解適合格子を用いたフェーズフィールド法に関する研究

Study on solution adaptive phase-field method

○ 藤屋 貴大，京工繊大院, 〒 606-8585 京都府京都市左京区松ケ崎御所海道町, E-mail：m7623030@edu.kit.ac.jp
田中 満，京工繊大, 〒 606-8585 京都府京都市左京区松ケ崎御所海道町, E-mail：mtanaka@kit.ac.jp
田尻 恭平，京工繊大, 〒 606-8585 京都府京都市左京区松ケ崎御所海道町, E-mail：tajiri@kit.ac.jp
西田 秀利，京工繊大, 〒 606-8585 京都府京都市左京区松ケ崎御所海道町, E-mail：nishida@kit.ac.jp
Takahiro FUJIYA, Dept.of Mechanophysics,Kyoto Inst.Tech., Matsugasaki,kyoto,606-8585,JAPAN
Mitsuru TANAKA, Dept.of Mechanophysics,Kyoto Inst.Tech., Matsugasaki,kyoto,606-8585,JAPAN
Kyohei TAJIRI, Dept.of Mechanophysics,Kyoto Inst.Tech., Matsugasaki,kyoto,606-8585,JAPAN
Hidetoshi NISHIDA, Dept.of Mechanophysics,Kyoto Inst.Tech., Matsugasaki,kyoto,606-8585,JAPAN

Two-phase flow is a flow seen in many natural phenomena and industrial equipment, and analysis. In two-phase flow simulations, it is important to resolve the interface very well. In this paper, the solution adaptive approach is applied to the phase-field method, in order to refine the interface region automatically. For validation, we consider the phase separation in a square domain. As a result, it is found that the high-resolution solution can be obtained in the interface region and total number of grid points are decrease. then, it is concluded that the present solution adaptive phase-field method is very effective to simulate the two-phase flow.

1. 緒言

二相流は，土石流や川の流れ、血液、原子炉の炉心中など，多くの自然現象や工業装置の中で見られる流れである．物質の気体，液体，固体の三相の内，二つの相が混ざり合って流動していることから，相の界面構造が極めて複雑なものとなっているため，CFD を用いた解析がなされている．このような二相流の解析手法として，計算格子を固定し，界面を表す関数を移流させることにより，界面の挙動を解析する VOF 法 [1]，Level set 法 [2]，フェーズフィールド法 [3] などが挙げられる．

本研究では，解析手法としてフェーズフィールド法を用いる．フェーズフィールド法は，界面を時々刻々追従することなく，界面の変化をシミュレーションすることができる手法である．界面領域において滑らかに変化するフェーズフィールド変数を新たに導入することで，滑らかな界面の状態を表現することができる．界面の移動をフェーズフィールド変数の時間発展として表現するため，界面を追従する必要がない．そのため，複雑な界面の構造を容易に表現することが可能となっている．また，フェーズフィールド法において，界面の構造は，フェーズフィールド変数によって定義される自由エネルギが最小になるように決定され，定常状態では，自由エネルギが最小となる [4]．このように，界面の構造を表現するのに複雑な幾何計算が必要ないなどの点から，二相流の解析手段としてフェーズフィールド法に注目が集まっている．

また，現在二相流が発生する工業装置の高性能化，高安全化などの点から，二相流で最も変化が大きい界面領域において，より高精度な解析が必要とされている．界面の構造をより詳細に理解するためには，界面を高解像度でとらえる必要がある．すべての計算格子を細かくすることで高い空間分解能で計算を行うことができるが，その分計算に必要とされるメモリ容量が大きくなり，計算時間も膨大なものとなってしまう．そこで，本研究では解適合格子 [5] を用いて，界面の高解像度化を行っていく．解適合格子とは，計算領域において高い分解能が必要なところ，つまり，計算解の勾配が急なところにおいてのみ細かい格子を配置し，勾配が緩やかなところでは荒い格子を配置することで，計算精度を高めることのできる格子である．

本研究では，このように格子を細分化する解適合格子をフェーズフィールド方程式に適用することにより，低コストかつ高精度な二相流解析手法の確立に取り組んだ．

2. 基礎方程式

二相流の支配方程式として，連続の式，非圧縮性 Navier-Stokes 方程式，Cahn-Hilliard 方程式を用いる．デカルト座標系においてそれぞれ次式で表される．

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{Re}\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{We_s^{-1}}{\epsilon}c\frac{\partial \mu}{\partial x_i} \tag{2}$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_j\frac{\partial c}{\partial x_j} = \frac{1}{Pe}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(M(c)\frac{\partial \mu}{\partial x_j}\right) \tag{3}$$

$$\mu(\mathbf{x},t) = \frac{dF(c)}{dc} - \epsilon^2\frac{\partial^2 c}{\partial x_j \partial x_j} \tag{4}$$

$$F(c) = \frac{1}{4}c^2(c-1)^2 \tag{5}$$

ここで，u_i は速度，p は圧力，Re, We_s, Pe はレイノルズ数，数値ウェーバー数，拡散ペクレ数であり，c はフェーズフィールド変数，μ は化学ポテンシャル，$M(c)$ は可動度，ϵ は界面厚さを表す．また，$F(c)$ は Helmholtz 自由エネルギである．数値ウェーバー数 We_s はウェーバー数 We に対応するものであり，互いの関係は式 (6) のように表される．

$$We_s = We\int_0^1 \sqrt{2F(c)}dc \tag{6}$$

なお，式 (2) においては，以下のように無次元化を行っている．

$$x_i = \frac{\overline{x_i}}{\overline{L_0}}, u_i = \frac{\overline{u_i}}{\overline{L_0}}, t = \bar{t}\frac{\overline{U_0}}{\overline{L_0}}, p = \frac{\overline{p}}{\overline{\rho_0 U_0^2}}, Re = \frac{\overline{U_0 L_0}}{\overline{\nu}} \tag{7}$$

ここで,「-」は有次元量を表し，$\overline{L_0}$ は代表長さ，$\overline{U_0}$ は代表速度，$\overline{\rho_0}$ は代表密度，$\overline{\nu}$ は動粘性係数を表している．ウェーバー数 We_s，拡散ペクレ数 Pe も以下のような無次元数として定義される．

$$We = \frac{\overline{\rho_0 U_0^2 L_0}}{\overline{\sigma}}, Pe = \frac{\overline{U_0 L_0}}{\overline{D}} \tag{8}$$

ここで，$\overline{\sigma}$ は表面張力係数，$\overline{D}$ は拡散係数である．
また，自由エネルギ $J(c)$，計算領域内の全エネルギ $E(t)$ は以下のように定義される [(6)]．

$$J(c) = \int_\Omega [F(c) + \frac{\epsilon^2}{2}|\nabla c|^2] d\mathbf{x} \tag{9}$$

$$E(t) = \int_\Omega \frac{|\mathbf{u}|^2}{2} d\mathbf{x} + \frac{We_s^{-1}}{\epsilon} J(c) \tag{10}$$

3. コロケーション差分法

本研究では，二相流の相分離で用いる基礎方程式及び物理量をセル中心で定義するコロケーション格子上において非圧縮性 Navier-Stokes 方程式，Cahn-Hilliard 方程式を解く．移流項・界面張力項の離散化については保存性差分法 [(7)] を用い，粘性項･圧力勾配･化学ポテンシャルの離散化には二次精度中心差分法を用いて計算を行う．非圧縮性 Navier-Stokes 方程式，Cahn-Hilliard 方程式には前進オイラー差分法を用いて次時間段階速度を得る．また，非圧縮性 Navier-Stokes 方程式に対しては速度と圧力のカップリングに Fractional Step 法を用いる．圧力方程式の解法には逐次過緩和法 (SOR 法) を用いて，収束解を算出する．

4. 解適合格子法

本章では，解適合格子法について述べる．解適合格子法は計算解の勾配が急なところにおいてのみ細かい格子を，勾配が緩やかなところでは粗い格子を配置したものである．解適合格子を用いて計算を行う際に，多次元配列を用いると計算容量が増大する．そのため本研究においては，1 次元配列を用いて計算を行う．

4.1 サブグリッドの構造

細分化については，Lv.2 では 1 つの計算セルを 4 分割して行い，Lv.3 では Lv.2 の格子を更に 4 分割して行う．Fig.1 に Lv.3 まで適応した解適合格子の拡大図を示す．ここで，M は計算格子 1 列における格子点数である．

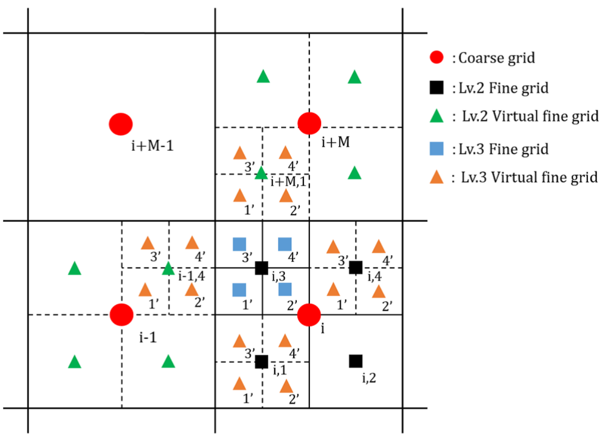


Fig. 1: Subdivided computational domain

Fig.1 において丸い点が通常の粗い格子における格子点，黒い四角の点が Lv.2 まで細分化した格子における格子点，緑の三角の点が Lv.2 において通常の格子において仮想的に細分化したときの格子点である．また，青い四角の点が Lv.3 まで細分化した格子における格子点，橙の三角の点が Lv.3 において通常の格子において仮想的に細分化したときの格子点となっている．

4.2 格子間データ補間

(1)Lv.2 におけるデータ補間

まず，Lv.2 における格子間のデータ補間について説明する．格子点 i において

$$\sqrt{\left(\frac{\partial \phi_i}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial y}\right)^2} \geq \alpha \frac{1}{\epsilon} \tag{11}$$

を満たす場合，細分化を行う．ここで α は Lv.2 の細分化領域を決定するパラメータ値である．細分化後の格子点における物理量は以下の Taylor 級数展開により評価する．

$$\phi_{i,k} = \phi_i + h_{x,k} \frac{\partial \phi}{\partial x}\bigg|_i + h_{y,k} \frac{\partial \phi}{\partial y}\bigg|_i \quad (k = 1, 2, 3, 4) \tag{12}$$

ここで，ϕ は各物理量 (u, v, p, c, μ) で，$h_{x,k}, h_{y,k}$ は，格子点 i を (0,0) としたときの相対座標である．
また，仮想的に細分化した格子 $i-1$ における格子点も同様に以下のように定義する．

$$\phi_{i-1,k} = \phi_{i-1} + h_{x,k} \frac{\partial \phi}{\partial x}\bigg|_{i-1} + h_{y,k} \frac{\partial \phi}{\partial y}\bigg|_{i-1} \quad (k = 1, 2, 3, 4) \tag{13}$$

次に，細分化しない格子における離散化は以下のように行う．

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}\bigg|_{i-1} = \frac{1}{2\Delta x}(\phi_i - \phi_{i-2}) \tag{14}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y}\bigg|_{i-1} = \frac{1}{2\Delta y}(\phi_{i+M-1} - \phi_{i-M-1}) \tag{15}$$

ここで，格子 i は細分化を行っているので，格子点 i における物理量は以下のように内挿により与える．

$$\phi_i = \frac{1}{4}(\phi_{i,1} + \phi_{i,2} + \phi_{i,3} + \phi_{i,4}) \tag{16}$$

次に，解適合格子における離散化について示す．細分化後の Lv.2 の密格子における離散化には以下の式を用いて計算を行う．$k=1$ の場合について示す．

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \phi}{\partial x}\bigg|_{i,1} &= \frac{1}{2h_x}(\phi_{i,2} - \phi_{i-1,2}) \\
\frac{\partial \phi}{\partial y}\bigg|_{i,1} &= \frac{1}{2h_y}(\phi_{i,3} - \phi_{i-M,3}) \\
\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\bigg|_{i,1} &= \frac{1}{h_x^2}(\phi_{i,2} - 2\phi_{i,1} - \phi_{i-1,2}) \\
\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2}\bigg|_{i,1} &= \frac{1}{h_y^2}(\phi_{i,3} - 2\phi_{i,1} - \phi_{i-M,3})
\end{aligned} \tag{17}$$

$k = 2, 3, 4$ の場合についても，同様に行う．
また，計算途中で $k = 1, 2, 3, 4$ 全てにおいて以下の条件を満たした密格子 i に関しては粗格子に戻して計算を行う．

$$\sqrt{\left(\frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \phi_{i,k}}{\partial y}\right)^2} < \alpha \frac{1}{\epsilon} \quad (k = 1, 2, 3, 4) \tag{18}$$

(2)Lv.3 におけるデータ補間

次に，Lv.3 における格子間のデータ補間について説明する．格子点 $i,k(k=1,2,3,4)$ において

$$\sqrt{\left(\frac{\partial\phi_{i,k}}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial\phi_{i,k}}{\partial y}\right)^2}\geq\beta\frac{1}{\epsilon} \quad (k=1,2,3,4) \tag{19}$$

を満たす場合，細分化を行う．ここで β は Lv.3 の細分化領域を決定するパラメータ値である．細分化後の格子点における物理量は以下の Taylor 級数展開により評価する．

$$\phi_{i,k,k'}=\phi_{i,k}+h_{x,k,k'}\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_{i,k}+h_{y,k,k'}\left.\frac{\partial\phi}{\partial y}\right|_{i,k} \quad (k'=1,2,3,4) \tag{20}$$

ここで，ϕ は各物理量 (u,v,p,c,μ) で，$h_{x,k,k'},h_{y,k,k'}$ は，格子点 i,k を (0,0) としたときの相対座標である．
また，仮想的に細分化した格子 $i-1$ における格子点も同様に以下のように定義する．

$$\begin{aligned}\phi_{i-1,k,k'}=\phi_{i-1,k}&+h_{x,k,k'}\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_{i-1,k}\\&+h_{y,k,k'}\left.\frac{\partial\phi}{\partial y}\right|_{i-1,k} \quad (k'=1,2,3,4)\end{aligned} \tag{21}$$

図において，格子 $i,3$ は細分化を行っているので，格子点 $i,3,1'$ における物理量は以下のように内挿により与える．

$$\phi_{i,3}=\frac{1}{4}(\phi_{i,3,1'}+\phi_{i,3,2'}+\phi_{i,3,3'}+\phi_{i,3,4'}) \tag{22}$$

Lv.3 における離散化には以下の式を用いて行う．格子点 $i,3$ における離散化を示す．

$$\begin{aligned}\left.\frac{\partial\phi}{\partial x}\right|_{i,3,1'}&=\frac{1}{2h_{x,1'}}(\phi_{i,3,2'}-\phi_{i-1,4,2'})\\\left.\frac{\partial\phi}{\partial y}\right|_{i,3,1'}&=\frac{1}{2h_{y,1'}}(\phi_{i,3,3'}-\phi_{i,1,3'})\\\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_{i,3,1'}&=\frac{1}{h^2_{x,1'}}(\phi_{i,3,2'}-2\phi_{i,3,1'}-\phi_{i-1,4,2'})\\\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right|_{i,3,1'}&=\frac{1}{h^2_{y,1'}}(\phi_{i,3,3}-2\phi_{i,3,1'}-\phi_{i,1,3'})\end{aligned} \tag{23}$$

$k'=2,3,4$ のときも同様に行い，格子点 $(i,1)$,$(i,2)$,$(i,4)$ においても同様の離散化をする．また，計算途中で $k'=1,2,3,4$ 全てにおいて以下の条件を満たした密格子 i,k に関しては粗格子に戻して計算を行う．

$$\sqrt{\left(\frac{\partial\phi_{i,k,k'}}{\partial x}\right)^2+\left(\frac{\partial\phi_{i,k,k'}}{\partial y}\right)^2}<\beta\frac{1}{\epsilon} \quad (k'=1,2,3,4) \tag{24}$$

5. Lv.3 までの解適合格子を適用した二次元正方領域内相分離の解析

ここでは，初期値の段階から式 (11) および式 (19) による Lv.3 までの格子の細分化を行い，二次元正方領域内相分離の定常解の計算を行う

5.1 計算領域

$x-y$ 平面で $[2\times\ 2]$ の正方領域とし，格子点数は，初期段階では水平方向に 128 点，鉛直方向に 128 点とし，式 (11) および式 (19) を満たした場合，格子を 4 分割し格子点を配置する．格子間隔は $\Delta x=\Delta y=2/128$ とする．

5.2 境界条件

境界条件は，すべての物理量に対して，x,y 方向共に周期境界条件とする．

5.3 収束条件

格子を細分化した場合の収束条件について述べる．今回はフェーズフィールド変数 c に対して収束条件を適用する．Lv.1 の格子においては，以下のように定義する．

$$W=\Sigma(c_i^{n+1}-c_i^n)^2 \tag{25}$$

次に，Lv.2 において細分化した格子においては，以下のように定義する．

$$\begin{aligned}W_d=\Sigma\big[&(c_{i,1}^{n+1}-c_{i,1}^n)^2+(c_{i,2}^{n+1}-c_{i,2}^n)^2\\&+(c_{i,3}^{n+1}-c_{i,3}^n)^2+(c_{i,4}^{n+1}-c_{i,4}^n)^2\big]\end{aligned} \tag{26}$$

最後に，Lv.3 において細分化した格子においては，以下のように定義する．

$$\begin{aligned}W_n=\Sigma\Big[&\big[(c_{i,1,1'}^{n+1}-c_{i,1,1'}^n)^2+(c_{i,1,2'}^{n+1}-c_{i,1,2'}^n)^2\\&+(c_{i,1,3'}^{n+1}-c_{i,1,3'}^n)^2+(c_{i,1,4'}^{n+1}-c_{i,1,4'}^n)^2\big]\\&+\big[(c_{i,2,1'}^{n+1}-c_{i,2,1'}^n)^2+(c_{i,2,2'}^{n+1}-c_{i,2,2'}^n)^2\\&+(c_{i,2,3'}^{n+1}-c_{i,2,3'}^n)^2+(c_{i,2,4'}^{n+1}-c_{i,2,4'}^n)^2\big]\\&+\big[(c_{i,3,1'}^{n+1}-c_{i,3,1'}^n)^2+(c_{i,3,2'}^{n+1}-c_{i,3,2'}^n)^2\\&+(c_{i,3,3'}^{n+1}-c_{i,3,3'}^n)^2+(c_{i,3,4'}^{n+1}-c_{i,3,4'}^n)^2\big]\\&+\big[(c_{i,4,1'}^{n+1}-c_{i,4,1'}^n)^2+(c_{i,4,2'}^{n+1}-c_{i,4,2'}^n)^2\\&+(c_{i,4,3'}^{n+1}-c_{i,4,3'}^n)^2+(c_{i,4,4'}^{n+1}-c_{i,4,4'}^n)^2\big]\end{aligned} \tag{27}$$

これらを用いて，収束判定条件を定める．

$$L2{-}Residual=\left[\frac{W+W_d+W_n}{N_{max}}\right]^{\frac{1}{2}}<1.0\times10^{-11} \tag{28}$$

ここで，N_{max} は細分化した場合の格子点を含む総格子点数である．

5.4 初期条件

フェーズフィールド変数 c の初期条件は式 (29) で与える．

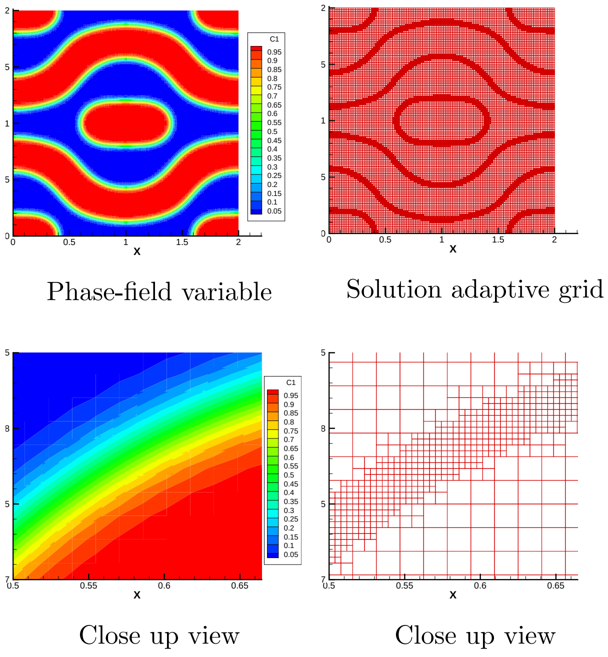
$$\begin{aligned}c(i)=0.5&+0.12cos(2\pi x(i))cos(2\pi y(i))\\&+0.2cos(\pi x(i))cos(3\pi y(i))\end{aligned} \tag{29}$$

また，時間間隔，拡散ペクレ数，可動度，界面厚さは以下のように与えた．

$$\Delta t=5.0\times10^{-8},\ Pe=1,\ M(c)=1,\ \epsilon=0.01 \tag{30}$$

5.5　計算結果

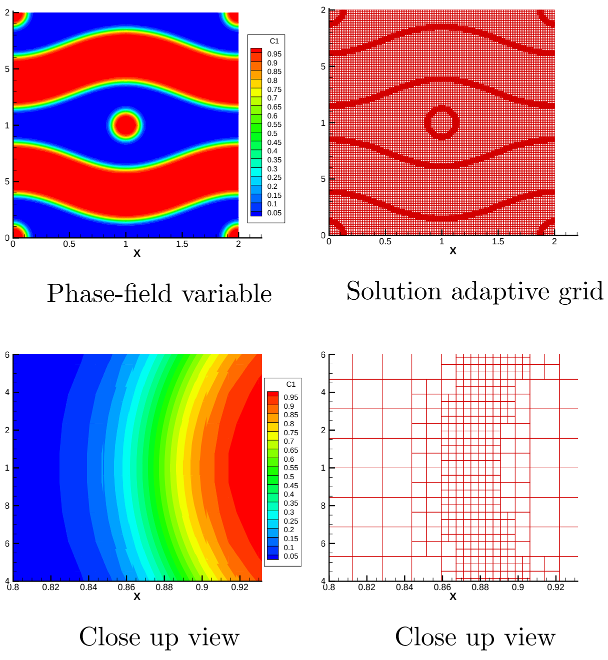
今回は判定条件として式 (11)，式 (19) において $\alpha = 0.09$，$\beta = 0.13$ として計算を行った．Fig.2 には無次元時間 $t = 0.5$，Fig.3 には無次元時間 $t = 5.0$，Fig.4 には無次元時間 $t = 10.0$ における分布, 格子の形状及びそれらの拡大図を示す．いずれの場合においても界面領域にのみ密格子が配置されており，拡大図から解適合格子において Lv.1〜Lv.3 の格子が混在しているのが確認できる．従って解適合格子の適用に関して良好な結果が得られたと考えられる．



Phase-field variable　　Solution adaptive grid

Close up view　　Close up view

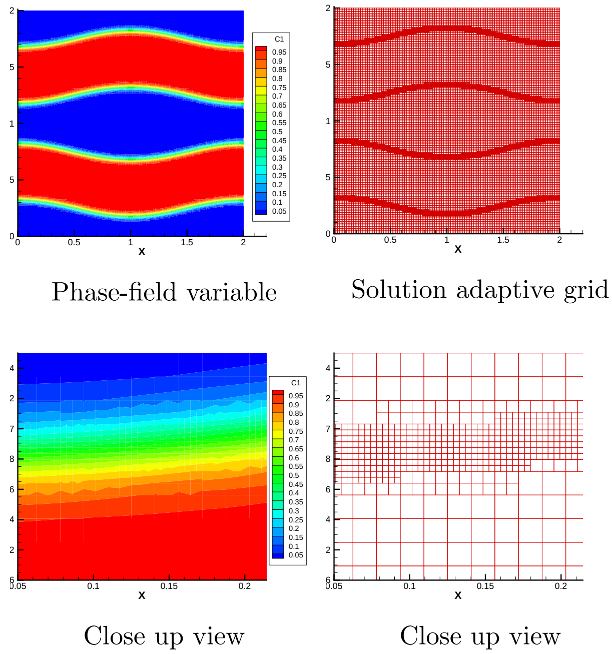
Fig. 2: Solution adaptive grid for t=0.5



Phase-field variable　　Solution adaptive grid

Close up view　　Close up view

Fig. 3: Solution adaptive grid for t=5.0



Phase-field variable　　Solution adaptive grid

Close up view　　Close up view

Fig. 4: Solution adaptive grid for t=10.0

また，以下の Fig. 5 に計算領域内の全エネルギの時間変化を粗格子 (128 × 128)，密格子 (512 × 512)，解適合格子で比較した図を示す．解適合格子の全エネルギの時間変化は粗格子のものとは異なり，密格子のものと完全に一致している．このことから格子点数を減少させながらも，密格子と同様の計算を行う事が出来ていることがわかる．以上より，定性的及び定量的に良好な結果が得られた．

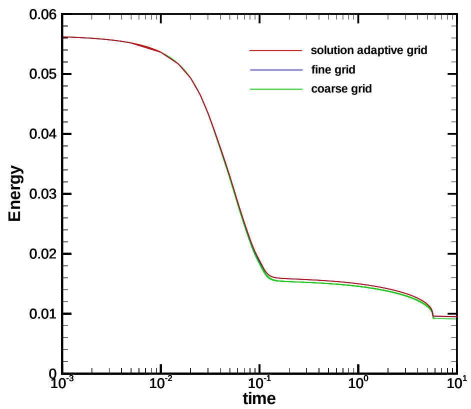


Fig. 5: Time evolution of total energy without flow

6.　結言

本研究では，二相流解析手法の一つであるフェーズフィールドフィールド法に解適合格子を適用し，低コストかつ高精度な解析手法の確立に取り組んだ．検証として二次元正方領域内相分離の解析を行い，その結果，定性的，定量的に良好な結果が得られ，フェーズフィールド法に対する解適合格子の有効性が確認された．

7. 参考文献

(1) C. W. Hort and B. D. Nichols. Volume of fluid(VOF) method for the dynamics of free boundaries. Journal of Computational Physics, Vol.39, (1981), 201-225.

(2) M. Sussman, P. Smereka, and s. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. Journal of Computational Physics, Vol.114, (1994), 146-159.

(3) 高木知弘，山中晃徳，フェーズフィールド法- 数値シミュレーションによる材料組織設計，(2012)，1-12，養賢堂.

(4) H.Nishida, S.Kohashi, N.Okita, Efficient Phase-field-based Scheme for Incompressible Two-phase Flow Simulation, The 4th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, (2013), 1-8.

(5) 中橋和博，藤井孝蔵，格子形成法とコンピュータグラフィックス，(1995)，52-63，東京大学出版会.

(6) Junseok Kim, Kyungkeun Kang, John Lowengrub, Conservative multigrid methods for Cahn-Hilliard fluids, Journal of Computational Physics 193, (2004), 511-543.

(7) Nishida H, and Satofuka N, A variable order method of lines: Accuracy, conservation and applications, Lecture notes in computational science and technology(Springer), 21, (2002), 167-174.