二相流で有用な界面曲率の数式表現について

　気液界面を持つ二相流れを数値計算する際に，固定メッシュ上で界面を捕獲する手法がよく用いられる．その場合，界面位置の情報を何らかの関数で表すことが必要である．界面が大変形しない場合には，気液界面を高さ関数$z=h(x,y,t)$のように表すことも可能だが，水波が覆いかぶさるような大変形の流れでは対応できない．一般には，レヴェルセット関数（界面からの距離を表す関数）などで表される．まず，二次元のデカルト座標系について考える．時間依存しない気液界面があるとしよう．それは陰関数表示で

$$\phi(x,y)=0 \tag{1}$$

として与えられる．結果として気液界面曲率は

$$\kappa=-\frac{1}{\left(\phi_x{}^2+\phi_y{}^2\right)^{\frac{3}{2}}}\left[\phi_{xx}\phi_y{}^2+\phi_{yy}\phi_x{}^2-2\phi_x\phi_y\phi_{xy}\right] \tag{2}$$

となる．この導出を試みる．

まず，$y=f(x)$で表される曲線の界面曲率は，次式で与えられる．

$$\kappa=\frac{\dfrac{d^2y}{dx^2}}{\left[1+\left(\dfrac{dy}{dx}\right)^2\right]^{\frac{3}{2}}} \tag{3}$$

これを利用して，式(2)の曲率の式を得ること目指す.

式(1)を x で微分すると，

$$\frac{\partial\phi(x,y)}{\partial x}+\frac{\partial\phi(x,y)}{\partial y}\frac{dy}{dx}=0$$

従って，式(3)の分母の 1 階微分は，

$$\frac{dy}{dx}=-\frac{\dfrac{\partial\phi(x,y)}{\partial x}}{\dfrac{\partial\phi(x,y)}{\partial y}}=-\frac{\phi_x}{\phi_y} \tag{4}$$

となる．次に，式(3)の分子の 2 階微分は，次のように展開できる．

$$\frac{d^2y}{dx^2}=\frac{d}{dx}\left(\frac{dy}{dx}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{dy}{dx}\right)+\frac{dy}{dx}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{dy}{dx}\right)$$

ここで，最右辺の各項は，以下のように展開できるので

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{dy}{dx}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\phi_x}{\phi_y}\right)=-\frac{\phi_{xx}\phi_y-\phi_x\phi_{xy}}{{\phi_y}^2}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{dy}{dx}\right)=\frac{\partial}{\partial y}\left(-\frac{\phi_x}{\phi_y}\right)=-\frac{\phi_{xy}\phi_y-\phi_x\phi_{yy}}{{\phi_y}^2}$$

結局，2 階微分は，次式のようになる．

$$\frac{d^2y}{dx^2}=-\frac{\phi_{xx}\phi_y-\phi_x\phi_{xy}}{{\phi_y}^2}+\frac{\phi_x}{\phi_y}\frac{\phi_{xy}\phi_y-\phi_x\phi_{yy}}{{\phi_y}^2}=\frac{2\phi_{xy}\phi_y\phi_x-{\phi_x}^2\phi_{yy}-\phi_{xx}{\phi_y}^2}{{\phi_y}^3} \tag{5}$$

したがって，式(3), (4), (5)から界面曲率は

$$\kappa=\frac{\dfrac{d^2y}{dx^2}}{\left[1+\left(\dfrac{dy}{dx}\right)^2\right]^{\frac{3}{2}}}=\frac{\dfrac{2\phi_{xy}\phi_x\phi_y-\phi_{xx}{\phi_y}^2-\phi_{yy}{\phi_x}^2}{{\phi_y}^3}}{\left[1+\left(-\dfrac{\phi_x}{\phi_y}\right)^2\right]^{\frac{3}{2}}}=\frac{2\phi_{xy}\phi_x\phi_y-\phi_{xx}{\phi_y}^2-\phi_{yy}{\phi_x}^2}{\left({\phi_x}^2+{\phi_y}^2\right)^{\frac{3}{2}}} \tag{6}$$

と得られる．一般には，曲率は界面法線単位ベクトルの発散として，次式で与えられる．

$$\kappa=\frac{2\phi_{xy}\phi_x\phi_y-\phi_{xx}{\phi_y}^2-\phi_{yy}{\phi_x}^2}{\left({\phi_x}^2+{\phi_y}^2\right)^{\frac{3}{2}}}=-\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{\nabla}\phi}{\left|\vec{\nabla}\phi\right|}\right) \tag{7}$$

以下，その証明と結果を示す.

2 次元デカルト座標系

ベクトル演算公式

$$\vec{\nabla}\cdot\left(f\,\vec{u}\right)=f\vec{\nabla}\cdot\vec{u}+\vec{u}\cdot\vec{\nabla}f \tag{8}$$

を用いれば，以下のように展開できる．

$$\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{\nabla}\phi}{\left|\vec{\nabla}\phi\right|}\right)=\frac{1}{\left|\vec{\nabla}\phi\right|}\nabla^2\phi+\vec{\nabla}\phi\cdot\vec{\nabla}\left(\frac{1}{\left|\vec{\nabla}\phi\right|}\right)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{{\phi_x}^2+{\phi_y}^2}}\left(\phi_{xx}+\phi_{yy}\right)+\phi_x\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\sqrt{{\phi_x}^2+{\phi_y}^2}}\right)+\phi_y\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{1}{\sqrt{{\phi_x}^2+{\phi_y}^2}}\right)$$

$$=\frac{\phi_{xx}+\phi_{yy}}{\sqrt{{\phi_x}^2+{\phi_y}^2}}-\frac{\phi_x}{2}\left({\phi_x}^2+{\phi_y}^2\right)^{-\frac{3}{2}}\cdot\left(2\phi_x\phi_{xx}+2\phi_y\phi_{yx}\right)-\frac{\phi_y}{2}\left({\phi_x}^2+{\phi_y}^2\right)^{-\frac{3}{2}}\cdot\left(2\phi_x\phi_{xy}+2\phi_y\phi_{yy}\right)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{{\phi_x}^2+{\phi_y}^2}}\left[\phi_{xx}+\phi_{yy}-\frac{{\phi_x}^2\phi_{xx}+2\phi_x\phi_y\phi_{xy}+{\phi_y}^2\phi_{yy}}{{\phi_x}^2+{\phi_y}^2}\right]=\frac{\phi_{xx}{\phi_y}^2+\phi_{yy}{\phi_x}^2-2\phi_x\phi_y\phi_{xy}}{\left({\phi_x}^2+{\phi_y}^2\right)^{\frac{3}{2}}}$$

別の考え方

$$
\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{\nabla}\phi}{\left|\vec{\nabla}\phi\right|}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\phi_x}{\left(\phi_x{}^2+\phi_y{}^2\right)^{\frac{1}{2}}}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\phi_y}{\left(\phi_x{}^2+\phi_y{}^2\right)^{\frac{1}{2}}}\right)
$$

$$
=\frac{\phi_{xx}\left(\phi_x{}^2+\phi_y{}^2\right)^{\frac{1}{2}}-\phi_x\frac{1}{2}\left(\phi_x{}^2+\phi_y{}^2\right)^{-\frac{1}{2}}\left(2\phi_x\phi_{xx}+2\phi_y\phi_{yx}\right)}{\phi_x{}^2+\phi_y{}^2}
$$

$$
+\frac{\phi_{yy}\left(\phi_x{}^2+\phi_y{}^2\right)^{\frac{1}{2}}-\phi_y\frac{1}{2}\left(\phi_x{}^2+\phi_y{}^2\right)^{-\frac{1}{2}}\left(2\phi_x\phi_{xy}+2\phi_y\phi_{yy}\right)}{\phi_x{}^2+\phi_y{}^2}
$$

$$
=\frac{\phi_{xx}\left(\cancel{\phi_x{}^2}+\phi_y{}^2\right)-\phi_x\left(\cancel{\phi_x\phi_{xx}}+\phi_y\phi_{yx}\right)}{\left(\phi_x{}^2+\phi_y{}^2\right)^{\frac{3}{2}}}+\frac{\phi_{yy}\left(\phi_x{}^2+\cancel{\phi_y{}^2}\right)-\phi_y\left(\phi_x\phi_{xy}+\cancel{\phi_y\phi_{yy}}\right)}{\left(\phi_x{}^2+\phi_y{}^2\right)^{\frac{3}{2}}}
$$

$$
\therefore\quad \kappa=-\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{\nabla}\phi}{\left|\vec{\nabla}\phi\right|}\right)=-\frac{\phi_{xx}\phi_y{}^2+\phi_{yy}\phi_x{}^2-2\phi_x\phi_y\phi_{xy}}{\left(\phi_x{}^2+\phi_y{}^2\right)^{\frac{3}{2}}} \tag{9}
$$

<u>3 次元デカルト座標系</u>

結果だけ示す.

$$
\kappa=\frac{-1}{\sqrt{\phi_x{}^2+\phi_y{}^2+\phi_z{}^2}}\left[\phi_{xx}+\phi_{yy}+\phi_{zz}-\frac{\left(\phi_x{}^2\phi_{xx}+\phi_y{}^2\phi_{yy}+\phi_z{}^2\phi_{zz}+2\phi_x\phi_y\phi_{xy}+2\phi_y\phi_z\phi_{yz}+2\phi_z\phi_x\phi_{zx}\right)}{\phi_x{}^2+\phi_y{}^2+\phi_z{}^2}\right]
$$

$$
=-\frac{\phi_{xx}\left(\phi_y{}^2+\phi_z{}^2\right)+\phi_{yy}\left(\phi_z{}^2+\phi_x{}^2\right)+\phi_{zz}\left(\phi_x{}^2+\phi_y{}^2\right)-2\left(\phi_x\phi_y\phi_{xy}+\phi_y\phi_z\phi_{yz}+\phi_z\phi_x\phi_{zx}\right)}{\left(\phi_x{}^2+\phi_y{}^2+\phi_z{}^2\right)^{\frac{3}{2}}} \tag{10}
$$

<u>軸対称円筒座標系</u>

結果だけ示す.

$$
\begin{aligned}
\kappa&=-\frac{\phi_{rr}+\frac{1}{r}\phi_r+\phi_{zz}}{\sqrt{\phi_r{}^2+\phi_z{}^2}}+\frac{\phi_r{}^2\phi_{rr}+\phi_z{}^2\phi_{zz}+2\phi_z\phi_r\phi_{zr}}{\left(\phi_r{}^2+\phi_z{}^2\right)^{\frac{3}{2}}}\\
&=-\frac{\phi_{rr}\phi_z{}^2+\frac{1}{r}\phi_r\left(\phi_z{}^2+\phi_r{}^2\right)+\phi_{zz}\phi_r{}^2-2\phi_z\phi_r\phi_{zr}}{\left(\phi_r{}^2+\phi_z{}^2\right)^{\frac{3}{2}}}
\end{aligned} \tag{11}
$$

3 次元円筒座標系

結果だけ示す.

$$\kappa = -\frac{\phi_{rr} + \frac{1}{r}\phi_r + \frac{1}{r^2}\phi_{\theta\theta} + \phi_{zz}}{\sqrt{\phi_r{}^2 + \frac{1}{r^2}\phi_\theta{}^2 + \phi_z{}^2}} + \frac{\left[\begin{array}{l}\phi_r{}^2\phi_{rr} + \frac{1}{r^4}\phi_\theta{}^2\phi_{\theta\theta} - \frac{1}{r^3}\phi_\theta{}^2\phi_r + \phi_z{}^2\phi_{zz} \\ \quad + 2\left(\frac{1}{r^2}\phi_r\phi_\theta\phi_{r\theta} + \frac{1}{r^2}\phi_\theta\phi_z\phi_{\theta z} + \phi_z\phi_r\phi_{zr}\right)\end{array}\right]}{\left(\phi_r{}^2 + \frac{1}{r^2}\phi_\theta{}^2 + \phi_z{}^2\right)^{\frac{3}{2}}}$$

$$= -\frac{\left[\begin{array}{l}\phi_{rr}\left(\frac{1}{r^2}\phi_\theta{}^2 + \phi_z{}^2\right) + \left(\frac{1}{r}\phi_r + \frac{1}{r^2}\phi_{\theta\theta}\right)\left(\phi_z{}^2 + \phi_r{}^2\right) + \phi_{zz}\left(\phi_r{}^2 + \frac{1}{r^2}\phi_\theta{}^2\right) \\ \quad - 2\left(\frac{1}{r^2}\phi_r\phi_\theta\phi_{r\theta} + \frac{1}{r^2}\phi_\theta\phi_z\phi_{\theta z} + \phi_z\phi_r\phi_{zr}\right)\end{array}\right]}{\left(\phi_r{}^2 + \frac{1}{r^2}\phi_\theta{}^2 + \phi_z{}^2\right)^{\frac{3}{2}}}$$

$$= -\frac{\left[\begin{array}{l}\frac{\phi_{rr}\phi_\theta{}^2 - 2\phi_r\phi_\theta\phi_{r\theta} + \phi_{\theta\theta}\phi_r{}^2}{r^2} + \frac{\phi_{\theta\theta}\phi_z{}^2 - 2\phi_\theta\phi_z\phi_{\theta z} + \phi_{zz}\phi_\theta{}^2}{r^2} \\ \quad + \left(\phi_{rr}\phi_z{}^2 - 2\phi_z\phi_r\phi_{zr} + \phi_{zz}\phi_r{}^2\right) + \frac{\phi_r}{r}\left(\phi_r{}^2 + \phi_z{}^2\right)\end{array}\right]}{\left(\phi_r{}^2 + \frac{1}{r^2}\phi_\theta{}^2 + \phi_z{}^2\right)^{\frac{3}{2}}} \tag{12}$$

3 次元球座標系

結果だけ示す.

$$\kappa = -\frac{\left[\begin{array}{l}\frac{\phi_{rr}\phi_\theta{}^2 - 2\phi_r\phi_\theta\phi_{r\theta} + \phi_{\theta\theta}\phi_r{}^2}{r^2} + \frac{\phi_{rr}\phi_\phi{}^2 - 2\phi_\phi\phi_r\phi_{\phi r} + \phi_{\phi\phi}\phi_r{}^2}{r^2\sin^2\theta} + \frac{\phi_{\theta\theta}\phi_\phi{}^2 - 2\phi_\theta\phi_\phi\phi_{\theta\phi} + \phi_{\phi\phi}\phi_\theta{}^2}{r^4\sin^2\theta} \\ \quad + \frac{\phi_r}{r}\left(2\phi_r{}^2 + \frac{3\phi_\theta{}^2}{r^2} + \frac{3\phi_\phi{}^2}{r^2\sin^2\theta}\right) + \frac{\phi_\theta\cot\theta}{r^2}\left(\phi_r{}^2 + \frac{\phi_\theta{}^2}{r^2} + \frac{2\phi_\phi{}^2}{r^2\sin^2\theta}\right)\end{array}\right]}{\left(\phi_r{}^2 + \frac{\phi_\theta{}^2}{r^2} + \frac{\phi_\phi{}^2}{r^2\sin^2\theta}\right)^{\frac{3}{2}}} \tag{13}$$

差分法での界面曲率計算ついて

二次元デカルト座標系では，界面の平均曲率が次式で与えられることは既に述べた.

$$\kappa = -\frac{\phi_{xx}\phi_y{}^2 + \phi_{yy}\phi_x{}^2 - 2\phi_x\phi_y\phi_{xy}}{\left(\phi_x{}^2 + \phi_y{}^2\right)^{\frac{3}{2}}} = -\frac{\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)^2 + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 - 2\frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial\phi}{\partial y}\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}}{\left\{\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)^2\right\}^{\frac{3}{2}}} \tag{14}$$

ここで，ϕは気相か液相かを判別するような関数である．それは流体の密度であっても良いし，格子セルの液体充填率を表す VOF 関数，あるいは気液界面からの距離（レヴェルセット関数）でも良い．例として，楕円の方程式を考える．陰関数表示で以下のように表される．

$$\phi(x,y)=\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}-1=0 \tag{15}$$

式(14)を構成する各項について計算すると，

$$\frac{\partial\phi}{\partial x}=\frac{2x}{a^2},\quad \frac{\partial\phi}{\partial y}=\frac{2y}{b^2},\quad \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}=\frac{2}{a^2},\quad \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}=\frac{2}{b^2},\quad \frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}=0 \tag{16}$$

であるから，界面曲率は

$$\kappa=-\frac{\dfrac{2}{a^2}\left(\dfrac{2y}{b^2}\right)^2+\dfrac{2}{b^2}\left(\dfrac{2x}{a^2}\right)^2-2\cdot\dfrac{2x}{a^2}\cdot\dfrac{2y}{b^2}\cdot 0}{\left\{\left(\dfrac{2x}{a^2}\right)^2+\left(\dfrac{2y}{b^2}\right)^2\right\}^{\frac{3}{2}}}=-\frac{1}{a^2b^2\left(\dfrac{x^2}{a^4}+\dfrac{y^2}{b^4}\right)^{\frac{3}{2}}} \tag{17}$$

と得られる．式(17)に対して，x，y に界面（曲線）上での値を代入すれば，その点における局所平均曲率が得られることになる（曲率の符号は関数の与え方で反転する）．ところが，差分法での数値計算においては，式(15)のように数式で関数形が与えられることは無い．ただ単に，ϕ値が格子点毎に離散的に与えられるのみである．その離散的なϕ値の情報のみを使って，気液界面における密度や粘度などの物性値の不連続な変化を捉える必要がある．式(16)のそれぞれの差分近似式（二次精度中心差分法）は以下の通りである．

$$\begin{aligned}&\frac{\partial\phi}{\partial x}=\frac{\phi_{i+1,j}-\phi_{i-1,j}}{2(\Delta x)},\quad \frac{\partial\phi}{\partial y}=\frac{\phi_{i,j+1}-\phi_{i,j-1}}{2(\Delta y)},\quad \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}=\frac{\phi_{i+1,j}-2\phi_{i,j}+\phi_{i-1,j}}{(\Delta x)^2},\\ &\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}=\frac{\phi_{i,j+1}-2\phi_{i,j}+\phi_{i,j-1}}{(\Delta y)^2},\quad \frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y}=\frac{\phi_{i+1,j+1}-\phi_{i-1,j+1}-\phi_{i+1,j-1}+\phi_{i-1,j-1}}{4(\Delta x)(\Delta y)}\end{aligned} \tag{18}$$

気液界面上には必ずしも格子点が有る訳ではなく，寧ろ無い事の方が殆どである．現実の気液界面は不連続と看做されるが，界面を跨いだ差分計算を行うと，必ず界面がぼやけることになる．そのぼやけ方は格子間隔に依存し，格子が粗いほどぼやけ方も大きい．したがって，格子は密であればあるほど良いのは当然であるが，限られたコンピュータリソースでの計算では，有限の格子点数の中で，いかにして界面曲率を精度良く算出するかが重要である．

レヴェルセット関数は，気液界面からの距離（界面逆向きでは負の値を取る）を表し，「ϕの勾配の大きさが１」になるように与えられる．したがって，界面近傍での曲率計算（界面を跨いだ差分計算）を比較的精度良く行えると考えられる．レヴェルセット法に限って云えば，上記の性質が保たれる限りにおいては，曲率計算（二次元デカルト座標系）のための式は，以下のように簡単な式で与えられる（ただし，関数の正負の与え方に応じて，曲率の値も正負が変わることに注意が必要である）．

$$\kappa = -\nabla^2 \phi = -\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) \tag{19}$$

然しながら，レヴェルセット法の問題点は，距離関数の移流方程式

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u\frac{\partial \phi}{\partial x} + v\frac{\partial \phi}{\partial y} = 0 \tag{20}$$

を解いたときに,「ϕの勾配の大きさが 1」という性質を満足できなくなる点にある. したがって，移流計算後に再初期化と呼ばれる，いわゆる距離関数の性質を取り戻すための関数の補正・再構築といった操作が必要にある．もう一つの問題点は，体積の保存性が良くないことである．体積の保存性をより厳密に確保するための手法としては，ドナー・アクセプター法に基づく VOF 法の方がずっと優れている．以上の理由から，移流方程式の計算には VOF 関数を用いて，その VOF 関数から距離関数を構築し，それを界面曲率の計算に用いることが望ましい．