



Title	トカマク型核融合炉におけるディスラプション及びELMによるタングステンダイバータの表面変動挙動特性の予測
Author(s)	浜口, 康平
Citation	大阪大学, 2022, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/89480
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

博士学位論文

トカマク型核融合炉におけるディスラプション
及び ELM によるタングステンダイバータの表
面変動挙動特性の予測

浜 口 康 平

2022年2月

大阪大学大学院工学研究科

要旨

ダイバータは磁場閉じ込め方式の核融合炉におけるプラズマ対向機器の一つであり、プラズマの純度維持や不純物除去の役割を持つ。プラズマは定常で安定を維持し続けることが難しく、一つに間欠的にディスラプション（崩壊）を起こす。また、トカマク型核融合炉の実験炉である国際熱核融合実験炉（ITER）での標準運転モードである H モード（プラズマの閉じ込め状態を指す）では、周辺輸送障壁で発生する間欠的・周期的な熱や粒子の放出現象である ELM が発生する。これらディスラプションや ELM が生じた際、ダイバータは非常に強い熱負荷にさらされる。この熱負荷からダイバータを守るために、計画当初はダイバータの表層に炭素系材料を用いることが検討されてきたが、コストの面からタングステンに変更された。タングstenは金属中で最も融点の高い材料であるが、それでもディスラプションや ELM での間欠的・周期的な高熱負荷により溶融・凝固を繰り返すことがこれまでの基礎実験により明らかにされてきた。加えて、溶融に至らなくても繰り返しの高熱負荷によってタングsten表面の粗面化や熱疲労による亀裂が発生することで、熱への耐性が低下し、ダイバータの破損につながる。そのため、高熱負荷を受けた時のタングstenの挙動を詳細に把握することは、寿命評価や改善策の検討の上で重要な課題となっていた。これまで実験的研究によってパルス熱負荷後のタングsten表面形状の評価が実施され、溶融、凝固後は中心が盛り上がり周辺にクレータを持つような形状になることが確認されているが、その詳細なメカニズムを把握するには至っていない。それをするためには、溶融したタングstenがどのような挙動をしているかを評価する必要があるが、この間欠的・周期的な熱負荷は ms オーダーであり、溶融金属は不可視の流体であるため、実験のみでその詳細を評価するのは非常に困難である。そのため、シミュレーションによる評価手法の確立が望まれてきた。これまで、相変化を伴った固気液が混在する多相シミュレーション手法を開発してきたが、タングstenの状態方程式データベースが不足していた。一方で、温度変化を伴う溶融金属の挙動に支配的な現象として、表面張力の温度依存性に起因して起こるマランゴニ対流があることが既往研究で指摘されてきた。これを考慮するためには界面接線方向成分を考慮した表面張力モデルの構築が必要だった。そこで本研究では、新たな状態方程式の構築と表面張力モデルの改良を行い、温度変化を伴う溶融タングsten挙動を詳細に把握し、実験で確認された熱負荷後の特徴的な表面形状の形成メカニズムを解明することでダイバータの設計・改良に必要な知見を提供することを目的とした。

第 1 章では、背景、目的及び論文構成について述べた。

第 2 章では、シミュレーション手法について述べた。圧縮・非圧縮性流体を同時に解くことができる C-CUP 法をベースとした解法、温度依存性を考慮した表面張力モデル、同時陰解法及びタングstenの状態方程式について示し、使用する 2 種類のシミュレーションモデル及び条件に付いて示した。

第 3 章では、シミュレーション結果との比較のためのデータを取得することを目的に本研究で実施した高熱負荷源にレーザー照射を用いた実験体系について述べた。

第4章では、本研究で使用するシミュレーション手法の機能検証（キャビティ流れ、自然対流問題における解析）と実験結果とのデータ比較から妥当性検証を行った。また、熔融タングステンの表面と平行に温度勾配を課した時の熔融層内の流速分布結果を既往研究と比較し、モデルの妥当性検証をした。

第5章では、壁面からの一様加熱により生じる表面の温度勾配によるマランゴニ対流の発達の発達過程や表面流速の評価を行った。また、熔融タングステン層のサイズによる熔融層の内部対流及び表面流速に与える影響について述べ、熔融タングステンに核融合炉内で起こりうる高熱負荷を模した局所加熱シミュレーションについて示した。高熱負荷によって生じるタングステン表面挙動の評価、及び様々な熱負荷条件に対する表面挙動特性を評価した。

第6章では、本研究で得られた結論について述べた。

目次

第 1 章	緒言	1
1.1	はじめに	1
1.2	研究背景	1
1.2.1	ITER の概要	1
1.2.2	ITER 計画	3
1.2.3	国内における ITER 開発	4
1.2.4	ダイバータ配位	6
1.2.5	ダイバータの材料	7
1.2.6	ダイバータの構造	10
1.2.7	ダイバータへの熱負荷	13
1.2.8	タングステンダイバータの開発	14
1.2.9	溶融金属内部の流動評価手法	15
1.3	本研究の目的・構成	17
第 2 章	シミュレーション手法	18
2.1	はじめに	18
2.2	CIP 法	18
2.3	密度関数	21
2.4	log 変換	22
2.5	時間分離解法	23
2.6	支配方程式	23
2.7	C-CUP 法	27
2.8	表面張力	30
2.8.1	表面張力(Continuous Surface Force : CSF)モデル	30
2.8.2	界面接線方向成分の算出	34
2.9	応力	36
2.9.1	流体領域の応力	36
2.9.2	固体領域の応力	36
2.9.3	von Mises の降伏条件	38
2.10	同時陰解法	39
2.11	状態方程式 (Equation Of State : EOS)	45
2.11.1	SESAME	46
2.11.2	GRAY EOS	47
2.11.3	QEOS	51
2.11.4	線形補正	51
2.12	アルゴリズム	52
2.13	シミュレーションモデル	54

2.13.1	熱負荷モデル	54
2.13.1.1	深さ方向の吸収分布	54
2.13.1.2	熱負荷フラックスの吸収分布	54
2.13.2	短パルス熱負荷シミュレーション	55
2.13.3	一様加熱による熱対流シミュレーション	56
2.13.4	局所加熱を受ける溶融層内流動シミュレーション	58
第3章	実験体系	60
3.1	はじめに	60
3.2	短パルスレーザー照射実験	60
3.3	長パルスレーザー照射実験	60
第4章	機能検証	62
4.1	強制対流機能の評価	62
4.2	自然対流機能の評価	63
4.3	極短パルス熱負荷に対する金属表面の挙動評価	65
4.4	周辺圧力による金属表面挙動への影響の評価	66
4.5	シミュレーションコードの他金属への適用性評価	68
4.6	長時間のパルス熱負荷を受ける AI の表面形状の評価	70
4.7	表面張力の接線成分に起因するマランゴニ効果の評価	71
4.8	高熱負荷によるタングステン表面温度変化の評価	72
第5章	結果と考察	75
5.1	溶融タングステンへの一様加熱シミュレーション	75
5.1.1	表面変動及び対流の発達過程	75
5.1.2	表面流速の評価	78
5.1.3	溶融層のサイズに対する流況依存性	80
5.2	局所過熱シミュレーション	96
5.2.1	局所加熱を受ける溶融層内の対流	96
5.2.2	溶融層内の対流及びそれに伴う表面変動	97
5.2.3	熱負荷パラメータに対する依存性	102
第6章	まとめ	108
参考文献		111

第1章 緒言

1.1 はじめに

現在日本や欧米などで研究が進められている国際熱核融合実験炉（ITER）ではダイバータの表面材料としてタングステンが検討されている。トカマク型の核融合炉において、ダイバータはディスラプションや周辺局在化モード(ELM)が発生した時に強い高熱負荷を受けることになり、ダイバータ表面のタングstenは溶融・凝固を繰り返す。その結果として、表面形状が変化してしまい、熱への耐性が変化する可能性があり、高熱負荷を受けきれなくなる可能性がある。表面形状を決める主要な要因として、溶融中のタングsten内の挙動が挙げられる。この挙動を把握することは、核融合炉の定常運転時におけるダイバータの挙動予測にとって重要な課題となっている。本研究は、高熱負荷を受けるタングstenの溶融中の挙動が評価可能なシミュレーション手法を構築し、様々な熱負荷条件に対する溶融タングstenの表面及び内部対流挙動の解明に関するものである。

1.2 研究背景

1.2.1 ITERの概要

世界中でエネルギー資源の枯渇が進む中、燃料資源が偏在せず無尽蔵に存在し、運転中には温室効果ガスをほとんど排出しない核融合発電が注目されている。核融合発電とは、核融合反応の際に放出されるエネルギーを取り出し発電する方式である。核融合発電の実現に向けて、現在検討されている核融合反応は以下のものが挙げられる。

$$D + T \rightarrow n(14.06\text{MeV}) + {}^4\text{He}(3.52\text{MeV}) \quad (1.2.1)$$

$$D + D \rightarrow n(2.45\text{MeV}) + {}^3\text{He}(0.82\text{MeV}) \quad (1.2.2)$$

$$D + D \rightarrow p(3.03\text{MeV}) + T(1.01\text{MeV}) \quad (1.2.3)$$

$$D + {}^3\text{Li} \rightarrow {}^4\text{He}(3.67\text{MeV}) + T(14.67\text{MeV}) \quad (1.2.4)$$

核融合反応のうち、水素の同位体である重水素（deuterium : D）と三重水素（トリチウム、tritium : T）による反応（DT 反応）が最も実現可能性が高く、その反応を利用する発電システムの実現に向けた研究が行われている。DT 反応に用いられるトリチウムは自然界にはほとんど存在しないが、海水中に大量に含まれているリチウムと中性子の反応により生産することができる。この反応を以下に示す。

$${}^6\text{Li} + n \rightarrow T(2.73\text{MeV}) + {}^4\text{He}(2.05\text{MeV}) \quad (1.2.5)$$

DT 反応を起こすには2つの原子核を近づける必要があり、そのためには電気的な反発力に打ち勝つエネルギーを粒子が持つ必要がある。この方法として、重水素とトリチウムを超高

温のガス状にして、イオンの熱運動で核子を衝突させることで核融合を起こす方法が用いられる。この際、イオンが高いエネルギーを持つためには数億度という高い温度が必要である。このような高温の状態をプラズマといい、核融合炉では高温・高密度下にプラズマを閉じ込め、一定時間以上持続させる必要がある。プラズマを閉じ込める方法として、大きく磁場閉じ込め方式と慣性閉じ込め方式の2つが挙げられる。このなかで、磁場閉じ込め方式の一つであるトカマク型の閉じ込め方式が実現に最も有力であると考えられており、核融合エネルギーの実現性を研究するための実験施設として国際熱核融合実験炉（ITER）の開発が進められている。図 1.2.1-1 に ITER の概念図を示す。

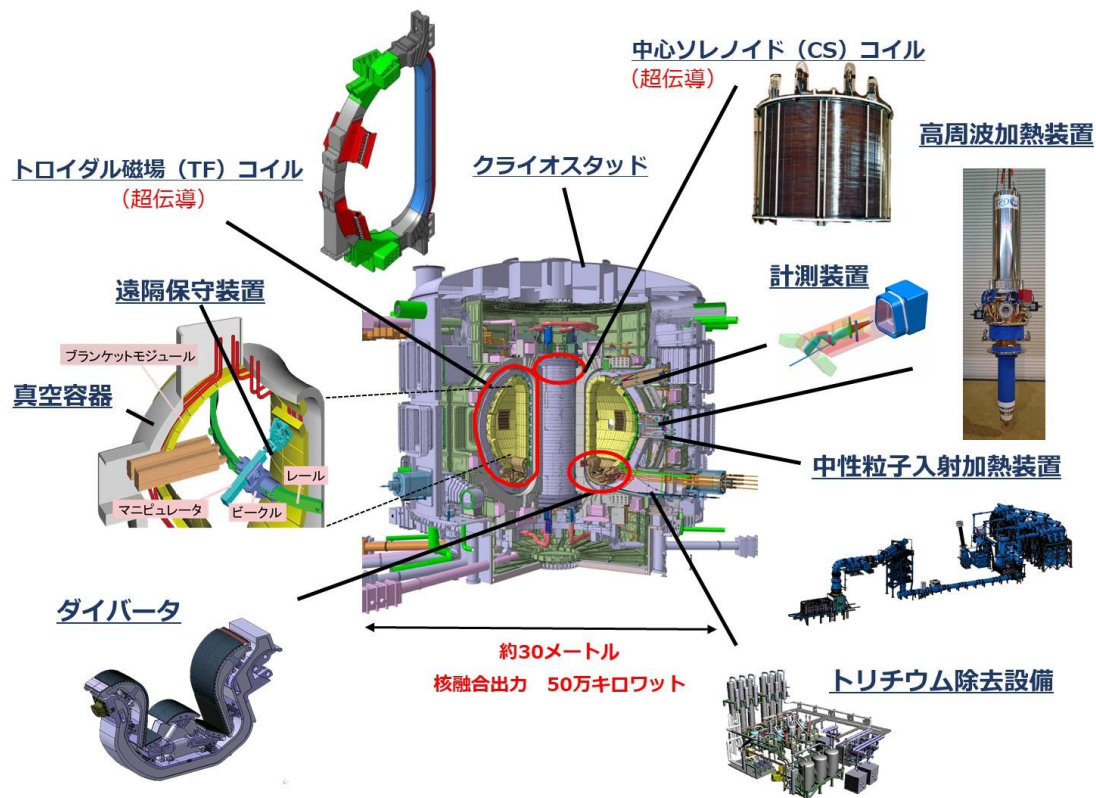


図 1.2.1-1 ITER の模式図^[1-1]

トカマク型の装置である ITER では、ドーナツ型真空容器の周りに配置された超伝導コイルによる磁場とプラズマ中に流れる電流との作用によりプラズマを閉じ込める。超伝導コイルは、超伝導に必要とされる超極低温を維持するためにクライオスタッドの中に置かれる。クライオスタッドの中は真真空に保たれている。その外側には、プラズマを加熱するための加熱装置、プラズマの温度や密度を測定するための測定器などが配置される。ITER のプラズマ体積は、自己点火条件を達成できるよう十分な大きさにする必要があり、それは日本の JT-60SA のプラズマ体積の 8 倍もの大きさになる^[1-2]。核融合反応により発生するエネルギーは、容器の内面に設置されたブランケットにおいて、冷却水による熱交換が行われ、炉の外に取り出される。ブランケットは中性子の遮断機能も持ち、さらに将来の核融合炉のブランケッ

トでは DT 反応の燃料であるトリチウムを生成する機能も持つ。ブランケットにおけるトリチウム生成は、核融合反応により発生した中性子を内部のベリリウムと反応させて増倍し、式(1.2.5)のように内部のリチウムと反応させてトリチウムを増殖させる構成となる。ITER では、核融合炉のブランケットを想定したテストブランケットモジュールを真空容器の窓部に挿入して、トリチウムの生産と冷却水による熱の取り出しの試験を行う。

ITER の目標は、核融合炉の科学的、技術的可能性を実証することである。この目標をもとに以下の具体的なプラズマ性能目標が掲げられている^[1-3]。

- 核融合エネルギー増倍率（原子核融合反応を起こすために投入したエネルギーと核融合反応で発生したエネルギー比率） Q が 10 以上の核融合燃焼を 300～500 秒間持続することを十分な裕度をもって達成すること
- Q が 5 以上の条件のもとで定常運転の実証を行うこと

また、以下が工学技術目標に設定されている。

- 核融合基盤技術の統合実証
- 将来の核融合プラントのための工学機器試験
- トリチウム増殖ブランケットモジュールの試験

上記の技術目標を達成するため、ITER の装置主要諸元が以下の表 1.2.1-1 のように決定されている。

表 1.2.1-1 ITER の主要緒言^[1-3]

プラズマ大半径	6.2 [m]
プラズマ体積	840 [m ³]
プラズマ電流	15 [MA]
核融合熱出力	500 [MW]
装置主要部重量 (真空容器、超電導コイル、極低温容器)	23350 [t]

1.2.2 ITER 計画

1985 年のレーガン・ゴルバチョフ米ソ首脳会談で原子力の平和利用の象徴的国際協力プロジェクトとして提案されたことが、ITER 計画のきっかけである。ITER は米ソのほか日本、EU の 4 極の国際協力として、1988 年から 1990 年までは概念設計活動（CDA）が行われた。その後、ソ連からロシアへの移行を経て、1992 年から 9 年間に渡って工学設計活動（EDA）を実施した。EDA の前半 6 年間では建設に向けた装置設計と主要な技術開発が実施され、残り 3 年間でプラズマ物理研究の最新の成果を取り入れて小型化設計が実施され、現在の ITER につながる工学設計が完了した^[1-4]。これを受けて日本は、ITER を「第三段階核融合研究開発基本計画（原子力委員会決定、1992 年 6 月）」における日本の核融合実験炉と位置づけた。EDA の終了後、建設サイトについての政府間協議が行われ、2005 年にサンポール・レ・デュランス（フランス）に決まった。政府間協議と並行して、EDA の成果を建設活動に円滑に繋げる

ために、ITER 移行措置の活動が那珂（日本）とガルヒン（ドイツ）の作業サイトで実施されたが、これらのサイトは 2006 年末に閉鎖され、作業サイトはサンポール・レ・デュランスに一本化された。このサンポール・レ・デュランスの作業サイトに、2007 年 10 月に ITER の建設と運転を主導する ITER 国際核融合エネルギー機構が設置された。

ITER 建設サイトであるサンポール・レ・デュランスはマルセイユから直線距離で約 60 km の内陸、南フランス、プロバンス地方に位置している。これまでに、石灰岩の台地を掘削・平坦化してプラットフォームとし、2012 年 10 月には ITER 機構本部ビル（地上 5 階、地下 1 階建）が竣工して、700 名以上の ITER 機構職員、1000 人以上の作業員が建設に従事している。最近の ITER サイト及びトカマク複合建屋建設現場を図 1.2.2-1 に示す。



図 1.2.2-1 ITER サイト建設状況（左）、地上レベルに到達した生体遮蔽のコンクリート打設（右）（2017 年 4 月）^[1-3]

サイト内各所で様々なプラント建屋の建設が並行して行われており、2016 年には組立建屋（高さ 60 m）の構造・外装工事が完了し、2017 年 3 月には 400 kV 受配電系が受電を開始した。トカマク複合建屋の建設現場では、2013 年 9 月に地下 2 階からコンクリート打設が開始され、現在、建屋の中心部の生体遮蔽をはじめ、地上レベルでの建設作業が進展している。ITER 計画の今後予定としては、2025 年に ITER の運転開始となるファーストプラズマの発生が計画され、その後段階的に運転範囲を拡張し、2035 年に核融合反応を起こす重水素とトリチウム燃料を使用した本格的な核融合運転の開始が計画されている。

1.2.3 国内における ITER 開発

日本では、日本原子力研究開発機構（現、量子科学技術研究開発機構（QST））が、2007 年日本における ITER 計画の実施機関の指定を受けた。ITER 機器の調達、日本人の ITER 機構職員公募への窓口業務、日本人 ITER 機構職員の生活支援、ITER 機構が募集する専門家、外部業務委託情報の日本国内への発信、ITER 事業全般の広報活動、及び産官学と連携した意見集約等の活動は QST が中心となって行っている。ITER 計画では、各参加極が調達すべき機器がきめられており、各国の実施機関がメーカーから機器を調達して ITER 機構に「物納」することになっている。図 1.2.3-1 に日本が物納する ITER 主要機器の調達分担を示す。

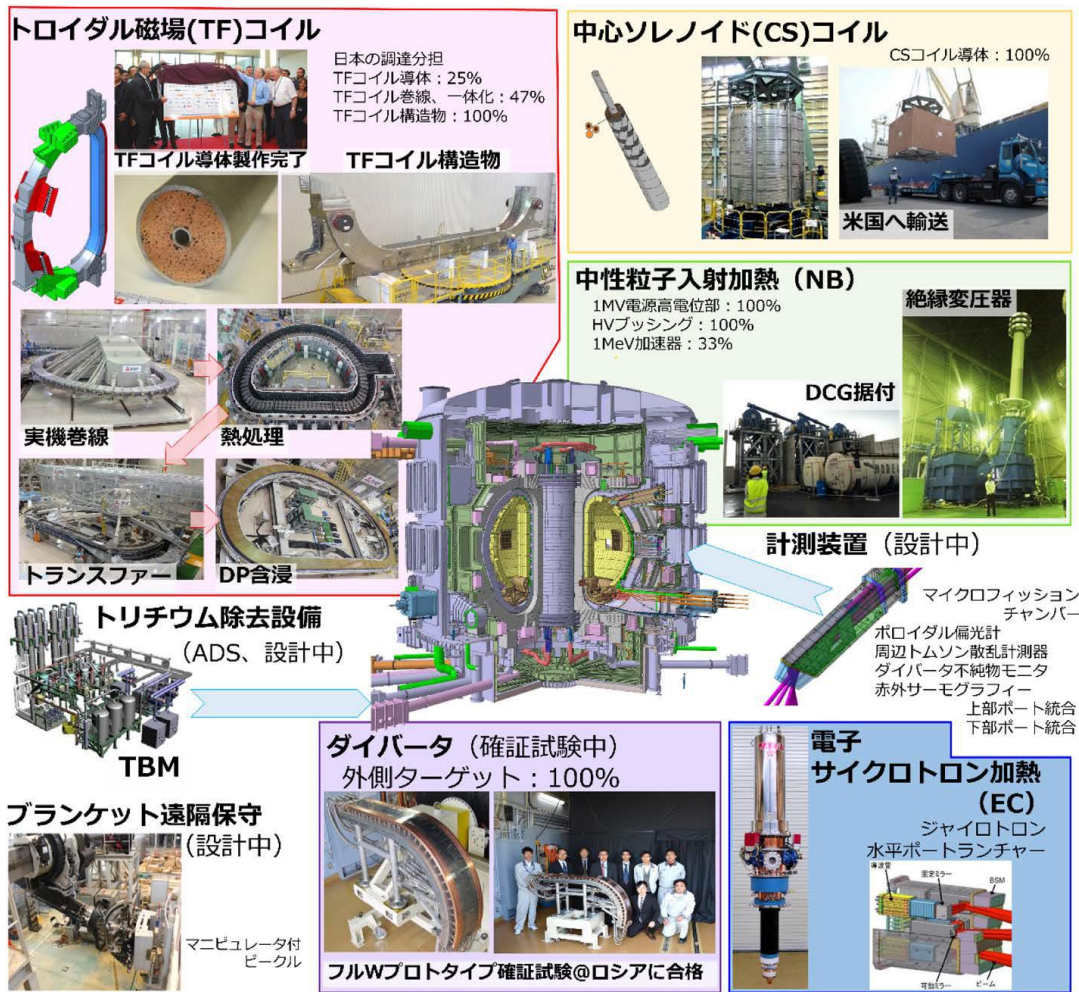


図 1.2.3-1 日本が調達を担当している機器^[1-3]

日本は、トロイダル磁場 (TF) コイル及び中心ソレノイド (CS) 用超伝導導体、中性粒子粒子入射加熱装置、電子サイクロトロン加熱装置、ダイバータ外側垂直ターゲット、テストブランケットモジュール、トリチウム除去設備及びブランケット遠隔保守機器の調達を分担している。日本における機器開発と製作は順調に進んでおり、例えば TF コイルに関しては、導体の製作が完了し、サンプル試験において良好な超伝導特性が確認され ITER 機構の認定も完了し、2014 年に TF コイル導体の調達を完了した。実機 TF コイルの複数機は製作が完了、2020 年に ITER への出荷も完了しており、残りの製作の最終段階に入っている。その他に、ダイバータに関しては、日本は外側ターゲットの全数を製作し、ITER 機構に納入することとなっている。現設計において、表面にはタングステンが採用され、銅合金製冷却管 (CuCrZr) に冶金的に接合して、十分な除熱性能を確保する構造となっている。現在、調達の最初のステップとなる実規模プロトタイプの製作を実施している。

1.2.4 ダイバータ配位

1.2.1 項で述べたように、ITER ではプラズマを磁場で閉じ込めるトカマク方式を採用しており、国内向け原型炉においてもトカマク方式を採用する計画となっている。この磁場でとじ込める超高温のコアプラズマを生成し維持するためには、コアプラズマとプラズマ対向壁との相互作用をできるだけ小さくする必要がある。初期のトカマク装置においては、コアプラズマが壁と直接接触しないように突起物を真空容器内に設置し、これによってコアプラズマの表面を決めていた。この突起物をリミタと呼ぶ。しかし、コアプラズマがリミタに当たると、リミタの材料がスパッタされて不純物が生じ、コアプラズマ中へ混入する。こうした金属不純物がコアプラズマへ混入すると、多大な放射損失が発生し、コアプラズマを冷やしてしまう。この問題を解決するために、コアプラズマを磁力により空中に浮かせて第一壁に直接触れさせないように、ダイバータ配位が考案された^[1-5]。図 1.2.4-1 にトカマクのポロイダル断面の概要図を示す。こういったポロイダル断面上でポロイダル方向の磁場が 0 となる点が存在する。この点をヌル点と呼ぶが、実際は円周をなしている。このヌル点を通る磁力線の作る 8 の字型の面をセパトロクスと呼ぶ。ダイバータ配位ではこのセパトロクスを生成し、コアプラズマの表面をこの磁場配位で決めることで、コアプラズマを高温高密度で閉じ込めて高温のプラズマと第一壁が直接接触することを避けている^[1-6]。プラズマで発生した粒子と熱はセパトロクスを横切り、スクレイプオフ層（Scrape Off Layer : SOL）へと流出する。この粒子と熱はスクレイプオフ層で磁力線方向に輸送され、ダイバータと接触される。このダイバータ配位は、原子力研究開発機構で開発された小型トカマク JFT-2a において世界ではじめて実装された^[1-7]。この JFT-2a での実験により、不純物混入の抑制効果が確認され、ダイバータ配位は世界標準となり、日本の大型トカマク JT-60 にもダイバータ配位が採用された。さらに、ドイツの ASDEX でもこのダイバータ配位の実験が実施され、不純物制御のみならず閉じ込めの改善（H モード）が発見された^[1-8]。米国の Doublet III では、コアプラズマ密度が高くなりダイバータへの粒子束が増加すると、ダイバータ部でのプラズマ密度が大きく上昇し、温度が低下することが観測された^[1-9]。このダイバータプラズマの高密度低温化により、ダイバータでの放射冷却が促進され、ダイバータへの直接的な熱流束を低減させることができた。この結果は、ITER 等の核融合実験炉におけるダイバータに流入する熱負荷低減の概念として採用されている。

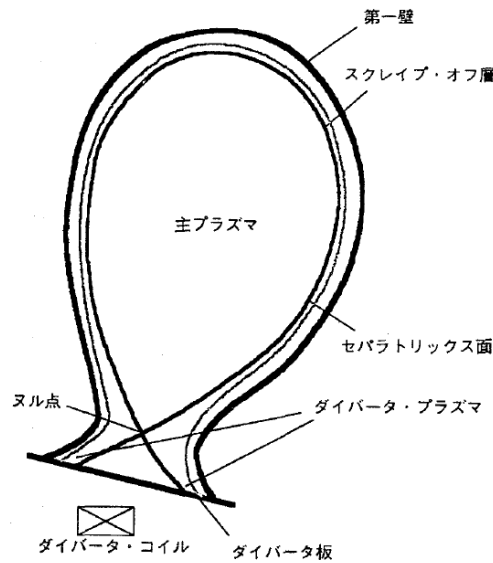


図 1.2.4-1 トカマクのポロイダル断面の概要図^[1-6]

1.2.5 ダイバータの材料

ダイバータは、磁力線に沿って入射する荷電粒子を不純物ガスとして排気ポートに導くことでプラズマの純度を保つ機能を持つ。ダイバータに入射する荷電粒子は、ダイバータ表面に衝突する際に電荷を失って不純物ガスとなる。この荷電交換の際に、粒子のもつ運動エネルギーがダイバータへ熱として与えられる。このため、ダイバータは核融合炉内機器において最も高い熱負荷を受ける機器となる。図 1.2.5-1 に ITER のダイバータの模式図を示す。ITER のダイバータは、内側と外側の垂直ターゲット（vertical target）及びドーム／ライナー（dome/liner）と呼ばれる機器から構成される。図 1.2.5-1(b)に示すように、磁力線と垂直ターゲットが交差する点をストライク点と言う。このストライク点に設置される垂直ターゲットの下部は、特に高い熱負荷を受けることになる。ITER では通常運転時の最大設計熱負荷は従来の工学機器と比較して 1 桁以上高い $10\sim 20 \text{ MW/m}^2$ であり、ダイバータにはこのような高熱負荷に対する除熱する機能が要求される。さらには、ITER のように DT 燃焼を行う核融合実験装置においては、核反応により発生する中性子に耐えるとともに、中性子照射に伴い発生する核発熱を除去することも要求される。この除熱機能に関して、プラズマの放電持続時間が限られている核融合実験装置 JT-60U などでは、ダイバータの支持構造を介して真空容器等に熱を逃がす慣性的な冷却方式が採用されている。一方で、ITER のように数百秒以上の長時間の放電実験を行う核融合実験装置においては、ダイバータの構成部材の熱容量が足りず、表面温度が融点又は昇華点を超えてしまうため、水冷による強制的な冷却方式を採用している。この水冷方式を採用する場合、ダイバータは炉内の真空環境と冷却水の圧力バウンダリとしての機能も要求されることになる。ダイバータにおける圧力バウンダリの機能が失われた場合、つまり真空容器に冷却材が漏洩した場合、ITER は実験を中止するだけでなく、かなりの復旧期間が必要となる。従って、ダイバータに要求される圧力バウンダリとしての機

能は、最優先で確保すべき機能である。

また、ダイバータの表面にはプラズマ運転中に絶えず入射する荷電粒子と中性粒子が磁力線に沿って絶えず入射し、これらの粒子によるスパッタリングによってダイバータの表面材料は損耗する。スパッタリングによってはじき出された粒子の一部はイオン化され、プラズマに不純物として混入し、プラズマの温度低下や閉じ込め性能低下を招く。つまり、表面材料の損耗量を抑制することもダイバータの重要な要求となる。

上述の通り、ITER においてダイバータが通常運転時において受ける熱負荷は $10\sim 20\text{ MW/m}^2$ であるが、この熱負荷は一般の工学機器と比較して非常に大きい。既存の軽水冷却型原子炉の構造材であるステンレス鋼でダイバータの冷却管を構成した場合、通常運転時の熱負荷に対して肉厚 1 mm の平板の加熱側表面と裏面には 500 K の温度差が生じることになり、この温度差に起因する熱応力が過大になる。従って、ITER では高い熱伝導率を持つ銅合金をダイバータの冷却管に使用している。粒子の飛散によるプラズマの冷却を防止するために、ダイバータの表面の受熱部に対しては、既存の核融合装置の多くで低原子番号材料、特に炭素系材料がアーマ材として用いられている。これは、原子番号の小さい材料ほどプラズマへの影響が小さいためであり、炭素系材料を用いることはプラズマへの悪影響を低減することが主たる目的であるが、除熱の観点からも熱伝導のより高い炭素系材料が開発された。実際に ITER ダイバータにおいても一部に炭素系材料の 1 つである炭素繊維強化炭素複合材料 (CFC 材料) の採用が検討されていた。図 1.2.5-2 に代表的な CFC 材料、銅及びタングステンの熱伝導率を示す^[1-11]。CFC 材料は高温側で熱伝導率の低下が顕著となるが、低温側では銅を超える熱伝導率を有する。しかしながら、ITER の初期装荷ダイバータがトリチウムを使用する運転時期にも延長利用される計画となった。ITER で定められたトリチウムの管理目標値を守るために、トリチウムの吸蔵量が小さく、スパッタリング率も低いタングステンが長期の連続運転には適する材料であると考えられ、プラズマの対抗材料はタングステン材とすることが 2013 年に決定された^[1-13]。表 1.2.5-1 に CFC 材料とタングステンの特性の比較を示す^[1-12]。タングステン材ダイバータの運転経験は乏しいとされているが、実際には AUG 装置 (ドイツ) や JET 装置 (イギリス) で経験が蓄積されているものの、ITER ではこれらの既存装置と比較して主プラズマからセパトリクスを横切ってスクレイプオフ層プラズマへ排出されるパワーは一桁近く高い。従って、ITER では既存装置での運転経験を基にプラズマ運転の習熟が非常に重要である。

表 1.2.5-1 CFC 材料とタングステンの特性比較^[1-12]

	炭素材ダイバータ (CFC)	タングステン材ダイバータ (バルク)
熱伝導率	高い	高い
融点 (溶融の可能性)	昇華 (溶融しない)	高い (3422℃). (溶融の可能性あり)
熱衝撃性能	高い	(延性・脆性遷移温度以下で) 低い
運転温度領域	広い	狭い (再結晶温度 (約1200℃) 以下)
寿命 (スパッタリング率)	短い (スパッタリング率が高い)	長い (スパッタリング率が低い, プロンプト・リデポジションの効果によりトカマク磁場下ではさらに低くなる)
中性子照射の影響	性能劣化が著しい	核変換による性能劣化
ダイバータプラズマなど低温プラズマ中での放射	高い	低い
主プラズマなど高温プラズマ中での放射	低い	高い
水素リテンション	多い	少ない
再たい積層・ダスト生成	多い	少ない
運転経験	豊か	乏しい

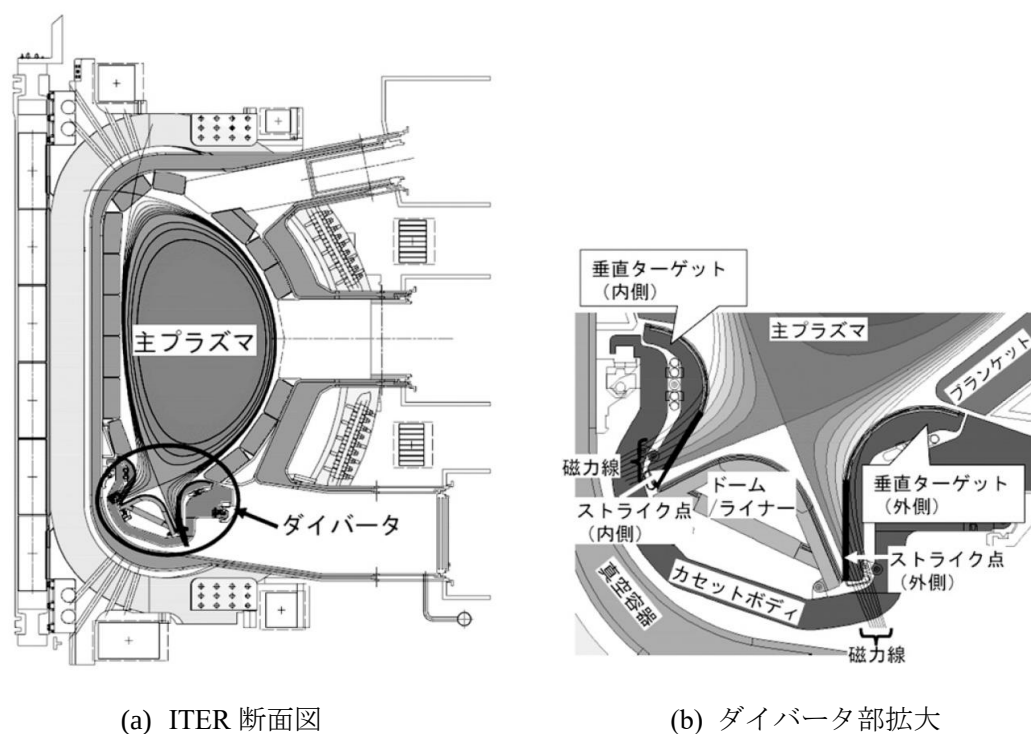


図 1.2.5-1 ITER のダイバータ模式図^[1-10]

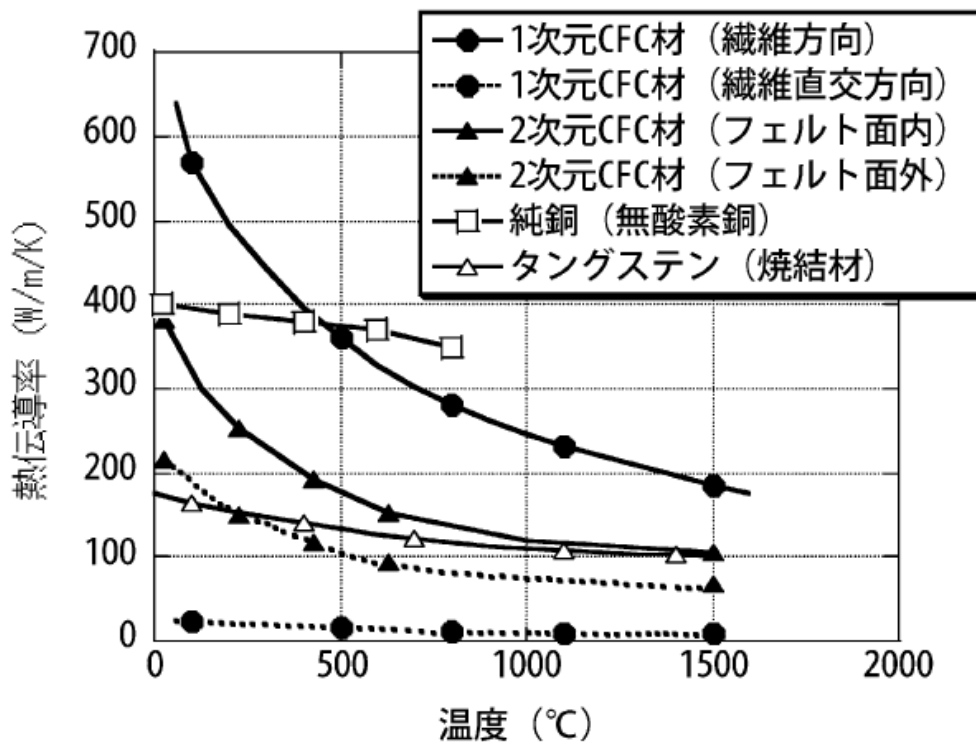


図 1.2.5-2 CFC 材料、銅及びタングステンの熱伝導率^[1-11]

1.2.6 ダイバータの構造

図 1.2.6-1 に ITER ダイバータの構造図を示す^[1-12]。ITER におけるダイバータは開発の当初から、運転期間中の交換を前提とした設計が行われている。また、DT 運転時には 14 MeV の中性子が発生し真空容器内の機器は放射化されるため、これらの機器が故障や損傷した場合には遠隔保守装置による保守・交換が必要となる。ダイバータもこの遠隔保守装置による交換作業を考慮し、カセット構造を採用している。ITER ダイバータの製作は、EU、ロシア、日本の 3 極が担当しており、ダイバータを構成する機器のうち、日本は外側垂直ターゲット (Outer Vertical Target : OVT)、EU は外側垂直ターゲット (Inner Vertical Target : IVT)、ロシアはドームと呼ばれるプラズマ対向機器の製作を担当している。図 1.2.6-2 に垂直ターゲットの構造図を、図 1.2.6-3 にダイバータ冷却管の内部構造図を示す^[1-10, 14]。1.2.5 項で述べた通り、ダイバータの表面のアーマの材料にはタングステンが使用されることとなっており、モノブロックと呼ばれる $30 \times 30 \times 10 \text{ mm}^3$ のバルク・タングステン材に約 2 m の銅冷却管を串刺しする構造となっている。このユニットがダイバータカセット上に約 20 列並び、合計 54 台のダイバータカセット上に並ぶモノブロックの総計は 30 万個となる。除熱の観点から、図 1.2.6-3 に示すように、通常の円形冷却管内に金属製のねじりテープを挿入した構造となっており、このねじりテープにより冷却管内に旋回流を生じさせ、除熱能力を向上させている。ITER における冷却水条件 (4 MPa、100 °C) の下では、ねじり比 (冷却管の内径 (テープの幅) とテープが 180 度回転するのに要する長さの比) が 3 のねじりテープを挿入させており、この冷

却管は通常の円管の約2倍の除熱能力を持つ^[1-15]。

また、モノブロックの形状を工夫することで熱負荷を低減するような設計も実施されている。モノブロック間には隙間があるため、トロイダル方向に垂直な面であるモノブロックの側面は磁力線に垂直に近い角度で接続し、非常に大きな熱負荷を受ける。さらに、プラズマ対向面となる表面からも熱負荷を受けるため、モノブロックの角は側面と表面で受けた熱のたまり場となり、最も溶融しやすくなる。図 1.2.6-4 にモノブロックの断面図を示す^[1-16]。この角を磁力線の影となるように隣り合うモノブロックの端を持ち上げた形状にすることによって、側面からの熱負荷の入射を防ぐ。その一方で、プラズマの影となる面積を大きく取りすぎると、プラズマ対向面の受熱面積が減少するため、単位面積あたりの熱負荷が増加する。これらはトレードオフの関係にある。また、ターゲットの直線部と湾曲部では想定される熱負荷の受け方が異なるため、段差や方向などの断面形状の検討の仕方も異なる^[1-12]。従って、モノブロックの形状は一部を除いて同一ではなく、なめらかに接続するような設計となっている。

このようなタングステンドライバータに対する最大の課題の一つは、ドライバータの溶融である。上述のような設計上の除熱能力の向上の工夫はされているが、溶融の可能性がないとは言えない。プラズマからの熱負荷によりタングステン・モノブロックの表面が溶融し、隣のモノブロック（モノブロック間の隙間は0.5 mm）に接続すれば、凝固時に発生する応力によって冷却配管の破断も起こりうる^[1-12]。冷却配管の破断は、圧力バウンダリの損失となるため、最優先で防止する必要がある。

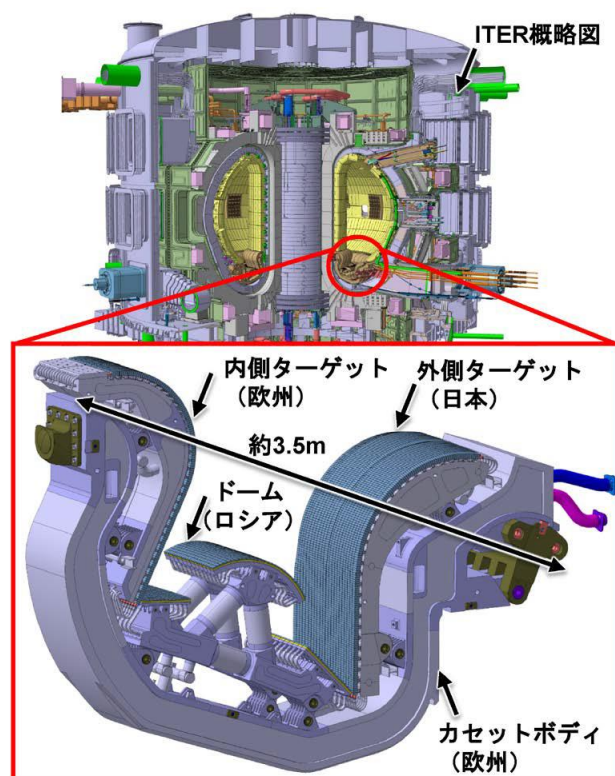


図 1.2.6-1 ITER ダイバータ構造図^[1-13]

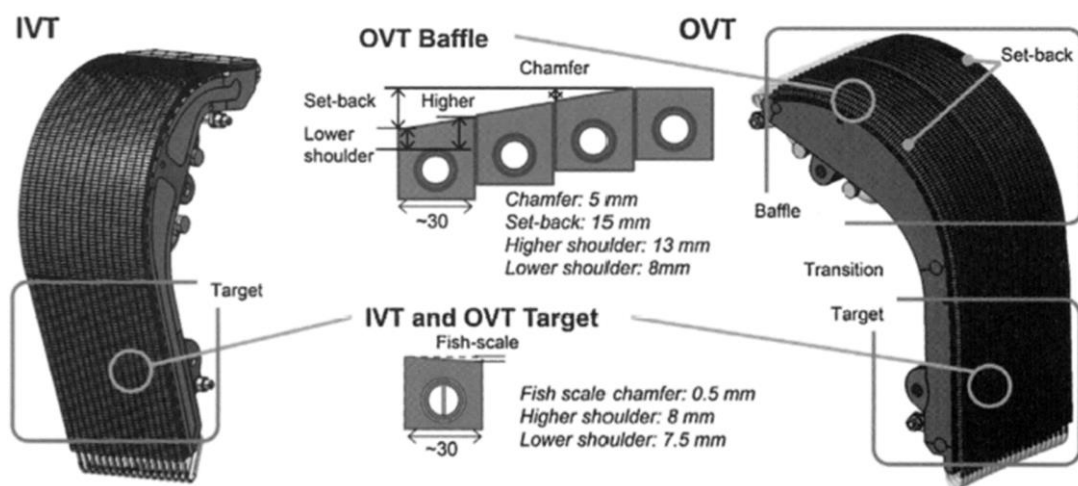


図 1.2.6-2 ITER 垂直ターゲットの構造図^[1-14]

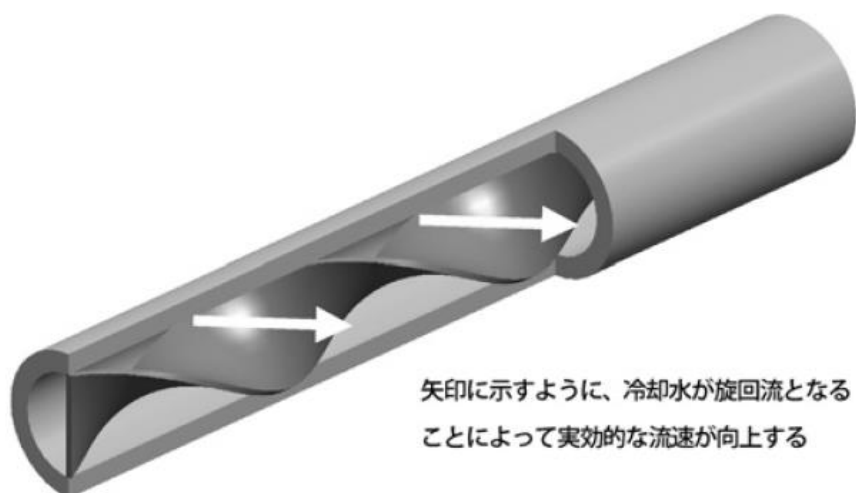


図 1.2.6-3 ITER ダイバータの冷却管の内部構造図^[1-10]

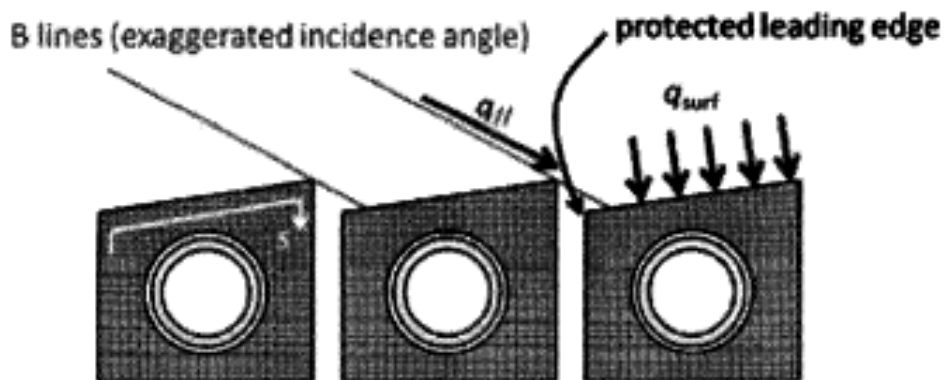


図 1.2.6-4 モノブロックの断面図^[1-16]

1.2.7 ダイバータへの熱負荷

ITER では、炉内機器にかかる熱負荷の種類を以下に分類している^[1-12]。

- ① 定常熱負荷 (10 MW/m^2 以下)
- ② 緩やかなパルスの熱負荷 (20 MW/m^2 以下)
- ③ ディスラプション ($110 - 2000 \text{ MJ/m}^2/\text{s}^{0.5}$) ^[1-17]

ディスラプションとは、不純物の混入やプラズマの制御ミスによりプラズマが 0.1 ms から数 ms という短い時間のうちに消滅する現象で、プラズマのエネルギーがプラズマ対向機器に放出されてしまう現象である。ディスラプションを特徴づける現象として、電流消滅と熱消滅がある。電流消滅は、プラズマの急速な低温化によりプラズマの電気抵抗が増大することで、プラズマ電流を維持することができなくなり、プラズマ電流が突然切れる現象である。この電流消滅により、真空容器やプラズマ対向機器等には電流消滅速度に比例した大きさを渦電流が流れる。この渦電流が磁場と結合することで電磁力が発生するため、この電磁力による負荷に耐えうる機器設計が必要となる。プラズマの低温下の原因は、プラズマの閉じ込め性能が急激に劣化し、プラズマ中に蓄えられた熱エネルギーが放出されることであり、これを熱消滅と呼ぶ。この時に放出された熱エネルギーはスクレイプオフ層の磁力線に沿ってダイバータに流れ込むため、数 ms 以下の短時間に少なくとも 100 MW/m^2 オーダーの熱負荷がダイバータ表面にかかる。熱負荷を与えることになる。この熱負荷により、ダイバータの表面が損耗し不純物が発生すると、放射損失が増大しプラズマはさらに低温化することになる^[1-18,19]。

- ④ ELM ($200 - 700 \text{ MJ/m}^2/\text{s}^{0.5}$)

ELM は、最も一般的なプラズマの閉じ込め改善状態である H モードで発生する間欠的・周期的な熱や粒子の放出現象である。さらに、ELM の中でも最も一般的なものは Type I ELM と呼ばれる。Type I ELM My H モードでは、良好なプラズマの閉じ込め状態を定常的に維持できるが、ELM に伴って大きなエネルギー流出されるため、ダイバータの表面を損傷させる恐れがある。^[1-20]

日本及び欧州が製作したタングステン・モノブロックの小型試験体に対する高熱負荷試験がロシア・エレモフ研究所にて実施され、 10 MW/m^2 の熱負荷が 5000 回、さらに 20 MW/m^2 の熱負荷が 300 回与えられたが、安定した除熱性能を維持するとともに亀裂などの損傷は見られなかったことが報告されている^[1-21]。この高熱負荷試験の結果から、定常熱負荷及び緩やかなパルスの熱負荷に対しては、タングステン・モノブロックが溶融・亀裂などの損傷を受ける可能性は低いことが分かる。しかし、トカマク磁場下では図 1.2.6-4 に示すように、モノブロックは表面に対して浅い角度で熱負荷を受けるため、モノブロックの断面の形状によっては、さらに温度が上昇した場合に溶解する危険性がある^[1-16]。特に、ディスラプションや ELM では非常に短い時間で高熱負荷がタングステン・モノブロックの表面に加わるため、表面温度の上昇による損傷が問題となっている。ITER の標準運転シナリオである ELM My H-mode の場合、ディスラプション前にプラズマ閉じ込めが劣化し、熱消滅時には蓄積エネルギーの

半分以上が失われている^[1-22]。この熱消滅によるダイバータへの熱負荷は 120 ~ 175 MJ と想定され、熱負荷の幅の広がり（通常運転時の 5 倍）や熱負荷の立ち上がり時間（1.5 ms）を用いて、ダイバータ表面の溶融に対するパラメータ ϵ (MJ/m²/s^{0.5}) を求めると約 400 となる。タングステンが溶融する ϵ の値は約 48 である^[1-23]ため、熱消滅による熱負荷を約 1/8 程度に緩和する必要がある。もし緩和がなければ 20 回程度のディスラプションでダイバータは寿命を迎える^[1-18]。

ディスラプションはトカマク型核融合炉において完全に除去することは出来ないが、頻繁に起こるようではそもそも炉として成り立たない。熱消滅が発生する前にプラズマ中の磁場の乱れを抑制することでディスラプションの発生を回避する方法^[1-24]や熱消滅が発生した後も ECRF（電子サイクロトロン周波数帯）加熱を行うことで電流消滅を回避する方法^[1-25]が考えられている。ディスラプションの回避方法や緩和方法が検討されている。ディスラプションが回避できない場合には、負荷の軽いディスラプションを意図的に起こしてプラズマ放電を急速に停止することが考えられ、そのための技術が開発されている^[1-26,27]。これは、大量の物質を短時間のうちにプラズマ中に注入することで、放射損失の急増によりプラズマの熱エネルギーを事前に散逸させ、熱消滅時の熱負荷を低減しつつ適切な時定数の電流消滅を得るものである。上記のような種々の緩和法により、ディスラプションの影響を緩和できるが、緩和法は実際には負荷の軽いディスラプションを引き起こすものであり、その影響は事前に検討しておく必要がある。また、100%の信頼性で緩和が成功するとは限らないことから、ディスラプションの発生自体を抑制することが ITER における究極の開発目標であるとも考えられる。

1.2.8 タングステンドイバータの開発

1.2.7 項で述べたように、10 MW/m² 以下の定常熱負荷や 20 MW/m² 以下の緩やかなパルスの熱負荷に対してのタングステン・モノブロックの健全性は確認されている。ディスラプションや ELM などによる高熱負荷によってタングステン表面に様々な損傷が生じることが分かっているが、ダイバータ寿命や安全運転、設計改善の観点からもタングステンへの高熱負荷の影響を詳しく知る必要がある。タングステン・モノブロックに ELM が与える影響に関して模擬実験が行われており、溶融が起こるエネルギー域や 2 種類の亀裂が発生すること、粒子が放出されること等が確認されている^[1-28]。また、溶融閾値より低いエネルギーであってもタングステン表面に粗面化や熱疲労による亀裂が発生すること、繰り返し回数が 10⁵ に達すると溶融閾値の 20%のエネルギーで、粗面化・亀裂に加えて再結晶化や局所溶融が起こることが確認されている^{[1-29][1-30]}。しかし、Ductile-Brittle Transition Temperature (DBTT) 以上の温度領域で ELM を模擬した高熱負荷を与えた場合には、亀裂の発生がある程度抑制される^[1-31]。亀裂には初期亀裂と二次亀裂があり、亀裂が発生すると付近の熱応力が緩和されるため、新たに発生する亀裂は離れた場所に発生し、かつ初期亀裂より深くはならない。その結果、表面に網の目のように亀裂が発生するということが報告されている^[1-32]。

ITER にて想定されるディスラプションや高エネルギーの ELM によってタングステンが溶

融する可能性がある。タングステンが溶融した際にプラズマに与える影響やタングステンの損耗状態の調査実験がドイツのトカマク装置 TEXTOR で行われた^{[1-33][1-34]}。その結果、溶融したタングステンがコアプラズマに放出されると、放射によってプラズマの温度が下がり、最悪の場合はディスラプションが起こることが報告されている。また、ディスラプション及び ELM を模擬したパルスレーザーによるタングステンへの高熱負荷実験を行い、照射後のタングステン表面の状態及び形状の観察も行われている^{[1-29][1-35][1-36][1-37]}。タングステンの溶融・凝固後、照射領域中心部が膨らみその周辺が落ち込む特徴的な形状になっていることが観察されている。熱負荷により溶融した際の表面の凹凸（リーディングエッジ）が、ラーマー半径程度以上に大きくなると、局所的に熱集中が起きようになり、次のパルス熱負荷や、あるいは定常熱負荷でも溶融が促進されることも報告されている^{[1-38][1-39]}。

1.2.9 溶融金属内部の流動評価手法

ダイバータの表面状態は熱耐性との関連性が強く、表面状態の悪化による熱耐性の低下はダイバータの機能低下や短命化につながる。従って、ダイバータの表面形状は ITER の定常運転にとっても非常に重要なファクターとなる。このようなプラズマからの高熱負荷に対する壁材料の応答はプラズマ・壁材料相互作用（Plasma Wall Interaction : PWI）と呼ばれ、現在でも分からないことが多く現象の解明が進められている。1.2.6～1.2.8 項で示したように、ダイバータ形状の工夫によるタングステンの溶融・蒸発対策やディスラプションなどの緩和・回避方法に関する研究が実施されているが、ダイバータ表面のタングステンの溶融の可能性は完全には除去できない。ゆえに、表面の溶融後の形状やそれが炉に与える影響の評価は、実用化を視野にしたときの課題となる。1.2.8 項に示したように既往研究において、タングステンに高熱負荷をかけることで核融合炉内環境を模擬し、溶融・凝固後のタングステンの顕微鏡による観察など、事後解析による静的な評価が主に行われてきた。溶融・凝固後の表面形状はタングステンの溶融から凝固に至るまでの相変化のプロセスにおける溶融タングステン中の挙動が重要なファクターとなる。しかしながら、このタングステンの相変化中のプロセスに関する動的な評価はあまり行われていない。そこで、パルスレーザーによる高熱負荷によって、タングステンの溶融及び凝固中のタングステン表面挙動を高速度カメラによって動的に観察する研究が実施されている^[1-40]。しかし、このような実験的研究ではタングステンの表面変動の動的な観察のみで、不透明な液体である溶融タングステン内部の対流を観察・評価することは難しい。ステンレス鋼に YAG レーザーを熱源として高熱負荷を与え、タングステンやジルコニア粒子をマーカーとして X 線透過法で溶融層の形状や内部対流を可視化する実験が実施されている^[1-41]。しかし、タングstenは融点が最も高い金属であるため粒子をマーカーとした X 線透過法が適用できないことや、X 線管では単位スペクトル幅あたりの強度が弱く固液界面など密度差の小さい界面の像は明瞭に撮影することはできないこと、この方法では溶融タングステンの流動を正確に評価することは難しい。一般的にも溶融層内部の詳細な温度分布等の物理量計測は難しい。従って、実験的研究のみでタングステンの溶融中の挙動を把握することは困難であり、シミュレーションによる評価手法の確立が必要となる。

さらに、炉内でタングステンが溶融する際には、強磁場下で相変化をしながら熱輸送を行うことになる。また、アブレーション生じた際のプルームのプラズマ化は、時間スケールで言えばプラズマ対向機器とは大きくことなるが、その運動により周囲には瞬間的に磁場が生じることが考えられる。これら进行评估するためには、溶融という相変化事象から、磁場下での熱伝達といった複合的な物理現象を取り扱う必要がある。このように、高熱負荷を受けるダイバータ表面で起こる現象は、磁場と流動といった複合的な物理現象を考える必要がある。しかし、核融合炉内環境を実験で再現することは極めて難しくコストも膨大にかかるため、実験によって得られる情報は限定的となってしまう。従って、ダイバータ表面で発生する複合現象を解明するためには実験的な研究による評価のみならず、シミュレーションによる評価が必要であり、その評価手法の確立が求められている。

溶融金属挙動の代表的な駆動力の一つに、液体表面の温度差による表面張力に起因するマランゴニ効果が知られている。液体表面の表面張力が一様な場合は、その液体は表面の曲率と液体内外の圧力差がつり合う形状で静止するが、表面の温度や濃度にばらつきがある場合には、表面張力が不均一となりその表面張力差によって流動が発生する。実際にダイバータにおいてタングステンが受ける熱負荷は場所によって異なるため、タングステン表面には温度勾配が発生し、溶融中のタングステン内部ではマランゴニ対流が発生すると考えられる。マランゴニ効果によって生じる対流は、マランゴニ対流と呼ばれる。これまで、水のような高プラントル数の流体に関してのマランゴニ効果に関する報告は多くなされてきたが^[1-42, 43]、溶融金属のような低プラントル流体に関するマランゴニ効果の報告例は少ない。ゆえに、低プラントル流体のマランゴニ効果の知見を得ることは、ダイバータの表面変形を評価する上で欠かせない。低プラントル流体の溶融シリコンを用いた環状プール内においてマランゴニ対流に関する評価がなされている^[1-44]が、いまだ体系的な理論構築はなされていない。2次元体系において温度差のみに起因するマランゴニ効果の解析が行われているが^[1-45]、3次元的に表面変形を伴う状態でのタングステンの相変化を含む物質挙動に関する研究をしている例は過去に報告されていない。Tsotridis らの解析^[1-45]では、表面張力を境界条件として与えることで表面は固定した状態で、溶融金属内部の挙動のみに着目していた。しかしながら、実際のタングステンの溶融状態を考慮すると、溶融状態中の表面は自由表面となり、この自由表面が変動した状態で凝固することで表面形状が変化する。ゆえに、高熱負荷を受けたタングステンの表面形状を評価するうえで、自由表面を表現することは不可欠である。

界面変動評価のシミュレーション手法として、自由表面を扱うことのできる界面補足法がある。この界面捕獲法は気液界面の移動を界面関数で定義し、固定したメッシュで界面の位置を捕捉する方法であり、代表的なものに level-set 法や VOF 法がある。実際に level-set 法を用いた鉄におけるキーホール生成シミュレーションモデル^[1-46]や VOF を用いた熱流体解析手法^[1-47]などが開発されているが、これらは気液界面のみを対象としており、固相を含む相変化を扱うことはできない。また、SPLICE と呼ばれるミクロ挙動とマクロ挙動を多階層スケールモデルにより接続する固気液統一非圧縮性粘性流解析コード^[1-48]も開発されているが、これは相別に式を解くために相間輸送がモデリングに依存する。また、この SPLICE は圧縮性を考慮していないこといいため、圧縮性流体への適用ができない。そこで、連続の式、運動量

方程式、エネルギー方程式、状態方程式を総括的に解く改良型 C-CUP (CIP-Combined Unified Procedure、CIP : Constraint Interpolation Profile) 法^{[1-49][1-50]}が帆足らによって提案されている。この手法は、固体、液体、気体の 3 相を全て同一の方程式で解くために、固気液の相の共存が可能である。さらに、局所的な音速をセル毎に計算することで、圧縮性も考慮した相変化を伴う流れ場を精度良く解くことができることから、圧縮・非圧縮性流体を同時に扱うことができ、自由表面を含む物質の相変化を扱うことが可能である。

1.3 本研究の目的・構成

本研究では、改良型 C-CUP 法をシミュレーション手法のベースとして用い、この手法にタングステンの状態方程式及び表面張力モデルを導入し、マランゴニ効果の寄与を受ける溶融タングステンの表面挙動及び内部対流を評価できるシミュレーションコードを構築した。そして、本シミュレーションコードを用いて、ダイバータの表面材料であるタングステンに関して、様々な熱負荷条件による溶融タングステンの表面変動挙動特性を予測することを目的とする。本論文では、タングステンの EOS の導入やマランゴニ効果の再現のための表面張力のモデル化、さらに同時陰解法を導入するための非対称疎行列を取り入れるアルゴリズムの構築を行う。本研究で取り入れた機能の検証を行ったうえで、溶融タングステンへの一様加熱及び局所加熱シミュレーションの実施し、溶融タングステンの内部流動の発達過程や溶融層サイズに対する流況依存性を明らかにし、様々な熱負荷条件に対する表面変動挙動の特性の評価を行う。

本論文は 6 章で構成される。1 章では背景や本研究の目的を述べた。2 章ではシミュレーション手法、3 章では実験体系、4 章ではシミュレーションコードの機能検証、5 章ではシミュレーション結果及び考察、6 章では結言を述べる。

第2章 シミュレーション手法

2.1 はじめに

高熱負荷環境下において相変化を起こした物質は、固体・液体・気体の複数の相が入り混じる混相流を形成する。通常、これら相変化を伴う混相流の数値計算において固-液、気-液の界面における 10^3 オーダーに及ぶ密度差や、衝撃波が起きたときのその前後における物性・速度等の不連続面で問題が起こりやすい。一般に用いられている数値解法は、不連続面の前後の計算セル（グリッド）の情報のみを用いた 1 次精度から 4 次精度の中心差分、TVD スキームのようにそれらを計算領域によって使い分ける手法と様々なものがあるが、どれも不連続面前後での大きな数値拡散や数値振動によりその初期形状や初期情報を大きく乱すものとなる。グリッド間隔をできるだけ小さくしその数を増やせば解決できる場合もあるが、CFL 条件や計算機の性能や容量等の制約によりあまりに実用的ではなくなってしまう。そこで本研究では矢部らによって提案された CIP (Cubic Interpolated Propagation) 法^{[2-1][2-2]}と呼ばれる手法を用いる。CIP 法を用いることで不連続面を精度良く追うことができ、固・気・液が混在する熱流動現象や衝撃波のような不連続面を伴う現象を比較の実用的なレベルのグリッド数で扱うことが可能である。そこで本章では、ディスラプションや ELM を模擬した高熱負荷を受けるタングステン溶融中の挙動を再現するために用いた、CIP 法をベースとした手法、モデル及び計算体系・条件について述べる。

2.2 CIP 法

CIP 法とは Yabe らによって提案された高次精度差分法の一つであり、一般的に一番難しいとされる対流項、1 次の空間微分項の差分を精度良く行うためにセミラグランジュ法として発展してきた手法である。通常の数値解析スキームでは N 次多項式を $(N+1)$ 個の格子点の情報から求める。しかし、精度を上げるために次数を上げれば上げるほど多くの、そしてより遠くの格子点情報が必要となり、境界外部では何らかの仮定を必要とするため境界付近では精度が落ちてしまう。CIP 法では格子間の情報を PIC (Particle In Cell) 法における粒子の代わりに 3 次多項式で補間するが、その最大の特徴は空間 1 次微分を変数として持ち、更にその移流方程式も解くことである。CIP 法と同じ 3 次精度を持つ QUICKEST や河村・桑原スキームといった手法は 1 次元の場合、4 点、あるいは 5 点の格子に関する情報を必要とするのに対して^[2-3]、CIP 法は空間 1 次微分を変数として持つため補間に必要な格子点の情報は 2 点でよく、精度に対してスキーム自体がコンパクトになるといった利点を持つ。また、変数である空間 1 次微分も移流させることで通常の陽的中心差分等の手法では失われるような格子間のプロファイルも移流することが可能となり、不等間隔格子などを用いずに不連続面を精度良く捉えることができる。

次式で与えられる単純な流速一定の 1 次元移流問題を例題として、CIP 法を説明する。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (2.2.1)$$

ここで、 f は任意の物理量、 u は速度[m/s]である。この方程式の解は次式で表される。

$$f(x, t) = f(x - u\Delta t, 0) \quad (2.2.2)$$

この解は初期条件の物理量が速度 u で平行移動することを意味しており、短い時間 Δt 内であれば各格子点上の速度 u はそれぞれ一定値とみなせる。よって以下のように表される。

$$f(x, t + \Delta t) \cong f(x - u\Delta t, t) \quad (2.2.3)$$

つまり、ある時刻 t における格子点上の物理量が分かっていたら Δt 秒後の物理量は式(2.2.3)で求まる。図 2.2-1 にその概略図を示す。

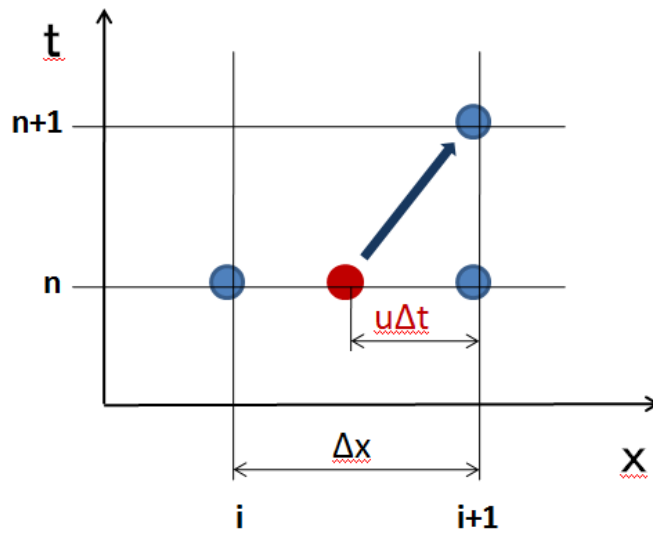


図 2.2-1 式(2.2.3)の概略図

CIP 法では格子間のプロファイルを特定するために、格子点間 $[i, i+1]$ で 3 次補間関数 $F(x)$ を定義する。

$$\begin{aligned} F(X) &= aX^3 + bX^2 + cX + d \\ X &= x - x_i \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

ここで、境界条件として以下の式を用いる。

$$\begin{aligned}
F(0) &= f_i^n \\
F(\Delta x) &= f_{i+1}^n \\
\partial_x F(0) &= \partial_x f_i^n \\
\partial_x F(-\Delta x) &= \partial_x f_{i+1}^n \\
\left(\frac{\partial f}{\partial x} \equiv \partial_x\right)
\end{aligned} \tag{2.2.5}$$

上付き添え字 n は n ステップ目における値もしくは微分値という事を表している。そしてこれらの条件から変数 a, b, c, d は次のようになる。

$$\begin{aligned}
a &= \frac{\partial_x f_i^n + \partial_x f_{i+1}^n}{\Delta x^2} + \frac{2(f_i^n - f_{i+1}^n)}{\Delta x^3} \\
b &= \frac{3(f_{i+1}^n - f_i^n)}{\Delta x^2} - \frac{2(\partial_x f_i^n + \partial_x f_{i+1}^n)}{\Delta x} \\
c &= \partial_x f_i^n \\
d &= f_i^n
\end{aligned} \tag{2.2.6}$$

CIP 法では値と共に微分値も時間発展させる。ここで、速度 u が一定値の場合は式(2.2.1)を空間微分すると、

$$\frac{\partial(\partial_x f)}{\partial t} + u \frac{\partial(\partial_x f)}{\partial x} = 0 \tag{2.2.7}$$

となり、微分値は値と全く同じ方程式を満たす事が分かる。よって、 Δt 秒後 ($n+1$ ステップ目) における値と微分値は次のように求める事ができる。

$$f_i^{n+1} = a\xi^3 + b\xi^2 + \partial_x \xi + f_i^n \tag{2.2.8}$$

$$\partial_x f_i^{n+1} = 3a\xi^2 + 2b\xi + \partial_x f_i^n \tag{2.2.9}$$

ここで $\xi = -u\Delta t$ である。初期条件を与えれば式(2.2.8)、(2.2.9)から時間発展を求める事ができる。また、CIP 法は風上差分であるので、速度の方向によって上流の定義方向も変化する。故に、 $u \geq 0$ に対しては $i+1 \Rightarrow i-1$ 、 $\Delta x \Rightarrow -\Delta x$ となる。

2.3 密度関数

複数の相が混在する流動現象の解析において、Yabe らは界面捕獲のために密度関数を用いている^[2-4]。密度関数は異なる相の区別をするものであり、体積占有率と等しい。密度関数を用いる手法は、ある計算セル内で物質の体積占有率が分かれば、どこに界面があるかを特定しやすいという特徴を持つ。界面追跡法としては、他にも VOF 法^[2-5]や Level-Set 法^{[2-6][2-7]}などがある。VOF 法は密度関数と同じく流体占有率の輸送方程式を解く手法であり、さらに VOF 法の特徴である質量の完全な保存性を保ちつつ、欠点である界面勾配輸送を正確に行う流体率輸送法として MARS 法と呼ばれる手法もある^[2-8]。Level-Set 法は Level-Set 関数と呼ばれる界面で 0 になる正負の符号を持った距離関数により界面を定義する手法であり、近年では CIP 法と組み合わせられた CIP-Level Set 法も提案されている^[2-9]。しかしながら、VOF 法は流体占有率の輸送方程式に対して、局所移動体積を完全に保存する donor-acceptor 法^[2-10]と呼ばれる特殊な離散化手法、あるいは高次差分法を用いる必要がある。MARS 法^[2-11]は各方向に隣接する格子境界の流体率の連続性を保証しながら流体率の保存形移流方程式を解くため、1 時刻ステップ内での界面輸送計算を座標軸に沿った方向ごとに多段階に行うという特殊な手法を採用している。また、Level-Set 関連の手法では Level-Set 関数の数値拡散に対して再初期化という操作が必要となり、その操作は複雑となる。しかし、この密度関数を用いる CIP 法では、その時間発展は単に移流現象によってのみ支配されるため、支配方程式群に密度関数の移流方程式を加えるだけで良い。従って、その移流方程式を解く際も CIP 法のサブルーチンがそのまま利用できるため、アルゴリズム自体がコンパクトになるといった利点も持っている。密度関数を ϕ とすると、その移流方程式は次式で表わされる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i} = 0 \quad (2.3.1)$$

ここで、下付き添え字 i は直交座標系の軸の方向を表す。これを CIP 法で解くために、その空間 1 次微分の移流方程式も解く必要がある。また、ある空間に物質 A と物質 B が混在している場合、密度関数は以下の関係が成り立つように定める。

$$\phi_A + \phi_B = 1 \quad (2.3.2)$$

ゆえに、任意のセル内の密度やその他の物性値、種々の物理定数、例えば粘性係数や熱伝導率、横弾性係数などは、それらをまとめて f とおくと、密度関数を用いて次式のように表わされる。

$$f = f_A \phi_A + f_B \phi_B = f_A \phi_A + f_B (1 - \phi_A) \quad (2.3.3)$$

こうすることで、物質による方程式の区別を無くし、全ての領域を同じ方程式系で解く事を可能としている。

界面を捕獲することを主な目的とする密度関数は不連続な値を持っているため、他のスキームに比べて数値拡散や数値振動が少ない CIP 法でも、ある程度数値拡散や数値振動は生じてしまう。そのため、その界面が複雑になった場合などに、その界面がぼやけたり、本来混

ざり合わない部分で混ざりあったりしてしまう。そこで、Yabe らは以下に定義される正接関数により ϕ を ϕ だけの関数 F_ϕ に変換する手法を提案している^[2-4]。

$$F_\phi = \tan[0.99\pi(\phi - 0.5)] \quad (2.3.4)$$

ここで 0.99 という変数因子は、 F_ϕ が $\phi = 0 \sim 1$ に対して $-\infty \sim \infty$ の間で変化するので、 $\phi = 0, 1$ の時に F_ϕ が無限大になるのを避けるために設定された値である。こうして ϕ だけの関数として変換された関数 F_ϕ は、以下の移流方程式を満たす。

$$\frac{\partial F_\phi}{\partial t} + u_i \frac{\partial F_\phi}{\partial x_i} = 0 \quad (2.3.5)$$

また、 F_ϕ は次式の逆変換により元の ϕ に変換される。

$$\phi = \frac{\arctan F_\phi}{0.99\pi} + 0.5 \quad (2.3.6)$$

この操作により、 F_ϕ が数値拡散による拡散や、数値振動によるオーバーシュートやアンダーシュートを起こしても、 ϕ の値は $0 \sim 1$ の範囲に収まるようになる。

2.4 log 変換

高熱負荷を受ける物質では、温度や圧力が数 1000 倍以上も変化する場合がある。アンダーシュートやオーバーシュートが少ない CIP 法を用いたとしても、数%の数値振動が生じる。この数値振動が 1000 倍変化して、初期値を上回る値になってしまう恐れがある。例えば初期値が 0.1 MPa の圧力において、短時間に高熱負荷を受けると圧力は数 10 GPa 以上も上昇するが、その数値振動がたかだか 0.1% だとしてもその値は数 10 MPa の値を示し、致命的な誤差となる。そういった数値振動を考慮し、本研究では log 変換を用いて移流項を解く。まず、以下のような物理量 f の輸送方程式を考える。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (2.4.1)$$

ここで、以下の変換を行う。

$$F = \log f \quad (2.4.2)$$

従って、式(2.4.1)は以下のように表すことができる。

$$\frac{\partial F}{\partial t} + u \frac{\partial F}{\partial x} = 0 \quad (2.4.3)$$

こうして F を移流させた後、以下のようにして元の f の値を得ることができる。

$$f = \exp F \quad (2.4.4)$$

この log 変換を使用することで、上記の例のような数 1000 倍の圧力上昇が生じ、移流により F においてその数%の誤差が生じてても f の誤差を非常に小さく抑えることが可能となる。

2.5 時間分離解法

式(2.2.1)の代わりに、以下のような生成項 g を含む一次元双曲型移流方程式を考える。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(uf)}{\partial x} = g \quad (2.5.1)$$

式(2.5.1)は以下のように変形できる。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial(uf)}{\partial x} = g - f \frac{\partial u}{\partial x} \equiv G \quad (2.5.2)$$

また、式(2.5.2)を空間微分することで物理量 f の空間 1 次微分の移流方程式を求めることができる。

$$\frac{\partial(\partial_x f)}{\partial t} + u \frac{\partial(\partial_x f)}{\partial x} = \partial_x G - \partial_x f \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.5.3)$$

CIP 法は移流項の高精度差分スキームであるので、移流項と非移流項を分けて段階的に解を求める時間分離解法との相性が非常に良い。時間分離解法では、非移流項は以下のように移流項と分離して考えることができる。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = G \quad (2.5.4)$$

$$\frac{\partial(\partial_x f)}{\partial t} = \partial_x G - \partial_x f \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.5.5)$$

これらの式を有限差分法を用いて解くことで、移流項と合わせて段階的に解を求める。このように、差分による数値拡散や数値粘性が大きくなる移流項を精度良く解くことができる CIP 法は時間分離解法との相性が良いことから様々な問題に対処することが可能である。

2.6 支配方程式

本シミュレーションコードでは支配方程式として連続の式、運動方程式、エネルギー方程式、状態方程式を使用している。それぞれの式を式(2.6.1)～(2.6.4)に示す。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.6.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial \rho(u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial S_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (2.6.2)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial \{(E+P)u_i\}}{\partial x_i} = \frac{\partial(S_{ij}u_i)}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + u_i(\rho g_i) + Q \quad (2.6.3)$$

$$P = P(\rho, T) \quad (2.6.4)$$

ここで、

$$E = \rho e + \frac{1}{2} \rho u_i u_i \quad (2.6.5)$$

であり、各記号は ρ : 密度 [kg/m³]、 u : 速度 [m/s]、 P : 圧力 [N/m²]、 S : 偏差応力(粘性応力) [N/m²]、 g : 重力加速度 [m/s²]、 e : 単位質量あたりの内部エネルギー [J/kg]、 κ : 熱伝導率 [W/(m・K)]、 T : 温度 [K]、 Q : 体積発熱量 [J/m³]である。

CIP 法は元々、非保存系方程式に対して発展してきた手法である。最近では保存系方程式を解く CIP 法も提案されているが^[2-12]、ここでは CIP 法の特徴の一つである時間分離法との相性の良さを生かすためにも、これらの式を非保存形に変形する。まず、式(2.6.1)～(2.6.3)を、実質微分($D/Dt = \partial/\partial t + u_i \partial/\partial x_i$)を用いて以下のように変形する。

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (2.6.6)$$

$$\frac{D(\rho u_i)}{Dt} = -\rho u_i \frac{\partial u_j}{\partial x_j} - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial S_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (2.6.7)$$

$$\frac{DE}{Dt} = -E \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{\partial(Pu_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial S_{ij}u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - u_i(\rho g_i) + Q \quad (2.6.8)$$

ここで、式(2.6.7)の左辺を展開し、式(2.6.6)を代入すると次式を得る。

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial S_{ij}}{\partial x_j} + \rho g_i \quad (2.6.9)$$

また、式(2.6.8)に式(2.6.5)を代入すると以下のようになる。

$$\begin{aligned} & \frac{D(\rho e)}{Dt} + \frac{1}{2} \frac{D(\rho u_i u_i)}{Dt} \\ &= -\rho e \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \rho u_i u_i \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{\partial(Pu_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial S_{ij}u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - u_i(\rho g_i) + Q \end{aligned} \quad (2.6.10)$$

この左辺を展開する。

$$\begin{aligned} & \rho \frac{De}{Dt} + e \frac{D\rho}{Dt} + \frac{\rho}{2} \frac{Du_i u_i}{Dt} + \frac{u_i u_i}{2} \frac{D\rho}{Dt} \\ &= -\rho e \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{1}{2} \rho u_i u_i \frac{\partial u_i}{\partial x_i} - \frac{\partial(Pu_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial S_{ij} u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - u_i (\rho g_i) + Q \end{aligned} \quad (2.6.11)$$

式(2.6.11)に式(2.6.6)を代入すると以下のエネルギー方程式が得られる。

$$\rho \frac{De}{Dt} + \frac{\rho}{2} \frac{Du_i u_i}{Dt} = -\frac{\partial(Pu_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial S_{ij} u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - u_i (\rho g_i) + Q \quad (2.6.12)$$

一方で、式(2.6.9)の両辺の内積を取り右辺を変形すると以下ようになる。

$$\frac{\rho}{2} \frac{Du_i u_i}{Dt} = -\frac{\partial(Pu_i)}{\partial x_i} + P \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial(S_{ij} u_i)}{\partial x_j} - S_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + u_i \rho g_i \quad (2.6.13)$$

ここで、式(2.6.12)から式(2.6.13)を引くと、以下の非保存系エネルギー方程式を得る。

$$\frac{De}{Dt} = -\frac{P}{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial(S_{ij} u_i)}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{Q}{\rho} \quad (2.6.14)$$

このようにして、非保存系支配方程式として以下の連続の式、運動方程式、エネルギー方程式を得る。

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (2.6.15)$$

$$\frac{Du_i}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial S_{ij}}{\partial x_j} + g_i \quad (2.6.16)$$

$$\frac{De}{Dt} = -\frac{P}{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial(S_{ij} u_i)}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{Q}{\rho} \quad (2.6.17)$$

ここで、式(2.6.17)から温度を従属変数とするエネルギー方程式へ変換する。内部エネルギーは温度のみの関数であることから、比内部エネルギーの微小変化量は次式のように表すことができる。

$$\Delta e = -\left(\frac{\partial e}{\partial v} \right)_T \Delta v + \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_v \Delta T \quad (2.6.18)$$

また、ヘルムホルツの自由エネルギーを $f = e - Ts$ とすると、圧力とエントロピー s は次式で

定義される。

$$P = -\left(\frac{\partial f}{\partial v}\right)_T \quad (2.6.19)$$

$$s = -\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_v \quad (2.6.20)$$

これより、次式が成り立つ。

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_v = \left\{ \frac{\partial}{\partial T} \left(-\frac{\partial f}{\partial v} \right)_T \right\}_v = \left(\frac{\partial s}{\partial v} \right)_T = \frac{1}{T} \left\{ P + \left(\frac{\partial e}{\partial v} \right)_T \right\} \quad (2.6.21)$$

$$\left(\frac{\partial e}{\partial v} \right)_T = T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_v - P \quad (2.6.22)$$

式(2.6.18)に式(2.6.22)を代入する。

$$\Delta e = -\left\{ T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_v - P \right\} \Delta v + \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_v \Delta T \quad (2.6.23)$$

上式の両辺で実質微分をとり、定容比熱 C_v を用いて変形すると次式のようになる。

$$\frac{De}{Dt} = -\left\{ T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_v - P \right\} \left(-\frac{1}{\rho^2} \right) \frac{D\rho}{Dt} + C_v \frac{DT}{Dt} \quad (2.6.24)$$

ここで、左辺に式(2.6.17)、右辺第1項に式(2.6.6)を代入し、 $P_{TH} = T(\partial P / \partial T)$ とすると、温度を従属としたエネルギー方程式が得られる。

$$\frac{DT}{Dt} = -\frac{P_{TH}}{\rho C_v} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{S_{ij}}{\rho C_v} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho C_v} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{Q}{\rho C_v} \quad (2.6.25)$$

本解析では、以下の連続の式、運動方程式、エネルギー方程式を支配方程式として用いる。

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (2.6.26)$$

$$\frac{Du_i}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial S_{ij}}{\partial x_j} + g_i \quad (2.6.27)$$

$$\frac{DT}{Dt} = -\frac{P_{TH}}{\rho C_v} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{S_{ij}}{\rho C_v} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho C_v} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \frac{Q}{\rho C_v} \quad (2.6.28)$$

ここで、式(2.6.28)中の右辺第1項について意味することについて考える。まず、流体を含む

混相流において以下の Clausius-Clapeyron の関係が成り立つ場合である。

$$P = P_0 \exp\left(-\frac{L}{RT}\right) \quad (2.6.29)$$

ここで、 P_0 : 初期圧力[N/m²]、 L : 潜熱[J/kg]、 R : 気体定数[J/(kg・K)]、である。この時、 P_{TH} は次式を満たすことになる。

$$P_{TH} = T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \propto L \quad (2.6.30)$$

式(2.6.30)より、 P_{TH} は潜熱に比例することが分かる。つまり、式(2.6.28)中の右辺第 1 項は溶融・蒸発における液化・気化膨張による体積の増加によって潜熱が奪われるプロセスを表している。一方で、固体に対しては異なる解釈をすることができる。ここで、等温体積膨張率 β と体積弾性率 B は次式で定義される。

$$\beta \equiv -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P \quad (2.6.31)$$

$$B \equiv \rho \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T \quad (2.6.32)$$

この時、 P_{TH} は次式で表すことができる。

$$P_{TH} = T \beta B \quad (2.6.33)$$

つまり、固体内部で局所的に温度差ができたときに生じる熱応力によるエネルギーの消散を表すことになる。このように、 P_{TH} を含む式(2.6.28)中の右辺第 1 項は溶融・蒸発の時の潜熱変化と熱応力によるエネルギー消散を同時に表すことができる。

2.7 C-CUP 法

CIP 法は基本的に対流項を比較的精度良く解くための手法であるため、非移流項も含めて解く解法が必要となる。そこで、矢部らは CIP 法を用いた圧縮・非圧縮性流体の同時解法として C-CUP (CIP-Combined Unified Procedure) と呼ばれる手法を提案した^[2-13]。この手法では、移流項と非移流項を分離し移流項のみを CIP 法で解き、その後別の手法で非移流項を解く。通常の流体では、密度の保存則から密度 ρ を求め、エネルギー方程式から温度 T を求めて $P = P(\rho, T)$ から圧力を求める。これを密度ベース解法と言う。しかし、 P - ρ の状態線図において常温・常圧付近の密度領域では傾きが急峻であり、10%程度の密度の揺れに対しても圧力の揺れは 3 桁から 4 桁程度の範囲で生じる。従って、通常この領域では密度ベース解法の適用は困難であり、この領域における流体解析では非圧縮流体近似を用いることが一般的であり、密度一定の元で圧力ポアソン方程式を導き、圧力と流速を求める。このような圧力ポアソン

方程式を導く手法を圧力ベース解法と言う。圧力ベース解法の代表的なものとして、非圧縮性流体の解析手法である MAC (Marker And Cell) [2-14]や SMAC (Simplified MAC) [2-15]、圧縮性を考慮した非定常流れの解析手法である SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equation) [2-16]、SIMPLER (SIMPLE Revised) [2-17]などが挙げられる。圧縮性流体解析としての圧力ベース解法の基礎は ICE (Implicit Continuous-fluid Eulerian) [2-18]である。ICE とは、密度の関数としての圧力の状態方程式から圧力ポアソン方程式を導く手法である。しかし、これでは低マッハ数流れにおいて圧力と密度のつながりが弱まるので、非圧縮仮定の元では本質的につまづくこととなる。さらに、SIMPLE や SIMPLER は、ICE とは異なって圧力による速度補正式から圧力方程式を導き圧力や速度等の全ての変数を反復計算で解く完全陰解法であるため、常に収束性が保証されているわけではない。PISO (Pressure-Implicit with Splitting of Operators) [2-19]ではこうした問題を解決するために、運動量方程式において対流項を演算子として分離して圧力方程式を求め、圧力のみを陰的に取り扱う時間発展型の半陰解法として発展させている。しかし、PISO では圧力ポアソン方程式を導く際に保存系のままで扱っている上に、対流項も圧力ポアソン方程式中に入れるため、その定式化は非常に複雑になっている。そこで、Yabe らは CIP 法の利点である分離解法との相性の良さを生かし、非保存系で時間分離解法によって対流項を除いた非移流項において圧力ポアソン方程式を求めることで、その定式化を簡単なものになっている。以下に、連続の式を用いて C-CUP 法の手順を説明する。

まず、連続の式を、テンソル表記を用いて式(2.7.1)のように表す。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.7.1)$$

この式(2.7.1)の 2 項を分解する。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = - \frac{\partial \rho}{\partial x_i} u_i \quad (2.7.2)$$

これを移流項と非移流項に分けると、それぞれ式(2.7.3)と式(2.7.4)のように表す事ができる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.7.3)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \frac{\partial \rho}{\partial x_i} u_i \quad (2.7.4)$$

ここで、移流項のみを表した式(2.7.3)を CIP 法によって解き、密度 ρ における中間項を求め、その中間項を用いて非移流項である式(2.7.4)を解いて次ステップの値を求める。このように、移流項を CIP 法で解いた後、非移流項を解く方法が C-CUP 法である。

続いて、状態方程式 $P = P(\rho, T)$ より次式が得られる。

$$\Delta P = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T \Delta \rho + \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho \Delta T = C_s^2 \Delta \rho + \frac{P_{TH}}{T} \Delta T \quad (2.7.5)$$

ここで、

$$C_s = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T} \quad (2.7.6)$$

である。式(2.7.5)を変形すると、

$$\frac{DP}{Dt} = C_s^2 \frac{D\rho}{Dt} + \frac{P_{TH}}{T} \frac{DT}{Dt} \quad (2.7.7)$$

となる。これに、式(2.6.26)及び式(2.6.28)を代入すると圧力を従属変数としたエネルギー方程式が得られる。

$$\frac{DP}{Dt} = -\left(\rho C_s^2 + \frac{P_{TH}^2}{\rho C_v T}\right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{P_{TH}}{\rho C_v T} \left\{ S_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + Q \right\} \quad (2.7.8)$$

式を簡略化するために、ここでは式(2.6.26)と、式(2.6.27)、式(2.7.8)から粘性項、重力項、熱伝導項、発熱項を除いた以下の方程式群を考える。

移流項：

$$\frac{\rho^* - \rho^n}{\Delta t} = -\mathbf{u}^n \cdot \nabla \rho^n \quad (2.7.9)$$

$$\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} = -\mathbf{u}^n \cdot \nabla \mathbf{u}^n \quad (2.7.10)$$

$$\frac{P^* - P^n}{\Delta t} = -\mathbf{u}^n \cdot \nabla P^n \quad (2.7.11)$$

非移流項：

$$\frac{\rho^{n+1} - \rho^*}{\Delta t} = -\rho^* (\nabla \cdot \mathbf{u})^{n+1} \quad (2.7.12)$$

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho^*} \nabla P^{n+1} \quad (2.7.13)$$

$$\frac{P^{n+1} - P^*}{\Delta t} = -\left(\rho^* C_s^2 + \frac{P_{TH}^2}{\rho^* C_v T^*}\right) (\nabla \cdot \mathbf{u})^{n+1} \quad (2.7.14)$$

ここで、上付き添字の n は時刻 t 、 $n+1$ は時刻 $t+\Delta t$ での値であり、*は中間解を表す。運動方程式と同様に移流項は CIP 法を用いて解き、非移流項は上式よりポアソン方程式を導く。式(2.7.13)の両辺の発散をとる。

$$\frac{(\nabla \cdot \mathbf{u})^{n+1} - (\nabla \cdot \mathbf{u})^*}{\Delta t} = -\nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho^*} \nabla P^{n+1} \right) \quad (2.7.15)$$

式(2.7.14)、(2.7.15)から $(\nabla \cdot \mathbf{u})^{n+1}$ を除くと圧力ポアソン方程式が得られる。

$$\nabla \cdot \left(\frac{\Delta t}{\rho^*} \nabla P^{n+1} \right) = (\nabla \cdot \mathbf{u})^* + \frac{P^{n+1} - P^*}{\Delta t (\rho^* C_s^2 + P_{TH}^2 / \rho^* C_v T^*)} \quad (2.7.16)$$

式(2.7.16)に粘性項、熱伝導項、発熱項を考慮して、以下の圧力ポアソン方程式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{P^{n+1} - P^*}{\Delta t} = & \left(\rho^* C_s^2 + \frac{P_{TH}^2}{\rho^* C_v T^*} \right) \left(-\frac{\partial u_i^*}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\Delta t}{\rho^*} \frac{\partial P^{n+1}}{\partial x_i} \right) \right) \\ & + \frac{P_{TH}}{\rho^* C_v T^*} \left(S_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa \frac{\partial T^*}{\partial x_i} \right) + Q \right) \end{aligned} \quad (2.7.17)$$

2.8 表面張力

流体表面では物性が不連続に変化しているため、この界面付近ではその境界条件が重要となる。微視的に見ると界面では流体分子が不均一な分子間力を受けており、これが表面張力の原因となっている。表面張力は物質界面固有の特性であるが、これは物性が不連続に変化すると流体分子が受ける分子間力が急激に変化するためである。物質が溶融して流体状態になった時に働く表面張力はマランゴニ対流などの物質移動における流動現象の原因でもあるため、この表面張力を考慮することは本研究が目指す溶融金属中の挙動の把握には不可欠である。そこで本研究では、Brackbill らの提案する CSF モデル^[2-19]の導入を行った。

界面における全表面力 $\mathbf{F}_{sa}$ は次式で表すことができる。

$$\mathbf{F}_{sa} = \mathbf{F}_{sa}^{(n)} + \mathbf{F}_{sa}^{(t)} \quad (2.8.1)$$

ここで、右辺第 1 項は界面に対する法線方向成分、第 2 項は接線方向成分である。

2.8.1 表面張力(Continuous Surface Force : CSF)モデル

まず、界面に対する法線成分 $\mathbf{F}_{sa}^{(n)}$ を求める。表面張力係数を σ とすると、単位界面面積当たりの表面力は次式で書ける。

$$\mathbf{F}_{sa}(\mathbf{x}_s) = \sigma \kappa(\mathbf{x}_s) \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_s) \quad (2.8.2)$$

ここで、 $\mathbf{x}_s$ は平面 A 上の位置ベクトル、 κ は曲率、 $\hat{\mathbf{n}}$ は単位法線ベクトルである。図 2.8.1-

1 に CSF モデルにおける 2 流体間で働く表面張力の概念図を、図 2.8.1-2 に CSF モデルにおける界面の概念図を示す。

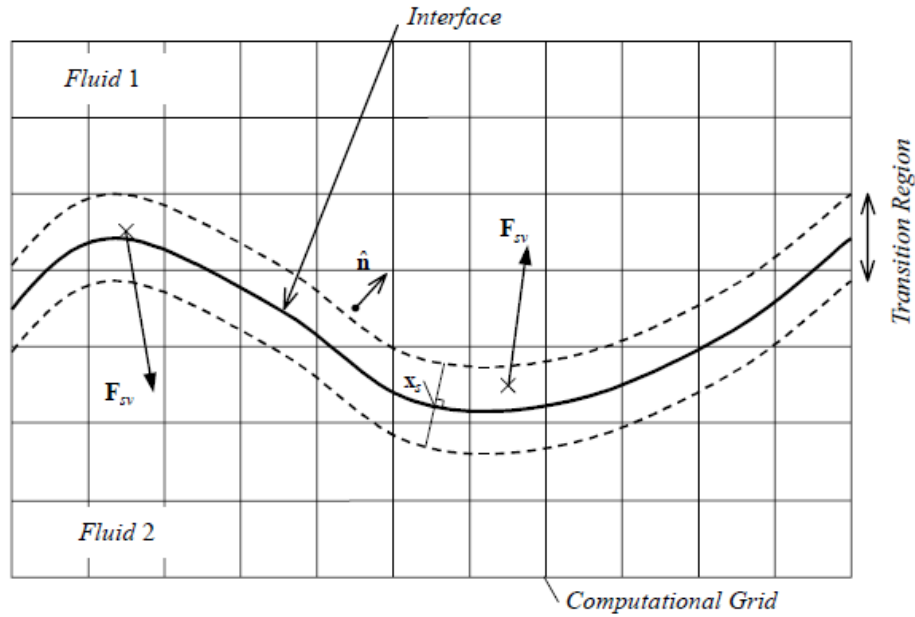


図 2.8.1-1 CSF モデルにおける 2 流体間で働く表面張力の概念図^[1-50]

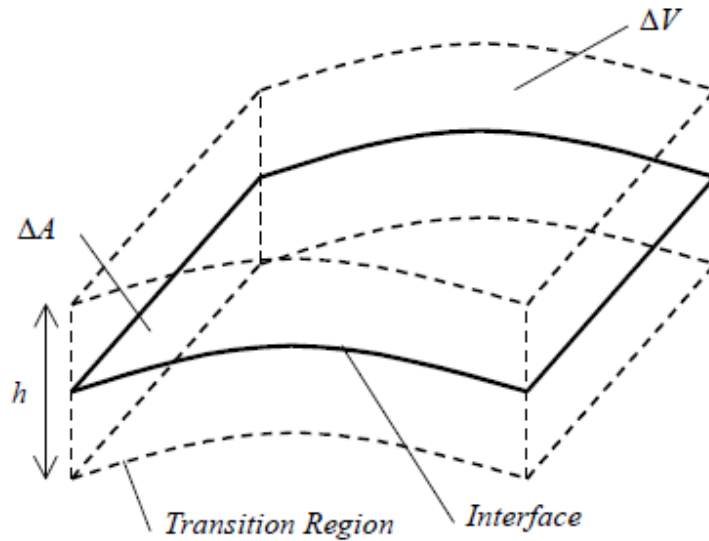


図 2.8.1-2 CSF モデルにおける界面の概念図^[1-50]

CSF モデルでは、不連続物質界面を有限幅 h を持つ連続遷移領域で近似する。この領域では界面曲率は滑らかに変化し、面積力である表面張力はこの領域に働く体積力に置き換えられる。体積力を $\mathbf{F}_{sv}$ とすると、体積力 $\mathbf{F}_{sv}$ と面積力 $\mathbf{F}_{sa}$ の関係は次式ようになる。

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Delta V} \mathbf{F}_{sv}(\mathbf{x}_s) dV = \int_{\Delta A} \mathbf{F}_{sa}(\mathbf{x}_s) dA \quad (2.8.3)$$

ここで、 $\mathbf{x}$ は体積 V 中の位置ベクトルである。また、有限幅 h は界面の曲率半径に比べ小さ

いものとする。 $\mathbf{F}_{sv}$ は遷移領域における体積力と定義するため、それ以外の領域では 0 になる。面要素 A 上の表面力 $\mathbf{F}_{sa}(\mathbf{x}_s)$ は、デルタ関数 δ によって面要素 A を含む体積要素 V 上の体積力 $\mathbf{F}_{sv}(\mathbf{x})$ に変換されるので、式(2.8.3)の右辺は次のようになる。

$$\begin{aligned}\int_{\Delta A} \mathbf{F}_{sa}(\mathbf{x}_s) dA &= \int_{\Delta V} \mathbf{F}_{sa}(\mathbf{x}) \delta[\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_s) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_s)] dV \\ &= \int_{\Delta V} \sigma \kappa(\mathbf{x}) \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}) \delta[\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{x}_s) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_s)] dV\end{aligned}\quad (2.8.4)$$

右辺の被積分関数内のデルタ関数は、次のような性質を持っている。体積要素 V 上の点 $\mathbf{x}$ が面要素 A 上の点 $\mathbf{x}_s$ における界面の接線上にあるとき、つまり $[\]$ の中が 0 になるとき以外は 0 で、且つその時のデルタ関数の体積積分値は 1 となる。ここで、界面を挟んだ 2 つの物質間で不連続な一定値 c_1, c_2 を持つ特性関数を $\mathbf{c}(\mathbf{x})$ 、その範囲で滑らかに変化する密度関数を $\tilde{c}(\mathbf{x})$ とすると、幅 h が 0 に近づくとき、 $\nabla \tilde{c}(\mathbf{x})$ は以下の式を満たす。

$$\lim_{h \rightarrow 0} \nabla \tilde{c}(\mathbf{x}) = \hat{\mathbf{n}}(c) \delta[\hat{\mathbf{n}} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_s)] = \nabla \mathbf{c}(\mathbf{x}) \quad (2.8.5)$$

ここで、 $[c] = c_1 - c_2$ である。式(2.8.4)と式(2.8.5)から、以下の関係が得られる。

$$\int_{\Delta A} \mathbf{F}_{sa}(\mathbf{x}_s) dA = \lim_{h \rightarrow 0} \int_{\Delta V} \sigma \kappa(\mathbf{x}) \frac{\nabla \tilde{c}(\mathbf{x})}{[c]} dV \quad (2.8.6)$$

式(2.8.3)と式(2.8.6)を比較すると、体積力 $\mathbf{F}_{sv}$ は次式で表せる。

$$\mathbf{F}_{sv}(\mathbf{x}) = \sigma \kappa(\mathbf{x}) \frac{\nabla \tilde{c}(\mathbf{x})}{[c]} \quad (2.8.7)$$

遷移領域の厚さは 1 格子間隔に等しく、界面位置 $\mathbf{x}_s$ における密度関数の値は以下のように定義できる。

$$\tilde{c}(\mathbf{x}_s) = \frac{1}{2}(c_1 + c_2) \equiv \langle c \rangle \quad (2.8.8)$$

また、界面の位置をより精度良く追うために、次式で定義される関数 $g(\mathbf{x})$ を導入する。

$$g(\mathbf{x}) = \frac{\tilde{c}(\mathbf{x})}{\langle c \rangle} \quad (2.8.9)$$

界面 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_s$ では $g(\mathbf{x}_s) = 1$ であるので、式(2.8.5)の右辺の被積分関数に $g(\mathbf{x})$ を掛けても $h \rightarrow 0$ においてはその積分値は変わらない。従って、式(2.8.6)に $g(\mathbf{x})$ を掛けても値に影響はないことになる。よって、界面に対して法線方向の表面張力は以下のようなになる。

$$\mathbf{F}_{sa}^{(n)}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}_{sv}(\mathbf{x}) = \sigma \kappa(\mathbf{x}) \frac{\nabla \tilde{c}(\mathbf{x})}{[c]} \frac{\tilde{c}(\mathbf{x})}{\langle c \rangle} \quad (2.8.10)$$

ここで、界面における曲率 κ は次式で書ける。

$$\kappa = -(\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}) \quad (2.8.11)$$

表面張力は温度によって変化するが、CSF モデルは基本的に c や κ といった値は無次元値である密度関数に依存するモデルであるために、このままでは表面張力の温度依存性から生じるマランゴニ対流などを考慮することはできない。そこで、表面張力の温度依存性について表面張力係数 σ を温度の関数にすることで考慮する。石川らは静電浮遊法を用いて熔融タングステンの物性値の測定を行った^[2-20]。図 2.8.1-3 に熔融タングステンの表面張力の温度依存性を示す。図 2.8.1-3 中の Present work が石川らのデータであり、表面張力は式(2.8.12)に示すような温度に依存する値を持つと結論付けた。

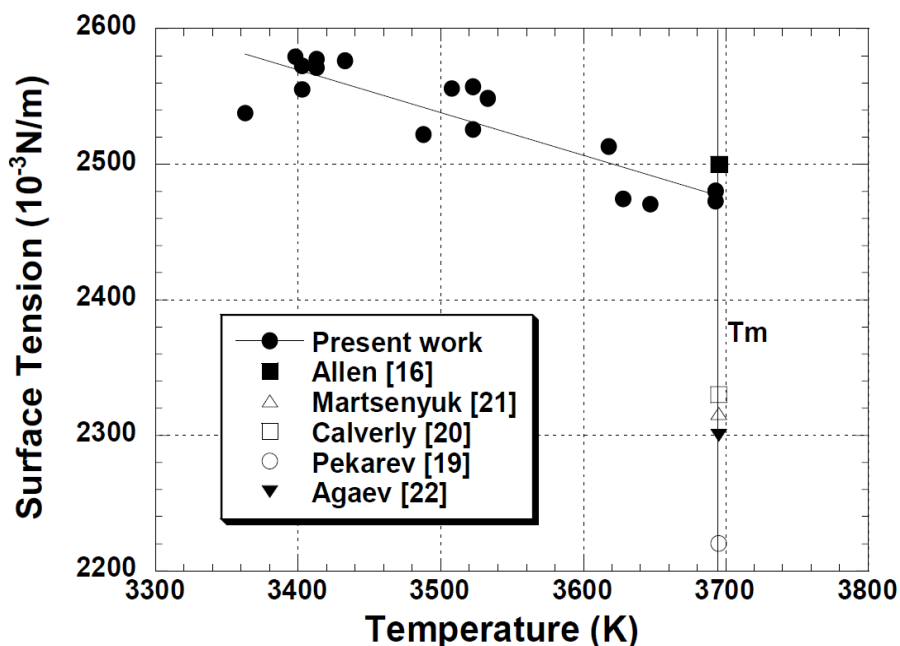


図 2.8.1-3 熔融タングステンの表面張力の温度依存性^[2-20]

$$\sigma(T) = 2.48 - 0.31(T - T_m) \times 10^{-3} \quad (2.8.12)$$

ここで、 T_m はタングステンの融点[K]を表す。熔融タングステンの過冷却状態の表面張力を測定しているため、測定範囲は融点近傍からさらに低い温度域となっている。しかし、他に熔融タングステンの表面張力の信頼できるデータは確認されておらず、本研究では融点以上の温度域においても表面張力は式(2.8.12)に従うと仮定し、表面張力を算出している。

また、本研究で使用する熔融タングステンの粘性係数についても、石川らの実験によって得られた値を使用している。図 2.8.1-4 に粘性係数と温度の関係を、式(2.8.13)に粘性係数の温度依存性に関する式を示す。

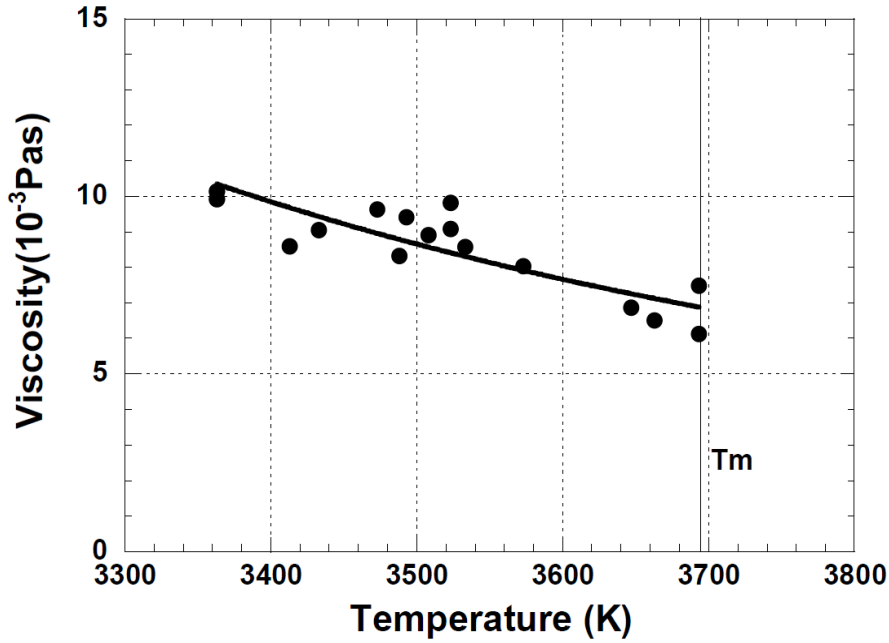


図 2.8.1-4 溶融タングステンの粘性係数の温度依存性^[2-20]

$$\mu(T) = 0.11 \exp(12.8 \cdot 10^4 / RT) \times 10^{-3} \quad (2.8.13)$$

ここで、 μ はタングステンの融点[Pa·s]を、 R はガス定数を表す。

2.8.2 界面接線方向成分の算出

次に、式(2.8.1)の表面張力を表す界面に対する接線方向成分 F_{sa}^{θ} を求める。表面張力係数の勾配を $\nabla \sigma$ で表すと、接線方向成分 F_{sa}^{θ} は次のように表すことができる。

$$\mathbf{F}_{sa}^{\theta}(\mathbf{x}) = \nabla \sigma \quad (2.8.14)$$

界面の接線方向成分の力が働く方向を特定するアルゴリズムを以下に示す。表面張力の法線方向成分を求める際に算出した単位法線ベクトル $\hat{\mathbf{n}}$ により界面勾配を求めることができれば、単位接線ベクトル $\hat{\mathbf{t}}$ が求まり、界面の接線方向成分の力が働く方向を表すことができる。単位法線ベクトル $\hat{\mathbf{n}}$ の値は、遷移領域（界面近傍）でのみ値を持つため、それ以外の領域では 0 であり、その領域の界面の接線成分の力 $\mathbf{F}_{sa}^{\theta}$ も 0 とする。接線ベクトル $\hat{\mathbf{t}}$ を求めるために、単位法線ベクトル $\hat{\mathbf{n}}$ を直交座標表示から極座標表示に変換する。このとき、極座標変換した単位法線ベクトルを $\hat{\mathbf{n}}(r, \theta, \phi)$ と表現する。ここで、図 2.8.2-1 に示すように、 r はベクトルの動径の長さ、 θ は直交座標系における z 軸からのベクトルの傾き、 ϕ は z 軸方向から見た xy 平面における回転角である。

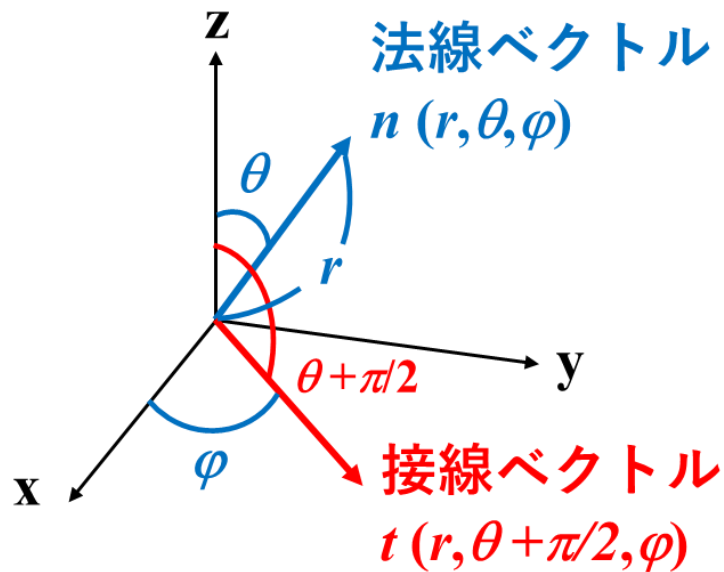


図 2.8.2-1 単位接線ベクトルの極座標系概略図

本モデルでは、単位法線ベクトル $\hat{n}(r, \theta, \phi)$ の θ を 90° 回転させたものを単位接線ベクトル $\hat{t}(r, \theta_t + \pi/2, \phi_t)$ と定義する。本モデルでは、 $\hat{t}$ を xz 面と yz 面に成分を分解し、各面に対して式(2.8.13)で表される接線方向の表面張力を計算し、界面の接線方向の力 $F_{sd}^{(t)}$ を求める。

次に、領域を微小空間に分割した際の任意のセルを基準として、 xz 面でのアルゴリズムを示す。この時、 i (x 方向)と j (y 方向)が水平方向、 k (z 方向)が鉛直方向を向いているとして考える。まず、 (i, j, k) 番目のセルに界面が存在する場合に、 x 軸正の方向の界面が xz 面において、 $(i, j, k+1)$, $(i+1, j, k)$ または $(i, j, k-1)$ のいずれかと隣接すると定義する。界面の x 軸正方向に隣接するセルを隣接セルと呼ぶことにし、そのアルゴリズムと模式図を図 2.8.2-2、図 2.8.2-3 で示す。まず、体積占有率により 2 つの条件に場合分けを行い、接線ベクトルの鉛直軸からの傾き θ_t を用いて隣接セルを特定する。

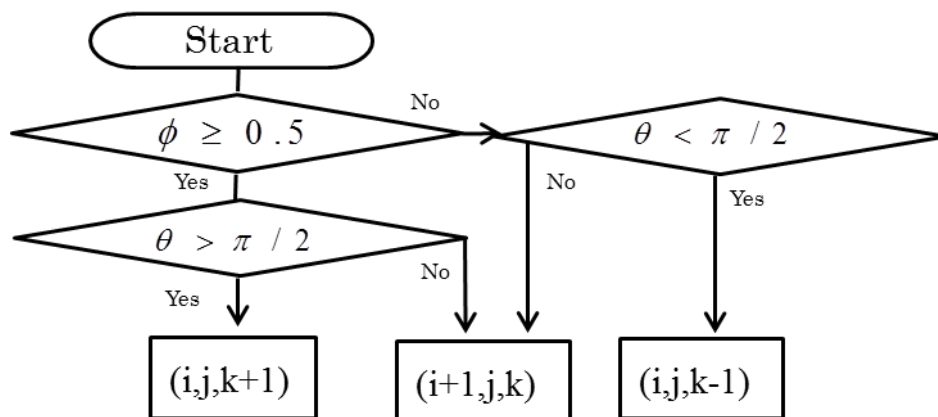


図 2.8.2-2 隣接セル特定アルゴリズム

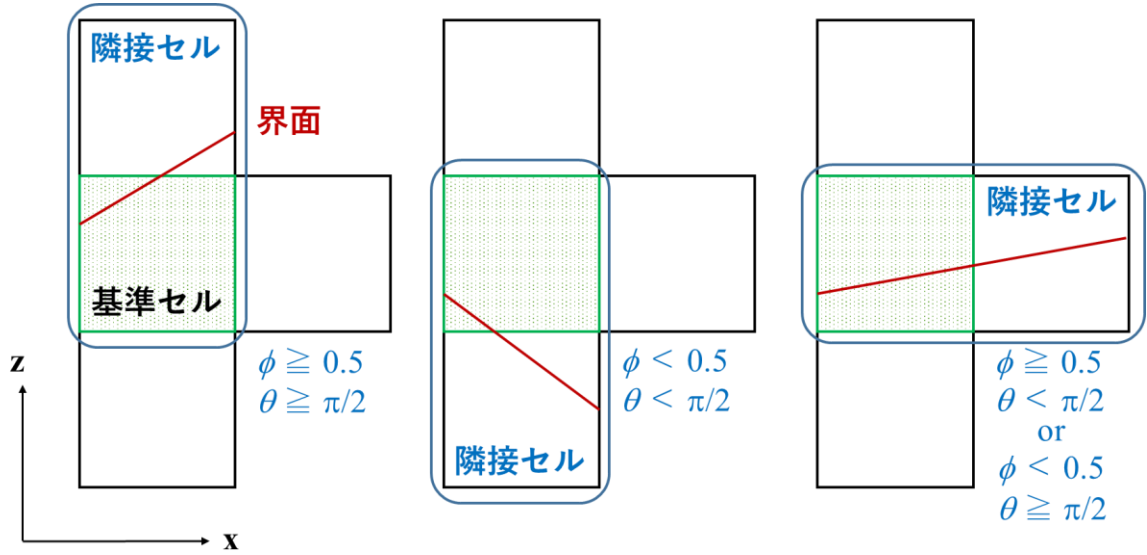


図 2.8.2-3 隣接セル特定の模式図

隣接するセルが決定された後に、基準となるセル(=ここでは(i, j, k)のセル)と隣接セルそれぞれで温度依存の値である表面張力係数 σ を算出し、二つのセル間で式(2.8.13)を計算することにより xz 面での接線方向の力の絶対値が導出される。そして、算出された力の絶対値と界面勾配を表す接線ベクトル $\hat{\mathbf{t}}$ の積により表面張力の x 成分、 z 成分が求まる。同様にして yz 面に関しても表面張力の力成分を計算し、それらの和が界面に接線方向の力 $\mathbf{F}_{sa}^{(t)}$ となる。

2.9 応力

2.9.1 流体領域の応力

流体部(液相及び気相状態)には Newton 流体を仮定し、以下のような粘性応力を与える。

$$S_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad (2.9.1)$$

ここで、 μ は粘性係数 [Pa·s]、 δ_{ij} はクロネッカーデルタである。

2.9.2 固体領域の応力

固体部には Wilkins が提唱した弾塑性モデル^[2-21]を適用する。Hooke の法則より、等方性の物質に対して応力 σ の増分はひずみ ε の増分から得る事ができる。

$$\dot{\sigma}_i = \lambda \frac{\dot{V}}{V} + 2\mu \dot{\varepsilon}_i \quad (2.9.2)$$

ここで、 λ 、 μ ：ラーメの定数、 V ：体積であり、文字上のドットは時間変化を、下付添え字 $i = 1, 2, 3$ は直交座標系における主軸を表している。Wilkins によると、応力を静水圧部 P と偏

差応力部 s に分けて考える事ができる。

$$\begin{aligned}\sigma_i &= -P + s_i \\ \dot{\sigma}_i &= -\dot{P} + \dot{s}_{ii}\end{aligned}\tag{2.9.3}$$

ここで、以下の式が成り立つ。

$$\begin{aligned}-P &= \frac{1}{3}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \\ -\dot{P} &= \frac{1}{3}(\dot{\sigma}_1 + \dot{\sigma}_2 + \dot{\sigma}_3)\end{aligned}\tag{2.9.4}$$

式(2.9.3)及び式(2.9.4)から次式が得られる。

$$\begin{aligned}s_1 + s_2 + s_3 &= 0 \\ \dot{s}_1 + \dot{s}_2 + \dot{s}_3 &= 0\end{aligned}\tag{2.9.5}$$

また、連続の式より以下の式が成り立つ。

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 = \frac{\dot{V}}{V}\tag{2.9.6}$$

式(2.9.2)、(2.9.4)、式(2.9.6)より、圧力の増分に関して次式が得られる。

$$\dot{P} = -B \frac{\dot{V}}{V}\tag{2.9.7}$$

ここで、 B は体積弾性率であり、次式で定義される。

$$B = \lambda + \frac{2}{3}\mu\tag{2.9.8}$$

よって、式(2.9.2)、(2.9.3)、(2.9.7)より偏差応力は次式で与えられる。

$$\dot{s}_i = 2\mu \left(\dot{\varepsilon}_i - \frac{1}{3} \frac{\dot{V}}{V} \delta_{ij} \right) + R_{ij}$$

ここで、 R_{ij} は構成要素の回転による補正項である。また、 $\dot{s}_1 = \dot{s}_{xx}$ 、 $\dot{s}_2 = \dot{s}_{yy}$ であり、 ε に関しても同様である。よって、式(2.9.6)はテンソル表記を用いて以下のように書くことができる。

$$\dot{\varepsilon}_{ii} = \frac{\dot{V}}{V}\tag{2.9.9}$$

ここで、変位速度によるひずみは以下のように定義される。

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.9.10)$$

よって、式(2.9.9)より、偏差応力は次式で表すことができる。

$$\dot{s}_{ij} = 2\mu \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \dot{\varepsilon}_{ll} \delta_{ij} \right) + R_{ij} \quad (2.9.11)$$

ラーメの定数 μ は横弾性係数に等しい。したがって、弾塑性モデルの構成方程式として以下の方程式を得ることができる。

$$\frac{\partial S_{ij}}{\partial t} = 2G \left(\frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) + R_{ij} \quad (2.9.12)$$

2.9.3 von Mises の降伏条件

von Mises の仮定によれば、塑性状態とは弾性エネルギーをもうそれ以上蓄えられない領域まで負荷をかけられている状態の事を言う。Wilkinsによれば von Mises は以下のような弾性限界を定義している。

$$(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2 = 2(Y^0)^2 \quad (2.9.13)$$

ここで、 Y^0 は降伏応力である。式(2.9.13)を満たす応力が弾性限界での応力となる。式(2.9.3)より、式(2.9.13)は以下のように書き換えられる。

$$(s_1 - s_2)^2 + (s_2 - s_3)^2 + (s_3 - s_1)^2 = 2(Y^0)^2 \quad (2.9.14)$$

ここでは等方性を仮定しているので、式(2.9.5)及び式(2.9.14)より、弾性限界は以下のように定義できる。

$$s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 = \frac{2}{3}(Y^0)^2 \quad (2.9.15)$$

つまり、弾塑性モデルにおいて、次式を満たす領域では弾性体、それ以上では塑性体と定義する。

$$s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 \leq \frac{2}{3}(Y^0)^2 \quad (2.9.16)$$

これをテンソル表記に直すと次式を得る。

$$S_{ij} \cdot S_{ij} \leq \frac{2}{3}(Y^0)^2 \quad (2.9.17)$$

これを von Mises の降伏条件と言う。弾性体の領域を超え塑性体の領域に入った場合、von Mises の仮定においてはこの領域で弾性エネルギーが増加することはない、つまり応力がそれ以上増加しないことを意味する。しかしながら、式(2.9.12)で応力の更新を続ける限り、応力は増加し続けてしまう。そこで、塑性体領域では以下のような応力補正を行う。

$$S_{ij} = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{Y^0}{\sqrt{S_{ij} \cdot S_{ij}}} S_{ij} \quad (2.9.18)$$

この操作は弾性限界を超えた応力を降伏応力の値まで戻すことを意味するものである。

従って、弾塑性モデルのアルゴリズムは次のようになる。まず、式(2.9.12)で応力の時間発展を求め、応力が式(2.9.17)を満たさなくなった場合、つまり塑性体領域に入った場合に式(2.9.18)で応力を補正する。

2.10 同時陰解法

帆足ら^[1-50]の用いた手法では移流項を CIP 法で解いた後に圧力と温度を陰的に離散化し、反復法で解く方法を採用していた。これは対象としていた現象がレーザーアブレーションなどのナノ秒あるいはピコ秒オーダーの非常に短時間であったため、速度については非線形性に強い陽解法を用いて解き、局所的に急上昇する圧力や温度については安定的に解くために陰解法を用いて解く、言わば半陰解法を採用していた。本研究ではこの手法をベースとしているが、対象とする現象が熔融金属内の流動でありミリ秒オーダーの現象となるため、帆足らの対象とはタイムステップが大きく異なる。このため、シミュレーションを実施する際、時間刻み幅 Δt を大きくとる必要があり、陽解法では CFL 条件の制限に引っかかることになる。従って、本研究では速度、圧力、温度のすべてを陰解法で解く、同時陰解法を採用した。以下に、同時陰解法の概要を紹介する。

まずは離散化について簡易的にイメージできるように、二次元の格子配列の一部を図 2.10-1 に示す。点 E と点 W (East と West を意味する) は格子点 P の x 方向の隣接セルを示し、点 N と点 S (North と South を意味する) は y 方向の隣接セルを示す。点線は点 P の周りのコントロール・ボリュームを示す。

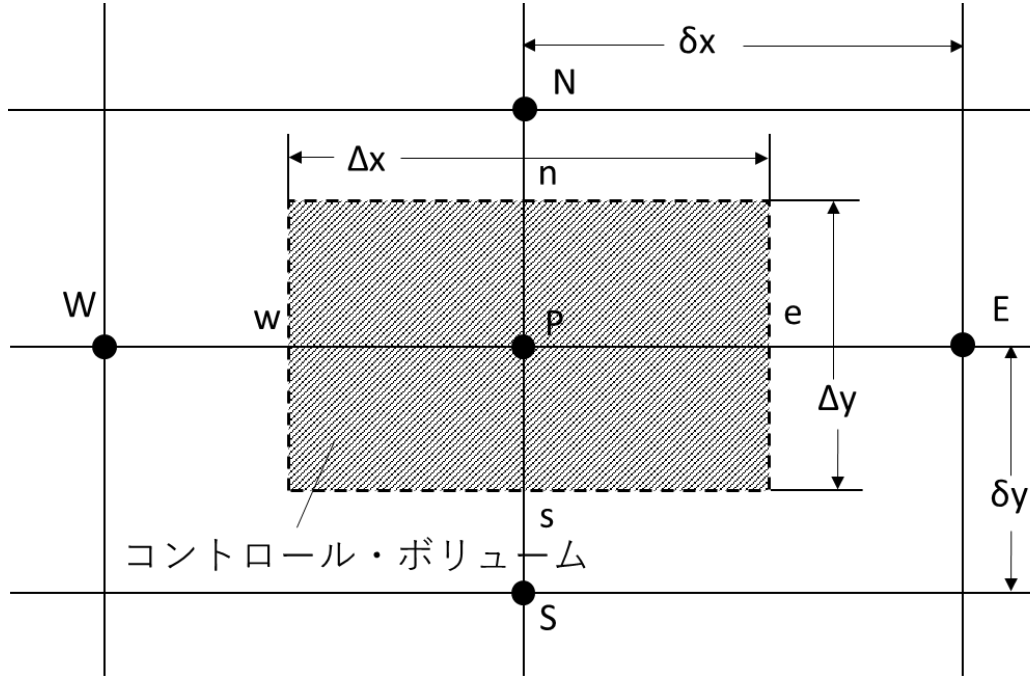


図 2.10-1 二次元場のコントロール・ボリューム

陰解法の離散化手法については詳しくはパタンカーらによって紹介されているが、後述の支配方程式の離散化の前段として、ここで三次元の熱伝導熱伝導方程式の離散化手法を簡易的に紹介する。非定常の三次元熱伝導方程式を式(2.10.1)に示す。

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k \cdot \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \cdot \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \cdot \frac{\partial T}{\partial z} \right) + S \quad (2.10.1)$$

式(2.10.1)は、式(2.10.2)の離散化して解くことができる。

$$a_p T_P = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + a_T T_T + a_B T_B + b \quad (2.10.2)$$

ここで、各係数は以下の式(2.10.3)~(2.10.11)のとおりである。なお、添え字 T と B (Top と Bottom を意味する) は z 方向の隣接セルを示す。

$$a_E = \frac{k_e \Delta y \Delta z}{(\delta x)_e} \quad (2.10.3)$$

$$a_W = \frac{k_w \Delta y \Delta z}{(\delta x)_w} \quad (2.10.4)$$

$$a_N = \frac{k_n \Delta z \Delta x}{(\delta x)_n} \quad (2.10.5)$$

$$a_S = \frac{k_s \Delta z \Delta x}{(\delta x)_s} \quad (2.10.6)$$

$$a_T = \frac{k_t \Delta x \Delta y}{(\delta x)_t} \quad (2.10.7)$$

$$a_B = \frac{k_b \Delta x \Delta y}{(\delta x)_b} \quad (2.10.8)$$

$$a_P^n = \frac{\rho c \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} \quad (2.10.9)$$

$$b = S_c \Delta x \Delta y \Delta z + a_P^n T_P^n \quad (2.10.10)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B + a_P^n - S_P \Delta x \Delta y \Delta z \quad (2.10.11)$$

上記のような離散化の操作を本研究の支配方程式である式(2.6.27),(2.6.28),(2.7.8)に適用する。
まず、式(2.6.27)の運動方程式は式(2.10.12)のように書き換える。

$$u^{n+1} = u^n - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{P_E - P_P}{\Delta x} + \frac{\Delta t}{\rho} \left(\frac{S_{xx,E} - S_{xx,P}}{\Delta x} + \frac{S_{xy,P} - S_{xy,S}}{\Delta y} + \frac{S_{xz,P} - S_{xz,B}}{\Delta z} \right) + g \cdot \Delta t \quad (2.10.12)$$

式(2.10.12)を未知数である時刻 $n+1$ における速度 u と圧力 P で整理すると、式(2.10.13)になる。

$$a_{u,P} u_P^{n+1} + a_{P,P} p_P^{n+1} = a_{P,E} p_E^{n+1} + S \quad (2.10.13)$$

ここで、各係数は式(2.10.14)~(2.10.17)のようになる。

$$a_{u,P} = (a_{u,P} + a_{u,W} + a_{u,N} + a_{u,S} + a_{u,T} + a_{u,B}) - S_P = -S_P \quad (2.10.14)$$

$$a_{P,P} = a_{P,E} (+a_{P,W} + a_{P,N} + a_{P,S} + a_{P,T} + a_{P,B}) = -\frac{1}{\rho_e} \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad (2.10.15)$$

$$S = S_u - S_P u_P \quad (2.10.16)$$

$$S_u = \frac{\Delta t}{\rho_e} \left(\frac{S_{xx,E} - S_{xx,P}}{\Delta x} + \frac{S_{xy,P} - S_{xy,S}}{\Delta y} + \frac{S_{zx,P} - S_{zx,B}}{\Delta z} \right) + u_P^n \quad (2.10.17)$$

y 方向、 z 方向の速度 v, w についても同様の方法で離散化方程式及び係数を算出する。

続いて、式(2.6.28)のエネルギー方程式を未知数である時刻 $n+1$ における速度 u, v, w と温度 T で整理すると、式(2.10.18)になる。

$$\begin{aligned} a_{T,P} T_P^{n+1} + a_{u,P} u_P^{n+1} + a_{v,P} v_P^{n+1} + a_{w,P} w_P^{n+1} &= a_{T,E} T_E^{n+1} + a_{T,W} T_W^{n+1} + \\ a_{T,N} T_N^{n+1} + a_{T,S} T_S^{n+1} + a_{T,T} T_T^{n+1} + a_{T,B} T_B^{n+1} &+ a_{u,E} u_E^{n+1} + a_{u,W} u_W^{n+1} + \\ a_{u,N} u_N^{n+1} + a_{u,S} u_S^{n+1} + a_{u,T} u_T^{n+1} + a_{u,B} u_B^{n+1} &+ a_{v,E} v_E^{n+1} + a_{v,W} v_W^{n+1} + \\ a_{v,N} v_N^{n+1} + a_{v,S} v_S^{n+1} + a_{v,T} v_T^{n+1} + a_{v,B} v_B^{n+1} &+ a_{w,E} w_E^{n+1} + a_{w,W} w_W^{n+1} + \\ a_{w,N} w_N^{n+1} + a_{w,S} w_S^{n+1} + a_{w,T} w_T^{n+1} + a_{w,B} w_B^{n+1} &+ S \end{aligned} \quad (2.10.18)$$

ここで、各係数は式(2.10.19)~(2.10.21)及び表 2.10-1 のようになる。

$$S = S_u - S_P T_P \quad (2.10.19)$$

$$S_u = T^n + \frac{\Delta t}{\rho c_V} Q \quad (2.10.20)$$

$$S_P = -1 \quad (2.10.21)$$

表 2.10-1 同時陰解法におけるエネルギー方程式の係数

係数a	East	West	North	South	Top	Bottom
u		$-\frac{\Delta t}{\rho C_V} (\frac{P_{TH}}{\Delta x} + \frac{S_{xy}}{\Delta x} \Delta y \Delta z)$	$-\frac{\Delta t}{\rho C_V} \frac{S_{xy}}{\Delta y} \Delta x \Delta z$		$-\frac{\Delta t}{\rho C_V} \frac{S_{xz}}{\Delta z} \Delta x \Delta y$	
v	$-\frac{\Delta t}{\rho C_V} \frac{S_{xy}}{\Delta x} \Delta y \Delta z$			$-\frac{\Delta t}{\rho C_V} (\frac{P_{TH}}{\Delta y} + \frac{S_{xy}}{\Delta y} \Delta x \Delta z)$	$-\frac{\Delta t}{\rho C_V} \frac{S_{yz}}{\Delta z} \Delta x \Delta y$	
w	$-\frac{\Delta t}{\rho C_V} \frac{S_{xz}}{\Delta x} \Delta y \Delta z$		$-\frac{\Delta t}{\rho C_V} \frac{S_{yz}}{\Delta y} \Delta x \Delta z$			$-\frac{\Delta t}{\rho C_V} (\frac{P_{TH}}{\Delta z} + \frac{S_{xz}}{\Delta z} \Delta x \Delta y)$
T	$\frac{\Delta t}{\rho C_V} \frac{\kappa_e}{\Delta x} T_E \Delta y \Delta z$	$\frac{\Delta t}{\rho C_V} \frac{\kappa_w}{\Delta x} T_W \Delta y \Delta z$	$\frac{\Delta t}{\rho C_V} \frac{\kappa_n}{\Delta y} T_N \Delta x \Delta z$	$\frac{\Delta t}{\rho C_V} \frac{\kappa_s}{\Delta y} T_S \Delta x \Delta z$	$\frac{\Delta t}{\rho C_V} \frac{\kappa_t}{\Delta z} T_T \Delta x \Delta y$	$\frac{\Delta t}{\rho C_V} \frac{\kappa_b}{\Delta z} T_B \Delta x \Delta y$

最後に、式(2.7.8)の圧力ポアソン方程式を未知数である時刻 $n+1$ における速度 u, v, w と温度 T 、圧力 P で整理すると、式(2.10.22)になる。

$$\begin{aligned}
 a_{P,P} P_P^{n+1} + a_{u,P} u_P^{n+1} + a_{v,P} v_P^{n+1} + a_{w,P} w_P^{n+1} = & a_{P,E} P_E^{n+1} + a_{P,W} P_W^{n+1} + \\
 a_{P,N} P_N^{n+1} + a_{P,S} P_S^{n+1} + a_{P,T} P_T^{n+1} + a_{P,B} P_B^{n+1} + & a_{T,E} T_E^{n+1} + a_{T,W} T_W^{n+1} + \\
 a_{T,N} T_N^{n+1} + a_{T,S} T_S^{n+1} + a_{T,T} T_T^{n+1} + a_{T,B} T_B^{n+1} + & a_{u,W} u_W^{n+1} + a_{u,N} u_N^{n+1} + \\
 a_{u,T} u_T^{n+1} + a_{v,E} v_E^{n+1} + a_{v,S} v_S^{n+1} + a_{v,T} v_T^{n+1} + & a_{w,E} w_E^{n+1} + a_{w,N} w_N^{n+1} + \\
 a_{w,B} w_B^{n+1} + S &
 \end{aligned} \quad (2.10.22)$$

ここで、各係数は式(2.10.23)~(2.10.27)及び表 2.10-2 のようになる。

$$S = S_u - S_P T_P \quad (2.10.23)$$

$$S_u = \frac{P^n}{\beta} + \frac{\alpha}{\beta} Q \quad (2.10.24)$$

$$S_P = -\frac{1}{\beta} \quad (2.10.25)$$

$$\alpha = \frac{P_{TH}}{\rho C_V T} \Delta t \quad (2.10.26)$$

$$\beta = \left(\rho C_S^2 + \frac{P_{TH}^2}{\rho C_V T} \right) \Delta t \quad (2.10.27)$$

表 2.10-2 同時陰解法における圧力ポアソン方程式の係数

係数a	East	West	North	South	Top	Bottom
u		$\frac{1}{\Delta x} - \frac{\alpha}{\beta} \frac{S_{xx}}{\Delta x} \Delta y \Delta z$	$\frac{\alpha}{\beta} \frac{S_{xy}}{\Delta y} \Delta x \Delta z$		$\frac{\alpha}{\beta} \frac{S_{xz}}{\Delta z} \Delta x \Delta y$	
v	$\frac{\alpha}{\beta} \frac{S_{xy}}{\Delta x} \Delta y \Delta z$			$\frac{1}{\Delta y} - \frac{\alpha}{\beta} \frac{S_{yy}}{\Delta y} \Delta x \Delta z$	$\frac{\alpha}{\beta} \frac{S_{yz}}{\Delta z} \Delta x \Delta y$	
w	$\frac{\alpha}{\beta} \frac{S_{xz}}{\Delta x} \Delta y \Delta z$		$\frac{\alpha}{\beta} \frac{S_{yz}}{\Delta y} \Delta x \Delta z$			$\frac{1}{\Delta z} - \frac{\alpha}{\beta} \frac{S_{zz}}{\Delta z} \Delta x \Delta y$
P	$\frac{1}{\rho_e} \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta y \Delta z$	$\frac{1}{\rho_w} \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta y \Delta z$	$\frac{1}{\rho_n} \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta y \Delta z$	$\frac{1}{\rho_s} \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta y \Delta z$	$\frac{1}{\rho_t} \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta y \Delta z$	$\frac{1}{\rho_b} \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta y \Delta z$
T	$\frac{\alpha}{\beta} \frac{\kappa_e}{\Delta x} T_E \Delta y \Delta z$	$\frac{\alpha}{\beta} \frac{\kappa_w}{\Delta x} T_W \Delta y \Delta z$	$\frac{\alpha}{\beta} \frac{\kappa_n}{\Delta y} T_N \Delta x \Delta z$	$\frac{\alpha}{\beta} \frac{\kappa_s}{\Delta y} T_S \Delta x \Delta z$	$\frac{\alpha}{\beta} \frac{\kappa_t}{\Delta z} T_T \Delta x \Delta y$	$\frac{\alpha}{\beta} \frac{\kappa_b}{\Delta z} T_B \Delta x \Delta y$

このようにして、離散化した運動方程式、エネルギー方程式、圧力ポアソン方程式を図 2.10-2 のように係数行列 $\mathbf{A}$ と定数ベクトル $\mathbf{b}$ を用いて、 $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ の連立一次方程式の形式で整理する。図 2.10-2 のように、この同時陰解法では速度 u, v, w 、圧力 P 、温度 T の 5 つの変数を同時に解くため、メッシュ数を k 個としたとき、 $5k \times 5k$ 行列を解く必要がある。従って、計算時間に対して行列を解くのに要する時間が支配的となる。そこで本研究では、係数行列の情報から仮想格子を作成し数値上情報から仮想格子点の間引きを行い、多重格子系を作成することで計算を加速する手法であり最高速の反復法として知られている AMG (Algebraic Multi-Grid) 法を用いており、SMS-AMG (Super Matrix Solver - Algebraic Multi Grid) と呼ばれる高速の行列解法を採用した。SMS-AMG は収束に至るまでの計算時間が短いこと、誤差が蓄積しにくく高精度の解が得られること、大規模な連立一次方程式の計算が可能という特徴を持ち、ポアソン方程式への適用などが田村らによって整理されている^[2-23]。SMS-AMG を使用する際に入力パラメータとなるのが、係数行列 $\mathbf{A}$ と右辺の定数ベクトル $\mathbf{b}$ となる。SMS-AMG では、この係数行列 $\mathbf{A}$ を入力する際、非対角成分を一次元配列に並べなおす必要がある。そこで本研究では、図 2.10-3 に示すように係数行列 $\mathbf{A}$ の非対角成分に番号を割り当てている。

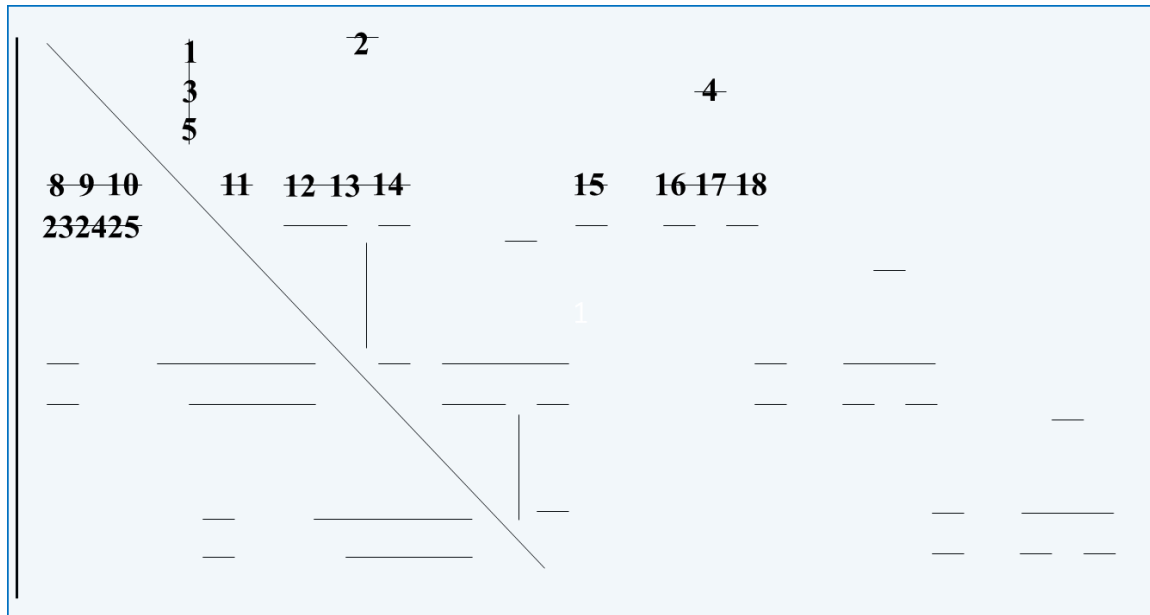


図 2.10-3 係数行列の一次元配列 (2/2)

2.11 状態方程式 (Equation Of State : EOS)

本手法では、エネルギー方程式(2.6.17)から熱伝導方程式(2.6.28)、圧力方程式(2.7.8)を導出し、対流項を除いた非移流において圧力ポアソン方程式(2.7.17)を導出する。そこで問題となるのが、熱伝導方程式や圧力方程式の導出時に使用する式(2.6.23)と式(2.7.5)である。これは EOS の (ρ, P, T) 空間において局所的線形近似を仮定していることを意味し、この 2 式を用いて定式化している本手法においてはこの局所的線形近似に伴う熱力学的誤差を許容することとなる。そのため、 ρ 、 P 、 T をそれぞれの方程式で解くと、得られた解の熱力学的妥当性を含む 3 つの変数の保存性が保証できなくなる。しかし、C-CUP ベース解法を用いた TCM 解析である本手法では 3 つの変数を解く必要があり、この熱力学的非保存性の克服が問題となってくる。そこで、本手法では圧力ポアソン方程式から圧力場を更新、その更新した圧力を用いて速度場を解き、その更新した速度から温度と密度を求め、最終的に状態方程式から圧力を補正することで上述の欠点を克服している。別の問題として、式(2.6.23)と式(2.7.5)の近似に伴う定式化の際に現れた圧力や内部エネルギーの微分値も必要となる。通常の流体であれば、理想気体を仮定しその状態方程式から解析的に算出することも可能であるが、今回取り扱うタングステンやアルミニウムのような固体にそのように都合のいい状態方程式は存在せず、以下のような圧力や内部エネルギーの微分値を正確に求めることができない。そこで、本研究では Al と Ni の EOS には SESAME を、W の EOS には GRAY EOS を EOS ライブラリとして用いた。

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T, \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho, \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho, P$$

2.11.1 SESAME

本研究ではこれらの値を求めるために米国のロスアラモス国立研究所が開発した **SESAME** 状態方程式ライブラリを用いる。**SESAME** ライブラリ^[2-24]は標準的なデータライブラリとして米国内はもちろんのこと全世界に配布され、多くの研究者に使用されている。物質としては単体、混合物、樹脂、ポリマーなどあらゆるものを網羅しており、現在もデータの追加・更新が行われている。物質の状態は、温度 P 、体積 $V(\rho)$ 、温度 T の3つの物理量で決定され、 P - V - T 線図もしくは P - ρ - T 線図と呼ばれる3次元構造を持っている。**SESAME** ライブラリの内容は、これらのデータをテーブル番号で区別された一連のアスキー形式のデータで構成されており、テキスト形式でテーブル化されてファイルに格納されている。 P 、内部エネルギー e およびヘルムホルツの自由エネルギー f のデータが、それぞれ $V(\rho)$ と T の関数としてテーブル形式にまとめられており、それぞれの温度一定の密度微分値、密度一定の温度微分値を求めることができる。各物質には ID 番号が付けられており、その ID 番号を参照することで目的の物質の EOS を得ることができる。また、**SESAME** ではテーブル形式の EOS データから物性値を算出する専用の FORTRAN コードで離散的に与えられているデータを内挿して物性値を算出する。図 2.11.1-1 に **SESAME** による Al の状態線図を示す。

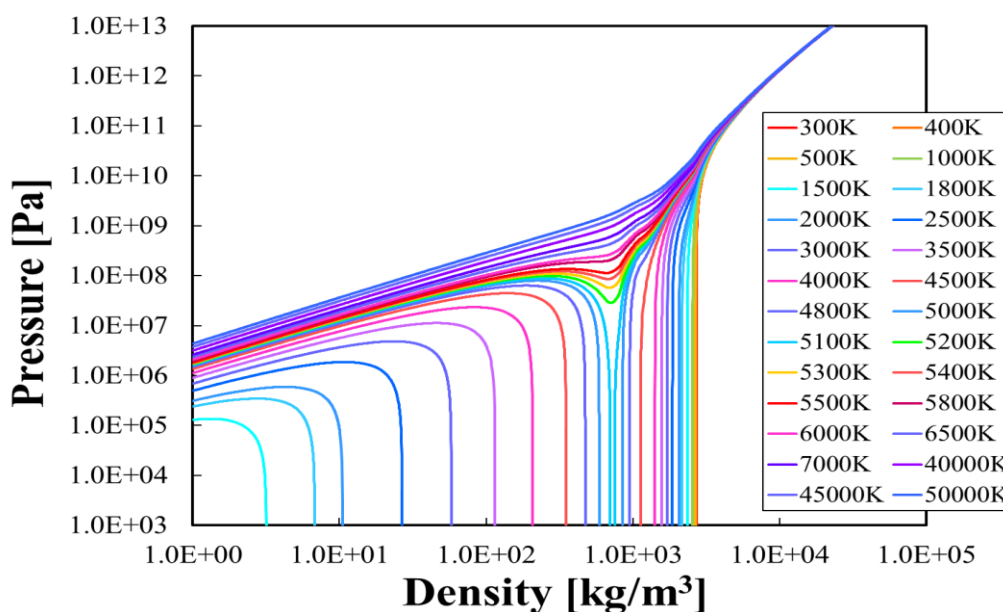


図 2.11.1-1 SESAME を用いた Al の状態方程式

SESAME は、上記のように LANL が提供するデータライブラリから各状態における諸変数を抽出するようにして用いるが、本研究で必要とする W のデータベースを保有していなかった。**SESAME** のデータライブラリは現在は非公開であるため、2.11.2 項に示すとおり別の EOS を W のデータベースとして導入した。

2.11.2 GRAY EOS

本研究では、W の EOS として高エネルギー密度に関する過渡的な問題の計算に用いることのできる GRAY EOS^[2-25]を採用した。以下に、GRAY EOS 及びその導入方法について述べる。

GRAY EOS では大きく、SOLID-LIQUID 領域と LIQUID-VAPOR 領域に分けられている。SOLID-LIQUID 領域では、固体部分でグリーンアイゼン EOS を含むスケーリング則 EOS^[2-26]を使用しており、LIQUID-VAPOR 領域では Young と Alder によって開発された EOS^[2-27]を使用している。また、この EOS は式(2.11.1)~式(2.11.4)により、さらに5つの領域に分割されている。

$$V' > V \quad (2.11.1)$$

$$T > T_m \left(\frac{3R'}{2\alpha'} \right) \quad (2.11.2)$$

$$T > T_m + \delta T \quad (2.11.3)$$

$$T > T_m - \delta T \quad (2.11.4)$$

ここで、 R' 、 α' は以下に示す式で表される値である。

$$R' = \frac{R}{A} \quad (2.11.5)$$

$$\alpha' = \frac{\alpha}{A} \quad (2.11.6)$$

また、 V' は体積、 V は比体積、 T_m は融点、 R は気体定数、 α は比熱の温度係数、 A は原子量、 $T_m + \delta T$ は液相線温度、 $T_m - \delta T$ は固相線温度である。式(2.11.1)を満たす領域では Vapor、式(2.11.2)を満たす領域を Hot Liquid、式(2.11.3)を満たす領域を Liquid、式(2.11.4)を満たす領域を Melt、いずれの式も満たさない領域を Solid とみなしている。それぞれの領域において圧力、内部エネルギーなどの式が与えられている。

Vapor の領域の圧力、内部エネルギーに関する式を以下に示す。

$$P = \frac{R'T}{V_b} \frac{(1+z+z^2-z^3)}{(1-z)^3} - \frac{a_y'}{V_b^2} z^2 + F_p(C_1 + C_2 T + C_3 T^2) \quad (2.11.7)$$

$$E = \frac{3}{2} R'T - \frac{a_y'}{V} + F_e(C_1 - C_3 T^2) + (D_1 + D_2 T + D_3 T^2) \quad (2.11.8)$$

ここで、 z 、 F_p 、 a_y' 、 F_e は以下に示す式で表される値である。

$$z = \frac{V_b}{V} \quad (2.11.9)$$

$$F_p = \left[\frac{z(\theta - z_J)}{z_J(\theta - z)} \right]^3 \quad (2.11.10)$$

$$a_Y' = \frac{a_Y}{A^2} \quad (2.11.11)$$

$$F_e = \frac{V_b}{2} \left[\frac{(\theta - z_J)^3 (2z - 2 + \theta)}{z_J^3 (\theta - z)^2} - \frac{(\theta - z_J)(2z_J - 2 + \theta)}{z_J^3} \right] \quad (2.11.12)$$

また、 V は体積、 C_1 、 C_2 、 C_3 、 D_1 、 D_2 、 D_3 は定数、 T は温度、 V_b は Vapor 領域での排除体積、 z_J は $V=V_J$ の時の z 、 θ は結合パラメータ（通常は 1）、 a_Y は Vapor 領域での引力ポテンシャル係数である。

Solid の領域の圧力、内部エネルギーに関する式を以下に示す。

$$P = P_1 + P_c + P_{cc} \quad (2.11.13)$$

$$P_1 = \frac{C^2 x}{V_0(1-x)(1-S_x)^2} \left[1 - \left(1 + \frac{\gamma_0}{2} \right) x + \frac{a}{2} x^2 \right] + \frac{\gamma_0 - ax}{V_0(1-x)} (E - E_{OH}) \quad (2.11.14)$$

$$P_c = \frac{1}{2V_0(1-x)} (\gamma_e - \gamma_0 + ax) G' T^2 \quad (2.11.15)$$

$$P_{cc} = \frac{(300)^2 G' (\gamma_0 - \gamma_e)}{2V_0} \quad (2.11.16)$$

$$E = E_0 + 3R'T + \frac{1}{2} G' T^2 \quad (2.11.17)$$

$$E_0 = \frac{C^2 x^2}{2(1-Sx)} \left[1 + \frac{Sx}{3} + \frac{S^2}{6} \left(1 - \frac{\gamma_0}{S} \right) x^2 \right] + E_{00} (1 + \gamma_0 x) + E_{0H} \quad (2.11.18)$$

ここで、 G' は以下に示す式で表される値である。

$$G' = \frac{g_e}{A} \quad (2.11.19)$$

また、 C はユゴニオのパラメータ、 V_0 は固体の通常体積、 γ_0 、 a は lattice gamma、 E_{00} は $V=V_0$ かつ $T=300$ K かつ $P=0$ の時の内部エネルギー、 γ_e は Electronic gamma、 E_0 は冷圧下の内部エネルギー、 g_e は電子エネルギー係数である。 E_{0H} は事前に値調整のために与えるエネルギーで、通常は 0 である。

Melt の領域の圧力は式(2.11.13)と同じである。ただし、 P_c は以下に示す式で表される。

$$P_c = \frac{1}{V_0(1-x)} \left\{ \frac{1}{2} (\gamma_e - \gamma_0 + ax) G' T^2 - v (\Delta S' - \alpha') [\lambda T_m + (T - v \delta T) (\gamma_0 - ax)] \right\} \quad (2.11.20)$$

内部エネルギーは以下の式で表される。

$$E = E_0 + 3R'T + \frac{1}{2}G'T^2 + \nu[T - \nu\delta T] \times (\Delta S' - \alpha') \quad (2.11.21)$$

ここで、 $\Delta S'$ は以下に示す式で表される値である。

$$\Delta S' = \frac{\Delta S}{A} \quad (2.11.22)$$

また、 ΔS は溶融のエントロピーである。

Liquid の領域の圧力は式(2.11.13)と同じである。ただし、 P_c は以下に示す式で表される。

$$P_c = \frac{1}{V_0(1-x)} \left\{ \frac{1}{2}(\gamma_e - \gamma_0 + ax)G'T^2 - T_m \left[\Delta S' - \frac{1}{2}\alpha' \left(1 + \frac{T^2}{T_m^2} \right) \right] (\lambda + \gamma_0 - ax) \right\} \quad (2.11.23)$$

内部エネルギーは以下の式で表される。

$$E = E_0 + 3R'T + \frac{1}{2}G'T^2 + T_m \times \left\{ \Delta S' - \frac{\alpha'}{2} \left(1 + \frac{T^2}{T_m^2} \right) \right\} \quad (2.11.24)$$

Hot Liquid の領域の圧力は式(2.11.13)と同じである。ただし、 P_c は以下の式で表される。

$$P_c = \frac{1}{V_0(1-x)} \left\langle \frac{1}{2}(\gamma_e - \gamma_0 + ax)G'T^2 - T_m \left\{ \Delta S' - \frac{1}{2}\alpha' \left[1 - M^2 + 2M \left(\frac{T}{T_m} \right) \right] \right\} (\lambda + \gamma_0 - ax) \right\rangle \quad (2.11.25)$$

内部エネルギーは以下の式で表される。

$$E = E_0 + T_m \left\{ \Delta S' + \frac{\alpha'}{2} \left[\left(\frac{3R'}{2\alpha'} \right)^2 - 1 \right] \right\} + \frac{3}{2}R'T + \frac{1}{2}G'T^2 \quad (2.11.26)$$

ここで M は以下に示す式で表される値である。

$$M = \frac{3R}{2\alpha} \quad (2.11.27)$$

GRAY EOS は様々な金属に対して、パラメータが準備されている。物質毎に必要なパラメータは、通常密度、ユゴニオ、圧力 0Pa での融点、結合エネルギーである。論文中^[2-2]ではベリリウム、マグネシウム、アルミニウム、チタン、Alloy304、ニッケル、Alloy400、銅、ニオブ、タンタル、タングステン、金、鉛、トリウム、Mulberry、ウランに関するパラメータも合わせて公開されている。表 2.11.2-1 に本研究で使したタングステンのパラメータを示す。

表 2.11.2-1 GRAYEOS タングステン EOS パラメータ

Normal volume of solid $V_0(\text{cm}^3/\text{g})$	0.518
Hugoniot parameter $C(\text{cm}/\mu\text{sec})$	0.403
Hugoniot parameter $S(\text{cm}/\mu\text{sec})$	1.237
Lattice gamma γ_0	1.78
Lattice gamma α	1.4
Electronic energy coefficient $g_e(\text{Mbar cm}^3/\text{mol deg}^2)$	10.9×10^9
Melting temperature parameter $T_{m0}(\text{deg})$	4520
Atomic weight $AW(\text{g/mol})$	183.85
V_J/V_0 [V_J : Volume where equation of state are joined]	1.34
V_b/V_0 [V_b : Excluded volume for vapor phase]	0.50
Coefficient of attractive potential for vapor $a_V\{\text{Mbar (cm}^3/\text{mol)}^2\}$	102

本節で示した方程式群から成る GRAY EOS に対し、表 2.11.2-1 で示したパラメータを用いて描いたタングステンの状態線図を図 2.11.2-1 に示す。縦軸は圧力[Pa]、横軸は密度[kg/m^3]である。しかしながら、高密度領域において明らかに非物理的な圧力低下が見られたため、高密度領域においては異なる状態方程式系を用いることにした。

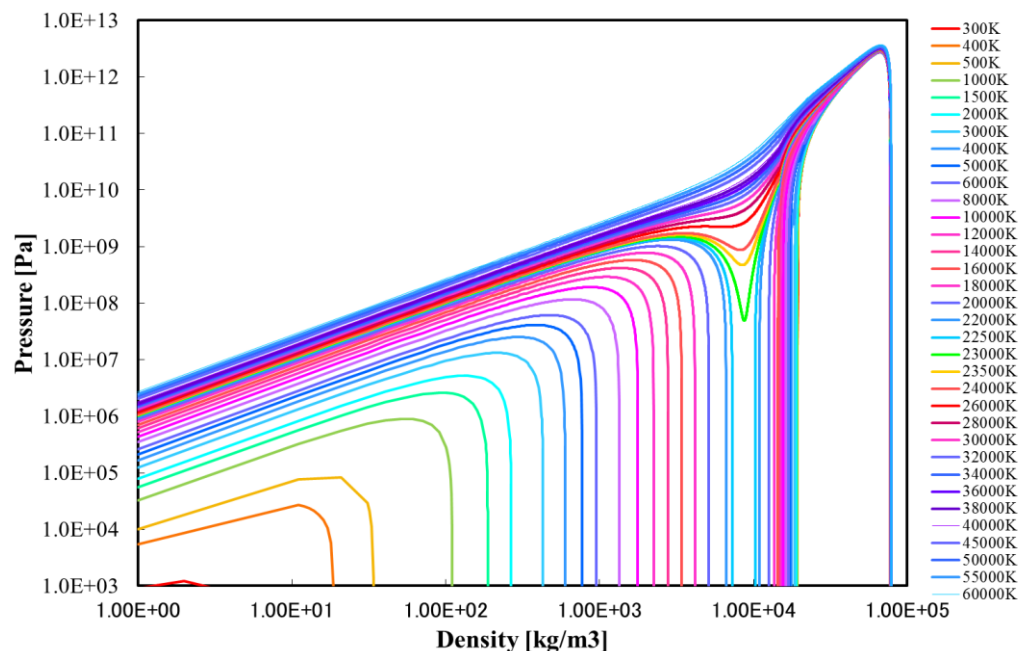


図 2.11.2-1 GRAY EOS によるタングステン状態線図

2.11.3 QEOS

QEOS (Quotidian Equation Of State) [2-28]は高圧現象の流体シミュレーションに使用するために開発された状態方程式モデルである。QEOS では、電子とイオンによる圧力やエネルギーへの寄与を分けて定式化している。電子の特性は modified Thomas-Fermi statistical model から得られ、イオンの熱運動は Debye、Gruneisen、Lindemann、流体スケール則を結びつけたマルチフェイズ状態方程式で表現される。これらを用いて圧力や内部エネルギー、エントロピー、ヘルムホルツの自由エネルギーが計算される。

QEOS では GRAY EOS に比べ、高密度領域において温度による圧力の差が顕著に現れる。これは QEOS ではイオンと電子の影響を分けて考慮しており、それぞれの項から温度による影響を受けるためであると考えられる。したがって GRAY EOS と QEOS を純粋に繋げて使用することは困難である。そこで、図 2.11.2-1 において圧力が下がり始めた密度 6.6 kg/m^3 以上の領域に対して、QEOS で得られた圧力/密度の勾配を用いて補正を行った。この補正により得られた状態線図を図 2.11.3-1 に示す。高密度領域で圧力が急激に落ちることはなくなったが、切り替え部分で勾配の変化が激しく、使用に耐え得るものではないと判断した。

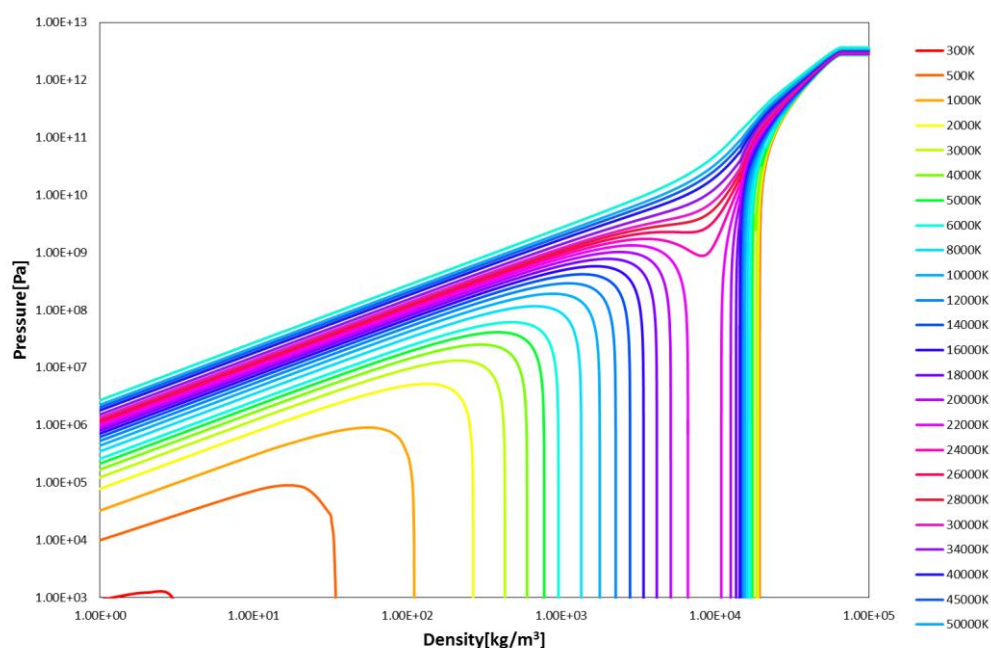


図 2.11.3-1 高密度領域において QEOS による補正を用いた状態線図

2.11.4 線形補正

GRAY EOS にて圧力が非物理的に下がり始めた 6.6 kg/m^3 から直前の圧力/密度の勾配を用いて、線形補正を行った。線形補正により得られた状態線図を図 2.11.4-1 に示す。

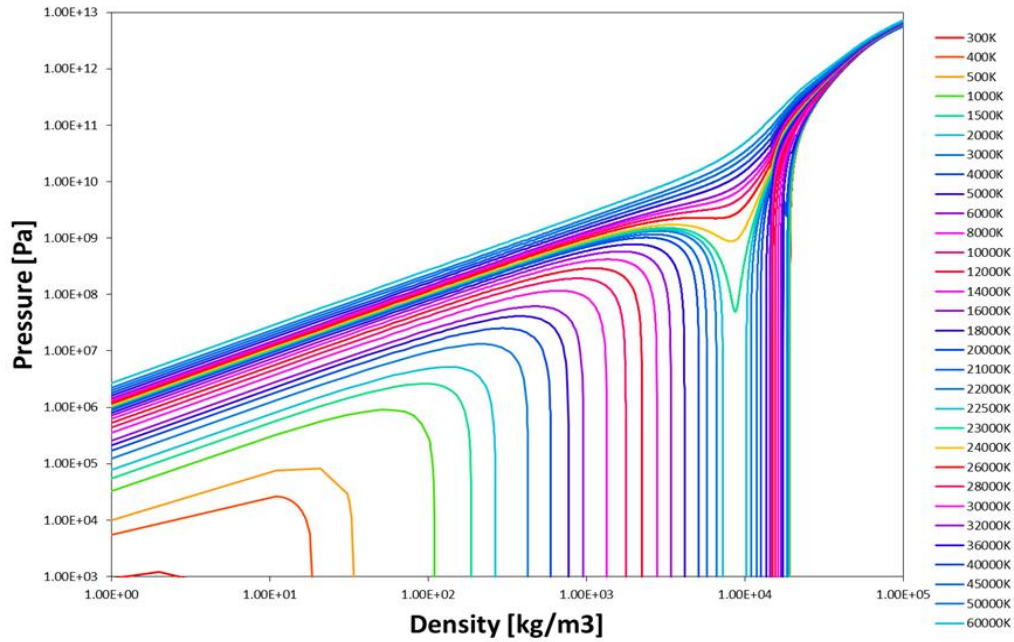


図 2.11.4-1 線形補正を用いた GRAY EOS の状態線図

タングステンの高圧高密度領域における実験データは存在せず、正確な評価を行うことは困難である。そこで、GRAY EOS から得られる諸変数について評価を行った。図 2.11.4-1 の状態線図から得られる $(\partial P / \partial \rho)_T$ の値は 1 気圧、300 K において 3.24×10^7 となる。音速はこの値の平方根として以下のように計算できる。

$$ss = \sqrt{\frac{\partial P}{\partial \rho}} = \sqrt{3.24 \times 10^7} = 5692.1 \quad (2.11.1)$$

ここで、ss は音速[m/s]である。タングステンの音速は 5480m/s であることから、その誤差は 5 %となる。

また、GRAY EOS から得られる変数 $(\partial \rho / \partial T)_p$ を用いて体積膨張率 β は以下のように計算できる。

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p = 1.88 \times 10^{-4} \quad (2.11.2)$$

文献^[2-19]によると 1 気圧、4000 K におけるタングステンの熱膨張率は 1.98×10^{-4} であるため、比較すると誤差は 5 %となる。ゆえに、本研究で用いる EOS としてのタングステンのデータベースには 5 %程度の誤差が生じていることを確認した。

2.12 アルゴリズム

本研究のシミュレーションコードのアルゴリズムフローチャートを図 2.12-1 に示す。

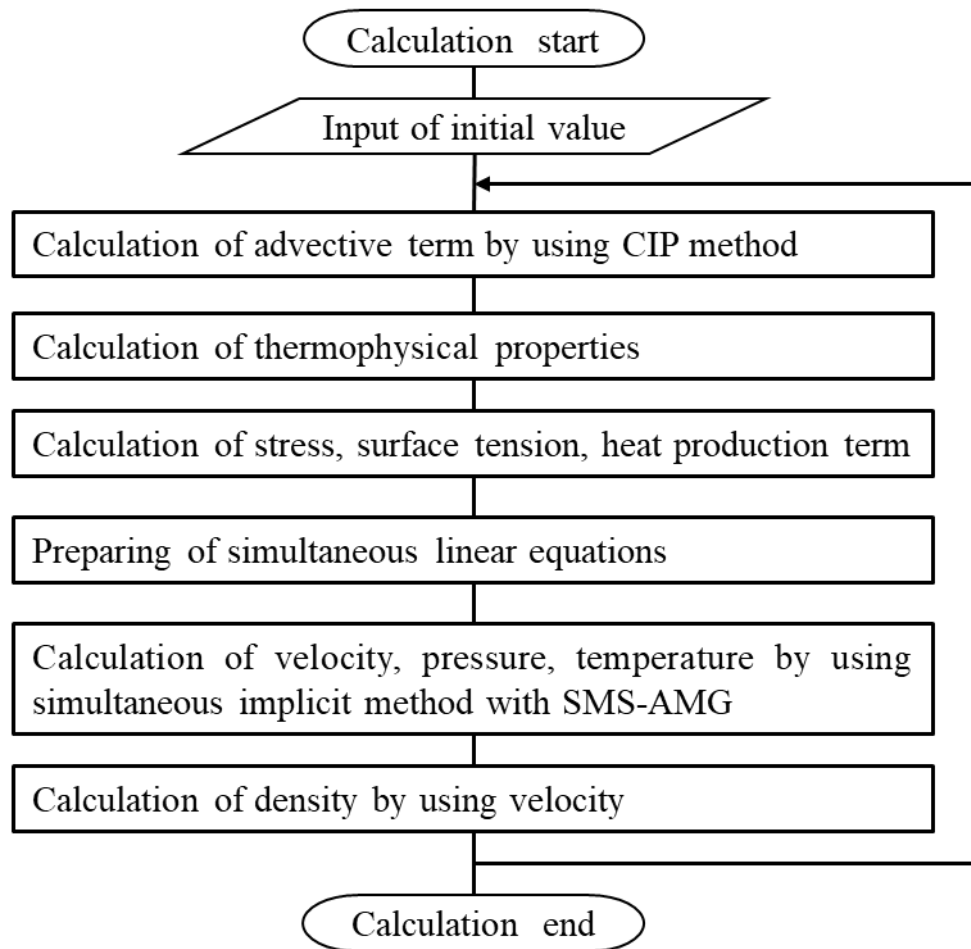


図 2.12-1 本シミュレーションコードのフローチャート

以下、このアルゴリズムについて順を追ってまとめる。

(1) CIP 法による移流項の計算

初期値入力後、CIP 法を用いて移流項を計算し、密度関数、速度、密度、圧力、温度の中間解を求める。その際、2.4 節で述べた log 変換を用いることでオーバーシュートやアンダーシュートを防いでいる。

(2) 熱物性値の計算

EOS のデータライブラリから各種熱物性値を計算する。

(3) 応力、表面張力、発熱項の計算

2.9 節で示した手法により応力を、2.8 節で示した表面張力モデルを用いて表面張力を、2.13.1 項で示すモデルを用いて発熱項を計算する。

(4) 連立一次方程式の作成

運動方程式、圧力ポアソン方程式、エネルギー方程式から連立一次方程式を作成する。

(5) 同時陰解法による連立一次方程式の計算

作成した連立一次方程式を SMS-AMG を用いた同時陰解法で解く。

(6) 速度を用いた密度の計算

連続の式の非移流項を解き、速度場から密度を更新する。

(7) 時間ステップの更新

時間ステップを更新し、設定した計算ステップ数まで(2)～(6)の計算を繰り返す。

2.13 シミュレーションモデル

2.13.1 熱負荷モデル

本研究では、実験との比較検討の観点から金属への熱源にレーザー照射を用いている。本項では使用するレーザーのモデルについて述べる。

2.13.1.1 深さ方向の吸収分布

金属内部におけるレーザーエネルギーの減衰は Beer の法則に従うとする。

$$I(d) = I_0 \exp(-\lambda d) \quad (2.13.1.1)$$

ここで、 λ はタングステンの吸収係数[1/m]、 $I(d)$ は深さ d での熱負荷フラックス[W/m²]、 I_0 は初期熱負荷フラックス[W/m²]である。

2.13.1.2 熱負荷フラックスの吸収分布

本研究で使用するレーザーモデルは、レーザー照射による高熱負荷を受けるタングステンの相変化の動的観察実験^[1-40]に使用されている Nd/YAG レーザー（ML-2450A：アマダミヤチ社製）による熱負荷を模擬している。表 2.13.1.2-1 にディスラプション時の熱負荷とレーザーによる熱負荷との比較を示す。表 2.13.1.2-1 より、本研究で模擬する Nd/YAG レーザーは、ディスラプション時の熱負荷条件を一部模擬できている。レーザーは、試料表面にて直径 0.6 mm に集光される。この時のビームプロファイルはカメラタイプのビームプロファイラー SP620U(OPHIR 社製)を用いることで測定される。そのプロファイルを図 2.13.1.2-1 に示す。

表 2.13.1.2-1 ディスラプションとレーザーによる熱負荷の比較

	ディスラプション	Nd/YAG レーザー
パルス幅 [ms]	数 ms 以下	0.25 ~ 5
照射強度 [GW/m ²]	1 ~	~ 25

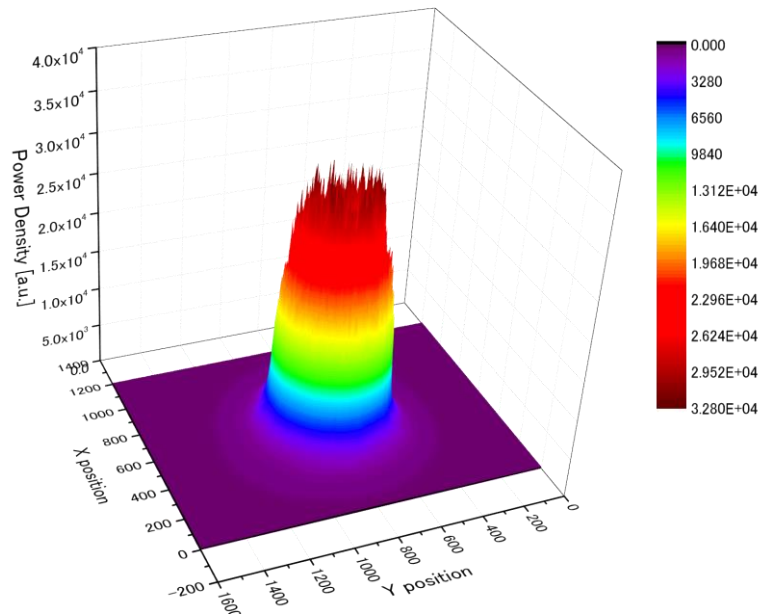


図 2.13.1.2-1 ビームプロファイル^[1-35]

図 2.13.1.2-1 から、ビームプロファイルは典型的なガウシアンプロファイルではなく、ピークが比較的平坦なプロファイルとなっていることが分かり、照射面は比較的一様な熱負荷を受けていると言える。この平坦なプロファイルはディスラプション時の熱負荷と同様のエネルギー分布を模擬している。本シミュレーションにおいても、物質表面が受ける熱負荷の半径方向の分布は照射領域内で一様とした。また、簡易化のために時間分布についても照射中は一様とした。

2.13.2 短パルス熱負荷シミュレーション

短パルスの熱負荷による Al と Ni の 2 次元シミュレーションを行い、シミュレーション結果と実験結果を比較することによって、本シミュレーションコードの機能検証を行った。図 2.13.2-1 にシミュレーションモデルを示す。3 章に示す実験モデルにあわせて、パルス幅は 10 ns、ターゲットの表面における熱負荷の直径は 100 μm とし、入射エネルギーは 25、50、78、100、および 150 TW/m^2 に設定した。

Metal : Al, Ni

Pulse duration : 10 ns

Diameter : 100 μm

Incident energy : 25 ~ 150 TW/m²

Boundary condition : outflow

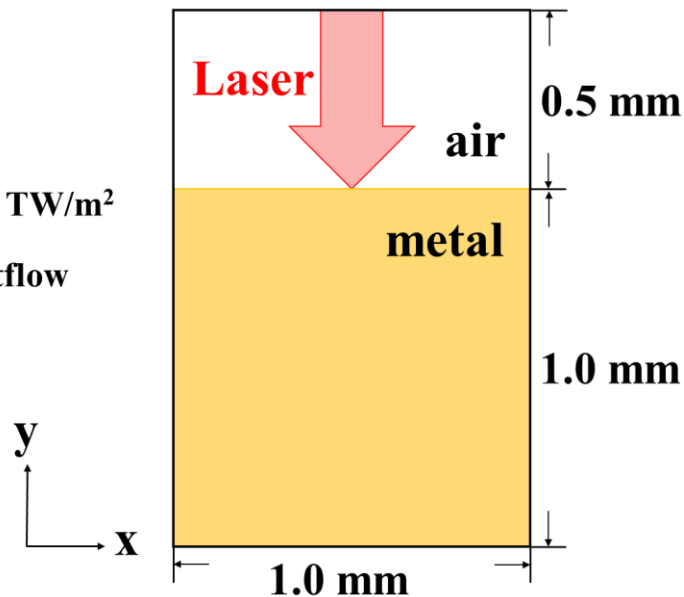


図 2.13.2-1 短パルス熱負荷シミュレーションモデル

本研究では、オイラー法を用いて流れ場を連続体と仮定し、連続の式や運動方程式を解いている。しかし、低圧力領域においては流れ場は希薄ガスとして扱う必要があり、連続体として仮定できなくなる。つまり、ボルツマン方程式が支配的となるため、オイラー法は使用できないことになる。そこで、流れ場を連続体として扱えるかどうかの判定として、式 (2.13.2.1) で算出される無次元数であるクヌーセン数 Kn を用いた。

$$Kn = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi \sigma^2 P L} = \frac{\lambda}{L} \quad (2.13.2.1)$$

ここで、 λ 、 L 、 k_B 、 T 、 P 、 σ はそれぞれ平均自由行程[m]、代表長さ[m]、ボルツマン定数[J/K]、温度[K]、全圧[Pa]、分子直径[m]を示す。 Kn が 1 より十分小さければ（例えば 0.2 程度）、流れ場は連続体としてみなすことができ、雰囲気圧力が 0.1 kPa で Kn は 0.2 となる。気圧が大きくなるにつれて平均自由行程 λ は小さくなることから、本研究では周辺初期圧力を 1 kPa に設定した。

図 2.13.2-1 において、メッシュ数は $900 \times 500 = 450,000$ 個とし、不等間隔メッシュを用いた。この不等間隔メッシュの深さ方向の最小サイズは、金属と空気の界面付近で 0.1 μm と設定し、境界に近づくにつれて大きなメッシュになるように設定している。本シミュレーションモデルの大きさは 1.5 mm $\times$ 1.0 mm になり、境界は流出条件に設定した。

2.13.3 一様加熱による熱対流シミュレーション

マランゴニ効果による溶融タングステン内の対流の発達現象を評価するために、一様加熱による温度勾配を課したシミュレーションを実施した。シミュレーションモデルを図 2.13.3-1 に示す。図 1.2.6-3 のように、ダイバータ表面のタングステン・モノブロックの表面は、対

向面のエッジを隠すために傾斜を持たせた形状となっている。この形状に対して入射する高熱負荷はそのフラックスに対して空間的に分布を持つ可能性があり、その場合には溶融したタングステンに図 2.13.3-2 に示すような表面に平行な温度勾配が生じることになる。図 2.13.1-1 に示すモデルはこのような状態を模擬したものである。

本シミュレーションモデルは 3 次元体系で、 z 方向上部に空気、下部に溶融タングステンを配置し、 z 方向中心を溶融タングステン表面に設定した。このタングステン表面は自由表面を想定している。 x 方向境界に高温壁と低温壁を設ける。 $x = 0$ の yz 面を低温壁、反対側の面を高温壁として、それぞれの温度を 4000 K、4100 K に固定し体系内に 100 K の温度差を設け、それ以外の面は断熱境界条件を設けた。また、温度勾配に対し平行な xz 面の境界では slip 条件、それ以外の面では non-slip 条件を設定した。壁面間距離を L 、溶融タングステンの液深を d として定義する。初期条件として溶融タングステンは圧力 0.1 MPa、温度 4000 K を設定し、密度は初期圧力と初期温度から GRAY EOS を用いて算出される値を使用し、空気は理想気体を仮定している。また、表 2.13.3-1 に本シミュレーションモデルにおける溶融タングステン層の形状の条件をまとめた。

マランゴニ対流の解析にはマランゴニ効果の強さを表す指標としてマランゴニ数という無次元数が用いられる。マランゴニ数は式(2.13.2.1)のように表すことができる。

$$Ma = \frac{\left(\frac{\partial \sigma}{\partial T} \right) \Delta T}{\nu \alpha} D \quad (2.13.3.1)$$

ここで、 ν は動粘性係数[kg/m/s]、 α は熱拡散率[m²/s]、 D は代表長さ[m]、 ΔT は代表温度差[K]を示す。 $(\partial \sigma / \partial T)$ は表面張力係数であり、式(2.13.3.1)で表されるように温度に依存する値であり、この値によって表面張力の温度依存性を考慮する。また、Nield ら^[2-29]は浮力と表面張力の両機構を考慮した安定解析を実施しており、液深が数 mm 以下の薄い液相においては浮力対流による影響よりも表面張力による対流の影響が支配的な結果となることを述べている。このモデルにおける代表長さは、対流が壁面間距離及び溶融層の深さ両方の影響を考慮して、以下の式(2.13.3.2)で示されるような溶融層の水力等価直径 D として定義している。

$$D = 4 \frac{Ld}{L + 2d} \quad (2.13.3.2)$$

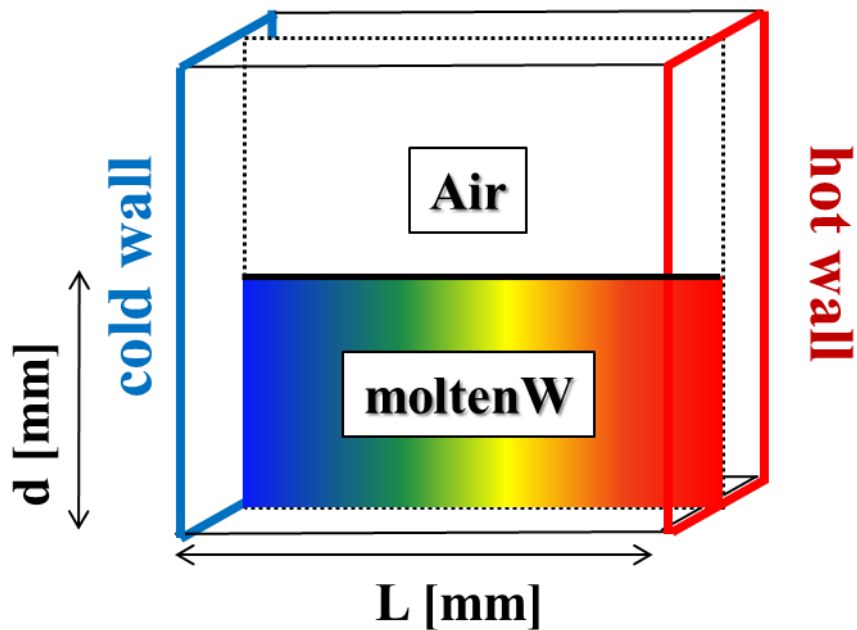


図 2.13.3-1 一様加熱による熱対流シミュレーションモデル

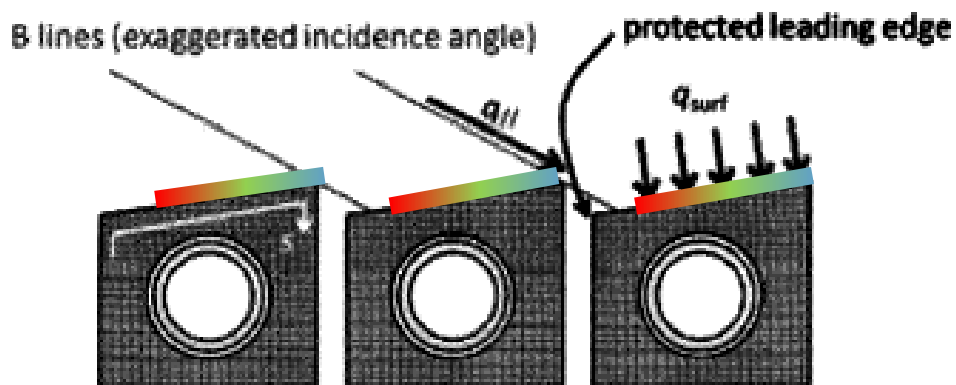


図 2.13.3-2 モノブロック表面にて生じる温度分布例のイメージ

2.13.4 局所加熱を受ける溶融層内流動シミュレーション

ディスラプション及び ELM 時には、ミリ秒のオーダーで局所的にダイバータ表面は高熱の負荷を受ける。本研究では、溶融状態中のタングステンに高熱負荷を与えた時の溶融層内の流動を評価する。シミュレーションモデルを図 2.13.4-1 に示す。モデルは図 2.13.3-1 と同様に 3 次元であり、 z 方向上部に空気、下部に溶融タングステンを配置し、初期表面の位置は z 方向中心に設定した。本シミュレーションモデルにおいても溶融層の表面変動を考慮するために、自由表面を仮定している。高熱負荷源は 2.13.1 項で述べたモデルとし、溶融タングステン表面の中心に熱負荷を受ける。境界条件は全て non-slip 条件を定義し、タングステンが溶融状態を保つように境界面のうち xz 、 yz 面は 4000 K に温度を固定した。 x 方向及び y 方向境界間距離を L 、代表長さ D はこのモデルにおける温度差がつく距離であるレーザー半径として

定義する。溶融タングステン及び空気の初期条件は 2.13.3 節と同様である。表 2.13.4-1 に本シミュレーションモデルにおける溶融タングステン層の形状及びレーザー条件をまとめた。

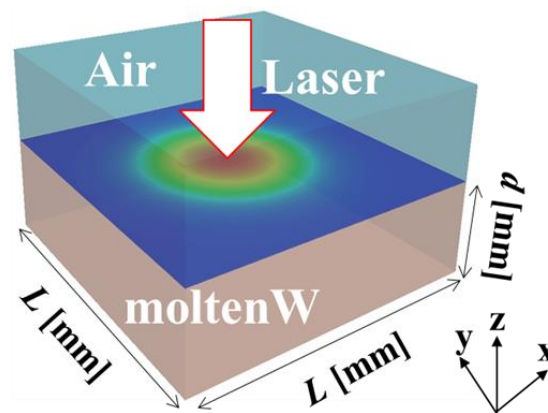


図 2.13.4-1 局所加熱による溶融タングステン内熱流動のシミュレーションモデル

第3章 実験体系

3.1 はじめに

本研究では、2つの実験を行った。1つはナノ秒オーダーの短時間のパルスレーザーを用いた実験であり、もう一つはミリ秒オーダーの前者よりも長時間のパルスレーザーを用いた実験である。本章では、これらの実験体系について述べる。

3.2 短パルスレーザー照射実験

本研究では2章で述べたように、帆足ら^[1-50]によって構築されたナノ秒オーダーの熱負荷を受ける金属の表面付近で起こる現象を評価するためのEOSを用いたシミュレーション手法をベースとしており、この基本的機能検証を目的として実験データとの比較を行った^[1-53]。この実験体系の概略図を図3.2-1に示す。本実験では、波長 1064 nm の Nd:YAG レーザーを熱負荷源として使用した。ターゲット金属はアルミニウムとし、レーザーのパルス幅は 10 ns、焦点距離 120 mm のレンズを使用したターゲット表面でのレーザー径は 100 μm とした。レーザーはビームスプリッターで分割され、ターゲット表面に照射されるエネルギーを測定するためにパワーメータへ導光される。実験時の真空チャンバーの圧力は 1 kPa に設定した。

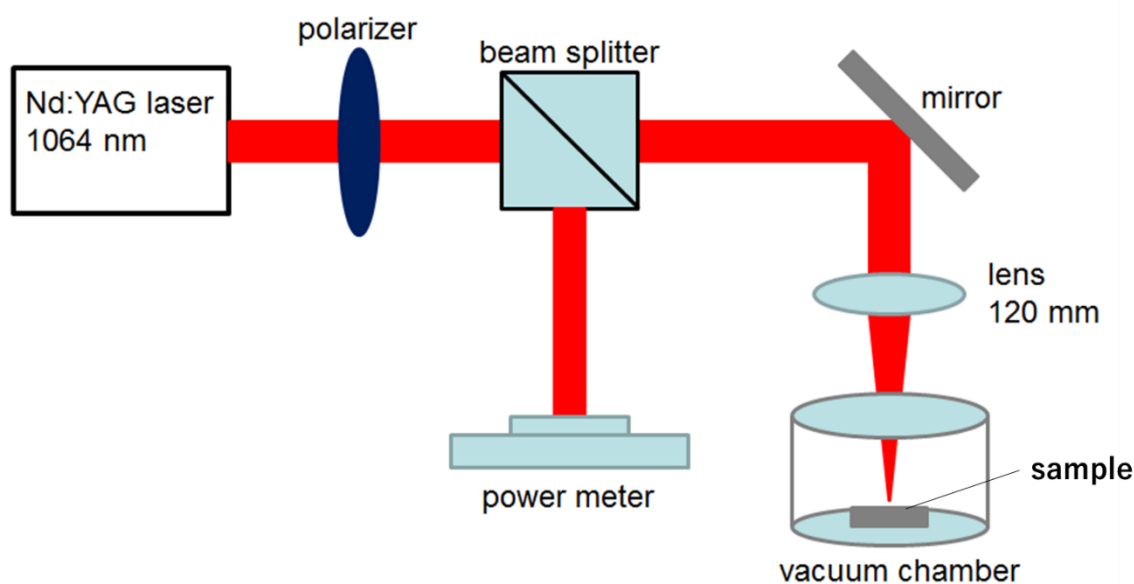


図 3.2-1 短パルスレーザー照射実験の概略体系

3.3 長パルスレーザー照射実験

アルミニウムをターゲット金属として、プラズマディスラプションや ELM のようなミリ秒オーダーでのパルスの熱負荷照射実験を行った^[1-53]。井上らによって行われた実験^[1-34]では、タングステンへの溶融・凝固後、照射領域中心部が膨らみ、その周辺が落ち込む特徴的な形状になっていることが観察されている。この実験では、熱負荷を受けた後のアルミニウムの表面形状がタングステンと同様の形状となっているか確認することである。熱負荷を受けた

後の表面形状が類似していれば、材料が異なっても同様のメカニズムで特徴的な形状が発生することになる。つまり、3.2 節でアルミニウムを用いて機能を検証したシミュレーションコードにタングステンの EOS を導入することで、タングステンのシミュレーションに適用することが可能になる。

この実験体系の概略図を図 3.3-1 に示す。本実験においても、波長 1064 nm の Nd:YAG レーザーを熱負荷源として使用した。ターゲット金属はアルミニウムとし、レーザーのパルス幅はミリ秒オーダーとし、レーザー径は焦点距離 120 mm と 240 mm の 2 つのレンズを用いてターゲット表面で 0.6 mm に集光される。実験時の真空チャンバー内の圧力は 10^{-7} トルオーダーに設定した。

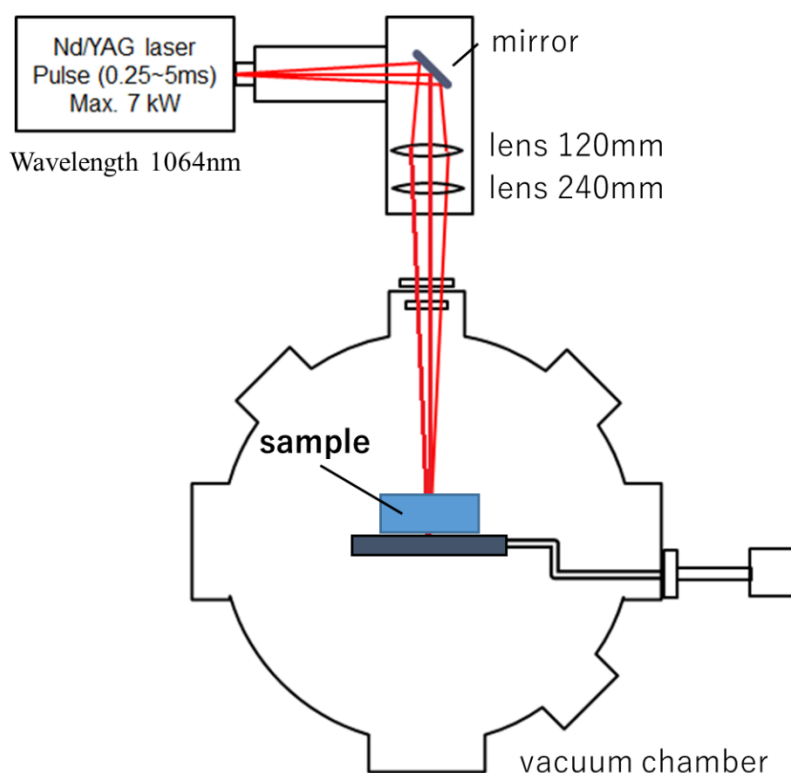


図 3.3-1 長パルスレーザー照射実験の概略体系

第4章 機能検証

4.1 強制対流機能の評価

本研究で使用する C-CUP 法をベースとした解法の強制対流による流動計算機能を検証するために、一般的な 2 次元のキャビティ流れの問題について計算を行った。解析体系を図 4.1-1 に示す。体系は長さ 1 cm の正方形のキャビティで奥行き方向には 4.0×10^{-4} m を与える。体系の上面を一定速度 U_0 m/s で動く駆動壁とし、下左右面は壁として Non-slip 条件を設定している。計算体系は 3 次元であるが 2 次元キャビティ流れとの比較するために、奥行き方向の流れが生じないように奥行き方向の面は両面とも Slip 条件を設定した。初期条件として体系内の圧力は 1 気圧とし、本研究のターゲット流体である熔融タングステンを選定して密度は 1.614×10^4 kg/m³、粘性係数 5.07×10^{-3} Pa·s とした。奥行き方向中心の断面における速度分布を Ghia らによる研究^[4-1]と比較し、流動計算機能の妥当性を評価する。なお、比較結果としてレイノルズ数を 3200 にするために、体系上部の駆動壁面速度 $U_{wall} = 92.5$ mm/s を与えた。

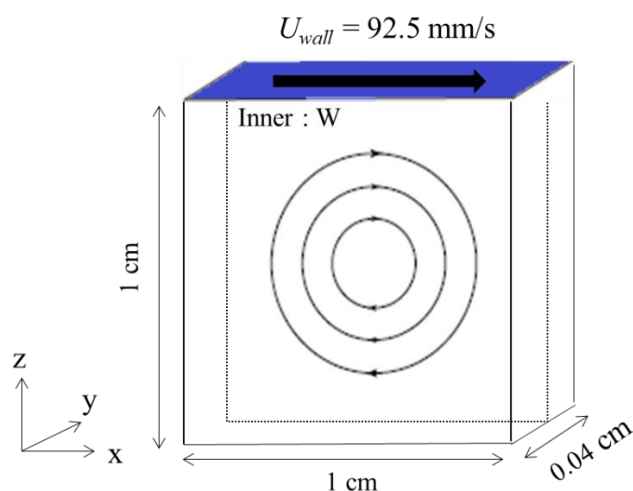


図 4.1-1 2次元キャビティ内強制対流計算の体系

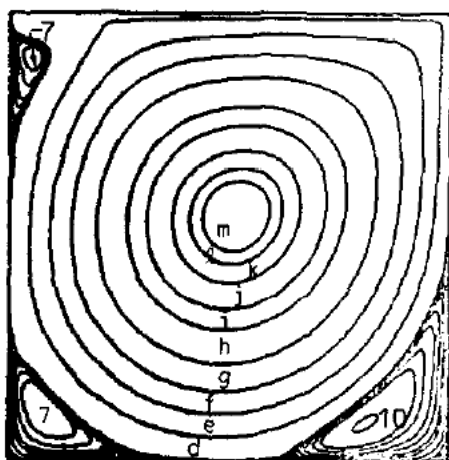


図 4.1-2 Ghia らによる流線分布^[4-1]

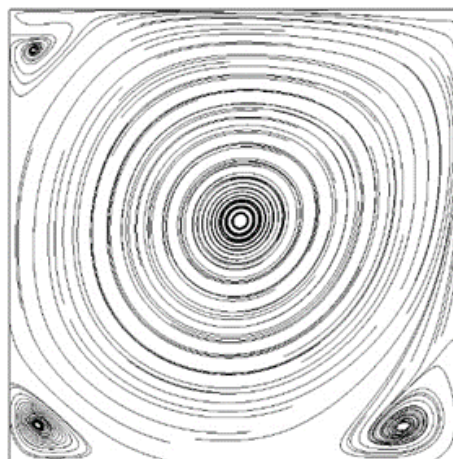


図 4.1-3 本研究における流線分布

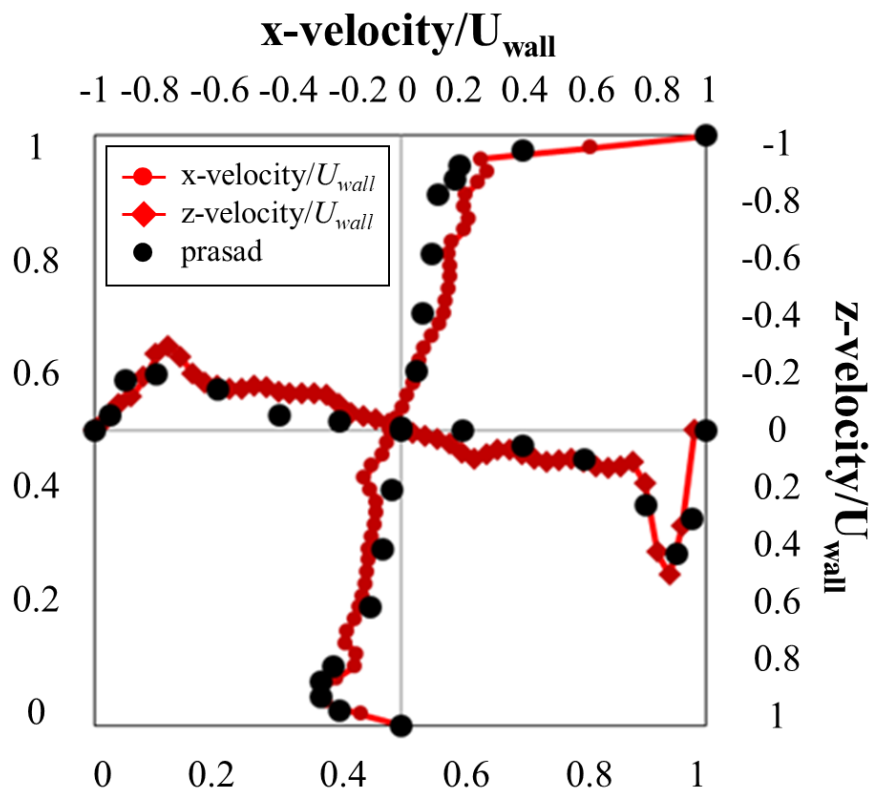


図 4.1-4 渦中心軸上での流速分布比較

結果の比較対象として Ghia らによる流線分布^[4-1]を図 4.1-2 に、本解析による流線分布を図 4.1-3 に示す。本シミュレーションコードによって、2 次元キャビティ流れによる流動を良く再現できていることが分かる。また、体系の中心線上での速度分布を図 4.1-4 に示す。図 4.1-4 の縦軸はキャビティ内渦の x 方向中心での z 方向速度成分、横軸は渦の y 方向中心での x 方向速度成分を示しており、値は各速度成分を上壁面の移動速度により規格化した無次元速度を用いている。図 4.1-4 は Prasad らの結果^[4-2]と比較する形で整理している。キャビティ内の流速分布を良く再現できており、Prasad らの結果と本計算による誤差の平均は 3.43 % となり、流体の流動特性を把握するのには十分な精度と言える。

4.2 自然対流機能の評価

前節に続き本研究で使用する C-CUP 法をベースとした解法の自然対流の計算機能を検証するために、低温面と高温面に挟まれたキャビティ内の熱対流の計算を行った。図 4.2-1 に解析モデルを示す。キャビティの大きさは $1\text{ cm} \times 0.1\text{ cm} \times 1\text{ cm}$ とし、温度壁以外の壁については断熱壁の条件を設定し、奥行き方向には Slip 条件を設定した。低温面、高温面の温度はそれぞれ 298 K、302 K に設定した。初期圧力及び初期温度はそれぞれ 1 気圧、300 K に設定した。キャビティ内は空気を満たし、熱伝導率及び粘性係数をそれぞれ 0.1 W/m/K 、 $7.7 \times 10^{-5}\text{ Pa}\cdot\text{s}$ に

設定し、熱流動計算のレイリー数を 1000 とした。

Davis らによる $Ra=1000$ の結果^[4-3]と比較したものを図 4.2-2 ~ 4.2-5 に示す。図 4.2-2、4.2-3 はそれぞれ本解析及び Davis ら^[4-3]による温度分布の結果を、図 4.2-4、4.2-5 はそれぞれ本解析及び Davis ら^[4-3]による流線分布の結果を示している。高温面側では温度上昇に伴い密度が減少し上方向に流れが生じ、低温面では逆に下方向に流れるキャビティ内対流が生じるが、本シミュレーションコードでも再現できていることが分かる。図 4.2-2 ~ 4.2-5 から温度分布、流線分布ともに Davis らの結果とよく一致しており、本シミュレーションコードの熱対流計算が検証されている。

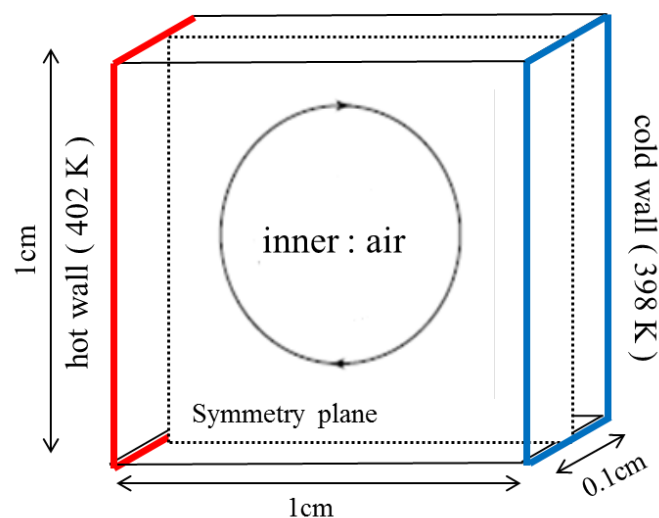


図 4.2-1 自然対流検証の計算体系

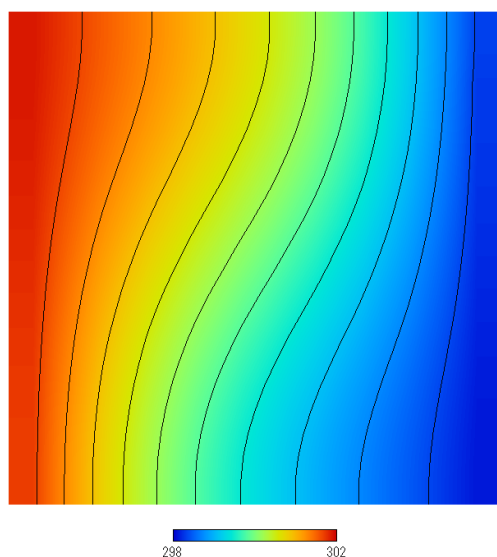


図 4.2-2 本解析による温度分布

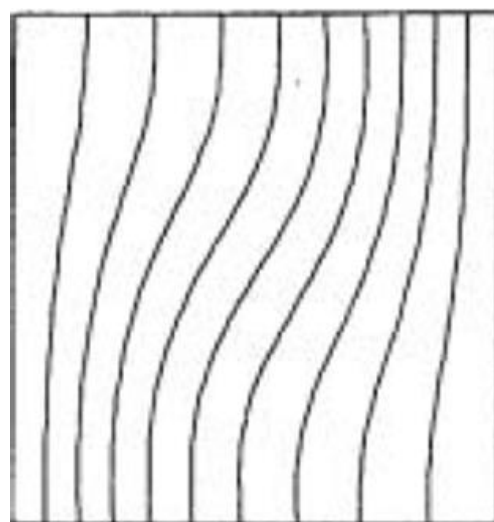


図 4.2-3 Davis らによる温度分布^[4-3]

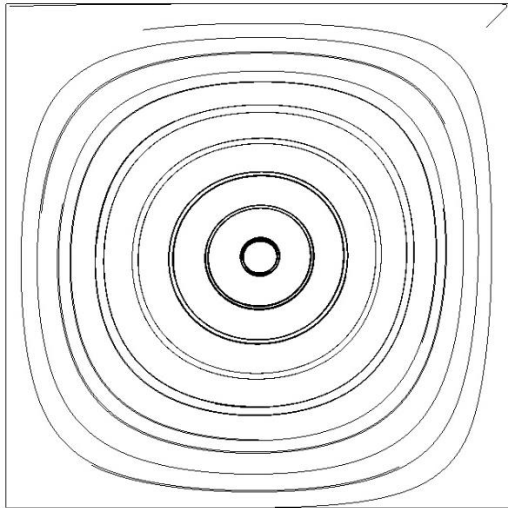


図 4.2-4 本解析による流線分布

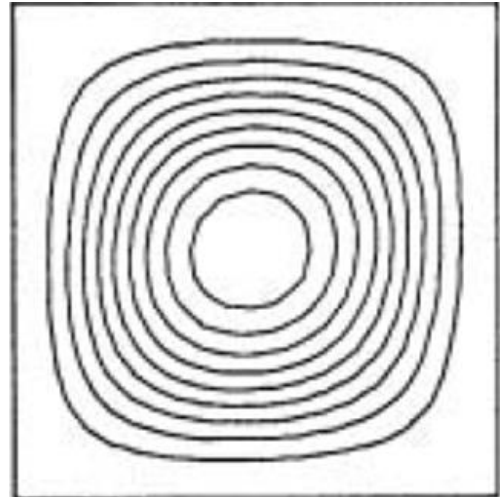


図 4.2-5 Davis らによる流線分布^[4-3]

4.3 極短パルス熱負荷に対する金属表面の挙動評価

本シミュレーションコードの短時間の高熱負荷に対する表面挙動計算の機能を検証するために、短時間のパルス熱負荷を受けたアルミニウムの掘削深さについて、実験結果との比較を行った^[1-53]。3.2 節で述べた実験体系において、ターゲット金属をアルミニウムとした時の熱負荷のエネルギーと掘削深さの相関を図 4.3-1 に示す。実験結果については、熱負荷後の固化後のアルミニウム表面をデジタル顕微鏡で測定した結果であり、測定精度は深さ方向に $\pm 5 \mu\text{m}$ となる。

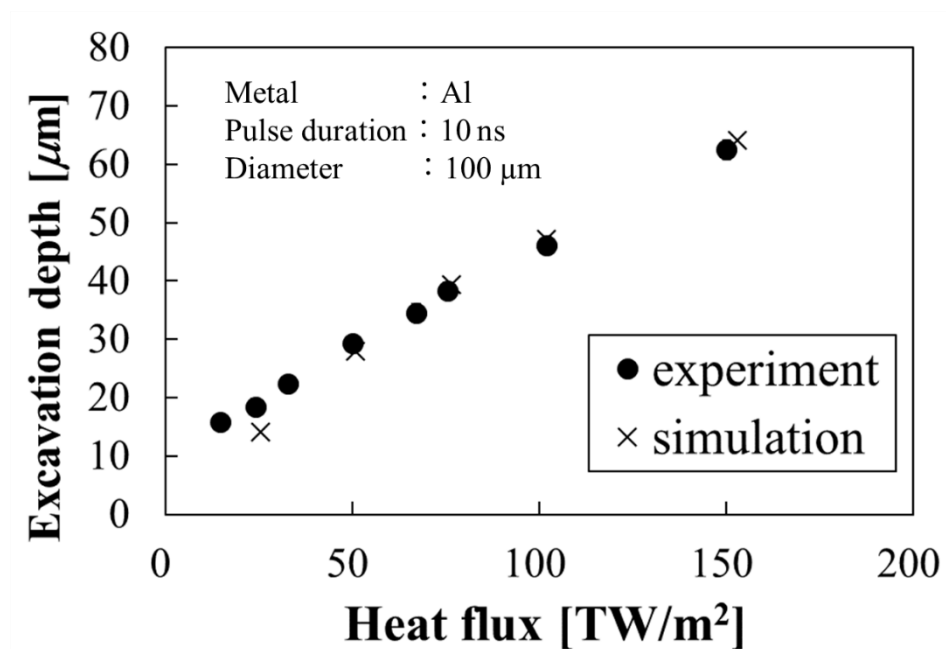


図 4.3-1 実験及びシミュレーションの掘削深さ比較^[1-53]

この結果から、シミュレーションと実験のどちらにおいても、熱負荷エネルギーと掘削深さは線形関係にあることが分かる。シミュレーション結果は実験結果とよく一致しており、本シミュレーションコードにより得られる極短パルス熱負荷に対する金属表面挙動は妥当であると確認できた。ただし、熱負荷が小さい領域においては掘削深さにわずかに差が生じている。実験に用いたアルミニウム表面において、粗い部分では熱負荷を受ける面積が多くなるため吸収するエネルギーが大きくなる。低いエネルギー領域においては、この粗さによる影響が大きくなると考えられる。

4.4 周辺圧力による金属表面挙動への影響の評価

2.13.2 項で述べたように、本研究では流れ場を連続体として扱える範囲で周辺圧力を設定している。一方で、実機の条件では真空となるため、本研究で入力値として扱う周辺圧力による金属表面挙動への影響を確認した。3.2 節で述べた実験体系において、熱負荷フラックスを 78 TW/m^2 、パルス幅を 10 ns に設定し、初期周辺圧力を $100, 10, 1 \text{ kPa}$ に変化させて熱負荷照射シミュレーションを実施した。なお、ターゲット金属をアルミニウムとした。熱負荷後 200 ns までの 10 ns 毎の圧力ピーク位置（表面からの深さ）及びその値を図 4.4-1 に示す。さらに、熱負荷後 $100, 200, 300, 400 \text{ ns}$ 後の密度分布を図 4.4-2 に示す。

図 4.4-1 はアルミニウム内部へ衝撃波の圧力が伝播していくことを示しているが、その伝播速度やピーク値は異なる周辺圧力に対しても違いがみられなかった。従って、金属内部に対してはターゲット周辺の圧力条件の影響は小さく、本研究で扱う圧力域においても実機の真空条件と同じ結果が得られると考えられる。一方で、図 4.4-2 から、 100 kPa の周辺圧力と 10 kPa 及び 1 kPa の周辺圧力ではアブレーションにより生じたプルームの飛散挙動が異なる結果となった。 100 kPa の場合、空気とアルミニウム蒸気のせん断応力によりプルーム形状が徐々に不安定になるが、 10 kPa 及び 1 kPa の場合、プルーム形状は滑らかに維持され垂直方向にさらに上方に散乱していくことになる。従って、実機の真空条件では、高熱負荷により蒸気は表面近傍での形状を維持したまま飛散していくと思われる。実際には、この蒸気によりダイバータに入射する熱負荷が軽減される蒸気遮蔽効果が得られることが分かっている。なお、タングステンは空気に比べて比重が非常に大きい金属であるため、熔融中のタングステンの流動挙動にも周辺圧力の影響はほとんどないと考えられる。

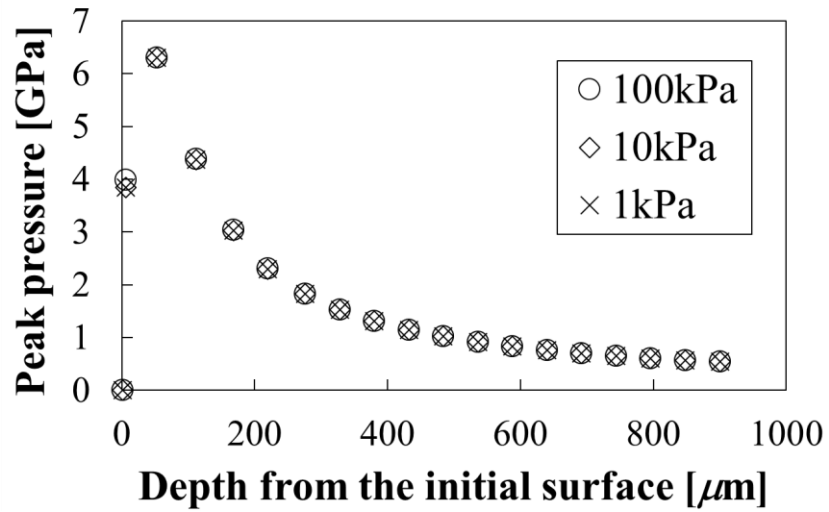


図 4.4-1 熱負荷後 200 ns までの圧力ピーク位置及び値の時系列変化

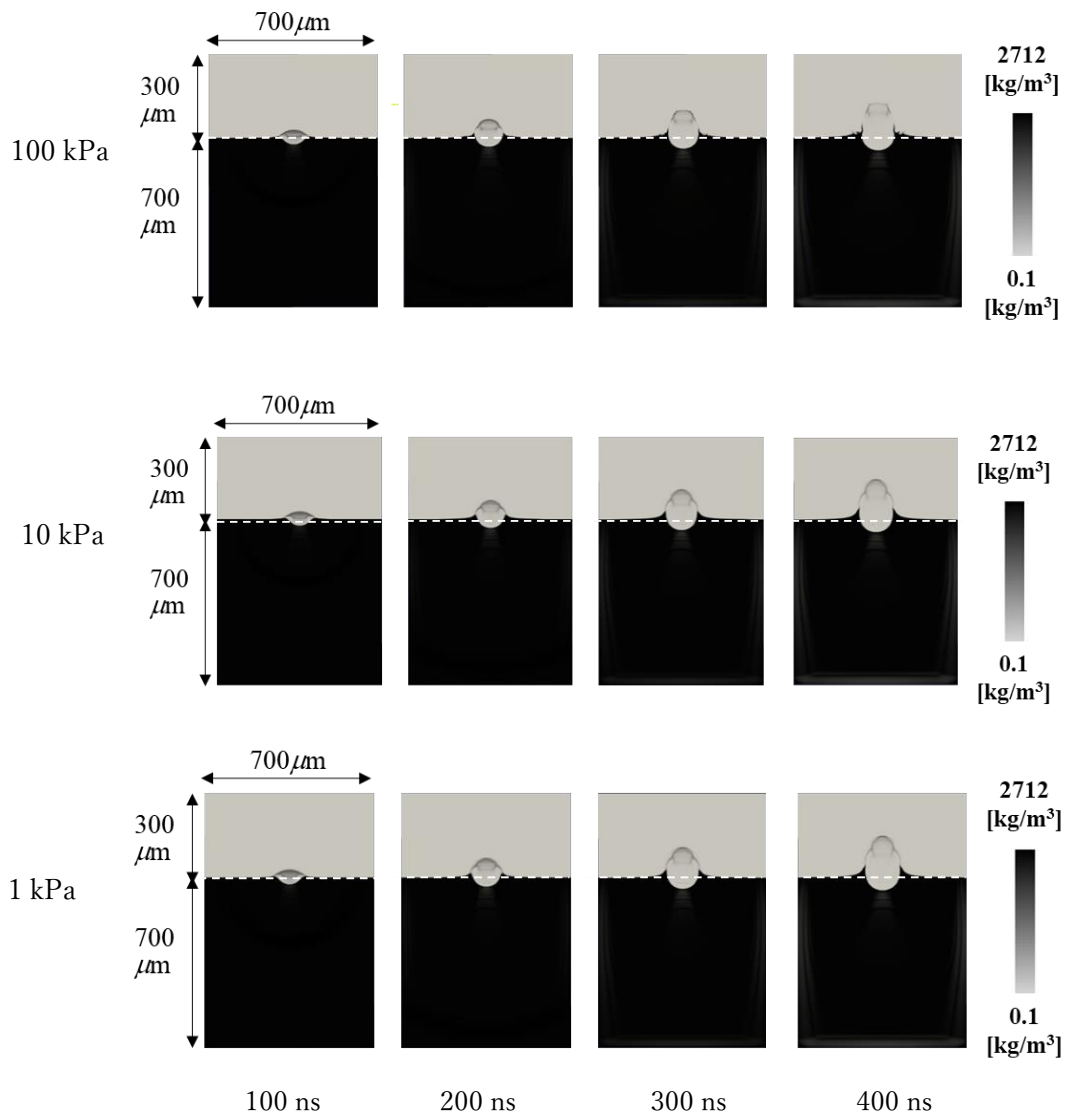


図 4.4-2 異なる周辺圧力に対する密度分布

4.5 シミュレーションコードの他金属への適用性評価

Al をターゲットとした高熱負荷照射シミュレーションに対して他の金属 EOS を適用し、本シミュレーションコードの他金属への適用性を確認した。本項では Al の他に Ni を対象として短時間のパルスの熱負荷シミュレーションを行った。Ni を選定した理由は、Al や W よりも熱拡散率が小さく熱負荷による表面挙動を比較できることと、Ni の SESAME のデータを保有していたためである。シミュレーションモデルは図 2.13.2-1 を使用し、パルス幅は 10 ns、レーザー径は 100 μm 、熱負荷強度は 78 TW/m^2 に設定した。図 4.5-1 に熱負荷後 400 ns 経過時の Al と Ni の密度分布及び温度分布を示す。また、図 4.5-2 及び 4.5-3 に Al 及び Ni の熱負荷後 200 ns までの内部の圧力分布を示す。

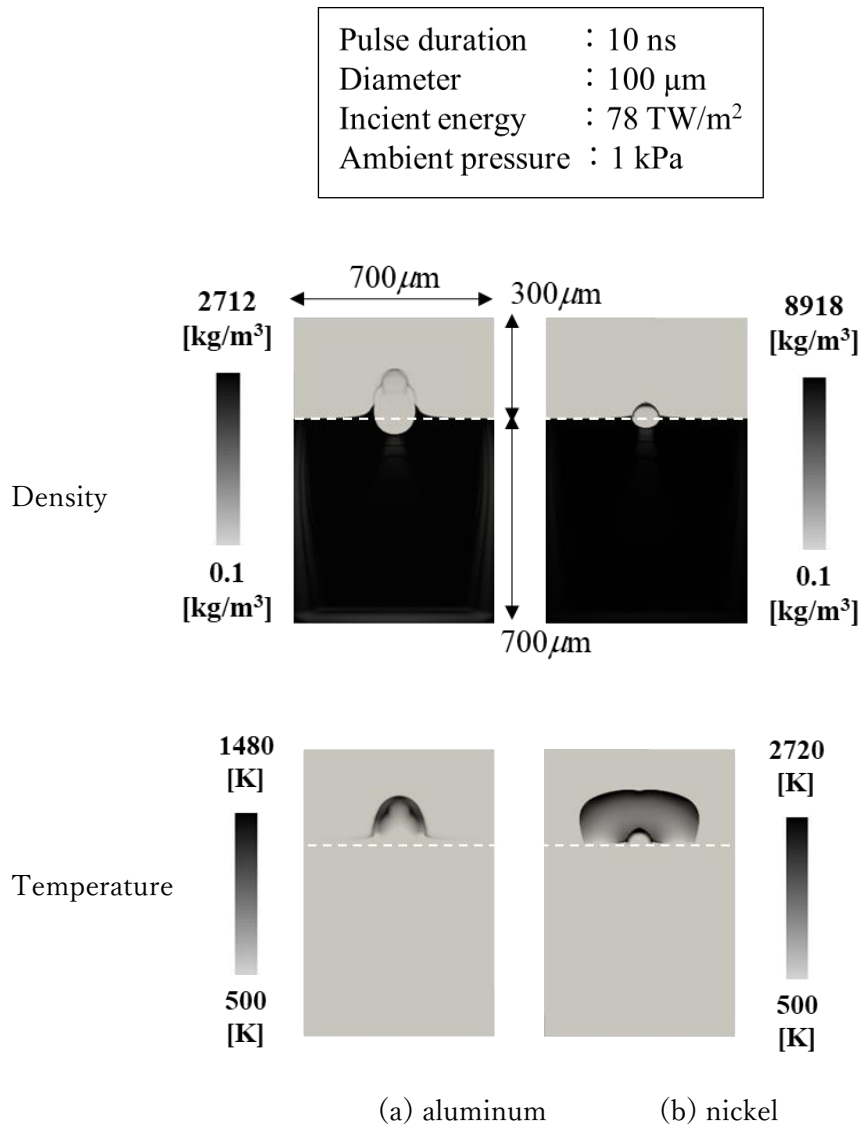


図 4.5-1 Al 及び Ni の熱負荷後 400 ns 経過時の密度分布及び温度分布

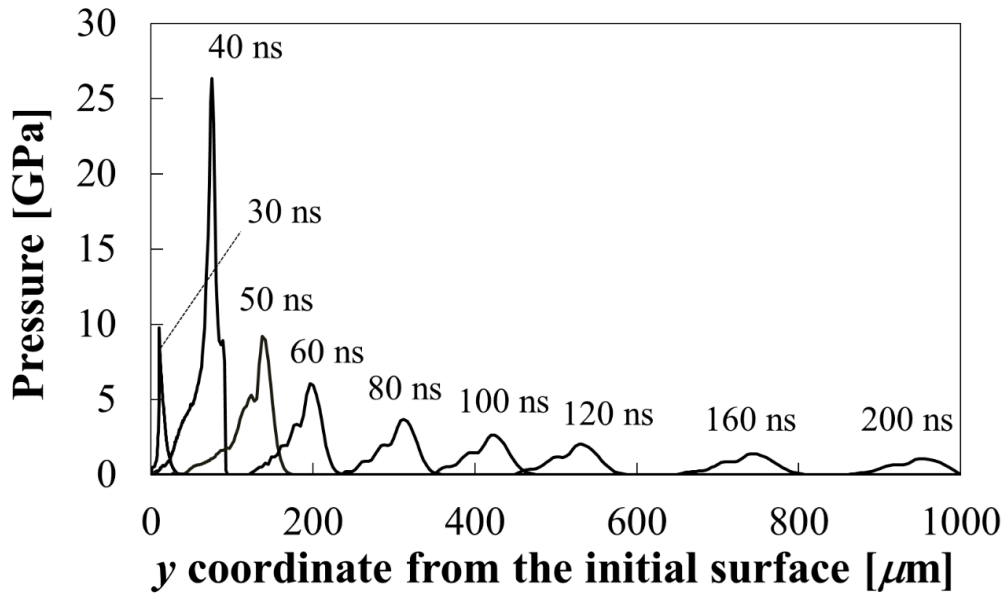


図 4.5-2 熱負荷後 200 ns までの Al 内部の圧力分布

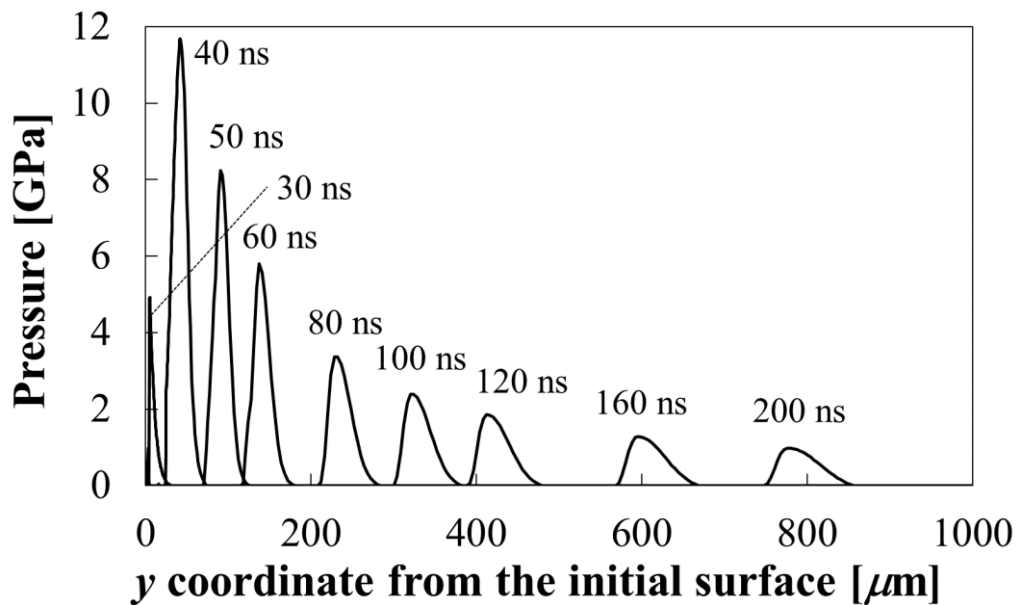


図 4.5-3 熱負荷後 200 ns までの Ni 内部の圧力分布

図 4.5-1 において、温度分布の高温領域はアブレーションによって生じたプルームであり、表面から飛散していく様子が分かる。Ni は Al と比較してアブレーションによる掘削深さは小さいが、これは Ni の方が Al よりも融点と沸点が高いためである。一方で、プルームは Ni の方が Al よりも広く飛散している。熱拡散率は Ni の方が小さいため、Ni は Al よりもターゲット部の表面において熱負荷による熱エネルギーを多く保有した状態となる。この熱エネルギーが運動エネルギーに変換されることで、Ni のプルームがより広範に飛散した。図 4.5-2, 3 から Al と Ni では内部の圧力の伝播挙動が異なることが分かる。シミュレーションで得られた Al 及び Ni の圧力伝播速度はそれぞれ約 5600 m/s、約 4500 m/s であり、Al 内部の方が

伝播が早い結果となった。Al 及び Ni の音速が 6320 m/s、5630 m/s であることから、本シミュレーションによるそれぞれの圧力伝播速度はそれぞれマッハ 0.88、0.79 となった。また、Al の圧力分布はピークの後方が緩やかなプロファイルとなったのに対して、Ni ではピークの前方が緩やかなプロファイルとなった。この違いは膨張率の違いによるものであり、Al は Ni よりも圧縮されやすい傾向を捉えることができている。

以上より、図 4.5-1~3 の結果は、Al と Ni の違いを物理的に表現できていると考えられる。従って、本シミュレーションコードは EOS を変更することで他金属をターゲットにしたシミュレーションが実施可能であることを確認できた。

4.6 長時間のパルス熱負荷を受ける Al の表面形状の評価

アルミニウムをターゲット金属として、プラズマディスラプションや ELM をレーザー照射で模擬したミリ秒オーダーでのパルスの熱負荷照射実験の結果を本項に示す。実験体系は図 3.3-1 を用いて、のレーザーのパルス幅を 5 ms、レーザー径を 0.6 mm、レーザーの照射強度を 17.68 GW/m²とした時の照射後の表面形状のプロファイルを図 4.6-1 に示す。プロファイルの作成には、4.3 項で用いたデジタル顕微鏡と同じものを用いた。また、本結果の比較として、図 3.2-1 の実験体系において、ナノ秒オーダーのパルスの熱負荷照射実験の結果^[4-5]を図 4.6-2 に示す。この比較結果における実験パラメータは、パルス幅が 10 ns、レーザー径は 50 μm、照射強度は 203.7 TW/m²である。

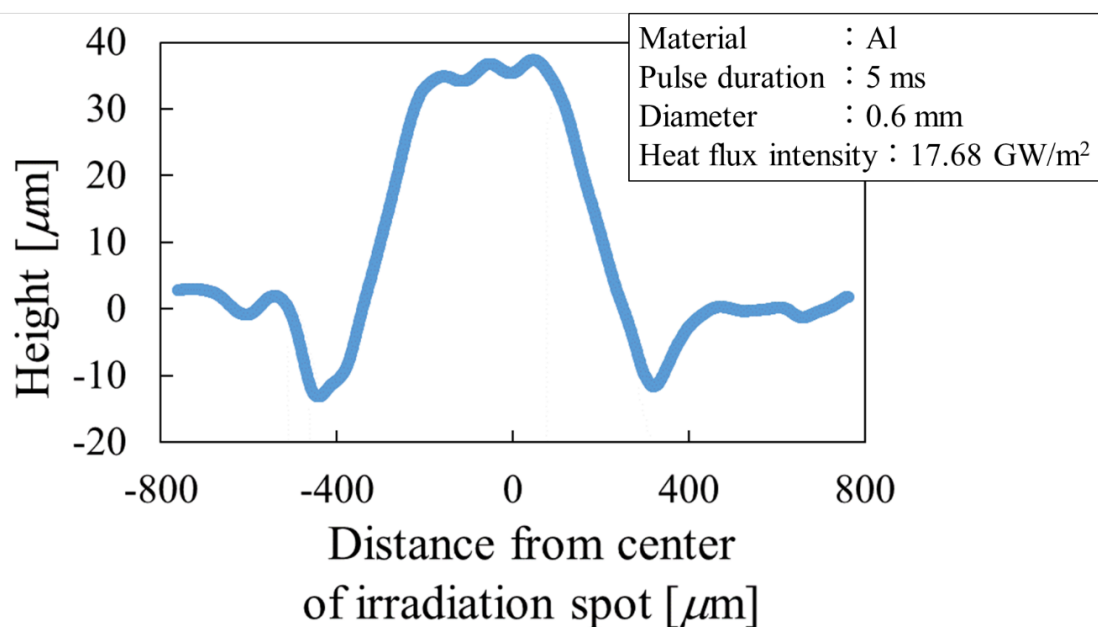


図 4.6-1 ミリ秒オーダーの熱負荷後の Al の表面プロファイル

Material : Al
Incident energy : 4.0 mJ
Pulse duration : 10 ns
Laser diameter : 50 μm

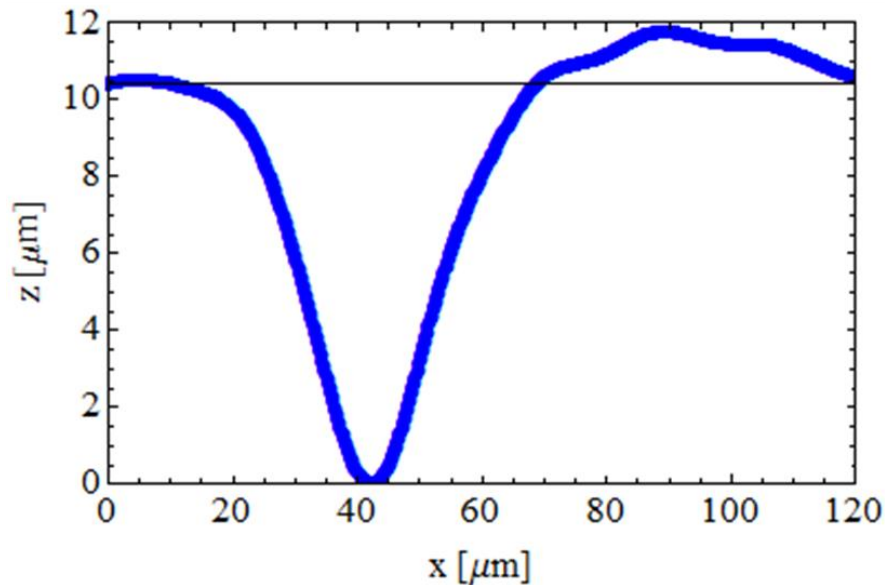
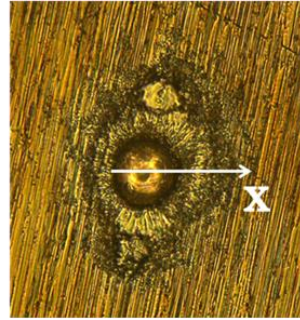


図 4.6-2 ナノ秒オーダーの熱負荷後の Al の表面プロファイル^[5-1]

図 4.6-1 からミリ秒オーダーの熱負荷後の表面形状はレーザー照射領域で円錐のように表面が膨らんだ形状となっており、ターゲットを Al としても W を用いた実験^[1-34]と同じような照射領域中心が膨らんだ特徴的な形状となった。図 4.6-2 からナノ秒オーダーでは熱負荷後時のアブレーションにより熱負荷領域は爆散的にプルームとして飛散していき、熱負荷後の表面は凹の形状となることが分かる。一方で、ミリ秒オーダーの熱負荷の場合には、溶融及び凝固中に生じる溶融 Al の熱対流が特徴的な形状の原因であると考えられる。従って、熱負荷後のこの特徴的な表面形状は材料によらず同じメカニズムで起こる。つまり、これは 2 章で示した本シミュレーションコードに W の EOS を導入することで、ターゲット物質を W として溶融中の熱対流の評価に適用することができることを意味する。

4.7 表面張力の接線成分に起因するマランゴニ効果の評価

2.8 節に述べたように、表面張力の接線成分をモデル化した本シミュレーションコードによりマランゴニ効果を再現できることを検証した^[1-51]。本検証では、図 2.13.3-1 に示すシミュレーションモデルを使用する。Smith ら^[1-42]は固定された界面に表面張力を境界条件として与え、

液相内部にマランゴニ対流を生じさせる数値解析を行っている。Smith らの結果と本解析における液相内でのマランゴニ対流の比較を行った。本解析では $L = 3 \text{ mm}$ 、 $d = 1.5 \text{ mm}$ として、 Ma を 400 として設定した。体系の x 及び y 方向中心の z 軸上における溶融タングステン層内の速度の x 成分の分布を図 4.7-1 に示す。図 4.4-1 の縦軸は液相内の鉛直方向座標であり界面の座標を 1 として規格化した z 座標であり、底面は 0 として表される。横軸は界面における規格化した x 方向の流速を示す。

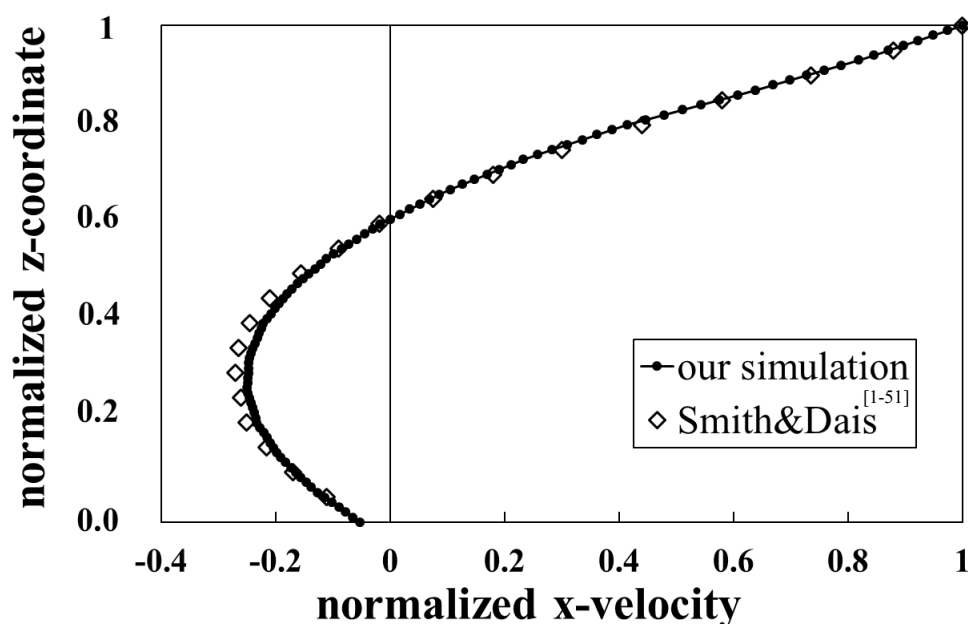


図 4.7-1 マランゴニ効果による液相内での無次元速度の比較

図 4.7-1 から、本解析の液層内の流動は Smith らの結果^[1-42]と比較して同様の結果を示した。どちらの結果も規格化座標 $z = 0.6$ において速度が 0 となっており、表層側と底面側の流れの厚さが非常に良く一致していること分かる。以上より、本研究で構築した表面張力の接線成分算出のアルゴリズム (2.8.2 項) によって液体表面での温度勾配に起因するマランゴニ効果を再現できていることを確認した。

4.8 高熱負荷によるタングステン表面温度変化の評価

高熱負荷を受けるタングステンの挙動として表面温度変化を確認することで本研究で導入したタングステンの EOS (GRAY EOS) の検証を行う。本項では高熱負荷を受ける溶融タングステンの表面温度変化を実験結果と比較することで、上記の検証を行った。前地ら^[1-36]は熱源に Nd:YAG レーザーを使用してタングステン試料にレーザー照射を行い、タングステン表面における温度上昇の時間経過を実験的に評価した。前地らの実験体系を図 4.8-1 に示す。この実験では、タングステン試料を 2 視点で観察して、それぞれの光路に組み込まれた別波長のバンドパスフィルターから同一点における特定波長の強度比を取り、プランクの黒体放射

における強度比から温度を推定している。

本検証に使用するシミュレーションモデルは、図 2.13.4-1 を使用した。シミュレーションにおける熱負荷パラメータは前地ら^[1-36]の実験パラメータに合わせ、レーザー径 0.6 mm、レーザー照射強度 3.5 kW とした。図 4.8-2 に前地ら^[1-36]実験結果及びシミュレーション結果におけるタングステン表面の温度上昇の結果を示す。横軸は時間[ms]、縦軸は温度[K]である。なお、本シミュレーションでは融点を超える温度を初期温度 3820 K として設定している。比較対象とする前地ら^[1-36]の実験では照射時間は 1 ms であるが、タングステン表面温度が 3820 K となる時刻は 0.5 ms であるため、シミュレーションではこの時刻 0.5 ms を計算開始とし、残りの照射時間の 0.5 ms をレーザーの照射時間として設定した。

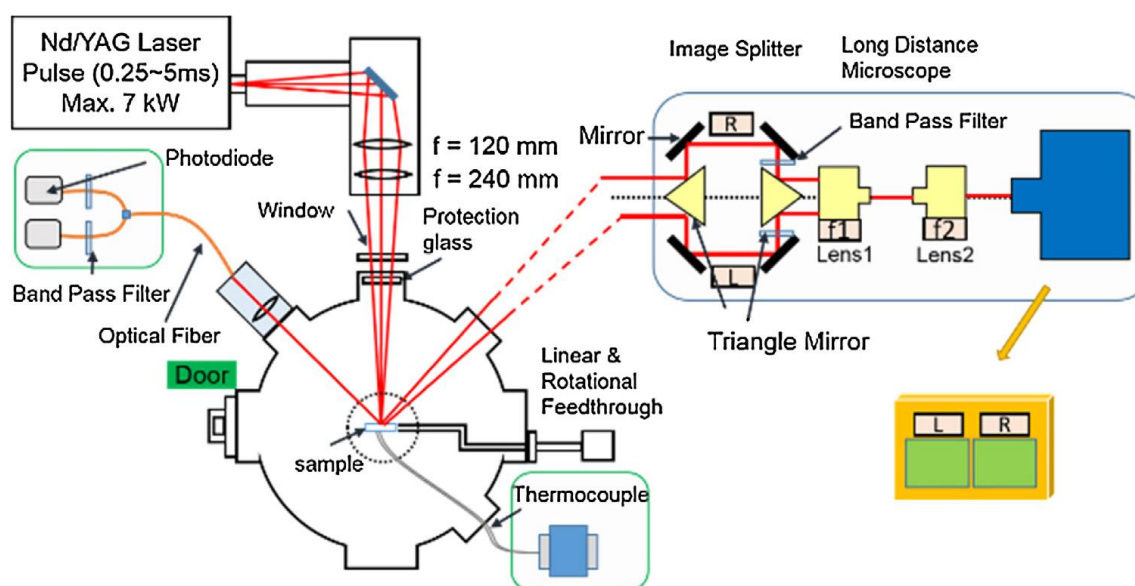


図 4.8-1 タングステンの表面温度測定の実験体系^[1-36]

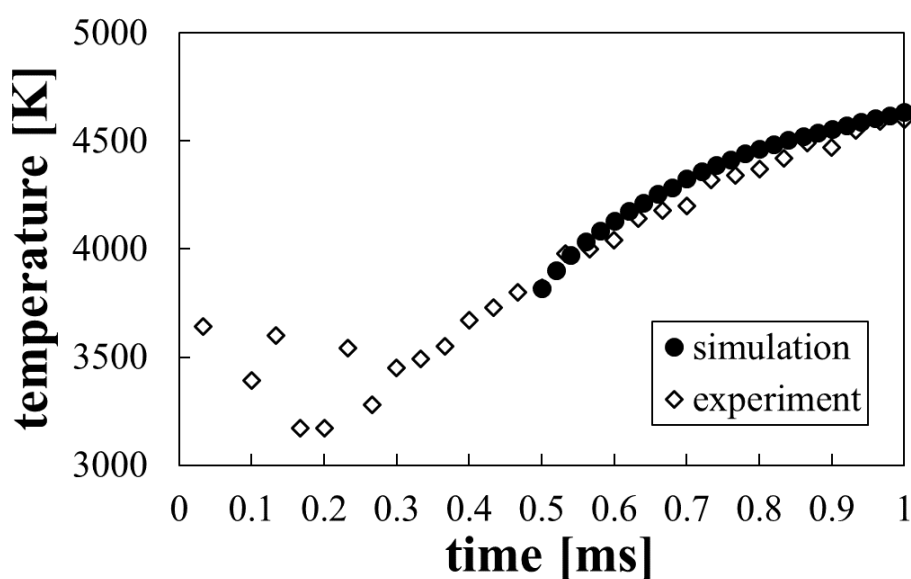


図 4.8-2 レーザー照射による実験とシミュレーションの温度上昇の比較^[1-52]

図 4.8-2 から、シミュレーションにおけるタングステン表面の温度上昇は実験と似た傾向を示した。シミュレーションと実験の平均誤差は 2.3%であり、実現象を精度良く表現できていることが分かった。式(2.6.28)示されるエネルギー方程式内で用いられる C_v や P_{th} といった変数はタングステンの物性値として、GRAY EOS を用いて算出している。本シミュレーションで使用している GRAYEOS には約 5 %程度の誤差があることを 2.4 節で確認しており、これらの変数にも同様の誤差があると考えられ、シミュレーション結果と実験結果の差はこれらの変数に起因するものと考えても、タングステンの表面温度変化を良く再現できたと言える。以上より、本シミュレーションコードはタングステンを対象とした高熱負荷シミュレーションに適用可能である。

第5章 結果と考察

5.1 溶融タングステンへの一様加熱シミュレーション

5.1.1 表面変動及び対流の発達過程

マランゴニ効果による溶融タングステン内の対流の発達現象を評価するために、一様加熱による温度勾配を課したシミュレーションを実施した。シミュレーションモデルは、2.13.3 項で述べたモデルを使用し、壁面からの一様加熱により溶融タングステン層の内部で対流を発達させた。なお、溶融層の幅方向長さ L は 1.5 mm、深さは 0.5 mm である。y 方向中心における溶融層内の流線及びベクトル分布図を 0.1 s から 1.4 s までそれぞれ図 5.1.1-1、5.1.1-2 に示す。また、0.9 s から 1.3 s までのタングステンの表面形状を図 5.1.1-3 に示す。なお、体系内において密度関数が 0.5 となる面をタングステンの表面と定義した。図 5.1.1-1~5.1.1-3 において、右側境界が高温壁、左側境界が低温壁である。

図 5.1.1-1、5.1.1-2 からモデル左右の境界壁面の温度差に起因するマランゴニ効果によって溶融 W 内部において対流が生じていることが分かる。式(2.8.12)から、タングステンの表面張力の温度係数は -0.31×10^{-3} と負であるため、温度が低いほど表面張力は大きくなる。表面張力は引っ張る力であるため、溶融層の表面では高温壁から低温壁へ向かう流れが生じる。ゆえに、図 5.1.1-2(a) - (i)で示されるように溶融層内の全体で反時計回りのマランゴニ対流が発生する。図 5.1.1-1(a) - (i)から、0.3 s までの対流発生初期は溶融層の x 方向中心付近に対流の中心が位置していたが、0.4 s から対流の中心が二つに分かれる。その後、分かれた対流の中心は時間の経過とともにそれぞれ反時計回りの渦として発達し、渦中心は壁面に近づいていく。図 5.1.1-1(h)から、0.8 s になると高温壁側においての渦は壁面近傍に到達し、表面付近において渦の中心が形成される。その後図 5.1.1-1(j)、5.1.1-2(j)、5.1.1-3(b)から、1.0 s になると高温壁側では渦から剥離した流れによってタングステンの表面が変動し、それに伴って高温壁側では時計回りの渦が生じる。低温側においても 1.0 s になると渦が低温壁近傍にまで到達し大きな渦へと成長しており、低温壁では反時計回り、高温壁側では時計回りの双子渦が発生する。図 5.1.1-1(j) - (n)、5.1.1-2(j) - (n)から、双子渦発生直後はそれぞれの渦の境界は低温壁付近の表面から高温壁付近の底面にかけて斜めとなっていたが、1.3 s には x 方向の中心で表面に対して垂直な境界となり、高温側・低温側の渦はそれぞれ同じ大きさで安定した渦となった。溶融層の表面ではマランゴニ効果によって高温壁側から低温壁側へと力が働き続けているはずであるが、高温壁側の渦は高温壁側での渦の流れはその力に逆らう向きに流れており、溶融層内の流動は双子渦が支配的となる。

図 5.1.1-3 から、1.0 s から両壁面近傍で界面変動が生じていることが分かる。これは、壁面かつ界面近傍で生じた剥離渦が起因となって生じたと考えられる。また、体系の中心、つまり双子渦の境目では双子渦によって底面から表面に向かって流れが生じていることから、さらに対流が発達すると壁面近傍だけでなく溶融層の中心を起点に溶融層表面全体にわたって変動することが予測される。このように、図 2.13.3-1 のように溶融相表面に平行な温度勾配によるマランゴニ効果だけでも、溶融層内に渦が発生し界面変動を生み出すことが分かった。

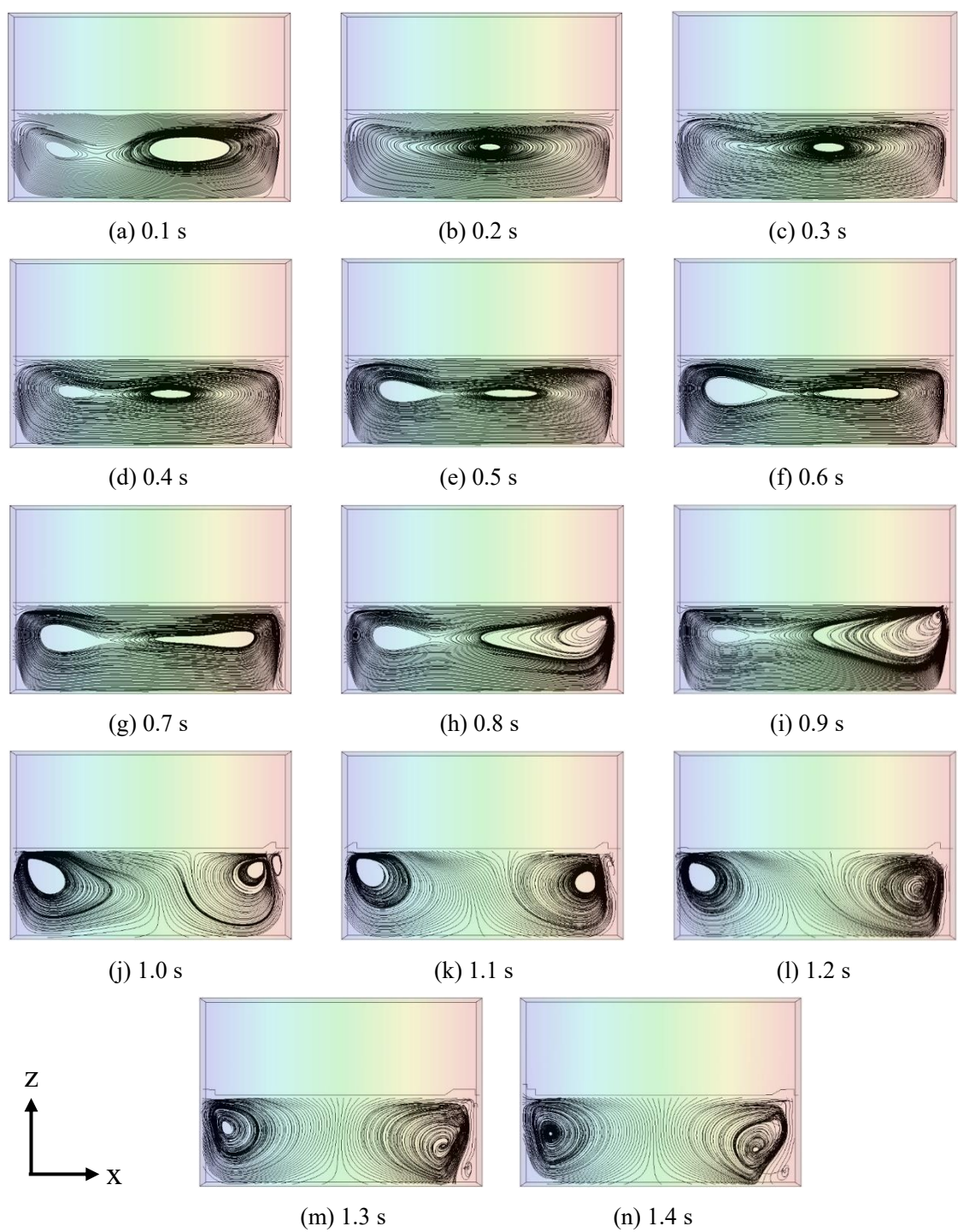


図 5.1.1-1 溶融 W 内部の流線分布

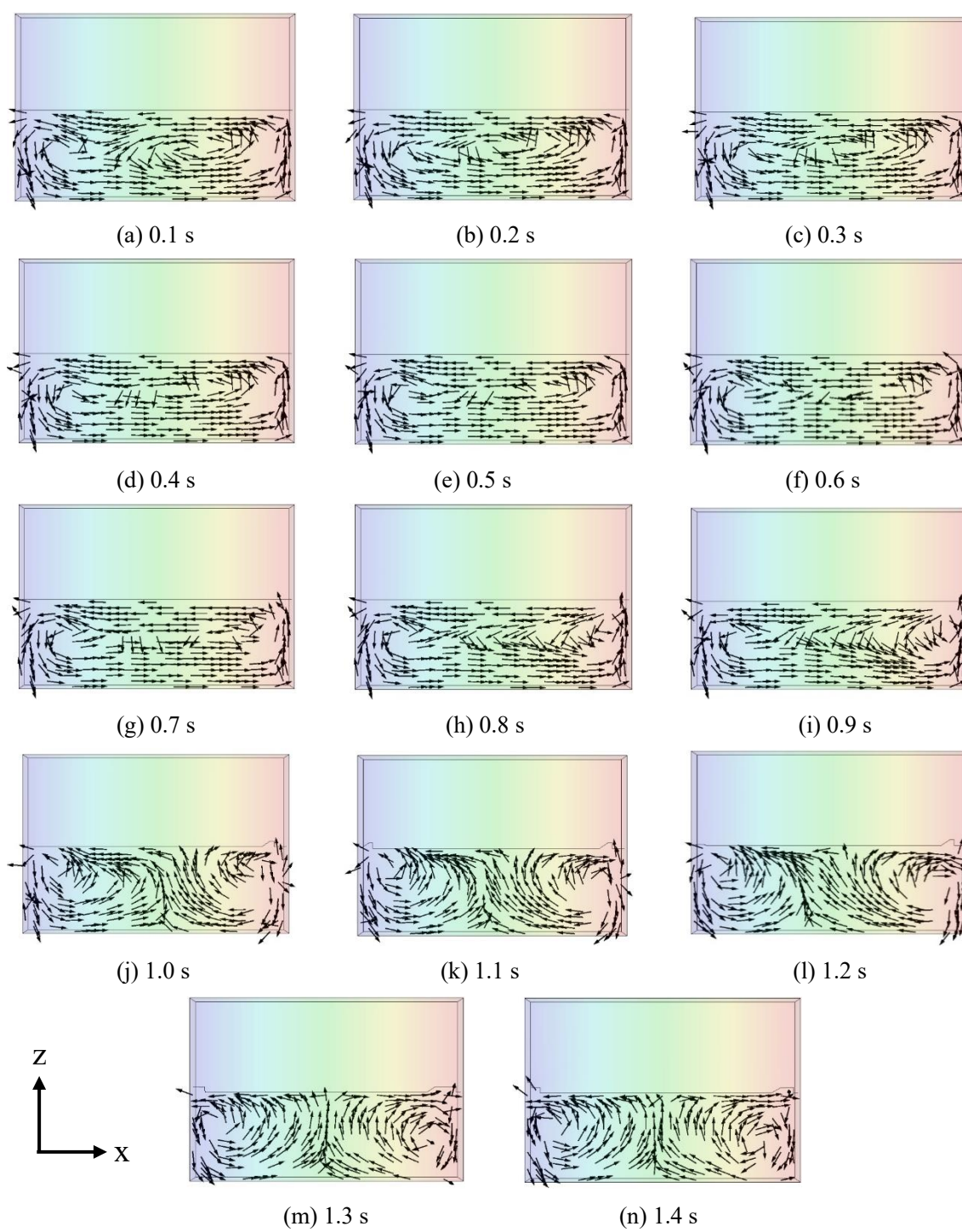


図 5.1.1-2 溶融 W 内部のベクトル分布

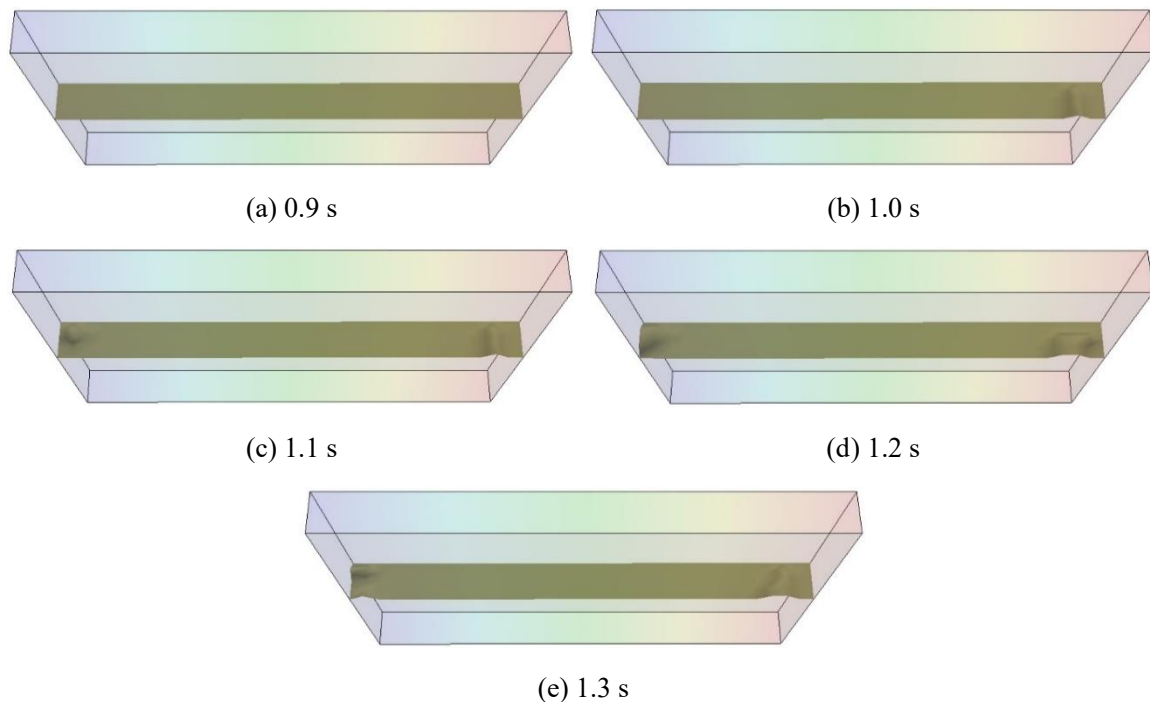


図 5.1.1-3 溶融 W の表面形状

5.1.2 表面流速の評価

本項では、5.1.1 項で述べた溶融 W 内部の対流の発達過程における溶融層の表面流速について述べる。5.1.1 項同様のモデル及び条件の 0.2 ~ 1.4 s における y 方向中心における表面流速の x 成分を図 5.1.2-1 及び 5.1.2-2 に示す。それぞれ横軸は 0 が低温壁、1 が高温壁として規格化した x 座標、縦軸には表面流速の x 成分を示しており、この流速の x 成分は壁面温度差により表面張力が働く方向の流速である。図 5.1.2-1 から、表面流速の x 成分は 0.6 s まで表面全体にわたって比較的均一な状態を維持しており、図 5.1.1-1(b, d, f) 及び 5.1.1-2(b, d, f) から分かるように、安定して対流が発達している。図 5.1.1-1(j)、5.1.1-2(j) 及び 5.1.2-2 から、双子渦の発生する 1.0 s 頃からは双子渦が相互作用することで表面流速が急激に上昇しており、双子渦の発生前の約 100 倍の流速となることが分かった。以上より、表面に平行な温度勾配に対しては、双子渦発生前では流速も小さく安定した対流が維持されることから、タングステンの表面状態への影響は少ない。一方で、双子渦発生後は流れが急激に発達し対流及びそれに伴う表面状態も乱れるため、双子渦発生前に温度勾配を低下させることが重要であり、タングステンを局所的に冷却するのではなく全体にわたって均一に低下させる必要があると考えられる。

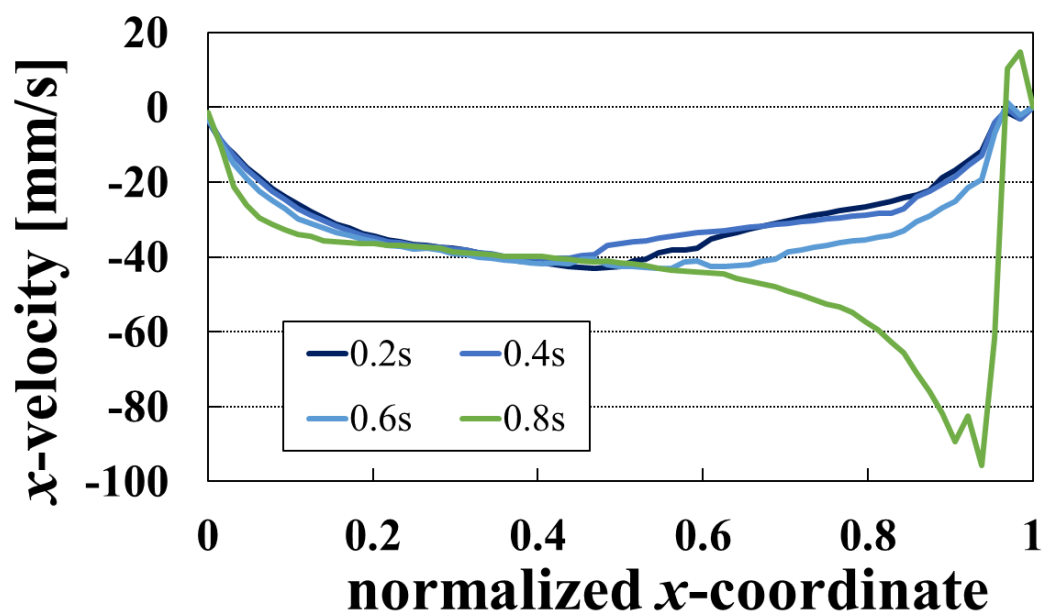


図 5.1.2-1 表面流速の x 成分 (0.2 s、0.4 s、0.6 s、0.8 s)

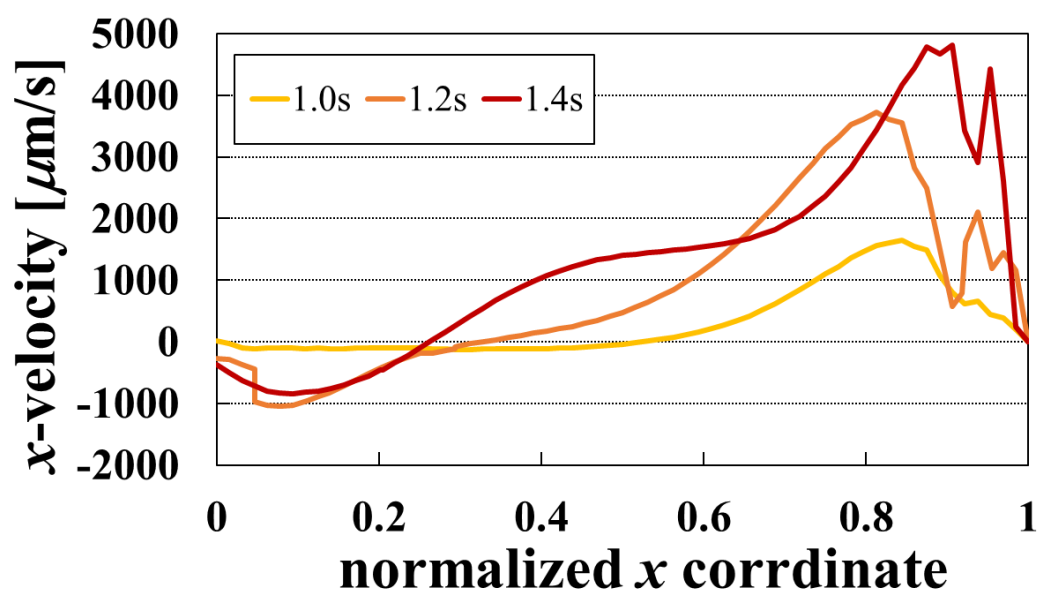


図 5.1.2-2 表面流速の x 成分 (1.0 s、1.2 s、1.4 s)

5.1.3 溶融層のサイズに対する流況依存性

高熱負荷の種類やその強さによって、溶融タングステン層の深さや幅が変わることは十分に考えられる。そこで、本項では溶融層の形状が内部対流及び表面流速に与える影響について評価する。シミュレーションモデルは 2.13.3 項に示すモデルを用いて、溶融層の形状は表 5.1.3-1 にまとめる。なお、どの溶融層に対しても壁面差温度は 5.1.1, 5.1.2 項と同様に 100 K で維持され、壁面差距離が変わる分温度勾配がモデルによって異なる。Case 2~6 の y 方向奥行き中心における溶融層内の流線及びベクトル分布を 1.2 s まで 0.1 s 毎にそれぞれ図 5.1.3-1 ~5.1.3-10 に示す。Case 1 の溶融層内の流線及びベクトル分布は 5.1.1 項に示すとおりである。

表 5.1.3-1 溶融層形状

	L [mm]	d [mm]	アスペクト 比 L/d	D [mm]	マランゴニ数 (Ma)	温度勾配 $\Delta T/L$ [K/mm]
Case 1	1.5	0.5	3	1.2	161	66.7
Case 2	2.25	0.75	3	1.8	241	44.4
Case 3	1.0	0.5	2	1.0	134	100
Case 4	1.5	0.75	2	1.5	201	66.7
Case 5	2.0	0.5	4	1.33	179	50
Case 6	3.0	0.75	4	2.0	268	33.3

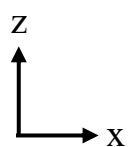
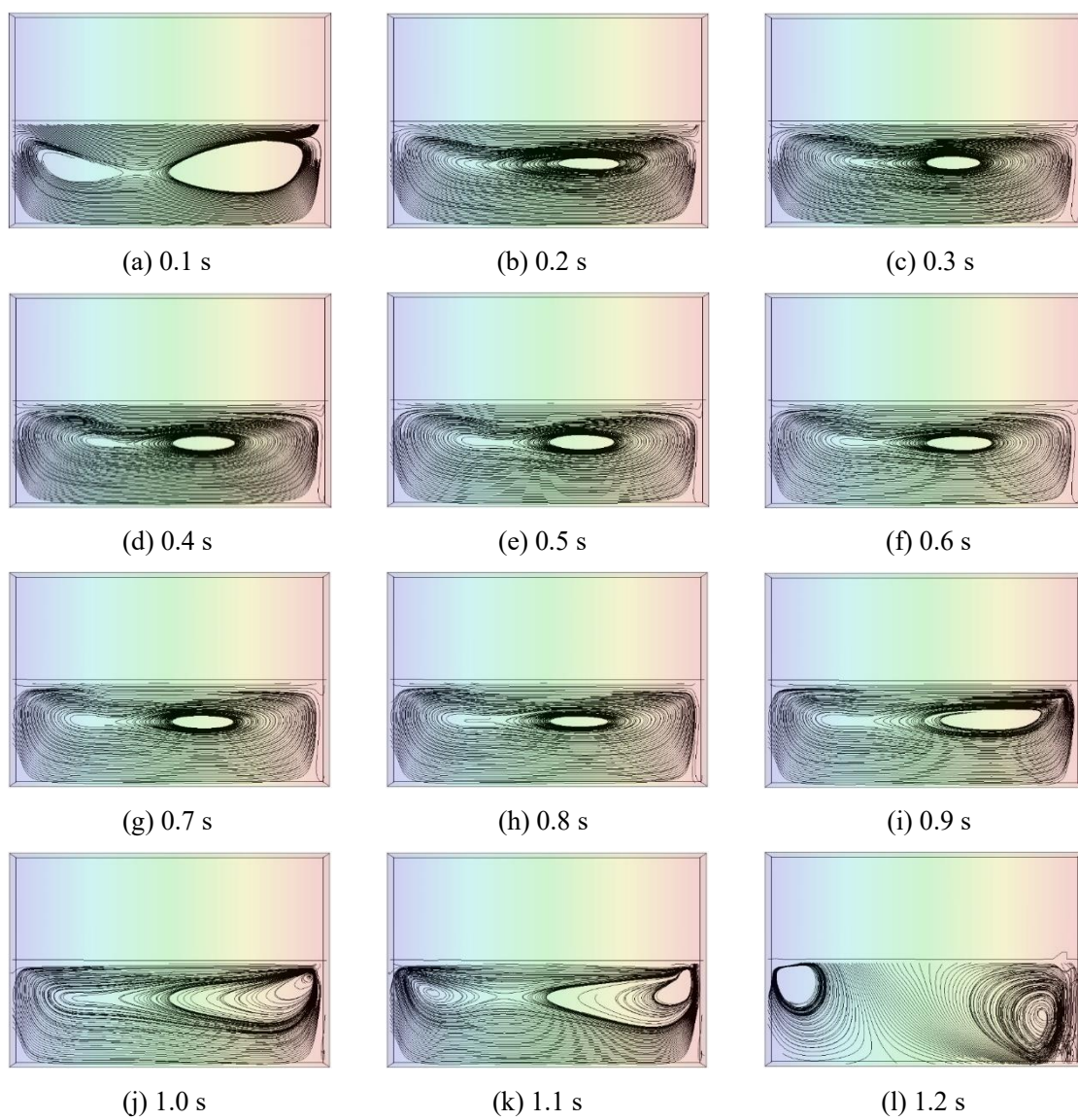


図 5.1.3-1 Case 2 ($L = 1.5\text{mm}$, $d = 0.5\text{ mm}$)における溶融層内の流線分布

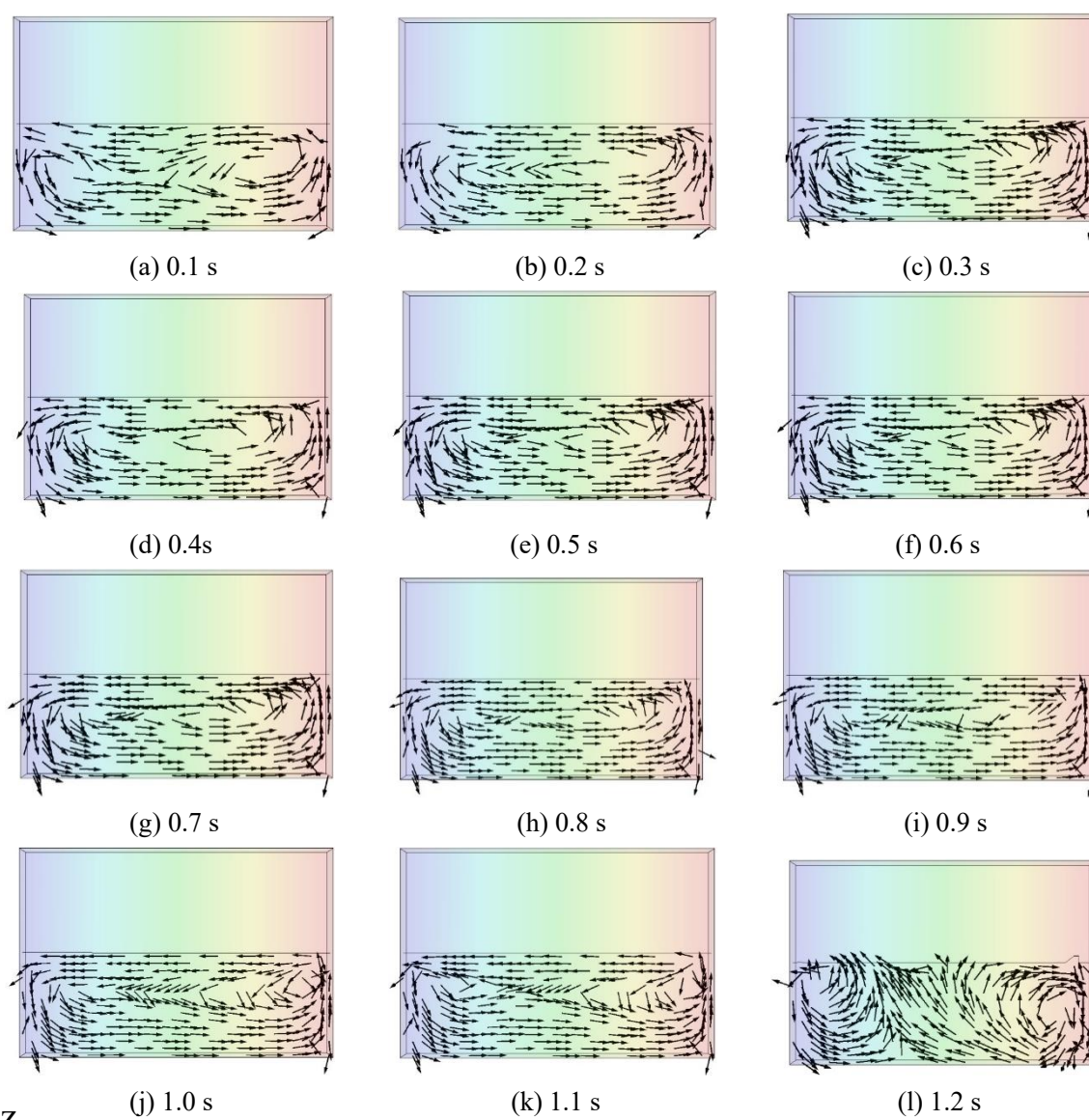


図 5.1.3-2 Case 2 ($L = 1.5\text{mm}$, $d = 0.5\text{ mm}$)における溶融層内のベクトル分布

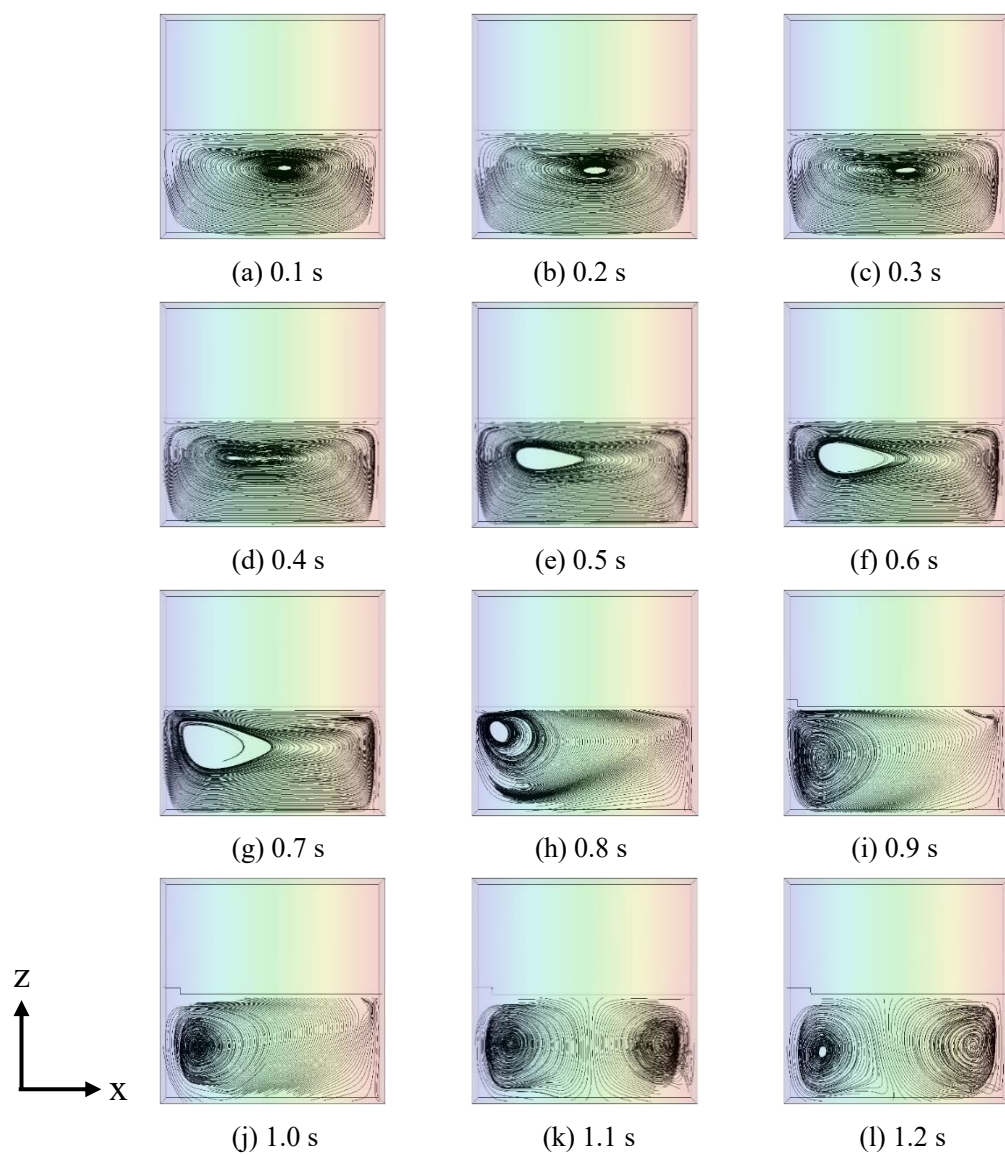


図 5.1.3-3 Case 3 ($L = 1.5\text{mm}$, $d = 0.5\text{ mm}$)における溶融層内の流線分布

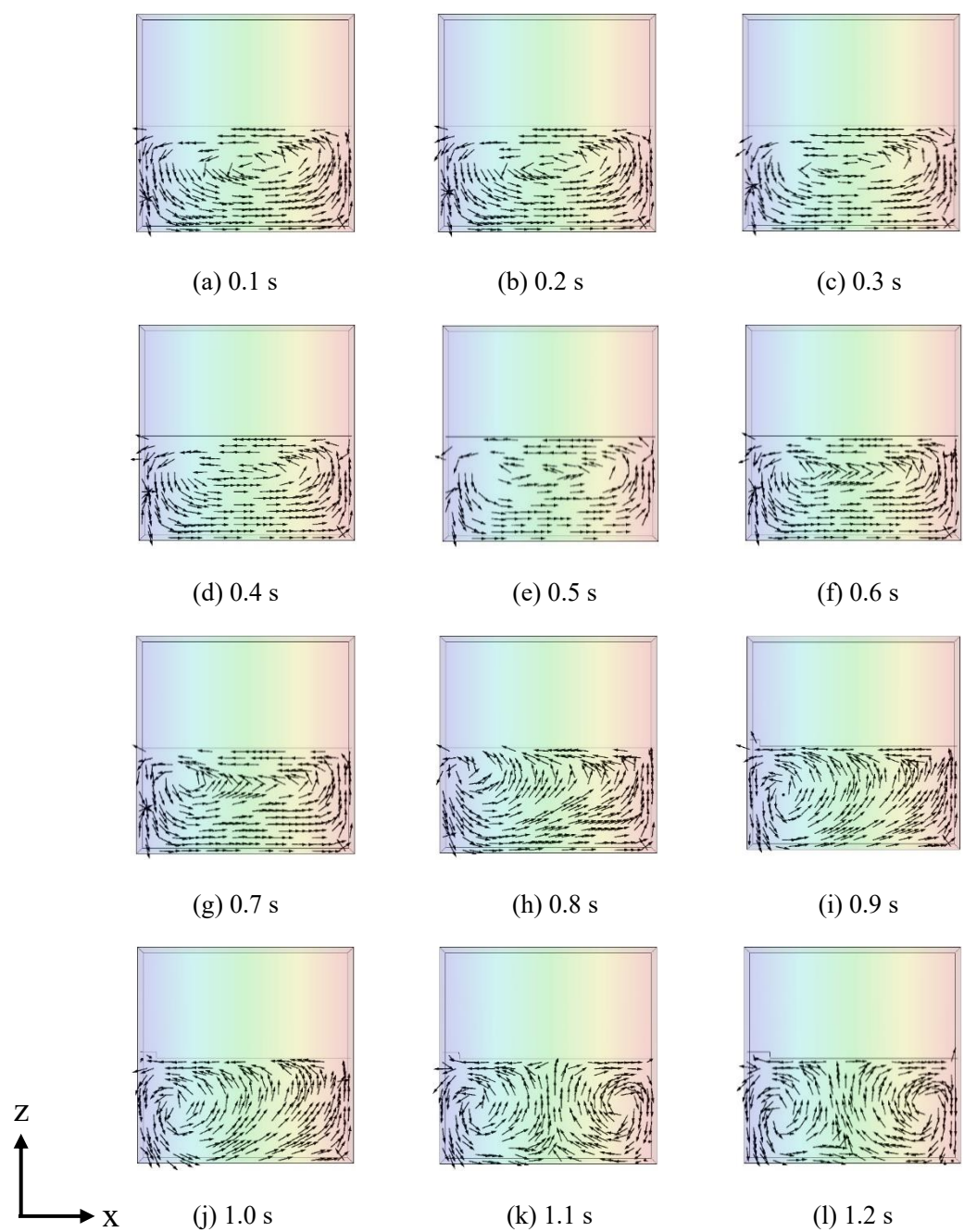
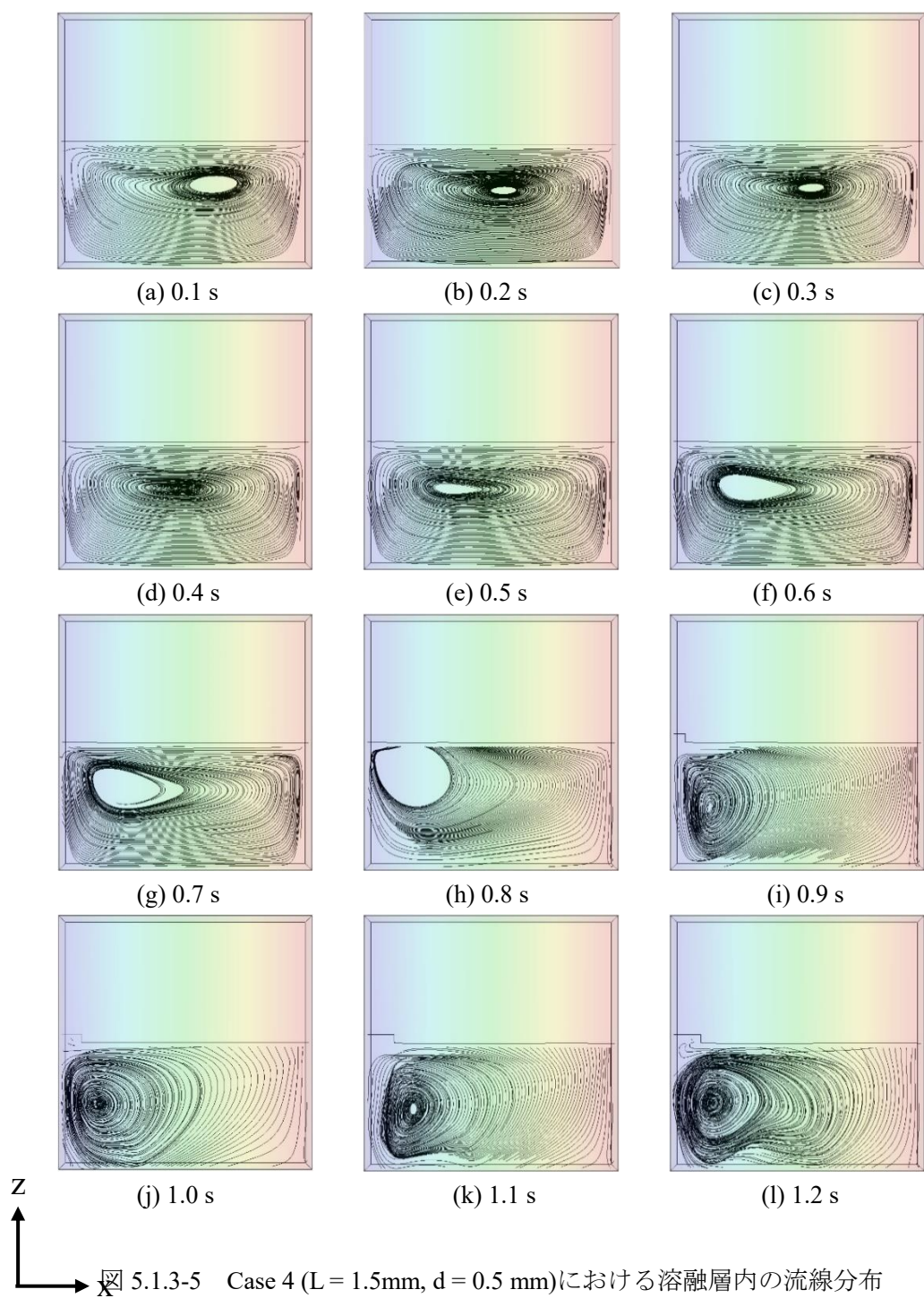
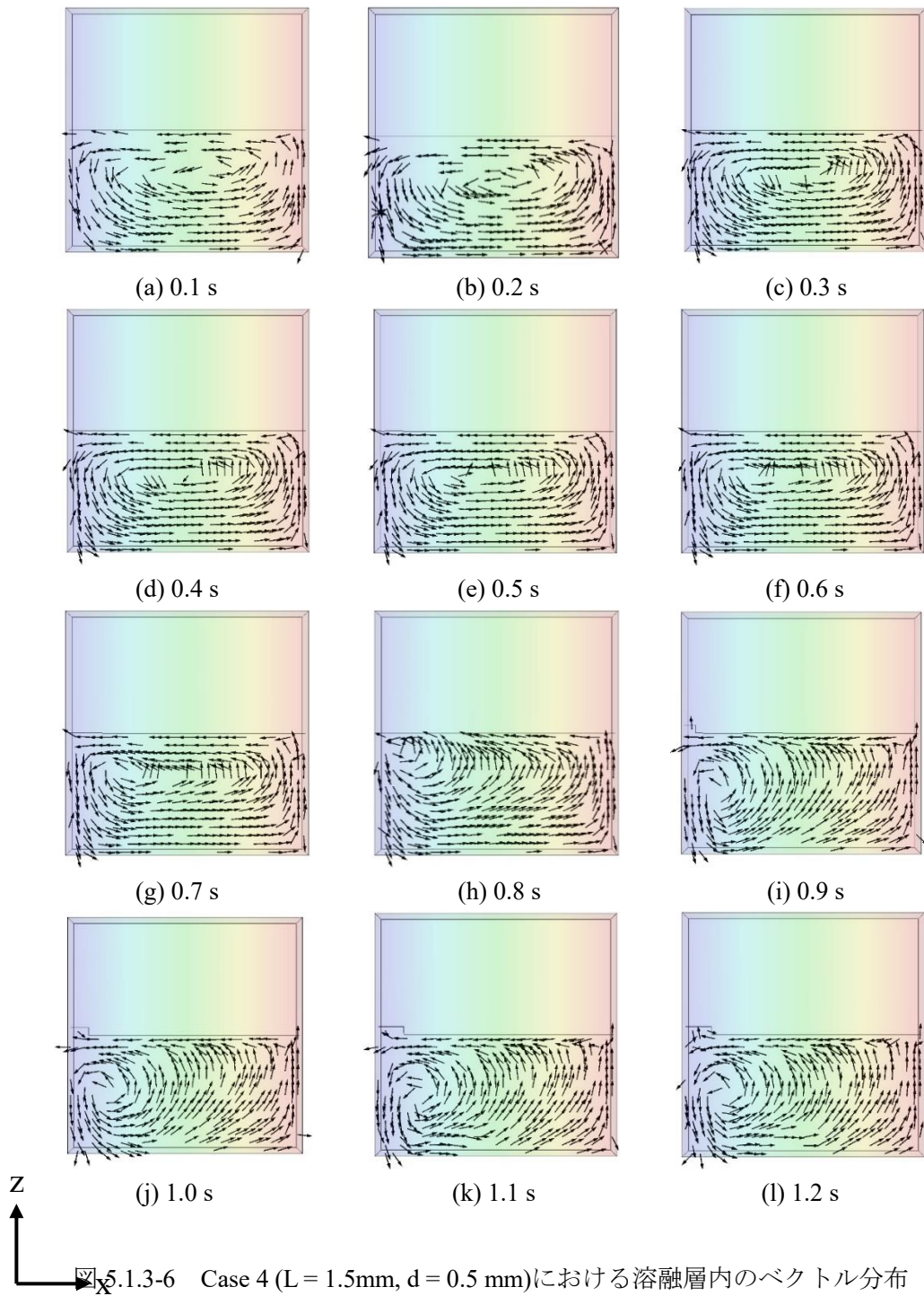


図 5.1.3-4 Case 3 ($L = 1.5\text{mm}$, $d = 0.5\text{ mm}$)における溶融層内のベクトル分布





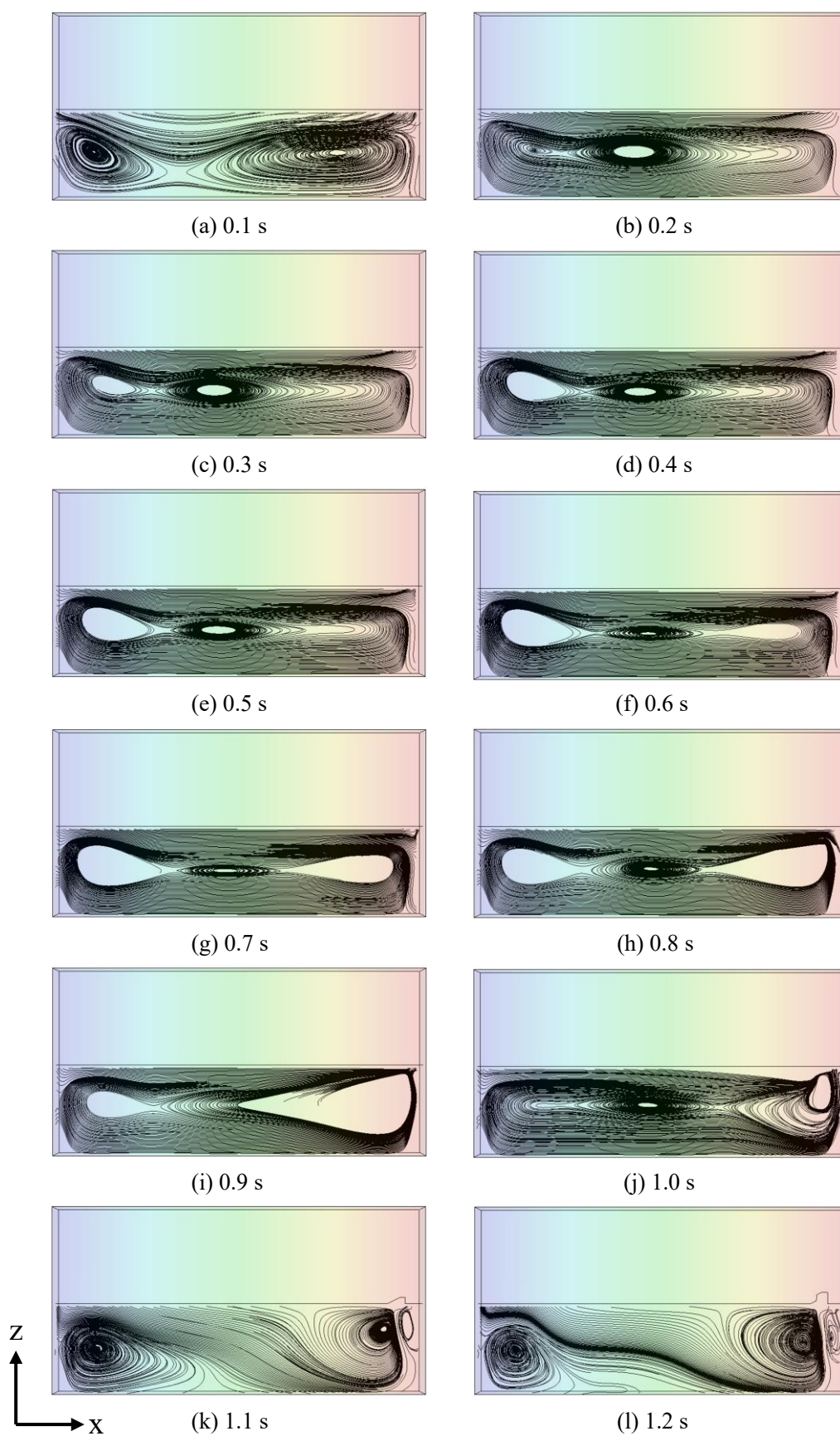


図 5.1.3-7 Case 5 ($L = 1.5\text{mm}$, $d = 0.5\text{ mm}$)における溶融層内の流線分布

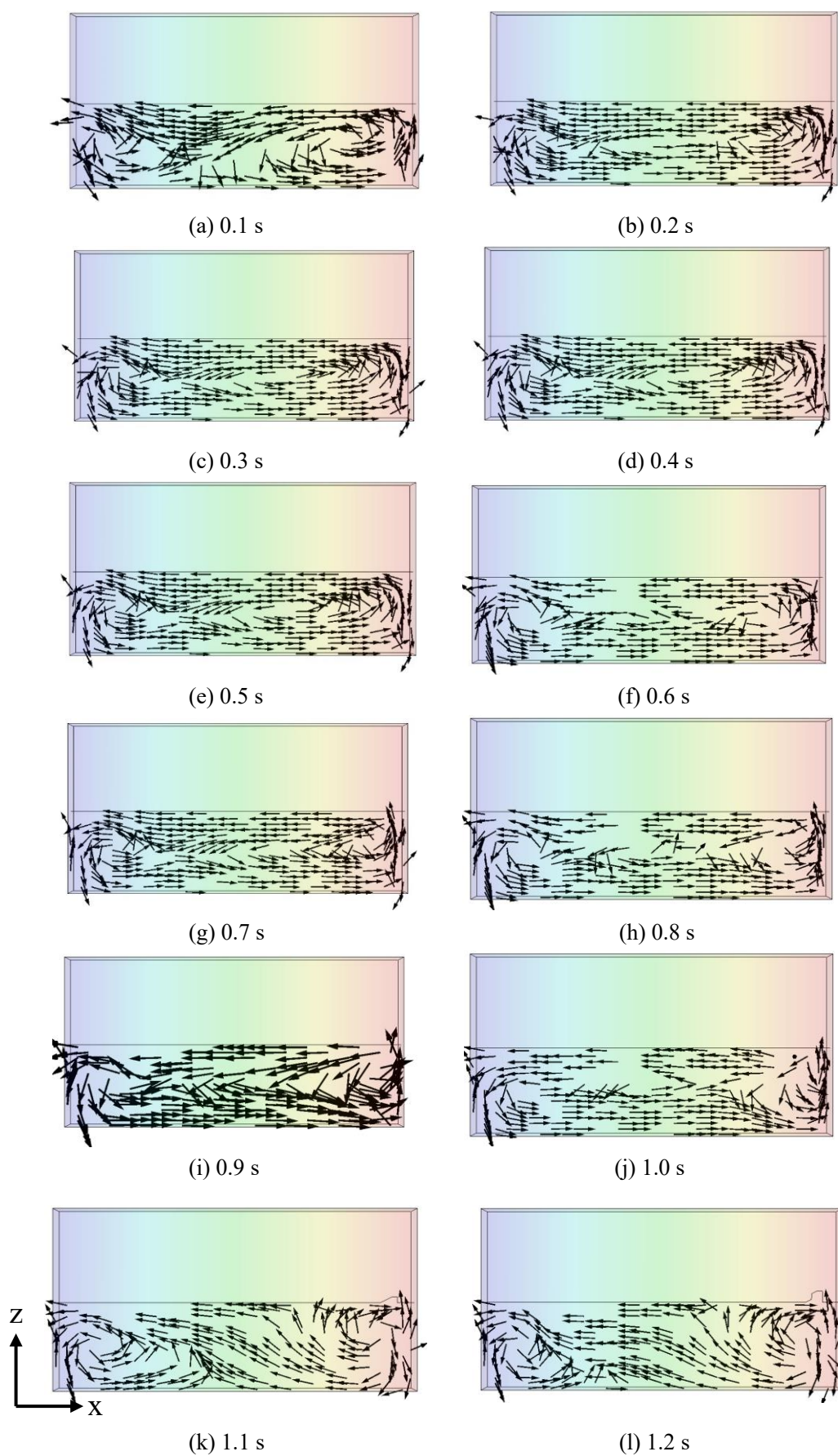


図 5.1.3-8 Case 5 ($L = 1.5\text{mm}$, $d = 0.5\text{ mm}$)における溶融層内のベクトル分布

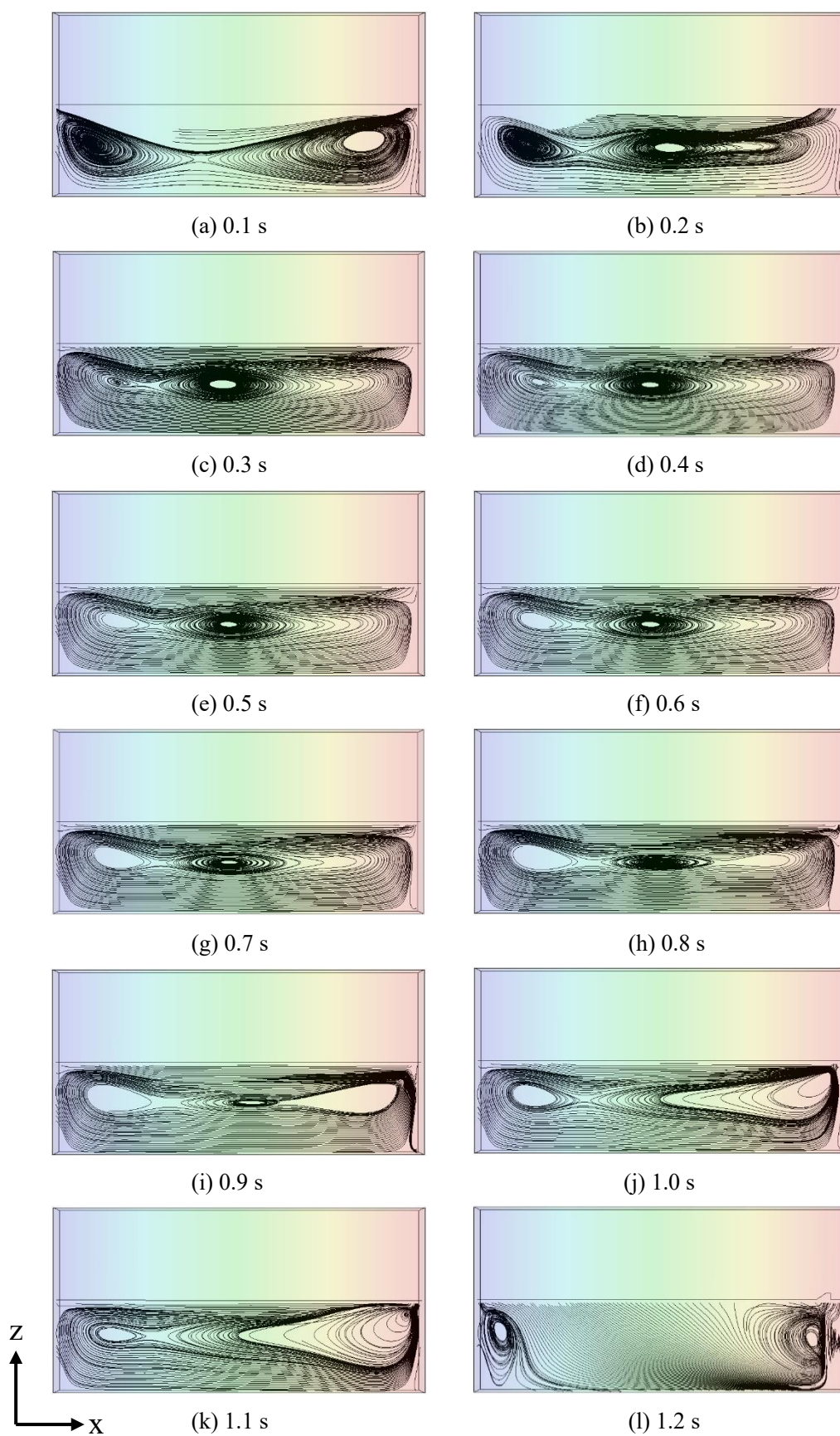


図 5.1.3-9 Case 6 ($L = 1.5\text{mm}$, $d = 0.5\text{ mm}$)における溶融層内の流線分布

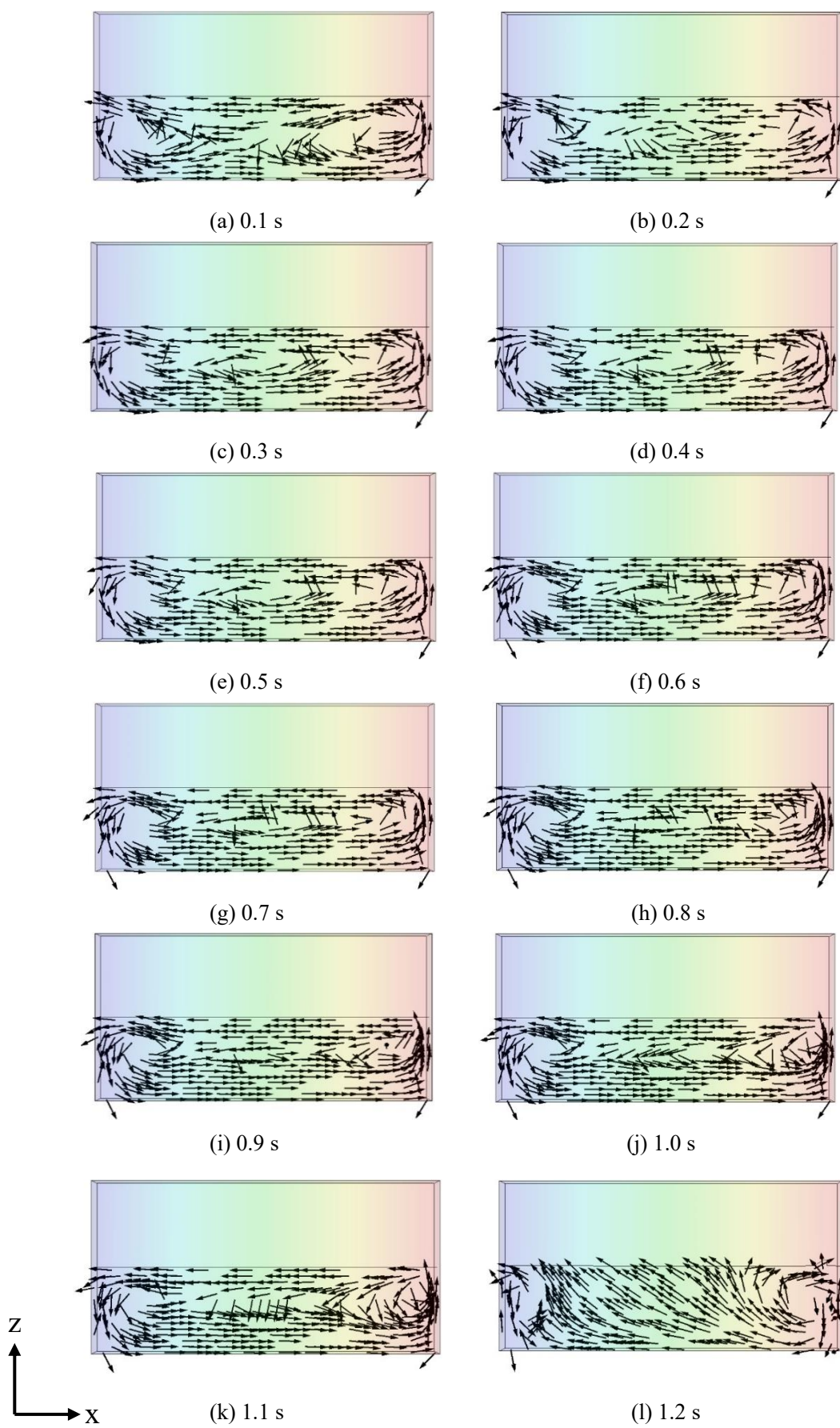


図 5.1.3-10 Case 6 ($L = 1.5\text{mm}$, $d = 0.5\text{ mm}$)における溶融層内のベクトル分布

case 1 における溶融層内の対流の発達過程は前節で述べたとおりであるが、図 5.1.3-1 ~ 10 から溶融層の形状によって内部対流の発達の様子が異なることが分かる。しかし、case 1 と case 2、case 3 と case 4、case 5 と case 6 はそれぞれ溶融層の大きさは異なるものの同じアスペクト比であり、アスペクト比が同じであれば内部対流の発達過程は同じ傾向となる。ゆえに、内部対流の発達過程は溶融層のアスペクト比に依存すると考えられる。図 5.1.1-1, 2 と図 5.1.3-1, 2 を比較すると、アスペクト比が 3 の case 1 及び case 2 では内部対流の発達過程は同じであるが、その発達速度は異なる。case 1 では 1.0 s 頃に双子渦が発生しているのに対して、case 2 では双子渦が発生するのは 1.2 s 頃である。この発達速度の違いはマランゴニ効果の強さによるものであり、case 1 は case 2 よりも壁面間距離が小さく温度勾配が大きいためマランゴニ効果が強く対流が早く発達した。図 5.1.3-3 ~ 6 からアスペクト比が 2 の case 3, 4 ではアスペクト比が 3 の case 1, 2 とは異なり、低温壁に近い方で先に渦が発生してから双子渦が発生する傾向となった。また、アスペクト比が 3 の形状と同様に、同じアスペクト比であれば温度勾配が大きくマランゴニ効果が強い方が内部対流の発達は早くなり、case 4 は 1.2 s 経過しても双子渦は形成されなかったが case 3 では 1.1 s 経過した時点で双子渦が発生した。アスペクト比が 4 の case 5, 6 に関しては、双子渦は形成されるものの溶融層内全体を双子渦が支配するわけではなく、両壁面近傍において双子渦が生じた。上記結果では 1.2 s までの結果であるが、より長時間温度勾配が負荷されると、溶融層内の渦は 3 つ以上形成される可能性もある。以上より、本モデルのような一方向の温度勾配が一樣に付加され続ける場合の溶融層に対して、アスペクト比が 3 以下の場合には双子渦によって溶融層内全体が支配される一方で、アスペクト比が 4 以上の場合には両壁面近傍において双子渦が形成され、より長時間の負荷により 3 つ以上の渦が形成される可能性があると考えられる。図 1.2.6-2, 3 で示されるように、実機におけるダイバータは内部の冷却管によって除熱する機構を持つ。この除熱機構を本モデルに当てはめると、モデル下部が低温部となる。つまり、実機条件では溶融層内の温度勾配は表面に平行ではなく、深さ方向に対しても温度勾配の分布を持つこととなる。本条件については、例えばモデル下部を溶融層よりも低い温度での固定壁に設定することで考慮することは可能である。なお、この設定をした場合のシミュレーション結果については、低温部では溶融タングステンの粘性が上がるため、内部対流の発達は本研究のモデルよりも緩やかになり、表面変動も起こりにくくなると考えられる。

溶融層の幅と液深のアスペクト比が対流速度に与える影響を確認するために、各ケースの表面流速について述べる。case 1 ~ 6 の y 方向中心の断面における表面流速の x 成分を 0.2 s 毎に図 5.1.3-11 ~ 16 に示す。横軸は規格化した x 座標、縦軸は表面流速の各成分を示す。アスペクト比に対する表面平均流速の比較結果例として 0.6 s 時点の各ケースの表面流速を図 5.1.3-17 に示す。

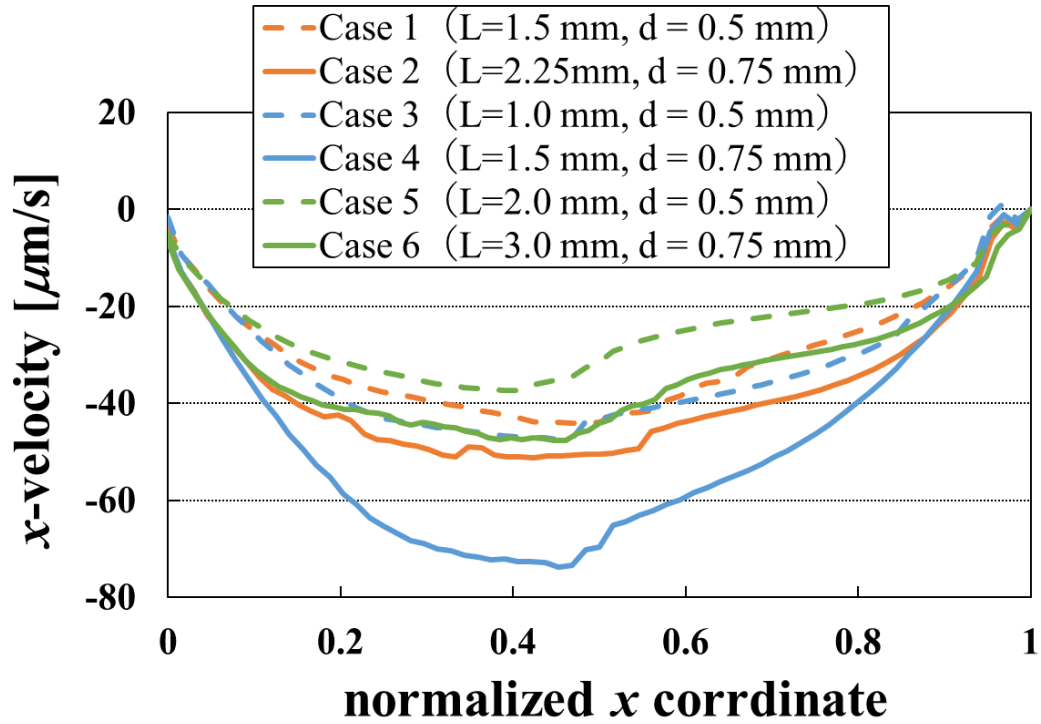


図 5.1.3-11 表面流速の x 成分 (0.2 s)

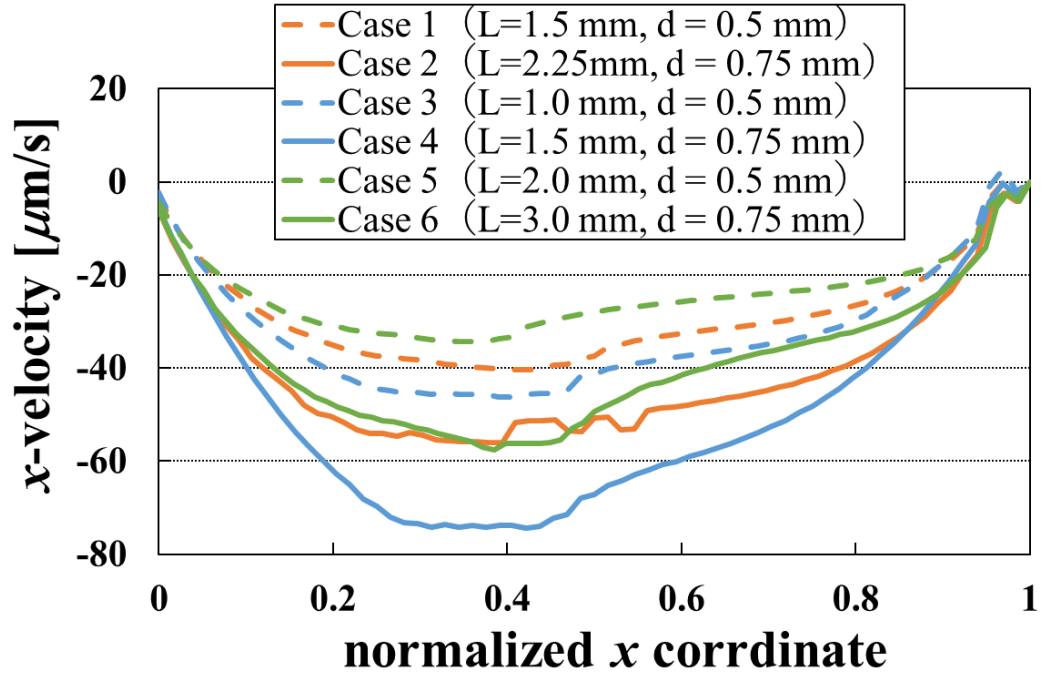


図 5.1.3-12 表面流速の x 成分 (0.4 s)

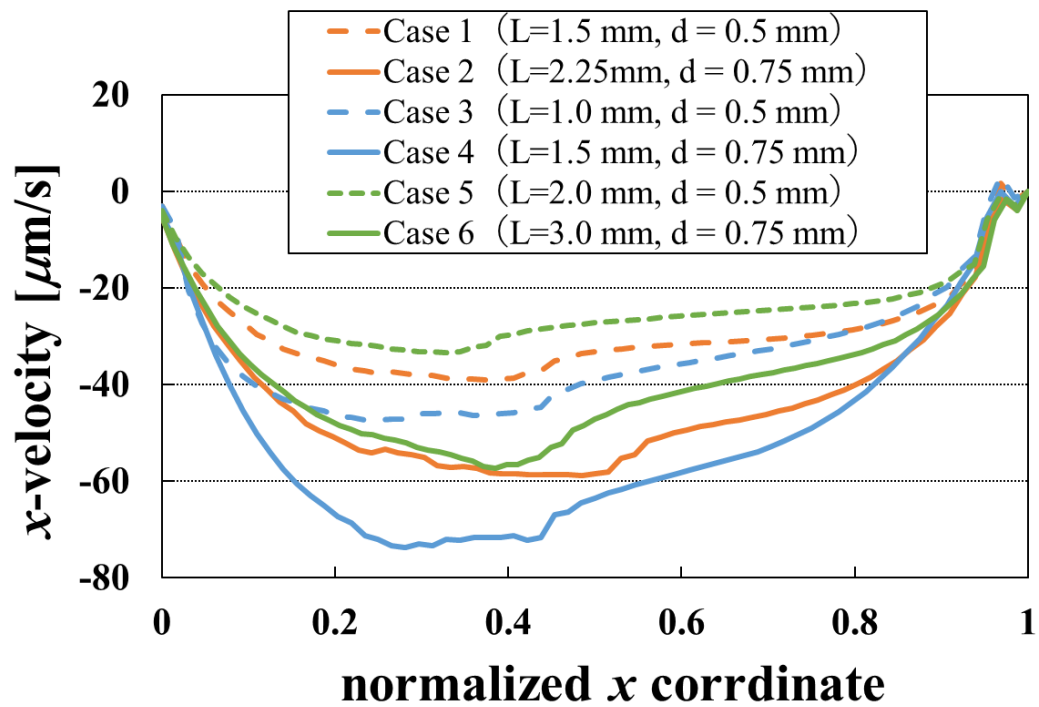


図 5.1.3-13 表面流速の x 成分 (0.6 s)

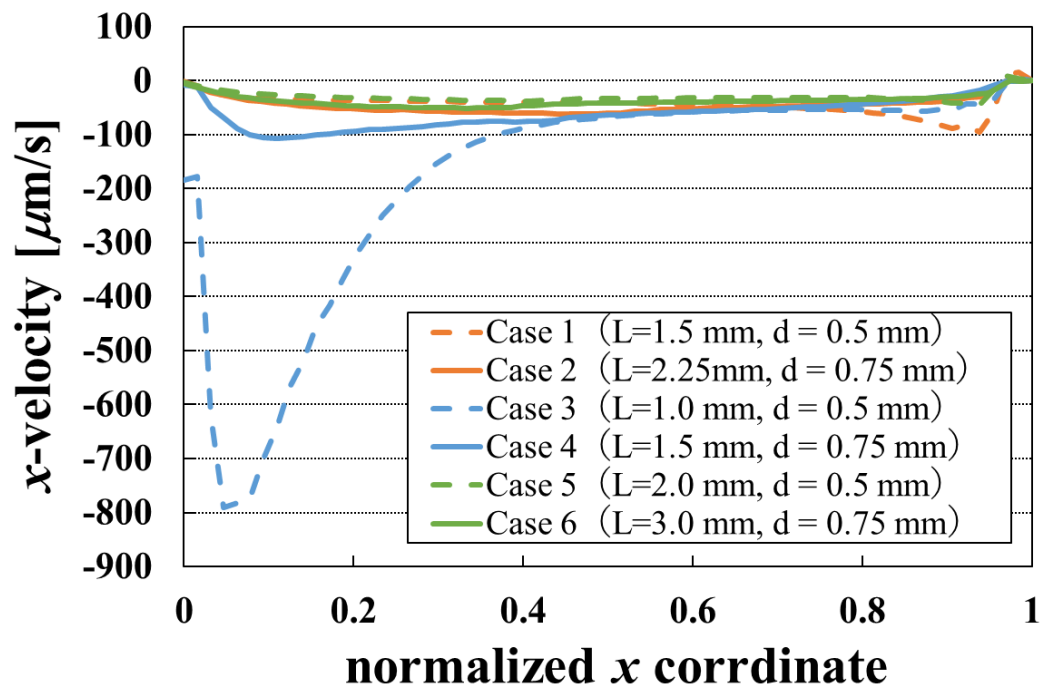


図 5.1.3-14 表面流速の x 成分 (0.8 s)

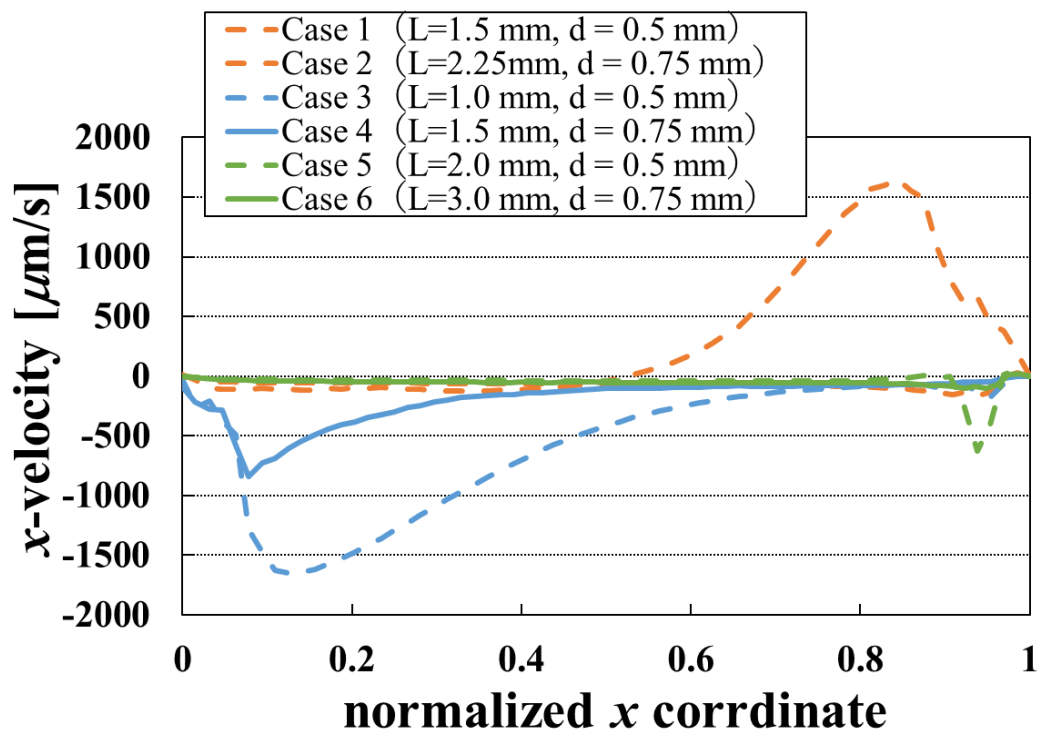


図 5.1.3-15 表面流速の x 成分 (1.0 s)

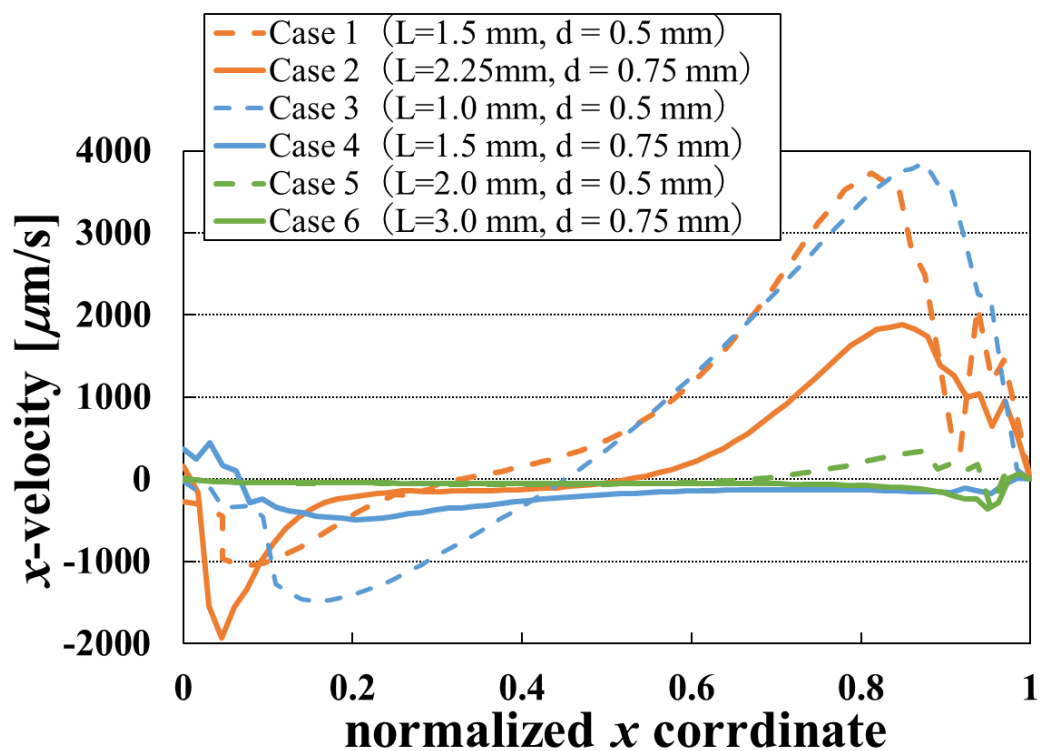


図 5.1.3-16 表面流速の x 成分 (1.2 s)

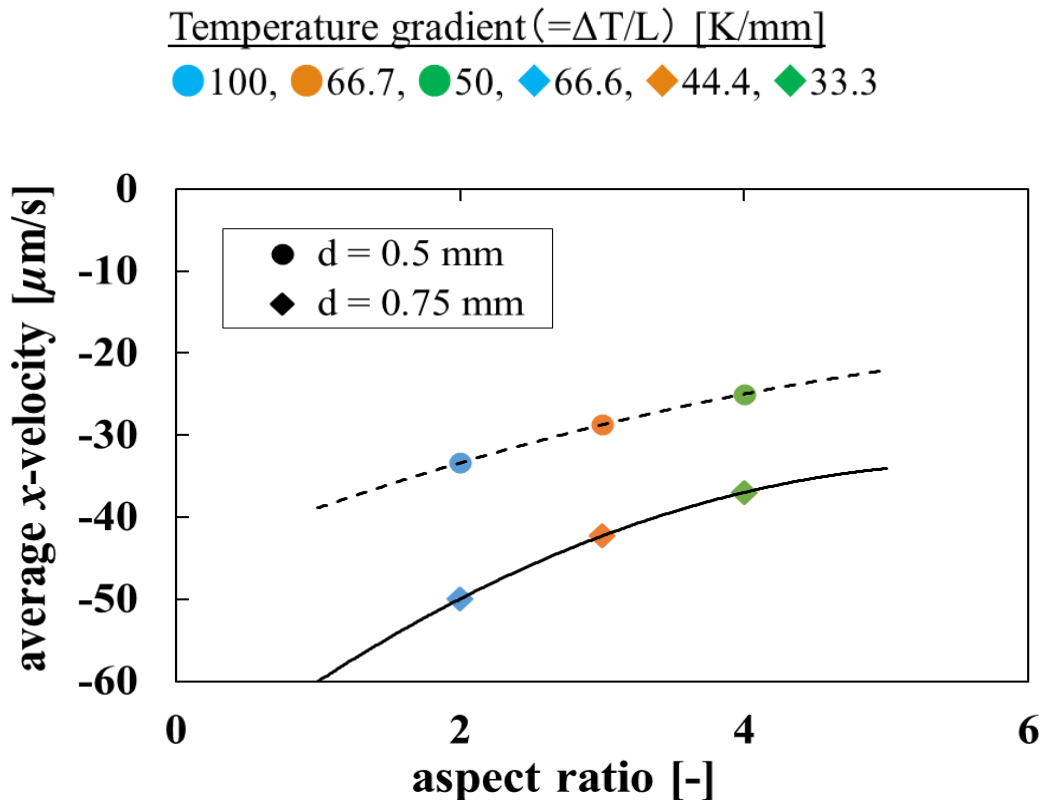


図 5.1.3-17 アスペクト比に対する表面平均流速 (x 成分)

図 5.1.3-11 ~ 16 から、表面流速の x 成分は各 case でそれぞれ異なる分布となり、熔融層の形状によって表面流速の発達の様子が異なることが分かる。対流の発達の初期段階である 0.6 s までは表面流速の大きさは壁面近傍で局所的に逆転しているところもあるが、概ね case 4 > case 2 > case 6 > case 3 > case 1 > case 5 の傾向となった。熔融層の幅に関しては case 4 > case 2 > case 6 かつ case 3 > case 1 > case 5 であり、熔融層の幅が小さい方が表面流速は大きくなっており、温度勾配が大きくマランゴニ効果の強さが表面流速に表れている。液深に関しては、case 2, 4, 6 の液深は 0.75 mm、case 1, 3, 5 の液深は 0.5 mm であることから、液深が大きいほど表面流速は大きくなる。したがって、液深が大きい、つまりアスペクト比が小さいほど流速が大きくなる傾向にあり、熔融層の幅よりも液深の方が対流に与える影響が大きくなるという結果が得られた。図 5.1.3-14 から 0.8 s 経過時には case 3 において表面流速が急激に大きくなっているが、これは低温壁面側で渦が発生したことによるものであり図 5.1.3-3, 4 からその渦が発生している様子が見て取れる。また、図 5.1.3-15 から、case 1, 4, 5 も表面流速が大きくなっているが、これらも渦が発生したことによることが図 5.1.1-1, 2 及び図 5.1.3-6, 7, 8, 9 から分かる。図 5.1.3-16 から、最終的に 1.2 s 経過時には特に高温壁面側で表面流速が大きくなっているものの、アスペクト比が 4 の case 5, 6 においては表面流速は比較的小さいままであった。熔融層のサイズに対する表面流速の関係をまとめたものが図 5.1.3-17 である。熔融層が深いほど流速は大きくなり、アスペクト比が小さい、つまり温度勾配が大きいほど流速は大きくなる傾向にあることが分かる。

図 5.1.3-18 に実機で生じる溶融層のイメージ図を示す。本項で対象とした溶融層サイズは、実験で模擬した熱負荷径 0.6 mm で生じる溶融層に近い実験的なスケールを対象としているが、実機では実験より広範囲に熱負荷を受けるため、溶融層のアスペクト比は実験もより大きくなると考えられる。本項結果を考慮すると、アスペクト比が大きいほど溶融層内に生じる対流は弱くなる傾向にあるため、実機においてはアスペクト比が大きく対流は弱くなる傾向になることが予測される。また、図 5.1.3-18 のように、実機では W モノブロックを貫通する冷却配管の除熱により、溶融層は底面から冷却されることになる。従って、溶融層底面の温度は表面よりも低くなるため、溶融層には 3 次元的な温度分布が生じることになり、流れ場はより複雑になる可能性があるとして予測される。

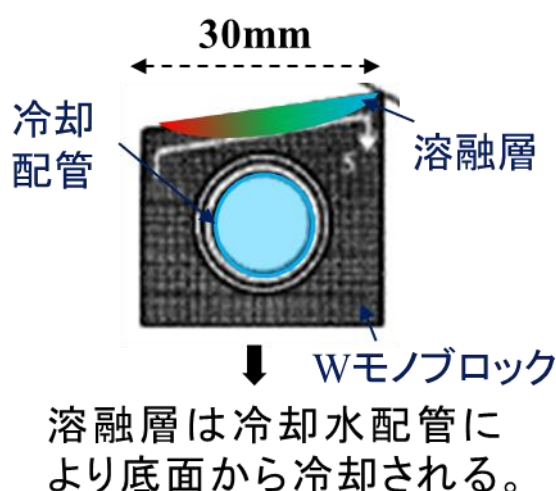


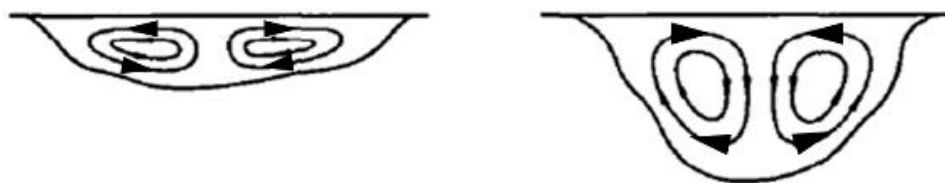
図 5.1.3-18 実機での溶融層イメージ

5.2 局所過熱シミュレーション

5.2.1 局所加熱を受ける溶融層内の対流

Tsotridis ら^[1-45]は、溶融状態の物質が高熱負荷を受けた時の溶融層内の対流についての解析を行った。この解析では表面張力を境界条件として設定しており自由表面は考慮されていないが、物質の表面張力の温度係数の正負によって溶融層内の対流の向きが変わることが明らかにされた。図 5.2.1-1 に Tsotridis らによる溶融層内の対流の模式図を示す。表面中心に高熱負荷がかかり、温度は中心で最も高く周辺に近づくにつれて低くなる。表面張力が負の場合には温度が低いほど表面張力は大きくなるため、図 5.2.1-1(a)のように表面では中心から周辺に向かってマランゴニ効果が働く。ゆえに、表面では中心から周辺の向きへ、底部では逆向きの流れが生じる。したがって、表面張力が負の物質では高熱負荷によって上昇した温度は対流によって周辺領域へ伝わりやすく、広く浅い溶融層となる傾向とある。一方で、正の表面張力の温度係数の物質に対して、表面に働くマランゴニ効果は逆向きとなるため、図 5.2.1-

1(b)のような流れとなり、深く狭い溶融層となる傾向にある。溶融 W は負の表面張力の温度係数を持つために、高熱負荷によるマランゴニ効果によって生じる溶融層内の対流は図 5.2.1-1(a)のような流れとなる。



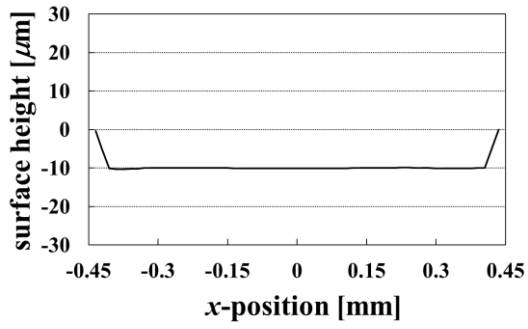
(a) 温度係数が負の物質内の対流

(b) 温度係数が負の物質内の対流

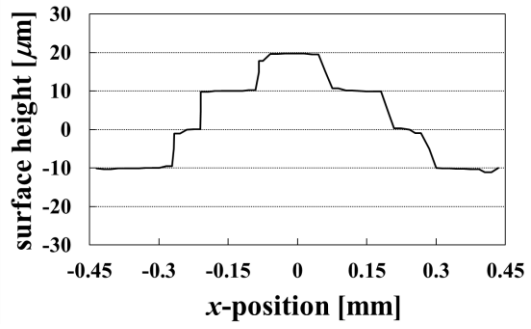
図 5.2.1-1 溶融層内の対流の模式図^[1-45]

5.2.2 溶融層内の対流及びそれに伴う表面変動

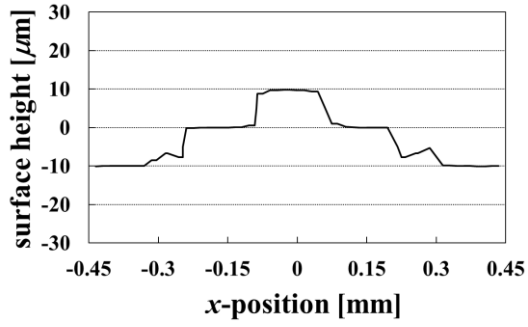
2.13.4-1 項に示すシミュレーションモデルにて、溶融状態中のタンゲステンに高熱負荷を与えた時の溶融層内の流動の評価を本項にて述べる。熱負荷条件は ELM やディスラプションを想定した熱負荷照射実験のレーザーパラメータに合わせて、熱負荷径 0.6 mm、熱負荷フラックス 3.3 GW/m²、パルス幅 3.0 ms とする。y 方向中心の xz 断面における溶融層の断面のプロファイルを計算開始から 40 ms まで 5 ms 毎に図 5.2.2-1 に示す。横軸は中心からの x 方向（熱負荷の径方向）の距離、縦軸は初期の溶融層表面の位置を 0 とした表面の高さである。図 5.2.2-1 と同時刻の溶融層内の流線分布及びベクトル分布を図 5.2.2-2 に示す。また、溶融層の表面中心における温度の時系列変化を図 5.2.2-3 に、溶融層表面中心の高さ及び表面流速の z 成分の時系列変化を図 5.2.2-4 に示す。



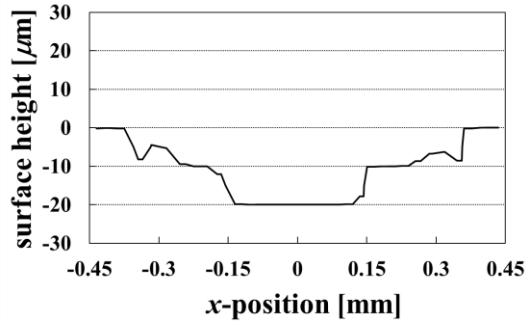
(a) 5 ms



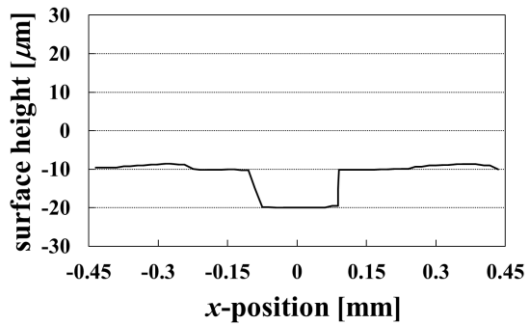
(b) 10 ms



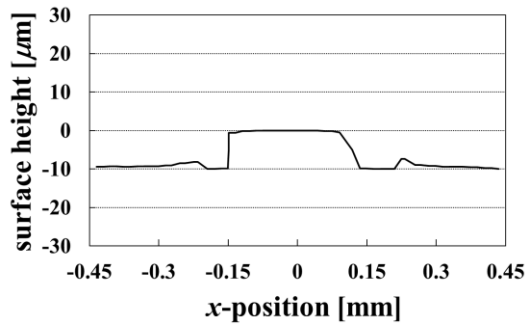
(c) 15 ms



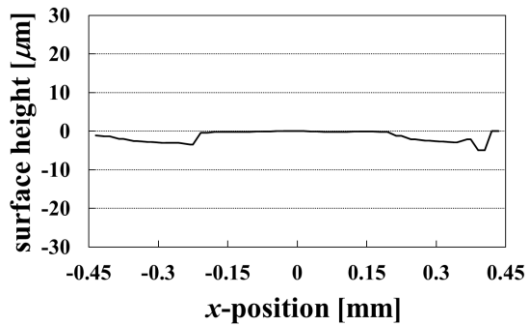
(d) 20 ms



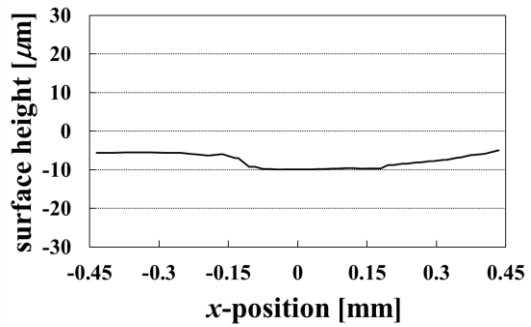
(e) 25 ms



(f) 30 ms

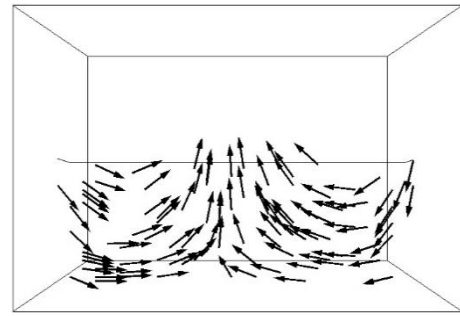
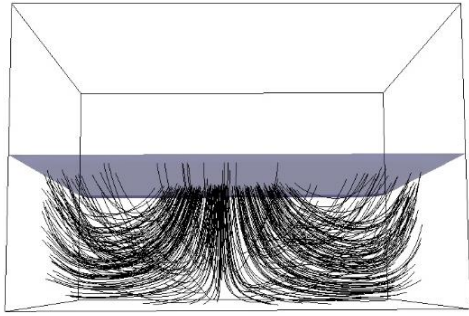


(g) 35 ms

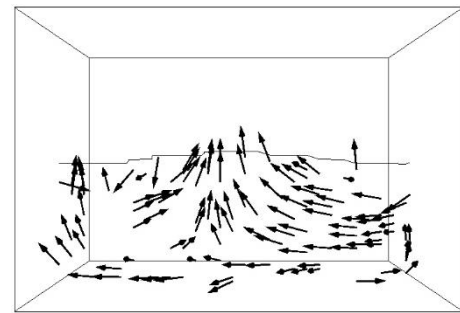
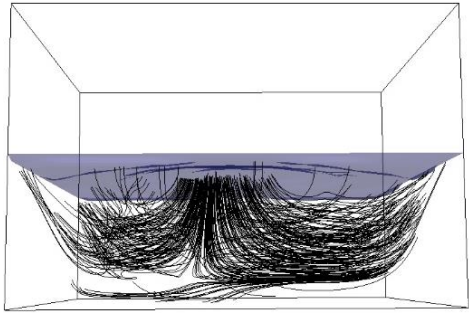


(h) 40 ms

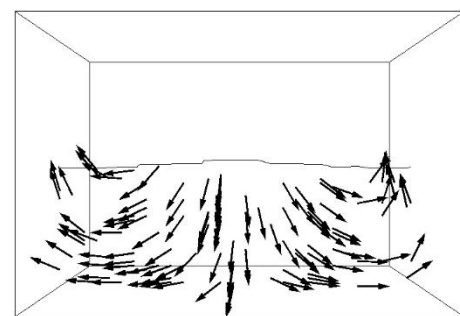
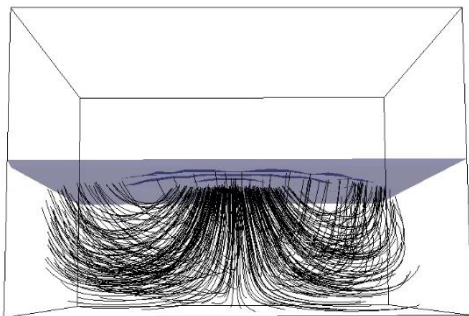
図 5.2.2-1 溶融層の断面プロファイル



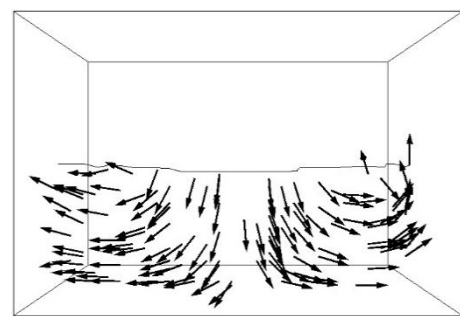
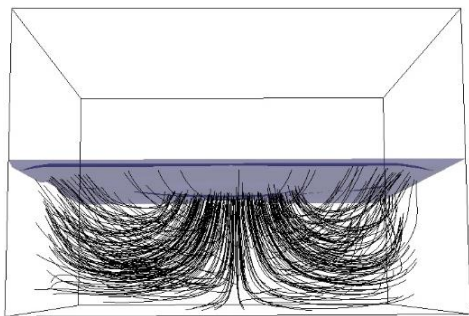
(a) 5 ms



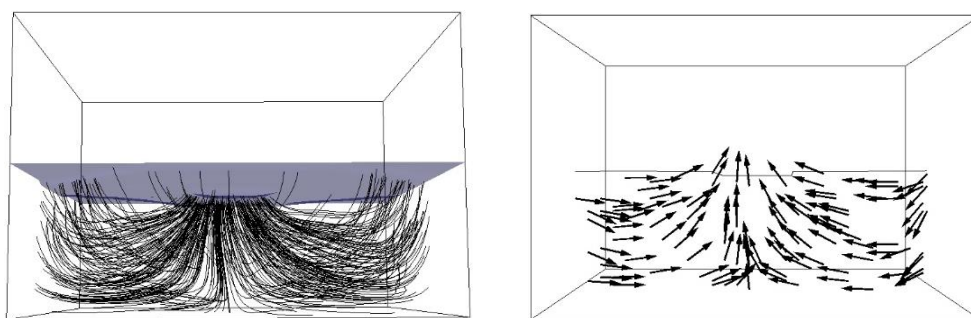
(b) 10 ms



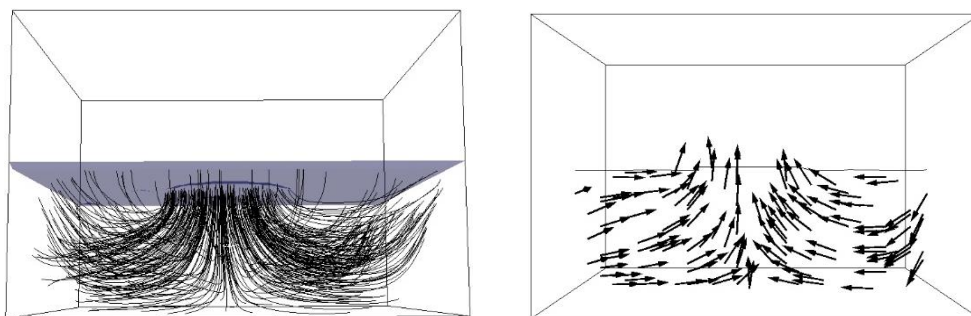
(c) 15 ms



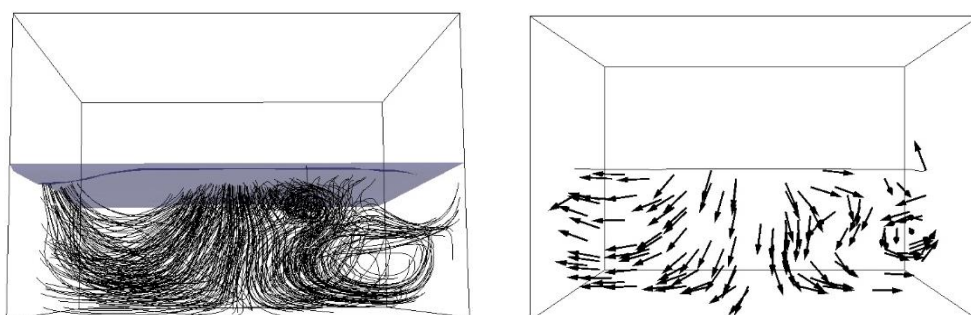
(d) 20 ms



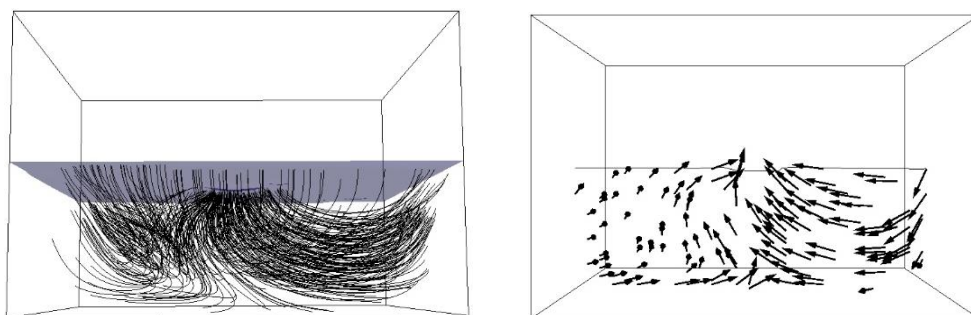
(e) 25 ms



(f) 30 ms



(g) 35 ms



(h) 40 ms

図 5.2.2-2 溶融層内の流線分布及びベクトル分布

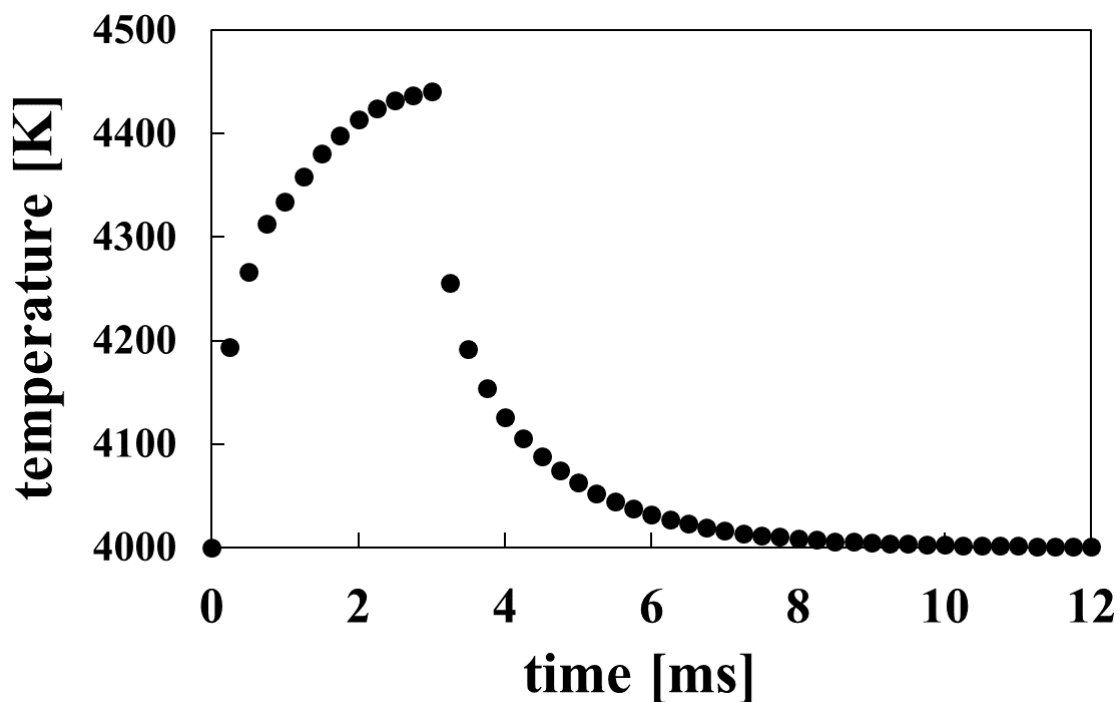


図 5.2.2-3 溶融層表面の温度変化

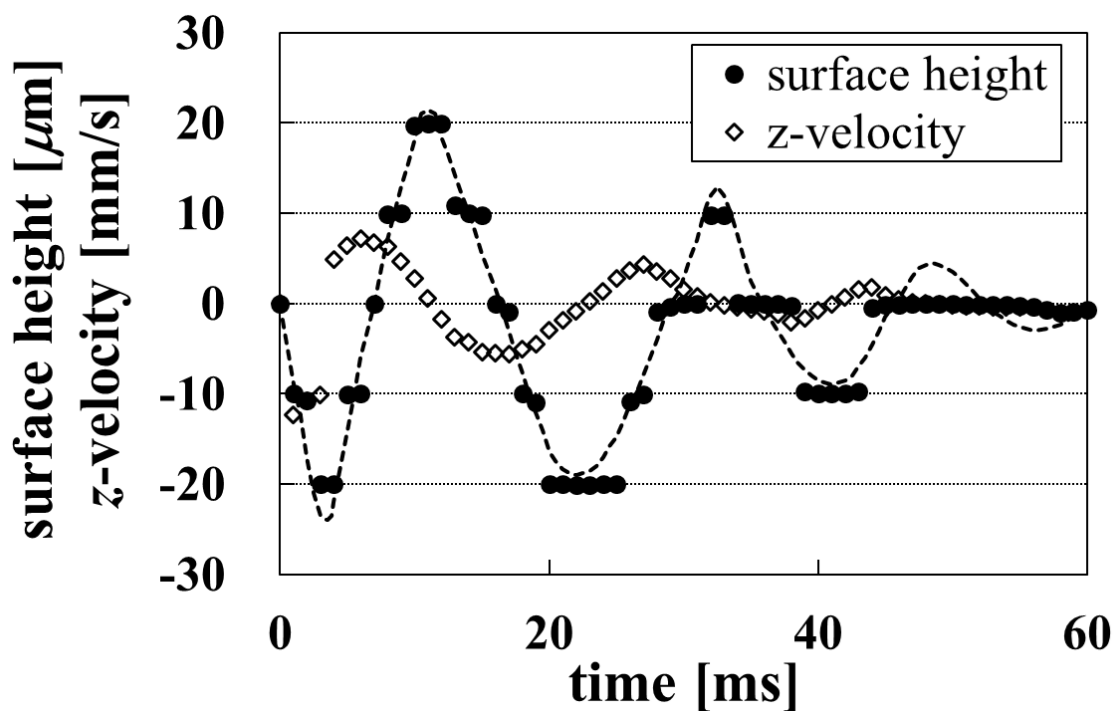


図 5.2.2-4 溶融層表面の高さ及び z 方向速度の時間変化

図 5.2.2-1 及び 5.2.2-4 から、溶融層表面の温度差に起因する表面張力を駆動力とするマランゴニ効果によって溶融層内部の対流が生じ、結果として溶融層表面が時間と共に変動する様子が分かる。溶融層の温度は高熱負荷領域の中心の表面において最大となり、この中心点における温度は図 5.2.2-3 に示されるように変化する。溶融 W は温度が低いほど表面張力が大

きくなるため、熔融層表面ではマランゴニ効果によって中心から周囲に向かって放射状に駆動力が働く。対流は境界付近で底面へ流れた後、中心付近で表面に向かって流れる。図 5.2.2-2(a)及び図 5.2.2-4 において、熱負荷終了後には中心付近で鉛直上向きの流れが生じており、このような内部対流によって熔融層表面が変動する。z 方向の表面速度成分の最大は約 8 mm/s、表面変動の最大は 19.94 $\mu\text{m/s}$ となるが、高熱負荷終了後には急激に温度は下がり 7 ms 経つと最大温度は境界と同じ 4000 K まで低下し熔融層内の温度は均一となるため、これ以降マランゴニ効果は生じなくなる。マランゴニ効果が無くなった後は、重力によって均一な表面形状に戻ろうとして表面変動は時間経過とともに減衰する。本シミュレーションでは z 方向のメッシュ幅は 10 μm であり、これより小さな変動については捉えることができない。ゆえに、図 5.2.4-4 における変動振幅は 10 μm 毎にプロットされているが、実際は破線のような正弦波でよく近似できる挙動で変動することが予想される。この正弦波の周期について考える。周期を変動振幅から算出しようとするするとメッシュ幅を速度で割った時間の誤差が含まれてしまう。そこで、変動周期は速度から算出することとし、速度の極大値間の時間を表面変動の周期とした。図 5.2.4-2 から、6.25 ms 及び 26.25 ms で速度は極大値となり、本条件における変動周期は 20 ms となった。

本シミュレーションでは、熔融 W のすべての境界を 4000 K の固定温度条件に設定し、W が熔融状態を維持するようなモデルとしている。実際には、熔融層の周囲は固体の W であり、熔融層よりも低温であるため温度勾配は大きくなる。従って、マランゴニ効果による駆動力は本シミュレーションよりも強くなると考えられる。また、熔融 W から固体 W への熱伝達により実際は熔融 W は周囲から凝固し、温度勾配がさらに大きくなりマランゴニ効果によってさらに内部対流が強くなり、表面中心における変動はより大きくなると考えられる。以上より、井上らの実験^[1-35]における照射領域中心での W が膨らんだ形状となるのはマランゴニ効果が原因となると考えられる。

5.2.3 熱負荷パラメータに対する依存性

本項では、熱負荷フラックスとパルス幅をパラメータとして異なる熱負荷を熔融 W に与えるシミュレーションを実施し、熔融 W に対する熱負荷フラックスとパルス幅の影響を述べる。シミュレーションモデルは 5.2.2 項のシミュレーションと同様に、2.13.4-1 項に示すモデルを使用した。熱負荷条件として、パルス幅を 3 ms に固定し熱負荷フラックス 1.0~4.5 GW/m^2 で変化させたときの最大温度と熔融層表面中心の最大変動幅を図 5.2.3-1 に示す。また、熱負荷フラックスを 3.0 GW/m^2 に固定しパルス幅を 1.0~5.0 ms に変化させたときの最大温度と熔融層表面中心の最大変動幅を図 5.2.3-2 に示す。また、表面中心における変動周期と熱負荷のエネルギーの関係を図 5.2.3-3 に示す。ここで、横軸の熱負荷の総エネルギーは[J] (= 熱負荷フラックス [W/m^2] × 負荷領域 [m^2] × パルス幅 [s]) で定義し、縦軸は変動周波数 [Hz] とし、5.2.2 項で定義した速度の極大値間の時間である周期 [s] の逆数から求める。さらに、表面中心における最大速度と温度勾配の関係を図 5.2.3-4 に示す。ここでの温度勾配は表面中心の最高温度と境界温度 4000 K の差をその距離で割った数値とした。

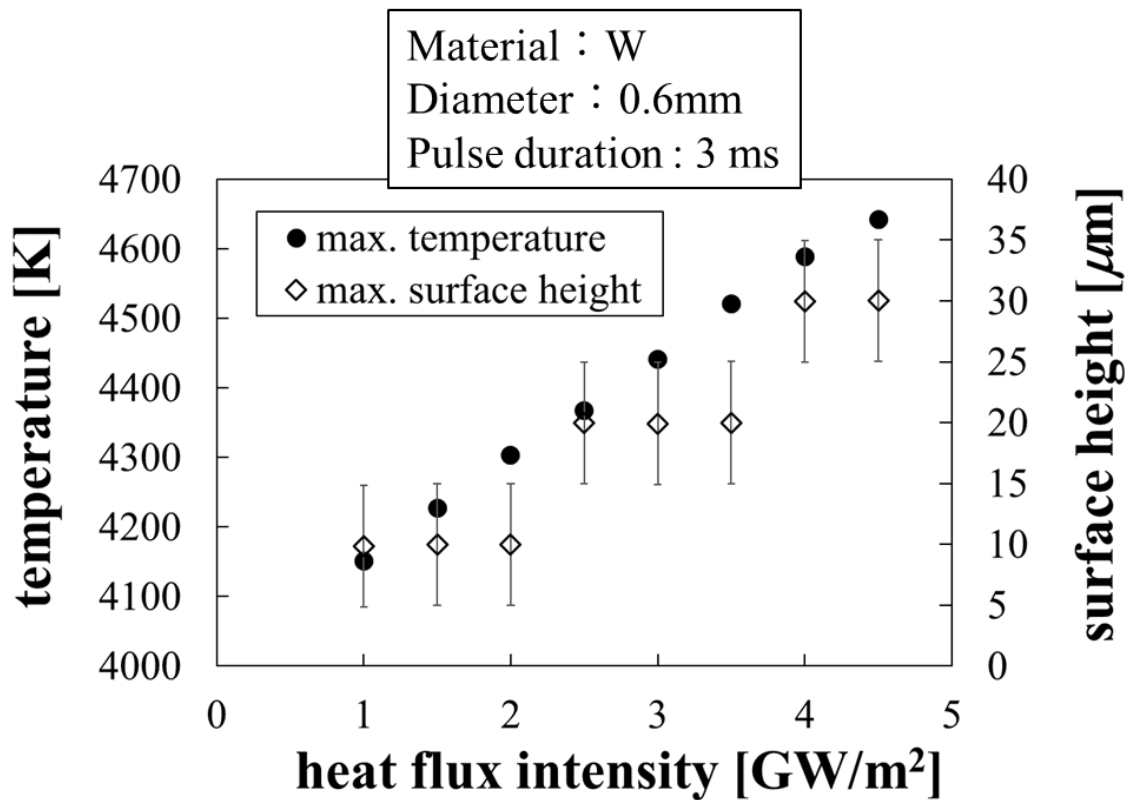


図 5.2.3-1 熱負荷フラックスに対する最大温度及び溶融層表面の最大変動幅

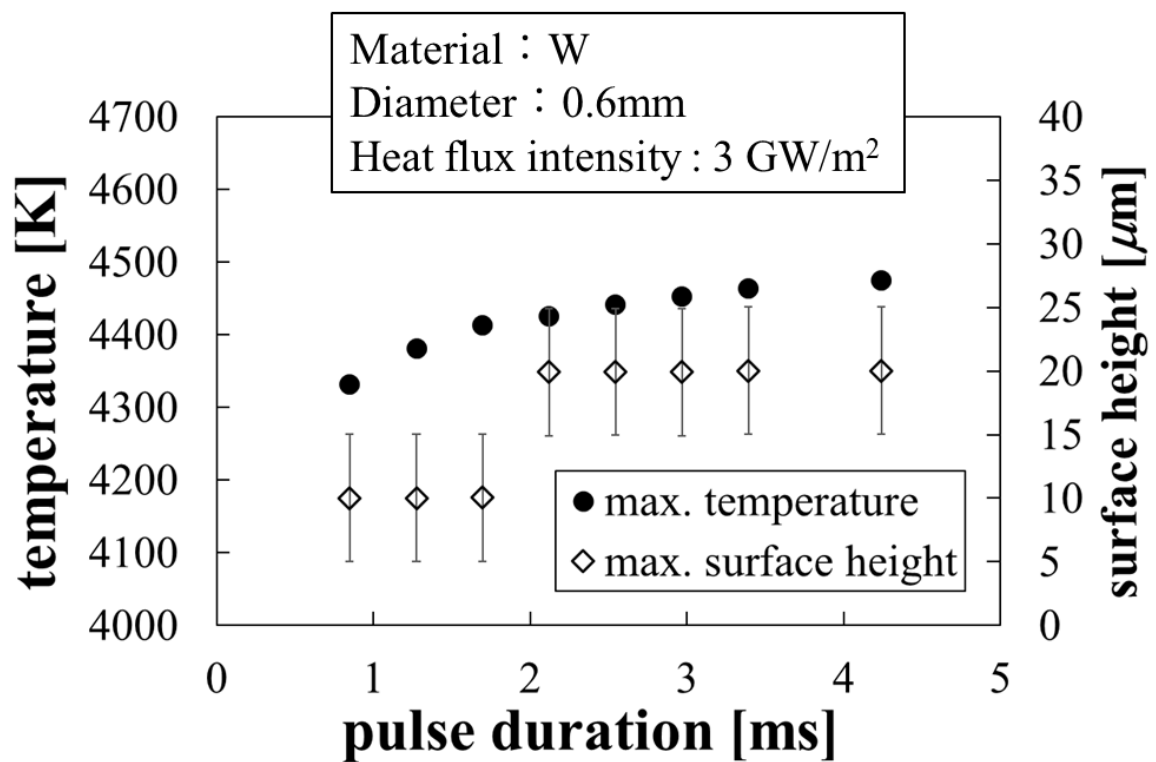


図 5.2.3-2 パルス幅に対する最大温度及び溶融層表面の最大変動幅

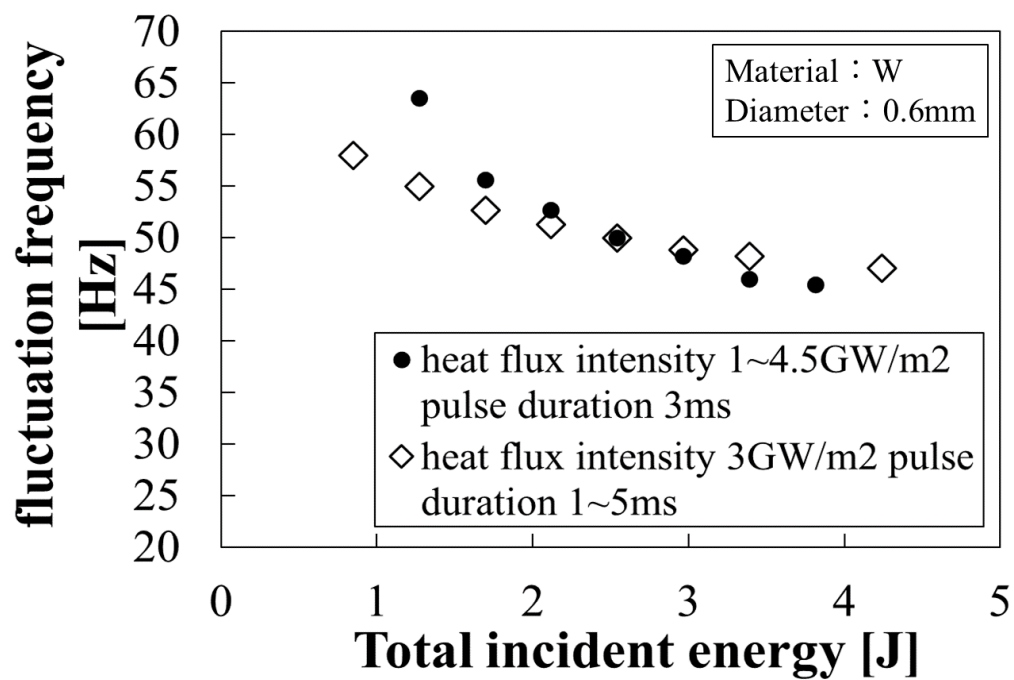


図 5.2.3-3 熱負荷のトータルエネルギーに対する変動周期

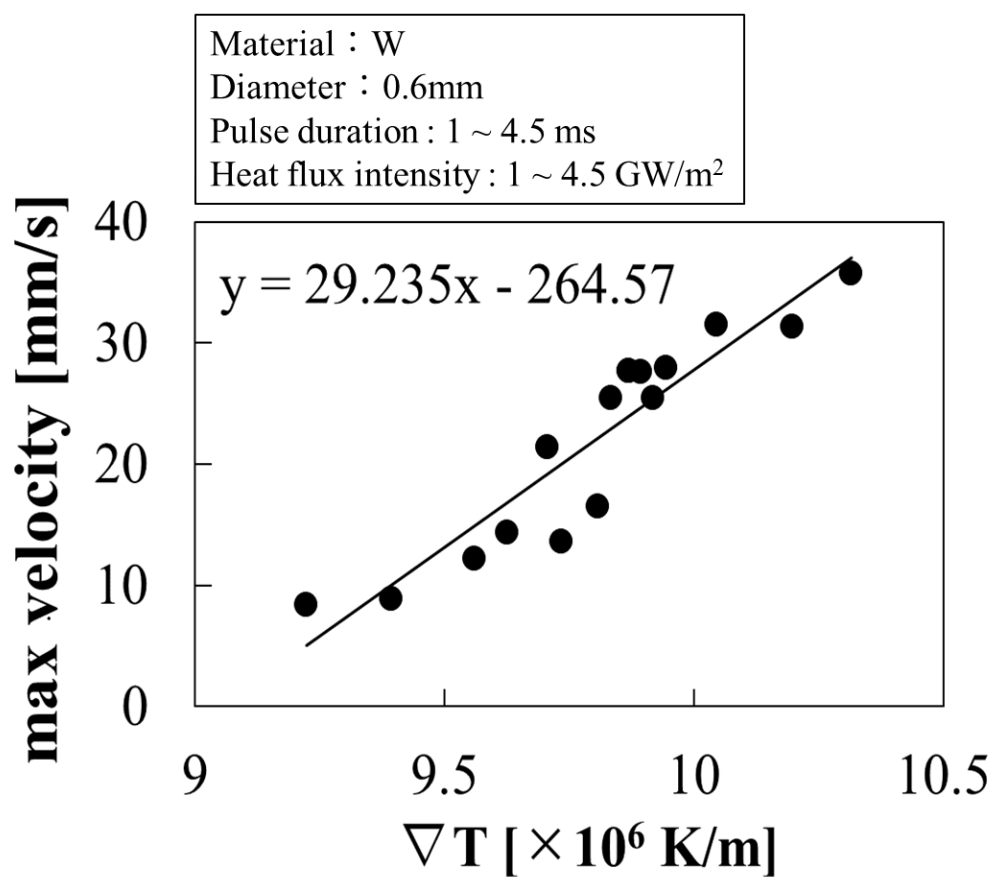


図 5.2.3-4 温度勾配に対する最大流速

図 5.2.3-1 から、熔融層の表面の中心における最大温度は熱負荷フラックスに線形性を示し、表面変動はも同様に線形に近い傾向となった。本モデルでは最小メッシュ幅が 10 μm であり 10 μm よりも小さい変動は同じプロットとなることを考慮すると、表面変動も熱負荷フラックスと最大温度と同様に熱負荷フラックスに対して線形性を示すと考えられる。一方で図 5.2.3-2 から、パルス幅に対して最大温度及び熔融層の表面中心における最大変動は対数関数的な挙動を示す。パルス幅が長い場合、熱負荷中に熔融層内部や境界外への熱輸送が顕熱よりも大きくなるため、長いパルス幅に対しては温度上昇が緩やかになる。図 5.2.3-3 から、熱負荷の総エネルギーが大きいほど表面中心における変動周波数は減少する傾向となった。総エネルギーが同じでもパラメータであるパルス幅と熱負荷フラックスでは変動周波数の減少率は異なる。熔融 W が短時間で強いエネルギーを吸収すると、負荷領域の温度は急激に上昇し温度勾配も大きくなるため、熔融層内部の対流の駆動力であるマランゴニ効果が強くなる。この強いマランゴニ効果により表面変動の振幅が大きくなること、変動周波数は小さくなる。図 5.2.3-4 から、熔融 W の最大表面速度は温度勾配に依存し、分布にばらつきはあるものの線形性を持つことが分かる。実現象では熔融層の固液界面近傍のわずかな範囲で大きな温度勾配が生じることになるため、実際のダイバータ表面での熔融層の周囲は固相であり 4000 K よりも低い温度であるため、温度勾配は本シミュレーション結果よりも大きくなると考えられる。従って、実機では強いマランゴニ効果が生じることになるため、局所的な表面速度は少なくとも数 100 mm/s 以上になり、表面もより激しく変動すると予測される。

熱負荷パラメータの影響の確認の一環として、熱負荷フラックスの時間変化に対する影響を確認した。トータルの熱負荷エネルギーは同じとし、熱負荷フラックスやパルス幅を表 5.2.3-1 のように変化させて、熔融 W への熱負荷シミュレーションを実施する。各熱負荷に対するフラックスの時間変化を図 5.2.3-5 に示す。シミュレーションモデルは 2.13.4-1 項に示すモデルを使用する。表 5.4.5-1 に示す熱負荷に対する熔融層の表面中心における温度の時系列変化を図 5.2.3-6 に示し、各熱負荷に対する熔融層表面の最高温度及び最大変動幅を表 5.2.3-2 に示す。

表 5.2.3-1 熱負荷の種類

熱負荷の種類	熱負荷フラックス の時間変化	熱負荷フラックス [GW/m ²]	パルス幅 [ms]
Standard	図 5.2.3-5 (a)	3.0	3.0
Half flux	図 5.2.3-5 (b)	1.5	6.0
Positive ramp	図 5.2.3-5 (c)	0 $\rightarrow$ 3.0 (+ 0.5 TW/m ² /s)	6.0
Negative ramp	図 5.2.3-5 (d)	3.0 $\rightarrow$ 0 (- 0.5 TW/m ² /s)	6.0

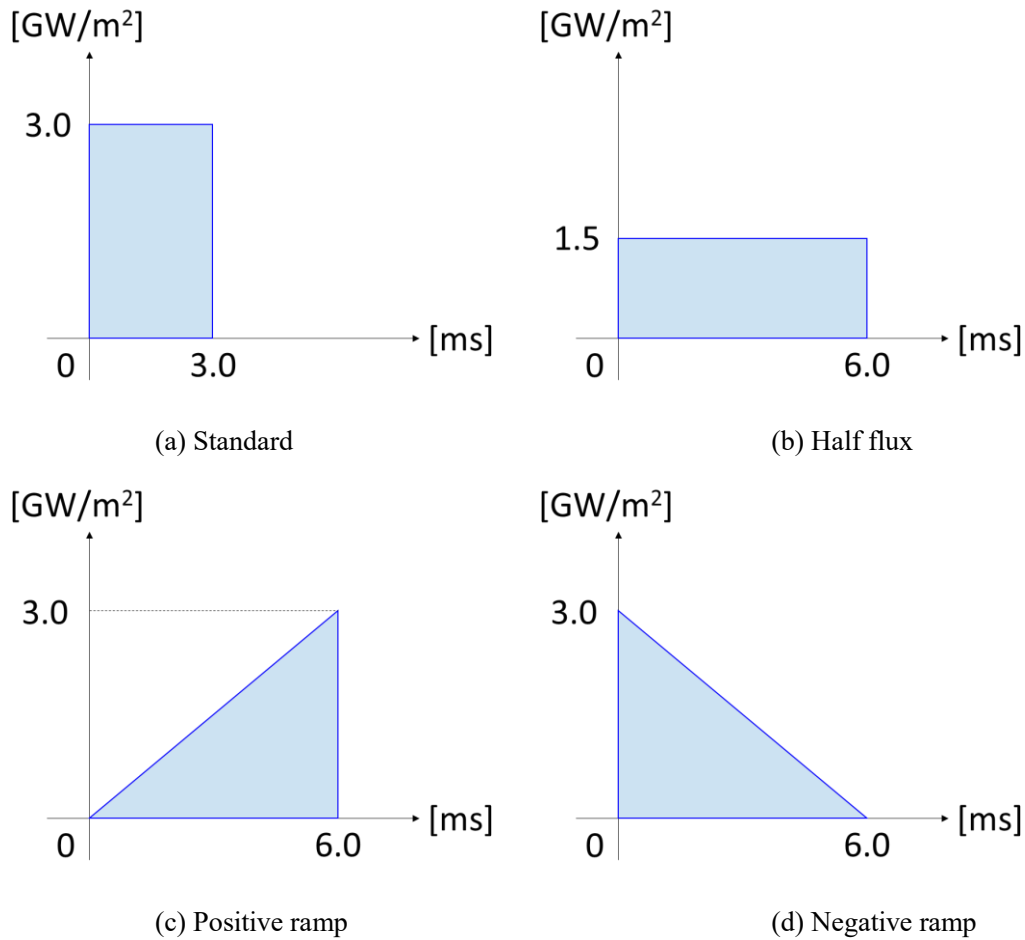


図 5.2.3-5 熱負荷フラックスの時間変化

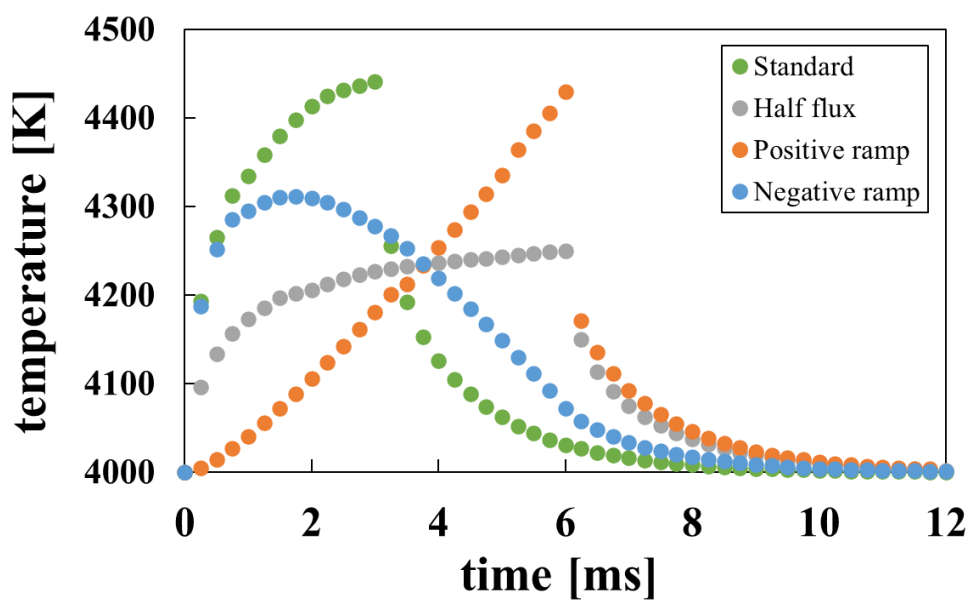


図 5.2.3-6 様々な熱負荷における溶融層表面中心における温度の時間変化

表 5.2.3-2 様々な熱負荷に対する最高温度及び最大変動幅

熱負荷の種類	最高温度 [K]	最大変動振幅 [μm]
Standard	4441.4	19.94
Half flux	4249.8	9.94
Positive ramp	4429.8	18.85
Negative ramp	4312.1	9.95

熱負荷フラックスの時間変化によって溶融 W の温度変化は大きく異なる結果となる。本項にて長いパルス幅に対しては温度上昇が緩やかになることを述べたが、入射されるトータルのエネルギーが同じだとしても同様の傾向となり、短時間で高フラックスの熱負荷が入射されることが高い温度上昇につながる。徐々に熱負荷フラックスが大きくなる **Positive ramp** に関しては、パルス幅が長いものの負荷終了直前では短時間に高フラックスの熱負荷となり、最大温度は高くなる。一方で、**Negative ramp** に関しては、熱負荷初期は高フラックスとなるため急激に温度は上昇するが、時間経過と共に低フラックスとなると熱負荷により得られるエネルギーよりも拡散で失うエネルギーの方が多く、熱負荷中であっても温度は低下する。変動振幅については、温度変化によらず最高温度が高いほど大きい結果となった。以上より、ディスラプションや ELM のような非常に強い高熱負荷は **Half flux** のように低フラックスで長時間持続させてエネルギーを分散させる、あるいは **Negative ramp** のように初期に強く徐々に低下させるように制御することが、ダイバータにとっては負荷が小さく望ましいと言える。

第6章 まとめ

本研究は、トカマク型核融合炉において最も高い熱負荷を受ける機器であるダイバータのプラズマ対向面の材料であるタングステンの高熱負荷に対する特性について探求したものである。ディスラプションや ELM 発生時の高熱負荷によるタングステンの表面形状の変化が危惧されており、表面形状を変化させるメカニズムや形状変化の挙動の把握が求められているが、実験的研究のみでは得られる情報が限られたものとなる。そこで、本研究では高熱負荷に対する溶融タングステンの表面変動挙動特性の予測を目的に、自由表面状態の溶融タングステンへの高熱負荷が可能なシミュレーションコードを構築した。本コードの構築にあたっては主に実施した内容は以下のとおりである

- ・ タングステンの EOS ライブラリとして GRAY EOS の導入を行い、
- ・ マランゴニ効果を再現するために表面張力のモデル化を行った。表面張力のモデル化にあたっては、マランゴニ効果に寄与する接線方向成分を算出するためのアルゴリズムを構築した。
- ・ 本研究で扱う時間と空間で異なるスケールとなる現象に対して、安定かつ高速に計算を行うために同時陰解法を導入した。本研究の同時陰解法の導入にあたっては、非対称疎行列となる係数行列を取り入れるためのアルゴリズムを構築し、計算コスト削減のために SMS-AMG 法を組み込んだ。

また、構築したコードの機能を確認するために以下の検証を行い、本コードはタングステンを対象とした高熱負荷シミュレーションに適用可能であることを確認した。

- ・ 温度差に起因する密度差により生じる自然対流の流線分布を既往研究結果と比較し、自然対流現象を再現できていることを確認した。
- ・ 移動境界により生じる強制対流の流線分布及び流速分布を既往研究結果と比較し、強制対流現象を再現できていることを確認した。
- ・ 極短パルス熱負荷を受ける金属表面の挙動（掘削深さ）を実験データと比較し、極短パルスに対する金属表面挙動は妥当であることを確認した。
- ・ 他金属の EOS を適用した高熱負荷シミュレーションの結果から、金属間の挙動の違いを物理的に表現できていることを確認し、本コードが他金属への適用できることを確認した。
- ・ 高熱負荷を受けるタングステンの挙動として高熱負荷を受けるタングステンの表面温度変化を実験データと比較し、導入した W の EOS を用いて計算されるデータが妥当であることを確認した。
- ・ 表面張力に起因する対流の速度分布を既往研究と比較し、表面張力の接線成分のモデル化によりマランゴニ効果を再現できていることを確認した。

本研究では、実機タングステンドイバータ表面に入射する熱負荷により生じうる温度勾配を想定した一様加熱シミュレーション（①）を実施した。さらに、タングステンの溶融中に対して高熱負荷が付与されることを想定した局所加熱シミュレーション（②）を実施した。両シミュレーション結果を以下にまとめる。

① 一様加熱シミュレーション

- ・ マランゴニ効果による溶融タングステンの内部対流の発達過程を明らかにした。温度勾配が維持されると溶融層内部に双子渦が生じ、この双子渦に内部対流は支配された。
- ・ 双子渦の相互作用により流速は急速に発達し、双子渦発生前と比較して 100 倍程度大きな流速となった。また、境界及び界面近傍では剥離渦により表面変動が生じた。
- ・ 溶融層内部の流況は溶融層のサイズに依存しており、アスペクト比が大きいほど流速は小さく、さらに深いほど流速は大きくなった。アスペクト比よりも溶融層の深さの方が流速に与える影響は大きい。
- ・ 一方で、実機においては、熱負荷を受ける面積が大きく溶融層が広くなることで温度勾配は小さくなりやすく、溶融層全体で生じるマランゴニ効果は比較的小さくなる傾向となる。さらに、溶融タングステンの下部は冷却されることから低温部では粘性が上がるため、一様温度勾配中の溶融タングステンにおける対流は、本シミュレーション結果よりも緩やかになることが示唆された。

② 局所加熱シミュレーション

- ・ 表面温度変化に伴うマランゴニ効果に起因する内部対流によって、表面変動が生じ、その変動の振幅は正弦波で近似できる挙動となった。
- ・ 溶融層の表面状態は、パルス幅よりも熱負荷フラックスへの依存性が強く、最大振幅は熱負荷フラックスに対して線形性を示した。
- ・ 表面の最大流速は表面の温度勾配に対して線形性を示し、本研究で対象とした熱負荷のエネルギー帯（約 1～5 J）の熱負荷に対しては 10～40 mm/s の表面流速が得られた。
- ・ 同じ熱負荷のエネルギーでも、最高温度はフラックスの時間分布が half で最も低く、最大振幅は half と negative で最も低くなった。
- ・ しかし、実機の条件においては、溶融層周囲部分の固液界面近傍のわずかな範囲において大きな温度勾配が生じるため、表面流速は本シミュレーション結果よりも温度勾配に対して強い線形性を示すと考えられ、少なくとも数 100 mm/s の流速になり、本シミュレーション結果よりも激しく表面が変動することが予測された。
- ・ 同じエネルギーの熱負荷に対しては、フラックスが低く長時間の熱負荷あるいは徐々にフラックスが低下する熱負荷については、熱輸送によりタングステンの温度上昇が緩やかとなり、表面の変動も小さくなる。従って、ダイバーズに高熱負荷を与える ELM やディスラプションは、できる限りフラックスが低く長時間あるいは徐々にフラックスが低下していくように制御することが望ましい。

両シミュレーション結果をふまえて、実機条件において想定される様々な熱負荷に対して、以下の挙動となることが予測された。

① 溶融タングステンに水平方向の温度勾配が負荷された場合

- ・ 実機では実験よりも溶融層のアスペクト比は大きくなると考えられ、実機で想定される広範囲の溶融層に生じる対流は弱くなる傾向と予測される。
- ・ 実機では溶融層の底面からの冷却により、底面の温度は表面よりも低くなり 3 次元温度分布が生じるため、流れ場は本結果よりも複雑になる可能性がある。

② 溶融タングステンに高熱負荷が入射された場合

- ・ 実現象では溶融層の固液界面近傍のわずかな範囲で大きな温度勾配が生じることから、実機では局所的な表面流速が本結果よりも大きくなり、最大数 100 mm/s 以上になると予測される。
- ・ W ダイバータの表面状態の観点では、ELM やディスラプションのような非常に強い高熱負荷は、エネルギーを長時間に分散させる (half) あるいは、初期に強く徐々に低下させる (negative) ように制御することが望ましい。

以上より、本研究で構築したコードを用いたシミュレーションにより、実機で想定される様々な熱負荷条件に対する溶融タングステンの表面変動挙動特性を予測できた。

本研究で対象とした熱負荷は、実験^[1-35,36,49]における熱負荷の条件と合わせたが、実機においては高熱負荷の照射領域はより広範囲となると考えられる。つまり、実機で生じる表面挙動を詳細に予測するためには、広範囲に熱負荷が生じた場合の表面挙動の評価が必要となる。実験ではレーザー照射により実機における高熱負荷を模擬しているが、実機相当の熱負荷フラックスを材料に負荷するためには、そのレーザー径を絞る必要がある。より広範囲に対して実機相当の熱負荷照射実験を実施するためには、それに対応できる設備の導入が必要であり、1 章の背景で述べたように膨大なコストがかかるほか、実験で得られるデータには限りがある。そこで、本研究で構築コードを用いることで、実機で想定される様々な熱負荷やスケールに対して、より詳細な溶融タングステンの挙動評価を行うことが可能である。一方で、本研究では固相からの溶融、溶融状態からの凝固といった相変化や磁場による影響は考慮していないため、より実機に近い条件で評価を行うためにはこれらの影響を考慮したシミュレーションを実施する必要がある。今後、本コードをベースにしたシミュレーションにより W ダイバータ表面にて生じる詳細な表面挙動予測結果が得られ、ダイバータの設計改善や運転時の安全性向上に寄与されることを期待する。

参考文献

- ・ [1-1] 量子科学技術研究開発機構核融合エネルギー研究開発部門, ITER の設計とは?, http://www.fusion.qst.go.jp/ITER/iter/page1_6.html
- ・ [1-2] 鎌田裕, JT-60SA 事業, RADIOISOTOPES, 67, 133–137 (2018)
- ・ [1-3] 井上多加志, 草間義紀, 杉本誠, 奥野清, 中嶋秀夫, ITER の歩み、現状と計画, RADIOISOTOPES, 67, 127–132 (2018)
- ・ [1-4] ITER 計画の機器開発・製作の進展, J. Plasma Fusion Res. Vol.92, No.6 (2016)393-395
- ・ [1-5] 鎌田裕, 核融合研究開発の最近の状況, RADIOISOTOPES, 66, 181–200 (2017)
- ・ [1-6] 嶋田道也, ダイバータの概要, プラズマ・核融合学会誌, Vol.69, 1146-1149 (1993)
- ・ [1-7] H. Maeda et al., in Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion Research (Proc. 7th Int. Conf., Innsbruck, 1978) Vol.1, IAEA, Vienna, p.377 (1979)
- ・ [1-8] F. Wagner et al., Phys. Rev. Lett. 49, 1408 (1982)
- ・ [1-9] M. Shimada et al., J. Nucl. Mater. 111-121, 362 (1982)
- ・ [1-10] 鈴木哲, 秋葉真人, 齋藤正克, ダイバータの構造を理解する, J. Plasma Fusion Res. Vol.82, No.10, 699-706 (2006)
- ・ [1-11] V. Barabash et al., J. Nucl. Mater. 233-237, 718 (1996).
- ・ [1-12] ITER でフルタングステンダイバータを導入するにあたって解決すべき課題とその対策, J. Plasma Fusion Res. Vol. 91, No.3(2015) 191 –196
- ・ [1-13] 関洋治, 福田誠, 江里幸一郎, 鈴木哲, プラズマ対向機器 (ダイバータ) , RADIOISOTOPES, 67, 191–194 (2018)
- ・ [1-14] T. Hirai et al., Fusion Eng. Des. 88, 1798 (2013) .
- ・ [1-15] M. Araki et al., Int. J. Heat Mass Trans. 39, 14 3045 (1996).
- ・ [1-16] JP. Gunn et al., Proc. IAEA FEC 2014 (FIP/1-2)
- ・ [1-17] R. Pitts et. al., J. Nucl. Matter. 438, S48 (2013) .
- ・ [1-18] ディスラプションを制御する～物理現象の理解と制御技術の発展, 河野康則, 杉原正芳, 飛田健次, J. Plasma Fusion Res. Vol.86, No.1 (2010) 3-16
- ・ [1-19] D.J. Ward and J.A. Wesson, Nucl. Fusion 32, 1117 (1992)
- ・ [1-20] ELM の概要, 鎌田裕, 大山直幸, 杉原正芳, J. Plasma Fusion Res. Vol.82, No.9 (2006) 566-574
- ・ [1-21] Y. Seki et al., Proc. IAEA FEC 2014 (FIP/1-1) .
- ・ [1-22] A. Loarte et al., Proc. 22nd IAEA Fusion Energy Conf. (2008) IT/P6-13.
- ・ [1-23] G. Federici et al., Plasma Phys. Control. Fusion 45, 1523 (2003).
- ・ [1-24] H. Hoshino, M. Mori, T. Yamamoto et al., Phys. Rev. Lett. 69, 2208 (1992).
- ・ [1-25] F. Salzedas, A.A.M. Oomens, F.C. Schüller et al., Nucl. Fusion 42, 881 (2002).
- ・ [1-26] Y. Kawano, R. Yoshino, Y. Neyatani et al., Fusion Sci. Tech. 42, 298 (2002).
- ・ [1-27] 芳野隆治, 小関隆久, 徳田伸二, 他: プラズマ・核融合学会誌 76, 116 (2000).
- ・ [1-28] A.Zhitlukhin et al., Effects of ELMs on ITER divertor armour materials, Journal of Nuclear

Materials 363–365 (2007) 301–307

- [1-29] Y. Ueda et al., Effects of repetitive ELM-like heat pulses on tungsten surface morphology, Fusion Eng. Des. 82 (2007) 1904-1910.
- [1-30] T. Loewenhoff, Combined Steady State and High Cycle Transient Heat Load Simulation with the Electron Beam Facility JUDITH 2, Ph.D. Thesis RWTH Aachen, Germany (2012)
- [1-31] I.E. Garkusha et al., Damage to preheated tungsten targets after multiple plasma impacts simulating ITER ELMs, Journal of Nuclear Materials 386-388 (2009) 127-131
- [1-32] S.E. Pestchanyi et al., Simulation of cracks in tungsten under ITER specific transient heat loads, Fusion Eng. Des. 82 (2007) 1657-1663.
- [1-33] J. W. Coenen et al., Melt-layer ejection and material changes of three different tungsten materials under high heat-flux conditions in the tokamak edge plasma of TEXTOR, Nucl. Fusion 51 (2011) 113020 (8pp)
- [1-34] J. W. Coenen et al., Analysis of tungsten melt-layer motion and splashing under tokamak conditions at TEXTOR, Nucl. Fusion 51 (2011) 083008 (11pp)
- [1-35] D. Inoue et al., Molten layer characteristics of W materials and film coated W by pulsed laser irradiation, Fusion Eng. Des. 124 (2017) 316-320
- [1-36] T. Maeji et al., Laser energy absorption coefficient and in-situ temperature measurement of laser-melted tungsten, Fusion Eng. Des. 124 (2017) 287-291
- [1-37] Y. Tanaka et al., Effect of Surface Damage on Thermal Response of Tungsten Monoblocks, Fusion Science and Technology, 68 (2015) 433-437
- [1-38] 炉心プラズマに関する基礎と課題, プラズマ・核融合学会誌, Vol.87 (増刊 2002 年 1 月)
- [1-39] 時谷政行, 上田良夫, ITER に向けたタングステン PWI 研究の進展と課題, J. Plasma Fusion Res. Vol.87, No.9 (2011) 591-599
- [1-40] E. Hoashi et al., Study on Melting and Solidification Behaviors of Tungsten Loaded by High Heat Flux for Divertor in Tokamak Fusion Reactor, Fusion Eng. Des. Vol.136 (2018) 350-356
- [1-41] 内藤恭章, 水谷正海, 片山聖二, 溶接学会論文集, 24 (2006) 24, 149 – 161.
- [1-42] M. K. Smith, S. H. Davis, Instabilities of dynamic thermocapillary liquid layers, J. Fluid Mech., Vol.132 (1983) 119-144
- [1-43] N. Imaishi, マランゴニ対流の基礎, Int. J. Microgravity Sci. No. 31 Supplement 2014 (S5–S12)
- [1-44] Y.R. Li et al., Three-dimensional oscillatory flow in a thin annular pool of silicon melt, J. Crystal Growth, 260 (2004) 28-42.
- [1-45] G. Tsotridis et al., On modelling of Marangoni convection flows in simulated plasma disruptions, Fusion Eng. Des. 15 (1991) 155-162
- [1-46] H. Ki et al., Metall. Mater. Trans. A 33A, 1817 (2002).
- [1-47] 野口暁, 他 レーザ加工学会誌 14, 113 (2007)
- [1-48] Yamashita, S., et al., (2011) in Proceedings of the 19th International Conference on Nuclear

Engineering

- [1-49] E. Hoashi et al., Numerical analysis of wave-type heat transfer propagating in a thin foil irradiated by short-pulsed laser, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol.46, No.21, (2003) 4083-4095
- [1-50] 帆足英二、極短パルス・高出力レーザー照射を受ける物質の熱過渡挙動解析に関する研究、九州大学 (2002)
- [1-51] K. Hamaguchi et al., Development of a simulation method for evaluating Marangoni convection with free surface for tungsten divertor, *Fusion Eng. Des.*, 136, Part A, (2018), 270-275.
- [1-52] K. Hamaguchi et al., Study on melting behavior of tungsten under high heat load including verification of simulation code using other metals, *J. Nucl. Sci. Technol.*, published online, 20 Feb 2022.
- [2-1] T.Yabe and T.Aoki, A universal solver for hyperbolic equations by cubic-polynomial interpolation I. One-dimensional solver, *Comp. Phys. Comm.*, Vol.66 (1991) 219-232
- [2-2] T.Yabe, T.Ishikawa, P.Y.Wang, T.Aoki, Y.Kadota and F.Ikeda, *Comp. Phys. Comm.*, Vol.66 (1991) 223.
- [2-3] 越塚誠一,「数値流体力学」, 培風館, (1997).
- [2-4] T.Yabe and F.Xiao, Description of complex and sharp interface during shock wave interaction with liquid drop, *J. Phys. Soci. Japan*, Vol.62, No.8, (1993) 2537.
- [2-5] Hirt, C. and Nichols, B.D (1981): Volume of fluid method for the dynamics of free boundaries, *Journ. of Computational Physics* 39, 201-225.
- [2-6] Osher S. and Sethian J. A., Front propagating with curvature dependent speed: Algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of Computational Physics*, Vol. 78, pp. 12–49, 1988.
- [2-7] M.Sussman, P.Smereka and S.Osher, A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow, *J. Comp. Phys.*, Vol.114 (1994) 146-159.
- [2-8] 功刀資彰, 自由界面を含む多相流の直接数値解析法, *機論 B*, Vol.63, No.609, p88, 1997.
- [2-9] 姫野武洋, 渡辺紀徳, 微小重力下で気液境界を有する流れの数値解析, *機論 B*, Vol.65, No.635, p2333, 1999.
- [2-10] 白川英観, 高田保之, 黒木虎人, 伊藤猛宏, VOF 法の改良 : Donor-Acceptor 法と表面張力計算法の改良, *日本機械学会論文集 B 編*, 1996 年 62 巻 604 号 p. 4068-4075
- [2-11] T. Kunugi, MARS for multiphase calculation, *Computational Fluid Dynamics Journal*, ,Vol.9, No.1(2000).
- [2-12] R.Tanaka, T.Nakamura and T.Yabe, Constructing exactly conservative scheme in a non-conservative form, *Comp. Phys. Comm.*, Vol.126 (2000) 232.
- [2-13] T.Yabe and P.Y.Wang, Unified Numerical Procedure for Compressible and Incompressible Fluid, *J. Phys. Soc. Japan*, Vol.60, No.7 (1991) 2105-2108.
- [2-14] F.H.Harlow and J.E.Welch, Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface, *Phys. Fluids*, Vol.8 (1965) 2182.
- [2-15] A.A.Amsden and F.H.Harlow, A Simplified MAC Technique for Incompressible Fluid Flow

- Calculations, J. Comp. Phys., Vol.6 (1970) 322.
- [2-16] S.V.Patankar and D.B.Spalding, A CALCULATION PROCEDURE FOR HEAT, MASS AND MOMENTUM TRANSFER IN THREE-DIMENSIONAL PARABOLIC FLOWS, Int. J. Heat Mass Trans., Vol.15 (1972) 1787.
 - [2-17] S.V.Patankar, A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations, Num. Heat Trans., Vol.4 (1981) 409.
 - [2-18] F.H.Harlow and A.A.Amsden, Numerical Calculation of Almost Incompressible Flow, J. Comp. Phys., Vol.3 (1968) 80.
 - [2-19] J.U.Brackbill, D.B.Kothe and C.Zemach, A Continuum Method for Modeling Surface Tension, J. Comp. Phys., Vol.100 (1992) 335-354.
 - [2-20] T. Ishikawa, Thermophysical properties of molten tungsten measured with an electrostatic levitator, 熱物性, 19 (2005) 61–66.
 - [2-21] M. L. Wilkins, Calculation of Elastic-Plastic Flow, Meth. Comp. Phy., Vol.3, Academic Press, NewYork, (1964) 211.
 - [2-22] S.V.パタンカー, 水谷幸夫, 香月正司, コンピュータによる熱移動と流れの数値解析, p.60-63, 2017.
 - [2-23] 田村敦宏, 菊地一雄, 高橋匡康, だ円形境界値問題の数値解法—残差切除法について (ポアソン方程式への適用), 日本機械学会論文集(B 編)62 巻 604 号 p.4076-4083, 1996.
 - [2-24] P.Lyon and J.D.Johnson, LA-CP-98-100, 1998.
 - [2-25] E.B.Royce, GRAY, A THREE-PHASE EQUATION OF STATE FOR METALS (1971)
 - [2-26] R. Grover, Liquid Metal Equation of State Based on Scaling, J. Chem. Phys. Vol.55, 7 (1971) 3435.
 - [2-27] DA Young, BJ. Alder, Critical Point of Metals from the van der Waals Model, Phys. Rev. Vol.3, 1 (1971) 364.
 - [2-28] R.M.More , K.H.Warren , D.A.Young , and G.B.Zimmerman, A new quotidian equation of state (QEOS) for hot dense matter , (1988)
 - [2-29] D.A. Nield, Surface tension and buoyancy effects in cellular convection, J. Fluid Mech. Vol.19, Issue 3 (1964) 341–352
 - [4-1] U.Ghia, K.N.Ghia, C.T.Shin, High-Re Solutions for Incompressible Flow Using the Navier-Stokes Equations and a Multigrid Method, J. Comp. Phys., Vol.48, (1982) 387-411.
 - [4-2] A. K. Prasad, Reynolds number and end-wall effects on a lid-driven cavity flow, Physics of Fluids A Fluid Dynamics, Vol.1, No.2 (1988) 208-218
 - [4-3] G. de V. Davis, NATURAL CONVECTION OF AIR IN A SQUARE CAVITY A BENCHMARK NUMERICAL SOLUTION, Int. J. Num. Methods Fluids, Vol.3 (1983) 249-264
 - [4-4] D.A. Nield, Surface tension and buoyancy effects in cellular convection, J. Fluid Mech. Vol.19, Issue 3 (1964) 341–352
 - [4-5] 足立佳代、修士論文「レーザー誘起衝撃波計測によるアブレーション現象の評価」(2011)

謝辞

本研究に従事するにあたり、終始有益なご指導、ご教授を賜りました帆足英二准教授に深く御礼申し上げます。先生の助言は毎回大変貴重なもので、その助言は常に私に研究の指針を示していただきました。また、研究面でのご指導・ご鞭撻のみならず博士後期課程の大学生活において多大なるご支援を賜りました沖田隆文助教に深く感謝致します。ネットワークの構築やPCの整備など研究を円滑に行う環境を用意して下さった山岡信夫元技術専門職員に深く感謝申し上げます。福井工業大学の堀池寛先生には研究面も含め帆足先生と同様に進路の選択の際にも、親身にいろいろな多大なるご助言を賜りましたこと、深く御礼申し上げます。名古屋大学の吉橋幸子先生には、レーザー照射の実験やその結果処理方法に関して丁寧にご指導いただきましたこと、深く御礼申し上げます。

本論文執筆の際に副査としてご指導を賜りました、環境エネルギー工学専攻の村田勲教授、電気電子情報通信工学専攻の上田良夫教授、レーザー科学研究所の重森啓介教授に深く御礼申し上げます。先生方には貴重なお時間を割いて頂き、大変有益なご助言を賜りました。

システム量子工学領域の事務補佐員として大学生活のご支援を頂きました長井智子氏にも感謝申し上げます。帆足研究室の柳岡君、藤井君、黄君、杉田君、山縣さん、森山君とは数値計算やLinuxについて有意義な議論を交わすことで私に知らない知識などを補ってくれ、研究を進める上で多くのことをご支援頂きました。レーザーの照射実験に際して補助して頂いた山下君、松田君、山本君、電気電子情報通信工学専攻プラズマ生成制御工学領域の学生の皆様にはレーザーや実験に関する助言を頂くだけでなく、必要な実験のデータを取得する際に多くのご支援を頂きました。藤田君、兼光君、圓谷君には日頃の研究生活を明るくものにして頂きました。渡辺君、東君、山田智健君、山田俊哉君には研究室内の仕事を進んで引き受けて頂き、研究に集中する環境を支えて頂きました。

この場をお借りしてシステム量子工学領域及び環境エネルギー工学専攻の皆様には感謝申し上げます。

最後に、未熟な私を最後まで支えてくれ、かつ私のわがままを聞き入れて更なる勉学への道に進むことを承諾してくれた両親に深く感謝申し上げます。

業績リスト

査読付き原著論文

1. Kohei Hamaguchi, Yu Teramoto, Eiji Hoashi, Takafumi Okita, Kenzo Ibano, Yoshio Ueda, “Development of a simulation method for evaluating Marangoni convection with free surface for tungsten divertor”, *Fusion Engineering and Design*, Volume 136, Part A, November 2018, Pages 270-275.
2. Kohei Hamaguchi, Eiji Hoashi, Takafumi Okita, Kenzo Ibano, Yoshio Ueda, “Evaluation of Marangoni Convection and Free Surface Velocity of Molten Tungsten for Tungsten Divertor”, *Fusion Engineering and Design*, Volume 140, March 2019, Pages 117-122.
3. Kohei HAMAGUCHI, Hibiki MATSUMOTO, Takuma SUGITA, Eiji HOASHI, Takafumi OKITA, “Study on melting behavior of tungsten under high heat load including verification of simulation code using other metals”, *Journal of Nuclear Science and Technology* (in press).

国際学会発表

1. HAMAGUCHI Kohei, HOASHI Eiji, OKITA Takafumi, IBANO Kenzo, UEDA Yoshio, “Development of Simulation Method for Predicting Tungsten Behavior Loaded by High Heat Flux”, *29th Symposium on Fusion Technology (SOFT2016)*, P4.110, Prague, Czech Republic, September 5-9, 2016.
2. Kohei Hamaguchi, Yu Teramoto, Eiji Hoashi, Takafumi Okita, Kenzo Ibano, Yoshio Ueda, “Development of Simulation Method for Evaluating Material Behavior Loaded by High Heat Flux for Tungsten Divertor”, *13th International Symposium on Fusion Nuclear Technology (ISFNT-13)*, P3-015, Kyoto, Japan, September 25-29, 2017.