相界面を含む流体の高速・高精度 生産安全基盤センター シミュレーション法の開発 直 樹 島 Ħ 内 橋 祐 介 17 パートナーシップで 目標を達成しよう 12 つくる責任 つかう責任 八重樫 優 太 B CO**Development of High-Performance and** Sumitomo Chemical Co., Ltd. **High-Accuracy Computational Fluid Dynamics** Production and Safety Fundamental Technology Center **Method for Interfaces** Naoki Shimada

Yusuke Uchihashi Yuta YAEGASHI

To understand fluid dynamics with multiphase flows, the equation with moving boundaries comprising the interfaces must be solved. This study introduces the volume of fluids (VOF) and level set (LS) methods. Consequently, the coupling techniques between the VOF and LS methods, and our proposed method are reviewed. The proposed method can reduce computational load and exhibits high accuracy. Finally, we demonstrate that the proposed method can visualize and contribute to the understanding of various flow phenomena.

はじめに

工業問題を取り扱う際、流体に関わる問題を避け ることはできない。梶島¹⁾は、流体を「気体と液体に 代表される物質を力学的に扱うときの概念」と定義 している。その定義の下で質量、運動量、エネルギー の保存則(および状態方程式)が論じられる。特に 運動量の保存則はナビエ・ストークスの式と呼ばれ、 成立した19世紀から現代まで流体力学者が苦闘して いる。1950年代に電子計算機が登場してからは、実 験と理論とに並ぶ第3の研究分野としてナビエ・ス トークスの式をどう解くかが数多くの研究者によっ て議論された。この辺りの苦心は先駆的な著書「コ ンピュータによる流体力学 (1978) 」²⁾に記されている。 最初の流体のシミュレーションは、気体あるいは 液体が1種類のみで流れる計算であった。ナビエ・ス トークスの式は偏微分方程式であり、壁や入口など を境界条件として設定しなければ求解できない。こ の境界条件は空間的に固定しておかないと、当時の 計算機性能では難しかった。一方、気体と液体、混 じりあわない二種類の液体(水と油)のように、複 数の相が混じりあう流体は多くの工業装置で見られ る。Fig. 1にその代表例を示している。これらは二相 流または混相流と呼ばれている。この場合、液体側 あるいは気体側でナビエ・ストークスの式は成立す

るが、液体と気体とを区分ける界面が空間を自在に 移動する。すなわち境界条件を課す位置が自由に動 くことになるので、移動境界問題と呼ばれるさらに 難易度の高い計算分野になる。

住友化学株式会社

現在、移動境界問題は物理・数学・工学分野での研 究が盛んであるが、今後は生理・医学・化学分野でも 発展すると考える。なぜならNurse博士³⁾や多くの研 究者が指摘している通り、境界(例えば生物の細胞壁) はエントロピーをコントロールし、宇宙全体を覆って いるカオスに向かう力に対して、首尾よく抵抗して進 化する現象を構成するからである。また、機能性物質 における自己組織化においても移動境界問題の考察 が欠かせない。

シミュレーションに話を戻すと、1980年代までは 工業的実用性を重要視し、相間速度差のモデル化に 主眼が置かれた。これらは均質流モデル、スリップ 流モデル、ドリフトフラックスモデル、二流体モデ ル⁴⁾へと発展してきた。相間速度差のモデル化は、理 想化した解析解か実験データを使って補完する。言 い換えれば、計算の精度はこのモデル化に大きく依 存することになる。モデル化の仮定が合えば全く問 題ないが、実在する全ての界面が仮定を満たすとは 限らない。例えば自在に変形する界面(Fig. 1)を解 くことは困難である。

1990年代に入ると、上記問題を克服すべく、変形





Fig. 1 Examples of flows with two immiscible fluids (left: experimental snapshot of a rising bubble swarm in liquid, right: simulated atomization at the leading edge of a rotating liquid film)

する界面を直接解く計算手法が提案された。Volumeof-Fluid (VOF) 法、Level Set (LS) 法、Front-Tracking法⁵⁾、Boundary Fitting Coordinate法⁶⁾、格子ボ ルツマン法、Phase Field法などがある。本稿では多 くのシミュレーションコードでよく利用されるVOF法 とLS法を概説する。次に、近年著者らが開発した新 たなVOF法とLS法のカップリング法と適用事例を説 明する。

界面の計算法

VOF法もLS法も流体の相を判別する方法であり、 根底にある基本概念はほとんど類似していると言っ てよい。ただ数値計算する際の問題と、改善の歴史 が異なっている。説明を簡単にするために、気体と 液体が計算領域にある二相流を考える。VOF法では 体積割合 α を識別する。例えば α = 1なら気体、 α = 0な ら液体とおく。0 < α < 1の場合は、気体と液体を含ん でいるので界面が存在することを意味する。一方、 LS法では界面からの符号付距離関数 ϕ を扱う。 ϕ = 0 は界面、 ϕ > 0なら気体、 ϕ < 0なら液体になる。技術 課題は α または ϕ が空間を移動する計算にある。

1. VOF法

まず α が空間移動する計算をする場合、物理的には 起こり得ない拡散や、 $\alpha > 1$ または $\alpha < 0$ となる計算を 払拭しなくてはならない。VOF法の先駆者であった Hirt⁷⁷はDonor-Acceptor法を導入した。さらに改良をす べく、MARS (Multi-interface Advection and Reconstruction Solver)⁸⁹法、PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation)⁹⁹法、HRIC (High Resolution Interface Capturing)¹⁰⁹法、CICSAM (Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Mesh)¹¹⁰法が提案され ている。

これらの方法によって確実に精度は良くなっているが、計算負荷が多大であった。2005年にXiao¹²⁾が

双曲線正接関数を使って、より簡便かつ正確にaを移 動させる方法を提案した。本手法はTHINC(Tangent of Hyperbola for Interface Capturing)法と呼ばれてい る。続いて2007年にYokoi¹³⁾がWLIC(Weighted Line Interface Calculation)法をTHINC法と組み合わせた 計算法を提案した。これによって、多次元の計算精度 が改善された。これらの手法は反復計算を必要としな いので、計算の高速化につながった。さらに著者らは 2013年に適応勾配(Adaptive Slope)によって双曲線 正接関数を補正した手法¹⁴⁾を開発し、簡便性と高速計 算は維持しつつ、さらに多次元における精度を向上さ せた。その経緯から、開発した手法をTHAINC(Tangent of Hyperbola with Adaptive slope for Interface Capturing)法と呼称している。

2. LS法

αが0から1へと急峻な分布を取り得るのに対して、 φは界面からの符号付距離をあらわすので、連続性の ある分布を取る。このため、空間微分∇φを計算した い場合の誤差が非常に小さい。特に表面張力を計算す る場合、界面とその曲率を計算するために空間微分を 取る必要があるので、φのこの特徴は極めて有効にな る。Sussman *et al.*¹⁵⁾は1994年に初めてLS法を気液二 相流に応用した。

本手法において重要な技術は、 ϕ の再初期化操作に ある。 ϕ を空間移動させると、数値誤差の蓄積に起因 して ϕ が符号付距離関数としての性質を失うことがあ る。そこで再初期化操作を実施して符号付距離関数と しての性質を回復させる。再初期化操作の際に、着目 流体の体積保存性が損なわれる問題が指摘されてい る。Hartmann *et al.*¹⁶⁾は、これを克服する再初期化の 改良法を提案している。著者ら¹⁷⁾はさらに、積層や相 変化の現象を考慮するために $\phi = 0$ の位置が変化する 場合においても誤差を生じない再初期化法を提案して いる。

3. VOF法とLS法との組み合わせ

2000年代に入って、VOF法とLS法とが発達し、長 所や短所が分かるようになると、これら二手法の組み 合わせが登場した。これによって互いの短所を補完で きるようになった。例えば、着目流体の追跡はVOF法 で、曲率や法線ベクトルの計算はLS法でおこなう。 これをCLSVOF (Coupled Level Set Volume-of-Fluid)¹⁷⁾ 法と呼ぶ。CLSVOF法は他の手法に比べて計算精度 の高い手法として現在も広く認識されている。あえて 課題を挙げるならば、計算負荷が増大することであ る。 $\alpha と \phi$ の両方を計算する上、 ϕ の再初期化も必要に なる。そこで、もう少し簡便にVOF法とLS法とを組 み合わせる試みが、2013年にAlbadawi *et al.*¹⁸⁾によっ てなされた。これは簡便なCLSVOF法であることか ら、文字通りS-CLSVOF (Simple Coupling Level Set Volume-of-Fluid) 法と呼ばれている。

S-CLSVOF法では、代数式を基にαからφを構築す るが、空間分布の情報を考慮しないためφの長所を十 分に生かしきれているとは言い難い。そこで著者ら は、前述のTHAINC法を活用してαからφを得る計算



(a) HRIC method

法を提案した。この方法であればAdaptive Slopeに よって空間分布の情報を ϕ に反映できる。さらに、計 算負荷もほとんど増大せず、簡便さを失っていない。 本報では、これを改良S-CLSVOF法¹⁹⁾と呼ぶ。

4. 開発した手法の実証

(1) THAINC法による空間移動の正確性

Fig. 2にaを一次元的に左から右方向に移動させた テスト例を示す。比較対象として、市販ソフトでも よく利用されるHRIC法を同じ計算条件で載せてい る。例えば、a = 0が液体、a = 1が気体のように相を 判別するためにaを用いる。HRIC法では0 < a < 1の領 域が若干広がっている。これは界面の拡散という非物 理的な誤差要因になり得る。一方、THAINC法では0 < a < 1の領域が狭く、相判別により有効であることが 分かる。

Fig. 3に二次元でテストした結果を示す。円を平面 上で1周剛体回転させて、初期と同じ形状と面積を 保っていれば、それだけ精度が高いことを意味して いる。比較対象としたDonor-Acceptor法やTHINC法



(b) THAINC method



2 Numerical test of one-dimensional advection of α (from the left to right direction)









(a) Test condition

(b) Donor-Acceptor method

(c) THINC method

(d) THAINC method

Fig. 3 Numerical test of two-dimensional rotational advection of α^{14} (the line indicates the contour of $0 \le \alpha \le 1$)

では円が大きく歪んでいるのに対し、THAINC法では 円の形状がよく保持されている。なお面積の保存性は 10の-11乗のオーダーであり、計算機の倍精度計算の 打ち切り誤差程度であることを確認している。

(2) LS法の再初期化

Fig. 4に の再初期化法の比較を示す。最初に赤線 で示す矩形を配置し、再初期化計算を実施すると、φ が赤線からの距離となるように矩形の外側に線が描か れていく。φの定義から線は等間隔で構成されるが、 オリジナルの再初期化法では最初に作成した赤線の矩 形の形状が崩れ、面積が小さくなっていることが分か る。これが初期のLS法で指摘された問題であった。 前述の通り著者らが提案した再初期化法では赤線の矩 形の形状や面積が維持されていることが分かる。

(3) 改良S-CLSVOF法による表面張力精度 Fig. 5に二次元気泡の表面張力テストを示す。無重





Comparison between the two-dimensional re-initialization method for ϕ^{17}



(a) VOF method



(b) Original S-CLSVOF



(c) Modified S-CLSVOF

Fig. 5 Surface tension test on a two-dimensional bubble

力空間において液体中に気泡を円形で配置すると、 表面張力に起因する圧力(ラプラス圧)が周囲流体 の圧力場とバランスして気泡は円形のまま静止する。 VOF法ではFig. 5(a)に示すように、表面張力の計算 誤差によって圧力のバランスが崩れ、界面付近に流 れが生じて気泡が円形を維持できずに振動する問題 が分かっている。これはparasitic currentと呼ぶ問題で あり、これを克服するための技術開発が数多く提案さ れてきた。Albadawi *et al.*¹⁸⁾によるオリジナルのS-CLSVOF法では、Fig. 5(b)の通りparasitic currentが かなり抑制できている。ここからもLS関数φの導入が 表面張力の計算に有効であることが分かる。加えて著 者らによる改良S-CLSVOF法ではFig. 5(c)のように parasitic currentがさらに減少できている。

(4) さまざまな二相流の計算例

最後に上記で解説した計算手法がさまざまな流体 現象を可視化し、その理解に貢献できることを実証 する。Fig. 6はノズルから生成する気泡を示してい る。図は二次元軸対称であり、黒線の左端が対称軸



Fig. 6

Simulation of a bubble generated from a nozzle



g. 7 Simulation of liquid entrainment via a single bubble¹⁴⁾

を示している。気泡がノズルから離脱する直前に、 気体の流路が細くなって流れが加速している様子が分 かる。精度が高く計算負荷の高いCLSVOF法と比べ ても、気泡の挙動に差異がないことを確認している。

Fig. 7は気泡が上昇する際に、黒色で着色した液体 を上方へと持ち上げている様子を示している。界面 を正確に捉えた上で流体の計算をしなければ、この ような現象は予測が難しい。

Fig. 8に液滴が固体壁面上に衝突する様子を示して いる。図の右半分が高速度カメラによる観察結果、 左半分がシミュレーションの結果である。ほぼ球形 で落下してきた液滴が壁面に衝突し、一度水平方向 に平たくなった後に、再び上方へと反発しようとす る挙動がよく再現できていることが分かる。Fig.9は 傾斜させた平板上を液滴が滑落する様子を比較して いる。Fig. 9(a)は高速度カメラによる観察結果であ る。液滴は図の左上から右下に移動するが、液滴が 右下で板と接する角度(前進角)と、左上で接する 角度(後退角)は異なっている。これらの角度の問 題は実験的にはよく報告があり、機能材料でも重要 になる場面がある。ただし、理論的にはまだ完全に 解明されている訳ではない。例えば、表面の濡れ性 等に関する文献ではヤングの式がよく記述されるが、 議論は接線方向の力の釣り合いのみであって、法線 方向や摩擦に関する説明はされていない。また多く のソフトウエアにおいて、接触角は自動的には計算 されず、経験値の入力が求められることも指摘して おく。接触角を静的に測定する場合、Fig. 9(b)に示 すように、前進角と後退角の判別はされず、実際の



Droplet wetting on the plate¹⁴⁾ (from upper, 0, 2, 10 ms)





Simulation of a single droplet slipping on an inclined plane



Fig. 10 Predicted collapse of a liquid column

液滴の形状と異なる。著者らは実用性を鑑みた処方 的方法として、前進角にJiang et al.の式²⁰⁾、後退角に Hoffman-Voinov-Tanner式²¹⁾を組み合わせ**Fig. 9**(c)の 修正を試みている。実験と傾向は近づくものの、こ れでも万能なモデルとは言えない。一見単純な現象 に見えるが、固体表面の粗さや不均一性、気体と液 体の摩擦から表面張力の変化まで、ミクロな状態を マクロな現象につなぐ必要がある、非常に難しい問 題である。

Fig. 10は水柱崩壊の問題である。初期に領域の左下 に液体を矩形状に配置する。時間が経過するにつれて 液体は重力によって崩壊を始めて、底部を右方向に進 行し、やがて右壁に衝突する。この問題はダム崩壊や 津波問題としてもよく議論される。Fig. 10(b)に液体 先端速度の計算結果をKoshizuka *et al.*²²⁾による実験 結果と比較したグラフを示す。本手法は実験結果と 良好な一致を得ている。

Fig. 11はスピンコートの計算例である。計算効率 化の観点から、二次元軸対象として、一点鎖線で示 す左端を軸対象とする。図の赤い部分が液体を、青 い部分が気体を表している。液体は遠心力によって 外側(図の右方向)に濡れ広がっていくが、その過 程で液体の膜厚に約数十µmの変化が生じている。



おわりに

移動境界問題として二相界面を計算するシミュ レーション技術を紹介した。別の問題として固体と 流体が干渉するシミュレーションも闊達に研究され ている。これはFSI (Fluid Structure Interaction) と も呼ばれる。前報において、著者らはカットセル法 による高速な計算法²³⁾を紹介しており、これもFSIの 一つと見なせる。ただし経験上、固体を空間移動さ せたときに計算の収束性が低下することが分かって いる。そこで、埋込境界法(IBM、Immersed Boundary Method) などの別手法も著者らは開発している。 このようにシミュレーションはまだ完成されている (≒コンピューターが自動的にやってくれる) 技術で はなく、現象の深い洞察を基に継続的に発展させる 必要がある。その上で、ハードウエアの性能は今後 も飛躍的向上が予想されるので、どうすればその恩 恵を最大限に享受できるかを常に考えるべきである。 本稿が少しでも参考になれば幸いである。

引用文献

- 1) 梶島 岳夫, "流体工学の基礎", 森北出版 (2002).
- P. J. Roche, "コンピュータによる流体力学",構造 計画研究所 (1978).
- P. Nurse, "What is Life? Understand Biology in Five Steps", David Fickling Books (2020).
- 日本原子力学会熱流動部会編, "気液二相流の数値 解析", 朝倉書店 (1993).
- 5) 太田 光浩 ほか, "混相流の数値シミュレーション", 丸善出版 (2015).

- 6) 越塚 誠一, "数值流体力学", 培風館 (1997).
- Hirt, C. W. and B. D. Nichols, J. Comput. Phys., 39, 209 (1981).
- 8) 功刀 資彰, 日本機械学会論文集B編, 63, 1576 (1997).
- W. J. Rider and D. B. Kothe, J. Comput. Phys., 141, 112 (1998).
- T. Waclawczyk and T. Koronowicz, J. Theor. Appl. Mech., 46, 2, 325 (2008).
- O. Ubbink and R. I. Issa, J. Comput. Phys., 153, 26 (1999).
- 12) F. Xiao, et al., Int. J. Numer. Meth. Fluids, 48, 1023 (2005).
- 13) K. Yokoi, J. Comput. Phys., 226, 1985 (2007).
- 14) ダール アビナーブ ほか, 化学工学論文集, 39, 2, 86 (2013).
- M. Sussman *et al.*, J. Comput. Phys., 114, 146 (1994).
- D. Hartmann *et al.*, J. Comput. Phys., 229, 1514 (2010).
- 17) 袖山 恭介 ほか, 化学工学論文集, 46, 3, 49 (2020).
- A. Albadawi *et al.*, Int. J. Multiphase Flow, 53, 11 (2013).
- 19) N. Shimada *et al.*, 4th Int. Symp. Multiscale Multiphase Process Eng. (2022).
- 20) T. S. Jiang *et al.*, J. Colloid and Interface Sci., 69, 1, 74 (1979).
- R. Hoffmann, J. Colloid and Interface Sci., 50, 2, 228 (1975).
- 22) S. Koshizuka and Y. Oka, Nucl. Sci. Eng. 123, 421 (1996).
- 23) 島田 直樹, 住友化学, 39 (2021).

PROFILE



島田 直樹 Naoki Shimada

住友化学株式会社 生産安全基盤センター 数値計算工学統括 博士(工学)



<u>八重樫 優太</u> <u>Yuta YAECASHI</u> 住友化学株式会社 生産安全基盤センター 博士 (農学)



内橋 祐介

 Yusuke UCHIHASHI

 住友化学株式会社

 生産安全基盤センター