

密度関数法による自由水表面流れ解析 のための体積補正法の開発

DEVELOPMENT OF VOLUME CORRECTION METHOD FOR FREE SURFACE
FLOW ANALYSIS USING DENSITY FUNCTION METHOD

坪郷浩一¹・朝位孝二²
Koichi TSUBOGO and Koji ASAI

¹学生会員 修士(工学) 山口大学大学院 理工学研究科博士後期課程 システム工学専攻
(〒755-8611 宇部市常盤台2-16-1)

²正会員 博士(工学) 山口大学助教授 工学部社会建設工学科 (〒755-8611 宇部市常盤台2-16-1)

In this paper, a volume correction method for free surface flow analysis using density function method is proposed. The proposed volume correction method consists of two steps. The first step is to correct the volume of fluid phase. The second step is to correct the mass in the whole computational domain. The effect of the proposed method was checked by solving a dam break problem. Especially, volume conservations and mass conservations are checked. It is found that the proposed volume correction method is effective and this method makes an air-water interface sharp.

Key Words: the density function method, volume correction method, advection term, mass conservation, gas-liquid two phase flow

1. はじめに

自由水表面が存在する流れの数値解析法として界面追跡法と界面捕捉法が挙げられるが、複雑で大規模な自由水表面問題に対しては界面捕捉法が有利である。界面捕捉法の先駆的な手法はVOF法である。最近では、気液二相流を直接解く手法が発展しており、C-CUP法^{1)・2)}、密度関数法³⁾、Level set法^{4)・5)・6)}などがその代表例として挙げられる。

密度関数法は、VOF法と同様に気相・液相を二値(例えば気相を0、液相を1など)で表す密度関数を定義し、密度関数の移流方程式を解き気液界面を捕捉していくものである。C-CUP法も同様である。Level set法は気液界面からの距離を場所と時間の関数(Level set関数)とし、Level set関数の移流方程式を解いて界面を捕捉するものである。

密度関数法では密度関数の移流輸送を数値的に解くわけであるが、計算進行とともに数値拡散によって気液界面がぼやけてしまうという問題点がある。一方、Level set法は数値拡散による界面のぼやけは直接には発生しないが、Level set関数の再初期化などの調整が必要であり、密度関数法に比べてアルゴリズムがやや煩雑になる。C-

CUP法ではタンゼント逆変換関数(デジタイザー)を用いることで界面のぼやけを防いでいる。

VOF法ではDonor-Acceptor法という特殊な解法が使用されることが多い。原理的にはDonor-Acceptor法は局所移動体積を完全に保存する。しかしながら、ダムブレイク問題を例題にして、Donor-Acceptor法では計算領域内の質量が保存されないことを山田らは示している⁷⁾。一方、密度関数法、Level set法、C-CUP法では界面を捕捉する関数の移流方程式の解法に例えばCIP法など高精度移流計算スキームを用いている。しかしながら、数値拡散を完全に抑制できるスキームは存在せず、数値拡散による界面のぼやけは避けられない。移流項計算スキームの高精度化だけでなく別の手段で界面のぼやけを回避することが必要である。

界面のぼやけに関連して液相体積の保存の問題が生じる。数値拡散により液相でも気相でもない領域が計算進行とともに広がり、結果として純粋液相体積部分が減少し、液相の初期体積が保存されなくなってしまう(3章を参照)。液相体積の減少はLevel set法では再初期化の段階で体積保存が満足されなくなる。したがって計算過程で生じた液体・気体の体積誤差を補正する必要がある。既往の体積補正の手法としては、Level set法では姫野らの手法⁸⁾、VOF法では桜庭らの手法⁹⁾が挙げられるが、

密度関数法に関する体積補正の手法は筆者らの知る限りでは見受けられない。

本研究は、密度関数の移流方程式に高次精度差分スキームを使用した場合を対象にし、界面のぼやけを回避し体積を補正する手法の開発を行ったものである。

2. 計算手法

(1) 基礎式

基礎式は非圧縮性流体に対する連続式、運動の方程式、密度の保存式から構成される。

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

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla (\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) = \frac{1}{\rho} (\mathbf{F} - \nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u}) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \rho) = 0 \quad (3)$$

ここで $\mathbf{u}$ は流速ベクトル、 ρ は密度、 p は圧力、 μ は粘性係数、 $\mathbf{F}$ は体積力である。

(2) 密度関数

密度関数法では式(3)を解く代わりに以下に示す密度関数($0 \leq \Phi \leq 1$)の保存則を解く。

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \Phi) = 0 \quad (4)$$

ここで Φ は密度関数である。この関数は液相で1を、気相で0を、気液界面で0.5の値をとる。

密度関数 Φ と密度 ρ および粘性係数 μ の関係は次式を用いる。

$$\rho = \Phi \rho_{Liq} + (1 - \Phi) \rho_{Gas} \quad (5)$$

$$\mu = \Phi \mu_{Liq} + (1 - \Phi) \mu_{Gas} \quad (6)$$

ここに、 ρ_{Liq} は液相の密度、 ρ_{Gas} は気相の密度、 μ_{Liq} は液相の粘性係数、 μ_{Gas} は気相の粘性係数である。

(3) 体積補正の概念

後述のように密度関数の移流方程式の移流項から生じる数値拡散により体積の保存性に問題が出てくる。そこで体積補正が必要となる。この節では本論文で提案する体積補正の原理を説明する。図-1はある時刻の気液界面を模式的に示したものである。破線は真の界面であり、実線は計算で求められた界面（計算界面と呼ぶことにする）である。計算界面は数値拡散のため真の界面と一致していない。計算界面と数値界面で囲まれた領域が体積誤差でここでは V_{Err} と標記する。この図では計算界面は液相側にずれており、液相体積が過小評価されている場合である。

密度関数はVOF関数と同様に液相占有率と解釈できる。

界面セルの総体積

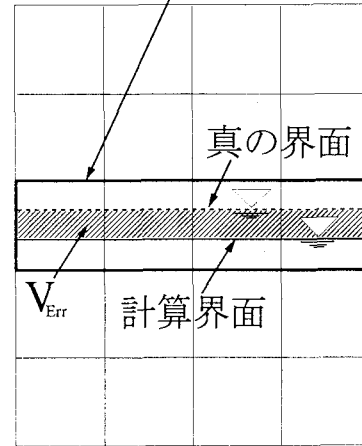


図-1 体積補正の概念

図-1の例では、界面セルの液相占有率が真のそれよりも小さいために液相体積が過小評価されてしまう。したがって、界面セルの液相占有率を高くする必要がある。そこで、液相占有率の補正量を算出し、それを各界面セルに加えることで体積誤差を解消させる。具体的には界面セルの総体積を求め、体積誤差をそれで除することで1セル当たりの平均的な補正量を算出する。この補正量を界面セルに一律に加えることで計算界面を真の界面に近づけることができる。

液相セルは1、気相セルは0の値となることが理想であるが、数値拡散のため界面セル近傍の液相セルには1に近いが1ではない数値が入っている場合がある。同様に界面セル近傍の気相セルも0以外の値となっている可能性がある。さらに、これが新たな数値拡散を引き起こす可能性がある。そこで液相セルにも補正量を加えて1に近づける。また気相セルには補正量を差し引き0に近づける。これは界面鋭敏化（界面のぼやけの抑制）の働きをする。液相が過大評価されている場合も同様の概念で補正を行う。

(4) 液相体積の計算

体積補正を行うためには気相または液相の体積を求める必要がある。水工学では液相の運動が重要であるので、液相体積の保存に着目し、この節では液相体積を計算する方法を説明する。なお、簡単のため本研究では2次元問題を取り扱う。すなわち体積ではなく面積を求めていることになる。

非圧縮性流体の数値解析は通常スタッガード計算格子が用いられる。本研究でもスタッガード計算格子を用いる。スタッガード計算格子では密度関数はセル中心で定義される。まず、各計算セル中心の Φ 値に応じて、 $\Phi > 0.5$ のとき液相セル、 $\Phi < 0.5$ のとき気相セル、 $\Phi = 0.5$ のとき気液界面セルと判別する。また、 $\Phi = 0.5$ の等値線が通過するセルも気液界面セルとする。

図-2に示すようにセル n と周囲4個のセルを考える。各

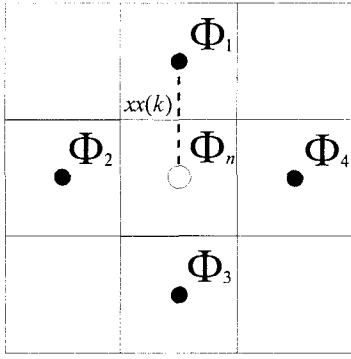


図-2 界面セルの判別

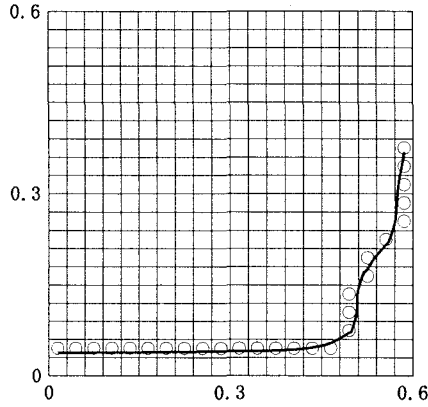


図-3 界面セルの捕捉状態の一例

セルの密度関数の値を Φ_n , Φ_k ($k=1\sim 4$)とする。セル n に $\Phi=0.5$ の等値線が通過するか否かを次のように判定する。セル n とセル k に関して、 $\Phi=0.5$ が存在する無次元距離はセル n の中心から以下のように与えられる。

$$xx(k) = \frac{0.5 - \Phi_k}{\Phi_k - \Phi_n} \quad (7)$$

$\Phi=0.5$ の等値線が通過するセルは以下のように判断する。

(i) $\Phi_n < 0.5$ かつ $\Phi_k \geq 0.5$ のとき

$$\begin{cases} xx(k) < 0.5 \text{であればセル} n \text{が界面セル} \\ xx(k) \geq 0.5 \text{であればセル} k \text{が界面セル} \end{cases} \quad (8)$$

(ii) $\Phi_n > 0.5$ かつ $\Phi_k \leq 0.5$ のとき

$$\begin{cases} xx(k) \leq 0.5 \text{であればセル} n \text{が界面セル} \\ xx(k) > 0.5 \text{であればセル} k \text{が界面セル} \end{cases} \quad (9)$$

界面セルの把握状態の一例を図-3に示す。図中の太線が $\Phi=0.5$ の等値線を表し、丸印が界面セルを表す。図より界面セルを的確に判断していることが分かる。

液相体積（ここでは面積）は次式で求める。

$$V_{Liq}(t) = \iint D(\Phi) dx dy \quad (10)$$

$$\text{ここで, } D(\Phi) = \begin{cases} 1 & \dots \text{液相セル} \\ \Phi(x, y, t) & \dots \text{界面セル} \\ 0 & \dots \text{気相セル} \end{cases}$$

(5) 体積補正

本研究で提案する体積補正法の具体的な手順は以下の通りである。

まず式(10)を行いて現在時刻 t の液相体積 $V_{Liq}(t)$ を計算する。初期液相体積を $V_{Liq}(0)$ とおけば、現在時刻 t の体積誤差 $V_{Err}(t)$ は次式で表せる。

$$V_{Err}(t) = V_{Liq}(t) - V_{Liq}(0) \quad (11)$$

計算領域内の界面セルの総体積を $A(t)$ とし、次式で体積補正量 L_{Err} を計算する。

$$L_{Err} = \frac{V_{Err}(t)}{A(t)} \quad (12)$$

$$A(t) = \iint S(\Phi) dx dy \quad (13)$$

$$\text{ここで, } S(\Phi) = \begin{cases} 0 & \dots \text{液相セル} \\ 1 & \dots \text{界面セル} \\ 0 & \dots \text{気相セル} \end{cases}$$

Φ^{n+1} を求めた時点で得られた密度関数 Φ の値に次のような操作を行う。 $L_{Err} < 0$ のときは液相体積が過小なので気液界面を気相側に移動させる目的で界面セルおよび液相セルの Φ の値から L_{Err} を引く。また気相セルの Φ の値に L_{Err} を加える。逆に $L_{Err} \geq 0$ のときは液相体積が過大なので、気液界面を液相側に移動させる目的で界面セルおよび気相セルの Φ の値から L_{Err} を引く。また液相セルの Φ の値に L_{Err} を加える。まとめると次のようになる。

$L_{Err} < 0$ の場合

$$\Phi^{n+1} = \begin{cases} \Phi^{n+1} - L_{Err} & \dots \text{界面・液相セル} \\ \Phi^{n+1} + L_{Err} & \dots \text{気相セル} \end{cases} \quad (14)$$

$L_{Err} \geq 0$ の場合

$$\Phi^{n+1} = \begin{cases} \Phi^{n+1} - L_{Err} & \dots \text{界面・気相セル} \\ \Phi^{n+1} + L_{Err} & \dots \text{液相セル} \end{cases} \quad (15)$$

補正を行うと密度関数 Φ が1以上または0以下になる場合がある。この場合、1以上の値であれば1に、0以下の値であれば0にする。

(6) 質量補正

体積補正法は密度関数の移流方程式に生成項を付加し初期体積を維持するように、特に界面近傍で生成項を合理的に働かせる手法と見なすことができる。しかしながら、体積補正法の生成項的な取り扱いが逆に計算領域内

の全質量保存を破綻させてしまう可能性がある。

体積補正により界面から離れた場所のセルの Φ 値は厳密に1または0の値となっているが、界面セルおよび界面近傍セルの Φ 値は $0 < \Phi < 1$ となっている。質量誤差は界面・界面近傍セルの Φ 値が適切でないために生じるものと思われる。そこで、体積補正の後に全質量の保存を保証する目的で以下のルーチンを行う。

現在時刻 t の計算領域内の全質量 $M(t)$ を計算する。本研究では密度と Φ 値は1対1の関係があるので、 Φ 値を計算領域内で積分すれば良い。初期全質量を $M(0)$ とおけば、現在時刻 t の質量誤差 $M_{Err}(t)$ は次式で表せる。

$$M_{Err}(t) = M(t) - M(0) \quad (16)$$

次に界面近傍の $0 < \Phi < 1$ となる領域 Ω_M の体積（面積） A_M を次式で求める。

$$A_M(t) = \iint S_M(\Phi) dx dy \quad (17)$$

$$\text{ここで, } S_M(\Phi) = \begin{cases} 1 & \cdots & 0 < \Phi(x, y) < 1 \\ 0 & \cdots & \text{Otherwise} \end{cases}$$

質量補正量 M_{Err} は以下のようにして求まる。

$$M_{Err} = \frac{M_{Err}(t)}{A_M(t)} \quad (18)$$

M_{Err} は領域 Ω_M の単位セル当たりの質量補正量である。式(19)のように領域 Ω_M 内のセルから M_{Err} を一様に差し引くことで補正される。

$$\Phi^{n+1} = \Phi^{n+1} - M_{Err} \quad (19)$$

非圧縮性流体の数値解法はMAC法系のFractional Step法を用いている。計算アルゴリズムのフローチャートを図-4に示す。

3. 体積補正・質量補正の効果

この章では自由水表面流れの検証問題の一つであるダムブレイク問題で体積補正法の効果の検討を行う。

初期条件として、図-5のように水柱左端から水柱右端までの長さを $L=0.15\text{m}$ 、右壁面を水柱左端から $4L$ 、水柱高さを底面から $2L$ の位置に設定し、 $0.6 \times 0.6\text{m}$ の水槽内における水柱破壊現象を崩壊開始から60秒後までをシミュレートした。各物性値を表-1に示す。計算条件としては格子間隔が $\Delta x = \Delta y = 0.015\text{m}$ 、時間刻みは $\Delta t = 0.0001\text{sec}$ で一定値とした。境界はすべて滑りありの固体壁とした。空気と水を想定したため、気液二相流の密度比は800、粘性比は約67となる。

使用した移流項計算スキームは運動方程式および密度関数移流方程式ともに3次精度TVD-MUSCL法¹⁰⁾である。また時間積分には2次精度Adams-Bashforth法を採用した。

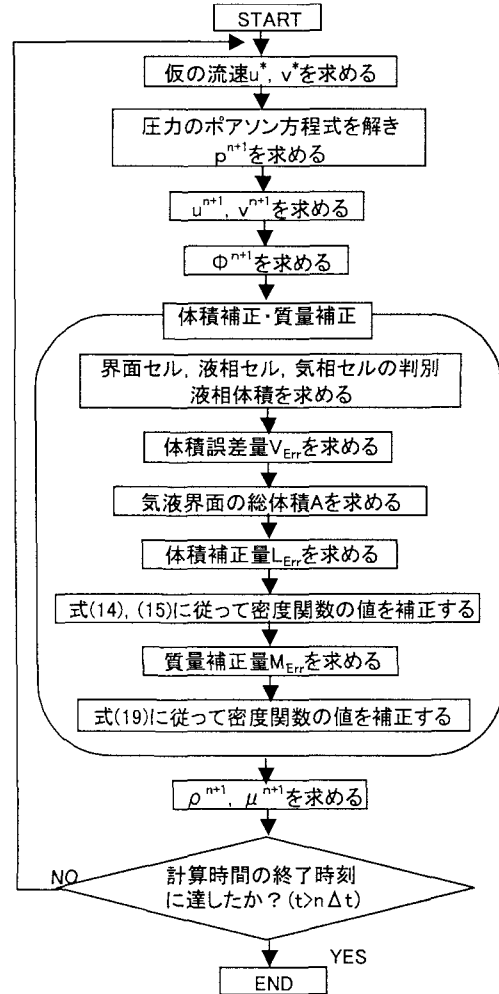


図-4 計算アルゴリズムのフローチャート

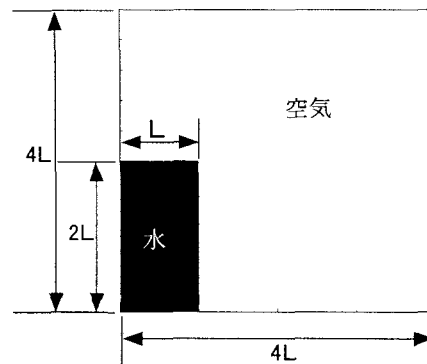


図-5 ダム破壊モデル計算の初期配置

始めに体積補正を行わない場合の結果について考察する。密度を計算領域全体で積分して得られる全質量の保存について検討する。境界は固体壁であるので初期質量は保存されなければならない。任意時刻の全質量と初期全質量の相対誤差は $10^{-13}\%$ 以内に収まった。

続いて、液相体積の相対誤差の検討を行う。式(10)で算出した液相体積の初期体積に対する相対誤差の時間変化を図-6に示す。比較のため、VOF-Donor-Acceptor法を

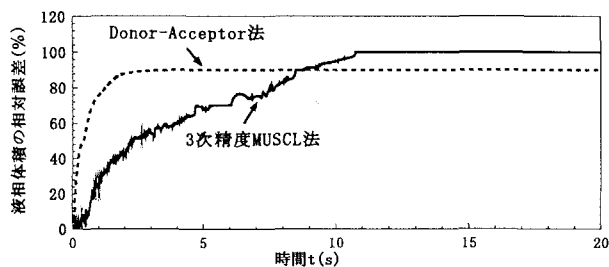


図-6 液相体積の相対誤差
(体積補正なし・質量補正なし)

用いた結果も示している。3次精度TVD-MUSCL法では相対誤差は時間とともに増加し、約11秒後には相対誤差が100%となった。これは数値拡散のため計算領域内に液相部分 (Φ 値が0.5以上の領域) が完全に無くなったためである。つまり計算領域内は水でも空気でもない状態になっている。しかしながら、計算領域内の質量は保存されている。したがって計算領域内の質量の保存は計算領域内の液相体積の保存を保証するものではないことが理解できる。一方、Donor-Acceptor法では比較的早い段階で液相体積誤差が大きくなり、3秒ではおよそ90%に達する。ここでは示していないが、全質量誤差も体積誤差と同様の傾向を示した。Donor-Acceptor法では液相体積、全質量ともに保存されない。

次に体積補正のみを行った場合の結果を考察する。

図-7は液相体積の相対誤差の時間変化を10秒まで示したものである。初期段階でスパイク的に相対誤差が大きくなる箇所が存在するが、それ以降では相対誤差は $10^{-13}\%$ 以下となり、体積補正が有効に働いていることが分かる。また、液相形状の時間変化と相対誤差の時系列の関係を検討した結果、液相が壁面に衝突して激しい形状変化が生じている時刻に誤差が瞬間的に大きくなる場合があることが分かった。

計算領域内の全質量の相対誤差の10秒までの時間変化を図-8に示す。相対誤差は激しく変動しているが、このような状態で60秒まで続いており、質量誤差が増大していくことはない。誤差の最大値は1%程度であり、このダムブレイクの問題に対しては大きな質量保存の精度の低下ではないと考えているが、問題によっては注意が必要であろう。

体積補正と質量補正の両者を適用した場合の結果を図-9, 10に示す。図-9は液相体積の相対誤差で、図-10は全質量の相対誤差である。液相体積の保存の精度は図-7と比較して低下したが、1秒近傍の0.26%の誤差を除けば、0.1%以内の誤差に収まっている。一方、全質量の保存については10秒まででは0.02%程度の誤差に収まり図-8と比較して精度が改善された。図-10は10秒以降では誤差が増加傾向になることが分かった（60秒後で約0.09%の相対誤差）。しかしながら、精度の良いスキームを使用すれば誤差は増加しないことが分かった。

図-11に液相の挙動の一例を示す。図中の太い等値線

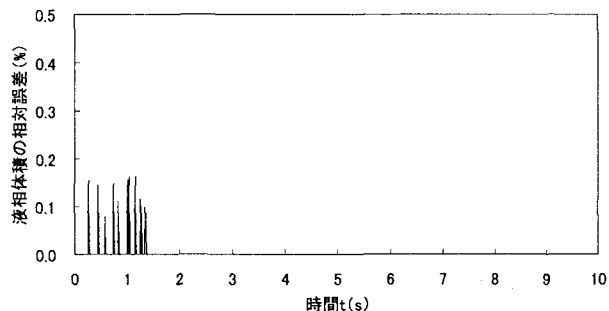


図-7 液相体積の相対誤差
(体積補正あり・質量補正なし)

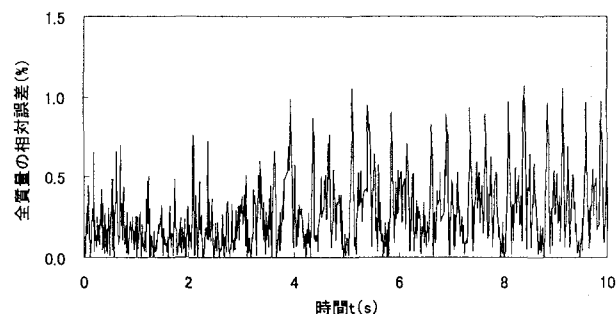


図-8 計算領域内の全質量の相対誤差
(体積補正あり・質量補正なし)

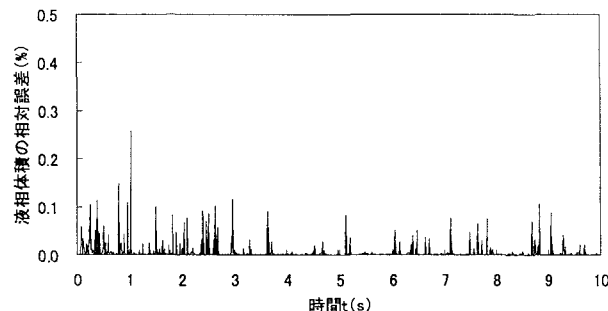


図-9 液相体積の相対誤差
(体積補正あり・質量補正あり)

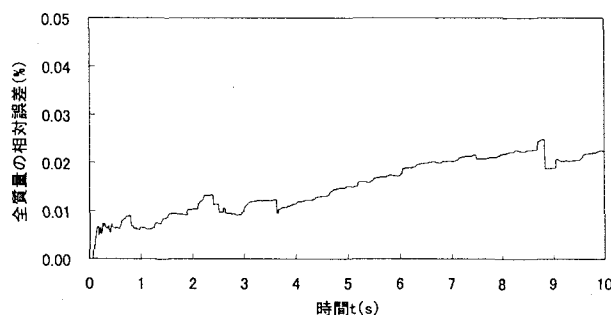


図-10 計算領域内の全質量の相対誤差
(体積補正あり・質量補正あり)

が $\Phi=0.5$ 、細い等値線が $\Phi=0.001$ を表す。体積補正・質量補正を施さない場合は、数値拡散により Φ 値が広がっていく様子が分かる。特に5秒では液相が減少し、体積保存が完全に破綻している。一方、補正を行うと体積保

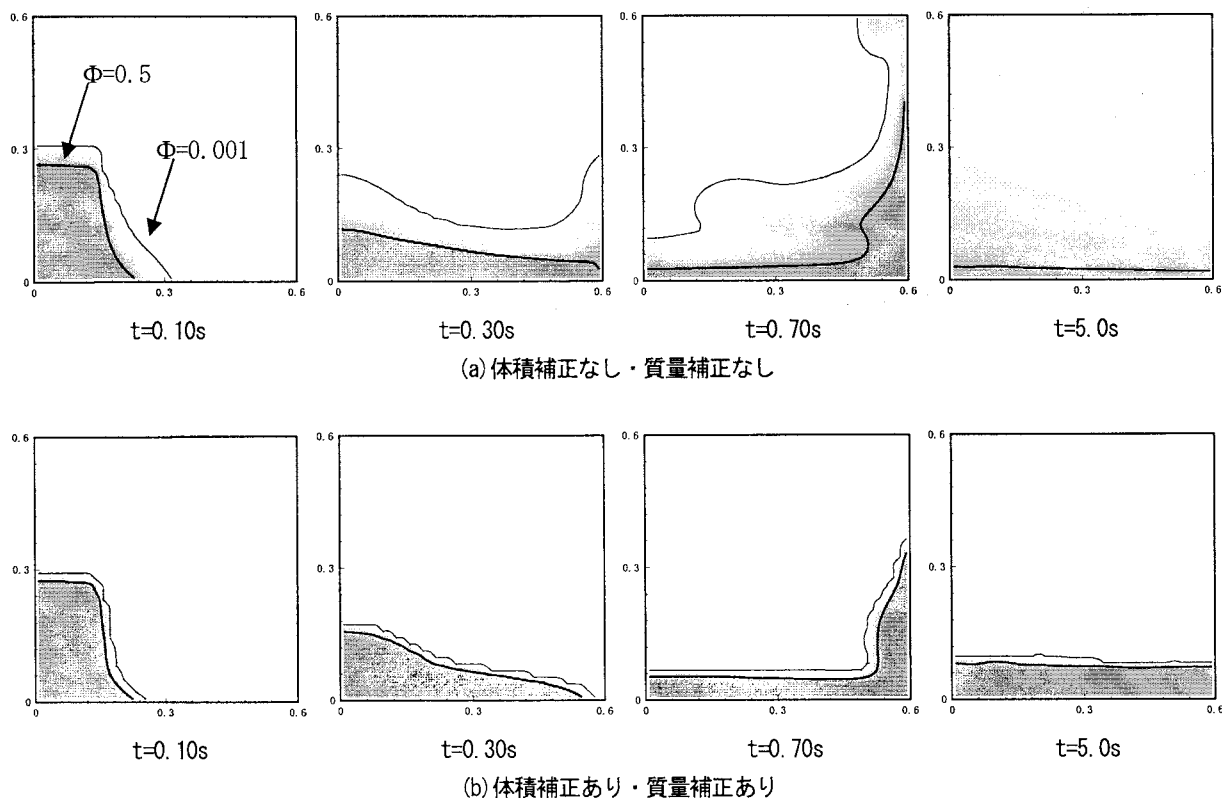


図-11 液相の挙動

存のみならず界面近傍の数値拡散も抑制され界面鋭敏化の効果が分かる。しかしながら、0.3秒における先端位置が補正なしと比較して若干遅れている。補正により流体運動が若干抑制される傾向がある。

4. おわりに

本研究は、密度関数法による自由水表面流れ解析のための体積補正法ならびに質量補正法の開発を行ったものである。数値実験により提案した手法は体積保存、質量保存の精度を維持させることが確認された。比較的数値拡散が大きいスキームを用いても、液相が消滅することなく長時間安定に計算することが可能となった。

本研究では体積・質量補正方法の有効性を主張するため、比較的数値拡散の大きい3次精度TVD-MUSCL法を用いたが、実用ではできる限り数値拡散の発生が少ない計算スキームと組み合わせると良い。今後は流入・流出のある開放された場への適用方法を開発する予定である。また、補正の精度の向上も行いたい。

謝辞：VOF-Donor-Acceptor法のコードを快く提供して下さいました熊本大学山田文彦助教授に深甚なる謝意を表します。

参考文献

- 1) Yabe, T. and P.-Y. Wang : Unified numerical procedure for

compressible and incompressible fluid, J. Physical Society of Japan, Vol.60, No.7, pp.2105-2108, 1991.

- 2) 陸田秀実, 河合ひろみ, 安田孝志 : C-CUP法による気液界面の直接数値計算, 海岸工学論文集, 第45巻, pp. 55-59, 1998.
- 3) 金井亮浩, 宮田秀明 : 密度関数法を応用した気泡の数値シミュレーション, 日本造船学会論文集, 第179号, pp. 41-48, 1996.
- 4) Sussmann, M., P. Smereka and S. Osher : A level set approach for computing solutions to incompressible two phase flow, J. Comp. Phys., Vol.114, pp.146-159, 1994.
- 5) 由比政年, 石田啓, 保智正和 : 界面の大変形を伴う気液二相流体場の数値解析, 海岸工学論文集, 第45巻, pp. 61-65, 1998.
- 6) 姫野武洋, 渡辺紀徳 : 微小重力環境における気液界面挙動の数値解析, 日本機械学会論文集 (B編), 65巻635号, pp. 147-154, 1999.
- 7) 山田文彦, 滝川清, 飯尾昌和 : 密度関数の解法にCIP法を用いたVOF法の解析精度に関する研究, 応用力学論文集, 1巻, pp. 283-292, 1998.
- 8) 桜庭雅明, 弘崎聡, 榎山和男 : 自由表面流れ解析のためのCIVA/VOF法に基づく高精度界面捕捉法の構築, 応用力学論文集, 6巻, pp. 215-222, 2003
- 9) 藤井孝蔵 : 流体力学の数値計算法, 東京大学出版会, pp. 72-76, 1994.

(2004. 9. 30 受付)