



S-CLSVOF法の OpenFOAMへの実装

大阪大学大学院基礎工学研究科
物質創成専攻化学工学領域
修士2年 山本卓也



混相流とは

混相流・・・複数の相が混ざり合う流れ

例)気液二相流(空気-水)

液液二相流(水-油)

固液二相流(粒子-水)

キャビテーション、気泡塔

有機溶媒と水の混合溶液

懸濁液

工業的に重要であることが多い

混相流例； ミルククラウン



富原ら,数値流体シンポジウム,2011,C04-3

様々な数値計算法が存在する



混相流の数値計算法

混相流のシミュレーションを分類すると以下の通りになる

- メッシュフリー法
- 界面捕獲法 (Interface Tracking)
- 界面追跡法 (Interface Capturing)
- 平均化(二流体)モデル

- メッシュフリー法

粒子法(MPS, SPH)

- 界面捕獲法

VOF法

Level-Set法

Phase Field法

Front-Tracking法

- 界面追跡法

BFC(界面適合座標)



それぞれの手法の特徴

• メッシュフリー法

微小の粒子の運動で表現する

メッシュ分割が不必要

衝撃波等の不連続場の扱いが容易

大変形、歪みに対して精度保持

精度が悪い

計算時間多大

• 界面捕獲法

計算格子を移動せずに計算する

手法によって異なるが界面がなまる

• 界面追跡法

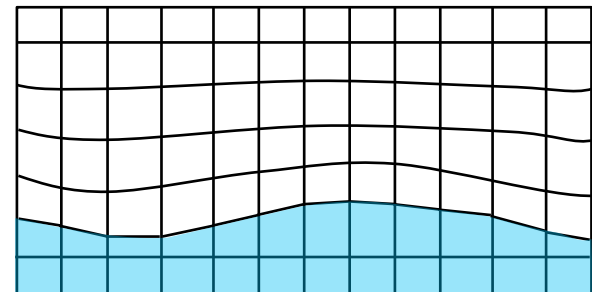
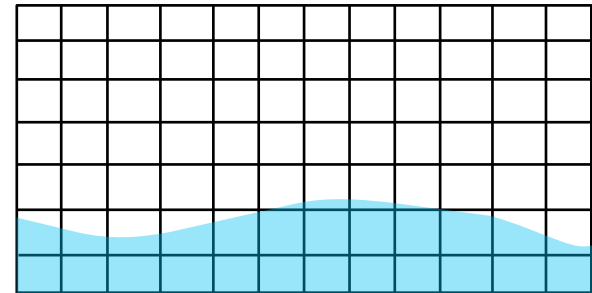
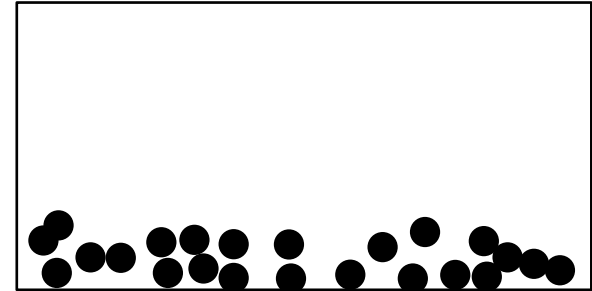
計算格子を時々刻々と移動する

精度がかなり高い

計算が破綻しやすい

砕波現象等の大変形をするものに不向き

概念図





OpenFOAMにおける実装

- メッシュフリー法

?粒子法

- 界面捕獲法

○VOF法

×Level-Set法

×Phase Field法

×Front tracking法

- 界面追跡法

△BFC(界面適合座標)



混相流のコードが少ない
ほとんどVOF法(interFoam系)

interFoam

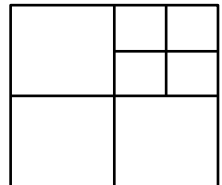
interDymFoam

interMixingFoam

...

VOF法

+



AMR(Adaptive Mesh Refinement)

局所格子分割するライブラリ



VOF法の精度改善方法

VOF法

VOF法 + AMR

CLSVOF法

VOF/PLIC法

VOF/SLIC法

VOF/WLIC法

VOF/IB法

数値スキーム

CIP法

WENO法

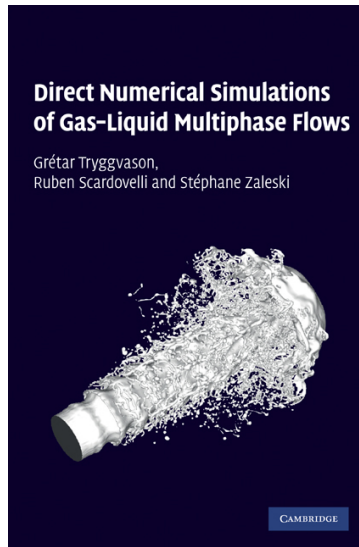
界面再構築のアルゴリズム

PLIC (Piecewise Linear Interface Calculation)

SLIC (Simple Line Interface Calculation)

WLIC (Weighted Line Interface Calculation)

様々なものが存在



洋書

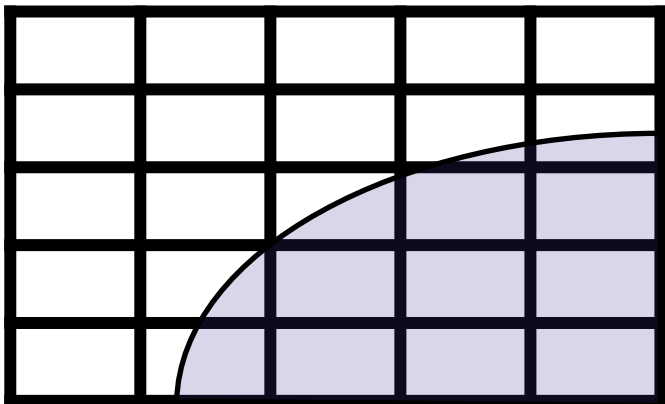
2011年出版(初版)

Cambridge Univ. Press

混相流の計算手法について
(主にVOF系, Front-Tracking,
Level-Set など)

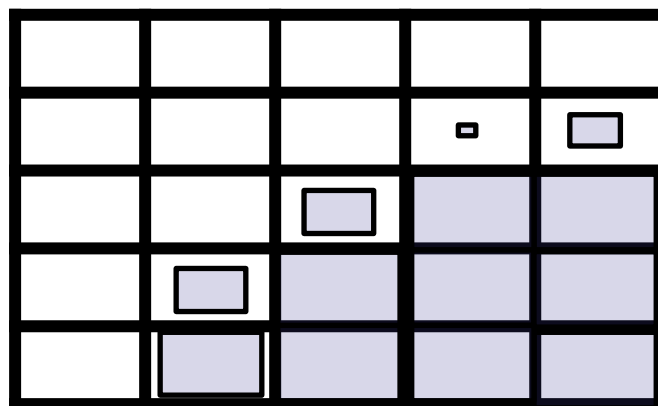


VOF法の界面再構築法



VOF

0	0	0	0	0
0	0	0	0.1	0.3
0	0	0.5	0.95	1.0
0	0.4	1.0	1.0	1.0
0	0.7	1.0	1.0	1.0

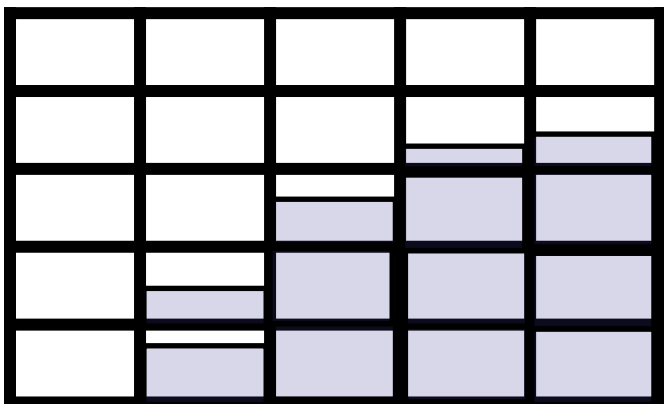
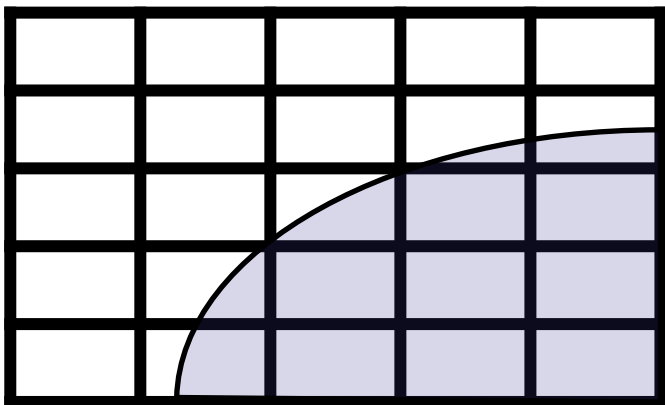


精度悪い
界面がなまりやすい

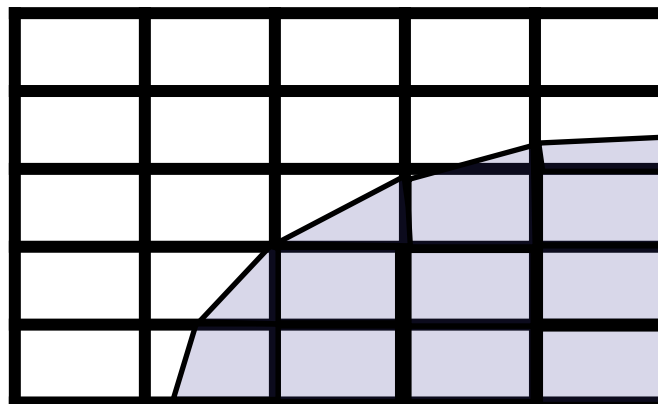
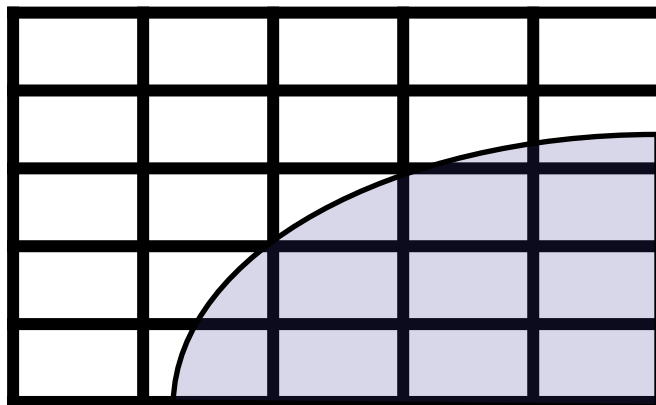


VOF法の界面再構築法

VOF-SLIC



VOF-PLIC



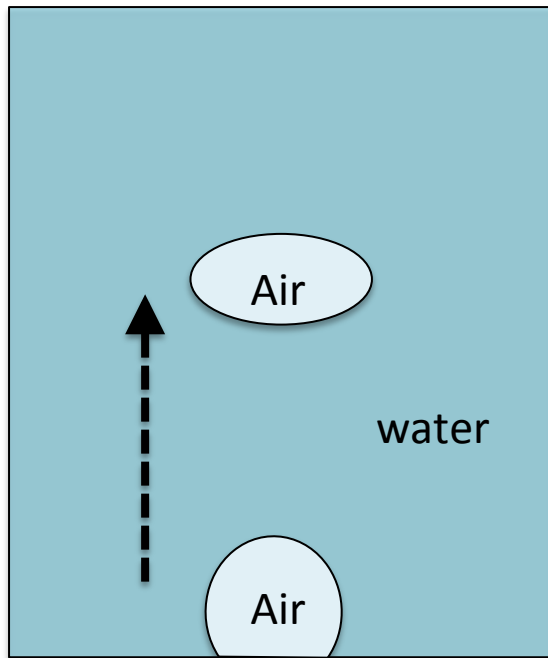
精度高

界面の再構築のアルゴリズムが非常に難しい

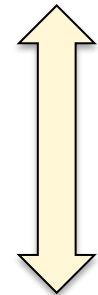


A. Albadawi *et al.* (2013)

S-CLSVOF (Simple Coupled Volume of Fluid with Level Set method)



VOF法(interFoam)



実験

誤差大

脱離時間
約35~50%
脱離体積
約25%

S-CLSVOF法



実験

誤差小

脱離時間
約2%
脱離体積
約3%

今回はS-CLSVOF法の実装とその検証



interFoam (VOF法)

- 支配方程式

Navier-Stokes 式

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F}_\sigma + \rho \mathbf{g}$$

$$\mathbf{F}_\sigma = \sigma \kappa \mathbf{n} \delta_s \quad \text{CSFモデル}$$

流体率 α の移流方程式

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{v}) = 0$$

$$\alpha = 1 \quad :: \text{liquid phase}$$

$$0 < \alpha < 1 \quad :: \text{interface}$$

$$\alpha = 0 \quad :: \text{gas phase}$$

$$\rho = \alpha \rho_l + (1 - \alpha) \rho_g$$

$$\mu = \alpha \mu_l + (1 - \alpha) \mu_g$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{v}) = 0$$



液相領域 $\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{v}_l) = 0$

固相領域 $\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot ((1 - \alpha) \mathbf{v}_g) = 0$

小文字 l, g はそれぞれ液相、気相を表す。

再定義

$$\mathbf{v} = \alpha \mathbf{v}_l + (1 - \alpha) \mathbf{v}_g$$

$$\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_l - \mathbf{v}_g$$

\mathbf{v}_r : 相関速度 (圧縮速度)



interFoam (VOF法)

- 支配方程式

Navier-Stokes 式

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F}_\sigma + \rho \mathbf{g}$$

$$\mathbf{F}_\sigma = \sigma \kappa \mathbf{n} \delta_s$$

流体率 α の移流方程式

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{v}) = 0$$

$$\alpha = 1 \quad :: \text{liquid phase}$$

$$0 < \alpha < 1 \quad :: \text{interface}$$

$$\alpha = 0 \quad :: \text{gas phase}$$

$$\rho = \alpha \rho_l + (1 - \alpha) \rho_g$$

$$\mu = \alpha \mu_l + (1 - \alpha) \mu_g$$

最終形

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{v}) + \nabla \cdot ((1 - \alpha) \alpha \mathbf{v}_r) = 0$$

alphaEqn.H中で設定

この項は界面上に働くもの
(1- α) α が入っているため



実際の物理現象では界面厚みがないため数値計算のために用いられる仮想的なもの



interFoam (VOF法)

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{v}) + \nabla \cdot ((1 - \alpha) \alpha \mathbf{v}_r) = 0$$



離散化 (program中で解く形に変換)

α 式の設定

$$\frac{d}{dt} \int_{\Delta V} \alpha dV + \int_S \alpha \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} dS + \int_S (1 - \alpha) \alpha \mathbf{v}_r \cdot \mathbf{n} dS$$

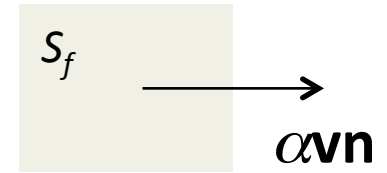
離散化

中点公式により近似

$$(\alpha \mathbf{v} \cdot \mathbf{n})_f \cdot S_f$$

$$((1 - \alpha) \alpha \mathbf{v}_r \cdot \mathbf{n})_f \cdot S_f$$

イメージ



ここで、 f はセル界面上を表す。
 S_f は表面積

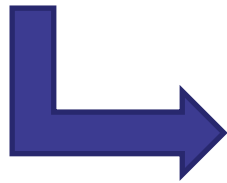
MULESでこのfluxを計算



interFoam (VOF法)

人工的に界面幅を圧縮する項

$$\left((1 - \alpha) \alpha \underline{v}_r \cdot \underline{n} \right)_f \cdot S_f$$



OpenFOAMのコード内

$$n_f \min \left[C_\alpha \frac{|u_f \cdot S_f|}{|S_f|}, \max \left(\frac{|u_f \cdot S_f|}{|S_f|} \right) \right]$$

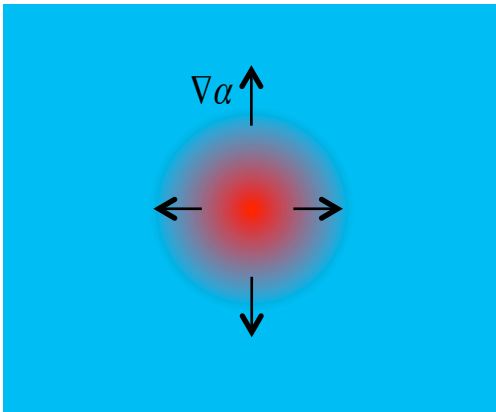
α 場 (赤:流体,
青:気体)

$$n_f = n_{fv} \cdot S_f$$

$$n_{fv} = \frac{(\nabla \alpha)_f}{|(\nabla \alpha)_f + \delta_N|}$$

$$\delta_N = \frac{1.0e^{-8}}{\left(\sum_N V_i / N \right)^{1/3}}$$

解を安定化するもの
(n_{fv} が無限大になるのを防ぐ)





S-CLSVOF法

- 支配方程式

Navier-Stokes 式

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F}_\sigma + \rho \mathbf{g}$$

流体率 α の移流方程式

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{v}) = 0$$

$\alpha = 1$:: liquid phase

$0 < \alpha < 1$:: interface

$\alpha = 0$:: gas phase

$$\rho = \alpha \rho_l + (1 - \alpha) \rho_g$$

$$\mu = \alpha \mu_l + (1 - \alpha) \mu_g$$

Level-Set関数 ϕ

$$\phi_0 = (2\alpha - 1) \cdot \Gamma$$

Γ ; 無次元数

$$\Gamma = 0.75 \Delta x$$

Δx ; 無次元数

Re-initialization equation

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = S(\phi_0) (1 - |\nabla \phi|)$$

$$\phi(x, 0) = \phi_0(x)$$

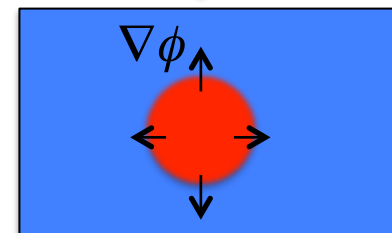
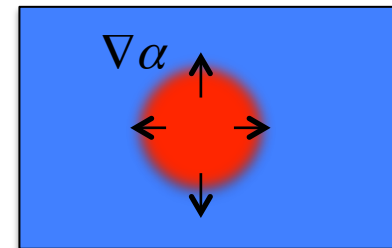
反復回数 ϕ_{corr}

$$\phi_{corr} = \frac{\varepsilon}{\Delta \tau}$$

界面幅 ε

$$\varepsilon = 1.5 \Delta x$$

イメージ





S-CLSVOF法

- 支配方程式

Navier-Stokes 式

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F}_\sigma + \rho \mathbf{g}$$

流体率 α の移流方程式

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{v}) = 0$$

$\alpha = 1$:: liquid phase

$0 < \alpha < 1$:: interface

$\alpha = 0$:: gas phase

$$\rho = \alpha \rho_l + (1 - \alpha) \rho_g$$

$$\mu = \alpha \mu_l + (1 - \alpha) \mu_g$$

CSFモデル

$$\mathbf{F}_\sigma = \sigma k \delta \nabla \phi$$

曲率

$$k = -\nabla \cdot \mathbf{n}_f = -\nabla \cdot \left(\frac{(\nabla \phi)_f}{(\nabla \phi)_f + \delta} \right)$$

ディラック関数 δ

$$\delta(\phi) = 0$$

$$\delta(\phi) = \frac{1}{2\varepsilon} \left(1 + \cos \left(\frac{\pi \phi}{\varepsilon} \right) \right) \quad \begin{array}{l} |\phi| > \varepsilon \\ |\phi| \leq \varepsilon \end{array}$$

ヘビサイド関数 H

$$H(\phi) = 0$$

$$H(\phi) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\phi}{\varepsilon} + \frac{1}{\pi} \sin \left(\frac{\pi \phi}{\varepsilon} \right) \right)$$

$$H(\phi) = 1$$



S-CLSVOF法

- 支配方程式

Navier-Stokes 式

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla P + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F}_\sigma + \rho \mathbf{g}$$

流体率 α の移流方程式

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{v}) = 0$$

$\alpha = 1$:: liquid phase

$0 < \alpha < 1$:: interface

$\alpha = 0$:: gas phase

$$\rho = \alpha \rho_l + (1 - \alpha) \rho_g$$

$$\mu = \alpha \mu_l + (1 - \alpha) \mu_g$$

ヘビサイド関数 H

$$H(\phi) = 0$$

$$H(\phi) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\phi}{\varepsilon} + \frac{1}{\pi} \sin \left(\frac{\pi \phi}{\varepsilon} \right) \right) \quad |\phi| \leq \varepsilon$$

$$H(\phi) = 1$$

$$\phi < -\varepsilon$$

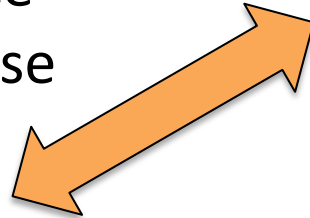
$$|\phi| \leq \varepsilon$$

$$\phi > \varepsilon$$

$$\rho = H \rho_l + (1 - H) \rho_g$$

$$\mu = H \mu_l + (1 - H) \mu_g$$

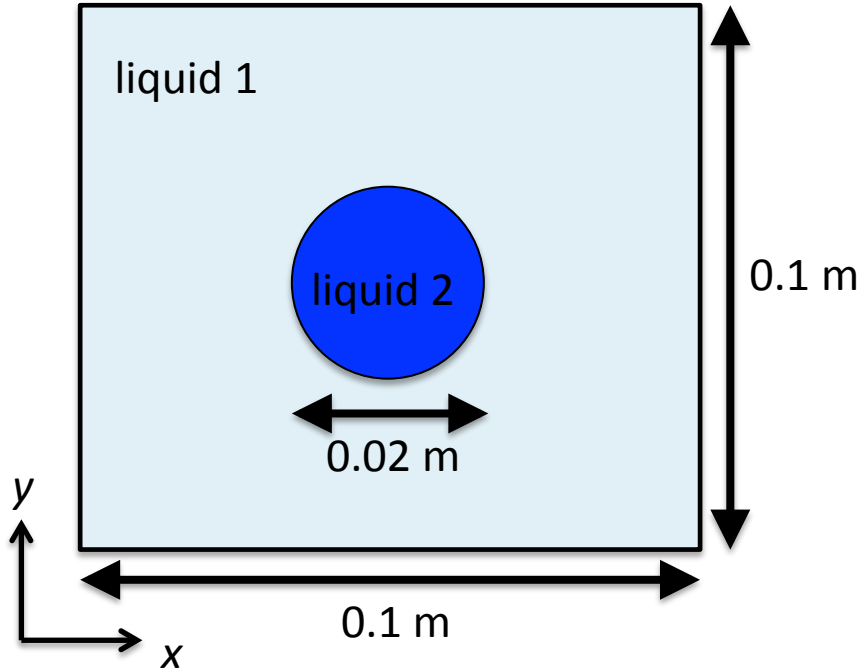
一般には物性値をヘビサイド関数で更新
しかし、A. Albadawi *et al.* (2013)では
物性値はヘビサイド関数で更新せず





計算例 1 (キャビティ内液滴)

0.5 m/s



目的

剪断によって液滴がどのように変形するか
(浮力差による影響は無視するため物性は
liquid 1とliquid 2で同じで表面張力のみ発生
するという系)

物性値

動粘度 $1.0 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$

表面張力 10 mN/m

計算格子

200 x 200 (x, y direction)

計算 1

interFoam (VOF法)

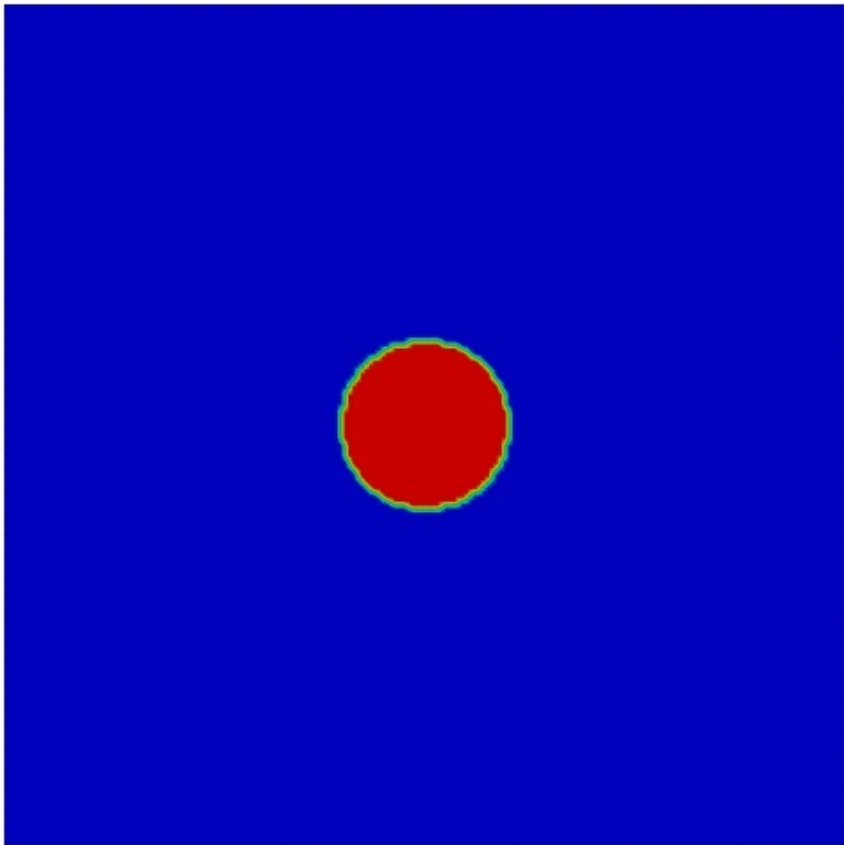
計算 2

sclsVOFFoam(S-CLSVOF法)

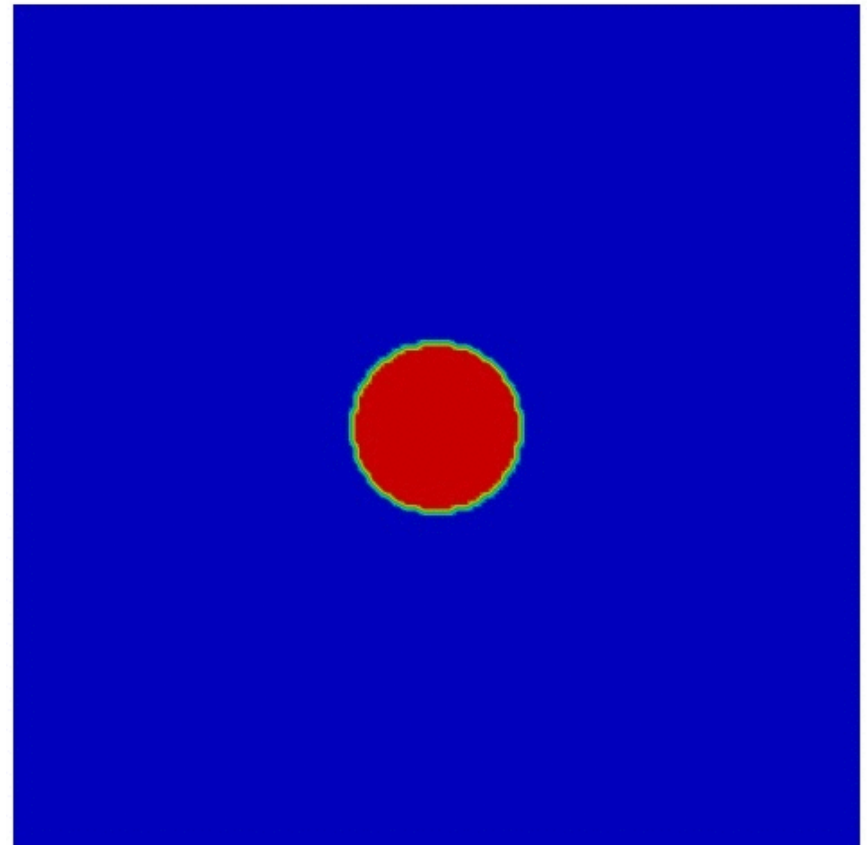


計算例 1 (キャビティ内液滴)

VOF法



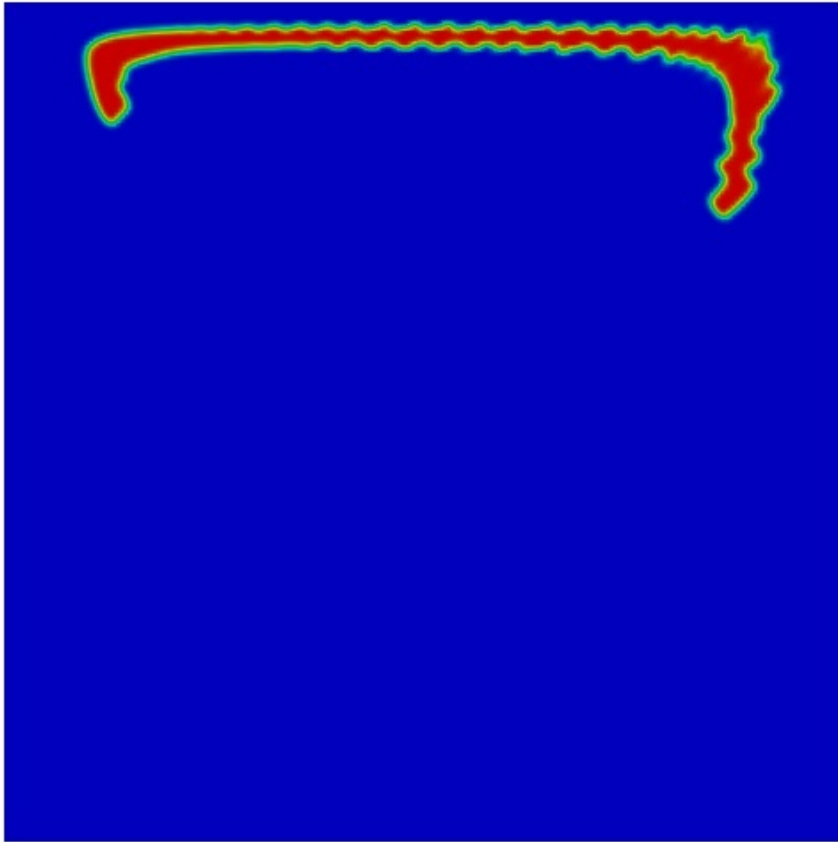
S-CLSVOF法





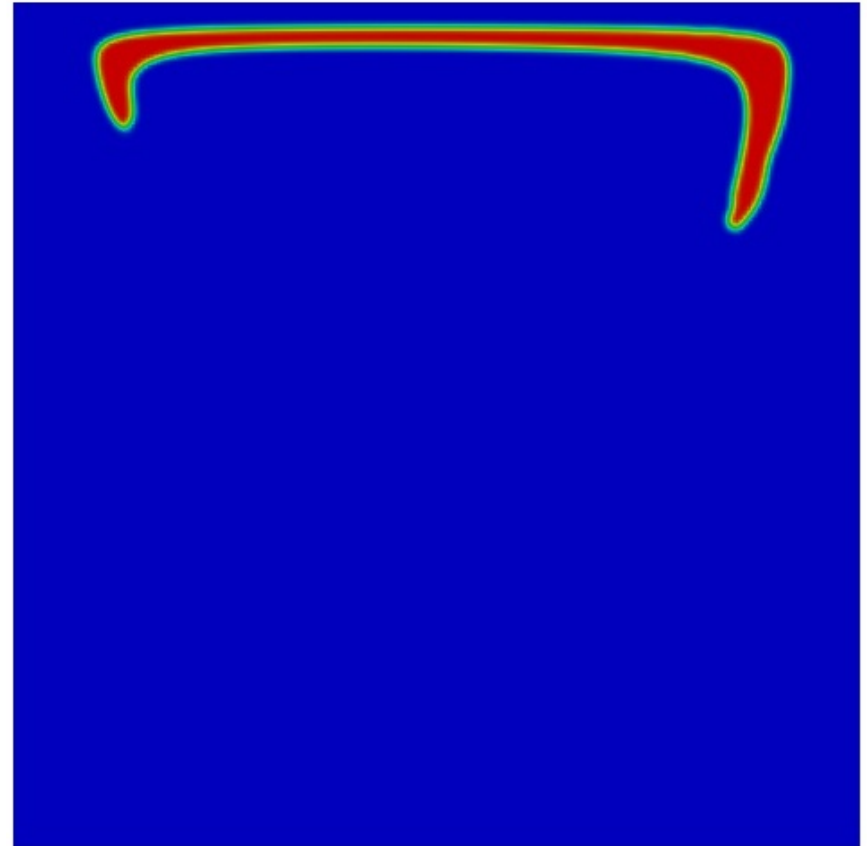
計算例 1 (キャビティ内液滴)

VOF法



界面の数値的な振動

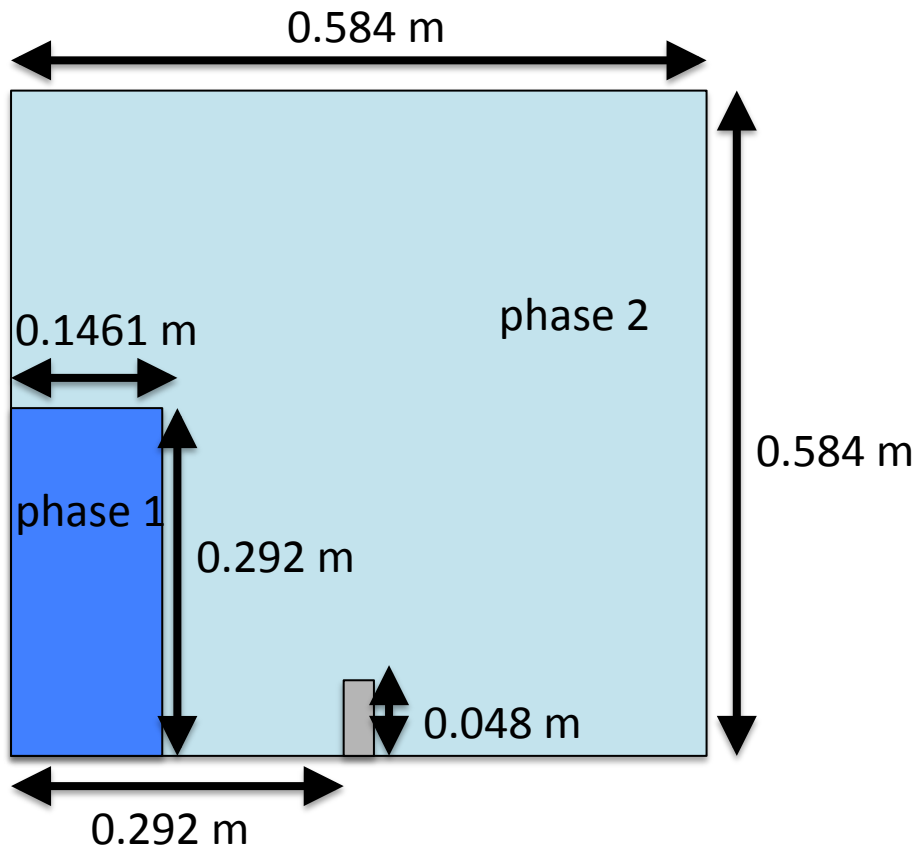
S-CLSVOF法



界面がスムーズ



計算例2 (ダムブレイク)



phase 1

動粘度 $1 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$

密度 1000 kg/m^3

phase 2

動粘度 $1.48 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

密度 1 kg/m^3

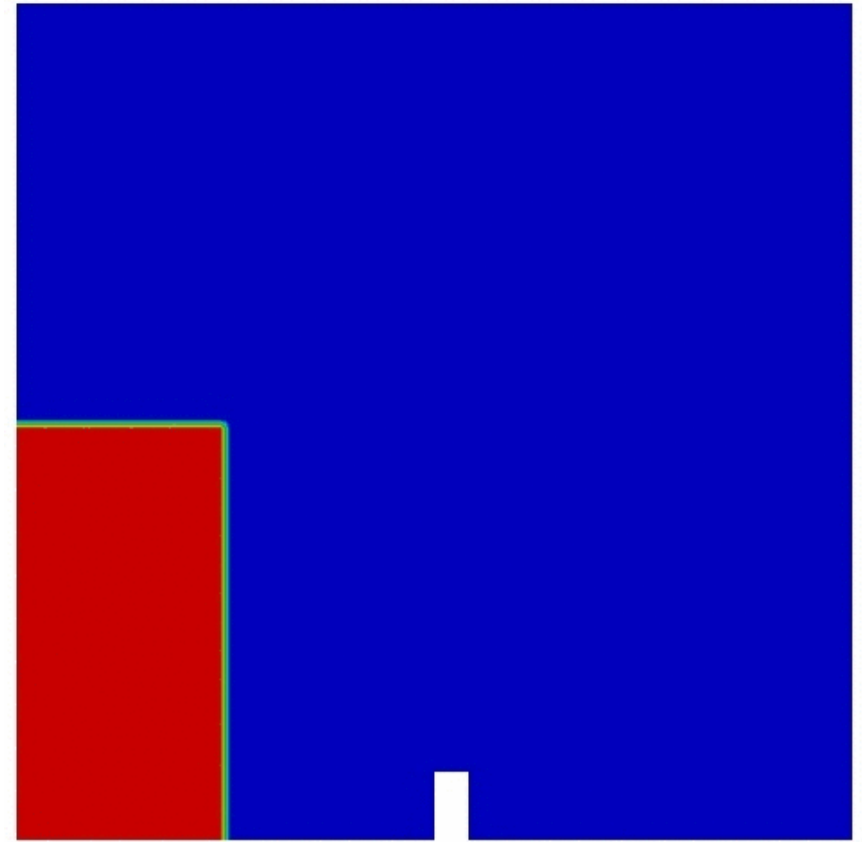
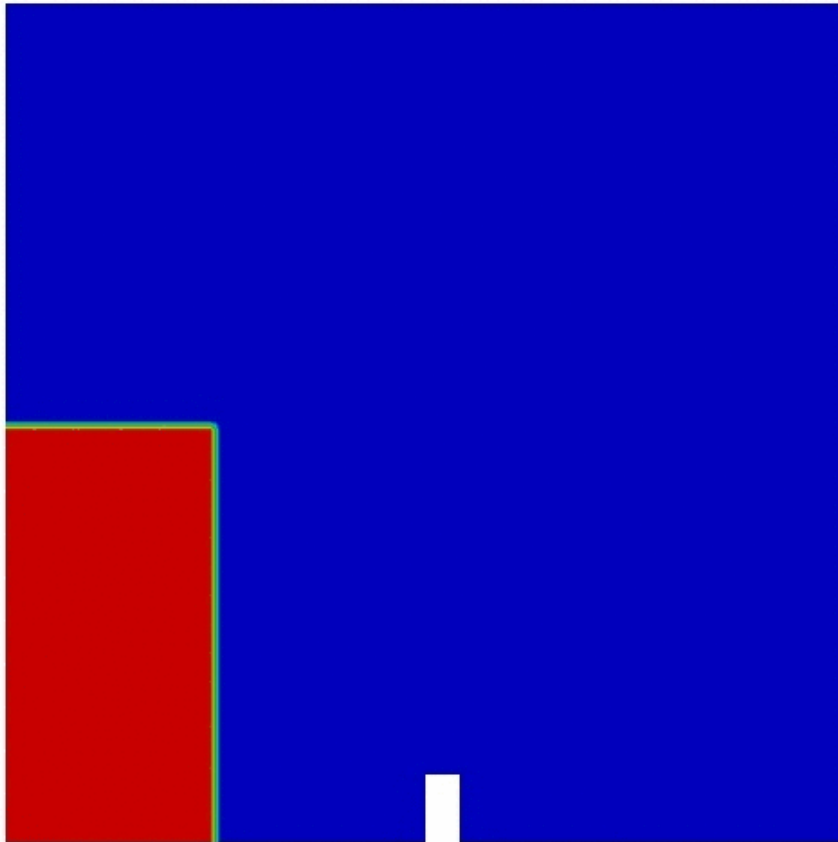
表面張力 70 mN/m



計算例2 (ダムブレイク)

VOF法

S-CLSVOF法



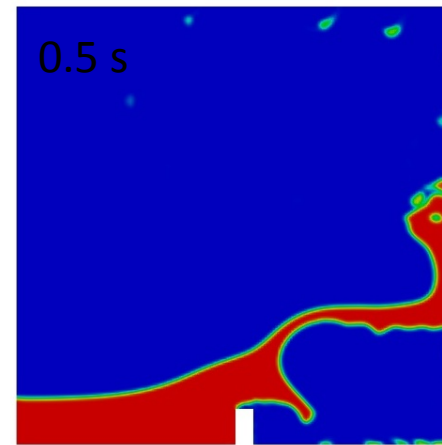
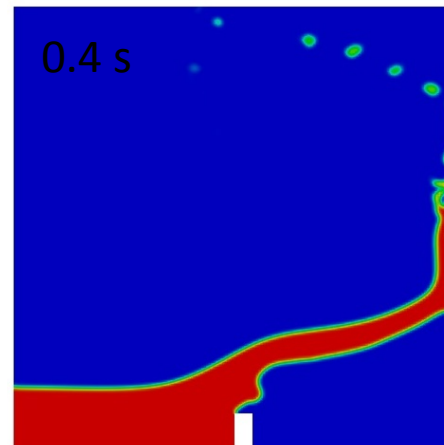
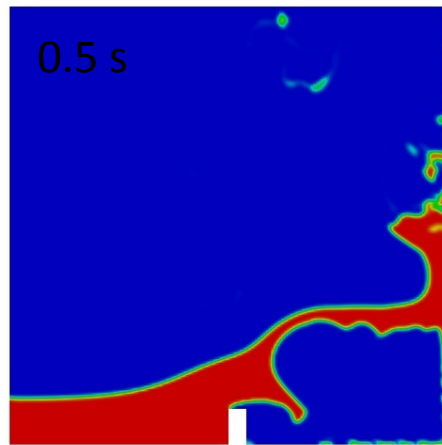
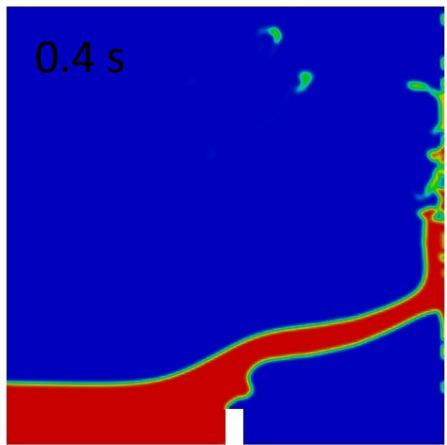
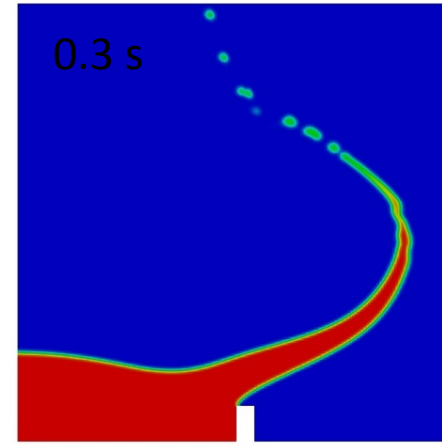
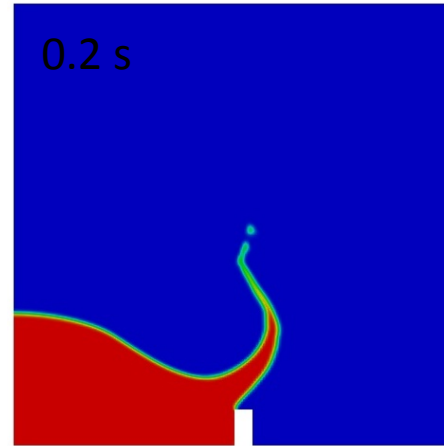
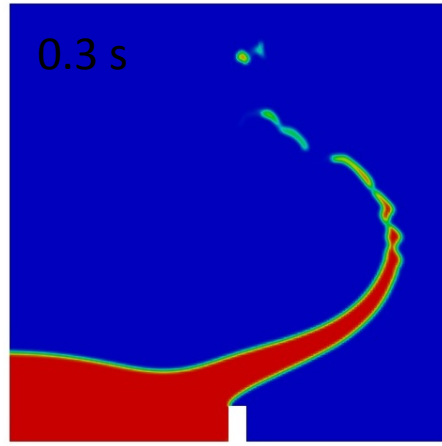
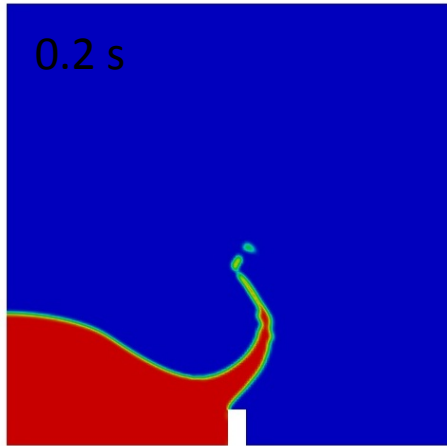
計算時間 約1.36倍



計算例2 (ダムブレイク)

VOF法

S-CLSVOF法





まとめ

- S-CLSVOF法の実装に成功した
- S-CLSVOF法の方が確実に精度が高い
- 計算時間少し上昇
- 他のケースにも実装予定 (interDymFoam等)
- 物性値の更新も実装予定
- コードが見せれるようになればOpenにする予定(綺麗に書き直し・コード検証)
- CLSVOF法も時間があれば挑戦予定



まとめ

コード開発者・コード検証者求めています

もし、興味があるようでしたら

個別に連絡の方よろしく申し上げます