様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ３０ 年　 ５ 月 ２３ 日現在

機関番号：１１３０１
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2016～2017
課題番号：１６Ｋ１３７７６

研究課題名（和文）多孔性媒質内の流体の挙動に関するミクロ－マクロ統合数理モデルの構築

研究課題名（英文）Mathematical modeling for multi-scale flows in porous media

研究代表者
水藤　寛（SUITO, Hiroshi）

東北大学・材料科学高等研究所・教授

研究者番号：１０３０２５３０

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　1,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、土壌中の水の流れや生体組織内の流れ、植生を伴う湖沼内の水流や森林を通り抜ける風の流れなど、生体から環境までの幅広い分野に現れる多孔性媒質内の流れを研究対象とした。多孔性媒質内の流れの特徴は、局所的な微細構造に由来する幾何形状の特徴が、ミクロ（微視的）な流れの構造を通してマクロ（巨視的）な流れに影響を与えていることである。それらを総合することで、それぞれのアプローチの長所短所を把握し、それらの間の関係性の理解が進んだことが、本研究の成果である。

研究成果の概要（英文）：In this study, flow in porous media has been considered. Flow in porous media arises in a lot of situations such as flows in biotissues, flows through forests, flows in lakes with vegetation and so on. In porous media, micro-scale structures of pores affect to the flow in the macro-scale. This kind of multi-scale problems is rather difficult for mathematical modeling and numerical simulations. In this study, flows through narrow gaps between small spheres and flows in homogeneous medium with constant drag force are simulated and compared.

研究分野：応用数学

キーワード：多孔性媒質　数値シミュレーション

１．研究開始当初の背景

本申請研究で取り上げる多孔性媒質内の流れ解析については、古くから多くの研究が行われてきている。H. Darcy から始まって、特に土木分野では現場における必要性から多くのモデルが提案され、実用化されてきている。環境分野においては、特に廃棄物の地下処理に際してその安全性を確保するために多孔性媒質内の流れ解析が積極的に進められている。それらの研究において主に用いられている飽和・不飽和浸透流方程式は、より一般的な流れの解析で用いられる Navier-Stokes 方程式と比較すると、土質中のように流速が非常に遅いところでは妥当なモデルとあると考えられている。

土壌物理の分野では、ミクロスケールでの Navier-Stokes 方程式からマクロスケールの Darcy 則を導こうとする試みが行われているが、特に不飽和状態（土壌間隙中に水と空気の両方が存在する場合）については困難が大きいようである。

対象とする時間・空間スケールに大きな幅があるマルチスケール問題は、多くの問題で現れ、そのいずれもが非常に困難な問題となっている。その中で、本研究で扱う多孔性媒質内の流れの問題は、地下水汚染の問題、生体軟組織内の流れの問題、環境シミュレーションにおける植生の影響の問題など、非常に幅広い応用対象を持っているのが特徴である。多孔性媒質中の流れに関する自由表面の運動と表面張力とを介したミクロとマクロのモデル統合は、これらの幅広い応用分野に対して新しい数理モデルを提供するのが特色であり、それらの応用における数値シミュレーションを大きく前進させると予想された。

２．研究の目的

多孔性媒質内の流れの現象については、マクロとミクロの両方の視点が存在し、多くの研究者がそれらをつなぐことに挑んでいるが、未だに実現していない。その過程には数理モデル構築の上での困難と数値計算上の困難がある。本研究は、マクロとミクロの視点をつなぐ数理モデルの進展とそれを用いた数値計算を提案することを目的とした。具体的には、「複雑な流路形状をもつ多孔性媒質内を、自由表面を伴った流体が、表面張力に由来する圧力ジャンプに打ち勝ちながら進んでいく」というミクロな見方と、「領域全体で速度やその勾配に依存する抵抗力が働いているという条件下での流れ」というマクロな見方を統合し、ミクロにおける諸現象を正当にマクロの方程式に取り込む数理モデルを構築することを当初の目的とした。

３．研究の方法

まず、ミクロスケールで見たときの、多孔性媒質の間隙中の流れのシミュレーションを行った。多孔性媒質の間隙形状は一般に非常に複雑であるが、本研究では球形の粒子をいくつかの規則にしたがって配置し、その間隙の流れを計算することとした。境界条件については、流入境界と流出境界において圧力差を与え、その圧力勾配に応じて流れが発生するものとした。粒子の表現については埋め込み境界法を用いた。これは、与えた境界形状内で流れに対する抵抗が働くように定式化するもので、複雑形状を有する流れの計算ではしばしば用いられる手法である。具体的には、Navier-Stokes 方程式の右辺に速度に比例する抵抗を与える。

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\,\boldsymbol{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\boldsymbol{u} - cA\boldsymbol{u}$$

ここで $A(x,y,z)$ は粒子内部で１, 外部で０の値をとる特性関数、c は抵抗係数である。より高解像度の計算に対応するため、GPU を用いたプログラムの並列化などの作業を進め、粒子の配置、圧力勾配などを変化させたシミュレーション結果を蓄積した。

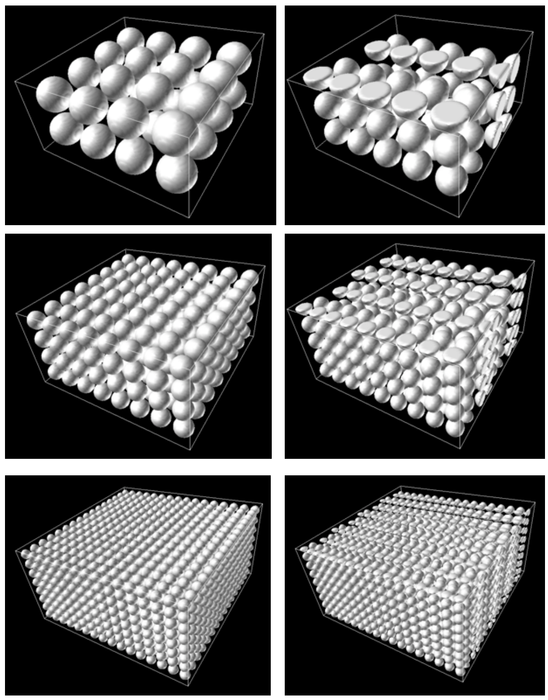

図 1 粒子による表現

図１に、使用したいくつかの粒子配置を示す。上から順に、体積率は一定のまま、粒子の直径を小さくしていったものである。左列は粒子を格子状に配置したもの、右列は奥行き方

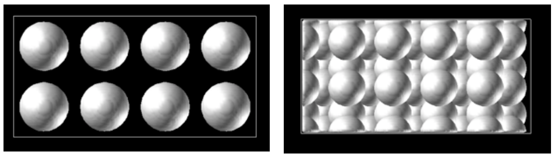

図 2 粒子配置

向に半格子ずつずらして配置したものである。最も粒子が大きなケースにおいて上流から見たものを図２に示す。

一方で、マクロスケールの見方として領域中に流れに対する一様な抵抗がはたらく条件での計算を行った。

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla)\,\boldsymbol{u} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu \nabla^2 \boldsymbol{u} - c_K \boldsymbol{u}$$

抵抗の形としては最も単純なものとして、流速に比例する抵抗が働く形を与えた。粒子に対する埋め込み境界法と同様に、速度に比例する抵抗の形で流れに対する影響を考慮する。ただし、この力は粒子の場合と異なり領域全体で発生するものである。この計算についても、一様な抵抗係数と圧力勾配を変化させたシミュレーション結果を蓄積した。

これらの手法によって計算した流れ場を観察し、そこで得られる流量と圧力勾配の関係を比較した。なお、レイノルズ数が比較的小さいため、流れは定常状態となる。流れ場の時間変化が非常に小さくなった状態を定常状態と見なして、その状態での比較を行うこととした。

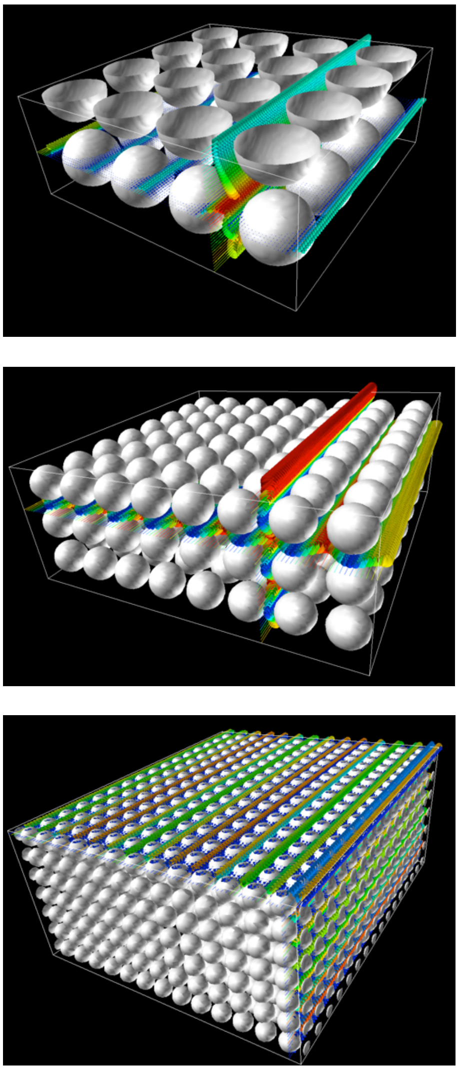

図３ 粒子間の流れ（格子配置）

４．研究成果

図３に、粒子を格子状に配置した場合の流れ場の様子を示す。図の手前が流入面、奥が流出面である。流入面に高い圧力、流出面に低い圧力を与え、その圧力勾配によって流れが駆動される形とした。空間の離散化には差分法を用い、計算格子は直交等間隔格子、格子への変数の配置はスタガード配置とした。粒子は前述のように埋め込み境界法を用いて表現しており、その半径は0.8 ㎜から 0.2 ㎜まで変化させた。図に示した計算結果では二つの断面における速度ベクトルを描いており、赤が速度の大きい部分、青が速度の小さい部分を示している。粒子を格子状に配置した場合には流入面から流出面に向かって障害物のない領域が直線上に存在するため、そのような部分に集中した流れ場が見られている。

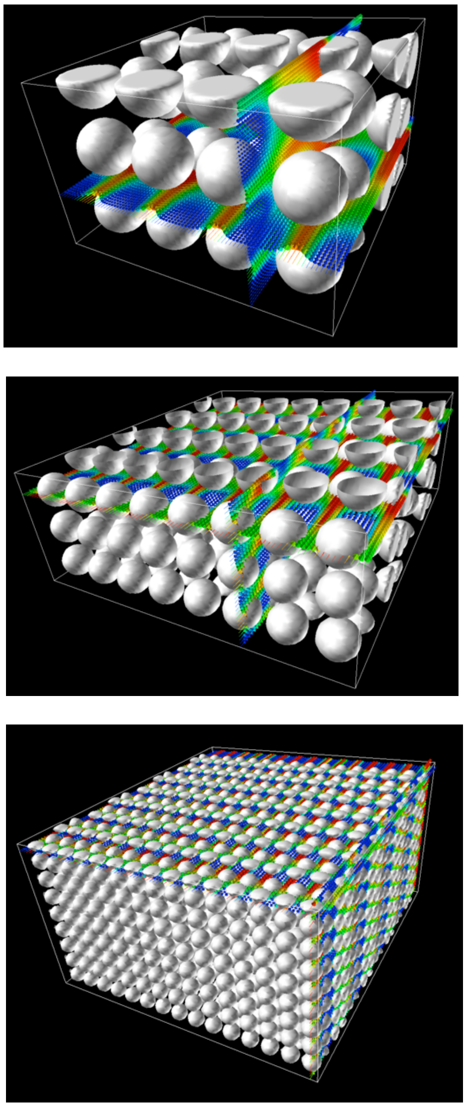

図４ 粒子間の流れ（交互配置）

それに対して図４に示した交互配置の場合には、流体は流入面から流出面に向かって直線上に流れることはできず、粒子の間の空隙を縫うようにして進んでいることがわかる。

これらの流れ場に対して流入境界と流出境界の間の圧力を変化させ、その圧力差と流量の関係を調べた。

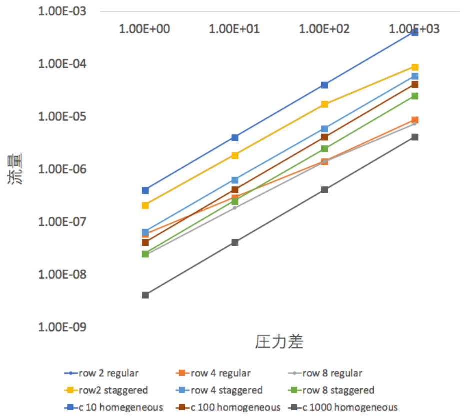

図5 圧力勾配と流量の関係

図5に圧力差と流量の関係を示す。ここで調べた範囲では、圧力差と流量の間にほぼ線形の関係が成り立っていることがわかる。また、粒子経が小さくなるほど圧力損失は大きく、同じ流量を得るためには大きな圧力差が必要になっていることがわかる。また、粒子の存在を領域内で一様に働く抵抗として表現した場合にも、圧力差と流量の間には線形関係が成り立っていることがわかる。

本研究では、多孔性媒質の構造を多数の粒子の存在によってモデル化し、その間を流れる流体の振る舞いを調べた。当初計画した全ての要素を実現するには至らなかったが、多孔性媒質を粒子の集合として表現した場合と、一様な抵抗力として表現した場合の類似点を見ることができた。また、流れの詳細を見ることを通じてそれぞれのアプローチの長所短所を把握し、それらの間の関係性を理解することができた。当初計画に含めていた摩擦型境界条件の適用については検討を行い、数値シミュレーションを実施したが、数値的不安定などの問題があり、他のアプローチと比較するには至らなかった。

本研究をさらに進めて多孔性媒質内の流れ場の理解を深め、ミクロとマクロを統合した見方を実現するためには、次のような項目について検討する必要があると考えられる。

① 本研究では、多孔性媒質の内部形状として、多数の球体が配置されている状況を考えた。もちろん実際には多孔性媒質の空隙ははるかに複雑な形状をしており、その違いによる流れ場の違いを考えることが必要である。
② 本研究では、多孔性媒質の空隙が水で満たされている飽和状態を対象としたシミュレーションのみを行った。現実の状況では、空隙内は水で飽和しておらず、空気と水の自由表面が存在する状況が一般的である。自由表面が存在する場合にはそこで働く表面張力による圧力ジャンプなどが重要になるため、それをマクロスケールの計算に適切に取り入れることが必要であると考えられる。
③ 本研究では、多孔性媒質中の空隙の離散化に、有限差分法と埋め込み境界法を用いた。埋め込み境界法は複雑形状を扱うのに非常に有利な手法であるが、格子面が境界面に完全には一致していないため、空隙表面での壁面応力を正確に計算することができない。その応力を正確に見積もることは、全体の圧力損失を知る上で重要であるので、有限要素法を用いるなどして境界形状を正確に表現することが必要であると考えられる。

本研究の成果の一部は講演等で発表したが、計算結果についてはまだ補充する必要があるため、論文として投稿するのはそれらの作業が完結してからとなる。

５．主な発表論文等

〔学会発表〕（計３件）
① Hiroshi Suito, “Fluid-structure interaction in environmental and medical applications with a machine learning approach”, Rencontres INRIA-LJLL en calcul scientifique, INRIA de Paris, 2017年10月
② Hiroshi Suito, “Fluid-structure interaction in environmental and medical applications”, Innovative Methods in Scientific Computing, University of Jyvaskyla, 2017年10月
③ Hiroshi Suito, “Application of immersed boundary method to environmental and biomedical problems”, Thematic program 2017, Nonlinear partial differential equations for future applications, Tohoku university, 2017年7月

６．研究組織
(1)研究代表者
水藤　寛（SUITO, Hiroshi）
東北大学・材料科学高等研究所・教授
研究者番号：１０３０２５３０
(2)研究分担者
なし
(3)連携研究者
なし
(4)研究協力者
鈴木和将（SUZUKI, Kazuyuki）
岡山大学・大学院環境生命科学研究科・博士後期課程
研究者番号：７０３７９８２４