

# OpenFOAMを用いたマイクロ流路内における交直流の数値解析

松野 弘貴・平野 博之\*・岡本 直孝\*・桑木 賢也\*\*

岡山理科大学 大学院 工学研究科 システム科学専攻 博士課程

\*岡山理科大学 工学部 バイオ・応用化学科

\*\*岡山理科大学 工学部 機械システム工学科

(2012年10月1日受付、2012年11月1日受理)

## 1. 緒言

OpenFOAM (Open Source Field Operation and Manipulation)<sup>1,2)</sup> は、当時広く用いられていたFortran言語よりも、一般的で柔軟な解析ツールとするために、1980年代終盤にImperial Collegeで開発されたC++言語のツールボックス、すなわち、サブルーチン群的な性格のものである。旧版は、FOAMという名前でNabla社から販売されていた。その後、2004年にオープンソース化されたが、2011年にSGI (Silicon Graphics International Corp.) に買収され、現在、OpenFOAMはSGIの登録商標となっている。OpenFOAMで実際に流体解析を行うためには、エネルギー移動や物質移動などを含む流体の支配方程式の理論、離散化や線形システム解法などの数値解析手法、圧力場や速度場を数値解析的に求めるためのアルゴリズムなどについて学んだうえで、C++のプログラミング技法にしたがって、必要なサブルーチンを選択し、場合によってはカスタマイズしなければならず、必ずしも容易に数値実験を行えるわけではない。しかしながら、格子生成や結果の可視化までも含む環境も整っていること、複雑な形状にも対応できること、乱流、反応、燃焼などの問題にも対応できることなど、非常に幅広い問題に適用できる。そして何よりもライセンス料が不要であることは非常に魅力的である。そして、最近では、OpenFOAMの計算精度などについての報告も見られるようになり、その信頼性についても認められつつある。もちろん、OpenFOAMは流体が関与する問題だけでなく、一般の微分方程式や線形システムの解法なども可能であり、利用できる分野は非常に広い。

本研究は、相互に溶解しない2種類の流体を代表長さが1 mm以下のいわゆるマイクロ流路内で合流させたときに、各々の相（セグメント）が縞模様のごとく交互に出現する交直流<sup>3,4,5)</sup>を取り上げ、上述のように最近とくに注目されているフリーウエアのOpenFOAMを用いて数値解析を行い、その流動様相について実験結果<sup>6)</sup>と比較検討したものである。計算についての詳細は、既報<sup>7)</sup>にて報告済みであるので、そちらを参照されたい。なお、汎用の計算プログラムを用いることなく交直流を計算した報告<sup>8)</sup>などもあるが、複雑な形状を有する問題を扱ったものは少ない。

## 2. 解析モデル

具体的な数理モデルについては、次元解析を中心にすでに既報<sup>7)</sup>にて詳細を記した。Figure 1には、本研究の解析に必要な、有機相が直進するT字型流路の有次元の数理モデルを示した。

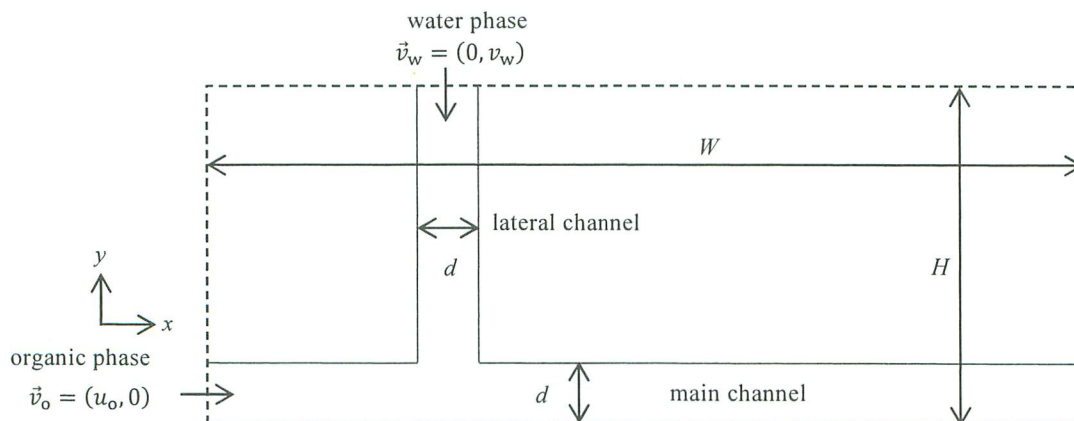


Fig.1 Analytical model in dimensional form

### 3. 支配方程式

支配方程式についても、すでに既報<sup>7)</sup>にて無次元の支配方程式の導出を含め詳細に記したので、ここでは、本研究で取り上げる現象を支配する、連続の式、運動方程式に加え、水相と有機相を区別するためのカラー関数の保存式を有次元系にて記すにとどめる。カラー関数 $C$ は相を占める成分の質量分率に相当し、この値がゼロもしくは1に応じて、それぞれの相を識別することができる。さらに、相の識別は支配方程式に含まれる物性値にも反映される。つまり、カラー関数を用いると、水相と有機相のそれぞれの相に応じた連続の式や運動方程式を記さなくて済む。したがって、カラー関数 $C$ の保存式は、移動現象論的のいうと、2成分系における対流拡散方程式（Fickの拡散第2法則）において、拡散係数をゼロとして拡散項を無視したものと等価である。

#### 3-1 有次元で表された支配方程式

本研究において必要となる支配方程式を、簡単のため $x, y$ 座標系の有次元系にて以下に示す。

・カラー関数

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(uC)}{\partial x} + \frac{\partial(vC)}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

・連続の式

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (2)$$

・運動方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\mu}{\rho} \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{\rho} f_{vx} \quad (3)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\mu}{\rho} \left( \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{\rho} f_{vy} \quad (4)$$

・物性値

$$\rho = \rho_o + C(\rho_w - \rho_o) \quad (5)$$

$$\mu = \mu_o + C(\mu_w - \mu_o) \quad (6)$$

本研究では、既報<sup>7)</sup>にしたがって、 $C=1$ はwater phaseを、 $C=0$ はorganic phaseを、それぞれ表すものとする。 $\vec{f}_v = (f_{vx}, f_{vy})$ は、界面張力の効果を表す項であり、既報<sup>7)</sup>と同様に本研究では、以下のようなCSF (Continuum Surface Force) モデル<sup>8)</sup>を用いた。

$$\vec{f}_v = \sigma \kappa \frac{\rho}{(\rho_w + \rho_o)/2} \nabla C \quad (7)$$

$$\kappa = -\nabla \cdot \hat{n} \quad (8)$$

$$\vec{n} = \nabla C \quad (9)$$

$$\hat{n} = \frac{\nabla C}{|\nabla C|} \quad (10)$$

$$\kappa = -\nabla \cdot \hat{n} = -\left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\frac{\partial C}{\partial x}}{\sqrt{\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial C}{\partial y}\right)^2}} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\frac{\partial C}{\partial y}}{\sqrt{\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial C}{\partial y}\right)^2}} \right] \right\} \quad (11)$$

$$\vec{f}_v = -\sigma \frac{\rho}{(\rho_w + \rho_o)/2} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\frac{\partial C}{\partial x}}{\sqrt{\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial C}{\partial y}\right)^2}} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\frac{\partial C}{\partial y}}{\sqrt{\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial C}{\partial y}\right)^2}} \right] \right\} \nabla C \quad (12)$$

ここに、 $\sigma$ は界面張力[N m<sup>-1</sup>]、 $\kappa$ は局所平均曲率[m<sup>-1</sup>]、 $\hat{n}$ は界面における法線単位ベクトルを表す。 $\vec{f}_v = (f_{vx}, f_{vy})$ は、界面張力とカラー関数を用いて表すことができる。

#### 4. 結果および考察

本研究では、Fig. 1に示した数理モデルおよび上述の支配方程式を用いた数値解析を実施し、その結果の妥当性について、Fig. 1にならった実験装置を用いた実験結果と比較し検討する。なお、計算と実験のそれぞれについて、流路は直径1 mmの円管であり、水相と有機相の合流前の流速は等しく設定した。数値解析は、実験条件と同じく、円柱領域について3次元にて行った。

Figure 2に、セグメントが生成する様子を示す。(a)はOpenFOAMを用いた計算結果で、(b)は実験結果である。実験結果において、青色は水相であり reactive blue2を用いて着色している。また赤色は有機相(cyclohexane)であり、Sudan IIIを用いて着色している。なお、実際の実験では有機相は右から流入させたが、実験結果(写真)を左右反転させて、有機相が左から流入するようにして計算結果と比較しやすく表示している。(a)、(b)いずれも、水相のセグメントが生成する瞬間である。計算結果と実験結果は、定性的によく一致している。すなわち、水相のセグメントが生成するとき、有機相の流体はこのセグメントにせき止められており、ここで激しい渦が生じている。これは動画として記録された結果の1コマを静止画として示した(b)の前後の様子を動画で見るとよくわかる。なお、(a)において示された流線を見てもこの様子がわかる。(a)の破線で示された領域の拡大図を見ると、水相と有機相のそれぞれの相に、循環流の存在を示唆する速度ベクトルが確認できる。このように、実験結果と計算結果の両者から、片相のセグメントが生成する際にその界面付近で、両相において循環流が存在することがわかる。したがって、この渦を有効に利用することで、例えば、抽出などにおいて、2相間の物質移動が促進されることが示唆される。

Figure 2において、計算結果と実験結果とのある程度的一致が認められ、計算結果の妥当性を検証できた。計算結果からは、流動様相を検証するために必要な速度ベクトル図などを容易に得ることができる。そこで、セグメントの生成する前後の様子を含め、交互流の流動様相をさらに詳しく調べるため、色による相の区別に加え、速度ベクトル図を用いて検討を行った。Figure 3は、セグメントが生成する一連の様子を計算結果で表したものである。図には、流路全体の様子と、合流点付近の拡大図を合わせて記した。(a)は、合流点から水相のセグメントの先端が下方に成長し始めているところである。セグメントの先端部分に、乱れが生じているのがわかる。(b)は水相のセグメントが、有機相が直進する主流路の流路壁に接する瞬間である。水相のセグメントの先端部分が流路壁に付着したことで、有機相がせき止められて生じた渦が確認できる。さらに(c)では、有機相が水相のセグメントとの界面に沿って流れることにより、せん断力が働いているのが確認できる。これにより、せん断面に沿った内部循環流が両相において認められる。(d)は、水相のセグメントが生成した直後の図である。セグメント生成時に課されていた、いわばストレスが解放され、もはやセグメント内には循環流は見られず、水相のセグメントは有機相によって押されている。この結果、セグメント全体が流れ方向に向かっていく。

Figure 4は、セグメントの長さに与える流速の影響を示した。流速が10 mm/sより速い範囲においては、計算結果は実験結果をよく表している。本研究の条件では、流速が速くなるとセグメントが短くなること、そして、セグメントの長さは2.0から2.5 mm程度であることがわかる。なお、流速が10 mm/s以下の範囲においては、実験結果に比べて、計算結果のセグメントの長さの方が短くなっている。これは、流速が遅い分、セグメントの成長速度も遅く、界面を精度よくゆっくりと計算する必要があるためであると思われる。界面の計算手法も含め、今後の検討課題であると思われる。

#### 5. 結論

OpenFOAMを用いて、マイクロ流路において水相と有機相(cyclohexane)を合流させることで生じる交互流に関して、せん断型のT字流路(有機相が直進)を取り上げて数値解析を試みた結果、以下の結論を得た。

- (1) OpenFOAMを用いた計算結果は、これまでに実験で得られた交互流を良好に再現できる。
- (2) セグメントが生成する際、界面近傍において、各々の相のセグメント内部に渦が生じる様子が明らかとなった。この結果は、これまでの実験結果と定性的に一致する。
- (3) セグメントの長さは流入速度が速くなると短くなり、またその値についても定量的にこれまでの実験結果と一致した。

## 謝辞

本研究は文部科学省 私立大学戦略的研究基盤形成支援事業社会連携研究推進事業(H24-28)「QOL向上を目指す支援技術のイノベーション研究拠点形成」の研究助成を受けて行われた。記して謝意を表す。

## 参考文献

- [1] <http://www.openfoam.org>
- [2] <http://wpedia.goo.ne.jp/enwiki/OpenFOAM>
- [3] Ehrfeld W., V. Hessel and H. Löwe: *Microreactors -New Technology for Modern Chemistry-*, Wiley-VCH, Weinheim (2000)
- [4] Geschke O., H. Klank and P. Tellemann: *Microsystem Engineering of Lab-on-a-Chip Devices*, Wiley-VCH, Weinheim (2004)
- [5] Hessel V., H. Löwe, A. Müller and G. Kolb: *Chemical Micro Process Engineering -Processing and Plants-*, Wiley-VCH, Weinheim (2005)
- [6] Matsuno H., H. Hirano, T. Nakagawa, X. Wang and N. Okamoto: Alternating Flow of Immiscible Liquids in Microchannel, *Asia-Pac. J. Chem. Eng.*, 7 (Suppl. 1), S48-S53 (2012)
- [7] 平野博之, 松野弘貴, 中川智博, 岡本直孝, 王 嫻: マイクロ流路内における二相流の無次元化, *岡山理科大学紀要*, 46A, pp.57-65 (2010)
- [8] Wang X., H. Hirano and N. Okamoto: Numerical investigation on the two-phase flow in a Y-shaped micro-channel, *ANZIAM J.*, 48, C963-C976 (2008)
- [9] Brackbill J.U., D. B. Kothe and C. Zemach: A continuum method for modeling surface tension, *J. Comp. Phys.*, 100, 335-354 (1992)

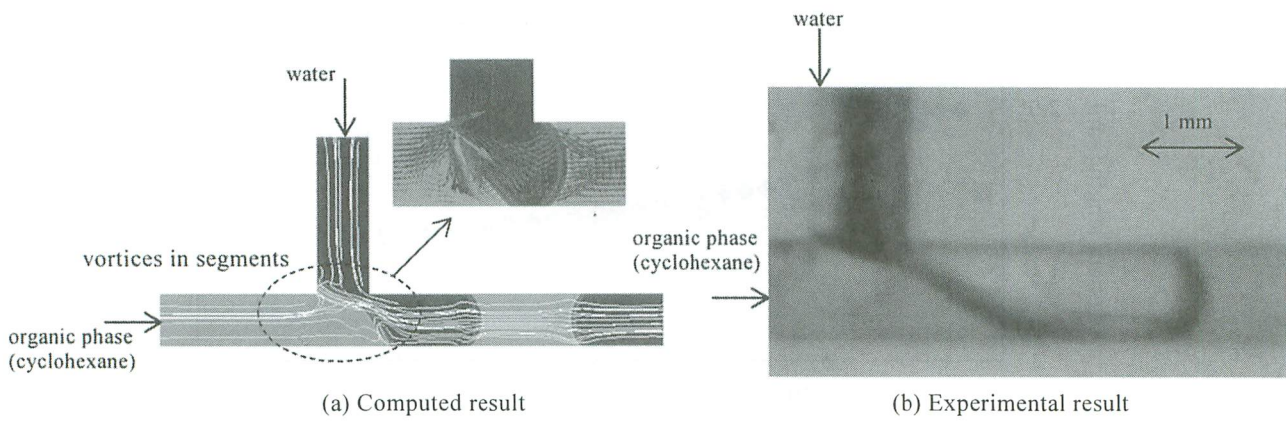


Figure 2 Snapshot of segment generation in microchannel

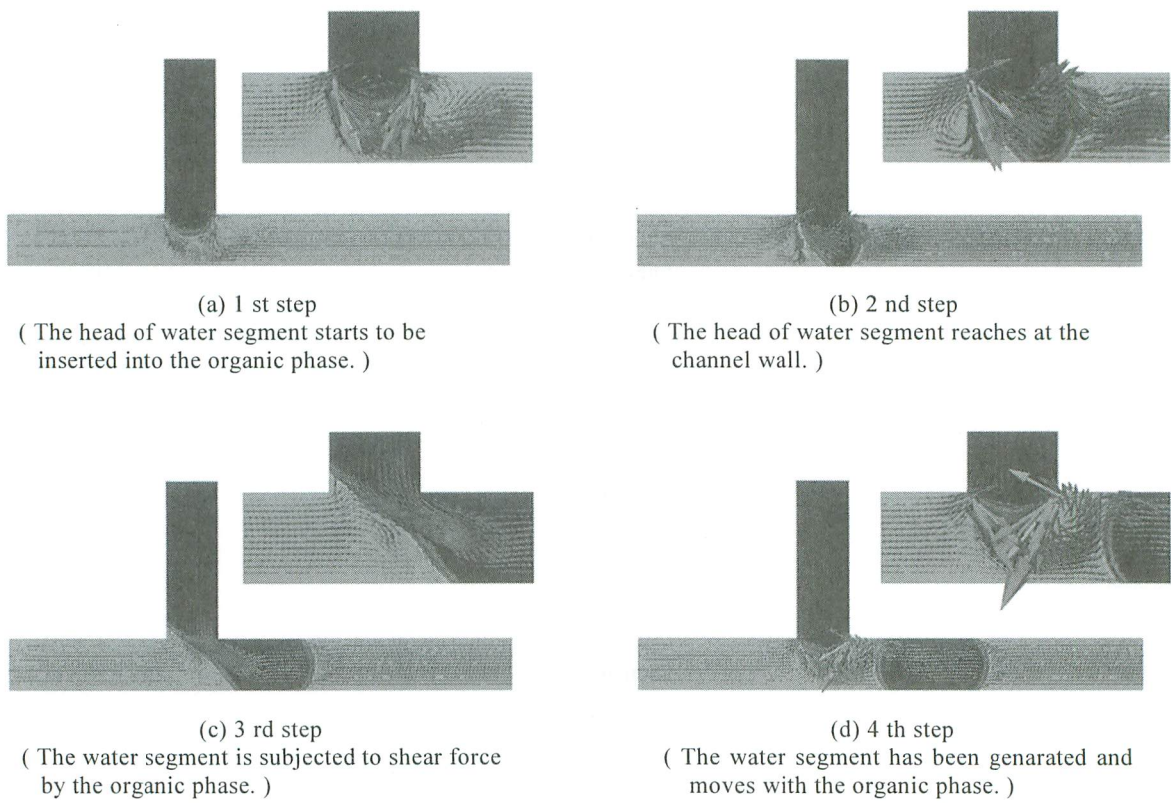


Figure 3 Illustration of segment generation in microchannel  
 ( The channel width is equal to 1 mm. The blue region is the water phase and the red one is the organic phase. )

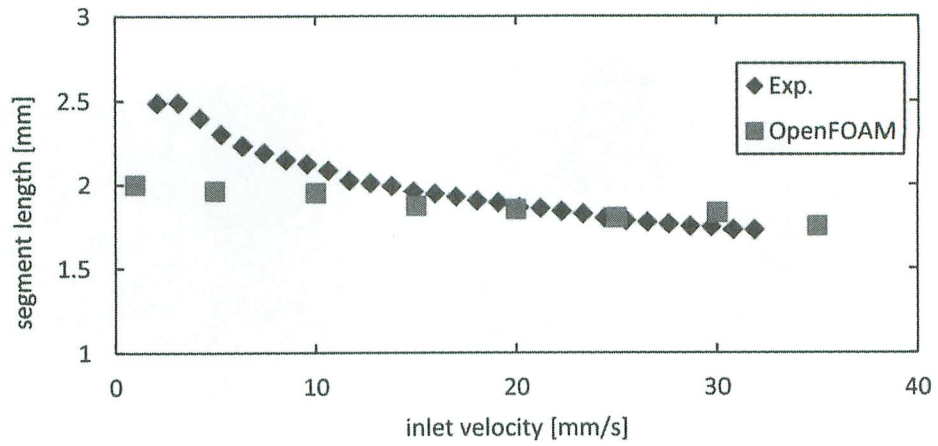


Figure 4 Comparison of the effect of the inlet velocity on the segment length between computational and experimental results.

#### Nomenclature

$C$	: color function	[-]
$d$	: width of channel	[m]
$f_v$	: body force	[N/m <sup>3</sup> ]
$H$	: height of domain	[m]
$\vec{n}$	: normal vector on interface	[m]
$p$	: pressure	[Pa]
$t$	: time	[s]
$\vec{v} = (u, v)$	: velocity vector and its components	[m/s]
$W$	: width of domain	[m]
$(x, y)$	: coordinate	[m]

#### Greek letters

$\mu$	: viscosity	[Pa s]
$\sigma$	: surface tension, interfacial tension	[N/m]
$\rho$	: density	[kg/m <sup>3</sup> ]
$\kappa$	: curvature	[1/m]

#### Subscripts

$o$	: organic phase
$w$	: water, aqueous phase

# Numerical Computation of Alternating Flow in Microchannel with OpenFOAM

Hiroki Matsuno, Hiroyuki Hirano\*, Naotaka Okamoto\*

and Kenya Kuwagi\*\*

*Department of System Science, Graduate School of Engineering,*

*\* Department of Applied Chemistry and Biotechnology, Faculty of Engineering,*

*\*\*Department of Mechanical System Engineering, Faculty of Engineering,*

*1-1 Ridai-cho, Kita-ku, Okayama 700-0005, Japan*

(Received October 1, 2012; accepted November 1, 2012)

This article is on the numerical analysis and its verification of the two-phase alternating flow of the aqueous and organic phases in the microchannel. As for the numerical analysis, OpenFOAM is adopted to solve the equations of continuity, motion and the color function which is widely used in the numerical study of the multiphase flow. The CSF (continuum surface force) model is adopted to calculate the interfacial force, and this model is also widely used in the numerical study on the interface between phases. It is concluded that the two-phase alternating flow can be reproduced by the numerical computation, and the vortices by the internal flow are found inside the segments. Further, according to the computation, the segment length becomes small with the increase of the inlet velocity of the fluid. This supports the experimental result, and the computed values of the segment length are in good agreement with the experimental ones.

**Keywords:** alternating flow; microchannel; two-phase flow; numerical calculation; OpenFOAM.