

マルチフェーズ保存型アレンカーン方程式 の改良LKS定式化と多相流れへの適用

Formulation of Modified Lattice Kinetic Scheme for Multi-Phase Conserved Allen-Cahn Equation
and Application to Multi-Phase Flow

野本祐春¹⁾, 草野正大²⁾, 北嶋具教¹⁾, 渡邊誠¹⁾

Sukeharu Nomoto, Masahiro Kusano, Tomonori Kitashima and Makoto Watanabe

- 1) 博(工) 物質材料研究機構 特別研究員 (〒305-0047 茨城県つくば市千現1-2-1, E-mail: nomoto.sukeharu@nims.go.jp)
- 2) 博(工) 物質材料研究機構 主任研究員 (〒305-0047 茨城県つくば市千現1-2-1, E-mail: kusano.masahiro@nims.go.jp)
- 3) 博(工) 物質材料研究機構 主幹研究員 (〒305-0047 茨城県つくば市千現1-2-1, E-mail: kitashima.tomonori@nims.go.jp)
- 4) 博(工) 物質材料研究機構 分野長 (〒305-0047 茨城県つくば市千現1-2-1, E-mail: watanabe.makoto@nims.go.jp)

Lattice Boltzmann method is well known as low consumption of calculation time and high numerical stability. Modified lattice kinetic scheme, which is a kind of lattice Boltzmann method, can be adapted to two phase flow with high differences density and viscosity. Conserved Allen-Cahn equation provides effective method to track free surface movement for two phases flow. This equation has been expanded to multi-phases flow as a multi-phase conserved Allen-Cahn equation. In this study, modified lattice Boltzmann scheme formulation for the multi-phase conserved Allen-Cahn equation was derived. This equation was validated in a fundamental problem consisting of three fluid phases system, in which a bubble is rising in two liquid phases.

Key Words : Modified Lattice Kinetic Scheme, Conserved Allen-Cahn Equation, Multi-Phase Field Method, Multi-Phase Flow

1. はじめに

流体計算において格子ボルツマン法 (LBM) は高速かつ高安定の手法としてよく知られている。改良Lattice Kineticスキーム (MLKS) [1]は密度と粘性係数が大きく異なる2相流の安定計算を目的に開発された手法である。MLKSは、連続の式とナビエストークス方程式との直接的変換ができる。このため、2相間自由表面捕捉法として近年よく用いられる保存型アレンカーン (CAC) 方程式も容易にMLKSの形式に変換でき、自由表面を伴う2相流体の高速かつ安定した計算を可能としている。一方、CAC方程式は多相系にも拡張されている。そこで、本研究では、MLKS形式の多相系CAC (MCAC) 方程式を導出した。そして、3相系の流れへの適用を試みたので報告する。

2. 改良Lattice Kineticスキームとマルチフェーズ 保存型アレンカーン方程式

2相界面のCAC方程式は次式で示される。

$$Sh \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (u_\alpha \phi) = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[M_\phi \left[1 - \frac{1}{| \nabla \phi |} \frac{4\phi(1-\phi)}{W} \right] \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} \right], \quad (1)$$

ここで、 u_α は流速、 ϕ は相オーダー、 W は界面厚み、 M_ϕ はモビリティ、 Sh はストローハル数である。LBMでは無次元表記で定式されるため、式(1)も無次元化されていることに注意する。式(1)の1次元平衡解は、 $\phi = [1 - \tanh(2x/W)]/2$ であり、フェーズフィールドを表現している事が分かる。式(1)を、MLKS形式で表現すると次式となる。

$$\begin{cases} \phi(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \sum_{i=1}^{N_p} \left\{ +AE_i[\phi(\mathbf{x}, t) - \phi(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i \Delta t, t)] \right\}, \\ \xi_i^{\text{eq}} = E_i \phi + 3E_i \mathbf{c}_i \cdot \mathbf{n} M_\phi \frac{4\phi(1-\phi)}{W}. \end{cases} \quad (2)$$

ここで、 \mathbf{c}_i と E_i は、それぞれ格子気体モデルの粒子速度と重みであり、本研究では3次元のD3Q15モデルを用いた。緩和係数 A はモビリティ M_ϕ と $M_\phi = (1 - A)\Delta x/6$ の関係がある。一方、多相系のCAC方程式はLeeとKimにより次式で与えられている[2]。

$$\begin{aligned} Sh \frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} (u_\alpha \phi_i) = M_\phi \left\{ \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(1 - \frac{1}{| \nabla \phi_i |} \frac{4\phi_i(1-\phi_i)}{W} \right) \frac{\partial \phi_i}{\partial x_\alpha} \right. \\ \left. - \frac{\phi_i^2}{\sum_{k=1}^N \phi_k^2} \sum_{j=1}^{N_p} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(1 - \frac{1}{| \nabla \phi_j |} \frac{4\phi_j(1-\phi_j)}{W} \right) \frac{\partial \phi_j}{\partial x_\alpha} \right\} \right\} \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、 ϕ_i は i 相のフェーズフィールドオーダー($0 \leq \phi_i \leq 1$)である。詳細は省略するが、式(1)から式(2)と同様の操作を経て、式(3)は次のMLKSの式に変換される[3]。

$$\begin{cases} \phi_i(\mathbf{x}, t + \Delta t) = \sum_{j=1}^N \left\{ +AE_j[\phi_i(\mathbf{x}, t) - \phi_i(\mathbf{x} - \mathbf{c}_j \Delta t, t)] \right\} \\ - \frac{\phi_i^2}{\sum_{k=1}^N \phi_k^2} \sum_{j=1}^{N_p} \sum_{k=1}^N \left\{ +AE_k[\phi_j(\mathbf{x}, t) - \phi_j(\mathbf{x} - \mathbf{c}_k \Delta t, t)] \right\} - \phi_j(\mathbf{x}, t) \\ f_j^{\text{eq}} = E_j \phi_i (1 + 3\mathbf{c}_j \cdot \mathbf{u}) + 3E_j \mathbf{c}_j \cdot \mathbf{n} M_\phi \frac{4\phi_i(1-\phi_i)}{W}, \\ \xi_k^{\text{eq}} = E_k \phi_j + 3E_k \mathbf{c}_k \cdot \mathbf{n} M_\phi \frac{4\phi_j(1-\phi_j)}{W}. \end{cases} \quad (4)$$

式(4)と連成させる流れ場のMLKS式を示しておく。LBMでは弱圧縮性を許容しており圧力方程式を解かないが、MLKSでは次の繰返し式により圧力 p を求める。

$$\begin{cases} p(x, t + \Delta t) = p(x, t) + \frac{\omega(x, t)}{3} \sum_{i=1}^{15} [\Delta P_i + g_i^{\text{eq}}(x - c_i \Delta x, t)] \\ \Delta P_i = \frac{3}{2} E_i \left[\frac{1}{\rho(x - c_i \Delta x, t)} + \frac{1}{\rho(x, t)} \right] [p(x - c_i \Delta x) - p(x)] \end{cases} \quad (5)$$

ここで、 ω は加速緩和係数、 g_i^{eq} は平衡分布関数であり次式で与えられる。

$$g_i^{\text{eq}} = E_i \left[3c_i \cdot \mathbf{u} + \frac{9}{2} (\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2} \mathbf{u}^2 \right] \quad (6)$$

流速 \mathbf{u} は次式で求める。

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(x, t + \Delta t) = & \sum_{i=1}^{15} \mathbf{c}_i \left\{ \begin{aligned} & \Delta P_i(x, t + \Delta t) + g_i^{\text{eq}}(x - c_i \Delta x, t) \\ & + 3A_u E_i c_i \rho [u_\beta(x, t) - u_\beta(x - c_i \Delta x, t)] \end{aligned} \right\} \\ & + \frac{1}{\rho(x, t)} \mathbf{F}_{\text{SV}} \Delta x + \frac{1}{\rho(x, t)} \mathbf{F}_{\text{buoy}} \Delta x \end{aligned} \quad (7)$$

ここで、 A_u は粘性係数 μ と $\mu = \rho(1 - A_u)\Delta x/6$ の関係がある。また、 \mathbf{F}_{buoy} は重力、 \mathbf{F}_{SV} は次式の界面領域での張力を示す。

$$\begin{cases} \mathbf{F}_{\text{SV}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=2}^3 [\sigma_{ij} (\chi_i \mathbf{n}_i + \chi_j \mathbf{n}_j) \cdot \xi], \\ \xi = B \phi_i \phi_j |\nabla \phi_i| |\nabla \phi_j|, \quad B = \frac{15W}{2 \tan^{-1}(1 - 2\lambda)}, \quad \lambda := 0.1 \end{cases} \quad (8)$$

以上、自由表面を伴う多相流れ場を、MLKSで統一表現された式(4)、(5)、(7)により計算する。

3. 液体2相間の気泡の解析

(1) 計算条件

試験計算として、Aiharaら[4]が提案した2次元モデルに類似した3次元モデルを設定した。計算モデルを図1に示す。図中において、 $L = 30 \Delta x$ であり、格子幅を1/6400 mとした。上部に液相2を、下部に液相3を配置し、界面中央に球形の気相1の中心となるように配置した。気相と液相の密度比は1000程度に取った。また、気相1、液相2、液相3の粘性係数は、それぞれ $1.0 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ 、 $1.0 \times 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ 、 $1.83 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ とした。CACパラメータは、界面厚みを $W = 4 \Delta x$ 、緩和係数 $A=0.6$ とした。代表長さを格子幅とし、粒子速度 c を200 m/sとした。

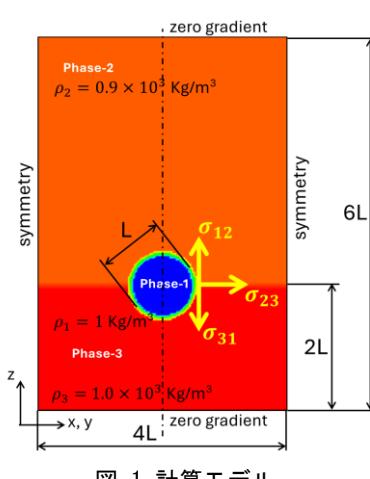


図1 計算モデル

図1における界面エネルギーは、 $\sigma_{31} = \sigma_{23} = 1 \text{ N/m}$ とし、 $\sigma_{12} = 0.3 \text{ N/m}$ (Case-1), 1 N/m (Case-2), 1.5 N/m (Case-3)と変化させ比較した。

(2) 計算結果

図2に概ね平衡に達した時点での密度と相分布を示す。Case-1では気相の浮力が相対的に強く、Case-2では概ね釣合った形態を示す。一方、Case-3では、気泡と液相2側の界面を内側に引き寄せるために、気泡はむしろ降下する傾向になる事が分かる。このように界面エネルギーの違いによる相分布形態の違いが確認された。

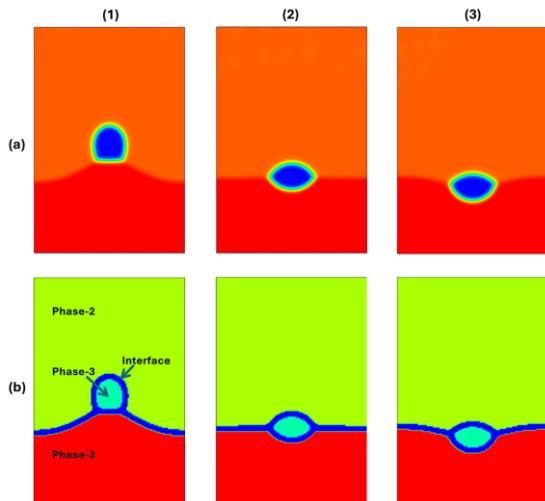


図2 (a) 密度分布と(b)相分布、(1) Case-1、(2) Case-2、(3) Case-3

4. まとめ

密度と粘性係数の差が非常に大きな2相流に対してMLKSの有効性は知られていたが、自由表面捕捉のためのCAC方程式に対するMLKS式が2相間に限られており、多相系への適用が困難であった。本研究で、多相系CAC方程式のMLKS式を導出し、3相流れに適用し検証した。

参考文献

- [1] T. Inamuro, A lattice kinetic scheme for incompressible viscous flows with heat transfer, Phil. Trans. R. Soc. Lond. A 360 (2002) 477-484.
- [2] H. G. Lee and J. Kim, An efficient numerical method for simulating multiphase flows using a diffuse interface model, Physica A 423 (2015) 33–50.
- [3] S. Nomoto, M. Kusano, T. Kitashima and M. Watanabe, Numerical simulation method for the laser powder bed fusion process by lattice Boltzmann and multi-phase field methods, Comp. Mater. Sci., 250(2025) 113688.
- [4] S. Aihara, T. Takaki and N. Takada, Multi-phase-field modeling using a conservative Allen–Cahn equation for multiphase flow, Computers and Fluids, 178 (2019) 141–151.