

No.1


**二相流数値シミュレーションにおける
界面追跡のためのフェーズフィールド
モデルと格子ボルツマン法**

高田 尚樹

独立行政法人 産業技術総合研究所 (AIST)
 環境管理研究部門 環境流体工学研究グループ
 〒305-8569 茨城県つくば市小野川16-1 つくば西事業所2G-1201

Naoki TAKADA (Research Scientist, Dr.Eng.)
 National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)
 16-1, Onogawa, Tsukuba, Ibaraki, 305-8569, JAPAN
 Tel: +81-29-861-8232, Fax: +81-29-861-8722
 E-mail: naoki-takada@aist.go.jp
 URL: http://staff.aist.go.jp/naoki-takada/index.html

(社)日本機械学会 2004年度年次大会
 先端技術フォーラム【F06】「熱流体解析技術の新展開—格子ボルツマン法—」
 2004年9月7日(火),北海道大学

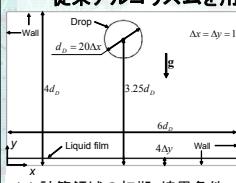
F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004

(C) Naoki TAKADA (AIST), All Rights Reserved.

No.2


本講演テーマの「先端技術」
フェーズフィールドモデル (Phase-Field Model, PFM)

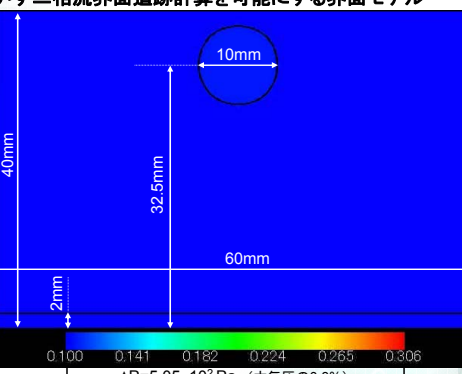
従来アルゴリズムを用いず二相流界面追跡計算を可能にする界面モデル



(a) 計算領域の初期・境界条件

自由落下液滴—壁面上液膜
の衝突・合体数値実験 (2D)

空気-水相当: $\rho_L / \rho_G = 801.7$
 $\mu_L / \mu_G = 73.76$



(b) 圧力&流速分布・界面形状

F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004

(C) Naoki TAKADA (AIST), All Rights Reserved.

No.3


講演内容

1. フェーズフィールドモデル(PFM)の概要
2. PFMに基づく二相流数値計算手法の概要
 - (1) 格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, LBM)
 - (2) 高密度比二相流 Navier-Stokes (NS)-PFM法*

(*注: 稲室先生の二相流LBMIに基づき拡張・開発)
3. PFMに基づく界面移流のベンチマーク計算
4. せん断流中における液滴挙動のLBM数値シミュレーション
5. NS-PFM法による数値シミュレーション(液滴・気泡・液膜)
6. まとめ

F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004

(C) Naoki TAKADA (AIST), All Rights Reserved.

No.4


Phase-Field Modeling
(1) 非平衡熱力学に基づく二相流体界面のモデル化
Cahn-Hilliard Free Energy Theory (1958)

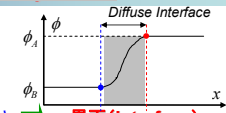
自由エネルギー関数

$$\Psi(\mathbf{x}) = \int \left(\phi(T, \phi) + \frac{\kappa}{2} (\nabla \phi)^2 \right) d\mathbf{x}$$

系全体の平衡状態
= Ψ の最小値

二相分離・共存
 $T < T_C$ (臨界温度)

界面形状・厚さ
表面張力



界面 (Interface)
= ϕ と流体物性が連続的に急激変化する有限な空間

ϕ : Order Parameter (秩序変数) ... 非一様な質量密度, 物質濃度の空間分布
= 界面形状の指標関数 (Index Function)

$\phi(T, \phi)$: 流体/バルク自由エネルギー (Double-Well Potential)

(例) van der Waals model: $\phi(T, \phi) = \phi \left[T \ln \left(\frac{\phi}{1-b\phi} \right) - a\phi \right]$

T : Temperature κ : Capillary parameter

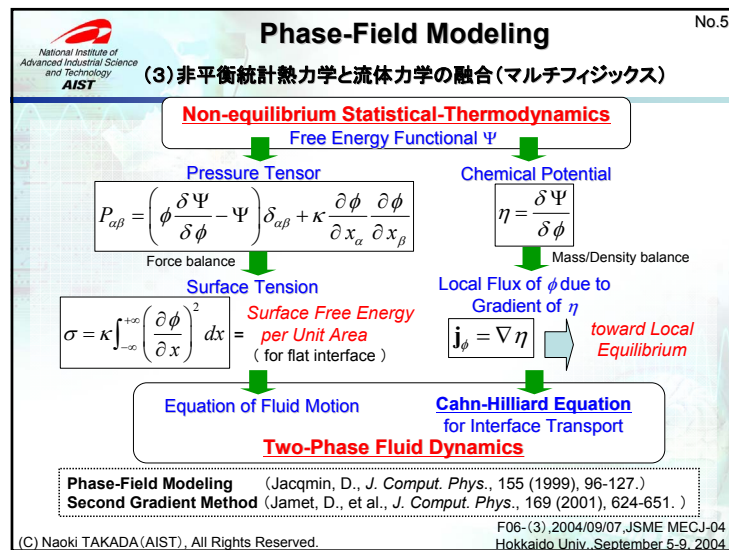
微視的組織形成過程のメソスケールシミュレーション (材料科学・設計)

... 二元合金凝固 / 高分子薄膜形成 (高機能材料設計プラットフォーム「OCTA」)
... Workshop【W01】マルチスケール塑性のための基礎知識 (9/8, 13:00-16:30)

(7)「フェーズフィールドモデルの正しい考え方」, 毛利哲雄 (北大)

F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004

(C) Naoki TAKADA (AIST), All Rights Reserved.



No.6

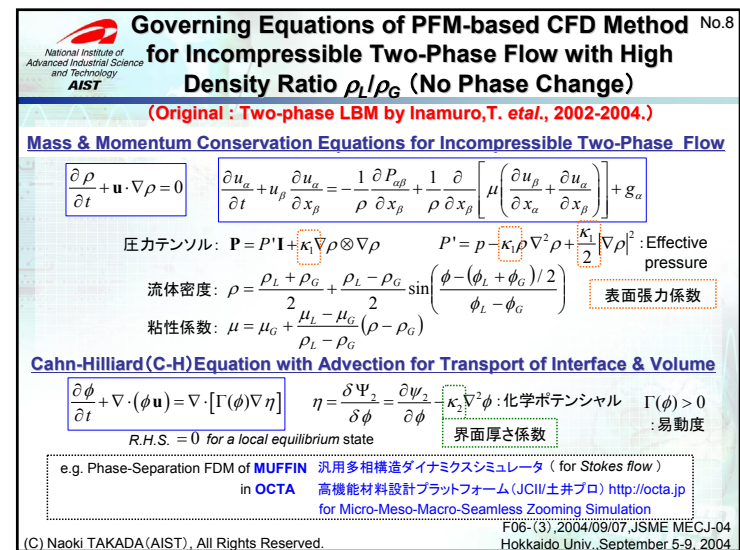
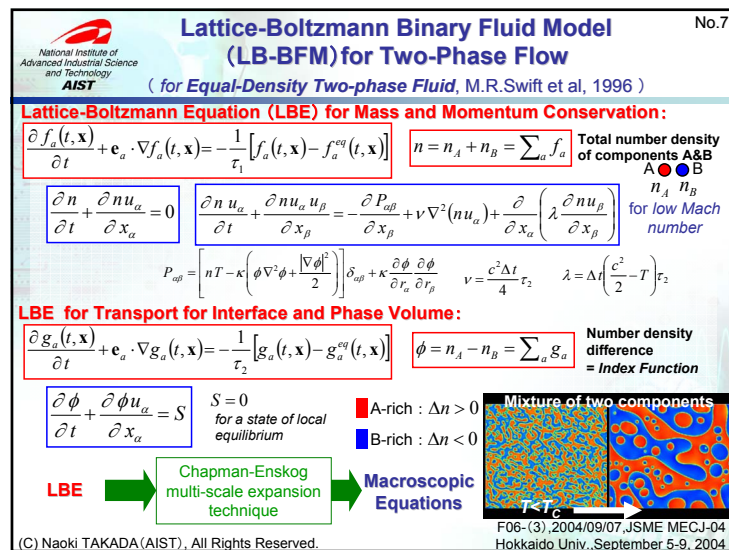
二相流界面追跡数値計算手法の構成 (従来手法/Phase-Field Model手法)

巨視的現象の記述法 流れの基礎方程式	+	界面現象の記述方式 界面移流・再構成法 ／表面張力計算法	=	二相流数値計算手法	数値計算手法の 具体例
plain Navier-Stokes (NS) Method	+	I/F-Tracking Scheme / CSF model	=	Conventional NS Method	Front-Tracking Level-Set Marker-and-Cell Volume-of-Fluid
plain LBM	+	Phase-Field Modeling (PFM)	=	Two-Phase Fluid LBM	Inamuro, T., et al. Seta, T., et al. Swift, M.R., et al.
plain-NS Method	+	Phase-Field Modeling (PFM)	=	NS-PFM Method	Doi, M., et al. (1997-) Jacqmin, D. (1999) Jamet, D., et al. (2001)

* 注: 支配方程式の離散化スキーム, 計算アルゴリズム, 座標系, 等は3者とも任意選択可能

F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004

(C) Naoki TAKADA(AIST), All Rights Reserved.



National Institute of Advanced Industrial Science and Technology
AIST

二相流界面追跡に関する従来計算法と
Phase-Field Model (PFM) 計算法との比較

No.9

計算法 (細分類)	従来計算法 (NS方程式)				PFM計算法		
	MAC Front Tracking	VOF	Level Set MPS		NS-PFM	LBM	LGCA
界面厚さ	数値的 ($0 \text{ or } \approx \Delta x$)				物理的 ($> \Delta x$, 数セル)		
表面張力	Continuum Surface Force (CSF) Model (界面厚さと関連なし)				界面自由エネルギー (界面厚さと関連あり)		
界面移流・再構成	MAC	PLIC	MARS		化学ポテンシャル勾配		
離散化	Eulerian				Semi/Fully-Lagrangian		ALE
	FDM				FEM	BEM / BFC	

PFMは新しい二相流計算アルゴリズムを提供する。

(C) Naoki TAKADA (AIST), All Rights Reserved.

F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology
AIST

Benchmark of Transport of Interface Using the Cahn-Hilliard Equations (1D)

No.10

Generally, $\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot [\phi \mathbf{u} + \Gamma(\phi) \mathbf{j}] = 0 \quad \mathbf{j} = -\nabla \eta$

C-H Equation $\Gamma(\phi) = \Gamma_0 \phi \quad \text{Mobility} \quad \Gamma_0 > 0 : \text{constant}$

In this study, $\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot [\phi \mathbf{u} + \Gamma_0 \mathbf{J}] = 0 \quad \mathbf{J} = -\phi \mathbf{j} = -\zeta \nabla \phi + \kappa_2 \phi \nabla (\nabla^2 \phi)$

Case (A) 1D square-wave propagation.

C-H方程式は数値振動・拡散を抑制した界面移流計算を実現

(C) Naoki TAKADA (AIST), All Rights Reserved.

F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology
AIST

2次元界面非定常移流問題の
C-H方程式によるベンチマーク計算

No.11

Cahn-Hilliard (C-H) 方程式 $\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot [\phi \mathbf{u} + \mathbf{F}(\phi)] = 0$

化学ポテンシャル勾配に基づく流束
(数値拡散・振動の抑制)

PFM-based interface tracking with only standard scheme

解法: 中心差分+2段階Runge-Kutta
 $\Delta x = \Delta y = 1 \quad u = v = 0.1$

Courant number: $C = \frac{u \Delta t}{\Delta x} = 8 \times 10^{-3}$

$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = 0$

*参考文献: 高田尚樹, 富山明男, 機論B (2004, 投稿中).

(C) Naoki TAKADA (AIST), All Rights Reserved.

F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology
AIST

Benchmark of Transport of Interface Using the Cahn-Hilliard Equations

No.12

Case (B) 2D Linear Transport.

(a) $C = 1.25 \times 10^{-2}$ (b) $C = 2.5 \times 10^{-2}$

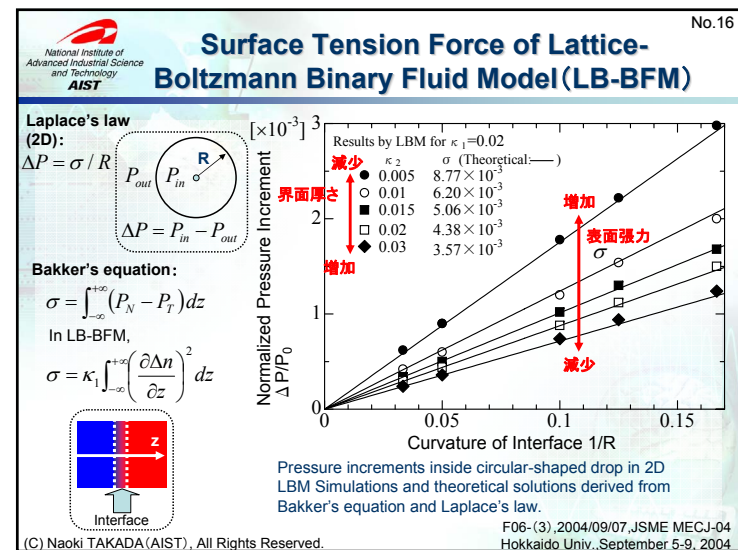
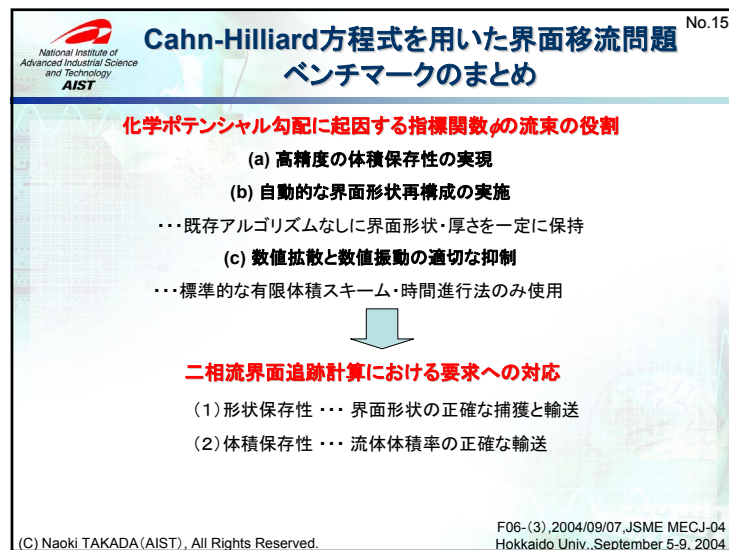
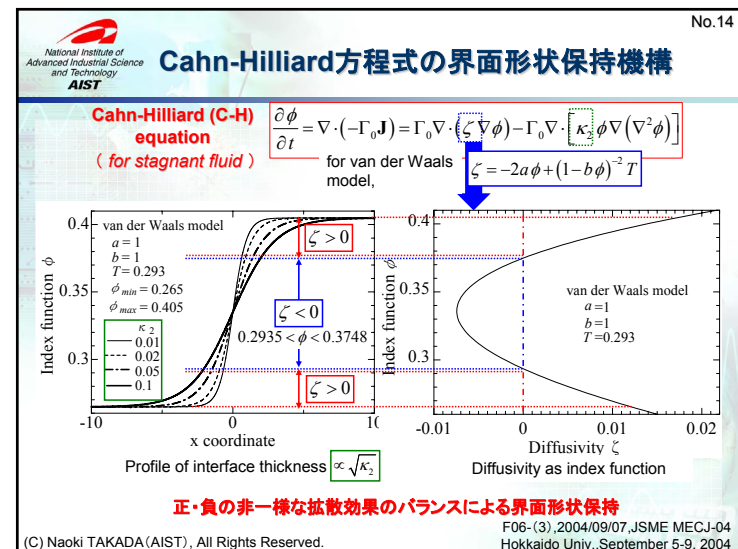
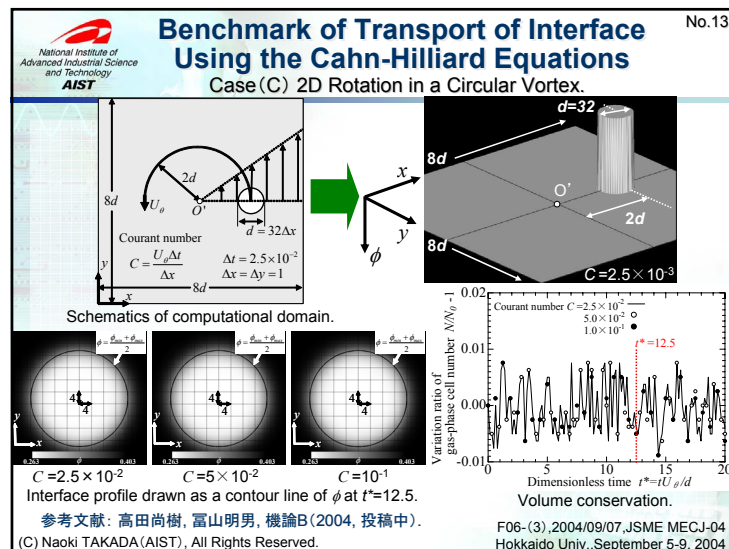
Variation ratio of gas-phase cell number $N/N_0 - 1$

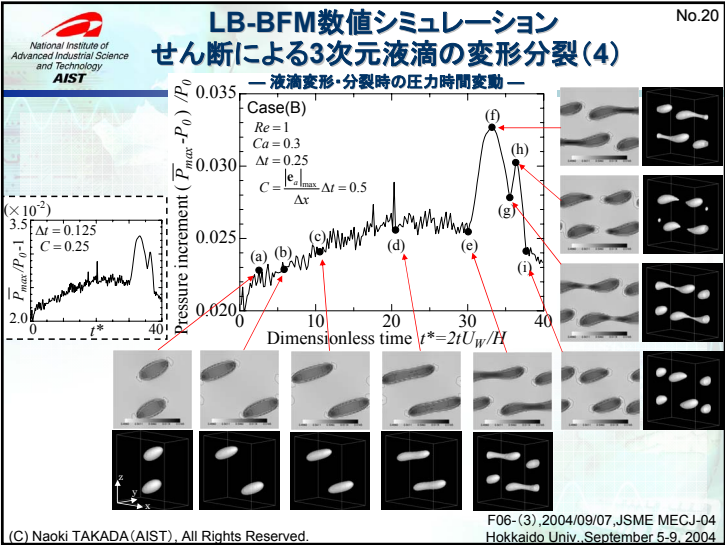
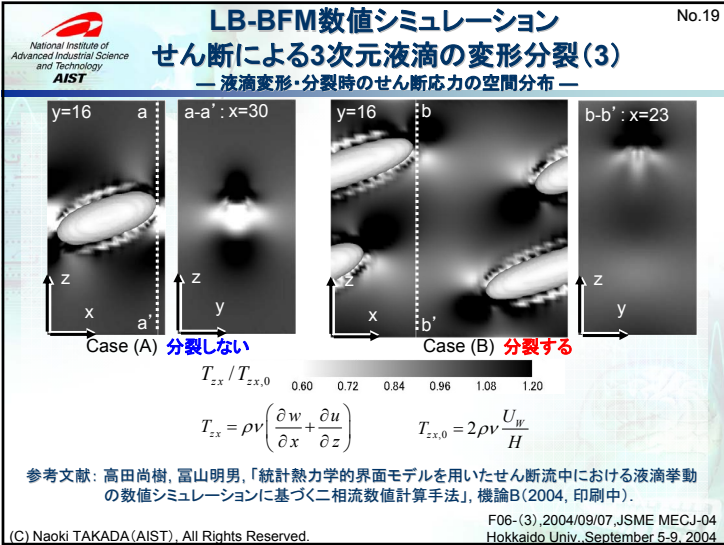
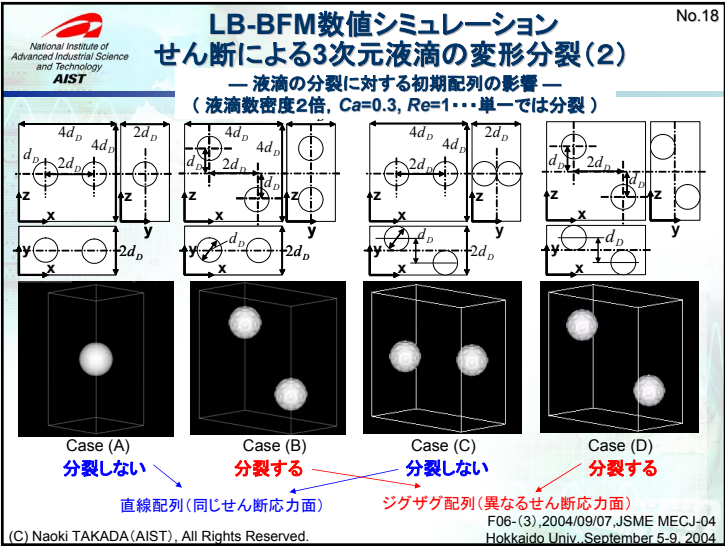
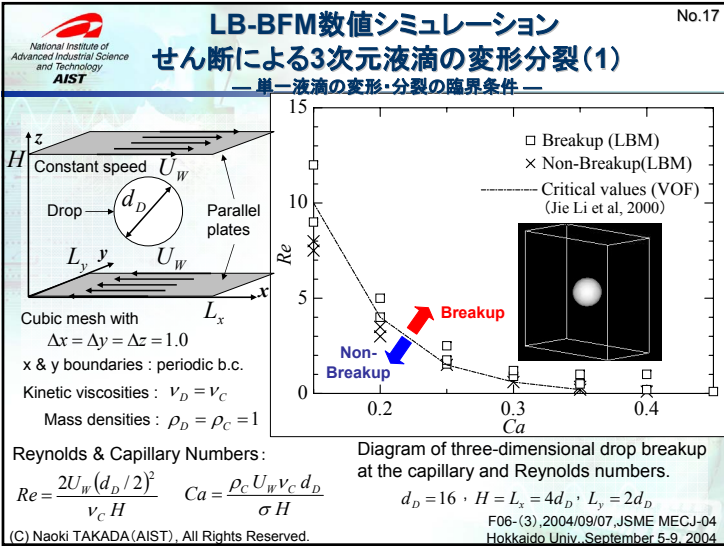
Dimensionless time $t^* = tU/d$

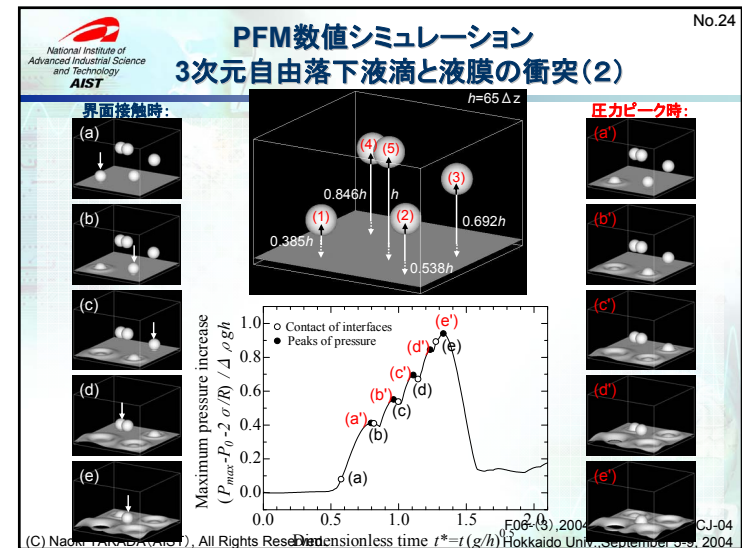
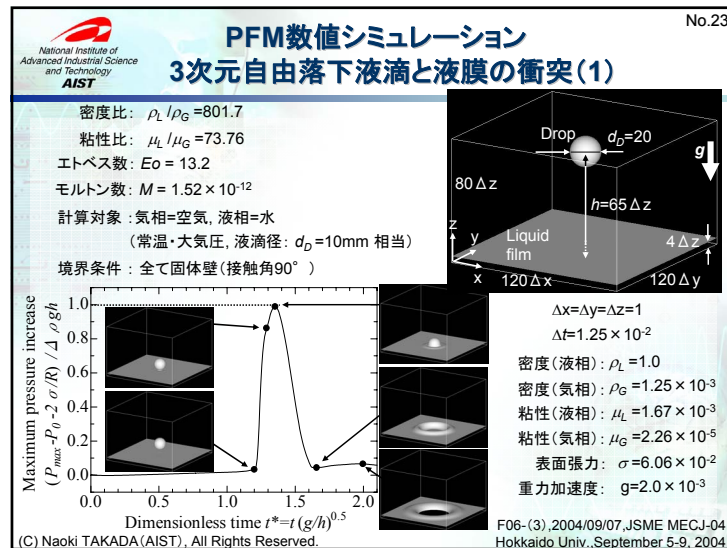
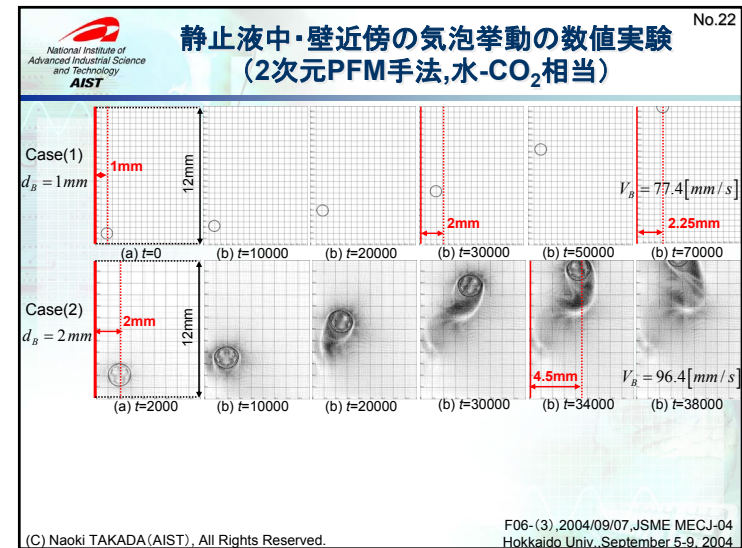
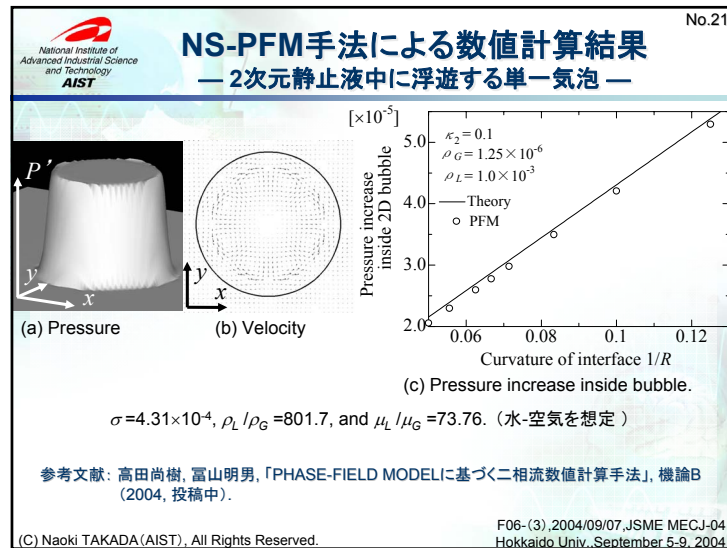
参考文献: 高田尚樹, 富山明男, 「PHASE-FIELD MODELに基づく二相流数値計算手法」, 機論B (2004, 投稿中).

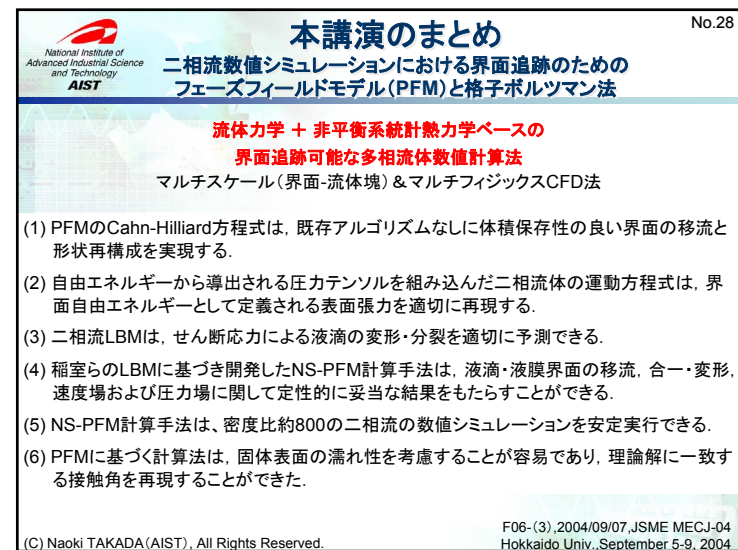
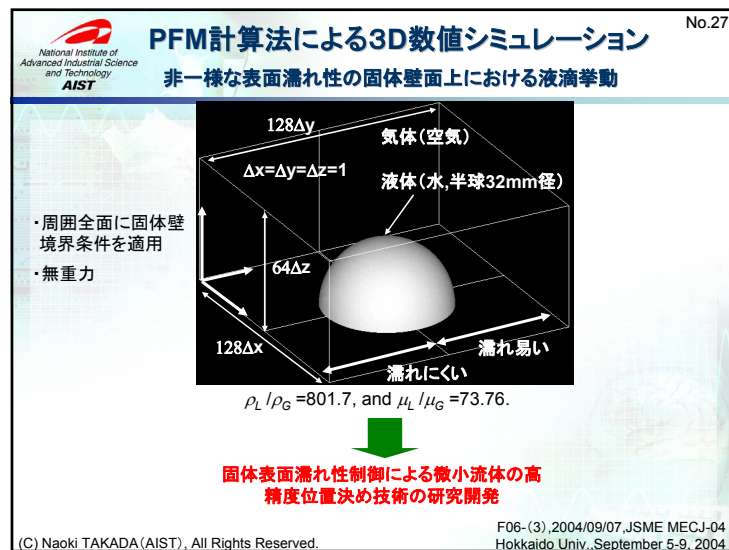
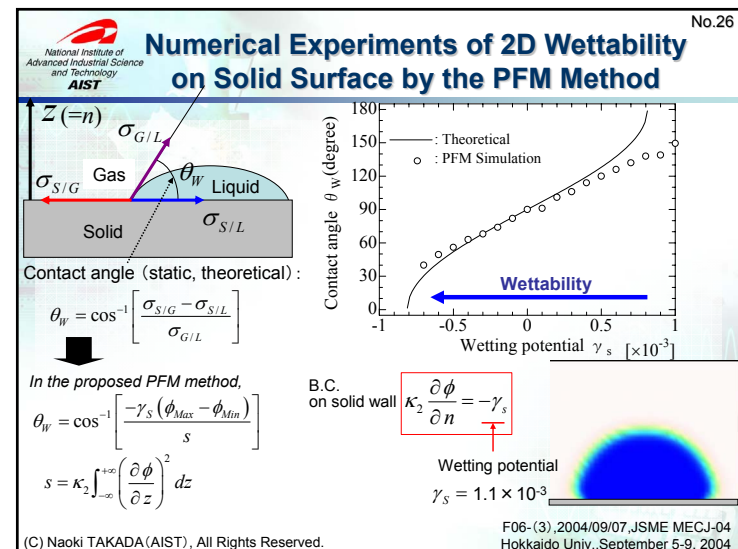
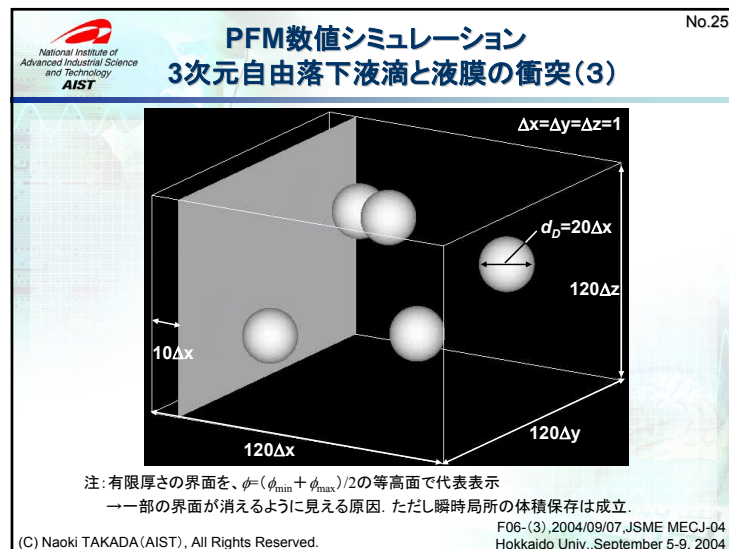
(C) Naoki TAKADA (AIST), All Rights Reserved.

F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004









No.29


**数値流体力学(CFD)に対する
Phase-Field Modelの貢献・重要性**

1. 既存の二相流数値計算領域

複雑性の高い二相流動現象の高効率計算

・・・表面張力と界面移流の計算量は時間・空間解像度でほぼ決まる。
(既存アルゴリズムなし → 界面の面積濃度や変形度合に直接関係しない)

・・・多数の複雑形状界面の追跡(合体・分裂を繰り返す液滴・気泡クラスター等)

**2. マルチスケール&マルチフィジックスな
シミュレーション領域**

(1) 界面厚さ, 固体表面濡れ性が顕著な流れ場

・・・マイクロチャンネル内流動, 地下水流れ(結晶質・堆積岩, 複雑多孔質体)

(2) 界面が独自の移動速度を持つ場合

・・・相変化・ガス溶解

F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004

(C) Naoki TAKADA(AIST), All Rights Reserved.

No.30


**謝 辞
(敬称略)**

研究協力 産業技術総合研究所
三澤雅樹 (複雑現象工学研究G)
高橋 学 (地殻物性チーム)
神戸大学
富山明男, 細川茂雄, 宋明良

研究実施 制度 **文部科学省 科学技術振興調整費・流動促進研究課題
(若手育成型)**
「閉鎖性水域の水質改善を目的としたマイクロバブル
生成機構の研究」, 2000-2002年度(終了)

文部科学省 原子力試験研究課題
「微視的数値解析手法による地層環境内の物質拡散現象
予測の高度化に関する研究」, 2002-2004年度(継続中).

F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004

(C) Naoki TAKADA(AIST), All Rights Reserved.

No.31


**本研究開発内容に関する
お問い合わせ**

高田 尚樹
独立行政法人 産業技術総合研究所(AIST)
環境管理研究部門 環境流体工学研究グループ
〒305-8569 茨城県つくば市小野川16-1
つくば西事業所 2G棟1201室
電話: 029-861-8232 Fax: 029-861-8722
E-mail: naoki-takada@aist.go.jp
URL: <http://staff.aist.go.jp/naoki-takada/index.html>

Naoki TAKADA (Research Scientist, Dr.Eng)
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)
16-1, Onogawa, Tsukuba, Ibaraki, 305-8569, JAPAN
Tel: +81-29-861-8232, Fax: +81-29-861-8722
E-mail: naoki-takada@aist.go.jp
URL: <http://staff.aist.go.jp/naoki-takada/index.html>

F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004

(C) Naoki TAKADA(AIST), All Rights Reserved.

No.32


**本講演に関する主要な参考文献
フェーズフィールドモデルと格子ボルツマン法**

(1) Jacqmin, D., J. Comput. Phys., **155** (1999), 96-127.
(2) Jamet, D., Lebaigue, O., Coutris, N. and Delhaye, J.M., J. Comput. Phys., **169** (2001), 624-651.
(3) Anderson, D.M., McFadden, G.B., and Wheeler, A.A., Annu. Rev. Fluid Mech., **30** (1998), 139-165.
(4) Bi, Z., and Sekerka, R. F., Physica, A **261** (1998), 95-106.
(5) 森田裕史, 川勝年洋, 土井正男, 高分子論文集, **56-10** (1999), 674-683.
(6) Cahn, J. W., and Hilliard, J. E., J. Chem. Phys., **28** (1958), 258-267.
(7) Bray, A. J., Adv. Phys., **43** (1994), 357-459.
(8) Chen, S. and Doolen, G.D., Annu. Rev. Fluid Mech., **30** (1998), 329-364.
(9) Swift, M. R., Osborn W. R., and Yeomans, J. M., Phys. Rev. Lett., **75** (1995), 830-833.
(10) Inamuro, T., Tomita, R. and Ogino, F., Int. J. Modern Phys. B, **17** (2003), 21-26.
(11) Inamuro, T., Ogata, T., Tajima, S., and Konishi, N., J. Comput. Phys., **198** (2004), 628-644.
(12) Chen, Y., Teng, S. and Ohashi, H., Proc. 3rd Organized Multiphase Flow Forum '99, Yokohama, Japan, Dec. 2-3 (1999), 58-64.
(13) Takada, N., Tomiyama, A., and Hosokawa, S., Computational Fluid Dynamics JOURNAL, **12**(2003), 475-481.
(14) 瀬田剛, 高橋亮一, 奥井健一, 竹越栄俊, 機論B, **68**-672 (2002), 2186-2194.
(15) 齊藤良行, 「組織形成と拡散方程式」, コロナ社(2000).
(16) 高田尚樹, 富山明男, 「統計熱力学的界面モデルを用いたせん断流中における液滴挙動の数値シミュレーションに基づく二相流数値計算手法」, 機論B(2004, 印刷中).
(17) 高田尚樹, 富山明男, 「PHASE-FIELD MODELに基づく二相流数値計算手法」, 機論B(2004, 投稿中).

F06-(3), 2004/09/07, JSME MECJ-04
Hokkaido Univ., September 5-9, 2004

(C) Naoki TAKADA(AIST), All Rights Reserved.