

## 特集記事・6

鉄鋼におけるマルチスケール・マルチフィジックス計算材料科学

フェーズフィールド法による  
プール沸騰のシミュレーション

Numerical Simulation of Pool Boiling Using Phase-Field Method

辻本公一

Koichi Tsujimoto

三重大学 大学院  
工学研究科 機械工学専攻  
教授

## 1 はじめに

## 1.1 沸騰現象の予測

沸騰伝熱は、高熱流束条件下での熱伝達を実現する最も有効な手段である。空調機器やボイラーなどの伝熱機器の設計における精度よい伝熱予測、鉄鋼分野では製品の高機能化、製造時の低コスト化のための沸騰現象の予測と制御が求められている。しかしながら、そのための数値シミュレーション技術は十分に確立されていない。その理由として表面張力、高い気液の密度比により数値不安定が生じること、相変化により界面で物質移動が生じるため、厳密に保存性を確保することが難しいことなどの理由を挙げることができる。そのため、沸騰伝熱の評価は経験的方法に大きく依存している。本解説では、沸騰現象の概説からシミュレーション技術の状況について触れ、筆者らのグループが現在行っているフェーズフィールド法による沸騰のシミュレーションを通してシミュレーションの可能性を示す。

## 1.2 沸騰現象とは

沸騰の形態は、液体の温度状態、流れ場および流動様式により分類される<sup>1)</sup>。液体の温度状態については、液体温度が飽和温度と等しい飽和沸騰と、飽和温度より低い過冷却の状態におけるサブクール沸騰がある。流れ場は、伝熱面が静止した液体と接触するプール沸騰と、伝熱面上を強制的に流動させられている強制対流沸騰に分けられる。流動様式はFig.1に示す沸騰曲線上で分類される。沸騰曲線では縦軸に壁面熱流束、横軸に伝熱面温度と飽和温度との温度差である過熱度がとられる。図中の領域(1)の非沸騰域では蒸気泡は発生せず、加熱された液体の密度差により生じる自然対流によって熱が移動する。領域(2)の核沸騰域では伝熱面に小さ

な蒸気泡が発生し、それが上昇することにより流体中へ熱が移動する。日常生活で見られる沸騰はこの核沸騰である。領域(3)の遷移沸騰域では、核沸騰と後述の膜沸騰が混在する状態である。また、核沸騰と遷移沸騰との境に存在する熱流束の極大値を限界熱流束(Critical Heat Flux: CHF)と呼び、低過熱度で伝熱が最大となる点である。領域(4)の膜沸騰域では、伝熱面上に蒸気の膜が形成されるため、過熱度が増加しても熱伝達は低下する。

このような流動状態を整理するものとして、伝熱に関する(i) 沸騰曲線(Fig.1)、(ii) 限界熱流束、壁面上での流動状態を示す蒸気泡の(iii) 離脱気泡直径、(iv) 離脱気泡頻度等に関するさまざまな経験式がある<sup>1)</sup>。これらの経験式は実用上の利用に加え、シミュレーションの妥当性を評価する上でも利用される。

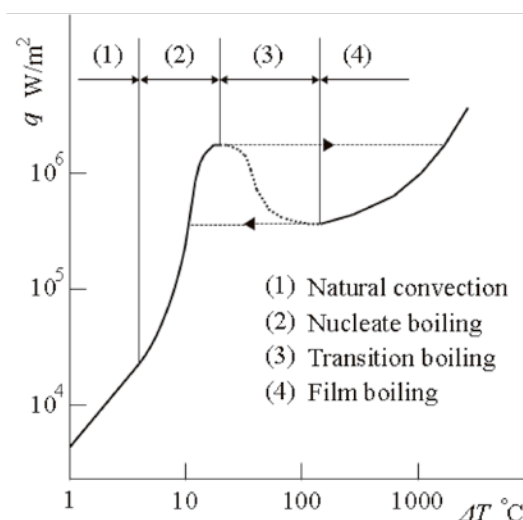


Fig.1 Boiling curve.

### 1.3 沸騰シミュレーションの現状

Welch<sup>2)</sup>により、非構造の移動格子を用いた2次元単独気泡の成長問題が、沸騰シミュレーションの初期に行われた。しかし強い変形が生じるような場合には対応が困難であり、空間に固定された座標系上で気液界面を追跡する方法が発展した。代表的な界面追跡法として、計算格子で構成される各検査体積内の流体体積占有率で界面形状を表現するVOF法、界面勾配を考慮しつつ質量及び体積の完全な保存性を有するMARS法、界面を表す仮想粒子を直接追跡するFront tracking法、界面からの距離関数に基づくLevel set関数により界面近くの幾何学的情報を高精度に再現するLevelset法、Level Set法の欠点である体積保存の難しさやVOF法での表面張力の誤差を改善するため、これら2つを組み合わせたCLSVOF法等のさまざまな手法が開発されている。これら沸騰シミュレーションの事情は最新の解説<sup>3)</sup>に詳しく記載されている。また、上記の離散化とは異なり、流体を多数の仮想粒子の集合体と仮定し、各粒子の衝突と並進により粒子の速度分布関数を時間発展させる格子ボルツマン法(Lattice-Boltzmann Method: LBM)や、流体粒子を仮定シラグランジュ的に追跡する粒子法によってもさまざまな沸騰問題が取り扱われている。

沸騰現象において膜沸騰と比べて核沸騰は、伝熱面近傍における微小液膜の存在や接触角、発泡点密度、伝熱面粗さ、キャビティ形状などの因子が影響を及ぼすと考えられ<sup>1)</sup>、そのため実験データのばらつきも大きい。そのことから単独気泡の沸騰計算を除き、3次元、高密度比のシミュレーションに対して前述の経験式を定量的に満足するシミュレーション結果の報告は筆者の知る限りまだない。

### 1.4 フェーズフィールド法とは

材料科学分野において自由境界面を含む凝固現象等、さまざまな現象解析のためのシミュレーション技術としてフェーズフィールド法(phase-field method: PFM)が有効な方法として注目を浴びている<sup>4,5)</sup>。PFMでは、異なる相の間に存在するシャープな界面をあえて有限な厚さを有する界面と仮定する拡散界面モデル(diffuse-interface model: DIM)の概念が導入され、界面内において、密度や粘性といった物性値が連続的に変化するとし、界面の分布形状が系の自由エネルギーによって決定される。

流体の質量密度または成分濃度に相当する秩序変数 $\phi$ (Fig.2の場合、液体で $\phi=1$ 、気体で $\phi=-1$ とした界面を想定している)を用いると、系の自由エネルギー $F(\phi)$ は式(1)で与えられる<sup>6)</sup>。

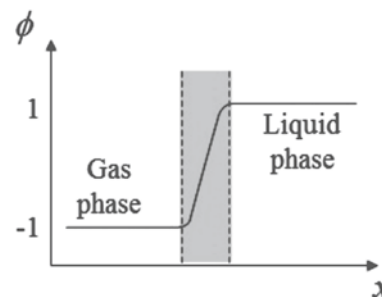


Fig.2 Diffuse interface. ( $x$ は界面の厚さ方向)

$$F[\phi] = \int_{\Omega} \left\{ f(\phi) + \frac{1}{2} \kappa |\nabla \phi|^2 \right\} d\Omega \quad (1)$$

( $\Omega$ は系の領域;  $\kappa$ は正の定数)

$$\mu_c(\phi) = \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi} = f'(\phi) - \xi^2 \nabla^2 \phi \quad (2)$$

( $\xi$ : 等価界面厚さ;  $f'(\phi)$ は $f'(\phi) = \phi^3 - \phi$ )

この自由エネルギーを最小化する化学ポテンシャル $\mu_c$ (式(2))から、自由エネルギーが時間とともに最小化する方向で、時間発展式が導出される<sup>6)</sup>。その際、秩序変数が保存される量であるか否かで発展方程式の選択は変わる。混相流のシミュレーションの場合、気液が交じり合わない非混和が仮定される場合が多く、保存型であるCahn-Hilliard(CH)式が基本となる方程式となる。材料科学での主要な取り扱いとは異なり混相流でのPFMでは、界面のミクロなメカニズムよりは界面追跡法として利用される。LBMの混相流シミュレーションの多くはCH式あるいは、修正されたCH式が利用されている。また、界面追跡により特化したPFMの議論もあり、新たな方程式が導出されている<sup>7)</sup>。フェーズフィールド法の利用に関するさらなる詳細については、最新の専門書<sup>4,5)</sup>が大変参考になる。

## 2 プール沸騰のシミュレーション

筆者らの沸騰シミュレーション手法ならびにプール核沸騰の結果について簡単に紹介する。

### 2.1 基礎式および離散化

沸騰は蒸気泡の膨張/収縮を伴う流れであるが低マッハ数流れのため、沸騰計算のほとんどは非圧縮粘性流れが仮定される。支配方程式は、連続の式、運動方程式、エネルギー式に加え界面追跡に関する輸送方程式が解かれる。筆者らの研究では、界面追跡法として、Cahn-Hilliard式を用いる。 $\dot{m}$ は相変化した質量流量、 $\rho_g$ 、 $\rho_l$ は気相ならびに液相の密度、 $\tau$ は粘性応力、 $\sigma$ は表面張力係数、 $\kappa$ は表面曲率、 $n$ は界面法線ベクトル、 $x_k$ は界面位置、 $c_p$ は定圧比熱、 $k$ は熱伝導率、 $Pe$ は

ペクレ数、 $\mu_c$ は化学ポテンシャルをそれぞれ示す。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \dot{m} \left( \frac{1}{\rho_g} - \frac{1}{\rho_l} \right) \quad (3)$$

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \int \frac{\sigma}{\rho} \kappa \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) \mathbf{n} \quad (4)$$

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot \mathbf{k} \nabla T \quad (5)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla(\phi \mathbf{u}) = \frac{1}{Pe} \nabla^2 \mu_c - \dot{m} \left( \frac{1}{\rho_g} + \frac{1}{\rho_l} \right) \quad (6)$$

沸騰の場合、上記に現れる相変化した質量流量 $\dot{m}$ を評価するための相変化モデルが必要となる。

## 2.2 相変化モデル

多くのシミュレーションにおいて、相変化量は気液界面の両側で生じる界面の法線方向に対する熱流束差から見積もられる。そのような方法では蒸発速度が無視されることから、経験式を導入したモデルの提案もある<sup>8)</sup>。筆者らはKunugiら<sup>9)</sup>を参考に温度回復法を採用した。温度回復法とは飽和温度以下にある液体が飽和温度を超え、飽和温度以上に達するのに必要な熱量全てが相変化に使われると仮定される。例えば液相が飽和温度を超えた場合、そのときの温度( $T$ )と飽和温度( $T_{sat}$ )の差 $\Delta T = T - T_{sat}$ で決定される熱量と相変化に使われる熱量が等しいものとする。その結果、相変化量である質量流量 $\dot{m}$ は以下となる。

$$\dot{m} = \frac{\rho c_p \Delta T}{L dt} dV \quad (6)$$

ここで、 $L$ は蒸発潜熱、 $dV$ 各検査体積、 $dt$ は時間刻みである。この方法では、界面上での熱流束の評価が不要で、幾何学的な界面情報を必要とすることなく相変化量が見積もられることから、界面追跡法としてのフェーズフィールド法の基本的な考え方とも整合する。

## 2.3 微小液膜モデル (Microlayer Model)

核沸騰において、蒸気泡と壁面との間に微小液膜が存在している。低過熱度の場合、微小液膜が熱流束に与える影響は20-30%程度と見積もられ、沸騰による伝熱量を正確に評価する上で考慮することが不可欠である。また、蒸気泡の大きさを数ミリとして、液膜の厚さは数マイクロメートルであることから、これらの微小液膜を解像するには膨大なメッシュが必要であり、何らかのモデルの導入も不可欠である。これまでに微小液膜のモデル化には2つの方法<sup>10,11)</sup>が提案されており、ここではSonらのモデル<sup>10)</sup>の幾何学的境界条件の一

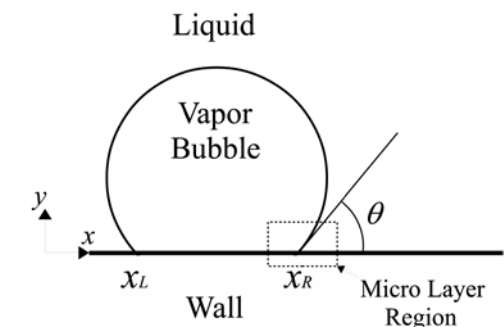
部を修正し利用した。モデルではFig.3 (a)のマクロ領域とFig.3 (b)の微小液膜領域に流れ場を分けて考える。マクロ領域の蒸気泡の左端 $x_L$ および右端 $x_R$ の位置を求め、中間の位置 $x_c$ で液膜厚さが最小となる液膜厚さ $\delta$ の分布が、蒸気泡内の熱力学的関係式と液膜の動力学が満足されるように決定される。モデルの詳細は文献<sup>10)</sup>に詳しくここでは省略するが、本研究では1次元的に定式化されたものを3次元流れ場に対応できるようモデルを拡張した<sup>12)</sup>。

## 2.4 Cahn-Hilliard 方程式の改良

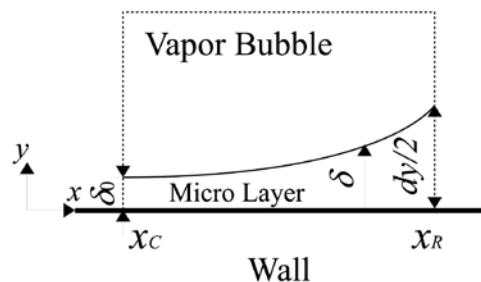
一般に混相流のシミュレーションでは、数値的な拡散により各相の保存が破綻する問題がある。CH式の場合、陽的なオイラースキームを用いると保存性を確保するためには膨大な反復回数が必要で、その解決策として陰的スキームの導入が有効であることを示した<sup>13)</sup>。しかしながら、密度比が高い混相流の相変化問題では秩序関数が不連続な分布となり、計算の不安定化につながる。そこで本研究では、Eyreら<sup>14)</sup>の線形安定化分離スキームにおける陽的なソースタイムを半陰的に扱う新たなスキームを開発し、そのことにより高密度比の場合の計算が安定に行われるようになった<sup>12,13)</sup>。

## 2.5 計算条件

計算対象として三次元場における水のサブクールプール沸騰のシミュレーションを行った。境界条件は側面に周期条件、



(a) Macro region



(b) Microlayer region

Fig.3 Microlayer model.

下面を壁面条件、上面を流出条件とした。初期の液相温度を  $T_l = 95^\circ\text{C}$ 、飽和温度を  $T_{sat} = 100^\circ\text{C}$  とした。水、水蒸気の物性値として液体密度  $\rho_l = 1000 \text{ kg/m}^3$ 、水蒸気密度  $\rho_g$  と液体密度との密度比  $\rho_g / \rho_l = 0.001$  とした。また過熱度  $\Delta T$  は核沸騰領域に相当する 10、20、30  $^\circ\text{C}$  とし、蒸気泡と壁面との接触角  $\theta = 30, 60^\circ$  に設定した。本研究で用いた温度回復法は各格子の温度と飽和温度の差を取ることによって相変化を表現する。計算では壁面上の温度のわずかな数値的な乱れによって核生成が生じ、人為的な核生成モデルを導入していない。

## 2.6 計算結果

Fig.4 に過熱度  $\Delta T = 10^\circ\text{C}$ 、接触角  $\theta = 30^\circ$  における瞬時の蒸気泡分布を示す。Fig.4 (a) から Fig.4 (d) へ時間が進行す

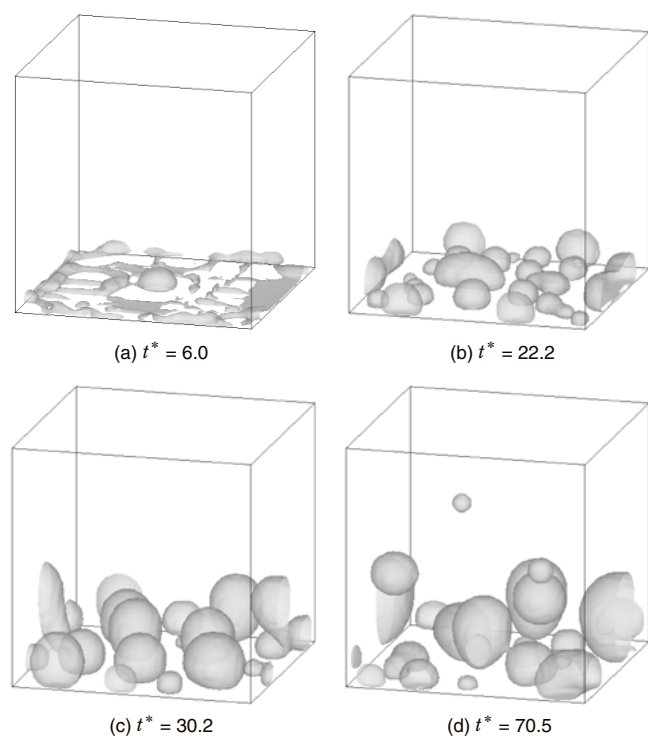


Fig.4 Instantaneous distribution of vapor bubble.

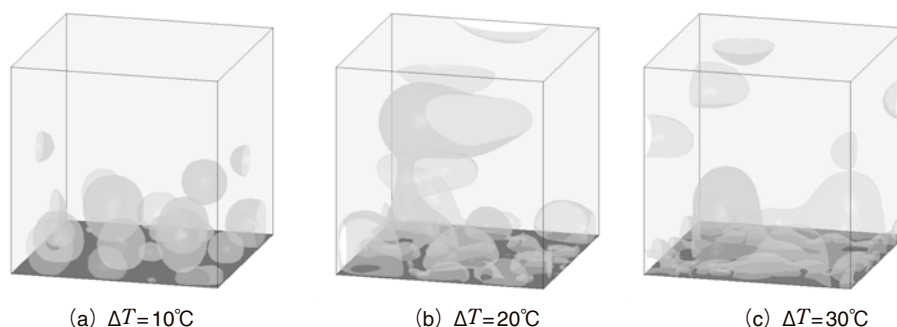


Fig.5 Instantaneous distribution of vapor bubble.

るにつれて、図中の下面に位置する伝熱面から水が加熱され、飽和温度を超えた水から蒸気泡に相変化する様子が捉えられている。伝熱面上では蒸気泡内での蒸発や蒸気泡同士の合体により蒸気泡が成長し、浮力によって離脱する。また、サブクール沸騰のため、蒸気泡は凝縮により上方へ向かうに従って小さくなる。

Fig.5 に過熱度  $\Delta T = 10, 20, 30^\circ\text{C}$ 、接触角  $\theta = 30^\circ$  における蒸気泡分布を示す。過熱度が大きくなると、より大きな蒸気泡が生成しており、より早く蒸気泡が上境界面に上昇している。また、 $\Delta T = 30^\circ\text{C}$  では壁面上が膜沸騰状態に近づいている様子も分かる。

伝熱量について定量的な評価を行うため、核沸騰域における代表的な実験式である Rohsenow の式、次元解析で得られる 14 種の無次元数を使って、多数の実験データを回帰分析して導出された Stephan-Abdelsalam の式と比較する。

Fig.6 に沸騰曲線を示す。記号はシミュレーションの結果で、白抜き記号は本研究で微小液膜モデルを用いて計算し

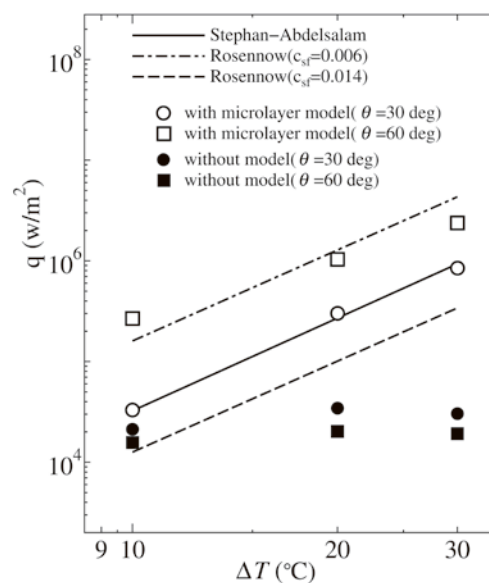


Fig.6 Boiling curve.

た場合である。丸記号は  $\theta = 30^\circ$ 、四角記号は  $\theta = 60^\circ$  の場合である。1点鎖線と破線はRohsenowの式で、水に対して整理されている最大値および最小値の線を、実線はStephan-Abdelsalamの式を示す。微小液膜モデルを導入した場合、接触角の大きさは無関係に過熱度が上昇するにつれて、実験結果と同じ傾きで伝熱量が増加する。接触角  $\theta = 30^\circ$  の場合、Stephan-Abdelsalamの式とほぼ一致し、接触角  $\theta = 60^\circ$  の場合、伝熱はより活性化してRohsenowの式の上限にほぼ一致する。一方、モデルの導入がない場合、定量的にも定性的にも過熱度の上昇に伴う傾向は全く生じない。微小液膜モデルの導入は伝熱予測に不可欠である。

Fig.7に各過熱度における瞬時の熱流束分布のコンター図を示す。各図でのコンター図のしきい値は大きく異なるが、各図中において高い熱流束値を黒色、低い熱流束値を白色で、白色の線が蒸気泡の界面の位置を表している。下段は微小液膜モデルを導入していない場合の結果を示しており、蒸気泡内での熱流束は低いため、白色部が広がり、それ以外の壁面上では高い熱流束が生じている。このことからモデルを導入しない場合、蒸気泡の外側での伝熱が主体となっている。一方、上段の微小液膜モデルを導入している場合、蒸気泡の外側での熱流束が蒸気泡内と比べて相対的に低く、蒸気泡内で高い熱流束が生じている。微小液膜モデルが高い過熱度においてより伝熱に寄与していることもわかる。

### 3 おわりに

3次元で高密度比の沸騰計算が、筆者らの提案するスキームで安定に計算でき、かつ熱流束も妥当に計算できることを示した。ここには示さなかったが、発生する蒸気泡径、離脱周期について、定性的な傾向は経験式と一致しているが、定量的にはまだ十分な一致はない。更なる伝熱面近傍のモデルの洗練化、発泡点密度のモデル化などいくつかの課題を解決する必要がある。一般に相変化計算は計算負荷が高く、そのことが計算スキームの検討を阻んでいる。近年、Graphics Processing Unit (GPU) による高速計算に注目が集まっており、筆者らのグループでも計算の高速化に取り組んでいる。現在、開発したFortranのソースコードに対してCUDA Fortranを利用した結果、30倍ほど高速化され、これまで1つの条件を計算するのに1ヶ月以上かかっていたものが、翌日に結果が得られるようになった。さらにモデルの改良、検討を進め予測精度のよいシミュレーション技術の完成を目指している。

#### 謝辞

本研究の遂行には、本研究室の大学院生、八木健太君に多大な協力を得た。ここに感謝の意を記す。

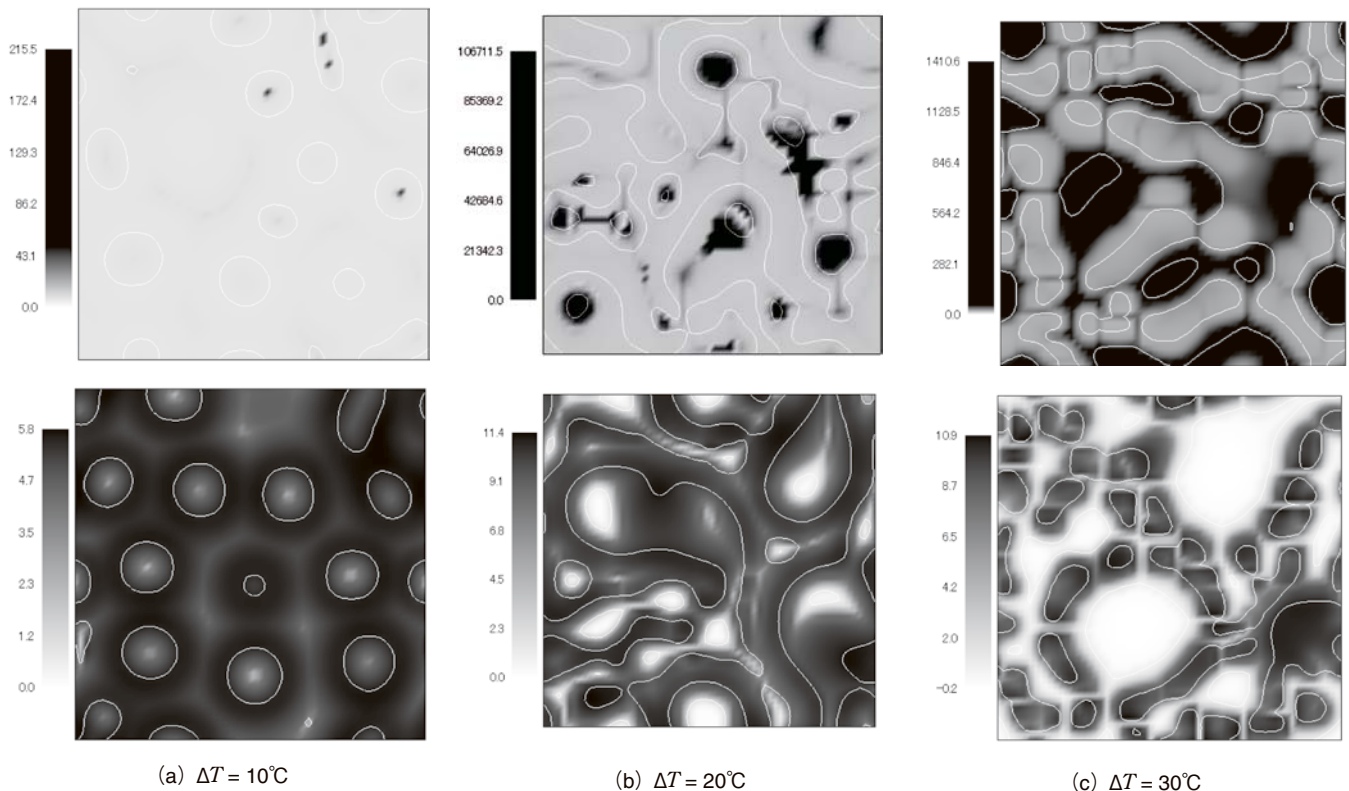


Fig.7 Instantaneous distribution of heat flux.

# 参考文献

- 1) 伝熱工学 (JSM. テキストシリーズ) , 日本機械学会編, 丸善出版, (2005)
- 2) S.Welch : J.Comp.Physics, 121 (1995) , 142.
- 3) V.K.Dhir, G.R.Warrie and E.Aktinol : J.Heat Transfer, 135 (2013) ,6, 061502.
- 4) 高木知弘, 山中晃徳: フェーズフィールド法- 数値シミュレーションによる材料組織設計-, 養賢堂, (2012)
- 5) 小山敏幸, 高木知弘: 計算力学レクチャーコースフェーズフィールド法入門, 丸善出版, (2013)
- 6) V.E.Badalassi, H.D.Ceniceros and S.Banerjee : J.Comp. Physics, 190 (2003) , 371.
- 7) P.H.Chi and Y.T.Lin : J.Comp.Physics, 230 (2011) , 185.
- 8) S.Hard and F.Wondra: J.Comp.Physics, 227 (2008) ,5871.
- 9) T.Kunugi, N.Saito, Y.Fujita and A.Serizawa : Heat Transfer, 3 (2002) ,497.
- 10) G.So and V.K.Dhir : Int.J.Heat and Mass Transfer, 51 (2008) , 2566.
- 11) C.Kunkelmann and P.Stephan : Numerical Heat Transfer A, 56 (2009) 631.
- 12) K.Tsujimoto, Y.Akatsuka, T.Shakouch and T.Ando : 8th Int. Conf. Multiphase Flow, ICMF 2013, USB memory, (2013)
- 13) K.Tsujimoto, A.Nakamura, T.Shakouch and T.Ando : 7th Int. Conf. on Multiphase Flow, ICMF 2010, USB memory, (2010)
- 14) D.J.Eyre : An Unconditionally stable one-step scheme for gradient systems, preprint, (1998)

(2014年7月24日受付)