

VOF法を用いた相変化解析の基礎検証

大西 陽一*

Basic Verification of Phase Change Using VOF Method

Yoichi Ohnishi*

相変化を伴い移動する境界の検証問題として知られているステファン問題を例にとり、気液二相間を厚みゼロの自由表面で扱う VOF 法を用いた相変化計算の基礎検証を示す。

Keywords: 数値流体力学、相変化、自由界面、VOF 法

1. はじめに

近年、産業界でも気液二相解析が広く利用されるようになってきた。その解析手法の 1 つである VOF 法は、気相と液相が自由表面によって明確に区別できるものとし、その識別関数としての液相体積分率の移流を精度よく解く手法である。スロッシングや液体燃料の微粒化など、液界面の振る舞いが重要となる現象に多く適用される。流れの中で複雑な振る舞いをする界面を離散化された有限要素でどのように捕獲再構築するかは過去に多く研究されている[1][2]一方で、界面における力学的境界条件を考慮した離散化手法は多少複雑であり、汎用ソフトごとに異なる取り扱いをしているようである。VOF 法は非圧縮性を仮定するため Navier-Stokes 方程式と圧力のポアソン方程式が支配方程式となるが、厚みゼロの界面に表面張力が働くことで圧力に不連続性（圧力ジャンプ）が存在する。また重力のように密度の関数となる体積力も、密度の異なる流体が接する界面において圧力勾配の不連続性を生じさせる。これらを界面において適切に離散化して圧力ポアソン方程式を解かなければ数値振動を引き起こすことになる。近年界面の境界条件を適切に扱う手法として Ghost Fluid 法の研究が進んでいる[3][4]。現在のところ、相変化を伴わない流れに関しては、Ghost Fluid 法が精度、離散化の定式化の明確さなど VOF 法における最も成功した手法である[5]。

*アドバンスソフト株式会社 第 3 事業部

3rd Computational Science and Engineering Group,
AdvanceSoft Corporation

一方で、蒸発凝縮など相変化を伴う流れ場における手法は、未だ定式化の面からも明確になっているとは言い難い。相変化は混相流れにおいて基本的かつ重要な現象であり、VOF 法を用いた気液二相流解析技術の適用範囲の拡大において避けて通れない問題である。

本稿では、Ghost Fluid 法の定式化を踏襲しつつ、自由界面における相変化を含めた定式化への拡張を示し、その検証として相変化を伴う移動境界の基本的検証例題として知られているステファン問題を実施した例を示す。

2 章で支配方程式を示したのち、3 章で相変化を含んだ界面での離散化の問題を明確化する。4 章で相変化を伴う流れ場の定式化を詳説する。また 5 章において、相変化を含む移動境界問題の検証としてステファン問題を例にとり検証解析結果を示す。6 章はまとめである。

2. 支配方程式

相変化を含む気液二相流れにおいては、全体質量、液体質量、運動量、エネルギーの 4 つの物理量の保存を考慮するが、気相・液相の非圧縮性を反映し以下の 4 つの支配方程式を解く。

連続の式

$$\nabla \cdot \vec{V} = \dot{M} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) \quad (1)$$

運動方程式(Navier-Stokes 方程式)

$$\frac{\partial \rho \vec{V}}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{V} \vec{V} = -\nabla p + \nabla \tau + \vec{F} \quad (2)$$

エネルギーの式

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h \vec{V}) = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (3)$$

液相質量の式

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V} \alpha) = \frac{\dot{M}}{\rho_l} \quad (4)$$

ここで τ は応力テンソル、 h は比エンタルピーである。 F_i は重力などの体積力のほかに、VOF 解析の場合は自由表面上で作用する表面張力を含んでいる。 Q は熱流束、 $\dot{M}$ は液相質量の生成項である。

3. 数値計算法

3.1. SIMPLE 法による離散化

AFFr では非構造有限体積法を採用している。計算領域をセルと呼ばれる微小な多面体要素で分割する。すべての物理量をセル要素中心に保持し、方程式は各セルに対して積分形であらわされる。速度と圧力のカップリングは SIMPLEC 法を用いる。詳細は[6]を参照いただきたい。では重力や表面張力の影響で圧力が界面において微分不可能な場合の離散化手法について詳述している。

3.2. VOF 法における移流項スキーム

液相質量の式(4)を有限体積法で離散化する。

$$\frac{(\alpha^{n+1} - \alpha^n)}{\Delta t} \Delta V + \sum_f J_f \alpha_f A_f = \frac{\dot{M}}{\rho_l} \Delta V \quad (5)$$

ここで ΔV はセル体積、 J_f 、 A_f はセル界面における流束および面積である。高解像度スキームでは、セル界面における被移流関数 α_f をどのように求めるかがスキームの解像度、精度を左右する。VOF 法に代表される移流項の高解像度スキームには、ドナーアクセプター法をベースにしているものが多い。具体的には以下の規格化された VOF 関数を導入する。

$$\tilde{\alpha} = \frac{\alpha - \alpha_D}{\alpha_U - \alpha_D} \quad (6)$$

ドナーアクセプター法では図 1 に示すように界面 f を挟んで風上側セル（ドナー D ）、さらにその風上側（風上セル U ）と界面の風下側セル（アクセプター A ）のブレンドとして表現する。図 1 下図の NVD ダイアグラムにおいて、色付けされて

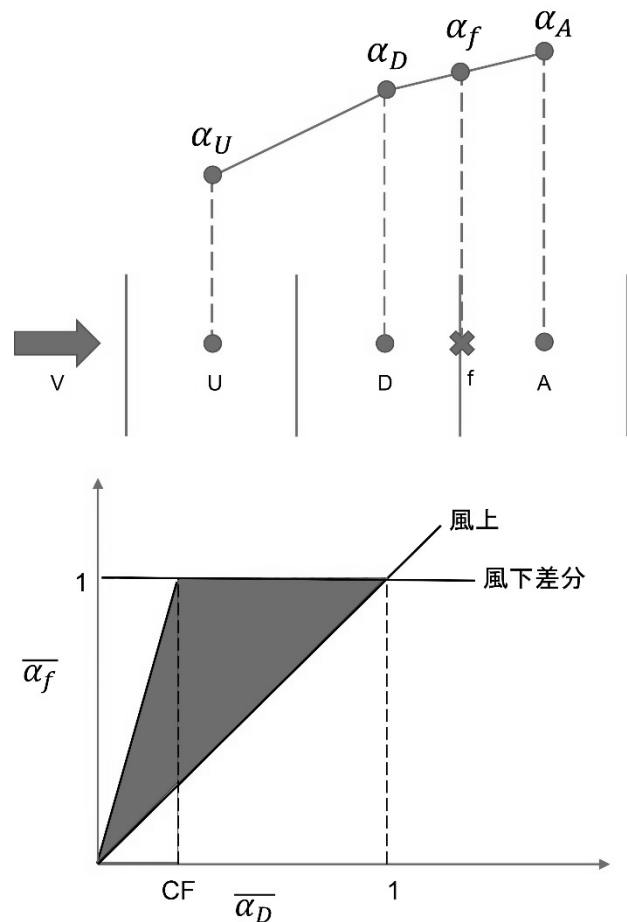


図 1 NVD ダイアグラム

いる領域が、規格化された界面関数の取りうる領域を示しており、 $\tilde{\alpha}_f$ は以下のように表される。

$$\tilde{\alpha}_f = \begin{cases} \tilde{\alpha}_D, & \tilde{\alpha}_D < 0, \tilde{\alpha}_D > 1 \\ \min(1, \frac{\tilde{\alpha}_D}{C_f}), & 0 < \tilde{\alpha}_D < 1 \end{cases} \quad (7)$$

$\tilde{\alpha}_f$ が分かれば以下のように界面での VOF 値を算出する。

$$\alpha_f = (1 - \tilde{\beta})\alpha_D + \tilde{\beta}\alpha_A \quad \tilde{\beta} = \frac{\tilde{\alpha}_f - \tilde{\alpha}_D}{1 - \tilde{\alpha}_D} \quad (8)$$

式(7)に現れる C_f は界面位置での流速から求めたクーラン数であり、時間進行中に界面を通じて移動する量を流速で制限した扱いとなっている。相変化を伴わない流れの場合は、式(8)で求めた界面 VOF 値を界面上下のセル間で受け渡ししながら移流させることで界面を保持しながら境界が移動する様子を再現することができる。ただし相変化を伴う場合は時間積分中に界面に到達する VOF 値も変化するため、特別な処理が必要となる。

3.3. 相変化速度

AFFr では、相変化は気液界面でのみ生じると仮定を置き、気相が多く存在するセルと液相が多く存在するセルの間に存在すると仮定する。相変化項をモデル化するには以下の過程を設ける。

- ・相変化は界面でのみ生じる。
 - ・界面の温度は飽和温度に保たれる。
 - ・界面を通過できない熱はすべて潜熱に使われる。
- これらの過程を満足する気液界面における物理量の境界条件として、界面温度一定の条件

$$T_f = T_{sat} \quad (9)$$

界面を通過する流束及び熱流束の不連続

$$\vec{V}_g - \vec{V}_l = -\left(\frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_l}\right) \dot{M} n_s \quad (10)$$

$$\vec{Q}_g - \vec{Q}_l = -(h_g - h_l) \dot{M} n_s \quad (11)$$

となる。ここで n_s は液相側を正にした界面法線ベクトルである。

気液界面における各相からの熱流束は

$$\vec{Q} = k \frac{T - T_{sat}}{dx} n_s \quad (12)$$

で表されるため、相変化速度は

$$\dot{M} = -\frac{(\vec{Q}_g - \vec{Q}_l) \cdot n_s}{h_g - h_l} \quad (13)$$

4. 相変化を伴う流れ場での自由界面の取り扱い

4.1. 移流項の扱い

式(8)で見たように、通常 VOF 法の高解像度スキームは、自由界面流速に乗って一定時間の間に通過する液相体積量を見積もり、その後時間平均した量として与える。界面で相変化がある場合には、自由界面上で速度の不連続が発生し、また自由界面位置を基準として液相体積の増加現象が発生する。これらを考慮した界面上の VOF 値は以下の式で与えられる。

$$\alpha_f^{\text{mod}} = \alpha_f - \frac{\frac{\dot{M}}{\rho_l} \Delta V}{J_f A_f - \dot{M} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) \Delta V} \quad (14)$$

ここで左辺第一項の α_f は式(8)で高解像度スキームを用いて求めた界面上の VOF 値である。式(14)はその補正という表式になっている。

エネルギーの移流項に関しても VOF と同等に補正する。移流される量は ρh とし、VOF の移流項と同等の高解像度スキームを用いて求めた界面エネルギー量に対して補正を施す。

$$(\rho h)_f^{\text{mod}} = (\rho h)_f - \frac{(h_g - h_l) \dot{M} \Delta V}{J_f A_f - \dot{M} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) \Delta V} \quad (15)$$

4.2. 流束の扱い

最後に流束に関しても相変化量の補正を施す。通常の SIMPLE 法における流束の離散化表式は

$$J_f = \hat{e}_n \cdot \vec{V} - \frac{\Delta V}{\bar{a}} \left(\frac{p_j - p_{j+1}}{\Delta x} - \nabla p_f \cdot \hat{e}_s \right) \frac{1}{\hat{e}_n \cdot \hat{e}_s} \quad (16)$$

ここで上付きバーは、界面における両側セルの物理量の平均を示す。 $\bar{a}$ は、Navie-Stokes 方程式を離散化したときの対角項 a を界面平均した量である。圧力 P の下添え字 $j, j+1$ は界面を挟んだ両隣のセル番号を示す。

相変化を伴う流れ場の場合、流束の表示は

$$J_f = \hat{e}_n \cdot \left(\vec{V} - \dot{M} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) n_s \right) - \frac{\Delta V}{\bar{a}} \left(\frac{p_j - p_{j+1}}{\Delta x} - \rho_f \vec{V} \cdot \dot{M} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) - \nabla p_f \cdot \hat{e}_s \right) \frac{1}{\hat{e}_n \cdot \hat{e}_s} \quad (17)$$

となり、第一項の流速の界面平均値は、式(10)に相当する不連続量を補正し、第2項の圧力勾配に関しても輸送される運動量分の不連続量を相変化相当分補正する。

5. ステファン問題

上述した相変化モデルによる蒸発現象の再現性を検証するため、図2に示すステファン問題を解いた。固体と液体の間には蒸気が存在しており、固体と蒸気が飽和温度であるのに対して、液体が加熱度 $\Delta T = 5.0[K]$ となっているため気液界面で蒸発が生じる。その際に生じた蒸気によって、液

体は図の右側へ移動する。

計算領域の長さは $L = 20[\text{mm}]$ とし、 $x = 0.0[\text{mm}]$ は固定壁とし、 $x = L$ では大気開放・自由流出、その他は滑り壁とした。初期の液面位置は $x_0 = 0.4[\text{mm}]$ とした。

ステファン問題における界面位置の解析解は

$$x_{\text{face}}(t) = 2\lambda\sqrt{kt} \quad (18)$$

ここで λ は以下の超越方程式の解である。

$$\lambda \exp(\lambda^2) \operatorname{erf}(\lambda) = \frac{c_p \Delta T}{L_{\text{sat}} \sqrt{\pi}} \quad (19)$$

ここで比熱 $c_p = 4215.1 \left[\frac{\text{J}}{\text{K} \cdot \text{kg}} \right]$ 、潜熱 $L_{\text{sat}} = 2157 \text{E}3 [\text{J/kg}]$ とした。

CFD 解析に用いたメッシュサイズ Δx は 0.05mm

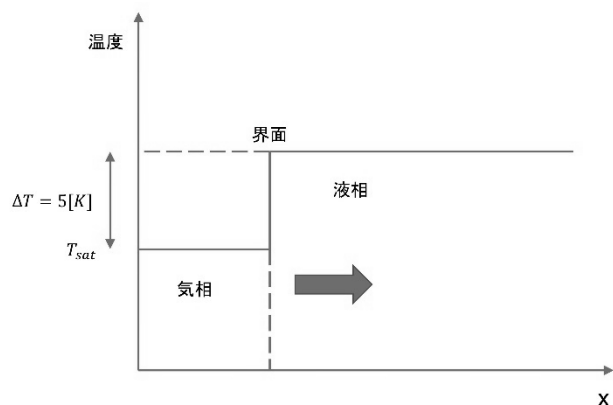


図 2 ステファン問題の温度分布

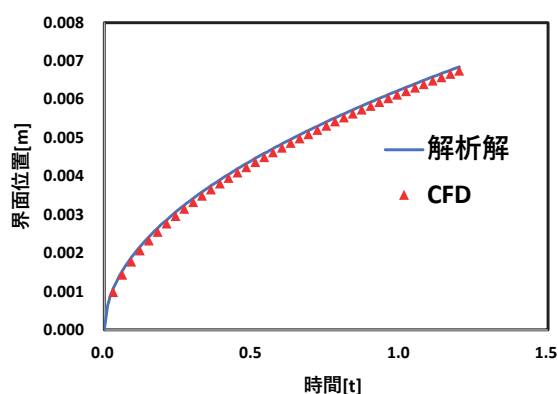


図 3 界面位置の解析解との比較

を用いた。図 3 に CFD 解析結果と解析解との比較を示す。CFD の結果は解析解とよく一致していることが分かる。

6. まとめ

相変化を伴う流れ場において、VOF 法の枠組みでの定式化を示した。界面において相変化が生じる場合、速度場、エネルギー、圧力場に不連続が生じる。数値流束を適切に処理することによってこのような不連続性を適切に捉えることができることを紹介した。この定式化を用いてステファン問題を解き、解析解とよく一致することを示した。

今後は、実機規模での実用的な解析ツールとして鋭意改良を進めていく。

記号

A:面積

n_x :セル界面法線方向 x 成分

ΔV :コントロールボリューム

e_n :界面法線ベクトル

e_s :セル中心を結ぶラインに沿った単位ベクトル

ds :セル間距離

参考文献

- [1] C.W. Hirt and B.D. Nichols. Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries. J. Comput. Phys.,39:201-225,1981
- [2] O. Ubbink. Numerical Prediction of Two Fluids Systems with Sharp Interfaces. PhD thesis, Imperial College of Science Technology and Medicine, London, England, 1997
- [3] Fedkiw, R., Aslam, T., and Xu,S., The Ghost Fluid Method for Deflagration and Detonation discontinuities, J. Computat. Physics 154,n.2,393-427(1999)
- [4] Fedkiw, R., and Liu, X-D., The Ghost Fluid Method for Viscous Flows, Progress in Numerical Solutions of Partial Differential Equations, Arcachon,France, edited by M.Hafez, July 1998
- [5] X-D. Liu, R. P. Fedkiw and M. Kang A Boundary Condition Capturing Method for Poisson's Equation on Irregular Domains
- [6] “圧力ベース解法における種々の不連続境

界面捕獲法の紹介”，特集1「PRA」、特集2
「AI」，技術情報誌 アドバンスシミュレー
ション Vol.28 (2020.9)

- [7] Samuel W.J. Welch and John Wilson, A Volume
of Fluid based Method for Fluid Flows with
Phase Change ,Journal of Computational Physics
160,662-682(2000)

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、
アドバンスソフト株式会社 ホームページのシ
ミュレーション図書館から、PDF ファイルが
ダウンロードできます。(ダウンロードしてい
ただくには、アドバンス/シミュレーション
フォーラム会員登録が必要です。)