

## フェーズフィールドモデルと格子ボルツマン法

(独)産業技術総合研究所 高田尚樹

## 1. 緒言

フェーズフィールドモデル (Phase-Field Model, PFM) <sup>(1),(2)</sup>は、多数の相が混在して複雑な形状の界面を含む非平衡系の振る舞いを予測する統計熱力学的な数値シミュレーション法であり、二相流体中の気泡・液滴挙動の解明以外にも、二元合金凝固<sup>(3)</sup>や高分子薄膜形成<sup>(4)</sup>等のメソスケール組織形成過程の研究で多用されている。計算流体力学シミュレーション法である格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, LBM) <sup>(5)</sup>で現在主流の二相流モデル<sup>(6),(9)</sup>も PFM の一種であり、従来のアルゴリズムを使用せずに van der Waals-Cahn-Hilliard 自由エネルギー理論<sup>(10),(11)</sup>に基づいて、二相流界面を高精度に追跡できる。本報では、PFM の特徴と界面移流・再構成機能を解説し、PFM に基づく LBM とナビエ・ストークス式数値解法による二相流数値シミュレーション結果<sup>(9),(12)</sup>を報告する。

## 2. フェーズフィールドモデル (PFM) の概要

PFM に基づく界面追跡可能な二相流計算法には、(1)ナビエ・ストークス (NS) 式の数値解法 (NS-PFM) <sup>(1), (2)</sup>と、(2)流体粒子密度の速度分布の時間発展を求める LBM および格子ガスオートマトン(LGCA)法<sup>(13)</sup>が挙げられる。いずれも、「系の自由エネルギーを最小にする」という統計熱力学的アルゴリズム<sup>(10),(11)</sup>に基づき界面の形状を自発的に決定するため、界面の境界条件を要しない。表 1 に示すように、これらの特徴は、Volume of Fluid (VOF) 法等の NS 式を用いる従来の界面追跡法<sup>(14)</sup>と異なり、

Table 1. Comparison of interface(I.F.)-tracking CFD methods.

I.F.-Tracking Method	Conventional (NS eq.)			Phase-Field Modeling		
	MAC Front Tracking	VOF	Level Set	NS-PFM	LBM	LGCA
I.F. Width	0, or $\approx \Delta x$			Several cells		
Surface Tension	Continuum Surface Force (CSF)			Interface Free Energy by (Density Gradient) <sup>2</sup>		
I.F. Re-Construction	DA PLIC	FLAIR MARS	SURFER TVD CIP	Chemical Potential Gradient Flux		

(1) 界面は、流体の物性 (密度, 粘性等) が連続的に変化する、幅 $\Delta x$ の空間セル数個分の空間として現れる(Diffuse Interface) <sup>(1),(2)</sup>,  
 (2) 表面張力は、質量密度 (または相・成分濃度) の勾配に起因する界面の自由エネルギー増分として与えられる<sup>(10),(11)</sup>,  
 (3) 界面の移流計算では、非平衡系の瞬時局所的な化学ポテンシャルの勾配を考慮して界面再構成を行う<sup>(1),(8),(12)</sup>,  
 という点にある。以上により、(1)表面張力が複雑な幾何計算を行わずに考慮される、(2)Donor-Acceptor(DA), MARS, CIP 等のアルゴリズム<sup>(14)</sup>を用いなくとも界面の輸送と再構成を実現できる、という利点もたらされる結果、PFM 計算法は、従来法に比べて合体や分裂を繰り返す液滴・気泡群の多数の界面の追跡に優れ、固体表面の濡れ性、相変化や溶解による界面移動を自然に再現できる<sup>(1),(2)</sup>。これまでの NS-PFM 法が質量密度比の小さい流体を対象としていた<sup>(1),(2)</sup>のに対して、PFM に基づく LBM<sup>(14),(15)</sup>では、Swift の気液モデル<sup>(6)</sup>を発展させた稲室ら<sup>(8)</sup>の二相流モデルが、界面形状を表す指標関数の導入と圧力の収束計算によって、数値的に安定した高密度比二相流の計算に成功した。著者は現在、この LBM<sup>(8)</sup>の長所を融合した新しい NS-PFM 計算法の開発に取り組み、(1)より効率的で安定した高密度比二相流計算、(2)要求精度に応じた離散化スキームと計算アルゴリズムの柔軟な選択、の実現を目指している<sup>(12)</sup>。

## 3. PFM が有する界面移流・再構成計算能力の評価

PFM 計算法では、時刻  $t$  に体積  $V$  の系  $\mathbf{x}$  内で局所流速  $\mathbf{u}$  を持つ二相流体の分布を、界面形状を表す指標の連続関数  $\phi(\mathbf{x}, t)$ <sup>(8)</sup>に関するカーン・ヒリアード (Cahn-Hilliard, C-H) 方程式<sup>(1),(10),(11)</sup>によって計算する。右辺の  $\Gamma(\phi)$  は易動度 (Mobility) と呼ばれる係数、式 (2) の  $\eta$  は系の自由エネルギー $\Psi$ <sup>(3)</sup>から導かれる化学ポテンシャルであり、これらが瞬時局所の非平衡状態で  $\phi$  の流れをもたらす。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = \nabla \cdot [\Gamma(\phi) \nabla \eta], \quad \eta = \frac{\delta \Psi}{\delta \phi}, \quad \Psi = \int_V \left[ \psi(\phi) + \frac{\kappa_2}{2} |\nabla \phi|^2 \right] dV \quad (1),(2),(3)$$

式(3)右辺の  $\psi(\phi)$  は単位体積あたりの流体の自由エネルギーであり、 $\phi$  に関して下に凸な 2 つの極値を持つことで、臨界点以下の温度で二相共存を実現する。第 2 項は、 $\phi$  の勾配で生じるエネルギー増加を表し、係数  $\kappa_2$  の 1/2 乗に比例する界面厚さを与える。LBM<sup>(6),(9)</sup>では、式(1)に代わって、離散的な速度  $\mathbf{c}_a$  を持ち、 $\phi$  の系を構成する粒子の数密度に関する速度分布関数  $g_a$  の時間発展<sup>(4)</sup>を計算する。

$$\frac{\partial g_a}{\partial t} + \mathbf{c}_a \cdot \nabla g_a = -\frac{1}{\tau} [g_a - g_a^{eq}(\mathbf{x}, t)], \quad \sum_a g_a = \sum_a g_a^{eq} = \phi, \quad \sum_a g_a^{eq} \mathbf{c}_a = \phi \mathbf{u} \quad (4),(5),(6)$$

式(4)右辺で、緩和時間  $\tau$  は式(1)の  $\Gamma$  に関係し、瞬時局所平衡時の粒子密度の速度分布関数  $g_a^{eq}$  は式(5), (6)を満たしつつ  $\eta$  を含む。

図 1 は C-H 式(3)を用いた 2 次元界面の非定常移流計算の結果を示す<sup>(12)</sup>。幅 1 の正方形セルで一様に離散化した  $(x, y)$  座標系に直径  $d=32$  の円形界面を配置し、Case(A)では一様等速度 ( $u = v$ ) 運動、Case(B)では半径  $2d$  の円軌道上の一定角速度運動を与えた。両条件とも Courant 数  $C=0.0125 \sim 0.1$  に対し、円形面積 (セル数  $N$ ) は各無次元時間  $t^*$  に初期値  $N_0$  の 2% 以内の誤差で保存され、界面形状も良く保持された。以上より、式(3)が従来アルゴリズムを使用せず高精度の体積保存性と形状保存性を実現することを確認した。

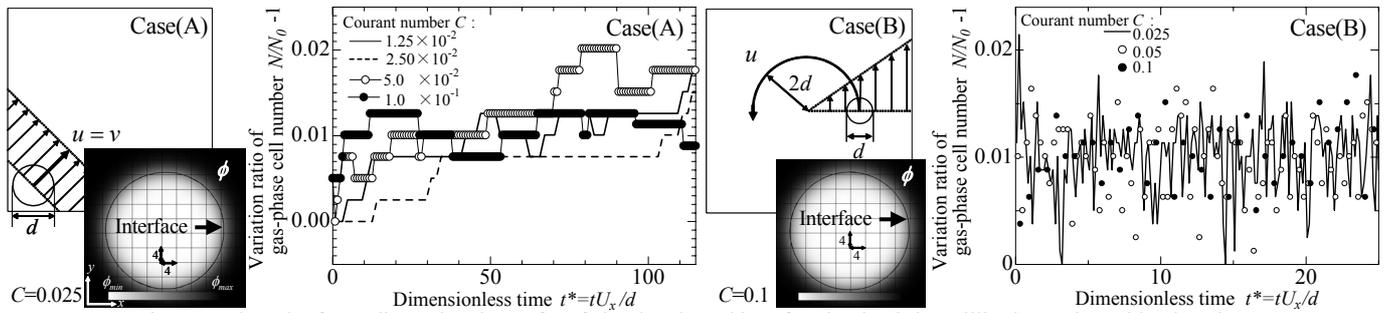


Fig.1 Benchmark of two-dimensional transfer of circular-shaped interface by the Cahn-Hilliard equation with advection.

#### 4. LBM と新しいPFM 計算法による液滴・気泡挙動の数値シミュレーション

ここで、2種類のPFM計算法で得られた非圧縮性二相流数値シミュレーション結果を述べる。まず、LBMによる3次元一様せん断流中で周期的に浮遊する液滴群(図2)の挙動計算<sup>(9)</sup>では、表面張力、せん断応力および液滴数密度が同じ2条件で、液滴の分裂に初期配列の依存性が現れた(図3)。これは、x-y平面に作用するx方向のせん断応力(無次元)の図4から、複数の液滴が同一平面に存在する場合、表面張力が平面付近に集中して局部的にせん断応力を弱めるために変形が抑制されて分裂が生じないと考えられる。

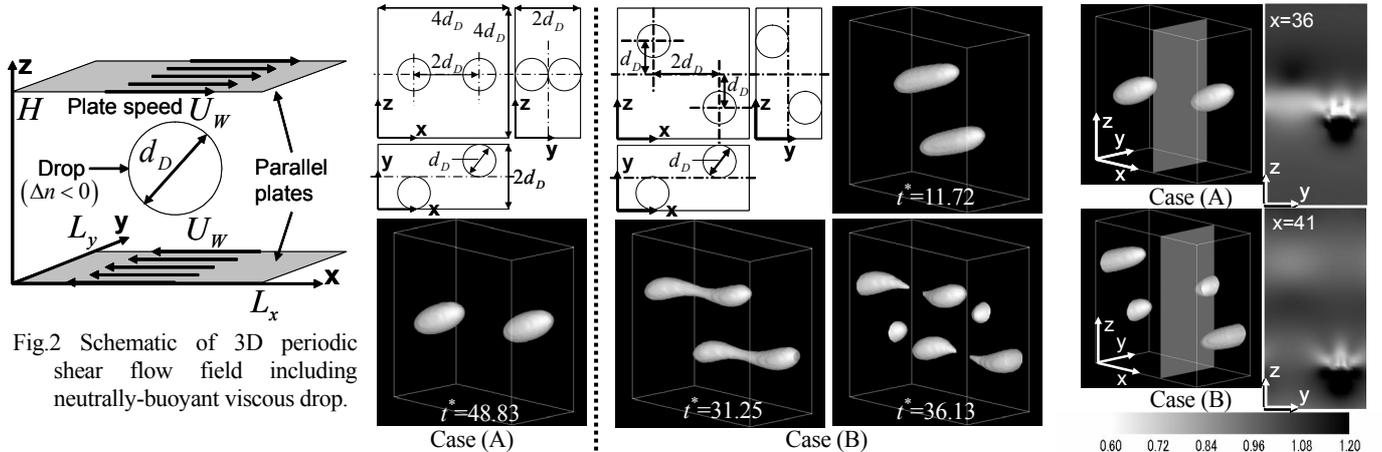


Fig.2 Schematic of 3D periodic shear flow field including neutrally-buoyant viscous drop.

Fig.3 Initial conditions and snapshots of drop interface at  $t^* = t \times 2U_w/H$ .

Fig.4 Shear stress on a y-z plane.

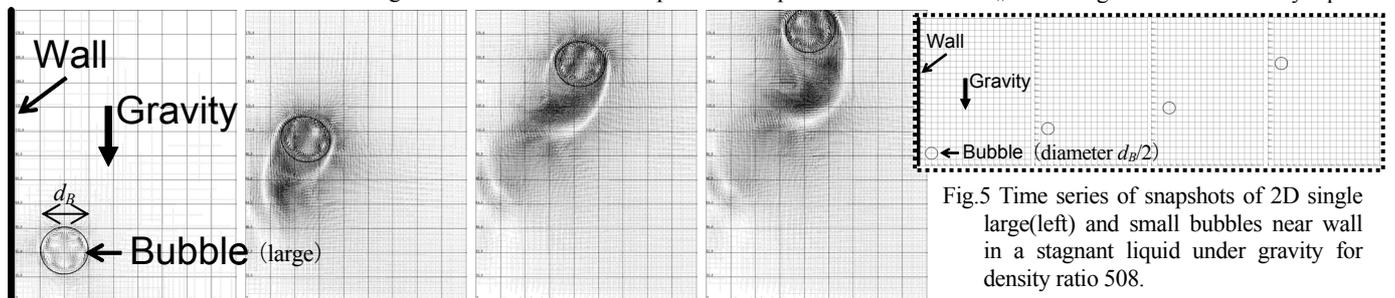


Fig.5 Time series of snapshots of 2D single large(left) and small bubbles near wall in a stagnant liquid under gravity for density ratio 508.

図5は、新しいNS-PFM計算法<sup>(12)</sup>による、重力下の静止液中で壁面近傍に初期配置された2次元単一気泡挙動の結果を示す。密度比、粘性比およびMorton数 $M$ は水-CO<sub>2</sub>ガス系の値に相当し、気泡径が2mmと1mmになるEötvös数 $Eu$ を設定した。左右の図(同サイズの表示領域)に見られるように、大気泡は揺動しながら壁から離れて上昇し、小気泡はほぼ鉛直に壁近傍を上昇するという実現象との定性的な一致を得た。さらに、水-空気系を想定した液滴と液膜の衝突合体の再現と本法の数値安定性も確認した(図6)<sup>(12)</sup>。

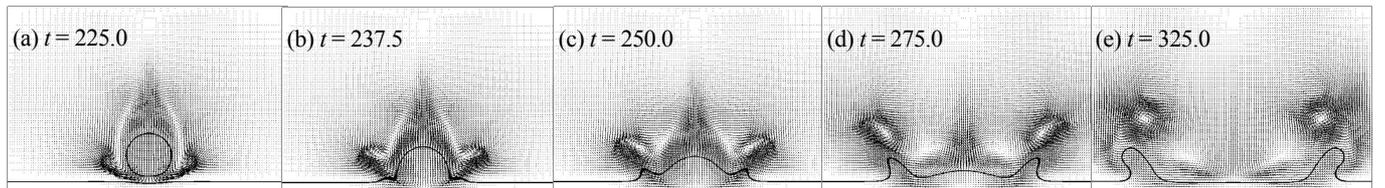


Fig.6 Time series of snapshot of velocity field and interface of 2D drop and liquid film under gravity for  $M = 1.52 \times 10^{-12}$  and  $Eu = 13.2$ .

文献：(1) Jacqmin, D., *J. Comput. Phys.*, **155** (1999), 96-127. (2) Jamet, D., Lebaïque, O., Coutris, N. and Delhaye, J. M., *J. Comput. Phys.*, **169** (2001), 624-651. (3) Bi, Z. and Sekerka, R. F., *Physica A* **261** (1998), 95-106. (4) 森田, 川勝, 土井, 高分子論文集, **56-10** (1999), 674-683. (5) Chen, S. and Doolen, G. D., *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **30** (1998), 329-364. (6) Swift, M. R., Osborn, W. R., and Yeomans, J. M., *Phys. Rev. Lett.*, **75** (1995), 830-833. (7) Seta, T., Kono, K. and Chen, S., *Int. J. Modern Phys., B* **17** (2003), 169-172. (8) Inamuro, T., Ogata, T., Tajima, S., and Konishi, N., *J. Comput. Phys.* (2004), in press. (9) Takada, N., Tomiyama, A., and Hosokawa, S., *Comput. Fluid Dyn. J.*, **12** (2003), 475-481. (10) Cahn, J. W., and Hilliard, J. E., *J. Chem. Phys.*, **28** (1958), 258-267. (11) Bray, A. J., *Adv. Phys.*, **43** (1994), 357-459. (12) 高田, 富山, 機論B (投稿中). (13) Tochio, D., Abe, Y., Matsukuma, Y., and Nariai, H., *Int. J. Modern Phys., B* **17** (2003), 189-192. (14) 秋山, 有富, 新しき気液二相流数値解析(2002), 50-177, コロナ社