

## Phase-Field モデルを用いた二相流計算

Computation of two-phase flows using Phase-Field Model

北海道大学大学院工学院 学生員 ○ 門脇壯健 (Soken Kadowaki)  
北海道大学大学院工学研究院 正会員 渡部靖憲 (Yasunori Watanabe)

## 1. はじめに

大気海洋間の熱輸送は、気象を予測する上で重要なファクターであるが、これには様々な実測や実験を基に構築された経験モデルがよく用いられている。一方で、この熱輸送には、強風や砕波などに起因する海面上の飛沫が蒸発することによって発生する潜熱が大きく関係するが、飛沫が蒸発するなどの特異な現象を数値流体シミュレーションで再現し、その微視的なメカニズムを決定論的に説明することは非常に困難である。

例えば、ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian) 法<sup>1)</sup>などの界面追跡法を用いた二相流計算では、砕波などによる飛沫や気泡の計算を行うと、全ての水と空気の境界を考慮することになり、計算コストが非常に上がり、また計算が破綻しやすいという問題がある。また、MPS (Moving-Particle Semi-implicit) 法<sup>2)</sup>などの粒子法は砕波などの特異な現象を扱うのが容易だが、精度が悪く、また計算コストも大きい。表面張力を体積力として考えたCSF (Continuum Surface Force) モデル<sup>3)</sup>は界面を有限の幅を持った領域として捉え、可変密度を持つ単一の流体として流れを処理することにより、界面追跡法や粒子法よりも計算コストを抑えることが可能だが、界面の物理現象を正確に表しておらず、界面の動きが非現実的になる場合が多くあり、やはり砕波などの特異な現象を扱うのに十分なモデルではない。これに対して、Phase-Field モデル<sup>4)5)</sup>はCSF モデル同様、可変密度を持つ単一の流体として二相流を処理することができる上、界面の挙動を流体分子の移流だけではなく拡散も考慮してモデル化することで、より正確に界面の挙動を表すことが可能である。

そこで本研究では、Phase-Field モデルを用いて、蒸発によって発生する潜熱などの熱輸送の問題を解くことを最終的な目的としている。そこでまず本論文では、Phase-Field モデルのテストケースとして、空気中から水滴が水面に落下する簡単なモデルでの数値実験を行なった結果について議論した。

## 2. 数値計算法

## 2.1 界面の拡散方程式

拡散界面の組成は分子の熱運動と分子間力の相克によって決定される。Van der Waals (1893) は自由エネルギー密度を導入することによって、この相克をモデル化した。

$$f = \frac{1}{2} \epsilon \sigma \alpha |\nabla C|^2 + \epsilon^{-1} \sigma \beta \Psi(C) \quad (1)$$

ここにおける  $f$  は自由エネルギー密度、 $\epsilon$  は界面厚さ、

$\sigma$  は表面張力、 $C$  は分子の濃度を表す変数であり、水バルクでは 0.5、空気バルクでは -0.5、界面内では -0.5 から 0.5 の値をとる。 $\Psi(C)$  は 2 相の混ざり合わなさを定義したモデル、 $\alpha$ 、 $\beta$  は使用する  $\Psi(C)$  と  $\epsilon$  の定義によって決定される無次元数である。さらに Van der Waals は、平衡状態の界面が、自由エネルギー  $F = \int f dV$  を最小とするものと仮定した。これは汎関数  $F$  の変分  $\delta F / \delta C$  が一定となることを意味する。

$$\epsilon \sigma \alpha \nabla^2 C + \epsilon^{-1} \sigma \beta \Psi'(C) = -\mu = \text{const.} \quad (2)$$

$\mu$  は汎関数  $F$  の変分であり、化学ポテンシャルと呼ばれるものである。ここで、表面張力は界面の自由エネルギー密度の積分に等しい。平衡プロファイル  $C = C(z)$  を有する静水面を仮定すると、表面張力は以下のように  $z$  の積分の形で与えられる。

$$\sigma = \epsilon \sigma \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{\text{eq}}^2 dz \quad (3)$$

式 (3) の両辺から表面張力  $\sigma$  を消去して、

$$\epsilon \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{\text{eq}}^2 dz = 1 \quad (4)$$

式 (4) によって  $\alpha$  が決定される。

Cahn (1961) は、界面内の拡散フラックスが化学ポテンシャルの勾配に比例すると仮定し、van der Waals の仮説を拡張することによって、拡散界面の組成の時間変化をモデル化した (CHW 方程式)。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot J = \kappa \nabla^2 \mu = -\kappa \nabla^2 (\epsilon \sigma \alpha \nabla^2 C - \epsilon^{-1} \sigma \beta \Psi'(C)) \quad (5)$$

ここでの  $J$  はフラックスであり、 $\kappa$  は移動度を示すパラメータである。

## 2.2 支配方程式

本研究ではまず、(5) 式を移流問題に拡張した、濃度  $C$  に関する移流拡散方程式 (6) を用いる。また、界面応力を考慮した流れ場の運動方程式である Navier-Stokes 方程式 (7) を用いる。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\sum_j u_j \frac{\partial C}{\partial x_j} + \nabla \cdot \kappa \nabla \mu \quad (6)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = -\sum_j u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \nu \nabla^2 u_i + \rho(C)^{-1} \sum_j \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \rho(C)^{-1} \nabla p + g_i \quad (7)$$

ここで  $u_i$  は流速ベクトル、 $\nu$  は動粘性係数、 $\rho$  は密度、 $p$  は圧力、 $g_i$  は重力ベクトルである。また、 $\tau_{ij}$  は濃度  $C$  の勾配に依存する界面の応力テンソルであり、次のように表される。

$$\tau_{jj} = \epsilon \sigma \alpha \sum_{i \neq j} \left( \frac{\partial C}{\partial x_i} \right)^2 \quad (8)$$

$$\tau_{ij, i \neq j} = -\epsilon \sigma \alpha \left( \frac{\partial C}{\partial x_i} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \quad (9)$$

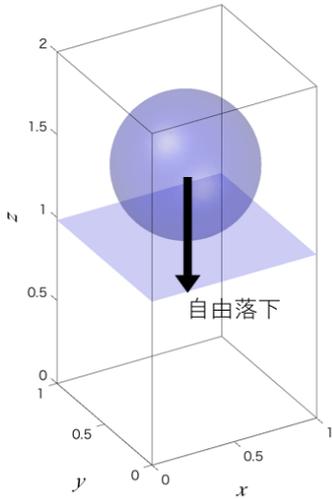


図-1 計算領域 ( $C = 0$ の等値面)

### 2.3 計算方法

濃度 $C$ に関する移流拡散方程式 (6) に関しては二段階分離解法を適応し、移流項はCIP法を用いた。また運動方程式 (7) は (6) 同様、二段階分離解法を適用し、移流項はCIP法を、非移流項は予測子修正子法を用いて計算した。

本研究では砕破によって発生した飛沫が水面に落ちる事象を想定し、水滴が着水する単純なモデルでの数値実験を行なった (図-1 参照)。本計算で取り扱うパラメータは全て重力加速度 $g$ 、水の密度 $\rho_{\text{liquid}}$ 、水深 $h$ で無次元化される。計算領域 ( $x \times y \times z$ ) は $1 \times 1 \times 2$ とし、水深 $1$ を持つ静水中に静水位から $z = 0.45$ の位置より半径 $0.4$ の水滴を自由落下させた。空気の密度 $\rho_{\text{air}}$ については今回、計算の安定のために $0.5$ とした。計算格子 ( $dx \times dy \times dz$ ) は $1/31 \times 1/31 \times 2/63$ とし、界面の厚さ $\epsilon$ は $dz \times 5$ とした。

境界条件について、計算領域の上面はすべり条件とし、底面は非すべり条件とした。側面においては向かって手前側と奥側、左側と右側を周期境界条件とした。また、計算領域をゲージ圧とするため、上面の圧力 $p$ を $0$ として固定した。

本研究において、 $\Psi(C)$ は最も単純で多く使用されている、 $C = 0$ でエネルギーのピークを持ち、 $C_{\text{bulkphase}} = \pm 1/2$ で最小値を持つ $(C + 1/2)^2(C - 1/2)^2$ であり、界面厚さ $\epsilon$ の定義は $C = -0.45 \sim 0.45$ である領域とする。これらの定義と式 (4) より $\alpha = 3/(2 \tanh^{-1}(0.9)) \approx 1.019$ 、 $\beta = 12 \tanh^{-1}(0.9) \approx 17.667$ と決定される。また初期条件としてモル分率 $C$ の平衡プロファイルを以下のように与える。

$$C = \frac{1}{2} \tanh \left( \sqrt{\frac{\beta}{2\alpha}} \times \frac{l}{\epsilon} \right) \quad (10)$$

ここでの $l$ は $C = 0$ 地点からの距離を示す。表面張力 $\sigma$ は $7.3 \times 10^{-2} [\text{N/m}]$ で与えた (Chanson ら 2006)。移動度においてはまず、移流の効果を見るために $\kappa = 0$ として、また界面厚さ $\epsilon = dz \times 5$  (約  $1.6 \text{mm}$ ) を考慮し $\kappa = 6.6 \times 10^{-6} [\text{cm}^5 \text{s}^{-1} \text{erg}^{-1}]$ として、2パターンの移動度での数値実験を行なった。

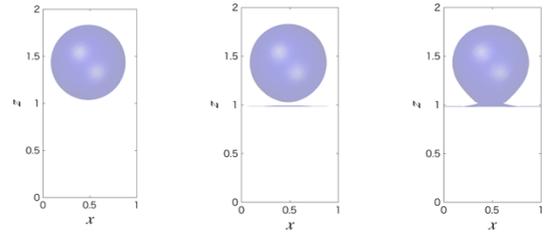


図-2 水滴と水面が接する前後の $C = 0$ の等値面の時間変化(時間間隔:  $0.005 \text{s}$ )

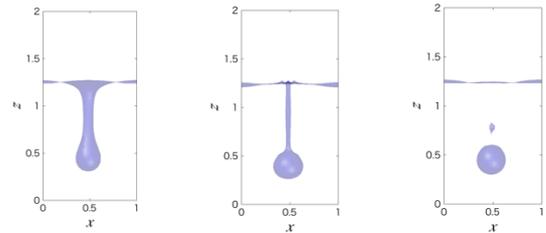


図-3 気泡生成前後の $C = 0$ の等値面の時間変化(時間間隔:  $0.040 \text{s}$ )

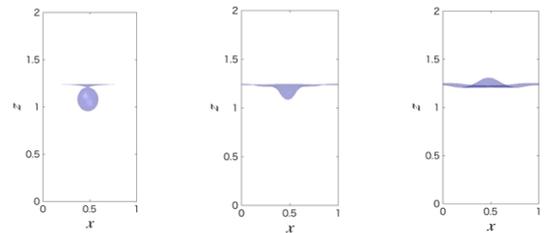


図-4 気泡と水面が接する前後の $C = 0$ の等値面の時間変化(時間間隔:  $0.010 \text{s}$ )

### 3. 結果

まず $\kappa = 0$ として、濃度 $C$ の拡散を考慮せず、移流だけを考慮した水滴が着水するモデルでの数値実験を行った結果を図-2から図-4に示した。図-2は、水滴と静水面が接する前後の $C = 0$ の等値面の時間変化を、初期条件から時間間隔 $0.005 \text{s}$ 刻みで表したものである。これらは水滴と静水面の界面同士が合成されるときの変形の様子を表している。図-3は、気泡生成前後の $C = 0$ の等値面の時間変化を、 $0.1 \text{s}$ 後から時間間隔 $0.040 \text{s}$ 刻みで表したものである。こちらは、水面が沈み込んで気泡が生成されるまでの界面の分離の様子を表している。図-4は、気泡と水面が接する前後の $C = 0$ の等値面の時間変化を、 $0.325 \text{s}$ から時間間隔 $0.010 \text{s}$ 刻みで表したものである。これは、気泡と水面の界面が合成されるときの変形の様子を表している。またこれらの図より、 $u, C$ の移流計算によって水、空気それぞれの体積は保存されることが分かる。

次に $\kappa = 6.6 \times 10^{-6} [\text{cm}^5 \text{s}^{-1} \text{erg}^{-1}]$ として同様の数値実験を行なった結果を図-5から図-7に示した。図-5は、水滴と静水面が接する前後の $C = 0$ の等値面の時間変化を、初期条件から時間間隔 $0.005 \text{s}$ 刻みで表したものである。これらは水滴と静水面の界面同士が合成されるときの変形の様子を表しているが、図-2と比べると界面の拡散を

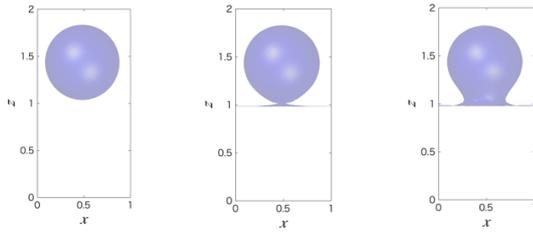


図-5 水滴と水面が接する前後の $C = 0$ の等値面の時間変化(時間間隔: 0.005s)

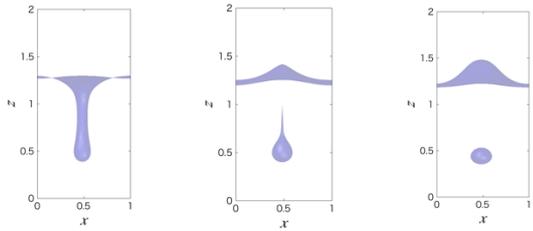


図-6 気泡生成前後の $C = 0$ の等値面の時間変化(時間間隔: 0.010s)

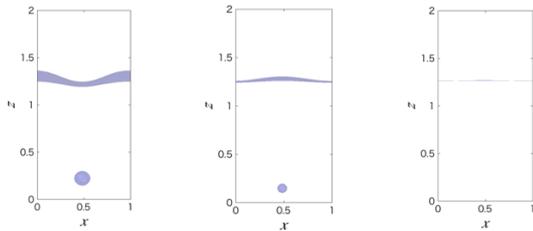


図-7 気泡生成後から $C = 0$ の等値面が消失するまでの時間変化(時間間隔: 0.040s)

考慮した方が若干速く水滴と水面の界面が合成されることがわかる。図-6 は、気泡生成前後の $C = 0$ の等値面の時間変化を、0.1s 後から時間間隔 0.010s 刻みで表したものである。図-3 と比べると短時間で気泡が生成されることがわかる。拡散を考慮しない場合、図-3 の左から 2 番目の図のように気泡生成中に水面が筒状になる状態がある程度の時間継続されるが、拡散を考慮するとその時間が短くなる。図-7 は気泡生成後から $C = 0$ の等値面が消失するまでの時間変化を、0.15s 後から時間間隔 0.040s 刻みで表したものである。これは拡散を考慮しない場合と違い、できた気泡は水面へ浮上せずバルク内に拡散していく様子を表している。このときの拡散の様子を濃度 $C$ のコンターで表したものを図-8 に示した。同図の 4 枚目の図(右下)は気泡が完全に拡散した後の濃度 $C$ の分布を表している(初期条件から 0.625 秒後)。これらのコンターは暖色な程水分子が多く、寒色な程空気分子が多いことを示している。これより水中の空気分子が拡散していく様子わかる。また、このときの化学ポテンシャル $\mu$ の時間変化を表したものを図-9 に示した。同図の 4 枚目の図(右下)は気泡が完全に拡散した後の化学ポテンシャル $\mu$ の分布を表している(初期条件から 0.625 秒後)。これらのコンターは暖色な程化学ポテンシャルが高く、寒色な程低いことを示している。

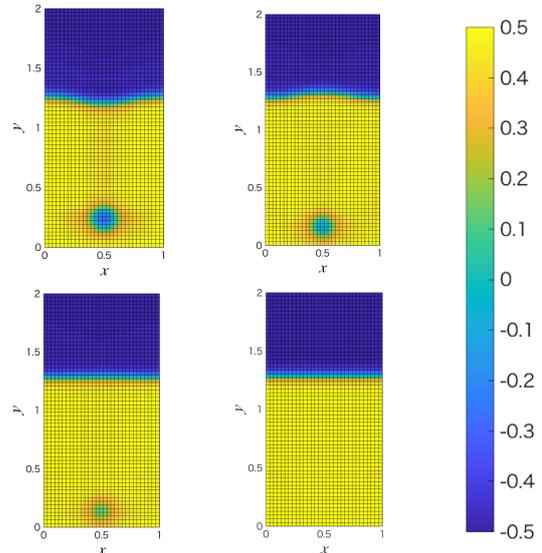


図-8 気泡拡散過程の濃度 $C$ の時間変化(時間間隔: 0.040s)  
(時系列: 左上→右上→左下)と  
気泡拡散後の濃度 $C$ の分布(右下)

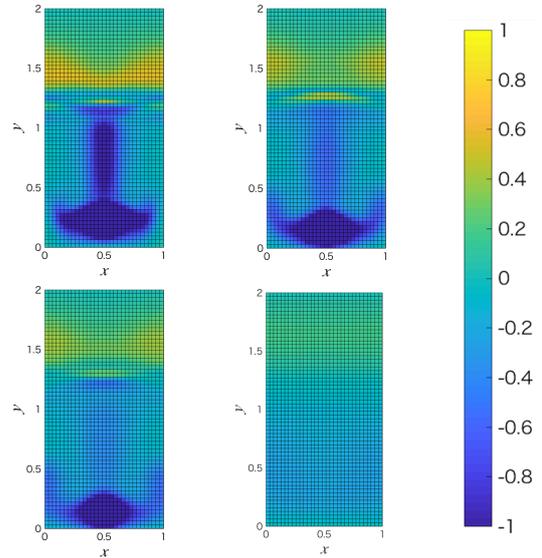


図-9 気泡拡散過程の化学ポテンシャル $\mu$ の時間変化(時間間隔: 0.040s)  
(時系列: 左上→右上→左下)と  
気泡拡散後の化学ポテンシャル $\mu$ の分布(右下)

これより、化学ポテンシャルが高いところから低いところへ正のフラックスが生じ、徐々にポテンシャルが一様になっていく様子わかる。ここで注目すべき点は、図-8 の右下図より、濃度 $C$ は最終的に二相それぞれの質量が保存された形で平衡状態に達するが、これに対して図-9 の右下図より、化学ポテンシャル $\mu$ は平衡状態に近づく、やがて系全体で一定となることである。つまりこれらは、濃度勾配 $\nabla C$ ではなく、化学ポテンシャル勾配 $\nabla \mu$ によって分子の拡散が駆動されることによって、水の蒸発や凝結がモデル化されていることを示している。

#### 4. 結論

Phase-Field モデルを用い、二相流を单相流のように解いても、 $u, C$ の移流によって水、空気それぞれの体積は保存されることを確認した(図-2~図-4 参照)。また濃度勾配 $\nabla C$ ではなく、化学ポテンシャル勾配 $\nabla \mu$ によって分子の拡散が駆動されることにより、蒸発や凝結がモデル化されていることを確認した(図-8、図-9 参照)。

しかしながら本論文では空気の密度 $\rho_{\text{air}}$ と界面厚さ $\epsilon$ 、この2つのパラメータに関しては現実的ではない。まず本来の空気の密度は水の密度の約 1/1000 倍だが、今回はテストケースでの数値実験ということで、計算の安定のため、空気の密度は水の密度の 0.5 倍とした。また現実的な界面厚さは0.5~5nmとされているが、今回用いた界面厚さは、密度同様計算の安定のため格子幅 5 つ分で定義し、約1.6mmとした。現在の計算方法において、密度差をさらに大きくして安定して計算を行うためには、界面厚さをさらに厚く設定する必要があるが、それではさらに界面厚さが現実離れたものになってしまう。よって今後、計算格子をより小さくすることや、界面厚さを定義する計算格子幅をより少なくしても計算が安定す

るようなスキームを取り入れ、界面厚さをより薄く設定することが課題となる。また今回は拡散による温度変化を考慮していない、つまり熱平衡状態での数値結果となっているので、非平衡状態を考慮したものに拡張することが今後の目標となる。

#### 参考文献

- 1) 岡本隆,河原陸人:ALE 有限要素法による二次元スロッシング解析,土木学会論文集,No.441/I-18,pp.29-48, (1992)
- 2) 越塚誠一 : 粒子法,丸善,(2005)
- 3) J. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach : A continuum method for modeling surface tension, J. Comput. Phys. 100,335, (1992)
- 4) David Jacqmin : Contact-line dynamics of a diffuse fluid interface, J. Fluid Mech., vol. 402, pp. 57-88, (2000)
- 5) David Jacqmin : Calculation of Two-Phase Navier-Stokes Flows Using Phase-Field Modeling, Journal of Computational Physics 155, 96-127, (1999)