

引力/界面張力モデル, 並びに粒子法による数値計算法

Attraction / surface tension model, and numerical scheme by particle method

○ 今村純也, *imi* 計算工学研究室, 351-0114 和光市本町 31-9-803, E-mail: jimamura@ra2.so-net.ne.jp
Junya Imamura, *imi* Computational Engineering Laboratory, 351-0114 Wako-shi, Honcho 31-9-803

This paper proposes an attraction / repulsion model for surfaces. Surface tension is caused by molecular forces, and the attraction by molecular forces is proportional to density. Bearing this in mind, an attraction / repulsion model proportional to densities is presented. The model can represent the differences of the surface tension caused by water and mercury in a test-tube or on a table. Repulsion is represented based on the mass conservation equation in which density is positive physical value. Therefore, the density, as an exponential function, is also demonstrated to represent repulsion on wall boundaries.

1. 目的と概要

MPS (Moving Particle Semi implicit) 法は, 双曲線モデルで斥力を表す点に特色があるが, 界面張力・濡れ性を表す引力モデルは, 別途加える必要がある。

本稿では粒子間の引力 / 斥力は, 分子間の引力 / 斥力に相似になるべきことを念頭に, モデル構築するものである。

引力は分子力であり, 密度の大きい分子順に, 極座標では同心円状に集まる概念でモデル化する。

従来の界面張力モデルを, 等密度分布曲線の曲率(液相の界面)に比例して表面張力が生じ, その法線方向の密度分布の曲率に比例して分子力が働いている, と考える。

これにより水平面でも, 気・液界面の引力は計算可能となる。

密度 ρ の湧き出し ($\nabla^2 \rho$) を最小化するよう, 流れ場では形状変化すると考える。すなわち $\nabla \nabla^2 \rho$ に比例した応力と, 平衡する慣性力が生じると考える。

よって状態の発散に, ($\nabla^2 \rho$) を最小化する余地があれば, ポテンシャルエネルギーは高く, 低い状態へ変形・変位する, と考える。

ただ, $\nabla \nabla^2 \rho$ は高階の微分であり, 数値微分は桁落ちし易く, 応力項として組み込むには, 桁落ち対策が最大の課題である。

既報⁽¹⁾で, 桁落ち誤差を次のように考察した。先ず, 桁落ちは乗・除演算では小さく, 加・減算で大きい, ことを認識して置く。

発散 $divu$ の 2 項に同じ数値誤差 e が, 相殺するように含まれていても, $divu$ の値は変わらない。

例えば $divu = u^{(100)} + v^{(100)} + w^{(100)}$ が $=(u^{(100)} + e) + (v^{(100)} - e) + w^{(100)}$ のケースである。 e は桁落ち量であり, $|e| \gg 0$ では $(u^{(100)} + e)$ も $(v^{(100)} - e)$ も数値精度は低下する。

既報⁽²⁾で, $(u^{(100)} - v^{(100)})$ などを $(u^{(100)} + v^{(100)})$ の共役変数と呼んで定義し, $(u^{(100)} - v^{(100)})$ を最小化 $\Rightarrow 0$ することで, 桁落ち誤差を最小化 ($2e \Rightarrow 0$) する技法を提案し, 桁落ち誤差最小化法と呼んだ。

2 項以上で表される微分方程式は, 2 以上の自由度数があり, 制約条件として桁落ち誤差最小化が望ましい。

高階の数値微分は高階差分であり, より桁落ちし易い。本稿の目的とする引力 / 斥力モデルでは, 桁落ち誤差最小化法を活用して, 引力 / 斥力を応力項の一部として数値計算に組み込む。

2. 方法

(1) 基礎方程式

密度を ρ , 変位を u , 速度を U として, 質量保存式は式(1)で表される。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \rho + \rho \operatorname{div} \mathbf{U} = 0 \quad (1)$$

分子力の係数を λ とし, 引力 / 斥力を $\lambda \nabla \nabla^2 \rho$ で組み込んだ Navier-Stokes (NS) 方程式を式(2)で表す。

$$\rho \frac{D\mathbf{U}}{Dt} + \nabla P + \lambda \nabla \nabla^2 \rho - \mu (2\nabla_{diag}^2 \mathbf{U} + \operatorname{shr}^2 \mathbf{U} - \frac{2}{3} \nabla \operatorname{div} \mathbf{U}) = 0 \quad (2)$$

よって, 湧き出しによる体積粘性応力 $1/3 \mu \nabla \nabla^2 \phi$ に対応する, $\lambda \nabla \nabla^2 \rho$ がゼロでなければ圧力勾配 ∇P が生じて変位する。

(2) 添え字記号と新しい演算子, 並びに共役変数

添え字は $(i=1,2,3)$ のほか, $(i+1=2,3,1)$ ($i-1=3,1,2$) を適用する。すなわち, $i+2=i-1$, $i-2=i+1$ である。これにより $curl$ などが添え字付きで容易に数式表示できる。また, スカラーを表す(と判定可能な)項は, 総和規約による。

∇u の対角項を $\nabla_{diag} u$ で表し, 非対角項を $\nabla_{offi} u$ で表す。

$\nabla_{curl} u$ で, 回転の成分をベクトル表示する。 $curlu: \nabla_{curl} u$ 同様, せん断ひずみとその成分ベクトルを $shru: \nabla_{shr} u$ で表す。すなわち, それぞれ式(3)および式(4)で表す。

$$curlu = \frac{\partial u_{i-1}}{\partial x_{i+1}} - \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i-1}}, \quad \nabla_{curl} u = \left\{ \frac{\partial u_{i-1}}{\partial x_{i+1}}, -\frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i-1}} \right\}^T \quad (3)$$

$$shru = \frac{\partial u_{i-1}}{\partial x_{i+1}} + \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i-1}}, \quad \nabla_{shr} u = \left\{ \frac{\partial u_{i-1}}{\partial x_{i+1}}, \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i-1}} \right\}^T \quad (4)$$

∇_{diag}^2 , ∇_{offi}^2 , ∇_{curl}^2 , ∇_{shr}^2 はいずれもベクトルを表すとする。

本稿ではスカラーにも, $\{\phi, \phi, \phi\}$ としてベクトル演算子を適用する。(e.g. $div\phi \equiv \phi^{(100)} + \phi^{(010)} + \phi^{(001)}$)

その他, 式(5)および式(6)の演算子を定義する。

$$imiu = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i+1}}, \quad \nabla_{imi} u = \left\{ \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i+1}} \right\}^T \quad (5)$$

$$naiu = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i+1}}, \quad \nabla_{nai} u = \left\{ \frac{\partial u_{i-1}}{\partial x_{i+1}}, -\frac{\partial u_{i+1}}{\partial x_{i-1}} \right\}^T \quad (6)$$

$\langle curlu: shru \rangle$ の対, および $\langle imiu: naiu \rangle$ が, それぞれ共役変数である。

$\langle cur^2 lu: shr^2 u \rangle$, $\langle imi^2 u: nai^2 u \rangle$ も共役変数であり, 共役変数の一方の演算には他方の最小化を制約条件とする。

例えば回転 *curl* の演算には、せん断ひずみの最小化 ($shru \Rightarrow 0$) を制約条件として付帯させる。それにより、数値微分の演算による桁落ち誤差は最小化される。

(3) 数値計算法

共役変数の最小化を伴うので、1 のパラメータについて、複数の条件式を満たす必要がある。

そこで、NS 方程式を含めて、いずれも重み付き残差法による変分式で解く。(一般に、重み付き回帰計算の概念で説明できる。)

粒子を *transaction* とし、移動を *advance* とするシミュレーションの概念で捉える。そのためには陽的计算が望ましい。

変位を陽的に計算するため、共役変数は桁落ち誤差の最小化を図るのが狙いである。したがって、時間ステップ *n* の状態量は *given* でなければならない。

圧力勾配は NS 方程式の残差分散を最小化するよう解く。(最小 2 乗法。)

時間ステップを進めるには、圧力勾配のみ得られれば良く、圧力そのものは必要でない。そこで、ノード点で $\{P^{(000)}\}_0 = 0$ とし、不連続関数とする。(連続な *P* 分布はシミュレーションの最後に計算。)

勾配モデルの計算法は別稿⁽⁴⁾による。共役変数制約式を加える重み付き残差法の数値計算は[Appendix-1]を参照のこと。

自由界面問題では圧力初期値は大気圧である。正の物理量であるから指数関数表示するのが望ましい。ただ、非線形式となるので計算は煩瑣であり、一般にはべき級数式が選択される。

圧力の絶対量は法線応力平均で定義されるので、一般には両者とも初期値ゼロとする。

圧力の負の値は好ましくないが、正・負の交替で積分値としてゼロとなる、いわゆるアワーグラスモードは最も好ましくない。それを緩和・除去するのがゆがみ項の最小化、すなわち共役変数の最小化である。

密度 ρ は、圧力・温度同様、正の物理量であり指数関数表示が望ましい。質量保存則を満たすためには、指数部を *r* として、指数関数表示する。 *i.e.*, $=\exp(r)$ 。よって、式(1)は式(7)を解く問題となる。

$$\frac{\partial r}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla r + \text{div} \mathbf{U} = 0 \quad (7)$$

粒子移動や密度の数値計算法などは別稿⁽⁴⁾に述べている。

式(2)の引力/斥力項も指数関数表示が望ましいが、圧力勾配以上に煩瑣となるので、べき級数モデルを選択する。

考え方としては、相 *i* の確率密度関数 P_i を計算して置き、 ρ_i を乗じて ρP_i で表す。⁽⁵⁾

確率密度関数はロジットモデルで表すのが望ましいが、指数関数表示となり、上述同様の理由で、べき級数とし、共役変数の最小化で対応する。

そのべき級数は *C*¹ 連続関数が望ましいが、高次式となるので、別稿⁽⁴⁾の勾配モデルと双対直交格子法を選択し、共役変数最小化法を併用する。 ([Appendix-2], [Appendix-3]参照のこと。)

不等距離差分法による勾配モデルの構築に当たっては、 $\{P_i^{(000)}\}_0$ は当該粒子の相の確率なので $=1.0$ とし、その近傍の粒子の確率 $\{1 \text{ or } 0\}_k$ を回帰データとして、先ずゆがみ項を欠く 2 次式で回帰計算する。

次いで、回帰計算結果に頼れるゆがみ項を最小化するため、 $im^2 P_i$ と $na^2 P_i$ とを同時に最小化して、修正する。

その数値計算法を、 P_i を *P* で表し、増分を ΔP として、式(8)に示

す。 ($P^m = P^{m-1} + \Delta P$)

$$\int_{\Omega} [\delta P^{(20)} \cdot \{\Delta P^{(20)} - (\alpha^{(20)} + \beta^{(02)})/2\} + \delta P^{(02)} \cdot \{\Delta P^{(02)} - (\alpha^{(20)} - \beta^{(02)})/2\}] d\Omega = 0, \quad (8)$$

$$\text{where } \int_{\Omega} [\delta \alpha^{(20)} \cdot \{\alpha^{(20)} - (P^{(20)} + P^{(02)})^{m-1}\}] d\Omega = 0$$

$$\int_{\Omega} [\delta \beta^{(02)} \cdot \{\beta^{(02)} - (P^{(20)} - P^{(02)})^{m-1}\}] d\Omega = 0$$

$A \equiv P^{(20)} + P^{(02)}$ とし、 $A^{(20)} + A^{(02)}$ も $A^{(20)} - A^{(02)}$ を共役変数として、同様に計算する。

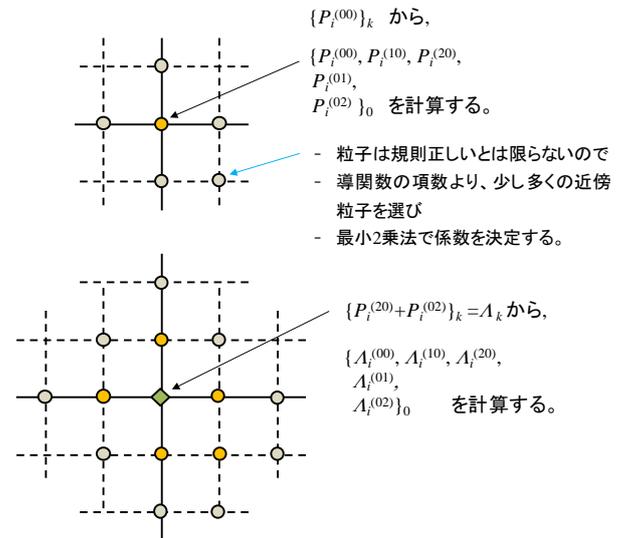


Fig.1 No-equidistant finite difference method

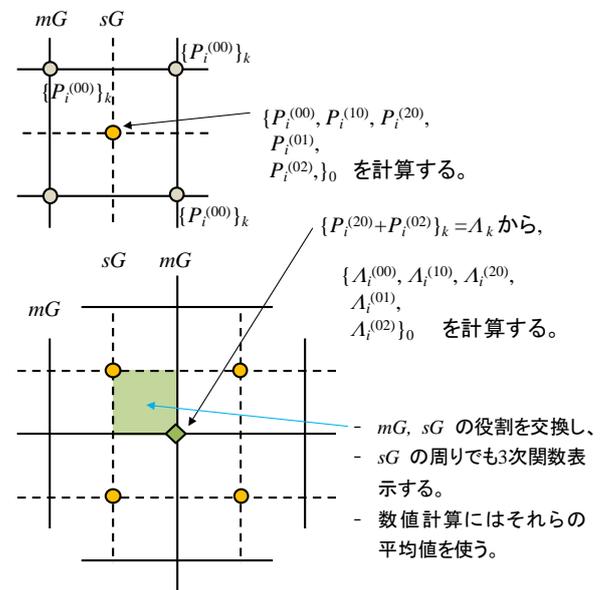


Fig.2 Dual Cartesian grid method

よって、式(2)は式(9)で表される。

$$\rho \frac{DU}{Dt} + \nabla P + \lambda \nabla A - \mu (2\nabla_{diag}^2 \mathbf{U} + shr^2 \mathbf{U} - \frac{2}{3} \nabla \text{div} \mathbf{U}) = 0 \quad (9)$$

P_i は液相と固体相で計算し、気相 P_3 はそれらの和 ($P_1 + P_2$) の 1

の補数で表す. *i.e.*; $P_3 = I - (P_1 + P_2)$.

3. ベンチマークテスト問題

ケース1: 水を入れた試験管壁の毛管現象, および水銀を入れた界面張力をシミュレーションする.

ケース2: 空中の, 初期形状立方体の水滴の形状変化をシミュレーションする.

ケース3: 同じシミュレーションを盤上で, 水と水銀で行う.

4. まとめと今後の課題

- 従来の界面張力モデルでは, 水平面では張力ゼロとなる.
- 等密度分布曲線の曲率(液相の界面)に比例して表面張力が生じ, その法線方向の密度分布の曲率に比例して分子力が働いている, とした.
- これにより, 気・液界面の引力を計算可能とした.
- 双対直交格子法により, 粒子を密度表示し, かつ3重3次の2者択一的表示を可能としていた.
- 別報の粒子法勾配モデルと組み合わせ, 新しい引力モデルの数値計算法を示した.
- その係数 λ は, 従来の相間の表面張力測定値に比例する筈である.
- 相の組み合わせシミュレーションにより, それを相固有の係数として分解することが, 直近の課題である.

謝辞: Helmholtz分解の有限要素法への適用の研究に関し, 長年慶應義塾大学名誉教授 棚橋隆彦先生にアドバイスを頂いた. 記して感謝の意を表します.

[Appendix-1] 共役変数制約式を付帯する不等距離差分法

不等距離差分法は重み付き回帰計算法である. 速度(変位)に $l/\Delta t$ の重みを付け, 勾配に動粘性係数 ν の重みを付けて回帰計算する.

粒子法では, 粒子は移動するので, 回帰データはパラメータ表示ではなく, 数値を与える.

よって, 与える数値データを f^{m-l} とし, 修正量を Δf とし, 次式で修正量を計算する. ($f^m = f^{m-l} + \Delta f$)

$$\int_{\Omega} [\delta f^{(20)} \cdot \{\Delta f^{(20)} - (\alpha^{(20)} + \beta^{(02)})/2\} + \delta f^{(02)} \cdot \{\Delta f^{(02)} - (\alpha^{(20)} - \beta^{(02)})/2\}] d\Omega = 0,$$

$$\text{where } \int_{\Omega} [\delta \alpha^{(20)} \cdot \{\alpha^{(20)} - (f^{(20)} + f^{(02)})^{m-1}\}] d\Omega = 0$$

$$\int_{\Omega} [\delta \beta^{(02)} \cdot \{\beta^{(02)} - (f^{(20)} - f^{(02)})^{m-1}\}] d\Omega = 0$$

[Appendix-2] 数値微分誤差の考察と最小化

数値微分は基本的に差分計算である. ノード A の値 A_x と, ノード B の値 B_x の差を, 間隔 l_x で除すことで得る. *i.e.*; $=(A_x - B_x)/l_x$

関数の局所原点から遠く離れた 2 点では, 差演算の桁落ち誤差は大きい. (乗・除算誤差は比較的小さい.)

2 点の値に e_x が加わっていても *i.e.*; $(A_x + e_x) - (B_x + e_x) >$, 結果は変わらないが, e_x が桁落ちするからである.

かつ反復計算では, e_x が増大しない保証はない.

それを食い止めるには, 反復計算で局所原点 (local origin) の値が, global origin から離れて行くのを防ぐ他ない. (local origin はノ

ド値で決まる.)

e_x はノード A_x の高上げ分(下駄)であり, $(A_x + e_x) + (B_x + e_x) \equiv R$ の値を最小化 ($R \Rightarrow 0$) することで下駄の値を最小化 $2e_x \Rightarrow 0$ して, 増大しないよう保つ. ($\Rightarrow 0$ は最小 2 乗法などによることを表す.)

変分式に表れる $(A_x - B_x)$ を目的変数, $(A_x + B_x)$ を共役変数と呼ぶものである.

$(A_x + B_x)$ が目的変数の変分式では, $(A_x - B_x)$ を共役変数と呼ぶ. e_x の値は予め分らないから, 共役変数を最小化する.

[Appendix-3] 桁落ち誤差の最小化

スカラーの勾配 ∇f の数値微分の桁落ち誤差 e を, $=\{u, v\}$ の適合誤差で考える.

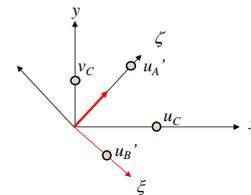
$\langle x, y \rangle 2D$ の変位を $\{u, v\}$, θ 回転した変位を $\{u', v'\}$ とし, $\theta_A = \pi/2$ 回転変位を $\{u', v'\}_A$, $\theta_B = -\pi/2$ 回転変位を $\{u', v'\}_B$ で表す.

変位に誤差 e が $\{u + e_A, v + e_A\}$, $\{u + e_B, v + e_B\}$ の 2 パターンで混入していたとする. ただし, $e_A > 0, e_B > 0$.

任意の誤差 e は e_A と e_B の和と差の組み合わせで表わせる.

$u = \{\cos\theta, \sin\theta\} \cdot \{u, v\}^T$, $v = \{-\sin\theta, \cos\theta\} \cdot \{u, v\}^T$ であるから, e_A は $\{u', v'\}_A$ では u' 値でしか検出されず, v' では相殺される. e_B は $\{u', v'\}_B$ で同様である.

u'_B, u'_A は直交しているから, 直交座標 $\langle \xi, \zeta \rangle$ 上のパラメータ $\{\xi, \zeta\}$ との差を最小化 ($\xi - u'_B \Rightarrow 0$), ($\zeta - u'_A \Rightarrow 0$) することで, 桁落ち誤差も最小化 ($2e_B \Rightarrow 0$), ($2e_A \Rightarrow 0$) する.



すなわち, $(\xi - u'_B \Rightarrow 0)$, $(\zeta - u'_A \Rightarrow 0)$ を計算する.

次いで, $\{\xi, \zeta\}$ を $\langle x, y \rangle$ 座標で表した $\{u, v\}_c$ と, 元の $\{u, v\}$ との差を最小化 $(u - (\xi + \zeta)/2 \Rightarrow 0)$, $(v - (\xi - \zeta)/2 \Rightarrow 0)$ することで, 桁落ち誤差を緩和・排除する.

すなわち, $(f^{(10)} - (\xi + \zeta)/2 \Rightarrow 0)$, $(f^{(01)} - (\xi - \zeta)/2 \Rightarrow 0)$ で計算する.

$\alpha^{(10)} + \alpha^{(01)} \equiv (u + v)$, $\beta^{(10)} + \beta^{(01)} \equiv (u - v)$ と置いて, $\{\alpha, \beta\}$ 要素をそれぞれ f 要素から計算する. ただし, $\{\alpha, \beta\}$ 要素それぞれノードのひとつは固定する.

よって, スカラー f 要素から桁落ち誤差を最小化した f 要素の数値微分値 ∇f は, $f^{(10)} = (\alpha + \beta)^{(10)}$, $f^{(01)} = (\alpha - \beta)^{(01)}$ の右辺を適用することで得る.

$\{\alpha, \beta\}$ 要素は, 適合誤差最小, かつ桁落ち誤差最小のフィルターの役割を果たしている.

流れ関数 ψ のケースでも, 単なるスカラーの数値微分誤差 $f \equiv \psi$ で考える.

ラプラシアン $\nabla^2 f$ ($\equiv \text{im}^2 f$) の数値微分では, $\text{na}^2 f \equiv f^{(20)} - f^{(02)}$ を共役変数として, $u \equiv f^{(20)}$, $v \equiv f^{(02)}$ にそれぞれ 2 パターンの誤差 e が含まれるとして考える.

$\alpha : (f^{(20)} + f^{(02)})$, $\beta : (f^{(20)} - f^{(02)})$ をフィルターとして, 同様に桁落ち誤差を最小化する.

参考文献

- (1) 今村, "修正 Helmholtz 分解要素を用いる Locking-free FEM," 日本流体力学会年会 2019 論文集, (2019).
- (2) 今村: 双対直交格子を用いるアダプティブ p 法, 並びに残差均等配分技法を用いた非圧縮流れ場解法による検証, 計算工学講演会論文集, Vol.24, 2019.

- (3) 今村: 仮想仕事法と双対直交格子を用いた運動量保存技法による非圧縮流れ場の数值計算法, 計算工学講演会論文集, Vol.24, 2019.
- (4) 今村, "差分法の桁落ち誤差最小化, 並びに不等距離差分法による粒子法勾配モデル," 第33回数值流体力学シンポジウム論文集, 講演番号 E09-1, (2019).
- (5) 今村: 粒子-双対直交格子(P-CG)を用いる累積密度関数表示の表面張力モデル, 計算工学講演会論文集, Vol.24, 2019.