様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２８ 年　 ６ 月 １４ 日現在

機関番号：１０１０１
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2014～2015
課題番号：２６６３００４４

研究課題名（和文）反応界面，相界面，固体壁面などの非平衡界面を統一的に扱う流体数理モデルの研究

研究課題名（英文）A research on uniformed mathematical model for inhomogeneous interface of reactive, two-phase or shock wave flows

研究代表者
大島　伸行（Oshima, Nobuyuki）

北海道大学・工学（系）研究科（研究院）・教授

研究者番号：１０２１７１３５

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,000,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では，予混合燃焼フレームレットモデルにおける局所界面速度の伝搬性とエネルギー保存則の関係を考察することで，局所界面速度を用いて拡張されたレベルセット方程式に対して曲率効果を包含するような新しい３次元定式を導いた．これは，レベルセット法の計算安定化に導入される界面厚さ分布の再初期化法と本質的に同等の効果をもち，また，特定の界面厚さ分布が満たされるとき一般的な界面移動モデルである任意の法線伝搬流および平均曲率流の粘性解を自然に与える定式であることを示した．また，非予混合火炎に適用できる一般化火炎片モデルを新たに導出して，基礎的な層流火炎場での数値検証にて従来手法欠点を改善する結果を得た．

研究成果の概要（英文）：This research investigates a relation between the scalar conservation equation and the level-set equation based on local interface speed model for a premixed combustion flame. A new model formulation is introduced for the source term of the conservation equation in three-dimensional interface phenomena, which gives the solution of the level-set equation coupled with a re-initialization procedure for the physical interface problems governed by conservation law. It may be an extensional formulation for a diffusive solution of the level-set equation.

研究分野：機械工学

キーワード：計算科学　数値流体力学　界面　フェーズフィールド法　レベルセット法

１．研究開始当初の背景

様々な流体現象，衝撃波(バーガーズ方程式)，予混合火炎(レベルセット法，局所火炎速度による G 方程式)，表面張力(LS 法保存系再初期化式)，相界面(フェーズフィールド法 Allen-Cahn 方程式) に対して個々に導出された物理モデルがいずれも同じ界面解を与える．これらの類似性の背景には「自由エネルギー最小原理」があり，フェーズフィールド法の基礎となる Allen-Cahn 方程式（または，その複素関数形式 Ginzburg-Landau 方程式）に帰着すると予想される．一方，界面数理モデルに関しては特にレベルセット法において詳細な研究がなされており，両者の境界領域となる流体界面現象に対しては両概念を融合したアプローチが有効と考えられる．

２．研究の目的

本研究では，代表的な界面現象の数理モデルであるフェーズフィールド法（PF）とレベルセット法（LES）に対して申請者が提案する４つの新しい定式モデル（①局所界面速度，②保存系定式モデル，③非平衡定式モデル，④複素数関数モデル）の数学的な類似性に着目して，様々な流体界面現象に統一的なアプローチによるモデル定式を示すことを目標とした．

３．研究の方法

予混合火炎を想定した前 2 者のモデル（局所界面速度の伝搬性とエネルギー保存則）の関係を考察することで，局所界面速度を用いて拡張されたレベルセット方程式に対して曲率効果を包含するような新しい３次元定式を導いた．界面の非平衡性の定式に関しては，分子動力学モデルによる気液が共存する非一様場において，熱力学的圧力の局所定義をビリアル定理に基づき近似的に導出した．複素数関数モデルに関しては，本研究では大きな進展を得ることができなかった．

本研究で最も顕著な成果を得た局所界面速度を用いて拡張されたレベルセット方程式の導出について以下に報告する．

４．研究成果

レベルセット法の基礎となる等高線方程式（レベルセット方程式）を物理的な界面現象に適用する場合，対象となる「界面」は現象を代表するスカラー量の等値面であると期待される．このようなスカラー量 u が界面近傍の両方向に連続的に分布し，遠方で異なる２つの値 u_-, u_+をとるものと想定すると，等値面 $u=u_0$（$u_- \leqq u_0 \leqq u_+$）で定義される「界面」の挙動は等高線方程式により記述される．たとえば，代表的な等高線方程式である等速成長流と平均曲率流の線形和は

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -V\left|\nabla u\right| \qquad (1)$$

ただし，界面速度：$V = s(u_0) + c(u_0)\kappa$
（κ ：平均曲率）

と与えられる．ここで，$s(u_0), c(u_0)$は界面 $u=u_0$ についての等速成長の速度，平均曲率流の速度係数をそれぞれ与える．また，記号$\otimes$ はベクトルのテンソル積を表す．具体的なスカラー量 u の例としては，レベルセット法でしばしば用いられる符号付距離関数（界面法線を正符号とした界面からの距離）が代表的な解としてあげられる(Russo ら 2000).

Chen (陳)ら(1991)によれば，一般に，等高線方程式が幾何学的かつ単調性であるという特徴によって，適切な定義域と初期条件の元で等高線方程式は，単調増加関数（dG/du＞0）による変数変換 $u^*=G(u)$ に対して恒等的であり，等値面 $u^*=u^*_0=G(u_0)$の時間発展について同一の解を与えることが知られている．よって，任意の増加関数 G(u)が等値面 $u=u_0$ についての等高線方程式の一般解であると解釈できる．

ここで，物理的な界面現象があるスカラー量 $u^*=G(u)$で記述されるとき，その「界面」を定義する具体的な値 $u^*_0=G(u_0)$ は定義域 $u^*_-=G(u_-)\leqq u^*\leqq G(u_+)=u^*_+$ において任意にとりうることを考えて，上述の一般解のうち式(1)（または式(2)）が任意の等値面 $G(u)= G(u_0)$ について共通に成り立つようなものを導出したい．スカラー関数 $G(u)$を物理的な界面現象と関連付けて特定の物理量を表すと考えると，関数 $G(u)$ の具体的な分布を定めるためには異なる初期等値面 $u=u_0$ に対する等高線方程式の解について何らかの関係性を課すことが必要となる．

関数 $u^*=G(u)$が具体的な界面現象と関係付けられる例として，Liu ら(2011)は，低温未反応の燃料／空気予混合ガスが高温の反応生成ガスと接触する界面で燃焼反応が生じる予混合火炎が定常伝播する現象に対して上記の等速成長流で近似するモデルを提案した．かれらは火炎前後の温度変化をレベルセット関数 u^*とみなすと火炎厚み内部の温度分布が tanh 関数で近似され，このとき生成量$\dot{q}$をスカラー勾配の絶対値$\left|\nabla u^*\right|$と基準密度ρ_0（通常は未燃ガスの値をとる）除した局所火炎速度

$$S^*=\frac{\dot{q}}{\rho_0\left|\nabla u^*\right|} \tag{2}$$

が温度の線形関数で与えられることを示した．物理的な解釈としては，生成量$\dot{q}$と温度勾配による拡散フラックスの和が定常な火炎速度（界面等速成長の速度）を与えると考えたときに「局所火炎速度」はそのうちの生成量$\dot{q}$に直接起因する成分を表すものと理解される．また，この局所火炎速度による温度時間発展は 1 次元において典型的な非線形対流方程式（バーガーズ方程式）を与え，予混合火炎伝播が圧縮性流体の衝撃波や浅水波の跳水現象などの界面現象と同等の数理モデルで表現されることを意味する．

そこで Liu らのモデルを一般化して，速度場 $\mathbf{v}$ の流体媒質上でスカラー関数 $u^*=G(u)$が以下ように流れ現象の一般的な保存則を満たすとする．

$$\rho\frac{\partial u^*}{\partial t}=-\rho\mathbf{v}\cdot\nabla u^*+\nabla\cdot\mathbf{j}+\dot{q} \tag{3}$$

ここで代表的な界面現象モデルである phase-field 法に習って, 界面により分けられる「２つの相」がスカラー変数 u^* の異なる値によって定義されるとして，このような示強量 u^*の時間変化に物質密度を乗じた量（左辺）が保存則を満たすと考えている．このとき，右辺は保存量フラックス（具体的には媒質の対流 $\mathbf{v}$ および勾配拡散 $\mathbf{j}=D\nabla u^*$ によりモデル化される）と生成量$\dot{q}$により与えられる．

生成量$\dot{q}$を Liu らの局所火炎速度 S^* (式 2）を用いてモデル化して式(3)に代入すると，定在する平面火炎では一次元流れの保存則より火炎を横切る流量$\rho\mathbf{v}\cdot\mathbf{n}=\rho V$が一定であることを考慮すると，火炎厚さ方向座標 ξ に対して以下の関係を満たす．

$$\left(\rho_0 S^*-\rho V\right)\frac{du^*}{d\xi}+\frac{d}{d\xi}\left(D\frac{du^*}{d\xi}\right)$$

ただし，$\left(\dfrac{du^*}{d\xi}\right)\mathbf{n}=\nabla u^*$，　$\mathbf{n}=\dfrac{\nabla u^*}{\left|\nabla u^*\right|}$ (4)

あるいは，これを積分して

$$\int\left(\rho_0 S^*-\rho V\right)du^*+D\frac{du^*}{d\xi}=0 \tag{5}$$

となる．ここで，境界条件を単純化してスカラー変数 u^*を火炎両側遠方で未燃側 $u^*=u^*_-=0$，既燃側 $u^*=u^*_+=1$ となるように無次元化し，局所燃焼速度S^*がスカラーu^*の線形式であると仮定すると，定常平面火炎の遠方条件，温度勾配$\left|\nabla u^*\right|=\dfrac{du^*}{d\xi}=0$より，

$$F \equiv \int (\rho_0 S^* - \rho V) du^* = -Au^*(1-u^*)$$

ただし，$\dfrac{A}{4} = \left[D|\nabla u^*|\right]_{\max}$ (6)

をえる．興味深いことに式(8)は一次元問題においてこれはレベルセット関数の局所安定化のために用いられる Olsson ら(2005)の再初期化式を与えている．

以上の考察から，これらが曲率効果を含む一般の 3 次元界面の等高線方程式(1)と関連付けられるような拡張として，次のような一般化定式モデルを考える．

$$\dot{q} = \alpha \mathbf{n}\cdot\nabla u^* + \beta \mathbf{n}\cdot\nabla F + (1-\beta)\nabla\cdot F\mathbf{n}$$

（α, β はモデル定数） (7)

これを保存方程式(3)に代入すると，ベクトル恒等式

$$\nabla\cdot(D\nabla u^*) \equiv \mathbf{n}\cdot\nabla\left(D|\nabla u^*|\right) + D|\nabla u^*|(\nabla\cdot\mathbf{n})$$

$$\nabla\cdot F\mathbf{n} \equiv \mathbf{n}\cdot\nabla F + F(\nabla\cdot\mathbf{n})$$

をもちいて

$$\rho\frac{\partial u^*}{\partial t} = -(\rho\mathbf{v} - \alpha\mathbf{n})\cdot\nabla u^* + \beta D|\nabla u^*|(\nabla\cdot\mathbf{n}) - \beta\left(F + D|\nabla u^*|\right)(\nabla\cdot\mathbf{n}) + \nabla\cdot\left(F + D|\nabla u^*|\right)\mathbf{n}$$

(8)

が導かれる．ここで，スカラー∇u^*が条件式(5) $F + D|\nabla u^*| = 0$ を満たすとき式(8)右辺第 3,4 項が 0 となり，界面速度

$V = s(u_0) + c(u_0)\kappa$ について

$$\rho s(u_0) = \rho\mathbf{v}\cdot\mathbf{n} - \alpha$$

$$\rho c(u_0) = -\beta D$$

であるような等高線方程式に帰着する．等速流速はα/ρで与えられ，一方，曲率流は定数Dとβの積に比例して，$D > 0$，$\beta > 0$のとき等高線の凹側，すなわち，曲率を減ずるように作用する．ここで，$\rho s(u_0)$，$\rho c(u_0)$が等値面レベル$u_0^* = G(u_0)$に依存していないことから，法線分布が平衡条件式(7) $F + D|\nabla u^*| = 0$ を満たす界面では全ての等値面$u^* = u_0^*$（あるいは$u = u_0$）が同じ等高線方程式によって記述できることを意味している．

一方，平衡条件式(5) $F + D|\nabla u^*| = 0$ からの変位に対して，式(8)右辺第 3，４項が

$$\beta\frac{d}{d\xi}\left\{\left(\frac{F}{|\nabla u^*|} + D\right)\frac{du^*}{d\xi}\right\} + (1-\beta)\nabla\cdot\left\{\left(\frac{F}{|\nabla u^*|} + D\right)\nabla u^*\right\}$$

(11)

と書き直されることから，$0 \le \beta \le 1$であればスカラー勾配が平衡条件よりも過大（過小）であるとき正（負）の拡散効果を与え，時間発展において等値面近傍の局所解を一次元的あるいは等方的に平衡条件（式 7）へ収束させることがわかる．これらは，レベルセット法の計算安定化に導入される再初期化の時間発展式（非保存型 Russo ら(2000)，保存型 Olsson ら）と本質的に同じ効果を与えるものとなる．

以上をまとめると，スカラー保存方程式(3)の生成項を式(7)でモデル化することによって，界面法線分布の再初期化の効果を伴った等値面方程式（レベルセット方程式）が導出される．これは，従来レベルセット法の再初期化補正を含む解法に対しての物理的な解釈を与える一案と考えられる．

Chen Y., Giga Y., Goto S., Uniqueness and existence of viscosity solution of generalized mean curvature flow equations, *Journal of differential geometry*, 33 (1991) 749-786

Russo, G., and Smereka, P., A remark on computing distance functions, *Journal of Computation Physics*, 164, (2000), pp. 51-67.

Liu Y., Oshima N., A Level Set Approach for a Premixed Flame Based on a New Concept of Flame Speed, *Journal of Thermal Science* *and Technology*, Vol.6, No.1 (2011) 140-153

Olsson E., Kreiss G., A conservative level set method for two phase flow, *Journal of computational physics*, 210 (2005) 225-246

５．主な発表論文等

（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計３件）

1. **N.OSHIMA**, An extensional formulation for a diffusive solution of the level-set equation by considering a relation to the scalar conservation equation, ***Mechanical Engineering Letters***, Vo.2 (2016) 1-5, DOI: 10.1299/mel.16-00220 、査読あり

2. J.Gong, **N.Oshima**, Reduction of spurious velocity in the free-energy-based lattice Boltzmann method for large density ratio, ***Journal of Thermal Science and Technology***, Vol.10, No.1 (2015) 1-14, DOI: 10.1299/jtst.2015jtst0004、査読あり

3. Y.Liu, **N.OSHIMA**, Validation of a new level set approach in the counter flow, ***Journal of Thermal Science and Technology***, Vol.9, No.1 (2014) 1-12, DOI: 10.1299/jtst.2014jtst0002、査読あり

〔学会発表〕（計８件）

1. **大島伸行**, 界面数理モデルに基づく非予混合燃焼における火炎伝搬機構についての考察, 第 21 回計算工学講演会 (2016.5.31-6.2) 朱鷺メッセ（新潟）査読なし

2. 矢口久雄, 宮澤拓也, **大島伸行**, 分子動力学法の局所圧力計算に対するビリアル定理の適用に関する基礎的検討, 第 29 回数値流体力学シンポジウム (2015.12.15-17) 九州大学（福岡県・福岡市）査読なし

3. KIM Jiun, **大島伸行**, 予混合火炎解析モデルの改良および層流部分予混合燃焼への適用, 第 53 回燃焼シンポジウム (2015.11.16-18) 筑波大学（茨城県・つくば市）査読なし

4. **大島伸行**, 火炎面の曲率を考慮した予混合火炎モデル, ***日本機械学会第 27 回計算力学講演会*** (2015.10.10-12) 横浜国立大学（神奈川県・横浜市）査読なし

5. **大島伸行**, 定常伝搬する予混合火炎のレベルセット法モデルの定式化について, ***日本機械学会第 27 回計算力学講演会*** (2014.11.22-24)岩手大学（岩手県・盛岡市）査読なし

6. **N.OSHIMA**, Y.TAKAHASHI, Large eddy simulation of turbulent combustion flows in gas-turbaine combustors, ***Korea-Japan CFD Workshop*** (2014.11.14) Yonju (Korea) 査読なし

7. K.MURASE, **N.OSHIMA**, Y.NONAKA, K.HIRANO, Validation of the turbulent burning speed model, Intern. ***Symposium on Combustion*** (2014.8.3-8) San Francisco(USA) 査読あり

8. Y.TAKAHASHI, **N.OSHIMA**, Y.IWAI, Large-Eddy simulation of transient behavior in a combustion field for gas-turbine engine, ***World Congress on Computational Mechanics*** (2014.7.20-25) Barcelona (Spain) 査読あり

〔図書〕（計０件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計０件）

○取得状況（計０件）

〔その他〕

なし

６．研究組織

(1)研究代表者

大島 伸行（Nobuyuki OSHIMA）・

北海道大学・工学研究院・教授

研究者番号：10217135

(3)連携研究者

利根川　吉廣（Yoshihiro TONEGAWA）

東京工業大学 理学院・教授

研究者番号：80296748