D 322

DRAFT

日本混相流学会 年会講演会 2006
講演論文集，2006－8.4 ～ 6，金沢

フェーズフィールド法を用いた相変化を伴う二相流の数値シミュレーション

Numerical Simulation of Two-phase Flows with Phase Change Using a Phase-field Method

高田 尚樹（産総研）　　冨山 明男（神戸大）

TAKADA Naoki　　TOMIYAMA Akio

Abstract　An interface-tracking method based on a phase-field modeling is evaluated for numerical simulation of thermal liquid-vapor flows with phase change. In the flow field, the interface with a finite width between phases is autonomously formed according to the free-energy theory. The phase-field method therefore needs no conventional elaborating algorithms for advection and reconstruction of the interfaces. From the numerical results of two-dimensional van-der-Waals fluid flows around a critical point, it is confirmed that the phase-field method is useful for more understanding microscopic two-phase flows with heat and mass transfer across the interfaces, such as bubble nucleation on heater and cavitations around solid body.

Keywords: Computational fluid dynamics, Liquid-vapor flow, Free energy, Diffuse-interface method, Lattice Boltzmann method

1. 緒　言

近年開発が進むμ-TAS 等のマイクロスケールの各種熱流体デバイス[1]は，気液・液液二相の固体表面濡れ性や相変化を利用して高効率・高精度の熱物質移動操作を実現する．それらデバイス内部のマイクロ流路の最適設計では，室内実験では観測困難な多次元的な流動現象をコンピュータによる数値実験を通してより詳細に理解することが必要不可欠となっている．本研究では，そのための新しい計算法であるフェーズフィールド法(PFM)[2-6]の基礎的検討を目的とし，本報では相変化を伴う二相流に対する PFM[2]の概要と数値シミュレーションへの適用について述べる．

2. フェーズフィールド法（Phase-field Method，PFM）

PFM [2,3]は，多成分系の相変態に伴う微視的組織形成過程を解明するため，金属や高分子材料のメゾスケールシミュレーションで使用されている．非平衡熱力学の自由エネルギー理論に基づく各相の析出・分離し，瞬時局所の界面の形状や移動速度の条件を課することなく系の時間発展が記述される．その界面は次の特徴を持つ[2-6].

(a) 界面は，物性が急峻かつ連続的に変化する，空間セル数個分の幅の有限体積領域に相当する．

(b) 表面張力は，質量密度または成分濃度の局所勾配に起因する単位面積当りの自由エネルギーに相当する．

(c) 界面は，化学ポテンシャル勾配で生じる物質拡散流束によって自律的に形成される．

以上より，二相流計算の格子ボルツマン法（LBM）[7-11]をはじめとする PFM は，従来の表面張力モデルや界面移流・再構成アルゴリズムを必要不可欠とせず，標準的差分スキームのみでもオイラー格子上で界面を追跡できる[2]．その結果，PFM では，界面の大変形や複雑形状界面の移流の計算を簡素化し，既存の界面追跡法よりも計算機資源と計算時間の節約が期待できる[3-6]．さらに，従来法では困難であった相変化や溶解に伴う界面を通した熱物質輸送計算も容易である[2,11].

3. 基礎方程式

相変化を伴う一成分系二相流の PFM [2,11]では，次の流体の質量ρ, 運動量$\rho\boldsymbol{u}$, エネルギーE の保存方程式を解く．

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{u})=0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial\rho\boldsymbol{u}}{\partial t}+\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{u}\otimes\boldsymbol{u})=\nabla\cdot(-\boldsymbol{P}+\boldsymbol{\tau}) \tag{2}$$

$$\frac{\partial E}{\partial t}+\nabla\cdot(E\boldsymbol{u})=\nabla\cdot\left[(-\boldsymbol{P}+\boldsymbol{\tau})\cdot\boldsymbol{u}\right]+\nabla\cdot(k\nabla T)+\nabla\cdot\left[-\kappa_S\rho(\nabla\cdot\boldsymbol{u})\nabla\rho\right] \tag{3}$$

$$\boldsymbol{P}=\left(p-\kappa_S\rho\nabla^2\rho-\frac{1}{2}\kappa_S|\nabla\rho|^2\right)\boldsymbol{I}+\kappa_S\nabla\rho\otimes\nabla\rho \tag{4}$$

係数κ_Sは平坦な界面での表面張力σの定義(5)に従う[2-6].

$$\sigma\equiv\int_{-\infty}^{+\infty}\kappa_S|\nabla\rho|^2\,d\xi \tag{5}$$

ここでは基盤研究段階として，臨界点近傍の圧縮性非理想流体を扱い[2,11], 以下の van der Waals 状態方程式 p と密度勾配依存の E を考慮した保存形 Navier-Stokes 式(1)-(3)を MacCormack 有限差分スキームで陽的に直接解いた[12,13].

$$p=\rho T(1-B\rho)^{-1}-A\rho^2 \tag{6}$$

$$E=\frac{1}{2}\rho\boldsymbol{u}^2+\rho(cT-A\rho)+\frac{\kappa_S}{2}|\nabla\rho|^2 \tag{7}$$

次式は液相に対する固体表面の濡れ性の境界条件を表す.

$$\kappa_S\frac{\partial\rho}{\partial n}=-\gamma_S \tag{8}$$

ここで，n は表面の法線方向を意味し，γ_S は界面と固体面との接触角θ_Wを調整する Wetting potential と呼ばれるパラメータである[2]. 本計算ではθ_W =90 度の条件γ_S=0 を用いた.

4. 相変化二相流数値シミュレーション結果

上記 PFM を用いて，まず，加熱平板上における 2 次元気泡核形成(Fig.1)を計算した．上式には, A=B=c=1, κ_S=0.01, k=μ(粘性係数)=0.2，空間セル幅Δx=Δy=1，時間刻みΔt=0.2 を与えた. 初期条件で 50Δx×50Δy の計算領域を T=T_0=0.293, ρ_L =0.405 の液相で満たし，左右に周期境界，上部に自由流出境界，下部にすべりなし固体壁境界を設定した．本結果

(Fig.2)では，幅 L_H=10Δx で一定温度 T_H=T_0+1.465×10^{-2} の加熱壁上でマッシュルーム状に成長するρ_G =0.265 の気相領域が確認された[12,14]. Fig.3 に示す，幅 a=20Δx，高さ 2H=10Δy, T_W=T_0 の等温物体周りの流れの計算(c=1.5, κ_S=μ=0.01, Δt=0.05)では，初期にρ_L=0.405，T=T_0 の液相で満たした L_x=300Δx，L_y=50Δy の計算領域の上下に鏡面対称境界，左側に $\boldsymbol{u}_{in}$=(0.05,0)の一様流入境界，右側に定圧 p=p_0=0.0354 の自由流出境界を置いた．本数値結果(Fig.3.(b),(c))では，下流側の物体背後でρ_G =0.265 の気相が発生した[13].

5. 結　論

本報では，相変化を伴う一成分系二相流の数値シミュレーションのためのフェーズフィールド法（PFM）を解説し，その数値結果から PFM の基本的な適用可能性を確認した．

謝　辞

上記成果の一部は，平成 18 年度科研費補助金若手研究 B，課題 No. 18760134「フェーズフィールドモデルに基づくマイクロ流路内二相流の界面追跡計算法の開発」で得られた．

Nomenclature

A:	long-range interaction of fluid particles
B:	short-range interaction of fluid particles
$\boldsymbol{I}$:	second-rank isotropic tensor
k:	thermal conductivity
p:	pressure in homogeneous system
T:	Temperature
t:	time
$\boldsymbol{u}$:	flow velocity vector
x,y,z:	position in Cartesian coordinate system
(Greek letters)	
Δ:	spatial or time increment in finite difference scheme
κ_S:	surface tension parameter
ρ:	mass density of fluid
σ:	surface tension
$\boldsymbol{\tau}$:	viscous stress tensor in Newtonian fluid flow

参考文献

[1] 丸山茂夫,他 編，ﾏｲｸﾛ･ﾅﾉ熱流体ﾊﾝﾄﾞﾌﾞｯｸ, NTS (2006).

[2] Jamet, D., Lebaique, O., Coutris, N. and Delhaye, J. M., *J. Comput. Phys.*, 169, 624–651 (2001).

[3] 高田尚樹，三澤雅樹，冨山明男，混相流研究の進展，1, 171–179 (2006).

[4] 高田尚樹，冨山明男，機論 B, 71(701), 117–124 (2005).

[5] Takada, N. and Tomiyama, A., *JSME Int. J. B-Fluid T.*, 49(3), Paper No.04–0186 (2006), in press.

[6] Takada, N., Misawa, M. and Tomiyama, A., *Math. Comput. Simulat.*, (2006), in press.

[7] 高田尚樹，混相流, 15(1), 23–30 (2001).

[8] 日本機械学会 編，改訂 気液二相流技術ﾊﾝﾄﾞﾌﾞｯｸ, 88–92，コロナ社 (2006).

[9] Takada, N., Misawa, M., Tomiyama, A. and Hosokawa, S., *J. Nucl. Sci. Technol.*, 38(5), 330–341 (2001).

[10] Inamuro, T., Ogata, T., Tajima, S. and Konishi, N., *J. Comput. Phys.*, 198, 628–644 (2004).

[11] Seta, T. and Kono, K.., *JSME Int. J. B-Fluid T.*, 47(3), 572–583 (2004).

[12] Takada, N., Misawa, M. and Tomiyama, A., *Proc. 2005 ASME Fluids Eng. Div. Summer Meeting and Exhibition*, Paper No. FEDSM2005–77367 (2005).

[13] Takada, N. and Tomiyama, A., *Proc. 2006 ASME Joint U.S.-European Fluids Eng. Summer Meeting*, Paper No. FEDSM2006–98536 (2006).

[14] http://staff.aist.go.jp/naoki-takada/phase_field_cfd.htm

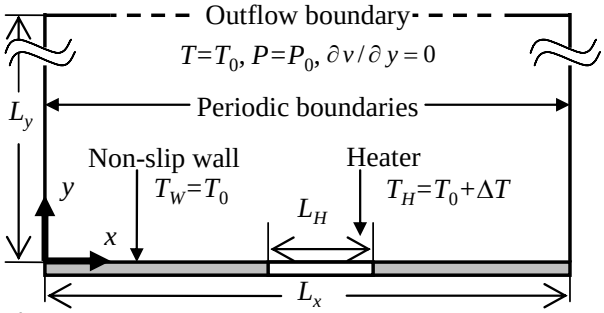

Fig.1 Schematic of computational domain for simulation of bubble nucleation in a non-ideal fluid on a flat heater

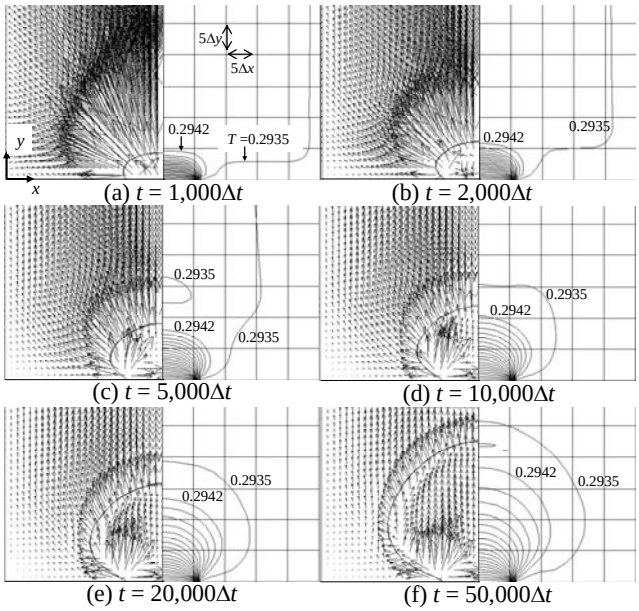

Fig.2 Interface profile, velocity and temperature fields around 2D bubble nucleated on heater with width L_H=10Δx in a van-der-Waals fluid at time t (Δx=Δy=1,Δt=0.2)

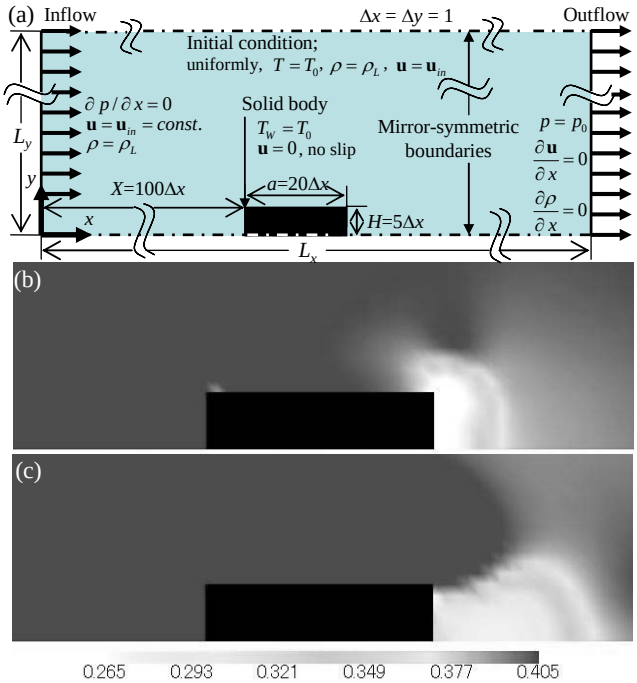

Fig.3 Schematic of computational domain (a), and snapshots of density field at time t = (b) 1000Δt and (c) 10000Δt in simulation of non-ideal fluid flow around a solid body