

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

Interface Capturing Method Based on Analytical Integration of Heaviside Function

○ 中西 為雄, 山形大・院, 〒992-8510 米沢市城南 4-3-16, E-mail: tameo@yz.yamagata-u.ac.jp
Tameo Nakanishi, Yamagata University, 4-3-16 Johan, Yonezawa 992-8510, Japan

We present a new method of using multi-dimensional Heaviside function as the indicator function for interface capturing. Noticing that the single variable Heaviside function is analytically and repetitively integrable, the volume integrations appearing in the cell average and the fluxes of the multi-dimensional Heaviside function connected by a single parametric variable are carried out analytically. The new method is equivalent to the PLIC method but excludes geometric reconstructions, appealing in computational efficiency and algorithmic simplicity. The new method is simple and efficient, can preserve sharp interfaces as compared to the smoothed indicator function VOF methods. Numerical results are provided for simple advection tests and the dam-break problem.

1. はじめに

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^(2,5)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 値から界面を決定するために、幾何学的再構築をするが必要である。

代数型 VOF 法は指標関数(indicator function)に基づく VOF 法とも呼ばれ、THINC / WLIC 法^(6,7) や MTHINC 法⁽⁸⁻¹⁰⁾はそれらの代表と言える。これらの方法は一次元ないし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ている。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。しかし、双曲線正接関数は、一次元の積分が解析的に求まるものの、初等関数でその体積分を解析的に表すことができない。そのために、一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。既存の代数型 VOF 法では、界面の厚さを制御するシャープネスパラメータを導入しており、大きなパラメータを使用すると近似積分の精度が低下する。

本報告はこれらの問題を解消する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を提案する。

2. 代数型 VOF 法の一般的な計算手順

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。

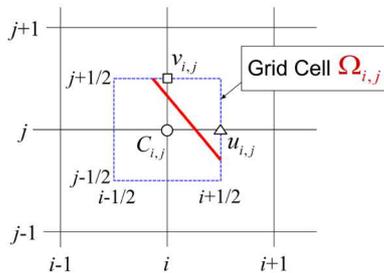


Fig. 1 Staggered grid cell.

図 1 に示すスターガード格子を使用し、各格子セル (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。下記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、 $\mathbf{u} = (u, v)$ はセル境界の中心で定義される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に亘る指標関数の積分で計算される。例えば、 $u_{i,j} \geq 0, v_{i,j} \geq 0$ の場合、これらは次のように表される。

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

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

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

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

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

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

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

トルである

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

C の勾配の近似に中心差分が使われる。

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 F_x, F_y を求めるところにある。

3. ヘビサイド関数の解析多重積分に基づく代数型 VOF 法⁽¹⁾

我々はヘビサイド関数を指標関数 $H_0(\tau)$ に選ぶ。

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

H_0 の τ に関する逐次積分関数をそれぞれ H_1, H_2, H_3 と置く。

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

$$H_2(\tau) = \int H_1(\tau) d\tau \quad (12)$$

$$H_3(\tau) = \int H_2(\tau) d\tau \quad (13)$$

H_1, H_2, H_3 は下記のように解析的に計算できる。

$$H_1 = \tau H_0(\tau), \quad H_2 = \frac{1}{2} \tau^2 H_0(\tau), \quad H_3 = \frac{1}{6} \tau^3 H_0(\tau) \quad (14)$$

なお、二次元問題の場合、 H_2 までのみが必要である。

$n_x n_y \neq 0$ 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(15)で表すことができる。

$$C_{i,j} = \frac{1}{n_x n_y} (H_2^{++} - H_2^{+-} - H_2^{-+} + H_2^{--}) \quad (15)$$

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

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

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

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

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

$n_x = 0$ または $n_y = 0$ の場合、0 である単位法線ベクトルの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(15)をそのまま使うことができる。この場合、式(15)は単位法線ベクトルの非零成分方向の一変数積分に収束することを数学的に証明できる。

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(15)から界面位置指標 d を求めることができる。式(15)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は簡

単であるが、界面を挟んで H_2 中の H_0 の値 (式(14)参照) が0または1にスイッチングするので、係数のケース分けが必要がある。係数をケース分けする代わりに、下記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。

$$d := d - \frac{f(d)}{f'(d)} \quad (16)$$

$$f(d) = H_2^{++} - H_2^{+-} - H_2^{-+} + H_2^{--} - n_x n_y C_{i,j}$$

$$f'(d) = H_1^{++} - H_1^{+-} - H_1^{-+} + H_1^{--}$$

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、

$$F_{x,i+1/2,j} = \frac{\Delta x \Delta y}{n_x n_y} \left[\begin{aligned} & H_2 \left(\frac{n_x}{2} + \frac{n_y}{2} + d \right) \\ & - H_2 \left(\frac{n_x}{2} - \frac{n_y}{2} + d \right) \\ & - H_2 \left(\frac{n_x}{2} - \lambda_x + \frac{n_y}{2} + d \right) \\ & + H_2 \left(\frac{n_x}{2} - \lambda_x - \frac{n_y}{2} + d \right) \end{aligned} \right] \quad (17)$$

上記の方法は代数型 VOF 法でありながら、本質的にPLIC法と等価である。これ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。

4. 気液二相流の計算法

気液二相流の支配方程式は下記のようになる。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (18)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\text{Re}_l} \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) - \mathbf{e} \quad (19)$$

$$\frac{\partial H_0}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} H_0) = H_0 (\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (20)$$

$$C = \int_{\Omega_{i,j}} H_0(\xi, \eta, d) d\xi d\eta \quad (21)$$

$$\rho = \rho_a + (\rho_l - \rho_a) C \quad (22)$$

$$\mu = \mu_a + (\mu_l - \mu_a) C \quad (23)$$

$$\mathbf{e} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \text{Re}_l = \frac{\rho_l (\sqrt{gL}) L}{\mu_l}$$

ここで、 p, ρ, μ はそれぞれ圧力、密度および粘度であり、 Re_l はレイノルズ数を表す。 \mathbf{e} は重力方向の単位ベクトルである。

上記支配方程式に対する時間積分法を下記に示す。

$$C^n \rightarrow C^{n+1} \text{ by the new method} \quad (24)$$

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = \frac{1}{\text{Re}_l} \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mu (\nabla \mathbf{u}^* + \nabla \mathbf{u}^{*T}) \quad (25)$$

$$\frac{\mathbf{u}^{**} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} + \mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^* = -\mathbf{e} \quad (26)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla p \right) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{u}^{**}}{\Delta t} \quad (27)$$

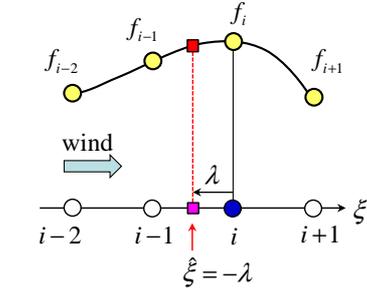
$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^{**}}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla p \quad (28)$$

式(26)を方向分離法で計算する。例えば、 u について

$$\frac{\tilde{u} - u^*}{\Delta t} + u^n \frac{\partial u^*}{\partial x} = 0 \quad (29)$$

$$\frac{u^{**} - \tilde{u}}{\Delta t} + v^n \frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} = 0 \quad (30)$$

各方向の1次元移流方程式に Fig.2 に示す semi-Lagrangian 法を適用する。例えば、 $\lambda = u_i \Delta t / \Delta x \geq 0$ の場合、上流側補間点 $\xi = -\lambda$ での移流関数 f の値を、 $(f_{i-2}, f_{i-1}, f_i, f_{i+1})$ を用いて補間する。



$$f_{\min} = \min(f_{i-1}, f_i)$$

$$f_{\max} = \max(f_{i-1}, f_i)$$

$$f_i^{\text{new}} = \min\left(\max\left(f(\xi^{\hat{)}, f_{\min}\right), f_{\max}\right)$$

Fig. 2 Upwind interpolation by cubic polynomial.

補間に用いる3次多項式を以下に示す。

$$f(\xi) = \sum_{k=i-2}^{i+1} f_k w_k \quad (31)$$

$$w_{i-2} = -\frac{1}{6}(\xi+1)\xi(\xi-1)$$

$$w_{i-1} = \frac{1}{2}(\xi+2)\xi(\xi-1)$$

$$w_i = -\frac{1}{2}(\xi+2)(\xi+1)(\xi-1)$$

$$w_{i+1} = \frac{1}{6}(\xi+2)(\xi+1)\xi$$

式(27), (28)中の諸項の近似に下記の中心差分公式が適用される。

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} \right) \Bigg|_{i,j} = \frac{2}{\Delta x^2} \left(\frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\rho_{i+1,j} + \rho_{i,j}} - \frac{p_{i,j} - p_{i-1,j}}{\rho_{i,j} + \rho_{i-1,j}} \right) \quad (32)$$

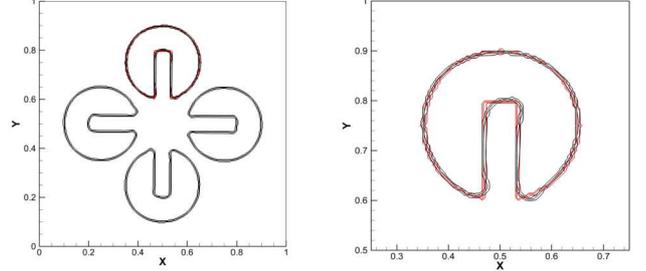
$$(\nabla \cdot \mathbf{u}^{**})_{i,j} = \frac{u_{i,j}^{**} - u_{i-1,j}^{**}}{\Delta x} + \frac{v_{i,j}^{**} - v_{i,j-1}^{**}}{\Delta y} \quad (33)$$

$$\frac{u_{i,j}^{(n+1)} - u_{i,j}^{**}}{\Delta t} = -\frac{2}{\Delta x} \cdot \frac{p_{i+1,j} - p_{i,j}}{\rho_{i+1,j}^{(n+1)} + \rho_{i,j}^{(n+1)}} \quad (34)$$

$$\frac{v_{i,j}^{(n+1)} - v_{i,j}^{**}}{\Delta t} = -\frac{2}{\Delta y} \cdot \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j}}{\rho_{i,j+1}^{(n+1)} + \rho_{i,j}^{(n+1)}} \quad (35)$$

5. 解析結果

以下に新しい方法による計算結果を示す。

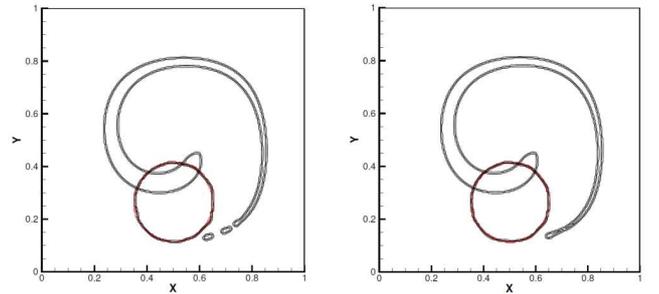


(a) During first cycle

(b) After four cycles.

Fig. 3 Zalesak's solid rotation test on 200×200 meshes, initial interface (red lines), numerical solution (black lines).

まず、Fig.3 に Zalesak の剛体回転問題⁽¹²⁾の計算結果を示す。 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。図は C の等高線 (レベル: 0.05, 0.5, 0.95) を示し、赤線は初期の等高線を示す。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ほぼ完全に一致する。4回転後の界面の歪みも非常に小さい。



(a) $\Delta t = \Delta x$

(b) $\Delta t = 0.5 \Delta x$

Fig. 4 Evolution of interfaces in a periodic ($T=20$) single vortex velocity field on 200×200 meshes.

Fig.4 に単一周期渦の速度場における円の変形問題⁽¹³⁾の計算結果を示す。なお、単一周の流れ関数を次式で与えた。

$$\psi = \frac{1}{\pi} \cos \frac{\pi t}{T} \sin \pi(x-0.5) \sin \pi(y-0.5) \quad (36)$$

ここで $T = 20$ は単一周の周期である。厳密解では $t = T/2$ まで円は螺旋状に引き伸ばされ、 $t = T$ で元の形状に戻る。

Fig.4(a)の $\Delta t = \Delta x$ での計算で時間分解能が不十分のため、最大変形時刻($t = T/2$)で界面先端の分断が計算された。これが回復時刻($t = T$)での界面の計算精度に影響を及ぼしている。Fig.4(b)の $\Delta t = 0.5 \Delta x$ での計算では、計算精度が向上している。数値計算では、解像度不足によって失われた界面情報を再び回復することは原理的にできないことに注意されたい。

Fig.5 にダムブレイク問題⁽¹⁴⁾の計算結果を示す。左から右に、上段から下段に、代表的な時刻での時系列の順に並べてある。 80×160 の等間隔格子を使用し、初期液体領域に対応する左下の白い細線の矩形は 40×20 の格子で解像している。計算では、水

と空気に対応する無次元密度, 粘度及び, 初期液体領域の幅に基づくレイノルズ数を下記のように与えている.

$$\rho_l = 1, \rho_a = 0.0012, \mu_l = 1, \mu_a = 0.018, \text{Re}_l = 10000$$

この問題では, 瞬間的に大きい無次元速度が計算されるので, 下記の可変時間刻み幅を用いている.

$$\Delta t = \frac{0.05\Delta x}{U_{\max} + 1} \quad (37)$$

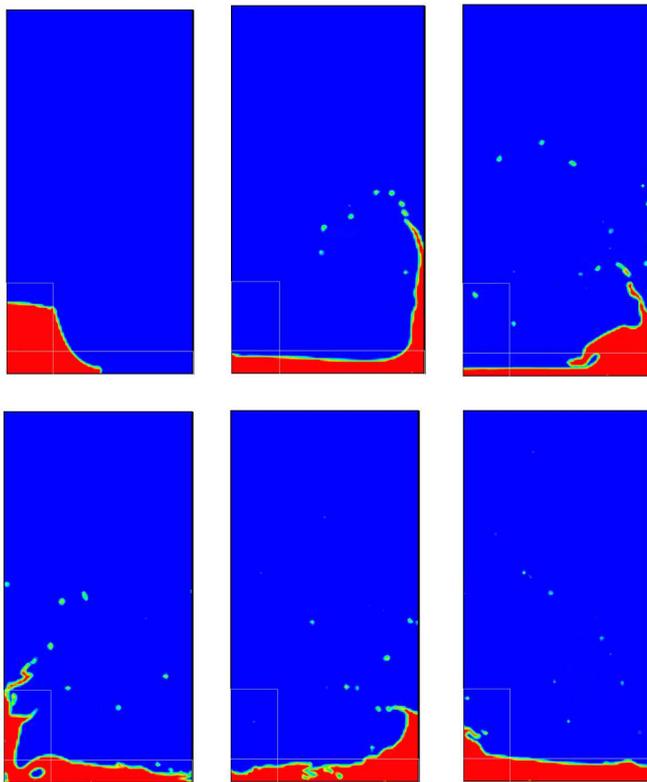


Fig. 5 Time series of interfaces of the dam break flow.

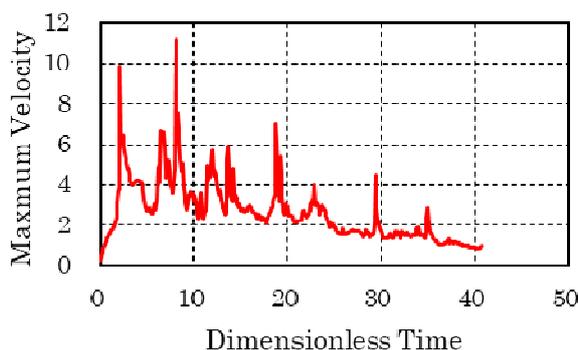


Fig. 6 Maximum velocity versus time.

Fig.6 に解析領域における流速の最大値の時間履歴を示す. 無次元時間 $t = 8$ 当たりで, 流速の最大値が 11 程度に達していることがわかる. 計算で発生する体積誤差を次式で計り, 全ての計算において, $V_{\text{error}} < 10^{-4}$ であることを確認した.

$$V_{\text{error}} = \left| \frac{\sum C_{i,j}^n}{\sum C_{i,j}^0} - 1 \right| \quad (38)$$

解析結果はダムブレイク流れの基本的特徴をよく再現できていると言える.

6. まとめ

代数型 VOF 法の一般的な計算手順, 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の基本的な考え方および気液二相流への応用について示した.

参考文献

- (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) Youngs, D. L., "An interface tracking method for a 3d Eulerian hydrodynamics code", Atomic Weapons Research Establishment (AWRE) Technical Report (44/92) (1984) 35.
- (4) Rider, W. J. and Kothe, D. B., "Reconstructing volume tracking", Journal of Computational Physics 141 (2) (1998) 112-152.
- (5) Scardovelli, R. and Zaleski, S., "Analytical relations connecting linear interfaces and volume fractions in rectangular grids", Journal of Computational Physics 164 (1) (2000) 228-237.
- (6) Xiao, F., Honma, Y., and Kono, T., "A simple algebraic interface capturing scheme using hyperbolic tangent function", International Journal for Numerical Methods in Fluids 48 (9) (2005) 1023-1040.
- (7) Yokoi, K., "Efficient implementation of THINC scheme: a simple and practical smoothed VOF algorithm", Journal of Computational Physics 226 (2) (2007) 1985-2002.
- (8) Ii, S., Sugiyama, K., Takeuchi, S., Takagi, S., Matsumoto, Y. and Xiao, F., "An interface capturing method with a continuous function: The THINC method with multi-dimensional reconstruction", Journal of Computational Physics 231 (5) (2012) 2328-2358.
- (9) Ii, S., Xie, B. and Xiao, F., "An interface capturing method with a continuous function: The THINC method on unstructured triangular and tetrahedral meshes", Journal of Computational Physics 259 (2014) 260-269.
- (10) Xie, B., and Xiao, F., "Toward efficient and accurate interface capturing on arbitrary hybrid unstructured grids: The THINC method with quadratic surface representation and Gaussian quadrature", Journal of Computational Physics 349 (2017) 415-440.
- (11) Nakanishi, T., "Analytical Multidimensional Integration of Heaviside Function for Interface Tracking", ICCFD10-220, Proc. ICCFD10, Barcelona, (2018).
<http://www.iccfd.org/iccfd10/papers/ICCFD10-220-Paper.pdf>
- (12) Zalesak, S. T., "Fully multidimensional flux-corrected transport algorithms for fluids, Journal of Computational physics 31 (3) (1979) 335-362.
- (13) Rudman, M., "Volume-tracking methods for interfacial flow calculations", International journal for numerical methods in fluids 24 (7) (1997) 671-691.
- (14) Martin, J. C. and Moyce, W. J. "An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane", Philos. Trans. Roy. Soc. London, Ser. A, 244 (1952) 312-324.