数理解析研究所講究録
第 744 巻 1991 年 100-111

凝固現象における自由境界問題の数値解析

花田孝郎（電気通信大学情報工学）
今井仁司（筑波大学電子情報工学）
名取 亮（筑波大学電子情報工学）
河原田秀夫（千葉大学工学）

凝固現象を表現する 2 相 Stefan 問題において相転移に伴う体積変化を考慮に入れた数理モデルを提案する．円柱形状の空間領域 G において，そのモデルに基づいたシミュレーションについて数理解析を行う．

1 凝固問題の定式

未知変数は温度 θ, 流速 $\boldsymbol{u}$, 圧力 p, および自由境界と自由表面の規定関数 Φ, Φ^+ である．基準の長さ L, 速度 U, 温度Θにより変数変換

$$\text{時間}\, t=\frac{L}{U}\bar{t},\ \text{座標}\, x=L\bar{x},$$
$$\theta=\Theta\bar{\theta}, \boldsymbol{u}=U\bar{\boldsymbol{u}}, p=\rho U^2\bar{p}\ (\rho\text{は密度}), \Phi=L\bar{\Phi},$$
$$\text{平均曲率}\, H=\frac{1}{L}\bar{H}, \text{応力テンソル}\boldsymbol{\sigma}=\frac{\eta U}{L}\bar{\boldsymbol{\sigma}},$$
$$Re=\frac{\rho LU}{\eta}(\eta\text{は粘性係数}), \text{潜熱}\, \ell=U^2\bar{\ell}, \text{比熱}\, c=\frac{U^2}{\Theta}\bar{c},$$
$$\text{熱伝導率}\, k=\frac{\rho LU^3}{\Theta}\bar{k}, \text{表面張力係数}\kappa=\rho U^2L\bar{\kappa}$$

を用いて，方程式系は無次元化しておく（上線は省略する）．

1.1 基礎方程式

正の実数 $T\in\mathbf{R}$ をとり，領域 $\Omega=]0,T[\times G$ で考察する．温度は（水の融点を基準にとっておく）固体領域 Ω^- では拡散方程式

$$c\dot{\theta}+k\nabla^*\nabla\theta=0 \text{ in } \Omega^- \tag{1}$$

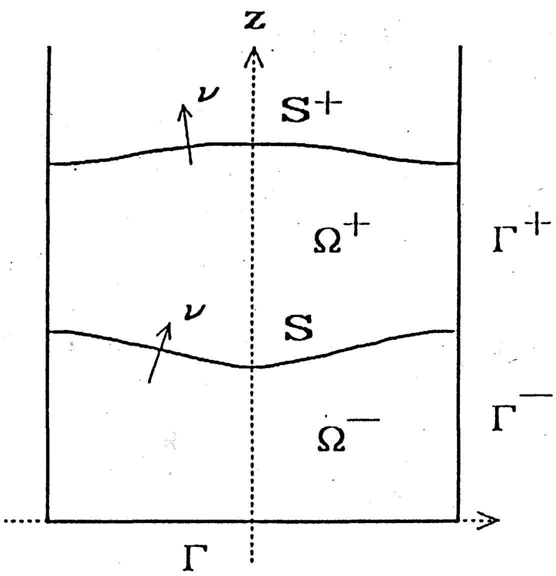

図 1: 空間領域 G での $\Omega[t]$

を，液体領域 Ω^+ では流速を含んだ拡散方程式

$$c\dot{\theta}+k\nabla^*\nabla\theta-c\nabla^*(\boldsymbol{u}\theta)-\frac{1}{Re}(\nabla\boldsymbol{u})\boldsymbol{\sigma}=0 \text{ in } \Omega^+ \tag{2}$$

を満足している．液相は非圧縮性の粘性流体と考えるので連続の式

$$\nabla^*\boldsymbol{u}=0 \text{ in } \Omega^+ \tag{3}$$

と Navier-Stokes 方程式

$$\dot{\boldsymbol{u}}+(\boldsymbol{u}\cdot\nabla)\boldsymbol{u}=-\nabla p-\frac{1}{Re}\nabla^*\nabla\boldsymbol{u} \text{ in } \Omega^+ \tag{4}$$

を満足する．

1.2 境界条件

つぎに，領域 $\Omega, \Omega^-, \Omega^+$ の境界上で満たすべき条件を列挙する．容器は底からだけ冷却されていて，壁では断熱的と考えれば

$$\theta = \theta_\Gamma(<0) \text{ on } \Gamma, \tag{5}$$

$$\theta_{,\boldsymbol{\nu}} = 0 \text{ on } \Gamma^\pm \tag{6}$$

を，液相での流れは壁に沿ってすべる条件

$$\boldsymbol{\nu}\cdot\boldsymbol{u} = 0, \tag{7}$$

$$(\boldsymbol{u}_\tau)_{,\boldsymbol{\nu}} = 0 \text{ on } \Gamma^+ \tag{8}$$

を仮定する．

液相と固相の内部界面 $S = \partial\Omega^- \cap \partial\Omega^+$ 上では温度の連続性

$$\theta^- = \theta^+ = 0 \tag{9}$$

および Stefan 条件

$$\ell\dot{\Phi} = -(k^-\nabla\theta - \alpha^{-1}k^+\nabla\theta^+)\cdot\nabla\Phi \tag{10}$$

および

$$(1-\alpha)\dot{\Phi} = -\boldsymbol{u}\cdot\nabla\Phi \tag{11}$$

を仮定する．ここで定数 $\alpha = \frac{\rho^-}{\rho^+}$ は膨張係数であり，

$$\theta^\pm = \theta|_{\Omega^\pm},\ k^\pm = k|_{\Omega^\pm}$$

である．

最後に自由表面 $S^+ = \partial\Omega^+ \setminus (\Gamma^+ \cup S)$ 上では

$$\theta_{,\boldsymbol{\nu}} = 0 \tag{12}$$

を仮定する．また，自由表面の保存条件および応力の連続性から

$$\dot{\Phi}^+ = -\boldsymbol{u}\cdot\nabla\Phi^+, \tag{13}$$

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\nu} = 0, \tag{14}$$

$$p = 2\kappa H \tag{15}$$

を満足する．

2 軸対称問題

前節 1 で述べた 3 次元モデルの適切性は未知であるので，まず回転対称性を仮定して 2 次元構造を持った解を数値的または数理的に解析する．

すなわち，座標系 (x, y, z) を円筒座標系 (r, ϑ, z) に変換すれば，各変数の ϑ 成分と ϑ 依存性が消去される．したがって，空間 G は 2 次元の矩形領域で表現され，新たに境界となる回転軸は Γ^a としておく．円筒座標系において発散 $-\nabla^*$ は

$$-\overline{\nabla^*}(u^r, u^z) = u^r_{,r} + \frac{u^r}{r} + u^z_{,z}$$

に変えなければならない．温度と流速を求めるためには方程式系

$$c\,\dot{\theta} = -k\overline{\nabla^*}\nabla\theta \qquad \text{in } \Omega^-, \qquad (16)$$

$$c\dot{\theta} = -k\overline{\nabla^*}\nabla\theta - c(\boldsymbol{u}\nabla)\theta, \qquad (17)$$

$$\dot{u^r} = -(\boldsymbol{u}\nabla)u^r - p_{,r} - \tfrac{1}{Re}(\overline{\nabla^*}\nabla u^r + u^r/r^2), \qquad (18)$$

$$\dot{u^z} = -(\boldsymbol{u}\nabla)u^z - p_{,z} - \tfrac{1}{Re}\overline{\nabla^*}\nabla u^z \qquad \text{in } \Omega^+, \qquad (19)$$

$$\theta = \theta_\Gamma \qquad \text{on } \Gamma, \qquad (20)$$

$$\theta_{,r} = u^r = u^z_{,z} = 0 \qquad \text{on } \Gamma^+ \cup \Gamma^- \cup \Gamma^a (21)$$

を用いる [11]．

シミュレーションには固定領域法を適用するため一般座標系 (τ, ξ, η) を導入する [5]．関数

$$\begin{aligned} \tau &= t \\ \xi &= \xi(t, r, z) \\ \zeta &= \zeta(t, r, z) \end{aligned} \qquad (22)$$

は物理空間上の領域 $\Omega[t]$ を計算空間上の規則的な領域に変換するように選ばれる．領域 $\Omega^-[t]$ と $\Omega^+[t]$ において，別々の変換関数 ξ と ζ を使用しているので，自由境界は $\zeta =$ 一定 の像として取り扱える．

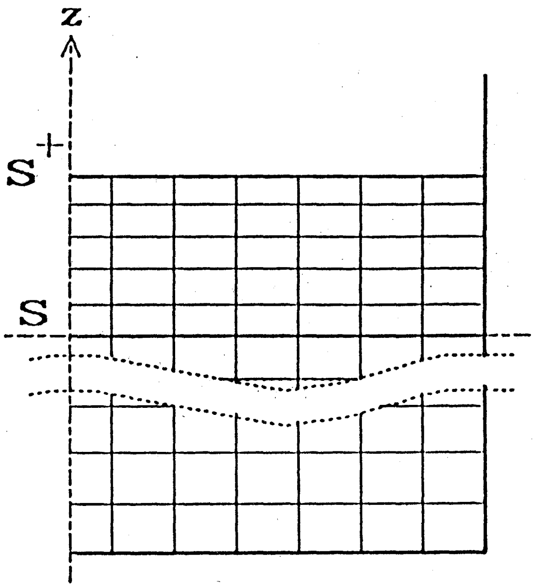

図 2: 初期格子分割

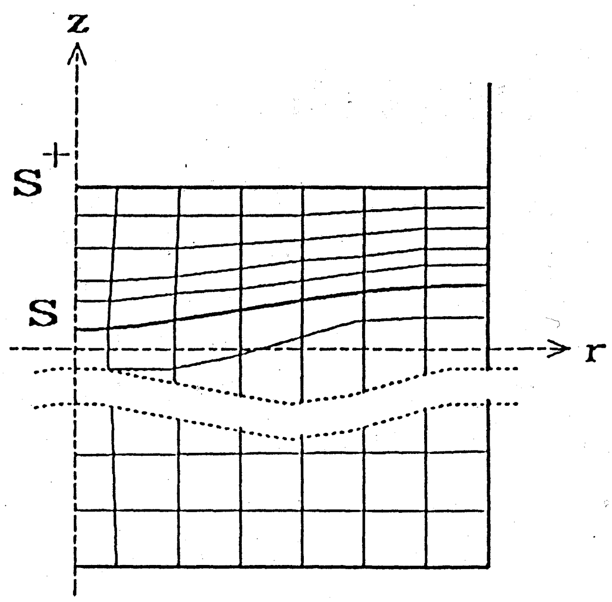

図 3: 途中での格子形状

基本方程式は関係式

$$
\begin{aligned}
J &= r_{,\xi} z_{,\zeta} - r_{,\zeta} z_{,\xi}, \\
f_{,r} &= (f_{,\xi} z_{,\zeta} - f_{,\zeta} z_{,\xi})/J, \\
f_{,z} &= (r_{,\xi} f_{,\zeta} - r_{,\zeta} f_{,\xi})/J, \\
\dot{f} &= f_{,\tau} - f_{,r} r_{,\tau} - f_{,z} z_{,\tau}, \\
(\boldsymbol{u}\nabla) f &= ((u^r z_{,\zeta} - u^z r_{,\zeta}) f_{,\xi} + (u^z r_{,\xi} - u^r z_{,\xi}) f_{,\zeta})/J, \\
\overline{\nabla^*}\nabla f &= -\Delta f + \Delta r f_{,r} + \Delta z f_{,z} - \frac{f_{,r}}{r}.
\end{aligned}
$$

但し,

$$\Delta f = ((r_{,\zeta}^2 + z_{,\zeta}^2) f_{,\xi\xi} + (r_{,\xi}^2 + z_{,\xi}^2) f_{,\zeta\zeta} - 2(r_{,\xi} r_{,\zeta} + z_{,\xi} z_{,\zeta}) f_{,\xi\zeta})/J^2$$

を用いて計算面上で（ξ と ζ に対して）表現される.

これらによって数値計算されるが，各時刻において圧力分布は

$$D = u_{,r}^r + \frac{u^r}{r} + u_{,z}^z \text{ in } \Omega^+$$

を用いて方程式

$$\overline{\nabla^*}\nabla p = \dot{D} + ((\boldsymbol{u}\nabla) u^r)_{,r} + ((\boldsymbol{u}\nabla) u^z)_{,z} + \tfrac{1}{r}(\boldsymbol{u}\nabla) u^r \qquad \text{in } \Omega^+, \quad (23)$$

$$
\begin{aligned}
p_{,r} &= 0 && \text{on } \Gamma^a, \quad (24)\\
p_{,r} &= \tfrac{1}{Re}(u^r_{,rr} + \tfrac{1}{r}u^r) && \text{on } \Gamma^+, \quad (25)\\
p &= \kappa H && \text{on } S^+ \quad (26)
\end{aligned}
$$

によって事前に求めている [11]．内部界面 S 上での p の境界値は補外によって与えている．

さらに，回転軸 Γ^a 上での特異性を避けるために特別な格子 [5] を利用し，簡単化のために空間的には中心差分で近似している．時間微分に関しては，$\dot{r}$ と $\dot{z}$ は陽的に，$\dot{u^r}$ と $\dot{u^z}$ は陰的に計算している．

3 数値計算

数値計算では，水の凝固における物理定数に近い値（MKS 単位）を採用して（潜熱は実際より小さめにとっている）

$$
\begin{aligned}
&\rho^- = 917, \quad \overline{k^-} = 24, \quad \overline{c^-} = 1.2, \quad \overline{\ell} = 100,\\
&\rho^+ = 999, \quad \overline{k^+} = 5.6, \quad \overline{c^+} = 5.6, \quad \overline{\kappa} = 100, \quad Re = 20
\end{aligned}
$$

で，基準値としては $U = 10^{-3}, L = 10^{-1}, \Theta = 10^{-6}$ とした．初期状態は

$$
\begin{aligned}
&\Omega^-[0] =]0,1[\times]-1,0[, \qquad \theta_\Gamma = -2,\\
&\Omega^+[0] =]0,1[\times]0,0.2[, \qquad \theta_{S^+} = 0.1
\end{aligned}
$$

として，領域 $\Omega^-[0]$ と $\Omega^+[0]$ はそれぞれ 40×40 格子に分割する．図 4–5 に自由境界の計算結果を示した．表 1 には各領域と全領域の（正規化）質量を示した．

図 6,7 には，回転軸および壁上での自由境界の位置の時間変化を示す．

初期状態を変えた別の数値結果も示す．図 8–9 に自由境界の結果を，表 2 に質量の変化を示した．

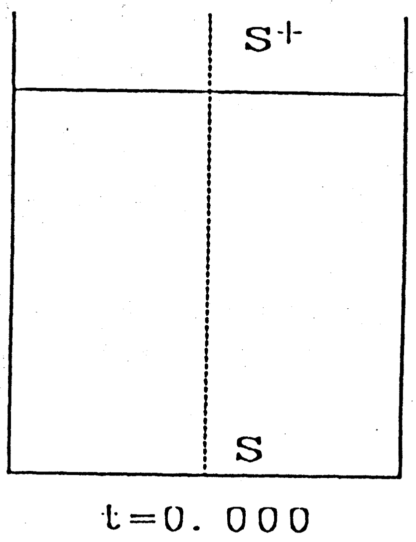

図 4: 初期状態

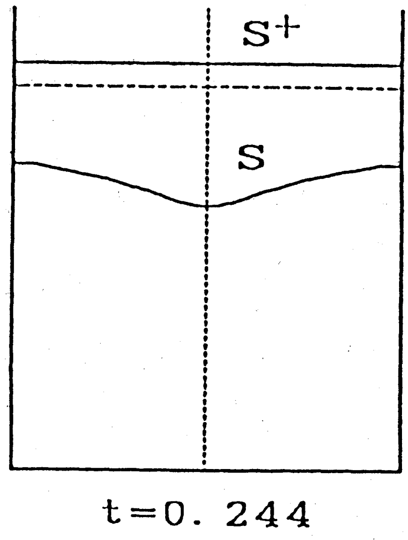

図 5: 中途での状態

時刻	氷	水	全質量
0	0.9171	0.1998	1.1170
0.08	0.9574	0.1595	1.1170
0.16	1.0059	0.1111	1.1170
0.24	1.0564	0.0605	1.1170

表 1: 質量の変化.

時刻	氷	水	全質量
0	0.9324	0.1832	1.1156
0.08	0.9375	0.1781	1.1156
0.16	0.9430	0.1726	1.1156
0.20	0.9479	0.1677	1.1156

表 2: 質量の変化

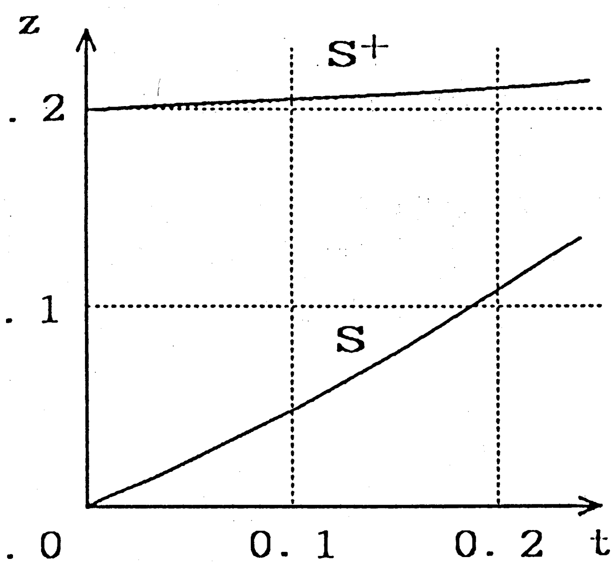

図 6: 回転軸上

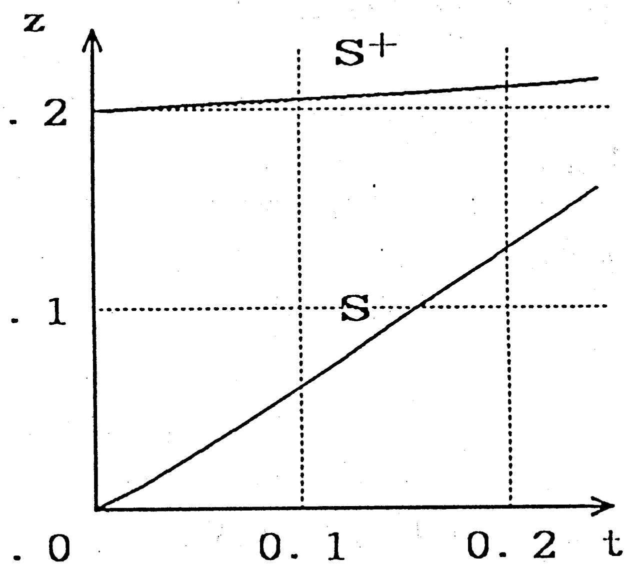

図 7: 壁上での自由境界

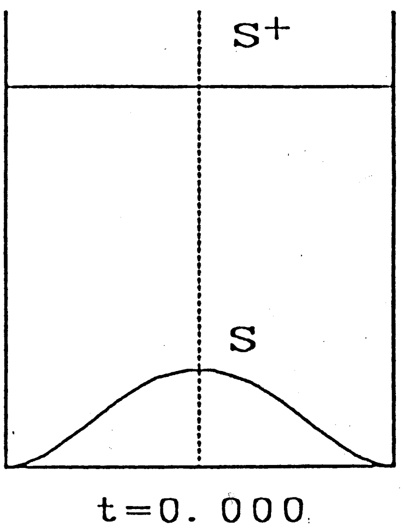

図 8: 初期状態

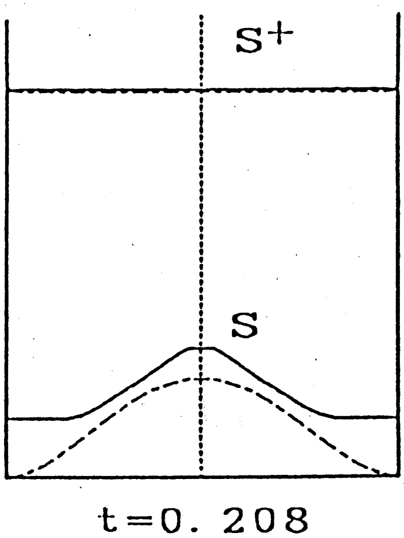

図 9: 中途での状態

4　1次元問題

この節では，さらに問題を単純化して1次元構造の（平坦）解の数値計算結果を示す．

すなわち，変数に対する r 依存性を消せば，問題は空間的には z 依存性だけが残るように1次元化することができる．このときには連続の式から流速 u の空間依存性がなくなり，単調（エンタルピー）関数 γ

$$\gamma[\theta] = \begin{cases} c\theta - \ell, & \text{if } \theta < 0, \\ c\theta, & \text{if } \theta > 0 \end{cases}$$

および，液相領域の特性関数 χ

$$\chi[\theta] = \begin{cases} 0, & \text{if } \theta < 0, \\ 1, & \text{if } \theta > 0 \end{cases}$$

を用いると

$$(\gamma[\theta])^{\cdot} + \chi u(\gamma[\theta])' - \theta'' = 0 \tag{27}$$

と弱定式される．ただし，自由境界 $z = s[t]$ に対して

$$u = (\frac{1}{\alpha} - 1)\dot{s}$$

である．

初期状態 θ^0 および

$$e^0 = \gamma[\theta^0], \quad u^0 = 0, \quad s^0 = e^0 \text{ の零点}$$

に対して，Chernoff 法に基づく反復

$$\chi^i = \begin{cases} 0 & \text{if } e^i < -\ell, \\ e^i/\ell + 1 & \text{if } -\ell < e^i < 0, \\ 1 & \text{if } 0 < e^i, \end{cases} \tag{28}$$

$$E^{i+1} - \frac{\Delta t}{\mu}(E^{i+1})'' = \theta^i - \frac{\Delta t}{\mu}\chi^i u^i (e^i)', \tag{29}$$

$$e^{i+1} = e^i + \mu(E^{i+1} - \theta^i), \tag{30}$$

$$
\begin{aligned}
s^{i+1} &= e^{i+1} \text{ の零点}, & (31)\\
\theta^{i+1} &= \gamma^{-1}[e^{i+1}], & (32)\\
u^{i+1} &= \frac{s^{i+1} - s^{i}}{\Delta t} & (33)
\end{aligned}
$$

によってシミュレーションされる．ここで，緩和パラメタ $\mu > 0$ は

$$\mu\gamma^{-1} \text{ は Lipschitz 関数（定数 1）}$$

にとっておく（離散計算の安定化のため）．

以下では，パラメタ

$$
\begin{aligned}
&c^{-} = 1, \quad \rho^{-} = 0.75, \quad \ell = 3,\\
&c^{+} = 2, \quad \rho^{+} = 1.00
\end{aligned}
$$

，境界値

$$\theta_{\Gamma} = -12,\ \theta_{S^{+}} = 6$$

で，初期状態

$$s[0] = 1/3,\ {}^{=}13/12,$$

として離散計算した．

図 10 に $n = 512$ のときの自由境界の時間変化を示す．表 3 に一定時間での自由境界の位置と，完全に凍った時刻の分割数 n による変化を示す．

n	内部界面	自由表面	結氷時刻
	($t = 0.25$)		
16	0.712	1.178	.625
32	0.748	1.187	.562
64	0.763	1.190	.500
128	0.771	1.193	.492
256	0.776	1.194	.484
512	0.779	1.195	.486

表 3: 自由境界の分割数依存性

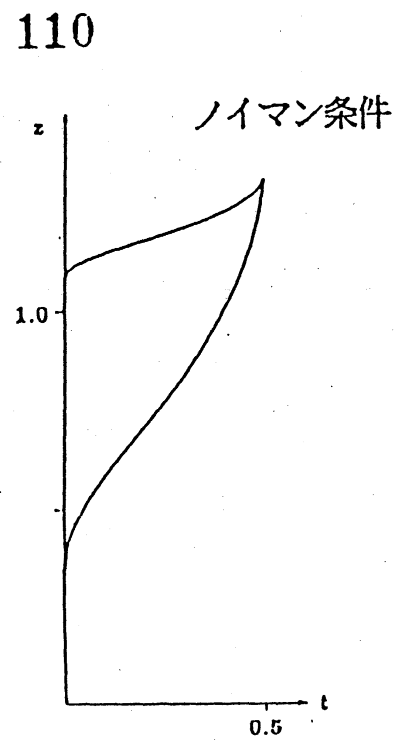

図 10: 自由境界の時間変化

5 おわりに

この報告では，凝固現象における相転移に伴う体積変化を考慮した自由境界問題に対する新たな定式を提案した．この定式は Stefan 問題の体積膨張率$\alpha = 1$以外への拡張であり，内部界面の他に自由表面が現れる．この定式に基づく離散計算からは，質量保存に関してはほぼ満足できる結果が得られている．内部界面は，平坦な初期状態から始めたとき壁の方が速く（約 20%）凍る結果が得られているが，その原因については不明である．自由表面の方はほとんど水平のままである．

数値計算は東京大学計算センタの HITAC M-682H と S820 で行った．

参考文献

[1] J.R.Cannon, E.DiBenedetto: *On the existence of weak-solutions to an n-dimensional Stefan problem with nonlinear boundary conditions*, SIAM J. Math. Anal., 11, 1980, pp.632-645

[2] J.Crank: *Free and moving boundary problems*, Clarendon Press, Oxford, 1984

[3] A.Fasano, M.Primicerio, S.Kamin: *Regularity of weak solutions of one-dimensional two-phase Stefan problem*, Ann. Mat. Pura Appl.(4), 115,

1977

[4] A.Friedman: *The Stefan problem in several variables*, Trans. Amer. Math. Soc. 133, 1968, pp.51-87

[5] Y.Katano, T.Kawamura, H.Takami: *Numerical study of drop formation from a capillary jet using a general coordinate system*, Theor. Appl. Mech. 34, 1986, pp.3-14

[6] H.Kawarada: 自由境界問題, 東京大学出版会, 1989

[7] K.Murata, M.Natori, Y.Karaki: 大型数値計算, 岩波書店

[8] M.Natori, H.Kawarada: 自由境界問題の数値解析, Japan. Phy. 31, 1976, pp.547-551

[9] R.H.Nochetto, C.Verdi: *An efficient linear scheme to approximate parabolic free boundary problems: error estimates and implementation*, Math.Comp. 51, 1988, pp.27-53

[10] R.H.Nochetto, C.Verdi: *Approximation of degenerate parabolic problems using numerical integration*, SIAM J. Numer. Anal., 25, 1988, pp.784-814

[11] D.Takahashi, Y.Takeda, H.Takami: *Numerical simulation of collision of liquid droplets*, Theor. Appl. Mech. 36, 1988, pp.3-15

[12] Joe F.Thompson, Z.U.A.Warsi, C.Wayne Mastin: *Numerical grid generation*, North-Holland, 1987

(Takao Hanada,
Hitoshi Imai,
Makoto Natori,
Hideo Kawarada)