

学位申請論文

MPS 法と MAC 法のカップリングに基づく
固気液三相流計算手法の開発

東京理科大学大学院 工学研究科 機械工学専攻

氏名：高橋亮平

提出年：2017 年 3 月

目次

第 1 章	緒論	5
1.1	研究の背景	5
1.2	多相流に関する数値的手法	6
1.2.1	VOF 法	8
1.2.2	Level-set 法	9
1.2.3	ALE 法	10
1.2.4	MPS 法	11
1.2.5	SPH 法	12
1.2.6	DEM	13
1.3	固気液三相流に関する過去研究	14
1.4	本研究の目的	16
1.5	本論文の概要と構成	17
第 2 章	MPS 法に基づく固気液三相流計算手法	19
2.1	緒言	19
2.2	数値計算手法	19
2.2.1	MPS 法	20
2.2.2	離散化手法	23
2.2.3	時間刻みの制限	25
2.2.4	壁面境界モデル	26
2.2.5	負圧計算モデル	29
2.2.6	表面張力モデルおよび接触角モデル	30
2.2.7	各相間のカップリング手法	33
2.2.8	固相粒子の取り扱い	37
2.3	ダム崩壊シミュレーション	39
2.3.1	計算条件	39
2.3.2	結果と考察	41

2.4	固体粒子の液面衝突シミュレーション	43
2.4.1	計算条件	43
2.4.2	結果と考察	45
2.5	結言	50
第 3 章	MPS 法 - MAC 法カップリングによる気液二相流計算手法	52
3.1	緒言	52
3.2	数値計算手法	53
3.2.1	格子法計算手法	54
3.2.2	MPS 法と MAC 法のカップリング手法	56
3.3	せん断流中の液滴の変形シミュレーション	60
3.3.1	計算条件	60
3.3.2	結果と考察	62
3.4	結言	73
第 4 章	MPS 法 - MAC 法カップリングによる固気液三相流計算手法	75
4.1	緒言	75
4.2	数値計算手法	75
4.2.1	MPS-MAC 法カップリングによる固気液三相流計算手法	75
4.3	固体粒子の液面衝突シミュレーション	78
4.3.1	計算条件	78
4.3.2	結果と考察	78
4.4	結言	86
第 5 章	総論	88
5.1	結論	88
5.2	今後の課題	91
	参考文献	93
	本論文を構成する主論文	103
	謝辞	104

記号表	105
付録	107
付録 A Marching Cubes 法による可視化法	107
付録 B MPS 計算高速化のための計算格子	110
付録 C 格子系座標系	112
付録 D ポテンシャルモデルによる表面張力の検証	114
付録 E ポテンシャルモデルによる接触角の検証	116
付録 F 接触角による固体粒子挙動に対する影響	117

第1章 緒論

1.1 研究の背景

現在、コンピュータの性能の向上と共に、航空宇宙・機械・船舶・エネルギー・化学・医療など様々な産業分野において、CFD (Computational Fluid Dynamics) が活用されている。このような産業で扱われる流体の多くは複数の相からなる多相流であり、産業分野における CFD 技術の発展のためには多相流解析手法の進歩が重要課題といえるであろう。

多相流は図 1.1 に示すように、その構成から気液・固液・固気二相流および固気液三相流へと分類される。図中に示したとおり、気液二相流は噴流層やマイクロバブル、固液二相流は攪拌槽や流動層、固気二相流はサイクロン分離器やジェットミル、固気液三相流は固液分離装置やエアリフトポンプで見られる現象であり、いずれも産業的なプロセスで頻繁に利用されている。

多相流では、固・気・液相の異なる物性が混在し、各相の相互作用により複雑な流動現象となることから、数値的な解析においても特別な取扱いが必要となることが知られている。先に述べた多相流の内、気液・固液・固気二相流に

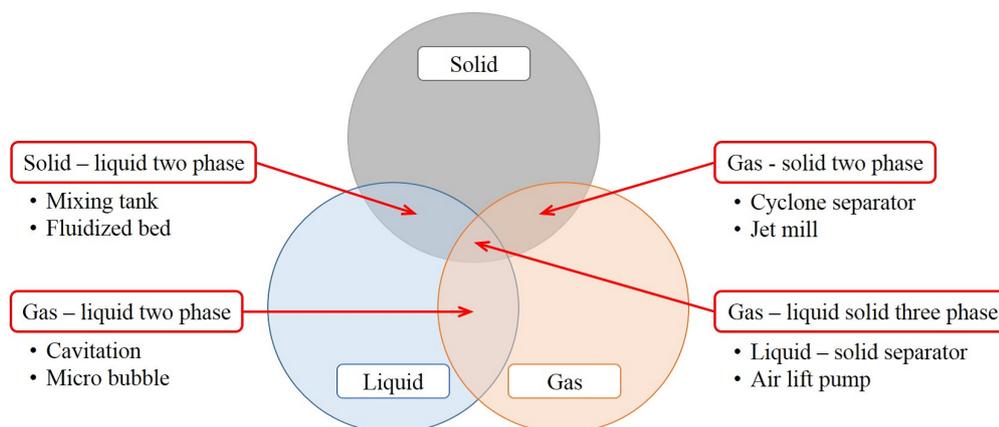


図 1.1 Classification of multi-phase flows

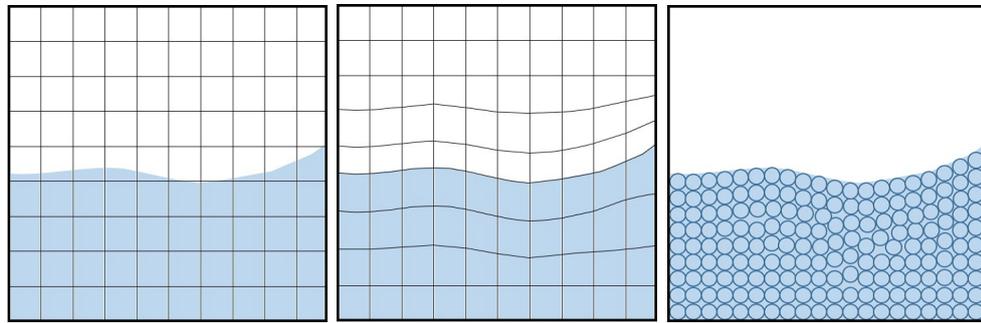
関する数値的研究は非常に多くなされており、様々な数値的手法の開発やその適用例が報告されている。代表的なものとして、気液二相流では原子力発電における蒸気爆発 [1] やマイクロバブル [2, 3] の解析、固液二相流では、赤血球を含む血液流れ [4, 5] や流動層のシミュレーション [6, 7, 8]、固気二相流では、固気系の流動相である噴流層の数値解析 [9] などが挙げられ、計算手法の精緻な検証・考察、様々な多相流に関する詳細な流動現象の解明がなされている。

一方で、固気液三相流に関する数値的な研究はほとんど行われていない。固気液三相流は化学処理における反応促進やスラリー輸送・エアリフトポンプや各種分離装置において見られる現象であり、固気液三相流の数値的な取扱いは、相間界面による数値的な不安定・大変形する界面の捕捉・三相間の相互干渉による複雑な物理を伴うことから非常に困難であることが知られている。これまでの三相流解析の多くは二相流計算手法を流用することにより扱われており、気液界面と固体粒子の相互干渉などの詳細な現象は考慮されていない。しかしながら、スラリー溶液内での気泡による固体粒子の巻き上げや固体への微細気泡の付着など、三相流特有の現象を再現するためには、固気液三相間の相互作用を取り扱うことのできる固気液三相流計算手法が必要となる。また、計算系も限られており、これまで行われてきた研究のほとんどは三相流動層に関するものである [10, 11, 12, 13, 14]。そのため、気液界面と固体との干渉などの詳細な現象の再現や適用性の向上などに主眼を置いた研究例は限られており、各相の界面の相互作用を取り扱うことが可能で汎用性の高い固気液三相流計算手法は開発されていないのが現状である。

1.2 多相流に関する数値的手法

本節では、代表的な多相流計算手法の例を示す。多相流に関する数値的な研究はこれまでに広く行われており、多くの多相流計算手法が提案されてきた。それらの手法は基本的には以下の3つへと分類することができる。

- 界面捕捉法
- 界面追跡法
- メッシュフリー法



(a) Interface capturing (b) Interface tracking (c) mesh-free

図 1.2 Numerical methods for multi-phase flow simulation

それぞれの手法の特徴を図 1.2 (a), (b), (c) にまとめる。図 1.2 (a), (b) に示した界面捕捉法及び界面追跡法は有限差分法・有限体積法に基づく手法で界面の表現に用いられ、どちらの手法も計算領域全体に格子の生成を行う。このとき、図に示したとおり、界面追跡法では界面にあわせた格子を作成し界面を再現するのに対し、界面捕捉法では領域に対して固定した格子で界面を表現する。界面追跡法では、界面適合格子を用いることで直接界面形状が再現され、界面上の物理量に対して正確な条件を設定することが可能であるため、界面捕捉法と比べ界面の再現精度が高い。しかし、界面にあわせた格子を生成することから、界面の分裂・合体を含む大変形に対応することが困難であり、また界面変形に伴い計算格子の再生成が必要となる。一方で、界面捕捉法では各格子点に何らかの物理量を与えることで界面が再現される。代表的なものは、相 1 内の格子で 1.0、相 2 内の格子で 0.0 の値をとるような密度関数を設定し、密度関数を移流させる手法である。この手法では格子を界面にあわせて生成する必要がなく、界面の変形で格子が破綻するようなことは起こらない。しかしながら、密度関数のような間接的な関数の移流により界面が取り扱われるため、数値拡散の影響により各相の体積が保存しない、界面がぼやけてしまうなどの問題が報告されている [15]。また、複雑な界面形状に対して界面の曲率・法線ベクトルを正確に算出することが困難であるため、界面の取り扱いに対して特別な注意が必要となる。

上記の 2 手法は Eulerian 的な手法であるのに対し、メッシュフリー法は Lagrangian 的な手法に属する。図 1.2 (c) に示したように、メッシュフリー

法では領域に対して固定された格子を設定するのではなく、流体を微小要素へと分割しそれらの運動により直接界面の追跡を行う。この手法では、格子と異なり計算点同士の相互配置が固定されないため、界面の分裂や合体を取り扱うことが容易であり、また、Lagrangian 的な手法であるため数値拡散の原因となる対流項を扱う必要がない。

各手法の例として、界面捕捉法では VOF (Volume of Fluid) 法 [16]、Level-set 法 [17, 18]、MAC (Marker and Cell) 法 [19]、Phase Field 法 [20]、界面追跡法は ALE (Arbitrary Lagrangian and Eulerian) 法 [21]、メッシュフリー法では MPS (Moving Particle Simulation) 法 [22]、SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法 [23]、DEM (Discrete Element Method) [24] などが挙げられる。代表的な手法の詳細を以下に示す。

1.2.1 VOF 法

VOF 法は Hirt と Nichols により開発された界面捕捉法の一つであり、主に流体-流体の多相流となる気液・気気・液液二相流の取り扱いに用いられる [16]。VOF 法では、格子内で気体と液体の占める体積比 F を定義し、この F に関する移流方程式を解くことで時間変化する界面形状を再現する。気液二相流を例にすると、図 1.3 に示すように液体セルで $F = 1.0$ 、気体セルで $F = 0.0$ と設定すると $F = 0.5$ の位置が気液界面となる。その上で、 F に基づいて以下の式により格子内の物性を決定する。

$$\mu = F\mu_l + (1 - F)\mu_g \quad (1.1)$$

$$\rho = F\rho_l + (1 - F)\rho_g \quad (1.2)$$

ここで、 μ は粘性係数、 ρ は密度であり、添え字 l, g はそれぞれ液体、気体を表す。

前述の通り VOF 法では界面の移動を F の移流によって取り扱う。したがって、移流計算による数値拡散により界面がぼやけてしまい、時間発展に伴い界面の位置を検出することが困難になる、界面の曲率・法線ベクトルの評価精度が下がり表面張力の算出が困難になるなどの問題が報告されている。そのため、移流方程式を高精度に取り扱う必要があるが、オリジナルの VOF 法では Donor-Acceptor 法を用いることで F の移流を扱っている。その他にも、移流方程式に対して CIP (Constrained Interpolation Profile) 法 [25, 26] や TVD

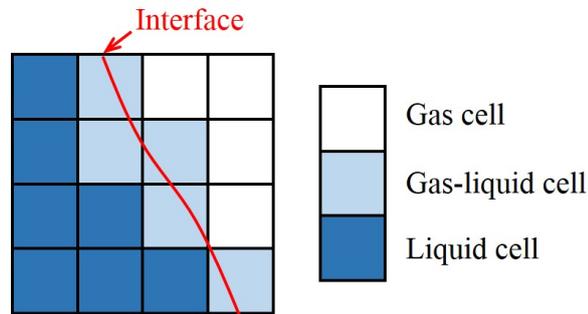


図 1.3 Schematics of VOF method

(Total Variation Diminishing) スキーム [27, 28] を適用することで、計算の安定化・高精度化がなされている [15]。

また、計算のアルゴリズムが単純であり低計算コストであることから現在でも広く用いられ、VOF-FEM カップリングによる波・地盤・構造物の連成解析 [29] や VOF-DEM-FEM カップリングによる潜堤の崩壊過程の解析 [30] など、他手法と VOF 法とのカップリングによる複雑系への適用が多く報告されている。

1.2.2 Level-set 法

Level-set 法は界面捕捉法の一つであり、流体-流体で構成される二相流の解析に用いられる [17, 18]。図 1.4 に示すように、Level-set 法では界面をゼロと設定し、計算領域全域に界面までの垂直距離を現す距離関数 ϕ を配置し界面の変形を表現する。距離関数 $\phi(x, y, z, t)$ は以下の式により定義され、液相内で正、気相内で負の値をとる。

$$\phi(x, y, z, t) = \pm \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2} \quad (1.3)$$

$$\phi(x, y, z, t) \begin{cases} > 0 & \text{(Liquid)} \\ = 0 & \text{(Interface)} \\ < 0 & \text{(Gas)} \end{cases} \quad (1.4)$$

ここで、 x_0, y_0, z_0 は各格子点から界面へと落とした垂線の足の座標を表し、この距離関数を移流させることで界面形状の時間変化を再現する。しかし、この距離関数は移流を重ねるうちに数値拡散などにより特性が保たれなくなるた

め、距離関数の再初期化が必要となる。このとき、体積保存が破綻するため、体積補正の手法が提案されている [31]。

Level-set 法では界面をシャープに保つことが可能で、表面張力の評価が容易であるという特徴を持っており、微小重力下における単一気泡上昇や液体貯蔵タンクからの液体流出の解析 [31]、液滴同士の正面衝突や液面に対する液滴の衝突 [32] などに適用されている。また、本手法は流体解析だけでなく、画像処理の分野においても表面の構築手法として用いられている [33, 34]。

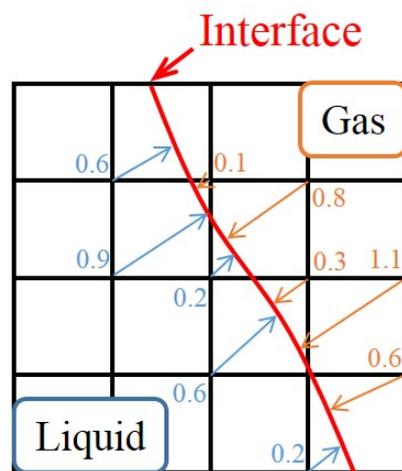


図 1.4 Schematics of level-set method

1.2.3 ALE 法

ALE 法は界面追跡法の一つであり、主に流体-流体系、流体-固体系の多相流解析で用いられる [21]。ALE 法は、Arbitrary Lagrangian and Eulerian の名の通り Lagrangian 法と Eulerian 法を組み合わせた手法である。一般的に Lagrangian 法では移動境界の取り扱いが容易であるが、複雑な流れに対して格子が破綻する問題があり、Eulerian 法では移動境界の取り扱いが困難である。そこで、任意に移動できる参照座標系を用いることで界面付近を Lagrangian 座標系、それ以外を Eulerian 座標系により取り扱う。ある物理量 ϕ の移流方程式を考える場合、任意の格子速度 \mathbf{u}_{grid} を導入することで以下の

式を得る。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \{\phi(\mathbf{u} - \mathbf{u}_{grid})\} = 0 \quad (1.5)$$

ここで、格子が移動しない場合 $\mathbf{u}_{grid} = 0$ となり、式 (1.5) は Eulerian 表記と一致、格子が $\mathbf{u}_{grid} = \mathbf{u}$ で移動する場合、Lagrangian 表記と一致する。この性質から、境界の移動を格子点の移動として表現することで、両座標系を連続的につなぐことができる。しかし、そのためには格子点の移動に伴い、格子が変形してしまうため、適切な格子点の制御が必要となり、格子点の移動や格子の再構成に関して多く研究がなされている [35, 36]。また、界面変形への適用性の高さから、FEM などとの組み合わせによる FSI (Fluid Structure Interaction) 解析が多く報告されている [37, 38]。

1.2.4 MPS 法

MPS 法は越塚らにより開発されたメッシュフリー法の一つであり、気液系における液相の計算に用いられる [22]。MPS 法では、連続体を図 1.2 (c) に示すような球形離散要素 (粒子) の集合とみなし、それぞれの計算粒子の相互作用により流体の運動を再現する。支配方程式の離散化は粒子間相互作用モデルを用いて行われ、次式のように周囲粒子の影響により勾配・ラプラシアン演算子が計算される。

$$\nabla \phi_i = \frac{d}{n^0} \sum_j \frac{\phi_j - \phi_i}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \mathbf{r}_{ij} w_{ij} \quad (1.6)$$

$$\nabla^2 \phi_i = \frac{2d}{\lambda n^0} \sum_j (\phi_j - \phi_i) w_{ij} \quad (1.7)$$

ここで、 ϕ は物理量、 d は次元数、 λ は統計的な分散の増加を解析解と一致させるための係数、添え字 i, j は計算粒子の識別番号を表し、周囲粒子との相互作用の大きさは粒子間距離 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i$ を用いて重み付けされる。

MPS 法では、界面の変形が計算粒子の移動により直接表現されるため、界面の大変形・分裂・合体などへの対応が容易であり、液相から飛び散る飛沫などを詳細に捉えることが可能である。しかし、圧力計算において発生する不自然な振動により計算が不安定になる場合があり、圧力計算アルゴリズムを変更する [39, 40]、ポアソン方程式の定式化を変更する [41, 42]、粒子間相互作用の重み付けを最適化する [43] など様々な工夫がなされている。また、多相流計算

への適用性の高さにより、気液二相流計算による蒸気爆発の解析 [44] や固液二相流解析による津波遡上時の漂流物の運動 [45] などの流体ベースの研究から、弾性体の衝突挙動の動的解析 [46]、マイクロチューブからの液滴射出時の流体-構造連成 [47] など構造ベースの研究まで広い分野の研究報告がなされている。

1.2.5 SPH 法

SPH 法はメッシュフリー法の一つであり、Lucy により宇宙物理学のシミュレーション手法として開発され [48]、流体の解析手法へと拡張された [23]。MPS 法と同様に連続体を計算粒子の集合として扱い流体の再現を行うが、非圧縮性流体の再現に特化した MPS 法に対して、SPH 法では圧縮性流体の取扱いに適している。支配方程式の離散化は MPS 法と同様に周囲粒子との相互作用により計算するが、物理量 $\phi(\mathbf{x})$ は各計算粒子の kernel 関数 $W(\mathbf{x}, h)$ の重ね合わせとして表され、

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_j m_j \frac{\phi_j}{\rho_j} W(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}, h) \quad (1.8)$$

その勾配・ラプラシアンは以下のように計算される。

$$\nabla \phi(\mathbf{x}) = \sum_j m_j \frac{\phi_j}{\rho_j} \nabla W(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}, h) \quad (1.9)$$

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{x}) = \sum_j m_j \frac{\phi_j}{\rho_j} \nabla^2 W(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}, h) \quad (1.10)$$

ここで、 m は質量、 h は kernel 関数の有効半径を表す。また、添え字 j は粒子の識別番号を表し、式 (1.8), (1.9), (1.10) が周囲粒子からの影響の和として表されていることがわかる。

SPH 法の適用例は非圧縮性流体への拡張 [49]、単一上昇気泡の解析 [50] などの流体分野に限らず、熱伝導計算 [51] や固体の衝突問題 [52] や CG 分野 [53] まで多岐にわたっている。

1.2.6 DEM

DEMはCundallらにより開発されたLagrangian的手法に基づく固体粒子追跡法であり[24]、メッシュフリー法に属する。主に粉体や粒状体の解析に広く利用される手法であるが、流体解析手法との組み合わせにより固体-流体系の多相流計算にも用いられている。DEMでは粒子同士の接触を扱うことができるため、一般的な粒子追跡手法と比べ高濃度の粒子流動に対して適応可能である点が大きなメリットである。

DEMでは粉体・粒状体の各粒子を計算点とし、粒子同士の接触力を図1.5に示す通りばね、ダッシュポット、フリクションスライダーの組み合わせとして取り扱う。DEMにおいて固体粒子の運動は並進運動と回転運動で表現され、

$$m\mathbf{a} = \sum \mathbf{F}_C + \mathbf{F}_g \quad (1.11)$$

$$\dot{\boldsymbol{\omega}} = \frac{\mathbf{T}}{I} \quad (1.12)$$

ここで、 m は粒子質量、 \mathbf{a} は粒子の加速度、 \mathbf{F}_C は粒子の接触力、 \mathbf{F}_g は重力、 $\boldsymbol{\omega}$ は角速度、 \mathbf{T} はトルク、 I は慣性モーメントを表す。粒子同士の接触力 \mathbf{F}_C は、前述の通りばね、ダッシュポット、フリクションスライダーの組み合わせとして表現され、法線成分・接線成分でそれぞれ以下のように表される。

$$\mathbf{F}_C = -k\boldsymbol{\delta}_{ij} - \eta\mathbf{v}_{ij} \quad (1.13)$$

ここで、 k はばね定数、 η は粘性減衰係数、 $\boldsymbol{\delta}_{ij}$ 、 \mathbf{v}_{ij} は固体粒子 i, j 間の相対変位及び速度を表す。

DEMは粉体のシミュレーションに広く用いられており、粉体のスクリーン搬送[54]や粉体攪拌器[55]などの産業的な利用もなされている。また、DEMとCFDとの組み合わせであるDEM-CFD法[56]により、固体を含む流れの解析にも用いられており、流動層内シミュレーション[11]や固気液三相流計算手法の開発[57]なども行われている。

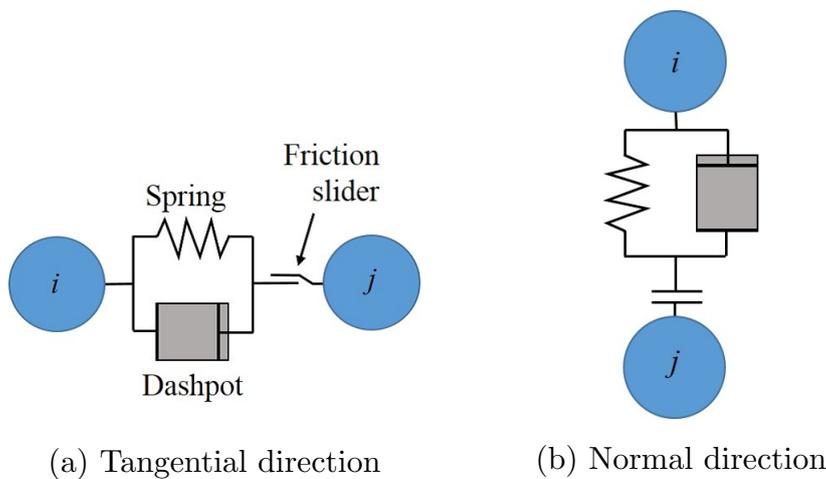


図 1.5 Contact forces in DEM

1.3 固気液三相流に関する過去研究

本節では、数値計算を用いて固気液三相流を取り扱った研究について述べる。先に述べた通り、これまで行われてきた固気液三相流計算手法に関する研究の多くは三相流動層に関する研究であり、DEM もしくは DPM (Discrete Particle Method) と CFD による流体解析のカップリング手法が用いられてきた。

例えば、Zhang ら [10] は液相を Eulerian 的な手法で計算し、固体粒子と気泡を DPM により追跡することで、三相流動層内の固気液三相流 2 次元計算を扱っている。これは、他の三相流動層における研究例と異なり、液相のみを Eulerian 的に、固気相を Lagrangian 的に扱った例である。この手法は固気相のスケールが微小でかつどちらも球形であると仮定できる場合のみ適用することができる。

これに対して、Wen ら [11] は気泡を含む気液相を二流体モデル (TFM)、固体粒子を DEM により扱い、また、Li ら [12, 13] および Zhang ら [14] は VOF 法による気液計算と DPM による固体粒子軌道計算により、三相流動層内の 2 次元計算を行っている。これらの研究で用いられた手法は、各相の計算に用いられた計算手法は異なるものの、気液相を Eulerian 的に、固相を Lagrangian 的に計算する点で共通点を持つ。このような気相を Eulerian 的に

扱う手法では気泡の変形を扱うことが可能であり、気泡がある程度大きく、変形を無視できない場合の解析に用いることができる。また、Annaland ら [58] は Front-Tracing 法による気液相計算と DPM による固体粒子の追跡の組み合わせで、三相流動層内の気泡および固体粒子の挙動を 3 次元的に解析し、気泡後流の流れに巻き込まれる固体粒子の運動を詳細に捉えている。

Iwata ら [59] は DNS (Direct Numerical Simulation) による固気液三相流計算手法を開発した。界面追跡には VOF 法を、固体粒子の計算には CMX (Conservative Momentum Exchange) 法を用いており、固体表面は IB (Immersed Boundary) 法 [60] を用いた取扱いがなされている。数値的テストとして微小固体粒子を多数含む液体内を上昇する単一気泡の固気液三相流シミュレーションを行っているが、計算系は前述の三相流動層内の現象を模擬したものであると考えられる。計算結果からは、上昇する気泡と沈降する粒子により生じる逆行流のパターンと共に、液相を通して気泡と粒子群との強い相互作用が捉えられている。気液界面と粒子との詳細な相互作用については述べられておらず、また、結果の定量的検証はなされていないものの、固体表面に対して IB 法による取扱いがなされているため、固体粒子周りの流れについても高い計算精度が保たれていると考えられる。

ここまで、全て三相流動層もしくはそれに準ずる計算系に対する研究を挙げたが、Sun ら [57] は VOF 法と DEM の組み合わせによる汎用性の高い固気液三相流計算手法を開発し、数値的なテストを行っている。この手法ではこれまでの VOF-DEM 計算に加え、Iwata らと同様に固体表面に IB 法を用いている。数値的なテストとして、液相への固体粒子群の衝突・沈降解析や固体粒子群を含むダム崩壊問題、空気・水・固体粒子群を含む回転ドラム内の挙動解析を行っており、三相流動層内のような液相内に固体粒子と気泡が混在するような系でなく、気液界面に対して固体が干渉する系に対して解析が行われている。固体粒子群の衝突・沈降解析では、気液界面に対する固体粒子の相互作用による複雑な現象に対する解析であり、定量的な検証はないものの、定性的に妥当な挙動と VOF 法により見積もられる気相体積の保存が確認されている。また、固体粒子群を含むダム崩壊問題や空気・水・固体粒子群を含む回転ドラム内の挙動を解析においては、固体粒子と気液界面の大きな干渉はないものの、実験値とのよい一致を得ている。

1.4 本研究の目的

多相流解析において、現在の主流は界面捕捉法、界面追跡法を含む Eulerian 法に基づく格子法であるが、近年、Lagrangian 法に基づき、作動流体を球体要素の集合として離散化を行う粒子法が開発されている [23, 22]。格子法では物理量は計算格子点上に定義され、界面の変形は VOF 法 [16]、Level-set 法 [17, 18]、ALE 法 [21] などの数値モデルを用いて、密度関数や流体充填率のような間接的な変数を介して表現される (1.2 節参照)。また、格子法を用いた解析では固定された座標上で対流を扱う必要があるため、対流項において数値拡散が生じ、特に界面付近における数値拡散の影響に対する対策が必要となる。粒子法は、Lagrangian 的手法であることから、物理量は流れと共に移動する計算点上に定義され、数値拡散の原因となる対流項を扱う必要が無い。また、界面の変形が計算点の移動により直接表現され、界面にあわせた格子の再生成が必要なく、界面変形による制限を受けないという利点を持っている。これらの特徴から、特に自由界面の大変形を含むケースへの適用性が高い。

本研究では、このような粒子法の特徴に着目し、粒子法に基づいた固気液三相流計算手法の開発・検証を行う。流体解析に用いられる粒子法として、MPS 法と SPH 法が代表的であるが、本研究では非圧縮性流体の取り扱いに特化した MPS を採用した。ここで、固気液三相の取り扱いにあたって、全ての相を MPS 法を用いて計算する場合、以下の 2 点が問題となる。

- MPS 法では計算空間内において計算解像度を変更することが困難であり、従来の格子法と比較して計算点の増加に対する計算コストの増加が大きい
- MPS 法では外部流れの取り扱いが困難であり、MPS 法を用いた気相計算は適用性が低い

以上の問題を解決するため、本研究では気相計算を格子法的一种である MAC 法により扱うことを考える。適用性が広く、計算コストの低い MAC 法により気相計算を、界面の取り扱いに特化した MPS 法により固液相計算を行い、両手法間の相互作用を考慮した Two-way カップリングをおこなうことで、低い計算コストと高い界面捕捉性能及び広い適用範囲を併せ持つ計算手法の開

発が可能となる。これにより、本研究では固液相を Lagrangian 的に、気相を Eulerian 的に扱うこととなる。

本研究では固気液三相流計算手法の開発にあたって、以下の 3 ステップを設定した。

1. MPS 法による固気液三相流計算手法の開発
2. MPS 法と MAC 法のカップリングによる気液二相流計算手法の開発
3. MPS 法と MAC 法のカップリングによる固気液三相流計算手法の開発

まず、1. では固気液三相全てを MPS 法を用いて計算する固気液三相流計算手法を行う。次に、2. では 1. の手法から気液計算部分のみを取り出し、気相計算部を MAC 法により代替することで、MPS 法と MAC 法のカップリングによる気液二相流計算手法の開発を行う。最後に、3. で 1. と 2. で開発した手法を組み合わせることで、MPS 法と MAC 法のカップリングによる固気液三相流計算へと拡張する。なお、1. および 3. の手法では固気液各相のカップリングを独立に行うため、液相計算をベースとする気液二相流・固気二相流・固気液三相流計算が可能である。

1.5 本論文の概要と構成

本論文の内容について、その概要と構成を以下に簡単に述べる。

本論文の第 1 章は序論であり、本研究の背景およびその必要性について述べると共に、多相流に関する過去研究を概観し、本研究の意義と目的を明確にした。

第 2 章では、MPS に基づく固気液三相流計算手法と題して、粒子法の一つである MPS 法を用いた多相流計算手法について述べる。ここでは、本論文で提案する計算手法の基礎部分について記載し、併せて、本研究で採用した MPS 法及びそれに伴う各物理モデル・計算手法について述べる。また、本論文で提案する全ての手法の基となることから、MPS 法による気液二相流・固液二相・固気液三相流に関する数値的なテストを行った。検証計算としては、ダム崩壊シミュレーション及び固体粒子の液面衝突シミュレーションを行い、それぞれ他の数値的・実験的研究との比較を行った。

第3章では、MPS - MAC カップリングによる気液二相流計算手法と題して、粒子法である MPS 法と格子法の一つである MAC 法のカップリング手法について述べる。第2章に記載した手法では、固・気・液相の全てを MPS 法によって取り扱うものであるが、粒子法による気相計算は適用性が低く、また、計算コストの面からも全ての相を MPS 法により扱うのは現実的でない。そこで、固気液三相の気相部分を気相計算に対して適用性が高く、計算コストの手ごろな MAC 法により置き換えることで手法自体の適用性向上が期待できる。そこで、第3章では第4章で述べる固気液三相流計算手法の前段階として、MPS 法と MAC 法のカップリングによる二相流計算手法を提案する。ここでは、気相計算手法として採用した MAC 法について述べ、両手法のカップリング手法について詳しく記載する。また、提案した二相流計算手法を用いて、せん断流内の液滴変形シミュレーションを行い、他の数値的実験的研究との比較を行った。

第4章では、MPS 法 - MAC 法カップリングによる固気液三相流計算手法と題して、第2, 3章で述べた手法の組み合わせにより固気液三相流計算手法を提案する。ここでは、特に両手法の組み合わせ方について述べ、固気液三相流計算手法として、固体粒子の液面衝突シミュレーションによる検証を行った。

最後に、第5章にて本研究で得られた成果の総括を行い、さらに今後の課題を述べる。

第 2 章 MPS 法に基づく固気液三相流計算手法

2.1 緒言

前章では代表的な多相流やそれに対する数値計算手法について述べた。それらの多くは Eulerian 的手法に基づく格子法により取り扱われているが、近年産業界において、Lagrangian 的手法に基づき、作動流体を球体要素の集合として離散化を行う粒子法の活用が数多く報告されている [61]。粒子法は、Lagrangian 的手法であることから、数値拡散の原因となる対流項を扱う必要がなく、また、界面の変形が VOF 法における流体充填率のような間接的な変数を介せず、計算点の移動により直接表現され、界面に合わせた格子の生成も必要ないという特徴を持っている。これらの特徴から、粒子法を用いることで、界面の大変形や相間の複雑な物理現象により、これまで数値計算により取り扱うことが困難であった固気液三相流など、多くの多相流に対して適用性の高い手法の開発が可能であると考えられる。

本章では、粒子法的一种である Explicit MPS 法に基づく固気液三相流計算手法について記載する。本手法では、固・気・液相の全てを粒子法に基づき扱い、各相間のカップリングを独立に行うことで、三相の任意の組み合わせによる多相流を扱うことができる。ここでは、気液二相流の検証としてダム崩壊シミュレーションを、固液二相・固気液三相流の検証として固体粒子の液面衝突シミュレーションを行い、手法の妥当性を確認する。

2.2 数値計算手法

本計算手法は Explicit MPS 法 [62] に基づいて各相の計算を行い、気液間カップリング手法 [44, 64] と二流体モデル [65] に基づいて各相間のカップリングを行う。本節では、各相の取り扱い及びそのカップリング法について述べる。

計算手法の開発にあたって、計算の再現性向上を目的とし、表面張力及び接

触角モデル [66]、壁面境界モデル [67] を導入した。また、粒子の分布が過疎となる領域の発生により計算精度が低下する現象を防ぐため、圧力計算において負圧を許容するモデルを開発・導入した。

2.2.1 MPS 法

MPS 法は流体を球形の離散要素に分割して扱う流体解析手法である。支配方程式は以下に示す Navier-Stokes 方程式と連続の式である。

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla P + \nu\nabla^2\mathbf{u} + \mathbf{F} \quad (2.1)$$

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2.2)$$

ここで、 \mathbf{u} は流速、 P は圧力、 ν は動粘性係数、 ρ は密度、 t は時間、 \mathbf{F} は外力を表す。本研究では、外力として重力と表面張力を考慮している。時間進行は Fractional-Step 法 [68] により扱われ、中間的なステップ $*$ を含め、 $k \rightarrow * \rightarrow k+1$ の順で進行する。計算のフローチャートは図 2.1 に示した通りであり、Prediction step と Correction step の二段階で計算が行われる。それに伴って、式 (2.1) の Navier-Stokes 方程式は、圧力勾配項とその他の項の 2 式へと分割される。

$$\left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt}\right)^{press} = -\frac{1}{\rho}\nabla P \quad (2.3)$$

$$\left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt}\right)^{other} = \nu\nabla^2\mathbf{u} + \mathbf{F} \quad (2.4)$$

Prediction step では、式 (2.4) に示したその他の項による影響が計算され、各計算粒子に対して仮の速度 \mathbf{u}^* 及び位置 \mathbf{x}^* が得られる。

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^k + \Delta t \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt}\right)^{other} \quad (2.5)$$

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{x}^k + \Delta t\mathbf{u}^* \quad (2.6)$$

Correction step では、Prediction step で計算した仮の速度 \mathbf{u}^* 及び位置 \mathbf{x}^* に対して圧力勾配項による影響を計算し、式 (2.3) により次ステップの速度

\mathbf{u}^{k+1} 及び位置 \mathbf{x}^{k+1} を計算する。なお、圧力勾配項の計算には中間ステップ * の情報を用いて計算が行われる。

$$\mathbf{u}^{k+1} = \mathbf{u}^* + \Delta t \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} \right)^{press} \quad (2.7)$$

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^* + \Delta t^2 \left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt} \right)^{press} \quad (2.8)$$

この Prediction step 及び Correction step の 2 段階計算により、粒子の速度・位置が計算される。

Semi-implicit MPS 法

本節では Semi-implicit MPS 法 [22] について記述する。本研究では後述の Explicit MPS 法 [62] を用いているが、Explicit MPS 法は Semi-implicit MPS 法の改良型として提案された手法である。

Semi-implicit MPS 法は手法名が示すとおり、半陰解法に基づく MPS 法であり、図 2.1 中の Prediction step に含まれる粘性・外力項を陽的に、Correction step に含まれる圧力勾配項を陰的に計算する。圧力計算においては、以下の手順で得られるポアソン方程式を不完全コレスキー分解付共役勾配法 (Incomplete Cholesky Conjugate Gradient Method : ICCG 法) などによ

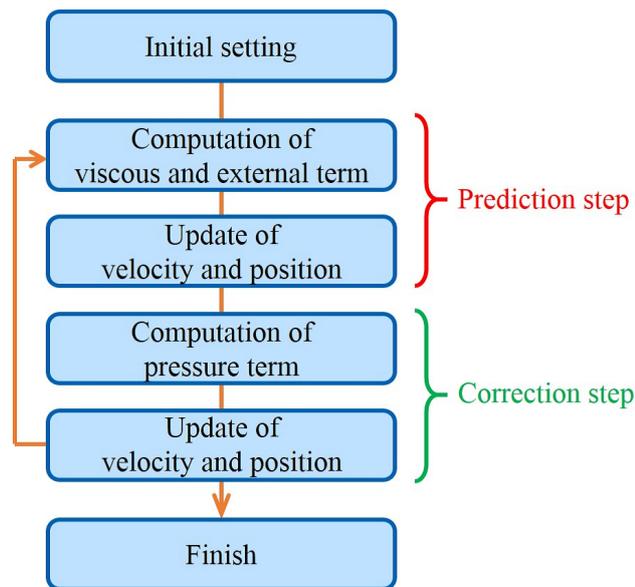


図 2.1 Flowchart of the MPS method

り繰り返し計算することで圧力を求めている。

式 (2.3) より、

$$\frac{\mathbf{u}^{k+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho^0} \nabla P^{k+1} \quad (2.9)$$

ここで、 ρ^0 は定常状態における流体密度を表す。上式両辺の発散を取ること
 で、

$$\frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^{k+1} - \nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho^0} \nabla^2 P^{k+1} \quad (2.10)$$

このとき、 $k + 1$ ステップについて非圧縮状態で式 (2.2) が満たされることを
 考えると、 $\nabla \cdot \mathbf{u}^{k+1} = 0$ となることから、

$$\nabla^2 P^{k+1} = \rho^0 \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^*}{\Delta t} \quad (2.11)$$

ここで、Prediction step ~ Correction step の間については必ずしも非圧縮条
 件が満たされないため連続の式は以下のように変形できる。

$$\frac{\rho^* - \rho^0}{\Delta t} + \rho^0 \nabla \cdot \mathbf{u}^* = 0 \quad (2.12)$$

式 (2.11), (2.12) より、

$$\nabla^2 P^{k+1} = -\frac{\rho^0}{\Delta t^2} \frac{\rho^* - \rho^0}{\rho^0} \quad (2.13)$$

となり、ポアソン方程式が得られた。ここでは、最も一般的なポアソン方程式
 について示したが、式 (2.13) を用いて計算を行った場合、非物理的な振動が
 発生するという報告があり、ポアソン方程式に追加項を加えることなどにより
 計算の安定化を図る手法が多く提案されている [41, 42]。

Explicit MPS 法

本手法では、全ての相を Explicit MPS 法 [62] を用いて計算する。本節で
 は、Explicit MPS 法の基礎についてまとめる。

Explicit MPS 法は一般的な Semi-implicit MPS 法とは異なり、微小な圧縮
 性を許容することで、圧力を密度の関数として陽的に計算する。これにより、
 Semi-implicit MPS 法計算コストの大部分を占めていた ICCG 法等による
 圧力の反復計算が必要なくなり、計算コストの大幅な削減が可能となる [69]。

圧力計算においては、微小な圧縮性を考慮することで、次式のように圧力を評価する。

$$\frac{DP}{D\rho} = c^2 \quad (2.14)$$

ここで、 c は音速を表す。水中における音速は約 1500 m/s であるが、Explicit MPS 法では任意に音速を設定することで、計算速度を大きく改善できることが報告されている [69]。式 (2.14) において、基準となる圧力を 0 と設定することで、以下のように圧力を求めることができる。

$$P = c^2 (\rho - \rho^0) \quad (2.15)$$

このとき、非圧縮条件下において、流体の密度 ρ は定常状態における密度 ρ^0 と等しくなる。このように、微小な圧縮性について、圧力を密度の関数として取り扱う手法は広く用いられている [48, 70]。

以下、計算手法については基本的に Explicit MPS 法を用いて計算を行うものとして記述する。

2.2.2 離散化手法

次に、前述の支配方程式に対する離散化手法について記述する。Lagrangian に基づく手法では、Eulerian ベースの手法と異なり、計算点が移動すると共に周囲に存在する計算点との位置関係が変化するため、任意の計算点における勾配・ラプラシアン計算に工夫が必要となる。MPS 法では、勾配・ラプラシアンにモデルを用いることで、支配方程式の離散化を行っている。本研究で用いた勾配・ラプラシアンモデルを以下に示す。

$$\nabla\phi_i = \frac{d}{n^0} \sum_j \frac{\phi_j - \phi_i}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \mathbf{r}_{ij} w_{ij} \quad (2.16)$$

$$\nabla^2\phi_i = \frac{2d}{\lambda n^0} \sum_j (\phi_j - \phi_i) w_{ij} \quad (2.17)$$

ここで、 ϕ は物理量、 d は次元数、添え字 i, j は計算粒子の識別番号を表す。本モデルにおいて、勾配・ラプラシアンは計算粒子同士の相互作用に基づいて計算され、それぞれの粒子間距離 $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i$ を用いて重み付けされる。 n^0 は初期状態における粒子数密度を表し、粒子 i 周りの粒子数密度 n_i は以下の

式で定義される。

$$n_i = \sum_j w_{ij} \quad (2.18)$$

初期粒子数密度 n^0 は、初期粒子配置において式 (2.18) により計算した粒子数密度であり、計算中常に同じ値を用いる。係数 λ は統計的な分散の増加を解析解と一致させるための係数であり、初期粒子配置について、以下の式により求められる。

$$\lambda = \frac{\sum_j |\mathbf{r}_{ij}|^2 w_{ij}}{\sum_j w_{ij}} \quad (2.19)$$

ここで、 w_{ij} は重み関数であり、代表的なものを以下に示す。

$$w_{ij} = \begin{cases} \frac{r_e}{|\mathbf{r}_{ij}|} - 1 & |\mathbf{r}_{ij}| < r_e \\ 0 & |\mathbf{r}_{ij}| \geq r_e \end{cases} \quad (2.20)$$

ここで、 r_e は影響半径を表し、計算コスト削減のため、粒子間距離が影響半径を越えた粒子同士は相互作用しないものとして扱う。影響半径は小さく設定するほど相互作用する粒子数が減少するため、計算コストが下がり、計算の安定性が低下する。本研究では、全ての計算について粒子間距離の 2.1 倍としているが、一般的に粒子間距離の 2~4 倍が計算時間と安定性のバランスがよいとされている [22]。

計算安定化などを目的に多くの重み関数が提案されているが [71, 72]、本研究においては特に Explicit MPS 法において用いられる以下の重み関数 [69] を採用した。

$$w_{ij} = \begin{cases} \frac{r_e}{|\mathbf{r}_{ij}|} + \frac{|\mathbf{r}_{ij}|}{r_e} - 2 & |\mathbf{r}_{ij}| < r_e \\ 0 & |\mathbf{r}_{ij}| \geq r_e \end{cases} \quad (2.21)$$

$$w_{ij}^{grad} = \begin{cases} \frac{r_e}{|\mathbf{r}_{ij}|} - \frac{|\mathbf{r}_{ij}|}{r_e} & |\mathbf{r}_{ij}| < r_e \\ 0 & |\mathbf{r}_{ij}| \geq r_e \end{cases} \quad (2.22)$$

ここで、 w_{ij}^{grad} は圧力勾配項計算用の重み関数であり、計算安定化のためその他の項とは異なる関数を用いている。図 2.2 に、一般的な重み関数である式 (2.20) と本研究で用いた重み関数である式 (2.21), (2.22) を比較し、グラフに示す。図から、一般的な重み関数と比較して、式 (2.21) は粒子間距離の小さ

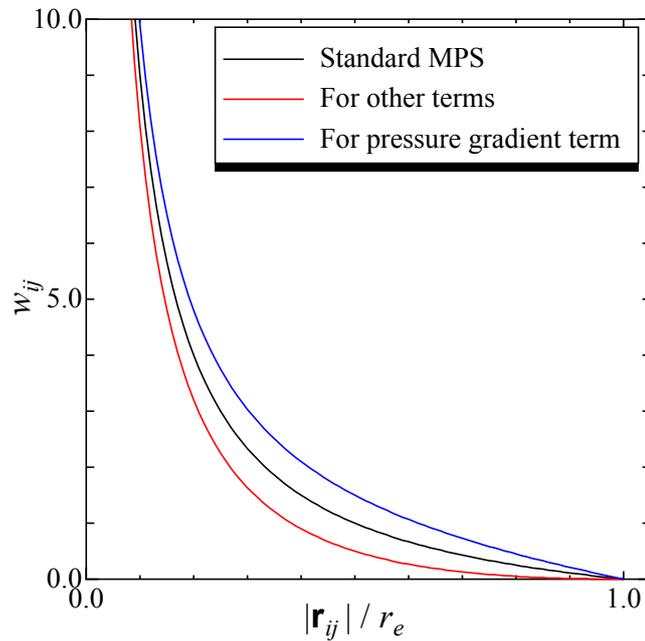


図 2.2 Comparison of weight functions

な領域とより大きな相互作用を、式 (2.22) は比較的粒子間距離の大きな粒子まで広く相互作用することが確認できる。

2.2.3 時間刻みの制限

数値計算では計算安定性のため、時間刻み Δt に制限が生じる。非圧縮流れのシミュレーションにおいては、一般的に対流項に対する制限が支配的であることが知られている。本手法で採用した Explicit MPS 法では、微小な圧縮性を許容するため、対流項に対する Courant 数 C は以下の式により表される。

$$C = \frac{(u_{max} + c) \Delta t}{l_0} \quad (2.23)$$

ここで、 u_{max} は粒子の最大速度、 c は音速、 l_0 は初期粒子間距離である。半陰解法的なアプローチである Semi-implicit MPS 法を用いる場合、Courant 数は 0.2 に設定するのが一般的であるが、陽的アルゴリズムとなる Explicit MPS 法ではこの設定が最適ではないとの報告がなされている [70]。そこで、Explicit MPS 法では Courant 数を以下のように、音速および流速について

別々に設定する。

$$C_{sound} = \frac{c\Delta t}{l_0} \quad (2.24)$$

$$C_{flow} = \frac{u_{max}\Delta t}{l_0} \quad (2.25)$$

このときの、音速及び流速に対する安定条件は以下のとおりである [62]。

$$C_{sound} < 1.0 \quad (2.26)$$

$$C_{flow} < 0.2 \quad (2.27)$$

なお、式 (2.26), (2.27) の関係から、

$$c = 5u_{max} \quad (2.28)$$

と設定することにより、安定条件は式 (2.27) のみとなり、Semi-MPS method による安定条件と一致する。このときのマッハ数は 0.2 であり、一般的な非圧縮性とみなすための判定値となっているマッハ数 0.3 より小さいことから、非圧縮性流体の取り扱いに関しても条件を満たすこととなる。

本研究においては、音速を任意に設定し、式 (2.26), (2.27) の両式を満たすよう時間刻みを決定している。

2.2.4 壁面境界モデル

粒子法において、壁面は一般的に壁面粒子を壁内に配置することで表現される。しかしながら、壁面粒子を用いた場合、シミュレーションに先立って壁面粒子を配置するプリプロセスが必要であり、流体表現には寄与しない大量の壁面粒子により計算コストが増大してしまう。また、壁面を粒子を用いて表現する影響で完全な平面を扱うことができず、壁面の最低厚さが影響半径により制限されてしまうという問題がある。そこで、原田ら [73] により、SPH 法において壁面からの距離関数を用いることで壁面粒子を配置することなく壁面を取り扱う壁面境界モデルが開発され、MPS 法へと適用された [67]。この手法は、壁面をポリゴンとして扱う CAD/CAE システムとの相性が非常によく、ミラー粒子を用いた各種境界条件の設定 [74] や壁面の大変形への対応 [75]、距離関数を用いない壁面境界の取り扱い [76] など様々な拡張がなされている。

本研究では、原田ら [67] により提案された手法を用いている。この手法では、粒子数密度・圧力勾配項・粘性項の計算における各粒子への影響を流体と

壁面からの寄与に分け、壁面からの影響分を壁面からの距離によりモデル化する。ここでは、それぞれの計算法を順に記述する。

MPS 法において粒子 i の粒子数密度 n_i は、式 (2.18) により周囲粒子からの影響の総和として計算される。そのため、粒子 i の影響半径内に壁面粒子が存在する場合、粒子数密度 n_i は周囲の流体粒子からの影響と壁面粒子からの影響に分けることができる。粒子 i の粒子数密度 n_i は以下のように、流体及び壁面からの寄与分に分割される。

$$\begin{aligned}
 n_i &= \sum w_{ij} \\
 &= \sum_{j \in fluid} w_{ij} + \sum_{j \in wall} w_{ij} \\
 &= \sum_{j \in fluid} w_{ij} + Z_i
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

ここで、壁面からの寄与分を壁重み関数 $Z_i = \sum_{j \in wall} w_{ij}$ とよぶ。壁面重み関数 Z_i は壁面から一定の距離ごとに前もって計算を行い、粒子 i から壁面までの距離を用いた補間計算により決定する。例として、圧力勾配計算に用いる壁重み関数、式 (2.22) と初期粒子間距離により無次元化した壁面からの距離

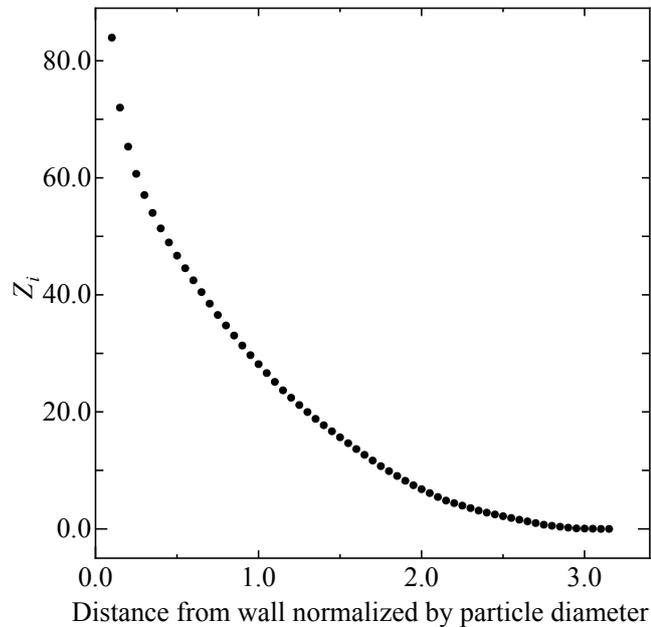


図 2.3 Profile of wall weight function

の関係を図 2.3 に示す。

次に、粒子数密度と同様、圧力勾配項・粘性項についても、それぞれ項を流体と壁面からの影響分に分割する。

$$\nabla P = (\nabla P)_{fluid} + (\nabla P)_{wall} \quad (2.30)$$

$$\nabla^2 \mathbf{u} = (\nabla^2 \mathbf{u})_{fluid} + (\nabla^2 \mathbf{u})_{wall} \quad (2.31)$$

それぞれ式 (2.16), (2.17) を用いて変形し、

$$\begin{aligned} \nabla P_i &= \frac{d}{n^0} \sum_{j \in fluid} \frac{P_j + P_i}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \mathbf{r}_{ij} w_{ij} \\ &+ \frac{d}{n^0} \frac{P_i}{|\mathbf{r}_{wall,i}|^2} \mathbf{r}_{wall,i} Z_i \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\begin{aligned} \nabla^2 \mathbf{u}_i &= \frac{2d}{\lambda n^0} \sum_{j \in fluid} (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) w_{ij} \\ &+ \frac{2d}{\lambda n^0} (\mathbf{u}_{wall} - \mathbf{u}_i) Z_i \end{aligned} \quad (2.33)$$

ここで、 $\mathbf{r}_{wall,i}$ は粒子 i から最も近い壁面までの距離を、 \mathbf{u}_{wall} は壁面の速度を表す。本手法を用いることで、壁面に粒子を配置することなく壁面を扱うことが可能となり、大幅な計算コストの削減が期待できる。

これまで述べた手法では、壁面が平面である場合しか取り扱うことができない。そこで、以下の手順により曲率を持つ壁面を表現する。まず、粒子 i 付近において最も近い壁面までの距離を計算し、以下の式を用いて粒子近傍における局所的な平均曲率 κ_{cur} および壁面角度 θ_{cur} を計算する。

$$\kappa_{cur} = \frac{1}{2} \nabla^2 D_{wall}(\mathbf{x}) \quad (2.34)$$

$$\theta_{cur} = 2 \arccos\left(\frac{\kappa_{cur}}{2}\right) \quad (2.35)$$

ここで、 $D_{wall}(\mathbf{x})$ は壁面からの距離関数を表す。最後に壁面角度 θ を用いて、曲率を考慮した壁重み関数 $Z_{cur,i}$ を計算する。

$$Z_{cur,i} = \frac{\theta_{cur}}{\pi} Z_i \quad (2.36)$$

このとき、壁面が曲率を持たない、つまり $\theta_{cur} = 0$ のとき、 $Z_{cur,i}$ は曲率を考慮しない壁重み関数 Z_i と一致する。この手法では大きな壁面角度を扱うことは困難であるが、大きな壁面角度など複雑な形状に対する拡張の報告がなされている [77]。

2.2.5 負圧計算モデル

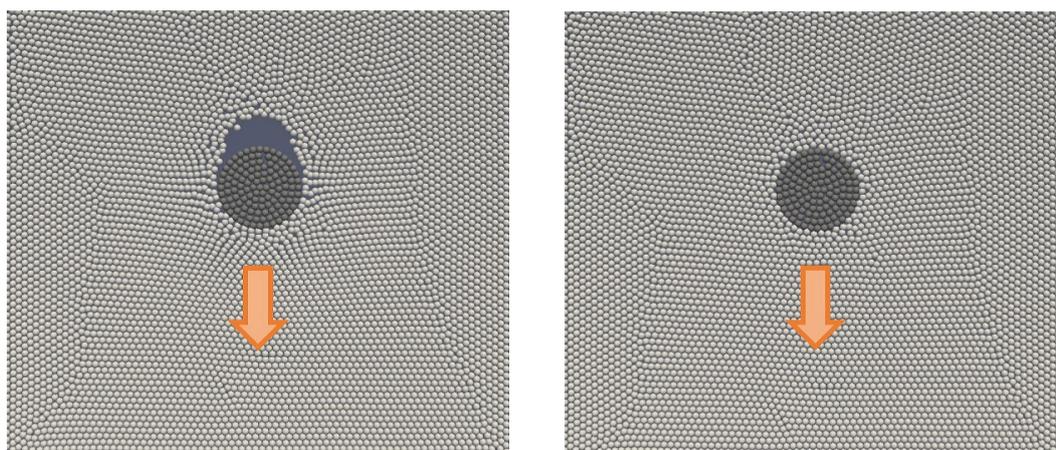
Explicit MPS 法において、圧力は式 (2.15) を用いて計算される。流体密度 ρ は粒子数密度 n と比例することから、式 (2.15) は以下のように変形できる。

$$\begin{aligned} P &= c^2 (\rho - \rho^0) \\ &= c^2 \frac{\rho^0}{n^0} (n - n^0) \end{aligned} \quad (2.37)$$

式 (2.37) から、粒子数密度が初期粒子数密度より小さい場合、圧力が負の値をとることとなるが、Explicit MPS 法では一般的に負圧をゼロに補正して計算を行っている [62]。これは、ゼロ補正なしに式 (2.15) で圧力計算を行った場合、自由界面付近の粒子が全て負圧となり、計算が発散してしまうためである。

しかしながら、隣接する壁面・固体粒子と流体粒子の速度差が大きくなる計算において、上記のゼロ補正を用いて圧力計算を行った場合、流体粒子が正しく壁面・固体に追従しない現象が発生する。ここでは、流体中を高速で運動する固体を含む計算において、固体後流において流体粒子が正しく固体に追従しない現象を例に示す (図 2.4 (a))。

図中の白色・灰色粒子はそれぞれ液相・固相粒子を表し、固相粒子の集合として表現される固体球が鉛直下向きへと運動する様子を示している。固体後流



(a) Without the model

(b) With the model

図 2.4 Influence of negative pressure model

で負圧が発生しないため流体粒子が固体に追従せず、非物理的に計算粒子が過疎となる領域が生じている。過疎領域の非物理性に加え、各粒子が計算点となる粒子法では、粒子の過疎領域がそのまま計算精度の低下へとつながる。

柴田ら [63] は Semi-implicit MPS 法において、圧力ポアソン方程式の修正および調整パラメータの導入により負圧を取り扱う手法を開発している。しかし、この手法は本研究で用いている Explicit MPS 法には適用できない。そのため、ここでは自由界面において負圧が発生すべきでない粒子の判定を行い、判定された粒子以外で負圧計算を許容することで Explicit MPS 法にも適用可能な負圧計算手法を開発する。本判定手法は 2 つの判定法の組み合わせにより、負圧許容粒子の判定を行う。以下に各々の判定条件を示す。

$$\alpha > \frac{1}{l_0 N} \sqrt{\left(\sum x_j - x_i\right)^2 + \left(\sum y_j - y_i\right)^2 + \left(\sum z_j - z_i\right)^2} \quad (2.38)$$

$$\beta < \frac{n_i}{n^0} \quad (2.39)$$

ここで、 α, β はモデル定数、 N は周囲粒子の総数である。式 (2.38) は粒子 i 周りの粒子の存在分布を表し、式中左辺の値が大きくなるほど周囲粒子の分布が偏っていることとなり、界面付近の粒子であることとなる。しかし、本式では粒子の分布が均一であれば粒子の粗密に関係なく判定がなされるため、界面粒子の判定に漏れが生じる可能性がある。式 (2.39) は粒子数密度の大小による判定であり、初期粒子数密度に対する粒子数密度の比率により界面の判定を行う。本式は MPS 法における界面判定に広く用いられている手法であり、一般的に $0.8 < \alpha < 0.97$ の値が採用されている [22]。

本手法では上記の 2 式を同時に満たす粒子に対して負圧計算を許容することで、自由界面に負圧を生じることなく、壁面・固体付近において非物理的な粒子過疎領域の発生を抑制する。図 2.4 (a) と同様の条件において、本モデルを用いることにより、図 2.4 (b) のように粒子過疎領域の抑制が確認されている。

2.2.6 表面張力モデルおよび接触角モデル

格子法に基づく多相流計算においては、CSF (Continuum Surface Force) モデル [78] を用いて表面張力を考慮することが一般的であり、MPS 法についても CSF モデルを用いた表面張力計算が報告されている [79, 80]。

表面張力項を含めた非圧縮性流体の Navier-Stokes 方程式は以下のように

なる。

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla P + \nu\nabla^2\mathbf{u} + \sigma\kappa\mathbf{n}\delta \quad (2.40)$$

ここで、右辺第 3 項が表面張力項であり、 σ が表面張力係数、 κ は界面曲率、 \mathbf{n} は界面の法線ベクトル、 δ はデルタ関数を表す。CSF モデルを用いて表面張力項を計算するためには、まず粒子配置から界面を検出し、界面曲率 κ 及び界面の法線ベクトル \mathbf{n} を計算する必要がある。しかしながら、MPS 法においては、界面の法線及び曲率の計算が煩雑であるという問題がある。

そこで、本研究では表面張力を粒子間ポテンシャル力としてモデル化するポテンシャルモデル [81, 66] を採用した。本研究では、粒子間に導入するポテンシャルとして以下の式を定義する。

$$P_{sf,ij}(|\mathbf{r}_{ij}|) = C_{sf}p_{sf,ij}(|\mathbf{r}_{ij}|) \quad (2.41)$$

$$p_{sf,ij}(|\mathbf{r}_{ij}|) = \frac{1}{3} \left(|\mathbf{r}_{ij}| - \frac{3}{2}l_0 + \frac{1}{2}r_e \right) (|\mathbf{r}_{ij}| - r_e)^2 \quad (2.42)$$

ここで、 $P_{sf,ij}$ は粒子 i, j 間のポテンシャルを、 $p_{sf,ij}$ 及び C_{sf} はポテンシャルの形状及び強度を表す。本研究では表面張力に関する影響半径は $r_e = 3.1l_0$ として設定している。

粒子間ポテンシャル力 $\mathbf{F}_{pot,i}$ はポテンシャルの微分形として得られる。

$$\mathbf{F}_{pot,i} = \sum_j^N \frac{\partial P_{sf,ij}}{\partial |\mathbf{r}_{ij}|} \frac{\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|} \quad (2.43)$$

$$= C_{sf} \sum_j^N (|\mathbf{r}_{ij}| - l_0) (|\mathbf{r}_{ij}| - r_e) \quad (2.44)$$

ここで、係数 C_{sf} を決定する必要があるが、本研究では近藤らの手法 [66] を採用した。表面張力係数 σ は表面の単位面積に蓄えられるエネルギーを表すことから、図 2.5 に示した A 粒子群を B 粒子群から引き離し、 $l_0 \times l_0$ の表面を作るのに必要となるエネルギーは以下のようになることを利用する。

$$2\sigma l_0^2 = \sum_{i \in A, j \in B} P_{sf,ij}(r_{ij}) \quad (2.45)$$

上式と式 (2.41), (2.42) を用いて C_{sf} を決定し、式 (2.44) により表面張力を求める。

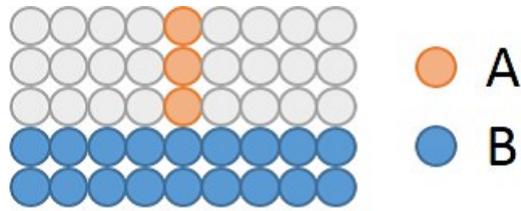


図 2.5 Image of surface energy estimation

続いて接触角モデルについて述べる。液体 - 液体及び液体 - 固体を引き剥がして面積 S の界面を形成するのに必要なエネルギー $E_{sf,ll}$, $E_{sf,ls}$ を考える。

$$E_{sf,ll} = 2\sigma_l S \quad (2.46)$$

$$E_{sf,ls} = (\sigma_l + \sigma_s - \sigma_{ls}) S \quad (2.47)$$

ここで、 σ_s は固体の表面エネルギー、 σ_{ls} は固液間の界面エネルギー、 σ_l は液体の表面エネルギーを表す。Young の式より、表面張力と接触角 (図 2.6) の関係は次式のように表される。

$$\sigma_s = \sigma_{ls} + \sigma_l \cos\theta \quad (2.48)$$

ここで、 θ は接触角を表す。ここから、液体 - 液体、液体 - 固体を引き剥がすのに必要となるエネルギーの比は次のようになる。

$$\frac{E_{sf,ls}}{E_{sf,ll}} = \frac{1}{2} (1 + \cos\theta) \quad (2.49)$$

ここで、エネルギーとポテンシャル係数 C_{sf} の間に比例関係があることから、次式が得られる。

$$\frac{C_{sf,ls}}{C_{sf,ll}} = \frac{1}{2} (1 + \cos\theta) \quad (2.50)$$

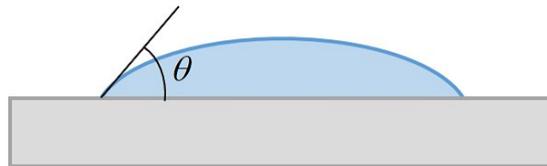


図 2.6 Definition of contact angle of the droplet on flat surface

式 (2.50) の $C_{sf,ll}$ はポテンシャルモデルを用いて計算する C_{sf} と同義であることから、式 (2.44) でポテンシャル力を求める際に、粒子 j が液相粒子の場合と固相 (壁面) 粒子の場合で $C_{sf,ll}$ と $C_{sf,ls}$ を切り替えることで、壁面と流体からの受けるポテンシャル力に重み付けを行い、接触角を表現する。

2.2.7 各相間のカップリング手法

本節では固気液三相間のカップリング手法について述べる。本手法では、固相・液相間のカップリングを二流体モデルにより、気相・固液相のカップリングを池田らによる手法 [44] により扱う。計算を安定的に行うため、2.2.1 節に記載した Prediction step (式 (2.5) および式 (2.6)) と Correction step (式 (2.7) および式 (2.8)) の 2 段階による計算手順をさらに、4 つのステップへと分割する。計算のフローチャートを図 2.7 に示す。

まず、第 1 ステップでは、固・気・液相全ての計算粒子について、式 (2.5) と式 (2.6) により粒子速度及び位置を更新し、Prediction step の計算を行う。このとき、全ての相の粒子は、その密度・動粘性係数を除いて同様に計算される。Prediction step において、粘性項・表面張力項・外力項が計算されるが、これらの計算については、界面付近に物性値のジャンプが存在しても問題なく取り扱うことができる。また、本手法は二流体モデルに基づいた手法であり、固相粒子についても、気液相粒子と同様に粘性項の計算がなされるため、固相内の動粘性係数を推算する必要があるが、2.2.8 節に記載する後藤らによるモデル [82] を用いて固相内の動粘性係数を決定する。

第 2 ステップでは、固・液相粒子に対して Correction step の計算を行う。まず、式 (2.15) により、固・液相粒子の $k+1$ ステップの圧力 P_s^{k+1} , P_l^{k+1} の計算を行う。このとき、気相粒子の存在は無視して計算を行うが、固気および気液界面上の固液相粒子に対して、隣接する気相粒子圧力 P_g^k を考慮して圧力勾配を計算する。ここで、上付文字は時間進行を表しており、Prediction step により計算される仮の位置・速度を持つ時間ステップ $*$ を含め、 $k \rightarrow * \rightarrow k+1$ の順に時間進行する。また、下付文字 s, l, g はそれぞれ固、液、気相を表している。固液相について圧力が計算された後に、以下の式により固液相粒子の速

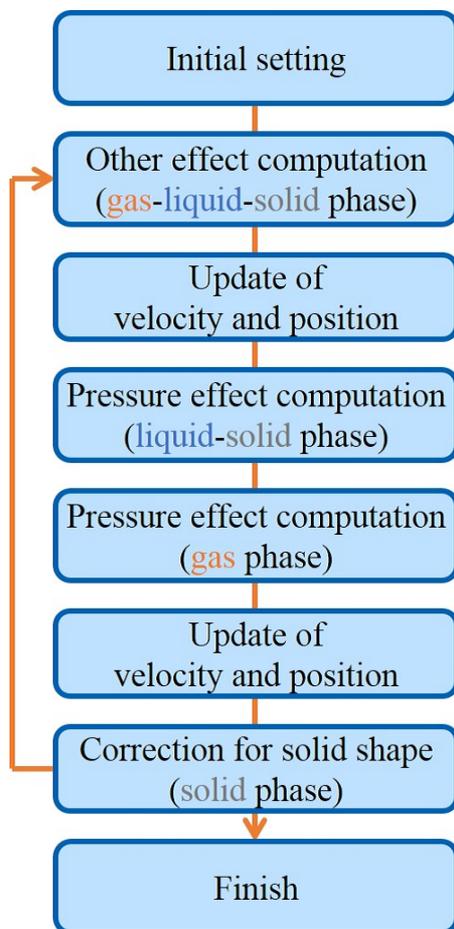


図 2.7 Flowchart of three-phase simulation

度位置更新を行う。

$$\mathbf{u}_s^{k+1} = \mathbf{u}_s^* + \Delta t \left(\frac{D\mathbf{u}_s}{Dt} \right)^{press} \quad (2.51)$$

$$\mathbf{x}_s^{k+1} = \mathbf{x}_s^* + \Delta t^2 \left(\frac{D\mathbf{u}_s}{Dt} \right)^{press} \quad (2.52)$$

$$\mathbf{u}_l^{k+1} = \mathbf{u}_l^* + \Delta t \left(\frac{D\mathbf{u}_l}{Dt} \right)^{press} \quad (2.53)$$

$$\mathbf{x}_l^{k+1} = \mathbf{x}_l^* + \Delta t^2 \left(\frac{D\mathbf{u}_l}{Dt} \right)^{press} \quad (2.54)$$

ここで、上式の右辺第二項に表れる Navier-Stokes 方程式の圧力勾配項部分は式 (2.3) に示す圧力勾配を式 (2.16) の勾配モデルを用いて計算する。一般に圧

力勾配の計算は以下のように行われる。

$$\nabla P = \frac{d}{n^0} \sum_j \frac{P_j - P_i}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \mathbf{r}_{ij} w_{ij} \quad (2.55)$$

上式より、圧力勾配は周囲粒子からの影響の総和として計算されるため、気液相からの影響を分離することができる。

$$\begin{aligned} \nabla P &= \frac{d}{n^0} \left\{ \sum_{j \in l} \frac{P_j - P_i}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \mathbf{r}_{ij} w_{ij} + \sum_{j \in g} \frac{P_j - P_i}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \mathbf{r}_{ij} w_{ij} \right\} \quad (2.56) \\ &= \nabla P_l + \nabla P_g \quad (2.57) \end{aligned}$$

ここで、液相の圧力計算は気相より先立って行われるため、気相から液相への影響は 1 step 前の気相情報を境界条件として与えることで考慮される。

$$\nabla P^{k+1} = \nabla P_l^{k+1} + \nabla P_g^k \quad (2.58)$$

次に、第 3 ステップでは、気相粒子の Correction 計算を行う。固液相と同様に式 (2.15) により気相粒子の圧力 P_g^{k+1} を計算するが、その際、固液相粒子は壁面粒子として扱う。Explicit MPS 法における圧力計算は式 (2.15) により行うが、流体密度 ρ は粒子数密度 n と比例関係にあることから、以下の式が得られる。

$$\begin{aligned} P &= c^2 (\rho - \rho^0) \\ &= c^2 \frac{\rho^0}{n^0} (n - n^0) \quad (2.59) \end{aligned}$$

ここで、式 (2.18) の通り、粒子数密度 n は周囲粒子からの影響の総和として計算される。そのため、気相粒子と固液相 (壁面) 粒子からの影響を分離することができる。

$$n = n_{sl} + n_g \quad (2.60)$$

よって圧力計算は次式により与えられる。

$$P_g = c^2 \frac{\rho^0}{n^0} (n_{sl} + n_g - n^0) \quad (2.61)$$

上式より、固液相から気相への圧力の影響は固液相の粒子数密度 n_{sl} を介して考慮される。 $k + 1$ ステップにおける気相粒子の速度 \mathbf{u}_g^{k+1} 及び位置 \mathbf{x}_g^{k+1} は

以下の式により更新される。

$$\mathbf{u}_g^{k+1} = \mathbf{u}_g^* + \Delta t \left(\frac{D\mathbf{u}_g}{Dt} \right)^{press} \quad (2.62)$$

$$\mathbf{x}_g^{k+1} = \mathbf{x}_g^* + \Delta t^2 \left(\frac{D\mathbf{u}_g}{Dt} \right)^{press} \quad (2.63)$$

一般的に気液二相流計算を行う際、気液界面における密度ジャンプにより圧力勾配が非常に大きくなり数値的な不安定が生じるため、相間の取り扱いには特別な手法が必要となる。MPS法においても気液相の密度比が10を超える場合、数値的な不安定が発生ことが報告されている [83]。この不安定は支配方程式である式 (2.1) に含まれる圧力勾配項 $(-\frac{1}{\rho}\nabla P)$ が密度の逆数に比例することから、気液界面における密度ジャンプにより密度の小さな気相粒子が発散してしまうことに起因している。そのため、池田らの手法 [44] は、密度の大きな相から密度の小さな相の順に計算を行い、気液相の圧力を別々に扱うことで計算不安定を回避した。池田らは気相から液相への影響を気液界面上の液相粒子に気相粒子の圧力をディリクレ境界条件として与えることで考慮しているが、本研究では式 (2.58) のように気相による圧力勾配を受け渡すことで取り扱っている。

最後に、第4ステップとして、固相粒子の位置 \mathbf{x}_s^{k+1} 及び速度 \mathbf{u}_s^{k+1} の修正を行う。第1, 2ステップにおいて固相粒子は液相粒子と同様に計算が行われるため、固相粒子が構成する固体の形状が保存されない。図 2.8 (a), (b), (c) に本計算手法における固体形状の変化を例示する。図 2.8 (a) は第1ステップ計算前の状態であり、固体は長方形形状である。その後、図 2.8 (b) では第1,

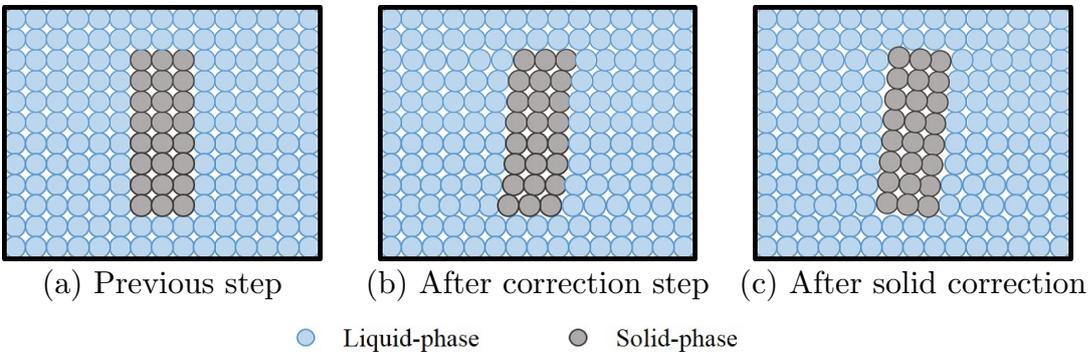


図 2.8 Schematics of correction process for solid-phase particles

2ステップで固相粒子に対して Prediction, Correction step の計算がなされ、固体の形状は周囲の流体と共に変形する。よって、図 2.8 (c) のように、固体の形状が保存されるよう固相粒子に対して補正を行う。補正手法に関しては、2.2.8 節において述べるものとする。

2.2.8 固相粒子の取り扱い

本研究では、固液相計算に関して二流体モデル [65] に基づいた取り扱いを行う。そのため、固相に関しても式 (2.1) の Navier-Stokes 方程式を解くこととなり、固相内の動粘性係数を定義する必要がある。そこで、固相粒子については、液相との密度比及び影響半径内の濃度比から、動粘性係数を見積もるモデル [82] を採用している。

$$\nu_{si} = \frac{\nu_f}{\sqrt{1 + \frac{\rho_s}{\rho_f} C_{s,i}}} \quad (2.64)$$

ここで、 ρ_s および ρ_f はそれぞれ固・液相の密度、 ν_f は液相の動粘性係数、 ν_{si} は固相に属する粒子 i の動粘性係数である。 $C_{s,i}$ は影響半径内の固相粒子の濃度を表し、固液相の重み関数の和として、以下の式により計算される。

$$C_{s,i} = \frac{\sum \delta_{sj} w_{ij}}{\sum \delta_{sj} w_{ij} + \sum (1 - \delta_{sj}) w_{ij}} \quad (2.65)$$

ここで、 δ_{sj} は粒子 j の相情報により決定する係数であり、以下のように設定する。

$$\delta_{sj} = \begin{cases} 0 & (\text{liquid particle}) \\ 1 & (\text{solid particle}) \end{cases} \quad (2.66)$$

本計算手法は、二流体モデルに基づき、固相粒子についても、一度流体相粒子として速度・位置を計算した後に、固体の形状を保つための速度・位置修正を行う。ここでは、後藤ら [84] 及び五十里ら [85] により提案された手法を用いて、固体の運動を重心の並進移動と重心周りの回転に分割して考える。まず、固体の並進移動について、時刻 t 及び時刻 $t + \Delta t$ における固体の重心位置 $x_g(t), x_g(t + \Delta t)$ は、以下のように計算できる。

$$\mathbf{x}_g(t) = \frac{1}{N_k} \sum \mathbf{x}_i(t) \quad (2.67)$$

$$\mathbf{x}_g(t + \Delta t) = \frac{1}{N_k} \sum \mathbf{x}_i(t + \Delta t) \quad (2.68)$$

ここで、 N_k は固体を構成する固相粒子の数であり、固体の並進移動は $\mathbf{x}_g(t + \Delta t) - \mathbf{x}_g(t)$ として表される。次に、重心周りの回転について、角速度ベクトル $\boldsymbol{\Omega}_k$ は、固体の回転運動量 \mathbf{L}_k と固体重心周りの慣性モーメント \mathbf{I}_k により、以下のように表される。

$$\mathbf{L}_k = \mathbf{I}_k \boldsymbol{\Omega}_k \quad (2.69)$$

ここで、慣性モーメント \mathbf{I}_k および回転運動量 \mathbf{L}_k は

$$\mathbf{I}_k = \sum \begin{pmatrix} |\mathbf{x}_{igy}|^2 + |\mathbf{x}_{igz}|^2 & -\mathbf{x}_{igx}\mathbf{x}_{igy} & -\mathbf{x}_{igx}\mathbf{x}_{igz} \\ -\mathbf{x}_{igy}\mathbf{x}_{igx} & |\mathbf{x}_{igx}|^2 + |\mathbf{x}_{igz}|^2 & -\mathbf{x}_{igy}\mathbf{x}_{igz} \\ -\mathbf{x}_{igz}\mathbf{x}_{igx} & -\mathbf{x}_{igz}\mathbf{x}_{igy} & |\mathbf{x}_{igx}|^2 + |\mathbf{x}_{igy}|^2 \end{pmatrix} \quad (2.70)$$

$$\mathbf{L}_k = \sum \mathbf{u}_i(t + \Delta t) \times (\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_g(t)) \quad (2.71)$$

として得られる。ただし、 $\mathbf{x}_{ig} = (\mathbf{x}_{igx}, \mathbf{x}_{igy}, \mathbf{x}_{igz}) = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_g$ とする。

次に、回転軸ベクトル ν_k および回転角度 θ_k は、以下の式により与えられる。

$$\nu_k = \frac{\Omega_k}{|\Omega_k|} \quad (2.72)$$

$$\theta_k = \Delta t |\Omega_k| \quad (2.73)$$

次いで、固体の回転を扱うため、次式により回転行列を計算する。

$$\mathbf{R}_k = \begin{bmatrix} 1 - 2q_y^2 - 2q_z^2 & 2q_xq_y - 2sq_z & 2q_xq_z + 2sq_y \\ 2q_xq_y + 2sq_z & 1 - 2q_x^2 - 2q_z^2 & 2q_yq_z - 2sq_x \\ 2q_xq_z - 2sq_y & 2q_yq_z + 2sq_x & 1 - 2q_x^2 - 2q_y^2 \end{bmatrix} \quad (2.74)$$

ここで、 s, q_x, q_y, q_z はクォータニオン $\mathbf{q}(s, q_x, q_y, q_z)$ の各成分であり、以下の式により設定する。

$$\mathbf{q}(s, q_x, q_y, q_z) = \left(\cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right), \nu_x \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right), \nu_y \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right), \nu_z \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \right) \quad (2.75)$$

最後に、回転行列 \mathbf{R}_k を用いて、固相粒子の位置は次式のように修正される。

$$\mathbf{x}_i(t + \Delta t) = \mathbf{x}_g(t + \Delta t) + (\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_g(t)) \cdot \mathbf{R}_k(t + \Delta t) \quad (2.76)$$

さらに、固相粒子の移動量から速度を修正する。

$$\mathbf{u}_i(t + \Delta t) = \frac{1}{\Delta t} (\mathbf{x}_i(t + \Delta t) - \mathbf{x}_i(t)) \quad (2.77)$$

以上の位置・速度修正を固相粒子に対して毎ステップ行うことにより、固体の形状を保ちつつ移動を追跡する。このとき、固相粒子のみ強制的に座標の移動を行うが、本修正による固相粒子の移動量は最大で $1.0 \times 10^{-4} \times l_0$ のオーダーであり、これによる周囲流体の密度に対する影響は 0.03 % 程度 (修正前の粒子間距離が l_0 の場合) となることから、圧力計算に対する悪影響はないものと考えられる。また、本手法による固体の取扱いは MPS 法・DEM による解析において広く用いられているが [45, 84, 85, 108]、この修正による計算不安定や非物理的な現象の発生は報告されていない。

2.3 ダム崩壊シミュレーション

2.3.1 計算条件

本節ではダム崩壊問題を用いて、本手法による気液二相流計算の検証及び液単相流計算との比較を行う。ダム崩壊問題は、気液二相流計算の検証に一般的に用いられる検証ケースである。

計算領域を図 2.9 (a), (b) および図 2.10 に示す。図 2.9 (a) に示したように、 $L \times 2.0L \times L$ の水塊がダムにより仕切られている。そこから、図 2.9 (b) に示すようにダムを瞬間的に取り除いたときの、水塊の崩壊挙動を解析する。

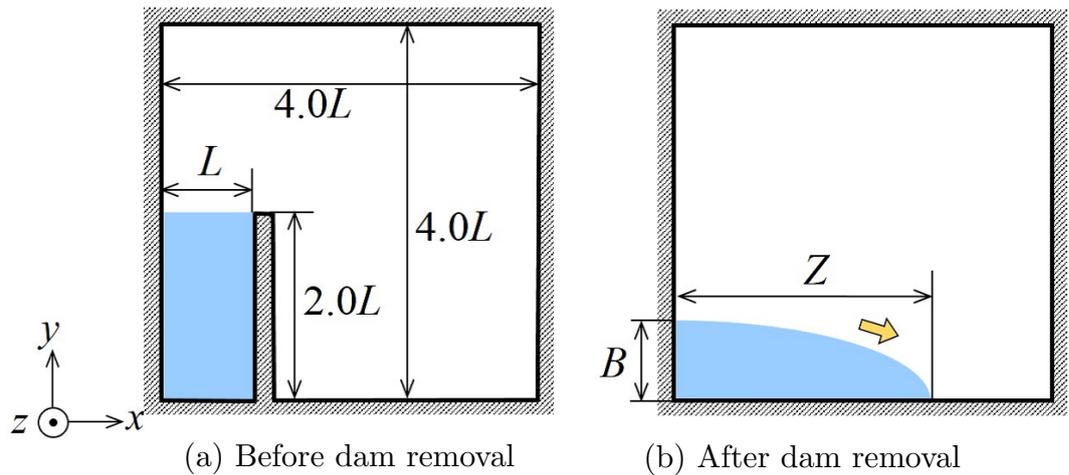


図 2.9 Schematics of dam break simulation: (a) computational domain and initial condition, (b) definition of B and Z

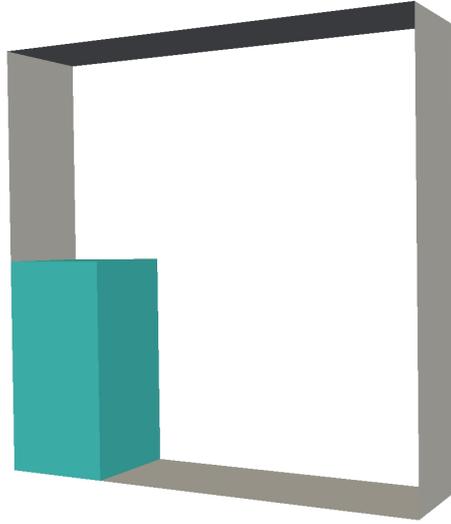


図 2.10 3-dimensional visualization of computational domain and initial condition in dam break simulation

表 2.1 Computational parameters for dam break simulation

Particle spacing		5.02×10^{-3}	m
Reference length		2.16×10^{-1}	m
Gas phase	Density	1.205	kg/m ³
	Kinematic viscosity	15.12×10^{-6}	m ² /s
Liquid phase	Density	998.2	kg/m ³
	Kinematic viscosity	1.004×10^{-4}	m ² /s

実験値との比較のため、計算領域左下端からの水隄の高さ B 及び先端の到達位置 Z を定義する。代表長さとなるダム初期幅は $L = 0.216$ m であり、計算領域のサイズは $4.0L \times 4.0L \times L$ 、初期粒子間距離は $l_0 = 0.00502$ m とする。計算領域の設定は実験的研究 [22, 86] に倣い設定を行った。図中奥行き方向に周期境界条件を、その他の境界は壁面境界として滑りなし壁を設定した。本計算における計算条件の詳細は表 2.1 に示す通りで、気・液相はそれぞれ空気・水としてパラメータを設定している。また、本計算条件を用いて行った 2 次元及び 3 次元の液单相流計算と気液二相流計算を本論文では、それぞれ 3D-1P (3-dimensional 1-phase), 3D-2P (3-dimensional 2-phase), 2D-1P (2-dimensional 1-phase), 2D-2P (2-dimensional 2-phase) と表記する。

2.3.2 結果と考察

3D-2P 計算により得られた、ダムを取り除いた瞬間を $t = 0.0$ s として 0.15 s ほどの可視化結果を図 2.11 (a), (b), (c), (d) に示す。図から、ダムを取り除いた後に、液面が右端壁へと向かって拡がり、右端壁へと衝突して上方へとスプラッシュする様子が捉えられている。これは、ダム崩壊問題の一般的な傾向を再現しており、計算結果の定性的な妥当性が示された。本可視化画像では計算粒子ではなく、Marching Cubes 法 [87] により抽出された界面を可視化している。可視化手法については、付録 A で詳細に述べるものとする。

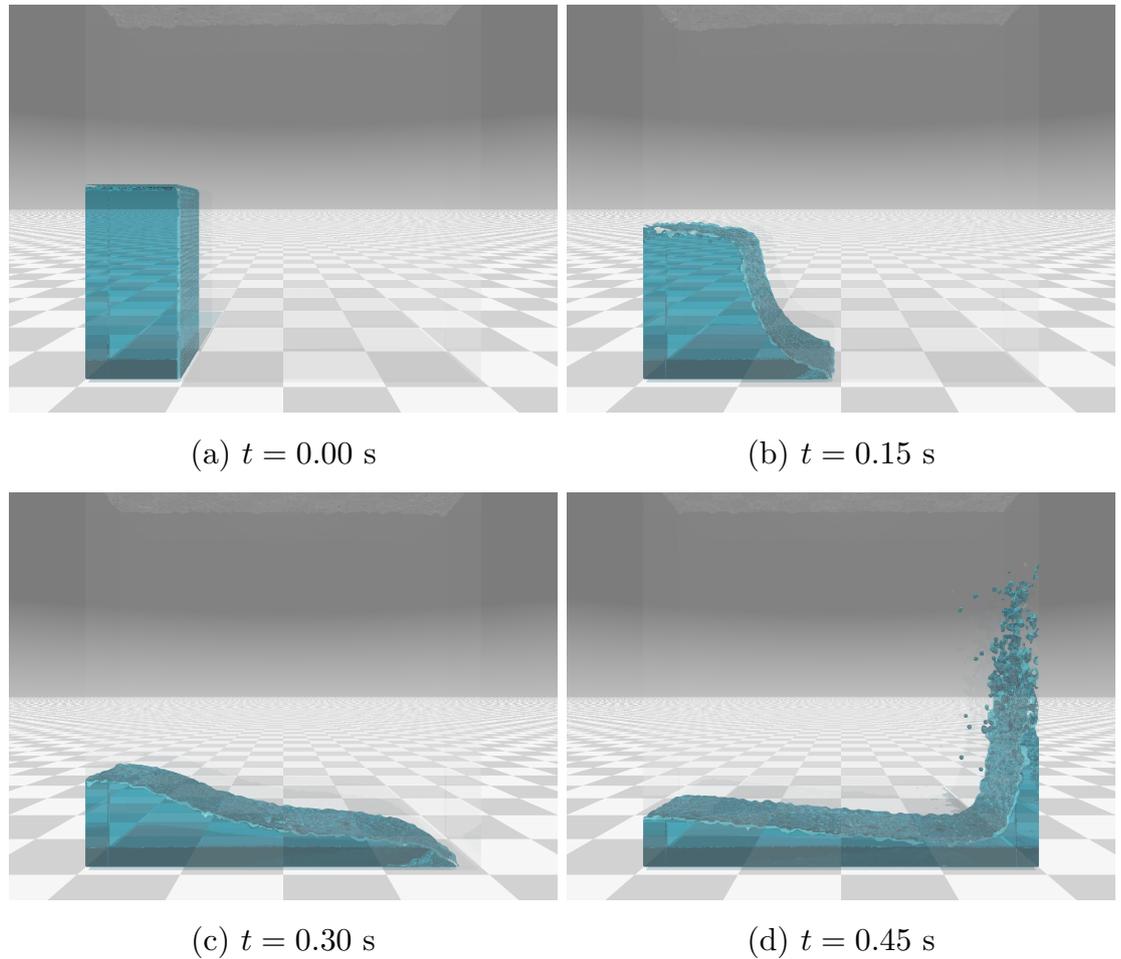


図 2.11 Snapshots of dam break problem in 3D-2P simulation

次に定量的な評価を行う。3D-1P 及び 3D-2P 計算により得られた、図 2.9 (b) に示す水隗の高さ B 及び液相先端の到達位置 Z と実験結果 [22, 86] との比較を図 2.12 (a), (b) に示す。両グラフともに横軸は重力加速度 g とダムの初期幅 L により無次元化された経過時間であり、縦軸は前述の B, L をそれぞれダムの初期幅 L とダムの初期高さ $2L$ で無次元化した値を示している。図から、3D-1P 及び 3D-2P の両計算が実験値とよく一致していることがわかる。先端位置に関しては、実験値と比較してわずかに過大評価しているが、他の数値的研究 [16, 22, 62] においても同様の傾向が得られていることから、実験の誤差の範囲内であると考えられる。一般的に、大きな密度差を扱う必要のある気液二相流計算においては、気液間の界面付近で計算が不安定となりやすいことが知られている。しかし、本計算結果においては界面付近の数値的な不安定は確認されておらず、数値的不安定による気相粒子の発散や粒子数密度が局所的に小さくなる過疎領域は確認されなかった。

3D-1P と 3D-2P 計算の結果を比較すると、わずかではあるが先端位置については 3D-2P 計算が、水隗の高さは 3D-1P 計算が大きな値を予測している。これらは 3D-1P 計算が先端の速度を大きく評価していることを表している。

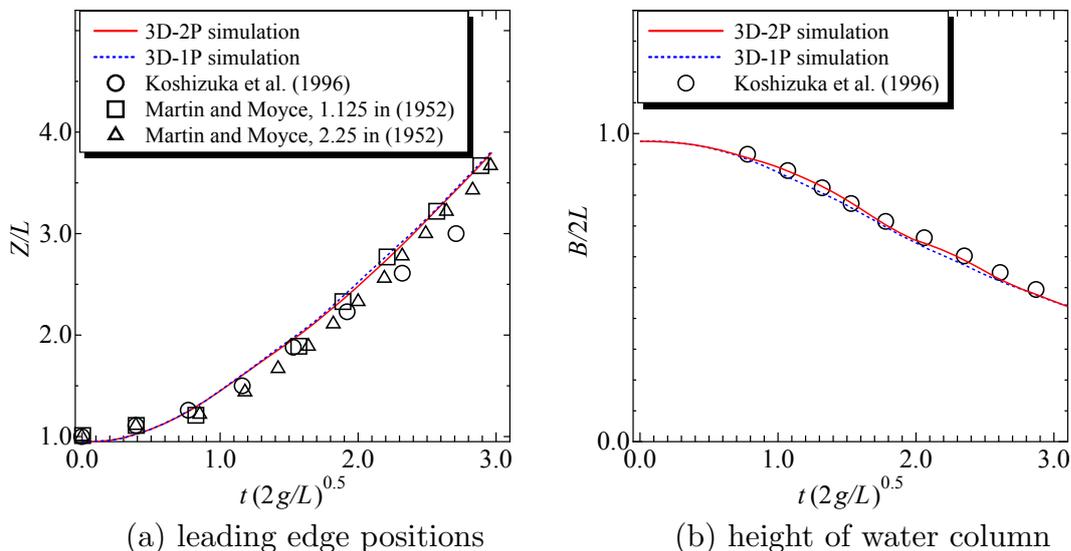


図 2.12 Time history of leading edge and height of water column in 3D simulation

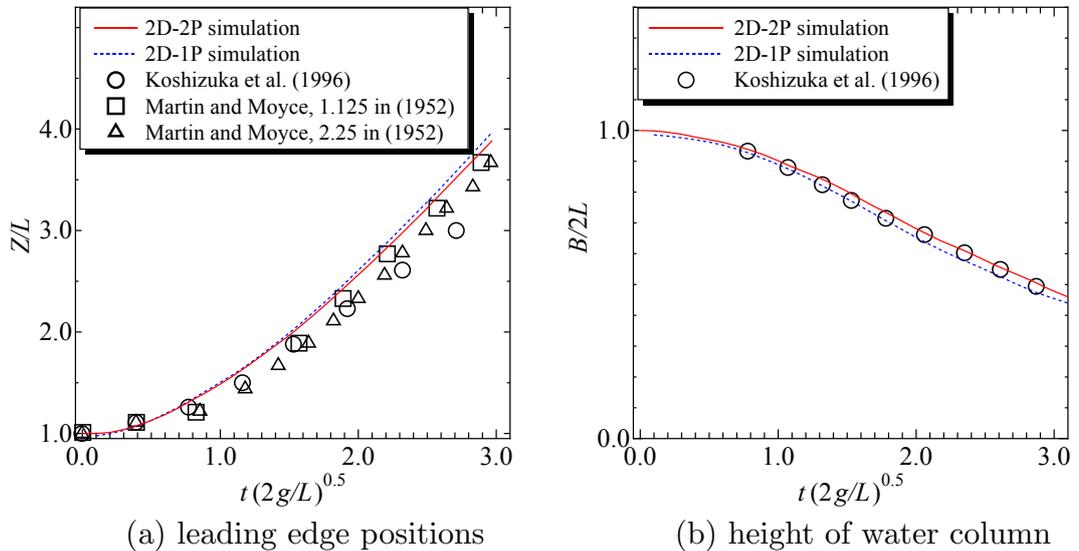


図 2.13 Time history of leading edge and height of water column in 2D simulation

これは 3D-2P 計算において、気相による液相に対する抵抗、つまり空気抵抗が再現された結果であると考えられる。

2D-1P および 2D-2P 計算により得られた、図 2.9 (b) に示す水塊の高さ B 及び液相先端の到達位置 Z の関係を図 2.13 (a), (b) に示す。図より、2次元計算についても実験値とよく一致していることが確認され、また、気液二相と比べ液単相流計算の結果液面速度が大きく、図 2.12 に示した 3次元計算と同様の傾向が得られた。2次元と3次元計算とを比較すると、2次元計算のほうが液面速度を大きく見積もる傾向が見られた。これは粒子の初期配置において、格子上に粒子を配置することから、3次元計算では2次元計算と比べ液相領域に対する粒子の充填率が低くなってしまふことによる影響であると考えられる。

2.4 固体粒子の液面衝突シミュレーション

2.4.1 計算条件

本節では固体粒子の液面衝突問題を用いて本計算による固液二相および気液三相流計算の検証を行う。計算領域を図 2.14 (a), (b) 及び図 2.15 に示

す。本計算では、図 2.14 (a) に示すように、幅及び奥行き $1.5L$ の断面を持つ容器に深さ L まで貯めた液相に対して、液面より高さ $1.25L$ から固体粒子を自由落下させ、液面へと衝突させる。固体粒子が液面へと衝突する過程における固体粒子の挙動及び図 2.14 (b) に示す固体粒子後流に生じる気泡の巻き込み挙動を解析する。検証は固体粒子の液面衝突後の液中沈降速度を実験値と比較することにより行う。計算条件として、代表長さである液相の深さは $L = 0.4 \text{ m}$ で、計算領域のサイズは $1.5L \times 2.5L \times 1.5L$ である。境界条件は、計算領域の上面境界のみ自由流入出、その他の境界は壁面境界として、滑り無し条件を課している。固体粒子径は 0.048 m であり、初期粒子間距離は 2 次元計算で 0.004 m 、3 次元計算で 0.008 m となる。本計算における計算条件の詳細は表 2.2 に示すとおりで、作動流体は気相は空気、液相は水とし、固体は合成樹脂製の球である。また、液相 - 固相間の接触角は 0 [deg.] と設定している (2.2.6 節参照)。本計算条件を用いて行った 2 次元及び 3 次元の固液二相流計算と固気液三相流計算を、それぞれ 3D-2P (3-dimensional 2-phase), 3D-3P (3-dimensional 3-phase), 2D-2P (2-dimensional 2-phase),

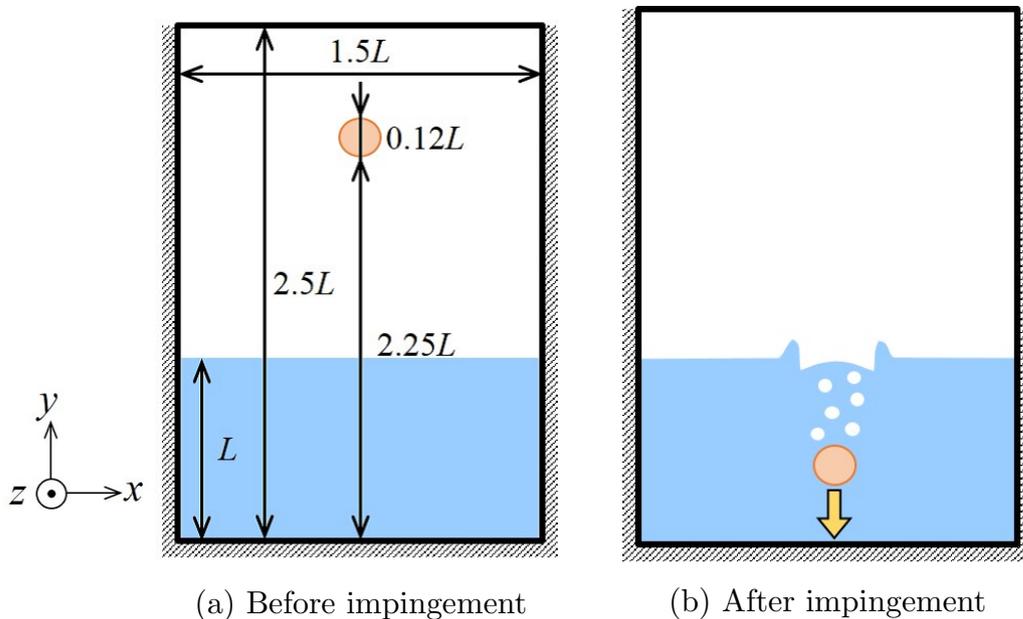


図 2.14 Schematics of solid-particle impingement simulation: (a) computational domain and initial condition, (b) behaviors of liquid and solid phase after impingement

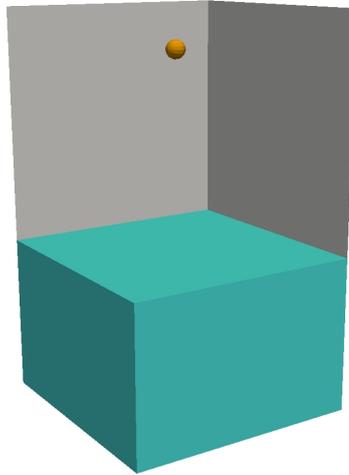


図 2.15 3-dimensional visualization of computational domain and initial condition in solid-particle impingement simulation

表 2.2 Computational parameters for solid-particle impingement simulation

Particle spacing		2D : 4.0×10^{-3} m	3D : 8.0×10^{-3} m
Reference length		4.0×10^{-1} m	
Solid-particle diameter		0.048 m	
Gas phase	Density	1.205	kg/m ³
	Kinematic viscosity	15.12×10^{-6}	m ² /s
Liquid phase	Density	998.2	kg/m ³
	Kinematic viscosity	1.004×10^{-4}	m ² /s
Solid phase	Density	1208	kg/m ³

2D-3P (2-dimensional 3-phase) と表記する。

2.4.2 結果と考察

本節では、固液二相および固気液三相流計算による固体粒子の液面衝突問題について結果を示し、実験値と比較することで両計算手法の検証を行う。

図 2.16 (a), (b), (c), (d) に 3D-3P 計算による計算結果を示す。図 2.14 (b) の概略図のとおり、本シミュレーションでは、固体粒子は初期位置から自由落下し、液面へと衝突した後、後流に気泡を巻き込み、最終的に液相中での終端

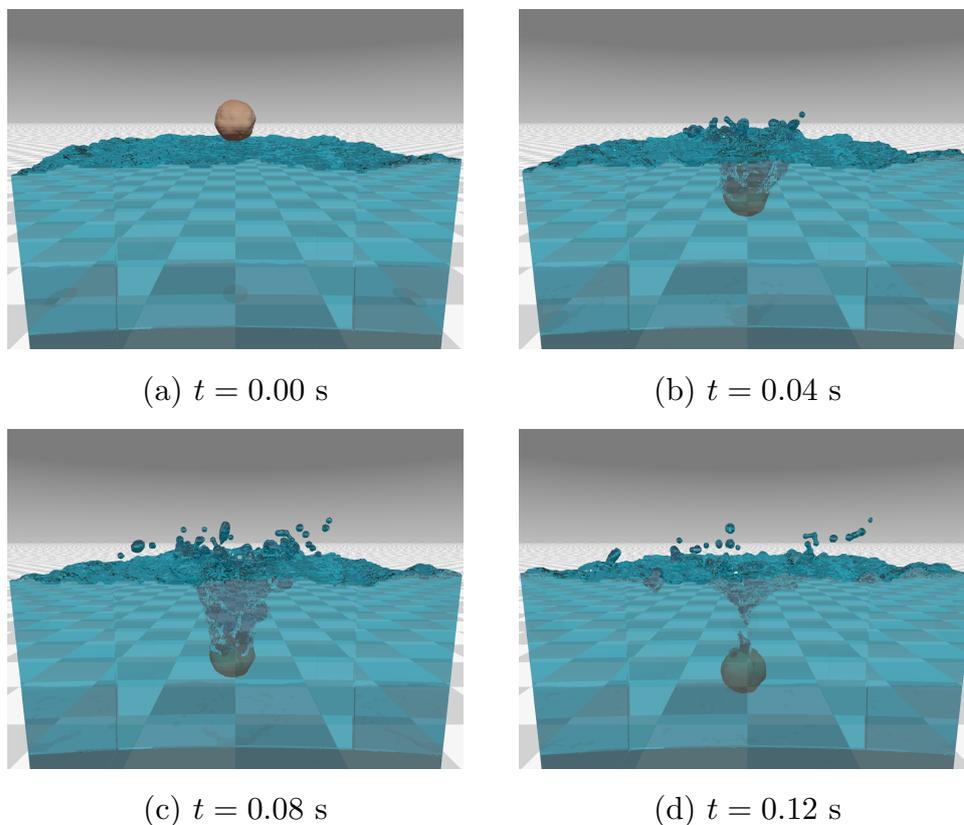


図 2.16 Snapshots of solid sphere impingement problem in 3D-3P simulation

速度で沈降する。図 2.16 (a), (b), (c), (d) より、固体粒子は $t = 0.00$ s で液面へと衝突し、 $t = 0.04$ s で固体粒子後流に円錐台の気相領域が形成される。その後、 $t = 0.08$ s で気相領域は収縮し、液面復活時に円錐台が中程で途切れることで、 $t = 0.12$ s に円錐台の固体粒子側が液相内に取り残され、固体粒子後流に気相として巻き込まれる。このような円錐台気相領域の断裂により固体粒子後流に気相が巻き込まれる現象は、実験的研究 [88, 89] により得られた典型的な気泡の巻き込みプロセスを再現している。

次に、液中沈降速度の実験値との定量的な比較を行う。図 2.17 に固体粒子の液面衝突後の鉛直下向き速度履歴を示す。図中の V は固体粒子の鉛直下向き速度、 $V_{ter.}$ は固体粒子の液相内での終端速度、 t は固体粒子の液面衝突時を 0 s とした経過時間を表す。図から、両計算による計算結果は実験結果と同様の傾向を示すことが確認された。しかし、実験結果は計算結果と比べて、液面衝突直後により急激に減速していることがわかる ($t < 5.0 \times 10^{-3}$)。これは、

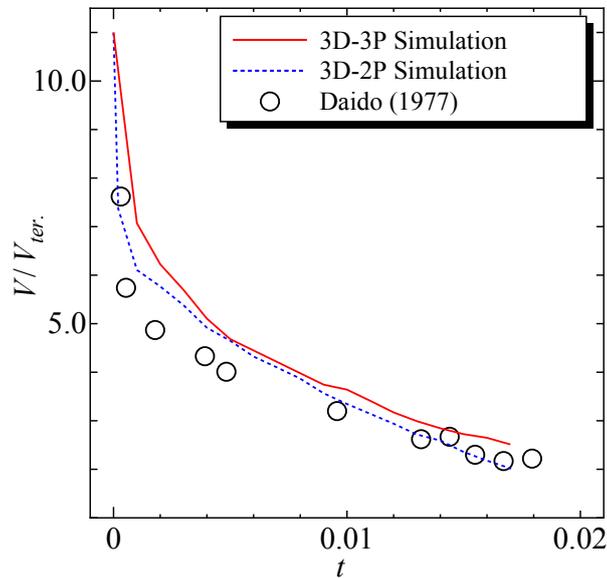
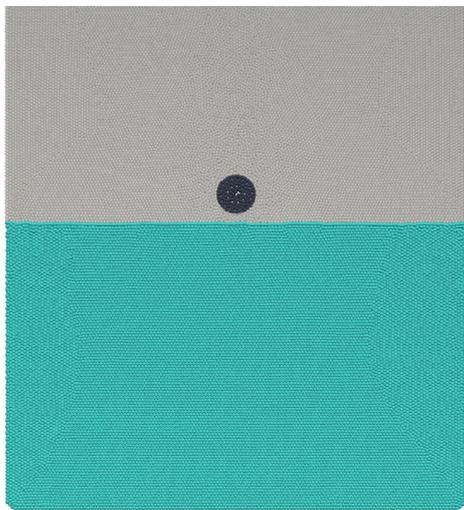


図 2.17 Time history of the downward velocity of the solid sphere in 3D simulation

本研究で用いている表面張力モデルによる表面張力の過大評価 [90] が原因であると考えられる (付録 D 参照)。表面張力が実際よりも大きく見積もられるため、固体粒子の衝突による液面の変形が抑制される。その結果、液面がはじけることによるエネルギーの消費が抑えられ、固体粒子から失われる運動エネルギーが減少し、固体粒子の減速が小さく見積もられる。液面衝突直後の急減速の後の無次元時間 $t > 5.0 \times 10^{-3}$ では、計算結果は実験結果と妥当な一致を示している。

断面における計算粒子および物理量の分布を確認するため、図 2.18 (a), (b), (c), (d) に 2D-3P 計算による計算結果を示す。図中の水色、黒、灰色粒子がそれぞれ液相、固相、気相粒子を表している。2次元計算においても、図 2.16 と同様に、固体粒子の液面衝突後の円錐台形状の液相領域形成および液相領域の断裂による気相の巻き込みが再現された。図から示されるように、本計算において、固・気・液相間の界面付近において数値的不安定により生じる界面付近の気相粒子の発散や粒子数密度が局所的に小さくなる過疎領域は発生せず、異なる相の衝突や複雑な相互作用も安定的な計算を行えることが確認された。

図 2.19 に 2D-2P 及び 2D-3P 計算により得られた固体粒子の液面衝突後の



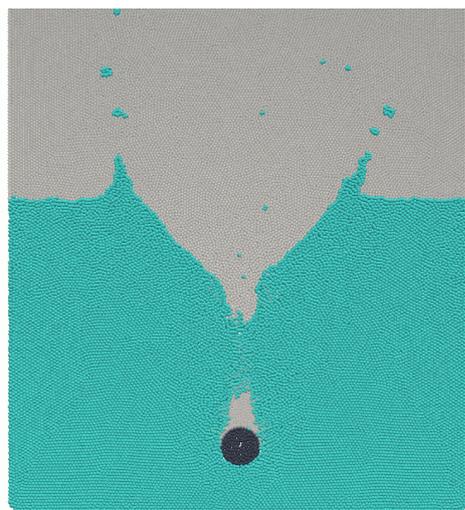
(a) $t = 0.00$ s



(b) $t = 0.04$ s



(c) $t = 0.08$ s



(d) $t = 0.12$ s

図 2.18 Snapshots of the solid sphere impingement problem in the 2D-3P simulation

鉛直下向き速度履歴を示す。本図においても、図 2.17 と同様に、固体粒子の液面衝突時を $t = 0$ s として、縦軸は液相内での終端速度 $V_{ter.}$ で無次元化した固体の鉛直下向き速度、横軸は経過時間 t を示している。図より 2 次元計算においても 3 次元計算と同様に、2D-2P, 2D-3P 両計算による計算結果は実験結果と同様の傾向を示すことが確認された。

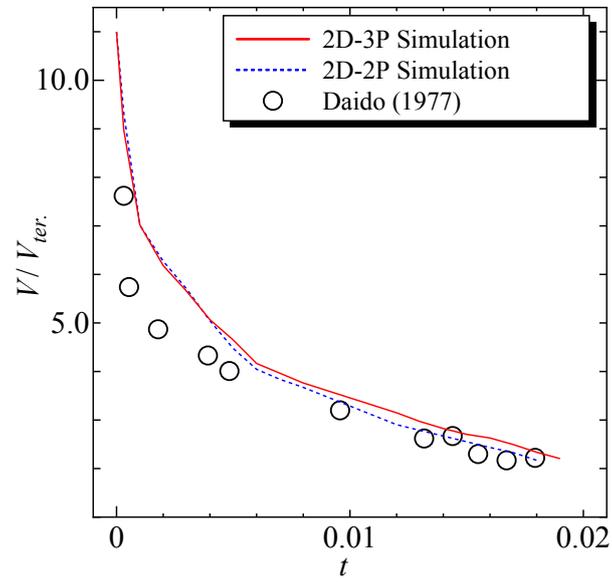


図 2.19 Time history of the downward velocity of the solid sphere in 2D simulation

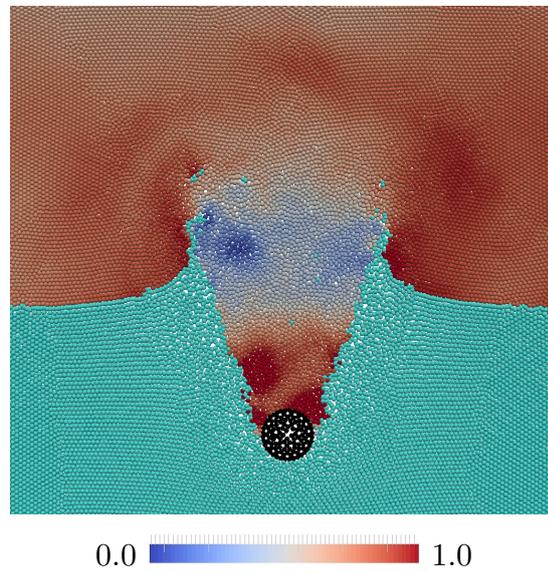


図 2.20 Instantaneous normalized pressure distribution after solid sphere impingement

また、図 2.17, 2.19 より、固液二相流計算と固気液三相流計算を比較すると、固液二相流計算のほうが固体速度を小さく見積もっていることがわかる。これは 2 次元、3 次元のどちらにおいても確認される傾向であり、固体粒子後流の圧力による影響であると考えられる。図 2.20 に 2D-3P 計算で得られた、固体粒子が液面に衝突した後の界面付近の無次元圧力分布を示す。図より固体粒子の急減速により、固体粒子後流に高圧領域が形成されていることが確認できる。固液二相流計算では固体後流において計算点となる気相粒子が存在せず圧力 0 となる一方で、固気液三相流計算では固体後流の気相粒子により高圧領域が捉えられる。そのため、三相流計算では二相流計算と比べ、固体粒子前後での圧力差が小さくなり、固体粒子の減速が小さく見積もられる。

2.5 結言

MPS 法に基づく固気液三相流計算手法の開発を行った。本手法の検証のために、ダム崩壊シミュレーション及び固体粒子の液面衝突シミュレーションを行い、気液二相流・固液二相流・固気液三相流計算について実験値との比較を行った。得られた知見は以下の通りである。

- 液单相・気液二相流計算について、ダム崩壊シミュレーションを用いて検証を行った。ダム崩壊時の液面の挙動について実験値との比較を行い、両計算共によい一致を得ることができた。
- ダム崩壊シミュレーションでは、気液二相流計算と液单相流計算の結果を比較し、気液二相流計算において液单相よりも液面速度が小さく評価された。これは、液相に対する気相による抵抗、つまり空気抵抗が再現された結果であると考えられる。
- 固液二相・固気液三相流計算について、固体粒子の液面衝突シミュレーションを行った。両計算で液面衝突後の固体粒子の鉛直下向き速度について実験値と妥当な一致が得られた。
- 固体粒子が液面に衝突・沈降する過程で固体粒子後流への気泡の巻き込みが再現され、巻き込みプロセスについて実験的な研究と定性的に同様の傾向を得ることができた。
- 固液二相・固気液三相流計算の結果を比較すると、固気液三相流計算では固液二相流計算と比べ、固体粒子の液面衝突による減速を小

さく見積もった。これは、固気液三相流計算では固体後流における高圧領域により、固体粒子前後の圧力差が減少するためである。

- 本手法により、液相をベースとする気液二相・固液二相・固気液三相流に対応できることが示された。

今後の展望として、以下に示す更なる発展・調査が必要である。

- MPS法の気相粒子への適用性向上
- 計算コストの低減
- 液相へと巻き込まれた気相粒子の挙動についての妥当性の検証

第3章 MPS法 - MAC法カップリングによる気液二相流計算手法

3.1 緒言

前章で Explicit MPS 法に基づく固気液三相流計算手法について記載したが、Explicit MPS 法は液相計算に特化した計算手法であり、気相計算に対する適用性が低いことが知られている。また、粒子法は計算粒子数の増加に対して計算コストの増加が大きいため、多くの計算ケースにおいて計算領域の大部分を占めることとなる気相計算を粒子法により取り扱うことは望ましくない。そこで、固気液三相流計算手法の気相計算のみを格子法の一様である MAC 法 [19] により置き換えることで、手法の適用性向上・計算コストの削減が見込めると考えられる。

本章では、固気液三相流計算手法への MAC 法による気相計算導入の前段階として、Explicit MPS 法と MAC 法のカップリングによる二流体系多相流計算手法の開発及び検証を行う。検証には、連続相と分散相の相互作用が系全体へと大きな影響を与えるせん断流内の液滴変形を扱う。本章に記載する計算手法の固気液三相流への導入については次章に記載するものとする。

本章で取り扱う、Explicit MPS 法と MAC 法のカップリングによる手法のように、他手法のカップリングによる多相流解析はこれまでに多数研究が行われている。これらのカップリング手法はそれぞれの計算手法の分類により、Euler-Euler・Euler-Lagrange・Lagrange-Lagrange カップリングへと大別され、本手法は Euler-Lagrange カップリングに属する。一般的に Euler-Lagrange カップリングによる多相流解析は固液二相流解析に用いられることが多く、流れ場計算を Euler 的手法により取扱い、Lagrange 的な手法に基づいて固体の追跡を行う [91, 92]。しかし、Euler-Lagrange カップリングによる気液二相流の取扱いについても研究が行われており、流れ場を Euler 的に計算し、気泡を Lagrange 的に追跡する気泡追跡法などが提案されている [93, 94]。

このような手法は多くの気泡を個別に追跡することが可能であるが、気泡の変形を考慮に入れることが困難であるため、微細な気泡が多数存在するような系に対して適用性が高い。また、前述の手法とは異なるアプローチとして、気液相の流れ場を Euler 的に計算し、界面の捕捉にのみ lagrange 的な手法を用いる手法として、石井ら [95] は MPS 法と CIP 法のカップリングにより全体の流れ場を CIP 法により計算し、界面挙動を MPS 法を用いて修正する手法を、Liu ら [96] は Level set 法において界面にマーカー粒子を配置し Lagrange 的に界面追跡を行う手法を提案している。これらの手法に対し、本章で提案する手法は気相部分を Euler 的な MAC 法により、液相を Lagrange 的な MPS 法により計算を行い、両手法をカップリングすることで気液二相流を扱うこととなる。これにより、気液界面に対する数値拡散の影響を排することができるという利点を有している。

3.2 数値計算手法

本計算手法では、分散相を粒子法的一种である Explicit MPS 法 [62] により、連続相を格子法である MAC 法 [19] により計算し、両計算のカップリングにより多相流計算を行う。本論文ではこの MPS 法と MAC 法のカップリングによる多相流計算手法を MPS-MAC 法と呼び、計算の概略図を図 3.1 に示す。図中の水色粒子が MPS 法の計算粒子、背景の赤色格子が MAC 法で用いる計算格子である。

Explicit MPS 法については 2 章に記載したため、ここでは連続相の計算に用いた格子法の計算手法及び粒子法と格子法のカップリング手法について述べる。格子法計算には有限差分法を採用し、非圧縮流れ解析で広く用いられる

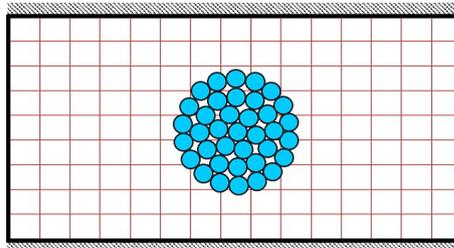


図 3.1 Schematics of the MPS-MAC method

MAC 法を用いる。ここでは、有限差分法の概要、MAC 法、本手法で用いている離散化手法について記載する。

3.2.1 格子法計算手法

有限差分法 (Finit Difference Method)

有限差分法は最も古典的な偏微分方程式の数値解法のひとつである。解析領域を格子により分割し、各格子点に物理量を割り当てることで、偏微分の解を求める。有限差分法は一般的に構造格子を用いた計算に適用され、周囲の格子点情報によりテイラー級数を用いた離散化を行う。格子点数分の代数関係式を連立方程式とし、境界条件等を用いることで方程式を閉じる。一般座標系変換を行うことで、複雑形状への適用性を向上や、保存性の向上がなされている。

MAC (Maker and Cell) 法

MAC 法 [19] は本来自由界面を伴う非定常流の解析手法として開発された計算手法であり、自由界面の追跡にマーカー粒子を用いることに由来している。非圧縮性流体解析においては、マーカー粒子による界面捕捉は行われませんが、速度場と圧力場のカップリング手法として広く用いられている。

MAC 法による非圧縮性流体解析の支配方程式は、非圧縮性を仮定した Navier-Stokes 方程式及び連続の式である。

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \{(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}\} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{u} \quad (3.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (3.2)$$

MAC 法において、連続の式 (3.2) を満たすため、以下の手順をふむ。まず、時刻 k における連続の式の残差を式 (3.3) で定義する。

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^k = D^k \quad (3.3)$$

式 (3.1) の発散をとると以下の式を得る。

$$\frac{\partial D^k}{\partial t} + \nabla \cdot \{(\mathbf{u}^k \cdot \nabla) \mathbf{u}^k\} = -\frac{1}{\rho} \nabla^2 P^k + \nu \nabla^2 D^k \quad (3.4)$$

次に、時刻 $k+1$ において式 (3.2) を満たすように ($D^{k+1} = 0$)、以下の圧力の

方程式から圧力場 P^k を求める。

$$\frac{1}{\rho} \nabla^2 P^k = -\nabla \cdot \{(\mathbf{u}^k \cdot \nabla) \mathbf{u}^k\} + \frac{D^k}{\Delta t} + \nu \nabla^2 D^k \quad (3.5)$$

以上のように、時刻 k における速度場 \mathbf{u}^k から、式 (3.3) により D^k を求め、式 (3.5) を用いて圧力場 P^k を得る。得られた圧力場より、式 (3.1) を時間進行させ、次ステップにおける速度場 \mathbf{u}^{k+1} を求める。

一般的に MAC 法では速度・圧力に対してスタガード格子を用い圧力計算の非物理性を回避するが、本研究では、MPS 法とのカップリング手法の複雑化を避けるためレギュラー格子を採用した。

離散化手法

本計算手法において、格子法計算では対流項計算には 1 次精度風上差分及び河村・桑原スキーム [97]、圧力・拡散項には 2 次精度中心差分を用いている。

ここでは、対流項の離散化手法について記載する。一般的に流れ場に対して対流が支配的になる場合において、解が数値的に振動してしまうのを回避するため、対流項は風上差分を用いて扱われる。本研究においては、対流項に対する風上差分手法として以下に示す、河村・桑原スキームを採用した。

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} = u \frac{\phi_{i-2} - 8\phi_{i-1} + 8\phi_{i+1} - \phi_{i+2}}{12\Delta x} + 3|u| \frac{\phi_{i-2} - 4\phi_{i-1} + 6\phi_i - 4\phi_{i+1} + \phi_{i+2}}{12\Delta x} \quad (3.6)$$

ここで、 Δx は格子幅、添え字 i は格子番号を表している。本手法は以下に示す 1 次精度風上差分よりも高次精度スキームとなっている。

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} = u \frac{-\phi_{i-1} + \phi_{i+1}}{2\Delta x} - |u| \frac{\phi_{i-1} - 2\phi_i + \phi_{i+1}}{2\Delta x} \quad (3.7)$$

しかしながら、式 (3.6) は離散化に $(i-2) \sim (i+2)$ の格子が必要となるため、境界付近では適用することができない。そのため、本研究では境界付近のみで式 (3.7) の 1 次精度風上差分を、それ以外の領域では式 (3.6) の河村・桑原スキームを用いる。

ここで、風上差分の式 (3.7) 右辺の第一項は中心差分の形となっており、そこに第二項の数値拡散を足すことにより安定化を図っている。そのため、風上差分を用いると必然的に数値拡散の影響を受けることとなり、低次精度風上差分を用いると過度な数値拡散が生じてしまうことをここに注記する。

次に、圧力・拡散項の離散化について述べる。前述の通り、本研究では圧力・拡散項に対して、2次精度中心差分を用いて離散化を行っている。以下にそれぞれ1階、2階微分の2次精度中心差分の式を示す。

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{-f_{i-1} + f_{i+1}}{2\Delta x} \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{2\Delta x} \quad (3.9)$$

時間進行法

本研究において、時間進行は1次精度オイラー陽解法により計算される。簡略化した支配方程式を以下のように定義し、

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = g \quad (3.10)$$

1次精度オイラー陽解法を用いた場合、

$$\frac{\phi^{k+1} - \phi^k}{\Delta t} = g^k \quad (3.11)$$

のように時間進行が行われる。

3.2.2 MPS法とMAC法のカップリング手法

本手法では、分散相を粒子法的一种であるExplicit MPS法により、連続相を格子法であるMAC法により計算し、両計算のカップリングにより多相流計算を行う。図3.2に本カップリング手法の計算フローを示す。

本計算手法では、MPS法計算粒子の存在分布からMPS法による計算領域を決定、その他の領域をMAC法による計算領域と設定し、両領域の境界部分において相互に情報伝達を行うことで多相流のカップリングを行う。図3.2に示した通り、計算は「MAC法からMPS法への情報伝達」、「MPS法計算」、「MPS法からMAC法への情報伝達」、「MAC法計算」の順でなされる。MAC法の計算格子については、計算領域全体に対して格子生成を行い、MAC法による計算領域に応じて計算をON/OFFする。それ故、計算領域設定に応じたリメッシュは行わない。

本節では、「MAC法からMPS法への情報伝達」及び「MPS法からMAC法への情報伝達」について順に述べる。

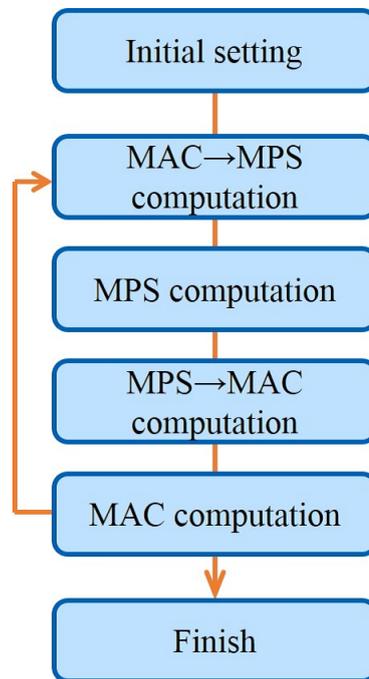


図 3.2 Flowchart of the coupled MPS-MAC methods

MAC 法から MPS 法への情報伝達

本手法では、MPS 法計算領域付近に満たした仮想的な計算粒子に MPS 法による物理量を線形補間することで、勾配・ラプラシアン計算を行い、MAC 法から MPS 法へと情報を伝達する。概略図を図 3.3 に示す。図中の水色部が分散相を、背景の赤色格子が計算格子を表しており、計算粒子付近にオレンジ色

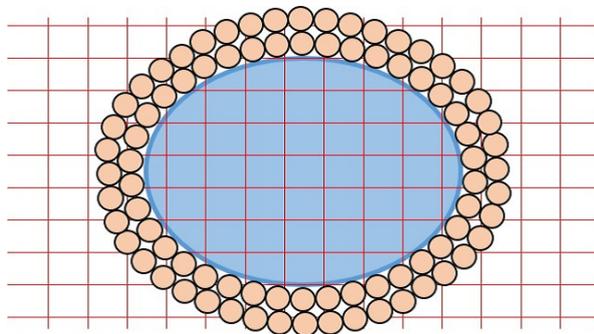


図 3.3 Arrangement of ghost particles on computational grids

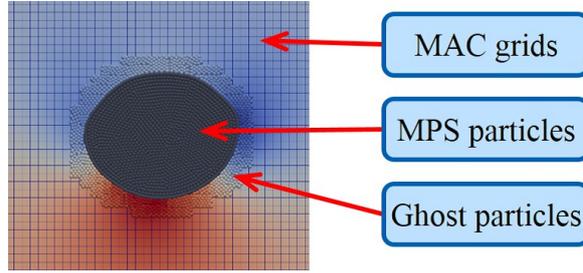


図 3.4 Actual MPS and ghost particle arrangement on computational grid

の仮想的な粒子が配置されている。仮想粒子は全計算粒子の影響半径内を埋め尽くすように配置する必要があり、本研究で採用している影響半径 $r_e = 3.1l_0$ の場合、MPS 法計算領域の周囲に 3 層分の仮想粒子が必要である。図 3.4 に、実計算における格子および粒子の配置を示す。図中の灰色粒子が計算粒子であり、周囲に仮想粒子が配置されている。図に示すように、配置した仮想粒子に対して、仮想粒子を囲う計算格子から線形補間により速度・圧力を補間する。ここでは、背景格子から仮想粒子に圧力が補間されている様子を示している。

Explicit MPS 法では、支配方程式 (2.1) を、式 (2.3), 式 (2.4) の圧力項とその他の項に分け、Fractional-Step 法に基づいて時間進行を行うが、本手法では以下の通りさらに MAC 法からの影響項を追加する。

$$\left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt}\right)^{press} = -\frac{1}{\rho}\nabla P - \frac{1}{\rho}\nabla P_{MAC} \quad (3.12)$$

$$\left(\frac{D\mathbf{u}}{Dt}\right)^{other} = \nu\nabla^2\mathbf{u} + \nu\nabla^2\mathbf{u}_{MAC} + \mathbf{F} \quad (3.13)$$

ここで、 \mathbf{u}_{MAC} , P_{MAC} はそれぞれ MAC 法計算から仮想粒子に補間した速度・圧力である。式 (2.3), (2.4) 中の第二項が MAC 法からの影響項であり、仮想粒子の物理量を用い、式 (2.16), (2.17) の勾配・ラプラシアンモデルを用いて計算する。

ここでは、式 (2.3) に示した圧力勾配の影響項に関する計算法について記載する。一般に圧力勾配項の計算は式 (2.16) を用いて以下のように計算される。

$$\nabla P = \frac{d}{n^0} \sum_j \frac{P_j - P_i}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \mathbf{r}_{ij} w_{ij} \quad (3.14)$$

上式より、圧力勾配は周囲粒子からの影響の総和として計算されるため、MPS

法粒子及び仮想粒子からの影響を分離して考えることができる。

$$\nabla P = \frac{d}{n^0} \left\{ \sum_{j \in MPS} \frac{P_j - P_i}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \mathbf{r}_{ij} w_{ij} + \sum_{j \in MAC} \frac{P_j - P_i}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \mathbf{r}_{ij} w_{ij} \right\} \quad (3.15)$$

ここでは、周囲粒子からの影響を $j \in MPS$ の MPS 粒子と $j \in MAC$ の仮想粒子に分割して取り扱っている。そのため、圧力勾配に関する影響項は以下のように表される。

$$\nabla P_{MAC} = \frac{d}{n^0} \sum_{j \in MAC} \frac{P_j - P_i}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \mathbf{r}_{ij} w_{ij} \quad (3.16)$$

粘性項における影響項も同様の手順で計算することができる。

MPS 法から MAC 法の情報伝達

前述の通り本手法では、MPS 法計算粒子の存在分布に応じて MAC 法による計算領域を決定する。計算領域の判定は各計算格子点における最近傍粒子までの距離により行い、以下の式を満たす場合、格子 i, j, k を MAC 法計算領域と設定する。

$$\text{Min } |\mathbf{r}_{ijk,l}| < \alpha l_0 \quad (3.17)$$

ここで、 $\mathbf{r}_{ijk,l}$ は格子 (i, j, k) と粒子 l との距離である。 α は定数であり、本計算では $\alpha = 0.8$ と設定している。 $\alpha < 1.0$ であることが望ましいが、 α を小さく設定しすぎると、計算粒子の隙間に格子法計算を行う点が発生し、MAC 法による圧力計算が発散する、もしくは分散相内に非物理的な空隙部が発生する可能性があるため注意が必要である。本判定式を満たす場合、格子 (i, j, k) では MAC 法計算を行い、満たさない場合、MAC 法計算は行わない。

MPS 法から MAC 法への情報伝達は、式 (3.17) を満たさず MPS 法領域と設定された格子点の端点に境界条件を与えることでなされる。図 3.5 に概略図を示す。図中水色部が分散相を、背景の赤色格子が計算格子を表しており、格子点上の黒×・緑△が MPS 法計算領域と設定された格子である。無印の格子点は MAC 法計算領域であり、通常の MAC 法計算がなされ、緑△の格子点に対して境界条件が課される。境界条件として課される変数は速度と圧力である。

ここから、境界条件の設定法について述べる。格子 (i, j, k) における、速度の境界条件 \mathbf{V}_{ijk} は計算粒子の速度を緑△格子へと補間計算することで決定さ

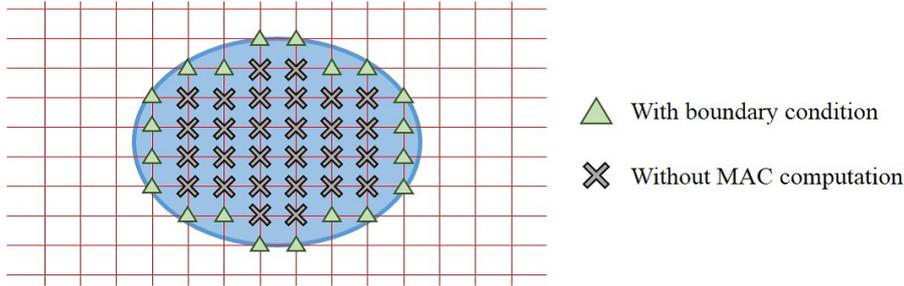


図 3.5 Classifications of computational grid points

れる。補間計算には以下の距離に基づいた重み付平均を用いた。

$$\mathbf{V}_{ijk} = \sum (w_{ijk,l} \cdot \mathbf{V}_l) / \sum w_{ijk,l} \quad (3.18)$$

$$w_{ijk,l} = \begin{cases} \frac{r_e}{|\mathbf{r}_{ijk,l}|} - \frac{|\mathbf{r}_{ijk,l}|}{r_e} & |\mathbf{r}_{ijk,l}| < r_e \\ 0 & |\mathbf{r}_{ijk,l}| \geq r_e \end{cases} \quad (3.19)$$

ここで、 \mathbf{V}_l は粒子 l の速度、 $\mathbf{r}_{ijk,l}$ 、 $w_{ijk,l}$ はそれぞれ格子 (i, j, k) と粒子 l との距離および重み関数、 r_e は平均化半径である。本研究では、平均化距離として MPS 法計算で用いる影響半径と同様に、初期粒子間距離の 3.1 倍を採用した。

圧力の境界条件は、計算の不安定を回避するため、緑△格子に MAC 法により計算した無印格子の圧力を外挿することで決定している。外挿値は周囲の格子計算領域と判定された格子圧力の平均として設定した。

3.3 せん断流中の液滴の変形シミュレーション

3.3.1 計算条件

本研究では、計算手法の検証にせん断流内の液滴変形の 3 次元シミュレーションを行った。計算領域を図 3.6, 3.7 に示す。計算領域は $2H \times H \times H$ の領域であり、ここに、 H は計算領域の高さを表す。領域中心に直径 $R = H/2$ の液滴 (図中水色部分) を配置、液滴および周囲流体は同種の流体であるとし、密度、粘性は全て同じとした。図中矢印方向へと速度 u_w で移動する上・下壁の運動によりせん断をうけ、液滴は変形する。上・下壁は計算領域内の流体がせん断速度 $\dot{\gamma} = 2u_w/H = 1.0$ となるよう運動すると設定する。計算条件は他の数

値的研究 [98, 100, 101] と比較を行うため、レイノルズ数 $Re = \rho\dot{\gamma}R/\mu = 0.2$ 、キャピラリー数 $Ca = \mu\dot{\gamma}R/\sigma = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ の 4 ケースで、各 Re, Ca に応じて、密度 ρ 、粘性係数 μ 、表面張力係数 σ を決定する。

本計算では、図 3.7 中水色で示した液滴部分に Explicit MPS 法を用いており、総計算粒子数は約 500,000 粒子。図中赤色格子で示す周囲流体に MAC 法を用い、計算格子は領域全体で計算解像度が一定となるデカルト格子とし、格

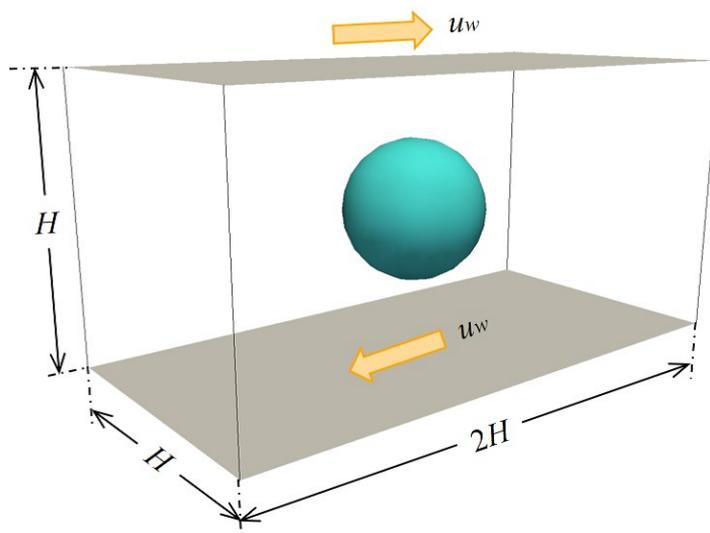


図 3.6 Computational domain and droplet in shear flow

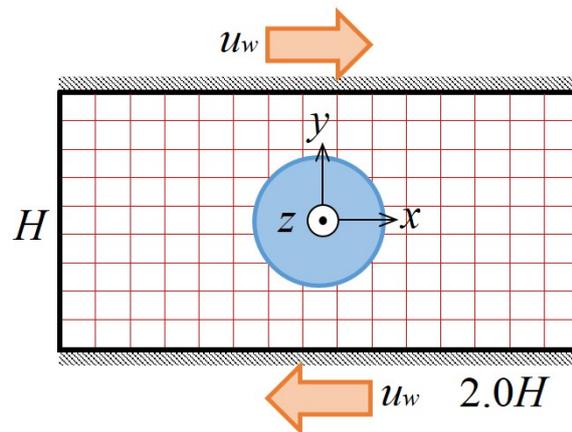


図 3.7 Computational domain and initial condition of simulation of droplet in shear flow

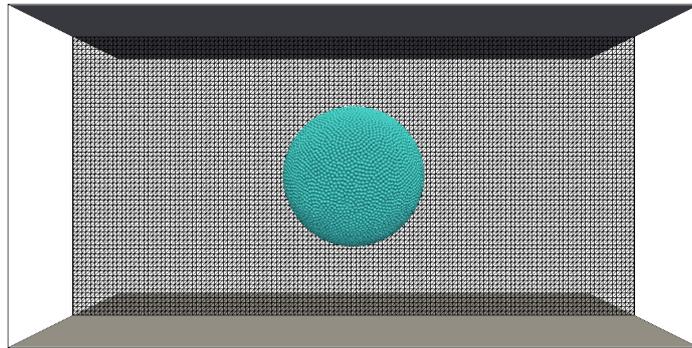


図 3.8 Computational grids and initial particle arrangement (side view)

粒子法・粒子法の計算解像度が等しくなるよう設定されている。計算格子数は $128 \times 64 \times 64$ の約 524,000 点であり、計算解像度は同条件において行われた数値的研究 [98] に倣い設定した。

図 3.8 に計算領域と計算粒子・格子の一部を示す。図中に黒で示した格子が液滴中心を通る xy 断面の計算格子であり、液滴を構成している水色粒子が計算粒子である。

格子法計算における境界条件は、上下壁とそれ以外の境界に分けて設定されている。上下壁においては、一定速度 u_w で移動する壁面に対する滑りなし条件として、圧力は計算領域内部よりゼロ次外挿を行っている。その他の境界においては、自由流入出として、速度・圧力共にゼロ次外挿を適用した。

3.3.2 結果と考察

流れ場

図 3.9 (a), (b), (c), (d) にそれぞれ $Ca = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ のケースについて、液滴中心を通る xy 断面における速度分布を示す。図中の速度は壁面速度 u_w で規格化されている。図中、水色粒子が Explicit MPS 法の計算粒子を表しており、液滴付近で白抜きとなっている部分は、格子法による計算がなされていない領域である。図から、全てのケースにおいて、上・下壁の運動により壁面付近で流速が高く、チャンネル中央部で低くなっている。このせん断により液滴が変形し、 Ca が大きいほど液滴の伸長も大きくなっていることが確認さ

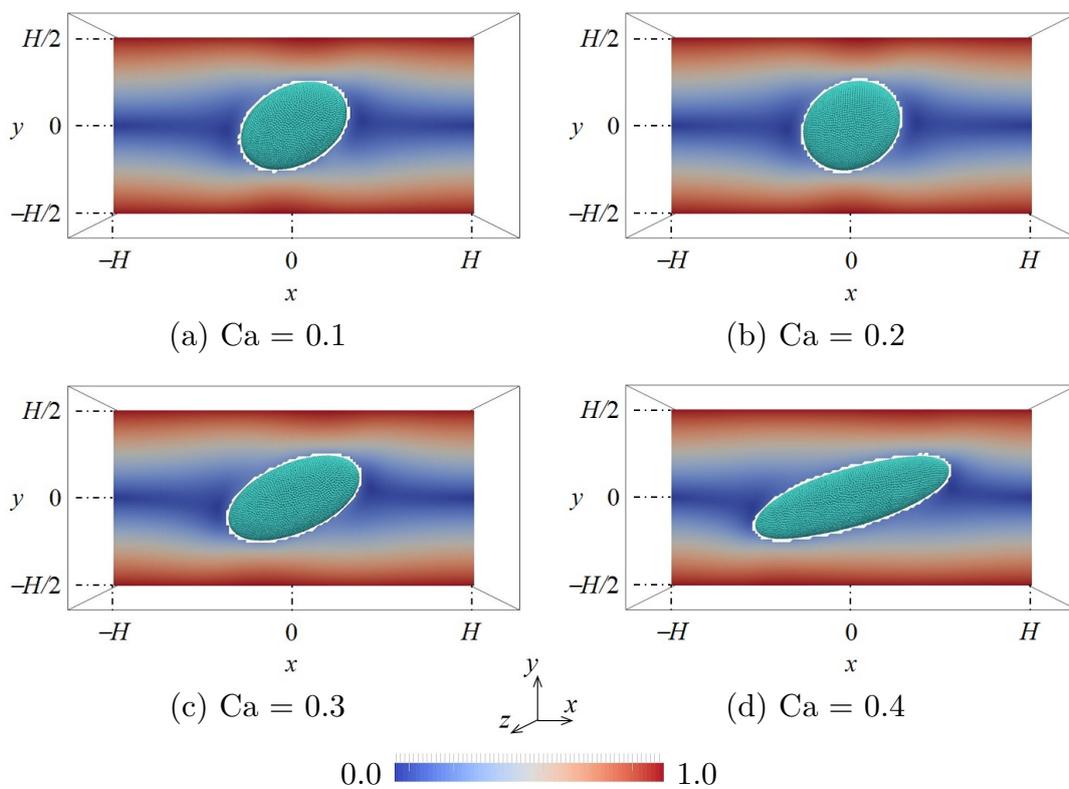


図 3.9 Distribution of the normalized velocity magnitude for different Ca

れた。本流れ場において、液滴の変形は液滴の表面張力と液滴表面が周囲流体から受けるせん断力のバランスにより決まるため、粘性と表面張力の比を表す Ca の増加と共に変形が増大することとなる。

図 3.10 は $Ca = 0.3$ のケースにおける液滴中心を通る xy 断面の液滴付近の速度ベクトルを表している。液滴内部の速度ベクトルから、液滴全体に z 軸を中心とする循環流が生じていることが確認できる。これは、実験的 [99]・数値的研究 [98, 101] においても同様の傾向が確認されていることから、定性的に妥当な結果が得られていると考えられる。また、この循環流により、チャンネル中央部付近においては周囲流体よりも液滴表面のほうが速度が大きくなり、チャンネル中央部においては周囲流体が液滴に引きずられるため、液滴に沿った流れができています。この液滴に沿う流れによりよどみ点は液滴表面から離れた位置 (図中赤点部) に生じている。

図 3.11 (a), (b) にそれぞれ各 Ca における x, y 軸に沿った速度を壁面

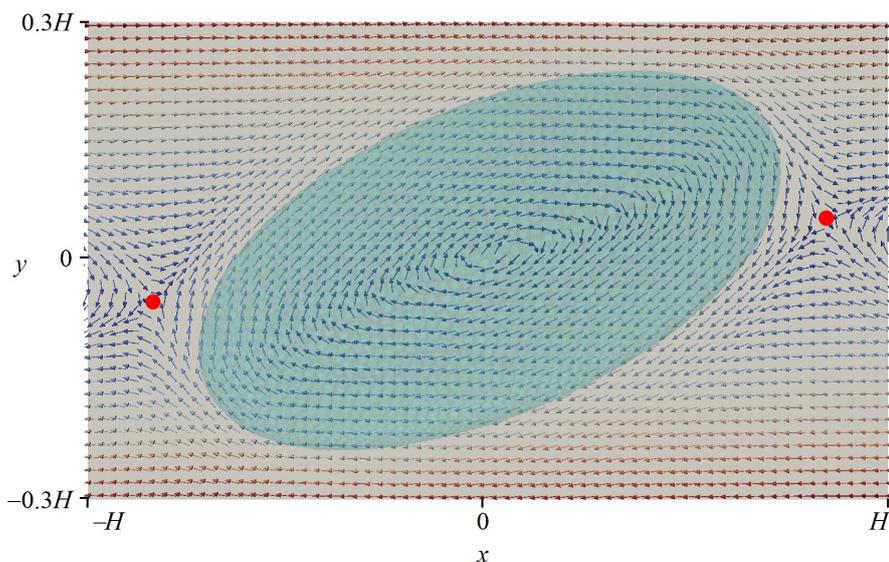


図 3.10 Distribution of the velocity vector in and around the droplet at the case of $Ca = 0.3$. The red circles indicate stagnation points.

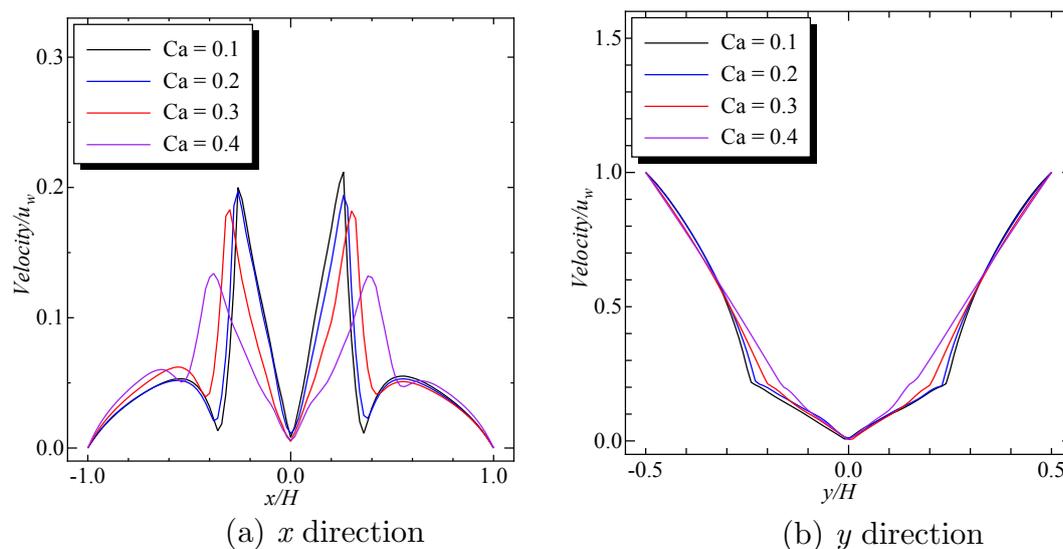


図 3.11 Profile of velocity magnitude for different Ca

速度 u_w で規格化した値を示す。図 3.11 (a) 中の $x/H = -0.2 \sim -0.4$ および $x/H = 0.2 \sim 0.4$ のピーク、図 3.11 (b) 中の $y/H = -0.2 \sim -0.3$ および $y/H = 0.2 \sim 0.3$ の速度勾配が変化する点が液滴界面を表しており、図 3.11 (a) においても、図 3.10 で示された液滴により引きずられる周囲流体の流れが確認され、その外側に下向きのピークが生じている。このピークは、図 3.10

で確認されたよどみ点によるものである。各 Ca の結果を比較すると、図 3.11 (a) で Ca が高いほど界面位置は x/H の絶対値が大きくなる方向へと移行し、液滴界面における流速は小さくなる傾向が見られる。これは Ca が大きいほど液滴変形が大きくなり、界面位置の x/H の絶対値が大きくなると共に、液滴の長軸側頂点が尖るため、頂点付近で流れが液滴から剥がれることに起因している。また、よどみ点の影響で生じる速度の下向きピークは、 Ca が高いほどなだらかなる傾向があるが、これは Ca の増加と共によどみ点が y 軸から離れることが原因である。

図 3.11 (b) における、速度勾配が変化する点の位置は、 Ca が大きくなるほど y/H が小さくなる傾向を示した。前述の通り、この点は液滴界面と y 軸との交点を表しており、 Ca が大きくなると共に液滴変形も大きくなり、液滴が扁平な形状となった結果である。また、この点における速度については、目立った傾向は得られなかった。

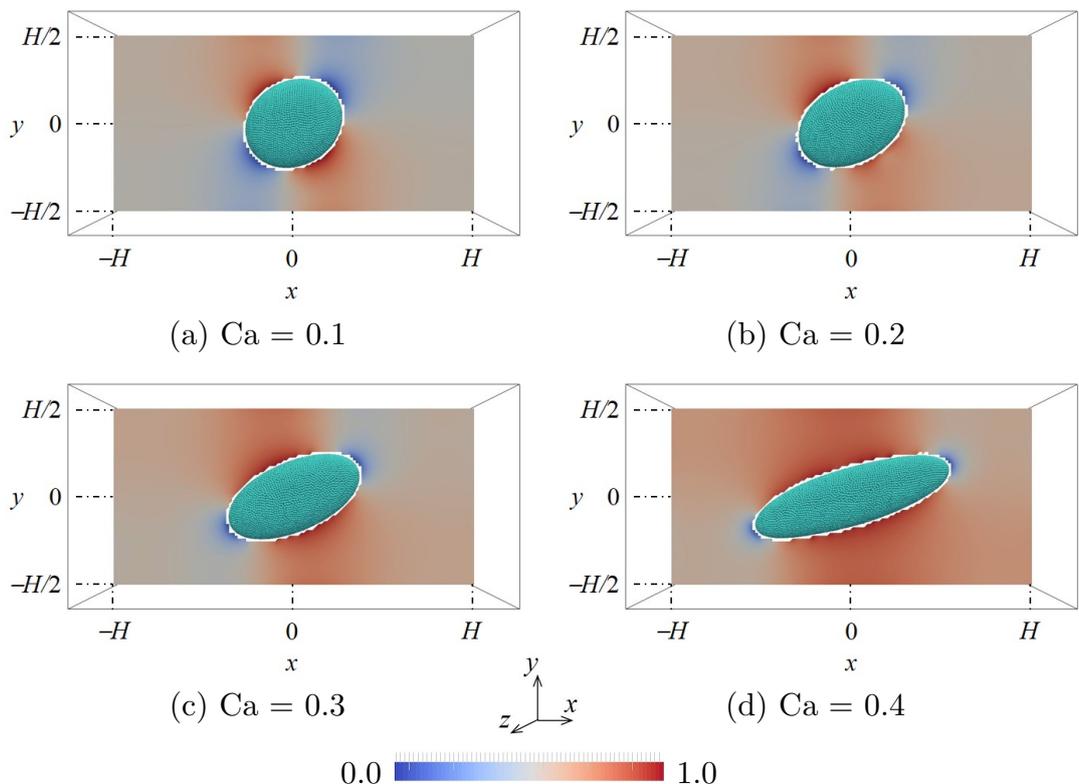


図 3.12 Distribution of the normalized pressure for different Ca

次に、各 Ca における液滴中心を通る xy 断面の圧力分布を図 3.12 に示す。圧力は最大圧力により規格化を行った。液滴中心を原点とする座標系において、第 II 及び IV 象限には高圧領域、第 I 及び III 象限には低圧領域が発生した。これは第 II 及び IV 象限では流れが液滴に衝突し、第 I 及び III 象限では流れが液滴の上下面を通り過ぎる際に流路が拡大するためである。また、 Ca が高くなるほど液滴変形が大きくなるため、流れが液滴に衝突する面積が拡大し、高圧部の面積も広がっている。この、高圧部拡大に伴い、低圧部は縮小した。

液滴形状

図 3.13 に示した液滴の幅、高さ、奥行きをチャンネル幅 H で無次元化し、各 Ca ごとに図 3.14 に示した。

図から、液滴の幅は Ca が大きくなるほど増加、高さ、奥行きは減少した。前述の通り、液滴の変形は液滴の表面張力と液滴表面が周囲流体から受けるせん断力のバランスにより決まるため、粘性と表面張力の比を表す Ca の増加と共に変形が増大する。そのため、せん断の存在する x 軸方向へと液滴は伸長し、液滴の体積保存のため y, z 方向は収縮する。本研究では、 $Ca = 0.4$ を Ca

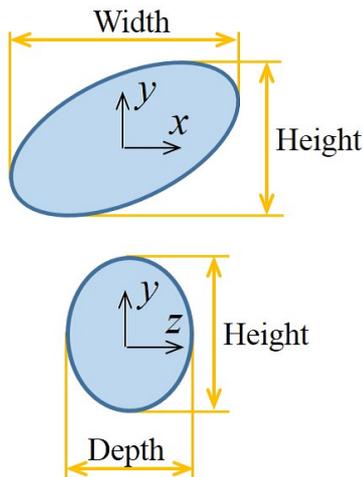


図 3.13 Definition of height, width, and depth of droplet

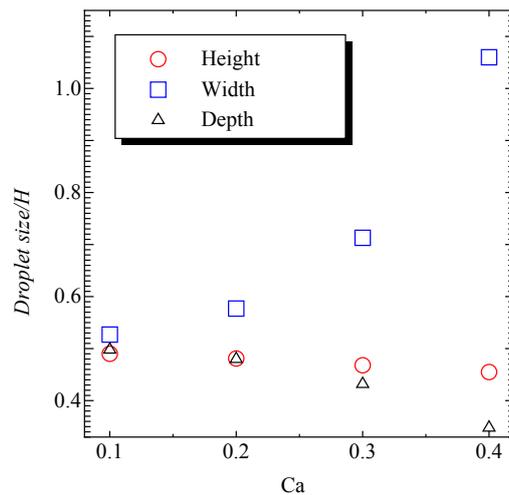


図 3.14 Droplet size as a function of Ca

の最大値としたが、他の研究 [98, 99, 101] において、ある一定の臨界 Ca 以上ではせん断により液滴が分裂することが確認されている。

まず、液滴形状の定性的な評価を行う。図 3.15 に、 $Ca = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$ における液滴中心を通る xy 断面の液滴形状について、本計算結果と VOF 法の結果 [98] の比較を示す。図から、本手法による結果は全ての Ca についてわずかに伸長を過小評価しているものの、概ねよく一致していることが確認される。特に Ca が高いほど、伸長が過小評価されている。これは、本研究で用い

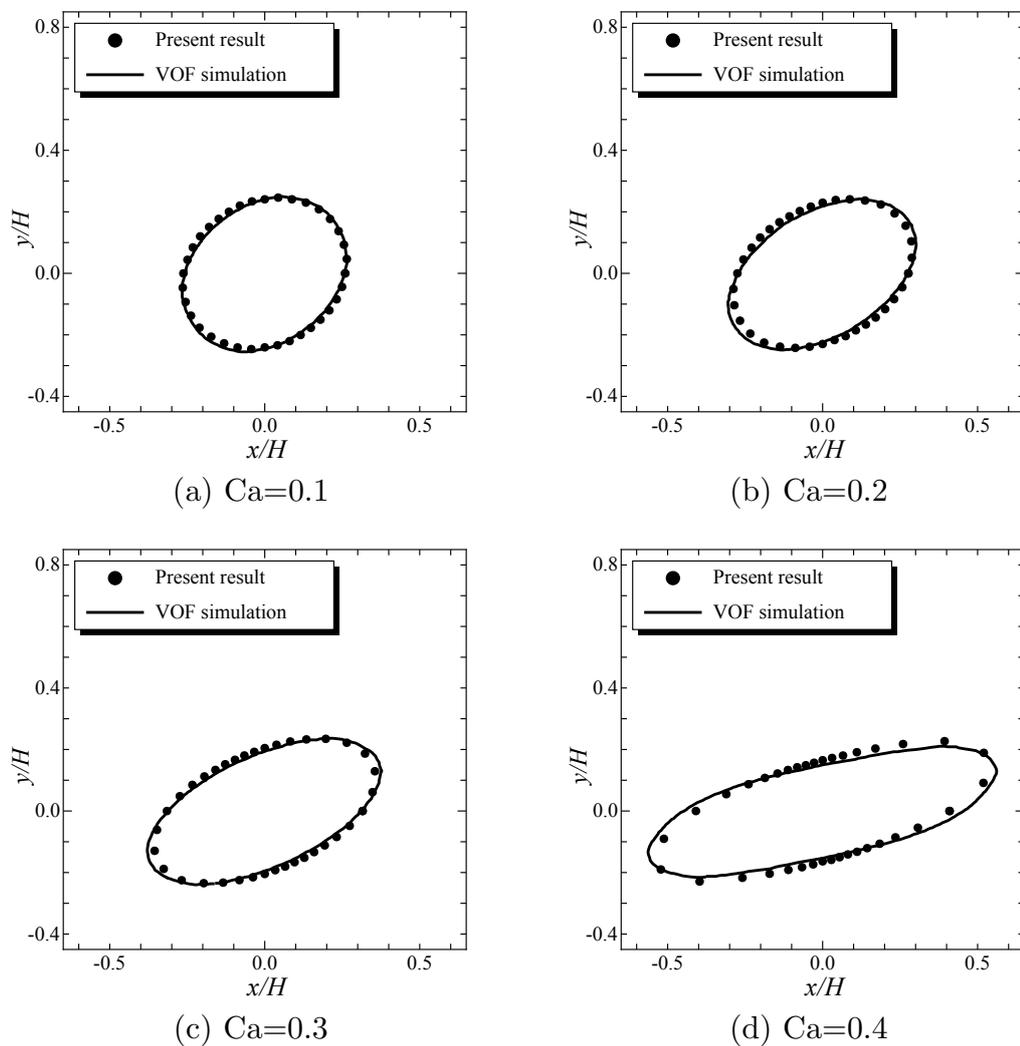


図 3.15 Comparison of the droplet shape between the present and VOF methods

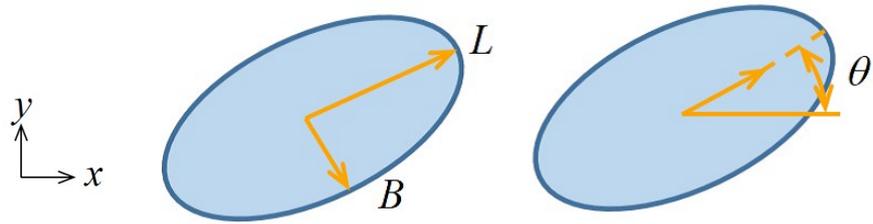


図 3.16 Definition of deformation parameters

たポテンシャルモデルでは表面張力が過大評価されるため [90]、液滴の伸長が小さく見積もられたのが原因である。界面の曲率が大きくなると界面付近での粒子数密度が下がり、式 (2.37) から圧力が低くなる。それに伴い粒子間距離が小さくなり、さらに表面張力が過大評価される。

次に、液滴形状の定量的な評価を行う。定量的評価のために、液滴の変形の大きさ及び液滴の変形角度について評価パラメータ D, θ をそれぞれ定義する。

$$D = \frac{(L - B)}{(L + B)} \quad (3.20)$$

ここで、 L, B はそれぞれ液滴形状の長軸・短軸、 θ は液滴の長軸と x 軸のなす角を表し (図 3.16)、液滴の変形が大きくなるほど D は大きく、液滴の傾きが大きくなるほど θ は小さな値をとる。

図 3.17 に、各 Ca における変形パラメータ D の値をまとめた。 Ca は粘性と表面張力の比を表す無次元数であり、 Ca が大きいほど D が大きくなるはずであるが、本手法による計算結果においても同様の傾向が確認された。また、過去の数値的 [98, 100, 101]・実験的研究 [99] の結果とよく一致しており、高精度な計算ができていることがわかる。

各 Ca における変形角度 θ の値を図 3.18 にまとめる。液滴は伸長が大きくなるほど、主流方向に沿う形となるため、 Ca が大きくなるほど θ は小さくなる。本手法による計算結果でも同様な傾向が得られた。また、実験的研究 [99] と比較して変形角度 θ を過大評価したが、他の数値的結果 [98, 100] とは良好な一致を示した。Rumscheidt らの実験的研究 [99] において、変形角度の正確な計測が困難であることが述べられていることから、この実験結果との差異は実験的誤差の範囲内であると考えられる。

以上、液滴形状の定性的、定量的評価より、本計算手法による二相流計算の

結果が実現象をよく捉えられていることが確認できた。

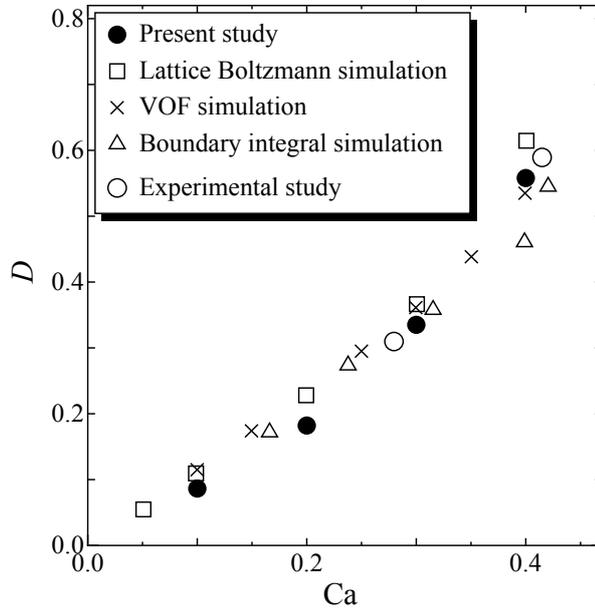


図 3.17 Deformation parameter D as a function of Ca

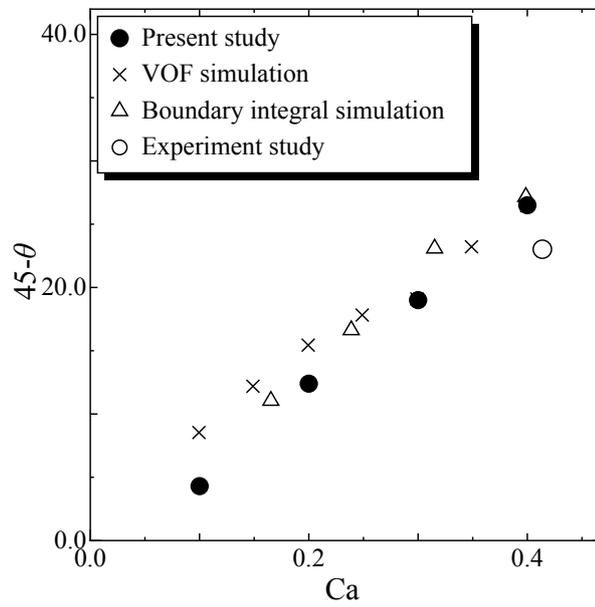
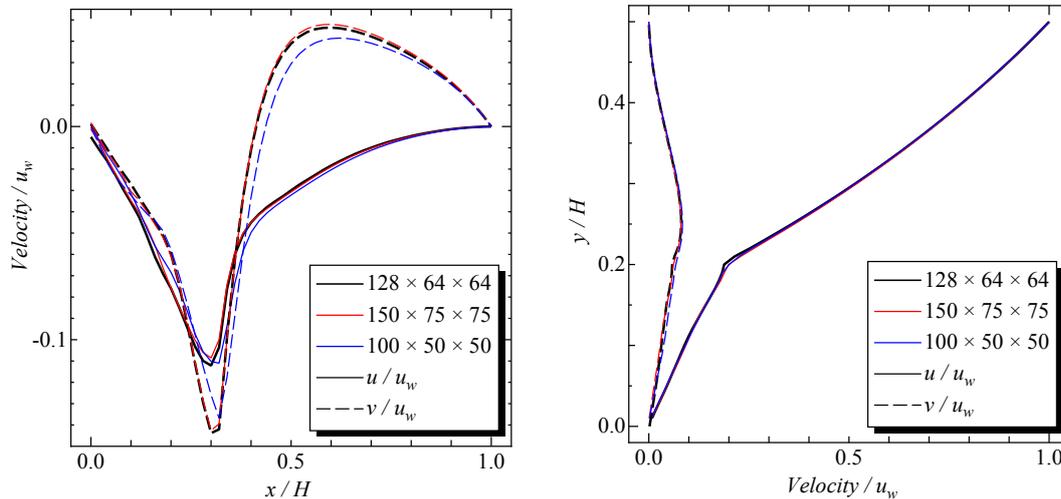


図 3.18 Deformation angle θ as a function of Ca

格子依存性の確認

本節では、格子法計算における計算解像度に対する依存性の確認を行う。ここでは計算解像度の異なる3つのデカルト格子を用いて、 $Re = 0.2$, $Ca = 0.3$ の計算を行い、流れ場および液滴形状について比較を行った。採用した格子は $100 \times 50 \times 50$, $128 \times 64 \times 64$, $150 \times 75 \times 75$ の解像度を持ち、総計算点数はそれぞれ約 250,000, 524,000, 844,000 点である。ここまで議論した計算では $128 \times 64 \times 64$ の計算解像度を用いたため、より粗い格子、より細かい格子と比較することとなる。この3 Case において、変更される条件は格子解像度のみであり、粒子法における計算解像度は変化させていないことを注記しておく。

まず、流れ場の比較を行う。ここでは流れ場の代表的な物理量として、液滴中心を通る x, y 軸に沿った速度の各方向成分 u, v を採用した。図 3.19 (a), (b) に各計算解像度を用いて得られた速度場 u, v を壁面の移動速度 u_w で無次元化し、それぞれ x, y 軸沿いの分布として示す。図中曲線の色 (黒、赤、青) はそれぞれ $128 \times 64 \times 64$, $150 \times 75 \times 75$, $100 \times 50 \times 50$ の計算解像度を、線



(a) Along x axis
 (b) Along y axis
 図 3.19 Dependency of the grid resolution on velocity profiles in (a) x axis and (b) y axis

種 (実線、破線) はそれぞれ速度 u, v の無次元数を表す。図 3.19 (b) では、 $u/u_w, v/u_w$ については全ての計算解像度でほとんど差が認められなかった。しかしながら、図 3.19 (a) では $128 \times 64 \times 64, 150 \times 75 \times 75$ では計算結果がよく一致しているのに対し、 $100 \times 50 \times 50$ と他の 2 Case では多少の差異が生じている。中でも v/u_w では大きな差異が見られるが、これは図 3.10 の赤点部に示した、液滴の回転に引き摺られる流れと流入した流れ、液滴から剥がれた流れの干渉に対して、より高い解像度が必要になるためであると考えられる。以上から、本計算においては $128 \times 64 \times 64$ 以上の解像度であれば、解像度依存性の影響を受けることはなく、本計算では十分な計算解像度によりなされていることが示された。

次に、液滴の形状について検証を行う。図 3.20 に各計算解像度を用いて計算した、液滴の xy 断面形状を示す。図から、 $128 \times 64 \times 64, 150 \times 75 \times 75$ では液滴形状はよく一致し、 $100 \times 50 \times 50$ では他の 2 Case と比べ変形を過大に評価していることがわかる。

図 3.21 に、各格子解像度を用いて計算した変形パラメータ及び変形角度 (図 3.16 参照) を、 $128 \times 64 \times 64$ の計算との変化率で示した。図 3.21 から、 $100 \times 50 \times 50$ では大きな差異が出ていることが確認される。このことから、液滴形状についても $128 \times 64 \times 64$ 以上の解像度を設定することで、格子依存

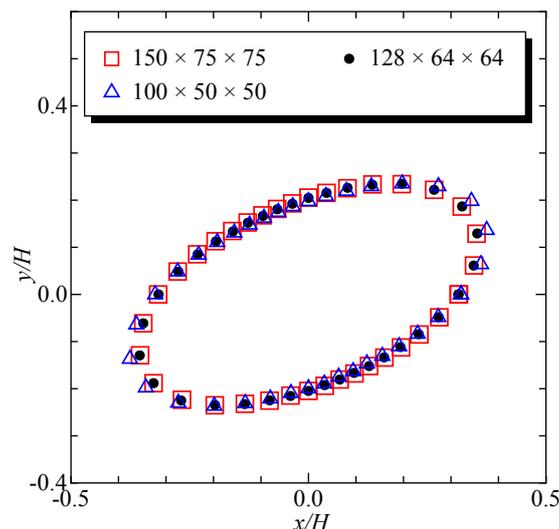


図 3.20 Dependency of the grid resolution on droplet shape

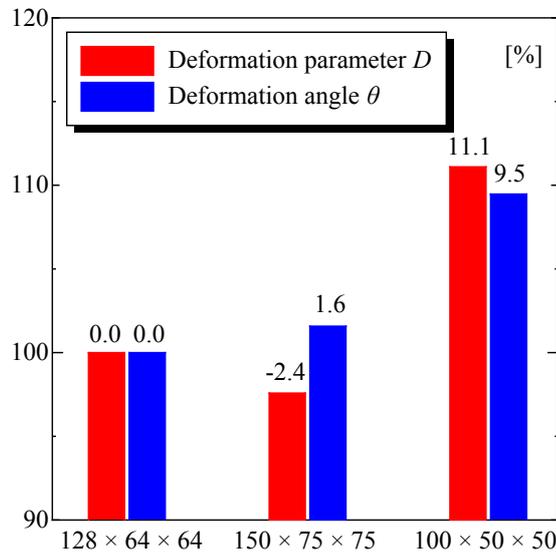


図 3.21 Normalized D and θ for different computational resolutions

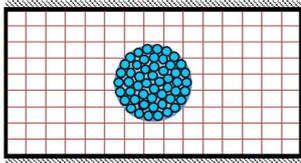
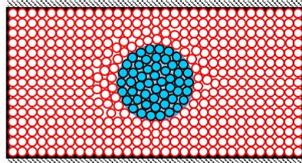
性の影響を受けることなく、計算を行うことが可能である。

よって、流れ場、液滴形状の比較から、実際の計算で用いた $128 \times 64 \times 64$ の解像度で、十分な計算解像度を有していることが示された。

計算コストの評価

本節では本手法による計算コストについて述べる。比較のため、2.2.7 節に記載した気液二相流計算手法を用いて、液滴、周囲流体を全て MPS 法を用いた計算を行い、本手法による計算コストとの比較を行った。本手法による MPS-MAC 法計算と全領域 MPS 法による計算 (以下、All-MPS 法とする) の総計算点、初期設定コスト、計算コスト、計算手法の概要を表 3.1 に示す。初期設定コストおよび計算コストは、All-MPS 法計算による計算時間を 1.0 として、それに対する比率として表している。MPS-MAC 法の総格子点数は計算粒子 18,946 + 計算格子 524,288 = 543,234 であり、All-MPS 法計算の計算粒子数 500,777 と比べ、増加している。これは本手法では周囲流体の計算に用いる MAC 法格子を MPS 法で計算する液滴領域に対しても重複して生成しているためである。しかし、MPS 法は MAC 法と比べ計算点の増加に対する計算コストの増加率が高いため、計算領域の大部分を格子法を用いて計算する本

表 3.1 Comparison of computational costs in simulation of droplet in shear flow

	MPS-MAC method	All-MPS method
Computational points	543,234	500,777
Initial setting cost	0.14	1.00
Computational cost	0.20	1.00
Schematics of computation		

計算手法では、All-MPS 法で計算する場合と比べ約 80% の計算コストを低減することに成功した。また、粒子配置と格子生成を含めた初期設定にかかるコストに関しては、約 86% のコストが削減された。

以上より、本手法による計算コストの削減効果が確認された。特に領域に対して粒子法計算領域の割合が小さくなるケースについて計算コスト低減効果が高いと考えられる。

3.4 結言

格子法・粒子法のカップリングに基づく多相流計算手法の開発および検証を行った。本手法の検証のために、せん断流内の液滴変形シミュレーションを行い、流れ場及び液滴の変形挙動について、数値的・実験的研究の結果と比較を行った。得られた知見は以下の通りである。

- Ca が大きくなるほど、液滴の表面張力に対する周囲流体のせん断力が大きくなり、液滴長さは増加、高さ・幅が減少し、液滴は扁平な形状で流れに対して小さな角度をとる。
- 液滴の変形が大きくなるほど、液滴と流入する流れの衝突による高圧部が拡大し、逆に液滴から流れが剥がれることで生じる低圧領域

が収縮する。

- 液滴は中心部まで全体が回転しており、他の数値的・実験的研究と同様の傾向が得られた。また、液滴の回転に周囲流体が引きずられ、液滴に沿う流れが発生する。
- 液滴中心断面における形状について、VOF 法を用いた数値的研究と比較を行い、定性的に良好な一致を得ることができた。
- 液滴形状について、変形パラメータ D 及び変形角度 θ を数値的・実験的研究と比較を行い、よい一致を得ることができた。
- 格子解像度による影響を流れ場及び液滴形状について調査し、本計算における格子解像度の妥当性を確認した。
- 本手法をにより VOF 法などで用いられる流体充填率のような間接的な変数を介すことなく直接的に界面を捉え、数値拡散の影響を受けることなく、相間の相互作用及び界面の変形を高精度に取り扱うことが可能となった。
- 計算領域全体を MPS 法を用いて計算する場合と比較し、本手法では計算コスト削減効果が得られることが確認された。特に、計算領域に対して MPS 法計算領域が小さくなるほど、コスト削減効果が大きいと考えられる。

今後の展望として、以下に示す更なる発展・調査が必要である。

- MPS 法から MAC 法へと情報伝達を行う際の MAC 法に対する境界条件設定の精緻化 (IB 法 [60] など)
- MPS 法・MAC 法の解像度比の許容値及び高解像度比による影響の調査
- MAC 法における計算格子のアスペクト比による影響の調査
- MAC 法に圧縮性流体に対応できる手法を導入することによる圧縮性計算への適用

第 4 章 MPS 法 - MAC 法カップリングによる固気液三相流計算手法

4.1 緒言

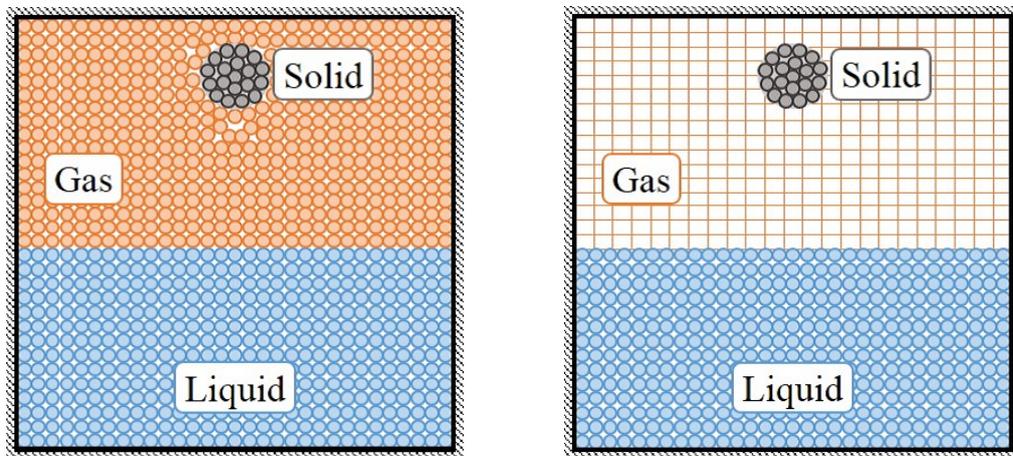
第 2 章では固気液三相の全てを Explicit MPS 法により計算する手法を、第 3 章では気液相を Explicit MPS 法と MAC 法のカップリングにより計算する手法を開発した。本章ではこれら 2 つの手法を組み合わせることで、固液相を Explicit MPS 法により、気相を MAC 法により計算し、両計算カップリングする手法を開発する。検証には、第 2 章でも固気液三相流計算手法の検証に用いた固体粒子の液面衝突シミュレーションを用い、手法の妥当性を確認する。また、固気液三相を全て Explicit MPS 法を用いた場合の結果と比較し、計算コストに関するメリットを評価する。

4.2 数値計算手法

4.2.1 MPS-MAC 法カップリングによる固気液三相流計算手法

本計算手法では、固液相を Lagrangian 的に、気相を Eulerian 的に計算を行う。本節では、MAC 法と MPS 法のカップリングによる固気液三相流計算手法について記述する。

図 4.1 (a), (b) に、第 2 章で開発した全ての領域を MPS 法により扱う手法と MAC 法・MPS 法のカップリング手法を用いた場合との固気液三相流計算の取扱いの比較を示す。前章と同様に、全ての領域を MPS 法により扱う手法を All-MPS 法、MPS 法・MAC 法のカップリング手法を MPS-MAC 法と表記する。図のように、MPS-MAC 法では All-MPS 法の気相計算を MAC 法で置き換えた形となる。MPS-MAC 法の計算フローを図 4.2 に示した。図中左側が計算のメインフローであり、右側にその MPS 計算部分のみを取り出した MPS フローを示している。メインフローは 3.2.2 節に記述した気液相の取扱



(a) All-MPS method

(b) MPS-MAC method

図 4.1 Schematics of computational method for three phase simulation

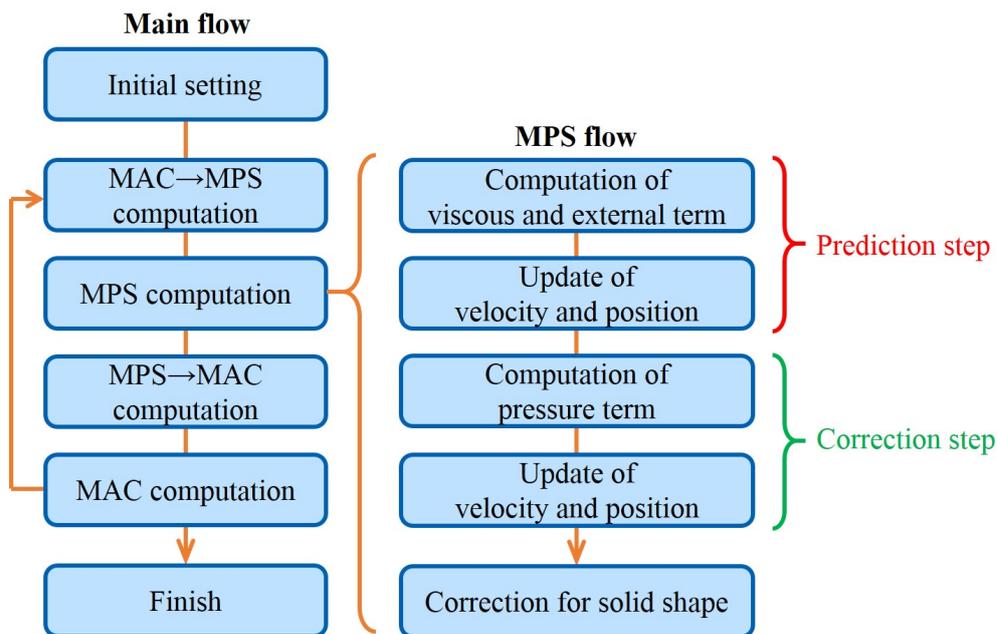


図 4.2 Flowchart for three-phase MPS-MAC method

いと同様であり、MAC 法 →MPS 法へ影響は式 (3.12), (3.13) に示す影響項により、MPS 法 →MAC 法へ影響は境界条件を通して伝達される。MPS フローは 2.2.7 節で記述した固液相の取扱いと同様であり、固液相粒子を移動させた後に固体が形状を保存するように固相粒子の位置・速度を修正する。固相

の物性は 2.2.8 節に記述した手法で決定する。

本手法を用いた固気液三相流計算の特徴として、以下の点が挙げられる。

1. 固気液三相の全てを計算可能
2. 各相間の相互作用を取り扱うことが可能
3. 気液界面、固体の形状変化に対応が可能
4. 表面張力の過大評価
5. 気相計算を非圧縮性として計算

まず、1. および 2. について、著者の知る限り固気液三相流を各相の相互作用を考慮して取り扱うことのできる商用流体解析ソルバーは発表されていない。一部のソルバーにおいて、気相情報を固定した状態で固液相への影響のみ考慮することで固気液三相流を扱うことができるが、固液相から気相に対する影響は考慮されていない。また、2. および 3. について、固体や気泡を単一計算点として Lagrange 的に追跡する手法では、固体・気泡は球形状として取り扱われ、形状の変化を考慮することができず、界面における詳細な相互作用の考慮は困難である。4. は本研究で採用した表面張力モデルにより表面張力が過大評価されている点 (付録 D 参照) で、高精度なモデルを用いることで改善できると考えられる。5. は本計算手法では気相計算に非圧縮性流体を取り扱う MAC 法を採用したことで、気相の圧縮性を考慮できない点であり、気相計算に圧縮性ソルバーを導入することで対応が可能である。

これらの特徴から、本計算手法は各相の相互作用や界面形状の変化が流れ場に対して大きな影響を及ぼす場合において有効な手法であると考えられる。一方で、各相の形状変化・相互作用が生じない現象や気泡・固体が球形状と仮定できるような現象においては、他手法を用いてより低い計算コストで固気液三相流を取り扱うことが可能である。また、液相の表面張力が大きな影響を及ぼす場合や気相計算において圧縮性の考慮が必要となる場合においては、本手法による取扱いは困難である。

手法の拡張として、気相計算に圧縮性ソルバーを導入することによる圧縮性計算への対応、固相計算に弾塑性体モデル [104] を導入することによる固体の変形への対応、固相計算に DEM [24] を導入することによる固体濃度の高い系への対応などが考えられる。

4.3 固体粒子の液面衝突シミュレーション

4.3.1 計算条件

本計算手法についても固体粒子の液面衝突シミュレーションにより手法の妥当性を検証する。計算条件は 2.4.1 節で述べたものと同様で、計算領域は図 2.14 (a), (b) 及び図 2.15、計算条件の詳細は表 2.2 に示した通りであり、作動流体は気相は空気、液相は水とし、固体は合成樹脂製の球である。MPS 法の初期粒子間距離は 0.006 m、MAC 法の格子は $100 \times 166 \times 100$ であり、第 2 章の All-MPS 法による計算と気相計算の解像度が同一となるよう、また、MPS, MAC 両計算の解像度が等しくなるよう設定している。格子法における境界条件は、上境界では自由流入出として速度・圧力をゼロ次外挿を行い、その他の境界においては滑りなし壁面条件を設定している。

また、大同 [88] によると液面への衝突速度が液相内での終端速度の十数倍から数倍の場合に、同様の傾向が得られると報告されている。そのため、上記の条件を Case 2 として、衝突速度が前述の範囲内となるようにそれぞれ液面衝突速度を $-15, +15\%$ とした Case 1, Case 3 を設定し、衝突速度の固体粒子および液面の挙動への影響を比較した。

4.3.2 結果と考察

手法の検証

本節では、MPS-MAC 法を用いた固体粒子の液面衝突問題の固気液三相流計算結果を示し、実験値および All-MPS 法による結果と比較することで計算手法の検証を行う。図 4.3 (a), (b), (c), (d) に MPS-MAC 法による計算結果の時系列スナップショットを示す。図より、固体粒子が自由落下し、液面衝突後、後流に気泡を巻き込む様子が捉えられている。図 2.16 と同様に $t = 0.00$ s で液面へと衝突、 $t = 0.04$ s で固体粒子後流に円錐台の気相領域が形成され、 $t = 0.08, 0.12$ s で気相領域の断裂により気泡が巻き込まれている。このような気泡巻き込みプロセスは実験的研究 [88, 89] と同様の傾向であり、定性的に妥当な結果が得られていると考えられる。

図 4.4 に液中沈降速度の定量的な評価を行う。図中縦軸は固体粒子の鉛直下

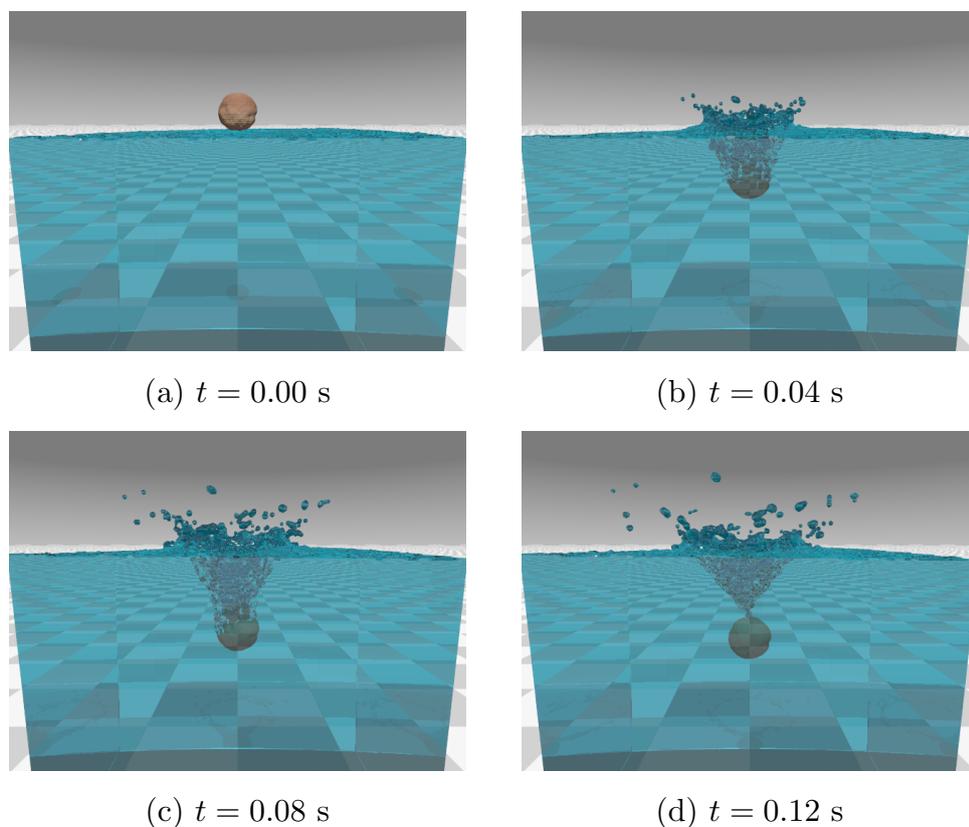


図 4.3 Snapshots of the solid sphere impingement problem with MPS-MAC method

向き速度 V を固体粒子の液相内での終端速度 $V_{ter.}$ で無次元化した無次元速度、横軸は固体粒子が液面に衝突した時間を 0 s とした経過時間 t である。図より固体粒子は液面衝突とともに急減速し、その後、減速の勾配を減じながら液中での終端速度へと向かい徐々に減速する。青線で示される MPS-MAC 法による計算結果は実験結果および All-MPS 法による結果と同様の傾向を再現しており、定量的に妥当な一致を示している。しかし、All-MPS 法による結果と同様に MPS-MAC 法においても液面衝突直後の固体粒子の減速を過小評価しており、液面衝突直後については実験値との誤差が認められる。この固体粒子減速の過小評価は付録 D にも示すとおり、本研究で用いている表面張力モデルによる表面張力の過大評価に伴い、液面衝突による液面の変形が抑えられることで固体粒子のエネルギー消費が小さく見積もられていることに起因すると考えられる。

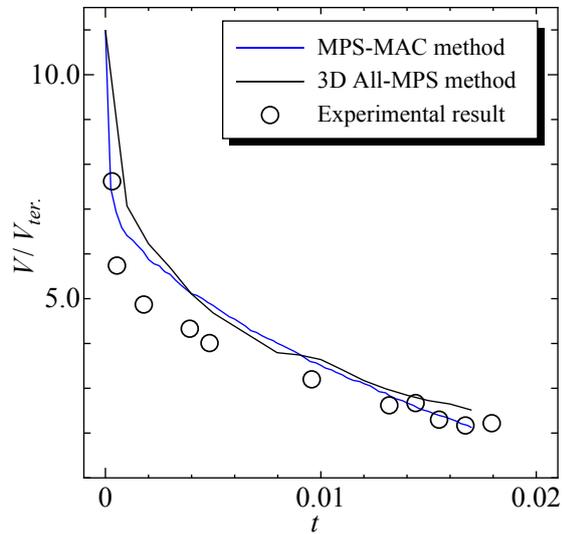


図 4.4 Time history of the downward velocity of the solid sphere

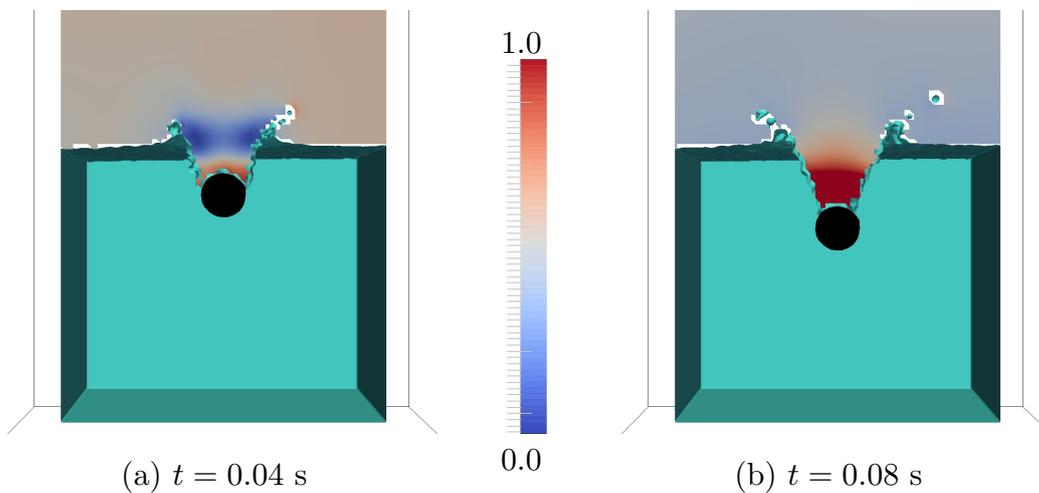


図 4.5 Distribution of normalized pressure behind the solid particle with MPS-MAC method

次に MPS-MAC 法と All-MPS 法の結果を比較すると、MPS-MAC 法では液面衝突直後の減速を All-MPS 法と比べよく予測できている。図 4.5 に $t = 0.04, 0.08$ s における固体粒子後流の圧力分布を示す。図中、液相付近で圧力分布が表示されていない領域は、MPS 法から MAC 法へと情報を受け渡す

際に境界条件として扱われた領域であり、MAC 法計算がなされていない領域である。図より $t = 0.04, 0.08$ s とともに固体粒子後流において高圧領域が再現されているが、Explicit MPS 法では圧力計算について不自然な圧力振動が発生するとの報告があり [102]、本計算手法では気相計算を MAC 法により行うことで、固体粒子後流の気相圧力計算がより精度の高く安定的に行われていると考えられる。液面上部の圧力は $t = 0.04$ s のほうが高圧となっているが、固体粒子が液面に衝突し、液面が上昇することによる圧力上昇が捉えられた結果である。 $t = 0.04$ s については、固体粒子の衝突により形成されるクラウンの内面において低圧領域が形成されており、図 2.20 に示した All-MPS 法による結果と同様の傾向を示している。

衝突速度による影響

本節では Case 1, 2, 3 の結果を比較することで、衝突速度による固体粒子および液面挙動への影響を調査する。図 4.6 に各 Case における衝突後の固体粒子の鉛直下向き速度の時間履歴を示す。図より衝突速度の異なる Case 1, 3 についても、図 4.4 にも示した Case 2 の結果と同様の傾向が得られており、液面衝突直後に急減速が生じ、その後終端速度に向かって徐々に減速する。これは、大同 [88] により報告されている、液相内での終端速度に対して十数倍から

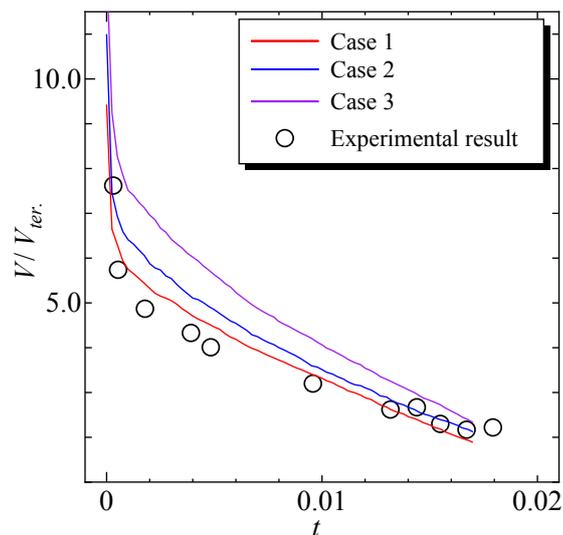


図 4.6 Comparison among different impingement speeds

数倍の速度で液面に突入した場合、同一モードの現象が観測されることと対応している。また、このとき液面衝突速度が大きいほど減速が早く、各 Case での速度差は時間とともに小さくなるのがわかる。

次に、固体粒子の衝突により液面に生じるクラウンについて比較を行う。図 4.7, 4.8 にそれぞれ $t = 0.04, 0.08$ s における、クラウンの形状を真上から見た可視化図を示す。図よりクラウン径は $(a) < (b) < (c)$ であり、衝突速度が大きくなるほどクラウンの径が大きくなっていることが確認できる。ここでは、液面より飛び散った粒子のうち xy 断面上で最も固体粒子中心から離れた粒子までの距離をクラウン半径としている。図 4.9 に各 Case におけるクラウン半径 L_c を液面深さ L により無次元化した値の時間履歴を示す。図より、衝突速度が大きくなるほどクラウン径が大きくなっていることがわかる。固体粒子が液相内へと突入するにしたがって、固体粒子の運動エネルギーが液相へと伝達されることでクラウンが形成されるが、液面衝突速度が大きいほど固体粒子に残

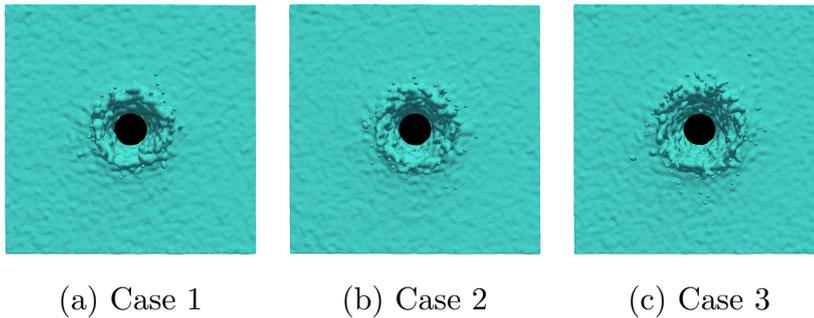


図 4.7 Comparison of crown shapes with different impingement speed at $t = 0.04$ s

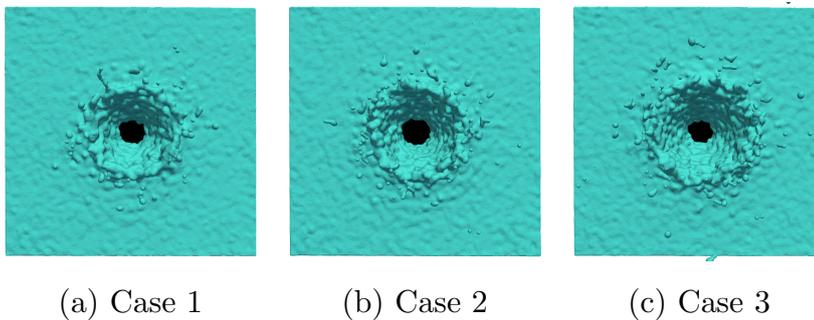


図 4.8 Comparison of crown shapes with different impingement speed at $t = 0.08$ s

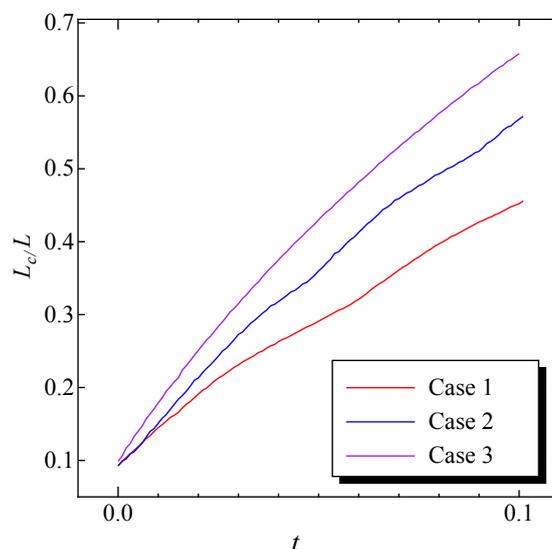


図 4.9 Time history of the crown width

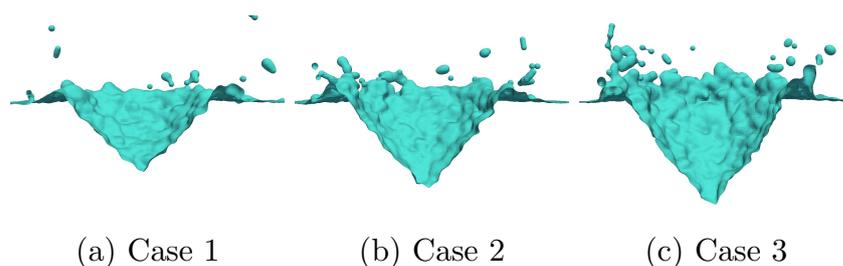


図 4.10 Surface shapes after liquid surface resurrection (side view)

存するエネルギーが大きくなるため、大きなクラウンが形成される。しかしながら、固体粒子の液相内沈降速度が大きいほど周囲流体との速度差が大きくなることから、時間当たりに失われるエネルギーが大きくなり、固体粒子の減速の加速度は大きくなる (図 4.6 参照)。このような固体の液面突入速度が大きいほど、減速の加速度が大きくなる傾向は過去の実験的研究 [103] から得られている傾向である。

図 4.10 (a), (b), (c) に各 Case における、固体粒子後流に気相が巻き込まれた直後の界面形状を示す。図より全ての Case で液面の形状はすり鉢状の形状となっており、衝突速度が大きくなるほどすり鉢形状の窪みが深くなっていることが確認できる。図 4.11 にすり鉢形状の xy 断面における断面形状を示す。なお、すり鉢形状のみを抽出するため、液面高さが L 以下となる部分のみをプ

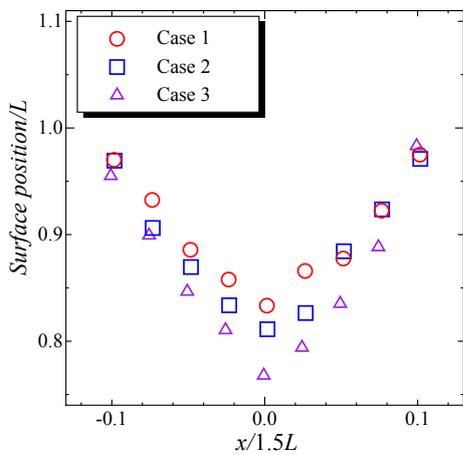


図 4.11 Surface shapes after liquid surface resurrection (vertical sectional view)

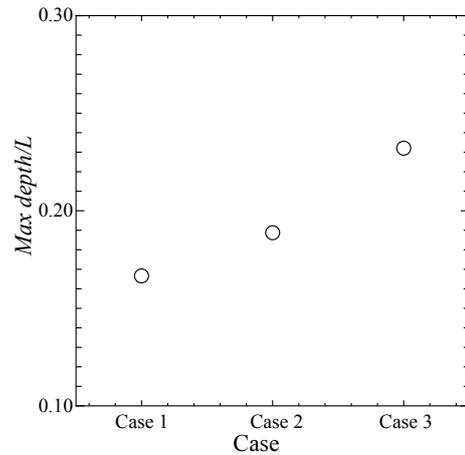


図 4.12 Max depths of depression after liquid surface resurrection

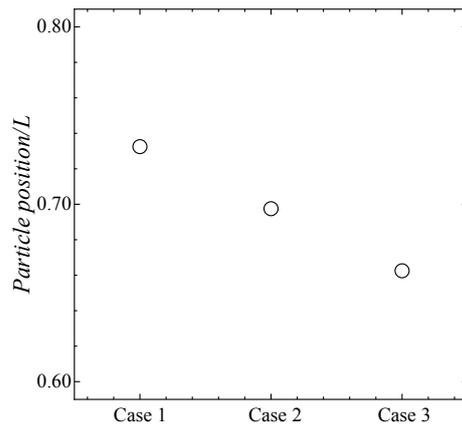


図 4.13 Solid particle positions after liquid surface resurrection

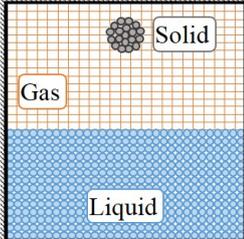
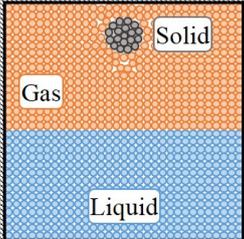
ロットした。図中縦軸は初期の液面深さ L で無次元化した窪み部分の液面高さを、横軸は x 座標を計算領域の横幅 $1.5L$ で無次元化した値を表す。図より、気相巻き込み時の窪み深さは衝突速度が大きくなるほど深くなるのに対し、窪み部分の幅は衝突速度によりほとんど影響されないことがわかる。各 Case の巻き込み時窪み深さの最大値が衝突速度と共に大きくなることは図 4.12 から確認される。図中縦軸は、初期の液面深さ L で無次元化した窪みの最大深さであり、横軸は各 Case を表している。図 4.13 に気相巻き込み時の固体粒

子の y 座標を初期の液面深さ L で無次元化した値を示す。図 4.6 より固体粒子の衝突速度が大きいほど固体粒子の減速が早いことが示されているが、本図から固体粒子の衝突速度が大きくなるほど、気相巻き込み時に固体粒子が液面に深く沈降していることがわかった。

計算コストの評価

本節では MPS-MAC 法のカップリングによる固気液三相流計算手法の計算コストについて述べる。比較対象として、第 2 章で提案した固気液三相全てを MPS 法により計算した All-MPS 法による結果と比較を行った。本手法による MPS-MAC 法計算と All-MPS 法による計算の総計算点、初期設定コスト、計算コスト、計算手法の概要を表 4.1 に示す。初期設定コストおよび計算コストは、全領域を MPS 法を用いた計算による計算時間を 1.0 として、それに対する比率として表している。MPS-MAC 法の総格子点数は計算粒子と計算格子合計で $63,580 + 1,660,000 = 1,725,580$ であり、MPS 法のみ計算粒子数 1,616,046 と比べ、増加している。これは計算手法の性質であり、気相計算用の MAC 法格子を固液相領域に重複するように生成しているためである。しかし、固液相との重複部分の格子は MAC 計算はなされず、また、MPS 計

表 4.1 Comparison of computational costs in solid-particle impingement simulation

	MPS-MAC method	All-MPS method
Computational points	1,725,580	1,616,046
Initial setting cost	0.24	1.00
Computational cost	0.40	1.00
Schematics of computation		

算は計算点の増加に対する計算コストの増加が大きいため、MPS-MAC 法では All-MPS 法と比較して計算コストが 60% 低減された。また、粒子配置および格子生成に必要となる計算コストは約 76% 低減され、本手法による計算コストの低減効果が確認された。

MPS-MAC 法においては、3.2.2 節に記載した仮想粒子の配置に対する計算コストが大きいため、計算領域に対する MPS 法計算領域と MAC 法計算領域間の境界面が占める割合が大きいかほど All-MPS 法に対する計算コスト低減率が小さくなる。そのため、第 2 章で行ったせん断流内の液滴変形シミュレーションと比較して MPS-MAC 法間の界面が大きくなる本計算では、表 3.1 に示したほどの低減効果は得られなかった。

4.4 結言

格子法・粒子法のカップリングに基づく固気液三相流計算手法の開発及び検証を行った。本手法の検証のために固体粒子の液面衝突シミュレーションを行い、実験値および All-MPS 法による計算結果と比較した。また、衝突速度の異なる Case の比較を行うことで、衝突速度による固体粒子および液面の挙動への影響を調査した。得られた知見は以下の通りである。

- 固体粒子の液面衝突シミュレーションにおいて、固体粒子の液面衝突から液中沈降のプロセスについて、実験的に得られている典型的な挙動と定性的に同様の傾向が再現され、固体粒子の鉛直下向き速度について実験値と妥当な一致を得ることができた。
- MPS-MAC 法と All-MPS 法の結果を比較すると、MPS-MAC 法では固体粒子の液面衝突直後の減速をより正確に捉えている。これは気相計算を MAC 法により行うことで固体粒子後流の気相計算についてより高い予測精度が得られたことに起因していると考えられる。
- 液面衝突速度を変化させた場合も固体粒子の鉛直下向き速度の時間履歴は同様の傾向を示すが、衝突速度が大きいかほど形成されるクラウン径も大きくなり、結果として、固体粒子のエネルギーが多くが失われることで液面衝突後の減速が早くなる。
- 気相巻き込み時の液面復活により液面にはすり鉢状の窪みが形成される。すり鉢形状は液面衝突速度が大きくなると共に深くなるが、

窪み形状の幅に大きな影響は見られなかった。また、そのとき液面衝突速度が大きくなると液面復活時の固体粒子の沈降距離も大きくなる。

- 固気液三相流計算についても、MPS-MAC 法を用いることで大幅な計算コストの削減が可能であることが確認された。

今後の展望として、以下に示す更なる発展・調査が必要である。

- 不等間隔格子を用い界面付近の計算解像度を向上させることによるより詳細な現象の再現
- さらに広範囲な衝突速度及び様々な物性による影響調査
- 固体の複雑形状に対する適用性の調査
- 液相内で粒子法・格子法をカップリングする手法の開発

第5章 総論

5.1 結論

本研究では、固気液三相流解析のための新たな計算手法の提案を行った。過去の固気液三相流計算手法に関する研究は、主に三相流動層に着目したものであり、三相流計算手法として気液相と固相の干渉などの詳細な現象の再現や手法の適用性の向上を目的とした研究はほとんどなさせておらず、固気液三相の相互作用を取り扱うことのできる固気液三相流計算手法の開発が必要である。そのため、本研究では(1) 固気液三相を MPS 法により扱う手法、(2) 気液二相を MPS 法と MAC 法のカップリングにより扱う手法、(3) 固気液三相を MPS 法と MAC 法のカップリングにより扱う手法の3段階で固気液三相流計算手法を開発し、それぞれ他の実験・数値的研究と比較を行うことで検証を行った。

第2章では、固気液三相を MPS 法により扱う手法の提案を行った。手法の検証のために、ダム崩壊シミュレーション及び固体粒子の液面衝突シミュレーションを行い、気液二相流・固液二相流・固気液三相流計算について実験値との比較を行った。得られた知見は以下の通りである。

- 液単相・気液二相流計算について、ダム崩壊シミュレーションを用いて検証を行った。ダム崩壊時の液面の挙動について実験値との比較を行い、両計算共によい一致を得ることができた。
- ダム崩壊シミュレーションでは、気液二相計算と液単相計算の結果を比較し、気液二相計算において液単相よりも液面速度が小さく評価された。これは、液相に対する気相による抵抗、つまり空気抵抗が再現された結果であると考えられる。
- 固液二相・固気液三相流計算について、固体粒子の液面衝突シミュレーションを行った。両計算で液面衝突後の固体粒子の鉛直下向き速度について実験値とよい一致が得られた。
- 固体粒子が液面に衝突・沈降する過程で固体粒子後流への気泡の巻

き込みが再現され、巻き込みプロセスについて実験的な研究と定性的に同様の傾向を得ることができた。

- 固液二相・固気液三相流計算の結果を比較すると、固気液三相計算では固液二相計算と比べ、固体粒子の液面衝突による減速を小さく見積もった。これは、固気液三相流計算では固体後流における高圧領域により、固体粒子前後の圧力差が減少するからである。
- 本手法により、液相をベースとする気液二相・固液二相・固気液三相流に対応できることが示された。

第3章では、気液二相をMPS法とMAC法のカップリングにより扱う手法の提案を行った。手法の検証のために、せん断流内の液滴変形シミュレーションを行い、流れ場及び液滴の変形挙動について、数値的・実験的研究の結果と比較を行った。得られた知見は以下の通りである。

- Ca が大きくなるほど、液滴の表面張力に対する周囲流体のせん断力が大きくなり、液滴長さは増加、高さ・幅が減少し、液滴は扁平な形状で流れに対して小さな角度をとる。
- 液滴の変形が大きくなるほど、液滴と流入する流れの衝突による高圧部が拡大し、逆に液滴から流れが剥がれることで生じる低圧領域が収縮する。
- 液滴は中心部まで全体が回転しており、他の数値的・実験的研究を同様の傾向が得られた。また、液滴の回転に周囲流体が引きずられ、液滴に沿う流れが発生する。
- 液滴中心断面における形状について、VOF法を用いた数値的研究と比較を行い、定性的に良好な一致を得ることができた。
- 液滴形状について、変形パラメータ D 及び変形角度 θ を数値的・実験的研究と比較を行い、よい一致を得ることができた。
- 格子解像度による影響を流れ場及び液滴形状について調査し、本計算における格子解像度の妥当性を確認した。
- 本手法をによりVOF法などで用いられる流体充填率のような間接的な変数を介すことなく直接的に界面を捉え、数値拡散の影響を受けることなく、相間の相互作用及び界面の変形を高精度に取り扱うことが可能となった。

- 計算領域全体を MPS 法により計算する場合と比較し、本手法では計算コスト削減効果が得られることが確認された。特に、計算領域に対して MPS 法計算領域が大きくなるほど、コスト削減効果が大きいと考えられる。

第 4 章では、第 2,3 章で提案した 2 手法を組み合わせることで、固気液三相を MPS 法と MAC 法のカップリングにより扱う手法の提案を行った。手法の検証のため、固体粒子の液面衝突シミュレーションを行い、実験値との比較を行った。また、液面衝突速度について 3 Case の解析を行い、固体粒子及び液面の挙動への調査を行った。得られた知見は以下の通りである。

- 固体粒子の液面衝突シミュレーションにおいて、固体粒子の液面衝突から液中沈降のプロセスについて、実験的に得られている典型的な挙動と定性的に同様の傾向が再現され、固体粒子の鉛直下向き速度について実験値と妥当な一致を得ることができた。
- MPS-MAC 法と All-MPS 法の結果を比較すると、MPS-MAC 法では固体粒子の液面衝突直後の減速をより正確に捉えている。これは気相計算を MAC 法により行うことで固体粒子後流の気相計算についてより高い予測精度が得られたことに起因していると考えられる。
- 液面衝突速度を変化させた場合も固体粒子の鉛直下向き速度の時間履歴は同様の傾向を示すが、衝突速度が大きいほど液面衝突後の減速は早く、また、液面にできるクラウンの径が大きくなる。
- 気相巻き込み時の液面復活により液面にはすり鉢状の窪みが形成される。すり鉢形状は液面衝突速度が大きくなると共に深くなるが、窪み形状の幅に大きな影響は見られなかった。また、そのとき液面衝突速度が大きくなると液面復活時の固体粒子の沈降距離も大きくなる。
- 固気液三相流計算についても、MPS-MAC 法を用いることで大幅な計算コストの削減が可能であることが確認された。

5.2 今後の課題

本節では本研究における今後の課題について述べる。以下に示した更なる調査・拡張を行うことで、より適用性・実用性の高い手法とすることが可能である。

- 気液界面における MPS-MAC カップリング法の精緻化
本研究では、気液相のカップリングで粒子法から格子法へと情報伝達を行う際の格子法に対する境界条件設定を、速度は MPS 法粒子からの単純な重み付き平均、圧力は MAC 法からの外挿としている。しかし、この手法では気液界面において厳密な速度及び圧力を設定できていない。そのため、界面の境界条件設定に IB 法を導入することでより精度の高い解析が可能であると考えられる。
- 格子法・粒子法の解像度比の許容値及び高解像度比による影響の調査
本研究では格子法・粒子法の解像度が同程度となるような設定を行っている。3.3.2 節において、格子幅：粒子径 = 1.5 : 1 の解析を行い、計算上問題が生じないことは確認しているが、格子幅：粒子径の許容値およびその計算精度への影響は調査していない。本手法では、不等間隔格子により MPS 計算手法領域付近に MAC 計算の解像度を局所的に高めることで、MPS 法を用いた高い界面捕捉精度と計算コスト低減を両立することが可能であるため、格子幅：粒子径の許容値及び計算解像度への影響調査が必要である。
- 格子法における計算格子のアスペクト比による影響の調査
前述の格子法・粒子法の解像度比と同様、3.3.2 節において計算格子にアスペクト比がある場合の計算を行い、計算上問題が生じないことは確認しているが、格子アスペクト比の許容値および計算精度への影響は調査していない。高アスペクト比格子による計算が可能であれば、本手法の適用性をさらに広げることが可能である。
- 格子法に圧縮性流体に対応できる手法を導入することによる圧縮性計算への適用
本計算手法では格子法計算に MAC 法計算を用いたため、気相計算

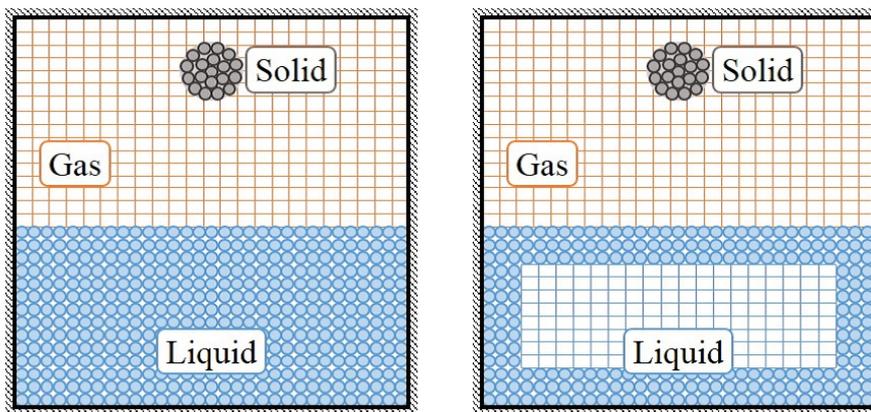
は非圧縮性流体の取扱いとなる。格子法計算を圧縮性計算に拡張することで、航空宇宙・機械などの産業分野においてより適用性を高めることが可能であると考えられる。

- 固体の複雑形状に対する適用性の調査

本研究では固体計算について球形状のみを扱ったが、より複雑な固体形状への適用性を調査が必要である。

- 液相内の粒子法・格子法カップリング手法の開発

本研究では気相計算を格子法により固液相を粒子法により扱ったが、さらに液相内で気液・固液界面付近のみを粒子法、その他の領域を格子法により計算する手法を開発することで更なる計算コストの削減が可能であると考えられる。図 5.1 (a), (b) にそれぞれ現在の手法及び上記の手法の概略を示す。



(a) Present work

(b) Future work

図 5.1 Future work for gas-liquid-solid three-phase simulation

参考文献

- [1] T. Yabe, F. Xiao, and Mochizuki. Simulation technique for dynamic evaporation processes. *Nucl Eng. Des.*, Vol. 455, pp. 45–53, 1995.
- [2] N. Ochiai, Y. Iga, M Nohmi, and T. Ikohagi. Numerical analysis of nonspherical bubble collapse behavior an induced impulsive pressure during first and second collaplses near the wall boundary. *J. Fluid Sci. Tech.*, Vol. 6, No. 6, pp. 860–874, 2011.
- [3] I. Akhatov, O. Lindau, A. Topolnikov, R. Mettin, N. Vakhitova, and W. Lauterborn. Collapse and rebound of a laser-induced cavitation bubble. *Phys. Fluids*, Vol. 13, No. 10, pp. 2805–2819, 2001.
- [4] C. D. Eggleton and A. S. Popel. Large deformation of red blood cel ghosts in a simple shear flow. *Phys. Fluids*, Vol. 10, pp. 1834–1845, 1998.
- [5] X. Gong, K. Sugiyama, S. Takagi, and Y. Matsumoto. The deformation behavior of multiple red blood cells in a capillary vessel. *J. Biomech. Eng.*, Vol. 131, No. 7, 074504, 2009.
- [6] E. L. Grossman, T. Zhou, and E. Ben-Naim. Towards granular hydrodynamics in two dimensions. *Phys. Rev. E*, Vol. 55, No. 4, pp. 4200–4206, 1997.
- [7] Y. Lan and D. Rosato. Macroscopic hebagior of vibrating beds of smooth inelastic spheres. *Phys. Fluids*, Vol. 7, No. 8, pp. 1818–1831, 1995.
- [8] Y. H. Taguchi and H. Takayasu. Power law velocity fluctuations due to inelastic collisions. *Europhys. lett.*, Vol. 30, pp. 499–504, 1995.
- [9] 川口寿裕, 田中敏嗣, 辻裕. 離散要素法による流動層の数値シミュレーション (噴流層の場合). 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 58, No. 551, pp. 2119–2125, 1992.

- [10] X. Zhang and G. Admadi. Eulerian-lagrangian simulations of liquid-gas-solid flows in three-phase slurry reactors. *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 60, pp. 5089–5104, 2005.
- [11] J. Wen, P. Lei, and L. Huang. Modelling and simulation of gas-liquid-solid three-phase fluidization. *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 192, pp. 941–955, 2005.
- [12] Y. Li, J. Zhang, and L. S. Fan. Numerical simulation of gas-solid-liquid fluidized systems using a combined CFD-VOF-DPM method: bubble wake behavior. *Chem. Eng. sci.*, Vol. 54, pp. 5101–5107, 1999.
- [13] Y. Li, G. Q. Yang, J. P. Zhang, and L. S. Fan. Numerical studies of bubble formation dynamics in gas-liquid-solid fluidization at high pressure. *Powder Tech.*, Vol. 116, pp. 246–260, 2001.
- [14] J. Zhang, Y. Li, and L. S. Fan. Discrete phase simulation of gas-liquid-solid fluidization systems: single bubble rising behavior. *Power Tech.*, Vol. 113, pp. 310–326, 2000.
- [15] 太田光浩, 酒井幹夫, 島田直樹, 本間俊司, 松隈洋介. 混相流の数値シミュレーション. 丸善出版, 2015.
- [16] C. W. Hirt and B. D. Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys.*, Vol. 39, pp. 201–225, 1981.
- [17] M. Sussmann, P. Smereka, and S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. *J. Comput. Phys.*, Vol. 114, pp. 146–159, 1994.
- [18] Y. C. Chang, T. Y. Hou, B. Merriman, and S. Osher. Level set formulation of Eulerian interface capturing methods for incompressible fluid flows. *J. Comput. Phys.*, Vol. 124, pp. 449–464, 1996.
- [19] F.H. Harlow and J.E. Welch. Numerical calculation of time dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, Vol. 8, pp. 2182–2189, 1965.
- [20] D. M. Anderson, G. B. McFadden, and A. A. Wheeler. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 30, pp. 139–165, 1998.

- [21] C. W. Hirt, A. A. Amsden, and J. L. Cook. An arbitrary Lagrangian-Eulerian computing method for all flow speed. *J. Comp. Phys.*, Vol. 14, pp. 227–253, 1974.
- [22] S. Koshizuka and Y. Oka. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nucl. Sci. Eng.*, Vol. 123, pp. 421–434, 1996.
- [23] J. J. Monaghan. An introduction to SPH. *Comput. Phys. Commun.*, Vol. 48, pp. 89–96, 1988.
- [24] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, Vol. 29, Issue 1, pp. 47–65, 1979.
- [25] T. Yabe and T. Aoki. A universal solver for hyperbolic equations by cubic-polynomial interpolation. *J. Comput. Phys.*, Vol. 66, pp. 219–232, 1991.
- [26] T. Yabe, F. Xiao, and T. Utsumi. The constrained interpolation profile method for multiphase analysis. *J. Comput. Phys.*, Vol. 169, pp. 556–593, 2001.
- [27] A. Harten. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. *J. Comput. Phys.*, Vol. 49, pp. 357–393, 1983.
- [28] P. K. Sweby. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 21, No. 5, pp. 995–1011, 1984.
- [29] 蔣勤, 高橋重雄, 村西佳美, 磯部雅彦. 波・地盤・構造物の相互作用に関する VOF-FEM 予測モデルの開発. 海岸工学論文集, Vol. 47, pp. 51–55, 2000.
- [30] 前野詩朗, 小川誠, L. G. Bierawski. VOF-DEM-FEM 連成モデルによる潜堤の挙動解析. 海岸工学論文集, Vol. 53, pp. 886–890, 2006.
- [31] 姫野武洋, 渡辺紀徳. 微小重力環境における気液界面挙動の数値解析. 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 65, No. 635, pp. 147–154, 1999.
- [32] 梁儒全, 里深信行. 標位関数法を用いた非圧縮性気液二相流における移動気液界面の挙動の数値計算. 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 64, No. 617, pp. 42–49, 1998.
- [33] J. A. Sethian. Level set methods and fast marching methods. *Cam-*

- bridge University Press, 1999.
- [34] S. Osher and R. Fedkiw. *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces*. Springer, 2003.
 - [35] W. K. Liu, H. Chang, J. S. Chen, and T. Belyschko. Arbitrary Lagrangian-Eulerian Petrov-Galerkin finite elements for nonlinear continua. *Comput. Meths. Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 68, pp. 259–310, 1988.
 - [36] T. Okamoto and M. Kawahara. Two-dimensional sloshing analysis by the arbitrary lagrangian-eulerian finite element method. *proc. JSCE*, Vol. 8, No. 4, pp. 39–48, 1992.
 - [37] 野村卓史, 新明正人. ALE 有限要素法による薄膜と流れとの連成解析. 応用力学論文集, Vol. 1, pp. 241–251, 1998.
 - [38] 芝野真次. 超弾性体構成則を用いた流体・構造相関. 計算工学講演会論文集, Vol. 17, pp. 241–251, 2012.
 - [39] 日比茂幸, 藪下和樹. MPS 法の不自然な圧力振動の抑制に関する研究. 関西造船境界論文集, Vol. 241, pp. 125–131, 2004.
 - [40] M. Sueyoshi. Validation of numerical code by a particle method for violent free-surface problems. *Int. J. Offshore Polar Eng.*, Vol. 16, No. 4, pp. 261–267, 2006.
 - [41] 近藤雅裕, 越塚誠一. MPS 法における不自然な数値振動の抑制. *Transactions of JSCEs*, Paper No. 20080015, 2008.
 - [42] 田中正幸, 益永孝幸. 擬似圧縮性効果による MPS 法の安定化と圧力の平滑化. *Transactions of JSCEs*, Paper No. 20080025, 2008.
 - [43] B. Ataie-Ashtiani and L. Farhadi. A stable moving-particle semi-implicit method for free surface flows. *Fluid Dyn. Res.*, Vol. 38, pp. 241–256, 2006.
 - [44] H. Ikeda, F. Matsuura, S. Koshizuka, and Y. Oka. Numerical analysis of fragmentation processes of liquid metal in vapor explosions using moving particle semi-implicit method. *Trans. Jpn. Soc. Mech. Eng. B*, Vol. 64, pp. 2431–2437, 1998.
 - [45] 室谷浩平, 越塚誠一, 玉井佑, 柴田和也, 三目直登, 吉村忍, 田中覚, 長谷川恭子, 藤澤智光. 階層型領域分割 MPS 陽解法を用いた多数の浮遊物

- が漂流する市街地津波遡上解析. 計算工学講演会論文集, Vol. 19, C-1-4, 2014.
- [46] 宋武燮, 越塚誠一, 岡芳明. MPS 法による弾性構造体の動的解析. 日本機械学会論文集 (A 編), Vol. 71, No. 701, pp. 16–22, 2005.
- [47] 鈴木幸人, 大野浩誠, 越塚誠一. MPS 法によるマイクロディスペンスターのシミュレーション. 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 73, No. 728, pp. 981–988, 2007.
- [48] L. B. Lucy. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis. *Astron. J.*, Vol. 82, pp. 1013–1024, 1977.
- [49] S. J. Cummins and M. Rudman. An SPH projection method. *J. Comput. Phys.*, Vol. 152, pp. 584–607, 1999.
- [50] A. Colagrossi and M. Landrini. Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics. *J. Comput. Phys.*, Vol. 191, pp. 448–475, 2003.
- [51] P. W. Cleary and J. J. Monaghan. Conduction modelling using smoothed particle hydrodynamics. *J. Comp. Phys.*, Vol. 148, pp. 227–264, 1999.
- [52] J. W. Swegle, S. W. Attaway, M. W. Heinstein, F. J. Mello, and D. L. Hicks. An analysis of smoothed particle hydrodynamics. *SANDIA Report*, No. SAND93-2513, 1994.
- [53] M. Desbrun and M. P. Gascuel. Smoothed particles: A new paradigm for animating highly deformable bodies. *Proc. Eurographic workshop on Computer animation and simulation*, pp. 61–76, 1996.
- [54] Y. Shigeto and M. Sakai. Arbitrary-shaped wall boundary modeling based on signed distance function for granular flow simulation. *Chem. Eng. J.*, Vol. 231, pp. 464–476, 2013.
- [55] G. Basinskas, 茂渡悠介, 酒井幹人. DEM シミュレーションの産業用混合機への応用. 第 20 回流動化・粒子プロセッシングシンポジウム, 2014.
- [56] 田中敏嗣, 石田俊哉, 辻裕. 水平管内粒状体プラグ流の直接数値シミュレーション. 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 57, No. 534, pp. 60–67, 1991.
- [57] X. Sun and M. Sakai. Three-dimensional simulation of gas-solid-

- liquid flows using the DEM-VOF method. *Chem. Eng. sci.*, Vol. 134, pp. 532–548, 2015.
- [58] M. Van Sint Annaland, N. G. Deen, and J. A. M. Kuipers. Numerical simulation of gas-liquid-solid flows using a combined front tracking and discrete particle method. *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 60, pp. 6188–6198, 2005.
- [59] R. Iwata, S. Takeuchi, and T. Kajishima. Large scale analysis of interaction behaviors of bubbles and particles in a liquid by a coupled immersed boundary and VOF technique. *Multi. Sci. Tech.*, Vol. 22, No. 3, pp. 233–246, 2010.
- [60] C. S. Peskin. The fluid dynamics of heart valves: Experimental, theoretical, and computational methods. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 14, pp. 235–259, 1982.
- [61] 越塚誠一, 柴田和也, 室谷浩平. 粒子法入門 流体シミュレーションの基礎から並列計算と可視化まで (C/C++ ソースコード付). 丸善出版, 6 2014.
- [62] 大地雅俊, 越塚誠一, 酒井幹夫. 自由表面流れ解析のための MPS 陽的アルゴリズムの開発. *Trans. JSCES*, Paper No. 20100013, 2010.
- [63] 柴田和也, 室園浩司, 近藤雅裕, 酒井幹夫, 越塚誠一. MPS 法における外気圧と負圧の考慮および curl 演算子の開発に関する研究. *Pros. JSCES*, Vol. 17, Paper No. C-2-3, 2012.
- [64] H. Ikeda, S. Koshizuka, Y. Oka, H. S. Park, and J. Sugimoto. Numerical analysis of jet injection behavior for fuel-coolant interaction using particle method. *J. Nucl. Sci. Tech.*, Vol. 38, No. 3, pp. 174–182, 2001.
- [65] K. Gotoh. *Plasma physics*. Kyoritsu Publishing, 1967. Tokyo: Kyoritsu publishing.
- [66] M. Kondo, S. Koshizuka, S. Suzuki, and M. Takimoto. Surface tension model using inter-particle potential force in moving particle semi-implicit method. *Proc. of 5th Joint ASME/JSME Fluids Engineering Conference FEDSM2007*, pp. 93–98, 2007.
- [67] 原田隆宏, 越塚誠一, 島崎克教. MPS 法における壁境界計算モデルの改

- 良. *Trans. JSCES*, Paper No. 20080006, 2008.
- [68] A. J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Math. Comput.*, Vol. 22, pp. 745–762, 1968.
- [69] 山田祥徳, 酒井幹夫, 水谷慎, 越塚誠一, 大地雅俊, 室園浩司. Explicit-MPS 法による三次元自由液面流れの数値解析. 日本原子力学会和文論文集, Vol. 10, No. 3, pp. 185–193, 2011.
- [70] A. Shakibaeinia and Y. C. Jin. A weakly compressible MPS method for modeling of open-boundary free-surface flow. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 63, pp. 1208–1232, 2010.
- [71] 林侑希, 豊谷純, 角田和彦. 双曲型重み関数を利用した MPS 法による流体シミュレーション. 日本大学生産工学部研究報告 A, Vol. 48, No. 1, pp. 11–18, 6 2015.
- [72] K. Kakuda, J. Toyotani, S. Matsuda, H. Tanaka, and K. Katagiri. Flow simulations by a particle method using logarithmic weighting function. *SL*, Vol. 4, No. 3, pp. 154–161, 2010.
- [73] 原田隆宏, 越塚誠一, 河口洋一郎. GPU を用いた SPH シミュレーション. 計算工学講演会論文集, Vol. 12, pp. 1–2, 2007.
- [74] 松永拓也, 柴田和也, 室谷浩平, 越塚誠一. ミラー粒子境界表現を用いた MPS 法による流体シミュレーション. *Trans. JSCES*, Paper No. 20160002, 2016.
- [75] 渡辺高志, 榎谷浩, 三橋祐太. 壁面境界の大変形を考慮した粒子法の計算手法に関する基礎的研究. *Trans. JSCES*, Paper No. 20130021, 2013.
- [76] N. Mitsume, S. Yoshimura, K. Murotani, and T. Yamada. Explicitly represented polygon wall boundary model for the explicit MPS method. *Comp. Part. Mech.*, Vol. 2, No. 1, pp. 73–89, 3 2015.
- [77] 佐々木智, 小笠原敏記. MPS 法における delaunay 三角形分割法によるポリゴン型境界モデルの開発. 土木学会論文集 B2 (海岸工学), Vol. 68, No. 2, pp. 856–860, 2012.
- [78] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *J. Comput. Phys.*, Vol. 100, pp. 335–354, 7 1992.
- [79] K. Nomura, S. Koshizuka, Y. Oka, and H. Obata. Numerical analysis

- of droplet breakup behavior using particle method. *J. Nucl. Sci. Tech.*, Vol. 38, No. 12, pp. 1057–1064, 2001.
- [80] 石井英二, 石川亨, 田辺好之. 自動車エンジン用インジェクタの燃料噴霧シミュレーション. 混相流研究の進展, Vol. 1, pp. 71–78, 2006.
- [81] N. Shirakawa, H. Horie, Y. Yamamoto, and S. Tsunayama. Analysis of the void distribution in a circular tube with the two-fluid particle interaction method. *J. Nucl. Sci. Tech.*, Vol. 38, pp. 392–402, 2001.
- [82] H. Gotoh and J. Fredsoe. Numerical simulation of diffusion process of sea disposal microscope sand with lagrangian two-phase flow model. *Proc. Coast. Eng.*, Vol. 46, pp. 986–990, 1999.
- [83] 越塚誠一. 計算力学レクチャーシリーズ 5 粒子法 (CD-ROM 付). 丸善出版, 2 2005.
- [84] 後藤仁志, 酒井哲郎, 林稔. 粒子法による流木群の堰止め過程の Lagrange 解析. 水工学論文集, Vol. 45, pp. 919–924, 2001.
- [85] 五十里洋行, 後藤仁志, 角哲也. 自然調節型洪水吐きの流木による閉塞機構に関する計算水理学的研究. 水工学論文集, Vol. 50, pp. 793–798, 2006.
- [86] D. M. Greaves. Simulation of viscous water column collapse using adapting hierarchical grids. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 50, pp. 693–711, 2006.
- [87] W. E. Lorensen and H. E. Cline. Marching cubes: A high resolution 3D surface construction algorithm. *Computer Graphics*, Vol. 21, No. 4, pp. 163–169, 1987.
- [88] 大同淳之. 液面に衝突する固体に作用する力. 水理講演会論文集, Vol. 21, pp. 127–132, 1977.
- [89] E. G. Richardson. The impact of a solid on a liquid surface. *Proc. Phys. Soc. London*, Vol. 61, No. 4, 1948.
- [90] 石井英二, 杉井泰介. 粒子法における表面張力モデルの開発. 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 78, pp. 1710–1725, 2012.
- [91] 瀧口智志, 梶島岳夫, 三宅裕. 固体粒子と乱流の相互作用の数値計算法. 日本機械学会論文集 (B 編), Vol. 64, pp. 2804–2810, 1998.
- [92] 清水義彦, 若井明彦, 長田健吾. 個別要素法と流れの数値解析を組み合わせ

- せた高濃度平衡流砂場の数値実験. 水工学論文集, Vol. 47, pp. 559–564, 2003.
- [93] 村井祐一, 北川石英, 宋向群, 山本富士夫, 太田淳一. 気泡流中の乱れの逆エネルギーカスケード構造 (第2報 Euler-Lagrange モデルによる数値解析). 日本機械学会論文集 (B編), Vol. 65, pp. 1347–1354, 1999.
- [94] A. Tomiyama, Y. Makino, I. Zun and T. Sakaguchi. A Three-Dimensional Particle Tracking Method for Bubbly Flow Simulation. *Nucl. Eng. Des.*, Vol. 175, pp. 77–86, 1997.
- [95] 石井英二, 石川亨, 田辺好之. 粒子法とグリッド法の結合によるマルチスケール気液界面解析. 日本伝熱学会論文集, Vol. 14, No. 3, pp. 51–59, 2006.
- [96] D. Enright, R. Fedkiw, J. Ferziger, I. Mitchell. A hybrid particle level set method for improved interface capturing. *J. Comp. Phys.*, Vol. 183, pp. 83–116, 2002.
- [97] T. Kawamura and H. Takami. Computation of high reynolds number flow around a circular cylinder with surface roughness. *Fluid Dyn. Res.*, Vol. 1, pp. 145–162, 1986.
- [98] J. Li, Y. Y. Renardy, and M. Renardy. Numerical simulation of breakup of a viscous drop in simple shear flow through a volume-of-fluid method. *Phys. Fluids*, Vol. 12, No. 2, pp. 269–282, 2000.
- [99] F. D. Rumscheidt and S. G. Mason. Practice motions in sheared suspensions. *J. Colloid Sci.*, Vol. 16, pp. 238–261, 1961.
- [100] J. M. Rallison. A numerical study of the deformation and burst of a viscous drop in general shear flows. *J. Fluid Mech.*, Vol. 109, pp. 465–482, 1981.
- [101] 稲室降二, 富田降治, 荻野文丸. 二相系格子ボルツマン法によるせん断流中の液滴の変形・分裂シミュレーション. 第15回数値流体力学シンポジウム Web 講演論文集, Paper No. B14-5, 2001.
- [102] 大地雅俊, 山田祥徳, 越塚誠一, 酒井幹夫. MPS 陽解法における圧力計算の検証. *Trans. JSCES*, Paper No. 20110002, 2011.
- [103] 平野陽一, 三浦公亮. 着水衝撃について. 東京大学宇宙航空研究所報告, Vol. 6, No. 3 (b), pp. 763–777, 1970.

- [104] 稲垣健太, 酒井幹夫, 越塚誠一. MPS 法を用いた弾塑性解析手法の開発. *Trans. JSCEs*, Paper No. 20080031, 2008.
- [105] 金森由博. メタボール. レイトレーシングによるコンピュータグラフィックス入門, 2014.
- [106] 村上伸一, 市原英也. メタボール法による 3 次元図形の表示について. 電子情報通信学論文集, Vol. 70-D, No. 8, pp. 1607–1615, 1987.
- [107] 越塚誠一. 粒子法ミュレーションの大規模化と高速化. スーパーコンピューティングニュース, Vol. 11, No. 1, pp. 125–138, 2009.
- [108] S. Koshizuka, A. Nobe, and Y. Oka. Numerical analysis of breaking waves using the moving particle semi-implicit method. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 26, pp. 751–769, 1998.
- [109] 山田満久, 向井琢也, 酒井譲. 粒子法の並列計算に関する研究. 計算力学講演会論文集, Vol. 16, pp. 967–968, 2003.
- [110] 入部綱清, 藤沢智光, 柴田和也, 越塚誠一. MPS 法を用いた流体並列解析に関する基礎的研究. *Trans. JSCEs*, Paper No. 20060015, 2006.
- [111] 後藤仁志, 堀智恵実, 五十里洋行, Abbas Khayyer. GPU による粒子法半陰解法アルゴリズムの高速化. 土木学会論文集 B, Vol. 66, No. 2, pp. 217–222, 2010.
- [112] 原田隆宏, 越塚誠一. SPH における壁境界計算手法の改良. 情報処理学会論文誌, Vol. 48, No. 4, pp. 1838–1846, 2007.
- [113] H. Lamb. *Hydrodynamics*. Cambridge Univ. Press, 1945.
- [114] 近藤雅裕, 越塚誠一, 滝本正人. MPS 法における粒子間ポテンシャル力を用いた表面張力モデル. *Trans. JSCEs*, Paper No. 20070021, 2007.
- [115] J. P. Morris. Simulating surface tension with smoothed particle hydrodynamics. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 33, No. 3, pp. 333–353, 2000.
- [116] 安田武夫. プラスチック材料の各動特性の試験法と評価結果 (5). プラスチックス, Vol. 51, No. 6, pp. 119–127, 2000.

本論文を構成する主論文

Multi-Physics Computational Fluid Dynamics Modelling of Three-Phase Flow in a Nano-Particle Separator using the Particle-Based Method

R. Takahashi, M. Suzuki, M. Yamamoto and H. Kitada

Proceedings of the Eighth International Conference on Engineering Computational Technology, Paper 117, 13 pp., 2012

Multi-Physics CFD Modeling of Three-phase Flows Using a Particle-Base Method

R. Takahashi and M. Yamamoto

Proceedings of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015 (AJK 2015-FED), pp. 225-230, 2015

Development and Elaboration of Numerical Method for Simulating Gas-Liquid-Solid Three-Phase Flows Based on Particle Method

R. Takahashi, H. Mamori and M. Yamamoto

International Journal of Computational Fluid Dynamics, Vol. 30, Issue 2, pp. 120-128, 2016

謝辞

本研究は東京理科大学工学部 山本誠 教授のご指導の下に行われたものであり、学部四年から修士過程までの三年間、就職した企業にて共同研究を一年間、博士課程の三年間と七年間に渡り、貴重なご指導・ご助言を賜りました。ここに深く感謝申し上げます。また、大変ご多忙の中、本論文の審査をお引き受けいただきました東京理科大学工学部 石川仁 教授、荒井正行 教授、元祐昌 廣 准教授、福島直哉 准教授、東京理科大学理工学部 川口靖夫 教授、電気通信大学 大学院情報理工学研究科 前川博 教授に謝意を表します。

山本誠 教授には、豊富な研究機材や国内外での研究発表の機会を与えて頂きました。また、修士課程の後に一度就職し、博士課程で東京理科大学に戻ってきた際にも非常に温かく受け入れていただきました。山本教授には何事にも動じず、広い心で見守っていただき、非常に楽しく充実した研究生活を送ることができました。ここに感謝申し上げます。

宇宙航空研究開発機構 航空本部の鈴木正也 氏 (元 山本研究室 助教)、大同大学 工学部の坪井涼 氏 (元 佐々木研究室 助教) と山本研究室の福島直哉 准教授、守裕也 助教には研究についての適格なご指摘・ご指導にとどまらず、日常生活など様々な面でご指導いただきました。ここに感謝の意を表します。

また、本研究は多くの先輩・同期の友人・後輩の多大な協力の下に達成されたものと思います。先輩方からは研究室に入りたての私に多くの御助言、御指導をいただきました。同期の友人には主に私的な面でお世話になりました。後輩からは先輩としての責任感と物事を教える難しさを学ばせていただきました。ここに感謝の意を表します。

本論文を終えるにあたり、上記の方々に再度心から感謝の意を表します。

記号表

変数		C_{sound}	: Courant 数 (音速)
\mathbf{x}	: 座標	C_{flow}	: Courant 数 (流速)
\mathbf{u}	: 流速	u_{max}	: 最大粒子速度
P	: 圧力	D_{wall}	: 壁面からの距離関数
\mathbf{F}	: 外力	κ_{cur}	: 壁面の平均曲率
t	: 時間	θ_{cur}	: 壁面角度
x, y, z	: 各軸方向座標	Z	: 壁重み関数
u, v, w	: 各軸方向速度	Z_{cur}	: 曲率を考慮した壁重み関数
μ	: 粘性係数	σ	: 表面張力係数
ν	: 動粘性係数	\mathbf{n}	: 界面の法線ベクトル
ρ	: 密度	δ	: デルタ関数
ρ^0	: 定常状態における密度	P_{sf}	: 粒子間ポテンシャル
ϕ	: 物理量	p_{sf}	: 粒子間ポテンシャル形状
d	: 次元数	C_{sf}	: 粒子間ポテンシャル強度
n	: 粒子数密度	E_{sf}	: 界面を形成するのに必要なエネルギー
n^0	: 初期粒子数密度	\mathbf{F}_{pot}	: 粒子間ポテンシャル力
N	: 周囲粒子の総数	S	: 界面面積
α, β	: モデル定数	θ	: 接触角
\mathbf{r}	: 粒子間距離		: 液滴変形角度
r_e	: 影響半径	δ_{sj}	: 粒子 j の相情報
l_0	: 初期粒子間距離	C_s	: 固相粒子濃度
w	: 重み関数	\mathbf{x}_g	: 固体の重心座標
w^{grad}	: 重み関数 (圧力勾配計算用)	N_k	: 固体を構成する計算粒子数
λ	: 計算係数	Ω_k	: 固体の角速度
c	: 音速	\mathbf{L}_k	: 固体の回転運動量
C	: Courant 数		

\mathbf{I}_k	: 固体の慣性モーメント	L_0	: 振動液滴の初期幅
ν_k	: 固体の回転軸ベクトル	s	: 液滴の振動モード
θ_k	: 固体の回転角度	m	: 質量
\mathbf{R}_k	: 固体の回転行列	F	: 流体充填率 (VOF 法)
\mathbf{q}	: クォータニオン	W	: 重み関数 (SPH 法)
L	: 代表長さ	h	: kernel 半径 (SPH 法)
	: 変形液滴の長半径	\mathbf{a}	: 加速度 (DEM)
	: 振動液滴の幅	\mathbf{F}_C	: 粒子間接触力 (DEM)
Z	: ダムの到達位置、高さ	\mathbf{F}_g	: 重力 (DEM)
B	: ダムの到達位置、高さ	ω	: 角速度 (DEM)
	: 変形液滴の短半径	\mathbf{T}	: トルク (DEM)
g	: 重力加速度	I	: 慣性モーメント (DEM)
V	: 固体粒子の鉛直下向き速度		
$V_{ter.}$: 固体粒子の液相内終端速度	添え字	
D	: 連続の式の残差	i, j, k, l :	計算粒子・格子の識別番号
	: 液滴変形パラメータ	s	: 固相
H	: 計算領域の高さ	l	: 液相
R	: 液滴直径	g	: 気相
u_w	: 壁面速度	$fluid$: 流体
$\dot{\gamma}$: せん断速度	$wall$: 壁面
Re	: レイノルズ数	MPS	: MPS 法計算
Ca	: キャピラリー数	MAC	: MAC 法計算
L_c	: クラウン径	$grid$: 格子情報
F	: 可視化用粒子数密度	$k, *$: 時間ステップ
f	: 可視化用重み関数		(* は中間ステップを表す)
T	: 可視化用閾値	$press$: N-S 方程式の圧力勾配項
	: 振動液滴の理論周期	$other$: N-S 方程式の圧力勾配項以外
C_{dis}	: 可視化用モデル定数		

付録

付録 A Marching Cubes 法による可視化法

Marching Cubes 法 [87] は二値化された格子に対してポリゴン (2次元の場合、線分の集合) により境界面を作成する手法である。2次元における手法の概要を図 2 (a), (b) に示す。

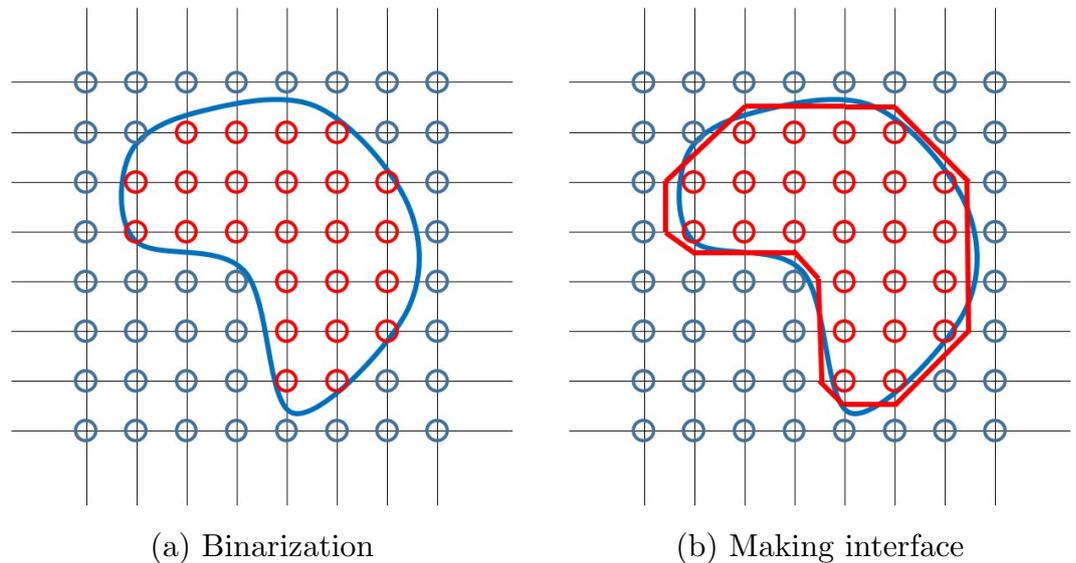


図 2 Schematics of Marching Cubes method

図 2 (a) のような格子に青線で囲われた領域があることを想定する。このとき、各格子点は領域内 (図中赤丸格子) と領域外 (図中青丸格子) の 2 つに分類することができる。全ての格子点を分類すると、各格子内の分類と境界線のパターンは $2^4 = 16$ 通りであり、図 3 に示した 6 種類の回転で表すことができる。全ての格子をパターンに当てはめることで図 2 (b) のように境界線を作成することができる。以上が 2次元における Marching Cubes 法の境界作成手順である。上記の手法を 3次元することで、同様の手順で MPS 法により得られた各相粒子の分布から各相の境界面を作成することができる。

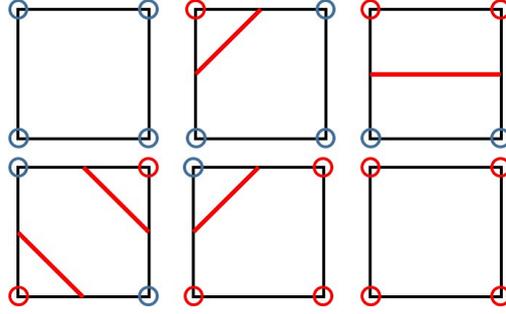


図3 Interface patterns in 2D visualization

ここから、実際の MPS 法の結果を Marching Cubes 法で可視化する手法について述べる。まず、領域全体にデカルト格子を作成し、各格子点に対して領域の内外判定を行う。デカルト格子の格子幅は界面の分割数に直結するため、格子を細かくするほど、緻密で滑らかな境界面を得ることができる。本研究においては可視化の綺麗さ、計算コストのバランスから、格子幅を初期粒子間距離の 0.25 倍と設定している。領域の内外判定はメタボール [105] を用いて、各相に含まれる格子点を判定する。この手法では、各格子点について粒子数密度を計算し、粒子数密度が閾値を上回る場合領域内であると判定する。格子点 (i, j, k) の粒子数密度 F_{ijk} は村上らにより提案された式 [106] により計算する。

$$F_{ijk} = \sum_l f_{ijk,l} \quad (1)$$

$$f_{ijk,l} = \begin{cases} \left(1 - \left(\frac{r_{ijk,l}}{r_e}\right)^2\right)^2 & (r_{ijk,l} < r_e) \\ 0 & (r_{ijk,l} \geq r_e) \end{cases} \quad (2)$$

ここで、 l は粒子番号、 $r_{ijk,l}$ は格子 (i, j, k) と粒子 l 間の距離、 r_e は影響半径であり、 $r_e = 1.5l_0$ とする。この粒子数密度が閾値 T 以上となる場合、領域内であると判定する。本研究ではこの閾値 T を格子から距離 $l_0 \times C_{dis}$ に単一粒子が存在する場合の粒子数密度とし、以下のように設定する。

$$T = \left(1 - \left(\frac{C_{dis} \times l_0}{r_e}\right)^2\right)^2 \quad (3)$$

ここで、 C_{dis} は初期粒子間距離に対する係数であり、本研究では $C_{dis} = 0.5$

と設定している。

次に Marching Cubes 法による境界面の作成を行う。前述の 2 次元 Marching Cubes 法では、境界は境界線として得られたが、3 次元では三角形要素により構成される境界面として得られる。手法概要として 2 次元における手順を示したが、3 次元においても境界面のパターンが $2^8 = 256$ 通りとなるだけで、手順は同じである。この 256 パターンは対称性を考慮することで 15 パターンの回転に落とし込むことが可能である。境界面が得られた後に、各三角形要素に対して法線ベクトルを計算する。図 4 (a), (b) に 3 次元における境界面及び法線ベクトルの例を示す。図 4 (a) はデカルト格子内の 1 格子分を取り出した

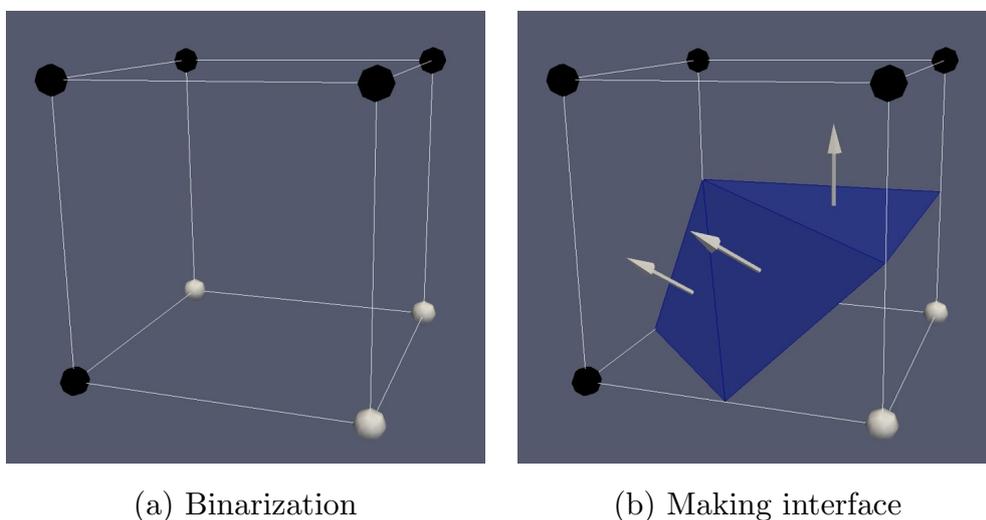
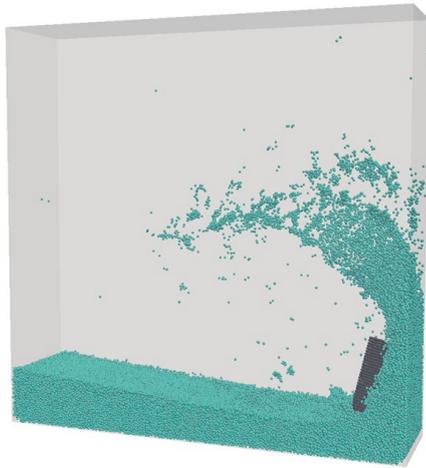


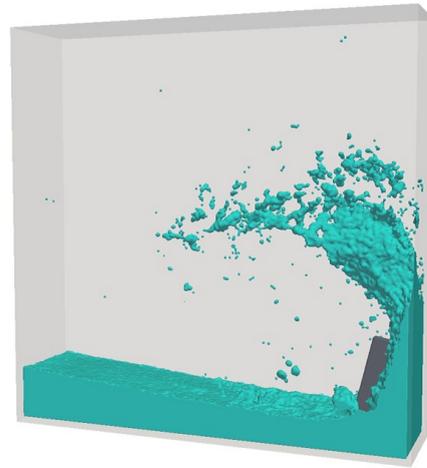
図 4 Visualization with Marching Cubes method

図であり、格子点の白丸が領域内、黒丸が領域外を表している。このようなパターンについては、境界面は図 4 (b) のような 3 つのポリゴンとして表現され、各面に対して法線ベクトルが計算されている。全ての領域に対して境界面が決定された後に、各格子点の粒子数密度を用いてポリゴンと格子の交点を調整することでより滑らかな境界面を得ることが可能である。

図 5 (a), (b) に粒子表示による及びポリゴン表示による可視化の比較を示す。図より、ポリゴン表示を用いることでより奥行き及び表面形状のわかりやすい可視化が可能である。図 5 (b) の表面拡大図を図 6 に示す。図より表面がポリゴンの集合として表現されていることがわかる。



(a) With particles



(b) With polygons

図5 Comparison between particle and polygon visualization

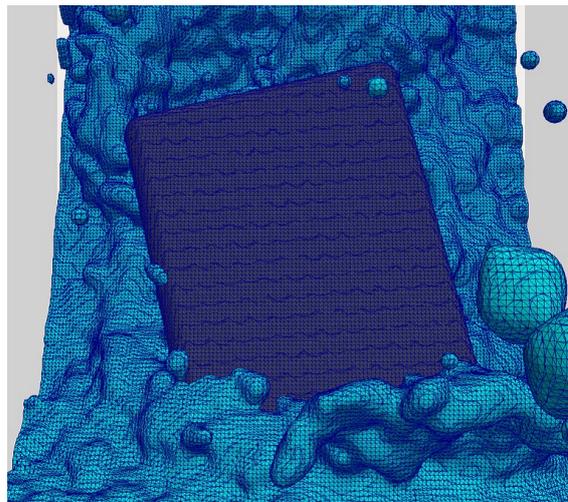
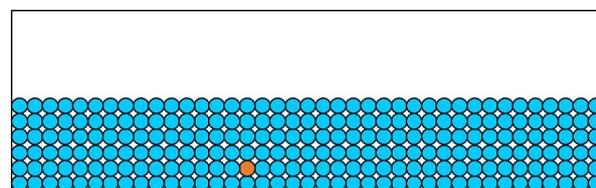


図6 Visualization with polygon (Zoom up view)

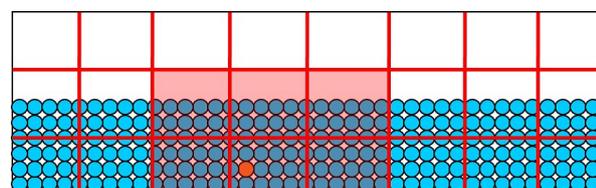
付録 B MPS 計算高速化のための計算格子

格子法では計算点の順番と計算点番号が固定されているのに対し、粒子法では計算点の位置が時々刻々と変化し、特定の粒子の周囲に存在する粒子が一定

でない。そのため、粒子法では一般的な格子法のように (3.2.1 節参照) 計算点の番号を用いて離散化計算を行うことができず、計算点である粒子が移動するたびに近傍粒子の探索を行う必要がある。近傍粒子の探索にあたって全ての粒子同士の粒子間距離が必要となるため、この計算コストは $O(N^2)$ となり、全計算コスト中の多くを近傍粒子の探索が占めることとなる。そこで、本研究では計算高速化のための格子を生成し、各々の格子に対して内包する粒子の粒子番号を記録することで、近傍粒子探索の際に粒子間距離の計算を行う粒子を制限する。図 7 (a), (b) に格子による計算高速化手法の概略を示す。本図ではオレンジ粒子の近傍粒子探索を行うことを想定する。



(a) Without computational grid



(b) With computational grid

図 7 Schematics of computational grid for efficient computation

まず、格子を用いない場合、近傍粒子の探索に図 7 (a) に示すオレンジ粒子と水色粒子全てとの粒子間距離を計算する必要がある。それに対して格子を用いて近傍粒子を探索する場合、図 7 (b) に示す赤色格子に内包する粒子番号を記録しておき、オレンジ粒子の含まれる格子の周囲格子 (図中赤色でハイライトされた格子) 内の粒子のみと粒子間距離を計算することで、大幅に計算コストを低減することが可能である。この格子は、格子幅を小さく設定するほど計算コストを低減することができるが、格子幅を粒子の影響半径の最大値以上と設定する必要があり、2次元では周囲の9格子、3次元では27格子に含まれる粒子との粒子間距離のみを計算する。これにより、計算コストを $O(N^1)$ まで抑えることが可能であるとの報告がなされており、アルゴリズムが単純なこと

から粒子法計算において広く用いられている [107]。

本研究では用いていないが、各粒子に対して影響半径以上の近傍粒子テーブルを作成し、そのテーブルの更新頻度を下げることによって計算コストを削減する手法 [108] や、複数のプロセッサを用いた計算の並列化 [109, 110]、GPU を用いたアルゴリズムの高速化 [111, 112] など、多くの計算高速化手法が提案されている。

付録 C 格子系座標系

粒子法では、計算領域に対して計算点が固定されていないため、格子法で行われるように格子番号による周期境界条件を設定することができない。そのため、本研究では格子座標系を設定することで、計算領域が単純形状である場合にのみ適用できる周期境界条件の設定法を開発した。この設定法は適用条件は限られているものの、アルゴリズムが非常にシンプルであることから、計算領域が単純形状である場合に関しては有効な手法であると考えられる。

粒子法における周期境界条件の設定では、境界面付近における近傍粒子の探索及び粒子間距離の計算について、追加的な設定が必要となる。そこで、本手法では粒子間距離の計算に対して、格子座標系を用いることで単純な設定で周期境界の設定を行う。図 8 (a), (b) に、一般的な粒子間距離計算法と格子座標

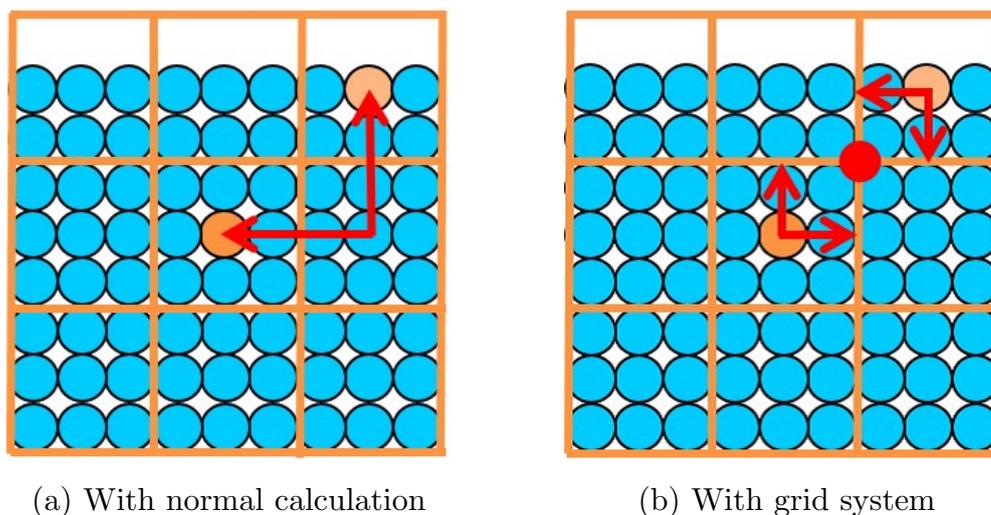
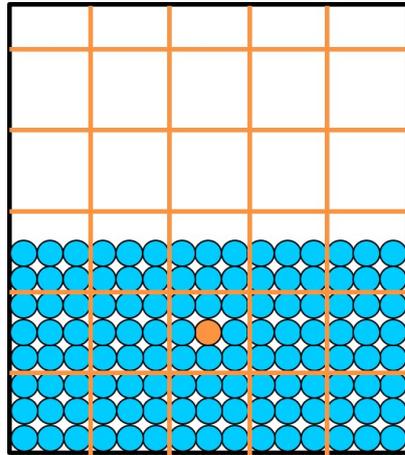
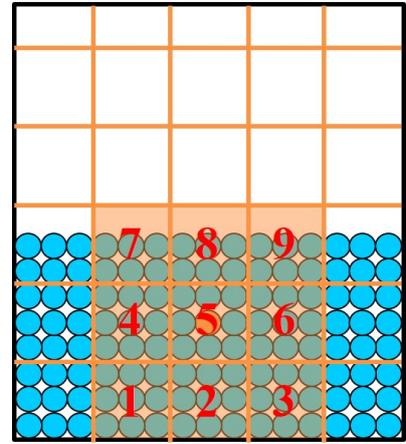


図 8 Schematics of grid coordinate system

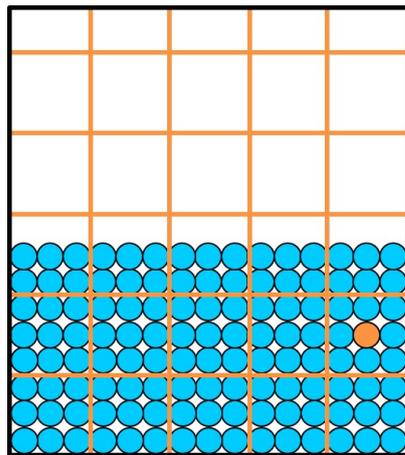


(a) Particle position

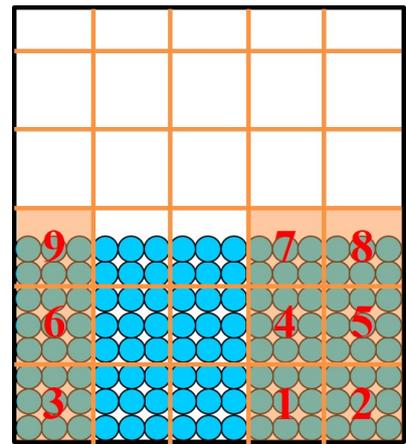


(b) Searching grids

図9 Searching grids away from periodic boundary



(a) Particle position



(b) Searching grids

図10 Searching grids near periodic boundary

系を用いる計算法の比較を示す。図8(a)は、一般的な粒子間距離計算法であり、以下の式により計算を行う。

$$\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i \quad (4)$$

それに対し、図8(b)に示す格子座標系を用いることで、以下の式により粒子

間距離を計算する。

$$\mathbf{r}_{ij} = (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{grid}) - (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_{grid}) \quad (5)$$

ここで、 \mathbf{x}_{grid} は図中の赤印で示した格子点の座標を示す。

本手法では、図 9 (a), (b) に示すように、計算開始時に各格子の隣接格子を設定しておき (ここでは 2 次元の場合の簡略図を示す)、図中の格子 1 ~ 9 内に含まれるの粒子に対して式 (5) を用いた粒子間距離計算及び近傍粒子の登録を行う。このとき、図中左右境界を境界条件と設定する場合、領域端に位置する格子の隣接格子の設定を図 10 (a), (b) のように設定することで容易に周期境界が設定される。ここで、2 次元では自粒子を含む格子を”格子 5”とした 1 ~ 9 の格子を用いたが、3 次元では自粒子を含む格子を”格子 14”とした 1 ~ 27 の格子の設定を行うことで、簡単に拡張することが可能である。

一般的に粒子法で用いられる計算高速化を目的とした背景格子では、計算領域端と格子端が一致する必要がないが、本手法を用いる場合、周期境界を設定する計算領域端と格子端が一致する必要があることをここに注記する。

付録 D ポテンシャルモデルによる表面張力の検証

本研究では、表面張力の計算に 2.2.6 節で述べたポテンシャルモデル [81, 66] を用いている。本節では、液滴の振動を用いて表面張力の検証を行う。検証のため、無重力下で液滴径 37.5 mm のエタノール液滴を立方体の状態から開放し、表面張力により液滴が振動しながら球形 (2 次元では円形) へと変形する過程のシミュレーションを行い、Lamb の理論解 [113] との比較を行った。計算条件を表 1 にまとめる。

3 次元計算の可視化結果を図 11 に示す。図より立方体形から開放された液

表 1 Computational parameters for surface tension validation

Liquid	Ethanol
Squire Side Length	37.5[mm]
Particle Spacing	1.5[mm]
Density	798.0[kg/m ³]
Viscosity	1.0×10 ⁻¹⁰ [Pa·s]
Surface tension coefficient	23.61×10 ⁻³ [N/m]

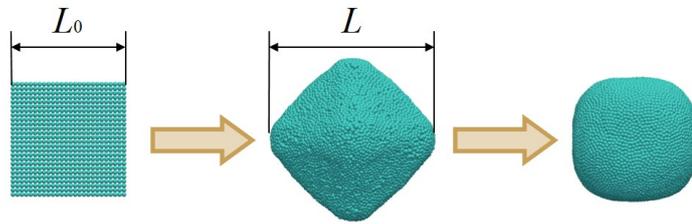


図 11 Droplet deformation with potential model

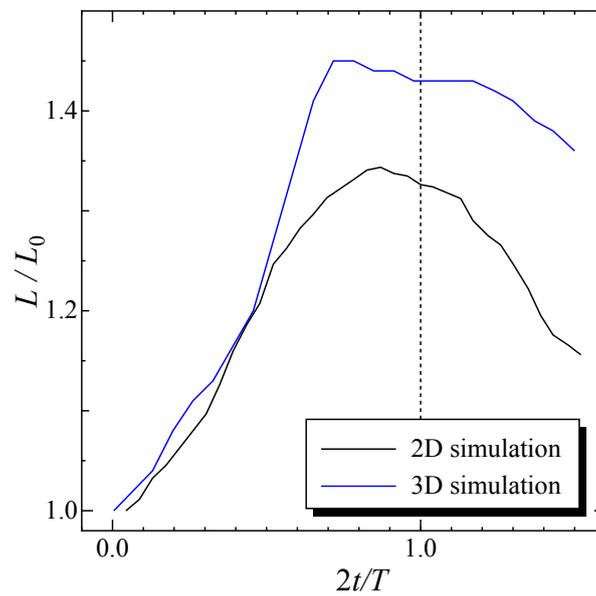


図 12 Droplet width with potential model

滴は初期状態における面中心を頂点とする八面体へと変化し、元の立方体へと戻る。液滴はこのプロセスを繰り返しながら、徐々に球形へと収束する。この際の液滴横幅の変化を 2 次元計算、3 次元計算について図 12 に示す。縦軸の液滴幅 L は初期液滴幅 L_0 で無次元化され (図 11 参照)、横軸の経過時間 t は Lamb の理論式により得られる振動半周期の理論値 $T/2$ で無次元化されている。Lamb の理論式は以下の式で与えられる。

$$T = \frac{\pi}{\sqrt{s(s^2 - 1) \frac{\sigma}{\rho r^3}}} \quad (6)$$

ここで、 r は円半径、 s は振動モード、 ρ は密度、 σ は表面張力係数を表す。本

計算で、振動モード s は矩形液滴にあたる 4 であり、円半径 r は以下の式により与えられる。

$$\pi r^2 = L_0^2 \quad (7)$$

本検証では、半周期で液滴横幅が最大値を取るため、図中ピーク値が $2t/T = 1.0$ となったとき、理論値と一致することとなる。本計算結果では、ピーク値は 2 次元、3 次元でそれぞれ $2t/T = 0.87, 0.78$ となっており、13%、22% 程度過小評価していることがわかる。

この原因としては以下の 2 点が考えられる。まず、Lamb の理論式では液滴振動の減衰が考慮されていないのに対し、本計算では液滴振動が減衰するために、図 11 のように液滴の各頂点が丸まり本来の周期よりも早く液滴幅のピークを迎えることである。2 点目は石井ら [90] により報告されているポテンシャルモデルが表面張力をわずかに過大評価する問題である。

近藤ら [114] も同様の検証を 2 次元計算で行っているが、振動半周期を 15% 程度過小評価する結果となっている。しかしながら、SPH 法および MPS 法で CSF モデルを用いた場合、界面において粒子が飛び散る [115, 114] ことが報告されており、本研究においてはポテンシャルモデルを採用している。

付録 E ポテンシャルモデルによる接触角の検証

本節では平面上の液滴の接触角を用いて、表面張力モデルの検証を行う。液滴径 2.0 mm のエタノールを壁面上に落とし、定常状態における接触角 θ を求める。計算条件を表 2 に示す。ここで、接触角は 60, 90, 120 deg. と設定する。

各設定接触角の計算結果をそれぞれ図 13 (a), (b), (c) に、計算で得られた接触角と設定接触角との比較を表 3 に示す。表から設定接触角 120 deg. では

表 2 Computational parameters for surface tension validation

Liquid	Ethanol
Particle Spacing	0.15[mm]
Density	798.0[kg/mm ³]
Viscosity	1.0×10^{-10} [Pa·s]
Surface tension coefficient	23.61×10^{-3} [N/m]

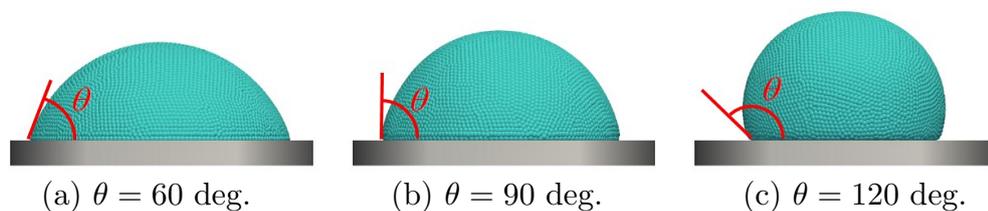


図 13 Droplet shapes with different contact angles

表 3 Comparison of computed contact angles and setting value [deg.]

Setting angle	60.0	90.0	120.0
Computed angle	66.9	94.5	103.7
Error	6.9	4.5	16.3

多少大きな誤差が出たものの、60, 90 deg. についてはよい精度で接触角が再現できていることが確認された。

他の研究でも同様の表面張力・接触角の検証が行われており、本研究と同様に誤差 20 deg. 程度で接触角を、最大 20% 程度の誤差で液滴高さを再現している。また、本検証と同様に設定接触角 90 deg. 付近で最も精度がよいことが報告されている [90, 114]。

付録 F 接触角による固体粒子挙動に対する影響

本節では、固体粒子の液面衝突シミュレーションにおける固液相間の接触角による影響を調査する。本シミュレーションにおける計算条件の設定は過去の実験的研究 [88] に基づいたものであるが、同論文に固液間の接触角に関する記述はなされていない。一般的に合成樹脂と水との接触角は 50 ~ 110 deg. とされている [116] が、第 2 章および 4 章では接触角 0 deg. を採用している。そのため、接触角の変化による固体粒子および液面の挙動に対する影響を調査する必要がある。計算条件は 2.4.1 節で述べた条件と同様であり、接触角の影響を調査するため、接触角を 0, 30, 60, 90, 120, 150, 180 deg. として 2D-3P シミュレーションを行った。

図 14 に各接触角における固体粒子の液面衝突後の鉛直下向き速度履歴を示

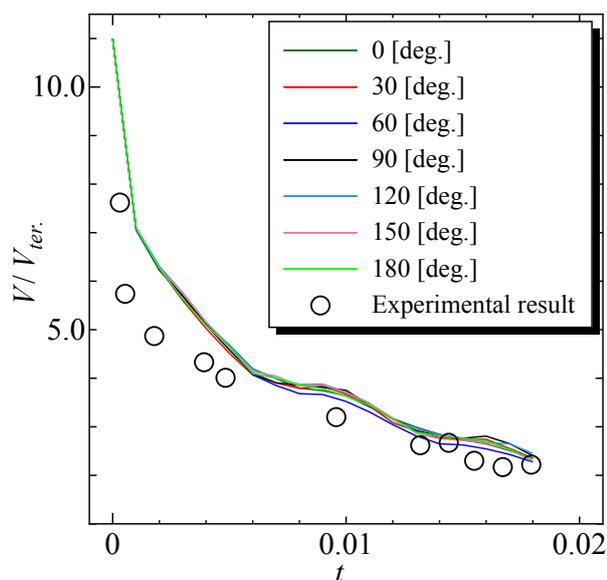


図 14 Time history of the downward velocity of the solid sphere with different contact angles

す。図中の V は固体粒子の鉛直下向き速度、 $V_{ter.}$ は固体粒子の液相内での終端速度、 t は固体粒子の液面衝突時を 0 s とした経過時間を表す。図より、全接触角について大きな差が認められないことがわかる。本検証については、液面衝突後の短い期間を用いたため、接触角による影響が小さかったものと考えられる。特に、液面衝突直後 ($t < 5.0 \times 10^{-3}$) については全ケースで殆ど違いが見られないが、これは固体粒子の液面衝突直後の挙動について液面への衝突圧が支配的であることに起因する。このことから、本シミュレーションにおいて、接触角による結果への影響は殆どなかったものと考えられる。