管路系流体解析の新しい取り組み

三橋　利玄[*]　　秋村　友香[**]　　大須賀　直子[**]

Recent Efforts in the One-Dimensional Fluid Analysis for Pipeline Systems

Toshiharu Mitsuhashi [*], Yuka Akimura[**] and Naoko Ohsuka[**]

管路系流体解析ソフトウェア Advance/FrontNet/Γ では、高度実用化のために、陰解法の導入や適用範囲の拡大を目的とした液体管路系や等温管路系への機能拡張、パッシブスカラーの導入などを行ってきた。さらなる高度化を目指し、より効率的な陰解法として Courant 数 50 以上で威力を発揮する SETS 法の開発の他、新たな取り組みとして Lagrange 粒子を活用したモデル、移動物体との連成モデル、多成分気液二相流解析モデルの導入検討を行った。SETS 法の開発では、これまでの陰解法と比べて解析機能に遜色はなく、かつ、大規模解析に対してより効率的な計算が可能であることが分かった。新たな取り組みのモデルについては、管路系への適用方法の説明を行い、一部については簡単な計算例の紹介も行った。

Key word: 管路系、流体解析、1 次元流れ、陰解法、Lagrange 粒子、移動物体、多成分気液二相流、Advance/FrontNet/Γ

1. はじめに

アドバンスソフト株式会社が開発・販売を進める管路系流体解析ソフトウェアのうち、現在最も機能汎用性および計算安定性が高いソフトウェアが Advance/FrontNet/Γ（以下、FrontNet/Γ と略）であり、都市ガス、火力、原子力、航空宇宙、化学プロセス等の幅広い分野において実績を重ねてきている。

本ソフトウェアは、管路系内の圧力伝播や熱流体、熱量、成分濃度の過渡応答を解くことができ、多成分系移流拡散モデル、構造物熱伝導モデル、対流および放射熱伝達モデル、管摩擦モデル、パッシブスカラーモデル、実在物性流体モデルなどを組み合わせることにより、気体、液体、超臨界流体、極低温流体に対するさまざまな物理現象を取り扱うことができる。また、流体機器モデルとして、弁（逆止弁や制御弁）、ファン・ブロワ、ポンプ、タービン、熱交換器、自由度の高い制御系を取り扱うことができ、管路系システムを構築し、熱流体と流体機器の連成計算を行うことができる。

これまで、FrontNet/Γ の実用性を高めつつ、高機能化、適用範囲の拡大を目指し、陰解法の導入、液体管路系や等温管路系への機能拡張、パッシブスカラーの導入などを行ってきた。さらなる機能向上のために、より効率的な陰解法の導入の他、新たにこれまでと異なる視点の解析機能の導入を検討している。本稿では、陰解法として新たに導入した SETS 法と、新たな取り組みとしての Lagrange 粒子を活用したモデル、移動物体との連成モデル、多成分気液二相流解析モデルを紹介している。SETS 法以外は、導入検討段階のため、一部に簡単な計算例の紹介があるものの、大半は新たな機能の管路系への適用方法の説明となっている。今後、これら新機能が正式に導入された段階で解析結果等の報告を予定している。

2. SETS 法の開発

2.1. 概要

多大な計算時間を必要とする解析に対して計算効率化および高速化を図るために、従来の陽解

[*]アドバンスソフト株式会社　技師長
Chief Engineer, AdvanceSoft Corporation
[**]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

法に加えて新たに半陰解法2種類と準陰解法2種類の合計4種類の陰解法の開発を行い、FrontNet/Γに実装を行ったことを前報[1]で報告した。

4 種類の陰解法は一長一短があり、求められる解析能力に対して十分ではない場合があるため、新たに SETS 法の開発を行い、FrontNet/Γ に実装を行った。

SETS 法[2]は、Stability Enhancing Two Step Method の略であり、文字通り 1 タイムステップの計算を 2 段階で行うことにより、計算の安定化を図った方法である。1 タイムステップの計算は安定化ステップ(Stabilizer Step)と基本ステップ(Basic Step)に分かれ、次のような計算手順で過渡解析が進められる。

① あらかじめ、管摩擦係数、熱伝達など 3 つの保存方程式に現れる諸量を求める。
② 運動量保存式の安定化ステップ(Stabilizer Step)として、圧力を陽的に扱い流速または運動量束を未知数とする連立方程式を解く。
③ 基本ステップ(Basic Step)として、密度、流速または運動量束、圧力、全エネルギーまたはエンタルピーを未知数として、3 つの保存方程式を半陰解法的に解く。解法として、Newton 法、ICE 法、圧縮系 SMAC 法などが用いられる。
④ 質量保存式の安定化ステップ(Stabilizer Step)として、密度を未知数とする連立方程式を解く。
⑤ エネルギー保存式の安定化ステップ(Stabilizer Step)として、全エネルギーまたはエンタルピーを未知数とする連立方程式を解く。
⑥ 状態方程式を用いてその他の物理量を求める。

SETS 法では、基礎方程式の非保存系を基本として組み立てられているが、FrontNet/Γ では保存系を基本としていることもあり、SETS 法を取り入れるにあたって、次のような工夫を行った。

(1) 質量保存式の安定化ステップ(Stabilizer Step)では、質量保存式と既に得られている運動量束を基に密度と流速を一括して求める方法を開発した。

(2) エネルギー保存式の安定化ステップ(Stabilizer Step)では、陰的強化のために、原子力熱水力解析コード TRACE[3]で用いられている数値計算法を採用した。

(3) 基本ステップ(Basic Step)では、FrontNet/Γ に既に組み込まれているエネルギー保存式ベースの圧力 Poisson 方程式を解く半陰解法（半陰解法 2[1]）を活用した。

下記では、FrontNet/Γ に組み込んだ SETS 法の離散化式、数値計算法の手順などを説明する。なお、基本ステップ(Basic Step)に用いられる基礎方程式の離散化式を基本式、安定化ステップ(Stabilizer Step) に用いられる基礎方程式の離散化式を安定化式と呼ぶことにする。

2.2. 離散化式

2.2.1. 基本式

(1) 質量保存式

$$\frac{(\tilde{\rho})_j^{n+1}-(\rho)_j^n}{\Delta t}+\frac{(\rho u)_{j+1/2}^{n+1}-(\rho u)_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}=0 \qquad (1)$$

ここで、ρは流体密度[kg/m^3]、uは流速[m/s]、tは時間[s]、xは座標[m]、jは格子インデックス、nはタイムステップである。

(2) 運動量保存式

$$\begin{aligned}&\frac{(\rho u)_{j+1/2}^{n+1}-(\rho u)_{j+1/2}^{n}}{\Delta t}\\&+\frac{(\widetilde{\rho u})_{j+1}^{n+1}\tilde{u}_{j+1}^{n+1}-(\widetilde{\rho u})_{j}^{n+1}\tilde{u}_{j}^{n+1}}{\Delta x_{j+1/2}}+\frac{p_{j+1}^{n+1}-p_j^{n+1}}{\Delta x_{j+1/2}}\\&+\frac{1}{2}\frac{K_{j+1/2}^n}{L_{j+1/2}}\left[2(\rho u)_{j+1/2}^{n+1}-(\rho u)_{j+1/2}^{n}\right]\left|u_{j+1/2}^n\right|\\&-\rho_{j+1/2}^n g\sin\theta_{j+1/2}-F_{j+1/2}^{n+1}=0\end{aligned} \qquad (2)$$

ここで、pは流体圧力[Pa]、Kは流体抵抗係数または管摩擦係数[-]、Lは格子間長さ[m]、gは重力加速度[m/s^2]、θは管路の傾き[rad]、Fは外力[kg/m^2/s^2]である。外力として、ポンプ、ファン、圧縮機などによる昇圧がある。

(3) エネルギー保存式

$$\frac{(\tilde{E})_j^{n+1}-(E)_j^n}{\Delta t}+\frac{\left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j+1/2}^n(\rho u)_{j+1/2}^{n+1}-\left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j-1/2}^n(\rho u)_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}-\frac{H_j^nA_{w,j}T_{w,j}^n}{V_j}+\frac{H_j^nA_{w,j}T_j^n}{V_j}\frac{(\tilde{E})_j^{n+1}}{(E)_j^n}=0 \quad (3)$$

ここで、Eは流体の全エネルギー[J/m^3]、Hは流体と管壁との熱伝達係数[W/m^2/K]、A_wは伝熱面積[m^2]、Tは流体温度[K] 、T_wは管壁温度[K] 、Vは格子体積[m^3]である。

2.2.2. 安定化式

(1) 質量保存式

$$\frac{(\rho)_j^{n+1}-(\rho)_j^n}{\Delta t}+\frac{(\rho u)_{j+1/2}^{n+1}-(\rho u)_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}=0 \quad (4)$$

(2) 運動量保存式

$$\frac{(\widetilde{\rho u})_{j+1/2}^{n+1}-(\rho u)_{j+1/2}^n}{\Delta t}+\frac{(\widetilde{\rho u})_{j+1}^{n+1}u_{j+1}^n-(\widetilde{\rho u})_j^{n+1}u_j^n}{\Delta x_{j+1/2}}+\frac{p_{j+1}^n-p_j^n}{\Delta x_{j+1/2}}+\frac{1}{2}\frac{K_{j+1/2}^n}{L_{j+1/2}}\left[2(\widetilde{\rho u})_{j+1/2}^{n+1}-(\rho u)_{j+1/2}^n\right]\left|u_{j+1/2}^n\right|-\rho_{j+1/2}^n g\sin\theta_{j+1/2}-F_{j+1/2}^{n+1}=0 \quad (5)$$

(3) エネルギー保存式

$$\frac{(E)_j^{n+1}-(E)_j^n}{\Delta t}+\frac{\left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j+1/2}^{n+1}(\rho u)_{j+1/2}^{n+1}-\left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j-1/2}^{n+1}(\rho u)_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}-\frac{H_j^nA_{w,j}T_{w,j}^n}{V_j}+\frac{H_j^nA_{w,j}T_j^n}{V_j}\frac{(E)_j^{n+1}}{(E)_j^n}=0 \quad (6)$$

2.3. 数値計算法の手順

SETS 法の数値計算法は次の 4 つの計算部から成る。

① 運動量保存式の安定化式の計算
② 基本式の半陰解法の計算
③ 質量保存式の安定化式の計算
④ エネルギー保存式の安定化式の計算

以下に、それぞれの計算の詳細を手順に従って述べる。

2.3.1. 運動量保存式の安定化式の計算

本計算では次式を用いた運動量束の予測値に関する連立方程式を解いて求める。

$$\frac{(\widetilde{\rho u})_{j+1/2}^{n+1}-(\rho u)_{j+1/2}^n}{\Delta t}+\frac{(\widetilde{\rho u})_{j+1}^{n+1}u_{j+1}^n-(\widetilde{\rho u})_j^{n+1}u_j^n}{\Delta x_{j+1/2}}+\frac{p_{j+1}^n-p_j^n}{\Delta x_{j+1/2}}+\frac{1}{2}\frac{K_{j+1/2}^n}{L_{j+1/2}}\left[2(\widetilde{\rho u})_{j+1/2}^{n+1}-(\rho u)_{j+1/2}^n\right]\left|u_{j+1/2}^n\right|-\rho_{j+1/2}^n g\sin\theta_{j+1/2}-F_{j+1/2}^{n+1}=0 \quad (7)$$

上にチルダ(～)が付いている(ρu)が運動量束の予測値であり、運動量束の予測値について整理すると、係数行列の要素 a と荷重ベクトルの要素 b は次のようになる。

$$a_{j,j-1}(\widetilde{\rho u})_{j-1/2}^{n+1}+a_{j,j}(\widetilde{\rho u})_{j+1/2}^{n+1}+a_{j,j+1}(\widetilde{\rho u})_{j+3/2}^{n+1}=b_j$$

$$a_{j,j-1}=-\frac{u_j^n}{\Delta x_j}\max\left[0,\mathrm{sign}(1,+u_j^n)\right]$$

$$a_{j,j}=-\frac{u_j^n}{\Delta x_j}\max\left[0,\mathrm{sign}(1,-u_j^n)\right]+\frac{u_{j+1}^n}{\Delta x_j}\max\left[0,\mathrm{sign}(1,+u_{j+1}^n)\right]+\frac{1}{\Delta t}+\frac{K_{j+1/2}^n}{L_{j+1/2}}\left|u_{j+1/2}^n\right| \quad (8)$$

$$a_{j,j+1}=+\frac{u_{j+1}^n}{\Delta x_j}\max\left[0,\mathrm{sign}(1,-u_{j+1}^n)\right]$$

$$b_j=\frac{(\rho u)_{j+1/2}^n}{\Delta t}-\frac{p_{j+1}^n-p_j^n}{\Delta x_{j+1/2}}+\frac{1}{2}\frac{K_{j+1/2}^n}{L_{j+1/2}}\left[(\rho u)_{j+1/2}^n\right]\left|u_{j+1/2}^n\right|+\rho_{j+1/2}^n g\sin\theta_{j+1/2}+F_{j+1/2}^{n+1}$$

ここで、u_j と u_{j+1} は格子中心で定義された流速であり、格子エッジの本来の流速から求めている。以上から運動量束の予測値に関する線形連立方程式を、BiCGStab 法[20]行列ソルバーを用いて解いて、運動量束の予測値を求める。

2.3.2. 基本式の半陰解法の計算

本計算は半陰解法 2[1]に相当し、計算手順で異なるのは、流体抵抗損失項、管摩擦損失項、熱伝達項、流体機器などの運動量保存式、エネルギー保存式のソースターム項を SETS 法の計算の始めで求めたものを半陰解法の計算で変更することなくそのまま用いることである。

本計算では、圧力と運動量束の最終値が得られ、密度と全エネルギーは次の計算のための中間値となる。以下に計算手順を述べる。

① 圧力項を陽的に扱った運動量保存式を用いて、ボリューム内の格子間とジャンクションの運動量束の予測値を求める。ここで、予測値を横線(ー)付きで示す。

対流項および摩擦損失項の運動量束は第 2.3.1 節で求めた最新の値(チルダ(～)が付いている変数)を用いているが、流速は最新の運動量束を前時刻の密度で割って用いている。

$$\left[\frac{1}{\Delta t}+\frac{K_{j+1/2}^{n}}{L_{j+1/2}}\left|u_{j+1/2}^{n}\right|\right](\overline{\rho u})_{j+1/2}^{n+1} = \frac{(\rho u)_{j+1/2}^{n}}{\Delta t} - \frac{(\widetilde{\rho u})_{j+1}^{n+1}\tilde{u}_{j+1}^{n+1}-(\widetilde{\rho u})_{j}^{n+1}\tilde{u}_{j}^{n+1}}{\Delta x_{j+1/2}} - \frac{p_{j+1}^{n}-p_{j}^{n}}{\Delta x_{j+1/2}} + \frac{1}{2}\frac{K_{j+1/2}^{n}}{L_{j+1/2}}\left[(\rho u)_{j+1/2}^{n}\right]\left|u_{j+1/2}^{n}\right| + \rho_{j+1/2}^{n} g\sin\theta_{j+1/2}+F_{j+1/2}^{n+1}=0 \tag{9}$$

② 圧力 Poisson 方程式を解いて得られる圧力修正量から新しい時刻の運動量束を求めるために事前に係数を次のように求めておく。圧力項を陽的に扱った運動量保存式は簡単化して次のように表す。なお、左辺は運動量束の予測値を示す。

$$(\overline{\rho u})_{j+1/2}^{n+1}=(\rho u)_{j+1/2}^{n}-A_{j+1/2}\left(p_{j+1}^{n}-p_{j}^{n}\right)+B_{j+1/2} \tag{10}$$

一方、圧力項を陰的に扱った運動量保存式は簡単化して次のように表す。

$$(\rho u)_{j+1/2}^{n+1}=(\rho u)_{j+1/2}^{n}-A_{j+1/2}\left(p_{j+1}^{n+1}-p_{j}^{n+1}\right)+B_{j+1/2} \tag{11}$$

式(11)から式(10)を差し引くと次式が得られる。

$$(\rho u)_{j+1/2}^{n+1}=(\overline{\rho u})_{j+1/2}^{n+1}-A_{j+1/2}\left(\delta p_{j+1}^{n+1}-\delta p_{j}^{n+1}\right)$$
$$p_{j}^{n+1}=p_{j}^{n}+\delta p_{j}^{n+1}$$
$$A_{j+1/2}=\frac{\Delta t}{\Delta x_{j+1/2}\left[1+\Delta t\frac{K_{j+1/2}^{n}}{L_{j+1/2}}\left|u_{j+1/2}^{n}\right|\right]} \tag{12}$$

③ 前時刻の密度と運動量束の近似値から運動エネルギーを求める。

④ エネルギー保存式を基に得られる圧力 Poisson 方程式の係数行列と荷重ベクトルを計算する。エネルギー保存式の時間項を圧力の時間項に置き換え、また、式(12)を用いることで、エネルギー保存式は次のように書き換えられ、圧力 Poisson 方程式が得られる。

$$\left(GZ_{j}^{n}-1\right)\left[\frac{1}{\Delta t}+\frac{H_{j}^{n}A_{w,j}T_{j}^{n}}{V_{j}}\frac{1}{(E)_{j}^{n}}\right]\delta p_{j}^{n+1} - \frac{\left[\begin{array}{l}\left(\frac{\tilde{E}+p}{\tilde{\rho}}\right)_{j+\frac{1}{2}}^{n+1}A_{j+\frac{1}{2}}\left(\delta p_{j+1}^{n+1}-\delta p_{j}^{n+1}\right)\\ -\left(\frac{\tilde{E}+p}{\tilde{\rho}}\right)_{j-1/2}^{n+1}A_{j-1/2}\left(\delta p_{j}^{n+1}-\delta p_{j-1}^{n+1}\right)\end{array}\right]}{\Delta x_{j}} = \frac{(E)_{j}^{n}}{\Delta t} + \frac{\left(\frac{\tilde{E}+p}{\tilde{\rho}}\right)_{j+1/2}^{n+1}(\overline{\rho u})_{j+1/2}^{n+1}-\left(\frac{\tilde{E}+p}{\tilde{\rho}}\right)_{j-1/2}^{n+1}(\overline{\rho u})_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_{j}} + \frac{H_{j}^{n}A_{w,j}T_{w,j}^{n}}{V_{j}} - \left[\left(GZ_{j}^{n}-1\right)p_{j}^{n}+KE_{j}^{n}\right]\left[\frac{1}{\Delta t}+\frac{H_{j}^{n}A_{w,j}T_{j}^{n}}{V_{j}}\frac{1}{(E)_{j}^{n}}\right] \tag{13}$$

ここで、

$$(E)_{j}^{n+1}=(\rho h)_{j}^{n+1}-p_{j}^{n+1}+KE_{j}^{n} =\left(GZ_{j}^{n}-1\right)\delta p_{j}^{n+1}+\left(GZ_{j}^{n}-1\right)p_{j}^{n}+KE_{j}^{n}$$
$$\delta p_{j}^{n+1}=p_{j}^{n+1}-p_{j}^{n}$$
$$(GZ)_{j}^{n}=\left(\frac{\rho h}{p}\right)_{j}^{n} \tag{14}$$
$$KE_{j}^{n}=\frac{\left[(\overline{\rho u})_{j}^{n}\right]}{2\rho_{j}^{n}}$$

である。これは、次のように整理ができ、δp の線形連立方程式、いわゆる圧力 Poisson 方程式となる。なお、GZ は理想気体であれば、状態方程式から$\gamma/[Z(\gamma-1)]$で表されるが、実在流体も解析対象としているため、共通化して $\rho h/p$ に置き換えている。

$$a_{j,j-1}\delta p_{j-1}^{n+1}+a_{j,j}\delta p_{j}^{n+1}+a_{j,j+1}\delta p_{j+1}^{n+1}=b_j$$

$$a_{j,j-1}=-\left(\frac{\tilde{E}+p}{\tilde{\rho}}\right)_{j-1/2}^{n+1}\frac{A_{j-1/2}}{\Delta x_j}$$

$$a_{j,j}=\left((GZ)_j^n-1\right)\left[\frac{1}{\Delta t}+\frac{H_j^n A_{w,j}T_j^n}{V_j}\frac{1}{(E)_j^n}\right]+$$

$$\left(\frac{\tilde{E}+p}{\tilde{\rho}}\right)_{j-1/2}^{n+1}\frac{A_{j-1/2}}{\Delta x_j}+\left(\frac{\tilde{E}+p}{\tilde{\rho}}\right)_{j+1/2}^{n+1}\frac{A_{j+1/2}}{\Delta x_j}$$

$$a_{j,j+1}=-\left(\frac{\tilde{E}+p}{\tilde{\rho}}\right)_{j+1/2}^{n+1}\frac{A_{j+1/2}}{\Delta x_j}$$

$$b_j \tag{15}$$

$$=\frac{(E)_j^n}{\Delta t}$$

$$+\frac{\left(\frac{\tilde{E}+p}{\tilde{\rho}}\right)_{j+1/2}^{n+1}(\overline{\rho u})_{j+1/2}^{n+1}-\left(\frac{\tilde{E}+p}{\tilde{\rho}}\right)_{j-1/2}^{n+1}(\overline{\rho u})_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}$$

$$+\frac{H_j^n A_{w,j}T_{w,j}^n}{V_j}$$

$$-\left[\left((GZ)_j^n-1\right)p_j^n+KE_j^n\right]\left[\frac{1}{\Delta t}+\frac{H_j^n A_{w,j}T_j^n}{V_j}\frac{1}{(E)_j^n}\right]$$

⑤ 圧力 Poisson 方程式の線形連立方程式を、BiCGStab 法行列ソルバーを用いて解いて圧力修正量を求め、得られた圧力修正量を式(12)に代入して新しい時刻の圧力 p^{n+1} と運動量束 ρu^{n+1} を求める。

⑥ 質量保存式に、新しい時刻の運動量束を代入して新しい時刻の密度ρ^{n+1}を求め、さらに流速u^{n+1}を求める。

$$(\tilde{\rho})_j^{n+1}=(\rho)_j^n-\frac{(\rho u)_{j+1/2}^{n+1}-(\rho u)_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}\Delta t$$

$$u_{j+1/2}^{n+1}=\frac{(\rho u)_{j+1/2}^{n+1}}{(\tilde{\rho})_{j+1/2}^{n+1}} \tag{16}$$

⑦ 式(14)にある GZ^n、新しい時刻の圧力 p^{n+1}、および運動エネルギーより全エネルギーE^{n+1}、エンタルピーh^{n+1}、内部エネルギーe^{n+1}を求める。

$$(\tilde{h})_j^{n+1}=\frac{(GZ)_j^n p_j^{n+1}}{(\tilde{\rho})_j^{n+1}}$$

$$(\tilde{E})_j^{n+1}=(\tilde{\rho})_j^{n+1}(\tilde{h})_j^{n+1}+\frac{1}{2}(\tilde{\rho})_j^{n+1}\left(u_j^{n+1}\right)^2-p_j^{n+1} \tag{17}$$

$$(\tilde{e})_j^{n+1}=(\tilde{h})_j^{n+1}-\frac{p_j^{n+1}}{(\tilde{\rho})_j^{n+1}}$$

⑧ 状態方程式または物性データテーブルから温度T^{n+1}、比熱、粘性係数、熱伝導度などを求める。

2.3.3. 質量保存式の安定化式の計算

本計算は質量保存式と既に得られている運動量束を基に密度と流速を一括して求めるものである。

SETS 法の開発当初では質量保存式と既知の運動量束から密度と流速を求める際、逐次代入法による反復計算を用いていたが、格子長さや時間刻み幅が小さい場合は収束性が良いが、大きくなると収束性が悪く、計算が破綻することがあった。そこで、既知の運動量束と未知の密度および流速の積の関係式と質量保存式を連立させて、密度と流速を求めるようにした。なお、連立方程式は Newton 法によって解くこととした。また、本計算は準陰解法 2[1]でも利用でき、計算安定化に寄与している。

前ステップの密度と流速をそれぞれρ_0、u_0とする。この計算に得られた運動量束$(\rho u)_k$が既知であるとして、ρ_0、u_0を反復の初期値として Newton 法により密度と流速を求めた。関数f, gを次のように定義する。

$$f(\rho,u)\equiv\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\rho u$$

$$g(\rho,u)\equiv\rho^{n+1}u^{n+1}-(\rho u)_K \tag{18}$$

このとき、f, gに対する全微分は以下のようになる。

$$\delta f(\rho,u)=\frac{\partial f}{\partial\rho}\delta\rho+\frac{\partial f}{\partial u}\delta u$$

$$\delta g(\rho,u)=\frac{\partial g}{\partial\rho}\delta\rho+\frac{\partial g}{\partial u}\delta u \tag{19}$$

行列形式で表すと次の通りである。

$$\begin{pmatrix}\delta f\\ \delta g\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}f_\rho & f_u\\ g_\rho & g_u\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\delta\rho\\ \delta u\end{pmatrix} \tag{20}$$

行列の各要素は次の通りである。

$$\begin{aligned}
f_\rho &= \frac{\partial f}{\partial \rho}=\frac{1}{\Delta t}+\frac{1}{V}\sum\left(u^{n+1(l)}A\right)_{upwind}\\
f_u &= \frac{\partial f}{\partial u}=\frac{1}{V}\sum\left(\rho^{n+1(l)}A\right)_{upwind}\\
g_\rho &= \frac{\partial g}{\partial \rho}=u^{n+1(l)}\\
g_u &= \frac{\partial g}{\partial u}=\rho^{n+1(l)}
\end{aligned} \tag{21}$$

これを$\delta\rho$、δuについて解くには、以下の方程式を解けばよい。

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix}\delta\rho\\ \delta u\end{pmatrix}&=\begin{pmatrix}f_\rho & f_u\\ g_\rho & g_u\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}\delta f\\ \delta g\end{pmatrix}\\
\begin{pmatrix}f_\rho & f_u\\ g_\rho & g_u\end{pmatrix}^{-1}&=\frac{1}{f_\rho g_u-f_u g_\rho}\begin{pmatrix}g_u & -f_u\\ -g_\rho & f_\rho\end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{22}$$

これにより、前ステップからの密度と流速の修正量$\delta\rho$、δuが求まり、修正量が十分小さくなるまで、反復を繰り返せばよい。

$$\begin{aligned}
\rho^{n+1(l+1)}&=\rho^{n+1(l)}-\delta\rho\\
u^{n+1(l+1)}&=u^{n+1(l)}-\delta u
\end{aligned} \tag{23}$$

以下に具体的な離散化式を示す。対流項に一次風上差分法を採用すれば、質量保存式の離散化式は次のように表される。また、質量流量の関係式も次のように表される。

$$\begin{aligned}
f_j &= \frac{(\rho)_j^{n+1}-(\rho)_j^{n}}{\Delta t}+\frac{\dot{\rho}_{j+1}^{n+1}u_{j+1}^{n+1}A_{j+1}-\dot{\rho}_j^{n+1}u_j^{n+1}A_j}{\Delta V_j}\\
g_j &= u_j^{n+1}\Big[\rho_{j-1}^{n+1}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,+u_j^{n+1}\right)\right)\\
&\qquad +\rho_j^{n+1}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,-u_j^{n+1}\right)\right)\Big]\\
&\qquad -\left((\rho u)_j\right)_K\\
u_j^{n+1} &= u_{j-1/2}^{n+1}\quad u_{j+1}^{n+1}=u_{j+1/2}^{n+1}\\
\dot{\rho}_{j+1}^{n+1} &= \begin{cases}\rho_j^{n+1} & (u_{j+1}^{n+1}\ge 0)\\ \rho_{j+1}^{n+1} & (u_{j+1}^{n+1}<0)\end{cases}\\
\dot{\rho}_j^{n+1} &= \begin{cases}\rho_{j-1}^{n+1} & (u_j^{n+1}\ge 0)\\ \rho_j^{n+1} & (u_j^{n+1}<0)\end{cases}
\end{aligned} \tag{24}$$

なお、管路網に対して当該格子に別のジャンクションとの繋がりがあれば、上式第 1 式の右辺第 2 項の分子に新たな項が加えられるが、以下では省略して説明する。また、式(24)の第 2 式の右辺第 2 項は、既知のため定数として扱われる。

式(19)は、式(24)に基づいて具体的には次のように表される。

$$\begin{aligned}
\delta f_j &= \frac{\partial f_j}{\partial \rho_j}\delta\rho_j+\frac{\partial f_j}{\partial \rho_{j-1}}\delta\rho_{j-1}+\frac{\partial f_j}{\partial \rho_{j+1}}\delta\rho_{j+1}+\frac{\partial f_j}{\partial u_j}\delta u_j\\
&\qquad +\frac{\partial f_j}{\partial u_{j+1}}\delta u_{j+1}\\
\delta g_j &= \frac{\partial g_j}{\partial \rho_j}\delta\rho_j+\frac{\partial g_j}{\partial \rho_{j-1}}\delta\rho_{j-1}+\frac{\partial g_j}{\partial u_j}\delta u_j
\end{aligned} \tag{25}$$

式(25)の偏微分は次の通りである。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f_j}{\partial \rho_j} &= \frac{1}{\Delta t}+\frac{u_{j+1}^{n+1}A_{j+1}}{\Delta V_j}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,+u_j^{n+1}\right)\right)\\
&\qquad -\frac{u_j^{n+1}A_j}{\Delta V_j}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,-u_j^{n+1}\right)\right)\\
\frac{\partial f_j}{\partial \rho_{j-1}} &= -\frac{u_j^{n+1}A_j}{\Delta V_j}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,+u_j^{n+1}\right)\right)\\
\frac{\partial f_j}{\partial \rho_{j+1}} &= +\frac{u_{j+1}^{n+1}A_{j+1}}{\Delta V_j}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,-u_j^{n+1}\right)\right)\\
\frac{\partial f_j}{\partial u_j} &= -\frac{\rho_{j-1}^{n+1}A_j}{\Delta V_j}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,+u_j^{n+1}\right)\right)\\
&\qquad -\frac{\rho_j^{n+1}A_j}{\Delta V_j}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,-u_j^{n+1}\right)\right)\\
\frac{\partial f_j}{\partial u_{j+1}} &= +\frac{\rho_j^{n+1}A_j}{\Delta V_j}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,+u_{j+1}^{n+1}\right)\right)\\
&\qquad +\frac{\rho_{j+1}^{n+1}A_j}{\Delta V_j}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,-u_{j+1}^{n+1}\right)\right)\\
\frac{\partial g_j}{\partial \rho_j} &= u_j^{n+1}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,-u_j^{n+1}\right)\right)\\
\frac{\partial g_j}{\partial \rho_{j-1}} &= u_j^{n+1}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,+u_j^{n+1}\right)\right)\\
\frac{\partial g_j}{\partial u_j} &= \rho_{j-1}^{n+1}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,+u_j^{n+1}\right)\right)\\
&\qquad +\rho_j^{n+1}\max\left(0,\mathrm{sign}\left(1,-u_j^{n+1}\right)\right)
\end{aligned} \tag{26}$$

これらを要素とする次のような行列を BiCGStab 法行列ソルバーで連立方程式を解くこととする。

$$
\begin{array}{cccccccccccc}
 & & & \delta\rho_{j-1} & \delta\rho_j & \delta\rho_{j+1} & & & \delta u_j & \delta u_{j+1} & & \\
\end{array}
$$

$$
\begin{bmatrix}
X & X & & & & & & & & & & \\
X & X & X & & & & & & & & & \\
 & & X & X & X & & & X & X & & & \\
 & & & X & X & X & & & X & X & & \\
 & & & & X & X & X & & & X & X & \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
X & X & & & & & & X & & & & \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
 & & X & X & & & & & X & & & \\
 & & & X & X & & & & & X & & \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots
\end{bmatrix}
\begin{pmatrix}
\delta\rho_1 \\ \vdots \\ \delta\rho_{j-1} \\ \delta\rho_j \\ \delta\rho_{j+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \delta u_1 \\ \vdots \\ \delta u_j \\ \delta u_{j+1} \\ \vdots
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
-f_1 \\ \vdots \\ -f_{i-1} \\ -f_i \\ -f_{i+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ -g_1 \\ \vdots \\ -g_j \\ -g_{j+1} \\ \vdots
\end{pmatrix}
\tag{27}
$$

2.3.4. エネルギー保存式の安定化式の計算

陰的強化のために、原子力熱水力解析コードTRACE[3]で用いられているエネルギー保存式の安定化式の計算方法を採用した。SETS 法の中の半陰解法では、エネルギー保存式の基本式の離散化において、次式のように対流項のスカラー量は前時刻の値を使用している。

$$
\frac{(\tilde{E})_j^{n+1} - (E)_j^n}{\Delta t}
+ \frac{\left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j+1/2}^{n} (\rho u)_{j+1/2}^{n+1} - \left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j-1/2}^{n} (\rho u)_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}
- \frac{H_j^n A_{w,j} T_{w,j}^n}{V_j} + \frac{H_j^n A_{w,j} T_j^n}{V_j}\frac{(\tilde{E})_j^{n+1}}{(E)_j^n} = 0
\tag{28}
$$

全エネルギーE_jを前時刻と次時刻の中間値としてチルダ(～)の付いた変数として示している。また、エネルギー保存式の安定化式の離散化は次の通りである。

$$
\frac{(E)_j^{n+1} - (E)_j^n}{\Delta t}
+ \frac{\left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j+1/2}^{n+1} (\rho u)_{j+1/2}^{n+1} - \left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j-1/2}^{n+1} (\rho u)_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}
- \frac{H_j^n A_{w,j} T_{w,j}^n}{V_j} + \frac{H_j^n A_{w,j} T_j^n}{V_j}\frac{(E)_j^{n+1}}{(E)_j^n} = 0
\tag{29}
$$

エネルギー保存式の安定化式は半陰解法で求められた圧力、運動量束と結びついているだけのため、エネルギー保存式の安定化式と基本式を解いて得られた全エネルギーとの関係が弱く、乖離が出る可能性がある。この場合、時間刻み幅がCourant 条件を大きく超えると計算安定性を損なう危険性があるため、基本式の全エネルギーと安定化式の全エネルギーの関係性を強めて陰的強化を図るために文献[3]に基づいて次のような改良を施した。式(29)から式(28)を引くと次のようになる。

$$
\frac{(E)_j^{n+1} - (\tilde{E})_j^n}{\Delta t}
+ \frac{\left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j+1/2}^{n+1} (\rho u)_{j+1/2}^{n+1} - \left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j-1/2}^{n+1} (\rho u)_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}
= \frac{\left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j+1/2}^{n} (\rho u)_{j+1/2}^{n+1} - \left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j-1/2}^{n} (\rho u)_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}
\tag{30}
$$

全エネルギーE_jに着目すると、解くべき式は次のようになる。

$$
\frac{(E)_j^{n+1} - (\tilde{E})_j^n}{\Delta t}
+ \frac{\left(\frac{E}{\rho}\right)_{j+1/2}^{n+1} (\rho u)_{j+1/2}^{n+1} - \left(\frac{E}{\rho}\right)_{j-1/2}^{n+1} (\rho u)_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}
= \frac{\left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j+1/2}^{n} (\rho u)_{j+1/2}^{n+1} - \left(\frac{E+p}{\rho}\right)_{j-1/2}^{n} (\rho u)_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}
- \frac{\left(\frac{p}{\rho}\right)_{j+1/2}^{n+1} (\rho u)_{j+1/2}^{n+1} - \left(\frac{p}{\rho}\right)_{j-1/2}^{n+1} (\rho u)_{j-1/2}^{n+1}}{\Delta x_j}
\tag{31}
$$

式(31)は、全エネルギーE_j^{n+1}以外は既知のため、BiCGStab 法行列ソルバーを用いて連立方程式として解くことができる。

2.4. SETS 法の適用性

SETS 法を含めた 5 種類の陰解法の適用性を陽解法と合わせて、表 1 に示す。適用性は多数の事例解析に基づいたものである。SETS 法は、他の陰解法と同等以上の幅広い適用性を有しているが、衝撃波管問題のような強圧縮性の解析はできても得られた解析結果の一部で物理的に説明できない不連続が見られたため、「△」としている。これは離散化方法等の見直しを必要があるものと考えられ、今後も精査していくつもりである。

表 1　陽解法と陰解法の適用性

No.	数値解法	圧力伝播	ガス	衝撃波	液体	大規模	定常計算	等温計算
1	陽解法	○	○	○	△	△	△	×
2	半陰解法 1	○	○	×	○	○	○	○
3	半陰解法 2	○	○	○	×	○	○	×
4	準陰解法 1	○	○	×	○	○	○	○
5	準陰解法 2	○	○	○	×	○	○	×
6	**SETS 法**	○	○	△	○	○	○	○

2.5. SETS 法の検証

SETS 法の検証のため、前報[4]で取り上げたバルブ閉鎖時の圧力伝播試験の解析を行った。図 1 に試験装置（重工メーカー様提供）に対する管路系解析モデルを示す。試験では、圧縮機で空気を供給し、開放端から空気を噴出させた定常状態後、電動閉止弁を 0.05 秒 で急閉止させて、観測点 P1～P5 での変動圧力を測定している。検証解析では、の青い部分、タンク以降からバルブ直下の開放端と閉止端までの管路系を対象とした。

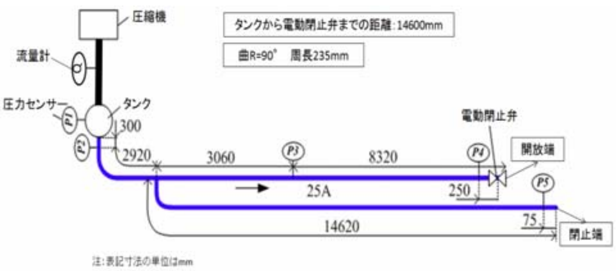


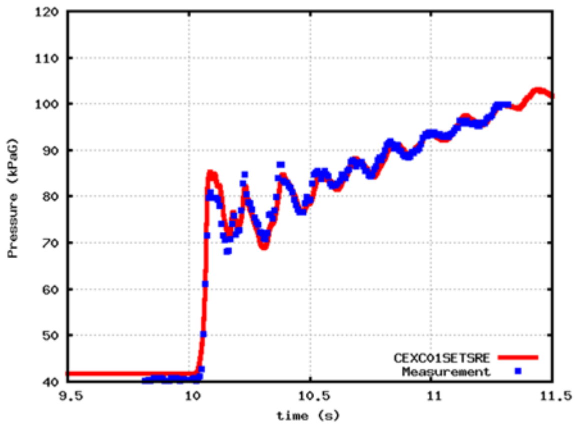
図 1　バルブ閉鎖時の圧力伝播試験解析の概要

解析で扱う気体は空気単成分であるが、流体物性は実在流体の混合流体として、空気の成分比に基づいて米国 NIST から有償で提供されている REFPROP[5]を用いて算定した。SETS 法による計算での時間刻み幅は、音速基準の Courant 数を 1.0 として自動で制御するようにした。

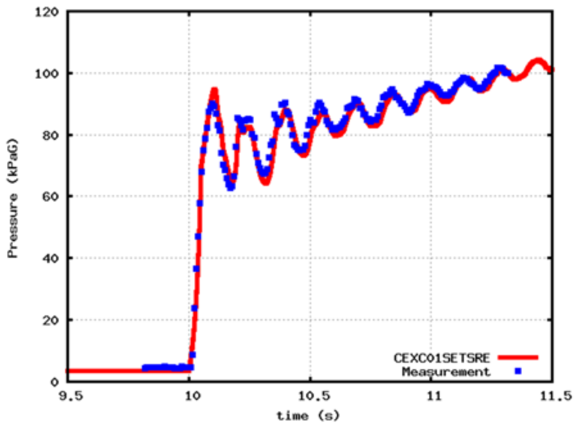
境界条件は、タンクに接続する流入部では、圧力はタンク圧による固定（Dirichlet）条件とし、温度は 20℃の Dirichlet 条件とした。バルブ直下の大気開放端では、大気圧による Dirichlet 条件とし、温度は勾配ゼロの Neumann 条件、流量は計算値とした。また、閉止端では、流量ゼロの Dirichlet 条件とし、圧力と温度は勾配ゼロの Neumann 条件とした。

定常計算 10 秒後に、末端のバルブを 0.05 秒で閉鎖させ、その後の圧力伝播挙動の解析を行った。

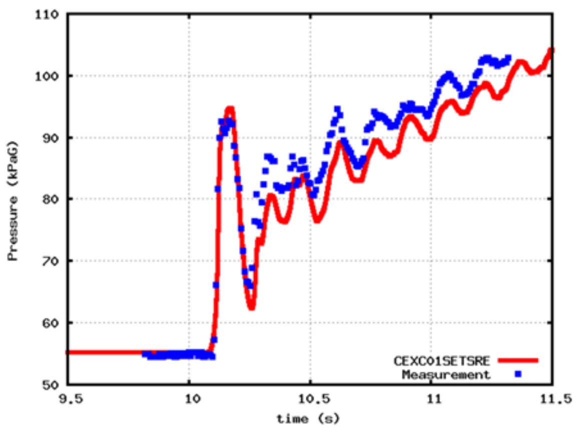
解析で得られた観測点 P3～P5 の圧力変化を試験結果と比較して図 2 に示す。太線は SETS 法による解析結果、四角マーク「■」で試験結果を表している。バルブ閉鎖後の圧力ピークや圧力振動の変化がよく一致して圧力伝播試験結果を再現しており、SETS 法の妥当性が確認できる。



(1) 観測点 P3



(2) 観測点 P4



(3) 観測点 P5

図 2 解析結果および試験結果との比較(SETS 法)

2.6. 大規模解析に対する性能検討

複雑な実規模管路網を用いて大規模解析に対する性能の検討を行った。検討に当たっては、陽解法と他の 4 種類の陰解法との性能比較を行った。表 2 に大規模解析に対する性能比較をまとめたものを示す。

本解析では、全長 110km の管路網をボリューム総数 800、ジャンクション総数 1,000、総格子数 12,000 でモデル化し、計算を 40,000 秒まで行った。Courant 条件として、陽解法では音速基準の Courant 数を 0.8、2 種類の半陰解法では流速基準の Courant 数を 0.5、2 種類の準陰解法と SETS 法では、Courant 数を 50.0 とした。なお、当モデルでは、ボリューム長さの関係から格子幅が 0.5m から 10.0m と幅広く、また、0.5m 幅の格子と 10.0m 幅の格子が隣接しているため計算不安定になりやすく、半陰解法では Courant 数を 0.5 以上にすることができなかった。

計算の実行時間の測定は次の計算機サーバーを用いて行った。

(a)OS : CentOS release 5.9
(b)CPU : Intel(R) Xeon(R) Processor X5660 12M Cache, 2.80 GHz
(c)Memory : 96.67GB

計算で得られた結果を比較すると、陽解法で見られる詳細な圧力伝播を除けば、全体の傾向は概ね一致した。陽解法での計算時間が 1,000 時間近くと 40 日以上も掛かっており、非現実的なものとなっている。陽解法に比べれば、陰解法での計算時間は現実的な範囲で収まっており、準陰解法では陽解法の 40 倍以上の高速化が得られ、SETS 法は 100 倍近い高速化が達成され特筆に値する。

計算時間のほとんどは圧力 Poisson 方程式の計算に費やしており、2 種類の準陰解法では全体の 90%を占め、SETS 法では全体の 70%以上占めている。SETS 法が 2 種類の準陰解法より少ないのは、圧力 Poisson 方程式の行列計算の反復回数が半分程度に抑えられているためであり、より効率的な計算を行っていることが分かる。

以上から、SETS 法が大規模解析に対して極めて有効な解析方法といえる。

表 2　大規模解析に対する陽解法と陰解法の性能比較

No.	数値解法	Courant 条件（注 1）	全タイムステップ数	計算時間(h)	高速化倍率（注 2）	反復回数（注 3）
1	陽解法	0.8	71,660,757	999.6	―	―
2	半陰解法 1	0.5	3,260,814	83.5	12.0	30
3	半陰解法 2	0.5	3,419,765	81.8	12.2	29
4	準陰解法 1	50.0	34,956	18.2	54.9	979
5	準陰解法 2	50.0	34,897	24.0	41.6	1,034
6	**SETS 法**	**50.0**	**35,130**	**10.2**	**98.0**	**471**

（注 1）ケース No.1 は音速基準、それ以外は流速基準
（注 2）陽解法に対する計算時間の比の逆数
（注 3）圧力 Poisson 方程式の行列計算の反復回数の 1 タイムステップ当たりの平均値

3. Lagrange 粒子モデル

流体解析では、空間を計算格子で分割して Euler 型の微分方程式を離散化して解いている。一方でトレーサーや空間を自由に動き回る粒子の解析では、このような Euler 型の計算方法では非効率な場合もあり、粒子の位置や速度を時間の関数として解く Lagrange 型の計算方法が適していることがある。そこで、Lagrange 型の計算方法を活用し、管路内の熱流体現象に加えて、Lagrange 粒子をトレーサー粒子と見立てて管路内の滞留時間の計測や管路内に混入した固体粒子や液滴などの粒子挙動が解析可能なモデルを開発し FrontNet/Γ への導入を試みている。本章では Lagrange粒子を活用した滞留時間計測モデルと粒子追跡モデルを紹介する。

3.1. 滞留時間計測モデル

ある時間に流体を配管入口から貯蔵して、ある時間に配管出口から取り出す場合を考える。流体と同じ速度で移動する Lagrange 粒子の移動距離 Δx[m]と貯蔵時間 T[s]を以下のように定義する。

$$\Delta x = u\Delta t \tag{32}$$

$$T = t_0 + \Delta t \tag{33}$$

ここで Δt は時間刻み幅[s]である。本式を解くことにより、配管内で Lagrange 粒子の位置にある流体がどれくらいの時間だけ貯蔵されているかを知ることができる。

図 3 に左上の入口境界から粒子を入れて右下の出口境界から粒子が出てくる計算結果を載せる。粒子が流体に輸送されている様子が分かる。

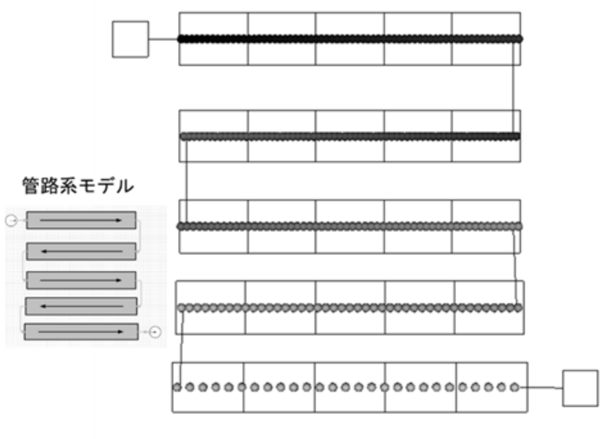


図 3　Lagrange 粒子の配管内の軌跡

以上のように Lagrange 粒子を用いた滞留時間計算では、流体のメッシュ分割数に依存せず、Lagrange粒子をどれくらいの頻度だけ流入させるかによって高精度な計算を行えることがメリットである。しかしながら、配管の合流部では一方から流入する Lagrange 粒子ともう一方から流入する Lagrange 粒子が異なる滞留時間を有しており、滞留時間の平均化の処理や、メモリ削減の観点から Lagrange 粒子の数を減らすなどの処理が必要である。

一方、Lagrange 粒子と同等の方法として、パッ

シブスカラーモデルを用いた方法がある。

$$\frac{\partial \rho\phi}{\partial t}+\frac{\partial \rho\phi u}{\partial x}=\rho\phi_s \tag{34}$$

ここでϕはパッシブスカラー、ρは流体密度、uは流速である。また、ϕ_sはパッシブスカラーのソースタームであり、本モデルでは 1.0[1/s]としている。以上の方法では、合流部の平均化処理のようなものは発生せず、滞留時間を流体と同じ解像度で求めることができる。

図 4 と図 5 にパッシブスカラーを用いた滞留時間の計算例を示す。バルブ遮断前は上下の配管は同等の流量が流れており、滞留時間の分布もほぼ同等である。バルブを遮断すると流速がゼロとなり、その位置に流体が滞留し、滞留時間が大きくなっていることが分かる。

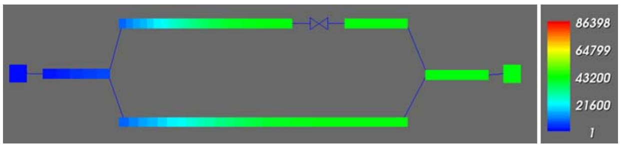


図 4　滞留時間計算
（パッシブスカラー使用、バルブ遮断前）

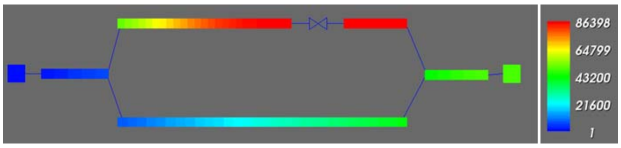


図 5　滞留時間計算
（パッシブスカラー使用、バルブ遮断後）

3.2. 固体粒子や液滴などの粒子追跡モデル

Lagrange 粒子をさまざまな物理粒子に適用することで、固体粒子、液滴、エアロゾル、気泡などの管路内挙動が解析できるようになれば、管壁への衝突、管壁の摩耗・損傷、付着・沈着などの評価の可能性を有している。本節では、FrontNet/T に試みとして導入している Lagrange 粒子による粒子追跡モデルの詳細を説明する。

3.2.1. 計算モデル

一個一個の粒子は、流動場の乱流と干渉しあいながら運動し、また、流動場との熱交換も生じる。本モデルは、粒子を Lagrange 的に取り扱い、Euler 的に解かれた流動場を移動する個々の粒子の軌跡として取り扱う DDM (Discrete Droplet Model)[6]や LDEF (Lagrangian Droplet Eulerian Fluid)[7][8] 法などを基本としている。個々の粒子の物理量は次の基礎方程式を解くことで評価される。

① 粒子軌跡算出式

$$\frac{d\boldsymbol{x}_p}{dt}=\boldsymbol{u}_p+\frac{\delta\boldsymbol{x}'_p}{\Delta\boldsymbol{t}} \tag{35}$$

ここで、$\boldsymbol{x}_p$は粒子の位置[m]、$\boldsymbol{u}_p$は粒子速度[m/s]、$\delta\boldsymbol{x}'_p$は乱流による粒子の位置変動 [m]である。なお、粒子軌跡、粒子速度、乱流による粒子の位置変動はベクトル量であり、いずれも次のように 3 成分を有している。

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_p &= \left(x_p, y_p, z_p\right)\\ \boldsymbol{u}_p &= \left(u_p, \mathrm{v}_p, \mathrm{w}_p\right)\\ \delta\boldsymbol{x}'_p &= \left(\delta x'_p, \delta y'_p, \delta z'_p\right)\end{aligned} \tag{36}$$

② 粒子の質量保存式

$$\frac{dm_p}{dt}=S_p \tag{37}$$

ここで、m_pは粒子の質量[kg]、S_pは蒸発や凝縮などの粒子個々の生成消滅速度[kg/s]である。

③ 粒子の運動量保存式

$$\begin{aligned}\frac{d\boldsymbol{u}_p}{dt}=\frac{3C_D\rho_f}{4d_p\rho_p}(\boldsymbol{u}_f+\boldsymbol{u}'_f-\boldsymbol{u}_p)|\boldsymbol{u}_f+\boldsymbol{u}'_f-\boldsymbol{u}_p|\\ +\left(1-\frac{\rho_f}{\rho_p}\right)\boldsymbol{g}+\frac{\delta\boldsymbol{u}'_p}{\Delta\boldsymbol{t}}+\frac{S_p\boldsymbol{u}_p}{m_p}\end{aligned} \tag{38}$$

ここで、上記運動量保存式は(x,y,z)の 3 方向について解かれ、右辺第 1 項は流体との抗力、右辺第 2 項は重力・浮力項を表し、C_Dは抗力係数[-]、$\boldsymbol{u}_f$は流速[m/s]、$\boldsymbol{u}'_f$は乱流による流速変動[m/s]、gは重力加速度[m/s^2]、$\delta\boldsymbol{u}'_p$は乱流による粒子の速度変動[m/s]を示す。なお、$\boldsymbol{u}_f$はベクトル量であるが、1 次元流れのため管路に沿った方向である x 方向のみ存在するが、$\boldsymbol{u}'_f$と$\delta\boldsymbol{u}'_p$は後述するように(x,y,z)の 3 方向で考慮される。

④ 粒子のエネルギー保存式

$$\frac{dm_p C_p T_p}{dt} = H_{pf} A_p (T_f - T_p) + S_p h_p \tag{39}$$

ここで、T_pは粒子の温度[K]、C_pは粒子の比熱[J/kg/K]、H_{pf}は粒子と流体との熱伝達係数[W/m^2/K]、A_pは伝熱面積[m^2]である。

抗力係数C_Dと熱伝達係数H_{pf}は次の構成方程式により求められる。

⑤ 抗力係数C_D

$$\begin{aligned} C_D &= 0.424, \quad (\mathrm{Re}_p > 1000) \\ &= \frac{24}{\mathrm{Re}_p}\left(1 + \frac{1}{6}\mathrm{Re}_p^{2/3}\right), \quad (\mathrm{Re}_p \le 1000) \end{aligned} \tag{40}$$

$$\mathrm{Re}_p = \frac{\rho_p |\boldsymbol{u}_f + \boldsymbol{u}_f' - \boldsymbol{u}_p| d_p}{\mu_f}$$

ここで、Re_pは粒子の Reynolds 数[-]である。

⑥ 熱伝達係数H_{pf}

$$\begin{aligned} H_{pf} &= \frac{k_p}{d_p}\left(2.0 + 0.55\mathrm{Re}_p^{0.5}\mathrm{Pr}^{1/3}\right), (\mathrm{Re}_p \le 1800) \\ &= \frac{k_p}{d_p}\left(2.0 + 0.34\mathrm{Re}_p^{2/3}\mathrm{Pr}^{1/3}\right), (\mathrm{Re}_p > 1800) \end{aligned} \tag{41}$$

ここで、k_pは粒子の熱伝導度[W/m/K]、d_pは粒子径[m]、Prは Prandtl 数[-]である。

乱流による流速変動$\boldsymbol{u}_f'$は乱流相関時間t_{turb}の経過の度に不連続に変化して与えられ、乱流の等方性を仮定して求められる。

乱流相関時間t_{turb}は渦消散時間t_{s1}と粒子が渦を横切る時間t_{s2}の小さい方として求める。

$$\begin{aligned} t_{turb} &= \min(t_{s1}, t_{s2}) \\ t_{s1} &= \frac{k}{\varepsilon} \\ t_{s2} &= 0.16432\frac{k}{\varepsilon}\sqrt{\frac{k}{|\boldsymbol{u}_f + \boldsymbol{u}_f' - \boldsymbol{u}_p|^2}} \end{aligned} \tag{42}$$

ここで、k は乱流エネルギー[m^2/s^2]、 ε は乱流エネルギー散逸[m^3/s^2]であり、管路の 1 次元流速$\boldsymbol{u}_f$や管路の等価直径を用いて、文献[9]に基づいて次のようにして得られる。

$$\begin{aligned} k &= \frac{3}{2}(\boldsymbol{u}_f I)^2 \quad I = 0.05\sim0.10 \\ \epsilon &= C_\mu^{3/4}\frac{k^{3/2}}{\delta} \quad C_\mu = 0.09 \quad \delta = 0.07D_e \end{aligned} \tag{43}$$

ここで、Iは乱流強度[-]、δは乱流特性長さまたは混合長さ[m]、D_eは管路の等価直径[m]を示す。

乱流による流速変動$\boldsymbol{u}_f'$は次の Gauss 分布に従うものとする。

$$\begin{aligned} G(\boldsymbol{u}_f') &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\exp\left[-\frac{(\boldsymbol{u}_f')^2}{2\sigma^2}\right] \\ \sigma &= \sqrt{\frac{2}{3}k} \end{aligned} \tag{44}$$

上記の式を解く場合、時間刻み幅$\Delta\mathrm{t}$と乱流相関時間t_{turb}の大小関係により次のよう処理する。

(1) $\Delta\mathrm{t} \le t_{turb}$

乱流による流速変動$\boldsymbol{u}_f'$の各成分は次のように式(44)をそのまま適用して求める。この場合、乱流による粒子の速度変動$\delta\boldsymbol{u}_p'$と位置変動$\delta\boldsymbol{x}_p'$ともゼロとする。

$$\begin{aligned} u_f' &= \sigma \cdot \mathrm{sign}(2\alpha_x - 1)\mathrm{erf}^{-1}(|2\alpha_x - 1|) \\ v_f' &= \sigma \cdot \mathrm{sign}(2\alpha_y - 1)\mathrm{erf}^{-1}(|2\alpha_y - 1|) \\ w_f' &= \sigma \cdot \mathrm{sign}(2\alpha_z - 1)\mathrm{erf}^{-1}(|2\alpha_z - 1|) \end{aligned} \tag{45}$$

ここで、α_x、α_y、α_zはそれぞれ[0,1]の一様乱数である。また、erf^{-1}は誤差関数の逆関数であり、範囲と結果が物理量に関係なく決まっているため、プログラム内部ではあらかじめ収束計算で求めてテーブル化を行って使用している。

(2) $\Delta\mathrm{t} > t_{turb}$

この場合、式(44)をそのまま適用することができないので、文献[8]に基づいて、乱流による流速変動$\boldsymbol{u}_f'$をゼロとし、乱流による粒子の速度変動$\delta\boldsymbol{u}_p'$と位置変動$\delta\boldsymbol{x}_p'$を次のようにして求める。

①粒子の速度変動$\delta\boldsymbol{u}_p'$

$$\begin{aligned} \delta u_p' &= \sigma_u \cdot \mathrm{sign}(2\alpha_x - 1)\mathrm{erf}^{-1}(|2\alpha_x - 1|) \\ \delta v_p' &= \sigma_u \cdot \mathrm{sign}(2\alpha_y - 1)\mathrm{erf}^{-1}(|2\alpha_y - 1|) \\ \delta w_p' &= \sigma_u \cdot \mathrm{sign}(2\alpha_z - 1)\mathrm{erf}^{-1}(|2\alpha_z - 1|) \\ \sigma_u &= \sigma\sqrt{\frac{1 - E_{Ktt}}{1 + E_{Ktt}}(1 + E_{Kdt}^2)} \end{aligned} \tag{46}$$

$$E_{Ktt} = \exp(-K_D t_{turb})$$
$$E_{Kdt} = \exp(-K_D \Delta t)$$
$$K_D = \frac{3C_D\rho_f}{4d_p\rho_p}\left|\boldsymbol{u}_f + \boldsymbol{u}'_f - \boldsymbol{u}_p\right|$$

②粒子の位置変動$\delta \boldsymbol{x}'_{\boldsymbol{p}}$

$$\delta x'_p = \delta u'_p t_{per} + \sigma_p \cdot \mathrm{sign}(2\alpha_x - 1)\mathrm{erf}^{-1}(|2\alpha_x - 1|)$$
$$\delta y'_p = \delta v'_p t_{per} + \sigma_p \cdot \mathrm{sign}(2\alpha_y - 1)\mathrm{erf}^{-1}(|2\alpha_y - 1|)$$
$$\delta z'_p = \delta w'_p t_{per} + \sigma_p \cdot \mathrm{sign}(2\alpha_z - 1)\mathrm{erf}^{-1}(|2\alpha_z - 1|)$$
$$t_{per} = t_{turb}\frac{1 - E_{Kdt}}{\sqrt{\frac{1 - E_{Ktt}}{1 + E_{Ktt}}(1 + E_{Kdt}^2)}} - \frac{1}{K_D} \tag{47}$$
$$\sigma_p = \sigma\sqrt{\sigma_x - (t_{per})^2\sqrt{\frac{1 - E_{Ktt}}{1 + E_{Ktt}}(1 + E_{Kdt}^2)}}$$
$$\sigma_x = t_{turb}\Delta t - 2t_{turb}\frac{1 - E_{Kdt}}{K_D} + \frac{\sqrt{\frac{1 - E_{Ktt}}{1 + E_{Ktt}}(1 + E_{Kdt}^2)}}{(K_D)^2}$$

ここで、σ_u、σ_p、σ_xは、粒子の速度変動や位置変動が Gauss 分布に従うと仮定したときの分散の平方根を示している。また、t_{per}は乱流持続時間[s]を表す。さらに、K_Dは、式(38)右辺の抗力項にある流体と粒子との相対速度$\left(\boldsymbol{u}_f + \boldsymbol{u}'_f - \boldsymbol{u}_p\right)$の係数に当たる。

粒子追跡モデルの数値計算では、式(35)から式(39)を次のように離散化することで、刻一刻の粒子の軌跡、質量、温度、速度を求めることができる。運動量保存式とエネルギー保存式の離散化に当たっては優対角化を図り、かつ、抗力係数がどんなに大きくなっても計算できるように離散化式の分母に位置するようにした。これにより、抗力係数が、例えば、無限大になっても計算できるようになり、この時の粒子速度は流速と一致する。すなわち、二流体モデルによる二相流解析における界面摩擦係数が無限大と見做せる均質流相当となる。

① 粒子軌跡算出式

$$x_p^{n+1} = x_p^n + \frac{1}{2}\left(u_p^{n+1} + u_p^n\right)\Delta\mathrm{t} + \delta x'_{\boldsymbol{p}}$$
$$y_p^{n+1} = y_p^n + \frac{1}{2}\left(v_p^{n+1} + v_p^n\right)\Delta\mathrm{t} + \delta y'_{\boldsymbol{p}} \tag{48}$$
$$z_p^{n+1} = z_p^n + \frac{1}{2}\left(w_p^{n+1} + w_p^n\right)\Delta\mathrm{t} + \delta z'_{\boldsymbol{p}}$$

② 粒子の質量保存式

$$m_p^{n+1} = m_p^n + \frac{1}{2}\left(S_p^{n+1} + S_p^n\right)\Delta\mathrm{t} \tag{49}$$

③ 粒子の運動量保存式

$$\left(\frac{1}{K_D\Delta t} + 1\right)u_p^{n+1} - \frac{S_p u_p^{n+1}}{m_p^{n+1}K_D}\mathrm{sign}(1.0, -S_p) = \frac{u_p^n}{K_D\Delta t} + \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p}\right)\frac{g_x}{K_D} + u_f + u'_f + \frac{\delta u'_p}{K_D\Delta t} + \frac{S_p u_p^n}{m_p^{n+1}K_D}\mathrm{sign}(1.0, S_p)$$
$$\left(\frac{1}{K_D\Delta t} + 1\right)v_p^{n+1} - \frac{S_p v_p^{n+1}}{m_p^{n+1}K_D}\mathrm{sign}(1.0, -S_p) = \frac{v_p^n}{K_D\Delta t} + \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p}\right)\frac{g_y}{K_D} + v_f + v'_f + \frac{\delta v'_p}{K_D\Delta t} + \frac{S_p v_p^n}{m_p^{n+1}K_D}\mathrm{sign}(1.0, S_p) \tag{50}$$
$$\left(\frac{1}{K_D\Delta t} + 1\right)w_p^{n+1} - \frac{S_p w_p^{n+1}}{m_p^{n+1}K_D}\mathrm{sign}(1.0, -S_p) = \frac{w_p^n}{K_D\Delta t} + \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p}\right)\frac{g_z}{K_D} + w_f + w'_f + \frac{\delta w'_p}{K_D\Delta t} + \frac{S_p w_p^n}{m_p^{n+1}K_D}\mathrm{sign}(1.0, S_p)$$

ここで、$S_p = \frac{1}{2}\left(S_p^{n+1} + S_p^n\right)$である。

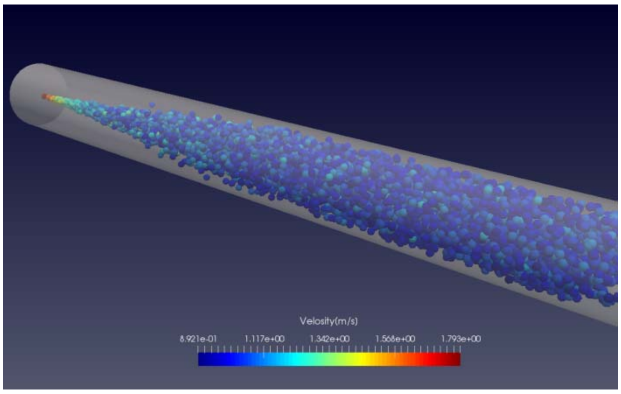
④ 粒子のエネルギー保存式

$$\left[\frac{(m_p C_p)^{n+1}}{\Delta\mathrm{t}} + (H_{pf}A_p)^{n+1}\right](T_p)^{n+1} = \frac{(m_p C_p T_p)^n}{\Delta\mathrm{t}} + (H_{pf}A_p T_f)^{n+1} + \frac{1}{2}\left(S_p^{n+1}h_p^{n+1} + S_p^n h_p^{n+1}\right) \tag{51}$$

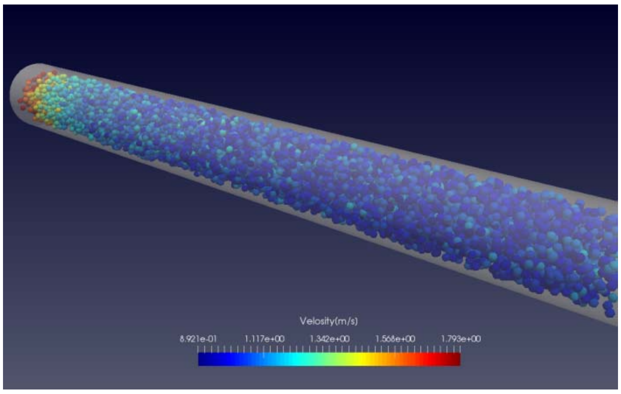
3.2.2. 試計算

FrontNet/Γ に導入した粒子追跡モデルは開発段階で可能な計算が限られているため、直径 1m、長さ 10m の簡単な単管体系を用いた試計算を行った。試計算では、流速が 1.0m/s の定常流れにおいて、粒子を 2.0m/s で入射し、3 つの入射パターンの計算を行った。

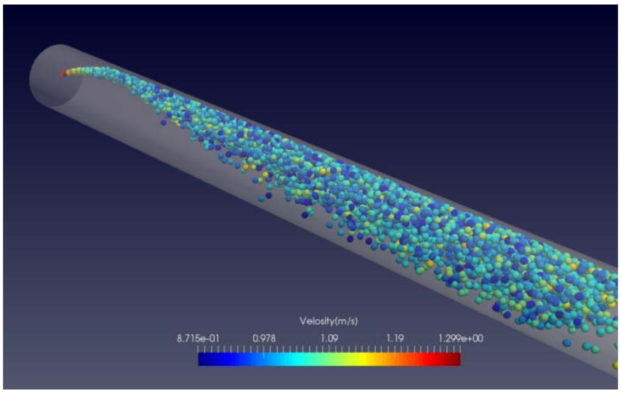
図 6 に①管路中心から管路方向に入射、②管路全面から管路方向に入射、③管路中心から斜め方向に入射の 3 パターンの試計算結果を示す。



① 管路中心から管路方向に入射



② 管路全面から管路方向に入射



③ 管路中心から斜め方向に入射

図 6 粒子追跡モデルの試計算結果

管路中心から管路方向に粒子を入射させた場合、粒子が乱流の影響を受けて拡がっていく様子が計算できている。また、粒子の速度は流体との抗力により最終的な流速と同等になっている。

管路全面から管路方向に入射させた場合、粒子は乱流の影響によりまっすぐ進まないため、適度に分散している様子が見られる。さらに、管路中心から斜めに粒子を入射させた場合、管路壁で粒子が反射して、下流に拡がっていく様子が見られる。

以上から、試計算では物理的に妥当な結果が得られ、FrontNet/Γ の導入段階である程度の完成が見られた。今後は、単管の他、合流分岐への対応、さまざまな現象に対する物理モデルの開発・実装を行っていく予定としている。

4. 移動物体との連成モデル

流体中を物体が移動して流体がその影響を受けるような解析はさまざまな分野で行われており、設計や品質改良、コスト削減などモノづくりに貢献している。例えば、回転翼周りの流体解析や、津波漂流物の解析、トンネル内の車両通過による気流解析や、自動ドア開閉時の人体移動気流解析などさまざまな例が挙げられる。

本章では、配管やトンネルなどの 1 次元近似がよく成り立つ系を対象として、FrontNet/Γ への導入を検討している FAVOR 法[10][11][12]による移動物体との連成モデルについて、管路系流体への適用方法を紹介する。

FAVOR 法では 1 つのメッシュ内で多孔質物体による流動抵抗を用い、移動物体を扱う場合は体積占有率と面開口率を時々刻々変化させる。車両等の移動物体が流路を通過する際のイメージを図 7 に示す。

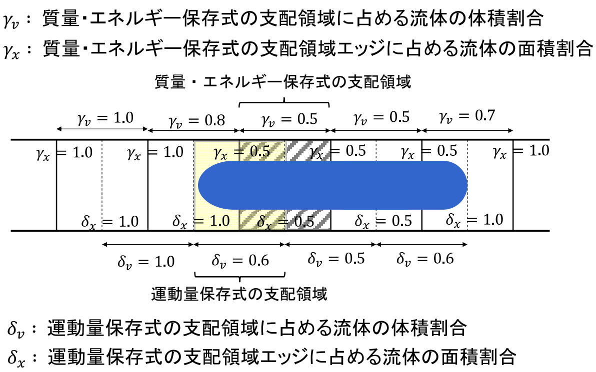


図 7　流路内移動物体の FAVOR 法のモデル化

FAVOR 法では体積占有率（ポロシティ）と面開口率を次のように定義する。なお、スタガード格子の採用により運動量と質量・エネルギー保存式の定義位置が異なるため、それぞれの体積占有率（ポロシティ）と面開口率を個別に扱う。

(1) 質量・エネルギー保存式の場合

① 体積占有率（ポロシティ）

$$\gamma_V = V_{fluid}/V_{mesh} \tag{52}$$

② 面開口率

$$\gamma_x = A_{fluid}/A_{mesh} \tag{53}$$

ここで、V_{mesh} はメッシュ体積、A_{mesh} はメッシュ断面積、V_{fluid} は流体が存在できる体積、A_{fluid} は流体が通過できる面積である。なお、いずれも質量・エネルギー保存式の支配領域で定義される。

(2) 運動量保存式の場合

① 体積占有率（ポロシティ）

$$\delta_V = V_{fluid}/V_{mesh} \tag{54}$$

② 面開口率

$$\delta_x = A_{fluid}/A_{mesh} \tag{55}$$

ここで、V_{mesh} はメッシュ体積、A_{mesh} はメッシュ断面積、V_{fluid} は流体が存在できる体積、A_{fluid} は流体が通過できる面積である。なお、いずれも運動量保存式の支配領域で定義される。

FAVOR 法を FrontNet/Γ に導入するに当たり、上記の体積占有率と開口率を用いて基礎方程式を以下のように書き換える。

① 質量保存式

$$\frac{\partial \gamma_V \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \gamma_x \rho u = 0 \tag{56}$$

② 運動量保存式

$$\frac{\partial \delta_V \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot \delta_x \rho u u + \delta_x \nabla p + \delta_V \frac{1}{2}\frac{K}{L}\rho u^2 - \delta_V \rho g \sin\theta = 0 \tag{57}$$

③ エネルギー保存式

$$\frac{\partial \gamma_V E}{\partial t} + \nabla \cdot \gamma_x (E+p)u - \gamma_V \frac{HA_w(T_w - T_f)}{V_{fluid}} = 0 \tag{58}$$

移動する物体に合わせて、体積占有率と開口率を刻一刻変化させながら、質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式を陽解法または陰解法で解くことで、移動物体の影響を受けた流路内の流動場が計算される。

5. 多成分気液二相流解析モデル

多成分気液二相流は、化学反応やガス吸収などの複雑な現象を伴う化学装置や施設、LNG やガソリンなどに関連する施設などの多くの工業分野で見られ、多様な装置スケールや形状、さまざまな運転条件に対する設計の高精度化や安全性評価の高度化などには、多成分気液二相流解析のシミュレーションを必要としている。

本章では、FrontNet/Γ への多成分気液二相流解析モデルの導入を前提に、管路系流体への多成分気液二相流解析モデルの適用方法を紹介する。なお、ここでの多成分系では、気相も液相も多成分系として取り扱うものとする。また、気相では非凝縮性ガスも考慮し、場合によっては、非凝縮性ガスの液相への溶解や析出も考慮できるように検討する。

5.1. 基礎方程式

多成分気液二相流解析モデルの基礎方程式は、気相と液相の質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式と、気相、液相それぞれを構成する各成分の質量保存式から成り、次の通りである。

① 質量保存式

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k u_k - \Gamma_k = 0 \tag{59}$$

② 運動量保存式

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_k \rho_k u_k}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k u_k u_k + \alpha_k \nabla p + \alpha_k \frac{1}{2}\frac{K}{L}\rho_k u_k^2 \\ + C_k^i (u_k - u_{k'})|u_k - u_{k'}| + F_{vm} \\ - \alpha_k \rho_k g \sin\theta - u_k \Gamma_k = 0\end{aligned} \tag{60}$$

③ エネルギー保存式

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha_k E_k}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k (E_k + p) u_k - \alpha_k \frac{H_k A_{wk} (T_w - T_k)}{V_{fluid}} \\ - H_k^i A_k^i (T_k^i - T_k) - h_k^i \Gamma_k = 0\end{aligned} \tag{61}$$

④ 各成分の質量保存式

$$\frac{\partial \alpha_k \rho_k Y_{k,n}}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k \rho_k Y_{k,n} u_k - \Gamma_{k,n} = 0 \tag{62}$$

基本変数は第 2.2 節で示した変数と同記号であれば同じである。第 2.2 節にないものとして、添字 k は気相または液相を示し、$k=g$ なら気相、$k=l$ なら液相を示す。上添字の i は気液界面、添字 n は各相を構成する成分を示し、添字 k,n は k 相中の成分 n を表している。

その他、α は体積分率(ボイド率) [-]、Y は質量分率[-]、Γ_kは蒸発、凝縮、化学反応、溶解、析出などによる生成消滅速度[kg/m³/s]、C_k^iは気液界面摩擦係数[kg/m⁴]、$u_{k'}$はある相に対する別の相の流速[m/s]、F_{vm}は仮想質量力[kg/m²/s²]、H_kは固体壁との熱伝達係数[W/m²/K]、H_k^iは気液界面熱伝達係数[W/m²/K]、A_k^iは気液界面積[m²/m³]、T_k^iは気液界面各相側の飽和温度[K]、h_k^iは気液界面各相側の飽和エンタルピー[J/kg]を示している。

気液各相の主要変数と各相を構成する成分の変数との関係は次の通りである。

各相各成分の体積分率の総和は各相の体積分率と等しく、各相の体積分率の総和を 1.0 とし、各相各成分の質量分率の総和を 1.0 とする。式(59)と式(62)を両立させるために、このようにする必要がある。

⑤ 体積分率と質量分率

$$\begin{gathered}\sum_k \alpha_k = 1.0 \\ \sum_n \alpha_{k,n} = \alpha_k \\ \alpha_{k,n} = \frac{Y_{k,n} \alpha_k \rho_k}{\rho_{k,n}} \\ \sum_n Y_{g,n} = 1.0, \quad \sum_n Y_{l,n} = 1.0\end{gathered} \tag{63}$$

⑥ 各相の密度

$$\alpha_k \rho_k = \sum_n \alpha_{k,n} \rho_{k,n} \tag{64}$$

⑦ 生成消滅速度による質量・エネルギー変化

$$\begin{gathered}\Gamma_k = \sum_n \Gamma_{k,n} \\ h_k^i \Gamma_k = \sum_n h_{k,n}^i \Gamma_{k,n}\end{gathered} \tag{65}$$

5.2. 構成方程式

以上の基礎方程式を完結させるためには、以下の構成方程式が必要となる。

① 蒸発、凝縮、化学反応、溶解、析出などによる生成消滅速度Γ_k
② 気液界面摩擦係数C_k^i
③ 気液界面熱伝達係数H_k^i
④ 気液界面積A_k^i
⑤ 仮想質量力F_{vm}
⑥ 固体壁との熱伝達係数H_k

単成分であれば、生成消滅速度は次の気液界面のエネルギー保存式を解くことで得られる。気液界面現象の時間スケールは流体の時間スケールより遥かに小さいとして、次のエネルギー保存式が成り立つ。

$$\begin{gathered}H_g^i A_g^i (T_g^i - T_g) + H_l^i A_l^i (T_l^i - T_l) + h_g^i \Gamma_g + h_l^i \Gamma_l = 0 \\ T_g^i = T_s \quad T_l^i = T_s \quad h_g^i = h_{gs} \quad h_l^i = h_{ls} \quad \Gamma_g = -\Gamma_l\end{gathered} \tag{66}$$

上式より、Γ_gを未知数、他を既知とすれば、生成消滅速度を求めることができる。さらに、式(66)

の各項を各相のエネルギー保存式に振り分けて与えることで完結する。

しかしながら、多成分系では、生成消滅速度やエンタルピーは各成分で異なるため、単成分のような簡単な方法で得ることができない。多成分系での気液界面のエネルギー保存式は次の通りである。

$$H_g^i A_g^i \left(T_g^i - T_g\right) + H_l^i A_l^i \left(T_l^i - T_l\right) + \sum_n h_{g,n}^i \Gamma_{g,n} + \sum_n h_{l,n}^i \Gamma_{l,n} = 0 \tag{67}$$

多成分系の計算方法として、各成分の蒸発または凝縮による生成消滅速度を、炭化水素系で利用されている物質伝達に基づく Reed の式[13]や Mackay の式[14]、および熱伝達と物質伝達のアナロジーに基づくモデル[15][16]などを用いて求め、界面熱伝達の片方の相側を既知とし、一方の相側の界面熱伝達を未知として求める方法が考えられる。

気液界面摩擦係数、気液界面熱伝達係数、気液界面積、仮想質量力について、RELAP5[17]や TRACE[3]で代表される原子力安全解析コードに実績豊富な構成方程式が数多く組み込まれているので、これらを参考に用意すればよい。気相の体積分率が同じであっても気泡流とスラグ流では気液界面積が大きく異なる。そのため、構成方程式は、気泡流、スラグ流、噴霧流などの流動様式ごとに用意されており、垂直流と水平流での流動様式を判別するマップが必要となる。気液二相流の流動様式のパターンとマップの例を図 8 と図 9 に示す。

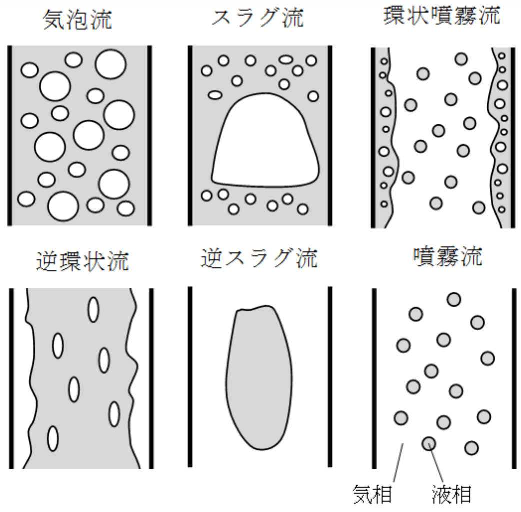


図 8　流動様式パターン例[18]

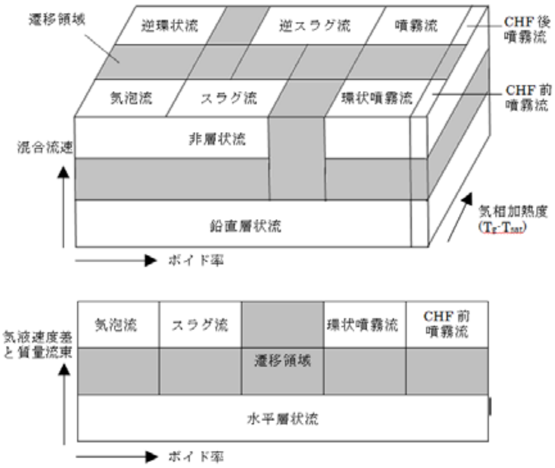


図 9　流動様式マップ例[18]

流動様式マップも上記の原子力安全解析コードに実績豊富なマップが用意されており、ボイド率、質量流束や体積流束、気液相対速度、沸騰状況などで判別して流動様式を決定している。

固体壁との熱伝達係数は、サブクール沸騰、バルク沸騰、遷移沸騰、膜沸騰などの沸騰曲線に応じた構成方程式が必要であり、これらの熱伝達係数の構成方程式も上記の原子力安全解析コードに詳細なモデルが用意されており、利用可能である。熱伝達係数の構成方程式の他、遷移沸騰や膜沸騰の判別のための構成方程式、例えば、限界熱流束や最小膜沸騰温度などの構成方程式も用意する必要がある。

ただし、極低温流体では原子力安全解析コードで利用されている熱伝達係数の構成方程式を適用することが難しいので、専用の構成方程式が必

要となるが、航空宇宙や超電導などの分野で数多くの研究開発が行われているので参考となる。

5.3. 物性

基礎方程式や構成方程式には、数多くの物性データが必要である。主要なものとして、未飽和、飽和、過飽和に至る幅広い範囲での状態に対する、密度、エンタルピー、内部エネルギー、比熱、粘性係数、熱伝導度などが必要である。また、飽和状態では、気相と液相に対する、飽和密度、飽和エンタルピー、飽和内部エネルギーなどの他、表面張力、飽和圧力、飽和温度なども必要となる。いずれも、圧力と温度に対する物性関数または数値としての物性テーブルとして用意する必要がある。さらには、多成分系では、各成分の圧力に対する飽和濃度、拡散係数、活量係数なども必要となる。

これらすべてを多成分系の各成分で物性関数または物性テーブルを用意することは並大抵のことではない。しかしながら、米国 NIST から物性関数プログラム REFPROP[5]が有償ながら入手することができ、水を含めて、水素、酸素、窒素、アンモニア、ヘリウムの他、メタン、エタン、プロパン、ヘプタン、ヘキサンなどの炭化水素系、メタノール、エタノールなどのアルコール系、ベンゼンなどの芳香族、さらには代替フロンの物性を、温度として極低温から 1,000K 程度、圧力として数 Pa から数 10MPa の幅広い範囲で、REFPROP に内蔵されている関数プログラムを用いて自由に取り出すことが可能である。例として、図 10 に REFPROP を用いて得られた炭化水素と水の温度に対する飽和圧力（飽和蒸気圧）曲線を示す。

FrontNet/Γ でも REFPROP を利用して、20 種類程度の純物質の物性テーブルを用意している。また、REFPROP では混合物の物性の算出が可能であるため、純物質に加えて、空気、都市ガス CG13A、LPG などの物性テーブルも用意している。

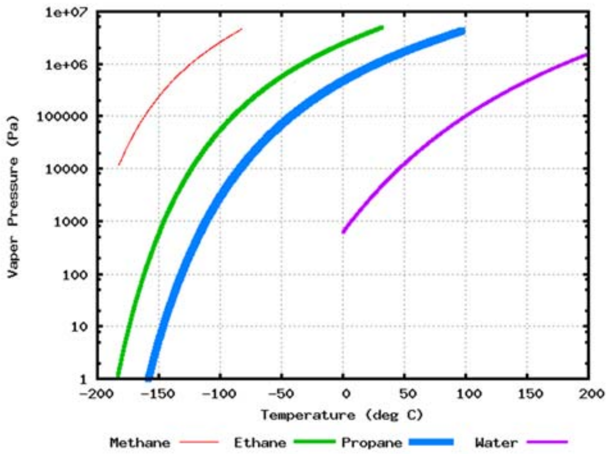


図 10　対温度飽和圧力曲線(REFPROP)

5.4. 数値解法

FrontNet/Γ への多成分気液二相流解析モデルの導入に当たっての基本方針は次の通りである。

① 保存性と計算安定性の優れたスタガード格子系とする。
② 基礎方程式の対流項の離散化は、一次精度風上差分法または高次精度の制限関数付きの TVD 法[21]とする。
③ 時間積分は陰解法とし、実用性を重視して Newton 法などの反復解法を用いないこととする。
④ 実用面から Courant 数として 1.0 以下の制限がある半陰解法ではなく、運動量保存式、質量保存式、エネルギー保存式の各連立方程式を解く陰解法を採用し、Courant 数の制限を受けないようにする。
⑤ 運動量保存式においては、生成消滅項を省略することが可能な非保存系に書き換えた式とする。
⑥ 圧力や温度の大きな変化に対応できるように、SIMPLE 系のような分離解法ではなく、圧力、流速、エネルギーが強く結びついた解法とする。

以上から、原子力熱水力解析コード TRACE[3]で採用されている SETS 法を基本として、基本式を解く半陰解法の部分を、反復計算を行わない RELAP5[17]の解法を採用することとしたい。

RELAP5 の解法はおおよそ次の通りである。なお、SETS 法については、第 2 節で示したものと同等であるので参考とされたい。

① 運動量保存式の圧力項を陽的に扱い、流速の予測値を求める。
② 流速の予測値、新しい時刻の流速、圧力修正量の関係式（流速と圧力の関係式）、および圧力修正量に対する流速修正のため係数を求める。
③ 質量保存式とエネルギー保存式に、流速と圧力の関係式と状態方程式を代入して圧力だけの方程式を作成する。
④ 圧力だけの方程式となった質量保存式とエネルギー保存式を縮約して、圧力のみの連立方程式である圧力 Poisson 方程式の行列と荷重ベクトルを作成する。
⑤ 圧力 Poisson 方程式の行列と荷重ベクトルから BiCGStab 法行列ソルバーを用いて解き、圧力修正量を求める。
⑥ 圧力修正量を用いて、新しい時刻の圧力と流速を求める。
⑦ 新しい時刻の圧力と流速を、質量保存式、エネルギー保存式、状態方程式に代入して、密度、エンタルピー、温度、ボイド率などを求める。

RELAP5 や TRACE の数値解法は単成分を対象としているため、そのままでは多成分系への適用が難しい。そこで、文献[19]の従来の混相流の数値解法を多成分系に拡張した数値解法も参考として、多成分気液二相流解析に対するより適切な数値解法を検討することとする。

6. おわりに

本稿では、陰解法として新たに導入した SETS 法と、新たな取り組みとしての Lagrange 粒子を活用したモデル、移動物体との連成モデル、多成分気液二相流解析モデルを紹介した。移動物体との連成モデル、多成分気液二相流解析モデルについては、数年後の完成を目指して開発を進めていく予定としている。今後、新たに取り組んでいる解析機能について、試験等による検証解析や実規模による実証解析がなされた段階で報告する予定としている。

参考文献

[1] 秋村, 大須賀, 三橋, “管路系流体解析ソフトウェアへの陰解法導入による計算効率の向上性検討”, アドバンスシミュレーション vol.24 (2017).

[2] J. H. Mahaffy, "A stability enhancing two-step method for one-dimensional two-phase flow", Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-7951-MS, US Nuclear Regulatory Commission Report NUREG/CR-0971 (1979).

[3] U.S. NRC, "TRACE V5.0 THEORY MANUAL Field Equations, Solution Methods and Physical Models", https://www.nrc.gov/docs/ML0710/ML071000097.pdf (2008).

[4] 大須賀, 秋村, 三橋, “圧力伝播解析への数値解析モデルの適用性検討”, アドバンスシミュレーション vol.24 (2017).

[5] REFPROP, https://www.nist.gov/srd/refprop.

[6] A. D. Gosman and R. J. R. Johns, “Computer Analysis of Fuel-Air Mixing in Direct-Injection Engines”, SAE Tech. Report No. 800091(1980).

[7] J. K. Dukowicz, “A particle-fluid numerical model for liquid sprays”, J. Compu.t Phys. 35(2) (1980).

[8] P. J. O’Rourke, “Statistical Properties and Numerical Implementation of a Model for Droplet Dispersion in a Turbulent Gas”, J. Compu.t Phys. 83 (1989).

[9] http://www.geocities.jp/penguinitis2002/study/note/turbulence_model.pdf.

[10] W. Hirt et al, “A Porosity Technique for the Definition of Obstacle in Rectangular Cell Meshes” 4th Int. Conf. on Numerical Ship Hydrodynamics, 1985. Washington DC.

[11] 森川 泰成, “移動境界問題に関する気流の数値シミュレーション技術-FAVOR 法の適用例”, 大成建設技術研究所報(1990).

[12] 米山望他, “FAVOR 法を用いた陸上遡上津波に伴う漂流物挙動の数値解析”, 水工学論文

集, 52 (2008).

[13] Reed, M., et. al., “A Coastal Zone Oil Spill Model: Development and Sensivity Studies”, Oil & Chemical Pollution 5(1989)411-449.

[14] Mackay, D., et. al., “Oil Spill Behavior and Models”, Report EE-8, University of Toronto, Report to Enviroment Protection Service, Ottawa, Ontario, Canada(1980).

[15] 武居, “混相流体力学 その 1 基礎力学編”, 千葉大学.

[16] 大野他, “ナトリウム燃焼解析コード ASSCOPS の開発と検証”, サイクル機構技報, No. 11, (2001).

[17] V. H. Ransom, et. al., "RELAP5/MOD3.3 Code Manual Volume I: Code Structure, System Models, and Solution Methods", NUREG/CR-5535 (2003).

[18] 浜野、吉岡他, “原子炉熱水力解析プログラムの概要 －RELAP5 と TRACE の実際－”, アドバンスシミュレーション vol.10 (2011).

[19] 島田, 富山他, “化学反応・ガス吸収・熱輸送を伴う気泡塔内気泡流の数値解法”, 化学工学論文集 31(6), 377-38 7(2005).

[20] H. A. van der Vorst, “Bi-CGSTAB : a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems”, SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing (1992). 13(2):631–644.

[21] Chakravarthy, S.R. Osher, S., "High resolution applications of the Osher upwind scheme for the Euler equations", Proc. AIAA 6th Computational Fluid Dynamics Conference, pp. 363–373, AIAA Paper 83-1943 (1983).

※ 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。）