

4. 3次元格子ガスオートマトン法の開発ならびに検証

4.1. 本章の目的

3章における圧力パルスを用いて蒸気膜を強制的に崩壊させた場合の実験では、どのサブクーリングにおいても圧力パルス到来時に蒸気膜全体が白く濁る白濁現象が観測された。この白濁現象はどのサブクーリングにおいても起きており、強制的な蒸気膜の崩壊挙動においては白濁現象が大きく関与していることが考えられる。そこで、熱伝導解析ならびにPIV法を用いた解析を行い気液界面温度ならびに気液界面の挙動を評価した結果、圧力波到来以前では界面温度が飽和温度以上であったが、圧力パルスが到来している時刻、すなわち蒸気膜全体が白濁している時刻において気液界面温度が飽和温度以下になることが示された。このことは、圧力パルス到来時に気液界面において凝縮が起きており、蒸気膜全体が白く濁る白濁現象は凝縮に起因する現象である可能性があることが示された。すなわち、強制的な蒸気膜の崩壊挙動は周囲流体の流動より相変化が支配的となることが示唆された。

そこで、本研究では圧力パルスが到来したときの蒸気膜の崩壊挙動に関して数値シミュレーションを行い、崩壊挙動に支配的となる要因を明らかにすることとした。しかしながら、従来の平均化された物理変数を用いた解析手法では、蒸気膜の微視的な挙動を再現するのは非常に困難を伴うことが考えられ、流体の微視的な挙動を再現する手法を用いる必要がある。

本研究では、近年、流体の微視的な挙動を解析する手法の1つとして提唱されている格子ガスオートマトン法^[71-75]を用いることとした。しかしながら、従来提唱されている格子ガスオートマトン法では2次元体系における流動計算^[76,77]が主であり、蒸気膜の崩壊挙動のような3次元のかつ伝熱・相変化を伴う現象を再現することは不可能である。

そこで、本章では蒸気膜の崩壊挙動を行うために、新たに3次元体系の格子ガスオートマトン法ならびに伝熱・相変化モデルを構築することとして、これら構築したモデルが現象を再現できるかどうか検証計算を行うこととした。

4.2. 格子ガスオートマトン法の概要

数値シミュレーションを用いて熱の移動や流体の流れなどの物理現象を再現する場合、その多くは微分方程式を離散化して解く差分法が用いられている。この手法は、比較的少ない計算負荷で信頼性のある結果を得ることができるが、現象を支配する方程式を明確に記述する必要がある。しかしながら、蒸気膜の崩壊挙動のような支配方程式などの数学的記述が十分に検証されていない混相流の高速非線形現象に対してこれらの手法の適応は困難である。これに対して、物理現象を連続体としてではなくその分子単位で捉えた分子動力学に基づいた数値シミュレーションに関する研究も近年盛んに行われている。この手法は現象を支配するモデルの記述が比較的容易であり、現象を平均化して取り扱う状態方程式と構成方程式から成り立つ差分式では表現が困難である局所のおよび瞬間的な現象の再現に非常に有用であるとされている。しかしながら、この手法では分子単位で計算を行っていくため計算負荷が非常に大きく、広い計算体系に対する計算では計算機の性能に大きく依存するという短所を有している。

以上の物理現象を巨視的スケール (Macro-scale) で扱う手法と微視的スケール (Micro-scale) で扱う手法に対して、その中間のスケール (Meso-scale) で現象を扱うセルラオートマトン法と呼ばれる新しい計算手法が提案されている。この手法では、時間および空間を離散化して、分子の運動を代表したものに相当する粒子に衝突および移動の法則を与えて、この粒子の運動を統計的に処理することで流体の流れなどの物理現象を再現する手法である。この手法では、現象を数式で明示する必要がなく、容易なオートマトン上の法則を与えるだけで複雑なパターンを形成できる特徴を有しており、分子動力学を用いた計算より少ない計算負荷での計算が可能であるという長所を有している。このため、セルラオートマトン法は巨視的スケールおよび微視的スケールの長所を有する手法と考えられ、複雑形状流れ、局所的な現象、混相流などの高速な熱流動現象への適応が期待されている。

セルラオートマトン法としては、格子ガスオートマトン法および格子ボルツマン法が提案されている。図 4.1.1 に格子ガスオートマトン法の概要図を示す。四角格子や六角格子で空間を離散化した計算体系の各格子点に速度を持つ粒子を配置する。配置された粒子は格子に沿って運動し、衝突および並進を繰り返して時間進展する。流速、圧力などの巨視的な物理量はこれらの粒子の運動を時間あるいは空間で平均化することにより求められる。またこの計算では、同じ時間レベルの同じ場所において同一の粒子が 1 個だけしか存在することができないという排他原理が課せられていて、粒子の状態は 1 (存在する) または 0 (存在しない) の Bool 変数で記述される。格子ガスオートマトン法においては計算に整数値を用いるので数値の打ち切り誤差、丸め誤差などを考慮する必要がなくなり、衝突などの法則が極めて単純なものとなる。しかしながら、整数値を用いることにより統計ノイズが発生してしまう。また、応力テンソルの等方性の問題から巨視的方程式への移行に適した格子モデルが限定されている。

格子ボルツマン法は基本的には格子ガスオートマトン法と同じであるが、粒子の占有状態を分布関数に置き換えて表現する手法である。格子ガスオートマトン法と比べると、占有状態が関数で表現されるため統計ノイズが非常に少なくなる反面、衝突則などの法則が複雑化するという欠点を有している。

格子のモデルとしては Hardy, de Pazzis および Pomeau によって考案された HPP モデルと呼ばれる 2 次元正方格子モデル、Frisch, Hasslacher および Pomeau によって考案された FHP モデルと呼ばれる 2 次元六角格子モデル、D. A. Wolf-Gladrow らによって考案された 2 次元 9 速度モデルと呼ばれる 2 次元 9 速度正方格子モデルなどが考案されている。従来の研究より、2 次元 9 速度正方格子モデルを用いて単成分ならびに二成分のエネルギーを考慮した解析が行われており、伝熱現象を実現することが示されている。

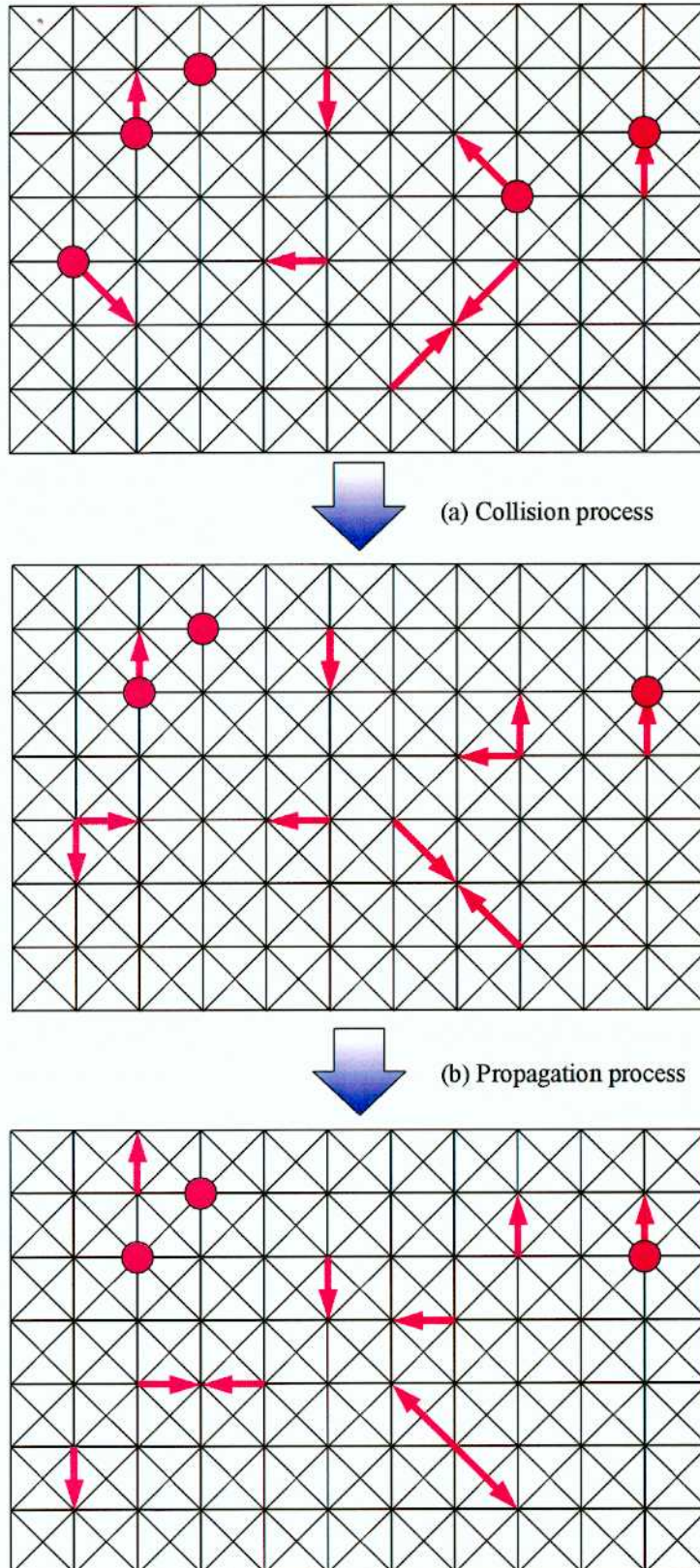


Fig. 4.2.1 An example of one time development in 2-dimensional nine-velocity model

4.3. 3次元15速度LGAモデル

4.3.1. 3次元15速度モデルの概要

現在、主に格子ガスオートマトン法で用いられている格子モデルは FHP モデルと呼ばれる 2次元六角格子モデルである。この格子モデルは Frisch, Hasslacher および Pomeau が導入したモデル^[78]であり、格子間距離は一定値 c を取り、すべての粒子が単一の速さ c で移動するというモデルである。

本研究では、従来提唱されている格子ガスオートマトン法の FHP モデルに拡張を施して、新たに 3次元15速度モデルを開発した。図 4.3.1 に 3次元15速度モデルの格子の構造を示す。この格子モデルは、立方体の中心から各面の面心へ向かう長さ c のリンクと、立方体の中心から角に向かう長さ $c\sqrt{3}$ のリンクを有している。表 4.3.1 に各速度方向に対する速度成分ならびに速度の大きさを示す。ここで、 i は速度の方向を表す番号である。

また、格子ガスオートマトン法では 1つの格子点において同じ速度を持つ粒子は存在できないという排他原理が用いられている。これにより、格子の占有状態は、粒子が存在している (1) か否か (0) の Bool 変数 n_i で表わすことができる。時間 t における位置 \mathbf{x} での粒子の占有状態 $\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)$ は、3次元15速度モデルでは以下の 15個の Bool 変数 $n_i(\mathbf{x}, t)$ の集合で表わされる。

$$\begin{aligned} \mathbf{n}(\mathbf{x}, t) &= \{n_i(\mathbf{x}, t), i = 1, \dots, 15\} \\ n_i(\mathbf{x}, t) &= \{0, 1\} \end{aligned} \quad (4.3.1)$$

図 4.3.2 に格子内に粒子が分布した状態の一例を示す。図中の矢印は、その方向の速度を有する粒子が存在することを示している。この図に示されている格子点における粒子の占有状態を Bool 変数で表わすと、 $\mathbf{n}(\mathbf{x}, t) = \{1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0\}$ と表わされる。

No. i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
c_{ix}/c	1	0	0	-1	0	0	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	0
c_{iy}/c	0	1	0	0	-1	0	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	0
c_{iz}/c	0	0	1	0	0	-1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1	0
$ c_i /c$	1	1	1	1	1	1	$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0

Table 4.3.1 Component of velocity in x-, y- and z-direction and magnitude

4.3.2. 衝突則

格子ガスオートマトン法における衝突は、同一格子内で起こる変化であり、分子の運動を代表したものに相当する粒子は弾性衝突であると仮定している。すなわち、複数の粒子が同時刻、同格子点に到達した時には、予め定められた衝突則に従って粒子数、運動量および運動エネルギーが保存されるような衝突が起こるものとする。すなわち、衝突前の状態を $n'_i(\mathbf{x}, t)$ 、衝突後の状態を $n_i^*(\mathbf{x}, t)$ と表わすと以下のように表わすことができる。

$$\sum_{i=1}^{15} n_i^*(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{15} n'_i(\mathbf{x}, t) \quad (4.3.2)$$

$$\sum_{i=1}^{15} c_i n_i''(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{15} c_i n_i'(\mathbf{x}, t) \quad (4.3.3)$$

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{15} c_i^2 n_i''(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{15} c_i^2 n_i'(\mathbf{x}, t) \quad (4.3.4)$$

また、衝突関数 $\Delta_i[\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)]$ が定義できる場合、衝突による状態の変化は次式のように表わすことができる。

$$n_i''(\mathbf{x}, t) = n_i'(\mathbf{x}, t) + \Delta_i[\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)] \quad (4.3.5)$$

式(4.3.2)、(4.3.3)、(4.3.4)ならびに(4.3.5)より、以下の関係式が導出される。

$$\sum_{i=1}^{15} \Delta_i[\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)] = 0 \quad (4.3.6)$$

$$\sum_{i=1}^{15} c_i \Delta_i[\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)] = 0 \quad (4.3.7)$$

$$\sum_{i=1}^{15} c_i^2 \Delta_i[\mathbf{n}(\mathbf{x}, t)] = 0 \quad (4.3.8)$$

衝突関数 Δ_i は用いる衝突則によって定まる。この衝突則をどのように選ぶかによってその系の動力学が決定される。また、壁面や障害物に粒子が衝突する場合には特別な衝突則が用意されなければならない。

4.3.3. 疎視化

格子ガスオートマトン法では、時間発展する全粒子の微視的状态をある時間間隔や有限領域で平均化を行うと、巨視的変数である流れの密度および流速を求めることができる。この操作を疎視化と呼び、平均化を行う領域を疎視化領域と呼ぶ。図 4.3.3 に疎視化の概念図を示す。格子点 \mathbf{x} を含む位置 \mathbf{X} の有限領域における i 方向の速度を持つ粒子の数の平均値 $N_i(\mathbf{X}, t)$ は、次式のように表わされる。

$$N_i(\mathbf{X}, t) = \langle n_i(\mathbf{x}, t) \rangle \quad (4.3.9)$$

ここで $\langle \dots \rangle$ は平均化操作を意味する。すなわち、疎視化領域内の格子点数を用いて物理量を平均化することを意味している。この $N_i(\mathbf{X}, t)$ を用いると、位置 \mathbf{X} の疎視化領域における密度 $\rho(\mathbf{X}, t)$ 、運動量 $\mathbf{M}(\mathbf{X}, t)$ および流速 $\mathbf{V}(\mathbf{X}, t)$ は次式のように表わされる。

$$\rho(\mathbf{X}, t) = \sum_{k=1}^{15} N_i(\mathbf{X}, t) \quad (4.3.10)$$

$$\mathbf{M}(\mathbf{X}, t) = \sum_{k=1}^{15} c_i N_i(\mathbf{X}, t) \quad (4.3.11)$$

$$\mathbf{V}(\mathbf{X}, t) = \frac{\mathbf{M}(\mathbf{X}, t)}{\rho(\mathbf{X}, t)} \quad (4.3.12)$$

3次元15速度モデルでは、衝突則は質量、運動量、運動エネルギーに依存するため、系の平衡状態は質量、運動量、運動エネルギーに依存しており、速さを持つ粒子の数密度は密度に比例しない。そこで、このモデルにおける圧力を統計力学に倣い考えることとし、速さを持つ粒子を個々に考慮することにした。

格子ガスオートマトン法で用いられている粒子は分子の運動を代表させたものなので、粒子の運動を分子の運動にならって考えることとし、疎視化領域での平均流速は粒子の速度に比べて非常に小さいと仮定することとした。格子に壁面を仮想的に考慮し、この壁面に粒子が衝突することで圧力を及ぼすこととなる。格子ガスオートマトン法では、速度を持つ粒子は1サイクルで1格子並進する。よって、この速度を持つ粒子は仮想的に考慮した格子の壁面に1サイクルで1度壁面に衝突し圧力を及ぼす。図4.3.4に示すように、 i 方向の速度を持つ粒子が壁面に衝突して運動量変化した場合、1つの粒子は1度の衝突で壁面に2倍の運動量を与えたことになる。このときの運動量変化は次式で表される。

$$\Delta \mathbf{M}(\mathbf{X}, t) = c_i n_i(\mathbf{x}, t) - [(-c_i) n_i(\mathbf{x}, t)] = 2c_i n_i(\mathbf{x}, t) \quad (4.3.13)$$

単位時間あたりの運動量変化すなわち力積 \mathbf{f} を考えると、次式のようになる。

$$\mathbf{f} = \frac{\Delta \mathbf{M}(\mathbf{X}, t)}{2/c_i} = \frac{2c_i n_i(\mathbf{x}, t)}{2/c_i} = c_i^2 n_i(\mathbf{x}, t) \quad (4.3.14)$$

統計力学的手法に倣い、この単位面積あたりに作用する力積を圧力と定義することとした。よって、ある格子点 \mathbf{x} における圧力は、全速度方向に対して総和をとった式で与えられる。

$$P(\mathbf{x}, t) = \sum_i c_i^2 n_i(\mathbf{x}, t) \quad (4.3.15)$$

よって、3次元15速度モデルに対して時間 t 、点 \mathbf{x} を含む疎視化領域 \mathbf{X} における圧力は次式で表される。

$$\begin{aligned} P(\mathbf{X}, t) &= \left\langle \sum_{i=1}^6 c_i n_i(\mathbf{X}, t) + \sum_{i=7}^{15} 3c_i n_i(\mathbf{X}, t) \right\rangle \\ &= c \cdot \left[\sum_{i=1}^6 N_i(\mathbf{X}, t) + 3 \cdot \sum_{i=7}^{15} N_i(\mathbf{X}, t) \right] \end{aligned} \quad (4.3.16)$$

4.3.4. 境界条件

図 4.3.5 に壁面の条件の概念図を示す。滑りありの壁は図 4.3.5(a)に示すように、粒子の運動は壁面と垂直方向の成分において運動方向が逆になる変化をし、壁面と水平方向の成分においては運動量を保存する変化が起こることとした。滑りなしの壁は図 4.3.5(b)に示すように粒子の運動は壁面と垂直方向の成分において運動方向が逆になる変化をし、壁面と水平方向の成分においても運動方向が逆になる変化が起こることとした。滑りあり壁の定義を式(4.3.17)に、滑りなしの壁の定義を式(4.3.18)に示す。

$$\left[\sum_{i=1}^{15} c_i n_i^* \right]_q = (1 - \delta_{pq}) \left[\sum_{i=1}^{15} c_i n_i' \right]_q - \delta_{pq} \left[\sum_{i=1}^{15} c_i n_i' \right]_q \quad (4.3.17)$$

$$\left[\sum_{i=1}^{15} c_i n_i^* \right]_q = -(1 - \delta_{pq}) \left[\sum_{i=1}^{15} c_i n_i' \right]_q - \delta_{pq} \left[\sum_{i=1}^{15} c_i n_i' \right]_q \quad (4.3.18)$$

ここで、添字の p は壁面に鉛直な方向、q は壁面に水平な方向を示し、 $[\]_\alpha$ は α 方向成分の物理量を表わす。 δ_{pq} は Kronecker のデルタである。また、壁面においては質量保存式(4.3.2)、運動エネルギー保存式(4.3.4)も同時に満たすこととし、一般の衝突は起こらないものとする。

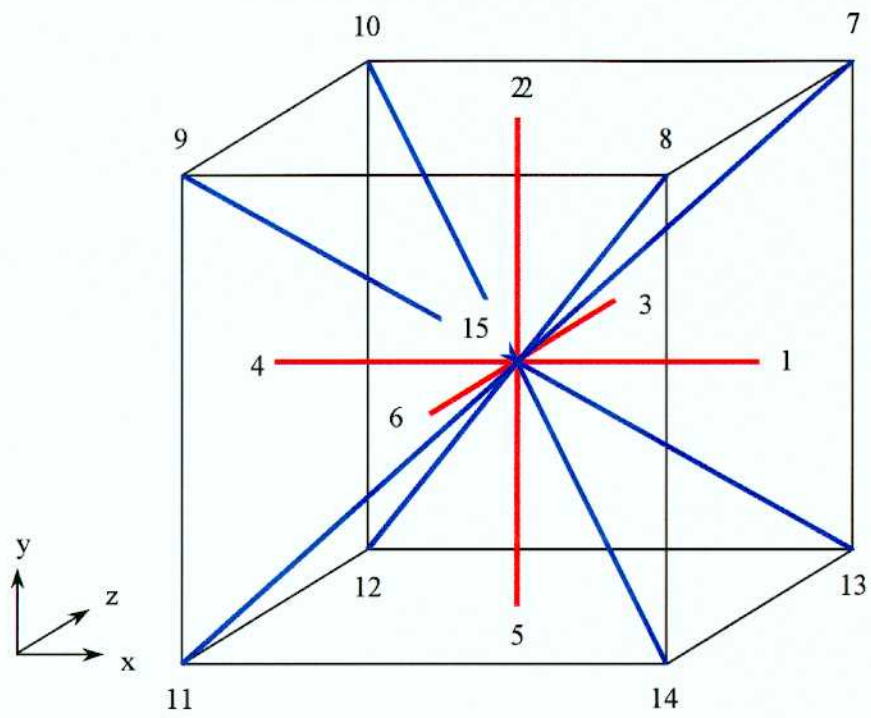


Fig. 4.3.1 Lattice geometry for 3-dimensional fifteen-velocity model

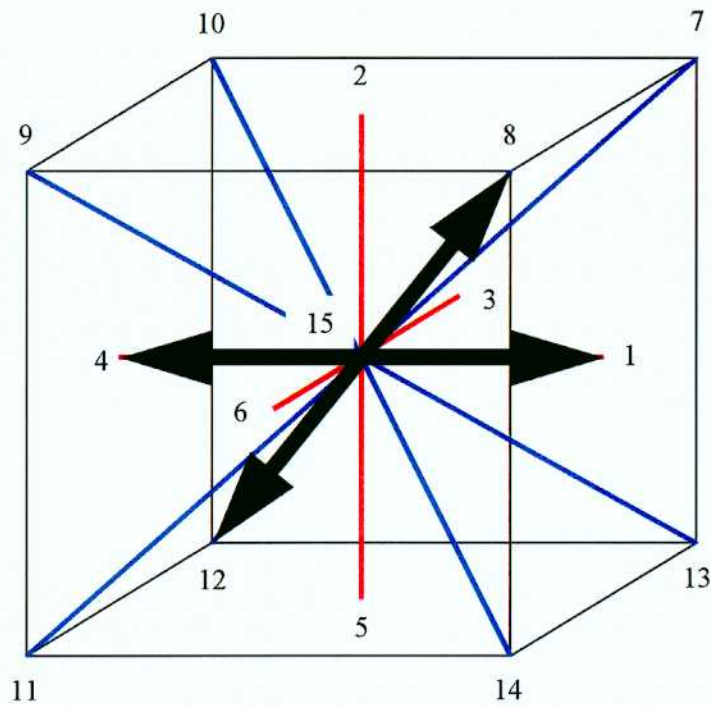


Fig. 4.3.2 An example of particle distribution in 3-dimensional fifteen-velocity model

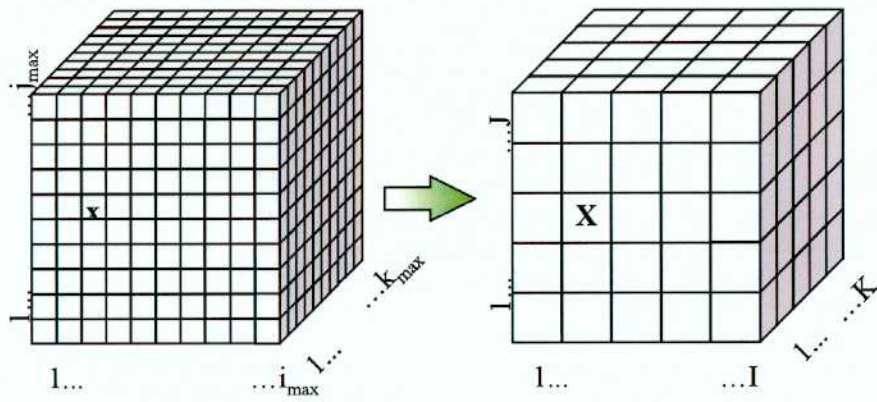


Fig. 4.3.3 Schematic diagram of coarse graining

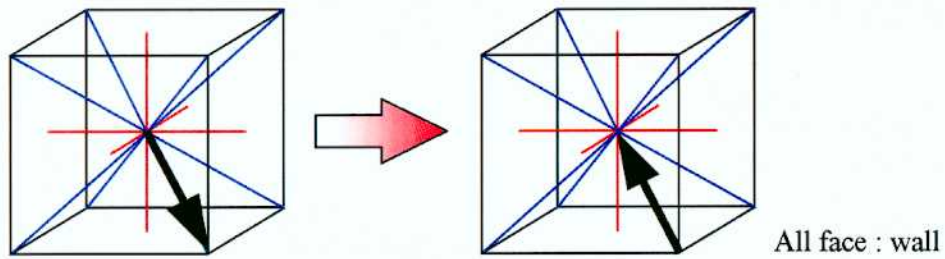


Fig. 4.3.4 An example of momentum change at wall

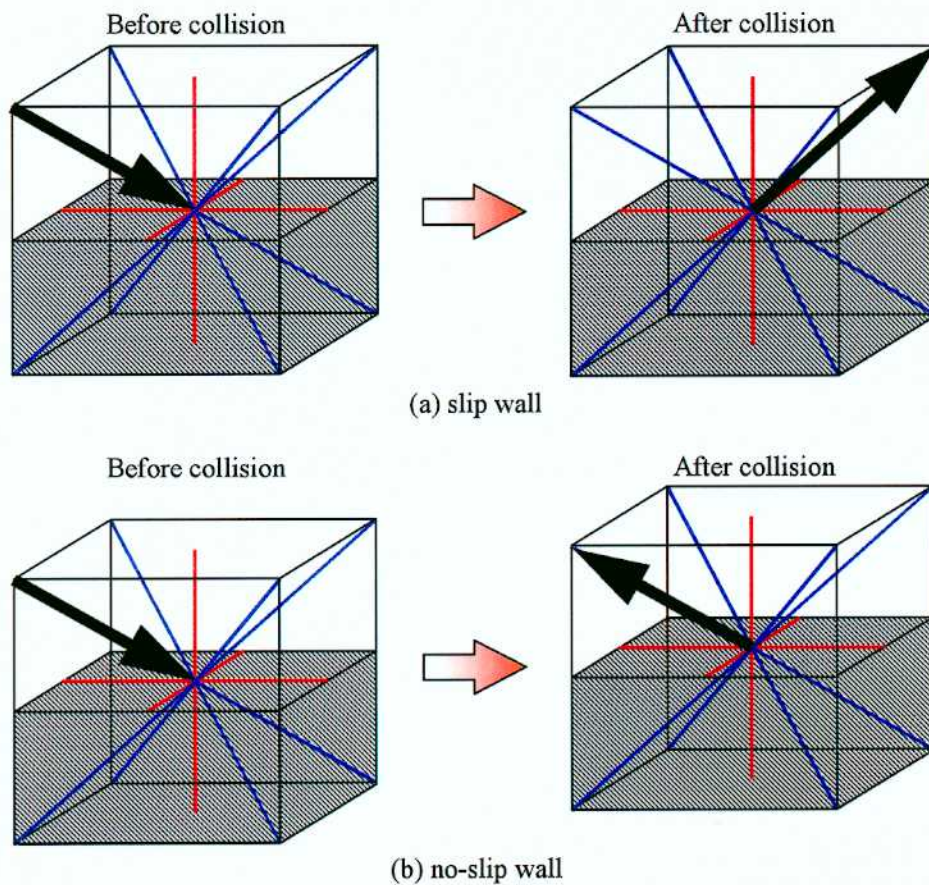


Fig 4.3.5 Boundary condition at wall

4.4. 3次元15速度ILGモデル

Rothmannら^[79,80]は2次元六角格子を用いた格子ガスオートマトン法を拡張して混ざり合わない二成分 (Immiscible Lattice Gas : ILG) の粒子を扱えるモデルを考案した。図4.4.1にその一例を示す。このモデルは図4.4.1に示すように、粒子に赤と青の色づけを行う。隣接する格子の状態が赤粒子3個、青粒子2個ならばR3B2と表記することとする。ILGモデルでは、赤粒子は周囲の格子点で赤粒子の割合が一番多い格子へ、また青粒子は周囲の格子点で青粒子の割合が一番多い格子へと向かう衝突則を用いることにより赤および青の粒子が混ざり合わずに計算を進展させることができるモデルである。図4.4.2に、二成分流体の分離の計算結果を示す。初めに混合していた赤、青の流体が、時間の経過とともに分離していく様子が計算された。

このモデルを4.3節で提案した3次元15速度LGAモデルに適用し、3次元15速度ILGモデルを構築することとした。以下にその定義を記述する。格子 \mathbf{x} における衝突後の赤粒子と青粒子の運動量の差をベクトルで定義する。これを色流速 $\mathbf{q}[\mathbf{r}(\mathbf{x},t),\mathbf{b}(\mathbf{x},t)]$ と呼び、以下の式で定義される。

$$\mathbf{q}[\mathbf{r}(\mathbf{x},t),\mathbf{b}(\mathbf{x},t)] = \sum_{i=1}^{15} \mathbf{c}_i [r_i(\mathbf{x},t) - b_i(\mathbf{x},t)] \quad (4.4.1)$$

また格子 \mathbf{x} に隣接する14の格子 $\mathbf{x} + \mathbf{c}_j$ の赤粒子と青粒子の質量の差をベクトルで定義し、局所的な色の場 $\mathbf{f}(\mathbf{x},t)$ とする。

$$\mathbf{f}(\mathbf{x},t) = \sum_{j=1}^{14} \frac{\mathbf{c}_j}{|\mathbf{c}_j|} \sum_{i=1}^{15} [r_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j, t) - b_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_j, t)] \quad (4.4.2)$$

3次元15速度モデルにおいては、 x 、 y ならびに z の各軸に平行な方向の格子間距離 c と斜め方向の格子間距離 $c\sqrt{3}$ があり、隣接する格子と引き合う力は距離によって異なると考えられる。そこで、式(4.4.2)は速度を規格化してある。このように定義された物理量の内積を考えると、仕事となる $\mathbf{W}[\mathbf{r}(\mathbf{x},t),\mathbf{b}(\mathbf{x},t)]$ が求められる。

$$\mathbf{W}[\mathbf{r}(\mathbf{x},t),\mathbf{b}(\mathbf{x},t)] = \mathbf{f}(\mathbf{x},t) \cdot \mathbf{q}[\mathbf{r}(\mathbf{x},t),\mathbf{b}(\mathbf{x},t)] \quad (4.4.3)$$

この式では、格子点 \mathbf{x} において各成分の流れる方向と量を表現する $\mathbf{q}[\mathbf{r}(\mathbf{x},t),\mathbf{b}(\mathbf{x},t)]$ と周囲の格子点における各成分の量を表す $\mathbf{f}(\mathbf{x},t)$ の内積となっている。すなわち、この式は格子点 \mathbf{x} における各成分と周囲の格子点における同じ成分の流体が引き合う度合いを表現している。よって、衝突の結果として同じ色の粒子を引き合わせるにはこの仕事 $\mathbf{W}[\mathbf{r}(\mathbf{x},t),\mathbf{b}(\mathbf{x},t)]$ を最大にすればよい。

そこで、衝突前の赤、青の各粒子を現すBool変数を $r'_i(\mathbf{x},t)$ 、 $b'_i(\mathbf{x},t)$ とし、衝突後を $r''_i(\mathbf{x},t)$ 、 $b''_i(\mathbf{x},t)$ と置き、以下の式を満足する衝突が起こると定義している。

$$\mathbf{W}[r''(\mathbf{x},t),b''(\mathbf{x},t)] = \max_{r(\mathbf{x},t),b(\mathbf{x},t)} (\mathbf{W}[r'(\mathbf{x},t),b'(\mathbf{x},t)]) = \max_{r(\mathbf{x},t),b(\mathbf{x},t)} (\mathbf{f}(\mathbf{x},t) \cdot \mathbf{q}[\mathbf{r}(\mathbf{x},t),\mathbf{b}(\mathbf{x},t)]) \quad (4.4.4)$$

$$\sum_{i=1}^{15} r_i''(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{15} r_i'(\mathbf{x}, t) \quad (4.4.5)$$

$$\sum_{i=1}^{15} b_i''(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^{15} b_i'(\mathbf{x}, t) \quad (4.4.6)$$

$$\sum_{i=1}^{15} c_i [r_i''(\mathbf{x}, t) + b_i''(\mathbf{x}, t)] = \sum_{i=1}^{15} c_i [r_i'(\mathbf{x}, t) + b_i'(\mathbf{x}, t)] \quad (4.4.7)$$

また、各々の粒子が拡散するような現象を扱う場合は、式(4.4.4)は次式のようになる。

$$W(r''(\mathbf{x}, t), b''(\mathbf{x}, t)) = \min_{r'(\mathbf{x}, t), b'(\mathbf{x}, t)} (W(r'(\mathbf{x}, t), b'(\mathbf{x}, t))) \quad (4.4.8)$$

これらより衝突則が決定されるが、条件を満たす衝突が多数ある場合は、各々の衝突が同じ確率で起こると定義する。

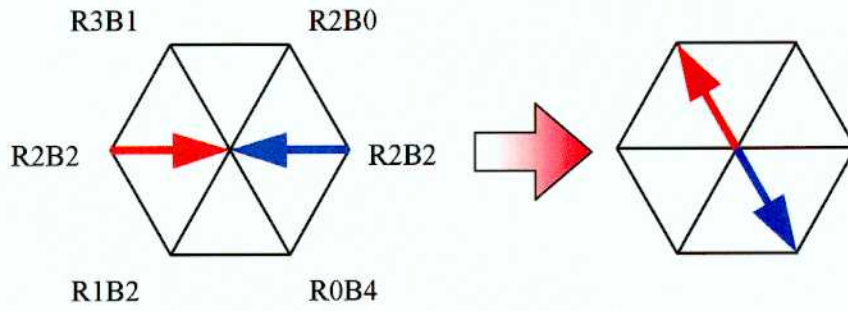


Fig. 4.4.1 Typical collision rule for ILG model

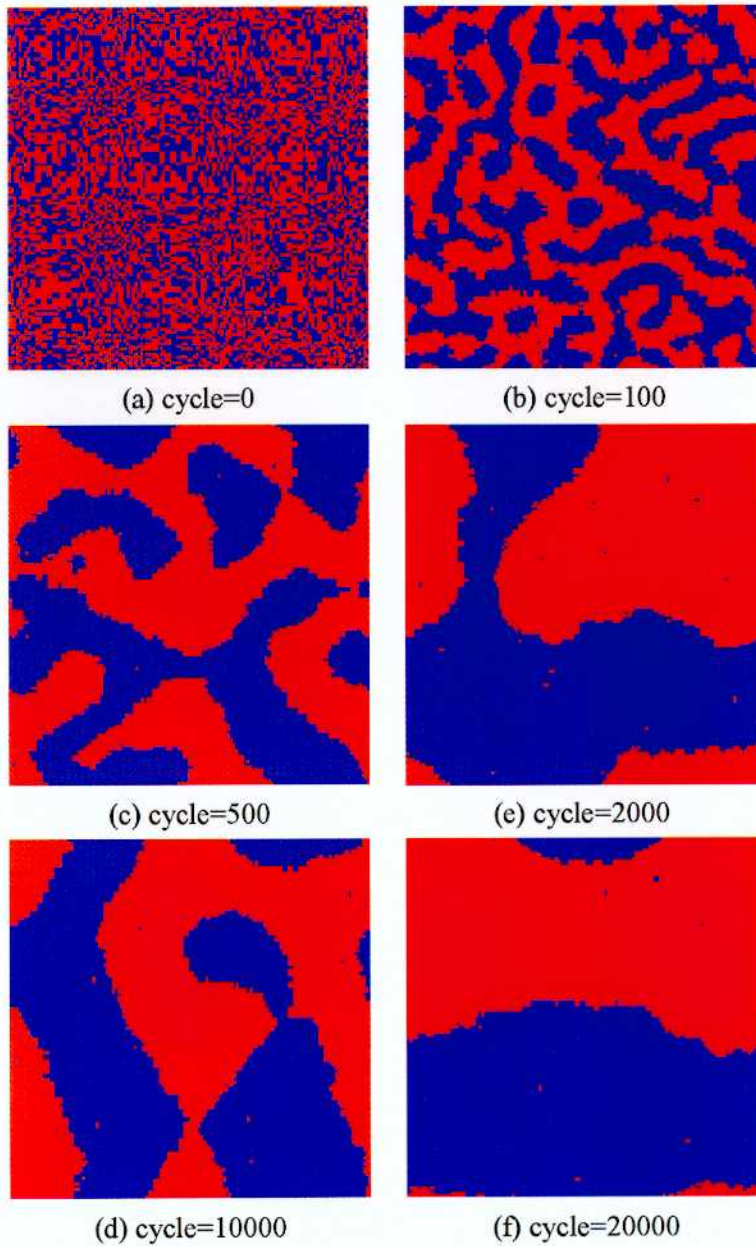


Fig. 4.4.2 Computational result of phase separation with 2-dimensional nine-velocity ILG model

4.5. 伝熱・相変化モデル

従来提唱されている格子ガスオートマトン法では、流動現象のみを扱うモデルが提唱されており、伝熱・相変化現象を扱うモデルはあまり提唱されていない。そこで、本研究では蒸気膜の崩壊挙動に関する数値シミュレーションを行うために、先の章で提案した3次元15速度ILGモデルに改良を加えて(1)加熱壁条件、(2)重力効果、(3)相変化モデルを新たに構築することとした。

4.5.1. 加熱壁条件

新たに構築するモデルでは、赤粒子を蒸気相を模擬する流体として扱い、青粒子を液体の水を模擬する流体として扱うこととする。相変化現象は粒子の色を変化させることで模擬した。蒸発現象は青粒子を赤粒子に変化させることで模擬した。同様に、凝縮現象は赤粒子を青粒子に変化させることで模擬した。

図4.5.1に加熱壁条件の概要図を示す。加熱壁を設定した境界に青粒子が到達した場合、ある確率(加熱壁変数と名づける) ε ($0 \leq \varepsilon \leq 1$) で青粒子を赤粒子へと変化させる。その後、すべりなし壁条件と同じように到来した方向に向けてバウンスバックさせる。赤粒子が到達した場合は、粒子の色を変化させずに到来した方向に向けてバウンスバックさせる。このようなモデルを与えることによって、高温壁面上での流体の蒸発を再現することとした。

4.5.2. 重力効果モデル

蒸気を模擬している赤粒子と液体の水を模擬している青粒子の比重差を表現するために重力効果を与えるモデルを作成した。図4.5.2に重力効果モデルの概要図を示す。重力効果は青粒子のみに与えることとする。衝突則に従って衝突させた後に、斜め上方向の速度を持つ青粒子をある確率(重力効果変数と名づける) g ($0 \leq g \leq 1$) で斜め下方向に変化させる。本モデルでは粒子速度の上下方向の成分のみを変化させ、その他の成分は変化させないこととする。

4.5.3. 相変化モデル

次に、流体間での熱の移動による相変化を格子ガスオートマトン法で表現するために、蒸発モデルならびに凝縮モデルを新たに構築した。図4.5.3に実現象における圧力-温度曲線の概略図を示す。縦軸は温度、横軸は圧力を示している。また、図中の緑線は飽和曲線を示している。実現象においては、流体が飽和曲線より上の領域になると蒸発が起りやすい状態となり、飽和曲線の下領域になると凝縮が起りやすい状態となる。そこでこの実現象に倣い、格子ガスオートマトン法で蒸発、凝縮の効果を表現することとする。

まず初めに、1格子点における局所圧力ならびに局所温度を評価する。局所圧力ならびに局所温度は以下の式で定義した。

$$P = \sum_{i=1}^{15} n_i(\mathbf{x}, t) c_i^2 \quad (4.5.1)$$

$$T = C \cdot \frac{\sum_{i=1}^{15} n_i(\mathbf{x}, t) |c_i|^2}{\sum_{i=1}^{15} n_i(\mathbf{x}, t)} = C \cdot \frac{P}{M} \quad (4.5.2)$$

ここで用いられている記号は以下の通りである。

C	: 定数	$n_i(\mathbf{x}, t)$: Bool 変数
c_i	: i 番目の速度	P	: 局所領域圧力
M	: 1 格子点内の粒子数	T	: 局所領域温度

次に、圧力-温度線図にこれら評価した値を当てはめ、蒸発、凝縮どちらの領域に存在するかを調べる。評価した点が蒸発領域ならば蒸発モデルを適用することとし、凝縮領域ならば凝縮モデルを適用することとする。

図 4.5.4(a)は蒸発効果モデルの概略図を示す。衝突則に従って粒子を衝突させた後、ある 1 格子点において赤粒子数が青粒子数より多い場合には、格子内に存在する全ての粒子を赤粒子へとある確率（蒸発効果変数と名づける） θ_v ($0 \leq \theta_v \leq 1$) で変化させる。このようなモデルを与えることによって流体内での蒸発現象を模擬することとする。

図 4.5.4(b)は凝縮効果モデルの概略図を示す。凝縮モデルについても同様の方法を用いることとする。衝突則に従って粒子を衝突させた後、ある 1 格子点において青粒子数が赤粒子数より多い場合には、格子内に存在する全ての粒子を青粒子へとある確率（凝縮効果変数と名づける） θ_c ($0 \leq \theta_c \leq 1$) で変化させる。このようなモデルを与えることによって流体内での凝縮現象を模擬することとする。

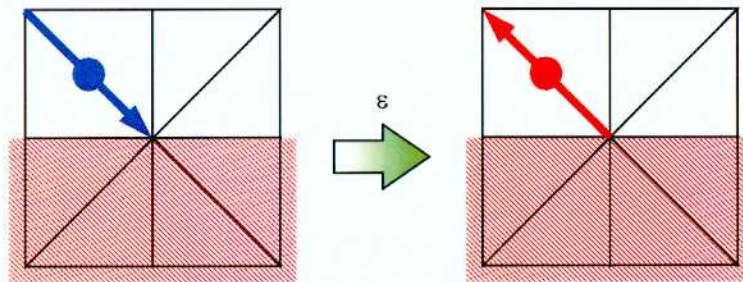


Fig. 4.5.1 Heat wall condition

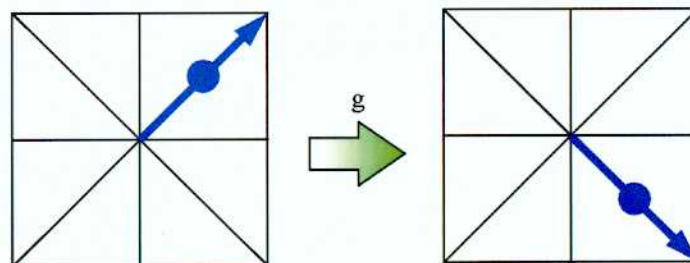


Fig. 4.5.2 Gravity effect

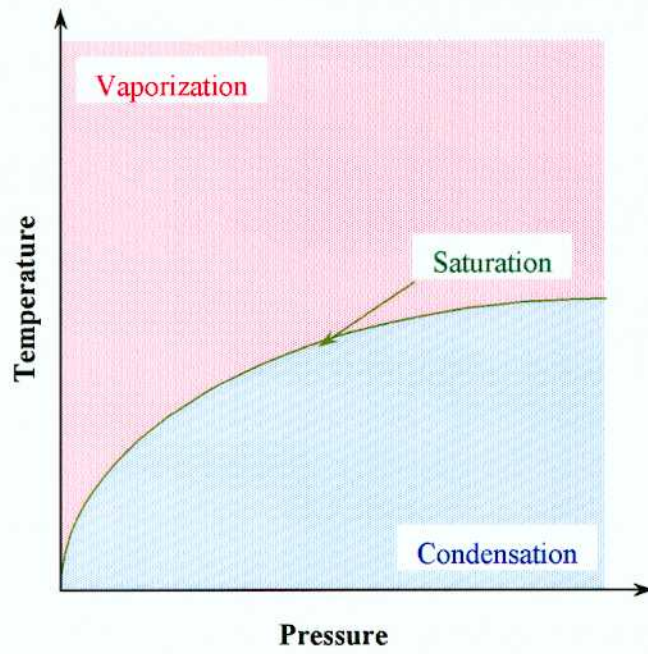


Fig. 4.5.3 Pressure-temperature diagram

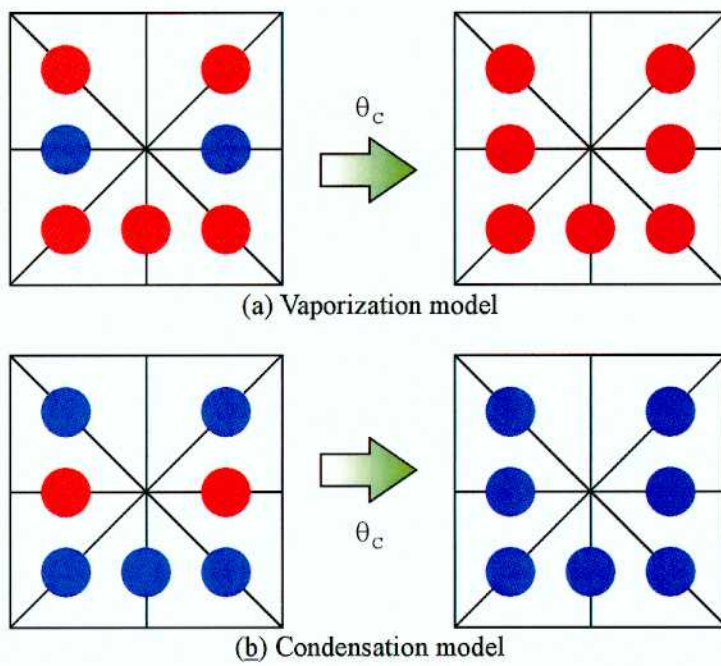


Fig. 4.5.4 Phase change model

4.6. 二成分混合流体の凝集・分離解析による 3 次元 15 速度 ILG モデルの検証

4.6.1. 二成分混合流体の凝集・分離解析

先の節で開発を行った 3 次元 15 速度 ILG モデルを蒸気膜の崩壊挙動に適用する前に、モデルの検証を行う必要がある。そこで、本節では本研究で開発・提案した 3 次元 15 速度 ILG モデルを用いて二成分流体の凝集・分離に関する計算を行い、本モデルの検証を行うとともに、本モデルの二成分混合流体の凝集・分離現象への適用可能性を検討することとした。

図 4.6.1 に二成分流体の凝集・分離の計算結果を示す。計算領域の大きさは $64 \times 64 \times 64$ 格子の立方体と設定し、境界は全て周期的境界とした。計算領域内に配置する粒子の数密度は $d=0.5$ と設定し、赤粒子と青粒子の割合が同じとなるように各成分の粒子を配置した。ここで、数密度 d はある格子点において粒子の占める割合を示している。本計算では、計算領域内に両成分の粒子をランダムに配置したあとに計算を 5000 サイクル行った。本図中において示されている面は赤粒子と青粒子の割合が同じとなる等値面を示している。

計算を開始したサイクル 10 において、赤粒子、青粒子お互いの成分はよく混合しており、境界面の形状も複雑となっている。サイクル 100、500 では境界面の形状がサイクル 10 と比べて単純な形状となっていることが示され、互いの成分が凝集・分離している様子が示された。サイクル 1000 でははっきりとした境界面が形成されており、境界面の形状も十字継手のような形状となっていた。サイクル 2000、サイクル 5000 でもほぼ同じ形状の境界面が形成されていることが示された。

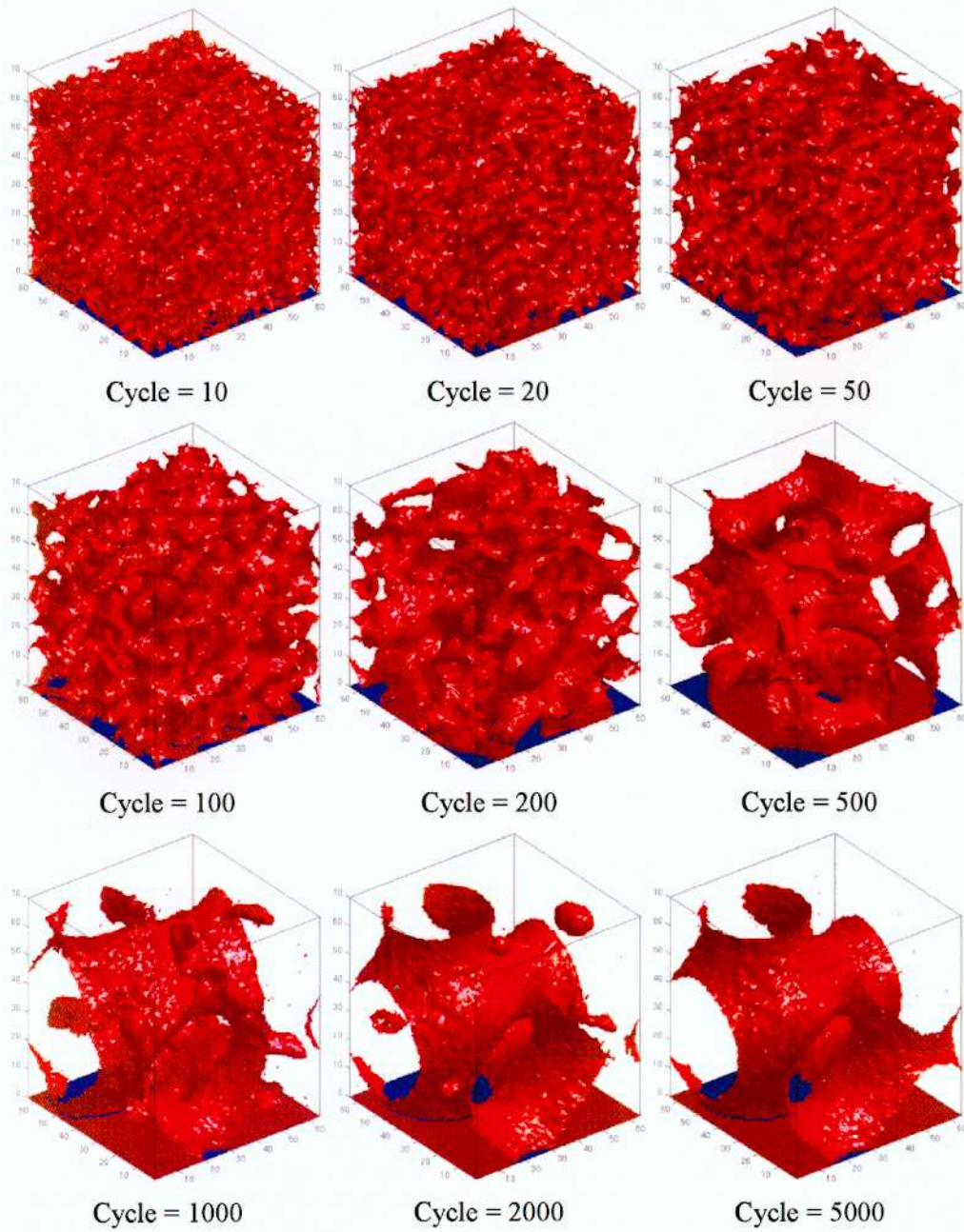


Fig. 4.4.1 Computational result of two-component fluid separation

4.6.2. 粒子数密度ならびに各成分割合を変化させた場合の二成分混合流体の凝集・分離解析

前節において、3次元15速度ILGモデルを用いて二成分流体の凝集・分離挙動に関する解析を行うことが可能であることが示された。そこで、本節では領域内に配置する粒子の数密度ならびに各成分存在割合を変化させた場合に、よく混合した二成分流体がどのような凝集・分離挙動を示すかを調べることにした。

まず初めに、計算領域内に配置する赤・青粒子の粒子数の割合を変化させた場合に、よく混合した二成分流体がどのような凝集・分離挙動を示すかを調べることにした。図4.6.2に粒子数密度を変化させた場合の二成分流体の凝集・分離挙動の解析結果を示す。計算領域の大きさは $64 \times 64 \times 64$ 格子の立方体と設定し、境界は全て周期的境界と設定した。計算領域内に配置する粒子の初期平均数密度を $d=0.1 \sim 0.9$ と設定し、赤成分ならびに青成分の粒子の割合が同じとなるように粒子を配置した。本計算では、初めに計算領域内に粒子をランダムに配置した後に計算を500サイクル行った。図4.6.2は計算結果をマトリクス状に示しており、縦方向は時間の変化、横方向は数密度の変化を示している。図中の面は赤成分の粒子と青成分の粒子の割合が同じとなる等値面を示している。

計算を開始した時点では、どの数密度においても粒子が計算領域内に均質に分散し、界面の形状も極めて複雑な形状となっていた。数密度 $d=0.1$ の条件では領域内の各成分は凝集せず、本計算サイクル内では界面の形状は終始複雑な形状をしていた。数密度 $d=0.3$ 以上の条件では各成分が凝集する様子が示され、複雑な界面が単純な形状へと変化してゆく様子が計算された。サイクル500における計算結果を見ると、数密度 $d=0.3$ において細かく飛散している粒子が見られた。これは、数密度が小さい場合には各成分が空間内で離れて存在しているために凝集しづらくなっているのに対し、数密度が増加するに従って各成分が近接して存在する確率が大きくなり、同じ成分同士が引き合う力が作用しやすくなるためと考えられる。

次に、計算領域内に配置する赤・青粒子の粒子数の割合を変化させた場合に、よく混合した二成分流体がどのような凝集・分離挙動を示すかを調べることにした。初めに、赤粒子数と青粒子数の存在比を示す指標 ε を以下の青粒子の割合を表す式で定義した。

$$\varepsilon = \frac{(\text{領域内の青粒子数})}{(\text{領域内の全粒子数})} \quad (4.6.1)$$

図4.6.3に二成分流体の存在比を変化させて行った計算結果を示す。計算領域の大きさは $64 \times 64 \times 64$ 格子の立方体と設定し、境界は全て周期的境界と設定した。計算領域内に配置する粒子の初期平均数密度を $d=0.5$ と設定し、青粒子の割合が $\varepsilon=0.5 \sim 0.9$ なるように赤・青粒子を配置した。本計算では、初めに計算領域内に粒子をランダムに配置した後に計算を500サイクル行った。図4.6.3は計算結果をマトリクス状に示しており、縦方向は時間の変化、横方向は ε の変化を示している。図中の面は赤粒子と青粒子の割合が同じとなる等値面を示している。

計算を開始した時点において、 $\varepsilon=0.5$ では界面が入り組んだ形状をしているが、 $\varepsilon=0.75$ 以上では粒状の界面が形成されていた。これは、図示している境界面は赤・青粒子の割合が同じとなる等値面を示しており、 ε が増加するにつれて赤・青粒子の割合が同じとなる等値面が形成されにくくなっていることに起因している。どの条件においても時間の経過とともに混合している二成分が凝集してゆく様子が示された。また、 ε が小さい場合には赤成分流体が連続して領域内に分布しているのに対し、 ε が大きくなるにつれて赤成分流体が青成分流体中に粒状に分布する結果となった。これは、 ε が小さい場合に

は連続し存在しうる量の赤成分流体が領域内に存在しているのに対し、 ϵ が大きくなるにつれて領域内の赤成分流体の量が減少してゆき、赤成分流体が連続して存在することが困難となったためと考えられる。さらに、計算開始時に領域内に細かく粒状に分布していた赤成分流体が時間の経過とともに凝集してゆき、赤成分流体の大きな粒へと変化してゆく様子が示された。

このことより、本研究で扱っている 3 次元 15 速度 ILG モデルによって、領域内に配置する粒子の数密度ならびに各成分の割合を変化させることで、任意の複雑形状の形成条件を取得しうることが示唆された。

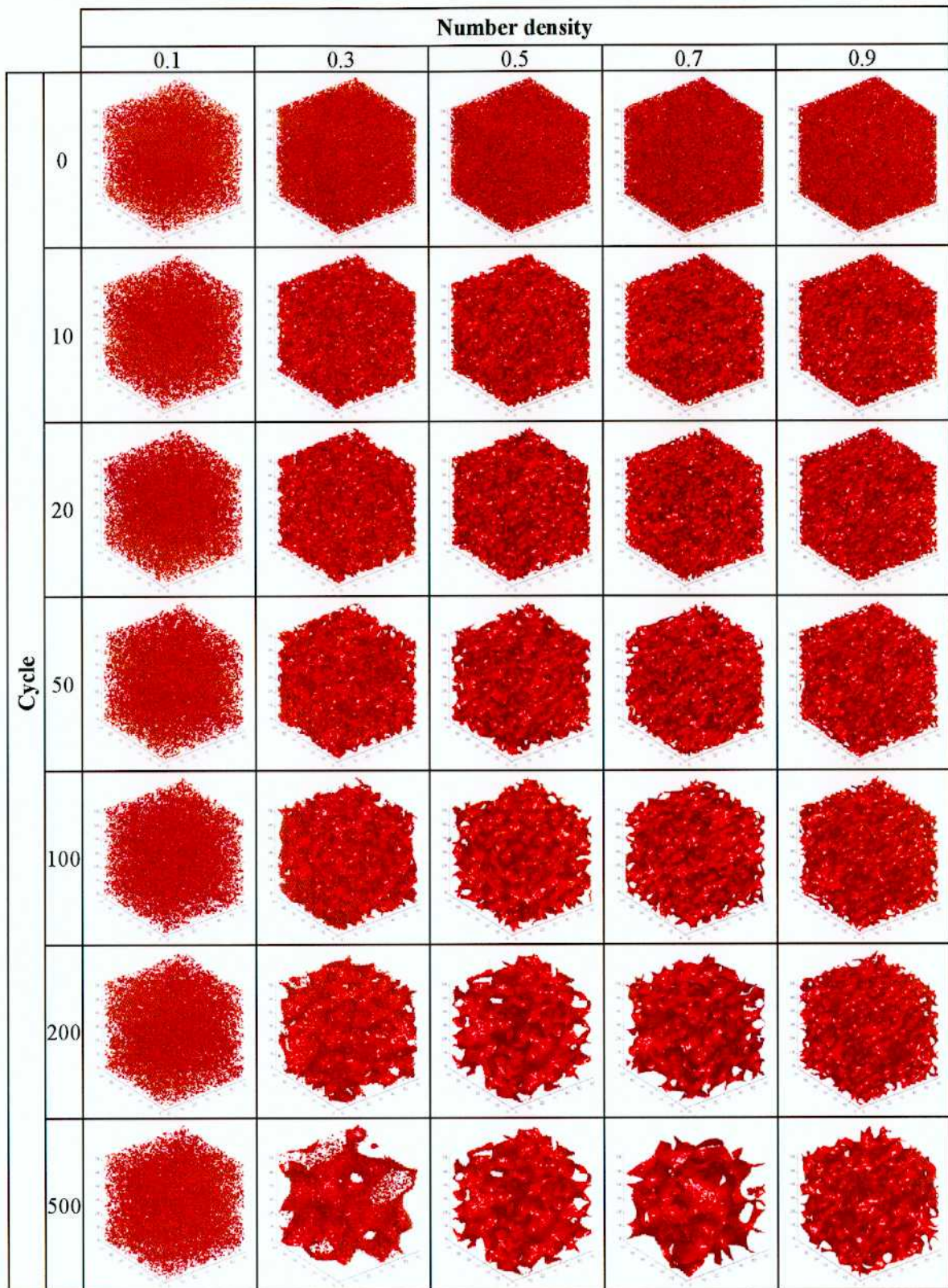


Fig. 4.6.2 Computational result of two-component fluid separation for different particle number density (Number of red particle is equal to number of blue particle)

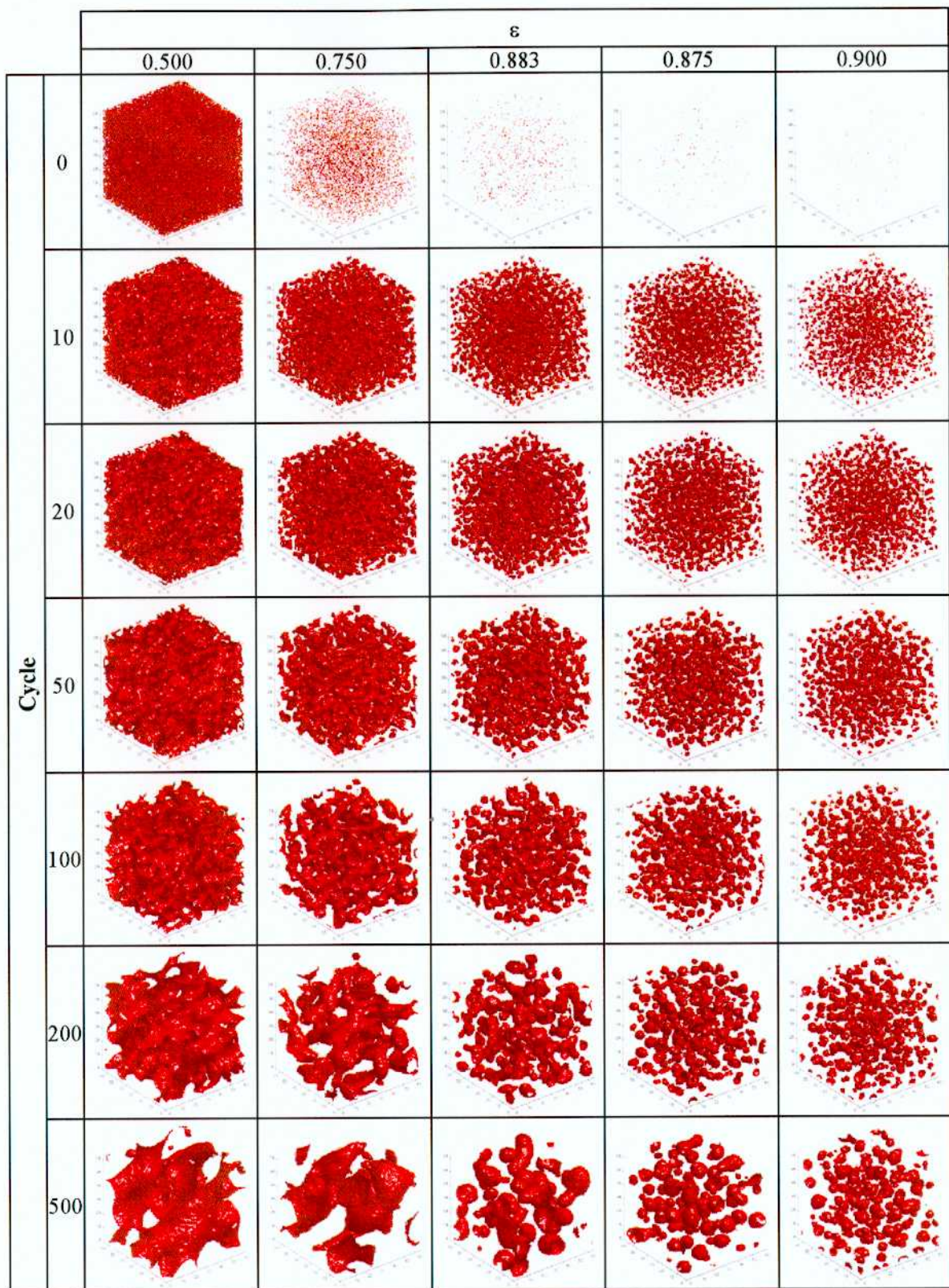


Fig. 4.6.3 Computational result of two-component fluid separation for different red-blue particle ratio (Number density $d=0.5$)

4.6.3. 界面積の時間変化の定量的評価ならびに理論式との比較

次に、本計算手法を用いて行った凝集・分離挙動において境界面の界面積が時間でどのように変化するかを調べるために、図 4.6.1 の計算結果に対して界面積の定量的な評価を行うこととした。界面積の評価方法を図 4.6.4 に示す。初めに、計算結果より計算領域各断面における粒子分布の画像を描き、その画像より境界面の等高線をプロットする。その等高線の画像における黒領域のピクセル数をカウントすることで界面積を評価した。

図 4.6.5 に図 4.6.1 の計算結果における計算領域全体に対する界面積の時間変化を示す。縦軸は界面積を示しており、横軸はサイクル数を示している。計算を開始した時点において界面積は非常に大きな値となっていた。初期のサイクルにおいて界面積は急激に減少したが、サイクル 200 付近で減少の度合いが緩やかとなり、サイクル 1000 を過ぎたあたりではほぼ一定の値となることが示された。この界面積の評価結果は、図 4.6.1 においてサイクル 1000 以降境界面の形状がほとんど変化しなかったことと定性的に一致していることが示された。

次に、この界面積の時間変化を従来提唱されている理論と比較することとした。Lifshitz-Slyozov^[81]によると、二成分流体の凝集・分離現象における界面積 A の時間変化は、時間を t とすると次式で与えられる。

$$A \sim t^{-1/3} \quad (4.6.2)$$

図 4.6.6 は、本計算結果より得られた界面積と式(4.6.2)を比較した結果を示している。縦軸は界面積を対数スケールで示しており、横軸はサイクル数を対数スケールで示している。図中のプロット点は本計算結果より得られた界面積を示しており、曲線は式(4.6.2)を表示した結果である。この図より、界面積の時間変化について従来提唱されている Lifshitz-Slyozov の理論と本計算結果より得られた界面積の時間変化は定性的に一致しており、本計算が二成分流体の凝集・分離挙動を再現できることが確認された。

次に、領域内に配置する粒子の数密度ならびに各成分割合を変化させた場合に、界面積が時間でどのように変化するかを調べるために各条件に対して界面積の定量的な評価を行うこととした。

まず初めに、図 4.6.2 に示した二成分流体の存在比を変化させた場合の二成分混合流体の凝集・分離計算における界面積の時間変化を調べるために、界面積の時間変化の定量的な評価を行うこととした。図 4.6.7 に示した数密度を変化させた場合の二成分混合流体の凝集・分離計算における界面積の時間変化を調べるために、界面積の定量的な評価を行うこととした。図 4.6.7 は評価した界面積の時間変化を示している。縦軸は計算領域全体における界面積を示し、横軸はサイクル数を示している。また、本図では数密度をパラメータとしている。界面積は図 4.6.4 に示されている手法を用いて評価を行った。計算を開始した時点ではどの条件においても界面積は非常に大きな値となっていた。数密度 $d=0.1$ の条件では界面積はほとんど変化せずほぼ一定の値を保っていた。それ以外の条件では、初期のサイクルにおいて界面積は急激に減少しており、時間の経過とともにある値に漸近してゆく様子が見られ、二成分流体が凝集・分離してゆく様子が示された。

また、数密度を変化させた場合に界面積の時間変化がどのように変化するかを調べることにした。図 4.6.8 にその結果を示す。縦軸は計算領域全体における界面積を示し、横軸は数密度を示している。また、本図ではサイクル数をパラメータとしている。数密度 $d=0.1$ では図 4.6.7 と同じように界面積はほとんど変化せず終始ほぼ一定の値を保っていた。計算を開始した時点では数密度 $d=0.5$ で最大となる上に凸の曲線であったが、サイクル 10 以降では数密度 $d=0.5$ で最小値をとる下に凸の曲線となることが

示された。

次に、図 4.6.3 に示した二成分流体の存在比を変化させた場合の二成分混合流体の凝集・分離計算における界面積の時間変化を調べるために、界面積の定量的な評価を行うこととした。図 4.6.9 は評価した界面積の時間変化を示している。縦軸は計算領域全体における界面積を示し、横軸はサイクル数を示している。また、本図では ε パラメーターとしている。界面積は図 4.6.4 に示されている手法を用いて評価を行った。 $\varepsilon = 0.5$ の条件では計算を開始した時点において界面積は非常に大きな値となっていた。初期のサイクルにおいて界面積は急激に減少しており、時間の経過とともにある値に漸近してゆく様子が見られ、二成分流体が凝集・分離してゆく様子が示された。これに対して $\varepsilon = 0.75$ 以上の条件では計算を開始した時点において界面積は小さく、初期のサイクルにおいては計算開始時の界面積より大きくなった。その後、時間の経過とともに指数関数的に減少してゆき、ある値に漸近してゆく様子が示された。

また、 ε を変化させた場合に界面積の時間変化がどのように変化するのかを調べることとした。図 4.6.10 にその結果を示す。縦軸は計算領域全体における界面積を示し、横軸は ε を示している。また、本図ではサイクル数をパラメーターとしている。計算を開始した時点では $\varepsilon = 0.5$ における界面積が最も大きく、 ε が増加するにつれて界面積が減少してゆく様子が示された。サイクル 10 において $\varepsilon = 0.5$ で界面積が劇的に減少していることが示され、 ε の増加とともに減少の度合いが緩やかとなっていることが示された。また $\varepsilon = 0.75$ 以上ではサイクル 0 における界面積よりも大きくなっている様子が示された。その後はどの条件においても界面積が減少してゆく様子が示され、サイクル 500 においてはどの条件においても界面積がほぼ一定の値となることが示された。

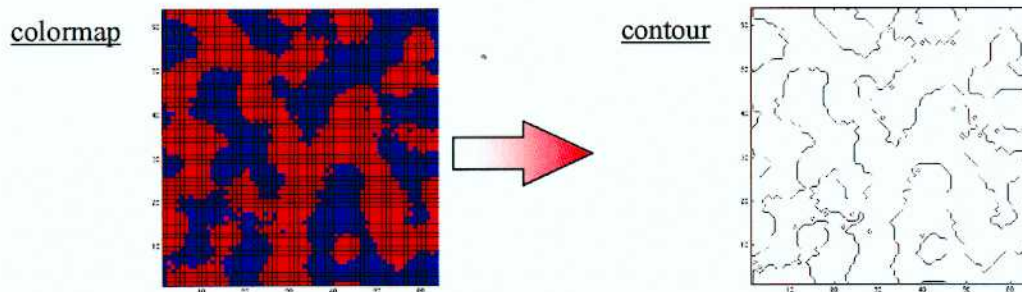


Fig. 4.6.4 Measuring method of interfacial area

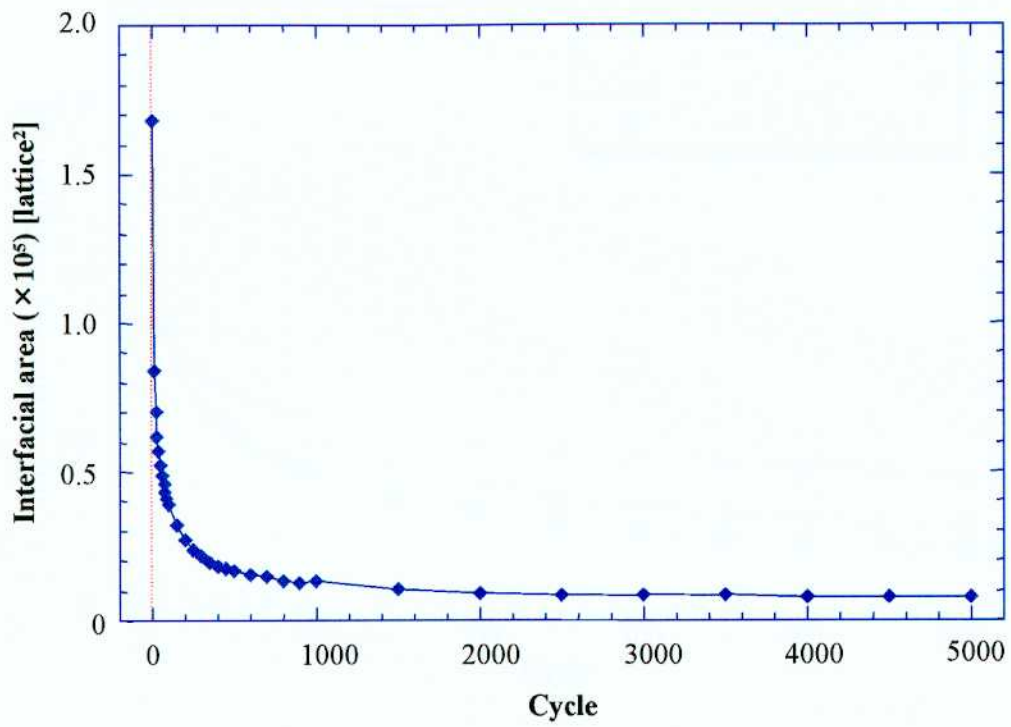


Fig. 4.6.5 Time variation of interfacial area

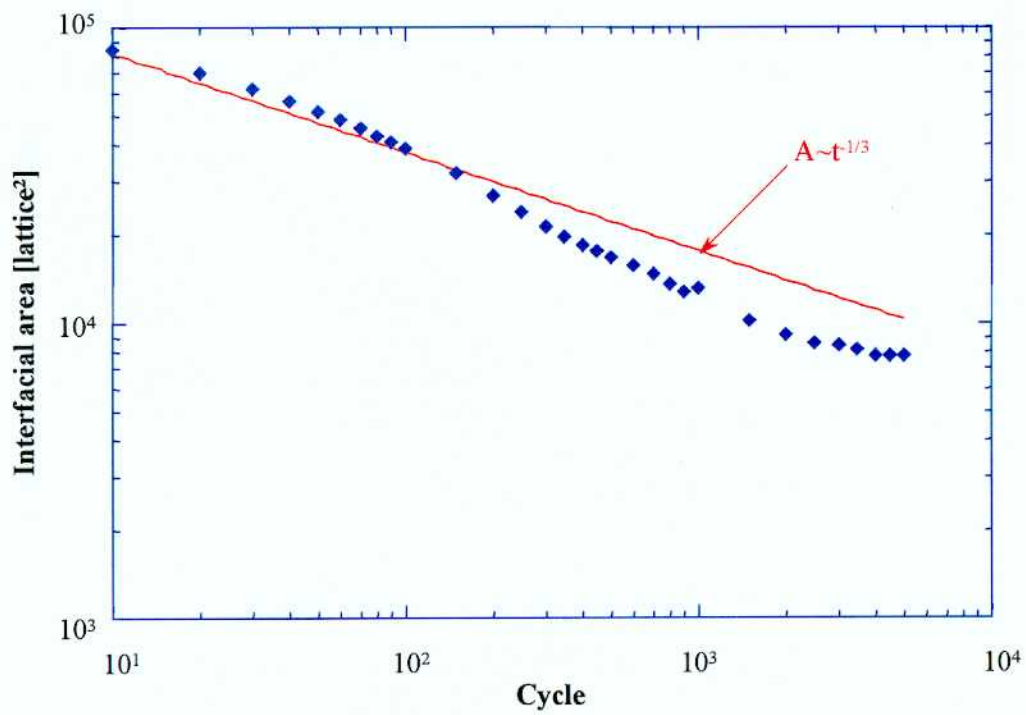


Fig. 4.6.6 Comparison with existing theory

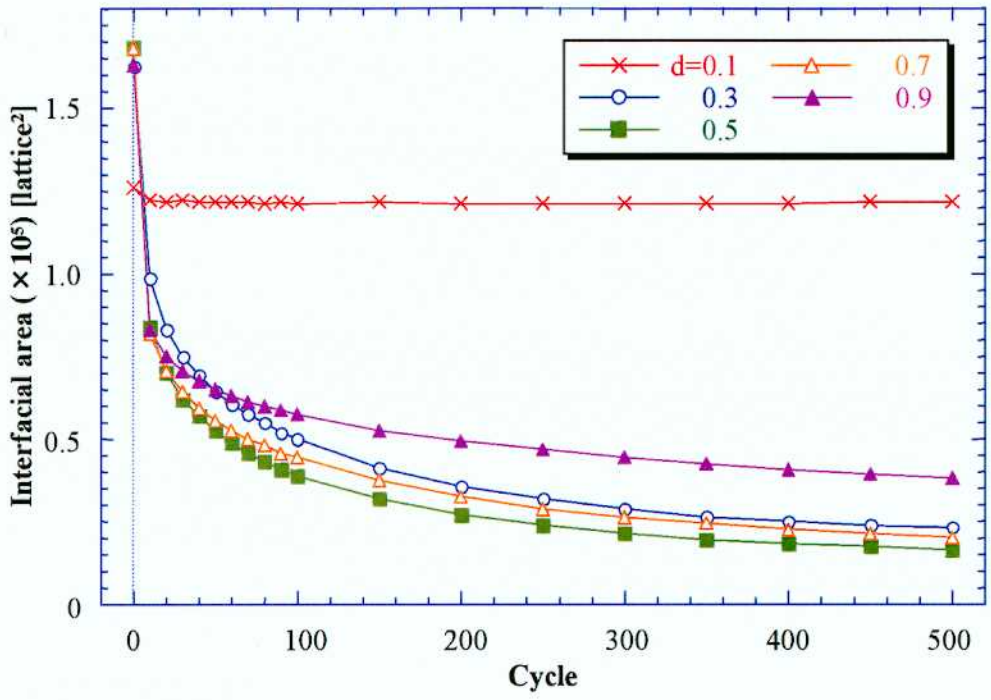


Fig. 4.6.7 Time variation of interfacial area for different particle number density (Cycle)

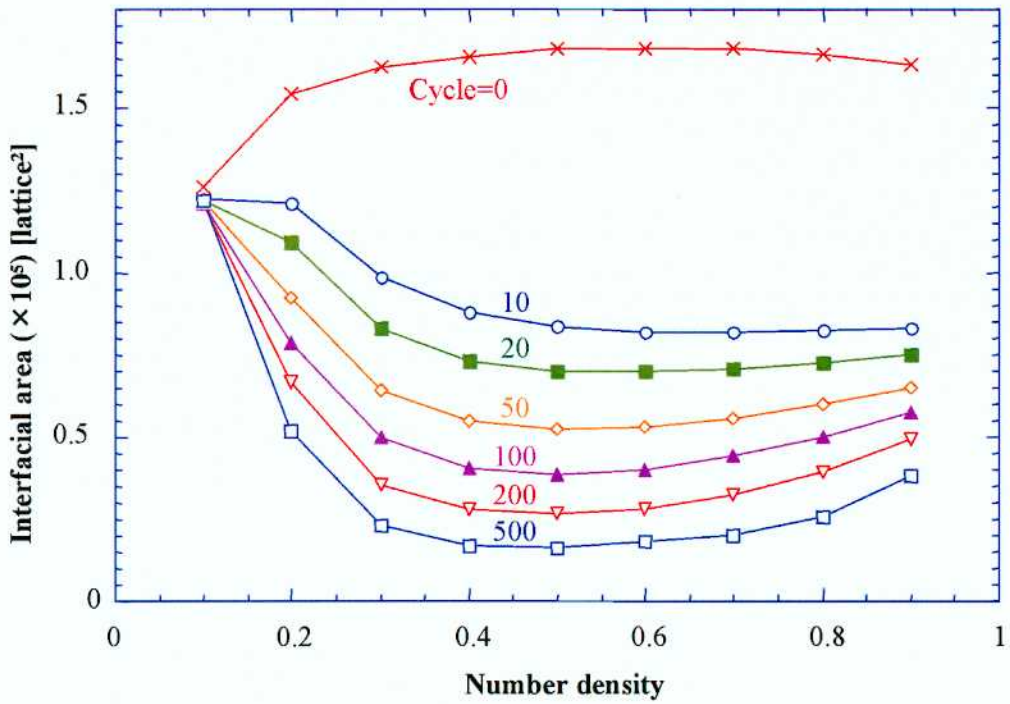


Fig. 4.6.8 Time variation of interfacial area for different particle number density (Number density)

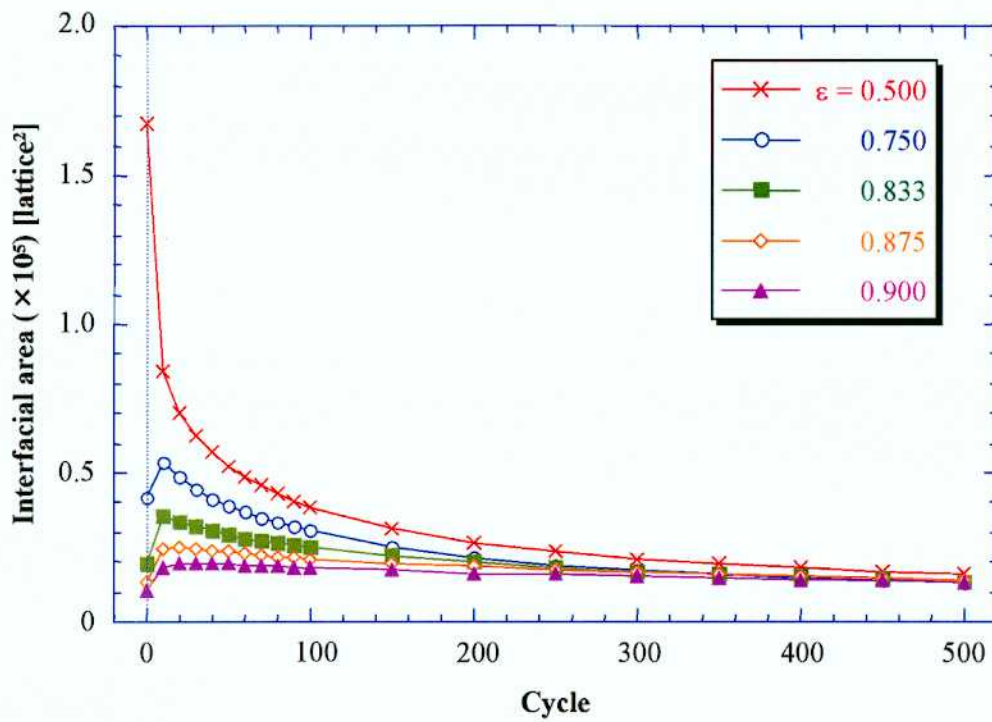


Fig. 4.6.9 Time variation of interfacial area for different red-blue particle ratio (Cycle)

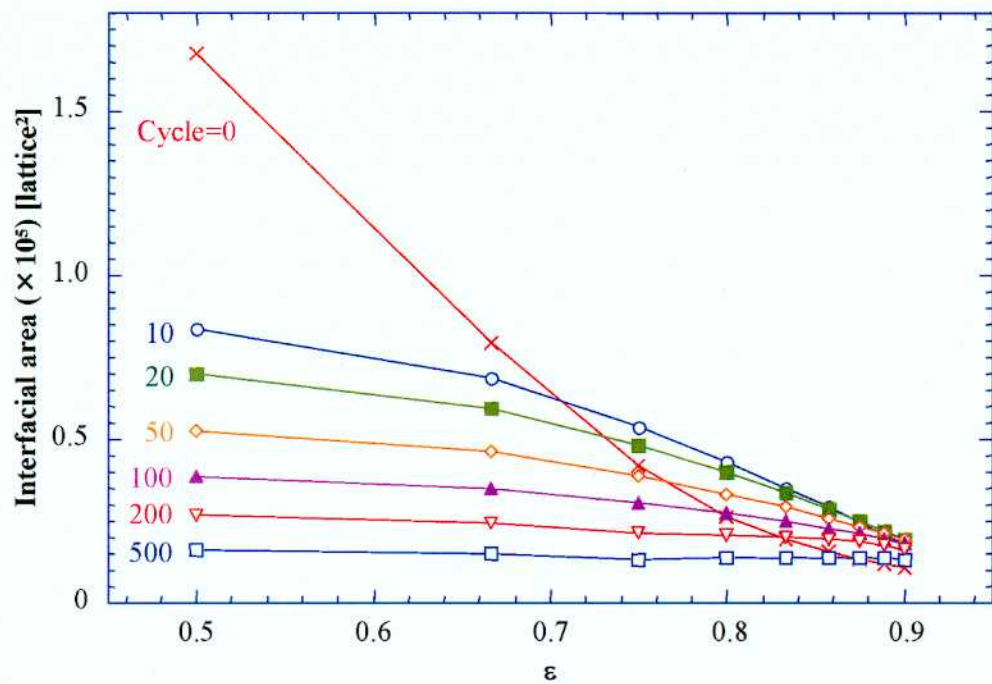


Fig. 4.6.10 Time variation of interfacial area for different red-blue particle ratio (Red-blue particle ratio)

4.6.4. 色仕事を用いた界面積の評価

先の節では、よく混合した二成分流体の凝集・分離挙動における界面積の時間変化を定量的に評価した。しかしながら、図 4.6.4 の方法によって評価した界面積は、等値線を描く際に設定する閾値などによってその値が変化する可能性がある。従来の研究において、閾値を設定せずに、凝集・分離の度合いを表している式(4.4.3)を用いて界面積を評価する方法が提案されている^[82]。以下にその方法を示す。

二成分流体を凝集・分離させる 3 次元 15 速度 ILG モデルでは、衝突後の粒子の状態として式(4.4.3)が最大となるような粒子配置が選ばれる。このため、計算体系全体に対する仕事 W の総和が二成分の界面積とともに凝集・分離の状態を表す物理量となることが考えられる。そこで、本研究では格子あたりの仕事 W を「界面積を示す指標 Φ 」として用いることとし、次式で定義する。

$$\Phi = \frac{\sum_x \sum_y \sum_z (-W)}{X_{\max} \cdot Y_{\max} \cdot Z_{\max}} = \frac{\sum_x \sum_y \sum_z (-f(x,t) \cdot q[r(x,t), b(x,t)])}{X_{\max} \cdot Y_{\max} \cdot Z_{\max}} \quad (4.6.3)$$

ここで x, y, z は各方向位置を示しており、 $X_{\max}, Y_{\max}, Z_{\max}$ は x, y, z 方向に対する計算領域の大きさを示している。2 次元 ILG モデルでは界面積と指標 Φ には相関関係があることが示されている。そこで、本研究では新たに開発した 3 次元 15 速度 ILG モデルにこの手法を適用し、2 次元 ILG モデルの場合と同様に界面積と指標 Φ の間に相関関係があるか、すなわち指標 Φ が本計算手法における界面積を評価しうるかどうかの検討を行うこととした。

図 4.6.11 は、図 4.6.2 に示した界面積の時間変化と指標 Φ の時間変化を示している。横軸はサイクル数を示しており、縦軸はそれぞれ界面積と指標 Φ を示している。本図中において、プロット付の青色の曲線は界面積の時間変化を示しており、プロットのない赤色の曲線は指標 Φ の時間変化を示している。この図より指標 Φ の時間変化を見ると、計算を開始した時点では大きな値をとっており、初期のサイクルでは急激に減少していることが示された。また、サイクル 200 において減少の度合いが緩やかとなり、サイクル 1000 を過ぎたあたりでほぼ一定の値となることが示された。指標 Φ と界面積の時間変化を比べると、指標 Φ は界面積の時間変化に追従するように時間変化していることが確認できる。

式(4.6.3)により定義される指標 Φ は、各成分の流れる方向と量を表現する色流束 q と周囲の格子点における各成分の量を表す f の内積となっており、その値の最大値を与えるということは、各成分が最も多く存在する方向にその成分を移動させる効果を与えるものと考えられる。すなわち、指標 Φ は同じ成分同士を引き合わせる効果を表現しており、結果的に指標 Φ は二成分流体の凝集・分離の度合い、すなわち界面積に関する指標となりうると考えられる。

そこで、指標 Φ と界面積の相関を調べることとした。その結果を図 4.6.12 に示す。縦軸は界面積を示しており、横軸は指標 Φ を示している。図中のプロット点は図 4.6.11 より評価した相関点を示している。この図より、指標 Φ と界面積の間には線形的な関係があることが示された。そこで、本図中にはこれらのプロット点を最小二乗法で近似した結果を合わせて示している。この直線は、界面積を A として以下の式で与えられる。

$$A = (1.0062 \times 10^5) + 0.54024 \cdot \Phi \quad (4.6.4)$$

このことより、界面積と指標 Φ には良い相関関係があり、指標 Φ は二成分流体の混合分離における界面

積を評価しうる指標となりうると判断できる。

次に、領域内に配置する粒子の数密度ならびに二成分流体割合を変化させることで、式(4.4.3)で定義した指標 Φ がどのように変化するかを調べることにした。

まず初めに、図 4.6.2 に示される数密度を変化させた場合の二成分混合流体の凝集・分離計算に対して、指標 Φ がどのように変化するかを調べることにした。図 4.6.13 は、数密度を変化させた場合の二成分混合流体の凝集・分離計算に対する指標 Φ の時間変化を数密度をパラメーターとして示している。縦軸は指標 Φ を示しており、横軸はサイクル数を示している。数密度 $d=0.1$ では指標 Φ はほとんど変化せず終始ほぼ一定の値を保っていた。その他の条件では、指標 Φ は初期のサイクルにおいては急激に減少しており、時間の経過とともにある値に漸近してゆく様子が示された。図 4.6.13 と図 4.4.7 を比較すると、それぞれの数密度に対する界面積と指標 Φ の時間変化は定性的に類似した変化を示しており、それぞれの数密度に対して相関があるものと思われる。

そこで、それぞれの数密度における界面積と指標 Φ の相関を調べることにした。図 4.6.14 はそれぞれの数密度に対する界面積と指標 Φ の関係を示している。縦軸は界面積を示しており、横軸は指標 Φ を示している。図中のプロット点は、図 4.6.7 と図 4.6.13 から評価したそれぞれの数密度に対する界面積と指標 Φ の相関点を示している。また、図中の直線は図 4.6.11 に倣い最小二乗法により求めた直線である。この図より、どの数密度においても界面積と指標 Φ の間には線形的な相関があることが示された。しかしながら、数密度を変化させると相関関係は別のものとなり、数密度を変化させた場合には個々に相関関係を求める必要があることも示された。

次に、図 4.6.3 に示される二成分流体の存在比を変化させた場合の二成分混合流体の凝集・分離計算に対して、指標 Φ がどのように変化するかを調べることにした。図 4.6.15 は、図 4.6.3 に示される二成分流体の存在比を変化させた場合の二成分混合流体の凝集・分離計算に対する指標 Φ の時間変化を ε をパラメーターとして示している。縦軸は指標 Φ を示しており、横軸はサイクル数を示している。また、図中の曲線付近の数字は ε を示している。どの条件においても、指標 Φ は計算開始時に大きな値となっており、初期のサイクルにおいては急激に減少していることが示された。その後、時間の経過とともに指数関数的に減少してゆき、ある値に漸近してゆく様子が示された。図 4.6.15 と図 4.6.9 を比較すると、それぞれの ε に対する界面積と指標 Φ の時間変化は定性的に類似した変化を示しており、それぞれの ε に対して相関があるものと思われる。

そこで、それぞれの ε における界面積と指標 Φ の相関を調べることにした。図 4.6.16 はそれぞれの ε に対する界面積と指標 Φ の関係を示している。縦軸は界面積を示しており、横軸は指標 Φ を示している。図中のプロット点は、図 4.6.9 と図 4.6.15 から評価したそれぞれの ε に対する界面積と指標 Φ の相関点を示している。この図より、界面積と指標 Φ の間には相関関係があることが示され、 ε を変化させた場合においてもほぼ同じ相関関係をとることが示された。

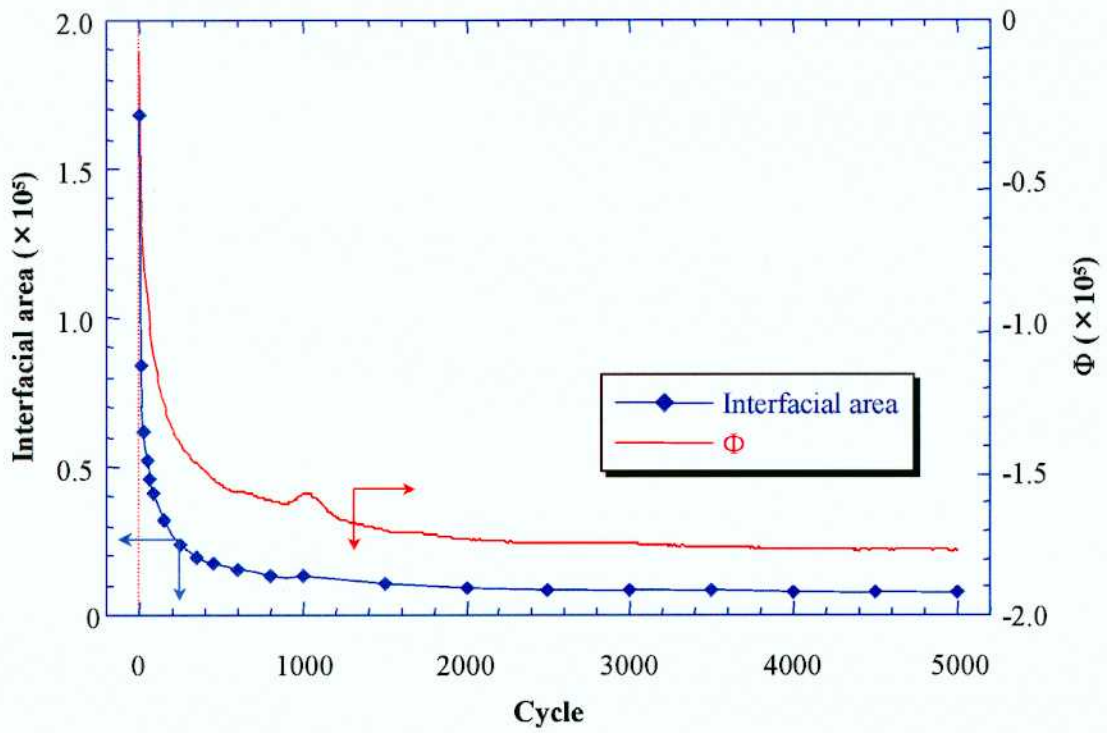


Fig. 4.6.11 Time variation of interfacial area and Φ

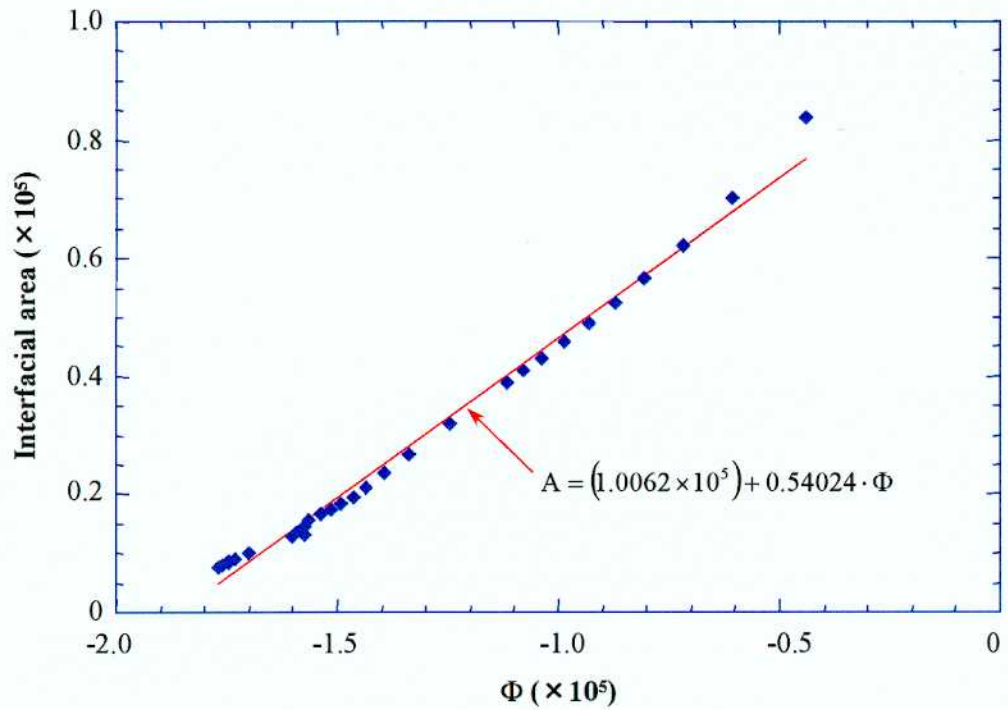


Fig. 4.6.12 Relationship between interfacial area and Φ

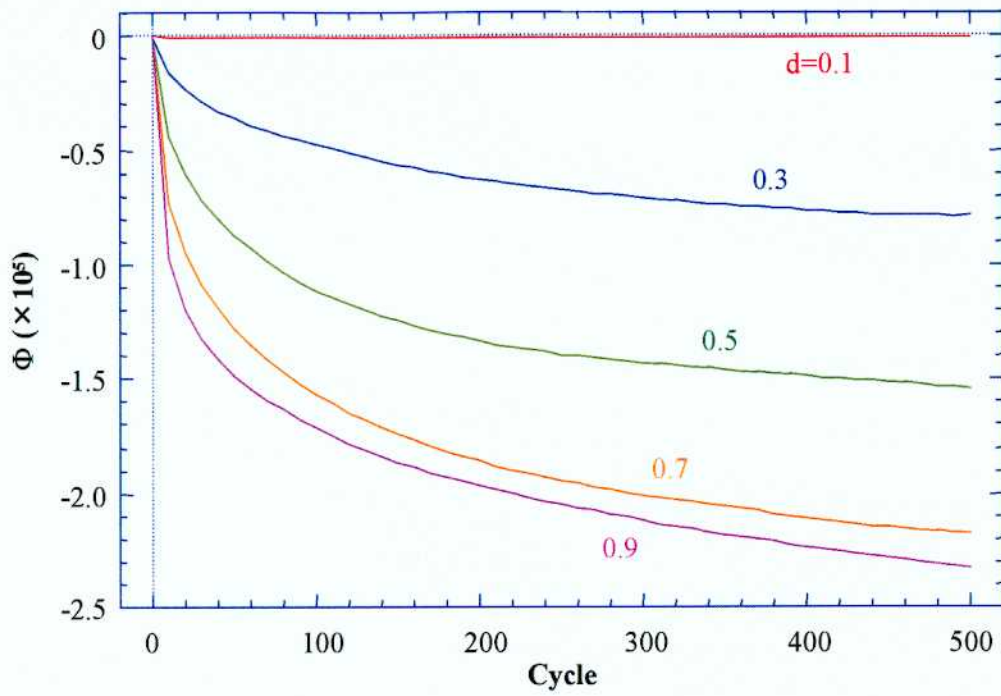


Fig. 4.6.13 Time variation of Φ for different particle number density

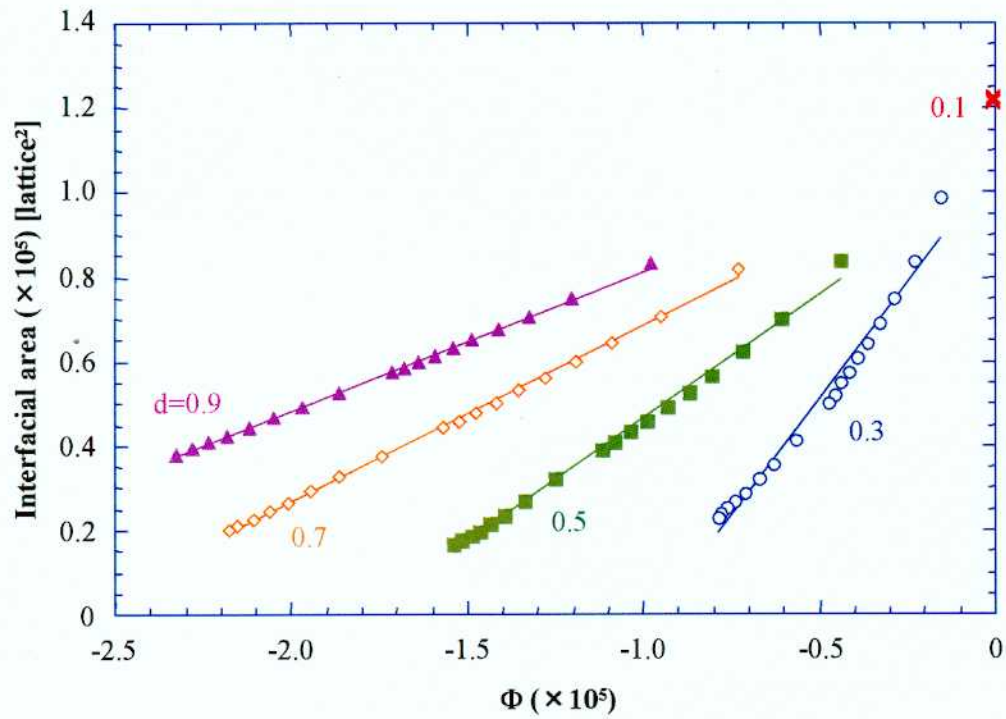


Fig. 4.6.14 Relationship between interfacial area and Φ for different particle number density

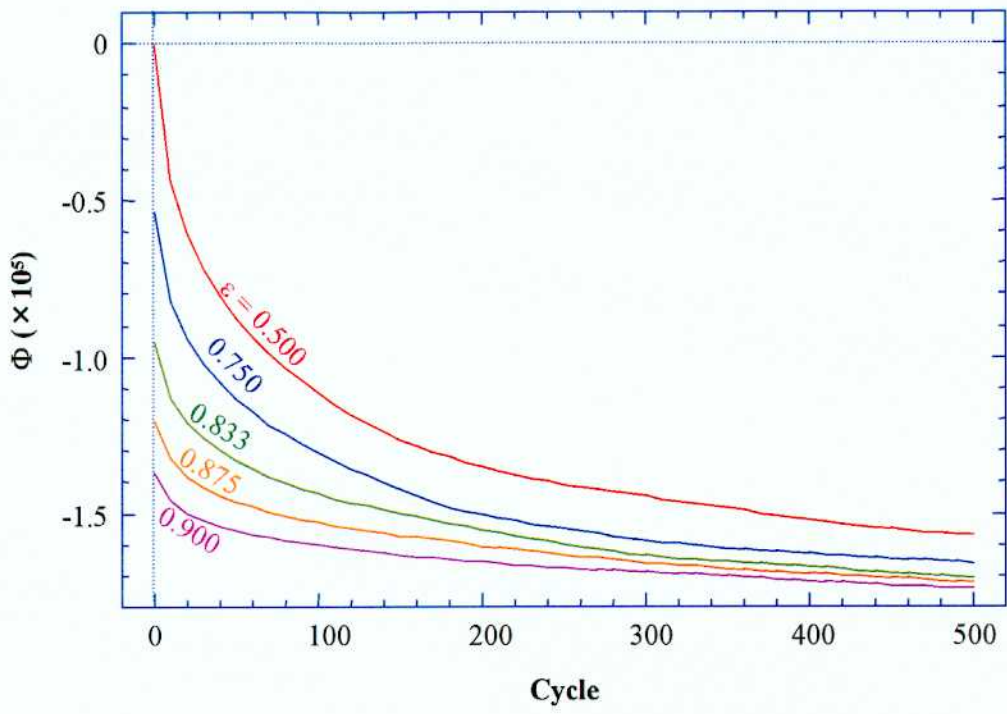


Fig. 4.6.15 Time variation of Φ for different red-blue particle ratio

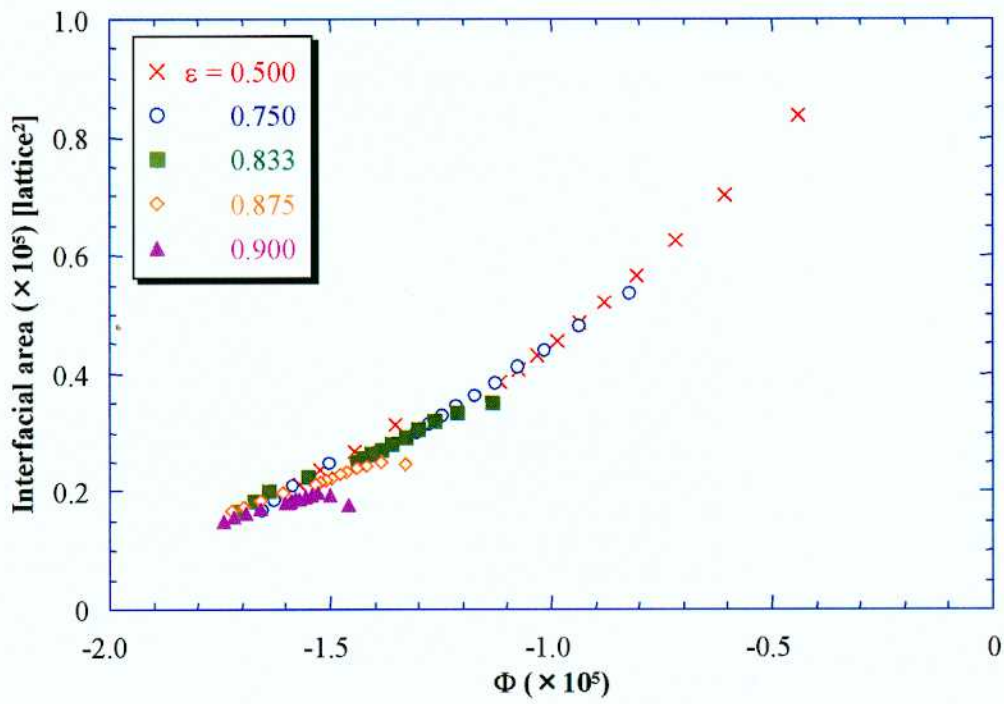


Fig. 4.6.16 Relationship between interfacial area and Φ for different red-blue particle ratio

4.7. 多孔質体内部の流動解析による 3 次元 15 速度 LGA モデルの検証

4.7.1. 多孔質体内部流動解析の概要

4.6 節では、4.4 節で開発した 3 次元 15 速度 ILG モデルを用いて二成分流体の分離計算を行い、3 次元 15 速度 ILG モデルの検証を行うとともに二成分流体の分離現象に関する解析を行うことが出来ることを確認した。それと同様に 4.3 節で新たに開発した 3 次元 15 速度 LGA モデルの検証を行う必要がある。このような微視的な流動現象を扱う工学デバイスの一つとして多孔質体が挙げられる。

図 4.7.1 に多孔質体の写真を示す。多孔質体は複雑な 3 次元形状の骨格を有しており、熱交換器、化学反応触媒、燃焼反応触媒などの工学機器に用いられている。この多孔質体は入り組んだ複雑な形状をしており、接触反応表面積が大きいという特徴を有している。そのために、高混合特性ならびに高反応特性が期待される。この多孔質体をさまざまな用途へ応用するためには、多孔質体内部の流動を予め把握しておく必要がある。しかしながら、実験的に流動を把握することは難しく、解析的に流動を把握することに期待が寄せられている

本節では多孔質体内部における流動現象の解析を行い、4.3 節で新たに開発した 3 次元 15 速度 LGA モデルの検証を行うとともに、本モデルの多孔質体内部流動現象への適用可能性について検討することとした^[83,84]。

図 4.7.2 に、4.6.1 節の図 4.6.1 で行った二成分混合流体の凝集・分離計算のサイクル 100 における結果を示す。左側の図は鳥瞰図を示しており、右の図は断面図を示している。図 4.7.2 と図 4.7.1 を比較すると、骨格ならびに空孔の複雑形状が極めて類似しているものと判断できる。そこで、4.4 節で得られた二成分混合流体の凝集・分離の計算結果を多孔質体とみなして、この内部に流体を流したときの流動を観察することとした。

多孔質体を模擬する障害物として、図 4.7.2 に示す二成分混合流体の凝集・分離の計算結果を用いることとした。凝集・分離の計算結果を用いる際に、赤粒子を障害物、青成分を流路とみなすこととした。このようにすると障害物の空隙率 ε は全粒子数に対する青粒子の割合で与えられる。すなわち、4.6 節の式(4.6.4)で表される。ここに再度記述する。

$$\varepsilon = \frac{(\text{領域内の青粒子数})}{(\text{領域内の全粒子数})} \quad (4.6.4)$$

図 4.7.2 に示した二成分混合流体の凝集・分離計算では、領域内に配置した赤粒子数と青粒子数は同じ割合となっていた。よって本計算で用いる障害物の空隙率は $\varepsilon = 0.50$ となる。この障害物を計算領域の中央に配置し内部に流体を流したときの挙動について調べることにした。

二成分混合流体の凝集・分離の計算結果を多孔質体に応用する際に、赤粒子が存在する領域を障害物、青粒子が存在する領域を流体が流れる流路とするモデルを作成するためには、赤粒子が存在する領域と青粒子が存在する領域の境界面を正確に判定する必要がある。図 4.7.3 にその判定方法ならびに作成したモデルを示す。

図 4.7.3(a)に格子点における色の表記方法について示す。ある格子点 x において赤粒子が青粒子より多く存在した場合には格子点 x の中心に赤色のひし形を置く。青粒子が赤粒子より多い場合にも同様の表記を用いることとする。この表記を用いて気液界面近傍の格子の状態を示したものが図 4.7.3(b)の中央の図である。図 4.7.3(b)の中央の図の点 A で示されるように境界面より離れて青成分の内部に位置する

格子点では、隣接する全ての格子点において赤粒子より青粒子を多く含んでいる。これに対して、点Bで示されるように境界面に隣接する格子点では、赤粒子の割合が多い格子点と青粒子の割合が多い格子点の両者が隣接することとなる。このように隣接する格子点における赤、青粒子の個数を調べ、赤粒子の割合が多い格子点と青粒子の割合が多い格子点の両方が隣接する格子点は二成分流体の境界面に接していると判定することが出来る。このようにして判定した境界面と接する赤粒子を多く含む格子点にすべりなし壁の境界条件を適用することとした。

図 4.7.4 に多孔質体内部の流動解析を行う際に設定した計算体系を示す。解析領域の大きさは x 、 y 、 z 方向に $128 \times 64 \times 64$ 格子と設定した。 x 軸方向の両端の壁は流入・流出壁とし、その他の壁はすべりなし壁と設定した。多孔質体を模擬した障害物の入口ならびに出口には、流入・流出部の影響を取り除き、流れを整流する目的で助走区間を設けた。駆動する流体は一成分のみとし、計算開始時において領域内の平均密度が $\rho_m = 7.5$ となるように粒子を配置した。また、 x 軸の正方向に流体を駆動するために、流入側境界における密度 ρ_m は障害物内部より高くなるように、流出側境界における密度 ρ_{out} は障害物内部より低くなるように $\rho_m = 9.0$ 、 $\rho_m = 6.0$ と設定した。



Fig. 4.7.1 Photographic view of high-porosity porous media

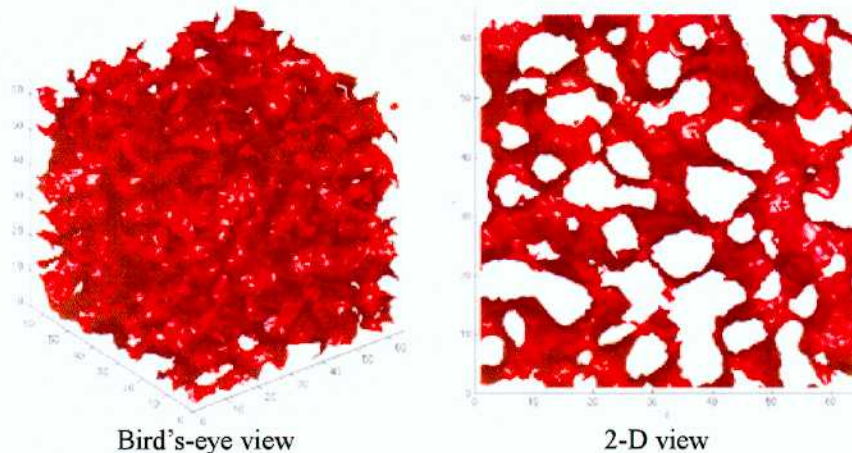
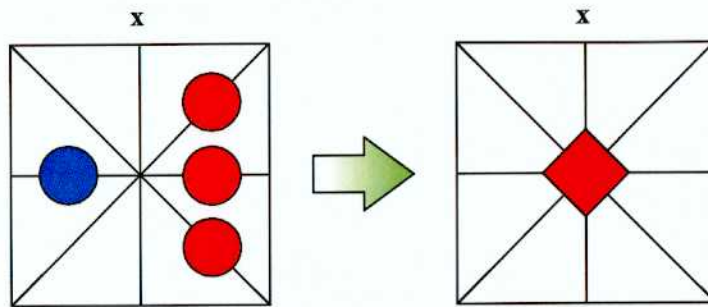
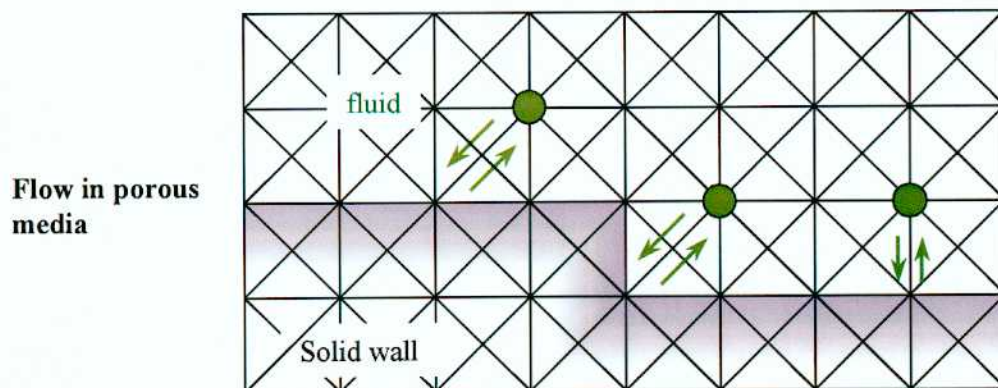
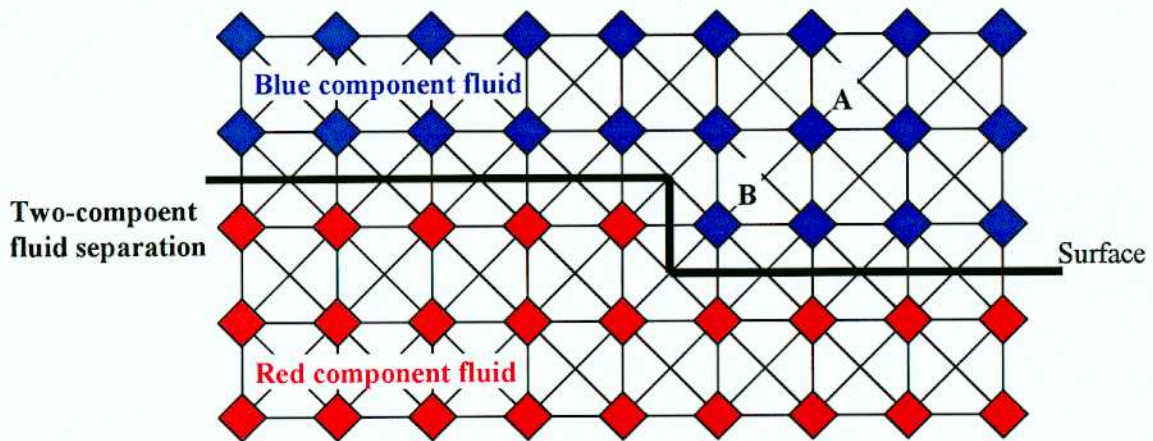
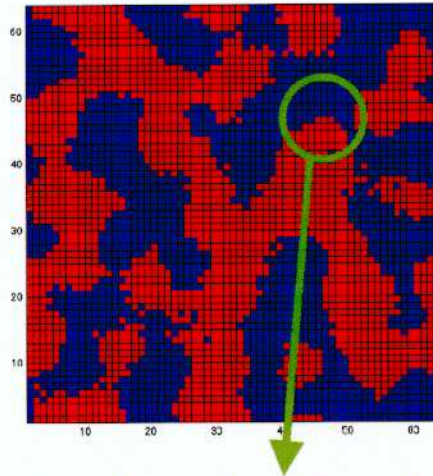


Fig. 4.7.2 Computational result of two-component fluid separation



(a) Description of color field



(b) Determination of wall boundary

Fig. 4.7.3 Determination of boundary condition

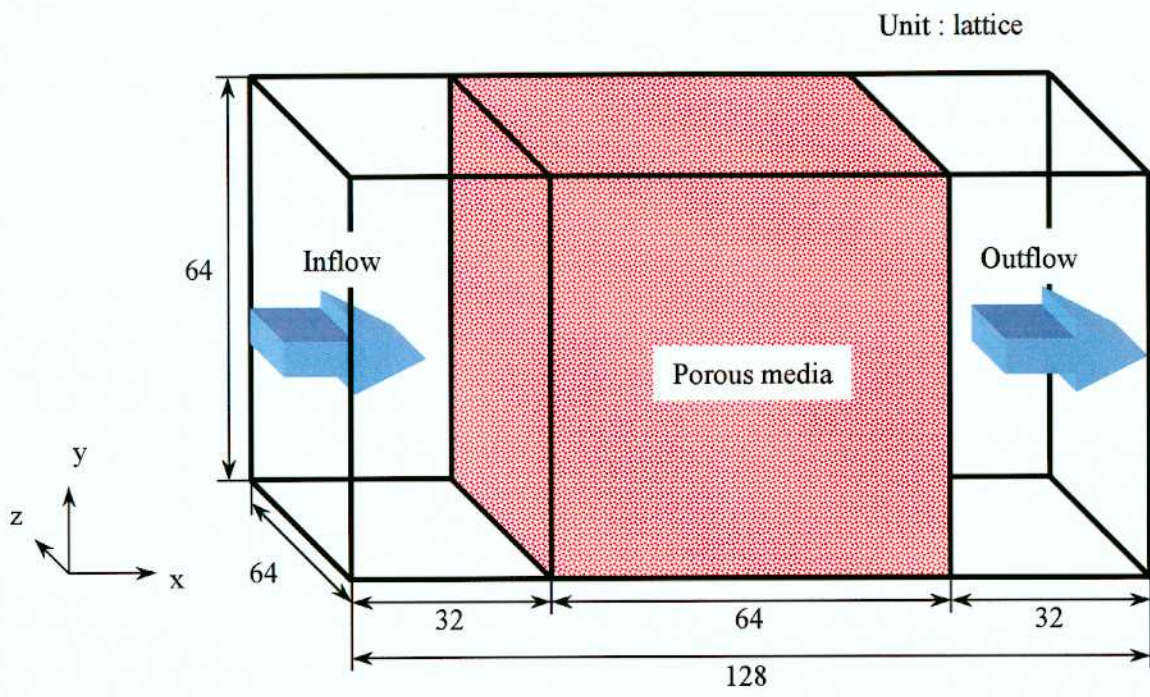


Fig. 4.7.4 Computational domain for flow analysis in porous media

4.7.2. 多孔質体内部流動の解析結果

図 4.7.5 に流れの状態が静定したサイクル 100,000 における多孔質体内部の流動に関する解析結果を示す。図 4.7.5(a) は密度分布ならびに流速ベクトル、図 4.7.5(b) は圧力分布ならびに流速ベクトル、図 4.7.5(c) は流線を示している。図 4.7.5(a)、(b) に描かれている矢印は $4 \times 4 \times 4$ で疎視化して得られた流速ベクトルであり、黒の領域は多孔質体を模擬した障害物を示している。図中の色は $4 \times 4 \times 4$ で疎視化して得られた密度分布ならびに圧力分布を示しており、図中右のカラーバーに対応している。これらの結果は、領域の z 方向中央における結果を抜き出してきたものである。Reynolds 数 Re は以下の式を用いて評価した。

$$Re = \frac{Ud}{\nu} \quad (4.7.1)$$

ここで用いられている記号は以下に示すとおりである。

- d : 障害物の平均孔径
- U : 孔部における平均流速
- ν : 動粘性係数

本解析では Reynolds 数は $Re=0.86954$ であった。

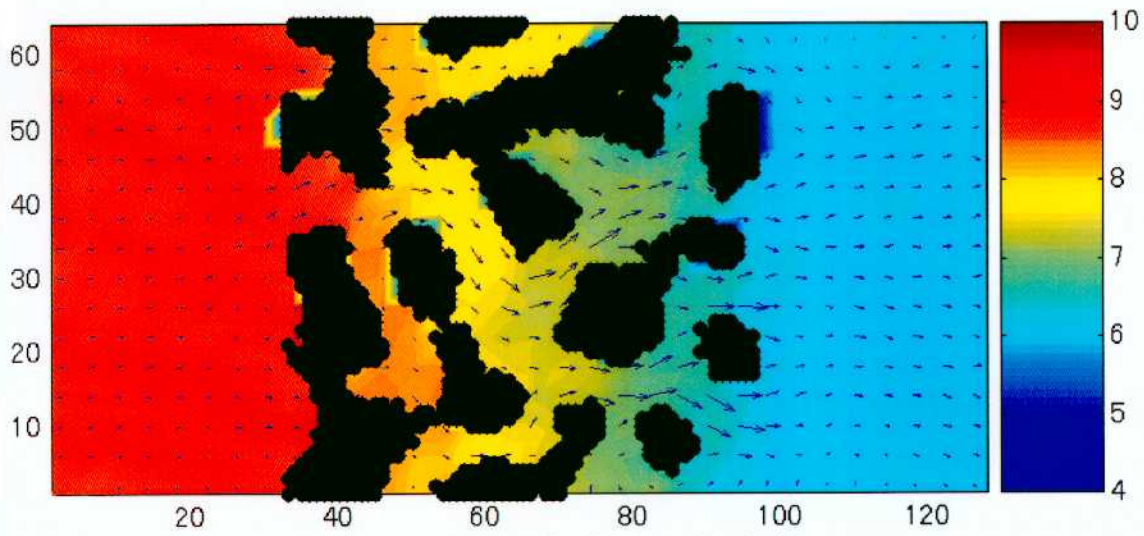
図 4.7.5(a)、(b) より、障害物内の圧力分布ならびに密度分布は流入・流出部で与えたように入口から出口にかけて減少しており、 x 軸方向に勾配が形成されていることが示された。また図 4.7.5(b) より、流体圧力の高い方から低い方向、すなわち x 軸正方向に向かって流体が流れていることが確認できる。その際、流体は障害物間の流路を一様に流れるのではなく特定の流路を流れる様子が見られ、多次元的な速度場が形成されていることが示された。

図 4.7.5(c) は流線を示している。流線の始点は左側の境界、すなわち流入側の境界に一定間隔で設定した。この図より、流線も速度ベクトルと同様に障害物間の流路を一様に流れるのではなく特定の流路を流れる様子が見られた。また、障害物の下部を通過する流線も描かれた。これは、多孔質体が 3 次元的な形状をしているのに対して、ここに示されている障害物の形状は奥行き方向に 1 格子分であり、この断面より奥行き方向に 1 格子進んだ点では障害物がなく、その流路を流体が流れたために描かれたものと思われる。

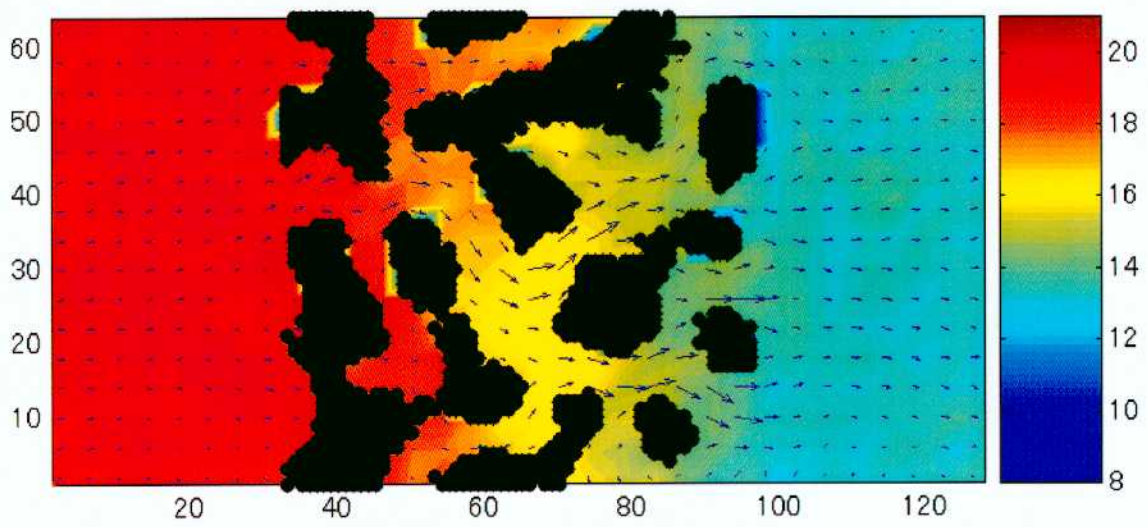
図 4.7.6 は各断面における流速分布を 2 次元的ならびに 3 次元的に示した図である。図 4.7.6(a) は障害物領域入口端における流速分布、図 4.7.6(b) は障害物領域中央部における流速分布、図 4.7.6(c) は障害物領域出口端における流速分布を示している。図中の 2 次元的に表示した分布の図において、黒で示された領域は多孔質体を模擬した障害物を示している。3 次元的に表示した図を見ると、多孔質体の入口では流速分布に大きな山と谷が形成されている様子が示され、流体が流路を選択的に流れることがより明確となった。また、流速が負となる領域、すなわち流路内に逆流が生じている領域も見られた。しかしながら、入口端では流速分布の山と谷の差が大きかったが、出口に近づくに従ってその差が小さくなってゆくことが示された。2 次元的に表示した流速分布を見ると、流速は流路の中央部分では大きく、障害物や壁に近くなるに従って小さくなることが示された。また、障害物が複雑に入り組んでいるところでは流速が小さく、大きな孔部を流れる流路における流速は大きくなる傾向が示された。

次に、得られた計算結果の妥当性を検証するために、障害物領域の出口端における速度分布を実験で測定した結果と比較することとした。図 4.7.7 は高空孔率多孔質体の出口端において測定された流速分布ならびに多孔質体出口端における多孔質体の画像を示す。図 4.7.7(a)は多孔質体出口端における画像、図 4.7.7(b)は実験より得られた多孔質体出口端における流速分布、図 4.7.7(c)は実験より得られた多孔質体出口端における流速分布を3次元的に表示した結果を示している。この実験では、多孔質体内部に流体を流して出口端部における流速分布を計測した。

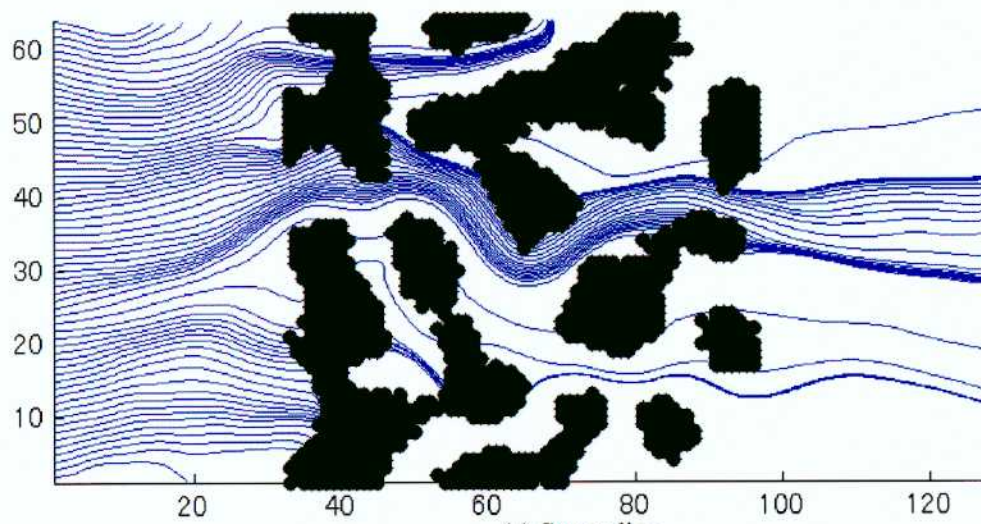
この実験結果より、多孔質体の出口端において、流速は大きな山と谷を持つ分布を形成する様子が見られた。図 4.7.6(c)の解析による多孔質体出口端における流速分布と比較すると、障害物が複雑に入り組んでいるところでは流速が小さく、大きな孔部を流れる流路における流速は大きくなるという定性的な一致が見られた。このことは、新たに開発した3次元 15 速度 ILG モデルを用いて得られた二成分流体の凝集・分離計算結果を多孔質体とみなし、その内部における流動現象を再現できることを示唆していると考えられる。



(a) Density distribution and velocity vector



(b) Pressure distribution and velocity vector



(c) Streamline

Fig. 4.7.5 Computational result of flow through porous media

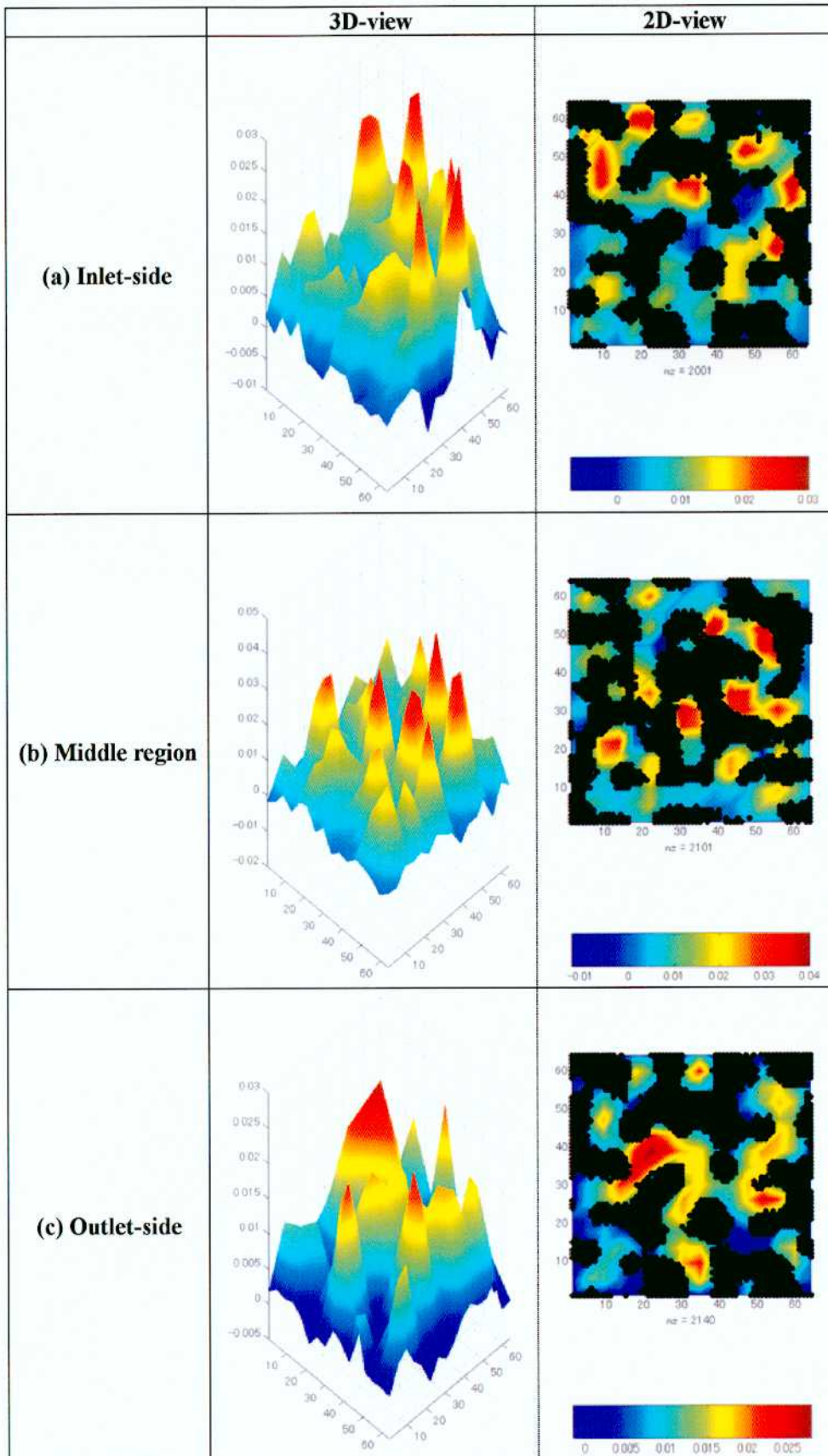


Fig. 4.7.6 Computational result of velocity distribution in porous media

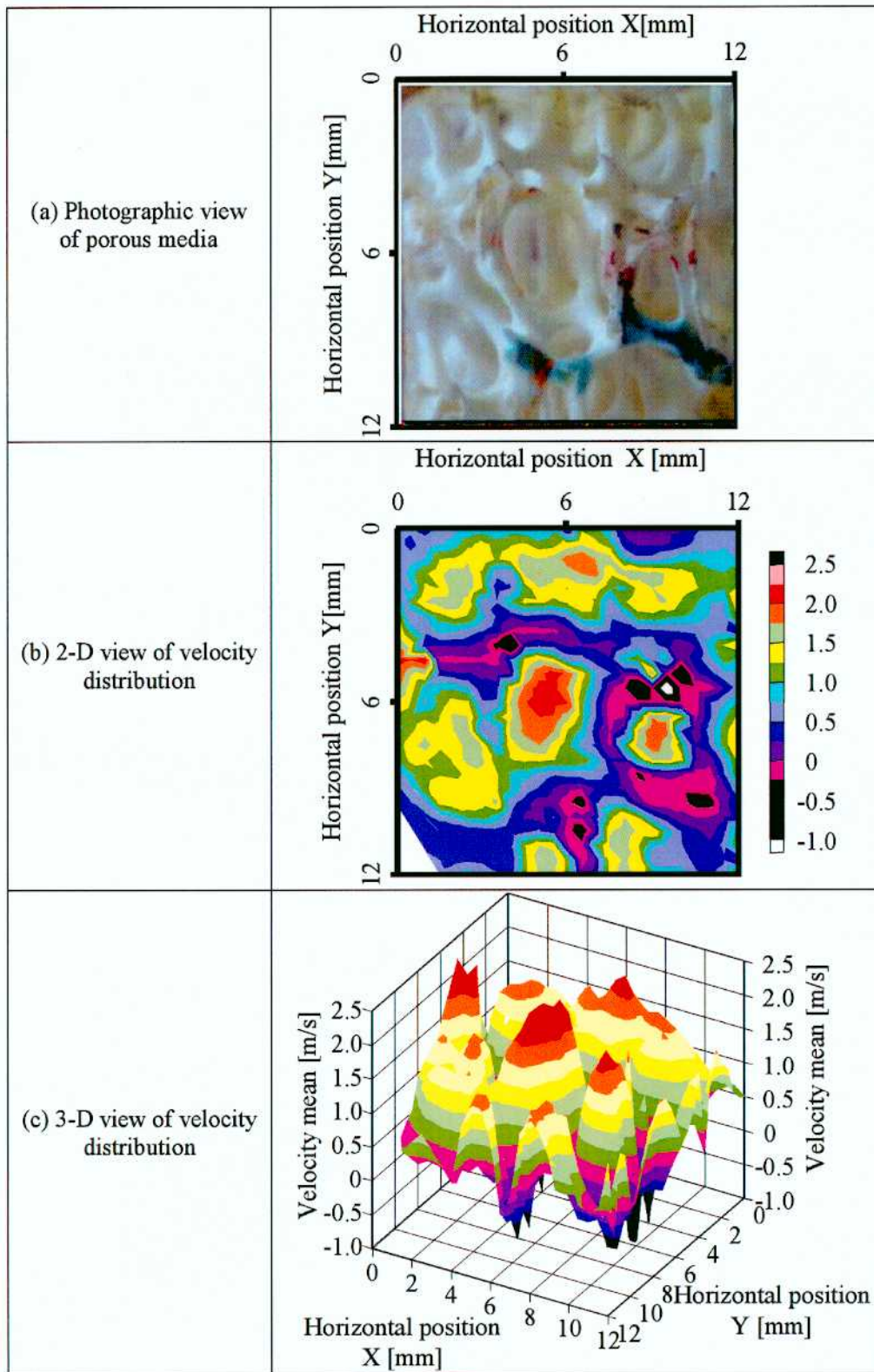


Fig. 4.7.7 Experimental result of velocity distribution and structure of porous media at outlet-side

4.7.3. 異なる空隙率の多孔質体内部における流動解析結果

次に、計算領域の中央に配置する障害物の空隙率を変化させた場合の障害物の内部流動を調べることとした。図 4.7.8 に本計算で障害物として用いた二成分混合流体の凝集・分離の計算結果を示す。これは、図 4.6.12 に示す二成分混合流体の凝集・分離計算のサイクル 100 における結果を用いたものである。図中の数字は障害物内の空隙率を表す ε を示している。本計算では、4.7.1 節の図 4.7.4 に示す計算体系を用いた。 $\varepsilon = 0.750$ 以下の障害物では障害物は連続的に存在しているが、それ以上の空隙率になると粒状に分散している。よって、 $\varepsilon = 0.750$ より上の空隙率を有する障害物を多孔質体とみなすには困難があるが、空隙率の大きい地層を流れる地下水などへの応用を検証することは興味深い。そこで、本会積では全ての多孔質体に対して解析を行うこととした。

図 4.7.9 以降に流れが静定したサイクル 100,000 における計算結果を示す。図 4.7.9 は圧力分布ならびに速度分布を示し、図 4.7.10 は密度分布ならびに速度分布を示している。これらの図中に描かれている矢印は $4 \times 4 \times 4$ で疎視化して得られた流速ベクトルであり、黒の領域は多孔質体を模擬した障害物を示している。図中の色は $4 \times 4 \times 4$ で疎視化して得られた密度分布ならびに圧力分布を示しており、図中右のカラーバーに対応している。これらの結果は、領域の z 方向中央における結果を抜き出してきたものである。また、それぞれの図の上に付されている数字は障害物の空隙率を示している。

これらの図より、どの障害物を用いた場合でも障害物内の圧力分布ならびに密度分布は流入・流出部で与えたように入口から出口にかけて減少しており、 x 軸方向に勾配が形成されていることが示された。また、空隙率が大きくなるにつれて流入側と流出側の圧力差が小さくなっている。すなわち、障害物の空隙率が大きくなるにつれて通過する際の圧力損失が小さくなることを示しており、実際の現象と定性的に一致している。また図 4.7.9 より、流体圧力の高い方から低い方向、すなわち x 軸正方向に向かって流体が流れていることが確認できる。その際、空隙率が小さい場合には流体が流路を選択的に流れるが、空隙率が大きくなるにつれて障害物内を一様に流れる様子が示された。

図 4.7.10 は流線を示している。流線の始点は左側の境界に一定間隔で設定した。この図より、どの条件においても、流路を通過する流線だけではなく障害物の下を通過する流線が描かれた。しかしながら、空隙率が小さい場合には流線は特定の流路に通過するように描かれているが、空隙率が大きくなるにつれて全体的に流線が描かれていることが示された。

図 4.7.11～図 4.7.13 は障害物の各部における x 方向速度分布を 2 次元的ならびに 3 次元的に表示した結果を示している。図 4.7.11 は障害物入口における x 方向速度分布、図 4.7.12 は障害物中央部における速度分布、図 4.7.13 は障害物出口における x 方向速度分布をそれぞれ示している。3 次元的に表示した結果を見ると、空隙率が小さい場合には速度分布が大きな山と谷を持つことが示され、空隙率が大きくなるにつれ速度分布に凹凸がなくなることが示された。これは、入口において偏りがあった速度分布が多孔質体内部を通過することで混合、均質化され、出口ではほぼ偏りのない速度分布となったものと思われる。また、2 次元的に表示した結果を見ると、どの障害物に対しても大きい穴の部分では大きな速度となり、小さい穴の部分ではほとんど流動が生じていない結果となった。また、場所によっては負の速度分布を持つ領域も存在した。さらに、障害物入口において空隙率が小さい場合には全体的に速度が小さく所々大きくなる分布が形成された。これに対し、空隙率が大きくなるにつれ計算領域の中央部では速度が大きくなり、境界部では小さくなる分布が形成された。これは、空隙率が小さい場合には計算領域の大きさに対する障害物の割合が大きく、狭隘流路流れとなっているが、空隙率が大きい場合には障害物の影響がほとんどなく、管内流れに近いためにこのような速度分布が形成されたものと思われる。

次に、多孔質体の内部流動に対して本研究で新たに開発した 3 次元 15 速度 LGA モデルがどの程度適

用性を有するかを検証するために、従来提唱されている理論式と比較することとした。比較する物理量として多孔質体内部における摩擦係数 f を用いることとした。これを計算結果より評価し、従来提唱されている Ergun の式ならびに Hagen-Poiseuille の式と比較することとした。

初めに、本節で使用する記号を以下に示す。

- D_H : 水力等価直径
- d_p : 等価粒子径
- f : 摩擦損失係数
- Re : Reynolds 数
- p : 圧力
- r_H : 水力等価半径
- u_m : 多孔質体内部の平均流速
- ε : 空隙率
- ρ_m : 多孔質体内部の平均密度

多孔質体内部を流れる際の摩擦損失係数を示す Ergun の式は次式のように与えられる。

$$f = \frac{33.3}{Re \cdot \varepsilon} + \frac{0.5833}{\varepsilon^2} \quad (4.7.2)$$

ここで、Reynolds 数は以下の式で評価した。

$$Re = \frac{4r_H \cdot v_m}{\nu} = \frac{D_H \cdot v_m}{\nu} \quad (4.7.3)$$

また、水力等価直径は以下の式で評価した。

$$r_H = \frac{(\text{障害物内の流路の体積})}{(\text{障害物内の流路の表面積})} = \frac{D_H}{4} \quad (4.7.4)$$

また、Hagen-Poiseuille の式は以下の式で与えられる。

$$f = \frac{64}{Re} \quad (4.7.5)$$

ここで、多孔質体内部における障害物領域を粒子径に換算したときの等価粒子径は次式で与えられる。

$$d_p = \frac{6(1-\varepsilon)}{\varepsilon} r_H \quad (4.7.6)$$

計算結果より摩擦損失係数を評価する際に、以下の Darcy-Weisbach の式を用いた。

$$f = \left(-\frac{dp}{dx} \right) \cdot r_H \cdot \frac{2}{\rho_m u_m^2} = \left(-\frac{dp}{dx} \right) \cdot \frac{D_h}{4} \cdot \frac{2}{\rho u_m^2} \quad (4.7.7)$$

図 4.7.14 は、それぞれの空隙率を有する多孔質体を用いた場合に生じる圧力勾配を示している。横軸は空隙率を示しており、縦軸は圧力勾配を示している。この図より、空隙率の増加とともに圧力勾配が小さくなる、すなわち圧力損失が小さくなる傾向が示された。

図 4.7.15 は、それぞれの空隙率を有する多孔質体を用いた場合に生じる多孔質体内部における平均速度ならびに平均密度を示している。横軸は空隙率を示しており、縦軸はそれぞれ平均速度と平均圧力を示している。空隙率の増加とともにどちらの値も増加することが示された。

図 4.7.16 は、それぞれの空隙率を有する多孔質に対する水力等価半径を示している。横軸は空隙率を示しており、縦軸は水力等価半径を示している。空隙率の増加とともに水力等価半径が大きくなることが示された。

図 4.7.17 は、それぞれの空隙率を有する多孔質体を用いた場合に対する Reynolds 数を示している。横軸は空隙率を示しており、縦軸は Reynolds 数を示している。空隙率の増加とともに Reynolds 数が大きくなることが示された。また、Reynolds 数は十分低い値となっており、本計算で扱う流れが層流であると判断することができる。

これらの値ならびに式(4.7.2)、(4.7.5)、(4.7.7)を用いて評価した摩擦損失係数を図 4.5.18 に示す。横軸は Reynolds 数を対数表示で示しており、縦軸は摩擦損失係数を対数表示で示している。赤色の線は Ergun の式(4.7.2)より算出した摩擦損失係数、青色の線は Hagen-Poiseuille の式(4.7.5)より算出した摩擦損失係数、緑色の線は実験結果を用いて Darcy-Weisbach の式(4.7.7)より算出した摩擦損失係数を示している。この図より、計算結果より得られた摩擦損失係数は、Ergun の式ならびに Hagen-Poiseuille の式と定性的に一致する結果となり、多孔質体内部の摩擦損失係数を表現する Ergun の式とほぼ同じ値となることが示された。

以上の結果より、4.3 節で新たに開発した 3 次元 15 速度 LGA モデルは、さまざまな空隙率を有する多孔質体内部流動の解析のような微細な流動の解析に対して有効な手法となりうることが示唆された。

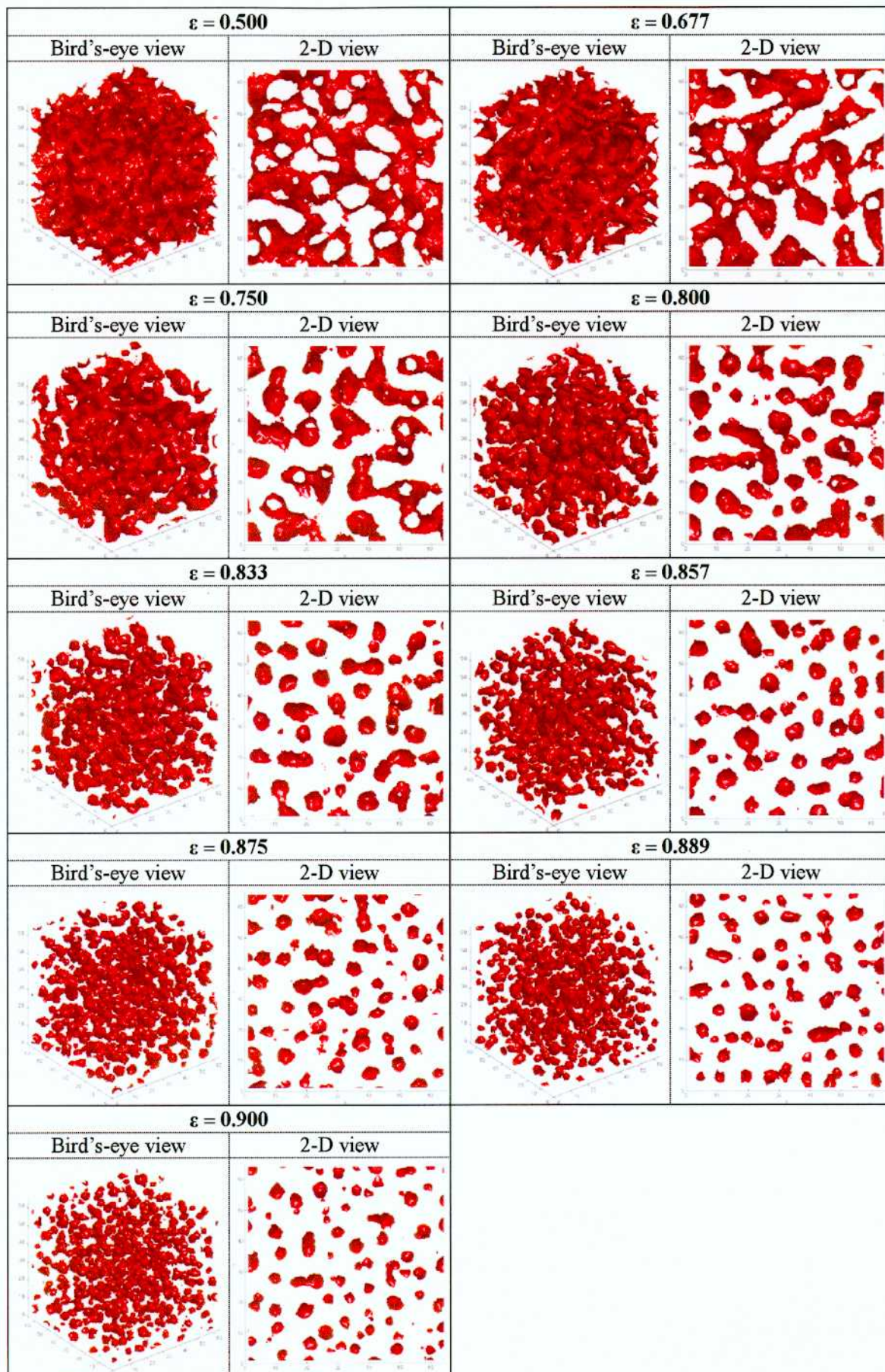


Fig. 4.7.8 Computational result of two-component fluid separation used in flow analysis in porous media

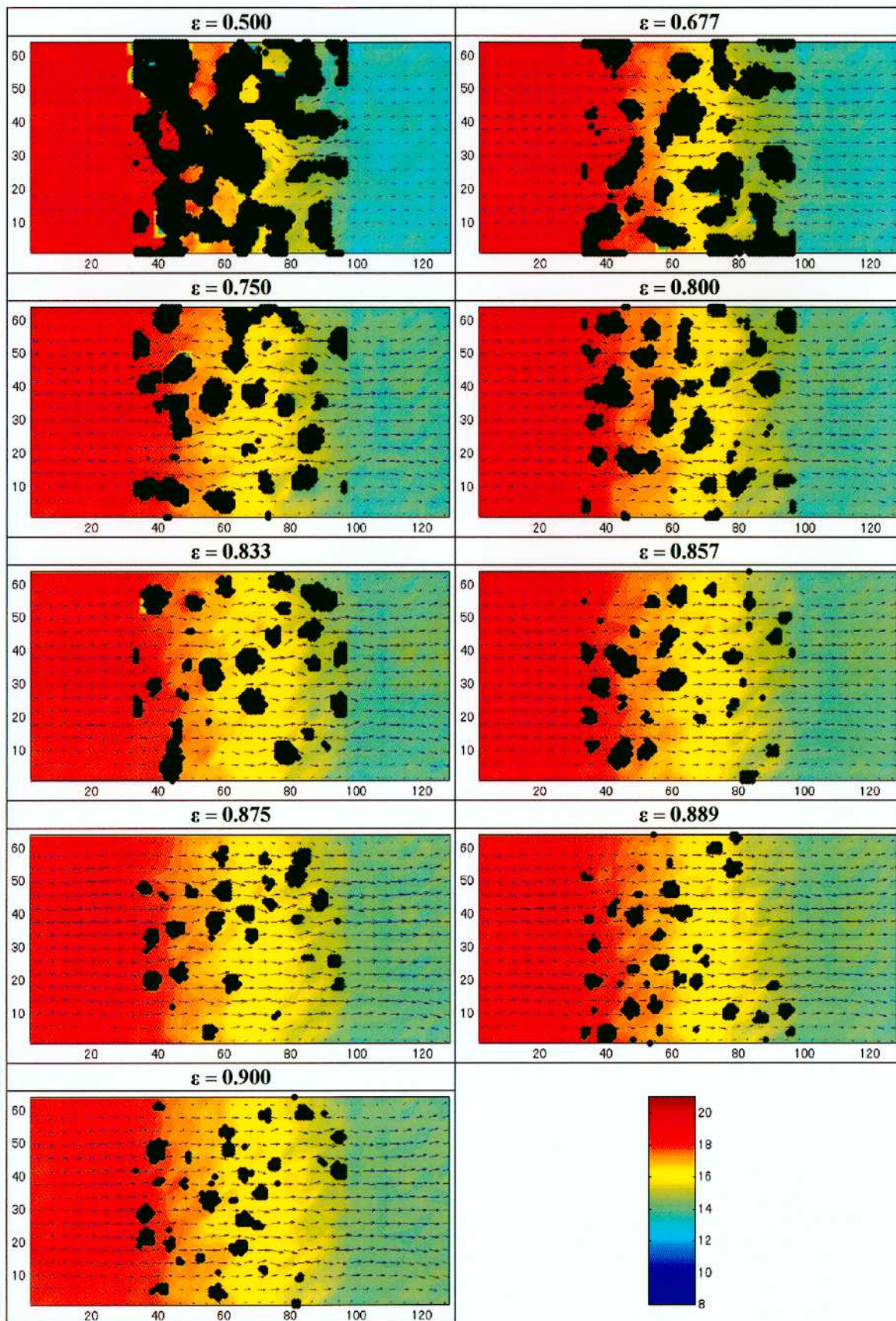


Fig. 4.7.8 Pressure distribution and velocity vector for different porosity porous media

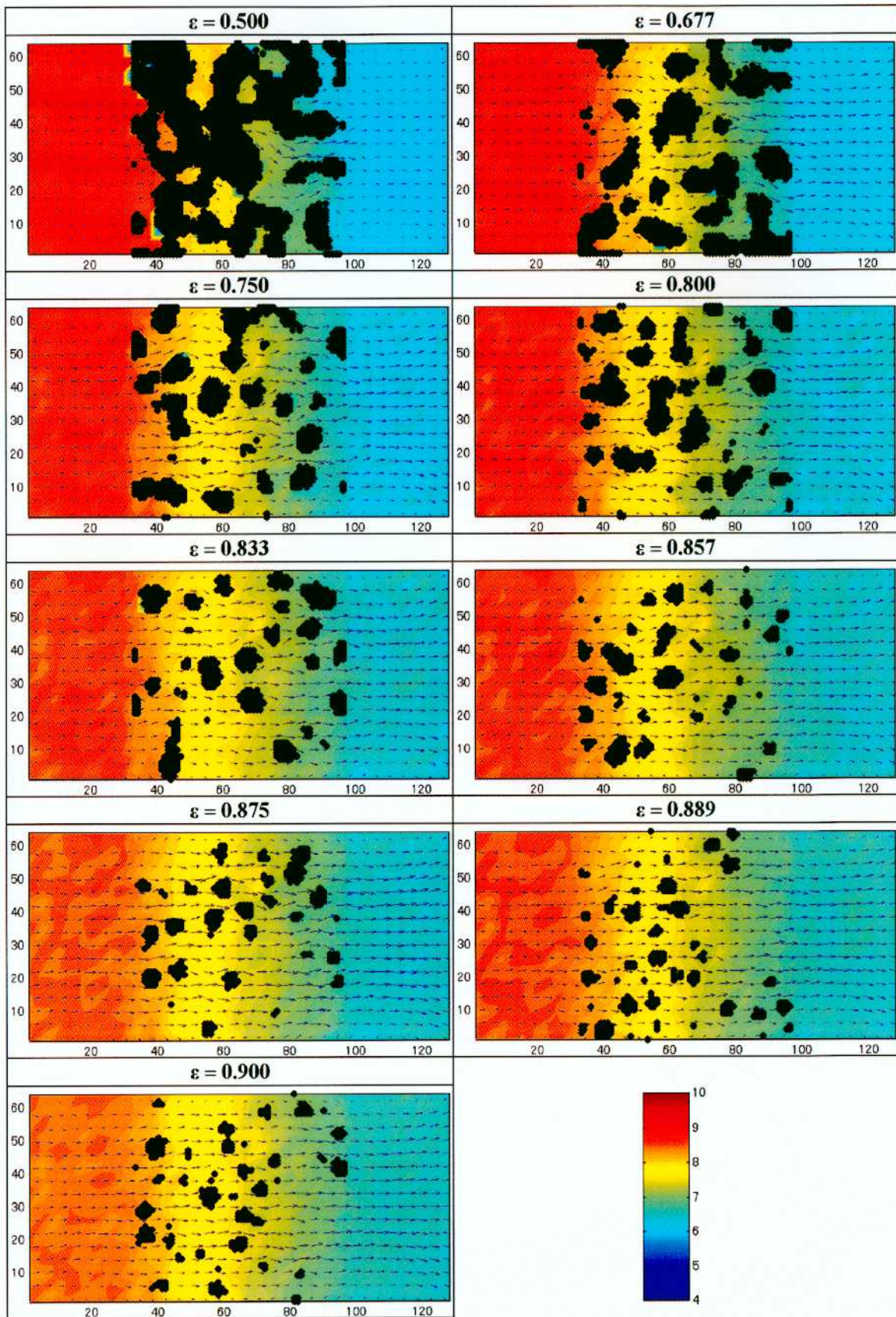


Fig. 4.7.9 Density distribution and velocity vector for different porosity porous media

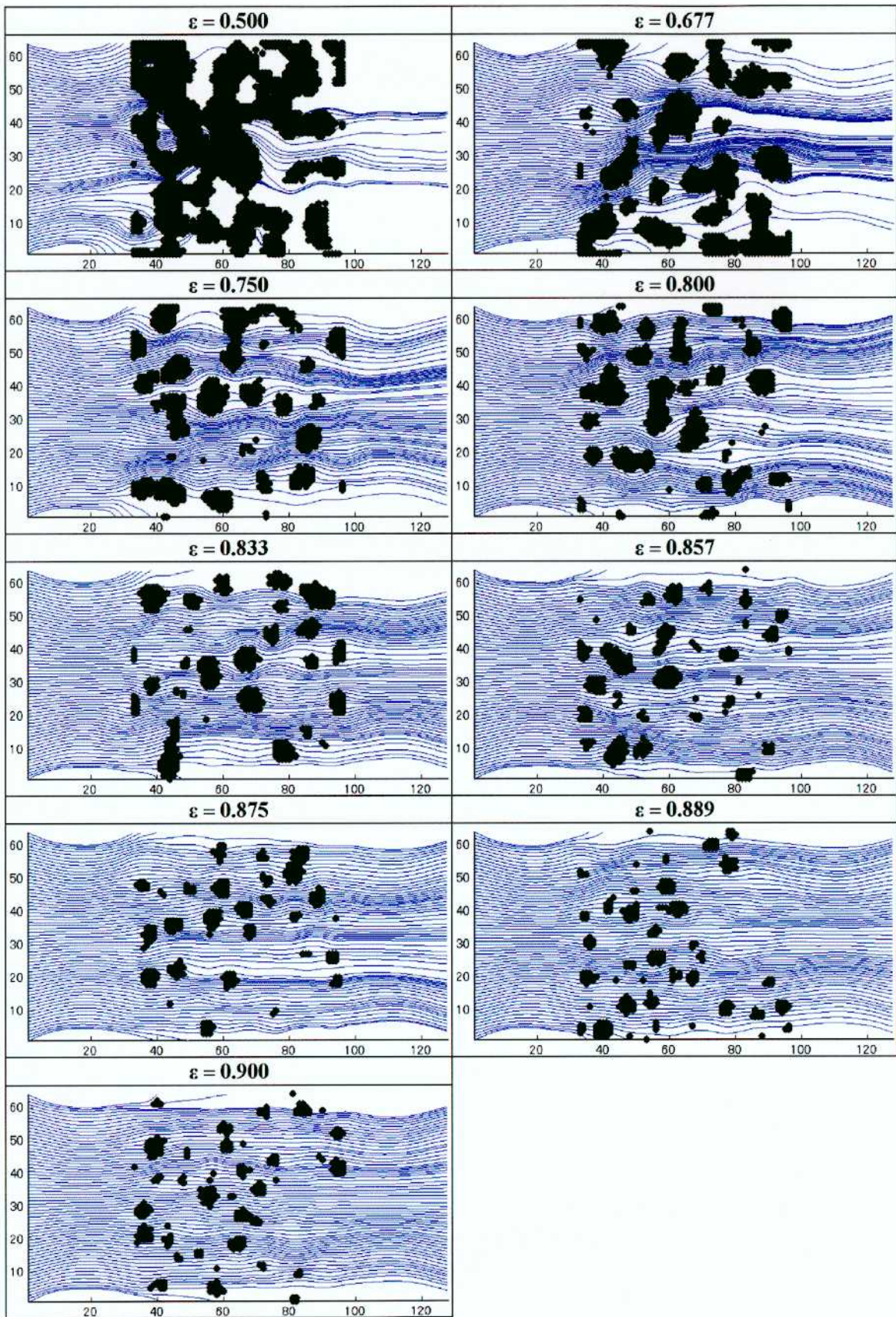


Fig. 4.7.10 Streamline for different porosity porous media

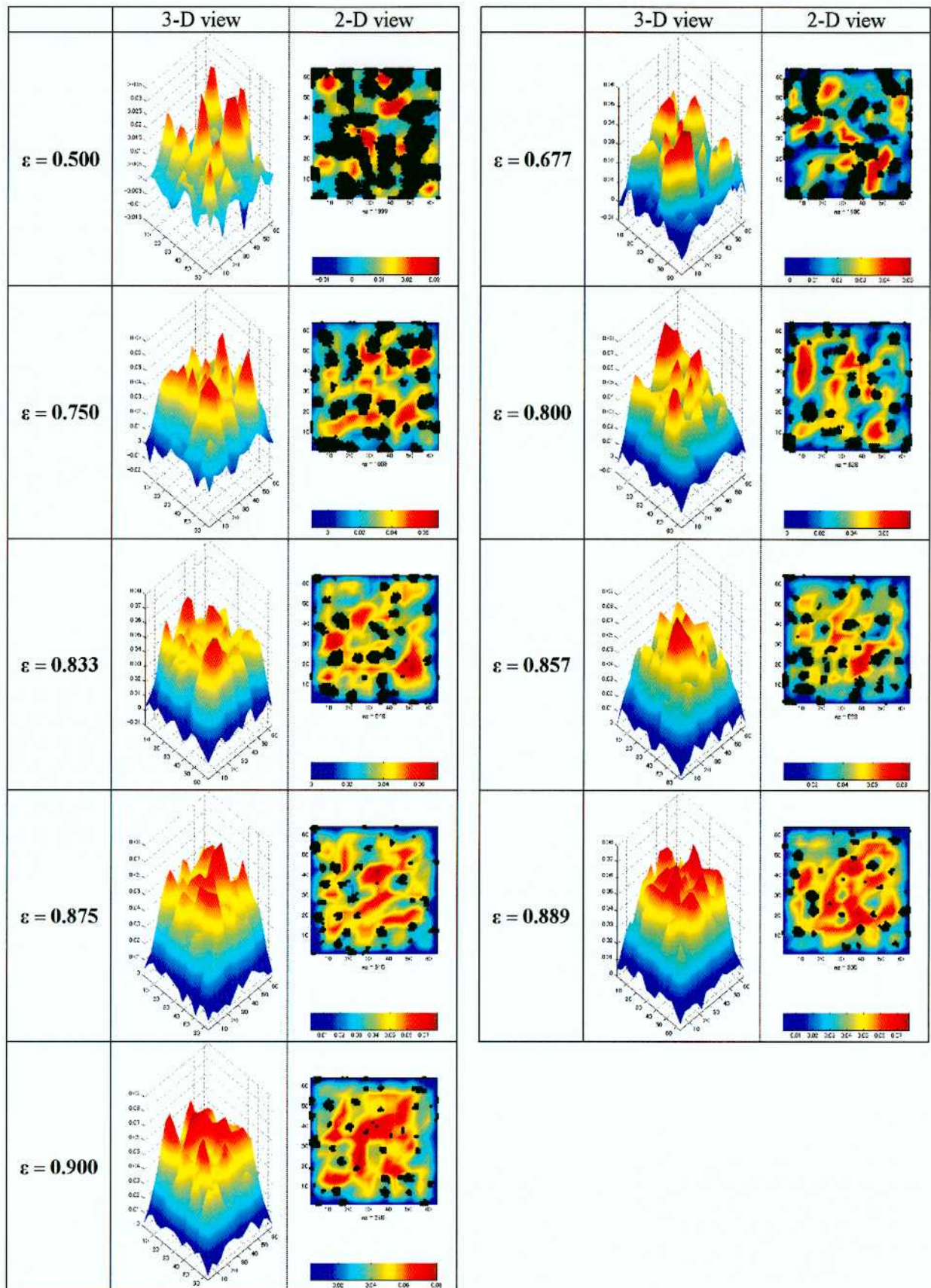


Fig. 4.7.11 Velocity distribution at inlet-side of porous media for different porosity porous media

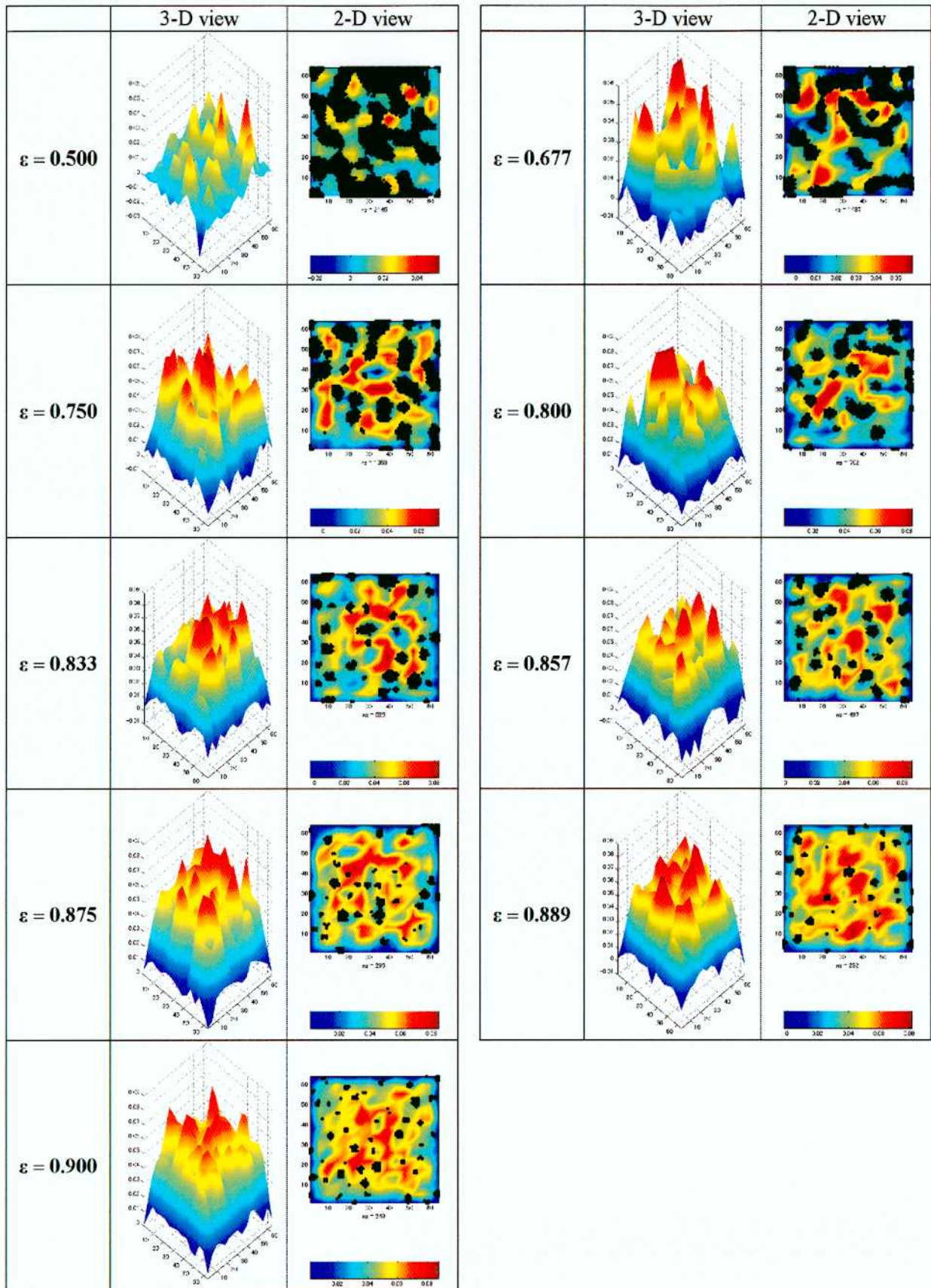


Fig. 4.7.12 Velocity distribution at middle region of porous media for different porosity porous media

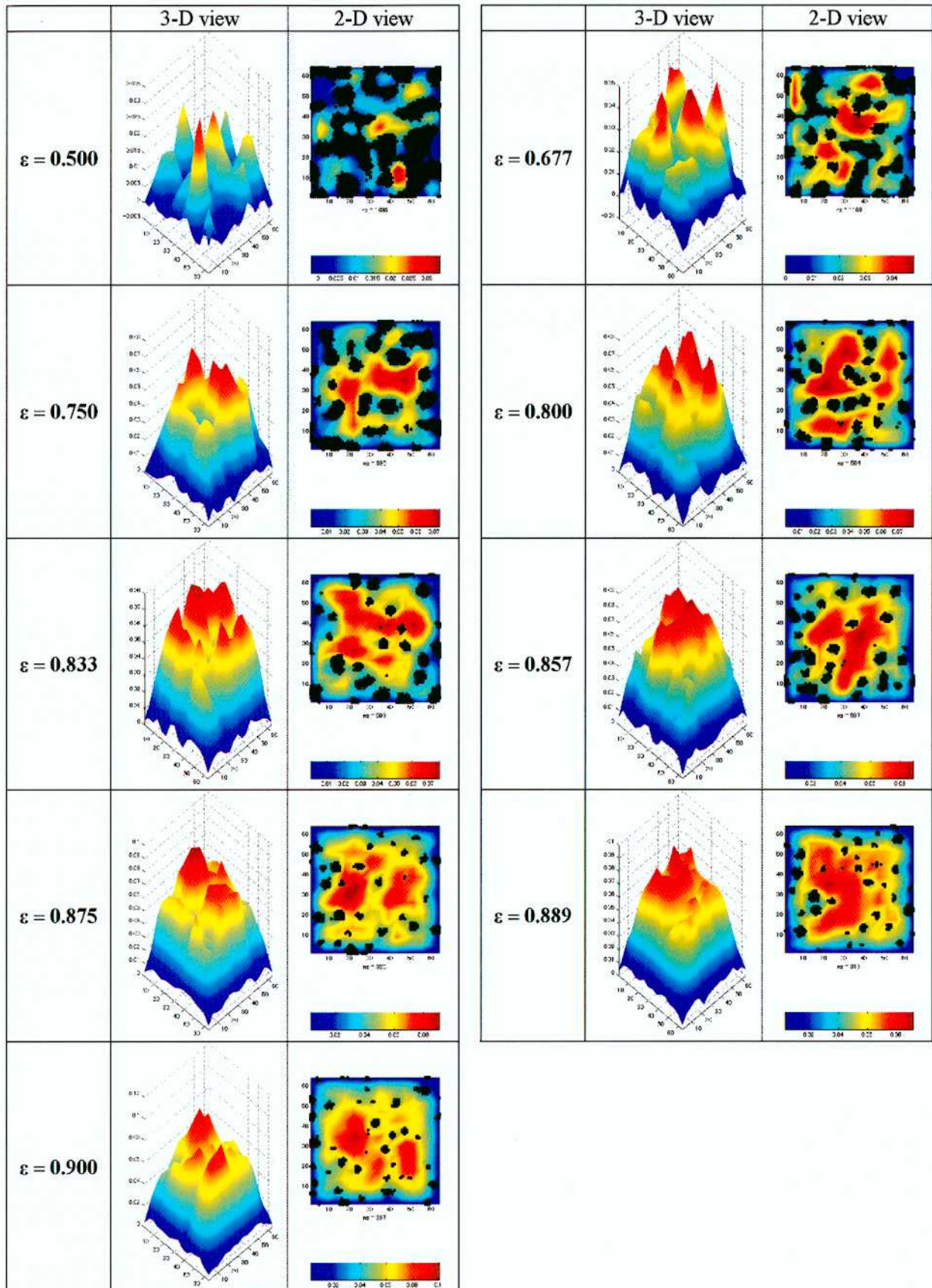


Fig. 4.7.13 Velocity distribution at inlet-side of porous media for different porosity porous media

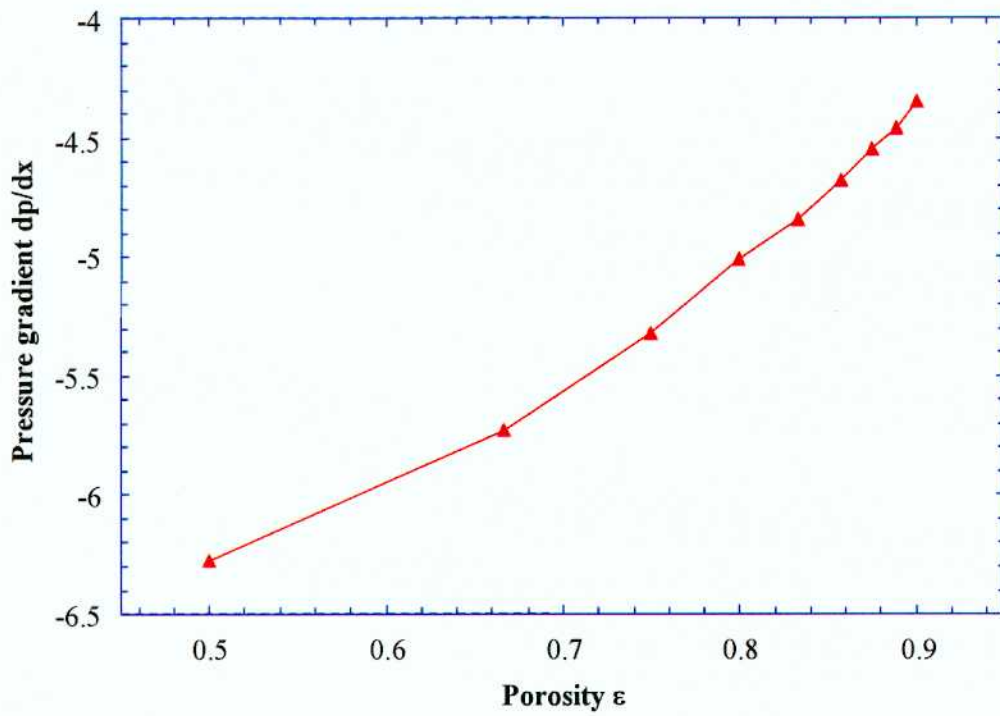


Fig. 4.7.14 Pressure gradient for different porosity porous media

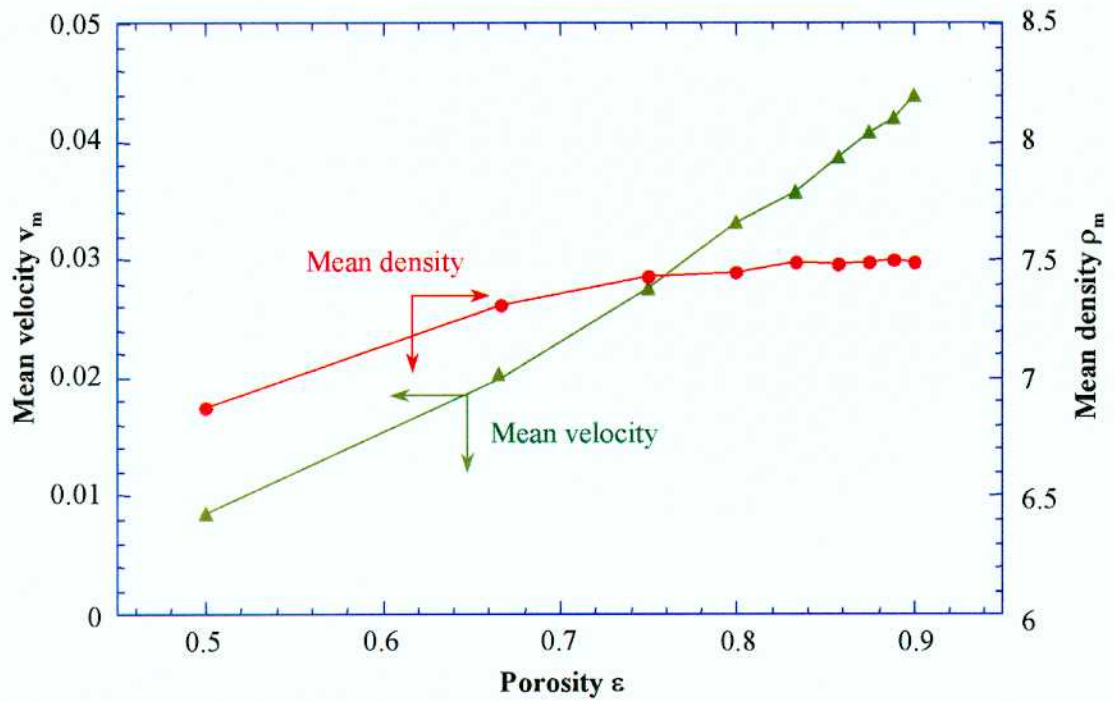


Fig. 4.7.15 Mean velocity and mean density for different porosity porous media

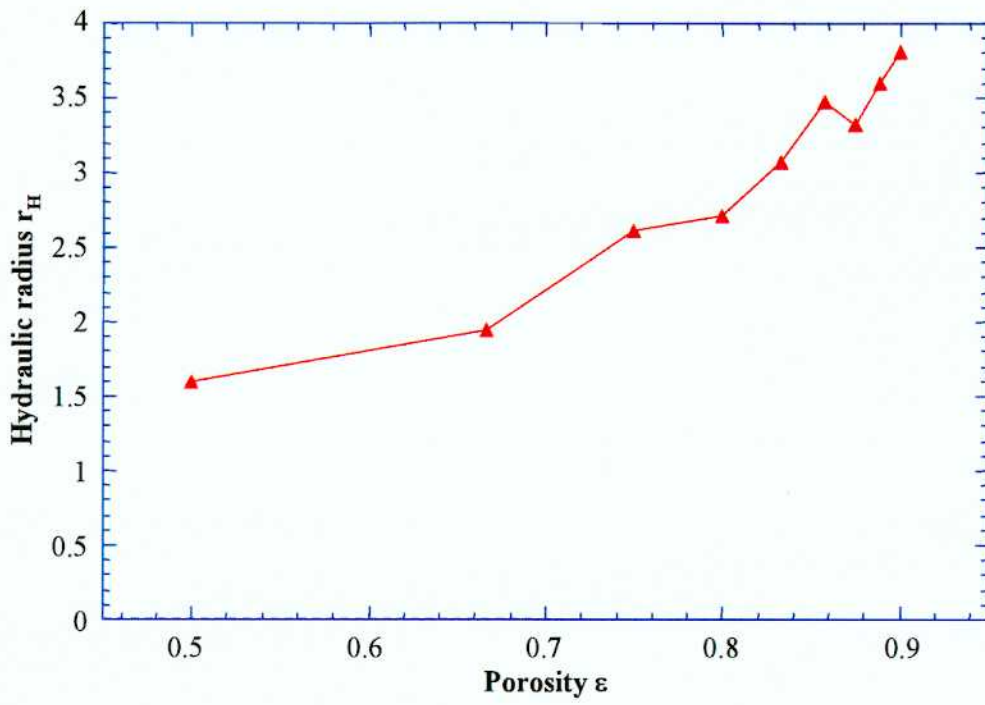


Fig. 4.7.16 Hydraulic diameter for different porosity porous media

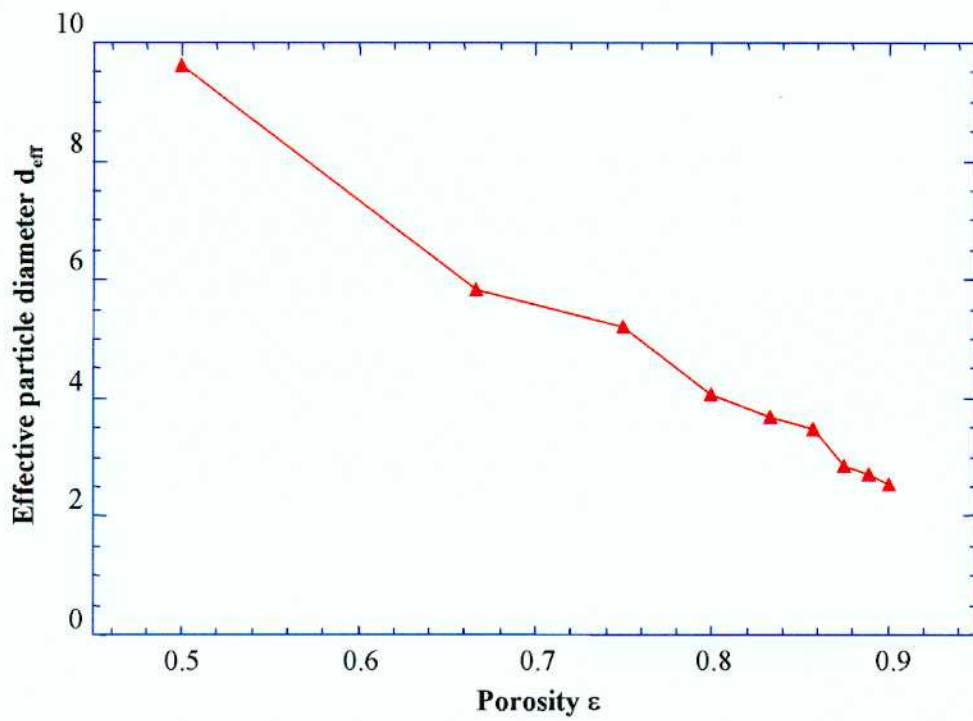


Fig. 4.7.17 Effective particle diameter for different porosity porous media

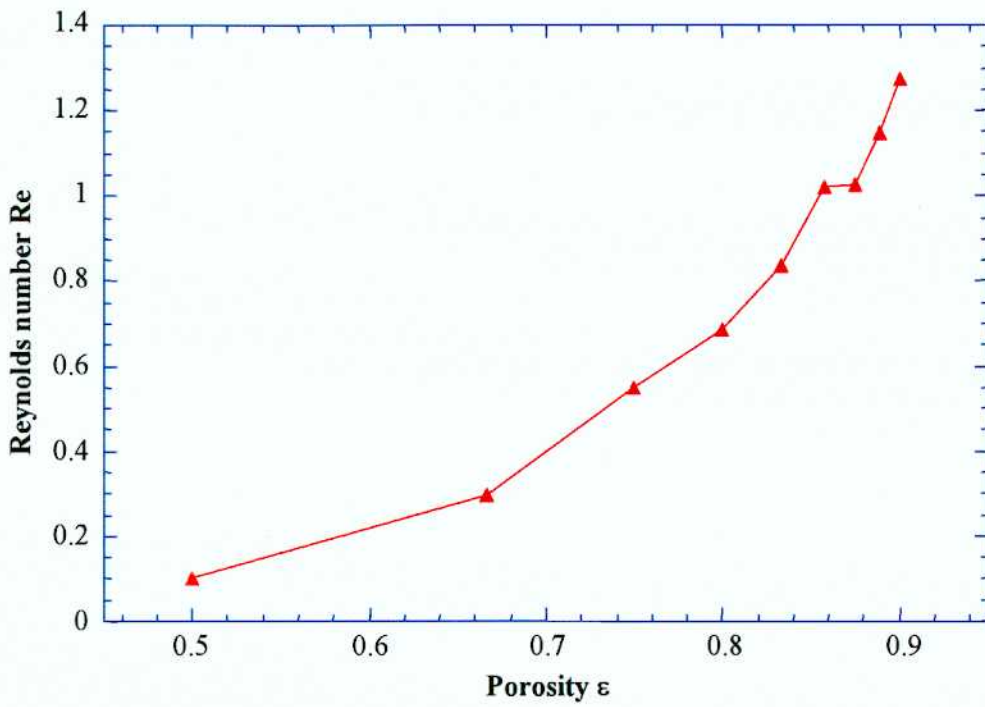


Fig. 4.7.18 Reynolds number for different porosity porous media

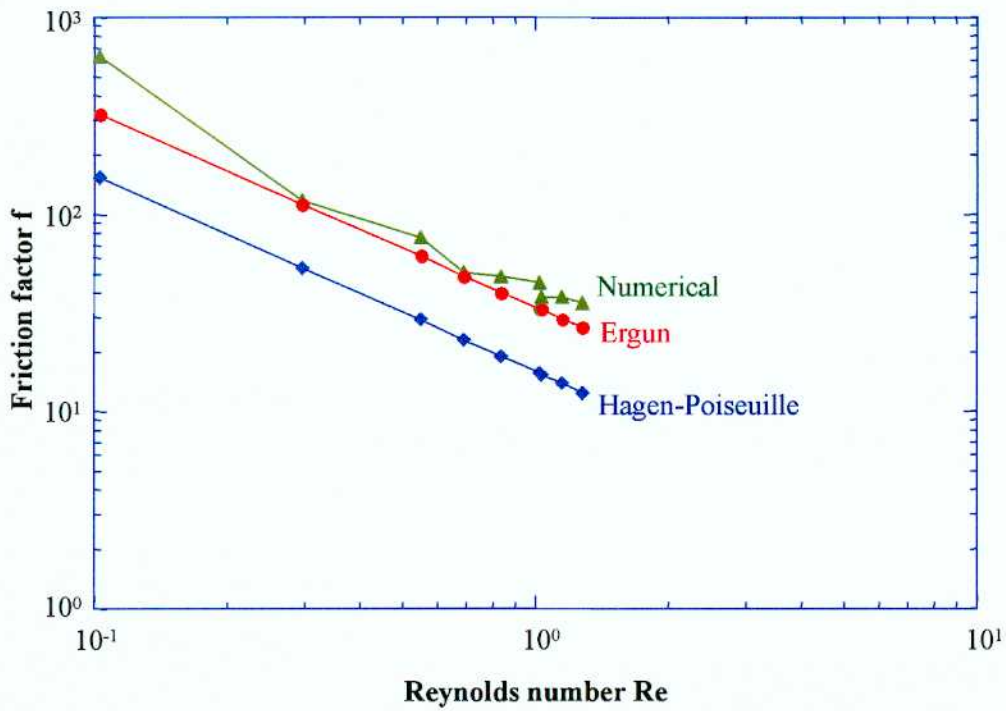


Fig. 4.7.19 Friction factor and comparison with existing theory

4.8. 沸騰現象の解析による 3 次元 15 速度伝熱・相変化モデルの検証

4.8.1. 解析概要

4.5 節で新たに構築した伝熱、相変化モデルが、沸騰・凝縮現象を再現するのにどの程度有効なツールとなりうるか検証を行うために、沸騰現象に関する数値シミュレーションを行うこととした。

図 4.8.1 に沸騰現象の数値シミュレーションで設定した計算体系を示す。計算領域の大きさは x、y、z 方向に $64 \times 64 \times 192$ 格子と設定した。高温球を模擬した加熱壁を有する固体球（直径 10）を $z = 32$ の位置に配置した。計算開始時には領域内を青粒子のみで満たしてあり、初期平均数密度は 0.5 と設定した。表 4.8.1 に本計算の計算条件を示す。

加熱壁変数	:	$\varepsilon = 0.001 \rightarrow 1.0$
重力効果変数	:	$g = 1/100$
蒸発効果変数	:	$\theta_v = 0.0$
凝縮効果変数	:	$\theta_c = 0.0, 0.1$

Table 4.8.1 Computational condition for boiling phenomena

4.8.2. 解析結果

まず初めに、沸騰現象に関する計算を行う前に、先に構築したモデルが実現象における圧力-温度曲線を再現できるかどうかの検証を数値実験を用いて行うこととした。その結果を図 4.8.2 に示す。縦軸は式(4.5.1)より評価した温度、横軸は式(4.5.2)より評価した圧力を示している。また、図中の赤丸は蒸発が発生した点を示し、青三角は凝縮が発生した点を示している。本計算では、緑線で示されている飽和曲線を以下の式で表すこととした。

$$T = 2.45455 \cdot \ln(P + 1) \quad (4.8.1)$$

この図より、飽和曲線より上の領域では蒸発が生じており、下の領域では凝縮が生じていることが確認でき、4.5 節で新たに開発した相変化モデルが計算に反映されていることが確認できた。

次に、このモデルを用いて沸騰現象に関する解析を行った。その結果を図 4.8.3 に示す。これらの図において、灰色の球は加熱壁を有する固体球を表している。また、赤の面は赤流体成分と青流体成分の界面、すなわち、赤粒子の割合と青粒子の割合が等しくなる等値面を示している。

図 4.8.3(a)は $\theta_v = 0.0$ 、 $\theta_c = 0.0$ と設定した場合の沸騰現象に関する計算結果、すなわち壁伝熱の効果のみを考慮した場合の計算結果を示している。計算を開始した時点では計算領域内に赤成分流体が存在していないが、サイクル 50 において固体球表面上に赤成分流体が生成し始めている様子が示された。サイクル 200 において、固体球表面上で生成した赤成分流体が固体球表面全体を覆う様子が示された。サイクル 1,000 では、赤成分流体が重力効果によって上方へと伸張する様子が示された。サイクル 5,000 では、赤成分流体の気泡が周期的に生成・離脱して領域内を上昇する様子が示された。

図 4.8.3(b)は $\theta_v = 0.0$ 、 $\theta_c = 0.1$ と設定した場合の沸騰現象に関する計算結果、すなわち壁伝熱ならびに凝縮の効果を検討した場合の計算結果を示している。図 4.8.3(a)に示す計算結果と同様に、計算を開始

した時点では計算領域内に赤成分流体が存在していない。サイクル 60 において固体球表面上に赤成分流体が生成し始めている様子が示された。サイクル 200 において、固体球表面上で生成した赤成分流体が鋼球表面全体を覆う様子が示された。しかしながら、サイクル 1,000 以降、図 4.8.3(a)に示す計算結果とは異なり赤成分流体が重力効果によって上方へと伸張する様子は見られなかった。これは、固体球表面で生成した赤粒子が、本研究で構築した凝縮効果により界面近傍で青粒子に変化し、上方に離脱するのに十分な赤粒子が固体球表面上に存在していないためであると思われる。

これらの結果より、本研究で構築した伝熱モデルを用いて沸騰現象を定性的に再現できる可能性が示唆された。

4.8.3. 熱流束の評価ならびに飽和曲線との比較

次に、本計算で行った沸騰現象を定量的に評価して、本研究で開発した伝熱モデルの更なる検証を行うこととした。物理量として、固体球表面より放出する熱流束を評価することとした。固体球表面より放出される熱流束 N は以下の式によって定義することとした。

$$N = \frac{\sum_A P_{RB}}{A} \quad (4.8.2)$$

ここで用いられている記号は以下のとおりである。

- N : 固体球表面より放出される熱流束
- P_{RB} : 固体球表面において青粒子から赤粒子に変化した粒子数
- A : 固体球の表面積

図 4.8.4 に、熱流束と加熱壁変数の関係を示す。横軸は固体球の加熱壁変数 ε を示しており、縦軸は式 (4.8.2)より評価した熱流束を示している。この図では図 4.8.3(a) ($\theta_v = 0.0$ 、 $\theta_c = 0.0$ の場合)と図 4.8.3(b) ($\theta_v = 0.0$ 、 $\theta_c = 0.1$ の場合)に対応した曲線が示されている。赤の曲線は(i) $\theta_v = 0.0$ 、 $\theta_c = 0.0$ の場合に対する結果を示しており、青の線は(ii) $\theta_v = 0.0$ 、 $\theta_c = 0.1$ の場合に対する結果を示している。また図中の記号(A)~(F)と(a)~(f)はそれぞれ図 4.8.3(a)、(b)中の画像の下部に付された記号に対応している。

計算を開始した時点では熱流束はゼロであったが、時刻(A)、(a)において加熱壁変数 ε の増加とともに熱流束が増加し始めている。しかしながら、この時刻には固体球表面上には赤成分流体は存在していなかった。時刻(B)、(b)において熱流束は最大となり、固体球表面上に赤成分流体が現れ始めた。時刻(C)、(D)ならびに時刻(c)、(d)において、加熱壁変数 ε が増加するにつれて熱流束が減少する様子が示された。この時刻において、固体球表面は赤成分流体で覆われ始めていた。時刻(E)、(F)ならびに時刻(e)、(f)において、熱流束はほぼ一定の値となることが示された。この時刻には、固体球表面は全体的に赤成分流体で覆われていた。

どちらの条件においても、曲線は同じ傾向となることが示された。しかしながら、加熱壁変数 ε にわたって、凝縮効果を考慮した(ii)の場合の熱流束が考慮していない(i)の場合の熱流束より大きくなることが示された。これは、加熱壁面上で生成した赤粒子が凝縮効果のために青粒子に変化し、次のサイクル

でこれらの青粒子が赤粒子に変化する。結果的に、凝縮効果が無い場合より赤粒子に変化する粒子数が多くなり熱流束が増加することとなる。

対流熱伝達領域、核沸騰領域、遷移沸騰領域において、これらの傾向は実現象における沸騰曲線とほぼ同じである。しかしながら、本モデルでは加熱壁から蒸気泡への熱伝達ならびに熱輻射を考慮していないので、膜沸騰領域はあまり良く再現されていないことが示された。

以上の結果より、本モデルは伝熱ならびに相変化現象を再現しうるのに有効なツールとなることが示された。

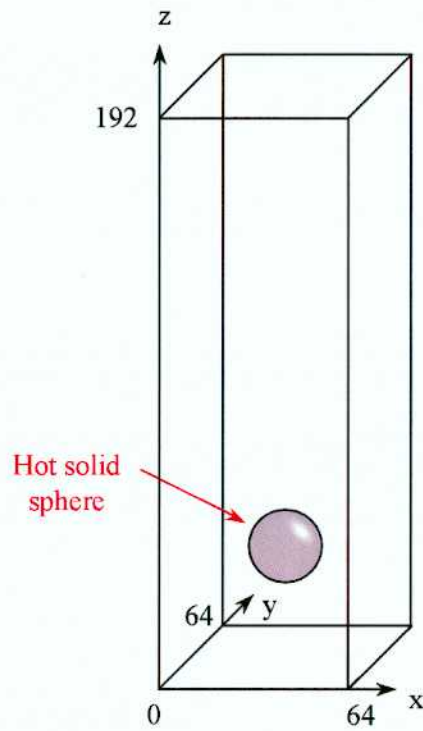


Fig. 4.8.1 Computational domain for numerical simulation of boiling phenomena

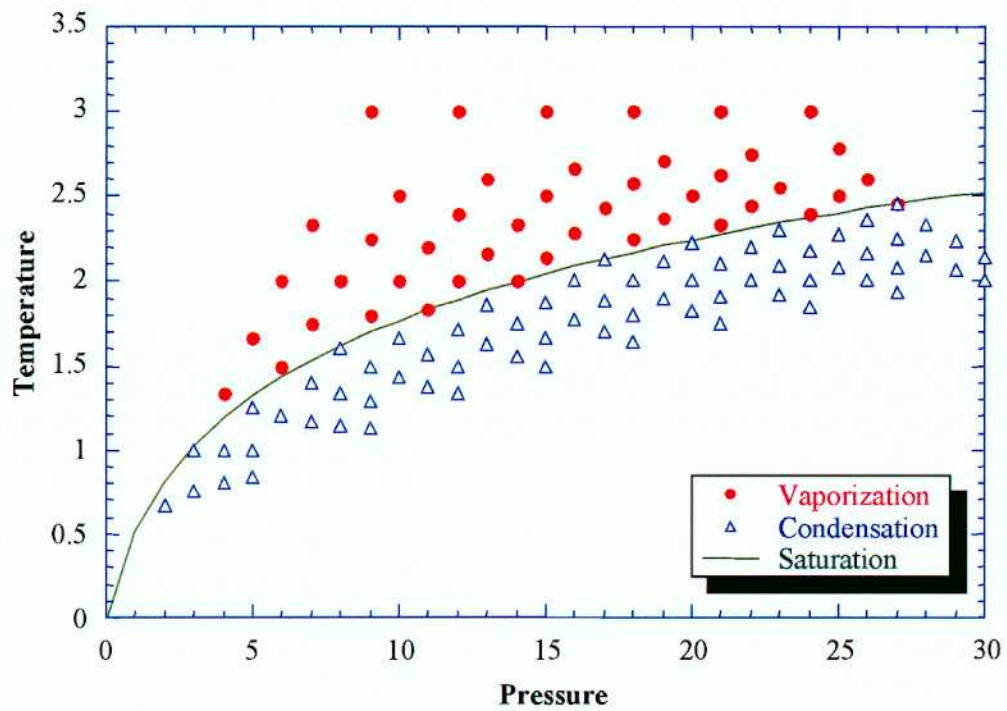


Fig. 4.8.2 Pressure- temperature diagram by numerical experiment

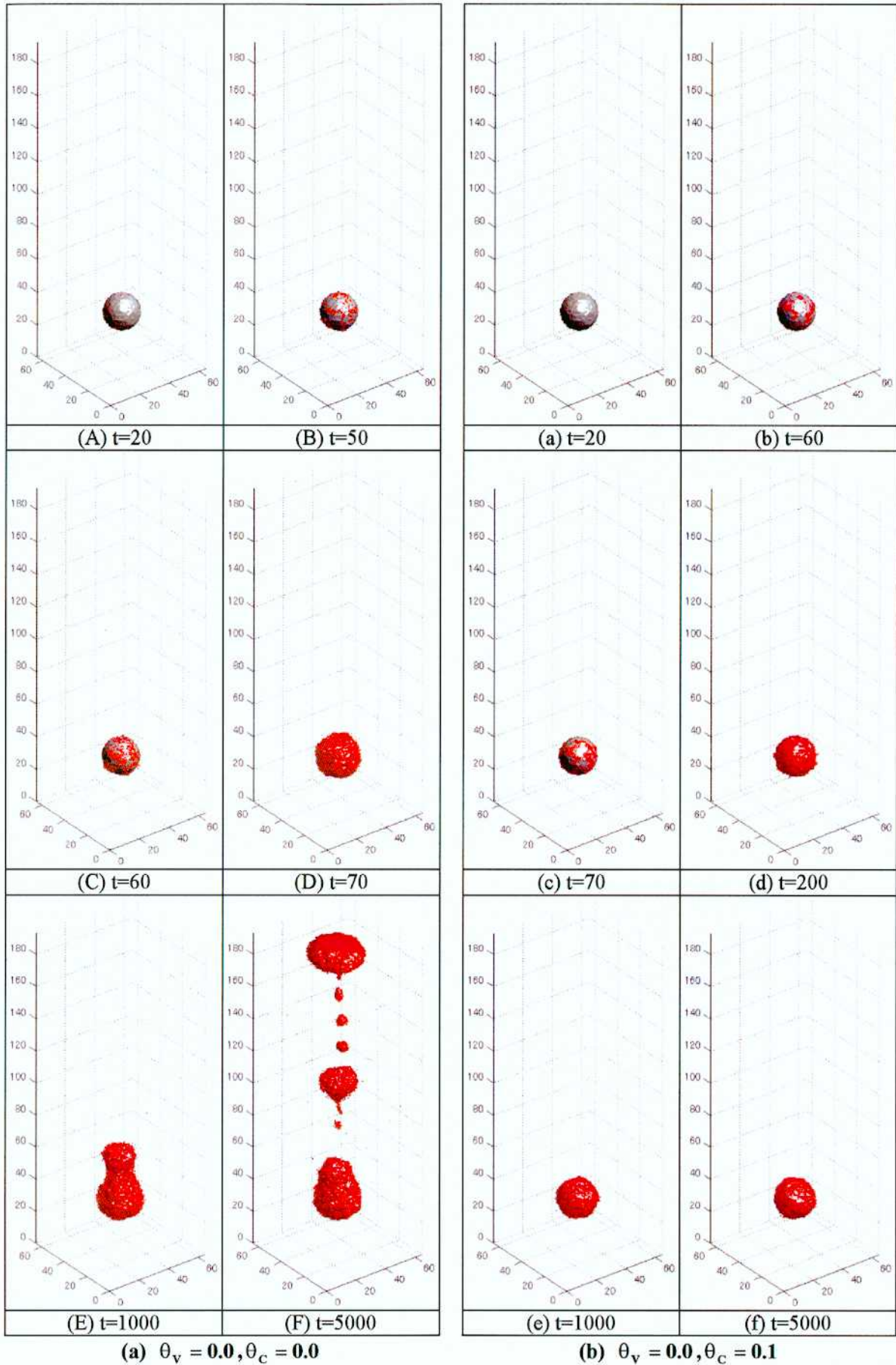


Fig. 4.8.3 Computational result of boiling phenomena

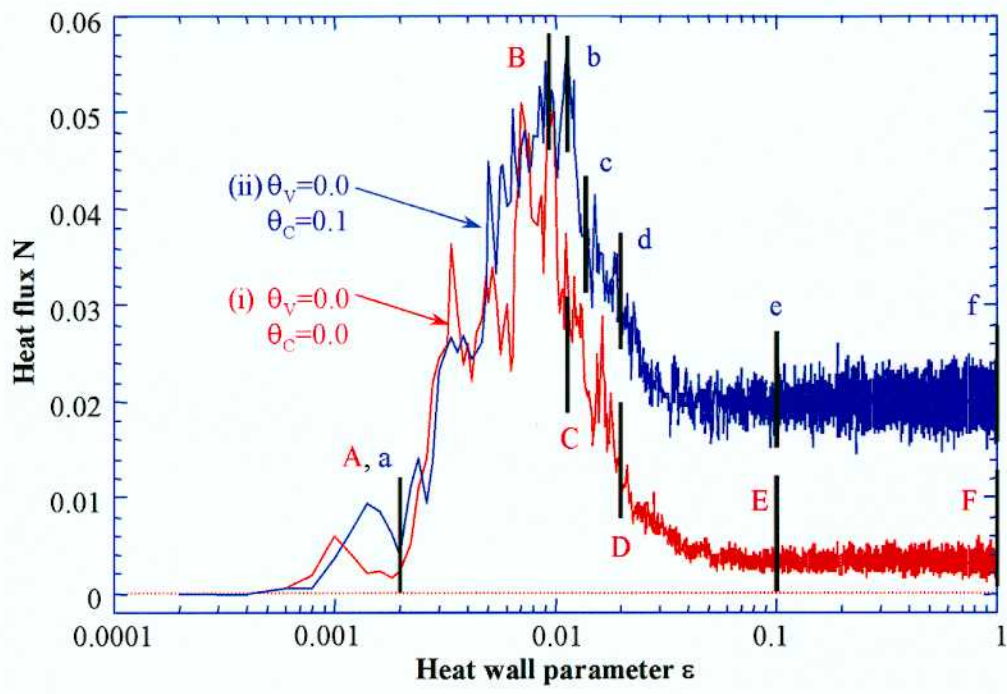


Fig. 4.8.4 Relationship between heat flux and heat wall parameter

4.9. 格子ガスオートマトン法の開発に関するまとめ

本研究では、蒸気膜の崩壊挙動を解析する手法として微視的な流動を解析する手法の1つとして提唱されている格子ガスオートマトン法を用いることとした。そこで本章では、この3次元的同时に伝熱・相変化現象の解析を行うために従来提唱されている格子ガスオートマトン法の2次元モデルを拡張し、新たに3次元15速度LGAモデル、3次元15速度ILGモデルならびに伝熱・相変化モデルを開発した。これらのモデルに関する検証を行うために以下の検証計算を行った。

まず初めに3次元15速度ILGモデルの検証を行うために、二成分混合流体の凝集・分離挙動の計算を行った。その結果、以下の知見を得た。

- 初めに、よく混合した二成分流体の凝集・分離計算を行った。その結果、時間の経過とともに界面の大きさが減少してゆく様子が示され、同じ成分同士が凝集し、各成分に分離してゆく様子が示された。また、界面積の時間変化をLifshitz-Slyozovの理論と比較したところ、定性的に類似する傾向が見られた。さらにILGモデルにおける色仕事と界面積の間には相関関係があり、色仕事により二成分間の界面積を評価することが出来ることを確認した。
- 計算領域内に配置する粒子の数密度を変化させた条件で凝集・分離の計算を行った。その結果、数密度を変化させることで界面の形状の複雑さ、すなわち凝集・分離の度合いが変化することが示された。
- さらに、数密度を一定として計算領域内に配置する赤・青粒子の割合を変化させた条件下で凝集・分離の計算を行った。その結果、赤・青粒子の割合が等しい場合にはそれぞれの成分が連続して分布しているのに対し、一方の成分の割合を増加させると他方の成分が粒状に分散する様子が見られた。

これらの特性から、新たに開発した3次元15速度ILGモデルは界面の変形を伴う流体の挙動を解析するのに有効なツールとなりうることを示された。

次に、3次元15速度LGAモデルの検証を行うために、多孔質体内部の流動に関する計算を行った。その結果、以下の知見を得た。

- 二成分流体の凝集・分離計算より得られた複雑形状を多孔質体とみなし、内部に流体を流したときの流動に関する解析を行った。その結果、多孔質体の入口、出口で圧力勾配を与えると、圧力勾配を与えた方向に流動が生じた。また、出口端において流速を測定した実験結果と計算結果を比較すると、定性的な一致が見られた。
- 領域に配置する多孔質体の空隙率を変化させて計算を行った。その結果、空隙率が大きくなるにつれて入口-出口間の圧力勾配が小さくなることが示された。さらに、空隙率が大きくなるにつれて多孔質体内部にわたって流動が生じていることが示された。
- 従来提唱されている多孔質体内部の摩擦損失係数を記述するErgunの式と計算結果より評価された摩擦損失係数の比較を行った。その結果、両者は定性的な一致が見られ、またその値もほぼ同じとなることが示された。

これらの結果より、新たに開発した3次元15速度LGAモデルは複雑流路内流動のような微視的な流体の挙動を再現するのに有効なツールとなりうることを示された。

さらに、本章で新たに開発した伝熱・相変化モデルの検証を行うため、沸騰現象に関する解析を行うこととした。その結果、以下の知見を得た。

- 高温の固体球を用いた場合の沸騰現象に関する数値シミュレーションを行い、固体球周りを膜が覆う様子、ならびに気泡となって離脱・上昇する様子を再現することが出来た。また、凝縮の効果を考慮することで、水のサブクーリングの効果を再現できることが出来た。
- 固体球表面より放出される熱流束の評価を行い、実現象における沸騰曲線との比較を行った結果、ほぼ定性的に一致する様子が見られた。

これらの結果より、新たに開発した伝熱・相変化モデルは沸騰・凝縮現象を再現するのに有効なツールとなりうることが示された。