

# MINI要素による複数物体を伴う気液固体の Multi-phase-field モデル三相解析

Multi-Phase-Field Model Three-Phase Analysis of Gas-Liquid-Solid with Multiple Objects using MINI Element

松本純一<sup>1)</sup>澤田有弘<sup>2)</sup>

Junichi Matsumoto and Tomohiro Sawada

<sup>1)</sup>博(工) 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 材料・化学領域 CD-FMat 研究チーム長  
(〒305-8568 茨城県つくば市梅園1-1-1 中央事業所2群, E-mail: matsumoto-junichi@aist.go.jp)

<sup>2)</sup>博(科) 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 材料・化学領域 CD-FMat 研究チーム長  
(〒305-8568 茨城県つくば市梅園1-1-1 中央事業所2群, E-mail: tomohiro-sawada@aist.go.jp )

A finite element method based on a Multi-Phase-Field model for free surface problem is proposed in this paper. Cahn-Hilliard equations are applied to estimate interface of gas, liquid and solid. MINI element, bubble function element /linear element, is used to solve Cahn-Hilliard equations. A three dimensional three-phase field fluid analysis with multiple objects is computed in this paper.

**Key Words :** Unstructured Grid, Multi-Phase-Field Model, Cahn-Hilliard Equation, Implicit Finite Element Method, Fluid Analysis, Multiple Objects

## 1. はじめに

四面体（非構造格子）を用いた複数物体の扱いが可能な気体・液体・固体における Multi-Phase-Field モデル三相解析の数値解法について検討する。Multi-Phase-Field モデルは、保存系の Cahn-Hilliard 方程式を採用する。本研究では、時間方向に陰解法、空間方向に安定化を考慮した MINI 要素による混合有限要素法を提案する。

## 2. 自由表面流れにおける界面関数の基礎方程式

複数物体を伴う気液固体の Multi-phase-field モデルによる界面方程式は、流速を  $\mathbf{u}$ 、界面関数を  $\psi_i$  として次の Cahn-Hilliard 方程式により表される。

Cahn-Hilliard 方程式 ( $i = 1 \sim N$ )

$$\dot{\psi}_i + \mathbf{u} \cdot \nabla \psi_i = \nabla \cdot \{M_c(\nabla \eta_i)\} \quad (1)$$

$$\sum_{i=1}^N \psi_i = 1 \quad (2)$$

$M_c$  はモビリティである。界面関数  $\psi_i$  は、 $\psi_1 = 1$  で液体、 $\psi_N = 1$  で気体、 $\psi_{2 \sim N-1} = 1$  で固体と定義する。各節点上で密度  $\rho$ 、粘性係数  $\mu$  は、界面関数  $\psi_i$  と液体、気体、固体の密度 ( $\rho_L, \rho_G, \rho_S$ )、粘性係数 ( $\mu_L, \mu_G, \mu_S$ ) を用いて式(3)によって計算され、Navier-Stokes 方程式にわたされる。

$$\rho = \psi_1 \rho_L + \psi_N \rho_G + \sum_{i=2}^{N-1} \psi_i \rho_S, \mu = \psi_1 \mu_L + \psi_N \mu_G + \sum_{i=2}^{N-1} \psi_i \mu_S \quad (3)$$

式(1)の  $\eta_i$  を次式のように表す。

$$\eta_i = 2\psi_i(\psi_i - 1)(2\psi_i - 1) - k_\psi (\nabla^2 \phi_i + \kappa |\nabla \phi_i|) \quad (4)$$

$\kappa$  は界面曲率を示す。液相および固相は式(1)の  $\psi_1$  から  $\psi_{N-1}$  に関する  $N-1$  個の方程式を連立して求め、気相は式(2)の関係式を用いて定義することにより、Multi-Phase-Field 三相モデルの計算を行う。多くの Multi-Phase-Field 三相モデルでは、固相を一つの Cahn-Hilliard 方程式で求めるが、複数物体が接した場合に物体同士の認識ができず、複数の物体が結合してしまうといった問題が生じる。本研究では、複数の物体 ( $i = 2 \sim N-1$ ) に対して、それそれ別々の Cahn-Hilliard 方程式を求ることにより、物体同士を認識できるようにする。ここで、 $k_\psi$ 、 $M_c$  を次式として定義する。

$$k_\psi = \frac{a_\delta^2 h_e^2}{2b^2}, M_a = \frac{2b^2}{a_\delta^2 h_e^2} M', M_c = \frac{2b^2}{a_\delta^2} M' \quad (5)$$

$$M' = M\gamma, b = 2 \tanh^{-1}(1 - 2\lambda), \lambda = 0.1$$

$M$ 、 $\gamma$  は界面モビリティ係数、界面エネルギー係数である。式(5)の導出において界面幅  $\delta$  と  $M_c$  は以下の仮定をした。

$$\delta = a_\delta h_e, M_c = M_a h_e^2 \quad (6)$$

$h_e$  は要素毎に定義されるメッシュ分割幅、 $a_\delta$  は連続的に変化する界面幅（1分割の場合は 1.0、2 分割の場合は 2.0）である。本研究では  $a_\delta = 4.0$  を用いる。

## 3. 時間方向の離散化と空間方向の離散化

本研究では、Cahn-Hilliard 方程式を用いて計算を行う。時間方向の離散化には、陰的解法を採用し、非線形方程式の解法に Newton-Raphson 法に基づいた反復計算を用いる。空間方向の離散化には、MINI 要素による混合補間 ( $\eta_i$  : 1 次要素、 $\psi_i$  : 直交基底気泡関数要素) を採用する [5]。

#### 4. 構造物の落下計算

Multi-Phase-Field モデルの固液気三相流れシミュレーションとして、図-1 に示す水深 5cm の液体（水面）の上部から直径 0.483cm, 0.544cm, 0.604cm の 3 種類の球体の構造物が初期速度 2m/s で落下する計算を行った。流体解析の計算手法は文献 [6] の陰解法を用いている。10cm を 128 分割、液体は水、気体は空気を仮定した密度、粘性係数を採用し、固体は鉄に相当する水の 7.85 倍の密度および水の 10 万倍の仮想的な粘性係数を用いた。

図-1 の左側は固相を一つの Cahn-Hilliard 方程式で求めた計算結果、右側は固相を複数の物体数（41 個）の Cahn-Hilliard 方程式で求めた計算結果である。図-1 をみると、双方の計算結果とも液体と固体が混合することなく、水面が円筒状に広がりながら構造物が落下してゆく様子が確認できる。図-2 に固体界面のみを描画した 0.05 秒後の計算結果を示す。図-2 をみると、左側の固相を一つの Cahn-Hilliard 方程式で求めた計算結果では、複数物体が接した場合に物体同士の認識ができずに複数の物体が結合している。これに対し、右側の固相を複数の物体数の Cahn-Hilliard 方程式で求めた計算結果では、各物体が認識でき、物体が結合せずに計算が行われている。

#### 5. おわりに

本論では、複数物体の扱いが可能な気体・液体・固体における Multi-Phase-Field モデル三相解析の数値解法について検討した。構造物の落下の計算例において、固相を一つの Cahn-Hilliard 方程式で求めた場合に生じる物体同士が結合してしまう問題に対し、固相を物体数の Cahn-Hilliard 方程式で求めることにより物体同士が結合せずに計算が行える結果を示し、本手法の有効性を確認した。

#### 参考文献

- [1] Nomoto, S., Izumi, T., Shiohara, Y., Umeda, T.: Numerical analysis of columnar grains growing in melt convection by phase field model, *Journal of Japan Institute of Metals*, Vol.65, pp.310-316, 2001.
- [2] 柳原徹哉, 高木知弘, 倉田正輝: 固液気三相流シミュレーションのための phase-field モデルの検討, 計算力学講演会, Vol.27, CD-ROM, 2014.
- [3] Beaumont, J. et al.: Modeling breakup and relaxation of Newtonian droplets using the advected phase-field approach, *Physical Review E*, Vol.75, pp.021405(1-8), 2007.
- [4] 高木知弘, 山中晃徳: フェーズフィールド法, 養賢堂, 2012.
- [5] 松本純一, 高田尚樹: 非構造格子を用いた Phase-Field モデル自由表面問題における化学ポテンシャルとモビリティーの効果の検討, 計算力学講演会, Vol.26, CD-ROM, 2013.
- [6] Matsumoto, J.: A relationship between stabilized FEM and bubble function element stabilization method with orthogonal basis for incompressible flows, *J. Appl. Mech., JSCE*, Vol.8, pp.233-242, 2005.

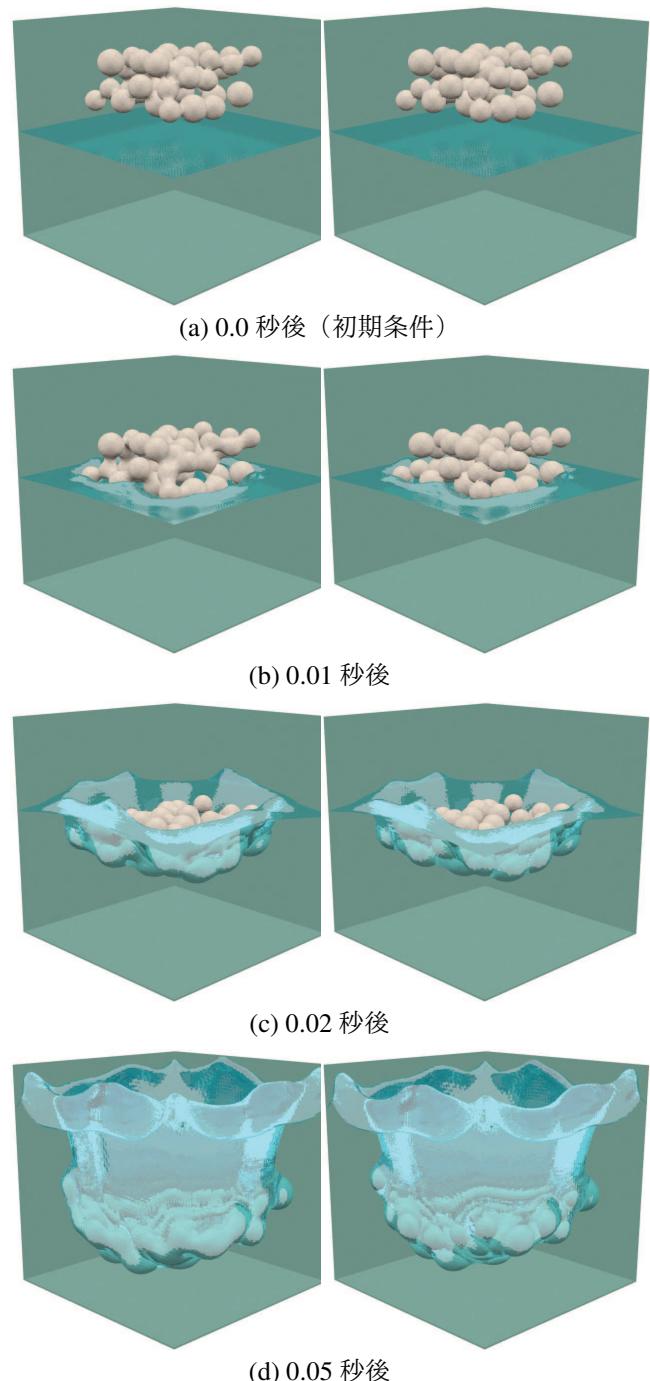


図-1 気液界面と固体界面（左：方程式 1 個、右：方程式 41 個）

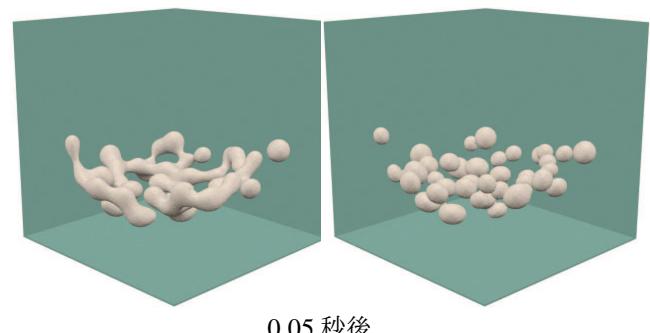


図-2 固体界面（左：方程式 1 個、右：方程式 41 個）