

凝固のある流れの数値シミュレーション

東大工学部 高橋 大輔
(Daisuke Takahashi)

東大工学部 高見 穎郎
(Hideo Takami)

§ 1 序論

流体が運動しつつ凝固する、もしくは、固体が融解して液体になり流れを生じるといふ現象は、現実のさまざまな状況のもとで現れる。例えば、低温下のパイプ中の流れ、溶鉱炉の製鉄プロセス、プラスチックや金属の成形加工、川や湖の凍結などである。しかしながら、この種の問題を具体的に解く際に、液体-固体の境界の時間的な変化とともに、両者の運動を求めなければならないという複雑な状況に出会う。これに対する解析的計算は、数多く試みられている。しかし、^{1)~12)}そこでは流れの様子や固相の形を仮定したものが多く、特に非定常問題をとくことは非常に難しい。また実験によるシミュレーションも、相転移を伴う温度場の測

定など、難しいものを含んでおり、満足な情報を引き出すことが、困難である。

そこで、現実的な解法として可能なものに、計算機を用いた数値計算による近似解法が挙げられる。これも従来、二次元以上の非定常問題を解いた例は殆どないが、最近の計算機の発達にともない、それも可能なものとなりつつある。

そこで、ここでは、流体が二次元的に自由表面をもって運動しながら凝固していく様子を、差分法による数値解法を用いて、金属テープの製造という具体的な状況に即して解いた例を報告する。

§ 2 基礎方程式及び境界条件

凝固には大きくわけて、結晶転移とガラス転移の二つの過程が存在する。両過程における温度 (T) と内部エネルギー (I)、及び温度と動粘性係数 (ν) の大まかな関係を、図 1 のグラフで示す。液相から固相に転移する際、結晶転移は、凝固点 (T_s) で潜熱を放出し、各物理量が不連続に変化して、固相領域はほとんど固体壁と同様に取り扱えるのに対し、ガラス転移は、連続的にガラス状態に移行し、動粘性係数が急

激に増大し、非ニュートン性が現れてくる。しかし、凝固点付近で急激に固体のふるまいに近付くため、ここでは結晶転移と同様、凝固点で固体の壁として液体の運動の境界条件に組み込むことにする。そして以下ではすべて結晶転移の場合に即して説明する。

1. 運動方程式

固相領域は与えられた速度で一様並進運動すると仮定する。

液相領域に対しては、非圧縮の連続方程式(1)とナビエ-ストークス方程式(2)が適用される。

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right) + G_i \quad (2)$$

ここで G_i は重力であり、 ν は内部エネルギー(もしくは温度)に依存、従って位置に依存する。上の(2)式をMAC法に従って発散をとり、圧力に関するポアソン方程式(3)を得る。¹³⁾

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial^2 P}{\partial x_i^2} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\nu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \right) \right] \quad (3)$$

この(3)式を用いて各時間ステップの圧力を求め、それを元に(2)式を解いて次の時間ステップの速度ベクトルを求めればよい。

また(2)、(3)式から差分方程式を作る際、数値的安定性を得るために、(2)式の対流項(左辺第2項)は一階の上流差分を用いる。(4)式、x成分のみ)

$$\frac{U_{i,j}^n + |U_{i,j}^n| U_{i,j}^n - U_{i-1,j}^n}{2 \Delta x} + \frac{U_{i,j}^n - |U_{i,j}^n| U_{i+1,j}^n - U_{i,j}^n}{2 \Delta x} \quad (4)$$

($U = U_x$ 、 $V = U_y$ とし、添字 i 、 j は空間メッシュの番号を示し、 n は時間ステップを示す。)

そして粘性項(右辺第2項)は、陰のオイラー・スキームを用いた。(5)式、x成分のみ)

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(2\nu \frac{\partial U^{n+1}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu \left(\frac{\partial U^{n+1}}{\partial y} + \frac{\partial V^{n+1}}{\partial x} \right) \right) \quad (5)$$

(2)、(3)式の他の項の空間微分は通常 of 3 点中心差分を用い、時間微分の項は、例えば、 $(U^{n+1} - U^n) / \Delta t$ のように差分化した。

2. 熱伝導方程式

以上のようにして構成された差分方程式は、内部エ

エネルギーの空間分布を求めて動粘性係数を求め、液相の固体壁境界としての固相領域を求めることが必要となる。そこで次に熱伝導方程式(6)を以下に示す。

$$\frac{\partial I}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla I = \frac{k}{\rho} \Delta T + \nu \Phi \quad (6)$$

$$\Phi = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right)^2 \quad (7)$$

ここで I は内部エネルギー、 k は熱伝導係数(一定と仮定)、 T は温度、 Φ は粘性散逸である。この(6)式は液相、固相領域全体に適用されるが、速度場が求まったときに、図1の内部エネルギーと温度の関係を用いて解くことができる。この表式を用いた理由は以下の通りである。

まずこの表式の別の表現として温度だけを未知変数にし、液相、固相領域全体に適用した(8)式がある。

$$\frac{\partial(cT)}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla(cT) = \frac{k}{\rho} \Delta T + \nu \Phi + J \quad (8)$$

ここで c は比熱、 J は潜熱項である。ところがこの潜熱項 J は、固液境界に現れるが、位置及び時間に依存しており、上の方程式から一意に決定することができない。

またもう一つのアプローチとして、(9)、(10)式のように固相領域と液相領域とを分けて解く方

法がある。

$$\frac{\partial(C_S T_S)}{\partial t} + U_S \cdot \nabla(C_S T_S) = \frac{k_S}{\rho} \Delta T_S \quad (9)$$

$$\frac{\partial(C_L T_L)}{\partial t} + U_L \cdot \nabla(C_L T_L) = \frac{k_L}{\rho} \Delta T_L + \nu \Phi_L \quad (10)$$

$$k_S \nabla T_S - k_L \nabla T_L = \rho Q \nu \quad (11)$$

ここで、S、Lは固相、液相の物理量を示す添字であり、(9)、(10)式はそれぞれ固相及び液相にのみ適用される。また、 Q は単位質量当たりの潜熱、 ν は固液境界の移動速度である。ある時間ステップの温度場及び固液境界の形が分かっているときに(11)式より次の時間ステップの固液境界の形が求まり、その境界を用いて(9)、(10)式より次の時間ステップの温度場が求まる。しかし、その際には計算の過程において固液境界の形を常に認識せねばならず、また、その境界の形に沿った格子を作る必要が生じ、境界が入り組んだ形の場合、大きな困難となる。

そこでここでは、空間的に固定された格子を用いているため、(6)、(7)の表式を用いた。ただ、この場合でも、固液境界のところで内部エネルギーは空

間的にステップ状になっており、厳密に解くにはやはり境界を認識する必要がある。しかし、そこでの誤差がそれほど大きく影響しなければ境界を考えずに解けるという点で、容易に数値計算に組み込むことができる。また、液体の運動方程式(1)~(3)を解く際に液相領域を決める必要があるが、各格子の中心での内部エネルギーの値を図1の I_s の値と比較して、各格子毎に液相か固相かを判断して液相領域を決定する。

(6)、(7)式の差分化も、前の(2)、(3)式と同様に安定性をはかるため、対流項に上流差分を用い、拡散項を陰のオイラー・スキームで差分化した。

3. 境界条件

境界として自由表面をもつ部分と、壁に接している部分がある。液相の運動方程式(1)~(3)の境界条件はMAC法で用いられている自由表面境界条件、及び壁境界条件を用いる。^{13)~18)}ただし、自由表面では、表面張力による外部圧力との差のみを考慮して圧力を決定し、速度は内部の液体の速度から補外を行った。また自由表面の形、及び液相固相領域を決定するため速度場に従って動く仮想的なマーカー粒子を置いた。

熱伝導方程式(6)、(7)の境界条件としては、自由表面、通常の壁、及び冷却壁があるが、自由表面と通常の壁では、熱が外に漏れないと仮定し、そこでの内部エネルギーを内部領域での値と同じにした。また、冷却壁では熱伝達過程によって熱が奪われていくとして、(12)式を適用した。

$$q = -h(T - T_w) \quad (12)$$

ここで q は冷却壁上で生じる熱流、 h は熱伝達係数、 T_w は冷却壁温度、 T は冷却壁に接している液体及び固体の温度である。

§ 3 計算結果と検討

問題としては、図2のような状況を考える。上の壁に囲まれた入り口から、温度が一様に T_{in} である液体が圧力 P_{in} で鉛直下向きに押し出されてくる。そして下の方で、温度が T_w で右方向に一定速度 U_w で動いている冷却壁にぶつかる。すると液体は冷やされ、固体になって冷却壁と同じ速度で移動し、右の方から薄いテープ状となって出て行く。左下にあるフリースリップの壁は、問題を簡単にするために仮定的に付け

たものである。

上の状況は、現実の金属テープを作成する様子を意識したもので、各パラメータ値は具体的な値を与えている。(表1)

なおこの際、作成されるテープが非常に薄くなるため、差分方程式を解く際には、鉛直方向に変数変換を行っており、図3に物理面と計算面の鉛直方向成分の対応を示す。以下で示される図はすべて計算面で描かれたもので、実際の状況では各図の下の方ほど圧縮されている。また水平方向の格子は等間隔に切っており、全体として鉛直×水平=20×120の格子を用いた。さらに格子はスタaggerド・メッシュを用い、各物理量の配置は図4のようになっている。

図5～図9が計算結果である。図5～図7がガラス転移の場合で、図5が自由表面及び固液領域の時間的变化を、図6が等圧力線、等温度線、速度ベクトルを描いたものである。ただし速度ベクトルは計算面で描かれており、実際には下の方の速度ベクトルの鉛直成分はこの図の1/20程度である。

この図を見て顕著なことは、等圧力線が固液境界(ただし固相領域は、前にも述べたように仮想的なも

のである。)で集中しており、高い圧力勾配の存在を示している。またそのために速度に乱れが生じ、自由表面も乱れている。このことは、固体部分が速い速度で移動するので、液体が追従するために圧力勾配が生じたと解釈される。ただかなり大きな勾配のため、数値計算において誤差が生じるように思われる。

また図7は、作成された金属テープの自由表面側での様子を描いたもので、上の二つが計算により得られたもの、下の二つが実験により得られたものである。ただしテープの厚みは数十パーセント食い違っている。この両者を比較すると、大体の傾向は合っているように見える。

また図8～図9は、結晶転移の場合の計算結果である。これは対応する実験データが現在のところ無いので、ガラス転移と比較するにとどめる。両転移で大きく異なるのは、固相、液相領域の形である。結晶転移の場合、潜熱を放出しなければ凝固しないため、ガラス転移と比べて固相の割合が少なくなっている。また、固液境界付近で同じように高い圧力勾配が発生している。

以上の計算では、冷却壁の速度がかなり高く、その

ためレイノルズ数が1000のオーダー以上の計算となっている。従って、液相が固相に追従するために固液境界付近で誤差が少し生じているが、もっと低いレイノルズ数では、精度の良い近似計算を行えることが予想される。

§ 4 まとめ

この研究では流体が自由表面をもちながら凝固していく二次元非定常の計算を行い、固定された長方形格子でも大体の様子をシミュレートすることができた。ただその際、固液境界付近では、固相に追従するために液相に大きな圧力勾配が生じることがわかった。この領域での計算を精度良く行うためには、§ 2でも触れたようにもっと滑らかに固液境界を近似するグリッド・ジェネレーションやアダプティブ・グリッドのような手法が必要であると予想される。

参考文献

1. M.Epstein and F.B.Cheung, Complex Freezing-Melting Interfaces in Fluid Flow, Ann. Rev. Fluid Mech. 15(1983),293.
2. W.D.Murray and F.Landis, Numerical and Machine Solutions of Transient Heat-Conduction Problems Involving Melting or Freezing, J. Heat Transfer 81(1959),106.
3. W.L.Heitz and J.W.Westwater, Extension of the Numerical Method for Melting and Freezing Problems, Int. J. Heat Mass Transfer 13(1970),1371.
4. J.C.Muehlbauer and J.E.Sunderland, Heat Conduction with Freezing or Melting, Appl. Mech. Rev. 18(1965),951.
5. J.M.Savino and R.Siegel, Experimental and Analytical Study of the Transient Solidification of a Warm Liquid Flowing over a Chilled Flat Plate, NASA Technical Note TN D-4015(1967)
6. M.Epstein and D.H.Cho, Melting Heat Transfer in Steady Laminar Flow over a Flat Plate, J. Heat Transfer 98(1976),531.
7. R.D.Zerkle and J.E.Sunderland, The Effect of Liquid Solidification in a Tube Upon Laminar-Flow Heat Transfer and Pressure Drop, J. Heat Transfer 90(1968),183.
8. G.J.Hwang and J.Sheu, Liquid Solidification in Combined Hydrodynamic and Thermal Entrance Region of a Circular Tube, Can. J. Chem. Eng. 54(1976),66.
9. J.C.Mulligan and D.D.Jones, Experiments on Heat Transfer and Pressure Drop in a Horizontal Tube with Internal Solidification, Int. J. Heat Mass Transfer 19(1976),213.
10. J.A.Bilenas and L.M.Jiji, Variational Solution of Axisymmetric Fluid Flow in Tubes with Surface Solidification, J. Franklin Inst. 289(1970),265.
11. E.P.Martinez and R.T.Beaubouef, Transient Freezing in Laminar Tube-Flow, Can. J. Chem. Eng. 50(1972),445.
12. M.N.Ozisik and J.C.Mulligan, Transient Freezing of Liquids in Forced Flow Inside Circular Tubes, J. Heat Transfer 91(1969),385.

13. F.H.Harlow and J.E.Welch, Numerical Calculation of Time Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface, *Phys. Fluids* **8**(1965),2182.
14. C.W.Hirt and J.P.Shannon, Free-Surface Stress Conditions for Incompressible-Flow Calculations, *J. Comput. Phys.* **2**(1968),403.
15. B.J.Dary, A Technique for Including Surface Tension Effects in Hydrodynamic Calculations, *J. Comput. Phys.* **4**(1969),97.
16. R.K.Chan and R.L.Street, A Computer Study of Finite Amplitude Water Waves, *J. Comput. Phys.* **6**(1970),68.
17. B.D.Nichols and C.W.Hirt, Improved Free Surface Boundary Conditions for Numerical Incompressible-Flow Calculations, *J. Comput. Phys.* **8**(1971),434.
18. C.W.Hirt and J.L.Cook, Calculating Three-Dimensional Flows around Structures and over Rough Terrain, *J. Comput. Phys.* **10**(1972),324.

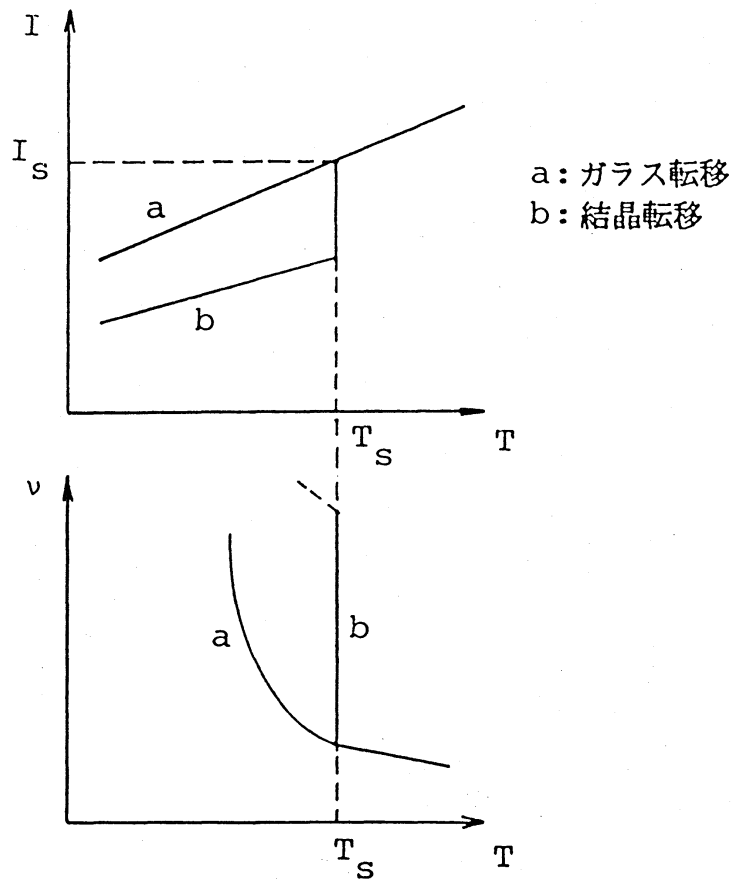


図1 内部エネルギー、動粘性係数の温度依存性

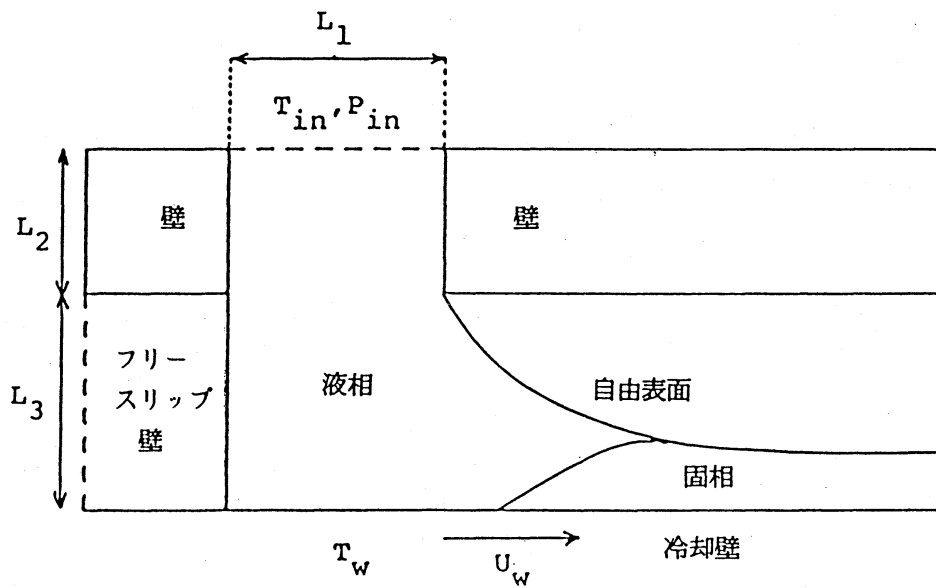


図2 問題の概念図

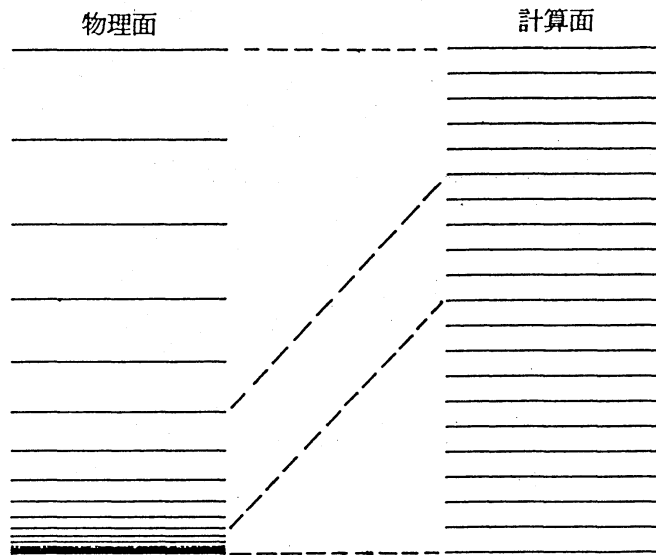


図3 鉛直方向変数変換

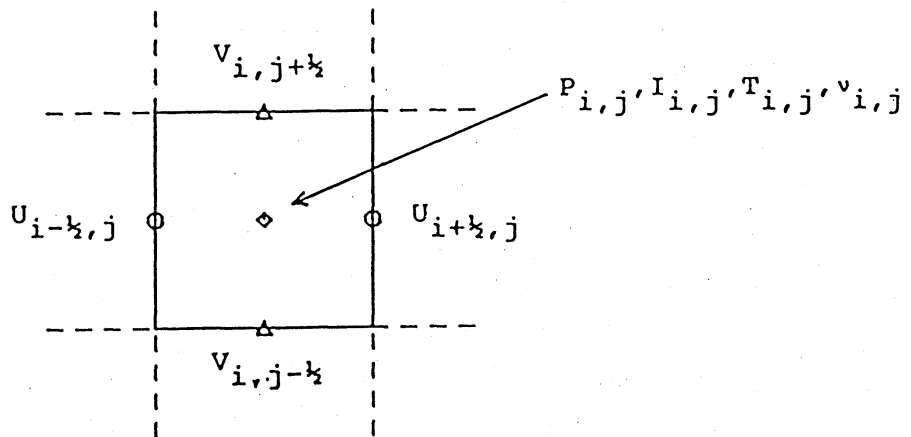


図4 格子における物理変数の配置

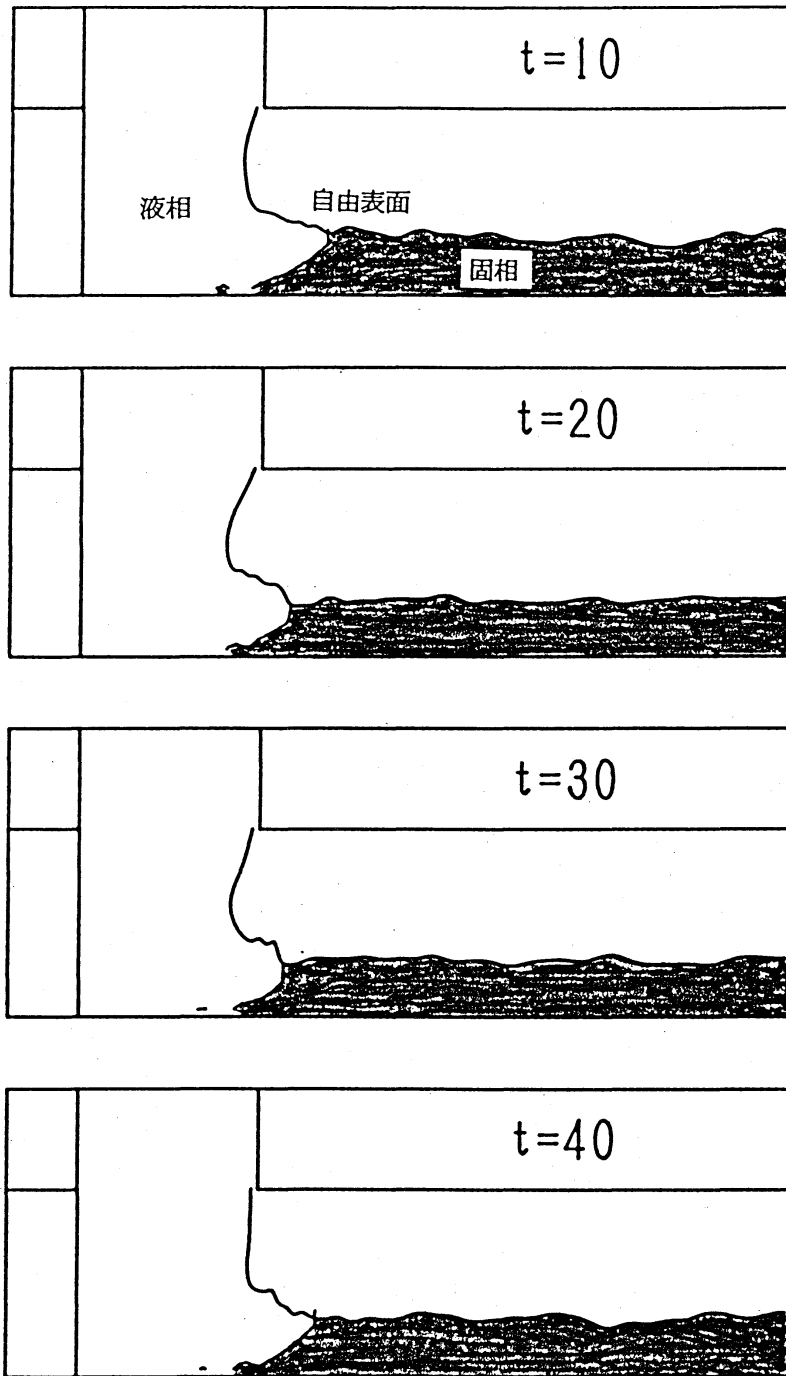


図5 自由表面と固液領域の時間変化（ガラス転移）

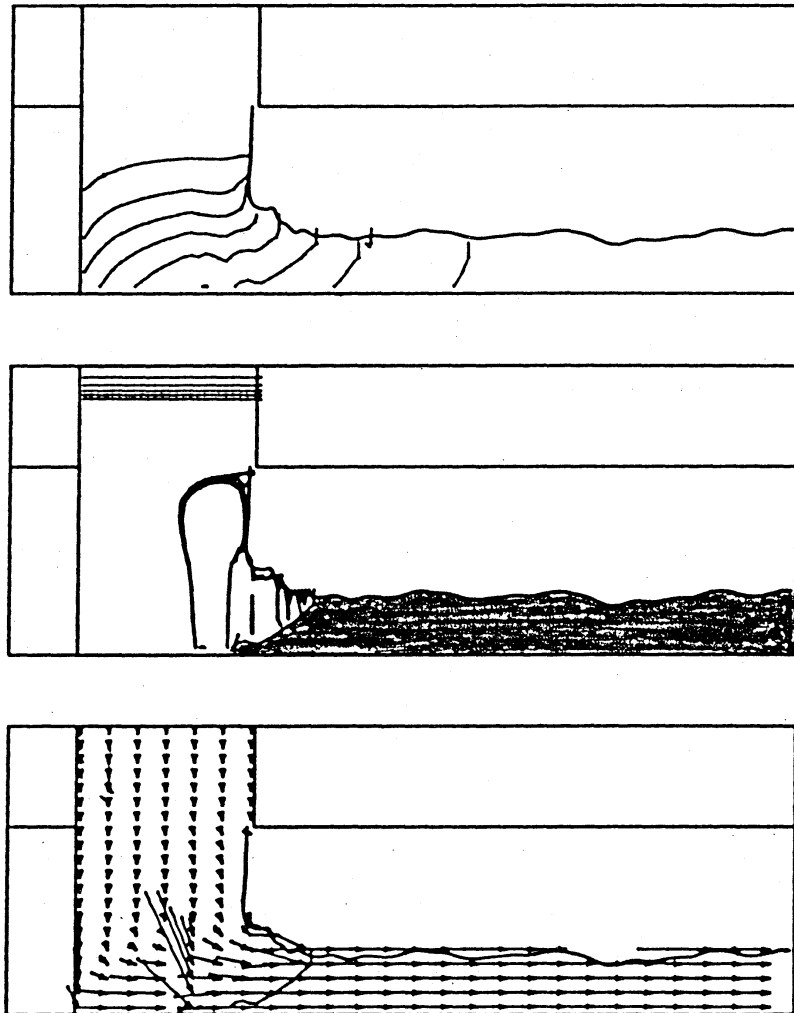
 $t=40$

図6 上から等温線、等圧線、速度ベクトル図（ガラス転移）

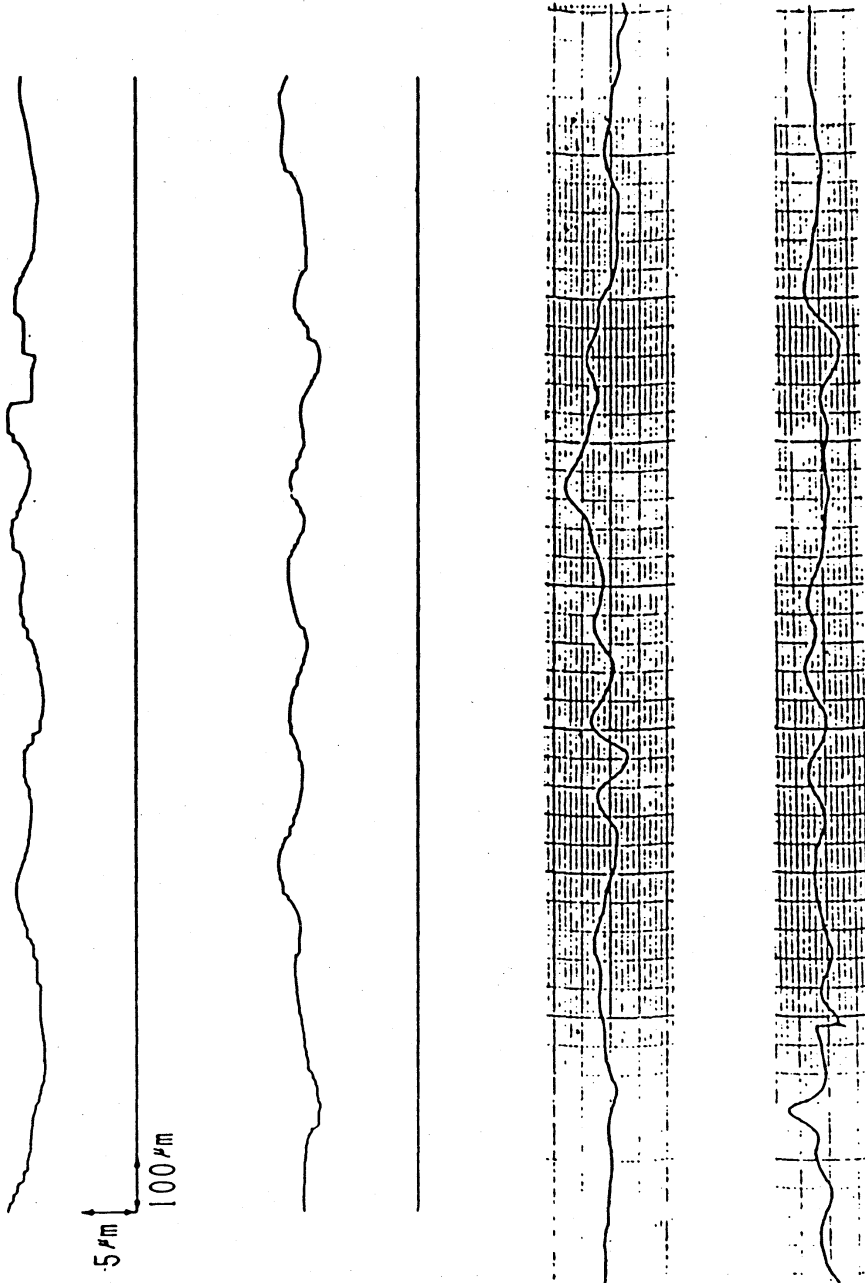


図7 生成された金属テープの表面形状
上の2つが計算、下の2つが実験

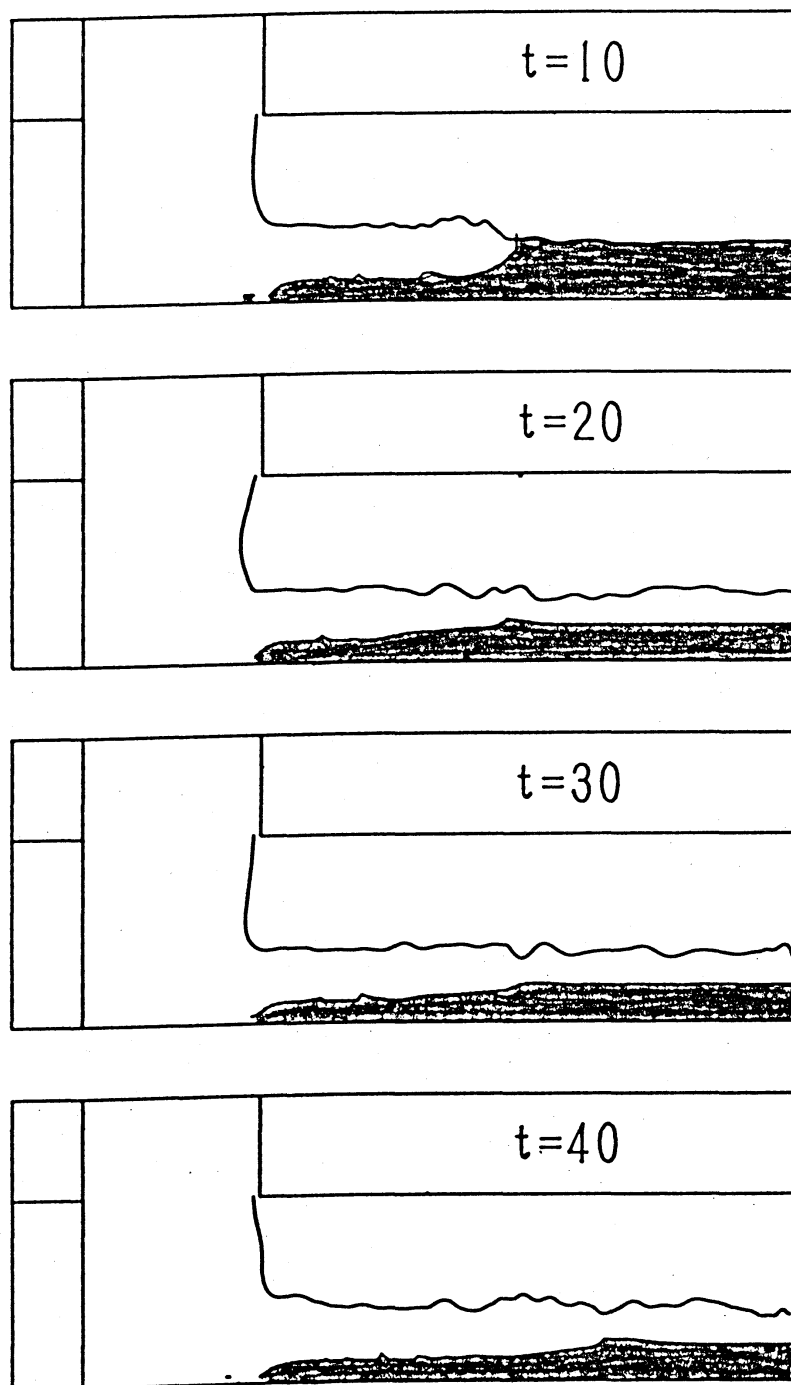
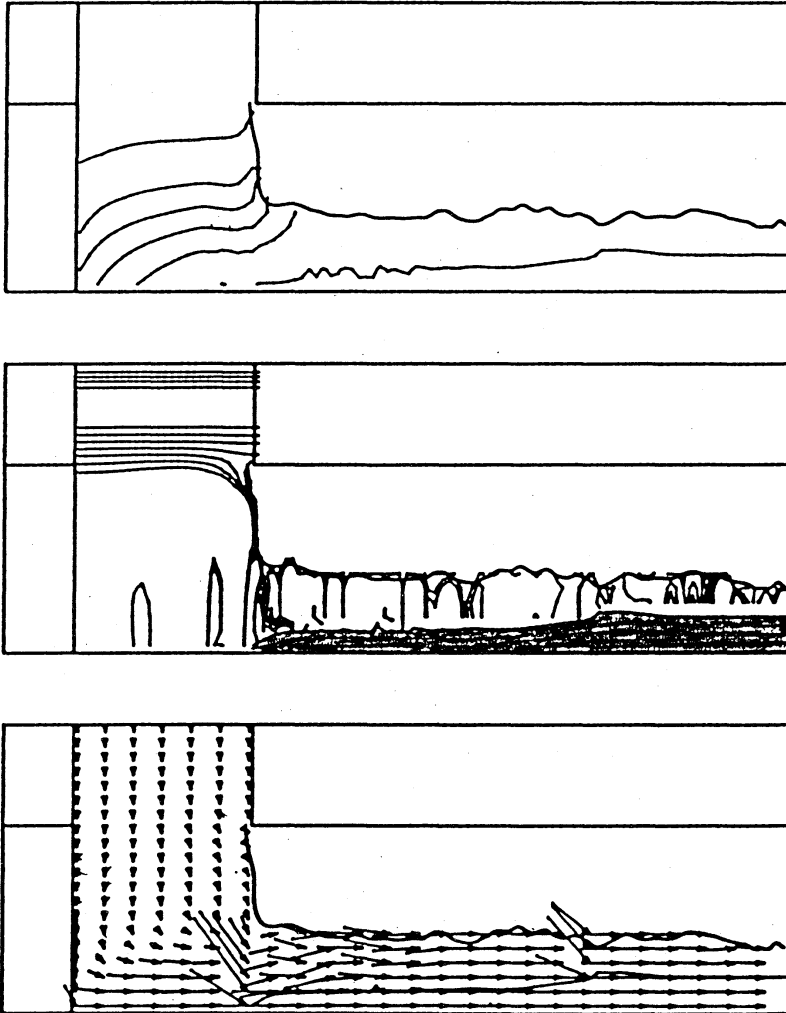


図8 自由表面と固液領域の時間変化（結晶転移）



$t=40$

図9 上から等温線、等圧線、速度ベクトル図（結晶転移）

			dimensionless
ρ	7	(g)	-
γ	1700	(dyn/cm)	7.8×10^{-4}
k	0.06	(cal/s.cm.°C)	4.6×10^{-2}
h	1.67	(cal/s.cm ² .°C)	6.4×10^{-2}
G_x	0	(cm/s ²)	0
G_y	-1000	(cm/s ²)	-8.0×10^{-6}
P_{in}	7×10^4	(dyn/cm ²)	1.6×10^{-3}
T_{in}	1170	(°C)	1
T_w	200	(°C)	-18.4
U_w	2.5×10^3	(cm/s)	1
L_1	0.05	(cm)	1
L_2	0.17	(cm)	3.4
L_3	0.03	(cm)	0.6

表1 各パラメータの値