

日本機械学会論文集  
Transactions of the Japan Society of  
Mechanical Engineers

別刷

71 卷 701 号 B 編

(平成 17 年 1 月)

社団法人 日本機械学会

# Offprint

## **A Numerical Method for Two-Phase Flow Based on a Phase-Field Model**

Naoki TAKADA and Akio TOMIYAMA

Corresponding author :

Naoki TAKADA

Research Scientist, Dr.Eng.

National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST),

Environmental Fluid Engineering Group,

Research Institute for Environmental Management Technology,

16-1 Onogawa, Tsukuba-shi, Ibaraki, 305-8569, Japan

E-mail: [naoki-takada@aist.go.jp](mailto:naoki-takada@aist.go.jp)

URL: <http://www.aist.go.jp>

Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B,  
Vol.71, No.701 (2005), Paper No.04-0186, pp.117-124 ( *in Japanese* ).

January, 2005

*A publication of the* Japan Society of Mechanical Engineers (JSME)

<http://www.jsme.or.jp/English/>

## PHASE-FIELD MODEL に基づく二相流数値計算手法\*

高田 尚 樹 \*<sup>1</sup>, 富山 明 男 \*<sup>2</sup>A Numerical Method for Two-Phase Flow  
Based on a Phase-Field ModelNaoki TAKADA \*<sup>3</sup> and Akio TOMIYAMA\*<sup>3</sup> National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST),  
16-1 Onogawa, Tsukuba-shi, Ibaraki, 305-8569, Japan

For interface-tracking simulation of incompressible two-phase fluids with a high density ratio, a numerical method based on the combination of a phase field model, Navier-Stokes equation, and a van-der-Waals Cahn-Hilliard (C-H) free energy was proposed in this study. The method was applied to several two-phase flow problems, by which it was confirmed that (1) the volume flux caused by a local chemical potential gradient in the C-H equation plays an important role in (a) volume conservation, (b) automatic reconstruction of gas-liquid interface, and (c) reduction of numerical diffusion and oscillation, (2) the proposed method gives good predictions of pressure increase inside a bubble caused by the surface tension force, and (3) a single liquid drop falling through a stagnant gas and merging into a stagnant liquid film was simulated well.

**Key Words** : Computational Fluid Dynamics, Multi-phase Flow, Numerical Analysis, Interface Tracking, Cahn-Hilliard Free Energy Theory, Phase-Field Model, Lattice Boltzmann Method

## 1. 緒 言

本研究の目的は、Phase-Field Model (PFM)<sup>(1),(2),(3)</sup>が有する二相流体界面の移流・再構成機能の特徴を明らかにし、PFM に基づく高密度比二相流の数値シミュレーション法を提案することである。PFM は、二元合金の凝固<sup>(4)</sup>、高機能材料設計プラットフォーム・プロジェクトにおける高分子薄膜形成<sup>(5)</sup>等のメゾスケールシミュレーションでも使用されており、相変態に伴う微視的組織化過程の研究に有効な手段の一つである<sup>(6)</sup>。PFM の界面は、流体の物性 (質量密度, 成分濃度, 密度や粘性等) が急激かつ連続的に変化する有限な領域として仮定する。界面形状は系の自由エネルギーが最小になるように自律的に決定されるため<sup>(6),(7)</sup>、界面における境界条件は不要である。PFM における界面構成の特徴は、Volume of Fluid (VOF) 法<sup>(8)</sup>等の従来の界面追跡法<sup>(9),(10)</sup>と異なり、(1) 表面張力を密度勾配による界面自由エネルギーとして与えられる、(2) 界面移流計算では、非平衡系の瞬時局所的な化学ポテンシャル勾配を考慮して界面再構成を行うという点にある。このため、複雑な幾何計算<sup>(8)</sup>を行わずに表面張力が流れ場に及ぼす影響を考慮できる。また、Donor-Acceptor<sup>(8)</sup>、FLAIR<sup>(11)</sup>、MARS<sup>(12)</sup>、CIP<sup>(13)</sup>等のアルゴリズムを必ずしも用いなくとも、界面の輸送と再構成を実現できる。

上記の結果、従来の界面追跡法では取り扱いが容易ではない相変化や溶解による界面の移動を PFM は自然に再現できる<sup>(2)</sup>。また、表面張力と界面移流の計算量は界面の面積濃度や変形度合に関係せず時間・空間解像度で決まるため、複雑性の高い二相流に対して従来法より効率的な計算実施が期待できる。この点から、PFM は合体・分裂を繰り返す液滴・気泡クラスター等の多数の界面の追跡に適していると考えられる。さらに、固体表面上の流体界面の接触角が濡れ性を考慮した簡潔な境界条件<sup>(1)</sup>から与えられるため、PFM は微細多孔性構造物体内の二相流計算に優れるとも予想される。

従来の PFM による二相流数値解法では、密度比 1:0.9 程度の非混和性二相<sup>(1)</sup>や臨界点近傍の蒸気-水<sup>(2)</sup>など密度比の小さい場合を対象としてナビエ・ストークス式を解いている。一方、粒子速度分布関数の時間発展式を解く格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, LBM)<sup>(14),(15)</sup>でも、Swift らは PFM の概念を取り入れた気液二相モデル<sup>(16)</sup>を提案している。その発展型である稲室ら<sup>(17)</sup>の二相流モデルは、界面形状を表す指標関数を導入することにより、高密度比二相流を数値的に安定に求められる<sup>(18)</sup>。本研究では、この二相流 LBM と既存の PFM 数値解法の長所をナビエ・ストークス式と融合した手法を提案する。本手法は、高密度比二相流計算が可能であり、要求される精度に応じて従来の離散化スキームや計算アルゴリズムを任意に選択

\*原稿受付 2004 年 3 月 2 日。

<sup>1</sup> 正員, 独立行政法人 産業技術総合研究所 (〒305-8569 つくば市小野川 16-1)<sup>2</sup> 正員, 神戸大学大学院自然科学研究科 (〒657-8501 神戸市灘区六甲台町 1-1)

E-mail: naoki-takada@aist.go.jp

できる利点を有する。

## 2. 統計熱力学に基づく二相界面モデル

**2.1 自由エネルギー理論** まず、自由エネルギー理論<sup>(5), (6)</sup>に基づく高密度比二相流の界面のモデル化を述べる。対象とする系1は、質量密度 $\rho$ が非一様に分布する等温の非圧縮性流体である。液相 $L$ と気相 $G$ は各々密度 $\rho_L$ と $\rho_G$ の領域に相当し、 $\rho$ が急激かつ連続的に変化する有限な空間が界面とみなされる。この系における二相共存の平衡状態は、次の Helmholtz の自由エネルギー $\Psi_1$ が最小な状態に対応する。

$$\Psi_1 = \int_V \left[ \psi_1(\rho) + \frac{\kappa_1}{2} |\nabla \rho|^2 \right] dV \quad (1)$$

上式右辺第1項は流体バルクの自由エネルギー、定数 $\kappa_1$ を持つ第2項は界面自由エネルギーを表す。式(1)は、表面張力を反映した圧力テンソル $P_{\alpha\beta}$ <sup>(3)</sup>を与える。

$$P_{\alpha\beta} = P\delta_{\alpha\beta} + \kappa_1 \frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta} \quad (2)$$

$$P = \rho \frac{\delta \Psi_1}{\delta \rho} - \Psi_1 = p - \kappa_1 \rho \nabla^2 \rho - \frac{\kappa_1}{2} |\nabla \rho|^2 \quad (3)$$

$$p = \rho \frac{\partial \psi_1}{\partial \rho} - \psi_1 \quad (4)$$

下付添字 $\alpha, \beta$ はデカルト座標系の指標を表す。

稲室らの二相流体LBM<sup>(18)</sup>は、表面張力と界面厚さの柔軟な設定<sup>(17)</sup>に加えて、高密度比 $\rho_L/\rho_G$ の二相流を容易に扱うため、状態方程式(4)の計算に代えて、実在の系1とは別の系2における自由エネルギー $\Psi_2$ を導入する。

$$\Psi_2 = \int_V \left[ \psi_2(\phi) + \frac{\kappa_2}{2} |\nabla \phi|^2 \right] dV \quad (5)$$

$\phi$ は界面形状を表す指標関数 (Index function)<sup>(17)</sup>であり、係数 $\kappa_2$ は界面の厚さに関する。本研究では稲室らのモデル同様、 $\phi$ に関して double-well な形式の関数 $\psi_2$ として、臨界点近傍の二成分二相系の振舞いを簡潔に記述する van der Waals (vdW) Model<sup>(16), (19)</sup>を利用する。

$$\psi_2(\phi) = \phi \left[ T \ln \left( \frac{\phi}{1-b\phi} \right) - a\phi \right] \quad (6)$$

定数 $a$ と $b$ は各々、系2の粒子同士の長距離引力作用、短距離反発作用の強さを意味する。vdW Modelでは、温度 $T$ を臨界温度 $T_c = 8a/(27b)$ より低く設定することによって相分離を示す非一様な $\phi$ の分布を形成し、最大値 $\phi_{max}$ および最小値 $\phi_{min}$ の各領域を液相、気相とみなす。二相共存平衡状態には、以下に示す化学ポテン

シャル $\eta$ の勾配に起因する $\phi$ の流れによって到達する。

$$\eta = \frac{\delta \Psi_2}{\delta \phi} = \frac{\partial \psi_2}{\partial \phi} - \kappa_2 \nabla^2 \phi \quad (7)$$

密度 $\rho$ は、以下の示すように $\phi$ の関数と仮定され<sup>(18)</sup>、界面を含む全領域で連続的に分布する。

$$\rho = \frac{\rho_L + \rho_G}{2} + \frac{\rho_L - \rho_G}{2} \sin \left( \frac{\phi - (\phi_L + \phi_G)/2}{\phi_L - \phi_G} \pi \right) \quad (8)$$

for  $\phi_G < \phi < \phi_L$

$$\rho = \rho_L \quad \text{for } \phi \geq \phi_L \quad (9)$$

$$\rho = \rho_G \quad \text{for } \phi \leq \phi_G \quad (10)$$

$\phi_L$ および $\phi_G$ は、気液を識別するための閾値である。

近年の二相流LBM<sup>(15)</sup>を含め、PFMに基づく流体数値解析手法は、式(2)および(7)を組み込んだ流れの支配方程式を解くことによって二相流界面の挙動を再現するものであり、非平衡統計熱力学を融合したマルチスケール・マルチフィジックスのCFD手法といえる<sup>(19)</sup>。

**2.2 表面張力の設定方法** PFMの表面張力 $\sigma$ は密度勾配による自由エネルギー増分に等しい。次の平坦な界面での $\sigma$ の定義式は、式(2)より得られる<sup>(3)</sup>。なお、 $x$ 軸は界面の法線方向に沿っている。

$$\sigma = \kappa_1 \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{\partial \rho}{\partial x} \right)^2 dx \quad (11)$$

本研究では、次の手順で $\sigma$ に関する初期設定を行う<sup>(20)</sup>。

- 1) 式(6)で $a, b, T$ の値を与えて、系2の Maxwell Construction 条件から $\phi_{max}$ と $\phi_{min}$ を計算する。
- 2)  $\kappa_2$ を与え、次の平衡条件から $\phi(x)$ を求める。

$$\eta(\phi) = \text{constant} (= \eta(\phi_{max}) = \eta(\phi_{min})) \quad (12)$$

- 3) 式(8)に $\phi(x)$ を代入して密度分布 $\rho(x)$ を得る。
- 4) 4次精度中心差分による密度勾配の計算。
- 5) Simpsonの公式による式(11)の数値積分。
- 6)  $\sigma = (\text{式(11)の積分値})$ から $\kappa_1$ の値を決める。

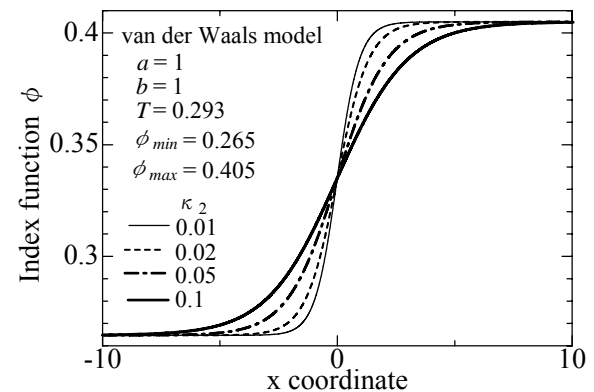


Fig.1 Profile of  $\phi$  for a flat interface.

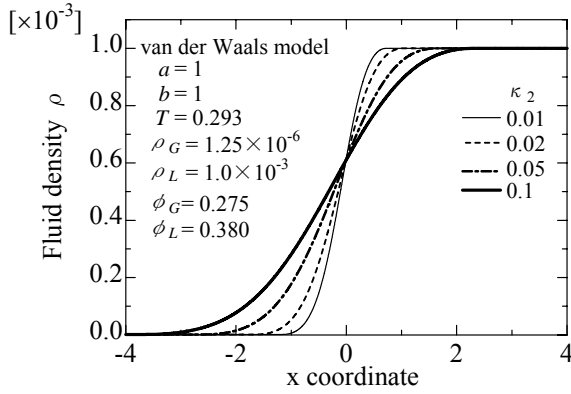


Fig.2 Profile of  $\rho$  for a flat interface.

図1, 2に, 式(12)より得られる平坦な界面に対する指標関数 $\phi$ の理論解, ならびに $\rho_L/\rho_G=801.7$ における密度 $\rho$ の分布を示す. 界面は $\rho$ が連続的に変化する領域に相当し, その厚さは $\kappa_2$ の値とともに増加する. 本研究では,  $a=b=1, T=0.293$ と設定し<sup>(18)</sup>, 界面を $\phi_{min}$ と $\phi_{max}$ の中間値の等高線として流れ場に描く.

### 3. 高密度比二相流のPFM数値シミュレーション法

PFMに基づく数値シミュレーション法<sup>(1),(2)</sup>は, これまで主に低密度比の二相流を対象としてきた. 本節では, 既存のPFM手法と, 稲室らが開発した二相流体LBM<sup>(18)</sup>を基礎に, 空気-水のような高密度比の二相流の取り扱いが可能なシミュレーション法を提案する.

**3.1 基礎方程式** 本手法では, 等温で相変化のない非圧縮性二相流を対象として, 連続の式, 式(2)を組み込んだナビエ・ストークス式, および流速 $\mathbf{u}$ による $\phi$ の移流を加味したCahn-Hilliard(C-H)式<sup>(1)</sup>を用いる.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial \rho}{\partial x_\beta} = 0 \quad (13)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) = - \frac{\partial P_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} \right) \right] + (\rho - \rho_k) g_\alpha \quad (k=L \text{ or } G) \quad (14)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial \phi u_\beta}{\partial x_\beta} = S \quad (15)$$

式(14)の圧力 $P_{\alpha\beta}$ には, 式(3)の $P$ に界面エネルギー $\kappa_1 |\nabla \rho|^2$ を加えた実効圧力 $P'$ <sup>(18),(21)</sup>を式(2)に代入したものを用いる. 右辺最終項は重力加速度 $g_\alpha$ による浮力を表し, 粘性係数 $\mu$ は液相と気相の値 $\mu_L$ と $\mu_G$ の間で次式に従って $\rho$ とともに変化する<sup>(18)</sup>.

$$\mu = \mu_G + \frac{\mu_L - \mu_G}{\rho_L - \rho_G} (\rho - \rho_G) \quad (16)$$

C-H式(15)の項 $S$ は $\eta$ の勾配による $\phi$ の変化を表す. 局所平衡状態( $S=0$ )の式(15)は, 界面追跡法における液相体積率やLevel Set関数の移流方程式と同型となる.

**3.2 計算方法と手順** 式(14)と(15)に対しては, 既存の離散化スキームと計算アルゴリズムを適用できる. 本研究では, スカラー・ベクトル各変数をスタガード状に配置し, 式(14)の対流項を河村・桑原スキーム<sup>(22)</sup>, 実効圧力 $P'$ の勾配を4次精度中心差分, 粘性項を2次精度中心差分で離散化した.  $P'$ と流速 $\mathbf{u}$ の計算には, Projection法とSOR法を用いた. 時間進行では, 次の順序で式(14), (15)各々に2段階Runge-Kutta法を適用し,  $\mathbf{u}$ と指標関数 $\phi$ を更新する.

- 1) 式(14)で, 現時刻 $t=n\Delta t$ の速度 $\mathbf{u}^n$ 等を用いて中間時刻 $t+\Delta t/2$ の速度 $\mathbf{u}^{n+1/2}$ を陽的に求める.
- 2) 式(15)で, 改良Euler法に従って,  $\mathbf{u}^n$ を用いて $t+\Delta t/2$ の指標関数 $\phi^{n+1/2}$ を求める.
- 3) 式(14)で, 修正Euler法に従って $\mathbf{u}^{n+1/2}$ および $\phi^{n+1/2}$ を用いて次の時刻 $t+\Delta t$ の $\mathbf{u}^{n+1}$ を求める.
- 4) 改良Euler法に従って, 式(15)で $\mathbf{u}^{n+1/2}$ および $\phi^{n+1/2}$ を用いて $t+\Delta t$ の $\phi^{n+1}$ を求める.

**3.3 Cahn-Hilliard方程式** 本研究では, 稲室らの二相流体LBM<sup>(17),(18)</sup>を参考にして, C-H式(15)の項 $S$ を $\phi$ の易動度 $\Gamma(>0)$ を用いて次のように定義する<sup>(23)</sup>.

$$S = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[ \Gamma \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left( U \delta_{\alpha\beta} + \kappa_2 \frac{\partial \phi}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \phi}{\partial x_\beta} \right) \right] \quad (17)$$

$$U = \phi \eta - \psi_2 - \frac{\kappa_2}{2} |\nabla \phi|^2 \quad (18)$$

その結果, 式(15)を以下のように整理できる.

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u} + \Gamma \mathbf{J}) = 0 \quad (19)$$

$$\mathbf{J} = -\phi \nabla \eta = -\zeta \nabla \phi + \kappa_2 \phi \nabla (\nabla^2 \phi) \quad (20)$$

$$\zeta = T(1-b\phi)^{-2} - 2a\phi \quad (21)$$

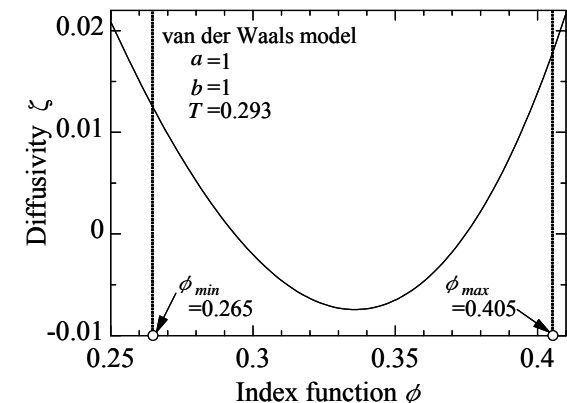


Fig.3 Negative diffusivity of index function  $\phi$ .

Fig.1 で示したように、係数 $\kappa_2$ が小さくなるにつれて界面は薄くなる<sup>(20)</sup>。これは、 $\phi$ の拡散性を支配する $\zeta$  (式(21))が界面の中心付近 ( $0.2935 < \phi < 0.3748$ ) で負の値を取るためである (図3)。それに対して、 $\kappa_2$ の項は界面中心付近で正の値を取り、界面を厚くする役割を持つ。PFM では、以上のような指標関数 $\phi$ に対する拡散調整機構によって界面の厚さを一定に保持する。

**3.4 界面の移流・再構成計算** 定式化した C-H 方程式(19)の界面追跡能力を検証するため、指標関数 $\phi$ の2次元非定常移流計算を実施した。(x,y)空間を幅1の正方形セルで一様に離散化し、直径  $d=32$  の円形状界面を  $x, y$  方向に一定速度  $u = v = 0.1$  で移動させた。時間幅 $\Delta t = 0.04$  より、Courant 数( $C=u\Delta t/\Delta x$ )は $4 \times 10^3$ である。系全体の $\phi$ の保存性は、以下の有限体積法に従う移流項の差分化によって確保している。

$$\frac{\partial F_{x,i}}{\partial x} \cong \frac{-F_{x,i+3/2} + 27(F_{x,i+1/2} - F_{x,i-1/2}) + F_{x,i-3/2}}{24\Delta x} \quad (22)$$

ここで添字 $i$ は $x$ 方向のセル番号であり、 $i$ 番セルの境界 $i+1/2$ 上の流束 $F_{x,i+1/2}$ は、流速 $\mathbf{u}$ と $\mathbf{J}$ による $\phi$ の $x$ 方向移動量の和を表す。境界 $i+1/2$ 上の $\phi$ は、近隣4セルの値を用いた以下の補間によって求めた。

$$\phi_{i+1/2} = \frac{1}{16} [9(\phi_{i+1} + \phi_i) - \phi_{x,i+2} - \phi_{x,i-1}] \quad (23)$$

また、式(20)右辺の3階微分の計算では、2階微分 $\nabla^2 \phi$ を4次精度中心差分で近似した上で、 $\nabla^2 \phi$ の1階微分に対して以下のような4次精度中心差分を適用した。

$$\frac{\partial \nabla^2 \phi_{i+1/2}}{\partial x} \cong \frac{-\nabla^2 \phi_{i+2} + 27(\nabla^2 \phi_{i+1} - \nabla^2 \phi_i) + \nabla^2 \phi_{i-1}}{24\Delta x} \quad (24)$$

式(22)~(24)以外にも様々な精度の補間や離散化のスキームの利用が考えられる。なお、本研究ではC-H式(19)の特徴の概説が第一目的であるため、ここでは精度や数値安定性に対する各種スキームの影響の詳細な検討については省略する。

図4は、(a)初期条件と無次元時刻 $t^*=6.25$ における(b) $\Gamma=1$ および(c) $\Gamma=0$ の場合の界面指標関数 $\phi(x,y)$ の計

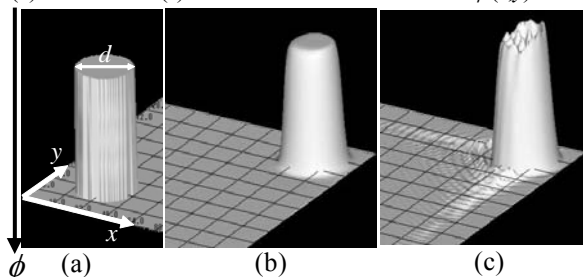


Fig.4 Two-dimensional transfer of circular-shaped interface. (a)Initial condition and the profile after transfer for (b)  $\Gamma = 1$  and (c)  $\Gamma = 0$ .

算結果である。(a)の円形領域には $\phi = \phi_{min}$ を与え、式(20)の $\mathbf{J}$ では $\kappa_2=0.04$ を用いた。(b)と(c)の比較から、 $\mathbf{J}$ は $\phi$ の数値的な振動や拡散を抑制する役割を果たし、界面厚さの維持に役立つことがわかる。また、円形領域内セル数 $N$ の初期値 $N_0$ に対する変化割合 $(N-N_0)/N_0$ の時系列データ (図5) より、初期面積が5%の誤差で保存されていることがわかる。図6に示すように、より高いCourant 数 $C = 1.25 \times 10^2, 2.5 \times 10^2$ でも、界面は $t^*=156.25$ まで直径 $d$ の円形状及び界面厚さを保持し( $\kappa_2=0.1, \Gamma=12$ ),  $C=5 \times 10^2, 10^1$ に対しても円形面積が $t^*=20$ まで $\pm 1\%$ の誤差で保存された (図7)。ただしここでは、円形領域内外の $\phi$ の初期値を $C = 4.0 \times 10^3$ の場合より小さい0.263および0.403と設定することで、

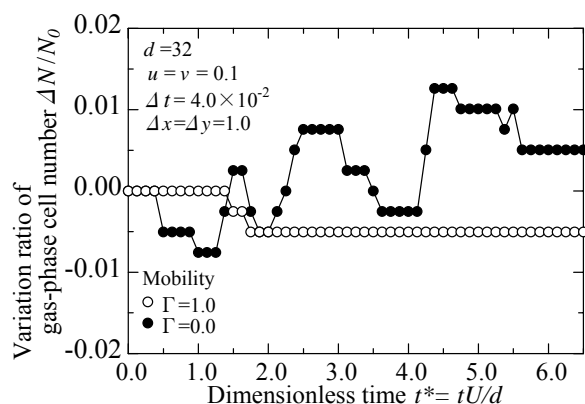


Fig.5 Volume conservation in 2D transfer simulation ( $C = 4 \times 10^3$ ).

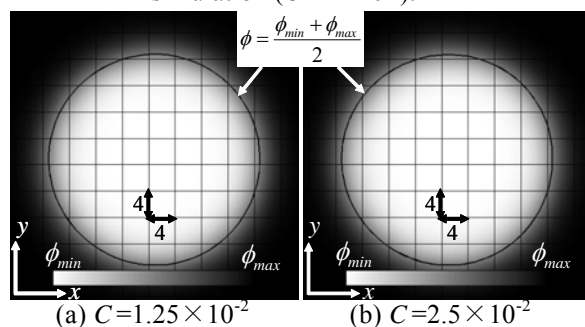


Fig.6 Interface profile drawn as a contour line of the index function  $\phi$  in 2D transfer simulation.

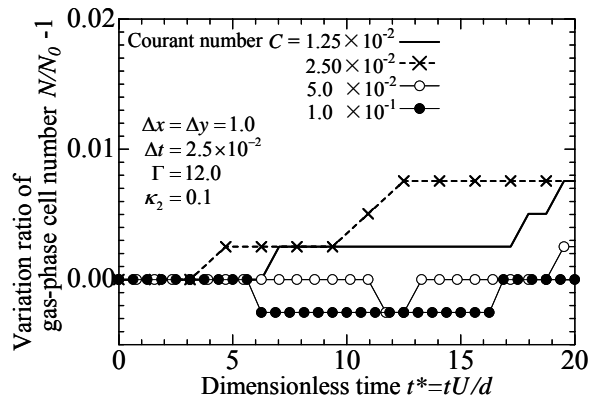


Fig.7 Volume conservation in 2D transfer simulation.



界面を含む全領域に渡って化学ポテンシャル $\eta$ のバランスをより精密に取り、界面曲率に依存した $\phi$ の局所的な流れの発生 (Gibbs-Thomson 効果<sup>(1)</sup>) を抑制した。

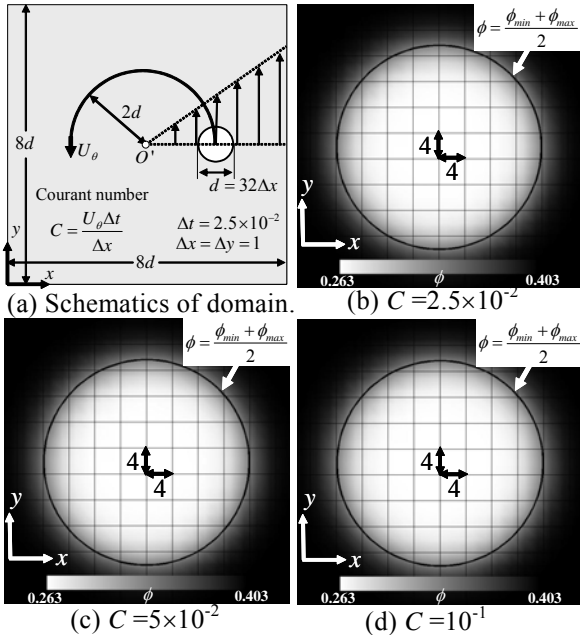


Fig.8 Interface profile drawn as a contour line of the index function  $\phi$  in 2D rotation simulation.

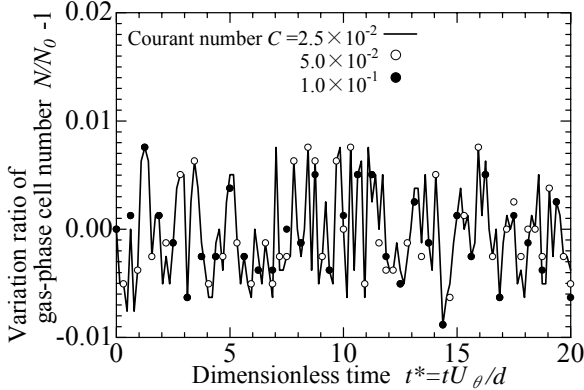


Fig.9 Volume conservation in 2D rotation in a circular vortex.

また、系全体を一定角速度で回転させる、非一様な流速分布に対する移流計算も実施した ( $\Delta t = 0.025$ ,  $\kappa_2 = 0.1$ ,  $\Gamma = 6$ )。図8に示すように、前出の結果同様、Courant数  $C = 2.5 \times 10^{-2}$ ,  $5 \times 10^{-2}$ ,  $10^{-1}$  で、界面の初期形状はほぼ一回転後の時刻  $t^* = 12.5$  においても保持され、円形面積も  $t^* = 20$  まで  $\pm 1\%$  の誤差で保存された (図9)。以上、定式化した C-H 式(19)により、各相の体積を保存しつつ界面の移流と界面形状再構成を高精度かつ数値的に安定して実現できることを確認した。なお、式(19)には既存の様々な離散化スキームと計算アルゴリズムを適用できるため、PFM は従来の界面追跡法と同等の計算精度と数値安定性を与えると考えられる。

式(19)による界面移流計算では、 $C$  以外に易動度 $\Gamma$ と係数 $\kappa_2$ が数値安定性に影響する。 $\Gamma$ については値の選

択に任意性があるが、図4から予想されるように、より大きな値が安定性と形状保存性を向上させる。本研究ではこれまで、(1) 時間刻み $\Delta t$ が小さければ $\Gamma$ をより大きく取ることができる、(2)  $\Gamma$ が大きすぎると逆に安定性が失われる、(3) その上限は界面の厚さ形状を決定する  $a, b, T$  および  $\kappa_2$  の値や系の状態 (速度場や相分布) に依存する、等を経験的に確認している。ここでは、任意の $\Gamma$ の値に対して上述のような C-H 式(19)による試験的な界面移流計算を反復実行し、その中から数値安定性を与える最も大きな値を選択した。一方、係数 $\kappa_2$ の値も大きくなれば、界面厚さが $\kappa_2^{0.5}$ に比例するため<sup>(1)</sup>、数値安定性は向上する反面、系全体の空間解像度を維持するにはより多くの空間メッシュが必要となる。また、一定の空間セル幅で $\kappa_2$ を小さくすると、界面厚さの減少とともに $\rho$ の勾配の計算誤差が増加するため、表面張力を精度良く評価できない。以上より、本 PFM 手法では、所定の空間セル幅の格子で界面領域の $\phi$ と $\rho$ の連続的かつ急激な変化を再現できる最小限の界面厚さが与えられるように、 $\kappa_2$ の値を図1および2に示す理論解を参照して決定した。

#### 4. 気液二相流体の数値シミュレーション

以下では、提案した手法の高密度比二相流計算への適用性を、2次元空間内の単一気泡および液滴の数値シミュレーションを通して検討する。対象は、常温・大気圧下の水-空気を模擬した密度比  $\rho_L / \rho_G = 801.7$  および粘性比  $\mu_L / \mu_G = 73.76$  の二相流体であり、計算領域を幅 $\Delta x = \Delta y = 1$ の正方形セルで一様に離散化する。また、 $\kappa_2 = 0.1$  および閾値 $\phi_c = 0.275$ ,  $\phi_l = 0.380$ を用いた結果、界面は約セル4~5個分の厚さを有した (図2)。

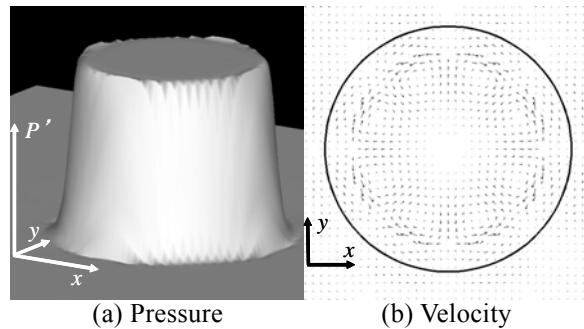


Fig.10 Neutrally-buoyant bubble in stagnant liquid.

##### 4.1 気液二相流中の圧力・速度の再現

まず、本解析手法が与える圧力と流速の特徴を調べるため、静止液中に浮遊する直径約 32 の気泡のシミュレーションを行った。計算結果の図10(a)に示すように、実効圧力 $P'$ は気泡内部で一様に上昇し、表面張力の効果が確認できる。一方、気泡内部の流速分布 (図(b)) は、圧力テンソル項の密度勾配の離散化によって生じるもの

で LBM でも観察されている<sup>(15)</sup>. ただし, この非物理的速度は非常に小さく, 流れ場全体に及ぼす影響は無視できる. なお, 非物理的速度は, 界面領域の空間解像度や差分スキームの改善によって低減できると考えられる.

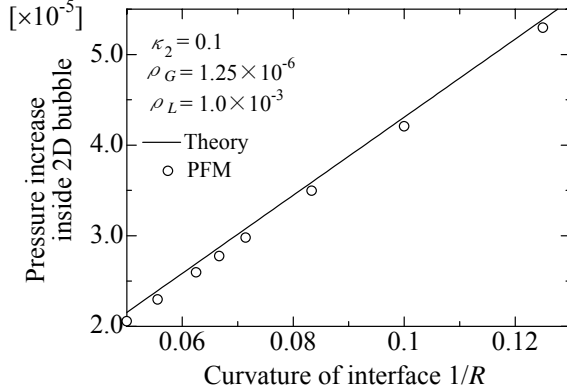


Fig.11 Pressure increase inside bubble neutrally-buoyant in stagnant liquid at  $\sigma=4.31 \times 10^{-4}$ ,  $\rho_L/\rho_G=801.7$ , and  $\mu_L/\mu_G=73.76$ .

**4.2 表面張力の検証** 次に, 表面張力による圧力上昇が正しく求められているか否かを確認するために, 静止液中に浮かぶ半径  $R$  の気泡内の圧力上昇値  $\Delta P$  を,  $\rho_L=1.0 \times 10^{-3}$ ,  $\kappa_1=1.71 \times 10^3$ ,  $\sigma=4.31 \times 10^{-4}$  の条件で計算した. 図 11 に示すように, 計算結果 (白丸) は,  $\sigma$  の定義式(11)と Laplace 則  $\Delta P=\sigma/R$  に基づく予測値 (実線) とほぼ一致しており, 運動方程式(14)により表面張力の影響が適切に求められていることを確認できた.

**4.3 液滴落下シミュレーション** 本節では, 重力下で気相中を自由落下する 2 次元単一液滴の数値シミュレーション結果を述べる.

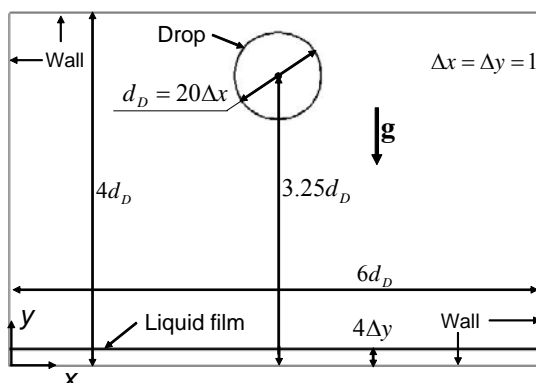


Fig.12 Schematic of 2D computational domain.

図 12 に示すように, 直径  $d_D=20\Delta x$  の水滴を含む計算領域は, 幅  $6d_D$ , 高さ  $4d_D$  で, 静止した平坦な固体壁で囲まれている. 初期条件では, 下壁の表面を厚さ  $4\Delta y$  の液膜で覆い, 液滴の体積中心をその上方  $y=3.25d_D$  に置いた. 重力  $g_y=-2.0 \times 10^2$  は液相にのみ加えた.

この系のモルトン数  $M$  は  $1.52 \times 10^{-12}$ , エトベス数  $Eo$

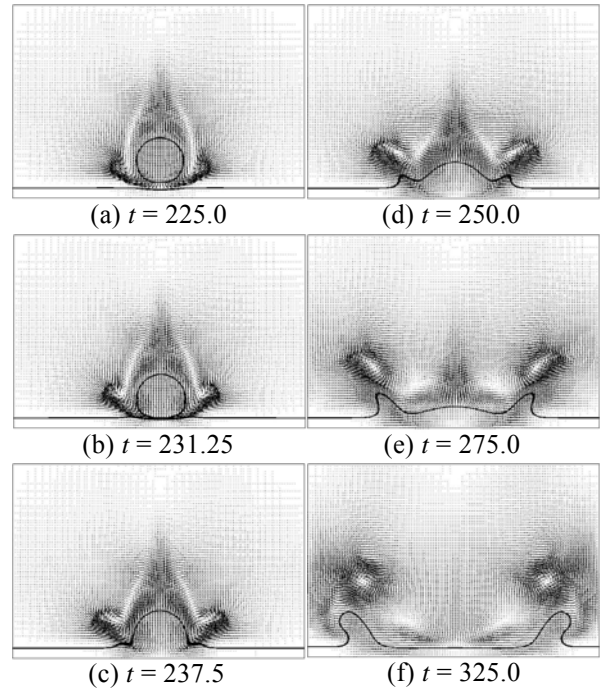


Fig.13 Time series of snapshot of velocity field and interface of 2D drop and liquid film under gravity for  $M=1.52 \times 10^{-12}$  and  $Eo=13.2$ .

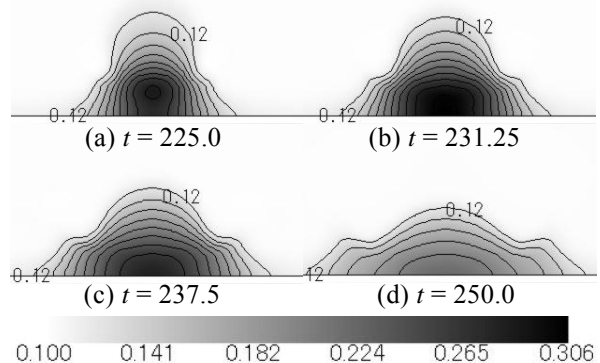


Fig.14 Snapshots of pressure field of 2D drop and liquid film in gas under gravity.

は 13.2, 通常重力場内水空気系における直径 10mm の水滴落下とはほぼ等価な計算条件となっている. 主な計算パラメータの値は以下の通りである:  $\rho_L=1.0$ ,  $\mu_L=1.67 \times 10^{-3}$ ,  $\sigma=6.06 \times 10^{-2}$ ,  $\Delta t=1.25 \times 10^{-2}$ ,  $\Gamma=12.0$ ,  $\kappa_1=0.240$ . 固体壁境界上では, 接線方向の速度に滑り無し, 法線方向に関しては速度 0, 圧力と関数  $\phi$  に関しては勾配無しの条件を与えた.

図 13 に各時刻における速度分布と界面形状の計算結果を示す. 液滴は, 落下開始後  $t=231.25$  (図(b)) で液膜表面に接触し,  $t=237.5$  (図(c)) において既に液膜と衝突している. 液滴と膜の間に挟まれた気相は, 衝突直前(a), (b)に液滴の周囲へ急速に排出され, 液膜上を伝播する波と, 気相中を上昇する渦が生じた.

図 14 に, 図 10 の時刻(a)~(d)における圧力の空間分



布を示す。等高線は、0.02 刻みの値で描かれている。最大圧力位置は、衝突直前 (a) では液滴と液膜の間にあるが、衝突後 (b) には壁面上へと移る。(c) から (d) へ衝突過程が進展するに従って全体的に圧力は急減した。時刻 (b) における最大圧力と最小圧力の差は 0.206 であり、水・空気系での値に換算すると  $5.05 \times 10^2 \text{ Pa}$ 、大気圧の約 0.8% に相当する。

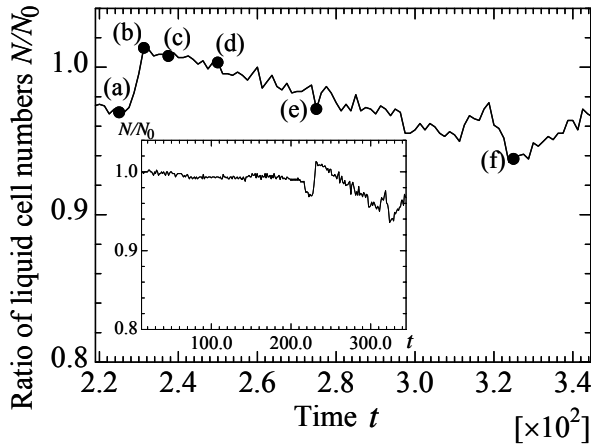


Fig. 15 Time series of liquid phase volume in 2D drop simulation.

次に、体積保存性を、 $\phi < (\phi_{min} + \phi_{max})/2$  の領域に入るセル数  $N$  の初期値  $N_0$  に対する割合によって評価した。その時系列データ (図 15) に見られるように、セル数  $N$  は液滴が気相中を落下する間はほぼ一定であるが、衝突前 (a), (b) の短時間に約 -2%, +1% の幅で変動した。液滴と液膜の衝突後、 $N$  は時刻 (f) まで一定の割合で減少を続け、最大で約 -6% の変化が確認された。有限体積法に基づく C-H 式 (19) の離散化によって、関数  $\phi$  は系全体では完全に保存されるが、数セル分の厚さを持つ界面が変形するとその分だけ特定の閾値で識別される領域の面積は変化する。また、3.4 で指摘した Gibbs-Thomson 効果<sup>(1)</sup> による  $\phi$  の局所的な流れも、セル数  $N$  の変化の一因と考えられる。しかしながら、 $N$  の変化は通常の界面追跡法に比べれば小さく、提案した数値解析手法は高密度比二相流の計算に活用できると考えられる。また、界面厚さの係数  $\kappa_2$  や易動度  $\Gamma$  をより小さく設定することにより、体積変動の低減は可能である。

本シミュレーションは、Intel 社製 CPU の 1GHz 版 Pentium M プロセッサと Microsoft 社製 OS の Windows XP を搭載したパーソナルコンピュータ上で実施し、図 10(f) の時刻までに 26,000 タイムステップ、約 40 分の計算時間を要したことを付記しておく。

## 5. 結 言

本研究では、自由エネルギー理論に基づき二相流体

界面をモデル化する Phase-Field Model (PFM) において Cahn-Hilliard (C-H) 方程式の界面追跡機能の特徴を明らかにするとともに、既存の PFM 手法<sup>(1)(2)</sup> と稲室らの格子ボルツマン法 (LBM)<sup>(17)(18)</sup> を参考にして、PFM とナビエ・ストークス式を融合した高密度比二相流の数値シミュレーション法を提案した。その能力を検討するため、2 次元空間における界面移流問題および重力下の高密度比二相流問題のシミュレーションを実施し、以下の知見を得た。

- (1) 本研究で定式化した C-H 方程式は、非平衡場の瞬時局所的な化学ポテンシャルバランスを計算することによって、体積保存性の良い界面の移流と形状再構成を実現する。
- (2) 自由エネルギーから導出される圧力テンソルを組み込んだ二相流体の運動方程式は、界面自由エネルギーとして定義される表面張力を適切に再現する。
- (3) 本手法による二相界面計算結果には、LBM 同様、密度勾配の離散化に伴う非物理的速度が現れるが、これは流れ場全体にはほとんど影響を与えない。
- (4) 気相中を自由落下する液滴と静止液膜の衝突の計算において、界面の移流、合一・変形、速度場および圧力場に関して定性的に妥当な結果が得られた。
- (5) 本手法は密度比約 800 の二相流の数値シミュレーションを安定に実施できる。

以上より、提案した手法は、水-空気系のような高密度比二相流の計算能力を備えていること、ならびに Phase-Field Model が界面追跡手法に有用であり、既存の二相流 CFD 技術と融合可能であることを確認した。なお、本手法には種々の離散化スキームや計算アルゴリズムを適用できるため、計算対象の形状や任意の座標系への拡張、時間・空間精度、数値安定性等に関する種々の要求にも柔軟に対応できる。また、C-H 方程式に対しては、van der Waals Model<sup>(10)</sup> 以外にも double-well な形式の自由エネルギー関数を適用できる。

## 文 献

- (1) Jacqmin, D., J. Comput. Phys., **155** (1999), 96-127.
- (2) Jamet, D., Lebaigue, O., Coutris, N. and Delhay, J.M., J. Comput. Phys., **169** (2001), 624-651.
- (3) Anderson, D.M., McFadden, G.B., and Wheeler, A.A., Annu. Rev. Fluid Mech., **30** (1998), 139-165.
- (4) Bi, Z., and Sekerka, R. F., Physica, A **261** (1998), 95-106.
- (5) 森田裕史, 川勝年洋, 土井正男, 高分子論文集, **56-10** (1999), 674-683.
- (6) Cahn, J. W., and Hilliard, J. E., J. Chem. Phys., **28** (1958), 258-267.

- (7) Bray, A. J., *Adv. Phys.*, **43** (1994), 357-459.
- (8) Hirt, C.W., and Nichols, B.D., *J. Comput. Phys.*, **39** (1981), 201-225.
- (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-」(2002), 150-177, コロナ社
- (10) Brackbill, J.U., Kothe, D.B. and Zemach, C., *J. Comput. Phys.*, **100** (1992), 335-354.
- (11) Ashgriz, N. and Poo, J.Y., *J. Comput. Phys.*, **93** (1991), 449-468.
- (12) 功刀資章, *機論 B*, **63**-609 (1997), 1567-1584.
- (13) Yabe, T., Ishikawa, T., Wang, P.Y., Aoki, T., Kadota, Y. and Ikeda, F., *Comput. Phys. Commun.*, **66** (1991), 233-242.
- (14) Succi, S., "The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond" (2001), Oxford at the Clarendon Press.
- (15) Chen, S. and Doolen, G.D., *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **30** (1998), 329-364.
- (16) Swift, M. R., Osborn W. R., and Yeomans, J. M., *Phys. Rev. Lett.*, **75** (1995), 830-833.
- (17) Inamuro, T., Tomita, R. and Ogino, F., *Int. J. Modern Phys. B*, **17** (2003), 21-26.
- (18) Inamuro, T., Ogata, T., Tajima, S., and Konishi, N., *J. Comput. Phys.*, **198** (2004), 628-644.
- (19) Chen, Y., Teng, S. and Ohashi, H., *Proc. 3rd Organized Multiphase Flow Forum '99*, Yokohama, Japan, Dec. 2-3 (1999), 58-64.
- (20) Takada, N., Tomiyama, A., and Hosokawa, S., *Computational Fluid Dynamics JOURNAL*, **12** (2003), 475-481.
- (21) 瀬田剛, 高橋亮一, 奥井健一, 竹越栄俊, *機論 B*, **68**-672 (2002), 2186-2194.
- (22) Kawamura, T., and Kuwahara, K., *AIAA Paper* (1984), 84-0340.
- (23) 高田尚樹, 第17回数値流体力学シンポジウム講演論文集 (2003), 論文番号 PB9-4.
-