# 格子ボルツマン法を用いた液体の沸騰現象の数値解析

Numerical analysis of boiling phenomena of liquid by the lattice Boltzmann method

精密工学専攻　24 号　坂原隆太郎

Ryutaro Sakahara

## 1. はじめに

数ある相変化現象の代表的な例として沸騰現象がある．沸騰現象は日常生活においても身近な現象であるが，工業的にも幅広く応用されている現象である．沸騰現象は Fig. 1 で見られるように核沸騰，膜沸騰とその中間領域である遷移沸騰の 3 つの状態に分けられる．核沸騰は 液体が沸点に超えてから熱流束が Fig. 1 中の臨界熱流束 (CHF) 付近に達するまでの I の箇所を指し，この現象を利用することで，伝熱面からエネルギーをより効率的に持ち出すことができる．しかし 膜沸騰へ遷移すると加熱面が気体に覆われるが，液体に比べて熱伝達率が低いため加熱面の温度が上昇し続け，仮に伝熱面の物質の融点に達したとき，いわゆるバーンアウトを引き起こし，重大な事故につながる恐れもある．このような事を防ぐためにも沸騰現象の伝熱特性を予測できる数値計算のためのモデルが必要となる．

本研究では核沸騰現象の解析を通して核生成過程における相変化モデルを構築し，同時に気泡の動きや伝熱特性を求め，さらに実際の沸騰現象のように一連の反応を連続的に再現することを目的とする. 今回の数値解析には界面移動による未知数の増加がなく，ミクロな現象である核生成過程のスケールに近い手法である格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method，LBM) を用いる．

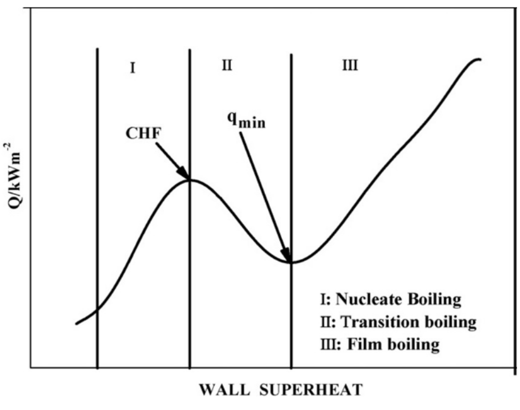



Fig. 1　Boiling curve[1]

## 2. 格子ボルツマン法

### 2.1 流体の表現

格子ボルツマン法では，流体は巨視的な物体よりは十分小さいが分子などの微視的な粒子よりは十分大きい仮想粒子の集合として表現される．この仮想粒子の考え方より，解析対象としては連続体を想定しており，かつ粒子の運動は微視的な物理現象の基本を損ねない程度にモデル化した制限されたものとなる．これらの仮想粒子の運動は粒子間での衝突と並進の 2 種類でのみ表現される．Fig. 2 に示すように衝突の過程で新たな仮想粒子の分布を計算する．このとき衝突は瞬時に起こり，並進の際に仮想粒子を移動させるのと同時に $\Delta t$ だけ時間を進める．

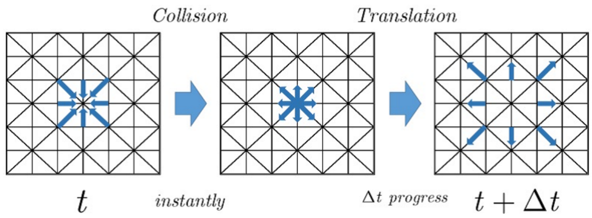



Fig. 2　Time developmennt

### 2.2 粒子分布関数

格子ボルツマン法では，粒子の運動を計算する領域を Fig. 3 (a) のような規則格子を用いて離散化する．仮想粒子は常にその格子点上に存在しているものとして，仮想粒子は時間ステップごとに Fig. 3 (b) のような格子線に沿った方向へと分布する．時刻 $t$ での位置 $\mathbf{r}$ においての粒子の分布は粒子分布関数 $f_i(t,\mathbf{r})$ のように表される．なお，下付き添字 $i$ は粒子の進む方向を表す．

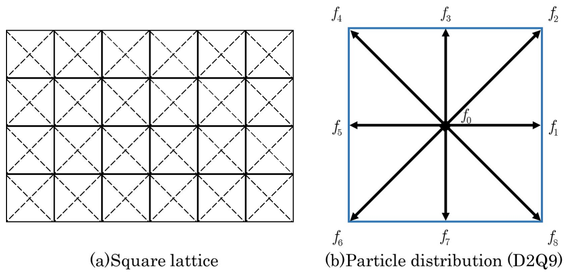



Fig. 3　Particle distribution function

### 2.3 格子ボルツマン方程式

今回用いる支配方程式として粒子分布関数を用いて表された式である式 (1) の格子ボルツマン方程式を用いて計算を行う．

$$f_i(t+\Delta t,\mathbf{r}+\mathbf{e}_i{\cdot}\Delta t) = f_i(t,\mathbf{r}) + \Omega_i[f_i(t,\mathbf{r})] \qquad (1)$$

ここでの $\Omega_i$ は衝突による粒子分布の変化を表すための衝突演算子である．本研究では格子 BGK モデルと呼ばれる衝突演算子を用いる．このとき式 (1) は式 (2) のように書き換えられる．

$$f_i(t+\Delta t,\mathbf{r}+\mathbf{e}_i{\cdot}\Delta t) = f_i(t,\mathbf{r}) - \frac{1}{\tau}[f_i(t,\mathbf{r}) - f_i^{eq}(t,\mathbf{r})] \quad (2)$$

$\tau$ は単一緩和時間係数を表す．式 (2) は各時間ステップごとにちょうど隣接する格子点へと移動できる速さ $c$ をもつ粒子がどれだけ存在するかを示す指標である．二次元 9 方向分布モデル（D2Q9 モデル）の粒子の速度 $\mathbf{e}_i$ は式 (3) で表される．

$$\mathbf{e}_i = \begin{cases} (0,0) & i=0 \\ (\pm1,0)c,(0,\pm1)c & i=2,4,6,8 \\ (\pm1,\pm1)c & i=1,3,5,7 \end{cases} \tag{3}$$

粒子分布関数から密度や速度といった実際の流体の物理量への変換は次のように行われる．

$$\rho = \sum_i f_i \quad , \quad \rho\mathbf{u} = \sum_i f_i \mathbf{e}_i \tag{4}$$

### 2.4 気液二相流の流れ解析

本研究では気液二相流を表現するため，Pseudo-potential LBM モデル [2] を用いて計算を行う．密度，速度の計算は式 (5) を用いる．

$$\begin{aligned} &f_i(t+\Delta t, \mathbf{r}+\mathbf{e}_i\cdot\Delta t) \\ &\quad = f_i(t,\mathbf{r}) - \frac{1}{\tau}[f_i(t,\mathbf{r}) - f_i^{eq}(t,\mathbf{r})] + \Delta f_i(t,\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{5}$$

このように式 (2) に更に右辺第三項の体積力項を付加することで，相変化による影響を直接反映させることで気液の分離を表現できる．$f_i^{eq}$ は局所平衡分布関数といい，任意の点での平衡状態における粒子分布であり，以下のように表される．

$$f_i^{eq} = \omega_i \rho \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{u})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{u}\cdot\mathbf{u}}{c_s^2} \right] \tag{6}$$

ここで $c_s = \dfrac{1}{\sqrt{3}}$，$\omega_i$ は各方向へ進む粒子の割合を示す重み係数である．式 (5) の体積力項は，

$$\Delta f_i(t,\mathbf{r}) = f_i^{eq}(\rho(t,\mathbf{r}), \mathbf{u}+\Delta\mathbf{u}) - f_i^{eq}(\rho(t,\mathbf{r}),\mathbf{u}) \tag{7}$$

で表す．ここで $\Delta\mathbf{u} = \dfrac{\mathbf{F}\Delta t}{\rho}$ であり，体積力の影響で生じる速度増分を表す．体積力 $\mathbf{F}$ は以下に示す 3 つの成分で構成される．

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{int}(\mathbf{r}) + \mathbf{F}_s(\mathbf{r}) + \mathbf{F}_g(\mathbf{r}) \tag{8}$$

$\mathbf{F}_{int}$ は分子間力，$\mathbf{F}_s$ は流体と壁との相互作用力，$\mathbf{F}_g$ は重力を表し，それぞれ以下のように計算される．

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{int} = &-\beta\psi(\mathbf{r})\sum_{\mathbf{r}'}\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) \\ &-\frac{1-\beta}{2}\sum_{\mathbf{r}'}\mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r}')\psi^2(\mathbf{r}')(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{9}$$

$$\mathbf{F}_s = -(1-e^{-\rho(\mathbf{r})})\sum_i g_s\omega_i s(\mathbf{r}+\mathbf{e}_i\Delta t)\cdot\mathbf{e}_i\Delta t \tag{10}$$

$$\mathbf{F}_g = \mathbf{G}(\rho(\mathbf{r}) - \rho_{ave}) \tag{11}$$

Pseudo-potential LBM モデルでは式 (2) の格子ボルツマン方程式に体積力項を付加しているため，実際の流速 $\mathbf{U}$ を計算する際には式 (3) ではなく次式を用いる．

$$\rho\mathbf{U} = \sum_i f_i\mathbf{e}_i + \frac{\Delta t}{2}\mathbf{F} \tag{12}$$

### 2.5 温度場の解析

本研究での温度場を支配する方程式として，密度の粒子分布関数 $f_i$ とは別に温度分布関数 $g_i$ を新たに定義し，双方を独立に解くことで熱流体運動を表現する．温度分布関数は式 (5) と同様に，格子 BGK モデルを用いて式 (13) のように表す．

$$\begin{aligned} &g_i(t+\Delta t, \mathbf{r}+\mathbf{e}_i\cdot\Delta t) \\ &\quad = g_i(t,\mathbf{r}) - \frac{1}{\tau_T}[g_i(t,\mathbf{r}) - g_i^{eq}(t,\mathbf{r})] + \Delta t\omega_i\phi \end{aligned} \tag{13}$$

ここでの $\tau_T$ は温度分布に関する単一緩和時間係数，$\phi$ は相変化を表すソース項である．式 (13) の $g_i^{eq}$ は温度分布における局所平衡分布関数であり，式 (14) のように示す．

$$g_i^{eq} = \omega_i T \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{U}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i\cdot\mathbf{U})^2}{2c_s^4} - \frac{\mathbf{U}\cdot\mathbf{U}}{c_s^2} \right] \tag{14}$$

式 (13) 中で用いられているソース項 $\phi$ についてはエントロピーのバランス方程式，エントロピーの熱力学的関係式，質量保存の方程式を用いると式 (15) のように表される．

$$\phi = T\left[1 - \frac{1}{\rho c_v}\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_\rho\right]\nabla\cdot\mathbf{U} \tag{15}$$

温度分布関数から実際の流体の温度 $T$ を算出する際には次式を用いる．

$$T = \sum_i g_i \tag{16}$$

## 3. 境界条件

### 3.1 開放境界条件

本研究では，加熱による気泡の生成から分離，上昇といったサイクルを連続的に表現するために，計算領域上部に開放境界条件を設定する．早坂 [3] は温度場に関しては移流方程式，密度，速度の計算に関しては一般的に良く用いられる一定圧力一定温度条件を可変圧力可変温度条件へ改良した新たな開放境界条件を提案した．しかし，気泡が境界付近に近づいた際に計算が破綻していた．

そのため本研究では温度場の条件は変えずに，密度，速度に関して新たな開放境界条件として Characteristic Boundary Condition(CBC) の導入を検討した [4]．

### 3.2 Characteristic boundary condition

この条件は境界上で流れの流線に沿って計算を行うものである．各ステップの衝突並進過程を計算後，式 (17) に示すナビエ・ストークス方程式を開放境界上の点の物理量を用いて解くことでそのステップでの境界の 1 つ上流点の

物理量を求める．求められた密度，速度を式 (6) を用いて新たな粒子分布関数 $f_i$ を決定する．計算領域外部から内部に入ってくる方向の粒子分布関数が未知であるので，そこに代入することで開放境界を表現する．

$$
\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} v \\ u \\ \rho \\ p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \dfrac{1}{\rho c_s}(L_4 - L_1) \\ L_3 \\ L_2 + \dfrac{1}{c_s^2}(L_4 + L_1) \\ L_4 + L_1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{u}_t \cdot \nabla_t v \\ \mathbf{u}_t \cdot \nabla_t v + \dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial p}{\partial y} \\ \nabla_t \cdot (\rho \mathbf{u}_t) \\ \mathbf{u}_t \cdot \nabla_t p + \gamma p \nabla_t \cdot \mathbf{u}_t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_u \\ d_v \\ d_\rho \\ d_p \end{bmatrix} \tag{17}
$$

式 (17) での $L_i$ は以下のように示す．

$$
\begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \\ L_3 \\ L_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dfrac{\lambda_1}{2}\left(\dfrac{\partial p}{\partial y} - \rho c_s \dfrac{\partial v}{\partial y}\right) \\ \lambda_2 \left(\dfrac{\partial \rho}{\partial y} - \dfrac{1}{c_s^2}\dfrac{\partial p}{\partial y}\right) \\ \lambda_3 \dfrac{\partial u}{\partial y} \\ \dfrac{\lambda_4}{2}\left(\dfrac{\partial p}{\partial y} + \rho c_s \dfrac{\partial v}{\partial y}\right) \end{bmatrix} \tag{18}
$$

なお，式中の導関数は後退差分で近似する．

### 3.3 温度場での境界条件

温度場における開放境界条件は，有限要素法で用いられている線形移流方程式 [5] を格子ボルツマン法へ適用することで計算する．線形移流方程式は，

$$
\frac{\partial T}{\partial t} + U\frac{\partial T}{\partial n} = 0 \tag{19}
$$

のように与えられる．ここでの $\mathbf{U}$ は移流速度であり，本研究では移流速度を定数とし，開放境界に対して法線方向の成分の計算を行うため，式 (19) を時間方向に前進差分，空間方向には後退差分によって近似した次式を用いて開放境界上の温度を計算する．

$$
\begin{aligned} T^{t+\Delta t}(\mathbf{r}) &= \\ &T^t(\mathbf{r}) - U\left[T^t(\mathbf{r}) - T^t(\mathbf{r} + \mathbf{e}_7 \cdot \Delta t)\right] \end{aligned} \tag{20}
$$

## 4. 数値計算

### 4.1 開放境界条件 (CBC) の検証

新たに導入した開放境界条件である CBC の有用性を検証するためのベンチマーク問題として，初期状態の底面付近に気泡を予め設置し，その気泡が浮力によって上昇し，開放境界を通過する過程のシミュレーションを行う．このとき流体内は一定温度とする．

この計算で用いる計算モデルを Fig. 4 に示す．幅 450 格子点，高さ 600 格子点とし，側面は周期境界，底面は断熱壁境界，上面は前述のＣＢＣを適用した開放境界とする．温度場についての計算は行わず，領域全体を一定温度 $T = 0.9T_c$，重力加速度を 10 m/s$^2$ として計算する．

気泡が上昇し，境界に到達した際の境界付近を拡大した結果を Fig. 5 に示す．境界を越える際に気泡が徐々に小さくなり，最終的には計算領域内から消える結果を得られた．その後の計算領域への影響として Fig. 5(f) のような高い密度が出るが計算に大きな影響を与えるものではないことから，計算領域内への影響を最小限に抑えて気泡を上方へ移流させることに成功した．

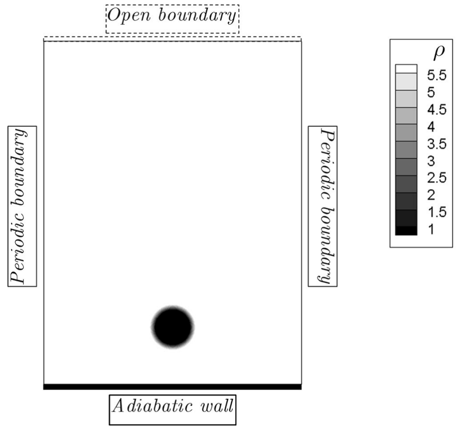
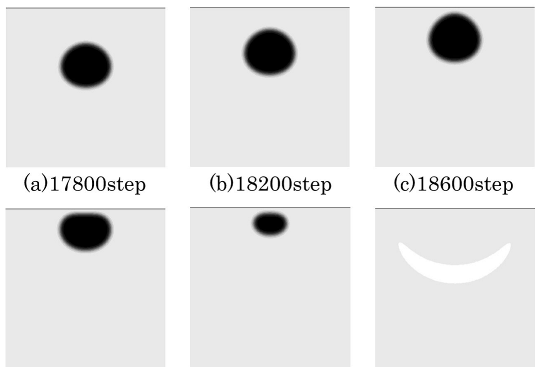



Fig. 4 Computational model of bubble rising



(a)17800step (b)18200step (c)18600step

(d)19000step (e)19400step (f)19800step

Fig. 5 Computational results of bubble rising

### 4.2 沸騰モデル

沸騰現象の解析に用いる計算モデルを Fig. 6 に示す．初期状態の温度は気泡上昇モデルと同様に $T = 0.9T_c$ とするが，沸騰モデルでは Fig. 6 の領域 Ω 内のように断熱壁の中心 3 格子点分にマイクロヒーターを設置し，ここから一定温度 $T_{wall} = 1.15T_c$ で加熱を行う．今後壁面にヒーターを取り付ける計算を行うため，底面と同様に断熱の壁条件とした．

まずマイクロヒーター付近での気泡の生成過程を比較を行った．計算領域は Gong ら [2] と同様に幅 150 格子点，高さ 450 格子点とした．底面付近での一定時間ステップおきの計算結果を比較したものを Fig. 7 に示す．気泡の核生成から徐々に気泡が成長していく様子が再現でき，双方の計算結果と比較しても，非常に類似した結果を得ることが出来た．

次に幅 450 格子点，高さ 600 格子点の計算モデルを用いて，気泡生成から更に時間を進めた計算結果を Fig. 8 に示す．気泡が成長し，ある程度の大きさで分離し，形を変えながら上昇していくという沸騰のサイクルが何度も繰り返されていることが分かる．開放境界付近を見ても計算が破綻することなく，次々と上昇してくる気泡を移流させることが出来ていることから，境界条件が十分に機能し，良好な計算結果を得ることが出来たといえる．

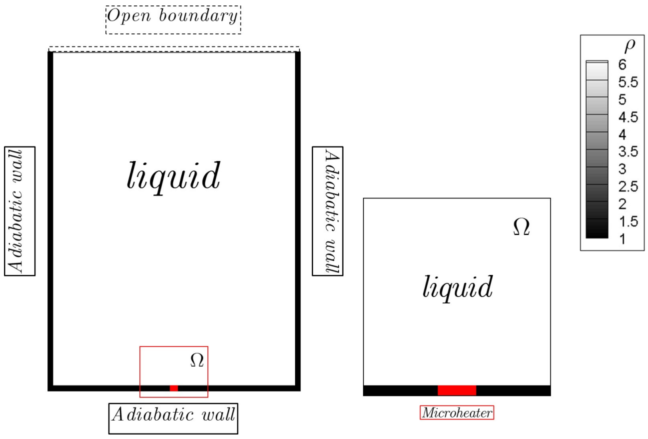
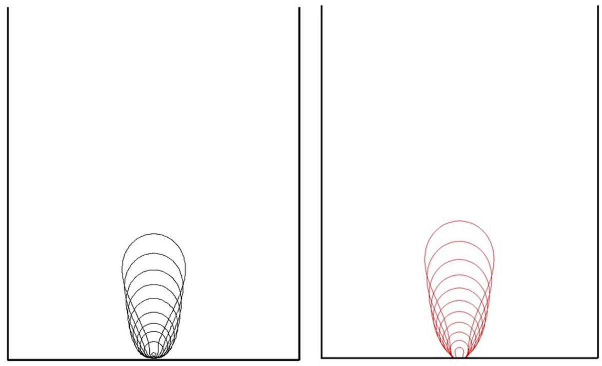
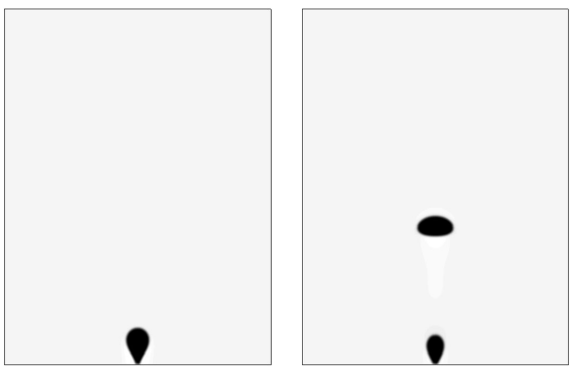



Fig. 6　Computational model of boiling



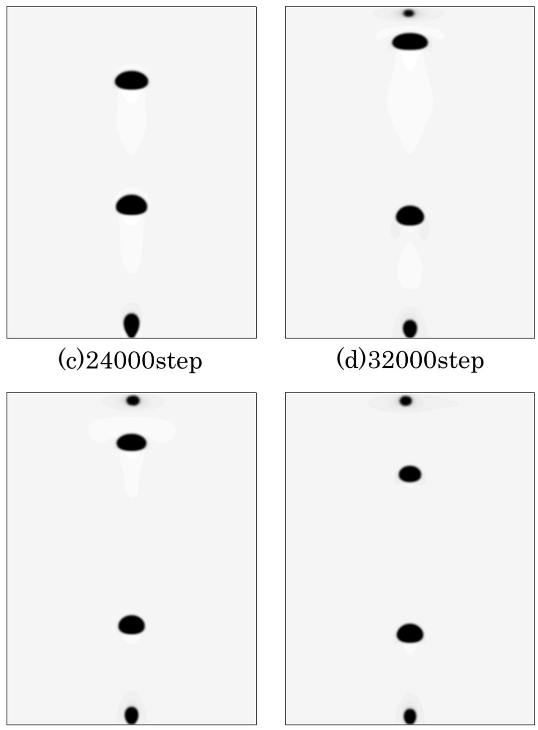
(a) Present calculation　　(b) S.Gong et al.[2]

Fig. 7　Bubble growth on a microheater before detachment



(a)8000step　　(b)16000step

Fig. 8　Computational results of boiling



(c)24000step　　(d)32000step

(e)40000step　　(f)48000step

Fig. 8　(Continued)

## 5. おわりに

格子ボルツマン法を用いた沸騰現象の数値解析において，CBC と移流方程式を併用した新しい開放境界条件を提案した．結果として，気泡を計算領域外へ移流させることに成功し，加熱をし続けることで気泡の生成から分離，上昇といったサイクルを複数にわたり長時間表現することが出来た．

## 参考文献

(1) H.M.Wei，G.H.Su，W.X.Tian，S.Z.Qiu，W.F.Ni，"Study on the characteristic points of boiling curve by using wavelet analysis and genetic neural network"，Nuclear Engineering and Design 239(2009) 2317-2325.

(2) S.Gong，P.Cheng，"A lattice Boltzmann method for simulation of liquid-vapor phase-change heat transfer"，International Journal of Heat and Mass Transfer，55 (2012) 4923-4927

(3) 早坂素, 格子ボルツマン法を用いた沸騰現象の数値解析, 修士論文, 中央大学 (2016).

(4) Narina Jung, Hae Won Seo, Chun Sang Yoo, "Two-dimensional characteristic boundary conditions for open boundaries in the lattice Boltzmann methods" ,Journal of Computational Physics 302 (2015) 191-199.

(5) 中山司，岩崎潤，熱移動を伴う管内粘性流の有限要素法解析における流出境界条件に関する検討，日本機械学会論文集，**58**-554，(1992-10)pp.2989-2994