

JAERI-Data/Code
96-033



多次元二流体モデル構成方程式評価用コード
ACE-3Dの開発

1996年11月

大貫 晃・加茂英樹*・秋本 肇

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の問い合わせは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越してください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1996

編集兼発行 日本原子力研究所
印 刷 いばらき印刷(株)

多次元二流体モデル構成方程式評価用コードACE-3Dの開発

日本原子力研究所東海研究所原子炉工学部

大貫 晃・加茂 英樹*・秋本 肇

(1996年10月4日受理)

受動的安全炉の設計研究を多次元二流体モデルコードにより高精度に行うための二流体モデルの構成方程式の評価・開発に使用できる解析コードACE-3Dを開発した。

本コードの特徴は以下の通りである：

1. 基礎式は3次元の二流体モデルであり、解析体系として直交座標系または円筒座標系が選択できる。流体としては空気-水または蒸気-水が選択できる。
2. スタッガードメッシュの有限差分で定式化し、対流項は風上差分、拡散項は中心差分である。
3. 時間進行は半陰解法で解いていく。反復計算において質量及びエネルギー式を同等に扱う。
4. 界面応力項として抗力、揚力、乱流拡散力、壁からの力、付加質量の各力を考慮する。
5. 乱流モデルとしては二相 $\kappa-\epsilon$ 乱流モデルを導入している。

開発したコードにより既存の小口径垂直管内気泡流の解析を行い、二流体モデルの多次元用構成方程式の評価・開発に本コードが適用できることを確認した。

今後、原研で取得している大口徑管でのデータベースを活用すると共に、ベクトル・並列化による計算速度の向上、相変化項の評価等を並行して進め、予測精度の検証された気液二相流用解析手法の確立を目指す予定である。

本報告書では、開発したACE-3Dコードの概要を基礎式並びにその差分式により述べると共に、プログラムの構造についても概説する。また、コードのチェック計算結果についてまとめる。

Development of Multidimensional Two-Fluid Model Code
ACE-3D for Evaluation of Constitutive Equations

Akira OHNUKI, Hideki KAMO* and Hajime AKIMOTO

Department of Reactor Engineering
Tokai Research Establishment
Japan Atomic Energy Research Institute
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received October 4, 1996)

In order to perform design calculations for a passive safety reactor with good accuracy by a multidimensional two-fluid model, we developed an analysis code, ACE-3D, which can apply for evaluation of constitutive equations.

The developed code has the following features:

1. The basic equations are based on 3-dimensional two-fluid model and the orthogonal or the cylindrical coordinate system can be selected. The fluid system is air-water or steam-water.
2. The basic equations are formulated by the finite-difference scheme of staggered mesh. The convection term is formulated by an upwind scheme and the diffusion term by a center-difference scheme.
3. Semi-implicit numerical scheme is adopted and the mass and the energy equations are treated equally in convergent steps for Jacobi equations.
4. The interfacial stress term consists of drag force, lift force, turbulent dispersion force, wall force and virtual mass force.
5. A κ - ϵ turbulent model for bubbly flow is incorporated as the turbulent model.

The predictive capability of ACE-3D has been verified using a data-base for bubbly flow in a small-scale vertical pipe. In future, the constitutive equations will be improved with a data-base in a large vertical pipe developed in our laboratory and we have a plan to construct a reliable analytical tool through the improvement work, the

* KSD Ltd.

progress of calculational speed with vector and parallel processing, the assessments for phase change terms and so on.

This report describes the outline for the basic equations and the finite-difference equations in ACE-3D code and also the outline for the program structure. Besides, the results for the assessments of ACE-3D code for the small-scale pipe are summarized.

Keywords: Passive Safety, Numerical Simulation, Two-phase Flow, Two-fluid Model, Constitutive Equation, Interfacial Stress, $\kappa - \varepsilon$ Turbulent Model, Void Fraction, Phase Change

目 次

1. 緒 言	1
2. 基礎方程式とその差分式	3
2.1 基礎方程式の概要	3
2.2 メッシュスキーム	5
2.3 せん断応力項の差分式	7
2.4 運動方程式の差分式	11
2.5 流速に関する境界条件	15
2.6 質量及びエネルギー保存式の差分式	18
2.7 二相乱流モデルの差分式	22
2.8 反復計算	24
3. プログラム構造と主要サブルーチンの処理概要	32
3.1 プログラム構造の概要	32
3.2 保存式を解く主要サブルーチンでの処理概要	37
4. チェック計算	42
5. 結 言	46
参考文献	47
付録A. ACE-3D用入力マニュアル	48
A.1 入力の前処理	48
A.2 入力マニュアル	50
A.3 実行方法	56
付録B. プロットプログラム用入力マニュアル	57
B.1 hkplotの入力マニュアル	57
B.2 hkgraphの入力マニュアル	68

Contents

1. Introduction	1
2. Basic Equations and Finite-Difference Equations	3
2.1 Outline of Basic Equations	3
2.2 Mesh Scheme	5
2.3 Finite-Difference Equations for Stress Terms	7
2.4 Finite-Difference Equations for Momentum Equations	11
2.5 Boundary Conditions on Velocity	15
2.6 Finite-Difference Equations for Mass and Energy Equations	18
2.7 Finite-Difference Equations for Two-Phase Turbulent Model	22
2.8 Numerical Iteration Method	24
3. Program Structure and Outline of Main Subroutines	32
3.1 Outline of Program Structure	32
3.2 Outline of Main Subroutines to Solve Conservation Equations	37
4. Check Calculation	42
5. Conclusions	46
References	47
Appendix A Usage Manual of ACE-3D Code	48
A.1 Pretreatment of Input	48
A.2 Input Manual	50
A.3 Sample of Execution	56
Appendix B Usage Manual of Plot System	57
B.1 Input Manual of hkplot System	57
B.2 Input Manual of hkgraph System	68

1 緒 言

近年、重力等の自然の力を積極的に活用した受動的安全炉の設計研究が進められている^{1) 2) 3)}。受動的安全炉で使用されている受動的安全設備のシステムではポンプといった能動的な機器は極力省かれており、重力や浮力といったポンプの駆動力に比べてはるかに弱い力に頼っている部分が多い。そのため、受動的安全炉の設計を進める上でシステム各部での圧力損失や気泡の体積割合(ボイド率)を従来より一段と高精度に予測する多次元のCFD (Computational Fluid Dynamics) コードが求められている。

单相流に対しては予測精度のある程度把握できている種々のCFD コードが活用できる。気液二相流に対しては多次元の二流体モデル⁴⁾が基礎方程式系として選択できるが、それを解くために必要な構成方程式については確立されていない。気泡には図1.1に示すような様々な力が働く。気泡と気泡周りの液相との相対速度に起因する抗力、気泡後流の渦による揚力、気泡の周りの液相の乱れに起因する乱流拡散力、気泡と液相の密度差による浮力といったものである。抗力、揚力、乱流拡散力といった力は二流体モデルの構成方程式としてモデル化されるが、データベースが不足しているため、小口径垂直管以外の体系についてはほとんど調べられていない。また、二相流の場合の液相の乱れについても单相流の乱流モデルの拡張でいいのかどうかについても調べる必要がある。

多次元の二流体モデルに基づく解析手法はいくつか提案されているが^{5) 6) 7)}、相変化項をモデル化でき、コードとしてソルバーまで公開されているものは少ない。Laheyらの研究グループはPHOENICSコードをベースに小口径垂直管内気泡流に対する解析を行い、揚力項や乱流モデルに対する検討を行っている^{7) 8) 9) 10)}。しかしながら、PHOENICSコードのソルバーは非公開であり、数値解法や乱流モデルといったコードの基本的な枠組みを大きく変えることはできないため、研究上の制約が多い。

そこで、原研では気泡に働く力を個別に基礎式に反映できる多次元の二流体モデルに基づくCFDコードを独自に開発することとし、原研で取得している内径の大きな垂直管でのデータ^{11) 12)}を活用し、実規模体系に適用できる構成方程式の確立に向けた研究を開始した。

本報告書では上記研究の第一歩として、新たに開発した多次元の二流体モデルに基づくコードACE-3D(Advanced Code for Evaluation of 3-Dimensional constitutive equations)の概要についてまとめる。現バージョンでの乱流モデルとしてはLaheyらの二相 $k-\epsilon$ 乱流モデル⁹⁾を採用しており、抗力及び相変化項のモデルとしてはTRACのモデル¹³⁾を修正して組み込んだ。

第2章では、二相乱流モデルのコーディングまで含めた基礎方程式とその差分式、及び数値解法の概要について述べる。第3章では、開発したコードのプログラム説明を行う。第4章では、開発したコードの解析性能をチェックするチェック計算結果について述べる。付録A及び付録Bに入力マニュアル及びプロットプログラムのマニュアルをそれぞれ示す。

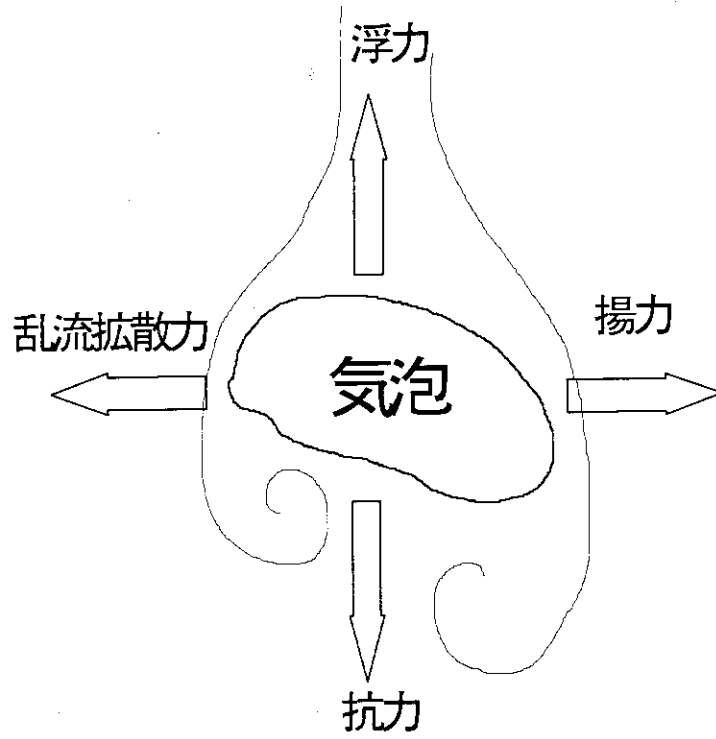


図 1.1 気泡に働く力

2 基礎方程式とその差分式

本章では、開発したコードACE-3Dで採用している基礎方程式とその差分式について述べる。まず、2.1節で解くべき基礎方程式である質量、運動量及びエネルギーの各保存式、界面応力項の概要及び乱流モデルについて述べる。次に2.2節で差分式を書き下すために採用したメッシュスキームとインデックスの振り方をまとめる。2.3節及び2.4節では、せん断応力項及び運動方程式の各差分式をそれぞれ示す。2.4節ではさらに差分式を解いて、新しい時刻の流速を圧力の関数としてあらわす方法を述べる。2.5節では必要となる流速の境界条件をまとめる。次に、2.6節では、質量及びエネルギー保存式の差分式を示すと共に必要となる境界条件を述べる。2.7節では、乱流モデルで用いられる基礎方程式の差分式と境界条件について述べる。最後に2.8節で、前節までで得られた非線形方程式を解く方法を述べる。

2.1 基礎方程式の概要

本コードで扱う基礎方程式は二流体モデルによる3次元の方程式であり、以下に示す通りである。また、座標系としては3次元の直交座標系または円筒座標系を取り扱うことができる。

気相の質量保存式

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{V}_g) = \Gamma$$

液相の質量保存式

$$\frac{\partial \alpha_l \rho_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{V}_l) = -\Gamma$$

気相の運動方程式

$$\frac{\partial \vec{V}_g}{\partial t} + \vec{V}_g \cdot \nabla \vec{V}_g = -\frac{1}{\rho_g} \nabla P - \frac{\vec{\tau}_{ig}}{\alpha_g \rho_g} - \frac{\Gamma^+}{\alpha_g \rho_g} (\vec{V}_g - \vec{V}_l) + \frac{\nabla \vec{\tau}_g}{\alpha_g \rho_g} + \vec{g}$$

液相の運動方程式

$$\frac{\partial \vec{V}_l}{\partial t} + \vec{V}_l \cdot \nabla \vec{V}_l = -\frac{1}{\rho_l} \nabla P - \frac{\vec{\tau}_{il}}{\alpha_l \rho_l} - \frac{\Gamma^-}{\alpha_l \rho_l} (\vec{V}_g - \vec{V}_l) + \frac{\nabla \vec{\tau}_l}{\alpha_l \rho_l} + \vec{g}$$

気相のエネルギー保存式

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_g \rho_g e_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g e_g \vec{V}_g) = -P \left[\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \vec{V}_g) \right] + q_{wg} + q_{ig} + \Gamma h_{gs}$$

液相のエネルギー保存式

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_l \rho_l e_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l e_l \vec{V}_l) = -P \left[\frac{\partial \alpha_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \vec{V}_l) \right] + q_{wl} + q_{il} - \Gamma h_{ls}$$

ここで、添え字 g は気相、 l は液相を示す。 α_k は、注目している相 ($k = g$ または $k = l$) の体積率である。 ρ は密度、 e は内部エネルギーを表わす。 h_{gs} は気相の飽和エンタルピー、 h_{ls} は液相の飽和エンタルピーである。

る。 P は両相の圧力、 \vec{V}_k は各相の速度である。 Γ は相変化量で、ジャンプ条件から

$$\Gamma = -\frac{q_{ig} + q_{il}}{h_{gs} - h_{ls}}$$

と書ける。ここで、

$$q_{ig} = h_{ig} A_i \frac{T_{sat} - T_g}{Vol}$$

及び

$$q_{il} = h_{il} A_i \frac{T_{sat} - T_l}{Vol}$$

である。 h_{ik} は、界面熱伝達係数であり、 A_i は界面積を表わす。Volはメッシュの体積である。 T_{sat} は飽和温度であり、 T_k は各相の温度である。 Γ^+ は、正(蒸発の場合)のとき、その値に等しく、負の時0とするものである。同様に Γ^- は、負のとき(凝縮の場合)、その値に等しく、正のとき0とするものである。

τ_{ik} は界面にはたらくさまざまな応力項であり、

$$\tau_{ik,i} = c_{i,i}(V_{k,i} - V_{k',i})|V_{k,i} - V_{k',i}| + \tau_{ik,i}^{lift} + \tau_{ik,i}^{td} + \tau_{ik,i}^{wall} + \tau_{ik,i}^{add}$$

と与えられる。ここで、添え字 i は空間成分をあらわす。空間成分の添え字は必ず"コンマ"の後に書く。 k' は注目している相 k と異なる相を表す。第1項は界面での摩擦項であり、 c_i は界面せん断応力係数である。第2項は流れに垂直に働く揚力項である。第3項は、液相の乱流の効果により、気泡が拡散する効果を表わす項である。第4項は、壁近傍で気泡を壁から離す様に働く力である。最後の項は、気泡の付加質量項である。これらの項の具体的な内容は後に述べる。

界面せん断応力係数及び界面熱伝達係数は適当な相関式により与える。これらの相関式は、TRACのもの¹³⁾を用いているが、片岡らの研究¹⁴⁾を参考に、スラグ気泡の最大径を以下の値に制限している：

$$d_{max} = 30 \left(\frac{\sigma}{g\Delta\rho} \right)^{0.5}$$

τ_k はせん断応力項であり、直交座標系の場合、

$$\tau_{k,i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \alpha_k \rho_k \mu_k^{(t)} \left(\frac{\partial V_{k,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial V_{k,j}}{\partial x_i} \right) \right\}$$

と与えられる。粘性係数 $\mu_k^{(t)}$ は乱流モデルから計算される。乱流モデルから計算される粘性係数を適用するのは液相に対してのみであり、気相は非粘性または層流モデルとしている。

気泡後流の渦に関連すると見られている揚力 lift force τ_{ik}^{lift} は、Laheyらのモデル⁷⁾、

$$\tau_{ig}^{lift} = -C_L \rho_l \alpha_g (\vec{V}_g - \vec{V}_l) \nabla \times \vec{V}_l$$

を組み込んだ。ここで C_L は揚力係数である。また、乱流によるボイドの拡散項 τ_{ik}^{td} も以下に示すLaheyらのモデル⁸⁾とした：

$$\tau_{ig}^{td} = -C_{TD} \rho_l k_l \nabla \ln \alpha_g$$

ここで、 C_{TD} は乱流拡散係数、 k_l は液相の乱流エネルギーである。乱流モデルを使わないオプションの場合、液相の乱流エネルギーは液相の運動エネルギーに比例するものとした。

壁近傍で働き気泡を壁から引き離す力 τ_{ig}^{wall} に対しては富山らの研究¹⁵⁾を参考に次式を採用した：

$$\begin{aligned}\tau_{ig}^{wall} &= -C_{lw}C_w\rho_\ell\alpha_g\frac{d}{2y^2}|\vec{V}_g - \vec{V}_\ell|^2 \\ C_w &= \begin{cases} e^{-0.933E_O+1.79} & (1 \leq E_O \leq 4.723) \\ 0.007E_O + 0.04 & (4.723 < E_O \leq 33) \end{cases} \\ E_O &= \frac{g(\rho_\ell - \rho_g)d^2}{\sigma}\end{aligned}$$

ここで、 C_{lw} は任意係数、 d は気泡径、 y は管壁からの距離である。

付加質量項についてはLaheyら⁷⁾の提案している次式を採用した：

$$\tau_{ig}^{add} = -C_{vm}\alpha_g\rho_\ell\left(\frac{D_L}{Dt}V_g - \frac{D_G}{Dt}V_\ell\right)$$

ここで、 D/Dt は物質微分、 C_{vm} は付加質量係数である。

乱流モデルは、Lahey等が開発した気泡流に対する $k-\epsilon$ モデル⁹⁾を用いた。このモデルは単相流における $k-\epsilon$ モデルを二相流に拡張したものであり、乱流エネルギーは液相の流速分布から生成されるエネルギー $k_{L(SI)}$ (shear induced turbulent energy)と気泡の存在により誘起される乱流エネルギー $k_{L(BI)}$ (bubble induced turbulent energy)の二つの成分よりなるとしている。

液相の流速分布から生成される乱流エネルギー及びエネルギー散逸率 ϵ_L は、単相流の $k-\epsilon$ モデルと同様に以下の式より導出する：

$$\begin{aligned}\alpha_\ell\frac{D_L}{Dt}k_{L(SI)} &= \nabla\alpha_\ell(\nu_L^t\nabla k_{L(SI)}) + \alpha_\ell(P_L - \epsilon_L) \\ \alpha_\ell\frac{D_L}{Dt}\epsilon_L &= \nabla\alpha_\ell\left(\frac{\nu_L^t}{\sigma_\epsilon}\nabla\epsilon_L\right) + \alpha_\ell\left(C_{\epsilon 1}\frac{P_L\epsilon_L}{k_{L(SI)}} - C_{\epsilon 2}\frac{\epsilon_L^2}{k_{L(SI)}}\right)\end{aligned}$$

ここで、 P_L は乱流エネルギー生成率であり、 $C_{\epsilon 1}$ 、 $C_{\epsilon 2}$ は任意係数である。

乱流量に対する気泡の効果は、乱流エネルギーと乱流による粘性係数に表れる。乱流エネルギー k_L は、上に述べた流速分布から生成される項と気泡により生成される項 $k_{L(BI)}$ よりなる。

$$\begin{aligned}k_L &= k_{L(SI)} + k_{L(BI)} \\ k_{L(BI)} &= \frac{1}{2}\alpha C_{VM}V_r^2\end{aligned}$$

ここで、 V_r は気相と液相の相対速度、 C_{VM} は任意係数である。また、粘性係数は

$$\nu_L^t = C_\mu\frac{k_{L(SI)}^2}{\epsilon_L} + C_{\mu b}R_b\alpha_gV_r$$

と与えられる。第1項は流速分布より生成された項であり、第2項は気泡により生成された項である。 C_μ 、 $C_{\mu b}$ は任意係数、 R_b は気泡の半径である。

2.2 メッシュスキーム

本コードでは前節での基礎方程式を差分法により解く。メッシュスキームはスタッガードメッシュとし、図2.1のように変数を割り付ける。ここで、流速の u は x もしくは r 方向、 v は y または θ 方向、 w は z 方向の流

速である。これらは、それぞれセル界面に配置される。スカラー量である圧力、ポイド率及び温度はセルの中心で定義する。せん断応力テンソルの配置は複雑であるため、次節のせん断応力項の差分式でふれる。

本コードでは、計算領域を x または r 方向に N_x 個、 y または θ 方向に N_y 個、 z 方向 N_z 個のメッシュに分割する。この外周に仮想のセルを張り付け、全体で $N_x + 2$ 、 $N_y + 2$ 及び $N_z + 2$ 個のメッシュを用意する。このインデックスを図 2.2 の様に割り付ける。これから、セル中心で定義されるスカラー量 S のインデックス (i, j, k) は、それぞれ、

$$0 \leq i \leq N_x + 1$$

$$0 \leq j \leq N_y + 1$$

$$0 \leq k \leq N_z + 1$$

の範囲を動き、0 及び $N + 1$ が仮想セルのインデックスに対応する。

セル界面に位置する流速のインデックスは図 2.3 の様にアサインする。即ち、セル界面は $-1/2$ から $N + 3/2$ までの値をとる。流速 u は、 x 方向にはセル界面で定義されているが、 y 及び z 方向には中心で定義されているので、流速 u に関するインデックス (i, j, k) は

$$-1/2 \leq i \leq N_x + 3/2$$

$$0 \leq j \leq N_y + 1$$

$$0 \leq k \leq N_z + 1$$

の範囲を動く事になる。同様に、 v 及び w のインデックスの範囲は以下の通りである。

v のインデックスに関して

$$0 \leq i \leq N_x + 1$$

$$-1/2 \leq j \leq N_y + 3/2$$

$$0 \leq k \leq N_z + 1$$

w のインデックスに関して

$$0 \leq i \leq N_x + 1$$

$$0 \leq j \leq N_y + 1$$

$$-1/2 \leq k \leq N_z + 3/2$$

コーディング上注意する必要があるのはセル中心のインデックスとセル界面の流速とのインデックスの関係である。差分式の表現では $i + 1/2$ 、 $j + 1/2$ 及び $k + 1/2$ が用いられるが、コーディング上、この表現を用いる事はない。そのため、セル界面のインデックスに対して $1/2$ を除いたインデックスの付け方を明らかにしておいた方がよい。セル (i, j, k) に対して、流速は、図 2.4 の様にインデックスが付けられている。即ち、差分式の $1/2$ を含んだインデックスから $1/2$ を引けばよい。具体的には

$$u_{i+1/2,j,k} \rightarrow u(i, j, k)$$

$$u_{i-1/2,j,k} \rightarrow u(i-1, j, k)$$

$$\begin{aligned}
 v_{i,j+1/2,k} &\rightarrow v(i,j,k) \\
 v_{i,j-1/2,k} &\rightarrow v(i,j-1,k) \\
 w_{i,j,k+1/2} &\rightarrow w(i,j,k) \\
 w_{i,j,k-1/2} &\rightarrow w(i,j,k-1)
 \end{aligned}$$

の様に対応している。この様に、1/2のインデックスの付け方がコーディングと対応出来るので、次節以降の差分式では、1/2のインデックスを用いて表現する。

2.3 せん断応力項の差分式

本節では、せん断応力項の差分式について述べる。まず、直交座標系の場合のせん断応力テンソルは次のようになる：

$$\tau_{k,ij} = \alpha_k \rho_k \nu_k \left(\frac{\partial V_{k,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial V_{k,j}}{\partial x_i} \right)$$

粘性係数 ν は、層流モデルを用いる場合は、一定値であるが、乱流モデルを用いる場合は、場所に依存している。この粘性係数の定義点は、メッシュ中心とする。これは、密度やボイド率と同じである。

これらの項の差分式を定めるためには、まず、これらの項の定義点を決定する必要がある。このためには、運動方程式に加わるせん断応力

$$\frac{\partial \tau_{k,ij}}{\partial x_j}$$

の定義点が、流速 $V_{k,i}$ の定義点と一致している事が望ましい。一致しない場合、運動方程式の差分式が複雑となる。

まず、流速の定義点から自然にせん断応力テンソルの定義点を決定する。このとき、セル境界で定義されている量の空間微分はセル中心で定義される事や、セル中心で定義されている量の空間微分はセル境界で定義される事を考慮すると差分式は以下の様になる(中心差分)。まず、対角成分はセル中心で定義され、

$$\begin{aligned}
 \tau_{k,xx,ijk} &= 2(\alpha_k \rho_k \nu_k)_{i,j,k} \frac{u_{k,i+1/2,j,k} - u_{k,i-1/2,j,k}}{\Delta x_i} \\
 \tau_{k,yy,ijk} &= 2(\alpha_k \rho_k \nu_k)_{i,j,k} \frac{v_{k,i,j+1/2,k} - v_{k,i,j-1/2,k}}{\Delta y_j} \\
 \tau_{k,zz,ijk} &= 2(\alpha_k \rho_k \nu_k)_{i,j,k} \frac{w_{k,i,j,k+1/2} - w_{k,i,j,k-1/2}}{\Delta z_k}
 \end{aligned}$$

となる。

非対角成分を考えるために、例として、 τ_{xy} を考察する。この項の中には、 $\partial u/\partial y$ と $\partial v/\partial x$ が含まれる。前者は、流速が $(i+1/2, j, k)$ で定義され、その y 微分であるから、定義点は $(i+1/2, j+1/2, k)$ となる。同様に、後者は流速が $(i, j+1/2, k)$ で定義され、その x 微分であるから、定義点は $(i+1/2, j+1/2, k)$ である。以上から、 τ_{xy} の定義点は $(i+1/2, j+1/2, k)$ となる。同様にして、 τ_{yz} の定義点は $(i, j+1/2, k+1/2)$ であり、 τ_{zx} の定義点は $(i+1/2, j, k+1/2)$ である事がわかる。非対角項の差分式は

$$\tau_{k,xy,i+1/2,j+1/2,k} = (\alpha_k \rho_k \nu_k)_{i+1/2,j+1/2,k}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left[\frac{u_{k,i+1/2,j+1,k} - u_{k,i+1/2,j,k}}{\Delta y_{j+1/2}} + \frac{v_{k,i+1,j+1/2,k} - v_{k,i,j+1/2,k}}{\Delta x_{i+1/2}} \right] \\
 \tau_{k,yz,i,j+1/2,k+1/2} &= (\alpha_k \rho_k \nu_k)_{i,j+1/2,k+1/2} \\
 & \times \left[\frac{v_{k,i,j+1/2,k+1} - v_{k,i,j+1/2,k}}{\Delta z_{k+1/2}} + \frac{w_{k,i,j+1,k+1/2} - w_{k,i,j,k+1/2}}{\Delta y_{j+1/2}} \right] \\
 \tau_{k,zx,i+1/2,j,k+1/2} &= (\alpha_k \rho_k \nu_k)_{i+1/2,j,k+1/2} \\
 & \times \left[\frac{w_{k,i+1,j,k+1/2} - w_{k,i,j,k+1/2}}{\Delta x_{i+1/2}} + \frac{u_{k,i+1/2,j,k+1} - u_{k,i+1/2,j,k}}{\Delta z_{k+1/2}} \right]
 \end{aligned}$$

と与えられる。

このように定義されたせん断応力テンソルを用いた場合、運動方程式の差分式がどのようになるかをみてみる。運動方程式に加わる応力項は

$$\begin{aligned}
 \tau_{k,x} &= \frac{\partial \tau_{k,xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{k,xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{k,xz}}{\partial z} \\
 \tau_{k,y} &= \frac{\partial \tau_{k,xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{k,yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{k,yz}}{\partial z} \\
 \tau_{k,z} &= \frac{\partial \tau_{k,xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{k,yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{k,zz}}{\partial z}
 \end{aligned}$$

である。このうち、 x 方向の運動方程式を考える。第1項は (i, j, k) で定義された量の x 微分であるから、 $(i + 1/2, j, k)$ で定義された量となる。第2項は $(i + 1/2, j + 1/2, k)$ で定義された量の y 微分であるから $(i + 1/2, j, k)$ で定義された量となる。同様に、第3項も $(i + 1/2, j, k)$ で定義された量となる。すなわち、せん断応力項は流速 u の定義点と同じとなる。 y 及び z 方向の運動方程式も同様である。以上から、応力テンソルの定義点を上の様に設定しておけば、運動方程式の定義点と応力の定義点が一致することがわかる。

以上のことより、本コードでのせん断応力の差分式は次のようになる：

$$\begin{aligned}
 \tau_{k,x,i+1/2,j,k} &= \frac{\tau_{k,xx,i+1,j,k} - \tau_{k,xx,i,j,k}}{\Delta x_{i+1/2}} + \frac{\tau_{k,xy,i+1/2,j+1/2,k} - \tau_{k,xy,i+1/2,j-1/2,k}}{\Delta y_j} \\
 &+ \frac{\tau_{k,zx,i+1/2,j,k+1/2} - \tau_{k,zx,i+1/2,j,k-1/2}}{\Delta z_k} \\
 \tau_{k,y,i,j+1/2,k} &= \frac{\tau_{k,xy,i+1/2,j+1/2,k} - \tau_{k,xy,i-1/2,j+1/2,k}}{\Delta x_i} + \frac{\tau_{k,yy,i,j+1,k} - \tau_{k,yy,i,j,k}}{\Delta y_{j+1/2}} \\
 &+ \frac{\tau_{k,yz,i,j+1/2,k+1/2} - \tau_{k,yz,i,j+1/2,k-1/2}}{\Delta z_k} \\
 \tau_{k,z,i,j,k+1/2} &= \frac{\tau_{k,zx,i+1/2,j,k+1/2} - \tau_{k,zx,i+1/2,j,k-1/2}}{\Delta x_i} + \frac{\tau_{k,yz,i,j+1/2,k+1/2} - \tau_{k,yz,i,j-1/2,k+1/2}}{\Delta y_j} \\
 &+ \frac{\tau_{k,zz,i,j,k+1} - \tau_{k,zz,i,j,k-1}}{\Delta z_{k+1/2}}
 \end{aligned}$$

ここで、応力テンソルの動く範囲を定めるためにどの点で運動方程式が考慮される可能性があるかをみておく。体系の境界(例えば $i = 0$)に圧力境界があった場合、その点でも運動方程式は考慮される。したがって、 x 方向の運動方程式は

$$\begin{aligned}
 1/2 \leq i \leq N_x + 1/2 \\
 1 \leq j \leq N_y \\
 1 \leq k \leq N_z
 \end{aligned}$$

の点で考慮されると考える必要がある。これから、 $\tau_{k,xx}$ は

$$\begin{aligned} 0 &\leq i \leq N_x + 1 \\ 1 &\leq j \leq N_y \\ 1 &\leq k \leq N_z \end{aligned}$$

のセル中心で定義される事となる。 $\tau_{k,xy}$ は

$$\begin{aligned} 1/2 &\leq i \leq N_x + 1/2 \\ 1/2 &\leq j \leq N_y + 1/2 \\ 1 &\leq k \leq N_z \end{aligned}$$

で定義され、 $\tau_{k,zx}$ は

$$\begin{aligned} 1/2 &\leq i \leq N_x + 1/2 \\ 1 &\leq j \leq N_y \\ 1/2 &\leq k \leq N_z + 1/2 \end{aligned}$$

で定義される。

同様の考察を y 及び z 方向の運動方程式についても行えば、 $\tau_{k,yy}$ は

$$\begin{aligned} 1 &\leq i \leq N_x \\ 0 &\leq j \leq N_y + 1 \\ 1 &\leq k \leq N_z \end{aligned}$$

の範囲を動き、 $\tau_{k,zz}$ は

$$\begin{aligned} 1 &\leq i \leq N_x \\ 1 &\leq j \leq N_y \\ 0 &\leq k \leq N_z + 1 \end{aligned}$$

の範囲を動く事がわかる。また、 $\tau_{k,yz}$ は

$$\begin{aligned} 1 &\leq i \leq N_x \\ 1/2 &\leq j \leq N_y + 1/2 \\ 1/2 &\leq k \leq N_z + 1/2 \end{aligned}$$

の範囲を動く。

スカラー項 α_{ν} (全体を ϕ と略記する) は線形内挿により求める。 $\phi_{i+1/2,j+1/2,k}$ は

$$\begin{aligned} \phi_{i+1/2,j+1/2,k} &= \frac{\Delta y_{j+1} \phi_{i+1/2,j,k} + \Delta y_j \phi_{i+1/2,j+1,k}}{\Delta y_j + \Delta y_{j+1}} \\ \phi_{i+1/2,j,k} &= \frac{\Delta x_{i+1} \phi_{i,j,k} + \Delta x_i \phi_{i+1,j,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \\ \phi_{i+1/2,j+1,k} &= \frac{\Delta x_{i+1} \phi_{i,j+1,k} + \Delta x_i \phi_{i+1,j+1,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \end{aligned}$$

と与えられる。 $\phi_{i,j+1/2,k+1/2}$ は

$$\begin{aligned}\phi_{i,j+1/2,k+1/2} &= \frac{\Delta z_{k+1}\phi_{i,j+1/2,k} + \Delta z_k\phi_{i,j+1/2,k+1}}{\Delta z_k + \Delta z_{k+1}} \\ \phi_{i,j+1/2,k} &= \frac{\Delta y_{j+1}\phi_{i,j,k} + \Delta y_j\phi_{i,j+1,k}}{\Delta y_j + \Delta y_{j+1}} \\ \phi_{i,j+1/2,k+1} &= \frac{\Delta y_{j+1}\phi_{i,j,k+1} + \Delta y_j\phi_{i,j+1,k+1}}{\Delta y_j + \Delta y_{j+1}}\end{aligned}$$

と内挿される。同様に $\phi_{i+1/2,j,k+1/2}$ は

$$\begin{aligned}\phi_{i+1/2,j,k+1/2} &= \frac{\Delta x_{i+1}\phi_{i,j,k+1/2} + \Delta x_i\phi_{i+1,j,k+1/2}}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}} \\ \phi_{i,j,k+1/2} &= \frac{\Delta z_{k+1}\phi_{i,j,k} + \Delta z_k\phi_{i,j,k+1}}{\Delta z_k + \Delta z_{k+1}} \\ \phi_{i+1,j,k+1/2} &= \frac{\Delta z_{k+1}\phi_{i+1,j,k} + \Delta z_k\phi_{i+1,j,k+1}}{\Delta z_k + \Delta z_{k+1}}\end{aligned}$$

となる。

ここまでは直交座標系での差分式であったが、円筒座標系でも同様である。円筒座標系では、応力項は以下の様に与えられる。

$$\begin{aligned}\tau_{rr} &= \bar{\mu}2\frac{\partial u}{\partial r} \\ \tau_{\theta\theta} &= \bar{\mu}\frac{2}{r}\left(\frac{\partial v}{\partial\theta} + u\right) \\ \tau_{zz} &= \bar{\mu}2\frac{\partial w}{\partial z} \\ \tau_{r\theta} &= \bar{\mu}\left[r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{v}{r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial\theta}\right] \\ \tau_{\theta z} &= \bar{\mu}\left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{1}{r}\frac{\partial w}{\partial\theta}\right) \\ \tau_{rz} &= \bar{\mu}\left(\frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial z}\right)\end{aligned}$$

ここで、 u は r 方向の流速、 v は θ 方向の流速である。 $\bar{\mu}$ は粘性率にポイド率をかけたものをあらわす。

これらの項の差分式をつくる。直交座標系と円筒座標系での式を同時にあらわすため、メッシュ中心の半径 $r_{i,j,k}$ を

$$r_{i,j,k} = \begin{cases} 1 & \text{直交座標のとき} \\ r_i & \text{円筒座標のとき} \end{cases}$$

と定義する。また、 ξ を直交座標系の時0であり、円筒座標系の時1の値をとるものとする。

τ_{rr} は、メッシュ中心で定義され

$$\tau_{rr,i,j,k} = 2\bar{\mu}\frac{u_{i+1/2,j,k} - u_{i-1/2,j,k}}{\Delta r_i}$$

と差分化される。また、 $\tau_{\theta\theta}$ も、メッシュ中心で定義され、その差分式は

$$\tau_{\theta\theta} = 2\bar{\mu}\frac{1}{r_{i,j,k}}\left(\frac{v_{i,j+1/2,k} - v_{i,j-1/2,k}}{\Delta\theta_j} + \xi \cdot \frac{u_{i+1/2,j,k} + u_{i-1/2,j,k}}{2}\right)$$

である。 τ_{zz} は直交座標系の場合とまったく同一である。

$\tau_{r\theta}$ は $(i+1/2, j+1/2, k)$ 点で定義され

$$\tau_{r\theta, i+1/2, j+1/2, k} = \tilde{\mu} \left[\tau_{i+1/2} \frac{(v_{i+1, j+1/2, k} / r_{i+1, j, k}) - (v_{i, j+1/2, k} / r_{i, j, k})}{\Delta r_{i+1/2}} + \frac{u_{i+1/2, j+1, k} - u_{i+1/2, j-1/2, k}}{r_{i+1/2} \Delta \theta_{j+1/2}} \right]$$

となる。ここで、 $r_{i+1/2}$ は

$$r_{i+1/2} = r_{i, j, k} + 0.5 \xi \Delta r_i$$

となり、直交座標系では1、円筒座標系では実際の半径の値をとる。同様に、 $\tau_{\theta, z}$ は $(i, j+1/2, k+1/2)$ 点で定義され

$$\tau_{\theta, z, i, j+1/2, k+1/2} = \tilde{\mu} \left[\frac{v_{i, j+1/2, k+1} - v_{i, j+1/2, k}}{\Delta z_{k+1/2}} + \frac{w_{i, j+1, k+1/2} - w_{i, j, k+1/2}}{r_{i, j, k} \Delta \theta_j} \right]$$

である。 τ_{zr} は直交座標系と同一である。

運動方程式に加わるせん断力は

$$\begin{aligned} \tau_r &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rr}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{r\theta}}{\partial \theta} - \frac{\tau_{\theta\theta}}{r} + \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} \\ \tau_\theta &= \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \tau_{r\theta}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\theta\theta}}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{\theta z}}{\partial z} \\ \tau_z &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \tau_{rz}) + \frac{1}{r} \frac{\partial \tau_{\theta z}}{\partial \theta} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \end{aligned}$$

である。上の様にせん断応力の定義点をとれば、直交座標系の場合と同様に、せん断力各項の定義点は流速の定義点と同じとなる。

2.4 運動方程式の差分式

本節では、運動方程式の差分式を示し、流速を圧力の関数として表す。簡略化のため直交座標系で x 方向のみの運動方程式を取り上げるが、他の方向についても同様な取り扱いをしている。

本コードでは、界面せん断応力以外にも、界面に働くさまざまな力を導入しているが、界面せん断応力項を除いては陽的に取り扱うものとする。付加質量項は、時間微分を含むので、運動方程式の解法に変更を及ぼす。このため、最初に付加質量項のない場合を示し、その後付加質量項の取り扱いを示す。

x 方向の運動方程式は、気相と液相に関して次のようになる：

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_g}{\partial t} + u_g \frac{\partial u_g}{\partial x} + v_g \frac{\partial u_g}{\partial y} + w_g \frac{\partial u_g}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho_g} \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{c_{ix}}{\alpha \rho_g} (u_g - u_\ell) |u_g - u_\ell| + \frac{\tau_{ig}}{\alpha \rho_g} \\ &\quad - \frac{\Gamma^+}{\alpha \rho_g} (u_g - u_\ell) + \frac{1}{\alpha \rho_g} \left(\frac{\partial \tau_{g,xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{g,xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{g,xz}}{\partial z} \right) + g_x \\ \frac{\partial u_\ell}{\partial t} + u_\ell \frac{\partial u_\ell}{\partial x} + v_\ell \frac{\partial u_\ell}{\partial y} + w_\ell \frac{\partial u_\ell}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho_\ell} \frac{\partial P}{\partial x} - \frac{c_{ix}}{(1-\alpha)\rho_\ell} (u_\ell - u_g) |u_\ell - u_g| + \frac{\tau_{i\ell}}{(1-\alpha)\rho_\ell} \\ &\quad + \frac{\Gamma^-}{(1-\alpha)\rho_\ell} (u_\ell - u_g) + \frac{1}{(1-\alpha)\rho_\ell} \left(\frac{\partial \tau_{\ell,xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{\ell,xy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{\ell,xz}}{\partial z} \right) + g_x \end{aligned}$$

である。ここで、 τ_{ik} は界面せん断応力以外の界面に働く力である。

差分は、半陰解法に基づいて行う。このため、新しい時間レベル($n+1$ とする)の量は、時間微分項に含まれている速度と圧力である。界面せん断応力項及び相変化による運動量交換項に含まれる流速は安定性に影響するので、一部分のみを新しい時間レベルの量とする。即ち、

$$c_{ix}^{(n)}(u_g^{(n+1)} - u_\ell^{(n+1)})|u_g^{(n)} - u_\ell^{(n)}| - \Gamma^{(n)}(u_g^{(n+1)} - u_\ell^{(n+1)})$$

とおく。相関式に基づいて計算される界面せん断応力係数や相変化量は古い時刻で評価し既知のものとする。揚力項は z 方向の流速の2次式であるので、新しいレベルの量を導入すると x 方向の流速とカップリングが起こる。このため、古い時刻のレベルとして陽的に評価する。新しい時間レベルの量を以上の様に定めたため、依然として、速度は、圧力の一次式で表現できる。

移流項($(conv)_k$ とおく)の差分を

$$(conv)_k = u_{k,i+1/2,j,k} \left\langle \frac{du}{dx} \right\rangle_{i+1/2,j,k} + v_{k,i+1/2,j,k} \left\langle \frac{du}{dy} \right\rangle_{i+1/2,j,k} + w_{k,i+1/2,j,k} \left\langle \frac{du}{dz} \right\rangle_{i+1/2,j,k}$$

と書く。ここで、 $\langle \rangle$ で囲まれた微分は、風上差分により計算する。上の式の各項は以下の様に求められる。

$$\left\langle \frac{du}{dx} \right\rangle_{i+1/2,j,k} = \begin{cases} (u_{k,i+1/2,j,k} - u_{k,i-1/2,j,k})/\Delta x_i & u_{k,i+1/2,j,k} > 0 \\ (u_{k,i+3/2,j,k} - u_{k,i+1/2,j,k})/\Delta x_{i+1} & u_{k,i+1/2,j,k} < 0 \end{cases}$$

$$v_{k,i+1/2,j,k} = \frac{\Delta x_{i+1} v_{k,i,j,k} + \Delta x_i v_{k,i+1,j,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}$$

$$v_{k,i,j,k} = \frac{1}{2}(v_{k,i,j+1/2,k} + v_{k,i,j-1/2,k})$$

$$v_{k,i+1,j,k} = \frac{1}{2}(v_{k,i+1,j+1/2,k} + v_{k,i+1,j-1/2,k})$$

$$\left\langle \frac{du}{dy} \right\rangle_{i+1/2,j,k} = \begin{cases} (u_{k,i+1/2,j,k} - u_{k,i+1/2,j-1,k})/\Delta y_{j-1/2} & v_{k,i+1/2,j,k} > 0 \\ (u_{k,i+1/2,j+1,k} - u_{k,i+1/2,j,k})/\Delta y_{j+1/2} & v_{k,i+1/2,j,k} < 0 \end{cases}$$

$$w_{k,i+1/2,j,k} = \frac{\Delta x_{i+1} w_{k,i,j,k} + \Delta x_i w_{k,i+1,j,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}$$

$$w_{k,i,j,k} = \frac{1}{2}(w_{k,i,j,k+1/2} + w_{k,i,j,k-1/2})$$

$$w_{k,i+1,j,k} = \frac{1}{2}(w_{k,i+1,j,k+1/2} + w_{k,i+1,j,k-1/2})$$

$$\left\langle \frac{du}{dz} \right\rangle_{i+1/2,j,k} = \begin{cases} (u_{k,i+1/2,j,k} - u_{k,i+1/2,j,k-1})/\Delta z_{k-1/2} & w_{k,i+1/2,j,k} > 0 \\ (u_{k,i+1/2,j,k+1} - u_{k,i+1/2,j,k})/\Delta z_{k+1/2} & w_{k,i+1/2,j,k} < 0 \end{cases}$$

せん断応力項 τ_{kx} は

$$\tau_{k,x,i+1/2,j,k} = \frac{\tau_{k,xx,i+1,j,k} - \tau_{k,xx,i,j,k}}{\Delta x_{i+1/2}} + \frac{\tau_{k,xy,i+1/2,j+1/2,k} - \tau_{k,xy,i+1/2,j-1/2,k}}{\Delta y_j} + \frac{\tau_{k,zx,i+1/2,j,k+1/2} - \tau_{k,zx,i+1/2,j,k-1/2}}{\Delta z_k}$$

である。

これらの表式を運動方程式に代入すれば

$$u_{g,i+1/2,j,k}^{(n+1)} - u_{g,i+1/2,j,k}^{(n)} + \Delta t(\text{conv})_g + \frac{\Delta t}{\rho_{g,i+1/2,j,k}} \frac{P_{i+1,j,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}}{\Delta x_{i+1/2}} \\ + \Delta t \tilde{C}_{xg} (u_{g,i+1/2,j,k}^{(n+1)} - u_{\ell,i+1/2,j,k}^{(n+1)}) - \Delta t \frac{\tau_{g,x,i+1/2,j,k}}{(\alpha \rho_g)_{i+1/2,j,k}} - \Delta t g_x = 0$$

$$u_{\ell,i+1/2,j,k}^{(n+1)} - u_{\ell,i+1/2,j,k}^{(n)} + \Delta t(\text{conv})_\ell + \frac{\Delta t}{\rho_{\ell,i+1/2,j,k}} \frac{P_{i+1,j,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}}{\Delta x_{i+1/2}} \\ + \Delta t \tilde{C}_{x\ell} (u_{\ell,i+1/2,j,k}^{(n+1)} - u_{g,i+1/2,j,k}^{(n+1)}) - \Delta t \frac{\tau_{\ell,x,i+1/2,j,k}}{((1-\alpha)\rho_\ell)_{i+1/2,j,k}} - \Delta t g_x = 0$$

となる。ここで、 \tilde{C}_{xk} は、相変化項と界面せん断応力項をまとめたもので

$$\tilde{C}_{xg} = \frac{1}{(\alpha \rho_g)_{i+1/2,j,k}} (c_{ix,i+1/2,j,k} |u_{g,i+1/2,j,k}^{(n)} - u_{\ell,i+1/2,j,k}^{(n)}| + \Gamma_{i+1/2,j,k}^+) \\ \tilde{C}_{x\ell} = \frac{1}{((1-\alpha)\rho_\ell)_{i+1/2,j,k}} (c_{ix,i+1/2,j,k} |u_{g,i+1/2,j,k}^{(n)} - u_{\ell,i+1/2,j,k}^{(n)}| - \Gamma_{i+1/2,j,k}^-)$$

である。また、 τ 項は、せん断応力項と界面に働く力のうち陽に扱う部分をまとめたものである。スカラー量 ϕ の $(i+1/2, j, k)$ での値は、内挿により

$$\phi_{i+1/2,j,k} = \frac{\Delta x_i \phi_{i+1,j,k} + \Delta x_{i+1} \phi_{i,j,k}}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}$$

と計算する。

これらの運動方程式は u_g と u_ℓ についての2元連立方程式になる。これらの式を

$$(1 + \Delta t \tilde{C}_{xg})u_g - \Delta t \tilde{C}_{xg}u_\ell = d_g + e_g(P_{i+1,j,k} - P_{i,j,k}) \\ - \Delta t \tilde{C}_{x\ell}u_g + (1 + \Delta t \tilde{C}_{x\ell})u_\ell = d_\ell + e_\ell(P_{i+1,j,k} - P_{i,j,k})$$

と書く。ここで、 $(i+1/2, j, k)$ 及び $(n+1)$ は省略した。係数 d 及び e は

$$d_g = u_g^{(n)} + \Delta t \left[-(\text{conv})_g + \frac{\tau_{gx}}{\alpha \rho_g} + g_x \right] \\ d_\ell = u_\ell^{(n)} + \Delta t \left[-(\text{conv})_\ell + \frac{\tau_{\ell x}}{(1-\alpha)\rho_\ell} + g_x \right] \\ e_g = -\frac{\Delta t}{\rho_g} \frac{1}{\Delta x_{i+1/2}} \\ e_\ell = -\frac{\Delta t}{\rho_\ell} \frac{1}{\Delta x_{i+1/2}}$$

である。

この連立方程式の解を

$$u_k = \tilde{u}_k + \left(\frac{du_k}{dP} \right) (P_{i+1,j,k} - P_{i,j,k})$$

と書くと、それぞれの係数は

$$\begin{aligned}\tilde{u}_g &= \frac{1}{\det} \left[d_g + \Delta t (\tilde{C}_{xg} d_\ell + \tilde{C}_{x\ell} d_g) \right] \\ \tilde{u}_\ell &= \frac{1}{\det} \left[d_\ell + \Delta t (\tilde{C}_{xg} d_\ell + \tilde{C}_{x\ell} d_g) \right] \\ \left(\frac{du_g}{dP} \right) &= \frac{1}{\det} \left[e_g + \Delta t (\tilde{C}_{xg} e_\ell + \tilde{C}_{x\ell} e_g) \right] \\ \left(\frac{du_\ell}{dP} \right) &= \frac{1}{\det} \left[e_\ell + \Delta t (\tilde{C}_{xg} e_\ell + \tilde{C}_{x\ell} e_g) \right]\end{aligned}$$

と与えられる。ここで、

$$\det = 1 + \Delta t (\tilde{C}_{xg} + \tilde{C}_{x\ell})$$

である。

以上により、 u_g 及び u_ℓ が圧力の関数として表現された。

2.4.1 付加質量項の導入

付加質量項は速度の時間微分を含むため、速度を圧力で表すとき、連立方程式の係数が変更される。ここでは、 x 方向の運動方程式を例に取り、変更部分を述べる。

時間微分項に注目して運動方程式を書き下すと

$$\begin{aligned}\alpha \rho_g \frac{\partial u_g}{\partial t} &= \dots - C_{add} \alpha \rho_\ell \left(\frac{D_L}{Dt} u_g - \frac{D_G}{Dt} u_\ell \right) \\ (1 - \alpha) \rho_\ell \frac{\partial u_\ell}{\partial t} &= \dots + C_{add} \alpha \rho_\ell \left(\frac{D_L}{Dt} u_g - \frac{D_G}{Dt} u_\ell \right)\end{aligned}$$

となる。ここで、付加質量項を分解して

$$\frac{D_L}{Dt} u_g - \frac{D_G}{Dt} u_\ell = \frac{\partial u_g}{\partial t} - \frac{\partial u_\ell}{\partial t} + ADD$$

とかく。ADDは物質微分項の空間微分の部分をまとめたものである。

時間微分項を

$$\frac{\phi^{(n+1)} - \phi^{(n)}}{\Delta t}$$

と差分化し、運動方程式に代入すると、気相の運動方程式は

$$\begin{aligned}\left[CVV1 + \frac{C_{add} \alpha \rho_\ell}{\alpha \rho_g} \right] u_g^{(n+1)} + \left[CVL1 - \frac{C_{add} \alpha \rho_\ell}{\alpha \rho_g} \right] u_\ell^{(n+1)} \\ = d_g + \frac{C_{add} \alpha \rho_\ell}{\alpha \rho_g} (u_g^{(n)} - u_\ell^{(n)}) - \frac{C_{add} \alpha \rho_\ell \Delta t \cdot ADD}{\alpha \rho_g} + e_g (P_{i+1,j,k} - P_{i,j,k})\end{aligned}$$

となる。また、液相の運動方程式は

$$\begin{aligned}\left[CVV2 - \frac{C_{add} \alpha \rho_\ell}{(1 - \alpha) \rho_\ell} \right] u_g^{(n+1)} + \left[CVL2 + \frac{C_{add} \alpha \rho_\ell}{(1 - \alpha) \rho_\ell} \right] u_\ell^{(n+1)} \\ = d_\ell - \frac{C_{add} \alpha \rho_\ell}{(1 - \alpha) \rho_\ell} (u_g^{(n)} - u_\ell^{(n)}) + \frac{C_{add} \alpha \rho_\ell \Delta t \cdot ADD}{(1 - \alpha) \rho_\ell} + e_\ell (P_{i+1,j,k} - P_{i,j,k})\end{aligned}$$

となる。ここで、CVV1、CVL1、CVV2及びCVL2は付加質量項がない場合の係数である。

この連立方程式を解くことにより、流速を圧力で表す事ができる。運動方程式の対角項に付加質量項の係数が加えられる事から、各相の密度が増加した効果がある。

2.5 流速に関する境界条件

本コードでは、考えている体系の側面のみには流体でない固体壁があるものとし、体系内には流れを妨げる障害物はないとしている。

固体壁での流速の境界条件としてはslip境界条件とnonslip境界条件を考える。前者の境界条件は、壁面において $\partial v/\partial n = 0$ という条件に対応している。ここで、 n は壁面の法線である。また、後者の条件は、壁面上で流速が0という条件に対応している。流速 v は壁面に平行な流速の成分である。この境界条件は、流速の2階微分項、即ち、せん断応力項に関するものであり、せん断応力項を評価する以前に設定される必要がある。

壁面に垂直な流速成分 u に関する境界条件は、その位置が固体壁であるか、注入位置であるか、その位置から流体が流出するかどうかにより決定される。注目している位置が固体壁の場合は、固体壁を貫通しない事から $u = 0$ である。この条件を便宜的にwall条件と呼ぶ。注目している位置が注入口である場合は、流速を注入速度に固定する。この条件を便宜的にfill条件と呼ぶ。注目している位置から流体が流出する場合は、その位置で運動方程式を解く。この条件を便宜的にbreak条件と呼ぶ。break条件では、出口での圧力を与える。

壁のどの位置にfillやbreakがあるかは任意であるが、固体壁がnonslipまたはslip条件を満たすかは、壁毎に決まると考えられる。従って、一つの壁ではnonslipかslipかのどちらかの条件を満たすものとする。

ここまでで述べた境界条件を以下に具体的に書き下す。簡略化のため x または r 方向の面について書き下す。他の方向についても同様に考えることができる。

2.5.1 $i = 1/2$ 壁面

この面は x または r 方向左側の面である。

(1)slipまたはnonslip条件

直交座標系の場合、壁上にあり壁に平行な速度は

$$v_{k,1/2,j,k} = \frac{\Delta x_0 v_{k,1,j,k} + \Delta x_1 v_{k,0,j,k}}{\Delta x_0 + \Delta x_1}$$

$$w_{k,1/2,j,k} = \frac{\Delta x_0 w_{k,1,j,k} + \Delta x_1 w_{k,0,j,k}}{\Delta x_0 + \Delta x_1}$$

である。従って、slip条件は

$$v_{k,1/2,j,k} = v_{k,1,j,k}$$

$$w_{k,1/2,j,k} = w_{k,1,j,k}$$

と、nonslip条件は

$$v_{k,1/2,j,k} = 0$$

$$w_{k,1/2,j,k} = 0$$

と与えられる。ところが、 $v_{k,1/2,j,k}$ 及び $w_{k,1/2,j,k}$ は流速の定義点ではないので、以上の条件をそのまま採用する事はできない。代わりに、上の条件を $v_{k,0,j,k}$ 及び $w_{k,0,j,k}$ に関する条件とする。境界条件を $i=0$ の流速について解くと、slip条件の時

$$v_{k,0,j,k} = v_{k,1,j,k}$$

$$w_{k,0,j,k} = w_{k,1,j,k}$$

となり、nonslip条件の時

$$v_{k,0,j,k} = -\frac{\Delta x_0}{\Delta x_1} v_{k,1,j,k}$$

$$w_{k,0,j,k} = -\frac{\Delta x_0}{\Delta x_1} w_{k,1,j,k}$$

となる。

上記の境界条件により、仮想セルの速度が設定できる。しかし、仮想セルの流速 u は設定されない。 u を設定するために

$$u_{k,-1/2,j,k} = u_{k,1/2,j,k}$$

とおく。この条件は、せん断応力テンソル $\tau_{k,xx} = 0$ に対応している。

円筒座標系の場合も同様であるが、この座標系の場合に特有の事柄は、この面が $r=0$ の場合である。この場合は、 $r=0$ で流速が有限になるために slip 条件しか成立しない。

(2) $(1/2, j, k)$ が wall 条件を満たす場合

壁に垂直な速度は $u_{k,1/2,j,k}$ である。従って、 u に関する境界条件は

$$u_{k,1/2,j,k} = 0$$

である。新しい時刻での流速 $u_{k,1/2,j,k}^{(n+1)}$ についても、値が0となる事を保証するため、運動方程式を圧力で表した時の係数に対して

$$\begin{aligned} \bar{u}_{k,1/2,j,k} &= 0 \\ \left(\frac{du_k}{dP} \right)_{1/2,j,k} &= 0 \end{aligned}$$

とおく。両者を0と置くことにより、新しい時刻での流速が0となる事が保証される。

(3) $(1/2, j, k)$ が fill 条件を満たす場合

新しい時刻での流速 $u_{k,1/2,j,k}^{(n+1)}$ についても、値が注入条件から決定される値となる事を保証するため、運動方程式を圧力で表した時の係数に対して

$$\begin{aligned} \bar{u}_{k,1/2,j,k} &= \text{注入条件で決まる値} \\ \left(\frac{du_k}{dP} \right)_{1/2,j,k} &= 0 \end{aligned}$$

とおく。圧力の係数を0と置くことにより、新しい時刻での流速が指定された値となる事が保証される。

(4) $(1/2, j, k)$ が break 条件を満たす場合

この場合は、運動方程式を解く。そのため係数を新たにセットしなおす必要はない。圧力 $P_{0,j,k}$ が指定された値である事を保証しなければならないが、これについては圧力の増分に関する行列の設定のところで述べる。

2.5.2 $i = N_x + 1/2$ 壁面

この面は x または r 方向右側の面である。

(1) slip または nonslip 条件

slip 条件は

$$\begin{aligned} v_{k,N_x+1,j,k} &= v_{k,N_x,j,k} \\ w_{k,N_x+1,j,k} &= w_{k,N_x,j,k} \end{aligned}$$

であり、nonslip 条件は

$$\begin{aligned} v_{k,N_x+1,j,k} &= -\frac{\Delta x_{N_x+1}}{\Delta x_{N_x}} v_{k,N_x,j,k} \\ w_{k,N_x+1,j,k} &= -\frac{\Delta x_{N_x+1}}{\Delta x_{N_x}} w_{k,N_x,j,k} \end{aligned}$$

である。

上記の境界条件により、仮想セルの速度が設定できる。しかし、仮想セルの流速 u は設定されない。 u を設定するために

$$u_{k,N_x+3/2,j,k} = u_{k,N_x+1/2,j,k}$$

とおく。この条件は、せん断応力テンソル $\tau_{k,xx} = 0$ に対応している。

(2) $(N_x + 1/2, j, k)$ が wall 条件を満たす場合

壁に垂直な速度は $u_{k,N_x+1/2,j,k}$ である。従って、 u に関する境界条件は

$$u_{k,N_x+1/2,j,k} = 0$$

である。新しい時刻での流速 $u_{k,N_x+1/2,j,k}^{(n+1)}$ についても、値が 0 となる事を保証するため、運動方程式を圧力で表した時の係数に対して

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{k,N_x+1/2,j,k} &= 0 \\ \left(\frac{du_k}{dP} \right)_{N_x+1/2,j,k} &= 0 \end{aligned}$$

とおく。両者を 0 と置くことにより、新しい時刻での流速が 0 となる事が保証される。

(3) $(N_x + 1/2, j, k)$ が fill 条件を満たす場合

新しい時刻での流速 $u_{k, N_x+1/2, j, k}^{(n+1)}$ についても、値が注入条件から決定される値となる事を保証するため、運動方程式を圧力で表した時の係数に対して

$$\begin{aligned} \bar{u}_{k, N_x+1/2, j, k} &= \text{注入条件で決まる値} \\ \left(\frac{du_k}{dP} \right)_{N_x+1/2, j, k} &= 0 \end{aligned}$$

とおく。圧力の係数を0と置くことにより、新しい時刻での流速が指定された値となる事が保証される。

(4) $(N_x + 1/2, j, k)$ が break 条件を満たす場合

この場合は、運動方程式を解く。そのため係数を新たにセットしなおす必要はない。圧力 $P_{N_x+1, j, k}$ が指定された値である事を保証しなければならないが、これについては圧力の増分に関する行列の設定のところで述べる。

2.6 質量及びエネルギー保存式の差分式

質量及びエネルギー保存式の差分も半陰解法に基づいて行う。従って、新しい時刻レベルの量は時間微分に含まれるものと流速である。相変化量は、非線形性が強いので、出来る限り陰的に取り扱う。

また、単相と二相の遷移の場合は、方程式のセットが変更される。本節では二相の場合の差分式を示す。

2.6.1 質量保存式の差分式

質量保存式の差分式は

$$\begin{aligned} M_{k, i, j, k} &\equiv \alpha_{k, i, j, k}^{(n+1)} \rho_{k, i, j, k}^{(n+1)} - \alpha_{k, i, j, k}^{(n)} \rho_{k, i, j, k}^{(n)} \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left(u_{k, i+1/2, j, k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i+1/2, j, k} - u_{k, i-1/2, j, k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i-1/2, j, k} \right) \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta y_j} \left(v_{k, i, j+1/2, k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i, j+1/2, k} - v_{k, i, j-1/2, k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i, j-1/2, k} \right) \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta z_k} \left(w_{k, i, j, k+1/2}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i, j, k+1/2} - w_{k, i, j, k-1/2}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i, j, k-1/2} \right) \\ &- \Delta t \Gamma_{k, i, j, k}^{(n+1)} = 0 \end{aligned}$$

である。ここで、 $\langle \rangle$ で囲まれた量は、セル境界でのフラックスであり、風上差分により計算する。

$$\langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i+1/2, j, k} = \begin{cases} \alpha_{k, i, j, k}^{(n)} \rho_{k, i, j, k}^{(n)} & u_{k, i+1/2, j, k}^{(n+1)} > 0 \text{の時} \\ \alpha_{k, i+1, j, k}^{(n)} \rho_{k, i+1, j, k}^{(n)} & u_{k, i+1/2, j, k}^{(n+1)} < 0 \text{の時} \end{cases}$$

$$\langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i-1/2, j, k} = \begin{cases} \alpha_{k, i-1, j, k}^{(n)} \rho_{k, i-1, j, k}^{(n)} & u_{k, i-1/2, j, k}^{(n+1)} > 0 \text{の時} \\ \alpha_{k, i, j, k}^{(n)} \rho_{k, i, j, k}^{(n)} & u_{k, i-1/2, j, k}^{(n+1)} < 0 \text{の時} \end{cases}$$

$$\langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i, j+1/2, k} = \begin{cases} \alpha_{k, i, j, k}^{(n)} \rho_{k, i, j, k}^{(n)} & v_{k, i, j+1/2, k}^{(n+1)} > 0 \text{の時} \\ \alpha_{k, i, j+1, k}^{(n)} \rho_{k, i, j+1, k}^{(n)} & v_{k, i, j+1/2, k}^{(n+1)} < 0 \text{の時} \end{cases}$$

$$\langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i,j-1/2,k} = \begin{cases} \alpha_{k,i,j-1,k}^{(n)} \rho_{k,i,j-1,k}^{(n)} & v_{k,i,j-1/2,k}^{(n+1)} > 0 \text{ の時} \\ \alpha_{k,i,j,k}^{(n)} \rho_{k,i,j,k}^{(n)} & v_{k,i,j-1/2,k}^{(n+1)} < 0 \text{ の時} \end{cases}$$

$$\langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i,j,k+1/2} = \begin{cases} \alpha_{k,i,j,k}^{(n)} \rho_{k,i,j,k}^{(n)} & w_{k,i,j,k+1/2}^{(n+1)} > 0 \text{ の時} \\ \alpha_{k,i,j,k+1}^{(n)} \rho_{k,i,j,k+1}^{(n)} & w_{k,i,j,k+1/2}^{(n+1)} < 0 \text{ の時} \end{cases}$$

$$\langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i,j,k-1/2} = \begin{cases} \alpha_{k,i,j,k-1}^{(n)} \rho_{k,i,j,k-1}^{(n)} & w_{k,i,j,k-1/2}^{(n+1)} > 0 \text{ の時} \\ \alpha_{k,i,j,k}^{(n)} \rho_{k,i,j,k}^{(n)} & w_{k,i,j,k-1/2}^{(n+1)} < 0 \text{ の時} \end{cases}$$

2.8節で示す様に、圧力を求めるためには、反復計算が必要となり、反復計算の途中で、新しい時刻レベルの流速も更新される。この反復計算中流速の向きが変化すると、この風上差分の計算においてセル界面のフラックスが不連続的に変化する場合がある。これは、反復計算に不安定さを生じさせるため、反復回数を一増やすことにより対処している。

質量保存式に、流速を圧力で表現した式

$$u_{k,i+1/2,j,k}^{(n+1)} = \tilde{u}_{k,i+1/2,j,k} + \left(\frac{du_k}{dP} \right)_{i+1/2,j,k} (P_{i+1,j,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)})$$

$$u_{k,i-1/2,j,k}^{(n+1)} = \tilde{u}_{k,i-1/2,j,k} + \left(\frac{du_k}{dP} \right)_{i-1/2,j,k} (P_{i,j,k}^{(n+1)} - P_{i-1,j,k}^{(n+1)})$$

$$v_{k,i,j+1/2,k}^{(n+1)} = \tilde{v}_{k,i,j+1/2,k} + \left(\frac{dv_k}{dP} \right)_{i,j+1/2,k} (P_{i,j+1,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)})$$

$$v_{k,i,j-1/2,k}^{(n+1)} = \tilde{v}_{k,i,j-1/2,k} + \left(\frac{dv_k}{dP} \right)_{i,j-1/2,k} (P_{i,j,k}^{(n+1)} - P_{i,j-1,k}^{(n+1)})$$

$$w_{k,i,j,k+1/2}^{(n+1)} = \tilde{w}_{k,i,j,k+1/2} + \left(\frac{dw_k}{dP} \right)_{i,j,k+1/2} (P_{i,j,k+1}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)})$$

$$w_{k,i,j,k-1/2}^{(n+1)} = \tilde{w}_{k,i,j,k-1/2} + \left(\frac{dw_k}{dP} \right)_{i,j,k-1/2} (P_{i,j,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k-1}^{(n+1)})$$

を代入すると

$$\begin{aligned} M_{k,i,j,k} &= \alpha_{k,i,j,k}^{(n+1)} \rho_{k,i,j,k}^{(n+1)} - \Delta t \Gamma_{k,i,j,k}^{(n+1)} \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta z_k} \left(\frac{dw_k}{dP} \right)_{i,j,k-1/2} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i,j,k-1/2} (P_{i,j,k-1}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta y_j} \left(\frac{dv_k}{dP} \right)_{i,j-1/2,k} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i,j-1/2,k} (P_{i,j-1,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left(\frac{du_k}{dP} \right)_{i-1/2,j,k} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i-1/2,j,k} (P_{i-1,j,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left(\frac{du_k}{dP} \right)_{i+1/2,j,k} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i+1/2,j,k} (P_{i+1,j,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta y_j} \left(\frac{dv_k}{dP} \right)_{i,j+1/2,k} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i,j+1/2,k} (P_{i,j+1,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta z_k} \left(\frac{dw_k}{dP} \right)_{i,j,k+1/2} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i,j,k+1/2} (P_{i,j,k+1}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\ &- \tilde{M}_{k,i,j,k} = 0 \end{aligned}$$

となる。この式を

$$M_{k,i,j,k} = \alpha_{k,i,j,k}^{(n+1)} \rho_{k,i,j,k}^{(n+1)} - \Delta t \Gamma_{k,i,j,k} + \sum_{face} m_{k,i,j,k,face} (P_{face}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) - \tilde{M}_{k,i,j,k}$$

と書く。faceはセル (i, j, k) に接しているセルのインデックス $(i, j, k-1)$ 、 $(i, j-1, k)$ 、 $(i-1, j, k)$ 、 $(i+1, j, k)$ 、 $(i, j+1, k)$ 及び $(i, j, k+1)$ をあらわす。ここで、 \tilde{M} は、新しい時刻レベルに関係のない量をまとめたもので

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{k,i,j,k} &= \alpha_{k,i,j,k}^{(n)} \rho_{k,i,j,k}^{(n)} \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left(\tilde{u}_{k,i+1/2,j,k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i+1/2,j,k} - \tilde{u}_{k,i-1/2,j,k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i-1/2,j,k} \right) \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta y_j} \left(\tilde{v}_{k,i,j+1/2,k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i,j+1/2,k} - \tilde{v}_{k,i,j-1/2,k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i,j-1/2,k} \right) \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta z_k} \left(\tilde{w}_{k,i,j,k+1/2}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i,j,k+1/2} - \tilde{w}_{k,i,j,k-1/2}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k \rangle_{i,j,k-1/2} \right) \end{aligned}$$

である。

2.6.2 エネルギー保存式の差分式

エネルギー保存式は

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_k \rho_k e_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k e_k \vec{V}_k) &= -P \frac{\partial \alpha_k}{\partial t} - P \nabla \cdot (\alpha_k \vec{V}_k) \\ &+ q_{wk} + q_{ik} + \Gamma_k h_{ks} \end{aligned}$$

である。質量保存式と同様に差分化すると

$$\begin{aligned} E_{k,i,j,k} &\equiv \alpha_{k,i,j,k}^{(n+1)} \rho_{k,i,j,k}^{(n+1)} e_{k,i,j,k}^{(n+1)} - \alpha_{k,i,j,k}^{(n)} \rho_{k,i,j,k}^{(n)} e_{k,i,j,k}^{(n)} \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left(u_{k,i+1/2,j,k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i+1/2,j,k} - u_{k,i-1/2,j,k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i-1/2,j,k} \right) \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta y_j} \left(v_{k,i,j+1/2,k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i,j+1/2,k} - v_{k,i,j-1/2,k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i,j-1/2,k} \right) \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta z_k} \left(w_{k,i,j,k+1/2}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i,j,k+1/2} - w_{k,i,j,k-1/2}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i,j,k-1/2} \right) \\ &+ P_{i,j,k}^{(n+1)} \left(\alpha_{i,j,k}^{(n+1)} - \alpha_{i,j,k}^{(n)} \right) \\ &+ P_{i,j,k}^{(n+1)} \left[\frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left(u_{k,i+1/2,j,k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rangle_{i+1/2,j,k} - u_{k,i-1/2,j,k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rangle_{i-1/2,j,k} \right) \right. \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta y_j} \left(v_{k,i,j+1/2,k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rangle_{i,j+1/2,k} - v_{k,i,j-1/2,k}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rangle_{i,j-1/2,k} \right) \\ &+ \left. \frac{\Delta t}{\Delta z_k} \left(w_{k,i,j,k+1/2}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rangle_{i,j,k+1/2} - w_{k,i,j,k-1/2}^{(n+1)} \langle \alpha_k \rangle_{i,j,k-1/2} \right) \right] \\ &- \Delta t q_{wk}^{(n)} - \Delta t \left(q_{ik}^{(n+1)} - \Gamma_{k,i,j,k}^{(n+1)} h_{ks}^{(n+1)} \right) = 0 \end{aligned}$$

である。ここで、体積変化による仕事の項(エネルギー方程式右辺の第1及び第2項)に含まれる圧力は新しい時刻レベルとした。半陰解法では、圧力はすべて陰的に扱うからである。 $\langle \rangle$ で囲まれた量は、風上差分により求める。風上差分についての注意は、質量保存式の差分化の場合と同様である。

この式に、速度を圧力で表したものを代入すると

$$\begin{aligned}
E_{k,i,j,k} &= \alpha_{k,i,j,k}^{(n+1)} \rho_{k,i,j,k}^{(n+1)} e_{k,i,j,k}^{(n+1)} + P_{i,j,k}^{(n+1)} \alpha_{k,i,j,k}^{(n+1)} + P_{i,j,k}^{(n+1)} \tilde{D}_{k,i,j,k} \\
&- \Delta t \left(q_{ik,i,j,k}^{(n+1)} + \Gamma_{k,i,j,k}^{(n+1)} h_{ks,i,j,k}^{(n+1)} \right) \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta z_k} \left(\frac{dw_k}{dP} \right)_{i,j,k-1/2} \left[\langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i,j,k-1/2} + \langle \alpha_k \rangle_{i,j,k-1/2} P_{i,j,k}^{(n+1)} \right] (P_{i,j,k-1}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta y_j} \left(\frac{dv_k}{dP} \right)_{i,j-1/2,k} \left[\langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i,j-1/2,k} + \langle \alpha_k \rangle_{i,j-1/2,k} P_{i,j,k}^{(n+1)} \right] (P_{i,j-1,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left(\frac{du_k}{dP} \right)_{i-1/2,j,k} \left[\langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i-1/2,j,k} + \langle \alpha_k \rangle_{i-1/2,j,k} P_{i,j,k}^{(n+1)} \right] (P_{i-1,j,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left(\frac{du_k}{dP} \right)_{i+1/2,j,k} \left[\langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i+1/2,j,k} + \langle \alpha_k \rangle_{i+1/2,j,k} P_{i,j,k}^{(n+1)} \right] (P_{i+1,j,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta y_j} \left(\frac{dv_k}{dP} \right)_{i,j+1/2,k} \left[\langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i,j+1/2,k} + \langle \alpha_k \rangle_{i,j+1/2,k} P_{i,j,k}^{(n+1)} \right] (P_{i,j+1,k}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta z_k} \left(\frac{dw_k}{dP} \right)_{i,j,k+1/2} \left[\langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i,j,k+1/2} + \langle \alpha_k \rangle_{i,j,k+1/2} P_{i,j,k}^{(n+1)} \right] (P_{i,j,k+1}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\
&- \tilde{E}_{k,i,j,k} = 0
\end{aligned}$$

となる。ここで、 \tilde{E} 及び \tilde{D} は $(n+1)$ レベルの量と無関係な部分をまとめたものであり

$$\begin{aligned}
\tilde{E}_{k,i,j,k} &= \alpha_{k,i,j,k}^{(n)} \rho_{k,i,j,k}^{(n)} e_{k,i,j,k}^{(n)} + \Delta t q_{wk,i,j,k}^{(n)} \\
&- \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left(\tilde{u}_{k,i+1/2,j,k} \langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i+1/2,j,k} - \tilde{u}_{k,i-1/2,j,k} \langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i-1/2,j,k} \right) \\
&- \frac{\Delta t}{\Delta y_j} \left(\tilde{v}_{k,i,j+1/2,k} \langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i,j+1/2,k} - \tilde{v}_{k,i,j-1/2,k} \langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i,j-1/2,k} \right) \\
&- \frac{\Delta t}{\Delta z_k} \left(\tilde{w}_{k,i,j,k+1/2} \langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i,j,k+1/2} - \tilde{w}_{k,i,j,k-1/2} \langle \alpha_k \rho_k e_k \rangle_{i,j,k-1/2} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{D}_{k,i,j,k} &= -\alpha_{k,i,j,k}^{(n)} \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta x_i} \left(\tilde{u}_{k,i+1/2,j,k} \langle \alpha_k \rangle_{i+1/2,j,k} - \tilde{u}_{k,i-1/2,j,k} \langle \alpha_k \rangle_{i-1/2,j,k} \right) \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta y_j} \left(\tilde{v}_{k,i,j+1/2,k} \langle \alpha_k \rangle_{i,j+1/2,k} - \tilde{v}_{k,i,j-1/2,k} \langle \alpha_k \rangle_{i,j-1/2,k} \right) \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta z_k} \left(\tilde{w}_{k,i,j,k+1/2} \langle \alpha_k \rangle_{i,j,k+1/2} - \tilde{w}_{k,i,j,k-1/2} \langle \alpha_k \rangle_{i,j,k-1/2} \right)
\end{aligned}$$

である。

以上の式をまとめて

$$\begin{aligned}
E_{k,i,j,k} &= \alpha_{k,i,j,k}^{(n+1)} \rho_{k,i,j,k}^{(n+1)} e_{k,i,j,k}^{(n+1)} + P_{i,j,k}^{(n+1)} \alpha_{k,i,j,k}^{(n+1)} + P_{i,j,k}^{(n+1)} \tilde{D}_{k,i,j,k} \\
&- \Delta t \left(q_{ik,i,j,k}^{(n+1)} + \Gamma_{k,i,j,k}^{(n+1)} h_{ks,i,j,k}^{(n+1)} \right) \\
&+ \sum_{face} \left(\tilde{e}_{k,i,j,k,face}^{(1)} + \tilde{e}_{k,i,j,k,face}^{(2)} P_{i,j,k}^{(n+1)} \right) (P_{face}^{(n+1)} - P_{i,j,k}^{(n+1)}) \\
&- \tilde{E}_{k,i,j,k}
\end{aligned}$$

と書く。

2.6.3 質量及びエネルギー保存式に対する境界条件

質量及びエネルギー保存式には、2階微分項が含まれていないので、境界条件は注入口 (fill) でフラックスを与えるのみでよい。現在のバージョンでは、fillは体系の外側に接続するのみであり、流速は運動方程式を解く時に設定されているので仮想セルにfill条件 (ボイド率、圧力及び温度) を設定するのみでよい。

例えば、 $(1/2, j, k)$ にfillがあり、現在の時刻での注入条件が

$$\begin{aligned} \text{ボイド率} & \alpha_{in} \\ \text{圧力} & P_{in} \\ \text{注入温度} & T_{g,in}, T_{l,in} \\ \text{流速} & u_{g,in}, u_{l,in} \end{aligned}$$

とすると、仮想セル $(0, j, k)$ の状態量を

$$\begin{aligned} \alpha_{0,j,k} & = \alpha_{in} \\ P_{0,j,k} & = P_{in} \\ T_{g,0,j,k} & = T_{g,in} \\ T_{l,0,j,k} & = T_{l,in} \end{aligned}$$

とし、流速を

$$\begin{aligned} u_{g,1/2,j,k} & = u_{g,in} \\ u_{l,1/2,j,k} & = u_{l,in} \end{aligned}$$

と設定すればよい。流速の設定方法の詳細については、流速に関する境界条件を記した2.5節を参照のこと。状態量が設定されれば、物性値ルーチンにより密度及び内部エネルギーが設定される。

境界条件がBreakの場合は外側の仮想セルに圧力を設定するが、逆流を考慮してそのセルに状態量を設定しておく。

2.7 二相乱流モデルの差分式

二相乱流モデルの基礎式は、2.1節で示した様に

$$\begin{aligned} \alpha_\ell \frac{D_L}{Dt} k_{L(SI)} & = \nabla \alpha_\ell (v_L^t \nabla k_{L(SI)}) + \alpha_\ell (P_L - \epsilon_L) \\ \alpha_\ell \frac{D_L}{Dt} \epsilon_L & = \nabla \alpha_\ell \left(\frac{v_L^t}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon_L \right) + \alpha_\ell \left(C_{\epsilon 1} \frac{P_L \epsilon_L}{k_{L(SI)}} - C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon_L^2}{k_{L(SI)}} \right) \end{aligned}$$

である。本節では、これらの差分式を示す。

乱流エネルギー及びエネルギー散逸率はメッシュの中心で定義する。乱流エネルギー生成率 P_L は直交座標の場合、

$$P_L = v_L^t \left[2 \left\{ \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right\} \right]$$

$$+ \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^2$$

と書き換えられる。また、円筒座標の場合は

$$P_L = \nu_L^t \left[2 \left\{ \left(\frac{\partial v_r}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{v_r}{r} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial z} \right)^2 \right\} + \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial x} + \frac{\partial v_z}{r \partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\theta}{r} \right) \right)^2 \right]$$

である。エネルギー生成率に関するはじめの3項は、自然に差分化すれば、セル中心での値になるので問題は無いが、残りの3項はコーナーでの値となる。例えば、直交座標での $\partial v / \partial x + \partial u / \partial y$ の差分式は

$$\frac{v_{i+1/2, j+1/2, k} - v_{i, j+1/2, k}}{\delta x} + \frac{u_{i+1/2, j+1, k} - u_{i+1/2, j, k}}{\delta y}$$

であり、この式は $(i+1/2, j+1/2, k)$ で定義されたものとなる。従って、4つのコーナーでの値を平均する事により、セル中心での値を求める。

移流項は非保存形で与えられている。直交座標系の場合、この項は

$$u \frac{\partial k_L}{\partial x} + v \frac{\partial k_L}{\partial y} + w \frac{\partial k_L}{\partial z}$$

であり、円筒座標系の場合は

$$v_r \frac{\partial k_L}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial k_L}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial k_L}{\partial z}$$

である。

この項は風上差分により差分化する。例として $u \partial k_L / \partial x$ の差分式を考える。セル中心での流速は、セル境界での流速を平均する事により求める。即ち、

$$u_{i,j,k} = \frac{u_{i+1/2,j,k} + u_{i-1/2,j,k}}{2}$$

とする。従って、

$$\left(u \frac{\partial k_L}{\partial x} \right) = \begin{cases} (k_{L,i,j,k} - k_{L,i-1,j,k}) / \delta x_{i-1/2,j,k} & \text{if } u_{i,j,k} \geq 0 \\ (k_{L,i+1,j,k} - k_{L,i,j,k}) / \delta x_{i+1/2,j,k} & \text{otherwise} \end{cases}$$

と差分化される。

拡散項は、直交座標系の場合、

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\nu_L \frac{\partial k_L}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu_L \frac{\partial k_L}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_L \frac{\partial k_L}{\partial z} \right)$$

であり、円筒座標系の場合

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(\nu_L r \frac{\partial k_L}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\nu_L \frac{\partial k_L}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_L \frac{\partial k_L}{\partial z} \right)$$

である。この式は、中心差分により差分化される。円筒座標系の場合、拡散項は

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r_i \delta r_i} \left[(\nu_L r)_{i+1/2,j,k} \frac{k_{L,i+1,j,k} - k_{L,i,j,k}}{\delta r_{i+1/2}} - (\nu_L r)_{i-1/2,j,k} \frac{k_{L,i,j,k} - k_{L,i-1,j,k}}{\delta r_{i-1/2}} \right] \\ & \frac{1}{r_i \delta \theta_j} \left[(\nu_L)_{i,j+1/2,k} \frac{k_{L,i,j+1,k} - k_{L,i,j,k}}{r_i \delta \theta_{j+1/2}} - (\nu_L)_{i,j-1/2,k} \frac{k_{L,i,j,k} - k_{L,i,j-1,k}}{r_i \delta \theta_{j-1/2}} \right] \\ & \frac{1}{\delta z_k} \left[(\nu_L)_{i,j,k+1/2} \frac{k_{L,i,j,k+1} - k_{L,i,j,k}}{\delta z_{k+1/2}} - (\nu_L)_{i,j,k-1/2} \frac{k_{L,i,j,k} - k_{L,i,j,k-1}}{\delta z_{i-1/2}} \right] \end{aligned}$$

となる。以上から、乱流モデルの方程式を差分化する事ができる。

時間レベルに関しては、生成項、移流項及び拡散項は陽的に扱い、それ以外の項は陰的に取り扱う。拡散項を陽的に取り扱うのは、運動方程式の拡散項を陽的に取り扱っている事に対応している。従って、乱流エネルギー及び散逸項の方程式は

$$\alpha_\ell \frac{k_L^{(n+1)} - k_L^{(n)}}{\Delta t} + convk = condk + \alpha_\ell (P_L - \epsilon_L^{(n+1)})$$

$$\alpha_\ell \frac{\epsilon_L^{(n+1)} - \epsilon_L^{(n)}}{\Delta t} + conve = conde + \alpha_\ell (C_{\epsilon 1} P_L - C_{\epsilon 2} \epsilon_L^{(n)}) \frac{\epsilon_L^{(n+1)}}{k_L^{(n)}}$$

となる。 $conv$ 及び $cond$ は、それぞれ、移流項及び拡散項を表している。この方程式は、セル間の結合がないため、セル毎の連立方程式になっている。散逸率の方程式から、新しい時刻レベルでの値を求め、乱流エネルギーの式に代入すると、新しい時刻レベルでの乱流エネルギーが求められる。

乱流エネルギーと散逸率の境界条件は壁関数で与えられる。壁近傍 (y_+ が10から100)の対数領域では、流速分布は

$$\frac{u}{u_*} = \frac{1}{\kappa} \ln y_+ + b$$

で与えられる。ここで、 u_* は摩擦速度であり、無次元距離 y_+ は

$$y_+ = \frac{y u_*}{\nu}$$

で定義される。ここで、 y は壁からの距離である。この領域では、乱流エネルギー及びエネルギー散逸率は

$$k_L = 4.2 u_*^2$$

$$\epsilon_L = \frac{u_*^3}{\kappa y}$$

と与えられる。

境界条件を与える壁からの距離 y を決めると、この位置での乱流エネルギーと散逸率が求まる。これを壁での値として上の方程式を解けばよい。この時、必要なものが摩擦速度である。差圧のデータから、摩擦速度を入力としてもよいが、空間的な一様流速から過渡計算により定常解を求めるために、初期に流速分布と摩擦速度が矛盾する場合がある。このため、計算された流速分布から摩擦速度を求める事にする。壁に最も近い壁に平行な速度を u とすると、上の対数則は摩擦速度についての方程式となる。これをNewton法で解けば、摩擦速度が求められる。イテレーションの初期値は $0.1u$ とする。この結果、得られた摩擦速度から乱流エネルギー及び散逸率の壁面での値が決まる。壁面以外では、法線方向の微分値が0という条件を設定している。

2.8 反復計算

2.6節の質量及びエネルギー保存式の差分式より、新しい時刻での圧力、ポイド率及び温度は

$$M_{k,i,j,k} = 0$$

$$E_{k,i,j,k} = 0$$

の解として与えられる事が示された。これらの方程式はもともと非線形であり、また、状態方程式(密度及び内部エネルギーを圧力及び温度の関数として与える構成式)を通して非線形になる。このため、これらの方程式をNewton法により解く。この節では、Newton法による反復計算の方法を述べる。はじめ二相の状態であっても、次の反復ステップでは単相になるときもあり、逆に、単相から二相へ移行することもある。この様な単相/二相の移行では、解くべき方程式のセットを変更する。本節では、反復計算中でも二相であるとして、基本的な反復計算の方法を述べる。

2.8.1 相変化量の微分

相変化量 Γ の微分を求めておく。 Γ は

$$\Gamma = -\frac{q_{ig} + q_{il}}{h_{fg}}$$

$$q_{ik} = h_{ik}(T_{sat} - T_k)$$

と与えられる。ここで、 h_{fg} は潜熱 $h_{gs} - h_{ls}$ である。

相変化量 Γ の圧力微分は飽和温度及び潜熱が圧力のみ関数であることから

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial P} = -\frac{(h_{ig} + h_{il})}{h_{fg}} \frac{dT_{sat}}{dP} - \frac{\Gamma}{h_{fg}} \frac{dh_{fg}}{dP}$$

となる。同様に温度による微分は

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial T_g} = \frac{h_{ig}}{h_{fg}}$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial T_l} = \frac{h_{il}}{h_{fg}}$$

となる。

相変化に伴うエネルギー輸送量 Q_{ik} を

$$Q_{ik} = q_{ik} + \Gamma_k h_{ks}$$

により定義すると $Q_{il} = -Q_{ig}$ である。これから、 Q_{ig} を Q_i とおくと

$$Q_i = q_{ig} + \Gamma h_{gs} = -\frac{h_{ls}q_{ig} + h_{gs}q_{il}}{h_{fg}}$$

と書く事ができる。これから、エネルギー輸送量 Q_i の圧力微分は

$$\frac{\partial Q_i}{\partial P} = -\frac{h_{ig}h_{ls} + h_{il}h_{gs}}{h_{fg}} \frac{dT_{sat}}{dP} - \frac{\Gamma}{h_{fg}} \left(\frac{dh_{gs}}{dP} h_{ls} - h_{gs} \frac{dh_{ls}}{dP} \right)$$

となる。同様に温度による微分は

$$\frac{\partial Q_i}{\partial T_g} = \frac{h_{ls}h_{ig}}{h_{fg}}$$

$$\frac{\partial Q_i}{\partial T_l} = \frac{h_{gs}h_{il}}{h_{fg}}$$

と計算される。

2.8.2 質量及びエネルギー保存式の Jacobian

気相の質量保存式は、2.6節の差分式から、

$$M_g = \alpha \rho_g - \Delta t \Gamma + \sum_{face} m_{g,face} (P_{face} - P) - \tilde{M}_g = 0$$

と与えられる。ここで、メッシュのインデックス (i, j, k) を省略した。圧力の添え字 $face$ は注目しているメッシュに隣接している6個のメッシュを動く。同様に液相の質量保存式は

$$M_\ell = (1 - \alpha) \rho_\ell + \Delta t \Gamma + \sum_{face} m_{\ell,face} (P_{face} - P) - \tilde{M}_\ell = 0$$

である。

これから、Jacobian の各エレメントは

$$\begin{aligned} \frac{\partial M_g}{\partial P} &= \alpha \frac{\partial \rho_g}{\partial P} - \Delta t \frac{\partial \Gamma}{\partial P} - \sum_{face} m_{g,face} \\ \frac{\partial M_g}{\partial P_{face}} &= m_{g,face} \\ \frac{\partial M_g}{\partial \alpha} &= \rho_g \\ \frac{\partial M_g}{\partial T_g} &= \alpha \frac{\partial \rho_g}{\partial T_g} - \Delta t \frac{\partial \Gamma}{\partial T_g} \\ \frac{\partial M_g}{\partial T_\ell} &= -\Delta t \frac{\partial \Gamma}{\partial T_\ell} \end{aligned}$$

及び

$$\begin{aligned} \frac{\partial M_\ell}{\partial P} &= (1 - \alpha) \rho_\ell + \Delta t \frac{\partial \Gamma}{\partial P} - \sum_{face} m_{\ell,face} \\ \frac{\partial M_\ell}{\partial P_{face}} &= m_{\ell,face} \\ \frac{\partial M_\ell}{\partial \alpha} &= -\rho_\ell \\ \frac{\partial M_\ell}{\partial T_g} &= \Delta t \frac{\partial \Gamma}{\partial T_g} \\ \frac{\partial M_\ell}{\partial T_\ell} &= (1 - \alpha) \frac{\partial \rho_\ell}{\partial T_\ell} + \Delta t \frac{\partial \Gamma}{\partial T_\ell} \end{aligned}$$

である。

同様にエネルギー保存則は

$$\begin{aligned} E_g &= \alpha \rho_g e_g + P \alpha + P \tilde{D}_g - \Delta t Q_i \\ &\quad + \sum_{face} (\tilde{e}_{g,face}^{(1)} + \tilde{e}_{g,face}^{(2)} P) (P_{face} - P) - \tilde{E}_g \\ E_\ell &= (1 - \alpha) \rho_\ell e_\ell + P (1 - \alpha) + P \tilde{D}_\ell + \Delta t Q_i \\ &\quad + \sum_{face} (\tilde{e}_{\ell,face}^{(1)} + \tilde{e}_{\ell,face}^{(2)} P) (P_{face} - P) - \tilde{E}_\ell \end{aligned}$$

と書く事ができる。これらの式を微分する事により

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_g}{\partial P} &= \alpha \left(\frac{\partial \rho_g}{\partial P} e_g + \rho_g \frac{\partial e_g}{\partial P} \right) + \alpha + \bar{D}_g - \Delta t \frac{\partial Q_i}{\partial P} \\ &\quad - \sum_{face} \left[\tilde{e}_{g,face}^{(1)} + \tilde{e}_{g,face}^{(2)} (2P - P_{face}) \right] \\ \frac{\partial E_g}{\partial P_{face}} &= \tilde{e}_{g,face}^{(1)} + \tilde{e}_{g,face}^{(2)} P \\ \frac{\partial E_g}{\partial \alpha} &= \rho_g e_g + P \\ \frac{\partial E_g}{\partial T_g} &= \alpha \left(\frac{\partial \rho_g}{\partial T_g} e_g + \rho_g \frac{\partial e_g}{\partial T_g} \right) - \Delta t \frac{\partial Q_i}{\partial T_g} \\ \frac{\partial E_g}{\partial T_\ell} &= -\Delta t \frac{\partial Q_i}{\partial T_\ell} \\ \frac{\partial E_\ell}{\partial P} &= (1 - \alpha) \left(\frac{\partial \rho_\ell}{\partial P} e_\ell + \rho_\ell \frac{\partial e_\ell}{\partial P} \right) + (1 - \alpha) + \bar{D}_\ell + \Delta t \frac{\partial Q_i}{\partial P} \\ &\quad - \sum_{face} \left[\tilde{e}_{\ell,face}^{(1)} + \tilde{e}_{\ell,face}^{(2)} (2P - P_{face}) \right] \\ \frac{\partial E_\ell}{\partial P_{face}} &= \tilde{e}_{\ell,face}^{(1)} + \tilde{e}_{\ell,face}^{(2)} P \\ \frac{\partial E_\ell}{\partial \alpha} &= -\rho_\ell e_\ell + P \\ \frac{\partial E_\ell}{\partial T_g} &= \Delta t \frac{\partial Q_i}{\partial T_g} \\ \frac{\partial E_\ell}{\partial T_\ell} &= (1 - \alpha) \left(\frac{\partial \rho_\ell}{\partial T_\ell} e_\ell + \rho_\ell \frac{\partial e_\ell}{\partial T_\ell} \right) + \Delta t \frac{\partial Q_i}{\partial T_\ell} \end{aligned}$$

が得られる。

以上から一つのセル (i, j, k) での Jacobi 方程式は

$$J \begin{pmatrix} \delta P \\ \delta \alpha \\ \delta t_g \\ \delta t_\ell \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} M_g \\ M_\ell \\ E_g \\ E_\ell \end{pmatrix} - \sum_{face} \begin{pmatrix} \partial M_g / \partial P_{face} \\ \partial M_\ell / \partial P_{face} \\ \partial E_g / \partial P_{face} \\ \partial E_\ell / \partial P_{face} \end{pmatrix} \delta P_{face}$$

となる。ここで、 J は

$$J = \begin{pmatrix} \partial M_g / \partial P & \partial M_g / \partial \alpha & \partial M_g / \partial t_g & \partial M_g / \partial t_\ell \\ \partial M_\ell / \partial P & \partial M_\ell / \partial \alpha & \partial M_\ell / \partial t_g & \partial M_\ell / \partial t_\ell \\ \partial E_g / \partial P & \partial E_g / \partial \alpha & \partial E_g / \partial t_g & \partial E_g / \partial t_\ell \\ \partial E_\ell / \partial P & \partial E_\ell / \partial \alpha & \partial E_\ell / \partial t_g & \partial E_\ell / \partial t_\ell \end{pmatrix}$$

である。

2.8.3 反復方法

前項で各セルにおける Jacobi 方程式が得られた。これを解くことにより各セルでの圧力、ボイド率及び温度の増分が求められる。本項では、この増分を求める方法について述べる。

Jacobi 方程式の両辺に J^{-1} を掛けると

$$\begin{pmatrix} \delta P \\ \delta \alpha \\ \delta t_g \\ \delta t_\ell \end{pmatrix} = -J^{-1} \begin{pmatrix} M_g \\ M_\ell \\ E_g \\ E_\ell \end{pmatrix} - \sum_{face} J^{-1} \begin{pmatrix} \partial M_g / \partial P_{face} \\ \partial M_\ell / \partial P_{face} \\ \partial E_g / \partial P_{face} \\ \partial E_\ell / \partial P_{face} \end{pmatrix} \delta P_{face}$$

となる。この式を

$$\begin{pmatrix} \delta P \\ \delta \alpha \\ \delta t_g \\ \delta t_\ell \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \end{pmatrix} - \sum_{face} \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \\ g_4 \end{pmatrix} \delta P_{face}$$

と書こう。第1行の式だけ取り出すと、

$$\delta P = -f_1 - \sum_{face} g_{1,face} \delta P_{face}$$

のように圧力みの方程式が得られる。この方程式の解法については後に述べるが、解けたものとする。そうすると、第2行以下の方程式

$$\begin{pmatrix} \delta \alpha \\ \delta t_g \\ \delta t_\ell \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} f_2 \\ f_3 \\ f_4 \end{pmatrix} - \sum_{face} \begin{pmatrix} g_2 \\ g_3 \\ g_4 \end{pmatrix} \delta P_{face}$$

に圧力の増分値を代入することにより、他の変数の増分値も計算できる。

以上から反復の新しい値

$$P_{new} = P + \delta P$$

$$\alpha_{new} = \alpha + \delta \alpha$$

$$T_{k,new} = T_k + \delta T_k$$

が得られる。以上の操作をセル毎の関数値 f_i が十分小さくなるまで繰り返す。

2.8.4 圧力みの方程式

前項の圧力みの式は、 (i, j, k) セルを中心としてその周りの6つのセルと圧力がカップルしている事を表している。これらの式をすべてのセルについて書きならべるとすべてのセルについての圧力の増分に関する連立方程式が得られる。

これを組織的に行なうため、セルに一意的な順序を導入する。この順序は、1対1ならば、どんなものでもよいが、ここでは、フォートランの配列の格納順序と同じものを採用する。即ち、 (i, j, k) セルの順番は

$$m(i, j, k) = i + N_x \times (j - 1) + N_x \times N_y \times (k - 1)$$

とする。ここで、 N_x は x 方向のメッシュ数、 N_y は y 方向のメッシュ数である。この様にメッシュの順序を定めることにより、全体の圧力増分の連立方程式を書き下す事ができる。得られる連立方程式は、対角項

と、その隣の項、 N_x だけ離れた項及び $N_x \times N_y$ だけ離れた項がゼロでなく、それ以外の項はすべてゼロになる7重対角連立方程式である。

このマッピングの方法は、 z 方向のメッシュ数が多い場合に有効である。即ち、バンド幅が $N_x \times N_y$ であり z 方向のメッシュ数に依存しないからである。2次元の体系の場合は、 $N_y = 1$ であり、 $j = 1$ であるから、上のマッピングの式を適用できる。構築された連立方程式は、体系が2次元までの場合はガウス消去法に準じた方法で解かれるが、3次元の場合は計算コスト低減が図れる不完全LU分解双共役勾配法 (ILUBCG法) を用いて解く (3.2.2節参照)。

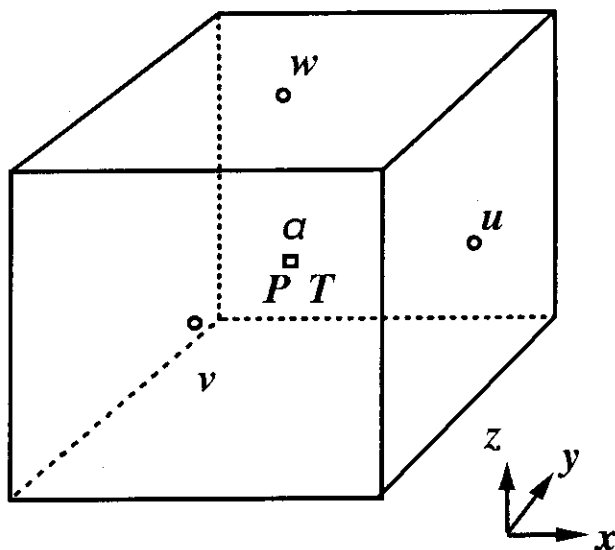


図 2.1 スタッガードメッシュスキーム

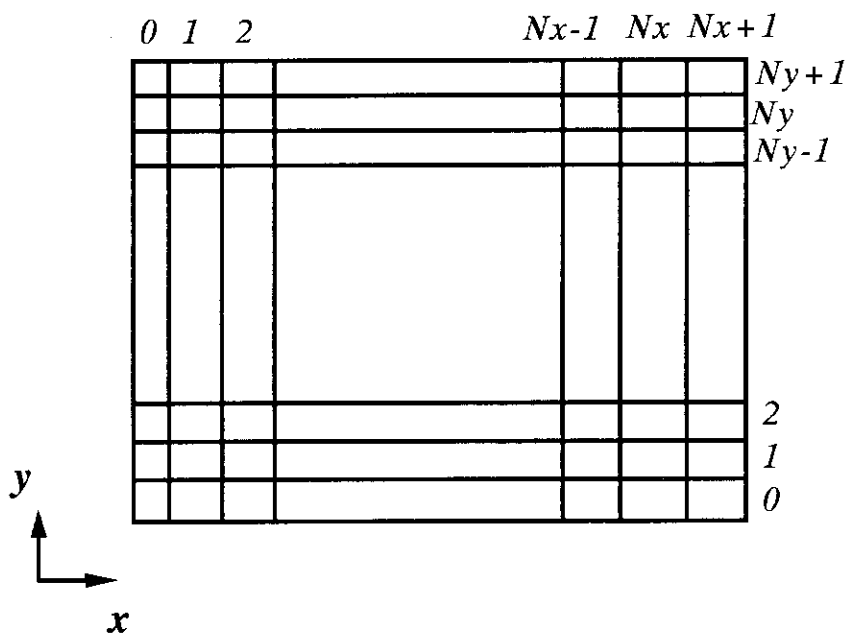


図 2.2 メッシュ中心のインデックス

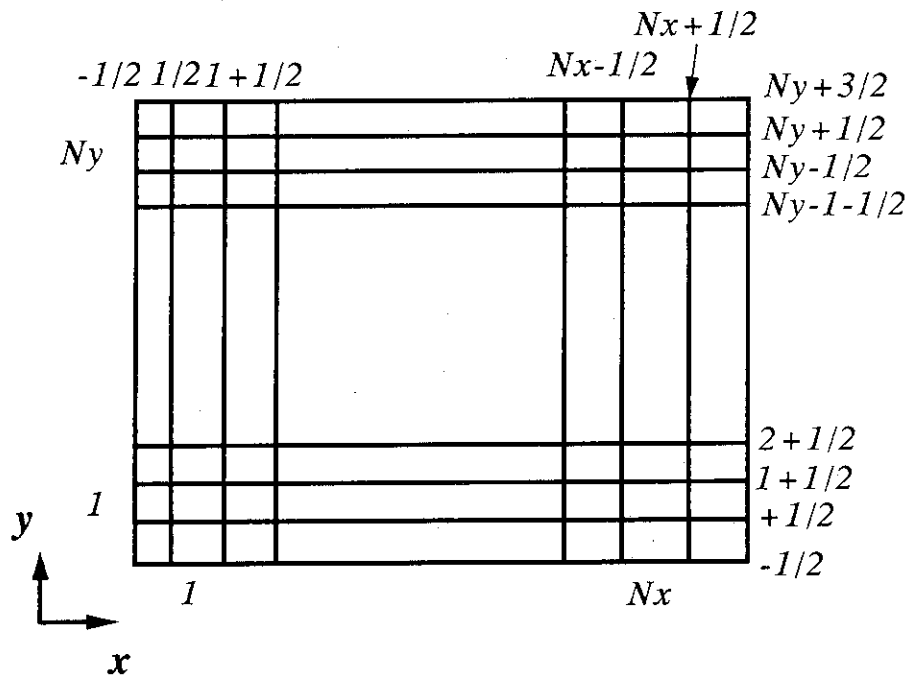


図 2.3 メッシュ境界のインデックス

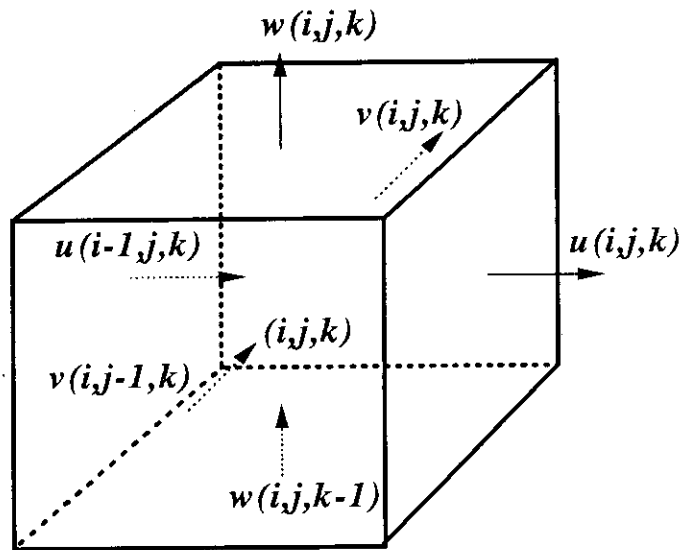


図 2.4 メッシュ中心のインデックスとメッシュ境界のインデックスの関係

3 プログラム構造と主要サブルーチンの処理概要

この章では、開発したコードACE-3Dのプログラム構造をサブルーチンツリーにより概説すると共に、計算に必要となる変数を提示する。併せて数値解法上の核となる主要サブルーチンの処理概要を述べる。

3.1 プログラム構造の概要

サブルーチンツリーを図3.1に示す。コロン(:)の前後でサブルーチン名が異なる場合は右側のサブルーチンに左側のものが結合していることを表わしている。本プログラムは処理内容から入力データの読み込みや各種初期設定を行う部分、計算結果をリスト出力や図形出力ファイルに書き出す部分、及びtrans.F以下で行っている数値計算の部分に別れる。ただし、2番目の出力関係のサブルーチンはツリー上は1番目及び3番目のカテゴリーの中に分散している。

入力データの読み込みや各種初期設定は以下のサブルーチン群の中で行われる：

rdcard.F 及び init.F 並びに input.F 以下のサブルーチン群

この中で fprop.F と thermo.F は物性値を設定するルーチンであるが thermo.F については圧力や温度に関する微係数も扱うため、数値計算部分でも参照される。

計算体系の形状データや計算結果のリスト出力は prnta.F が行っており、図形出力ファイルへの書き出しは plotf.F が行っている。

trans.F 以下の数値計算部分では

- (1) タイムステップのコントロールを行う timstp.F 以下のサブルーチン群
- (2) 各種構成式の計算及び数値計算の初期設定を行う vssl1.F 以下のサブルーチン群
- (3) 各保存式を解く vssl2.F 以下のサブルーチン群

に大きく別れる。この中で数値計算の核となる tf3d で始まるサブルーチン群等については3.2節でやや詳しく述べる。

3.1.1 計算に必要となる変数

計算に必要な変数は、すべて variable というインクルードファイルにまとめられている。このファイルでは、まず最初に、セルの最大値を定義する。計算したい体系のセル数がこの値よりも大きい場合には、最大値を修正して再コンパイルが必要である。以下にセル数の最大値が3の場合の例を示す。

```
c*cd variable
c
c   definitions of variables
c
c   number of max cells
c
c   integer mxmax , mymax , mzymax
c   parameter ( mxmax = 3 , mymax = 3 , mzymax = 3 )
```

c

次に幾何形状を表す変数が続く。

```

real*8 vol ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dxr ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dyt ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dzz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 rmean( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 faxr (-1:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 fayt ( 0:mxmax+1, -1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 faz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, -1:mzmax+1)
real*8 hdxr (-1:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 hdyt ( 0:mxmax+1, -1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 hdz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, -1:mzmax+1)
real*8 gravt( 0:mymax )
real*8 gravr( 0:mymax )
real*8 distw(-1:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)

```

ここで、volはセル体積、dxr - dzzは各方向のセル長さ、faで始まる変数はセル各面の流路面積、hdで始まる変数は各方向の水力等価直径、gravで始まる変数はz方向以外の重力項、distwは、壁からの距離(($i + 1/2, j, k$)位置での)である。変数distwは乱流モデルと関係する量である。

次は、基本変数である。最後にnが付いているのが新時刻ステップでの未知変数でありnがないのが旧時刻での値である。

```

real*8 alp ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 p ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tv ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tl ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 vvxr (-1:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 vvyt ( 0:mxmax+1, -1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 vvz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, -1:mzmax+1)
real*8 vlxr (-1:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 vlyt ( 0:mxmax+1, -1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 vlz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, -1:mzmax+1)
real*8 bit ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 alpn ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 pn ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tvn ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tln ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 vvxrn (-1:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 vvytn ( 0:mxmax+1, -1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 vvzn ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, -1:mzmax+1)
real*8 vlxrn (-1:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 vlytn ( 0:mxmax+1, -1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 vlzn ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, -1:mzmax+1)
real*8 bitn ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)

```

変数alpはボイド率、pは圧力、tで始まる変数は温度、vで始まる変数は流速である。気相液相の別、及び方向の違いにより温度及び流速の変数名は異なっている。

次に示す変数は基本変数に含まれているが、donor cellの値(wで始まる変数)とwater packingのためのもの(dで始まる変数)である。

```

real*8 wvxr (-1:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)

```



```

real*8 wvyt ( 0:mxmax+1,-1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 wvz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1,-1:mzmax+1)
real*8 wlxr (-1:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 wlyt ( 0:mxmax+1,-1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 wlz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1,-1:mzmax+1)
real*8 dvvs1 ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvvs1m( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvvs2 ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvvs2m( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvvs3 ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvvs3m( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvls1 ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvls1m( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvls2 ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvls2m( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvls3 ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvls3m( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)

```

次の変数のグループは、旧時刻レベルでの $\alpha\rho$ 及び $\alpha\rho e$ をセットしておくものである。

```

real*8 arv ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 arl ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 arev ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 arel ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)

```

次の変数グループは、剪断応力及び乱流エネルギー等の乱流モデルに関するものである。変数telがトータルの乱流エネルギーである。

```

real*8 tvrxr( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tlrxr( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tvtyt( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tlytyt( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tvzz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tlzz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tvxryt(-1:mxmax+1,-1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tlxryt(-1:mxmax+1,-1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tvyzt ( 0:mxmax+1,-1:mymax+1,-1:mzmax+1)
real*8 tlyzt ( 0:mxmax+1,-1:mymax+1,-1:mzmax+1)
real*8 tvxrz (-1:mxmax+1, 0:mymax+1,-1:mzmax+1)
real*8 tlxrz (-1:mxmax+1, 0:mymax+1,-1:mzmax+1)
real*8 kveddy( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 kleddy( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tel ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 klsin ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 klsi ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 epsln ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 epsl ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)

```

次の変数のセットは物性値ルーチンによる水・蒸気の状態量及びその微係数、及び輸送係数である。

```

real*8 rov ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 rol ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 ev ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 el ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tsat ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 hfg ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 cpv ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 cpl ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)

```

```

real*8 cv ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 cl ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 visv ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 visl ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 sig ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dr ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1, nthm)

```

これらの量はすべて新時刻または、イタレーション中の量である。質量及びエネルギー保存の差分式の左辺

$$\frac{\alpha_k^{n+1} \rho_k^{n+1} - \alpha_k^n \rho_k^n}{\Delta t}$$

$$\frac{\alpha_k^{n+1} \rho_k^{n+1} e_k^{n+1} - \alpha_k^n \rho_k^n e_k^n}{\Delta t}$$

では密度及び内部エネルギーの旧時刻での値が必要であるが、これらは arv、arl、arev 及び arel として保存されているので問題はない。

次のグループは、構成式から計算される量である。wf で始まる変数は壁摩擦係数、ci で始まる変数は界面せん断応力及び hi で始まるものは界面熱伝達係数である。

```

real*8 wfvxr (-1:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 wfvyt ( 0:mxmax+1, -1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 wfvz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, -1:mzmax+1)
real*8 wflxr (-1:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 wflyt ( 0:mxmax+1, -1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 wflz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, -1:mzmax+1)
real*8 cinxr (-1:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 cinyt ( 0:mxmax+1, -1:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 cinz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, -1:mzmax+1)
real*8 hig ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 hil ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 gamm ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)

```

次の変数群は、ワーク領域である。これは、物理的な意味合いが明確なものと数値解法上必要なワーク領域に分類される。dv で始まる変数は、 dv/dp を表している。f で始まる変数は、セル界面のフラックスに対応した量である。半陰解法では、質量及びエネルギー方程式のフラックス項の速度に掛かる係数は旧時刻の量であるから、それを格納している。ar で始まる変数群は上で述べたものである。

```

real*8 dvvxr ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvlxr ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvvyt ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvlyt ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvvz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 dvlz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 tsn ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 favxr ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 favyt ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 favz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 frvvr ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 frvyt ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 frvz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 fevvr ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 fevyt ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)

```

```

real*8 fevz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 falxr ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 falyt ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 falz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 frlxx ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 frlyt ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 frlz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 felxr ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 felyt ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 felz ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 arv ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 arl ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 arev ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)
real*8 arel ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1)

```

次のワーク領域は方程式の解法上必要なものである。各セル毎の質量・エネルギー方程式を解いた後、その係数を保存しておく領域が必要となる。この領域が、次に示すものである。

c

```

real*8 dprhs (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 darhs (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 dtvrhs (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 dtlrhs (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 cip1 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 cip2 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 cip3 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 cip4 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 cip5 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 cip6 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c2p1 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c2p2 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c2p3 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c2p4 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c2p5 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c2p6 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c3p1 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c3p2 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c3p3 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c3p4 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c3p5 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c3p6 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c4p1 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c4p2 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c4p3 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c4p4 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c4p5 (mxmax,mymax,mzmax)
real*8 c4p6 (mxmax,mymax,mzmax)
integer itleq (mxmax,mymax,mzmax)

```

次の変数群は物性値ルーチンで計算される微係数に関係した量である。

```

real*8 dtdp ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
real*8 deldp ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
real*8 degdp ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
real*8 deldt ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
real*8 degdt ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
real*8 drldp ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
real*8 drgdp ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )

```

```

real*8 drldt( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
real*8 drgdt( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
real*8 hvs ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
real*8 hls ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
real*8 dhvs ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
real*8 dhls ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
equivalence ( dtssdp(0,0,0) , dr(0,0,0,1) )
equivalence ( deldp(0,0,0) , dr(0,0,0,2) )
equivalence ( degdp(0,0,0) , dr(0,0,0,3) )
equivalence ( deldt(0,0,0) , dr(0,0,0,4) )
equivalence ( degdt(0,0,0) , dr(0,0,0,5) )
equivalence ( drldp(0,0,0) , dr(0,0,0,6) )
equivalence ( drgdp(0,0,0) , dr(0,0,0,7) )
equivalence ( drldt(0,0,0) , dr(0,0,0,8) )
equivalence ( drgdt(0,0,0) , dr(0,0,0,9) )
equivalence ( hvs (0,0,0) , dr(0,0,0,10) )
equivalence ( hls (0,0,0) , dr(0,0,0,11) )
equivalence ( dhvs (0,0,0) , dr(0,0,0,12) )
equivalence ( dhls (0,0,0) , dr(0,0,0,13) )
real*8 dtssdp ( 0:mxmax+1, 0:mymax+1, 0:mzmax+1 )
equivalence ( dtssdp(0,0,0) , dtssdp(0,0,0) )

```

以上が、必要な変数であるが、その他に、圧力マトリックスやその右辺のベクトルが必要となる。これらも mxmax、mymax 及び mzmax で記述できるが、無駄が多くなる。そこで、これらの領域は、1次元配列から必要に応じて切り出すようにしている。その領域が cwork である。この領域からは、必要に応じて、上記以外のワーク変数も確保される。

```

c*cd cwork
c
c   common for pressure matrix
c
c   integer nrwork , niwork
c   parameter ( nrwork = 10000 , niwork = 1000 )
c
c   real*8 work(nrwork)
c   integer iwork(niwork)
c   common / cwork / work(nrwork) , iwork(niwork)

```

コモン cwork で確保したワーク変数が不足した場合は、その旨のメッセージがプリントされてジョブがストップする。この場合には、コモンの大きさを増やして再コンパイルする必要がある。

3.2 保存式を解く主要サブルーチンでの処理概要

質量、運動量及びエネルギーの各保存式を半陰解法の手法で解く主要サブルーチンは tf3d で始まるものであり、vssl2.F 以下にある。本節ではこれらのサブルーチン群での処理概要を述べる。

3.2.1 サブルーチン tf3dxr、tf3dyt 及び tf3dzz

これらのサブルーチンは、運動方程式を解いて流速を圧力で表すものである。x または r 方向の運動方程式を処理するサブルーチンが tf3dxr であり、y または θ 方向の運動方程式を処理するルーチンが tf3dyt である。また、z 方向の運動方程式を解くサブルーチンが tf3dzz である。

これらのサブルーチンの構造は全体がメッシュセルに関する三重ループになっている。そして、各メッシュセル毎に速度を圧力で表している。本コードでは、運動方程式を解く際に、陽に境界条件を考慮するようにしているため、三重ループの始めに内部のセルか境界のセルかどうかをチェックし、境界のセルの場合は、境界条件に従って内部の処理をバイパスするようにした。

3.2.2 サブルーチン tf3ds 及び圧力方程式の解法

サブルーチン tf3ds は、質量及びエネルギー保存式を解き、ボイド率及び温度の増分を圧力の増分で表し、さらに、隣接するセル間での圧力の増分に対する関係式を求めるものである。

サブルーチン tf3ds において、各セル毎に、隣接するセルの圧力増分の関係式

$$c_3 \delta p_{i,j,k-1} + c_2 \delta p_{i,j-1,k} + c_1 \delta p_{i-1,j,k} + c_0 \delta p_{i,j,k} + c_4 \delta p_{i+1,j,k} + c_5 \delta p_{i,j+1,k} + c_6 \delta p_{i,j,k+1} = f_{i,j,k}$$

が得られる。ここで、

$$c_0 = 1.0 - c_3 - c_2 - c_1 - c_4 - c_5 - c_6$$

である。

これを用いて、圧力の全体方程式をセットアップする。出来た方程式はバンド幅が $N_x \times N_y$ の非対称な疎行列となる。本コードでは、この連立方程式を2次元体系までの場合はバンド行列のガウス消去法ルーチン dbgfa 及び dbgsl (linpack のルーチン) と同等なサブルーチン bglu.F を用いて解く。また、3次元体系の場合は不完全 LU 分解双共役勾配法 (ILUBCG 法) によるサブルーチン ilubcg.F を用いて解く。

サブルーチン bglu.F の場合、上の圧力の増分の式を圧力の全体方程式にセットアップする手順は以下の通りである。まず、 $\delta p_{i,j,k}$ を 2.8.4 節で述べたように

$$ii = i + N_x \times (j - 1) + N_x \times N_y \times (k - 1)$$

に従い、 δp_{ii} とする。このインデックス ii を用いて圧力の増分の式を書き換えると

$$c_3 \delta p_{ii-nx \cdot ny} + c_2 \delta p_{ii-nx} + c_1 \delta p_{ii-1} + c_0 \delta p_{ii} + c_4 \delta p_{ii+1} + c_5 \delta p_{ii+nx} + c_6 \delta p_{ii+nx \cdot ny} = f_{ii}$$

となり、これから簡単に行列要素を設定できる。この要素の設定はサブルーチン stdir.F で行う。

サブルーチン bglu.F やサブルーチン ilubcg.F を用いると圧力の増分の解が f に格納される。これから圧力を更新するには

```

do 130 k = 1, nz
  do 120 j = 1, ny
    do 110 i = 1, nx
      ii = i + nx*(j-1) + nx*ny*(k-1)
      pn(i,j,k) = pn(i,j,k) + f(ii)
    110 continue
  120 continue
130 continue

```

とすればよい。この処理はサブルーチン bacit.F で行っている。

3.2.3 サブルーチン tf3ds3

本サブルーチンでは、全体の圧力方程式を解いて得られた圧力の増分値をもとに速度、ボイド率及び温度を更新している。

コーディング上セル境界の量である速度は、x方向、y方向及びz方向でループを分離しており、

1. x方向の速度の更新
2. y方向の速度の更新
3. z方向の速度の更新
4. ボイド率および温度の更新

という4個のパートに分け、各々を独立のループとしている。

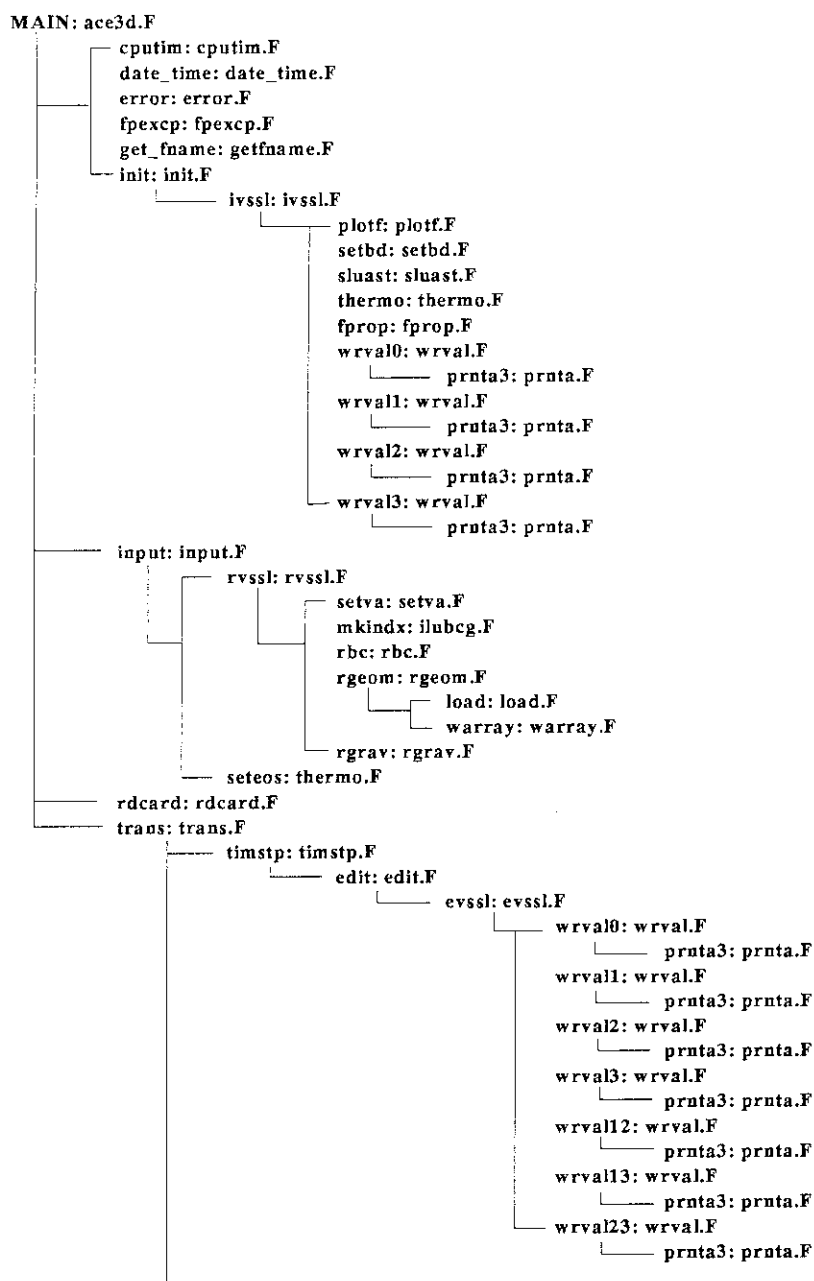


図 3.1 ACE-3D コードのサブルーチンツリー (1)

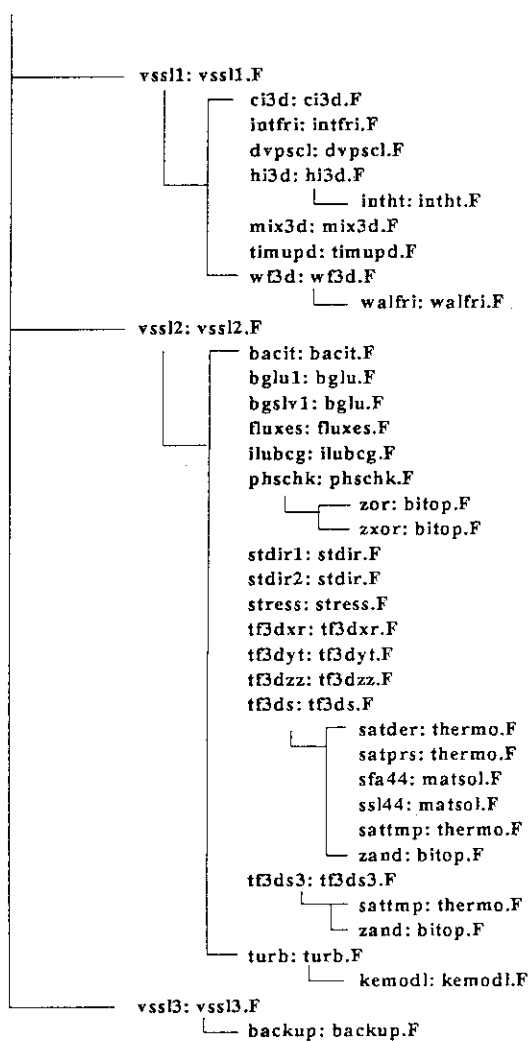


図 3.1 ACE-3D コードのサブルーチンツリー (2)

4 チェック計算

本章では、開発したコードACE-3Dのチェック計算を行なう。使用したデータはWangらのもの¹⁶⁾で、小口径(内径5.7cm)垂直管内気泡流である。壁面近傍にポイド率ピークの現れるデータセットを使った。本データはLaheyらも解析している。2.1節で示したように本コードで現在採用している種々の界面応力項並びに二相乱流モデルの大部分はLaheyらのモデルである。本章ではACE-3Dによる解析結果と彼らの結果とを比較することで本コードの数値解析能力のチェックを行う。

計算体系はr-zの2次元体系とした。グリッド体系及び境界条件を図4.1に示す。また、使用した入力データのリストを以下に示す(各変数の意味はAppendix Aを参照)：

```

/*ieos*/ 1 /*iopt*/ 1
Wang bubbly flow J1=1.08m/s Jg=0.1m/s
&option clift=0.5, ctd=0.1 cvm=2.0 ilift=-1
      clw=0.15 wallds=0.0035 on_tim=1.5 &end
//
// control cards
//
/*stime*/ 0.0 /*endtim*/ 10.0 /*delmtmx*/ 0.1 /*delmtmn*/ 1.0e-8
/*edtim*/ 1.0 /*pltim*/ 0.1
/*maxitr*/ 20 /*epscnv*/ 1.0e-4
//
// mesh data
//
/*nr*/ 14 /*nth*/ 1 /*nz*/ 10
//
// wall friction and turbulence option
//
/*iwall*/ 1 /*iturb*/ 2
/*bubdia*/ 0.004
//
// geometry cards
//
/*igeom*/ 0 /*cyclic*/ 1 /*nvgrav*/ 0
//
// boundary condition
//
/*igbcz*/ 1 2
/*iwbc(1)*/ 0 1
/*iwbc(2)*/ 0 0
/*iwbc(3)*/ 0 0
//
// mesh data
//
/*z*/ 0.00 0.20 0.40 0.60 0.80 1.00 1.20 1.40 1.60 1.80 2.00
/*r*/ 0.0 0.004 0.008 0.012 0.014 0.016 0.018 0.020 0.022 0.023
/*r*/ 0.024 0.025 0.026 0.027 0.0285
/*th*/ 0.0 0.174
//
// no grav data because of nvgrav = 0
//
//

```

```

// hydro-diameters
//
0.057 0.057 0.057
//
// alp, press, tv, tl
//
0.08 1.0e5 303.0 303.0
//
// vvr, vvth, vvz
//
0.0 0.0 1.25
//
// vlr, vlth, vlz
//
0.0 0.0 1.174
//
// fill condition
//
// alp, p, tv, tl
//
0.08 1.0e5 303.0 303.0
//
// vvz
//
15*1.25 /* j = 1 */
//
// vlz
//
15*1.174 /* j = 1 */
//
// break condition
//
/*dz*/ 0.20
//
// alp, p, tv, tl
//
1.0 1.0e5 303.0 303.0
//
// vvz
//
15*0.0 /* j = 1 */
//
// vlz
//
15*0.0 /* j = 1 */

```

入力データのネームリストからもわかるように予測結果に大きな影響を与える揚力係数 C_L 、乱流拡散力係数 C_{TD} 及び壁面からの力にかかる係数 C_{lw} は以下のものを使った： $C_L = 0.5$ 、 $C_{TD} = 0.1$ 、 $C_{lw} = 0.15$

図4.2に予測結果を示す。ボイド率の壁面ピークがデータに比べやや低く、ピークの幅がやや広がっているものの、相分布及び液流速分布とも良く予測できている。今後、本コードをベースに種々の構成方程式の評価並びに新たな構成方程式の開発が行えると考えている。なお、文献に示されているLaheyらの予測結果⁸⁾とも同程度の予測結果となっている。彼らが使っている各モデルの係数は $C_L = 0.5$ 、 $C_{TD} = 0.2$ であり、本コードの場合と同程度の値である。このことは本コードの数値解析部分がLaheyらのものと同程度の解析能力のあることを意味している。

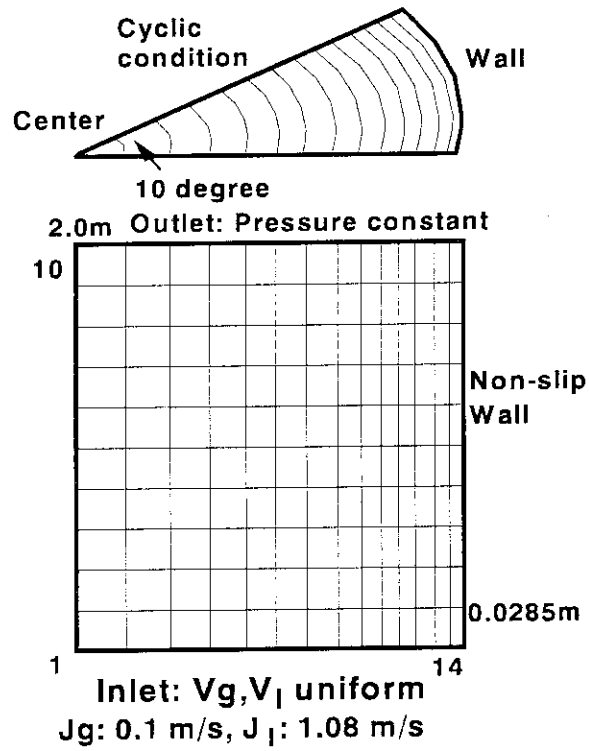


図 4.1 チェック計算用グリッド体系及び境界条件

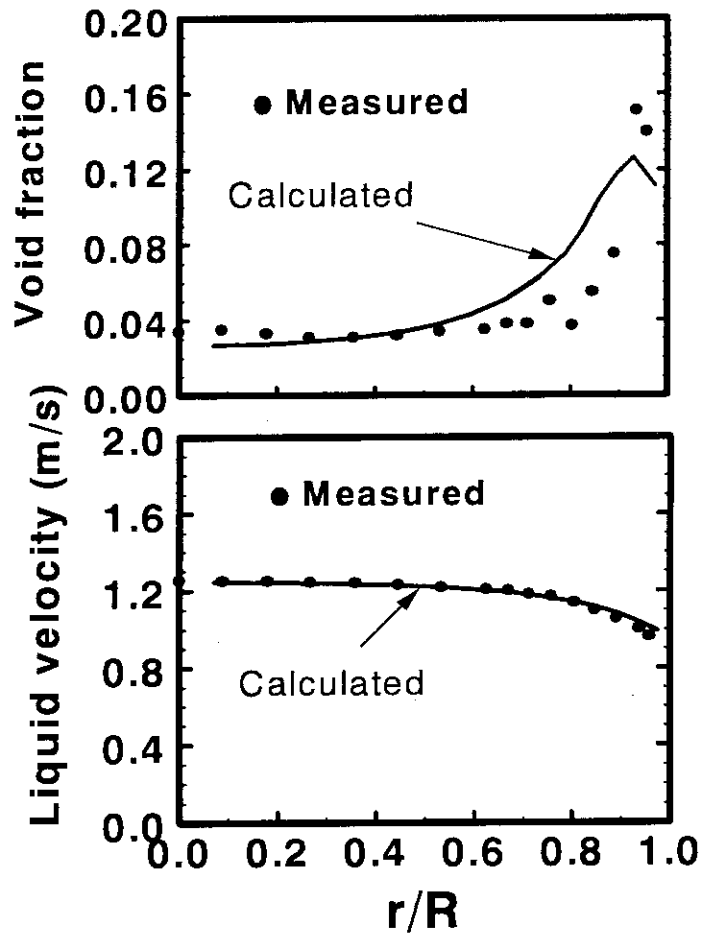


図 4.2 チェック計算の結果

5 結 言

受動的安全炉の設計研究を多次元の二流体モデルコードにより高精度に行うための二流体モデルの構成方程式の評価・開発に使用できるCFDコードACE-3Dを開発した。

本コードの特徴を下記に示す:

1. 基礎式は3次元の二流体モデルであり、解析体系として直交座標系または円筒座標系が選択できる。流体としては空気-水または蒸気-水が選択できる。
2. スタッガードメッシュの有限差分で定式化し、対流項は風上差分、拡散項は中心差分である。
3. 時間進行は半陰解法で解いていく。反復計算において質量及びエネルギー式を同等に扱う。
4. 界面応力項として抗力、揚力、乱流拡散力、壁からの力、付加質量の各力を考慮する。
5. 乱流モデルとしては二相 $k-\epsilon$ 乱流モデルを導入している。

開発したコードにより既存の小口径垂直管内気泡流の解析を行い、二流体モデルの多次元用構成方程式の評価・開発に本コードが適用できることを確認した。

今後、原研で取得している大口径管でのデータベースを活用すると共に、ベクトル・並列化による計算速度の向上、相変化項の評価等を並行して進め、予測精度の検証された気液二相流用解析手法の確立を目指す予定である。

参考文献

- 1) Murao, Y. et al.: "Proc. of 3rd JSME/ASME Joint Int. Conf. on Nucl. Eng. (ICONE)", 2, 723 (1995).
- 2) Matsuoka, T. et al.: Nucl. Safety, 33, 196 (1992).
- 3) McIntyre, B.A. and Beck, R.K.: Nucl. Safety, 33, 1 (1992).
- 4) Ishii, M.: "Multiphase Science and Technology", Hemisphere, 5 (1990).
- 5) Minato, A. et al.: J. Nucl. Sci. Technol., 25, 901 (1988).
- 6) 富山明男他4名: 機論B, 60-580, 3987 (1994).
- 7) Lahey, R.T., Jr.: Nucl. Eng. Des., 122, 17 (1990).
- 8) Lahey, R.T., Jr. and Lopez de Bertodano, M.: "Proc. of ASME/JSME Thermal Engineering - ASME 1991", 2, 193 (1991).
- 9) Lopez de Bertodano, M. et al.: Trans. ASME, J. Fluids Eng., 116, 128 (1994).
- 10) Lopez de Bertodano, M. et al.: Int. J. Multiphase Flow, 20, 805 (1994).
- 11) Ohnuki, A. et al.: "Proc. of 2nd Int. Conf. on Multiphase Flow '95 - Kyoto", 3, FT1-17 (1995).
- 12) Ohnuki, A. and Akimoto H.: "Proc. of ASME Heat Transfer and Fluids Engineering Divisions", HTD-Vol. 321/FED-Vol. 233, 473 (1995).
- 13) Liles, D.R. et al.: NUREG/CR-5069 LA-11208-MS (1988).
- 14) Kataoka, I. and Ishii, M.: Int. J. Heat Mass Transfer, 30, 1927 (1987).
- 15) Tomiyama, A. et al.: "Proc. of 2nd Int. Conf. on Multiphase Flow '95 - Kyoto", 1, PD1-11 (1995).
- 16) Wang, S.K. et al.: Int. J. Multiphase Flow, 13, 327 (1987).

Appendix A ACE-3D用入力マニュアル

本付録は3次元二相流解析コードACE-3Dの入力マニュアルである。入力はFortranの自由フォーマットにより読み込まれる。また、入力データ中にコメント等を記述出来る様に、入力データの前処理を行っている。まず、A.1節で、この前処理について述べる。次に、A.2節で、データの入力方法を示す。

A.1 入力の前処理

コメントやちょっとしたメモをインプットデータ中に残しておきたい場合がよくある。本サブルーチンの目的は、インプットデータ中のコメント等を取り除き、Fortranのインプットデータとして用いられるように、入力データを整形することである。更に、別の入力データのインクルードの様なプリプロセッサの機能も備えている。

コメントの記述方法には2通りある。二つのスラッシュ(//)は、その場所から行の最後までがコメントである事を指示する。従って、行の最初にあれば、その行全体がコメントとして取り扱われる。また、行の中にあれば、行の始めからそのスラッシュの直前までは入力データとして扱われ、その場所から行の終わりまでがコメントとして取り扱われる。例えば、

```
// this card is a comment card.
3 5 12.6 // this card is the 1st card.
```

というカードを考える。1枚目のカードでは、//が行の最初のあるため、このカード全体がコメントになる。2枚目のカードでは、//以降がコメントの扱いを受ける。

もう一つのコメントの記述方法は/*及び*/でコメントを囲むことである。//によるコメントの記述方法では、行にまたがるコメントを記述出来ないが、この方法では、行にまたがるコメントの記述も可能になる。以下に例を示す。

```
/* node */ 15 /* element */ 6
23.8 /*
this is a comment.
*/ 56.7
/* /* this is an example of nesting. */ */
```

1枚目のカードでは、/* node */及び/* element */がコメントである。この機能はコメント中にインプットされる変数の名前等を記述する時に便利である。2枚目のカードに含まれる/*に対応する*/は4枚目のカード内にある。従って、この間の部分がコメントとして扱われる。具体的には、2枚目のカードの/*以降、3枚目のカード全体及び4枚目のカードの*/までである。2枚目のカードの23.8及び4枚目のカードの56.7は入力データとして取り扱われる。このコメントのネストは許されない。ネストが発見された場合は、

ジョブの実行を中止する。従って、上の例の5枚目のカードのようなネストが検出された場合は、この時点で、ジョブの実行を中止する。

コメントの部分は空白で置き換えられる。従って、上の例の3枚目のカードは空白カードになる。

前処理ルーチンrdcardに色々な機能の実行を要求するコマンド(ディレクティブと呼ぶ)は1カラム目に#を書き、続けてコマンド名を記述する。そのコマンドにパラメタが必要な場合には、コマンド名と空白をあけてパラメタを記述する。現在、以下のディレクティブがインストールされている。

- ファイルのインクルード(#include filename)
この位置に別のファイルをインクルードする。インクルードファイルのネストは、現在のバージョンでは、許されていない。
- 改ページ(#eject)
サブルーチンrdcardでは、入力データがエコーされるが、そのアウトプットの改ページを行うディレクティブである。
- 1ページの行数を設定(#linecount number)
入力データのエコーを行う際の行数を設定する。デフォルト値は50である。このディレクティブが現れたページから行数が再設定される。
- リスト出力の中止(#listoff)
このディレクティブより次の入力データからエコーを行わない。このディレクティブのエコーは出力される。エコーの再開は次のlistonディレクティブにより行われる。
- リスト出力の再開(#liston)
リスト出力を行う。デフォルトはこのモードである。listoffになっていて、このディレクティブがあらわれた場合、次の入力データからエコーされる。

これらのディレクティブの例は次の通りである:

```
#include data1
#eject
#linecount 45
#listoff
#liston
```

1カラム目が#であっても2カラム目以降が上のディレクティブに一致しない場合は、通常の入力データとして取り扱われる。例えば、

```
# include data1
#inclde data1
```

等である。はじめの例は#とincludeの間に空白があり、2番目の例ではincludeのつづりがまちがっている。

これらのディレクティブは、入力データから消される。即ち、これらのディレクティブの現れた行は、ブランク行として、データ中には残らない。

入力データは、80桁のカードから読み込まれるものとし、72カラム以降はカードid フィールドとして無視する。

A.2 入力マニュアル

カードの入力は以下の順序で行う。

A.2.1 オプションカード

このカードでは、二相流が水-蒸気系か水-空気系かを区別するフラグを入力する。

変数	タイプ	説明
ieos	整数	二相流の区別 0 = 水-蒸気系 1 = 水-空気系
iopt	整数	ネームリストを用いるかどうかのフラグ 0 = ネームリストを用いない 1 = ネームリストを用いる

A.2.2 タイトルカード

このカードはすべてa72のフォーマットで読み込まれる。

A.2.3 ネームリスト

一枚目のカードのioptが1の場合、ネームリストoptionを入力する。ネームリストの入力フォーマットはフォートランのマニュアルを参照の事。ネームリストoptionで定義されている変数は以下の通りである。これらのデフォルト値は括弧の中に示されている。

変数	タイプ	説明
clift	実数	気相の水平方向の lift force に掛かる係数 (0.0)
ilift	整数	揚力モデルのオプション (0) -1 = Lahey らのモデル (r 方向のみに働く) 0 = Lahey らのモデル (3 方向に働く) 1 = 湊らのモデル
ctd	実数	気相の乱流拡散力に掛かる係数 (0.0)
cvm	実数	付加質量項の係数 (0.0)
clw	実数	wall force の係数 (0.0)
wallds	実数	wall force が働く壁からの距離 (0.0)
amultg	実数	気相の粘性係数に掛ける係数 (0.0)
amultl	実数	液相の粘性係数に掛ける係数 (0.0)
tmult	実数	液相の乱流エネルギーが主流のエネルギーに比例するとしたときの比例係数 (0.01)
sdtim	実数	crt にメッセージを出す間隔 (0.1)
editop	整数	エディットの形式 (0) 0 = 基本変数のみ出力する 1 = 主要変数を出力する 2 = 全ての変数を出力する
on_tim	実数	lift force、乱流拡散力及び wall force を作動させる時刻 (-1.0)
ibub	整数	界面せん断応力係数を計算するための流動様式 (0) 0 = TRAC 全部の流動様式を使用する 1 = 気泡流のみの流動様式を使用する
noslug	整数	気泡流でスラグ成分を考慮するかどうかのフラッグ (0) 0 = スラグ成分を考慮する 1 = スラグ成分を考慮しない ibub の値が 0 のときは 0 に、ibub の値が 1 のときは 1 にセットされる。
idia	整数	気泡径を Weber 数から計算するかどうかのフラッグ (0) 0 = Weber 数から計算する 1 = 定数で与える ibub の値が 0 のときは 0 にリセットされる。
dbub	実数	idia の値が 1 のときに使用される気泡径 (0.001)

A.2.4 タイムステップカード

このカードでは、解析開始時刻、解析終了時刻、最大時間ステップ幅、最少時間ステップ幅及び出力時間幅(何秒に1回プリンターまたはプロットファイルに出力するか)を入力する。

変数	タイプ	説明
sttime	実数	解析開始時刻
endtim	実数	解析終了時刻
deltmx	実数	最大時間ステップ幅
deltrn	実数	最少時間ステップ幅

変数	タイプ	説明
edtim	実数	プリンタ出力時間ステップ幅
pltim	実数	プロットファイルへの出力時間ステップ幅

A.2.5 収束判定条件カード

このカードでは、最大反復回数及び収束条件値を与える。圧力の反復回数が最大反復回数を越えた場合、そのステップは収束しなかったものとみなされ、時間ステップ幅を1/2にして再計算する。圧力の相対誤差が収束条件値より小さくなった場合、そのステップは収束したものとする。

変数	タイプ	説明
maxitr	整数	最大反復回数
epsenc	実数	収束判定値

A.2.6 体系カード

これらのカードでは、解析体系を入力する。1枚目のカードでは、メッシュ数の入力を行なう。2枚目のカードでは、壁摩擦オプション及び乱流モデルのオプションを入力する。その後のカードでは、直交座標か円筒座標系の区別、 y または θ 方向の周期境界条件及び重力の入力方法の指定を行う。また、 z 方向の入口及び出口の境界条件を入力する。境界条件は壁面、注入及び流出の条件を付与することができる。その他の面はすべて壁面である。以後のカードでは壁面での速度のslip/nonslipの条件を指定する。

変数	タイプ	説明
nx	整数	x または r 方向メッシュ数
ny	整数	y または θ 方向メッシュ数
nz	整数	z 方向メッシュ数

変数	タイプ	説明
iwall	整数	壁摩擦オプション 0 = 壁摩擦相関式を用いる 1 = 壁摩擦相関式を用いない
iturb	整数	乱流モデルオプション 0 = 乱流モデルを用いない 1 = 乱流拡散係数にSATOのモデルを用いる 乱流エネルギーは主流のエネルギーに比例すると仮定する 2 = 二相乱流モデルを用いる

iturbの値が1の時、以下のカードを入力する。

変数	タイプ	説明
bubdia	実数	気泡径
uast	実数	摩擦速度

iturbの値が2の時、以下のカードを入力する。

変数	タイプ	説明
bubdia	実数	気泡径

変数	タイプ	説明
igeom	整数	0 = 円筒座標系 1 = 直交座標系
cyclic	整数	y または θ 方向周期境界条件 0 = 壁面 1 = 周期条件
nvgrav	整数	重力の入力方法 0 = z 方向のみ $g_z = -9.807\text{m/s}^2$ 1 = g_x 、 g_y 及び g_z を入力する

変数	タイプ	説明
igbcz(1)	整数	z 方向入口境界条件 0 = 壁面 1 = 注入条件 2 = 流出条件
igbcz(2)	整数	z 方向出口境界条件 0 = 壁面 1 = 注入条件 2 = 流出条件

変数	タイプ	説明
iwbc(1,1)	整数	x または r 方向内側slip/nonslip境界条件 0 = slip条件 1 = nonslip条件
iwbc(2,1)	整数	x または r 方向外側slip/nonslip境界条件 0 = slip条件 1 = nonslip条件

変数	タイプ	説明
iwbc(1,2)	整数	y または θ 方向内側slip/nonslip境界条件 0 = slip条件 1 = nonslip条件
iwbc(2,2)	整数	y または θ 方向外側slip/nonslip境界条件 0 = slip条件 1 = nonslip条件

変数	タイプ	説明
iwbc(1,3)	整数	z 方向下側slip/nonslip境界条件 0 = slip条件 1 = nonslip条件
iwbc(2,3)	整数	z 方向上側slip/nonslip境界条件 0 = slip条件 1 = nonslip条件

A.2.7 メッシュデータカード

これらのカードでは、メッシュの座標値を入力する。

変数	タイプ	説明
z	実数	z方向セル境界の座標。nz+1個入力する
変数	タイプ	説明
rad	実数	xまたはr方向セル境界の座標。nx+1個入力する
変数	タイプ	説明
th	実数	yまたはθ方向セル境界の座標。ny+1個入力する

A.2.8 重力データ入力カード

nvgrav = 0の場合は、このデータの 입력は必要でない。nvgrav = 1の場合、以下のカードを入力する。

変数	タイプ	説明
gc	実数	重力加速度の大きさ
gravx	実数	xまたはr方向の割合
gravy	実数	yまたはθ方向の割合
gravz	実数	z方向の割合

A.2.9 セルデータカード

入力を簡単にするために、セルの体積やセル界面の断面積には障害物はなく、幾何形状に等しい値とする。従って、入力する必要はない。また、等価直径は全セルで一定とし、その一定値を入力する。ボイド率、圧力、温度及び両相の速度も、その初期値は一樣とし、その一定値を入力する。

変数	タイプ	説明
hdxr0	実数	xまたはr方向の等価直径
hdyt0	実数	yまたはθ方向の等価直径
hdz0	実数	z方向の等価直径
変数	タイプ	説明
alpn0	実数	ボイド率初期値
pn0	実数	圧力初期値
tvn0	実数	気相温度初期値
tln0	実数	液相温度初期値
変数	タイプ	説明
vvxr0	実数	xまたはr方向気相流速初期値
vvyt0	実数	yまたはθ方向気相流速初期値
vvz0	実数	z方向気相流速初期値
変数	タイプ	説明
vlxr0	実数	xまたはr方向液相流速初期値
vlyt0	実数	yまたはθ方向液相流速初期値
vlz0	実数	z方向液相流速初期値

A.2.10 境界条件入力カード

この節では、境界条件を入力する。境界条件が付与出来るのはz方向の入口及び出口のみである。はじめに入口の境界条件を入力し、次に出口の境界条件を入力する。入口と出口の境界条件の入力方法はまったく同じであるので、まとめて、境界条件の入力方法と呼ぶことにする。

境界条件の入力方法は以下の通りである。体系カードで入力したigbczが0の場合は以下のデータを入力する必要がない。

igbczが2のとき、次のデータを入力する。このデータに基づいて境界条件セルの体積等を計算する。ibcgzが1の時は、隣接する内部セルの値をコピーする。

変数	タイプ	説明
dz	実数	z方向メッシュ幅

以下のボイド率、圧力、温度及び速度のデータはigbczが1でも2でも入力する必要がある。ボイド率、圧力及び温度が、入口または出口で一様ならば、その一定値を入力する。これらの値に負の値を入力すると、メッシュ毎に値が異なるものと解釈され、続いて、メッシュ毎の値を入力する。一方、速度はメッシュ毎に変化するものとしている。

変数	タイプ	説明
alpha	実数	ボイド率
press	実数	圧力
tempv	実数	気相温度
templ	実数	液相温度

alphaの値が負の場合は、各セルでのボイド率の値を入力する。この入力フォーマットは速度と同じである。

変数	タイプ	説明
alpha	実数	ボイド率

pressの値が負の場合は、各セルでの圧力の値を入力する。入力フォーマットは速度と同じである。

変数	タイプ	説明
press	実数	圧力

tempvの値が負の場合は、各セルでの気相温度の値を入力する。入力フォーマットは速度と同じである。

変数	タイプ	説明
tempv	実数	気相温度

templの値が負の場合は、各セルでの液相温度の値を入力する。入力フォーマットは速度と同じである。

変数	タイプ	説明
templ	実数	液相温度

速度は2次元のデータであり

```
do 100 j = 1 , ny
  read(iwkunt,*) ( vel(i,j,k) , i = 1 , nx )
100 continue
```

のフォーマットで読み込まれる。ここで、入口の場合 $k = 0$ であり、出口の場合 $k = nz$ である。セルデータカードの入力の際にも同じデータが読み込まれているが、ここのデータが優先される。注入条件の場合、この速度が注入速度となる。

変数	タイプ	説明
vvz	実数	気相速度

変数	タイプ	説明
vlz	実数	液相速度

A.3 実行方法

Unix 環境下での ACE-3D の実行方法は以下の通りである。

```
ace3d -i inputfile -o outputfile -p plotfile
```

ここで、inputfile は入力データのファイル名であり、outputfile はプリンター出力のファイル名である。同様に、plotfile はプロットファイルのファイル名である。入力データファイル名は省略することが出来ない。プリンター出力ファイル名を省略すれば (-o を含めて)、./work/outlist という名前でファイルが作成される。また、プロット出力ファイル名を -p を含めて省略すれば、./work/plotfile という名前でファイルが作成される。

Appendix B プロットプログラム用入力マニュアル

本付録は3次元二相流解析コードACE-3Dの解析結果のグラフ出力用プログラムhkplot及びhkgraphの入力マニュアルである。hkplotは各種物理量の時間変化やある軸ぞいの分布などの1次元グラフを描くプログラムであり、hkgraphはある時刻における各種物理量のコンター図やベクトル図などの2次元グラフを描くプログラムである。

これらのプログラムは、プロットをインタラクティブに行う事を念頭に置き作成されている。従って、入力はすべてコマンド形式になっている。即ち、入力はコマンド、パラメータの順序にフリーフォーマットで入力される。各単語の間のセパレータは一つ以上の空白である。また、空白カードは読み飛ばされる。入力の最後が\の場合は、次のカードは、前のカードの継続カードであるとみなされ、連結される。また、#のあとはコメントとして扱われる。

B.1 hkplotの入力マニュアル

B.1.1 データ入力コマンド

openコマンド

このコマンドは、データをファイルから読み込む場合に、そのファイルをオープンするためのコマンドである。

コマンド名	パラメータ
open	type file名

第1のパラメータtypeはデータのタイプを示し、次の値をとる。第2パラメータはオープンしたいファイルのファイル名である。

type	内容
plot	プログラムACE-3Dからの出力ファイル
data	カードイメージのデータであり、以下のreadfコマンドで読み込まれる
print	以下のprintfコマンドで書き出されるファイル

readコマンド

このコマンドは、キーボードからデータを読み込むコマンドである。キーボードは常にオープンされているから、openコマンドでファイルをオープンする必要はない。

コマンド名	パラメータ
read	did
read	なし

didは、読み込まれたデータにつけるタグであり、a1、a2の様にaのあとに数字をつける。この数字は、プログラム内部で格納されるデータにつけられる番号である。以後のプロット命令はこの内部のタグdidに対して行う。didを指定しない場合は、コード内部で使用されていないdidを順番にアサインする。この後、以下のデータを入力する。入力はフリーフォーマットである。

変数名	内容
len	データの長さ
data(i), i = 1, len	データ

readf コマンド

このコマンドはopenコマンドでオープンしたdataタイプのファイルの内容を読み込むコマンドである。plotタイプのファイル(ACE-3Dからの出力ファイル)は次のgetコマンドにより読み込まれる。

コマンド名	パラメータ
readf	なし
readf	did

didは、読み込まれたデータにつけるタグであり、a1、a2の様にaのあとに数字をつける。この数字は、プログラム内部で格納されるデータにつけられる番号である。以後のプロット命令はこの内部のタグdidに対して行う。didを指定しない場合は、コード内部で使用されていないdidを順番にアサインする。この後、以下のデータを入力する。入力はフリーフォーマットである。

変数名	内容
len	データの長さ
data(i), i = 1, len	データ

このファイルはひとたびopenされると、closeコマンドでcloseしない限り、openされたままである。このため、このコマンドにより連続的にデータを読み込む事ができる。

get コマンド

このコマンドはopenコマンドでオープンしたplotタイプのファイル(ACE-3Dからの出力ファイル)の内容を読み込む。

コマンド名	パラメータ
get	varname (did)
get	varname ipos jpos kpos (did)

第1の形式で読み込まれる変数(varname)はtime及びdelt(時間ステップ幅)である。(did)は内部タグであり、括弧はdidを書いても書かなくてもよいことを示す。

第2の形式で読み込まれる変数(varname)は、3次元の変数であり以下に示される。これらの変数名はACE-3Dで用いられているものと同じである。ipos、jpos及びkposはメッシュのインデックスである。即ち物理量varname(ipos,jpos,kpos)の時間ヒストリーを読み込む。

alpn	ボイド率
pn	圧力
tvn	気相温度
tln	液相温度
vvxrn	気相 x または r 方向速度
vixrn	液相 x または r 方向速度
vvyt	気相 y または θ 方向速度
vlytn	液相 y または θ 方向速度
vvzn	気相 z 方向速度
vlyzn	液相 z 方向速度
rov	気相密度
rol	液相密度
ev	気相内部エネルギー
el	液相内部エネルギー
tsat	飽和温度
wfvxr	気相 x または r 方向壁摩擦
wflxr	液相 x または r 方向壁摩擦
wfvyt	気相 y または θ 方向壁摩擦
wflyt	液相 y または θ 方向壁摩擦
wfvz	気相 z 方向壁摩擦
wflz	液相 z 方向壁摩擦
cinxr	x または r 方向界面せん断応力
cinyt	y または θ 方向界面せん断応力
cinz	z 方向界面せん断応力
hig	気相界面熱伝達係数
hil	液相界面熱伝達係数
klsin	シアーにより誘起された乱流エネルギー
epsln	シアーにより誘起されたエネルギー散逸率
tel	トータルの乱流エネルギー

select コマンド

このコマンドでは、物理量のある時刻でのある軸にそっての空間分布を選択する。

コマンド名	パラメータ
select	varname ipos jpos kpos time (did)
select	geom ipos jpos kpos type (did)

第1の形式では、get コマンドで示されている3次元の物理量のある軸ぞいの空間分布を取り出す。例えば、三次元のデータ $data(i, j, k)$ があつたとき、 $data(3, 4, k)$ ($k = 1, nz$) を取り出すためには、select data

3 4 *とする。即ち、記号によってどの軸ぞいの分布であるかを指定する。その後のtimeは空間分布を取り出す時刻で、この時刻を越えない最終のステップのデータが取り出される。didは内部タグであり、指定すればそのタグで示される場所にデータが格納される。指定しない場合には、空いている場所に格納される。

select コマンドの第2の形では、座標値を読み込む。xまたはr方向の座標を取り出すためにはgeomの項にxrcrd、yまたはθ方向の座標を取り出すにはytrcd、z方向の座標を取り出すためにはzrcrdを与える。ipos、jpos及びkposは第1の形式と同じである。最後のtypeは、セル中心の場合にはc、セル端の場合にはeを与える。

close コマンド

このコマンドは、open コマンドでオープンされたファイルをクローズするためのコマンドである。異なるデータのプロットを行う場合は、まず、close コマンドでファイルをクローズし、改めてopen コマンドでファイルをオープンする必要がある。

コマンド名	パラメータ
close	type

パラメータtypeはデータのタイプを示し、open コマンドで示された値をとる。

B.1.2 図の内容を決めるコマンド

これらのコマンドは一回設定すると、以後、変更があるまで、その設定は保存される。

xtitle コマンド

x軸のタイトルを設定する。デフォルトの値はblankである。データがファイルから読み込まれたときタイトルも設定される。read コマンドではタイトルは設定されないので、このコマンドでタイトルを設定する必要がある。

コマンド名	パラメータ
xtitle	heading(最大16文字、blankも含む)

ytitle コマンド

y軸のタイトルを設定する。デフォルトの値はblankである。データがファイルから読み込まれたときタイトルも設定される。read コマンドではタイトルは設定されないので、このコマンドでタイトルを設定する必要がある。

コマンド名	パラメータ
ytitle	heading(最大16文字、blankも含む)

ftitle コマンド

図のタイトルを設定する。デフォルトの値は空白である。get コマンドまたはselect ではプロットファイルのタイトルが図のタイトルとして設定される。

コマンド名	パラメータ
ftitle	heading(最大 60 文字、空白も含む)

xscale コマンド

このコマンドで、x 軸の範囲を指定する。デフォルトはオートスケールで、その範囲はデータで入力された値である。

コマンド名	パラメータ
xscale	xmin xmax
xscale	auto

前者の形式は、x 軸の範囲を指定するものである。xmin は最小値、xmax は最大値である。二番目の形式は範囲をオートスケールにもどすものである。

yscale コマンド

このコマンドで、y 軸の範囲を指定する。デフォルトはオートスケールで、その範囲はデータで入力された値である。

コマンド名	パラメータ
yscale	ymin ymax
yr	auto

前者の形式は、y 軸の範囲を指定するものである。ymin は最小値、ymax は最大値である。二番目の形式は範囲をオートスケールにもどすものである。

grid コマンド

このコマンドは、グラフにグリッドを書き込むかどうかを決めるものである。デフォルトではグリッドを書く。その個数をこの grid コマンドで指定する。個数が指定されていない時は、コードで適当に選定する(オート形式)。

コマンド名	パラメータ
grid	on
grid	off
grid	x n
grid	y n

第1の形式では、グリッドを以後のグラフに書き込む。このときグリッドの個数は、オート形式にリセットされる。第2の形式では、グリッドを、以後、書かない事を指定する。これら二つのコマンドでグリッドの on/off を制御する。第3の形式では、x 軸のグリッド数を n に設定する。第4の形式では、y 軸のグリッド数を n に設定する。この個数に 0 を指定すると、グリッドの個数はオート形式になる。

line コマンド

プロットする線の種類を指定する。現在、指定できる線種は実線(1)と点線(2)である。デフォルト値はすべて実線である。線を書かない場合は線種の0を指定する。

コマンド名	パラメータ
line	線の番号 線種

例えば、1番目の線を実線とし2番目の線を点線とするには、line 1 1 2 2とする。

symbol コマンド

プロットする線につけるシンボルの種類を指定する。シンボルの種類の番号は、calcompのsymbolルーチンに従う。シンボルをつけない場合は0を指定する。

コマンド名	パラメータ
symbol	線の番号 シンボル種

log スケールコマンド

log スケールでプロットする。

コマンド名	パラメータ
logx	なし
logy	なし

前者はx軸をlogスケールに、後者はy軸をlogスケールにする。

B.1.3 図の大きさと位置を決めるコマンド

コマンド plen

軸の長さを指定するコマンドである。

コマンド名	パラメータ
plen	xlen ylen

xlenは図のx軸の長さ(単位cm)であり、ylenは図のy軸の長さ(単位cm)である。デフォルト値は縦横ともに15cmである。

コマンド default

図の体裁をデフォルト値に戻すコマンドである。

コマンド名	パラメータ
default	なし

B.1.4 グラフを書くコマンド

コマンド plot

グラフを書くコマンドである。これまでのコマンドで指定された図の内容、体裁でグラフを書く。

コマンド名	パラメータ
plot	did1 did2 / did3 did4 / did5 did6 / ...

グラフの第1番目のラインのxデータを内部タグ did1 に格納されているデータとし、yデータを内部タグ did2 に格納されているデータである。同様に2番目のラインは (did3, did4) のペアである。

B.1.5 終了コマンド

コンタプロットを終了するコマンドである。

コマンド名	パラメータ
end	なし

B.1.6 使用方法

このプログラム hkplot の使用方法は以下の通りである。コマンドをインタラクティブに入力する場合は

```
xplot
```

と入力すれば、プログラムが起動され、プロンプトが出、コマンドの入力状態になる。コマンドを記述した入力ファイルを用いる場合は

```
xplot -i filename
```

と入力する。ここで、filename はコマンドを記述した入力ファイルのファイル名である。

plot コマンドが実行されると、画面内に plotwindow と名前がついた新しいウィンドウがオープンされる。まだ、このウィンドウには何も描かれていない。マウスの左ボタンをクリックすると描画が始まる。図が描かれた後、再び、マウスの左ボタンをクリックするとウィンドウがクローズし、次のコマンドが実行される。

プロット図をポストスクリプトプリンターへ出力するには以下のようにすればよい。

```
pplot -i filename
```

によりポストスクリプトファイル形式のプロットファイルが fort.77 として作成される。

B.1.7 実行例

第4章でのチェック計算において解析した結果を hkplot で出力した例を示す。入力データは以下のものであり、それによる出力結果を図 B.1 から図 B.6 に示す。

```
#
# input for Plenum base
#
open plot ./work/plotfile
get time a1
get alpn 2 1 10 a3
get alpn 8 1 10 a5
get alpn 13 1 10 a7
get alpn 14 1 10 a10
plot a1 a3 a5 a7 a10
select xrcrd * 1 10 c a11
select alpn * 1 1 9.0 a12
select alpn * 1 3 9.0 a13
select alpn * 1 8 9.0 a14
select alpn * 1 9 9.0 a15
select alpn * 1 10 9.0 a16
plot a11 a12 a13 a14 a15 a16
#
get vvzn 2 1 10 a3
get vvzn 8 1 10 a5
get vvzn 13 1 10 a7
get vvzn 14 1 10 a10
plot a1 a3 a5 a7 a10
select xrcrd * 1 10 c a11
select vvzn * 1 1 9.0 a12
select vvzn * 1 3 9.0 a13
select vvzn * 1 7 9.0 a14
select vvzn * 1 8 9.0 a15
select vvzn * 1 9 9.0 a16
select vvzn * 1 10 9.0 a17
plot a11 a12 a13 a14 a15 a16 a17
#
get vlzn 2 1 10 a3
get vlzn 8 1 10 a5
get vlzn 13 1 10 a7
get vlzn 14 1 10 a10
plot a1 a3 a5 a7 a10
select xrcrd * 1 10 c a11
select vlzn * 1 1 9.0 a12
select vlzn * 1 3 9.0 a13
select vlzn * 1 7 9.0 a14
select vlzn * 1 8 9.0 a15
select vlzn * 1 9 9.0 a16
select vlzn * 1 10 9.0 a17
plot a11 a12 a13 a14 a15 a16 a17
#
end
```

Wang bubbly flow $Jl=1.08\text{m/s}$ $Jg=0.1\text{m/s}$

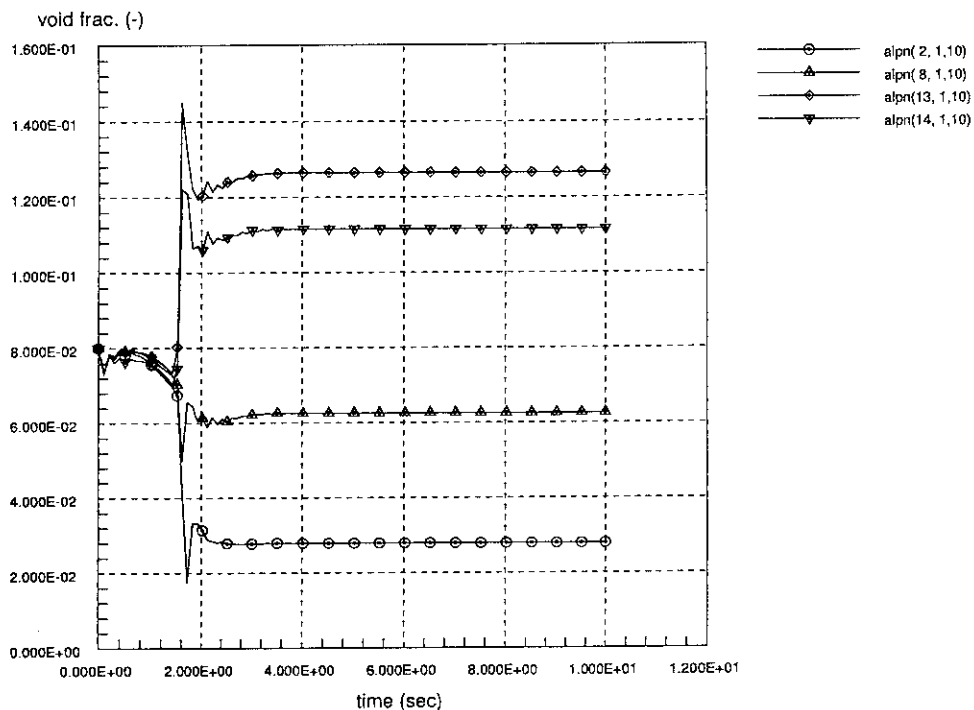


図 B. 1 hkplot出力例(1)

Wang bubbly flow $Jl=1.08\text{m/s}$ $Jg=0.1\text{m/s}$

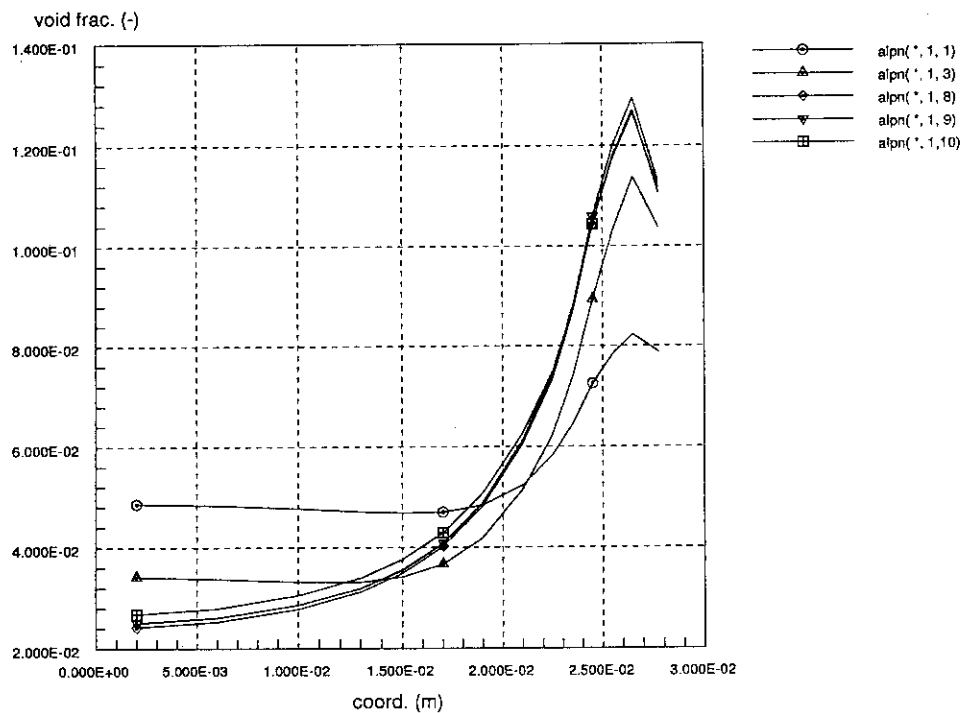


図 B. 2 hkplot出力例(2)

Wang bubbly flow $Jl=1.08\text{m/s}$ $Jg=0.1\text{m/s}$

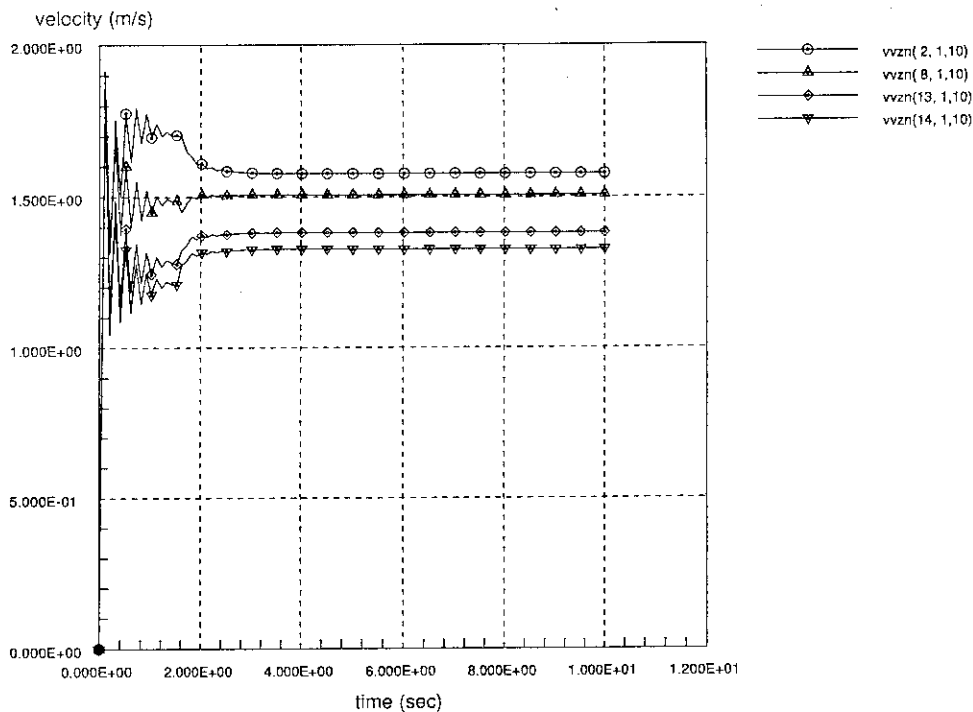


図 B. 3 hkplot出力例(3)

Wang bubbly flow $Jl=1.08\text{m/s}$ $Jg=0.1\text{m/s}$

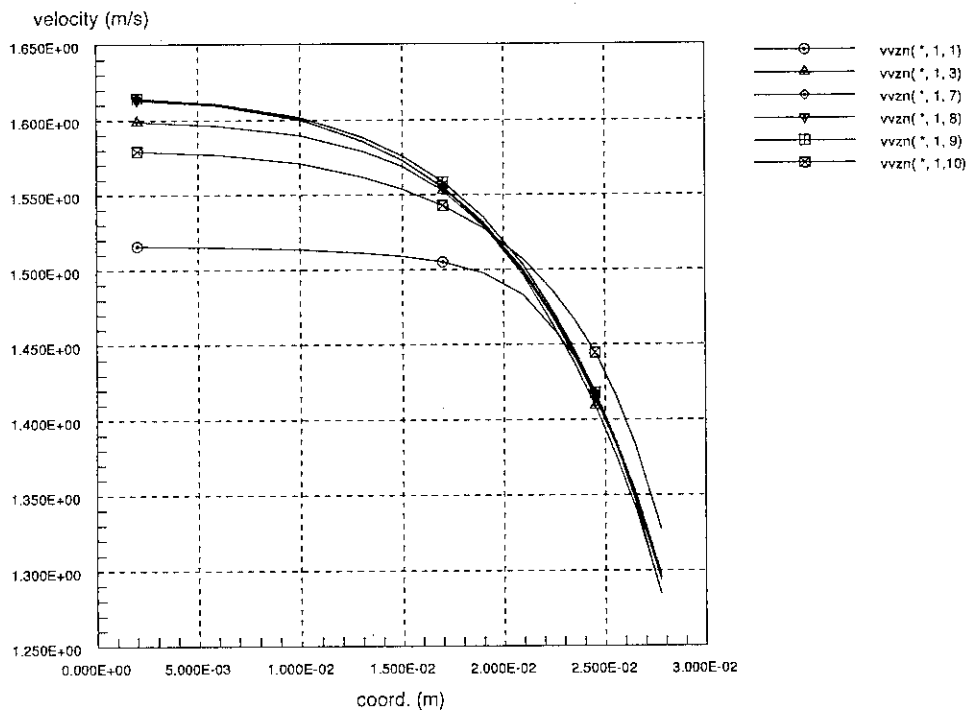


図 B. 4 hkplot出力例(4)

Wang bubbly flow $Jl=1.08\text{m/s}$ $Jg=0.1\text{m/s}$

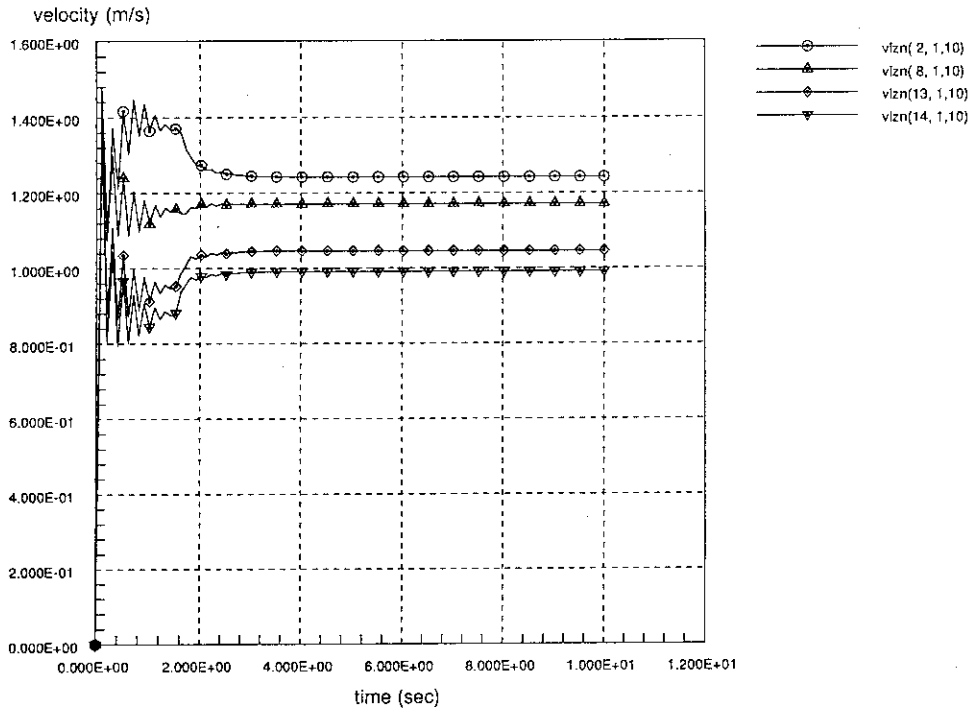


図 B. 5 hkplot出力例(5)

Wang bubbly flow $Jl=1.08\text{m/s}$ $Jg=0.1\text{m/s}$

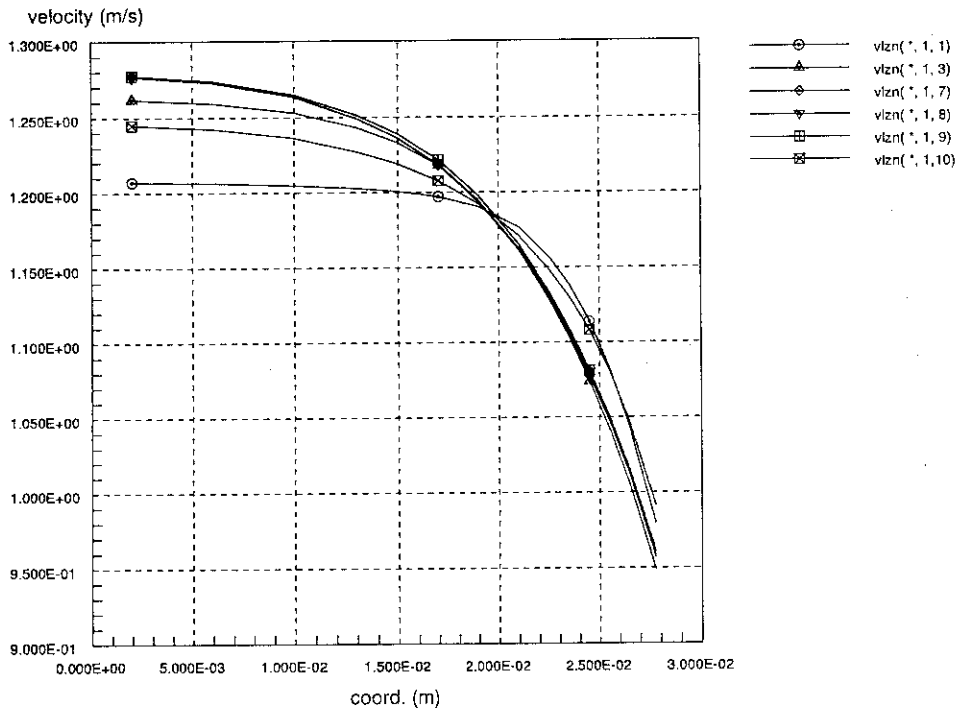


図 B. 6 hkplot出力例(6)

B.2 hkgraphの入力マニュアル

B.2.1 データ入力コマンド

openコマンド

このコマンドは、データをファイルから読み込む場合に、そのファイルをオープンするためのコマンドである。

コマンド名	パラメータ
open	type file名

第1のパラメータtypeはデータのタイプを示し、次の値をとる。第2パラメータはオープンしたいファイルのファイル名である。

type	内容
plot	プログラムACE-3Dからの出力ファイル
data	カードイメージのデータであり、以下のreadfコマンドで読み込まれる
print	以下のprintfコマンドで書き出されるファイル

readコマンド

このコマンドは、キーボードからデータを読み込むコマンドである。キーボードは常にオープンされているから、openコマンドでファイルをオープンする必要はない。

コマンド名	パラメータ
read	なし

この後、以下のデータを入力する。入力はフリーフォーマットである。

変数名	内容
nkdata	データの種類
nxdata, nydata	x方向及びy方向のデータ数
xcoord(i), i = 1, nxdata	データのx座標
ycoord(j), j = 1, nydata	データのy座標

ベクトルの場合には、データの種類として1を与える。コンター(スカラ)の場合には、データの種類として2を入力する。上で座標を入力した後に書くべきデータを入力する。ベクトルの場合、全ての点でのx成分 $vx(i, j)$ を入力し、その後、y成分 $vy(i, j)$ を入力する。入力は

```

do 100 j = 1 , nydata
  read(*,*) ( vx(i,j) , i = 1 , nxdata )
100 continue
do 200 j = 1 , nydata
  read(*,*) ( vy(i,j) , i = 1 , nxdata )
200 continue

```

というフォートランにもとづいて行なわれる。スカラの場合は、

```

do 300 j = 1 , nydata
  read(*,*) ( sc(i,j) , i = 1 , nxdata )
300 continue

```

というフォートランにもとづいて、データが読み込まれる。以上のデータを入力する場合に#以後はコメントであるとか、行の最後が\の場合は継続行となるなどの規則は適用されない。上のフォートランにもとづいて、データを読むのみである。

readf コマンド

このコマンドはopenコマンドでオープンしたdataタイプのファイルの内容を読み込むコマンドである。plotタイプのファイル(ACE-3Dからの出力ファイル)は次のgetコマンドにより読み込まれる。

コマンド名	パラメータ
readf	なし

この後、以下のデータを入力する。入力はフリーフォーマットである。そのデータ形式はread5コマンドの項で説明したものと同一である。

このファイルはひとたびopenされると、closeコマンドでcloseしない限り、openされたままである。このため、このコマンドにより連続的にデータを読み込む事ができる。

get コマンド

このコマンドはopenコマンドでオープンしたplotタイプのファイル(ACE-3Dからの出力ファイル)の内容を読み込む。このコマンドは、次のcutコマンドとペアになって用いられる。

コマンド名	パラメータ
get	varname time

このコマンドで読み込まれる変数(varname)は、3次元の変数であり以下に示される。これらの変数名はACE-3Dで用いられているものと同じであり、現在は、以下の物理量に限られている。

alpn	ボイド率
pn	圧力
tvn	気相温度
tlv	液相温度
vvv	気相速度
vlv	液相速度
klsin	シアーにより誘起された乱流エネルギー
epsln	シアーにより誘起されたエネルギー散逸率
tel	トータルの乱流エネルギー

気相及び液相の速度はベクトル図としてプロットされ、他の物理量はすべてコンタ図として描かれる。

2番目のパラメタは、物理量をプロットする時刻であり、プロットファイルの中のデータのうち、この時刻を越えないでこの時刻に最も近いステップのデータが読み込まれる。従って、プロットファイルの最終ステップのデータをプロットしたいならば、このタイムに大きな値を入れておけばよい。

cut コマンド

このコマンドでは、get コマンドで読み込まれた物理量のある面にそっての空間分布を選択する。

コマンド名	パラメータ
cut	axis pos

このコマンドの第1パラメタでは軸を指定し、第2パラメタでは位置を指定する。例えば、x軸の5番の位置を指定したとする。このときは、get コマンドで示されている3次元の物理量の $data(i, j, k)$ の $data(5, *, *)$ が取り出される。即ち、軸と位置で決まる面内の2次元分布をプロットする。

軸の指定方法は、x軸または半径rのときはxまたはrを入力する。y軸または角度の時はyまたはtを入力する。z軸はzと入力する。位置はメッシュの番号を入力する。ベクトルの場合も、平均をとることにより、すべて、メッシュの中心で定義されている。

close コマンド

このコマンドは、open コマンドでオープンされたファイルをクローズするためのコマンドである。異なるデータのプロットを行う場合は、まず、close コマンドでファイルをクローズし、改めてopen コマンドでファイルをオープンする必要がある。

コマンド名	パラメータ
close	type

パラメータ type はデータのタイプを示し、open コマンドで示された値をとる。

B.2.2 図の体裁を決めるコマンド

これらのコマンドは一回設定すると、以後、変更があるまで、その設定は保存される。

ftitle コマンド

図のタイトルを設定する。デフォルトの値は空白である。get コマンドではプロットファイルのタイトルが図のタイトルとして設定される。

コマンド名	パラメータ
ftitle	heading(最大60文字、空白も含む)

xscale コマンド

このコマンドで、x軸の範囲を指定する。デフォルトはオートスケールで、その範囲はデータで入力された値である。

コマンド名	パラメータ
xscale	xmin xmax
xscale	auto

前者の形式は、x軸の範囲を指定するものである。xminは最小値、xmaxは最大値である。二番目の形式は範囲をオートスケールにもどすものである。このxmin及びyminの値を設定することにより、グラフを拡大したり縮小したりすることができる。

yscale コマンド

このコマンドで、y軸の範囲を指定する。デフォルトはオートスケールで、その範囲はデータで入力された値である。

コマンド名	パラメータ
yscale	ymin ymax
yr	auto

前者の形式は、y軸の範囲を指定するものである。yminは最小値、ymaxは最大値である。二番目の形式は範囲をオートスケールにもどすものである。このxmin及びyminの値を設定することにより、グラフを拡大したり縮小したりすることができる。

line コマンド

プロットする線の種類を指定する。

コマンド名	パラメータ
line	線の番号 線種

例えば、1番目の線を実線とし2番目の線を点線とするには、line 1 1 2 2とする。

B.2.3 図の大きさと位置を決めるコマンド

コマンド plen

軸の長さを指定するコマンドである。

コマンド名	パラメータ
plen	xlen ylen

xlenは図のx軸の長さ(単位cm)であり、ylenは図のy軸の長さ(単位cm)である。デフォルト値は縦横ともに12cmである。

コマンド default

図の体裁をデフォルト値に戻すコマンドである。

コマンド名	パラメータ
default	なし

コマンド scale

ベクトルのスケールを決定するコマンドである。

コマンド名	パラメータ
scale	value/auto

パラメータとして数値 value を入力した場合、長さ 1cm の矢印が絶対値 value のベクトルに対応する。パラメータとして auto を入力した場合、データに含まれる最大のベクトルを 1cm の長さの矢印であらわす。デフォルト値は auto である。

コマンド level

コンタ図のレベルを設定するコマンドである。

コマンド名	パラメータ
level	num (auto/range)

コマンドの第一パラメータはコンタレベルの本数である。最大値は 9 である。二番目のパラメータはなくてもよい。この場合は、次にレベルの値をすべて入力する。二番目のパラメータとして auto を指定した場合は、データの最大値と最小値からレベルを決定する。二番目のパラメータとして range を指定した場合には、次に最小値と最大値を入力する。この範囲で等分割したレベルをコンタレベルとして採用する。レベルの値及び最小値/最大値の入力はフリーフォーマットである。

デフォルトは auto で本数は 5 本である。

B.2.4 グラフを書くコマンド

コマンド vect

ベクトル図を書くコマンドである。

コマンド名	パラメータ
vect	なし

コマンド cont

コンタ図を書くコマンドである。

コマンド名	パラメータ
cont	なし

B.2.5 データを出力するコマンド

コマンド print5

ベクトル図またはコンタ図のデータを画面に書きだすコマンドである。

コマンド名	パラメータ
print5	なし

コマンド printf

ベクトル図またはコンタ図のデータをファイルに書きだすコマンドである。このファイルは open コマンドで open されてなければならない。また、書き出されたデータは readf コマンドで読み込む事ができる。

コマンド名	パラメータ
printf	なし

B.2.6 終了コマンド

このプログラムを終了するコマンドである。

コマンド名	パラメータ
end	なし

B.2.7 使用方法

このプログラム hkgraph の使用法は以下の通りである。コマンドをインタラクティブに入力する場合は

```
xgraph
```

と入力すれば、プログラムが起動され、プロンプトが出、コマンドの入力状態になる。コマンドを記述した入力ファイルを用いる場合は

```
xgraph -i filename
```

と入力する。ここで、filename はコマンドを記述した入力ファイルのファイル名である。

cont/vect コマンドが実行されると、画面内に plotwindow と名前がついた新しいウインドウがオープンされる。まだ、このウインドウには何も描かれていない。マウスの左ボタンをクリックすると描画が始まる。図が描かれた後、再び、マウスの左ボタンをクリックするとウインドウがクローズし、次のコマンドが実行される。

プロット図をポストスクリプトプリンターへ出力するには以下のようにすればよい。まず、

```
pgraph -i filename
```

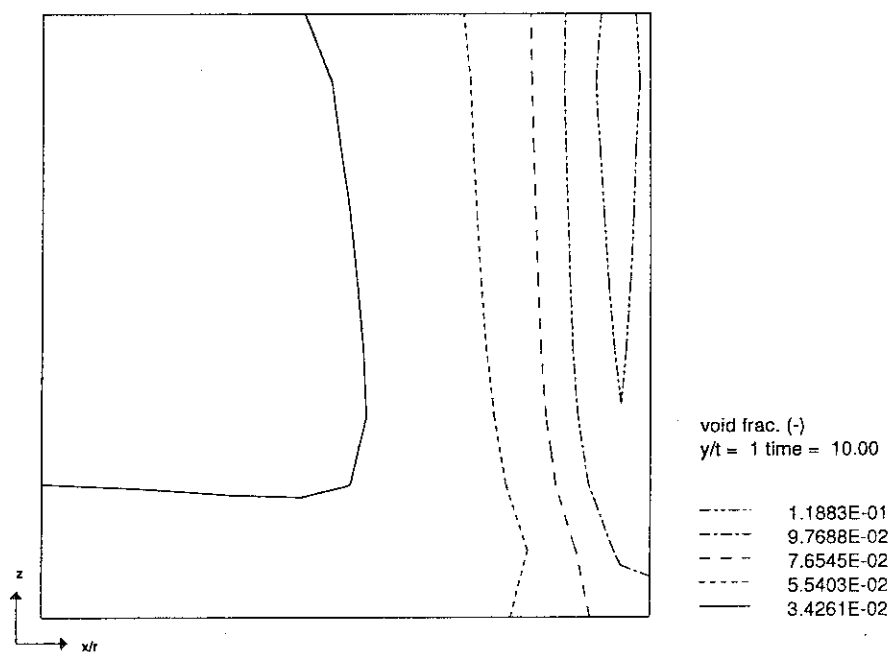
によりポストスクリプト形式のプロットファイルが fort.77 として作成される。このファイルをポストスクリプトプリンタに出力すればよい。

B.2.8 実行例

第4章でのチェック計算において解析した結果をhkgraphで出力した例を示す。入力データは以下のものであり、それによる出力結果を図B.7から図B.9に示す。

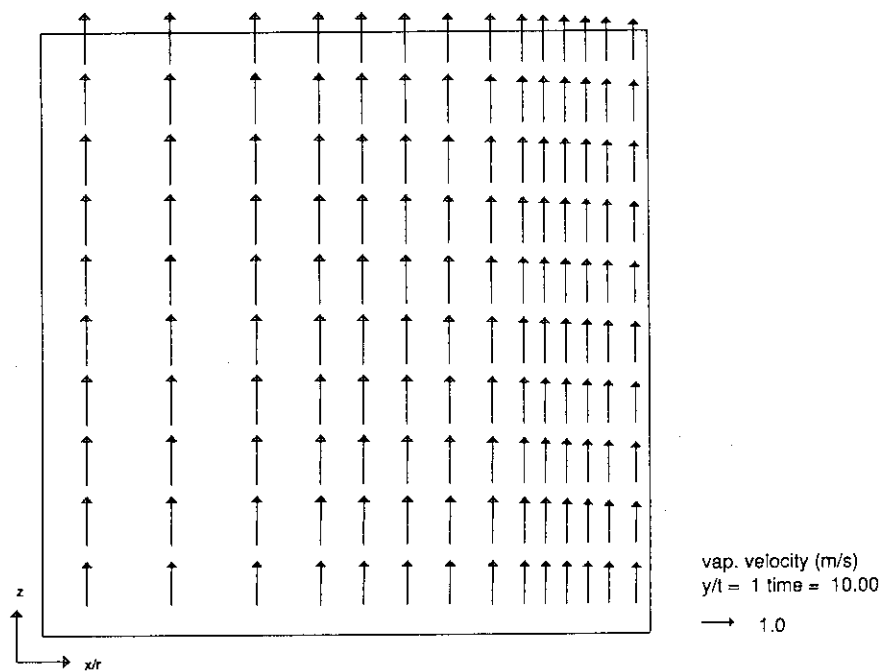
```
#
# input for Wang test
#
ftitle Test for Wang data set J1=1m/s Jg=0.1m/s
open plot ./work/plotfile
get alpn 10
cut t 1
cont
get vvn 10
cut t 1
vect
get vln 10
cut t 1
vect
#
end
```

Wang bubbly flow $Jl=1.08\text{m/s}$ $Jg=0.1\text{m/s}$



図B. 7 hkgraph出力例(1)

Wang bubbly flow $Jl=1.08\text{m/s}$ $Jg=0.1\text{m/s}$



図B. 8 hkgraph出力例(2)

Wang bubbly flow $Jl=1.08\text{m/s}$ $Jg=0.1\text{m/s}$

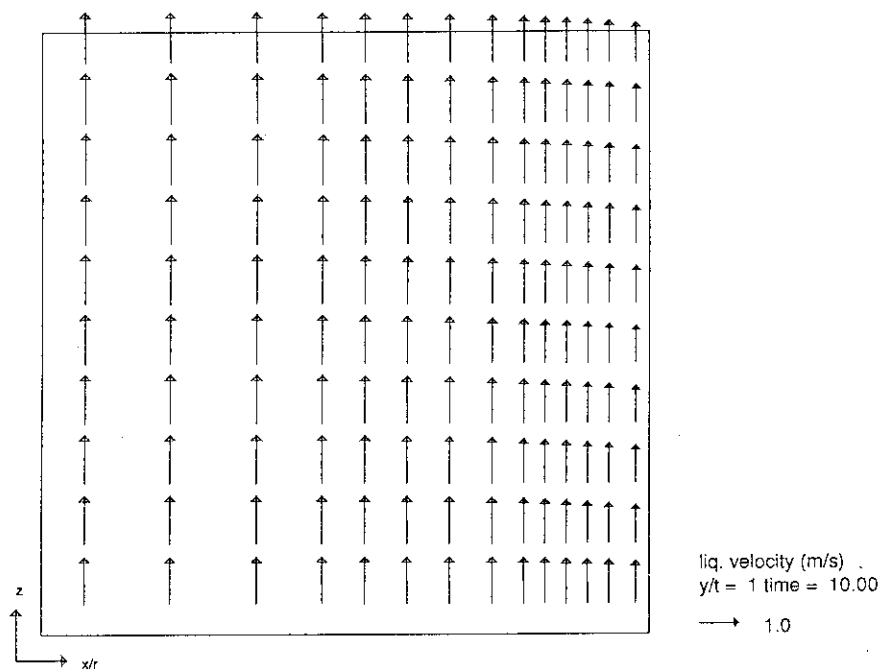


図 B. 9 hkgraph出力例(3)