改良 SOLA 法による断熱二流体モデルの数値解法* (第2報, 相遷移の取扱い方と数値計算例)

平野 雅 司^{*1}, 富山 明 男^{*2}

A Numerical Method for an Adiabatic Two-Fluid Model Based on the Modified SOLA Method (2nd Report, A Numerical Treatment for Phase Transition and Sample Calculation)

Masashi HIRANO and Akio TOMIYAMA

In the first report of the present study, a numerical solution method for an adiabatic two-fluid model was developed based on the modified SOLA (Solution Algorithm) method. In this second report, a numerical treatment is discussed for the case when a phase occupying a computational cell is changed with time from single phase to two-phase or vice versa, which is defined as a phase transition. In addition, the numerical method with a treatment for the phase transition is applied to a numerical benchmark problem. The problem is to calculate two-dimensional sedimentation due to gravitational force. The problem is suitable to discuss the numerical method for an adiabatic two-fluid model including the treatment for the phase transition. The calculated results are qualitatively well understood, and therefore, it is confirmed that the present method is applicable to the transient two-phase flow analyses including the phase transition.

Key Words: Computational Fluid Dynamics, Multi-phase Flow, Finite Difference Method, Modified SOLA Method, Adiabatic Two-Fluid Model, Phase Transition, Two-Dimensional Sedimentation

1. 緒 言

SOLA (Solution Algorithm) 法⁽¹⁾ は, 単相の非圧縮性粘性流の数値解法として, SMAC (Simplified Marker and Cell) 法⁽²⁾ などともに広く用いられている。既報⁽³⁾⁽⁴⁾ では, SOLA 法の反復過程にノイマン形の境界条件の影響を適切に考慮することにより, 反復収束特性の改良を達成した。第1報⁽⁵⁾ では, この改良 SOLA 法を基に, 圧縮性を考慮した断熱二流体モデル基礎式に適用可能な数値解法を提案した。この解法は, アルゴリズムが単純でプログラム化が容易であるという特徴を有している。本報では, この数値解法の有効性を検証するとともに, ある計算セルが時間の経過とともに単相状態から二相状態, または, 二相状態から単相状態へと遷移する場合(以下, 相遷移と呼ぶことにする)の数値的な取扱いを検討することを目的として, この解法を二相流数値解法の基礎的な検証問題に適用する。計算対象とした検証問題は, 重力による二次元の気液置換問題であり, これは, 1985年に米国エネルギー省(USDOE)と米国電力研究所(EPRI)後援

の基に, 研究者グループ二相流の基礎(Two-Phase Flow Fundamentals)が提唱した二相流数値ベンチマーク問題⁽⁶⁾ のうちの一つである。この数値ベンチマーク問題では, 解くべき二相流モデルの基礎式, 構成式, 状態方程式, 幾何形状, メッシュ分割, 時算刻み幅などの計算に必要なすべての条件が指定されており, 数値解法の妥当性のみが検討対象となっている。

二相流の数値解法を現実的な問題に適用する場合の困難の一つに, 相遷移の取扱いがある。その困難の回避法の一つとして, 単相状態で実際には存在しない相(ない相と呼ぶ)が微小な体積率で存在すると仮定して, 常に二相状態の差分方程式を解く方法が, 特に一次元計算では広く用いられている⁽⁷⁾。この方法を採用しても, 相遷移時の諸量の不連続を回避したり, ない相を微小な体積率で安定に存在させるためには, 採用する数値解法に応じて何らかの工夫が施される必要がある。ただし, こうした相遷移の取扱いについては, 通常, 数値実験などによる試行錯誤を通して経験的に作られるものであるため, これまであまり議論がなされていない。

本報では, まず, 第1報で示した数値解法の概要を述べる。次に, それに適合した相遷移の取扱方法を示す。この方法は, 圧力補正方程式を解くための反復計

* 原稿受付 平成4年6月1日。

^{*1} 正員, 日本原子力研究所(〒319-11 茨城県那珂郡東海村白方白根2-4)。

^{*2} 正員, 神戸大学工学部(〒657 神戸市灘区六甲台町1-1)。

算に入る前に、すべての計算セルで二相状態であると仮定し、反復の過程で一方の相の体積率が負と計算された場合、単相状態を仮定した式に乗り移る方法である。さらに、第1報で提案した解法に、この相遷移の取扱いを組み込み、先に述べた検証問題に適用した結果を示す。この検証問題は、すべての計算セルで、初期には単相(気相または液相)であったものが時間の経過とともに二相状態となり、さらに、多くの計算セルで最終的には再び単相状態に移行するものであり、相遷移の取扱いの妥当性を検討するのに適当な問題である。

2. 改良 SOLA 法に基づく断熱二流体モデルの数値解法の概要

SOLA 法は、SMAC 法における圧力補正量に関するポアソン方程式の求解部分を、流速と圧力の同時反復解法に変更した解法であり、SMAC 法に比べアルゴリズムが単純である。SOLA 法では、スタガードメッシュを採用し、質量保存式(連続の式)と運動量保存式の圧力こう配項を陰的に、他の項を陽的に差分する、いわゆる半陰解法である。圧力補正方程式としては、各計算セルでの質量保存式からのずれを取り、それを、加速係数 ω を考慮したニュートン法で解く。その際、ヤコビ行列に対して、優対角近似を施す。すなわち、

$$\delta p^{l+1} = -\omega \nabla \cdot \mathbf{v}^l / \left\{ \frac{\Delta t}{\rho} \left(\frac{c_x}{\Delta x^2} + \frac{c_y}{\Delta y^2} + \frac{c_z}{\Delta z^2} \right) \right\} \quad \dots\dots\dots (1)$$

とする。ここで、 δp は圧力補正量、 ρ は流体密度、 $\mathbf{v}$ は流速、 Δt は時間刻み幅、 $\Delta m(m=x,y,z)$ は、 m 方向の空間刻み幅とする。 $c_m(m=x,y,z)$ は、改良 SOLA 法で導入したパラメータであり、原版の SOLA 法では、 $c_x=c_y=c_z=2$ である。原版の SOLA 法では、式(1)にノイマン形の境界条件の影響が考慮されていない。そこで、既報⁽³⁾⁽⁴⁾では、

$c_m=1$: m 方向の速度成分を規定する境界に接する場合

2 : その他の場合 ($m=x,y,z$) $\dots\dots\dots (2)$

とする改良法を提案し、これにより、反復収束特性の改善を達成した。さらに、第1報⁽⁴⁾では、この改良 SOLA 法を圧縮性を考慮した断熱二流体モデル基礎式に適用できるように拡張した。

断熱二流体モデルの基礎式は、運動量保存式を保存形で表示すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \alpha_k \rho_k + \nabla \cdot \mathbf{m}_k &= 0 \quad \dots\dots\dots (3) \\ \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{m}_k + \nabla (\mathbf{m}_k \mathbf{v}_k) &= -\alpha_k \nabla p + \mathbf{F}_{\text{visc},k} \end{aligned}$$

$$+ \mathbf{F}_{ik} + \alpha_k \rho_k \mathbf{g}_k (k=g,l) \quad \dots\dots\dots (4)$$

と書ける。ここで、 k は気相(g)または液相(l)、 α は体積率、 $\mathbf{m}$ は運動量($=\alpha \rho \mathbf{v}$)、 p は圧力、 $\mathbf{F}_i$ は気液運動量輸送項、 $\mathbf{F}_{\text{visc}}$ は粘性項を意味する。ただし、 $\mathbf{F}_{ig} = -\mathbf{F}_{il}$ である。式(3)、(4)の従属変数は p と $\mathbf{m}$ である。変数配置は図1に示すスタガードメッシュとする。計算セル番号は斜体文字 i, j, k で表示する。圧力の補正方程式は、各計算セルでの気液両相の体積バランスから得られる。すなわち、圧力補正方程式の i, j, k の成分を

$$f_{i,j,k} = \sum_k \eta_k^{n+1} \alpha_{k,i,j,k}^{n+1} - 1 \quad \dots\dots\dots (5)$$

と定義する。ここで、式(3)より

$$\alpha_{k,i,j,k}^{n+1} = \frac{1}{\rho_{k,i,j,k}^{n+1}} (\alpha_{k,i,j,k}^n \rho_{k,i,j,k}^n - \Delta t \nabla_{i,j,k} \cdot \mathbf{m}_{k,i,j,k}^{n+1}) \quad \dots\dots\dots (6)$$

である。式(6)の中の ρ_k^{n+1} は状態方程式 $\rho_k = \rho_k(p)$ より p^{n+1} の関数である。また、 η_k は、後に説明するように相状態を表すパラメータであり、二相状態では両相に対して1である。以後、特に混乱のない場合を除いては、添字 i, j, k を省略する。式(5)、(6)にニュートン法と優対角近似を適用すると、ニュートン法の $l+1$ 回目の反復における圧力の補正量として、

$$\begin{aligned} \delta p^{l+1} &= \omega \left\{ \sum_k \frac{\eta_k^l}{\rho_k^l} (\alpha_k^n \rho_k^n - \Delta t \nabla \cdot \mathbf{m}_k^l) - 1 \right\} \\ &/ \left[\sum_k \frac{\eta_k^l}{\rho_k^l} \left\{ \frac{1}{\rho_k^l C_k^{l2}} (\alpha_k^n \rho_k^n - \Delta t \nabla \cdot \mathbf{m}_k^l) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \Delta t^2 \left(\frac{c_{kx}^{lp}}{\Delta x^2} + \frac{c_{ky}^{lp}}{\Delta y^2} + \frac{c_{kz}^{lp}}{\Delta z^2} \right) \right\} \right] \quad \dots\dots\dots (7) \end{aligned}$$

が得られる。ここで、 C_k は音速で、状態方程式で評価される。また、式(7)中の c_{km}^{lp} は、

$$c_{km}^{lp} = c_{km} + \alpha_{km}^n + c_{km} - \alpha_{km}^n \quad (m=x,y,z) \quad \dots\dots\dots (8)$$

$c_{km\pm} = 0$: m 方向土側セル境界が m 方向速度成分を規定する境界の場合

1 : その他の場合 (複合同順)

で定義される。ここで、+側はセルの正側の境界、一側

図1 変数配置

は負側の境界を意味する。セル境界での体積率は、隣接するセルの体積率の幾何平均とする。

運動量の補正量は、式(7)の δp^{l+1} より、

$$\delta m_{kx, i \pm (1/2), j, k}^{l+1} = \pm \frac{\Delta t}{\Delta x} \alpha_{k, i \pm (1/2), j, k}^{l+1} \delta p_{k, i, j, k}^{l+1} \quad (\text{複合同順})$$

……………(9)

と表せる。y, z 方向についても同様である。以上の諸式より $l+1$ 回めの反復における圧力および運動量を求めた後、式(6)の $n+1$ を $l+1$ に置き換えた式より各相の体積率を求める。

一方、運動保存式を非保存形で表示した場合、従属変数として運動量 m ではなく、流速 v を取る。この場合、圧力補正量の陽的表現は容易には得られないが、適当な近似による式(7)と同じ表現が得られる。詳細については第1報⁽⁵⁾を参照されたい。

3. 相 遷 移 の 取 扱 い

2章では、すべての計算セルが常時二相状態である場合について述べた。しかし、圧力補正方程式(5)において、

$$\begin{aligned} \eta_k &= 1 \text{ および } \eta_{k'} = 0 && : k \text{ 相単相状態} \\ \eta_k &= 0 \text{ および } \eta_{k'} = 1 && : k' \text{ 相単相状態,} \\ \eta_k &= 1 \text{ および } \eta_{k'} = 1 && : \text{二相状態} \end{aligned}$$

……………(10)

と定義すると、式(5)はすべての相状態に適用できる。ここで、 k' 相は、 k 相以外の相($k=g$ の場合 $k'=l$ 、および、 $k=l$ の場合 $k'=g$)を意味する。式(10)は、例えば k 相単相状態の場合、 k 相の質量が保存するように圧力を補正し、 k' 相(ない相)の質量保存は考えないことを意味する。すなわち、 η_k は、相状態に応じて単相と二相の圧力補正方程式を乗り換えるためのパラメータと考えられる。そこで、 η_k を利用した相遷移の取扱い法を考案した。

本方法は、ニュートン法の反復計算に入る前に、すべての計算セルで二相状態であると仮定し、 l 回めの反復で一方の相の体積率が負と計算された場合、 η_k を用いて単相状態の式に乗り移る方法である。全セルで二相流状態を仮定する理由は、相遷移取扱法を説明した後に述べる。 l 回めの反復では、まず、式(6)より各相の体積率 $\alpha_{k, i, j, k}^{l+1}$ および $\alpha_{k', i, j, k}^{l+1}$ を求める。次に、これらを用いて、以下に示す方法で相状態を決定する。

$$\begin{aligned} k \text{ 相単相状態} &: \alpha_{k', i, j, k}^{l+1} \leq 0, \\ k' \text{ 相単相状態} &: \alpha_{k, i, j, k}^{l+1} \leq 0, \\ \text{二相状態} &: \text{それ以外} \end{aligned}$$

……………(11)

上式で決定された相状態に基づき、式(10)から η_k を

求める。ただし、 k 相単相状態と判定された場合は、

$$\alpha_{k, i, j, k}^{l+1} = 1 \text{ および } \alpha_{k', i, j, k}^{l+1} = 0 \quad \text{……………(12)}$$

とする。 k' 相単相の場合も同様とする。得られた η_k を用いて、式(7)より圧力補正量を求め、さらに、式(9)により運動量の補正量を求める。

以上の操作で二相と単相の差分方程式の乗り換えができるが、単相状態では、ない相の質量保存を考慮していない点に留意する必要がある。すなわち、セル i, j, k が k' 相単相状態であった場合、 k 相の体積率は零であるので、そのセルから流出する k 相の運動量は零でなければならない。さらに、そのセルに流入する k 相の運動量も零でなければならない。なぜなら、 k 相の運動量の流入があれば、 k' 相単相とはならず、二相となるべきであるからである。したがって、セル i, j, k が k' 相単相の場合、

$$\begin{aligned} m_{kx, i, j \pm (1/2), k}^{l+1} &= 0, m_{ky, i, j \pm (1/2), k}^{l+1} = 0 \text{ および} \\ m_{kz, i, j \pm (1/2), k}^{l+1} &= 0 \quad \text{……………(13)} \end{aligned}$$

を課す必要がある。しかし、二相状態から k 相がなくなる場合に式(14)を課すと、質量保存式(6)と矛盾が生じる。すなわち、二相流状態では、 $\alpha_{k, i, j, k}^{l+1} \neq 0$ であるので、式(6)で $n+1$ を $l+1$ に置き換えた式と式(13)より、

$$\alpha_{k, i, j, k}^{l+1} \neq 0 \quad \text{……………(14)}$$

となり、 k' 相単相状態を仮定することと矛盾する。したがって、反復の途中で k' 相単相状態に遷移した場合、

$$\alpha_{k, i, j, k}^{l+1} = 0 \quad \text{……………(15)}$$

を課す必要がある。これは質量保存を崩しているが、二相状態から k' 相単相状態への遷移が生じる場合は、通常、 $\alpha_{k, i, j, k}^{l+1}$ は小さいので、この質量バランスの崩れは小さく、問題とならないものと考えられる。

なお、ニュートン法の反復の過程で式(13)を課すということは、例えば、あるセルで l 回めの反復時に k' 相単相と判定された場合、 $l+1$ 回め以降も k' 相単相状態となることを意味する。なぜなら、式(13)を課せば、そのセルへの k 相の流入がなくなるため、断熱を仮定している以上、そのセルに k 相が生成されることはないからである。したがって、すでに述べたように、ニュートン法の反復計算を始める前に、すべての計算セルで二相状態を仮定する必要があるわけである。

非保存形の運動量式に対する解法についても、上記と同様な相遷移の取扱いが適用できる。

4. 数 値 計 算 例

4.1 計算対象 本報で計算対象としたベンチマーク問題の幾何形状および初期条件を図2に示す。こ

の問題では、初期に、水平から 10° 傾いたく形の容器内の上半分に液相、下半分に気相が静止した状態で満たされており、時刻零で気相-液相間の仕切りを取り払い、重力による置換を開始させる。最終的には、容器の下半分に液相、上半分に気相が静止した状態に至る。ただし、終状態における気液界面(水面)は水平面となる。本問題では、初期にすべての計算セルで单相であるが、時間の経過とともに、二相、さらに再び单相へと遷移する。したがって、この問題を解くことにより、相遷移を含めた二相流の数値解法の妥当性を検討することができる。

解くべき基礎式は式(3)および式(4)と指定されている。ただし、二次元とし、式(4)の粘性項は無視されている。単位体積当たりの相間運動量輸送量は、

$$F_{igx} = -F_{lix} = c_f \alpha_i \alpha_l (a_g \rho_g + a_l \rho_l) (v_{gx} - v_{lx}) \quad \dots\dots\dots (16)$$

$$F_{igy} = -F_{liy} = c_f \alpha_i \alpha_l (a_g \rho_g + a_l \rho_l) (v_{gy} - v_{ly}) \quad \dots\dots\dots (17)$$

で与えられている。ここで、 c_f は界面抗力係数で、

$$c_f = 2 : \text{ケース 1} \\ 1000 : \text{ケース 2} \quad \dots\dots\dots (18)$$

図2 解析対象形状と初期条件

で与えられている。また、気液両相とも非圧縮性流体と仮定され、密度および重力の加速度は

$$\rho_g = 0.999, \rho_l = 1.0 \text{ および } g = \frac{\rho_l + \rho_g}{2(\rho_l - \rho_g)} \quad \dots\dots\dots (19)$$

で与えられている。気液の密度が大きく異なることに起因する数値的誤差を低減するために、気液の密度差を小さく取っているが、重力の加速度は大きく、現実的な問題に対応している。壁での境界条件は、法線方向の流速は零で、壁に沿っては自由滑りと指定されている。

4.2 計算結果および考察 以下に示す計算例では、計算体系を、 x 方向に15等分割、 y 方向に20等分割し、圧力の補正方程式(5)に対する収束判定条件 ε を 1×10^{-8} とした。また、対流項は一次のドナーセル差分で近似した。

図3から図5に、ケース1(界面抗力係数の小さいケース)における時刻2 sにおける気相の体積率の等高線図、気相、液相運動量のベクトルを示す。図6には、同じく時刻4 sにおける気相の体積率の等高線図を示す。この計算例では、保存形の基礎式に対する数値解法を用い、時間刻み幅 Δt を5 msで一定とした。この時間刻み幅は、クーラン条件を満たしている。時間の経過とともに、気液対向流状態で気液の置換が進行するとともに、容器が右側に傾いているために、両相とも右回りに旋回して置換が進行する様子が示されている。図7には、 x 軸に垂直な中心線上の6セル($x = 0.75 \text{ m}$, $y = 0.05, 0.55, 0.95, 1.05, 1.55, 1.95 \text{ m}$)における気相体積率の時間変化を示す。このうち、容器の上部および下部に位置する4セル($y = 0.05, 0.55, 1.55, 1.95 \text{ m}$)では、单相から二相、二相から初期とは異なる单相へと遷移する様子が計算されている。容器中央部の2

図3 ケース1の時刻2 sにおける気相体積率(保存形)

図4 ケース1の時刻2 sにおける気相運動量(保存形)

図5 ケース1の時刻2 sにおける液相運動量(保存形)

図 6 ケース 1 の時刻 4 s における気相体積率(保存形)

図 7 ケース 1 における気相体積率の経時変化(保存形)

図 8 ケース 1 の時刻 4 s における気相体積率(非保存形)

図 9 PHOENICS VL におけるケース 1 の時刻 4 s による気相体積率⁽⁶⁾

図 10 保存形と非保存形における収束までの反復数の比較(ケース 1)

図 11 保存形における CPU 時間の時間刻み幅依存(ケース 1)

セルでは、10 s たっても単相状態に至っていない。これは、ドナーセル差分の数値拡散により水面がぼやけた状態で振動しているためである。以上の計算結果から、定性的には妥当な結果が得られたといえる。

図 8 には、非保存形の基礎式に対する数値解法を用い、時間刻み幅 Δt を同じく 5 ms とした場合の時刻 4 s における気相の体積率の等高線図を示す。さらに、参考のため、文献(5)に示されている IPSA 法と Van Leer 差分法を用いた PHOENICS VL コードによる計算結果を図 9 に示す。図 6、8 および図 9 を比較すると、三者とも大きな相違がないことがわかる。

図 10 に、上記保存形の場合と非保存形の場合の収束までの反復回数の比較を示す。第 1 報で示したように、保存形の場合は、圧力補正量の陽的表現が容易に得られるのに対して、非保存形の場合はそれが容易には得られないため近似を用いた。この近似により、非保存形の場合の収束が保存形より悪くなったと考えられる。

図 11 に、時間刻み幅を変えて計算した場合の CPU 時間の比較を示す。横軸は物理時間である。計算には、

FACOM VP-2600 を使用した。図 11 中に示した三つの計算例では、時間刻み数が大きく異なるにもかかわらず計算に必要な CPU 時間には大きな違いはない。これは、時間刻み幅を小さくすると、1 回の収束に要する反復回数が減少することによる。例えば、 Δt が 5 ms と 0.5 ms の場合を比較すると、 Δt が 0.5 ms の場合に 1 回の収束に要する平均反復回数は、5 ms の場合の約 1/10 となっていることが図 11 からわかる。図 12 と図 13 に、ケース 2 (界面抗力係数の大きいケー

図 12 ケース 2 の時刻 4 s における
気相体積率(保存形)

図 13 ケース 2 の時刻 6 s における
気相体積率(保存形)

図 14 ケース 2 の時刻 6 s における
気相体積率(非保存形)

ス)における時刻 4 s および 6 s における気相の体積率の等高線図を示す。この計算例では、保存形に対する数値解法を用い、時間刻み幅 Δt を 0.5 ms で一定とした。ケース 2 では、界面抗力係数が大きいために気液対向流による置換の進行は、ケース 1 に比べて遅く、気液の境界が比較的明りょうなまま、全体が右回りに旋回している。

図 14 には、非保存形を用い、時間刻み幅 Δt を同じく 0.5 ms とした場合の時刻 6 s における気相の体積率の等高線図を示す。図 13 と図 14 を比較すると、保存形と非保存形の場合の計算結果の差異は小さいことがわかる。

以上の結果より、本研究で提示した数値解法と相遷移の取扱手法により、気液置換という流動状態の動的変化が大きな問題でも円滑に計算できることが確認できた。

5. 結 言

既報⁽⁴⁾では、SOLA 法の反復過程にノイマン形の境界条件の影響を適切に考慮して、反復収束特性を改善した。第 1 報⁽⁵⁾では、この改良 SOLA 法に基に、圧縮性を考慮した断熱二流体モデル基礎式に適用可能な数

値解法を、保存形と非保存形の運動量保存式の両者について提案した。本報では、この数値解法に適合した相遷移の取扱方法を示すとともに、これを組み込んだ解法を重力による二次元の気液置換問題に適用した。この結果、保存形と非保存形のいずれの場合についても、界面抗力係数の小さなケースと大きなケースの両者に対して、現実的な計算時間の範囲で妥当な解が得られた。保存形の場合と非保存形の場合の比較については、非保存形の場合、圧力補正方程式のヤコビ行列の対角成分を求める際に近似を用いたために収束が保存形の場合に比べて悪いことが明らかとなった。

今後、計算精度の検討と IPSA 法などの他の数値解法との計算時間の比較検討が必要と考えられる。

文 献

- (1) Amsden, A. A., and Harlow, F. H., LA-4370(1970).
- (2) Hirt, C. W., ほか 2 名, LA-5852(1975).
- (3) 富山・平野・坂口, 機論, No. 910-84(1991), 97.
- (4) 富山・ほか 1 名, 機論, 58-551, B(1992), 2171.
- (5) 富山・平野, 機論, 58-556, B(1992), 3613.
- (6) DOE/EPRI Workshop Two-Phase Flow Fundam. (1987)16-20, PRI, Troy, NY USA.
- (7) Hirano, M., ほか 6 名, Jpn. J. Multiphase Flow, 1(1987), 1.