

二次曲面による MOF 法の提案： 単一セル情報に基づく界面再構成および界面曲率計算

Moment-of-fluid interface reconstruction with quadric surface

- 立田 康介, 阪大院, 大阪府吹田市山田丘 2-1, E-mail : tatsuta@fluid.mech.eng.osaka-u.ac.jp
大森 健史, 阪大工, 大阪府吹田市山田丘 2-1, E-mail : t.omori@mech.eng.osaka-u.ac.jp
藤井 健博, 阪大院, 大阪府吹田市山田丘 2-1, E-mail : fujii@fluid.mech.eng.osaka-u.ac.jp
梶島 岳夫, 阪大工, 大阪府吹田市山田丘 2-1, E-mail : kajisima@mech.eng.osaka-u.ac.jp
Kosuke TATSUTA, Osaka University, 2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871 Japan
Takeshi OMORI, Osaka University, 2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871 Japan
Takehiro FUJII, Osaka University, 2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871 Japan
Takeo KAJISHIMA, Osaka University, 2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka, 565-0871 Japan

In the analysis of the multiphase flow, it is important to find the accurate prediction of fluid acceleration due to interfacial tension. For its prediction, continuous-surface-force (CSF) method and the sharp-surface-force (SSF) method, which are popular methods used in the interface-capturing methods such as the volume-of-fluid (VOF) and the conventional moment-of-fluid (MOF) methods, all require the volume fraction data of the neighbor computational cells. It has hindered the application of those methods to the multiphase flows with more than 3 phases. The present study proposes a MOF interface reconstruction with fitting ellipsoid, which enables both the interface reconstruction and the interface curvature estimation on the local computational cell with high accuracy.

1. 緒言

多相流解析において界面張力に起因する流体加速度を正確に求めることは重要な課題であり, Navier-Stokes 方程式への付加項の離散形式として様々なものが提案されている. 本研究では界面捕獲法においてよく用いられている Continuum Surface Force (CSF) モデル⁽¹⁾または Sharp Surface Force (SSF) モデル⁽²⁾を議論の基礎とし, 二相流解析だけでなく多相流解析への拡張も可能な界面曲率の高精度な算出法を提案する. 従来の界面曲率算出法では多数の計算セルを参照するか再構成した界面から符号付き距離関数を構築する必要があるため, 三相以上が存在する計算セルやその周囲の計算セルでは界面曲率を精度よく求めることができず, 多相流解析への拡張が困難であった. そこで本研究では各界面セルで体積率の情報を保持する代表的な界面捕獲法である Volume-of-Fluid (VOF)⁽³⁾法ではなく, 各界面セルで体積率に加え重心座標の情報を保持することによって界面捕獲法でありながら, 単一の計算セルのみへの参照で界面再構成が行える Moment-of-Fluid (MOF)⁽⁴⁾法に着目する. 既存の MOF 法では線形に界面再構成をするために, 界面曲率の算出には従来法と同様に周囲セルを参照しなければならないという問題があった. 本研究では, MOF 法に界面を追跡するラグランジュ点を活用することにより平面ではなく二次曲面で界面を再構成し, 曲率についても単一の計算セルの体積率, 重心座標の参照で高精度に算出することを可能とした.

2. 数値計算法

2.1 基礎方程式

各相の流体は非圧縮 Newton 流体とし, 全領域で以下の連続の式および運動量保存式にしたがう.

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

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot [\mu \{ \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \}] + \boldsymbol{\alpha}_s + \mathbf{g} \quad (2)$$

t は時間, \mathbf{v} は流体の速度, p は静圧, \mathbf{g} は重力加速度, ρ は流体の密度, μ は流体の粘度であり, 界面張力に起因する流体加速度は $\boldsymbol{\alpha}_s$ と表している.

各計算セルにおける密度, 粘度は

$$\rho = \sum_{i=1, N} F_i \rho_i \quad (3)$$

$$\mu = \sum_{i=1, N} F_i \mu_i \quad (4)$$

とする. ここで, 各相の体積率を F_i , 密度を ρ_i , 粘度を μ_i とし, 相の総数を N とした.

CSF モデルまたは SSF モデルでは界面張力に起因する流体加速度は以下ようになる.

$$\boldsymbol{\alpha}_s = \frac{1}{\rho} \mathbf{f}_s \delta_s \quad (5)$$

ここで δ_s は界面上を原点とし, 原点における界面の法線ベクトル方向に座標 n をとった時, $\delta(n)$ で表される 1 次元デルタ関数である. このとき, $\mathbf{f}_s \delta_s$ は

$$\mathbf{f}_s \delta_s = \sigma \kappa n \delta_s \quad (6)$$

となる. ここで, σ は界面張力係数, κ は平均曲率, n は単位法線ベクトルである.

2.2 時間発展方法

以下に時刻 t^n から t^{n+1} に時間刻み Δt だけ方程式系を時間積分する手順を示す. ここで n は時間ステップ数である.

- (1) 各相の体積率および重心位置については Lagrangian Explicit (LE) 法⁽⁵⁾を, 各ラグランジュ点については 1 次 Euler 陽解法を用い, 移流をそれぞれ行う.
- (2) 3 節で詳述する方法で界面を再構成し, 再構成した界面上にラグランジュ点を再配置する.
- (3) 式 (3) および式 (4) から ρ^{n+1} および μ^{n+1} を求める.
- (4) 式 (5) (6) から界面張力に起因する流体加速度 $\boldsymbol{\alpha}_s$ を求める.

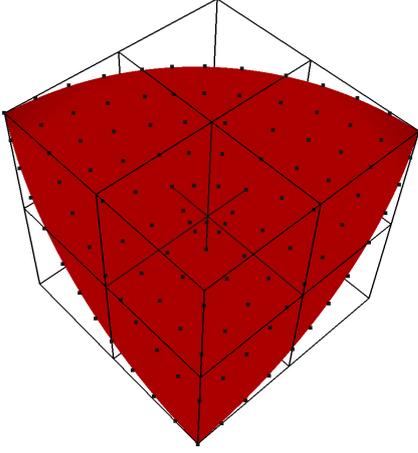


Fig. 1: The example of arrangement of Lagrange points. The shape is spherical surface with 2 grid width. The red surface is spherical surface and the black points is Lagrange points. Only an eighth of the whole sphere is shown for the symmetry.

- (5) 圧力項を除いた式 (2) の離散式から部分段階速度 v^F を計算する .
- (6) 圧力方程式

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla p^{n+1} \right) = \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot v^F \quad (7)$$

を解き, 得られた p^{n+1} を用いて以下のように部分段階速度を修正することで, 式 (1) を満たす速度 v^{n+1} を得る .

$$v^{n+1} = v^F - \frac{\Delta t}{\rho^{n+1}} \nabla p^{n+1} \quad (8)$$

本研究では界面の再構成および曲率計算の方法について議論するため, 以上の手順のうち (1) から (4) を対象とする .

3. 界面再構成法

界面再構成は以下の手順で行う .

- (1) 界面セルとその周囲の $3 \times 3 \times 3$ のセルにある移流されたラグランジュ点 (Front) から楕円面をフィッティングする . ラグランジュ点の配置方法の一例を Fig. 1 に示す .
- (2) フィッティングされた楕円面を移流された体積率の保存を満たし, さらに重心位置の誤差が最小となるように平行移動させる .

3.1 楕円体のフィッティング

二次曲面の式は以下のようにかける .

$$ax^2 + by^2 + cz^2 + dxy + eyz + fzx + gx + hy + iz + j = 0 \quad (9)$$

行列表記すると

$$\begin{pmatrix} x & y & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & d/2 & f/2 \\ d/2 & b & e/2 \\ f/2 & e/2 & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} g & h & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} + j = 0 \quad (10)$$

左辺第一項の行列を P とする . このとき, 二次曲面の分類は P のみで決まる . 本研究では二次曲面の分類のうち楕円面に限定する . 行列 P を対角化した行列を P' とし, 各成分を以下のように定義する .

$$P' = \begin{pmatrix} a' & 0 & 0 \\ 0 & b' & 0 \\ 0 & 0 & c' \end{pmatrix} \quad (11)$$

このとき, 楕円面となるための条件は P' の対角成分がすべて正となるときである . この条件は行列の不変量である行列式を考えると,

$$|P| = |P'| = a'b'c' > 0 \quad (12)$$

であり

$$|P| = 1 \quad (13)$$

と正規化しても一般性は失われない . 式 (13) の条件の下, 最小自乗法により楕円面をフィッティングする . これは以下の S_1 を最小化する問題となる .

$$S_1 = \sum_{i \in \text{Front}} (ax_i^2 + by_i^2 + cz_i^2 + dx_iy_i + ey_iz_i + fzx_ix_i + gx_i + hy_i + iz_i + j)^2 \quad (14)$$

ただし式 (13) より

$$c = \frac{af^2 + be^2 - def + 4}{4ab - d^2} \quad (15)$$

この時, S_1 の括弧内は係数に対して非線形であるため, 非線形最小自乗法である Levenberg-Marquardt 法⁽⁶⁾を用いる . そのため, 初期値が必要となる . 式 (13) の条件を満たす二葉双曲面への収束を防ぐために, 初期形状として球面を与える . 初期値の球として, 2 つの球面を考える . まずは, 最小自乗法を用いて球面を直接フィッティングする方法であり, 以下の S_2 を最小化する問題となる .

$$S_2 = \sum_{i \in \text{Front}} (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2 + Ax_i + By_i + Cz_i + D)^2 \quad (16)$$

S_2 の括弧内は係数に対して線形であるため線形最小自乗法を用いる . この方法では反復計算をすることなく球面をフィッティング出来るが, 曲率が小さい場合に精度よくフィッティングすることができず, その結果, 楕円面のフィッティングにおいて大域的最適解ではなく, 局所最適解に収束してしまうという問題がある . 次に, 平面のフィッティングを利用する方法であり, 平面のフィッティングは以下の S_3 を最小化する問題となる .

$$S_3 = \sum_{i \in \text{Front}} (Ax_i + By_i + Cz_i + 1)^2 \quad (17)$$

S_3 の括弧内も係数に対して線形であるため線形最小自乗法を用いる . しかし, 平面の式は式 (15) を満たさない . そのため, フィッティングした平面に格子中央に最も近いラグランジュ点で接し, 半径が領域の 1 辺の長さの球面とする . どちらを初期値として採用するかについての判定方法としては, フィッティングした球面または平面と Front との距離の和が小さいほうとする .

Tab. 1: Interface reconstruction test. The numerical error was evaluated by Eq. (18), (19)

| | L_2/\sqrt{N} | L_∞ |
|---------|-----------------------|-----------------------|
| VOF | 7.79×10^{-2} | 1.17×10^{-1} |
| MOF | 3.57×10^{-2} | 4.52×10^{-2} |
| Present | 2.22×10^{-6} | 5.86×10^{-6} |

3.2 MOF 法による平行移動

3.1 節でフィッティングした楕円面と格子に囲まれた領域は移流された体積率の保存を満たしていない．そこで移流された体積率の保存を満たし，さらに移流された重心位置の誤差を最小化するようにフィッティングした楕円面を平行移動させる．ここで参照相の体積率と重心位置を $F_{\text{ref}}, \mathbf{x}_{\text{ref}}^{\text{cent}}$ ，格子幅を h ，楕円面を平行移動させる距離をそれぞれ $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ ，平行移動させた楕円面と格子に囲まれた領域の体積率と重心位置を $F(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ ， $\mathbf{x}^{\text{cent}}(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ とすると以下の最適化問題となる．

$$\begin{cases} \min & E_{\text{MOF}} = \|\mathbf{x}^{\text{cent}}(\Delta x, \Delta y, \Delta z) - \mathbf{x}_{\text{ref}}^{\text{cent}}\|_2 \\ & |F(\Delta x, \Delta y, \Delta z) - F_{\text{ref}}| = 0 \\ \text{s.t.} & -h \leq \Delta x \leq h \\ & -h \leq \Delta y \leq h \\ & -h \leq \Delta z \leq h \end{cases}$$

上式を制約条件付き最適化問題において，高速な解法であると知られている逐次二次近似法を用いて解く．

4. 検証計算

4.1 界面再構成法の精度検証

界面再構成法の精度検証を VOF 法，MOF 法，提案手法について行った．VOF 法での界面再構成法としては Mixed-Youngs-and-Centered (MYC) 法⁽⁷⁾を用いた．検証を行う形状としては半径が 2 格子の球とし，単位法線ベクトルに対して $L_2/\sqrt{N}, L_\infty$ を以下のように定義することで定量的に検証を行った．

$$\frac{L_2}{\sqrt{N}} = \sqrt{\frac{\sum_{i \in \text{InterfacialCell}} \|\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_a\|_2^2}{N}} \quad (18)$$

$$L_\infty = \max_{i \in \text{InterfacialCell}} \|\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_a\|_2 \quad (19)$$

ここで， N は界面セルの個数， \mathbf{n}_a は解析解であり，界面セルの集合を InterfacialCell と表記した．

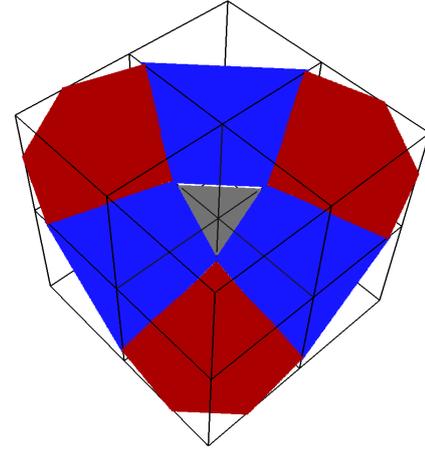
Fig. 2 は再構成した界面を表しており，提案手法では MOF 法と比較すると，平面ではなく，二次曲面で界面を再構成しているため，界面が格子に接する部分で精度よく界面が再構成できていることがわかる．また，Tab. 1 に各手法における誤差をまとめており，提案手法では VOF 法や MOF 法よりも精度よく界面を再構成できていることがわかる．

4.2 界面曲率算出の精度検証

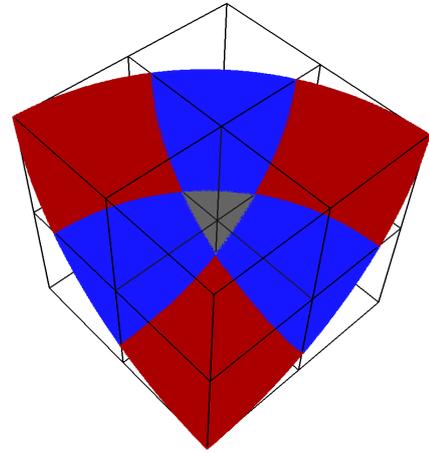
ここでは領域 $1.0 \times 1.0 \times 1.0$ ，半径 0.15 の球形気泡に対して各座標方向に対する格子数を 32, 64, 128, 256 としたときに格子幅 h と平均曲率 κ の誤差の関係について調べた．誤差評価の方法として以下のように誤差 E を定義する．

$$E = \max_{i \in \text{InterfacialCell}} |\kappa_i - \kappa_a| \quad (20)$$

ここで κ_a は平均曲率の解析解である．提案手法以外の手法においては，参照相で 1，その他で 0 となるヘビサイ



(a)MOF



(b)Present

Fig. 2: Reconstructed sphere surface. The colored surface is a reconstructed interface and the difference of color denotes the difference in the belonging computational cell. Only an eighth of the whole sphere is shown for the symmetry.

ド関数の近似であるカラー関数の勾配を陽に用いる方法を用い，以下の関係式を用いる．

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla C}{|\nabla C|} \quad (21)$$

$$\kappa = -\nabla \cdot \mathbf{n} \quad (22)$$

カラー関数として体積率を用いたものを Finite Difference，平滑化した体積率を用いたものを Smoothing と表記する．Fig. 3 に各手法における格子幅 h と平均曲率 κ の誤差の関係を示す．Fig. 3 より提案手法では最も精度よく曲率を求めることが出来ているが，他の手法と同様に格子幅を小さくすると誤差が大きくなっていることがわかる．この原因としては，カラー関数の勾配を陽に用いる方法では，格子幅を小さくするほどカラー関数の分布が滑らかでなくなることであると考えられ，提案手法では格子幅を小さくするほど体積率が 0 や 1 に近いセルが存在し，このとき，界面再構成の楕円面のフィッティングにおいて，フィッティングの対象となるラグランジュ点の数が減少し，フィッティングの精度が低くなるためであると考えられる．

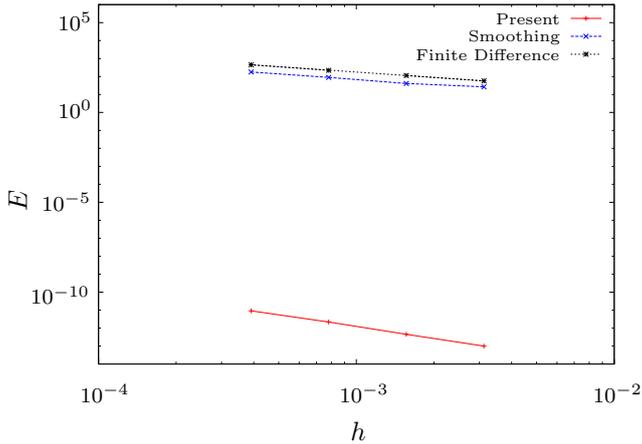


Fig. 3: Numerical error for the curvature estimation .

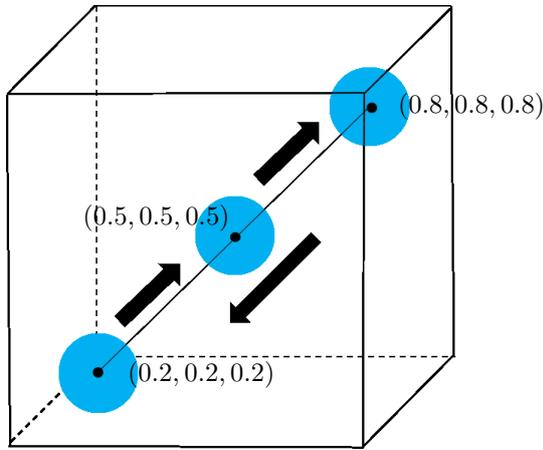


Fig. 4: Schematics of the advection test without interface deformation .

4.3 変形を伴わない移流を行う場合の精度検証

ここでは時刻 $t = 0$ での球形気泡が時刻 $t = T$ で元の位置に戻る速度場を与えることによって、界面再構成法と界面移流法の誤差評価を行う。よって、界面の形状保存誤差として

$$E = \sum \Delta^3 |F_{i,j,k}^T - F_{i,j,k}^0| \quad (23)$$

と定義する。ここで Δ は格子幅、 F は各計算セルにおける体積率であり、総和は全領域に対してとる。速度場としては、全領域で一様な速度場を与えることによって、界面の変形を伴わずに Fig. 4 に示すように移流を行う。計算条件は領域 $1.0 \times 1.0 \times 1.0$ 、格子数 $80 \times 80 \times 80$ 、初期の球形気泡直径 0.25 (20 格子)、CFL 数 0.5 とする。各手法における誤差評価の結果を Tab. 2 に、また、提案手法における移流の様子を Fig. 5 に示す。Tab. 2 より提案手法では VOF 法や MOF 法よりも精度よく移流を行うことが出来ていることがわかる。

4.4 変形を伴う移流を行う場合の精度検証

4.3 節と同様に時刻 $t = 0$ での球形気泡が時刻 $t = T$ で元の位置に戻る速度場を与え、誤差評価も同様に行う。速度場としては以下のように与えることによって界面の変形を伴う移流を行う⁽⁷⁾。

$$u(x, y, z, t) = \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \sin^2(\pi x) \{\cos(\pi z) - \cos(\pi y)\} \quad (24)$$

Tab. 2: Interface advection test without deformation (Sec. 4.3). The numerical error was evaluated by Eq. (23).

| | E |
|---------|-----------------------|
| VOF | 7.78×10^{-5} |
| MOF | 1.27×10^{-5} |
| Present | 7.26×10^{-6} |

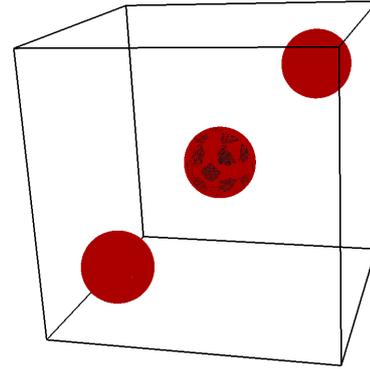


Fig. 5: Interface advection test without deformation (Sec. 4.3). The colored surface is reconstructed interface with present method at $t = 0, T/4, 3T/4, T$ and it is black only at $t = 0$.

$$v(x, y, z, t) = \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \sin^2(\pi y) \{\cos(\pi x) - \cos(\pi z)\} \quad (25)$$

$$w(x, y, z, t) = \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \sin^2(\pi z) \{\cos(\pi y) - \cos(\pi x)\} \quad (26)$$

このとき、時刻 $t = T/2$ で最大の変形となる。計算条件は領域 $1.0 \times 1.0 \times 1.0$ 、格子数 $80 \times 80 \times 80$ 、初期の球形気泡直径 0.3 (24 格子)、初期の球形気泡中心座標 $(0.7, 0.5, 0.5)$ 、CFL 数 0.5 、 $T = 2.0$ とする。各手法における誤差評価の結果を Tab. 3 に、また、提案手法における移流の様子を Fig. 6 に示す。Tab. 3 からわかるように、各手法で誤差がほとんど変化しない。これは、界面再構成法ではなく、移流法である LE 法の誤差が支配的であるからと考えられる。

5. 結言

多相流解析においても界面曲率を高精度に算出するために、MOF 法にラグランジュ点を活用し、二次曲面で界面を再構成することによって、単一のセルの体積率と重心位置の参照のみで界面再構成だけでなく、界面曲率の算出も可能である手法を開発した。また、二相のみが存在する場合において、既存の手法よりも界面再構成、界面曲率の算出を精度よく行えることを示した。

謝辞

最適化問題の解法について大阪大学工学研究科の矢地謙太郎博士には有益な助言を頂きました。ここに記して謝意を表します。

- (7) Aulisa, E., Manservigi, S., Scardovelli, R., Zaleski, S., “Interface reconstruction with least-square fit and split advection in three-dimensional Cartesian geometry”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 225 (2007), pp. 2301-2319.

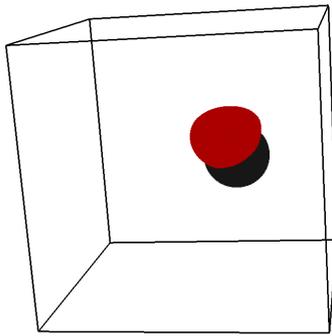


Fig. 6: Interface advection test with deformation (Sec. 4.4). The black surface is reconstructed interface with present method at $t = 0$ and the red surface is one at $t = T/2$.

Tab. 3: Interface advection test with deformation (Sec. 4.4). The numerical error was evaluated by Eq. (23).

| | E |
|---------|-----------------------|
| VOF | 2.38×10^{-4} |
| MOF | 2.39×10^{-4} |
| Present | 4.32×10^{-4} |

参考文献

- (1) Brackbill, J. U., Kothe, D. B., Zemach, C., “A continuum method for modeling surface tension”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 100 (1992), pp. 335-354.
- (2) Francois, M. M., Cummins, S. J., Dendy, E. D., Kothe, D. B., Sicilian, J. M., Williams, M. W., “Balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 213 (2006), pp. 141-173.
- (3) Hirt, C. W., Nichols, D. B., “Volume of Fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 39 (1981), pp. 201-225
- (4) Dyadechko, V., Shashkov, M., “Moment-of-fluid interface reconstruction”. Los Alamos Report LA-UR-05-7571, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, (2005)
- (5) Gueyffier, D., Li, J., Nadim, A., Scardovelli, R., Zaleski, S., “Volume-of-Fluid interface tracking with smoothed surface stress method for three-dimensional flows”, *Journal of Computational Physics*, Vol. 152 (1999), pp. 423-456.
- (6) 山下, 福島, “Levenberg-Marquardt 法の局所収束性について”, *数理解析研究所講究録*, Vol. 1174 (2000), pp. 161-168