非圧縮二相流れに対する構造保存型数値解法について
On a structure preserving numerical method for incompressible two-phase flows

○ 鈴木幸人，早大理工，東京都新宿区大久保３－４－１, E-mail: y_suzuki@aoni.waseda.jp
越塚誠一，東大工，東京都文京区本郷, E-mail: koshizuka@sys.t.u-tokyo.ac.jp
Yukihito SUZUKI, Dept. of Math., Waseda Univ., 3-4-1 Ohkubo, Shinjuku-ku, Tokyo
Seiichi KOSHIZUKA, Dept. of Systems Innovation, Univ. of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo

The vorticity/Cahn-Hilliard equations for incompressible two-phase flows are formulated within bracket formulations. The budgets of kinetic energy, helicity, and enstrophy are properly inherited by the finite difference equations obtained by invoking the discrete variational derivative method combined with the mimetic finite difference method. The energy dissipates not only due to viscosity but also to so called Cahn-Hilliard diffusion. The helicity varies due to viscosity and surface tension in the direction of vorticity. The enstrophy is produced by vortex stretching and surface tension, and dissipated by viscosity and diffusion. Numerical experiments on a periodic array of droplets have been done to examine the properties and usefulness of the proposed method.

１．はじめに

近年，構造保存型数値解法あるいは幾何学的数値積分法と呼ばれる手法の研究が盛んになってきている[1),(2]．これは微分方程式がもつ何らかの数学的構造を離散化後も保持することによって，微分方程式の解の定性的挙動を忠実に再現するような近似解を得ることを目指す数値計算法である．正準 Hamilton 系の symplectic 構造を保存する symplectic 法が代表的な例であるが，降旗・森[(3)]によって保存系のみならず散逸系の偏微分方程式にも適用可能な離散変分導関数法と呼ばれる手法が提案された．これは微分方程式がある汎関数に作用する歪対称作用素と負定値対称作用素で表される場合，その構造を保存するように離散化を行うことによって，汎関数の（歪対称作用素に起因する）保存性と（負定値対称作用素に起因する）散逸性を常に保証する数値解法を構築するものである．

一方，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いる[(4)]．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[(5),(6)]．筆者等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，それに上記の離散変分導関数法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[(7),(8)]．本講演ではそれを Navier-Stokes/Cahn-Hilliard 方程式に拡張した結果[(9)]について報告する．なお三次元の渦度方程式のとき[(8)]と同様に Euclid 空間の de Rham 複体[(10)]の構造を格子上で保存するような離散化手法を開発した．これは Mimetic Finite Difference 法[(11)]等として研究されているものと同様であるが，その基本的な概念は数値流体力学の研究者に認識されていたものである[(12)]．これにより，渦度場の速度場との関係と非発散条件が自動的に離散系に引き継がれると同時に，離散化した渦度方程式を速度と圧力を未知数とする離散 Navier-Stokes 方程式に帰着させることが可能になる．

２．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

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

を導入し（ ϵ と $\hat\sigma$ はそれぞれ界面厚さと表面エネルギーの尺度で f は二重井戸型ポテンシャル），Hamiltonian と enstrophy を

$$\mathcal{H}=\int_\Omega \frac{\rho}{2}|v|^2dV+\Psi \tag{2}$$

および

$$\mathcal{Z}=\int_\Omega \frac{1}{2}|\omega|^2dV+\lambda\Psi \tag{3}$$

と定義する．ここで ψ を流れ関数（あるいはベクトルポテンシャル）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．以下，境界では周期条件を課すものとする．

Poisson 括弧と散逸括弧を（渦度場とオーダーパラメータ上の汎関数 $\mathcal{F},\mathcal{G}$ に対して）それぞれ

$$\begin{aligned}\{\mathcal{F},\mathcal{G}\}&=\int_\Omega\left(\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega},\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\varphi}\right)\begin{pmatrix}\mathcal{L}_{11}&\mathcal{L}_{12}\\\mathcal{L}_{21}&O\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\delta\mathcal{F}/\delta\omega\\\delta\mathcal{F}/\delta\varphi\end{pmatrix}dV,\\ \mathcal{L}_{11}&=-(1/\rho)\nabla\times\{\omega\times(\nabla\times\ \cdot\ )\},\\ \mathcal{L}_{12}&=(1/\rho)\nabla\times(\ \cdot\ \nabla\varphi),\\ \mathcal{L}_{21}&=-(1/\rho)(\nabla\varphi)\cdot(\nabla\times\ \cdot\ )\end{aligned} \tag{4}$$

と

$$\begin{aligned}[\mathcal{F},\mathcal{G}]&=\int_\Omega\left(\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\omega},\frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\varphi}\right)\begin{pmatrix}\mathcal{M}_{11}&O\\O&\mathcal{M}_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\delta\mathcal{F}/\delta\omega\\\delta\mathcal{F}/\delta\varphi\end{pmatrix}dV,\\ \mathcal{M}_{11}&=\nu\Delta,\ \mathcal{M}_{22}=(m/\lambda)\Delta\end{aligned} \tag{5}$$

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（任意の汎関数 $\mathcal{F}$ に対して）

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt}=\{\mathcal{F},\mathcal{H}\}+[\mathcal{F},\mathcal{Z}] \tag{6}$$

が成り立つことと同値である[(9)]．特に，$\delta\mathcal{H}/\delta\omega=\psi,\delta\mathcal{H}/\delta\varphi=\mathrm{M},\delta\mathcal{Z}/\delta\omega=\omega,\delta\mathcal{Z}/\delta\varphi=\lambda\mathrm{M}$ ただし

$$\mathrm{M}=\frac{\delta\Psi}{\delta\varphi}=\frac{1}{\epsilon}f'(\varphi)-\epsilon\hat\sigma\Delta\varphi \tag{7}$$

であるから，(6)式において（任意のベクトル場 ξ とスカラー場 Φ を用いて）

$$\mathcal{F}=\int_\Omega(\xi\cdot\omega+\Phi\varphi)dV \tag{8}$$

とすると（ $\delta\mathcal{F}/\delta\omega=\xi,\delta\mathcal{F}/\delta\varphi=\Phi$ より）

$$\int_\Omega\left\{\xi\cdot\left[\frac{\partial\omega}{\partial t}+\nabla\times(\omega\times v)+\frac{\epsilon\hat\sigma}{\rho}\nabla\times(\Delta\varphi\nabla\varphi)-\nu\Delta\omega\right]+\Phi\left[\frac{\partial\varphi}{\partial t}+v\cdot\nabla\varphi-m\Delta\mathrm{M}\right]\right\}dV=0 \tag{9}$$

が得られる．また(6)式より保存則

$$
\begin{aligned}
\frac{d\mathcal{H}}{dt} &= \{\mathcal{H},\mathcal{H}\} + [\mathcal{H},\mathcal{Z}] \\
&= -\int_\Omega (\mu|\omega|^2 + m|\nabla \mathrm{M}|^2) dV, \\
\frac{d\mathcal{S}}{dt} &= \{\mathcal{S},\mathcal{H}\} + [\mathcal{S},\mathcal{Z}] \\
&= \int_\Omega \omega \cdot [-\epsilon\hat{\sigma}(\Delta\varphi)\nabla\varphi + \mu\Delta v] dV, \\
\frac{d\mathcal{Z}}{dt} &= \{\mathcal{Z},\mathcal{H}\} + [\mathcal{Z},\mathcal{Z}] \\
&= \int_\Omega \Big\{ \omega \cdot D\omega - \left(\nabla \times \frac{\omega}{\rho} - \lambda v\right) \cdot [\epsilon\hat{\sigma}(\Delta\varphi)\nabla\varphi] \\
&\qquad - \nu|\nabla\omega|^2 - m\lambda|\nabla \mathrm{M}|^2 \Big\} dV
\end{aligned}
\tag{10}
$$

が成り立つことが分かる．ただし $\mu = \rho\nu$ は粘性係数，$D = (1/2)(\nabla v + \nabla v^T)$ はひずみ速度テンソルで

$$
\mathcal{S} = \int_\Omega \frac{\rho}{2} v \cdot \omega dV \tag{11}
$$

はヘリシティである．

3．空間離散化

デカルト座標 (x^1, x^2, x^3) の座標軸をそれぞれ

$$
0 = x_1^i < \cdots < x_{N^i}^i = L^i \; (i = 1,2,3)
$$

と分割することにより直交格子を生成し，Fig.1 に示すように変数を配置する．すなわちスカラー場の離散近似は格子点 $x_I = (x_{I^1}^1, x_{I^2}^2, x_{I^3}^3)$（ただし $I = (I^1, I^2, I^3)$ ）あるいはセル中心

$$
\bar{x}_I = (\bar{x}_{I^1}^1, \bar{x}_{I^2}^2, \bar{x}_{I^3}^3), \;\; \bar{x}_{I^i}^i = (x_{I^i+1}^i + x_{I^i}^i)/2 \;\; (i = 1,2,3)
$$

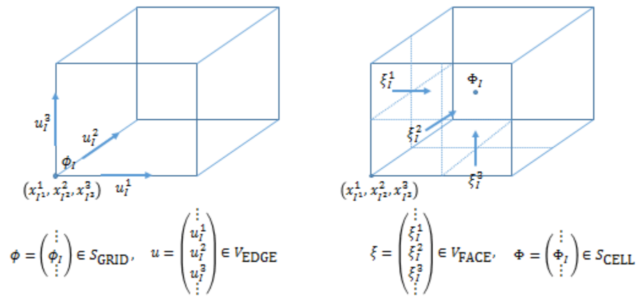
において定義される関数 $\phi: x_I \mapsto \phi_I$ あるいは $\Phi: \bar{x}_I \mapsto \Phi_I$ であるとし，その全体をそれぞれ S_{GRID} および S_{CELL} と記す．これらはそれぞれ格子点数とセル数の次元をもつ線型空間となる．同様にベクトル場の離散近似は（各座標方向の）格子辺の中心

$$
\hat{x}_I = (\bar{x}_{I^1}^1, x_{I^2}^2, x_{I^3}^3), \;\; \hat{y}_I = (x_{I^1}^1, \bar{x}_{I^2}^2, x_{I^3}^3), \;\; \hat{z}_I = (x_{I^1}^1, x_{I^2}^2, \bar{x}_{I^3}^3)
$$

あるいは（各座標方向の）格子面の中心

$$
\check{x}_I = (x_{I^1}^1, \bar{x}_{I^2}^2, \bar{x}_{I^3}^3), \;\; \check{y}_I = (\bar{x}_{I^1}^1, x_{I^2}^2, \bar{x}_{I^3}^3), \;\; \check{z}_I = (\bar{x}_{I^1}^1, \bar{x}_{I^2}^2, x_{I^3}^3)
$$

において定義される関数 $u = (u^1, u^2, u^3)$ ただし $u^1: \hat{x}_I \mapsto u_I^1$, $u^2: \hat{y}_I \mapsto u_I^2, u^3: \hat{z}_I \mapsto u_I^3$ あるいは $\xi = (\xi^1, \xi^2, \xi^3)$ ただし $\xi^1: \check{x}_I \mapsto \xi_I^1, \xi^2: \check{y}_I \mapsto \xi_I^2, \xi^3: \check{z}_I \mapsto \xi_I^3$ であるとすると，その全体は有限次元の線型空間であり，それぞれ V_{EDGE} および V_{FACE} と記すことにする．



(a)variables defined on points and edges　(b)variables defined on faces and cells

Fig. 1　Configuration of discretized variables

これらの離散関数に対して離散勾配作用素 $\nabla_{\mathrm{GE}}: S_{\mathrm{GRID}} \to V_{\mathrm{EDGE}}$，$\nabla_{\mathrm{CF}}^*: S_{\mathrm{CELL}} \to V_{\mathrm{FACE}}$，離散回転作用素 $(\nabla\times)_{\mathrm{EF}}: V_{\mathrm{EDGE}} \to V_{\mathrm{FACE}}$，$(\nabla^*\times)_{\mathrm{FE}}: V_{\mathrm{FACE}} \to V_{\mathrm{EDGE}}$ および離散発散作用素 $(\nabla\cdot)_{\mathrm{FC}}: V_{\mathrm{FACE}} \to S_{\mathrm{CELL}}$，$(\nabla^*\cdot)_{\mathrm{EG}}: V_{\mathrm{EDGE}} \to S_{\mathrm{GRID}}$ を

$$
(\nabla_{\mathrm{GE}}\phi)_I^i = (\delta_i\phi)_I, \;\; (\nabla_{\mathrm{CF}}^*\Phi)_I^i = (\delta_i^*\Phi)_I \;\; (i = 1,2,3) \tag{12}
$$

$$
\begin{aligned}
[(\nabla\times)_{\mathrm{EF}}u]_I^i &= \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk}(\delta_j u^k)_I, \\
[(\nabla^*\times)_{\mathrm{FE}}\xi]_I^i &= \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk}(\delta_j^* \xi^k)_I \;\; (i = 1,2,3)
\end{aligned}
\tag{13}
$$

$$
\begin{aligned}
[(\nabla\cdot)_{\mathrm{FC}}\xi]_I &= (\delta_1\xi^1) + (\delta_2\xi^2)_I + (\delta_3\xi^3)_I, \\
[(\nabla^*\cdot)_{\mathrm{EG}}u]_I &= (\delta_1^*u^1)_I + (\delta_2^*u^2)_I + (\delta_3^*u^3)_I
\end{aligned}
\tag{14}
$$

と定義する（ $\phi \in S_{\mathrm{GRID}}, u \in V_{\mathrm{EDGE}}, \xi \in V_{\mathrm{FACE}}, \Phi \in S_{\mathrm{CELL}}$ ）．ここで δ_i および $\delta_i^* \; (i = 1,2,3)$ は

$$
(\delta_i\phi)_I = \frac{\phi_{\mathfrak{S}_+^i I} - \phi_I}{\Delta x_{I^i}^i}, \;\; (\delta_i^*\Phi)_I = \frac{\Phi_I - \Phi_{\mathfrak{S}_-^i I}}{\Delta \bar{x}_{I^i}^i} \tag{15}
$$

ただし

$$
\Delta x_I^i = x_{\mathfrak{S}_+^i I}^i - x_I^i, \;\; \Delta \bar{x}_I^i = \left(x_{\mathfrak{S}_+^i I}^i - x_{\mathfrak{S}_-^i I}^i\right)/2
$$

によって定義される差分作用素であり，$\mathfrak{S}_\pm^i$ は格子インデックス $I = (I^1, I^2, I^3)$ に作用するシフト作用素で

$$
\mathfrak{S}_\pm^i I = (I^1 \pm \delta_{1i}, I^2 \pm \delta_{2i}, I^3 \pm \delta_{3i})
$$

と定義されるものである．これらの関数と作用素に対して，格子辺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[8]. また任意の関数 $\phi \in S_{\mathrm{GRID}}, u \in V_{\mathrm{EDGE}}, \xi \in V_{\mathrm{FACE}}, \Phi \in S_{\mathrm{CELL}}$ に対して

$$
\begin{aligned}
&(\nabla\times)_{\mathrm{EF}}\nabla_{\mathrm{GE}}\phi = 0 \in V_{\mathrm{FACE}}, \\
&(\nabla\cdot)_{\mathrm{FC}}(\nabla\times)_{\mathrm{EF}}u = 0 \in S_{\mathrm{CELL}}, \\
&(\nabla^*\times)_{\mathrm{FE}}\nabla_{\mathrm{CF}}^*\Phi = 0 \in V_{\mathrm{EDGE}}, \\
&(\nabla^*\cdot)_{\mathrm{EG}}(\nabla^*\times)_{\mathrm{FE}}\xi = 0 \in S_{\mathrm{GRID}}
\end{aligned}
\tag{16}
$$

が成り立つことが示される[8]．すなわち，これらは

$$
S_{\mathrm{GRID}} \xrightarrow{\nabla_{\mathrm{GE}}} V_{\mathrm{EDGE}} \xrightarrow{(\nabla\times)_{\mathrm{EF}}} V_{\mathrm{FACE}} \xrightarrow{(\nabla\cdot)_{\mathrm{FC}}} S_{\mathrm{CELL}},
$$

$$
S_{\mathrm{GRID}} \xleftarrow{(\nabla^*\cdot)_{\mathrm{EG}}} V_{\mathrm{EDGE}} \xleftarrow{(\nabla^*\times)_{\mathrm{FE}}} V_{\mathrm{FACE}} \xleftarrow{\nabla_{\mathrm{CF}}^*} S_{\mathrm{CELL}}
$$

なる de Rham 複体[10]を構成する．さらに，これは適当な境界条件のもとで完全であることを示すことができる[8]．また

$$
\begin{aligned}
(\nabla^*\cdot)_{\mathrm{EG}}u = 0 &\Rightarrow (\nabla^*\times)_{\mathrm{FE}}(\nabla\times)_{\mathrm{EF}}u = -\Delta_{\mathrm{EE}}u, \\
(\nabla\cdot)_{\mathrm{FC}}\xi = 0 &\Rightarrow (\nabla\times)_{\mathrm{EF}}(\nabla^*\times)_{\mathrm{FE}}\xi = -\Delta_{\mathrm{FF}}\xi
\end{aligned}
\tag{17}
$$

ただし

$$
\begin{aligned}
(\Delta_{\mathrm{EE}}u)_I^1 &= [(\delta_1\delta_1^* + \delta_2^*\delta_2 + \delta_3^*\delta_3)u^1]_I, \\
(\Delta_{\mathrm{EE}}u)_I^2 &= [(\delta_1^*\delta_1 + \delta_2\delta_2^* + \delta_3^*\delta_3)u^2]_I, \\
(\Delta_{\mathrm{EE}}u)_I^3 &= [(\delta_1^*\delta_1 + \delta_2^*\delta_2 + \delta_3\delta_3^*)u^3]_I, \\
(\Delta_{\mathrm{FF}}\xi)_I^1 &= [(\delta_1^*\delta_1 + \delta_2\delta_2^* + \delta_3\delta_3^*)\xi^1]_I, \\
(\Delta_{\mathrm{FF}}\xi)_I^2 &= [(\delta_1\delta_1^* + \delta_2^*\delta_2 + \delta_3\delta_3^*)\xi^2]_I, \\
(\Delta_{\mathrm{FF}}\xi)_I^3 &= [(\delta_1\delta_1^* + \delta_2\delta_2^* + \delta_3^*\delta_3)\xi^3]_I
\end{aligned}
$$

が成り立つ[8].

線型空間 $S_{\mathrm{GRID}}, V_{\mathrm{EDGE}}, V_{\mathrm{FACE}}, S_{\mathrm{CELL}}$ に内積をそれぞれ

$$
\begin{aligned}
\langle\phi,\theta\rangle_{\mathrm{GRID}} &= \sum_I \phi_I\theta_I|\Delta\Omega_I^G|, \\
\langle u,w\rangle_{\mathrm{EDGE}} &= \sum_I \left(u_I^1 w_I^1|\Delta\Omega_I^{E_1}| + u_I^2 w_I^2|\Delta\Omega_I^{E_2}| + u_I^3 w_I^3|\Delta\Omega_I^{E_3}|\right), \\
\langle\xi,\eta\rangle_{\mathrm{FACE}} &= \sum_I \left(\xi_I^1\eta_I^1|\Delta\Omega_I^{F_1}| + \xi^2\eta^2|\Delta\Omega_I^{F_2}| + \xi^3\eta^3|\Delta\Omega_I^{F_3}|\right),
\end{aligned}
$$

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

ただし

$$\left|\Delta\Omega_I^G\right| = \Delta\bar{x}_{I^1}^1 \Delta\bar{x}_{I^2}^2 \Delta\bar{x}_{I^3}^3,\ \left|\Delta\Omega_I^C\right| = \Delta x_{I^1}^1 \Delta x_{I^2}^2 \Delta x_{I^3}^3,$$

$$\left|\Delta\Omega_I^{E_1}\right| = \Delta x_{I^1}^1 \Delta\bar{x}_{I^2}^2 \Delta\bar{x}_{I^3}^3,\ \left|\Delta\Omega_I^{E_2}\right| = \Delta\bar{x}_{I^1}^1 \Delta x_{I^2}^2 \Delta\bar{x}_{I^3}^3,$$

$$\left|\Delta\Omega_I^{E_3}\right| = \Delta\bar{x}_{I^1}^1 \Delta\bar{x}_{I^2}^2 \Delta x_{I^3}^3,\ \left|\Delta\Omega_I^{F_1}\right| = \Delta\bar{x}_{I^1}^1 \Delta x_{I^2}^2 \Delta x_{I^3}^3,$$

$$\left|\Delta\Omega_I^{F_2}\right| = \Delta x_{I^1}^1 \Delta\bar{x}_{I^2}^2 \Delta x_{I^3}^3,\ \left|\Delta\Omega_I^{F_3}\right| = \Delta x_{I^1}^1 \Delta x_{I^2}^2 \Delta\bar{x}_{I^3}^3$$

と定義すると

$$\begin{aligned} &\langle \nabla_{\mathrm{GE}}\phi, u \rangle_{\mathrm{EDGE}} = -\langle \phi, (\nabla^* \cdot)_{\mathrm{EG}} u \rangle_{\mathrm{GRID}}, \\ &\langle (\nabla \times)_{\mathrm{EF}} u, \xi \rangle_{\mathrm{FACE}} = \langle u, (\nabla^* \times)_{\mathrm{FE}} \xi \rangle_{\mathrm{EDGE}}, \\ &\langle (\nabla \cdot)_{\mathrm{FC}} \xi, \Phi \rangle_{\mathrm{CELL}} = -\langle \xi, \nabla_{\mathrm{CF}}^* \Phi \rangle_{\mathrm{FACE}} \end{aligned} \tag{18}$$

が成り立つ[8]．また補間作用素 $\mu_{EF}: V_{\mathrm{EDGE}} \to V_{\mathrm{FACE}}$ および $\mu_{\mathrm{FE}}^*: V_{\mathrm{FACE}} \to V_{\mathrm{EDGE}}$ を（ $u \in V_{\mathrm{EDGE}}$ と $\xi \in V_{\mathrm{FACE}}$ に対し）

$$\begin{aligned} &(\mu_{\mathrm{EF}} u)_I^1 = (m_1^* m_2 m_3 u^1)_I,\ (\mu_{EF} u)_I^2 = (m_1 m_2^* m_3 u^2)_I, \\ &(\mu_{\mathrm{EF}} u)_I^3 = (m_1 m_2 m_3^* u^3)_I,\ (\mu_{\mathrm{FE}}^* \xi)_I^1 = (m_1 m_2^* m_3^* \xi^1)_I, \\ &(\mu_{\mathrm{FE}}^* \xi)_I^2 = (m_1^* m_2 m_3^* \xi^2)_I,\ (\mu_{\mathrm{FE}}^* \xi)_I^3 = (m_1^* m_2^* m_3 \xi^3)_I \end{aligned}$$

と定義する．ここで m_i および m_i^* は

$$\begin{aligned} &(m_i \phi)_I = \left(\phi_{\mathfrak{S}_+^i I} + \phi_I\right)/2, \\ &(m_i^* \Phi)_I = \left(\Delta x_{I^i}^i \Phi_I + \Delta x_{I^i-1}^i \Phi_{\mathfrak{S}_-^i I}\right)/2\Delta\bar{x}_{I^i}^i \end{aligned} \tag{19}$$

で定義される成分毎の補間作用素である．これを用いると V_{EDGE} および V_{FACE} 上の外積を

$$\begin{aligned} &(u \times w)_I^i = \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk} m_i \left[\left(m_j^* u^j\right)_I (m_k^* w^k)_I \right], \\ &(\xi \times \eta)_I^i = \sum_{j,k=1}^{3} \epsilon_{ijk} m_i^* \left[\left(m_j \xi^j\right)_I (m_k \eta^k)_I \right] \end{aligned} \tag{20}$$

と定義することができる．

4．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 $\tilde{\psi}^n \in V_{\mathrm{FACE}}$ ($n = 0,1,2,\ldots$) とし，速度場と渦度場の離散近似をそれぞれ

$$\tilde{v}^n = (\nabla^* \times)_{\mathrm{FE}} \tilde{\psi}^n \in V_{\mathrm{EDGE}},\ \ \tilde{\omega}^n = (\nabla \times)_{\mathrm{EF}} \tilde{v}^n \in V_{\mathrm{FACE}}$$

と定義すると，(16)式より $(\nabla^* \cdot)_{\mathrm{EG}} \tilde{v}^n = 0$ および $(\nabla \cdot)_{\mathrm{FC}} \tilde{\omega}^n = 0$ が成り立ち（ $(\nabla \cdot)_{\mathrm{FC}} \tilde{\psi}^n = 0$ を仮定すれば）(17)式より

$$\tilde{\omega}^n = (\nabla \times)_{\mathrm{EF}} (\nabla^* \times)_{\mathrm{FE}} \tilde{\psi}^n = -\Delta_{\mathrm{FF}} \tilde{\psi}^n$$

が成り立つ．またエネルギー，helicity および enstrophy の離散化を

$$\begin{aligned} &H\left(\tilde{\psi}^n, \tilde{\varphi}^n\right) = \frac{\rho}{2} \langle \tilde{v}^n, \tilde{v}^n \rangle_{\mathrm{EDGE}} + \tilde{\Psi}(\tilde{\varphi}^n), \\ &S\left(\tilde{\psi}^n\right) = \frac{1}{2} \langle \mu_{\mathrm{EF}} \tilde{v}^n, (\nabla \times)_{\mathrm{EF}} \tilde{v}^n \rangle_{\mathrm{FACE}}, \\ &Z\left(\tilde{\psi}^n, \tilde{\varphi}^n\right) = \frac{1}{2} \langle \tilde{\omega}^n, \tilde{\omega}^n \rangle_{\mathrm{FACE}} + \lambda \tilde{\Psi}(\tilde{\varphi}^n) \end{aligned} \tag{21}$$

ただし

$$\tilde{\Psi}(\tilde{\varphi}) = \frac{1}{\epsilon} \left[\langle 1, \tilde{f}(\tilde{\varphi}) \rangle_{\mathrm{GRID}} + \frac{\hat{\sigma}}{2} \epsilon^2 \langle \nabla_{\mathrm{GE}} \tilde{\varphi}, \nabla_{\mathrm{GE}} \tilde{\varphi} \rangle_{\mathrm{EDGE}} \right]$$

と定義すると，それらの時間差分を

$$\begin{aligned} &\frac{H\left(\tilde{\psi}^{n+1}, \tilde{\varphi}^{n+1}\right) - H\left(\tilde{\psi}^n, \tilde{\varphi}^n\right)}{\Delta t} \\ &\quad = \left\langle \rho \left(m_t \tilde{\psi}\right)^{n+1/2}, (\delta_t \tilde{\omega})^{n+1/2} \right\rangle_{\mathrm{FACE}} \\ &\qquad + \langle \tilde{\mathrm{M}}^{n+1/2}, (\delta_t \varphi)^{n+1/2} \rangle_{\mathrm{GRID}}, \\ &\frac{S\left(\tilde{\psi}^{n+1}\right) - S\left(\tilde{\psi}^n\right)}{\Delta t} \\ &\quad = \rho \langle \mu_{\mathrm{EF}} (m_t \tilde{v})^{n+1/2}, (\delta_t \tilde{\omega})^{n+1/2} \rangle_{\mathrm{FACE}}, \\ &\frac{Z\left(\tilde{\psi}^{n+1}, \tilde{\varphi}^{n+1}\right) - Z\left(\tilde{\psi}^n, \tilde{\varphi}^n\right)}{\Delta t} \\ &\quad = \langle (m_t \tilde{\omega})^{n+1/2}, (\delta_t \tilde{\omega})^{n+1/2} \rangle_{\mathrm{FACE}} \\ &\qquad + \lambda \langle \tilde{\mathrm{M}}^{n+1/2}, (\delta_t \varphi)^{n+1/2} \rangle_{\mathrm{GRID}} \end{aligned}$$

ただし

$$\begin{aligned} &\tilde{\mathrm{M}}^{n+1/2} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\tilde{f}(\tilde{\varphi}^{n+1}) - \tilde{f}(\tilde{\varphi}^n)}{\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^n} - \hat{\sigma} \epsilon \Delta_{\mathrm{GG}} (m_t \tilde{\varphi})^{n+1/2} \\ &(\delta_t \phi)^{n+1/2} = (\phi^{n+1} - \phi^n)/\Delta t, \\ &(m_t \phi)^{n+1/2} = (\phi^{n+1} + \phi^n)/2 \\ &\qquad (\phi \in S_{\mathrm{GRID}}, V_{\mathrm{EDGE}}, V_{\mathrm{FACE}}, S_{\mathrm{CELL}}) \end{aligned}$$

と計算することができる[9]から

$$\begin{aligned} &(\delta H / \delta \tilde{\omega})^{n+1/2} = \left(m_t \tilde{\psi}\right)^{n+1/2}, \\ &(\delta H / \delta \tilde{\varphi})^{n+1/2} = \tilde{\mathrm{M}}^{n+1/2}, \\ &(\delta S / \delta \tilde{\omega})^{n+1/2} = \mu_{\mathrm{EF}} (m_t \tilde{v})^{n+1/2}, \\ &(\delta Z / \delta \tilde{\omega})^{n+1/2} = (m_t \tilde{\omega})^{n+1/2}, \\ &(\delta Z / \delta \tilde{\varphi})^{n+1/2} = \lambda \tilde{\mathrm{M}}^{n+1/2} \end{aligned} \tag{22}$$

と定義する．さらに Poisson 括弧と散逸括弧の離散近似を（ $V_{\mathrm{FACE}} \times S_{\mathrm{GRID}}$ 上の汎関数 F, G に対して）

$$\begin{aligned} \{F, G\} = &\frac{1}{\rho} \left\langle (\nabla^* \times)_{\mathrm{FE}} \frac{\delta F}{\delta \tilde{\omega}}, \right. \\ &\qquad \left. \left[(\nabla^* \times)_{\mathrm{FE}} \frac{\delta G}{\delta \tilde{\omega}} \right] \times \left[\mu_{\mathrm{FE}}^* (m_t \tilde{\omega})^{n+1/2} \right] \right\rangle_{\mathrm{EDGE}} \\ &+ \frac{1}{\rho} \langle (\nabla^* \times)_{\mathrm{FE}} \frac{\delta F}{\delta \tilde{\omega}}, \left(\mu_{\mathrm{GE}} \frac{\delta G}{\delta \tilde{\varphi}} \right) \nabla_{\mathrm{GE}} (m_t \tilde{\varphi})^{n+1/2} \rangle_{\mathrm{EDGE}} \\ &- \frac{1}{\rho} \langle (\nabla^* \times)_{\mathrm{FE}} \frac{\delta G}{\delta \tilde{\omega}}, \left(\mu_{\mathrm{GE}} \frac{\delta F}{\delta \tilde{\varphi}} \right) \nabla_{\mathrm{GE}} (m_t \tilde{\varphi})^{n+1/2} \rangle_{\mathrm{EDGE}} \end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned} [F, G] = &-\nu \langle (\nabla^* \times)_{\mathrm{FE}} \frac{\delta F}{\delta \tilde{\omega}}, (\nabla^* \times)_{\mathrm{FE}} \frac{\delta G}{\delta \tilde{\omega}} \rangle_{\mathrm{EDGE}} \\ &- \frac{m}{\lambda} \langle \nabla_{\mathrm{GE}} \frac{\delta F}{\delta \tilde{\varphi}}, \nabla_{\mathrm{GE}} \frac{\delta G}{\delta \tilde{\varphi}} \rangle_{\mathrm{EDGE}} \end{aligned}$$

と定義すれば，これらはそれぞれ歪対称と半負定値対称である．また，これらを用いて(6)式の離散化を（任意の $V_{\mathrm{FACE}} \times S_{\mathrm{GRID}}$ 上の汎関数 F に対して）

$$\frac{F(\tilde{\omega}^{n+1}, \tilde{\varphi}^{n+1}) - F(\tilde{\omega}^n, \tilde{\varphi}^n)}{\Delta t} = \{F, H\} + [F, Z] \tag{23}$$

とすることができる．特に任意の $\xi \in V_{\mathrm{FACE}}$ と $\phi \in S_{\mathrm{GRID}}$ に対して $F(\tilde{\omega}, \tilde{\varphi}) = \langle \xi, \tilde{\omega} \rangle_{\mathrm{FACE}} + \langle \phi, \tilde{\varphi} \rangle_{\mathrm{GRID}}$ とすると $(\delta F / \delta \tilde{\omega})^{n+1/2} = \xi, (\delta F / \delta \tilde{\varphi})^{n+1/2} = \phi$ であり

$$\begin{aligned} &\{F, H\} \\ &\quad = \langle \xi, (\nabla \times)_{\mathrm{EF}} \left[(m_t \tilde{v})^{n+1/2} \times \mu_{\mathrm{FE}}^* (m_t \tilde{\omega})^{n+1/2} \right] \rangle_{\mathrm{FACE}} \\ &\quad + \langle \xi, (\nabla \times)_{\mathrm{EF}} \left[(1/\rho) \mu_{\mathrm{GE}} \tilde{\mathrm{M}}^{n+1/2} \nabla_{\mathrm{GE}} (m_t \tilde{\varphi})^{n+1/2} \right] \rangle_{\mathrm{FACE}} \\ &\quad - \langle \phi, (\nabla^* \cdot)_{\mathrm{EG}} \left[\mu_{\mathrm{GE}} (m_t \tilde{\varphi})^{n+1/2} (m_t \tilde{v})^{n+1/2} \right] \rangle_{\mathrm{GRID}} \end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned} [F, Z] = &\ \nu \langle \xi, \Delta_{\mathrm{FF}} (m_t \tilde{\omega})^{n+1/2} \rangle_{\mathrm{FACE}} \\ &+ m \langle \phi, \Delta_{\mathrm{GG}} \tilde{\mathrm{M}}^{n+1/2} \rangle_{\mathrm{GRID}} \end{aligned}$$

であるから，(23)式より

$$\begin{aligned} &(\delta_t \tilde{\omega})^{n+1/2} \\ &\quad = (\nabla \times)_{\mathrm{EF}} \left[(m_t \tilde{v})^{n+1/2} \times \mu_{\mathrm{FE}}^* (m_t \tilde{\omega})^{n+1/2} \right] \\ &\quad + (\nabla \times)_{\mathrm{EF}} \left[(1/\rho) \mu_{\mathrm{GE}} \tilde{\mathrm{M}}^{n+1/2} \nabla_{\mathrm{GE}} (m_t \tilde{\varphi})^{n+1/2} \right] \\ &\quad + \nu \Delta_{\mathrm{FF}} (m_t \tilde{\omega})^{n+1/2} \end{aligned} \tag{24}$$

および

$$\begin{aligned}(\delta_t\tilde{\varphi})^{n+1/2} &= (\nabla^*\cdot)_{\mathrm{EG}}\{-[\mu_{\mathrm{GE}}(m_t\tilde{\varphi})^{n+1/2}](m_t\tilde{v})^{n+1/2} \\ &\qquad + m\nabla_{\mathrm{GE}}\widetilde{\mathrm{M}}^{n+1/2}\}\end{aligned} \tag{25}$$

が得られる．さらに，$\tilde{\omega}^n = (\nabla\times)_{\mathrm{EF}}\tilde{v}^n$ であるから，（de Rham 複体の完全性より）(24)式はある $\phi^{n+1}\in S_{\mathrm{GRID}}$ が存在して

$$\begin{aligned}(\delta_t\tilde{v})^{n+1/2} &= (m_t\tilde{v})^{n+1/2}\times\mu^*_{\mathrm{FE}}(m_t\tilde{\omega})^{n+1/2} \\ &\quad + (1/\rho)\mu_{\mathrm{GE}}\widetilde{\mathrm{M}}^{n+1/2}\nabla_{\mathrm{GE}}(m_t\tilde{\varphi})^{n+1/2} \\ &\quad + \nu\tilde{\Delta}_{\mathrm{EE}}(m_t\tilde{v})^{n+1/2} - \tilde{\nabla}_{\mathrm{GE}}\phi^{n+1}\end{aligned} \tag{26}$$

が成り立つことと同値である．これと

$$\left(\tilde{\nabla}^*\cdot\right)_{\mathrm{EG}}\tilde{v}^{n+1} = 0 \tag{27}$$

および(25)式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 $\tilde{\varphi}^n$ $(n=1,2,\dots)$ を求めることができる．そのとき(23)式より

$$\begin{aligned}
&\frac{H(\tilde{\omega}^{n+1},\tilde{\varphi}^{n+1})-H(\tilde{\omega}^n,\tilde{\varphi}^n)}{\Delta t} = \{H,H\}+[H,Z] \\
&= -\mu\left|(m_t\tilde{\omega})^{n+1/2}\right|^2_{\mathrm{EDGE}} - m\left|\nabla_{\mathrm{GE}}\widetilde{\mathrm{M}}^{n+1/2}\right|^2_{\mathrm{EDGE}}, \\
&\frac{S(\tilde{\omega}^{n+1},\tilde{\varphi}^{n+1})-S(\tilde{\omega}^n,\tilde{\varphi}^n)}{\Delta t} = \{S,H\}+[S,Z] \\
&= \left\langle(m_t\tilde{\omega})^{n+1/2}, \mu_{\mathrm{EF}}\mu_{\mathrm{GE}}\widetilde{\mathrm{M}}^{n+1/2}\nabla_{\mathrm{GE}}(m_t\tilde{\varphi})^{n+1/2}\right\rangle_{\mathrm{FACE}} \\
&\quad + \langle(m_t\tilde{\omega})^{n+1/2}, \mu\tilde{\Delta}_{\mathrm{FF}}\mu_{\mathrm{EF}}(m_t\tilde{v})^{n+1/2}\rangle_{\mathrm{FACE}}, \\
&\frac{Z(\tilde{\omega}^{n+1},\tilde{\varphi}^{n+1})-Z(\tilde{\omega}^n,\tilde{\varphi}^n)}{\Delta t} = \{Z,H\}+[Z,Z] \\
&= \Big\langle(m_t\tilde{\omega})^{n+1/2}, \\
&\qquad (\nabla\times)_{\mathrm{EF}}\left[(m_t\tilde{v})^{n+1/2}\times\mu^*_{\mathrm{FE}}(m_t\tilde{\omega})^{n+1/2}\right]\Big\rangle_{\mathrm{FACE}} \\
&\quad + \Big\langle(\nabla^*\times)_{\mathrm{FE}}(m_t\tilde{\omega})^{n+1/2}/\rho - \lambda(m_t\tilde{v})^{n+1/2}, \\
&\qquad\qquad \mu_{\mathrm{GE}}\widetilde{\mathrm{M}}^{n+1/2}\nabla_{\mathrm{GE}}(m_t\tilde{\varphi})^{n+1/2}\Big\rangle_{\mathrm{EDGE}} \\
&\quad - \nu\left|(\nabla^*\times)_{\mathrm{FE}}(m_t\tilde{\omega})^{n+1/2}\right|^2_{\mathrm{EDGE}} \\
&\quad - \lambda m\left|\nabla_{\mathrm{GE}}\widetilde{\mathrm{M}}^{n+1/2}\right|^2_{\mathrm{EDGE}}
\end{aligned} \tag{28}$$

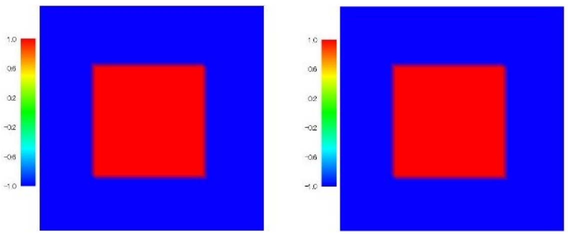
が成り立つことが保証される．

５．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. 2 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．

$$\rho=1,\ \epsilon=0.05,\ \hat{\sigma}=0.2,\ \lambda=m=2.0\times10^{-3}$$

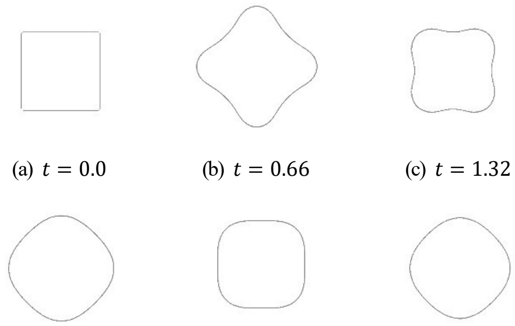
流体は非粘性（ $\nu=0.0$ ）とし，二重井戸型ポテンシャル f は $f(\varphi)=(\hat{\sigma}/4)(\varphi^2-1)^2$ とした．格子分割は各方向 40 の等分割とし，各方向に周期境界条件を設定した．



(a) x-y plane　　(b) x-z plane

Fig. 2　Initial distribution of the order parameter

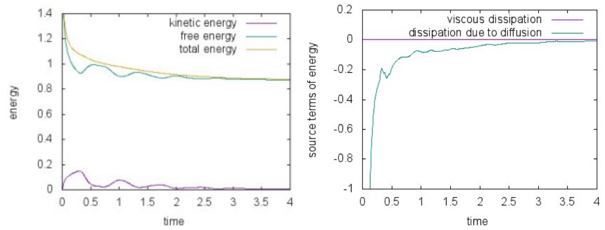
Fig. 3 に液滴の xy 断面（ $z=0$ ）の時間変化を示す．正方形と菱形の間で振動するが，その振幅は徐々に減衰し円形に近づいていく．これは Cahn-Hilliard 方程式で表現される拡散効果によってエネルギーが減衰することによる．Fig. 4 にエネルギーとその散逸率の時間履歴を示す。運動エネルギーと自由エネルギーは液滴の振動とともに振動するが，全エネルギーは単調に減少していることが分かる．このエネルギーの単調減少は(28)式で保証されている．また流体が非粘性であるのでエネルギーの粘性散逸は０であり，散逸は拡散によってもたらされていることが確認できる．



(a) $t=0.0$　(b) $t=0.66$　(c) $t=1.32$

(d) $t=1.98$　(e) $t=2.64$　(f) $t=3.30$

Fig. 3　Shape of the cross section of the droplet (x-y plane)



(a) Time history of energy　(b) Dissipation of energy

Fig. 4　Time history of energy and dissipation of energy

参考文献

(1) 松尾, 宮武, "微分方程式に対する構造保存数値解法," 日本応用数理学会論文誌, 22 (2012), pp. 213-251.
(2) Hairer, E., Lubich, C. and Wanner, G., Geometric Numerical Integration, 2nd ed., Springer, 2006.
(3) 降旗, 森, "偏微分方程式に対する差分スキームの離散的変分による統一的導出," 日本応用数理学会論文誌, 8 (1998), pp.317-340.
(4) Olver, P. J., "A nonlinear Hamiltonian structure for the Euler equations," J. Math. Anal. Appl. 89 (1982), pp.233-250.
(5) Öttinger, H. C., Beyond Equilibrium Thermodynamics, Wiley, 2005.
(6) Morrison, P. J., "Thoughts on brackets and dissipation: old and new," J. Phys.: Conference Series 169 (2009), 012006.
(7) Suzuki, Y. and Ohnawa, M., "GENERIC formalism and discrete variational derivative method for the two-dimensional vorticity equation," J. Comput. Appl. Math. 296 (2016), pp.690-708.
(8) Suzuki, Y., "Bracket formulations and energy- and helicity-preserving numerical methods for the three-dimensional vorticity equation," submitted to Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.
(9) Suzuki, Y., "Bracket formulations and energy- and helicity-preserving numerical methods for incompressible two-phase flows," in preparation.
(10) 森田，微分形式の幾何学，岩波書店，2005.
(11) Lipnikov, K., Manzini, G. and Shashkov, M., "Mimetic finite difference method," J. Comput. Phys. 257 (2014), pp.1163-1227.
(12) 越塚, 数値流体力学, 培風館, 1997.