収束計算を伴う界面捕捉手法による 3 次元 PLIC のアルゴリズム

An algorithm for three dimensional piecewise linear interface calculation by interface capturing method using convergent calculation

藤岡 奨*・牛島 省**

Susumu FUJIOKA and Satoru USHIJIMA

*正会員 (独) 土木研究所水災害・リスクマネジメント国際センター (〒 330-6008 茨城県つくば市南原 1-6)

**正会員 工博 京都大学教授 学術情報メディアセンター (〒 606-8501 京都市左京区吉田本町)

This paper proposes an algorithm of interface capturing using convergent calculation. Three dimensional piecewise linear interface calculation (3DPLIC) has been shown its preciseness not only in two dimensional problem but also three dimensional problems. However, some algorithms of three dimensional PLIC is known to be complicated and prohibitive in three dimensional problem. This paper proposes an new algorithm to determine the interface plane based on the fraction of cell volume and local normal vector. The proposed algorithm defines a function which returns volume of the fraction when the position of the plane is given. Utilizing the function in an iterative algorithm, the position of the interface plane is decided. A series of examinations of the computational time and precision of 3DPLIC with proposed algorithm are presented. Computational time and precision are discussed in the context of comparison with an existing advection method, THINC\WLIC. The results show that the proposed algorithm is superior to the existing method in precision.

Key Words : PLIC, three dimensional advection, interface capturing

1. はじめに

固体の大変形を伴う固液連成解析においては、固体の変形や運動を Euler 格子にて追跡する Euler 型解法が有効な解法の一つである。Euler 型解法を用いた固液混相流れの数値計算は杉山ら¹⁾によって研究が進められ、大変形を伴う流体と構造の連成計算も行われている。Euler 型解法においては、固体の形状を各計算セルにおける固体の占有体積率によって表現するが、固体表面の形状を平面や曲面による精緻な表現は得意ではない。このため、固体の変形や運動による境界面の時間変化を十分な精度で追跡する手法が必要とされている。

計算セル体積内の界面形状を与えられた法線ベクトルを有する平面で近似する PLIC 法^{2),3)}は界面の時間変化を追跡する一つの手法として精力的に研究が進められている。例えば最近では、平面の傾きと周囲計算セルにおける体積占有率とのバランスを考慮することによって形状表現能力を高める手法⁴⁾や、計算セル内の界面形状を 2 次多項式や^{5),6)}、ベジェ曲面⁷⁾で表現する手法あるいは距離関数を用いる手法⁸⁾等に関する多くの研究がなされている。また、2 次元ではあるが単一計算セルにおける複数の境界面の取り扱いも検討されている⁹⁾。

西口ら¹⁰⁾は、固体の体積占有率の移流計算に 3 次元における PLIC を適用した計算を行っており、3DPLIC^{11),12)}が有効であることを示している。

図-1 計算セル体積と切断平面の位置関係

3DPLIC は、計算セルにおける体積占有率と法線ベクトルから計算セル内における固体表面を表現する平面を推定する手法であり、高精度である反面、推定平面と計算セル頂点の位置関係によって場合分けが生じるため、推定手法が煩雑になる。そこで、本研究では推定平面と計算セル頂点の位置関係によらない統一的なアルゴリズムにて推定平面を得る手法について検討した。

2. 多相場における界面捕捉法

2.1 3DPLIC

本研究においては、固体体積率の局所分布から求められる法線ベクトルと計算セルに定義された体積占有率から図-1 に示されるように計算セル内部の固体表面

形状を表す平面を求める手法について検討した。

推定平面の傾きは法線ベクトル $\mathbf{n}$ で与えられるため、推定平面の位置を体積占有率と整合がとれる様に調整することが必要である。図-1 に示される様に切断平面が点 $\mathbf{n}_0$ を通るならば切断平面の式は以下で与えられる。

$$0 = n_x(x - n_{0x}) + n_y(y - n_{0y}) + n_z(z - n_{0z}) \quad (1)$$

また、計算セルの頂点を一つ選び、その座標を K とすると、推定平面の位置を決める点 $\mathbf{n}_0$ は、あるスカラー値 s を用いて以下の通りに表される。

$$\mathbf{n}_0 = \mathbf{K} + s\mathbf{n} \quad (2)$$

一方で、平面位置 $\mathbf{n}_0$ と法線ベクトル $\mathbf{n}$ が与えられた場合、平面によって切り取られる計算セル体積は後に述べられる手順によって求められる。この手順により、体積断片 V_0 は、未知スカラー s の関数として、式 (3) で表される。

$$V_0 = f(s, \mathbf{n}, \Delta\mathbf{x}) \quad (3)$$

$\mathbf{n} = (1, 1, 1)$ の場合、式 (3) に基づき V_0 と s の関係を表した図が図-2 である。本来であれば、与えられた V_0 から s が直接求められることが望ましいが、本研究においては、ニュートン法を用いて $V_0 = \phi$ を満たす s を求める。ニュートン法の適用にあたっては、以下の漸化式によって次ステップの s を求め、体積断片 V_0 が与えられた体積率 ϕ と許容誤差内で一致するまで繰り返し計算を行う。本研究で用いた収束条件は、体積占有率の相対誤差 $E = |\phi - V_0|/\phi$ が 1.0×10^{-5} を下回るものとした。

$$\Delta s^n = \frac{\phi - f^n(s^n)}{f_s^n} \quad (4)$$

$$s^{n+1} = s^n + \Delta s^n \quad (5)$$

ただし、 f_s^n は f の s による一次微分項であるが、数式で求めるのは煩雑であるため、次式にて近似した。

$$f_s^n \approx \frac{f^n - f^{n-1}}{s^n - s^{n-1}} \quad (6)$$

また、後に示される通り $f(s)$ の初期値 f^0 の精度が高ければ、少ない繰り返し計算回数で収束する。

文献¹²⁾による 3DPLIC においても、体積占有率から切断平面位置を決定するためには高々3次の代数方程式を反復解法にて解く必要がある。また、適切な実数解を得るためには反復解法に対する適切な初期値を設定する必要がある。本研究における反復解法による切断平面位置の決定という問題は図-2 における縦軸の体積占有率 ϕ から横軸の s を求める問題である。元々のアルゴリズムと本質は同様であり、高々3次の代数方程式の Newton 法による求解と解釈できる。

従って、本アルゴリズムにおいても初期値推定の精度が収束性に影響すると考えられる。次節にて議論する適切な初期値の推定についてはこのような背景によ

図-2 s と体積断片体積の関係 ($\mathbf{n} = (1, 1, 1)$)

るものであり、解の収束性を確保するという点で重要である。

2.2 切断断面の初期推定

本節では、反復解法に与える初期切断平面の求め方について述べる。初期状態として、法線ベクトル $\mathbf{n}$ と計算セルの各辺の長さ $\Delta_\alpha, \alpha = x, y, z$ および、計算セルの原点と平面上の一点の相対位置関係を表すベクトル $\mathbf{n}_0$ が与えられる。ただし、計算セルの原点 $\mathbf{O}$ は、式 (7) に示されるとおり、法線ベクトル $\mathbf{n}$ の各成分の符号によって位置を決める。

$$O_\alpha = \max(0, -\text{sgn}(n_\alpha))\Delta_\alpha \quad (7)$$

ただし、計算セル頂点の座標は x, y, z 成分がそれぞれ最小となる座標をもつ頂点を基準に相対座標で表現されているものとする。計算セル原点座標から法線ベクトルの実数倍の位置に切断平面があると仮定できるため、相対位置ベクトル $\mathbf{n}_0$ を次式で求め、切断平面の初期値とする。

$$\mathbf{n}_0 = \mathbf{O} + s\mathbf{n} \quad (8)$$

定数 s については、与えられた体積占有率 ϕ の値と法線ベクトル $\mathbf{n}$ の各成分の値および計算セル幅の関係から求める。 s を体積占有率と計算セル原点から切断平面までの距離の関係性を推定する成分 s^* と、 s の絶対値を調整する成分 $\hat{s}$ に分けて $s = s^*\hat{s}$ として求める。ただし、 $s^*, \hat{s}$ はそれぞれ式 (9)、式 (10) にて求める。

$$s^* = \begin{cases} 0.9\phi & z(\mathbf{n}) = 2 \\ 0.9\phi^{1/2} & z(\mathbf{n}) = 1 \\ 0.9\phi^{1/3} & z(\mathbf{n}) = 0 \end{cases} \quad (9)$$

ただし、 $z(\mathbf{a})$ はベクトル $\mathbf{a}$ の成分のうち値が 0 である成分の数である。

$$\hat{s} = \frac{\Delta_\beta}{|n_\beta|} \text{ where } |n_\beta| = \max_{\alpha=x,y,z} |n_\alpha| \quad (10)$$

式 (10) において β は x, y, z のいずれかである。このとき、初期推定の切断平面は式 (8) および式 (1) を用いて求められる。

2.3 体積断片の求積

本節では、与えられた切断平面が切り取る計算セル体積の求積方法について述べる。まず、計算セルの各辺と切断平面の交点位置を求める。このとき、12本の辺を各座標軸方向の4本ずつのグループ $L_\alpha (\alpha = x, y, z)$ を作成し、グループ毎に切断平面との交点を求めるものとする。辺のグループ L_α と各辺の原点側の座標 $\mathbf{p}_{i,j}^k (i =$

図-3 計算セル体積辺グループ L_α と各辺の原点側座標 $\mathbf{p}_{i,j}^k$ の関係

$1, 2; j = 1, 2; k = 1, 2, 3)$ の関係は図-3 に示される。ただし、 i, j の整数の組み合わせはグループ L_α 内に含まれる4辺を識別するためのインデックスで、 $k = 1, 2, 3$ は $\alpha = x, y, z$ に対応する。辺方向の計算セルサイズおよび平面の式を決める二つのベクトル $\mathbf{n}, \mathbf{n}_0$ から各辺の交点座標 $\lambda_{\sigma_k(x), i, j}$ を次式で求める。

$$\lambda_{\sigma_k(x), i, j} = n_{0\sigma_k(x)} - (n_{\sigma_k(y)}(p_{i,j,\sigma_k(y)}^k - n_{0\sigma_k(y)}) + n_{\sigma_k(z)}(p_{i,j,\sigma_k(z)}^k - n_{0\sigma_k(z)})) / n_{\sigma_k(x)}$$

where $n_{\sigma_k(x)} \neq 0 (k = 1, 2, 3)$ (11)

ここに、 $S_3 \in \sigma_k(x) (k = 1, 2, 3)$ は3次の巡回置換であり、 $k = 1$ の場合は $x = \sigma_1(x)$, $k = 2, 3$ の場合は次式に示す通りである。

$$\sigma_2(x) = y, \sigma_2(y) = z, \sigma_2(z) = x \quad (12)$$

$$\sigma_3(x) = z, \sigma_3(y) = x, \sigma_3(z) = y \quad (13)$$

各交点座標が、 $0 < \lambda < \Delta_\alpha$ を満たす場合に、交点 P_S の数として計上する。この作業をそれぞれのグループ L_α について実行する。従って、体積断片を構成する頂点 P_S の部分集合 $T_S \subset T$ が得られる。ただし、 T は体積断片を構成する頂点全体の集合である。このとき、切断平面と辺の交点の数は、 $n(T_S)$ によって得られる。次に、計算セル頂点の取り扱いを行う。頂点の座標は既知であるため、図-1 に示される様に全ての頂点に対して次式に示す識別子 Φ を配置し、各頂点が原点に対

して切断平面の内側か外側かあるいは切断平面上かを判断する。

$$\Phi(\mathbf{P}_{Vm}) = \text{sgn} \left[\sum_{\alpha=x,y,z} n_\alpha (p_{Vm\alpha} - n_{0\alpha}) \right] \quad (14)$$

ただし、 p_α は点 P の座標成分であり、 m は頂点の識別番号である。識別子 Φ の値が0あるいは原点の Φ の値と同じである頂点 P をまとめ、体積片を構成する頂点の部分集合 $T_v \subset T$ を定義する。

$$T_v = \{P_{Vi} | \Phi_i = (\Phi(\mathbf{O}) \cup 0)\} \quad (15)$$

この部分集合の要素の和 $n(T_v)$ が8である場合には、切断平面に対して全ての頂点が同じ側に存在することになるため、切断平面と計算セル体積が接触しないと判断する。切断面が計算セル頂点を通る場合に頂点座標の重複計上を避けるために、部分集合 T_S には計算セル頂点を含めないものとした。このため、体積断片を構成する座標の集合 T は T_v と T_S の直和で求められる。

$$T = T_v + T_S \quad (16)$$

図-4 には、 T_v に含まれる頂点 P_v 及び T_S に含まれる交点 P_S の例が示されている。

体積断片が凸多面体であることを仮定すれば、体積断片内に適当な一点をとることによって体積断片を四面体の集合体に分割することができる。ここでは、頂点座標 $\hat{\mathbf{p}} \in T$ から求められる重心 G を用いて体積断片を四面体の集合体に分割する。重心 G の座標は頂点座標の単純平均にて求めた。

体積断片は、 G を頂点として含み、残りの3点は直方体の6面あるいは切断面上に存在するような四面体に分割することとした。分割した四面体の集合を $\mathcal{U}$ とすると、頂点 G を除く3点が共有する面によって部分集合を作ることが可能であり、 $\mathcal{U}^i \in \mathcal{U}, (i = 1, \dots, 7)$ とできる。ここに、 i は面につけられた番号であり、1から6はセル体積である6面体のそれぞれの面を示し、7は切断面を示す。各部分集合 $\mathcal{U}^i$ に含まれる四面体 $\hat{t}$ の頂点は T の要素および G の中から選ばれる。次式に示される部分集合 T^i は、部分集合 $\mathcal{U}^i$ の要素の四面体の頂点の集合である。

$$T^i = \{\hat{\mathbf{p}} \in T | \hat{\mathbf{p}} \in \hat{t} \in \mathcal{U}^i\} \quad (17)$$

部分集合 $\mathcal{U}^i$ の要素の体積の和は、 i 番目の平面上の多角形を底面とし G を頂点とする多角錐の体積として扱えるため、以下では i 番目の平面上の多角形の面積を求める手法について記述する。直方体と切断平面の交差問題においては、 $3 \leq n(T^i) \leq 6$ である。面 i に存在する多角形の頂点座標の集合は T^i にて求められているため、 $\hat{\mathbf{p}} \in T^i$ の凸包を求めるなどして多角形の面積を求めることが可能である。以下では、多角形を三角形に分割にして面積を求める手法について記述する。

図-4 体積断片を構成する頂点座標 P_V, P_S 及びその重心 G

図-5 多角形の三角形への分割手順

まず $3 \leq n(T^i)$ である場合、任意の3点 ($\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3$) を T^i から選び最初の三角形を作る。図-5 に示される通り、4点目以降は帰納的に以下の手順を繰り返す。 $m \leq n(T^i)$ である場合には T^i の m 番目の要素である $\hat{p}_m$ を取り出し、既に取り出された $m-1$ 点のうち2点と $\hat{p}_m$ を結ぶ線分のなす角を調べる。このとき、なす角を最大とする2点と $\hat{p}_m$ が作る三角形が $m-2$ 個目の三角形である。なす角を最大とする2点を $\hat{p}_a, \hat{p}_b$ とすると、次式で表される。

$$(\hat{p}_a, \hat{p}_b) \in T^i | \cos \theta_{m;ab} = \min_{(j,k) \in C_{m-1}} \cos \theta_{m;jk} \quad (18)$$

ただし、 C_m は、1 から m の整数の中から2個の整数を選ぶ組み合わせ元とする集合である。 $\hat{p}_m, \hat{p}_a, \hat{p}_b, G$ の4点の座標から四面体 $\hat{t} \in U^i$ の体積 t を求めることができる。 $m = m+1$ として、 $m = n(T^i)$ となるまで同様の手順を繰り返す。体積断片の体積は、次式で求められる。

$$f(s) = \sum_{i=1}^7 \sum_{k=1}^{n(U^i)} t_k \quad (19)$$

2.4 体積率フラックスの評価方法

体積率の移流計算に用いる体積率フラックスの評価においては、式(3)に示される断片体積 V_0 を求める関数を用いた。体積フラックスを求める場合には、界面を表現する平面位置が固定されている状態で隣接セルへの移流体積に含まれる体積率を求めるため、前節にて必要とされた収束計算は必要なく、断片体積を求める関数から直接求めることが出来る。移流計算は方向分離し、 x, y, z 方向に順に移流計算、フラックス評価を行った。ただし、計算1ステップ毎にフラックス評

表-1 フラックス計算の有無と原点移動の有無

	流速	フラックス計算	原点移動
正側の境界	正	有	有
	負	無	-
負側の境界	正	無	-
	負	有	無

図-6 x 正方向へのフラックスの計算例

価の順番を逆順とした。

フラックス評価は、各流体セルにおいて移流方向の正側と負側のセル境界面で行い、常に当該流体計算セルから流出するフラックスを求めることとした。移流体積の各辺の長さ Δ'_β ($\beta = x, y, z$) は次式で求められる。

$$\Delta'_\beta = \begin{cases} \Delta_\alpha & \alpha \neq \beta \\ \|u_{b\alpha} \Delta t\| & \alpha = \beta \end{cases} \quad (20)$$

ここに、 $u_{b\alpha}$ は計算セル境界に定義される α 軸方向の流速成分である。表-1 に示される通り、移流体積の原点 O' と計算セル体積の原点 O が異なるパターンは、軸方向に正の向きのセル境界における流速が正の場合のみである。この場合には、切断面を通る点 n_0 の位置を原点の移動量 b だけ移動させる必要がある。

$$b_\beta = \begin{cases} 0 & \alpha \neq \beta \\ \|u_{b\alpha} \Delta t\| & \alpha = \beta \end{cases} \quad (21)$$

図-6 においては、 $d_\alpha = \Delta_\alpha - b_\alpha$ の関係である。原点移動を考慮した切断面位置 n_0^* は次式で求められる。

$$n_0^* = n_0 - \Delta + b \quad (22)$$

以上の手順にて求められた、 n_0^*, Δ'_β および与えられた s, n を用いて2.3節に述べられる体積片求積方法を利用して移流体積に含まれる体積フラックスを求めることができる。

2.5 セル内における法線ベクトルの評価

次に、法線ベクトルの評価法について述べる。法線ベクトル評価方法の問題に対しては、既往研究^{2),12),11)}等に多数提案されているが、これらを含めての詳細な

検討は本論文の主旨とずれるため、ここでは簡易的に以下の方法を用いた。

法線ベクトルは計算セル内における界面の法線ベクトル $\mathbf{n}_c(\mathbf{x})$ を流体体積率 ϕ の局所勾配方向から求めた。

$$\mathbf{n}_c(\mathbf{x}) = \nabla \phi \quad (23)$$

ただし、本研究においては簡易的に局所勾配を式 (24) の通りに離散化し、周囲の計算セルにおける法線ベクトル方向と極端に異なる法線ベクトル分布とならない様に隣接セルも含めた勾配に重み w_a, w_b をつけて法線ベクトルを求めた。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi}{\partial \alpha}(\mathbf{x}) = & \frac{1}{|w_a + 4w_b|} \left[w_a \frac{\phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha) - \phi(\mathbf{x} - \mathbf{e}_\alpha)}{2\Delta_\alpha} \right. \\ & + w_b \sum_{\beta \neq \alpha}^{\beta=x,y,z} \frac{\phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha + \mathbf{e}_\beta) - \phi(\mathbf{x} - \mathbf{e}_\alpha + \mathbf{e}_\beta)}{2\Delta_\alpha} \\ & \left. + w_b \sum_{\beta \neq \alpha}^{\beta=x,y,z} \frac{\phi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_\alpha - \mathbf{e}_\beta) - \phi(\mathbf{x} - \mathbf{e}_\alpha - \mathbf{e}_\beta)}{2\Delta_\alpha} \right] \quad (24) \end{aligned}$$

ただし、 α は x, y, z のいずれかである。また、 $\mathbf{e}_\alpha$ は、 α 軸方向の単位ベクトルに、セル幅をかけたものである。

3. 計算手法に関する各種検討

3.1 法線ベクトル評価係数に関する検討

本節では、界面の法線ベクトルを求める式 (24) におけるパラメーター w_a, w_b について簡単な数値実験を通して検討を行った。表-2 に示される通り、ケース A においては隣接セルにおける空間勾配を用いない場合、ケース B においては隣接計算セルの空間勾配との単純平均を用いた場合に相当し、ケース C,D,E においては隣接セルの空間勾配に対する重みが逓減していくケースとした。

計算精度を比較する検証計算例としては、3次元移流問題のベンチマークとしてよく使われる single vortex 問題¹³⁾を用いた。計算領域は $1 \times 1 \times 1$ の立方体領域とし、半径 0.15 の球を (0.35, 0.35, 0.35) に配置した。3次元計算領域において流れ場 (u, v, w) は式 (25) に示され、 $t = 0$ から $t = T$ まで移流計算を行った。せん断流れによって計算領域内に初期配置された物体は変形し、 $t = T/2$ において最大変形状態を与える。一方で、 $t = T/2$ において式 (25) に示される流れ場は反転するため、理想的な移流スキームを用いれば、 $t = T$ においてはせん断変形した物体は初期形状を復元する。移流計算の精度を測る指標として、 $t = T$ における体積占有率の値と初期における体積占有率の値から得られる E_{L2} 誤差を用いた。

$$\begin{aligned} u(x, y, z) &= 2 \sin^2(\pi x) \sin(2\pi y) \sin(2\pi z) \\ v(x, y, z) &= -\sin(2\pi x) \sin^2(\pi y) \sin(2\pi z) \\ w(x, y, z) &= -\sin(2\pi x) \sin(2\pi y) \sin^2(\pi z) \end{aligned} \quad (25)$$

表-2 法線ベクトル評価係数に関する検討

ケース名	係数 (w_a, w_b)
A	(1, 0)
B	(1, 1)
C	($\sqrt{2}$, 1)
D	(2, 1)
E	(4, 1)

表-3 法線ベクトル評価係数に関する検討結果

ケース	20^3	50^3	100^3
A	3.230×10^{-3}	2.275×10^{-3}	1.504×10^{-3}
B	3.778×10^{-3}	2.624×10^{-3}	1.176×10^{-3}
C	3.764×10^{-3}	2.576×10^{-3}	1.173×10^{-3}
D	3.741×10^{-3}	2.514×10^{-3}	1.181×10^{-3}
E	3.694×10^{-3}	2.421×10^{-3}	1.263×10^{-3}

ただし、 E_{L2} は次式にて定義した。

$$E_{L2} = \frac{1}{N} \sum_i^N (\phi_i^{\text{sim}} - \phi_i^e)^2 \quad (26)$$

式 (26) において ϕ_i^{sim} は数値計算結果で ϕ_i^e は理論解である。時間刻みは、計算領域内の最大クーラン数が 0.2 となる様に調整した。計算セル分割数は、 $20^3, 50^3, 100^3$ のケースを検討し、 $T = 2.0$ とした。各ケースの結果を表-3 に示す。なお、以下の検討では 100^3 のケースで最も精度の良い C を採用して法線ベクトルを求めた。

3.2 切断平面初期値に関する検討

切断平面の初期値が収束計算回数や収束性に与える影響について調べた。単一の計算セルに任意の体積占有率と法線ベクトルを与え、前節に示されたアルゴリズムによって切断面位置を求めた。この際、切断面位置の初期推定値が収束値に近ければ、収束計算が早く終了するものと期待される。また、計算の安定性の面からも初期推定値が収束値に近いことが望ましい。このため、本研究による提案アルゴリズムにおいては式 (9) を初期値推定に用いている。本節では、初期値推定値に式 (9) のうち、 $z = 2, 1, 0$ の式を用いた場合をそれぞれ (a),(b),(c) とした。

図-7 は、(a), (b),(c) にある法線ベクトルと体積占有率を与えた時のパラメーター s の初期推定値と収束値の関係を示したものである。

図-7(a) においては、成分が (1, 0, 0) である法線ベクトル $\mathbf{n}$ と体積占有率 ϕ が与えられた時の s^* の初期推定値が実線で、収束値が破線で示されている。また、右の y 軸に各体積占有率 ϕ が与えられた時に必要となった収束計算回数 N_c をとっており、黒塗りの四角にてプ

ロットしている。法線ベクトルの2成分が0であるため、 s^* と ϕ の関係は単純な線形関係となるため、良好な初期値推定が可能であり、収束計算回数も ϕ の全域で2回となっている。

次に、図-7(b)においては、法線ベクトル成分として $(1, 1, 0)$ を与えた場合の s^* と ϕ の関係を示す。初期値推定に $s^* = 0.9\phi^{1/2}$ を用いるが、特に0付近で収束値のプロットと形が一致する。0付近では初期値の推定値と収束値が近づいており、早い収束が期待できる。この場合、収束のための繰り返し回数は5回から7回である。また、参考のため、(a)のケースで用いた初期値推定式も記入してある。

最後に、図-7(c)においては、法線ベクトル成分として $(1, 1, 1), (1, 1, 2), (1, 1, 3)$ を与えた場合の s^* と ϕ の関係を示す。(b)と同様、0付近では(c)の式による推定が(a)による推定に比べて収束値に近い値を与えていることが確認できる。また、法線ベクトルの方向によって収束値の分布形が変化するが、その分布形は式による推定値と同様の形状である。

図-8には、(c)のケースにおける収束計算回数をプロットしている。初期値の予測として(a)を用いた場合及び(c)を用いた場合で場合分けし、さらにそれぞれのケースにて法線ベクトル成分が $(1, 1, 1)$ であるケースと $(1, 1, 2)$ であるケースを検討した。(a)のケースでは、体積占有率が0.5付近では収束回数が少ないが、0あるいは1近辺で収束計算回数が増加する。実際、 $\phi = 0.001$ においては(a)のケースではニュートン法が収束せずに発散した。一方で、(c)のケースは ϕ の値によらずに収束計算回数が5回前後でまとまっている。このため、計算の安定性の面からも、(c)による初期値推定が優れていると考えられる。

3.3 移流計算の順番に関する検討

本節では、移流計算の空間方向の順番に関して計算精度に対する影響を調べた。例題として、以下に示す球体の回転運動問題を取り上げた。

計算領域は、 $1 \times 1 \times 1$ の立方体領域とし、半径0.15の球を $(0.35, 0.35, 0.5)$ に配置した。計算領域には、次式によって得られる流れ場 $\mathbf{u}$ を与えた。

$$\mathbf{u} = (u, v, w) = (-(y - 0.5), (x - 0.5), 0) \quad (27)$$

時間刻みは計算領域分割に応じて調整し、計算領域内の最大クーラン数が0.2となるように調整した。球体の回転運動は、円軌道を1周終了するまで行った。

計算順序は、表-4に示されるAからEのパターンについて検討した。AとBはそれぞれ毎ステップにおける移流計算の方向の順番が決まっているパターンである。Cは、AとBを1ステップ毎に交互に入れ替えるパターンである。Dは、3種類の順番を1ステップ毎に入れ替えるパターンであり、Eは同様に6種類の

(a) 法線ベクトルの2成分が0の場合

(b) 法線ベクトルの1成分が0の場合

(c) 法線ベクトルの全ての成分が0でない場合

図-7 体積占有率 ϕ と s の初期推定値および収束値の関係

順番を入れ替えるパターンである。表-5に計算結果を示す。計算セル分割を $50^3, 80^3$ として E_{L2} 誤差を評価したが、AからEのケース間で有意な違いは確認できなかった。このため、移流計算の順序が計算精度に与える影響は少ないものと考えられる。

図-8 収束計算回数 N_c と体積占有率 ϕ の関係

表-4 移流計算における計算順序

ケース	順番
A	$x \rightarrow y \rightarrow z$
B	$z \rightarrow y \rightarrow x$
C	$(x \rightarrow y \rightarrow z, z \rightarrow y \rightarrow x)$
D	$(x \rightarrow y \rightarrow z, y \rightarrow z \rightarrow x, z \rightarrow x \rightarrow y)$
E	$(x \rightarrow y \rightarrow z, y \rightarrow z \rightarrow x, z \rightarrow x \rightarrow y, y \rightarrow x \rightarrow z, x \rightarrow z \rightarrow y, z \rightarrow y \rightarrow x)$

表-5 移流方向計算順序の違いによる E_{L2} 誤差

ケース	50^3	80^3
A	2.469×10^{-4}	1.832×10^{-4}
B	2.470×10^{-4}	1.833×10^{-4}
C	2.470×10^{-4}	1.833×10^{-4}
D	2.469×10^{-4}	1.832×10^{-4}
E	2.470×10^{-4}	1.833×10^{-4}

4. 体積率移流計算検証例題

4.1 球体回転問題

移流計算精度と解の収束性を確かめる検証問題として、3.3節同様の球体回転問題を行った。計算領域分割はそれぞれ 20^3 , 40^3 , 80^3 , 160^3 の等分割とした。計算結果を表-6および表-7に示す。表-6に記載されている r_e は、例えば X^3 のケースと Y^3 のケースの間では、次式で求めた。

$$r_e = \log_2(E_{L2}(X)/E_{L2}(Y)) \quad (28)$$

ただし、 $E_{L2}(X)$ は、 X^3 のケースで得られる E_{L2} である。一方、表-7に記載されている r_t は、次式で求めた。

$$r_t = \log_2(T(Y)/T(X)) \quad (29)$$

ただし、 $T(X)$ は、 X^3 のケースにおける計算時間である。比較検討に用いた移流計算手法として、文献¹²⁾

表-6 球体回転問題 (一周) における各手法の E_{L2} 誤差

セル数	THINC\WLIC	3DPLIC (提案)	3DPLIC (元)
20^3	6.488×10^{-4}	4.039×10^{-4}	4.454×10^{-4}
r_e	0.3354	0.5142	0.4153
40^3	5.142×10^{-4}	2.828×10^{-4}	3.340×10^{-4}
r_e	0.5236	0.6256	0.4992
80^3	3.577×10^{-4}	1.833×10^{-4}	2.363×10^{-4}
r_e	0.7291	0.8400	0.506
160^3	2.158×10^{-4}	1.024×10^{-4}	1.664×10^{-4}

表-7 球体回転問題における各手法の計算時間

セル数	THINC\WLIC	3DPLIC (提案)	3DPLIC (元)
20^3	1.966	7.688	1.202
r_t	3.183	2.769	2.762
40^3	17.86	52.41	8.153
r_t	3.743	3.046	3.844
80^3	239.1	432.9	117.1
r_t	3.497	3.211	3.753
160^3	2700	4008	1578

による元の 3DPLIC および PLIC 以外の手法として THINC\WLIC を選定した。表-6によると、 E_{L2} の比較においては、3DPLIC(元)と 3DPLIC(提案)に精度と収束性の上で差異が認められている。特に、3DPLIC(元)では収束性が比較的低い値となっている。

THINC\WLIC との比較においては、3DPLIC(提案)が精度および収束性において優勢であることが確認できる。

一方、表-7に示される様に計算時間を比較すると、3DPLIC(元)が最も高速である結果を得た。アルゴリズム構築上は場合分けが煩雑であるが、計算効率は優れているものと考えられる。反復計算の都度体積断片の求積を行う 3DPLIC(提案)は計算量の多さから、最も計算時間を要する結果となった。

4.2 3次元 single vortex 問題

次に、前節と同様の single vortex 問題を用いて精度検証を行った。計算セル分割は、 $20^3, 40^3, 80^3, 160^3$ を用いた以外の条件は同じである。

表-8に THINC\WLIC¹⁴⁾ および 3DPLIC によって得られた E_{L2} 誤差を示す。 20^3 の計算セル分割を用いたケースでは、3DPLIC(元)が相対的に高い精度を与えたが、収束性は 3DPLIC(提案)の方が優れており、 40^3 よりも細かい計算セル分割を用いた場合には 1.0 を超える収束性を示している。また、 160^3 の計算セル分割を用いたケースでは 3DPLIC(提案)の方が逆転し

図-9 計算精度と計算時間

て精度が高くなっている。表-9 には、基準時間に対する計算時間とその増加率を示す。表-9 に示される計算時間は、1 次風上差分法で 20^3 の計算ケースを実行した際に要する計算時間を基準時間とし、それぞれの計算ケースで基準時間の何倍の計算時間を要したかを示している。この結果より、3DPLIC(提案) の計算時間は THINC\WLIC の計算時間の 1.5 倍から 3.5 倍程度の値となることが分かった。特に、計算セル数が多くなった場合に 3DPLIC(提案) の計算時間の増加割合が 3DPLIC(元) と THINC\WLIC と比べて鈍くなっていることが関係していると考えられる。

球回転問題および Single Vortex 問題において 3DPLIC(提案) が 3DPLIC(元) よりも高い収束性を示すことについては、3DPLIC(提案) は計算セルサイズによらず体積占有率に対する相対誤差で誤差制御した上で切断平面位置を決めているが、3DPLIC(元) ではそのような誤差制御は行っていない。以上の切断平面位置決定上のアルゴリズムの差異により、計算セルサイズが小さくなる程 3DPLIC(提案) の優位性が現れているものと考えられる。

また、図-9 には同一精度の移流計算に必要な計算時間の比較を各手法毎に比較した。図-9 に示される (s) は Single Vortex 問題の計算による結果で、(r) は前節の球の回転運動問題の計算による結果である。どちらのベンチマーク問題に対しても、3DPLIC による結果は、どちらの検証問題に対しても同一計算時間に対して得られる計算精度が比較的高い傾向が確認できる。また、3DPLIC(提案) の方が 3DPLIC(元) と比較して、計算時間の増分に対する精度の向上率が大きくなっている。

次にスタンフォード大学の Web サイトにて公開されているウサギの 3D スキャンデータを用いて同様の Single Vortex 問題を扱った。移流計算に用いたスキ-

表-8 Single Vortex 問題 (球) における E_{L2} 誤差と収束性

セル数	THINC\WLIC	3DPLIC (提案)	3DPLIC (元)
20^3	3.474×10^{-3}	4.002×10^{-3}	3.409×10^{-3}
r_e	0.0567	0.2804	0.3765
40^3	3.340×10^{-3}	3.295×10^{-3}	2.626×10^{-3}
r_e	0.5245	1.156	0.7634
80^3	2.322×10^{-3}	1.479×10^{-3}	1.547×10^{-3}
r_e	0.9015	1.116	0.678
160^3	1.243×10^{-3}	6.825×10^{-4}	9.669×10^{-4}

表-9 Single Vortex 問題 (球) における計算時間

セル数	THINC\WLIC	3DPLIC (提案)	3DPLIC (元)
20^3	2.323	6.434 (2.77)	1.956
r_t	2.289	2.614	2.362
40^3	11.35	39.38 (3.47)	10.05
r_t	3.766	2.937	3.273
80^3	154.4	301.5 (1.95)	97.14
r_t	3.575	3.216	3.509
160^3	1840	2802 (1.52)	1105

ムは 3DPLIC(提案) および THINC\WLIC である。計算セル分割を 100^3 として行った結果を図-10 に示す。3DPLIC では $E_{L2} = 2.332 \times 10^{-3}$ 、THINC\WLIC では 4.532×10^{-3} が得られ、精度の面では 3DPLIC が優位であった。また、図-10 において目視による比較を行った場合、以下の点で 3DPLIC が優位であった。一点目は、THINC\WLIC のケース ($t=2.0$) で見られるウサギの首から肩にかけて見られる光の反射は初期状態において見られないものである。3DPLIC においては、初期状態及び形状復元後にこのような光の反射が見られない。二点目にウサギの首から胸にかけてのラインの復元性を見ると、3DPLIC においては比較的よく復元しているのに対して THINC\WLIC のケースではラインが崩れている。

最後に、流れ場が次式で与えられるベンチマークテスト⁷⁾を行った。計算に用いた移流スキームは、ウサギの Single Vortex 問題と同様とした。

$$\begin{aligned} u &= \sin^2(\pi x) \sin(2\pi y) \cos(\pi t/T) \\ v &= -\sin^2(\pi y) \sin(2\pi x) \cos(\pi t/T) \\ w &= \{1 - 2[(0.5 - x)^2 + (0.5 - y)^2]^{1/2}\}^2 \cos(\pi t/T) \end{aligned} \quad (30)$$

$t = 0$ から $t = T$ まで移流計算を行った。計算格子分割を $40 \times 40 \times 80$ とし $T = 9$ とした。計算結果を図-11 に示す。本計算における誤差 E_v は $E_v = \sum_i \Omega_i |\phi_i^{\text{sim}} - \phi_i^e|$ にて定義したただし、 Ω_i は計算セル体積である。表-10 に得られた E_v および文献⁷⁾ に示されている同一検証例題に対する他手法の E_v を比較する。計算セル数が

図-10 Single Vortex 問題

表-10 Box 内 Single Vortex 問題の E_v	
Youngs* ($32 \times 32 \times 64$)	1.60×10^{-2}
CLCIR* ($32 \times 32 \times 64$)	1.61×10^{-2}
CLC-CBIR* ($32 \times 32 \times 64$)	1.47×10^{-2}
THINC\WLIC($40 \times 40 \times 80$)	1.62×10^{-2}
3DPLIC(提案)($40 \times 40 \times 80$)	1.56×10^{-2}

* は文献 7)からの引用

若干異なるが、ほぼ同様の結果を得られていることを確認した。

5. おわりに

本研究では、気液混相流れや Euler 型解法による固気液混相流れ数値計算における高精度界面捕捉法として利用可能な 3DPLIC に対して、切断平面と計算セルの位置関係によらず統一的に扱うアルゴリズムを検討した。提案手法は、与えられた平面位置から体積断片の体積を求めるアルゴリズムを利用して収束計算を用いて切断平面を求めるものであるため、初期値として与える切断平面位置が収束性に影響を与える。本手法においては初期値の与え方についても検討したが、体積占有率のみからの初期値の推定には限界があるため、法線ベクトルと体積占有率から更に精度の良い初期値の推定が課題である。

図-11 3次元せん断流れ移流計算の比較

計算精度と計算時間の関係については、既往手法である 3DPLIC および THINC\WLIC との比較検討を行い、同一計算セルでは計算精度の点で優位であることを示した。計算時間は THINC\WLIC の 1.5 倍から 3.5 倍程度を要するが、収束性が高いため計算セル数が増える程 THINC\WLIC との計算時間の比は 1 に近づく傾向にある。元の 3DPLIC と比較すると、計算時間を長く要するものの比較的高い収束性を有するため、計算セル数が増加すると精度の面では優位に立つことが確認された。

今後の課題としては、計算セル内に 3 種類以上の相が混ざった場合など、計算セル内の界面形状が 1 平面では表現しきれない状態の取り扱いや、隣接計算セル間での界面形状の整合性、界面形状の曲面による表現などが挙げられる。

参考文献

- 1) Kazuyasu Sugiyama, Satoshi Ii, Shintaro Takeuchi, Shu Takagi, and Yoichiro Matsumoto. A full Eulerian finite difference approach for solving fluid-structure coupling problems. *J. Comput. Phys.*, Vol. 230, pp. 596–627, 2011.
- 2) Youngs D.L. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, Vol. 24, pp. 273–285, 1982.
- 3) Scardovelli R. and Zaleski S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 31, pp. 567–603, 1999.
- 4) Puckett E.G., Almgren A.S., Bell J.B., Marcus D.L., and Rider W.J. A High-Order Projection Method for Tracking Fluid Interfaces in Variable Density Incompressible Flows. *J. Comput. Phys.*, Vol. 130, pp. 269–282, 1997.
- 5) E. Aulisa, S. Manservigi, R. Scardovelli, and S. Zaleski. Interface reconstruction with least-squares fit and split advection in three-dimensional Cartesian geometry. *J. Comput. Phys.*, Vol. 225, No. 2301–2319, 2007.
- 6) Ruben Scardovelli and Stephane Zaleski. Interface reconstruction with least-squares fit and split Eulerian-Lagrangian advection. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 41, pp. 251–274, 2003.
- 7) Lopez J., Zanzi C., Gomez P., Faura F., and Hernandez J. A new volume of fluid method in three dimensions-Part II: Piecewise-planar interface reconstruction with cubic-Bezier fit. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 58, pp. 923–944, 2008.
- 8) Zhaoyuan Wang, Jianming Yang, and Frederick Stern. A new volume-of-fluid method with a constructed distance function on general structured grids. *J. Comput. Phys.*, Vol. 231, pp. 3703–3722, 2012.
- 9) Lopez J., Hernandez J. Gomez P., and Faura F. An improved PLICVOF method for tracking thin fluid structures in incompressible two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, Vol. 208, pp. 51–74, 2005.
- 10) 西口浩二, 岡澤重信, 田中智行, 前田和久. PLIC 法を用いた平均化統一解法による Euler 型固体連成解析. 計算力学講演会論文集, Vol. 15, , 2010. E9-4.
- 11) Denis Gueyffier, Jie Li, Ali Nadim, and Ruben Scardovelli ad Stéphane Zaleski. Volume-of-Fluid Interface Tracking with Smoothed Surface Stress Methods for Three-Dimensional Flows. *J. Comput. Phys.*, Vol. 152, pp. 423–456, 1999.
- 12) Benjamin Biausser, Stephan Guignard, Richard Marcer, and Philippe Fraunié. 3d two phase flows numerical simulations by SL-VOF method. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, Vol. 45, pp. 581–604, 2004.
- 13) Leung S. and Zhao H. A grid based particle method for moving interface problems. *J. Comput. Phys.*, Vol. 228, No. 8, pp. 2993–3024, 2009.
- 14) Yokoi K. Efficient implementation of THINC scheme: A simple and practical smoothed VOF algorithm. *J. Comput. Phys.*, Vol. 226, pp. 1985–2002, 2007.

(2012 年 3 月 8 日 受付)