

AMRを導入した運動量保存型気液二相流計算への PLIC-HF法の実装

Implementing PLIC-HF Method into Gas-Liquid Two-Phase Flow Simulation
based on Momentum-Conserved Weakly Compressible Scheme with Adaptive Mesh Refinement

内田遥己¹⁾, 青木尊之²⁾, 松下真太郎³⁾

Haruki Uchida, Takayuki Aoki and Shintaro Matsushita

1) 東京工業大学大学院 (〒152-8550 東京都目黒区大岡山2-12-1, E-mail: uchida@sim.gsic.titech.ac.jp)

2) 東京工業大学 学内国際情報センター (E-mail: taoki@gsic.titech.ac.jp)

3) 東京工業大学 工学院 (E-mail: matsushita.s.ad@m.titech.ac.jp)

We have implemented PLIC-HF method into gas-liquid two-phase flow simulation based on momentum-conserved weakly compressible scheme with adaptive mesh refinement. It is known that the PLIC-HF method can calculate interfaces with high accuracy. A simulation of milk crown formation was performed as a typical application showing the performance of the implemented method. A milk crown was successfully formed with much shorter computational time and memory use to compare with the uniform mesh.

Key Words : PLIC, HF, Adaptive Mesh Refinement, Milk Crown

1. 緒言

近年、計算機の発展と計算手法の発達により、大規模気液二相流計算の研究が進んでいる。弱圧縮性流体解析手法[1]を用いることで収束性の悪いポアソン方程式を解くことなく、完全陽解法での気液二相流計算が可能となり、大規模計算のために使用されるようになった。

更に松下らは弱圧縮性流体解法を用いた気液二相流計算へのAMR (Adaptive Mesh Refinement) 法[2]の導入に成功した。高解像度格子が必要な領域に細かい格子を集めることで計算コストを削減し、複数GPUを使用した並列計算の併用により更なる大規模計算が可能となった。

加えて、弱圧縮性流体解法に対してKaiにより開発された運動量保存スキームが適応された[3]。ナビエ・ストークス方程式を非保存形で解くと気液間で適切な運動量交換がなされず、非物理的挙動を示すことがある。この問題について、運動量保存スキームを用いることで運動量と密度の定義位置を同じとし、整合性のとれた計算が可能となった。

上述のように大規模気液二相流計算は発展してきたが、界面計算の精度が課題であった。沸騰計算等の界面が複雑に混ざり合う計算や、界面の大変形を含む計算を行うためには、界面を精度よく計算する必要がある。界面を高精度に計算する手法の大規模気液二相流計算への導入は難しく、これまで実現しなかった。

そこで本研究では、AMRを導入した運動量保存型気液二相流計算へ界面を高精度に計算できるPLIC-HF法を実

装する。これにより大規模かつ非常に高精度な界面計算を可能にすることが本研究の目的である。また、界面精度の向上をミルククラウンの形成シミュレーションにより検証する。

2. 計算手法

(1) 流体数値解析手法

大規模計算に適した計算手法である弱圧縮性流体解析手法を使用する。式(1)(2)に圧縮性ナビエ・ストークス方程式と低マッハ数近似を仮定した圧力発展方程式を示す。 t は時間、 ρ は密度、 $\mathbf{u}$ は流速、 p は圧力、 $\boldsymbol{\tau}$ は粘性応力テンソル、 $\mathbf{g}$ は重力加速度、 $\mathbf{F}_s$ は表面張力項、 C_s は音速である。

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} \mathbf{u} = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_s \quad (1)$$

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

運動量保存スキームでは運動量 $\rho \mathbf{u}$ をセルセンターに定義し、セルフフェイスに流束を配置する。有限体積法を用いた離散化により運動量の保存性を担保する。運動量流束 $\mathbf{F}^{\rho \mathbf{u}}$ は質量流束 $\mathbf{F}^{\rho}$ から式(3)を用いて計算する。運動量と密度の整合性をとることで、速度を運動量から求める計算を安定して行うことができる。

$$\mathbf{F}^{\rho \mathbf{u}} = \mathbf{F}^{\rho} \mathbf{u} \quad (3)$$

質量流束 $\mathbf{F}^{\rho}$ はVOF流束 $\mathbf{F}^{\phi}$ より求める。

(2) 界面捕獲手法

界面捕獲にはVOF (Volume Of Fluid) 法[4]を用いる。セル内のある相が占める体積割合をVOF値 ϕ として定義し、VOF値の移流方程式を解くことで界面を捕獲する。体積保存性が極めて高いという特徴がある。図1のように $\phi = 0$ の領域が気相、 $\phi = 1$ の領域が液相、 $0 < \phi < 1$ の領域が界面を表す。

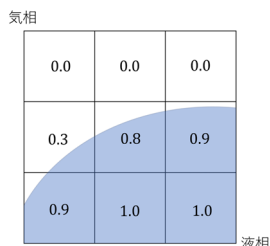


Fig.1 VOF method

VOF値 ϕ を用いて流体の密度 ρ 及び粘性係数 μ は式(4)(5)で表される。

$$\rho = \rho_l \phi + \rho_g (1 - \phi) \quad (4)$$

$$\mu = \mu_l \phi + \mu_g (1 - \phi) \quad (5)$$

ここで、下付き添え字の l は液相、 g は気相の値を表す。

(3) 表面張力の評価

表面張力の計算には横井により提案されたCSF (density-scaled Continuum Surface Force) モデルを用いる[5]。面積力である表面張力を体積力として界面近傍に振り分ける。陽的に界面を見つける必要がなく、PLIC-VOF法に組み込むことができる。表面張力 f_s は式(6)のように求める。

$$f_s = \frac{2\rho}{\rho_l + \rho_g} \sigma \kappa \nabla \phi \quad (6)$$

ここで σ は表面張力係数であり、 κ は後述するHFにより算出する界面曲率である。

3. PLIC-HF法の実装

(1) PLIC法

VOF値は離散的であるため移流計算には界面の再現が必要である。移流計算手法として様々な手法が存在する。移流計算手法の一例であるTHINC (Tangent Hyperbola for INterface Capturing) 法[6]は気液界面をヘビサイド関数で補間し流束を計算する手法である。実装が簡単であり、高い精度であることが知られている。しかし、界面の一部が気相側の流れに乗って小さなVOF値が浮遊する現象や、液相側にVOF値が小さい領域が点在し長時間消滅しない現象など非物理的な挙動を引き起こすため、非常に高精度な界面計算が必要な場合には適さない。

そこで本研究では非常に高精度な界面計算手法であるPLIC (Piecewise Linear Interface Calculation) 法[7]を実装する。図2(a)のように界面を平面として幾何的に再構築する手法であり、実装は難しい。しかし、少ない格子数でシャープに界面を記述することができ、細かな液滴や気泡を解像することができる。

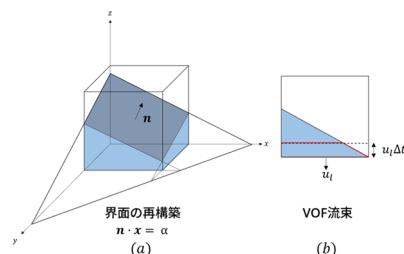


Fig.2 Interface reconstruction (a) and VOF flux calculation (b) for the PLIC method.

PLIC法によるVOF移流計算の手順は次の通りである。

始めにVOF値からMYC (Mixed Youngs-Centered) 法[8]を用いて界面法線ベクトル $\mathbf{n}$ を算出する。幾何計算を簡単にするため、界面法線ベクトル $\mathbf{n}$ は式(7)を満たすように正規化する。

$$|n_x| + |n_y| + |n_z| = 1 \quad (7)$$

次にVOF値と求めた界面法線ベクトル $\mathbf{n}$ から、界面の再構築を行う。線形の界面は式(8)で表される。ここで α は平面の方程式の切片である。

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{x} = \alpha \quad (8)$$

計算セルのVOF値は界面法線ベクトル $\mathbf{n}$ と切片 α で表すことができるため、逆問題として切片 α を計算することができる。

続いてVOF値と運動量の移流計算を行う。ここで同時に3方向同時に移流計算を行うと重複する部分が生じるため、1方向ずつ移流計算を行う。二次元計算の場合、図2(b)のように赤線に囲まれた領域がVOF流束 $\mathbf{F}\phi$ に対応する。最後に時間積分をし、他方向も同様に計算する。

(2) HF法

界面曲率の計算手法としてHF (Height Function) 法を使用する。界面曲率を計算するセルごとに座標系を定義することで、界面を高さ関数(HF)のグラフとして記述し曲率を求める手法である。界面捕獲手法にPLIC法を組み合わせる事で曲率を精度よく算出できることが知られている。また、界面近傍で発生する非物理的速度(spurious current)を抑制できる[9]。

高さ関数は次のように計算する。界面法線ベクトル $\mathbf{n}$ から最も絶対値の大きい成分を求める。例えば界面法線ベ

クトル $\mathbf{n}$ のうち z 方向成分の絶対値が最大であるとき、図3のようにセル (i, j, k) を中心に $3 \times 3 \times 7$ のステンシルをとる。

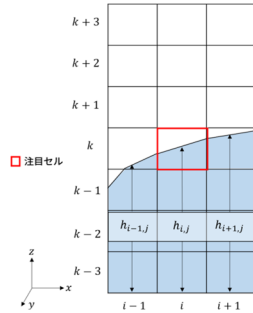


Fig.3 Schematic of HF method at $|n_z| > \max(|n_x|, |n_y|)$.

高さ関数 $h_{i,j}$ はVOF値 ϕ を足し合わせることで式(9)により計算する。 Δh は格子サイズである。

$$h_{i,j} = \sum_{m=k-3}^{k+3} \phi_{i,j,m} \Delta h \quad (9)$$

曲率 κ は高さ関数 h から式(10)により求める。

$$\kappa = \frac{h_{xx} + h_{yy} + h_{xx}h_y^2 + h_{yy}h_x^2 - 2h_{xy}h_xh_y}{(1 + h_x^2 + h_y^2)^{3/2}} \quad (10)$$

一階微分 h_x, h_y と二階のクロス微分 h_{xy} は中心差分により式(11)(12)のように離散化する。

$$h_x = \frac{h_{i+1,j} - h_{i-1,j}}{2\Delta h} \quad (11)$$

$$h_{xy} = \frac{h_{i+1,j+1} - h_{i-1,j+1} - h_{i+1,j-1} + h_{i-1,j-1}}{4\Delta h^2} \quad (12)$$

二階微分 h_{xx}, h_{yy} は式(13)により離散化する[10]. 本研究では $\gamma = 0.2$ とする。

$$\begin{aligned} h_{xx} = & \left(\gamma \frac{h_{i-1,j+1} - 2h_{i,j+1} + h_{i+1,j+1}}{\Delta h^2} \right. \\ & + \frac{h_{i-1,j+1} - 2h_{i,j+1} + h_{i+1,j+1}}{\Delta h^2} \\ & \left. + \gamma \frac{h_{i-1,j-1} - 2h_{i,j-1} + h_{i+1,j-1}}{\Delta h^2} \right) / (1 + 2\gamma) \end{aligned} \quad (13)$$

4. ミルククラウン形成のシミュレーション

(1) 概要

薄い液膜に液滴を衝突させると、クラウン状の界面形状が形成される。ミルククラウンの形成シミュレーションは多くの研究者によって行われている[11]. 形成されるクラウン状の薄い界面の解像と表面張力の正確な計算を両立する必要があり、ミルククラウンの再現は難しい。本研究では導入した計算手法を用いて、ミルククラウン形成シミュレーションを実施した。本計算手法の界面計算精度の高さを示す。

(2) 計算条件

計算初期状態を図4に示す。計算条件はKai[12]を参考にした。計算領域 $0.06 \text{ m} \times 0.06 \text{ m} \times 0.02 \text{ m}$ の中に半径 7.04 mm の液滴を配置する。液滴に初速度 -1.61 m/s を与え、厚さ 0.89 mm の液膜に衝突させる。液相は $\rho_l = 1000 \text{ kg/m}^3$, $\mu_l = 1.0 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$, 気相は $\rho_g = 1 \text{ kg/m}^3$, $\mu_g = 1.0 \times 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ とした。表面張力係数を $\sigma = 0.07275 \text{ N/m}$ とする。ウェーバー数 We は 250 である。境界条件は全ての面でノンスリップ境界とする。最細格子サイズは $ds = 3.90625 \times 10^{-5} \text{ m}$ とする。Kaiは本研究の最細格子と同じ格子サイズを使用した均一格子計算を実施している。Kaiは対称性を考慮した1/4の計算領域を使用しているため、本研究の計算領域は4倍である。計算にはA100 (80GB) を2台使用した。

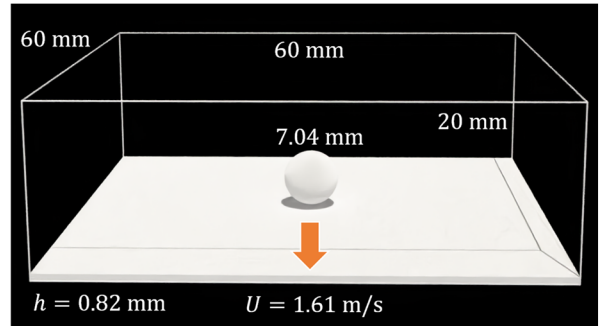


Fig.4 Calculation condition.

(3) 計算結果および考察

ミルククラウンの形成シミュレーションの結果を図5に、AMR格子の配置を図6に示す。 $t = 32 \text{ ms}$ においてミルククラウンの形成が明瞭に確認できる。

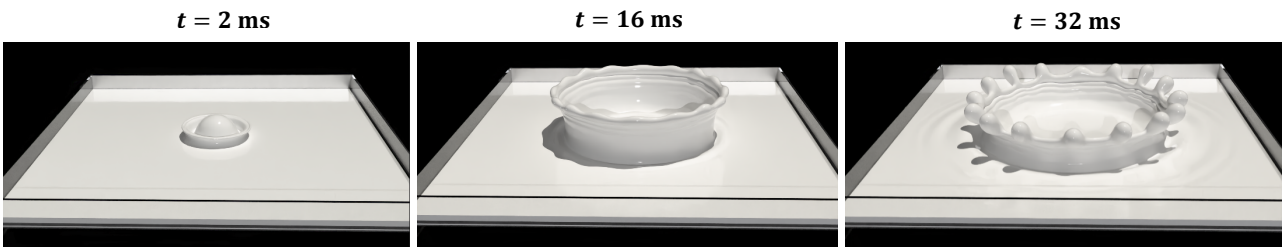


Fig.5 Milk crown formation.

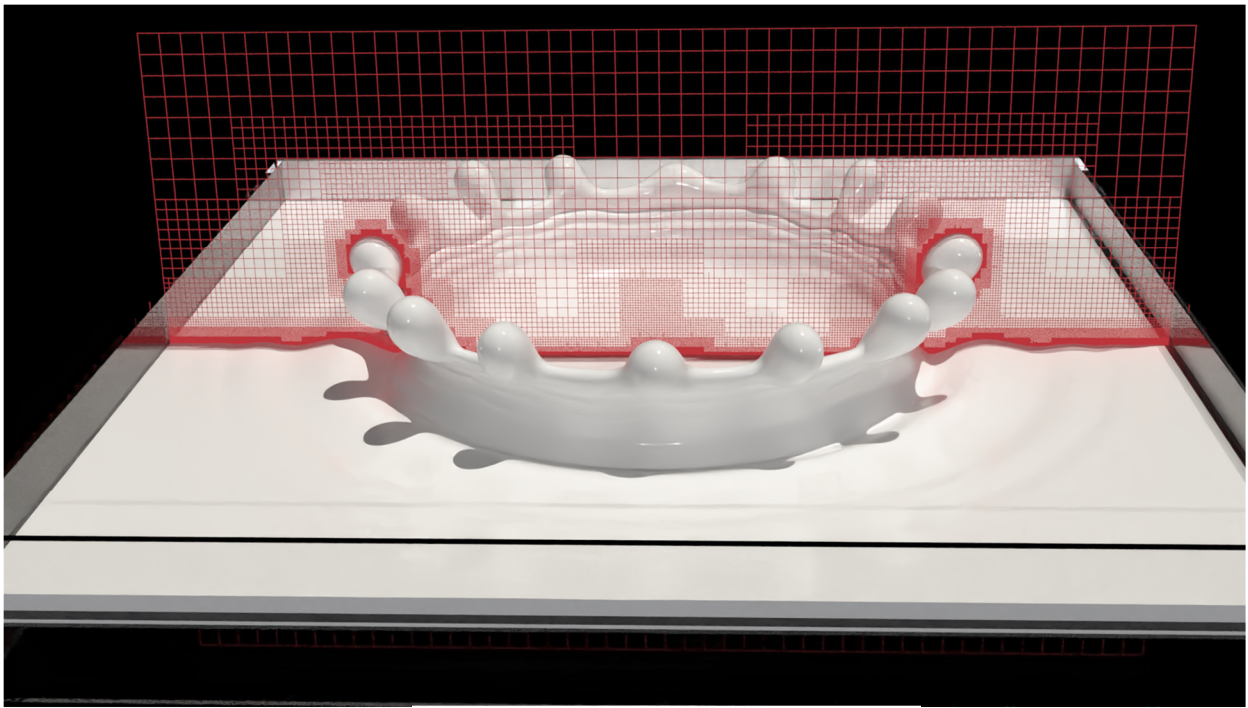


Fig.6 Milk crown with AMR Mesh at $t = 32\text{ms}$.

AMRを使用しているため、図6のように最細格子は界面近傍に集中している。

KaiはV100を18台使用し、 $t = 44\text{ ms}$ まで6.5時間であった。一方で本研究ではA100を2台使用した計算であり、同時刻までの計算時間は18.3時間であった。本研究はKaiと比較して計算領域が4倍、並列数も1/9であるが、高速かつ消費メモリを大きく抑えた計算が可能となっている。

さらに、GPU並列数を増やすことでKaiよりも小さい格子を使用した計算も可能である。

5. 結言

AMRを導入した運動量保存型気液二相流計算へのPLIC-HF法の実装を行い、大規模計算において界面を高精度に計算できるようになった。応用計算として実施したミルククラウン形成シミュレーションにより、界面の大変形を含む流れ計算においても適切に表面張力を含む流体計算が可能であることが分かった。均一格子を使用したKaiの結果と比較して、計算速度や消費メモリが大きく改善されたことを確認した。

謝辞

本研究は科学研究費補助金・基盤研究(S) 課題番号19H05613「自由界面を含む混相流の革新的数値流体シミュレーション」および HPCIシステム利用研究課題hp240161「高熱流束における微細構造を解像する核沸騰シミュレーション」から一部支援を頂いた。計算には、東京工業大学・情報基盤センター「TUBAME4.0」、東京大学・情報基盤センター Wisteria/BDEC-01 Aquarius、名古屋大学・情報基盤センター「不老」を利用させて頂いた。記して謝意を記す。

参考文献

- [1] Shintaro Matsushita and Takayuki Aoki: A weakly compressible scheme with a diffuse-interface method for low mach number two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, Vol.376, pp.838–862, 2019.
- [2] Marsha, J. and Joseph, O.: Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, Vol.53, No. 3, pp.484–512, 1984.
- [3] Kai Yang, Takayuki Aoki: GPU-based cell-centered AMR for two-phase flow simulation using an iterative pressure-evolution projection method, *International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics*, 2020.
- [4] C.W Hirt and B.D Nichols: Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, Vol.39, No. 1, pp.201–225, 1981.
- [5] Kensuke Yokoi: A practical numerical framework for free surface flows based on CLSVOF method, multi-moment methods and density-scaled CSF model, *Numerical simulations of droplet splashing*, *Journal of Computational Physics*, Vol.232, pp.252–271, 2013.
- [6] Kensuke Yokoi: Efficient implementation of THINC scheme: A simple and practical smoothed VOF algorithm, *Journal of Computational Physics*, Vol.226, pp.1985–2002, 2007.
- [7] David L Youngs: Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion, *Numerical methods for fluid dynamics*, 1982.
- [8] ulisa, E., Manservigi, S., Scardovelli, R., Zaleski, S.: Interface reconstruction with least squares fit and split advection in three-dimensional cartesian geometry, *J. Comput. Phys.* 225(2), pp.2301–2319, 2007.
- [9] T Abadie, J Aubin, and D Legendre: On the combined effects of surface tension force calculation and interface advection on spurious currents within volume of fluid and level set frameworks. *Journal of Computational Physics*, Vol.297, 2015.
- [10] J L'opez, C Zanzi, P G'omez, R Zamora, F Faura, and J Hern'andez: An improved height function technique for

computing interface curvature from volume fractions, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol.198, pp.2555-2564, 2009.

- [11] Yarin, A.L., et al.: Drop impact dynamics: splashing, spreading, receding, bouncing. Ann. Rev. Fluid Mech. 38(1), pp.159-192, 2006.

- [12] Kai Yang and Takayuki Aoki: Multi-GPU Scaling of a Conservative Weakly Compressible Solver for Large-Scale Two-Phase Flow Simulation, Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies, pp.16-27, 2023.