

1259 格子ボルツマン法による核生成のシミュレーション

Lattice Boltzmann Simulation of Nucleation

○正 瀬田 剛 (富山大) 正 高橋 亮一 (東工大)
正 奥井 健一 (富山大) 正 竹越 栄俊 (富山大)

Takeshi SETA, Toyama University, 3190 Gofuku, Toyama-shi, Toyama
Ryoichi TAKAHASHI, Tokyo Institute of Technology
Kenichi OKUI, Toyama University
Eisyun TAKEGOSHI, Toyama University

In this paper, we propose a lattice Boltzmann model for two-phase flows pertinent to thermal nonideal fluids. The LBM introduces a fictitious forcing term and recovers thermohydrodynamic equations for nonideal fluid through the Chapman-Enskog expansion procedure. The latent heat is identified by a comparison of density with enthalpy in the simulation of the bubble generation. The numerical measurements of departure radius of bubbles for surface tensions and for contact angles approximately agree with experimental equation. Simulations of pool boiling with heat transfer are carried out, showing the applicability of the model for two-phase flows with thermal effects. Using finite difference Lattice Boltzmann method ensures numerical stability of the scheme.

Keywords: Two-Phase Flows, Computational Fluid Dynamics, Lattice Boltzmann Method, Fictitious Forcing Term, van der Waals-Cahn-Hilliard Free Energy

1. はじめに

格子ボルツマン法 (LBM) は複雑な界面挙動を比較的簡単に再現できることから、二相流に対する LB モデルが次々に提案された^(1,2)。しかし、これらのモデルでは、解析条件が等温場に限定されている。実際の相変化では、熱の放出や吸収、凝縮や沸騰における潜熱の発生などがあり、熱流動現象の計算が可能な二相流 LB モデルを開発する必要がある。著者らは、熱流動 LBM に仮想的な外力項を付加することで、エネルギー保存式を解析できる二次元および三次元の二相流 LB モデルを提案した⁽³⁾。本 LB モデルを用い、沸騰二相流現象の素過程である、気泡の生成・離脱の数値実験を行い、本 LB モデルの二相流シミュレーションへの適用性を実証する。

2. 熱流動二相流格子ボルツマンモデル

van der Waals-Cahn-Hilliard による自由エネルギー理論に基づく圧力テンソル⁽¹⁾,

$$P_{\alpha\beta} = \left[p - \kappa_s \rho \nabla^2 \rho - \frac{\kappa_s}{2} |\nabla \rho|^2 \right] \delta_{\alpha\beta} + \kappa_s \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_\alpha} \right) \left(\frac{\partial \rho}{\partial x_\beta} \right), \quad (1)$$

を解析できる LB モデルを提案する。ここで、 κ_s は表面張力の強さを調整する表面張力パラメータ、 $\delta_{\alpha\beta}$ はクロネッカーのデルタ、圧力 p は、van der Waals の状態方程式に従う温度 T と密度 ρ の関数である。式(1)により相分離現象や表面張力をモデル化できることが示されている⁽¹⁾。本 LBM では、BGK 近似衝突項に、擬似的な外力項 $F_{i,\sigma}$ を付加した衝突オペレータが適用された動力学方程式：

$$\frac{\partial f_{i,\sigma}(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \mathbf{e}_{i,\sigma} \cdot \nabla f_{i,\sigma}(\mathbf{x}, t) = - \frac{f_{i,\sigma}(\mathbf{x}, t) - f_{i,\sigma}^{(0)}(\mathbf{x}, t)}{\tau \delta} + F_{i,\sigma}, \quad (2)$$

に従って、1つの静止粒子と12個の運動粒子に対応する速

度分布関数 $f_{i,\sigma}$ が、離散格子上を運動することにより、系が時間発展する⁽⁴⁾。この分布関数 $f_{i,\sigma}$ の振る舞いの累積として系全体の巨視的な挙動が再現される。ここで、 $\mathbf{e}_{i,\sigma}$ は格子点を i 方向に進む粒子の単位速度ベクトル、 σ は粒子速度を示すインデックス、 τ は緩和時間、 δ はクヌッセン数に比例する十分小さなパラメータ、 $f_{i,\sigma}^{(0)}$ は局所平衡分布関数である。外力項を、

$$F_{\sigma,i} = (G_\sigma)_\alpha (e_{\sigma,i})_\alpha + H_\sigma |e_{\sigma,i}|^2, \quad (3)$$

のように定式化することで、LBM によるメソ・スコピックな二相流のモデル化が可能となる。平衡分布関数は、局所速度を $|u_\alpha| \ll 1$ と仮定し、 u_α まわりに展開した丸めた Maxwell-Boltzmann 分布で与えられる。Chapman-Enskog 展開により、第二粘性係数 $\lambda = -\rho \epsilon \tau$ 、せん断粘性係数 $\mu = \rho \epsilon \tau$ 、熱伝導率 $\kappa_r = 2\rho \epsilon \tau$ が求まる⁽³⁾。

3. 数値計算

本 LBM の二相流のシミュレーションへの適用性を検証するため、気泡の生成の数値実験を行う。液体で満たされた計算領域において、高温に設定した下方静止境界付近から気泡が生成される。生成された孤立泡について、時間 $t = 500$ における密度分布とエンタルピー分布を図1(a),(b)に、それぞれ示す。エンタルピーは、

$$h = \epsilon + p/\rho, \quad (4)$$

によって定義され、潜熱 L は、

$$L = h_1 - h_2, \quad (5)$$

から求まる。液相と気相の間にエンタルピー差が生じ、潜熱が発生していることが図1より分かる。

気泡は、浮力が気泡を伝熱面に保持する表面張力に打ち

勝つに十分な大きさまで成長すると、伝熱面を離れて液体中を成長しながら上昇していく。気泡を伝熱面に保持する力は接触角に関する。簡単な実験式によると、伝熱面離脱時の気泡直径 D は、次式で表される⁽⁵⁾。

$$D = 0.0209\theta \sqrt{\frac{\sigma}{g(\rho_L - \rho_G)}} \quad (6)$$

ここで、 θ は接触角である。初期条件として、過熱壁に接触するように静止気泡を一つおき、表面張力係数 κ_s を 5.0 ~ 7.0 の間に変え、重力加速度を一定とした場合に対する、気泡離脱時の接触角と気泡径を計算した。計算結果から得られた接触角と表面張力の平方根の積に対する気泡直径の関係を図 2 に示す。離脱気泡径は、 θ と $\sqrt{\sigma}$ の積にほぼ比例することが、本数値実験により示された。

最後に、気泡の生成・離脱の数値実験を行う。初期条件として、計算領域を液体で満たし、静止境界を垂直方向に、周期境界を水平方向に設定する。下方静止境界の位置 $x = 32$ において熱量一定とするため、温度勾配を設定する。密度分布、流速分布の時間発展を、それぞれ、図 3, 4 に示す。図 3 より、境界下部の過熱壁付近より気泡が生成され、浮力が表面張力に打ち勝つのに、十分な大きさに成長した後、伝熱面から離脱することが分かる。気泡が離脱を開始すると、一度下方に円錐状に伸ばされた気泡下端が急激に縮小する。初気泡離脱後、次の気泡が発生するまでの間、しばらく気泡発生点が休止している期間が自立的に発生していることが分かる。

図 4 において、伝熱面に気泡が発生すると、その体積に相当する液体を周囲に押しやり、排除流が発生することが示されている。孤立気泡成長時における排除流と、気泡離脱時における後流によって、液体の循環が引き起こされている。図 4(b), (c) に示されるように、気泡が離れるに従い、下方の周囲液体より熱い液体の伴流が形成されており、その形状は、円錐形でほとんど左右対称になっている。図 4(d) より、次に生成された気泡は、離脱した気泡により、かく乱効果を受けている。

本数値計算で示された密度、流速分布に関する様相は、物理実験結果⁽⁶⁾とほぼ等しいことから、本熱流動 LBM が、二相流のシミュレーションへ適用可能であると結論できる。

4. おわりに

外力項を改良し、van der Waals-Cahn-Hilliard 自由エネルギー理論から導出される圧力テンソルを解析する熱流動二相格子 Boltzmann モデルを提案した。本 LBM から計算された密度、流速分布の挙動は、物理実験結果とほぼ一致することから、本 LBM の二相流のシミュレーションへの適用性が実証された。本 LB モデルによって、気泡生成のシミュレーションに成功したが、この結果は、気泡の発生には、少なくとも臨界半径以上の核の存在が必要であるとする見解と矛盾する⁽⁶⁾。今後、伝熱面のモデル化と、気泡生成における過熱度の問題を検討する必要がある。

参考文献

- (1) Swift, M. R., Osborn, W. R., and Yeomans, J. M., Phys. Rev. Lett., Vol. 75, 830-833, (1995).
- (2) Seta, T., Kono, K., Martínez, D., and Chen, S., JSME Int. Journal, Vol. 43, No.2, 305-313, (2000).
- (3) 瀬田, 高橋, 奥井, 竹越, 機論(B編), 印刷中.
- (4) Seta, T. and Takahashi, R., J. Stat. Phys., 107, 557-572, (2002).

- (5) 西川, 藤田, 伝熱学, 理工学社, (1982).
- (6) 日本機械学会, 沸騰熱伝達, (1965).

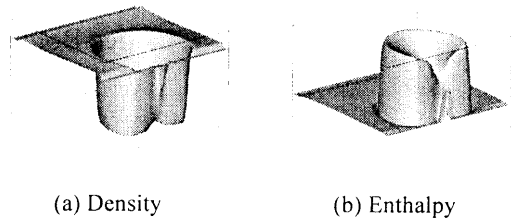


Fig. 1 The density and enthalpy distribution of the bubble generation at time, $t = 500$.

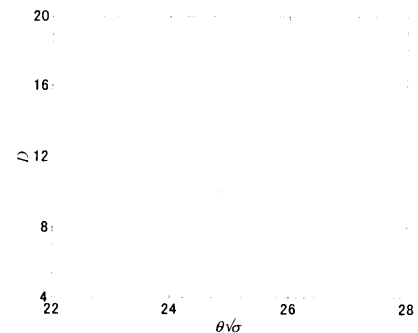
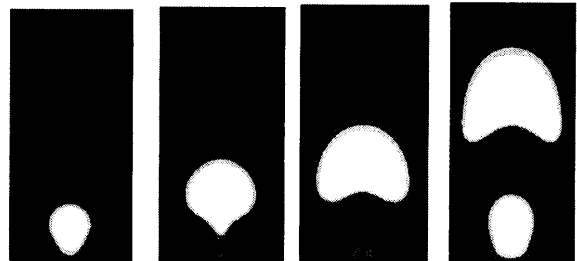
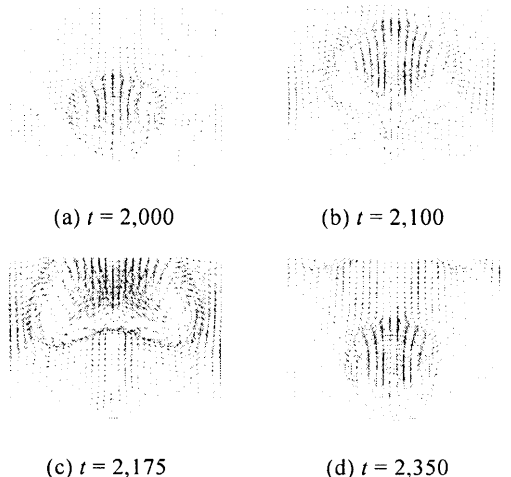


Fig. 2 Dependence of departure radius on surface tension and on contact angle as a test of Fritz's correlation.



(a) $t = 2,000$ (b) $t = 2,100$ (c) $t = 2,175$ (d) $t = 2,350$

Fig. 3 Snapshots of density field of the pool boiling.



(a) $t = 2,000$ (b) $t = 2,100$ (c) $t = 2,175$ (d) $t = 2,350$

Fig. 4 Snapshots of velocity field of the pool boiling.