

体積保存性を考慮した沸騰シミュレーション

藤澤 誠[†] 三浦 憲二郎^{††}

この論文は体積保存性を考慮した熱力学に基づく沸騰シミュレーション手法を提案する。本手法では保存系の CIP 法を用いて液体表面を移流させることで、移流時の体積損失を抑える。また、従来の沸騰シミュレーションにおける核沸騰時の沸騰核生成による体積損失を抑制するために、沸騰核固体を用いた核沸騰シミュレーション手法を提案する。この沸騰核固体は他の固体と相互作用せず、レンダリングもされない。従来の方法では VOF (Volume-of-Fluid) などで表された液体体積を直接減算する。つまり、沸騰核発生箇所に“穴を開ける”操作をするため、沸騰核体積量の体積損失が発生する。本手法では、壁面に流入境界条件を設定し、その流れを沸騰核生成のための専用の固体で制御することで、沸騰核を“壁面から押し出される”操作として実現し、核沸騰シミュレーションにおけるシーン全体の液体体積損失問題を解決した。また、この手法は任意形状熱源による沸騰現象を再現することも可能である。

Volume-preserving Boiling Simulation

MAKOTO FUJISAWA[†] and KENJIRO T. MIURA^{††}

This paper proposes a method for volume-preserving boiling simulation. The method suppresses volume loss by use of the CIP method for a conservative system for advection of the liquid interface. Furthermore, we propose a technique for nucleate boiling simulation using the “nucleation solid,” defined as an object that is not registered to the simulation engine for collision detection and is not rendered. Here, we introduce a method to reduce volume loss induced by nucleation in existing boiling or bubble simulations. The existing simulations directly reduce liquid volume represented by, for example, VOF (Volume-of-Fluid), or make a “hole space” at the nucleation site. As a result, volume loss equivalent to nucleation volume occurs. To solve the problem of volume loss in nucleate boiling simulation, we set up the inlet boundary condition at the wall surface, and control fluid flow by the nucleation solid object and implement nucleation as an operation of “pushing fluid out of the wall surface” by a solid object. The technique has no restriction on the shape of the heat source because of independence from the grid, and it is directly applicable to other fluid simulations.

1. はじめに

液体を熱したときに液体が気体に変化することで気泡が発生し、気泡は液体からのさらなる相転移によりその体積を膨張させながら液中を上昇する。これは沸騰現象とよばれ、その沸騰気泡 (vapor) の形状変化は複雑であり、その解析には熱力学と流体力学の両方の解析を必要とする。

沸騰現象は、サブクール沸騰、核沸騰、膜沸騰などに分類される。膜沸騰は原子炉の冷却水などのように液体が非常に高温になったときに発生する現象であり、我々にとって身近な沸騰現象はサブクール沸騰と核沸騰である。サブクール沸騰は液体の沸点 (飽和温度) 以下で起こる沸騰であり、その基本原理は核沸騰と同様である。よって、

本研究では核沸騰をシミュレーションする。核沸騰は、1) 沸騰核 (nucleation) の発生、2) 気泡の膨張、の2つの要素で構成され、2) に関しては、Son らの流体の体積保存則を用いた手法⁹⁾ で計算する。問題となるのは1)の沸騰核の発生である。ほとんどの手法では、沸騰核を初期条件としてシミュレーション空間に配置するか、VOF 関数のような体積分率を表す値を減算する、つまり、“穴を開ける”ことでその発生を再現する。しかし、前者では新しい核の発生を表現できず、後者では液体全体の非常に激しい体積損失が発生する。

本研究では、沸騰核生成の新しい手法を提案する。提案手法は核生成のために、気体流入境界条件とレンダリング時に不可視な球形固体を用いる。この固体は流体とは相互作用するが、固体同士の衝突などによるインタラクション、およびレンダリングを行わず、単に沸騰核形状の制御に用いる。提案手法は任意形状の熱源上の任意位置に核を発生させることができ、体積損失の問題も解決する。また、沸騰気泡の成長、水面への上昇をシミュレートするとき、非保存系の CIP 法では流体シミュレーショ

[†] 奈良先端科学技術大学院大学情報科学研究科

Graduate School of Information Science, Nara Institute of Science and Technology

^{††} 静岡大学創造科学技術大学院

Graduate School of Science and Technology, Shizuoka University

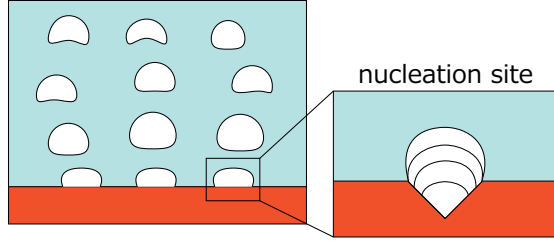


図1 核沸騰の原理

ンにおける体積損失を軽減するために、保存系の CIP 法である CIP-CSL3¹⁰⁾ を用いる。

この論文の次節以降の構成は以下である。次章で関連研究を述べ、第3章で核沸騰シミュレーション手法、そして、第4章において我々の手法を用いた結果を示し、これらのまとめを第5章で述べる。

2. 関連研究

コンピュータグラフィックスにおける沸騰の物理シミュレーションに於いて、Harris らによる CML (Coupled Map Lattices) を用いた擬似的な沸騰シミュレーション⁴⁾がある。彼らの研究では、Cell Automaton の拡張の一つであり continuous real value を各セルに格納する CML を熱力学を用いた沸騰に応用した手法¹³⁾を GPU で実装した。この手法はさらに Kim と Carlson によって拡張された⁵⁾。流体シミュレーションと沸騰を組み合わせた研究として、Müller らによる多相流 SPH 法による沸騰シミュレーション⁸⁾、Mihalef らによる 2 相流版 Coupled Level Set and Volume Of Fluid (CLSVOF) によるもの⁷⁾などがあげられる。Mihalef らの手法では沸騰核の生成において、“穴を開ける”操作を用いたため、数秒のアニメーションにもかかわらず大きな体積損失が生じている。本研究ではこの問題を解決するために、気体流入境界条件と球形固体による沸騰核生成シミュレーションを提案する。

3. シミュレーション手法

核沸騰は、1) 沸騰核の発生、2) 気泡の膨張 (成長) の 2 つの要素で構成される。核沸騰は図1に示すように、固体表面上の微少な凹凸に残った微少な沸騰核が成長することによって生じる³⁾。本研究では、沸騰核はランダムな分布を用いて熱源表面の特定の位置から発生させ、相転移質量ベクトルを用いて、その成長をシミュレーションする。沸騰核の生成では、Mihalef らの方法⁷⁾の問題点であった体積損失を解決する新しい手法を提案する。

3.1 支配方程式

沸騰気泡は流体の流れと熱によって支配され、その支配方程式は次式として与えられる。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\mathbf{m}}{\rho^2} \cdot \nabla \rho, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + \nu \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{f}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \nabla^2 T - (\mathbf{u} \cdot \nabla) T + E_r \quad (3)$$

ここで、 \mathbf{u} は流体速度、 ν は動粘性係数、 ρ は流体の密度、 T は温度、 p は圧力、 \mathbf{m} は相転移質量ベクトル、 \mathbf{f} は外力で浮力、重力、表面張力などを含む。 a は熱拡散係数、 E_r は放射エネルギーである。本研究ではスタガード MAC グリッドを用いる。そのため、温度 T はグリッド中心でスカラー値として定義され、式 (3) で移流、拡散する。粘性拡散・熱拡散の計算は¹⁾の高粘性ソルバを用い、微小な気泡の振る舞いにおいて重要なファクターとなる表面張力の計算には、Zheng らの陰解法¹⁴⁾を用いることで、大きな表面張力に対しても安定して解くことができる。

Navier-Stokes 方程式を解くための方法として、この圧力ベース解法の一つである C-CUP 法¹²⁾を用いる。C-CUP 法は移流項を CIP 法で解く手法であり、圧縮性流体と非圧縮性流体を同一の計算領域内で統一的に扱うことができる手法である。また、気体と液体を区別せず、単に密度の違う流体として扱う homogeneous な手法であり、沸騰現象などのように液体から気体への相転移を伴い、かつ、両相間の相互作用が重要であるシミュレーションにおいては最適な解法であると我々は考えている。

沸騰による液体から気体への相転移を考慮した圧力のポアソン方程式は以下となる。

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \nabla p^* \right) = \frac{p^* - p^n}{\rho c_s^2 \Delta t^2} + \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^n - \frac{1}{\Delta t} \frac{\mathbf{m}}{\rho^2} \cdot \nabla \rho \quad (4)$$

相転移質量ベクトル \mathbf{m} は以下で計算する。

$$\mathbf{m} = \rho (\mathbf{u}_{\text{int}} - \mathbf{u}) = \frac{k \nabla T}{L} \quad (5)$$

ここで、 \mathbf{u}_{int} は気泡表面速度、 L は潜熱である。相転移質量は沸点以上の液体が気体に変化する量であり、液体と気体の境界面で発生する。この液体界面を追跡するために、C-CUP 法では CIP 法と VOF に類似した関数である密度関数を用いる。しかし、CIP 法と密度関数による界面追跡は非保存系での移流法であるため、とくに沸騰気泡をシミュレートするときに体積損失の問題が発生する。そのため、保存系での CIP 移流法を次節で説明する。

3.2 保存系セミラグランジュ法による表面追跡

液体界面追跡には¹²⁾の密度関数 ϕ と CIP 移流法を用いた手法を用いる。密度関数は VOF と同様にグリッドの体積分率を表すが、レベルセット法と同様に以下の式で移流させる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \phi = 0 \quad (6)$$

移流時の補間には CIP 法を用いる。CIP 法では移流したい関数 $f(x)$ の値とその空間導関数値 $g(x) = \partial f / \partial x$ を移流させ、 f と g を用いた 3 次補間により関数の形状を

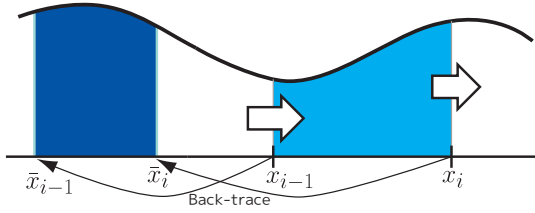


図2 CIP-CSL3における積分値 ρ の更新方法の改良

保ったまま移流する。しかし、この方法では関数の形状は保存されるが体積の保存は保証されない。とくに、小さな気泡では表面張力の影響が大きくなるため、体積損失により気泡自体が消失してしまう。

CIP法の体積損失の問題を解決するために、保存系のCIP法であるCIP-CSL(Conservative Semi-Lagrangian scheme)を用いる。CIP-CSLは関数の値と勾配値に加えて、積分値も移流させることで体積を保存する。積分値と勾配値の与え方によって、CIP-CSL4, CIP-CSL2, CIP-CSL3などの種類があるが、本研究では、界面拡散制御も可能であるCIP-CSL3¹¹⁾を用いる。

CIP-CSL3¹¹⁾は、グリッドセル $[x_{i-1}, x_i]$ 間の積分値 $\rho_{i-1/2} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx$ とグリッド中心 $x_{i-1/2}$ における勾配 (slope) $d_{i-1/2} = df(x)/dx$ を用いてCIP補間を行う手法である。グリッド間のプロファイル $F(x)$ は3次補間式

$$F_i(x) = c_0 + c_1(x - x_i) + c_2(x - x_i)^2 + c_3(x - x_i)^3, \quad (7)$$

for $x \in [x_{i-1}, x_i]$

で補間される。ここで、 c_1, c_2, c_3 は補間係数であり、関数値 $f(x_{i-1}), f(x_i)$ 、積分値 $\rho_{i-1/2}$ 、slope $d_{i-1/2}$ より計算する。

¹¹⁾において積分値 $\rho_{i-1/2}$ は次式で更新する。

$$\rho_{i-1/2}^{n+1} = \rho_{i-1/2}^n - (g_i - g_{i-1}) \quad (8)$$

ここで、 g_i はタイムステップ幅 Δt 間に境界 x_i を通る ρ の流束 (flux) である。この更新方法では Δt がグリッド幅と最大流速によって制限されるため、図2に示すように改良する。

$$\rho_{i-1/2}^{n+1} = \int_{\bar{x}_{i-1}}^{\bar{x}_i} f(x)dx \quad (9)$$

CIP-CSL3はslopeを制御することで、界面の滑らかさを直接制御できる¹⁰⁾。しかし、界面から離れた位置での拡散抑制は難しく、これが不自然な微小液体領域 (flotsam) の発生を引き起こす。我々は²⁾の改良STAA手法とslopeの制御を組み合わせることで、flotsamを抑え、より広範囲な界面拡散制御を可能とした。

3.3 沸騰核の生成

沸騰シミュレーションのために、核沸騰における沸騰核の生成をシミュレートする。沸騰核は熱源表面上の微

少な凹凸に残った気体であり、その半径は非常に小さい。そのため、グリッドによる空間離散化では表現することが困難であり、従来の手法ではある程度成長した核が突然現れると考え、数グリッド程度の直径を持つ球状の“穴”を発生させることによって核の生成としている⁷⁾。これによりそのアニメーションでは液体体積が急激に損失する。沸騰は液体から気体への相変化であり、実際にそれによって徐々に液体の体積は減る。しかし、それは数十分、数時間かけて減っていくのであり、数秒、数分程度では大きくは変化しない。そのため、この体積損失がアニメーションを不自然にしている。

この解決策としては、八分木データ構造を用いて生成する沸騰核の大きさをより小さくすることがまずあげられる。しかし、八分木の階層を深くすることによる計算効率の低下という問題があり、さらにグリッドを小さくすることには限界があり、どんなにグリッドを小さくできたとしても結局体積損失をゼロにできるわけではなく、根本的な解決とはならない。我々は沸騰核生成における体積損失問題を解決するための新しい手法を提案する。

本研究での提案手法は、壁面境界条件の改良と固体密度関数の利用による沸騰核の生成である。密度関数 ϕ の壁面境界条件を沸騰核生成場所において、壁面上の数グリッド分を気体の流入境界条件として扱う。図3左にその模式図を示す。熱源壁面上の境界条件を常に $\phi = 0$ とし、壁面の法線方向に速度場を与えることで流入した気体が膨張し沸騰核となる。

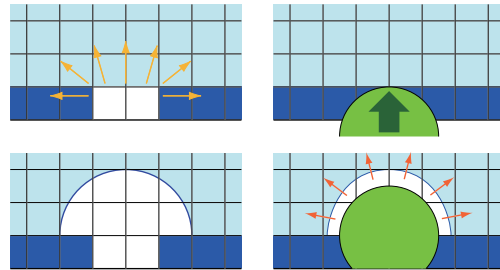


図3 左：壁面境界条件の改良による沸騰核シミュレーション、右：固体密度関数を用いた沸騰核シミュレーション

この方法の問題点は、1) 気泡核の形状と大きさの制御が難しい、2) 任意の形状の熱源を扱いにくい、である。1) は必要な速度・圧力は核生成場所の水深や液体密度などによって変化し、沸騰核として最適な形状・大きさが得られるとは限らない。2) は壁面境界条件としてだけでは、液体中に任意の形状の熱源が存在するシーン (例えば、日本刀の焼き入れの際に熱した鉄を水中に投入するシーン、水中火山からの気泡の発生など) の場合、グリッドが固体形状にフィットしていれば問題ないが、本研究のシミュレーションでは固定グリッドを用いているため、流入条件のためにどのグリッドを流入境界とするかを判断

することが難しい。これらの問題を解決するために、固体密度関数を用いる。固体密度関数は固体の表現に液体と同様の密度関数を用いて、液体と固体の相互作用を計算するために用いる関数である。図3右にこの固体密度関数を用いた沸騰核生成法の模式図を示す。壁面上において上記の流入条件において、流入境界としたグリッドの位置から固体密度関数で表された球状固体を出現させる。このとき、壁面の法線方向に速度場を与えるのではなく、固体が液体に作用することで固体の形状に沿った核形状になる。この固体は(固体密度関数を持ち)液体とは相互作用するが、固体同士の衝突などによるインタラクションは無効とし、衝突シミュレーションエンジンには登録しない。また、レンダリング時にも描画しない。この固体を以降では沸騰核固体と呼ぶ。

沸騰核固体を用いた沸騰シミュレーションの手順を説明する。

- (1) 沸騰核生成場所のマップを乱数を用いて生成する。核沸騰は熱源表面上の微少な凹凸から発生するため、表面上の一定の場所から常に沸騰気泡が発生する。そのため、最初にランダムな位置をマップに格納し、格納した位置に沸騰核固体を生成する。
- (2) 沸騰核固体を生成する。ランダムマップを元に生成場所を決定する。このとき、沸騰核固体は熱源壁面内部に配置する。沸騰核固体は固体同士の衝突などによるインタラクションは無効となっているため、熱源壁面とは衝突判定・応答しない。
- (3) 沸騰核固体を壁面法線方向へ一定速度で移動する。移動速度はユーザが任意に設定する、もしくは、乱数を用いて計算する。ただし、壁面法線方向の液温が沸点以上であり、かつ、そこに気泡が存在しない場合のみ速度を与える。気泡の存在判定は単純に密度関数の値をチェックする。
- (4) 熱源壁面から沸騰核固体の中心がある程度出たら削除、もしくは、壁面内に移動させる。我々の実験では沸騰核固体の中心が壁面から0.5~1グリッド幅程度が最も適していた。
- (5) 2~4をシミュレーションステップの間繰り返す。沸騰核固体の数や速度、大きさを調整することで、様々な沸騰を再現できる。また、沸騰核固体はグリッドに独立に生成・移動でき、固体密度関数で表された非沸騰核固体の内部に沸騰核固体を配置し、固体の表面法線方向に移動させることで、任意形状の熱源においても、壁面の場合と同様に核沸騰をシミュレートできる。ただし、固体内部は液体密度関数が0でなければならない。

4. 結果

この章では提案手法を用いて作成したアニメーションを示す。使用したPCはPentium4 3.6GHzで4GBのメモリを搭載している。

沸騰核固体を用いた核生成による沸騰シミュレーション結果を図5に示す。10の沸騰核固体を前計算で求めておいた出現場所のランダム分布に基づいて、下部の壁面熱源からランダムな速度で出現させた。沸騰核固体はその中心が壁面から少しだけ出るぐらいで削除(正確には同壁面内の別の位置に一タイムステップで移動)する。シミュレーションに用いたグリッド数は $80 \times 80 \times 80$ である。沸騰核固体はレンダリング時には不可視となっている。従来の沸騰核生成では突然沸騰核が現れていたことに比べて、より自然な沸騰アニメーションが実現できた。

図6は²⁾の氷解シミュレーションと組み合わせた結果である。初期温度 0°C の水を沸騰と同時に投入した。密度関数を用いたことで、固体-液体-気体間の相変化をシームレスに表現することができた。シミュレーションに用いたグリッド数は $64 \times 64 \times 64$ であり、沸騰核固体は1つだけ使い、その中心が壁面から少しだけ段階でランダム分布に基づく異なる位置へ移動させた。

図4は図6のシミュレーションにおいて、氷解する固体を組み合わせずにシミュレートしたときの体積変化をプロットしたグラフである。従来の“穴”をあける方法に比べて提案手法はほとんど体積が減少していない。しかし²⁾の改良STAA法はそのパラメータをあまり大きくしすぎると、表面付近の体積移動が境界を越えてしまい、体積が増減するため注意が必要である。具体的には $\alpha \leq 1.0$ である。

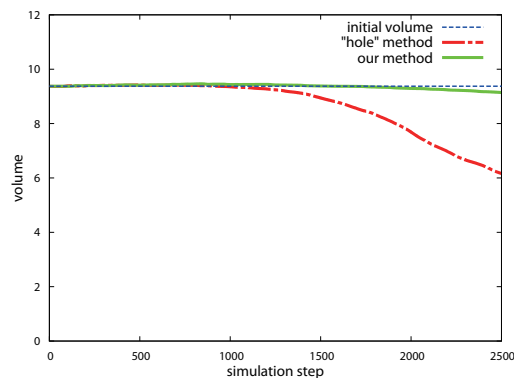


図4 沸騰シミュレーションの体積変化グラフ

5. まとめと今後の課題

本論文では、CIP-CSL3法と沸騰核固体を用いた新しい核沸騰シミュレーション手法により、体積保存性を考慮した液体から気体への相変化による沸騰シミュレーション手法を提案した。保存系CIP法の一種であるCIP-CSL3法ではslopeを用いた界面拡散制御が可能であり、これとCG向けの改良STAA法を組み合わせた手法を開発した。沸騰ではその気泡の挙動が問題となるが、そのときに重要なファクタとなる表面張力の影響を陰解法を用いた計

算法を採用し、より安定して計算し、そして、体積損失の問題を解決した壁面境界条件の改良と固体密度関数の利用による沸騰核の生成手法を提案した。提案手法を用いた実験によって、体積損失の改善を確認することができた。しかし、改良 STAA 法²⁾における係数 $\alpha > 1.0$ としたときの、不自然な体積増大の解決が課題として残っている。

また、沸騰核固体を用いた手法は壁面からの沸騰だけでなく⁵⁾のような移動する任意形状熱源にも応用できる。しかし、本手法では密度関数を用いて固体・液体を表現しており、液体の密度関数が固体用の密度関数と重なってしまう現象が起こったため、シミュレーションステップが進むにつれて沸騰気泡の生成が困難になると考えられる。重なりの問題は6)のようなレベルセット法を用いた解決方法などを密度関数に応用するなどを試してみたい。

参 考 文 献

- 1) Carlson, M., Mucha, P.J., Van Horn III, R.B. and Turk, G.: Melting and Flowing, *Proc. SCA2002*, pp.167–174 (2002).
- 2) Fujisawa, M. and Miura, K.T.: Animation of ice melting phenomenon based on thermodynamics with thermal radiation, *Proc. GRAPHITE2007*, pp.249–256 (2007).
- 3) Han, C.-Y. and Griffith, P.: The mechanism of heat transfer in nucleate pool boiling - Part I : Bubble initiation, growth and departure, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol.8, pp.887–904 (1965).
- 4) Harris, M.J.: Implementation of a CML Boiling Simulation using Graphics Hardware, Technical Report TR02-016, UNC Technical Report (2002).
- 5) Kim, T. and Carlson, M.: A simple boiling module, *Proc. SCA2007*, pp.27–34 (2007).
- 6) Losasso, F., Shinar, T., Selle, A. and Fedkiw, R.: Multiple interacting liquids, *SIGGRAPH 2006*, pp.812–819 (2006).
- 7) Mihalef, V., Unlusu, B., Metaxas, D., Sussman, M. and Hussaini, M.Y.: Physics based boiling simulation, *Proc. SCA2006*, pp.317–324 (2006).
- 8) Müller, M., Solenthaler, B., Keiser, R. and Gross, M.: Particle-based fluid-fluid interaction, *Proc. SCA2005*, pp.237–244 (2005).
- 9) Son, G., Dhir, V.K. and Ramanujapu, N.: Dynamics and heat transfer associated with a single bubble during nucleate boiling on a horizontal surface, *Journal of Heat Transfer*, Vol.121, pp.623–631 (1999).
- 10) Xiao, F.: Unified formulation for compressible and incompressible flows by using multi-integrated moments I: one-dimensional inviscid compressible flow, *Journal of Computational Physics*, Vol.195, pp.629–654 (2004).
- 11) Xiao, F. and Yabe, T.: Completely Conservative and Oscillationless Semi-Lagrangian Schemes for Advection Transportation, *Journal of Computational Physics*, Vol.170, pp.498–522 (2001).
- 12) Yabe, T., Xiao, F. and Utsumi, T.: The Constrained Interpolation Profile Method for Multiphase Analysis, *Journal of Computational Physics*, Vol.169, pp.556–593 (2001).
- 13) Yanagita, T.: Phenomenology of boiling: A coupled map lattice model, *Chaos*, Vol.2, pp.343–350 (1992).
- 14) Zheng, W., Yong, J.-H. and Paul, J.-C.: Simulation of Bubbles, *Proc. SCA2006*, pp.325–333 (2006).

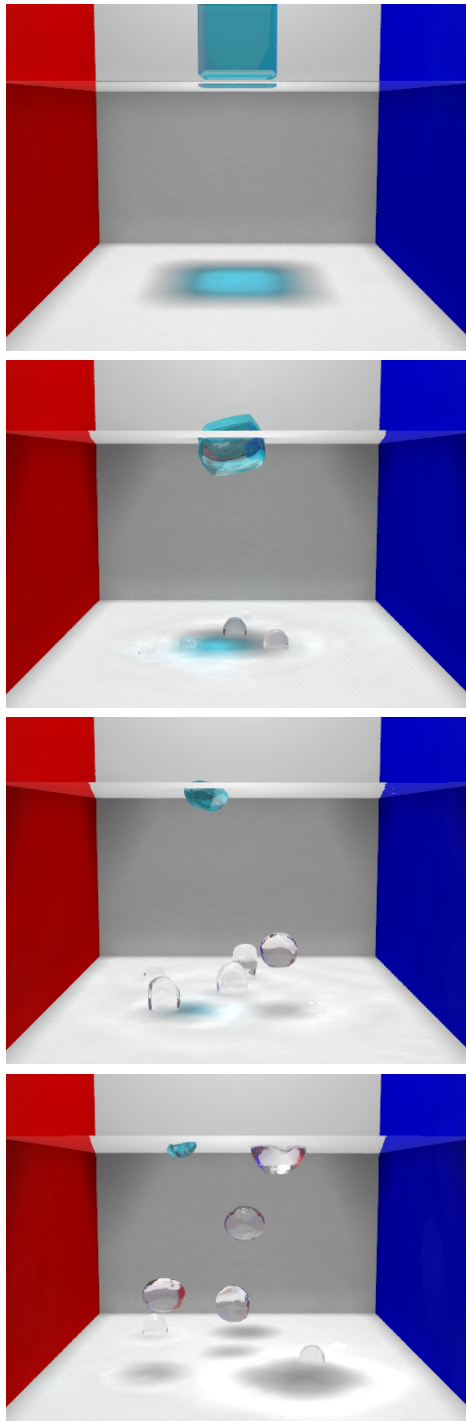


図 5 沸騰核固体を用いた 3 次元沸騰シミュレーション

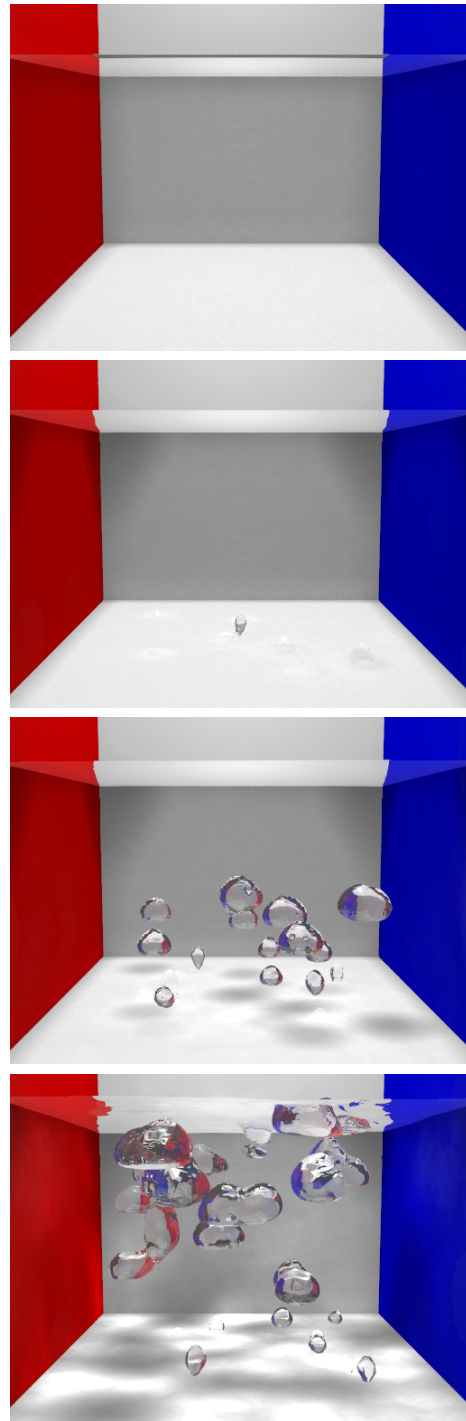


図 6 氷解+沸騰シミュレーション