

非構造格子に基づく流体粒子数値予測手法に関する研究

長 正和* , 林 公祐** , 赤対 秀明***

Study on Interface Tracking Method based on Unstructured Grid

Masakazu CHO* Kosuke HAYASHI** Hideaki SHAKUTSUI***

ABSTRACT

Numerical methods of grid generation and velocity-pressure coupling are examined to develop an accurate interface tracking method. Grid type chosen is unstructured and element shape is triangle. A modified Delaunay triangulation is used to automatically generate triangle elements. The velocity and pressure fields are coupled based on the SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation) with the collocated arrangement. These methods are examined through the following benchmark problems: (1) drag forces acting on a cylinder and a sphere in infinite medium, (2) drag forces acting on spheres in circular tubes and (3) grid regeneration for a deforming boundary. The result confirms that the SIMPLE based on the unstructured triangle elements gives good predictions for drag coefficients of the cylinder and sphere, and the modified Delaunay triangulation generates high quality elements even if the boundary deforms. It is, therefore, expected that an accurate interface tracking method for deforming fluid particles can be developed by combining the SIMPLE and the grid regeneration algorithm.

Keywords : Fluid particle, Delaunay triangulation, Unstructured grid, Finite volume method

1 はじめに

気泡や液滴（流体粒子）を含む流れは化学反応塔や石油輸送パイプラインなど、多くの工業装置で見受けられる。したがって、流体粒子の運動を正確に予測することは、工業装置の設計上重要である。近年では、流体粒子運動の詳細な数値予測が試みられているが、流体粒子に働く抗力や揚力などに関する知識および評価モデルは不足した状態にあるのが現状である。

単一あるいは少数の流体粒子の高精度な計算を目的とする場合、流体粒子と周囲流体中で成立する連続の式および運動方程式を、界面における跳躍条件を考慮して解く界面追跡法^{(1),(2)}が用いられる。気泡の場合、気相の粘性が小さいため、跳躍条件において気相側粘性応力を無視できる。したがって、気泡体積一定の条件より跳躍条件における気泡内圧を与えれば、気泡内部の速度場を解かなくてもよい。流体粒子内部のメッシングを行う必要がない⁽³⁾。これまでに、流体粒子の界面に沿った構造格子を生成する境界適合格子法に基づく界面追跡法によって、三次元領域における変形気泡の流れの数値計算が行われている⁽³⁾。一方、液滴の場合、液滴内部の流れも同時

に解く必要があるため、流体粒子内部のメッシングが必要になる。しかしながら、変形液滴内部の流れを構造格子を用いて解く場合、時間経過に伴い変形・移動する液滴内部に質の良い構造格子を自動生成することは難しいため、これまでの構造格子に基づく境界適合格子法では変形しない液滴のみを対象としている^{(4),(5)}。

本研究では、変形を伴う流体粒子の抗力や揚力などの流体力のモデリングに利用できる界面追跡法の開発を目標とする。本報ではその第一段階として、格子構造や数値解法に関して、目標の達成に適した要素技術を選定する。また、選定した各々の要素技術の特性をいくつかの検証計算を通して検討する。

2 基礎方程式

本研究では、非加熱系の非圧縮性二相流を対象とする。この場合、流体粒子内部および外部では、式(1)および(2)に示す運動方程式と連続の式が成立する。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho u_i d\Omega = \int_S (-\rho u_i u_j - p \delta_{ij} + \tau_{ij}) dS_j + \int_{\Omega} \rho g_i d\Omega \quad (1)$$

$$\int_S u_j dS_j = 0 \quad (2)$$

ここで、 t は時間、 ρ は密度、 u_i は速度ベクトル、 p は圧

* 専攻科 機械システム工学専攻

** 神戸大学大学院 機械工学専攻

*** 機械工学科 教授

力, δ_{ij} はクロネッカーのデルタ, τ_{ij} は粘性応力テンソル, g_i は重力加速度ベクトル, $d\Omega$ は微小体積要素, dS_j は面積要素ベクトルである.

二相界面では, 相変化なし, すべりなしの条件下で, 式(3)~(6)に示す跳躍条件が成立する.

$$u_n^{(o)} = u_n^{(i)} \tag{3}$$

$$u_t^{(o)} = u_t^{(i)} \tag{4}$$

$$-p^{(o)} + \tau_{nn}^{(o)} = -p^{(i)} + \tau_{nn}^{(i)} - \sigma\kappa \tag{5}$$

$$\tau_m^{(o)} = \tau_m^{(i)} \tag{6}$$

ここで, 上付添字(i), (o)は各流体粒子内部および外部の量を意味し, 下付添字 n, t は界面法線および接線方向成分を意味する. また, σ は界面張力, κ は界面曲率である.

3 変形を伴う流体粒子数値予測のための手法選定

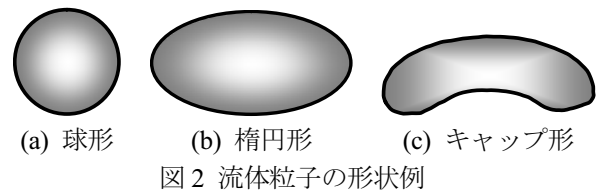
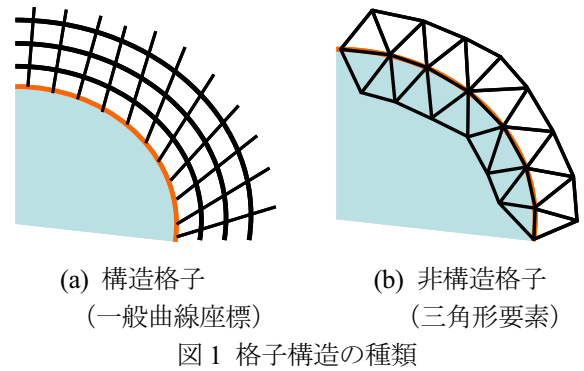
気泡や液滴の運動を高精度に予測するためには, 以下の特性を具備する計算技術が必要となる.

- (a) 界面近傍など精度が必要な領域に格子を集中可能な格子構造
- (b) 流体粒子内外に質の良い格子を容易に生成できる格子生成法
- (c) 界面変形に伴って格子を再生成できる格子生成法
- (d) 内外の解を界面上でマッチングするための反復計算アルゴリズム

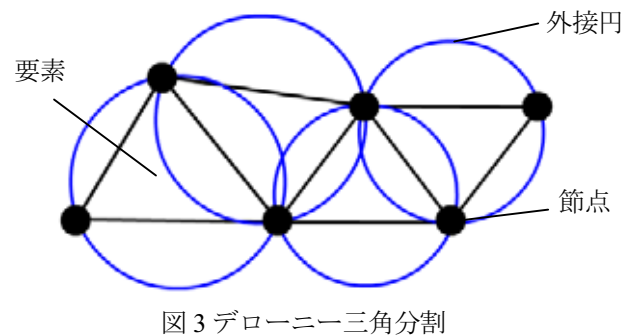
3.1 格子構造 跳躍条件を正確に考慮するためには, 界面上に格子点を設け, 格子線によって界面形状を表現する方法が良い. 従来は図 1(a)のような一般曲線座標に基づく構造格子を利用した研究例が多いが, 一般曲線座標では複雑に変形する流体粒子内部に質の良い格子を再構成することは難しい. そこで, (b)のような格子構造を非構造, 要素形状を三角形要素とする. 非構造格子は局所的な格子の集中が容易であり, また三角形要素は任意二次元領域を分割できる. したがって, 上記(a)~(c)の要求を満たせる.

3.1.1 非構造格子による三角形体積要素の生成

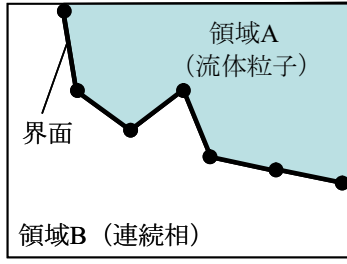
気泡や液滴は, 図 2 に示すように, 非常に低い粒子レイノルズ数 $Re (= \rho v d / \mu, d: \text{流体粒子直径}, v: \text{上昇速度}, \mu: \text{粘性係数})$ においては球形を維持するが, $Re > 1$ の場合は楕円体やキャップ形になる. 工業装置内の流れはほとんどの場合 $Re > 1$ であるため, 流体粒子の変形を考慮する必要がある.



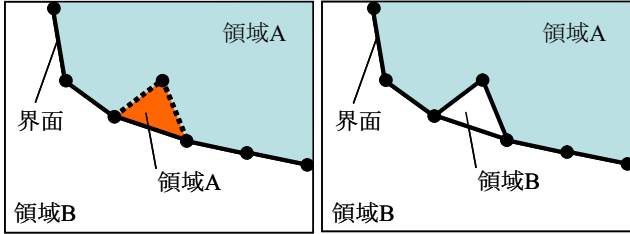
変形する流体粒子を扱うには, 流体粒子の運動に伴い, 界面に適合するように格子を再配置する必要がある. 特に三次元計算では, 構造格子による相界面近傍の複雑な形状に対する格子再配置は難しい. そこで, 三角形要素を利用することにより, 任意の二次元領域を分割でき, 界面近傍に要素を集中させることが容易となる. 本研究では, 内部境界を含む任意の二次元領域を一括で分割できるデローニー三角分割法を採用する. デローニー三角分割は, 図 3 に示すように, 生成されたある三角形の外接円内に他のいずれの節点も含まれないという特徴を持つ. この特徴によってひずみの少ない三角形要素が生成される.



しかしながら, デローニー三角分割法は, キャップ形のように界面が凹型部となっている場合, 正しく格子を生成できない. そこで, 凹型領域においても正しく格子生成ができるように改良された修正デローニー三角分割法⁶⁾を採用する. 従来のデローニー三角分割法では, 図 4(a)のような凹型領域を持つ計算領域を分割した場合, (b)のように実際とは異なる界面を形成してしまうが, (c)の修正デローニー三角分割法ではこの問題を解消している.

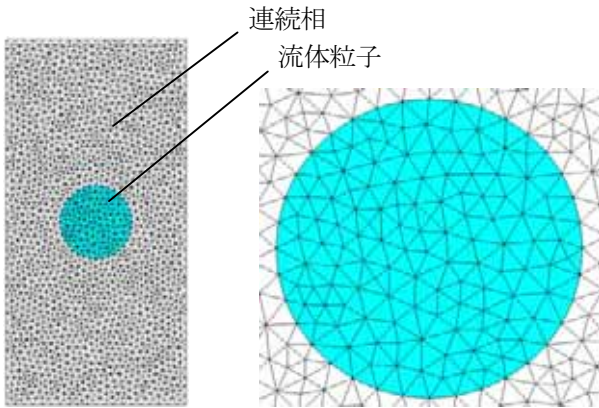


(a) 計算領域



(b) デローニー三角分割 (c) 修正デローニー三角分割
図4 修正デローニー三角分割

3.1.2 分割例 図5に、流体粒子と周囲の連続相を修正デローニー分割法により分割した例を示す。総節点数は2000、総要素数は3864である。粒子内外の領域を、ほぼ均質な三角形要素で分割できている。



(a) 全体図 (b) 流体粒子近傍 (拡大図)
図5 修正デローニー三角分割例

3.2 流れ場の解法

3.2.1 数値計算法の選定 修正デローニー三角分割法によって生成された各三角形体積要素上で、運動方程式(1)と連続の式(2)の離散化を行う。等間隔に配置された正方格子や一般曲線座標の場合は、数値計算手法として有限差分法が用いられることが多い。しかし、有限差分法では、本研究のような一定間隔に配置されていない格子配列に対する計算は困難である。

そこで本研究では、運動方程式の計算に有限体積法を用いる。有限体積法は、非構造の格子配列に対して用いられる手法のひとつである。

3.2.2 有限体積法に基づく運動方程式の離散化

式(1)の運動方程式を整理し、速度予測子 u^* を求めるための代数方程式を導出する⁽⁷⁾。式(1)の右辺第一項を展開し、式(7)を得る。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \rho u_i d\Omega = - \int_S \rho u_i u_j dS_j + \int_S \tau_{ij} dS_j - \int_S p \delta_{ij} dS_j + \int_{\Omega} \rho g_i d\Omega \quad (7)$$

ここで、式(7)の左辺は時間項、右辺の各項は第一項から順に、対流項、粘性項、圧力項、重力加速度項である。表面積分においては、要素表面を中心とする中心差分を行い、体積積分は微小体積要素を近似した。時間項の差分は二次精度の差分とした。

各項を離散化して整理すると、次の代数方程式が得られる。

$$A_P u_{i,P}^* = - \sum_N A_N u_{i,N}^* + Q_{i,P} \quad (8)$$

ここで、 A は各項を離散化した際の速度 u^* の係数、 Q は陽的に計算される項（生成項）である。下付添字 P は計算の対象となっている要素（セル）、 N は要素 P に隣接している要素を示す。

3.2.3 修正座標による計算精度の維持

これまでの近似では、要素重心座標 \mathbf{r}_P と \mathbf{r}_E を結ぶ直線が要素表面中心 \mathbf{r}_e を通ると仮定し、中心差分によって二次精度としていた。しかし、その仮定を満たすのは、2つの要素がどちらも正三角形である、あるいは同じ底辺を使用する二等辺三角形であるなど限定されており、実際は図6に示すように、 \mathbf{r}_P と \mathbf{r}_E を結ぶ直線は、 \mathbf{r}_e から離れた \mathbf{r}_e を通る。そのため、近似が二次精度を維持することができない問題が生じる。

この問題に対応するため、 \mathbf{r}_e を通り、なおかつ要素表面に対して垂直に交わるような直線が結べる修正座標 $\mathbf{r}_{P'}$ と $\mathbf{r}_{E'}$ を式(9)、(10)で求め、修正座標における物性値 $\phi_{P'}$ 、 $\phi_{E'}$ を式(11)、(12)で求める。

$$\mathbf{r}_{P'} = \mathbf{r}_e - [(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_P) \cdot \mathbf{n}] \mathbf{n} \quad (9)$$

$$\mathbf{r}_{E'} = \mathbf{r}_e - [(\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_E) \cdot \mathbf{n}] \mathbf{n} \quad (10)$$

$$\phi_{P'} = \phi_P + (\nabla \phi)_P \cdot (\mathbf{r}_{P'} - \mathbf{r}_P) \quad (11)$$

$$\phi_{E'} = \phi_E + (\nabla \phi)_E \cdot (\mathbf{r}_{E'} - \mathbf{r}_E) \quad (12)$$

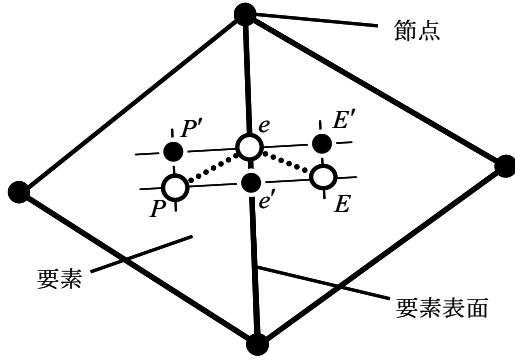


図6 修正座標の定義

ここで、 $\nabla\phi$ は各要素における平均勾配である。平均勾配は、式(13)のようにガウスの発散定理によって体積積分を面積分に近似する。そして、式(14)のように、対象要素を構成する要素表面の物性値と面積ベクトルの積の総和を、対象要素の体積で割ることによって求められる。

$$\int_{\Delta\Omega} \left(\frac{\partial\phi}{\partial x_i} \right)_p d\Omega = \int_{\Delta\Omega} (\nabla\phi)_p d\Omega \approx \int_S \phi n_i dS \quad (13)$$

$$(\nabla\phi)_p = \frac{\sum_N \phi_{N,e} S_{N,e}}{\Delta\Omega_p} \quad (14)$$

3.3 反復計算法の選定 代数方程式の解法として用いられる代表的なアルゴリズムには、MAC⁽⁷⁾(Marker And Cell method)や SIMPLE⁽⁸⁾ (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equation)が挙げられる。MACは運動方程式より速度の予測値を求め、圧力方程式を解いて速度予測値を連続の式を満たすように修正し、時間を更新するため、得られた速度・圧力場は運動方程式を完全には満たしていない。これに対し、SIMPLEは運動方程式と連続の式の両方を満たすまで両式に対して外部反復と呼ばれる反復計算を行う。本研究では、流体粒子内部の流れを詳細に解けることを目標としており、そのために流体粒子の外側と内側の流れを交互に解き、界面近傍の速度が一致したとき時間を更新することを予定しているため、SIMPLEを採用した。これにより上記要求(d)を満たせる。

SIMPLEのアルゴリズム⁽⁸⁾を以下に説明する。

- 1) 圧力場 p^* を推測する
- 2) 式(7)を離散化し、速度予測子 $u_{i,p}^{m*}$ を求める

$$u_{i,p}^{m*} = \frac{-\sum_N A_N^u u_{i,N}^{m*} + Q_{i,p}^{m-1}}{A_p^u} \quad (7)$$

- 3) $u_{i,p}^{m*}$ を用いて、界面の法線方向速度成分 $v_{n,e}^{m*}$ を式(15)

で求める

$$v_{n,e}^{m*} = \left(v_n^{m*} \right)_e - \Delta\Omega_e \left(\frac{1}{A_p^{v_n}} \right)_e \left[\left(\frac{\partial p}{\partial n} \right)_e - \left(\frac{\partial p}{\partial n} \right)_e \right]^{m-1} \quad (15)$$

- 4) $v_{n,e}^{m*}$ を用いて各界面を通過する質量流量 \dot{m}_e^{m*} を式(16)で計算し、各要素別で総出入量を求める

$$\dot{m}_e^{m*} = \rho_e v_{n,e}^{m*} S_e \quad (16)$$

- 5) 質量流量が0であるならば、連続の式を満たしたことを意味するため、外部ループを抜け、速度および圧力を更新する。0でないならば、式(16)が0になるように速度の修正を行う必要がある。式(17)に示す、圧力修正の勾配による速度修正を用いて質量流束の修正を行う

$$\begin{aligned} \dot{m}'_e &= \rho_e v'_{n,e} S_e \approx -(\rho \cdot \Delta\Omega \cdot S)_e \left(\frac{1}{A_p^{v_n}} \right)_e \left(\frac{\partial p'}{\partial n} \right)_e \\ &\approx -(\rho \cdot \Delta\Omega \cdot S)_e \left(\frac{1}{A_p^{v_n}} \right)_e \left[\frac{p'_E - p'_P}{(\mathbf{r}_E - \mathbf{r}_P) \cdot \mathbf{n}} \right] \\ &= A_E^p p'_E + A_P^p p'_P \end{aligned} \quad (17)$$

ここで、 A_P^p 、 A_E^p は質量流束の修正式によって得られる係数である。この考えを、対象要素を構成するすべての要素表面について適用すると、式(18)を得る。

$$\Delta\dot{m}' = \sum_N A_N^p p'_N + A_P^p p'_P \quad (18)$$

- 6) 式(18)より圧力修正量 p' を求めるための代数方程式(19)を導き、 p^* を式(20)によって新しく推測し、2)に戻り収束解が得られるまで全手続きを繰り返す

$$p'_P = \frac{-\sum_N A_N^p p'_N + \Delta\dot{m}'}{A_P^p} \quad (19)$$

$$p_P^* = p_P^* + \alpha_p p'_P \quad (20)$$

ここで、 α_p は緩和係数である。

流体粒子を計算対象とする場合、上記のアルゴリズムにおいて各外部反復の最初に跳躍条件を適用して界面上

の値を更新し、その後流体粒子内外の速度および圧力を更新する。粒子内外の全要素において連続の式および運動方程式が満たされたときに時間を更新する。

4 要素技術の性能検証

4.1 円柱周りおよび固体球周りの流れ 一様流中の円柱および固体球に働く抗力については、過去の理論的、実験的研究により広範囲の条件において信頼性の高い値が得られている。そこで、これらの流れを上述の計算法により数値予測し、実験結果との比較を通して計算法の妥当性を検証した。

図8に各粒子レイノルズ数 $Re (=Ud/\nu)$ (ここで、 U は一様流速度、 d は円柱直径、 ν は動粘度である)における円柱周りの流線の計算結果を示す。 $Re=1$ においては円柱に沿った流れが形成されているが、 $Re=10, 100$ においては円柱後方に渦が形成されている。

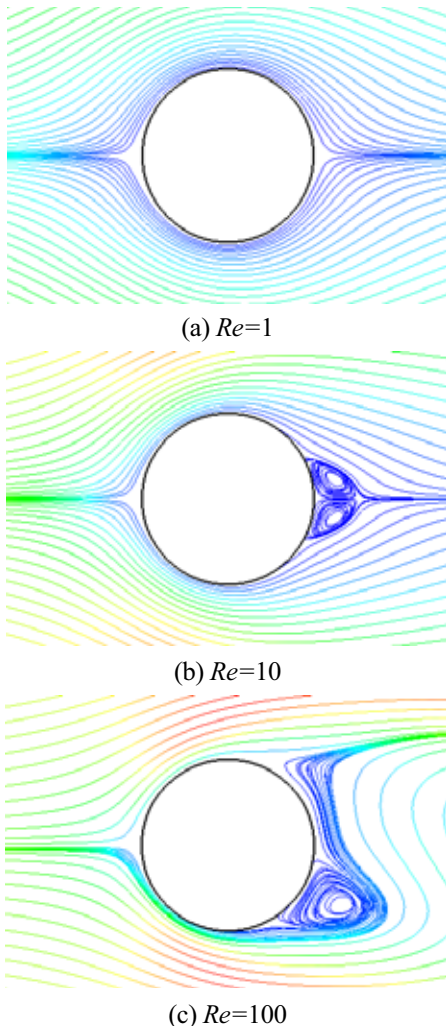


図8 円柱周りの流線

図9は固体球周りの流線である。低 Re の場合、固体球周りの流れは軸対称になるため、ここでは二次元円筒座標系を用いて計算した。 $Re=1, 10$ においては、流線は固

体球表面に沿っているが、 $Re=100$ では剥離が生じて後方に渦が形成されている。これらの計算結果は可視化実験による結果と定性的によく一致している。

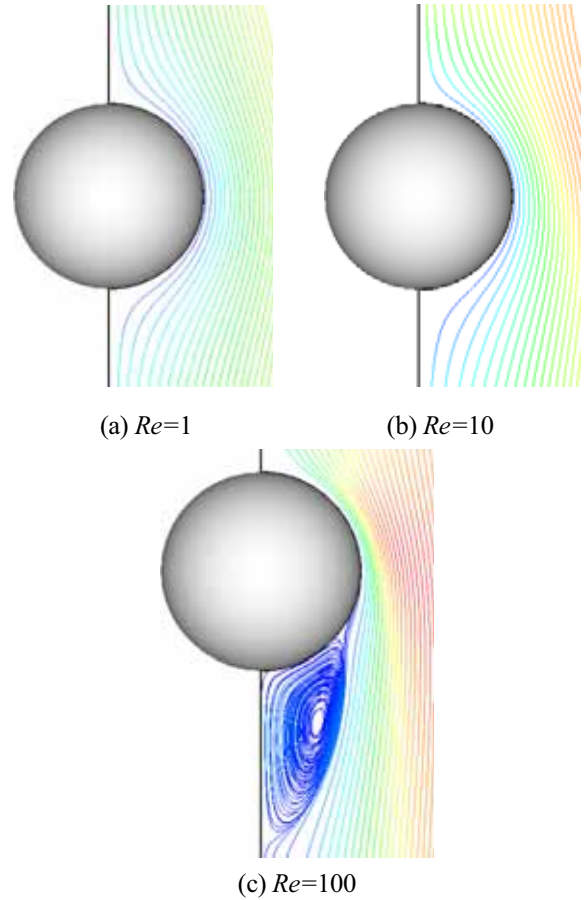


図9 固体球周りの流線

計算で得た円柱および固体球周りの抗力係数と理論値および測定値⁹⁾との比較を図10に示す。本計算法により、一様流中円柱および固体球の抗力係数を良好に評価できることが確認できた。

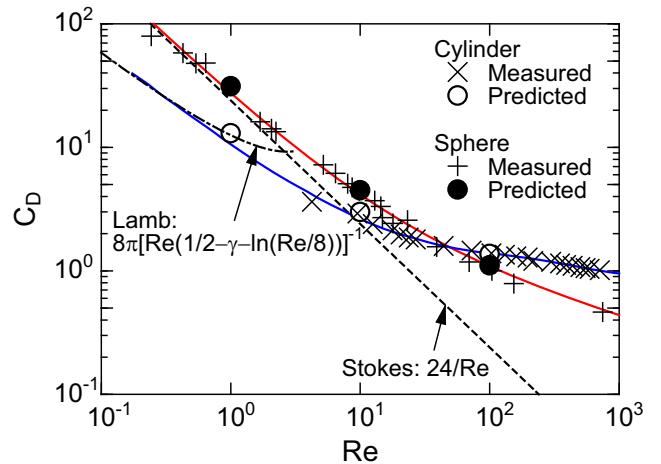
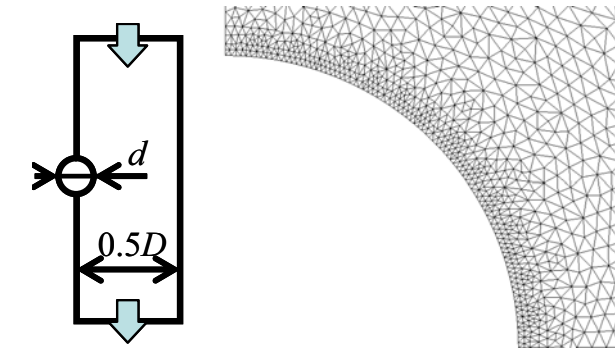


図10 抗力係数予測値と測定値および解析解⁹⁾との比較

4.2 円管内固体球の抗力に対する壁効果 工業装置内の流体粒子の運動は、流路形状や流路面積などの影響を受ける。そこで、円管内粒子に働く抗力に対する壁効果を精度良く評価できるか否かを調べた。図11に計算領域および固体球近傍の格子を示す。固体球直径 d と円管直径 D の直径比 $\lambda (= d/D)$ をパラメータとして、0.1, 0.2, 0.3, 0.4 の4条件の計算を実施した。



(a) 計算領域全体図 (b) 球近傍
図11 計算領域

図12に抗力係数の計算結果と Haberman らの解析解⁽¹⁰⁾との比較を示す。予測値と解析解はよく一致しており、本計算法によれば、流路壁が流体粒子に働く抗力に及ぼす影響を良好に評価できることを確認できた。

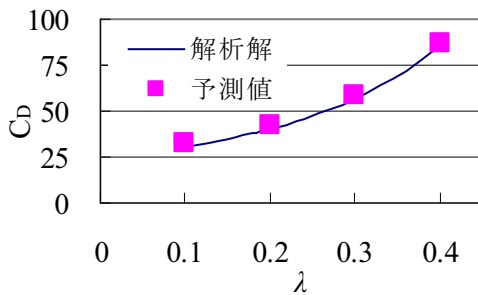


図12 円管内粒子の抗力係数

4.3 界面の移動による格子の再構成 移動及び変形を伴う粒子に対する自動格子再生成法を開発した。図13に本手法の適用例を示す。なお、ここでは流れを解かず、格子の移動量を入力値として与えた。本手法によれば、変形を伴う粒子周りの格子を容易に再分割できることが確認できる。

5 おわりに

非構造格子に基づく有限体積法によれば、一様流中球周りの流れや格子形状の時間変化を良好に扱えることを確認した。この流れ場の解法と本研究で開発した格子再生成法を組み合わせることにより、変形を伴う気泡や液滴の高精度数値解法を構築できる見通しを得た。

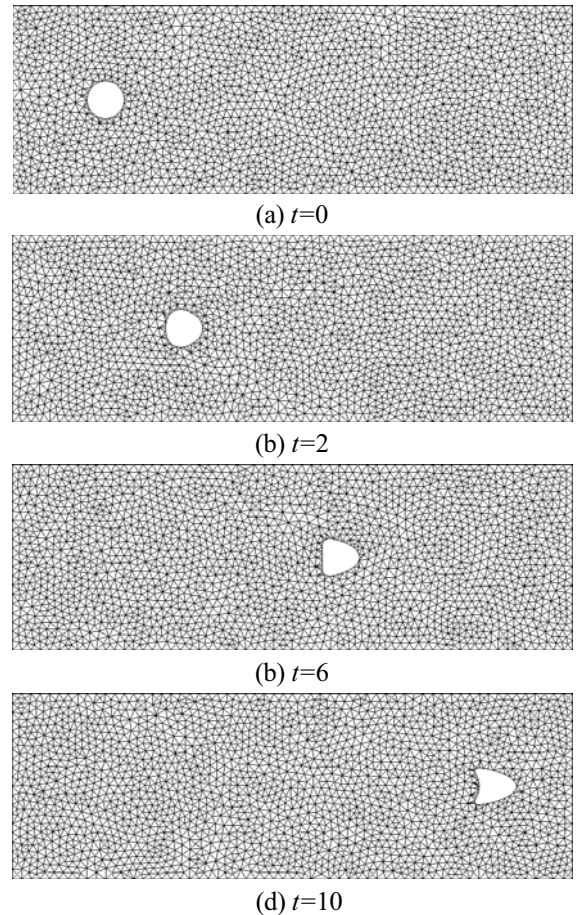


図13 界面の移動に伴う格子の再構成

参考文献

- (1) G. Ryskin and L. G. Leal, *Journal of Fluid Mechanics*, 148, 1-17, 1984.
- (2) C. W. Hirt, D. B. Nichols, *Journal of Computational Physics*, 39, 201-225, 1981.
- (3) 高木周, 松本洋一郎, 黄華雄, 日本機械学会論文集(B編), 61巻, 586号, 10-17, 1995.
- (4) D. S. Dandy, L. G. Leal, *Journal of Fluid mechanics*, 208, 161-192, 1989.
- (5) 杉岡健一, 小森悟, 日本流体力学学会, AM05-24-009, 2005.
- (6) 谷口健男:「FEMのための要素自動分割」, 森北出版株式会社, 1992.
- (7) J. H. ファーツィガー, M. ペリッチ:「コンピュータによる流体力学」, シュプリンガーフェアラーク東京, 2003.
- (8) S. V. パタンカー:「コンピュータによる熱移動と流れの数値解析」, 森北出版, 1991.
- (9) O. Wieselsberger, *National Advisory Committee for Aeronautics, Technical Note No. 121*, 1922.
- (10) W. L. Haberman, R. M. Sayre, *David Taylor Model Basin Report No.1143*, 1958.