

埋め込み境界射影法による動的濡れ現象の定式化

Immersed boundary projection approach for the Navier-Stokes/Cahn-Hilliard system

- 藤井 健博, 阪大院, 吹田市山田丘 2-1, E-mail : fujii@fluid.mech.eng.osaka-u.ac.jp
- 大森 健史, 阪大工, 吹田市山田丘 2-1, E-mail : t.omori@mech.eng.osaka-u.ac.jp
- 梶島 岳夫, 阪大工, 吹田市山田丘 2-1, E-mail : kajishima@mech.eng.osaka-u.ac.jp

Takehiro FUJII, Osaka University, 2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871 Japan

Takeshi OMORI, Osaka University, 2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871 Japan

Takeo KAJISHIMA, Osaka University, 2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871 Japan

A dynamic contact angle affects the adhesion of particles to bubbles. In order to predict the process of the adhesion with various flow fields, it is necessary to analyze the dynamic wetting using the numerical simulations of gas-liquid-solid three-phase flows. For the analysis of dynamic wetting on arbitrary-shaped surfaces, we formulated the discretized form of the Navier-Stokes and the Cahn-Hilliard equations by the immersed boundary projection approach. We introduced the separate delta function for each side of the boundary to discretize the generalized Navier boundary condition on the immersed boundaries, which also enabled the independent evaluation of the constraints on each side of the boundary.

1. 緒言

動的濡れ現象は固気液三相流などで固気界面, 固液界面, 気液界面の3つの界面が交わった時にできる接触線で現れ, その現象の予測は工学的に重要である. 例えば, 気泡流を利用した物質の分離で動的濡れ現象が見られる. 近年, 製鉄プロセスでは, 溶鋼中に存在する固形不純物をアルゴンなどの不活性ガスを吹き込み, それに付着させることで除去する方法が着目されている⁽¹⁾. その付着現象には濡れ性が大きな影響を及ぼすことが知られている. しかし, 実験によって溶鋼中の不純物除去プロセスを直接観察することは困難であり, 固形不純物表面での濡れ性に加え, 溶鋼の流動状態や各相の分布等が不純物の回収確率に与える影響など, 詳細なメカニズムについてはわかっていない. そこで, 除去のメカニズム解明や効率向上の技術開発に対して, 濡れ性を考慮した固気液三相流の数値計算による解析の寄与が期待される.

数値解析による粒子と気泡の相互作用に関する先行研究では, 多くの場合気泡は剛体や弾性体として扱われており, 粒子と気泡との間で発生する van der Waals 力や疎水性力などの相互作用を考慮して計算を行なっている⁽²⁾が, 接触線の運動を扱うような計算は行われていない. しかし, 様々な流動状態や粒子表面での濡れ性も考慮して付着現象を解析するには, 流体相については Navier-Stokes 方程式などの基礎方程式に基づいて計算し, 動的濡れ現象も計算に反映させる必要がある. Omori らによる先行研究⁽³⁾では, 二成分流のチャンネル流れに対して Navier-Stokes 方程式と Cahn-Hilliard 方程式の連成問題を解くことで固体壁面での動的接触角の解析を行なっており, その結果は分子動力学シミュレーションで予測された流れを再現している. 本研究では, 粒子の気泡への付着現象を Navier-Stokes 方程式と Cahn-Hilliard 方程式の連成問題として記述し, 任意物体形状周りの流れに適用できる数値計算手法を確立することを目的とする.

この連成問題を解くにあたって, 物体表面での境界条件を満たす必要がある. 物体表面に沿った格子を用いて境界条件を課す方法もあるが, Cahn-Hilliard 方程式に高階の微分が含まれるため好ましくない, そのため, 直交固定格子を用いる埋め込み境界法 (Immersed Boundary Method) によって境界条件を課す. Peskin⁽⁴⁾による埋め込み境界法では, 物体表面ですべりなし境界条件を満たすように境界力を導入した. その境界力は構成式によって得られる. しかし, 物体が剛体の場合には高 CFL 数を使えないという問題がある. また, Cahn-Hilliard 方程式に対する境界条件に対しては, それを課す境界力に対応するような物理量はわかっておらず, そのため構成式のようにその物理量を式で与えることができない. 一方, Taira

ら⁽⁵⁾による埋め込み境界射影法 (Immersed Boundary Projection Method) では構成式を使わず, すべりなし境界条件を満たすように決定される Lagrange 乗数として境界力を扱っている. これは, 非圧縮流れの解法である部分段階法において, 圧力が非圧縮条件を満たすように決定される Lagrange 乗数であるということに対応している. この手法では, 剛体の場合にも高 CFL 数を用いることができるという点のほかに, 境界条件などを Lagrange 乗数によって課すことができるという点に汎用性がある. そこで本研究では, 埋め込み境界射影法を用いて Navier-Stokes 方程式および Cahn-Hilliard 方程式の境界条件を課す計算手法の確立を行う.

2. 支配方程式

二相 (相 1, 相 2) の互いに混ざり合わない非圧縮ニュートン流体と任意の物体形状で表面が滑らかな剛体の固相に対し, その二次元流れを考える. このとき, 支配方程式は以下の連続の式, Navier-Stokes 方程式, Cahn-Hilliard 方程式から成るとする. 剛体の運動は流体から受ける力が与えられれば運動方程式を用いて解くことができるが, ここでは流体の運動に焦点を当て, 剛体の運動はあらかじめ規定されている (固体と流体に関しては one-way) とする.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot [\eta \{ \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \}] + \frac{\mu}{\rho} \nabla \phi + \mathbf{f} \quad (2)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = M \nabla^2 \mu \quad (3)$$

ここで \mathbf{u} [m/s] は流速, t [s] は時間, ρ [kg/m³] は流体の密度, p [Pa] は圧力, η [Pa·s] は流体の粘性係数, μ [Pa] は流体の化学ポテンシャル, ϕ [-] は -1 から 1 の値の範囲をもつ秩序パラメータで, \mathbf{f} [m/s²] は剛体からの力を表す項, M [m²/(Pa·s)] は易動度である. 相 1, 相 2 の密度および粘性係数をそれぞれ ρ_1, ρ_2 および η_1, η_2 とすると, ρ および η はそれぞれ ϕ を用いて

$$\rho = \frac{1 + \phi}{2} \rho_1 + \frac{1 - \phi}{2} \rho_2 \quad (4)$$

$$\eta = \frac{1+\phi}{2}\eta_1 + \frac{1-\phi}{2}\eta_2 \quad (5)$$

で表されるとする．化学ポテンシャル μ は自由エネルギー $F[\phi]$ の汎関数微分で与えられる．本研究では自由エネルギーを

$$F[\phi] = \int dx \left\{ \frac{K}{2} |\nabla\phi|^2 - \frac{r}{2}\phi^2 + \frac{r}{4}\phi^4 \right\} \quad (6)$$

とモデル化する．このとき， μ は

$$\mu = \frac{\delta F}{\delta\phi} = -\frac{K}{2}\nabla^2\phi - r\phi + r\phi^3 \quad (7)$$

と表される．ここで， K, r は流体界面の厚さ ξ [m] と界面張力 γ [N/m] を用いてそれぞれ，

$$K = \frac{3}{2\sqrt{2}}\gamma\xi \quad (8)$$

$$r = \frac{3}{2\sqrt{2}}\frac{\gamma}{\xi} \quad (9)$$

と表される．物体表面上では以下の一般化 Navier 境界条件

$$\eta \left(\frac{\partial u_t}{\partial x_n} + \frac{\partial u_n}{\partial x_t} \right) - L(\phi) \frac{\partial\phi}{\partial x_t} = \beta(u_t - u_t^B) \quad (10)$$

秩序パラメータの緩和条件

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + u_t \frac{\partial\phi}{\partial x_t} = \Gamma L(\phi) \quad (11)$$

および不浸透条件

$$u_n = u_n^B, \quad (12)$$

$$\frac{\partial\mu}{\partial x_n} = 0 \quad (13)$$

が成り立つとする．ここで，下付き添字の t, n はそれぞれ物体境界の接線方向，法線方向を表しており， u_t^B, u_n^B はそれぞれ物体境界の接線方向，法線方向の速度を表している． β はすべり摩擦係数で密度と ϕ の関係式 (4) と同様の式が成り立つとし， Γ は物体表面での秩序パラメータの緩和係数である． $L(\phi)$ は

$$L(\phi) = K \frac{\partial\phi}{\partial x_n} + \frac{\partial\gamma_{sf}(\phi)}{\partial\phi} \quad (14)$$

と表される．ここで， γ_{sf} は固体・流体間界面の自由エネルギー密度であり，固相・相 1 間界面，固相・相 2 間界面の自由エネルギー密度 γ_1, γ_2 を用いて

$$\gamma_{sf}(\phi) = \frac{\gamma_2 - \gamma_1}{2} \sin\left(\frac{\pi\phi}{2}\right) \quad (15)$$

と表されるものとする．また，

$$\gamma_2 - \gamma_1 = \gamma \cos\theta_e \quad (16)$$

が成り立つ．ここで， θ_e は静的接触角である．

以上の支配方程式および物体表面での境界条件を K, r および代表速度 V を用いて無次元化すると支配方程式は

$$\nabla^* \cdot \mathbf{u}^* = 0 \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}^*}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \mathbf{u}^* = & \frac{1}{\rho^* \mathcal{R}} \left(-\nabla^* P^* \right. \\ & \left. + \nabla^* \cdot [\eta^* \{ \nabla^* \mathbf{u}^* + (\nabla^* \mathbf{u}^*)^T \}] \right. \\ & \left. + \mathcal{B} \mu^* \nabla^* \phi + \rho^* \mathcal{R} \mathbf{f}^* \right) \end{aligned} \quad (18)$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t^*} + \mathbf{u}^* \cdot \nabla^* \phi = \mathcal{L}_d \nabla^{*2} \mu^* \quad (19)$$

となり，境界条件は

$$\eta^* \left(\frac{\partial u_t^*}{\partial x_n^*} + \frac{\partial u_n^*}{\partial x_t^*} \right) - \mathcal{B} L^*(\phi) \frac{\partial\phi}{\partial x_t^*} = \frac{1}{\mathcal{L}_s} (u_t^* - u_t^{B*}) \quad (20)$$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t^*} + u_t^* \frac{\partial\phi}{\partial x_t^*} = \nu_s L^*(\phi) \quad (21)$$

$$u_n^* = u_n^{B*} \quad (22)$$

$$\frac{\partial\mu^*}{\partial x_n^*} = 0 \quad (23)$$

となる．ここで $\rho^* = \rho/\rho_1, \mathcal{R} = \rho_1 V \xi / \eta_1, P^* = p/(\eta_1 V / \xi), \eta^* = \eta/\eta_1, \mathcal{B} = \sqrt{Kr}/(\eta_1 V), \mu^* = \mu/r, \mathcal{L}_d = Mr/(\xi V), L^*(\phi) = L(\phi)/\sqrt{Kr}, \mathcal{L}_s = \eta_1/(\beta\xi), \nu_s = K\Gamma/V$ である．以下では，* を省略する．

3. 埋め込み境界射影法を用いた数値計算法

3.1 計算の流れの概要

Navier-Stokes 方程式と Cahn-Hilliard 方程式を解く計算の流れは，

- 1 時刻 t^n の速度場を用いて第 3.4 節に示す方法により Cahn-Hilliard 方程式を解き，時刻 t^{n+1} の秩序パラメータ ϕ^{n+1} を得る．
- 2 ϕ^{n+1} から密度，粘性係数，すべり摩擦係数（無次元化された式においては \mathcal{L}_s に相当），化学ポテンシャルを更新する．
- 3 第 3.5 節に示す方法により Navier-Stokes 方程式を解き， \mathbf{u}^{n+1} を得る．
- 4 $n = n + 1$ として 1 へ．

とする．

3.2 演算子を用いた境界条件の記法

埋め込み境界射影法では線形演算子を用いて方程式系を記述する．そこで，境界条件を線形演算子によって表現することを考える．直交格子上の領域を D ，物体境界領域を S_B とし，それぞれにおける位置ベクトルを $\mathbf{x}, \xi(s)$ と表す．ここで s は境界の位置を表すパラメータであり，境界の曲線の長さを表すことにする．このとき，例えば

流速の境界法線方向に対する条件は次のように書きなおすことができる。

$$\int_D u_n(\mathbf{x})\delta(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi})d\mathbf{x} = u_n^B(\boldsymbol{\xi}) \quad (24)$$

計算において物体境界は Lagrange 点の集合で表されるとして、 k 番目の Lagrange 点に対して上式を 1 次元離散 δ 関数 $d(x)$ で

$$\Delta x \Delta y \sum_i u_{n,i} d(x_i - \xi_k) d(y_i - \eta_k) = u_{n,k}^B \quad (25)$$

と表す。このような演算を演算子 \hat{E} を用いて

$$\hat{E}_{ki} u_{n,i} = u_{n,k}^B \quad (26)$$

と表す。 \hat{E} は Euler 格子から Lagrange 点へ物理量を補間する演算子である。しかし、それを表す離散 δ 関数 $d(x - \xi)d(y - \eta)$ は台が Lagrange 点を中心に物体外部の流体部分と物体内部に広がる。そのため、一般化 Navier 境界条件 (20) などで現れる、法線方向、接線方向の微分を Lagrange 点に補間する際には、物体内部の微分まで用いてしまう。これでは物体境界でのすべりを精度良く再現することが難しくなる。そこで、境界上の同一点に 2 つの Lagrange 点を設け、境界の表と裏で別々に補間することを考える。別々に補間するために、例えば離散 δ 関数の台を境界の表側だけにしてしまうと本来その各 1 次元離散 δ 関数が持っていた保存性

$$\Delta x \sum_i d(i\Delta x - \xi) = 1 \quad \text{for all } \xi \quad (27)$$

の性質を失ってしまう。そこで例えば境界の表側のみで補間する場合、Fig. 1 のように着目する Lagrange 点における境界の接線で離散 δ 関数の台を流体領域と物体領域に分け、物体領域ではそこでの物理量の値を用いるのではなく、その点と Lagrange 点に関して点対称な位置にある点での値を用いる。境界の裏側のみで補間する場合も同様にする。そうすることで、離散 δ 関数の保存性を保ち、片側だけの情報を用いることができる。しかし、このようにして点対称に移された点は一般に Euler 格子上の定義点に無いため、周りの定義点から線形補間などをして、その点での物理量を求める。このようにして境界の片側だけの情報を用いて補間する演算子を表面、裏面でそれぞれ \hat{E}_1, \hat{E}_2 とする。これらを用いると、速度の法線方向に対する境界条件は

$$\hat{E}_{1,ki} u_{n,i} = u_{n,k}^B \quad (28)$$

$$\hat{E}_{2,ki} u_{n,i} = u_{n,k}^B \quad (29)$$

と表される。一般化 Navier 境界条件 (20) では、左辺第 2 項は計算順序から既知であるため、それを \hat{E}_1 または \hat{E}_2 で Lagrange 点に補間して $u_{t,k}^B$ の補正として考えることができる。その結果、接触線近傍を含む全物体境界上で Navier 境界条件を考えればよいという事になる。法線方向、接線方向の差分をそれぞれ \hat{G}_n, \hat{G}_t という演算子で表すと、Navier 境界条件は

$$\hat{E}_{1,ki} u_{t,i} - \hat{E}_{1,ki} \mathcal{L}_s \eta \hat{G}_n u_{t,i} - \hat{E}_{1,ki} \mathcal{L}_s \eta \hat{G}_t u_{n,i} = u_{1t,k}^B \quad (30)$$

$$\hat{E}_{2,ki} u_{t,i} - \hat{E}_{2,ki} \mathcal{L}_s \eta \hat{G}_n u_{t,i} - \hat{E}_{2,ki} \mathcal{L}_s \eta \hat{G}_t u_{n,i} = u_{2t,k}^B \quad (31)$$

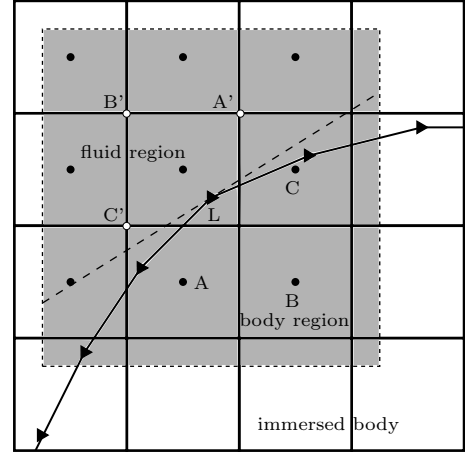


Fig. 1: The method of interpolation using information on one side of the immersed boundary. The shaded region around the Lagrange point L represents the support of the discrete delta function. The tangent line of the boundary on L separates the support into the fluid region and the body region. The cell center A, B and C on the body region are transferred to the point A', B' and C' symmetrically with respect to the Lagrange point L respectively.

と表される。以上は t, n 方向で書かれたものであるため、これを x, y 方向に座標変換させることによって、速度に対する境界条件は、

$$\hat{B}_1 \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}_1^B \quad (32)$$

$$\hat{B}_2 \mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}_2^B \quad (33)$$

のように演算子 \hat{B}_1, \hat{B}_2 を用いて表すことができる。秩序パラメータの緩和の条件 (21) については、まずこれを時間に関して次のように離散化する。

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} + \frac{u_t^n}{2} \frac{\partial}{\partial x_t} (\phi^{n+1} + \phi^n) \\ = \frac{\nu_s}{2} \frac{\partial}{\partial x_n} (\phi^{n+1} + \phi^n) \\ + \frac{\pi \nu_s}{3\sqrt{2}} \cos \theta_e \cos \left(\frac{\pi \phi^n}{2} \right) \end{aligned} \quad (34)$$

この式を t, n 方向の微分を座標変換によって x, y 方向の微分に変換し、補間演算子をかけることによって

$$\hat{T}_1 \phi^{n+1} = \hat{E}_1 g(\phi^n) \quad (35)$$

$$\hat{T}_2 \phi^{n+1} = \hat{E}_2 g(\phi^n) \quad (36)$$

のように演算子 \hat{T}_1, \hat{T}_2 を用いた形式で表すことができる。法線方向の化学ポテンシャルの境界条件 (23) については、 μ を ϕ で表すことにより、

$$\frac{\partial}{\partial x_n} \left\{ -\frac{1}{2} \nabla^2 \phi^{n+1} - \phi^{n+1} + (\phi^{n+1})^3 \right\} = 0 \quad (37)$$

となる。左辺第 3 項は非線形項であり、このままでは線形演算子を用いて表すことができない。そこで、

$$\frac{\partial (\phi^{n+1})^3}{\partial x_n} \simeq 3(\phi^n)^2 \frac{\partial \phi^{n+1}}{\partial x_n} \quad (38)$$

と近似する．これにより，線形演算子を用いて表すことができ，座標変換して補間演算子をかけることにより，物体境界の両面に対してそれぞれ

$$\hat{N}_1 \phi^{n+1} = 0 \quad (39)$$

$$\hat{N}_2 \phi^{n+1} = 0 \quad (40)$$

のように表すことができる．

3.3 Lagrange 乗数

以上の境界条件を課するための Lagrange 乗数を支配方程式に導入する．Navier-Stokes 方程式において境界条件 (32), (33) を課す Lagrange 乗数は物体境界上で定義された境界力である．この表裏 2 つの境界条件に対し，境界の表裏別々に与えられる境界力 F_1, F_2 を考える．従来のように境界の点に Lagrange 点を 1 つ配置して，そこでの境界力 F を考える場合には Navier-Stokes 方程式 (18) における f と次のような関係がある．

$$f(x) = \int_{S_B} F(\xi(s)) \delta(x - \xi(s)) ds \quad (41)$$

これを離散 δ 関数によって近似すれば，

$$f_i = \Delta s \sum_k F_k d(x_i - \xi_k) d(y_i - \eta_k) \quad (42)$$

となり，このような演算を演算子 \hat{H} を用いて表せば，

$$f_i = \hat{H}_{ik} F_k \quad (43)$$

となる．ここで Δs は Lagrange 点の間隔である．一方，同一点に配置される 2 つの Lagrange 点それぞれで定義される境界力 F_1, F_2 はそれぞれ境界の片側にのみ配置されるものとして考える．そのため補間演算子と同じ方法で片側への分配演算子 \hat{H}_1, \hat{H}_2 を作る．このとき，

$$f_i = \hat{H}_{1,ik} F_{1,k} + \hat{H}_{2,ik} F_{2,k} \quad (44)$$

となる．これにより，流体側にかかる力と物体内部に仮想的にかかる力を分離することができる．

Cahn-Hilliard 方程式における境界条件 (39), (40) を課す Lagrange 乗数は Lagrange 点で定義された化学ポテンシャルの補正量であると考え，それを ν_1, ν_2 とする．これらはそれぞれ $\mathcal{L}_d \hat{L} \hat{H}_1 \nu_1, \mathcal{L}_d \hat{L} \hat{H}_2 \nu_2$ という形で Cahn-Hilliard 方程式の離散化式に加えられる．ここで， \hat{L} は離散化された Laplacian 演算子を表す．また，境界条件 (35), (36) を課す Lagrange 点で定義された Lagrange 乗数を ψ_1, ψ_2 とする．これらはそれぞれ $\hat{H}_1 \psi_1, \hat{H}_2 \psi_2$ という形で Cahn-Hilliard 方程式の離散化式に加えられる．

3.4 Cahn-Hilliard 方程式の離散表現と計算手順

以上の Lagrange 乗数を加えた方程式を解く計算手順を示す．まず，Cahn-Hilliard 方程式について次式のように離散化する．

$$\begin{aligned} \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} + \mathbf{u} \cdot \hat{G} \phi^n = & \mathcal{L}_d \hat{L} \left\{ -\frac{1}{2} \hat{L} (\phi^{n+1} + \phi^n) \right. \\ & - \phi^n + (\phi^n)^3 \\ & \left. + \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{2} (-1 + 3(\phi^n)^2) \right\} \\ & + \mathcal{L}_d \hat{L} \hat{H}_1 \nu_1^{n+1} + \mathcal{L}_d \hat{L} \hat{H}_2 \nu_2^{n+1} \\ & + \hat{H}_1 \psi_1^{n+1} + \hat{H}_2 \psi_2^{n+1} \quad (45) \end{aligned}$$

ここで， \hat{G} は離散化された勾配演算子を表し，右辺第 1 項の括弧内の最後の項は非線形項に対して 2 次の最適散逸スキームを適用した結果現れている．

$$\hat{X} = \hat{I} + \Delta t \frac{\mathcal{L}_d}{2} \left\{ \hat{L} \hat{L} - \hat{L} (-1 + 3(\phi^n)^2) \right\} \quad (46)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{CH} = & \phi^n - \Delta t \mathbf{u} \cdot \hat{G} \phi^n + \Delta t \mathcal{L}_d \hat{L} \left\{ -\frac{1}{2} \hat{L} \phi^n \right. \\ & - \phi^n + (\phi^n)^3 \\ & \left. - \frac{\phi^n}{2} (-1 + 3(\phi^n)^2) \right\} \\ & + \Delta t \mathcal{L}_d \hat{L} \hat{H}_1 \nu_1^n + \Delta t \mathcal{L}_d \hat{L} \hat{H}_2 \nu_2^n \\ & + \Delta t \hat{H}_1 \psi_1^n + \Delta t \hat{H}_2 \psi_2^n \quad (47) \end{aligned}$$

と置けば，式 (45) は次式のように表される．ここで， \hat{I} は恒等演算子である．

$$\begin{aligned} \hat{X} \phi^{n+1} - \Delta t \mathcal{L}_d \hat{X} \hat{L} \hat{H}_1 \delta \nu_1^{n+1} - \Delta t \mathcal{L}_d \hat{X} \hat{L} \hat{H}_2 \delta \nu_2^{n+1} \\ - \Delta t \hat{X} \hat{H}_1 \delta \psi_1^{n+1} - \Delta t \hat{X} \hat{H}_2 \delta \psi_2^{n+1} = \mathbf{r}_{CH} \quad (48) \end{aligned}$$

ここで，

$$\hat{L} \hat{H}_i \nu_i^{n+1} = \hat{L} \hat{H}_i \nu_i^n + \hat{X} \hat{L} \hat{H}_i \delta \nu_i^{n+1} \quad (49)$$

$$\hat{H}_i \psi_i^{n+1} = \hat{H}_i \psi_i^n + \hat{X} \hat{H}_i \delta \psi_i^{n+1} \quad (50)$$

($i = 1, 2$) が成り立つ．しかし， $\hat{X} = \hat{I} + O(\Delta t)$ ， $\delta \nu_i^{n+1} = O(\Delta t)$ であることを考慮すれば， $\hat{X} \hat{L} \hat{H}_i \delta \nu_i^{n+1} = \hat{L} \hat{H}_i \delta \nu_i^{n+1} + O((\Delta t)^2)$ である．同様に， $\hat{X} \hat{H}_i \delta \psi_i^{n+1} = \hat{H}_i \delta \psi_i^{n+1} + O((\Delta t)^2)$ である．そこで

$$\nu_i^{n+1} = \nu_i^n + \delta \nu_i^{n+1} \quad (51)$$

$$\psi_i^{n+1} = \psi_i^n + \delta \psi_i^{n+1} \quad (52)$$

としても時間に関して導入する誤差は高々 2 次である．

$$\hat{Z} = \begin{bmatrix} \mathcal{L}_d \hat{L} \hat{H}_1 & \mathcal{L}_d \hat{L} \hat{H}_2 & \hat{H}_1 & \hat{H}_2 \end{bmatrix} \quad (53)$$

$$\hat{Y} = \begin{bmatrix} \hat{N}_1 & \hat{N}_2 & \hat{T}_1 & \hat{T}_2 \end{bmatrix}^T \quad (54)$$

$$\chi^{n+1} = \begin{bmatrix} \delta \nu_1^{n+1} & \delta \nu_2^{n+1} & \delta \psi_1^{n+1} & \delta \psi_2^{n+1} \end{bmatrix}^T \quad (55)$$

$$\mathbf{r}_c = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \hat{E}_1 g(\phi^n) & \hat{E}_2 g(\phi^n) \end{bmatrix}^T \quad (56)$$

および \hat{O} を零演算子とすると，式 (48), (39), (40), (35), (36) を合わせた方程式系は次のように表される．

$$\begin{bmatrix} \hat{X} & -\Delta t \hat{X} \hat{Z} \\ \hat{Y} & \hat{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi^{n+1} \\ \chi^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_{CH} \\ \mathbf{r}_c \end{bmatrix} \quad (57)$$

この係数行列を LU 分解すると

$$\begin{bmatrix} \hat{X} & -\Delta t \hat{X} \hat{Z} \\ \hat{Y} & \hat{O} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{X} & \hat{O} \\ \hat{Y} & \Delta t \hat{Y} \hat{Z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{I} & -\Delta t \hat{Z} \\ \hat{O} & \hat{I} \end{bmatrix} \quad (58)$$

となる．式 (57), (58) より Cahn-Hilliard 方程式の計算手順は次のようになる．

- 1 $\hat{X}\phi^P = r_{CH}$ により予測秩序パラメータを求める .
- 2 $\Delta t \hat{Y} \hat{Z} \chi^{n+1} = -\hat{Y} \phi^P + r_c$ より Lagrange 乗数を求める .
- 3 $\phi^{n+1} = \phi^P + \Delta t \hat{Z} \chi^{n+1}$ により秩序パラメータを更新する .
- 4 式 (51), (52) により v_i^{n+1}, ψ_i^{n+1} ($i = 1, 2$) を求める .

3.5 Navier-Stokes 方程式の離散表現と計算手順
次に Navier-Stokes 方程式に対しても同様に計算手順を示す . Navier-Stokes 方程式を次のように離散化する .

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^n}{\Delta t} &= \frac{1}{2}(3\mathbf{A}^n - \mathbf{A}^{n-1}) - \frac{1}{\rho^{n+1}\mathcal{R}} \hat{G}P^{n+1} \\ &+ \frac{1}{2\mathcal{R}}(\mathbf{D}^{n+1} + \mathbf{D}^n) \\ &+ \frac{\mathcal{B}}{2\mathcal{R}} \left(\frac{\nu^{n+1}}{\rho^{n+1}} \hat{G}\phi^{n+1} + \frac{\nu^n}{\rho^n} \hat{G}\phi^n \right) \\ &+ \hat{H}_1 \mathbf{F}_1^{n+1} + \hat{H}_2 \mathbf{F}_2^{n+1} \end{aligned} \quad (59)$$

対流項, 粘性にはそれぞれ 2 次の Adams-Bashforth 法, Crank-Nicolson 法を用いており, $\mathbf{A}^n = -\mathbf{u}^n \cdot \hat{G}\mathbf{u}^n$, $\mathbf{D}^n = (1/\rho^n)\hat{D}(\eta^n \hat{G}\mathbf{u}^n + \eta^n \hat{G}^T \mathbf{u}^n)$ である . ここで, \hat{G}^T は勾配をとって転置させる演算子である .

$$\hat{R} = \hat{I} - \frac{\Delta t}{2\rho^{n+1}\mathcal{R}} \hat{D}(\eta^{n+1} \hat{G} + \eta^{n+1} \hat{G}^T) \quad (60)$$

$$\begin{aligned} s_{NS} = \mathbf{u}^n + \frac{\Delta t}{2}(3\mathbf{A}^n - \mathbf{A}^{n-1}) - \frac{\Delta t}{\rho^{n+1}\mathcal{R}} \hat{G}P^n \\ + \frac{\Delta t}{2\mathcal{R}} \mathbf{D}^n \\ + \frac{\Delta t \mathcal{B}}{2\mathcal{R}} \left(\frac{\nu^{n+1}}{\rho^{n+1}} \hat{G}\phi^{n+1} + \frac{\nu^n}{\rho^n} \hat{G}\phi^n \right) \\ + \Delta t \hat{H}_1 \mathbf{F}_1^n + \Delta t \hat{H}_2 \mathbf{F}_2^n \end{aligned} \quad (61)$$

と置けば, 式 (59) は次のように表される .

$$\begin{aligned} \hat{R}\mathbf{u}^{n+1} + \frac{\Delta t}{\mathcal{R}} \hat{R} \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \hat{G} \right) \delta P^{n+1} - \Delta t \hat{R} \hat{H}_1 \delta \mathbf{F}_1^{n+1} \\ - \Delta t \hat{R} \hat{H}_2 \delta \mathbf{F}_2^{n+1} \\ = s_{NS} \end{aligned} \quad (62)$$

ここで,

$$\frac{1}{\rho^{n+1}} \hat{G}P^{n+1} = \frac{1}{\rho^{n+1}} \hat{G}P^n + \hat{R} \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \hat{G} \right) \delta P^{n+1} \quad (63)$$

$$\hat{H}_i \mathbf{F}_i^{n+1} = \hat{H}_i \mathbf{F}_i^n + \hat{R} \hat{H}_i \delta \mathbf{F}_i^{n+1} \quad (64)$$

($i = 1, 2$) が成り立つ . しかし, $\hat{R} = \hat{I} + O(\Delta t)$, $\delta P^{n+1} = O(\Delta t)$, $\delta \mathbf{F}_i^{n+1} = O(\Delta t)$ であることを考慮すれば, Cahn-Hilliard 方程式の Lagrange 乗数と同様に,

$$P^{n+1} = P^n + \delta P^{n+1} \quad (65)$$

$$\mathbf{F}_i^{n+1} = \mathbf{F}_i^n + \delta \mathbf{F}_i^{n+1} \quad (66)$$

としても時間に関して導入する誤差は高々 2 次である . 連続の式を離散化すると

$$\hat{D}\mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad (67)$$

となる .

$$\hat{Q} = \left[\frac{\Delta t}{\rho^{n+1}\mathcal{R}} \hat{G} \quad -\Delta t \hat{H}_1 \quad -\Delta t \hat{H}_2 \right] \quad (68)$$

$$\hat{W} = \left[\hat{D} \quad \hat{B}_1 \quad \hat{B}_2 \right]^T \quad (69)$$

$$\lambda^{n+1} = \left[\delta P^{n+1} \quad \delta \mathbf{F}_1^{n+1} \quad \delta \mathbf{F}_2^{n+1} \right]^T \quad (70)$$

$$s_c = \left[0 \quad \mathbf{u}_1^B \quad \mathbf{u}_2^B \right]^T \quad (71)$$

と置くと, 式 (62), (67), (32), (33) を合わせた方程式系は次のように表される .

$$\begin{bmatrix} \hat{R} & \hat{R}\hat{Q} \\ \hat{W} & \hat{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}^{n+1} \\ \lambda^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{NS} \\ s_c \end{bmatrix} \quad (72)$$

この係数行列を LU 分解すると

$$\begin{bmatrix} \hat{R} & \hat{R}\hat{Q} \\ \hat{W} & \hat{O} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{R} & \hat{O} \\ \hat{W} & -\hat{W}\hat{Q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{I} & \hat{Q} \\ \hat{O} & \hat{I} \end{bmatrix} \quad (73)$$

となる . 式 (72), (73) より, Navier-Stokes 方程式の計算手順は次のようになる .

- 1 $\hat{R}\mathbf{u}^P = s_{NS}$ により予測速度を求める .
- 2 $\hat{W}\hat{Q}\lambda^{n+1} = \hat{W}\mathbf{u}^P - s_c$ より Lagrange 乗数を求める .
- 3 $\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^P - \hat{Q}\lambda^{n+1}$ により速度を更新する .
- 4 式 (65), (66) により $P^{n+1}, \mathbf{F}_i^{n+1}$ ($i = 1, 2$) を求める .

4. 結言

動的濡れ現象の解析を目的として, Navier-Stokes 方程式と Cahn-Hilliard 方程式の任意形状物体周りにおける離散化式を埋め込み境界射影法を援用することにより定式化した . 境界条件を物体境界の表裏でそれぞれ別々に課すことにより, 物体表面における境界条件をより精度よく表現できると期待され, また, 物体境界で働く力を境界の表裏で分離することが可能となった .

参考文献

- (1) 新井, 飯田, 松本, 谷口, 中岡, 國井, 坂本, “液中分散粒子の気泡付着除去特性 - 接触角の影響 -,” 鉄と鋼, 93-1 (2007), pp. 1-8.
- (2) R. Maxwell, S. Ata, E.J. Wanless, R. Moreno-Atanasio, “Computer simulations of particle-bubble interactions and particle sliding using Discrete Element Method,” J. Colloid Interface Sci., 381 (2012), pp. 1-10.
- (3) T. Omori, T. Kajishima, “Apparent and microscopic dynamic contact angles in confined flows,” Phys. Fluids, 29-112107 (2017), pp. 1-13.
- (4) C.S. Peskin, “Flow patterns around heart valves: a numerical method,” J. Comput. Phys., 10 (1972), pp. 252-271.
- (5) K. Taira, T. Colonius, “The immersed boundary method: a projection approach,” J. Comput. Phys., 225 (2007), pp. 2118-2137.