

令和 4 年 6 月 8 日現在

機関番号：34416

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2021

課題番号：19K04248

研究課題名（和文）固気液三相界面における濡れの物理モデル構築に関する研究

研究課題名（英文）Investigation of physical model for wettability on solid-liquid-gas interface

研究代表者

網 健行（Ami, Takeyuki）

関西大学・システム理工学部・准教授

研究者番号：00581654

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 1,300,000円

研究成果の概要（和文）：本研究は、固気液三相界面における濡れの物理モデルの構築および、濡れ性を考慮した沸騰現象の数値シミュレーションが目的である。計算手法としてVOF法を用い、沸騰・凝縮現象を取り扱うために、エネルギー方程式に相変化モデルの組み込み、さらに乱流による熱輸送量を考慮するため、低レイノルズ数モデルであるk- $\omega$  SSTモデルを組み込んだ。相変化モデルにおける物質輸送係数を蒸発と凝縮に対してそれぞれ異なる値を用いることで、強制流動サブクール沸騰における気泡挙動を数値的に再現することが可能となった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

濡れ性は固気液三相界面で生じる現象であり、その物理モデルの構築は様々な分野で応用が期待される。本研究では、濡れ性を考慮した強制流動沸騰現象の数値シミュレーションを実施した。相変化を伴う熱交換器、ボイラ、エアコン・冷凍機器におけるエバポレータ、コンデンサ、高性能電子機器冷却などにおいて高い冷却性能を持つ相変化熱伝達の解析、冷却・伝熱性能の評価を行う上で重要となるものである。様々な流動系に適用することが可能であり、上昇流のみならず水平流、下降流、傾斜流など実際の機器の設計に応じた解析が可能である。

研究成果の概要（英文）：The aim of this study is to construction of physical model for wettability on solid-liquid-gas interfaces and numerically realize the boiling phenomena taken account of wettability. The numerical simulation of boiling phenomena was implemented with VOF method. In this calculation, in order to calculate boiling and condensation phenomena, the phase change model was added to the energy conservation equation. Moreover, k- $\omega$  SST model in low Reynolds turbulent model was selected as the heat transfer term due to turbulent flow. The mass transfer coefficient for evaporation and condensation were set at different value each other. We successfully numerically have realized the bubble behavior in subcooled nucleate boiling.

研究分野：熱工学

キーワード：数値シミュレーション 伝熱工学 沸騰 濡れ性

### 1. 研究開始当初の背景

固相、液相、気相が共存する固気液三相界面は、例えば固体表面上に置かれた空気中の液滴、あるいは伝熱面から生成する沸騰気泡などにおいて形成され、その静的特性ならびに動的挙動は、これら諸現象を決定づける最も基本的な物理現象の一つである。固体表面上に微量の液体を設置した場合、“濡れる”特性を持つ場合(親水性)は、固体表面上で液膜が形成されるのに対し、“濡れない”特性を持つ場合(疎水性)は、固体表面上で球状の液滴が形成される。この特性を「濡れ性」という。近年の MEMS 技術の発達により、様々なマイクロ・ナノオーダーの熱流体・生化学分析デバイスが登場し、微細な液滴・気泡の挙動制御が求められている。これには濡れ性の物理モデルが必須となるが、濡れ性は固体と液体の組合せ、温度や圧力といった境界条件、そして固体表面の機械的構造によっても劇的に変化する。そのため、厳密な物理モデルの構築が困難である。工学分野ではこれを解決するために、固体表面と界面が成す液体の角度である接触角をあらかじめ計測しておき、これを用いてモデルの単純化を図っているのが現状である。また、沸騰気泡を取り扱う上では、伝熱面上での濡れ性に加えて、エネルギー方程式の導入と相変化モデルの組み込みが必要となる。本一連の研究により、電気二重層の電気ポテンシャル分布に起因したクーロン力を固液界面張力として組み込んだ簡易モデルを構築することで、基本的な濡れ性を表現することができたものの、より正確な物理モデル構築に向けたモデルの改良と拡張を行う必要がある。

### 2. 研究の目的

以下の2点が主な目的である。

(1) 従来手法で用いられる接触角などの工学的仮定は一切用いず、流体に作用する力のバランスのみで濡れ性を表現することができる物理モデルを構築し、数値シミュレーションによるモデル評価

(2) エネルギー方程式の導入による温度場への対応、さらに、相変化モデルの組み込みによる強制流動沸騰系におけるサブクール沸騰における気泡挙動に関する数値シミュレーションによる相変化モデルの評価

### 3. 研究の方法

(1) 電気二重層内の分子挙動を厳密に取り扱うために、電気二重層内の固体表面から  $1\mu\text{m}$  以下の固定層では、分子動力学法によるシミュレーションを導入し、拡散層では連続体近似による界面追跡を行い、これらをカップリングすることで、流動場全体の挙動予測を試みる。分子動力学法 (Molecular Dynamics) は、粒子一つ一つに対しニュートンの運動方程式を用いて、系の時間発展を求める手法であり、古典 MD 法の典型である LAMMPS を用いて数値シミュレーションの実施を試みた。これまで連続体に対して電気二重層内に形成される電気ポテンシャル分布をガイ・チャップマンモデルにより与え、この勾配に起因したクーロン力を電気流体力学的にナビエ・ストークス方程式に加えることで、固液界面張力を表現した。しかし、固定層において分子間力による電気二重層を表現するためには、粒子 - 粒子間におけるポテンシャルモデルを新たに構築する必要が明らかとなった。そのため、以下(2)に重点を置き、研究を進めた。

(2) 本一連の研究では、プール体系におけるオングストロームオーダーの沸騰気泡を対象に数値シミュレーションを行ったが、実機の沸騰現象を解析するには適していない。そのため、実用的なミリメートルオーダーで、より複雑で実際の流れである強制流動沸騰系を計算対象とした。計算手法には VOF (Volume of Fluid) 法<sup>①</sup>を用いた。VOF 法による計算手法を以下に簡単に示す。各セル内の液ホールドアップ $\varepsilon_L$ を、以下の相変化による湧き出し項を追加した輸送方程式により輸送する。

$$\frac{\partial \varepsilon_L}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \varepsilon_L) = \frac{S}{\rho_L}$$

このとき、 $S$  は相変化による物質伝達係数であり、本計算では相変化モデルとして、セル内の温度のみで相変化量の計算が完結する Lee モデル を用いた。

$$S = S_C - S_V,$$

$$S_C = \gamma_{iC} \varepsilon_G \rho_G \frac{T - T_{sat}}{T_{sat}} \quad \text{凝縮の場合 } (T < T_{sat}),$$

$$S_V = \gamma_{iV} \varepsilon_L \rho_L \frac{T - T_{sat}}{T_{sat}} \quad \text{蒸発の場合 } (T > T_{sat}).$$

ここで、 $\gamma_{iC}$ 、 $\gamma_{iV}$  は物質伝達強度であり、本計算では本係数が流動場、気泡生成挙動、相変化量に与える影響の評価を試みた。また、輸送方程式における  $\mathbf{u}$  は速度ベクトルであり、運動量保存

式である、ナビエ・ストークス方程式

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla p' + \nabla \cdot \left[ \mu_{eff} (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T) \right] + f_s$$

を用いて計算する。なお、表面張力には CSF (continuum surface force) モデルを用いた。また、温度場については、以下のエネルギー方程式を練成することで、計算を行った。

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}T) = -\nabla \cdot (a_{eff} \nabla T) + \frac{H_{LG} S}{\rho c_p}$$

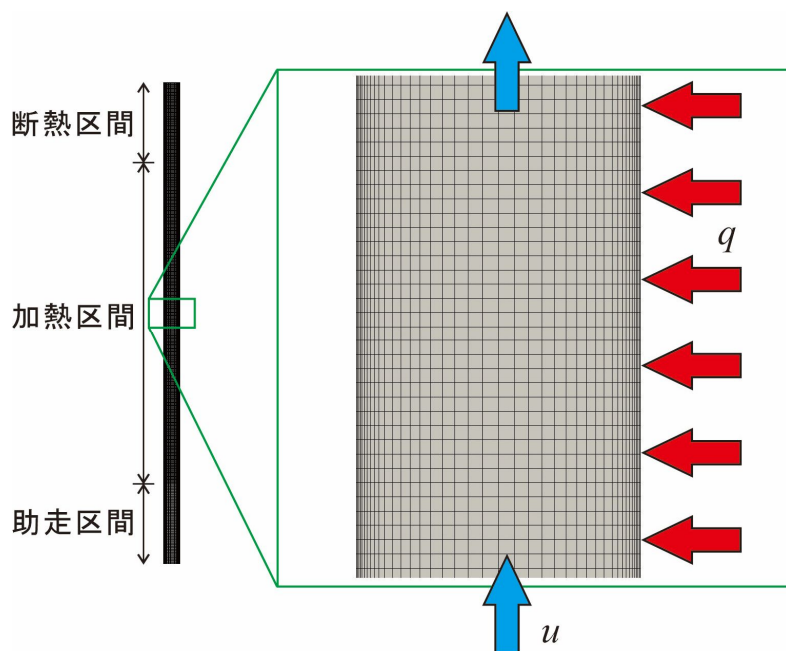


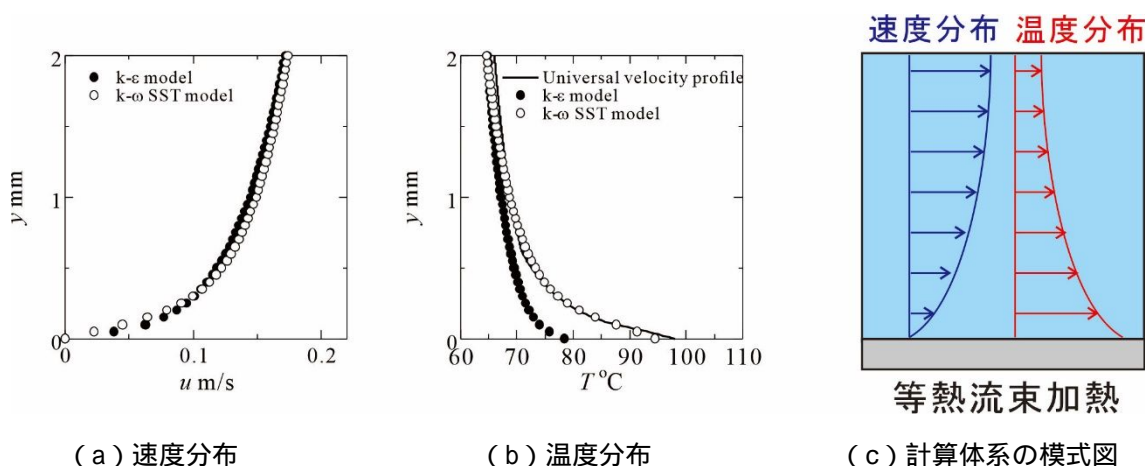
図 1 計算体系

ここで、 $\mu_{eff}$ 、 $a_{eff}$  はそれぞれ、分子粘性と乱流による渦粘性、熱拡散と乱流による渦熱拡散である。本研究では、乱流エネルギー  $k$  とエネルギー散逸率  $\varepsilon$  による  $k-\varepsilon$  モデル、粘性底層の流れを取り扱うのに適した SST  $k-\omega$  モデルの 2 つを用いて比較検討を行った。図 1 に計算体系を示す。2 次元流路で、流路下部から流入し、助走区間 (50 mm) を経て加熱区間 (200 mm) 断熱部 (50 mm) を通過し、上部から流出する強制流動系であり、メッシュ長さは壁近傍で  $40 \mu\text{m}$ 、流路中心部で  $550 \mu\text{m}$  のメッシュを用い、クーラン条件を満足するように

時間ステップは  $10^{-6} \text{ s}$  オーダーで設定した。

#### 4. 研究成果

計算結果の代表例として、乱流モデルに  $k-\varepsilon$  モデル、 $k-\omega$  SST モデルを用いた場合の、等熱流束条件下における速度分布および温度分布の計算結果を示す。なお、比較対象として一般速度分布より得られる温度分布の理論値を実線で示す。



(a) 速度分布

(b) 温度分布

(c) 計算体系の模式図

図 2 速度分布と温度分布

図 2 (a) 壁面 ( $y=0$ ) において Non-Slip 条件であるため、速度は 0 であり、そこから  $y=0.5 \text{ mm}$  程度までなだらかに速度は発達し、以降は急激に速度が大きくなっていることが分かる。速度分布については、乱流モデルの差はあまり見られなかった。一方、図 2 (b) では、温度は  $y=0$  の壁面で最も高く、速度の発達とともにエンタルピー輸送により温度が低下し、壁から離れるにしたがって、急激に温度が低下していることが分かる。 $k-\varepsilon$  モデルによる計算結果は、 $y < 1 \text{ mm}$  の粘性底層、遷移層内において理論値を過小評価しているのに対し、 $k-\omega$  SST モデルによ

る計算結果は、理論値とよく一致していることが分かった。そのため以降では、乱流モデルとして  $k-\omega$  SST モデルを用いた計算を行った。

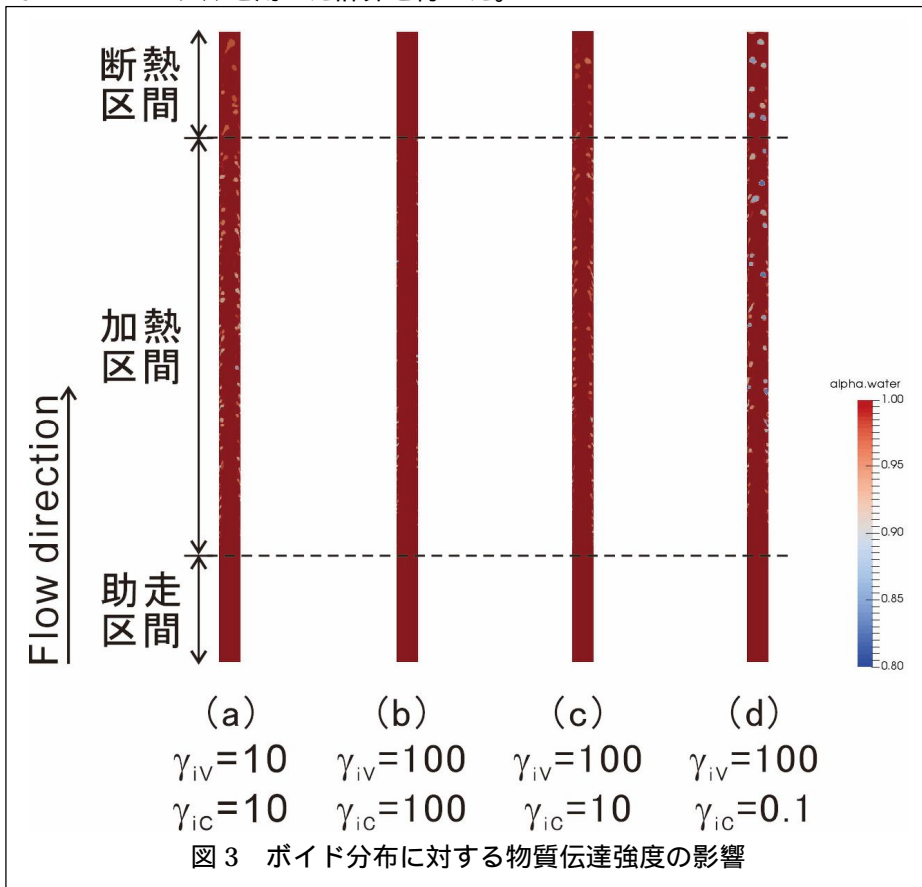


図3に、ある時間における強制流動サブクール沸騰中のボイド分布をコンタ図にて示す。なお、物質伝達強度を  $\gamma_{iv} = 10, 100, \gamma_{ic} = 0.1, 10, 100$  とする。コンタ図が示すボイド率をカラーバーで示す。

図3(a)は蒸発・凝縮の物質伝達強度をともし10とした場合の計算結果である。助走区間を得て加熱区間に入ると流体は加熱されるために、壁面近傍の流体温度が上昇するため、壁か

ら蒸気泡が生成されることが分かる。上流から下流に行くにしたがって、気泡は大きくなり、ボイド率も大きくなっていることが分かる。つまり、蒸気泡が温度境界層内をスライドしながら成長する様子を数値的に再現できたことになる。さて、図3(b)は蒸発・凝縮の物質伝達強度をともし100とした場合の計算結果である。図3(a)よりも明らかに形成される気泡の数、大きさ、ボイド率が小さくなり、ほとんど気泡が生成されていないことが分かる。蒸発の物質伝達強度が大きくなるため、気泡生成頻度およびボイド率も大きくなることが想定されたが、それ以上に凝縮の影響が大きいことが分かった。そこで、蒸発・凝縮の物質伝達強度をともし同じ値に設定するのではなく、蒸発と凝縮に対する物質伝達強度の影響が異なることを鑑みて、それぞれ異なる値を設定した。蒸発の物質伝達強度を100に固定し、凝縮の物質伝達強度を10(図3(c))にしたところ、図3(b)よりも気泡が生成されたものの、まだ凝縮の影響が大きく、ボイド率が上昇せず、壁面からの気泡離脱も確認できなかった。そこで、さらに凝縮の影響を小さくするために、凝縮の物質伝達強度を0.1とした場合の計算結果を図3(d)に示す。図より、加熱区間の上流側で気泡が壁面から生成されると、中流域まで移流しながら成長するとともに、下流になると壁面から離脱し、コア部へ集まる気泡挙動を得ることができた。

今後は、2次元から3次元へ計算体系を拡張するとともに、壁面内の熱伝導方程式も練成することが必要となる。

#### <参考文献>

- ① Tryggvason, G., Scardovelli, R., Zaleski, S., Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multiphase Flows, Cambridge University Press, (2011).  
 Lee, J., O'Neill, L.E., Mudawar, I., 3-D Computational Investigation and Experimental Validation of Effect of Shear-Lift on Two-Phase Flow and Heat Transfer Characteristics of Highly Subcooled Flow Boiling in Vertical Upflow, International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol.150 119291 (2020).  
 Brackbill, J.U., Kothe, D.B., Zemach, C., A Continuum Method for Modeling Surface Tension, Journal of Computational Physics, Vol.100(2), 335-354 (1992).  
 Menter, F.R., Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications, AIAA Journal, Vol.32(8), 1598-1605 (1994).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計0件

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------