

体積変化を伴う凝固現象の数値解析

花田孝郎 (Hanada Takao, 電気通信大学情報工学)

今井仁司 (Imai Hitoshi, 筑波大学電子情報工学)

名取 亮 (Natori Makoto, 筑波大学電子情報工学)

河原田秀夫 (Kawarada Hideo, 千葉大学工学)

物理系の多くは多相系であり, 系で起きている現象は界面における相の間の相互作用に関連している. それぞれの相の間の界面は相互作用のために時間的に変化している. 物理現象の多くは自由境界問題として捉えられるべきであると思われる. 例えば, 凝固・融解問題では界面での熱の出入りによって界面が変化しており, Stefan 問題として研究されている. 2 相 Stefan 問題では相転移に伴う比熱や熱伝導率など物理定数の不連続性は考慮されて定式されている. しかし, 物質の相転移のときの密度の変化による体積変化は無視されている. ここでは体積保存ではなく, 質量保存に基づいた数理解析モデルを提案する. その定式に基づいて, 軸対称性を仮定した場合のシミュレーションおよび深さ方向にのみ依存している平坦な 1 次元解についての数理解析を報告する.

1 はじめに

液体の凝固現象を考えると, 固相領域との間の内部界面とともに外界との境界である表面は (容器壁として固定されている部分以外では) 相転移に伴う体積変化を考慮することによって移動しなければならない. 内部界面に対する自由境界問題は Stefan 問題として [4] を始めとして広く研究されている. Stefan 問題では密度の変化に伴う体積変化は (したがって, 自由表面の動きも) 無視して定式されていた.

この論文では, 円柱状領域 G の容器の中の液体の凝固現象に対する Stefan 問題を体積変化を考慮に入れて定式し直した. その結果, 内部の移動界面と

自由表面を含む2つの自由境界を持つ問題となる。空間1次元の場合においては内部界面での運動の解析によって厳密に質量を保存する定式が得られるので、その考え方を空間が多次元の場合に拡張している。このとき、質量保存は近似的にのみ成立している(2節)。

先ず、軸対称性を仮定して回転方向に一様な2次元問題に帰着して(3節)数値的な解析(6節)を行う。さらに、半径方向にも一様性を入れて深さ方向だけの空間1次元問題に帰着させて数理的な解析も行う(4節)。

2 凝固問題の定式

2.1 基礎方程式

正の実数 $T \in \mathbb{R}^+$ をとり、領域 $\Omega =]0, T[\times G$ で考察する。

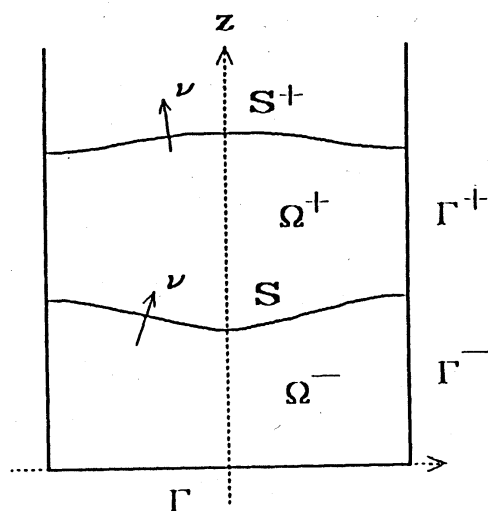


図 1: 領域 $\Omega[t] = G$ とその境界

温度 θ はその融点を基準にとっておく。温度が負である固体領域 Ω^- では物質の移動は考えないので、満たすべき条件は熱の拡散方程式

$$\rho c \dot{\theta} + k \nabla^* \nabla \theta = 0 \quad (1)$$

となる。ここで ρ は密度、 c は比熱、 k は熱伝導率であり、

$$\nabla = \text{grad}, \quad \nabla^* = -\text{div}$$

とする.

温度が正である液体領域 Ω^+ では, 相変化に伴う体積変化に起因する流れを考慮に入れる. 流速 $\mathbf{u}$ を用いると拡散方程式

$$\rho c \dot{\theta} + k \nabla^* \nabla \theta - \rho c \nabla^* (\mathbf{u} \theta) - (\nabla \mathbf{u}) \sigma = 0 \quad (2)$$

が成立している. ここで σ は応力テンソルである. 液相を非圧縮性の粘性流体と考えるので連続の式

$$\nabla^* \mathbf{u} = 0 \quad (3)$$

と Navier-Stokes 方程式

$$\rho \dot{\mathbf{u}} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p - \eta \nabla^* \nabla \mathbf{u} \quad (4)$$

を満足する. ここで η は粘性係数である.

2.2 境界条件

つぎに, 領域 $\Omega, \Omega^-, \Omega^+$ の境界上で満たすべき条件を列挙する. 容器は底からだけ冷却されていると考えれば領域 Ω の下底 Γ では

$$\theta = \theta_\Gamma (< 0) \quad (5)$$

とする. 壁 $\Gamma^\pm$ では断熱条件

$$\theta_{,\nu} = 0 \quad (6)$$

を仮定する. 液相での流れは壁 Γ^+ に沿ってすべる条件

$$\nu \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (7)$$

$$(\mathbf{u}_\tau)_{,\nu} = 0 \quad (8)$$

を仮定する. これらの境界 Γ と $\Gamma^\pm$ は $\partial\Omega$ の部分集合であるが, Γ だけが時間的に不変である.

液相と固相の内部界面 $S = \partial\Omega^- \cap \partial\Omega^+$ 上では温度の連続性

$$\theta^- = \theta^+ = 0 \quad (9)$$

および Stefan 条件

$$\rho^- \ell \dot{\Phi} = -(k^- \nabla \theta - k^+ \nabla \theta^+) \cdot \nabla \Phi \quad (10)$$

が成立している。ここで

$$\theta^\pm = \theta|_{\Omega^\pm}, \quad k^\pm = k|_{\Omega^\pm}, \quad \rho^- = \rho|_{\Omega^-}$$

で, ℓ は固体の融解熱である。 Φ は

$$\Phi[t, x] = 0 \Leftrightarrow (t, x) \in S$$

なる自由界面 S を規定する滑らかな関数である。さらに, 流速に関しては

$$\mathbf{u} = -(1 - \alpha) \dot{\Phi} \boldsymbol{\nu} / |\nabla \Phi| \quad (11)$$

すなわち

$$(1 - \alpha) \dot{\Phi} = -\mathbf{u} \cdot \nabla \Phi$$

を仮定する。定数 $\alpha = \frac{\rho^-}{\rho^+}$ は膨張係数である。

最後に自由表面 $S^+ = \partial\Omega^+ \setminus (\Gamma^+ \cup S)$ 上では

$$\theta_{,\nu} = 0 \quad (12)$$

あるいは Dirichlet 条件

$$\theta = \theta_{S^+}$$

とする。境界の移動に関しては Φ^+ を自由表面の規定関数として

$$\dot{\Phi}^+ = -\mathbf{u} \cdot \nabla \Phi^+ \quad (13)$$

を, 自由表面の保存条件からは

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nu} = 0 \quad (14)$$

を, 応力の連続性からは

$$p = 2\kappa H \quad (15)$$

を仮定する。ここで κ は表面張力係数で, H は平均曲率である。

2.3 無次元化

基準となる長さ L , 速度 U , 温度 Θ を用いて変数変換

$$t = \frac{L}{U} \bar{t}, \mathbf{u} = U \bar{\mathbf{u}}, p = \rho U^2 \bar{p}, x = L \bar{x}, \Phi = L \bar{\Phi}, H = \frac{\bar{H}}{L}, \theta = \Theta \bar{\theta}, \ell = U^2 \bar{\ell}$$

を行い, 方程式系を無次元化すると以下のようなになる (上線は必要ない限り省略する).

$$\left. \begin{aligned} \bar{c} \dot{\bar{\theta}} + \bar{k} \nabla^* \nabla \bar{\theta} &= 0 && \text{in } \Omega^-, \\ \bar{c} \dot{\bar{\theta}} + \bar{k} \nabla^* \nabla \bar{\theta} &= \bar{c} \nabla^* (\bar{\mathbf{u}} \bar{\theta} + \frac{1}{R} (\nabla \bar{\mathbf{u}}) \bar{\sigma}), \\ \nabla^* \bar{\mathbf{u}} &= 0, \\ \bar{\mathbf{u}} + (\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla) \bar{\mathbf{u}} + \frac{1}{R} \nabla^* \nabla \bar{\mathbf{u}} &= -\nabla \bar{p} \end{aligned} \right\} \quad \text{in } \Omega^+,$$

$$\left. \begin{aligned} \bar{\theta} &= \bar{\theta}_\Gamma && \text{on } \Gamma, \\ \bar{\theta}_{,\nu} &= 0 && \text{on } \Gamma^\pm, \\ \nu \cdot \bar{\mathbf{u}} &= 0, \\ (\bar{\mathbf{u}}_r)_{,\nu} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad \text{on } \Gamma^+,$$

$$\left. \begin{aligned} \bar{\theta}^- &= \bar{\theta}^+ = 0, \\ \bar{\ell} \dot{\bar{\Phi}} &= (\bar{k}^- \nabla \bar{\theta}^- - \frac{1}{\alpha} \bar{k}^+ \nabla \bar{\theta}^+) \cdot \nabla \bar{\Phi}, \\ \bar{\mathbf{u}} &= -(1 - \alpha) \dot{\bar{\Phi}} \nu \end{aligned} \right\} \quad \text{on } S,$$

$$\left. \begin{aligned} \bar{\theta}_{,\nu} &= 0, \\ \dot{\bar{\Phi}}^+ &= -\bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\Phi}^+, \\ \bar{\sigma} \cdot \nu &= 0, \\ \bar{p} &= \bar{\kappa} \bar{H} \end{aligned} \right\} \quad \text{on } S^+$$

となる. ここで $c = \frac{U^2}{\Theta} \bar{c}, k = \frac{\rho L U^3}{\Theta} \bar{k}, \sigma = \frac{\eta U}{L} \bar{\sigma}, R = \frac{\rho L U}{\eta}$ である.

3 2次元問題

前節 2 で述べた 3 次元定式では, その問題の適切性は未知であるので, まず回転対称性を仮定して 2 次元問題に帰着させておいて数値的に解析する.

すなわち座標系 (x, y, z) を円筒座標系 (r, ϑ, z) に変換すれば, 各変数の ϑ 成分と ϑ 依存性が消去される. したがって, G は 2 次元の矩形領域となる. 新たに境界となる回転軸は Γ^a としておく. 円筒座標系における発散

$$\overline{\nabla}^*(u^r, u^z) = u^r_{,r} + \frac{u^r}{r} + u^z_{,z}$$

を用いると方程式系は

$$\left. \begin{aligned} c\dot{\theta} &= -k\overline{\nabla}^*\nabla\theta && \text{in } \Omega^-, \\ c\dot{\theta} &= -k\overline{\nabla}^*\nabla\theta - c\mathbf{u} \cdot \nabla\theta + \frac{1}{R}(\nabla\mathbf{u})\sigma, \\ \overline{\nabla}^*\mathbf{u} &= 0, \\ \dot{\mathbf{u}} &= -(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \nabla p - \frac{1}{R}\overline{\nabla}^*\nabla\mathbf{u} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} & \\ & \\ & \text{in } \Omega^+, \\ & \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} \theta &= \theta_\Gamma, \\ \theta_{,r} &= 0, \\ \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\nu} &= 0, \\ \mathbf{u}_{,\nu} &= 0 \end{aligned} \right\} \begin{aligned} & \text{on } \Gamma, \\ & \text{on } \Gamma^\pm, \\ & \text{on } \Gamma^+ \cup \Gamma^a, \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} \ell\dot{\Phi} &= -(k^-\nabla\theta^- - \frac{1}{\alpha}k^+\nabla\theta^+) \cdot \overline{\nabla}\Phi, \\ (1-\alpha)\dot{\Phi} &= -\mathbf{u} \cdot \overline{\nabla}\Phi \end{aligned} \right\} \begin{aligned} & \\ & \text{on } S, \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} \theta_{,\nu} &= 0, \\ \sigma \cdot \boldsymbol{\nu} &= 0, \\ \dot{\Phi}^+ &= -\mathbf{u} \cdot \nabla\Phi^+, \\ p &= 2\kappa H \end{aligned} \right\} \begin{aligned} & \\ & \\ & \text{on } S^+ \end{aligned}$$

となる.

4 1次元問題

この節では, さらに問題を単純化して 1 次元問題に帰着してその数理的構造を解析しよう.

すなわち, 変数に対する r 依存性を消せば, 問題は空間的には z 依存性だけが残るように 1 次元化することができる. このときには連続の式

$$u' = 0$$

から流速 u の空間 (z -) 依存性がなくなる (z 微分を $'$ で表している). 自由境界 S, S^+ がそれぞれ $z = s[t], z = s^+[t]$ で表現できるとして, 方程式系を表現しなおすと

$$\left. \begin{aligned} c\dot{\theta} &= k\theta'' && \text{in } \Omega^-, \\ c\dot{\theta} &= k\theta'' - cu\theta', \\ \dot{u} &= -p' \end{aligned} \right\} && \text{in } \Omega^+, \\ \theta &= \theta_\Gamma && \text{on } \Gamma, \\ \theta^- &= \theta^+ = 0, \\ \ell\dot{s} &= k^-(\theta^-)' - \frac{k^+}{\alpha}(\theta^+)', \\ u &= (1-\alpha)\dot{s} \end{aligned} \right\} && \text{on } S, \\ \left. \begin{aligned} p &= 0, \\ s^+ &= u, \\ k\theta' + (q - cu)\theta &= \psi \end{aligned} \right\} && \text{on } S^+$$

のように変換される. 圧力 p は

$$p[t, z] = \dot{u}[t](s^+[t] - z)$$

と, 他の関数値から定まるので別に解くことができる.

$$\text{ここで座標変換 } d\tilde{z} = \begin{cases} \rho^- dx, & z < s[t] \\ \rho^+ dx, & s[t] < z < s^+[t] \end{cases} \quad \text{および変数変換}$$

$$\tilde{\theta} = \begin{cases} \alpha^2 k \theta[z], \\ k \theta[z] \end{cases}, \tilde{c} = \begin{cases} c/\alpha^2 k, \\ c/k \end{cases}$$

を行う. したがって自由境界に関しては

$$\tilde{s} = \alpha s, \tilde{s}^+ = \alpha s + s^+ - s$$

であるが,

$$\dot{\hat{s}}^+ = \alpha \dot{s} + \dot{s}^+ - \dot{s} = 0$$

なので自由表面は時間的に不変となる.

したがって解くべき方程式系は(波線は省略すると)

$$c \dot{\theta} = k \theta'' \quad \text{in } \Omega^-, \quad (16)$$

$$c \dot{\theta} = k \theta'' - cu \theta' \quad \text{in } \Omega^+, \quad (17)$$

$$\theta = \theta_\Gamma \quad \text{on } \Gamma^\pm, \quad (18)$$

$$\theta^- = \theta^+ = 0, \quad (19)$$

$$\ell \dot{s} = (\theta^-)' - (\theta^+)', \quad (20)$$

$$u = \left(\frac{1}{\alpha} - 1\right) \dot{s} \quad \text{on } S, \quad (21)$$

$$\theta' = 0 \quad \text{on } S^+ \quad (22)$$

となる.

ここで単調(なエンタルピー)関数 γ を

$$\gamma'[\theta] = c, \quad \gamma[-0] = -\ell, \quad \gamma[+0] = 0 \quad (23)$$

によって定めておくと

$$(\gamma[\theta])' + \chi u (\gamma[\theta])' - \theta'' = 0 \quad (24)$$

と弱い形で定式される.

5 離散化問題

前節 4 での定式に基づいて自由境界を伴う数値計算を行うが, ここでは Chernoff 法 [9] を応用した離散化法を利用する. 方程式 (24) の時間微分を差分で近似 ($\theta^i = \theta[i\Delta t]$, $e^i = \gamma[\theta^i]$ と) すると

$$e^{i+1} - e^i + \Delta t (\chi^i u^i (e^i)' - (\theta^{i+1})'') = 0 \quad (25)$$

となる. 初期条件 e^0 および

$$\theta^0 = \gamma^{-1}[e^0], \quad u^0 = 0$$

に基づき, この式 (25) を変形した

$$E^{i+1} - u^i = \frac{\Delta t}{\mu} (-\chi^i u^i (e^i)' + (E^{i+1})''), \quad (26)$$

$$e^{i+1} - e^i = \mu(E^{i+1} - u^i), \quad (27)$$

$$u^{i+1} = \gamma^{-1}[e^{i+1}] \quad (28)$$

をさらに空間的にも離散化したアルゴリズムによって数値計算を行う. ここで, 緩和パラメタ $\mu > 0$ は

$\mu\gamma^{-1}$ は (定数 1 の) Lipshitz 関数である

にとっておく ([9] により, 元来の Stefan 問題に対してはこの Chernoff 法は離散化パラメタに対して無条件安定である).

6 数値計算

6.1 平坦解

1次元化解についてはパラメタ

$$\begin{aligned} \widetilde{c}^- &= 1, \quad \widetilde{\rho}^- = 0.75, \quad \bar{\ell} = 3, \\ \widetilde{c}^+ &= 2, \quad \widetilde{\rho}^+ = 1.00 \end{aligned}$$

および境界値

$$\widetilde{\theta}_\Gamma = -12$$

で, 初期値

$$\widetilde{s}[0] = 0.25, \quad \widetilde{s}^+ = 1.0$$

とした.

6.1.1 Dirichlet 問題

境界条件

$$\widetilde{\theta}_{s^+} = 6$$

の場合には定常状態が求められる。表 1 には、固定時刻 $t = 1$ での自由境界の位置の計算値の分割数 n 依存性を示した。図 2 には $n = 512$ のときの自由境界の時間変化を示した。定常状態は内部界面が $s = \frac{8}{9}$ で自由表面が $s^+ = \frac{11}{9}$ であり、その値に近づいている。

6.1.2 Neumann 問題

境界条件

$$\theta_{,\nu} = 0$$

のときには、氷結するまで数値計算できる。表 2 には、固定時刻 $t = 0.25$ での自由境界の位置と、氷結時刻の計算値の分割数 n 依存性を示した。図 3 には $n = 512$ のときの自由境界の時間変化を示した。

n	界面 ($t = 1.00$)	表面
16	.809	1.202
32	.846	1.211
64	.867	1.217
128	.875	1.219
256	.880	1.220
512	.881	1.220

表 1: Dirichlet 問題

n	界面 ($t = 0.25$)	表面	凍結 時刻
16	0.712	1.178	.625
32	0.748	1.187	.562
64	0.763	1.190	.500
128	0.771	1.193	.492
256	0.776	1.194	.484
512	0.779	1.195	.486

表 2: Neumann 問題

6.2 軸対称解

数値計算では、水の凝固における物理定数に近い値 (MKS 単位) を採用して (潜熱は実際より小さめにとっている)

$$\begin{aligned} \rho^- &= 917, \quad \overline{k^-} = 24, \quad \overline{c^-} = 1.2, \quad \overline{\ell} = 100, \\ \rho^+ &= 999, \quad \overline{k^+} = 5.6, \quad \overline{c^+} = 5.6, \quad \overline{\kappa} = 100, \quad R = 20 \end{aligned}$$

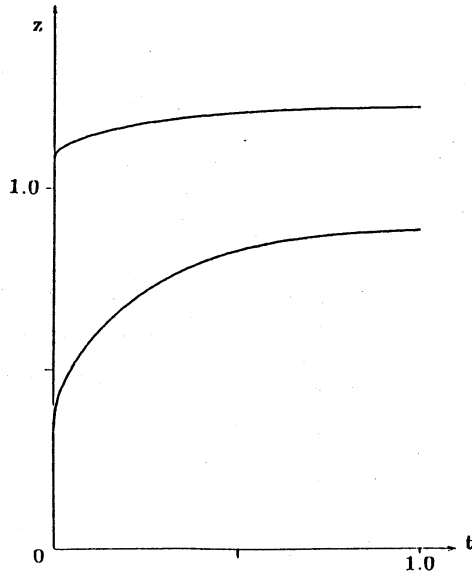


図 2: Dirichlet 問題

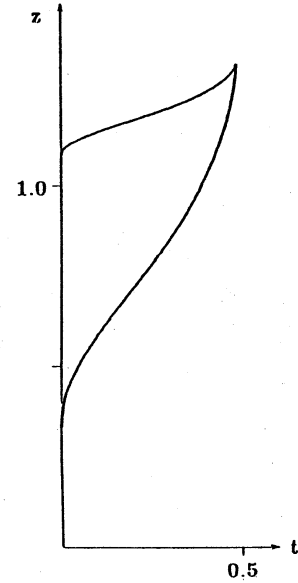


図 3: Neumann 問題

で, 基準値としては $U = 10^{-3}, L = 10^{-1}, \Theta = 10^{-6}$ とした. 初期状態は

$$\Omega^{-}[0] =]0, 1[\times]-1, 0[, \quad \theta_{\Gamma} = -2,$$

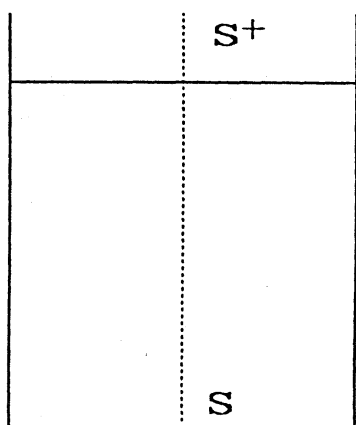
$$\Omega^{+}[0] =]0, 1[\times]0, 0.2[, \quad \theta_{S^{+}} = 0.1$$

として, 領域 $\Omega^{-}[0]$ と $\Omega^{+}[0]$ はそれぞれ 40×40 格子に分割する. 数値計算は, 固定領域法を用いている. 図 4-6 に自由境界の計算結果を示した. 表 3 には各領域と全領域の (正規化) 質量を示した.

時刻	氷	水	全質量
0	0.9171	0.1998	1.1170
0.08	0.9574	0.1595	1.1170
0.16	1.0059	0.1111	1.1170
0.24	1.0564	0.0605	1.1170

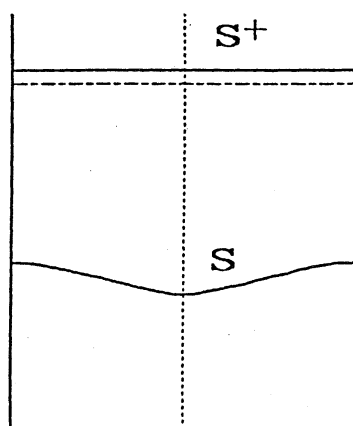
表 3: 質量の変化

図 7,8 には, 回転軸および壁上での自由境界の位置の時間変化を示す.



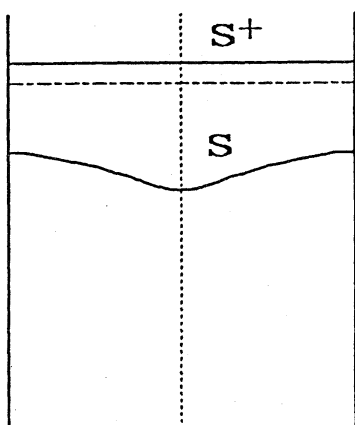
$t=0.000$

図 4: 初期状態



$t=0.152$

図 5: 中途での状態



$t=0.244$

図 6: 計算限界での状態

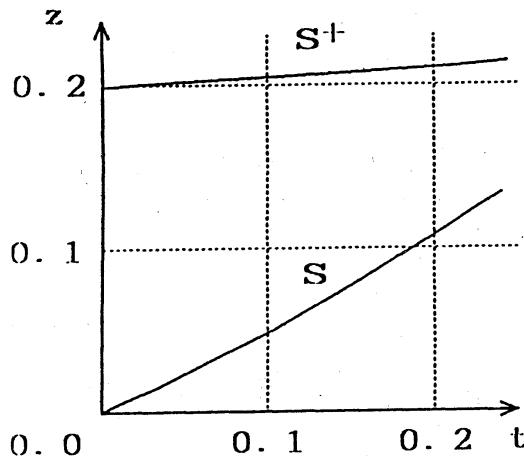


図 7: 回転軸上

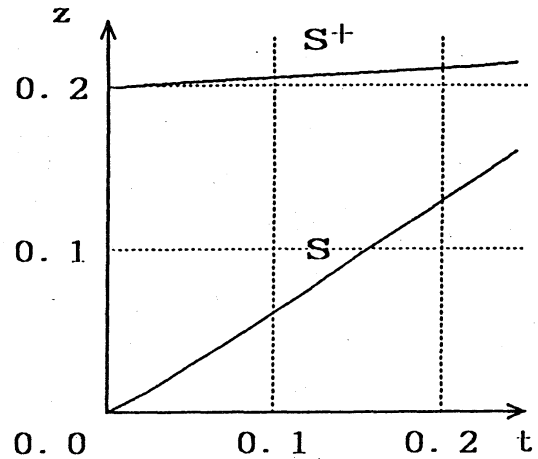


図 8: 壁上での自由境界

7 おわりに

この報告では、凝固現象における相転移に伴う体積変化を考慮した自由境界問題に対する新たな定式を提案した。この定式は Stefan 問題の体積膨張率 $\alpha = 1$ 以外への拡張であり、内部界面の他に自由表面が現れる。この定式に基づく離散計算からは、質量保存に関してはほぼ満足できる結果が得られている。

数値計算は東京大学計算センタの HITAC M-682H と S820 で行った。

参考文献

- [1] J.R.Cannon, E.DiBenedetto: *On the existence of weak-solutions to an n-dimensional Stefan problem with nonlinear boundary conditions*, SIAM J. Math. Anal., 11, 1980, pp.632-645
- [2] J.Crank: *Free and moving boundary problems*, Clarendon Press, Oxford, 1984
- [3] A.Fasano, M.Primicerio, S.Kamin: *Regularity of weak solutions of one-dimensional two-phase Stefan problem*, Ann. Mat. Pura Appl.(4), 115, 1977

- [4] A.Friedman: *The Stefan problem in several variables*, Trans. Amer. Math. Soc. 133, 1968, pp.51-87
- [5] Y.Katano, T.Kawamura, H.Takami: *Numerical study of drop formation from a capillary jet using a general coordinate system*, Theor. Appl. Mech. 34, 1986, pp.3-14
- [6] H.Kawarada: 自由境界問題, 東京大学出版会, 1989
- [7] K.Murata, M.Natori, Y.Karaki: 大型数値計算, 岩波書店
- [8] M.Natori, H.Kawarada: 自由境界問題の数値解析, Japan. Phy. 31, 1976, pp.547-551
- [9] R.H.Nochetto, C.Verdi: *An efficient linear scheme to approximate parabolic free boundary problems: error estimates and implementation*, Math.Comp. 51, 1988, pp.27-53
- [10] R.H.Nochetto, C.Verdi: *Approximation of degenerate parabolic problems using numerical integration*, SIAM J. Numer. Anal., 25, 1988, pp.784-814
- [11] D.Takahashi, Y.Takeda, H.Takami: *Numerical simulation of collision of liquid droplets*, Theor. Appl. Mech. 36, 1988, pp.3-15
- [12] Joe F.Thompson, Z.U.A.Warsi, C.Wayne Mastin: *Numerical grid generation*, North-Holland, 1987