様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成　23　年　6 月　2 日現在

機関番号：12601
研究種目：若手研究（B）
研究期間：2009～2010
課題番号：21740064
研究課題名（和文）　フェーズフィールドモデルに基づく二相流体問題の数値解析

研究課題名（英文）　Numerical analysis of two-phase flow problems by phase-field models

研究代表者
齊藤　宣一（SAITO　NORIKAZU）
東京大学・大学院数理科学研究科・准教授
研究者番号：00334706

研究成果の概要（和文）：本研究では，非圧縮性粘性流体の二相問題に対するフェーズフィールドモデルを対象に，有限要素法による数値計算手法の開発と妥当性・正当性の解析を行った．特に，数学的枠組み(数値解析向けの定式化)の研究，および数値実験による発見的考察と結果の検証に最も力を入れた．結果的に，多相流体現象とその数学理論およびその数値計算手法に，今までになかった視点からの新しい寄与をなした．

研究成果の概要（英文）：In this work, I have developed new methods of analysis for the finite element method applied to the two-phase problem of the viscous incompressible fluid based on the phase field model. In particular, I have studied a suitable mathematical framework to treat those problems. The main contribution of this work was to give a new methodology on the mathematical theory and numerical analysis of multi-phase fluid-flow problems.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2009 年度	2,400,000	720,000	3,120,000
2010 年度	1,100,000	330,000	1,430,000
年度			
年度			
年度			
総　計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：数値解析
科研費の分科・細目：数学・数学一般（含確率論・統計数学）
キーワード：応用数学、数値解析、有限要素法、流体

1.　研究開始当初の背景

非圧縮性粘性流体の多相(水と油，空気など)問題は，理工医学において様々な形で現れる，基本的でありがなら現在的な研究課題である．数学的には，粘性や密度等を不連続係数として持つ Navier-Stokes 方程式と，流体各相の境目(界面)における接合条件とその時間発展で運動が記述される．その数値計算手法は，界面追跡法と界面捕捉法とに大別される．前者は，界面の変化に合わせて離散格子(メッシュ)を再構成する方法であり，界面が数値的に表現しやすく，高精度の数値解が得られるが，界面の大きな変形やトポロジカルな変化(たとえば流体各相の分離や結合など)には全く対応できず，この方法で対処できる現象はかなり限られたものとなる．一方，後者の界面

捕捉法では, 擬密度関数(あるいはレベルセット関数)を導入し, 界面をその等高面という形で陰的に扱う．したがって，少なくとも偏微分方程式の段階では，界面の大きな変形やトポロジカルな変化に柔軟に対応でき，広範囲の現象が扱える．また，界面捕捉法では，通常，界面の運動を，擬密度関数に対する移流方程式で表現し，これを流速・圧力の計算と同じ固定メッシュを用いて計算する．しかしながら，擬密度関数の等高面は一般にメッシュの節点上では定義されず，したがって界面形状を表現するために複雑な幾何計算が必要になったり，流体の(各相の)体積保存が壊れてしまったりなどの，別の問題が生じる．また，同じ原因で，解の正則性に応じた数値解の精度が実際には得られない．このような問題点を克服するために，数理モデリングの段階で界面に「厚み」を持たせた方程式を導出し，計算を行うという，いわゆる diffuse interface 法が考案された．この中で，現在，計算の現場において最も応用されているものの一つに**フェーズフィールド法**がある(Gurtin et al. 1996, Jacqmin 1999 など)．フェーズフィールド法は，表面積分で表わされる全界面自由エネルギーを，フェーズフィールド関数(オーダーパラメータ)を導入することにより，体積分で近似することに基づいている．たとえば，二相流体を考えるとき，フェーズフィールド関数の符号が各流体に対応していると考える．全界面自由エネルギーの一部である容積(bulk)エネルギーを最も典型的に選ぶと，結果として，Navier-Stokes 方程式にフェーズフィールド関数による摂動の入った方程式と，フェーズフィールド関数に対する Cahn-Hilliard 型の方程式，および非圧縮条件が導出される．このように導出された系を**フェーズフィールドモデル**と呼ぶ．この数値計算では，表面積分を直接扱わなくてもよくなるので，数値計算が容易になる．また，生物・医学等で現れる液相が細胞膜で分離されているような流体現象を扱う際には，界面における弾性曲げエネルギーを考慮することになるが，このような現象への拡張も，フェーズフィールド法は直接に柔軟に対応が可能である(Du et al. 2007). フェーズフィールド法は，物理的観点からのモデリングを経て導入されたと言うよりは，数値流体力学分野の研究者が，数値計算における安定化手法を，材料科学分野(高分子薄膜，二元合金など)における数理モデルからの連想で導入したところ，成功したと言った方が正確である．そのせいもあってか，(I)二相流体問題の数理モデル，(II) 二相流体問題のフェーズフィールドモデルによる近似・表現，(III)フェーズフィールドモデルに対する離散化の三つが計算現場において混合されており，それが計算手法や計算結果の正当化を停滞させている(この点に関しては，詳細な文献調査，および数値流体力学分野の共同研究者との討論により，そう確信するに至った)．実際，数学的立場からの研究は散見されるばかりで，例えば，有限要素法による離散化問題の研究では，流速・圧力・フェーズフィールド関数を求める有限要素空間の関係は明らかではなく，数学的立場からの整理・解明が急務のはずが，扱いやすい具体的な有限要素についての数学的結果が報告されているのみである．また，収束という概念は，(I)と(II)，そして(II)と(III)において，それぞれに定義されなければならないが，この点が曖昧なまま計算手法の妥当性を論じている論文も少なくない．このような一般論の欠如は，新しい問題への応用の可能性を制限する恐れがある．したがって，申請者の立場からは，これらを数学的に整理し，解析理論を構築することで，手法の正当化や，新しい問題への自在な応用の基礎を固める

ことが肝要であると考え，本研究計画の立案に至った．

2. 研究の目的

本研究では，非圧縮性粘性流体の二相問題に対するフェーズフィールドモデルを対象に，有限要素法による数値計算手法の開発と妥当性・正当性の解析を行う．そのために，数学的枠組み(数値解析向けの定式化)の研究，および数値実験による発見的考察と結果の検証に相当に力を入れる．さらに，構築した数学的枠組みに基づいて，二相流体問題の近似モデルとしてのフェーズフィールドモデルの正当性を解析するのも，一つの主要な目的である．フェーズフィールドモデルを中心に，二相流体問題，その数理モデル，数値計算手法を研究することで，多相流体現象とその数学理論およびその数値計算手法に，今までになかった視点からの新しい寄与をなすことを目標にしている．

本研究の学際的な特色・独創的な点，また予想される結果と意義としては次のようなものが挙げられる．二相流体問題は，今日的な研究課題であるが，それに対する数学理論および数値的手法の研究は発展途上である(もちろん，単一相流体問題の研究も発展途上であるが，それに比べると蓄積が極端に少ない)．本研究は，フェーズフィールドモデルに基づいて，(数値解析の立場からの)数学理論の深化および数値的手法の開発・解析を同時に行う点において個性的である．すなわち，上記の(II)を出発点に，(I)および(III)の双方向に研究を進めることで，今までになかった視点から，二相流体問題の研究に寄与をなし，二相流体現象の精密な理解に役立つ基礎を築くことを目指している．また，具体的な離散化手法としては有限要素法のみを扱うが，有限要素法そのものの研究と同時に，離散化に自然に進めるような数学的枠組みの構築に重きを置いていることが，本研究の特徴である．研究題目を「数値解析」としたのは，この気持ちを込めてのことである．

３．研究の方法

具体的な離散化手法としては，汎用性と数学理論構築の観点から,有限要素法を扱う．上記の研究目的を踏まえた期間内における具体的な到達目標は次の通り．

1. 有限要素法向きの数学的定式化の導出とその数学的研究
   - ① フェーズフィールドモデルの解の一意存在，安定性
   - ② フェーズフィールドモデルと Navier-Stokes 二相流問題の関係
2. 有限要素法による近似の導出とその数学的研究
   - ① フェーズフィールド関数を求める有限要素空間の研究
   - ② 各未知関数を求める有限要素空間の関係を統一的に導出する
   - ③ 誤差解析
3. 数値実験による近似の妥当性の研究
   - ① 有限要素近似の妥当性だけでなく，フェーズフィールドモデルの妥当性の検証も含む
   - ② 2 の結果の検証に留まらず，数値実験による発見的な考察で,2の考察を後押し

４．研究成果

初年度は，研究協力者との討論行いながら，あるいは実際の計算現場の研究者との連絡を持ちながら，(I)二相流体問題の数理モデル，(II) 二相流体問題のフェーズフィール

ドモデルによる近似・表現，(III)フェーズフィールドモデルに対する離散化，の三つを数学的に整理した．これにより，従来，有限要素法による離散化問題の研究では，流速・圧力・フェーズフィールド関数を求める有限要素空間の関係は明らかではなかったが，適切な関数空間設定について，目処が立った．さらに，２年目は，前年度の成果を踏まえて，いくつかの関数空間の組について，数値実験を行った．問題としては，完全な非圧縮性粘性流体の二相問題に対するフェーズフィールドモデルではなく，Stokes 方程式にフェーズフィールド方程式を連立させたモデル問題を扱い，問題の数学的本質を顕著にした．さらに，解析的な考察をするための基盤固めとして，仮想領域法による移動境界問題研究をし，収束性等の議論をするための議論を構成した．

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計４ 件）

1. 齊藤宣一：有限体積法と Baba-Tabata 型保存的上流有限要素法，京都大学数理解析研究所講究録，1719 巻 (2010) 130-141，査読無
2. 齊藤宣一：Keller-Segel 方程式の数値解析，応用数理，第 19 巻，第 4 号，2009 年，65-74，査読有り
3. N. Saito: Conservative numerical schemes for the Keller-Segel system and numerical results, RIMS Kokyuroku Bessatsu, B15 (2009), 125-146. 査読有り
4. K. Ohmori and N. Saito: Some remarks on the flux-free finite-element method for immiscible two-fluid flows, Journal of Computational and Applied Mathematics, 232 (2009) 127-138. 査読有り

６．研究組織

(1)研究代表者

齊藤　宣一 (NORIKAZU SAITO)
東京大学・大学院数理科学研究科・准教授
研究者番号：00334706