

自由表面を伴う流体の運動の数値計算

*東京大学工学部物工 高橋大輔

**(株)リコー 武田有介

Numerical Simulation of Fluid Flow with Free Surfaces

Daisuke TAKAHASHI

Department of Applied Physics, Faculty of Engineering,

University of Tokyo

Yusuke TAKEDA

Imaging Technology Research Center, Ricoh Company Limited

(Received 1 August 1987)

A finite-difference method to calculate the fluid flow with free surfaces numerically is proposed. This method is an extension of MAC (marker and cell) method, and two-dimensional, axisymmetrical or three-dimensional complex fluid flows with the surface tension effect can be calculated effectively. Numerical calculations are carried out for the collision of liquid drops, for the collision of a liquid drop with a rigid wall and for a splashing of a liquid drop.

(KEY WORDS)

Finite-difference method, MAC method, Liquid drop, Surface tension

自由表面を伴う流体の運動を差分法で数値計算する方法を提出する。この方法は従来のMAC法を改良した方法であり、2次元、軸対称、3次元の複雑な運動を表面張力効果を含めて効率良く計算できる。計算は液滴同士の衝突、液滴の剛体壁への衝突、液滴のスプラッシュについて行った。

§1. はじめに

現実の流体を考えると、その流体が密閉容器に完全に閉じ込められているような場合を除いて、真空、あるいは空気など別の種類の流体に触れていることが多い。つまり、流体の境界のうちの一部はたいてい何らかの意味で動きうるものとなっている。こういう状況での流体の運動を考えると、その境界の変形を考慮せねばならず、自由境界の一種である自由表面の問題として、古くから解析が難しいものの一つに挙げられている。この種の問題

*〒113 東京都文京区本郷7-3-1

**〒143 東京都大田区中馬込1-3-6

は、ダムの決壊、波の運動、射出成形、インク・ジェットなどさまざまな状況で現れ、工学的な意味においても非常に興味深い問題となっている。

これら自由表面問題に対して、差分法における解法として広く知られているものに Harlow と Welch が提案した MAC 法と呼ばれる方法がある¹⁾。この方法は、固定した差分格子上に、流体領域の形状を近似するためのマーカー粒子と呼ばれる仮想的な粒子をばらまき、領域の変形をマーカー粒子の移動によって追跡するという方法である。また、もう一つのアプローチとして、グリッド・ジェネレーション法²⁾を応用して差分格子を常に流体領域だけに滑らかに沿うように生成し、領域の変形を差分格子自身で追跡するという方法もある。後者の方法は、常に差分格子をうまく生成できるならば、効率良く、また、精度良く計算が行え、破碎などの起こらない波の問題などによく適用されるが、自由表面問題の中には複数の流体領域の合体や分裂を伴うものが数多くあり、差分格子をいかにして生成するかという大きな問題が残る³⁾。これに対して、前者の方法は、このような合体、分離の問題にもうまく対処でき、非常に汎用なプログラムを作れる可能性が高い。しかし、自由表面での境界条件として表面張力の計算などが必要であり、そのために表面形状を認識する必要が生じるが、これについてはあまり精度が良くなく、誤認識の可能性が高い。とはいうものの、いろいろな問題が解けるという利点は大きい。そこでここでは MAC 法に基づいてそれに改良を加えた解法を提出し、微小液滴の運動に対するいくつかの数値計算結果を報告する。まず、§2 では非圧縮流体の自由表面問題に対する基礎方程式とその数値スキーム、それと境界条件について説明し、§3 で計算の具体的なアルゴリズムとそこで生じるいくつかの問題点について説明し、§4 で数値計算による数例の結果について述べる。

§ 2. 基礎方程式と境界条件

非圧縮流体の運動を支配する方程式は、連続の方程式(1)とナビエーストークス方程式(2)である。

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

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \nu \Delta \mathbf{u} + \mathbf{g} \quad (2)$$

ここで \mathbf{u} は流体の速度ベクトル、 p は圧力を密度で割ったもの、 ν は動粘性率、 \mathbf{g} は重力である。(2)式の両辺の発散をとり、圧力に関するポアソン方程式、

$$\Delta p = -\frac{\partial D}{\partial t} + \nu \Delta D - \nabla \cdot ((\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}) \quad (3)$$

$$D = \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (4)$$

を得る。以上の式を差分化するが、まず時間差分については(3)、(2)式を、

$$\Delta p^n = \frac{D^n}{\Delta t} - \nabla \cdot ((\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n) \quad (5)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \Delta t (-(\mathbf{u}^n \cdot \nabla) \mathbf{u}^n - \nabla p^n + \nu \Delta \mathbf{u}^{n+1/2} + \mathbf{g}) \quad (6)$$

のように差分化する。ここで Δt は時間ステップの増分であり、 n は時間ステップ数を表す。もし n ステップ目の速度が求まると、(5)式より n ステップ目の圧力が求まり、(6)式を用いて次の $n+1$ ステップ目の速度が求まる。この過程を繰り返して任意の時間ステップでの圧力と速度が求まるわけである。(5)式の右辺第一項は $D^{n+1} = 0$ とするために加えた修正項である。また空間差分に関しては、全ての微分項を三点中心差分で近似する。対流項

$(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}$ から生じる数値的な不安定性を抑えるには、対流項の空間差分を高次精度の上流差分に修正した方がよいが、ここでは簡単化のため中心差分を用いた。

自由表面においては運動量が表面から漏れない、つまり、自由表面は常に自由表面であるという条件より次式の境界条件が成立する^{4),5)}。

$$\sigma_{ij} n_j = 0 \quad (7)$$

$$\sigma_{ij} = -p' \delta_{ij} + \nu \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (8)$$

$$p' = p + \gamma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (9)$$

ここで σ_{ij} は応力テンソル、 n_j は表面の法線ベクトル、 γ は表面張力、 R_1 と R_2 は自由表面における主曲率半径であり、曲率中心が自由表面を境に流体側にあれば正流体の外側にあれば負の値を取るとする。(8)式を完全に境界条件に取り込むのは自由表面の形状と関連し、自由表面の法線、接線方向を認識する必要があるが、ここでは簡単化のため自由表面における圧力は表面張力による寄与 $\gamma(1/R_1 + 1/R_2)$ の値に等しいとする。また速度ベクトルに対する境界条件として、流体内部の速度からの外挿を行うとする。この簡単化のために主にティーパーット効果などの運動量流の効果が無視されることになる。

§ 3. 計算のアルゴリズム

以上の基礎方程式の差分式と境界条件を用いて自由表面を伴う流体の数値シミュレーションを行うが、ここでは MAC (Marker and Cell) 法と呼ばれる計算手法を使った。そのアルゴリズムは必ずしも一意的でないが、以下にその概要を示す。

まず、初期条件として、流体領域、真空領域、壁が例えば図 1 (a) のように配置されているとする。これらの領域を図 1 (b) のように時間的に固定された差分格子に分ける。ここで小さな単位正方格子をセルと呼び、各物理量はセルの中心で代表されるとする。次に図 1 (c) のように流体領域の形を近似するように仮想的なマーカー粒子を各セルにばらまき、各粒子の位置座標をメモリーに格納する。自由表面の形状が表面張力の計算で必要となるのでマーカー粒子を自由表面のところで細かく並べることが望ましい。ただし、後にも触れるがマーカー粒子は自由表面にのみ並べるだけでも計算可能である。

次にマーカー粒子の存在によって各セルを以下のルールで分類する。

- 1) 壁領域に位置するセルを W (wall) セルとする。
- 2) それ以外のセルでマーカー粒子が存在しないセルを E (empty) セルとする。
- 3) マーカー粒子が存在し、かつ E セルに四辺のどれかを接しているセルを S (surface) セルとする。
- 4) 残りのセルを F (full) セルとする。
- 5) さらに、S セルのうち、ひとつも F セルに接していないセルを E セルに分類し直し、そこに属するマーカー粒子を取り除く。

今の場合だとこのルールを用いて図 1 (d) のように各セルが分類される。この分類によって流体領域がセル単位で区別できることになる。これら分類されたセルに対し、F セルが流体の内部を表すとみなして F セルの中心での格子点には差分式(5)、(6)を適用し、S セルは自由表面を表すとみなして境界条件を適用する。また E セルは流体の存在しない領域であるとみなして、計算からは除外し、W セルには固定壁としての境界条件を適用する。

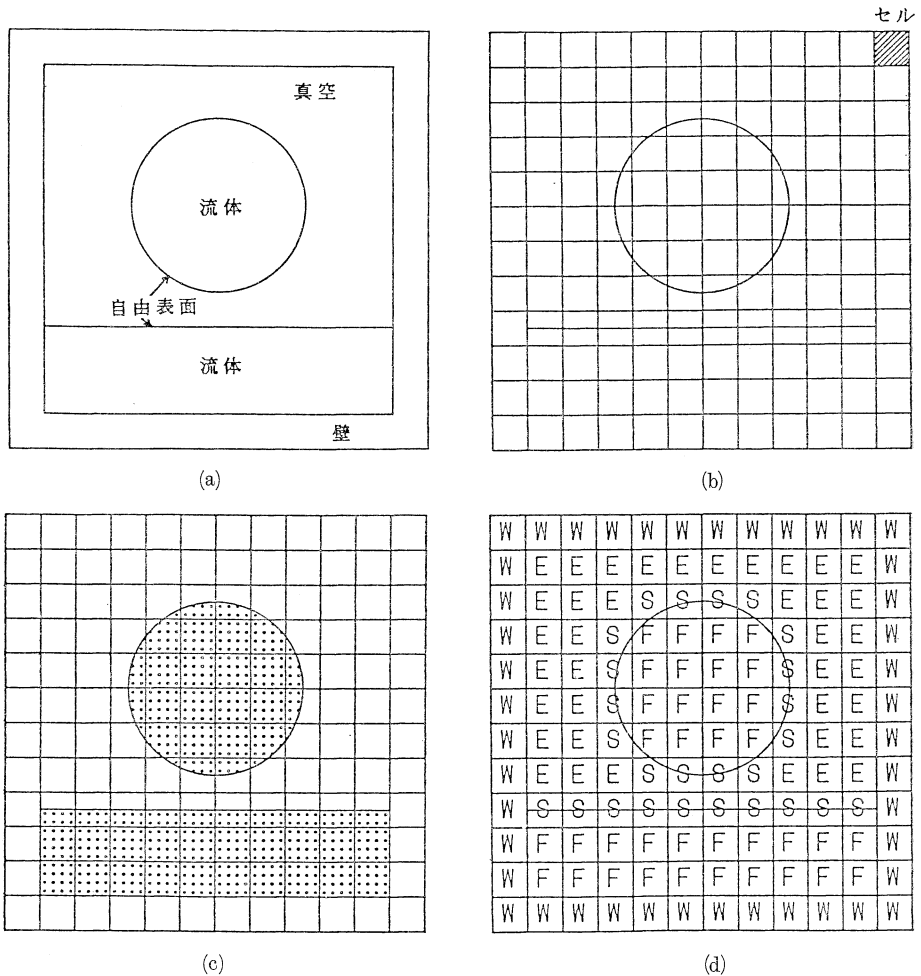


図 1 MAC 法の概念図

こうして計算のアルゴリズムが以下のように定まる。

- 0) まず初期条件として流体領域の形を近似するようにマーカー粒子をおき, 各セルを F, S, E, Wセルに分類し, Fセルの格子点で速度を与える。
- 1) Sセルに属する自由表面を近似するマーカー粒子の位置から, そこでの主曲率半径を計算し, 表面張力を求める。Sセルでの速度の値は隣接するFセルから補外して求める。
- 2) (5)式を用いて, 圧力の値を反復計算により求める。
- 3) (6)式を用いて, 次の時間ステップでの速度の値を反復計算により求める。このとき自由表面での速度は外挿して与える。
- 4) マーカー粒子をこの速度を用いて時間刻み幅 Δt だけ動かす。
- 5) こうして次の時間ステップでの流体領域の形がマーカー粒子の位置から求まり, 各セルが新しく分類され直す。
- 6) 1)に戻る。

以上に述べたアルゴリズムにより原理的には自由表面を伴う流体の運動をシミュレートでき

るのであるが、実際にはいくつか問題が生じる。まず、第一にはマーカー粒子の取扱いである。長時間マーカー粒子を動かして流体領域の変形を追っていくと、初期においたマーカー粒子の分布がかたよってくる、特に自由表面に置いたマーカー粒子が表面の伸び縮みにより、ある部分では密に、そしてある部分では疎になりがちである。密になった部分では流体領域の形としての情報が過剰に与えられておりメモリーの無駄であり、また、疎になった部分では少ないマーカー粒子で流体の形を近似せねばならず誤認識を伴いやすい。もちろん、初期に非常に多くのマーカー粒子を置くだけのメモリーの余裕があれば良いが、セルの数の多い大規模計算になるとそのような余裕が無くなる。そこでマーカー粒子の置き方に以下のようものが考えられる。

- 1) マーカー粒子を初期の全流体領域に密にばらまく。以後の計算では置き直しや削除・挿入をしない。
 - 2) マーカー粒子を初期の流体領域の S セルにのみ密に置く。以後の計算では置き直しや削除・挿入をしない。
 - 3) マーカー粒子を初期の流体領域の S セルにのみ疎に置き、例えば各 S セルに常にある一定の数だけ置くように毎時間ステップでマーカー粒子の置き直しや削除・挿入を行う。
- 1) の方法はマーカー粒子の再配列に計算時間が全くかからず、また曲率の計算もかなり楽になるが、先程述べたように差分格子数の数十倍のオーダーのメモリー量が必要となり、それは 3 次元計算では非常に大きなものとなる。また 3) の方法は特に 3 次元計算でかなり再配列の方法が難しく、誤認識の可能性が高い。そこで現実的な方法としては 2) が最も良いと思われるが、非常に大きい変形を伴う長時間の計算が必要ならば、やはり数ステップに一回程度は再配列を行う必要があるであろう。このところはまだ議論の余地があると思われる。今回の計算では 2 次元および 3 次元計算共に 3) の方法を採用している。

次に自由表面における曲率の計算についてであるが、今回の計算に即して言うと、2 次元及び軸対称計算の場合は、曲率を計算したい S セルからマーカー粒子をひとつ、それと隣接する 2 つの S セルからマーカー粒子をひとつずつ取り出し、その 3 粒子の座標から放物線の曲線あてはめを行って曲率を計算している。また曲率の符号に対しては曲率中心方向に隣合うセルが E セルであるか否かによって曲率中心が流体側にあるか否かを判断している。ただしこの判断も万全ではなく、誤認識の可能性もある。また 3 次元計算の場合は、マーカー粒子の位置から曲面の推測をしなければならないが、これはアルゴリズム上たいへん難しい問題であり、非常に多くの計算時間が要求される。今回の計算では、まず、曲率を計算したい S セルからマーカー粒子をすべて取り出し、隣合う全ての S セルからもマーカー粒子をすべて取り出し、それらの粒子のうちから 4 つを選び、その 4 粒子を含む球面を計算し、その半径の逆数の、4 粒子の組合せによる平均値で平均曲率を近似している。曲面が球面や平板の場合にはこの方法で曲率の精密な値が計算され、また、それ以外の場合でも、これによって曲率の大体の値が推測される。この方法によって表面張力の計算にかかる時間は大きく節約される。

§ 4. 計算例

4.1 液滴のスプラッシュ（軸対称）

ここでは液滴が同種の流体で構成された浅いプールに落ち、液面がへこみ、再び上向きに盛り上がっていく様子をシミュレートした。液滴の直径は 2.3mm で初期のプールの深さは

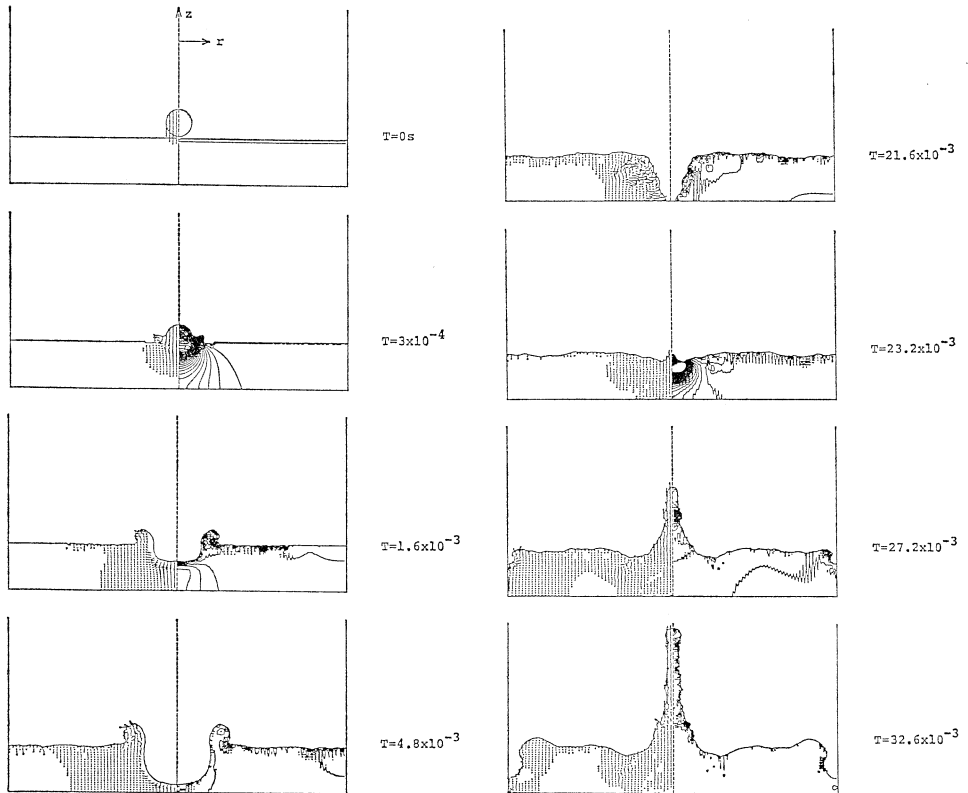


図 2 液滴のスプラッシュ

表 1 液滴のスプラッシュで用いられた条件

図 2	
動粘性率	0.01cm ² /s
表面張力	75dyn/cm
初期の液滴の直径	0.23cm
初期の液滴の速度	-320cm/s
重力	-1000cm/s ²
プールの深さ	0.4cm
プールの直径	3.0cm
格子数	100x100
格子間隔 (Δr)	0.015cm
格子間隔 (Δz)	0.01cm
時間ステップの増分 (Δt)	4x10 ⁻⁶ s

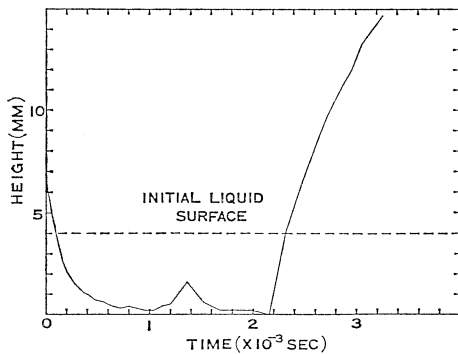


図 3 対称軸上の液体領域の最高点の時間変化

4mm, また液滴の初期速度は 320cm/s である. 物性値は水の物性値をとり, 重力加速度を考慮している. 同様の計算が Amsden と Harlow⁶⁾ によってなされたが, 彼らは表面張力の影響を無視しており, 表面張力による液体の分裂などは計算されない.

計算結果を図 2 に示す. この図では速度ベクトルと圧力の等高線をそれぞれ対称軸の左側及び右側に描いている. また, 図 3 に対称軸上の液体領域の最高点の時間変化をプロットし

た. Macklin と Hobbs の実験⁷⁾によると対称軸上の液体領域の最大高さは約 10mm であり, 計算はこれよりかなり高いが, プールの境界条件がかなり影響するので直接は比較できない. なお, 計算で用いられた条件を表 1 に示す.

4.2 液滴同士の衝突 (軸対称)

この例では, 2つの液滴が衝突する様子を初期の液滴同士の大きさや速度を変えてシミュレートした. 状況は軸対称であり, 初期条件として2つの球状の液滴の中心を対称軸上に置き, 速度は対称軸に平行に逆向きにとる.

計算結果を図 4, 5, 6 に示す. それぞれ対称軸が点線で示してあり, 液体領域内の上半分に圧力の等高線, 下半分に速度ベクトルを描いている. 図 4 では初期の液滴の半径が共に 2mm で初速度は $\pm 50\text{cm/s}$ である. 図 5 では初期半径が 3mm, 1.5mm であり, 初速度が $\pm 50\text{cm/s}$ である. 図 6 では初期半径が 3mm, 1.5mm であり, 初速度が $\pm 100\text{cm/s}$ であ

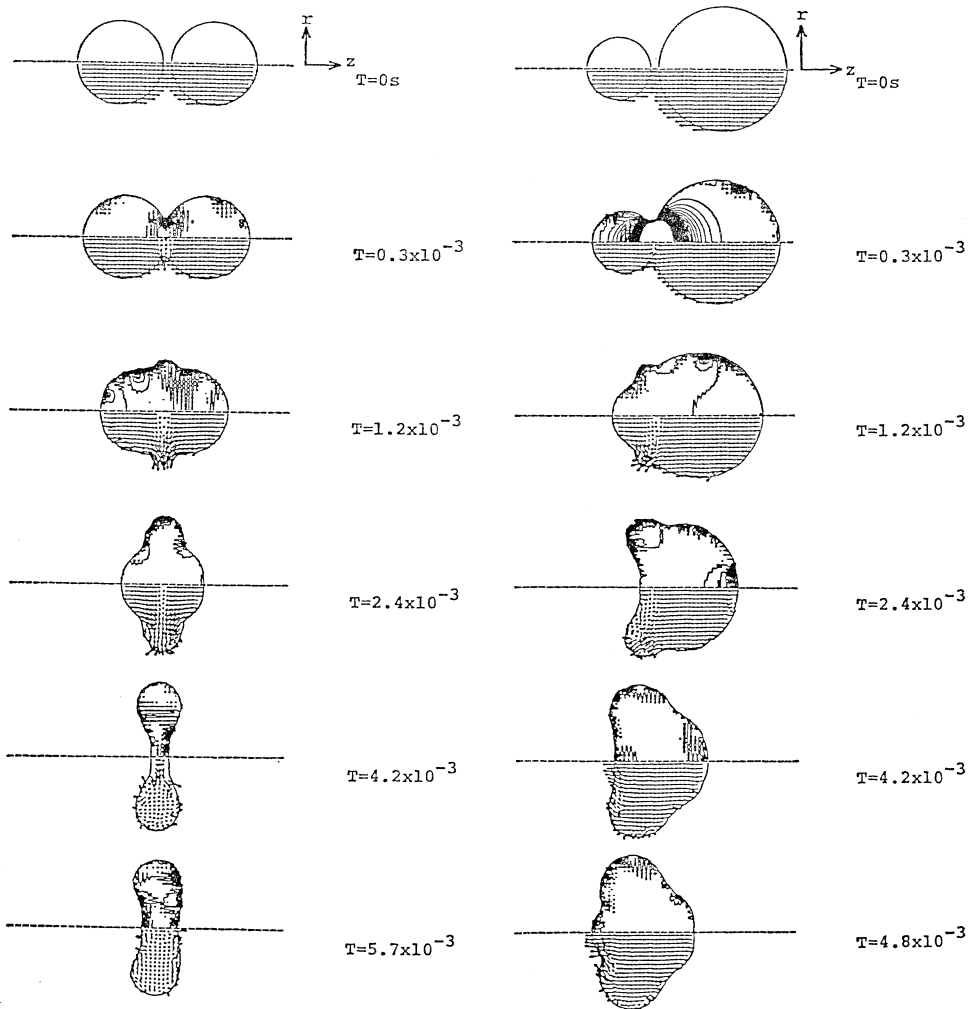


図 4 同じ半径の液滴同士の衝突 (軸対称, 初速度 = $\pm 50\text{cm/s}$)

図 5 異なる半径の液滴同士の衝突 (軸対称, 初速度 = $\pm 50\text{cm/s}$)

る。図4の場合、2つの液滴は衝突して一体になり、 r 方向に伸びていく。そして周囲に液体が拡がり中心がかなり薄くなるが、最後には表面張力効果で再び中心の方に液体が戻り始める。また図5、6では大きい液滴が小さい方を包み込むように全体が湾曲した形になるが、いずれも最後には表面張力効果により一体化した液体領域になることが予想される。なお、これらの図は静止座標系で描いているので図5、6の場合、重心が左方向に一定速度で移動している。計算で用いられた条件を表2に示す。

4.3 液滴の壁への衝突

この例では液滴が壁に衝突する様子をシミュレートした。計算は軸対称及び2次元で行った。

(1) 軸対称の場合

表面張力を75dyn/cmと15dyn/cmの場合について計算を行い、その計算結果をそれぞれ図7と図8に示す。重力効果は無視しており、初期の液滴の半径は共に2.2mmで初速度は壁に垂直方向に50cm/sである。図7の場合、衝突した液滴は r 方向にあまり拡がらずに、中心部に穴が開いてリングになる。一方、図8の場合、衝突した液滴は r 方向にかなり拡がってリングが形成されない。この違いは表面張力によるものである。計算で用いられた条件を表3

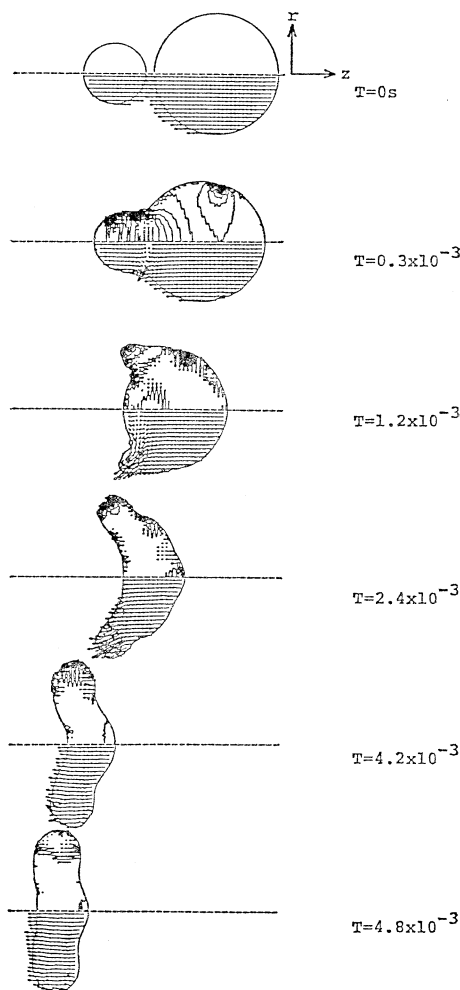


図6 異なる半径の液滴同士の衝突（軸対称，初速度=±100cm/s）

表2 液滴同士の衝突（軸対称）で用いられた条件

	図4	図5	図6
動粘性率	0.01cm ² /s	0.01cm ² /s	0.01cm ² /s
表面張力	75dyn/cm	75dyn/cm	75dyn/cm
初期の液滴の直径	0.2cm, 0.2cm	0.3cm, 0.15cm	0.3cm, 0.15cm
初期の液滴の速度	±50cm/s	±50cm/s	±100cm/s
格子数	130(z)×80(r)	130(z)×80(r)	130(z)×80(r)
格子間隔(Δr)	0.005cm	0.005cm	0.005cm
格子間隔(Δz)	0.005cm	0.005cm	0.005cm
時間ステップの増分(Δt)	1×10 ⁻⁶ s	1×10 ⁻⁶ s	5×10 ⁻⁷ s

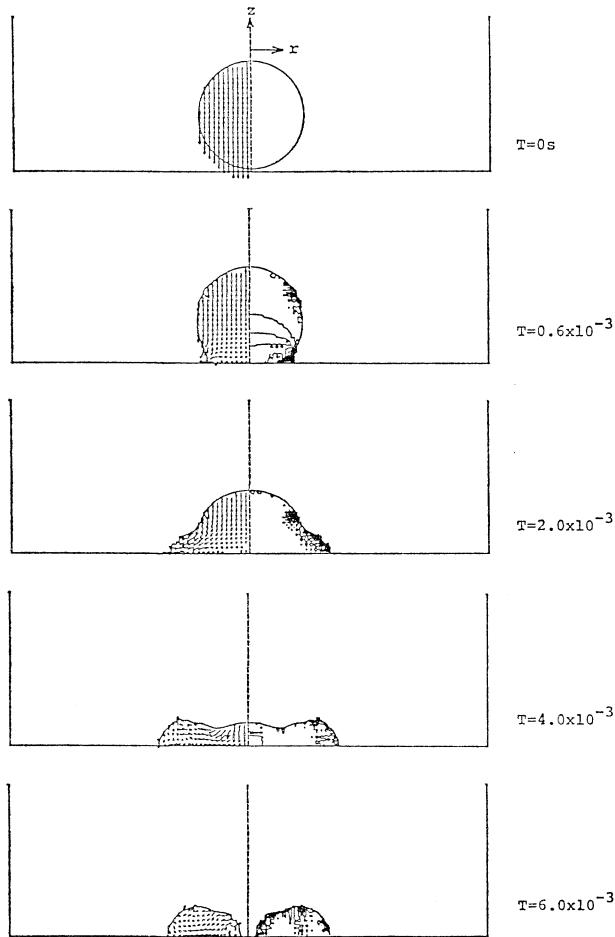


図7 液滴の壁への衝突（軸対称，表面張力=75dyn/cm）

に示す。

(2) 2次元の場合

2次元の場合は壁への入射角度を変えることが可能なので，入射角度を 90° と 45° の2つの場合を計算し，それぞれ図9，10に計算結果を示す． 45° の場合，左方向に流体が伸びていく様子が良くあらわれている．計算で用いられた条件を表4に示す。

4.4 液滴同士の衝突（3次元）

ここでは無重力下で2つの水滴が衝突する様子の3次元計算を行った．図11，12がその計算結果であるが，両図ともマーカー粒子の位置を元にして，表面を近似する多面体を構成し隠面処理を施した．図11は液滴が正面衝突する場合である．衝突後，液体領域のまわりに非対称な皺ができていたのが判る．この皺が物理的な不安定性によるものか数値的な誤差によるものかはまだ確認していない．また，図12は，初速度が初期の液滴の中心を結んだ直線に平行でない場合である．合体した液滴がお互いの周りを回り，最初に鋭角に突き出していた部

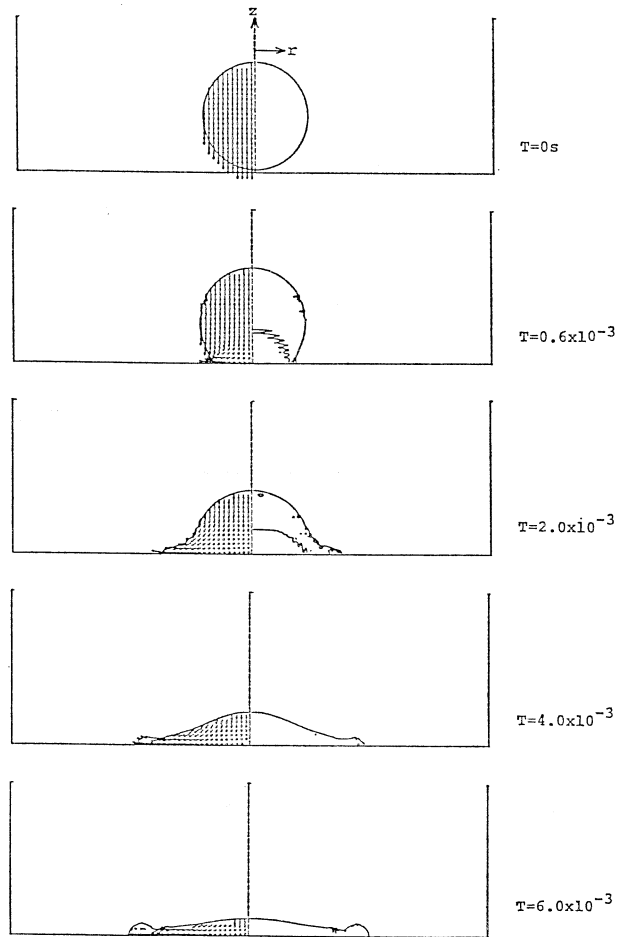


図 8 液滴の壁への衝突 (軸対称, 表面張力=15dyn/cm)

表 3 液滴の壁への衝突 (軸対称) で用いられた条件

	図 7	図 8
動粘性率	0.01cm ² /s	0.01cm ² /s
表面張力	75dyn/cm	15dyn/cm
初期の液滴の直径	0.22cm	0.22cm
初期の液滴の速度	-50cm/s	-50cm/s
格子数	100x100	100x100
格子間隔 (Δr)	0.005cm	0.005cm
格子間隔 (Δz)	0.005cm	0.005cm
時間ステップの増分 (Δt)	1x10 ⁻⁶ s	1x10 ⁻⁶ s

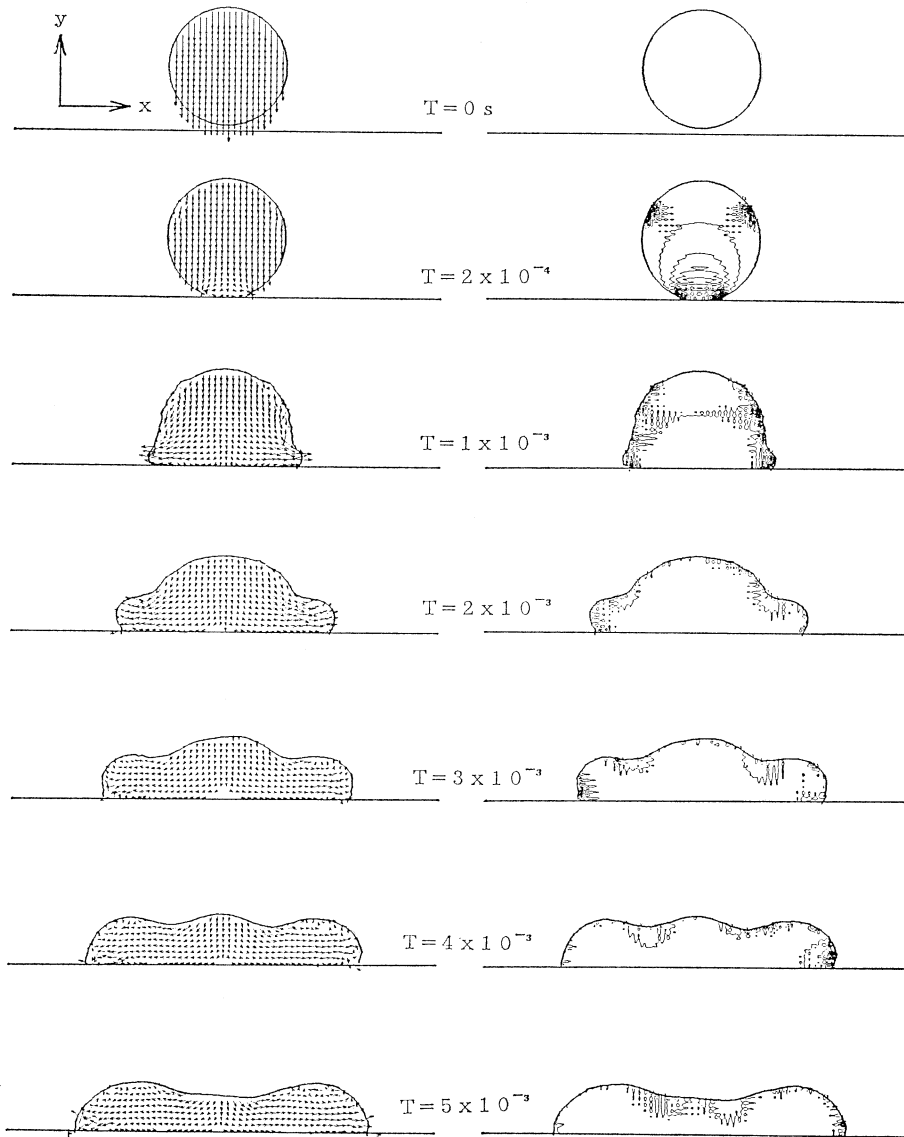


図9 液滴の壁への衝突（2次元，入射角度=90°）

分が表面張力によって丸くなっていく様子が判る。ただし両図の結果とも、表面におけるマーカー粒子の取り扱いがまだ確実とは言えず、この程度の状況までしか計算できていない。少ないマーカー粒子の置き直しによって常に表面を認識しようとしていることが誤認識の可能性を高めているようである。なお、計算で用いられた条件を表5に示す。

§5. おわりに

これまで MAC 法に基づいてそれに改良を加えた解法を具体的に説明し、様々な状況に

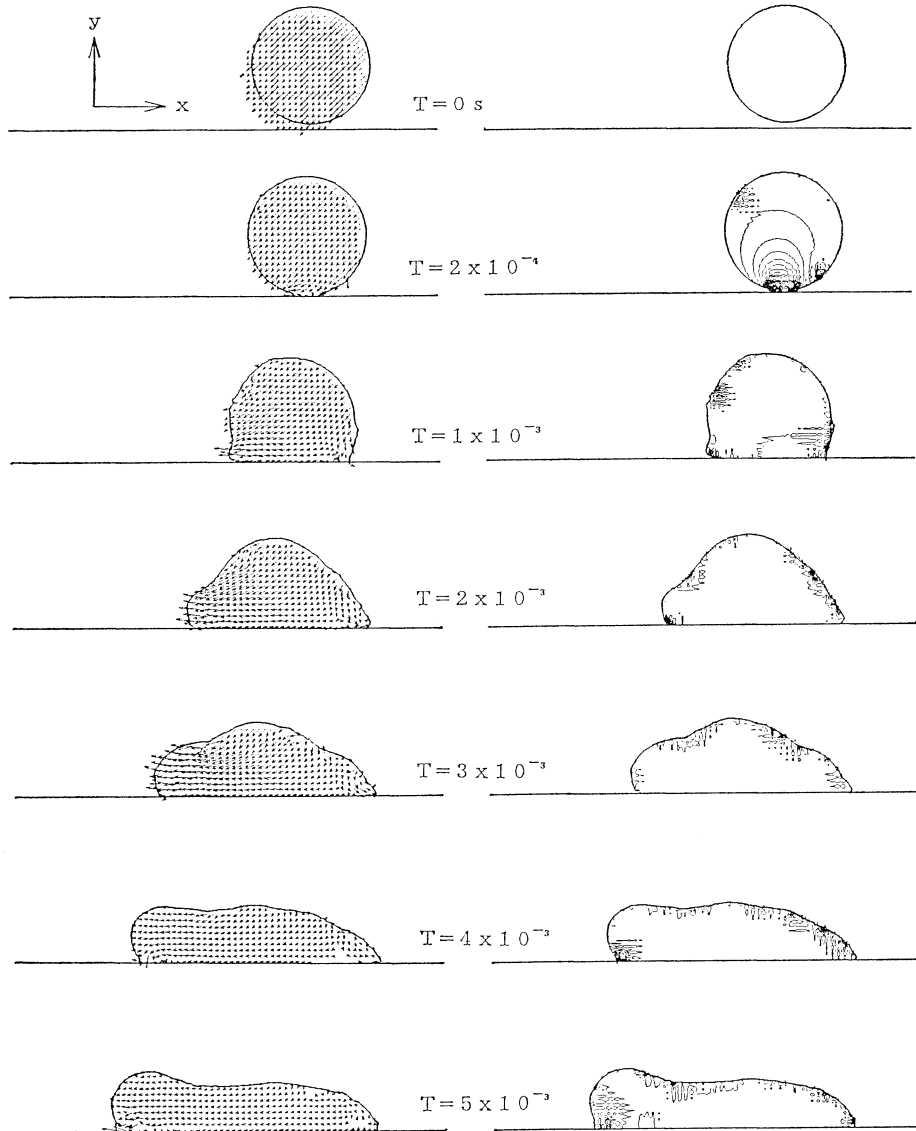


図10 液滴の壁への衝突 (2次元, 入射角度=45°)

表 4 液滴の壁への衝突 (2次元) で用いられた条件

	図9	図10
動粘性率	0.01cm ² /s	0.01cm ² /s
表面張力	75dyn/cm	75dyn/cm
入射角度	90°	45°
初期の液滴の直径	0.2cm	0.2cm
初期の液滴の速度	-50cm/s(y)	-35.4cm/s(x,y)
格子数	160(x)x60(y)	160(x)x60(y)
格子間隔 (Δx)	0.005cm	0.005cm
格子間隔 (Δy)	0.005cm	0.005cm
時間ステップの増分 (Δt)	1x10 ⁻⁶ s	1x10 ⁻⁶ s

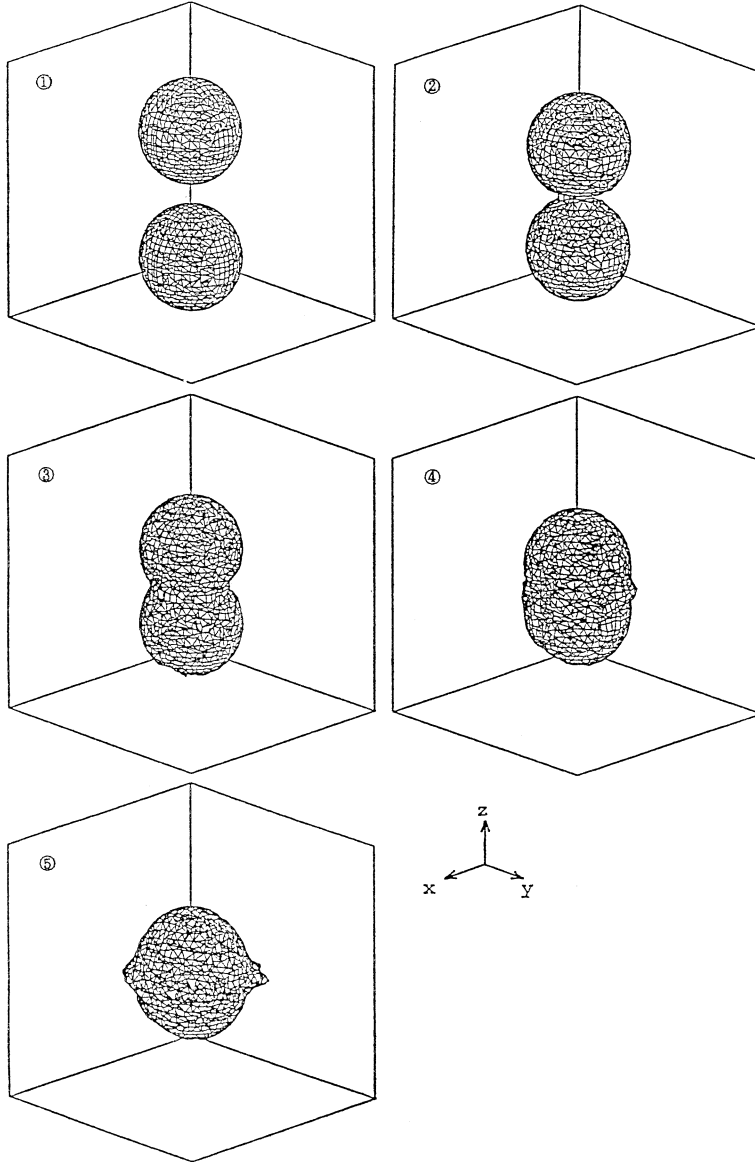


図11 液滴同士の衝突（3次元）

対する数値計算例を紹介した．この種の計算では，メモリーの節約や計算時間の節約が重要であり，それらの制限のもとで精度良く，また，位相的に複雑な問題にも対応できるようなスキームを作らねばならず，特に3次元計算はかなり難しいものとなっている．ここでは，その問題に対してマーカー粒子をある程度疎に置いて常に表面形状を近似するように置き直すという試みを行った．2次元計算では，自由表面の各セルで3つのマーカー粒子の位置から表面張力を計算し，液滴の運動のいろいろな問題に対しある程度の定性的な結果が得られた．また，3次元計算においては，球面当てはめによる曲率の推測によって表面張力を計算

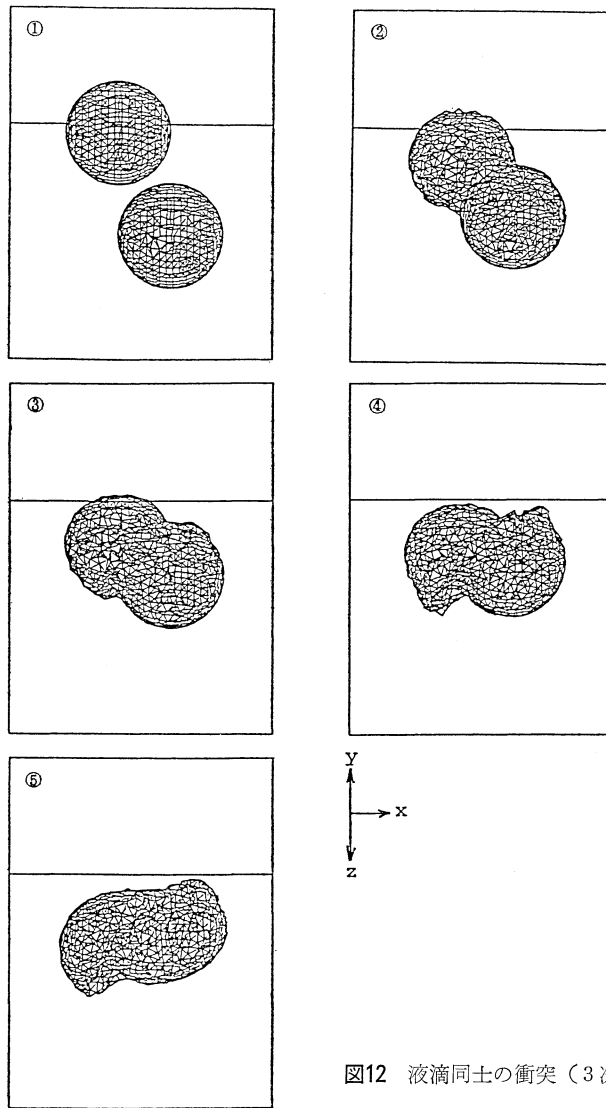


図12 液滴同士の衝突 (3次元)

表 5 液滴同士の衝突 (3次元) で用いられた条件

	図 1 1	図 1 2
動粘性率	0.01cm ² /s	0.01cm ² /s
表面張力	75dyn/cm	75dyn/cm
初期の液滴の直径	2cm, 2cm	2cm, 2cm
初期の液滴の速度	±500cm/s	±500cm/s
初期の液滴の中心の位置 (cm)	(2.5, 2.5, 3.75)	(3.0, 2.5, 3.75)
格子数	40(x) x 40(y) x 50(z)	40(x) x 40(y) x 50(z)
格子間隔 (Δx)	0.125cm	0.125cm
格子間隔 (Δy)	0.125cm	0.125cm
格子間隔 (Δz)	0.1cm	0.1cm
時間ステップの増分 (Δt)	2x10 ⁻⁶ s	2x10 ⁻⁶ s

し、液滴の衝突を計算した。以上の近似によって計算時間は節約されたが、まだ表面形状の認識に誤認識の可能性が高く、これらの解法が万全のものとは言えない。今後の課題としては、境界条件(7)式を取り込むこと、表面形状をもっと精度良く、かつ、効率良く取り扱うことなどが挙げられる。

参 考 文 献

- 1) F. H. Harlow & J. E. Welch : Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface, *Phys. Fluids* 8 (1965) 2182-2189.
- 2) J. F. Thompson, F. C. Thames & C. W. Mastin : Automatic numerical generation of body-fitted curvilinear coordinate system for field containing any number of arbitrary two-dimensional bodies, *J. Comp. Phys.* 15 (1974) 299-319.
- 3) Y. Katano, T. Kawamura & H. Takami : Numerical study of drop formation from a capillary jet using a general coordinate system. *Theoretical and Applied Mechanics*, Vol. 34 (Univ. of Tokyo Press, 1986) 3-14.
- 4) C. W. Hirt & J. P. Shannon : Free-surface stress conditions for incompressible-flow calculations, *J. Comp. Phys.* 2 (1968) 403-411.
- 5) B. J. Daly : A technique for including surface tension effects in hydrodynamic calculations, *J. Comp. Phys.* 4 (1969) 97-117.
- 6) A. A. Amsden & F. H. Harlow : The SMAC method : A numerical technique for calculating incompressible fluid flow, (Los Alamos Scientific Laboratory Report, 1970) LA-4370.
- 7) W. C. Macklin & P. V. Hobbs : Surface phenomena and the splashing of drops on shallow liquids, *Science* 166 (1969) 107-108.