

Numerical simulation for the interaction analysis between fluid and membrane

金沢大学 大学院自然科学研究科 風間正喜 (Masaki KAZAMA)

1 はじめに

本稿では膜と流体が連成する現象に対する数値計算法を紹介する.

この現象の簡単な例として, 水を満たしたグラスを弾性体の膜で密封することを考える (図 1).

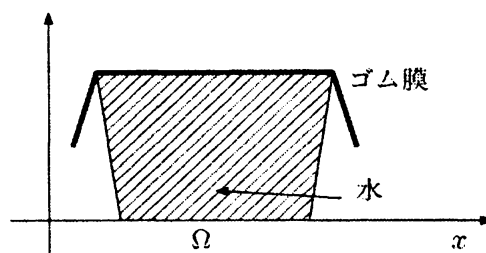


図 1: ゴム膜で密封したグラス

膜に外力を加え動かすと, 中の水も膜に押され運動し, そして水の流れが膜にぶつかり, 膜の運動に影響を与える. 従って, この現象は流体と弾性体の膜が連成する典型的な現象である.

時刻 t での膜の形状をスカラー関数 $\eta(x, t)$ を用いて表し, グラスの中は水で満たされ密封されているため, 膜は下の体積 $V = \int_{\Omega} \eta(x, t) dx$ を保ちながら運動するとみなすと, 膜の運動は以下のような方程式に従うと考えられる.

$$\eta_{tt} = \Delta \eta + F + \lambda \quad (1)$$

ここで $F(x, t)$ は流体から受ける影響と, その他の外力項を表す. $\lambda(t)$ は体積保存条件に由来するラグランジュ未定乗数で, 以下のような形をもつ.

$$\lambda = \frac{1}{V} \int_{\Omega} [\eta \eta_{tt} + |\nabla \eta|^2 - F \eta] dx. \quad (2)$$

このような非局所的な項が現れることが, 方程式 (1) の特徴である.

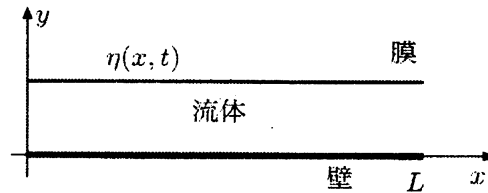
今回、膜と流体が連成する現象を数値的に解くため、離散勾配流法と MPS 法を組み合わせた数値計算手法を開発した。離散勾配流法は変分の直接法による解法で、許容空間を制限するだけで、方程式にあらわれるラグランジュ未定乗数を計算しなくてすむ [1]。一方 MPS 法 (Moving Particle Semi-implicit Method)[2] は粒子法の 1 つで、膜内部の流れを計算するのに適している。

本稿では、最初に膜と流体が連成する現象に対するモデル方程式を導出し、その数値解法について説明する。そしてこの連成解析を、ひとつは弾性体膜に外力を加えて、流体を駆動させるポンプに対して、もうひとつは、水滴の挙動へと応用し、それぞれの数値計算結果を紹介する。後者の現象では膜は存在しないが、表面張力と接触角を表現するために、仮想的な膜を考えることで、現象を良く再現していることを示す。

なお、この研究は金沢大学小俣正朗教授との共同研究である。

2 膜と流体の方程式の導出

ここでは、膜と流体の連成する現象のモデル方程式を導出する。簡略化のため、以下の 2 次元の形状で考える。



膜と流体それぞれに対して、 $x = 0, L$ では適当な境界条件が課されているものとする。

まず、膜の方程式を考える。膜は y 方向のみしか運動しないと仮定し、スカラー関数 $\eta(x, t)$ で膜の形状を表す。作用積分 $J(\eta)$ を以下のように構成し、膜の運動方程式を導出する。

$$J(\eta) = \int_0^T \int_0^L \left[\frac{\gamma}{2} \eta_x^2 - \frac{\sigma}{2} \eta_t^2 - f\eta \right] dx dt. \quad (3)$$

σ, γ はそれぞれ、膜の密度、張力係数、 $f(x, t)$ は外力である。

ここで $V = \int_0^L \eta(x, t) dx$ とおく。 J の第 1 変分を体積保存条件下で取り、

$$\left. \frac{dJ \left(\frac{\eta + \epsilon \phi}{1 + \frac{\epsilon}{V} \int_0^L \phi dx} \right)}{d\epsilon} \right|_{\epsilon=0} = 0 \quad \forall \phi \in C_0^\infty((0, L) \times (0, T)) \quad (4)$$

以下の膜の運動方程式を得る。

$$\sigma\eta_{tt} = \gamma\eta_{xx} + f + \lambda. \quad (5)$$

$\lambda(t)$ は体積保存条件を満たすための、ラグランジュの未定乗数で

$$\lambda(t) = \frac{1}{V} \int_0^L (\sigma\eta\eta_{tt} + \gamma\eta_x^2 - f\eta) dx \quad (6)$$

である.

さらに膜には流体からの影響として、圧力による力 f_p と粘性応力による力 f_v が加えられる. それぞれの力は以下のように書くことができる.

$$f_p(x, t) = p(x, \eta, t) \quad (7)$$

$$f_v(x, t) = \mu\eta_x \left(\frac{\partial(\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{y}})}{\partial x} - \frac{\partial(\mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{x}})}{\partial y} \right) \Big|_{y=\eta}. \quad (8)$$

ここで $\mathbf{v}(x, y, t)$, $p(x, y, t)$ はそれぞれ、流体の速度場、圧力場、 $\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}$ はそれぞれ、 x, y 方向単位ベクトル、 μ は流体の粘性率である.

流体の影響を考慮した膜の運動方程式は、以下のようになると考えられる.

$$\sigma\eta_{tt} = \gamma\eta_{xx} + f + f_p + f_v + \lambda. \quad (9)$$

ラグランジュ未定乗数は形式的に、

$$\lambda(t) = \frac{1}{V} \int_0^L (\sigma\eta\eta_{tt} + \gamma\eta_x^2 - (f + f_p + f_v)\eta) dx \quad (10)$$

となる.

流体の速度場、圧力場は、膜の下の流体の運動を解いて決定される. 流体に対しては、以下の非圧縮性流体の方程式を採用する.

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{v} \quad (11)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \quad (12)$$

ここで ρ は流体の密度である. 境界条件は以下の粘着条件を課す.

$$\mathbf{v}(x, 0, t) = 0, \quad \mathbf{v}(x, \eta, t) = (0, \eta_t). \quad (13)$$

圧力を求める方程式は式 (11) と (12) から以下のように求められる.

$$\Delta p = -\rho \nabla \cdot [(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}] \quad (14)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \mu \hat{\mathbf{y}} \cdot \Delta \mathbf{v} \quad \text{at } y = 0 \quad (15)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = -\frac{\rho}{\sigma \sqrt{1 + \eta_x^2}} (\gamma\eta_{xx} + f_p + f_v + f + \lambda) + \mu \mathbf{n} \cdot \Delta \mathbf{v} \quad \text{at } y = \eta. \quad (16)$$

$\mathbf{n}$ は膜に対する外向き法線単位ベクトルである.

以上をまとめると, 膜と流体が連成する現象の方程式は以下のようなになる.

$$\sigma \eta_{tt} = \gamma \eta_{xx} + f_p + f_v + f + \lambda \quad (17)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{v} \quad (18)$$

$$\Delta p = -\rho \nabla \cdot [(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}] \quad (19)$$

$$\mathbf{v}(x, 0, t) = 0, \quad \mathbf{v}(x, \eta, t) = (0, \eta_t) \quad (20)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = \mu \hat{\mathbf{y}} \cdot \Delta \mathbf{v} \quad \text{at } y = 0 \quad (21)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} = -\frac{\rho}{\sigma \sqrt{1 + \eta_x^2}} (\gamma \eta_{xx} + f_p + f_v + f + \lambda) + \mu \mathbf{n} \cdot \Delta \mathbf{v} \quad \text{at } y = \eta. \quad (22)$$

3 数値解法

3.1 離散勾配流法

離散勾配流法は, 膜の方程式 (17) の数値解法として用いる. この方法では, 時間区間 $[0, T]$ を N 分割し, 各時間ステップ $n = 2, 3, \dots, N$ での汎関数の最小化問題を考える手法である.

各時間ステップ n で汎関数 J_n を以下のように定義する.

$$\begin{aligned} J_n(\eta) = & \int_0^L \sigma \frac{|\eta - 2\eta^{n-1} + \eta^{n-2}|^2}{2h^2} dx + \int_0^L \frac{\gamma}{2} \eta_x^2 dx \\ & - \int_0^L (f_p(x, (n-1)h) + f_v(x, (n-1)h) + f(x, (n-1)h)) \eta dx. \end{aligned} \quad (23)$$

J_n に対する最小化関数 η^n を体積保存条件下で求める. ここで $h = \frac{T}{N}$, $\eta^{n-1}(x)$, $\eta^{n-2}(x)$ はそれぞれ J_{n-1} , J_{n-2} に対する最小化関数である. η^0, η^1 が初期条件として与えられれば, 各 η^n は帰納的に求められる.

J_n の第 1 変分を式 (4) のように取ることで, 以下の方程式が導出される.

$$\sigma \frac{\eta - 2\eta^{n-1} + \eta^{n-2}}{h^2} = \gamma \eta_{xx} + f_p + f_v + f + \lambda_n. \quad (24)$$

ここで

$$\lambda_n = \frac{1}{V} \int_0^L \left[\sigma \frac{\eta - 2\eta^{n-1} + \eta^{n-2}}{h^2} \eta + \gamma \eta_x^2 - (f_p + f_v + f) \eta \right] dx \quad (25)$$

である. 式 (24) は式 (17) を時間に対して差分化した方程式である. 従って J_n の最小化関数 $\eta^n(x)$ を求めることで, 式 (17) を数値的に解くことができる.

最小化関数 η^n を探索するアルゴリズムは以下のようなである:

空間に対して有限要素法で差分化し, 適当な初期値 η^{n_0} から, 以下の計算を行う.

(a) $q = 1, \dots, Q$ に対して:

- i. $p^q = \nabla_{\eta} J_n(\eta^{n_q})$ を計算する.
- ii. $-p^q$ 方向で J_n を最小にする関数を2分法により求める. 見つかった関数を $\hat{\eta}^{n_{q+1}}$ とする.
- iii. 体積保存平面へ $\hat{\eta}^{n_{q+1}}$ を射影する: $\eta^{n_{q+1}} = \mathcal{P}(\hat{\eta}^{n_{q+1}})$.

(b) $q = Q$ で収束条件を満たしたとする: $\eta^n = \eta^{n_Q}$.

3.2 MPS 法

内部の流体の運動は MPS 法を用いて解く. MPS 法は流体を多数 (K 個) の粒子で分割し, 各粒子を流体力学方程式を用いて時間発展させて, 流体の運動を表現する方法である. これは領域の形が時間的に変化する場合に都合が良い. 各粒子 $k = 1, \dots, K$ の位置と速度をそれぞれ $\mathbf{x}_k, \mathbf{v}_k$ と書く.

MPS 法では, 流体の方程式を解くために以下の重み関数を用いる.

$$w(r) = \begin{cases} \frac{r_e}{r} - 1 & (0 \leq r < r_e) \\ 0 & (r_e \leq r) \end{cases}$$

r_e は粒子間距離の 2, 3 倍程度の値で, 初期に固定する. 重み関数を用いて粒子数密度 n_k を以下のように導入する.

$$n_k = \sum_{j \neq k} w(|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k|). \quad (26)$$

また各粒子 k が物理量 ϕ_k を持っていたとき, ϕ_k の勾配やラプラシアン等の空間微分量は以下のように近似する.

$$\langle \nabla \phi \rangle_k = \frac{d}{n_0} \sum_{j \neq k} \left[\frac{(\phi_j - \phi_k)(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k)}{|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k|^2} w(|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k|) \right] \quad (27)$$

$$\langle \Delta \phi \rangle_k = \frac{2d}{\tau_0 n_0} \sum_{j \neq k} [(\phi_j - \phi_k) w(|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k|)]. \quad (28)$$

d は次元, n_0 は粒子が一様に分布しているときの粒子数密度, τ_0 は $\tau_k = \frac{\sum_{j \neq k} |\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k|^2 w(|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k|)}{\sum_{j \neq k} w(|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k|)}$ を一定値で近似した定数である.

これらを用いて, 非圧縮性流体の方程式を以下のように解く. 各時間ステップ $n = 1, \dots, N$ について, まずは圧力項以外の項を計算する.

$$\mathbf{v}_k^* = \mathbf{v}_k^n + h \frac{\mu}{\rho} \langle \Delta \mathbf{v}^n \rangle_k \quad (29)$$

$$\mathbf{x}_k^* = \mathbf{x}_k^n + h \mathbf{v}_k^*. \quad (30)$$

ここで以下の連立1次方程式を解いて、圧力を求める.

$$\langle \Delta p^n \rangle_k = -\frac{\rho}{h^2} \frac{n_k^* - n_0}{n_0}. \quad (31)$$

ここで $n_k^* = \sum_{j \neq k} w(|\mathbf{x}_j^* - \mathbf{x}_k^*|)$ である. 得られた圧力を用いて各粒子の位置と速度を以下のように修正する.

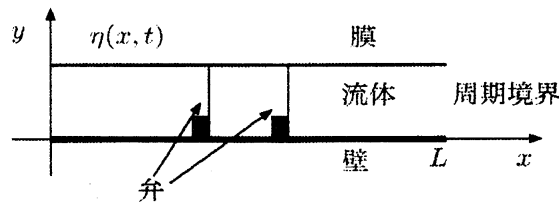
$$\mathbf{v}_k^{n+1} = \mathbf{v}_k^* - h \frac{1}{\rho} \langle \nabla p^n \rangle_k \quad (32)$$

$$\mathbf{x}_k^{n+1} = \mathbf{x}_k^* - h^2 \frac{1}{\rho} \langle \nabla p^n \rangle_k. \quad (33)$$

離散勾配流法と MPS 法を組み合わせ、膜と流体の運動を解いていく.

4 ポンプのモデルと計算結果

以下のような形状に対して数値計算を行う.



弁に囲まれた領域をポンプとみなし、膜に外力を加え、内部の流体に x 正の方向の流れを与える. このモデルは魚の心臓を単純化したものと考えることができる.

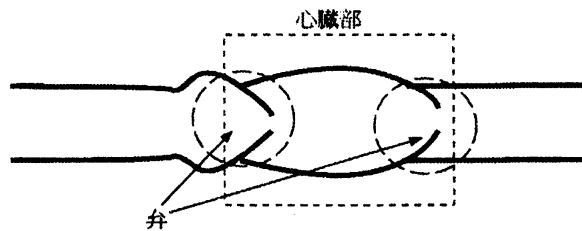
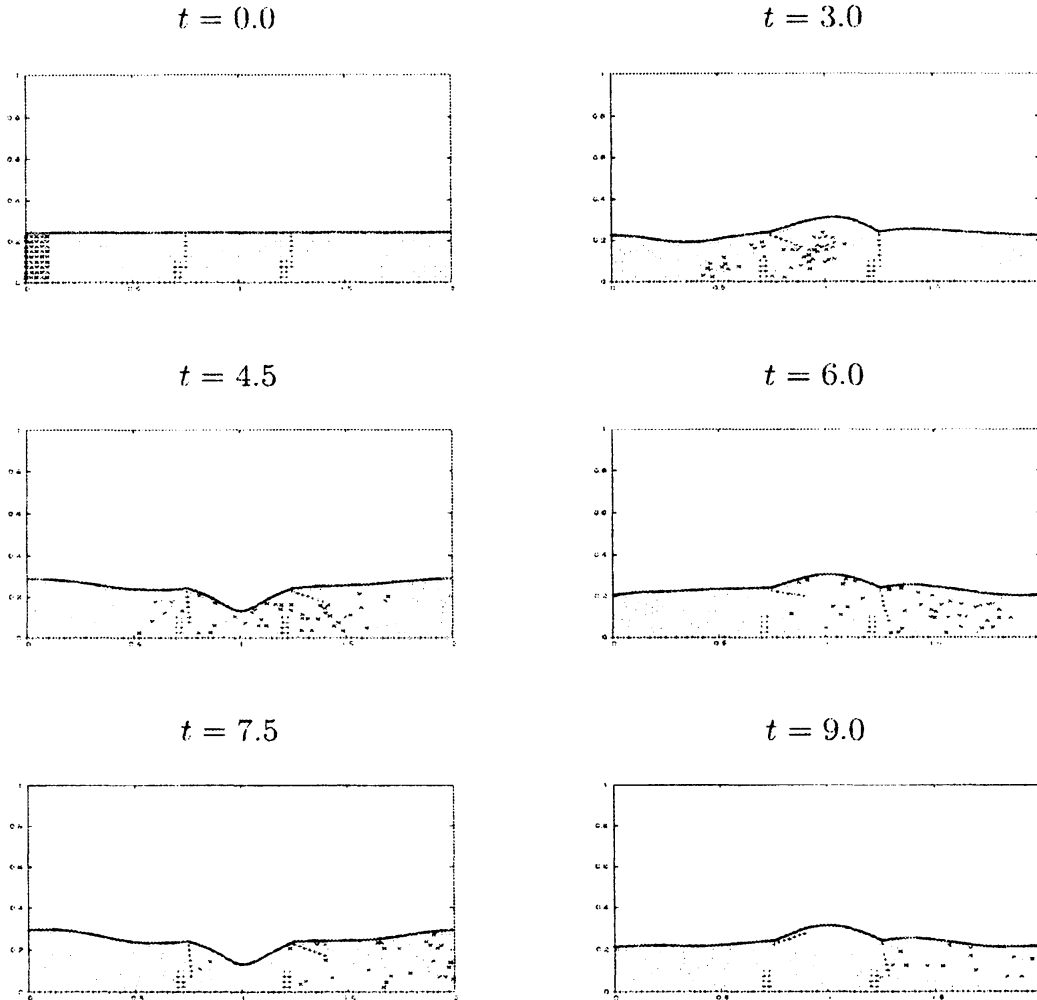


図 2: 魚の心臓略図

膜と流体の方程式は式 (17)-(22) を用いる.

弁は剛体の棒で、膜に付着している部分を固定し、回転運動のみできるようにした. 剛体と流体の連成は MPS 法により計算できる [3].

区間は $x \in [0, 2)$ で、周期境界条件を課す。膜の分割数 $M = 240$, 粒子数 $K = 1040$, 膜と流体の物性値は $\sigma = 1, \gamma = 3, \rho = 1, \mu = 0.0003$ として与え、膜を押す外力は時間的に $\sin(\pi t)$ で振動させた。



印を付けた粒子が x 正の方向へ移動していくようすが見て取れる。

5 水滴のモデル方程式

水滴の運動は内部の流体の流れ以外に表面張力や接触角などの特徴をもつ。静止している水滴の接触角 θ (図 3) は以下のヤングの式で表される。

$$\gamma_s = -\gamma_g \cos \theta \quad (34)$$

ここで γ_s は床 (固体) と流体との表面張力と床の表面張力の差, γ_g は流体の表面張力である。

接触角と表面張力を流体の方程式のみで表すことは困難であるため、流体の表面に弾性体の膜が存在すると仮定し、膜と流体が連成するモデルにより、全ての特徴を表現することを試みる。

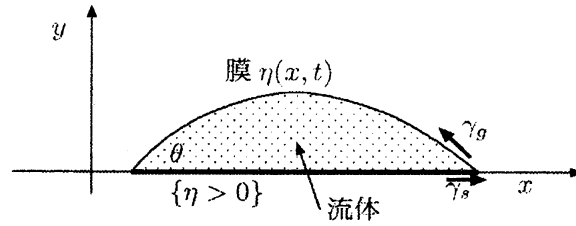


図 3: 水滴

今回は 2 次元の水滴を扱い、接触角は 90° 以上にならない場合のみ考え、水滴表面の形状をスカラー関数 $\eta(x, t)$ で表す。

水滴の表面膜の運動は以下の方程式が提案されている [1].

$$\chi_{\eta>0}\beta\eta_{tt} + \alpha\eta_t = \gamma_g\eta_{xx} - (\gamma_g + \gamma_s)\chi'_\epsilon(\eta) + f + \chi_{\eta>0}\lambda \quad (x \in \Omega, \quad 0 < t < T) \quad (35)$$

ここで $f(x, t)$ は外力, $\lambda(t)$ は体積保存条件によるラグランジュ未定乗数である. $\chi_{\eta>0}$ は集合 $\{\eta > 0\} = \{(x, t) \in \Omega \times (0, T); \eta(x, t) > 0\}$ の特性関数, $\chi_\epsilon(s)$ は特性関数 $\chi_{s>0}$ を ϵ の幅で滑らかに近似した関数である. Ω は水滴の広がりよりも十分に広い領域を取る.

式 (35) は $\epsilon \rightarrow 0$ のとき形式的に以下の方程式に収束すると考えられる.

$$\beta\eta_{tt} + \alpha\eta_t = \gamma_g\eta_{xx} + f + \chi_{\eta>0}\lambda \quad x \in \Omega \times (0, T) \cap \{\eta > 0\} \quad (36)$$

$$\gamma_g\eta_x^2 - \beta\eta_t^2 = 2(\gamma_g + \gamma_s) \quad \text{on } \partial\{\eta > 0\}. \quad (37)$$

式 (37) は水滴が床に接触する自由境界での式で、水滴が静止している場合は、ヤングの式 (34) を近似したものになっている。

式 (35) の β, α は表面膜の存在を仮定したことにより出たパラメータであり、これらは水滴の物性値等からは決まらない。しかし、水滴の運動の時間スケール等から選ぶことができると考えている。例えば、水滴の運動が非常に遅く、振動を伴わない現象の場合には、 $\beta = 0$ として、水滴の運動の時間スケールを実験と比較して α の値を決めることができた ([4])。

2 章で紹介した方程式のように、表面膜の式 (35) と、非圧縮性流体の方程式を連成させた方程式を水滴のモデルとした。

6 水滴のモデルの数値計算結果

数値解法はポンプのモデルと同様に離散勾配流法と MPS 法を用いた。今回の計算では、まだ十分に式 (35) の β, α の値を吟味できていない。

坂の上に置かれた水滴の数値計算を行った。水滴は、ほぼ形を変えずに一定の速度で坂をくだる。左図は床と接触している表面の表面張力を一定として計算したものである。右図は水滴が通過した床で表面張力を低下させている。これは床が濡れたとき床の性質が変化するとしたモデルである。右図では、後端の接触角が小さくなり、後方に水滴が伸びている。印を付けた粒子の運動を見ると、流体の先端を曲がり、回転する流れを見て取れる。これは実験 [5] でも観測されている。

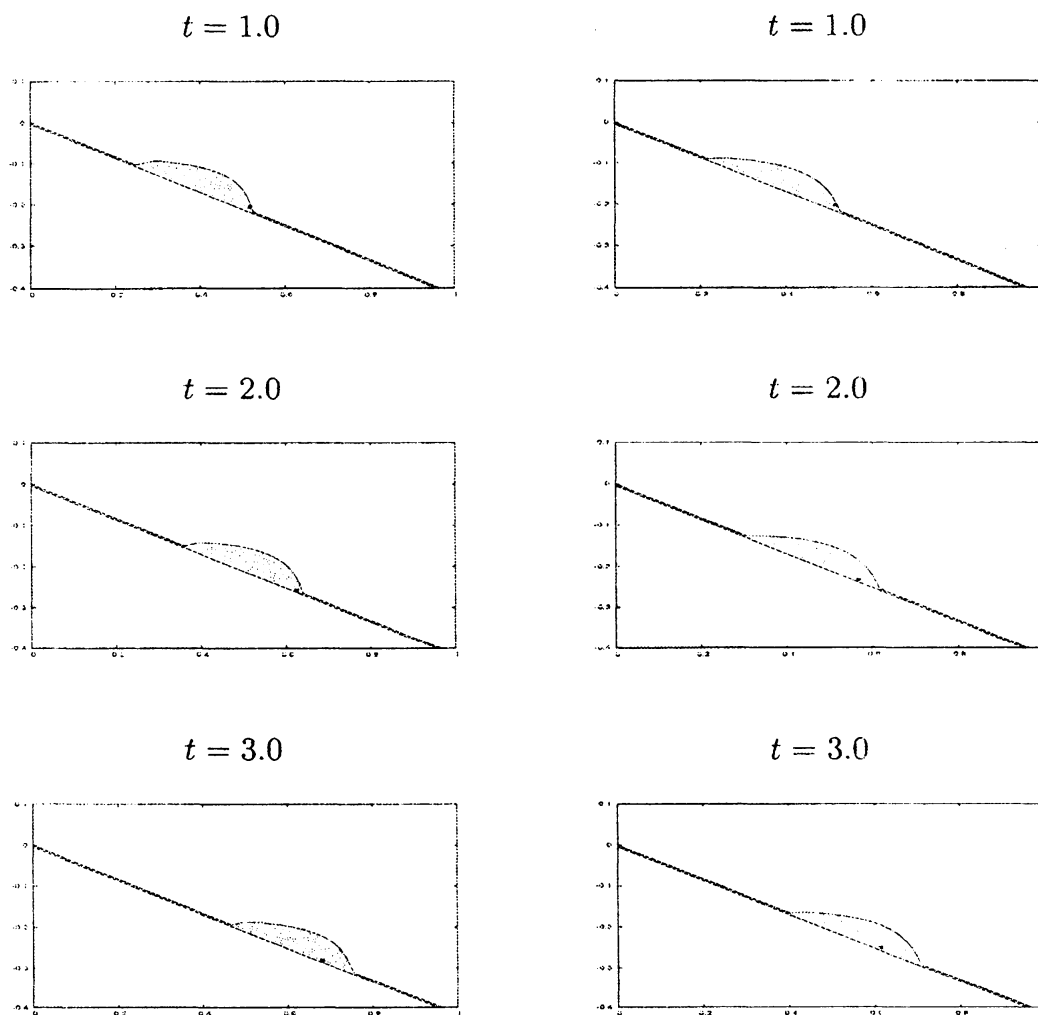


図4はOHPシートの上に水滴を乗せ、横からデジタルカメラで撮影した画像である。水滴は図4の形状をほとんど変えずに一定速度で流れ落ちる様子を観測した。

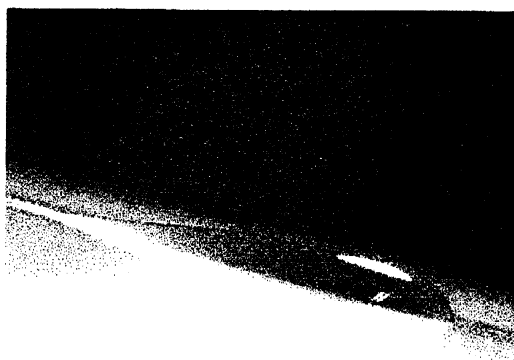
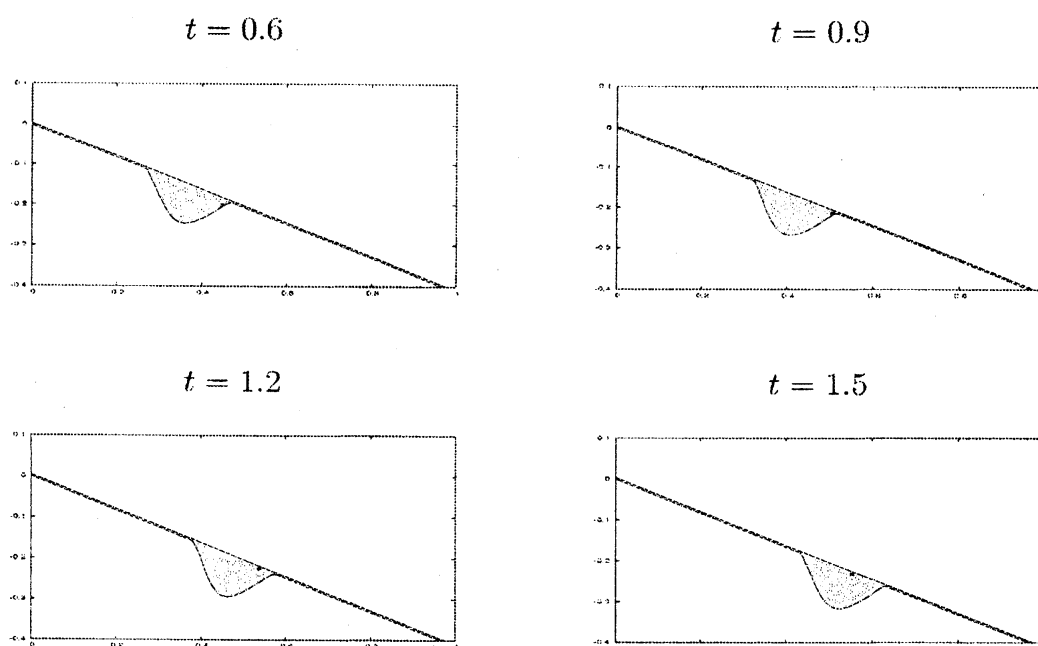


図 4: 水滴の形状

下図は天井に付着した水滴である。先ほどの計算と同様に、水滴はほぼ形状を変えずに一定速度で移動し、内部に回転する流れを観測した。



7 まとめ

膜と流体の連成する現象に対するモデル方程式を導出し、その数値解法の一つとして、離散勾配流法と MPS 法を組み合わせた手法を確立した。この手法を用いた数値計算により、ホンプのモデルでは、膜内部の流体を駆動させることができた。また水滴の数値計算を行い、坂を下る水滴の運動を表現した。しかしこれらの結果は、まだ実験との比較が十分でなく、他のモデルとの比較もできていない。今後は実験との比較や、他の数値解法との比較を行い、モデルの検証をしていきたい。

参考文献

- [1] T. Yamazaki, S. Omata, K. Švadlenka, K. Ohara, “*Construction of approximate solution to a hyperbolic free boundary problem with volume constraint and its numerical computation*”, Adv. Math. Sci. Appl. **16-1**(2006), 57-67.
- [2] S. Koshizuka, Y. Oka, “*Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid*”, Nuclear Science and Engineering **123** (1996), 421–434.
- [3] S. Koshizuka, A. Nobe, Y. Oka, “*Numerical analysis of breaking waves using the moving particle semi-implicit method*”, International Journal for Numerical Method in Fluids **26**(1998), 751–769.
- [4] K. Ito, M. Kazama, H. Nakagawa, K. Švadlenka, “*Numerical solution of a volume-constrained free boundary problem by the discrete Morse flow method*”, submitted to Proceedings of the International Conference on Free Boundary Problems in Chiba 2007, Gakuto Intern. Ser. Math. Sci. Appl. (2008).
- [5] M. Sasaki, J.-H. Song, N. Yoshida, S. Suzuki, Y. Kameshima, A. Nakajima, “*Direct observation of internal fluidity in a water droplet during sliding on hydrophobic surfaces*”, Langmuir **22**(2006), 4906–4909.