

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 6 日現在

機関番号：13301

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23510003

研究課題名(和文) 土壌水の浸潤・脱水過程における界面形状変化の精密計算と物質輸送解析への応用

研究課題名(英文) Precise simulation of gas-water interface and its application to mass transport.

研究代表者

川西 琢也 (Kawanishi, Takuya)

金沢大学・自然システム学系・准教授

研究者番号：80234087

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,300,000円、(間接経費) 1,290,000円

研究成果の概要(和文)：本研究は、近年進歩の著しい流体の数値解析法である粒子法を多孔質体内の水の浸潤、脱水過程に応用して、界面形状の変化について解析するとともに、それを土壌の輸送過程の1つである気相中の拡散係数の推算へ応用することを目的としたものである。

結果として、MPS法で、3つの球からなる孔への水の浸潤過程を計算することには成功したが、界面形状に関しては正確に再現することは難しかった。このため、幾何学に基づいた界面形状の計算法について検討を始めた。

研究成果の概要(英文)：In this study, I tried to apply the particle method for simulating the change in the shape of gas/water interface during wetting and drying processes, and in addition analyze its effect on the gas diffusion coefficient in porous media.

I used one of the variation of the particle method, moving-particle-semi-implicit (MPS). With this method, I successfully simulated the wetting of the pore throat, which is formed among three spheres; however, the simulated shape of the gas/water interface was far from satisfaction. So, I began to try a new method for calculating the interface based on geometry.

研究分野：環境科学

科研費の分科・細目：環境動態解析

キーワード：土壌 浸潤・脱水 シミュレーション GPGPU 粒子法 濡れ 曲面 種数

1. 研究開始当初の背景

土壌中の水の浸潤・脱水過程に関しては、多くのモデルが提案されてきたが、界面の形状を精密に計算することは難しかった。

一方、流体解析の分野で粒子法という計算手法が発展し、界面のダイナミックな形状変化を計算することが可能となってきた。例えば、有名な例としてはミルククラウン、あるいは波の水しぶきなどの計算である。

研究代表者は、この粒子法を土壌粒子中の界面形状の精密な形状の計算に応用できないかと考えた。

また、研究代表者は、水分を含む土壌中の気相拡散係数が、浸潤・脱水過程においてヒステリシスをもつことを実験的に明らかにしてきたが、この現象について、粒子法による浸潤・脱水シミュレーションで解明できるのではないかと考えた。

2. 研究の目的

以下のとおりである。

- 1) 粒子法のひとつである MPS 法によって浸潤・脱水に関する界面形状変化を正確にシミュレーションすること。
- 2) それによって、数十から数百の粒子層中の浸潤・脱水過程をシミュレーションすること。
- 3) さらに、気相に関して拡散係数を計算し、そのヒステリシスの機構を解明すること。

3. 研究の方法

粒子法の一つ法である MPS 法（越塚誠一「粒子法」丸善、2005）の実装系である Particleworks(プロメテック・ソフトウェア)により、シミュレーションした。

粒子法では、連続の式と Navier-Stokes 式を、自由に動き回る粒子の形に離散化し、流れを計算する。Particleworks では、分子間力に似たポテンシャル力を外力項として導入、これにより、表面張力、および濡れなどが表現できる。2つの流体粒子間のポテンシャル関数は、

$$\phi(|\vec{r}_{ij}|) = \frac{C_f}{3r_e^2} (|\vec{r}_{ij}| - r_e)^2 \left( |\vec{r}_{ij}| + \frac{1}{2}r_e \right)$$

で与えられる。ここで  $C_f$  は流体粒子間のポテンシャル係数

$$C_f = \frac{138\sigma}{\rho l_0^2 (r_e/l_0)^2}$$

であり、接触角  $\theta$  は、流体と固体との間のポテンシャル関数  $C_{fs}$  を与えることで設定できる。

$$\frac{C_{fs}}{C_f} = \frac{1}{2} (1 + \cos\theta)$$

まずは最小単位として、3つの球形粒子を用意し、その間にできる間隙に水が入っていく状況をシミュレートした。本来の計画では、この後、粒子層への水の浸潤・脱水過程をシ

ミュレートするはずであったが、様々なチューニングをこころみたまもの、界面形状が思ったほど正確にシミュレートできないことが分かり、途中で Particleworks のチューニングを断念、界面形状の計算について位相幾何学に基づいた新しい方法の開発を目指して検討を進めた。

4. 研究成果

(1) チューニング

MPS 法は、剛体（この場合、球形粒子）と流体（この場合水、計算粒子によってあらわされる）との間にポテンシャル関数を導入することにより、剛体と流体の間の濡れ、接触角などを表現できる。実際、後に示すように、剛体粒子表面が綺麗に濡れる状態を再現することができるが、そこに達するまでには、試行錯誤が必要であった。

まず、初期状態で剛体粒子を水で濡れた状態を設定するのが難しかった（これは表面に広がった流体の粒子が剛体との作用で、自由な流体粒子よりも密になることによると考えられる）ため、裸の剛体球表面に少しずつ水を供給して、表面が完全に濡れた状態を再現するのだが、流体の供給速度、計算粒子の細かさによっては、図1のように計算が発散したり、また、図2のように本来、均等に広がるはずの流体が、団子状になったりすることがあった。

これをなんとかクリアして、図3のように、均等に濡れた綺麗な剛体粒子を作ることができた。さらに、図4、図5に示すように3つの粒子の間の孔が流体で塞がれる、という、浸潤過程の様子が再現できている。これにより、MPS 法で基本的にこの過程が計算できることが分かった。

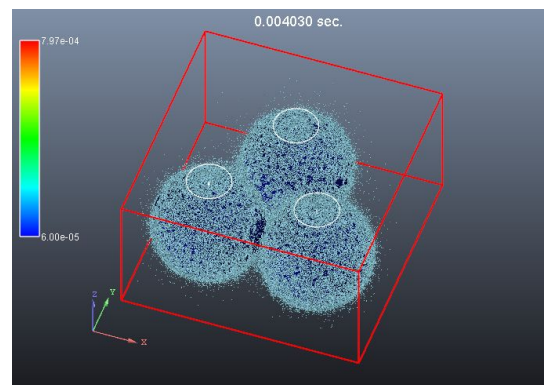


図1 発散の例

(3) 界面形状の再現の不備

しかしながら、図3において、界面形状を詳細に見てみると、2球の間に出来る水の環（Pendular ring）は、その中心部がへこむ形にならねばならないのに対し、図3 - 5では、まっすぐになっているように見える。

そこで、対象を2球の間の水の環にしぼり、さまざまな検討を行った。流体粒子を細かくするなど、様々な検討を行ったにもかかわらず、図6、図7に示すように、粒子間の水の

環の形状は、円筒外周のような形（図6）あるいは、凹むどころか膨らむ形（図7）などのような形になり、実際の粒子で観察されているような界面形状は再現できなかった。

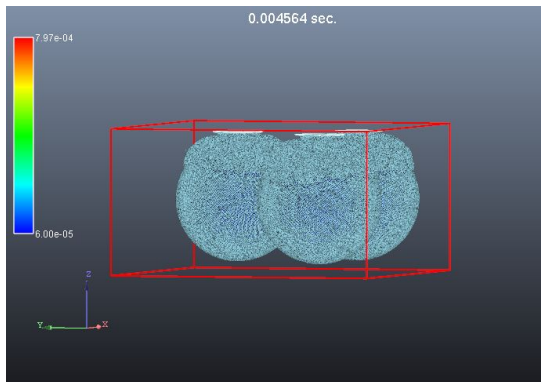


図2 濡れが再現できない例

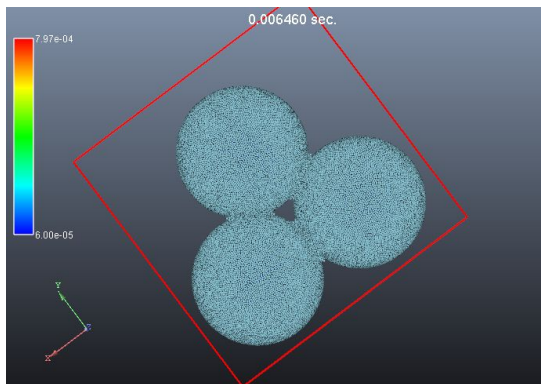


図3 一応の成功例1

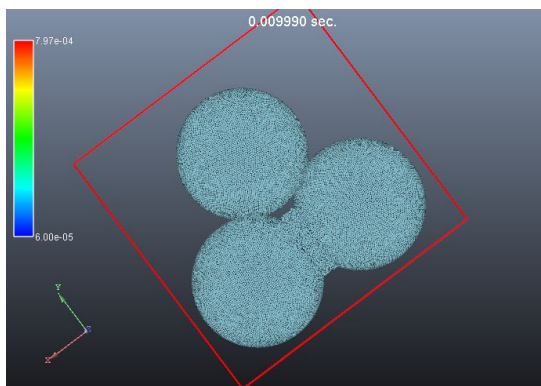


図4 一応の成功例2

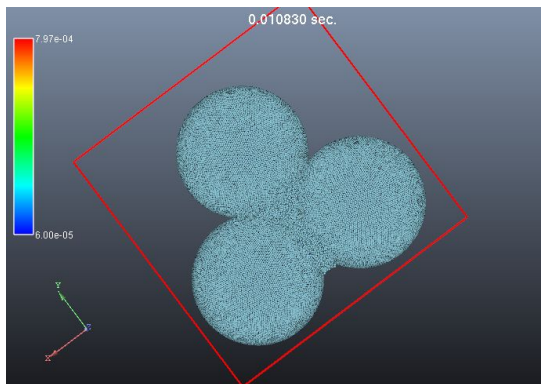


図5 一応の成功例3

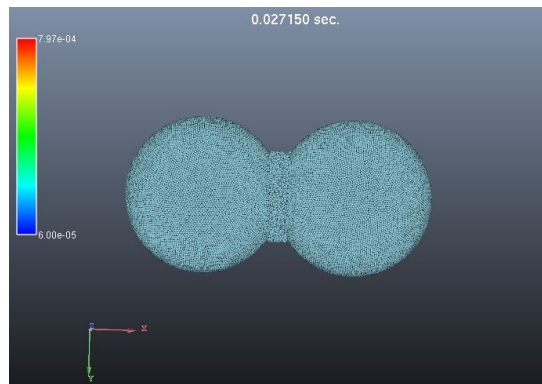


図6 Pendular ring の形状1

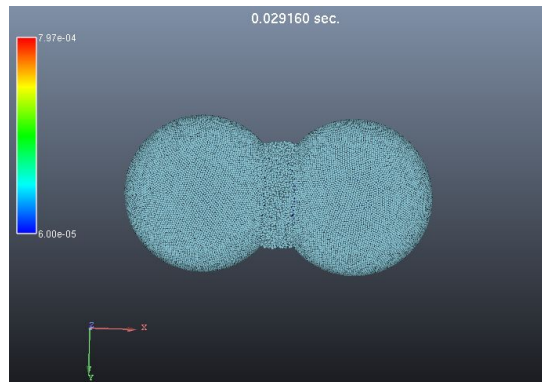


図7 Pendular ring の形状2

水粒子が球体の全面を覆っていることから、濡れの計算はできており、また、別の検討で、単純な管の中ではメニスカスが再現できるため、今回、界面形状が正確に再現できなかった理由については、以下のように考察される。

(1) 何等かの理由で、一方が凹、一方が凸の曲面の再現が難しくなっている、(2) 流体の粒子が表面を覆う状態になったときに、実際の厚みよりかなり大きな値となり、これによって、接触角ができる部分の計算に何らかの影響を与えている。

#### (4) 代替手法

Particleworks のチューニングに関しては、できる限りのことをやると判断したので、いったん数値計算を打ち切り、界面の形状の幾何学的な観点からの新たな計算手法について検討を加えた。

代替手法開発のためのチャレンジはいくつかある。

1. 濡れの取扱い。
2. 界面形状の種数の変化の取扱い。
3. 種数の変化にともなう「急激な」物理量の変化への対応。

界面形状そのものについては、平均曲率一定曲面の形状、ということで、幾何学的にも物理的にも特に目新しいことはない。

問題は、土壌中の水の浸潤・脱水過程において、トポロジーが変化することにより、物理量の急激な変化が生じ、これが計算の不安

定性につながることにあると考えられる。

3つの球形粒子の間の水の脱水過程を例に考えると、位相幾何学的には、3つの境界をもつ1つの図形が2つの境界をもつ3つの図形に変化する。臨界点は、水膜の両側の凹み接触してつながる点となる。このとき、圧力の大きな変動が生ずる。

粒子法は、界面のこのような幾何学的変化を、特に特別な考慮なしに計算できることが特徴であるが、計算を進めるうちに、幾何学的変化そのものをモデルに組み込む方法のほうが界面形状の「精密な」計算のためには適しているのではないかと考えるようになった。

位相幾何学の言葉で上記脱水過程を表現すると、(i) 水膜の両端の点の接触を検知し、(適切なモース関数の設定) (ii) 接触点を切れ目として、ここに円筒状の「ハンドル」を貼り付け、(iii) 平均曲率一定となるように形状を調整する、という操作が必要となる。

今後、この手法についてさらに検討を進める。幾何学的な観点の導入は安定した計算結果につながると考えられ、脱水・浸潤のヒステリシスを含めた精密な形状変化が可能になると考える。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計 0 件)

〔学会発表〕(計 0 件)

〔図書〕(計 1 件)

日本地下水学会編、川西琢也 (項目分担執筆)、地下水用語集、理工図書、2011.10、143

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

川西 琢也 (KAWANISHI, Takuya)

金沢大学・自然システム学系・准教授

研究者番号：80234087