

二相流界面追跡シミュレーションのためのフェーズフィールド法

A Phase-Field Method for Interface-Tracking Simulation of Two-Phase Flows

高田 尚樹 (産総研), 三澤 雅樹 (産総研), 富山 明男 (神戸大)

TAKADA Naoki, MISAWA Masaki, TOMIYAMA Akio

Abstract For interface-tracking simulation of two-phase flows, a computational method, NS-PFM, combining Navier-Stokes (NS) equations with phase-field model (PFM) is proposed in this study. Based on the free energy theory, PFM describes an interface as a volumetric zone across which physical properties vary continuously. Surface tension is defined as an excess free energy per unit area induced by density gradient. Consequently, PFM simplifies the interface-tracking procedure by use of a standard technique. The proposed NS-PFM was applied to several problems of incompressible, isothermal two-phase flow with the same density ratio as that of an air-water system. In this method, the Cahn-Hilliard (CH) equation was used for predicting interface configuration. It was confirmed through numerical simulations that (1) the flux driven by chemical potential gradient in the CH equation plays an important role in interfacial advection and reconstruction, (2) the NS-PFM gives good predictions for pressure increase inside a bubble caused by the surface tension, (3) coalescence of liquid film and single drop falling through a stagnant gas was well simulated, and (4) collapse of liquid column under gravity was predicted in good agreement with other available data.

Keywords: Computational Fluid Dynamics, Free Energy Theory, Phase-Field Modeling, Lattice Boltzmann Method, Gas-Liquid Interface

1. 緒言

著者らは近年, 格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method, LBM)の二相流体モデルの一つ[1]に基づき, ナヴィエ・ストークス(NS)方程式とフェーズフィールドモデル(Phase-Field Model, PFM)[2,3]を融合した新しい気液界面追跡計算法(NS-PFM)[4,5]を提案している. 本報では, 空気-水相当の高密度比二相流の数値シミュレーションを通して, 二相流問題に対する本計算法の適用可能性を示す.

2. フェーズフィールド法の概要

PFMに基づく二相流計算法[1]-[7]は, (1)NS 方程式の直接数値解法 (NS-PFM) [2][3]と, (2)流体粒子の数密度の速度分布の時間発展を求める LBM[1][6][7]に分類される. いずれも自由エネルギー理論に基づき界面を自律形成するため, 界面の境界条件を要しない. PFM 法に共通する以下の特徴は, Volume of Fluid (VOF) 法[8]等の従来法[9]と異なる.

- (1) 界面は物性が連続的に変化する有限領域に相当する.
 - (2) 表面張力は, 質量密度 (または相・成分濃度) 勾配に起因する界面の自由エネルギー増分に相当する.
 - (3) 化学ポテンシャル η の勾配を考慮した界面再構成.
- 上記の特徴は, 次の2つの計算プロセスを可能にする.

- (1) 表面張力が複雑な幾何計算なしに考慮される.
- (2) Donor-Acceptor, MARS, CIP 等のアルゴリズム[9]を使用せずに界面の輸送・形状再構成が実施できる.

以上の結果, PFM 計算法は次の利点を有する.

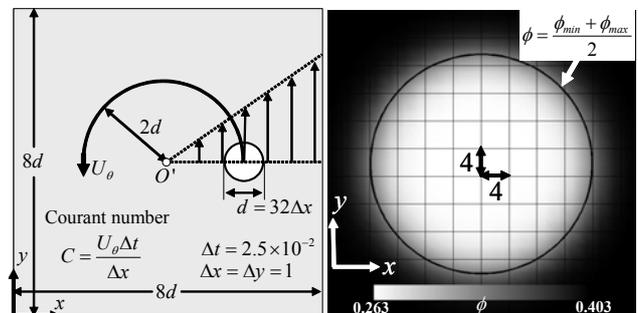
- (1) 界面追跡計算の簡素化とコードの3次元への拡張.
- (2) 相変化や溶解に伴う熱物質輸送現象の自律的再現.

従来の NS-PFM[2][3]は, 主に低密度比の二相流を対象としてきた. これに対して著者らは, 稲室らの二相流 LBM[1]を基礎に, 高密度比の二相流解析に適用可能な NS-PFM を提案し, (1)効率的で安定した高密度比二相流数値解析, (2)要求に応じた離散化スキームと計算アルゴリズムの柔軟な

選択, の実現を目指している[4,5]. 本法では, 相変化のない等温・非圧縮性二相流を対象として, 連続の式と NS 方程式を Cahn-Hilliard(CH)方程式(1)[2]と連結させて解くことにより, 空間内の時刻 t における局所の流速 u , 圧力, および界面形状を示す連続関数 $\phi(\mathbf{x}, t)$ を求める.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) = -\nabla \cdot [-\Gamma(\phi) \nabla \eta] \quad (1)$$

ここで $\Gamma(\phi)$ は ϕ に関する易動度であり, 化学ポテンシャル勾配で生じる流束 $-\nabla \eta$ が界面厚さを一定に保持しつつ自律的な界面再構成と高精度の体積保存性を実現する[4]. 尚, 流体の密度 ρ は, 気相 G と液相 L で各々 ρ_G, ρ_L となる一方, 界面内部では ϕ の関数として与えられる[1].



(a) Schematics of domain. (b) Courant number $C=0.1$
Fig.1: Interface profile drawn as a contour line of the index function ϕ at $t^* = U_0 t / d = 12.5$ in 2D rotation simulation

3. 二相流数値シミュレーション結果

まず, NS-PFM で CH 式(1)のみを用いた界面移流問題の計算結果を Fig.1 に示す. 界面は, 一定角速度で回転する 2次元空間に配置され, セル幅 $\Delta x = \Delta y = 1$ に対して初期直径

$d=32$ を与えられた。その形状は、Courant 数 $C=0.1$ に対して約 1 周後の無次元時刻 $t^*=12.5$ まで保持された (図(b))。以上から、式(1)を用いる NS-PFM が従来アルゴリズムなしに界面移流・再構成計算を実施できることを確認した。

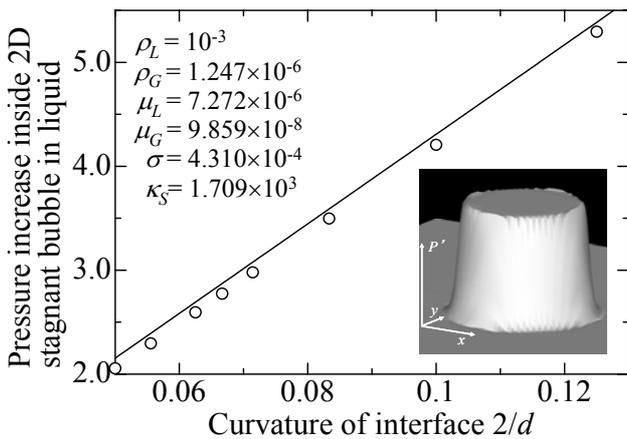


Fig. 2: Pressure increase inside bubble neutrally-buoyant in stagnant liquid at $\rho_L/\rho_G=801.7$ and $\sigma=4.31 \times 10^{-4}$

次に、NS-PFM の表面張力を検証するため、2次元静止液相内に浮かぶ単一円形気泡の内部圧力を測定した。Fig.2 に示すように、本計算での内部圧力上昇(○印)は、Laplace 則(実線)に従って気泡径 d に反比例しており、自由エネルギーに基づく表面張力は二相中で適切に反映された。

以上を踏まえて、重力 $|\mathbf{g}|=g$ の下で空気-水相当の密度比 $\rho_L/\rho_G=801.7$ と粘性比 $\mu_L/\mu_G=73.76$ を持つ二相流体の数値解析に本法を適用した[5]。幅 a 、アスペクト比 $n^2=H/a=2$ の2次元液柱の倒壊(Fig.3)では、時刻 t の液柱下端の界面位置 X/a に関する結果($a=10\Delta x$:破線, $18\Delta x$:実線)は、実験結果[10]やVOF法とMPS法による数値結果[8][11]と良く一致した。また、静止気相中を高き $H=65.5$ から自由落下する $d=20$ の液滴と水平壁面上の液膜の合一の3次元計算(Fig.4)では、

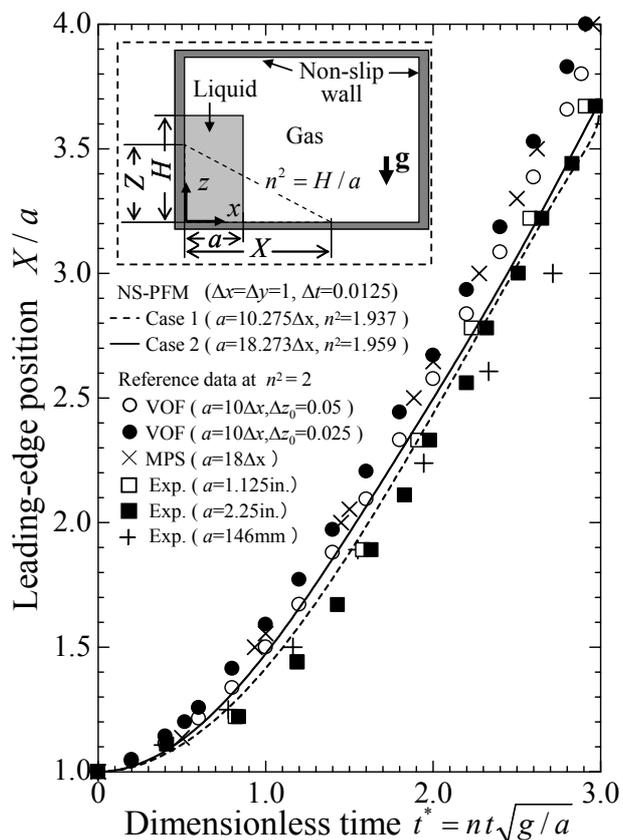


Fig. 3: Time series of leading-edge position X of liquid column

接触直前(a) $t^*=0.879$ の液滴と液膜間の圧力増加や円環状の波の発生(b)と伝播(c)が数値的に安定して再現された。

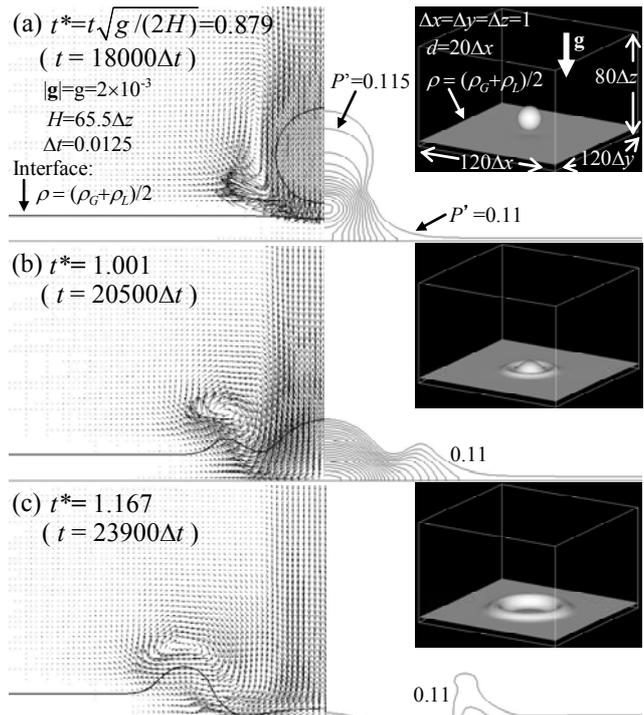


Fig.4: 3D interfacial profile, cross-sectional flow velocity and pressure P' fields in coalescence of drop and liquid film.

4. 結言

本報では、著者らが文献[1]-[3]に基づき提案している、Phase-Field Model(PFM)を導入してCahn-Hilliard(CH)方程式とNavier-Stokes(NS)方程式を連立させて解く、新しい二相流界面追跡計算法(NS-PFM)[4][5]の概要を述べた。また、数値シミュレーション結果により、提案したNS-PFMは(1)従来アルゴリズムを使用せず表面張力と界面移流を精度良く計算できる、(2)空気-水相当の高密度比二相流問題に適用できる、ことを実証した。尚、Internet web サイト[12]では、上記のシミュレーション結果の動画を公開している。

参考文献

- [1] Inamuro, T., Ogata, T., Tajima, S. and Konishi, N., *J. Comput. Phys.* **198**, 628-644 (2004).
- [2] Jacqmin, D., *J. Comput. Phys.* **155**, 96-127 (1999).
- [3] Jamet, D., Lebaigue, O., Coutris, N. and Delhay, J.M., *J. Comput. Phys.* **169**, 624-651 (2001).
- [4] 高田尚樹, 富山明男, 機論 B **71**, 117-124 (2005).
- [5] Takada, N., Misawa, M. and Tomiyama, A., Proc. 2005 ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting and Exhibition (2005), Paper No. FEDSM2005-77367.
- [6] Seta, T. and Kono, K., *JSME Int. J. B* **47**, 572-583 (2004).
- [7] Takada, N., Misawa, M., Tomiyama, A. and Hosokawa, S. *J. Nucl. Sci. Technol.*, **38**, 330-341 (2001).
- [8] Hirt, C.W. and Nichols, B.D., *J. Comput. Phys.* **39**, 201-225 (1981).
- [9] 秋山守, 有富正憲ほか, 新しい気液二相流数値解析 - 多次元流動解析 -, 150-177, コロナ社 (2002).
- [10] Martin, J.C. and Moyce, W.J., *Philos. Trans. Roy. Soc. London, Ser. A* **244**, 312-324 (1952).
- [11] Koshizuka, S. and Oka, Y., *Nucl. Sci. Eng.* **123**, 421-434 (1996).
- [12] http://staff.aist.go.jp/naoki-takada/phase_field_cfd.htm