

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 10 日現在

機関番号：14303

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2015

課題番号：25420121

研究課題名(和文) 超高効率汎用混相熱流動解析システムの構築

研究課題名(英文) Construction of higher efficient and versatile system for multi-phase thermal flow analysis

研究代表者

西田 秀利 (NISHIDA, HIDETOSHI)

京都工芸繊維大学・機械工学系・教授

研究者番号：40164561

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,000,000円

研究成果の概要(和文)：相変化を伴う熱流動解析における超高効率かつ汎用性を有するデカルト格子アプローチの核となる計算技術を確立するために、研究代表者が考案したシームレス仮想境界法及び安定化フェーズフィールド法を組み合わせたシームレス仮想境界フェーズフィールド法を構築し、基礎的な検証問題に対して適用した結果、本手法がデカルト格子に沿わない境界に対しても有効に機能することを示した。相変化を伴う熱流動場として沸騰・蒸発問題を取り上げ、さらに、周囲流体との一括シミュレーションを実施した結果、現象が再現でき、本研究で構築したシームレス仮想境界フェーズフィールド法は高効率で汎用的な手法であるとの結論を得た。

研究成果の概要(英文)：In order to develop a higher effective and versatile approach on the Cartesian grid for thermal flow with phase change, the seamless immersed boundary phase-field method is constructed. In the fundamental verification problems, the present method gives appropriate solutions. In the phase change problems, i.e., boiling and evaporation, the present method can reproduce the physical phenomena successfully. Therefore, it is concluded that the present seamless immersed boundary phase-field method is very efficient and versatile method for multi-phase thermal flow simulations with phase change.

研究分野：計算流体力学

キーワード：フェーズフィールド法 シームレス仮想境界法 二相流 デカルト格子アプローチ

1. 研究開始当初の背景

現在の熱流動解析は主として実験的手法(EFD)及び計算的手法(CFD)によって為されている。この内、CFDはコンピュータ性能の目覚ましい向上と低価格化のために非常に有力な手法になっている。CFDにおいては熱流動現象単体の解析に留まらず、連成現象の解析や相変化を伴う解析などのマルチフィジックス解析も行われるようになっており、(小特集「マルチフィジックス CFD/EFD の最前線」日本機械学会論文集(B), Vol.76, No.765)。特に、蒸発や凝縮等の相変化を伴う熱流動現象は工業製品の製造工程において頻繁に見られる現象であり、このような相変化を伴う現象を解析することの意義は工学上非常に大きいものがある。

相変化を伴う現象を取り扱う際には、相界面を正確に捕獲する必要がある。界面の捕獲に対してはVOF法(Volume of fluid method)やレベルセット法(Level set method)が主に用いられているが、界面の不連続性(VOF法)や距離関数の維持(レベルセット法)といった問題点も指摘されている。そこで、本研究においてはフェーズフィールド変数の勾配で相界面を定義するフェーズフィールド法(Phase-field method)を採用した。フェーズフィールド法は当初、固体力学分野の結晶成長等のマイクロ組織形成のシミュレーションに用いられてきており(例えば、Wheeler A.A. et al., Phys. Rev. A, 45, pp.7424-7439, 1992)、その後、流動解析にも採用されるようになってきている(例えば、Antanovski, L.K., Phys. Fluids, 7, pp.747-753, 1995)。フェーズフィールド法においては、相界面は有限な厚さを持ち、その内部においては物性は連続的に変化すると仮定しており、界面形状は系の自由エネルギーが最小になるように自律的に決定されるため、界面における境界条件が不要となる。また、複雑な幾何学的計算無しで界面の輸送及び再構成が可能であり、従来取り扱いが容易ではなかった相変化による界面の移動を簡便に再現できると考えられる。

しかしながら、フェーズフィールド変数の支配方程式であるCahn-Hilliard方程式は方程式に内在する4階微分項により安定条件が非常に厳しいため、流れ場の支配方程式であるNavier-Stokes方程式の時間間隔に比べ1桁以上小さな時間間隔で計算する必要があるという問題点が存在する。さらに、複雑な形状の流れ場に対して通常採用される境界適合座標系(BFC)に対しては座標変換に伴う項の極端な増加のために計算効率が非常に悪化するという問題点も存在する。

そこで、境界適合座標系ではなく、デカルト格子を用いて複雑な流れを解析可能な「シームレス仮想境界法」と界面を容易に追跡可能で安定条件をも緩和した「安定化フェーズフィールド法」とを組み合わせた「シームレス仮想境界フェーズフィールド法」を開発・

構築することにより、超高効率で汎用的な相変化を伴う熱流動解析が可能となるのではないかとこの着想を得たものである。

2. 研究の目的

研究の全体構想は、蒸発や凝縮等の相変化を伴う混相熱流動解析における超高効率かつ汎用性を有するデカルト格子アプローチを開発・確立することである。本研究の目的は、相界面を規定するためのフェーズフィールド法に代表者が改良を施した安定化フェーズフィールド法を採用し、デカルト格子上での複雑熱流動解析のために代表者が考案・開発したシームレス仮想境界法を採用する新たな混相熱流動解析スキームである「シームレス仮想境界フェーズフィールド法(Seamless immersed boundary phase-field method)」を開発し、その検証を実施することにより、相変化を伴うような熱流動解析における超高効率かつ汎用性を有するデカルト格子アプローチの核となる計算技術を確立・構築することにある。

3. 研究の方法

(1) 二相流に対するシームレス仮想境界フェーズフィールド法の有効性の検証：フェーズフィールド法の支配方程式であるCahn-Hilliard方程式に対して、シームレス仮想境界法を適用し、Navier-Stokes方程式と連立させ数値解を求め、その有効性を回転正方空洞内相分離問題に対して実施し、検証する。また、化学ポテンシャルに対して離散フィルター操作を施し、安定条件の緩和を行う安定化フェーズフィールド法に対しても検証を実施する。

(2) 相変化を伴う二相流に対するシームレス仮想境界フェーズフィールド法の適用性の検証：相変化モデルとして温度回復法を採用し、安定化フェーズフィールド法を用いたシームレス仮想境界フェーズフィールド法の有効性の検証を沸騰・蒸発問題に対して実施する。

(3) 周囲流体との相互作用の一括シミュレーション：気泡蒸発問題に対して、流れの有無、流れの方向が蒸発性能に与える影響についてシミュレーションを実施する。また、機能性薄膜形成に対して重要な指針を与える自己組織化のシミュレーションをフェーズフィールド・クリスタル法を用いて実施し、安定なハニカムパターンを形成するための最適条件の同定を行う。

4. 研究成果

(1) 二相流に対するシームレス仮想境界フェーズフィールド法の有効性の検証：

計算対象として図1に示す回転正方空洞内相分離問題を取り上げる。回転正方空洞の仮想境界条件はノイマン条件($\partial c / \partial n = 0$)で

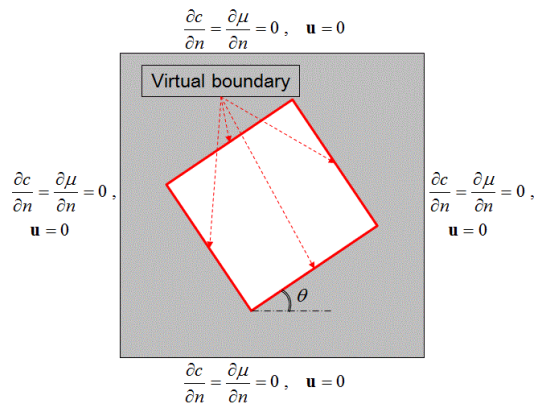


図 1 回転正方空洞内相分離問題

あり、仮想境界条件を満足するように多変数 Taylor 級数展開により、仮想境界上のフェーズフィールド変数を決定する。

回転角度をさまざまに変化させ、回転角度 0 度の数値解と比較する。図 2 に流れがない場合におけるフェーズフィールド変数の比較の一例を示す。左図が回転角度 0 度の結果であり、右図が 30 度の結果である。

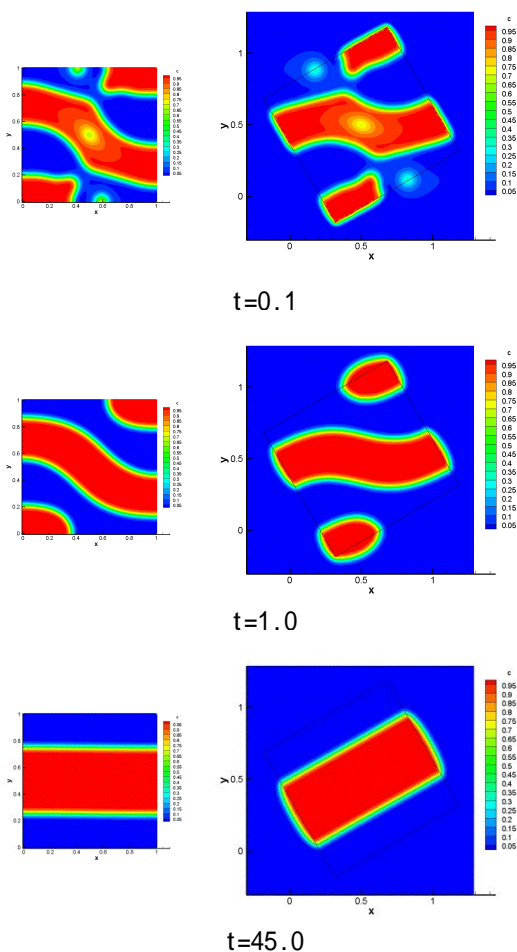


図 2 フェーズフィールド変数の比較 (流れなし, 回転角度 30 度)

図から分かるように、どの時刻においても両者が一致していることが認められる。同様に、流れがある場合の比較の一例として回転

角度 60 度の場合を図 3 に示す。流れがない場合と同様に、どの時刻においても同一フェーズフィールド場が得られていることが確認できる。

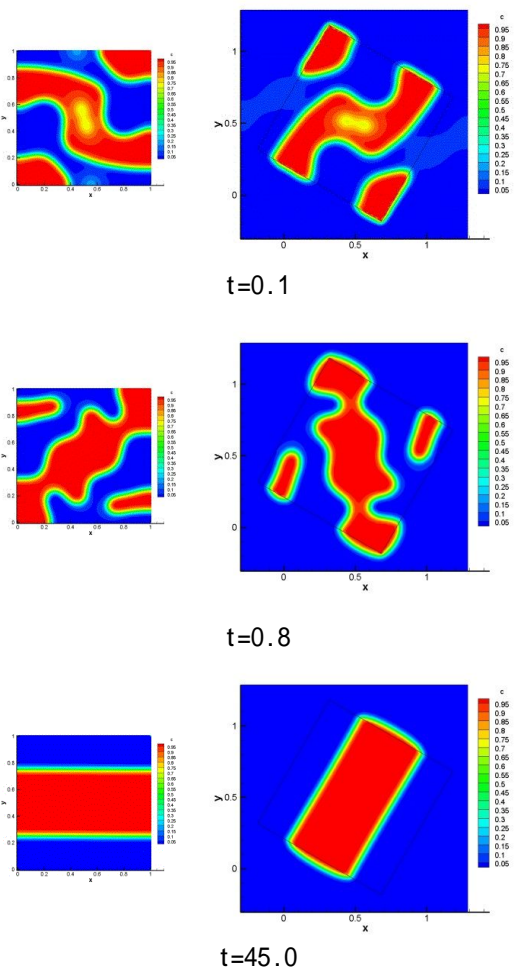
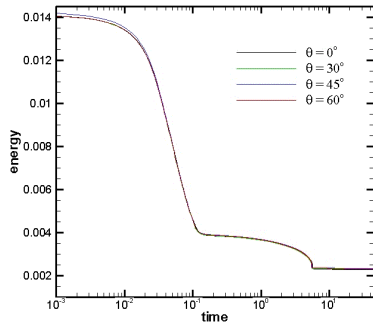


図 3 フェーズフィールド変数の比較 (流れあり, 回転角度 60 度)

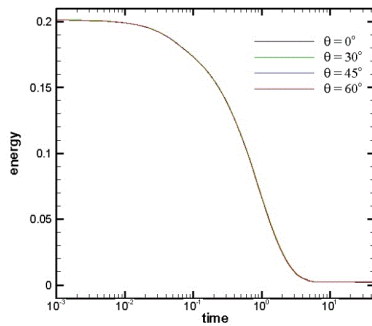
また、全エネルギー (運動エネルギー及び界面エネルギー) の時間変化を図 4 に示す。ここでは、回転角度として 30 度、45 度、60 度の三例を比較している。流れがない場合も流れがある場合においても、定常状態において全エネルギーが最小値を示している。これは、フェーズフィールド法がエネルギーを最小にするように界面が自律的に変化することと符合しており、どちらの場合においても全エネルギーが回転角度 0 度の結果とほぼ一致していることが確認できる。

以上のことより、本研究において構築したシームレス仮想境界フェーズフィールド法がデカルト格子と一致しない境界を有する二相流解析において、有効に機能するとの結論を得た。

(2) 相変化を伴う二相流に対するシームレス仮想境界フェーズフィールド法の適用性の検証:



(a) 流れなし



(b) 流れあり

図4 全エネルギーの比較

最初に、安定化フェーズフィールド法の有効性を検証するために、1次元相変化問題をシミュレーションした結果（界面の時間履歴）を図5に示す。安定化フェーズフィールド法においては、化学ポテンシャルに対して離散フィルター操作を施している。図より分かるように本手法の結果は解析解を良く近似していることが認められる。また、Case3はCase1の7倍の時間刻み幅で計算したものであり、安定条件の緩和が達成されていることが確認できる。

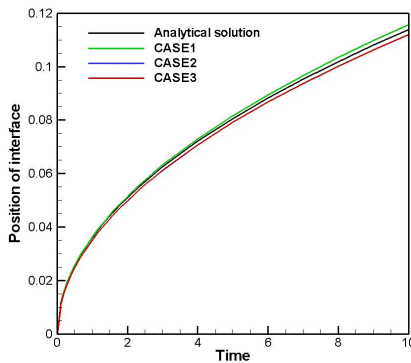
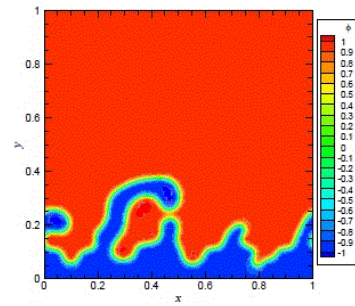
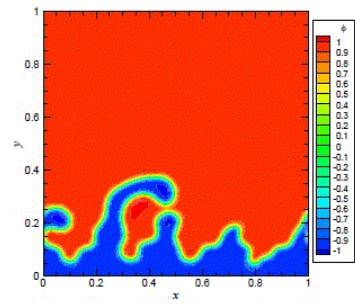


図5 界面の時間履歴

次に、2次元沸騰問題における界面の比較を図6に示す。安定化フェーズフィールド法の結果が従来法によるものとほぼ同一の界面を与えていることが認められる。



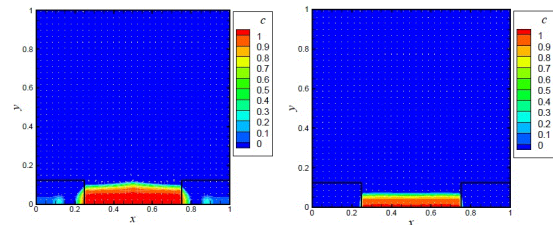
(a) 安定化フェーズフィールド法



(b) 従来法

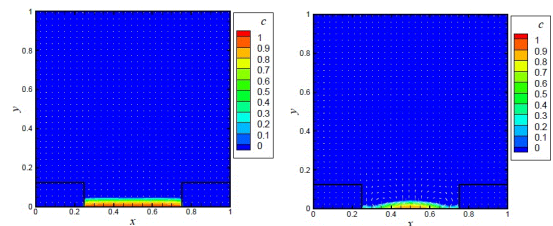
図6 沸騰界面の比較 (t=4.0)

さらに、2次元気泡蒸発問題を安定化フェーズフィールド法及びシームレス仮想境界法を用いてシミュレーションした結果を図7に示す。初期に矩形領域に存在した気泡が時間の経過とともに蒸発し、半円形に変形・縮小する様子が再現されている。



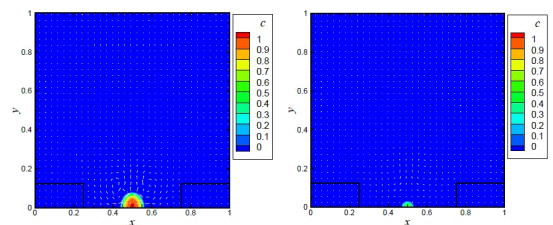
t=0.1

t=0.5



t=1.0

t=1.3



t=1.5

t=1.9

図7 蒸発界面の時間履歴

(3) 周囲流体との相互作用の一括シミュレーション：

ここでは、(2)で述べた気泡蒸発問題に対して、流れの有無による気泡蒸発性能に与える影響についてシミュレーションを実施した結果について示す。一例として、流れが左斜め45度方向から流入する場合について図7と同一時刻の蒸発界面の履歴を図8に示す。

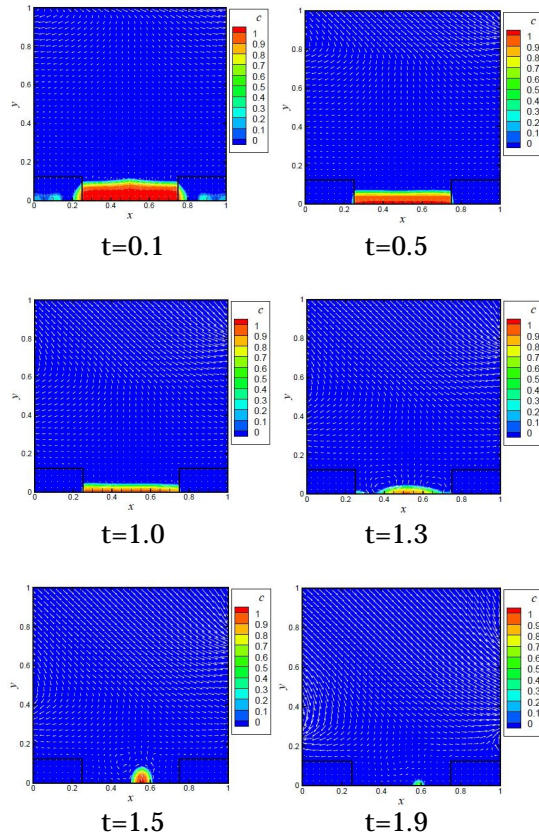


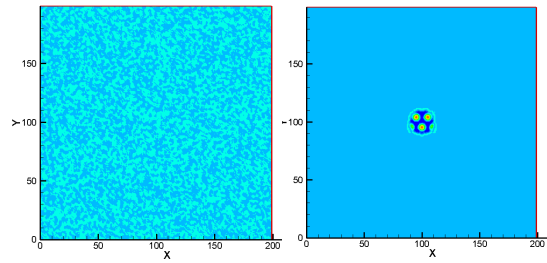
図8 蒸発界面の時間履歴（流れ有）

時刻 $t=1.0$ 程度までは流れの有無による蒸発性能の差異は見受けられない。しかしながら、時刻 $t=1.3$ 以降、流れを与えた場合の方が高蒸発性能を示すことが認められる。

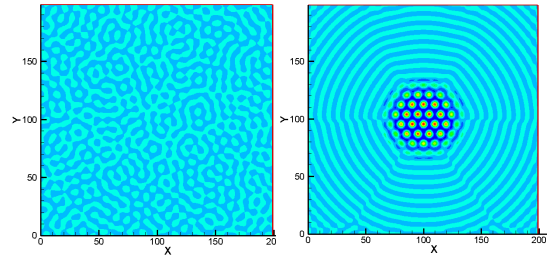
最後に、機能性薄膜形成に対して重要な指針を与える自己組織化のシミュレーションに対してフェーズフィールド・クリスタル法を用いて実施した結果について示す。等方的な薄膜形成に対しては安定なハニカムパターンを形成することが必要となる。

図9は初期分布が自己組織化結果に与える影響について示したものであり、ランダムな初期分布から出発すると（左段の結果）、安定なハニカムパターンが形成されないことが認められる。それに対して、領域中央に安定な分布を配置した場合、最終的に安定なハニカムパターンが形成される。

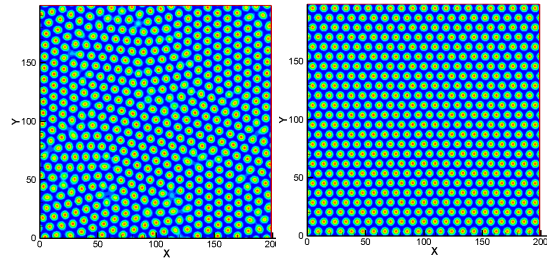
しかしながら、実際の薄膜製造過程においてはランダムな初期分布から出発する方が簡便である。そのため、初期分布をランダム場とし、一方向（実際にはロールの運動方向に垂直な方向）を拘束する条件を採用した際の自己組織化結果を図10に示す。



(a) 初期分布

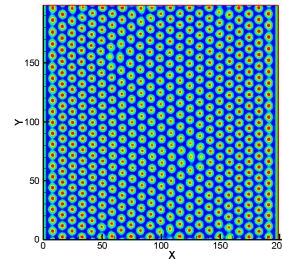


(b) 1000 ステップ



(c) 10000 ステップ

図9 自己組織化シミュレーション



10000 ステップ

図10 境界条件の影響（x方向拘束条件）

初期分布にランダム場を採用しているにもかかわらず、安定なハニカムパターンが形成されていることが確認できる。この結果は、実験における結果とも合致しており、機能性薄膜形成にシミュレーションの知見を反映し得るとの結論を得た。

以上の結果に基づき、本研究において構築したシームレス仮想境界フェーズフィールド法は複雑な混相熱流動場を境界適合座標を用いることなくデカルト格子上で解析可能であり、相変化を伴うような熱流動場に対しても適用できるとの結論を得た。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計2件)

Hidetoshi NISHIDA, Development of Seamless Immersed Boundary Method for Various Partial Differential Equations, Proc. Korea-Japan CFD Workshop, 査読有, 1, 2015, 1-15.

Kyohei TAJIRI, Hidetoshi NISHIDA, Mitsuru TANAKA, Numerical Simulation of Incompressible Flows with Heat Transfer using Seamless Immersed Boundary Method, Journal of Computational Science and Technology, 7-2, 査読有, 2013, 286-296. DOI:10.1299/jcst.7.286

[学会発表](計7件)

Hidetoshi NISHIDA, Development of Seamless Immersed Boundary Family, The 5th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, BEXCO, Busan, Korea, Nov.22-25, 2015, (Plenary Lecture).

Hidetoshi NISHIDA, Development of Seamless Immersed Boundary Method for Various Partial Differential Equations, Korea-Japan CFD Workshop, Kyushu Univ., Fukuoka, Japan, Dec.16-17, 2015, (Invited Lecture).

Hidetoshi NISHIDA, Construction of Seamless Immersed Boundary Phase-field Method, The 5th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, BEXCO, Busan, Korea, Nov.22-25, 2015.

Souichi KOHASHI, Hidetoshi NISHIDA, Mitsuru TANAKA, Numerical Simulation of Self-organized Honeycomb-pattern, The 5th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, BEXCO, Busan, Korea, Nov.22-25, 2015.

松浦正博, 西田秀利, フェーズフィールド法に対する仮想境界法に関する研究, 第28回数値流体力学シンポジウム, タワーホール船堀, Dec.9-11, 2014.

沖田展彬, 西田秀利, 安定化フェーズフィールド法を用いた非圧縮性二相流解析に関する研究, 第27回数値流体力学シンポジウム, 名古屋大学豊田講堂, Dec.17-19, 2013.

Hidetoshi NISHIDA, Efficient Phase-field-based Scheme for Incompressible Two-phase Flow Simulation, The 4th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow, The Hong Kong Univ. of Science and Technology, Hong Kong, China, June 3-6, 2013.

[図書](計0件)

[産業財産権]
出願状況(計0件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
出願年月日:
国内外の別:

取得状況(計0件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
取得年月日:
国内外の別:

[その他]

ホームページ等

<http://www.cis.kit.ac.jp/~nishida/index.html>

(京都工芸繊維大学大学院 工芸科学研究科 機械物理学専攻 計算工学研究室 HP)

6. 研究組織

(1)研究代表者

西田 秀利 (NISHIDA HIDETOSHI)
京都工芸繊維大学・機械工学系・教授
研究者番号: 40164561

(2)研究分担者

()

研究者番号:

(3)連携研究者

()

研究者番号: