計算工学講演会論文集　Vol.28 (2023年5月)　計算工学会

二相流計算における修正Allen-Cahn方程式の混合法定式化

A variational mixed formulation of conservative Allen-Cahn equation for two-phase incompressible flows

澤田 有弘[1)], 松本 純一[2)]
Tomohiro Sawada and Junichi Matsumoto

1) 博(科) 産業技術総合研究所（〒305-8568 茨城県つくば市梅園1-1-1 中央第2, E-mail: tomohiro-sawada@aist.go.jp）
2) 博(工) 産業技術総合研究所（〒305-8568 茨城県つくば市梅園1-1-1 中央第2, E-mail: matsumoto-junichi@aist.go.jp）

This paper presents a variational mixed formulation of the conservative Allen-Cahn equation for stable and accurate computation of two-phase incompressible viscous flows. We split the Allen-Cahn equation into the convection and the diffusion-reaction, namely mobility equation by introducing a scalar Lagrange-multiplier having diffusional dimension. Practical computational results will be shown on the day of the conference.

Key Words : *Two-phase incompressible flow, Conservative Allen-Cahn equation, Mixed formulation, Finite element method*

1.　緒　言

連続体力学に基づく二相流計算においては界面の取り扱い方の異なりによって、VOF法、Levelset法、Phase-fields法などの手法がある。このうちPhase-field法による解法は、二相流の界面を保存形のCahn-Hilliard方程式を解くことで追跡する方法、保存形もしくは非保存形のAllen-Cahn方程式を解くことで追跡する手法がある。最近では保存形のAllen-Cahn方程式が用いられることが多くなっている。修正Allen-Cahn方程式とも呼ばれる。Phase-field法による二相流計算では、質量保存則から導出される界面の対流方程式に、界面幅を一定に保つ効果をもたらす、人工的な拡散・相分離項が追加される。このとき、界面を保つ効果の強さを表す係数としてMobilityと呼ばれる係数も導入される。またどのようにCahn-Hilliard方程式やAllen-Cahn方程式を数値的に解くかも研究されている[1], [2]。

本研究では、文献[1], [2]などを先行研究に、保存形のAllen-Cahn方程式をペナルティ法や未定乗数法の見地から再考察し、未定乗数法に基づく混合法定式化、更にペナルティ法と未定乗数法を同時に適用するAugmented Lagrange未定乗数法及びPerturbed Lagrange未定乗数法に相当する定式化を示す。空間離散化手法としては有限要素法を適用することを前提とする。性能などの比較、検証結果や更なる改良型の定式化に関する検討は講演時に示すものとする。

2.　保存型のAllen-Cahn方程式

時刻tにおける界面関数をϕ、Navier-Stokes方程式から与えられる流速を$\boldsymbol{v}$、Phase-field法におけるMobility（拡散係数）をM、相当界面幅をw、相分離力を$M\boldsymbol{f}$とすると、保存形のAllen-Cahn方程式は次の式で与えられる。

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi-M\nabla\cdot(\nabla\phi-\boldsymbol{f})=0 \tag{1}$$

$$\boldsymbol{f}=\frac{1}{w}\phi(1-\phi)\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} \tag{2}$$

ここで式(1)左辺第3項が界面幅を一定に保つ効果をもたらす拡散・相分離項となる。
有限要素法での離散化のため、計算領域をΩ、その境界をΓとして式(1)の弱形式をとると次の式を得る。ここで、δは変分演算子、$\boldsymbol{n}$はΓに対する外向きの法線ベクトルである。また、本稿ではMは定数として積分の外に出した。

$$\int_\Omega \delta\phi\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi\right)\mathrm{d}\Omega+M\int_\Omega \nabla\delta\phi\cdot(\nabla\phi-\boldsymbol{f})\,\mathrm{d}\Omega = M\int_\Gamma \delta\phi\boldsymbol{n}\cdot(\nabla\phi-\boldsymbol{f})\,\mathrm{d}\Gamma \tag{3}$$

3.　保存型のAllen-Cahn方程式の混合法定式化

式(1)と式(2)の連立方程式の解法としては、式(2)を式(1)に代入して直接的に解く方法や、式(2)の$\boldsymbol{f}$を一種の媒介変数として連立する方法などがある。文献[2]などではこの媒介変数に基づく方法も混合法の一種と位置付けている。

一方で式(1)において、拡散・相分離項（Mobilityに関する項）が界面幅を一定に保つことのみを目的とした完全に人工的な項とみなせる場合には、拡散・相分離項は慣性項に対するPenalty項、MはPenalty係数と解釈することも可能である。それゆえ、Mが過大であると安定な解を得ることが難しくなる傾向をもたらす。

この種の課題に対し古くから存在しているのがLagrange未定乗数法に基づく混合法定式化である。式(1)

を次のように二つの式に分離して考えると、Lagrange未定乗数法に基づく混合法定式化の起点となる式となる。Penalty法の見地からは、Mが無限大のときの式となる。

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi=0 \tag{4}$$

$$\breve{M}\nabla\cdot(\nabla\phi-\boldsymbol{f})=0 \tag{5}$$

この形式を採用する場合、式(5)から分かるようにMは無用となるが、式(1)との対応関係を明瞭にするため$\breve{M}$として残した。本研究ではこの連立方程式に対し、Navier-Stokes方程式と非圧縮性拘束条件式の連立解法（圧力を未定乗数とした混合法定式化）と同様に、新たな未定乗数λを導入して弱定式化する。すると以下の式を得る。

$$\int_\Omega \delta\phi\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi\right)d\Omega+\breve{M}\int_\Omega(\nabla\delta\phi-\delta\boldsymbol{f})\cdot\nabla\lambda\, d\Omega = \breve{M}\int_\Gamma(\nabla\delta\phi-\delta\boldsymbol{f})\boldsymbol{n}\cdot\lambda\, d\Gamma \tag{6}$$

$$\breve{M}\int_\Omega \nabla\delta\lambda\cdot(\nabla\phi-\boldsymbol{f})\, d\Omega=\breve{M}\int_\Gamma \delta\lambda\boldsymbol{n}\cdot(\nabla\phi-\boldsymbol{f})\, d\Gamma \tag{7}$$

この式が、本研究における修正Allen-Cahn方程式の混合法定式化となる。次元解析により、未定乗数λはMobility（拡散係数）の次元を有する未知数であることが分かる。

更に、Penalty法と未定乗数法を同時に適用することで安定化を図る手法がAugmented Lagrange未定乗数法として知られている。式(7)の対角項に小さな摂動項を付与することで局所的な不定値性を取り除く手法がPerturbed Lagrange未定乗数法として知られている。このAugmented Lagrange未定乗数法及びPerturbed Lagrange未定乗数法に対応する定式化は、式(3)のPenalty項と式(6)、(7)の未定乗数項を同時に導入し、更に式(7)にPerturbation項も付与した以下の式で与えられる。

$$\begin{aligned}\int_\Omega \delta\phi\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\nabla\phi\right)d\Omega&+\breve{M}\int_\Omega(\nabla\delta\phi-\delta\boldsymbol{f})\cdot\nabla\lambda\, d\Omega\\ &+M\int_\Omega \nabla\delta\phi\cdot(\nabla\phi-\boldsymbol{f})\, d\Omega\\ &=\breve{M}\int_\Gamma(\nabla\delta\phi-\delta\boldsymbol{f})\boldsymbol{n}\cdot\lambda\, d\Gamma\\ &+M\int_\Gamma \delta\phi\boldsymbol{n}\cdot(\nabla\phi-\boldsymbol{f})\, d\Gamma\end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned}\breve{M}\int_\Omega \nabla\delta\lambda\cdot(\nabla\phi-\boldsymbol{f})\, d\Omega&-\breve{M}\frac{\tau}{w^2}\int_\Omega \delta\lambda\lambda\, d\Omega\\ &=\breve{M}\int_\Gamma \delta\lambda\boldsymbol{n}\cdot(\nabla\phi-\boldsymbol{f})\, d\Gamma\end{aligned} \tag{9}$$

ここで$\breve{M}$は形式的に残した係数であることから、$\breve{M}=1$とすることが基本となるが、$\breve{M}=\|\bar{\boldsymbol{v}}\|w$、ここで$\|\bar{\boldsymbol{v}}\|$は代表流速等のノルムとすることで、$\lambda$をMobility（拡散係数）の次元で無次元化する係数として用いることもできる。式(9)のτは、次元解析によりMobilityの逆数の次元を有するPerturbation係数となる。

4. 結　言

本研究では、保存形のAllen-Cahn方程式をペナルティ法や未定乗数法の見地から再考察し、未定乗数法に基づく混合法定式化、更にペナルティ法と未定乗数法を同時に適用するAugmented Lagrange未定乗数法及びPerturbed Lagrange未定乗数法に相当する定式化を示した。

このような定式化に基づく解法が実際にどのような性能、傾向、特性を示すかに関しては学術的に興味深いものと考えられる。そのため、実際の性能に関する比較・検証計算や、安定性の更なる向上のための定式化などを講演時に紹介する。

参考文献

[1] H. Gomez and T.J.R. Hughes, Provably unconditionally stable, second-order time-accurate, mixed variational methods for phase-field models, Journal of Computational Physics, 230 (2011) 5310-5327.

[2] W. Ma and Y. Shen, A mixed formulation of proper generalized decomposition for solving the Allen-Cahn and Cahn-Hilliard equations, Finite Elements in Analysis and Design, 194 (2021) 103560.