

令和 2 年 6 月 29 日現在

機関番号：11501

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2017～2019

課題番号：17K18836

研究課題名（和文）ヘビサイド関数の解析多重積分に基づく新しい界面捕獲アルゴリズムの創成

研究課題名（英文）Development of an interface-capturing method using analytical multidimensional integration of Heaviside function

研究代表者

中西 為雄（Nakanishi, Tameo）

山形大学・大学院理工学研究科・准教授

研究者番号：10235799

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,500,000円

研究成果の概要（和文）：気液界面が存在する流れを扱う代数型VOF法について、媒介変数を介しての多次元ヘビサイド関数を指標関数に選定し、その逐次積分関数を解析的に求めた。これに基づく新しい界面捕獲法を確立し、気液二相流の高精度シミュレーションツールを構築した。新しい方法は界面を1格子間隔で捕え続けることができる。従来の方法に比べ、界面の変形をより正確に再現することができ、質量保存性も優れている。

本研究の過程で、MTHINC法に対する質量中心近似による計算法も考案した。さらに、ヘビサイド関数とその逐次積分関数、デルタ関数に収束する解析的に微分・積分可能な補間関数群を新たに発見した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

40年前にVOF法が提案されてから、多くの研究者によって改良され、気液二相流のコア解析技術としての地位を得ている。VOF法は幾何学型と代数型に分類され、前者は格子セル内の界面位置を定めるために、幾何学的再構築が必要である。後者は滑らかな指標関数を使用し、その体積分を計算する必要がある。

本研究は媒介変数を介しての多次元ヘビサイド関数を指標関数に選定し、その体積分を解析的に計算する方法を確立し、VOF法の最大のネックとなっていた問題を解決した。新しい方法は既存の方法より優れ、アルゴリズムが極めて簡単で、界面の劣化が発生しない。気液二相流の数値解析技術を著しく進歩させることができる。

研究成果の概要（英文）：In an algebraic VOF method, volume integration of the indicator function is conducted to determine the interface location and the volume fluxes across the cell surfaces.

Finding an analytically integrable indicator function is crucial to developing an effective and accurate algebraic VOF method. We developed an algebraic VOF method using a multidimensional Heaviside function connected by a single parametric variable. The volume integration of the Heaviside function is carried out analytically. The new method retains all the advantages of the geometric VOF method but excludes geometric reconstructions of the interface, appealing in computational efficiency, accuracy, and algorithmic simplicity. Numerical results provide evidence for the method's improved solution quality.

研究分野：流体工学、数値流体力学

キーワード：Multiphase Flow Interface Capturing Algebraic VOF Method Heaviside Function

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

一般的に、気液界面を扱う VOF 法を幾何学型と代数型に分類することができる⁽¹⁾。幾何学型 VOF 法の代表である PLIC 法^(2,3)では、各格子セルにおける気液界面を直線 (2次元) または平面 (3次元) で近似している。VOF 値から界面位置を決定するために、界面を幾何学的に再構築するが必要である。代数型 VOF 法の代表である THINC/WLIC 法^(4,5) や MTHINC 法^(6,7) では、界面を一定の幅を持つ滑らかな指標関数で近似している。具体的に、1次元または媒介変数を介しての多次元双曲線正接関数を指標関数に使用し、各セル内における界面位置指標及び指標関数のセル表面を通過する流束を決定するために、指標関数の体積分を計算する必要がある。双曲線正接関数を指標関数に用いる場合、一次元の積分は解析的に求まるものの、その体積分を解析的に表すことができない。この問題を回避するために、次元による簡略化や重み関数、一次元の解析積分をベースとした近似を導入している。また、これらの方法は界面の厚さを人工的に制御する急峻さパラメータを導入しており、パラメータの値を大きくすると近似積分の精度が低下する。

本研究はこれらの問題を解消するために、ヘビサイド関数を指標関数に選定し、その解析多重積分に基づく新しい界面捕獲法を提案する。本研究の目的、方法、成果を理解するために、まず、代数型 VOF 法の一般的な計算手順を理解する必要がある。

以下に、簡単のために、2次元の場合における代数型 VOF 法の一般的な計算手順を示す。

図1に示すスターガード格子を使用し、格子セル (i, j) における界面を指標関数 $H_0(x, y, d)$ (d は界面位置指標) で近似する。式(1)の移流方程式を解くことで H_0 を時間的に更新する。

$$\frac{\partial H_0}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}H_0) = H_0 \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{u} = (u, v)$ は速度ベクトルである。

H_0 のセル平均値 $C_{i,j}$ は式(2)で定義される。

$$C_{i,j} = \int_{-1/2}^{1/2} \int_{-1/2}^{1/2} H_0(\xi, \eta, d) d\xi d\eta \quad (2)$$

ここで、 ξ, η はセル内正規化座標である。

$C_{i,j}$ がわかると、式(2)から $C_{i,j}$ に対応する界面位置指標 d を求めることができる。

式(1)を時間 $n\Delta t \leq t \leq (n+1)\Delta t$ と $\Omega_{i,j}$ で積分するとセル平均値 $C_{i,j}$ に関する離散方程式が導かれる。さらに、 $C_{i,j}$ は下記の方向分離法により時間的に更新することができる。

$$C_{i,j}^* = C_{i,j}^n - \frac{F_{x,i+1/2,j}^n - F_{x,i-1/2,j}^n}{\Delta x} + C_{i,j}^n \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x} \Delta t \quad (3)$$

$$C_{i,j}^{n+1} = C_{i,j}^* - \frac{F_{y,i,j+1/2}^* - F_{y,i,j-1/2}^*}{\Delta y} + C_{i,j}^* \frac{v_{i,j} - v_{i,j-1}}{\Delta y} \Delta t \quad (4)$$

ここで、 F_x, F_y はそれぞれ指標関数のセル境界を通過する x, y 方向の流束である。また、上付き添え字は時間のレベルを表す。

2次元問題の場合、 F_x, F_y は Δt 間にセル境界を通過する面積の指標関数積分で計算される。例えば、 $u_{i,j} \geq 0, v_{i,j} \geq 0$ の場合、これらは以下のように表される。

$$F_{x,i+1/2,j}^n = \Delta x \Delta y \int_{-1/2}^{1/2} \int_{1/2-\lambda_x}^{1/2} H_0(\xi, \eta, d^n) d\xi d\eta \quad (5)$$

$$F_{y,i,j+1/2}^* = \Delta x \Delta y \int_{-1/2}^{1/2} \int_{1/2-\lambda_y}^{1/2} H_0(\xi, \eta, d^*) d\eta d\xi \quad (6)$$

2. 研究の目的

- (1) ヘビサイド関数の解析多重積分に基づく新しい界面捕獲アルゴリズムを創成する。
- (2) これを応用した気液二相流の高精度シミュレーションツールを完成させることである。

3. 研究の方法

- (1) 2次元問題を対象に、本研究のアイデアを単純な界面の移流問題に適用し、新しいアルゴリズムのコア部分を完成させる。
- (2) 新しいアルゴリズムを、筆者が以前に開発した気液界面が存在する2次元非圧縮性流れの解

ここで、 $\lambda_x = u_{i,j} \Delta t / \Delta x, \lambda_y = v_{i,j} \Delta t / \Delta y$ である。

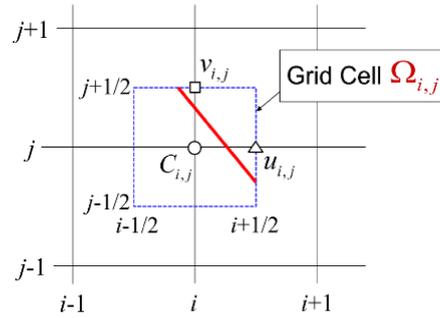


図1 スターガード格子セル (赤線は流体界面)

式(5), (6)は界面を含むセルのみに適用される。界面を含まないセルの場合、指標関数の流束は式(7), (8)より簡単に計算できる。

$$F_{x,i+1/2,j}^n = \Delta x \Delta y \lambda_x C_{i,j}^n \quad (7)$$

$$F_{y,i,j+1/2}^* = \Delta x \Delta y \lambda_y C_{i,j}^* \quad (8)$$

多次元代数型 VOF 法では、媒介変数 $\tau = n_x \xi + n_y \eta + d$ を導入し、指標関数 $H_0(x, y, d)$ を τ の一変数関数 $H_0(\tau)$ で表している。ここで、 $(n_x, n_y) = \mathbf{n}$ は界面の単位法線ベクトルであり、指標関数のセル平均値 C の勾配から計算される。

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla C}{|\nabla C| + 10^{-7}} \quad (9)$$

代数型 VOF 法を構築する要は、①セル領域積分が解析的に求まる H_0 を選び、②精度良く、簡単に $C_{i,j}$ から d 、 d から指標関数のセル境界を通過する流束を求めるところにある。

析プログラムに導入する。ベンチマーク問題を用いて詳細な検証計算を行い、従来の方法に対する本アルゴリズムの優位性を確認しながら、改良していく。

(3) これまでの研究の問題点を系統的に整理し、改良を続ける。2次元版のアルゴリズムを3次元版に拡張し、気液二相流の高精度シミュレーションツールを完成させる。複雑な3次元応用問題を解き、従来の方法に対する優位性を実証する。

4. 研究成果

(1) 異なる流体の界面が存在する流れを対象に、任意の計算セルにおいて、界面を平面と近似し、界面を表す指標関数 H_0 に、媒介変数 (2次元の場合は $\tau = n_x \xi + n_y \eta + d$, 3次元の場合は $\tau = n_x \xi + n_y \eta + n_z \zeta + d$) を介しての多次元 Heaviside 関数を新たに導入し、その逐次積分関数を解析的に表すことができた。

$$H_0(\tau) = \text{Heaviside}(\tau) = \begin{cases} 1 & \tau > 0 \\ 1/2 & \tau = 0 \\ 0 & \tau < 0 \end{cases} \quad (10)$$

$$H_1(\tau) = \int H_0(\tau) d\tau = \tau H_0(\tau) \quad (11)$$

$$H_2(\tau) = \int H_1(\tau) d\tau = \frac{1}{2} \tau^2 H_0(\tau) \quad (12)$$

$$H_3(\tau) = \int H_2(\tau) d\tau = \frac{1}{6} \tau^3 H_0(\tau) \quad (13)$$

ここで、 H_1, H_2, H_3 は H_0 の τ に関する逐次積分関数であり、 H_0 と初等関数で解析的に表せる。2次元問題の場合は H_2 まで、3次元問題の場合は H_3 までが使用される。

(2) 2次元問題を対象に、式(10)の多次元 Heaviside 関数を単純な界面移流問題に適用し、新しい界面捕獲アルゴリズムのコア部分に関するプログラムを完成させた。剛体キー回転問題および単一渦による界面変形問題に適用し、その有効性を確認した。新しいアルゴリズムは界面法線方向の数値拡散を排除し、界面を1格子間隔で捕え続けることができる。従来の界面を滑らかな指標関数で表す方法と比較して、界面の変形をより正確に再現することができ、質量保存性も優れている。アルゴリズムの詳細を以下に示す。

$n_x n_y \neq 0$ の場合、式(2)右辺のセル領域積分を解析的に計算でき、セル平均値 $C_{i,j}$ を式(14)で表すことができた。

$$C_{i,j} = \frac{1}{n_x n_y} (H_2^{++} - H_2^{+-} - H_2^{-+} + H_2^{--}) \quad (14)$$

$$H_2^{++} = H_2 \left(\frac{n_x}{2} + \frac{n_y}{2} + d \right), H_2^{+-} = H_2 \left(\frac{n_x}{2} - \frac{n_y}{2} + d \right), H_2^{-+} = H_2 \left(-\frac{n_x}{2} + \frac{n_y}{2} + d \right), H_2^{--} = H_2 \left(-\frac{n_x}{2} - \frac{n_y}{2} + d \right)$$

ここで、 $H_2^{++}, H_2^{+-}, H_2^{-+}, H_2^{--}$ はそれぞれセル4頂点 (図1) での H_2 の値である。

単位法線ベクトルの成分が0の場合、その0成分に絶対値の極めて小さい値 (例えば 10^{-6}) を代入することで、式(14)はそのまま使用できる。式(14)は数学的に単変数の積分に収束することが証明できた。

式(9)を使用して、 ∇C から n_x, n_y を計算し、 $n_x, n_y, C_{i,j}$ がわかると式(14)から界面位置指標 d を求めることができる。 ∇C の算出に、格子点 (i, j) を中心とする9点ステンシルのデータによる最小二乗近似を用いている。

式(14)を最終的に d の2次方程式に整理できる。 d を解析的に求めることもできるが、 H_2 中の H_0 の値 (式(12)参照) が0または1にスイッチングするので、係数をケース分けする必要がある。ケース分けする代わりに、式(15)のニュートン法により20回以内の反復で十分に収束した解を求めることができる。

$$d := d - \frac{f(d)}{f'(d)}; f(d) = H_2^{++} - H_2^{+-} - H_2^{-+} + H_2^{--} - n_x n_y C_{i,j}, f'(d) = H_1^{++} - H_1^{+-} - H_1^{-+} + H_1^{--} \quad (15)$$

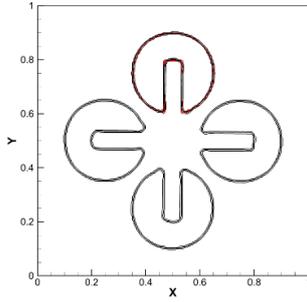
d が決定されると式(5), (6)から指標関数の流束を算出することができる。これらの式の右辺にある領域積分は、式(2)中の領域積分と同様に解析的に計算できる。例えば、 $u_{i,j} \geq 0$ の場合、

$$F_{x,i+1/2,j} = \frac{\Delta x \Delta y}{n_x n_y} \left[H_2 \left(\frac{n_x}{2} + \frac{n_y}{2} + d \right) - H_2 \left(\frac{n_x}{2} - \frac{n_y}{2} + d \right) - H_2 \left(\frac{n_x}{2} - \lambda_x + \frac{n_y}{2} + d \right) + H_2 \left(\frac{n_x}{2} - \lambda_x - \frac{n_y}{2} + d \right) \right] \quad (16)$$

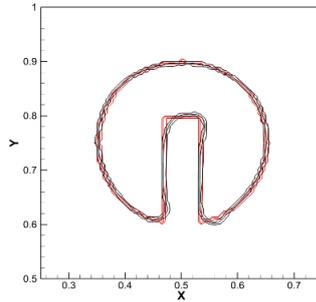
上記の方法を気液二相流の解析プログラムに組み込み、気液界面をぼかすことなく解析することができる。

図2に新しい方法を剛体回転問題に適用した場合の結果を示す。200×200の等間隔格子を使用し、円の直径とキー幅はそれぞれ60と12格子間隔に対応している。界面での最大 CFL 数は約0.25である。図2はCの等高線を示し、赤線は初期の等高線を表す。新しい方法は界面幅を1格子間隔内に制限することができる。1回転後の界面形状は初期形状とよく一致し、4回転後の界面の歪みも非常に小さい。

図 3 に単一周期渦速度場における円の変形問題の計算結果を示す。単一周の流れ関数を $\psi = \pi^{-1} \cos(\pi t/T) \sin \pi(x-0.5) \sin \pi(y-0.5)$; $T = 20$ で与えている。200×200の等間隔格子を使用し、 $\Delta t = 0.5\Delta x$ で与えている。厳密解では $t = T/2$ まで円は螺旋状に引き伸ばされ、 $t = T$ で元の形状に戻っている。 $t = T/2$ での変形が非常に大きいにもかかわらず、 $t = T$ での計算結果は厳密解とよく一致している。



(a) 1 周期



(b) 4 周期後

図 2 剛体回転問題の計算結果

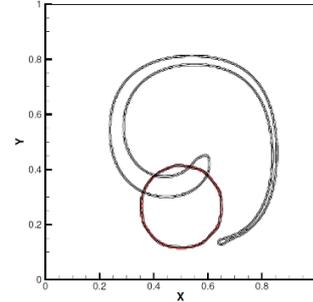


図 3 単一周期渦速度場における円の変形問題の計算結果

(3) 新しいアルゴリズムを、筆者が以前に開発した気液界面が存在する 2次元非圧縮性流れの解析プログラムに導入した。Dam-break 問題を用いて詳細な検証計算を行い、従来の方法に対する本アルゴリズムの優位性を確認した。本研究の過程で、従来の界面を滑らかな指標関数で表す方法に対する質量中心近似による簡易計算法も考案した。さらに、ヘビサイド関数とその逐次積分関数、デルタ関数に収束する解析的に微分・積分可能なサブグリッド補間関数群を簡単に構築する方法を新たに発見した。

(4) 新しいアルゴリズムを 3次元に拡張し、単純移流問題に対するプログラムの作成・検証を終えた後、3次元版気液二相流プログラムに組み込み、気液二相流の高精度シミュレーションツールを完成させた。3次元 Dam-break 問題を用いて検証計算を行い、従来の方法に対する優位性を確認した。3次元アルゴリズムの概要を以下に示す。

図 4 の 3D スターガード格子を使用し、 $n_x n_y n_z \neq 0$ の場合、セル平均値 $C_{i,j,k}$ を式(17)で表せる。

$$C_{i,j,k} = \frac{1}{n_x n_y n_z} \left(\begin{aligned} &H_3^{+++} - H_3^{++-} - H_3^{+-+} + H_3^{+--} \\ &- H_3^{-++} + H_3^{-+-} + H_3^{-+ -} - H_3^{---} \end{aligned} \right) \quad (17)$$

$$\text{with } H_3^{+++} = H_3 \left(\frac{1}{2}(n_x + n_y + n_z) + d \right)$$

$$H_3^{+-+} = H_3 \left(\frac{1}{2}(n_x + n_y - n_z) + d \right) \text{ etc.}$$

ここで、 H_3^{+++}, H_3^{+-+} などはそれぞれ図 4 中の計算セルの 8 頂点での H_3 の値である。

単位法線ベクトルの成分が 0 の場合、その 0 成分に絶対値の極めて小さい値 (例えば 10^{-6}) を代入することで、式(17)はそのまま使用できる。

式(17)を d の 3 次方程式に整理でき、式(18)のニュートン法により 20 回以内の反復で十分に収束した解を求めることができる。

$$d := d - \frac{f(d)}{f'(d)} \quad (18)$$

$$f(d) = H_3^{+++} - H_3^{++-} - H_3^{+-+} + H_3^{+--} - H_3^{-++} + H_3^{-+-} + H_3^{-+ -} - H_3^{---} - n_x n_y n_z C_{i,j,k}$$

$$f'(d) = H_2^{+++} - H_2^{++-} - H_2^{+-+} + H_2^{+--} - H_2^{-++} + H_2^{-+-} + H_2^{-+ -} - H_2^{---}$$

式(18)から d が求まると指標関数の流束を算出することができる。例えば、 $u_{i,j,k} \geq 0$ の場合、 $F_{x,i+1/2,j,k}$ は次のように計算される。

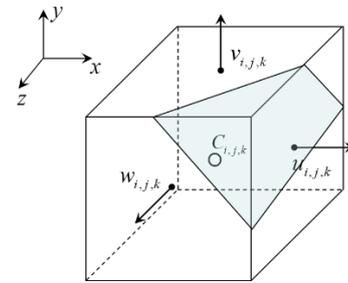


図 4 3次元スターガード格子セル (水色の平面は流体界面)

$$F_{x,i+1/2,j,k} = \frac{\Delta x \Delta y \Delta z}{n_x n_y n_z} \left[H_3 \left(\frac{1}{2} (n_x + n_y + n_z) + d \right) - H_3 \left(\frac{1}{2} (n_x + n_y - n_z) + d \right) \right. \\ \left. - H_3 \left(\frac{1}{2} (n_x - n_y + n_z) + d \right) + H_3 \left(\frac{1}{2} (n_x - n_y - n_z) + d \right) \right. \\ \left. - H_3 \left(\frac{1}{2} (n_x - 2\lambda_x + n_y + n_z) + d \right) + H_3 \left(\frac{1}{2} (n_x - 2\lambda_x + n_y - n_z) + d \right) \right. \\ \left. + H_3 \left(\frac{1}{2} (n_x - 2\lambda_x - n_y + n_z) + d \right) - H_3 \left(\frac{1}{2} (n_x - 2\lambda_x - n_y - n_z) + d \right) \right] \quad (19)$$

$C_{i,j,k}$ は下記の方向分離法により時間的に更新される。

$$C_{i,j,k}^* = C_{i,j,k}^n - \frac{F_{x,i+1/2,j,k}^n - F_{x,i-1/2,j,k}^n}{\Delta x} + C_{i,j,k}^n \frac{u_{i,j,k} - u_{i-1,j,k}}{\Delta x} \Delta t \quad (20)$$

$$C_{i,j,k}^{**} = C_{i,j,k}^* - \frac{F_{y,i,j+1/2,k}^* - F_{y,i,j-1/2,k}^*}{\Delta y} + C_{i,j,k}^* \frac{v_{i,j,k} - v_{i,j-1,k}}{\Delta y} \Delta t \quad (21)$$

$$C_{i,j,k}^{n+1} = C_{i,j,k}^{**} - \frac{F_{z,i,j,k+1/2}^{**} - F_{z,i,j,k-1/2}^{**}}{\Delta z} + C_{i,j,k}^{**} \frac{w_{i,j,k} - w_{i,j,k-1}}{\Delta z} \Delta t \quad (22)$$

図 5 に $200 \times 200 \times 200$ の等間隔格子による 3 次元剛体回転問題の解析結果を示す。界面での最大 CFL 数は約 0.25 である。1 回転後の界面形状は初期形状とよく一致していることが確認できる。質量保存性が優れ、相対体積誤差は 10^{-8} 以下である。

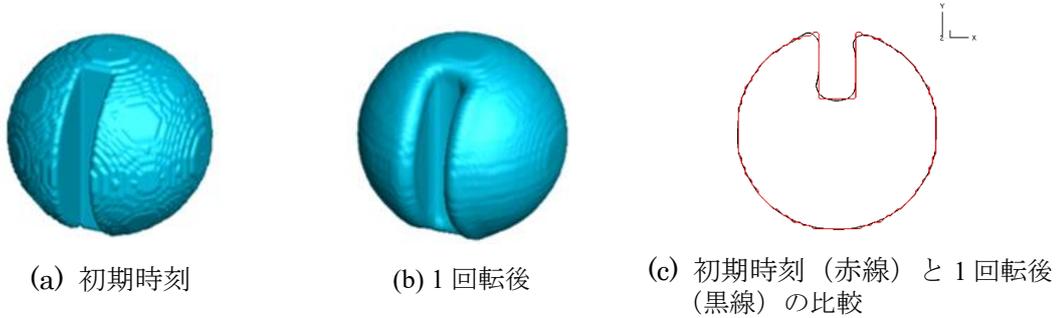


図 5 3 次元剛体回転問題の解析結果

図 6 に 3 次元 Dam-break 問題の解析結果の一例 ($Re=10000$, $20 \times 80 \times 160$ の等間隔格子, CFL 数 0.2) を示す。実験結果とよく一致していることが確認されている。

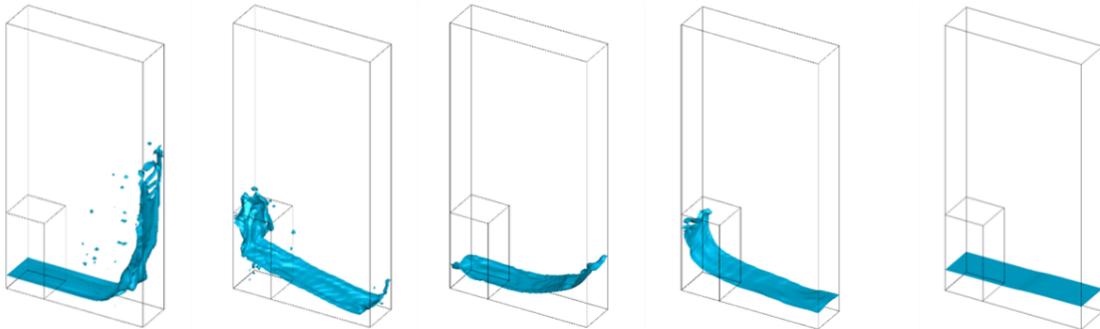


図 6 3 次元 Dam-break 問題の計算結果

<引用文献>

- (1) Mirjalili, S., Jain, S. S. and Dodd, M., "Interface-capturing methods for two-phase flows: An overview and recent developments", Center for Turbulence Research Annual Research Briefs (2017), 117-135.
- (2) Youngs, D. L., "Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion", Numerical methods for fluid dynamics (1982) 273-486.
- (3) Rider, W. J. and Kothe, D. B., Journal of Computational Physics 141 (2) (1998) 112-152.
- (4) Xiao, F., Honma, Y., and Kono, T., International Journal for Numerical Methods in Fluids 48 (9) (2005) 1023-1040.
- (5) Yokoi, K., Journal of Computational Physics 226 (2) (2007) 1985-2002.
- (6) Ii, S., Sugiyama, K., Takeuchi, S., Takagi, S., Matsumoto, Y. and Xiao, F., Journal of Computational Physics 231 (5) (2012) 2328-2358.
- (7) Ii, S., Xie, B. and Xiao, F., Journal of Computational Physics 259 (2014) 260-269.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 中西為雄
2. 発表標題 ヘビサイド関数の解析多重積分に基づく新しい界面捕獲法
3. 学会等名 第32回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tameo Nakanishi
2. 発表標題 Mass Center Approximation of MTHINC Integrations for Free Surface Flows
3. 学会等名 The 29th International Symposium on Transport Phenomena (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tameo Nakanishi
2. 発表標題 Analytical Multidimensional Integration of Heaviside Function for Interface Tracking
3. 学会等名 Tenth International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD10), Barcelona, Spain (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tameo Nakanishi
2. 発表標題 A Multidimensional Heaviside Function Based VOF Method for Three-Dimensional Free Surface Flows
3. 学会等名 The 30th International Symposium on Transport Phenomena (ISTP30) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ryosuke Sasaki and Tameo Nakanishi
2. 発表標題 Simplified MTHINC Method Using Mass Center Approximation of Indicator Function Integral for Three-dimensional Free Surface
3. 学会等名 Sixteenth International Conference on Flow Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	佐々木 諒輔 (Sasaki Ryosuke)	山形大学・大学院理工学研究科・大学院生 (11501)	