

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	弱圧縮性流体計算による非圧縮性気液二相流の数値シミュレーション
Title(English)	Incompressible Gas-Liquid Two-Phase Flow Simulation based on Weakly Compressible Scheme
著者(和文)	松下真太郎
Author(English)	Shintaro Matsushita
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第11415号, 授与年月日:2020年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:青木 尊之,平井 秀一郎,末包 哲也,肖 鋒,長崎 孝夫
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第11415号, Conferred date:2020/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Type(English)	Doctoral Thesis

令和元年度 博士論文

弱圧縮性流体計算による非圧縮性気液二
相流の数値シミュレーション

Incompressible Gas-Liquid Two-Phase Flow
Simulation based on Weakly Compressible Scheme

東京工業大学 工学院機械系機械コース

松下真太郎

Shintaro Matsushita

指導教員

青木尊之 教授

Takayuki Aoki

目次

第 1 章	緒言	1
1.1	研究背景	1
1.2	研究目的	6
1.3	論文の構成	8
第 2 章	特性線に基づく弱圧縮性計算による気液二相流解析	11
2.1	半陰解法を用いる非圧縮性解法の問題点	11
2.2	弱圧縮性近似による完全陽解法	12
2.3	支配方程式	13
2.4	特性線の理論に基づく定式化	14
2.4.1	1次元オイラー方程式に対する特性線解法	14
2.4.2	多次元オイラー方程式に対する特性線解法	15
2.4.3	重力項	17
2.4.4	粘性応力項	18
2.5	二相流モデル	19
2.5.1	保存型 Phase field 法	19
2.5.2	Level Set 法	20
2.5.3	Level Set 関数と Phase field 法のカップリング	21
2.5.4	表面張力の評価	23
2.5.5	接触角の評価	24
2.6	離散化手法	26
2.6.1	特性線解法	26
2.6.2	重力項	28
2.6.3	粘性応力項	28
2.6.4	表面張力項	29
2.6.5	接触角	29
2.6.6	保存形マルチモーメント法による保存形 Phase field 法	30
2.6.7	Level Set 関数の移流計算と再初期化	33

2.7	境界条件	35
2.8	Immersed Boundary Method による単相流中の複雑形状の表現	36
2.9	時間刻みの決定	37
2.10	音速の低減による計算効率の向上	39
2.11	方向分離誤差を考慮した解法	39
2.12	GPU 実装	40
2.12.1	単一 GPU 実装	40
2.12.2	MPI ライブラリによる複数 GPU 実装	42
2.13	検証計算	42
2.13.1	移流スキームの精度検証	42
2.13.2	単相流計算の検証	45
	1 次元 shock tube 問題	45
	Cavity flow 問題	46
	2 次元円柱後方に生じるカルマン渦の計算	49
	3 次元球周りの流れの計算	51
2.13.3	界面捕獲手法の検証	54
	斜め移流問題	54
	Single vortex 問題	58
	気液二相流計算における THINC/WLIC 法と保存型 Phase field 法の比較	60
	Phase field モビリティの影響	64
	Level Set 法とのカップリングによる影響	64
2.13.4	気液二相流計算の検証	66
	2 次元ダム崩壊問題	66
	液滴振動問題	71
	接触角の検証	71
	2 次元単一気泡上昇問題	75
	3 次元単一気泡上昇問題	80
2.14	応用計算	84
2.14.1	ミルククラウンの生成シミュレーション	84
2.14.2	浅い水面上でのダム崩壊による砕波	85
2.14.3	複数 GPU による高解像度ダム崩壊計算	85
2.15	特性線に基づく弱圧縮性解法による気液二相流解析のまとめ	90
第 3 章	等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く弱圧縮性解法の導入	91
3.1	等温過程の Navier-Stokes 方程式	91
3.2	特性線解法との違い	92
3.3	初期圧力場修正のためのポアソン方程式	93

3.4	有限体積法による保存形 Allen-Cahn 方程式の解法	94
3.5	離散化手法	95
3.5.1	移流項	95
3.5.2	圧力勾配項	96
3.5.3	粘性応力項	96
3.5.4	速度場発散項	97
3.6	境界条件	98
3.7	液膜計算のための簡便な曲率修正	99
3.8	検証計算	100
3.8.1	単相流計算の検証	100
	Cavity flow 問題	100
3.8.2	界面捕獲手法の検証	101
	Single vortex 問題	101
	Zalesak 問題	101
3.8.3	気液二相流計算の検証	106
	2 次元ダム崩壊問題	106
	2 次元気泡上昇問題	110
3.9	等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く弱圧縮性解法導入のまとめ	111
第 4 章	界面に適合する AMR 法	113
4.1	木構造に基づくブロック構造 AMR 法	113
4.2	レベル差補間	114
4.2.1	ノードセンターで定義される変数のレベル差補間	114
4.2.2	マルチモーメント変数のレベル差補間	114
4.2.3	スタaggered 格子で定義される変数のレベル差補間	116
4.3	AMR 法の GPU 実装	117
4.3.1	界面に適合する動的格子細分化	119
4.3.2	メモリ・プールと木構造を用いた CPU/GPU 上のメモリ管理	121
4.3.3	GPU 上のステンシル計算	122
4.3.4	セル中心からノード中心への補間	123
4.4	保存形マルチモーメント法および特性線解法による計算結果	128
4.4.1	Single vortex 界面移流計算	128
4.4.2	格子点数削減による計算時間の短縮	131
4.4.3	スプーンに衝突する流れの 2 次元計算	131
4.4.4	スプーンに衝突する流れの 3 次元計算	135
4.5	等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く手法に AMR 法を導入した計算結果	136
4.5.1	乾いた床へ浸水するダム崩壊問題	136

4.5.2	濡れた床へ浸水するダム崩壊問題	142
4.5.3	3次元単一気泡上昇問題	144
4.5.4	Liquid jet break up	145
4.5.5	シャボン玉形成過程の2次元計算	149
4.5.6	シャボン玉形成過程の3次元計算	152
4.5.7	液面上で液膜を形成する気泡上昇計算	154
4.6	界面に適合する AMR 法のまとめ	157
第 5 章	FENE-CR モデルの導入による粘弾性流体解析	159
5.1	粘弾性流体の分類	159
5.2	FENE ダンベルモデルに基づく粘弾性テンソル	160
5.3	数値計算法	164
5.4	検証計算	165
5.4.1	乾いた床へ衝突する粘弾性液滴問題	165
5.5	液膜安定化への影響	167
5.6	FENE-CR モデルの導入による粘弾性流体解析のまとめ	171
第 6 章	界面活性剤の吸着・脱離を考慮した輸送方程式と濃度差マランゴニ効果の導入	173
6.1	界面活性剤の吸着・脱離を考慮した輸送方程式	173
6.2	濃度差マランゴニ効果の導入	174
6.3	数値計算手法	175
6.4	検証計算	176
6.4.1	Single vortex 移流計算	176
6.4.2	界面活性剤溶液中を上昇する単一気泡	179
6.5	液膜安定化への影響	184
6.6	界面活性剤の吸着・脱離を考慮した輸送方程式と濃度差マランゴニ効果の導入のまとめ	196
第 7 章	結言	197
付録 A	オイラー方程式の式展開	205
A.1	非保存系への変換	205
A.2	対角化	206
付録 B	非圧縮性ソルバーについて	209
付録 C	VOF 法	211
付録 D	THINC/WLIC 法について	213
D.1	THINC 法	213

D.2	THINC/WLIC 法	214
参考文献		215
研究業績		225
謝辞		229

目次

2.1	The upwind interpolation according to $u, u + c_s, u - c_s$	15
2.2	Interface parameters at equilibrium state of Allen-Cahn equation, the interface width corresponding to $\lambda < \phi < (1 - \lambda)$ for this figure are $\delta = 0.03$	20
2.3	The property of the level-set function as signed distance function.	22
2.4	The trapped phase-field value by incorrect normal vector around the end area of level-set reinitialization.	23
2.5	The definition of normal vectors according to the contact angle.	25
2.6	Time evolution of advection equation by using semi-Lagrangian scheme.	26
2.7	The arrangement of multi-moment variables for two-dimensional domain.	30
2.8	The arrangement of multi-moment variables for three-dimensional domain.	31
2.9	The values in halo region of the computational boundary.	35
2.10	Neumann condition for the multi-moment variables.	37
2.11	The schematic representation of Immersed boundary method.	38
2.12	The GPU-implementation of fluid computation.	41
2.13	The schematics of CUDA block and threads.	41
2.14	The halo data communication between each GPUs.	43
2.15	The L1 norm error of linear advection equation solved by semi-Lagrangian scheme with 5th order WENO scheme.	44
2.16	The L1 norm error of linear advection equation solved by semi-Lagrangian scheme with CIP-CSL2 and CIP-CSLR1 scheme.	44
2.17	The initial setting of the shock tube problem.	45
2.18	The density profile at $t = 0.2$ for the shock tube problem. ($N = 100$)	46
2.19	The density profile at $t = 0.2$ for the shock tube problem. ($N = 500$)	47
2.20	The setting of the cavity flow problem.	48
2.21	The velocity profiles at steady state for the cavity flow problem.	48
2.22	The initial setting for the Karman vortex street past a cylinder problem.	49
2.23	The time history of drag and lift coefficients of cylinder for the Karman vortex street past a cylinder problem.	50

2.24	Incorrect drag and lift coefficients without consideration of the order of solving directional equations.	51
2.25	The iso-surface of Q value for the flow around sphere problem.	52
2.26	The relation between Re number and drag coefficient for the flow around sphere problem. .	53
2.27	The setting of the diagonal advection problem.	54
2.28	The phase-field profile solved by using CIP-CSL2 scheme for the diagonal advection problem.	55
2.29	The phase-field profile solved by using CIP-CSR1 scheme for the diagonal advection problem.	56
2.30	The results obtained by solving the conservative Allen-Cahn equation for the diagonal advection problem.	57
2.31	The setting of the single vortex problem.	58
2.32	The phase-field profiles obtained by solving conservative Allen-Cahn equation for the single vortex problem.	59
2.33	The contour line of $\phi = 0.5$ obtained by using THINC/WLIC scheme adapted from reference[4].	59
2.34	The initial setting of the two-dimensional dam breaking onto wet floor problem.	61
2.35	The phase-field profiles obtained by using THINC/WLIC scheme for the two-dimensional dam breaking onto wet floor problem.	61
2.36	The phase-field profiles obtained by solving conservative Allen-Cahn equation for the two-dimensional dam breaking onto wet floor problem.	62
2.37	The phase-field profiles obtained by using THINC/WLIC scheme for the Rayleigh Taylor instability problem.	63
2.38	The phase-field profiles obtained by solving conservative Allen-Cahn equation for the Rayleigh Taylor instability problem.	63
2.39	The effect of the mobility parameter of conservative Allen-Cahn equation.	64
2.40	The phase-field profiles when the normal vector is computed by using phase-field variables.	65
2.41	The phase-field profiles when the normal vector is computed by using level-set function. .	65
2.42	The initial setting of two-dimensional dam breaking onto dry floor problem.	66
2.43	Snapshots of the 2-D dam breaking problem for 200×75 mesh. Results of (a) the weakly compressible solver and (b) the incompressible solver.	67
2.44	The same 2-D dam breaking problem with 400×150 mesh. Results of (a) the weakly compressible solver and (b) the incompressible solver.	68
2.45	Velocity divergence profiles of (a) 200×75 mesh and (b) 400×150 mesh for the 2-D dam breaking problem solved by the weakly compressible scheme.	68
2.46	Color contour of the phase field variable with a color map emphasized for $\phi < 0.0$ and $\phi > 1.0$ for the 2-D dam breaking problem on 200×75 mesh, (a) same as Fig.2.43 (a), and (b) the result with a twice-higher sound speed.	69

2.47	2-D dam breaking problem on 200×75 mesh with a twice-higher sound speed, (a) snapshots of the interface profile represented by the phase field variable ϕ and (b) profiles of the velocity divergence.	69
2.48	Total volume changes from the initial value. (a) 200×75 mesh and (b) 400×150 mesh. . .	70
2.49	Comparisons of (a) heights of water column and (b) front locations of the weakly compressible solver based on characteristic method with those of the incompressible solver and the experimental data[79]	70
2.50	Time evolution of interfaces for the droplet vibration	72
2.51	The perspective view of contact angle problem at different angles.	73
2.52	The sectional view of contact angle problem at different angles.	74
2.53	The initial setting of two-dimensional bubble rising problem.	75
2.54	Computational shape of two-dimensional bubble rising at $t = 3.0$	76
2.55	Computational shape of bubble for six different codes	77
2.56	The time history of the center of mass of the bubble compared with reference results for the two-dimensional bubble rising problem.	78
2.57	The time history of the rise velocity of bubble for $Ma_{\max} = 0.03$ compared with reference results.	78
2.58	The time history of rise velocity of bubble for $Ma_{\max} = 0.01$ compared with reference results.	79
2.59	Grace diagram.	81
2.60	The initial setting of the three-dimensional bubble rising problem.	82
2.61	The computed shapes of bubble for the three-dimensional bubble.	83
2.62	The initial setting of the milk crown simulation	85
2.63	The predicted time evolution of gas-liquid interface, obtained at $297 \times 297 \times 108$ meshes for the milk crown simulation	86
2.64	The initial setting for the three-dimensional dam breaking onto wet floor problem.	87
2.65	The predicted time evolution of gas-liquid interface, obtained at $576 \times 288 \times 96$ meshes for the dam breaking onto wet floor problem	88
2.66	The predicted time evolution of gas-liquid in the case of $L = 0.018$ m, obtained at $1152 \times 192 \times 576$ meshes for the dam breaking onto wet floor problem.	89
3.1	Configuration of staggered grid system, vector components are defined at cell-face and scalars are defined at cell-center.	96
3.2	Stencil computations of viscous term	97
3.3	Boundary setting on staggered-grid system	98
3.4	The severe curvature error and the distribution of Q at the valley of levelset within the thin liquid film.	100

3.5	Velocity profile of the cavity flow problem for the Reynolds number $Re = 100$ (left) and $Re = 5000$ (right).	101
3.6	Results of the single vortex problem by using the THINC/WLIC scheme (Left) and the conservative Phase-field equation (Right) with 128×128 mesh.	102
3.7	Results of the single vortex problem by using the THINC/WLIC scheme (Left) and the conservative Phase-field equation (Right) with 256×256 mesh.	103
3.8	Results of the Zalesak problem after 1 revolution by using the THINC/WLIC scheme (Left) and the conservative Phase-field equation (Right) with 100×100 and 200×200 meshes.	104
3.9	Results of the Zalesak problem after 10 revolution by using the THINC/WLIC scheme (Left) and the conservative Phase-field equation (Right) with 100×100 and 200×200 meshes.	105
3.10	Snapshots of the 2D dam breaking problem for 200×75 mesh obtained by solving isothermal Navier-Stokes equation.	107
3.11	Comparisons of heights of water column and front locations of the weakly compressible solver based on directly solving isothermal Navier-Stokes equation with those of the incompressible solver and the experimental data[90]	107
3.12	$\nabla \cdot \mathbf{u} \Delta t_{\text{fluid}}$ profile of the 2D dam breaking problem for 200×75 mesh obtained by solving isothermal Navier-Stokes equation.	108
3.13	The effect of $\nabla \cdot \mathbf{u} \Delta t_{\text{fluid}}$ profile on v_p value for the 2D dam breaking problem.	109
3.14	Interface shapes of a two-dimensional bubble rising problem at $t = 3$ by solving the weakly compressible scheme (left side of each figures (a) and (b)) with comparison to the references(right side of each figures (a) and (b)).	110
3.15	Rising velocity of bubble over time compared to those of Ref.[82]	110
4.1	The refinement procedure of tree based AMR	114
4.2	Level gap interpolation of node-centered variables	115
4.3	Multi-dimensional interpolation process	116
4.4	Interpolation to a fine mesh from a coarse mesh	116
4.5	Interpolation in a coarse mesh and numerical fluxes between coarse and fine meshes	117
4.6	Level gap interpolation of variables on cell-center between coarse to fine mesh	118
4.7	Level gap interpolation of variables on staggered grid between coarse to fine mesh	118
4.8	Tree based AMR on GPU and CPU with space-filling curve	119
4.9	C++ class implementations for tree data structure	119
4.10	C++ class implementations for buffer pool and block data structure	120
4.11	C++ class implementations for block information	120
4.12	Mesh refinement based on signed distance function	121
4.13	Adaptation and defragmentation of tree-based AMR and memory pool	122

4.14	A extended stencils of a leaf including halo region on shared memory	123
4.15	Arrow arrays to convert from cell-centered to node-centered variables	125
4.16	Prolongation from cell-centered to node-centred variables	125
4.17	Arrow copy for cell-centered to node-centered variables	126
4.18	Arrow arrays to convert from cell-centered to node-centered variables for 3D	126
4.19	Arrow copy process at leaf boundary with coarse neighbour for 3D	127
4.20	Arrow copy process at leaf boundary with fine neighbour for 3D	127
4.21	Color contour of the initial phase-field variable $\phi(t = 0)$ with AMR method for the single vortex problem.	128
4.22	Level set function constructed from the phase-field variable($t = 0.0625T$) with AMR method for the single vortex problem.	129
4.23	(i) Leaf lines adapted nearby the interface and (ii) Color contour of the phase-field variable $\phi(t = T/2)$ for the single vortex problem.	129
4.24	Color contour of the phase-field variable $\phi(t = T)$ with AMR method for the single vortex problem.	130
4.25	Time history of the total mesh number with AMR method for the single vortex problem. . .	130
4.26	Initial setting of two-dimensional water flow against spoon problem	132
4.27	Gas-liquid interface profile with leaf lines computed by characteristic method with AMR method for 2D flow impinging spoon problem	133
4.28	Gas-liquid interface profile with leaf lines computed by characteristic method with AMR method for 2D flow impinging spoon problem(later time)	134
4.29	Initial setting of three-dimensional water flow against spoon problem	135
4.30	Gas-liquid interface profile with leaf lines and rendered view computed by characteristic method with AMR method for 3D flow impinging spoon problem	137
4.31	Gas-liquid interface profile with leaf lines and rendered view computed by characteristic method with AMR method for 3D flow impinging spoon problem(later time)	138
4.32	The time history of mesh points for the 3D flow impinging spoon problem	139
4.33	Initial setting of the three-dimensional dam breaking onto a dry floor problem.	139
4.34	Evolution of water profile for three-dimensional dam breaking problem on a dry floor. . . .	140
4.35	Comparisons of heights of water column and front locations of the weakly compressible solver with those of the experimental data[79][102].	141
4.36	The predicted time evolution of gas-liquid, obtained at $768 \times 128 \times 384$ uniform meshes and AMR mesh for the dam breaking problem onto wet floor.	143
4.37	Computed shape of bubbles by present solver	144
4.38	Initial setting of liquid jet breakup problem.	145

4.39	The predicted time evolution of gas-liquid interface with 7-level AMR method for the liquid jet breakup problem. Each leaf has 4^3 meshes and the width of finest mesh equals to $\Delta x = D/256$	147
4.40	The overall flow structure colored by mainstream velocity at $t^* = 7.19$. (a) is adapted from reference using incompressible solver on uniform mesh[103]($\Delta x = D/286$). (b) is our results($\Delta x = D/256$).	148
4.41	Initial setting of the two-dimensional soap bubble forming simulation.	149
4.42	The profile of phase-field variables with leaf lines for the two-dimensional soap bubble forming simulation. Each leaf has 4^2 meshes.	150
4.43	Enlarged views of the phase-field profile at $t = 5.0$ s.	151
4.44	Time history of displacement of the front and top position of liquid film.	151
4.45	Time history of the gradient of front and top position of liquid film.	151
4.46	Initial setting of the soap bubble forming simulation.	152
4.47	The predicted time evolution of gas-liquid with 9-level AMR method for the soap bubble forming simulation, where $\sigma = 0.02$ N/m.	153
4.48	The predicted time evolution of gas-liquid with 9-level AMR method for the soap bubble forming simulation, where $\sigma = 0.001$ N/m.	153
4.49	The predicted time evolution of gas-liquid interface with 8-level AMR method for the bubble colliding with the liquid surface problem.	155
4.50	The predicted time evolution of gas-liquid interface with 8-level AMR method for the bubble colliding with the liquid surface problem (later time).	156
5.1	Shear stress properties of Newtonian and Nonnewtonian fluids	160
5.2	Typical time history of viscosity and elasticity of viscoelastic fluid	160
5.3	Dumbbell model for polymer chain	161
5.4	Initial settings of viscoelastic droplet falling onto a dry floor problem	165
5.5	Evolution of profile for three-dimensional viscoelastic droplet falling onto a dry floor problem	166
5.6	Time evolution of width of the viscoelastic droplet falling onto a dry floor	166
5.7	Phase-field profile for the bubble colliding with the liquid surface and forming liquid film in Newtonian fluid.	168
5.8	The effect of De to the phase-field profile for the bubble colliding with the liquid surface and forming liquid film in FENE-CR viscoelastic fluid.	169
5.9	The effect of L to the phase-field profile for the bubble colliding with the liquid surface and forming liquid film in FENE-CR viscoelastic fluid.	170
6.1	Dependence of surface tension on surfactant concentration expressed by Langmuir equation of state	176

6.2	The phase-field profile for the single vortex problem to validate the interface surfactant transportation.	177
6.3	Interface surfactant concentration for the single vortex problem	178
6.4	Bulk surfactant concentration at $t = 0.5$ for the single vortex problem with bulk interface coupling	180
6.5	Interface surfactant concentration at $t = 0.5$ for the single vortex problem with bulk interface coupling	181
6.6	Drag coefficient of rising bubble into 1-pentanol surfactant solution	182
6.7	The profile of y -directional velocity and interface surfactant concentration for the bubble rising into 1-pentanol surfactant solution problem	182
6.8	Phase-field profile for the bubble colliding started from clean with the liquid surface and forming liquid film in water solution.	185
6.9	Phase-field profile for the bubble colliding started from clean with the liquid surface and forming liquid film in water solution(later time).	186
6.10	Phase-field profile for the bubble colliding started from contaminated state with the liquid surface and forming liquid film in water solution.	188
6.11	Phase-field profile for the bubble colliding started from contaminated state with the liquid surface and forming liquid film in water solution(later time).	189
6.12	Interface surfactant ratio within $0.1 < \phi < 0.9$ for the bubble colliding from contaminated state with the liquid surface problem.	190
6.13	Color adjusted interface surfactant ratio within $0.1 < \phi < 0.9$ for the bubble colliding from contaminated state with the liquid surface problem($La = 15$).	191
6.14	Phase-field profile for the bubble colliding with the liquid surface and forming liquid film in 20% gricelyne solution; from $t = 0.0$ s to $t = 0.080$ s.	193
6.15	Phase-field profile for the bubble colliding with the liquid surface and forming liquid film in 20% gricelyne solution; from $t = 0.083$ s to $t = 0.166$ s.	194
6.16	Phase-field profile for the bubble colliding with the liquid surface and forming liquid film in 20% gricelyne solution using higher resolution mesh	195
B.1	Staggered grid system.	210

表目次

2.1	The order of solving x -, y - directional equations for eqch time step.	40
2.2	The comparison of drag and lift coefficients of the cylinder for $Re = 200$ with the results of experiment and incompressible solvers.	50
2.3	The order of solving x -, y - directions for each time-step	51
2.4	The physical properties of gas and liquid phase for the two-dimensional bubble rising problem. 75	
2.5	The comparison of Re numbers computed by rise velocity estimated from simulation results with the experimental and computed results of references.	82
4.1	Computational times(CPU time) for AMR mesh and uniform mesh for the single vortex problem.	131
4.2	Comparison of Re number of the rising bubble	145
4.3	Physical properties of two-dimensional bubble rising problem	149
5.1	The viscoelastic parameter setting for the bubble colliding with liquid interface problem. . .	167
6.1	Physical properties of 1-Pentanol[118]	179
6.2	Physical properties of Triton X-100[119]	184
6.3	The setting of physical properties of surfactant	184

第 1 章

緒言

1.1 研究背景

まえがき

我々の身の周りに存在する水や空気などの流体現象は、気象現象や津波のような災害を支配している他、工学的に利用されることも多く、流体現象を完全に理解することは人類にとって大きな目標である。学問分野として流体力学はかなり発展し、流体はミクロに見れば分子から構成されているが、分子間の衝突が十分頻繁であれば、流体は巨視的な範囲で Navier-Stokes 方程式によって非常に良く記述される。偏微分方程式である Navier-Stokes 方程式を解ければ、流体現象を完全に理解できると言える。しかしながら、Navier-Stokes 方程式の数学的な困難さから、解析的に解くことはおろか解の存在すら証明されておらず、難問として数学者の大きなテーマともなっている。

解析的に解けない Navier-Stokes 方程式に対するアプローチとして、方程式を離散化し数値的に式を解く、数値流体シミュレーションが登場し、様々な流体現象を予測する手段として多くの場面で活躍している。近年の計算機の著しい発展に伴い、シミュレーション技術による予測精度も向上し、その有用性はさらに増している。精度の高い近似解が得られれば、様々な流体現象の予測をより正確に行うことができ、気象予測や防災、工学的応用に大きく貢献できることは間違いない。

数値流体シミュレーションは Computational Fluid Dynamics (CFD) として一つの分野が形成されるまでに成熟し、より複雑な現象のシミュレーションや大規模な計算が行えるようになってきている。産業分野でも自動車や航空機的设计など、多くの場面で欠くことができない存在となっている。

気液二相流の特徴

前述のように数値流体シミュレーションは大いに発展し、流体現象を近似的によく再現することができるようになってきたが、まだ十分に計算できない流体現象も多くある。多相流あるいは混相流もその中で一つで、固体・液体・気体のいずれかの二相以上が混在する流れのことをいい、特に気体と液体が混在する流れを気液二相流という。気液二相流は液体燃料の噴射、原子力発電所や化学プラント、液体燃料タンク、オイル攪拌、燃料電池の内排水など多くの場面で見られ、応用先は広い。我々がしばしば解析

対象とする気液二相流は、典型的には水と空気など、常温では密度差が 830 倍程度と非常に高密度差となり、界面で互いの相同士が溶け合わない非混合な流体では、気相と液相間が分子スケールの長さとなるような気液界面を形成する。気相と液相の気液界面のことを単に自由界面、または自由表面と呼ぶこともある。これは、気相の密度が液相と比較して小さいため、液相の慣性がほぼ支配的となり、気相の慣性をほとんど無視して自由に流動する様子を表現した用語である。自由表面を含む流れでは、条件によっては分裂・合体を伴いながら大変形を伴うなど複雑な挙動を示す。特に両面が自由表面となるような液膜を含む流れでは、液体の散逸効果や気液界面における非均一の表面張力効果を考慮しなければならず、界面挙動は非常に複雑となる。以下では液膜両面が自由表面となるような液膜のことを液体自由膜と呼ぶこととする。

大規模気液二相流の課題

これまで工学的予測手段として用いられてきた気液二相流解析のためのモデルの一つに平均化二相流モデル [1] があり、原子力の分野で長く使われてきた [2]。しかし、平均化二相流モデルでは気液界面を直接計算することができず、速度、圧力等の物理量の平均値とボイド率と呼ばれる気体の存在割合を表す変数を計算するため、界面挙動が平均化されてしまい、界面の複雑な挙動が追えないという欠点が存在する。気液二相流は本質的に過渡現象であり、界面は時間とともに大きく変化する場合が多い。二流体モデルでは特性が解明されている範囲での平均的な現象を扱っているに過ぎず、気液二相流の本質的な理解のためには界面挙動を直接計算することが必要である。

Navier-Stokes 方程式は時間と空間に関する偏微分方程式であり、時間と空間の離散化の刻みを小さくしていくと数値計算結果は偏微分方程式の解に近づいていかなければ解の収束性が得られているとは言えない。しかし、現在の気液二相流解析は空間離散化の刻みを小さくしていくと、新しい液滴や気泡が現れ、十分な解の収束性に至る解像度の段階に達していない。即ち、気液二相流解析に十分な空間解像度で計算できておらず、より高解像度の計算が必要であるということである。

既往の気液二相流計算に関する研究

これまでの非圧縮性気液二相流シミュレーションでは、大規模計算が行われた例は少ない。比較的大規模な気液二相流計算の例として、丹ら [3] の円筒座標系を用いた回転体に駆動される気液二相流計算があるが、高回転数下では十分な格子解像度を用いることができず、さらなる高解像度計算の必要性が示唆されている。杉原 [4] は複数 GPU を用いた大規模気液二相流計算を実現し、4000 万格子を用いることでミルククラウンの生成過程をシミュレーションすることに成功している。ミルククラウンのシミュレーションでは、格子解像度を各方向半分に落とした場合ではクラウンの生成を再現することができておらず、複雑な界面挙動を再現するには大規模な計算が必要となることが示されている。

より高い解像度で計算する必要があるにも関わらず十分な解像度で非圧縮性気液二相流計算を行うことができない理由は計算機性能が不足しているからではない。気体と液体の界面で密度が大きく変化する気液二相流では、格子解像度を上げると、非圧縮性を担保するための圧力ポアソン方程式の解の収束

性が極端に悪化し、現実的な計算時間で解を得ることが難しくなるためである。これからさらに計算規模を大きくしなければならないことを考えると、ポアソン方程式の解の収束性の悪化は非常に深刻な問題であり、ポアソン方程式を解く半陰解法から脱却しない限り、エクサスケール (1 秒あたり浮動小数点演算を 10^{18} 回可能な性能) の大規模気液二相流計算への望みは薄いと言える。

近年、上記のような潮流からポアソン方程式を解く必要がない陽解法が注目されつつあり、仮想的な粒子群の速度分布関数の時間発展を解く格子ボルツマン法 (LBM: Lattice Boltzman Method) による流体計算が行われている。LBM は弱圧縮性を仮定した完全陽解法で、局所的なステンシルアクセスで効率的な計算が行えることからスパコンを用いた大規模な計算が行われている [5][6][7]。LBM を気液二相流に適用した事例も報告されており、高密度差でも安定に計算が行えるようになってきている [8][9][10][11]。しかしながら、LBM による気液二相流計算では、高レイノルズ数下での激しい流れの計算はそのままでは安定に計算することが非常に困難であり適用範囲が限定的である他、有限差分法と比べると歴史が浅いために未だに多くの計算モデルが提案されているなど、計算精度に関する議論の余地も残されている。近年の LBM を用いた二相流計算として、高レイノルズ数流れに対して強力な安定性を保つ cumulant モデルと、フィルターを適用することによって激しい気液二相流計算の安定化に成功した例がある [12]。しかし、フィルター適用の際に速度のステンシル参照が必要となり、LBM の局所性という利点が失われている他、フィルターの作用によって界面の細かい構造が散逸的となる傾向がある。有限差分法の枠組みでは、単相流の定常解を得るために開発された Artificial Compressible Method (ACM) が Chorin によって提案されている [13]。元々は定常状態で速度場の発散が 0 となるように擬似圧縮性を仮定して Navier-Stokes 方程式を解く手法で、最終的に解かれる式は非圧縮性 Navier-Stokes 方程式と同等である。その後、dual-time stepping method を用いて非定常解に対して適用する研究 [14] が登場し、近年では ACM と LBM の類似性についても議論されている [15]。圧縮性 Navier-Stokes 方程式から導かれる弱圧縮を仮定した等温過程の Navier-Stokes 方程式は、元々の考え方こそ異なるものの ACM の定式化と類似しており [16][17]、cavity flow などの簡単な単相流 [18] の他、乱流計算への適用もされつつある [19]。しかし、弱圧縮性解法を気液二相流へ適用して応用計算を行った例は未だない。

気液二相流解析の必要性

気相側の慣性が無視できるほど小さい気液二相流の性質を利用して、液相側の流体方程式のみを解いて気液界面上で自由表面としての境界条件を満たすように気相側に値を与える自由表面モデルという数値流体計算法も存在する。既往研究として格子ボルツマン法で液相側のみ流体方程式を解いた自由表面モデルによる解析が行われた [20]。密度差を考慮しなくて良いので格子ボルツマン法で生じる数値不安定性を回避しており、ダム崩壊計算や、津波計算など流体の慣性が支配的な流れにおける界面挙動は精度よく予測することが可能であることが示されている。しかし、気相側は単に境界条件として考慮されているだけなので気体側の流体的性質が計算結果に与える影響は本質的に損なわれることになる。気相の流れによって液相が駆動されるような計算を行うことができない他、気相内部の流動による気泡の変形を高精度に捉えることは困難であるなど、適用範囲は限定される。気相および液相両方共に流体方程式を解く気液二相流解析では、気相側から液相側への影響も考慮できる他、密度差が考慮でき、より現実

に即した気液二相流解析が可能となる。他にもシャボン玉形成のような液膜を含む流れ計算においても、空気を流入させて膨張する液膜をシミュレーションで再現しなければならず、気相側の流動を計算することは必須である。気相の流れが液相を駆動するような流体現象は、例えば燃料電池内や自動車内部の凝縮水の排水などの場面で現れ、液膜を含む流れは配管ポンプ内で見ることができる。配管ポンプ内では、摩擦促進の原因となる泡を除去するための消泡技術が必要とされる。シミュレーションによって自由表面挙動を高精度に予測できれば、設計上役立つ知見を得られることになり、工学的意義を持つと考えられる。

気液二相流計算における界面追跡の課題

気液二相流計算では、気液界面の挙動を追跡することが必要となる。これまでに、界面に適合した格子を用いる方法 [21] や界面付近に粒子を撒いて追跡する方法 [22] などが提案されてきたが、これらの方法では、界面が変形する度に格子を再生成する必要がある。気泡の分裂や合体などの複雑な界面挙動を含む流れの計算では計算の安定性や精度の面で問題がある。一方、拡散界面型の DIM(Diffuse Interface Method) による手法としては、直交格子上で陰的に界面位置を表わした関数の時間発展を解く Level Set 法 [23] や Volume Of Fluid (VOF) 法 [24] 等の界面捕獲法が提案されており、計算アルゴリズムの簡易さや適用可能な格子系の多さや並列計算の容易さ等から広く用いられている。VOF 法は質量保存性が確保されているために体積保存性に優れるが、界面の曲率半径が格子間隔に近づくと界面形状の精度が悪くなる。補間関数に hyperbolic tangent 関数を用いた THINC (Tangent Hyperbola for Interface Capturing) 法 [25] や THINC 法を多次元計算に適用した際に界面形状を改善する THINC/WLIC 法 [26] や、界面形状の精度に優れる Level Set 法を組み合わせる CLSVOF (Coupled Level Set and VOF) 法 [27] 等が提案され、界面を精度よく捉えつつ体積保存性を担保する試みがなされてきている。しかし、気液二相流の激しい流れでは非物理的な挙動を引き起こす。具体的には、長時間積分で界面の一部が気相側の流れに乗って小さな VOF 値が浮遊したり、液相側に VOF 値が低い領域が点在し長時間消滅しないというような非物理的な現象が起こる。

上記問題を解決するために、新たなアプローチとして非平衡系の自由エネルギー理論に基づく DIM として、Phase field 法が提案され、気液二相流への適用もされつつある [28]。Phase field 法では、界面を識別する Phase field 変数の時間発展を解く手法で、VOF 法と異なる点として、気液界面幅よりも外側であっても拡散・逆拡散の効果を持つ項により、界面から離れてしまった Phase field 変数を気液界面に戻す性質がある。また、界面捕獲手法についてのレビュー論文 [29] では、種々の界面捕獲手法を比較しており、CLSVOF 法および保存形 Allen-Cahn 法が保存性・形状に優れると結論づけられている。

GPU コンピューティング

近年 Graphics Processing Unit (GPU) を利用した科学技術計算の高速化が注目されている。GPU はグラフィック処理用に開発されたプロセッサだが、高い浮動小数点演算性能を持ち、メモリ帯域が大きくメモリアクセスを高速に行えるため科学技術計算に対する適合性が高い [30]。スーパーコンピュータの性

能ランキングである Top500[31] の上位には GPU を搭載したコンピュータがランクインしており、GPU を利用することによって超大規模・高速計算が現実のものとなってきた。低消費電力である GPU をアクセラレータとして利用するスーパーコンピュータは今後も増えていくと考えられ、GPU 上で効率的に演算可能なソルバーの開発が必要になると考えられる。東京工業大学も 1 ノードあたり 4 台の GPU を搭載したノード 540 台から構成される Tsubame3.0 を所持しており、GPU アクセラレータを気軽に利用できる環境にあることから、GPU 上で効率的に動作するソルバーの開発を行えば、低コストで幅広い高性能計算が可能となる。

AMR 法 (Adaptive Mesh Refinement) の導入

計算領域全体を均一の格子を用いて計算する場合、格子幅を半分にしても 3 次元では総格子点数が 8 倍となり、典型的な移流支配の時間刻み幅の制限ならば時間刻み幅も半分となって、総計算コストは少なくとも 16 倍必要となる。大規模化にあたっては多次元計算における格子点数の増加は深刻な問題である。計算領域全体に対して高解像度格子が必要であることは稀であり、ある基準に基づいて必要な領域に高解像度格子を割り当てることが考えられる。この考え方に基づき、Berger らは計算領域に解像度の異なる格子を配置する AMR 法を提案した [32]。界面や衝撃波など急激な勾配を含む領域に高解像度格子を割り当てることによって格子あたりの波数を軽減し、精度を維持しながら総格子点数を削減する。Berger らが提案した AMR 法は、現在ではパッチ型と呼ばれるものに分類される。パッチ型は任意の位置に解像度の異なるパッチと呼ばれる領域を貼り付けるようにして配置する。細分化を動的に行わない場合などは、自由度の高い解像度配置が行えるため、航空分野で翼周りの計算などによく用いられる。パッチ型の他に、ツリー型の AMR 法が提案されており [33]、木構造に基づいて簡単に解像度の割り当てを処理することができるため、動的に解像度を変化させる場合に適する。特に、木構造が管理する単位領域を 8^3 などの決まった数の直交格子とするブロック構造 AMR は、メモリが連続的となり、メモリアクセス効率が高いことから GPU 計算に適しており、近年盛んに研究されている [34]。

AMR 法はエクサスケール計算に向けた重要な計算手法として認識されており [35]、米国バークレイ国立研究所では AMR Co-Design Center を立ち上げ、超大規模計算向けの AMR フレームワークの開発を進めている [36] など、国際的にも注目を集めている手法である。AMR 法が適用されている既往研究として、Fakhari らによる界面に格子を適合した気液二相流計算 [37] があるが、単一 CPU による 2 次元計算にとどまっている。他にも気泡上昇の 3 次元計算を行なっている研究 [38] や、粘弾性流体中の気泡上昇を扱っている研究 [39][40] もあるが、いずれも CPU を用いており、半陰解法を用いていて、超大規模計算に向けた手法とは言い難い。AMR 法を適用可能な気液二相流計算フレームワークとして、Popinet らが開発した Gerris[41] がある。近年 Gerris を元にして改良された Basilisk[42] が開発され、気泡上昇計算や船舶周りの計算、ジェットフローの気液二相流計算などが行われており、応用先は広い。メニーコア CPU を搭載したスーパーコンピュータで大規模計算が可能であるが、手法は半陰解法を用いており、GPU への対応は十分に行われていない。GPU のメモリ構造は階層的で CPU と異なり、メモリの動的確保と解放が非常に低速であるため、自身のコード内でのメモリ管理が重要となる AMR 法の適用難易度は高いとされている。Top500 では近年 GPU を搭載したスーパーコンピュータが増加しており、GPU 上で

効率的に計算可能な手法の開発および AMR 法のためのコーディング技術が必要になると考えられる。

1.2 研究目的

本研究では、非圧縮性領域の気液二相流解析を GPU 上で高効率に計算するための計算手法の開発を目的とする。ポアソン方程式を含む半陰解法では成し得なかったような超大規模な気液二相流を実現するために、ポアソン方程式から脱却した完全陽解法による気液二相流計算手法の開発する。さらに GPU 上で効率的に計算可能なブロックベースのツリー型 AMR 法を導入し、界面に高解像度格子を集めることで大幅な格子点数削減を実現する。

完全陽解法による気液二相流計算が実現できれば、ポアソン方程式を解くための大規模疎行列の反復計算における収束性の問題から解放されることになる。ポアソン方程式を解かずに計算を行うために、流体に圧縮性を仮定する。非圧縮性領域での圧縮性解法では、時間刻みが流速ではなく音速によって支配されるため、非圧縮性流れの計算より時間刻みが小さくなる。疎行列の反復計算の代わりに時間ステップ数が増大してしまうことから、音速の調整と効率的な計算手法の導入を試みることで、大規模計算が可能な計算手法を開発する。

音波の伝搬に対して安定かつ効率的に計算を行うために、流体の支配方程式を方向分離し、各々の方向の式に対して特性線法を導入した手法を開発する。支配方程式は特性速度に対する移流方程式に帰着でき、計算効率と計算精度の両立を可能にする semi-Lagrangian 法を用いることができる。一方、この定式化は保存形ではないため、双曲型方程式の弱解を計算できる保証がない他、密度差の大きい気液二相流において界面間での運動量交換を正しく評価できない可能性を含む。しかし、非圧縮性領域（低マッハ数領域）では衝撃波捕獲精度は余り重要ではなく、音波伝搬が精度よく計算できることの方が重要である。気相と液相間の密度の空間変化を考慮した差分法を適用するために、等温過程の Navier-Stokes 方程式を直接解く弱圧縮性解法の開発も行い、高密度差で引き起こされる数値的 Helvin-Helmholtz 不安定性を抑制する。

気液二相流のシミュレーションでは、物体近傍や界面近傍における現象を捉えることが重要であることに着目し、界面に高解像度格子を集める AMR 法を導入する。総格子点数を削減し、計算精度を維持しながら計算時間とメモリ使用量を削減する。GPU 計算に AMR 法を効率的に適用するために、shared memory を用いたステンシル参照を行う手法を開発し、メモリの使用量を削減する。界面が時間とともに動的に動くために、格子の生成と消滅が高い頻度で繰り返される。GPU 上のメモリの確保と解放を高い頻度で行うことは非効率的であるので、あらかじめ余分に確保したメモリ・プールのデータ構造を用いて、界面に動的に適合する AMR 法による気液二相流計算を効率的に行う。開発したソルバーを用いて検証問題を解き、精度を保ちながら総格子点数の削減が行えることを示す。

気液界面の捕獲には CLSVOF 法に倣って、保存形 Phase field 法を Level Set 法とカップリングさせた手法を開発し、界面形状と相質量の保存性を両立させる。保存形マルチモーメント法を用いた保存形 Phase field 法の解法を考案し、AMR 法におけるレベル差補間をコンパクトかつ高精度に実現した手法を開発する。保存形マルチモーメント法は格子点上の値とは別に積分値を変数として配置しそれぞれに対して時間発展を解く手法である。保存形 CIP 法 [43] と保存形 IDO 法 [44] を用いることで質量保存性を

担保する。界面移流ベンチマーク問題を解くことで、開発した手法が質量保存性を保ちながら界面形状精度が良いことを示し、激しい気液二相流計算に対して過剰な界面拡散を抑制する効果を持つことを確認する。

開発した AMR 法を導入した完全陽解法による気液二相流ソルバーを用いて、AMR 法が非常に有効である薄い液膜を含む流れ計算を行う。有限厚さを持つ格子で界面を解像するため、気-液-気のような液体自由膜を解像するためには非常に多くの格子が必要となる。液膜内部で起こる曲率の精度悪化に対して簡便な曲率修正法を適用し、さらに界面活性剤の輸送方程式を解いてマランゴニ効果を考慮することで、薄い液膜を安定に維持させた計算を実現する。また液膜形成では流体の弾性的性質が安定化に寄与している可能性を考え、FENE-CR モデルに基づく粘弾性流体を解析可能なソルバーを開発し、弱圧縮性流体解析手法へ適用可能であるか確認する。

具体的な研究項目について以下に示す。

特性線解法に基づく気液二相流の弱圧縮性計算について離散化された方程式の導出、数値計算手法について示し、開発した弱圧縮性解法が非圧縮性領域の単相流および気液二相流へ適用可能であることを検証問題を解くことで確認する。semi-Lagrangian 法の利点である高 CFL 数条件下でも安定かつ高精度であることを活かすために、方向分離された式を解く順番を交互に変更することで $CFL = 0.9$ でも精度よく計算できるようにする。検証問題として基本的な問題である cavity flow の他、格子に沿わない形状を含んだ球周りの流れ計算も行い、Immersed Boundary Method による物体境界条件の導入が弱圧縮性解法に有効であることも検証する。気液二相流の検証では、ダム崩壊計算を行い、非圧縮性ソルバーとの実験値の比較、音速による結果への影響について検証する。界面捕獲手法として、保存形マルチモーメント法による保存形 Allen-Cahn 方程式の解法を説明し、Level Set 関数とのカップリング手法について述べ、カップリングの効果についても検証する。気液二相流の応用計算として、浅い水面を設定したダム崩壊問題を計算し、複数 GPU による大規模計算かつ高レイノルズ数の激しい流れに対する堅牢性を確かめる。ミルククラウンの生成問題を解くことで、界面の大変形を伴う流れ計算においても、表面張力が精度よく解けていることを確認する。

密度の空間変化を考慮した移流項の評価を適用するために、等温過程の Navier-Stokes 方程式を直接解く手法の導入および数値計算法について説明する。特性線解法を用いた気泡上昇計算で見られていたような圧力波による速度場の振動を抑制するために、初期圧力修正のために数ステップのみポアソン方程式を解き、初期条件による圧力波の発生を抑制する。計算コスト削減のために保存形 Allen-Cahn 方程式を有限体積法で解き、保存形マルチモーメント法から自由度を $1/8$ に減少させる。界面に常に細かい格子を適合する AMR 法を適用する場合、レベル差で Phase Field 変数の勾配がほとんどゼロであり、レベル差補間精度は計算結果にほとんど影響を与えないため、有限体積法適用を検討した。単相流・気液二相流・界面捕獲手法について検証問題を解き、開発された手法が非圧縮性気液二相流計算へ適用可能であることを確認する。

木構造に基づいた細分化格子の管理を CPU 側で実装し、GPU 側では余分に確保されたメモリ・プールのデータ構造を用いることでメモリの確保・解放の頻度を大幅に削減する。メモリの確保・解放に伴う虫食い状態になったメモリに対してデフラグメンテーションを行い、メモリ・プール長さの肥大化を防

ぐ、離散化式を解くために必要となるステンシル計算には、shared memory を用いる。一つの単位ブロック領域が一つの CUDA block に対応するようにカーネル関数を実行し、隣接ステンシルを share memory 上に構築することで、最小限のメモリ使用量とする。AMR 法は保存形マルチモーメント法の変数配置、特性線解法で流体変数が配置されるノード・センター配置、等温過程の Navier-Stokes 方程式で用いる Staggered 格子配置全てに対応するコードをそれぞれ開発し、開発されたコードを用いて検証問題を解く。AMR 法を適用した保存形マルチモーメント法を用いて界面移流のベンチマーク問題を解き、格子点数削減と計算時間削減の効果を確認する。特性線解法と等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く手法で気液二相流のベンチマーク問題を解き、AMR 法が弱圧縮性解法に対して適用可能であることを示す。弱圧縮性解法と AMR 法によるジェット流れの計算では、非圧縮性ソルバーの計算時間を比較し、本ソルバーが高速演算可能であることを示す。液膜を含む流れ計算として、シャボン玉形成過程のシミュレーションを実行し、高解像度格子が界面に対して必要となる計算に本手法が非常に効果的であることを示す。また、薄い液膜の安定維持という現実世界で見られる現象の再現をシミュレーションで実現する。

FENE-CR モデルに基づく粘弾性流体モデルを導入し、本ソルバーの適用範囲を拡大させる。ニュートン性流体とは異なり、粘性応力がひずみに対して線形ではなくなる他、粘性・弾性特性に時間応答を含む非常に複雑な流体的性質を扱う。粘弾性応力を表現するための構成方程式の導出と数値計算手法について説明する。検証問題を解いて手法およびコードの妥当性を確認し、液膜形成に対する粘弾性パラメータの影響を確認する。

液膜形成過程のシミュレーション実現のために、界面活性剤の輸送とマランゴニ効果を考慮した流体計算を本手法へ導入する。界面への吸着・脱離を考慮した溶媒内での界面活性剤輸送方程式と、界面上での界面活性剤輸送方程式を導入し、流体計算側にはマランゴニ効果と、濃度による表面張力低下の状態方程式によって界面活性剤の効果を考慮する。検証問題として流れ場が与えられている場合の輸送方程式を解き、輸送方程式そのものが妥当に解けているか確認する。加えて水と空気のような高密度比の気液二相流計算へ適用可能であるか確認するために、界面活性剤を添加した水溶液と空気を用いた系における実験および数値計算と、本手法による結果を比較して、実用計算への適用可能性を検証する。最後にマランゴニ効果を考慮した液膜計算を行い、液体自由膜が安定して維持し続ける現象を数値計算上で再現し、液膜を安定に維持し続けるために必要な条件を明らかにする。

以上の研究から、開発した弱圧縮性流体解析手法による気液二相流計算手法が高レイノルズ数の激しい流れを含む非圧縮性領域の実問題に適用可能であることを示し、GPU コンピューティングと界面に適合する AMR 法によって高解像度気液二相流シミュレーションが可能なソルバーの開発を目的とする。

1.3 論文の構成

本論文は「弱圧縮性流体計算による非圧縮性気液二相流の数値シミュレーション」と題し、弱圧縮性スキームを用いた完全陽解法による気液二相流計算の開発および AMR 法の効率的な実装方法、検証結果について述べるものであり、以下の全 7 章から構成される。

第 1 章では、研究背景として気液二相流解析の重要性・現状について述べ、GPU の登場に伴う計算スケールの向上とそれに伴う現状の気液二相流解析手法の問題と本手法の立ち位置について述べた。

第2章では、特性線解法による弱圧縮性流体計算による完全陽解法の流体計算手法、気液二相流における界面捕獲手法や表面張力の計算方法、接触角の計算モデルおよび離散化手法について述べる。

第3章では、等温過程の Navier-Stokes 方程式を直接解く弱圧縮性解法について述べ、検証計算を解いて妥当性を確認する。

第4章では、AMR 法の実装について述べ、AMR 法の格子点数削減効果・均一格子の結果を再現できるかどうか等の検証結果を述べる。AMR 法と弱圧縮性解法による気液二相流の応用計算の結果についても報告する。

第5章では、FENE-CR モデルに基づく粘弾性応力を導入した流体計算について述べる。検証問題を解き妥当性を確認したのち、粘弾性パラメータの液膜安定化に対する寄与を検討する。

第6章では、界面への吸着脱離を考慮した界面活性剤の輸送およびマランゴニ効果の導入について述べ、検証計算で妥当性を確認したのち、界面活性剤を添加した流体計算で液膜を安定化させた計算を実行する。

第7章で、本研究の結論を述べる。

第 2 章

特性線に基づく弱圧縮性計算による気液二相流解析

本章では特性線解法に基づく弱圧縮性流体計算 [45] による圧縮性 Navier-Stokes 方程式の離散化式の導出および数値計算手法についての説明，気液二相流を扱うための界面捕獲手法，表面張力，接触角の取り扱いについて述べる．検証問題と応用計算の結果を示し，手法の妥当性と激しい流れ計算への適用性を確認する．

2.1 半陰解法を用いる非圧縮性解法の問題点

気液二相流解析では，音速の伝搬を無視した非圧縮近似がなされた非圧縮性 Navier-Stokes 方程式が幅広く解かれてきた [46][47]．これは，圧縮性解法の場合は時間刻みが音速に律速される一方で非圧縮近似を用いた場合は時間刻み幅に音速の制限がなくなり，効率的に解析ができると考えられたためである．しかし，第 1 章でも述べたように，大規模並列計算が可能となってきた現代において，気液二相流解析を行うにあたっては手法の並列計算への適合性，すなわちスケーラビリティの良さが重要となる．半陰解法による気液二相流解析では，典型的にはポアソン方程式は以下のように表される．

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}}{\Delta t}. \quad (2.1)$$

ここで， Δt は時間刻み幅であり， ρ は密度を表す．圧力 p は速度場の発散 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ を満たすように修正される．非圧縮性でよく用いられるセル面にベクトル量を，セル中心にスカラー量を定義するスタッ

ガード格子上で式 (3.15) を離散化すると次のように表せる.

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{1}{\rho_{i+1/2,j,k}} \frac{p_{i+1,j,k} - p_{i,j,k}}{\Delta x} - \frac{1}{\rho_{i-1/2,j,k}} \frac{p_{i,j,k} - p_{i-1,j,k}}{\Delta x} \right) / \Delta x \\
 & + \left(\frac{1}{\rho_{i,j+1/2,k}} \frac{p_{i,j+1,k} - p_{i,j,k}}{\Delta y} - \frac{1}{\rho_{i,j-1/2,k}} \frac{p_{i,j,k} - p_{i,j-1,k}}{\Delta y} \right) / \Delta y \\
 & + \left(\frac{1}{\rho_{i,j,k+1/2}} \frac{p_{i,j,k+1} - p_{i,j,k}}{\Delta z} - \frac{1}{\rho_{i,j,k-1/2}} \frac{p_{i,j,k} - p_{i,j,k-1}}{\Delta z} \right) / \Delta z \\
 & = \left(\frac{u_{i+1,j,k} - u_{i,j,k}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+1,k} - v_{i,j,k}}{\Delta y} + \frac{w_{i,j,k+1} - w_{i,j,k}}{\Delta z} \right) / \Delta t
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

離散化された式 (2.2) は纏めると $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ の大規模な連立一次方程式を解く問題に帰着させることができる. 気液二相流では気相と液相の密度差が典型的には 830 倍程度あるため, 密度項を含む係数行列の条件が悪く, 反復計算の収束性が悪化することが知られている [48][49]. 問題が大規模化すれば, 係数行列のサイズは総格子点数の 2 乗となり, 問題は深刻となる. 小野寺らによる複数 GPU を用いた液滴落下問題のシミュレーションでは半陰解法を用いた場合, ポアソン方程式のソルバーに収束性が最も良いと言われているマルチグリッド前処理付き BiCGSTAB 法を用いても弱スケーリング・強スケーリングともに悪化することが示されている [48]. 単一プロセッサの周波数の向上が頭打ちとなって, 多数のコアやノードによる並列計算の重要度が増す中では, 並列計算性能の良い計算手法であることと, 大規模化による自由度の増加に比例した各ステップ当たりの計算負荷の増大であることが求められる.

2.2 弱圧縮性近似による完全陽解法

本研究では大規模並列計算でボトルネックとなるポアソン方程式を解かずに計算を行うために, 流体に弱圧縮性を許容することで, 完全陽解法による計算を行う. 完全陽解法では全ての格子点の時間発展を陽に行うため, 格子点数 N に比例した $\mathcal{O}(N)$ の計算コスト増加となり, 良好なスケーラビリティが期待できる. 一方で, 弱圧縮性を許容しているため音波伝搬を解く必要があり, 時間刻み幅が音速に律速されるため, 所望の物理時間までにかかる計算ステップ数が増大する. しかし, 1 回の計算ステップにかかる計算時間は半陰解法と比較して短いことと, 並列計算向きの手法であるため, 全体の計算時間としては高速化が期待できる.

弱圧縮性を許容した計算手法の中で, ステンシルアクセスが隣接点のみで高速に演算可能な格子ボルツマン法 (LBM: Lattice Boltzmann Methods) [50] が近年注目を集めており, 種々の大規模流体解析に適用され, 気液二相流への適用もされつつある [51][52][53]. 格子ボルツマン法では Navier-Stokes 方程式を 2 次中心差分で解くことに相当するため, 急激な密度プロファイルを持つ気液二相流では計算が非常に不安定になりやすく, 高レイノルズ数流れや激しい流れ計算への適用性には課題が残る. 近年, 安定性の高い cumulant モデル [54] とフィルターを組み合わせた Filtered cumulant LBM [12] による高レイノルズ数の気液二相流計算が報告されているが, フィルター演算で近傍点への参照が必要になり, LBM の長所であったメモリアccessの局所性が損なわれてしまう他, フィルターの影響によって微細な界面構造が失われている. そこで本研究では, 有限差分法を用いた弱圧縮性近似に基づく気液二相流解析手法を開

発し，LBM では困難であった激しい流れ計算への適用性を確認する．

2.3 支配方程式

弱圧縮近似では圧縮性 Navier-Stokes 方程式を，実際より遅い音速を仮定して解く．圧縮性 Navier-Stokes 方程式は以下のように記述される．

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \mathbf{F}_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \mathbf{F}_3}{\partial x_3} = \mathbf{K} \quad (2.3)$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ \rho e \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

式 (2.4) は保存変数の密度，運動エネルギー，全エネルギーを表す． $\mathbf{K}$ は外力項で典型的には重力などを表す．全エネルギーは理想気体に対して，式 (2.5) で表される．

$$\rho e = \rho \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} \rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2) \quad (2.5)$$

γ は比熱比である．流束 $\mathbf{F}_i$ は $i = 1, 2, 3$ に対して式 (2.6) で記述される．

$$\mathbf{F}_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 - \sigma_{i1} \\ \rho u_i u_2 - \sigma_{i2} \\ \rho u_i u_3 - \sigma_{i3} \\ \rho e u_i - u_j \sigma_{ij} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

$\lambda = \rho C_p \kappa$ は熱伝導係数を表す．ここで κ は熱拡散係数， C_p は定圧比熱を表す．応力テンソル成分 σ_{ij} は，ニュートンの方程式によって式 (2.7) で表される．

$$\sigma_{ij} = -p \delta_{ij} + 2\nu A_{ij} \quad (2.7)$$

δ_{ij} はクロネッカーのデルタで， A_{ij} は式 (2.8) で表される歪み速度テンソルの偏差である．

$$A_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \delta_{ij} \quad (2.8)$$

以上のように示した圧縮性 Navier-Stokes 方程式から粘性項を除いたものをオイラー方程式といい，流束 $\mathbf{F}_i$ は式 (2.9) で表される．

$$\mathbf{F}_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_i u_1 - p \delta_{i1} \\ \rho u_i u_2 - p \delta_{i2} \\ \rho u_i u_3 - p \delta_{i3} \\ \rho e u_i - u_i p \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

特性線の理論に基づく定式化のため，支配方程式としてオイラー方程式を採用する．粘性項についてはフラクショナル・ステップ法 [13] でオイラー方程式の時間発展のあとに評価する．

2.4 特性線の理論に基づく定式化

圧縮性流体の支配方程式であるオイラー方程式は双曲型方程式であるため、方向分離法を適用することで、特性線の理論に基づき特性曲線に沿って伝搬する波の式に置き換えることができる。以下では1次元のオイラー方程式に対する特性線の理論に基づく定式化と、多次元での定式化を示す。

2.4.1 1次元オイラー方程式に対する特性線解法

1次元オイラー方程式は式 (2.10), 式 (2.11) で記述される。

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0 \quad (2.10)$$

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho e \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(\rho e + p) \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

式 (2.10), 式 (2.11) を非保存系に変形し、対角化を行うと以下の式 (2.12), 式 (2.13) を得る。式展開の詳細は付録 A に示す。

$$\mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{\Lambda L} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} = 0 \quad (2.12)$$

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\frac{1}{c_s^2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{\rho c_s} \\ 0 & 1 & -\frac{1}{\rho c_s} \end{bmatrix}, \mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} u & 0 & 0 \\ 0 & u + c_s & 0 \\ 0 & 0 & u - c_s \end{bmatrix}, \mathbf{q} = \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ p \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

c_s は音速であり、式 (2.14) で表される。

$$c_s = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}} \quad (2.14)$$

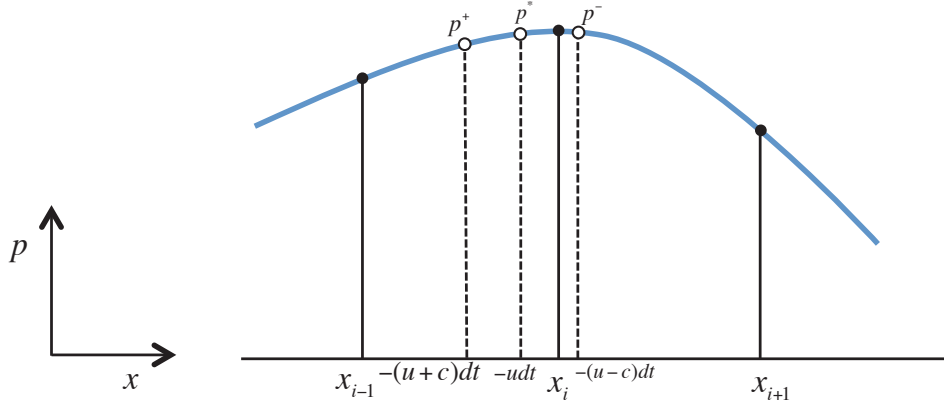
式 (2.12) を展開し、ラグランジュ微分形式で表すと以下の式 (2.15)-式 (2.17) となる。

$$\frac{D}{Dt} \left(\rho - \frac{1}{c_s^2} p \right) = 0, \frac{dx}{dt} = u \quad (2.15)$$

$$\frac{D}{Dt} \left(u + \frac{1}{\rho c_s} p \right) = 0, \frac{dx}{dt} = u + c_s \quad (2.16)$$

$$\frac{D}{Dt} \left(u - \frac{1}{\rho c_s} p \right) = 0, \frac{dx}{dt} = u - c_s \quad (2.17)$$

式 (2.15)-式 (2.17) はそれぞれ特性線 $\frac{dx}{dt} = u, \frac{dx}{dt} = u \pm c_s$ 上で成り立つ常微分方程式となっている。

Fig.2.1: The upwind interpolation according to $u, u+c_s, u-c_s$.

式 (2.15)-式 (2.17) を時間積分し、連立して p, u, ρ について解くと、 $n+1$ 時間ステップの値として式 (2.18)-式 (2.20) を得る。

$$p^{n+1} = \frac{1}{2}(p^+ + p^- + \tilde{\rho}\tilde{c}_s(u^+ - u^-)) \quad (2.18)$$

$$u^{n+1} = \frac{1}{2}\left(u^+ + u^- + \frac{1}{\tilde{\rho}\tilde{c}_s}(p^+ - p^-)\right) \quad (2.19)$$

$$\rho^{n+1} = \rho^* + \frac{1}{\tilde{c}_s^2}(p^{n+1} - p^*) \quad (2.20)$$

上添字の $*, +, -$ はそれぞれ特性速度 $u, u+c_s, u-c_s$ で上流点を補間した値である。上流点補間とは例えば p の場合、Fig. 2.1 のように特性速度の風上方向に多くステンシルを取った補間関数によって補間値を構築する。また上添字 $\sim$ は微小時間での変化がないと仮定された物理量であり、 n ステップ目の値を用いて計算される。

2.4.2 多次元オイラー方程式に対する特性線解法

1次元では各物理量は特性線に沿って伝搬するが、例えば2次元では特性面に沿って伝搬する。特性面を解く方法として従特性線曲線法 (Method of Bicharacteristic) [55] があるが、この方法は波を多次元的に得る必要があり、計算コストが高い。そこで、多次元の支配方程式を解く場合に、方向分離法を用いる。方向分離法は多次元の場合でも1次元的に波の伝搬を捉えれば良く、各次元へ同じ操作を繰り返せば良いため定式化が容易である。以下で、2次元の場合の方向分離法を用いた定式化について説明する。

2次元オイラー方程式は式 (2.21), 式 (2.22) で記述される。

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = 0 \quad (2.21)$$

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho E \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(\rho E + p) \end{pmatrix}, \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(\rho E + p) \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

1次元の場合と同様に、式(2.21), 式(2.22)を非保存系に変形すると以下の式(2.23), 式(2.24)を得る。

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} + \mathbf{B}(\mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial y} = 0 \quad (2.23)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} u & \rho & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & \frac{1}{\rho} \\ 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & \rho c_s^2 & 0 & u \end{bmatrix}, \mathbf{B}(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} v & \rho & 0 & 0 \\ 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & \frac{1}{\rho} \\ 0 & 0 & \rho c_s^2 & v \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

方向分離法は、式(2.23)を以下の x 方向についての式(2.25)を解き、得られた解を元に y 方向についての式(2.26)を解く方法である。

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} = 0 \quad (2.25)$$

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{B}(\mathbf{q}) \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial y} = 0 \quad (2.26)$$

まず、 x 方向について考えると、1次元の特性線法による定式化と同じ手順で離散化することができる。対角化を行い、式(2.27), 式(2.28)を得る。

$$\mathbf{L}_1 \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{\Lambda}_1 \mathbf{L}_1 \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} = 0 \quad (2.27)$$

$$\mathbf{L}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -\frac{1}{c_s^2} \\ 0 & 1 & 0 & \frac{1}{\rho c_s} \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{1}{\rho c_s} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{\Lambda}_1 = \begin{bmatrix} u & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u + c_s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u - c_s & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u \end{bmatrix}, \mathbf{q} = \begin{pmatrix} \rho \\ u \\ v \\ p \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

式(2.27)を展開し、ラグランジュ微分形式で表すと式(2.29)-式(2.31)となる。

$$\frac{D}{Dt} \left(\rho - \frac{1}{c_s^2} p \right) = 0, \frac{dx}{dt} = u \quad (2.29)$$

$$\frac{D}{Dt} \left(u \pm \frac{1}{\rho c_s} p \right) = 0, \frac{dx}{dt} = u \pm c_s \quad (2.30)$$

$$\frac{D}{Dt} (v) = 0, \frac{dx}{dt} = u \quad (2.31)$$

同様にして、 y 方向についても対角化及び展開を行い、ラグランジュ微分形式で表すと式(2.32)-式(2.34)

となる。

$$\frac{D}{Dt} \left(\rho - \frac{1}{c_s^2} p \right) = 0, \frac{dy}{dt} = v \quad (2.32)$$

$$\frac{D}{Dt} \left(v \pm \frac{1}{\rho c_s} p \right) = 0, \frac{dy}{dt} = v \pm c_s \quad (2.33)$$

$$\frac{D}{Dt}(u) = 0, \frac{dy}{dt} = v \quad (2.34)$$

以上の式 (2.29)-式 (2.34) を時間積分し連立して p, u, v, ρ について解くと, $n+1$ 時間ステップでの物理量は x 方向, y 方向それぞれで以下ようになる。

x 方向 :

$$p^{n+1} = \frac{1}{2} (p^+ + p^- + \rho^n c_s (u^+ - u^-)) \quad (2.35)$$

$$u^{n+1} = \frac{1}{2} \left(u^+ + u^- + \frac{1}{\rho^n c_s} (p^+ - p^-) \right) \quad (2.36)$$

$$v^{n+1} = v^* \quad (2.37)$$

$$\rho^{n+1} = \rho^* + \frac{1}{c_s^2} (p^{n+1} - p^*) \quad (2.38)$$

y 方向 :

$$p^{n+1} = \frac{1}{2} (p^+ + p^- + \rho^n c_s (v^+ - v^-)) \quad (2.39)$$

$$u^{n+1} = u^* \quad (2.40)$$

$$v^{n+1} = \frac{1}{2} \left(v^+ + v^- + \frac{1}{\rho^n c_s} (p^+ - p^-) \right) \quad (2.41)$$

$$\rho^{n+1} = \rho^* + \frac{1}{c_s^2} (p^{n+1} - p^*) \quad (2.42)$$

以上のようにして, 多次元の場合は 1 次元の場合の手順を繰り返すことで $n+1$ 時間ステップの値が求まる. 3 次元の場合はこれに z 方向の速度 w を考えて同様に解けばよい。

2.4.3 重力項

圧縮性 Navier-Stokes 方程式に含まれる重力項は圧縮性 Navier-Stokes 方程式の外力項を $\mathbf{K} = (0, 0, -\rho g)$ とすれば, フラクショナル・ステップ法を用いれば単純に下記のような式で, 特性線による時間発展のあとに計算できる。

$$\frac{\partial w}{\partial t} = g \quad (2.43)$$

ここで、 g は重力加速度であり、特に断りがない限り $g = 9.8 \text{ m/s}^2$ とする。重力項の評価は式 (2.43) の右辺が定数であるように、非常に簡単な計算であるので、わざわざこの計算のためにループを回す必要性も薄い。そのため特性線による時間発展の z 方向の速度 w の時間発展式中で重力項の評価も行う。

2.4.4 粘性応力項

本手法は低マッハ数領域の流れに対して適用するため、非圧縮性ニュートン流体に対する粘性応力の評価式を用いる。粘性応力テンソル τ は粘性係数 μ を用いると次のように表される。

$$\begin{aligned} \tau &= \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \\ &= \mu \begin{pmatrix} 2\frac{\partial u}{\partial x} & \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right) & \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x}\right) \\ \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}\right) & 2\frac{\partial v}{\partial y} & \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y}\right) \\ \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z}\right) & \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z}\right) & 2\frac{\partial w}{\partial z} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.44)$$

したがって、粘性応力は式 (2.45) となる。

$$\nabla \cdot \tau = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left(2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

なお、二相流の場合は粘性係数 μ が空間変化することに注意する。フラクショナル・ステップ法で評価するので、例えば x 方向速度 u の時間微分に対して次のようにして粘性項を評価する、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right) \right) \quad (2.46)$$

y, z 方向の速度 v, w に対しても同様に評価する。また、水と空気の場合など、粘性応力が支配的でない流れの場合、下記のようにして近似的に同一方向に対する微分のみを含んだ完全方向分離の形式で解くことができる。

$$\nabla \cdot \tau = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left(2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial}{\partial y} \left(2\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(2\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

2.5 二相流モデル

本研究では、フラクショナル・ステップ法で特性線、重力、粘性、表面張力、接触角を逐次的に評価していく。気液二相流では密度・粘性係数が界面で空間的に変化するため、特性線による計算では单相の場合と比べて密度の計算のみが変わる。具体的には、二相流計算では式 (2.20)、式 (2.38)、式 (2.42) では密度の時間発展を行わずに、液相で $\phi = 1$ 、気相で $\phi = 0$ となる秩序変数 ϕ を保存型 Phase field 法で時間発展させ、以下の式から求める。

$$\rho = \phi \rho_l + (1 - \phi) \rho_g \quad (2.48)$$

ここで下添え字 l は液相の、 g は気相の値を表す。粘性係数も同様に

$$\mu = \phi \mu_l + (1 - \phi) \mu_g \quad (2.49)$$

から求める。

2.5.1 保存型 Phase field 法

Phase field 法 [56] は非平衡熱力学の自由エネルギー理論 [57] に基づく DIM の一つで、系の自由エネルギー汎関数が最小となるように相の平衡状態を決定する手法である。Phase field 法では界面形状を表す秩序変数 ϕ を定義し時間発展を解く。秩序変数を液相に $\phi = 1$ 、気相に $\phi = 0$ と割り当て、その間の $0 < \phi < 1$ の有限厚さ領域を界面と見なすことで VOF 法における VOF 値と同じような役割を果たす。Phase field 法では、大きく分けて保存系に対する時間依存 Ginzburg Landau (TDGL: Time-Dependent Ginzburg Landau) 方程式を解く Cahn-Hilliard 型方程式と、非保存系に対する TDGL 方程式である Allen-Cahn 型方程式を解くものがある。気液二相流解析を行うにあたっては、非混合性で各相の質量が保存されるため保存系に対する方程式である Cahn-Hilliard 型方程式が一見適していると考えられるが、Cahn-Hilliard 型方程式は一般に 4 階微分項といった高階微分項が含まれるために計算に用いるステンシルが多くなり、形状精度も悪いという欠点があった。近年、保存形に修正された Allen-Cahn 型方程式が提案され、気液二相流の界面捕獲手法として非常に良い結果が報告されている [28]。保存型 Allen-Cahn 方程式は下記で表される。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi) = \tilde{\gamma} \left\{ \varepsilon \nabla \cdot (\nabla \phi) - \nabla \cdot \left(\phi (1 - \phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \right\} \quad (2.50)$$

既往の Phase field 方程式では、曲率依存の界面形成が式に含まれてしまっており、表面張力を運動方程式で評価すると、表面張力をダブルカウントしてしまうという問題もあった。しかし、式 (2.50) では、曲率の影響を排除した式となっており、ダブルカウントすることなく流速 $\mathbf{u}$ に対して表面張力効果を考慮することができる。式 (2.50) の平衡状態における界面プロファイルは界面からの符号付距離関数 ψ を用いて下記の式で表される。

$$\phi_0 = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \tanh \frac{\psi}{2\varepsilon} \right\} \quad (2.51)$$

初期界面プロファイル ϕ_0 は、符号付き距離関数を与え、式 (2.51) から計算する。

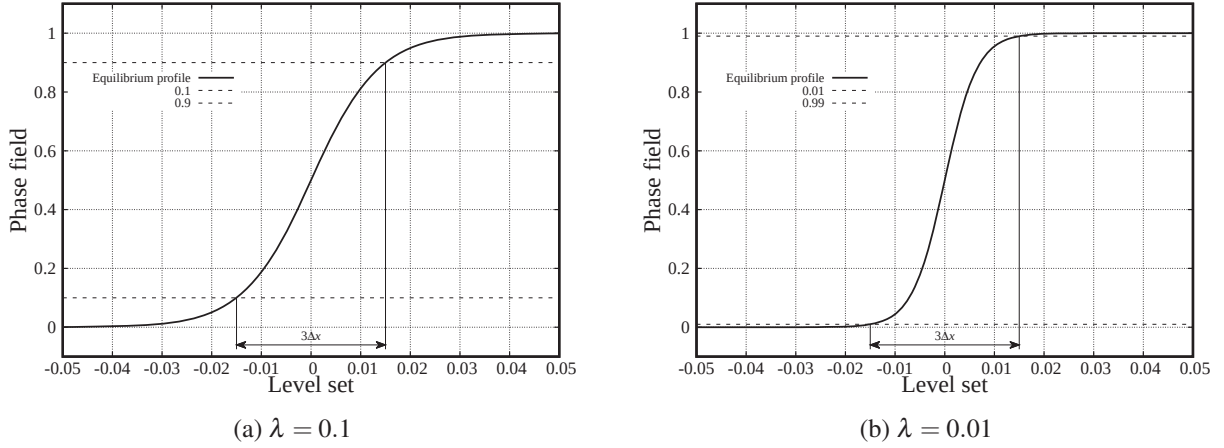


Fig.2.2: Interface parameters at equilibrium state of Allen-Cahn equation, the interface width corresponding to $\lambda < \phi < (1 - \lambda)$ for this figure are $\delta = 0.03$.

式 (2.50) は簡易なパラメータで式が表されているが、Phase field 法ではパラメータによって界面挙動が変わるため、注意深く設定する必要がある。より詳細に界面プロファイルのパラメータで設定できるように Fig. 2.2 に示す通り、 $\lambda < \phi < (1 - \lambda)$ に対応する界面幅を δ としてパラメータを与えると、 ε は以下のように計算できる。

$$\varepsilon = \frac{\delta}{4} \frac{1}{\tanh^{-1}(1 - 2\lambda)}. \quad (2.52)$$

次に $\bar{\gamma}$ について考える。 $\bar{\gamma}$ は Phase field の易動度（モビリティ）を表す係数となっている。式 (2.50) の右辺は左辺で生じる数値粘性による界面の引き伸ばしに対して、界面プロファイルが $\tanh$ で表される平衡状態に修正する効果を持つ。そのため右辺が正確ならば $\bar{\gamma}$ は大きいほど良いが、実際には右辺も数値的に計算されるため誤差が含まれる。左辺による時間発展がほとんどないような低速の場合に右辺を過大評価してしまうと右辺に含まれる数値誤差によって界面形状が悪化する。Chiu らによれば $|\mathbf{u}|_{\max}$ の値が用いられており、界面が数値粘性によって引き延ばされる量を見積もっていると考えられる。本研究では、調整可能なパラメータ M_ϕ 各軸方向 (3 次元なら $j = 1, 2, 3$) の流速の最大値 $|u_j|_{\max}$ を用いて、 $\bar{\gamma}_j = M_\phi |u_j|_{\max}$ を用いる。

2.5.2 Level Set 法

Level Set 法 [58] は、符号付距離関数としての性質を持つものであり、Osher らによって提案され、界面捕獲手法として気液二相流解析にも用いられてきた [23]。Level Set 関数 ψ は計算領域を $\psi > 0$ と $\psi < 0$ に分け、それによって相を切り分ける。Fig. 2.3 のように $\psi = 0$ の等値面が相界面を表す。

Level Set 関数は下記の移流方程式に従って時間発展する。

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \psi = 0 \quad (2.53)$$

Level Set 関数は、界面からの符号付距離を表すものであり、

$$|\nabla\psi| = 1 \quad (2.54)$$

という性質を持つ。この性質のおかげで、VOF 法や Phase field 法などの拡散界面としての値を持つ指標関数から界面の法線や曲率などの幾何計算をするよりも、Level Set 関数から計算した方が精度が良い。しかし、長時間積分による数値誤差によって $|\nabla\psi| = 1$ の性質を満たさなくなってくる。そのため、Level Set 関数の「再初期化」と呼ばれる処理を行い、符号付距離関数としての性質を保つ必要がある。

再初期化は、ある物理時間ステップ内で次の偏微分方程式を仮想的な時間刻み τ を用いて時間発展させることで行われる。

$$\frac{\partial\psi}{\partial\tau} = -S(\psi)(|\nabla\psi| - 1) \quad (2.55)$$

$$S(\psi) = \frac{\psi}{\sqrt{\psi^2 + |\nabla\psi|^2 \Delta x^2}} \quad (2.56)$$

式 (2.55), 式 (2.56) をそのまま離散化して計算すると、球の中心などの Level Set 関数が微分不可能な場所で、数値振動が起こる。数値振動を防ぐために $\frac{\partial\psi^2}{\partial x}$ を求める際に以下のような処理をする。

$$\frac{\partial\psi^2}{\partial x} = \begin{cases} \max \left(\left(\max \left(\frac{\partial\psi^-}{\partial x}, 0 \right) \right)^2, \left(\min \left(\frac{\partial\psi^+}{\partial x}, 0 \right) \right)^2 \right) & (\psi > 0) \\ \max \left(\left(\min \left(\frac{\partial\psi^-}{\partial x}, 0 \right) \right)^2, \left(\max \left(\frac{\partial\psi^+}{\partial x}, 0 \right) \right)^2 \right) & (\psi \leq 0) \end{cases} \quad (2.57)$$

ここで、 $\frac{\partial\psi^+}{\partial x}$ は x 正方向にステンシルを多く取った風上差分で計算するという意味であり、 $\frac{\partial\psi^-}{\partial x}$ は x 負方向に多くステンシルを取った風上差分で計算することを表す。

再初期化計算は、1 ステップに $\frac{\Delta\tau}{\Delta x}$ 格子分更新されていくので、本研究では、 $\frac{\Delta\tau}{\Delta x} = 0.5$ とし、物理時間ステップ数百ステップごとに 30 回程度計算を行う。これは陽解法の時間刻みが音速に支配され、小さいため、流速のスケールで進む Level Set 関数の移流による誤差蓄積は、半陰解法と比べて時間ステップが多くかかるためである。

2.5.3 Level Set 関数と Phase field 法のカップリング

Sussman によって、VOF 法と Level Set 法とカップリングさせた CLSVOF 法が提案されている [27]。VOF 法は相質量の保存性に優れるが、法線などの幾何計算に難があり、界面形状の精度が悪いという欠点がある。一方 Level Set 法は、幾何計算は高精度だが、保存性が悪いために、格子解像度未満の気泡が消滅するという物理的に不整合な欠点を持つ。この二つを組み合わせた CLSVOF 法では、界面捕獲を VOF 法で行い、VOF 値から生成した Level Set 関数で幾何計算を行うことで、相質量保存を保ちつつ高精度な幾何計算が可能となる。

本研究では Phase field 法を用いるが、指標関数 ϕ は VOF 値と似たような役割を果たすので、CLSVOF 法と似たような考え方でカップリングを行うことができる。具体的なカップリングの方法は、Level Set

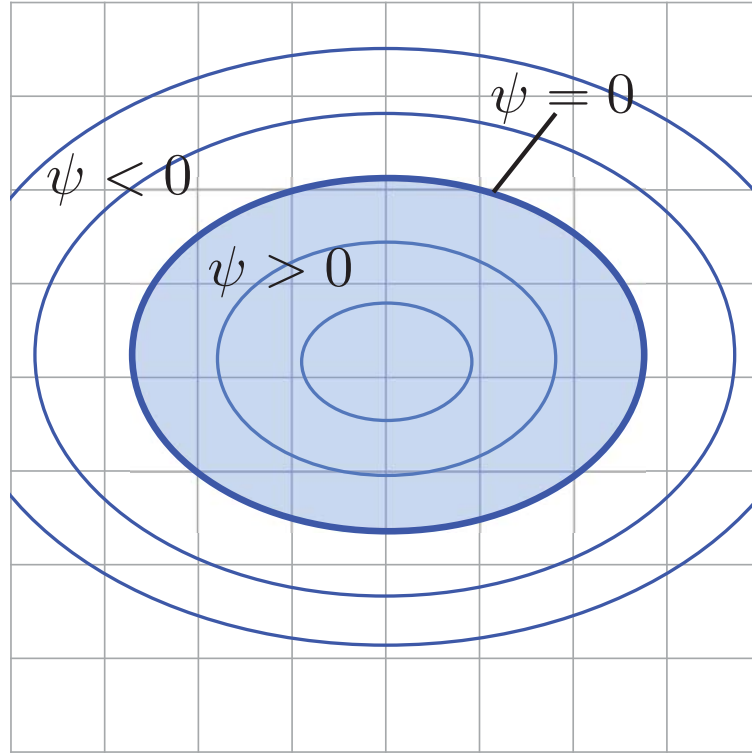


Fig.2.3: The property of the level-set function as signed distance function.

関数の再初期化の式 (2.55) に与える Level Set 関数の初期値 ψ_0 に, Phase field 変数の平衡状態の式 (2.51) から ψ について解くと以下の式を得る.

$$\psi_0(\phi) = \varepsilon \ln \frac{\phi}{1-\phi} \quad (k\lambda < \phi < 1-k\lambda) \quad (2.58)$$

式 (2.58) は対数を含んでいるため, 界面からごく近傍のみで計算する. 本研究では調整可能なパラメータ $k = 1.0$ 程度に設定する. 式 (2.58) で修正された Level Set 関数の界面位置は Phase field 変数とほぼ一致するはずなので, 保存形 Allen-Cahn 方程式 (2.50) 中の法線ベクトルとみなせる項を,

$$\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} = \frac{\nabla \psi}{|\nabla \psi|} \quad (2.59)$$

で計算することで幾何形状精度を向上させる.

全計算領域で式 (2.58) から Level Set 関数を生成する場合, Level Set 関数の再初期化は計算量の観点から 30 ステップ程度しか行われず, 界面から高々 15 格子分までしか計算されないため, Fig. 2.4 のように再初期化計算の末端では正しくない Level Set 関数の勾配が計算される. 非圧縮性流体解析では音波の伝搬を無視するため, 界面近傍のみ正しい Level Set 関数が入れば良いので, 再初期化の末端について議論する必要はない. 一方で, 弱圧縮性流体解析では音波の伝搬が圧力波として伝搬するため, 微小ながらも ϕ が圧力波によって伝搬する. そのため, 伝搬した微小の ϕ が再初期化の末端にトラップされ計算結果に悪影響を及ぼすことがある. このようなエラーを防ぐため Level Set による勾配計算で以下のよう

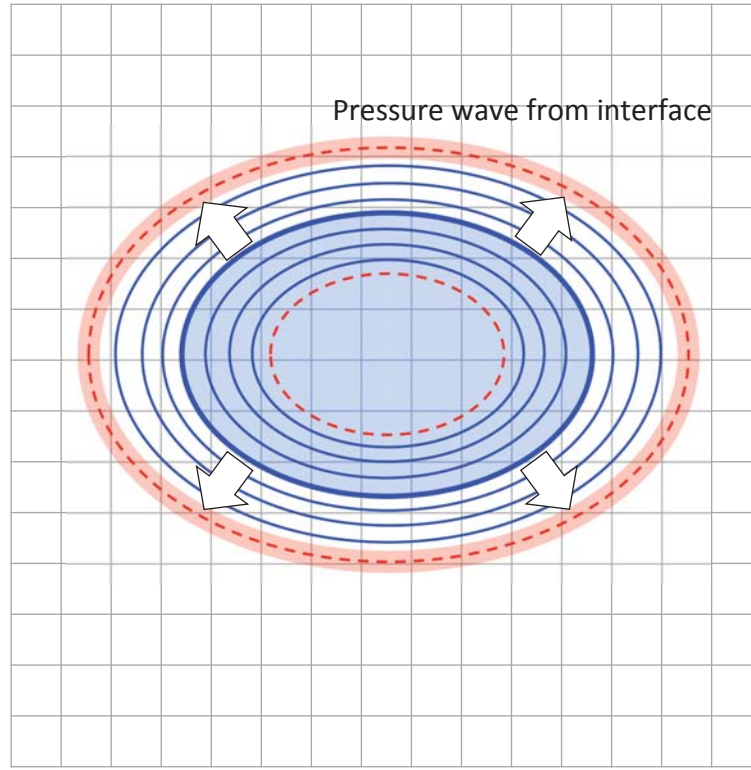


Fig.2.4: The trapped phase-field value by incorrect normal vector around the end area of level-set reinitialization.

な処理を施す.

$$\nabla\psi = \begin{cases} (0,0,0) & (|\psi| > s) \\ \nabla\psi & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (2.60)$$

ここで, s は再初期化計算が 30 ステップ程度行われるなら 15 格子までは正しい Level Set 関数の値が設定されているので, $s = 10\Delta x$ 程度に設定する.

2.5.4 表面張力の評価

表面張力は相界面に作用する面積力である. しかしながら, Phase field 法や Level Set 法は界面位置を陰的に表す関数の時間発展を解く手法であるため, 界面のみに面積力を作用させるのは困難であり, 仮に界面位置を探して作用させても数値的不安定性の原因となってしまう.

本研究では, 表面張力の計算に Yokoi によって提案された Level Set based density-scaled balanced continuous surface force モデル [59] を用いる. この手法は Brackbill らによる Continuous Surface Force (CSF) モデル [60] をベースとした手法で, 面積力である表面張力を体積力として界面近傍に振り分ける. 陽的に界面位置を見つける必要がないため, Phase field 法でも適切に表面張力を組み込むことがで

きる。Yokoi によるモデル [59] では表面張力 $\mathbf{f}_s$ は下記で表される。

$$\mathbf{f}_s = \sigma \kappa \nabla H_\alpha^{\text{sc}}(\psi) \quad (2.61)$$

ここで、 σ は表面張力係数、 κ は界面曲率、 $H_\alpha^{\text{sc}}(\psi)$ は密度スケーリングされた近似 Heaviside 関数で、 ψ は Level Set 関数である。 $H_\alpha^{\text{sc}}(\psi)$ は近似 Heaviside 関数 $H_\alpha(\psi)$ 、密度スケーリングされた密度デルタ関数 $\delta_\alpha^{\text{sc}}(\psi)$ を用いて下記のように表される。

$$H_\alpha(\psi) = \begin{cases} 0 & (\psi < -\alpha) \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\psi}{\alpha} + \frac{1}{\pi} \sin \left(\frac{\pi \psi}{\alpha} \right) \right) & (|\psi| \leq \alpha) \\ 1 & (\psi > \alpha) \end{cases} \quad (2.62)$$

$$\delta_\alpha(\psi) = \frac{\partial H_\alpha}{\partial \psi} = \begin{cases} \frac{1}{2\alpha} \left(1 + \cos \left(\frac{\pi \psi}{\alpha} \right) \right) & (|\psi| \leq \alpha) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (2.63)$$

$$\delta_\alpha^{\text{sc}}(\psi) = 2H_\alpha(\psi)\delta_\alpha(\psi) \quad (2.64)$$

$$H_\alpha^{\text{sc}}(\psi) = \begin{cases} 0 & (\psi < \alpha) \\ \frac{1}{4} \left(1 + \frac{\psi}{\alpha} + \frac{1}{\pi} \sin \left(\frac{\pi \psi}{\alpha} \right) \right) & (|\psi| \leq \alpha) \\ 1 & (\psi > \alpha) \end{cases} \quad (2.65)$$

α は界面幅の半分を表すパラメータで、Phase field 法ではパラメータとして界面幅を与えることができるので、その半分の値を与える。密度スケーリングすることで、近似デルタ関数のピークが密度の大きい流体側に寄るため、表面張力による加速度の大きさが界面の両側で対称になり、加速度の掛かり方が均一に近づく。

この手法は balanced force algorithm[61] を元にして作られているため、表面張力の離散化の仕方を圧力項と一致させる必要がある。本手法では圧力項は速度離散式で式 (2.19) のように表されるので、表面張力項は例えば x 方向について下記のように記述できる。

$$f_{sx} = \sigma \kappa \frac{1}{2c} (H_\alpha^{\text{sc}+}(\psi) - H_\alpha^{\text{sc}-}(\psi)) \quad (2.66)$$

本手法ではフラクショナル・ステップ法で逐次的に評価していくので、下記のように速度の時間微分に対して表面張力項を評価する。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \kappa \frac{1}{2\rho c} (H_\alpha^{\text{sc}+}(\psi) - H_\alpha^{\text{sc}-}(\psi)) \quad (2.67)$$

2.5.5 接触角の評価

固相・液相・気相といった異なる相が接触する際に、各相の物性値によって境界面で相同士の成す角は変化する。このうち液相と固相が接触面で成す角を接触角と呼び、“濡れ”の程度を定量化したものであ

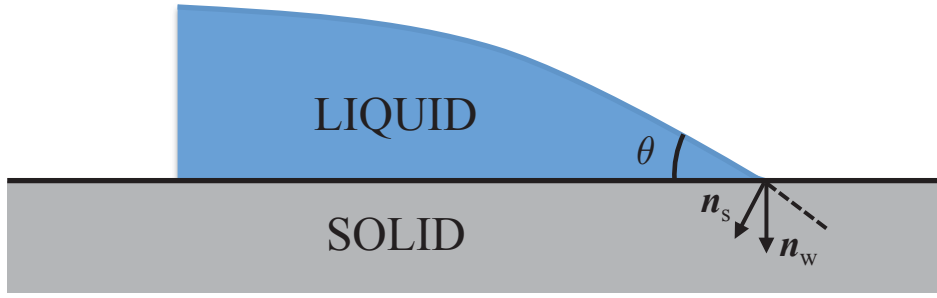


Fig.2.5: The definition of normal vectors according to the contact angle.

る。接触角が小さい場合は濡れやすく、その性質を親水性と呼ぶ。一方接触角が大きい場合は濡れにくいことを表し、その性質を撥水性と呼ぶ。接触角は液相と固相の物性により変化し、固体表面上で液体が安定した状態での接触角を静的接触角、固体上を液体が運動している時の接触角を動的接触角という。動的接触角については数値計算に取り入れるモデルが未だに確立されておらず、あっても半経験的な式であるので、本研究では静的接触角のみを扱う。

本研究では、Sussman らにより提案された Level Set 関数を用いたモデル [62] を用いる。このモデルでは、物体内に位置する気液界面の Level Set 関数を外挿し、境界条件として接触角を反映させる。修正されるのが物体内部に位置する Level Set 関数のみなので、物理量の保存性に一切影響しないという利点がある。また、固液相の接触点を陽的に探す必要がないため、任意形状の物体への適用も、物体の Level Set 関数さえあればそのまま適用可能であるという利点もある。

物体内に位置する気液界面の Level Set 関数は以下の偏微分方程式を時間発展させて外挿する。

$$\frac{\partial \psi_{\text{obj}}}{\partial \tau} + (\mathbf{u}_{\text{ext}} \cdot \nabla) \psi_{\text{obj}} = 0 \quad (2.68)$$

ここで、 τ は仮想的な時間であり、 $\tau = 0.5\Delta x$ とすると式 (2.68) の 1 ステップの計算で Level Set 関数は物体内におよそ 0.5 格子分外挿される。 $\mathbf{u}_{\text{ext}}$ は、Fig. 2.5 で示すように界面の Level Set 関数から得た界面法線を $\mathbf{n}_s$ 、物体自身の Level Set 関数から得た物体法線を $\mathbf{n}_w$ 、接触角を θ とすると、以下のように計算される。

$$\mathbf{u}_{\text{ext}} = \begin{cases} \text{normalize} \left(\mathbf{n}_w - \frac{\mathbf{n}}{\tan(\pi - \theta)} \right) & (s < 0) \\ \text{normalize} \left(\mathbf{n}_w + \frac{\mathbf{n}}{\tan(\pi - \theta)} \right) & (s > 0) \\ \mathbf{n}_w & (s = 0) \end{cases} \quad (2.69)$$

$$\mathbf{n} = \text{normalize}(\mathbf{n}_s \times \mathbf{n}_w \times \mathbf{n}_w) \quad (2.70)$$

$$s = \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{n} \quad (2.71)$$

ここで、normalize はベクトルを正規化する関数である。

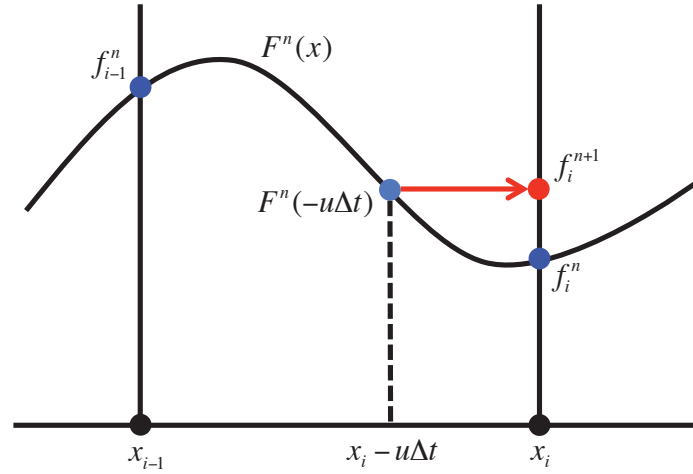


Fig.2.6: Time evolution of advection equation by using semi-Lagrangian scheme.

2.6 離散化手法

2.6.1 特性線解法

特性の理論に基づく定式化によって得られた $n+1$ ステップ目の値は、各物理量の上流点補間の値の足し引きによって表されている。上流点補間の値とは式 (2.29)-式 (2.31) からわかるように、物理量が移流方程式の形で時間発展された値を意味する。

移流方程式の解法として、Euler 法と Lagrangian 法の折衷法である semi-Lagrangian 法を用いる。Euler 法とは、格子上の座標値の位置に注目対象を固定し、各時刻に注目している座標値の位置に存在する素片についての運動を記述する方法である。一方、Lagrangian 法は計算時間全体を通してある流体粒子に注目して運動を記述する。semi-Lagrangian 法は、各時間ステップごとに格子点近傍に流体粒子を仮定し、追跡を行う方法である。例えば、Fig. 2.6 のように、時間ステップ n から $n+1$ における座標点 x_i での物理量 f_i^n, f_i^{n+1} を考える。 $n+1$ ステップと n ステップの時間刻みを Δt とすると、 $n+1$ ステップでは x_i から $u\Delta t$ 遡った点から物理量が流れてくる。semi-Lagrangian 法では格子点上の物理量から補間関数 $F(x)$ を構築することで、式 (2.72) から上流点の値を得る。

$$f_{x_i}^{n+1} = F_{x_i}^n(x_i - u\Delta t) \quad (2.72)$$

即ち、例えば p について

$$p_i^+ = F_{x_i}^n(x_i - (u+c)\Delta t) \quad (2.73)$$

のようにして求まる。

一般に Euler 法では空間離散化に対して高次精度のスキームを用いた場合、時間積分の離散化に対しても高次精度のスキームを用いる必要がある。高次精度の時間積分スキームとしてよく使われるものに Runge Kutta 法が挙げられるが、高次精度であるほど多段計算が必要となり時間がかかってしまう。

一方で semi-Lagrangian 法では一段の計算で時間精度が空間精度と一致するため、少ない計算量で高精度な計算が行えるという利点がある。本研究では補間関数に、5 次精度 WENO (Weighted Essentially Non-Oscillation) スキーム [63] を用いる。WENO スキームは風上スキームの一種で、下記のように 6 点のステンシルを用いて 3 つの 3 次 Lagrange 補間を非線形に組み合わせることによって数値振動を抑制しながら 5 次精度を実現したものである。

$$F_{x_i}^n = w_{\text{dn}}P_{\text{dn}}(x) + w_{\text{ct}}P_{\text{ct}} + w_{\text{up}}P_{\text{up}}(x) \quad (2.74)$$

ここで、 w は重み係数で、 P は 3 次 Lagrange 補間関数を表す。下添字 $\text{dn}, \text{ct}, \text{up}$ はそれぞれ下流側、中心、上流側に多くステンシルを取って計算されたものを表す。実際に補間関数を構築する際には、

$$\begin{cases} \Delta h = \Delta x, \\ f_{\text{ppp}} = f_{i+3}, f_{\text{pp}} = f_{i+2}, f_{\text{p}} = f_{i+1}, \quad (u \leq 0) \\ f_{\text{m}} = f_{i-1}, f_{\text{mm}} = f_{i-2} \end{cases} \quad (2.75)$$

$$\begin{cases} \Delta h = -\Delta x, \\ f_{\text{ppp}} = f_{i-3}, f_{\text{pp}} = f_{i-2}, f_{\text{p}} = f_{i-1}, \quad (u > 0) \\ f_{\text{m}} = f_{i+1}, f_{\text{mm}} = f_{i+2} \end{cases} \quad (2.76)$$

のようにして特性速度 u の符号に応じて風上方向にステンシルをとって、

$$P_{\text{dn}}(x) = a_{\text{dn}}x^3 + b_{\text{dn}}x^2 + c_{\text{dn}}x + f_i \quad (2.77)$$

$$\begin{cases} a_{\text{dn}} = \frac{f_{\text{p}} - 3(f_i - f_{\text{m}}) - f_{\text{mm}}}{6\Delta h^3} \\ b_{\text{dn}} = \frac{f_{\text{p}} - 2f_i + f_{\text{m}}}{2\Delta h^2} \\ c_{\text{dn}} = \frac{2f_{\text{p}} + 3f_i - 6f_{\text{m}} + f_{\text{mm}}}{6\Delta h} \end{cases} \quad (2.78)$$

$$P_{\text{ct}}(x) = a_{\text{ct}}x^3 + b_{\text{ct}}x^2 + c_{\text{ct}}x + f_i \quad (2.79)$$

$$\begin{cases} a_{\text{ct}} = \frac{f_{\text{pp}} - 3(f_{\text{p}} - f_i) - f_{\text{m}}}{6\Delta h^3} \\ b_{\text{ct}} = \frac{f_{\text{p}} - 2f_i + f_{\text{m}}}{2\Delta h^2} \\ c_{\text{ct}} = \frac{-f_{\text{pp}} + 6f_{\text{p}} - 3f_i - 2f_{\text{m}}}{6\Delta h} \end{cases} \quad (2.80)$$

$$P_{\text{up}}(x) = a_{\text{up}}x^3 + b_{\text{up}}x^2 + c_{\text{up}}x + f_i \quad (2.81)$$

$$\begin{cases} a_{\text{up}} = \frac{f_{\text{ppp}} - 3(f_{\text{pp}} - f_{\text{p}}) - f_i}{6\Delta h^3} \\ b_{\text{up}} = -\frac{f_{\text{ppp}} - 4f_{\text{pp}} + 5f_{\text{p}} - 2f_i}{2\Delta h^2} \\ c_{\text{up}} = \frac{2f_{\text{ppp}} - 9f_{\text{pp}} + 18f_{\text{p}} - 11f_i}{6\Delta h} \end{cases} \quad (2.82)$$

上記式 (2.77), 式 (2.79), 式 (2.81) のようにして 3 次 Lagrangian 補間関数を求める．非線形重み付け係数 w_k は

$$w_k(x) = \frac{\alpha_k(x)}{\sum_l \alpha_l(x)} \quad (2.83)$$

$$\alpha_k(x) = \frac{C_k(x)}{(\beta_k + \varepsilon)^2} \quad (2.84)$$

から求める．式 (2.84) 中の ε はゼロ割を防ぐための微小定数で 10^{-10} 程度の値に設定する． $C_k(x)$ は $\sum_k C_k(x) = 1$ を満たし、

$$\begin{aligned} C_{\text{dn}} &= \frac{(-2\Delta h + x)(-3\Delta h + x)}{20\Delta h^2} \\ C_{\text{ct}} &= -\frac{(2\Delta h + x)(-3\Delta h + x)}{10\Delta h^2} \\ C_{\text{up}} &= \frac{(2\Delta h + x)(\Delta h + x)}{20\Delta h^2} \end{aligned} \quad (2.85)$$

から求まる． β_k は smooth indicator で $\beta_k = \sum_{l=1}^n \int_{x_l}^{x_{l+1}} \Delta x^{2l-1} (P_k^{(l)})^2 dx$ という条件から次のように求まる．

$$\begin{aligned} \beta_{\text{dn}} &= \frac{407}{90} f_p f_p + \frac{721}{30} f_i f_i + \frac{248}{15} f_m f_m + \frac{61}{45} f_{\text{mm}} f_{\text{mm}} - \frac{1193}{60} f_p f_i \\ &\quad + \frac{439}{30} f_p f_m - \frac{683}{180} f_p f_{\text{mm}} - \frac{2309}{60} f_i f_m + \frac{309}{30} f_i f_{\text{mm}} - \frac{553}{60} f_m f_{\text{mm}} \end{aligned} \quad (2.86)$$

$$\begin{aligned} \beta_{\text{up}} &= \frac{407}{90} f_i f_i + \frac{721}{30} f_p f_p + \frac{248}{15} f_{\text{pp}} f_{\text{pp}} + \frac{61}{45} f_{\text{ppp}} f_{\text{ppp}} - \frac{1193}{60} f_i f_p \\ &\quad + \frac{439}{30} f_i f_{\text{pp}} - \frac{683}{180} f_i f_{\text{ppp}} - \frac{2309}{60} f_p f_{\text{pp}} + \frac{309}{30} f_p f_{\text{ppp}} - \frac{553}{60} f_{\text{pp}} f_{\text{ppp}} \end{aligned} \quad (2.87)$$

$$\begin{aligned} \beta_{\text{ct}} &= \frac{61}{45} f_m f_m + \frac{331}{30} f_i f_i + \frac{331}{30} f_p f_p + \frac{61}{45} f_{\text{pp}} f_{\text{pp}} - \frac{141}{20} f_m f_i \\ &\quad + \frac{179}{30} f_m f_p - \frac{293}{180} f_m f_{\text{pp}} - \frac{1259}{60} f_i f_p + \frac{179}{30} f_i f_{\text{pp}} - \frac{141}{20} f_p f_{\text{pp}} \end{aligned} \quad (2.88)$$

2.6.2 重力項

重力項は定数であるので当然ながら空間離散化の必要はない．時間積分は 1 次精度で計算し、 z 方向速度 w の計算の中で下記のように評価する．

$$w^{n+1} = \frac{1}{2} \left(w^+ + w^- + \frac{1}{\rho^n c} (p^+ - p^-) \right) + g \Delta t \quad (2.89)$$

2.6.3 粘性応力項

節 2.4.4 で記述した粘性項の式 (2.45) は 2 次精度中心差分法で離散化する．二相流の場合、粘性係数 μ は空間変化するため、微分の外に出すことはできない．このような場合、数学的に整合性を保った離散化を行うため、粘性項中に現れる二階微分項は、差分の差分として計算する．粘性応力項式 (2.45) 中の

項には、速度と微分の方向が一致している $\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)$ のような項と一致していない $\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)$ のような項がある。それぞれに対する離散式は次のように書ける。

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right\}_i = \frac{\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i+1} - \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i-1}}{2\Delta x} \quad (2.90)$$

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) \right\}_i = \frac{\left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)_{j+1} - \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)_{j-1}}{2\Delta y} \quad (2.91)$$

式 (2.90), 式 (2.91) 中の微分は同様に 2 次中心差分で下記のように離散化される。

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \quad (2.92)$$

時間積分は 1 次精度で下記のように計算する。

$$u^{\text{visc}} = u^{\text{chara}} + \left\{ \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(2\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right) \right) \right\} \Delta t \quad (2.93)$$

ここで u^{chara} は重力を含めた特性線によって時間発展された速度（式 (2.19) でいうところの u^{n+1} ）を表し、 u^{visc} は粘性項による時間発展後の速度を表す。

2.6.4 表面張力項

2.5.4 で記述した式 (2.67) 中の密度スケーリングされた近似 Heaviside 関数は、対応する特性速度で semi-Lagrangian 移流させて時間発展させる。表面張力による加速も、フラクショナル・ステップ的に評価するので、

$$u^{n+1} = u^{\text{visc}} + \sigma \kappa \frac{1}{2\rho c} (H_{\alpha}^{\text{sc}+}(\psi) - H_{\alpha}^{\text{sc}-}(\psi)) \quad (2.94)$$

として $n+1$ ステップ目の速度を求める。 y, z 方向の速度についても同様である。

2.6.5 接触角

節 2.5.5 に記述した接触角の評価では、 u, p, ρ といった物理量に直接修正を加えるのではなく、物体内部に位置する界面の Level Set 関数が修正されることによって、表面張力計算における物体内部の境界条件が変化し、結果として接触角が評価されるというものである。式 (2.68) の偏微分方程式の時間発展は 1 次精度で、空間微分は 2 次精度中心差分で離散化する。

$$\psi_{\text{obj}}^{n+1} = \psi_{\text{obj}}^n + \left(u_{\text{ext}} \frac{\partial \psi_{\text{obj}}}{\partial x} + v_{\text{ext}} \frac{\partial \psi_{\text{obj}}}{\partial y} + w_{\text{ext}} \frac{\partial \psi_{\text{obj}}}{\partial z} \right) \quad (2.95)$$

$$\frac{\partial \psi_{\text{obj}}}{\partial x} = \frac{\psi_{\text{obj},i+1} - \psi_{\text{obj},i-1}}{2\Delta x} \quad (2.96)$$

y, z 方向微分についても同様である。

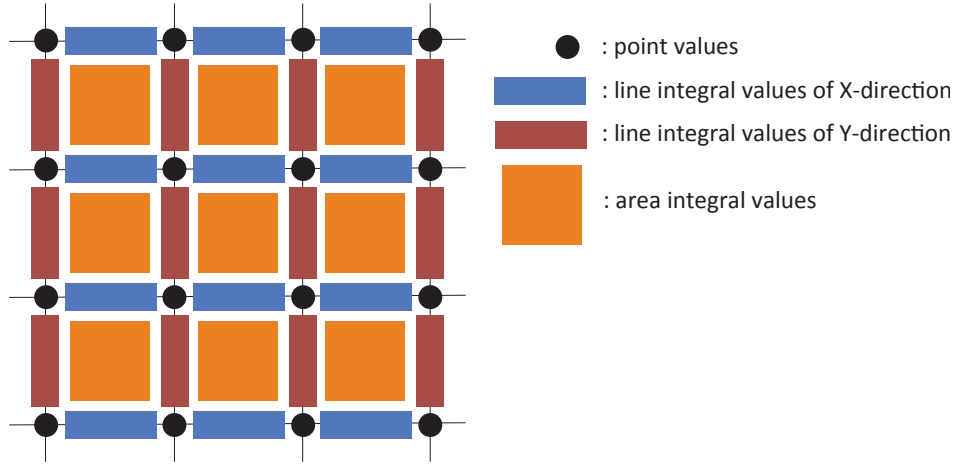


Fig.2.7: The arrangement of multi-moment variables for two-dimensional domain.

2.6.6 保存形マルチモーメント法による保存形 Phase field 法

節 2.5.1 に記述した保存形 Phase field 法を，保存形マルチモーメント法で解く．保存形マルチモーメント法は Fig. 2.7 のように格子点上の値とは別に，格子点と格子点の間に積分値を配置してそれぞれの時間発展を解く手法である．3次元の場合は Fig. 2.8 のように，点値，線積分値，面積積分値，体積分値が配置される．本研究では，式 (2.50) を左辺の ϕ の保存方程式の部分と右辺の拡散・逆拡散の部分に分離して解く．

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) = 0 \quad (2.97)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \bar{\gamma} \left\{ \varepsilon \nabla \cdot (\nabla \phi) - \nabla \cdot \left(\phi (1 - \phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \right\} \quad (2.98)$$

分離して解くことによって，各々の式に別々のスキームを適用することができる．式 (2.97) は CIP-CSLR1 法 [64] で解き，式 (2.98) は保存型 IDO 法 [44] で解く．CIP-CSLR1 法は保存型 CIP 法 [43] をベースとした解法で，補間関数に有理関数を用いたものである．

まず，式 (2.97) の離散化を x 方向を例に考える． x 方向の式は

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial u\phi}{\partial x} = 0 \quad (2.99)$$

と書ける．式 (2.99) の格子点上の値の $n+1$ ステップでの値は，semi-Lagrangian 法を用いて次のように解く．

$$\phi_i^{n+1} = \begin{cases} \Phi_i(x_i - udt) - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(\phi \frac{\partial u}{\partial x} \right) dt & (u_i \leq 0) \\ \Phi_i(x_{i-1} - udt) - \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(\phi \frac{\partial u}{\partial x} \right) dt & (u_i > 0) \end{cases} \quad (2.100)$$

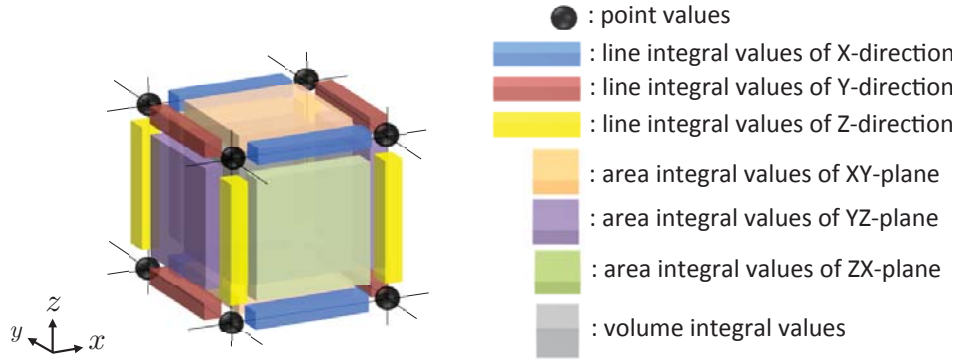


Fig.2.8: The arrangement of multi-moment variables for three-dimensional domain.

ここで、 Φ_i は周囲の点値および積分値を拘束条件として求められた補間関数である．semi-Lagrangian 不変数の解を計算し．

$$\phi_i^* = \begin{cases} \Phi_i(x_i - udt) & (u_i \leq 0) \\ \Phi_{i-1}(x_i - udt) & (u_i > 0) \end{cases} \quad (2.101)$$

速度発散の軌跡に沿う積分による修正を加える．一般にこの積分は容易ではないので，以下のように求める [65].

$$\phi_i^{n+1} = \begin{cases} \phi_i^* - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\phi_i^* + \phi_i^n)(u_{i+1} - u_i) & (u_i \leq 0) \\ \phi_i^* - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(\phi_i^* + \phi_i^n)(u_i - u_{i-1}) & (u_i > 0) \end{cases} \quad (2.102)$$

次に，積分値については，点値との次元を合わせておくこと計算上都合が良いので， ϕ を x_i から x_{i+1} まで積分したものを格子幅 Δx で割った積分平均値を次のように定義しておく．

$${}^x\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \phi dx \quad (2.103)$$

式 (2.99) を x_i から x_{i+1} まで積分すると，次のように記述できる．

$$\frac{\partial {}^x\bar{\phi}}{\partial t} + \frac{1}{\Delta x} (u_{i+1}\phi_{i+1} - u_i\phi_i) = 0 \quad (2.104)$$

積分値の時間発展を求めるために，式 (2.104) を時間積分すれば， $n+1$ ステップでの積分平均値は，

$${}^x\bar{\phi}^{n+1} = {}^x\bar{\phi}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\int_{t^n}^{t^{n+1}} u_{i+1}\phi_{i+1} dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} u_i\phi_i dt \right) = 0 \quad (2.105)$$

となる．式 (2.105) の積分値は補間関数を用いれば，

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} u_i\phi_i dt = \int_{x_i}^{x_i - u_i \Delta t} \Phi_i dx \quad (2.106)$$

で近似的に求まる．CIP-CSLR1 法 [64] では補間関数に以下のような有理関数を用いる．

$$\Phi_i(x) = \frac{c_0 + 2c_1(x - x_i) + (3c_2 + \alpha\beta c_1)(x - x_i)^2 + 2\alpha\beta c_2(x - x_i)^3}{(1 + \alpha\beta(x - x_i))^2} \quad (2.107)$$

補間関数は、移流速度に対して風上方向に3つのモーメントの値を用いて構成される。移流速度 u に応じて下記のように変数を定義しておく、

$$\begin{cases} \Delta h = \Delta x, \\ \phi_p = \phi_{i+1}, \\ {}^x\bar{\phi}_p = {}^x\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (u \leq 0) \quad (2.108)$$

$$\begin{cases} \Delta h = -\Delta x, \\ \phi_p = \phi_{i-1}, \\ {}^x\bar{\phi}_p = {}^x\bar{\phi}_{i-\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (u > 0) \quad (2.109)$$

未知数 β は

$$\beta = \frac{1}{\Delta h} \left(\left| \frac{\phi_i - {}^x\bar{\phi}_p}{{}^x\bar{\phi}_p - \phi_p} \right| - 1 \right) \quad (2.110)$$

から求まり、その他の未知数 c_0, c_1, c_2 は周囲の点値および積分値から下記のように決定される。

$$\begin{cases} c_0 = \phi_i \\ c_1 = \frac{\gamma(2{}^x\bar{\phi}_p - \phi_p) + {}^x\bar{\phi}_p - 2\phi_i}{\Delta h} \\ c_2 = \frac{\gamma({}^x\bar{\phi}_p - \phi_p) - {}^x\bar{\phi}_p + \phi_i}{\Delta h^2} \end{cases} \quad (2.111)$$

where :

$$\begin{cases} \alpha = 1 \\ \gamma = 1 + \alpha\beta\Delta h \end{cases} \quad (2.112)$$

ここで α は switching parameter であり、0 か 1 の値をとる。 $\alpha = 1$ で有理関数 CIP となり、 $\alpha = 0$ で 2 次補間関数に帰着する。

拡散・逆拡散については、保存型 IDO 法を用いて点値および積分値を時間発展させる。本研究では保存型 IDO 法として中心補間関数を用いる保存型 IDO-CF 法で補間値および微分値を計算する。保存型 IDO-CF 法では、3つの点値と2つの積分値を拘束条件として構築される4次多項式で補間関数が定まる。

$$\Phi(x) = \sum_{j=0}^4 C_j (x - x_i)^j \quad (2.113)$$

C_j は周囲の3つの点値と2つの積分値を拘束条件として下記のように求まる。

$$\begin{cases} C_0 = \phi_i \\ C_1 = -\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} + \frac{2({}^x\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2}} - {}^x\bar{\phi}_{i-\frac{1}{2}})}{\Delta x} \\ C_2 = -\frac{3(\phi_{i+1} + 8\phi_i + \phi_{i-1})}{4\Delta x^2} + \frac{15({}^x\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2}} + {}^x\bar{\phi}_{i-\frac{1}{2}})}{4\Delta x^2} \\ C_3 = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{\Delta x^3} - \frac{2({}^x\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2}} - {}^x\bar{\phi}_{i-\frac{1}{2}})}{\Delta x^3} \\ C_4 = \frac{5(\phi_{i+1} + 4\phi_i + \phi_{i-1})}{4\Delta x^4} - \frac{15({}^x\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2}} + {}^x\bar{\phi}_{i-\frac{1}{2}})}{4\Delta x^4} \end{cases} \quad (2.114)$$

ここで式 (2.98) 中の $\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}$ は法線ベクトルと見ることができるため、 $\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} = (n_x, n_y, n_z)$ と表す。時間積分は 1 次精度で離散化すると x 方向の点値の時間発展は

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \left[\bar{\gamma} \epsilon \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \bar{\gamma} \left\{ n_x \frac{\partial}{\partial x} \phi (1 - \phi) + \frac{\partial n_x}{\partial x} \phi (1 - \phi) \right\} \right] \Delta t \quad (2.115)$$

で求める。ここで、 n_x の微分を IDO 法で求める際に必要となる積分平均値は

$${}^x \bar{n}_{x_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{(n_{x_{i+1}} + n_{x_i})}{2} \quad (2.116)$$

から求める。次に積分値の時間発展は、式 (2.98) を x_i から x_{i+1} まで積分すれば、

$$\frac{\partial^x \bar{\phi}}{\partial t} = \bar{\gamma} \epsilon \frac{1}{\Delta x} \left\{ \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1} - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i \right\} - \bar{\gamma} \frac{1}{\Delta x} \{ \phi_{i+1} (1 - \phi_{i+1}) n_{x_{i+1}} - \phi_i (1 - \phi_i) n_{x_i} \} \quad (2.117)$$

となり、式 (2.117) 中の空間微分項は、保存型 IDO-CF 法で構築した補間関数を微分して求める。式 (2.117) の時間積分は同様に 1 次精度で計算して、

$${}^x \bar{\phi}^{n+1} = {}^x \bar{\phi}^n + \left[\bar{\gamma} \epsilon \frac{1}{\Delta x} \left\{ \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_{i+1} - \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i \right\} - \bar{\gamma} \frac{1}{\Delta x} \{ \phi_{i+1} (1 - \phi_{i+1}) n_{x_{i+1}} - \phi_i (1 - \phi_i) n_{x_i} \} \right] \Delta t \quad (2.118)$$

から求まる。

2.6.7 Level Set 関数の移流計算と再初期化

節 2.5.2 で記述した Level Set 関数の移流方程式である式 (2.53) と再初期化のための偏微分方程式である式 (2.55)、式 (2.56) の空間微分には 5 次精度 HJ-WENO 法 [66] を用いる。5 次精度 HJ-WENO 法は 3 次精度微分を非線形重み付けで組み合わせることによって、数値振動を抑えながら 5 次精度を実現したものである。

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_i = \omega_0 \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_i^0 + \omega_1 \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_i^1 + \omega_2 \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_i^2 \quad (2.119)$$

$$\begin{cases} \Delta h = \Delta x, \\ \psi_{\text{ppp}} = \psi_{i+3}, \psi_{\text{pp}} = \psi_{i+2}, \psi_{\text{p}} = \psi_{i+1}, \quad (u \leq 0) \\ \psi_{\text{m}} = \psi_{i-1}, \psi_{\text{mm}} = \psi_{i-2} \end{cases} \quad (2.120)$$

$$\begin{cases} \Delta h = -\Delta x, \\ \psi_{\text{ppp}} = \psi_{i-3}, \psi_{\text{pp}} = \psi_{i-2}, \psi_{\text{p}} = \psi_{i-1}, \quad (u > 0) \\ \psi_{\text{m}} = \psi_{i+1}, \psi_{\text{mm}} = \psi_{i+2} \end{cases} \quad (2.121)$$

$$\begin{aligned} v_0 &= (\psi_{\text{ppp}} - \psi_{\text{pp}}) / \Delta h \\ v_1 &= (\psi_{\text{pp}} - \psi_{\text{p}}) / \Delta h \\ v_2 &= (\psi_{\text{p}} - \psi_i) / \Delta h \\ v_3 &= (\psi_i - \psi_{\text{m}}) / \Delta h \\ v_4 &= (\psi_{\text{m}} - \psi_{\text{mm}}) / \Delta h \end{aligned} \quad (2.122)$$

$$\begin{aligned}
IS_0 &= \frac{13}{12} (v_0 - 2v_1 + v_2)^2 + \frac{1}{4} (v_0 - 4v_1 + 3v_2)^2 \\
IS_1 &= \frac{13}{12} (v_1 - 2v_2 + v_3)^2 + \frac{1}{4} (v_1 - v_3) \\
IS_2 &= \frac{13}{12} (v_2 - 2v_3 + v_4)^2 + \frac{1}{4} (3v_2 - 4v_3 + v_4)^2
\end{aligned} \tag{2.123}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_0 &= \frac{1}{10} \frac{1}{(IS_0 + \varepsilon)^2} \\
\alpha_1 &= \frac{6}{10} \frac{1}{(IS_1 + \varepsilon)^2} \\
\alpha_2 &= \frac{3}{10} \frac{1}{(IS_2 + \varepsilon)^2}
\end{aligned} \tag{2.124}$$

$$\begin{aligned}
\omega_0 &= \frac{\alpha_0}{\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2} \\
\omega_1 &= \frac{\alpha_1}{\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2} \\
\omega_2 &= \frac{\alpha_2}{\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2}
\end{aligned} \tag{2.125}$$

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_i^0 &= \frac{1}{3} v_0 - \frac{7}{6} v_1 + \frac{11}{6} v_2 \\
\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_i^1 &= -\frac{1}{6} v_1 + \frac{5}{6} v_2 + \frac{1}{3} v_3 \\
\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)_i^2 &= \frac{1}{3} v_2 + \frac{5}{6} v_3 - \frac{1}{6} v_4
\end{aligned} \tag{2.126}$$

IS は関数の滑らかさを表す smooth indicator で, $IS_0 = IS_1 = IS_2 = 0$ のとき, 5 次精度風上差分に一致する. ε はゼロ割を防ぐための微小定数で, $\varepsilon = 10^{-10}$ 程度に設定する.

空間微分に 5 次精度 HJ-WENO 法などの高次精度な離散化を用いた場合, 時間積分も高次精度で行う必要がある. 本研究では 3 段 3 次精度 Runge Kutta 法 [67] を用いる.

簡単のために解く方程式を

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = L(\mathbf{u}) \tag{2.127}$$

とおく, 3 段 3 次精度 Runge Kutta 法では次のように, 3 段の計算を行う.

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}^{(1)} &= \mathbf{u}^n + L(\mathbf{u}^{(0)}) \Delta t \\
\mathbf{u}^{(2)} &= \mathbf{u}^n + \frac{1}{4} \left(L(\mathbf{u}^{(0)}) + L(\mathbf{u}^{(1)}) \right) \Delta t \\
&= \frac{3}{4} \mathbf{u}^n + \frac{1}{4} \mathbf{u}^{(1)} + \frac{1}{4} L(\mathbf{u}^{(1)}) \Delta t \\
\mathbf{u}^{n+1} &= \mathbf{u}^n + \frac{1}{6} \left(L(\mathbf{u}^{(0)}) + L(\mathbf{u}^{(1)}) + 4L(\mathbf{u}^{(2)}) \right) \\
&= \frac{1}{3} \mathbf{u}^n + \frac{2}{3} \mathbf{u}^{(2)} + \frac{2}{3} L(\mathbf{u}^{(2)}) \Delta t
\end{aligned} \tag{2.128}$$

これは TVD Runge Kutta 法の一つで, 数値安定性が高いことで知られている.

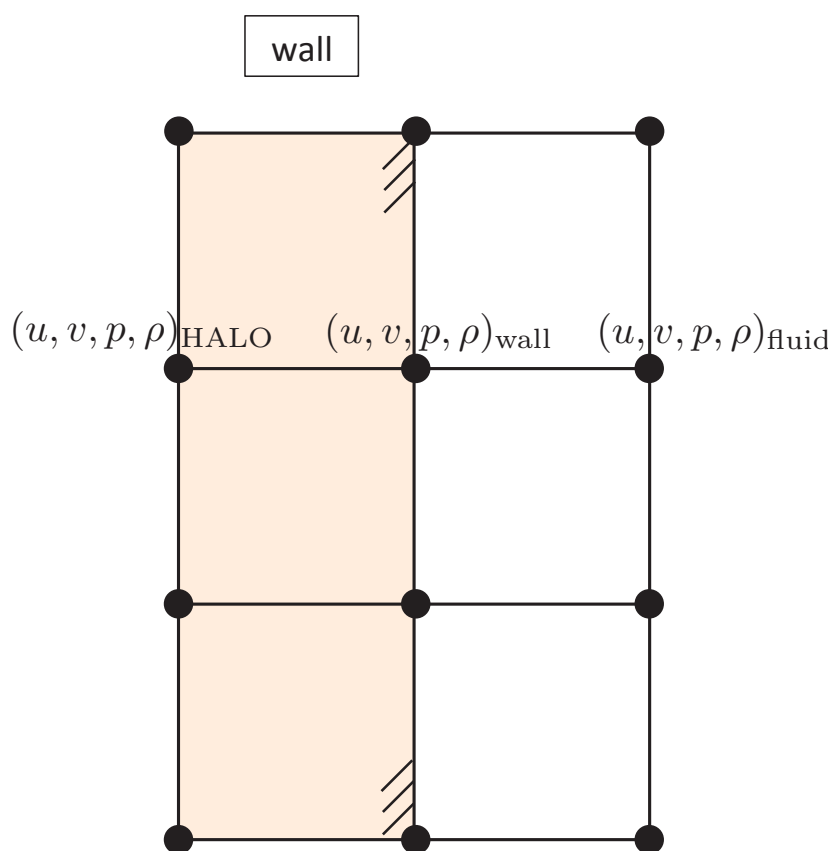


Fig.2.9: The values in halo region of the computational boundary.

2.7 境界条件

本計算手法では、 $\mathbf{u}, p, \rho$ といった物理量は格子点上に定義されるが、保存型 Allen-Cahn 方程式は保存型マルチモーメント法を用いて解かれるため、モーメントごとに定義点異なり、境界条件の設定に注意が必要である。壁面境界には、slip と non-slip の 2 種類があり、2 次元の場合を例にそれぞれについて説明する。

slip 壁

slip 壁では，壁に平行な速度成分と，垂直な速度成分で扱いが異なる．Fig. 2.9 のような場合，下添え字 wall の点まで計算し，

$$\begin{aligned} u_{\text{wall}} &= 0 \\ u_{\text{HALO}} &= -u_{\text{fluid}} \\ v_{\text{HALO}} &= v_{\text{fluid}} \end{aligned} \quad (2.129)$$

として、速度を設定する。圧力・密度に関しては断りが無い限り以下のようにノイマン条件を適用する。

$$\begin{aligned} p_{\text{HALO}} &= p_{\text{fluid}} \\ \rho_{\text{HALO}} &= \rho_{\text{HALO}} \end{aligned} \quad (2.130)$$

non-slip 壁

non-slip 壁では、圧力・密度はノイマン条件を設定し、速度成分は

$$\begin{aligned} u_{\text{wall}} &= v_{\text{wall}} = 0 \\ u_{\text{HALO}} &= -u_{\text{HALO}} \\ v_{\text{HALO}} &= -v_{\text{HALO}} \end{aligned} \quad (2.131)$$

とすれば良い。密度がノイマン条件で設定されるように、Phase field 秩序変数 ϕ もノイマン条件を課す。Fig. 2.10 のように、格子点間に定義された積分平均値も、壁面を対称にコピーする。

2.8 Immersed Boundary Method による単相流中の複雑形状の表現

本研究では、高効率な並列計算を行うために直交格子を採用しているため、格子に沿わないような複雑形状物体を表現するためには、モデルが必要となる。格子に沿わない物体を表すモデルとして Peskin らによって提案された Immersed Boundary Method (IBM) [68] を用いる。IBM は広く用いられている手法で、現在に至るまでに様々な手法が提案されているが、本研究では境界条件を満たすように物体内部に補間によって値を与える手法を用いる。

IBM について、2次元の場合を例に説明する。本研究で使用する IBM では Fig. 2.11 のように物体の Level Set 関数を用いて物体内部の Solid cell、流体側の Fluid cell、物体内部の cell のうち Fluid cell に隣接している cell を Ghost cell として識別する。Ghost cell から物体と流体の境界線に対して垂線を引き、境界線との交点を Boundary Intercept (BI) と表し、BI から一定の距離 $R1$ まで引いた位置を Image Point (IP) と表す。また、Ghost cell から BI までの距離を $R2$ とする。

境界線上で流速が 0 となる滑りなし条件について考える。つまり $u_{\text{BI}} = 0$ として与えられている場合である。このとき Ghost cell 上の流速 u_{GC} は幾何学的に以下のように決定される。

$$u_{\text{GC}} = -\frac{R2}{R1} u_{\text{IP}} \quad (2.132)$$

また、圧力・密度等に対して Neumann 条件を設定する場合には、

$$p_{\text{GC}} = p_{\text{IP}} \quad (2.133)$$

として、IP 上の値をコピーする。IP 上の物理量 f_{IP} は Fig. 2.11 のように、IP 近傍の 4 点の値を用いて補間して求める。2次元の場合以下の bilinear 補間で補間値を求める。

$$f_{\text{IP}} = C_1 xy + C_2 x + C_3 y + C_4 \quad (2.134)$$

3次元の場合は、trilinear 補間で補間値を求める。

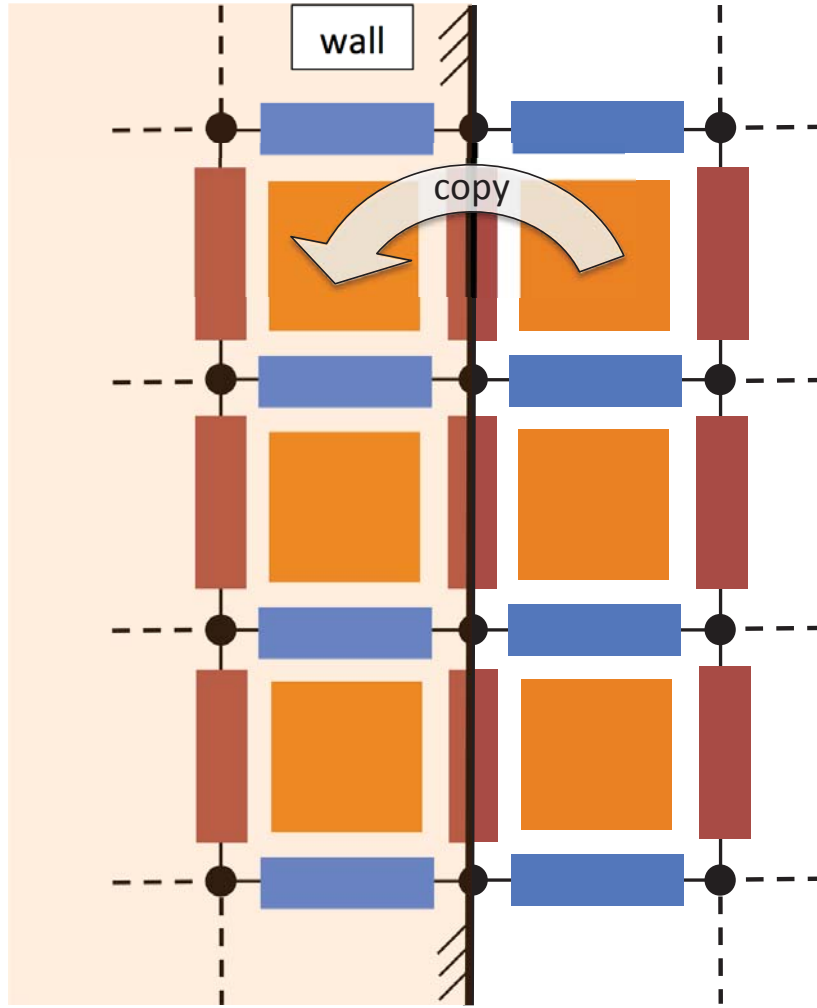


Fig.2.10: Neumann condition for the multi-moment variables.

2.9 時間刻みの決定

本手法は完全陽解法で支配方程式を解いているため、時間刻みは主に音速で支配される。低マッハ数領域を解くため、流速と比べて音速が大きく、流速 $\mathbf{u}$ の移流方程式となっている Level Set 関数の移流方程式である式 (2.53) や保存型 Phase field 法の左辺部分の式 (2.97) による時間刻み Δt の制限は無視できる。従って本手法における時間刻み幅は下記のように制限される。

1. 特性線の移流による制限

$$\Delta t_{\text{adv}} \leq \frac{\Delta x}{\max(|u| + c, |v| + c, |w| + c)} \quad (2.135)$$

2. 粘性による制限

$$\Delta t_{\text{visc}} \leq \frac{\Delta x^2}{2\nu} \quad (2.136)$$

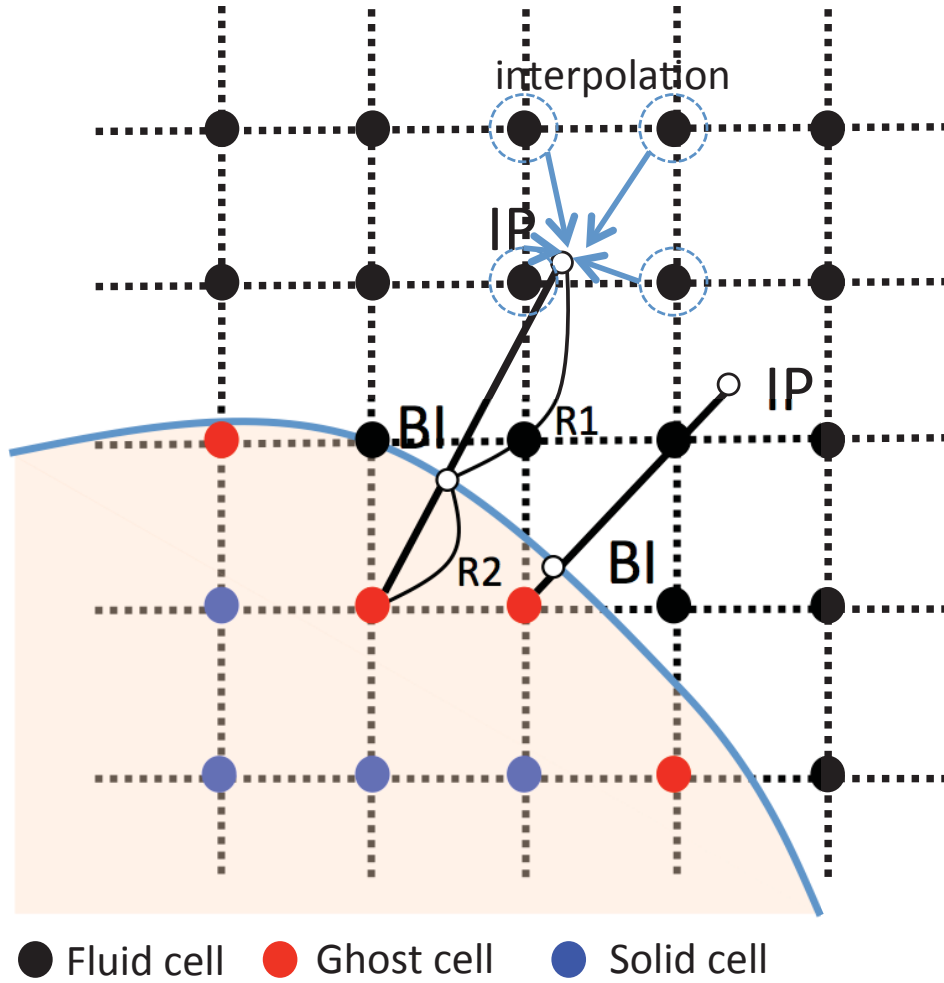


Fig.2.11: The schematic representation of Immersed boundary method.

3. 表面張力による制限

表面張力による時間刻みは、表面張力波の伝搬を考慮すると、下記で制限される [60].

$$\Delta t_{sf} \leq \sqrt{\frac{\rho_l + \rho_g}{2} \frac{\Delta x^3}{2\pi\sigma}} \quad (2.137)$$

4. 保存型 Phase field 法による制限

保存型 Allen-Cahn 方程式の右辺式 (2.98) は拡散・逆拡散から成る．式 (2.98) は保存型 IDO 法で解かれるが、拡散項については杉原による安定性解析 [4] が行われており、時間積分を 1 次精度とした場合は時間刻みは下記のように制限される．

$$\Delta t_{cpf} \leq 0.13 \frac{\Delta x^2}{\gamma} \quad (2.138)$$

以上の時間刻み Δt の制限から最終的な時間刻み Δt は以下のようにして決定する．

$$\Delta t = \min(CFL_{adv}\Delta t_{adv}, k_{visc}\Delta t_{visc}, k_{sf}\Delta t_{sf}, k_{cpf}\Delta t_{cpf}) \quad (2.139)$$

CFL は 1 未満の定数で、通常は計算の安定化のために $CFL = 0.1, 0.2$ 程度の値が用いられる。特に 3 次元計算の場合は方向分離法を用いない場合は 1 次元計算のときと比べて CFL を小さく設定しなければならない。本研究では、特性線による時間発展で安定かつ高精度な semi-Lagrangian 法を用いており、方向分離法で各々の方向の式を解いているので $CFL_{adv} = 0.9$ とし、時間刻みを大きくとることで計算を高速化する。その他の係数 k については $k_{visc} = k_{sf} = k_{cpf} = 0.2$ とした。

2.10 音速の低減による計算効率の向上

上記で述べてきたように、本手法は陽解法で物理量の時間発展が行われるため、時間刻み Δt が音速で支配される。非圧縮性流れに近い低マッハ数流れの場合、音速は流速に比べて非常に大きいため、流速で時間刻み幅が支配される半陰解法と比べて本手法では時間刻みが非常に小さくなってしまう。そこで、比熱比 γ を時間的に変化させることによって音速を低減し、計算効率をあげる。

具体的には、流れの最大マッハ数 $Ma_{max} = 0.03$ というように具体的な値を与えて、

1. $Ma_k = \frac{u_k}{c_k}$ が最大となるような点 x_k を探す
2. 点 x_k での比熱比 γ_k を、 $Ma_k = Ma_{max}$ となるように変更する。つまり、

$$\gamma_k = \frac{\rho_k u_k^2}{p_k Ma_{max}^2} \quad (2.140)$$

というように、流れの最大マッハ数が与えられた値になるように音速を低減するために、比熱比の値を調整する。この操作をすることによって流れが音速より遅いほど計算は高速化され、流れのマッハ数が与えられた数を越えないため、低マッハ数流れに向けた効率的なスキームを適用しても問題がないということになる。

2.11 方向分離誤差を考慮した解法

方向分離法を用いると、各々の方向に対する式を解けば良いので、1 次元的な式を繰り返し解くだけで多次元計算を行うことができるという利点がある。特に本手法では、特性線に基づく定式化を行っているため多次元的に特性面などを捉える必要がなくなり、その恩恵は大きい。節 1.2 でも述べたように、AMR 適用に際しては、補間値を 1 次元的に捉えるだけで良いという点からも、方向分離法で陽解法による気液二相流計算が行えるということは大きな意義を持つ。

方向分離法では、本来同時に時間発展するはずの各方向の式を、順次解くため誤差が生じる。特に本研究では $CFL = 0.9$ で計算を行うため CFL が小さいときと比べて 1 ステップ内での現象の変化が激しく、方向分離による誤差がより顕著に現れる。

本研究では、方向分離法で解く各々の方向に対する式を解く順序を Table 2.1 のようにして全体で見たときに方向による偏りが少なくなるように修正する。この修正による方向分離誤差の改善については、節 2.13.2 で詳しく述べる。

Table2.1: The order of solving x-, y- directional equations for eqch time step.

Time Step	1	2	3	4	5	6	...
Present	$x \rightarrow y \rightarrow z$	$z \rightarrow y \rightarrow x$	$y \rightarrow z \rightarrow x$	$x \rightarrow z \rightarrow y$	$z \rightarrow x \rightarrow y$	$y \rightarrow x \rightarrow z$	...
General	$x \rightarrow y \rightarrow z$	$x \rightarrow y \rightarrow z$	$x \rightarrow y \rightarrow z$	$x \rightarrow y \rightarrow z$	$x \rightarrow y \rightarrow z$	$x \rightarrow y \rightarrow z$	...

2.12 GPU 実装

2.12.1 単一 GPU 実装

GPU は CPU と比べて非常に多数の演算コアを持ち、Single Instruction Multiple Thread (SIMT) 型のアーキテクチャを有し、同じ命令を数万オーダーという多数のスレッドで同時に実行する。有限差分法で離散化された流体の偏微分方程式を解く際には隣接するステンシルへのアクセスが行われるため、メモリの局所性が高く、GPU を用いることで計算の高速化が見込める。

GPU のアーキテクチャは CPU と大きく異なるため、GPU の演算性能を発揮するためにはアーキテクチャを意識したプログラミングが必要である。本研究ではプログラミング言語として NVIDIA 社により開発された CUDA (Compute Unified Device Architecture) [69] を用いる。GPU のメモリ空間は CPU と独立しているため、CPU と GPU は互いに他方のメモリを直接参照することができない。そのため互いのメモリにのっているデータを参照するためには、基本的には明示的なデータのコピーが必要となるが、CPU-GPU 間のメモリバンド幅は GPU 上のメモリバンド幅に比べて数十倍遅い。Fig. 2.12 のように MPI 通信やデータ出力以外では CPU のメモリへのデータのコピーを行わず、その他の処理を全て GPU 上で行うフル GPU 実装を行った。

GPU ではスレッド数が非常に多いため、CUDA では Fig. 2.13 のようにスレッドはブロックという単位でまとめられ、ブロックはグリッドという単位で管理されている。ブロック・スレッドは 3 次元配列状に配置されており、GPU 上でルーチンを実行する際には、3 次元配列の各次元の個数を指定する。本研究では、ブロックを 3 次元的に、スレッドを 2 次元的に割り当て、1 スレッドに 1 格子点の計算を担当させる。具体的なブロック数・スレッド数の指定は、各軸方向の格子点数を N_x, N_y, N_z 、グリッド内のブロック数を g_x, g_y, g_z 、ブロック内のスレッド数を $b_x, b_y, b_z (=1)$ とすると、ブロック数は次のように計算できる。

$$\begin{aligned}
 g_x &= \text{floor} \left(\frac{N_x + b_x - 1}{b_x} \right) \\
 g_y &= \text{floor} \left(\frac{N_y + b_y - 1}{b_y} \right) \\
 g_z &= \text{floor} \left(\frac{N_z + b_z - 1}{b_z} \right)
 \end{aligned} \tag{2.141}$$

ここで、floor は小数点以下を切り捨てる関数である。式 (2.141) から $g_x \times b_x$ が N_x 以上になるので、任意の格子点数に対して十分なブロック数を指定することができる。スレッド数については、32 個のスレ

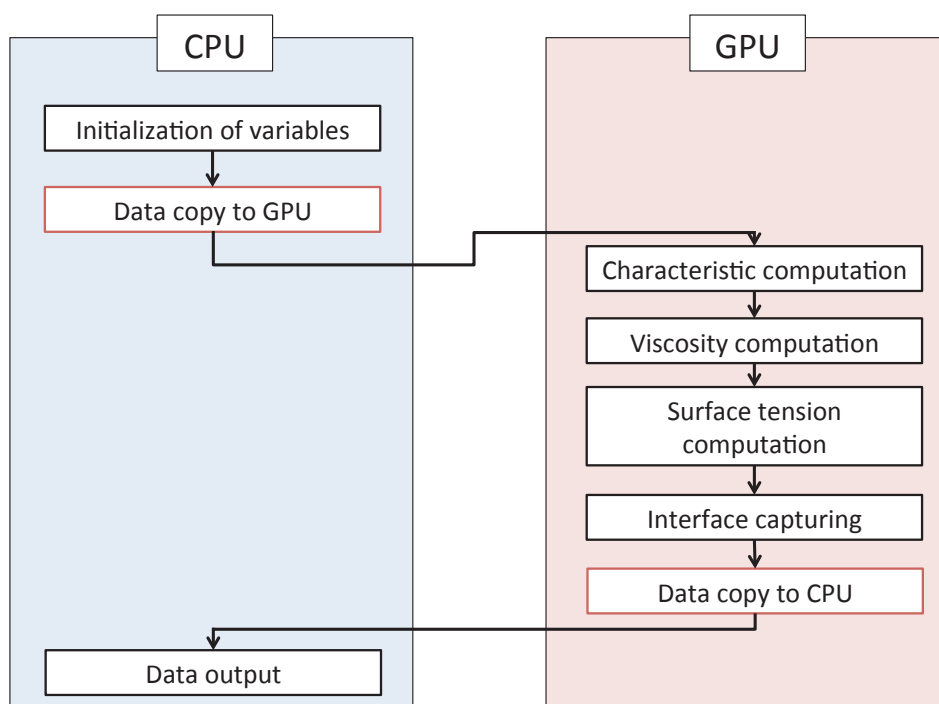


Fig.2.12: The GPU-implementation of fluid computation.

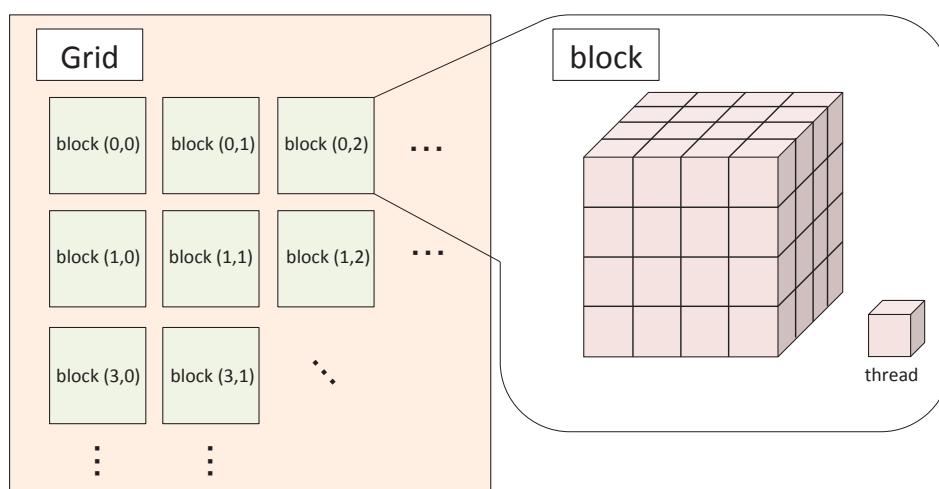


Fig.2.13: The schematics of CUDA block and threads.

ドは Warp という単位で同時実行されることから, $b_x = 32, b_y = 4, b_z = 1$ とした.

GPU 上で実行される関数内で, ブロックの大きさは `blockDim`, ブロック・スレッドのインデックスは `blockIdx`, `threadIdx` で取得できる. これらは例えば x 方向のブロックの大きさなら `blockDim.x` といった具合に取得することができる. あるスレッドに対応する x, y, z 方向の格子のインデックス i, j, k および格

子点番号 id は下記のように計算できる.

$$\begin{aligned} i &= \text{threadIdx.x} + \text{blockDim.x} \times \text{blockIdx.x} \\ j &= \text{threadIdx.y} + \text{blockDim.y} \times \text{blockIdx.y} \\ k &= \text{threadIdx.z} + \text{blockDim.z} \times \text{blockIdx.z} \\ id &= i + N_x \times (j + N_y \times k) \end{aligned} \quad (2.142)$$

2.12.2 MPI ライブラリによる複数 GPU 実装

複数枚の GPU を用いて計算を行うために, MPI による並列化を行う. 本研究では, 1 つの MPI プロセスに対して 1CPU,1GPU を割り当てるフラット MPI で並列化する. 流体計算では隣接するステンシルの値が必要となるが, 各 GPU のメモリ空間は独立しているため, GPU 間で値をコピーする必要がある. GPU 間で直接通信する GPU Direct という規格が存在するが, 東工大のスーパーコンピュータである TSUBAME2.5 では, 完全にその機能を使うことができなかったため, 本研究では GPU 間でデータをやりとりする際には CPU を介しての通信を行う. 2 枚の GPU を用いた場合のデータのやりとりを例に説明する. Fig. 2.14 に示すように, 各プロセスに割り当てられている計算領域は袖領域を持つ. 本論文ではこの袖領域をハロー領域 (HALO) と呼ぶこととする. 本研究では 5 次精度 WENO スキームを用いるため, 隣接格子 3 点を参照する. そのため実際に流体計算が行われる領域に加えて参照される 3 格子点分の HALO を持たせる. HALO の通信では, まず GPU1 で通信する HALO 領域中のデータを 1 次元配列に格納する packing の処理を行う. 次に packing されたデータを CPU1 へ CUDA の API である `cudaMemcpy` 関数でコピーする. その後 CPU1 から CPU2 へ MPI 通信でデータをコピーする. CPU2 へデータが送られた後は, CPU2 から GPU2 へ `cudaMemcpy` でデータをコピーし, 1 次元配列で表された HALO のデータを元の計算格子上のデータに戻す unpacking の処理を行い, GPU1 から GPU2 へのデータ転送が完了する. 物理量が更新されれば当然 HALO の値も変わるので, その度に袖領域の通信が必要となる. 方向分離法を用いているため通信回数としては多くなるが, 例えば x 方向の計算が行われる場合は, y, z 方向の参照は起こらないので, x 方向の HALO 領域のみ通信を行えば良いため, 合計の通信量はそれほど多くなならない.

2.13 検証計算

2.13.1 移流スキームの精度検証

圧縮性 Navier-Stokes 方程式を離散化するにあたって, 移流項の離散化は解に最も大きな影響を及ぼす. 節 2.6 の特性線解法で述べたように, 移流計算は 5 次精度 WENO 補間関数を用いて semi-Lagrangian 法で計算される. 加えて, 節 2.6.6 に記述した界面捕獲手法の計算では保存方程式の移流部分に semi-Lagrangian 法を用いて CIP-CLSR1 法で計算されるため, CIP-CLSR1 法についても精度検証を行う. 精度検証では, スカラー量 $f(t, x)$ の 1 次元線形移流方程式 (2.143) を解く.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (2.143)$$

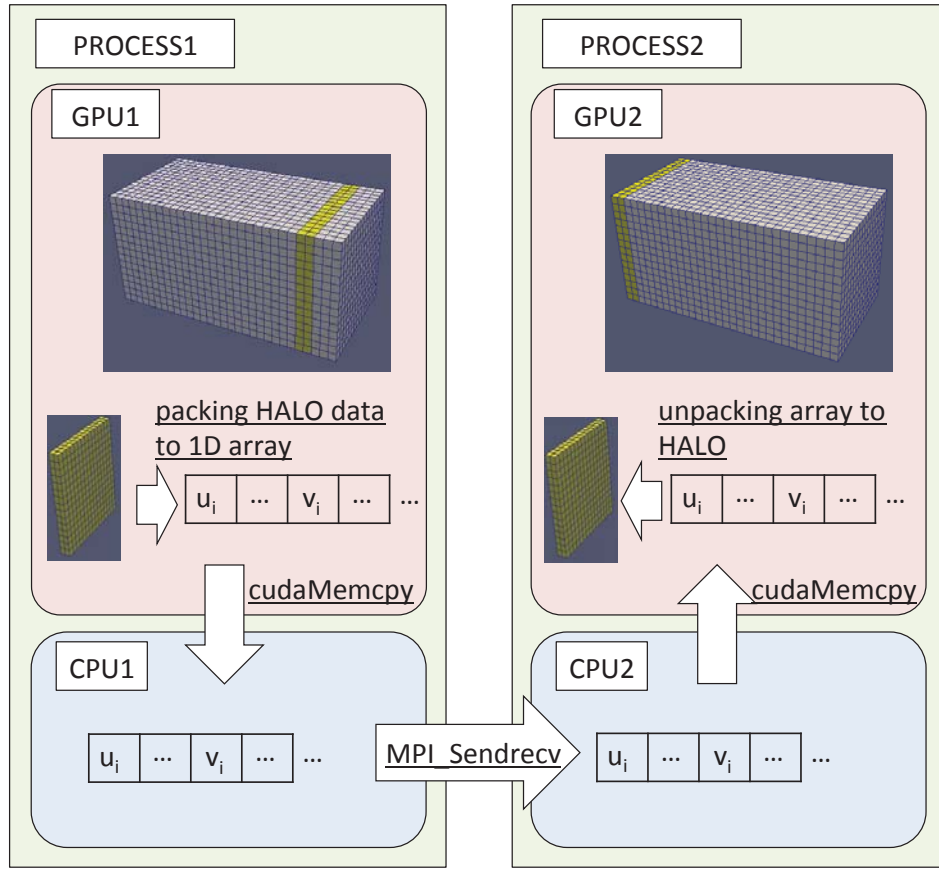


Fig.2.14: The halo data communication between each GPUs.

初期プロファイルに $f(0,x) = \sin(x)$ を与え格子数 $N = 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024$ と変化させていったときの式 (2.144) で表す L1 誤差を求め、対数グラフにプロットしたものを Fig. 2.15, Fig. 2.16 に示す.

$$L1 = \frac{1}{N} \sum_i^N |f_i - f_{\text{exact}}| \quad (2.144)$$

Fig. 2.15 から 5 次精度 WENO 補間関数を用いた semi-Lagrangian 法で 5 次精度が出ており, Fig. 2.16 から CIP-CSL2 法では 3 次精度が出ており, CIP-CSLR1 法では 2 次以上 3 次未満の精度が出ていることが確認できた.

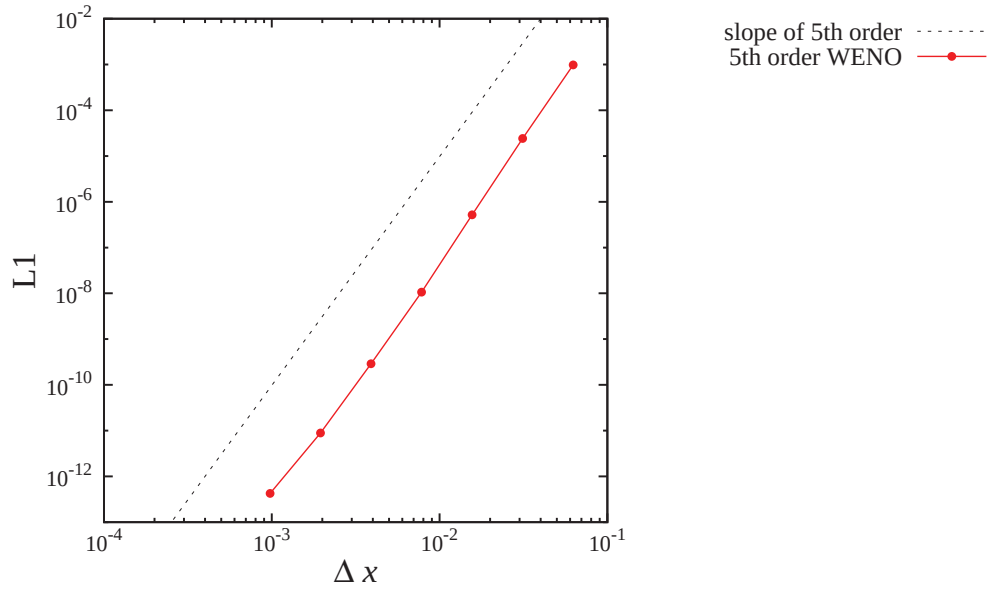


Fig.2.15: The L1 norm error of linear advection equation solved by semi-Lagrangian scheme with 5th order WENO scheme.

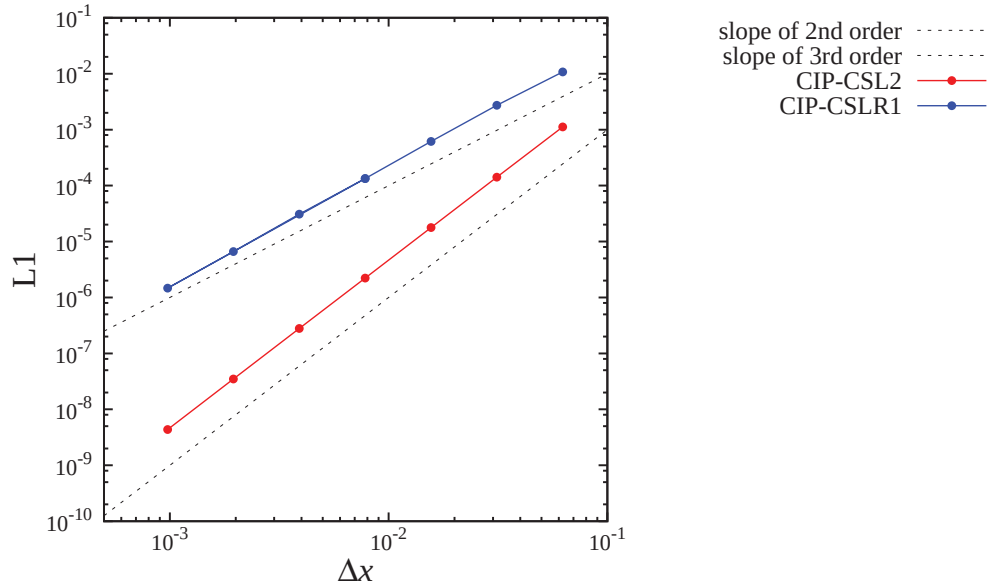


Fig.2.16: The L1 norm error of linear advection equation solved by semi-Lagrangian scheme with CIP-CSL2 and CIP-CSLR1 scheme.

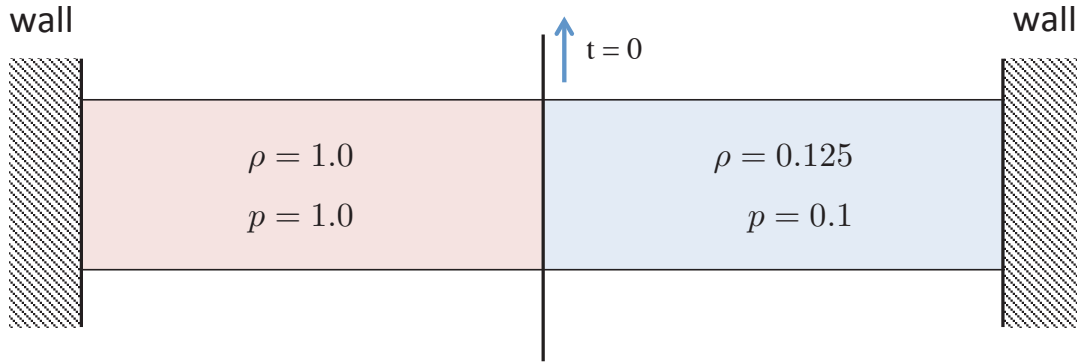


Fig.2.17: The initial setting of the shock tube problem.

2.13.2 単相流計算の検証

本節では，特性線に基づく弱圧縮性解析手法を用いて，単相流のベンチマーク問題を解き，手法の妥当性を確認する．

1 次元 shock tube 問題

圧縮性スキームの検証問題として，Sod により提案された shock tube 問題 [70] を解く．shock tube 問題は，Fig. 2.17 に示すように管の中央に仕切りを用意し，左側に高圧・高密度な流体を満たし，右側には低圧・低密度の同一種の流体を満たしたとき， $t = 0$ で仕切りを外したあとの流体の挙動を 1 次元的に計算する問題である．

初期条件は以下に示す通りである．

$$(\rho_0, u_0, p_0) = \begin{cases} (1.0, 0.0, 1.0) & (x \leq 0.5) \\ (0.125, 0.0, 0.1) & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (2.145)$$

領域 $[0, 1]$ を格子分割数 $N = 100,500$ で分割して計算を行った． $CFL = 0.9$ としても計算が十分可能であることを確認するために， $CFL = 0.5, 0.9$ の二通りで計算する．また，WENO 補間関数の効果を確認するために，補間関数に 3 次 Lagrange 補間関数を用いた場合との比較を行う．

$N = 100$ の $t = 0.2$ における密度プロファイルを図 2.18 に示す．shock tube 問題では Fig. 2.18 の (a) に示すように，膨張波面，接触不連続面，衝撃波面という特徴的な領域が確認できる． $N = 100$ のケースでは Lagrange 補間関数を用いた場合 (Fig. 2.18(a), (b))， $CFL = 0.5, 0.9$ のいずれでも膨張波面・接触不連続面・衝撃波面でオーバーシュート・アンダーシュートが発生しており，膨張波面以外は精度よく捉えられているとは言えず， CFL を増加させると計算精度が悪化している様子がわかる．一方，WENO 補間関数を用いた場合 (Fig. 2.18(c), (d))，オーバーシュート・アンダーシュートを抑えられており， CFL を増加させても計算精度はそれほど落ちていないと考えられる．衝撃波面は厳密解とあっていないが，これは本手法が非保存形のスキームであるためである．本研究では弱圧縮性の低マッハ数流れを取り扱うので，衝撃波捕獲はそれほど重要ではないと判断し，計算効率を優先する．Fig. 2.19 に示す $N = 500$ の

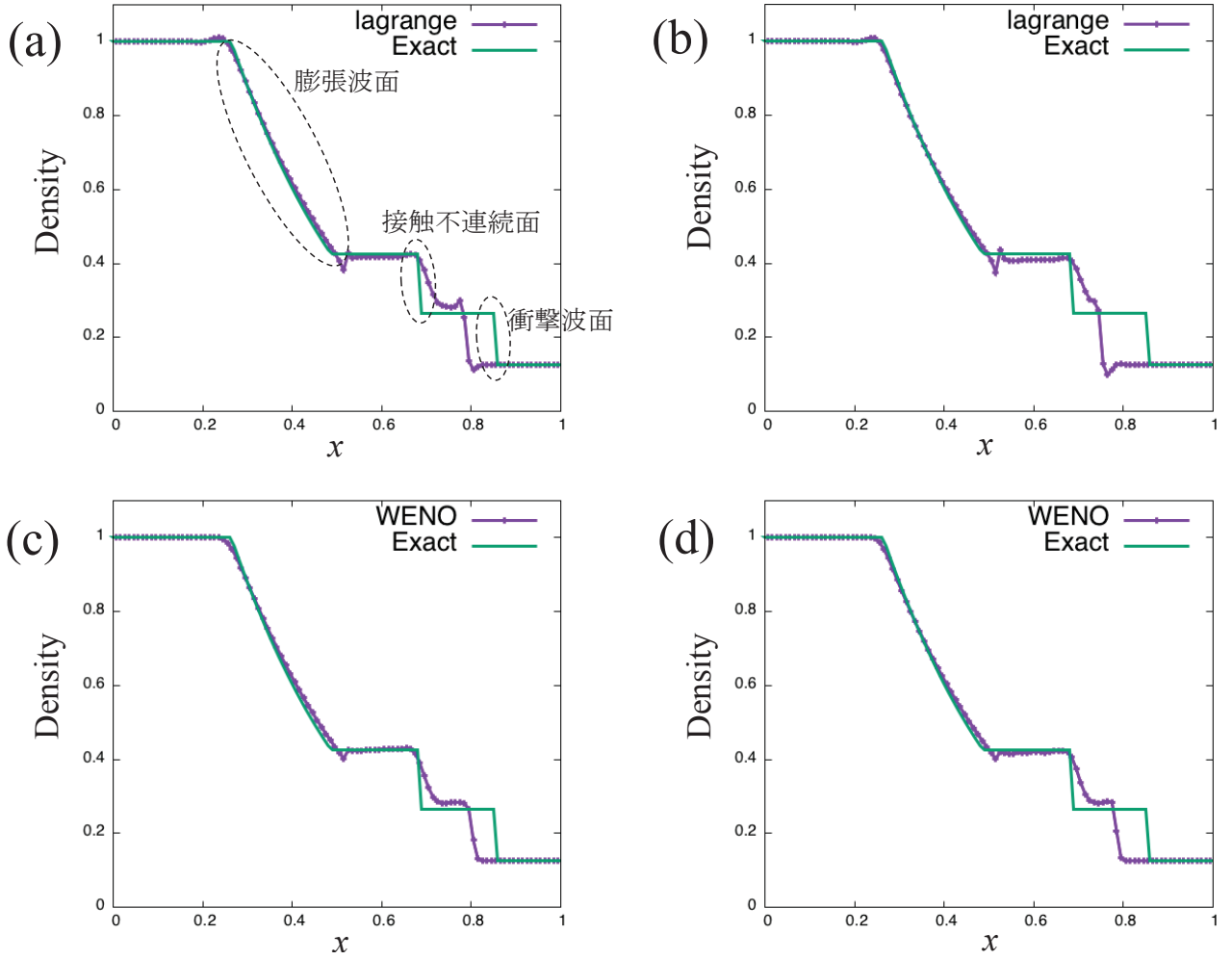


Fig.2.18: The density profile at $t = 0.2$ for the shock tube problem ($N = 100$). (a) 3rd order Lagrange interpolation, $CFL = 0.5$; (b) 3rd order Lagrange interpolation, $CFL = 0.9$; (c) 5th order WENO interpolation, $CFL = 0.5$; (d) 5th order WENO interpolation, $CFL = 0.9$.

ケースでは、接触不連続面が厳密解とよく一致しており、オーバーシュート・アンダーシュートの発生傾向や CFL の影響、衝撃波面については $N = 100$ の場合と同様の傾向が確認できる。

Cavity flow 問題

流体の数値計算例として最も有名なものの一つに Cavity flow 問題がある。この問題には数学的な厳密解は存在しないものの、経験的に Ghia らの計算結果 [71] に収束することが知られている。

Cavity flow 問題は、Fig. 2.20 に示すように、一辺の長さ L の正方形領域の上側の壁面が一定速度 U で動く問題である。十分時間が経つと流れは定常流となり、その時の中心軸上の x , y 方向の速度分布を Ghia らの結果と比較する。

流れは粘性によって領域内を渦巻くようにして流動する。粘性係数 μ と密度 ρ を用いて Reynolds 数

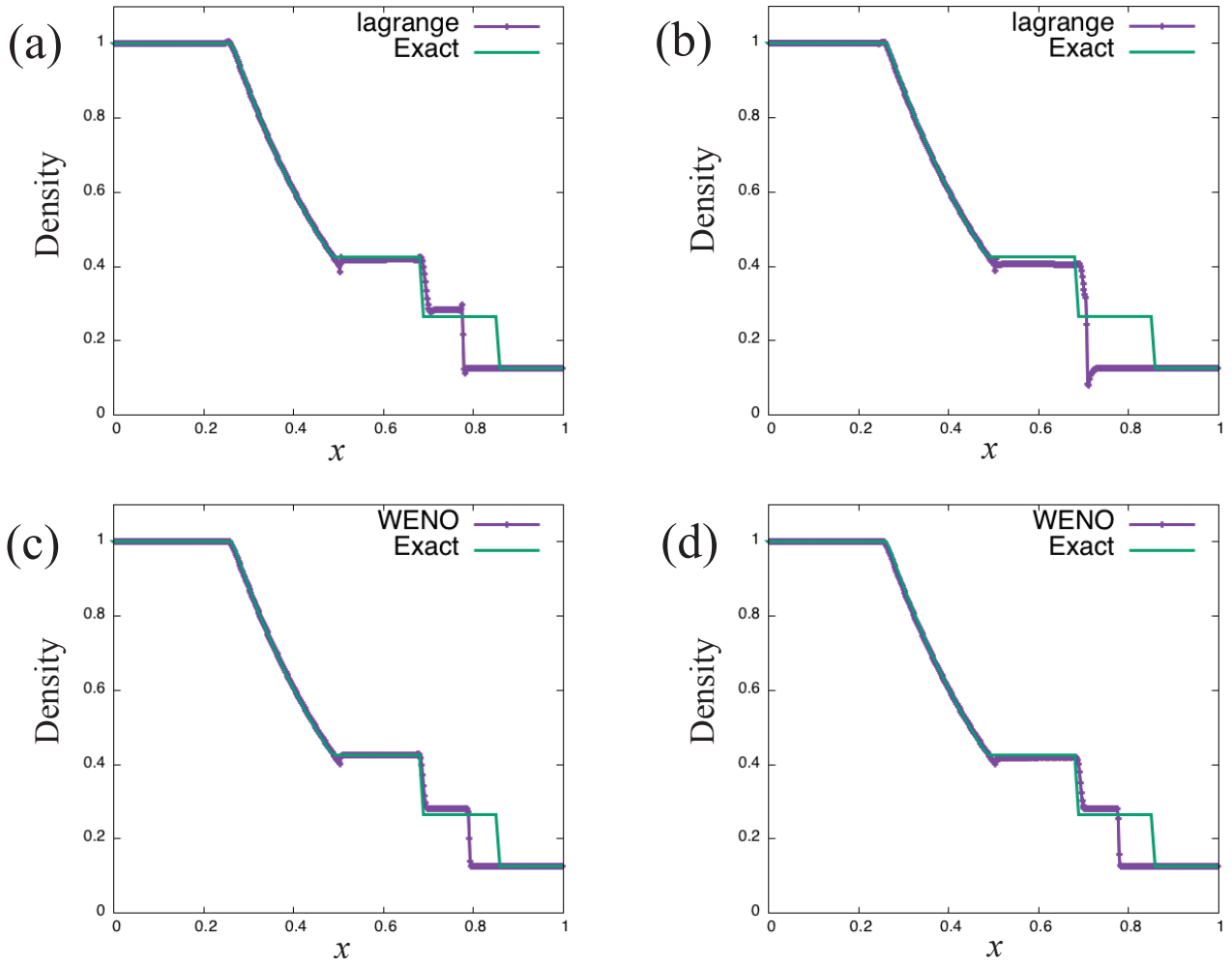


Fig.2.19: The density profile at $t = 0.2$ for the shock tube problem ($N = 500$). (a) 3rd order Lagrange interpolation, $CFL = 0.5$; (b) 3rd order Lagrange interpolation, $CFL = 0.9$; (c) 5th order WENO interpolation, $CFL = 0.5$; (d) 5th order WENO interpolation, $CFL = 0.9$.

Re を以下の式で定義する.

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} \quad (2.146)$$

本計算では, $U = 1.0, L = 1.0, \rho = 1.0$ と固定して, μ の値を変化させた. またマッハ数 $Ma = \frac{U}{c} = 0.03$ となるように初期音速 c を設定した. 計算格子数は 128×128 とし, $Re = 100, 5000$ の二通りで計算した結果を Fig. 2.21 に示す. $Re = 100, 5000$ という Reynolds 数が低い場合と高い場合の両方で, Ghia らの結果とよく一致していることが確かめられ, 非圧縮性流れ計算として妥当な計算が行えていると考えられる.

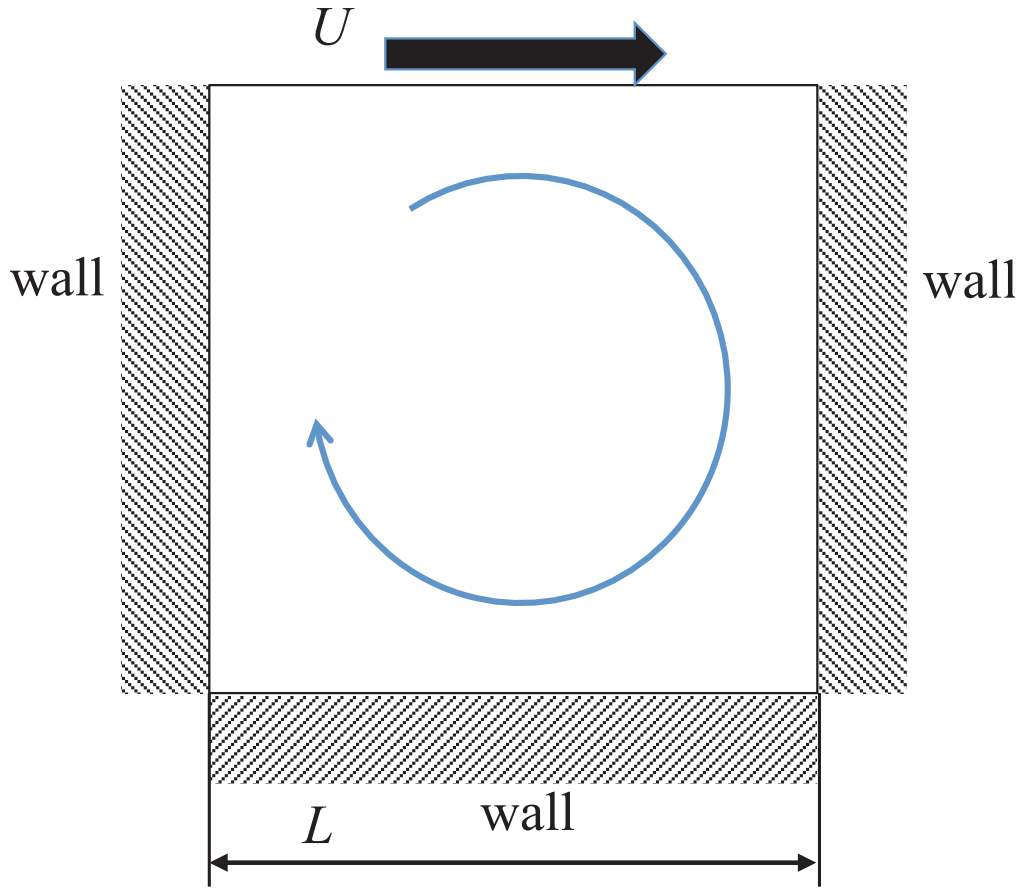
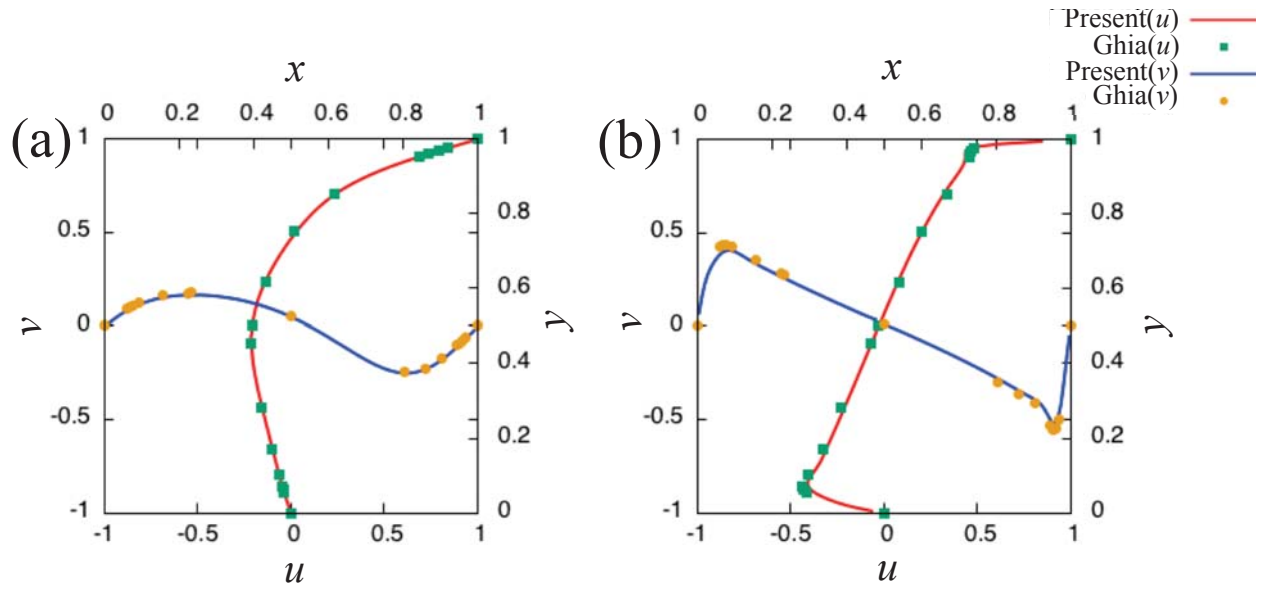


Fig.2.20: The setting of the cavity flow problem.

Fig.2.21: The velocity profiles at steady state for the cavity flow problem. Left shows the results of $Re = 100$ and right shows that of $Re = 5000$.

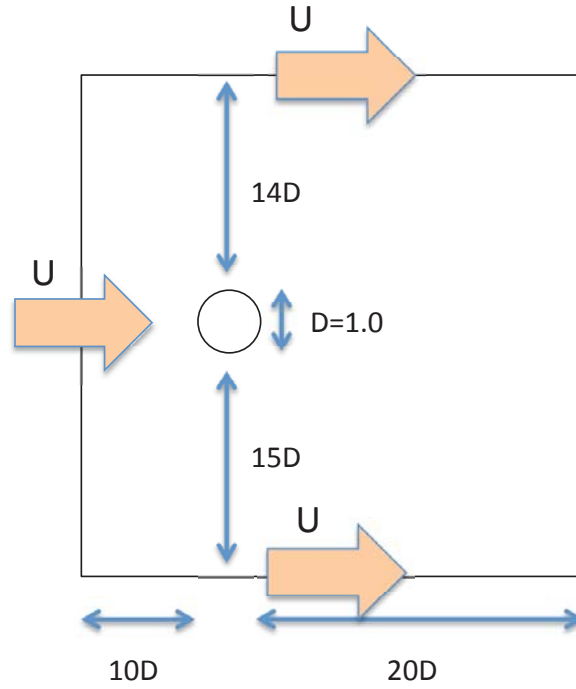


Fig.2.22: The initial setting for the Karman vortex street past a cylinder problem.

2次元円柱後方に生じるカルマン渦の計算

2次元で IBM による物体表現の妥当性と、非圧縮性流れ計算のベンチマーク問題として、2次元円柱後方に生じるカルマン渦の計算を行った。一様流中の円柱後方には、ある Reynolds 数以上でカルマン渦と呼ばれる渦が規則的に生じることが知られており、過去に数値実験が多くなされてきている問題である [72][73][74]。

Fig. 2.22 に示すように、 $31D \times 30D$ の計算領域に $D = 1.0$ の円柱を配置し初期流速 $(U, 0)$ の一様流を与える。マッハ数は $Ma = U/c = 0.2$ とし、Reynolds 数は 2次元性が確保される値としては最大に近い $Re = UD/\nu = 200$ とした。計算格子数は 620×600 で計算し、カルマン渦の発生を促すために、円柱から計算領域上面と下面までの距離を非対称としている。

計算領域の境界条件には、上面・左面・下面上で流速が U となるように与え、右面は流出境界とした。圧力・密度は Neumann 条件を与える場合が多いが、圧縮性解法で計算しているため、Neumann 条件を与えると圧力波が減衰せずに反射を繰り返し、抗力計算に悪影響を及ぼす。そこで、本計算では、圧力・密度の境界条件として、固定値を与え、圧力波の反射を抑制した。

計算結果を定量的に評価するために、円柱にかかる力から抗力係数および揚力係数を求め、既往の計算結果との比較を行う。抗力係数 C_d および揚力係数 C_l は x 方向の力である抗力 F_d と y 方向の力である揚力 F_l を用いれば以下のように求まる。

$$C_d = \frac{F_d}{\frac{1}{2}\rho U^2 D} \quad (2.147)$$

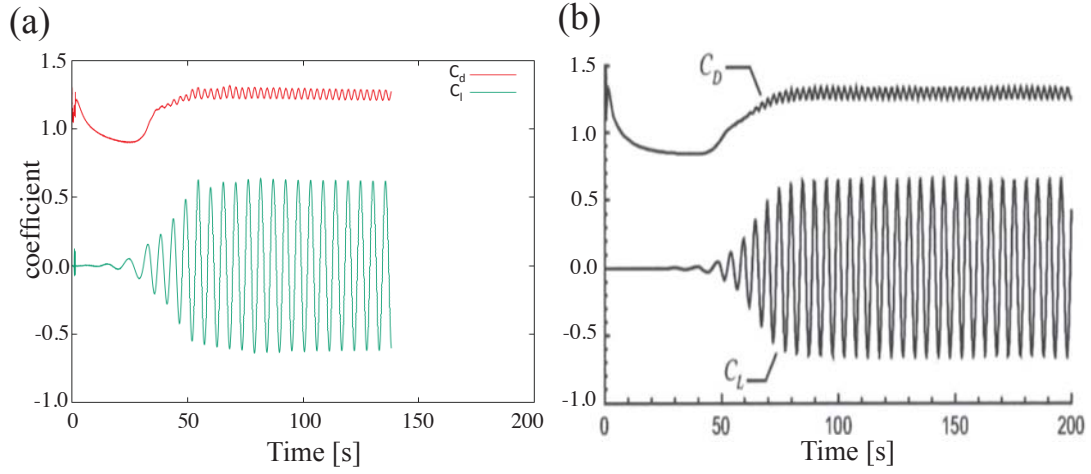


Fig.2.23: The time history of drag and lift coefficients of cylinder for the Karman vortex street past a cylinder problem. (a) Present, (b) E.Guilmineau et.al[75].

Table2.2: The comparison of drag and lift coefficients of the cylinder for $Re = 200$ with the results of experiment and incompressible solvers.

	C_d	C_l
Present	1.25	0.62
David[74]	1.17	0.67
Liu et al.[72]	1.31	0.64
Wille(exp)[76]	1.30	

$$C_l = \frac{F_l}{\frac{1}{2}\rho U^2 D} \quad (2.148)$$

ここで、揚力、抗力は式 (2.149)、式 (2.150) のように円柱周りの周回積分で求まる。

$$F_d = \frac{1}{2}D \int_0^{2\pi} (-p \cos \theta) d\theta + \frac{D}{2Re} \int_0^{2\pi} \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} \cos \theta + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \sin \theta \right) d\theta \quad (2.149)$$

$$F_l = \frac{1}{2}D \int_0^{2\pi} (-p \sin \theta) d\theta + \frac{D}{2Re} \int_0^{2\pi} \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} \sin \theta + \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \cos \theta \right) d\theta \quad (2.150)$$

計算結果として、 C_d, C_l の時間変化を E.Guilmineau らの結果 [75] とともに、Fig. 2.23 に示す。また、規則的なカルマン渦が発生した後の抗力係数の平均値と揚力係数のピークの平均値を算出した結果を、既往の数値計算結果とともに Table 2.2 に示す。抗力・揚力係数の時刻歴は E.Guilmineau らの結果と定性的によく一致していることが確認できる。抗力係数および揚力係数の平均値は既往の数値計算で得られた結果と比べても妥当な結果が得られたと言える。以上のことから IBM を含めた单相流計算が妥当に行えていると考えられる。

Table2.3: The order of solving x -, y - directions for each time-step

time step	1step	2step	3step	...
Present	$x \rightarrow y$	$y \rightarrow x$	$x \rightarrow y$	...
General	$x \rightarrow y$	$x \rightarrow y$	$x \rightarrow y$	...

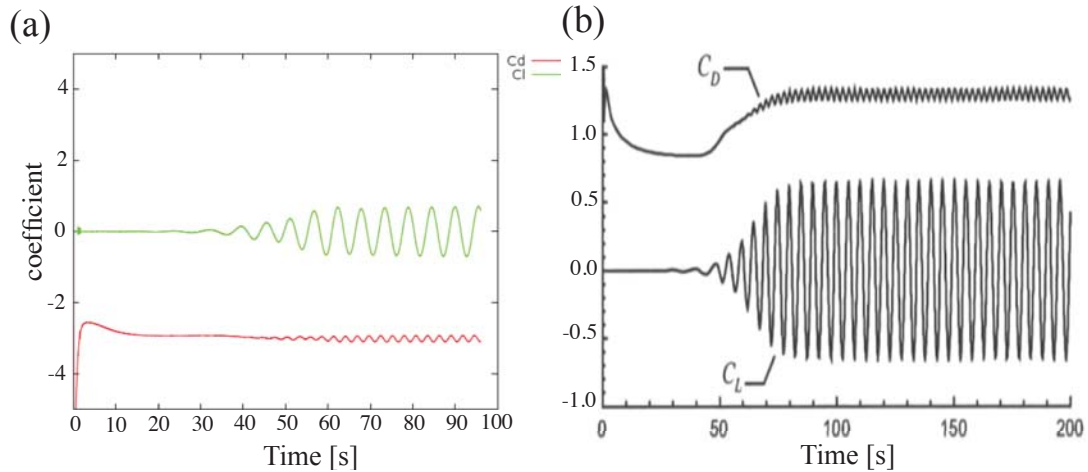


Fig.2.24: Incorrect drag and lift coefficients without consideration of the order of solving directional equations. (a) General order, (b) E.Guilmineau et.al[75].

方向分離誤差の影響

節 2.11 で述べたように、高 CFL 条件下では方向分離による誤差が顕著に見られる。特に、Cavity flow のような定常計算ではなく、カルマン渦のような非定常な流れを扱う場合は、誤差の影響が大きい。2 次元計算においても Table 2.3 のようにして時間積分全体を通して方向による偏りが出ないように各々の方向に対する式を解いているが、このような工夫をせずに Table 2.3 中の **General** のような順序で計算を行うと、抗力・揚力係数の時刻歴は Fig. 2.24 の左図のようになる。方向分離で解く式の順序を考慮しない場合 C_d が負の値となっており、物理的には上流側へ向かう抗力が生じていることになり、明らかに正しい挙動ではない。これは、音速で伝搬する変化の急激な圧力波を $CFL = 0.9$ で計算しているため、1 ステップ内で x, y 方向の計算における順序性が出てしまっているものであると考えられる。以上の結果から、節 2.11 で説明した方向分離で解く各々の方向に対する式の順序の偏りを時間的に平滑化する方法は有効であると言える。

3 次元球周りの流れの計算

単相流計算の 3 次元検証問題として、球周りの流れの計算を行う。球周りの流れでは幅広い Reynolds 数に対して球にかかる抗力係数が実験的に得られており、空力シミュレーションの検証問題としてよく計算される。どの程度のマッハ数を設定すれば非圧縮性流体解析として本計算手法が適用可能であるか

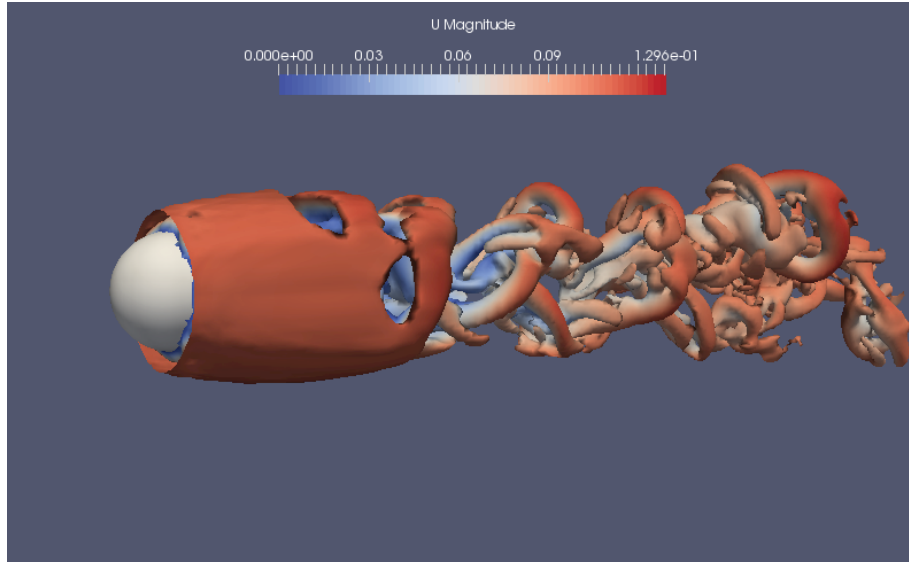


Fig.2.25: The iso-surface of Q value for the flow around sphere problem.

の検証を行うため, $Ma = 0.03, 0.1$ の二通りについて $Re = 10^0$ から 10^4 の範囲で計算を行い, 抗力係数を実験式と比較する.

直径 $D = 1.0$ m に対して計算領域 $15D \times 10D \times 10D$ を計算格子数 $300 \times 200 \times 200$ で計算した.

Fig. 2.25 に $Re = 10000$ における Q 値の等値面を示す. Q 値とは, 3次元計算の可視化にしばしば用いられるもので, 式 (2.151) から計算される速度勾配テンソルの第二不変量である.

$$Q = \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad (2.151)$$

Fig. 2.25 から球後方に渦状の流れが生じている様子がわかる. 次に, Fig. 2.26 に $Ma = 0.03, 0.1$ の場合の Re に対する抗力係数を実験式 [77] と共に示す. $Re = 10^3$ 以上の高 Reynolds 数領域では抗力係数がやや高めに見積もられているものの, 全体としては幅広い Reynolds 数で実験式とよく一致していることがわかる. 本計算手法では特性線解法の semi-Lagrangian 移流に WENO 補間関数を用いているためその数値粘性が $Re = 10^3$ 以上の領域で作用し, 計算の安定化に寄与していると考えられる. 以上の結果から, $Ma = 0.03, 0.1$ 程度に設定した場合でも実験と比べても遜色ない結果が得られたと言える.

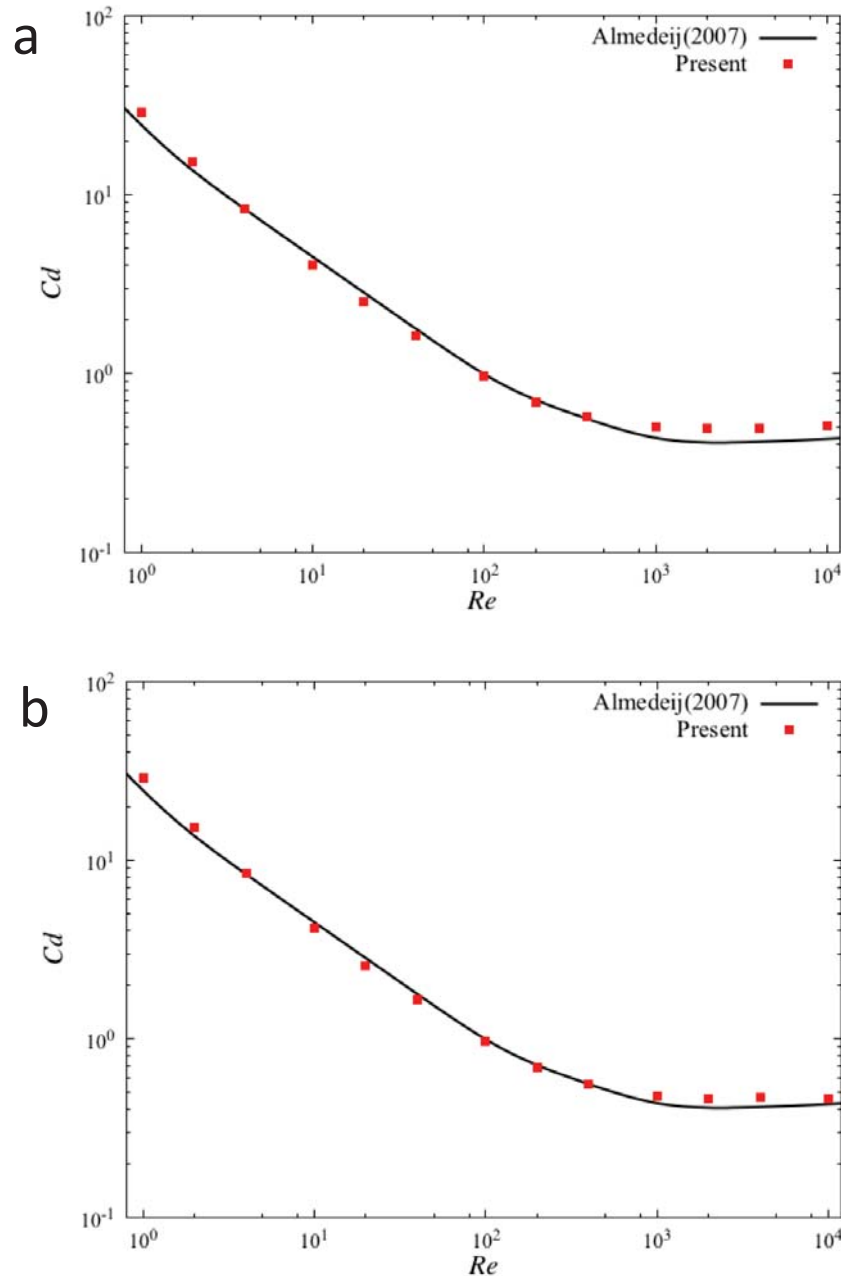


Fig.2.26: The relation between Re number and drag coefficient for the flow around sphere problem. (a) $Ma = 0.03$, (b) $Ma = 0.1$.

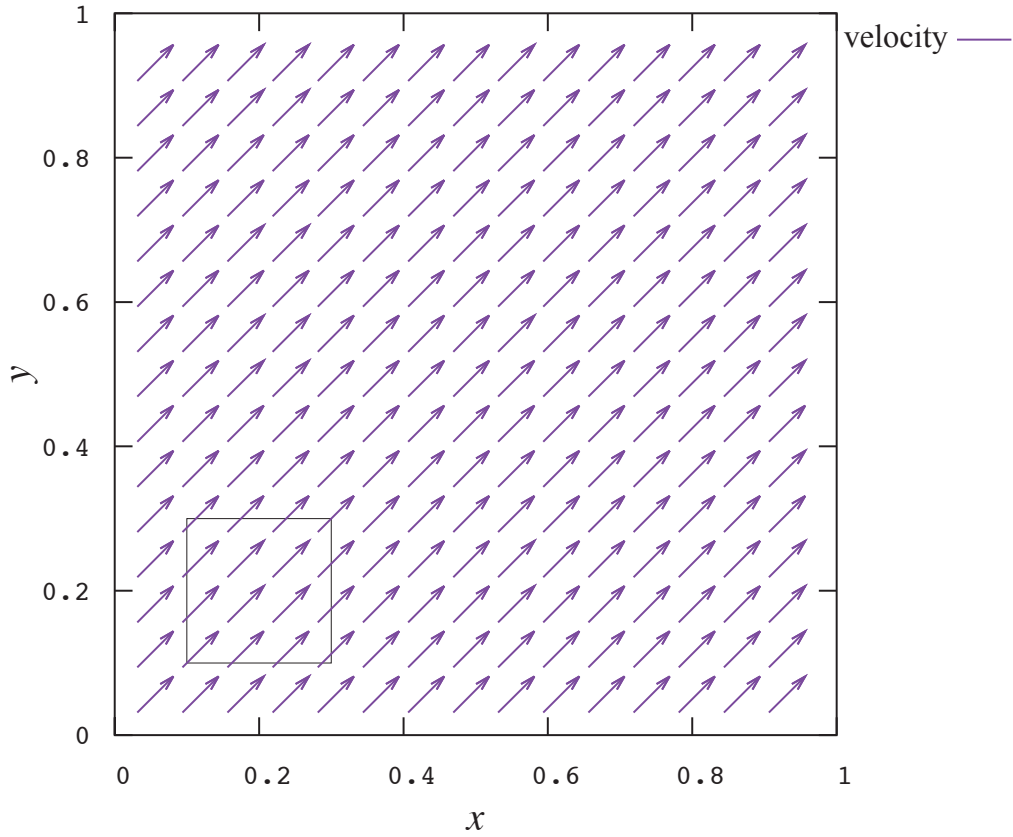


Fig.2.27: The setting of the diagonal advection problem.

2.13.3 界面捕獲手法の検証

本節では、界面捕獲手法である保存型 Phase field 法の検証問題として、斜め移流問題と、Single vortex 問題を解く。さらに、非圧縮性流体計算の界面捕獲法に保存型 Phase field 法と VOF 法の一つである THINC/WLIC 法を用いて両者の比較を行う。VOF 法および THINC/WLIC 法については付録 C, D を参照されたい。

斜め移流問題

計算領域全体に一樣流速 $\mathbf{u} = (1, 1)$ を設定した斜め移流問題を Level Set 法とカップリングさせずに保存型 Phase field 法で解く。初期条件は Fig. 2.27 に示す通りで、計算領域 $[0, 1] \times [0, 1]$ を格子数 100×100 で計算する。領域境界は周期境界条件を与え、初期界面形状は一辺の長さ $L = 0.2$ 、中心座標 $(0.2, 0.2)$ とした。節 2.6.6 で述べたように、本手法では保存型 Allen-Cahn 方程式を左辺と右辺に分離して解く。そのためまずは移流のみを解き、CIP-CSLR1 法を用いた場合の利点を確認する。Fig. 2.28 に移流に CIP-CSLR2 法を用いた場合の、 ϕ を高さにとったグラフを示し、Fig. 2.29 に CIP-CSLR1 法を用いた結果を示す。Fig. 2.28, Fig. 2.29 中の n cycle という表現は界面が周期境界条件によって n 周まわって、初期

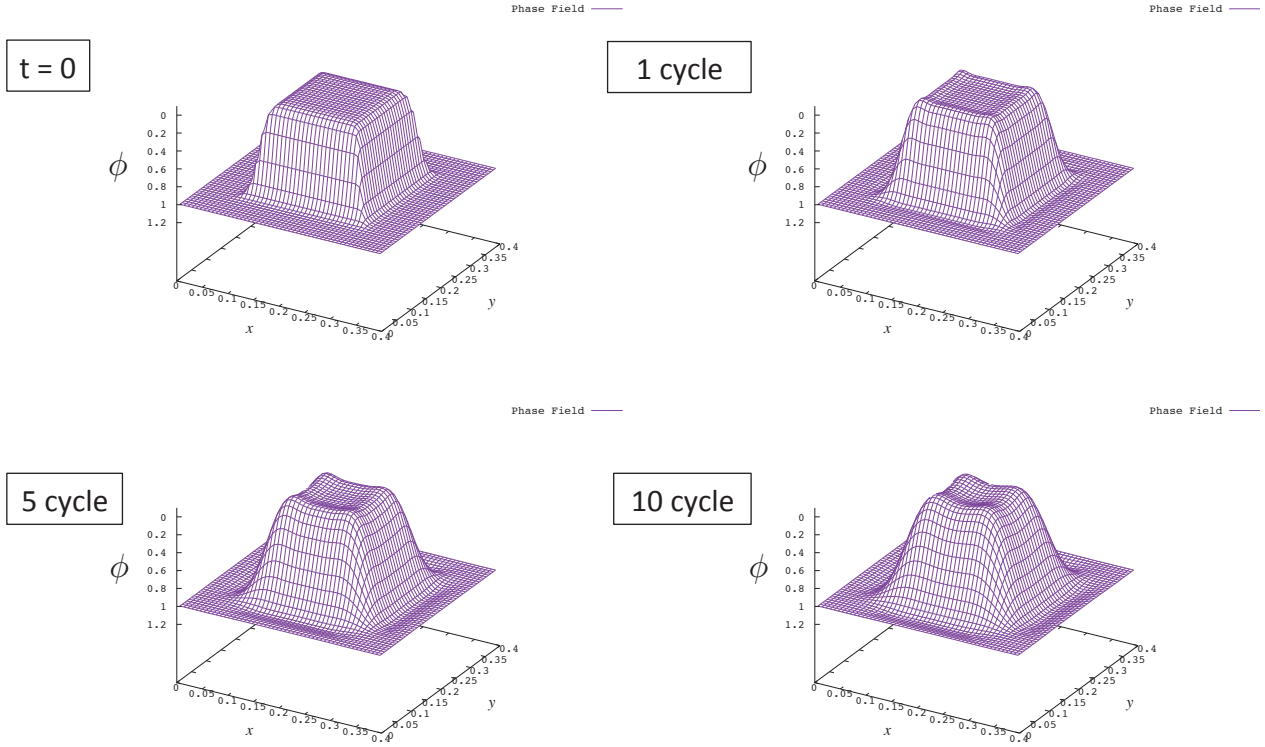


Fig.2.28: The phase-field profile solved by using CIP-CSL2 scheme for the diagonal advection problem.

位置に戻ってきたときの状態を示す．いずれにおいても数値粘性によって界面が拡散している様子がわかり，CIP-CSL2 法ではオーバーシュート・アンダーシュートが見られるのに対し，CIP-CSLR1 法ではオーバーシュート・アンダーシュートが抑制されていることがわかる．

本手法で用いる保存型 Allen-Cahn 方程式による Phase field 法では，上記の ϕ の保存方程式に加えて，右辺の拡散・逆拡散の効果を持つ式 (2.98) を計算する．界面パラメータを $\delta = 0.2\Delta x$ ， $\lambda = 0.1$ として，斜め移流問題を保存型 Allen-Cahn 方程式で解くと，1 cycle 後，10 cycle 後の界面は Fig. 2.30 のようになる．Fig. 2.30 の左側は ϕ の等高線を表しており，右側には界面近傍の ϕ のプロファイルを一次元的に表している．界面幅 δ がほぼ一定に保たれており，本手法で数値粘性による過剰な界面拡散を防ぐことができると言える．界面形状がやや歪になっているのは，保存型 Allen-Cahn 方程式 (2.50) の右辺に含まれる法線ベクトルを表す項 $\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}$ を Phase field の秩序変数 ϕ から計算しているためであると考えられ，Level Set とのカップリングを行うことで改善が見込める．

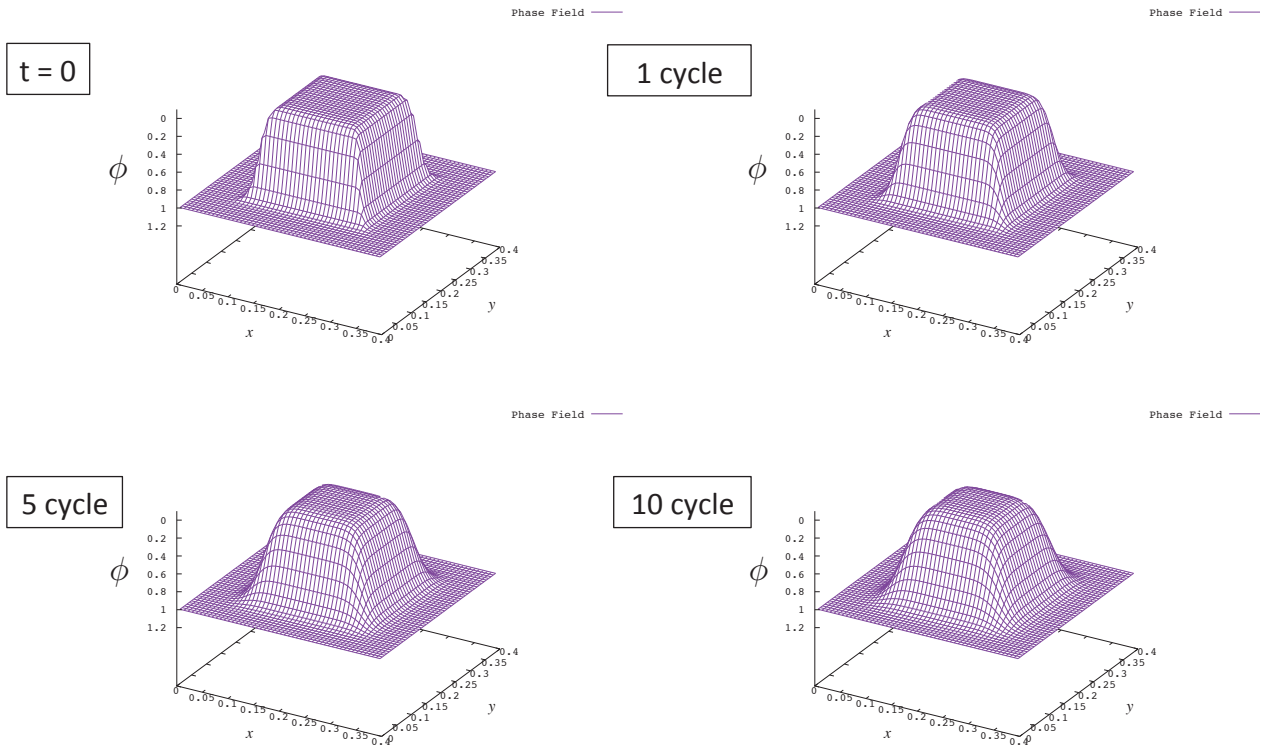


Fig.2.29: The phase-field profile solved by using CIP-CSR1 scheme for the diagonal advection problem.

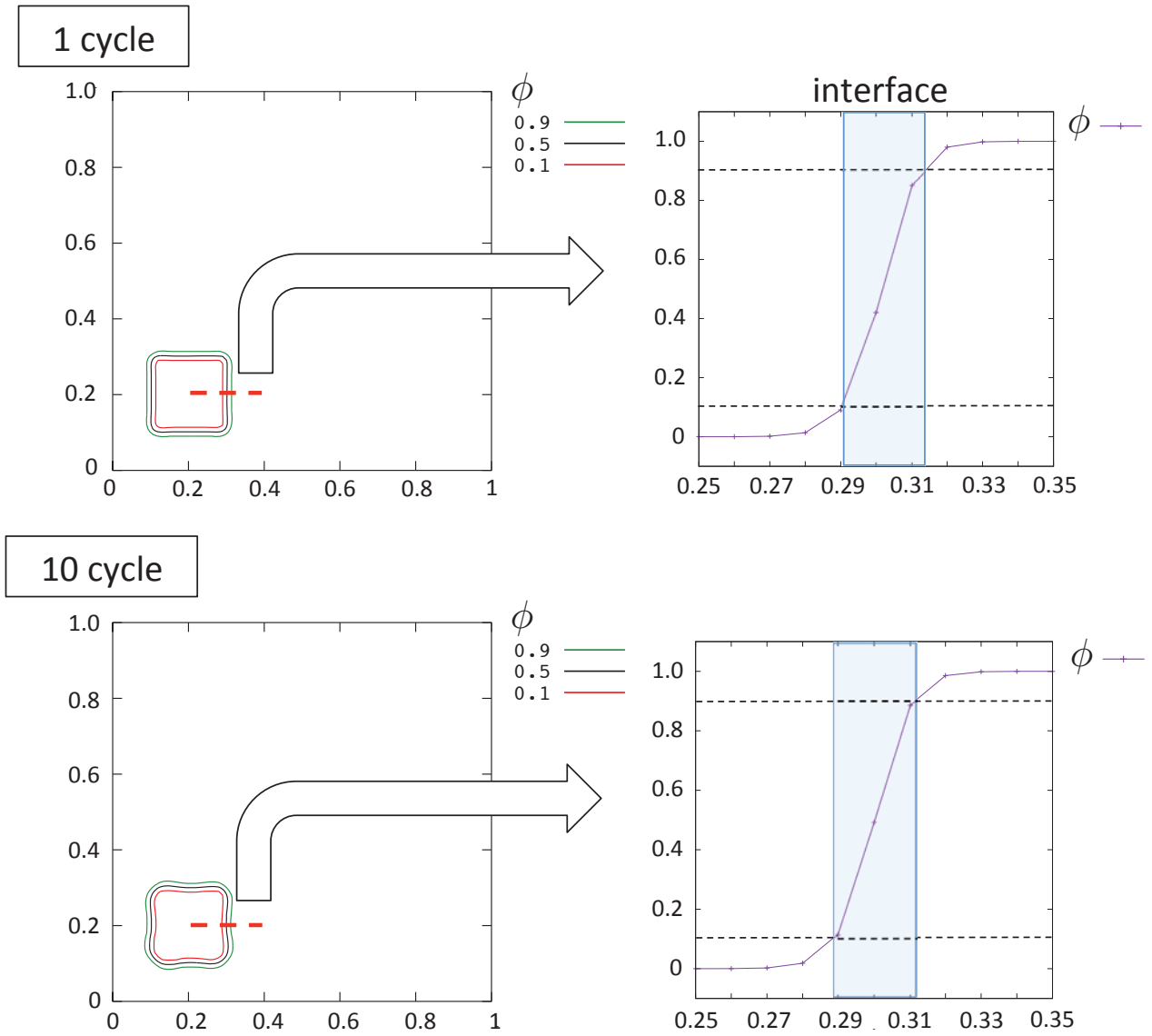


Fig.2.30: The results obtained by solving the conservative Allen-Cahn equation for the diagonal advection problem. Left shows the contour of ϕ and right shows 1-dimensional profile of ϕ on the sectional line.

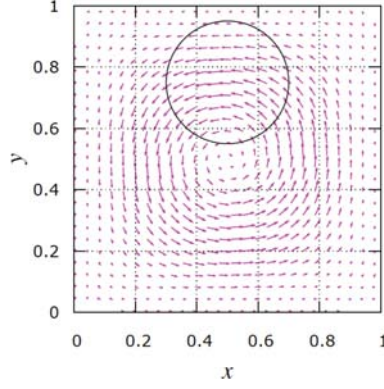


Fig.2.31: The setting of the single vortex problem.

Single vortex 問題

Rider らによって提案された Single vortex 問題 [78] を解き、界面が大きく変形する移流問題における保存型 Phase field 法の有用性を検証する。計算領域 $[0, 1] \times [0, 1]$ を格子数 100×100 で計算する。初期条件は Fig. 2.31 に示す通りで、初期位置 $(0.5, 0.75)$ に半径 0.2 の円形プロファイルを設定し、式 (2.152) で表される流れ関数に従って移流する。

$$\Psi(t, x, y) = \frac{1}{\pi} \sin^2(\pi x) \sin^2(\pi y) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \quad (2.152)$$

流れ関数から具体的な速度場は以下のように与えられる。

$$u(x, y, t) = \frac{\partial \Psi}{\partial y} = 2 \sin^2(\pi x) \sin(\pi y) \cos(\pi y) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \quad (2.153)$$

$$v(x, y, t) = -\frac{\partial \Psi}{\partial x} = -2 \sin(\pi x) \cos(\pi x) \sin^2(\pi y) \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \quad (2.154)$$

ここで、 T は周期である。流れ場によって界面プロファイルは $t = T/2$ まで引き伸ばされ、 $t = T/2$ からは反転した流れ場によって理想的には $t = T$ で初期形状に回復する。本計算では $T = 8$ とし、時間刻み $\Delta t = 0.1 \Delta x$ とした。これは節 2.9 で述べたように弱圧縮性解法は主に時間刻み Δt が音速で支配されるのに対し、界面捕獲の移流計算では移流速度 $\mathbf{u}$ で支配され、流速に対して十分小さく時間刻みを取れるためである。

Fig. 2.32 に $t = 0$, $t = T/2$, $t = T$ における界面プロファイルの等高線を示す。最も界面プロファイルが引き伸ばされる $t = T/2$ においても界面幅が一定に保たれており、Level Set 法とのカップリングを行っていないにも関わらず $t = T$ においても比較的高精度に初期形状を回復している。この結果は杉原 [4] による 128×128 格子を用いた CLSVOF 法および THINC/WLIC 法による結果 Fig. 2.33 と比べても遜色ない結果である。

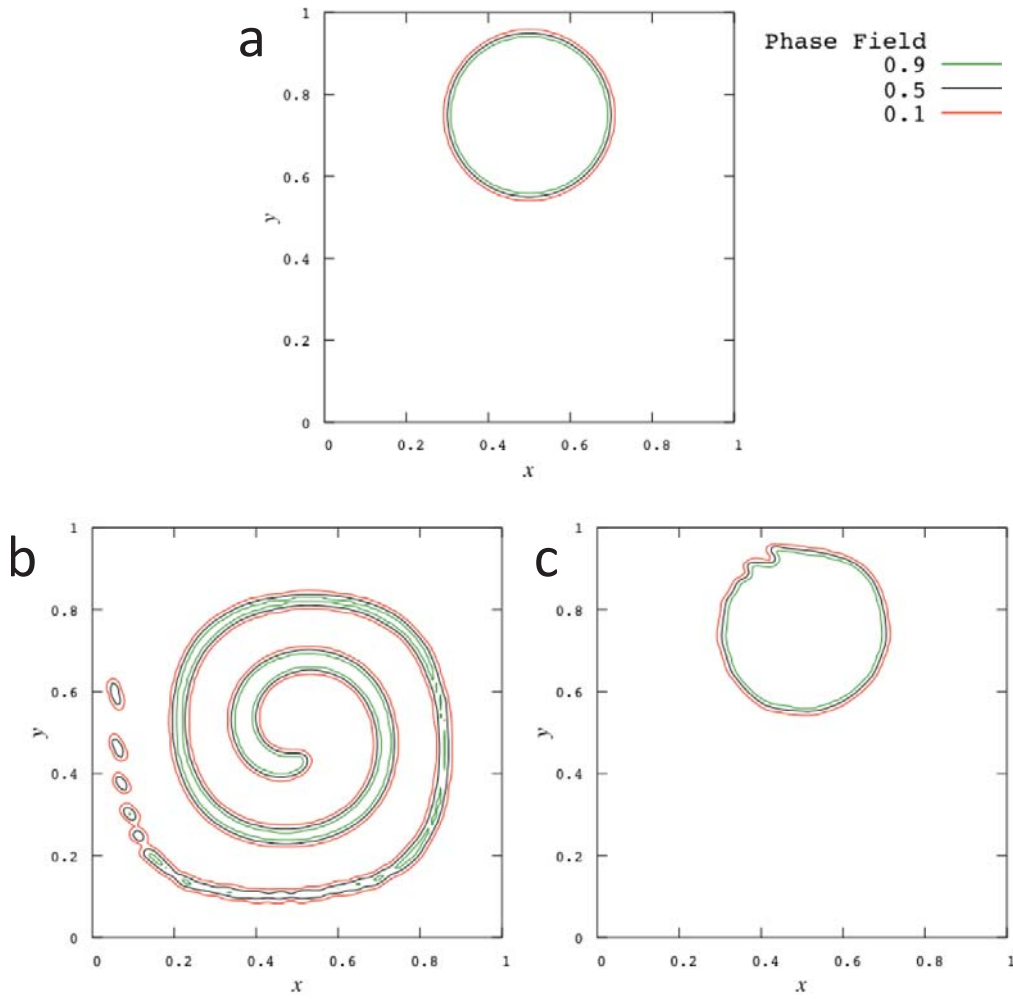


Fig.2.32: The phase-field profiles obtained by solving conservative Allen-Cahn equation for the single vortex problem. (a) $t = 0$; (b) $t = T/2$; (c) $t = T$.

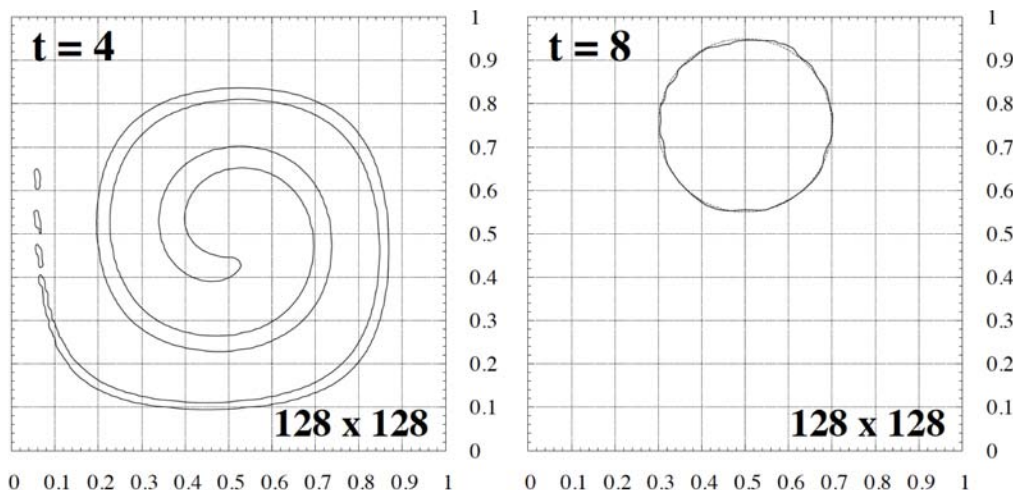


Fig.2.33: The contour line of $\phi = 0.5$ obtained by using THINC/WLIC scheme adapted from reference[4].

気液二相流計算における THINC/WLIC 法と保存型 Phase field 法の比較

付録 D に示した THINC/WLIC 法は補関数に hyperbolic tangent 関数を用いることで逆拡散の効果を含むが、基本的には VOF 値の移流方程式を解くので、長時間積分に伴う数値粘性によって、界面が過剰に拡散してしまうことがある。拡散した小さな VOF 値が気相の流れに引っ張られて 0.5 に満たない小さな VOF 値の浮遊という非物理的現象が起こるが、界面を可視化する際には、VOF 値 0.5 の等値面を気液界面として可視化されることが多いため、問題が表面化しにくい。

保存型 Phase field 法では、拡散・逆拡散の効果を持つ項を明示的に計算するため、界面幅を一定に保つことができ、VOF 値の浮遊という非物理的な現象を防ぐことが期待できる。この節では、気液二相流計算の界面捕獲手法に THINC/WLIC 法と用いた場合と保存型 Phase field 法を用いた場合の結果を比較する。なお、純粋に界面捕獲手法の比較を行いたいため、弱圧縮性スキームによる影響を排除するため流体計算には非圧縮性気液二相流ソルバーを用いる。気液二相流ソルバーは Staggered 格子で変数を配置し、SMAC 法で圧力項を陰的に解き、その他の項は陽的に解く。流体部分の空間離散化には 3 次精度 WENO スキームを用い、時間離散化には 3 次 TVD Runge Kutta 法を用いる。非圧縮性ソルバーについては付録 B に記載する。

2 次元ダム崩壊問題によるモビリティの影響の検証

Fig. 2.34 のように、水柱だけでなく床面に水を設定したダム崩壊では、水柱下部で、床の水を巻き込みながら流れが進行し、右側の壁面に流れた水の先端が衝突すると、激しく水が飛び散る。このような液相に激しい流れを伴う問題では、THINC/WLIC 法などの VOF 法では VOF 値の浮遊が起こりやすい。界面捕獲手法に保存型 Phase field 法を用いた場合 THINC/WLIC 法を用いた場合と比べてどの程度改善されるのかを確認する。二相の物性値は 20 °C における水と空気のもので、液相密度 $\rho_l = 998 \text{ kg/m}^3$ 、粘性係数 $\mu_l = 1.0 \times 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ で気相の密度 $\rho_g = 1.2 \text{ kg/m}^3$ 、粘性係数 $1.8 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ である。計算領域 $[0, 0.72] \times [0, 0.36] \text{ m}$ を格子数 200×100 で計算する。なお、境界条件は全て slip 境界とし、表面張力は考慮しない。

計算結果として、THINC/WLIC 法の界面プロファイルの時刻変化を Fig. 2.35 に、保存型 Phase field 法のものを Fig. 2.35 に示す。 ϕ は THINC/WLIC 法では VOF 値に対応し、保存型 Phase field 法では Phase field 秩序変数を表す。THINC/WLIC 法では $t = 3 \text{ s}$ で VOF 値が引き千切られ、小さな値の VOF 値が気流にのって空中を浮遊してしまっている様子がわかる。一方保存型 Phase field 法では、界面幅が一定に保たれ、THINC/WLIC 法で見られる VOF 値の浮遊もかなり軽減できていることがわかる。

Rayleigh Taylor 不安定性

水平な界面を挟んで上側に重い流体を設定し、下側に軽い流体を設定した不安定平衡状態で、界面に微小な攪乱を与えると重力の影響で指数関数的に不安定性が成長し、渦状の流れを生じながら流体が激しく混ざり合う。このように二相が激しく混ざり合う問題において、THINC/WLIC 法と保存型 Phase field 法を比較する。

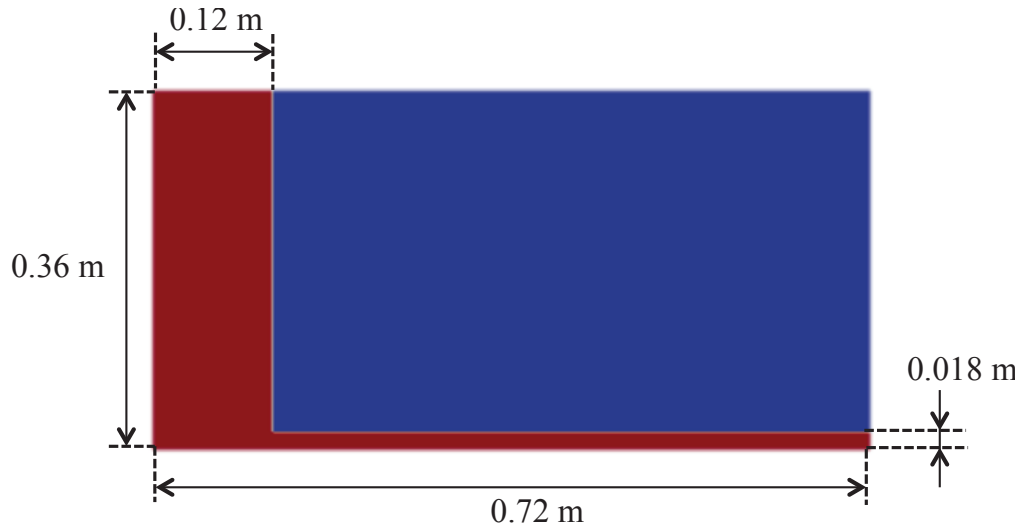


Fig.2.34: The initial setting of the two-dimensional dam breaking onto wet floor problem.

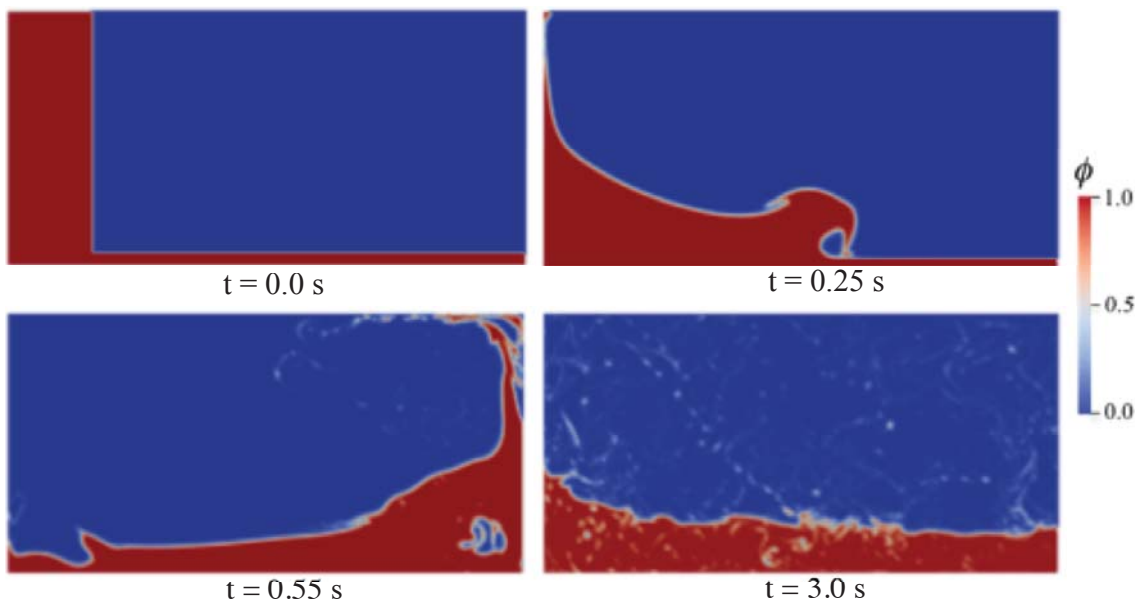


Fig.2.35: The phase-field profiles obtained by using THINC/WLIC scheme for the two-dimensional dam breaking onto wet floor problem.

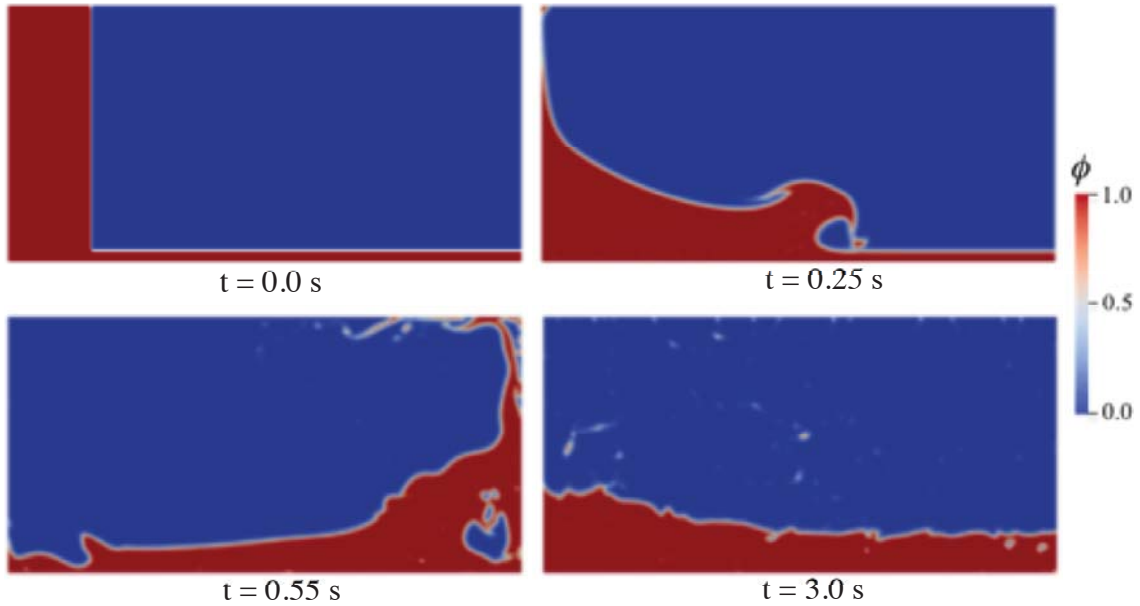


Fig.2.36: The phase-field profiles obtained by solving conservative Allen-Cahn equation for the two-dimensional dam breaking onto wet floor problem.

計算領域 $[0, 0.5] \times [0, 1.0]$ m に格子数 64×128 を割り当て、密度比 2:1 の流体で Rayleigh Taylor 不安定性の計算を行った。流体は非粘性で、表面張力は 0 とし、初期攪乱を界面近傍に与えた。THINC/WLIC 法の結果を Fig. 2.37 に、保存型 Phase field 法の結果を Fig. 2.38 に示す。THINC/WLIC 法・保存型 Phase field 法の結果ともに、0.3 s で渦状の流れを生じながら重い上側の流体が沈み込んでいる様子がわかる。両者の差が顕著に現れているのが $t = 9.0$ s における界面プロファイルで、THINC/WLIC 法で値の小さな VOF の浮遊が多く見られるのに対して、保存型 Phase field 法では、界面がシャープに保たれており、VOF 値の浮遊も改善されている。

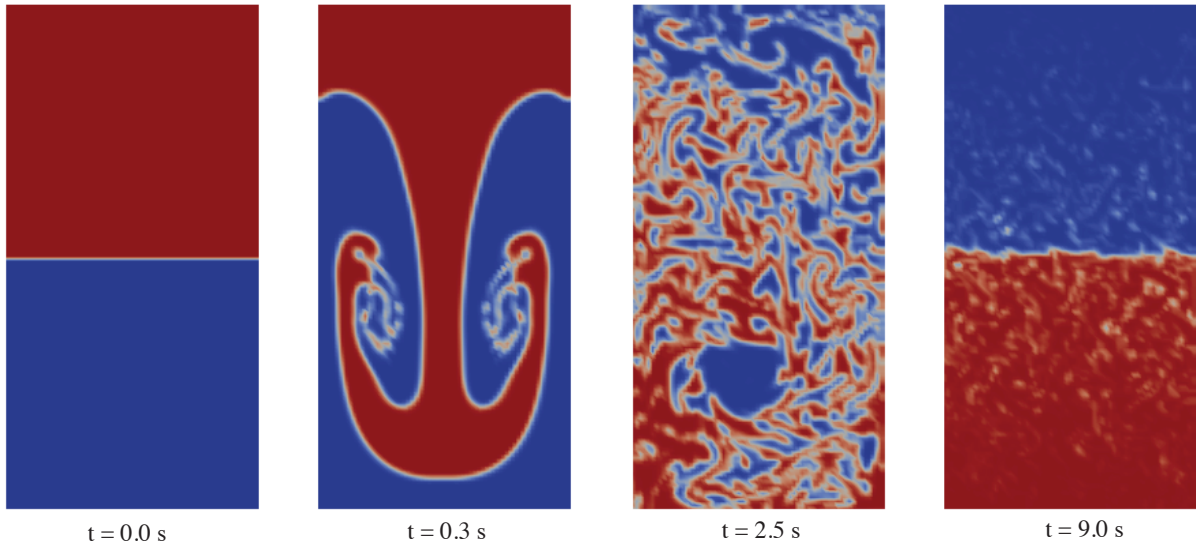


Fig.2.37: The phase-field profiles obtained by using THINC/WLIC scheme for the Rayleigh Taylor instability problem.

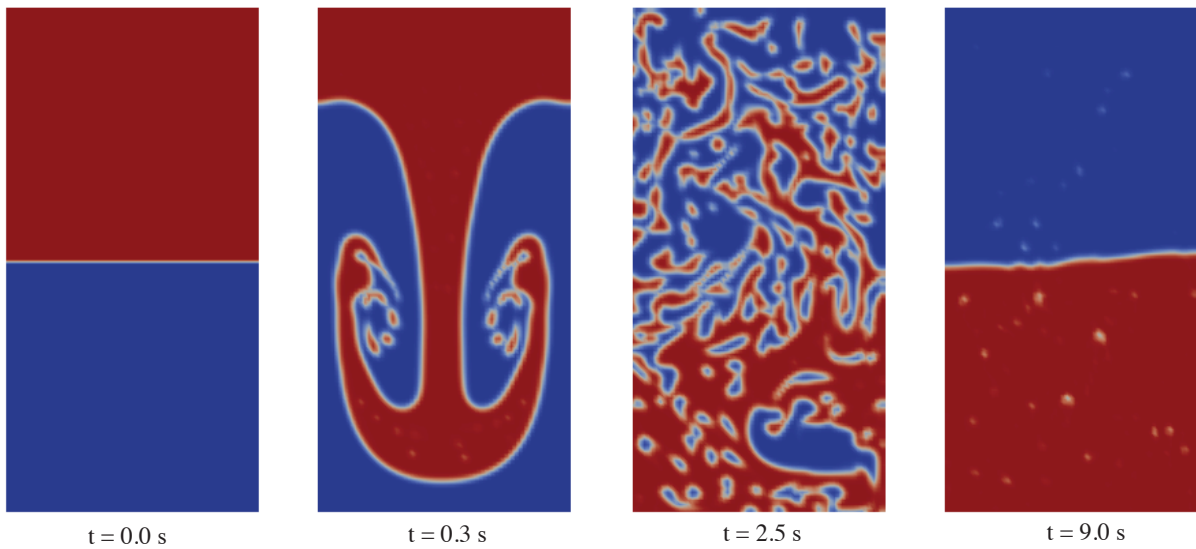


Fig.2.38: The phase-field profiles obtained by solving conservative Allen-Cahn equation for the Rayleigh Taylor instability problem.

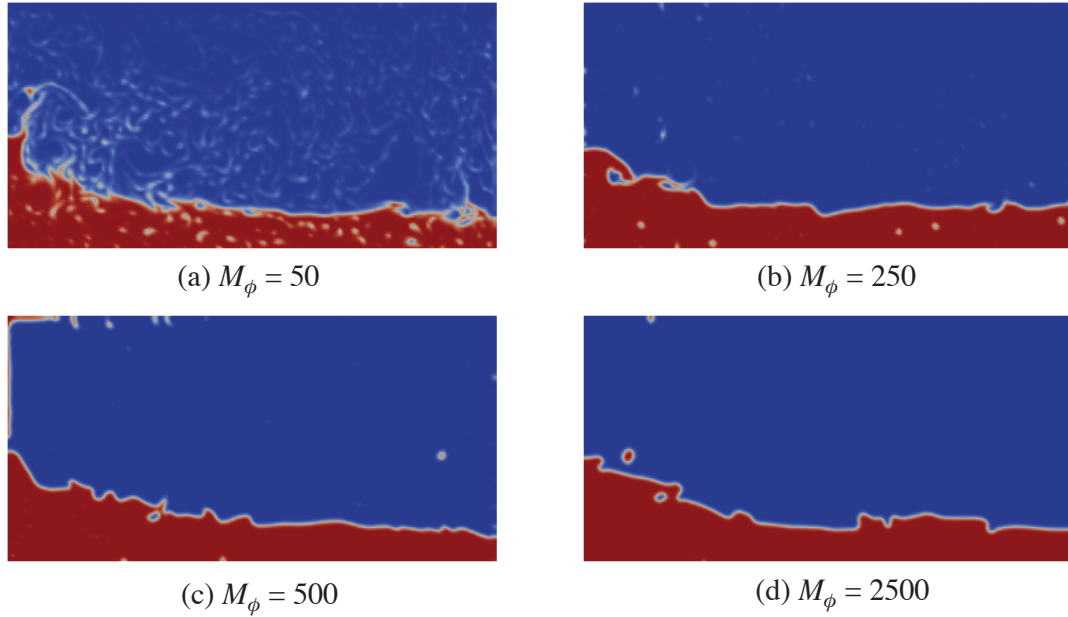


Fig.2.39: The effect of the mobility parameter of conservative Allen-Cahn equation.

Phase field モビリティの影響

節 2.5.1 で記述した保存型 Allen-Cahn 方程式 (2.50) の右辺第一項は拡散の効果を持ち、第二項は逆拡散の効果を持つ。この二つの項の比率は ε によって定まり、界面幅についての情報を与えれば一意に決まる。一方右辺全体にかかる係数である $\tilde{\gamma} = M_\phi |u|_{\max}$ は Phase field モビリティに関わる係数で、 M_ϕ は試行計算によって決める。Phase field 法はパラメータによって界面の様子が大きく変わってくるので、 M_ϕ による計算結果の影響について考察する。

節 2.13.3 の 2 次元ダム崩壊問題について、 M_ϕ の値を変化させた結果を Fig. 2.39 に示す。 M_ϕ の値を増やせば増やすほど界面のシャープさは増すが、値を増加させすぎると右辺の効果が強く働き過ぎてしまい、液相が塊になりやすくなってしまっている。また、Allen-Cahn 方程式の右辺には法線ベクトルを表す項が含まれているため、 M_ϕ を増加させると法線ベクトルの誤差による影響が顕著に現れてくるという問題もある。従って保存型 Phase field 法を用いる際には、数値粘性による界面の過剰な拡散と、逆拡散項による界面をシャープに保つ効果のバランスを考えながら注意深く設定する必要がある。

Level Set 法とのカップリングによる影響

節 2.5.3 で述べたように、本研究では保存型 Phase field 法と Level Set 法のカップリングを行い、幾何計算に Level Set 関数を用いることで、界面形状の精度をあげる。前節 2.13.3 で述べたように、Phase field 法ではモビリティを大きくするほど界面のシャープさは増すが、同時に Allen-Cahn 方程式 (2.50) に含まれる法線ベクトルの影響が増すということも意味するので、注意が必要である。

Level Set 法と保存型 Phase field 法のカップリングの効果を確認するため、計算領域 $[0, 1] \times [0, 1]$ m の

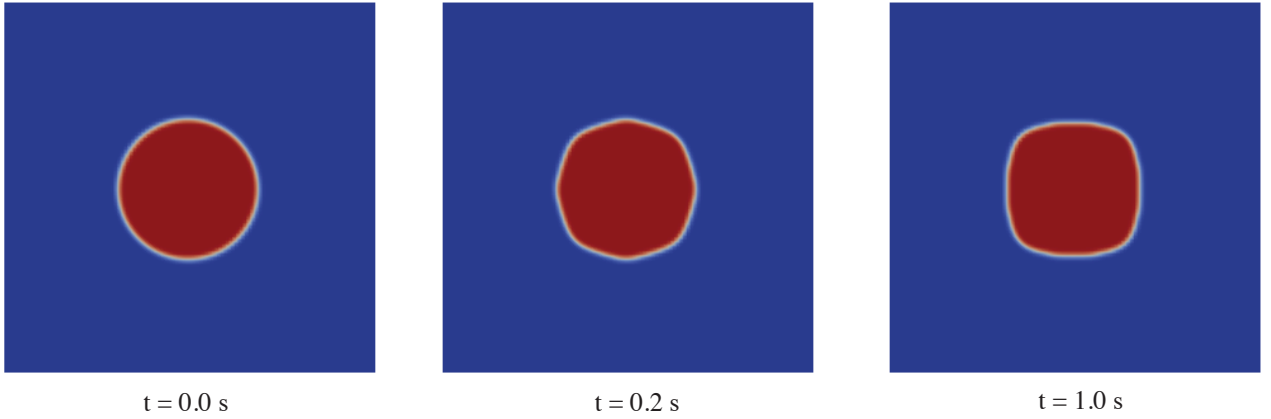


Fig.2.40: The phase-field profiles when the normal vector is computed by using phase-field variables.

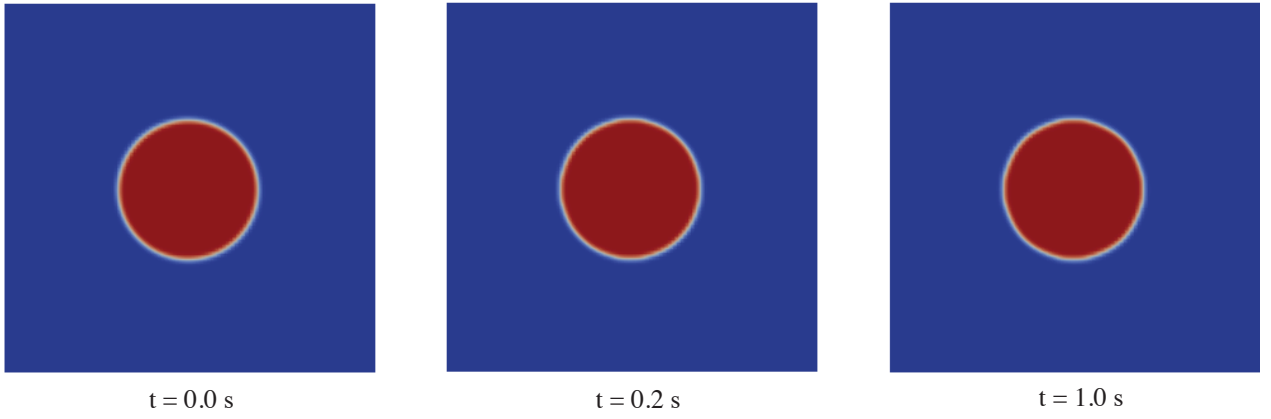


Fig.2.41: The phase-field profiles when the normal vector is computed by using level-set function.

中心に半径 0.2 m の円形状の液相を設定した。界面幅 $\delta = 2\Delta x$, $\lambda = 0.1$, $M_\phi = 500$ とし、本来 $|\mathbf{u}|_{\max}$ として与えていた部分に 1.0 を与え、重力・表面張力を作用させずに Allen-Cahn 方程式の右辺の影響を調べた。

Fig. 2.40 に法線ベクトルを Phase field 秩序変数 ϕ から求めた場合の界面プロファイルの時刻変化を示し、Fig. 2.41 に保存型 Phase field 法とカップリングした Level Set 関数 ψ から法線ベクトルを求めた場合の界面プロファイルの時刻変化を示す。 ϕ のみから法線ベクトルを計算した場合は、 $t = 0.2, 1.0$ s で本来円形であるはずの界面形状が四角い形状に近づいており、 ϕ による法線ベクトルを計算の精度が悪いことがわかる。一方で Level Set 関数から法線ベクトルを求めた場合は $t = 1.0$ s においても界面は円形を保っており、Level Set 法とのカップリングによって幾何計算が高精度に行えていることがわかる。

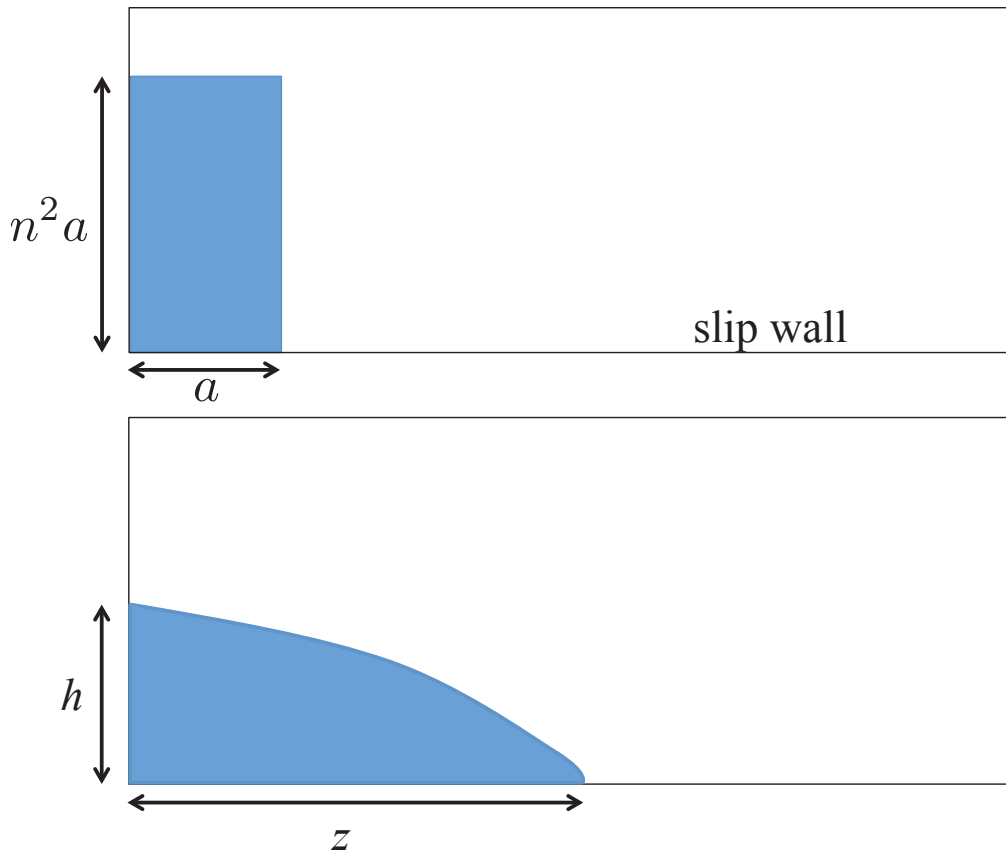


Fig.2.42: The initial setting of two-dimensional dam breaking onto dry floor problem.

2.13.4 気液二相流計算の検証

本説では、特性線に基づく弱圧縮性気液二相流解析手法を用いて、非圧縮性気液二相流計算の検証問題としてよく解かれる問題を解き、本手法が非圧縮性気液二相流解析に適用可能であるかの検証を行う。

2次元ダム崩壊問題

気液二相流計算の簡単な検証問題として2次元ダム崩壊問題を計算し、非圧縮性ソルバーの結果および Martin らの実験結果 [79] と比較する。

初期条件として、Fig. 2.42 に示すように、計算領域左側に水柱を設定する。このとき水柱の横幅を a 、水柱高さを $n^2 a$ として、 n, a をパラメータとして計算する。

計算領域 $[0, 0.4] \times [0, 0.15]$ m を格子数 200×75 , 400×150 で解像し、気液相にはそれぞれ 20°C の空気と水の物性値を用いる。本計算では壁付近の境界層を解像できるほどの格子数を用いていないため、境界条件は全ての壁面を slip 境界とした。また、本計算のスケールでは表面張力は結果に大きく依存しないため、表面張力は 0 として計算した。非圧縮性ソルバーについては付録 B に示すものを用いる。

Fig. 2.43 に 200×75 格子を用いた界面の時刻変化を示し、 400×150 格子を用いたものを Fig. 2.44 に

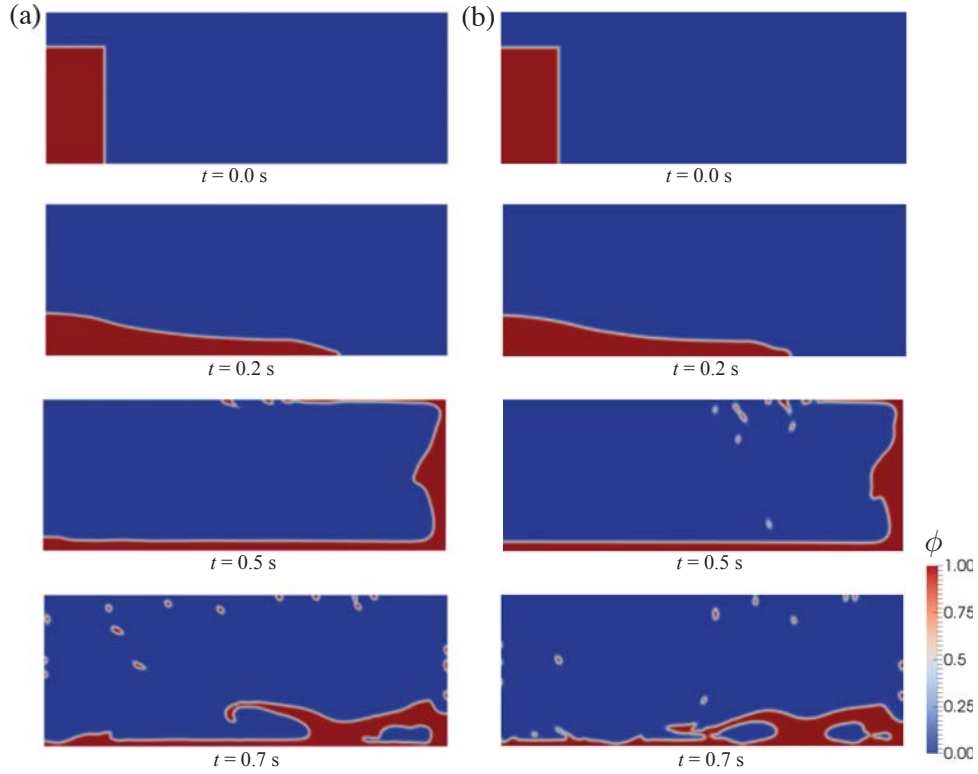


Fig.2.43: Snapshots of the 2-D dam breaking problem for 200×75 mesh. Results of (a) the weakly compressible solver and (b) the incompressible solver.

示す．細かい界面形状に差はあるが，全体の流れの傾向は定性的に一致している．

弱圧縮性解法は $\text{Div} \mathbf{u} = 0$ を満たさないため，圧縮性の影響を議論するために，最大流速 $\mathbf{u}_{\max}$ で無次元化した速度場の発散を考える．連続の式は，

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (2.155)$$

であるので，ここから Δt における密度の圧縮率を算出できる．

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} \simeq -\nabla \cdot \mathbf{u} \Delta t. \quad (2.156)$$

代表的な時間刻みとして $\Delta t = \Delta x / |\mathbf{u}_{\max}|$ を採用する．Fig. 2.45 に $\nabla \cdot \mathbf{u} \Delta t$ を示す．これは密度圧縮率 $\Delta \rho / \rho$ を表す．値は 0.01 から 0.05 程度であり，計算領域左側でピークが出ていることがわかる．

弱圧縮性手法では $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ を完全には満たさないので，流れ場の圧縮性によって ϕ が圧縮することがある．Fig. 2.46 に Phase field 変数 $\phi > 1$ と $\phi < 0$ となっている領域を強調した図を示す．Fig. 2.46(b) は (a) と比較して音速を二倍にした結果である．両者で $\phi < 0$ の領域があるが，値は非常に小さく $\phi = 0$ としても結果にほとんど影響しない．音速を 2 倍にすると ϕ の最大値は 1.01520 から 1.00368 となり，格子数を増やした時圧縮性は減少する方向に働いていることがわかる．

Fig. 2.48 に体積の計算領域における総和の時間変化を示す．密度は保存形 Allen-Cahn 方程式を有限体

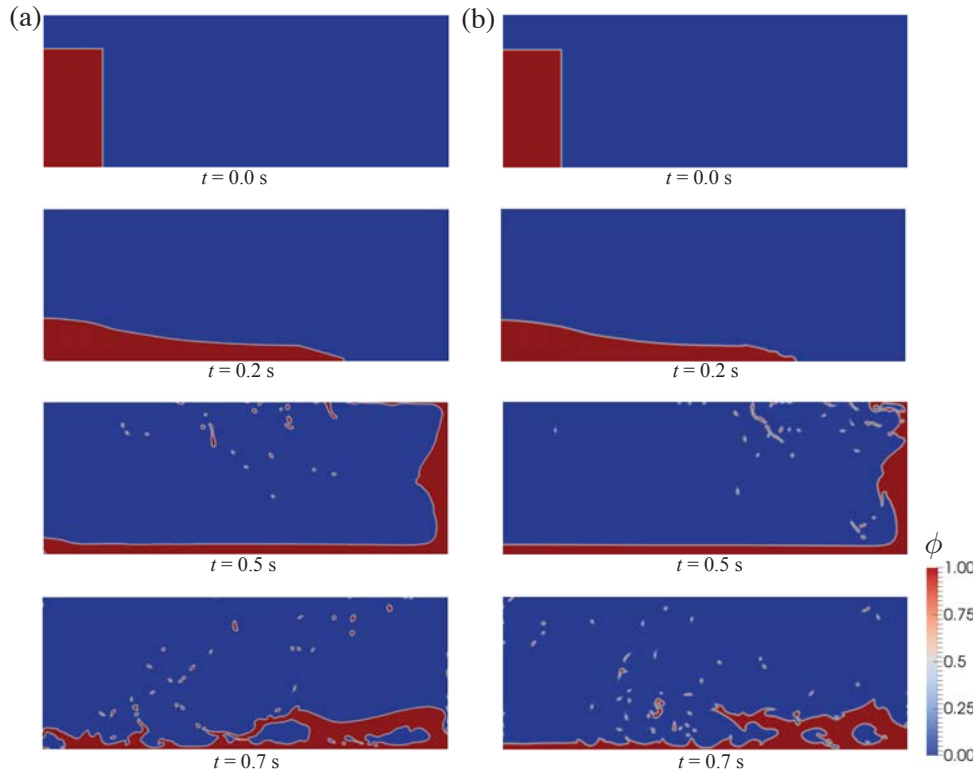


Fig.2.44: The same 2-D dam breaking problem with 400×150 mesh. Results of (a) the weakly compressible solver and (b) the incompressible solver.

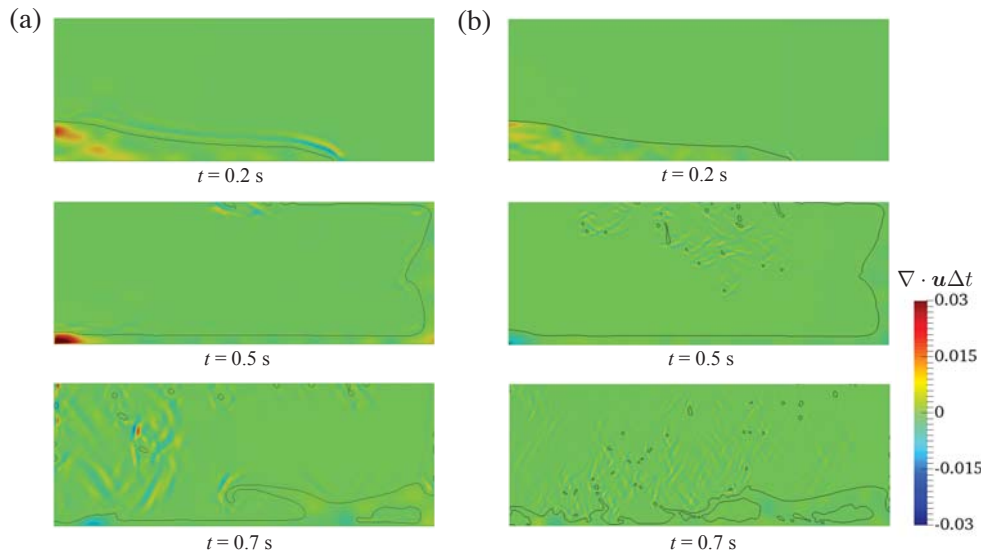


Fig.2.45: Velocity divergence profiles of (a) 200×75 mesh and (b) 400×150 mesh for the 2-D dam breaking problem solved by the weakly compressible scheme.

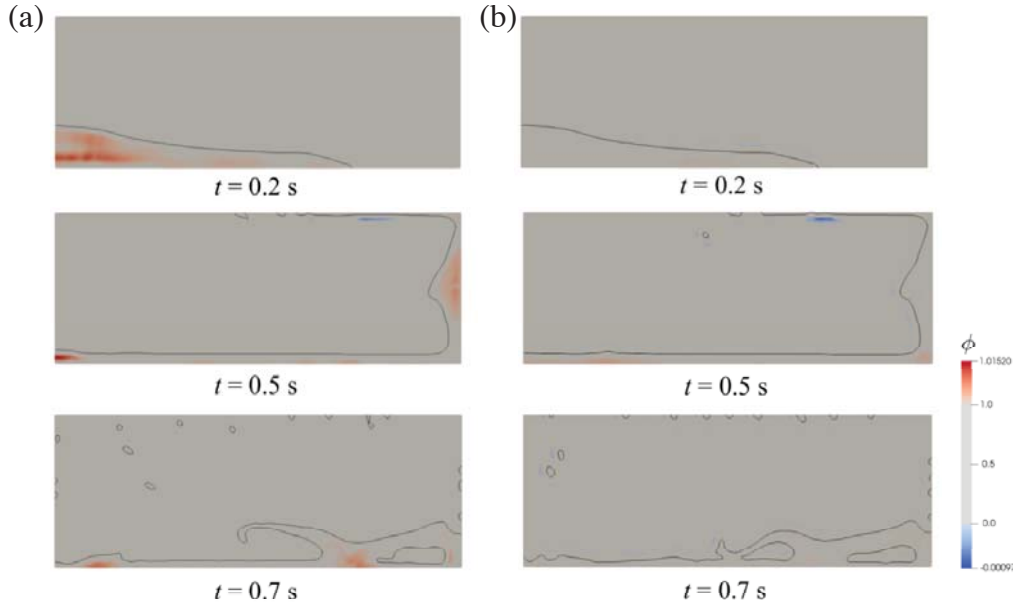


Fig.2.46: Color contour of the phase field variable with a color map emphasized for $\phi < 0.0$ and $\phi > 1.0$ for the 2-D dam breaking problem on 200×75 mesh, (a) same as Fig.2.43 (a), and (b) the result with a twice-higher sound speed.

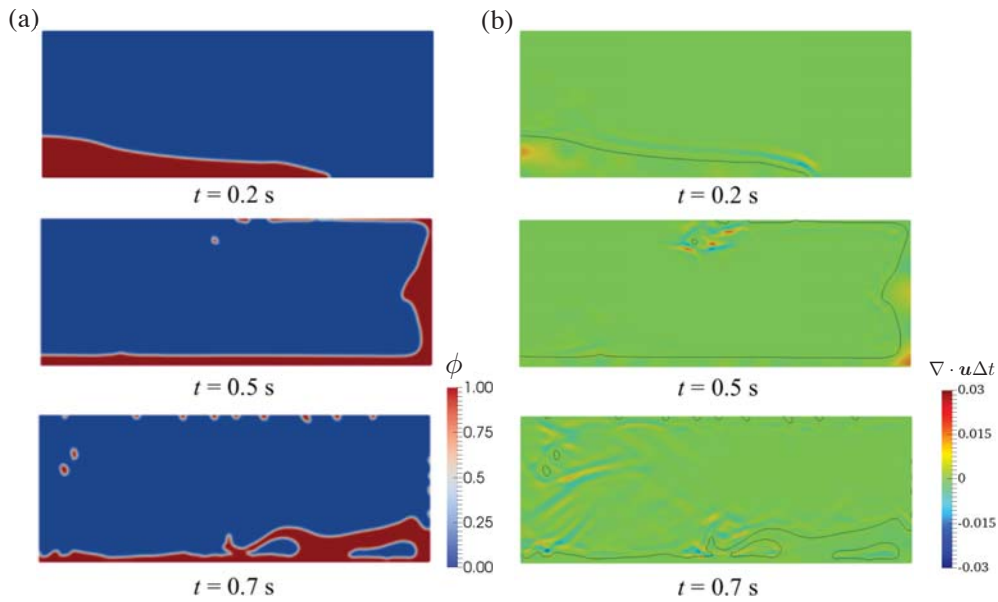


Fig.2.47: 2-D dam breaking problem on 200×75 mesh with a twice-higher sound speed, (a) snapshots of the interface profile represented by the phase field variable ϕ and (b) profiles of the velocity divergence.

積分で解いているため完全に保存するが、体積は圧縮性の影響を受けるため完全には保存しない。しかし体積の変化は 0.4% 以下で留まっている。

また、計算開始から t 秒後の水柱先端到達距離を z ，左側の壁面における水柱の高さを h ，重力加速度

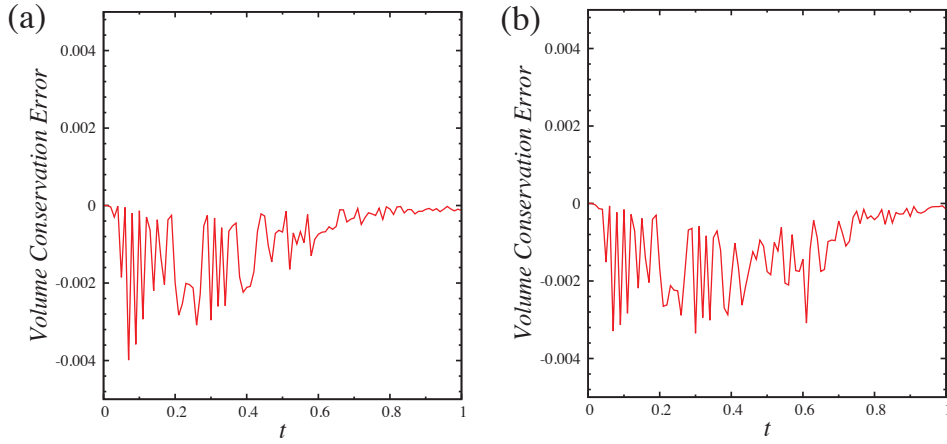


Fig.2.48: Total volume changes from the initial value. (a) 200×75 mesh and (b) 400×150 mesh.

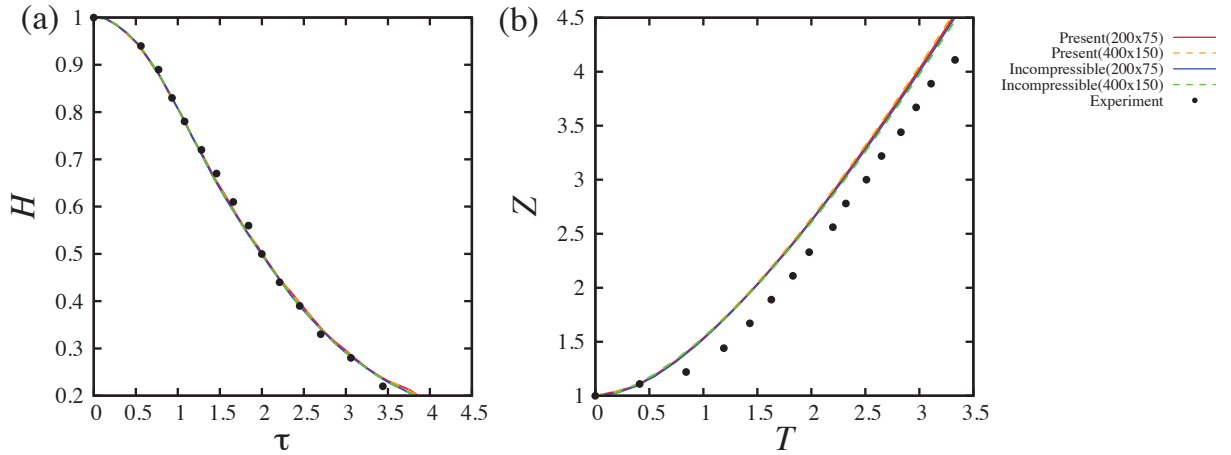


Fig.2.49: Comparisons of (a) heights of water column and (b) front locations of the weakly compressible solver based on characteristic method with those of the incompressible solver and the experimental data[79]

$g = 9.8 \text{ m/s}^2$ を，以下の式で無次元化し Martin らの実験結果 [79] と比較したグラフを Fig. 2.49 に示す．

$$\begin{aligned} \tau &= t \sqrt{\frac{g}{a}}, & H &= \frac{h}{n^2 a}, \\ T &= n\tau, & Z &= \frac{z}{a}. \end{aligned} \quad (2.157)$$

無次元化された到達距離 Z および H について，実験値とよく一致していることがわかる．到達距離については実験値より大きめに見積もられているが，これは壁面境界を *slip* としたためであると考えられる．Hirt らの SOLA-VOF 法による結果 [24] や越塚らの MPS 法による結果 [80] でも同様の傾向が見られるため，これは本手法特有の問題ではないと考えられる．以上から，本手法によって気液二相流計算が妥当に行えていると考えられる．

液滴振動問題

表面張力単体の検証のため，無重力下における液滴の振動を 2 次元的に計算する．計算領域 $[0, 75] \times [0, 75]$ mm の中央に一辺の長さ $l = 37.5$ mm の正方形液滴を配置し，表面張力を作用させて，液滴の振動周期を計算する．各相の物性値は 20 °C における空気と水のものを用い，非粘性とする．表面張力は $\sigma = 0.07252$ N/m とする．

Lamb による解析解 [81] より，液滴の振動周期 T は以下の式で計算できる．

$$\begin{aligned} T &= \frac{2\pi}{k} \\ k &= \sqrt{s(s^2 - 1)} \frac{\sigma}{\rho_l r^3} \\ r &= \sqrt{\frac{l^2}{\pi}} \end{aligned} \tag{2.158}$$

ここで s は振動モードを表し，正方形の場合 $s = 4$ である．本計算のパラメータを代入すると，周期 $T = 0.292$ と計算できる．Fig. 2.50 に液滴の振動の様子を示す．表面張力によって丸くなる方向に力がかかり円形に近づいたのちに， $t = 0.15$ s までオーバーシュートし， $t = 0.3$ s で再び正方形に戻っている．この周期はおよそ 0.3 秒であり，解析解と良好に一致する結果が得られた．

接触角の検証

節 2.5.5 に記述した接触角モデルによって接触角が適切に計算できるか確かめるため，無重力下における液滴の挙動を 3 次元的に計算する．

半径 0.2 mm の半球状の液滴を壁面に接触させ，十分に時間が経過した状態での壁面との成す角を確かめる．二相の物性値には空気とエチレングリコールのものを用いる．エチレングリコールは密度 $\rho_l = 1113.2$ kg/m³，粘性係数 $\mu_l = 0.0161$ Pa·s，表面張力 $\sigma = 0.04799$ N/m である．なお，壁面には non-slip 境界条件を設定する．

計算領域 $1.2 \times 1.2 \times 0.5$ mm を格子数 $60 \times 60 \times 20$ で計算した結果を 3 次元的に見たものを Fig. 2.51 に，断面図を Fig. 2.52 に示す．接触角 $\theta = 30, 60, 90, 120, 150^\circ$ という広い範囲で静的接触角をよく再現できていることがわかる．Fig. 2.52 から，接触角が小さいときは壁面近傍で鋭角を表現しきれていないが，これは解像度不足が原因であると考えられる．以上より，接触角モデルで妥当な静的接触角を再現できていると考えられる．

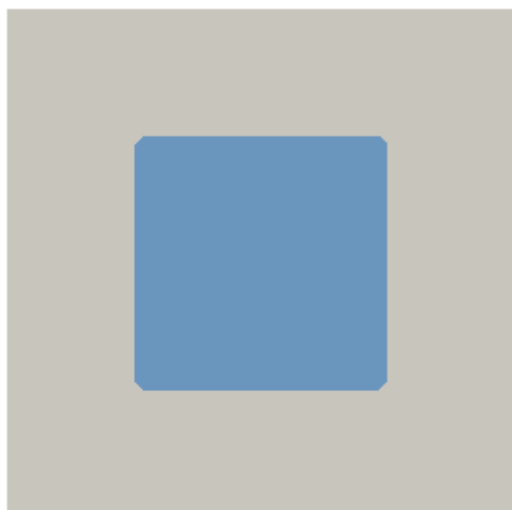
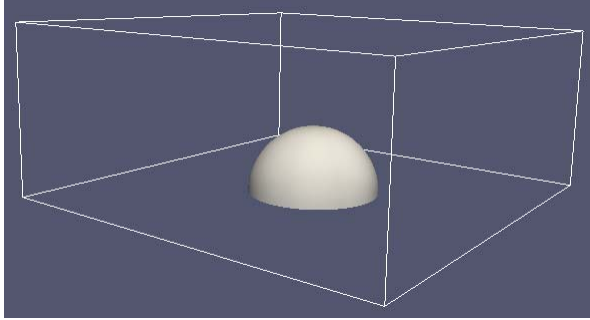
(a) $t = 0.0$ s(b) $t = 0.05$ s(c) $t = 0.15$ s(d) $t = 0.30$ s

Fig.2.50: Time evolution of interfaces for the droplet vibration at (a) $t = 0.0$ s; (b) $t = 0.05$ s; (c) $t = 0.15$ s; (d) $t = 0.30$ s.



(a) Initial condition

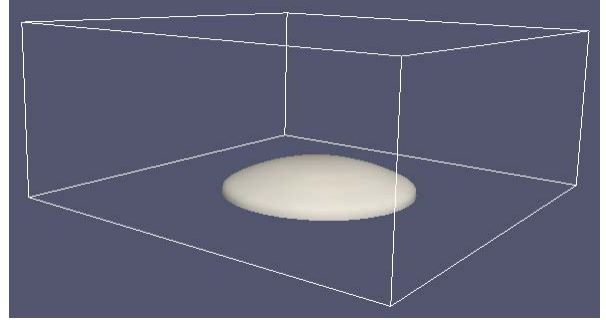
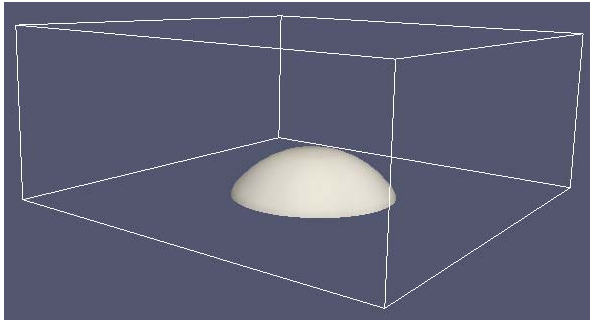
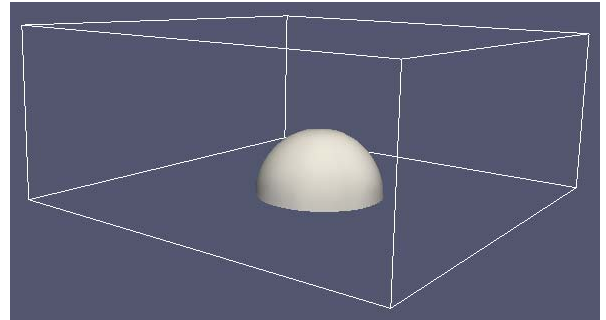
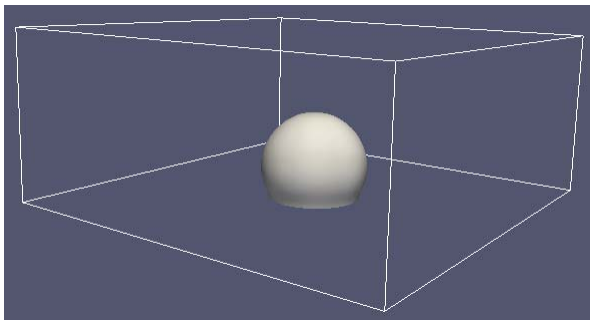
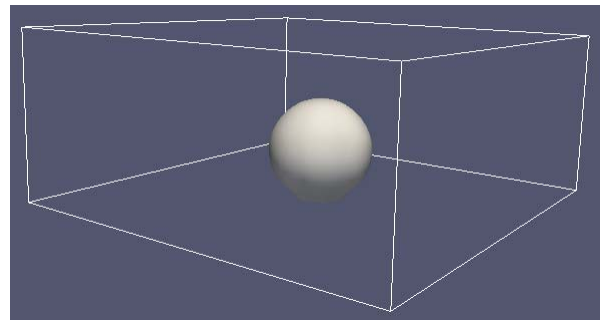
(b) $\theta = 30^\circ$ (c) $\theta = 60^\circ$ (d) $\theta = 90^\circ$ (e) $\theta = 120^\circ$ (f) $\theta = 150^\circ$

Fig.2.51: The perspective view of contact angle problem at different angles, (a) initial condition; (b) $\theta = 30^\circ$; (c) $\theta = 60^\circ$; (d) $\theta = 90^\circ$; (e) $\theta = 120^\circ$; (f) $\theta = 150^\circ$.

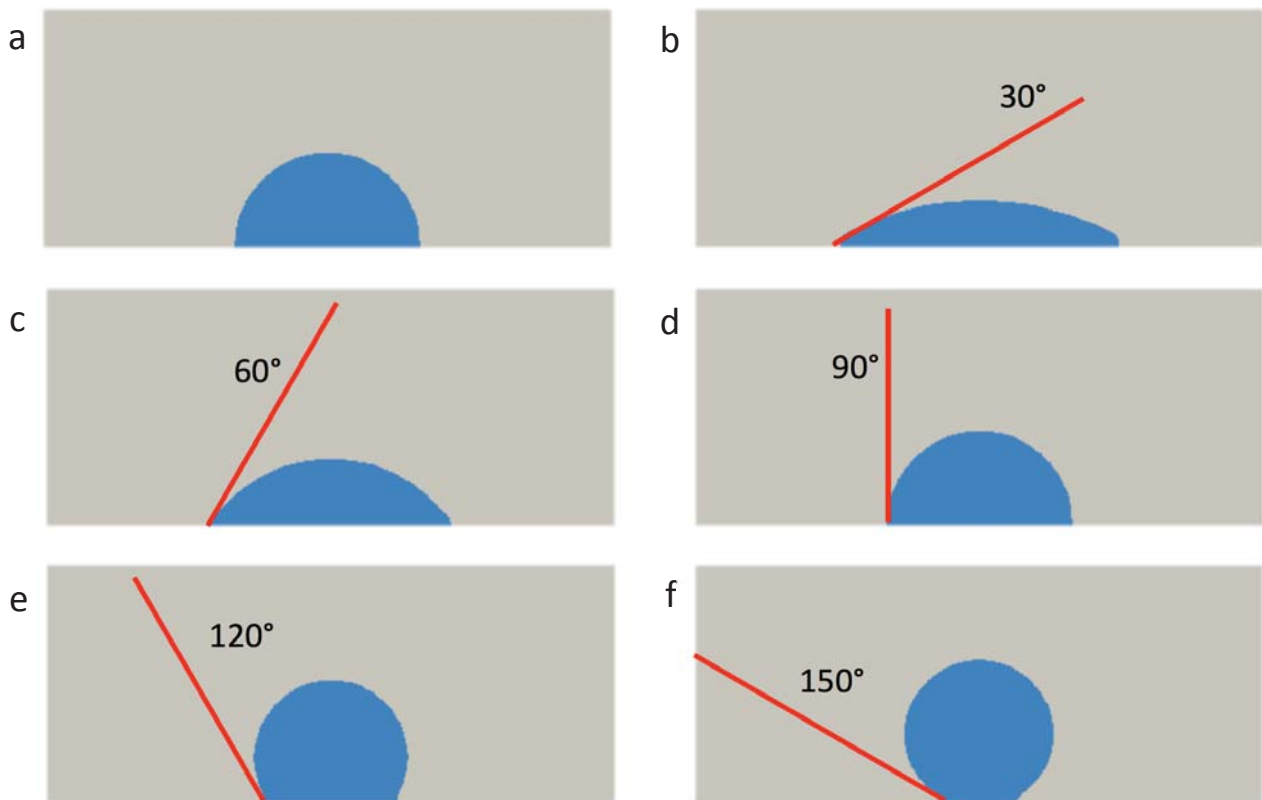


Fig.2.52: The sectional view of contact angle problem with fixed angle lines at different angles, (a) initial condition; (b) $\theta = 30^\circ$; (c) $\theta = 60^\circ$; (d) $\theta = 90^\circ$; (e) $\theta = 120^\circ$; (f) $\theta = 150^\circ$.

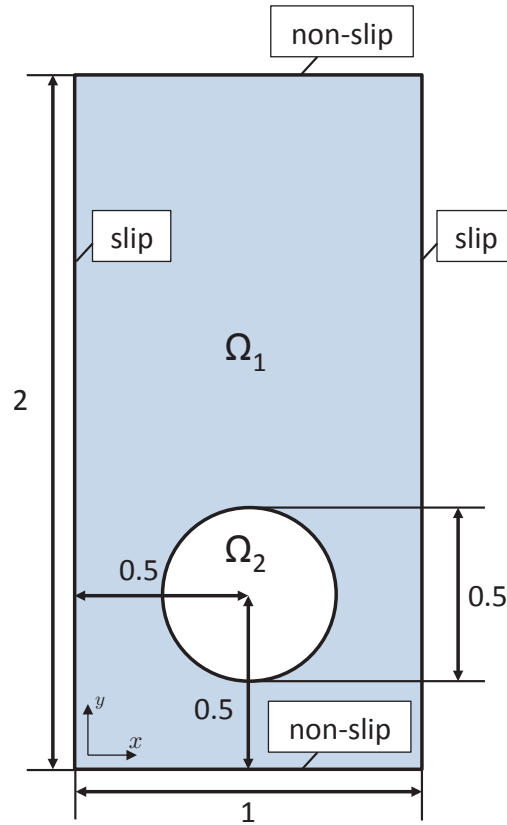


Fig.2.53: The initial setting of two-dimensional bubble rising problem.

Table2.4: The physical properties of gas and liquid phase for the two-dimensional bubble rising problem.

Test case	ρ_1	ρ_2	μ_1	μ_2	g	σ
caseA	1000	100	10	1	0.98	24.5
caseB	1000	1	10	0.1	0.98	1.96

2次元単一気泡上昇問題

表面張力を含むより詳細な気液二相流計算の検証として、2次元単一気泡上昇問題を解く。2次元単一気泡上昇問題は、二相流の検証問題としてよく解かれている問題である [23][82][83]。

問題設定は、Hysing[82] らと Klostermann ら [83] のものに合わせる。初期条件は Fig. 2.53 に示す通りで、液相領域 Ω_1 と気相領域 Ω_2 から成る。 $[0, 1] \times [0, 2]$ の領域を 256×512 格子で計算する。二相の物性値は Table 2.4 に示すものを用い、caseA と caseB の二通りについて計算する。

今回比較対象とした Hysing らの計算は、T2PD, FreeLIFE, MooNMD という3つの非圧縮性ソルバーを用いた計算である。T2PD (Transport Phenomena in 2D) は Featflow[84] と呼ばれる非圧縮性ソルバーを拡張したもので、有限要素法と Level Set 法を用いている。FreeLIFE (Free-Surface Library of Finite

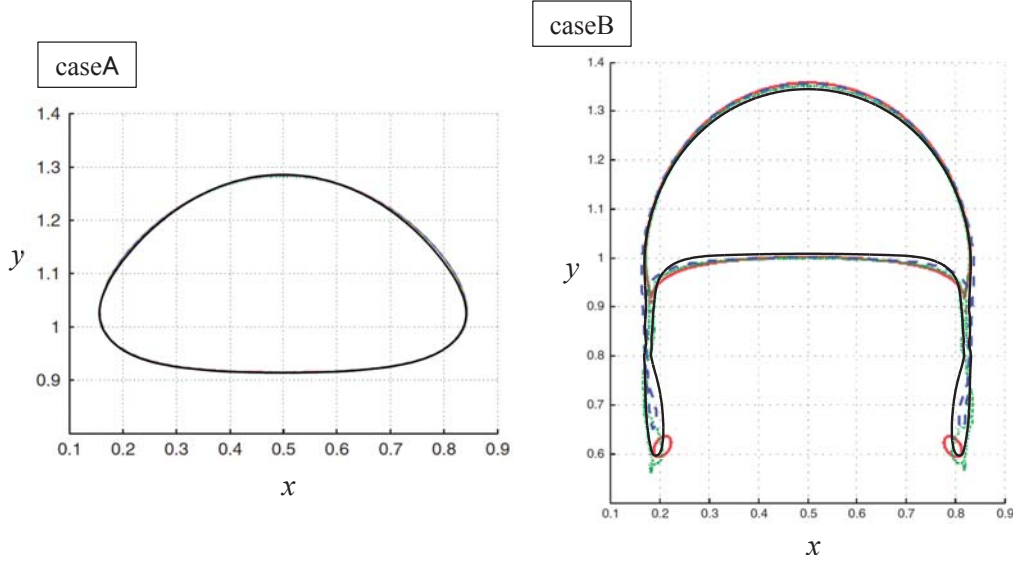


Fig.2.54: Computational shape of two-dimensional bubble rising at $t = 3.0$. Present (solid black), TP2D (solid red), FreeLIFE (dotted green), and MooNMD (dashed blue)

Element) も有限要素法と Level Set 法を用いた自由界面二流体を解くためのソルバーであり、それを用いた計算結果についても議論がなされている [85]. MooNMD (Mathematics and object-oriented Numerics in MagDeburg) [86] も同様に有限要素法を用いた二相流ソルバーである。これらの二相流ソルバーについては Hysing らの論文内 [82] で紹介されている。

計算によって得られた気泡形状を、Hysing らの結果に重ねたものを Fig. 2.54 に示す。caseA の気泡形状は線の区別ができないほどによく一致している。caseB については気泡の下側の形状が Hysing らの結果とやや異なるものの、概ね一致していることがわかる。気泡形状の細かい形状の差は、Fig. 2.55 のようにソルバーによって差が出てくるものであり、どれが正しい結果であるかは議論の余地がある。また本手法で界面捕獲手法に用いている保存型 Phase field 法は節 2.13.3 で示したように、パラメータによっても界面形状が変わる可能性もあるので、概ねの形状の一致が見られる今回の計算結果は妥当であると判断する。また、上昇する気泡の重心の時刻歴と気泡上昇速度を計算し、Hysing らの結果と比較する。気泡の重心位置 $\mathbf{X}_c$ および気泡上昇速度 $\mathbf{U}_c$ は以下の式で計算する [82]。

$$\begin{aligned}\mathbf{X}_c = (x_c, y_c) &= \frac{\int_{\Omega_2} \mathbf{x} dx}{\int_{\Omega_2} 1 dx} \\ \mathbf{U}_c &= \frac{\int_{\Omega_2} \mathbf{u} dx}{\int_{\Omega_2} 1 dx}\end{aligned}\tag{2.159}$$

本手法によって得られた気泡重心位置、気泡上昇速度の y 成分を Hysing らの結果と重ねたものを Fig. 2.56, Fig. 2.57 に示す。caseA, caseB とともに、気泡上昇位置はよく一致しているが、気泡上昇速度は激しく振動している様子が確認できる。本手法は弱圧縮スキームであるので、圧力波を捉えることができる。気泡が上昇する際には界面から圧力波が生じ、計算領域の壁面で反射を繰り返す。その圧力波

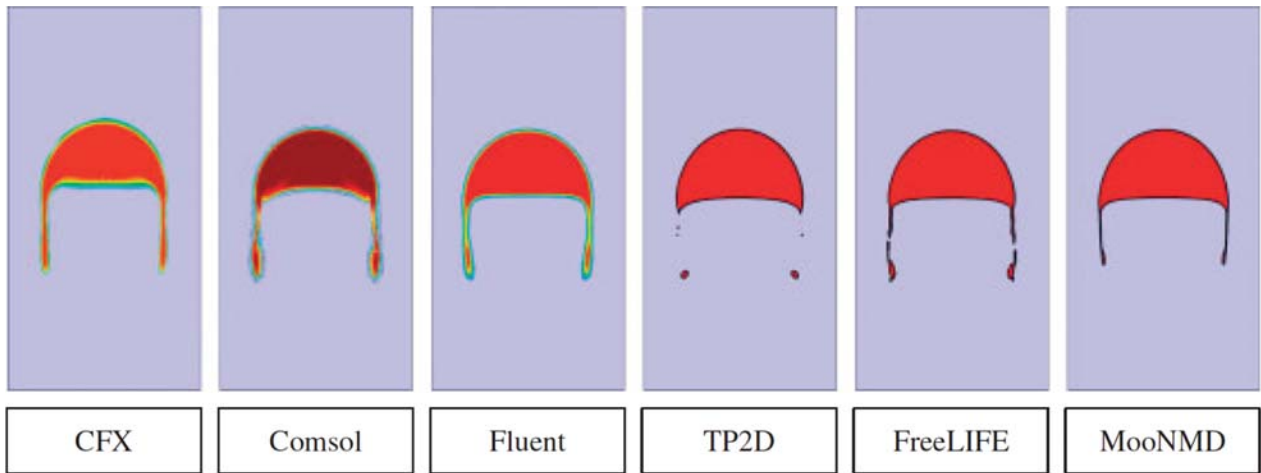


Fig.2.55: Computational shape of bubble for six different codes adapted from "Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics" by Hysing et. al.[82].

の反射によって、上昇速度の振動が生じていると考えられる。Fig. 2.57 は最大マッハ数 $Ma_{\max} = 0.03$ とした結果であるが、ここから音速をあげた場合、つまり最大マッハ数を小さくした場合に上昇速度がどのような挙動を示すのかを調べる。Fig. 2.58 に最大マッハ数 $Ma_{\max} = 0.01$ とした場合の気泡上昇速度を示す。最大マッハ数 $Ma_{\max} = 0.03$ のときと比べて振幅が小さく、非圧縮ソルバーの結果に近づいていることがわかる。非圧縮近似では音速を無限大と仮定するので、音速をあげた場合に非圧縮ソルバーの結果に近づいた今回の結果は妥当であると言える。

以上のことから、本手法による表面張力を含む二相流の 2 次元計算が妥当に行えていると考えられる。さらに、弱圧縮スキームを用いたことにより、非圧縮ソルバーでは確認できなかった圧力波の反射による気泡上昇速度の振動が確認できた。

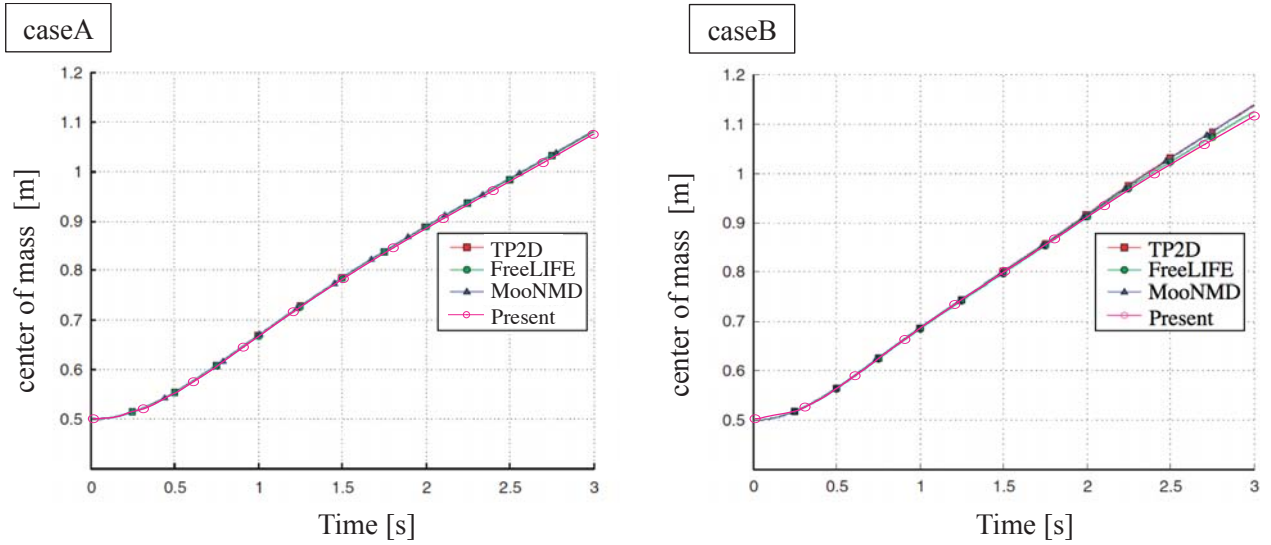


Fig.2.56: The time history of the center of mass of the bubble compared with reference results adapted from "Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics" by Hysing et. al.[82] for the two-dimensional bubble rising problem.

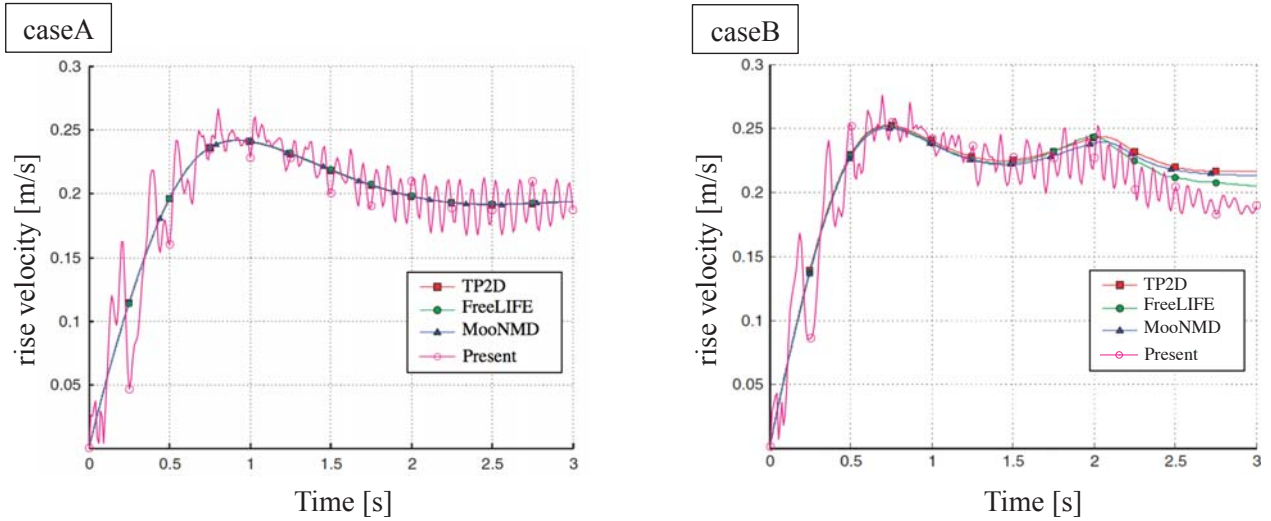


Fig.2.57: The time history of rise velocity of bubble for $Ma_{\max} = 0.03$ compared with reference results adapted from "Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics" by Hysing et. al.[82].

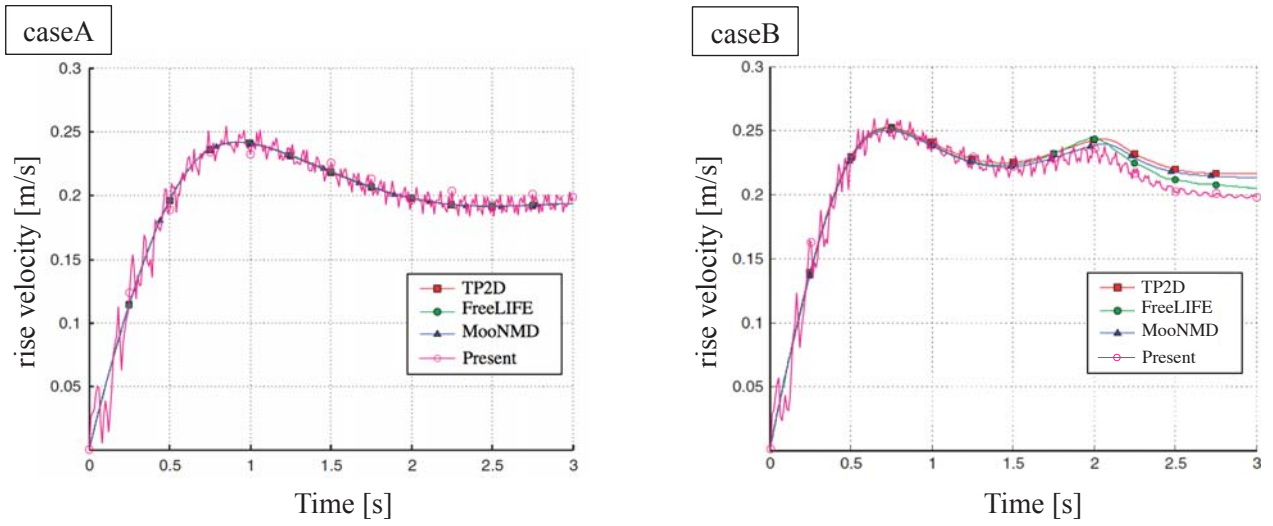


Fig.2.58: The time history of rise velocity of bubble for $Ma_{\max} = 0.01$ compared with reference results adapted from "Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics" by Hysing et. al.[82].

3次元単一気泡上昇問題

表面張力を含むより3次元気液二相流計算の検証問題として、単一気泡上昇問題を解く。Grace は多くの実験データを元に、気泡形状および気泡上昇速度を以下に示すモルトン数、エトベス数、気泡レイノルズ数という3つの無次元数を用いて Fig. 2.59 に示す Grace diagram にまとめている [87]。

$$Mo = \frac{(\rho_l - \rho_g) \mu_l^4 g}{\rho_l^2 \sigma^3}, \quad (2.160)$$

$$Eo = \frac{(\rho_l - \rho_g) d^2 g}{\sigma}, \quad (2.161)$$

$$Re = \frac{\rho_l d V_t}{\mu_l}, \quad (2.162)$$

ここで、 d は気泡の有効直径（同じ気泡体積における球直径）、 V_t は気泡の終端速度である。気液二相流計算の検証として、 Mo 、 Eo を与え、気泡上昇速度 V_t から Re を算出して Grace の実験値との比較が行われている。Annaland らは Grace diagram から以下に示す4つの気泡形状について計算を行い、得られた気泡レイノルズ数を比較している [89]。

- (A) Spherical : $Mo = 1.26 \times 10^{-3}, Eo = 0.971$
- (B) Ellipsoidal : $Mo = 0.10, Eo = 9.71$
- (C) Skirted : $Mo = 0.971, Eo = 97.1$
- (D) Dimpled/Ellipsoidal : $Mo = 1000, Eo = 97.1$

上記4つの気泡形状について、本手法を用いて計算を行い、Annaland らの計算結果および Grace の実験結果と比較する。物性値は Annaland らの設定に従い、 $\rho_l/\rho_g = 100$ 、 $\mu_l/\mu_g = 100$ とし、重力加速度 $g = 9.8 \text{ m/s}^2$ とした。初期条件は Fig. 2.60 に示す通りで、領域 $0.04 \times 0.04 \times 0.1 \text{ m}$ を格子数 $160 \times 160 \times 400$ で、初期球直径 $d_0 = 10^{-2} \text{ m}$ に対して40格子割り当てた計算となっている。

Fig. 2.61 に本手法によって得られた気泡形状を、Annaland らの結果 [89] と合わせて示す。気泡形状は各ケースについてよく特徴を捉えており、定性的な一致が確認できる。気泡レイノルズ数 Re を実験結果および過去に行われた数値計算結果と比較したものを Table 2.5 に示す。気泡レイノルズ数は Grace による実験結果および Annaland らの数値計算の結果とよく一致していることがわかる。以上より、3次元計算においても妥当な気液二相流計算を行えていると考えられる。

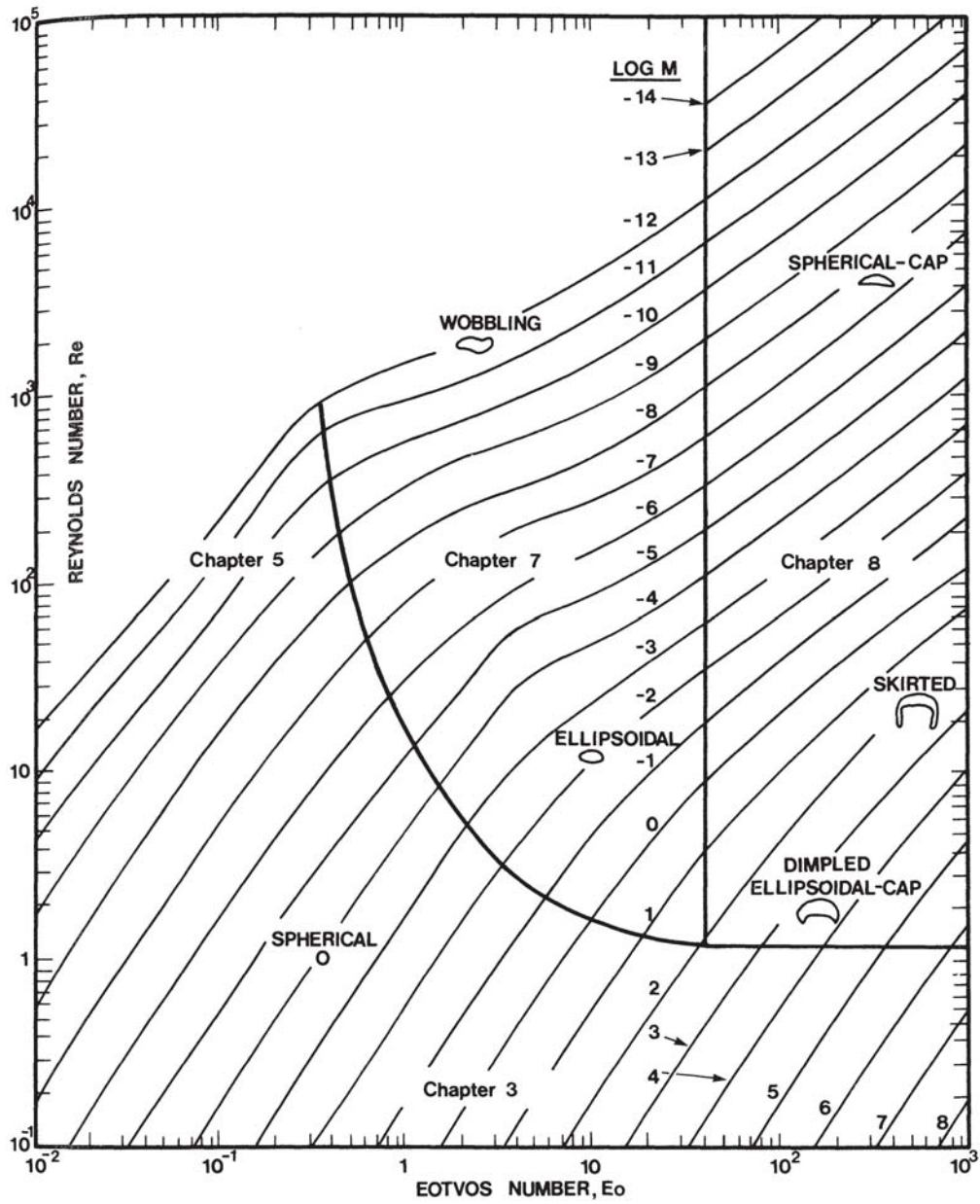


Fig.2.59: Grace diagram. adapted from Clift et.al. "Bubbles, Drops, and Particles"[88].

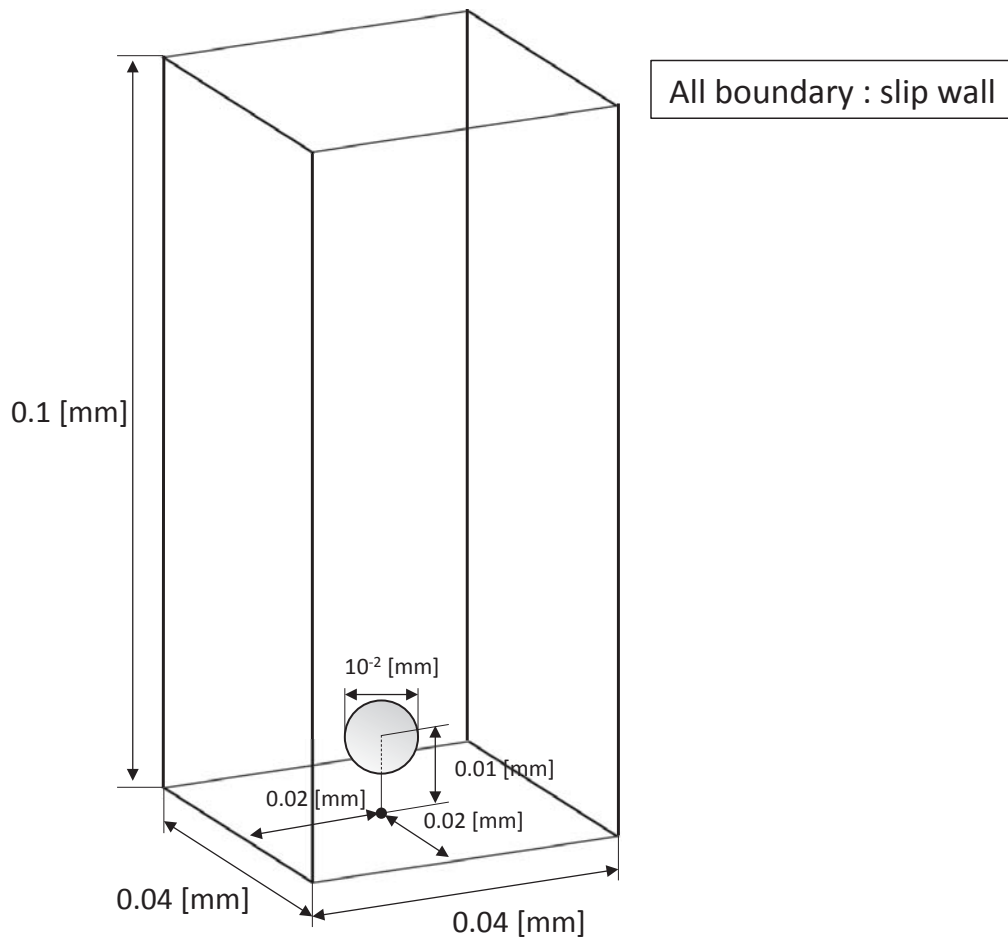


Fig.2.60: The initial setting of the three-dimensional bubble rising problem.

Table2.5: The comparison of Re numbers computed by rise velocity estimated from simulation results with the experimental and computed results of references.

	Re (Grace)	Re (Annaland)	Re (present)
(A) Spherical	1.7	1.6	1.5
(B) Ellipsoidal	4.6	4.3	4.6
(C) Skirted	20	18	17.5
(D) Dimpled/Ellipsoidal	1.5	1.7	1.8

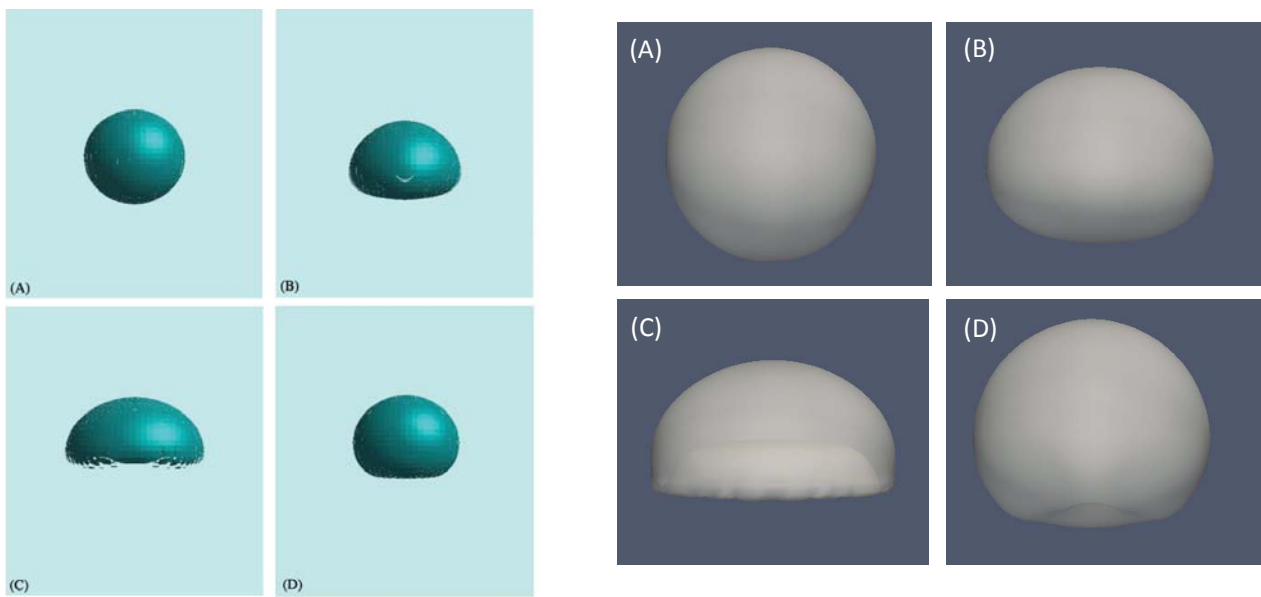


Fig.2.61: The computed shapes of bubble for the three-dimensional bubble rising problem. The right side panels show present results. The left side panels show Annaland's results adapted from "Numerical simulation of gas bubbles behaviour using a three-dimensional volume of fluid method"[89].

2.14 応用計算

本節では、特性線に基づいた弱圧縮性気液二相流解析手法を用いて、ミルククラウン生成、浅い水面を設定したダム崩壊問題の計算を高解像度格子を用いて計算し、過去の実験および数値計算との定性的な確認と、ソルバーの激しい流れ計算への適用性を確認する。

2.14.1 ミルククラウンの生成シミュレーション

薄い液膜に液滴を衝突させると、クラウン状の界面形状が生成されることが知られている。特にミルクの場合、水と比較して粘性が約2倍で表面張力が約半分であることからクラウン状の界面が生成されやすく、物性値にミルクの値を用いたミルククラウンの生成シミュレーションが多くの研究者によって行われている [90][91][92]。

ミルククラウンは流体力学的なメカニズムによって生成される。メカニズムに関しては、密度差のある流体が水平運動する際に発生する Kelvin Helmholtz 不安定性が原因だとする説 [93] や、表面張力不安定性の Plateau Rayleigh 不安定性がフィンガー生成の鍵であるとする説 [94] の他、Rayleigh Taylor 不安定性と似た Richtmyer Meshkov 不安定性が原因であるとする説 [95] など、様々な説が提唱されており、未だ決定的な結論には至っていない。

ミルククラウン生成シミュレーションの難しい点は、液滴衝突後に生成されるクラウン状の薄い界面の解像と表面張力を正確に計算することの両立である。界面捕獲に DIM を用いているため、界面は有限幅の厚みを持ち、薄い液膜を解像するためには非常に多くの計算格子が必要となる。表面張力を計算する際には、ある程度の界面厚みを設定しなければ正確に表面張力効果を計算することができないため、界面幅をある程度持たせつつ薄い液膜を解像しなければならない、必然的に高解像度計算が必要となる。

本手法を用いて、Fig. 2.62 のような問題設定で、厚さ 0.9 mm の液膜に直径 $D = 4.8\text{ mm}$ の液滴を衝突させる。計算領域は $5.5D \times 5.5D \times 2.0D$ を設定し、格子数 $297 \times 297 \times 107$ で計算した。初期速度 $w_0 = 2.8\text{ m/s}$ は 40 cm の高さから落とした時の速度に相当する。重力加速度は $g = 9.8\text{ m/s}^2$ とし、気相と液相の物性値は空気とミルクのものを使用する。液相は $\rho_l = 1000\text{ kg/m}^3$, $\mu_l = 1.64 \times 10^{-3}\text{ Pa}\cdot\text{s}$, 気相は $\rho_g = 1.2\text{ kg/m}^3$, $\mu_g = 1.8 \times 10^{-5}\text{ Pa}\cdot\text{s}$ とした。また、境界条件は non-slip 境界を設定した。Fig. 2.63 に本手法によって得られた計算結果を示す。Krechetnikov らの実験結果 [95] では、 0.9 ms 時点でフィンガーの種が生成されているようだが、本手法では 2.0 ms においてもフィンガーの種をはっきりとは確認できないといった相違点はあるものの、 6.0 ms でははっきりとミルククラウンの生成が確認できる。本手法で捉えきれなかったフィンガーの種の再現のためには、さらなる高解像度計算や、Phase field 法のパラメータの調整などが考えられる。

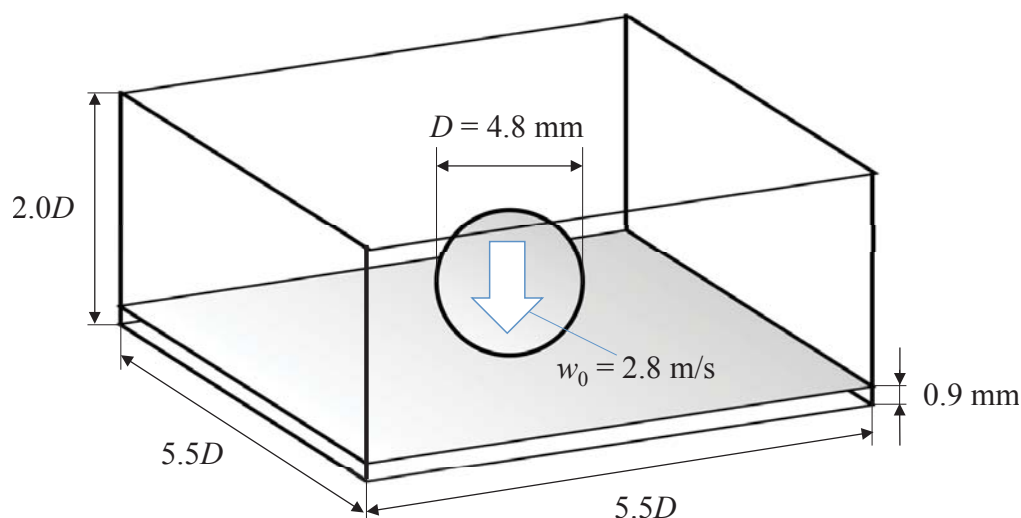


Fig.2.62: The initial setting of the milk crown simulation

2.14.2 浅い水面上でのダム崩壊による碎波

乾いた床を設定したダム崩壊では崩壊した水の先端は節 2.13.4 で示したように、床を這うようにして進んでいく。Stansby らの実験 [96] によれば、床上に浅い水面を設定したダム崩壊では、崩壊初期で水柱下部で噴流が発生し、崩壊した水は水面を巻き込みながら進み、水深が波の高さに近づくと前方へと崩れる碎波という現象が確認できる。巻き込み時の界面形状は初期の水深と水柱の高さの比に依存し、比が大きいほど噴流の角度が浅く、進行方向に巻き込む。

Fig. 2.64 に示すような条件で、浅い水面状でのダム崩壊による碎波シミュレーションを行った。計算領域 $0.72 \times 0.12 \times 0.36$ m の計算領域を格子数 $576 \times 96 \times 288$ で計算した。幅 0.15 m の水柱と、水深 $L = 0.018$ m の水面を設定し、重力加速度 $g = 9.8 \text{ m/s}^2$ とした。二相の物性値は 20°C の空気と水のものと、節 2.13.4 に示すものと同様である。なお、境界条件は全ての壁面で non-slip 境界とした。

この問題のスケールや代表流速を考えると、レイノルズ数 Re は概算で 10^6 オーダーとなり、高レイノルズ数の気液二相流であると言える。このような高レイノルズ数の気液二相流は陽解法である LBM でも未だ成功例の報告が見られず、陽解法による高レイノルズ数気液二相流計算の成功例としても、この結果は意義があると考えられる。LBM は基本的に二次中心差分系の離散化を行っている状態に近く、高レイノルズ数状況下では安定性が下がる。本手法では、移流部分に 5 次精度 WENO 補間関数を用いているため、WENO による数値粘性が安定性に寄与し、計算が実行できたと考えられる。

2.14.3 複数 GPU による高解像度ダム崩壊計算

節 2.14.2 で記述した浅い水面を設定したダム崩壊問題の水深 $L = 0.018$ m の場合を、 x , y , z 方向それぞれ二倍の $1152 \times 192 \times 576$ 格子で計算する。計算規模の増加に伴い、複数 GPU による計算を行う。

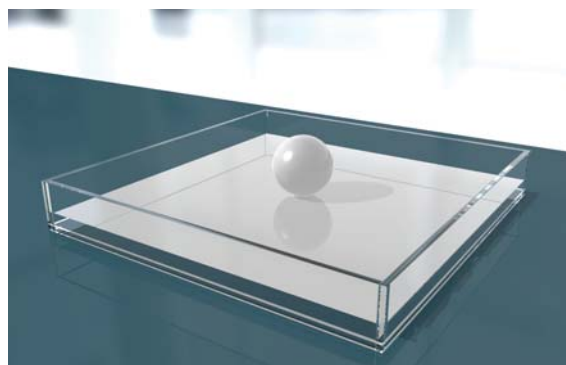
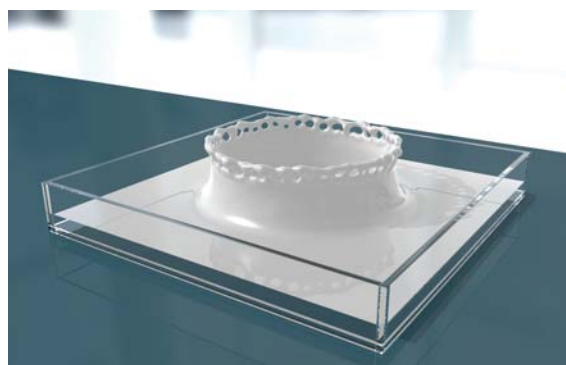
 $t = 0.0$ ms $t = 2.0$ ms $t = 4.0$ ms $t = 6.0$ ms

Fig.2.63: The predicted time evolution of gas-liquid interface, obtained at $297 \times 297 \times 108$ meshes for the milk crown simulation

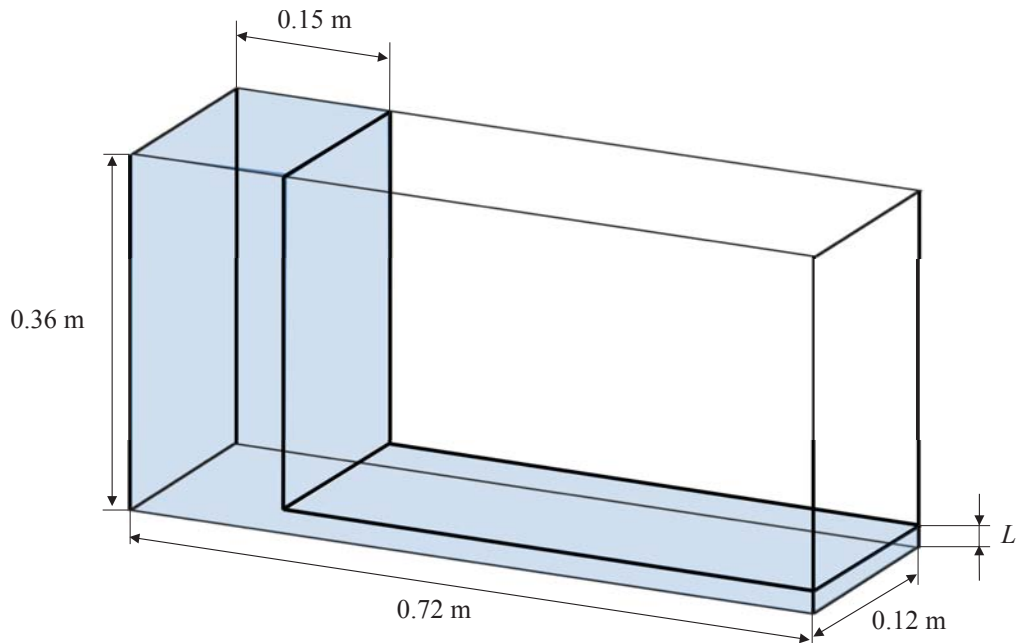
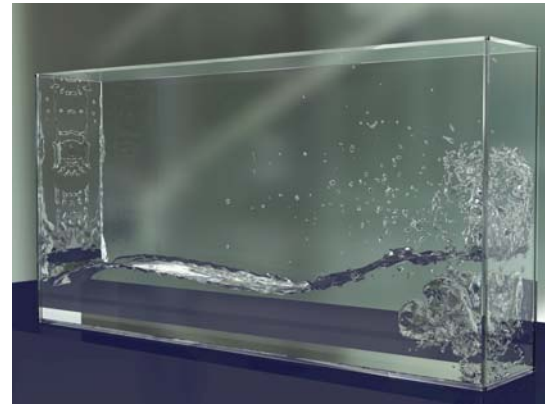


Fig.2.64: The initial setting for the three-dimensional dam breaking onto wet floor problem.

Fig. 2.66 に計算によって得られた界面の時刻変化を示す．前節 2.14.2 で示した $567 \times 96 \times 288$ 格子の結果では確認できなかった小さな気泡や水飛沫が確認でき，より高解像度な計算が必要であることが示された．また，今回の計算は約 1.27 億計算格子を用いた規模の大きい計算であり，陽解法でこのような計算規模の，激しい流れを伴う高レイノルズ数の気液二相流計算を完全陽解法で実行した例は未だなく，今後の超大規模計算への展望が開ける非常に意義のある結果が得られたと言える．

 $t = 0.2 \text{ s}$  $t = 0.2 \text{ s}$  $t = 0.4 \text{ s}$  $t = 0.4 \text{ s}$  $t = 0.6 \text{ s}$  $t = 0.6 \text{ s}$

(a) Characteristic based weakly compressible

(b) Incompressible

Fig.2.65: The predicted time evolution of gas-liquid interface, obtained at $576 \times 288 \times 96$ meshes for the dam breaking onto wet floor problem

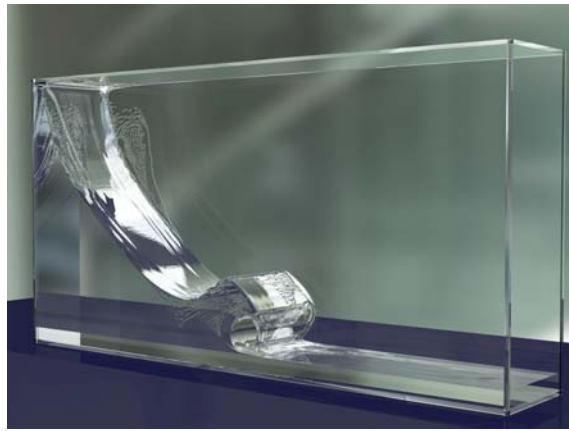
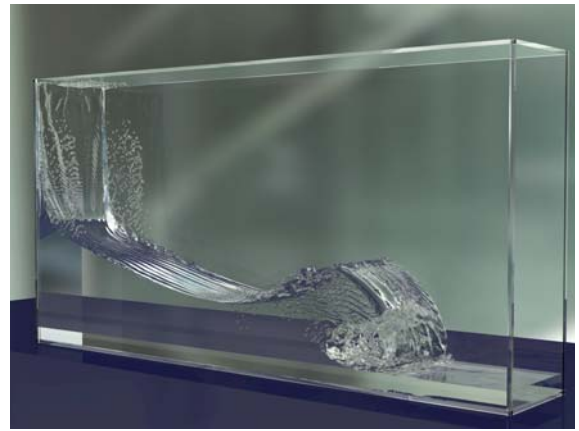
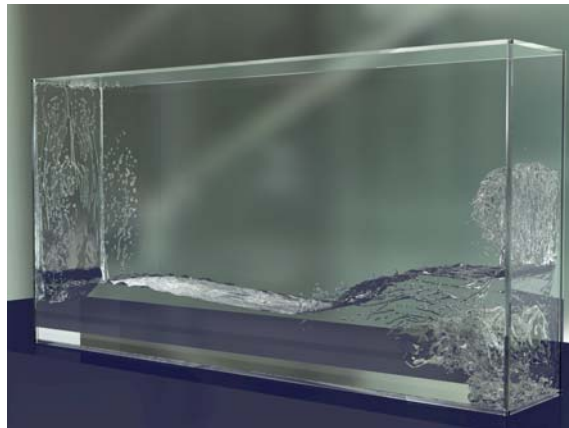
 $t = 0.2 \text{ s}$  $t = 0.3 \text{ s}$  $t = 0.4 \text{ s}$  $t = 0.5 \text{ s}$  $t = 0.6 \text{ s}$  $t = 0.7 \text{ s}$

Fig.2.66: The predicted time evolution of gas-liquid in the case of $L = 0.018 \text{ m}$, obtained at $1152 \times 192 \times 576$ meshes for the dam breaking onto wet floor problem.

2.15 特性線に基づく弱圧縮性解法による気液二相流解析のまとめ

本章では、流体に弱圧縮性を許容することでポアソン方程式を解く必要がない完全陽解法である非圧縮性領域の気液二相流計算手法の開発を行った。

フラクショナル・ステップ法を適用することで、圧縮性 Navier-Stokes 方程式をオイラー方程式、粘性項、外力項に分離し、さらに方向分離法を用いることで1次元オイラー方程式に特性線解法を適用した。特性線解法では、速度・圧力等の物理量の時間発展が1次元の移流方程式に置き換わり、semi-Lagrangian 法を適用することで高 CFL 条件下でも安定かつ高精度な計算が可能である他、一段の時間積分計算で時間精度が補間関数の空間精度と一致するため、多段演算が必要な Runge-Kutta 法と比較して高効率な手法を構築できた。

気液界面の捕獲手法として拡散界面型のモデルの一種である Phase Field 法を用いた。曲率の影響が排除された保存形 Allen-Cahn 方程式を保存形マルチモーメント法で解き、有理関数 CIP を用いることでオーバーシュート・アンダーシュートを防ぐとともに、方程式に含まれる法線ベクトル計算を Level Set 関数に置き換えることで界面形状の精度を向上させた。THINC/WLIC 法との比較のためのベンチマーク問題として Single vortex 移流問題を解き、THINC/WLIC 法と同程度の界面形状精度を保つことができることを確かめた。さらに気液二相流計算においても界面手法の検証を行い、保存形 Allen-Cahn 方程式を解く本手法は、2次元ダム崩壊問題と Rayleigh-Taylor 不安定性の計算において、THINC/WLIC 法で生じていた過剰な界面拡散を防ぐことができた。

開発した手法を用いて単相流のベンチマーク問題を解き、非圧縮性領域の計算へ適用可能であることを確かめた。格子に沿わない物体形状の表現として Ghost cell を用いる Immersed Boundary 法を実装し、球周りの流れ計算で実験値と良い一致を得た。気液二相流のベンチマーク問題では、ダム崩壊計算や気泡上昇問題を解き、表面張力を含む流れ計算においても非圧縮性ソルバーの結果および実験値を良好な一致を得た。以上より、本手法は非圧縮性気液二相流計算へ十分適用可能であると言える。

応用計算例として、多くの研究者によって計算されているミルククラウン形成計算を行い、クラウン状の界面形状を再現する結果を得た。浅い水面を設定したダム崩壊問題では、砕波を含む非常に激しい高レイノルズ数流れの計算となるが、1.27 億程度の高解像度格子を用いた場合でも安定して計算できることが確かめられた。このような激しい気液二相流計算は同じ完全陽解法である LBM では安定して計算することが非常に困難であり、フィルターとキュムラントを適用して安定に計算できた結果が2019年に報告されている [12]。しかし、フィルター適用に際して LBM のメモリの局所性が失われ、本手法の結果や非圧縮性の結果と比較して微細な界面構造も散逸的であることから、本手法には優位性があると考えられる。特性線解法の適用による高効率な計算手法と、Level Set 法を組み合わせた保存形 Allen-Cahn 方程式の解法によってポアソン方程式から脱却した完全陽解法による気液二相流計算手法の実現に成功し、大規模気液二相流計算が可能となった。

第 3 章

等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く弱圧縮性解法の導入

本章では等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く弱圧縮性解法による離散化式の導出と，気液二相流計算手法の説明，および検証問題について示す．

3.1 等温過程の Navier-Stokes 方程式

等温過程の Navier-Stokes 方程式は圧縮性 Navier-Stokes 方程式から導出される．等温過程より温度 T の時間発展は解かないため，以下の連続の式，運動量方程式から速度と圧力に関する時間発展方程式を導出する．

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{F} \quad (3.2)$$

式 (3.1) と式 (3.2) より速度 $\mathbf{u}$ に関する時間発展方程式を得る．

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \frac{1}{\rho} \mathbf{F} \quad (3.3)$$

等温過程の状態方程式は，

$$\frac{\partial p}{\partial \rho} = c_s^2 \quad (3.4)$$

であるので，連続の式 (3.1) に代入すると，以下の圧力発展方程式を得る．

$$\frac{\partial p}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) p = -\rho c_s^2 \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (3.5)$$

$Ma = \frac{U}{c_s} \ll 1$ の時，密度変動 $\frac{\delta \rho}{\rho_0} \ll 1$ であるので，弱圧縮性の仮定により，単相流計算では式 (3.7) 中の密度は一定とし，気液二相流計算では保存形 Allen-Cahn 方程式を用いて密度を計算することで，密度の圧縮性をできるだけ無視する．

また、圧力の物質微分項は $Ma = \frac{U}{c_s} \ll 1$ の時、音波による伝搬が支配的となり

$$\frac{\partial p}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) p \approx \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.6)$$

と近似できる．式 (3.6) の近似によってベンチマーク問題の結果は非圧縮性の結果に近づくことが報告されており [16]，わずかではあるが演算回数削減も期待できるため本研究でもこの近似を用いる．

以上より，解く支配方程式を再掲する．

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \frac{1}{\rho} \mathbf{F} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) p = -\rho c_s^2 \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (3.8)$$

速度が大きく変化するような場合は，マッハ数が大きくなり $\nabla \cdot \mathbf{u}$ の値が大きくなりすぎてしまう可能性があるので，最大マッハ数の上限を 0.3 などと定め，流速が急激に上昇したとき c_s を時間的に制御する．

3.2 特性線解法との違い

式 (3.7) から粘性項，外力項を除き，1次元の場合を考えると節 2.4 と同様の手順で密度 ρ を除いた時間発展が得られるため，本質的には解かれている方程式はほぼ同等である．しかし，特性線解法では音速 c_s を空間一様なパラメータで与えると非常に小さい CFL 条件下でしかまともに計算できず，式 (2.14) を用いる必要がある．式 (2.14) を用いると水と空気などの典型的な気液二相流では空気の音速が水の音速の 30 倍程度大きくなるため，液相の流速が大きいような流れでは低マッハ数を担保するために液相の音速をあげると気相の音速が非常に大きくなり，時間ステップ数が増大する．また，式 (2.18) 式 (2.20) 中の $\tilde{\rho}$ には一定の仮定があるため，密度の空間変化を考慮した差分法の適用が困難である．

密度の空間変化を考慮した差分法は，丹によって非圧縮性ソルバーへの適用がすでになされている [3]．非保存形 Navier-Stokes 方程式を解く気液二相流解析手法では，保存形で運動量 $\rho \mathbf{u}$ に対する差分を取る箇所が速度 $\mathbf{u}$ に対する差分に置き換わっているため，気液界面などの高密度差がある領域での運動量交換が適切に評価されず，本来比重の大きい液相が気相に巻き上げられるなどの数値的な Kelvin-Helmholtz 不安定性が生じる．そこで速度の微分項に対して，以下のように密度の空間変化を考慮した数学的に等価な式を評価する．

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial (\rho u)}{\partial x} - u \frac{\partial \rho}{\partial x} \right]. \quad (3.9)$$

式 (3.9) は差分化すると，左辺は速度の値のみを見て勾配が決定されるが，右辺は密度勾配を考慮した形となる．ただし，右辺は密度変化 $\frac{\partial \rho}{\partial x} = 0$ となるような界面から遠方の領域では，差分化された式も左辺と一致する．2次元の移流項に含まれる微分は以下のように表せる．

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{1}{\rho} \left[u \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} - u^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} + v \frac{\partial \rho u}{\partial y} - uv \frac{\partial \rho}{\partial y} \right]. \quad (3.10)$$

ここで速度 $v_{i-\frac{1}{2},j}$ は以下のように運動量を考慮した式で算出する.

$$v_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{(\rho v)_{i,j-\frac{1}{2}} + (\rho v)_{i,j+\frac{1}{2}} + (\rho v)_{i-1,j-\frac{1}{2}} + (\rho v)_{i-1,j+\frac{1}{2}}}{\rho_{i,j-\frac{1}{2}} + \rho_{i,j+\frac{1}{2}} + \rho_{i-1,j-\frac{1}{2}} + \rho_{i-1,j+\frac{1}{2}}}. \quad (3.11)$$

密度 ρ は Phase field 変数から計算され, 両者ともセル中心に定義される. セル面 $i, j - \frac{1}{2}$ での値は以下の通り, 線形補間で求める.

$$\rho_{i,j-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\rho_{i,j} + \rho_{i,j-1}) \quad (3.12)$$

密度の空間変化を考慮した上記の離散化では, 界面近傍で 1000 倍程度の密度差を持つ急激なプロファイルに対して微分操作を行うため, 数値不安定性が生じやすい. 数値安定性を向上させるために, 3 次精度 WENO で求めた勾配に勾配制限関数を適用する.

$$f_x = f_x^{1st} + \Psi(r) (f_x^{\text{WENO}} - f_x^{1st}), \quad (3.13)$$

r は smooth indicator で以下のように表せる.

$$r_{i-\frac{1}{2}} = \begin{cases} \frac{f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}}{f_{i-\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{3}{2}}} & u_{i-\frac{1}{2}} > 0 \\ \frac{f_{i-\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{3}{2}}}{f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}} & u_{i-\frac{1}{2}} \leq 0. \end{cases} \quad (3.14)$$

制限関数 Ψ には minmod limiter 関数 [97] を用いる.

3.3 初期圧力場修正のためのポアソン方程式

本手法では, 2.13.4 内で示した気泡上昇速度時刻歴 Fig. 2.57, Fig. 2.58 で観測できるような弱圧縮性解法特有の圧力波による流れ場の振動を抑制するために, 初期圧力釣り合いのためだけにポアソン方程式を解く. 非圧縮性ソルバーでは一様の圧力を初期条件として与えても, ポアソン方程式が解かれるのでダイバージェンスフリー条件を満たすような圧力場に即座に修正されるが, 弱圧縮性スキームでは圧力ポアソン方程式は通常解かれなないので, 初期圧力場による影響が残り続ける. 気泡上昇問題では, ノイマン条件で設定された壁面で圧力波が反射し続けるため, 結果として上昇速度がいつまでも振動し続ける. これを避けるために, 最初の 10step 程度のみ以下の圧力ポアソン方程式を解く.

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p \right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}}{\Delta t}. \quad (3.15)$$

初期の圧力場改善のためだけに解かれるものであり, 計算ステップ数は全体で数十万 step 程度となることが多いため, ポアソン方程式の求解は全体の計算時間に対してほとんど無視できる. GPU 実装が容易である Red-Black SOR(Successive Over-Relaxation) 法を用いて, 収束条件として通常 $\nabla \cdot \mathbf{u} \leq 10^{-7}$ 程度まで反復させる.

3.4 有限体積法による保存形 Allen-Cahn 方程式の解法

前章節 2.5.1 で説明した保存形 Allen-Cahn 方程式に対して、特性線解法では節 2.6.6 のように保存形マルチモーメント法を用いた離散化を行っていたが、計算コスト削減のために有限体積法を導入する。AMR 適用を念頭に考えるとレベル差補間の精度が重要かつ保存性を担保したい場合にはマルチモーメント法は優れるが、レベル差で Phase field 変数の勾配はほぼゼロである場合、レベル差補間精度は重要ではなくなる。本研究では界面近傍に常に細かい格子を集める AMR 法を適用し、Phase field 変数のレベル差境界での勾配がゼロとなるため、精度をある程度担保しながら有限体積法適用によるコスト軽減が期待できる。AMR 法の細分化基準として渦度や速度勾配テンソルなど他の基準値を用いる場合にはレベル差で界面を跨ぐ可能性があり、マルチモーメント法の利点が活かせると考えられる。

式 (2.50) に対し、体積 V を持つコントロールボリュームで体積積分を行い、両辺に $\frac{1}{V}$ をかけると以下の式を得る。

$$\frac{1}{V} \int_V \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \frac{1}{V} \int_V \nabla \cdot (\mathbf{u}\phi) dV = \bar{\gamma} \left\{ \varepsilon \frac{1}{V} \int_V \nabla \cdot (\nabla \phi) dV - \frac{1}{V} \int_V \nabla \cdot \left[\phi(1-\phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right] dV \right\} \quad (3.16)$$

ガウスの発散定理より、体積積分は面積分に置き換えることができる。

$$\frac{1}{V} \int_V \frac{\partial \phi}{\partial t} dV + \frac{1}{V} \oint_S (\mathbf{u}\phi) \cdot \mathbf{n}_S dS = \bar{\gamma} \left\{ \varepsilon \frac{1}{V} \oint_S (\nabla \phi) \cdot \mathbf{n}_S dS - \frac{1}{V} \oint_S \left[\phi(1-\phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right] \cdot \mathbf{n}_S dS \right\} \quad (3.17)$$

ここで S はコントロールボリューム V の面積で $\mathbf{n}_S$ は S に対応する法線ベクトルである。左辺の流束項は $\Delta x \times \Delta y \times \Delta z = \Delta V$ の直交格子でコントロールボリュームを考えれば、以下のように離散化される。

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \oint_S (\mathbf{u}\phi) \cdot \mathbf{n}_S dS &= \frac{1}{\Delta V} \sum_{l=1}^6 (\mathbf{u}\phi)_l \Delta S_l \\ &= \left\{ \left[(u\phi)_{i+\frac{1}{2},j,k} - (u\phi)_{i-\frac{1}{2},j,k} \right] \Delta y \Delta z \right. \\ &\quad + \left[(v\phi)_{i,j+\frac{1}{2},k} - (v\phi)_{i,j-\frac{1}{2},k} \right] \Delta z \Delta x \\ &\quad \left. + \left[(w\phi)_{i,j,k+\frac{1}{2}} - (w\phi)_{i,j,k-\frac{1}{2}} \right] \Delta x \Delta y \right\} / (\Delta x \Delta y \Delta z) \end{aligned} \quad (3.18)$$

式 (3.18) の Flux は風上化する必要があるので、minmod 制限関数を用いる 3 次精度 MUSCL (Monotone Upstream-centered Scheme for Conservation Law) 法 [98] を適用してオーバーシュート・アンダーシュートを防ぐ。

保存形 Allen-Cahn 方程式の右辺も、Flux 形式で表現できる。直交格子上での半離散化された右辺の項

はそれぞれ以下の通りである。

$$\begin{aligned}\bar{\gamma}\varepsilon\frac{1}{V}\oint_S(\nabla\phi)\cdot\mathbf{n}_S dS &= \bar{\gamma}\varepsilon\frac{1}{\Delta V}\sum_{l=1}^6(\nabla\phi)_l\Delta S_l \\ &= \bar{\gamma}\varepsilon\left\{\left[\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i+\frac{1}{2},j,k}-\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i-\frac{1}{2},j,k}\right]\Delta y\Delta z\right. \\ &\quad +\left[\left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_{i,j+\frac{1}{2},k}-\left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_{i,j-\frac{1}{2},k}\right]\Delta z\Delta x \\ &\quad \left.+\left[\left(\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)_{i,j,k+\frac{1}{2}}-\left(\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)_{i,j,k-\frac{1}{2}}\right]\Delta x\Delta y\right\}/(\Delta x\Delta y\Delta z)\end{aligned}\quad (3.19)$$

$$\begin{aligned}\bar{\gamma}\frac{1}{V}\oint_S\left[\phi(1-\phi)\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}\right]\cdot\mathbf{n}_S dS &= \bar{\gamma}\frac{1}{\Delta V}\sum_{l=1}^6\left[\phi(1-\phi)\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|}\right]_l\Delta S_l \\ &= \bar{\gamma}\left\{\left[\phi_{i+\frac{1}{2},j,k}\left(1-\phi_{i+\frac{1}{2},j,k}\right)n_{x\ i+\frac{1}{2},j,k}-\phi_{i-\frac{1}{2},j,k}\left(1-\phi_{i-\frac{1}{2},j,k}\right)n_{x\ i-\frac{1}{2},j,k}\right]\Delta y\Delta z\right. \\ &\quad +\left[\phi_{i,j+\frac{1}{2},k}\left(1-\phi_{i,j+\frac{1}{2},k}\right)n_{y\ i,j+\frac{1}{2},k}-\phi_{i,j-\frac{1}{2},k}\left(1-\phi_{i,j-\frac{1}{2},k}\right)n_{y\ i,j-\frac{1}{2},k}\right]\Delta z\Delta x \\ &\quad \left.+\left[\phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}\left(1-\phi_{i,j,k+\frac{1}{2}}\right)n_{z\ i,j,k+\frac{1}{2}}-\phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}\left(1-\phi_{i,j,k-\frac{1}{2}}\right)n_{z\ i,j,k-\frac{1}{2}}\right]\Delta x\Delta y\right\}/(\Delta x\Delta y\Delta z)\end{aligned}\quad (3.20)$$

セル面で計算する必要のある気液界面の法線ベクトルは Level Set 関数の性質 $|\nabla\psi| = 1$ を利用して簡潔に計算できる。

$$n_{x\ i-\frac{1}{2},j,k} = \frac{\psi_{i,j,k}-\psi_{i-1,j,k}}{\Delta x}\quad (3.21)$$

式 (3.20) に含まれる微分項は 2 次中心差分で計算する。

ϕ をセルにおける積分平均値として次のように再定義することで、保存形 Allen-Cahn 方程式はセル中心における積分平均値の時間発展方程式とみなせる。

$$\phi = \frac{1}{V}\int_V\phi(\mathbf{x})dV.\quad (3.22)$$

3.5 離散化手法

速度場と圧力のカップリングを良くするために、Fig. 3.1 に示すスタaggerド格子を採用する。ベクトル量はセル面に、スカラー量はセル中心に定義する。以下では 2 次元の場合についての説明を示す。

3.5.1 移流項

密度重み付けされた移流項の離散化式 (3.13) 中の空間微分値 f_x^{WENO} には 3 次精度 HJ-WENO スキームを用いる。ある格子点 i の微分値 $\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i$ は、格子幅を Δx とすると次のようにして求まる。3 次精度 HJ-WENO では中心差分と数値粘性の和として以下のように表現することが可能である。

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_i = \frac{f_{i+1}-f_{i-1}}{2\Delta x} + \frac{f_x^\pm}{1+2r^2}\quad (3.23)$$

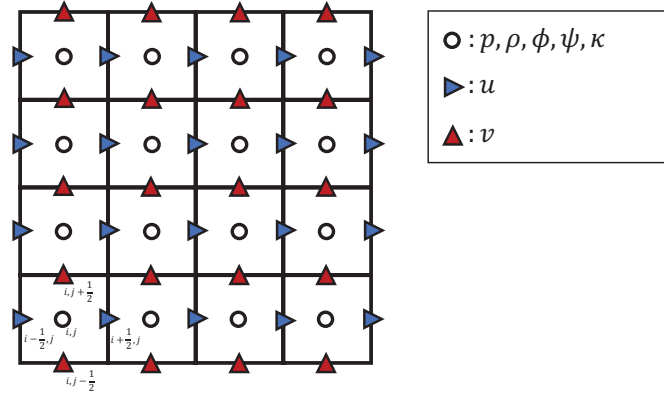


Fig.3.1: Configuration of staggered grid system, vector components are defined at cell-face and scalars are defined at cell-center.

数値粘性は移流速度 u に対して風上方向にステンシルをとって構築する.

$$\begin{cases} \Delta h = \Delta x, \\ f_{pp} = f_{i+2}, f_p = f_{i+1}, \quad (u \leq 0) \\ f_m = f_{i-1} \end{cases} \quad (3.24)$$

$$\begin{cases} \Delta h = -\Delta x, \\ f_{pp} = f_{i-2}, f_p = f_{i-1}, \quad (u > 0) \\ f_m = f_{i+1} \end{cases} \quad (3.25)$$

$$f_x^\pm = \frac{-f_{pp} + 3f_p - 3f_i + f_m}{2\Delta h} \quad (3.26)$$

$$r = \frac{f_i - 2f_p + f_{pp} + \varepsilon}{f_p - 2f_i + f_m + \varepsilon} \quad (3.27)$$

ここで ε はゼロ割を防ぐための微小定数で, 10^{-10} を用いる. r は関数の滑らかさの指標であり, $r = 1$ の時 3 次精度風上差分法に一致する.

3.5.2 圧力勾配項

速度の時間発展方程式中に含まれる圧力勾配 ∇p は 2 次中心差分法で評価する. x 方向の速度 u はセル面 $i + \frac{1}{2}$ に定義されるため, u の時間発展方程式中の圧力の差分は $i + \frac{1}{2}$ 上で計算する.

$$\left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{p_{i+1} - p_i}{\Delta x} \quad (3.28)$$

3.5.3 粘性応力項

粘性応力項 $\nabla \cdot \tau = \nabla \cdot \{ \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \}$ も 2 次精度中心差分で評価する. 粘性係数 μ は界面近傍で空間的に変化するため, μ に対しても差分を取るように離散化する. 粘性応力テンソルの成分中の $\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)$

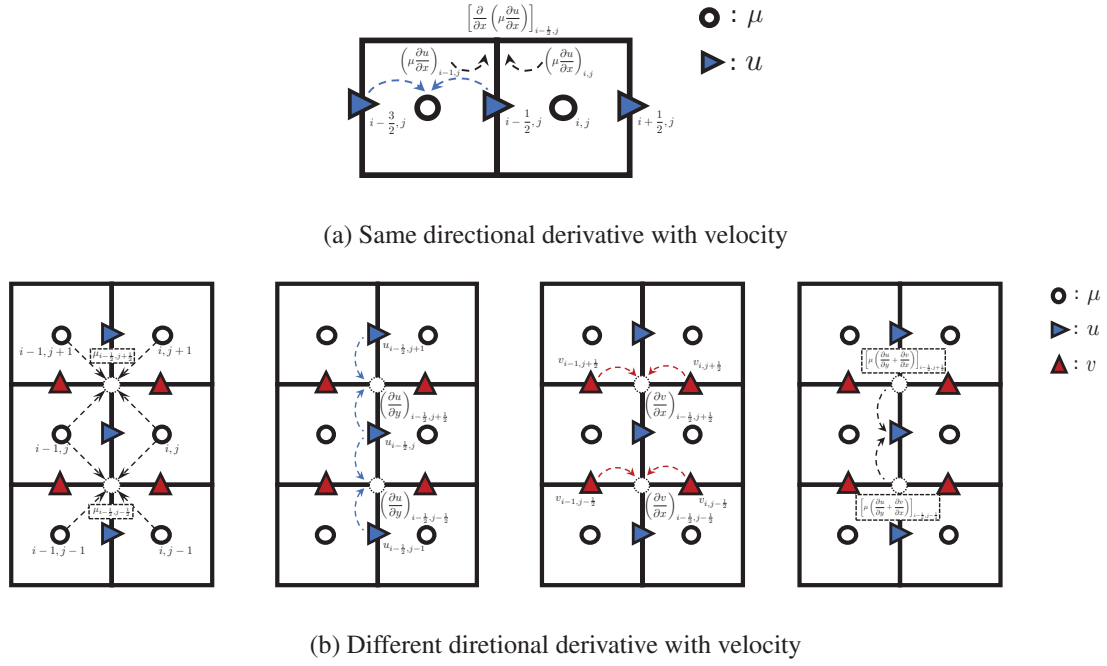


Fig.3.2: Stencil computations of viscous term

のように速度方向と微分方向が一致しているものに対しては,

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) \right]_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{\left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i,j} - \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right)_{i-1,j}}{\Delta x} \quad (3.29)$$

で計算され, Fig. 3.2a に示すようなステンシル計算となる. $\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right)_{i-\frac{1}{2}}$ のように u の時間発展方程式に含まれていながら速度方向と微分方向が一致していない項は,

$$\left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right) \right]_{i-\frac{1}{2},j} = \frac{\left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right]_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right]_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} \quad (3.30)$$

で計算する. 式 (3.30) 中の各項は Fig. 3.2b に示すようなステンシル計算で求まる.

3.5.4 速度場発散項

圧力発展方程式 (3.8) の右辺に含まれる速度場発散項は 2 次中心差分で評価する.

$$(\nabla \cdot \mathbf{u})_{i,j} = \frac{u_{i+\frac{1}{2},j} - u_{i-\frac{1}{2},j}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j+\frac{1}{2}} - v_{i,j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} \quad (3.31)$$

時間積分には 2.6.7 で示した 3 段 3 次精度 Runge-Kutta 法を用いる.

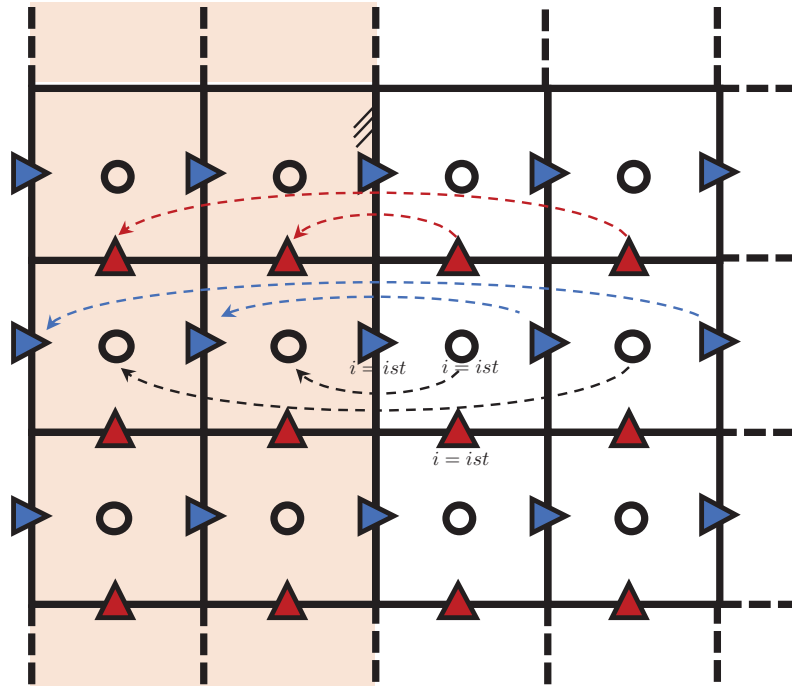


Fig.3.3: Boundary setting on staggered-grid system

3.6 境界条件

スタaggerド格子に定義される変数の境界条件は、境界の方向によって設定方法が異なる。Fig. 3.3 に示すように x 負の方向、あるいは x 正の方向に壁面がある場合で、Fig. 3.3 に示す通り、インデックス $i = ist$ の速度 u_{ist} が壁面上に重なる場合を考える。コンピュータ上では $i - \frac{1}{2}$ のような分数インデックス表記は通常扱えないので、セル中心インデックス i, j , u のインデックス $i - \frac{1}{2}, j$, v のインデックス $i, j - \frac{1}{2}$ を、コード上では i, j に対応させる。

slip/nonslip 壁

slip 壁および nonslip 壁を実装するための簡易コードを以下に示す。

```
/* Boundary Type Definitions */
#define SLIP_BOUNDARY      1
#define NONSLIP_BOUNDARY -1
boundary_type = NON_SLIP_BOUNDARY;

const int index = GetIndex( i, j );

if( i < ist ){
```

```

// Index computations
const int id_cc = GetIndex( 2*ist-i-1, j );
const int id_nc = GetIndex( 2*ist-i,   j );

// Cell-centered variables, p:pressure, r:density
p[index] = p[id_cc];
r[index] = r[id_cc];

// Cell-face variables, u,v
u[index] = -u[id_nc];
v[index] = boundary_type * v[id_cc];

}
if( i == ist ) u[index] = 0.0;

```

ここで、 $\text{GetIndex}(i,j)$ は x,y 方向の格子点インデックス i,j から配列状の1次元的なインデックスを得る関数とする。 x 正方向では $i > \text{ien}$ で GetIndex 関数の ist を ien に置き換えれば良く、 y 方向の壁面では u と v の立場を入れ替えれば良い。

3.7 液膜計算のための簡便な曲率修正

現実世界で見られる気泡は、表面張力によって形状が平滑化される。問題のスケールが小さい場合や慣性が小さい場合など、表面張力が支配的となるような流れ場では、表面張力を精度よく計算することが重要となる。気-液-気のような非常に薄い液体自由膜を含む流れ計算をする場合、曲率計算に対して注意を払う必要がある。界面の Level Set 関数は液膜の中心に沿って谷を作っており、勾配がなだらかなくなり、Fig. 3.4a に示すように $|\nabla\psi| = 1$ を満たさなくなる、液膜の中心で生じる曲率の深刻な誤差は、液膜を崩壊させやすく、既往研究でも問題点が指摘されている [99]。本研究では、深刻な誤差を含む曲率が表面張力計算に用いられることを防ぐために、以下の手法を新たに考案し、適用する。まず、通常の離散化方法で曲率を計算する、

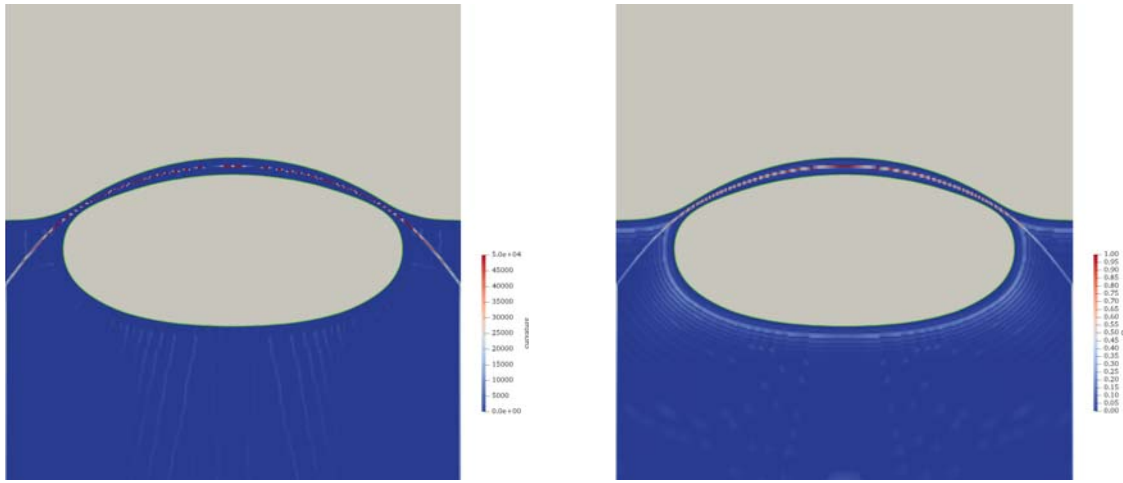
$$\kappa^{\text{raw}} = -\frac{\psi_x^2(\psi_{yy} + \psi_{zz}) + \psi_y^2(\psi_{zz} + \psi_{xx}) + \psi_z^2(\psi_{xx} + \psi_{yy}) - 2(\psi_x\psi_y\psi_{xy} + \psi_y\psi_z\psi_{yz} + \psi_z\psi_x\psi_{zx})}{4\Delta x^2}, \quad (3.32)$$

ここで、下添字は $\psi_x = \frac{\partial\psi}{\partial x}$ のように微分値を示す。次に、Level Set 関数の品質を評価する関数 $Q(\psi)$ を次のように定義し、計算する。

$$Q(\psi) = |1 - |\nabla\psi||. \quad (3.33)$$

薄い液膜内部では、Fig. 3.4b に示すように $Q(\psi)$ の値が 0 から遠い値を持っており、誤差の大きい曲率となっている格子点に対応していることがわかる。本手法では、 $Q(\psi)$ の大きさがある基準値 η を超えた場合、その格子点の曲率は深刻な誤差を含むと判断し、隣接格子点のうち最も $Q(\psi)$ の値が 0 に近い格子点の曲率を代わりに用いる。つまり、以下のような操作を行う。

$$\kappa_{i,j,k} = \begin{cases} \kappa_{i',j',k'}^{\text{raw}} & \text{where: } Q_{i',j',k'} = \min(Q_{i-1,j,k}, Q_{i+1,j,k}, Q_{i,j-1,k}, Q_{i,j+1,k}, Q_{i,j,k-1}, Q_{i,j,k+1}) \quad (Q_{i,j,k} < \eta) \\ \kappa_{i,j,k}^{\text{raw}} & \text{(otherwise).} \end{cases} \quad (3.34)$$



(a) The curvature κ computed by using standard central difference scheme

(b) The quality Q distribution

Fig.3.4: The severe curvature error and the distribution of Q at the valley of levelset within the thin liquid film.

η は施行計算によって得られた 0.05 の値を用いる．この値は Level Set 関数の再初期化精度，頻度，Phase field 変数とのカップリングの精度等に左右される可能性があるため，高次精度スキームへの変更などがあれば適宜調整する．

この手法は，界面に近いほど Q の値が 0 に近く，表面張力係数に用いられる曲率は本来界面に近い場所で計算される値が用いられるべきであるという発想に基づいている．

3.8 検証計算

3.8.1 単相流計算の検証

本節では，等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く弱圧縮性解法を用いて，単相流のベンチマーク問題を解き，手法の妥当性を確認する．

Cavity flow 問題

2.13.2 に示す条件を用いて解き，Ghia の結果と比較する．マッハ数は 0.03 とした．計算格子数は 128^2 および 256^2 で， $Re = 100, 5000$ の二通りで計算した結果を Fig. 3.5 に示す． $Re = 100$ では少ない格子点数でも非圧縮性の結果とよく一致している． $Re = 5000$ では，格子解像度を上げることで本手法の結果が Ghia の結果に近づいていることから，数値粘性の影響で速度が過小評価されていると考えられ，弱圧縮性解法特有のものではないと考えられる．

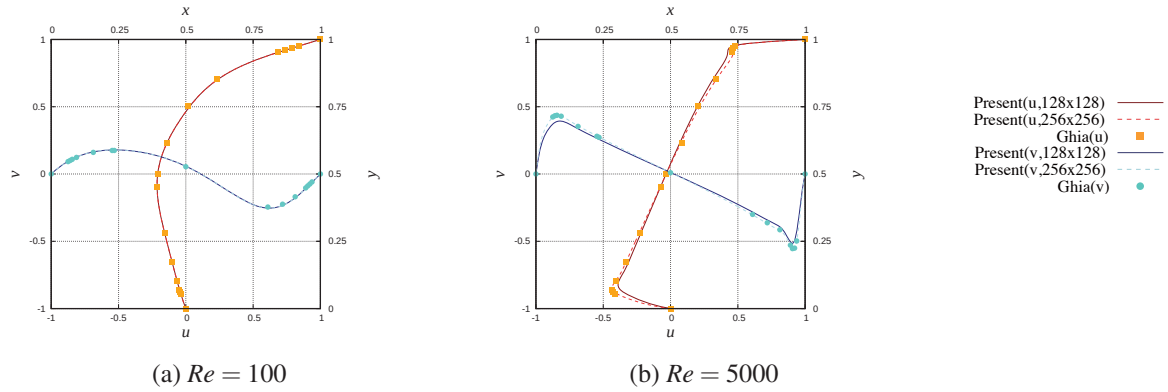


Fig.3.5: Velocity profile of the cavity flow problem for the Reynolds number $Re = 100$ (left) and $Re = 5000$ (right).

3.8.2 界面捕獲手法の検証

本節では、界面移流のベンチマーク問題である Single Vortex 問題を解いて、有限体積法を用いた保存形 Allen-Cahn 方程式による結果と THINC/WLIC 法を比較して、本手法の妥当性を確認する。

Single vortex 問題

本節では、Rider らによって提案された Single vortex 移流問題を解く。節 2.13.3 では先行研究の結果と比較するために初期円形プロファイルの半径 $R = 0.2$ としたが、ここでは原論文の設定 $R = 0.15$ を用いて自ら作成した THIC/WLIC 法を用いたコードによる結果と比較する。流れ場の条件は節 2.13.3 と同じで、時間刻み幅を $\Delta t = \Delta x/10$ とする。

格子数 128×128 と 256×256 の結果を Fig. 3.6, Fig. 3.7 にそれぞれ示す。結果より、保存形 Allen-Cahn 方程式を解く本手法は、THIC/WLIC 法で生じているような過剰な界面拡散による界面プロファイルの剥がれを抑制できており精度よく界面形状を捕らえられていることがわかる。

Zalesak 問題

界面移流ベンチマーク問題としてよく解かれる Zalesak によって提案されたベンチマーク問題 [100] を解いた結果を示す。初期プロファイルは円形に長さ 15 の切り欠きを加えたもので、以下の流れ場で移流される。

$$\begin{aligned} u &= \frac{\pi(50-y)}{314} \\ v &= \frac{\pi(x-50)}{314}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

$\Delta t = \Delta x/4$ の元で、格子解像度 100×100 と 200×200 として計算した結果を Fig. 3.8(after 1 revolution), Fig. 3.9(after 10 revolution) に示す。結果より界面形状は THIC/WLIC 法と同程度の精度を保っているこ

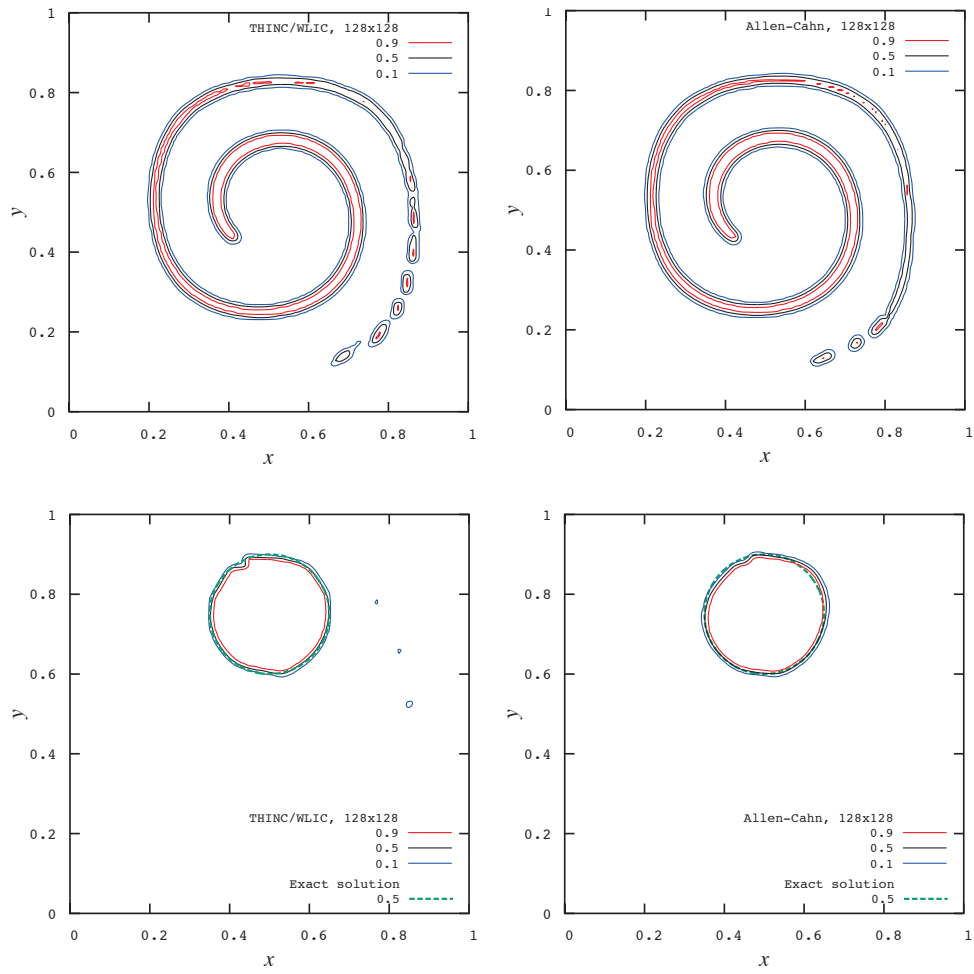


Fig.3.6: Results of the single vortex problem by using the THINC/WLIC scheme (Left) and the conservative Phase-field equation (Right) with 128×128 mesh.

とがわかる。

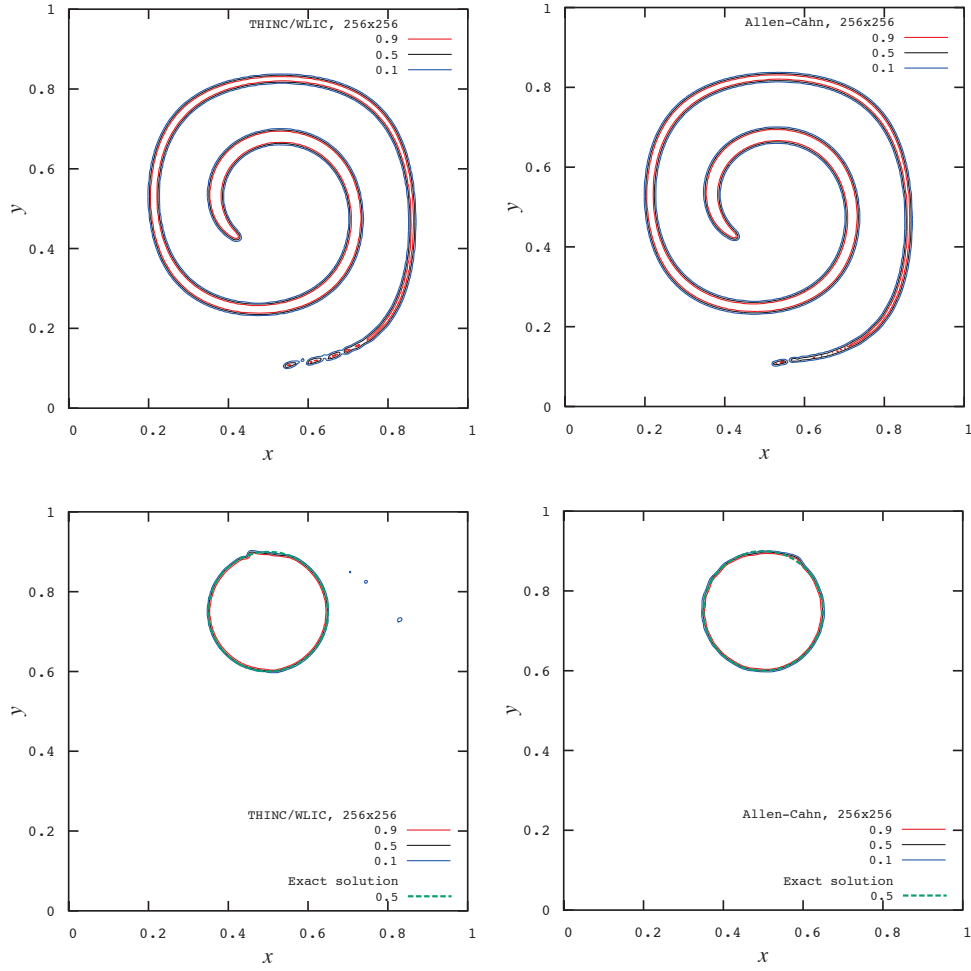


Fig.3.7: Results of the single vortex problem by using the THINC/WLIC scheme (Left) and the conservative Phase-field equation (Right) with 256×256 mesh.

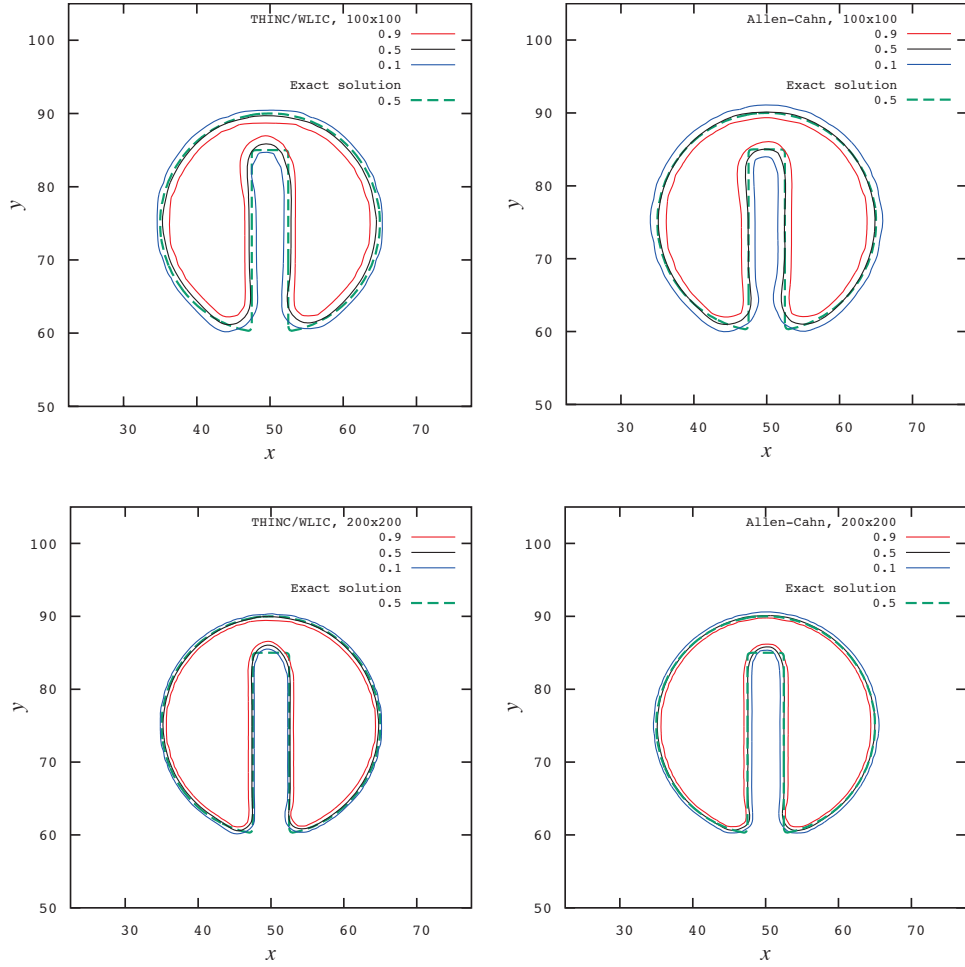


Fig.3.8: Results of the Zalesak problem after 1 revolution by using the THINC/WLIC scheme (Left) and the conservative Phase-field equation (Right) with 100×100 and 200×200 meshes.

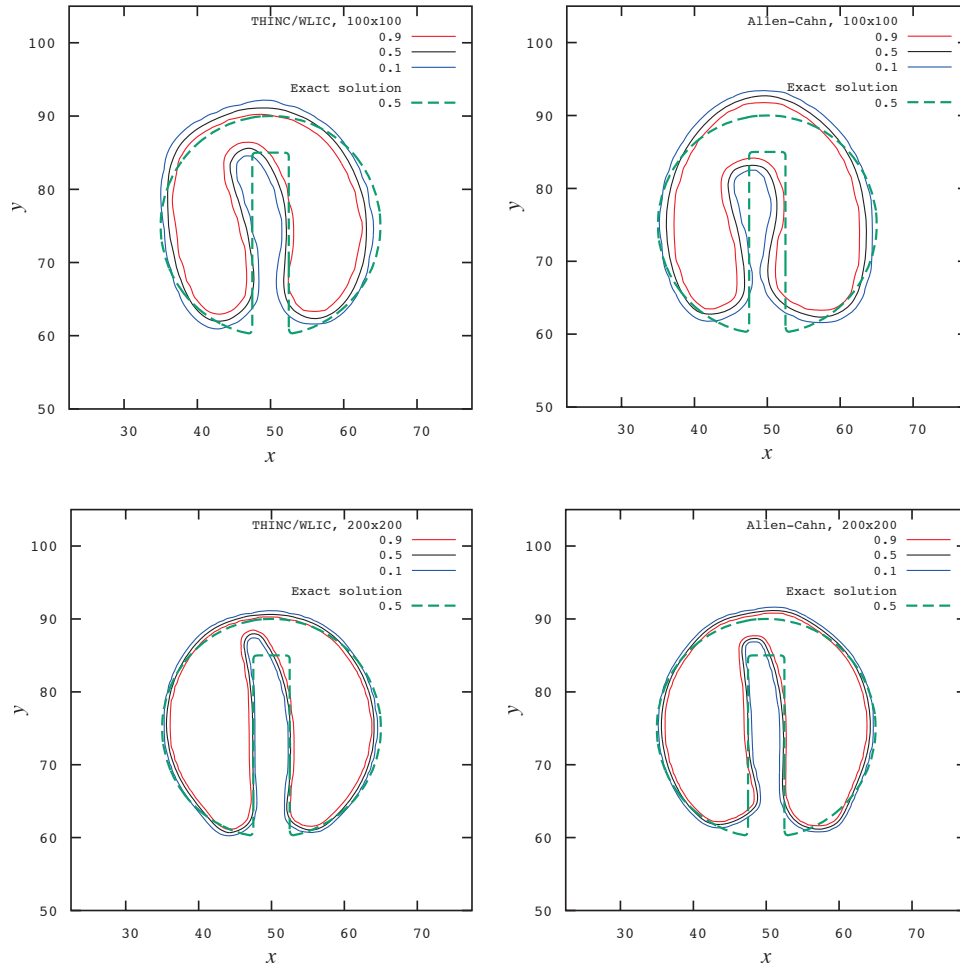


Fig.3.9: Results of the Zalesak problem after 10 revolution by using the THINC/WLIC scheme (Left) and the conservative Phase-field equation (Right) with 100×100 and 200×200 meshes.

3.8.3 気液二相流計算の検証

本説では、等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く弱圧縮性気液二相流解析手法を用いて、非圧縮性気液二相流計算の検証問題としてよく解かれる問題を解き、本手法が非圧縮性気液二相流解析に適用可能であるかの検証を行う。

2次元ダム崩壊問題

節 2.13.4 に示した条件で 2 次元ダム崩壊問題を解く。界面捕獲手法は両ソルバーとも保存形 Allen-Cahn 方程式を有限体積法で解き、格子数は 200×75 として計算する。

界面プロファイルを図 3.10 に示す。界面挙動は非圧縮性および特性線解法による結果 (Fig. 2.43) と定性的な一致が確認できる。節 2.13.4 で示した式 (2.157) と同様にして無次元化した水面の到達距離 Z と水柱高さ H の時刻歴を図 3.11 に示す。特性線解法と同様に非圧縮性ソルバーの結果および実験値と同様の傾向を示し、十分な精度で非圧縮性領域のダム崩壊計算が行えていると言える。

次に圧縮性の影響について考察する。 $\nabla \cdot \mathbf{u} \Delta t_{\text{fluid}}$ を色付けしたものを Fig. 3.12 に示す。ここで、 $\Delta t_{\text{fluid}} = \frac{\Delta x}{u_{\text{max}}}$ である。特性線解法では音速が状態方程式から計算されるため、等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く手法と圧縮性の条件を同等にすることは困難だが、最大マッハ数が同程度となるように音速を設定した。等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く手法では格子配置がスタッガード格子となっており、圧力と速度のカップリングがよく、 $\nabla \cdot \mathbf{u} \Delta t_{\text{fluid}}$ の値が小さくなっていると考えられる。 $\nabla \cdot \mathbf{u} \Delta t_{\text{fluid}}$ の値は時間とともに増加していく傾向が見られるが、2 次元ダム崩壊計算は、計算領域全体が slip 壁であり圧力にはノイマン条件が課されているため、弱圧縮性解法で発生する圧力波がノイマン条件の壁面で減衰せずに反射を繰り返すことが原因であると考えられる。

圧力波はほとんど界面挙動に影響を与えていないが、圧力発展方程式に拡散項 $v_p \nabla^2 p$ を導入することで圧力振動を低減することが考えられる。単相流計算の ACM で圧力拡散項を導入した計算はすでに報告されており、係数 v_p を大きく設定しすぎなければ非圧縮性に近い解が得られることが示されている [16][17]。気液二相流計算で圧力拡散項の効果を調べるために $v_p = 2\Delta x, 10\Delta x$ で計算した $t = 0.7 \text{ s}$ における結果を図 3.13 に示す。圧力拡散項の導入により圧力波が散逸され $\nabla \cdot \mathbf{u} \Delta t_{\text{fluid}}$ の値が低減できている。 $v_p = 2\Delta x$ の界面挙動は拡散項を導入していない場合とほぼ同じであるが $v_p = 10\Delta x$ の場合は界面挙動が異なっている。以上より気液二相流計算においても弱圧縮性解法の圧力拡散項は速度場の発散を低減させる効果を持つが大きすぎると界面挙動に影響を与えることがわかった。ソルバーには変更可能な安定化パラメータとして v_p を与えられるようにするが、以後の計算では $v_p = 0$ として計算している。

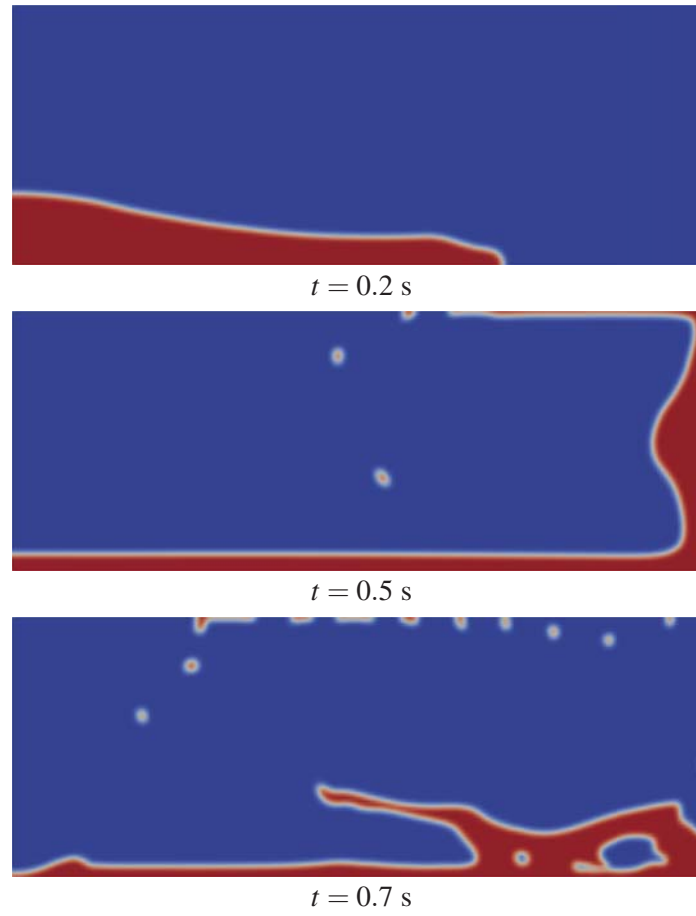


Fig.3.10: Snapshots of the 2D dam breaking problem for 200×75 mesh obtained by solving isothermal Navier-Stokes equation.

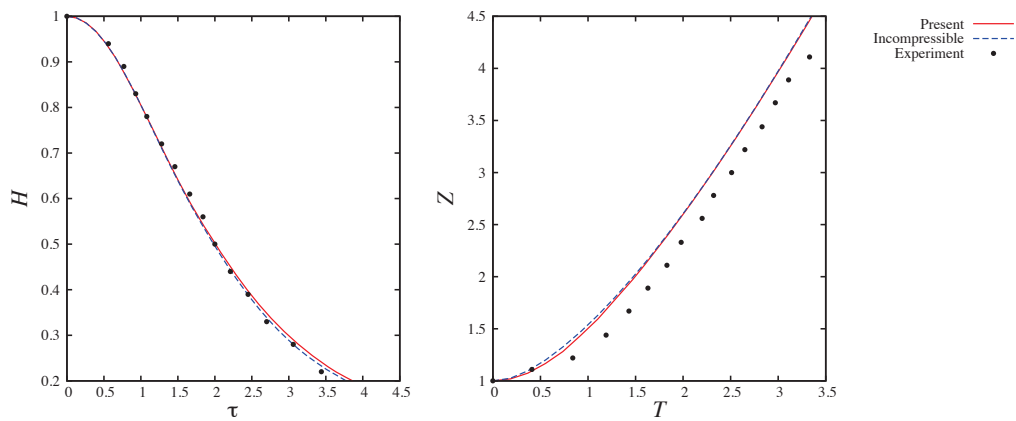


Fig.3.11: Comparisons of heights of water column and front locations of the weakly compressible solver based on directly solving isothermal Navier-Stokes equation with those of the incompressible solver and the experimental data[90]

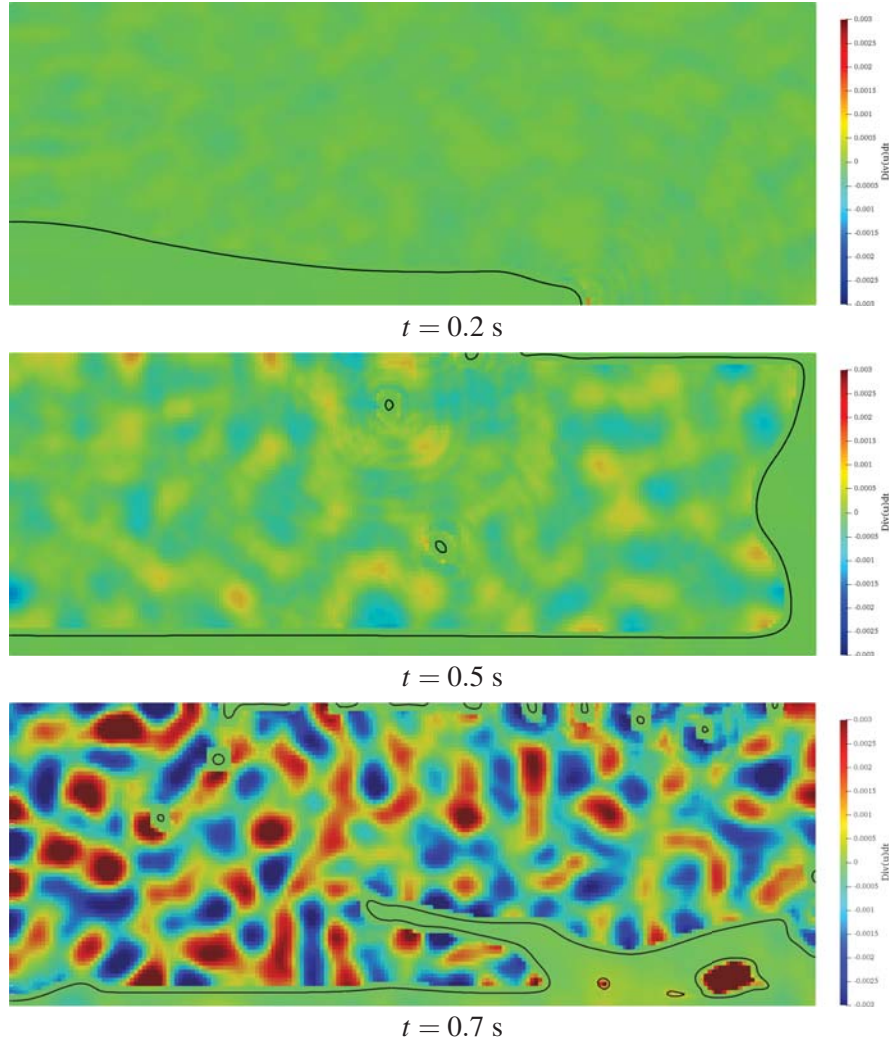


Fig.3.12: $\nabla \cdot \mathbf{u} \Delta t_{\text{fluid}}$ profile of the 2D dam breaking problem for 200×75 mesh obtained by solving isothermal Navier-Stokes equation.

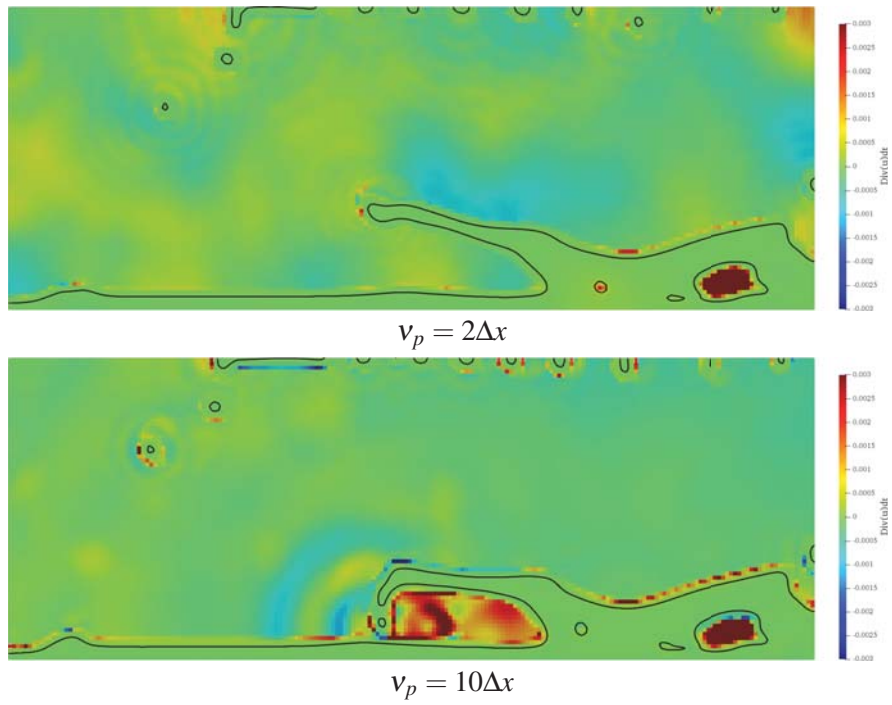


Fig.3.13: The effect of $\nabla \cdot \mathbf{u} \Delta t_{\text{fluid}}$ profile on v_p value for the 2D dam breaking problem.

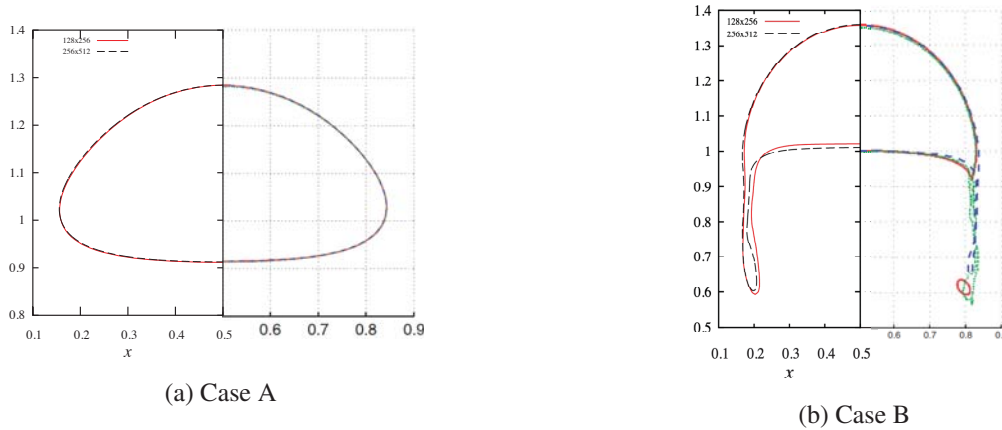


Fig.3.14: Interface shapes of a two-dimensional bubble rising problem at $t = 3$ by solving the weakly compressible scheme (left side of each figures (a) and (b)) with comparison to the references(right side of each figures (a) and (b)).

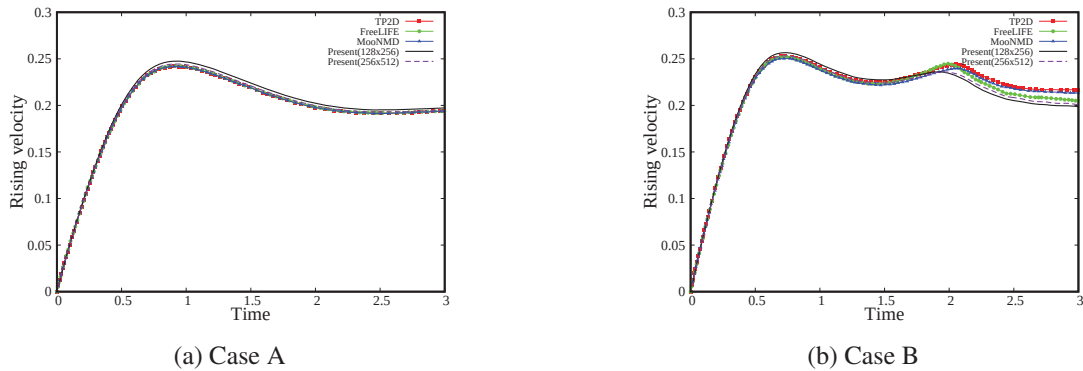


Fig.3.15: Rising velocity of bubble over time compared to those of Ref.[82]

2次元気泡上昇問題

表面張力を含むベンチマーク問題として、節 2.13.4 に示した 2 次元の気泡上昇問題を、本手法でも解く。物性値等の条件は同様のものを用いる。格子数は 128×256 と 256×512 で計算する。マッハ数 $Ma = 0.03$ とし、代表流速は 0.5 程度とする。

$t = 0.3$ s における $\phi = 0.5$ コンターを CaseA, CaseB についてそれぞれ Fig. 3.14 に示す。本手法による結果は非圧縮性ソルバーと良い一致を得ている。CaseB についてはわずかに差異が見られるが、等間隔直交格子を用いた計算例では同様の傾向が見られ [12], 弱圧縮性ソルバー特有のものではないと考える。また、格子解像度を上げることによって形状は非圧縮性ソルバーに近づいていることもわかる。Fig. 3.15 には気泡上昇速度の時刻歴で、本手法によるものと非圧縮性ソルバーによる結果を合わせて示している。本手法の結果は非圧縮性ソルバーの結果とよく一致しており、格子解像度の増加に伴って非圧縮性の結果に近づいていることがわかる。

3.9 等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く弱圧縮性解法導入のまとめ

本章では、等温過程の Navier-Stokes 方程式を直接解く弱圧縮性解法の説明および検証計算を行った。

等温過程の状態方程式によって音速が完全にパラメータ化され、空間的に一様な値を与えることができるようになった。ベクトルをセル面に、スカラーをセル中心に定義するスタッガード格子配置を用いることで、速度と圧力のカップリングを向上させた。特性線解法で適用が困難であった密度の空間変化を考慮した移流項の離散化を適用することに成功し、液相と気相の高い密度比を考慮した差分式を弱圧縮性解法で解くことが可能となった。気液界面捕獲手法には前章と同様に保存形 Allen-Cahn 方程式を解くが、自由度を削減して計算効率を上げるために有限体積法を導入した。AMR 法適用の際に、レベル差で界面をまたぐことがない実装ならば、レベル差補間が計算精度に与える影響は無視できるため、界面に常に細かい格子を集めることを想定すれば自由度が $1/8$ に減ることによる計算コスト削減効果の方が大きい。

弱圧縮性解法ではポアソン方程式を解かないので、 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ に近いような圧力場が初期および 1step 後に設定される保証はなく、初期条件から生じる圧力波が計算領域で反射を繰り返し、速度場が振動する現象が見られる。実際に特性線解法では 2 次元気泡上昇速度が振動しており、弱圧縮性特有の問題と言える。これに対して、初期数ステップの圧力修正のみのためにポアソン方程式を解くようにし、圧力振動を軽減させた。

検証問題として 2 次元ダム崩壊計算、2 次元気泡上昇計算を行い、実験結果および非圧縮性ソルバーの結果をよく再現する結果を得た。2 次元気泡上昇問題ではポアソン方程式を初期数ステップのみ解くことで、上昇速度の振動を抑制することができた。検証計算の結果から、等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く弱圧縮性解析手法も非圧縮性気液二相流計算へ十分適用可能であると言える。

第 4 章

界面に適合する AMR 法

本章では，界面近傍に細かい格子を集める AMR 法の実装，および検証問題について示す．

4.1 木構造に基づくブロック構造 AMR 法

メモリアクセスが順序性を持つ直交格子上を用いることで，GPU による並列計算は効率的に行われ，スーパーコンピュータを用いた大規模計算も数多く報告されている．しかし，実際の現象で計算領域全体に高解像度格子が必要であることは稀である．例えば $\sin$ 波のプロファイルを解像することを考えると，計算領域全体にわたって一定の波数を持つため均一格子で解像すれば全ての格子点で同程度の誤差蓄積となる．実現象では全計算領域で波数成分が同一であることは稀で，急激な勾配を持つ領域となだらかな勾配を持つ領域を同じ格子解像度で解像することは非効率的である，そこで，計算コスト削減のために Beger らが AMR(Adaptive Mesh Refinement) 法を提案した．高解像度格子が必要な領域に集めることで全体の格子点数を削減する．Beger らの提案した手法はパッチ型と呼ばれ，解像度の異なる任意の直交格子領域を，任意の場所に割り当てる．パッチと呼ばれる領域は直交格子であるため，GPU への親和性は高いが，パッチ領域の大きさが変わるため細分化処理がやや複雑となる．界面に適合する AMR 法では，格子細分化が動的に頻繁に繰り返されるため細分化を木構造で容易に管理することができるツリー型の AMR 法 [33] を用いる．木構造で管理される小領域を 4^3 や 8^3 等の決まったサイズのブロック構造格子とすることで規則的なメモリアクセスとなり，GPU 並列計算に適する．

Fig. 4.1 に示すようなある領域に対して各辺の格子幅を半分にするような格子細分化を行った時，一つの領域は四等分される．この細分化は，木構造上では親ノードに対して 2 次元では 4 つの子ノード，3 次元では 8 つの子ノードが生成されることに対応する．正方形の計算領域を仮定する場合は，計算領域全体に対応するルートノードが一つ用意され，ある基準に基づいて再帰的に格子細分化が行われる．実際に流体計算が行われるのは，細分化が終了した状態の計算領域に対してであり，木構造では末端のノードに対応する．これらの末端ノードおよびノードに対応するブロック状の計算領域をリーフと呼ぶ．計算安定化および，処理が複雑化することを防ぐために隣接する領域の格子サイズは高々 2 倍とする 2:1 バランシングを用いる．

一つの木構造は正方形の領域にしか対応することができないため，複数の木構造を 3 次元的に配置す

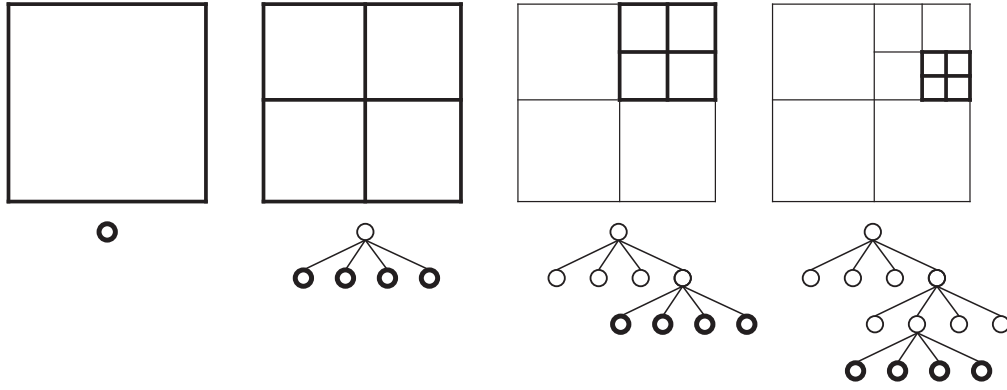


Fig.4.1: The refinement procedure of tree based AMR

ることで直方体の計算領域に対応させる。

4.2 レベル差補間

隣接リーフ同士でレベル差がある場合，ステンシル計算のために参照される隣接リーフのレベルを，ステンシル計算を行うリーフのレベルに合わせる補間が必要となる．2:1 バランシングの元では，補間は細分化と粗視化のどちらかの操作を高々 1 回行う処理となる。

特性線解法では，ノード・センターおよび保存形マルチモーメント法で配置される変数のレベル差補間が必要となる．等温過程の Navier-Stokes ではスタッガード格子を用いているため，セル中心およびセル面で定義される値の補間が必要となる．以下ではそれぞれの定義点におけるレベル差補間を述べる。

4.2.1 ノードセンターで定義される変数のレベル差補間

ノードセンターで定義される値の補間は 2 次精度を担保できる線形補間でも，単一リーフで閉じている． Fig. 4.2 に示すように粗い格子から細かい格子への補間は線形補間で容易に計算することができる．細かい格子から粗い格子への値の計算は重なっている点のコピーとなる。

4.2.2 マルチモーメント変数のレベル差補間

細かい格子側から粗い格子の中の対応する位置での値を補間するには， Fig. 4.3(a) の x 方向に対する補関数の構築を行った後に， (b) の y 方向に対する補関数の構築を行う． Fig. 4.3 中の上付添え字 c は元の格子の値を， f は補間により得られた格子の値を示す． (a) の x 方向の補間では，格子点上の値 $\phi_{i,j}^c, \phi_{i+1,j}^c$ とその間に位置する x 方向の線積分平均値 ${}^x\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2},j}^c$ から中間点の値 ${}^x\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2},j}^f, \phi_{i+1,j}^f, {}^x\bar{\phi}_{i+\frac{3}{2},j}^f$ を求める．同様の処理を元の格子の $j+1$ でも行う．さらに ${}^y\bar{\phi}_{i,j+\frac{1}{2}}^c, {}^y\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^c, {}^y\bar{\phi}_{i+1,j+\frac{1}{2}}^c$ に対しても全く同じように x 方向に対する補関数を構築することができ，中間の位置の値 ${}^{xy}\bar{\phi}_m^*, {}^y\bar{\phi}_h^*, {}^{xy}\bar{\phi}_p^*$ が求まる．次に (b) の y 方向の補間では， ${}^x\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2},j}^f, {}^{xy}\bar{\phi}_m^*, {}^x\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2},j+2}^f$ から補関数を構築し， ${}^{xy}\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^f, {}^x\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2},j+1}^f, {}^{xy}\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{3}{2}}^f$

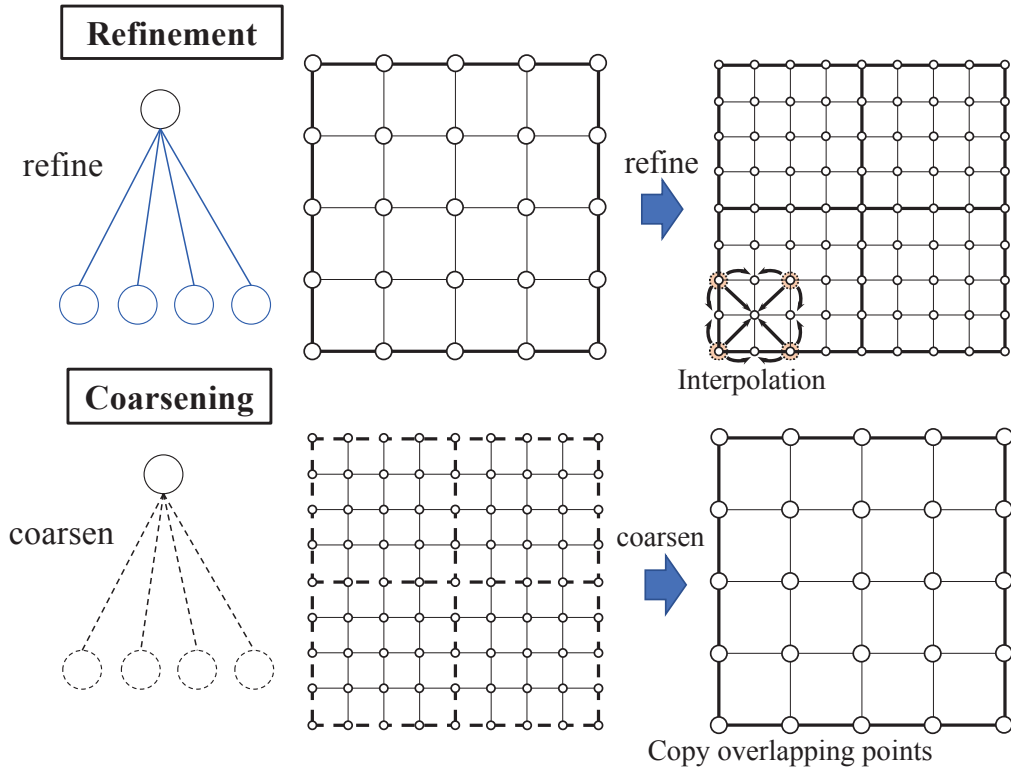


Fig.4.2: Level gap interpolation of node-centered variables

が求まる． ${}^x\bar{\phi}_{i+\frac{3}{2},j}^f, {}^{xy}\bar{\phi}_p^*, {}^x\bar{\phi}_{i+\frac{3}{2},j+2}^f$ と $\phi_{i+1,j}^f, {}^y\bar{\phi}_h^*, \phi_{i+1,j+2}^f$ に対しても同様にして補間関数を構築し，中間の位置での値 ${}^{xy}\bar{\phi}_{i+\frac{3}{2},j+\frac{1}{2}}^f, {}^x\bar{\phi}_{i+\frac{3}{2},j+1}^f, {}^{xy}\bar{\phi}_{i+\frac{3}{2},j+\frac{3}{2}}^f$ および， ${}^y\bar{\phi}_{i+1,j+\frac{1}{2}}^f, \phi_{i+1,j+1}^f, {}^y\bar{\phi}_{i+1,j+\frac{3}{2}}^f$ が求まる．Fig. 4.3 中の ${}^y\bar{\phi}_{i,j+\frac{1}{2}}^c$ のように隣接リーフの細かい格子とオーバーラップしている位置の値は細かい格子の値を採用する．また，細分化前後でオーバーラップしている格子点上の値は補間が必要ないため，元の格子の値をそのままコピーする．

補間関数には保存形 IDO 法によって構築された以下の二次多項式を用いる．

$$\Phi(x) = \sum_{j=0}^2 C_j (x - x_i)^j \quad (4.1)$$

Fig. 4.4 のように元のレベルの積分平均値 ${}^x\bar{\phi}_i^c$ を中心として，その前後に位置する格子点上の値を $\phi_{i-\frac{1}{2}}^c$ ， $\phi_{i+\frac{1}{2}}^c$ を拘束条件とすると

$$\begin{cases} C_0 = \frac{5(\phi_{i+\frac{1}{2}}^c + \phi_{i-\frac{1}{2}}^c) - 6{}^x\bar{\phi}_i^c}{4} \\ C_1 = \frac{\phi_{i+\frac{1}{2}}^c - \phi_{i-\frac{1}{2}}^c}{\Delta x} \\ C_2 = \frac{3(\phi_{i+\frac{1}{2}}^c + \phi_{i-\frac{1}{2}}^c) - 6{}^x\bar{\phi}_i^c}{\Delta x^2} \end{cases} \quad (4.2)$$

となる． Δx は元のレベルの格子幅である．上記の補間関数を用いれば，Fig. 4.4 に点線で示すような位

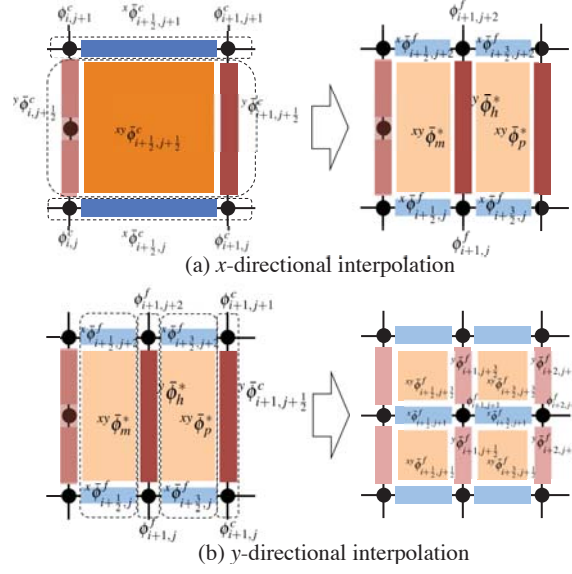


Fig.4.3: Multi-dimensional interpolation process

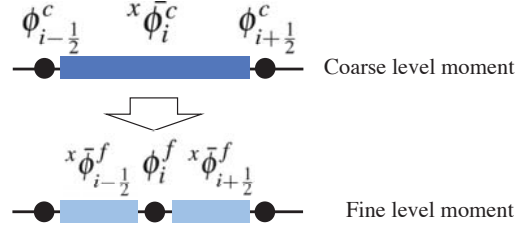


Fig.4.4: Interpolation to a fine mesh from a coarse mesh

置の値と、両脇の積分平均値は以下のように求まる。

$$\begin{cases} \phi_i^f = C_0 \\ x\bar{\phi}_{i-\frac{1}{2}}^f = C_0 - \frac{1}{4}\Delta x (C_1 - \frac{1}{3}C_2\Delta x) \\ x\bar{\phi}_{i+\frac{1}{2}}^f = C_0 + \frac{1}{4}\Delta x (C_1 + \frac{1}{3}C_2\Delta x) \end{cases} \quad (4.3)$$

保存形マルチモーメント法では積分値は流束の出入りで計算されるので、Fig. 4.5 に示すようなレベル差がある場合には細かい格子側の流束を足し合わせるによって面積分値の保存性を担保する。

4.2.3 スタッガード格子で定義される変数のレベル差補間

スタッガード格子では、セル中心に定義される圧力や Phase field 変数、Level Set 関数などのスカラー値とセルフフェイス上で定義されるベクトル値の補間が必要となる。セル中心で定義される値の細分化では、粗い格子の値を4つの近傍点に振り分ける。値のコピーとなるため1次精度とはなるが、Phase field 変数はレベル差境界でほとんど勾配を持たず、Level Set 関数も、精度が要求される法線・曲率計算は界面近傍のみで用いられ、レベル差を跨ぐような界面から遠方にある Level Set 関数は格子細分化の基準値

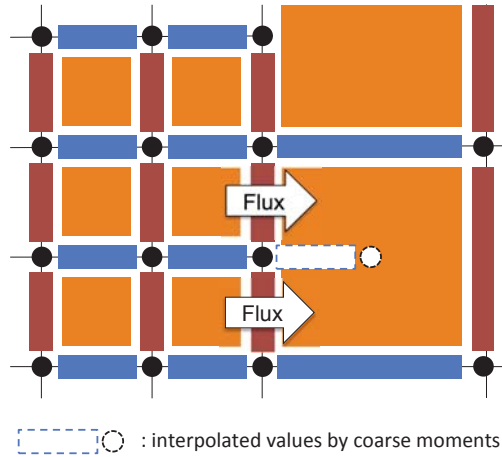


Fig.4.5: Interpolation in a coarse mesh and numerical fluxes between coarse and fine meshes

として用いられるだけなので、レベル差における誤差の影響はほとんどないと考えられる。

保存形マルチモーメント法と同様に、有限体積法における Flux 計算で、保存性を担保するために、レベル差境界の Flux は粗い側の Flux を細かい格子で計算されたものを足し合わせた値に修正する。

Fig. 4.7 に示すように、セル面で定義される速度については線形補間と近傍点コピーを組み合わせた補間を用いる。上記全ての細分化・粗大化補間は単一のリーフ内で閉じているため隣接リーフへのアクセス頻度が減り、効率よく計算できる。リーフ内で閉じていない補間の場合は、斜め方向の隣接情報を保存しなければならなかったり、レベル差のあるステンシル構築のために呼ばれる隣接リーフの補間の際に、さらにそのリーフの隣接情報にアクセスする必要がある。隣接リーフの補間のために用いる隣接リーフにレベル差がある場合ここでも補間操作が必要となり、実装が煩雑かつ非効率的となるため、斜め方向に対しても 2:1 バランシングをかけることが多い。しかしながら、本実装ではリーフ内で閉じた補間を行っているため、補間値精度は犠牲となるが、斜め方向でレベル差が 2 つく場合も許容することができる。これにより少ない格子数で、必要な領域に格子を集めることができる。

4.3 AMR 法の GPU 実装

各々のリーフは決まった数の格子点数を持つ直交格子状のデータであるので、それらを連続的にメモリ確保することで参照の局所性が高まり計算効率が向上する。Fig. 4.8 に示すように AMR の構造を管理する木データ構造は CPU 側のみで保持し、GPU 側ではリーフを 1 次元配列状に並べた構造を保持する。隣接リーフ等のレベル差補間時に必要となる情報は同じ順序で並べた 1 次元配列状に別の配列状データとして保持する。CPU 上の配列状データは出力時のみに使用され、動的格子細分化の際は CPU 側で木構造のみが操作され、細分化・粗大化の候補となったデータは GPU 状で並列に補間操作が行われる。配列はモートンカーブ、別名 Z-Ordering で順序づけされる。Fig. 4.9 に木構造を管理するための C++ で記述されたクラスの概要図を示す。Forest クラスは複数の木構造のポインタを多次元配列状で持つクラスであり、木の各々のノードを表すクラスである TreeNode が連なった状態が木構造である。これらのク

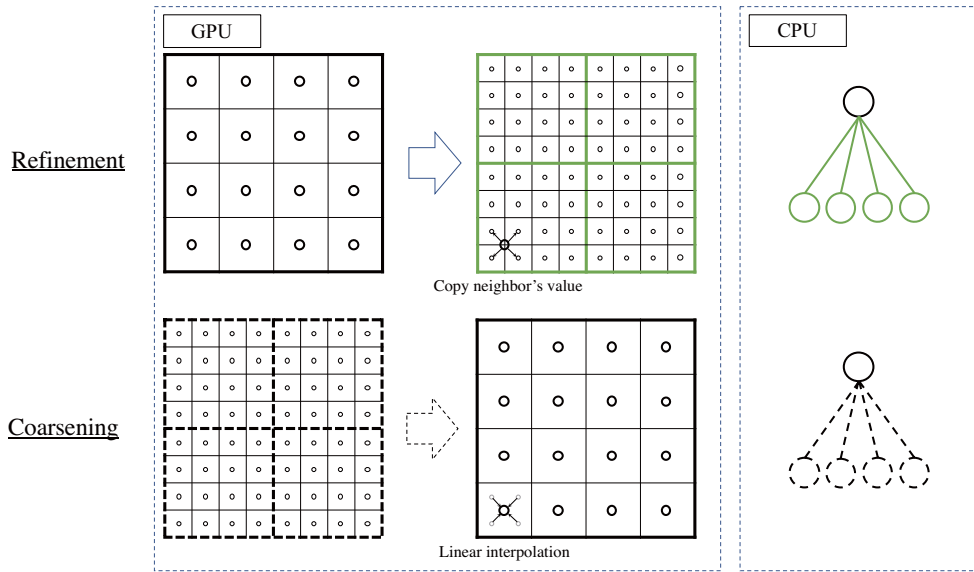


Fig.4.6: Level gap interpolation of variables on cell-center between coarse to fine mesh

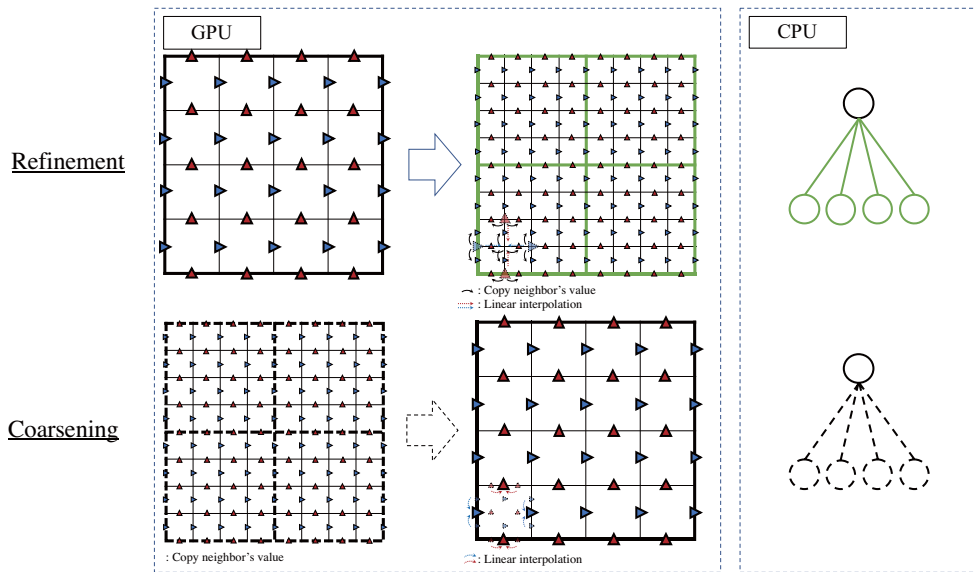


Fig.4.7: Level gap interpolation of variables on staggered grid between coarse to fine mesh

ラスは CPU 側のみで保持・管理され、GPU 側では全く参照されない。real とは単精度 float もしくは double が typedef によって設定される型名である。NUM_CHILD および NUM_NEIG には 2 次元の場合 4 が与えられる。

物理量を保存し、演算に用いるためのメモリの実態としてのクラスは Fig. 4.10 に示す通りである。BufPool クラスは任意の型 T の配列状データを複数管理するクラスで、 u, v, p, ϕ といった物理量の種類によって `d_pool[0]`, `d_pool[1]`, `d_pool[2]`, `d_pool[3]` のように複数の pool を持つ。d_はデバイス上、つまり GPU 上で取られるメモリを示し、h_はホスト側で管理される pool である。実際には

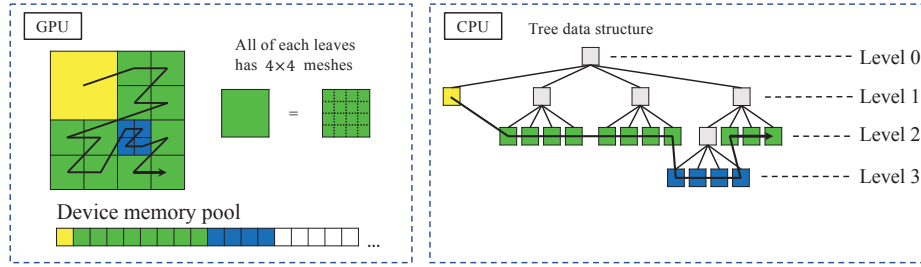


Fig.4.8: Tree based AMR on GPU and CPU with space-filling curve

Class	Forest<real>	TreeNode<real,NUM_CHILD>
Structure		
Members	<pre> template <typename T> class Forest{ public: TreeNode<T> *trees; int TX,TY,TZ; real3 whole_axis_min_; real3 whole_axis_max_; // member funcs ... } </pre>	<pre> template <typename T, int NUM_CHILD = 4> class TreeNode{ // member variables public: const int level_; // refine level, depth of Tree const unsigned int node_id_; // Node/Branch id, 32 bit int leaf_pool_id_; // id of the leaf pool array int space_filling_id_; // order of the data block of the Morton int ti,tj,tk; // index of tree in Forest TreeNode *parent_; TreeNode *child_[NUM_CHILD]; real3 axis_min_; real3 axis_max_; real3 dh_; unsigned int neig_tree_[NUM_NEIG]; bool refine_flag_; bool coarsen_flag_; // member funcs ... } </pre>

Fig.4.9: C++ class implementations for tree data structure

`d_pool[static_cast<int>(ECellPoolID::P)]` などのように列挙型であらかじめ定義された ID 情報を用いて物理量の種類の同定を行う。BufPool は任意の型のメモリ・プールを取れるクラスになっているので、テンプレート引数に LeafBlock を設定することによって 4^2 や 5^2 等のリーフが担当するブロック型直行格子のメモリ・プールが実装できる。隣接リーフ情報等の更新は Fig. 4.11 に示すクラス TreeBlockInfo を 1 次元配列状で管理し、CPU 側の木構造が操作されたのちに TreeBlockInfo クラスの情報が更新され、GPU 側にコピーされる。

4.3.1 界面に適合する動的格子細分化

界面挙動を細かい格子で精度よく捉えるために、界面に細かい格子を適合させる。界面を高解像度格子で解像できるため、(1) より細かい界面構造を捉えられる、(2) 界面近傍で急激となる密度・圧力等の勾配に対して細かい格子を寄せることで格子あたりの波数を下げ、誤差蓄積を抑える、といった利点を均一と比べて少ない格子数で実現できる。

Class	BufPool<real>	LeafBlock<real, BLOCK_SIZE >
Structure		
Members	<pre> template<typename T> class BufPool{ public: // member variables unsigned int num_quantity_; unsigned int num_stagg_; unsigned int num_workspace_; unsigned int num_use_temp_; unsigned int mem_size_; unsigned int mem_used_; unsigned int extend_size_; bool is_fragment_; T **h_pool_; T **h_defrag_pool_; T **d_pool_; T **d_temp_pool_; // for keeping previous data T **d_work_pool_; // for intermediate results ... }; </pre>	<pre> template<typename T, int N> class LeafBlock{ public: __host__ __device__ CellLeafBlock& operator=(const CellLeafBlock& new_block){ for(int j = 0; j < N; ++j){ for(int i = 0; i < N; ++i){ const int index = i + N * (j); data_[index] = new_block.data_[index]; } } return *this; }; T data_[N * N]; }; </pre>

Fig.4.10: C++ class implementations for buffer pool and block data structure

Class	TreeBlockInfo
Structure	<pre> TreeBlockInfo[]; </pre>
Members	<pre> class TreeBlockInfo{ public: int block_id_; int halo_block_id_; int level_; unsigned int child_id_; // to determine the location real3 dh_; int neighbour_id_[4][4]; // safety int neighbour_level_diff_[4]; ... }; </pre>

Fig.4.11: C++ class implementations for block information

本研究では、符号付距離関数としての性質を持つ Level Set 関数 ψ を細分化基準に用いる。基本的には気液界面の Level Set 関数 ψ_Γ を用いるが、物体を含む流れを計算する場合は物体の Level Set 関数 ψ_{obj} も合わせてチェックする。細分化は以下の不等式が真かつ、細分化されたレベルがあらかじめ決められた最大レベル n_{max} 以下であるとき行われる。

$$\min(|\psi_m|) < \sqrt{3} \times dh_{n+1} \times b, \quad (4.4)$$

ここで、 m はあるリーフのリーフ id を示し、 n はリーフ m のレベル、 b はリーフの持つ一辺の格子数である。式 (4.4) に基づく細分化について、 $n_{max} = 3$ と仮定して Fig. 4.12 の各ブロックに便宜的に id をつけ、簡単のために 2 次元のノードセンターに符号付き距離関数が定義されている場合で説明する。Fig. 4.12 の緑色で示した矢印の長さは 2 次元では $\sqrt{2} \times dh_{n+1} \times b$ だが、3 次元的には $\sqrt{3} \times dh_{n+1} \times b$ となる点に注意する。図の赤線はリーフ境界線を示し、黒い破線は格子線を示す。細分化されていないルートノード

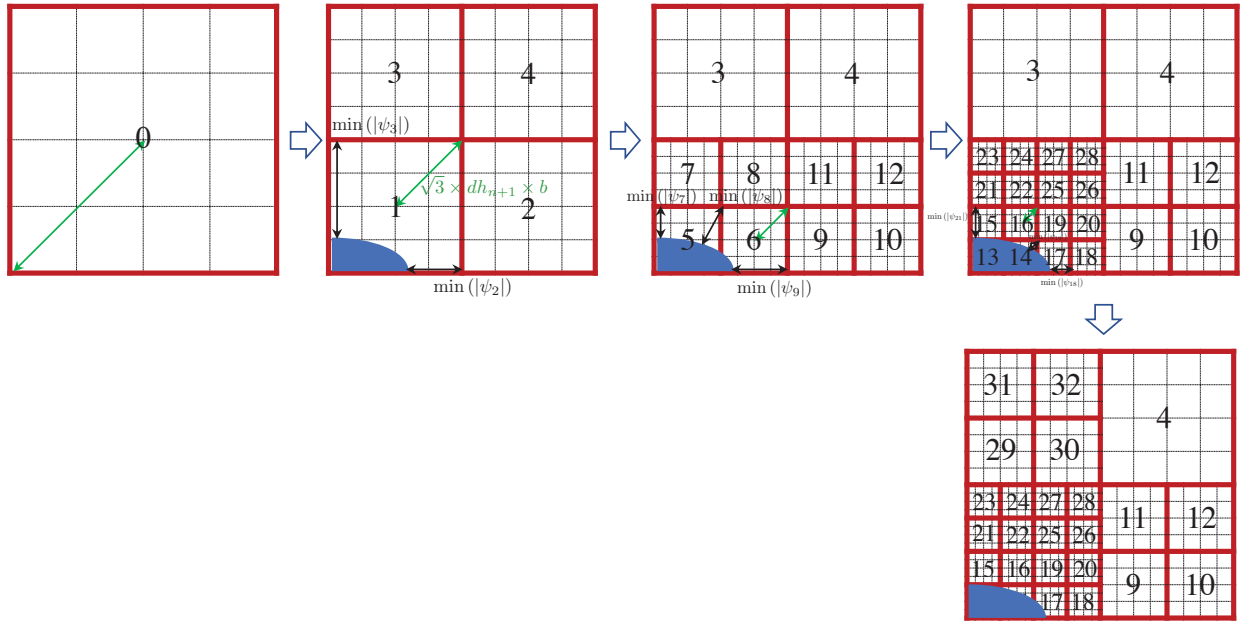


Fig.4.12: Mesh refinement based on signed distance function

ドに当たるリーフ 0 は界面を含んでいるため明らかに式 (4.4) を満たすので細分化され、リーフ 1,2,3,4 が生成される。 $n = 1 < n_{max}$ であるので細分化は継続され、界面を含むリーフ 1 と図中の矢印の大きさを考えれば、リーフ 2,3 は不等式 (4.4) を満たすので細分化される。細分化され $n = 2$ となり、界面を含むリーフ 5,6 は明らかに不等式を満たし、リーフ 7,8 も不等式を満たすが、リーフ 9 は不等式を満たさないで細分化されない。従ってレベル $n = 3$ での細分化された格子は Fig. 4.12 の右上のようになる。しかし、リーフ 3 と 23,24,27,28 の間はレベル差が 2 以上ついているので 2:1 バランシングに基づきリーフ 3 は細分化される。仮に $n = 4$ まで細分化を行うことを考えると、13,14,15,16,17,19 が細分化され、細分化を繰り返すごとに界面形状に沿った細かい格子が生成されることがわかる。

4.3.2 メモリ・プールと木構造を用いた CPU/GPU 上のメモリ管理

リーフに格納されている物理量演算に必要な格子状のメモリはメモリ・プールのデータ構造を持って 1 次元配列状に GPU のデバイスメモリとして保持されている。速度や圧力等様々な物理量を保存するために、Structure of Array のデータ構造を採用する。気液二相流計算で界面に適合する AMR 法を導入する場合、一般に気液界面は時間とともに移動し、大変形・合体・分離を伴うため格子の細分化および粗大化が頻繁に行われる。細分化では新しくデータを保存するためのメモリが必要となり、粗大化ではメモリの削除することになるため、ナイーブな実装をした場合には `cudaMalloc` 関数や `cudaFree` 関数を毎回呼び出すこととなる。GPU ではメモリのアドレスが固定されているため、毎回メモリの確保・解放を行なうことは非効率的である。そこで、あらかじめリーフ配列の要素サイズより大きめに確保されたメモリ・プールを用意し、細分化・粗大化の際のメモリの確保・解放頻度を大幅に削減する。Fig. 4.13

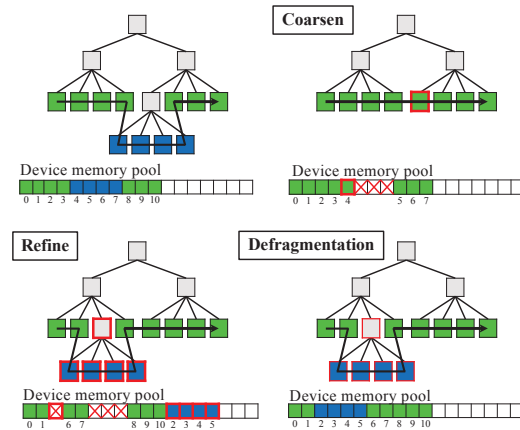


Fig.4.13: Adaptation and defragmentation of tree-based AMR and memory pool

に示すように、格子の粗大化が行われる際には使用していた 4 つの子リーフが対応する配列状のデータの先頭を新たな親リーフ用のメモリとし、その他の 3 つは使わないメモリとしてフラグを立てる。細分化の際は新たに生成される子リーフは配列の後ろに追加し、親ノードは使用しないようフラグを立てる。このような操作を行うと、メモリが虫食い状となるので、コード状でデフラグメンテーションまで行い、メモリを整頓する。メモリの確保・解放は配列状の要素数が、実際に確保しているメモリ量のある一定の割合以上となった時に行い、常に余分にメモリを確保する。

4.3.3 GPU 上のステンシル計算

離散化された偏微分方程式を解くためにはステンシル計算が必要となるが、AMR 法ではリーフ単位で 4^2 などの格子状の物理量データが保持されているため、隣接点参照時に隣接リーフの情報が必要となる場合、隣接リーフへの通信が必要となる。本実装では、 4^2 などのリーフ内に含まれる格子点数を CUDA block あたりの thread 数にあわせ、リーフ数分の CUDA block を設定してカーネル関数を投げる。投げる block は CUDA の定める上限に達しない限り `gridDim.x` のみに配列要素数を対応させ、`grid` に 1 次元状にリーフの格子サイズと同様の CUDA block が配置されているような配置とする。すなわち、典型的なカーネル関数の簡易コードは以下のようにかける。

```
/* Number of cells on one side */
#define CELL_N 4

void func( ...,
           const unsigned int array_length /* number of leaf array elements */ ){

    const dim3 thread = ( CELL_N, CELL_N );
    const dim3 block  = ( array_length );
    some_kernel<<< block, thread >>> ( ... );

}
```

カーネル関数内でステンシル計算が必要となる場合には、まず Fig. 4.14 に示すようにステンシル計

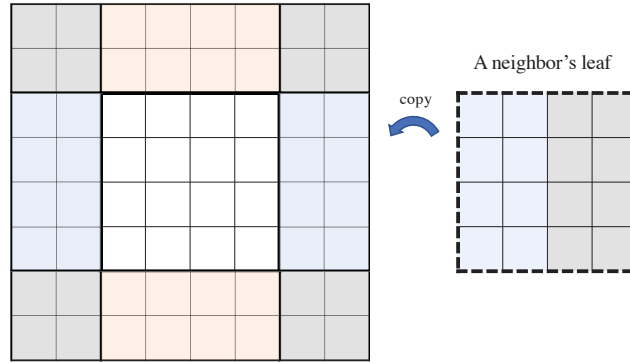


Fig.4.14: A extended stencils of a leaf including halo region on shared memory

算に必要となる分の格子点数分の **shared memory** を用意する. WENO3 次精度では 2 点先まで参照される可能性があるため, ここでは 4^2 のリーフ内格子 +HALO リーフとして 2 つを足した 8^2 を用いる. Fig. 4.14 中の白色の格子は, リーフのデバイスのグローバルメモリから直接コピーする. Fig. 4.14 の薄青色/薄赤色で示す x -/ y - 方向のステンシル参照で必要となる HALO 領域は隣接リーフのグローバルメモリから構築され, レベル差がある場合には 4.2 で説明した補間が行われる. CUDA block はリーフ内の格子数分 4^2 threads を発行するので, 1 つの thread が一つの白色の値のコピー, 薄青色の 1 点の構築, 薄赤色の 1 点の構築を行う. 以上の手順で構築された **shared memory** 上の値を用いてあるリーフのステンシル参照は完結する.

グレーで示した領域は通常値が参照されないが, スタッガード格子で粘性応力項を計算する際には, 節 3.5.3 で説明したように速度方向と異なる方向の微分値計算において斜め方向のセル中心に定義された Phase field 変数を用いる必要がある (節 3.5.3 中 Fig. 3.2b 参照). それ以外では斜め参照を必要としない実装が使えるため, 計算効率化のために斜め参照を避け, あらかじめセル中心からノード中心上に値を補間しておき, $\mu_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}$ などの値を直接用いて計算する.

4.3.4 セル中心からノード中心への補間

粘性応力テンソルと章 5 内で説明する粘弾性応力テンソルの計算で必要となる斜め方向のリーフ参照を避けるために, 計算カーネル実行前にあらかじめセル中心で定義された値からノード中心への補間を行う. 例えばノード中心で定義された Phase field 変数 ϕ から計算される粘性係数 μ を用いれば, 例えば節 3.5.3 で説明していた粘性応力項の計算式 (3.30) 中の $\mu_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}, \mu_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}$ は計算カーネル内でセル中心からの補間を行うのではなく, 事前にノード中心に補間された値を直接用いる.

ノード中心からセル中心への値の補間は, x,y,z 方向の補間操作を逐次的に行うことで斜め方向の情報を考慮する. まず 2 次元の場合を説明する. Fig. 4.15 に示すように, 説明の単純化のためにセル中心からノード中心を目掛けた矢印で示す配列 $\text{arrow}0,1,2,3$ を考える. arrow 配列は 5^2 のメモリを持つノード中心で定義される変数となり, 最終的な補間では同じインデックス情報で $\text{arrow}0,1,2,3$ の値を使ってノード中心の値が計算される. 次に Fig. 4.16 のように各リーフ内でセル中心の値から arrow 配列に値を

格納する。CUDA block は 4^2 threads 発行して実行され、セル中心のインデックス i, j からコピーされる arrow 配列は Fig. 4.16 の左側で拡大した図のような arrow 配列が対応し、arrow 配列は 5^2 の配列データなので、ノード中心のインデックス計算がされることに注意する。次に Fig. 4.17a のように、 x 方向の arrow 配列のコピーが行われ、次に y 方向のコピーを行う (Fig. 4.17b)。この操作によって、あるリーフのノード中心に向かう arrow 配列に値が全て入るので、後は対応するノード点で同じノード中心インデックス i, j について arrow0,1,2,3 の値を線形補間して算出する。

3次元の場合も同様で、Fig. 4.18 に示すように 8 本の arrow 配列を使って実現される。隣接リーフとレベル差がある場合は、点と点との距離を重みとした重み付け平均で値を補間する。ただし、Phase field 変数のようにレベル差境界でほとんど勾配を持たない変数のみにこの操作を行う場合は、メモリ節約のために点と点との距離を保存する配列を用いずに単に平均操作を行う。隣接リーフが粗い格子の場合、隣接リーフからの arrow 配列データの複製操作中、Fig. 4.19 のようにレベル境界でオーバーラップしていない点はコピーされる arrow 配列の数が 4 より少なくなる。 x 方向インデックス i と y 方向インデックス j を用いると、図のような x 正方向の場合分けを示した簡易コードは以下ようになる。

```
// arrow id setting for X+ direction
const int aid[4] = GetArrowId( EDirection::XP ); // Detect direction by EDirection
                                                    // aid[4] = {1,3,5,7}

const int index = GetIndex( i, j );

if( i % 2 == 0 && j % 2 == 0 ){
// 今まで通りの処理
    for( int s = 0; s<4; s++){
        //copy data of arrow[aid[s]] and distance[aid[s]]
        ...;
    }
}else if( i % 2 == 1 && j % 2 == 1 ){
    //copy data of arrow[aid[0]] and distance[aid[0]]
    ...;
}else{
    int eoid[2];
    SetEvenOddArrowId( eoid, aid, i, j, EDirection::XP );
    for( int s = 0; s<2 s++ ){
        // copy data of arrow[eoid[s]] and distance[eoid[s]]
        ...;
    }
}
```

distance[] は点同士の距離を保存する配列である。最終的にノード中心に集約された arrow 配列の本数分重み付け平均を行なう。隣接リーフのレベルが大きい場合は、Fig. 4.20 に示すように、粗い側のリーフに入る arrow 配列の数は同じなので、対応する位置の arrow 配列をコピーすれば良い。

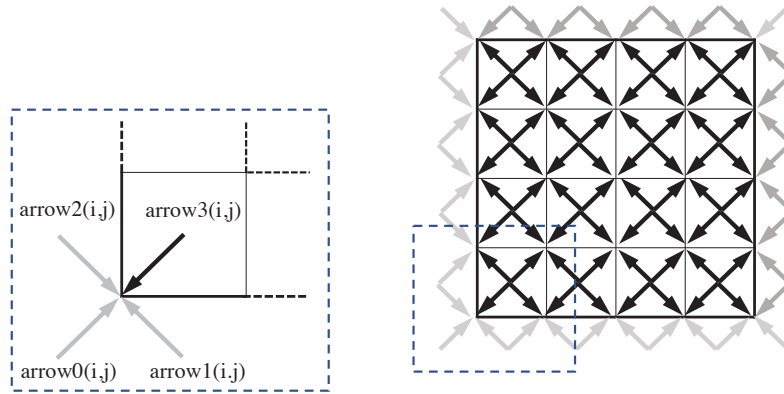


Fig.4.15: Arrow arrays to convert from cell-centered to node-centered variables

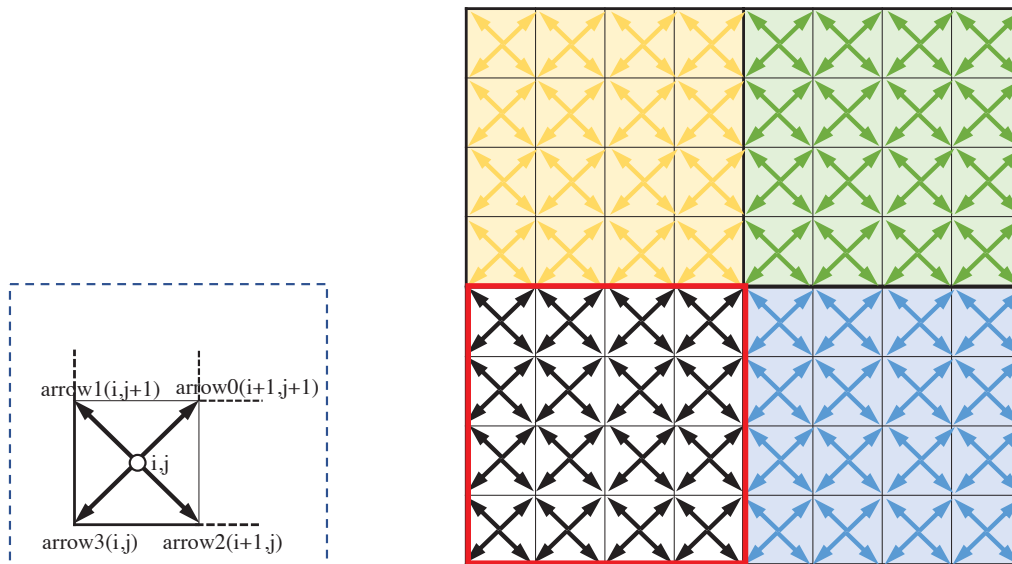


Fig.4.16: Prolongation from cell-centered to node-centred variables

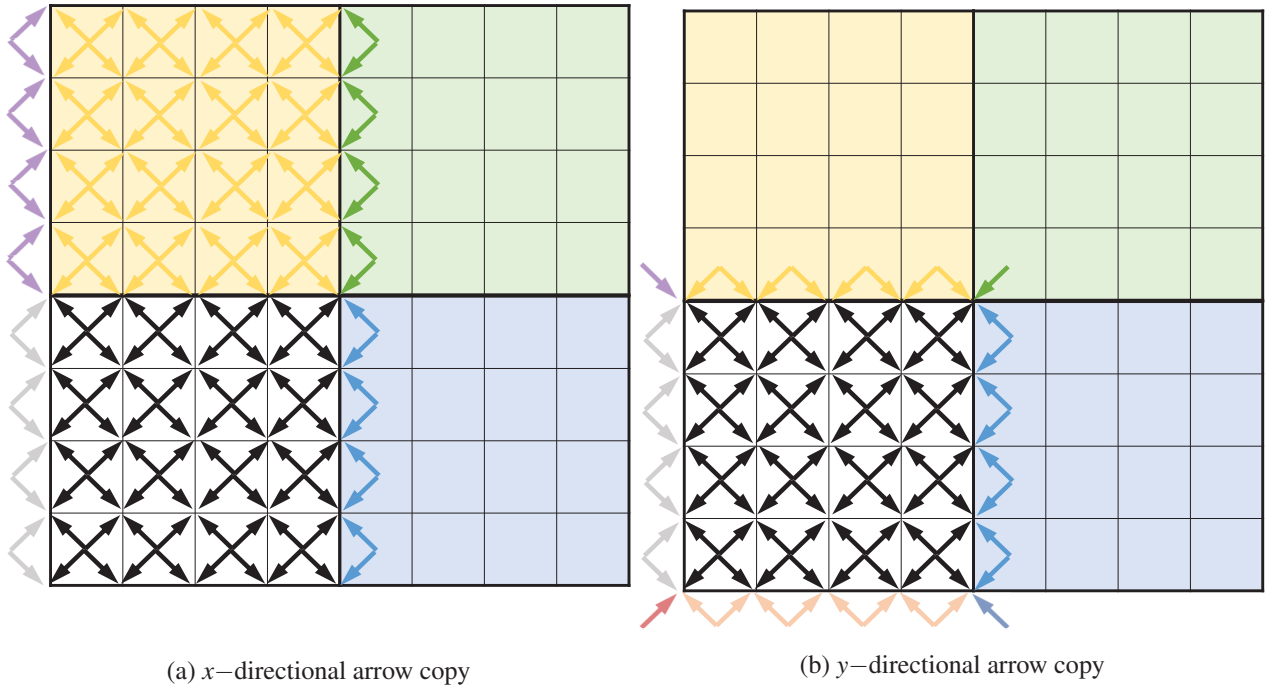


Fig.4.17: Arrow copy for cell-centered to node-centered variables

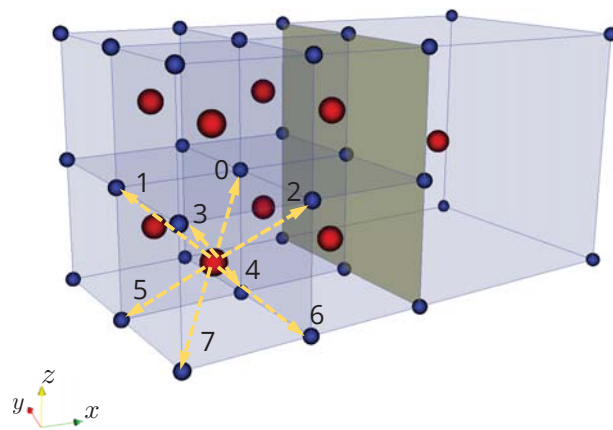


Fig.4.18: Arrow arrays to convert from cell-centered to node-centered variables for 3D

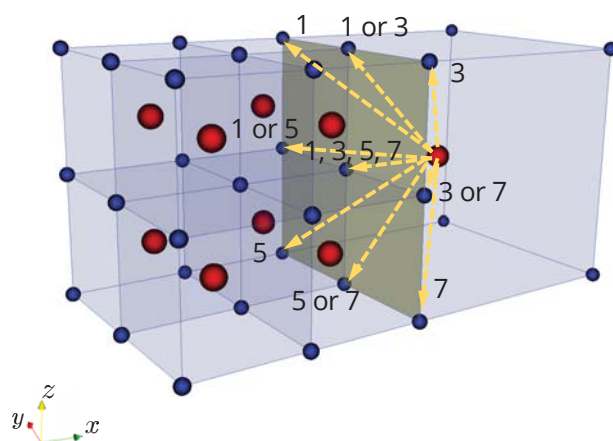


Fig.4.19: Arrow copy process at leaf boundary with coarse neighbour for 3D

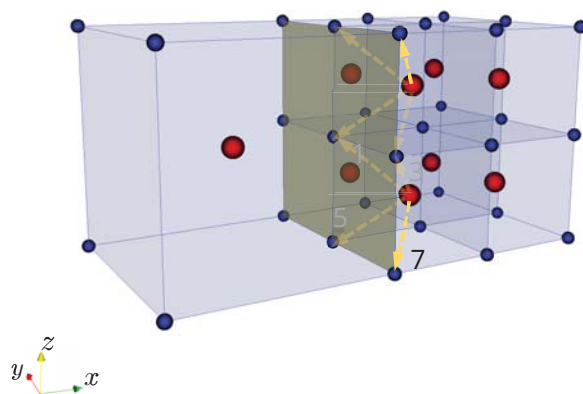


Fig.4.20: Arrow copy process at leaf boundary with fine neighbour for 3D

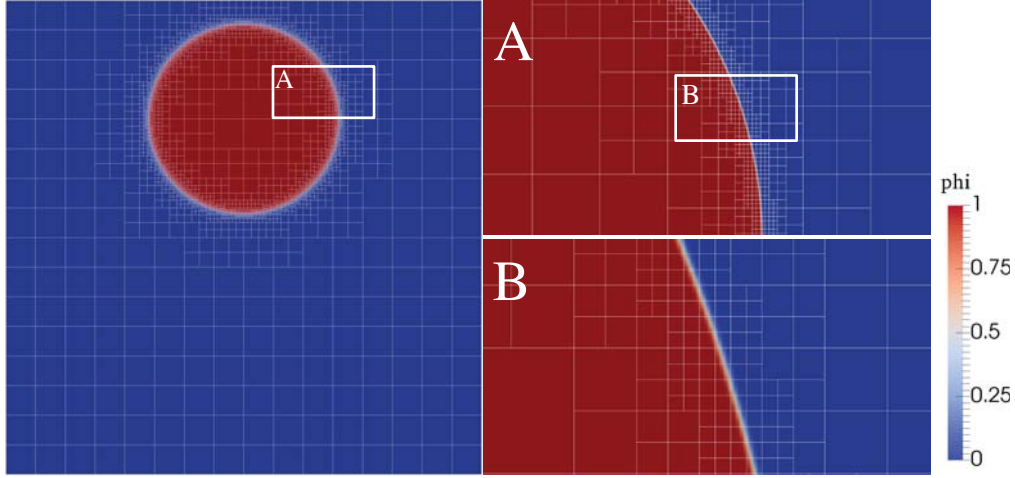


Fig.4.21: Color contour of the initial phase-field variable $\phi(t=0)$ with AMR method for the single vortex problem.

4.4 保存形マルチモーメント法および特性線解法による計算結果

4.4.1 Single vortex 界面移流計算

2.13.3 で説明した Single vortex 問題に GPU 実装の前段階として開発した CPU コードによる AMR 法を適用し、格子数削減と計算効率向上効果を確認める [101]. 格子解像度は、Fig. 4.21 に示すようにルート of 64×64 格子をレベル 0 とし、レベル差が 5 となるまでリーフの細分化を行う. 本計算では、リーフ内に 4×4 の格子を配置している. 即ち、最も細かい格子は計算領域全体に $2,048 \times 2,048$ 格子を用いた場合に相当する. Fig. 4.21 中の A,B は拡大図となっており、界面に細かく格子が集まっていることがわかる. Fig. 4.21 中の格子状の白線はリーフの境界線を表しており、白線で囲まれた各領域には 4×4 の格子が含まれている. Fig. 4.22 に $t = 0.0625T$ における Phase field 変数 (左図) と Level Set 関数のカラーマップ (右図) を示す. Fig. 4.22 の右図の中の黒い線は $\psi = 0$ の等高線であり、白線は $|\psi| = 0.05$ 毎に描いた等高線である. Level Set 関数の再初期化は 20 ステップごとに反復計算を 50 回行っている. 界面から離れた位置での Level Set 関数は十分な精度がないが、格子細分化の判定に利用しているだけなので界面形状の精度への影響はない. $t = T/2$ における界面形状を Fig. 4.23 に示す. (i) は黒い線でリーフの境界線のみを示した図となっており、(ii) は ϕ のカラーコンターを示している. 拡大した領域 A,B,C 中の白線はリーフの境界線を示しており、本手法によって動的に格子が界面近傍に集まっていることがわかる. また、Phase field 法では界面幅を一定に保つ効果が働くため、常に格子界面に対して非常に細かい格子を割り当てることができている.

$t = T$ における界面形状を解析解の界面等高線と共に Fig. 4.24 に示す. 白線はこれまでの図と同様にリーフ境界線を表している. 拡大しなければ見分けがつかないほどに界面の等高線が一致しており、界面に格子を集めることによって非常に高精度な移流計算が行えていることがわかる. 界面幅は Fig. 4.24 に

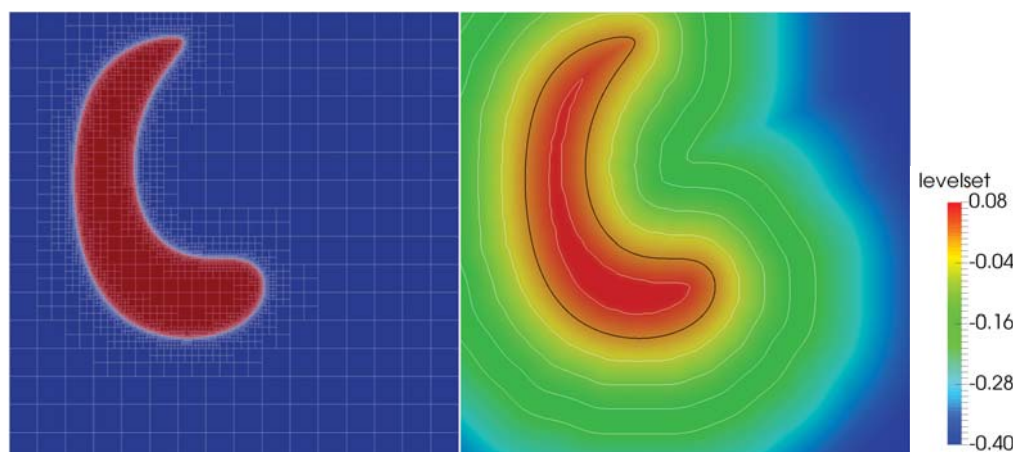


Fig.4.22: Level set function constructed from the phase-field variable($t = 0.0625T$) with AMR method for the single vortex problem.

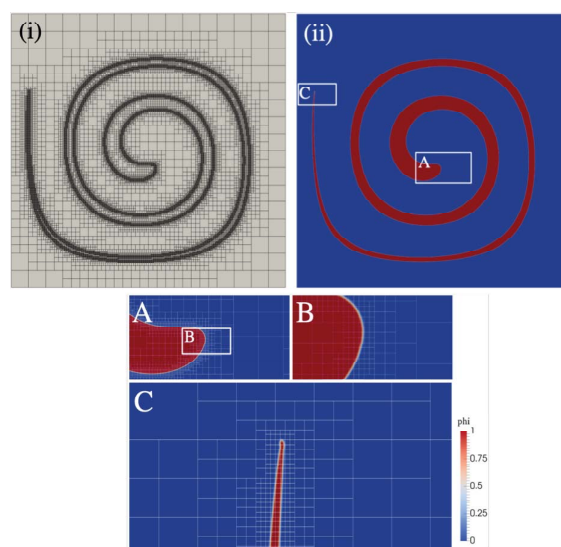


Fig.4.23: (i) Leaf lines adapted nearby the interface and (ii) Color contour of the phase-field variable $\phi(t = T/2)$ for the single vortex problem.

示すような二段階の拡大でようやく判別できるほどであり，マルチモーメント法を用いた本手法によってコンパクトで高精度な補間による AMR 法の計算ができていることを検証することができた。

格子点数削減による形状精度への影響

本手法でレベル 0 から 5 までレベル差をつけた場合， $t = 0.0$ で計算するリーフ数は 6,412 で，各リーフが 4×4 の格子を有しており，格子点数としては 5×5 となるので単純に計算すると 160,300 の格子点となる．実際の計算では，隣接するリーフとのレベル差がない場合に重複点は計算しない実装になっており，計算される総格子点数は 109,109 である．総格子点数は動的格子細分化によって時間と共に変化

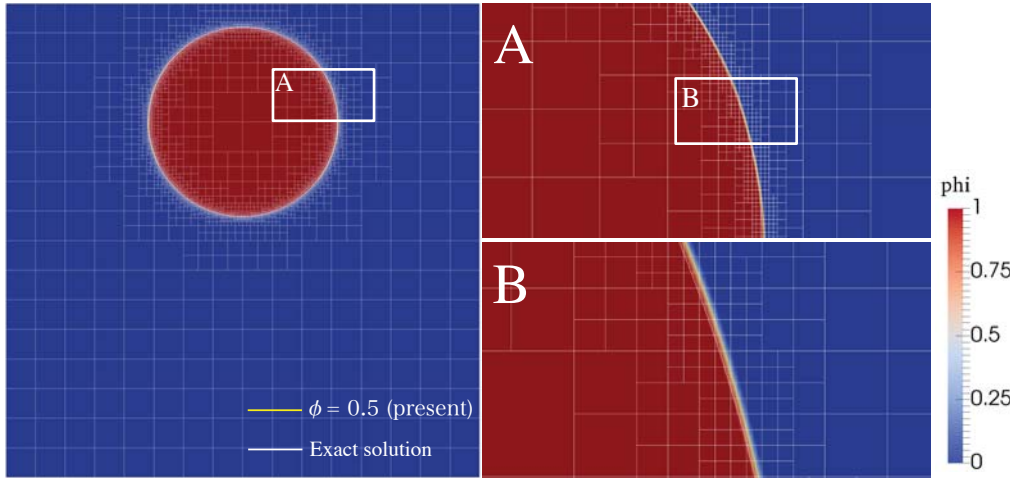


Fig.4.24: Color contour of the phase-field variable $\phi(t = T)$ with AMR method for the single vortex problem.

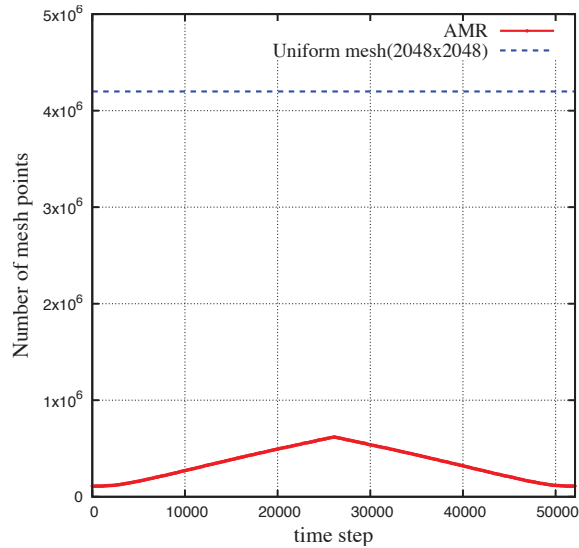


Fig.4.25: Time history of the total mesh number with AMR method for the single vortex problem.

する。Fig. 4.25 に総格子点数の時刻変化を赤の実線で示し、最も細かい格子幅で均一格子を用いて計算した場合の格子点数を青の点線で示す。界面近傍に細かい格子を集めることによって、計算領域全体を均一の格子で解像した場合と比較して大幅に格子点数を削減できていることがわかる。Single vortex 問題は、節 2.13.3 内の Fig. 2.32 で示した結果のように、十分な格子解像度がないと $t = T/2$ などでは界面の破断が生じる。このように界面近傍で格子解像度が必要とされる問題に対し、界面近傍に格子を集める手法が非常に効果的であり、均一格子を用いた場合と比べて非常に少ない格子点数で界面形状精度を向上させることができた。

Table 4.1: Computational times(CPU time) for AMR mesh and uniform mesh for the single vortex problem.

Mesh	CPU time from $t = 0$ to $t = T$ (sec)
AMR mesh	9,511.9
Uniform mesh (2,048 × 2,048)	88,058.4

4.4.2 格子点数削減による計算時間の短縮

レベル0から5まで格子細分化を行った Single vortex 問題に対して、計算領域全体に均一な $2,048 \times 2,048$ 格子を用いた場合と、本手法で格子点数を削減した場合の計算時間の比較を行う。Single vortex 問題で $t = 0.0$ から $t = T$ までの計算時間を計測した結果を Table 4.1 に示す。計算には東京工業大学のスーパーコンピュータである TSUBAME3.0 に搭載されている Intel® Xeon® CPU E5-2680 v4 2.4GHz を使い、OpenMP のスレッド数 28 で並列実行している。AMR 法の格子生成の時間やレベル差補間の時間があるため総格子点数に比例した計算時間の短縮とはならないが、AMR 法によって均一格子を用いた場合と比べて格子点数が $1/38.4$ に削減されている 100 ステップまでの計算では、21.9 倍の高速化がなされている。Fig. 4.25 に示すように、 $t = T/2$ に近づくと AMR 法を用いた場合の総格子点数が増加し、均一格子と比較して約 $1/6.8$ 程度の格子点数となる。平均では $1/12.3$ の格子点数となり、全体の計算時間では 9.26 倍の高速化を達成し、格子点数の削減によって計算時間の大幅な削減を行うことができた。

4.4.3 スプーンに衝突する流れの2次元計算

水道から流出する水をスプーンに衝突させると、スプーンの形状に沿って液膜が形成される。有限の格子幅で界面を再現する数値計算手法によって液膜を解像するためには、界面近傍に非常に多くの格子が必要となる。弱圧縮性気液二相流解析手法と AMR 法を組み合わせることによって、このような液膜を含む流れを効率的に行う。計算領域 0.16×0.04 m に Fig. 4.26 のように物体および水を配置し、重力加速度と同じ方向に水を 0.5 m/s で流入させる。気相および液相には 20°C の水と空気の物性値を用いる。Fig. 4.27($t = 0.0 - 0.08$ s) および Fig. 4.28($t = 0.10 - 0.20$ s) に示す計算結果の白線中に 4^2 の格子が含まれている。 $t = 0.02$ s 付近までに、水の先端が気流の影響でやや丸みを帯びながらスプーンに向けて落下後に形状に沿って薄い液膜が形成される。液膜先端は液膜の薄さと巻き込む気流に影響によって界面挙動は複雑となり、小さな液滴が生じる。 $t = 0.14$ s 付近で液膜は下端壁面に到達し、激しく巻き上げられる。 $t = 0.20$ s では非常に激しい流動と細かい液滴を伴う流れであるが、界面に沿って細かい格子が適切に追従していることがわかる。

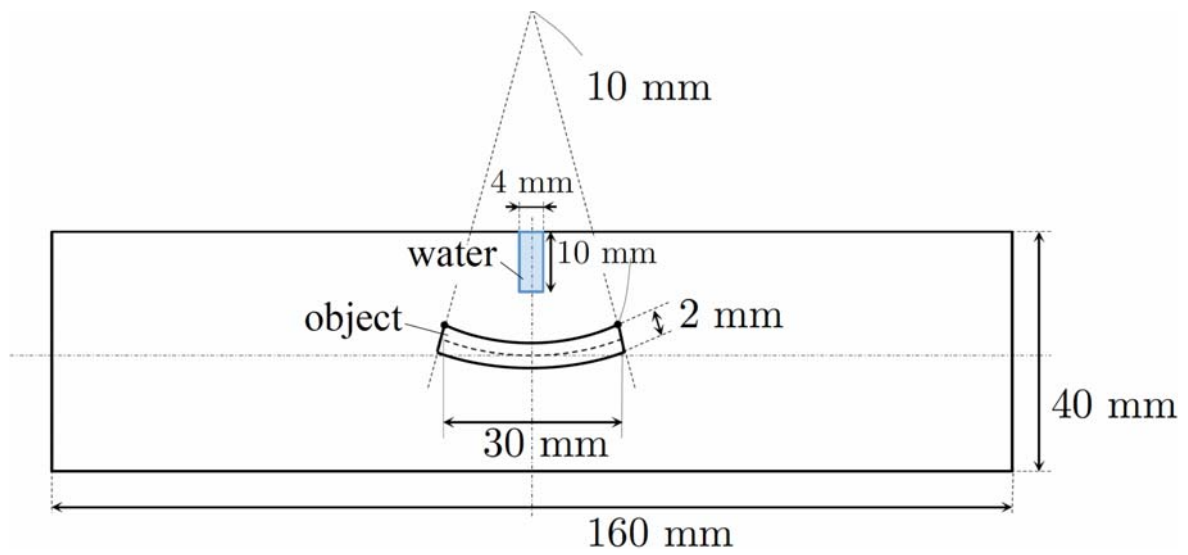


Fig.4.26: Initial setting of two-dimensional water flow against spoon problem

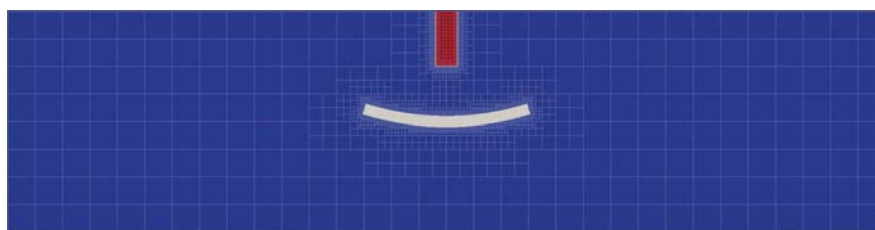
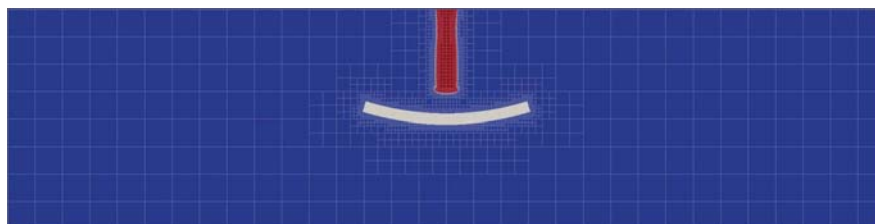
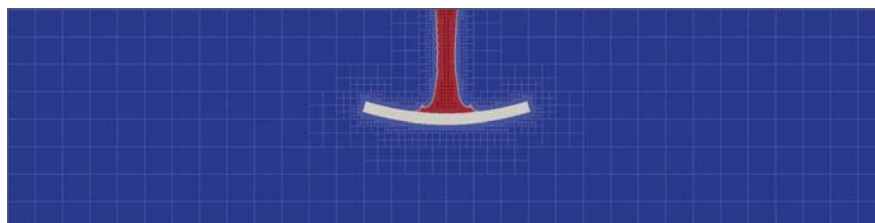
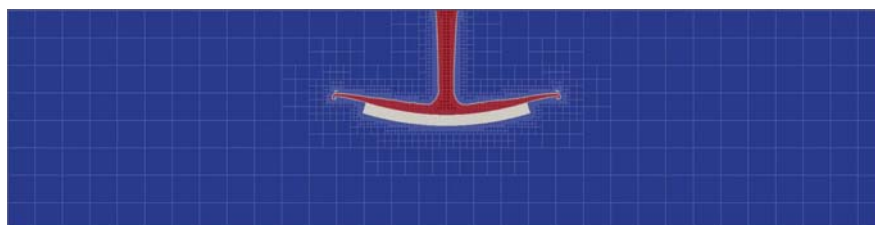
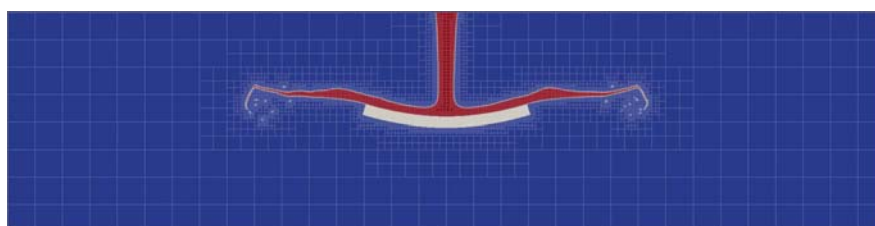
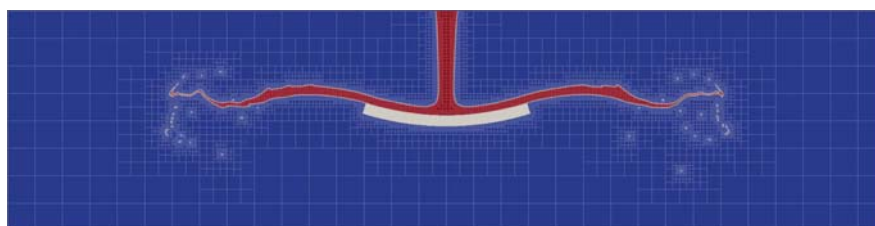
(a) $t = 0.00$ s(b) $t = 0.01$ s(c) $t = 0.02$ s(d) $t = 0.04$ s(e) $t = 0.06$ s(f) $t = 0.08$ s

Fig.4.27: Gas-liquid interface profile with leaf lines computed by characteristic method with AMR method for 2D flow impinging spoon problem

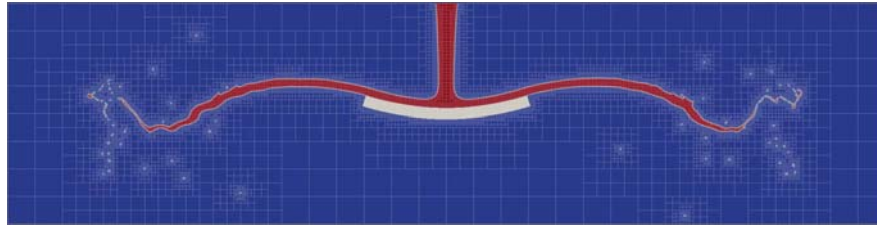
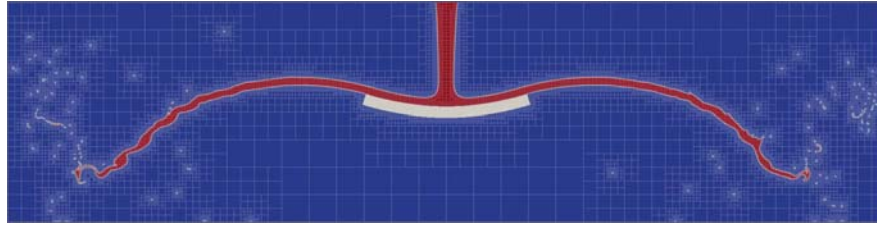
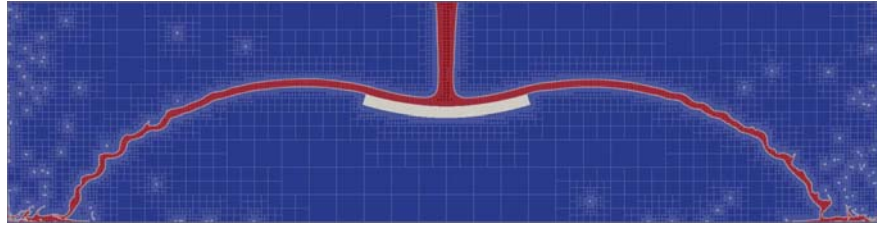
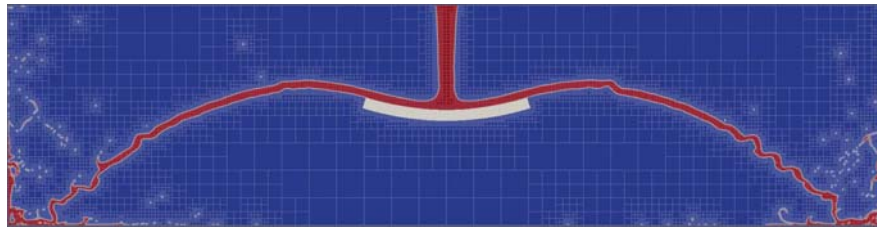
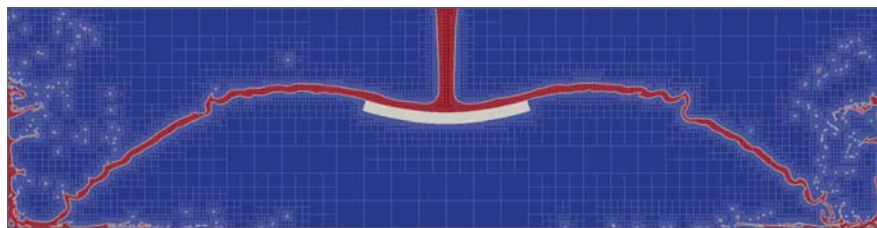
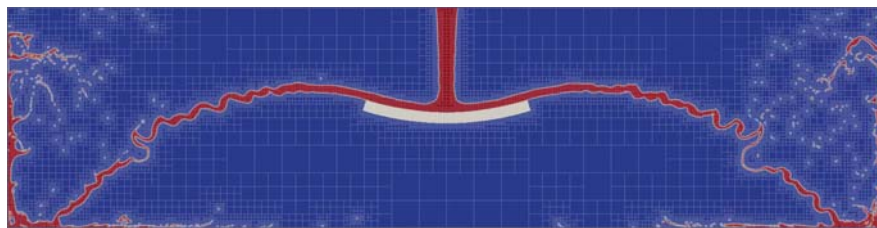
(a) $t = 0.10$ s(b) $t = 0.12$ s(c) $t = 0.14$ s(d) $t = 0.16$ s(e) $t = 0.18$ s(f) $t = 0.20$ s

Fig.4.28: Gas-liquid interface profile with leaf lines computed by characteristic method with AMR method for 2D flow impinging spoon problem(later time)

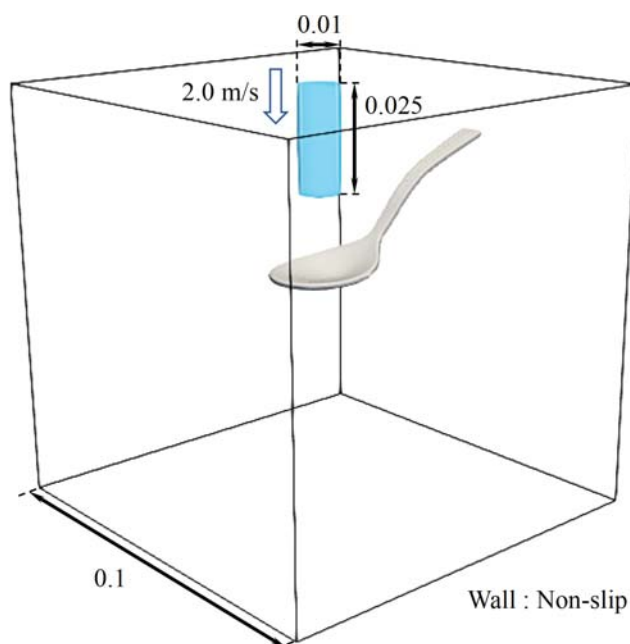


Fig.4.29: Initial setting of three-dimensional water flow against spoon problem

4.4.4 スプーンに衝突する流れの3次元計算

実際のスプーン形状データから生成した Level Set 関数を用いて計算空間上でスプーンを表現し、スプーンに衝突する水の流れ計算を行う。スプーンの湾曲した部分の横幅を代表長さに取り、 $Re = 25500$, $Fr = 4.61$ 程度となるように物性値を調整することで、実スケールの計算となるように設定した。Fig. 4.29 に示すように、計算領域は 1.0^3 m の流入部分以外が non-slip 壁に囲まれた立方体とする。初期条件として上面からスプーンの中央付近に向けて直径 0.1 m、長さ 0.025 m の水柱を設定し、 $t = 0$ s で鉛直下方向に流速 2.0 m/s を与える。時間的に連続に水を流入させるために、流入境界条件として水柱の上面境界上での鉛直下向きの流速が 2.0 m/s となるように流入境界条件を与える。Phase field 変数に対してはノイマン境界条件でも流入境界を満足させることができるが、計算領域内部の水のプロファイルに変形があると、変形された分が上面境界内部にコピーされ、円柱形状から遠のく恐れがあるため、初期条件として設定した円柱プロファイルを常に計算領域上面の境界に延長する形で固定して入れる。

計算によって得られた界面プロファイルとリーフ線を Fig. 4.30, Fig. 4.31 に示す。スプーン衝突前は、2次元計算と同様に気流の影響で水柱下面はやや丸みを帯びながら落下し、衝突後はスプーンの形状に沿って液膜が形成される。2次元と比較すると液膜は早い段階で崩壊し、液膜先端近傍は細かい水滴を伴いながら激しく流動している。スプーンの形状は軸対象ではなく、流れに3次元性が出ることによって流動は複雑性を増している。この問題は厚さ方向の長さが小さいスプーンに IBM で境界条件を入れるために格子解像度がある程度必要とされ、薄い液膜解像のためにも格子解像度が求められるが、計算領域に対する界面の占有率は小さく AMR 法が非常に効果的である。均一格子と比較した格子点数削減の効果

は Fig. 4.32 に示す通りで、水が計算領域横方向に十分広がった $t = 0.3$ s 付近でも均一と比較して 6.8% と、大幅な格子点数の削減に成功している。なお、AMR 適用時の格子点数は、リーフ数 N_{leaf} 、リーフ内の格子点数を 5^3 として、 $N_{\text{leaf}} \times 5^3$ から計算している。

4.5 等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く手法に AMR 法を導入した計算結果

4.5.1 乾いた床へ浸水するダム崩壊問題

検証問題としてよく解かれるダム崩壊問題を均一格子および AMR 法を適用した格子で解き、AMR 法の妥当性を検証する。ダム崩壊計算は多くの実験が行われており [79][102]、数値計算も数多くなされている [80][24]。本節では Hu らによる実験と条件を合わせ、初期水柱幅 $a = 0.2$ m、高さ $n^2a = 0.4$ m を計算領域 $0.8 \times 0.2 \times 0.6 \times \text{m}$ に、Fig. 4.33 に示すように配置する。物性値は 20°C の水と空気のものを使用し、代表流速 U は次のように、水柱の持つ位置エネルギーから見積もる。

$$U = \sqrt{gn^2a} \simeq 2.0 \text{ m/s}, \quad (4.5)$$

マッハ数 $Ma = 0.03 = \frac{U}{c_s}$ となるように設定するが、ダム崩壊問題のような激しい流動を含む流れでは液滴の一部が急激に加速され、マッハ数が大きくなる恐れがあるので、実際の流速の最大値から計算される最大マッハ数が 0.3 を超えた時、音速をあげることで $Ma \leq 0.3$ となるよう制限する。これによって一部の液滴が高マッハ数となることを防ぐ。

Fig. 4.34 に $t = 0.18$ s, 0.39 s, 0.52 s そして 0.99 s における界面挙動を示す。まず、弱圧縮性解法による結果 (Fig. 4.34b と Fig. 4.34d) は実験結果と比較して、全体的な界面挙動をよく捉えている。実験は水柱を $t = 0$ s まで崩壊させず保持するために仕切り板を用いており、重りの重力による加速を利用して仕切り板を引き上げている。そのため界面は仕切り板との粘性によって若干引っ張られており、その影響で界面挙動にわずかな差異が生じているものと考えられる。次に、時刻に関する変数 τ と T で以下のように正規化した浸水位置 X と水柱左壁面での高さ H の時刻歴を Fig. 4.35 に示す。

$$\begin{aligned} \tau &= t \sqrt{\frac{g}{a}}, & H &= \frac{h}{n^2a}, \\ T &= n\tau, & X &= \frac{x}{a}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

ここで h は $x = 0$ 壁面における有次元の水柱高さであり、 t は有次元時間である。本手法によって得られた無次元高さは、実験結果とよく一致している。浸水位置を見ると、シミュレーションの結果はわずかに実験より早い。過去の数値計算結果でも似た傾向が報告されている [80][24]。仕切り板の影響によって初期段階で界面が上に引き上げられているため、その影響であると考えられる。また、AMR 法を適用した計算結果は $x = L_x$ 壁面衝突後の液滴飛散など細かい挙動に差は生じているものの、均一格子の界面プロファイルをよく再現しており、浸水位置および水柱高さではほとんど差がない。以上より、ダム崩壊問題のような激しい流れ計算において、弱圧縮性ソルバーが実験結果をよく再現することと、AMR 法を適用した結果が均一格子を用いた結果をよく再現することが確かめられた。

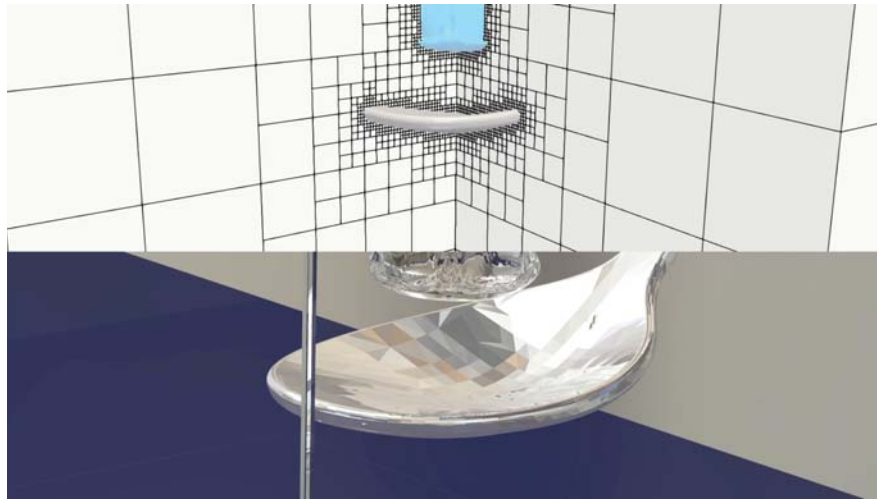
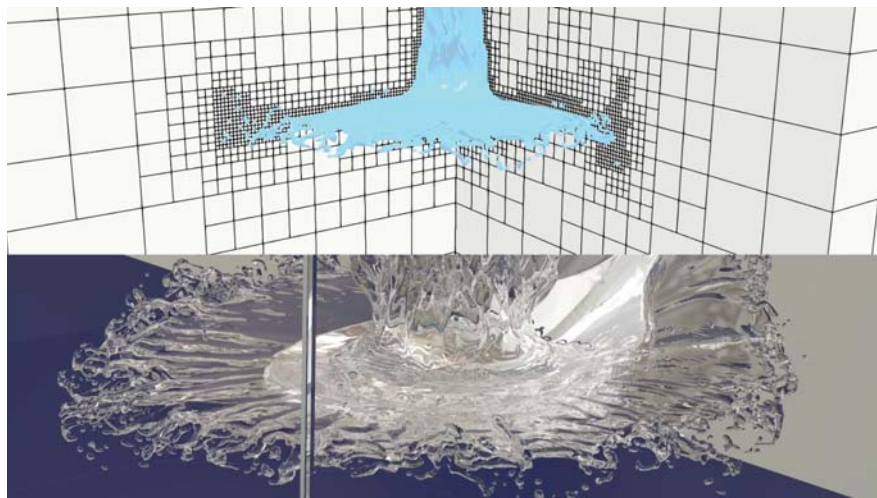
(a) $t = 0.80$ s(b) $t = 0.16$ s(c) $t = 0.24$ s

Fig.4.30: Gas-liquid interface profile with leaf lines and rendered view computed by characteristic method with AMR method for 3D flow impinging spoon problem

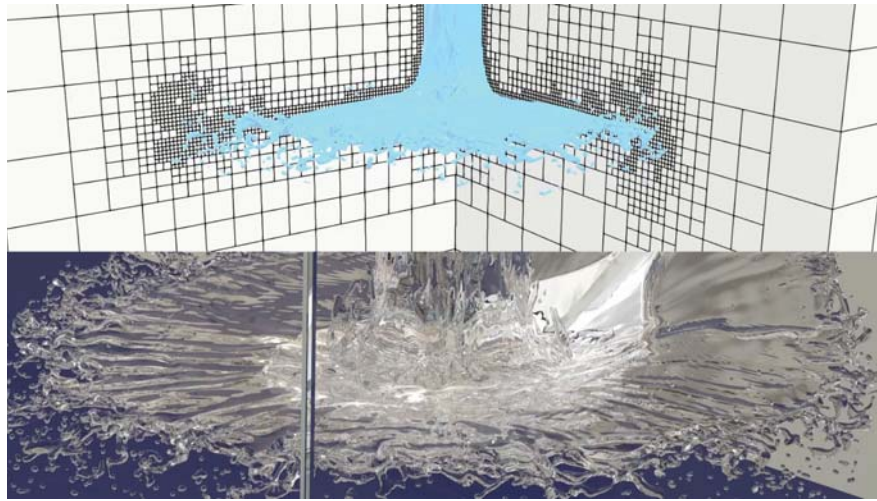
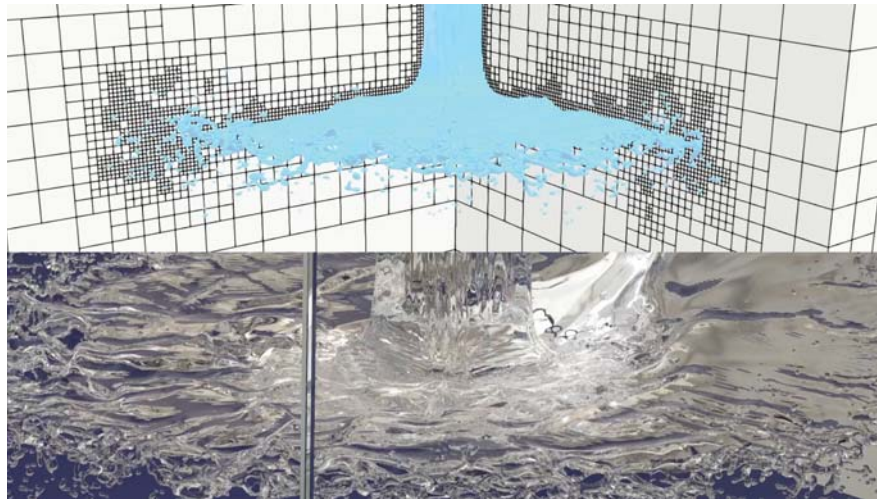
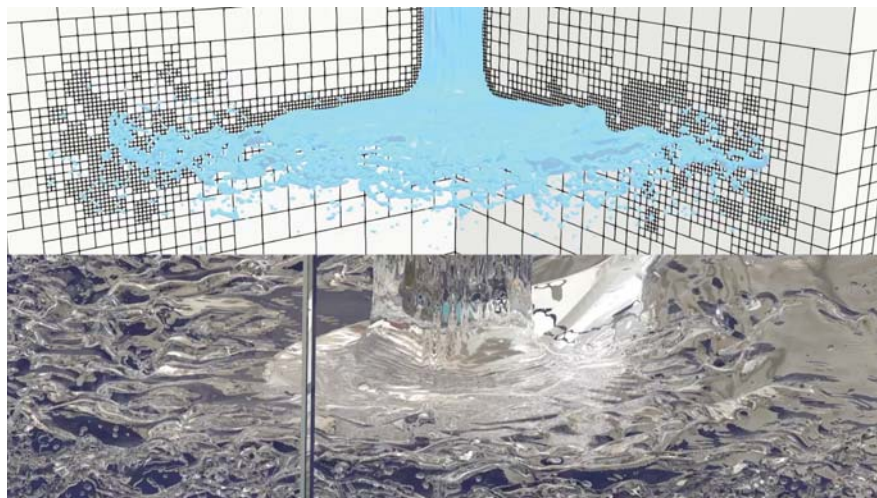
(a) $t = 0.28$ s(b) $t = 0.32$ s(c) $t = 0.36$ s

Fig.4.31: Gas-liquid interface profile with leaf lines and rendered view computed by characteristic method with AMR method for 3D flow impinging spoon problem(later time)

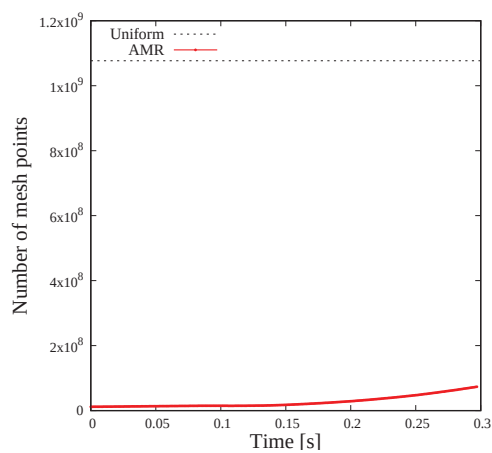


Fig.4.32: The time history of mesh points for the 3D flow impinging spoon problem

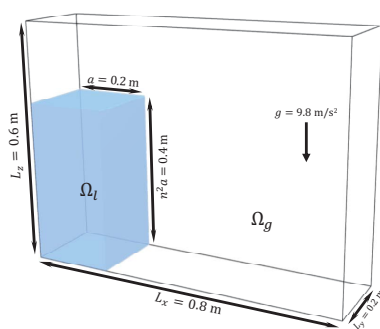
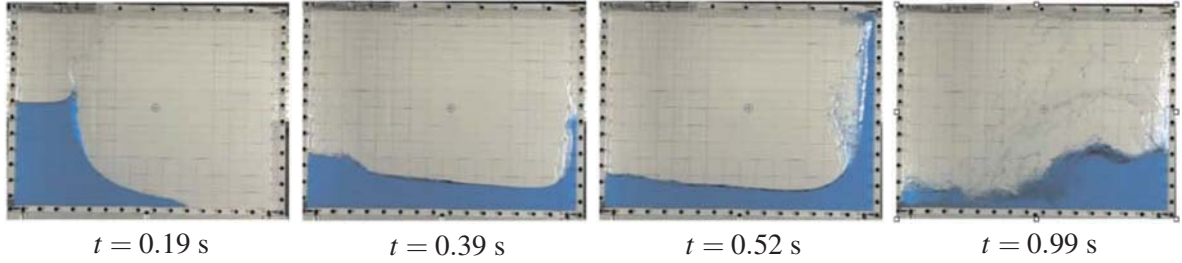
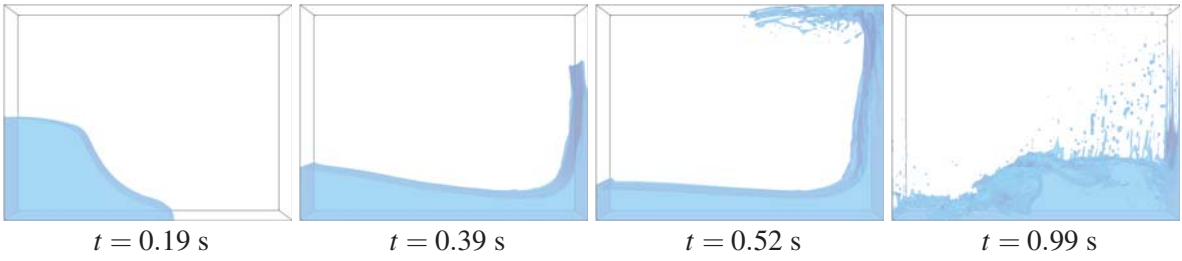


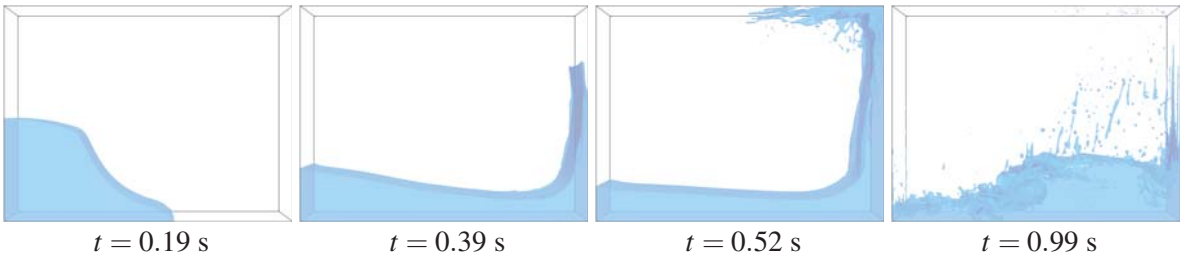
Fig.4.33: Initial setting of the three-dimensional dam breaking onto a dry floor problem.



(a) Experimental results by Hu and Sueyoshi[102]



(b) Simulation results by the weakly compressible scheme on Uniform mesh



(c) Simulation results by the weakly compressible scheme on AMR mesh

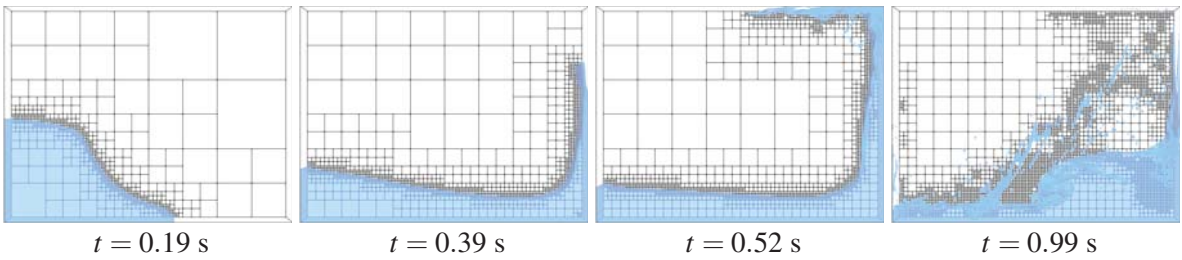
(d) Simulation results by the weakly compressible scheme on AMR mesh with leaf lines on $y = L_y/2$ sliced plane. Each leaf around four black lines has 4^3 meshes.

Fig.4.34: Evolution of water profile for three-dimensional dam breaking problem on a dry floor.

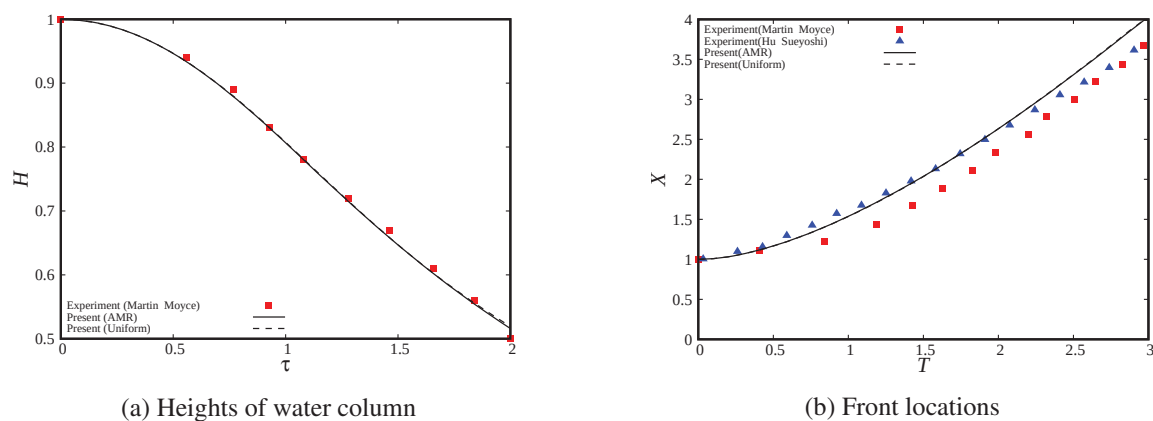


Fig.4.35: Comparisons of heights of water column and front locations of the weakly compressible solver with those of the experimental data[79][102].

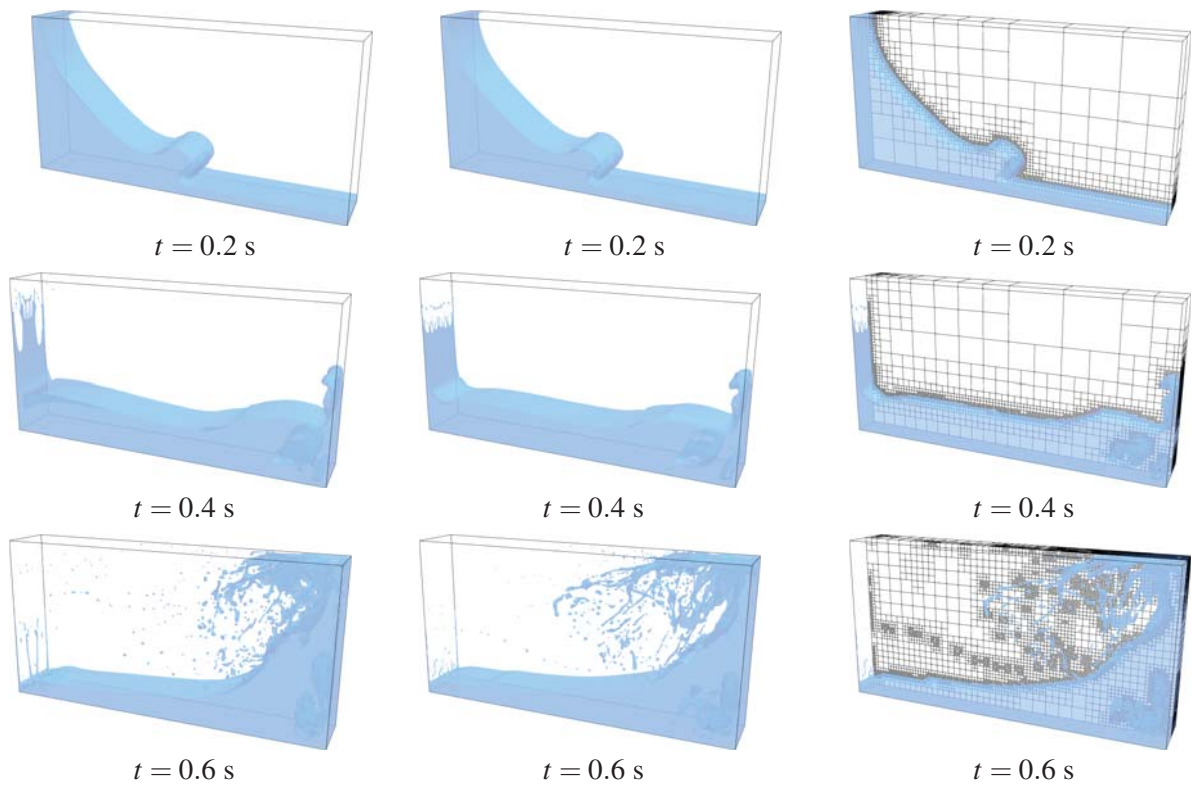
4.5.2 濡れた床へ浸水するダム崩壊問題

節 2.14.2 で説明した問題設定を用いる．マッハ数 Ma の設定に用いる代表流速は以下の通りである．

$$U = \sqrt{g(L_z)} \simeq 1.83 \text{ m/s.} \quad (4.7)$$

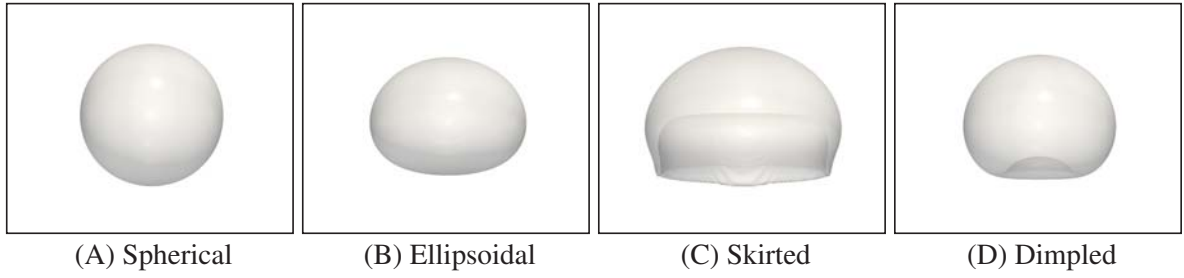
$Ma = 0.03 = \frac{U}{c_s}$ とするが， x 正方向境界に衝突後水は加速され，一部液滴や気相側の流速が非常に大きくなることもあるため， Ma 数が 0.3 を超えた時に音速をあげ，低マッハ数流れを担保する．

均一格子と，AMR 法を適用した格子を用いて得られた界面プロファイルを Fig. 4.36 に示す． $t = 0.3 \text{ s}$ までに波が成長し， $t = 0.4 \text{ s}$ で床上の水を巻き込みながら波が崩れる砕波が起こっている． $t = 0.5 \text{ s}$ で空気を巻き込みながら x 正方向の壁面に衝突し， $t = 0.6 \text{ s}$ で水は巻き上げられている．その後，多数の気泡や液滴が現れる．全体の流れの傾向は，過去の数値計算結果をよく再現している．陽解法では激しい流動を含む高レイノルズ数流れ計算を安定して行うことが困難とされているが，本手法では AMR 法を適用した場合でも安定に計算可能である．均一格子と AMR 法を適用した結果を比較すると，細かい液滴等の界面挙動に差が生じている．この問題では壁面に衝突後非常に激しい流れとなり，レベル差境界で速度勾配が急激に変化する可能性があり，レベル差補間精度が計算結果に影響を与える．高レイノルズ数の気液二相流計算では，わずかなパラメータ変化に対して細かい界面挙動は変化しうるため，レベル差補間を含む AMR 法で均一格子と完全に一致した結果を得ることは困難であるが，AMR 法適用によって少ない格子点数で細かい界面構造の解像を行うことには成功している．



(a) Simulation results by the present weakly compressible scheme on Uniform mesh (b) Simulation results by the weakly compressible scheme on AMR mesh (c) Simulation results by the present weakly compressible scheme on AMR mesh with leaf lines

Fig.4.36: The predicted time evolution of gas-liquid, obtained at $768 \times 128 \times 384$ uniform meshes and AMR mesh for the dam breaking problem onto wet floor.



(a) Simulation results by the weakly compressible scheme on uniform mesh

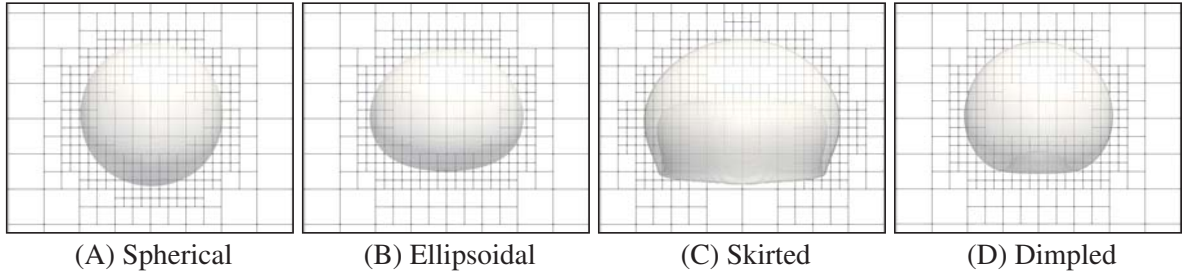
(b) Simulation results by the weakly compressible scheme on AMR mesh with leaf lines on $y = L_y/2$ sliced plane. Each leaf around four black lines has 4^3 meshes.

Fig.4.37: Computed shape of bubbles by present solver

4.5.3 3次元単一気泡上昇問題

節 2.13.4 で示した 3 次元単一気泡上昇問題を，等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く手法で均一格子および AMR 法を適用した格子で解く．計算条件はほとんど同様に，4 パターンの無次元数の組み合わせで計算し，気泡形状および気泡上昇速度から計算できる気泡レイノルズ数を比較する．

AMR 法を適用した格子の最も細かい格子幅を均一格子 $160 \times 160 \times 400$ に合わせる．代表速度は以下の通り算出して，マッハ数 $Ma = 0.03$ とする．

$$U = \sqrt{gL_z} \simeq 0.99 \text{ m/s}, \quad (4.8)$$

ここで L_z は z 方向の計算領域の長さである．

Fig. 4.37 に $\phi = 0.5$ 等値面を可視化したものを示す．本手法の結果は均一格子および AMR を適用した結果両者とも非圧縮性ソルバーで計算した気泡形状 [89] の特徴をよく捉えており，AMR 法の結果は均一格子の結果をよく再現している．4 ケースの気泡レイノルズ数を Table 4.2 に示す．気泡上昇速度から算出される気泡レイノルズ数も非圧縮性ソルバーおよび実験と近い値を得ており，AMR 法と均一格子でよく一致している．

Table4.2: Comparison of Re number of the rising bubble

	Grace (experiment)	Annaland (incompressible)	Present (uniform)	Present (AMR)
(A) Spherical	1.7	1.6	1.5	1.5
(B) Ellipsoidal	4.6	4.3	4.6	4.6
(C) Skirted	20	18	19.2	18.9
(D) Dimpled	1.5	1.7	1.76	1.74

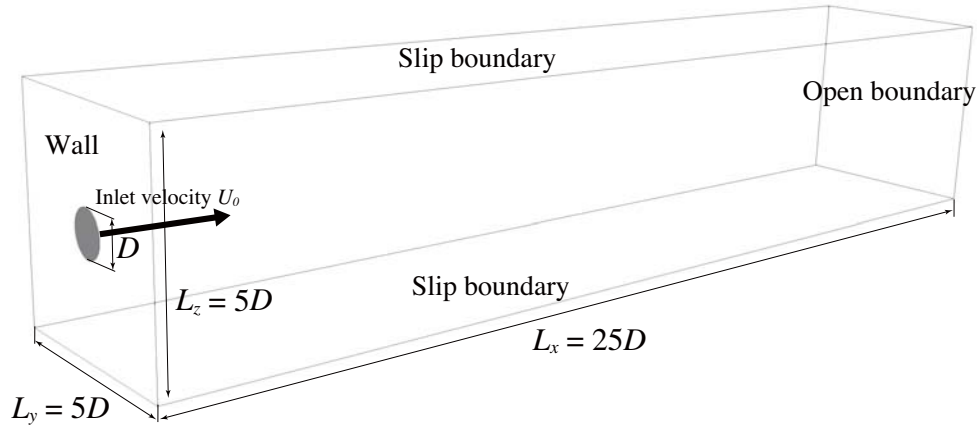


Fig.4.38: Initial setting of liquid jet breakup problem.

4.5.4 Liquid jet break up

本手法の効率および精度のさらなる検証のために、ジェット流れの問題を解く．先行研究として，非圧縮性ソルバーによる計算結果 [103] と，フィルターが施された cumulant LBM による計算 [12] が存在する．本手法の計算結果および計算時間に関する比較を行い，妥当性および計算効率を評価する．非圧縮性ソルバーを用いても，高密度比かつ高レイノルズ数の気液二相流大規模計算はチャレンジングな問題であり，陽解法では安定性も課題となりやすい．

Fig. 4.38 に計算の初期条件の概要図を示す．直径 $D = 0.0001$ m の円形の液相が境界面上で一定流速 U_0 となるように，計算領域に流入する．計算効率上昇と，メモリ使用量削減のために計算領域を 1/4 にした $L'_x \times L'_y \times L'_z = L_x \times L_y / 2 \times L_z / 2 = 25D \times 2.5D \times 2.5D$ のみで計算し， $y = L_y / 2$ と $z = L_z / 2$ 境界上では対称となるように境界条件を施す．非圧縮性ソルバーを用いた参考文献 [103] で行われている 4 ケースから一つを選択し，燃料と圧縮された空気を想定した物性値 $\rho_l = 848 \text{ kg/m}^3$, $\rho_g = 34.5 \text{ kg/m}^3$, $\mu_l = 2.87 \times 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$, $\mu_g = 1.97 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ を用いる．表面張力係数 $\sigma = 0.03 \text{ N/m}$ で，流入流速は $U_0 = 100 \text{ m/s}$ である．

レベル差 7 をつけた AMR 法を適用し，最細格子幅は $\Delta x = D/256$ となる．無次元時間を次のように

定義する.

$$t^* = t \frac{U_0}{D}. \quad (4.9)$$

Fig. 4.39 に本手法によって得られた $\phi = 0.5$ 等値面を示す. 流入した液相先端は Rayleigh-Taylor 不安定性によりマッシュルーム形状となっている. 流入が進むにつれて多くの液滴が先端から飛散し, 非常に細かい界面構造まで解像できている. $t^* = 13.6$ 後すぐに, 単一 GPU のメモリ制限から計算を続けることができなかつたため計算を終了している.

得られた界面形状について, 参考文献と比較したものを Fig. 4.40 に示す. 全体的な界面挙動はよくとられられているものの, 細かい構造には違いが生じている. 非圧縮性ソルバーによる結果 (Fig. 4.40a) は最も液滴の飛散が大きい. この原因として界面捕獲手法の違いと密度重み付け効果が考えられる. 本手法では保存形 Allen-Cahn 方程式を解くこと数値粘性で引き伸ばされた VOF 値の非物理的な剥がれを抑制することができており, 密度重み付けされた移流項の離散化を行うことで数値的 Kelvin-Helmholtz 不安定性を抑制する効果を持ち [104], 数値的な飛散を抑制することができていると考えられる.

次に Fig. 4.40b と比較すると, LBM による計算では陽解法での激しい流れ計算を安定化させるために高解像度計算ではフィルターを用いており, 流れ場が散逸的となって細かい界面構造が捉えきれていない欠点が存在する. 本手法では並列計算への適用性が高い陽解法の結果として LBM と比較しても, 界面をよりシャープにとられられており, 高い安定性を有し, 密度の空間変化を考慮した移流項の離散化が行えるという利点を持つと言える.

この問題は計算初期段階では計算領域全体に対する界面の割合が非常に小さく, AMR 法による格子点数削減効果が効きやすい問題である. 本手法による計算は $t^* = 13.6$ までの計算で Tesla V100 を 1 台用いて約 11 時間の計算時間を要した. 非圧縮性ソルバーの計算時間は, $t^* = 16$ までに 5760 cores の GPU を用いて 410 時間かかっている [103] ので, 同じ無次元時間までのコア時間は $5760 \times 410 \times 13.6 / 16 = 2007360$ となる. GPU と CPU の違いや, チューニングの有無等の差によって実行時間に差が出ることを考慮しても, 本手法が非常に効率的に計算できていることがわかる.

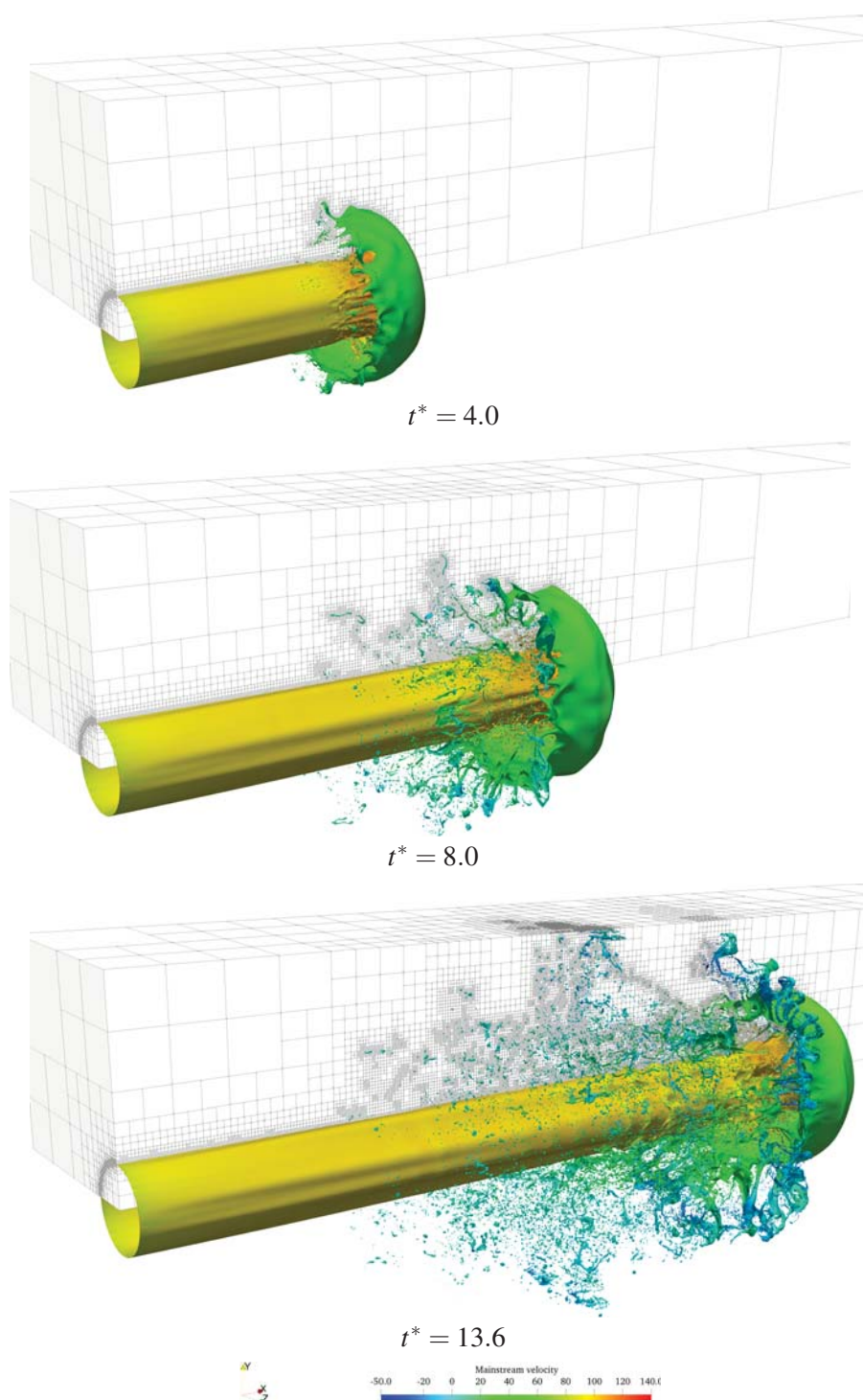
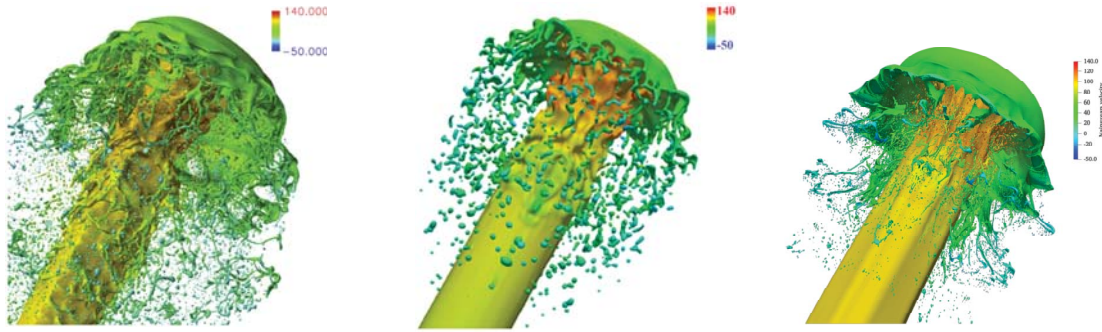


Fig.4.39: The predicted time evolution of gas-liquid interface with 7-level AMR method for the liquid jet breakup problem. Each leaf has 4^3 meshes and the width of finest mesh equals to $\Delta x = D/256$.



(a) Incompressible solver on uniform mesh[103] (b) Unfiltered cumulant LBM on uniform mesh[12] (c) Weakly compressible on AMR grid

Fig.4.40: The overall flow structure colored by mainstream velocity at $t^* = 7.19$. (a) is adapted from reference using incompressible solver on uniform mesh[103]($\Delta x = D/286$). (b) is our results($\Delta x = D/256$).

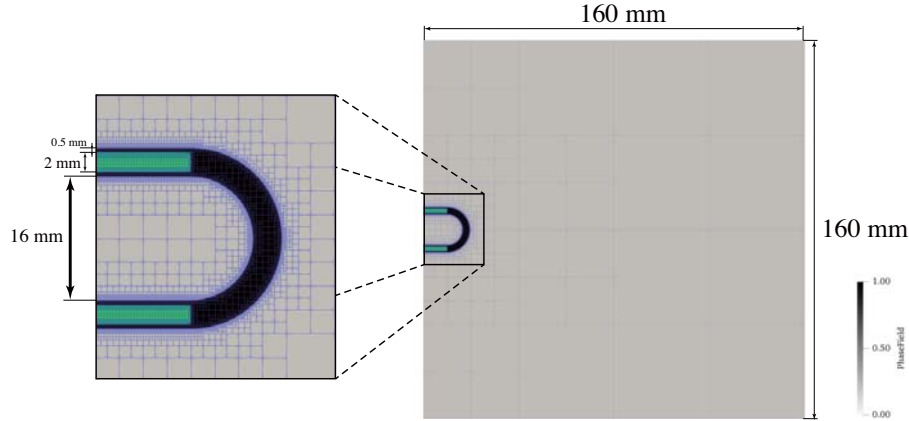


Fig.4.41: Initial setting of the two-dimensional soap bubble forming simulation.

Table4.3: Physical properties of two-dimensional bubble rising problem

ρ_l	ρ_g	μ_l	μ_g	g
1045.9	1.2	1.77×10^{-3}	1.8×10^{-5}	9.8

4.5.5 シャボン玉形成過程の 2 次元計算

シャボン玉の形成と崩壊は、我々が身近で目にすることができる液膜を含む複雑な流体现象である。シャボン玉が膨張するにつれて液膜は非常に薄くなり、有限幅を持つ界面幅を数格子で解像する必要がある拡散界面型の手法でこの現象を再現するためには、界面に対して非常に多くの格子が必要となり、挑戦的な問題となる。本手法は陽解法かつ AMR 法を含んでいるため、界面に対して高解像度を割り当てる計算が可能であるため、この問題を解く。

問題設定は Fig. 4.41 に示す通りである。物性値には Table 4.3 に示す 20% グリセリン水溶液と空気を仮定する。表面張力係数はシャボン液の表面活性剤の効果によって $\sigma = 0.02 \text{ N/m}$ となっていると仮定する [105]。流入流速は空間的・時間的な関数 $u_{\text{in}}(y, t)$ を $x = 0$ 壁面に分布させる。本計算では、ポアズイユ流れを空間的に与え、時間的には線形に加速させる。

$$u_{\text{in}}(y) = U \left(1 - \frac{(y - y_c)^2}{R^2} \right), \quad (4.10)$$

$$u_{\text{in}}(y, t) = \min \left(u_{\text{in}}(y) \frac{t}{t_{\text{ac}}}, u_{\text{in}}(y) \right)$$

ここで、 $U = 0.25 \text{ m/s}$ は空間および時間における最大流速で、 $y_c = 0.08$ はポアズイユ流れの中心座標、 $R = 0.008$ はポアズイユ流れの径でストローを模した物体形状に合わせて設定する。流入流速は時間的に $t_{\text{ac}} = 0.01 \text{ s}$ の加速時間で 0 m/s から $U = 0.25 \text{ m/s}$ まで加速される。

9 レベル差をつけた AMR 法を適用して得られた Phase field 変数のカラーコンターとリーフ線を Fig. 4.42 に示し、 $t = 5.0 \text{ s}$ における拡大図を Fig. 4.43 に示す。最細格子幅は 0.0195 mm で初期のシャ

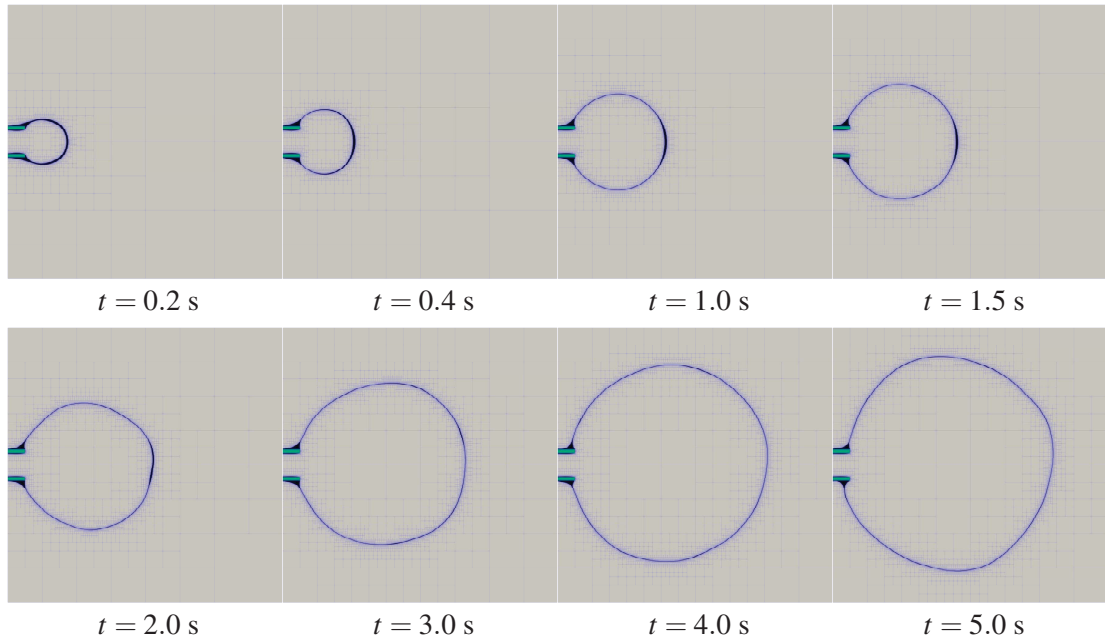


Fig.4.42: The profile of phase-field variables with leaf lines for the two-dimensional soap bubble forming simulation. Each leaf has 4^2 meshes.

ボン玉内径に対して 820 格子割り当てたような解像度に相当する。 $t = 5.0$ s まで非常に薄い液膜を解像することに成功している。シャボン玉は時間とともに膨張し、内側の面積は $t = 0$ s から $t = 5.0$ s までで 7.8 倍に膨張する。 Fig. 4.44 にシャボン玉先端および上端の変位時刻歴を示し、 Fig. 4.45 は変位の勾配を変位とサンプリングした時間刻み幅から求めたものである。 $t \sim 1$ s までは、膨張過程は x 方向と y 方向交互に繰り返される。 x 方向の膨張は流入してくる気流によって起こり、その後表面張力によって界面は円形に近づこうとし、 y 方向の膨張が起こる。 $t = 1.0$ s からの膨張は、シャボン玉面積が大きく流入してくる気流が液膜に達するまでに散逸し、膨張は不規則となる。流入してくる気流による x 方向に大きい流速と表面張力による作用で振動しながら膨張していく。液膜上の速度場を観察すると、 x 正方向の大きさは常に小さく、ストローを模した物体からの液体供給は少ない。そのため、液膜は時間とともに薄くなっていき、大きく膨張したシャボン玉を解像するためには非常に多くの格子が必要となる。

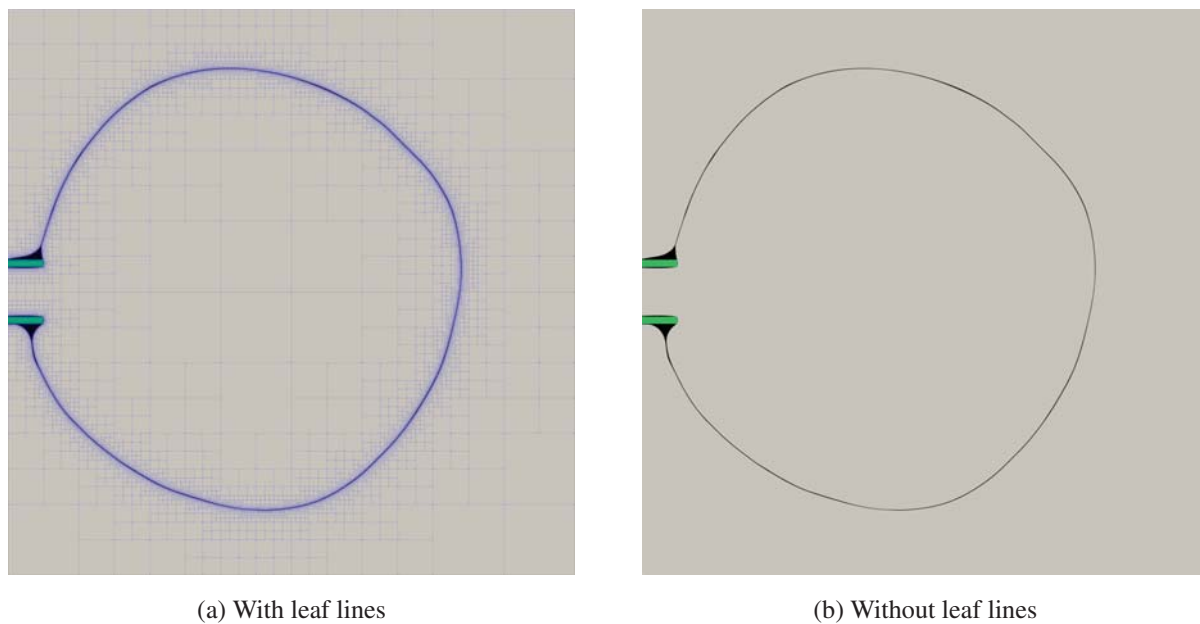
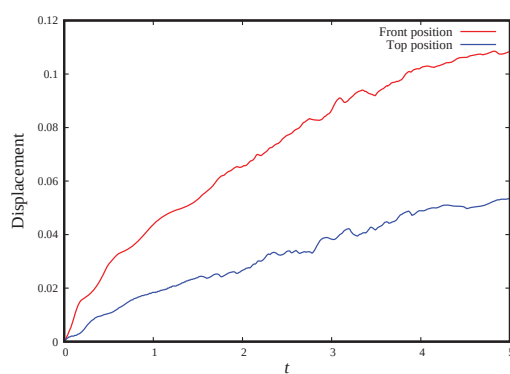
Fig.4.43: Enlarged views of the phase-field profile at $t = 5.0$ s.

Fig.4.44: Time history of displacement of the front and top position of liquid film.

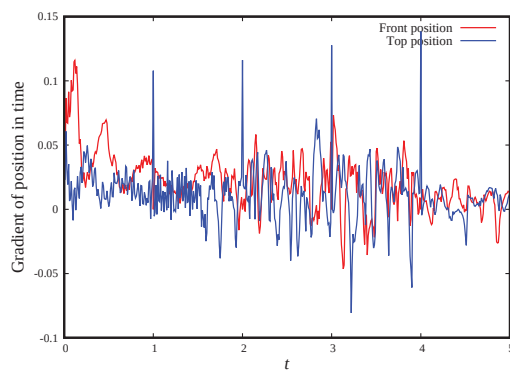


Fig.4.45: Time history of the gradient of front and top position of liquid film.

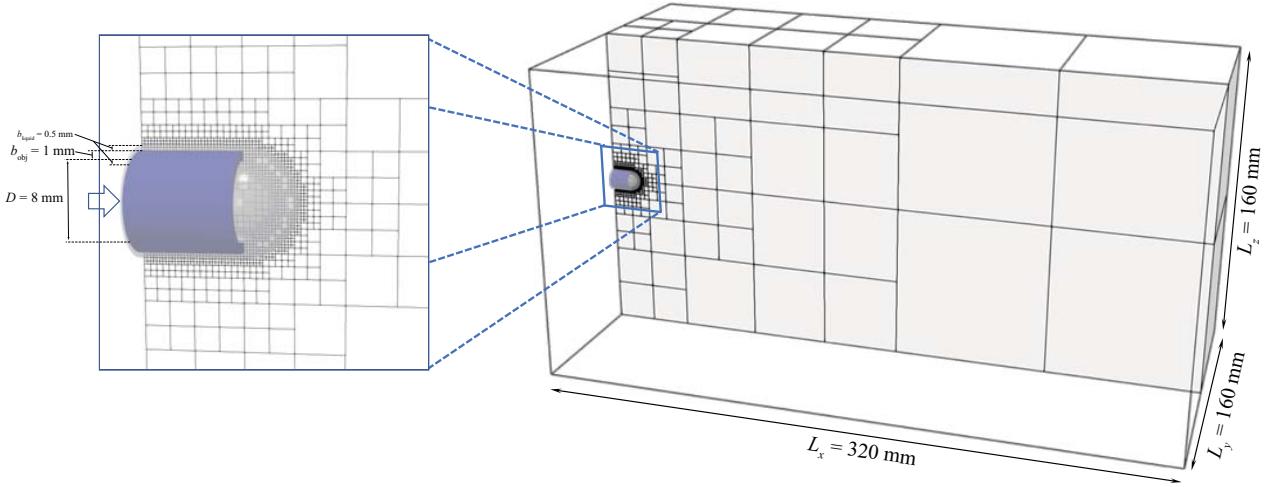


Fig.4.46: Initial setting of the soap bubble forming simulation.

4.5.6 シャボン玉形成過程の3次元計算

前節の2次元計算を3次元に拡張する．問題設定は Fig. 4.46 に示す通りで，境界の影響排除のために大きめの領域を取っている．最細格子幅は 0.07825 mm で，仮に同じ解像度の格子を均一に用いると $4096 \times 2048 \times 2048$ 格子必要となる．界面活性効果によって表面張力係数が減少した場合を想定して， $\sigma = 0.02 \text{ N/m}$, $\sigma = 0.001 \text{ N/m}$ の2ケースを計算し，表面張力による影響を調べる．流入流速は時空間的に分布を持つ $u_{\text{in}}(r, t)$ を $x = 0$ の yz 平面に適用する．2次元計算と同様にポアズイユ流れを仮定して次のように与える．

$$\begin{aligned}
 u_{\text{in}}(r) &= U \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right), \\
 u_{\text{in}}(r, t) &= \min \left(u_{\text{in}}(r) \frac{t}{t_{\text{ac}}}, u_{\text{in}}(r) \right) \\
 r(y, z) &= \sqrt{(y - y_c)^2 + (z - z_c)^2},
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

ここで最大流速 $U = 0.25 \text{ m/s}$ ，ポアズイユ流れの中心座標 $(y_c, z_c) = (0.08, 0.08)$ ，ポアズイユ流れの径 $R = 0.004$ とし，加速時間は $t_{\text{ac}} = 0.01 \text{ s}$ とする．

$\phi = 0.5$ 等値面を主流方向速度の大きさに色付けしたものを Fig. 4.47($\sigma = 0.02 \text{ N/m}$) と Fig. 4.48($\sigma = 0.001 \text{ N/m}$) に示す．シャボン玉は時間とともに膨張し，球形の液膜が成長する様子がわかる．表面張力が小さい計算では液膜崩壊の時刻が遅れており，表面張力が液膜形成崩壊に与える影響が大きいことがわかる．GPU 計算と AMR 法を適用することで高解像度格子を界面に割り当てることができたが，2次元計算の結果と乖離が大きく，格子解像度不足が考えられる．さらなる高解像度には実装することが容易ではない効率的な複数 GPU 実装が求められる．

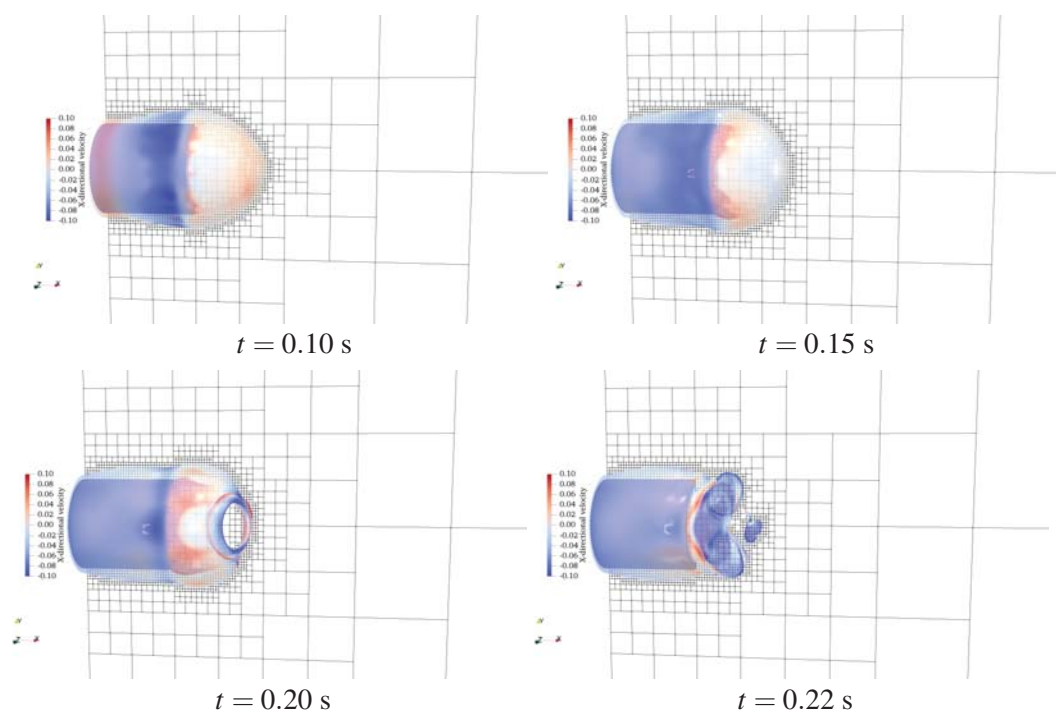


Fig.4.47: The predicted time evolution of gas-liquid with 9-level AMR method for the soap bubble forming simulation, where $\sigma = 0.02 \text{ N/m}$.

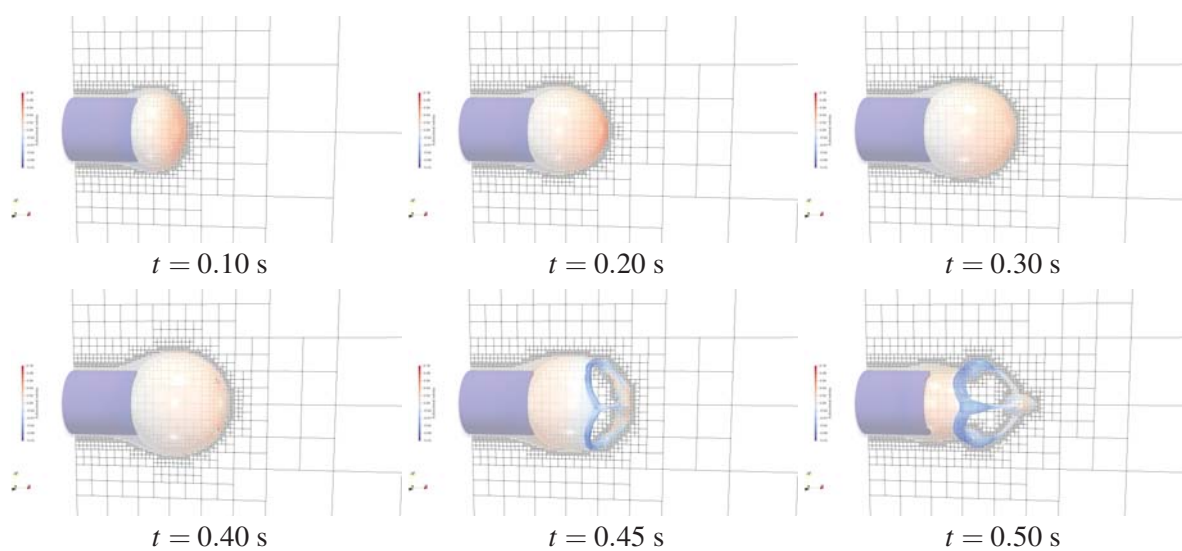


Fig.4.48: The predicted time evolution of gas-liquid with 9-level AMR method for the soap bubble forming simulation, where $\sigma = 0.001 \text{ N/m}$.

4.5.7 液面上で液膜を形成する気泡上昇計算

液体中を上昇する気泡形状についての実験，数値計算は数多く行われているが，DIM を用いた液面へ衝突して液膜を形成する気泡上昇計算は見られない．有限厚さで界面を解像する DIM では，非常に薄い液膜を解像するために高解像度計算が必須となる．本手法を用いて 8 レベル差つけた AMR 法を適用し，直径 $D = 0.3$ cm の球状の気泡に対して最細格子約 307 格子を割り当てて計算する．最細格子の解像度で均一格子を用いた場合， $1024 \times 1024 \times 2048$ 格子に相当する．計算領域 $1.0 \times 1.0 \times 2.0$ cm 中の $z = 1.0$ cm に液面を設定し，初期気泡中心座標 $(x_c, y_c, z_c) = (0.5, 0.5, 0.5)$ cm に設定する．物性値には空気と，シャボン液を想定した 20% グリセリン水溶液を用いる．

AMR のリーフ線と $\phi = 0.5$ 等値面を示した図と，リアリスティックに可視化した画像を Fig. 4.50 に示す．気泡上昇後， $t = 0.50$ ms まで液膜を形成しながら気泡が上昇し続ける．その後，気泡は跳ね返るようにして下降し，再び上昇し， $t = 0.70$ ms で非常に薄い液膜を形成する． $t = 0.80$ ms では液膜を維持するが，その後 $t = 0.90$ のように液膜は崩壊する．高解像度格子を界面に割り当てることによって，液面での気泡の跳ね返りおよび液膜形成が再現できた．仮に一段粗い 7 レベル差の格子を用いると気泡が最初に液面に衝突する段階で液膜は崩壊し，気泡の跳ね返りが再現できない．このように，薄い液膜を含む計算には多くの格子が必要となることがわかる．本計算では液膜の維持をある程度再現できたが，現実世界で見られるような液膜の長時間安定維持のためには界面活性剤の効果などさらなる物理モデルの導入が必要であると考えられる．

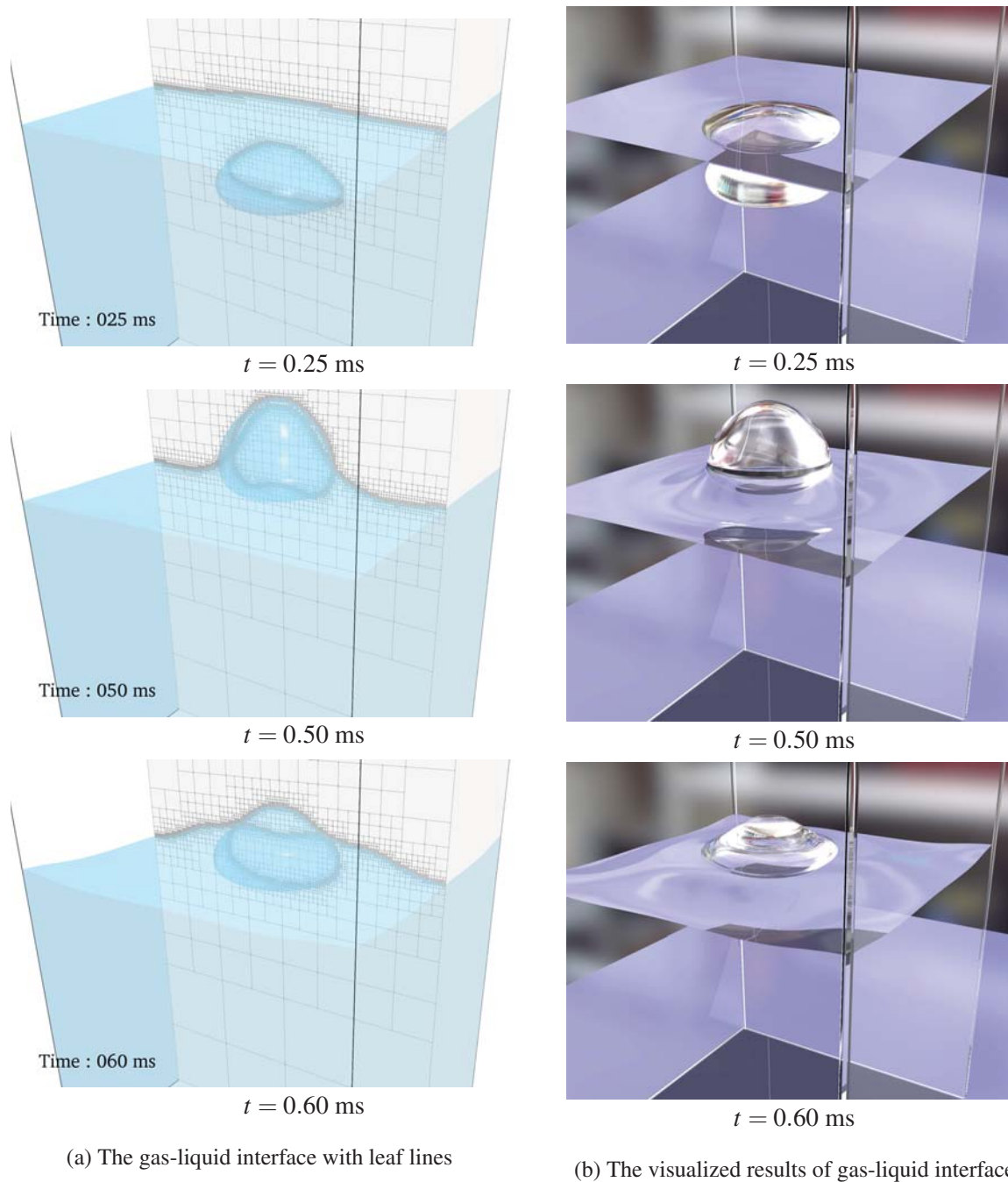
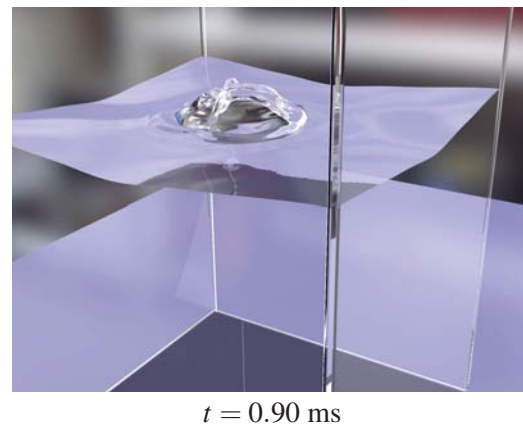
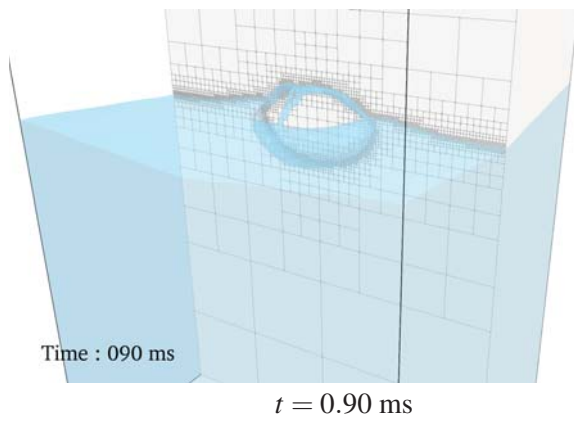
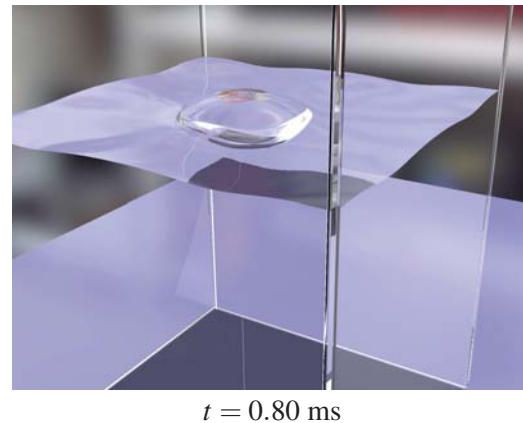
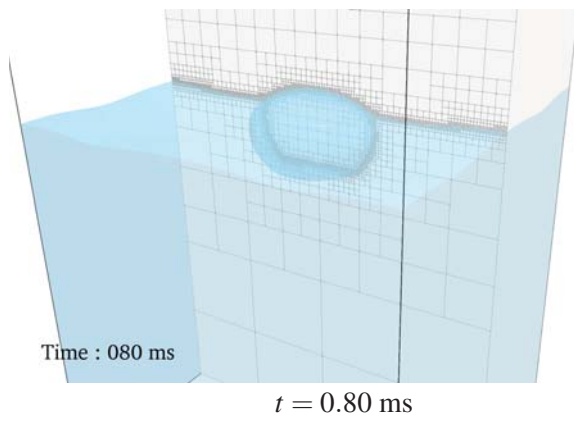
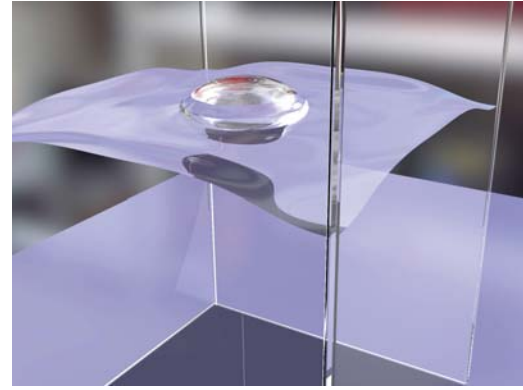
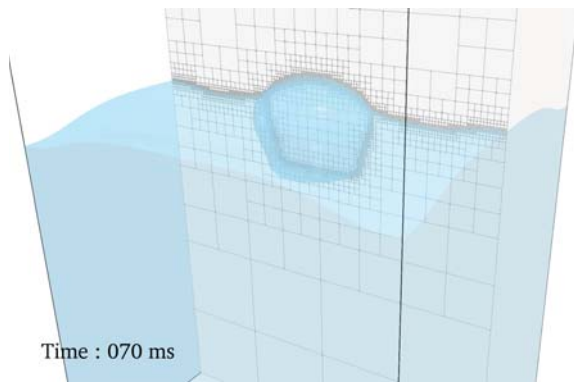


Fig.4.49: The predicted time evolution of gas-liquid interface with 8-level AMR method for the bubble colliding with the liquid surface problem.



(a) The gas-liquid interface with leaf lines

(b) The visualized results of gas-liquid interface

Fig.4.50: The predicted time evolution of gas-liquid interface with 8-level AMR method for the bubble colliding with the liquid surface problem (later time).

4.6 界面に適合する AMR 法のまとめ

本章では、AMR 法の実装、検証および応用計算の結果について述べた。界面からの符号付き距離関数を基準値として動的に界面に適合する AMR 法を開発し、頻繁に繰り返される格子の細分化・粗大化に対応するためにツリー型のデータ構造を用いた。ツリーが管理する単位領域はブロック状の決まった格子点数の直交格子とし、メモリアクセスが連続になるので、GPU で効率的に計算可能である。冗長な実装では、格子の細分化・粗大化のたびにメモリの確保・解放を行う必要があるが、`cudaMalloc` や `cudaFree` は低速であり、それらを頻繁に行うことは現実的ではない。そこであらかじめ余分にメモリを確保した配列状のメモリ・プールのデータ構造を用い、細分化・粗大化の際には使用するメモリを付け替えるようにした。虫食い状態になるメモリプールに対してデフラグメンテーションまでコード側で行うことでメモリ使用量の肥大化を防ぎ、メモリの確保・解放の頻度を下げることで効率を上げた。

隣接点とレベル差がある場合や、新たに格子を細分化・粗大化する際に必要となるレベル差補間では、ノード中心の値に対しては閉じたリーフ内で線形補間を行い、セル中心の値は近傍点をコピーする。保存形マルチモーメントでは、閉じたリーフ内で 3 次精度の補間値を構築することができ、コンパクトな領域で高精度なレベル差補間が可能となった。

検証計算として、界面移流ベンチマーク問題を解き、保存形マルチモーメント法を用いた AMR コードが均一格子と比較して時間平均 $1/12.3$ の格子点数削減に対して 9.26 倍の高速化を達成した。気液二相流計算へ拡張し、3 次元ダム崩壊計算、3 次元気法上昇問題を解いて、AMR 法が均一格子の結果をよく再現することが確認でき、弱圧縮性気液二相流と AMR 法を用いて精度を保ちながら大幅な格子点数削減が可能であることが示された。

浅い水面を設定したダム崩壊計算では、均一格子の結果と AMR 法を適用した結果で若干の差異が見られ、高レイノルズ数の激しい気液二相流計算で均一の結果を完璧に再現することは難しいことが示されたものの、高解像度格子によって細かい界面構造を表現することができ、AMR の効果は高いと言える。Jet flow の気液二相流計算では、既往研究の均一格子を用いた非圧縮性ソルバーで 2007360 コア時間かかっていた計算を 1GPU でわずか 11 時間で実行することができ、CPU と GPU の差や計算機性能の違いはあるものの、本ソルバーが気液二相流を高速に計算可能であることが示された。AMR 法が有効な流れとして、薄い液体自由膜を含む流れを計算し、2 次元シャボン玉形成過程のシミュレーションでは、非常に薄い液膜を形成しながら初期直径の 7.8 倍まで膨張する過程の計算に成功した。3 次元計算では本ソルバーを用いてもまだ格子解像度の不足が考えられ、複数 GPU 実装が必要であると考えられる。液膜を含む計算では、冗長に差分式を解いて曲率を評価すると、Level Set 関数が谷となる近傍で深刻な誤差が生じる。そこで Level Set 関数の質を評価する関数を導入し、質が悪い格子点の曲率を計算に使わずに、代わりに近傍の質の最も良い曲率を用いることで、大きな誤差を含む曲率が計算に用いられることを防ぎ、液膜の曲率計算による数値的崩壊要因を排除した。液面で液膜を形成する気泡上昇計算では、粗い格子では再現できなかった液膜形成後の気泡の跳ね返りを再現することができたものの、現実世界で見られるような液膜の長時間安定維持を再現することは困難であり、さらなる高解像度化および界面活性剤の効果の考慮などの物理モデルの改良が必要であると考えられる。

第 5 章

FENE-CR モデルの導入による粘弾性流体解析

本章では、FENE-CR モデルによる粘弾性流体解析手法の説明を述べる。AMR 法による格子点数削減効果が非常に効果的であるシャボン玉のような気-液-気の界面状態を保つ液体自由膜を含む流れ計算を行い、液膜安定化に対して粘弾性効果がどのように作用するか考察する。

5.1 粘弾性流体の分類

粘弾性流体とは、粘性と弾性両方の性質を持つ流体で、融解したゴムやプラスチックなどが具体例として挙げられる。ニュートン性流体ではないという広義の意味からすれば、非ニュートン性流体の一種と言える。ニュートンの粘性法則によって歪みと応力が関係づけられ、Navier-Stokes 方程式に応力テンソルとして考慮されるニュートン性流体は、単一の種類の流体中では粘性が一定で低分子の流体をよく表現する理想的な流体である。ニュートン流体では、粘性応力は歪み速度に比例し、弾性は考慮されない。非ニュートン性流体の粘性応力を評価するためには、ニュートン性流体で線形的な関係となる応力と歪み速度の関係や、ニュートン性流体では一定となる粘度の歪み速度に対する関係をモデル化する必要がある。

まず粘性特性による非ニュートン性流体の区分を以下で述べる。擬塑性流体はせん断速度をあげると粘度が低下する流体で、Fig. 5.1 中の Pseudo-plastic Fluid で示すような特性を示す。これは例えば塗料やマヨネーズのような流体で、せん断速度が大きいような場合には流動性がよくなって容器からの噴出はスムーズだが、物体に付着後せん断速度が低下すると粘性が大きくなる。逆に、せん断速度上昇に伴って粘度が上がるような特性を示す流体はダイラタント流体と呼ばれ、Fig. 5.1 中の Dilatant Fluid で示すような特性を示す。現実世界で見られる例としては、片栗粉を水に溶いた流体が挙げられる。急激な変形に対しては固体的性質を示し、低速のせん断速度に対しては流動性を示す。その他にも、一定の応力に達しないと流動しないビンガム流体も存在する。

弾性とは応力が加えられた時に生じる変形が、応力が取り除かれた際に戻ろうとする性質のことであり、理想的な固体はフックの法則に従う弾性を持ち、応力が歪みに比例する。粘弾性流体では、弾性的

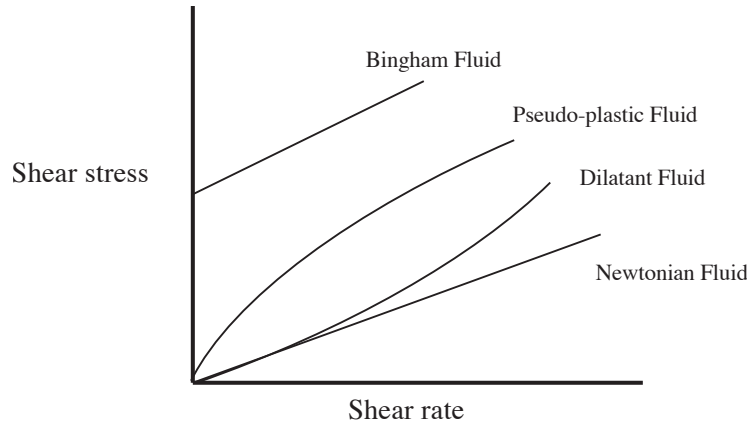


Fig.5.1: Shear stress properties of Newtonian and Nonnewtonian fluids

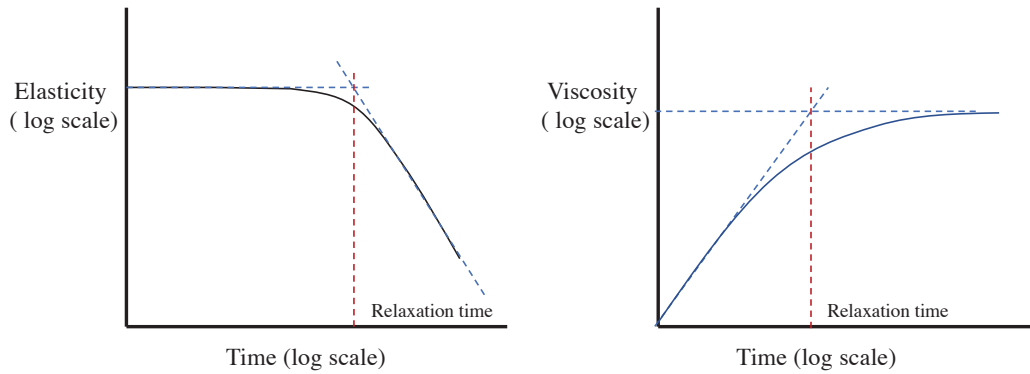


Fig.5.2: Typical time history of viscosity and elasticity of viscoelastic fluid

性質と粘性的性質が時間変化する．弾性および粘性は典型的には Fig. 5.2 に示すような時間変化をする．この時重要となるのが弾性的性質と流体的性質への時間的な切り替わりの指標である緩和時間というパラメータである．粘弾性流体は緩和時間によって流動が特徴付けられる．観察時間に対する物質の緩和時間が十分小さいとき流体はほぼ粘性流体とみなせる．

5.2 FENE ダンベルモデルに基づく粘弾性テンソル

粘弾性応力テンソルを導出するために，粘弾性応力の構成方程式が必要となる．複雑流体の構成方程式の導出は，経験則や線形モデルの拡張，力学的な力の釣り合いから導出されるなど様々だが，FENE(Finite Extendable Non-linear Elastic) ダンベルモデルに基づく導出は力学的な力の釣り合いから導出が始まり，物理量の統計平均等の導入を経て導かれる [106][107]．ダンベルモデルでは，粘弾性流体に含まれる高分子間を結合するポリマー鎖を Fig. 5.3 に示すようなダンベルでモデル化する．ダンベルは二つのビーズと呼ばれる質点 m_1, m_2 とそれらを結ぶバネで構成され，バネの復元力でポリマー鎖間に働く引力を表現する．ただしバネは必ずしも線形バネではなく，FENE モデルでは後述する非線形バネが仮定される．ビーズ 1,2 の位置ベクトルを $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ とし，ビーズ間を結ぶベクトルを $\mathbf{R}$ で定義しておく． $\mathbf{r}$ における流体

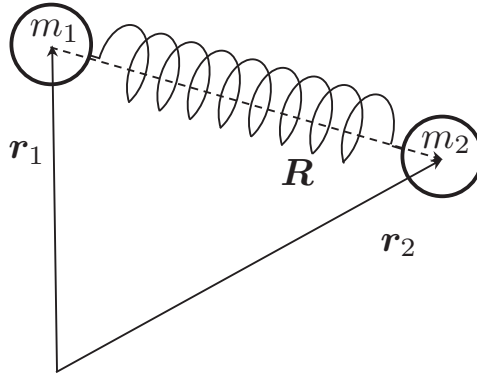


Fig.5.3: Dumbbell model for polymer chain

の速度場を $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ とすると、運動方程式は以下のようにかける。

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = -\zeta \left(\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} - \mathbf{u}(\mathbf{r}_i) \right) + (\mathbf{F}_B)_i + \mathbf{F}_i \quad (i = 1, 2) \quad (5.1)$$

ここで右辺 1 項目は流体から受ける抗力をストークス抵抗としてモデル化したもので ζ は摩擦係数でビーズを半径 a の球形、流体の粘度を η_s と仮定すると $\zeta = 6\pi\eta_s a$ である。ダンベルは高分子をモデル化したもので、 $\mathbf{R}$ は非常に小さいために低い Re 数に対してのみ用いることのできるストークスの粘性抵抗を適用していると考えられる。 $\mathbf{F}_{B_i}$ は高分子周囲の溶媒分子のブラウン運動によるランダム力で、 $\mathbf{F}_i$ はバネの復元力であり、作用反作用の法則から $\mathbf{F} = \mathbf{F}_1 = -\mathbf{F}_2$ である。式 (5.1) を $\mathbf{R}$ についての式にするために、辺々引いて整理すると、

$$m \frac{d^2 \mathbf{R}}{dt^2} = -\zeta \left(\frac{d\mathbf{R}}{dt} - \mathbf{u}(\mathbf{r}_2) + \mathbf{u}(\mathbf{r}_1) \right) + (\mathbf{F}_B)_2 - (\mathbf{F}_B)_1 - 2\mathbf{F} \quad (5.2)$$

ダンベル長は流体の流れに対して小さいため、ダンベル近傍で一定の $\nabla \mathbf{u}$ を仮定すれば、式 (5.2) 右辺 1 項目は次のようにかける。

$$-\zeta \left(\frac{d\mathbf{R}}{dt} - \mathbf{u}(\mathbf{r}_2) + \mathbf{u}(\mathbf{r}_1) \right) = -\zeta \left(\frac{d\mathbf{R}}{dt} - \mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) \quad (5.3)$$

式 (5.1) は Langevin 方程式と呼ばれ、巨視的な視点で見たストークス抵抗による力と微視的な視点で見たブラウン運動による力を含む。このままでは解を得ることが困難であるので、ダンベルの確率密度関数 $f(\mathbf{R}, t)$ を導入する。 $f(\mathbf{R}, t)$ は時刻 t においてその末端間ベクトルが $\mathbf{R}$ と $\mathbf{R} + d\mathbf{R}$ の間に存在するようなダンベルの確率密度関数である。

ビーズの速度の緩和時間 t_v 、つまり速度分布が非平衡状態から平衡状態になるのにかかる時間は $\frac{d\mathbf{r}}{dt}$ と $\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2}$ の係数を比較することで推定できる。

$$t_v = \frac{m}{6\pi\eta_s a} \sim 10^{-12} \quad (5.4)$$

t_v に比べて十分長い時間が経過すれば、周囲分子の運動はマクスウェル分布に従い、時間平均化されたランダム力は以下のように表せる。

$$(\mathbf{F}_B)_i = -k_B T \frac{\partial \ln f}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (5.5)$$

k_B はボルツマン定数、 T は絶対温度である。式 (5.2) のブラウン運動によるランダム力は $\mathbf{R}$ を用いれば以下のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} (\mathbf{F}_B)_2 - (\mathbf{F}_B)_1 &= -k_B T \left(\frac{\partial \ln f}{\partial \mathbf{r}_2} - \frac{\partial \ln f}{\partial \mathbf{r}_1} \right) \\ &= -k_B T \left(\frac{\partial \ln f}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_2} - \frac{\partial \ln f}{\partial \mathbf{R}} \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_1} \right) \\ &= -k_B T \left(\frac{\partial \ln f}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial \ln f}{\partial \mathbf{R}} \right) \\ &= -2k_B T \frac{\partial \ln f}{\partial \mathbf{R}} \end{aligned} \quad (5.6)$$

t_v より十分長い、 $d\mathbf{R}$ に対しては短い時間で式 (5.1) を時間平均することを考えれば、時間平均されたブラウン運動による力 (式 (5.5)) を使用して運動方程式を書き直すことができる。 t_v より十分長い時間で平均化するので、慣性項 $m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2}$ は無視して、

$$\begin{aligned} \zeta \left(\frac{d\mathbf{R}}{dt} - \mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) + 2k_B T \frac{\partial \ln f}{\partial \mathbf{R}} + 2\mathbf{F} &= 0 \\ \frac{d\mathbf{R}}{dt} - \mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{u} + 2\zeta^{-1} k_B T \frac{\partial \ln f}{\partial \mathbf{R}} + 2\zeta^{-1} \mathbf{F} &= 0 \end{aligned} \quad (5.7)$$

次に両辺に f を乗じる。 $\frac{\partial \ln f}{\partial \mathbf{R}} = \frac{\partial \ln f}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{R}} = \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{R}}$ であることに注意する。

$$f \frac{d\mathbf{R}}{dt} = \mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{u} f - 2\zeta^{-1} k_B T \frac{\partial f}{\partial \mathbf{R}} - 2\zeta^{-1} \mathbf{F} f \quad (5.8)$$

確率密度関数も、密度と同様に以下のような連続の式を満たす。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left(f \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial t} \right) = 0 \quad (5.9)$$

式 (5.9) に式 (5.8) を代入すると、以下の方程式を得る。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left[\mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{u} f - 2\zeta^{-1} k_B T \frac{\partial f}{\partial \mathbf{R}} - 2\zeta^{-1} \mathbf{F} f \right] = 0 \quad (5.10)$$

この式 Smoluchowski 方程式の一種で、Fokker-Planck 方程式とも呼ばれる。

式 (5.10) を解いて応力テンソルの時間発展方程式を得るために、平均量 $\langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle = \int_{\mathbf{R}^3} f \mathbf{R}\mathbf{R} d\mathbf{R}$ の関係式を考える。両辺に $\mathbf{R}\mathbf{R}$ を乗じて、 $\mathbf{R}$ 空間で積分する。部分積分を適用すると、 $|\mathbf{R}| \rightarrow \infty$ のとき、 $f \rightarrow 0$ となることから境界値は 0 となることに注意して、式 (5.10) の各項は次のように書ける。

$$\int_{\mathbf{R}^3} \frac{\partial f}{\partial t} \mathbf{R}\mathbf{R} d\mathbf{R} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbf{R}^3} f \mathbf{R}\mathbf{R} d\mathbf{R} = \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle \quad (5.11)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbf{R}^3} \mathbf{RR} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (\mathbf{R} \cdot \nabla \mathbf{u} f) d\mathbf{R} \\ &= -\nabla \mathbf{u}^T \cdot \langle \mathbf{RR} \rangle - \langle \mathbf{RR} \rangle \cdot \nabla \mathbf{u} \end{aligned} \quad (5.12)$$

$$\begin{aligned} & -2\zeta^{-1} k_B T \int_{\mathbf{R}^3} \mathbf{RR} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{R}} d\mathbf{R} \\ &= -4\zeta^{-1} k_B T \mathbf{I} \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} -2\zeta^{-1} \int_{\mathbf{R}^3} \mathbf{RR} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} (\mathbf{F} f) d\mathbf{R} &= -2\zeta^{-1} \left[\mathbf{RR} \cdot \mathbf{F} f|_{\mathbf{R}^3} - \int_{\mathbf{R}^3} 2\mathbf{R} \mathbf{F} f d\mathbf{R} \right] \\ &= 4\zeta^{-1} \langle \mathbf{F} \mathbf{R} \rangle \end{aligned} \quad (5.14)$$

である。ここで、 $\mathbf{I}$ は単位テンソルである。式を整理すると、

$$\frac{\delta}{\delta t} \langle \mathbf{RR} \rangle = -4\zeta^{-1} k_B T \mathbf{I} + 4\zeta^{-1} \langle \mathbf{F} \mathbf{R} \rangle \quad (5.15)$$

ここで、

$$\frac{\delta}{\delta t} \langle \mathbf{RR} \rangle = \frac{D \langle \mathbf{RR} \rangle}{Dt} - \nabla \mathbf{u} \cdot \langle \mathbf{RR} \rangle - \langle \mathbf{RR} \rangle \cdot \nabla \mathbf{u}^T \quad (5.16)$$

は、上対流微分と呼ばれるものである。今までの議論はビーズをラグランジュ的に見ていたが、オイラー的な視点の方程式を得るために時間微分が物質微分に置き換わっている。

ダンベルによる応力テンソルは、Kramers の表現を用いる。単位体積領域の面にかかる応力を考慮すれば容易に導ける。

$$\boldsymbol{\sigma} = n \int \mathbf{R} \mathbf{F} f d\mathbf{R}^3 = n \langle \mathbf{R} \mathbf{F} \rangle \quad (5.17)$$

ここで n は単位体積あたりのダンベル数である。ビーズ間のばねをばね定数 H の線形バネとした場合、 $\mathbf{F} = H\mathbf{R}$ である、これを式 (5.16)、式 (5.17) に代入すると、

$$\frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \cdot \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{\lambda^*} (\boldsymbol{\sigma} - G\mathbf{I}) \quad (5.18)$$

を得る。ここで、 $\lambda^* = \frac{\zeta}{4H}$ 、 $G = k_B T n$ である。これは UCM(Upper Convected Maxwell) モデルと呼ばれ、溶媒寄与分と粘弾性寄与分を含めた場合、Oldyoyd-B モデルの構成方程式となる。

Oldyoyd-B モデルや UCM モデルでは、せん断粘度がせん断速度依存性を示さないなど、実際の高分子流体の特性を十分に表現できないことがある。これは線形バネを用いていることが原因である。弾性バネをよりよく表現するモデルとして FENE バネが提案されており、以下のように表す。

$$\mathbf{F} = \frac{H\mathbf{R}}{1 - \frac{R^2}{R_0^2}} \quad (5.19)$$

ここで、 $R^2 = \text{tr} \mathbf{RR}$ 、 R_0 はバネの最大長さである。Peterlin 近似を適用すると、

$$\mathbf{F} = \frac{H\mathbf{R}}{1 - \left\langle \frac{R^2}{R_0^2} \right\rangle} \quad (5.20)$$

となる．ここで，無次元テンソル $\mathbf{A} = \frac{H}{k_B T} \langle \mathbf{R}\mathbf{R} \rangle$ を導入して $\mathbf{A}$ に関する方程式を導出する．

$$\frac{\delta}{\delta t} \mathbf{A} = -\frac{1}{\lambda} (f(\mathbf{A})\mathbf{A} - \mathbf{I}) \quad (5.21)$$

ここで， $\lambda = \frac{4H}{\zeta}$ は緩和時間で，弾性バネの係数と粘性の比となっていることがわかる．このモデルを用いる場合，数学的に閉じた形の応力の構成方程式を得ることができず，何らかの近似が必要となる．本研究で用いる FENE-CR モデルは，Chilcott と Rallison によって提案されたもので，その頭文字をとった名前になっている．FENE-CR モデルでは， $(f(\mathbf{A})\mathbf{A} - \mathbf{I})$ を $f(\mathbf{A})(\mathbf{A} - \mathbf{I})$ に置き換えることで式を解く近似であり，Peterlin 近似を施したものの改良した形として提案されているため，本研究では FENE-CR モデルを用いる．

5.3 数値計算法

FENE-CR モデルを用いた粘弾性流体の数値計算は，半陰解法による既往研究が存在する [108][109][40]．弱圧縮スキームは完全陽解法であるため，時間刻み幅が小さく，計算効率を考えれば FENE-CR モデルによる構成方程式も陽解法で解く必要がある．粘弾性応力テンソル $\boldsymbol{\tau}_p$ を含めた流体方程式をおよび構成方程式を再掲する．流体方程式は章 3 の手法で解く．

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_s + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_p + \frac{1}{\rho} \mathbf{F} \quad (5.22)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) p = -\rho c_s^2 \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (5.23)$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{A} - \frac{f(\mathbf{A})}{\lambda} (\mathbf{A} - \mathbf{I}) \quad (5.24)$$

粘弾性応力テンソル $\boldsymbol{\tau}_p$ は

$$\boldsymbol{\tau}_p = \frac{\mu_p}{\lambda} f(\mathbf{A}) \mathbf{A} \quad (5.25)$$

で求める．気液二相流では，溶媒である液相のみ非ニュートン性を考慮し，気相はニュートン流体とする．従って，ポリマー粘性寄与 μ_p を

$$\mu_p = \phi \mu_p \quad (5.26)$$

として計算することで，液相のみ粘弾性応力を作用させる．粘弾性流体は液相側のみであるので，式 (5.24) は液相のみで解き，気相側は以下の方程式を解くことで外挿する．

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \tau} = \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{A} \quad (5.27)$$

ここで $\mathbf{n}$ は界面の法線ベクトルで，Level Set 関数から求める．式 (5.24) の移流項は 3 次精度 WENO スキームを用いて離散化し，その他の項は 2 次中心差分で離散化する．時間積分は 3 段 3 次の TVD Runge-Kutta 法を用いる．

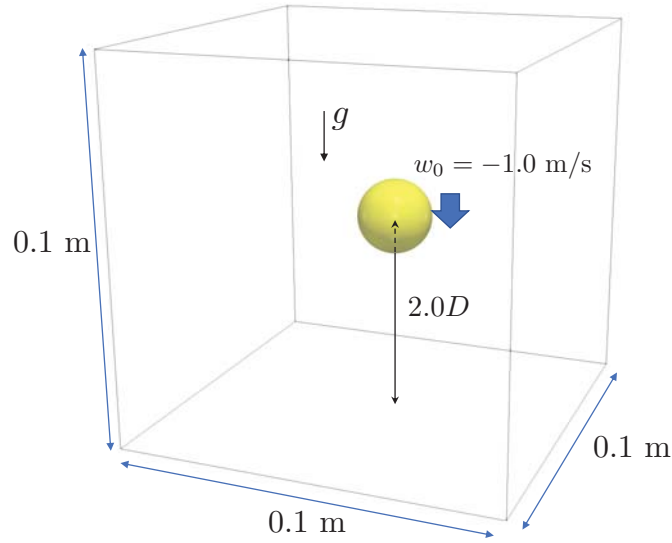


Fig.5.4: Initial settings of viscoelastic droplet falling onto a dry floor problem

5.4 検証計算

FENE-CR モデルに基づく粘弾性効果を導入した AMR コードを用いて検証問題を解き、手法の妥当性を確認する。

5.4.1 乾いた床へ衝突する粘弾性液滴問題

高密度比の気液二相流における粘弾性流体の検証問題として、粘弾性流体の球体液滴を重力加速度の元、壁に衝突させる問題を解く。既往研究では、軸対象な座標系を用いた 2 次元計算が行われている [40][109] が、本ソルバーは Cartesian 座標系を用いているので、3 次元計算を行う。

初期条件および境界条件は、Fig. 5.4 に示す通りである。物性値は、比較のために参考文献に合わせ、以下の無次元数から算出した有次元の値を設定する。

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu_0} = 5.0, Wi = \lambda \frac{U}{L} = 1.0, Fr = \frac{U}{\sqrt{gL}} = 2.26, \beta = \frac{\mu_p}{\mu_l + \mu_p} = 0.1 \quad (5.28)$$

ここで、 Wi はワイゼンベルグ数、 Fr はフルード数、 β は全体の粘度に対するポリマー粘度の割合を示す無次元数で、 $\mu_0 = \mu_l + \mu_p$ である。代表長さは液滴球直径 $L = D = 0.02$ とし、代表流速は初期流速 $U = 1.0$ を与える。また、 Ma 数は U に対して 0.03 とした。格子解像度は、最細格子が均一 256^3 相当、 D に対して 51 格子程度相当となる格子 M1 と、均一 512^3 、 D に対して 102 格子相当となる格子 M2 で計算した。

本手法によって得られた界面形状と、参考文献の結果を比較したものを Fig. 5.5 に示す。 $t = 1.7$ における壁面近傍の界面形状もよく一致しており、衝突後に引き伸ばされた液体が元に戻ろうとする弾性的性

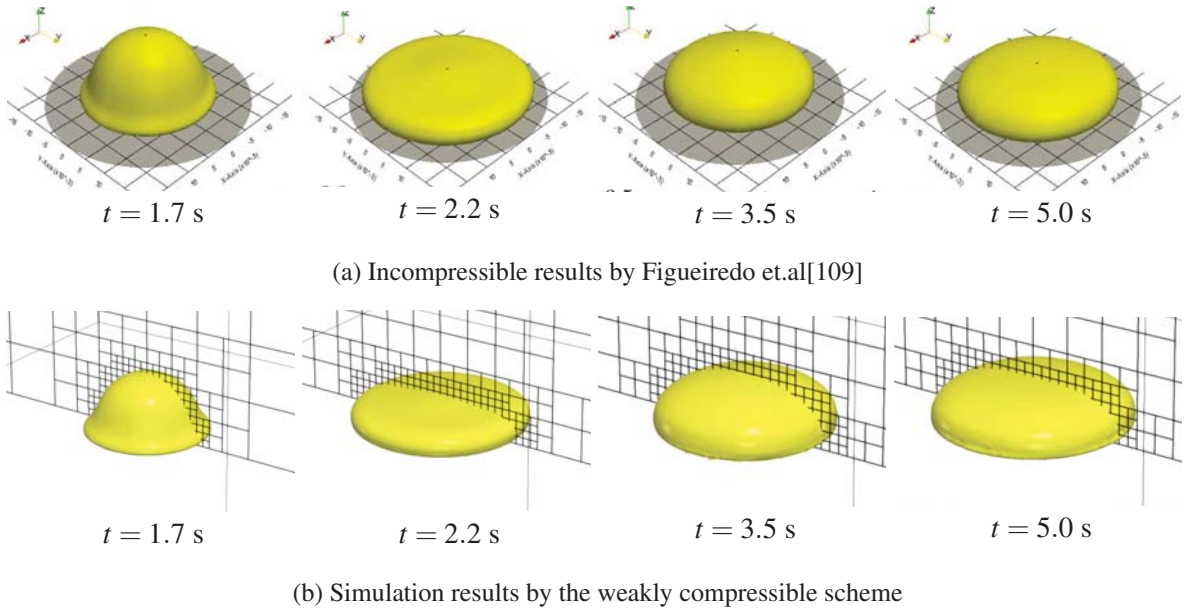


Fig.5.5: Evolution of profile for three-dimensional viscoelastic droplet falling onto a dry floor problem

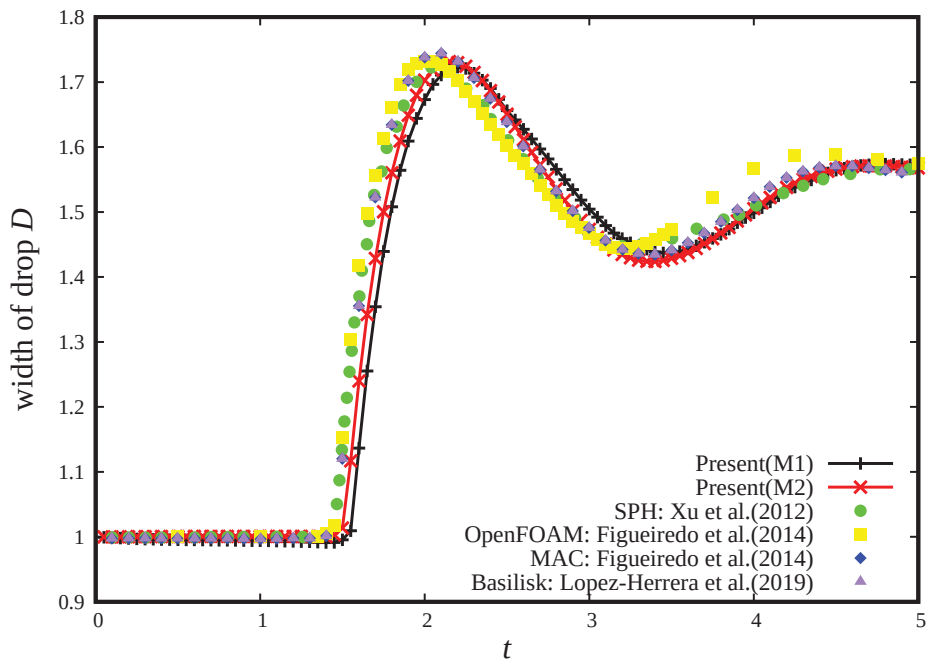


Fig.5.6: Time evolution of width of the viscoelastic droplet falling onto a dry floor

質をよく再現している． Fig. 5.6 に液滴直径の時刻変化を種々の参考文献の結果と比較したものを示す．本手法の結果は M1, M2 とも既往研究の結果を定性的に再現している．液滴衝突に若干の遅れが見られるものの，格子解像度を増やすことによって結果は改善しており，妥当な結果であると結論づける．

Table 5.1: The viscoelastic parameter setting for the bubble colliding with liquid interface problem.

	L	De
Case A1	10	5
Case A2	10	10
Case A3	10	25
Case B1	2	5
Case B2	5	5

5.5 液膜安定化への影響

液面に衝突する気泡上昇問題を解き、粘弾性パラメータが液膜安定化に与える影響を調べる。水と空気の物性値を用いて、計算領域 0.02×0.04 m 中に直径 $d = 8.0$ mm 気泡を $(x_c, y_c) = (0.01, 0.01)$ m に配置し、 $y = 0.02$ m に設定した液面に向かって気泡が情報する。重力加速度は 9.8 m/s^2 で、表面張力 $\sigma = 72.8 \times 10^{-3} \text{ N/m}$ を考慮する。粘弾性パラメータとして、 $\beta = 0.1$ を固定し、 De 数および最大の FENE ダンベル長さと平衡状態の長さの比を表すパラメータ L を Table 5.1 のように変化させて挙動を確認する。 $L \rightarrow \infty$ のとき、FENE ダンベルモデルの復元力は線形バネと同等になり、Oldyord-B 流体となる。 De 数は以下のように定義される無次元数である。

$$De = \lambda \frac{U}{L'} \quad (5.29)$$

ここで U は代表流速、 L' は代表長さである。この問題に対する代表長さは $L' = d$ を用いる。代表流速は気泡中心座標から液面までの距離 $h = 0.01$ m と重力加速度 g から概算して $U = \sqrt{gh} = 0.313$ と定める。AMR 法による格子細分化は最細格子が均一 512×1024 相当となるように適用する。

まず、粘弾性応力がゼロとなるニュートン性流体の結果を Fig. 5.7 に示す。気泡は変形しながら上昇し、 $t = 0.09$ s 付近で液面に到達後、液面近傍で上下に振動しながら液膜を形成して流動する。上下に振動するたびに液膜は薄くなり、 $t = 0.212$ s で最も液膜が薄くなる気泡上面から液膜は崩壊する。

Fig. 5.8 に $L = 10$ と固定し、 De 数を変化させた場合の Case A1 から Case A3 計算結果を示す。 De 数を上げすぎると計算が不安定になりやすい傾向が確認されたため、 $De = 5, 10, 25$ の範囲で変化させた。 $De = 5, 10, 25$ の変化による緩和時間の差は界面挙動にそれほど大きな変化を及ぼさないことが確認できる。 $De = 10$ の場合はわずかではあるが $De = 5$ より液膜崩壊が遅くなっている。 De 数の増加によって液膜が若干安定化しているが $De = 25$ の場合は最も液膜が早く崩壊しており、 De 数をあげ過ぎれば崩壊が早まるという現象が確認された。 De 数が大きすぎると粘弾性応力テンソルで表現される弾性的性質から粘性的性質へ遷移するまでの時間が長く、弾性寄与は増すがその分粘性の寄与が減少する。そのため、単に弾性的性質を上げれば上げるだけ良いということではなく、液膜安定化のためには弾性と粘性のバランスが必要であると考えられる。

次に、 De 数を固定して L を小さくした場合の Case B1 と Case B2 についての結果を Fig. 5.9 に示す。

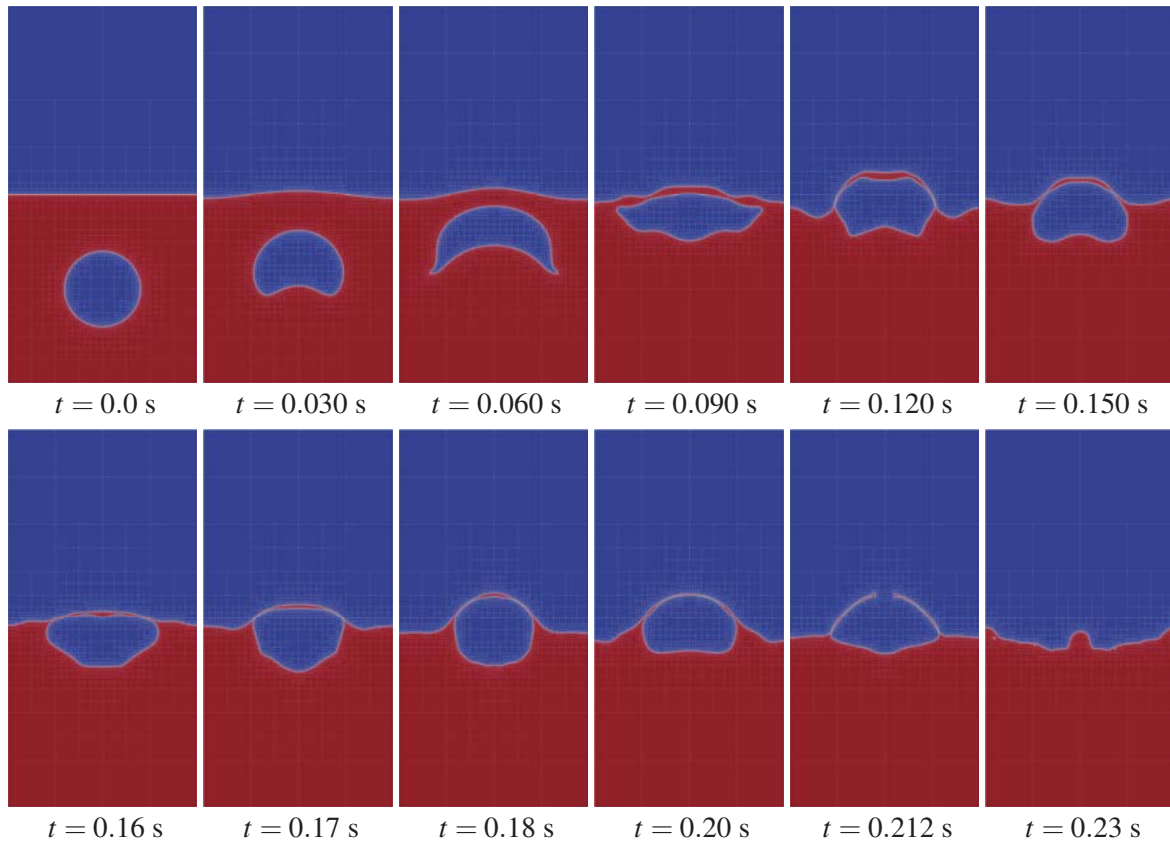


Fig.5.7: Phase-field profile for the bubble colliding with the liquid surface and forming liquid film in Newtonian fluid.

FENE ダンベルモデルではダンベル長さが最大長さに近づくほど復元力が大きくなるモデルとなっているので、 L が小さいほど、小さな変形が起こりにくくなる傾向となるはずである．ニュートン流体中の気泡と比較して明らかに変形が抑制されており、液面に達した段階で円形に近い形状となっている．液膜は粘弾性流体の方が早く崩壊している．この理由として考えられるのは、計算領域左右の液体流動も粘弾性効果によって抑制されてしまい、液膜に供給される方向の流動が抑えられたことによって早い段階で液膜自体の変形が収まり、重力が早い段階で支配的になった結果液膜が崩壊したのではないかと考える． L が小さいほど気泡の変形は抑制されており、液膜崩壊の時間も遅くなっている．液膜崩壊時に対してバネの復元力が強く働いたことによって L が小さいほど液膜崩壊が遅れていると考えられる．

以上の結果から、液膜の崩壊が気泡の変形によるものではなく重力によるものと考えられるような場合は粘弾性によって液膜を安定化させることは困難であることが示唆される．変形に対する抑制効果は確認されたため、表面張力の影響が小さいような系で気泡の大変形が液膜崩壊の要因となるような場合には液膜崩壊を抑制できる可能性がある．また、 L を小さくすることによって液膜崩壊時に復元力が強く働き液膜崩壊時間が遅れる結果が得られた．

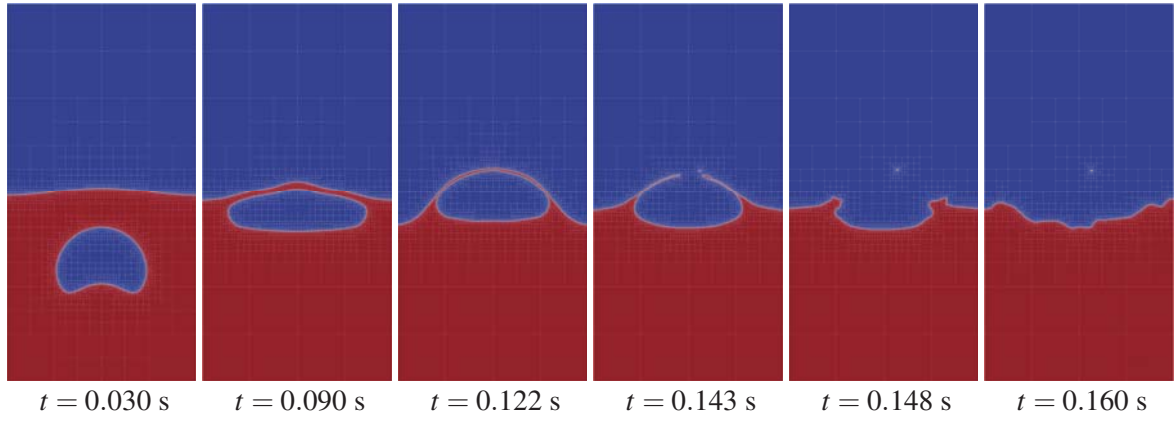
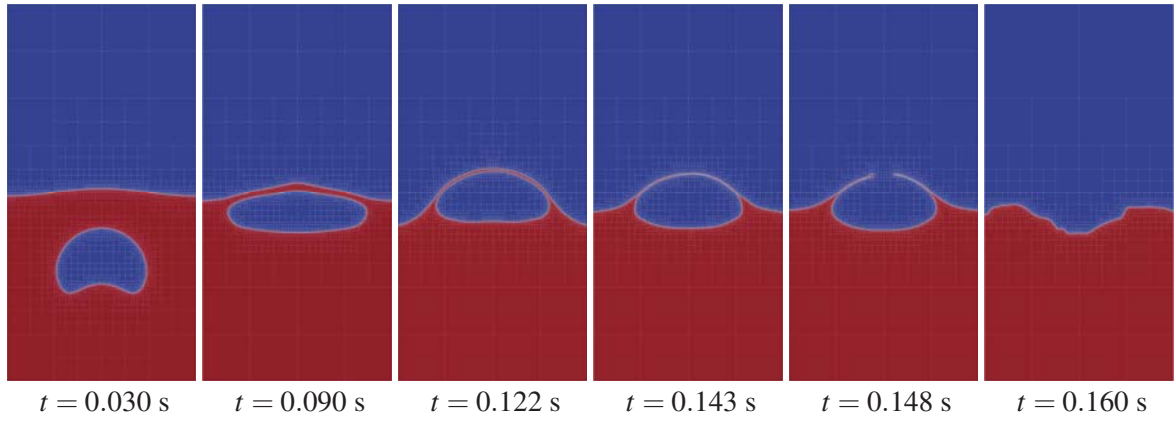
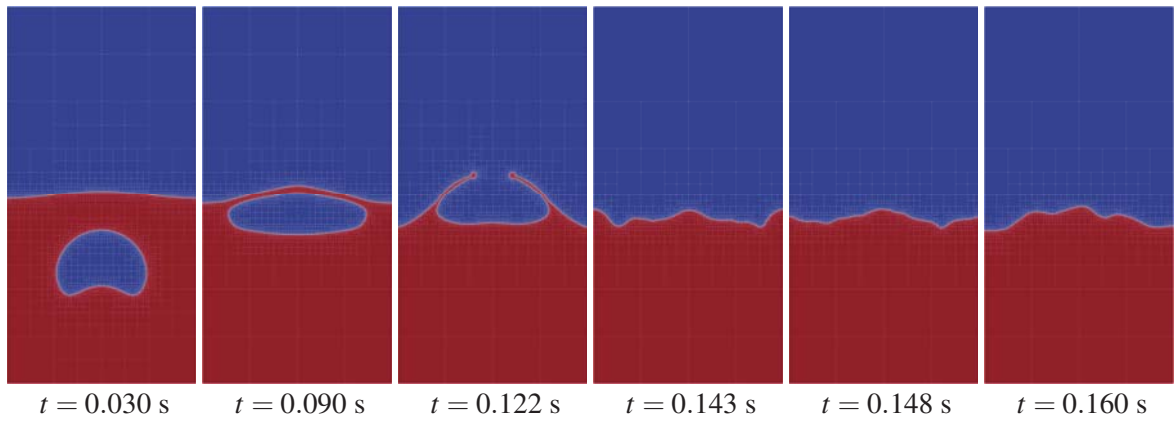
(a) $De = 5$ (b) $De = 10$ (c) $De = 25$

Fig.5.8: The effect of De to the phase-field profile for the bubble colliding with the liquid surface and forming liquid film in FENE-CR viscoelastic fluid.

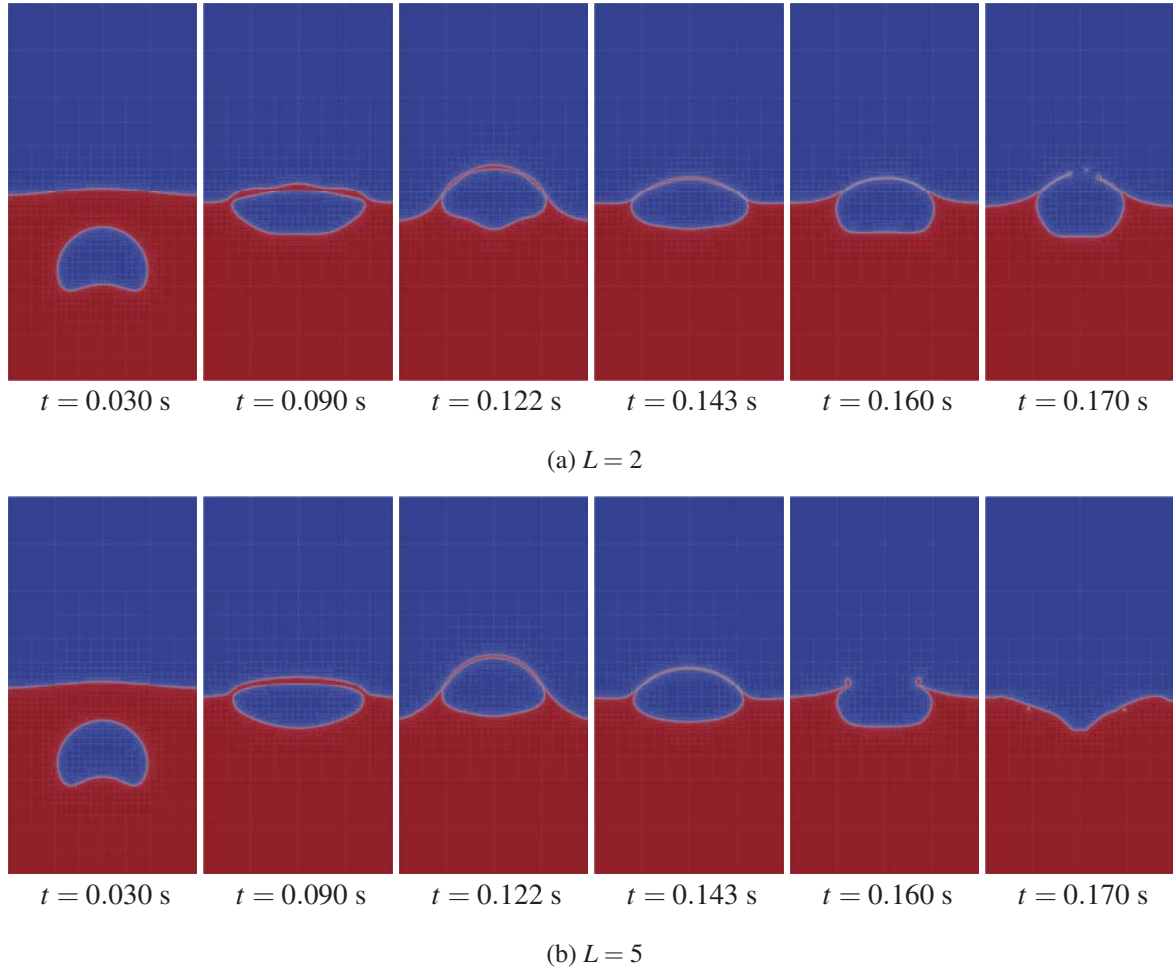


Fig.5.9: The effect of L to the phase-field profile for the bubble colliding with the liquid surface and forming liquid film in FENE-CR viscoelastic fluid.

5.6 FENE-CR モデルの導入による粘弾性流体解析のまとめ

本章では、FENE ダンベルモデルに基づく粘弾性流体の構成方程式導出および数値計算手法についての説明を述べた。粘弾性流体の液滴が重力加速度の元で落下し、壁面に衝突する問題を解き、開発したコードの妥当性を確認した。液滴の界面挙動は既往の非圧縮性ソルバーを用いた粘弾性流体計算の結果とよく一致し、直径時刻歴も種々の数値計算結果を定性的に一致することが確かめられた。

応用計算として、液面で液膜を形成する気泡上昇計算を行い、代表的な粘弾性パラメータを変化させて液膜挙動を観察した。粘弾性流体中を上昇する気泡は、ニュートン性流体中を上昇する気泡と比較して変形が抑制され、早い段階で界面の変形が収まり、重力が支配的となる。その結果、液膜はニュートン性流体より早い段階で崩壊することが観察された。弾性的パラメータの強さを示す De 数を上昇させた場合、界面挙動の差はわずかではあったが弾性をあげればあげるほど液膜が安定化するのではなく、弾性と粘性のバランスが必要であることが示唆された。次に最大の FENE ダンベル長さと平衡状態の長さの比を表すパラメータ L を小さくすることで、微小な変化に対する復元力を上昇させて計算を行った。 L が小さいほど微小変化に対する FENE バネの復元力が増加し、結果として液膜の崩壊が遅れる結果が得られたものの、ニュートン性流体より早く液膜が崩壊する結果となった。

以上の結果より、FENE-CR モデルによる粘弾性は界面の変形を抑制させる効果を持つが、液膜を安定化させるのに十分な力とはなりにくいことが示唆された。今回解いた系では液膜崩壊の要因が界面の変形ではなく、液面で落ち着いたのちに重力によって液膜が薄くなって崩壊するため、粘弾性は液膜長時間維持に寄与しなかったが、変形が液膜崩壊の主たる原因である場合は安定化要因になり得る。

第 6 章

界面活性剤の吸着・脱離を考慮した輸送方程式と濃度差マランゴニ効果の導入

本章では，界面活性剤の吸着・脱離を考慮した輸送方程式および界面活性剤の密度差に起因するマランゴニ効果について示し，離散化手法についても述べる．検証問題を解いて手法の妥当性を確認したのち，マランゴニ効果が液膜安定化にどの程度寄与するかを考察する．

6.1 界面活性剤の吸着・脱離を考慮した輸送方程式

表面張力項を含む気液二相流計算は幅広く研究されているが，ほとんどの場合表面張力係数は一定で，理想的な純水中での界面挙動予測であったり，濃度が一定の界面活性剤を考慮して表面張力係数を一律に下げることしかできない．節 4.5.5 で示したようなシャボン玉形成を考えても，実際は界面活性剤の効果によって表面張力係数が減少することに加えて，界面上で界面活性剤の濃度が不均一になり，マランゴニ効果が発生する．節 4.5.5 では重力を考慮していないため，液膜内部まで表面張力等の力を精度よく再現可能な高解像度格子を割り当てることで非常に薄い液膜を維持しながらシャボン玉が膨張する過程をシミュレーションで再現することができたが，4.5.7 のような重力を含む系で液膜が生じる場合は液膜が重力によって薄まっていき，いずれ崩壊する．現実世界で見られるような長時間の液膜安定維持再現のためには，重力に対抗しうる逆向きの力を導入する必要がある．マランゴニ効果は濃度差に起因する力で界面の接線方向に働き，液膜を安定化させる方向に働き得る．

界面活性剤は，水に溶けた際に電離してイオン化するイオン性界面活性剤と，イオン化しない非イオン性界面活性剤に大別できる．イオン性界面活性剤はさらに，親水性部分の電極の符号によってアニオン界面活性剤，カチオン活性剤，両性界面活性剤に分けられる．極性を持つイオン性界面活性剤は，吸着表面と界面活性剤の分子の符号に応じて挙動が複雑となる．非イオン性界面活性剤は親水性部分がイオン化しないため，電解質の影響を受けにくい特性を持ち，その使いやすさから近年よく利用されている．極性を持たない非イオン性界面活性剤の界面活性剤による表面張力係数の変化は Langmuir モデルでよくモデル化できることが実験においても示されており [110]，既往研究としても，界面の変形を考慮せず，ラグランジュ的に界面上での輸送方程式を解いたもの [111] や，気液界面上での界面活性剤の輸送と，溶

液中での輸送方程式を解き、さらに溶液-界面間での吸着脱離を考慮した界面追跡手法を提案しているものの [112] がある。本研究では、既往研究でも報告例が多く Langmuir モデルで特性をよく表せる非イオン性界面活性剤を取り扱う。

本手法では全ての式はオイラー的に解かれており、界面の大変形を含むことから、それに適した手法を用いる。溶液中の界面活性剤濃度 F と界面上における界面活性剤濃度 f の輸送方程式は、移流・拡散および吸着・脱離効果をモデル化した以下の式で表せる。

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla F = D_F \nabla^2 F + j \delta(\psi) \quad (6.1)$$

$$\frac{Df}{Dt} - \mathbf{u} \cdot \nabla_s f (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) (\nabla_s \cdot \mathbf{n}) = -\nabla_s \cdot (f \mathbf{u}) + D_f \nabla_f^2 f + j \quad (6.2)$$

ここで $\nabla_s = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \nabla$ で表される表面上での勾配で、 j は F と f 間でやり取りされる吸着脱離をモデル化したソース項である。本研究では Langmuir のモデルを用いて以下の式で表現される。

$$j = k_{ad} F (f_{lim} - f) - k_{de} f \quad (6.3)$$

ここで、 k_{ad} は吸着速度係数、 f_{lim} は飽和濃度、 k_{de} は脱離速度係数である。式 (6.2) を Cartesian 座標系の微分で表すと、

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla f - f (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}) = D_f (\nabla^2 f - \mathbf{n} \cdot \nabla \nabla f \cdot \mathbf{n} - \kappa \mathbf{n} \cdot \nabla f) + j \quad (6.4)$$

式 (6.4) は界面上で成り立つ方程式を Cartesian 座標系の微分で書き直した形であるが、本研究では界面位置を陰的に表現する Phase field 法を用いているため、界面近傍で f も何らかの分布を持っている必要がある。そこで、次の式を解いて各相内に $\mathbf{n} \cdot \nabla f = 0$ となるような f の分布を作る [113]。

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} + S(\psi) \mathbf{n} \cdot \nabla f = 0 \quad (6.5)$$

ここで $S(\psi)$ は引数である Level Set 関数の符号を返す関数である。式 (6.5) を解き、界面のごく近傍の値を用いてその周辺に値を分布させる。バルクの界面活性剤 F に関しても、液相内のみで輸送方程式を解くために気相側の値が液相に影響を与えないよう、液相側の値を外挿する [114]。

$$\frac{\partial F}{\partial \tau} = S(\psi) \mathbf{n} \cdot \nabla F \quad (6.6)$$

式 (6.6) は気相側のみで解かれる。

6.2 濃度差マランゴニ効果の導入

マランゴニ効果とは、温度差や界面活性剤濃度によって表面張力に勾配が生じて発生する界面に沿った自由表面移動または流れのことをいう。特に流れに対してはマランゴニ対流などと呼ぶこともある。流体方程式は等温過程の Navier-Stokes 方程式を解くため、温度差によるマランゴニ効果は考慮せず、界面活性剤の濃度差に起因するマランゴニ効果のみを考慮する。界面活性剤は界面に吸着することで表面

張力を低下させる働きを持つ。表面張力とは、各相の分子密度差に起因する凝集エネルギー差が張力となって現れるものであるが、界面活性剤が界面に吸着すると、疎水性部分を気相側に、親水性部分を水の相に溶解させ、配向した吸着となる。そのため疎水性部分が気相側の凝集エネルギーを受け取り、親水性部分が水分子の凝集エネルギーを受け取る。そして界面活性剤の共有結合を通じて界面領域で両相の凝集エネルギーは平均化する。その結果、吸着前には数分子層厚さで生じていた凝集エネルギー勾配が、界面活性剤吸着によって数十から数百分子層に広がり、緩やかなエネルギー勾配となり、表面張力が低下することになる [115]。界面活性剤の濃度あるいは温度による表面張力係数の変化は以下の Langmuir の状態方程式でよく表される。

$$\sigma(f) = \sigma_0 \left[1 + \frac{RT f_{\text{lim}}}{\sigma_0} \ln \left(1 - \frac{f}{f_{\text{lim}}} \right) \right] \quad (6.7)$$

ここで、 R は理想気体の気体定数で T は絶対温度、 σ_0 は界面活性剤濃度が 0 の時の溶媒の表面張力である。式 (6.7) は対数を含む非線形の式で、Fig. 6.1 で表されるような変化を示し、界面活性剤濃度が f_{lim} に近づくと表面張力係数は $-\infty$ に漸近し、非常に激しい勾配となる。計算の安定化のために、線形化された以下の式が用いられることもある。

$$\sigma(f) = \sigma_0 \left[1 - \frac{RT f_{\text{lim}}}{\sigma_0} \frac{f}{f_{\text{lim}}} \right] \quad (6.8)$$

線形化した式も Fig. 6.1 に示しているが、界面活性剤濃度が小さい際には非線形の式をよく近似しているが、界面活性剤濃度が f_{lim} に近い時は非線形式と乖離がある。本研究では基本的には式 (6.7) を用いるが、飽和界面活性剤濃度に近づいたとき計算が不安定になることを防ぐために、以下のように表面張力計算中の界面活性剤濃度に対してのみ上限を設ける。

$$\sigma(f) = \sigma_0 \left[1 + \frac{RT f_{\text{lim}}}{\sigma_0} \ln \left(1 - \frac{\min(f, kf)}{f_{\text{lim}}} \right) \right] \quad (6.9)$$

ここで k は任意パラメータであり、本研究では $k = 0.95$ 程度を用いる。

界面活性剤濃度に応じた表面張力は流体計算中で考慮され、定数であった表面張力係数が界面活性剤濃度の関数となるとともに、界面の接線方向の表面張力勾配によるいわゆるマランゴニ効果が以下の式で組み込まれる。

$$\mathbf{F}_{\text{sf}} = \sigma(f) \boldsymbol{\kappa} + \nabla_s \sigma(f) \delta_{\Gamma} \quad (6.10)$$

ここで、 $\nabla_s = (\mathbf{I} - \mathbf{n} \otimes \mathbf{n}) \nabla$ で、 δ_{Γ} は界面近傍のみ正の値を持つ近似デルタ関数である。近似デルタ関数にはいくつかの定義式が候補に上がるが、Cahn-Hilliard 型の DIM を用いて界面活性剤濃度輸送を解いている文献 [116] を参考に、本研究で用いるパラメータ ε の定義に注意して、以下の式を用いる。

$$\delta_{\Gamma} \approx \frac{6}{\varepsilon} \phi^2 (1 - \phi)^2. \quad (6.11)$$

6.3 数値計算手法

流体方程式は章 3 で説明した等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く。界面活性剤の輸送方程式は 3 段 3 次精度 Runge-Kutta 法で時間積分し、空間微分については移流項に 3 次精度 WENO スキーム、その他

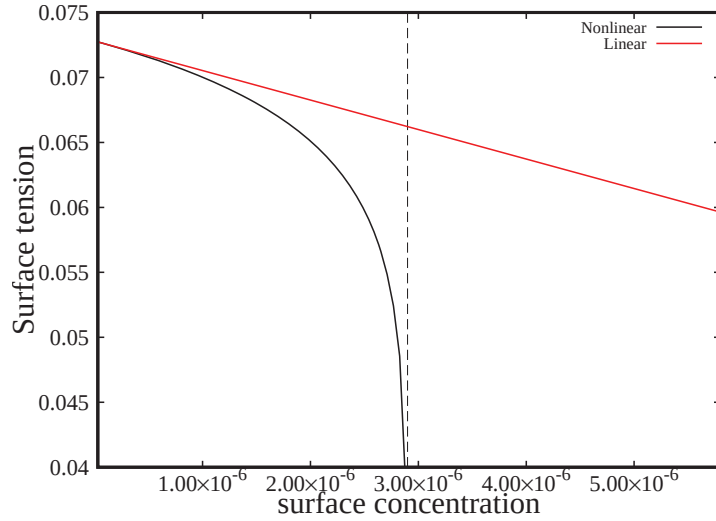


Fig.6.1: Dependence of surface tension on surfactant concentration expressed by Langmuir equation of state

の項には2次精度中心差分を適用する。

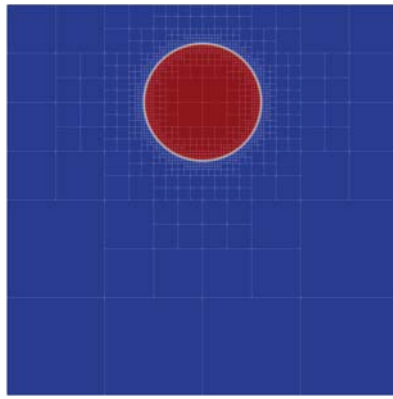
6.4 検証計算

6.4.1 Single vortex 移流計算

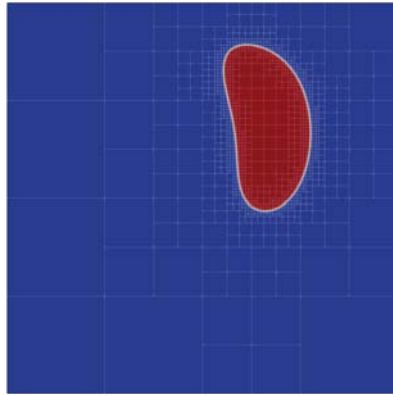
速度場が与えられているとき、界面活性剤濃度輸送が正しく解けることを確認するために、Single vortex 問題を解いて参考文献と比較する。流れ場の計算条件は節 3.8.2 と同じ条件を用いるが、参考文献との比較のため周期 $T = 1.0$ とする。

まずは、界面上での界面活性剤濃度輸送方程式のみを $D_f = 10^{-3}$ として解き、バルク界面活性剤濃度は考慮しない。初期濃度 $f_0 = 1.0$ とし、格子解像度は7レベル差をつけ、最細格子幅が $1/512$ となるように設定する。本手法で得られた界面プロファイルを参考文献の結果とともに Fig. 6.2 に示す。当然ながら界面移流形状はよく一致している。次に界面上での界面活性剤濃度を参考文献の計算結果とともに Fig. 6.3 に示す。本手法では f を界面近傍に分布させているため、可視化のために $f \times 4 \times \phi(1 - \phi)$ を高さとして表示している。そのため、可視化の都合上界面活性剤濃度が振動しているように見えるかもしれないが、実際はなだらかなプロファイルである。界面上での界面活性剤濃度 f の分布もピークの値がやや過小評価気味だが、定性的に一致していることがわかり、Extension の式を含む本手法でも界面活性剤濃度輸送計算が行えると考えられる。

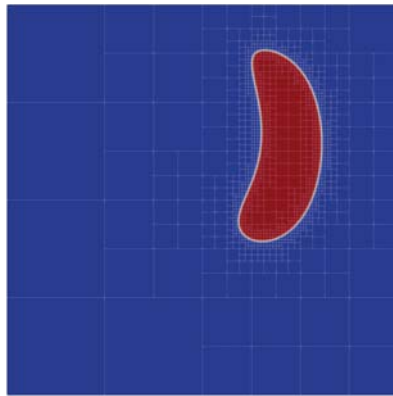
次にバルクの界面活性剤濃度輸送方程式も合わせて解く。 $D_F = 0.1$, $k_{ad} = 100$, $k_{de} = 200$ とする。 f_{lim} は参考文献中に表記がないので、平衡状態の濃度、つまり $j = 0$ の時の濃度を与えることとした。最細格子幅は $1/256$ である。 D_f の値を変化させ、 $D = D_f/D_F = 0.1, 1.0, 10.0$ の3通りを計算して参考文献の結果と比較する。本手法によって得られたバルクの界面活性剤濃度を参考文献の結果とともに Fig. 6.4 に、界面上での界面活性剤濃度を Fig. 6.5 に示す。 D_f の増加に伴ってバルクおよび界面活性剤濃度が散



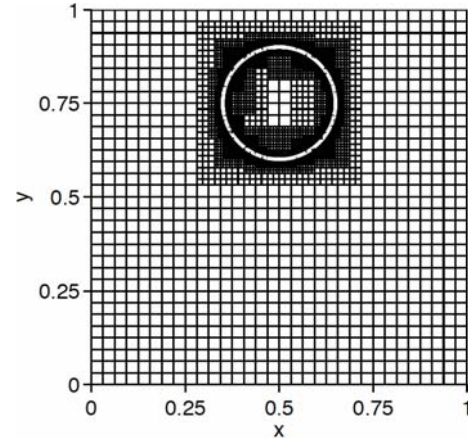
$t = 0.0 \text{ s}$



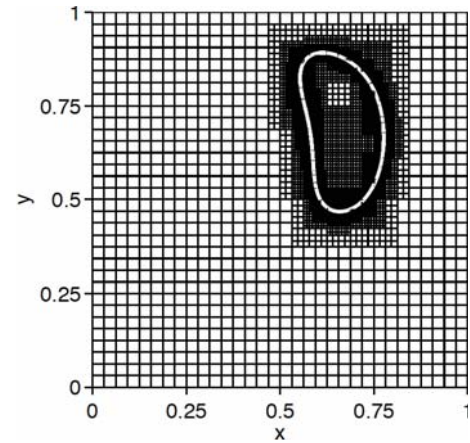
$t = 0.25 \text{ s}$



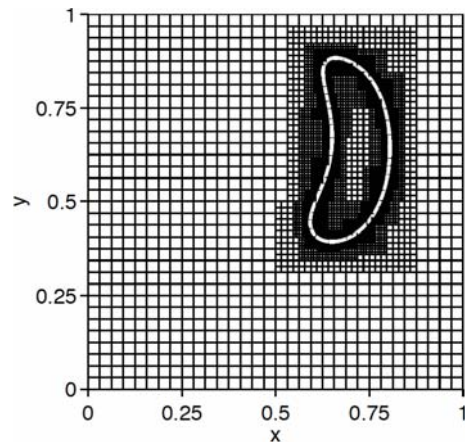
$t = 0.50 \text{ s}$



$t = 0.0 \text{ s}$



$t = 0.25 \text{ s}$

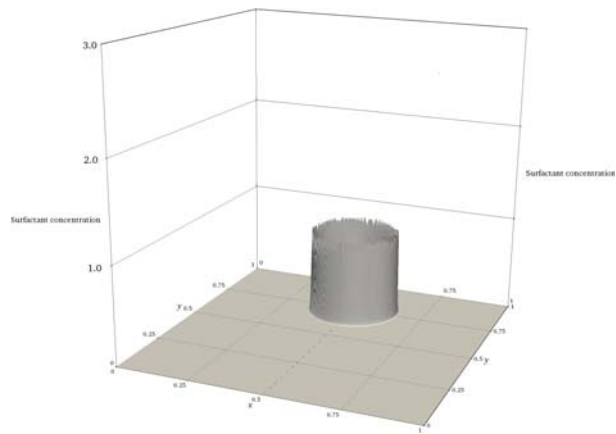


$t = 0.50 \text{ s}$

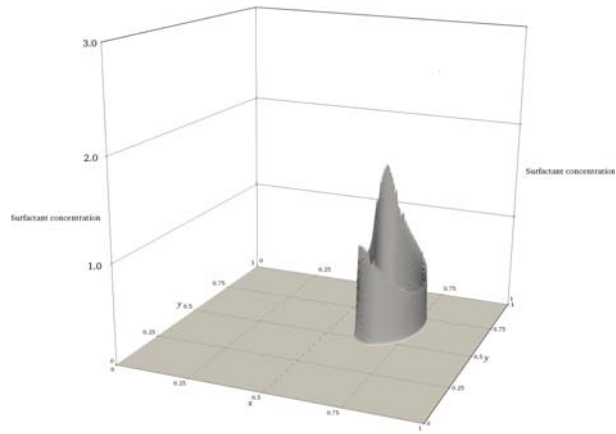
(a) Phase-field profile with leaf lines obtained by present solver

(b) Phase-field profile adapted from reference[117]

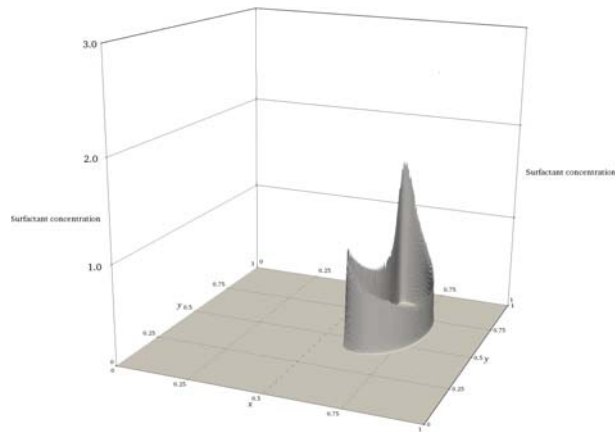
Fig.6.2: The phase-field profile for the single vortex problem to validate the interface surfactant transportation.



$t = 0.0 \text{ s}$

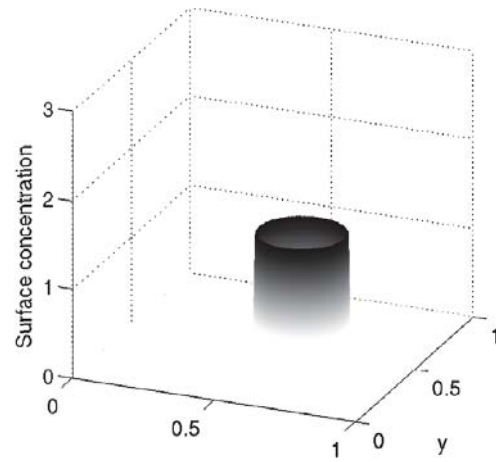


$t = 0.25 \text{ s}$

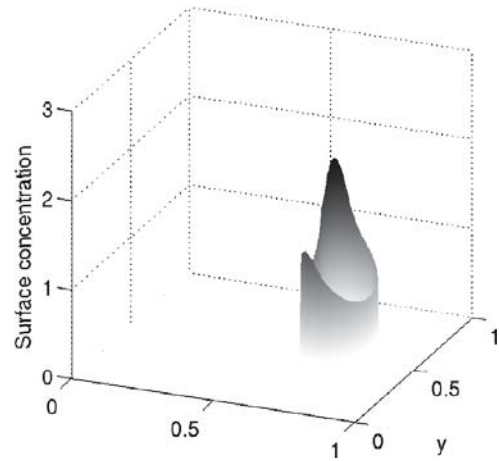


$t = 0.50 \text{ s}$

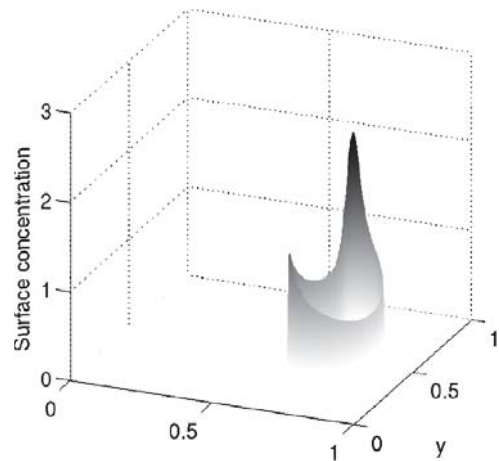
(a) The results of present solver



$t = 0.0 \text{ s}$



$t = 0.25 \text{ s}$



$t = 0.50 \text{ s}$

(b) The results of reference[117]

Fig.6.3: Interface surfactant concentration for the single vortex problem

Table 6.1: Physical properties of 1-Pentanol[118]

	k_{ad} [m ³ /(mol · s)]	β [mol/m ³]	f_{lim} [mol/m ²]	k_{de} [s ⁻¹]
1-pentanol	5.08	21.7	5.9×10^{-6}	110.236

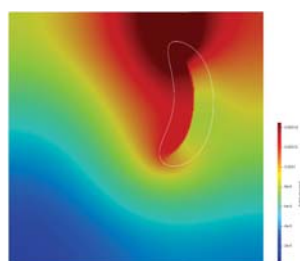
逸的になっている傾向をよく再現している．バルクの界面活性剤濃度を見ると， D の違いによる界面下面や右面での分布の違いがよく再現されていることがわかる．本手法ではバルクの界面活性剤濃度は法線ベクトルの方向での勾配が0となるように外挿されているため， $\phi > 0.5$ の相内部にも境界条件を満足するような値を持っている．界面上での界面活性剤濃度分布も， $D = 0.1$ の場合には界面上側と下側間の勾配が急になっていて， D の増加に伴って勾配がなだらかになっている様子がよく再現されている．以上より，Single vortex問題のように，速度場が与えられ，曲率が大きく変わるような変形を含む場合でも，本手法は界面活性剤濃度輸送を妥当に計算できていると考えられる．

参考文献では界面捕獲方程式がCahn-Hilliard方程式が解かれており，指標関数から計算される近似デルタ関数および近似ヘビサイド関数を用いた方程式が陰解法で解かれている．本手法では最終的に弱圧縮性解法へ組み込むため，時間刻み幅が小さくなることから，界面活性剤濃度輸送方程式を陰解法で解く場合の時間刻み幅を大きく取れる強みが活かせず，1step内の計算コストが重い反復計算を導入することは非現実的である．本手法では界面近傍に界面活性剤濃度を分布させることで陽解法を用いて解いているため，濃度がやや散逸的となり，参考文献の結果との差が生じていると考えられる．

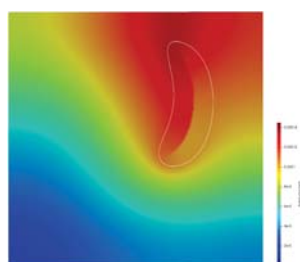
6.4.2 界面活性剤溶液中を上昇する単一気泡

界面活性剤輸送方程式およびマランゴニ効果を含む二相流計算は液滴を引き延ばす計算 [116] がよく解かれるようだが，密度比が小さく，界面活性剤付与による変形の度合いも小さいため水と空気のような典型的な物性値に対する検証問題としては不十分である可能性がある．そこで，本節では界面活性剤を付与した液相中を上昇する単一気泡を計算し，実験および数値計算の結果と比較する．1-ペンタノール水溶液中を上昇する気泡の直径を $d = 0.35, 0.45, 0.75$ mm と変化させ，上昇速度から抗力係数を算出する．液相および気相はそれぞれ水と空気の値を用いる．1-ペンタノールの物性値は Table 6.1 に示す通りで， 0.69 mol/m^3 混入させた水溶液中を気泡が上昇する．ここで Table 6.1 中の脱離係数 β は脱離速度係数 k_{de} と吸着速度係数 k_{ad} を用いて $\beta = \frac{k_{de}}{k_{ad}}$ で表せる係数である．計算領域は， $d = 0.35, 0.45$ mm に対しては $2.4 \times 2.4 \times 9.6$ mm を用い， $d = 0.75$ mm に対しては $3.6 \times 3.6 \times 14.4$ mm とした．重力加速度 $g = 9.8 \text{ m/s}^2$ とし，上面と下面に non-slip 壁面を，それ以外は slip 壁として境界条件を与えた．

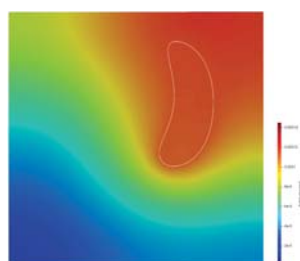
Fig. 6.6 に得られた抗力係数をプロットしたグラフを示す．高木らの実験および数値計算の結果 [111] とよく一致している．また，計算結果の一例として $d = 0.45$ mm における y 方向速度と，界面上での界面活性剤濃度を $\phi = 0.1 - 0.9$ の範囲で色付けしたものを Fig. 6.7 に示す．界面上での流れ場によって界面上での界面活性剤濃度は気泡気泡前方で低くなり，後方で上昇する．マランゴニ効果によって，活性剤濃度が高くなる下部では表面張力が低下し，上部では表面張力が上昇するため，表面張力の大きい上方に向かってせん断応力が発生することにより抗力が増加し，上昇速度の減少がもたらされる [111]．



$D = 0.1$

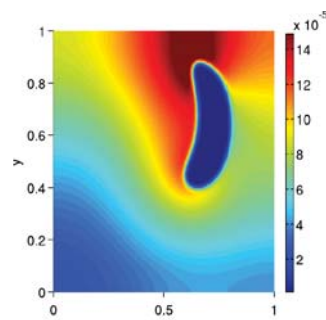


$D = 1.0$

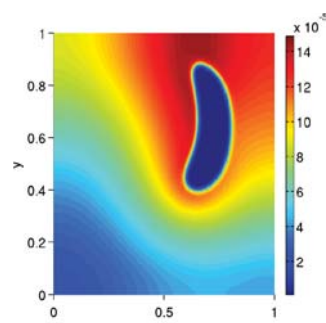


$D = 10.0$

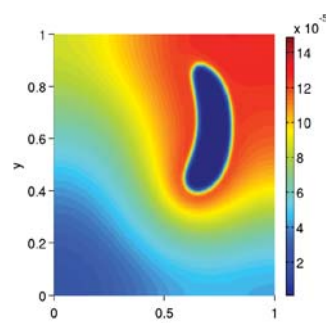
(a) The results of present solver



$D = 0.1$



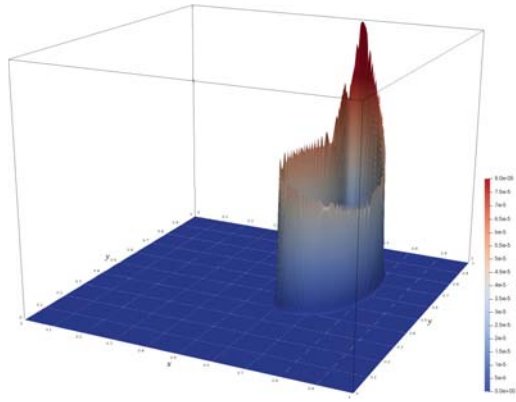
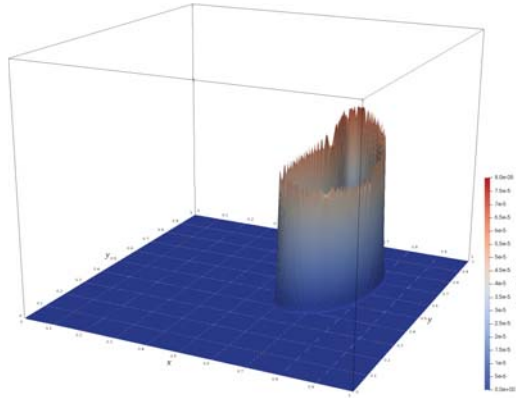
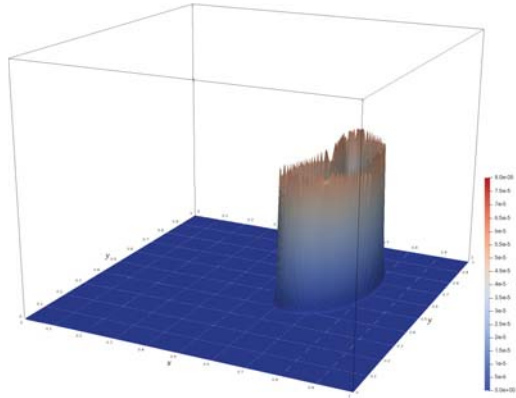
$D = 1.0$



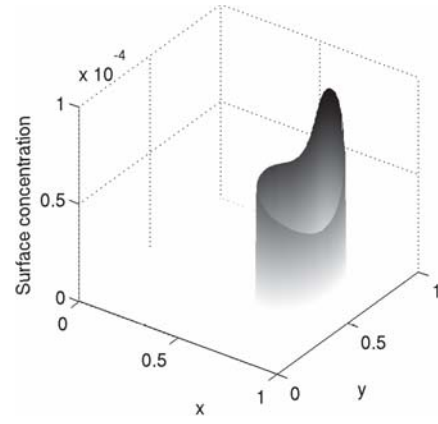
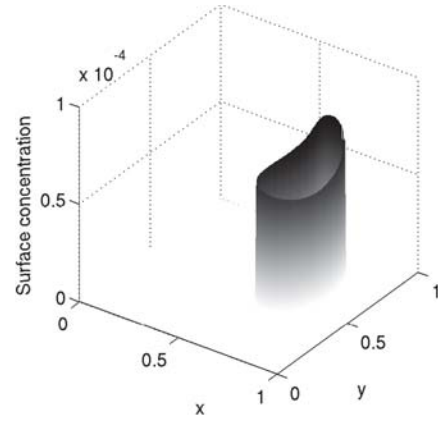
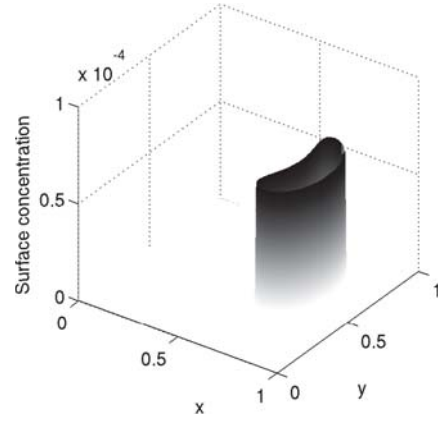
$D = 10.0$

(b) The results of reference[117]

Fig.6.4: Bulk surfactant concentration at $t = 0.5$ for the single vortex problem with bulk interface coupling

 $D = 0.1$  $D = 1.0$  $D = 10.0$

(a) The results of present solver

 $D = 0.1$  $D = 1.0$  $D = 10.0$

(b) The results of reference[117]

Fig.6.5: Interface surfactant concentration at $t = 0.5$ for the single vortex problem with bulk interface coupling

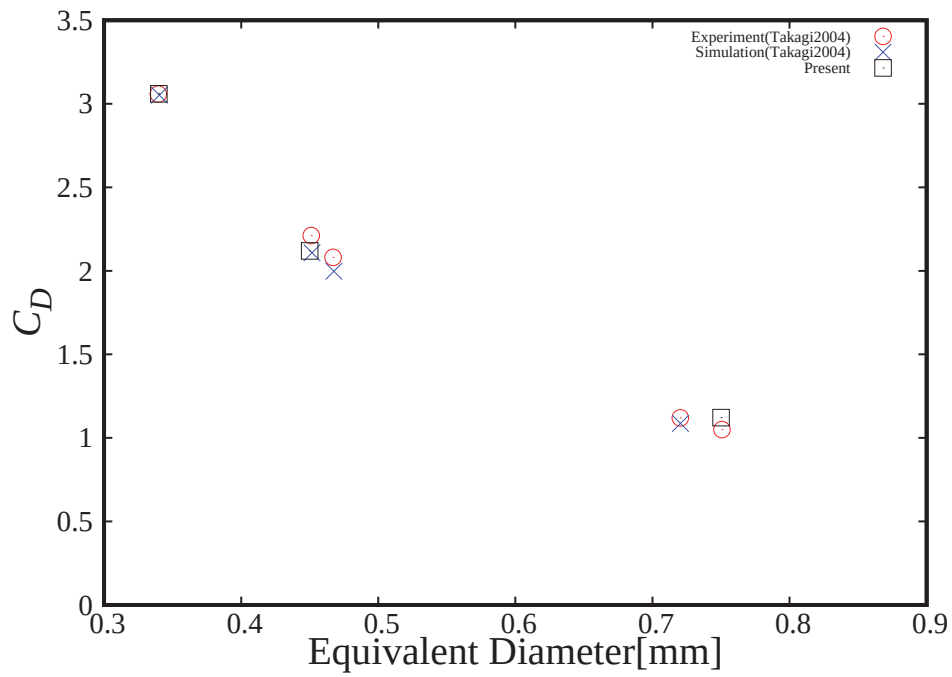


Fig.6.6: Drag coefficient of rising bubble into 1-pentanol surfactant solution

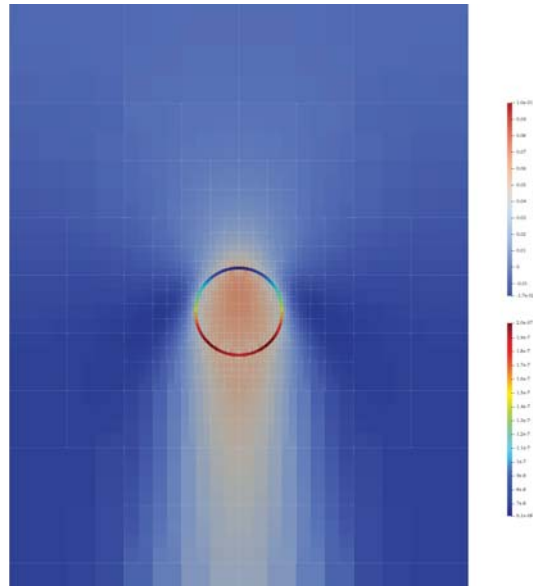


Fig.6.7: The profile of y-directional velocity and interface surfactant concentration for the bubble rising into 1-pentanol surfactant solution problem

参考文献の数値計算は、気泡が球形を保つと仮定し、軸対称直交曲線座標系の解適合格子を用いることで、界面上での界面活性剤輸送方程式をラグランジュポイント上で直接解いている。本手法と比較すると **Extension** のような操作を含まないため、より高精度に解くことが期待できる反面、気泡の変形を考慮できない欠点が存在する。本手法は **DIM** で任意の気泡変形や分離・合体も考慮できる利点があり、実験および解適合格子を用いた数値計算と同等の精度を持つことが示された。

Table6.2: Physical properties of Triton X-100[119]

	$k_{ad}[\text{m}^3/(\text{mol} \cdot \text{s})]$	$\beta[\text{mol}/\text{m}^3]$	$f_{lim}[\text{mol}/\text{m}^2]$	$k_{de}[\text{s}^{-1}]$
Triton X-100	50	6.6×10^{-4}	2.9×10^{-6}	0.033

Table6.3: The setting of physical properties of surfactant

	$F_0[\text{mol}/\text{m}^3]$	La
Triton X-100	1.0×10^{-4}	0.15
	1.0×10^{-3}	1.5
	1.0×10^{-2}	15

6.5 液膜安定化への影響

液膜に対して高解像度格子を割り当てるために、AMR法を適用した2次元計算を行う。水と空気の物性値を用いて、節5.5と同じ領域および界面設定を用い、計算領域 $0.02 \times 0.04 \text{ m}$ 中に直径 $d = 8.0 \text{ mm}$ 気泡を $(x_c, y_c) = (1.0, 1.0) \text{ mm}$ に配置し、気泡は $y = 0.02 \text{ m}$ に設定した液面に向かって上昇する。界面活性剤は、界面活性効果が強い Triton-X 100[119] を用いる。物性値は Table 6.2 に示す通りである。初期のバルク中の界面活性剤濃度 F_0 を変更して吸着・脱離特性を調整し、液膜への影響を調べる。界面活性剤の脱離のしやすさを表す無次元数であるラングミュア数 La は

$$La = \frac{F k_{ad}}{k_{de}} \quad (6.12)$$

で表せる。Triton-X 100 は吸着速度係数大きい割に脱離速度係数が小さいため、1-ペンタノールと比較しても吸着しやすく脱離しにくい性質を持つ。計算する La は Table 6.3 に示す通りである。界面上での界面活性剤濃度は $t = 0$ で $f = 0$ とし、まずは気泡がクリーンな状態から汚染が始まる条件で計算する。初期をクリーンな気泡とした場合の計算は $La = 1.5, 15$ の2通りで比較を行った。上昇する気泡形状は Fig. 6.8 に示す通りで、気泡形状の差はごくわずかである。Fig. 6.8, Fig. 6.9 では $0.1 < \phi < 0.9$ の範囲を界面上の界面活性剤濃度で色付けしており、 $La = 1.5$ と $La = 15$ でカラーバーのレンジが10倍程度異なっている点に注意する。 $La = 1.5$ と $La = 15$ では吸着している界面上での界面活性剤には10倍程度の差がつき、 La 数による吸着の強さがよく再現されていることがわかる。しかし、この問題の系では液面に到達するまでに飽和界面活性剤濃度に十分近づかず、式 (6.7) および Fig. 6.1 を見るとわかるように表面張力係数がそれほど減少しない結果、勾配もつきにくいためにマランゴニ効果もほとんど働いていないため、界面挙動にほとんど差が生じていないと考えられる。

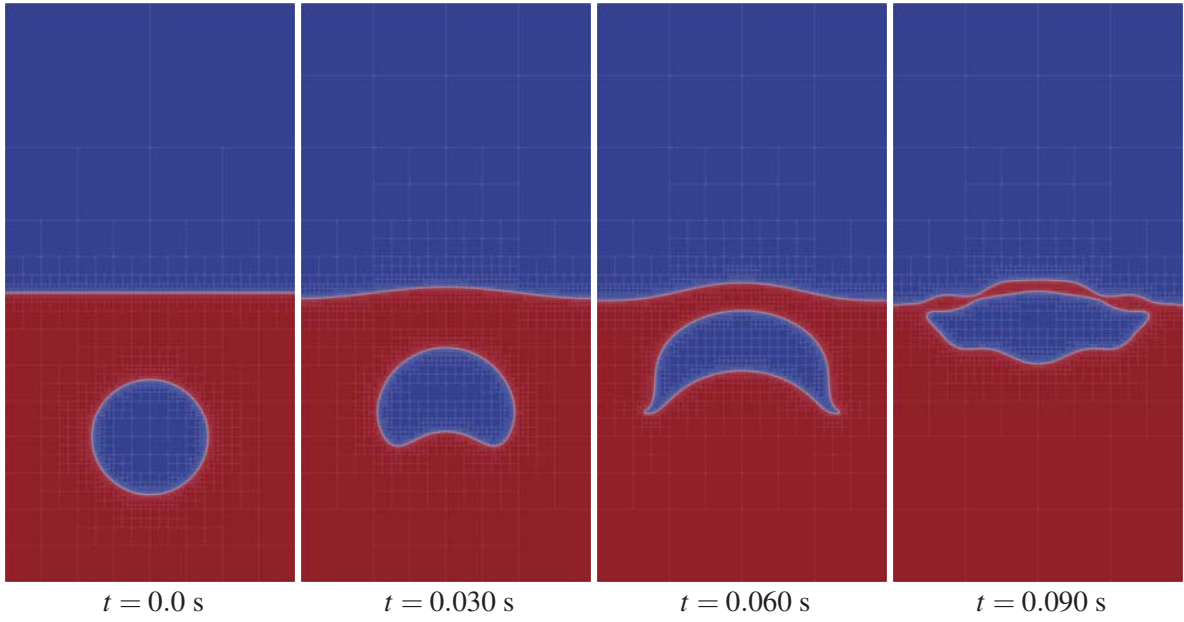
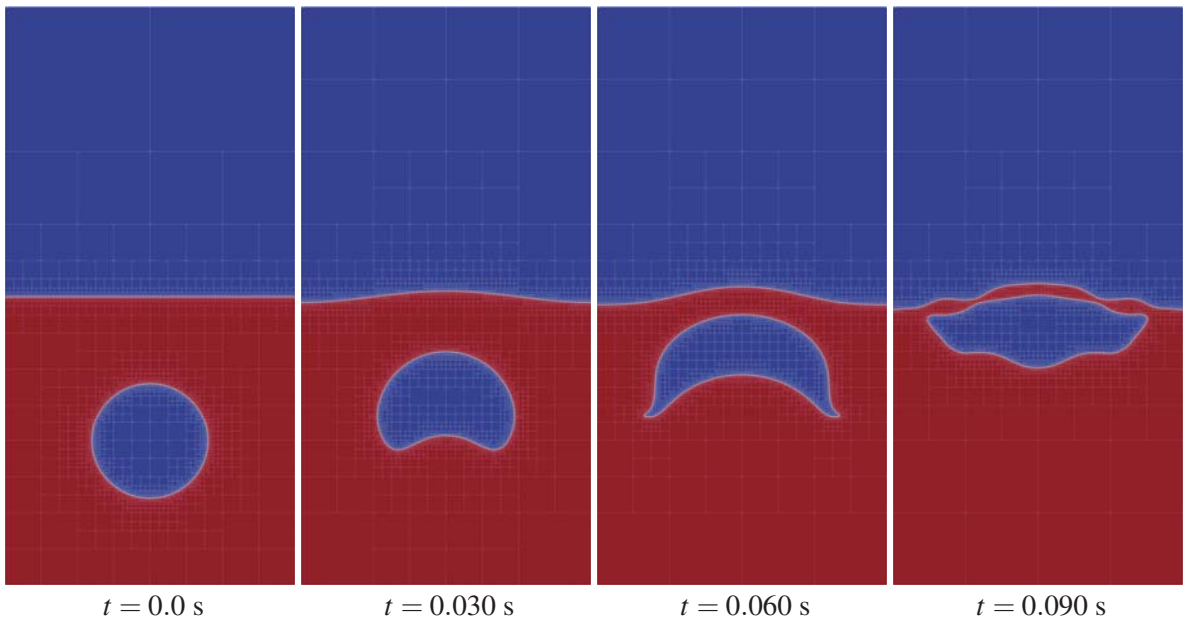
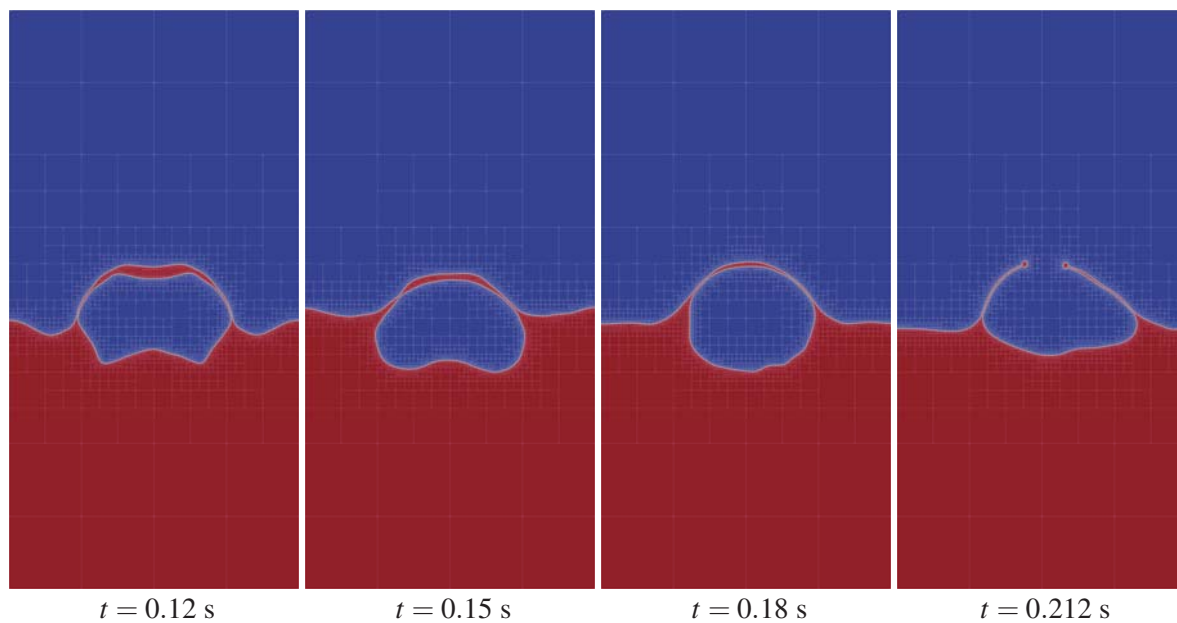
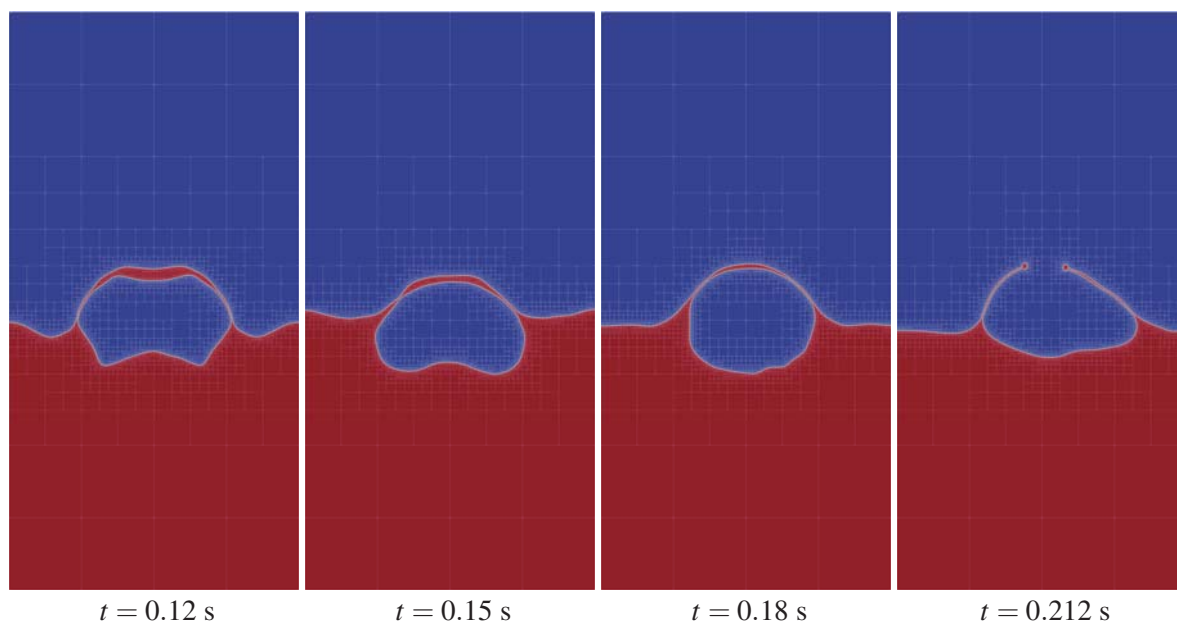
(a) $La = 1.5$ (b) $La = 15$

Fig.6.8: Phase-field profile for the bubble colliding started from clean with the liquid surface and forming liquid film in water solution.



(a) $La = 1.5$



(b) $La = 15$

Fig.6.9: Phase-field profile for the bubble colliding started from clean with the liquid surface and forming liquid film in water solution(later time).

続いて、界面活性剤の効果をより見やすくするために、初期の界面上での界面活性剤濃度を $j = 0$ となる平衡状態の濃度に設定する。物理的には気泡が十分長い時間静止した状態で汚染された仮定となる。Fig. 6.10, Fig. 6.11 に $La = 0.15, 1.5, 15$ の Phase Field プロファイルの時刻歴を示す。 La が大きいほど上昇気泡は平滑化されている。平衡状態の濃度を初期値に設定したことで、吸着が進みやすいとき飽和濃度に近づき、表面張力係数の勾配が急激になることによって強いマランゴニ効果が働き、気泡形状は平滑化される。気泡前方では流動によって界面活性剤濃度が低下し、液膜の上側における界面活性剤濃度が低いことになるので濃度が高い側から低い側への流動が発生し、液膜安定化に寄与していると考えられる。Fig. 6.12 に $0.1 < \phi < 0.9$ の領域における界面上の飽和濃度に対する界面活性剤濃度の割合 (すなわち f/f_{lim}) を色付けしたものを示す。Fig. 6.12 は La ごとにカラーレンジが異なっている点に注意されたい。気泡上昇に伴って気泡下部で界面活性剤が吸着し、前方で脱離が生じている。この吸着脱離傾向は非圧縮性溶媒による既往研究の結果とよく一致する [111]。バルクの濃度に応じて吸着の進み具合が変わっているが Triton X-100 のような吸着が強い界面活性剤では $1 \times 10^{-3} \text{ mol/m}^3$ 程度の添加でも気泡上昇中に十分飽和濃度に近づくような吸着が生じている。液膜形成後に注目すると、薄い液膜の液膜の下面は上昇気泡の上面に相当するため上昇運動中に脱離が発生し、界面活性剤濃度は液膜上面と比較して小さい値となっている。次に、マランゴニ効果について考察するために $La = 15$ の計算結果に対して、 $t = 0.25 \text{ s}$ における液膜上面および下面での濃度勾配がわかりやすくなるようカラーレンジを調整した図を Fig. 6.13 に示す。液膜上面および下面の両方で、液膜の上方で濃度が低く、気泡中心から左右に離れるほど界面活性剤濃度が上昇していることがわかる。この分布は重力によって界面活性剤が下向きに輸送されていると考えられる。この濃度勾配を回復するように界面の接戦方向にマランゴニ対流が生じ、重力による液膜崩壊とは逆向きの、液膜を安定化させる方向に力が働いていると考えられる。また、式 (6.7) からわかるように、界面活性剤濃度が飽和濃度に近づくとき表面張力係数自体が低下するため、表面張力係数の低下自体も液膜安定化に寄与していると考えられる。以上の結果から、界面上の界面活性剤濃度が飽和濃度に近い分布を持つとき、 La 数が高いと、界面上の界面活性剤濃度勾配から生じる表面張力係数の勾配が大きくなり、結果として強いマランゴニ効果が働くことによって液膜安定化に寄与すると結論づけられる。

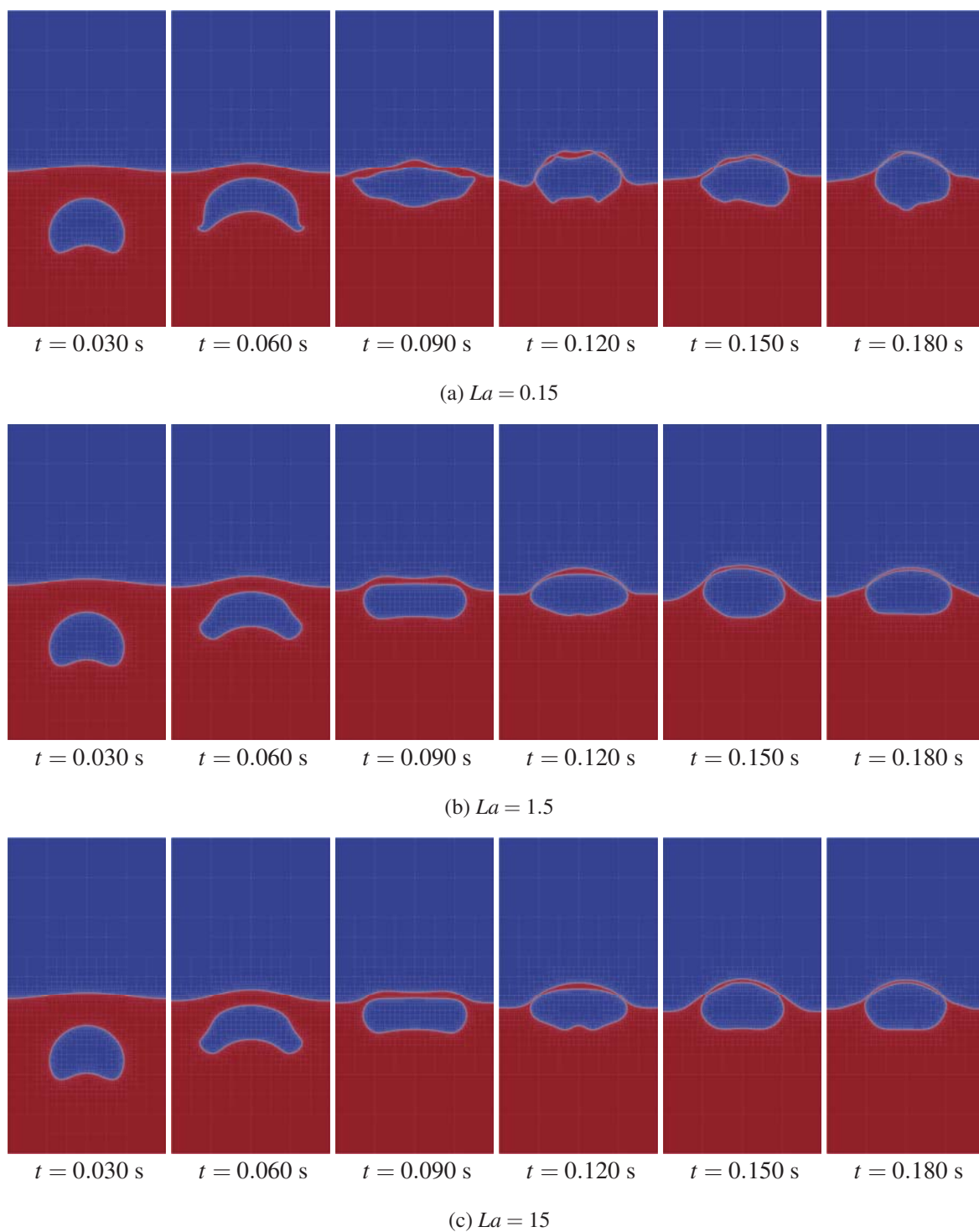


Fig.6.10: Phase-field profile for the bubble colliding started from contaminated state with the liquid surface and forming liquid film in water solution.

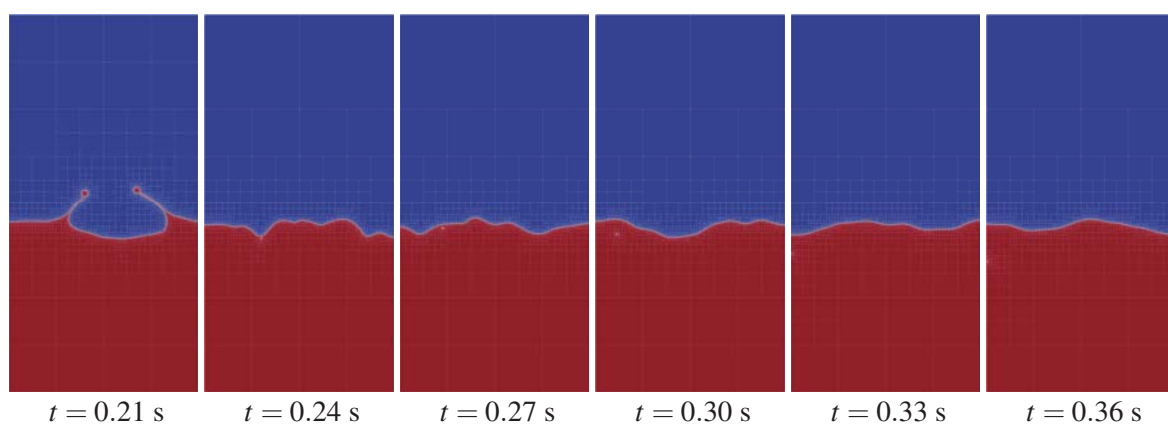
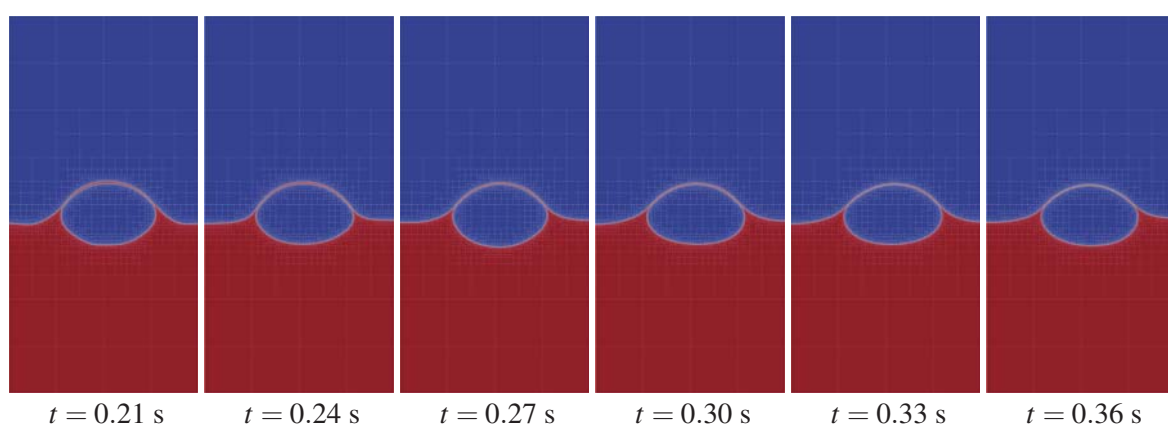
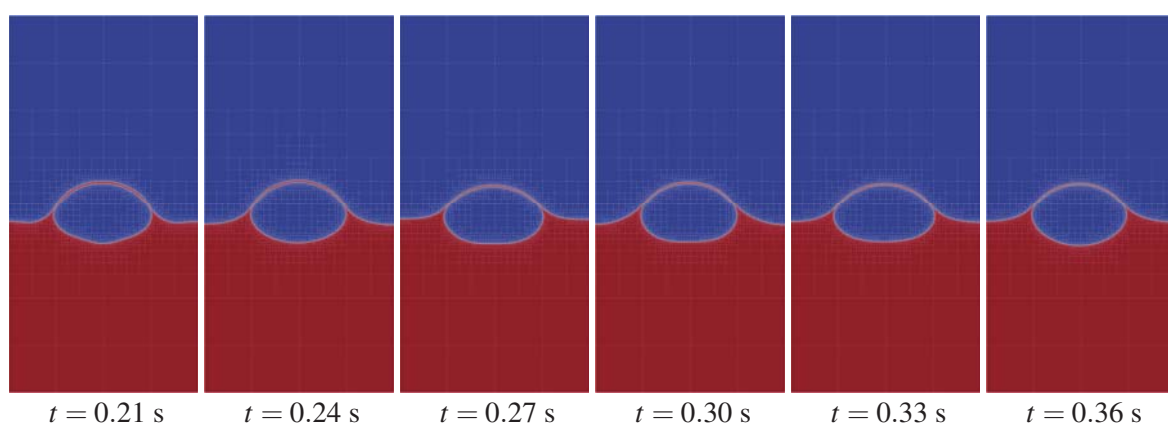
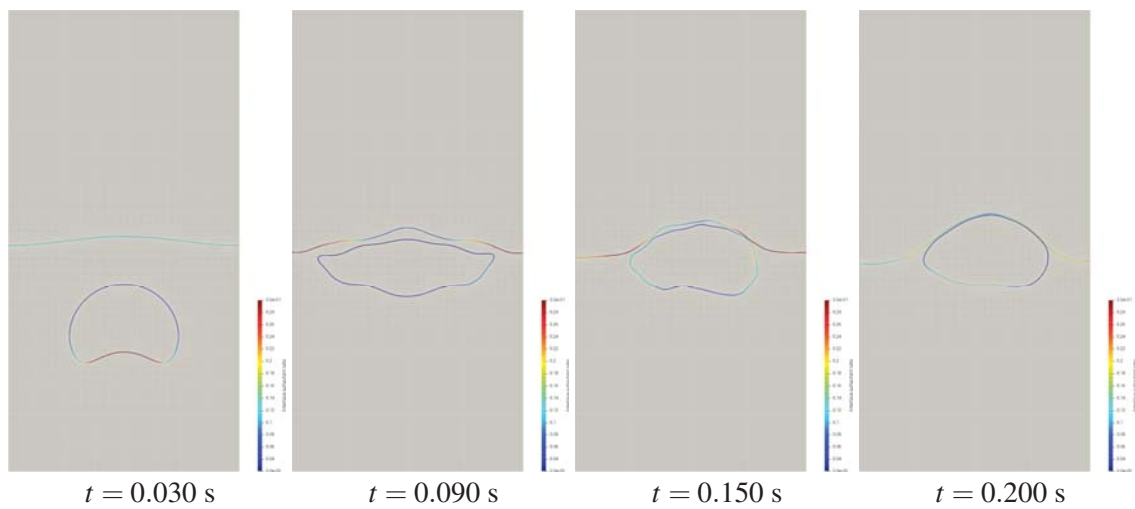
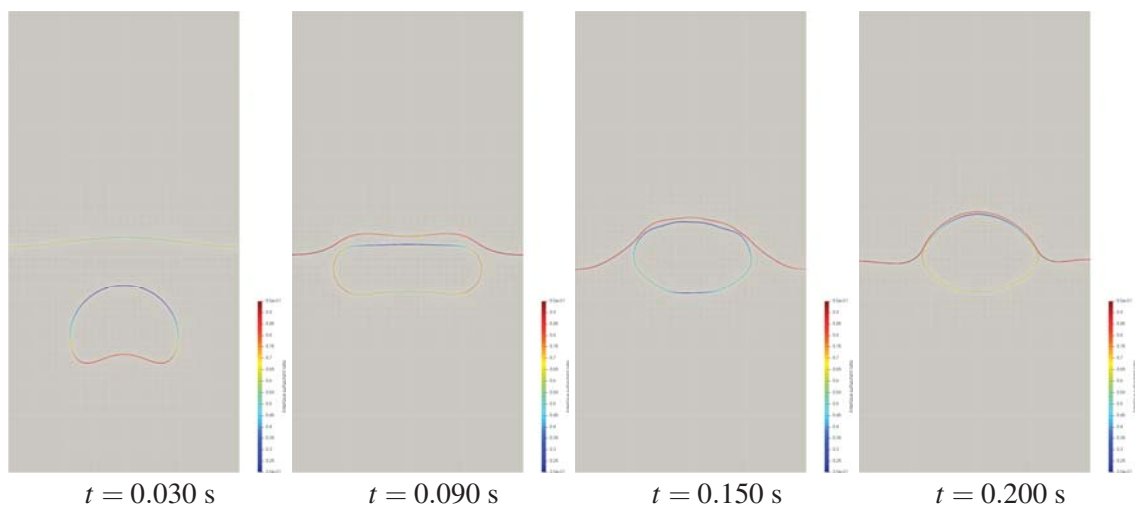
(a) $La = 0.15$ (b) $La = 1.5$ (c) $La = 15$

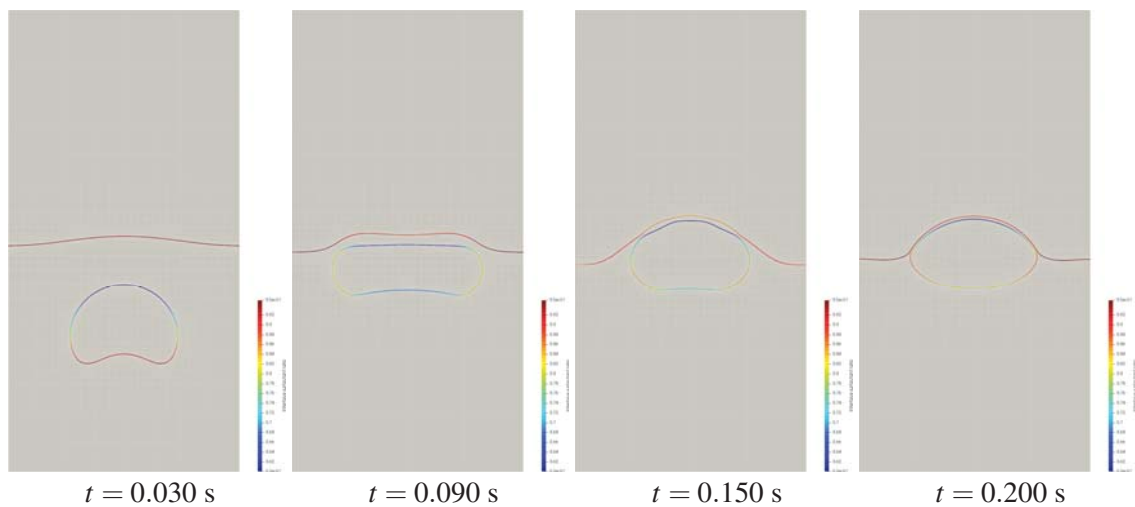
Fig.6.11: Phase-field profile for the bubble colliding started from contaminated state with the liquid surface and forming liquid film in water solution(later time).



(a) $La = 0.15$



(b) $La = 1.5$



(c) $La = 15$

Fig.6.12: Interface surfactant ratio within $0.1 < \phi < 0.9$ for the bubble colliding from contaminated state with the liquid surface problem.

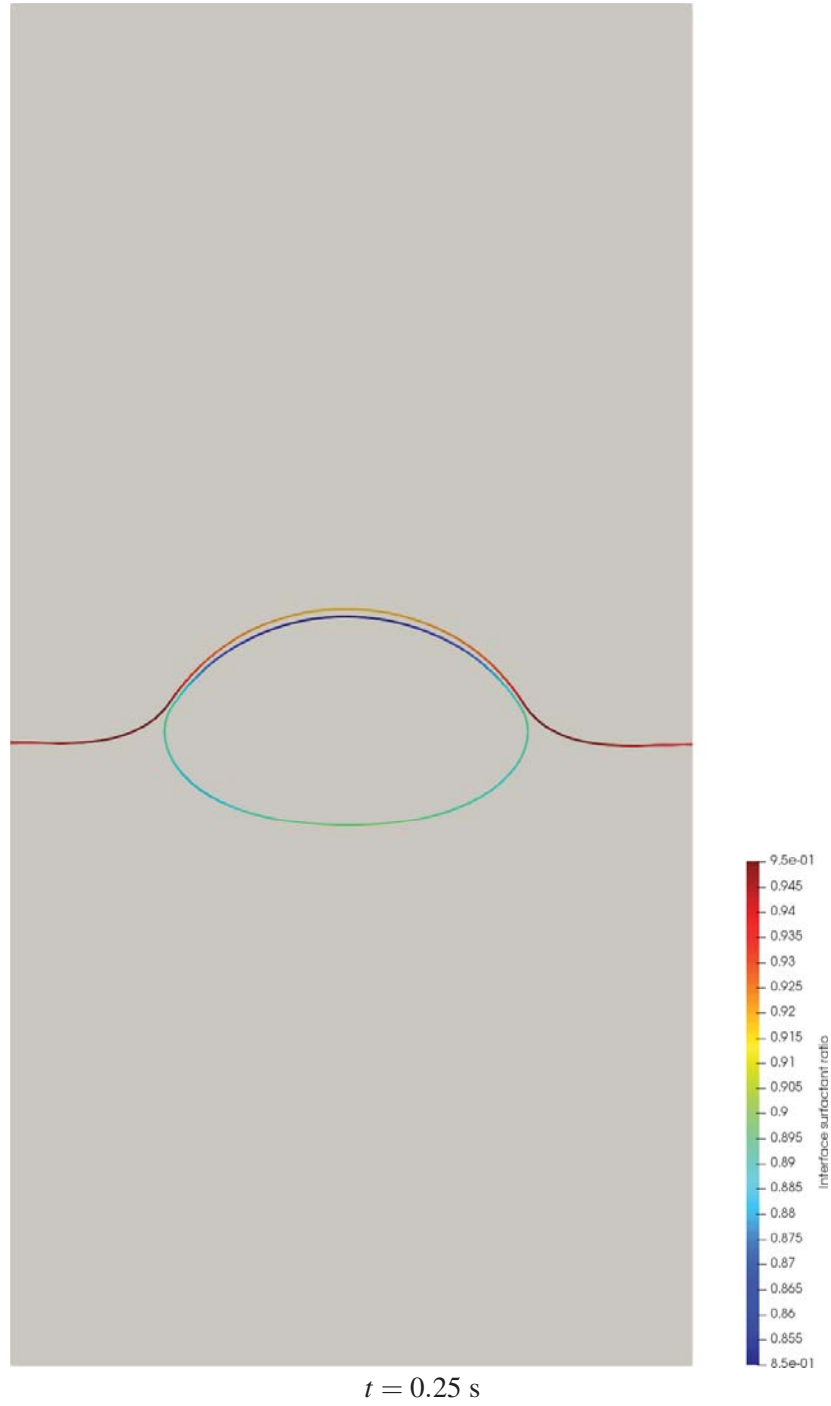


Fig.6.13: Color adjusted interface surfactant ratio within $0.1 < \phi < 0.9$ for the bubble colliding from contaminated state with the liquid surface problem($La = 15$).

上記の液膜安定化のための表面張力および界面活性剤濃度に関する知見を活かして、別の物性値を用いても液膜が安定化できるかどうか確かめる。節 4.5.5 で用いたシャボン液に対してさらに Triton-X 100 を添加した場合の気泡上昇を考える。AMR 法による最細格子は均一 512×1024 格子相当である。水中を上昇する気泡計算と EO 数を同程度とするために、スケールを $1/2$ とし、添加する界面活性剤濃度は $2.0 \times 10^{-6} \text{ mol/l}^3$ と少量とするが、界面上の界面活性剤濃度は飽和濃度の 20% 程度汚染された状態から計算を始める。界面活性剤を加えていない場合と、加えた場合の Phase field 変数プロファイルを Fig. 6.14($t = 0.0 \text{ s}$ から $t = 0.080 \text{ s}$) と Fig. 6.15($t = 0.083 \text{ s}$ から $t = 0.166 \text{ s}$) に示す。界面活性剤がない場合、上昇する気泡は変形が大きく、気泡上昇後に薄くなった液膜部分から即座に破れる。一方で界面活性剤水溶液中の気泡は上昇中に形状が平滑化されており、 $t = 0.166 \text{ s}$ まで液膜を維持し続ける。界面活性剤が添加されると表面張力係数は低くなり、気泡が丸くなろうとする力は弱まるはずだが、マランゴニ効果によって濃度勾配を均一化するように流動が起こり、結果として気泡形状が平滑化されている。 $2.0 \times 10^{-6} \text{ mol/l}^3$ というごく少量の Triton X-100 の添加だが、初期気泡が十分汚染されていれば、Triton X-100 の吸着脱離特性に応じて飽和濃度に近い領域で表面張力係数の勾配が大きくなり、マランゴニ効果が作用することが確かめられた。同じ計算条件で、界面活性剤を添加した気泡上昇をもう一段細かい格子 (均一 1024×2048 相当) で解いた結果を Fig. 6.16 に示す。上昇する気泡形状は粗い格子の結果とほとんど変化がなく、液膜を含まない段階では格子を細かくしたことによる効果はほとんど見られない。高解像度格子を用いると $t = 0.166 \text{ s}$ で起きていた液膜の崩壊が起こらず、 $t = 0.4 \text{ s}$ 以降はほぼ界面状態は定常となり、変形が起こらなくなる。長時間計算でも崩壊せず安定になるか確認するため、 $t = 2.0 \text{ s}$ まで計算したが、液膜は安定して維持し続ける結果を得た。

以上より、液膜形成計算では、表面・粘性・慣性のバランスはもちろんのこと、マランゴニ効果を含む界面活性剤の効果が非常に重要であり、液膜形成の段階で界面上での濃度が飽和濃度に近くなるように、初期バルク界面活性剤濃度および La 数の高くなりやすい界面活性剤を用いる必要がある。界面活性剤濃度分布および表面張力自体の解像のためにも、薄い液膜を解像するための高解像度格子も必須と言える。高解像度格子と、液膜内部の曲率修正およびマランゴニ効果を導入することで、有限厚さの界面幅を持つ拡散界面型でも液膜を安定化させることができることを示した。

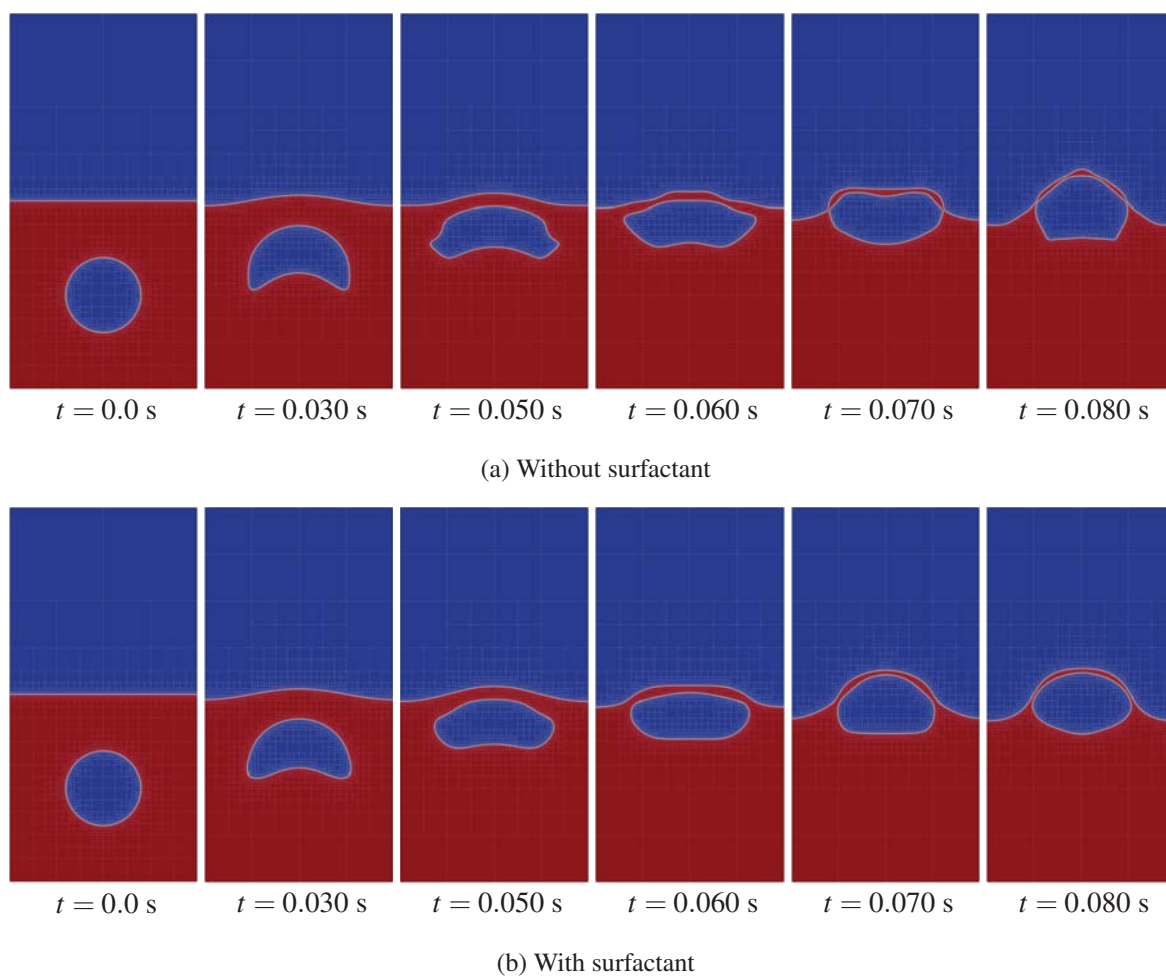


Fig.6.14: Phase-field profile for the bubble colliding with the liquid surface and forming liquid film in 20% gricelyne solution; from $t = 0.0$ s to $t = 0.080$ s.

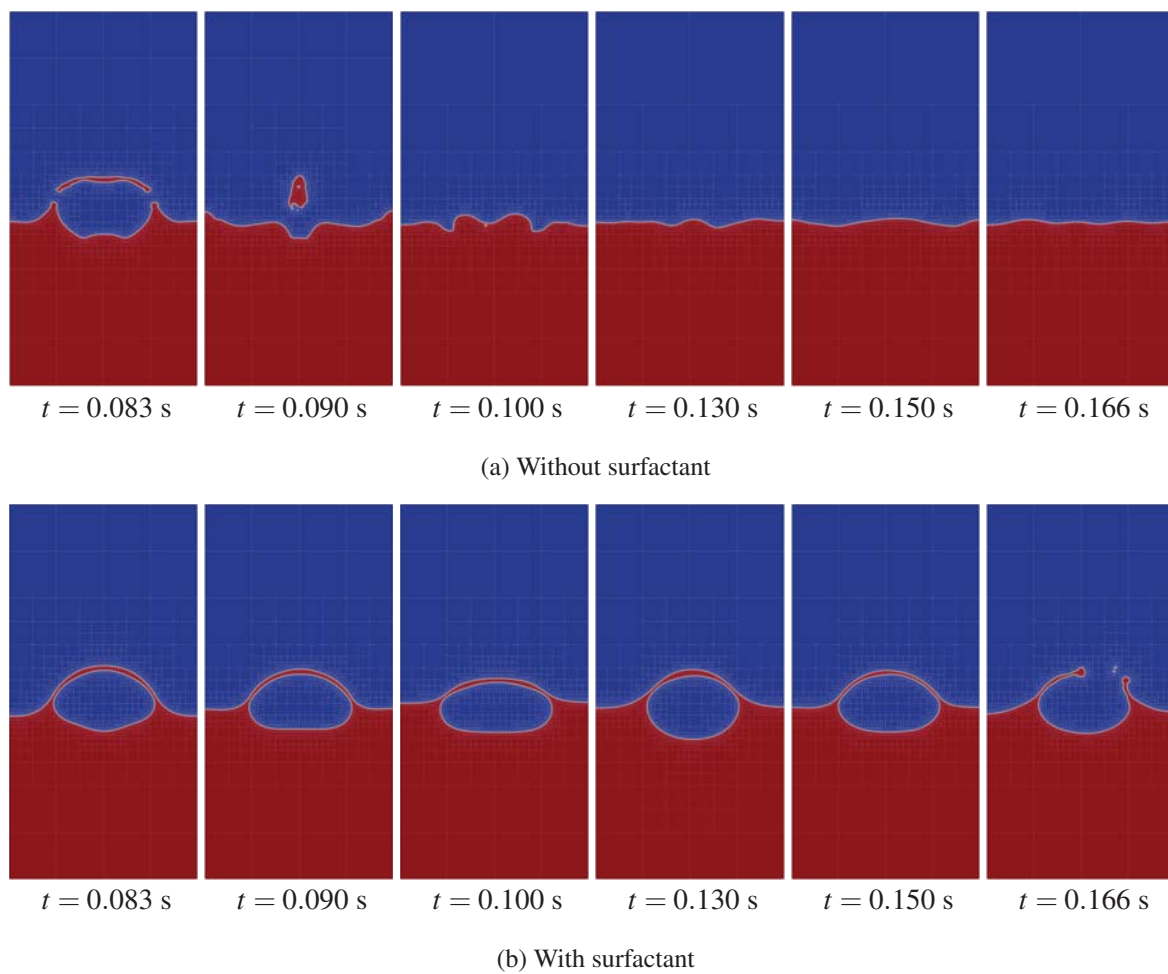


Fig.6.15: Phase-field profile for the bubble colliding with the liquid surface and forming liquid film in 20% gricelyne solution; from $t = 0.083$ s to $t = 0.166$ s.

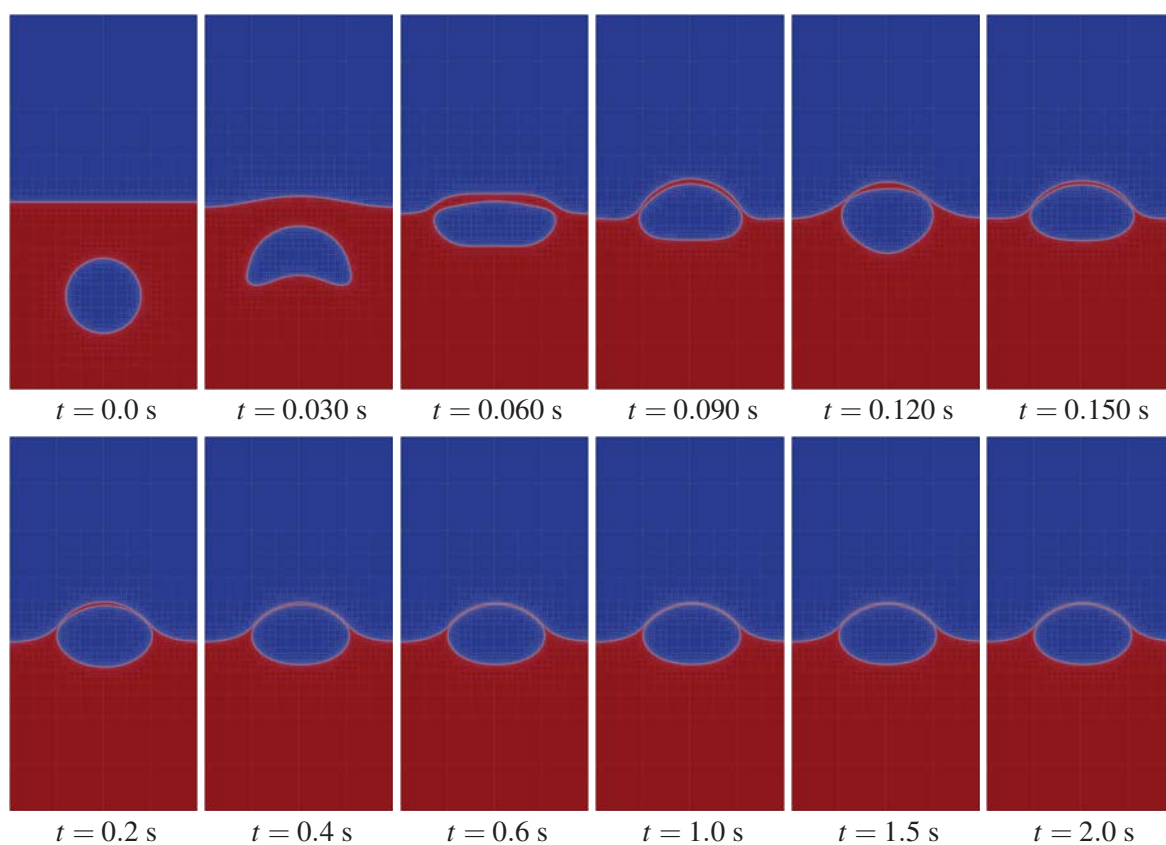


Fig.6.16: Phase-field profile for the bubble colliding with the liquid surface and forming liquid film in 20% gricelyne solution using higher resolution mesh

6.6 界面活性剤の吸着・脱離を考慮した輸送方程式と濃度差マランゴニ効果の導入のまとめ

本章では、バルクおよび界面上における界面活性剤の吸着・脱離を考慮した輸送方程式とマランゴニ効果を弱圧縮性流体解析手法を用いた AMR コードに導入した。マランゴニ効果は界面上での界面活性剤濃度勾配による表面張力の勾配によって引き起こされ、界面上での界面活性剤濃度を数値的に予測することが必要となる。バルクの界面活性剤移流拡散方程式と、界面上での界面活性剤輸送方程式を Langmuir の式で橋渡しすることで、吸着脱離特性を考慮した。

検証計算として、速度場が与えられている場合の界面上での界面活性剤濃度輸送方程式を解き、陰解法で解かれる既往研究の結果を、陽解法でよく再現する結果を得た。界面上とバルクの界面活性剤をカップリングさせた場合の移流ベンチマーク問題による界面活性剤輸送も、拡散係数の違いによる界面活性剤分布の違いが定性的に捉えられており、本ソルバーが妥当に輸送方程式を解けていると言える。高密度比の気液二相流へ適用可能であるかの検証として、界面活性剤溶液中の気泡上昇計算を行い、気泡の抗力係数が実験および既往の数値計算結果と非常によく一致することを確認した。汚染された気泡の上昇速度は滑りあり壁面を境界条件とする剛体球の抗力係数に近づくことが知られており、その傾向もよく再現されている。既往の数値計算では、気泡を完全な球形と仮定してラグランジュポイントを持たせて陽的に界面位置を同定し続けることができる手法で、界面上での濃度輸送に関しては高精度に解くことが可能であると考えられる一方で変形を考慮できない。本手法では気泡は球仮定を適用しているわけではなく表面張力によって球形を保っており、任意の変形・分裂も可能でありながら、高精度に濃度分布から引き起こされるマランゴニ効果による気泡上昇速度の減少を捉えられており、様々な問題でマランゴニ効果を高精度に予測可能であると考えられる。

界面活性剤が液膜形成に与える影響を調べるために吸着の度合いを表す無次元数 La 数を変えて液面向かって上昇する気泡計算を行った。初期条件で全く汚染されていない気泡を設定した場合、気泡が液面の到達するまでに、界面活性剤が界面上に十分吸着し切らず、表面張力係数の勾配が小さかったために界面活性剤による液膜安定化の効果はほとんど見られなかった。初期気泡が十分汚染された状態で気泡上昇計算を行うと、バルクにわずか $1.0 \times 10^{-3} \text{ mol/m}^3$ の Triton X-100 を添加しただけでも界面活性効果が顕著に現れ、マランゴニ効果によって気泡が平滑化され、液膜は安定に維持される。界面活性剤は気泡の上面で濃度が低下し、下面で濃度が低下する。上昇中の気泡形状の平滑化はこの濃度差によって引き起こされるマランゴニ効果によるものであると考えられる。液膜形成後は重力によって液膜上方での界面活性剤濃度が界面上に沿って左右に流されるため、上方の濃度低下を補う方向にマランゴニ効果が働き、液膜を安定化させる方向に力が働く。界面活性剤を考慮しない場合、液膜は重力によって徐々に薄まっていき、破れるため、重力を含む液膜計算には限度がある。本計算結果によって液膜安定化のためには、マランゴニ効果が重要な役割を果たしており、界面上で十分吸着した界面活性剤の濃度勾配による界面接線方向の表面張力勾配が大きいとき液膜が安定化することが数値計算によって確認された。

第 7 章

結言

気液二相流は、化学プラントや液体燃料電池内部、自動車などの工学製品で現れ、現象予測・設計に役立つ知見獲得のために界面での現象を数値計算で精度よく捉えることは重要である。そのために界面近傍を高解像度格子で計算する必要があるが、ポアソン方程式の求解がボトルネックとなる半陰解法では大規模化に限界があり、実現が困難であった。本研究では、ポアソン方程式から脱却した完全陽解法による気液二相流計算手法を開発し、計算精度・安定性を有しながら様々な非圧縮性領域の気液二相流計算へ十分適用可能であることを示した。GPU 上で効率的に演算可能な AMR 法のコードをフルスクラッチで開発し、界面に動的に高解像度格子を適合するスケーラビリティの良い弱圧縮性解法の開発に成功した。

各章の内容を以下にまとめる。

特性線に基づく弱圧縮性計算による気液二相流解析

第 2 章では、特性線解法に基づく弱圧縮性気液二相流計算手法の開発および検証を行った。流体方程式にフラクショナル・ステップ法と方向分離法を適用することで 1 次元オイラー方程式を解く問題へ帰着させ、 $CFL = 0.9$ の条件の元で semi-Lagrangian 法を適用可能にした。5 次精度 WENO 補間関数を用いているため、1 段の時間積分計算で 1 次元のオイラー方程式に対しては 5 次精度の時間精度となり、高効率かつ高精度な手法を実現した。界面捕獲手法として、保存形マルチモーメント法による保存形 Allen-Cahn 方程式を解く手法を開発し、Level Set 関数とカップリングさせることで幾何計算精度を向上させた。圧縮する Phase field 変数に対して、制限を設けて再初期化された Level Set 関数は非圧縮となる。Allen-Cahn 方程式の拡散項による密度の圧縮性緩和効果を Phase-field 変数に対して適用する一方で、比較的高いマッハ数で計算した際に生じる振幅の大きい圧力波による密度の圧縮性に対して、Allen-Cahn 方程式の逆拡散項の勾配計算を Level Set 関数で計算することで密度の圧縮性を緩和させることに成功した。

検証問題として典型的なベンチマーク問題を解いた。semi-Lagrangian 法による線形移流計算精度検証から始まり、単相流計算では、Shock tube 問題、Cavity flow 問題、円柱周りの流れ計算、球周りの流れ計算を行った。非保存形の圧縮性 Navier-Stokes 方程式を解いているため、Shock tube 問題では衝撃波面は解析解と合わなかったが、接触不連続面および膨張波面は解析解とよく一致しており、低マッハ数領域で

の計算へ適用可能であることを確かめるとともに、オーバーシュート・アンダーシュートを抑制可能な WENO 補間関数を用いれば $CFL=0.9$ でも高精度に計算が可能であることが確かめられた。多次元計算では、Cavity flow 問題、円柱周りの流れ計算、球周りの流れ計算を行い、非圧縮性の結果および実験値と良好な一致を得た。界面移流ベンチマークとして、矩形移流問題を解き、CIP-CSLR1 法が有理関数の効果によってオーバーシュート・アンダーシュートを防ぐことと、保存形 Allen-Cahn 方程式の右辺の効果によって界面幅が一定に保たれることを確かめた。Single vortex 問題においても本手法が THINC/WLIC 法と遜色ない界面形状精度を達成できることが確かめられた。続いて気液二相流のベンチマーク問題としてダム崩壊問題、Rayleigh-Taylor 不安定性の計算を行い、Phase field パラメータが弱すぎると界面拡散が過剰となり、強すぎると界面形状精度が悪化することがわかった。また Level Set 法とカップリングすることで、強い界面モビリティパラメータに対しても、カップリングしない場合と比較して界面形状精度を向上させることができた。適切にパラメータを設定することで、THINC/WLIC 法で生じていた界面拡散による界面の剥がれを防ぐことができた。ダム崩壊計算や、気泡上昇問題、液滴振動問題では非圧縮性の結果と良好な一致を得ることができ、表面張力を含む非圧縮性領域の気液二相流へ十分に起用可能であることが示された。応用計算として、ミルククラウンの形成過程のシミュレーションを実行した結果、非圧縮性で見られるようなフィンガー状の界面形状を再現することができ、界面の大変形を含む流れ計算においても適切に表面張力を含む流体計算が行えていることがわかった。複数 GPU による浅い水面を設定したダム崩壊計算では、約 1.27 億格子を用いた非常に激しい高レイノルズ数流れの計算となり、陽解法ではしばしば安定性を維持することが困難とされるが、本手法では安定して計算を行うことができ、高い堅牢性と高解像度計算への適用性を確認することができた。

等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く弱圧縮性解法の導入

第3章では、等温過程の Navier-Stokes 方程式を解く弱圧縮性解法の開発および検証を行った。等温過程では温度 T が一定となり、音速をパラメータとした状態方程式を適用することができ、連続の式は圧力の発展方程式に置き換えられる。導出した式に対してさらに低マッハ数を仮定して式を簡略化することで最終的な方程式が得られるが、運動量保存から導かれる式は非圧縮性 Navier-Stokes 方程式と同等となり、放物型の圧力ポアソン方程式が双曲型の圧力発展方程式に置き換わる。単相流の検証では Cavity flow を解き、 $Re = 100,5000$ で非圧縮性ソルバーとよい一致を得た。計算コスト削減のために、界面捕獲手法を解くスキームを保存形マルチモーメント法から有限体積法に変更し、自由度を $1/8$ に削減した。界面移流のベンチマーク問題を解いた結果は、THINC/WLIC 法と遜色ない結果を得ることができた。非圧縮性ソルバーですでに適用されている密度重み付けされた移流項の離散化を弱圧縮性解法に対しても適用し、密度の空間変化を考慮した。非圧縮性気液二相流計算のベンチマーク問題としてダム崩壊計算と気泡上昇問題を解き、非圧縮性ソルバーの結果および実験値を良好な一致を得た。また、弱圧縮性手法ではポアソン方程式を解かないので、初期圧力場はダイバージェンスフリーを満たす圧力場から程遠い場合に、振幅の大きい圧力波が発生し、ノイマン条件が課された壁面で反射を繰り返すことによって圧力・速度場が振動する。これに対して初期数ステップ程度ポアソン方程式を解くことで初期圧力プロファイルを回復させ、2次元気泡上昇問題における弱圧縮性特有の上昇速度振動を抑制した。特性線解法

に基づく弱圧縮性手法と比較すると、スタaggerド格子配置となるため AMR 法実装がやや煩雑となるが、音速を空間的に一定なパラメータとして扱える点と、密度重み付けされた移流項の評価が行える点が利点となることを示すことができた。

界面に適合する AMR 法

第 4 章では、AMR 法の実装について述べ、検証計算および応用計算を行った。GPU 計算の高効率化と、界面に適合して頻繁に行われる動的な格子細分化・粗大化に対応するために、メモリアクセスが連続的となるブロック構造格子を単位領域にもつツリー型の AMR 法を採用した。立方体領域以外に対応するために複数の木構造を用いたデータ構造を用い、メモリの確保・開放が低速である GPU のために余分に確保されたメモリ・プールのデータ構造を用いる実装を行った。これにより頻繁に繰り返される細分化・粗大化の際に毎回メモリの確保・開放を行わなくてよくなり、効率が向上する。メモリのデフラグメンテーションまでコード側で行うことで、虫食い状になったメモリ・プールを整理し、余分なメモリの確保頻度を減らした。一つのリーフが一つの CUDA block に対応するようにコード設計を行うことで、shared memory を利用したステンシル構築を行った。隣接点への参照があるカーネル関数内部で隣接リーフの情報にアクセスして shared memory 上に値を構築し、その後は等間隔直交格子の計算を行えばよい実装となる。隣接点参照のためにリーフに袖領域を持たせたり、ゴーストリーフを確保するような手法と比較するとメモリ使用量が最小限に抑えられ、かつグローバルメモリへの読み書き頻度も減少する。開発したコードではノード・センター、セル・センター、スタaggerド格子配置(セルフェイス)の値に対して AMR 法を適用できるようにメモリ・プールの配列の型を変更できるような実装になっている。例えばセル・センターならば CellBlock クラスをテンプレート引数にした BufPool クラスでメモリを管理するといった具合になり、拡張が比較的容易である。保存形マルチモーメント変数の AMR 補間では、単一のリーフで閉じていながら 3 次精度の補間値を構築することができるという点が非常に優れており、界面でレベル差を許容する場合や、レベル差で急激な勾配を許すような格子の適合を行う場合には有効であると考えられるが、界面に適合する AMR 法では、Phase field 変数はレベル差で勾配をほぼ持たない。そのためレベル差補間制度は計算結果にほとんど影響しないので、界面に常に最細格子を適合させるならば有限体積法でも十分であることがわかった。

検証問題として、CPU で保存形マルチモーメント法による界面移流のベンチマーク計算を実施し、時間平均 1/12.3 の格子点数削減に対して 9.26 倍の計算時間削減を達成し、AMR 法が非常に有効であることを示した。開発したコードを GPU へ拡張し、気液二相流計算と組み合わせてダム崩壊計算や気泡上昇計算を行い、AMR 法を適用した計算結果が均一格子をよく再現することを確かめた。浅い水面を設定したダム崩壊計算など、非常に激しく高レイノルズ数流れとなる場合は均一格子の結果と AMR 法を適用した結果で若干の差異が確認され、AMR 法は完璧であるとは言い難いものの、細かい液滴の飛散や気泡の生成を少ない格子点数で再現することができており、計算コストを削減しながら細かい界面挙動を把握できている。さらに、物体を含む流れ計算として、スプーンに衝突する水の 2 次元/3 次元流れ計算を行い、スプーンの湾曲面に沿って液膜が生成されるという現実世界でよく目にするような現象を再現することができた。水が最も広がっている物理時間における格子数削減効果も、均一と比較して 6.8% と大

幅な削減に成功している。AMR と弱圧縮性による Jet flow の計算では、同じ陽解法である LBM にフィルターを施して安定化させた計算結果より界面をシャープに捉えられている。非圧縮性との差異は、密度重み付けによるものであると考えられ、密度変化を考慮しながら、非常に激しい流れ計算を安定に行っている。非圧縮性ソルバーでは、均一格子を用いて 2007360 コア時間を要した計算規模の問題に対して、単一の Tesla V100 の GPU で約 11 時間程度で計算が終了しており、CPU と GPU との差や計算機世代の差を考慮しても、非常に高速に計算が行えることを示した。AMR 法が非常に有効な流れ計算として液体自由膜を含む流れ計算を行い、2 次元/3 次元シャボン玉形成シミュレーションを実施した。液膜では Level Set 関数の谷で曲率に深刻な誤差を含むため、簡便な曲率修正法を考案し適用することで、液膜を破れにくくした。3 次元シャボン玉形成シミュレーションでは、表面張力係数が大きいほど液膜が破れやすくなる結果が示されたが、液膜崩壊が非常に早く、格子解像度が不足していると考えられる。2 次元計算では十分に格子を割り当てることができ、物理時間 5 秒まで気体を流入させてもシャボン玉は破断せず、初期直径に対して 7.8 倍膨張させることができた。AMR 法を用いることで、非常に薄い液膜を高解像度格子で表現することができたおかげで現象の再現に成功した。3 次元の液面で液膜を形成する気泡上昇計算では、粗い格子で再現できなかった液膜形成後の気泡の跳ね返りを再現することができ、液膜を含む流れ計算に対して非常に多くの格子が必要なることが明らかとなった。

FENE-CR モデルの導入による粘弾性流体解析

第 5 章では、FENE-CR ダンベルモデルに基づく粘弾性構成方程式の導出および数値計算法について述べた。4 章までで開発したコードに粘弾性流体モデルを組み込むことで、ソルバーの適用範囲を拡大した。検証計算として、粘弾性液滴を重力加速度の元で落下させて地面に衝突させる問題を 3 次元の AMR コードを用いて解き、界面形状の時刻歴が非圧縮性ソルバーを用いた参考文献とよく一致することを確認した。さらに液滴の直径の時刻歴を比較し、種々のソルバーの結果と定性的に一致することが確かめられ、FENE-CR モデルを妥当に組み込んでいると結論づけた。応用計算として、液面で液膜を形成する気泡上昇計算を行い、代表的な粘弾性パラメータである緩和時間を変化させた時の上昇気泡および液膜の挙動を調べた。粘弾性流体中を上昇する気泡の変形はニュートン性流体中を上昇する気泡と比較して変形が抑制され、早い段階で液膜が液面でほとんど静止した状態へ移行する。しかし、液面で落ち着いた気泡上面で形成される液膜は重力によって薄くなり、結果としてニュートン性流体より早い段階で崩壊する。変形が液膜崩壊の主たる要因である場合は液膜を長時間安定化させる効果が期待できるが、変形が落ち着いたのちの重力による液膜の崩壊を防ぐほどの効果はなく、マランゴニ効果などの重力に対抗しうる効果を導入する必要があることを示すことができた。

界面活性剤の吸着・脱離を考慮した輸送方程式と濃度差マランゴニ効果の導入

第 6 章では、界面活性剤の吸着・脱離を考慮した輸送方程式とマランゴニ効果を弱圧縮性解法と AMR 法を含むソルバーへの導入した。バルク中の界面活性剤の移流拡散方程式に加えて、界面上での界面活性剤濃度輸送式を解き、Langmuir の式で両方程式を橋渡しすることで、界面への界面活性剤の吸着脱離

を考慮した。界面位置を陽に表さない DIM を用いているので、界面上での活性剤濃度を界面近傍に境界条件を満足する様に分布させることで、オイラー格子上で記述される本手法への適用を可能とした。検証計算として、速度場が与えられている場合の界面活性剤輸送を解き、まず界面上の界面活性剤単体の輸送方程式が妥当に解けていることを確かめた。次にバルクと界面上の界面活性剤輸送をカップリングさせた場合の検証を行い、参考文献の非圧縮性ソルバーおよび、陰解法による輸送方程式の解法を用いた結果と定性的一致を得た。高密度比気液二相流計算へ適用可能であるかの検証として、界面活性剤水溶液中を上昇する単一気泡上昇問題を解き、実験および非圧縮性ソルバーの結果と抗力係数がよく一致することを確認した。不純物中の気泡は滑りなし速度の境界条件を課した剛体球に近い抗力係数を示すことが知られており、その傾向を再現することができた。また参考文献の非圧縮性ソルバーでは気泡を変形なしの球と仮定してラグランジュポイント上での界面活性剤濃度を解いているため、界面上での境界条件の精度が高い。本手法は任意の変形が可能でありながら、同等の結果を得ることができており、汎用性の高さを維持しながら精度の高い界面活性剤濃度分布予測を実現した。

界面活性剤が液膜形成に与える影響を調べるために、 La 数を変えて液面に向かって上昇する気泡の計算を行った。全く汚染されていない気泡を初期条件とした場合は、気泡が液面に到達するまでに界面上に界面活性剤が吸着し切らず、Langmuir の状態方程式で表現される表面張力係数の勾配が弱くなり、結果としてマランゴニ効果が弱かったために液膜を安定化させる効果は弱いことがわかった。次に初期気泡が平衡状態まで汚染された仮定で気泡を上昇させると、液面に衝突するまでに界面上での界面活性剤は飽和濃度に近くなり、 La 数による違いが顕著に現れた。 La 数が大きい、つまり吸着の効果が高いほど上昇中の気泡が平滑化され、液膜は安定維持できる傾向が確認された。以上より、液膜の安定維持のためには液面到達までにマランゴニ効果が強くなる様に、すなわち界面上での界面活性剤が飽和濃度に近くなる様に La 数の高い条件を整える必要があると言える。液膜の長時間安定維持を再現する目的で、シャボン液に対してさらに界面活性効果を考慮した計算を行った。界面活性剤を添加しない場合は気泡が液面に到達した後即座に崩壊するが、界面活性剤を添加することで液膜は崩壊を免れ、ある程度安定維持したのちに崩壊する挙動を確認した。格子解像度をさらに上げることで現実世界で見られる様な液膜が安定に長時間維持され続ける現象の再現に成功した。現実世界で見られる様な液膜形成計算のためには、液膜を解像するための高解像度格子が不可欠であり、液膜崩壊の要因となる重力に対抗しうるマランゴニ効果を考慮する必要があることを示した。液体自由膜を含む泡の形成は気液二相流で非常によく見られる現象であるが、直接計算で液膜の構造を扱った例は未だない。本手法によって非定常気液二相流中の液膜形成が議論できる可能性を示すことができた。

本論文の結論

以上、本研究では、界面を高解像度格子で計算するための超大規模計算に適した完全陽解法による気液二相流計算手法の開発に成功し、GPU 上で効率的に計算可能な AMR 法の導入による高解像度シミュレーションに成功した。

音波伝搬による密度変化が無視できるほど小さい非圧縮性領域の計算では、一般的にポアソン方程式の求解を含む半陰解法が用いられてきた。ポアソン方程式は大規模疎行列計算に帰着され、大規模化に

伴って収束性が悪化することに加えて、係数行列に密度を含むため密度比の大きい気液二相流計算では収束性が悪化する．弱圧縮性を仮定した手法を適用することで完全陽解法による気液二相流計算を実現し、ポアソン方程式から脱却したスケラビリティの良い手法の開発に成功した．高レイノルズ数流れや激しい流れ計算で計算が不安定になりやすい格子ボルツマン法と比較しても安定性に優れており、解析可能な問題範囲は広い．高解像度計算が必要となるのは高レイノルズ数流れである場合が多く、安定性に優れる本手法の利点は大きいことを示すことができた．

開発した特性線に基づく手法は semi-Lagrangian 法による安定かつ高精度な特性量移流計算が可能である．気液二相流の検証問題も良い制度で解けており、激しい流れ計算への適用性も高い．しかし、高 CFL 条件下では方向分離誤差に注意を払う必要がある他、非保存形で Navier-Stokes 方程式を解いている手法には共通する課題だが、密度重み付けされた移流項の離散化が困難で、界面近傍の運動量交換が正しく評価されない．その問題を解決する目的で等温過程の Navier-Stokes 方程式を直接解く弱圧縮性解析手法も開発し、検証問題を十分な精度で解くことができることを示した．

気液二相流計算では、界面挙動を精度よく捉えることがしばしば重要とされ、物理量の勾配も界面近傍で急激となることが多い．そこで界面に適合する AMR 法を適用し高解像度格子を界面に常に集めることで均一格子と比較して大幅な格子点数の削減を実現した．AMR 法を適用した計算と、均一格子による計算結果を、検証問題で比較し、計算精度を保ちながら格子点数削減が可能であることを示した．スプーンに衝突する水の流れ計算や、浅い水面を設定したダム崩壊問題などの激しい流れ計算を行うことも可能で、AMR 法を弱圧縮性手法による気液二相流解析対象を拡大させることができた．

AMR 法が非常に有効な流れ計算として液体自由膜を含む流れが挙げられる．有限厚さを持つ拡散界面モデルでは薄い液膜に働く表面張力等を精度よく表現するために非常に多くの格子が必要となる．シャボン玉形成過程の酢ミューレーションでは 2 次元計算で、初期直径に対して 7.8 倍の膨張まで計算することができ、非常に薄い液膜を安定に維持させることができた．我々がよく目にする液面上で安定に維持し続ける液膜は、重力を伴う計算となり、崩壊に対して安定化させる力の導入が必要である．重力による崩壊を遅らせる要因として粘弾性を考慮することを考え、FENE-CR モデルに基づく粘弾性モデルを導入した．非ニュートン性流体の中でも複雑な特性を示す粘弾性流体は、時間変化する粘性および弾性を考慮することが可能で、本手法の適用範囲も拡大した．緩和時間の増加に伴って液膜崩壊を遅らせる効果があることがわかり、ニュートン性流体として近似することがほとんどである溶媒の粘弾性的性質も安定化の一因となっていることを示すことができた．

液膜を安定化させるために界面活性剤の吸着脱離を考慮した輸送方程式を導入し、表面張力が界面活性剤濃度によって局所的に変化する計算が可能になった．表面張力の勾配によって生じるマランゴニ効果も考慮し、液膜形成計算に適用し、界面活性剤の吸着特性が液膜安定化に大きく寄与することが確かめられた．液体自由膜は、液膜内部の曲率修正による深刻な誤差の回避、粘性・表面張力・慣性のバランスとマランゴニ効果が絡む非常に複雑な流体現象のバランスによって形成され数値計算による再現はチャレンジングな内容であると考えられるが、汎用性の高い本手法で再現することに成功した．

本研究により、ポアソン方程式から脱却した完全陽解法による超大規模計算が可能な気液二相流計算手法の開発に成功した．GPU 上で効率的に動作する AMR 法を実装し、界面近傍に高解像度格子を割り

当てることで単一 GPU 上で高解像度気液二相流解析が可能であることを示した。ソルバーは粘弾性流体および界面活性剤濃度輸送によるマランゴニ効果を考慮することが可能で、高解像度格子を適合させることでこれまで議論されてこなかった液膜の形成を数値計算上で再現することができ、マランゴニ効果が液膜安定化に寄与する大きな要因であることを数値計算により確認した。

付録 A

オイラー方程式の式展開

A.1 非保存系への変換

節 2.4.1 で示した一次元オイラー方程式 (2.10) を再掲する.

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} = 0, \quad (\text{A.1})$$

まずは, 式 (A.1) を非保存系に変換するために, 変換行列を用いて q に対する微分に変換する.

$$\frac{\partial Q}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.2})$$

左辺第一項を消去するために, 左から逆行列 $\left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)$ をかける.

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)^{-1} \frac{\partial F}{\partial q} \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.3})$$

ここで, 左辺第二項の係数行列を A とおくと以下のように記述できる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial t} + A \frac{\partial q}{\partial x} &= 0 \\ A &= \left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)^{-1} \left(\frac{\partial F}{\partial q}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

続いて, A を具体的に求める. まず $\left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)^{-1}$ を求めていく.

$$\left(\frac{\partial Q}{\partial q}\right)^{-1} = \frac{\partial q}{\partial Q} \quad (\text{A.5})$$

であるので, q を Q で微分するために q を Q の成分で表す. 理想気体を仮定すると, エネルギーの式 (2.5) から

$$\begin{aligned} u &= \frac{\rho u}{\rho} \\ p &= (\gamma - 1) \left(e - \frac{1}{2} \frac{(\rho u)^2}{\rho} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

従って

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{Q}} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho & \frac{\partial}{\partial \rho u} \rho & \frac{\partial}{\partial e} \rho \\ \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{\rho u}{\rho} & \frac{\partial}{\partial \rho u} \frac{\rho u}{\rho} & \frac{\partial}{\partial e} \frac{\rho u}{\rho} \\ \frac{\partial}{\partial \rho} (\gamma-1) \left(e - \frac{1}{2} \frac{(\rho u)^2}{\rho} \right) & \frac{\partial}{\partial \rho u} (\gamma-1) \left(e - \frac{1}{2} \frac{(\rho u)^2}{\rho} \right) & \frac{\partial}{\partial e} (\gamma-1) \left(e - \frac{1}{2} \frac{(\rho u)^2}{\rho} \right) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{u}{\rho} & \frac{1}{\rho} & 0 \\ (\gamma-1) \frac{u^2}{2} & -(\gamma-1)u & (\gamma-1) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

続いて、 $\left(\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}} \right)$ の導出でも同様に、 $\mathbf{F}$ の成分を $\mathbf{q}$ の成分で表す。

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(e+p) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho u \left(p \frac{\gamma}{\gamma-1} + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

$\mathbf{F}$ について $\mathbf{q}$ で偏微分すれば

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}} = \begin{bmatrix} u & \rho & 0 \\ u^2 & 2\rho u & 1 \\ \frac{u^3}{2} & p \frac{\gamma}{\gamma-1} + \frac{3}{2} \rho u^2 & u \left(\frac{1}{\gamma-1} + 1 \right) \end{bmatrix} \quad (\text{A.9})$$

以上より、 $\mathbf{A}$ は以下のように具体的に計算できる。

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{u}{\rho} & \frac{1}{\rho} & 0 \\ (\gamma-1) \frac{u^2}{2} & -(\gamma-1)u & (\gamma-1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u & \rho & 0 \\ u^2 & 2\rho u & 1 \\ \frac{u^3}{2} & p \frac{\gamma}{\gamma-1} + \frac{3}{2} \rho u^2 & u \left(\frac{1}{\gamma-1} + 1 \right) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} u & \rho & 0 \\ 0 & u & \frac{1}{\rho} \\ 0 & \rho c^2 & u \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

A.2 対角化

前節で述べた非保存系オイラー方程式 (A.4) の係数行列 $\mathbf{A}$ は具体的には下記のように記述できる。

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} u & \rho & 0 \\ 0 & u & \frac{1}{\rho} \\ 0 & \rho c^2 & u \end{bmatrix} \quad (\text{A.11})$$

線形代数の知識から、係数行列 $\mathbf{A}$ は次のように記述できる。

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{L} \quad (\text{A.12})$$

式 (A.12) を式 (A.4) に代入し、左から $\mathbf{L}$ をかけると、

$$\mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \mathbf{\Lambda} \mathbf{L} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial x} = 0, \quad (\text{A.13})$$

が得られる。

続いて，固有値行列 $\mathbf{A}$ および左固有ベクトル $\mathbf{L}$ を求める．係数行列 $\mathbf{A}$ の固有値は以下のように固有方程式を解けばよい．

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}| &= 0 \\
 \begin{vmatrix} u - \lambda & \rho & 0 \\ 0 & u - \lambda & \frac{1}{\rho} \\ 0 & \rho c^2 & u - \lambda \end{vmatrix} &= 0 \\
 (u - \lambda) \begin{vmatrix} u - \lambda & \frac{1}{\rho} \\ \rho c^2 & u - \lambda \end{vmatrix} &= 0 \\
 (u - \lambda) ((u - \lambda)^2 - c^2) &= 0 \\
 (u - \lambda)(u + c - \lambda)(u - c - \lambda) &= 0
 \end{aligned} \tag{A.14}$$

$$\begin{cases} \lambda_1 = u \\ \lambda_2 = u + c \\ \lambda_3 = u - c \end{cases} \tag{A.15}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} u & 0 & 0 \\ 0 & u + c & 0 \\ 0 & 0 & u - c \end{bmatrix} \tag{A.16}$$

左固有ベクトル $\mathbf{L}$ は，固有値 λ_i に対応する固有ベクトルを $\mathbf{l}_i$ とすると，

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A} \mathbf{l}_1 &= u \mathbf{l}_1 \\
 \mathbf{A} \mathbf{l}_2 &= (u + c) \mathbf{l}_2 \\
 \mathbf{A} \mathbf{l}_3 &= (u - c) \mathbf{l}_3
 \end{aligned} \tag{A.17}$$

という関係があるので，上式を解けば下記のように求まる．

$$\mathbf{L} = (\mathbf{l}_1, \mathbf{l}_2, \mathbf{l}_3) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -\frac{1}{c^2} \\ 0 & 1 & \frac{1}{\rho c} \\ 0 & 1 & -\frac{1}{\rho c} \end{bmatrix} \tag{A.18}$$

付録 B

非圧縮性ソルバーについて

節 2.13.3 で述べた THINC/WLIC 法と保存型 Phase field 法それぞれを用いた場合の気液二相流計算の比較には、純粋に界面捕獲手法の比較を行うために弱圧縮性二相流解析手法ではなく、非圧縮性気液二相流ソルバーを用いる。

解かれる流体の支配方程式は、連続の式 (B.1)、表面張力 $\mathbf{f}_s$ を含めた非圧縮性 Navier-Stokes 方程式 (B.2) である。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (\text{B.1})$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \frac{1}{\rho} (-\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{K} + \mathbf{f}_s) \quad (\text{B.2})$$

THINC/WLIC 法を用いる場合、上式に加えて VOF 値の時間発展式が解かれる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{V} \oint_S \chi \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS = \frac{1}{V} \int_V \chi \nabla \cdot \mathbf{u} dV \quad (\text{B.3})$$

Level Set 関数の移流および再初期化計算は、弱圧縮性流体解析手法と同様である。

非圧縮性流体の代表的な数値解法として、Harlow らの MAC 法 [22] をベースとした SMAC 法 [120], SIMPLE 法 [121], C-CUP 法 [122] などの Projection 法があげられる。本研究では、非圧縮性流体解析手法として、シンプルなアルゴリズムで、実績のある SMAC 法を採用した。

変数は Fig. B.1 のような Staggered 格子に配置する。Staggered 格子は、速度の発散を小さな値に保つことができるため、非圧縮条件 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ を満たさなければならない非圧縮性解析ではよく用いられる。THINC/WLIC 法は有限体積法で計算されるため、VOF 値の定義点はセルセンターとなる。

式 (B.2) を時間方向に離散化すると、

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n = \frac{1}{\rho} (\nabla p^{n+1} + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n + \mathbf{K}^n + \mathbf{f}_s^n) \quad (\text{B.4})$$

となる。SMAC 法では、圧力を陰的に解き、その他の項は陽的に解く。即ち、

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + (\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n = \frac{1}{\rho} (\nabla p^n + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n + \mathbf{K}^n + \mathbf{f}_s^n) \quad (\text{B.5})$$

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla(\delta p) \quad (\text{B.6})$$

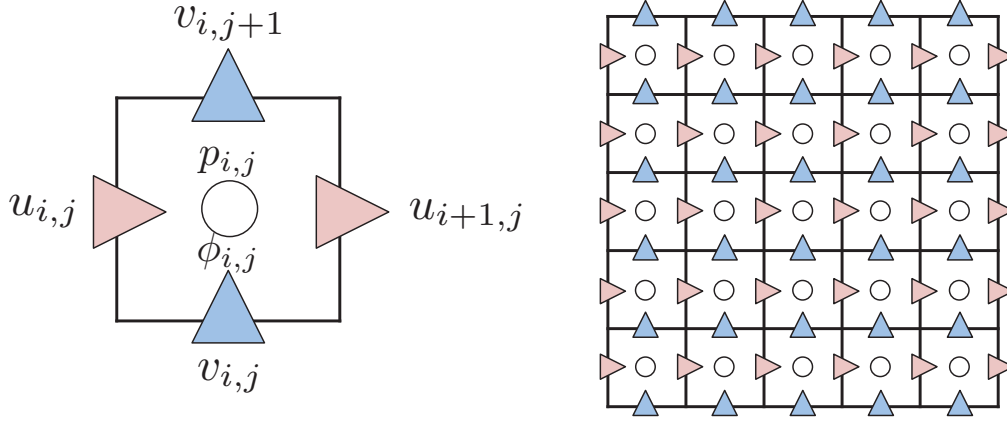


Fig.B.1: Staggered grid system.

ここで $\delta p = p^{n+1} - p^n$ は圧力の増分である．SMAC 法ではまず，式 (B.5) から仮の速度 $\mathbf{u}^*$ を陽的に求める．次に，式 (B.6) の発散をとると，

$$\frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} - \nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla(\delta p) \right) \quad (\text{B.7})$$

が得られる．非圧縮条件より $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$ であるが， $\mathbf{u}^*$ については陽的に求められたもので，一般に $\nabla \cdot \mathbf{u}^* = 0$ を満たさない．以上より，以下のような圧力に関する Poisson 方程式が導かれる．

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla(\delta p) \right) = \frac{\mathbf{u}^*}{\Delta t} \quad (\text{B.8})$$

上記 Poisson 方程式は，代数的マルチグリッド前処理を用いた共役勾配法（AMGCG 法）[123] を用いて陰的に解かれる．Poisson 方程式が解かれ， δp が得られたら，式 (B.6) から $\mathbf{u}^{n+1}$ を求め，圧力についても，

$$p^{n+1} = p^n + \delta p \quad (\text{B.9})$$

から $n+1$ ステップの値が求まる．

流体計算の空間離散化としては，移流項に 3 次精度 HJ-WENO 法を用い，圧力項，粘性項および表面張力項は 2 次精度中心差分法で離散化する．時間離散化は 3 段 3 次精度 Runge Kutta 法を用いて計算される．

付録 C

VOF 法

VOF 法 [24] は Hirt らによって提案された界面捕獲手法である．計算格子内である相が占める体積の割合を VOF 値として定義し，その時間発展を解くことで相界面を追跡する．VOF 値は通常セルセンターに定義し，有限体積法で計算されるので，体積の保存性に優れる．

VOF 法では，空間上のある点が例えば液相であるなら 1，気相なら 0 の値をとるような特性関数 $\chi(t, x)$ を考え，計算格子内で特性関数の積分値をとったものを VOF 値 ϕ と定義する．VOF 値は計算格子が完全に液相で満たされていれば 1，気相で満たされているなら 0 の値を取り，両方が混在する相は 0 から 1 の値をとる．通常は VOF 値 $\phi = 0.5$ を界面として可視化する．

気液二相流のように，ある相が他の相とほとんど混じり合わない場合，特性関数 $\chi(t, x)$ は $\mathbf{u}$ を速度場とすると次のような移流方程式に従って時間発展する．

$$\frac{\partial \chi}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \chi = 0 \quad (\text{C.1})$$

両式に $\chi \nabla \cdot \mathbf{u}$ を加え，格子体積 V で体積分平均をとると，次の VOF 値の時間発展式を得る．

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{V} \oint_S \chi \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS = \frac{1}{V} \int_V \chi \nabla \cdot \mathbf{u} dV \quad (\text{C.2})$$

ここで，上式の第二項はガウスの発散定理により計算格子境界面 S での面積分に置き変えている．非圧縮性流体の場合は非圧縮条件 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ が成り立つので，

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{V} \oint_S \chi \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (\text{C.3})$$

となる．

付録 D

THINC/WLIC 法について

D.1 THINC 法

THINC (Tangent Hyperbola for Interface Capturing) 法 [25] は, Xiao らによって提案された VOF 法の一つで, 特性関数の補間関数に hyperbolic tangent 関数を利用したものである. 1 次元を例に考える. 時間刻み Δt の間にセル境界 $x_{i+\frac{1}{2}}$ を通過する特性関数の流束 $F_{x_{i+\frac{1}{2}}}$ は, 特性関数の補間関数 $\chi_i(x)$ を用いれば

$$F_{x_{i+\frac{1}{2}}} = \int_{x_{i+\frac{1}{2}} - u_{i+\frac{1}{2}} \Delta t}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \chi_i(x) dx \quad (\text{D.1})$$

となる. THINC 法ではこの補間関数の形に $\tanh(\beta x)$ を採用する. hyperbolic tangent 関数は値域 $[-1:1]$ の単調関数で, β の値を大きくすれば界面がよりシャープになる. 適切な β を設定することで数値的な拡散を少なくすることができる. 具体的な補間関数の式は

$$\chi_i(x) = \frac{1}{2} \left(1 + \alpha \tanh \left(\beta \left(\frac{x - x_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta x} - \tilde{x}_i \right) \right) \right) \quad (\text{D.2})$$

となり, 式 (D.2) を式 (D.1) に代入して計算すれば

$$F_{x_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{1}{2} \left(u_{i+\frac{1}{2}} \Delta t + \frac{\alpha \Delta x}{\beta} \log \left(\frac{C_1}{C_2} \right) \right) \quad (\text{D.3})$$

となる. ここで α は界面法線, $\tilde{x}_i$ は $\phi = 0.5$ となる界面の無次元位置であり, 以下の式で求まる.

$$\alpha = \begin{cases} 1 & (\phi_{i+1} - \phi_i > 0) \\ -1 & (\phi_{i+1} - \phi_i \leq 0) \end{cases} \quad (\text{D.4})$$

$$\tilde{x}_i = \frac{1}{2\beta} \log \left(\frac{b^2 - ab}{ab - 1} \right) \quad (\text{D.5})$$

$$a = \exp \left(\frac{\beta}{\alpha} (2\phi_i - 1) \right) \quad (\text{D.6})$$

$$b = \exp(\beta) \quad (\text{D.7})$$

$$C_1 = \cosh(\beta(\gamma - \tilde{x}_i)) \quad (\text{D.8})$$

$$C_2 = \cosh\left(\beta\left(\gamma - \frac{u_{i+\frac{1}{2}}\Delta t}{\Delta x} - \tilde{x}_i\right)\right) \quad (\text{D.9})$$

$$\gamma = \begin{cases} 1 & \left(u_{i+\frac{1}{2}} > 0\right) \\ 0 & \left(u_{i+\frac{1}{2}} \leq 0\right) \end{cases} \quad (\text{D.10})$$

D.2 THINC/WLIC 法

THINC 法を多次元計算に用いた場合、計算格子に対して斜め方向の界面が正確に表現できず、本来丸みをもった界面が四角くなってしまうという問題があることが知られている。これを解決する手法として、Ii による MTHINC (Multi-dimensional THINC) 法 [124] や、Yokoi による WLIC (Weighted Line Interface Calculation) 法 [26] が提案されてきた。また、VOF 法の代表的なものに SLIC (Simple Line Interface Calculation) 法 [24], PLIC (Piecewise Line Interface Calculation) 法 [125] があげられる。SLIC 法はセル内の界面形状を直線的に再構築する手法で、直線であるために精度が悪く界面拡散が発生しやすい。PLIC 法はセル内で 1 次の補間関数を構築して flux を求める手法で、精度は SLIC 法と比べて良くなるが、3 次元の実装が非常に煩雑になってしまう欠点がある。THINC/WLIC 法は PLIC 法と比べても遜色ない精度を持ち、3 次元での実装も非常に単純であることから二相流の 3 次元計算にも採用されている [126][127]。

WLIC 法では、 x, y, z 各方向の界面を独立に再構築して、その重み付けで flux を計算する。各軸方向の重みを w_x, w_y, w_z とすると、

$$\sum_{l=x,y,z} w_l = 1 \quad (\text{D.11})$$

を満たすように決定される。重みの計算には任意性があるが、本研究では $k = x, y, z$ について

$$w_k = \frac{|\mathbf{n}_k|}{\sum_{l=x,y,z} |\mathbf{n}_l|} \quad (\text{D.12})$$

で計算される。ここで $\mathbf{n}_k$ は k 軸方向の法線ベクトルを表す。

参考文献

- [1] M. Ishii. *Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow*. Collection de la Direction des études et recherches d'Électricité de France. Eyrolles, 1975.
- [2] Satoru Sugawara and Yoshihiro Miyamoto. FIDAS: Detailed subchannel analysis code based on the three-fluid and three-field model. *Nuclear Engineering and Design*, Vol. 120, No. 2–3, pp. 147 – 161, 1990.
- [3] 丹愛彦, 青木尊之, 井上景介, 吉谷清文. 回転体に駆動される気液二相流の数値計算. 日本機械学会論文集中 (B 編), Vol. 77, No. 781, pp. 11–26, 2011.
- [4] 杉原健太. 界面追跡法による多相流シミュレーションの GPU を用いた高速化. PhD thesis, 東京工業大学, 2011.
- [5] Massimo Bernaschi, Mauro Bisson, Toshio Endo, Satoshi Matsuoka, and Massimiliano Fatica. Petaflop biofluidics simulations on a two million-core system. *SC '11 Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, p. 4, 2011.
- [6] 小野寺直幸, 青木尊之, 下川辺隆史, 小林宏充. 格子ボルツマン法による 1m 格子を用いた都市部 10km 四方の大規模 LES 気流シミュレーション. ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム論文集, No. 62013, pp. 123–131, 2003.
- [7] Amanda Randles, Erik W. Draeger, Tomas Oppelstrup, Liam Krauss, and John A. Gunnels. Massively parallel models of the human circulatory system. *SC '15 Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis*, p. 1, 2003.
- [8] T. Inamuro, T. Ogata, S. Tajima, and N. Konishi. A lattice boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences. *Journal of Computational Physics*, Vol. 198, No. 2, pp. 628–644, 2004.
- [9] Ching-Long Lin Taehun Lee. A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio. *Journal of Computational Physics*, Vol. 206, No. 1, pp. 16–47, 2005.
- [10] Y. T. Chew H. W. Zheng, C. Shu. A lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio. *Journal of Computational Physics*, Vol. 218, No. 1, pp. 353–371, 2006.
- [11] Siamak Kazemzadeh Hannani Meisam Mehravaran. Simulation of incompressible two-phase flows with large density differences employing lattice Boltzmann and level set methods. *Computer Methods*

- in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 198, No. 2, pp. 223–233, 2008.
- [12] Yos Panagaman Sitompul and Takayuki Aoki. A filtered cumulant lattice boltzmann method for violent two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, Vol. 390, pp. 93 – 120, 2019.
 - [13] Alexandre Joel Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of computation*, Vol. 22, No. 104, pp. 745–762, 1968.
 - [14] Stuart E. Rogers and Dochan Kwak. Upwind differencing scheme for the time-accurate incompressible navier-stokes equations. *AIAA Journal*, Vol. 28, No. 2, pp. 253–262, 1990.
 - [15] Taku Ohwada, Pietro Asinari, and Daisuke Yabusaki. Artificial compressibility method and lattice boltzmann method: Similarities and differences. *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 61, No. 12, pp. 3461 – 3474, 2011.
 - [16] Jonathan R. Clausen. Entropically damped form of artificial compressibility for explicit simulation of incompressible flow. *Physical Review E*, Vol. 87, p. 013309, Jan. 2013.
 - [17] Adrien Toutant. General and exact pressure evolution equation. *Physics Letters A*, Vol. 381, No. 44, pp. 3739 – 3742, 2017.
 - [18] Yann T. Delorme, Kunal Puri, Jan Nordström, Viktor Linders, Suchuan Dong, and Steven H. Frankel. A simple and efficient incompressible navier-stokes solver for unsteady complex geometry flows on truncated domains. *Computers & Fluids*, Vol. 150, pp. 84–94, 2017.
 - [19] Adam Kajzer and Jacek Pozorski. Application of the entropically damped artificial compressibility model to direct numerical simulation of turbulent channel flow. *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 76, No. 5, pp. 997 – 1013, 2018.
 - [20] 渡辺勢也. AMR 法を導入した格子ボルツマン法による混相流の大規模 GPU シミュレーション. PhD thesis, 東京工業大学, 2019.
 - [21] M.J Fritts and J.P Boris. The Lagrangian solution of transient problems in hydrodynamics using a triangular mesh. *Journal of Computational Physics*, Vol. 31, No. 2, pp. 173–215, 1979.
 - [22] FH Harlow and JE Welch. Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface. *Physics of fluids*, Vol. 8, No. 12, pp. 2182–2189, 1965.
 - [23] Mark Sussman, Peter Smereka, and Stanley Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *Journal of Computational Physics*, Vol. 114, No. 1, pp. 146–159, 1994.
 - [24] C.W Hirt and B.D Nichols. Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, Vol. 39, No. 1, pp. 201–225, 1981.
 - [25] F. Xiao, Y. Honma, and T. Kono. A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 48, No. 9, pp. 1023–1040, 2005.
 - [26] Kensuke Yokoi. Efficient implementation of thinc scheme: A simple and practical smoothed vof algorithm. *Journal of Computational Physics*, Vol. 226, No. 2, pp. 1985–2002, 2007.

-
- [27] Mark Sussman and Elbridge Gerry Puckett. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, Vol. 162, No. 2, pp. 301 – 337, 2000.
 - [28] Pao-Hsiung Chiu and Yan-Ting Liu. A conservative phase field method for solving incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, Vol. 230, No. 1, pp. 185–204, 2011.
 - [29] Shahab Mirjalili, Suhas S Jain, and Micheal Dodd. Interface-capturing methods for two-phase flows: An overview and recent developments. *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, pp. 117–135, 2017.
 - [30] Takashi Shimokawabe, Takayuki Aoki, and Naoyuki Onodera. High-Productivity Framework on GPU-Rich Supercomputers for Operational Weather Prediction Code ASUCA. In *SC*, pp. 251–261. IEEE, 2014.
 - [31] Top500 Supercomputer Sites. <http://www.top500.org>. last accessed on 2019/12/28.
 - [32] Marsha J Berger and Joseph Oliger. Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations. *Journal of Computational Physics*, Vol. 53, No. 3, pp. 484–512, 1984.
 - [33] Mark A. Yerry and Mark S. Shephard. Automatic three-dimensional mesh generation by the modified-octree technique. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 20, No. 11, pp. 1965–1990, 1984.
 - [34] Carsten Burstedde, Lucas C. Wilcox, and Omar Ghattas. P4est: Scalable algorithms for parallel adaptive mesh refinement on forests of octrees. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 33, No. 3, pp. 1103–1133, 2011.
 - [35] Robert F. Lucas, J. A. Ang, Keren Bergman, Shekhar Y. Borkar, William Carlson, Laura Carrington, George Liang-Tai Chiu, Robert P. Colwell, William J. Dally, Jack J. Dongarra, Al Geist, R Sterling Haring, Jeffrey Hittinger, Adolfo Hoisie, Dean Klein, Peter M. Kogge, Richard Lethin, Vivek Sarkar, Robert Schreiber, John Shalf, Thomas L. Sterling, Rick L Stevens, Jon Bashor, Ron Brightwell, Paul W. Coteus, Erik Debenedictus, Jon Hiller, Kyu hyoun Kim, Harper Langston, Richard M. Murphy, Clayton G. Webster, Stefan M. Wild, Gary Grider, Robert B. Ross, Sven Leyffer, and James H. Laros. Doe advanced scientific computing advisory subcommittee (ascac) report: Top ten exascale research challenges. 2014.
 - [36] AMReX-Codes. <https://amrex-codes.github.io/index.html> last accessed on 2019/12/28.
 - [37] Abbas Fakhari, Martin Geier, and Taehun Lee. A mass-conserving lattice boltzmann method with dynamic grid refinement for immiscible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, Vol. 315, , 6 2016.
 - [38] Zhao Yu and Liang-Shih Fan. An interaction potential based lattice boltzmann method with adaptive mesh refinement (AMR) for two-phase flow simulation. *Journal of Computational Physics*, Vol. 228, pp. 6456–6478, 09 2009.
 - [39] Mitsuhiro Ohta, Kei Onodera, Yutaka Yoshida, and Mark Sussman. Three-dimensional numerical

- simulations of a rising bubble in a viscoelastic FENE-CR model fluid. *AIP Conference Proceedings*, Vol. 1027, No. 2008, pp. 896–898, 2008.
- [40] J.M. López-Herrera, S. Popinet, and A.A. Castrejón-Pita. An adaptive solver for viscoelastic incompressible two-phase problems applied to the study of the splashing of weakly viscoelastic droplets. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Vol. 264, pp. 144 – 158, 2019.
- [41] Gerris flow solver. http://gfs.sourceforge.net/wiki/index.php/Main_Page. last accessed on 2019/12/28.
- [42] Stéphan Popinet, Francesco De Vita, Jose-Maria Fullana, Geoffroy Kirstetter, Pierre-Yves Lagrée, Emily Lane, Jose Lopez-Herrera, and John MacFarlane. Basilisk.fr. [urlhttp://basilisk.fr](http://basilisk.fr). last accessed on 2019/12/28.
- [43] T. Yabe, R. Tanaka, T. Nakamura, and F. Xiao. An Exactly Conservative Semi-Lagrangian Scheme (CIP-CSL) in One Dimension. *Monthly Weather Review*, Vol. 129, No. 2, pp. 332–344, 2001.
- [44] Kenji Takizawa Yohsuke Imai, Takayuki Aoki. Conservative form of interpolated differential operator scheme for compressible and incompressible fluid dynamics. *Journal of Computational Physics*, Vol. 227, No. 4, pp. 2263–2285, 2008.
- [45] Shintaro Matsushita and Takayuki Aoki. A weakly compressible scheme with a diffuse-interface method for low mach number two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, Vol. 376, pp. 838 – 862, 2019.
- [46] Mark Sussman, Emad Fatemi, Peter Smereka, and Stanley Osher. An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Computers & Fluids*, Vol. 27, No. 5, pp. 663 – 680, 1998.
- [47] Peter Zaspel and Michael Griebel. Solving incompressible two-phase flows on multi-gpu clusters. *Computers & Fluids*, Vol. 80, pp. 356 – 364, 2013. Selected contributions of the 23rd International Conference on Parallel Fluid Dynamics ParCFD2011.
- [48] Naoyuki Onodera and Takayuki Aoki. Large-scale simulation of gas-liquid-solid multiphase flow on gpu cluster. *Japanese Journal of Multiphase flow*, Vol. 27, No. 5, pp. 607–613, 2014.
- [49] Sanghyun Ha, Junshin Park, and Donghyun You. A gpu-accelerated semi-implicit fractional-step method for numerical solutions of incompressible navier–stokes equations. *Journal of Computational Physics*, Vol. 352, pp. 246–264, 2018.
- [50] Dieter A Wolf-Gladrow. *Lattice-gas cellular automata and lattice Boltzmann models: An Introduction*. No. 1725. Springer Science & Business Media, 2000.
- [51] Takaji Inamuro, Takaaki Yokoyama, Kentaro Tanaka, and Motoki Taniguchi. An improved lattice boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences. *Computers & Fluids*, Vol. 137, No. C, pp. 55–69, 2016.
- [52] Abbas Fakhari and Diogo Bolster. Diffuse interface modeling of three-phase contact line dynamics on curved boundaries: A lattice boltzmann model for large density and viscosity ratios. *Journal of Computational Physics*, Vol. 334, pp. 620 – 638, 2017.

-
- [53] Chunhua Zhang, Zhaoli Guo, and Yibao Li. A fractional step lattice boltzmann model for two-phase flow with large density differences. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 138, pp. 1128 – 1141, 2019.
 - [54] Martin Geier, Martin Schönherr, Andrea Pasquali, and Manfred Krafczyk. The cumulant lattice boltzmann equation in three dimensions: Theory and validation. *Computers & Mathematics with Applications*, Vol. 70, No. 4, pp. 507 – 547, 2015.
 - [55] E. Süli M. H. Pham, M. Rudgyard. *Bicharacteristic Methods for Multi-Dimensional Hyperbolic Systems*, pp. 691–698. Springer US, 2001.
 - [56] D. M. Anderson and G. B. McFadden. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, Vol. 30, pp. 139–165, 1998.
 - [57] John W. Cahn and John E. Hilliard. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 28, No. 2, pp. 258–267, 1958.
 - [58] Stanley Osher and James A Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, Vol. 79, No. 1, pp. 12–49, 1988.
 - [59] Kensuke Yokoi. A density-scaled continuum surface force model within a balanced force formulation. *Journal of Computational Physics*, Vol. 278, No. 1, pp. 221–228, 2014.
 - [60] JU Brackbill, DB Kothe, and C Zemach. A Continuum Method for Modeling Surface Tension. *Journal of Computational Physics*, Vol. 100, pp. 335–354, 1992.
 - [61] Marianne M. Francois, Sharen J. Cummins, Edward D. Dendy, Douglas B. Kothe, James M. Sicilian, and Matthew W. Williams. A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework. *Journal of Computational Physics*, Vol. 213, No. 1, pp. 141–173, Mar. 2006.
 - [62] Mark Sussman. *An Adaptive Mesh Algorithm for Free Surface Flows in General Geometries*. Chapman and Hall/CRC, 2001.
 - [63] R. Ferretti E. Carlini and G. Russo. A Weighted Essentially Nonoscillatory, Large Time-Step Scheme for Hamilton-Jacobi Equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, Vol. 27, No. 3, pp. 1071–1091, 2005.
 - [64] F. Xiao, T. Yabe, G. Nizam, and T. Ito. Constructing a multi-dimensional oscillation preventing scheme for the advection equation by a rational function. *Computer Physics Communications*, Vol. 94, No. 2-3, pp. 103–118, 1996.
 - [65] 小野寺 直幸 肖 鋒. 計算流体力学-CIP マルチモーメント法による手法-. コロナ社, 2009.
 - [66] G. Jiang and D. Peng. Weighted eno schemes for hamilton-jacobi equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 21, No. 6, pp. 2126–2143, 2000.
 - [67] Chi-Wang Shu and Stanley Osher. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. *Journal of Computational Physics*, Vol. 77, No. 2, pp. 439 – 471, 1988.
 - [68] Peskin and Charles S. Flow patterns around heart valves: A numerical method. *Journal of Computa-*

- tional Physics*, Vol. 10, No. 2, pp. 252–271, 1972.
- [69] NVIDIA: CUDA Zone. <https://developer.nvidia.com/cuda-zone>. last accessed on 2019/12/28.
- [70] Gary A Sod. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, Vol. 27, No. 1, pp. 1–31, 1978.
- [71] U Ghia, K.N Ghia, and C.T Shin. High-re solutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multigrid method. *Journal of Computational Physics*, Vol. 48, No. 3, pp. 387–411, 1982.
- [72] C.H. Sung C. Liu, X. Zheng. Preconditioned Multigrid Methods for Unsteady Incompressible Flows. *Journal of Computational Physics*, Vol. 139, No. 1, pp. 35–57, 1998.
- [73] Charles S. Peskin Ming-Chih Lai. An Immersed Boundary Method with Formal Second-Order Accuracy and Reduced Numerical Viscosity. *Journal of Computational Physics*, Vol. 160, No. 2, pp. 705–719, 2000.
- [74] David Russell and Z. Jane Wang. A cartesian grid method for modeling multiple moving objects in 2D incompressible viscous flow. *Journal of Computational Physics*, Vol. 191, No. 1, pp. 177–205, 2003.
- [75] P. Queutey E. Guilmineau. A Numerical Simulation of Vortex Shedding from an Oscillating Circular Cylinder. *Journal of Fluids and Structures*, Vol. 16, No. 6, pp. 773–794, 2002.
- [76] R. While. Karman vortex streets. *Advances in Applied Mechanics*, Vol. 6, pp. 273–287, 2002.
- [77] Jaber Almedeij. Drag coefficient of flow around a sphere: Matching asymptotically the wide trend. *Power Technology*, Vol. 186, No. 3, pp. 218–223, 2008.
- [78] William J. Rider and Douglas B. Kothe. Reconstructing Volume Tracking. *Journal of Computational Physics*, Vol. 141, No. 2, pp. 112 – 152, 1998.
- [79] J. C. Martin and W. J. Moyce. An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London, Series A, Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 244, No. 882, pp. 325–334, 1952.
- [80] S. Koshizuka and Y. Oka. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nuclear science and Engineering*, Vol. 123, No. 3, pp. 421–434, 1996.
- [81] Horace Lamb. *Hydrodynamics*. Dover Publications, 1945.
- [82] S. Hysing, S. Turek, N. Parolini D. Kuzmin, E. Burman, S. Ganesan, and L. Tobiska. Quantitative benchmark computations of two-dimensional bubble dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 60, No. 11, pp. 1259–1288, 2009.
- [83] J. Klostermann, K. Schaake, and R. Schwarze. Numerical simulation of a single rising bubble by vof with surface compression. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, Vol. 71, No. 8, pp. 960–982, 2012.
- [84] Featflow. <http://www.featflow.de/en/index.html>. last accessed on 2019/12/28.

-
- [85] Burman E. Parolini N. A finite element level set method for viscous free-surface flows. *Applied and Industrial Mathematics in Italy*, pp. 416–427, 2005.
 - [86] Gunar Matthies Volker John. MooNMD – a program package based on mapped finite element methods. *Computing and Visualization in Science*, Vol. 6, No. 2, pp. 163–170, 2004.
 - [87] J. R. Grace. Shapes and velocities of bubbles rising in infinite liquids. *Chemical Engineering Research and Design*, Vol. 51a, pp. 116–120, 1973.
 - [88] Clift, R. and Grace, J.R. and Weber, M.E. *Bubbles, Drops, and Particles*. Academic Press, 1978.
 - [89] M. van Sint Annaland, N.G. Deen, and J.A.M. Kuipers. Numerical simulation of gas bubbles behaviour using a three-dimensional volume of fluid method. *Chemical Engineering Science*, Vol. 60, No. 11, pp. 2999–3011, 2005.
 - [90] Arnold Frohn Martin Rieber. A numerical study on the mechanism of splashing. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, Vol. 20, No. 5, pp. 455–461, 1999.
 - [91] Feng Xiao, Akio Ikebata, and Takashi Hasegawa. Numerical simulations of free-interface fluids by a multi-integrated moment method. *Computers & Structures*, Vol. 83, No. 6-7, pp. 409–423, 2005.
 - [92] Kensuke Yokoi. A Numerical Method for Free-Surface Flows and Its Application to Droplet Impact on a Thin Liquid Layer. *Journal of Scientific Computing*, Vol. 35, No. 2, pp. 372–396, 2008.
 - [93] S.S. Yoon, R.A. Jepsen, M.R. Nissen, T.J.O’ Hern. Experimental investigation on splashing and nonlinear fingerlike instability of large water drops. *Journal of Fluids and Structures*, Vol. 23, No. 1, pp. 101–115, 2007.
 - [94] José Maria Fullana and Stéphane Zaleski. Stability of a growing end rim in a liquid sheet of uniform thickness. *Physics of Fluid*, Vol. 11, No. 5, pp. 952–954, 1999.
 - [95] George M. Homsy Rouslan Krechetnikov. Crown-forming instability phenomena in the drop splash. *Journal of Fluids and Structures*, Vol. 311, No. 2, pp. 555–559, 2009.
 - [96] A. Chegini P. K. Stansby and T. C. D. Barnes. The initial stages of dam-break flow. *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 370, pp. 203–220, 1998.
 - [97] Ami Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*, Vol. 49, No. 3, pp. 357 – 393, 1983.
 - [98] Bram Van Leer. Towards the ultimate conservative difference scheme. iv. a new approach to numerical convection. *Journal of Computational Physics*, Vol. 23, No. 3, pp. 276 – 299, 1977.
 - [99] Byungmoon Kim, Yingjie Liu, Ignacio Llamas, and Jarek Rossignac. Simulation of bubbles and liquid films. *GVU Center Technical Report*, Vol. GIT-GVU-06-10, , 2006.
 - [100] Steven T Zalesak. Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids. *Journal of Computational Physics*, Vol. 31, No. 3, pp. 335–362, 1979.
 - [101] Shintaro Matsushita and Takayuki Aoki. A computation with tree-based amr method using multi-moment scheme for conservative phase-field equation with a flux term. *Transactions of the Japan Society for Computational Engineering and Science*, Vol. 2018, pp. 20180005–20180005, 2018.

- [102] Changhong Hu and Makoto Sueyoshi. Numerical simulation and experiment on dam break problem. *Journal of Marine Science and Application*, Vol. 9, No. 2, pp. 109–114, Jun 2010.
- [103] J. Shinjo and A. Umemura. Simulation of liquid jet primary breakup: Dynamics of ligament and droplet formation. *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 36, No. 7, pp. 513–532, 2010.
- [104] Naruhiko Tan. *Numerical simulation of two-phase flow driven by a rotating object with an interface capturing method*. PhD thesis, Tokyo Institute of Technology, 2012.
- [105] 日本機械学会. 流体の熱物性値集:技術資料. 1983.
- [106] Takehiro Yamamoto. Numerical flow simulation of complex fluids coupling with analyses of fluid inner structures. *Nagare*, Vol. 29, No. 5, pp. 313–318, oct 2010.
- [107] Ronald G Larson. *Constitutive equations for polymer melts and solutions*. Butterworth-Heinemann, 1988.
- [108] Xiaoyang Xu, Jie Ouyang, Tao Jiang, and Qiang Li. Numerical simulation of 3d-unsteady viscoelastic free surface flows by improved smoothed particle hydrodynamics method. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, Vol. 177-178, pp. 109 – 120, 2012.
- [109] R.A. Figueiredo, C.M. Oishi, A.M. Afonso, I.V.M. Tasso, and J.A. Cuminato. A two-phase solver for complex fluids: Studies of the weissenberg effect. *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 84, pp. 98 – 115, 2016.
- [110] 青木二郎. 鉛直管内汚染系二酸化炭素気泡の溶解過程に関する研究. PhD thesis, 神戸大学, 2017.
- [111] 高木周. 界面活性剤が気泡挙動に与える影響. 日本流体力学会誌「ながれ」, Vol. 23, No. 1, pp. 17–26, 2004.
- [112] Kosuke Hayashi and Akio Tomiyama. Effects of surfactant on terminal velocity of a taylor bubble in a vertical pipe. *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 39, pp. 78 – 87, 2012.
- [113] Jian-Jun Xu, Zhilin Li, John Lowengrub, and Hongkai Zhao. A level-set method for interfacial flows with surfactant. *Journal of Computational Physics*, Vol. 212, pp. 590–616, 03 2006.
- [114] Tariq D. Aslam. A partial differential equation approach to multidimensional extrapolation. *Journal of Computational Physics*, Vol. 193, No. 1, pp. 349–355, Jan 2004.
- [115] 田嶋和夫. 界面活性剤の構造と用途. オレオサイエンス, Vol. 1, No. 1, pp. 83–92, 2001.
- [116] Knut Erik Teigen, Peng Song, John Lowengrub, and Axel Voigt. A diffuse-interface method for two-phase flows with soluble surfactants. *Journal of Computational Physics*, Vol. 230, No. 2, pp. 375 – 393, 2011.
- [117] Knut Erik Teigen, Xiangrong Li, John Lowengrub, Fan Wang, and Axel Voigt. A diffuse-interface approach for modeling transport, diffusion and adsorption/desorption of material quantities on a deformable interface. *Communications in mathematical sciences*, Vol. 47, pp. 1009–1037, 2009.
- [118] V. B. Fainerman. Dynamic surface tension and kinetics of adsorption in solutions of normal alcohols. *Kolloidn. Zh.*, Vol. 44, pp. 538–544, 1982.
- [119] Shi-Yow Lin, Hong-Chi Chang, and En-Ming Chen. The effect of bulk concentration on surfactant

adsorption processes: The shift from diffusion-control to mixed kinetic-diffusion control with bulk concentration. *JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING OF JAPAN*, Vol. 29, No. 4, pp. 634–641, 1996.

- [120] A. A. Amseden and F. H. Harlow. A simplified MAC Technique for incompressible fluid flow calculations. *Journal of Computational Physics*, Vol. 6, pp. 322–325, 1970.
- [121] S.V Patankar and D.B Spalding. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 15, No. 10, pp. 1787–1806, 1972.
- [122] Takashi Yabe, Feng Xiao, and Takayuki Utsumi. The Constrained Interpolation Profile Method for Multiphase Analysis. *Journal of Computational Physics*, Vol. 169, No. 2, pp. 556–593, may 2001.
- [123] 永野勝尋. GPU による大規模疎行列の高速解法—AMGCG 法による並列スモータの比較—. みずほ情報総研 技報, Vol. 3, No. 1, pp. 54–59, 2011.
- [124] Satoshi Ii, Kazuyasu Sugiyama, Shintaro Takeuchi, Shu Takagi, Yoichiro Matsumoto, and Feng Xiao. An interface capturing method with a continuous function: The THINC method with multi-dimensional reconstruction. *Journal of Computational Physics*, Vol. 231, No. 5, pp. 2328–2358, mar 2012.
- [125] D L Youngs. *Time-Dependent Multi-Material Flow with large Fluid Distorsion*, pp. 273–285. Academic Press, 1982.
- [126] John Hinch Kensuke Yokoi, Damien Vadillo and Ian Hutchings. Numerical studies of the influence of the dynamic contact angle on a droplet impacting on a dry surface. *Physics of Fluids*, Vol. 21, No. 7, pp. 72–102, 2009.
- [127] Changhong Hu Xizeng Zhao. Numerical and experimental study on a 2-D floating body under extreme wave conditions. *Applied Ocean Research*, Vol. 35, pp. 1–13, 2012.

研究業績

学術論文

- (1) Shintaro Matsushita, Takayuki Aoki: A weakly compressible scheme with a diffuse-interface method for low Mach number two-phase flows, J. Comput. Phys., 376(6), pp.838–862, 2019
- (2) 松下真太郎, 青木尊之: 界面に適合する AMR 法を用いた気液二相流の数値シミュレーション, 混相流, Vol. 33, No. 1, 2019
- (3) 松下真太郎, 青木尊之: 木構造に基づいた AMR 法を用いた流束項付きフェーズフィールド方程式のマルチ・モーメント法による解法, 日本計算工学会論文集, Vol.2018, 2018
- (4) 竹口昌之, 高橋駿平, 芳野広起, 鈴木裕貴, 渡辺彩夏, 勝又俊貴, 松下真太郎, 三輪史朗, 松本祐子, 芳野恭士: 門池の水質と水深, 技術・教育研究論文誌, Vol.26(1) pp.1-9, 2019

国際学会

- (1) Shintaro Matsushita, Takayuki Aoki: A TWO-PHASE FLOW SIMULATION BASED ON WEAKLY COMPRESSIBLE ASSUMPTION WITH INTERFACE-ADAPTED AMR METHOD, ASCHT2019, Tokyo, Sep. 6, 2019
- (2) Shintaro Matsushita, Takayuki Aoki: A Full-explicit Two-phase Flow Simulation Based on Weakly Compressible Assumption with Interface-Adapted AMR Method, Taiwan-Japan CFD workshop, National Tsing Hua University, Hsinchu, Mar. 8, 2019
- (3) Shintaro Matsushita, Takayuki Aoki: A Fully-explicit Two-phase Flow Simulation Based on Weakly Compressible Assumption with Interface-adapted AMR method, The 2nd ICM 2018, jointing conferences of the 12th ACFD, the 25th NCFD and the 4th ACMT, Yilan City, Taiwan, Oct. 17, 2018
- (4) Takayuki Aoki, Shintaro Matsushita, Seiya Watanabe: Explicit CFD solvers for free-surface flows and gas-liquid two-phase flows, Taiwan-Japan Workshop on Mechanical and Aerospace Engineering, Taiwan, National Chiao Tung University, Oct. 6, 2018
- (5) Shintaro Matsushita, Takayuki Aoki, Un-Hong Wong: A full-explicit two-phase flow simulation with interface- adapted AMR method, ECCOMAS Congress 2018, Glasgow, UK, Jun. 16, 2018
- (6) Shintaro Matsushita, Takayuki Aoki: A Two-Phase Flow Simulation Using a Full-Explicit Scheme with Interface- Adapted AMR Method, Parallel CFD 2018, Indianapolis, USA, May 15, 2018

- (7) Shintaro Matsushita, Takayuki Aoki : A two-phase flow simulation based on weakly compressible flow scheme coupled with conservative phase-field method, COUPLED PROBLEMS 2017, Rhodes Island, Greece, Jun. 2017

国内学会

- (1) 菊田大輔, 青木尊之, 松下真太郎: 動的接触角を考慮した斜面を流れ落ちる液滴のシミュレーション, 日本流体力学会・第 33 回数値流体力学シンポジウム, 11 月, 2019
- (2) 松下真太郎, 青木尊之: 界面に適合する AMR 法による液膜シミュレーション, 日本機械学会・第 32 回計算力学講演会, 9 月, 2019
- (3) 松下真太郎, 青木尊之: 界面に細分化格子を適合する気液二相流の AMR 計算, 日本機械学会・第 21 回複雑流体研究会, 京都, 6 月, 2019
- (4) 松下真太郎, 青木尊之: 界面に適合する AMR 法と弱圧縮性解法による高解像度気液二相流計算, 日本計算工学会・第 24 回計算工学講演会, 6 月, 2019
- (5) 松下真太郎, 青木尊之: 界面に適合する AMR 法と完全陽解法を用いた液膜形成と崩壊の GPU 計算, 日本流体力学会・第 32 回数値流体力学シンポジウム (CFD2018), 12 月, 2018.
- (6) 松下真太郎, 青木尊之: 界面に適合する AMR 法と完全陽解法による高解像度気液二相流計算, 日本機械学会・第 31 回計算力学講演会, 11 月, 2018
- (7) 渡辺勢也, 青木尊之, 松下真太郎, Christian Conti, 高木知弘: AMR 法の動的領域分割へのマルチフェーズフィールド法の適用, 日本機械学会・第 31 回計算力学講演会, 11 月, 2018
- (8) 松下真太郎, 青木尊之: 界面に適合する AMR 法を用いた液膜の形成と崩壊の数値シミュレーション, 日本混相流学会・混相流シンポジウム 2018, 8 月, 2018
- (9) 松下真太郎, 青木尊之: 界面に適合する AMR 法と弱圧縮性近似に基づく完全陽解法を組み合わせた気液二相流の三次元計算, 日本計算工学会・第 23 回計算工学講演会, 6 月, 2018
- (10) 黄遠雄, 青木尊之, 松下真太郎: 保存形フェースフィールド方程式による AMR 法を用いた界面移流計算の動的メモリ管理による GPU 実装, 日本流体力学会・第 31 回数値流体力学シンポジウム (CFD2017), 12 月, 2017
- (11) 松下真太郎, 青木尊之: 界面に適合する AMR 法を用いた気液二相流の完全陽解法計算, 日本流体力学会・第 31 回数値流体力学シンポジウム (CFD2017), 12 月, 2017
- (12) 渡辺勢也, 青木尊之, 長谷川雄太, 松下真太郎: Phase-field 法による界面捕獲手法を用いた自由界面流れと固体粒子の連成解析, 日本機械学会・第 30 回計算力学講演会, 9 月, 2017
- (13) 松下真太郎, 青木尊之: 弱圧縮性近似による気液二相流の直交格子ベース陽解法, 日本機械学会・第 30 回計算力学講演会, 9 月, 2017
- (14) 松下真太郎, 青木尊之: 弱圧縮性流体解析手法に基づく完全陽解法による気液二相流の GPU 計算, 日本混相流学会・混相流シンポジウム 2017, 8 月, 2017
- (15) 渡辺勢也, 青木尊之, 長谷川雄太, 松下真太郎: 自由界面流れと固体粒子の連成シミュレーション, 日本

混相流学会・混相流シンポジウム 2017, 8 月, 2017

- (16) 松下真太郎, 青木尊之: 複数 GPU を用いた完全陽解法による気液二相流計算, 日本計算工学会・第 22 回計算工学講演会, 6 月, 2017
- (17) 松下真太郎, 青木尊之: 弱圧縮性流体解析手法による気液二相流解析, 日本流体力学会・第 30 回数値流体力学シンポジウム (CFD2016), 12 月, 2016
- (18) 松下真太郎, 青木尊之, 高木知弘, 相原慎太郎: 保存型 IDO 法を用いた Phase-Field 法による界面捕獲手法の検討, 日本機械学会・第 29 回計算力学講演会 (CMD2016), 9 月, 2016

受賞

- (1) 松下真太郎, 青木尊之, グラフィックスアワード特別賞, 日本計算工学会・第 24 回計算工学講演会, 6 月, 2019
- (2) 松下真太郎, 青木尊之, 日本計算工学会 論文賞, 木構造に基づいた AMR 法を用いた流束項付きフェーズフィールド方程式のマルチ・モーメント法による解法, 6 月, 2019
- (3) 松下真太郎, 青木尊之, ベストペーパーアワード, 日本計算工学会・第 23 回計算工学講演会, 名古屋, 6 月 6 日, 2018
- (4) 松下真太郎, 青木尊之, グラフィックスアワード特別賞, 日本計算工学会・第 22 回計算工学講演会, 6 月, 2017
- (5) 松下真太郎, 青木尊之, グラフィックスアワード動画部門・銀賞, 日本流体力学会・第 30 回数値流体力学シンポジウム, 12 月, 2016
- (6) 松下真太郎, 東京工業大学 総合理工学研究科 創造エネルギー専攻 最優秀論文賞, 2 月 14 日, 2017

その他

- (1) 松下真太郎, 青木尊之: 界面に適合する AMR 法と完全陽解法を用いた液膜形成と崩壊の GPU 計算, 特集記事 (注目研究 in CFD32), ながれ, Vol.38, No.2, 2019
- (2) 青木尊之, 松下真太郎: 陽解法による非圧縮性気液二相流の大規模シミュレーション, 特集記事 (解説記事), 混相流, Vol.32, No.4, 2018
- (3) 松下真太郎, 青木尊之: 弱圧縮性流体解析手法に基づく完全陽解法による気液二相流の GPU 計算, 口絵写真, 混相流, Vol.32, No.4, 2018

謝辞

本研究を進めるにあたって、指導教員として5年間多大なるご指導を賜りました学術国際情報センター青木尊之教授に心から感謝申し上げます。研究の進め方から論文や査読に対する回答書の添削など、様々な面で丁寧にご指導いただきました。国内外の学会への発表での参加だけでなく、聴講のみの参加にも快く旅費を出していただいたり、至れり尽くせりの研究生活だったと感じています。学会等で最先端の研究に触れつつ、最前線で常に精力的に研究活動に取り組む青木先生の姿勢を見ながら過ごせたこの5年間はとても充実していました。来年以降も気を引き締めて研究に取り組んでいきたいと思ひます。よろしくお願い致します。

研究生活を事務的な面から支えてくださった青木研究室秘書の伊藤晃子さん、昨年度退職されました高橋千恵子さんに感謝申し上げます。出張の手配やフライトの予約、学会参加費の精算等、お世話になりました。科学研究費研究員の杉原健太さんには界面捕獲法や気液二相流計算手法に関して、悩んでいる点があるときにアドバイスをしていただいたり、Povrayの可視化に関して多くのことを教わりました。来年度以降もよろしくお願い致します。青木研究室の先輩である東京大学情報基盤センターの下川辺隆史准教授と日本原子力研究開発機構の小野寺直幸さんに感謝申し上げます。下川辺さんには修士課程で論文の添削をしていただいたり、毎週のゼミで助言をいただくなどお世話になりました。小野寺さんとは学会等でよく声をかけていただき、陽解法について色々アドバイスをしていただいたり、博士課程修了後の進路に関してもご助言を下さいました。

昨年度退職されたチェスターさんにはAMR法のGPU実装について基礎的な部分を教えていただいたり、データ構造の考え方を参考にさせていただきました。研究員だったContiさんには英語論文の添削をしていただき、ありがとうございました。

青木研究室の先輩として長い間お世話になった日本原子力開発機構の長谷川雄太さん、研究員だった渡辺勢也さんに感謝申し上げます。お二人にはAMR法や界面捕獲手法、数値計算手法などの研究に関する議論はもちろんのこと、日々の研究生活で大変お世話になりました。初めてで色々わからないことがあるときにはお二人が過去やっていたことを参考にすることができたり気軽に聞きに行くことができいつも安心感がありました。これから学会等でお会いできる機会もきっと多くなると思うので、よろしくお願い致します。また、修士課程で先輩だった泉田さん、杉山さんに感謝いたします。泉田さんには気液二相流に関する知識を色々教えてもらっただけでなく、修士論文をかなり参考にさせていただきました。杉山さんには圧縮性流体解析手法についての知識を教えていただきました。

後輩のKai君は、気液二相流の陽解法に関して多くの議論をすることができ、非常に楽しかったです。

論文をきちんとサーベイして色々な知識を蓄えながら実装力もある Kai 君には常に驚かされてきました。私も負けないように頑張りたいと思います。また、気液二相流の陽解法に関する研究をしている後輩の方々には、ゼミなどで新しい知見や改善点を教えてもらい、ありがたく思っています。共に研究をした青木研究室の他の学生にも感謝いたします。

最後に、経済面および精神面で支えてくれた家族に感謝します。経済的に苦しい中、博士過程進学という我儘を当たり前のように許してくださったことに感謝します。

研究支援に対する謝辞

本研究を進めるにあたり、保存形 Allen-Cahn 方程式について貴重な情報を提供いただいた京都工芸繊維大学高木知弘准教授と相原慎太郎氏に深く感謝いたします。本研究は、科学研究費補助金・基盤研究(S) 課題番号 2622002「ものづくり HPC アプリケーションのエクサスケールへの進化」、科学研究費補助金・基盤研究(S) 課題番号 19H05613「自由界面を含む混相流の革新的数値流体シミュレーション」、科学技術振興機構 CREST「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」、革新的ハイパフォーマンズ・コンピューティング・インフラ (HPCI) 課題番号 hp190130, および学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) 課題番号: jh180035,jh190054 から支援を頂いた。計算には東京工業大学学術国際情報センターのスパコン TSUBAME2.5 および TSUBAME3.0, 九州大学情報基盤研究開発センターの ITO サブシステム B を利用させて頂いた。記して謝意を表す。