計算工学講演会論文集 Vol. 30 (2025 年 6 月) 日本計算工学会

気泡関数要素による複数物体を伴う気液固体 Multi-phase-field モデルの大規模三相解析

Multi-Phase-Field Model Large-Scale Three-Phase Analysis of Gas-Liquid-Solid with Multiple Objects using Bubble Function Element

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

[1)] 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 マテリアル DX 研究センター 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）
[2)] 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 マテリアル DX 研究センター 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 large-scale analysis by distributed memory parallelization of 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

四面体要素（非構造格子）を用いた複数物体を伴う気体・液体・固体の Multi-Phase-Field モデルの分散メモリ型並列による大規模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気泡関数要素と一次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

Multi-Phase-Field 多相モデル [1][2] による系の自由エネルギー密度 f を式 (1) のように定義する．

$$f = \sum_{i=1}^{N} \psi_i^2 - 2\sum_{i=1}^{N} \psi_i^3 + \left(\sum_{i=1}^{N} \psi_i^2\right)^2 + \sum_{i=1}^{N} \frac{k_\psi}{2} \nabla\psi_i \cdot \nabla\psi_i \quad (1)$$

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

自由エネルギーの最小化原理により，式 (1) から導出される複数物体を伴う気液固体の Multi-phase-field モデルの界面方程式は，流速を $\boldsymbol{u}$，界面関数を ψ_i として次の Cahn-Hilliard 方程式（$i = 1 \sim N$）により表される．

$$\dot{\psi}_i + \boldsymbol{u} \cdot \nabla\psi_i = \nabla \cdot \{M_c (\nabla\eta_i)\} \quad (3)$$

M_c はモビリティである．界面関数 ψ_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．各節点上での密度 ρ，粘性係数 μ は，界面関数 ψ_i と液体，気体，固体の密度（ρ_L，ρ_G，ρ_S），粘性係数（μ_L，μ_G，μ_S）を用いて式 (4) によって計算され，Navier-Stokes 方程式にわたされる．

$$\rho = \psi_1\rho_L + \psi_N\rho_G + \sum_{i=2}^{N-1} \psi_i\rho_S \,,\ \mu = \psi_1\mu_L + \psi_N\mu_G + \sum_{i=2}^{N-1} \psi_i\mu_S \quad (4)$$

式 (3) の η_i は次式のように表される．

$$\eta_i = 2\psi_i(\psi_i - 1)(2\psi_i - 1) - k_\psi \left(\nabla^2\psi_i + \kappa|\nabla\psi_i|\right) \quad (5)$$

κ は界面曲率を示す．本研究では，Navier-Stokes の運動方程式に CSF モデル項 [3] を用いて表面張力の効果を考慮するため，式 (5) の右辺の最後の項に，Cahn-Hilliard 方程式から表面張力の効果を取り除く項を追加している [4]．液相および固相は式 (3) の ψ_1 から ψ_{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，それぞれ別々の Cahn-Hilliard 方程式を求めることにより，物体同士を認識できるようにする．ここで，k_ψ，M_c を次式として定義する．

$$k_\psi = \frac{a_\delta^2 h_e^2}{2b^2} \,,\ M_a = \frac{2b^2}{a_\delta^2 h_e^2} M' \,,\ M_c = \frac{2b^2}{a_\delta^2} M' \quad (6)$$

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

M，γ は界面モビリティ係数，界面エネルギー係数である．式 (6) の導出において界面幅 δ と M_c は以下の仮定

をした．

$$\delta = a_\delta h_e \ , \ M_c = M_a h_e^2 \tag{7}$$

h_e は要素毎に定義されるメッシュ分割幅，a_δ 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．

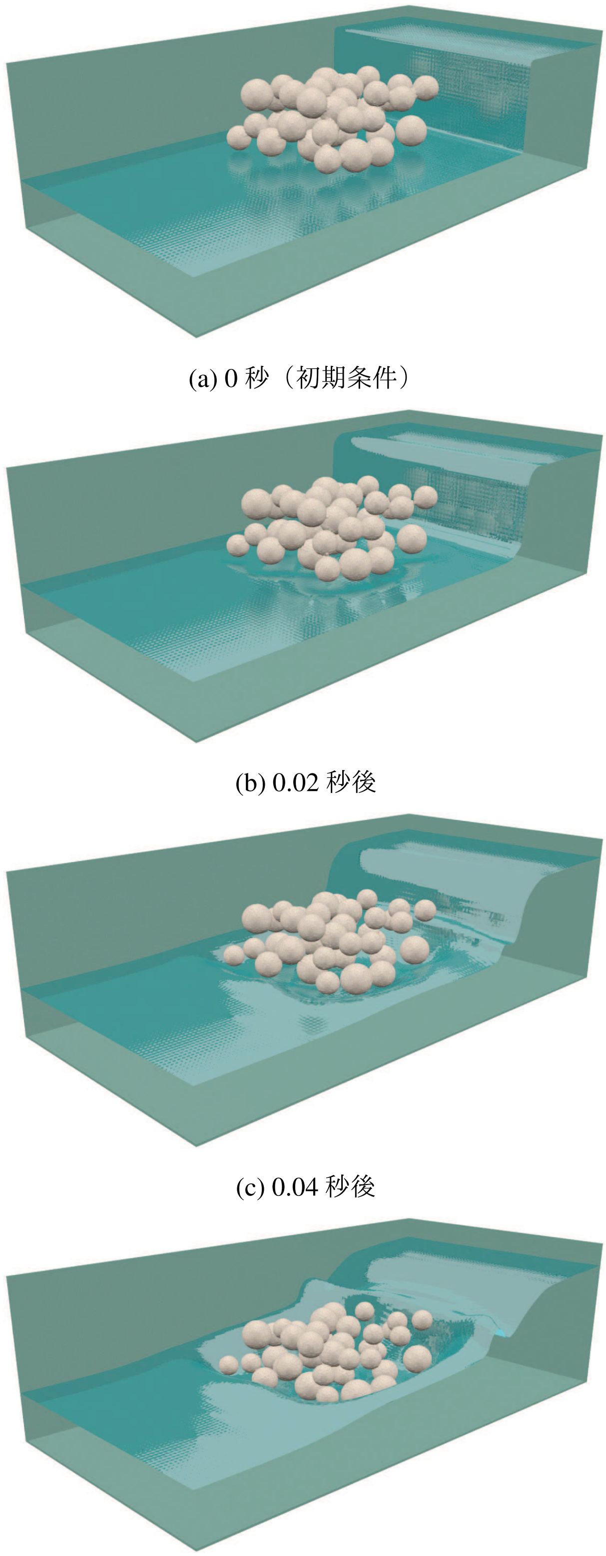
3. 時間方向の離散化と空間方向の離散化

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（η_i：1 次要素，ψ_i：直交基底気泡関数要素）を採用する [5]．

4. 段波を伴う構造物の落下計算

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 に示す水位差 3.5cm の段波を伴う直径 0.483cm,0.544cm,0.604cm の 3 種類の球体（合計 41 個）の構造物が落下する計算を行った．流体解析の計算手法は文献 [5] 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．分散メモリ型並列を採用し，AMD EPYC 7773X の 128 コアによる計算を実施した．

図-1 に 0 秒から 0.0575 秒後の計算結果を示す．図-1 をみると，固体と液体の相互作用により，段波の波形が構造物の影響を受けながら進んで行く様子が確認できる．また，固相を物体数（41 個）の Cahn-Hilliard 方程式により求めているため各物体が認識でき，物体が結合せずに計算が行われている．



(a) 0 秒（初期条件）

(b) 0.02 秒後

(c) 0.04 秒後

(d) 0.0575 秒後

図–1 計算結果

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．段波を伴う構造物の落下の 3 次元問題において分散メモリ型並列を適用し，段波の波形が構造物の影響を受けながら進んで行く計算例を示した．また，固相を物体数の Cahn-Hilliard 方程式で求めることにより，物体同士の結合が生じ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 M etals*, Vol.65, pp.310-316, 2001.

[2] 榊原徹哉，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] Brackbill, J.U., Kothe, D.B., and Zemach, C.: A Continuum method for modeling surface tension, *J. Comput. Phys.*, Vol.100, 335-354, 1992.

[4] Beaucount, 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.

[5] 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.