



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Mathematical study on the thickened interface model by viscosity solution of the level-set equation
Author(s)	OSHIMA, Nobuyuki
Citation	Journal of Thermal Science and Technology, 17(1), 21-00410-21-00410 https://doi.org/10.1299/jtst.21-00410
Issue Date	2022-01-20
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/83856
Type	journal article
File Information	JTST_17_21-00410_translation.pdf, Author's translation



レベルセット方程式の粘性解に基づく人工厚さ界面モデルの数学的検討

大島伸行
北海道大学工学研究院

概要

粘性解に拡張されたレベルセット法について、流体現象の保存則と自由エネルギー理論に基づくフェーズフィールド法との関係を導出する。この数学的アプローチは、流体界面問題の近似モデルを考える際に有用である。ここでは、このアプローチを燃焼火炎解析などの人工厚さ界面モデルに適用し、レベルセット方程式の粘性解による新しい数学的定式化を導出する。この定式化は大域近似解の曲率にかかわらず界面伝播速度を保存することができる。この成果に基づき、経験的な人工厚さ火炎モデルの数学的不整合を明らかにし、いくつかの改善を提案する。

キーワード: レベルセット方程式, 粘性解, 燃焼火炎, 人工厚さ界面モデル, 保存則, フェーズフィールド・アプローチ

1. 緒言

炎は燃焼理論における基本的な問題であり、複雑な燃焼現象の視覚的イメージを与えるだけでなく、これらの現象を解析するための数学的アプローチも提供する。燃焼火炎は、気液相界面や衝撃波などの他の流体界面現象と同様に、典型的には薄いシート状の構造として特徴づけられる。その際、レベルセット方程式は、界面構造の空間伝播を記述するための有用な数学的ツールであり、さまざまな界面現象における薄いシート状構造の一般的な数値モデルとなる (Osher et al., 2002)。これは数学的解析でも詳細に調査されている (儀我ら 2002)。Chen et al., 1991 は粘性解の概念を導入してレベルセット方程式の解の一意性を証明した。この概念は、レベルセット方程式の数値的不安定性を抑制するための再初期化手順 (Russo et al., 2000; Olsson et al., 2005) の基礎にもつながる。また石田ら(2009)はフェーズフィールド・アプローチの最もよく知られたモデルである 1 次元 Allen-Cahn 型方程式に対しても本質的に同じ一意性を導出している。工学応用としては、レベルセット・アプローチとフェーズフィールド・アプローチによる 2 種類の界面モデルの類似性を検討して、Liu & Oshima (2011)は予混合燃焼火炎の数値モデルを提案し、Oshima (2016, 2017)は後にこのモデルをレベルセット方程式の 3 次元粘性解に拡張した。

燃焼火炎は薄いシート状構造であるため数値シミュレーションには細かい格子解像度が必要であり、流れ場の解像度と比較しても解くには小さすぎる場合がある。そこで、火炎厚さ方向に局所座標変換を施すアプローチ (Legier et al., 2000; Collin et al., 2000; Durand and Polifke, 2007; Terashima et al., 2021) が火炎の大域的挙動を解析するのに役立つ。これまでの経験的アプローチでは、予混合燃焼の平面火炎伝播の 1 次元解には適合するが、火炎面が曲率を持つ多次元問題を解くことには依然として問題が残る。これら過去研究では、火炎面曲率による駆動源の調査に十分な注意が払われていなかった可能性がある。

上記と本質的に同じ意味を持つ人工的厚さを仮定した界面モデルの問題は、気液相界面でも研究されている。Tiwari et al. (2013) は、この問題を不連続解を持つ輸送方程式の数値的解法として扱った。そこでは、

Nyigizente et al. (2021)が指摘したように、界面厚さ分布が表面張力の力のバランスと熱変数の理論的条件として扱われ、大域的な挙動を満たす人工厚さ相界面の数学的に一貫した定式化が導出されている。彼らは、相変化がない（あるいは相変化が遅い）定常および非定常界面現象に適切な流れ場や熱場の解を与えた。しかし、燃焼火炎は、大きな密度変化の下で熱流体保存則によって支配されるという意味で気液相界面と似た特性を有するものの、大きな伝播速度（燃焼速度）と複雑な化学反応システムによって引き起こされる追加の物理特性をも持っている。このことが、人工厚さ界面アプローチで、Nyigizente et al. (2021) が相界面に適用したような一貫した熱力学モデルに基づいて燃焼火炎を扱うことを困難にする。

燃焼速度（界面伝搬速度）や火炎厚さなどの重要な量が燃焼火炎の挙動を支配することがわかっている場合、代替アプローチとしてレベルセット方程式の概念を用いた一般的な数学的アプローチに従って、火炎を大域的な界面現象として扱うことができる。その目的で、Oshima (2017) は粘性解に対する拡張レベルセット方程式を導出し、これが数学的には保存則とフェーズフィールドの時空間偏微分方程式とも同等であることが示した。

これらの成果を踏まえて本研究では、拡張レベルセット方程式を人工厚さ界面アプローチに適用し、3次元伝播界面における数学的に一貫した定式化を調査する。

2. 人工厚さ界面の統一的な定式化

2.1 粘性解に拡張されたレベルセット方程式の定式化

レベルセット方程式は次のように表現される。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = v |\nabla \phi| \quad (1)$$

ここで、変数 ϕ の等値面 $\phi = \phi_0$ が面形状を定義し、その時間的挙動が面要素に垂直な伝搬速度 v によって計算される。この定式において、平均曲率は法線単位ベクトル $\mathbf{n} = \nabla \phi / |\nabla \phi|$ によって $\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}$ と定義される。このタイプの方程式は、数値的不安定性の問題を回避し解の一意性を維持するために、一般に追加の拡散項または数値誤差を使用して解かれる。Chen ら (1991)はレベルセット方程式の粘性解について、石田ら (2009) はそれと関連付けられるフェーズフィールド・アプローチの1次元 Allen-Cahn 型方程式について、数学的基礎を検証した。数値シミュレーションにてしばしば導入される再初期化手順 (Russo et al., 2000; Olsson et al., 2015, 2017) は、この目的で粘性解を用いるという意味で、この概念を表現している。

Oshima (2016, 2017) は、このアプローチを熱流体保存則によって支配される大きな密度変化を持つ物理流体界面に適用した。その粘性解を計算する拡張レベルセット方程式は、次のように表される。

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = \rho v |\nabla \phi| + O(\phi, \nabla \phi) . \quad (2)$$

ここで、変数 ϕ は流体媒質の速度ベクトル \mathbf{u} （原著記号 \mathbf{V} を改めた）と流体密度 ρ によって駆動される流体内のスカラー量として再定義され、これに対して等値面の界面伝搬フラックス $\rho v = s + c\kappa$ を導入すると法線流 s と曲率流 $c\kappa$ の2つの成分をもつ。

従来レベルセット法が単一の等値面をモデル化する代わりに、本研究で提案するアプローチでは、図1に示すように界面を複数の等高線 ($\phi = \phi_0$) が積層した有限厚さ領域 ($\phi_- \leq \phi_0 \leq \phi_+$) として、式 (2) によってモデル化する。隣接する等値面が連続的な伝搬速度（フラックス）を持つならば、変数 ϕ は等値面 $\phi = \phi_0$

の周りに、その隣接場とつながるような局所分布を形成する。したがって式 (2)は、有限の厚さの範囲 ($\phi_- \leq \phi_0 \leq \phi_+$)内の積層された複数の等値面としてレベルセット方程式の粘性解を与える。このとき、式 (2) 右辺の汎関数 $O(\phi, \nabla\phi)$ は、隣接する等値面間の相互作用を定義して、それらの定数 ϕ_0 が単調に変化するような積層分布を数学的に与える。これによって、安定した薄い界面領域を維持するための物理モデルが記述される。従来研究(Russo et al., 2000; Olsson et al., 2015, 2017)において微分方程式で表現された再初期化方法は、 $\partial\phi/\partial t = O(\phi, \nabla\phi)$ による時間進行計算で安定した収束解を与える機能モデルの候補となる。 $O(\phi, \nabla\phi) = 0$ の条件下で各等値面は同じ伝搬フラックス $\rho v = s + c\kappa$ を持つため、拡張された方程式(2)は再初期化手順を伴うレベルセット法と同等になる。

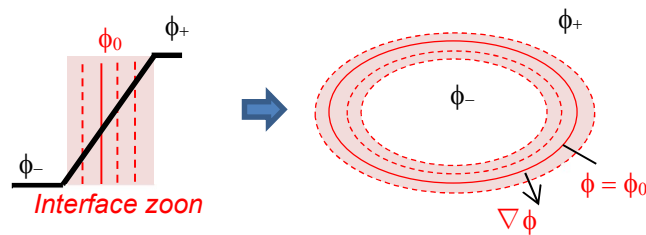


図 1 積層等値面に拡張されたレベルセット法 の概念 (Oshima, 2017).

Liu ら(2011) に従い、ここでは界面の物理的挙動を、次式で表されるスカラー保存則

$$\rho \frac{\partial\phi}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla\phi = \nabla \cdot \mathbf{j} + q. \quad (3)$$

との関係に基づいて考察しよう。ここで、変数 ϕ は、対流項 $\rho \mathbf{u} \cdot \nabla\phi$ と勾配モデルによる拡散項フラックス $\mathbf{j} = d\nabla\phi$ に駆動される流体内の保存的スカラーであり、正の拡散係数: $d > 0$ と生成 q をもつ。保存方程式(3) からレベルセット定式化を導くために、Liu ら (2011) は局所界面伝搬速度 $s^*(\phi) = q/|\nabla\phi|$ (物理的には局所燃焼速度または局所火炎速度として定義される) を導入し、これによって、拡散中立位置 ($\nabla \cdot \mathbf{j} = 0$) に観測される急勾配な局所的安定解 $|\nabla\phi|$ を用いて、大域的な界面伝搬速度 s が記述される。

さらに大島 (2017) は、曲率流れを伴う 3 次元問題に対する拡張定式化を次のように提案した。

$$q = -(\rho v + f') \frac{f}{d} + \kappa f, \quad f' = \frac{df}{d\phi} \quad (4)$$

ここで、界面伝搬フラックス $\rho v = s + c\kappa$ は式 (2) と同様に大域的な界面挙動を与え、また、

$$\frac{f}{d} + |\nabla\phi| = 0 \quad (5)$$

の条件下で炎の厚さ分布を定義する形状関数 $f(\phi)$ が導入される。稲毛ら (2007) が提案した燃焼火炎の双曲正接分布近似 (HTA) モデルは、式 (4) で f を二次関数と仮定して曲率 κ の効果 (右辺第 2 項) を除いたものと同一である。式 (4) を代入すると、保存方程式(3) の右辺は拡散項を加えて次のように書き直すことができる。

$$RH = \rho v |\nabla\phi| - (\rho v + f') \left(\frac{f}{d} + |\nabla\phi| \right) + \nabla \cdot d \left(\frac{f}{d} + |\nabla\phi| \right) \mathbf{n} \quad (6)$$

これは、式 (5) の厚さ分布により第2, 3項が消えるときに、式 (2) のレベルセット方程式の粘性解を与える。大島 (2017) が解析したように、レベルセット方程式の再初期化手順として他の研究者 (Russo et al., 2000; Olsson et al., 2005) によって提案されたものと同様となる。すなわち、第2項は、最も急な勾配 $|\nabla\phi|$ に位置するであろう $f'=0$ における等値面の周囲に Russo らの再初期化解に収束する解を与えるものであり、また第3項の役割は、界面厚さ分布を Olsson らによる再初期化解へ保存的に収束させると考察できる。

保存則からレベルセット解を与える界面駆動力の式 (4) は、自由エネルギー理論に基づくフェーズフィールド・アプローチによっても導出できる。すなわち、Allen-Cahn 方程式の界面駆動力は、汎関数 Φ_i の変数 ϕ への変分によってオイラー・ラグランジュ方程式で定式化され以下となる。

$$\frac{D\phi}{Dt} \equiv \frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\phi = -M \sum \frac{\delta\Phi_i}{\delta\phi} \quad (7)$$

フェーズフィールド・アプローチでは変数 ϕ を「秩序パラメータ」と呼ぶが、これは界面の位置を示すレベルセット関数に対応する。汎関数 Φ_i (式(8)) が積層する等値面ごとに評価されると考えると、積分厚さ全体にわたって同等の変化 $d|\nabla\phi|$ を維持するためにオイラー・ラグランジュ方程式 (7) の移動度係数は $\rho dM=1$ と仮定される。

界面の形状と伝搬移動を与える汎関数 Φ_i は次のように定義される。

$$\Phi_i = \int F_i dV \quad (8)$$

ここで、自由エネルギーポテンシャル F_i は、界面要素の体積 dV を通して積分された i 番目成分の効果を記述する。本研究では、ポテンシャル関数を4つの成分によって与える。

$$F_1 = \int s f d\phi, \quad F_2 = \frac{1}{2} f^2, \quad F_3 = (d-c) f |\nabla\phi|, \quad F_4 = \frac{1}{2} d^2 |\nabla\phi|^2, \quad (9)$$

ここで、 F_2 と F_4 は局所平衡界面問題に対するフェーズフィールド・アプローチで広く適用されるもので、 F_2 は変数 ϕ の二重井戸関数とされ、その最も単純な式は Olsson の再初期化に用いられた放物線関数 f によって定義されている (和訳補足: 稲毛らの HTA 火炎モデルも同様)。また、 F_1 は非平衡界面問題における界面伝搬をモデル化する (Kobayashi, 1993)。Oshima (2017) によって新たに提案された F_3 は、前述の積層された隣接層による局所非平衡を考慮し、 $c\kappa$ の曲率流れを制御する。特に、 $F_3=0$ のときには拡散係数 d に比例する「非ゼロ曲率流れ」を引き起こす。界面曲率を持つ多次元問題を解くことは困難であるが、稲毛ら (2007) や Kobayashi (1993) はこの問題にいくらかの注意を払っている。

2.2 レベルセット解に随伴する輸送方程式

二重井戸関数 F_2 が形状関数 f の平方で与えられるとき、式(3)と式(4) (またはそれと等価な式(7)) は界面法線座標 ξ に沿った単調解 ϕ を与える。ここで、式(5)は次のように表される。

$$f = -d |\nabla\phi| = -d (\mathbf{n} \cdot \nabla\phi) = -d \frac{d\phi}{d\xi}. \quad (10)$$

したがって、界面を定義するレベルセット変数 ϕ が単調であれば、その関数 $\phi_a(\phi)$ によって座標 ξ に沿った任意の連続分布 (非単調あるいは非正でもよい) が記述できる。そこで、界面法線座標 ξ に沿った ϕ の新しい関数 $f_a(\phi)$ とその導関数を次のように導入する。

$$f_a = -d (\mathbf{n} \cdot \nabla\phi_a) = -d \frac{d\phi_a}{d\xi} = \phi_a' f, \quad \phi_a' = \frac{d\phi_a}{d\phi}, \quad (11)$$

$$f_a' = \frac{df_a}{d\phi} = \phi_a' f' + \phi_a'' f, \quad \phi_a'' = \frac{d^2\phi_a}{d\phi^2}, \quad (12)$$

ただし、これらは一般に ϕ_a の関数として定義されるわけではないことに注意する。

前述の再初期化手法に従って、 ϕ_a に対する次の式が導出される。

$$\rho \frac{\partial \phi_a}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla \phi_a = \rho \mathbf{v} \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a - (\rho \mathbf{v} \phi_a' + f_a') \left(\frac{f}{d} + \mathbf{n} \cdot \nabla \phi \right) + \nabla \cdot d \left(\frac{f_a}{d} + \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a \right) \mathbf{n} \quad (13)$$

ここで、界面伝搬フラックス $\rho V = s + c\kappa$ と法線単位ベクトル \mathbf{n} は、レベルセット変数 ϕ に対する式(6) に定義されたものと同じである。式(6)と同様に式(13)は、 ϕ と ϕ_a の安定解の条件がそれぞれ式(10)と(11)で与えられている場合、界面伝搬フラックス $\rho \mathbf{v}$ により ϕ_a の解を伝搬する。特に、式(3)と(6)によって与えられるレベルセット解 ϕ の条件(5)を満たす薄い界面（法線単位ベクトル \mathbf{n} と平均曲率 κ ）において、 ϕ_a に対する式(13)では右辺の第2項が消失し、一方、最後の項が次式を満たすよう再初期化の役割を果たす。

$$\frac{f_a}{d} + \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a = 0. \quad (14)$$

さらに、式(4)から(6)を導いたのと同様の方法で、式(13)から保存則を記述する同等の定式化

$$\rho \frac{\partial \phi_a}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla \phi_a = \nabla \cdot \mathbf{j}_a + q_a, \quad \mathbf{j}_a = d \nabla \phi_a, \quad q_a = -(\rho \mathbf{v} \phi_a' + f_a') \frac{f}{d} + f_a \kappa, \quad (15)$$

に変換できる。ここで、以下のベクトル公式と微分関係の恒等式を適用した。

$$\nabla \cdot f_a \mathbf{n} = f_a' \mathbf{n} \cdot \nabla \phi + f_a \kappa, \quad (\mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a) \mathbf{n} = \frac{d\phi_a}{d\phi} (\mathbf{n} \cdot \nabla \phi) \mathbf{n} = \frac{d\phi_a}{d\phi} \nabla \phi = \nabla \phi_a.$$

これに式(11)および(12)を代入すると、式(15)の生成項の別の定式が導出される。

$$q_a = -(s + f') \frac{f_a}{d} - (c - d) \kappa \frac{f_a}{d} - \phi_a'' \frac{f^2}{d}, \quad (16)$$

これは3つの原動力から構成されており、第1項はLiuの局所伝搬速度（フラックス） $s^* = s + f'$ 、第2項は拡散項の曲率成分 $d\kappa$ を補正する曲率流駆動、第3項は界面形状関数 f に依存する駆動力である。ここで、第1および第2の駆動力は拡散フラックス $\mathbf{j}_a = d \nabla \phi_a$ を合わせることで、式(14)による安定解の下で界面伝搬 $(s^* + c\kappa) \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a$ を与える。対照的に、 $\phi_a'' f |\nabla \phi|$ と評価される第3の駆動力は、形状関数 f および $|\nabla \phi|$ によって定義される界面に伴われて、変数 $\phi_a(\phi)$ のターゲットとなる分布（式(14)）を維持すると考察される。したがって、変数 $\phi_a(\phi)$ が対流と拡散を伴う保存則によって支配される場合に、式(15)は伝搬界面において安定な分布を維持する数学的に一貫した定式化を与えたといえる。

2.3 人工厚さ界面モデル式の導出

前節で、安定な伝搬界面に伴う変数について共通の定式化（式(13)または(15)）を導出した。この導出は、従来知られた修正された拡散係数を介して厚くなった界面（人工厚さ界面）の数値モデルにとって肯定的および否定的な両面の結果をもたらす。すなわち、上記に示した定式化(15)は、**曲率のない平面界面**では従来モデルの考え方（拡散係数と生成に互いに逆数となる係数を乗ずる）が正しいことを裏付けている。しかし一方で、曲率を伴う一般的な多次元問題では、修正された拡散係数は誤った曲率流を誘導して界面を変形するであろうことを示す。よって、人工厚さ界面をモデル化する際に平均曲率への考慮を含まない定式化は正しい解を与えることができないと結論される。

ここでもし、界面分布 $\phi_a(\phi)$ またはその形状関数 $f_a(\phi)$ が分かっている場合、これを適用して式(13)または式(15)の正しい平均曲率流解を導くことができる。すなわち、人工厚さ界面に対する修正された定式化は、

拡散係数 d に伸張係数 α を導入することで自然に導かれる。

$$\rho \frac{\partial \phi_a}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla \phi_a = \rho v \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a - (\rho v \phi_a' + f_a') \left(\frac{f}{\alpha d} + \mathbf{n} \cdot \nabla \phi \right) + \nabla \cdot \alpha d \left(\frac{f_a}{\alpha d} + \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a \right) \mathbf{n}, \quad (17)$$

これは、レベルセット変数に対する式

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \rho v \mathbf{n} \cdot \nabla \phi - (\rho v + f') \left(\frac{f}{\alpha d} + \mathbf{n} \cdot \nabla \phi \right) + \nabla \cdot \alpha d \left(\frac{f}{\alpha d} + \mathbf{n} \cdot \nabla \phi \right) \mathbf{n}. \quad (18)$$

と連成して解く必要がある。前述の議論に従って、数学的に同値で保存則を表す定式も次のように導かれる。

$$\rho \frac{\partial \phi_a}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla \phi_a = \nabla \cdot \alpha \mathbf{j}_a + Q_a, \quad Q_a = -(\rho v \phi_a' + f_a') \frac{f}{\alpha d} + f_a \kappa \quad (19)$$

および、

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \alpha \mathbf{j} + Q, \quad Q = -(\rho v + f') \frac{f}{\alpha d} + f \kappa. \quad (20)$$

ここで、人工厚さ界面に再定義された ϕ および $\phi_a(\phi)$ の分布は以下で与えられる。

$$\frac{f}{\alpha d} + \mathbf{n} \cdot \nabla \phi = 0 \quad \text{and} \quad \frac{f_a}{\alpha d} + \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a = 0. \quad (21)$$

しかし、形状関数 f_a がモデル方程式を解く前には未知であると、この定式は一般的には適用できない。そこで、局所的に定常な解(式(21))を仮定して、式(17)の最後の項を $-\alpha d \kappa \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a$ に置き換えた

$$Q_a = \frac{q_a}{\alpha} + (1 - \alpha) d \kappa \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a, \quad (22)$$

が提案される。このアプローチでは、変数 ϕ_a の方程式から形状関数 f や f_a を明示的に含む項が除かれるので、従来の人工厚さをを用いた火炎モデルにおける曲率流の問題に対して実用的な改善につながる可能性がある。

もう一つの案としては、拡散係数 d を変えずに保つというやり方もあり、これはほとんどの物理的問題で曲率流を誘発する可能性がある拡散項の効果を変化させないという利点がある。特に、物理的な曲率流が拡散係数 d の寄与のみで与えられる場合（すなわち $c = d$ ）、生成は界面曲率 κ からの寄与を持たない。そこで、式(14)による安定解と伝搬速度 s が既知であるとして、生成項は伝搬項と残余項に分解され、

$$q_a = s \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a + q_a^*, \quad q_a^* = -\frac{1}{d} (\phi_a' F_2' + 2 \phi_a'' F_2), \quad F_2' = \frac{dF_2}{d\phi}. \quad (23)$$

となる。ここで、厚くなった界面で変数 $\phi_a(\phi)$ が維持されるならば、生成項 q_a^* は形状関数 $2F_2 = f^2$ のみに依存する。したがって、伸張係数 α により形状関数を f/α と修正することによって、式(21)で定義された厚くなった界面条件を満たす定式化を与えることができる。

結果、人工厚さ界面の新しいモデルが次のように導出される。

$$\rho \frac{\partial \phi_a}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla \phi_a = \nabla \cdot \mathbf{j}_a + Q_a, \quad \mathbf{j}_a = d \nabla \phi_a, \quad Q_a = s \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a + \frac{q_a^*}{\alpha^2} = \left(1 - \frac{1}{\alpha} \right) s \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_a + \frac{q_a}{\alpha^2} \quad (24)$$

および

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot \mathbf{j} + Q, \quad \mathbf{j} = d \nabla \phi, \quad Q = \left(1 - \frac{1}{\alpha} \right) s |\nabla \phi| + \frac{q}{\alpha^2}, \quad (25)$$

このとき、ターゲットとなる条件式 (21) を満たす人工厚さ界面での新しい解 ϕ_a および ϕ が、正しい界面フラックス $\rho v = s + d \kappa$ で伝搬する。式 (24) は、界面法線流れフラックスベクトル $s \mathbf{n}$ を除いて、形状関数 f_a や f の予備情報を必要としないため、化学反応で駆動する燃焼火炎場 (s は平面火炎の燃焼速度として既知であることが多い) に使用可能な定式化となる。ここで、厚くなった界面の解 ϕ_a と ϕ は、上記の仮定の下

で、元の解と同じ変分関係 ($d\phi_a/d\phi$) を維持する。したがって、厚くなった一つの界面をレベルセット関数 ϕ で定義したときに、それに伴うように複数の変数 ϕ_a を統一的に解くことができる。

2.4 人工厚さ界面のフェーズフィールド近似

フェーズフィールド・アプローチは熱力学理論に基づいて界面現象の物理的メカニズムを考慮するのに有用である。Oshima (2017) に従って、レベルセット変数 ϕ が定義する厚くなった界面 (式 (20)) は、ポテンシャル成分 F_3 および F_4 に大きな拡散係数を誘導することにより、Allen-Cahn 方程式に変換される。

$$F_3 = (\alpha d - c) f |\nabla \phi|, \quad F_4 = \frac{1}{2} (\alpha d)^2 |\nabla \phi|^2, \quad (26)$$

ここで、移動度係数も $\rho(\alpha d)M = 1$ と修正される。拡大係数 $\alpha \geq 1$ ならば物理的条件が $F_3 = 0$ であっても、界面伝搬フラックス $\rho v = s + c\kappa$ の同一性を維持するために F_3 の明示的定式化が必要となる。これと同等の界面熱力学条件を表すものとして Nygizente ら (2021) が気液相界面について議論したように、人工厚さ火炎モデルの拡散制御アプローチには拡散フラックスによる曲率流れの補正処理の導入が必要であると分かる。

逆に式(9)の形状関数 f への因子 α を誘導すれば、代替の定式化(式(25))も次のように導かれる。

$$F_1 = \int s \left(\frac{f}{\alpha} \right) d\phi, \quad F_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{f}{\alpha} \right)^2, \quad F_3 = (d - c) \frac{f}{\alpha} |\nabla \phi|, \quad F_4 = \frac{1}{2} d^2 |\nabla \phi|^2. \quad (27)$$

これによって、第 3 成分 $F_3 = 0$ ($c = d$) および移動度係数 $\rho d M = 1$ としたときに、界面伝搬フラックスの恒等性 $\rho v = s + c\kappa$ を保持する。すなわち、化学反応が与える燃焼速度 s が既知のときに、物理仮定 $c = d$ のもとで拡散メカニズムを含む火炎伝搬フラックス $\rho v = s + c\kappa$ を正しく与えるモデルとして、このアプローチは他よりも簡明かつ普遍的といえる。

同様にして、の結果、式(26) および式(27)に相当するフェーズフィールド・アプローチによる変数 ϕ_a のポテンシャル定式が以下に導出される。

$$F_1 = \int s f_a d\phi, \quad F_2 = \int (f_a' f) d\phi, \quad F_3 = (\alpha d - c) f_a |\nabla \phi|, \quad F_4 = \frac{1}{2} (\alpha d)^2 |\nabla \phi|^2, \quad \rho(\alpha d)M = 1, \quad (28)$$

および

$$F_1 = \int s \left(\frac{f_a}{\alpha} \right) d\phi, \quad F_2 = \int \frac{f_a' f}{\alpha^2} d\phi, \quad F_3 = (d - c) \frac{f_a}{\alpha} |\nabla \phi|, \quad F_4 = \frac{1}{2} d^2 |\nabla \phi|^2, \quad \rho d M = 1, \quad (29)$$

これらの式は、条件 $\alpha = 1$ とすれば元の物理解に帰着する。ただし、このポテンシャル定式化は矛盾のない数学モデルであるが、積層界面の力学に対する移動度係数 M についてまだ十分な物理的検討がなされていないため、必ずしもそのまま物理現象における自由エネルギーを与えるとは言えない。この問題は将来研究として残され、よく知られているアレニウスの法則と温度の関係と同様に、燃焼火炎における伝搬速度は界面レベルセットを表す変数に対して非線形な関係を持つ可能性がある。

3. 計算結果

上述の人工厚さ界面アプローチに関する数学的研究は、レベルセット方程式の粘性解とそれと同等の保存則の定式化に基づいて一貫した方程式系を導出する。提案されたアプローチは、拡散項による曲率流を暗黙的に含める人工厚さ界面モデルで発生する問題を解決することができる。以下では、新しく提案された方法を数値シミュレーションに適用して得られた 1 次元解の例をいくつか示す。

簡略化された問題として、界面レベルセット ϕ は形状関数 $f = \phi(\phi - 1)$ によって与えられるとすれば、ここで、界面法線座標に沿った式 (10) の安定分布は次のように計算される。

$$\phi = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\xi}{2d}\right) \quad 0 \leq \phi \leq 1. \quad (30)$$

これに付随する変数 $\phi_a = (A\phi + B)\phi(1-\phi)$ を仮定すると、その形状関数は条件 (11) の下で次のように計算されます

$$f_a = \phi_a' f = \{A(1-2\phi) + B(2\phi - 3\phi^2)\} \phi(\phi-1) \quad (31)$$

本研究では、初期条件の式 (26) が与える界面内でレベルセット ϕ に対して非単調となる解 ϕ_a を作成するために、 $A=1$ および $B=-1.5$ と設定した (図 2 右)。平面界面座標 $x=\xi$ および円筒界面座標 $r=\xi$ によって評価される 2 つのケースにおいて、界面曲率はそれぞれ $\kappa=0$ および $\kappa=1/r$ となる。界面伝搬係数は $s=1$ or 0 および $c=d$ or 0 と与えおよびえ、拡散係数は $d=0.2$ とした。密度は $\rho=1$ で一定と仮定する。前述のように、界面伝搬フラックス $\rho v = s + c\kappa$ は、レベルセット面の法線流 s と曲率流 $c\kappa$ によって定義される。

厚さ因子 α を伴う微分方程式系 (式 (19) および (20)) は、時間積分についてはオイラー陽解法、空間導関数については 2 次中心差分法によって解かれる。同じ解が等価な定式化である式 (17) および (18) によっても正確に与えられる。レベルセット粘性解の概念によって導入された保存方程式の明示的な拡散項の働きによって、数値不安定性を除去するための人工的な追加手順や風上スキームの使用を回避することが可能となる。時間と空間の増分は、一般の対流拡散問題の場合と同じ方法で $dt=0.01$ および $d\xi=0.1$ と設定すれば安定条件

$$v \frac{dt}{d\xi} < 1, \quad \frac{d}{\rho} \frac{dt}{d\xi^2} < \frac{1}{2}, \quad \frac{v}{d} dx < 2$$

を満たす。

最初のケースでは基準となる平面界面 ($\alpha=1$) の伝搬について、図 2 に示すようなレベルセット変数 ϕ と付随変数 ϕ_a の両方に対して均一な伝搬速度が得られた。この場合には曲率係数 c は解に寄与しない。これに厚み因子 ($\alpha=2$) を適用した解 (図 3) は、元の解 (図 2) を正しい係数で x 座標に伸長し、かつ、同じ速度で伝搬することがわかる。

2 つ目のケースには同じ厚さ因子 ($\alpha=2$) を用いて円筒界面における曲率流れ ($s=0$) を評価する。曲率係数を拡散係数と等しく $c=d=0.2$ と設定した。これは拡散項による曲率流れの補正のない人工厚さ界面モデルに対応するが、解 (図 4 左) は初期分布から徐々に変形することがわかる。一方、曲率係数がゼロの場合 ($c=0$) は解 (図 4 右) が補正され、式 (21) で定義された同じ初期分布が正確に維持される。

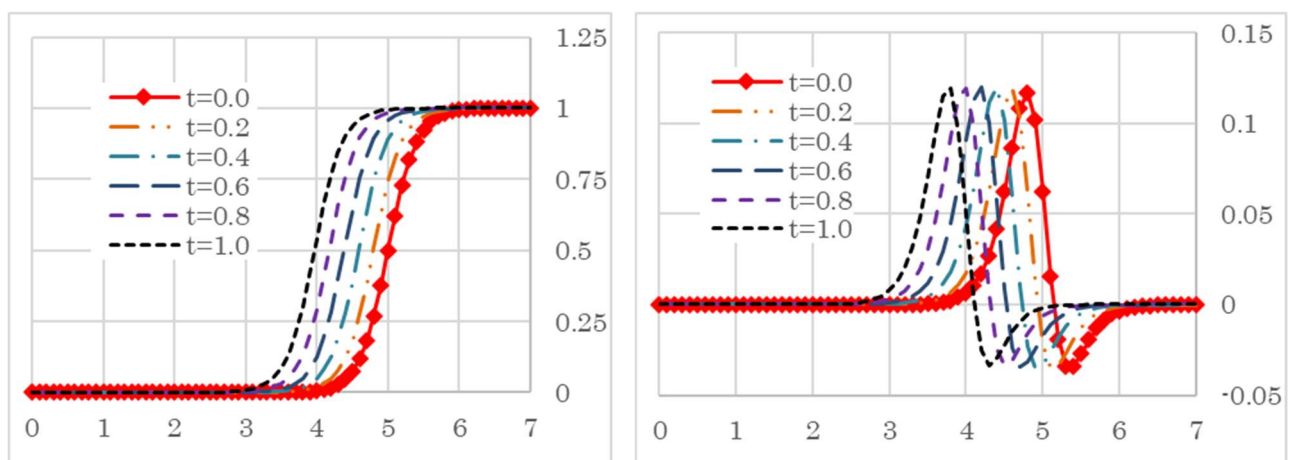


図 3 平面界面 ($\alpha=1$) の伝搬, $s=1$, $c=d=0.2$; 左: レベルセット変数 ϕ および 右: 随伴変数 ϕ_a

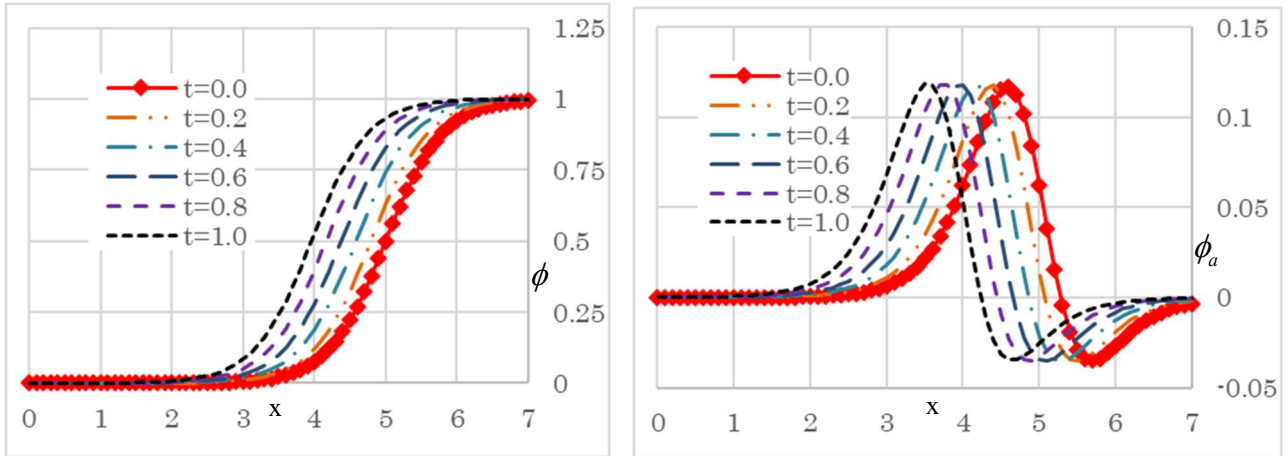


図3 人工厚さ界面($\alpha=2$)の伝搬, $s=1$, $c=d=0.2$; 左: レベルセット変数 ϕ および 右: 随伴変数 ϕ_a

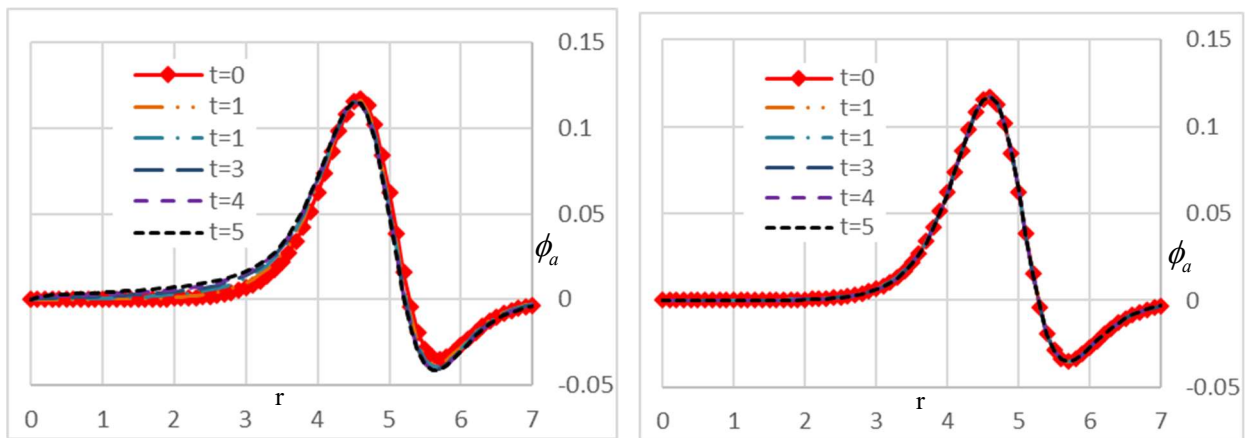


図4 円筒界面での ϕ_a の解; 人工厚さ界面($\alpha=2$), 左: $s=0$, $c=d=0.2$, および, 右: $c=0$, $d=0.2$

4. 結言

本論文では、レベルセット方程式の粘性解に基づき人工厚さ界面モデルの数学的に一貫した定式化を調査した。その結果、3つの主要な提案が得られた。

1. 安定した伝搬界面とともに輸送される変数量について、界面レベルセットの付随方程式として新しい数学モデルが導入された。これにより、レベルセットの界面伝搬フラックスを指定したときに、保存則を満たし安定した分布を保って伝搬する変数解を予測できる。
2. 人工厚さ界面モデルの数学的に一貫した定式化が導出された。これに基づき界面の曲率寄与を正しく処理することで、多次元問題に対して従来の経験的モデルで発生した困難を克服した。
3. 新しい数理モデルを用いて、燃焼火炎や気液相界面などの物理界面を保持・駆動するメカニズムに一貫的な説明を示した。また、これに対応するフェーズフィールド・アプローチのポテンシャル汎関数の定式化が導出された。

参考文献

- Chen, Y., Giga, Y. and Goto, S., Uniqueness and existence of viscosity solution of generalized mean curvature flow equations, *Journal of Differential Geometry*, Vol.33 (1991), pp. 749–786. DOI: 10.4310/jdg/1214446564.
- Colin, O, Ducros, F., Veynante, D. and Poinso, T., A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion, *Physics of Fluids*, Vol.12, No.7 (2000), pp.1843–1863. DOI: 10.1063/1.870436.
- Giga, Y., Surface evolution equations – a level set method, Hokkaido University Technical Report Series in Mathematics, (2002). DOI: 10.14943/647.
- Inage, A., Proposal of United Combustion Model for Premixed and Diffusion Flames and Its Evaluation (1st Report: Estimation of the Fundamental Model), *Journal of the Combustion Society of Japan*, Vol.49. No.150 (2007), pp.267–276, in Japanese. DOI: 10.1115/GT2008-50233. (稲毛, 予混合～拡散燃焼場に適用可能な統一燃焼モデルの提案とその評価－第一報 基本モデルの構築, 日本燃焼学会誌)
- Ishida, A. and Tonegawa, Y., A relation between a mean curvature equation and a phase transform of parabolic equations in an equation for the premixed combustion flames, *Proceedings of Annual Meeting of Mathematical Society of Japan* (2009) 2p. (石田, 利根川, 日本数学会年会梗概)
- Kobayashi, R., Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth, *Physica D*, Vol.63 (1993), pp.410–423. DOI: 10.1016/0167-2789(93)90120-P.
- Legier, J.P., Poinso, T. and Veynante, D., Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion, *Proceedings of the Summer Program 2000, Center for Turbulence Research*, (2000), pp.157–168.
- Liu, Y. and Oshima, N., A level set approach for a premixed flame based on a new concept of flame speed, *Journal of Thermal Science and Technology*, Vol.6, No.1 (2011), pp. 140–153. DOI: 10.1299/jtst.6.140.
- Nyigizente, D., Ducruix S. and Schmitt, T., Development of an interface thickening method for the direct numerical simulation of compressible liquid-vapor flows in the framework of the second gradient theory, *Physics of Fluids*, Vol.33, 052119 (2021). DOI: 10.1063/5.004875.
- Olsson, E. and Kreiss, G., A conservative level set method for two phase flow, *Journal of Computational Physics*, Vol.210 (2005), pp. 225–246. DOI: 10.1016/j.jcp.2005.04.007.
- Osher, S. and Fedkiw, R., *Level set methods and dynamic implicit surfaces*, Springer (2002). ISBN-13: 978-0387954820.
- Oshima, N., An extensional formulation for a diffusive solution of the level-set equation by considering a relation to the scalar conservation equation, *Mechanical Engineering Letters*, Vol.2 (2016), 16-00220. DOI: 10.1299/mel.16-00220.
- Oshima, N., A fluid interface model by phase field approach applied to the diffusive solution of level-set equation, *Mechanical Engineering Letters*, Vol.3 (2017), 17-00080. DOI: 10.1299/mel.17-00080.
- Russo, G. and Smereka, P., A remark on computing distance functions, *Journal of Computational Physics*, Vol.164 (2000), pp. 51–67. DOI: 10.1006/jcph.2000.6553.
- Terashima H., Haneda, Y. and Kawai, S., A localized thickened flame model for simulations of propagation and autoignition under elevated pressure conditions, *Proceedings of Combustion Institute*, 38 (2021), pp.2119–2126. DOI: 10.1061/j.proci.2020.06.063.
- Tiwari, A., Freund, J. B. and Pantano, C., A diffuse interface model with immiscibility preservation, *Journal of Computational Physics*, Vol.252 (2013), pp.290–309. DOI: 10.1016/j.jcp.2013.06.021.