

研究種目：若手研究（B）
 研究期間：2006～2008
 課題番号：18760134
 研究課題名（和文） 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
 研究課題名（英文） Development of an interface-tracking method based on a phase-field
 model for numerical simulation of two-phase flows in micro channels
 研究代表者
 高田 尚樹
 独立行政法人産業技術総合研究所・先進製造プロセス研究部門・研究員
 研究者番号：60357358

研究成果の概要： 本研究では、ライフサイエンス・環境分野の製薬・分析装置等で新しい化学・流体工学プロセスを実現する各種マイクロデバイスの最適化設計に有用な、微小流路内で気体と液体が混在して流れる二相流現象の解明に適用できる計算法を開発した。不均一な固体表面の濡れ性を扱う簡素な境界条件の提案や温度に依存する表面張力モデルの導入により、本計算法はマイクロスケールで顕著に現れる気液二相流現象を良好に詳細予測する能力を持つ。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	1,500,000	0	1,500,000
2007年度	1,200,000	0	1,200,000
2008年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	240,000	3,740,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：マイクロ・ナノデバイス、流体工学、混相流、濡れ性、数値流体力学、接触角、気液二相流、自由エネルギー

1. 研究開始当初の背景

1～数百ミクロン幅のマイクロ流路を持つマイクロリアクター（MR）は、従来の大量合成化学プロセスに代わり、多品種少量生産・低環境負荷型の新しい化学反応と物質混合分離プロセスを実現するツールとして、ライフサイエンス分野、環境・エネルギー分野で近年注目されている。マイクロ流路内では、水・空気・油その他複数成分の流体が混在した流れと流路壁面の性質により従来に無い高効率・高精度のプロセス操作が可能である。このような利点を持つMRを様々な用途に応じてその機能を最適化するため、室内実験で

は観察が困難な流路内の気体-液体や液体-液体の接触面（界面）を含む二相流現象を詳細に解明・予測できる、流体力学に基づく計算法によるコンピュータシミュレーション（数値実験）の重要性が増してきた。

VOF法やLevel-Set法等、国内外で現在主流の二相流計算法では、界面の追跡・捕捉と表面張力の計算で界面形状を記述する際に複雑な幾何学演算を行うため、多数の界面が時間的・空間的に大きく変形しながら移動する場合、計算効率や数値安定性だけでなく体積や界面形状の保存精度も低下する。また、固体表面の濡れ性を厳密に取り扱う境界条

件は十分確立されていない。

一方、熱力学の自由エネルギー理論に基づき界面を自律的に形成するフェーズフィールドモデル (PFM) を導入する二相流計算法は、国内では高機能材料設計プラットフォーム OCTA や格子ボルツマン法 (LBM) に関する研究を除き、流体工学分野では殆ど研究されていない。LBM 関連研究の多くは、二相流数値実験への LBM の適用と現象の解明に重点を置き、界面追跡・捕捉に対する PFM の特徴や重要性を指摘するものは少ない。国外では、PFM 二相流計算法は進展しつつあるが、空気-水のような高密度比二相流体を扱うことができる PFM 法は国内外を通して皆無であった。マイクロ流路内二相流の従来研究では、国内外ともに室内実験を行うことが多く、数値実験は主に密度比の小さい液液二相に対して実施され、高密度比の例は数少なかった。

2. 研究の目的

以上を踏まえ、本研究では、従来の二相流計算法よりも高精度な移動界面の捕捉・追跡能力、数値的安定性ならびに高い計算効率に加えて、従来法と同等の解析ニーズに対する柔軟性を兼ね備えた、マイクロ流路内の二相流問題に適用可能な PFM に基づく新しい界面追跡計算法 (ナビエ-ストークス・フェーズフィールドモデル計算法、NS-PFM 法) の開発を目的とした。NS-PFM 法は、自律的な界面形成過程を記述するカーン・ヒリアード (CH) 方程式を導入し、従来の VOF 法等と同様の計算スキームとアルゴリズムを使用して、流体の運動方程式であるナビエ-ストークス (NS) 方程式とともに直接解く二相流計算法である。NS-PFM 法は LBM よりも計算メモリ使用量が少なく済み、VOF 法等の従来計算法よりも界面形成・追跡計算が容易であるという利点をあわせ持つ。

3. 研究の方法

数値実験を実施する主要設備として PC ワークステーションを使用し、当該研究者が近年提案している水-空気のような高密度比の気液二相流に適用可能な新しい界面追跡計算法 (NS-PFM 法) と、格子ボルツマン法 (LBM) に関するこれまでの研究成果を基盤としながら、当該研究者が単独で以下の項目に従って研究を進めた。

- (1) 流路の固体壁表面に対する液体の親和性 (濡れ性) を考慮した、化学反応や相変化を伴わない場合の気液・液液二相の濡れ性境界条件 (壁面での液体の接触角の設定) の提案。
- (2) 上記(1)の濡れ性境界条件を組み込んだ、マイクロ流路内二相流の界面追跡計算法と計算コードの開発。
- (3) 上記(2)の計算コードを用いた二相流の

基礎的数値実験(下記①-③)を、流体の種類、接触角、壁面上の均一および不均一な濡れ性の分布に関する条件を変えて実施した。

- ① 静止した固体壁表面上の気泡および液滴の形状と挙動
 - ② 水平マイクロ流路内の二相流 (対象: 微細流路への液体の浸透)
 - ③ 垂直マイクロ流路内の二相流 (対象: 毛管作用による液体の流路への浸透流れ)
- (4) 上記(3)の数値実験結果を、液滴や気泡の静的接触角・界面形状・界面移動速度に関して、理論解や既存の室内実験結果および他の計算法 (VOF 法など) による結果と比較し、本計算法の妥当性の検討と計算コードの予測精度の評価を行い、それらの改良と最適化を図った。
- (5) 流体温度や溶質濃度に依存する表面張力を再現できる PFM の NS 方程式への導入と基礎的数値実験による適用性の評価。
- 開発に際して必要となる二相流数値実験技術に関する情報収集のため、流体工学に関する国内外の学術講演会に出席した。また、PFM 計算法の理論的な構築や数値実験に関して生じる問題の解決を図るため、研究支援者 (富山明男教授・神戸大学工学部、市川直樹研究員・産業技術総合研究所) との定期的な研究打合せを当該研究者 1 名で実施した。

4. 研究成果

(1) 静的接触線問題への計算法の適用と検証

まず、本研究で開発した濡れ性境界条件で与えられる本計算法の毛細管力を検証するため、重力下の静的な接触線 (流体界面と固体表面の交線) 問題として、(a)濡れやすい表面 (静的接触角 $\theta_w < 90^\circ$) を持つ空気-水系で 5mm の平板間の 2 次元液柱と (b)濡れやすい水平平板上の半球状の液滴の形成に関する数値実験を行った。なお、 θ_w と流体に対する固体表面の境界条件で与える濡れ性制御パラメータ γ_s の関係 (図 1) は、無重力下で平板に付着する 3 次元静止液滴形成の予備的数値実験から得た。

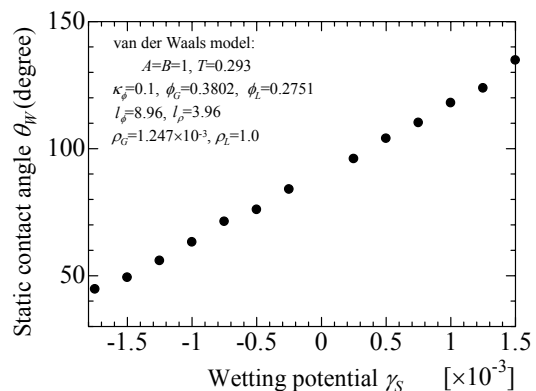
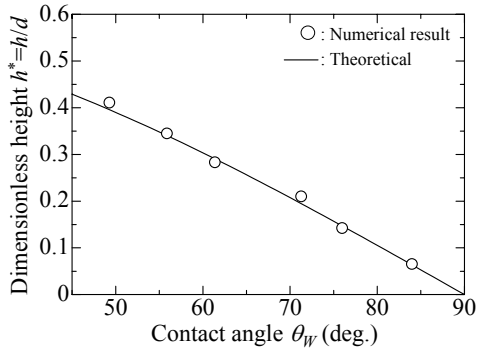
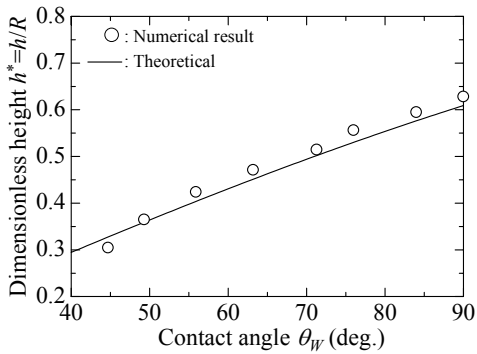


図 1 濡れ性パラメータ γ_s と接触角 θ_w の関係

液柱と液滴の高さ h の数値実験結果は理論解と一致することから、本計算法で毛細管力は適切に与えられていることが確認できた (図 2)。



(a) 2D liquid column between parallel plates



(b) 3D liquid drop on flat solid surface

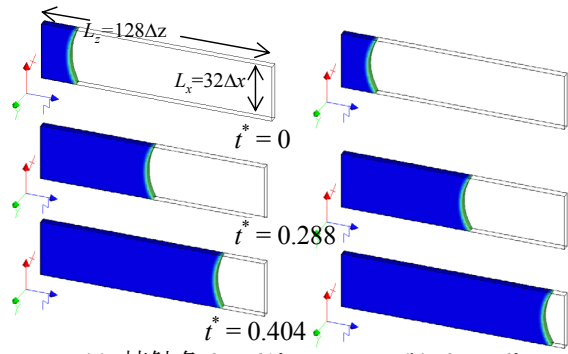
図 2 重力下の(a)2次元液柱と(b)3次元液滴の高さ h の接触角 θ_W に対する変化

(2) 動的接触線問題への計算法の適用と検証

次に、無重力下で静止した平行平板間および矩形流路内における毛管力起因の2次元・3次元二相流を取り上げた。平板間領域は、3次元座標系 (x, y, z) で $32 \times 5 \times 128$ 個の立方セルに分割し、 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。3次元流路では、高さ h (x 軸方向) を 32 セル幅に固定して、流路幅 w (y 方向) を変化させた。平板と流路の固体表面では、流体に対して一様に滑り無し条件と一定の接触角 (気液界面と固体表面が形成する液体側の角度) $\theta_W = 61^\circ$ または 56° を設定し、 z 方向の境界面には自由流入条件を適用した。

図 3 に、平板間に浸透している液相の各無次元時刻 t^* での形状を示す。より小さい θ_W (より高い新水性) の条件に対して、液相はより速く浸透している。その界面の水平位置 s の時間履歴 (図 4) に関して、数値実験結果は液相のみを考慮した1次元問題の理論解 (実線・破線) と良く一致した。また、矩形管 (空気-水で高さ $h=5\text{mm}$ 、幅 $w=2.5\text{mm}$) 内の3次元問題でも θ_W の各値に対して s の数値実験結果は理論解と一致した (図 5)。なお、上記の他に、平板間隔 $0.1\text{mm} \sim 1\text{mm}$ で空気-水、空気-エタノールの場合、また、 $\varepsilon = h/w = 1.0, 1.5$ の空気-水の場合

でも理論解と良く一致する数値結果を得た。



(a) 接触角 $\theta_W = 61^\circ$ (b) $\theta_W = 56^\circ$

図 3 平板間に浸透する液体 (空気-水系、無重力、平板間隔 5mm)

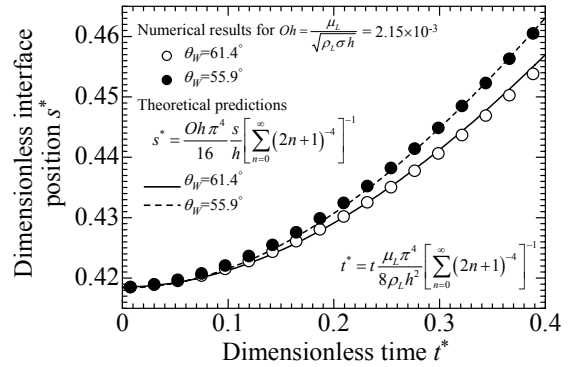


図 4 毛細管力による平行平板間の気液界面位置 s の時間変化

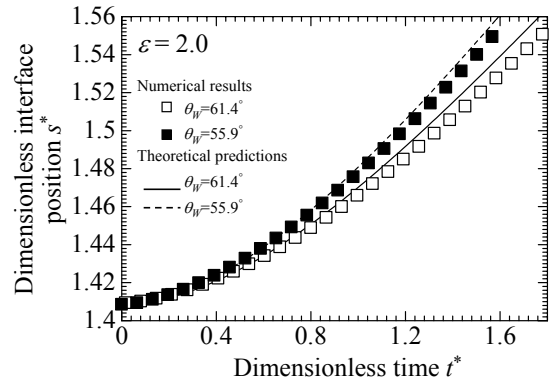


図 5 アスペクト比 $\varepsilon = h/w$ の矩形管内の毛細管力による気液界面位置 s の時間変化

(3) 不均一な濡れ性による液滴の移動・変形

次に、マイクロスケールで顕著になる固体表面の不均一な濡れ性効果による二相流現象として、無重力下で固体表面に付着する3次元単一液滴の運動を取り上げた。図 6 の初期条件では、空気-水系換算で半径 $R=8\text{mm}$ の半球形状の液滴を、幅 8mm の疎水性表面と両側の親水性表面上に渡って左右対称に配置した。液滴は親水性面に向かって移動して疎水性面を境に左右に分裂し、両表面間の接触角度差 $\Delta\theta_W$ が大きくなるとより速く移動し、早期に分裂している。上述の数値結果は、従

来の室内実験結果と定性的に良く一致することから、開発した簡素な境界条件は不均一な濡れ性を適切に表現できると考えられる。

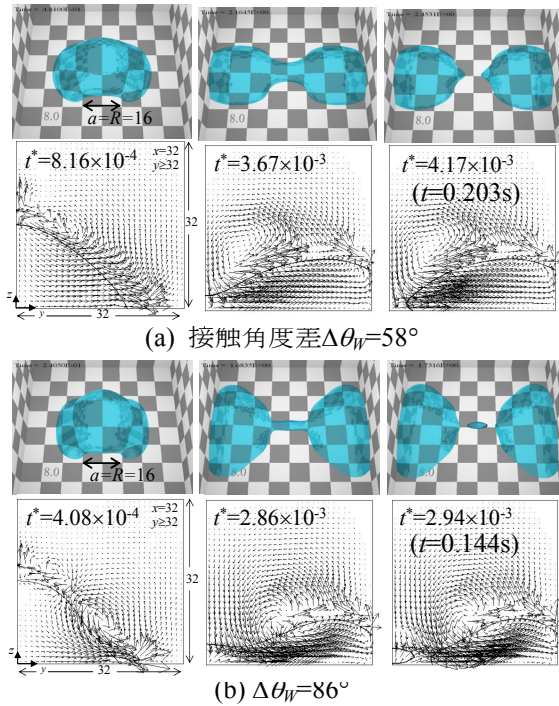


図6 不均一な濡れ性により固体表面上で分裂する水滴の形状と垂直断面内の流体速度分布(空気-水系、初期半径 $R=8\text{mm}$)

(4) マイクロデバイス二相流問題への適用

以上の良好な結果を踏まえて、次に、近年実用化が進む Electro-Wetting-On-Dielectric (EWOD) 技術を採用するマイクロデバイスの二相流問題への適用を試みた。EWODは、電位差による固体表面の濡れ性の変化を利用して、固体に付着する微細な流体の動きを高速制御できる。今回は、 $80\mu\text{m} \times 80\mu\text{m} \times 10\mu\text{m}$ の微小閉空間内の空気-水系を想定し、初期に厚さ $2.5\mu\text{m}$ の液膜で覆われた底部固体面、上面と垂直壁面の一つを $\theta_W = 124^\circ$ に、他は $\theta_W = 90^\circ$ に設定した。計算領域は $160 \times 160 \times 20$ 個の立方体セルで分割した。

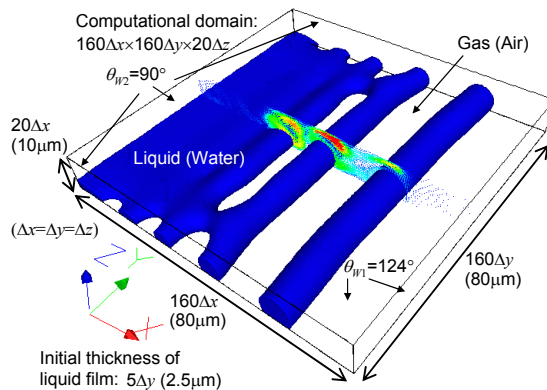


図7 微細セル内の液膜の剥離 ($5.05\mu\text{s}$ 後)

本数値実験では疎水性表面ではじかれた液膜の剥離挙動(図7)が捕らえられており、空間解像度の影響は今後の検討課題であるが、実験の文献との比較から実在現象が定性的に再現されていると考えられる。

(5) マランゴニ効果による液中の気泡の移動

表面張力が流体中のスカラー量 T (温度や溶質濃度)に依存する場合、界面近傍で T が不均一な場合に表面張力差に起因して接線方向に流体が移動する。このマランゴニ効果は表面張力が支配的なマイクロスケール環境でより顕著に現れる。本研究ではこの効果を考慮するため、文献に従って T 依存型の表面力を導出して NS 方程式に組み込み、 T の時間発展方程式を NS・CH 方程式と解いた。

図8は、本研究で得られた無重力下の2次元空間で一定の温度勾配がある液相中の単一気泡周囲の流速分布と温度分布を示す。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現象が定性的に良好に再現され、従来の3次元数値解析と類似の流速・温度分布が得られた。

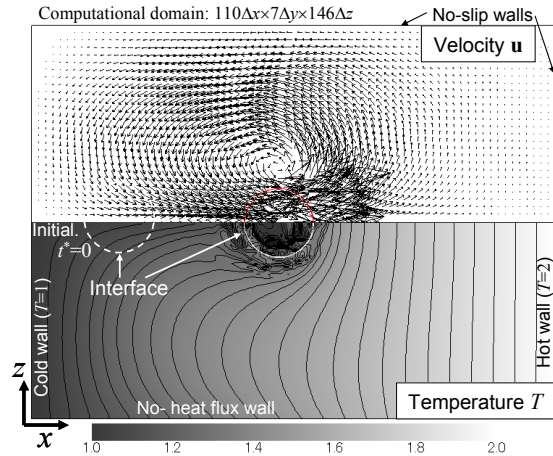


図8 一定温度勾配下の2次元気泡の移動

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計4件)

- ① 高田尚樹、松本純一、拡散界面モデルを用いた二相流体流れの数値解析、数理解析研究所講究録(数値解析における理論・手法・応用)、Vol.1638、pp.83-94、査読有
(<http://ci.nii.ac.jp/naid/110007054914>)
- ② Naoki Takada, Junichi Matsumoto, Sohei Matsumoto and Naoki Ichikawa, 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, No.2 (2008), pp.318-329, 査読有 (<http://dx.doi.org/10.1299/jcst.2.318>)
- ③ Naoki Takada and Akio Tomiyama, Numerical Simulation of Isothermal and Thermal Two-Phase Flows Using Phase-Field Modeling, International Journal of Modern Physics C, Vol.18, No.4 (2007), pp.536-545, 査読有 (<http://dx.doi.org/10.1142/S0129183107010772>)
- ④ 高田尚樹、富山明男、フェーズフィールド法を用いた相変化を伴う二相流の数値シミュレーション、混相流研究の進展、2巻 (2007)、pp.173-180、査読有 (<http://dx.doi.org/10.3811/pmfr.2.173>) [学会発表] (計30件)
- ① 高田尚樹、松本純一、松本壮平、マイクロ流体デバイスのための拡散界面モデルを用いた二相流体挙動の数値シミュレーション、日本機械学会関東支部第15期総会講演会、2009年3月6日、茨城大学水戸キャンパス (茨城県)
- ② 高田尚樹、松本純一、拡散界面モデルを用いた二相流体流れの数値解析、RIMS 研究集会 数値解析における理論・手法・応用、2008年11月16日、京都大学数理解析研究所 (RIMS、京都市)
- ③ 高田尚樹、松本純一、松本壮平、市川直樹、二相流数値解析のためのフェーズフィールドモデルアプローチ、日本機械学会第21回計算力学講演会、2008年11月2日、琉球大学千原キャンパス (沖縄県)
- ④ Naoki Takada, Junichi Matsumoto, Sohei Matsumoto and Naoki Ichikawa, Numerical Simulation of Microscopic Two-Phase Flows Using Diffuse-Interface Model Based on Free-Energy Theory, The 7th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference (TFEC2008) October 16, 2008, Hokkaido Citizens Activities Center, Sapporo, Hokkaido, Japan
- ⑤ 高田尚樹、二相流数値解析のための拡散界面モデルに基づく界面追跡 CFD 法、日本機械学会関西支部第9回秋季技術交流フォーラム、2008年10月11日、同志社大学京田辺キャンパス (京都府)
- ⑥ 高田尚樹、環境改善技術開発のための二相流数値シミュレーション、資源・素材2008 仙台 ((社)資源・素材学会平成20年度秋季大会)、2008年10月8日、仙台国際センター (宮城県)
- ⑦ 高田尚樹、拡散界面モデルに基づく気液・液液二相流界面追跡計算法の基礎と適用例、株式会社技術情報協会主催セミナー「微小液滴」-インクジェット技術へ活かすための微小液滴の物性制御と挙動メカニズムおよびそのコントロール、2008年9月29日、北とびあ (財団法人北区文化振興財団、東京都)
- ⑧ 高田尚樹、他3名、拡散界面モデルに基づく二相流計算法の表面張力流れ問題への適用、日本流体力学会年会2008、2008年9月4日、神戸大学六甲台キャンパス (兵庫県)
- ⑨ 高田尚樹、他3名、固体表面上の高密度比二相流問題に対する拡散界面追跡計算法の適用、日本混相流学会年会講演会2008、2008年8月8日、会津大学 (福島県)
- ⑩ 高田尚樹、他3名、拡散界面モデルに基づく移流拡散方程式の二相流数値シミュレーションへの適用、第57回理論応用力学講演会、2008年6月11日、日本学会会議 (東京都)
- ⑪ 高田尚樹、他3名、二相流界面追跡シミュレーションのための自由エネルギー理論に基づく拡散界面モデル、第45回日本伝熱シンポジウム、2008年5月23日、つくば国際会議場 (茨城県)
- ⑫ 高田尚樹、他3名、自由エネルギー理論に基づく拡散界面モデルを用いる微視的二相流の界面追跡計算法、日本計算工学会第13回計算工学講演会、2008年5月21日、仙台市民会館 (宮城県)
- ⑬ 高田尚樹、他3名、拡散界面モデルに基づく界面追跡法を用いた二相流数値シミュレーション、日本流体力学会第21回数値流体力学シンポジウム、2007年12月19日、秋葉原コンベンションホール (東京都)
- ⑭ Naoki Takada, et al., Application of Phase-Field Method to Numerical Analysis of Motions of Two-Phase Fluid on Solid Surface, Third Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM'07-EPMESC XI), December 4, 2007, ICC Kyoto, Paper ID-287213
- ⑮ 高田尚樹、二相流格子ボルツマン法の拡散界面モデルについて、日本機械学会第20回計算力学講演会、2007年11月28日、同志社大学京田辺キャンパス (京都府)
- ⑯ 高田尚樹、二相流界面追跡シミュレーションへのフェーズフィールドモデルの導入について、日本機械学会創立110周年記念2007年度年次大会 先端技術フォーラム、2007年9月10日、関西大学千里山キャンパス (大阪府)
- ⑰ Naoki Takada, Application of Interface-Tracking Method Based on Phase-Field Model to Numerical Analysis of Isothermal and Thermal Two-Phase Flows, The 5th Joint ASME/JSME Fluids Engineering Conference

- (FEDSM2007), July 30, 2007, San Diego, California, USA, Paper No. FEDSM2007-37536
- ⑱ Naoki Takada, et al., Numerical Simulation of Motions of Incompressible Two-Phase Fluid on Solid Surface Using a Phase-field Method, The 6th International Conference on Multiphase Flow (ICMF2007), July 12, 2007, Congress Centre Leipzig (CCL), Leipzig, Germany, Paper No. S1_Thu_D_61
- ⑲ 高田尚樹、他 3 名、フェーズフィールド法による固体表面上における二相流体挙動の数値シミュレーション、日本混相流学会年会講演会 2007、2007 年 6 月 24 日、札幌コンベンションセンター(北海道)
- ⑳ 高田尚樹、濡れ性が不均一な固体表面上の二相流体挙動のフェーズフィールド法による数値シミュレーション、第 12 回日本計算工学会講演会、2007 年 5 月 23 日、国立青少年オリンピック記念総合センター(東京都)
- 21 高田尚樹、市川直樹、フェーズフィールド法を用いたマイクロチャンネル内高密度比二相流数値シミュレーション、第 56 回理論応用力学講演会 (NCTAM2007)、2007 年 3 月 9 日、日本学術会議 (東京都)
- 22 高田尚樹、フェーズフィールド法による二相流界面追跡シミュレーションについて、第 56 回理論応用力学講演会 (NCTAM2007)、パネルディスカッション PD4 流れの粗視化とシミュレーション、2007 年 3 月 8 日、日本学術会議 (東京都)
- 23 高田尚樹、廣川景俊、林 公祐、富山明男、フェーズフィールド法による二相流数値シミュレーション、日本流体力学会 第 20 回数値流体力学シンポジウム、2006 年 12 月 20 日、名古屋大学(愛知県)
- 24 高田尚樹、フェーズフィールドモデルに基づく二相流数値計算手法について、北陸 M 倶楽部 (HMC) セミナー、2006 年 12 月 8 日、富山大学人間発達科学部 (富山市)
- 25 高田尚樹、相変化を伴う二相流数値シミュレーションのためのフェーズフィールド法、日本機械学会熱工学コンファレンス 2006、2006 年 11 月 24 日、慶応義塾大学理工学部 (横浜市)
- 26 高田尚樹、二相流数値シミュレーションに対するフェーズフィールドモデリング、日本機械学会第 19 回計算力学講演会、2006 年 11 月 3 日、名古屋大学 (愛知県)
- 27 Naoki Takada and Akio Tomiyama, Numerical Simulation of Isothermal and Thermal Two-phase Flows Using Phase-field Modeling, The 15th Discrete Simulation of Fluid Dynamics (DSFD2006) Conference - The 20th anniversary of Lattice Gases and beyond -, August 23, 2006, Univ. Geneva, Geneva, Switzerland
- 28 Naoki Takada and Akio Tomiyama, Interface-Tracking Simulation of Two-Phase Flows by Phase-Field Method, 2006 ASME Joint U.S.-European Fluids Engineering Summer Meeting (FEDSM2006), July 19, 2006, Miami, Florida, USA, Paper No. FEDSM2006-98536
- 29 高田尚樹、富山明男、フェーズフィールド法を用いた相変化を伴う二相流の数値シミュレーション、日本混相流学会年会講演会 2006、2006 年 8 月 6 日、金沢工業大学 (石川県)
- 30 高田尚樹、広川景俊、林公祐、富山明男、二相流数値シミュレーションの界面移流・再構成計算に対するカーン・ヒリアード方程式の適用性の検討、第 11 回日本計算工学会講演会、2006 年 6 月 12 日、大阪大学コンベンションセンター (大阪府)
- [その他]
- ① 高田尚樹、自由エネルギー拡散界面モデルの二相流数値解析への導入、日本機械学会流体工学部門 (JSME-FED) ニュースレター 流れ、2008 年 4 月号 (http://www.jsme-fed.org/newsletters/2008_4/no4.html#ctop)
- ② 研究成果一覧 Web ページ (日本語版) : <http://staff.aist.go.jp/naoki-takada/index.html>
- ③ 研究内容紹介 Web ページ (日本語版) : http://staff.aist.go.jp/naoki-takada/phase_field_cfd.htm
- ④ 研究成果一覧 Web ページ (英語版) : http://staff.aist.go.jp/naoki-takada/index_en.html
- ⑤ 研究内容紹介 Web ページ (英語版) : http://staff.aist.go.jp/naoki-takada/phase-field_cfd_en.html
6. 研究組織
- (1) 研究代表者
高田 尚樹 (TAKADA NAOKI)
独立行政法人産業技術総合研究所・先進製造プロセス研究部門・研究員
研究者番号 : 60357358
- (2) 研究分担者
- (3) 連携研究者