非構造格子系における界面体積追跡法の検討*

永 武 拓^{*1}, 功 刀 資 彰^{*2}A Study of Interfacial Volume Tracking Method for
Unstructured Grid System Based on MARSTaku NAGATAKE^{*3} and Tomoaki KUNUGI^{*3} Department of Nuclear Engineering, Kyoto University,
Yoshida-honmachi, Sakyo-ku, Kyoto-shi, Kyoto, 606-8501 Japan

There are several methods of tracking gas-liquid interface of multi-phase flows (MF). In these methods, the MARS (Multi-interfaces Advection and Reconstruction Solver) developed by one of the authors has been successfully applied to many problems, because of the accurate volume/mass conservation of fluid. But the MARS was developed on a structured grid system, and it is difficult to get the results with high accuracy for the complex geometry of the solution domain. On the other hand, the usage of an unstructured grid system in the computational fluid dynamics is now to be a popular manner for handling the complex geometry of the computational domain. In the present study, we have developed an interface-volume tracking algorithm on the unstructured grid system for the MF numerical simulation based on the MARS. This paper describes the interface-volume tracking procedure based on the MARS for the unstructured grid system, and discusses on the accuracy of the reconstruction of the interfaces and also discusses on the conservation of the volume of fluid through the advection process.

Key Words: Multi-phase Flow, Numerical Analysis, MARS, Unstructured Grid, Interface Volume Tracking

1. 緒 言

気液二相流は気体と液体が混在する流れであり、沸騰水型原子炉、ボイラー等伝熱装置、化学工学機器など幅広い分野で利用されている。その数値解析手法として、例えば原子炉内サブチャンネル解析などでは流れ場に出現する様々な混相流動場を流動様式に分類し、各流動様式に対する基礎的な実験で得られた実験相関式を「構成方程式」の形で空間平均された混相流運動方程式に取り込むことで数値解析モデルを構築している。しかしながら、このような手法で得られた解析結果は、用いられる構成方程式の精度に大きく依存するため、「数値予測」は困難である。これに対して、気液界面を追跡する手法は表面張力を考慮できるため、構成方程式が不要となり、現象の「数値予測」が可能

となる。

気液界面を追跡あるいは捕獲する混相流数値解析手法としては、MAC 法⁽¹⁾、VOF (Volume of Fluid) 法⁽²⁾、Level-Set 法⁽³⁾、CIP 法⁽⁴⁾、MARS⁽⁵⁾などが挙げられる。これらの手法のうち MARS は VOF 法と同様、計算セル内の流体の占有率 (VOF 率: F) を連続の式に基づいて輸送することにより界面を輸送する手法であり、 F のみで界面形状を記述でき、流体の体積保存性が良いことが特徴である。VOF 法は連続の式に基づいて F を輸送する際に界面形状を考慮しないため、例えば、円形の気泡が四角形になるといった問題がある。これに対し、MARS は界面勾配を考慮した輸送を行うため、界面形状及び質量・体積保存性ともに優れており、現在のところ最も精度の高い界面追跡手法である。しかし、現在の MARS は構造格子系を対象に開発されたため、複雑な形状を有する計算領域の解析では境界面を高精度に表現することが出来ず、このような場の高精度解析は不可能である。一方、境界適合格子系や非構造格子系は境界面に沿ったメッシュを利用できるため、

* 原稿受付 2007 年 10 月 19 日。

^{*1} 京都大学大学院工学研究科原子核工学専攻 (〒606-8501 京都市左京区吉田本町)。^{*2} 正員、京都大学大学院工学研究科原子核工学専攻。

E-mail: t-nagatake@nucleng.kyoto-u.ac.jp

複雑な境界を持つ領域における混相流動解析の高精度化が期待できる。

本研究では、非構造格子系を用いた MARS を構築するための第一段階として、MARS の考え方を基にした非構造格子系における新しい界面輸送法を考案した。そして、2 次元体系における界面輸送解析を行い、本手法の解析精度の検証を行った。また、非構造格子系における界面面積輸送時に生ずる輸送面積の保存性について検討した。

2. 主な記号

F	: VOF 率
l	: 境界辺長さ[m]
$\mathbf{n}$	: 法線ベクトル[-]
t	: 任意時刻[s]
t_0	: 初期時刻[s]
δt	: フラクショナルタイムステップ時間[s]
$\mathbf{u}$	: 流速[m/s]
u_{norm}	: 要素境界速度[m/s]
u_n	: 輸送距離の比[-]
V	: 要素面積[m ²]
添字	
α	: 要素境界辺
e	: 注目要素
theo	: 理論値
cal	: 計算値
S	: 要素境界

3. 計算手法

まず、MARS の特徴である界面輸送法について簡単に述べ、次いで新たに考案した MARS の考え方に基づく非構造格子系における界面輸送法について述べる。

3・1 MARS MARS は VOF 法における弱点である界面形状の保存性を克服した界面輸送法である。VOF 法の特徴である質量および体積の完全な保存性を保ちつつ、その欠点である界面勾配輸送の不正確性を克服するため、界面勾配を考慮した流体体積輸送を実現している。

界面の輸送は、MARS と同様に連続の式を保存系に書き直した以下の方程式に基づいて行う。

$$\frac{\partial F}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) F = \frac{\partial F}{\partial t} + \nabla \cdot (F \mathbf{u}) - F \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

MARS は要素内で界面を一次関数で近似する。すなわち各要素で界面の勾配を計算する必要がある。この

界面勾配は隣接する F の勾配から求める。次いで、各界面要素においては図 1 に示すように F と F の勾配より界面を再構築する。この界面を基に、要素境界面で定義した速度場を用いて VOF 率を隣接要素へ輸送する。この際、VOF 率自身を輸送するのではなく、積分量である境界面を横切る流量 ΔF を輸送するため、体積保存性 (2 次元では面積保存性) に優れたスキームとなっている。

Fig.1 Reconstruction of free surface

3・2 非構造格子系における界面法線ベクトル 非構造格子系における界面法線ベクトルの計算法を検討する。まず界面勾配を決める F の勾配は Gauss-Green の定理に基づく次式の周回積分⁽⁷⁾を行うことにより算出した。

$$\nabla F = \frac{1}{V} \oint F \mathbf{n} dS = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} l_{\alpha} F_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} \quad (2)$$

構造格子系 MARS では、表面張力の計算に CSF モデル⁽⁶⁾を使用しているが、気液界面法線ベクトルの計算法には 2 通りの方法がある。すなわち、計算点を格子点とする ALE 形式とセル境界とする MAC 形式である。図 2 に示すように、ALE 形式では格子点 (●印) を中心に、周囲セルの F の定義点である重心位置を通る積分経路 (図中の点線) を選んだ。一方 MAC 形式では、定義点 (■印) を含む両側の要素周り (図中の破線) を積分経路とした。界面を再構築する際、要素中心の界面法線ベクトルが必要となる。これはそれぞれのスキームで求めた法線ベクトルを補間して求めた。

- ALE-like
- - - - - MAC-like

Fig.2 ALE-like and MAC-like scheme

3・3 界面再構築法 まず、要素中心の界面法線ベクトルと、要素を構成する格子点を結ぶ3本のベクトルとの内積を計算する。このうち絶対値が最大となるベクトルを含む辺と気液界面は必ず交差することを利用し、式(3)を用いて界面を再構築する⁽⁸⁾。式(3)では気液界面と各辺との交点が、その辺上のどの位置に存在するかを比で表現している。図3は辺BCと気液界面が交差する場合を示している。ここで F^* は気液界面が頂点Aを通る場合のVOF率で、 $F^*=BD/BC$ である。次いで、構造格子系MARSと同様に界面勾配を考慮し、要素境界の辺上で定義した速度場を用いて輸送流量 ΔF を求め、それを流速ベクトル方向の隣接要素へと輸送する。

Fig.3 Interface reconstruction on unstructured grid system

$$\begin{aligned} \text{for}(F \leq F^*) \quad \frac{BE}{AB} &= \sqrt{\frac{F}{F^*}}, \quad \frac{BD}{BC} = \sqrt{FF^*} \\ \text{for}(F > F^*) \quad \frac{CE}{AC} &= \sqrt{\frac{(1.0-F)}{(1.0-F^*)}} \\ \frac{CD}{BC} &= \sqrt{(1.0-F)(1.0-F^*)} \end{aligned} \quad (3)$$

3・4 界面輸送法 3・3節で再構築した気液界面を用いて、図4(a)-(g)と式(4)に示すように5通りの場合に分け輸送流量 ΔF を算出する。ここで輸送の際に使用する要素境界辺で定義した速度には各辺の法線方向成分を使用した。初めに計算する境界辺に平行で、距離が $\delta t \cdot u_{nom}$ である直線を仮定し、境界辺と台形を作る。この台形は境界辺を通して隣の要素へ流出する流体の総流量である。このうち、今注目している流体が占める量は、図のように注目している流体と構築した台形が重なる部分、すなわち図中の斜線部となる。したがって、斜線部の面積を幾何学的に計算することにより各要素境界を通過する輸送流量 ΔF が算出できる。

Fig.4 Advection of fluid volume

$$\begin{aligned} \Delta F = & \\ \text{for}(a) \quad & 0.0 \\ \text{for}(b) \quad & F \frac{(u_n - AD/AB)^2}{(BD/AB)(CE/BC - AD/AB)} \\ \text{for}(c) \quad & F - (1.0 - u_n)^2 \\ \text{for}(d) \quad & F \left[1.0 - \left(\frac{CD/BC - u_n}{CD/BC} \right)^2 \right] \\ \text{for}(e) \quad & F \end{aligned} \quad (4)$$

ここで

$$u_n = \frac{\delta t \cdot u_{norm}}{2V/BC} \quad (5)$$

であり、輸送時間あたりに輸送する台形の高さと三角形の高さの比である。気相と液相が逆の場合は台形 AFGC と式(4)で求めた値の差をとることにより ΔF を求めることができる。

4. 数値解析

非構造格子系において、界面法線ベクトルの計算法の精度と、考案した界面輸送法の精度を検証するため、剛体輸送問題を解析した。本章ではその結果について述べる。

4・1 界面法線ベクトルの計算精度 非構造格子系における ALE 形式と MAC 形式の界面法線ベクトル計算法による精度検証を行った。図 5 に示す市販ソフトを用いて作成した非構造メッシュ上に円を配置し、前述した 2 種類の計算スキームで界面法線ベクトルを計算した。円の半径は 0.03[m]、メッシュあたりの面積は $5.01 \times 10^{-7} [\text{m}^2]$ である。

Fig.5 Calculation domain

図 6 は界面法線ベクトルを ALE 形式と MAC 形式について示したものである。計算上は界面が存在しない要素中にも法線ベクトルが現れるが、本論文では表面張力の計算は行っておらず、気液界面の再構築および輸送には無関係なため、界面が存在する要素における法線ベクトルのみを対象に精度の検討を行った。図 6 より、ALE 形式が MAC 形式に比べ界面を滑らかに捉えていることが分かる。

(a) ALE-like

(b) MAC-like

Fig.6 Surface normal vector

この精度を定量的に検討するため誤差評価を行った。具体的には、界面が存在する要素毎に法線ベクトルの理論値と計算で求めた法線ベクトルとの内積を求め、以下の式で誤差を評価した。ここで、法線ベクトルの理論値とは要素中心から配置した円の中心へ向かう単位ベクトルである。

$$E = \frac{\sum_{\text{surface}} (\mathbf{n}_{theo} \cdot \mathbf{n}_{theo}) - \sum_{\text{surface}} (\mathbf{n}_{cal} \cdot \mathbf{n}_{theo})}{\sum_{\text{surface}} (\mathbf{n}_{theo} \cdot \mathbf{n}_{theo})} \quad (6)$$

ここでは、界面が存在する要素について総和を取っている。また図 5 と同様の体系で、メッシュサイズのみを変化させた結果を表 1 に示した。case1 は図 5 の結果であり、case2 は要素あたりの面積を $2.81 \times 10^{-7} [\text{m}^2]$ 、case3 は $1.30 \times 10^{-6} [\text{m}^2]$ とそれぞれメッシュを細かく、または粗くしたものである。今回用いたメッシュ体系では、ALE 形式はメッシュを細かくすると精度が高くなっており、妥当な結果となっている。MAC 形式の精度はメッシュのサイズにあまり依存しない結果となった。このことより、2 種類の形式を比較すると、ALE 形式が MAC 形式に比べ高精度であることが分かる。

これは積分範囲の広い ALE 形式のスキームの方が高次の空間補間となっているため、メッシュ形状に対する依存性が小さいものと考えられる。したがって、本節以後の解析には ALE 形式を用いている。

Table1 Error of surface normal vector

	case1	case2	case3
Mesh area [m ²]	5.01×10^{-7}	2.81×10^{-7}	1.30×10^{-6}
ALE-like	6.941×10^{-6}	3.992×10^{-6}	1.765×10^{-5}
MAC-like	9.728×10^{-2}	1.015×10^{-1}	1.071×10^{-1}

4・2 Zalesak の剛体回転問題 界面輸送法の精度を検証するため、この種のベンチマークとして知られる Zalesak の剛体回転問題⁹⁾を実施した。図 7 に計算体系を示す。初期に配置した切り欠きのある円を反時計回りに 1 回転させ、回転前と回転後の形状を比較した。本解析では、タイムステップが形状・体積保存性へ与える影響を調べるためフラクショナルステップ数を変えた条件で行った。ここでフラクショナルステップとは、1 タイムステップあたり式(1)の連続式を複数回解くことにより界面再構築の精度を上げる手法であり、構造格子系 MARS においても使用されている⁶⁾。今回は 1 タイムステップを 10 分割と 50 分割した場合について解析を行った。ここで、タイムステップは 1.0×10^{-3} [s]、すなわちフラクショナルステップ数が 10 の場合は $\delta t = 1.0 \times 10^{-4}$ [s]、50 の場合は $\delta t = 2.0 \times 10^{-5}$ [s] となる。このタイムステップは構造格子系においても同じ値に設定した。メッシュは前節の case1 と同じものを利用し、また比較のために、構造格子系における解析も同様に行った。構造格子のメッシュサイズは 5.0×10^{-4} [m] であり、1 メッシュあたりの面積は 2.5×10^{-7} [m²] で非構造格子のおよそ半分である。

図 8 は剛体を一回転させた形状を初期形状と比較したものである。図 8-(a) の初期形状の切り欠きの直線部分及びエッジ部分がシャープに配置されていないように見えるが、これは可視化の際に値を格子点へと補間しているためにエッジ部分などが鈍されてしまう可視化ソフトの問題である。図 8-(b) と (c) の比較から非構造格子系におけるフラクショナルステップによる形状の違いはほとんど見られず、フラクショナルステップ数が 10 程度でこの手法における形状保存性が十分に保たれていることが分かる。また図 8-(d) の構造格子系との比較において、一方輸送後の切り欠きの部分の形状などもほぼ同様であることより、形状保存性は構造格子系とほぼ同等であると言える。

図 9 は回転輸送中の輸送面積の誤差を示したグラフである。これは以下の式で面積の誤差 $\varepsilon(\Delta F)$ を評価したもので、縦軸を誤差、横軸を時間としてプロットしたものである。

$$\varepsilon(\Delta F) = \frac{\sum_e (F_e^t V_e) - \sum_e F_e^{t_0} V_e}{\sum_e F_e^{t_0} V_e} \quad (7)$$

非構造格子系における輸送面積の誤差は最大で、フラクショナルステップ 10 分割が 4.0×10^{-5} 、50 分割が 7.0×10^{-6} 程度となっており、構造格子系の値 5.0×10^{-6} と比較して 50 分割したものは界面追跡手法としては十分な精度を有していると言えよう。

しかし、10 分割の場合には 0.3 秒付近に最も誤差が大きくなる部分や、全体として周期性が見られる。これはメッシュサイズが面積保存性に影響を与えていると考えられる。このメッシュサイズの影響に関しては次節で議論を行う。しかし、フラクショナルステップを適切に用いることにより、構造格子系と同等の面積保存性を有する界面輸送解析が可能であることが分かった。

Fig.7 Rotated disk problem

Fig.8 Shape of rotated disk

Fig.9 Error of volume conservation

4・3 異なるメッシュサイズ領域内を移動する場合の剛体輸送 図 10 に示すメッシュを用いて、正方形の剛体を $1.0 \times 10^{-1}[\text{m/s}]$ の速度で右方向へ輸送した。このメッシュは図に示すように左側から右側へ向かって 2 つの部分でメッシュが粗くなっている。メッシュあたりの面積は細かい方から順に $2.632 \times 10^{-8}[\text{m}^2]$, $1.096 \times 10^{-7}[\text{m}^2]$, $4.211 \times 10^{-7}[\text{m}^2]$ となっており、面積でおよそ 4 倍になっている。これにより、メッシュサイズが形状・面積保存性に与える影響を調べることができる。図 11 は初期状態からの形状の変化を示しており、配置してある正方形は一辺 $2.0 \times 10^{-2}[\text{m}]$ 、計算領域の高さは $3.0 \times 10^{-2}[\text{m}]$ 、タイムステップは $1.0 \times 10^{-3}[\text{s}]$ 、フラクショナルステップは 10 分割として、右側へ輸送し

た。図中の形状は左側から順番に $0.0[\text{s}]$, $3.0 \times 10^{-1}[\text{s}]$, $7.0 \times 10^{-1}[\text{s}]$ 経過後の様子であり、メッシュサイズが異なる領域内に剛体が輸送された際のスナップショットである。メッシュが粗くなるに従い角の部分が鈍されており、形状を保存するには解析条件に応じてメッシュサイズを局所的に変更する必要があることが分かる。

Fig.10 Computational domain

Fig.11 Shape of square in different mesh size

次に異なるサイズのメッシュによる面積保存性を検討するため、図 9 と同様に縦軸に式(7)で計算される輸送面積の誤差を、横軸に時間をプロットしたグラフを図 12 に示す。4・2 節の輸送面積の誤差と比較すると 3.0×10^{-3} 程度とかなり精度が低下している。またグラフの形状は、 $0.15[\text{s}]$ から $0.35[\text{s}]$ と $0.45[\text{s}]$ から $0.65[\text{s}]$ へかけて大きく低下していることが分かる。これらの時刻はちょうど輸送する剛体がメッシュサイズの異なる部分を通過する時刻と一致しており、メッシュサイズの異なる部分を通過する際に面積保存性が損なわれていることが分かる。この面積保存性の低下の原因について考察する。

Fig.12 Error of volume conservation

図 13 にメッシュサイズが異なる部分の模式図を示す。図中の矢印は各境界面に垂直な速度成分であり、この速度で VOF 率の輸送を行っている。本解析手法では、辺中心に定義された輸送速度として輸送方向の速度ベクトルを各辺の法線ベクトル方向へ射影した速度を用いており、この速度場はソレノイダル条件を満たしていない。ソレノイダル条件を満たす速度場であれば式(1)の $F \nabla \cdot \mathbf{u}$ の項が 0 となるため、厳密に面積保存性を保った輸送ができるが、一般に数値解析ではこの項は厳密には 0 とはならず、この項は輸送量の面積保存誤差を修正する項として作用する。本解析において、図 13 の色付きの要素の例では、輸送量は流出量が流入量より大きくなるため、 $F \nabla \cdot \mathbf{u}$ が発生し、この面積輸送量の修正により全体として VOF 率の増加や減少を引き起こすこととなる。このことは 4・2 節の解析でも見られ、そこで述べた面積保存性が損われた時間がフラクショナルステップ数に依らないのは、メッシュサイズが異なる部分を通してしているためであると考えられる。また、周期性については、逆にメッシュが小さくなる場合今までの議論の逆のこと、すなわち大きくなる場合は VOF 率アンダーシュートが、小さくなる場合はオーバーシュートが起り、補正が各々の場合逆に働くこととなる。このため、剛体が 1 回転して元の位置に戻ることににより、補正による収支が釣り合い、面積保存誤差がほぼ 0 となるためである。しかし、これら保存性の低下は、圧力ポアソン方程式を解き、速度場がソレノイダル条件を満たせば改善する本手法に特有の問題であると考えられる。

Fig.13 Conservation failure of unstructured mesh system

5. 結 論

MARS に基づく非構造格子系における界面輸送法を考案し、形状と面積の保存性について検証することにより、本手法の有用性を示す以下の結論を得た。

- (1) CSF モデルの界面法線ベクトル計算を ALE 形式と MAC 形式スキームの 2 種類で実施し、算出された法線ベクトルの誤差を評価した。その結果、要素頂

点で界面法線ベクトルの計算には、高精度の ALE 形式スキームを用いるべきであることが示された。

- (2) Zalezak の剛体回転問題を実施し、その形状・面積保存性を構造格子系 MARS との比較により検証した。これにより、本輸送法はフラクショナルステップ数を適切に選ぶことにより、構造格子系と同程度の形状・面積保存性を満たすことを確認した。
- (3) メッシュサイズが異なる領域における界面輸送の場合の形状・面積保存性に与える影響について検討した。その結果、メッシュサイズが大きく変化することで、解像度が低下して形状に鈍りが生じ、またメッシュサイズの異なる領域を通過する際に面積保存性が損なわれるという結果を得た。前者は構造格子系でも同様であり、解析に十分な解像度を有するメッシュを使用することにより解決でき、後者は圧力ポアソン方程式を解いて速度場がソレノイダル条件を満足する状態で界面輸送を行うことで解決できると考える。

以上より、本研究で考案した非構造格子系 MARS は界面面積 (3 次元では体積) 追跡法として有望であると言える。

文 献

- (1) Harlow, F. H., Welch, J. E., Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flows of Fluid with Free Surface, *Physics of Fluids*, Vol.8(1965), pp.2182-2189.
- (2) Hirt, C., Nichols, B.D., Volume of Fluid Method for the Dynamics of Free Boundaries, *Journal of Computational Physics*, Vol.39(1981), pp.201-225.
- (3) Sussman, M., Smereka, P., Osher, S., A Level Set Approach or Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow, *Journal of Computational Physics*, Vol.114(1994), pp.146-159.
- (4) Yabe, T., Xiao, F., Utsumi, T., The Constrained Interpolation Profile Method for Multiphase Analysis, *Journal of Computational Physics*, Vol.169(2001), pp.556-593.
- (5) Kunugi, T., MARS for Multiphase Calculation, *Computational Fluid Dynamics Journal*, Vol.9(2001), pp.563-571.
- (6) Brackbill, J. U., Kothe, D. B., Zemach, C., Continuum Method for Modeling Surface Tension, *Journal of Computational Physics*, Vol.100 (1992), pp. 335-354.
- (7) Blazek, J., *Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications*, Elsevier (2001)
- (8) Yang, X., James, A. J., Analytic Relations for Reconstructing Piecewise Linear Interfaces in Triangular and Tetrahedral Grids, *Journal of Computational Physics*, Vol. 214(2006), pp.41-54.
- (9) Zalesak, S. T., Fully Multidimensional Flux-Corrected Transport Algorithms for Fluids, *Journal of Computational Physics*, Vol.31(1979), pp.335-362.