

ミルクラウンの数値解析

Numerical Analysis of Milk Crown

岡 田 信 宏*
Nobuhiro OKADA高 谷 幸 司
Kouji TAKATANI

抄 録

ミルクラウンとは、液滴が液膜に落下する際に、王冠状に跳ね上がる現象である。この美しい流体現象は、液体の慣性力と表面張力のバランスにより、短い時間に発生する現象である。この現象を数値流体力学で再現することは極めて難しく、古くから難題として知られてきた。気相と液相の密度差が約 1000 倍もあるため、混相流解析は困難であることが原因である。近年、液体の自由表面を考慮した混相流の解析は、Volume of Fluid 法の開発により、飛躍的に向上した。しかし、表面張力を考慮し、気液界面の挙動を高精度に計算することは依然として困難である。本報告では、数値解析技術を用いてミルクラウンをコンピュータ上で再現することに試みた結果を報告する。

Abstract

Milk crown is a phenomenon in which a droplet bounces up in a crown-like shape when it falls into a liquid film. This beautiful fluid phenomenon occurs in a short time due to the balance between the liquid's inertial force and surface tension. Reproducing this phenomenon using computational fluid dynamics (CFD) is extremely difficult and has long been a challenging task. Multiphase flow analysis is difficult because the density difference between the gas and the liquid phases is approximately 1000 fold. In recent years, the development of the Volume of Fluid method, which considers the free surface of a liquid, has improved the level of multiphase flow analysis. However, it remains difficult to accurately calculate the behavior of the gas-liquid interface while considering the surface tension. In this paper, numerical analysis techniques were reported to represent a milk crown on a computer.

1. 緒 言

ミルクラウンは、牛乳の液滴を落下させたときに、王冠状に跳ね上がる美しい自然現象である。Milk Drop Coronet とも呼ばれ、王冠か宝冠かは議論が分かれるところではあるが、多くの人を引き付ける美しさがある。ミルクラウンが発生して消失する時間は、数ミリ秒と非常に短く、目視でその挙動を詳細に把握することは難しい。ミルクラウンは、1907 年に A. M. Worthington により学術雑誌に報告され¹⁾、H. E. Edgerton が 1957 年に美しい撮影を行っている²⁾。Edgerton はストロボ制御技術の先駆者であり、1/1000 秒の現象を数多く撮影し報告している。

高速撮影技術が進化するに従い、ミルクラウンの挙動の解析も進み、多くの報告がなされている。Deegan らは、高速度カメラによる撮影結果を解析し、ミルクラウンの形態を、Crown Splash, Microdroplet Splash, Peregrine Sheet

に分類し、無次元数のウェーバー数 We とレイノルズ数 Re で整理を行っている³⁾。

$$We = \frac{\rho DU^2}{\sigma}, \quad Re = \frac{\rho DU}{\nu} \quad (1)$$

ここで、 ρ は液体の密度、 D は液滴の直径、 U は液滴の落下速度、 σ は表面張力、 ν は動粘性係数である。

ミルクラウンの形成は 4 段階の過程がある。まず、液滴が液膜に衝突し、円環状の液膜が形成され、円環状の上端部が厚みを持つ。次に、厚みを持った上端部が、流動不安定性から波状に厚い箇所と薄い箇所を形成する。第 3 段階として、端部の厚みを増した箇所から腕 (arm) または角 (corner) と呼ばれる複数の突起部が成長する。第 4 段階では、突起部の先端が表面張力により丸みを帯びて、突起部から乖離する。この第 4 段階の形状が、Crown Splash と呼ばれるミルクラウンの象徴的な形状である。Microdroplet Splash は、突起部が成長する前に、微細な液滴が飛散する

* 先端技術研究所 数理科学研究部 室長 (主席研究員) 工学博士 千葉県富津市新富 20-1 〒293-8511

現象であり、Peregrine Sheet は円筒膜の隆起が生じるが、突起部が十分に成長しない状態である。

Deegan らによると、Re 数が 1000 よりも小さく、We 数が 600 よりも大きい場合に、Crown Splash のみが発生し、Re 数が高くなると Microdroplet Splash を伴うと整理されている。また、Re 数が 1300 以下で、We 数が 40 より小さいと Peregrine Sheet も形成されない。Crown Splash が発生する条件として、式 (2) の条件を報告している。このように、ミルククラウンの形成には落下液滴の慣性力と界面張力のバランスで、その挙動が変化することが分かる。

$$We > 2.6 \times 10^4 Re^{-0.5} \quad (2)$$

Terzis らは、表面張力を調整した尿素水溶液を用いミルククラウンの詳細な撮影と定量的な解析を行っている⁴⁾。We 数と液膜厚みにより、発生するアームの数を分析しており、We 数が小さいほど、液膜が厚くなるほどアームの数が少なくなることを報告している。さらに、液滴が衝突する液膜の厚みもミルククラウンの形成に少なからず影響を及ぼす。

ミルククラウンの数値流体解析が困難と言われているのは、自由表面の再現の難しさである。空間を離散化し、ラグランジェ的に液体の運動を計算する差分法や有限体積法による流体解析では、数値拡散を完全に抑制することが不可能であるため、輸送に伴い界面がぼやけていくという問題が生じる。そのため、ミルククラウンの解析は、粒子モデル⁵⁾や格子ボルツマン法⁶⁾による報告例が多い。これらの計算方法は、自由界面を表現するには優れているが、伝熱や反応などとの連成解析が難しくなる。製鉄プロセスにおける流体解析でも、差分法または有限体積法ベースの解析手法が広く用いられている。ミルククラウンの解析に挑戦することにより得られた技術を反映するため、有限体積法による解析に取り組んだ。

差分法や有限体積法で自由表面を取り扱う方法は、Hirt らが開発した Volume of Fluid (VOF) 法⁷⁾を用いる。VOF 法は、気相と液相の 2 相混相流において、流体率 (VOF)

を精度良く輸送させることにより界面を表現する方法である。VOF 法とレベルセット法^{8,9)}を組み合わせた界面捕獲法により、自由表面の精度良い計算が可能となった。レベルセット法は、界面を表現するために、界面からの距離を示す距離関数の計算を行う。これにより、特に計算が難しい表面張力を精度良く計算することが可能となる。液滴や気泡など、界面張力が支配的な系の計算は、非常に繊細であり、計算方法の細部が異なるだけで、大きく異なった計算結果となる。そのため、多くの計算方法が報告されており、各手法における一長一短も議論されている¹⁰⁾。本報告では、定量性には欠ける点もあるが、如何にミルククラウンを美しく計算できるかを追求した結果を報告する。

2. 数学モデル

2.1 VOF 法の計算方法

ミルククラウンを計算するために解くべき方程式は、次の式 (3) から式 (5) に示す 3 つの方程式である。ここで、 ρ は流体の密度、 \mathbf{u} は速度ベクトル、 p は圧力、 μ は粘性係数、 \mathbf{g} は重力加速度ベクトル、 \mathbf{F} は外力ベクトル、 φ は液相の体積率 (以後、流体率と呼ぶ) である。上付きの T は、転置行列を意味する。

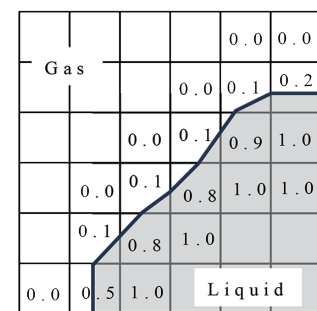
$$\frac{\partial(\rho\mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)) + \rho\mathbf{g} + \mathbf{F} \quad (3)$$

$$\nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = 0 \quad (4)$$

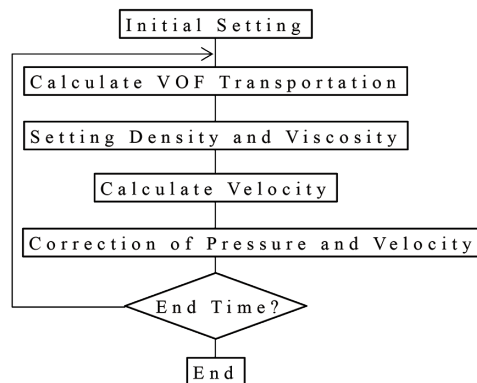
$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (\varphi\mathbf{u}) = 0 \quad (5)$$

式 (3) は運動量の輸送方程式であり、式 (4) は質量保存則、式 (5) は流体率の輸送方程式である。未知数は、速度 \mathbf{u} 、圧力 P 、流体率 φ の 3 つで、3 つの支配方程式から計算を行う。

図 1 に VOF 法における計算方法の模式図を示す。図 1(a) に示すように、計算セルを液相が 100% 占める場合に流体率 φ は 1.0 となり、気相が 100% 占める場合に 0.0 となる。気液界面は流体率が $0 < \varphi < 1$ のセルに含まれる。



(a) System of VOF mesh



(b) Calculation flowchart

図 1 VOF 法の模式図
Schematic diagram of VOF method

図1(b)にVOF法の計算フロチャートを示し、全体的な計算流れを説明する。通常のVOF法では、気相と液相も同じ速度場で表現する一流体モデルで計算を行う。初期設定として、初期の液相の分布を流体率で設定し、ミルクラウンの場合は、落下液滴に速度を設定する。以後、微小時間間隔 Δt で式(3)から式(5)を時間発展的に計算する。計算の順番は、式(5)から次の時刻における流体率 φ^{n+1} を算出する。次に得られた流体率から、各セルの密度や粘性などの物性値を計算し、式(3)から次の時刻の流速を算出する。ただし、次の時刻の流速が式(4)の保存則を満たしている保証はないため、式(4)を満たすように圧力と流速を補正する。ミルクラウンの計算を行うために、幾つかの技法が必要であり、著者らが検討した中で妥当と思われる方法を次節に説明する。

2.2 流体率輸送の計算方法

式(5)の離散化を式(6)に示す。上付き n は、現在の時刻の値を示し、 $n+1$ が Δt 秒後の値である。

$$\frac{\varphi^{n+1} - \varphi^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\varphi^n \mathbf{u}^n) = 0 \quad (6)$$

式(6)の計算方法を説明するために、図2に有限体積法による流体解析における変数配置の模式図を示す。 φ と速度 U は、セルの中心に設定されており、セル界面の流速を U_f とする。図2では、単純に左から右方向への流れがあり、

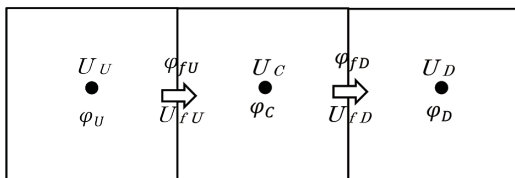


図2 流体解析における変数配置
Coordinate system of control volume in fluid dynamics

左側の要素が上流側である。上流側は下添え字 U 、中央は C 、下流側を D とする。次の時刻の φ_C は、式(7)から算出する。

$$\varphi_C^{n+1} = -\Delta t (\varphi_D^n U_{fD} S_D - \varphi_U^n U_{fU} S_U) / V + \varphi_C^n \quad (7)$$

ここで、 S は界面の面積であり、 V はセルの体積である。 φ_C の変化量は、セルから流出する値と流入する値との差となる。界面の流速は、流速計算結果から得られているが、界面の値 φ_f をどのように設定するかが問題となる。単純にセル中心からの線形補完とすれば良いと思われるが、この場合、非物理的な振動が発生するために工夫が必要となる。例えば、安定化のために風上差分を適用してみる。界面の値は、流れの上流側のセルの値を用いるという方法である。図2の場合で、1次の風上化を適用すると、式(8)となる。

$$\varphi_C^{n+1} = -\Delta t (\varphi_C^n U_{fD} S_D - \varphi_U^n U_{fU} S_U) / V + \varphi_C^n \quad (8)$$

上流化により輸送量は、滑らかな分布で算出されるようになるが、数値拡散という問題が発生し、今日でも流体解析の大きな課題となっている。図3に数値拡散の説明として、(a)理想的な輸送、(b)数値拡散が発生する場合を示す。時刻 $n=1$ において、輸送量は左から2つ目のセルが1.0で、他のセルは0.0とする。左から右に輸送される場合、拡散がない場合は図3(a)に示すように、 $n=1$ のセルの幅を持って、下流側に輸送されるべきである。しかし、上流化を適用した場合は、図3(b)に示すように界面に輸送量が到達する前から下流側へ先走って輸送されることになり、あたかも拡散しているように広がってしまう。これが数値拡散と呼ばれる数値解析上の現象である。輸送量が流体率であった場合、気液界面は、計算が進む度にぼやけていくという問題となり、これを解決するため多くの界面捕獲法が開発されてきた。

今回、界面捕獲法はCICSAM (Compressive Interface Capturing Scheme for Arbitrary Meshes) 法¹⁰⁾を用いた。CICSAM法は、VOF法が大きく発展した切掛けとなった手

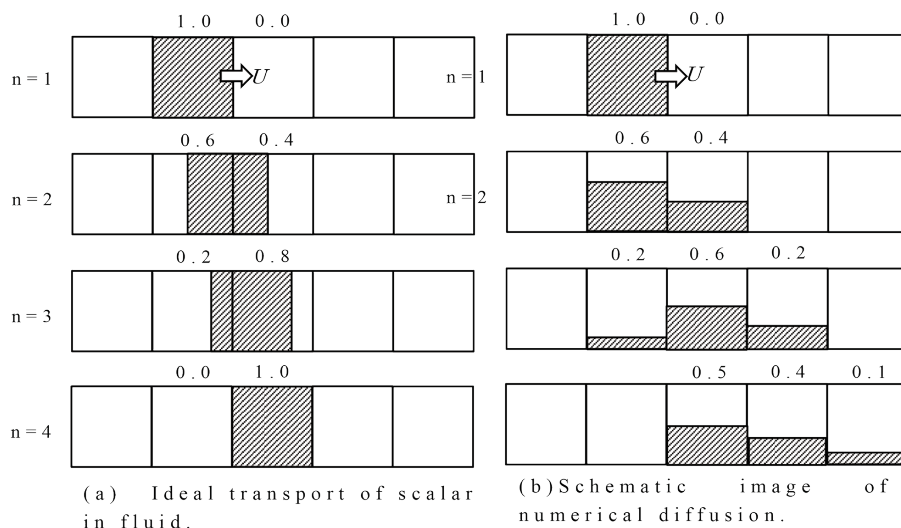


図3 数値拡散の模式図
Schematic image of numerical diffusion

法であり、他の新しい手法と比較しても大きな差はなかった。

流体率の輸送計算は、時間積分方法の影響が大きい。式(8)は、時刻 n の値から陽的に時刻 $n+1$ の値を算出する単純な方法であり、クーラン数が 0.1 程度と小さい場合は、計算することが可能である。クーラン数 Cr は、 $Cr=U\Delta t/\Delta x$ として表される。ここで、 U は流速、 Δx はメッシュ長さである。1 ステップの計算において、流れによる輸送がメッシュ長さを超えると計算は不安定となる。よって、安定した計算を行うためには、タイムステップを小さくする必要があるため、計算時間が長くなる。また、流体率の計算が破綻する場合もあるため、高精度の計算を行った方がよい。今回、時間積分は、式(9)に示す Crank-Nicolson 法により計算を行った。

$$\frac{\varphi^{n+1}-\varphi^n}{\Delta t} = -\frac{1}{2} \{ \nabla \cdot (\varphi^n \mathbf{u}^n) + \nabla \cdot (\varphi^{n+1} \mathbf{u}^n) \} \quad (9)$$

式(9)では、右辺にも次の時刻の値を含むため、反復計算が必要になる。よって、陽的な解法よりも計算時間が必要になるが、クーラン数を大きく設定することができる。ただし、計算精度を維持するにはクーラン数は 1 以下である。

図 4 は、CICSAM 法の模式図を示し、CICSAM 法における移流項の離散化方法を説明する。CICSAM 法では、移流項を式(10)のように計算を行う。

$$\nabla \cdot (\varphi \mathbf{u}) = \gamma(\theta) [\text{BD Scheme}] + (1-\gamma(\theta)) [\text{HR Scheme}]$$

$$\gamma(\theta) = \frac{\cos(2\theta)+1}{2}, \quad \theta = \arccos(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_\varphi) \quad (10)$$

ここで、 \mathbf{n} はセル界面に垂直な単位法線ベクトル、 \mathbf{n}_φ は気液界面の単位法線ベクトルである。 $\gamma(\theta)$ は、図 4(a) のように、気液界面とセル界面が平行な場合に $\gamma(\theta)=1$ となり、式(10)において BD Scheme が 100% となる。BD Scheme は、Bounded Downwind Scheme であり、風下の値を採用する手法である。図 4(a) において、着目セル界面の値 φ_{fu} は、1 次風上法では上流側のセルの値 φ_u が採用される。しかし、 φ_u を採用すると、まだ気液界面が着目セル界面に到達していないのに、流体率を下流側に輸送することになる。これを避けるために、BD Scheme では、セル界面の値として下流側の φ_c を採用する。BD Scheme には、Hyper-C と呼ばれるスキームが使われている。

図 4(b) に示すように、気液界面とセル界面が垂直な場合は、上流側の流体率を下流側に高精度に輸送させればよい。このため、HR Scheme (High Resolution Scheme) としては、Ultimate QUICKEST と呼ばれる高精度の上流化法が用いられている。

気液界面に垂直な法線ベクトル \mathbf{n}_φ は、式(11)から算出する。これは、Brackbill らが表面力を体積力として計算する方法¹¹⁾として提案した CSF (Continuum Surface Force) 法に含まれる方法である。ただし、後述するように、流体率から気液界面の法線ベクトルを精度良く求めることにも課題がある。

$$\mathbf{n}_\varphi = \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \quad (11)$$

図 5 は、流体率の輸送計算例として、Slotted Circle の計算結果を示す。Slotted Circle は、図 5(a) に示すように、切り欠きのある円盤状に初期流体率を設定し、一周回転させてその形状が維持できているか評価する方法である¹²⁾。計算メッシュの分割数は 35×35 であり、均一の角速度で流体率の輸送計算を行った。クーラン数 Cr は 0.1 であり、陽解法で計算した。図 5(b) は、1 次風上法の結果であり、数値拡散が大きく、気液界面がぼやけてしまっている。図

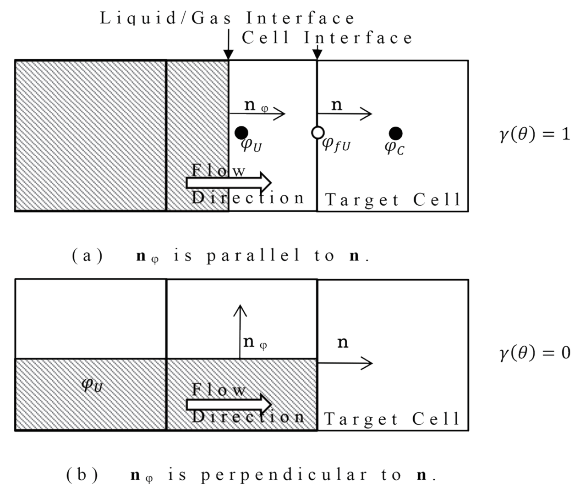


図 4 CICSAM 法の模式図
Schematic diagram of the CICSAM method

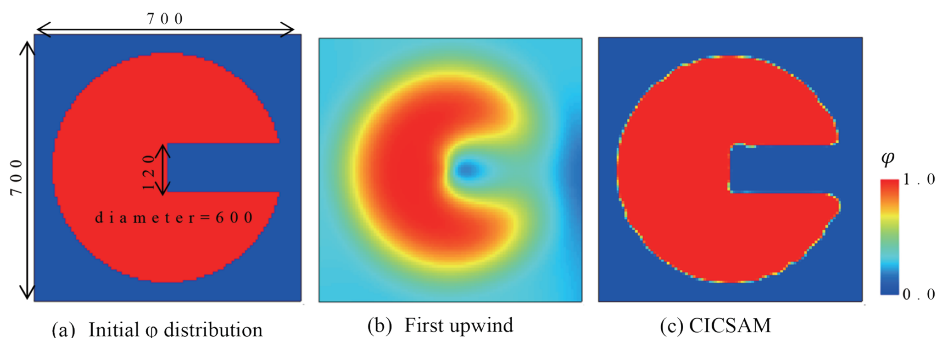


図 5 Slotted circle の計算結果例 (陽解法, $Cr=0.1$)
Calculation results of the slotted circle (Explicit method, $Cr=0.1$)

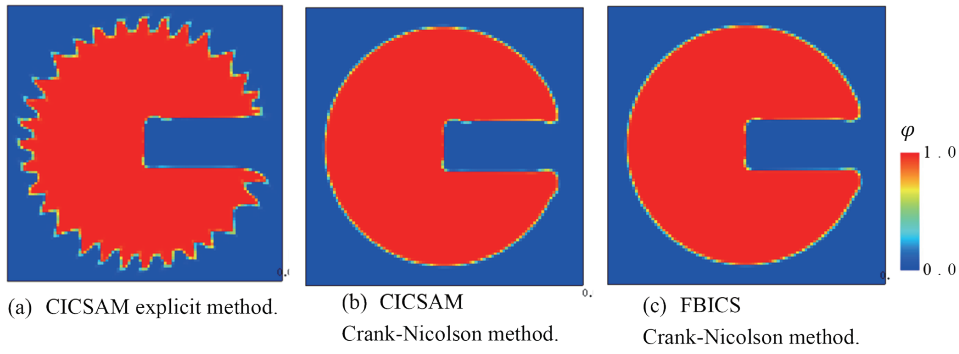


図6 Slotted circle の計算結果例 (Cr=0.25)
Calculation results of the slotted circle (Cr=0.25)

5(c) は、CICSAM 法の計算結果であり、境界の流体率がある程度滲んでいるが、Slotted Circle の形状を維持できていることが確認される。

図6は、クーラン数 Cr を 0.25 とした場合の Slotted Circle の計算結果を示す。図6(a)は、移流項の計算を陽解法とした CICSAM 法の計算結果であり、不自然な結果となっている。図6(b)は、CICSAM 法において、移流項の計算を Crank-Nicolson 法とした結果であり、Slotted Circle の形状が維持できている。Crank-Nicolson 法を適用すれば、 $Cr=0.25$ においても妥当な流体率の輸送計算が可能であることが確認される。また、図6(c)は、FBICS 法¹³⁾で計算した結果であり、この方法も適していると言える。CICSAM 法では、Crank-Nicolson 法を用いても $Cr=0.5$ で形状が崩れるが、FBICS 法は $Cr=0.5$ でも形状が維持できることを確認した。

図6に示すように、VOF 法における気液界面の輸送計算は、一見許容できるレベルには可能となった。ただし、切り欠き部の流体率は滲んでおり、時間発展を重ねると徐々に界面が崩れていることが予見される。この問題を解決するため、数値拡散により分散した流体率を集約する処理が提案されている。Berberović らは、界面圧縮法として、流体率の輸送計算に式(12)の左辺第3項を提案している¹⁴⁾。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\phi(1-\phi) \mathbf{u}_c) = 0 \quad (12)$$

$$\mathbf{u}_c = C_a U_f \mathbf{n}_f, \quad \mathbf{n}_f = \nabla f / |\nabla f| \quad (13)$$

ここで、 C_a は定数である。

Takatani は、通常の拡散とは逆方向の輸送として、式(14)の逆拡散モデルを提案している¹⁵⁾。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{u}) + \nabla \cdot (D_r \nabla \phi) = 0 \quad (14)$$

$$D_r = C\phi(1-\phi)C_r(1-C_r), \quad C_r = U_f \Delta t / d \quad (15)$$

ここで、 C は定数であり、 d は対称セルと隣接セルの中心間距離である。Berberović らのモデルと Takatani のモデルは、いずれも流体率の低いセルから高いセルに輸送され、輸送量は流体率が 0 または 1 に近いほど少なくなる。

Takatani のモデルでは、クーラン数が 0 または 1 の時に数値拡散がゼロであることも考慮されている。

2.3 界面張力の計算方法

気相と液相の界面に働く力は表面張力と呼ばれ、それ以外の液相／固相では界面張力と呼ばれる場合がある。本報告では、気相と液相について記述するが、計算方法はこれに限定されないため、界面張力と記す。界面張力は、界面張力係数 σ と曲率 k の積の大きさで作用する。有限体積法では、微小体積に分割されたセルに対して計算を行うため、界面張力を体積力に変換する必要がある。Brackbill が提案した CSF 法¹¹⁾は、優れた手法であり、多くのモデルで用いられている。理想的な界面では、界面の位置を \mathbf{x}_0 とした場合に、位置 \mathbf{x} における界面張力は δ 関数を用いて、式(16)のように表される。

$$\mathbf{F}_s = \sigma k \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad (16)$$

図7(a)に理想的な界面における流体率の分布を示す。数値解析では数値拡散があるため、図7(a)に示すように界面を維持することはできず、図7(b)に示すような流体率がある幅 Δx で勾配を持った分布となる。CSF 法では、この勾配の範囲に界面張力を式(17)で示す形で作用させる。

$$\mathbf{F}_s = \sigma k \nabla \phi \quad (17)$$

この方法により、界面張力を体積力に変換することができ、有限体積法で計算することが可能となる。当然ながら、 Δx は小さいほど高精度に界面張力を計算することが可能であり、 $\Delta x=0$ の場合に式(16)と一致する。

界面張力の計算には、曲率 k が必要である。曲率は、界面方向の単位法線ベクトル \mathbf{n}_s の発散として、式(18)から計算される¹⁶⁾。

$$k = \nabla \cdot \mathbf{n}_s = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) = \frac{\phi_{xx}^2 + \phi_{yy}^2 + \phi_{zz}^2 + \phi_{xx}\phi_{yy} + \phi_{xx}\phi_{zz} + \phi_{yy}\phi_{zz} - 2(\phi_{xy}\phi_{xz} + \phi_{yz}\phi_{xz} + \phi_{zx}\phi_{xy})}{(\phi_x^2 + \phi_y^2 + \phi_z^2)^{3/2}} \quad (18)$$

ここで、 $\phi_{x_i} = \frac{\partial \phi}{\partial x_i}$ であり、 $\phi_{ij} = \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial \phi}{\partial x_i}$ である。

しかしながら、流体率から算出される曲率は、界面張力の計算を行うには精度が不足しており、Level Set 関数を用

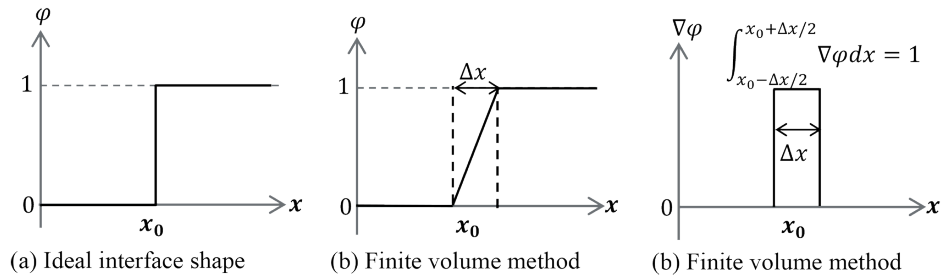


図7 気液界面における流体率の分布
Distribution of VOF around the interface between the gas and liquid phase

いた計算方法の方が適していることが報告されている¹⁷⁾。VOF法とLevel Set関数を組み合わせた自由界面の計算方法はCLSVOF (Coupled Level Set and Volume Of Fluid) 法と呼ばれている。Level Set関数 ψ (以後、距離関数と呼ぶ)は、界面からの距離を表し、式(19)を満たす。

$$|\nabla\psi| = 1 \quad (19)$$

この距離関数の輸送を式(20)で算出すれば、界面を追跡することができるが、数値拡散により距離関数の性質である式(19)を満たさなくなる。

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\psi = 0 \quad (20)$$

この問題を解決するために、式(21)を用いて、距離関数の再初期化を行う必要がある¹⁸⁾。

$$\frac{\partial\psi}{\partial\tau} + \mathbf{w} \cdot \nabla\psi = S(\psi), \quad \mathbf{w} = S(\psi) \frac{\nabla\psi}{|\nabla\psi|}, \quad S(\psi) = \frac{\psi}{\sqrt{\psi^2 + \delta_c^2}} \quad (21)$$

ここで、 τ は疑似的な時間であり、 δ_c は格子幅である。距離関数の再初期化は、界面近傍の数セル分だけ行えば十分であり、具体的には15回程度の計算を行えば良い¹⁹⁾。曲率の算出は、式(18)の液相率を距離関数に置き換えて計算する。

また、距離関数は、Heaviside関数と組み合わせて、気相と液相が混在するセルの密度や粘性を算出する場合にも使われる。今回の計算では、この影響は小さかったので、単純に体積率から密度と粘性は算出した。Heaviside関数は、気相と液相が混在するセルにおいて、密度の大きい液相の影響度を高めるために用いられている。界面張力の計算にこの考え方を適用したのが、density-scaled CSFモデルという手法であり、ミルククラウンの計算には必須と考えられる。density-scaled CSFモデルにおける界面張力を式(22)に示す¹⁹⁾。

$$\mathbf{F}_s = \frac{\rho}{\frac{1}{2}(\rho_g + \rho_l)} \sigma k \delta_\alpha(\psi) \frac{\nabla\psi}{|\nabla\psi|} \quad (22)$$

ここで、 ρ_g は気相の密度、 ρ_l は液相の密度である。 δ_α は、smoothed delta関数であり、式(23)のように表される。

$$\delta_\alpha(\psi) = \begin{cases} \frac{1}{2\alpha} [1 + \cos(\frac{\pi\psi}{\alpha})] & \text{if } |\psi| < \alpha \\ 0 & \text{else} \end{cases} \quad (23)$$

α は、界面評価距離であり、格子幅を用いた。

計算方法の理解の一助として、図8に界面張力の計算例を示す。図8は、2次元で無重力の水中における半径3mmの気泡に発生する界面張力を計算した結果である。図8(a)は、流体率の分布を示し、図8(b)は距離関数の分布を示す。距離関数は、流体率が0.5の位置を界面として、再初期化計算を行っている。距離関数は、界面近傍でのみ必要であるため、気泡中心まで正確には計算を行っていない。距離関数から算出した界面を図中に示す。図8(c)は曲率の計算結果であり、半径3mmの曲率は333であるが、計算格子の影響を受けた分布となっている。図8(d)が、最終的に式(22)から算出された界面張力である。方向は図示していないが気泡を内側に向く方向である。density-scaled CSFモデルにより、外側の液相側の界面張力の値が大きくなっていることが確認できる。密度の小さい気相に大きな界面張力が作用すると、気相側に不自然に速い流速が発生することを抑制することができる。

2.4 速度の計算方法

速度は、流体率の輸送を計算した後で次の時刻の密度 ρ^{n+1} と表面張力 \mathbf{F}_s^{n+1} を用いて、式(24)から計算を行う。ここで、流速 \mathbf{u}^{n+1} を得るため、予測値を $\tilde{\mathbf{u}}$ とした式(25)を用いる。

$$\frac{\rho^{n+1}\mathbf{u}^{n+1} - \rho^n\mathbf{u}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\rho^{n+1}\mathbf{u}^n\mathbf{u}^n) = -\nabla p^{n+1} + \nabla \cdot (\mu(\nabla\mathbf{u}^n + (\nabla\mathbf{u}^n)^T)) + \mathbf{F}_s^{n+1} + \rho^{n+1}\mathbf{g} \quad (24)$$

$$\frac{\rho^{n+1}\tilde{\mathbf{u}} - \rho^n\mathbf{u}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\rho^{n+1}\mathbf{u}^n\mathbf{u}^n) = -\nabla p^n + \nabla \cdot (\mu(\nabla\mathbf{u}^n + (\nabla\mathbf{u}^n)^T)) + \mathbf{F}_s^{n+1} + \rho^{n+1}\mathbf{g} \quad (25)$$

式(24)と式(25)の差をとると式(26)を得る。

$$\frac{\rho^{n+1}(\mathbf{u}^{n+1} - \tilde{\mathbf{u}})}{\Delta t} = -\nabla\delta p \quad (26)$$

ここで、 δp は式(27)に示すように、前の時刻との圧力変化量である。

$$\delta p = p^{n+1} - p^n \quad (27)$$

式(26)の両辺を密度で除してから発散をとると、式(28)となる。

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} - \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = -\Delta t \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla \delta p \right) \quad (28)$$

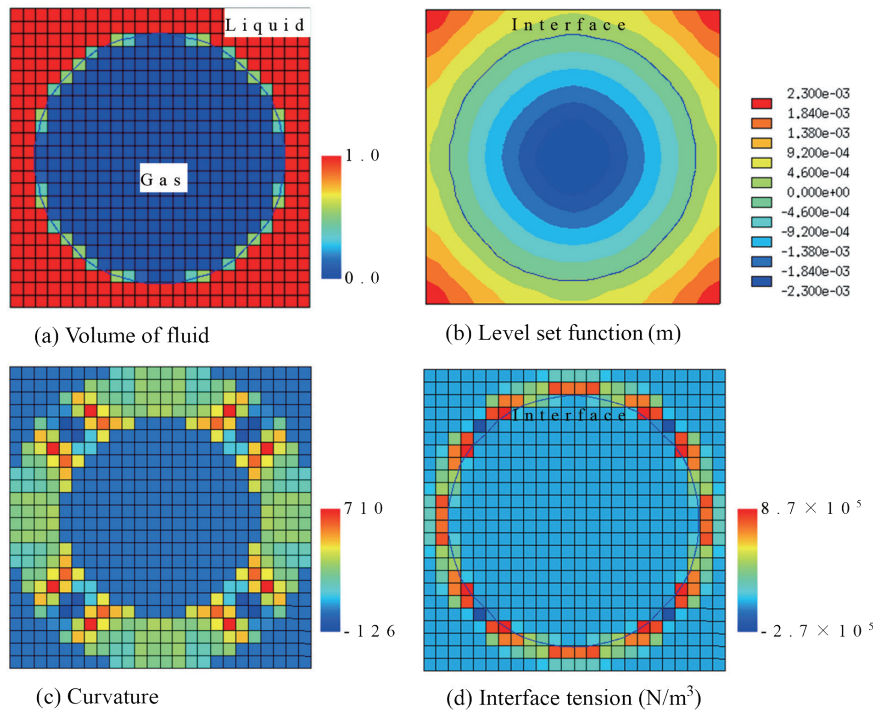


図8 界面張力の計算結果例
Example of calculation results for interface tension

次の時刻の流速は、式(4)の保存測を満たすため、 $\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0$ であり、式(28)は式(29)となる。

$$\Delta t \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho^{n+1}} \nabla \delta p \right) = \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} \quad (29)$$

式(29)を計算し、圧力変化量を算出し、式(26)から次の時刻の流速を得ることができる。

また、対流項の計算精度を向上させるために、式(30)に示すようにAdams-Bashforth²⁰⁾を適用している。流速の上流化は、2次精度であるQUICK (quadratic upstream interpolation for convective kinetics)²¹⁾を適用した。

$$\nabla \cdot (\rho^{n+1} \mathbf{u}^n \mathbf{u}^n) = \frac{3}{2} \nabla \cdot (\rho^{n+1} \mathbf{u}^n \mathbf{u}^n) - \frac{1}{2} \nabla \cdot (\rho^n \mathbf{u}^{n-1} \mathbf{u}^{n-1}) \quad (30)$$

3. 数値解析結果

数値解析コードは、有限体積法を用いた流体解析コードをc言語で自作し、Open MPI²²⁾による並列計算を行った。

市販の牛乳を用いてミルクラウンの撮影を実施した結果との比較を行った。シャーレに注入した液膜1mmの牛乳に55cmの高さからホールピペットで牛乳を1滴落下させ、1000フレーム/秒の高速カメラで撮影を行った。

数値解析は、 $30 \times 30 \times 15$ mmの領域を $50 \mu\text{m}$ 間隔で分割した $600 \times 600 \times 300$ (=1億800万)の計算メッシュを用いた。牛乳の界面張力は 5×10^{-2} N/m、粘性係数は 1.7×10^{-3} Pa·s、密度は 1100 kg/m^3 とした。予備計算による検討から、逆拡散の計算には、Takataniのモデルを用いて係数は0.0001とした。高速カメラの撮影結果から、落下液滴の直径は3.6mm、衝突時の液滴速度は3.2m/sと推定し、この条件で

計算を行った。空気抵抗を考慮しない場合、55cm高さからの落下速度は3.28m/sであるため、妥当な速度であると考えられるが、画像のブレも考慮すると落下速度は2.9～3.2m/sと推測される。また、シャーレに注入した液膜は、1mm厚みとなる体積量を注入したが、表面張力により落下位置の液膜は1mmよりも薄くなっていたと考えられる。

図9は、牛乳のミルクラウンの撮影結果と計算結果の比較を示す。計算結果は、流体率0.5の等値面を3次的に表示している。計算は、液膜厚み t の影響をみるため、液膜を3.0, 1.5, 0.8, 0.6mmの4水準で行った。Case4は、撮影結果により近づけることを狙い、落下速度を $v=2.9 \text{ m/s}$ とした。

図9では、液滴が液膜に衝突した時を0msとし、5msと10ms後の実験結果と計算結果の比較を示す。実験のアームの本数は17本であり、数値解析のアーム本数は15本から17本と一致している。液膜が厚いと円筒部が末広がり形状をしている。実験結果は円筒部が液面に対して垂直に近いため、液膜が薄い0.6mmのCase4の結果に近い形状である。ただし、実験のミルクラウンは5msから10msにかけて円筒部が高く成長しているが、Case4の円筒高さは成長していない。実験結果やCase3では、5msから10msにかけて円筒部が高くなっており、円筒高さは衝突速度の影響が大きいことが確認される。今回の計算ではCase3が実験結果に最も近い結果となったが、Case3とCase4の中間の条件がより実験結果に一致すると考えられる。このように、定量性に欠ける比較ではあるが、実際のミルクラウンを数値解析により再現可能であることが確

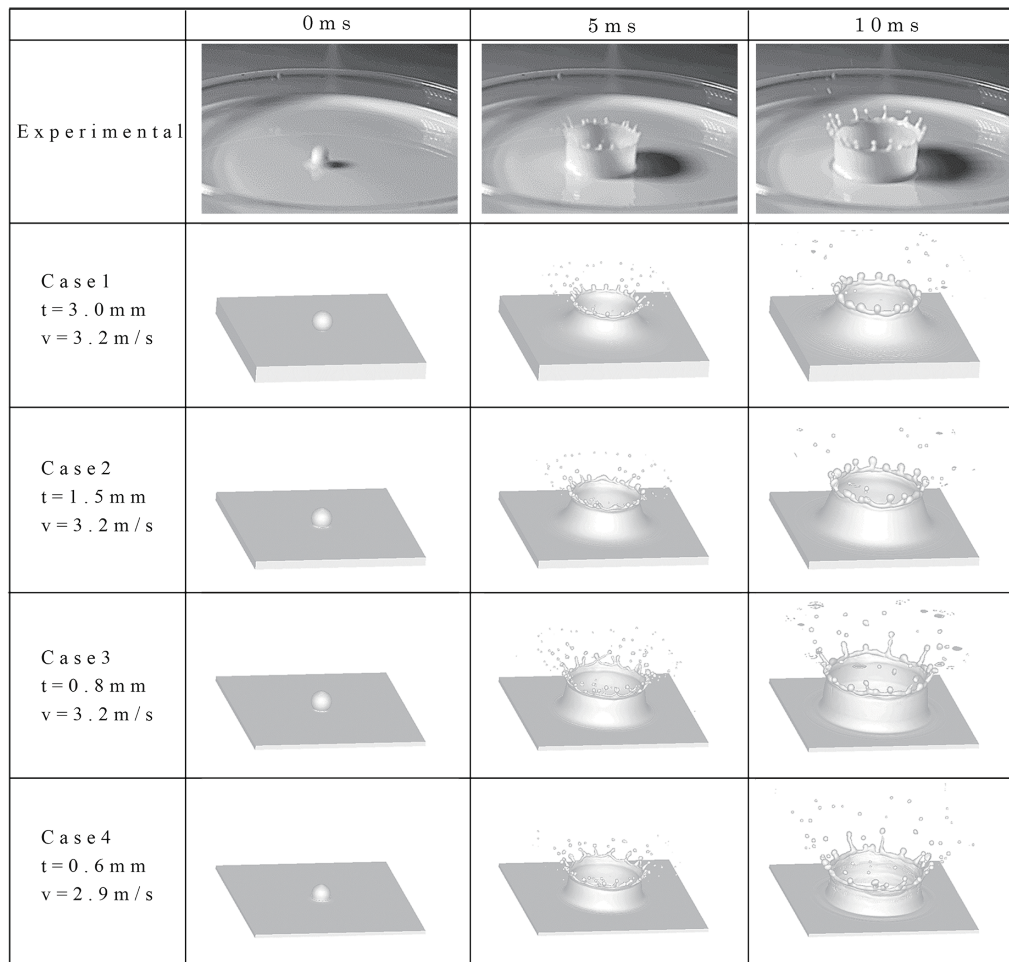


図9 ミルククラウンの実験結果と計算結果の比較
Comparison of the experimental results and numerical results

認された。

図10は、Terzis⁴⁾らの尿素水溶液における実験の条件で計算を行った結果を示す。液滴直径は2.1mm、落下速度は4.26m/s、界面張力は $7.28 \times 10^{-2} \text{ N/m}$ 、粘性係数は $1.37 \times 10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ 、液膜厚みは0.252mm、密度は 1083 kg/m^3 、We数は560である。計算領域は、 $15 \text{ mm} \times 15 \text{ mm} \times 5.0 \text{ mm}$ であり、格子間隔は $37.5 \mu\text{m}$ で、約2000万メッシュの計算を行った。

図10から、液滴が液膜に衝突後0.5ms程度までは、円筒形の液膜が隆起し、微少な飛沫が生じている。その後、1ms程度までに円筒の上端部の厚みが増し、突起部が成長してアームを形成している。1.5ms程度で、突起部の先端から球状の液滴が分離し、ミルククラウンを形成している。2.3msでは、計算領域の上端に液滴が到達している。

計算結果から確認できるアームの本数は25本であり、Terzis⁴⁾らの実験結果でのアームの数は26本である。ミルククラウンの形状は、Terzisの報告している写真と良く一致した。

図11は、液滴の物性値を溶鋼とし、図10の尿素水溶液と同じWe数で計算した結果を示す。液滴と液膜は同じ値とし、溶鋼の密度は 7000 kg/m^3 、界面張力は 1.0 N/m とし、

We数が同じ560となるように、落下速度は6.18m/sとした。

図11から、We数が同じであれば、クラウンの形状は尿素水溶液とよく似ていることが確認できる。ただし、衝突速度が速く、密度も大きいと、微少な飛沫液滴の速度が尿素水溶液よりも速い結果となった。溶鋼の飛散は、水モデルで評価され、We数で整理されることが多い。この場合、凹みや隆起形状は相似性があると考えられるが、飛沫液滴の距離が異なることが懸念される。

4. まとめ

ミルククラウンと呼ばれる自然現象を数値解析により再現することを試みた。わずかに数センチ四方の数ミリ秒の現象を再現するために、多くの技法と膨大な計算機コストを必要とした。得られた知見は、混相流プロセスの解析に今後反映していく。製鉄業における大規模なプロセスの数値解析は、ミルククラウンのように精緻な計算を行うことは現実的に不可能であるため、主要な現象を抽出してモデル化し、現実的な計算時間で解を得る必要がある。この主要な現象を見極めることで、プロセスの本質を理解できることが数値解析の真髄であると思われる。

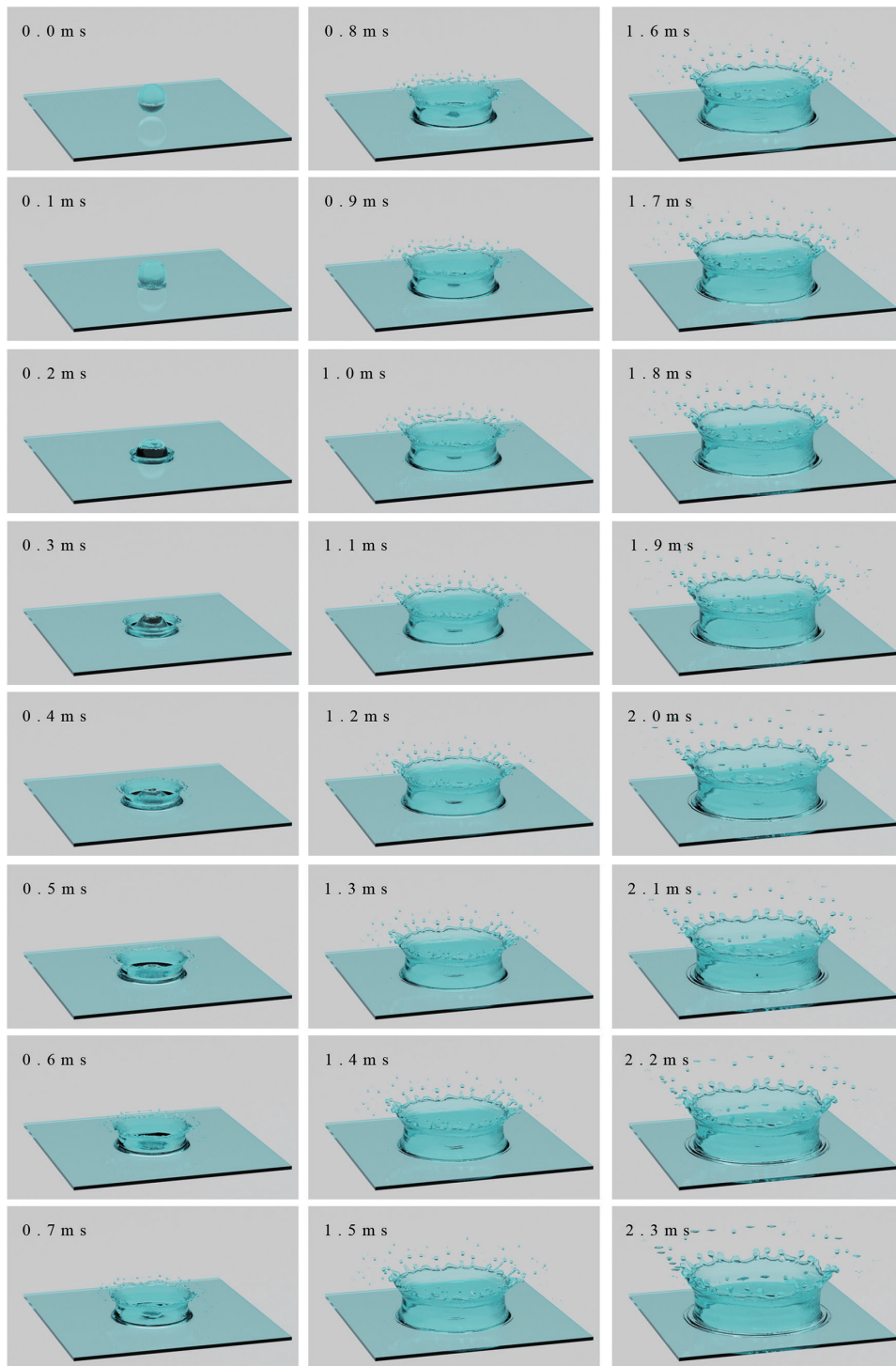


図 10 尿素溶液のミルククラウンの計算結果
Calculation results of milk crown for the urea-water solution

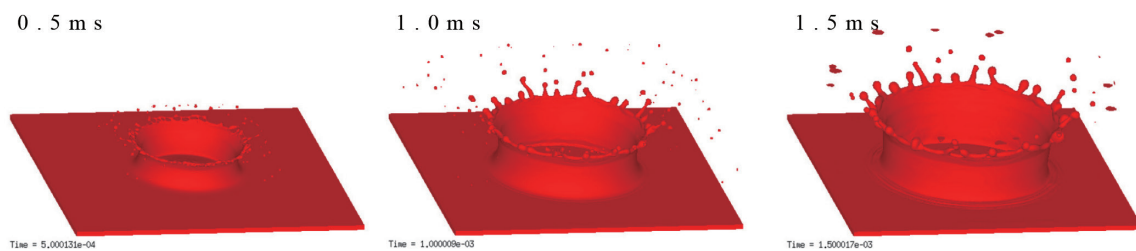


図 11 溶鋼のミルククラウンの計算結果
Calculation results of milk crown for molten steel

参考文献

- 1) Worthington, A. M.: A Study of Splashes. Longmans Green and Company, London, 1908
- 2) <https://mitmuseum.mit.edu/collections/object/HEE-NC-57001>
- 3) Deegan, R. D., Brunet, P., Eggers, J.: Complexities of splashing. *Nonlinearity*. 21 (1), C1 (2008)
- 4) Terzis, A., Kirsch, M., Vaikuntanathan, V., Geppert, A., Lamanna, G., Weigand, B.: *Experimental Thermal and Fluid Science*. 102, 152 (2019)
- 5) Yokoyama, M., Murotani, K., Yagawa, G.: *Computational Particle Mechanics*. 6, 249 (2019)
- 6) 稲室隆二, 吉野正人, 鈴木泰裕: 格子ボルツマン法入門. 丸善出版, 東京, 2020
- 7) Hirt, C. W., Nichols, B. D.: *Journal of Computational Physics*. 39, 201 (1981)
- 8) Sethian, J. A.: *Level Set Method and Fast Marching Methods*. 2nd ed. Cambridge University Press, Cambridge, 1999
- 9) Osher, S., Fedkw, R.: *Level Set Methods and Dynamic Implicit Surface*. Springer-Verlag, New York, 2003
- 10) Ubbink, O., Issa, R.: *J. Comput. Phys.* 100, 25 (1992)
- 11) Blackbill, J. U., Kothe, D. B., Zemach, C.: *J. Comput. Phys.* 100, 335 (1992)
- 12) Heyns, J. A., Malan, A. G., Harms, T. M., Oxtoby, F.: *Int. J. Numer. Meth. Fluid.* (2012), DOI:10.1002/fld.3694
- 13) Tsui, Y. Y., Lin, S. W., Cheng, T. T., Wu, T. C.: *Int. J. Heat and Mass Transfer*. 52, 5547 (2009)
- 14) Berberović, E., van Hinsbergs, N. P., Jakirlić, S., Roisman, I. V., Tropea, C.: *The American Physical Society*. 79, 036306 (2009)
- 15) Takatani, K.: *ISIJ Int.* 47, 545 (2007)
- 16) Croce, R.: Ein paralleler, dreidimensionaler Navier-Stokes-Löser für inkompressible Zweiphasenströmungen mit Oberächenspannung, Hindernissen und dynamischen Kontaktflächen. Diplomarbeit, Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, (2002)
- 17) Tomiyama, A., Sakoda, K., Hayashi, K., Sou, A., Shimada, N., Hosokawa, S.: *Modeling Hybrid Simulation of Bubbly Flow*. Japan-US Seminar on Two-Phase Dynamics, December 6-11, 2004, Nagahama, Japan
- 18) Sussman, M., Smereka, P., Osher, S.: *J. Comput. Phys.* 146, 114 (1994)
- 19) Yokoi, K.: *J. Comput. Phys.* 232, 252 (2013)
- 20) 小林敏雄編: 数値流体ハンドブック. 東京, 丸善, 2003, p. 35
- 21) Leonard, A.: *Adv. Geophys.* 18A, 237 (1974)
- 22) <https://www.open-mpi.org/>



岡田信宏 Nobuhiro OKADA
先端技術研究所 数理科学研究部
室長 (主席研究員) 工学博士
千葉県富津市新富20-1 〒293-8511



高谷幸司 Kouji TAKATANI
元顧問 工学博士