

反応・相界面の非平衡を统一的に扱う流体数値モデル

Unified model for non-equilibrium fluid interface of chemical reaction and phase change

- 大島伸行, 北大工, 札幌市北区北 13 条東 8 丁目, E-mail:oshima@eng.hokudai.ac.jp
 姜 晨醒, 北大工, 札幌市北区北 13 条東 8 丁目
 Nobuyuki OSHIMA, Hokkaido univ., Kita-13 Higashi-8, Kita-ku, Sapporo, Japan
 Chen-xing JIANG, Hokkaido univ., Kita-13 Higashi-8, Kita-ku, Sapporo, Japan

This paper investigates a new mathematical model of globally non-equilibrium fluid interface phenomena for the diffusive solution of a level-set equation under the local equilibrium condition defined by the phase field approach. It gives formulations of local premixed flame and boiling gas-liquid interface, which are discussed on their common or individual characteristics in mathematics and physics.

1. レベルセット方程式の粘性解

レベルセット法の基礎となる等高線方程式(レベルセット方程式)を物理的な界面現象に適用する場合, 対象となる「界面」は現象を代表するスカラー量の等値面であると期待される. このようなスカラー量 ϕ が界面近傍で両法線方向に連続的に分布すると想定すると, 物理的に有限厚みをもつ「界面」は, 等値面 $\phi = \phi_0$ 表される界面要素が積層したものと定義される. このとき各界面要素(等値面 $\phi = \phi_0$)の挙動は等高線方程式

$$\frac{Du}{Dt} = -V|\nabla u| \quad \text{界面速度: } V = s(u_0) + c(u_0)\kappa \quad (\kappa: \text{平均曲率}) \quad (1)$$

により一般的に記述される. ここで, 物理的な界面現象が安定して存在するには複数の界面要素が同じ界面速度 V を持つことが条件となり, 異なる等値面 $\phi = \phi_0$ に対する等高線方程式の解について何らかの関係性を課すことが必要となる. このことは, 数学的には等高線方程式の解を一意に限定する粘性解の導出 (Chen et al. 1991⁽¹⁾) を行うことを意味し, レベルセット法の実際応用での数値安定化のためにしばしば適用される「界面近傍解の再初期化」がその具体的な方法を与えている. しかし, これらの拡張されたレベルセット法が物理現象とどのように関連付けられるかは十分議論されていない.

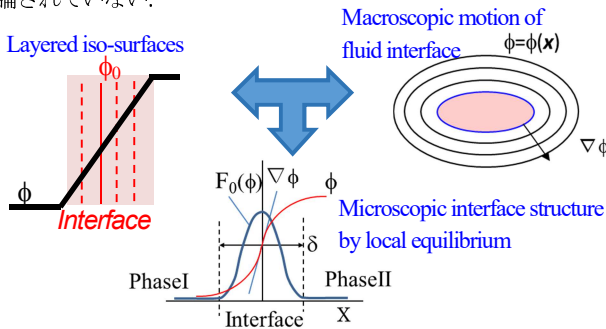


Fig.1 Concept of unified fluid interface model

一方, この問題は物理的にはスカラー場保存方程式と関連付けることができ, Liu ら(2011)⁽²⁾は予混合火炎の定常伝播を等速成長流で近似するモデルを, Oshima (2016)⁽³⁾は3次元かつ密度変化を伴う流体界面に拡張して, 質量保存と平均曲率流を考慮した定式

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \phi = \rho s |\nabla \phi| - \beta (F + D|\nabla \phi|)(\nabla \cdot \mathbf{n}) + \nabla \cdot (F + D|\nabla \phi|)\mathbf{n} \quad (2)$$

を与えた. ここで, 関数 F が界面法線勾配に Single wep 分布を与えるとして, たとえば Olsson et al. ら(2005)⁽⁴⁾の再初期化法の提案に従って,

$$F = A(\phi - \phi_-)(\phi - \phi_+) \quad (A: \text{比例定数}) \quad (3)$$

とすれば, スカラー ϕ は界面法線座標において \tanh 関数分布に収束する. このときパラメータ s は等速成長流を, パラメータ β は $c = \beta D/\rho$ によって平均曲率流を与える. Oshima (2016)が指摘するように, 定式(3)はレベルセット方程式(1)を条件式

$$F + D|\nabla \phi| = 0 \quad (4)$$

の下で解を求める変分式とも解釈でき, これは再初期化法と同様に, レベルセット方程式の粘性解を与える修正とみなせる. 以下ではこれを拡張レベルセット方程式と呼ぶ.

2. 自由エネルギーとフェーズフィールド方程式の導出

本研究では, さらに上記の拡張レベルセット方程式について, フェーズフィールド法における自由エネルギー最小化の考え方を導入して界面内部の局所平衡条件から再定義する. これによって, 等高線方程式の粘性解に基づく拡張されたレベルセット法が構築される(fig.1).

界面のマイクロ視点での物理モデルの代表例であるフェーズフィールド法では, 界面で区分される2つの相を表す物理量(相変化が分子構造のエンタルピーレベルの違いにより定義されるとしてオーダーパラメータと呼ぶ)の分布が非均一場で定義される自由エネルギーを最小化する変分方程式(一般には Ginzburg-Landau 方程式, 実数関数としては Allen-Cahn 方程式)として以下にモデル化される.

$$\frac{D\phi}{Dt} = -M \sum \frac{\delta \Phi_i}{\delta \phi}, \quad \Phi_i = \int F_i dV \quad (5)$$

要素面の移動と平衡分布を与える自由エネルギー汎関数を

$$\begin{aligned} F_1 &= \int s(\phi) f(\phi) d\phi, \\ F_2 &= \frac{1}{2} \{f(\phi)\}^2, \\ F_3 &= \{d(\phi) - c(\phi)\} f(\phi) |\nabla \phi|, \\ F_4 &= \frac{1}{2} \{d(\phi)\}^2 |\nabla \phi|^2 \end{aligned} \quad (6)$$

と仮定する. ここで, F_2 および F_4 は平衡界面を表す Allen-Cahn 方程式にて従来用いられ, また, F_1 は等速成長流を与える付加項として Kobayashi(1993)⁽⁵⁾により提案されている F_3 は本研究で新たに提案した. 式(6)それぞれの変分は以下のように求められる.

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Phi_1}{\delta \phi} &= \frac{\partial F_1}{\partial \phi} = sf, \\ \frac{\delta \Phi_2}{\delta \phi} &= \frac{\partial F_2}{\partial \phi} = f \left(\frac{\partial f}{\partial \phi} \right), \end{aligned}$$

$$\frac{\delta\Phi_3}{\delta\phi} = \frac{\partial F_3}{\partial\phi} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial F_3}{\partial\nabla\phi} \right) = -(d-c)f\kappa,$$

$$\frac{\delta\Phi_4}{\delta\phi} = \frac{\partial F_4}{\partial\phi} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial F_4}{\partial\nabla\phi} \right) = -d\nabla \cdot d\nabla\phi \quad (7)$$

これらを式(5)に適用し $Ma = 1$ を仮定すると,

$$\frac{D\phi}{dt} = \nabla \cdot d\nabla\phi + \dot{q}, \quad \dot{q} = -\left(s + \left(\frac{\partial f}{\partial\phi} \right) + (c-d)\kappa \right) \frac{f}{d} \quad (8)$$

となり, 生成量 \dot{q} をもつ保存方程式型の定式を得る. このとき, パラメータ d がマクロ視点では, 拡散係数 (あるいは勾配 $\nabla\phi$ (界面厚さ) の代表スケール) を表すことがわかる.

ここで, 自由エネルギー式(6)の総和が

$$\sum \Phi_i = \iint [sf d\phi + cf|\nabla\phi| + (f+d|\nabla\phi|)^2] dV$$

であることから, 平衡界面 (界面速度係数 $s = c = 0$) では自明な最小解

$$f + d|\nabla\phi| = 0 \quad (9)$$

を持つことがわかる. そこで, マクロ非平衡 ($s \neq 0$ or $c \neq 0$) においても, 界面近傍の局所平衡として式(9)が近似的に成り立つと考えて, 式(8)右辺を以下のように書き直すことができる.

$$RH = V|\nabla\phi| + \nabla \cdot (f + d|\nabla\phi|)\mathbf{n}, \quad V = s + c\kappa \quad (10)$$

これは, 本質的に Oshima の拡張レベルセット法 (予混合火炎モデル) の定式(2)を与えている.

上記の新たな定式モデルでは, 平均曲率流パラメータ c が拡散係数 d と一致するときのみ第3項 $F_3 = 0$ となり, 従来フェーズフィールド法の F_3 を含まない定式が, 常にマクロ場に平均曲率 ($c \neq 0$) を伴っていたことが明示されている. この項は, 界面がマクロ視点で非平衡性をもつ (すなわち, 界面速度 $V \neq 0$) 場合に, 局所平衡を界面要素 (積層した等値面) に適用して隣接界面要素との関係性を $|\nabla\phi|$ にて直接定式化したものと解釈することができる.

3. 気液流体界面のモデル化⁽⁶⁾

3.1 相変化のモデル化

前節の保存方程式(8) (または, (10)) を気液相界面に適用することを考え, 気相・液相を表す指標関数 ϕ として比エンタルピー h を採用すると, 界面の温度 θ における両相の差 $\Delta h = h(\theta) - h_g(\theta)$ が相変化の潜熱を与える. 界面曲率に対して十分薄い ($\kappa\delta \sim 0$) とき界面速度パラメータ (密度変化場では ρ_s, ρ_c) は観測等値面 $h = h_0$ の定義によらない定数とみなせ, 界面の蒸発・凝縮による成長流は界面移動に必要な熱量 $Q = \rho_s \Delta h$ と関係づけられる. ここで保存方程式(2)は蒸発・凝縮に要する生成 \dot{q} が対流・拡散フラックスとバランスして界面分布を与えることを意味している. たとえば, 圧力一定 (非圧縮性流れ条件) で蒸発量が液相側の過熱度 $\Delta\theta$ に比例すると仮定できるとき

$$\rho_s = \frac{C\Delta\theta}{\Delta h} \quad (C: \text{蒸発速度係数}) \quad (11)$$

と定式化される. ここで界面指標量 h とともに, 発熱量 Q を用いて温度 θ を与えるエネルギー方程式を連成して解くならば, 界面遠方 ($h = h(\theta)$ or $h_g(\theta)$) での大域的な対流・拡散場と接続する.

3.2 表面張力のモデル化

気液相界面が曲率をもって平衡する場合には, 界面張力が両相の圧力差と釣り合うと考え, 実質的な界面移動に関しては, 平均

曲率流を圧力差により誘起される付加的な流束 $j = \rho\mathbf{v}' \cdot \nabla h$ により補正する必要がある. 簡単のため平衡場 ($s = 0$) を仮定すると, 式(4)左辺第1項は

$$\rho V |\nabla h| \Rightarrow (\rho c \kappa \mathbf{n} - \rho \mathbf{v}') \cdot \nabla h = \nabla \cdot (\rho c \kappa \mathbf{n} - \rho \mathbf{v}') h + h \nabla \cdot (\rho c \kappa \mathbf{n} - \rho \mathbf{v}') \quad (8)$$

と修正され, スカラー h が保存されるためには

$$\nabla \cdot (\rho c \kappa \mathbf{n} - \rho \mathbf{v}') = 0 \quad (13)$$

の条件が課される. ここで系が非圧縮的のみならず, ポテンシャル ϕ によって付加流 $\rho\mathbf{v}' = -\nabla\phi$ を与えると,

$$\nabla \cdot \nabla\phi = -\nabla \cdot \rho c \kappa \mathbf{n} \equiv -\rho c \kappa^2 \quad (14)$$

を得る. このとき, 式(10)右辺第1項は式(14)第1項に置きなおされて, 曲率流効果に対して保存的な定式となる.

曲率をもつ平衡気液界面において表面張力 σ は界面を挟む両相の圧力差 Δp と釣り合う. 指標量に比エンタルピー h をとるとき, 界面法線方向の圧力勾配は $\nabla p \cdot \mathbf{n} = j$ により与えられ, 等方場の平衡形状である球面でのつり合いを界面法線座標 ξ の積分から求めると,

$$2\sigma\kappa = \Delta p = \int_{\delta} j d\xi = -\int_{\delta} \rho c \kappa |\nabla h| d\xi \equiv \rho c \kappa \Delta h \quad (15)$$

の関係を得る. ここで, 界面厚さ δ において曲率流一定 $\rho c \kappa$ と近似すると, 曲率流係数 $\rho c = 2\sigma/\Delta h$ が厚さ δ によらない値として定まることに注意されたい.

上記の付加流束 j は界面近傍に限られ遠方の平衡場では 0 となることから, 大域的な界面移動を与える媒質流れ $\rho\mathbf{v}$ とは時間・空間スケールが異なる. また, 薄い界面すなわち相対的な曲率が小さい条件では界面遠方の平衡場の熱力学条件に与える影響が小さいと仮定できる. そこで, 媒質の力学的つり合い (運動方程式) においては式(9)を満たす補正された流束を用い, 媒質流の大域的圧力と区別して評価する, ことが数値精度の観点から適切と考えられる.

3.3 人工の厚みによる界面モデル

上記に導出した拡張レベルセット定式(10)では, 界面速度 $V = s + c\kappa$ による大域的な移動変形とともに, 局所的な法線分布 $|\nabla\phi| = -f/d$ を与える. ここで, 常温常圧で平衡する気液界面では多くの場合に厚みが分子スケール ($\sim \text{nm}$) 程度に薄く, 可視スケール ($> \mu\text{m}$) の大域的界面形状をとらえるような数値計算では事実上解像できない. ここで, 定式(4)では両者の効果が独立分離して表現されていることに着目し, 数値的に解像可能な人工の厚みを界面分布に与える.

ここで条件式(9)による最大勾配を界面厚さ δ の指標として,

$$\frac{1}{\delta} \equiv |\nabla\phi|_{\max} = [-f/d]_{\max} \quad (16)$$

と評価すると, たとえば, 関数 f のモデル式(3)に対して

$$4A = \delta(\phi_+ - \phi_-)^2 \quad (17)$$

を得る. 物理界面厚さが解像できない問題では, 人工の界面厚さ δ を格子サイズの定数倍 (経験的には $3\sim 5$ 程度) とすることで, 条件式(5)を数値的に安定に収束させることができる. このとき, 拡張レベルセット方程式(10)は右辺第2, 3項が 0 に収束する限りにおいて, 関数 f すなわち人工の厚みを陽に用いない定式となっており, 大域的な界面移動に対するモデルには修正を必要としない. これはレベルセット方程式(1)の数学的性質を正しく引き継ぐもので, 保存方程式を直接的に扱う定式(8)に対しての利点となっている.

4. 解析例⁶⁾

相変化を伴わない界面 ($s=0$) の場合として、液相流中に一定量の気相を導入する計算例を示す。曲率流を伴わない場合($c=0$)、孤立した気相（気泡）が液相せん断流れによる変形分裂を受けつつ流下する(fig.2a)。一方、曲率流に補正を伴わない場合($c \neq 0$)、気相変形は抑制されるが分裂が促進して、体積減少を伴い係数 c が大きい場合は下流で気相が消失する(fig.2a)。相変化を伴わない（小さい）条件で液相（気泡）が安定に保たれる平衡状態を与えるには補正(14)が必要であることが分かる。

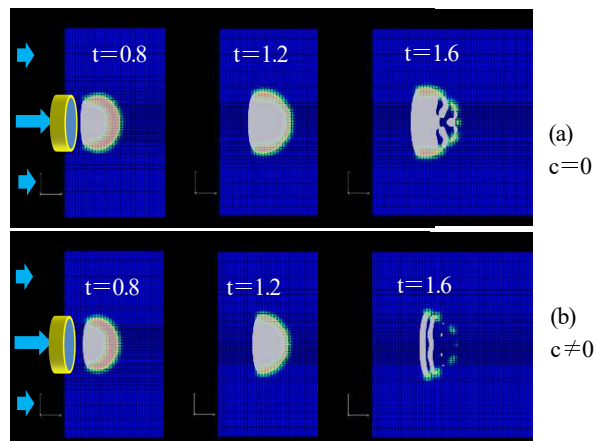


Fig.2 Gas bubble in a liquid jet flow

謝辞

本研究の一部は科学研究費補助金(基盤 B 15H03912)の助成により行われた。

参考文献

- (1) Chen Y., Giga Y., Goto S., *Journal of differential geometry*, 33 (1991) 749-78
- (2) Liu Y., Oshima N., *J. Thermal Science and Technology*, Vol.6, No.1 (2011) 140-153
- (3) Oshima N., *Mechanical Engineering Letters*, 2 (2016)
- (4) Olsson E., Kreiss G., *J. comput. physics*, 210 (2005) 225-246
- (5) Kobayashi R., *Physica D* 63 410-423 (1993)
- (6) 大島、機械学会計算力学講演会 #266 (2016)