

気液二相流解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/MP: 計算性能向上のための改良 (SIMPLEC法、Lisライブラリ、圧縮性解析機能の導入)

波田地 洋隆* 杉中 隆史** 三橋 利玄**

Improvements of calculation performance of two fluid analysis software, Advance/FrontFlow/MP

Hiroataka Hadachi*, Takahumi Suginaka** and Toshiharu Mitsuhashi**

数値流体計算では、保存則を表す複数の偏微分方程式を離散化し、それらを連成して計算する。アドバンスソフト社の二相流解析ソフト Advance/FrontFlow/MP (以下、AFFMP) では、この連成手法に圧力ベース分離型陰解法を用い、圧力方程式の導出に SIMPLE 法を採用している。本報告では、収束性が良いとされている SIMPLEC 法を二流体モデルに導入し、選択できるようにした。また、連立一次方程式の解法を拡充するため、Lis ライブラリを参照できるようにした。最後に、開発中の圧縮性解析機能について、衝撃波管を例に解析を行った。それらについて紹介する。

Keywords: 二相流、SIMPLEC 法、圧縮性流体、Lis ライブラリ、衝撃波管解析

1. はじめに

二相流は、工業・産業において様々なところで見られる現象であり、相の種類に応じて、気液、固液、固気二相流などに分類される。例えば、発電所内の沸騰流やボイラーによる気泡発生、金属の焼き入れ、スプレー、キャビテーション、壁面での水蒸気の凝集などでは気液二相流を形成する。また、容器下部からの送風により固体粒子を流動化させる固気流動層は化学反応、乾燥、吸着、熱交換、造粒、粒子の分離などに使用されており、固気二相流となる。その他、石炭などの固体粒子を水力輸送により目的値まで移動させるスラリー輸送や、橋脚まわりの洗掘現象は固液二相流の例である。

AFFMP は非圧縮性流体の二相流解析ソフトウェア

であり、Euler-Euler 型の二流体モデルを採用している。また、オプションとして Level set 法により自由界面を表現する一流体モデルが組み込まれている。AFFMP の二流体モデルは、気相と液相が主な対象であるが、固気二相流、固液二相流についても、KTGF 法を用いた専用バージョンがある。

現在、AFFMP の計算性能向上を目的として、圧力ベース分離型陰解法のアルゴリズムの検討、連立一次方程式を計算するための手法の拡充、圧縮性解析機能の追加を進めている。圧力ベース分離型陰解法は質量保存式と運動量保存式を同時に満たすための手法の 1 つであり、非圧縮性流体ソルバーでよく使用される。この方法では質量保存式と運動保存式を独立に計算して解の推定値を得た後、圧力方程式から得られる圧力から推定値を補正し、その補正量が十分小さくなるまで反復計算することで各方程式の解を求める。AFFMP では圧力ベース分離型陰解法である SIMPLE 法[1]を採用しているが、単相流の多くの解析では SIMPLEC 法[2]が収束性、計算安定性に優れていることが多い。このため、二流体モデルへの SIMPLEC 法の組み込みを実施した。また、圧力ベ

*アドバンスソフト株式会社 第 4 事業部

4th Computational Science and Engineering Group, AdvanceSoft Corporation

**アドバンスソフト株式会社 熱流動エンジニアリングセンター

Thermal Hydraulics Engineering Centre, AdvanceSoft Corporation

一解法では、各方程式は連立一次方程式に帰着する。そこで、連立一次方程式の解を得るための手法の拡充として、国産の並列反復解法ソフトウェアライブラリ Lis[3]を参照できるようにした。最後に、開発中の圧縮性解析機能について記載した。圧力ベース分離型陰解法は主に非圧縮性流体で開発された手法であるが、一圧力モデルの多相流解析に対して圧縮性流体に拡張するアルゴリズムが報告されている[4]。そのアルゴリズムを参考に AFFMP に圧縮性解析機能を組み込み、衝撃波管解析に適用した。

本稿の構成を示す。2 章で支配方程式を示した後、3 章で圧力ベース分離型陰解法である SIMPLE 法と SIMPLEC 法の離散化の説明を行う。4 章では Lis ライブラリについて概要を説明する。5 章では、3 章で説明した圧力ベース分離型陰解法の AFFMP における圧縮性流体への拡張方法を示す。6 章では SIMPLE 法と SIMPLEC 法の収束性の評価、および、圧縮性解析機能を用いた衝撃波管解析への適用例を示す。最後に、7 章にまとめと課題を示す。

2. 支配方程式

一圧力二流体モデルを採用している。 k 相の質量、運動量、エネルギーの支配方程式は、

$$\frac{\partial(\rho_k \alpha_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \vec{v}_k) = \Gamma_k \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_k \alpha_k \vec{v}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \vec{v}_k \vec{v}_k) \\ = \nabla \cdot (\alpha_k \bar{\tau}_k) - \alpha_k \nabla P + \vec{M}_{ik} \\ + \vec{M}_{gk} + \vec{M}_{wk} + \Gamma_k \vec{v}_{ik} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_k \alpha_k h_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k h_k \vec{v}_k) \\ = -\nabla \cdot (\alpha_k k \nabla T) + \alpha_k \frac{DP}{Dt} \\ + \alpha_k (\bar{\tau}_k : \nabla \vec{v}_k) + q_{ik}''' + q_{wk}''' \\ + \Gamma_k \left(h_{ik} + \frac{1}{2} |v_{ik} - v_k|^2 \right) \end{aligned} \quad (3)$$

である($k = 1, 2$)。 h_k は比エンタルピー、 Γ_k は相変化率、 $\bar{\tau}_k$ は応力テンソル、 $\vec{M}_{ik}$ は界面抗力、 $\vec{M}_{gk}$ は体積力、 $\vec{M}_{wk}$ は壁面潤滑力、 q_{ik}''' は界面熱伝達、 q_{wk}'''

は壁面熱伝達を表す。ここで、エネルギー保存式において、せん断応力が k 相に行う仕事によるエネルギー変化 $[\alpha_k (\bar{\tau}_k : \nabla \vec{v}_k)]$ を含んでいるが、計算では無視している。

3. 数値計算法

3.1. 一般変数の輸送方程式とその離散式

保存式である式(1)から式(3)を一般変数 ϕ で表現すると次式で書ける。

$$\frac{\partial(\rho_k \phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \vec{v}_k \phi) = \nabla \cdot (\lambda_k \nabla \phi) + S_k^\phi \quad (4)$$

AFFMP では非構造格子の有限体積法により輸送方程式を離散化する。有限体積法では解析領域を有限体積をもつ複数の領域 (コントロールボリューム、以降 CV) で分割し、CV ごとに支配方程式をたてる。支配方程式は CV 体積で積分された積分形により表現され、対流項と拡散項は Gauss の発散定理により面積分に変換されて、離散化される。

$$\begin{aligned} \frac{\rho_k^{n+1} \phi^{n+1} - \rho_k^n \phi^n}{\Delta t} \Omega + \sum_f (\rho_k \vec{v}_k \phi)_f \cdot \vec{n}_f S_f \\ = \sum_f (\lambda_k \nabla \phi)_f \cdot \vec{n}_f + S_k^\phi \Omega \end{aligned} \quad (5)$$

Ω は CV の体積、 f は CV を構成する各面を表す。上添え字の n はタイムステップを表す。対流項と拡散項を計算するには面 f 上での変数の値を与える。この方法は様々な方法があるが、AFFMP は FrontFlow/Red をベースとしており、デフォルトでは対流項に 1 次風上差分、拡散項は Muzaferija が提案した Defer-Correction-Term 法を用いる[5]。その他に、対流項の離散化スキームには 2 次 TVD 風上差分および、1 次風上差分と 2 次中心差分のハイブリットも選択可能である。いずれの方法にしても、面 f での値は面 f を挟む 2 つの CV 中心の値から計算されるため、一般変数 ϕ で表現された輸送方程式の離散式は、

$$a^\phi \phi^{n+1} + \sum_{nb} a_{nb}^\phi \phi_{nb}^{n+1} = b^\phi \quad (6)$$

と書ける。ここで、 nb は着目 CV に隣接する CV での値を表す。また、 a^ϕ 、 b^ϕ は変数 ϕ の方程式を離散化して式(6)の形に整理したときの係数と右

辺であり、既知の量である。よって、式(6)は未知数 ϕ^{n+1} の連立一次方程式であり、BiCGStab 法などの線形ソルバーを用いて解かれ、次のタイムステップ $n+1$ の値が計算される。

3.2. SIMPLE 法と SIMPLEC 法

非圧縮性流体に対する圧力ベース分離型陰解法では、圧力と速度の更新値を推定値と補正量の和で表現する。

$$P^{n+1} = P^* + \delta P \quad (7)$$

$$\vec{v}_k^{n+1} = \vec{v}_k^* + \delta \vec{v}_k \quad (8)$$

ここで、 δP 、 $\delta \vec{v}_k$ は圧力と速度の補正量、*は推定値を意味する。この方法では1タイムステップ内で反復処理を行い、これらの補正量が十分小さくなったとき、解が得られたものと見なす。 P^* には一つ前の反復で計算された更新値 P^m ($n+1$ の値)、 $\vec{v}_k^*$ には圧力 P^m を用いて運動量保存式から計算された値を用いる。

更新値 P^{n+1} 、 $\vec{v}_k^{n+1}$ を求めるためには、補正量 δP 、 $\delta \vec{v}_k$ を求める必要がある。各相の質量保存式を足し合わせ、式(7)と式(8)を代入し、整理すると、

$$\begin{aligned} & \sum_k \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \delta \vec{v}_k) \\ &= \sum_k \left\{ -\frac{(\rho_k \alpha_k)^m - (\rho_k \alpha_k)^n}{\Delta t} \right. \\ & \quad \left. - \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \vec{v}_k^m) + \Gamma_k \right\} \equiv \sum_k R_k \end{aligned} \quad (9)$$

となる。 R_k は k 相の質量保存式の残差である。仮に、速度補正量と圧力補正量の関係が、

$$\delta \vec{v}_k \approx \gamma_k \nabla \delta P \quad (10)$$

と書けるのであれば、式(9)は、

$$\sum_k \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \gamma_k \nabla \delta P) = \sum_k R_k \quad (11)$$

となり、有限体積法により離散化すると、圧力補正量 δP を未知数とする圧力方程式が得られる。

$$\sum_{nb} a_{nb}^p (\delta P)_{nb}^{n+1} = b^p \quad (12)$$

圧力方程式(12)から圧力補正量 δP を求め、式(10)より速度補正量 $\delta \vec{v}_k$ を求める。そして、式(7)と式(8)により、その反復内における圧力と速度

の $n+1$ の値を求める。この求めた値を新たに $P^m, \vec{v}_k^m$ として、これらの処理を補正量が十分小さくなるまで1タイムステップ内で繰り返すことで、質量保存則と運動量保存則を同時に満足する解を計算する。以上が SIMPLE 法と SIMPLEC 法のアルゴリズムの流れである。

SIMPLE 法と SIMPLEC 法の違いは、圧力補正量 δp と速度補正量 $\delta \vec{v}_k$ の間の関係を表す式(10)の係数 γ_k である。式(7)と式(8)を k 相の運動量保存式に代入し、整理すると、

$$\begin{aligned} a_k^v \delta \vec{v}_k^{n+1} + \sum_{nb} a_{k,nb}^v \delta \vec{v}_{k,nb}^{n+1} + d_{kq} \delta \vec{v}_q^{n+1} \\ = -\alpha_k \Omega \nabla \delta P \end{aligned} \quad (13)$$

と書ける。左辺第3項は界面抗力等の相間の相互作用に含まれる $q(\neq k)$ 相の速度に関する項を整理したものである。SIMPLE 法では左辺第二項を完全に無視して、

$$a_k^v \delta \vec{v}_k^{n+1} + d_{kq} \delta \vec{v}_q^{n+1} = -\alpha_k \Omega \nabla \delta P \quad (14)$$

とするのに対して、SIMPLEC 法では、着目 CV の速度補正量が隣接 CV の速度補正量の重み付き平均で表されると仮定して、

$$\delta \vec{v}_k^{n+1} = \frac{\sum_{nb} a_{k,nb}^v \delta \vec{v}_{k,nb}^{n+1}}{\sum_{nb} a_{k,nb}^v} \quad (15)$$

とする。これにより、式(13)を、

$$\begin{aligned} \left(a_k^v + \sum_{nb} a_{k,nb}^v \right) \delta \vec{v}_k^{n+1} + d_{kq} \delta \vec{v}_q^{n+1} \\ = -\alpha_k \Omega \nabla \delta P \end{aligned} \quad (16)$$

と変形する。

式(14)、式(16)は k 相に対する方程式であるが、同様に q 相に対する方程式も成り立つため、 $\delta \vec{v}_k^{n+1}$ 、 $\delta \vec{v}_q^{n+1}$ に対する二元連立一次方程式が得られ、それを解くと、

$$\delta \vec{v}_k = \gamma_k \nabla \delta P \quad (k=1,2) \quad (17)$$

という形に整理できる。

なお、AFFMP ではコロケート格子を採用しているため、checkerboard 振動を防ぐために、式(11)の右辺に Rhie-Chow により提案された修正項を別途加えている[6]。

4. Lis ライブラリの追加

3 章で説明したように、輸送方程式と圧力方程式は、離散化により連立一次方程式の形で表現される。AFFMP には既存の圧力方程式の解法として、前処理に不完全コレスキー分解法または代数マルチグリッド法(AMG 法)を用いた共役勾配法が組み込まれている。また、圧力方程式以外に対しては BiCGStab 法が使用されており、高速に計算できる。一方、問題によっては前処理を変えて、計算時間と計算安定性が改善されないかを確認したい場合がある。このため、国産の並列反復解法ソフトウェアライブラリ Lis[3]を AFFMP から参照できるようにした。Lis ライブラリに組み込まれている解法と前処理を表 4-1 に示す。AFFMP からの Lis ライブラリの参照は、圧力方程式とそれ以外の方程式に分けて、それぞれの解法と前処理を設定できるようにした。

表 4-1 Lis ライブラリに組み込まれている線形方程式の解法と前処理[3]

解法		前処理
CG	CR	Jacobi
BiCG	BiCR	SSOR
CGS	CRS	ILU(k)
BiCGSTAB	BiCRSTAB	ILUT
GPBiCG	GPBiCR	crout ILU
BiCGSafe	BiCRSafe	I+S
BiCGSTAB(l)	TFQMR	SA-AMG
Jacobi	Orthomin (m)	Hybrid
Gauss-Seidel	GMRES	SAINV
SOR	FGMRES	Additive Schwarz
IDR	MINRES	
COCG	COCR	

5. 圧縮性流体解析機能の追加

圧力ベース解法は、非圧縮性流体で発展してきた手法であるが、二相流においても一圧力モデルの近似のもとで、圧縮性流体に拡張するアルゴリ

ズムが提案されている[4]。ここでは簡単化のため、気液二相流を考え、気相を圧縮性流体として扱い、理想気体を仮定する。

圧縮性流体に対しても、非圧縮性流体の場合と基本的には同じように離散化することができるが、いくつか修正点がある。圧縮性流体では流体の密度変化を考慮するため、式(7)と式(8)の圧力と速度の補正式に加えて、密度も補正する。

$$\rho_g^{n+1} = \rho_g^m + \delta \rho_g \quad (18)$$

ここで、等エントロピー過程を仮定すると、

$$c_g^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho_g} \right)_s \quad (19)$$

である。 c_g は音速を意味する。この式を用いて、補正量の関係を、

$$\delta \rho_g = \frac{\delta P}{c_g^2} \equiv C_\rho^g \delta P \quad (20)$$

とする。圧力補正量は収束すればゼロになるため、係数 C_ρ^g は収束する途中では計算結果に影響するが、収束後は計算結果に影響しない。このとき、圧力方程式は、

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha_g C_\rho^g \delta P}{\Delta t} + \nabla \cdot (\alpha_g C_\rho^g \delta P \vec{v}_g) \\ & + \sum_k \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \gamma_k \nabla \delta P) \\ & = \sum_k \left\{ - \frac{(\rho_k \alpha_k)^m - (\rho_k \alpha_k)^n}{\Delta t} \right. \\ & \quad \left. - \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \vec{v}_k^m) + \Gamma_k \right\} \end{aligned} \quad (21)$$

となる。左辺第一項と第二項が気相の圧縮性により追加された項である。

また、エネルギー保存式においては、式(3)の右辺第二項における DP/Dt の項を考慮する。

式(7)、式(8)および式(18)により、速度と圧力、密度の更新値を計算した後、エネルギー保存式等の他の輸送方程式を解く。その後、密度については、理想気体の状態方程式から計算される値が正しいとして、更新値を置き換える。

$$\rho^{n+1} = \frac{p^{n+1}}{RT^{n+1}} \quad (22)$$

そして、次の反復に進み、収束誤差が十分小さく

なるまで、反復計算を実施することで、そのタイムステップにおける更新値を求める。

非圧縮性流体の場合には、式(11)に示すように圧力方程式は離散化された Poisson 方程式であるのに対して、式(21)の圧力方程式は非定常項と対流項を含み、波動方程式となる。マッハ数が大きくなるにつれ、式(21)の圧力方程式の対流項が大きくなり、波動方程式としての特性が現れるようになる。

6. 計算例

6.1. スロッシング解析

Okamoto[7]らが行ったスロッシング実験の条件で計算を行い、SIMPLE 法および SIMPLEC 法を適用して、収束性を確認した。実験は、長さ 1 m の正方形タンクで、初期水深は 0.5 m である。このタンクを、変位 9.3 mm、角速度 5.311 rad/s の正弦関数で揺らす。このときの流体の流動を計算した。計算条件を表 6-1 に示す。温度は一定とし、乱流モデルは考慮しない。解析時間は 7 秒までとした。図 1 に 7 秒における解析結果を示す。このスロッシング解析において、収束誤差を調べた。誤差評価は、方程式の残差 R を用いて、

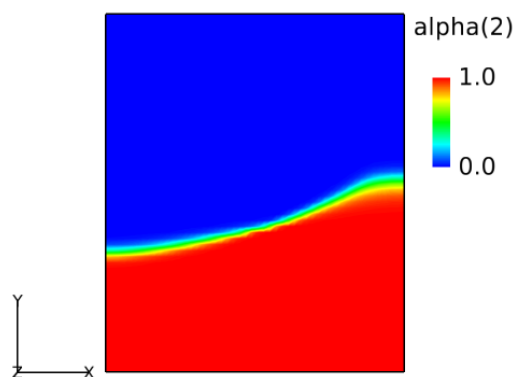
$$\text{Error} = \sum_{\text{All cell}} |R| \quad (23)$$

とした。

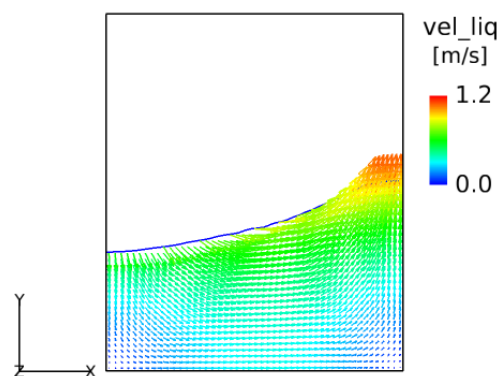
表 6-1 スロッシング解析の計算条件

項目	値
解析体系	幅 1 m、高さ 1.2 m
相の種類	1 相：気相 / 2 相：液相
気体密度	1.2 kg/m ³
液相密度	1000 kg/m ³
気体の粘性係数	1.8×10 ⁻⁵ Pa・s
液体の粘性係数	1×10 ⁻³ Pa・s
流動様式	気泡流・中間・噴流流
気泡径	1 mm
液滴径	0.1 mm
初期速度	ゼロ
時間刻み	10 ⁻⁴ s

ステップ数	70,000
現象時間	7 秒



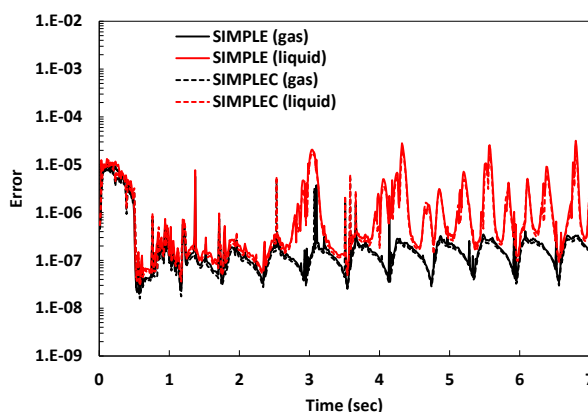
(a) 液相体積割合 (7 秒)



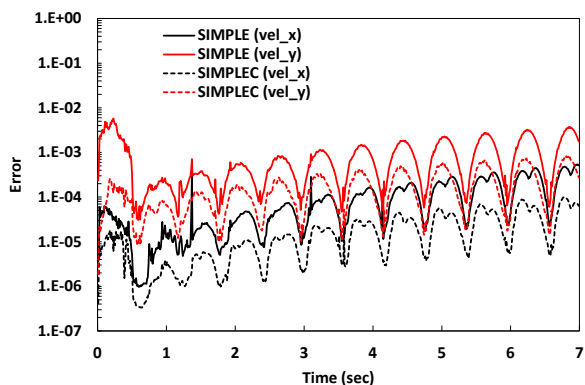
(b) 液相速度 (7 秒)

図 1 スロッシング解析結果

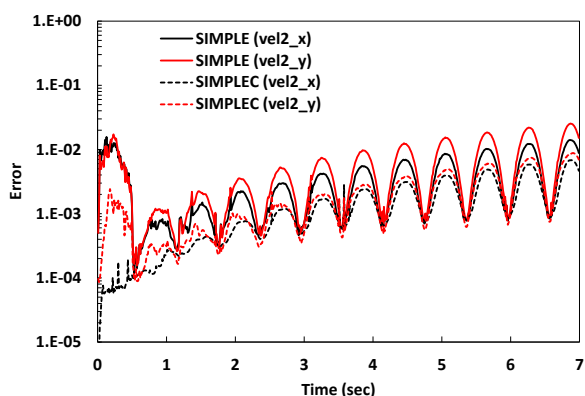
SIMPLE 法および SIMPLEC 法の反復回数を 10 回とし、緩和係数はいずれも 0.7 とした。そのときの誤差の時間変化を求めた結果を図 2 に示す。質量保存則に関しては同程度、運動量保存則に関しては SIMPLE 法に対して SIMPLEC 法の誤差が小さくなっていることが確認できた。



(a) 1 相および 2 相の質量保存式の誤差



(b) 1 相の運動量保存式の誤差



(c) 2 相の運動量保存式の誤差

図 2 SIMPLE 法と SIMPLEC 法の比較

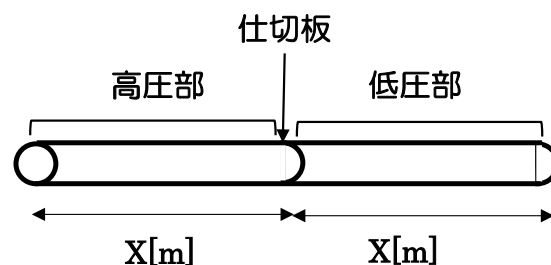


図 3 衝撃波管問題

表 6-2 衝撃波管解析の計算条件

項目	値
配管長さ	1 m
相の種類	1 相：気相 2 相：液相
ボイド率	1
仕切板位置	配管中心
初期速度	0 m/s
高圧部の初期圧力	1×10^5 Pa
高圧部の初期密度	1 kg/m^3
低圧部の初期圧力	1×10^4 Pa
低圧部の初期密度	0.125 kg/m^3
断熱比	1.4
分子量	29 g/mol

6.2.1 次元衝撃波管解析

圧縮性解析機能の確認として、衝撃波管問題の 1 次元解析を実施した。衝撃波管問題は、図 3 に示すように一定断面積の長い配管内に、比熱比が等しく熱力学的状態が異なる流体を 1 枚の仕切りによって分けておき、その仕切りを取り去ったときの流体の変化を調べる問題である。この問題には、衝撃波、膨張波、接触不連続面などの圧縮性流体で見られる物理現象が含まれており、厳密解も既知であるため、解析コードの検証によく使用される[8]。ここでは、AFFMP により解析を行い、厳密解と一致するかを調べた。

解析では、配管長さを 1 m、仕切り位置を配管中心とし、その位置を原点とした。計算条件を表 6-2 に示す。仕切りを外した時刻を 0 秒とし、時刻 5×10^{-4} 秒における圧力、速度、密度の空間分布を計算した。格子数は 1000、時間離散化幅は 5×10^{-6} 秒とした。乱流モデルは考慮していない。

計算結果を図 4 に示す。厳密解を実線、解析結果を丸印で表している。接触不連続面において、密度がなまる結果になったが、概ね厳密解と同じ傾向の結果が得られた。

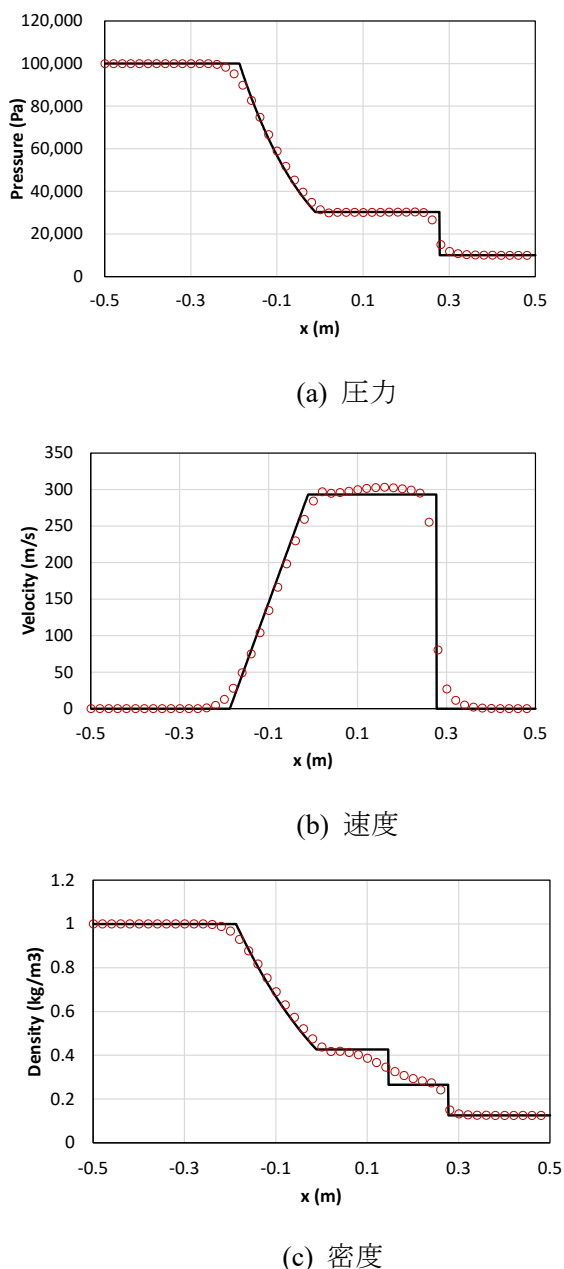


図 4 衝撃波管問題の解析結果

7. まとめ

AFFMP の計算性能向上を目的として導入した、SIMPLEC 法と LIS ライブラリ、開発中の圧縮性解析機能について紹介した。今後、SIMPLEC 法の適用例を増やし、どのようなケースに対して、結果が改善されるのかについて確認する。また、圧縮性解析機能について、スキームの高精度化と安定化、境界条件の整備を実施する。

参考文献

- [1] S.V.Patankar and D.B.Spalding, A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. In Numerical prediction of flow, heat transfer, turbulence and combustion, 54-73, 1983
- [2] J.P. van Doormaal, and G.D.Raithby, Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows, Numerical heat transfer, 7(2), 147-163, 1984
- [3] 反復解法ライブラリ Lis (<https://www.ssisc.org/lis/>)
- [4] F.Moukalled and M.Darwish, Pressure-based algorithms for multifluid flow at all speeds – part 1: Mass conservation formulation, Numerical Heat Transfer, Part B, 45: 495-522, 2004
- [5] 畝村 毅、張 会来、谷口 伸行、次世代流体解析ソフトウェア FrontFlow/Red の開発、生産研究、56(1)、40-43、2004
- [6] C.Rhie and W.Chow, Numerical study of the turbulent flow past and airfoil with trailing edge separation, AIAA journal, vol.21, No.10, 1523-1532, 1983
- [7] T.Okamoto, M.Kawahara, Two-dimensional sloshing analysis by Lagrangian finite element method, Int. J. Numer. Methods Fluids, 11, 453-477, 1990
- [8] G.A.Sod, A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws, Journal of computational physics, 27, 1-31, 1978

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイル (カラー版) がダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)