

凝固現象における数値解析

(接触角の変化と表面張力)

花田孝郎 (Takao HANADA) 今井仁司 (Hitoshi IMAI)

電気通信大学情報工学科

徳島大学工学部

液体が凝固する際の体積変化の影響による現象を計算するための数理モデルを提案し、数値解析を行う。

2 相ステファン問題として、液相および固相では熱拡散方程式 (1,2), 相境界ではステファン条件 (12) として定式される。相転移にともなう密度変化を考慮に入れると、相境界では界面が動くときに体積が変化する。それにより物質粒子の移動が界面で発生し (13), 液体が非圧縮的である (4) とすると領域の可変性 (自由表面の存在) を含めた液相での流れ (3,4) を考察することが必要になる。表面粒子の保存に基づいた自由表面の動き (15) と、固定境界 (壁面) でのスリップ境界条件 (9,10) によって質量保存に基づいた定式が得られる。

1 定式

軸対称な領域 Ω (図.1) での定式を以下に示す。

温度 θ (in 領域 Ω), 流速 \mathbf{u} および圧力 p (in 液相領域 Ω^+) についての方程式は

$$\rho c \dot{\theta} + k \nabla^* \nabla \theta = 0 \quad \text{in } \Omega^-, \quad (1)$$

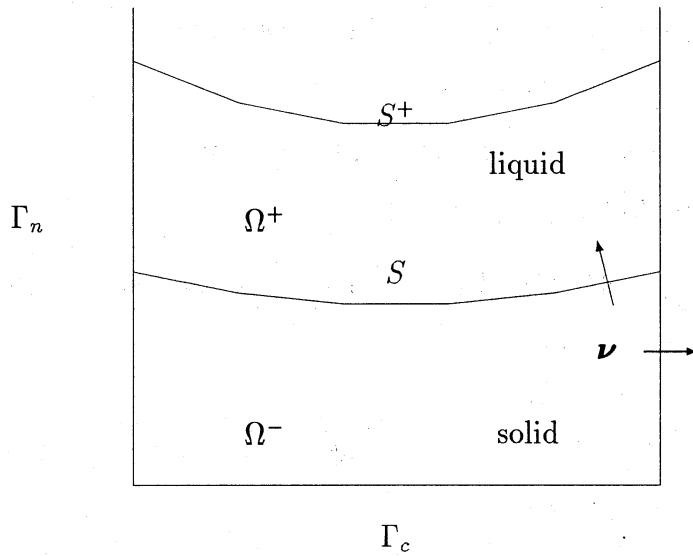


図 1. ある時刻 t での領域 $\Omega[t]$

$$\rho c \dot{\theta} + k \nabla^* \nabla \theta = \rho c \nabla^* (\mathbf{u} \theta), \quad (2)$$

$$\rho \dot{\mathbf{u}} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p - \mu \nabla^* \nabla \mathbf{u}, \quad (3)$$

$$\nabla^* \mathbf{u} = 0 \quad \text{in } \Omega^+ \quad (4)$$

である。ここで、 ρ は密度、 c は比熱、 k は熱伝導率、 μ は粘性係数であり、

$$\dot{\cdot} = \frac{d}{dt}, \quad \nabla = \text{grad}, \quad \nabla^* = -\text{div}.$$

を用いている。初期条件は

$$\theta[0] = \theta_0, \quad (5)$$

$$\mathbf{u}[0] = \mathbf{0} \quad (6)$$

である。

固定境界 ($\Gamma_c \cup \Gamma_n$) での条件は、容器の底からだけ冷却する ($\theta_0^- < 0$) と仮定して

$$\theta = \theta_0^- \quad \text{on 底 } \Gamma_c, \quad (7)$$

$$\boldsymbol{\nu} \cdot \nabla \theta = 0, \quad (8)$$

$$\boldsymbol{\nu} \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (9)$$

$$(\boldsymbol{\nu} \cdot \nabla) \mathbf{u}_\tau = \mathbf{0} \quad \text{on 壁 } \Gamma_n. \quad (10)$$

ただし、 $\mathbf{u}_\tau = \mathbf{u} - (\mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\nu}) \boldsymbol{\nu}$ である。

内部界面 ($S = \partial\Omega^- \cap \partial\Omega^+ = \{(t, x) : \Phi[t, x] = 0\}$) での条件は

$$\theta^- = \theta^+ = 0, \quad (11)$$

$$\rho^- \ell \dot{\Phi} = -(k^- \nabla \theta^- - k^+ \nabla \theta^+) \cdot \nabla \Phi, \quad (12)$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla \Phi = -(1 - \alpha) \dot{\Phi}. \quad (13)$$

ただし, ℓ は潜熱で, $\alpha = \rho^- / \rho^+$ は膨張係数 (the coefficient of expansion) である.

自由表面 ($S^+ = \partial\Omega^+ \setminus (\Gamma_n \cup S) = \{(t, x) : \Phi^+[t, x] = 0\}$) では

$$\boldsymbol{\nu} \cdot \nabla \theta = 0, \quad (14)$$

$$\dot{\Phi}^+ = -\mathbf{u} \cdot \nabla \Phi^+, \quad (15)$$

$$\boldsymbol{\tau} \cdot \boldsymbol{\epsilon} \boldsymbol{\nu} = 0, \quad (16)$$

$$p = \kappa H. \quad (17)$$

ただし H は主曲率の和で, $\boldsymbol{\epsilon} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^t)$.

2 接触角の動き

3つの相 (液相 L, 壁 W, 外気 G) のそれぞれの間の界面張力 $\kappa_G = \kappa_{GW}, \kappa_L = \kappa_{LW}, \kappa = \kappa_{GL}$ (図.2) を用いると, 静止状態での平面上の平衡接触角 ψ^0 は Young の条件

$$\kappa_{GW} = \kappa_{LW} + \kappa_{GL} \cos \psi^0$$

から,

$$\kappa_W = \kappa \cos \psi^0$$

を満たしている. ただし, $\kappa_W := \kappa_G - \kappa_L$.

静力学的な接触線の動きとして

$$u^z = \mu^{-1} \kappa (\cos \psi^0 - \cos \psi) \quad (18)$$

なるモデルを提案する. 初期状態として (18) が満足されていない (ような, 自由表面が平坦な) 場合もあるので, 過渡現象を考慮し, 緩和時間 σ を導入して

$$-\sigma \dot{u}^z = u^z - \mu^{-1} \kappa (\cos \psi^0 - \cos \psi) \quad (19)$$

を定式に含める.

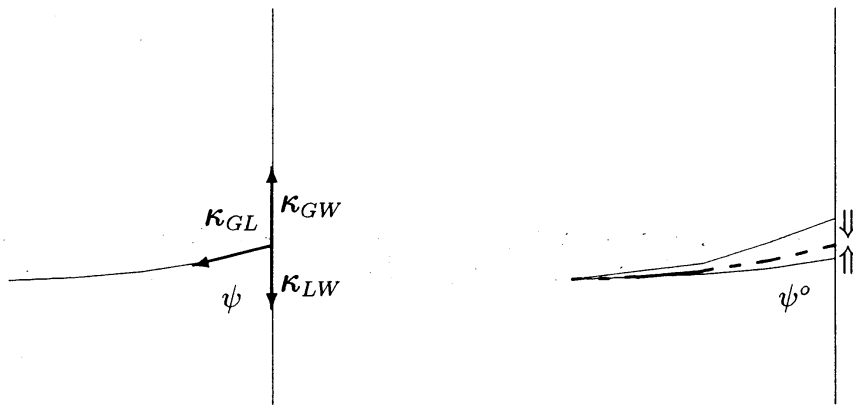


図 2. 表面張力の関係

3 容器縁から溢れるときの様相について

凝固のときに膨張する(水のような)場合には, 小さな容器からは溢れ出ることもある. 容器の縁が直角であるときの接触角の動きについては, 接触点が縁にあ(って, 接触角が ψ であ)るときの表面張力の合力は

$$\begin{pmatrix} \kappa_G - \kappa \sin \psi \\ -\kappa_L - \kappa \cos \psi \end{pmatrix}$$

である. このことから, 平衡角 ψ^0 の他に,

$$\kappa \sin \psi_G = \kappa_G, \quad (20)$$

$$\kappa \cos \psi_L = -\kappa_L \quad (21)$$

なる $\psi_G, \psi_L \in [\frac{\pi}{2}, \pi]$ および $\psi^{00} = \psi^0 + \frac{\pi}{2}$ の間の関係を調べる. 常に成立する関係としては,

$$\psi^0 \leq \psi_l, \quad \psi_G \leq \psi^{00}$$

がある. 簡単のために, $\psi^0 = \pi/2$, すなわち $\kappa_G = \kappa_L$ の場合に考える.

- $\kappa_G < \kappa/\sqrt{2}$ のときには

$$\psi^0 \leq \psi_l \leq \psi_G \leq \psi^{00}$$

であり, 縁での ψ は, ψ^0 から ψ_L まで増加する. 接触角が ψ_L を超えると合力の垂直成分が上向きになるので, 溢れ出しながら ψ^{00} まで増加する.

- $\kappa/\sqrt{2} < \kappa_G < \kappa$ のときには

$$\psi^0 \leq \psi_G \leq \psi_l \leq \psi^{00}$$

となり, 接触角は縁で ψ^0 から ψ_G まで増加して, それを超えると合力の水平成分が外向きになるので溢れ出す. (図.3)

- $\kappa < \kappa_G$ のときには ψ_G, ψ_L が存在しないので, 接触角は縁で ψ° から ψ^{oo} まで増加してから溢れ出す.

$\psi^\circ = \pi/2$ ではない場合にも, 少し複雑にはなるが, 同じような動き方をする.
以上の考察に基づいた数理モデルの構成が今後の問題である.

参考文献

- [1] L.A.Caffarelli, L.C.Evans: *Continuity of the temperature in the two-phase Stefan problem*, Arch. Rational Mech. Anal. 81, 1983, pp.200-220
- [2] J.Crank: *Free and moving boundary problems*, Clarendon Press, Oxford, 1984
- [3] A.Friedman: *The Stefan problem in several variables*, Trans. Amer. Math. Soc. 133, 1968, pp.51-87
- [4] .Hanada, H.Imai, H.Kawarada, M.Natori: *Numerical Computations for Solidification problems with Change of Volume*, Bull. Greek Mathe. Soc., 31, 1990, pp.29-49
- [5] T.Hanada, H.Imai, H.Kawarada, M.Natori: *Numerical Computation for Solidification Problems with Moving Surface*, Proc. of the International Conference on Nonlinear Mathematical Problems in Industry 1, 1993, pp.17-38

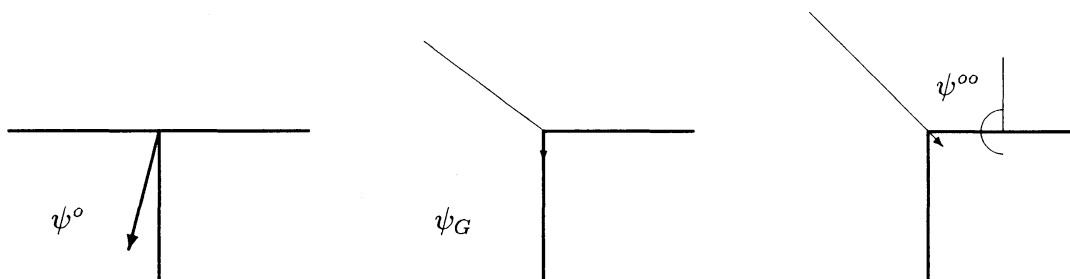


図 3. 接触角の動きと表面張力の合力

- [6] 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
- [7] 河原田秀夫: 自由境界問題, 東京大学出版, 1989
- [8] E.Magenes, C.Verdi, A.Visintin: *Theoretical and numerical results in the two-phase Stefan problem* SIAM J. Numer. Anal., 26, 1989, pp.1425-1438
- [9] 村田健郎, 名取亮, 唐木幸比古: 大型数値シミュレーション, 岩波, 1990
- [10] D.Takahashi, Y.Takeda, H.Takami: *Numerical simulation of collision of liquid droplets*, Theor. Appl. Mech. 36, 1988, pp.3-15
- [11] Joe F.Thompson, Z.U.A.Warsi, C.Wayne Mastin: *Numerical grid generation*, North-Holland, 1987