

拡散界面モデルを用いた二相流体流れの数値解析

Numerical Analysis of Two-phase Fluid Flows Using a Diffuse-interface Model

(独) 産業技術総合研究所・先進製造プロセス研究部門
高田 尚樹, 松本 純一

Naoki TAKADA and Junichi MATSUMOTO
Advanced Manufacturing Research Institute (AMRI)
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

Abstract: A computational-fluid-dynamics (CFD) method solving a set of Navier-Stokes equations and adopting a diffuse-interface model (DIM) is applied to isothermal and thermal incompressible two-phase flows with high density ratios. In the DIM, utilizing the free-energy approach for a non-equilibrium mesoscopic system, a fluid-fluid interface is assumed as an artificially-enlarged finite volumetric zone across which the physical properties vary continuously. The major findings from the CFD simulations are as follows: (1) the DIM method predicts well the motion of two-dimensional liquid column on a solid wall under gravity; (2) there are good agreements between the numerical results and the theoretical solutions in two-dimensional capillarity-driven gas-liquid flows between parallel plates with hydrophilic surfaces; (3) it also predicts qualitatively well 2D single bubble motion in a liquid with temperature gradient under no gravity caused by heterogeneous surface-tension force. These results prove that the DIM is one of useful interface models for numerically analyzing the two-phase flows.

Key words: Computational fluid dynamics, Phase-field model, Interface tracking, Contact line, Wetting, Thermo-capillary force

1. はじめに

近年, 様々な理工学分野で, MEMS (Micro Electro-Mechanical Systems) 技術等を利用するマイクロスケールの流体デバイス (流路, ポンプ, バルブ, 分離・混合・反応容器など) とそれら統合システム機器 (μ -TAS, 燃料電池等) の開発・普及が進み, それらの高機能化とともにデバイス製造プロセスの高度化のニーズも高まっている^{(1),(2)}. マイクロデバイスと統合システム機器, それらの製造プロセスを用途毎に最適化するには, 微細な流路や流体容器の内部の流体现象の理解と予測が必要不可欠である. 時間スケール・空間スケールの制約から室内実験では 3 次元的な計測や可視化が困難な場合があり, そのような対象については計算機を使用した数値流体力学 (CFD) 解析が重要になる. そこで我々は, 気液または液液二相を扱うマイクロスケールの流体デバイスの開発に適した新しい CFD 計算法の開発を目的として, 従来の汎用的な計算スキーム下で拡散界面モデル (Diffuse-Interface Model, DIM)⁽³⁾を導入する高密度比二相流の計算法を提案し⁽⁴⁾, その適用性を検討している^{(5),(6)}. DIM では, 自由エネルギー最小化^{(7),(8)}に伴って相界面が流体中で有限幅の物性遷移領域として自律的に形成・保持されるため, 界面の移流・構築演算が簡素化されるという利点がある. 本報では, DIM とその二相流 CFD 計算法を解説するとともに, 固体表面の濡れ性と表面張力の効果が重要な役割を占める空気-水系相当の高密度比・非圧縮・粘性二相流の基礎的問題への DIM 法の適用について述べる.

2. 拡散界面モデル (DIM)

拡散界面モデル (Diffuse-interface Model, DIM)⁽³⁾は、高分子や金属の材料科学分野の Phase-field 法と同様な非平衡系の自由エネルギー理論^{(7),(8)}に基づき、多相が共存する系の平衡状態を自由エネルギー汎関数 Ψ の最小値によって定義する。本研究で採用する、二相系に対して一般に用いられる Ψ の最も簡素な形式は次のように記される⁽³⁾。

$$\Psi = \int d\mathbf{x} \left\{ \psi(\phi, T) + \frac{\kappa}{2} |\nabla\phi|^2 \right\} \quad (1)$$

ここで、 $\phi(\mathbf{x}, t)$ は時刻 t に座標 \mathbf{x} の空間内で各相を識別し界面形状を表す指標関数 (秩序変数とも呼ばれる) であり、質量密度 ρ やモル濃度などに相当する。流体バルクのエネルギー密度 ψ は ϕ の二重井戸ポテンシャルであり ϕ の不均一な空間分布をもたらす役割を担っている。界面でのエネルギー増加を表す第2項の係数 κ は表面張力の大きさと界面厚さに関係しており、一般的な DIM では一定と仮定される。熱エネルギーのパラメータ (温度) T が臨界値より低い時、 ϕ の不均一な空間分布が自律的に成長することで相変化や相分離が表現される。

式(1)からは様々な熱力学的変数が導出される。次式で定義される化学ポテンシャル η は、その空間勾配に起因する物質移動を起こす⁽³⁾。

$$\eta \equiv \frac{\delta\Psi}{\delta\phi} = \frac{\partial\psi}{\partial\phi} - \kappa \nabla^2\phi \quad (2)$$

物質移動が生じない平衡状態は $\eta = \text{一定}$ で達成される。そこで現れる相界面は、 ϕ や物性が連続的に変化する、 $\kappa^{0.5}$ に比例する幅の有限体積領域に相当する。

物質中の単位面積あたりの界面がもたらす可逆的応力 (単位体積あたりエネルギー) \mathbf{P} は、一成分二相系では式(1)の ϕ を密度 ρ に取って次のように定義される^{(3),(9),(10)}。

$$\mathbf{P} \equiv \left(p - \kappa \rho \nabla^2 \rho - \frac{\kappa}{2} |\nabla\rho|^2 \right) \mathbf{I} + \kappa \nabla\rho \otimes \nabla\rho \quad (3)$$

ここで \mathbf{I} は 2 階の等方テンソルであり、 p は均質な系における圧力 (状態方程式) に相当する。なお、上述のように式(2)と(3)ではともに $\kappa = \text{constant}$ を仮定している。

表面張力 σ の力学的定義は、静止した平坦な界面に対しては次の Bakker の式によって与えられる⁽¹¹⁾。

$$\sigma \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} (P_N - P_T) d\xi \quad (4)$$

P_N と P_T は各々界面に働く \mathbf{P} の法線成分と接線成分を示す (ξ 軸は法線方向に沿う)。上式に式(3)を代入して接線方向に $\rho(\xi) = \text{constant}$ を考慮すると、勾配自乗に起因する単位面積あたりの自由エネルギー増分に基づく以下の定義式(5)が得られる^{(3),(9)}。

$$\sigma \equiv \kappa \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial\rho}{\partial\xi} \right)^2 d\xi \quad (5)$$

なお、本計算で界面厚さと表面張力 σ を独立に任意に設定するため、 η の式(2)と \mathbf{P} の式(3)~(5)に共通の係数 κ は各々異なる κ_ϕ と κ_ρ に置き換えている^{(4),(5)}。

3. 二相流DIM計算法

3.1 基礎方程式

DIMに基づく二相流計算法^{(4)-(6),(9),(10),(12)-(17)}は、上述のような、式(1)から導かれる熱力学変数が組み込まれた流体流れ場の支配方程式を使用する。本研究では、空気-水のような相変化のない非混和性二成分で高密度比の非圧縮性気液二相流体の流れを対象として、以下のような一流体モデルの定式化 (one-field model formulation) に基づく連続の式、運動方程式、ならびに拡散項を有する界面の移流方程式を解く^{(4),(11)}。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = \nabla \cdot (-\mathbf{P} + \boldsymbol{\tau}) + (\rho - \rho_c) \mathbf{g} \quad (7)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot [\phi \mathbf{u} - \Gamma(\phi) \nabla \eta] = 0 \quad (8)$$

ここで \mathbf{u} は流体の速度、式(7)の $\boldsymbol{\tau}$ は粘性応力、 \mathbf{g} は重力加速度、 ρ_c は連続相の密度を表す。Cahn-Hilliard (CH) 方程式とも呼ばれる式(8)で正の値を取る易動度 $\Gamma(\phi)$ は ϕ の拡散性の強さを表す。式(7)の \mathbf{P} と式(8)の η には前出の式(3)と(2)が適用される。

流体の密度 ρ は、文献⁽¹²⁾と同様に、界面領域内部では気相(G)と液相(L)の各定数 ρ_G と ρ_L ($\rho_G < \rho_L$) の間で滑らかに変化する ϕ の関数として与えられている⁽¹²⁾。 $\boldsymbol{\tau}$ には Newton 粘性則を適用し、その比例係数 μ を二相中で一定値 μ_G と μ_L 、界面領域内部で ρ の線形関数として与えた⁽¹²⁾。

$$\boldsymbol{\tau} = \mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \quad (9)$$

$$\mu = \frac{\mu_L - \mu_G}{\rho_L - \rho_G} (\rho - \rho_G) + \mu_G \quad (10)$$

本研究では、式(7)の圧力テンソル項を次のような2つの項に分解して計算する⁽⁵⁾。

$$-\nabla \cdot \mathbf{P} = -\nabla p + \rho \kappa_S \nabla \nabla^2 \rho \quad (11)$$

右辺第2項は表面張力により生じる界面領域内の体積力を表す。

CH方程式(8)では、van der Waals 型のバルク自由エネルギー密度 $\psi(\phi)$ から導出される η と、以下の形式の $\Gamma(\phi)$ を採用した^{(4)-(6),(12)}。

$$\Gamma(\phi) = \Gamma_0 \phi \quad (12)$$

Γ_0 は正の定数である。拡散流束 $-\Gamma(\phi) \nabla \eta$ は、瞬時局所的な非平衡状態において発生し、 ϕ に関する部分的に適度な負の拡散をもたらすことにより界面の厚さを一定に保持する役割を担う⁽⁴⁾。

上記の式以外にも様々な形式の選択とそれらの組み合わせが考えられる⁽¹³⁾。例えば、式(14)の圧力勾配を実効圧力 $P' = p - \kappa_S \nabla^2 \rho + \kappa_S |\nabla \rho|^2 / 2$ で評価する方法^{(4),(12)}、表面張力起因の体積力を界面の曲率と法線ベクトルから直接評価する従来の Continuum Surface

Force (CSF) モデルの採用^{(6),(13)}, ψ が ϕ の4次関数のもの^{(13),(14)}, 圧力テンソル \mathbf{P} の式(3)で密度 ρ が ϕ に変更された形式⁽¹⁴⁾等が提案されている。

3.2 固体表面の境界条件

流体界面が固体壁面上を移動する接触線問題では, 他の研究同様⁽¹⁴⁾⁻⁽¹⁶⁾, 固体表面の濡れ性は次の条件を通して表現される⁽⁵⁾。

$$\mathbf{n} \cdot (\kappa_s \nabla \phi) = -\gamma_s \quad (13)$$

式中の \mathbf{n} は固体表面の単位法線ベクトルを表す。本研究では上式を界面領域 $\rho_G \leq \rho \leq \rho_L$ でのみ考慮する⁽⁵⁾。Wetting potential と呼ばれる γ_s は, 次のように簡素化された固体面の自由エネルギー関数における単位面積あたりのエネルギー変化率に相当する⁽¹⁴⁾⁻⁽¹⁶⁾。

$$\Psi_{solid} \equiv - \int_S \gamma_s \phi dS, \quad (14)$$

流体界面と固体面が成す液相側の角度 (接触角) θ_w は γ_s によって変化し, $\gamma_s=0$ では $\theta_w=90^\circ$ である。流体が浸透しないすべり無しの静止した固体表面では, 式(13)に加えて以下の条件も課される⁽⁵⁾。

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \eta = 0 \quad (15)$$

$$\mathbf{n} \cdot \nabla p = 0 \quad (16)$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (17)$$

3.3 不均一な表面張力効果

表面張力 σ が流体温度や流体中の物質濃度のような任意のスカラー量 T に依存する場合, 界面近傍の T の不均一な空間分布は表面張力差に起因した接線方向の流体運動をもたらす。この種の現象は微小重力環境下で顕著に現れるが⁽¹⁷⁾, 粘性や表面張力の影響が重力効果よりも支配的なマイクロスケール環境でも同様に観察される⁽¹⁸⁾。本研究では, 文献⁽¹⁹⁾に従って, このようなマランゴニ効果を考慮するため, 式(7)に代えて以下の式(18)を用いるとともに T の移流拡散方程式(19)も合わせて解く。

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \nabla [\nabla \cdot (\kappa_s(T) \nabla \rho)] \quad (18)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (T \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\alpha \nabla T) \quad (19)$$

今回は, 式(19)右辺の拡散係数 α を, μ の式(10)と同様に, 気液各相で一定値 α_G , α_L に取り, 界面領域内部では密度 ρ の線形関数として定義する。

$$\alpha = \frac{\alpha_L - \alpha_G}{\rho_L - \rho_G} (\rho - \rho_G) + \alpha_G \quad (20)$$

表面張力による体積力を表す式(18)右辺最終項は, 係数 κ_s が一定でない場合の圧力テンソル \mathbf{P} を代入した式(7)を変形すれば導き出せる⁽¹⁹⁾。本研究では, 文献⁽¹⁹⁾と同様に, κ_s を以下のような T の簡素な関数として与えた。

$$\kappa_s(T) = \kappa_{s,0} + K_T (T - T_0) \quad (21)$$

ここで、右辺第1項目の $\kappa_{s,0}$ は、基準値 T_0 の表面張力 σ_0 に対する κ_s の定数であり、式(5)を満たす。第2項目の変化率 K_T も一定とした。表面張力 σ の T に関する変化率 $\sigma_T = d\sigma/dT$ は、平坦な界面において K_T と以下の関係を持つ。

$$\sigma_T \equiv \frac{d}{dT} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \kappa_s(T) \left(\frac{\partial \rho}{\partial \xi} \right)^2 d\xi \right] = K_T \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial \rho}{\partial \xi} \right)^2 d\xi \quad (22)$$

ここで、 ξ は式(5)と同様に界面の法線方向座標軸を表し、 σ_T の定義上 T は ξ 方向に変化しない場合を想定している。

3.4 計算スキーム

本研究では、DIM 計算法の基礎的適用性の評価を第一の目的として、上述の式(6)~(8), (18), (19)を以下で述べる簡素で標準的な方法によって解いた^{(4),(5),(20),(21)}。まず、3次元デカルト座標系 (x, y, z) で幅 $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1$ の立方セル構造格子によって空間を一様に分割し、スカラー・ベクトル各変数をスタガード状に配置した。セル表面上のスカラー変数は、法線方向に隣接する4個のセル中心での値から4次精度で補間した。また、 \mathbf{u} と ϕ の時間更新では時間刻み幅 $\Delta t = \text{constant}$ で2次精度Runge-Kutta法を用いた。本研究では運動方程式(7)もしくは(18)とCH方程式(8)を同一の空間・時間解像度で離散化したが、これらは両式で一致させる必要はない。次の時間ステップの \mathbf{u} と圧力 p はProjection法⁽²²⁾を用いて式(7)から求めた。その際、 \mathbf{u} がソレノイダル条件 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ を満たすようにSOR法を用いて p のPoisson方程式を解いた。運動方程式では、移流項、圧力項、Newton流体粘性項の各々を、3次精度風上差分、4次精度中心差分、2次精度中心差分で近似した。一方のCH方程式(8)とスカラー変数 T の式(19)では、移流・拡散両項を有限体積法に従って4次精度中心差分で近似した。スカラー量の1階空間微分も4次精度中心差分近似で評価した。

4. 数値解析結果

本節では、マイクロスケールの気液二相流問題への上記DIM計算法の基礎的適用可能性を評価するために予備的に実施したベンチマーク数値解析について述べる。解析では、計算セル約9個分の遷移領域を持つ指標関数 ϕ の空間分布から与えた密度 ρ (ϕ)の計算セル4個分相当の遷移領域として流体界面を再現した。なお、今回の計算は全て3次元空間で行われたが、問題の簡素化のため解析対象は2次元的なものを選択し、空間の1方向の両端境界には周期条件を適用した。

4.1 重力下の移動接触線問題

まず、気液界面が固体表面上を移動する接触線問題として、重力下の2次元液柱倒壊を取り上げた^{(5),(20),(21)}。二相流体には、各相の密度と粘性をそれらの比 $\rho_L/\rho_G = 801.7$, $\mu_L/\mu_G = 73.76$ から設定した。静的接触角 θ_w は90度(式(13)で濡れ性のパラメータ $\gamma_s = 0$)とした。初期条件では、アスペクト比 $n^2 = h/a = 2$ (h :高さ, a :幅)の矩形状の液相を静止固体壁で囲まれた計算領域の左側と下部の壁面に接して配置した。流体は初期に全て静止しており、時刻 $t = 0$ 以降で $\rho > \rho_G$ の液相側でのみ重力加速度 \mathbf{g} による力を考慮した。液柱の幅 a は空気-水系で146mmに相当した。

Fig. 1に、実在系換算で0.1s, 0.2s, 0.3s相当の各無次元時刻 $t^* = t(n^2|g/a)^{0.5}$ におけ

る密度 ρ の空間分布を示す. 同図の(a), (b), (c)は3種類の異なる空間解像度 ($a=20\Delta x$, $40\Delta x$, $60\Delta x$) で得られた計算結果を表している. これらの図からわかるように, 計算領域に対する界面領域の相対的厚さの違いに関係なく, 液相の高さや水平先端部は無次元時刻では同じように時間的に変化している. また, 界面厚さも(a)~(c)各解像度条件でほぼ一定に保持されている. 既に, 著者らは, (b)の解像度で液相の高さや水平先端部の位置と移動速度が他者の実験結果とよく一致することを確認しており⁽⁵⁾, 今回の計算結果は, 移動する接触線に関して界面の変形が捉えられる範囲では解像度の違いによらず同じく適切な結果がDIM法で得られることを示している.

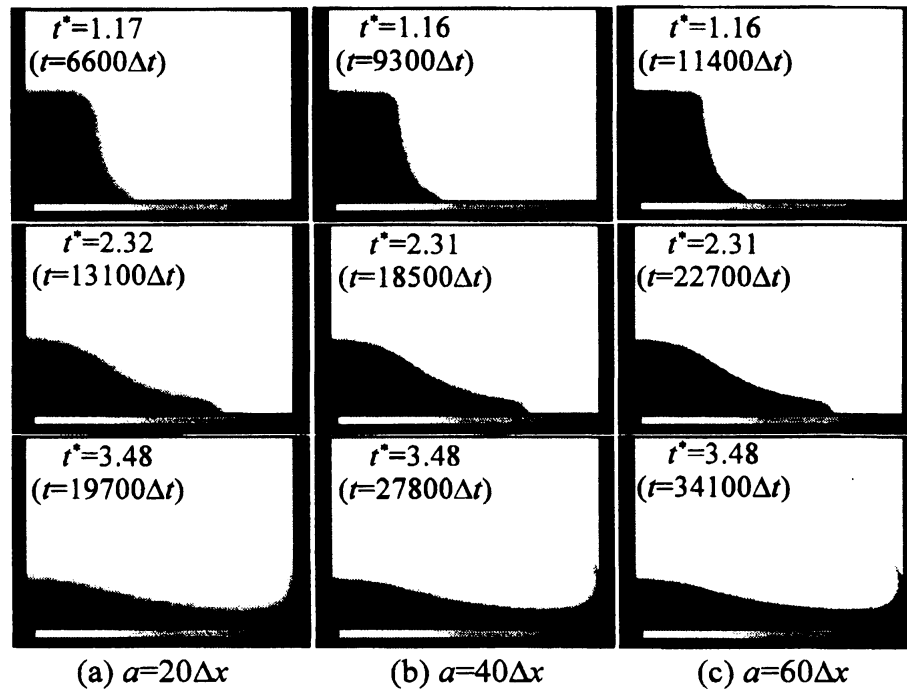


Fig. 1 The snapshot of the collapsing liquid column at time $t^* = t (n^2 |g| / a)^{0.5}$ ($n^2 = h/a = 2$).

4.2 毛細管力による動的接触線問題

次の動的接触線問題として, 無重力下で静止した平行平板間における毛細管力起因の気液二相流を取り上げた. 3次元座標系(x, y, z)の平板間領域は, $32 \times 5 \times 128$ 個の立方セルで空間分割し, x 方向境界に平板を配置し, y 方向境界面には周期条件を適用した. 平板表面では一様に滑り無し条件と一定の静的接触角 $\theta_w = 61^\circ$ または 56° を設定した⁽⁵⁾. 計算領域の z 方向の両端には自由流入の境界条件を適用したが, 実際の平板端・流路端は境界から各々1024セル離れた所で大気圧下に開放されていると仮定した. この系を代表する無次元数の一つは以下の Ohnesorge 数である.

$$Oh = \frac{\mu_L}{\sqrt{\rho_L \sigma h}} \quad (23)$$

今回の解析は, 平板間距離 $h = 32\Delta x$ が $10^\circ\text{C} \cdot 1$ 気圧下の空気-水系で約 5mm に相当する条件 $Oh = 2.15 \times 10^{-3}$ で行った. 二相の密度比と粘性比は上記 4.1 と同じ値に設定した.

Fig. 2 (a) に, 本解析で得られた, 平板間に浸透する液相の各無次元時刻 t^* ⁽¹³⁾ の形状を示す. 図に見られるように, より小さい θ_w (より高い新水性) の条件に対して, メ

ニスカス（湾曲界面）の曲率は大きくなり，液相はより早く移動している．また， $\rho = (\rho_G + \rho_L)/2$ の等値面で代表される界面の水平（ z 方向）位置 s と移動速度 V の時間履歴（Fig. 3）に関して， $\theta_w = 61^\circ$ と 56° の各計算結果（記号○・●）は液相のみを考慮した 1 次元非定常毛細管流れの解析解（実線・破線）⁽²³⁾ と良好に一致した．著者らは，重力下の静的接触線問題の解析から，本 DIM 法で毛細管力を適切に評価できることをすでに確認している⁽⁵⁾．今回の数値解析結果は，他の DIM 法同様⁽²⁴⁾，本計算法が毛細管力により気液二相流が誘起される動的接触線問題にも適用できることを示している．

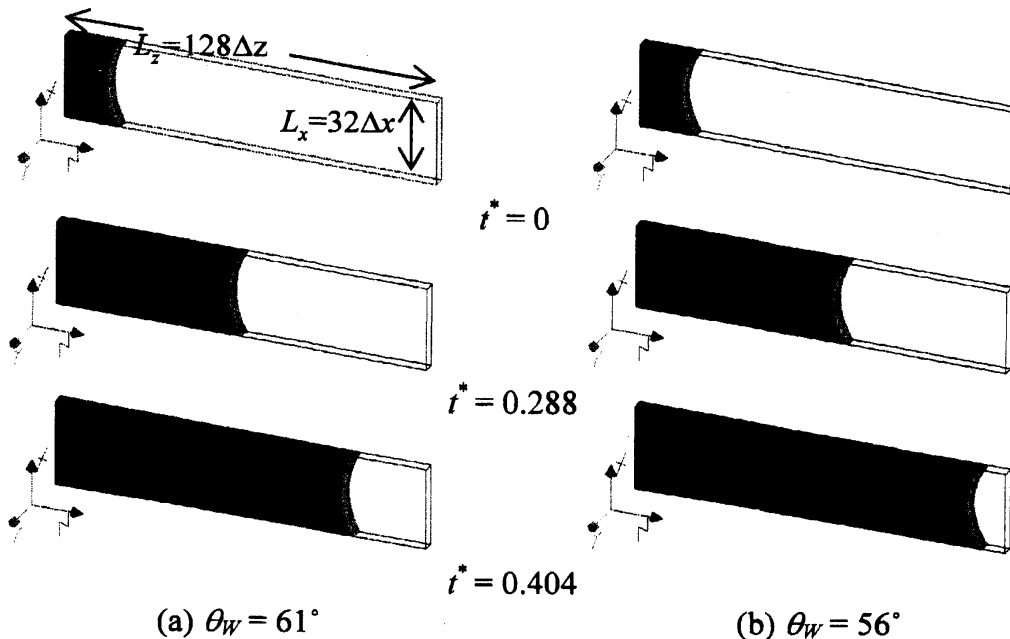


Fig. 2 Snapshots of the liquid permeating the gap between 2D parallel plates under no gravity at dimensionless time t^* .

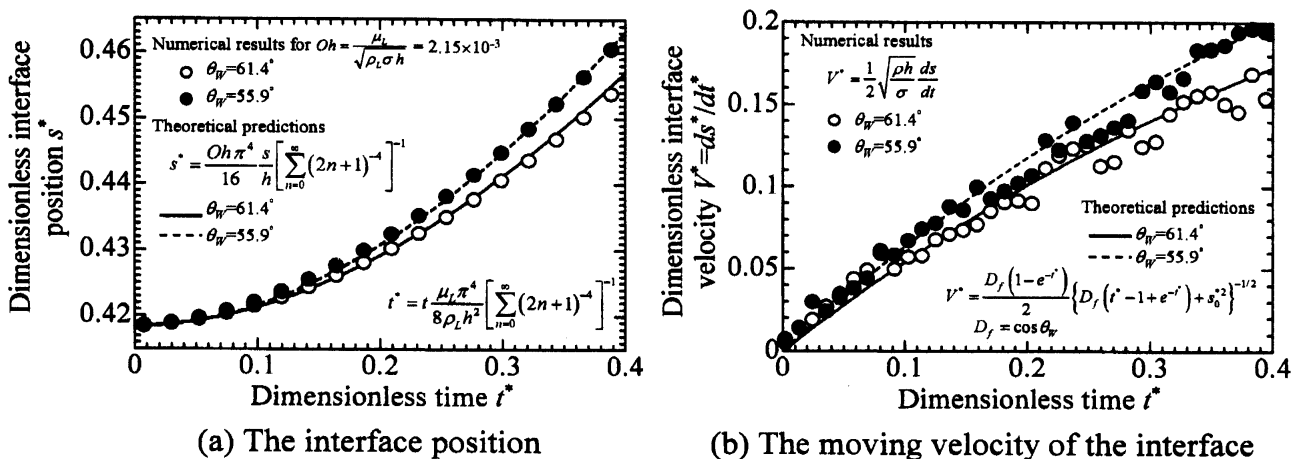


Fig. 3 Time history of the fluid interface position

4.3 マランゴニ効果による無重力下の気泡移動現象

本研究では，表面張力の不均一性を考慮する DIM 法の基礎的適用例として，無重力下で温度勾配が存在する液相中の単一気泡の運動⁽²⁵⁾を取り上げた．この解析では式

(19)のスカラー変数 T を流体温度と見なした。計算領域は3次元 (x, y, z) 座標系で単位立方セル $146 \times 7 \times 110$ 個で一様に分割し、 x 方向と z 方向の両端境界に固体壁を配置し、 y 方向境界に周期条件を適用した。左右 (x 方向) の壁面は各々一定の低温 ($T_1=1$) と高温 ($T_2=2$) に保たれる一方、上下 (z 方向) 壁面には断熱条件 ($\mathbf{n} \cdot \nabla T = 0$) を課した。気液各二相の密度、粘性、温度拡散は、 $\rho_L/\rho_G = 804.3$, $\mu_L/\mu_G = 429.2$, $\alpha_L/\alpha_G = 1.0$ の条件で設定された ($\rho_L = 1.0$, $\mu_L = 1.490 \times 10^{-2}$, $\alpha_L = 1.627 \times 10^{-4}$)。表面張力 σ は T の増加に反比例して一定割合で減少する (式(22)の比例係数 $\sigma_T = -2.082 \times 10^{-3}$) が、他の流体物性は T に依存しないと仮定した。基準表面張力 $\sigma_0 = 2.67 \times 10^{-2}$ に対する温度 T_0 は $(T_1+T_2)/2$ とした。初期条件では、静止液相で満たした計算領域全体に一定の温度勾配 $\nabla T_\infty = (T_2-T_1)/(146\Delta x)$ を与えて、直径 $d = 20\Delta x$ 相当の2次元円形状単一気泡の中心を左側の低温壁近傍の地点 $(x, z) = (24.5\Delta x, 55\Delta z)$ に配置した。流れ場の時刻は $\Delta t = 1.25 \times 10^{-2}$ 刻みで進めた。

この流れ場の代表的無次元数としては、以下の Marangoni 数 Ma , Prandtl 数 Pr , Weber 数 We が定義される⁽²⁵⁾。

$$Ma = \frac{u_0 R}{\alpha_L} \quad (24)$$

$$Pr = \frac{\mu_L}{\rho_L \alpha_L} \quad (25)$$

$$We = \frac{\rho_L u_0^2 R}{\sigma_0} \quad (26)$$

$$u_0 = \frac{|\sigma_T \nabla T_\infty| R}{\mu_L} \quad (27)$$

ここで、 u_0 は誘起代表速度、 R は初期気泡半径 $d/2 = 10\Delta x$ である。今回の解析は、 $Ma = 588.5$, $Pr = 91.5$, $We = 3.43 \times 10^{-2}$ ($u_0 = 9.575 \times 10^{-3}$) の条件で実施した。

Fig. 4 は、無次元時刻 $t^* = t \times u_0 / d = 10.47$ および 13.46 における流れ場の流速分布と温度分布を表している。この図に見られるように、高温側の気泡表面では表面張力が相対的に弱いために気液界面に沿って高温側から低温側へ流体が引っ張られることにより流れが誘起され、その結果として気泡が低温領域から高温領域に向かって移動している。また、気泡の後部に流に巻き込まれて低温度領域の液相が高温側に移動するとともに気泡上下の液相が気泡後部に回り込んでいることも確認される。Fig. 5 (a), (b) は各々、気泡の移動距離と速度の時間変化を示している。気泡速度は $t^* = 1$ 以降でほぼ一定に加速されて $t^* = 13$ 付近で最大値を取るが、高温壁に近づくにつれて減速していることがわかる。以上の数値結果は、2次元ではあるものの、微小重力環境で温度勾配を持つ液相中を気泡が高温側へ移動するという実在の現象⁽¹⁷⁾を定性的に良好に再現している。また、Level-set 法による従来の3次元数値解析 ($Ma = 452$, $Pr = 91.5$, $We = 0.021$)⁽²⁵⁾と比較して本解析では類似した流れ場の流速分布と温度分布の結果が得られている。よって、本 DIM 計算法は、不均一な表面張力効果が誘起する高密度比二相系の熱流動現象を適切に解析する能力を有すると考えられる。

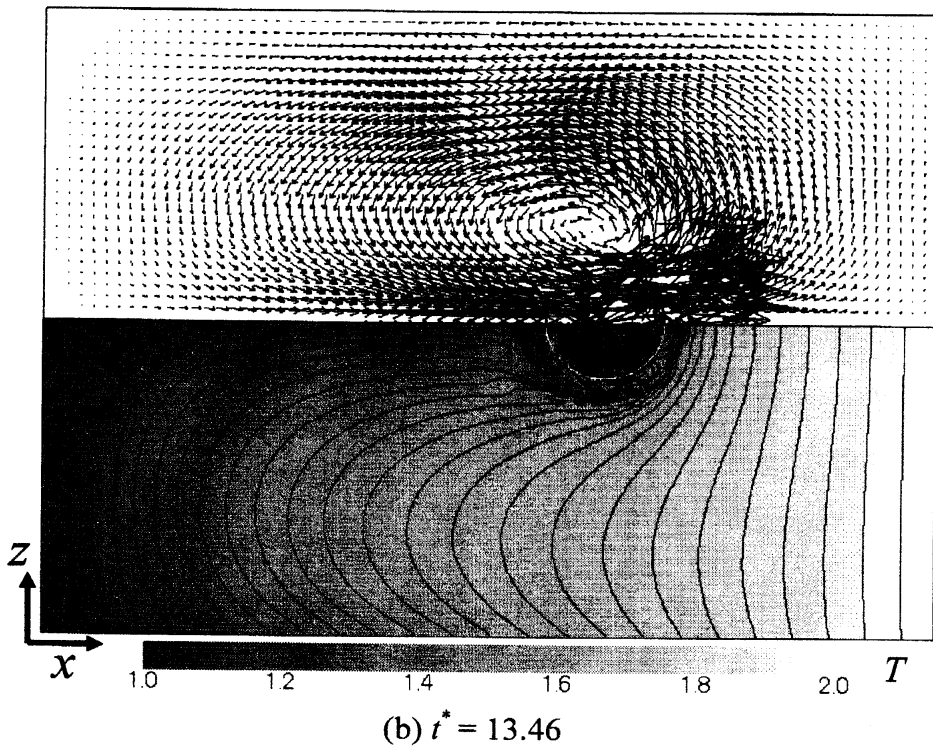
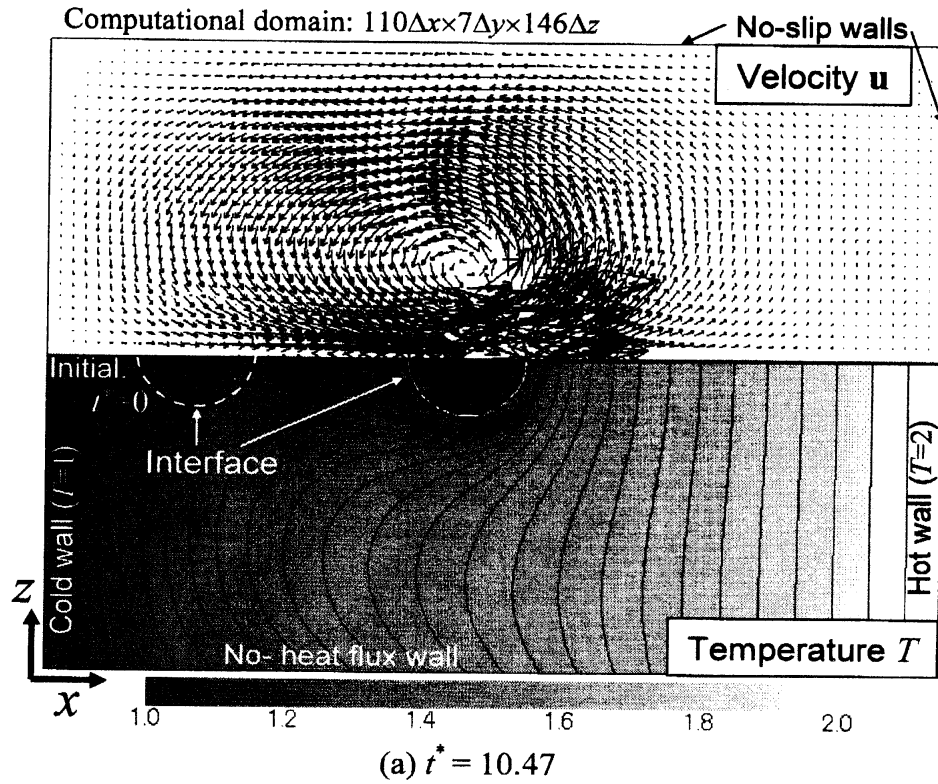


Fig.4 The flow velocity and temperature distributions around the 2D single bubble with initial diameter d moving in a liquid due to thermo-capillary force under no gravity at dimensionless time $t^* = (u_0/d)t$, for $Ma = 588.5$, $Pr = 91.5$ and $We = 3.43 \times 10^{-2}$.

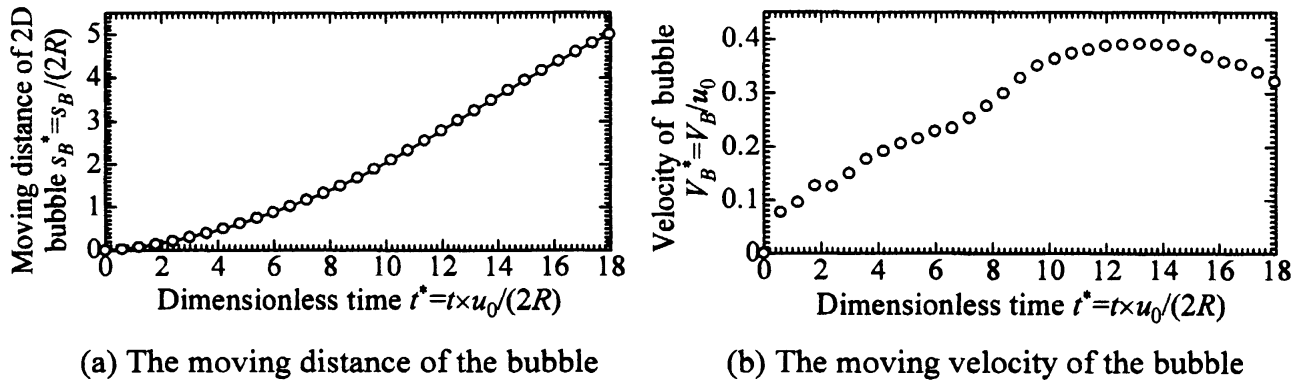


Fig.5 The motion of the 2D single bubble due to thermo-capillary force for $Ma = 588.5$, $Pr = 91.5$ and $We = 3.43 \times 10^{-2}$.

5. おわりに

本報では、非平衡系の自由エネルギーの概念を利用する拡散界面モデル (DIM) ⁽³⁾ と DIM に基づく等温・非等温下の高密度比二相流に対する数値流体力学 (CFD) 計算法^{(4),(5)}を解説し、固体表面の濡れ性と表面張力の影響が顕著になる基礎的流体問題への適用について述べた。空気-水系相当の高密度比条件での本 DIM 法による二相流 CFD 解析では以下の知見を得た。

- (1) 重力下の 2 次元液柱倒壊問題において、本計算法は固体壁面上の気液界面 (接触線) の運動を適切に予測する。
- (2) 平行平板間で毛細管力により駆動される気液二相流において、本計算法による界面の位置と移動速度の結果は、液相のみ考慮する 1 次元非定常流れの理論解と良く一致する。
- (3) 本計算法は、温度勾配の下で不均一な表面張力効果により生じる二相流現象を再現するポテンシャルを有する。

以上により、DIM は表面張力の効果が重要になる高密度比二相流の CFD 解析において有効な連続体界面モデルであり、DIM を導入した上記の CFD 計算法は毛細管力流れやマランゴニ対流などマイクロデバイスだけでなく微小重力環境下の気液二相流問題への基礎的適用可能性を備えていることが確認された。

実在する流体界面の厚さはナノメートルのオーダーであり、連続性流体の CFD 解析の空間分割スケールと比べると無視出来るほど非常に薄い。そのような界面は、流体運動とは異なる空間・時間スケールの下で形成されている。例えば、界面形成のための式(8)で η の勾配による拡散は非平衡状態で現れるのに対して、一般的な連続流体の力学の方程式は瞬時局所的な平衡状態で成り立つものである。しかしながら、本報で述べた二相流 DIM 計算法では、界面も連続性を持つ流体の一部と考慮して、非平衡熱力学の項を取り入れた流体力学方程式を流体相だけでなく界面領域にも適用する。その結果、界面は、計算領域の中では実在の界面よりもはるかに厚くなって現れ、複数の空間計算セルで分割される程度の物性変化領域に相当する。よって、本研究の DIM が再現する界面はあくまで人工的に拡張される仮想的な連続体であり、従来計算法の Front-Tracking 法⁽²⁶⁾や Volume-of-Fluid 法⁽²⁷⁾で界面がマクロスケールから見て厚み

のない相境界面と見なされる点で大きく異なる。一方、界面形状を定義する距離関数の時間空間発展方程式を解く Level-Set 法⁽²⁸⁾は、連続関数の移流・再構築演算を行う点で DIM 法と同じである。ただし、両者では界面構築のメカニズムが異なり、DIM 法では界面近傍でのみ界面指標関数の再構築が行われるため Level-Set 法よりも高精度の体積保存を容易に実現できることが予想される。しかしながら、各計算法には各々長所と短所があり、解析対象が同じであれば基本的には使用する方程式も同じであるから、今後はそれぞれの短所を長所で補い合うような融合・統合型 CFD 計算法の開発がさらに進展すると思われる。

謝 辞

上記成果は、文部科学省と日本学術振興会の支援の下、科学研究費補助金若手研究(B)課題 (No. 18760134) 「フェーズフィールドモデルに基づくマイクロ流路内二相流の界面追跡計算法の開発」 (平成 18~20 年度) で得られたものである。ここに感謝申し上げます。

References

- (1) IEEE ed., *Proceedings of the 21st International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS 2008)*.
- (2) Berthier, J., Clementz, Ph., Raccurt, O., Jary, D., Claustre, P., Peponnet, C. and Fouillet, Y., Computer aided design of an EWOD microdevice, *Sens. Actuator A – Phys.*, Vol. 127 (2006), pp. 283–294.
- (3) Anderson, D. M., McFadden, G. B. and Wheeler, A. A., Diffuse-interface methods in fluid mechanics, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 30 (1998), pp. 139–165.
- (4) Takada, N. and Tomiyama, A., A numerical method for two-phase flow based on a phase-field model, *JSME Int. J. Ser. B – Fluids Therm. Eng.*, Vol. 49 (2006), pp. 636–644 (doi:10.1299/jsmeb.49.636).
- (5) Takada, N., Matsumoto, J., Matsumoto, S. and Ichikawa, N., Application of a phase-field method to the numerical analysis of motions of a two-phase fluid with high density ratio on a solid surface, *Journal of Computational Science and Technology*, Vol. 2 (2008), pp. 318–329 (doi:10.1299/jcst.2.318).
- (6) Matsumoto, J. and Takada, N., Two-phase flow analysis based on a phase-field model using orthogonal basis bubble function finite element method, *Int. J. Comput. Fluid Dyn.*, Vol. 22 (2008), pp. 555–568 (doi:10.1080/10618560802238226).
- (7) van der Waals, J. E., The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous density variation, Transl. Rowlinson, J. S., *J. Stat. Phys.*, Vol. 20 (1979), pp. 197–244.
- (8) Cahn, J. W. and Hilliard, J. E., Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy, *J. Chem. Phys.*, Vol. 28 (1958), pp. 258–267.
- (9) Jamet, D., Lebaigue, O., Coutris, N. and Delhay, J.M., The second gradient method for the direct numerical simulation of liquid-vapor flows with phase change, *J. Comput. Phys.*, Vol. 169 (2001), pp. 624–651.
- (10) Onuki, A., Dynamic van der Waals theory, *Phys. Rev. E*, Vol. 75 (2007), 036304.
- (11) Ono, S., *Surface Tension* (in Japanese), 114–116, Kyoritsu Shuppan, Tokyo (1980).
- (12) Inamuro, T., Ogata, T., Tajima, S. and Konishi, N., A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows with large density differences, *J. Comput. Phys.*, Vol. 198 (2004), pp. 628–644.
- (13) Kim, J. 2005 A continuous surface tension force formulation for diffuse-interface models, *J. Comput. Phys.*, Vol. 204, pp. 784–804.

- (14) Yan, Y. Y. and Zu, Y. Q., A lattice Boltzmann method for incompressible two-phase flows on partial wetting surface with large density ratio, *J. Comput. Phys.*, Vol. 227 (2007), pp. 763–775.
- (15) Briant, A. J., Papatzacos, P. and Yeomans, J. M., Lattice Boltzmann simulations of contact line motion in a liquid-gas system, *Philos. Trans. Roy. Soc. London, Ser. A*, Vol. 360 (2002), pp. 485–495.
- (16) Yoshino, M. and Mizutani, Y., Lattice Boltzmann simulation of liquid-gas flows through solid bodies in a square duct, *Math. Comput. Simul.*, Vol. 72 (2006), pp. 264–269.
- (17) Hadland, P. H., Balasubramaniam, R., Wozniak, G. And Subramanian, R. S., Thermocapillary migration of bubbles and drops at moderate to large Marangoni number and moderate Reynolds number in reduced gravity, *Exp. Fluids*, Vol. 26 (1999), pp. 240–248.
- (18) Ichikawa, N. and Maeda, R., Flow behavior in vicinity of advancing interface with single- and two-component liquids in microchannel, *Proceedings of 8th International Conference on Miniaturized Systems in Chemistry and Life Sciences (Micro Total Analysis Systems 2004)*, Vol. 1 (2004), pp. 599–601.
- (19) Borcia, R. and Bestehorn, M., Phase-field model for Marangoni convection in liquid-gas systems with a deformable interface, *Phys. Rev. E*, Vol. 67 (2003), 066307.
- (20) Takada, N., Misawa, M. and Tomiyama, A., A phase-field method for interface-tracking simulation of two-phase flows, *Math. Comput. Simul.*, Vol. 72 (2006), pp. 220–226 (doi:10.1016/j.matcom.2006.05.006).
- (21) Takada, N. and Tomiyama, A., Application of interface-tracking method based on phase-field model to numerical analysis of free surface flow, *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, Vol. 55 (2006), pp. 149–156.
- (22) Chorin, A. J., Numerical solution of the Navier-Stokes equations, *Math. Comput.*, Vol. 22 (1968), pp. 745–762.
- (23) Ichikawa, N., Hosokawa, K. and Maeda, R., Interface motion of capillary-driven flow in rectilinear microchannel, *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 280 (2004), pp. 155–164.
- (24) Kobayashi, K., Inamuro, T. and Ogino, F., Numerical simulation of advancing interface in a micro heterogeneous channel by the lattice Boltzmann method, *J. Chem. Eng. Jpn.*, Vol. 39 (2006), pp. 257–266.
- (25) Ohira, H., Matsumoto, S., Mashiko, T. and Yoda, S., Numerical analysis of bubble migration in a rectangular duct under microgravity condition, *Proceedings of 6th International Conference on Multiphase Flow (ICMF2007)* (2007), Paper No. S1_Mon_C_8, CD-ROM.
- (26) Tryggvason, G., Bunner, B., Esmaeeli, A., Juric, D., Al-Rawahi, N., Tauber, W., Han, J., Nas, S. and Jan, Y.-J., A front-tracking method for the computations of multiphase flow, *J. Comput. Phys.*, Vol. 169 (2001), pp. 708–759.
- (27) Scardovelli, R. and Zaleski, S., Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 31 (1999), pp. 567–603.
- (28) Sussman, M., Smereka, P. and Osher, S., A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow, *J. Comput. Phys.*, Vol. 114 (1994), pp. 146–159.