

自由界面多相流数値解析モデル thincFoam による液体分裂のシミュレーション

Numerical simulations of liquid breakup by thincFoam - a numerical model for interfacial multiphase flows

- 中山裕貴, 東工大, 横浜市緑区長津田町 4259 (J2-31), E-mail : nakayama.m.af@m.titech.ac.jp
- 謝彬, 東工大, 横浜市緑区長津田町 4259 (J2-31), E-mail : xie.b.aa@m.titech.ac.jp
- 肖鋒, 東工大, 横浜市緑区長津田町 4259 (J2-31), E-mail : xiao@es.titech.ac.jp
- Hiroki NAKAYAMA, Tokyo Institute of Technology, 4259 Nagatsuta, Midori-ku, Yokohama
- Xie BIN, Tokyo Institute of Technology, 4259 Nagatsuta, Midori-ku, Yokohama
- Feng XIAO, Tokyo Institute of Technology, 4259 Nagatsuta, Midori-ku, Yokohama

We combined in this paper the THINC (tangent of hyperbola interface capturing) method, one of the efficient and accurate algebraic interface capturing method, and open source CFD toolbox OpenFOAM and developed a new solver named thincFoam. THINC scheme does not require the explicit geometric representation of the interface when computing numerical fluxes and thus is very computationally efficient. Using this solver we carried out two validation tests about liquid breakup phenomenon, namely low speed liquid jet and Plateau-Rayleigh instability. By comparing its simulation results with the experimental results and theoretical solutions, we have verified the thincFoam and it showed the good capability for the gas-liquid two-phase flow simulation.

1. はじめに

自由界面を追跡する手法として、厳密な数値保存性を持つ Volume of Fluid (VOF) 法は現在のところ最も一般的に使われている手法である。有限体積法においては、数値流束の計算のために界面はこれまで幾何学的に再構築されてきた。最も単純な再構築法である Simple Linear Interface Calculation (SLIC) 法では 2 次元は直線、3 次元は平面を用いて座標軸に平行になるように界面が再構築され、その改良版である Piecewise Linear Interface Calculation (PLIC) 法では界面の法線方向を考慮し界面が再構築される。PLIC は SLIC に比べ精度が良く、これまでに数多くの多相流シミュレーションにおいて大きな成功を収めている。しかしながら、格子を横切る平面を扱う為に簡略化の研究はされてきたものの、幾何学的表現のアルゴリズムは依然複雑である。また、改良版 PLIC VOF の一種である moment of fluid (MOF) 法も体積率に加えて質量中心を用いておりコンパクトステンシルで高精度が期待できるが、非構造格子を用いた計算例はまだ多くなく、アルゴリズムの複雑さ故に需要は大きいもののあまり広く使用されていない⁽¹⁾。一方、幾何学的に界面の再構築を行わない界面再構築法も提案されており、ここでは代数的再構築法 (algebraic reconstruction) と呼んでいる。代数的再構築は幾何学的再構築に比べアルゴリズムが単純で実装が容易であり、幾何学的計算も含まないため非構造格子への発展も容易である。代数的 VOF 法である THINC 法は体積率の不連続部分を双曲線正接関数を用いて表現する手法で、流束は THINC 関数から直接計算でき、界面追跡の計算も単純な移流計算となる⁽²⁾。また、界面の拡散も界面領域の厚みをコントロールすることによって完全に除去することが可能である。THINC 法を 3 次元に拡張した MTHINC 法も提案されており、非構造格子における定式化も行われている⁽³⁾⁽⁴⁾⁽⁵⁾。

本研究では、MTHINC 法をオープンソース CFD ツールボックス OpenFOAM 内の interFoam ソルバーに実装し、非構造六面体格子を用いた液体分裂シミュレーションを行い作成したソルバーの性能を評価した。液体分裂の正確な計算は噴霧現象などへの応用が期待される。

2. THINC 法

2.1 体積率関数と輸送方程式

計算領域 $\Omega \subset \mathbf{R}^3$ に複数の流体が存在する場合を考える。流体 1 をその他と区別する為に点 \mathbf{x} において流体の種類を識別する関数 $H(\mathbf{x}, t)$ を定義する。

$$H(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 1 & (\text{流体 1 が存在}) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases} \quad (1)$$

流体粒子の速度を \mathbf{v} とすると、 $H(\mathbf{x}, t)$ は次の移流方程式に従う。

$$\frac{D}{Dt} (H(\mathbf{x}, t)) = 0 \quad (2)$$

D/Dt は実質微分 $\partial/\partial t + \mathbf{v} \cdot \nabla$ である。オイラー形式では次式で表現される。

$$\frac{\partial H}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v}H) = H \nabla \cdot \mathbf{v} \quad (3)$$

計算領域がセル Ω_i ($i = 1, 2, \dots, N$) に分割されていれば、 Ω_i における体積率は次式で定義される。 ΔV_i はセル Ω_i の体積である。

$$\phi_i(t) \equiv \frac{1}{\Delta V_i} \int_{\Omega_i(\mathbf{x})} H(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} \quad (4)$$

流体 1 は体積率が 0 と 1 の間の値をもつセルによって判別される。すなわち、 $0 < \phi_i(t) < 1$ となるセルが界面となる。

式 (3) より、有限体積法を用いたセル Ω_i での体積率 $\phi_i(t)$ の更新は次式に従う。

$$\begin{aligned} \frac{d\phi_i(t)}{dt} + \frac{1}{\Delta V_i} \sum_{j=1}^J (v_{n_{ij}} \int_{S_{ij}} H(\mathbf{x}, t) dS) \\ = \frac{\phi_i(t)}{\Delta V_i} \sum_{j=1}^J (v_{n_{ij}} \Delta S_{ij}) \end{aligned} \quad (5)$$

添字 ij はセル Ω_i における j 番目の面 S_{ij} を指定する。また、 J はセルの持つ面の数で、2次元四辺形セルであれば $J = 4$ 、3次元六面体セルであれば $J = 6$ となる。

2.2 アルゴリズム

2.2.1 概要

式 (5) を解くためには数値流束 $v_{n_{ij}} \int_{S_{ij}} H(\mathbf{x}, t) dS$ を離散化された VOF 値 ϕ_i より計算する必要がある。THINC 法では $H(\mathbf{x})$ は双曲線正接関数を用いた区分近似関数 $H_i(\mathbf{x})$ で局所的に近似される。

$$H_i(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\hat{\beta} \left(\mathcal{P}_i(x, y, z) + \hat{d}_{ij} \right) \right) \right) \quad (6)$$

$\hat{\beta}$ は $H_i(\mathbf{x})$ におけるジャンプ部分の幅、すなわち界面幅を決定するパラメータであり、 $\mathcal{P}_i(x, y, z) + \hat{d}_{ij} = 0$ は $\mathcal{P}_i(x, y, z)$ を二次多項式とする界面の方程式である。

ここで、六面体セル Ω_i の 8 つの頂点を \mathbf{x}_{ij} ($j = 1, 2, \dots, 8$) とし、グローバル座標系 $\mathbf{x} = (x, y, z)$ をセル Ω_i のローカル座標系 $\xi = (\xi, \eta, \zeta)$ ($0 \leq \xi, \eta, \zeta \leq 1$) に基底関数 $N_j = \frac{1}{4}(1 + \xi_j \xi)(1 + \eta_j \eta)(1 + \zeta_j \zeta)$ を用いて変換する。 ξ_j, η_j, ζ_j は j 番目の頂点がセル内のどこに位置しているかによって決まるもので、六面体であればローカル座標系の小さい方に位置する頂点は -1 を、大きい方に位置する頂点は $+1$ をとる。

$$\mathbf{x} = \sum_{j=1}^8 (\mathbf{x}_j N_j), \quad \mathbf{x} \in \Omega_i \quad (7)$$

これにより、区分近似関数 $H_i(\mathbf{x})$ と界面方程式もローカル座標 (ξ, η, ζ) を用いて次のように書き換えられる。

$$H_i(\xi) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\beta \left(\mathcal{P}_i(\xi, \eta, \zeta) + d_i \right) \right) \right) \quad (8)$$

$$\mathcal{P}_i(\xi, \eta, \zeta) + d_i = 0 \quad (9)$$

(3)によれば、式 (9) の $\mathcal{P}_i(\xi, \eta, \zeta)$ はローカル座標を用いた次の二次式で表現される。

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_i(\xi, \eta, \zeta) = & c^{(\xi)} a_{200} \xi^2 + c^{(\eta)} a_{020} \eta^2 + c^{(\zeta)} a_{002} \zeta^2 \\ & + c^{(\xi)} c^{(\eta)} a_{110} \xi \eta + c^{(\eta)} c^{(\zeta)} a_{011} \eta \zeta + c^{(\xi)} c^{(\zeta)} a_{101} \xi \zeta \\ & + a_{100} \xi + a_{010} \eta + a_{001} \zeta \end{aligned} \quad (10)$$

a_{srt} ($s, r, t = 0, 1, 2$ and $s + r + t \leq 2$) はセル Ω_i とそれに隣接するセルの VOF 値 ϕ_i から計算され、 c^p ($p = \xi, \eta, \zeta$) は 0 か 1 をとる (後述)。これにより、式 (8) に含まれる未知数は \hat{d}_{ij} のみとなる。 \hat{d}_{ij} は界面の位置を示す値であり、 $H_i(\xi, \eta, \zeta)$ をローカル変数でセル Ω_i に関して積分することにより得られる。

$$\int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 H_i(\xi, \eta, \zeta) d\xi d\eta d\zeta = \phi_i \quad (11)$$

\hat{d}_{ij} の計算により $H_i(\xi, \eta, \zeta)$ が一意に決まり界面が再構築されると、数値流束はガウス求積法から求まり、式 (5) によって VOF 値は更新される。

2.2.2 法線ベクトルと曲率テンソル

まず、界面セルの周囲に置かれた VOF 値を使って、セルの各頂点 (x_{ij}, y_{ij}, z_{ij}) ($j = 1, 2, \dots, 8$) における勾配 $\nabla \phi_{ij} = (\phi_{xij}, \phi_{yij}, \phi_{zij})$ およびその点での値 ϕ_{ij} を最小二乗法により求める。求める頂点の周囲に存在する K 個のセルにはその中心 (x_k, y_k, z_k) に ϕ_k が与えられているので、対象とする頂点における多項式を式 (12) で与えれば、式 (13) が最小となるような $\phi_{ij}, \phi_{xij}, \phi_{yij}, \phi_{zij}$ を求めればよい。

$$\tilde{\Phi}(x, y, z) = \phi_{ij} + \phi_{xij}x + \phi_{yij}y + \phi_{zij}z \quad (12)$$

$$\mathcal{I}_{ij} = \sum_{k=1}^K (\tilde{\Phi}(x_k, y_k, z_k) - \phi_k)^2 \quad (13)$$

各頂点の一回微分値のグローバル座標系 (x, y, z) からローカル座標系 (ξ, η, ζ) への変換は次式により扱われる。

$$\begin{cases} \phi_{\xi ij} = x_{\xi ij} \phi_{xij} + y_{\xi ij} \phi_{yij} + z_{\xi ij} \phi_{zij} \\ \phi_{\eta ij} = x_{\eta ij} \phi_{xij} + y_{\eta ij} \phi_{yij} + z_{\eta ij} \phi_{zij} \\ \phi_{\zeta ij} = x_{\zeta ij} \phi_{xij} + y_{\zeta ij} \phi_{yij} + z_{\zeta ij} \phi_{zij} \end{cases}$$

右辺の各係数は式 (7) より求めることができる。以上より、各頂点における勾配ベクトルが求まったので、次式により正規化する。

$$\begin{cases} \psi_{\xi ij} = \phi_{\xi ij} / |\hat{\nabla} \phi_{ij}| \\ \psi_{\eta ij} = \phi_{\eta ij} / |\hat{\nabla} \phi_{ij}| \\ \psi_{\zeta ij} = \phi_{\zeta ij} / |\hat{\nabla} \phi_{ij}| \end{cases} \quad (14)$$

$\hat{\nabla} \phi_{ij}$ は正規化前の勾配ベクトル $(\phi_{\xi ij}, \phi_{\eta ij}, \phi_{\zeta ij})$ である。セルを構成する各頂点の法線要素が求められたので、全ての点における勾配ベクトルの各要素の平均をとり、セル中心の法線ベクトル $(\psi_{\xi i}, \psi_{\eta i}, \psi_{\zeta i})$ を計算する。

$$\begin{cases} \psi_{\xi i} = \frac{1}{8} \sum_{j=1}^8 \phi_{\xi ij} / |\hat{\nabla} \phi_i| \\ \psi_{\eta i} = \frac{1}{8} \sum_{j=1}^8 \phi_{\eta ij} / |\hat{\nabla} \phi_i| \\ \psi_{\zeta i} = \frac{1}{8} \sum_{j=1}^8 \phi_{\zeta ij} / |\hat{\nabla} \phi_i| \end{cases} \quad (15)$$

但し、 $\hat{\nabla} \phi_i = \left(\frac{1}{8} \sum_{j=1}^8 \phi_{\xi ij}, \frac{1}{8} \sum_{j=1}^8 \phi_{\eta ij}, \frac{1}{8} \sum_{j=1}^8 \phi_{\zeta ij} \right)$ である。

また、セル中心における二回微分値は式 (14) で得られた正規化勾配ベクトルから中心差分で計算する。

$$\begin{cases} \psi_{\xi^2 i} = \frac{1}{4} (\psi_{\xi i2} + \psi_{\xi i3} + \psi_{\xi i6} + \psi_{\xi i7} - \psi_{\xi i1} - \psi_{\xi i4} - \psi_{\xi i5} - \psi_{\xi i8}) \\ \psi_{\eta^2 i} = \frac{1}{4} (\psi_{\eta i3} + \psi_{\eta i4} + \psi_{\eta i7} + \psi_{\eta i8} - \psi_{\eta i1} - \psi_{\eta i2} - \psi_{\eta i5} - \psi_{\eta i6}) \\ \psi_{\zeta^2 i} = \frac{1}{4} (\psi_{\zeta i5} + \psi_{\zeta i6} + \psi_{\zeta i7} + \psi_{\zeta i8} - \psi_{\zeta i1} - \psi_{\zeta i2} - \psi_{\zeta i3} - \psi_{\zeta i4}) \\ \psi_{\xi \eta i} = \frac{1}{4} (\psi_{\xi i3} + \psi_{\xi i4} + \psi_{\xi i7} + \psi_{\xi i8} - \psi_{\xi i1} - \psi_{\xi i2} - \psi_{\xi i5} - \psi_{\xi i6}) \\ \psi_{\eta \xi i} = \frac{1}{4} (\psi_{\eta i2} + \psi_{\eta i3} + \psi_{\eta i6} + \psi_{\eta i7} - \psi_{\eta i1} - \psi_{\eta i4} - \psi_{\eta i5} - \psi_{\eta i8}) \\ \psi_{\eta \zeta i} = \frac{1}{4} (\psi_{\eta i5} + \psi_{\eta i6} + \psi_{\eta i7} + \psi_{\eta i8} - \psi_{\eta i1} - \psi_{\eta i2} - \psi_{\eta i3} - \psi_{\eta i4}) \\ \psi_{\zeta \eta i} = \frac{1}{4} (\psi_{\zeta i3} + \psi_{\zeta i4} + \psi_{\zeta i7} + \psi_{\zeta i8} - \psi_{\zeta i1} - \psi_{\zeta i2} - \psi_{\zeta i5} - \psi_{\zeta i6}) \\ \psi_{\xi \eta i} = \frac{1}{4} (\psi_{\xi i5} + \psi_{\xi i6} + \psi_{\xi i7} + \psi_{\xi i8} - \psi_{\xi i1} - \psi_{\xi i2} - \psi_{\xi i3} - \psi_{\xi i4}) \\ \psi_{\zeta \xi i} = \frac{1}{4} (\psi_{\zeta i2} + \psi_{\zeta i3} + \psi_{\zeta i6} + \psi_{\zeta i7} - \psi_{\zeta i1} - \psi_{\zeta i4} - \psi_{\zeta i5} - \psi_{\zeta i8}) \end{cases} \quad (16)$$

式 (15) と (16) より, 法線ベクトル $(n_{\xi}, n_{\eta}, n_{\zeta})$ および曲率テンソル l_{pq} ($p, q = \xi, \eta, \zeta$) は次のように表される.

$$\begin{aligned} n_{\xi} &= \psi_{\xi i}, \quad n_{\eta} = \psi_{\eta i}, \quad n_{\zeta} = \psi_{\zeta i} \\ l_{\xi\xi} &= \psi_{\xi^2 i}, \quad l_{\eta\eta} = \psi_{\eta^2 i}, \quad l_{\zeta\zeta} = \psi_{\zeta^2 i} \\ l_{\xi\eta} &= \frac{1}{2}(\pi_{\xi\eta i} + \psi_{\eta\xi i}) \\ l_{\eta\zeta} &= \frac{1}{2}(\pi_{\eta\zeta i} + \psi_{\zeta\eta i}) \\ l_{\zeta\xi} &= \frac{1}{2}(\pi_{\zeta\xi i} + \psi_{\xi\zeta i}) \end{aligned} \quad (17)$$

2.3 THINC 関数

前節で導出した離散化された VOF 値より計算された各情報によって, 前述の二次多項式 (10) にはセル中心 $cc : (\xi, \eta, \zeta) = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ において以下の制限を課す.

$$\begin{cases} \left. \frac{\partial \mathcal{P}_i}{\partial \xi} \right|_{cc} = n_{\xi}, \quad \left. \frac{\partial \mathcal{P}_i}{\partial \eta} \right|_{cc} = n_{\eta}, \quad \left. \frac{\partial \mathcal{P}_i}{\partial \zeta} \right|_{cc} = n_{\zeta} \\ \left. \frac{\partial^2 \mathcal{P}_i}{\partial \xi^2} \right|_{cc} = l_{\xi\xi}, \quad \left. \frac{\partial^2 \mathcal{P}_i}{\partial \eta^2} \right|_{cc} = l_{\eta\eta}, \quad \left. \frac{\partial^2 \mathcal{P}_i}{\partial \zeta^2} \right|_{cc} = l_{\zeta\zeta} \\ \left. \frac{\partial^2 \mathcal{P}_i}{\partial \xi \partial \eta} \right|_{cc} = l_{\xi\eta}, \quad \left. \frac{\partial^2 \mathcal{P}_i}{\partial \eta \partial \zeta} \right|_{cc} = l_{\eta\zeta}, \quad \left. \frac{\partial^2 \mathcal{P}_i}{\partial \xi \partial \zeta} \right|_{cc} = l_{\xi\zeta} \end{cases} \quad (18)$$

上記の制限条件から, 式 (10) の各係数は次式により与えられる⁽³⁾.

$$\begin{cases} a_{100} = n_{\xi} - \frac{1}{2} \left(c^{(\xi)} l_{\xi\xi} + c^{(\xi)} c^{(\eta)} l_{\xi\eta} + c^{(\xi)} c^{(\zeta)} l_{\xi\zeta} \right) \\ a_{010} = n_{\eta} - \frac{1}{2} \left(c^{(\eta)} l_{\eta\eta} + c^{(\xi)} c^{(\eta)} l_{\xi\eta} + c^{(\eta)} c^{(\zeta)} l_{\eta\zeta} \right) \\ a_{001} = n_{\zeta} - \frac{1}{2} \left(c^{(\zeta)} l_{\zeta\zeta} + c^{(\xi)} c^{(\zeta)} l_{\xi\zeta} + c^{(\eta)} c^{(\zeta)} l_{\eta\zeta} \right) \\ a_{110} = c^{(\xi)} c^{(\eta)} l_{\xi\eta}, \quad a_{011} = c^{(\eta)} c^{(\xi)} l_{\eta\xi}, \quad a_{101} = c^{(\xi)} c^{(\zeta)} l_{\xi\zeta} \\ a_{200} = \frac{1}{2} c^{(\xi)} l_{\xi\xi}, \quad a_{020} = \frac{1}{2} c^{(\eta)} l_{\eta\eta}, \quad a_{002} = \frac{1}{2} c^{(\zeta)} l_{\zeta\zeta} \end{cases} \quad (19)$$

式 (10) の各係数が決まったので, 式 (8) に含まれる唯一の未知数 d_i を式 (11) の計算によって求める. この空間積分は一次元では \tanh 関数の厳密積分で計算できるが, 二次元以上の計算では数値積分が用いられる.

本稿では, 式 (11) の積分により d_i を計算する手順を場合分けして以下に簡潔にまとめる. 詳細は⁽³⁾を参照されたい.

case1: $|n_{\xi}| = \max(|n_{\xi}|, |n_{\eta}|, |n_{\zeta}|)$

- $c^{(\xi)} = 0, c^{(\eta)} = c^{(\zeta)} = 1$
- ξ 方向に厳密積分を行う.

$$\begin{aligned} \bar{H}_i^{\xi}(\eta, \zeta) &= \int_0^1 H_i(\xi, \eta, \zeta) d\xi \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\beta a_{100}} \ln \left(\frac{\cosh(\beta(\mathcal{P}_i(1, \eta, \zeta) + d_i))}{\cosh(\beta(\mathcal{P}_i(0, \eta, \zeta) + d_i))} \right) \right) \end{aligned} \quad (20)$$

- η, ζ 方向にガウス求積で積分する. (η_p, ζ_q) は積分点, ω_{pq} は重みである.

$$\overline{\bar{H}_i^{\xi}} = \int_0^1 \int_0^1 \bar{H}_i^{\xi}(\eta, \zeta) d\eta d\zeta = \sum_{p,q=1}^m \omega_{pq} \bar{H}_i^{\xi}(\eta_p, \zeta_p) \quad (21)$$

- 積分結果が VOF 値となるように d_i を決定する.

$$\sum_{p,q=1}^m \omega_{pq} \bar{H}_i^{\xi}(\eta_p, \zeta_p) = \phi_i \quad (22)$$

case2: $|n_{\eta}| = \max(|n_{\xi}|, |n_{\eta}|, |n_{\zeta}|)$

- $c^{(\eta)} = 0, c^{(\xi)} = c^{(\zeta)} = 1$
- η 方向に厳密積分を行う.

$$\begin{aligned} \bar{H}_i^{\eta}(\xi, \zeta) &= \int_0^1 H_i(\xi, \eta, \zeta) d\eta \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\beta a_{010}} \ln \left(\frac{\cosh(\beta(\mathcal{P}_i(\xi, 1, \zeta) + d_i))}{\cosh(\beta(\mathcal{P}_i(\xi, 0, \zeta) + d_i))} \right) \right) \end{aligned} \quad (23)$$

- ξ, ζ 方向にガウス求積で積分する. (ξ_p, ζ_q) は積分点, ω_{pq} は重みである.

$$\overline{\bar{H}_i^{\eta}} = \int_0^1 \int_0^1 \bar{H}_i^{\eta}(\xi, \zeta) d\xi d\zeta = \sum_{p,q=1}^m \omega_{pq} \bar{H}_i^{\eta}(\xi_p, \zeta_p) \quad (24)$$

- 積分結果が VOF 値となるように d_i を決定する.

$$\sum_{p,q=1}^m \omega_{pq} \bar{H}_i^{\eta}(\xi_p, \zeta_p) = \phi_i \quad (25)$$

case3: $|n_{\zeta}| = \max(|n_{\xi}|, |n_{\eta}|, |n_{\zeta}|)$

- $c^{(\zeta)} = 0, c^{(\xi)} = c^{(\eta)} = 1$
- ζ 方向に厳密積分を行う.

$$\begin{aligned} \bar{H}_i^{\zeta}(\xi, \eta) &= \int_0^1 H_i(\xi, \eta, \zeta) d\zeta \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\beta a_{001}} \ln \left(\frac{\cosh(\beta(\mathcal{P}_i(\xi, \eta, 1) + d_i))}{\cosh(\beta(\mathcal{P}_i(\xi, \eta, 0) + d_i))} \right) \right) \end{aligned} \quad (26)$$

- ξ, η 方向にガウス求積で積分する. (ξ_p, η_q) は積分点, ω_{pq} は重みである.

$$\overline{\bar{H}_i^{\zeta}} = \int_0^1 \int_0^1 \bar{H}_i^{\zeta}(\xi, \eta) d\xi d\eta = \sum_{p,q=1}^m \omega_{pq} \bar{H}_i^{\zeta}(\xi_p, \eta_p) \quad (27)$$

- 積分結果が VOF 値となるように d_i を決定する.

$$\sum_{p,q=1}^m \omega_{pq} \bar{H}_i^{\zeta}(\xi_p, \eta_p) = \phi_i \quad (28)$$

2.4 体積率の更新

セル Ω_i の区分近似関数 $H_i(\xi, \eta, \zeta)$ が得られたら, VOF 値を更新する. 式 (5) を離散的に表現すると次式に書きかわる.

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = -\frac{1}{\Delta V_i} \sum_{j=1}^J (v_{n_{ij}} \Delta S_{ij} \langle H_{i_{up}} \rangle_{S_{ij}}) + \frac{\phi_i}{\Delta_i} \sum_{j=1}^J (v_{n_{ij}} \Delta S_{ij}) \quad (29)$$

右辺第二項に含まれる $\langle H_{i_{up}} \rangle_{S_{ij}}$ は, セル境界面 S_{ij} の上流側の H を利用して計算される面平均値である. したがって, 添字 i_{up} は次のように場合分けされる.

$$i_{up} = \begin{cases} i & (v_{n_{ij}} \geq 0) \\ ij & (\text{その他}) \end{cases} \quad (30)$$

j は面番号であり, 二次元であれば $j = 1, 2, 3, 4$, 三次元であれば $j = 1, 2, \dots, 6$ となる. また, 上式における添字 ij は面 S_{ij} を挟んでセル Ω_i の上流側に隣接するセル, すなわち Ω_i と面 S_{ij} を共有するセルを指定する.

2.5 スキーム検証

六面体非構造格子を用いて三次元切り欠き付き球体の回転を計算し、THINC 法の性能試験を行った。VOF 値の初期分布は次式で与えた。

$$H(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & (x-0.5)^2 + (y-0.75)^2 + (z-0.5)^2 \leq 0.15^2 \\ & \wedge (|x-0.5| \geq 0.025 \vee y > 0.725) \\ 0 & \text{(上式以外)} \end{cases} \quad (31)$$

また、回転速度場は $\mathbf{u} = (y-0.5, 0.5-x, 0)$ で与え、 $CFL \leq 0.5$ で計算した。図 1 に計算領域とそのメッシュ断面を示し、図 2 に一回転後の計算結果を示す。構造、非構造ともに元の形状を非常に精度良く維持できていることが確認できた。

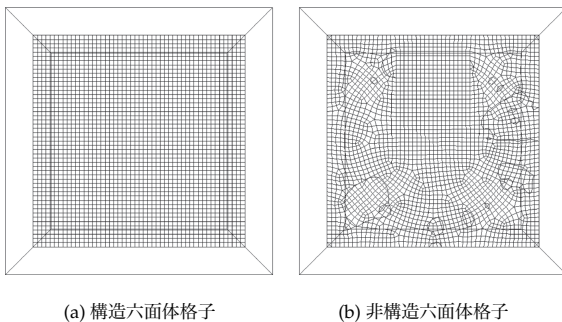


Fig. 1: 計算領域

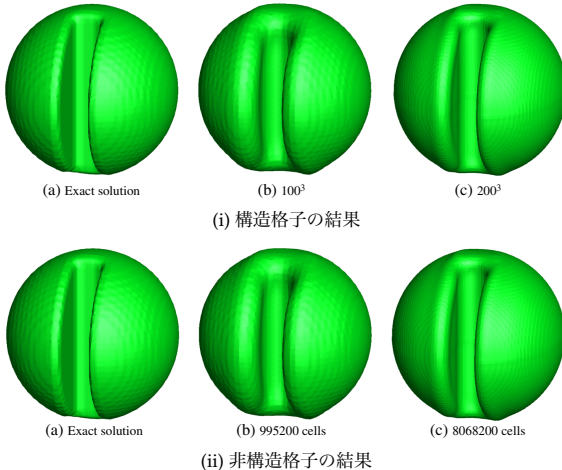


Fig. 2: 三次元固体回転テストの $t = 2\pi$ における計算結果

3. thincFoam の構成

本研究ではオープンソース CFD ツールボックスの OpenFOAM フレームワーク (version 2.3.0) を用いて次節で紹介する各種数値検証を行った。OpenFOAM (Open Source Field Operation and Manipulation) は流体解析をはじめ、化学反応や熱伝導、燃焼、経済など様々な分野の支配方程式を用いてシミュレーションが行える C++ 言語のライブラリー群である。プリ・ポスト処理も含めたパッケージが OpenFOAM Foundation より提供され

ている⁽⁶⁾。

OpenFOAM には非圧縮多相流解析ソルバーである interFoam が実装されており、本研究では interFoam の界面追跡法を前節で示した THINC 法に書き換えることで新たな thincFoam ソルバーを作成した。interFoam の支配方程式は以下の連続の式および NS 方程式である⁽⁷⁾。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (32)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p + [\nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{u}) + \nabla \mathbf{u} \cdot \nabla \mu] + \rho \mathbf{g} + \int_{\Gamma} \sigma \kappa \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_s) \mathbf{n} d\Gamma(\mathbf{x}_s) \quad (33)$$

液体と気体の密度および粘度を $\rho_l, \nu_l, \rho_g, \nu_g$ として、 $\rho = \rho_l \phi + \rho_g(1 - \phi)$, $\mu = \mu_l \phi + \mu_g(1 - \phi)$ となる。また、 Γ は気液界面を示し、 $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_s)$ は三次元ディラックデルタ関数である。interFoam では表面張力の計算に Brackbill らの continuum surface force (CSF) モデル⁽⁸⁾が採用されている。

4. 数値検証

thincFoam の性能試験として、本研究では低速液ジェットとプラトー・レイリー不安定性に関する二つの液体分裂の物理現象シミュレーションを行った。

4.1 低速液ジェット

Clanet らの低速液ジェットに関する実験的研究により、静止気体中に放出された低速の液ジェットには We 数に応じて図 3 に示す三種類の分裂モードが存在することが知られている⁽⁹⁾。

各分裂モードは左から periodic dripping (PD), chaotic dripping (CD), jetting (J) と呼ばれ、それぞれ以下の特徴を持っている。

PD: We 数が極めて低い領域で観測される分裂モードである。液柱はノズル出口からおおよそ 1 直径分下流で周期的に分裂し、分裂後の液滴の質量は一定となる。

CD: 流速がある速度を超えると無秩序に液柱が分裂するようになる。分裂位置は刻々と変化し、おおよそ数直径分下流に移動する。これにより分裂により生じた液滴の質量も常に変化する。

J: 流速の増加に伴い、急激に分裂位置がノズル出口から 10 直径分以上下流に移動する。

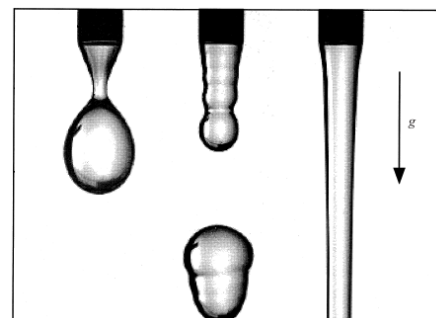


Fig. 3: 低速液ジェット⁽⁹⁾

本研究ではノズル直径を $D_0 = 1.2\text{mm}$ とし、流速 $V_j = 0.2000, 0.4337, 0.6322, 0.8167, 0.9987\text{m/s}$ の 5 ケースのシミュレーションを行った。物性値は液体が密度 $\rho = 1000\text{kg/m}^3$ 、動粘度 $\nu = 0.001\text{m}^2/\text{s}$ 、気体は $\rho = 1\text{kg/m}^3$ 、 $\nu = 1.48 \times 10^{-5}\text{m}^2/\text{s}$ とした。また、 $\text{CFL}=0.1$ で計算した。

$V_j = 0.2000, 0.4337, 0.6322\text{m/s}$ は実験により得られている流速と分裂モードの関係よりそれぞれ PD, CD, J モードに属することが知られているが、図 4 に示す *thinFoam* による計算結果からもそれぞれの分裂モードを確認することができた。また、 $V_j = 0.6322, 0.8167, 0.9987\text{m/s}$ に関してはノズル出口から分裂位置までの分裂距離 L_{bu} を計測し、図 5 に流速と分裂位置の関係を示した。これらの速度域のジェットはレイリー分裂に属するため、流速と分裂距離は比例関係となることが知られており、*thinFoam* による解析結果が非常に良く一致していることが確認できた。

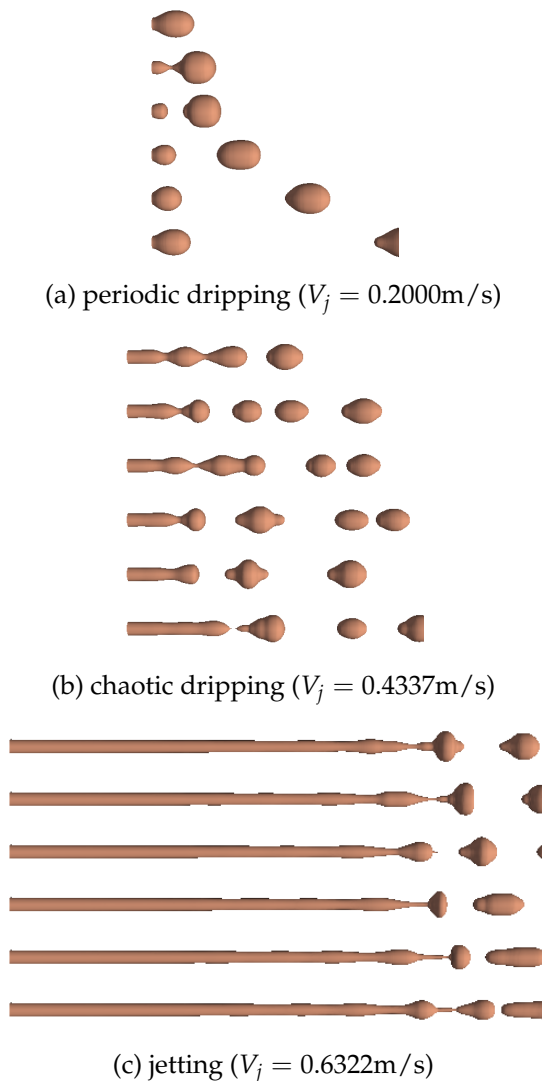


Fig. 4: *thinFoam* による解析結果

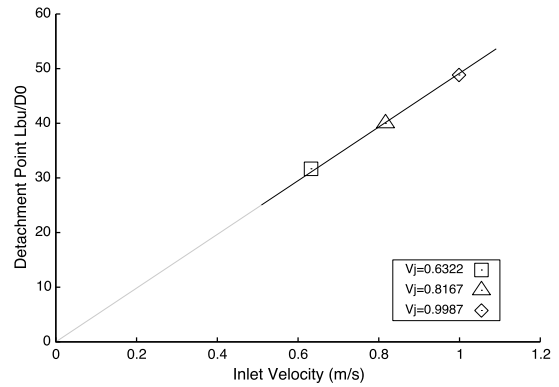


Fig. 5: 流速と分裂位置の関係

4.2 プラトー・レイリー不安定性

無重力下にくびれた形状の液柱を配置すると、プラトー・レイリー不安定性により表面張力が変形を加速させ液柱を分裂させる⁽¹⁰⁾。変形が進み分裂直前の液柱には細い部分と太い部分の間に曲率の大きな部分が存在するため、結果液柱はメインドロップレットとサテライトドロップレットと呼ばれる大小二つの液滴に分裂する。この現象は解析的には直径方向に $R = R_0 + \eta_0 \sin kz$ の変動を与える場合、 $kR_0 < 1$ であれば分裂するとされている。 k は R_0 により無次元化した波数であり $k = \frac{2\pi R_0}{\lambda}$ で表される。 k が λ に反比例していることから、 k が小さくなるほど計算領域を広く長く用意する必要があり、また、全体の体積が増えるためサテライトドロップレットのサイズが大きくなることが実験より確認されている⁽¹¹⁾。

本研究では *thinFoam* によって $k = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$ の 5 ケースの計算を行った。物性値は低速液ジェットの場合と同様、液体に $\rho = 1000\text{kg/m}^3$ 、 $\nu = 0.001\text{m}^2/\text{s}$ 、気体に $\rho = 1\text{kg/m}^3$ 、 $\nu = 1.48 \times 10^{-5}\text{m}^2/\text{s}$ を使い、初期変動は $R_0 = 0.14\text{m}$ 、 $\eta_0 = 0.02\text{m}$ として与えた。また、直径方向と直交する z 方向には周期的境界条件を適用し、変動の一波長分だけを計算した。

$k = 0.7$ における液柱の時間変化と $t = 40\text{s}$ での圧力コounter図を図 6 に示す。時間と共に変形が加速していく様子と、分裂によって大小二つの液滴が生成されたことが確認できた。また、 k と液滴サイズの関係を表した図 7 より、 *thinFoam* による解析結果が解析解、実験結果に非常に良く一致したことがわかった。

5. まとめ

本論文では代数的界面再構築法である THINC 法を OpenFOAM プラットフォームに実装し、既存の *interFoam* ソルバーの界面追跡スキームを THINC 法に変更した *thinFoam* ソルバーを作成した。また、 *thinFoam* を用いて低速液ジェットとプラトー・レイリー不安定性の数値実験を行い、解析解および実験結果との比較から液体の分裂現象を正確に解析することができることが確認できた。今後は、噴霧等のより複雑な分裂現象への適用を行い、分裂機構の解明を目指す。

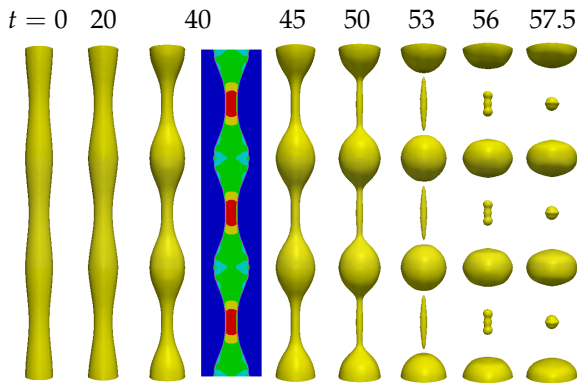


Fig. 6: thincFoam による解析結果 ($k = 0.7$)

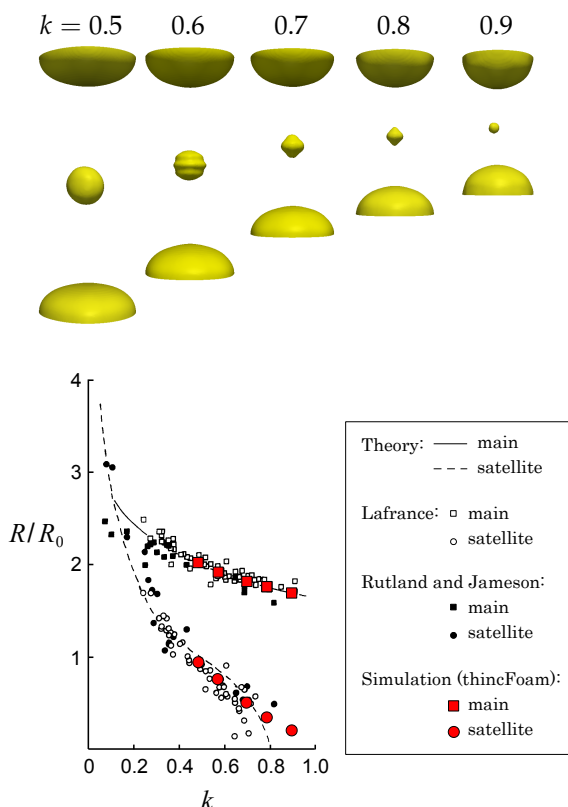


Fig. 7: 各液滴のサイズ⁽¹¹⁾⁽¹²⁾

参考文献

- (1) Scardovelli R, Zaleski S. Analytical relations connecting linear interfaces and volume fractions in rectangular grids. *Journal of Computational Physics* 2000; **164**: 228-237
- (2) Xiao F, Honma Y, Kono Y. A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 2005; **48**: 1023-1040
- (3) Ii S, Sugiyama K, Takeuchi S, Takagi S, Matsumoto Y, Xiao F. An interface capturing method with a continuous function: The THINC method with multi-dimensional reconstruction. *Journal of Computational Physics* 2012; **231**: 2328-2358
- (4) Ii S, Xie B, Xiao F. An interface capturing method with a continuous function: the THINC method on unstructured triangular and tetrahedral meshes. *Journal of Computational Physics* 2014; **259**: 260-269
- (5) Xie B, Ii S, Xiao F. An efficient and accurate algebraic interface capturing method for unstructured grids in 2 and 3 dimensions: The THINC method with quadratic surface representation. *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 2014; **76**: 1025-1042
- (6) OpenFOAM Foundation. OpenFOAM User Guide Version 2.3.0. 2014
- (7) Deshpande S, Anumolu L, Trujillo M. Evaluation performance of the two-phase flow solver interFoam. *Computational Science & Discovery* 2012; **5**: 014016
- (8) Brackbill U, Kothe B, Zemach C. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics* 1992; **100**: 335-354
- (9) Clanet C, Lasheras J. Transition from dripping to jetting. *Journal of Fluid Mechanics* 1999; **383**: 307-326
- (10) Rayleigh L. On the instability of jet. *Proceedings of the London Mathematical Society* 1878; **s1-10 (1)**: 4-13
- (11) Lafrance P. Nonlinear breakup of a laminar liquid jet. *Physics of Fluids* 1975; **18**: 428-432
- (12) Rutland D, Jameson G. Theoretical prediction of the sizes of drops formed in the breakup of capillary jets. *Chemical Engineering Science* 1970; **25**: 1689-1698