

令和 3 年 6 月 14 日現在

機関番号：31101

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2020

課題番号：17K05376

研究課題名（和文）流体力学における構造保存型数値解法の開発

研究課題名（英文）Structure preserving numerical methods for fluid dynamics

研究代表者

鈴木 幸人（Suzuki, Yukihiro）

青森大学・ソフトウェア情報学部・教授

研究者番号：90596975

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,500,000円

研究成果の概要（和文）：三次元非圧縮単相流れと二相流れに対して構造保存型の数値解法を開発した。それは離散化された勾配、回転、発散が連続の場合と同じ性質を保持し、流れのPoisson構造と散逸構造を離散化後も保存するものである。その結果、エネルギー（速度ベクトル場の自乗量）、ヘリシティ（速度ベクトル場と渦度ベクトル場の内積）、エンストロフィー（渦度ベクトル場の自乗量）の収支が離散化後も連続の場合と同じ形に表される。特に非粘性流れの場合にはエネルギーとヘリシティは正確に保存するがエンストロフィーは渦伸長効果によって増大し、また粘性流れの場合にはそれらが粘性で減衰するような数値解法を開発することに成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

現在の数値流体力学（CFD）では計算の安定性を確保するために実際よりも多くエネルギーを散逸させるように調整されている（数値粘性）。また得られた数値解はNavier-Stokes方程式の近似解であることは保証されているが、それがNavier-Stokes方程式から理論的に導出される渦度方程式、運動エネルギー・ヘリシティ・エンストロフィーの保存則を満たす保証はない。一方、本研究で開発した構造保存型数値解法によれば、それら全ての方程式を離散化後も正確に満たすことが保証され、物理的に正しい数値解を常に得ることができる。

研究成果の概要（英文）：Structure preserving numerical methods are developed for three-dimensional one and two-phase incompressible flows. Discretized gradient, curl, and divergence operators have same properties as the continuum case. Then the budgets of energy, helicity, and enstrophy are expressed in the same form as the continuum case. The energy and helicity are conserved and the enstrophy is generated by vortex stretching in inviscid flows, and those are dissipated due to the viscosity in viscous flows.

研究分野：数値流体力学

キーワード：構造保存型数値解法

1. 研究開始当初の背景

非平衡熱力学の一つの理論的枠組みとして GENERIC (General Equation for the Non-Equilibrium Reversible-Irreversible Coupling) と呼ばれるものが提案されていた。これは状態空間上に定義される二つの汎関数：エネルギー汎関数とエントロピー汎関数によって系の力学的・熱力学的性質が記述されるとするもので、系の時間進展はエネルギー汎関数の汎関数微分に作用する歪対称作用素とエントロピー汎関数の汎関数微分に作用する半正定値対称作用素によって記述される。この二つの作用素はある特定の退化条件を満たし、それによってエネルギー保存則とエントロピー増大則が成り立つことになる。

一方、微分方程式がもつ何らかの構造を離散化後も保つような数値計算法は幾何学的数値積分法あるいは構造保存数値解法などと呼ばれ、盛んに研究が行われていた。偏微分方程式に関しては Hamilton 系などの保存系に関する研究が多くを占める中で、特に離散変分法のアイデアは散逸系を扱うことができるという点で画期的であり、特に汎関数微分に働く作用素によって表される構造を保存するという点で、上記の GENERIC の定式化と非常に相性が良いものではないかと考えられた。

2. 研究の目的

本研究では流体力学に現れる各種方程式を(正準・非正準の) Hamilton 系あるいはそれに散逸を表す負定値勾配系が加わる形で定式化し、離散変分法のアイデアに基づいた構造保存型数値解法の開発と数学解析を行う。近年、特に正準 Hamilton 系を中心として構造保存型数値解法の研究が盛んになっているが、広範な応用をもつ数値流体力学の分野に広く波及しているとは言い難い。本研究では自由表面問題や二相流問題を含む流体力学の方程式に対して構造保存型数値解法を開発を行い、各種保存則が離散化後も正確に成り立つような計算手法を確立することによって、現在の数値流体力学の主流である上流化による安定化手法に取って代わり得る次世代の計算手法を提案することを目的とする。

3. 研究の方法

本研究では、流体力学の各種基礎方程式を GENERIC に準じる形で定式化し、それに離散変分法のアイデアを適用することによって構造保存型の数値解法を構築する。方程式としては、まずは理想気体の圧縮性 Navier-Stokes 方程式を考え、それに対してエネルギー保存則とエントロピー増大則が離散化後も成り立つような数値解法を開発する。その後、この圧縮性 Navier-Stokes 方程式の研究で得られた知見と非圧縮性 Navier-Stokes 方程式に対する構造保存型数値解法の開発の際に得られた知見を総合し、自由表面流れや二相流れを記述する方程式の構造保存型数値解法を開発を目指す。いずれも実際にプログラムを作成して計算を行い、その有効性を評価・検証する。

4. 研究成果

非圧縮流れを記述する渦度方程式は非粘性の場合 Poisson 構造をもつことが知られており、また保存系の Poisson 構造に負定値対称の二次形式を組み合わせることによって散逸系を記述する試みも行われている。本研究ではこれらの概念を用いて二次元と三次元の渦度方程式を歪対称の Poisson 括弧と半負定値対称の散逸括弧により定式化し、それに離散変分導関数法のアイデアを適用して運動エネルギーと enstrophy(三次元の場合は helicity) が非粘性の時には正確に保存し、粘性がある時には適切に散逸する計算手法を開発した。さらに、それを Navier-Stokes/Cahn-Hilliard 方程式に拡張することにも成功した。

4.1 渦度方程式/Cahn-Hilliard 方程式の定式化

流れの領域 $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ 上で自由エネルギー

$$\Psi = \int_{\Omega} \frac{1}{\epsilon} \left(f + \frac{\sigma}{2} \epsilon^2 |\nabla \varphi|^2 \right) dV$$

を導入し、Hamiltonian と enstrophy を

$$\mathcal{H} = \int_{\Omega} \frac{\rho}{2} |v|^2 dV + \Psi, \quad \mathcal{Z} = \int_{\Omega} \frac{1}{2} |\omega|^2 dV + \lambda \Psi$$

と定義する。ここで ψ を流れ関数とし、 $v = \nabla \times \psi$ は速度、 $\omega = \nabla \times v$ は渦度である。また ρ は密度で φ は二相を区別するオーダーパラメータである。Poisson 括弧と散逸括弧をそれぞれ

$$\{\mathcal{F}, \mathcal{G}\} = \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega} & \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi} \\ \mathcal{L}_{11} & \mathcal{L}_{12} \\ \mathcal{L}_{21} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \mathcal{F} / \delta \omega \\ \delta \mathcal{F} / \delta \varphi \end{pmatrix} dV,$$

$$\mathcal{L}_{11} = -(1/\rho) \nabla \times \{\omega \times (\nabla \times \cdot)\}, \quad \mathcal{L}_{12} = (1/\rho) \nabla \times (\cdot \nabla \varphi),$$

$$\mathcal{L}_{21} = -(1/\rho) (\nabla \varphi) \cdot (\nabla \times \cdot)$$

と

$$\{\mathcal{F}, \mathcal{G}\} = \int_{\Omega} \begin{pmatrix} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \omega} & \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi} \\ \mathcal{M}_{11} & 0 \\ 0 & \mathcal{M}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \mathcal{F} / \delta \omega \\ \delta \mathcal{F} / \delta \varphi \end{pmatrix} dV,$$

$$\mathcal{M}_{11} = \nu \Delta, \quad \mathcal{M}_{22} = (m/\lambda) \Delta$$

によって定義すると, Poisson 括弧は歪対称, 散逸括弧は対称半負定値で, 渦度方程式/Cahn-Hilliard 方程式は

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \{\mathcal{F}, \mathcal{H}\} + [\mathcal{F}, \mathcal{Z}]$$

が成り立つことと同値である⁽¹⁾.

4.2 空間離散化

離散勾配作用素 ∇_{GE} , ∇_{CF}^* , 離散回転作用素 $(\nabla \times)_{EF}$, $(\nabla^* \times)_{FE}$ および離散発散作用素 $(\nabla \cdot)_{FC}$, $(\nabla^* \cdot)_{EG}$ を

$$(\nabla_{GE} \phi)_I^i = (\delta_i \phi)_I, \quad (\nabla_{CF}^* \Phi)_I^i = (\delta_i^* \Phi)_I \quad (i = 1, 2, 3)$$

$$[(\nabla \times)_{EF} u]_I^i = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} (\delta_j u^k)_I, \quad [(\nabla^* \times)_{FE} \xi]_I^i = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} (\delta_j^* \xi^k)_I \quad (i = 1, 2, 3)$$

$$[(\nabla \cdot)_{FC} \xi]_I = (\delta_1 \xi^1)_I + (\delta_2 \xi^2)_I + (\delta_3 \xi^3)_I,$$

$$[(\nabla^* \cdot)_{EG} u]_I = (\delta_1^* u^1)_I + (\delta_2^* u^2)_I + (\delta_3^* u^3)_I$$

と定義する. ここで δ_i および δ_i^* ($i = 1, 2, 3$) は

$$(\delta_i \phi)_I = \frac{\phi_{\ominus_{+I}^i} - \phi_I}{\Delta x_{+I}^i}, \quad (\delta_i^* \Phi)_I = \frac{\Phi_I - \Phi_{\ominus_{-I}^i}}{\Delta \bar{x}_{-I}^i}$$

ただし

$$\Delta x_{+I}^i = x_{\ominus_{+I}^i}^i - x_I^i, \quad \Delta \bar{x}_{-I}^i = (x_{\ominus_{+I}^i}^i - x_{\ominus_{-I}^i}^i) / 2$$

によって定義される差分作用素である. これらの関数と作用素に対して, 格子边上の線積分に関する微積分の基本定理, 格子面上の面積分に関する Green の定理およびセル上の体積積分に関する Gauss の発散定理が自然な形で成り立つことを示すことができる⁽²⁾. また任意の関数 ϕ , u , ξ , Φ に対して

$$(\nabla \times)_{EF} \nabla_{GE} \phi = 0, \quad (\nabla \cdot)_{FC} (\nabla \times)_{EF} u = 0,$$

$$(\nabla^* \times)_{FE} \nabla_{CF}^* \Phi = 0, \quad (\nabla^* \cdot)_{EG} (\nabla^* \times)_{FE} \xi = 0$$

が成り立つことが示される⁽²⁾. また

$$(\nabla^* \cdot)_{EG} u = 0 \Rightarrow (\nabla^* \times)_{FE} (\nabla \times)_{EF} u = -\Delta_{EE} u,$$

$$(\nabla \cdot)_{FC} \xi = 0 \Rightarrow (\nabla \times)_{EF} (\nabla^* \times)_{FE} \xi = -\Delta_{FF} \xi$$

が成り立つ⁽²⁾. 内積をそれぞれ

$$\langle \phi, \theta \rangle_{GRID} = \sum_I \phi_I \theta_I |\Delta \Omega_I^c|,$$

$$\langle u, w \rangle_{\text{EDGE}} = \sum_I (u_I^1 w_I^1 |\Delta\Omega_I^{E_1}| + u_I^2 w_I^2 |\Delta\Omega_I^{E_2}| + u_I^3 w_I^3 |\Delta\Omega_I^{E_3}|),$$

$$\langle \xi, \eta \rangle_{\text{FACE}} = \sum_I (\xi_I^1 \eta_I^1 |\Delta\Omega_I^{F_1}| + \xi_I^2 \eta_I^2 |\Delta\Omega_I^{F_2}| + \xi_I^3 \eta_I^3 |\Delta\Omega_I^{F_3}|),$$

$$\langle \Phi, \Theta \rangle_{\text{CELL}} = \sum_I \Phi_I \Theta_I |\Delta\Omega_I^C|$$

と定義すると

$$\langle \nabla_{\text{GE}} \phi, u \rangle_{\text{EDGE}} = -\langle \phi, (\nabla^* \cdot)_{\text{EG}} u \rangle_{\text{GRID}},$$

$$\langle (\nabla \times)_{\text{EF}} u, \xi \rangle_{\text{FACE}} = \langle u, (\nabla^* \times)_{\text{FE}} \xi \rangle_{\text{EDGE}},$$

$$\langle (\nabla \cdot)_{\text{FC}} \xi, \Phi \rangle_{\text{CELL}} = -\langle \xi, \nabla_{\text{CF}}^* \Phi \rangle_{\text{FACE}}$$

が成り立つ⁽²⁾ . また補間作用素 μ_{EF} および μ_{FE}^* を

$$(\mu_{EF} u)_I^1 = (m_1^* m_2 m_3 u^1)_I, \quad (\mu_{EF} u)_I^2 = (m_1 m_2^* m_3 u^2)_I,$$

$$(\mu_{EF} u)_I^3 = (m_1 m_2 m_3^* u^3)_I, \quad (\mu_{FE}^* \xi)_I^1 = (m_1 m_2^* m_3^* \xi^1)_I,$$

$$(\mu_{FE}^* \xi)_I^2 = (m_1^* m_2 m_3^* \xi^2)_I, \quad (\mu_{FE}^* \xi)_I^3 = (m_1^* m_2^* m_3 \xi^3)_I$$

と定義すると外積を

$$(u \times w)_I^i = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} m_i [(m_j^* u^j)_I (m_k^* w^k)_I],$$

$$(\xi \times \eta)_I^i = \sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} m_i^* [(m_j \xi^j)_I (m_k \eta^k)_I]$$

と定義することができる .

4.3 渦度方程式/Cahn-Hilliard 方程式の離散化

流れ関数と渦度場の離散近似を $\tilde{\psi}^n$ とし , 速度場と渦度場の離散近似をそれぞれ

$$\tilde{v}^n = (\nabla^* \times)_{\text{FE}} \tilde{\psi}^n, \quad \tilde{\omega}^n = (\nabla \times)_{\text{EF}} \tilde{v}^n$$

と定義する . そのとき離散 Navier-Stokes 方程式は

$$\begin{aligned} (\delta_t \tilde{v})^{n+1/2} &= (m_t \tilde{v})^{n+1/2} \times \mu_{FE}^* (m_t \tilde{\omega})^{n+1/2} \\ &+ (1/\rho) \mu_{\text{GE}} \tilde{M}^{n+1/2} \nabla_{\text{GE}} (m_t \tilde{\phi})^{n+1/2} + \nu \tilde{\Delta}_{\text{EE}} (m_t \tilde{v})^{n+1/2} - \tilde{\nabla}_{\text{GE}} \phi^{n+1} \end{aligned}$$

離散 Cahn-Hilliard 方程式は

$$(\delta_t \tilde{\phi})^{n+1/2} = (\nabla^* \cdot)_{\text{EG}} \{ -[\mu_{\text{GE}} (m_t \tilde{\phi})^{n+1/2}] (m_t \tilde{v})^{n+1/2} + m \nabla_{\text{GE}} \tilde{M}^{n+1/2} \}$$

となる . これらと

$$(\tilde{\nabla}^* \cdot)_{\text{EG}} \tilde{v}^{n+1} = 0$$

を連立して解くことにより速度 \tilde{v}^n , Bernoulli 関数 ϕ^n およびオーダーパラメータ $\tilde{\phi}^n$ ($n = 1, 2, \dots$) を求めることができる .

4.4 検査計算

立方体領域 $[-1, 1] \times [-1, 1] \times [-1, 1]$ の中央に置かれた , 初期形状が一辺の長さ 1 の立方体である液滴を考える . 初期状態のオーダーパラメータの分布を Fig.1 に示す . 表面張力によって初期形状から安定状態の球に向かって変形することになり , その過程を計算した . 計算に用いたパラメータの値は次の通りである .

$$\rho = 1, \quad \epsilon = 0.05, \quad \delta = 0.2, \quad \lambda = m = 2.0 \times 10^{-3}$$

流体は非粘性とし，二重井戸型ポテンシャル f は $f(\varphi) = (\hat{\sigma}/4)(\varphi^2 - 1)^2$ とした．格子分割は各方向 40 の等分割とし，各方向に周期境界条件を設定した．

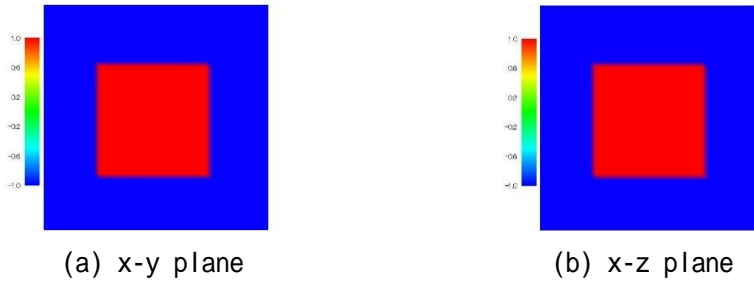


Fig.1 Initial distribution of the order parameter

Fig.2に液滴の xy 断面の時間変化を示す．正方形と菱形の間で振動するが，その振幅は徐々に減衰し円形に近づいていく．これは Cahn-Hilliard 方程式で表現される拡散効果によってエネルギーが減衰することによる．Fig.3にエネルギーとその散逸率の時間履歴を示す．運動エネルギーと自由エネルギーは液滴の振動とともに振動するが，全エネルギーは単調に減少していることが分かる．また流体が非粘性であるのでエネルギーの粘性散逸は0であり，散逸は拡散によってもたらされていることが確認できる．

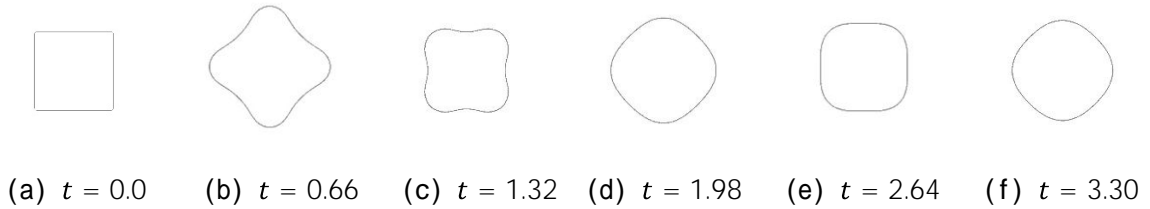


Fig.2 Shape of the cross section of the droplet (x-y plane)

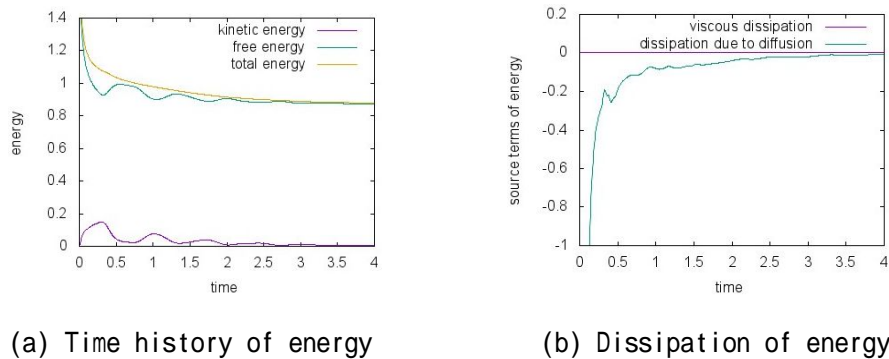


Fig.3 Time history of energy and dissipation of energy

参考文献

- (1) Suzuki, Y., "Bracket formulations and energy- and helicity-preserving numerical methods for incompressible two-phase flows," *Journal of Computational Physics* 356, 64–97, 2018.
- (2) Suzuki, Y., "Bracket formulations and energy- and helicity-preserving numerical methods for the three-dimensional vorticity equation," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 317, 174–225, 2017.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Suzuki Yukihiro	4. 巻 52
2. 論文標題 A GENERIC formalism for Korteweg-type fluids: I. A comparison with classical theory	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Fluid Dynamics Research	6. 最初と最後の頁 015516 ~ 015516
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1873-7005/ab6f47	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Suzuki Yukihiro	4. 巻 52
2. 論文標題 A GENERIC formalism for Korteweg-type fluids: II. Higher-order models and relation to microforces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Fluid Dynamics Research	6. 最初と最後の頁 025510 ~ 025510
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1873-7005/ab7ff6	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Suzuki Yukihiro	4. 巻 317
2. 論文標題 Bracket formulations and energy- and helicity-preserving numerical methods for the three-dimensional vorticity equation	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering	6. 最初と最後の頁 174 ~ 225
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cma.2016.12.012	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Suzuki Yukihiro	4. 巻 356
2. 論文標題 Bracket formulations and energy- and helicity-preserving numerical methods for incompressible two-phase flows	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Computational Physics	6. 最初と最後の頁 64 ~ 97
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcp.2017.11.034	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 鈴木幸人
2. 発表標題 On GENERIC formalisms for complex fluids
3. 学会等名 流体と気体の数学解析（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yukihito Suzuki
2. 発表標題 A GENERIC formalism for complex fluids with Cattaneo heat flux
3. 学会等名 Waseda Workshop on Partial Differential Equations 2019（国際学会）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木幸人
2. 発表標題 流体力学における構造保存型数値解法について
3. 学会等名 第14回 非線型の諸問題
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Yukihito Suzuki
2. 発表標題 A GENERIC formalism and the interstitial work flux for Korteweg-type fluids
3. 学会等名 International Workshop on the Multi-Phase Flow; Analysis, Modeling and Numerics（国際学会）
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担 者	大縄 将史 (Ohnawa Masashi) (10443243)	東京海洋大学・学術研究院・准教授 (12614)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------