自由界面を含む多相流の直接数値解析法

功 刀 資 彰^{*1}Direct Numerical Algorithm for Multiphase Flow
with Free Surfaces and Interfaces

Tomoaki KUNUGI

This paper is to describe a new direct numerical procedure for solving general multiphase flow problems with many free surfaces and interfaces. Since conventional cell volume fraction approaches, such as SOLA-VOF, use the donor-acceptor procedure for the transport of fluid-segments, they cannot transport the interface slope with sufficient accuracy. In the present study, a new accurate algorithm for interface advection and its reconstruction, called MARS (Multi-interfaces Advection and Reconstruction Solver), was developed. It consists of the continuum surface force (CSF) model for surface tension and a new line-segment algorithm for capturing and connecting the interface between neighborhood computational cells. In order to show the potential of the MARS, some direct numerical simulation results for the formation and agglomeration of bubbles in a bubble column were presented as an example.

Key Words: Computational Fluid Dynamics, Multiphase-Flow, Free Surface Capture, Interface Reconstruction, Line-Segment Algorithm, CSF Model, Bubble Behavior

1. 緒 言

自由界面を含む多相流現象は広範な工学分野で頻繁に出現する極めて重要なものであり、古くから実験的・解析的によく調べられている。しかし、水中に発生した気泡が周辺の他の気泡と合一し、より大きな気泡を形成したり、水面の大きな波立ちから液滴が発生するといったごく基本的な現象ですら数値解析できていないのが現状である。一般に自由界面流解析においては、界面における表面張力効果を正確に考慮する必要があり、このために界面曲率を精度よく求めることが重要な課題である。界面曲率を高精度に求めるためには界面形状を高精度に追跡する必要がある。自由表面を含む流れ解析の一つの典型である気泡流解析では、従来から界面を一種の膜としてその挙動を境界積分法^{(1)~(3)}で追跡する手法(zero Reynolds 数流れか非粘性流に限定)が用いられている。また、自由界面形状を精度よく追跡するために有限要素法^{(4)~(6)}、境界適合座標系^{(7)~(10)}、Lagrangian 法⁽¹¹⁾等の適用が試みられているが、いずれの方法も界面追跡のために計算格

子の頻繁な再構成が必要であり、その際に数値誤差や数値不安定を発生する可能性がある。

このような計算格子の再構成を必要としない解析手法として、MAC(Marker and Particle)法⁽¹²⁾⁽¹³⁾に代表される質量をもたないマーカー粒子を追跡して界面形状を追跡する方法があるが、混入した粒子が一部で凝集したり界面近傍に粒子が存在しない場合が生ずるため、粒子数の保存や粒子再配置等についての人為的な制御が必要である。また、界面が合一するような場合には界面近傍の粒子の制御は極めて困難である。自由界面を含む流れの解析に威力を示しているのは、流体の占有率(VOF: Volume of Fluid, 流体率と呼ばれる)に着目し、その輸送方程式を Navier-Stokes 式と連成して解く SOLA-VOF 法⁽¹⁴⁾である。富山ら⁽¹⁵⁾⁽¹⁶⁾は改良 SOLA-VOF 法による気泡流の二次元および三次元詳細解析を精力的に行っているが、解析の前提条件として気泡の合一は生じないものとしている。これは、VOF 法が局所移動体積を完全に保存する Donor-Acceptor 法という特殊であるが高精度な離散化手法を適用しながら、界面こう配の輸送が不完全なためにその能力を十分に生かし切っていないことに原因があると考えられる。VOF 法系統で界面こう配を考慮した流体率輸送法は、詳細は不明だが Youngs⁽¹⁷⁾

* 原稿受付 1996年7月29日。

^{*1} 正員、日本原子力研究所 (〒319 11 茨城県那珂郡東海村白方白根2-4)。

の研究や Ashgriz ら⁽¹⁸⁾ の FLAIR 法が報告されているのみである。

最近, Zaleski ら⁽¹⁹⁾ は改良された VOF 法による自由界面の直接数値シミュレーションのレビューを行い, Kelvin-Helmholtz 不安定性, 液滴崩壊, Rayleigh-Taylor 不安定性等への適用で大きな成果を挙げていることを報告している。そこで使われている界面輸送の方法は Lafaurie ら⁽²⁰⁾ の SURFER 法に基づいていると想像されるが, 詳細については非公開な参考文献が多いために明らかではない。著者の知る限りにおいて, VOF 法での破碎波からの液滴発生や界面合一といった極端な界面変形の研究はこのレビューでの紹介事例以外に行われていない。

一方, 矢部ら⁽²¹⁾ は非保存形の流体方程式に基づく CIP(Cubic Interpolated Propagation)法へ界面で連続なカラー関数(VOF 率と同様)デジタイザ(tangent 変換)の導入によって界面を捕獲し, また Osher ら⁽²²⁾⁻⁽²⁴⁾ は Level Set 法を開発して界面捕獲を行って多相流の直接解析を可能としている。しかし, これらの手法は, 界面で連続なカラー関数に対してデジタイズや Level-Set により界面捕獲を行うため, 界面でのカラー関数分布がデジタイザ関数形と整合しない場合や微小な気泡や液滴が発生した場合には, 一部の微小気泡や液滴が消失する可能性があり, 質量保存が損なわれることも考えられる。

そこで, 本研究では VOF 法の特徴である質量の完全な保存性を保ちつつ, その欠点である界面こう配輸送の不正確性を克服する新しい流体率輸送法を開発し, 最終的には相変化を伴う固体・液体・気体の混在する多相熱流体の統一的直接解析手法の構築を目指している。

本報告では, 表面張力モデルの取扱いおよび新しく開発した「界面こう配を考慮した界面輸送法」を含む多相流の直接解析手法 MARS(Multi-interface Advection and Reconstruction Solver)の概要を述べるとともに, 解析例として, 気泡塔下部オリフィスから連続的に発生する気泡および発生した気泡同士の合一挙動を解析した結果を示す。

2. おもな記号

- C : 連続関数
- $\tilde{C}$: 内挿関数
- f, F : 界面こう配
- $F, \delta F$: 体積率, 流体率, 移動流束
- F_v : 界面セル中心での表面張力による体積力
- F_s : 界面上での表面張力

- g : 規格化関数 [界面で $g(x)=1$]
- G : 重力
- h : 遷移領域の幅
- n : 単位法線ベクトル $=\nabla F_0$
- $\bar{n}$: 規格化した単位法線ベクトル $=n/|n|_0$
- P : 圧力
- P_s : 表面張力に誘起される界面での圧力差
- S : 面積, 面積率
- u, U : 速度
- v : 速度
- V : 体積, 体積率
- x_0, x_1, x_2 : 規格化した格子セルの中心座標
- $\Delta x, \Delta y$: 格子セル幅
- $t, \delta t, \Delta t$: 時間, 時間刻み
- κ : 曲率
- μ : 粘性係数
- $\rho, \bar{\rho}$: 密度, 界面での密度
- σ : 表面張力係数
- τ : 粘性応力
- 添 字
 - $()_\alpha$: 流体 α に関する変数
 - $()_s$: 表面上の関数
 - $\sim$: 時間発展における中間値
 - $\langle \rangle, \langle \rangle_M$: 平均, 物質体積比の総和
 - $[]$: C, F 値の跳値, 例えば,

$$[C] = C_2 - C_1 = 1, [F] = F_2 - F_1 = 1.$$

3. 表面張力モデル

二つの連続媒質の境界面を扱う問題は極めて狭い遷移層を挟む不連続問題であるが, Brackbill ら⁽²⁵⁾ による CSF(Continuum Surface Force)モデルでは, この遷移層を幅 h の遷移領域として連続関数 C で近似し, 不連続問題を一つの連続体における境界値問題へ置き換えている。したがって, 遷移領域 $C_1 \leq C \leq C_2$ での曲率は $\kappa < 1/h$ となる(ここで注意すべきことは, 遷移層の厚さ $O(h)$ は格子セルの解像度 Δx に依存することになる点である)。

この連続関数 C の導入により, 以下に示すように界面での圧力差を遷移領域の全域へ作用する体積力としての表面張力で置き換えることができる。ここでは, 問題を単純化するため, 一, 二次元モデルを用いて記述するが, 三次元モデルへの拡張は容易に可能である。

本研究では, Kothe ら⁽²⁶⁾ の RIPPLE コードと同様に VOF 関数 F がこの連続関数 C と同等な働きをもつとし, 流体 1 と流体 2 の界面上で働く法線方向の圧

力境界条件は粘性力 τ と表面張力係数 σ の変化を考慮した一般形として次式で考慮した⁽²⁷⁾。

$$(P_1 - P_2 + \sigma\kappa)\hat{n}_i = (\tau_{1ik} - \tau_{2ik})\hat{n}_k + \frac{\partial\sigma}{\partial x_i} \quad \dots (1)$$

ここで、 P_α は流体 α ($\alpha=1, 2$) の圧力、 $\hat{n}$ は流体 2 へ向かう単位法線ベクトル、 τ_{aik} は粘性応力テンソルである。

式(1)で界面領域に完全流体を仮定し、表面張力係数が界面に沿って変化しないものとすれば、界面での圧力差 $P_s (= P_2 - P_1)$ は次式のように書ける。

$$P_s = \sigma\kappa \quad \dots (2)$$

界面曲率 κ は、VOF 関数から求められる単位法線ベクトル $\hat{n}$ (定義点は図 1 参照) を用いて次式から求められる。

$$\kappa = -(\nabla \cdot \hat{n}) = \frac{1}{|\hat{n}|} \left[\left(\frac{\hat{n}}{|\hat{n}|} \cdot \nabla \right) |\hat{n}| - (\nabla \cdot \hat{n}) \right] \quad \dots (3)$$

さて、CSF モデルでは界面上の点 x_s の単位面積当たりの表面張力 $F_s(x)$ は、界面域での非粘性流体の仮定から界面法線ベクトルを用いて、次式で表される。

$$F_s(x_s) = \sigma\kappa(x_s)\hat{n}(x_s) \quad \dots (4)$$

体積力 F_v は、遷移領域の幅の極限 ($h \rightarrow 0$) で上式の単位面積当たりの表面張力 $F_s(x)$ と釣り合う力として次式で与えられる。

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Delta V} F_v(x) d^3x = \int_{\Delta S} F_s(x_s) dS \quad \dots (5)$$

ここで、 ΔV は距離 h 離れた界面に平行な二つの面と界面に垂直な四つの面に囲まれた微小体積要素を表しており、右辺は ΔV の界面上の微小面積 ΔS 上での面積分である。

式(5)を遷移領域内のみに適用し、それ以外の領域では $F_v = 0$ とするため、Delta 関数 $\delta[\hat{n}(x_s) \cdot (x - x_s)]$

を導入して式(4)を考慮すれば、以下の式を得る。

$$\begin{aligned} \int_{\Delta S} F_s(x_s) dS &= \int_{\Delta V} F_s(x_s) \delta[\hat{n}(x_s) \cdot (x - x_s)] d^3x \\ &= \int_{\Delta V} \sigma\kappa(x_s) \hat{n}(x_s) \delta[\hat{n}(x_s) \cdot (x - x_s)] d^3x \quad \dots (6) \end{aligned}$$

この Delta 関数は $h \rightarrow 0$ の極限で内挿関数 $\tilde{C}(x)$ のこう配と以下の関係をもつ⁽²⁵⁾。

$$\lim_{h \rightarrow 0} \nabla \tilde{C}(x) = \hat{n}[C] \delta[\hat{n}(x_s) \cdot (x - x_s)] = \nabla C(x) \quad \dots (7)$$

ここで、式(7)を式(6)へ代入すると、

$$\int_{\Delta S} F_s(x_s) dS = \lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Delta V} \sigma\kappa(x_s) \frac{\nabla \tilde{C}(x_s)}{[C]} d^3x \quad \dots (8)$$

となる。したがって、式(5)と式(8)の比較から表面張力による体積力 F_v は次式のようにモデル化できる。

$$F_v(x) = \sigma\kappa(x) \frac{\nabla \tilde{C}(x)}{[C]} \quad \dots (9)$$

ここで、非圧縮性流体への応用を考えた場合、 $\tilde{C}(x)$ の代わりに密度 $\rho(x)$ を用いることになる。この場合、界面での密度が $\bar{\rho} = (\rho_1 + \rho_2)/2$ となるように規格化する、つまり、関数 $g(x) = \rho(x)/\bar{\rho}$ [$\because$ 界面で $g(x) = 1$] を導入すると、以下の関係が得られる。

$$\nabla \tilde{C}(x) = \nabla C(x)g(x) = \nabla F(x)\rho(x)/\bar{\rho} \quad \dots (10)$$

したがって、体積力 F_v の最終形は次式となる。

$$\begin{aligned} F_v(x) &= \sigma\kappa(x) \frac{\nabla F(x)}{[F]} \frac{\rho(x)}{\bar{\rho}} \\ &= \sigma\kappa(x) \nabla F(x) \rho(x) / \bar{\rho} \\ \therefore F_v(x) &= \sigma\kappa(x) n(x) \rho(x) / \bar{\rho} \quad \dots (11) \end{aligned}$$

4. 界面こう配を考慮した界面輸送法

VOF 法では、Donor-Acceptor 法の考えから、微小時間に輸送される流体の体積を厳密に保存し、界面をばかさないため、解析空間の微小面積(格子セル)において、隣接するセル間を横切る界面のこう配を無視した流体輸送を行っている。このため、進行方向に斜めな界面は計算を続けるうちにやがて流れ方向に対して垂直な界面となり、二次元問題では斜め界面は階段状となる。この欠点を克服するため、移動流束 $\delta F (= u \delta t)$ の計算を行う際に、界面のこう配 ($\partial F / \partial x$) を考慮する。すなわち、流れ方向に垂直な断面の流体面積率を $S(x)$ とすると移動流束 δF は以下の式で書ける。

$$\delta F = \int_{x-u\delta t}^x S(x) dx \quad \dots (12)$$

したがって、 F の移動量に界面こう配を考慮する問

Fig. 1 Unit normal vector $\hat{n}$, Curvature κ and Volume force F_v

題は $S(x)$ の補間問題へ置き換えて考えることができる。

議論を単純化するため、一次元問題を考える。まず、格子セル内での曲率が無視できる程度の、流れ方向に斜めな界面を考える。注目しているセルの左側面から右側面の間で界面より下に存在する流体の面積 $S(x)$ が連続的に変化しているものとすれば、 $S(x)$ と連続関数 $C(x)$ には以下の関係が成立する。

$$S(x) = C(x) \cdots \cdots (13)$$

すなわち、連続関数 $C(x)$ の関数形が既知であれば流体の面積率 $S(x)$ が求まることになる。この $C(x)$ を line-segment 関数と呼ぶ。

line-segment 関数を利用した FLAIR 法⁽¹⁸⁾ では、隣り合う二つの格子セルの界面における界面こう配の連続性を考慮した line-segment 関数を仮定し、その積分値と界面こう配判定図によって界面こう配を決めている。このため、格子セル内部で関数不連続という問題が生じている。したがって、本研究のように表面張力を格子セル中心に働く体積力として評価する場合には、格子セル中心における界面こう配を周囲のセルから別途計算する必要がある。また、Youngs⁽¹⁷⁾ は各セル内部で界面こう配を求めて(求め方の詳細は不明)流体率を輸送する方法を提案しているが、隣接する格子セル境界での流体率の連続性を無視しているようである(Ashgriz⁽¹⁸⁾ の論文中の図2を参照)。

SURFER 法⁽²⁰⁾ は格子セル内部を再分割し、移動流体 δF を段階的に輸送する。このため界面が流れ方向に垂直であれば正確に輸送されるが、平行な場合には輸送されず、界面法線ベクトルと流れとのなす角度(臨界角)に応じて界面輸送方向を変更しなければならない。これは、VOF 法と同様に界面輸送に界面こう配を考慮していないためであると考えられる。最近 Zaleski ら⁽¹⁹⁾ は、隣接セルの流体率から各セルごとに界面こう配に近い line-segment 関数を計算し、

SURFER 法で流体率輸送、Lagrangian 法で界面の輸送を行うことにより、密度変化を伴う多相流の直接シミュレーションを行っていると推察されるが、その詳細については明らかではない。

本研究では、以上のような line-segment 関数を利用した従来の方法の欠点を克服するため、line-segment 関数 $C(x)$ として以下に示す単純な一次関数形を提案する。これは、格子セル内での界面こう配を一次関数で近似し、そのこう配と流体率から格子セル境界での流体率を計算する方法であるが、表面張力モデルの精度が格子分解幅以上には期待できないことを考慮すれば妥当な近似といえる。また、本手法の多次元への拡張は極めて容易である。以下に具体的な手法を述べる。

曲率が無視できる程度の格子が確保できれば、次式のように界面の法線ベクトル成分を用いて界面こう配 f' および line-segment 関数 $C(x)$ を定義できる。

$$C(x) = f'x + \frac{1}{2}, \quad f' = \frac{\partial F}{\partial x} \Big|_{x_0} = \frac{n_y/\Delta y}{n_x/\Delta x} \Big|_{x_0} \cdots \cdots (14)$$

図2は、幅 $(\Delta x, \Delta y)$ で規格化した格子セル ΔV 内の流体が負の界面こう配 ($f' < 0$) をもつ場合の概念図を示したものであり、実際の流体界面 $S(x)$ を line-segment 関数 $C(x)$ で近似した様子を模式的に表している。

したがって、line-segment 関数 $C(x)$ より下方に存在する流体部分の近似断面積 $S(x)$ は、台形の面積として次式から解析的に計算できる(ここで、 x_0 は界面こう配 f' を求めた x 座標である)。

$$S(x) \approx f'(x_0 + x) + \frac{1}{2}, \quad [\because 0 \leq S(x) \leq 1] \cdots \cdots (15)$$

例えば、界面こう配 $0 < f' < 1$ の場合の流体率 $F(x)$ は、図2の規格化した格子セルを右側に移動して右側境界が $y=1$ となるときのセル中心点を x_1 、同様に右側に移動して左側境界が $y=1$ となるときのセル中心点を x_2 とすると、以下に示すように任意の x に対して計算できることになる。

$$\left. \begin{aligned} F(x) &= 0.0 & \text{for } x \leq -x_2 \\ F(x) &= \frac{1}{2}f'[x - (-x_2)]^2, & \text{for } -x_2 < x \leq -x_1 \\ F(x) &= f'x + \frac{1}{2} & \text{for } -x_1 < x \leq x_1 \\ F(x) &= 1 - \frac{1}{2}f'(x_2 - x)^2, & \text{for } x_1 < x \leq x_2 \\ F(x) &= 1.0, & \text{for } x_2 \leq x \end{aligned} \right\} \cdots \cdots (16)$$

Fig. 2 Normalized computational cell, fluid-area fraction $S(x)$ and a line-segment function $C(x)$

これらの式は、界面こう配が $-1 < f' < 0$ の場合や $1 < |f'|$ についても同様に得られ、これらすべての場合をまとめると、次式のように簡潔に書き表すことができる。

$$\left. \begin{aligned} \text{sign} &= \text{sign}(f') \\ x_1 &= \frac{1}{2} \left| \text{sign} \times \frac{1}{f'} - 1 \right|, \\ x_2 &= \frac{1}{2} \left(\text{sign} \times \frac{1}{f'} + 1 \right) \\ F' &= \text{Min}(1, \text{sign} \times f') \\ \text{(i)} \quad x_1 &< x \\ x_0 &= x_2 - \sqrt{-\frac{2}{f'} \left[F_{\text{given}} - \frac{1}{2} (1 + \text{sign}) \right]}, \\ \text{(ii)} \quad -x_1 &\leq x \leq x_1 \\ x_0 &= \text{sign} \times \left(F_{\text{given}} - \frac{1}{2} \right) \frac{1}{F'}, \\ \text{(iii)} \quad x &< -x_1 \\ x_0 &= x_2 + \sqrt{\frac{2}{f'} \left[F_{\text{given}} - \frac{1}{2} (1 - \text{sign}) \right]}, \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (17)$$

したがって、注目している格子セルの流体率 F および界面こう配 f' が既知であれば、式(17)からセル中心位置 x_0 が求められ、式(15)より正確な格子セルの境界面積率 $S(x)$ が計算できる。ただし、 $f' = 0$ の場合は $S(x_0 + x) = F_{\text{given}}$ (既知) であり、 $f' = \pm \infty$ の場合は Donor-Acceptor 法⁽¹⁴⁾ を適用する。

以上のように、界面法線ベクトルから界面こう配を計算することおよび line-segment 関数を利用して解析的に格子境界面積率を計算することにより界面が捕獲できる。また、求めた境界面積率を隣接する格子セル境界で共有することによって格子セル間での流体率の連続性を保つことができる。

ここで、非圧縮性流体の界面輸送についての問題点を整理すると、次の三つの性質が重要であると考えられる。

- (1) 界面形状の正確な捕獲と輸送 (形状保存)
- (2) 界面格子セル内の流体率の正確な輸送 (体積保存)
- (3) 格子界面での流体率の連続性の保証 (界面再構築)

SOLA-VOF⁽¹⁴⁾ の Donor-Acceptor 法や SURFER⁽²⁰⁾ は (2) を考慮しているが、(1) と (3) が課題。矢部ら⁽²¹⁾ や Osher ら⁽²²⁾ は (1) と (3) を考慮しているが、(2) が課題 (Chang ら⁽²⁴⁾ は面積保存のために Hamilton-Jacobi 式を用いた再初期化計算法を提案しているが、形状保存との関連が不明確)。Youngs⁽¹⁷⁾ や Zaleski ら⁽¹⁹⁾ は (1) と (2) を考慮しているが (3) が課題。Ashgriz ら⁽¹⁸⁾ は (2) と (3) を考慮しているが、界面

こう配と表面張力モデルの直接的な結合がないため (1) が課題である。

本手法については、これまでに (2) と (3) の取扱い法を示したので、以下では (1) の界面輸送法を検討する。

界面の輸送は VOF 法と同様な流体率 F の移流方程式を保存形に書き直した以下の移流方程式に基づいて行う。

$$\frac{\partial \langle F \rangle}{\partial t} + (U \cdot \nabla) F = \frac{\partial \langle F \rangle}{\partial t} + \nabla \cdot (FU) - (F \cdot \nabla) U = 0 \quad \dots\dots\dots (18)$$

ここで、流体率 F の移流方程式に保存形を用いたのは、単なるカラー関数の移流でなく、 F を流体の物理量として移流するためである。

上式を解析空間で差分化して解く場合、急しゅんな界面を正確に追うためには細かい格子と高次差分を用いる必要があるが、高次差分を用いればより多くの格子点情報を必要とするため Filtering 効果によって界面形状は丸くなりやすく、液滴崩壊や気泡分裂など界面形状が大きく乱れる場合の正確な界面捕獲は困難である。このため矢部ら⁽²¹⁾ は非保存形のカラー関数およびその一階微分の移流方程式を用いて数値拡散の極めて少ない界面輸送を実現し (CIP 法)、Osher ら⁽²²⁾ は非保存形の Level-Set 関数の移流方程式を密度および粘性係数の移流方程式に連成させて界面形状の捕獲と輸送を行っている。

本研究では、各方向の隣接する格子セル境界の流体率の連続性を保証しながら界面輸送を行うため、1 時刻ステップ内での界面輸送計算を座標軸に沿った方向ごとに多段階で行う方法を提案する。本手法での F の二次元移流方程式の差分表示は次式で表せる。

$$\frac{\tilde{F} - F^n}{\Delta t} = - \frac{(u^{n+1} F^n)_e - (u^{n+1} F^n)_w}{\Delta x} + F^n \left(\frac{u_e^{n+1} - u_w^{n+1}}{\Delta x} \right) \quad \dots\dots\dots (19 \cdot a)$$

$$\frac{F^{n+1} - \tilde{F}}{\Delta t} = - \frac{(v^{n+1} \tilde{F})_n - (v^{n+1} \tilde{F})_s}{\Delta y} + \tilde{F} \left(\frac{v_n^{n+1} - v_s^{n+1}}{\Delta y} \right) \quad \dots\dots\dots (19 \cdot b)$$

ここで、上添字 ($n, n+1$) はそれぞれ時刻を表し、 $\tilde{F}$ は中間時刻の F 値を表している。下添字 (e, w, n, s) はそれぞれ格子セルの界面を表している。

具体的な界面輸送手順を以下に述べる。

- (1) 界面法線ベクトル n を F^n 値から求める。
- (2) x 方向の界面輸送を行い、式(19・a)で $\tilde{F}$ 値を求める。
- (3) $\tilde{F}$ から界面法線ベクトルを再計算する。

(4) y 方向の界面輸送を行い、式(19・b)で F^{n+1} 値を求める。

本手法は三次元へも同様に拡張でき、三次元界面輸送を精度よく計算することができる(紙面の都合上示していないが、立方体計算領域の一つのコーナにある球が等速度で対角コーナ部へ斜めに移動する問題を解き、界面輸送が精度よく行われていることを確認している)。

以上のように、本手法は三つの界面輸送に関する重要な性質を具備した本格的な界面輸送法といえ、以降では「界面こう配を考慮した界面輸送法」と称する。

5. 自由界面を含む多相流の直接数値解析法

ここでは、自由界面を含む非定常多相流動の典型的な問題として、気泡塔内における気泡の連続発生と発生気泡同士の合一挙動を解析する問題を取り上げ、4章で新しく開発した「界面こう配を考慮した界面輸送法」に基づく自由界面を含む多相流の直接数値解析法の構築を試みる。なお、固体・液体・気体を含む多相流の直接数値解析法を構築するのが本研究の最終目的であるが、その第1段階として、ここでは流体(液体と気体)側のみの多相流について基本的な解析手法の構築を行う(固体は存在しているが移動しない)。

本解析法は多相熱流動解析の統一解法を目指しており、流体は一つの運動方程式に支配される。また、将来、固体物質の融解を考慮するため、解析空間の任意の点 $(x_i, i=1, 2, 3)$ 周りのセルに占める各物質(固・液・気体)の時空間分布を体積率関数 $F(t, x_i)$ を使ってモデル化し、固体表面、自由界面を定義する。空間分布 $\langle F \rangle_M$ はセルにおける物質の体積比の総和として次式で表せる。

$$\langle F \rangle_M = \sum F_n = 1.0 \quad (20)$$

ここで F_n は物質 n の体積率、 $\langle \rangle$ は平均を表す。また、流体(液体・気体)および部分的に融解している固体物質についても、同様に次式で定義できる。

$$\langle F \rangle = \sum F_m \quad (21)$$

また、多相流を一つの流体として取扱うため、物性値 ϕ は各相の平均値 $\langle \phi \rangle$ として次式で定義する。また、非圧縮性粘性流体を仮定し、気体の圧縮性の影響等は考慮しないものとする。

$$\langle \phi \rangle = \sum (F_m \phi_m) \quad (22)$$

以下では、液体・気体の両領域の連続式および運動方程式を2段階 projection 法⁽²⁸⁾で解く方法を示す。

多相 m 流体の連続式は次のように書ける。

$$\frac{\partial \langle F \rangle}{\partial t} + \sum [\nabla \cdot (F_m U_m)] = 0 \quad (23)$$

運動方程式は、非 Boussinesq 近似の Navier-Stokes 方程式を用い、表面張力を体積力 F_v [式(11)]として考慮した。

$$\frac{\partial U}{\partial t} + (U \cdot \nabla) U = G - \frac{1}{\langle \rho \rangle} (\nabla P + \nabla \cdot \tau - F_v) \quad (24)$$

ここで、粘性応力は次式で定義した。

$$\tau = -\langle \mu \rangle [(\nabla U) + (\nabla U)^T] \quad (25)$$

2段階 projection 法では以下のように運動方程式を2段階に分けて計算する。

第1段階では、式(24)から圧力項を取り除いた以下の式を解き、中間速度場 $\tilde{U}$ を求める。

$$\frac{\partial U}{\partial t} + (U \cdot \nabla) U = G - \frac{1}{\langle \rho \rangle} (\nabla \cdot \tau - F_v) \quad (26)$$

第2段階では、圧力項と連続式 $\nabla \cdot U^{n+1} = 0$ を用いて次式の圧力ポアソン式を導き、中間速度場 $\tilde{U}$ を用いて圧力値を求める。この際、気液界面での大きな密度差と界面での圧力差が流体を加速することを考慮すると、左辺で密度を取扱う次式が適切な定式化となる。

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{\langle \rho \rangle} \cdot \nabla P \right] = \frac{\nabla \cdot \tilde{U}}{\Delta t} \quad (27)$$

密度が大きく異なる場で上記の圧力ポアソン式を精度よく解くことが直接解析法の一つの要点であり、ここでは共役残差法(CR)を用いた。収束判定は誤差二乗ノルムが 10^{-8} 以下とした。

この圧力場を用いて、次式で速度場を補正する。

$$U_i^{n+1} = \tilde{U}_i - \frac{\partial t}{\langle \rho \rangle} \left(\frac{\partial P}{\partial x_i} \right)^{n+1} \quad (28)$$

次に、式(15)と式(17)を用いて流体界面率を求め、式(28)で得られた $(n+1)$ 時刻での速度を用いて界面輸送の計算[式(19)]を行う。これで、一連の流体計算が終了するので時間発展させるため再び式(26)の運動方程式へ戻る。

以上が今回開発した自由表面を含む多相流の直接解析手法 MARS (Multi-interfaces Advection and Reconstruction Solver) の概要である。

MARS の解析能力を検討するため、図3に示すような水を満たした気泡塔の下部プレナム(空気で満たされている)に取付けた単一孔オリフィスから連続的に気泡が発生し、発生した気泡同士が合一しながら気泡塔内を上昇する挙動の非定常シミュレーションを試みた。

解析体系としては、高さ 60 mm、幅 15 mm の垂直な二次元気泡塔の上部に水を満たし(水部の高さ 55

Fig. 3 Solution domain and boundary conditions for a bubble column

mm), 下部プレナム部(高さ 3.5 mm)には外部より空気が供給され, 下部プレナムに取付けられた幅 2 mm, 厚さ 1 mm のスリット状オリフィスから気泡が発生する。二相の密度比は $\rho_{\text{water}}/\rho_{\text{air}}=886$ であり, 物性値は室温における値を用いた。境界条件としては, 上方境界は自由流出条件かつ大気圧で圧力差(流入口との圧力差)が零, 壁面では速度の滑りなし条件, 気泡塔下部プレナムへのプレナム側壁部からの空気流入条件は, (1)流入速度一定および(2)流入口で圧力差一定の 2 条件とした。

図 4 は下部プレナムへの空気流入速度が一定(0.1 m/s)の条件における結果の一例を示したもので, 図 4 中の実線は界面($F=0.5$)を等高線表示している。オリフィスから気泡が発生, 成長しながら上昇し, やがて気泡が離脱していき, それと同時に次の気泡の成長が始まる様子や, 上方の気泡が壁面近傍の下向き流れの影響で左右に揺動しながら上昇を続ける様子などが明りょうに計算できていることがわかる。なお, 本条件における流入口での圧力は約 580 Pa であった。

図 5 は, $t=0.4$ s における界面位置および速度ベクトルを示したものである。4 個の気泡と一つの成長中

の気柱周辺に激しい液流の渦が存在している様子がわかる。

図 6 に下部プレナムへの空気流入口で圧力一定(580 Pa)条件を課した場合の $t=0.16$ s における結果を示す。流入速度一定条件の流入口での圧力とほぼ同じ圧力を流入口に設定したにもかかわらず, 気泡成長速度はかなり遅くなり, 気泡離脱時に異常な速度発生を生じて計算不能となった。この原因はいまだはっきりしていないが, 気泡離脱時の圧力変化と関係しているものと推測し, 気泡離脱直前で流入口圧力を低下させたところ(580 Pa $\Rightarrow$ 430 Pa), 気泡の離脱と連続的な発生が可能となった。これらの現象自体の物理的な検討は今後の課題であるが, このような気泡の初生から成長, 離脱, 合体および連続的な気泡発生までを解析した例はこれまでに報告されておらず, MARS が多相流直接解析に極めて有力であることがわかった。本計算例では $120 \times 32 \times 2 = 7680$ の格子セル数(z 方向に 2 仮想格子セル)に対して, 富士通 VPP 500(1 プロセッサのみ利用)上で, 時間刻み $\Delta t = 10^{-4}$ s とした場合, 1 時刻ステップ当たり約 2 s 要した。

今後, MARS を用いた解析値と既往実験値の比較検討を行い, 解析精度およびモデルの信頼性を検討するとともに, 相変化を含む固体・液体・気体の多相熱流体の統一的直接解析手法へ展開していく予定である。

6. 結 論

自由表面を含む多相流の直接解析手法 MARS (Multi-interfaces Advection and Reconstruction Solver)を開発した。

本手法の特長は, 界面こう配を考慮した界面輸送に重要な以下の三つの性質を具備している点にある。

- (1) 界面形状の正確な捕獲と輸送(形状保存)
- (2) 界面格子セル内の流体率の正確な輸送(体積保存)
- (3) 格子界面での流体率の連続性の保証(界面再構築)

本手法を気泡塔内流動解析に適用した結果, 気泡の発生, 離脱, 合体および連続発生の直接シミュレーションが初めて可能となり, MARS が異種流体間の任意界面挙動を伴う多相流動挙動の数値解析に十分適用可能であることを示した。

今後, MARS によって複雑形状場の熱流動解析や移動境界問題が極めて単純に取扱えるようになり, 機械工学や化学工学分野を始めとする広範な理工学分野での新しい展開が期待できる。

最後に, 本研究のプログラム開発にご助力いただいた(財)高度情報科学技術推進機構の平塚篤氏および小

Fig. 4 Bubble formation and agglomeration in case of constant inlet velocity

Fig. 5 Bubble behavior and velocity vectors at $t=0.4$ s in case of constant inlet velocity ($U=0.1$ m/s)

Fig. 6 Bubble behavior and velocity vectors at $t=0.16$ s in case of constant inlet pressure ($P=580$ Pa)

瀬裕男氏に記して感謝申し上げる。

文 献

- (1) Yeung, R. W., *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **14**(1982), 395-442.
- (2) Geller, A. S., Lee, S. H. and Leal, L. G., *J. Fluid Mech.*, **169**(1986), 27-69.
- (3) Rallison, J. M. and Acrivos, A., *J. Fluid Mech.*, **89**(1978), 191-200.
- (4) Bonnerot, R. and Jamet, P., *J. Comput. Phys.*, **25**(1977), 163-181.
- (5) Lynch, D. R., *J. Comput. Phys.*, **47**(1982), 387-411.
- (6) Bach, P. and Hassager, O., *J. Fluid Mech.*, **152**(1985), 173-190.
- (7) Kang, I. S. and Leal, L. G., *Phys. Fluids*, **30**(1987), 1929-1940.
- (8) Ryskin, G. and Leal, L. G., *J. Fluid Mech.*, **148**(1984), 19-35.
- (9) Asaithambi, N. S., *J. Comput. Phys.*, **73**(1987), 380-394.
- (10) 高木周・松本洋一郎・黄華雄, 機論, **61**-586, B(1995), 1976-1983.
- (11) Fritts, M. J. and Boris, J. P., *J. Comput. Phys.*, **31**(1979), 173-215.
- (12) Welch, J. E., Harlow, F. H., Shannon, J. P. and Daly, B. J., *Los Alamos Sci. Labo. Rep.*, LA-3425(1966).
- (13) Miyata, H., *J. Comput. Phys.*, **65**(1986), 179-214.
- (14) Hirt, C. W. and Nichols, D. B., *J. Comput. Phys.*, **39**(1981), 201-225.
- (15) 富山明男・宋明良・南川久人・坂口忠司, 機論, **57**-539, B(1991), 2167-2173.
- (16) 富山明男・宋明良・吉川秀雄・坂口忠司, 機論, **60**-576, B(1994), 2678-2685.
- (17) Youngs, D. L., (Morton, K. W. and Baines, M. J.) *Numerical Methods for Fluid Dynamics*, (1982), 273-285, Academic Press.
- (18) Ashgriz, N. and Poo, J. Y., *J. Comput. Phys.*, **93**(1991), 449-468.
- (19) Zaleski, S., Li, J., Succi, S., Scardovelli, R. and Zanetti, G., *Proc. 2nd Int. Conf. Multiphase Flow '95*, Kyoto, (1995), PT2-1-PT2-11.
- (20) Lafaurie, B., Nardone, C., Scardovelli, R., Zaleski, S. and Zanetti, G., *J. Comput. Phys.*, **113**(1994), 134-147.
- (21) Yabe, T. and Xiao, F., *Nucl. Eng. Des.*, **115**(1995), 45-53.
- (22) Osher, S. and Sethian, J. A., *J. Comput. Phys.*, **79**(1988), 12-49.
- (23) Sussman, M., Smereka, P. and Osher, S., *J. Comput. Phys.*, **114**(1994), 146-159.
- (24) Chang, Y. C., Hou, T. Y., Merriman, B. and Osher, S., *J. Comput. Phys.*, **124**(1996), 449-464.
- (25) Brackbill, J. U., Kothe, D. B. and Zemach, C., *J. Comput. Phys.*, **100**(1992), 335-354.
- (26) Kothe, D. B. and Mjolsness, R. C., *AIAA J.*, **30**(1992), 2694-2700.
- (27) Landau, L. D. and Lifshiz, E. M., *Fluid Mechanics*, 2nd ed., (1987), 241, Pergamon.
- (28) Chorin, A. J., *Math. Comput.*, **22**(1968), 745-762.