非構造格子における界面捕獲手法の構築

Development of an interface capturing method on an unstructured mesh

〇 伊井 仁志, 東大, 文京区本郷 7-3-1, sii@fel.t.u-tokyo.ac.jp:

肖 鋒, 東工大, 横浜市緑区長津田町 4259, xiao@es.titech.ac.jp:

Satoshi Ii, The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo Bunkyo-ku

Feng Xiao, Tokyo Institute of Technology, 4259 Nagatsuta, Midori-ku

An interface capturing method is newly developed in a philosophy of a smoothed volume-of-fluid (VOF) approach, on the unstructured meshes, i.e., triangular mesh and tetrahedral mesh. The present method, based on the tangent of hyperbola interface capturing scheme (Xiao et al., Int. J. Numer. Meth. Fluids, 48 (2005) 1023-1040), employs a multi-dimensional hyperbolic tangent (or sigmoid) function with a discretized volume fraction data, thus the VOF function keeps a smooth profile over a few computational meshes, offering that a derivative value of the VOF function is directly obtained from itself. The numerical results show that the present method maintains an initial VOF profile well, and also infer a possibility to a multi-phase flow simulation on the unstructured meshes.

1. はじめに

日、日のでした 自由界面の大変形や大移動,またそれに伴うトポロジー 変化が頻繁に起こるような多相流問題では,それらを容易 に扱える固定格子を用いた解析手法が有用である.ここで 固定格子において界面を陰的に取り扱う界面捕獲手法と して,例えば,流体の体積占有率を用いたVOF(Volumeof-fluid)法⁽⁵⁾,距離関数を用いたLS(Level-set)法^(9,17), また VOF 法とLS 法と組み合わせた CLSVOF(Coupled level-set and volume-of-fluid)法⁽¹⁸⁾,密度関数を用いた 密度関数法^(22,20),また相場関数を用いたPhase-Field法 ⁽⁷⁾ などが挙げられる.本研究では,質量保存性(界面に囲 まれた領域の体積保存性とは別に定義)に優れた VOF 法 に関して新たな手法を提案する.VOF 法で幅広く用いら れている PLIC(Piecewise linear interface calculation)法 ^(25,11,12,14,10)では,離散変数である VOF 関数を用い,各 計算要素において線形界面形状を持つへビサイド関数が 近似的に構築される.ヘビサイド関数の特異性により近似 関数構築は幾何的な操作を必要とし複雑化するが,線形界 面であれば解析かつ容易に関数が構築される⁽¹³⁾.一方, このような幾何的操作を避けるために,滑らかな VOF 関数(あるいは各相を表す指標関数)を導入し,各計算要 素での指標関数を tanh 関数で近似した THINC(Tangent of hyperbola interface capturing)法⁽¹⁹⁾が提案されてお り,その発展手法^(24,21)も提案されている.また多次元 において,界面を準二次曲面と仮定し,多次元 tanh 関数 を用いた MTHINC(Multidimensional THINC)法⁽⁶⁾ が 近年著者らのグループで開発されている.

を用いた MTHINC(Multidimensional THINC) 法(⁶⁾ が 近年著者らのグループで開発されている. ここで,上記で述べた先行研究らは直交格子において 定式化がなされているが,実用問題においては,複雑形 状を精度良く扱うことができる非構造を用いた定式化も 今後重要となると考えられる.PLIC法で用いられる幾 何的構築を基礎とした三角形あるいは四面体での定式化 は,例えば,文献^(15,23)などに見られるが,幾何的構築 に伴うアルゴリズムの複雑化により線形界面を仮定して いる.そこで本研究では,三角形格子また四面体格子に おいて,将来的に高次界面(曲面)を用いた高精度界面捕 獲手法の開発を目指し,直交格子において定式化された MTHINC法を非構造拡張に拡張する.その初段階とし て,線形界面を仮定し手法を構築し,いくつかの移流テ ストにより提案手法の妥当性を検証する.

2. 非構造格子における界面捕獲手法

2.1 滑らかな指標関数により定義される VOF 関数 本研究では,気相と液相は混じり合わないとし,それ らは連続体領域(あるいは計算要素幅)で滑らかに遷移し ていると仮定する.その際,全領域 Ω を液相領域 Ω_l ,気 相領域 Ω_g および遷移領域 Γ に分割し,各相とその遷移 領域を表す指標関数 (indicator function): $\chi(\mathbf{x})$ を以下の ように導入する .

$$\chi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in \Omega_l, \\ 0, & \mathbf{x} \in \Omega_g, \\ 0 < \chi(\mathbf{x}) < 1, & \mathbf{x} \in \Gamma, \end{cases}$$
(1)
$$\mathbf{R}^3 = \{(x, y, z) \mid \mathbf{x} \in \Omega = \Omega_l \cup \Omega_g \cup \Gamma\}.$$

この時,検査領域 $\delta V(\mathbf{x})$ における液相の体積占有率 (volume-fraction function: VOF 関数): $\phi(\mathbf{x})$ は以下の ように定義される.

$$\phi(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{|\delta V(\mathbf{x})|} \int_{\delta V(\mathbf{x})} \chi(\mathbf{x}') d\mathbf{x}' = \langle \chi(\mathbf{x}') \rangle_{\delta V(\mathbf{x})} \quad (2)$$

2.2 VOF 関数の半離散時間発展式

本研究では,気液界面を VOF 関数により陰的に表現 する.各相が混じり合わない場合, $\chi(\mathbf{x})$ の時間発展式は 以下のように与えられる.

$$\frac{D\chi}{Dt} = 0, \ \to \ \frac{\partial\chi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}\chi) = \chi \nabla \cdot \mathbf{v}, \tag{3}$$

ここで各計算要素 i $(i = 1, ..., N_e)$ での検査領域を δV_i とすると,定義式 (2) および式 (3) より, VOF 関数 ϕ_i の時間発展式は,

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \frac{1}{|\delta V_i|} \oint_{\delta S_i} (v_n \chi) dS = \frac{\phi_i}{|\delta V_i|} \oint_{\delta S_i} v_n dS, \quad (4)$$

と与えられる.ここで, $v_n = \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}$ は法線方向 n の射影 速度, また $\oint_{\delta S} dS_i$ は検査領域 δV_i での周回積分を表す. 式(4)より,非圧縮条件 $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$ では ϕ の保存性は保 証されるが,通常,非圧縮条件は数値的な誤差を伴い満 たされるため右辺項は残しておく.計算要素を構成する 面要素(二次元三角形では3つの直線,三次元四面体で は4つの三角形)での面積分から周回積分を評価し,数 値積分を適用すると空間方向に離散化された時間常微分 方程式が得られる.本研究では,面要素の数値積分に四 次精度ガウス求積法⁽²⁾また時間積分には三次精度 TVD ルンゲ・クッタ法⁽¹⁶⁾を適用する.

2.3 近似関数の構築

VOF 関数を用いた界面捕獲法においては,各計算要素 領域において式 (4)の左辺第2項に含まれる $\chi(\mathbf{x})$ を離散 変数 ϕ_i $(i = 1, .., N_e)$ から如何に精度良く近似するかが る.すなわち, $\{\mathbf{x}\in\delta V_i:\chi(\mathbf{x})\}=H_i(\mathbf{x})$.この際,ヘビ サイド関数の特異性により近似関数構築に幾何的な操作 を必要とするが,直交格子での解析的表現⁽¹³⁾,また三 角形および四面体格子での解析的表現⁽²³⁾が提案されて 用形のよび四面体格子での解析的表現(=5)が提案されており,線形界面での近似関数が容易に構築される.ただし曲面を考慮した際,幾何的操作によりアルゴリズムはとたんに複雑になり⁽⁴⁾,一般的に解析的構築はほぼ不可能となる.一方,MTHINC法⁽⁶⁾では連続関数である多次元シグモイド関数を用いるため幾何的な操作を必要を

線形であると仮定する.その際,各計算要素における近 | 似関数 $\hat{H}_i(\mathbf{x})$ を以下のように与える.これ以降,簡単化 のため要素インデックス i を省略して記述する.

$$\hat{H}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh(\beta(n_x x + n_y y + n_z z + c))) \right).$$
(5)

ここで, $\mathbf{n}=(n_x,n_y,n_z)$ は界面の単位法線ベクトルで 後述の評価法より求める.また $eta=eta'/h_{
m ave}$ と定義され, have は以下のように定義した平均格子幅である.

$$h_{\rm ave} = \frac{1}{N_e} \sum_{i=1}^{N_e} (6|\delta V_i|)^{1/3}.$$
 (6)

 N_e は全要素数,また eta'は VOF 関数の遷移領域幅を決 定するパラメータであり,本研究では文献 $^{(21)}$ およびいくつかの数値テストにより $\beta'=2.3$ とする.

単位法線ベクトル n は要素中心での値 n_c により近似 する.これらは Youngs らの方法⁽²⁵⁾を非構造格子に適用 し,要素頂点での VOF 関数の勾配を隣接する離散 VOF 関数から最小二乗法により求め,要素中心での平均勾配 $abla \phi_c$ から $\mathbf{n}_c =
abla \phi_c / \sqrt{|
abla \phi_c|^2 + 10^{-16}}$ と評価する.本手 法では、離散 VOF 関数が格子幅に対してある程度の遷移領域を持ち滑らかに分布していることを利用し、VOF 関数の勾配から直接法線ベクトルを求めているが、空間 収束性に問題があることが知られているため⁽³⁾,高精度 な法線ベクトル評価法が今後の課題と考えられる. 近似関数の構築にあたり,四面体格子において局座標 系 (ξ,η,ζ) を導入する(Fig.1).基準点を x_0 とした時,

$$\mathbf{x}_{\xi} = \mathbf{x}_{1} - \mathbf{x}_{0}, \ \mathbf{x}_{\eta} = \mathbf{x}_{2} - \mathbf{x}_{0}, \ \mathbf{x}_{\zeta} = \mathbf{x}_{3} - \mathbf{x}_{0},$$
$$\mathbf{x} = \xi \mathbf{x}_{\xi} + \eta \mathbf{x}_{\eta} + \zeta \mathbf{x}_{\zeta}, \qquad (7)$$
$$(0 \le \xi, \eta, \zeta \le 1, \ \xi + \eta + \zeta \le 1),$$

となり,それに伴い近似関数(5)は局座標系における近 (似関数 $\hat{H}(\xi,\eta,\zeta)$) に置き換えられる.

$$0 \leq \xi, \eta, \zeta \leq 1, \ \xi + \eta + \zeta \leq 1:$$

$$\hat{H}(\xi, \eta, \zeta) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh(a_{\xi}\xi + a_{\eta}\eta + a_{\zeta}\zeta + d) \right).$$
 (8)

ここでそれぞれ、

$$a_{\xi} = \beta \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}_{\xi}, \ a_{\eta} = \beta \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}_{\eta}, \ a_{\zeta} = \beta \mathbf{n} \cdot \mathbf{x}_{\zeta}, d = \beta (\mathbf{n} \cdot \mathbf{x}_{0} + c),$$
(9)

である.



Fig. 1: Schematic of a local coordinate system on a tetrahedral mesh.

VOF 関数の定義式 (2) より,近似関数 (8)の体積積分 値から逆問題として d が決定されるが, $tanh(\xi,\eta,\zeta)$ の 多次元積分が初等関数では表現できないため、解析積分 と1 点数値積分を併用する.ここで,

$$\overline{\hat{H}}^{(\xi)}(\eta,\zeta) \equiv \frac{1}{1-\eta-\zeta} \int_{0}^{1-\eta-\zeta} \hat{H}(\xi,\eta,\zeta)d\xi,$$

$$\overline{\hat{H}}^{(\eta)}(\xi,\zeta) \equiv \frac{1}{1-\xi-\zeta} \int_{0}^{1-\xi-\zeta} \hat{H}(\xi,\eta,\zeta)d\eta, \quad (10)$$

$$\overline{\hat{H}}^{(\zeta)}(\xi,\eta) \equiv \frac{1}{1-\xi-\eta} \int_{0}^{1-\xi-\eta} \hat{H}(\xi,\eta,\zeta)d\zeta,$$

を定義し,以下のような場合分けにより d を決定する.

 $\langle \rangle$

$$\begin{aligned} \mathbf{Case1} &: a_{\xi} = \max(a_{\xi}, a_{\eta}, a_{\zeta}), \\ & \overline{\hat{H}}^{(\xi)}(1/4, 1/4) = \phi, \end{aligned} \tag{11}$$

Case2 : $a_\eta = \max(a_\xi, a_\eta, a_\zeta),$ (12)

$$\overline{\hat{H}}^{(\eta)}(1/4, 1/4) = \phi,$$
(1)

Case3 :
$$a_{\zeta} = \max(a_{\xi}, a_{\eta}, a_{\zeta}),$$
 (13)

$$\overline{\hat{H}}^{(\zeta)}(1/4, 1/4) = \phi.$$
 (10)

ここで, Case1 に注目すると以下の手順より d を逆問題 (11) から求めることができる.

$$d = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1 - AQ}{AB(Q - A)} \right),$$

$$A = \exp(a_{\xi}/2),$$

$$B = \exp((a_{\eta} + a_{\zeta})/2),$$

$$Q = \exp(a_{\xi}(\phi - 1/2)).$$

(14)

他の場合(12),(13)に関しても,係数を順次入れ替えて d を求めることができる.

式 (14) より, $\phi = 0$ あるいは $\phi = 1$ においては定義が 成り立たないため,本研究では微小数 $\epsilon=10^{-8}$ を導入し,以下のように計算要素 i での指標関数を近似する.

$$\{\mathbf{x} \in \delta V_i : \chi(\mathbf{x})\} = \begin{cases} \hat{H}_i(\mathbf{x}), & \text{for } 0 \le \phi_i \le 1, \\ \phi_i, & \text{otherwise.} \end{cases}$$
(15)

移流テスト 3.

本研究では,計算要素でのCFL(Courant-Friedrichs-Lewy) 数を以下のように定義する.

$$CFL_{i} = \begin{cases} \frac{\max(|u_{i}|,|v_{i}|)\Delta t}{(2|\delta S_{i}|)^{1/2}}, & \text{in 2D,} \\ \frac{\max(|u_{i}|,|v_{i}|,|w_{i}|)\Delta t}{(6|\delta V_{i}|)^{1/3}}, & \text{in 3D,} \end{cases}$$
(16)
(*i* = 1, ..., *N_e*).

いくつかの数値テストより、 $CFL_{max} = max(CFL_i)_{i \in [1, N_e]}$ が0.25以下において十分な精度 を保つこと確認しており、この基準を満足する時間増分 Δt を用いる.

3.1 三角形格子

Delaunay 分割により作成された三角形格子において数 値テストを行う.ここで,全要素数を直交格子と対比させるため $N_e=N^2 imes 2$ と表記する.

スロットを持つ円盤の剛体回転⁽²⁶⁾

スロットを持つ円盤の剛体回転⁽⁴⁰⁾ 計算要素 $N_e = 71^2 \times 2 \approx 10000$ において $\text{CFL}_{\text{max}} = 0.25$ のもと計算を行う.初期結果,1回転後また5回転後の計算結果を Fig.2 に示す.ここでは剛体部を拡大して表示している.計算結果より,1回転後において界面形状を良く保持していることが確認できる.5回転後の結果では,スロット部において回転方向に依存する誤差が見られるが,VOF 関数の数値拡散が抑えられているため体積保存性は良く保たわている め体積保存性は良く保たれている.



Fig. 2: Numerical results in a slotted-disk rotation on a triangular mesh. Black line: initial, red line: 1 rotation, blue line: 5 rotations.

二次元の時間反転渦度場における形状再現性 ^(1,12)

計算要素 $N_e = 64^2 \times 2$, $128^2 \times 2$ また $256^2 \times 2$ にお いて CFL_{max} ≈ 0.17 のもと計算を行う.ここで, T = 8を 1 周期とする時間反転速度場を与え,初期形状の再現 性を検証する.Fig.3 に計算結果を示す.t = T/2におい て界面間の厚みは非常に薄くなり空間解像度が厳しくな るため,t = Tにおいて $N_e = 128^2 \times 2$ 要素では初期円 形状が若干崩れている. $N_e = 256^2 \times 2$ 要素を用いた計 算結果 (Fig.3(b)) より,これらは空間解像度を上げるこ とにより改善できていることが確認できる.また,Fig.3 において $\phi = 0.05$, 0.5 また 0.95 での等高線を示してお り,本手法は VOF 関数の時間的な散逸を抑制できていることが確認できる.ここで,空間解像度に対する L_1 ノルムによる初期解との相対誤差をTab.1に示す.本問題においては,空間二次精度の収束性を示している.

3.2 四面体格子

次に四面体格子において数値テストを行う.ここで,四 面体格子は三次元直交格子を5分割した規則性のある格 子を用いる(Fig.4).その際,全要素数は $N_e = N^3 \times 5$ と表記する.



(b) $N_e = 256^2 \times 2$

Fig. 3: Numerical results in a 2D time-dependent single vortex flow at t = 0 (left), t = T/2 (middle) and t = T(right) in case where T = 8. The contour lines of the VOF function are shown at 0.05 (blue), 0.5 (black) and 0.95 (red), respectively.

Tab. 1: Numerical errors and convergence rates for the spatial resolution in a 2D time-dependent single vortex flow.

N_e	$64^2 \times 2$	$128^2 \times 2$	$256^2 \times 2$
Error	1.59E-2	3.13E-3	6.03E-4
Order	_	2.34	2.37



Fig. 4: The *regular* tetrahedral meshes divided from the 2^3 cubic meshes.

三次元の時間反転渦渦度場における形状再現性⁽⁸⁾ 計算要素 $N_e = 30^3 \times 5$, $60^3 \times 5$ また $120^3 \times 5$ にお いて CFL_{max} ≈ 0.12 のもと計算を行う.本テストでは, T = 3 を 1 周期とする時間反転速度場を与え,初期形状 の再現性を検証する.Fig.5 に t = 0, T/2 また T での計 算結果を示す.二次元問題と同様に,t = T/2 において 界面間の厚みは最も薄くなり空間解像度が厳しくなるが, 空間解像度を上げることで改善できており,それに伴い 初期球形状の再現性も増している.更に,空間解像度に 対する L_1 ノルムによる初期解との相対誤差 (Tab.2) よ り,本問題においても空間二次精度が実現されている.





(b) $N_e = 120^3 \times 5$

Fig. 5: Numerical results in a 3D time-dependent vortex flow at t = 0 (left), t = T/2 (middle) and t = T (right) in case where T = 3.

Tab. 2: Numerical errors and convergence rates for the spatial resolution in a 3D time-dependent vortex flow.

N_e	$30^3 \times 5$	$60^3 \times 5$	$120^3 \times 5$
Error	7.14E-3	2.18E-3	5.31E-4
Order	_	1.71	2.04

4. まとめ

本研究では,格子サイズで分布する滑らかな離散 VOF 関数を導入し,連続関数である多次元 tanh 関数によ り計算要素での指標関数を近似する多次元 THINC 法 (MTHINC 法)を非構造格子に拡張した.本提案手法は 界面捕獲手法で重要な点である;1)VOF 関数の時間的な 散逸の抑制;2)体積保存性,に対し優れた計算結果を示 すことができた.今後は,流体解析と連成させその有用 性を検討していく.

参考文献

- J.B. Bell, P. Colella, H.M. Glaz, A second-order projection method for the incompressible Navier-Stokes equations, J. Comput. Phys., 85 (1989) 257-283.
- (2) G.R. Cowper, Gaussian Quadrature Formulas for Triangle, Int. J. Numer. Meth. Eng., 7 (1973) 405-408.
- (3) S.J. Cummins, M.M. Francois, D.B. Kothe, Estimating curvature from volume fractions, *Comput. Structures*, 83 (2005) 425-434.

- (4) S.V. Diwakar, S.K. Das, T. Sundararajan, A Quadratic Spline based Interface (QUASI) reconstruction algorithm for accurate tracking of twophase flows, J. Comput. Phys., 228 (2009) 9107-9130.
- (5) C.W. Hirt, B.D. Nichols, Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, J. Comput. Phys., 39 (1981) 201-225.
- (6) S. Ii, K. Sugiyama, S. Takeuchi, S. Takagi, Y. Matsumoto, F.Xiao, An interface capturing method with a continuous function: the THINC method with multi-dimensional reconstruction, J. Comput. Phys., revised (2011).
- (7) D. Jacqmin, Calculation of two-phase Navier-Stokes flows using phase-field modeling, J. Comput. Phys., 1455 (1999) 96-127.
- (8) R. LeVeque, High-Resolution Conservative Algorithms For Advection In Incompressible Flow, SIAM J. Numerical Analysis, 33 (1996) 627-665.
- (9) S.J. Osher, J.A. Sethian, Fronts propagating with curvature dependent speed. Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations, *J. Comput. Phys.*, **79** (1988) 12-49.
- (10) J.E. Pilliod Jr., E.G. Puckett, Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces, J. Comput. Phys., 199 (2004) 465-502.
- (11) E.G. Puckett, A.S. Almgren, J.B. Bell, D.L. Marcus and W.J. Rider, A High-Order Projection Method for Tracking Fluid Interfaces in Variable Density Incompressible Flows, J. Comput. Phys., 130 (1997) 269-282.
- (12) W.J. Rider, D.B. Kothe, Reconstructing volume tracking, J. Comput. Phys., 141 (1998) 112-152.
- (13) R. Scardovelli, S. Zaleski, Analytical relations connecting linear interfaces and volume fractions in rectangular grids, J. Comput. Phys., 164 (2000) 228-237.
- (14) R. Scardovelli, S. Zaleski, Interface reconstruction with least-square fit and split Eulerian Lagrangian advection, Int. J. Numer. Meth. Fluids, 41 (2003) 251-274.
- (15) K. Shahbazi, M. Paraschivoiu, J. Mostaghimi, Second order accurate volume tracking based on remapping for triangular meshes J. Comput. Phys., 188 (2003) 100-122.
- (16) C.W. Shu, Total-variation-diminishing time discretizations, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 9 (1988) 1073-1084.
- (17) M. Sussman, P. Smereka, S. Osher, A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flows, J. Comput. Phys., 114 (1994) 146-159.
- (18) M. Sussman, E.G. Puckett, A Coupled Level Set and Volume-of-Fluid Method for Computing 3D and Axisymmetric Incompressible Two-Phase Flows, J. Comput. Phys., 162 (2000) 301-337.
- (19) F. Xiao, Y. Honma, K. Kono, A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **48** (2005) 1023-1040.

- (20) F. Xiao, A. Ikebata, An efficient method for capturing free boundary in multi-fluid simulations, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, **42** (2003) 187-210.
- (21) F. Xiao, S. Ii and C.G. Chen, Revisit to the THINC scheme: a simple algebraic VOF algorithm, J. Comput. Phys., 230 (2011) 7086-7092.
- (22) T. Yabe, F. Xiao, Description of Complex and Sharp Interface during Shock Wave Interaction with Liquid Drop, J. Phys. Soc. Jpn., 62 (1993) 2537-2540.
- (23) X. Yang, A.J. James, Analytic relations for reconstructing piecewise linear interfaces in triangular and tetrahedral grids, J. Comput. Phys., 214 (2006) 41-54.
- (24) K. Yokoi, Efficient implementation of THINC scheme: A simple and practical smoothed VOF algorithm, J. Comput. Phys., 226 (2007) 1985-2002.
- (25) D.L. Youngs, Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion, in K.W. Morton and M.J. Baines (eds), *Numerical Methods for Fluid Dynamics* Academic, New York, 1982, 273-285.
- (26) S.T. Zalesak, Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids, J. Comput. Phys., 31 (1979) 335-362.