

粒子法を用いた相変化・化学反応を伴う流動解析・評価作業

(核燃料サイクル開発機構 契約業務報告書)



2001年2月

株式会社 東芝

本資料の全部または一部を複写・複製・転載する場合は、下記にお問い合わせください。

〒319-1184 茨城県那珂郡東海村村松 4 番地 49

核燃料サイクル開発機構

技術展開部 技術協力課

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to:

Technical Cooperation Section,

Technical Management Division,

Japan Nuclear Cycle Development Institute

4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki 319-1184

Japan

© 核燃料サイクル開発機構 (Japan Nuclear Cycle Development Institute)

2001

2001年2月

粒子法を用いた相変化・化学反応を伴う流動解析・評価作業  
(核燃料サイクル開発機構契約業務報告書)

白川典幸\* 堀江英樹\* 山本雄一\*\*

要旨

伝熱流動数値実験によって、化学反応を伴う伝熱流動が高速炉を構成する機器に及ぼす影響を評価するには、反応の発生箇所近傍だけでなく機器全体を解析対象とする必要がある。そのため、計算負荷の観点から微視的な解析手法を直接用いることができない。このため、使用する熱流動解析コードには、化学反応によって生じる多相・多成分の反応性流体の挙動をモデル化し、相関式として組み込まなければならない。

反応性流体の挙動の内、相変化量・化学反応量は、反応の生じている界面の面積に依存しており、この面積は界面の形状により大きく変化する。しかしナトリウムー水反応における界面挙動に関し、まとまった知見は現在のところ得られていない。本件は、微視的・直接的な解析手法である粒子法を用いて、多相・多成分・反応性流体の挙動に対する機構論的解析手法を開発し、流動様式・界面濃度に関する知見を得ることを目的とする。

本年度は、次の作業を実施した。

- 1) 界面面積評価モデルの開発とプログラミング、
- 2) 相変化評価モデルの開発とプログラミング、
- 3) 機能確認解析と評価、および
- 4) 実験調査。

---

本報告書は株式会社東芝が核燃料サイクル開発機構との契約により実施した業務成果に関するものである。

機構担当部課室;大洗工学センター システム技術開発部 热流体技術開発グループ

\*東芝 電力・産業システム技術開発センター システム解析技術開発部

\*\*東芝アドバンストシステム

JNC TJ9400 2001-006

February 2001

Analysis of the flow with phase change and chemical reaction with the particle interaction method  
(Report under the contract between JNC and Toshiba Corporation)

Noriyuki SHIRAKAWA\* Hideki HORIE\* Yucihi YAMAMOTO\*\*

Abstract

The numerical thermohydraulic analysis of a LMFR component should involve its whole boundary in order to evaluate the effect of chemical reaction within it. Therefore, it becomes difficult mainly due to computing time to adopt microscopic approach for the chemical reaction directly. Thus, the thermohydraulic code is required to model the chemically reactive fluid dynamics with constitutive correlations.

The reaction rate depends on the binary contact areas between components such as continuous liquids, droplets, solid particles, and bubbles. The contact areas change sharply according to the interface state between components. Since no experiments to study the jet flow with sodium-water chemical reaction have been done, the goal of this study is to obtain the knowledge of flow regimes and contact areas by analyzing the fluid dynamics of multi-phase and reactive components mechanistically with the particle interaction method.

In this fiscal year, following works were performed:

- 1) Development and coding of the interfacial area model,
- 2) Development and coding of the phase change model,
- 3) Verification of the fundamental functions of the models, and
- 4) Literature investigation of the related experiments.

---

This work was performed by Toshiba Corporation under contract with Japan Nuclear Cycle Development Institute.

JNC Liaison: Thermalhydraulic Research Group, System Engineering Technology Division, O-arai Engineering Center

\* Core and Fuel Technology Group, Nuclear Engineering Laboratory, Toshiba Corporation

\*\* Toshiba Advanced Systems Corporation

粒子法を用いた相変化・化学反応を伴う流動解析・評価作業

2001年2月

目 次

要旨	(i)
Abstract	(ii)
目次	(iii)
図表リスト	(iv)
1.はじめに	1-1
2.界面面積評価モデルの開発	2.1-1
2.1 界面面積評価モデルの定式化	2.1-1
2.2 コーディングと機能検証	2.2-1
3.相変化評価モデルの開発	3.1-1
3.1 相変化評価モデルの定式化	3.1-1
3.2 コーディングと機能検証	3.2-1
4.調査検討	4-1
5.まとめ	5-1
謝辞	R-1
参考文献	R-1
付録 解析プログラムの説明	A-i
付録目次	A-ii

図リスト

図2. 1-1 sub-particle を持つ同種粒子が接近したときの扱い

図2. 1-2 親粒子間の接触

図2. 1-3 sub-particle の接触

図2. 1-4 sub-particle を考慮した粒子法の計算アルゴリズム

図2. 1-5 sub-particle 半径の計算、境界面積係数の評価のアルゴリズム(液体)

図2. 2-1 ガソリンプールへの水ジェットの噴射解析の解析体系とBCA評価用領域分割

図2. 2-2 caes1-0 の流動状態の変化( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮しない)

図2. 2-3 caes1-1 の流動状態の変化( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮)

図2. 2-4 caes2-0 の流動状態の変化( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 2 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮しない)

図2. 2-5 caes2-1 の流動状態の変化( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 2 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮)

図2. 2-6 ジェットの広がり角度の実験写真との比較( $u = 2.0 \text{ m/s}$ )

図2. 2-7 case1-0 の解析結果( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮しない)

図2. 2-8 case1-1 の解析結果( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮)

図2. 2-9 case2-0 の解析結果( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 2 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮しない)

図2. 2-10 case2-1 の解析結果( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 2 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮)

図2. 2-11 ジェットから分離した粒子のBCAの例

(case1-1、 $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $t = 0.2 \text{ s}$ 、 $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮)

図2. 2-12 case1-2 の解析結果( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $t = 0.3 \text{ s}$ 、 $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮、sub-particle 半径の平均操作無し)

図2. 2-13 case2-2 の解析結果( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $t = 0.3 \text{ s}$ 、 $\Delta = 2 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮、sub-particle 半径の平均操作無し)

図2. 2-14 2流体の相対速度とsub-particle 半径の関係

図2. 2-15 sub-particle 半径の分布(case1-1)

図3. 1-1 移行熱量の概念図

図3. 2-1 SWAT3/Run19 解析における水及び蒸気の流動状態

図3. 2-2 SWAT3/Run19 解析における水の体積率( $t = 0.008 \text{ s}$ )

図3. 2-3 SWAT3/Run19 解析における蒸気の体積率( $t = 0.008 \text{ s}$ )

図4-1 乾き蒸気中に置かれた銅球表面への蒸気凝縮実験の実験条件

図4-2 乾き蒸気中に置かれた銅球表面への蒸気凝縮実験での銅球の温度測定結果

図4-3 水プールへ蒸気を吹き込む実験の実験体系

図4-4 水プールへ蒸気を吹き込む実験の実験写真

## 1. はじめに

ナトリウムー水反応に代表される現象が高速炉を構成する機器に及ぼす影響を、伝熱流動数値実験により評価するには、反応の発生箇所のみならず機器全体を解析対象とする必要がある。このためには、相変化・化学反応を伴う多相・多成分の反応性流体の挙動を適切にモデル化し、解析コードに組み込む必要がある。

反応性流体の挙動の内、相変化量・化学反応量は、反応の生じている界面の面積に依存しており、この面積は界面の形状により大きく変化する。しかしながらナトリウムー水反応における界面挙動に関し、まとまった知見は現在のところ得られていない。本件は、微視的・直接的な解析手法である粒子法を用いて、多相・多成分・反応性流体の挙動に対する機構論的解析手法を開発し、流動様式・界面濃度に関する知見を得ることを目的とする。

ここで採用した手法は、越塚らが開発した粒子法[1-1, 1-2]をベースとして、これを多流体に拡張するとともに、それに伴い必要と考えられたいいくつかのモデル開発と計算アルゴリズムの工夫を行った手法[1-3～1-8]である。基本的手法については、[1-3～1-8]を参照されたい。

次に、粒子法を用いて水・ナトリウム反応を扱うための第一段階として、液体ジェットが他の液体プールに噴出する際の流体力学的挙動への粒子法の適用性を「ガソリンプールに水を噴出させる実験」を選び検討した[1-9]。その結果、2流体粒子法に基づく本手法により、ジェット流動様式を適切に扱うことができる事を確認した。一方、蒸気発生器内部の伝熱管水リーク事故では管群内のジェット流を解析することになる。このような複雑体系への本手法の適用性を検討するため、(旧)動燃で実施された SWAT3/Run19 試験[1-10, 1-11]を例として相変化・化学反応を含まない流体力学のみの予備解析を実施した[1-9]。この解析においても、計測された熱電対の応答から推定できる水ジェットの拡がり状況の再現性を確認することにより、伝熱管群を含む複雑体系においても高速ジェット流とプール流体との相互作用を考慮した流動挙動への適用性が確認できた。

しかしながら上記の解析においては、主として計算時間の制約から物理的に必要であると考えられる粒子サイズを用いることができなかった。そのため界面挙動に関する解像度が低下し、相変化や化学反応を取り扱う場合には変化量・反応量を適切に評価できない可能性があると考えられた。そのため、本件では計算粒子サイズ以下のスケールへの液滴の分裂現象を、粒子に作用する動圧（慣性力）、表面張力、粘性せん断力によって評価するモデルの開発を行った。

相変化過程についても、これまで東芝で開発および機能検証を実施してきた界面温度を

基準としたヒートフラックスに基づく非平衡伝熱律速モデルによる手法の、伝熱管群を含む複雑体系への適用性を検討した。

本報告書では、2. で界面面積評価モデルについて、3. で相変化評価モデルについて、4. で実験に関する調査について述べ、5. でまとめる。

## 2. 界面面積評価モデルの開発

### 2. 1 界面面積評価モデルの定式化

ジェットの挙動を考える上で重要な要素には、

- (i) liquid core からのブレイクアップ
- (ii) liquid core 近傍のスプレイの挙動
- (iii) ジェットから離れた部分での液滴のブレイクアップ

等があり、ジェット流動を解析するためには、粒子法に限らず、それらの評価精度が現象把握の鍵になると考えられる。

Na-水系のような化学反応を伴う流動では、相間の界面積がその解析に対して非常に重要な要素となってくる。既存のメッシュを用いる流動計算コードでは、相間の界面積は、実験相関式や境界面積の保存方程式を用いて求められているが、これらは一般的な垂直あるいは水平管内二相流（混相流）に対して適用されるべきものであり、本研究で扱うノズルから流出するジェットのような現象に対しては必ずしも適切であるとはいえない。

それに対して粒子法は、流動様式線図等に関する実験相関式を用いなくても流動様式を適切に表現できる手法である。しかしながら、実際には計算時間の制約から、粒子径をある程度大きくとらざるを得ないこと、粒子径より小さな液滴を扱う事ができない（粒子径が最小液滴径に相当すること等により、解析の解像度が低下し、流れの状況を適切に評価できなくなる可能性がある）。本解析の対象とする物理現象では、ジェットの模擬に用いる粒子数が少ないため上述した(i)liquid core からのブレイクアップ自体を詳細に表現することは困難である。そもそも liquid core のブレイクアップは、Kelvin-Helmholtz 不安定性によって liquid core と周囲の流体との相対速度によって生じるものであるため、粒子数さえある程度確保することができれば、評価可能であると考えられる。しかしながら、liquid core 近傍のスプレイ挙動およびそのブレイクアップ挙動に関して、液滴の分裂を現象に即して表現するためには膨大な粒子数を必要とするため、何らかの対策が必要となる。

本研究では、液滴の分裂等の実験式を併用したモデルを考察する。

このモデルでは、計算で扱う粒子を親粒子とし、親粒子は流体力学的不安定性により分裂して親粒子より小さくなり得るものとするが、分裂液滴は親粒子の中に存在しているものとして運動は親粒子と同じものであるとして扱うこととする。

#### (1) 気泡および液滴の分裂

ジェットの研究を行う上で液滴の分裂挙動を理解することは本質的に重要である。分裂メカニズムは実験・理論両面から研究され、液滴表面を流れるガスが液滴表面に対して非均一な法線方向

の動圧を及ぼし、結果的に液滴の歪みを引き起こすことが明らかになった。動圧が液体の表面張力や粘性せん断力をしのぐ程度になると、液滴に十分な歪みが生じ、結果的に分裂する。現在では、液滴の分裂は動圧（慣性力）、表面張力、粘性せん断力によって支配されていると結論づけられている。

### (1-1) 気泡の分裂

さまざまな実験結果より、気泡や液滴の変形は慣性力と表面張力の比である Weber 数(We)がある値になったとき、分裂に至ることが分かっている[2-1]。この気泡や液滴が分裂するときの Weber 数を臨界 Weber 数と呼び、次式で定義されている。

$$We_{cr} = \frac{\rho_c (d_{eq})_{\max} (u_c - u_d)^2}{\sigma} \quad (2.1-1)$$

ここで、 $(u_c - u_d)$ は連続相成分と分散相成分の相対速度、 $(d_{eq})_{\max}$ は液滴の最大等価直径、 $\rho_c$ は連続相の密度、 $\sigma = |\sigma_c - \sigma_d|$ は表面張力係数である。また、添字 c は連続相成分を、d は分散相成分を示す。

Hinze[2-2]はそれらの実験結果から、粘性の効果を考慮して臨界 Weber 数が分散相の粘性の関数で表されると仮定し、

$$We_{cr} = We_{cr}|_{\mu=0} [1 + f(N_{\mu d})] \quad (2.1-2)$$

とした。ここで、 $N_{\mu d}$  は、

$$N_{\mu d} = \frac{\nu_d^2}{\rho_d (d_{eq})_{\max} \sigma} \quad (2.1-3)$$

で表される分散相の粘性に基づく無次元数である。また、 $We_{cr}|_{\mu=0}$  は分散相成分の粘性の効果がないときの臨界 Weber 数の値、 $\rho_d$  は分散相成分の密度、 $\nu_d$  は分散相成分の動粘性係数である。

(2.1-3)式の  $N_{\mu d}$  の平方根( $N_{\mu d})^{1/2}$  は、Ohnesorge 数(On)あるいは Z 数とも呼ばれる。

$f(N_{\mu d})$  は次式の Brodkey による表式が実験値とよい一致を得ている。

$$We_{cr} = We_{cr}|_{\mu=0} + 14N_{\mu d} \quad (2.1-4)$$

以上より、

$$\frac{\rho_c (d_{eq})_{\max} (u_c - u_d)^2}{\sigma} = We_{cr}|_{\mu=0} + 14 \frac{\mu_d^2}{\rho_d d_{\max} \sigma} \quad (2.1-5)$$

ここで、 $d_{eq} = 2r_{eq}$  として平衡半径  $r_{eq}$  について解くと、

$$r_{eq} = \frac{\sigma}{4\rho_c(u_c - u_d)^2} We_{cr}|_{\mu=0} + \sqrt{\left\{ \frac{\sigma}{4\rho_c(u_c - u_d)^2} We_{cr}|_{\mu=0} \right\}^2 + \frac{7}{2} \frac{\mu_d^2}{\rho_c \rho_d (u_c - u_d)^2}} \quad (2.1-6)$$

上式において粘性項の効果を調節するパラメータ  $C_1$  を考慮すると、次式のようになる。

$$r_{eq} = \frac{\sigma}{4\rho_c(u_c - u_d)^2} We_{cr}|_{\mu=0} + \sqrt{\left\{ \frac{\sigma}{4\rho_c(u_c - u_d)^2} We_{cr}|_{\mu=0} \right\}^2 + \frac{7}{2} C_1 \frac{\mu_d^2}{\rho_c \rho_d (u_c - u_d)^2}} \quad (2.1-7)$$

ここで、 $We_{cr}|_{\mu=0}$  は、およそ 13 である。

### (1-2) 液滴の分裂

液滴が分散粒子の場合も同様に、(2.1-7)式によって平衡半径は定義される。しかしながら、気泡の分裂の場合、気泡はより小さい気泡を生成する多段階の分裂過程のみによって支配されるが、液滴の分裂の場合、流れ場との間の相対速度を減少させるように分裂片が加速される効果が現れるため、Pilch and Erdman[2-3]はそれら 2 つの効果を考慮することによって、液滴の最大安定直径の評価方法を次式のように定義した。

$$d_{eq}^{\max} = We_{cr} \frac{\sigma}{\rho_c(u_c - u_d)^2} \left(1 - \frac{u_d}{u}\right)^{-2} \quad (2.1-8)$$

液-液系の場合において、

$$\frac{u_d}{u_c \varepsilon^{0.5}} = \frac{\frac{3}{4} C_d T}{1 + \frac{3}{4} C_d \varepsilon^{0.5} T} \quad (2.1-9)$$

ここで、

$$\varepsilon = \frac{\rho_c}{\rho_d} \quad (2.1-10)$$

とすると、(2.1-8)式は、

$$d_{eq}^{\max} = We_{cr} \frac{\sigma}{\rho_c(u_c - u_d)^2} \left(1 - \frac{\frac{3}{4} C_d \varepsilon^{0.5} T}{1 + \frac{3}{4} C_d \varepsilon^{0.5} T}\right)^{-2} \quad (2.1-11)$$

(2.1-11)式において、実験結果より、

$$T \approx 6 \quad (2.1-12)$$

として、

$$\frac{3}{4} C_d T = 10 \quad (2.1-13)$$

とすると、

$$d_{eq}^{\max} = We_{cr} \frac{\sigma}{\rho_c (u_c - u_d)^2} \left( 1 - \frac{10\varepsilon^{0.5}}{1+10\varepsilon^{0.5}} \right)^{-2} \quad (2.1-14)$$

よって、次式となる。

$$r_{eq}^{\max} = \frac{We_{cr}}{2} \frac{\sigma}{\rho_c (u_c - u_d)^2} \left( 1 - \frac{10\varepsilon^{0.5}}{1+10\varepsilon^{0.5}} \right)^{-2} \quad (2.1-15)$$

従って、平衡半径は、

$$r_{eq} = \min(r_{eq}^{\max}, r_{eq}) \quad (2.1-16)$$

また、平衡半径は分裂過程において前ステップより大きくなることはないものとする。

## (2) 粒子法への適用

### (2-1) 微粒化の導入

微粒化とは、ある成分粒子が粒子法で定義される粒子径以下に分裂することを意味する。ここでは、微粒化した液滴粒子を sub-particle と呼ぶことにする。ある粒子の周囲に異種粒子のみ存在し同種粒子が存在しない場合、それは孤立した粒子であると判断され、(1) で示した流体力学的不安定性による分裂の評価が行われ、分裂の過程が計算される。

その際の粒子のサイズは(2.1-7)、(2.1-15)式によって評価され、他種粒子との接触界面積  $BCA(x_{ij})'$  は以下のように計算される。

昨年度の検討では 2 粒子間の界面積(BCA)は次のように定義した。

$$BCA(x_{ij}) = \frac{A^0}{n^0} w(|x_j - x_i|) \quad (2.1-17)$$

ここで、

$$\sum BCA(x_{ij}) = \frac{A^0}{n^0} \sum_{j \neq i} [w(|x_j - x_i|)] = A^0 \quad (2.1-18)$$

ここで、  $A^0 = 4\pi\Delta^2$ 、  $\Delta$  : 粒子径 (初期配置粒子間隔)、

$n^0$  : 初期粒子数密度

$w(|x_j - x_i|)$  : カーネル関数、  $x_i$ ,  $x_j$  : 粒子位置ベクトル、  $x_{ij}$  : 粒子間距離ベクトル

(2.1-18)式は任意の粒子の相互作用半径内に存在する他粒子との面積の総和が、その粒子の表面積に相当することを意味している。例えば、2 相状態において、ある粒子の周りに存在する同種粒子の数密度がある値以下になった場合、その粒子は孤立しているものと判断し、その半径を  $\Delta$  とすると、2 粒子間の界面積は(2.1-17)式で評価される。

液滴の半径が  $\Delta$  よりも小さい半径  $r_d$  ( $< \Delta$ ) の液滴へ分裂する流体力学的条件を満たす場合、この  $\Delta$  内の領域での分裂を考える。この場合、半径が  $\Delta$  の粒子を親粒子とすると、その sub-particle

が属する親粒子 i と、その周囲に存在し粒子 i と同様に微粒化した sub-particle を含んだ他粒子 j の間の境界面積  $BCA(x_{ij})'$  は、次のように定義されるものとする。

$$BCA(x_{ij})' = BCA(x_{ij}) \left( \frac{\Delta_i}{r_{eq,i}} \right) \left( \frac{\Delta_j}{r_{eq,j}} \right) \quad (2.1-19)$$

ただし、半径  $r_d$  は親粒子の半径  $\Delta$  以上にも、最小半径（入力） $r_{min}$  以下にもならないものとする。

なお、sub-particle は仮想的なものであり、粒子法における粒子の運動の計算自体はオリジナルのサイズに対して行われる。

## (2-2) 粒子の分裂モデルの適用

(1) で検討した分裂の定義を粒子法に適用する。

(2.1-7)式によって分裂粒子である sub-particle の半径は決定されるが、(2.1-7)式は粒子間の速度差の関数になっており、これを相互作用半径内に存在する他種粒子との間で考慮しなければならない。周囲に存在する他種粒子との距離は重み関数によって考慮される。

分散成分粒子である自粒子 i と周囲の連続成分である他種粒子 j の速度をそれぞれ  $u_i$ 、 $u_j$  とすると、(2.1-7)式から計算される sub-particle の半径は、

$$r_{ij,eq} = \frac{|\sigma_j - \sigma_i|}{4\rho_j(u_j - u_i)^2} We_{cr}|_{\mu=0} + \sqrt{\left( \frac{|\sigma_j - \sigma_i|}{4\rho_j(u_j - u_i)^2} We_{cr}|_{\mu=0} \right)^2 + \frac{7}{2} C_1 \frac{\mu_i^2}{\rho_j \rho_i (u_j - u_i)^2}} \quad (2.1-20)$$

また、液-液系における  $r_{eq}^{max}$  も同様に(2.1-15)式より、

$$r_{ij,eq}^{max} = \frac{We_{cr}}{2} \frac{\sigma}{\rho_j(u_j - u_i)^2} \left( 1 - \frac{10\varepsilon^{0.5}}{1+10\varepsilon^{0.5}} \right)^{-2} \quad (2.1-21)$$

ここで、

$$\varepsilon = \frac{\rho_j}{\rho_i} \quad (2.1-22)$$

式 (2.1-21)における臨界 Weber 数  $We_{cr}$  は式(2.1-1)で与えられているが、粒子法においては次式で表現する：

$$We_{cr} = \frac{\rho_j (d_{eq})_{max} (u_j - u_i)^2}{\sigma} \quad (2.1-23)$$

ここで、最大等価直径としては、

$$(d_{eq})_{max} = 2r_{ij,eq} \quad (2.1-24)$$

を用いる。以上より、液-液系の最終的な sub-particle の半径は、

$$r_{ij,eq} = \min(r_{ij,eq}^{max}, r_{ij,eq}) \quad (2.1-25)$$

で与えられる。

自粒子 i の相互作用半径内に n 個の他種粒子が存在すると、この影響による sub-particle の半径  $r_{i,eq}$  は、次式のようになる。

$$r_{i,eq} = \frac{1}{n^0} \sum_{j=1}^n r_{i,j,eq} w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \quad (2.1-26)$$

なお、計算上用いる sub-particle の半径は、

$$r_{min} \leq r_{eq} \leq r_{max} \quad (2.1-27)$$

を満たすものとする。ここで、 $r_{min}$ 、 $r_{max}$  は入力で指定する。

Sub-particle の半径が決まると、境界面積が定義され、粒子間の運動量や熱の移行量が評価できるようになる。

#### (2-4) 親粒子の運動による sub-particle の扱いについて

##### (i) sub-particle を持つ同種粒子同士が接近した場合

ここでは同種粒子同士の衝突の扱いについて述べる。本来、sub-particle 同士の合体の効果を考慮すべきであるが、ここでは以下のように簡易に扱う。ここで言う“接近”とは親粒子同士が相互作用半径内に位置していることを意味する。

まず、2つの粒子が接近する場合を考え、このとき両粒子の sub-particle の半径は等しくなるものとする。粒子 i、j の半径をそれぞれ  $\Delta$ 、またそれら粒子の sub-particle の半径を  $r_i$ 、 $r_j$  とする。

粒子 i 中の sub-particle の個数  $n_i$  は、

$$n_i = \frac{\frac{4}{3}\pi\Delta^3}{\frac{4}{3}\pi r_i^3} = \left(\frac{\Delta}{r_{i,eq}}\right)^3 \quad (2.1-28)$$

粒子 j 中の sub-particle の個数  $n_j$  も同様に、

$$n_j = \left(\frac{\Delta}{r_{j,eq}}\right)^3 \quad (2.1-29)$$

接近したときに新たに定義される半径  $\bar{r}_{(i,j),eq}$  は、両者の半径が大きく異なっている場合、単純に算術平均を行うと大きい半径側に偏るので、両者の対数平均をとる。

$$\log \bar{r}_{(i,j),eq} = \frac{\log r_{i,eq} + \log r_{j,eq}}{2} \quad (2.1-30)$$

よって、

$$\bar{r}_{(i,j),eq} = (r_{i,eq} \cdot r_{j,eq})^{1/2} \quad (2.1-31)$$

## (ii) カーネル関数の効果を考慮した場合

自粒子 i と、その相互作用半径  $r_e$  内に入ってきた粒子 j の相互作用は半径  $r_e$  に依存するため、その効果を(2.1-30)式に導入する。2次曲線型カーネル関数の値は自粒子の中心を 1 として相互作用半径の位置で 0 になるように滑らかに変化するため、粒子 i, j の位置が重なったとき(2.1-30)、(2.1-31)式を満たすように、かつ、相互作用半径以上離れた位置で他粒子の効果が 0 になるように再定義すると(2.1-30)式は次式のようになる（図 2. 1 - 1）。

$$\log \bar{r}_{(i,j),eq} = \left\{ 1 - \frac{w(|r_j - r_i|)}{2} \right\} \log r_{i,eq} + \frac{w(|r_j - r_i|)}{2} \log r_{j,eq} \quad (2.1-32)$$

$$\bar{r}_{(i,j),eq} = r_{i,eq}^{\left\{ 1 - \frac{w(|r_j - r_i|)}{2} \right\}} r_{j,eq}^{\frac{w(|r_j - r_i|)}{2}} \quad (2.1-33)$$

## (iii) 相互作用半径内に複数の粒子が存在する場合

相互作用半径内に自粒子以外に n 個の同種粒子が存在する場合に (2.1-30)式を拡張する。ここでは単純に n+1 個の和として対数平均をとることにする。

$$\log \bar{r}_{i,sum(n)} = \frac{1}{n+1} (\log r_{i,eq} + \log r_{1,eq} + \log r_{2,eq} + \dots + \log r_{n,eq}) \quad (2.1-34)$$

従って、カーネル関数を考慮した形式では次式となる。

$$\begin{aligned} \log \bar{r}_{i,sum(n)} &= \left[ \left\{ \frac{1}{n} - \frac{w(|r_1 - r_i|)}{n+1} \right\} \log r_i + \frac{w(|r_1 - r_i|)}{n+1} \log r_1 \right] \\ &\quad + \left[ \left\{ \frac{1}{n} - \frac{w(|r_2 - r_i|)}{n+1} \right\} \log r_i + \frac{w(|r_2 - r_i|)}{n+1} \log r_2 \right] \\ &\quad + \dots + \left[ \left\{ \frac{1}{n} - \frac{w(|r_n - r_i|)}{n+1} \right\} \log r_i + \frac{w(|r_n - r_i|)}{n+1} \log r_n \right] \end{aligned} \quad (2.1-35)$$

## (2-5) 運動量拡散の評価

これまでに述べたように粒子間の境界面積が評価された。従来、粒子法における運動量拡散項は次式のように扱ってきた。

$$D_i = \nu_i \nabla^2 u_i = C \nu_i \sum_{j \neq i} [(u_i - u_j) w(|r_j - r_i|)] \quad (2.1-36)$$

$\nu_i$  は動粘性係数、C は解析空間の次元等によって決まる係数である。Sub-particle を考慮した場

合には、粒子間の境界面積が増加するため、(2.1-36)式に(2.1-19)式から求められる境界面積の比、

$$\text{ratio\_BCA}(x_{ij}) = \frac{\text{BCA}(x_{ij})'}{\text{BCA}(x_{ij})} = \left( \frac{\Delta_i}{r_{eq,i}} \right) \left( \frac{\Delta_j}{r_{eq,j}} \right) \quad (2.1-37)$$

を乗することによって評価する。従って、(2.1-36)式は、

$$D_i = \nu_i \nabla^2 u_i = C \nu_i \sum_{j \neq i} [(u_i - u_j) w(|r_j - r_i|)] \text{ratio\_BCA}(x_{ij}) \quad (2.1-38)$$

図2. 1-2に示すように、粒子i, jが相互作用半径内に存在し、粒子iにはその半径 $r_i$ が $1/2\Delta$ のsub-particleが8個、粒子jにはその半径 $r_j$ が $1/4\Delta$ のsub-particleが64個含まれているような状況を考える。図2. 1-3(a)にはオリジナルの粒子径 $\Delta$ の $1/2$ の半径を持つ粒子を親粒子として考えた場合、図2. 1-3(b)には同様に $1/4\Delta$ の半径を持つ粒子を親粒子として考えた場合の状況を示す。図2. 1-2で考える空間には、図2. 1-3(a)で示す半径 $1/2\Delta$ の粒子は（オリジナルの粒子に対して体積が $1/8$ であるため粒子が均一に存在していると考えると）8倍存在できることは明らかである。しかしながら、粒子の表面積は上述したように2倍であるため、同じ体積空間では接触面積が2倍になると考えられる。同様に、図2. 1-3(b)で示す場合も体積的には同一であるが、表面積比は4倍であるため、接触面積は4倍になると考えられる。従って、(2.1-37)式に示すように、この場合 ratio\_BCA は $2 \times 4 = 8$ となり、(2.1-38)式で示す拡散項の大きさが単なる親粒子同士の接触の場合の8倍になると仮定する。

### (3) sub-particle を考慮した粒子法アルゴリズム

熱計算を行わない粒子法における、sub-particle を考慮した計算アルゴリズムを図2. 1-4に示す。ここで、新たに追加された部分は、(1) sub-particle 半径の計算、境界面積係数の評価、(2) 拡散係数の計算の2つである。

(1) に関する詳細なアルゴリズムを以下に説明する。例として、液体粒子に関する量を求めるルーチンを図2. 1-5に示す。近傍に同種粒子が存在しない場合は、sub-particle 半径の計算を行う。このとき、sub-particle 半径は前回値より大きくはならないとする。近傍に同種粒子が存在する場合は sub-particle 半径の計算は行わず、同種粒子間での sub-particle 半径の対数平均を計算する。対数平均に用いる sub-particle 半径は前回のタイムステップでの値である。

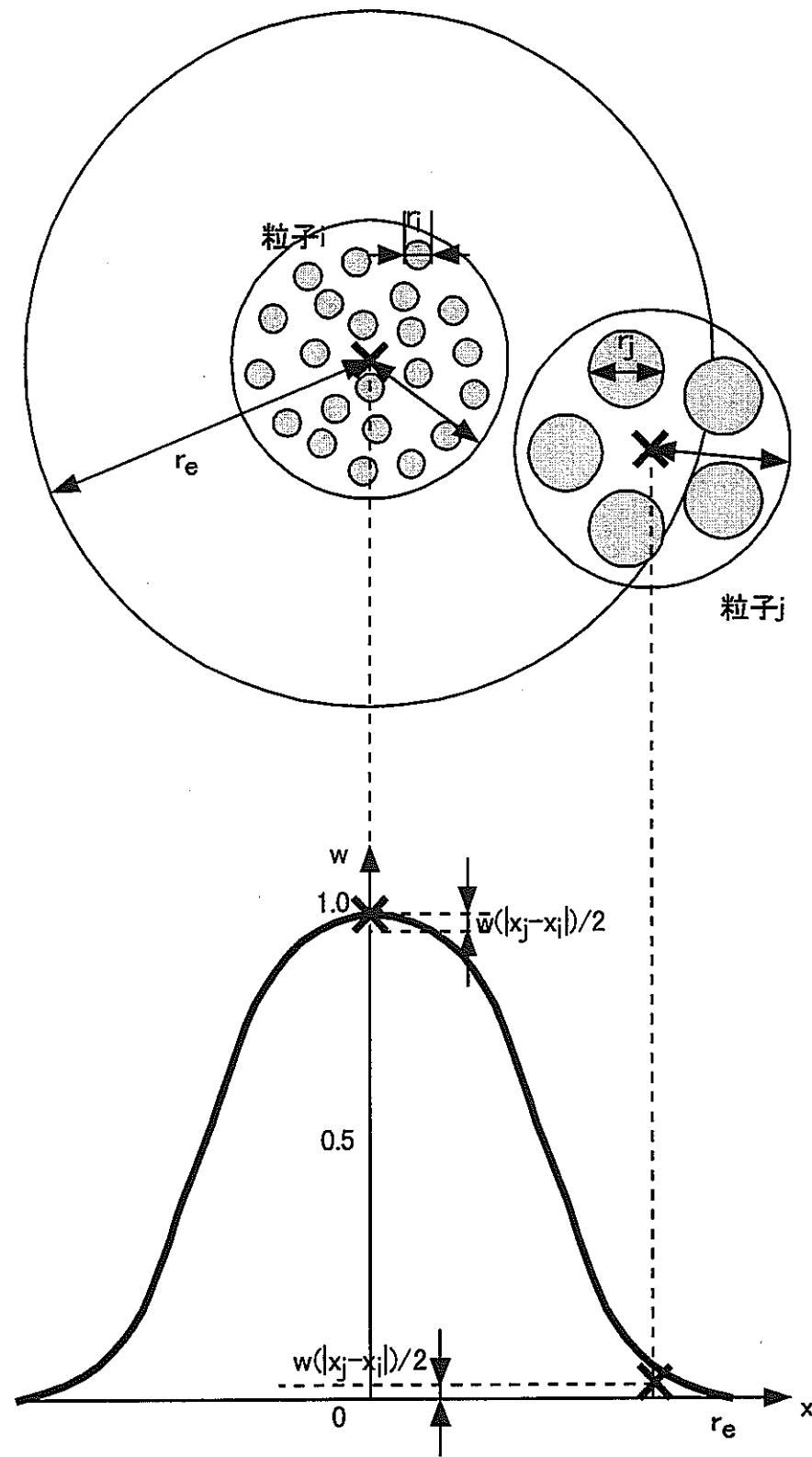
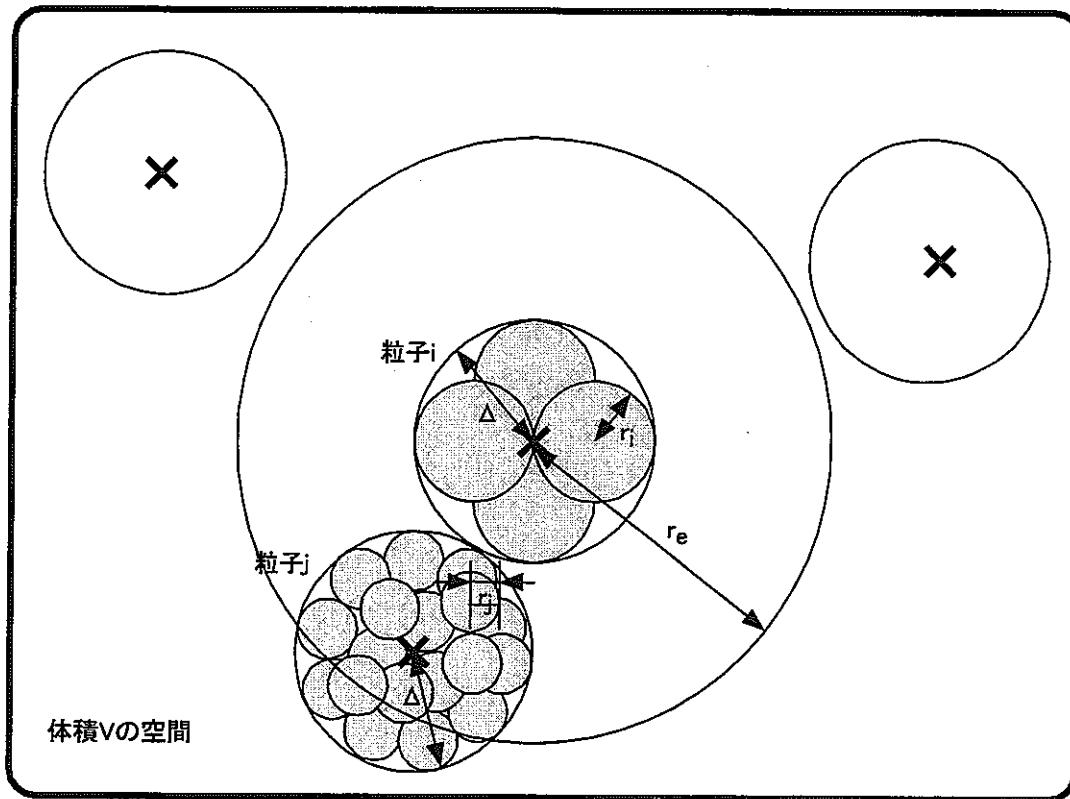


図2. 1-1 sub-particleを持つ同種粒子が接近したときの扱い



親粒子の半径  $\Delta$

粒子 i のsub-particleの半径  $r_i$  ( $= 1/2 \Delta$ )

粒子 j のsub-particleの半径  $r_j$  ( $= 1/4 \Delta$ )

図 2. 1 - 2 親粒子間の接触

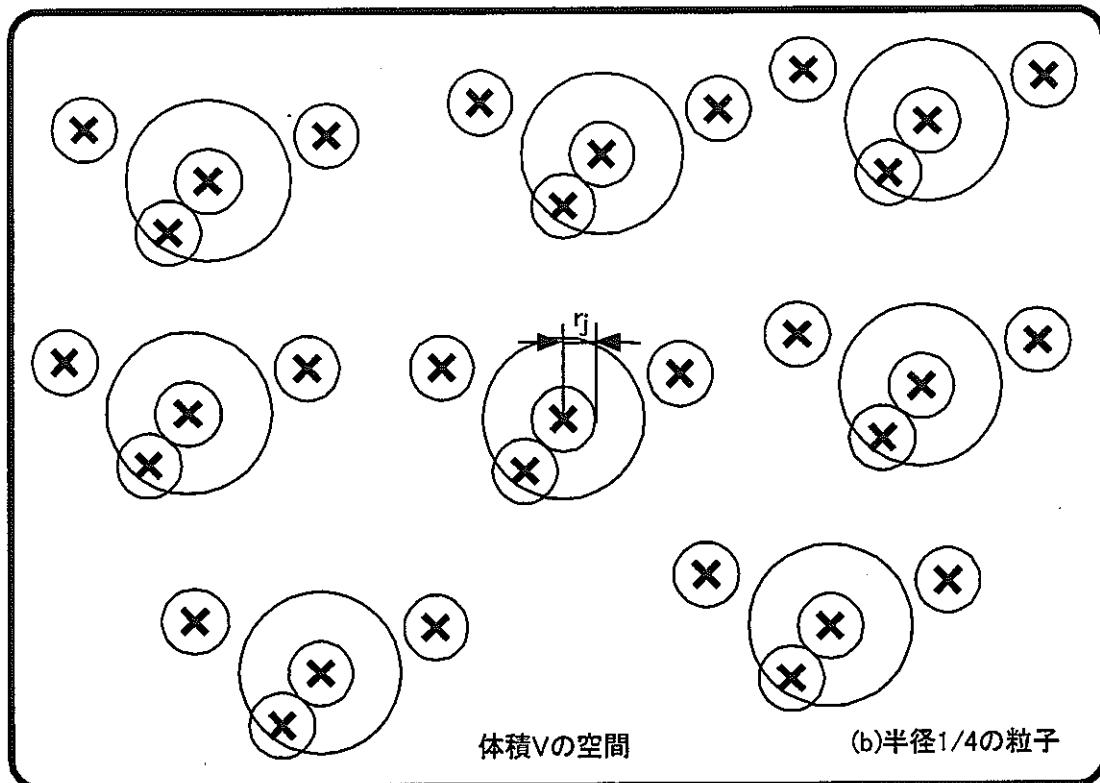
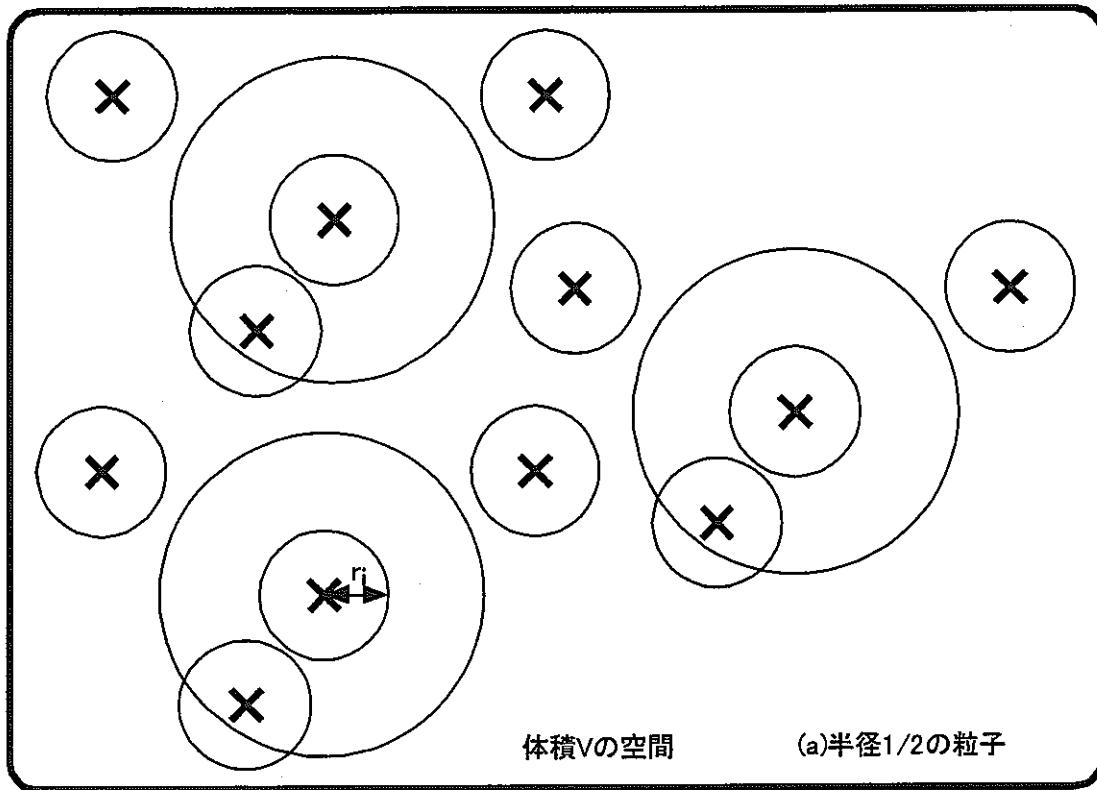


図2. 1-3 sub-particle の接触

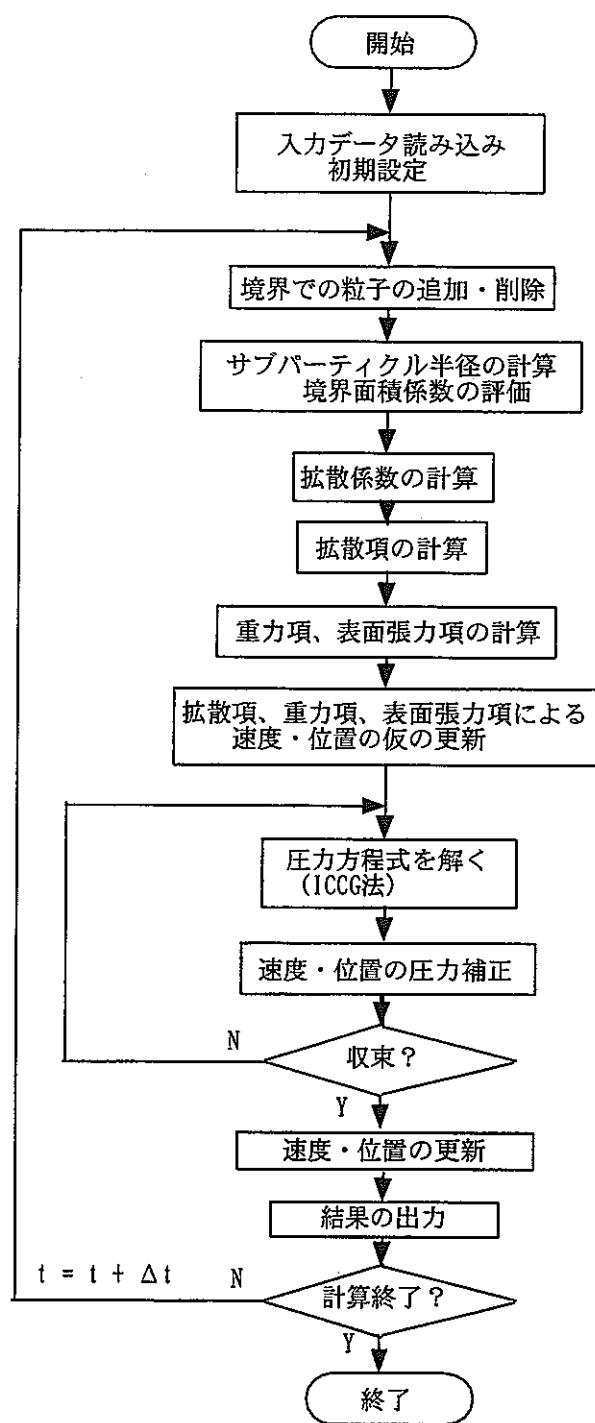


図2. 1-4 sub-particle を考慮した粒子法の計算アルゴリズム

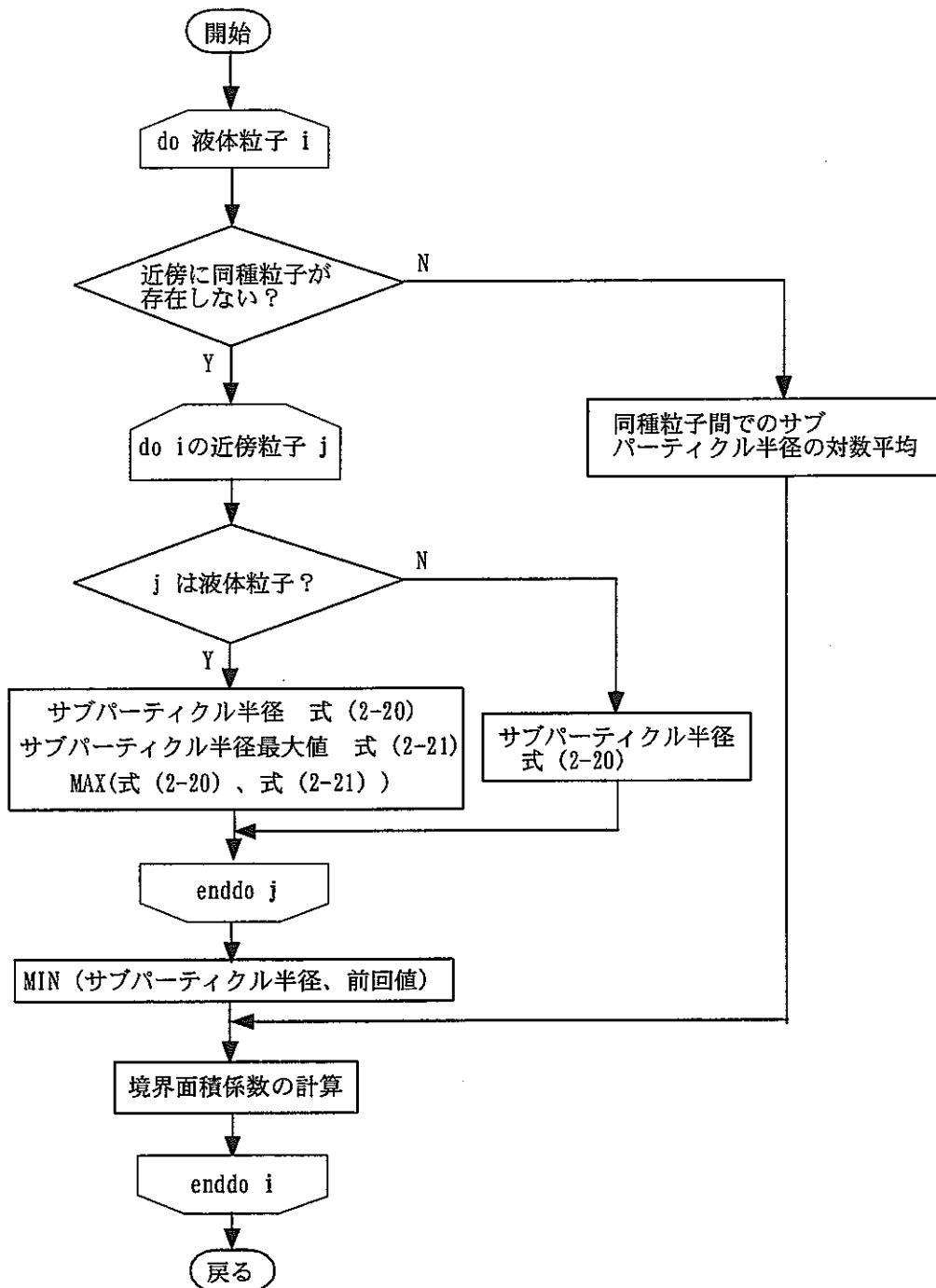


図2. 1-5 sub-particle 半径の計算、境界面積係数の評価のアルゴリズム（液体）

## 2. 2 コーディングと機能検証

2. 1で示した sub-particle モデルの定式化をコーディングしたコードの機能検証解析を実施した。対象は前年度に実施したガソリンプールに水を吹き込む実験とした[1-9]。この解析は相変化や化学反応過程を含まないので sub-particle モデルを考慮した BCA の影響は流体力学過程において拡散項の増大としてのみ現れる。以下では、sub-particle を考慮することが解像度の向上にどう結びついているかを検討するために、次の 2 点を検討する。

- ①ジェットの広がり角度の実験再現性
- ②異なる初期粒子間隔を用いた解析で得られる BCA の比較

水ジェットの流速が 2.0 m/s のケースを例として初期粒子間隔が 1 mm と 2 mm のケースに対して、以下の条件での解析を実施した。初期粒子間隔 2 mm はノズル径と同じ長さであり、粒子間隔としては大きすぎるが、初期粒子間隔 0.5 mm として同じ解析サイズの計算を行うと全粒子数が約 20 万となり現状では計算困難であることから、ここでは初期粒子間隔を 1 mm と 2 mm とした。

case1-0 初期粒子間隔 1 mm、sub-particle を考慮しない

case1-1 初期粒子間隔 1 mm、sub-particle を考慮する

case2-0 初期粒子間隔 2 mm、sub-particle を考慮しない

case2-1 初期粒子間隔 2 mm、sub-particle を考慮する

また、比較のため sub-particle モデルにおいて近傍同種粒子間の sub-particle 半径の平均操作を行わないケースも実施し、平均操作の影響を評価した。

case1-2 初期粒子間隔 1 mm、sub-particle を考慮する、sub-particle 半径の平均操作無し

case2-2 初期粒子間隔 2 mm、sub-particle を考慮する、sub-particle 半径の平均操作無し

解析体系を図 2. 2-1 に示す。同図(a)は計算領域とサイズを示す。用いた粒子数は、

初期粒子間隔	流体（水+ガソリン）	構造体
1 mm	16,532	8,044
2 mm	2,907	2,023

である。

図 2. 2-1 (b)はジェットの体積率分布や境界面積を評価するための計算領域の空間分

割を示す。水平断面では半径差が 1mm の同心円に、鉛直方向 (+Z 方向) には 2 mm 間隔で分割した。ただし、初期粒子間隔 2 mm のケースでは半径差は 2 mm とした。解析体系のサイズや領域分割は前年度実施の解析（初期粒子間隔は 1 mm）と同じである。

境界条件に関しては前年度と同様であり、プール液体とジェット液体とともに非圧縮性として扱うため、計算体系内の粒子数が保存するように設定する。すなわち、水ジェットの計算領域への侵入にしたがって上部からガソリン粒子を全粒子数（ガソリン+水）を保存するように取り去る。また、計算領域の下端に達した水粒子は計算から除外する。速度の圧力補正も前年度に採用したジェットの運動量拡散の増大を抑制する方法を用いている。

水とガソリンの質量密度はそれぞれ  $1000 \text{ kg/m}^3$ 、 $787 \text{ kg/m}^3$ 、sub-particle 半径の計算で用いた表面張力係数は水  $72.5 \text{ mN/m}$ 、ガソリン  $24.5 \text{ mN/m}$  である。粘性の効果がないときの臨界 Weber 数は  $We_{cr}|_{\mu=0} = 13$ 、粘性項の効果を調節するパラメータは  $C_1 = 1$  を用いた。

図 2. 2-2～図 2. 2-5 にそれぞれ case1-0、case1-1、case2-0、case2-1 の流動状況の時系列変化を示す。図では 0.02 s から 0.04 s 刻みで 0.30 s までを示した。計算結果はガソリン粒子を除いて水粒子だけを 3 次元で見たものである。

- ・初期粒子間隔 1 mm のケース (case1-0、case1-1) では sub-particle モデルを考慮してもジェットの広がり角度はほとんど変化がないことが分かる。
- ・初期粒子間隔 2 mm のケース (case2-0、case2-1) は初期粒子間隔が大きいためノズル直下でのジェットの広がりが小さくなっているが、全体的な水粒子の広がり角度は初期粒子間隔 1 mm の場合と大差はない。
- ・ただし、sub-particle モデルを考慮した場合 (case2-1) はしない場合 (case2-0) に比べてやや広がり角度が小さくなっている。これは、sub-particle モデルによりジェット粒子とプール粒子の間の運動量拡散が大きくなつたためであると考えられる。
- ・さらに、case1-2 の 0.3 s に見られるように、運動量拡散増大の効果により一時的にジェットが細くなる現象も起きている。

図 2. 2-6 に実験写真との比較を 0.18 s と 0.30 s を例として示した。同図上段の一番左が実験写真であり、およそそのジェットの広がりを示す線を引いてある。この広がりを示す線を解析結果の図にも重ねて描いてある。

- ・case1-0 と case1-1 におけるジェットの広がりはともに実験とほぼ同程度となっていることが分かる。

- case2-0 と case2-1においては粒子径が大きくジェットから分離してしまっている粒子もあるが、ジェットの広がり角度としては実験結果程度の値となっている。

次に、BCA 等の結果を示す。case1-0、case1-1、case2-0、case2-1 の結果をそれぞれ図 2. 2 - 7～図 2. 2 - 10 に示した。結果は時刻 0.1、0.2、0.3 s に対して物理量のコンター図を示した。以下の説明において境界面積を増加させる係数  $\Delta/r_{eq}$  を増加係数と呼ぶ。それぞれの図において、(a)水の体積率、(b)ガソリンの体積率、(c)BCA（増加係数無し）、(d)水とガソリンの増加係数の積、(e)BCA（増加係数有り）、(f)水の増加係数、(g)ガソリンの増加係数、である。ただし、case1-0 と case2-0 については(a)～(c)まで示した。

(a)、(b)の体積率は図 2. 2 - 1(b)に示した各分割領域内での水粒子とガソリン粒子の数から計算した量である。(c)の BCA（増加係数無し）は全ての水粒子とガソリン粒子のペアに対しその中間点に式(2.1-17)で定義される BCA が存在するとして BCA の空間分布を計算し、各領域内で和をとったものである。(d)の増加係数の積は、式(2.1-19)や式(2.1-37)に現れる

$\left(\frac{\Delta_i}{r_{eq,i}}\right)\left(\frac{\Delta_j}{r_{eq,j}}\right)$  である。この積は BCA と同様に、粒子 i と j の中点にあるとしている。また、

i と j が異なる液体（水またはガソリン）の場合のみが考慮されている。よって、値が存在する領域は BCA が存在する領域と同じである。(e)の BCA（増加係数有り）は(c)と同様の方法で式(2.1-19)で定義される BCA を評価したものである。(f)、(g)の増加係数はそれぞれ水、ガソリンに対して、各粒子の位置に増加係数が分布しているとして増加係数の空間分布を考え、各領域内での平均値を計算したものである。これらは、sub-particle 半径の空間分布を増加係数の形式で表示したものに相当する。

すべてのケースで体積率分布は妥当な値と思われるが、比較できる実験はない。初期粒子間隔 1 mm のケースにおける BCA の結果に関しては、拡散項の sub-particle モデルによる増加の影響を見るために図 2. 2 - 7(c)と図 2. 2 - 8(c)を比較すると、0.2 s 程度までは両者でほとんど差が無いことが分かる。次に、増加係数の効果を見るために、図 2. 2 - 8(c)と図 2. 2 - 8(e)を比較しても、BCA に差はほとんどない。これは、増加係数の積（図 2. 2 - 8(d)) が一部のピークを除いてほぼ 1 であることからも分かる。初期粒子間隔 2 mm の場合も拡散項増加の影響は少ない。このことは、図 2. 2 - 9(c)と図 2. 2 - 10(c)に示した増加係数無しの BCA を比較するとノズル直下ではほぼ等しい値であり、 $z \geq 0.025$  m のジェットが広がった領域でも時刻により変化するものの平均としてはほぼ同程度の値となっていることから分かる。ところが、BCA に対する sub-particle モデルの影響は顕著にな

っている。図 2. 2-10(d)に示した増加係数は体系下端付近で数 10 程度の値となっているので、増加係数を乗じてある図 2. 2-10(e)に示した BCA は体系下端付近で大きなピークを持つ分布となっている。

一方、初期粒子間隔による BCA の違いに注目すると、図 2. 2-7(c)と図 2. 2-10(c)の比較より、sub-particle モデルを考慮しない BCA はノズル直下において初期粒子間隔が 1 mm に比べて 2 mm の場合がほぼ 2 倍の値となっている。これは、この領域のようにノズルから噴射された水粒子が半径方向にあまり広がっていない場合、初期粒子間隔が 2 mm の場合は 1 mm に比べて水粒子とガソリン粒子のペアーナンバーは約半分であるが、係数  $A^0 = 4\pi A^2$  ののは 4 倍になっているからである。

粒子ペアーナンバーの大きな変化は、ノズル径が 2 mm に対して初期粒子間隔 2 mm が大きすぎることが原因であり、小さい初期粒子間隔を用いれば異なる値に対しても粒子ペアーナンバーは同程度の数となる。

一方、 $z \geq 0.025 \text{ m}$  での BCA の値は計算初期の 0.1 s では同程度であるが、以後 0.2 s, 0.3 s では初期粒子間隔が 2 mm の場合が 30~40% 小さくなっている。初期粒子間隔が 2 倍になってもこの程度の差しか現れないのは、(粒子間隔が 2 倍になると) ある体積内の水粒子とガソリン粒子のペアーナンバーが約 1/4 になる一方、係数  $A^0 = 4\pi A^2$  が 4 倍になるからであり、BCA の定義式の妥当性を示している。次に、sub-particle モデルを考慮した場合を比較すると、初期粒子間隔 1 mm の場合は sub-particle モデルを考慮しない場合と変化は無いが、2 mm の場合は図 2. 2-10(e)に示したように  $z \geq 0.025 \text{ m}$  でのジェットが広がった領域での BCA は増加係数の影響により大きな値となり、絶対値としては 1 mm の場合より 3~4 倍となっている。しかし、空間全体の BCA の分布形状は 1 mm の場合と近くなっているといえる。

ここで、ジェットから分離した水粒子の増加係数と BCA について補足する。

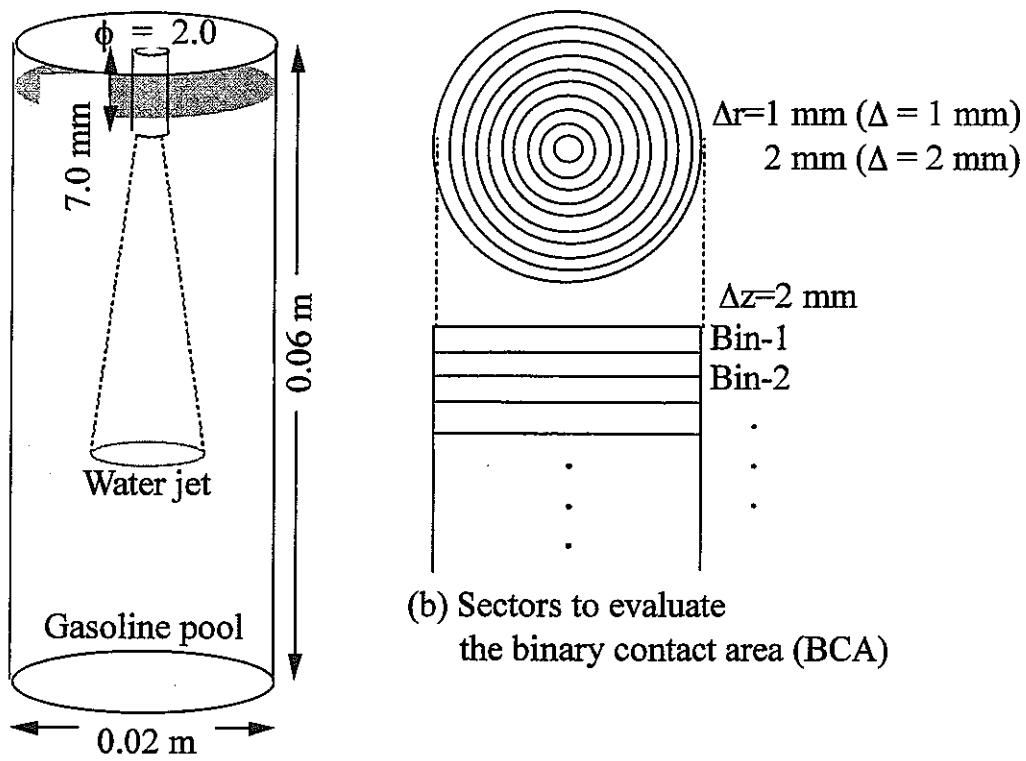
計算結果は、ジェットから遠く分離した水粒子のいくつかは非常に大きな増加係数をもつことが多いことを示しているが、これらはセンター図のジェット部分を見やすくするために表示していない。図 2. 2-11 に case1-1 に関してジェットから分離した水粒子を除外する前のセンター図を示した。同図では  $z = 0.017 \text{ m}$  付近に大きい増加係数をもった水粒子が存在している。体積率では図 2. 2-8(a)の 0.2 s の  $z = 0.017 \text{ m}$  付近にある非常に小さなピークに対応する。初期粒子間隔 2 mm の場合は増加係数のピークが数 100 から数 1000 に達するものも存在した。これらの粒子はその BCA の大きさから速やかに相変化や化学変化を起こす粒子であり、ここでの結果は sub-particle モデルはジェットから分離した粒子の相変化や化学反応が非常に早く進行するモデルとなっていることを示している。

最後に sub-particle モデルにおける近傍同種粒子間の sub-particle 半径の平均操作の効果について簡単にふれておく。

図 2. 2-12 と図 2. 2-13 にそれぞれ初期粒子間隔が 1 mm と 2 mm の場合における、 sub-particle 半径の平均操作を行わない場合の結果を示した。両図ともに時刻 0.3 s での結果である。図 2. 2-12 の結果は図 2. 2-8 と比較すると分かるように、  $z \geq 0.025 \text{ m}$  でのジェットが広がった領域において増加係数の最大値が大きくなるとともに多くのピークが現れている。その結果 BCA も多くのピークを示している。これにより、ジェット内部での BCA の分布に大きな偏りが現れている。この偏りの空間スケールは初期粒子間隔程度である。ジェットが広がった領域では水とガソリンがある程度一様に混合すると考えられることから、現状のように初期粒子間隔を十分小さく採れない場合 sub-particle 半径の平均操作は妥当なモデリングであると考えられる。

粒子サイズを倍にしても、 sub-particle モデルを用いれば、もとの粒子サイズによる結果と同程度の流体力学的挙動が得られると予想したが、粒子サイズを倍にして sub-particle モデルを用いない結果ともとの粒子サイズによる結果との間に大差が見られなかった。これは、 2.0 m/s というジェットの噴出速度が小さかったことが考えられる。実際に式 (2.1-6) から計算される sub-particle 半径が 2 流体の相対速度にどのように依存するかを図 2. 2-14 に示した。ジェットの噴出速度が 2.0 m/s の場合の解析結果は、ジェットの先端の速度がおよそ 0.5 m/s になっていることを示している。2 流体の相対速度がこの程度の値とすると、対応する sub-particle 半径は 1.6 mm となる。すなわち、ガソリンプールに水を吹き込む実験の解析においては、初期粒子間隔として 1 mm 程度の値でも現象を比較的よく記述できる可能性を示している。

しかし、実際には 2 流体間の相対速度は局所的には平均速度より大きな値となる場合があるため、小さい sub-particle 半径を持つ粒子も存在する。図 2. 2-15 に case1-1 における sub-particle 半径の分布を示す。最小で 0.04~0.08 mm 程度の粒子も存在するが、ほとんどの粒子が 0.9 mm 程度の半径であることが分かる。対応する相対速度は 0.66 m/s である。



(a) Calculational setup

図2.2-1 ガソリンプールへの水ジェットの噴射解析の解析体系と BCA 評価用領域分割

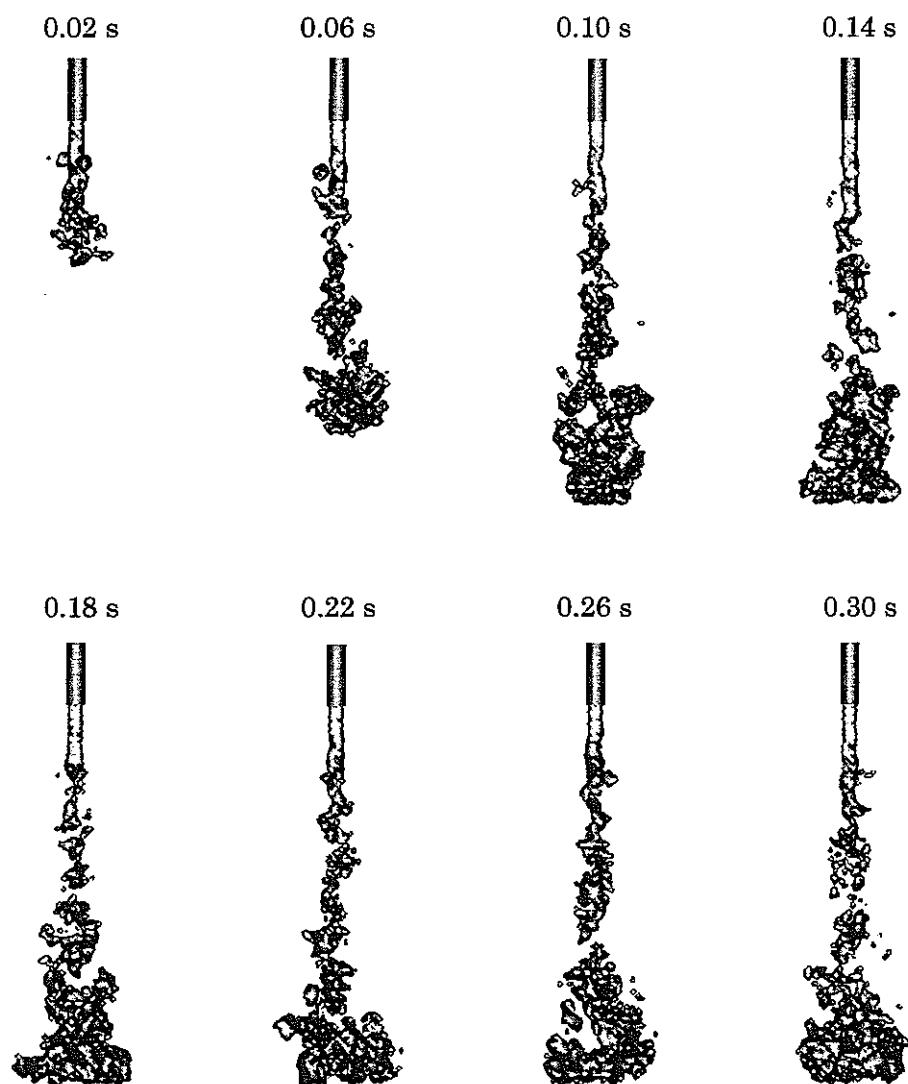


図 2. 2-2 caes1-0 の流動状態の変化  
( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮しない)

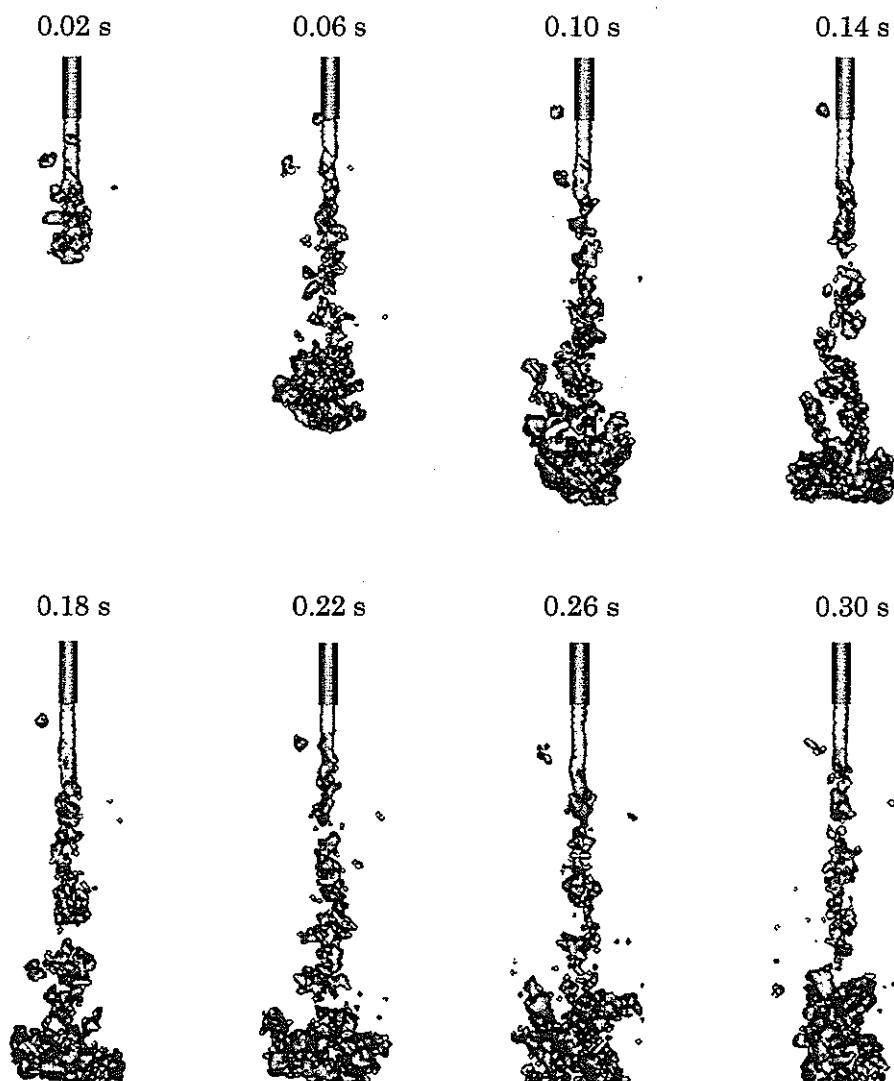


図2. 2-3 caes1-1の流動状態の変化  
( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮)

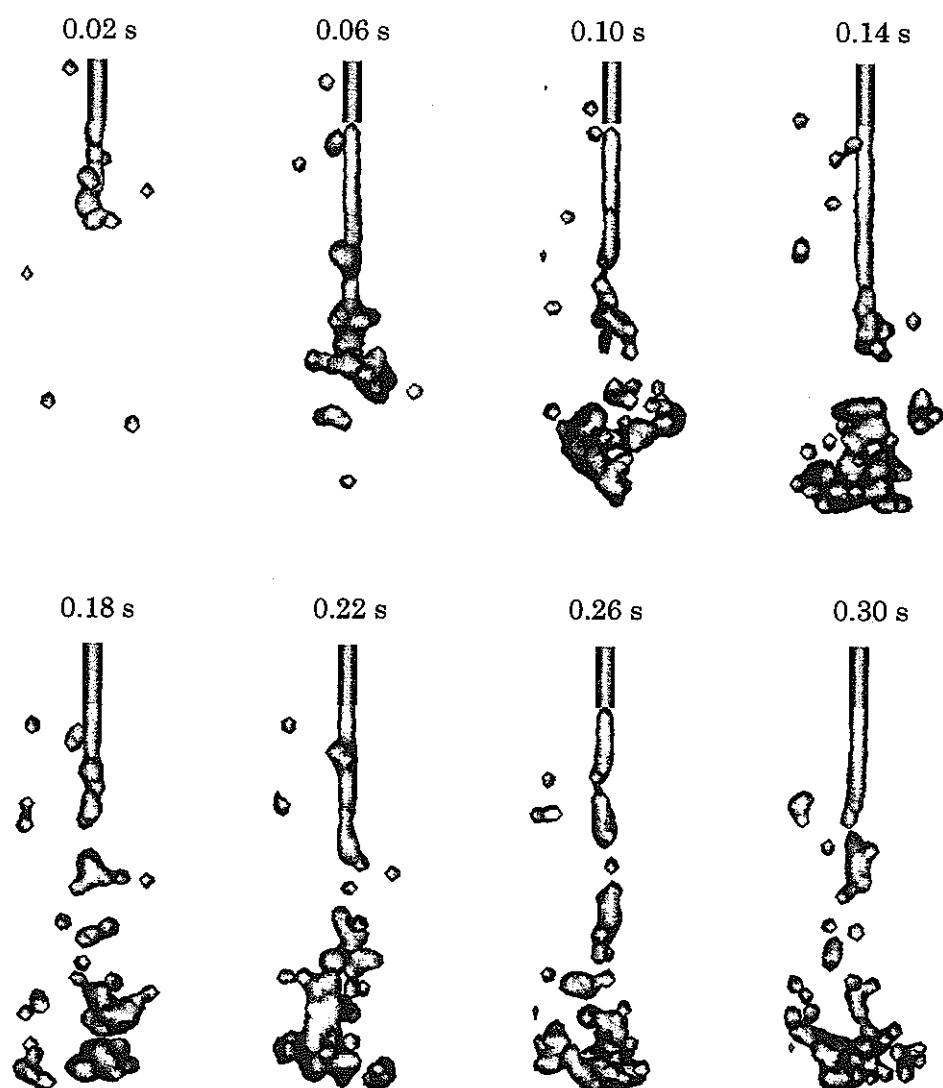


図 2. 2-4 caes2-0 の流動状態の変化  
( $u = 2.0 \text{ m/s}$ ,  $\Delta = 2 \text{ mm}$ , sub-particle を考慮しない)

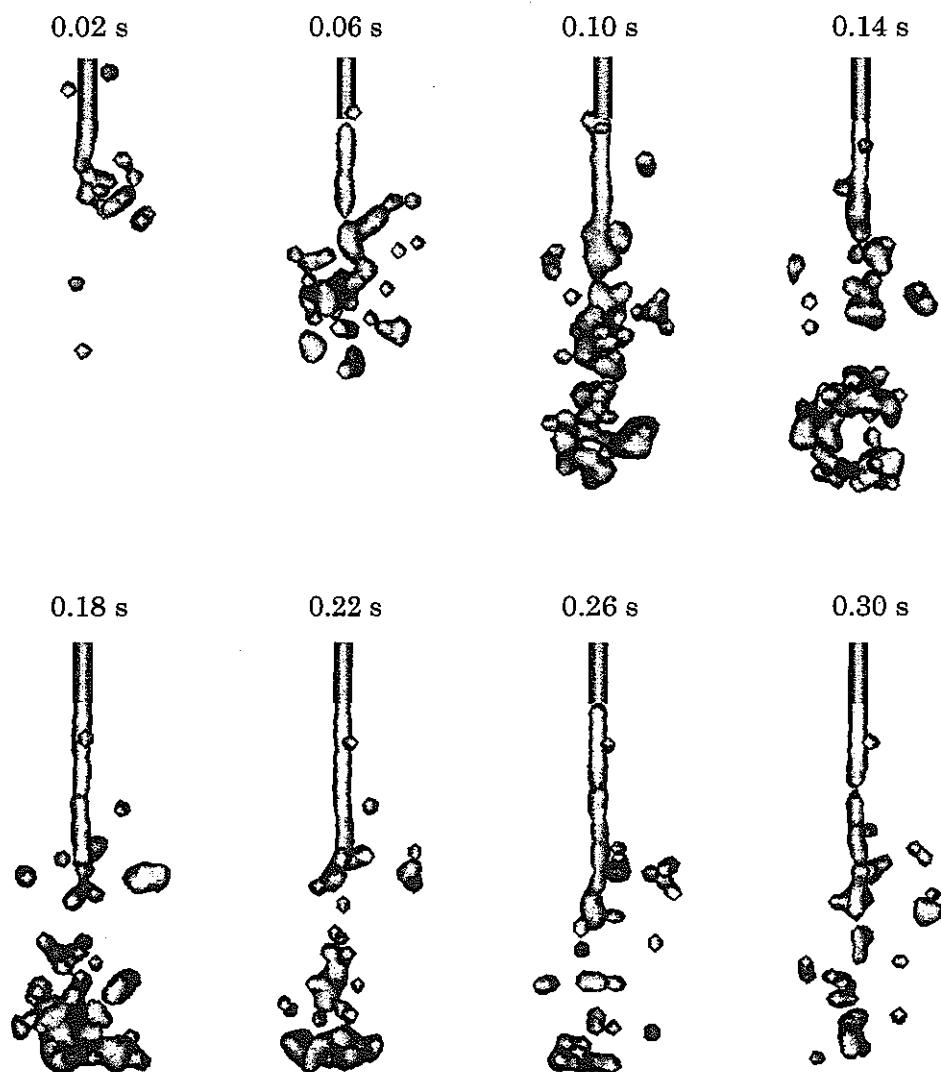


図2. 2-5 caes2-1の流動状態の変化  
( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 2 \text{ mm}$ 、sub-particleを考慮)

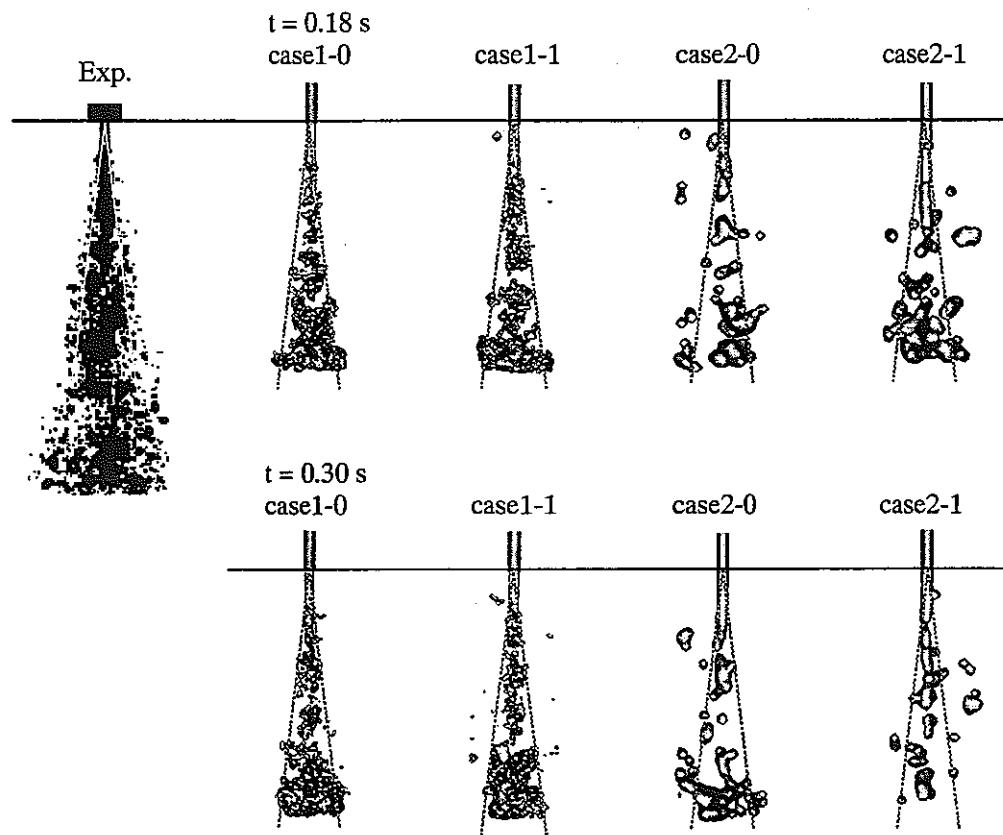


図2. 2-6 ジェットの広がり角度の実験写真との比較 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ )

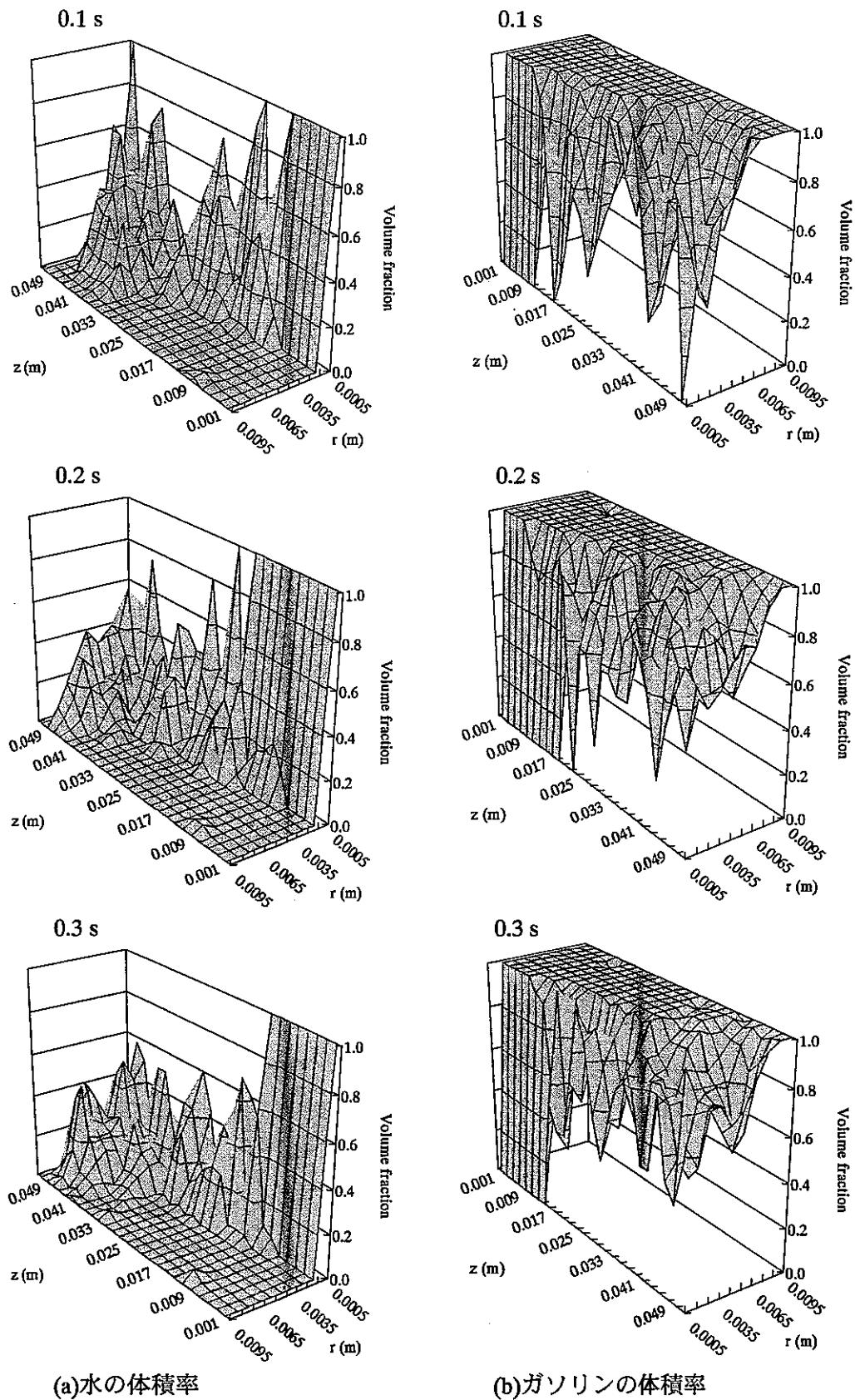
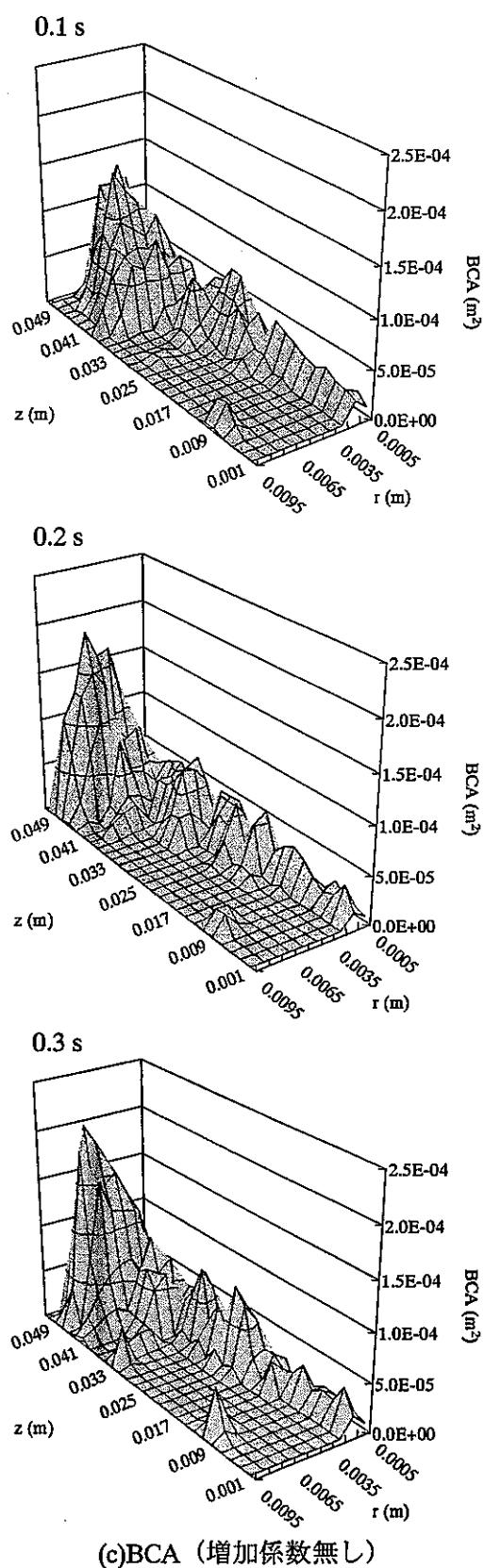


図2. 2-7 case1-0 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ ,  $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮しない)



(c)BCA (増加係数無し)

図2. 2-7 case1-0 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮しない) 続き

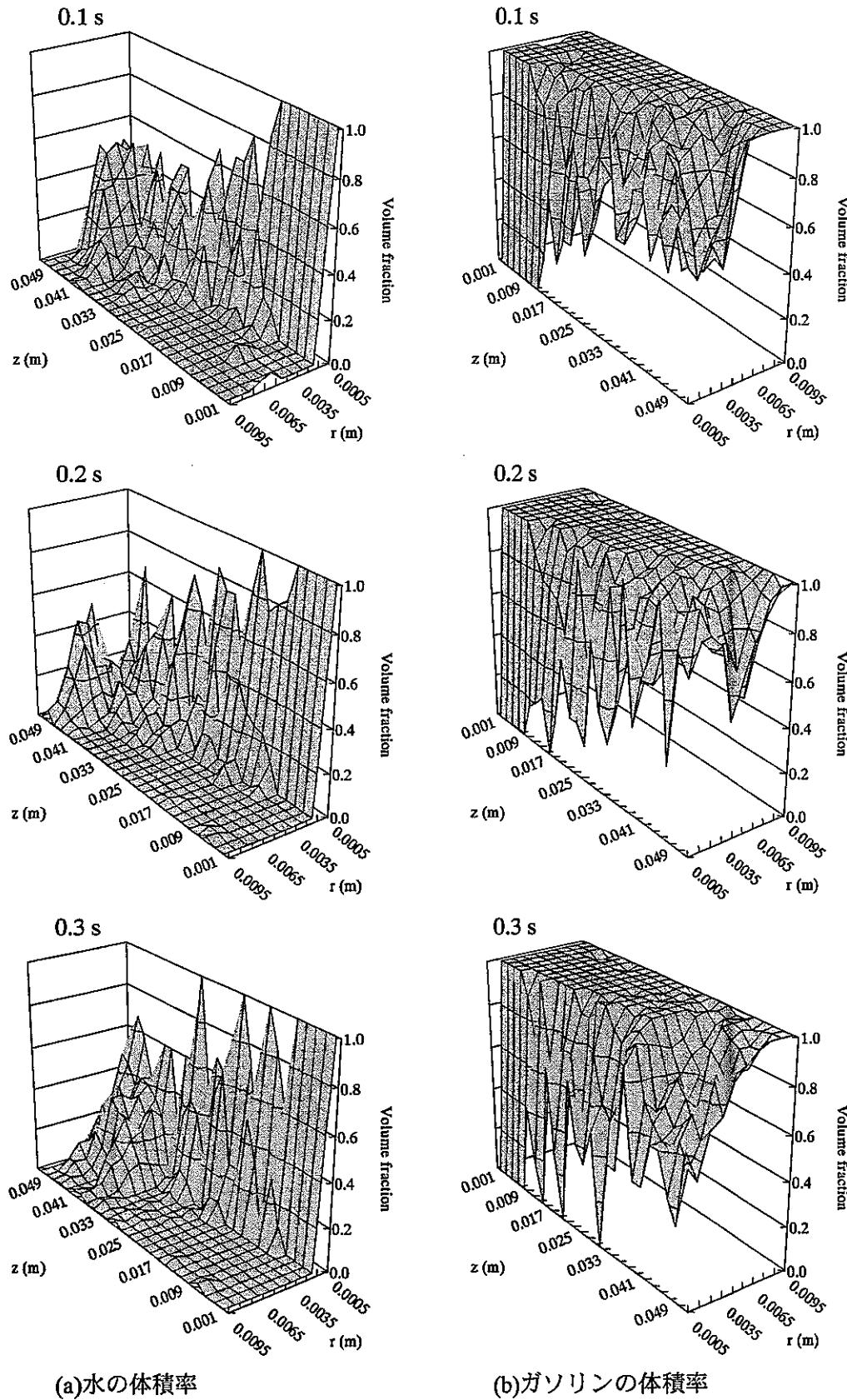
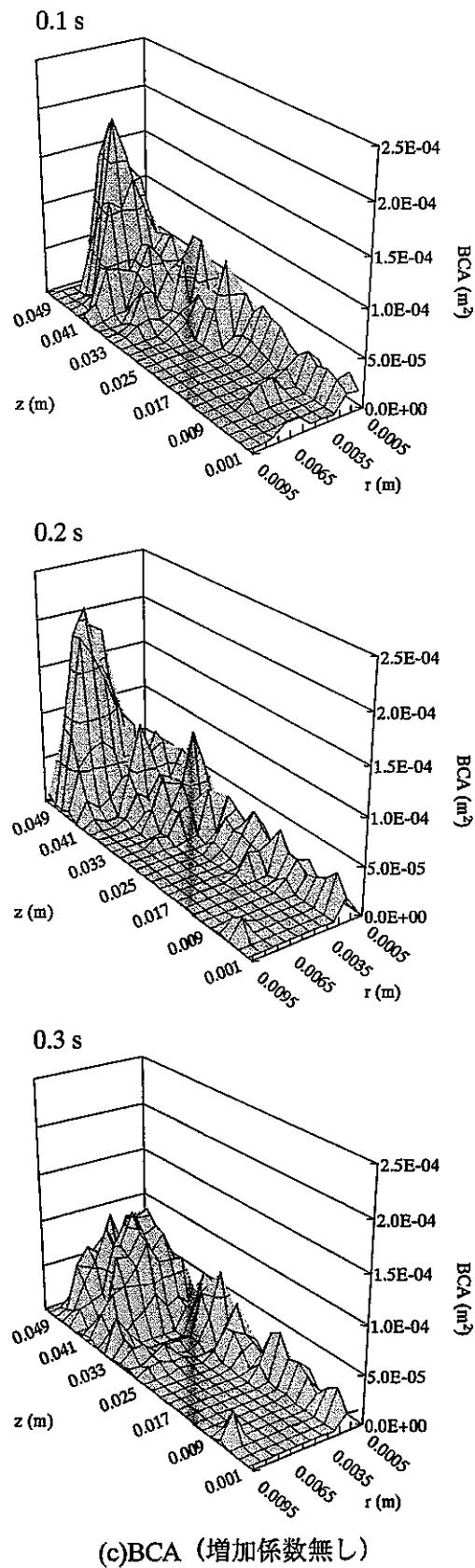
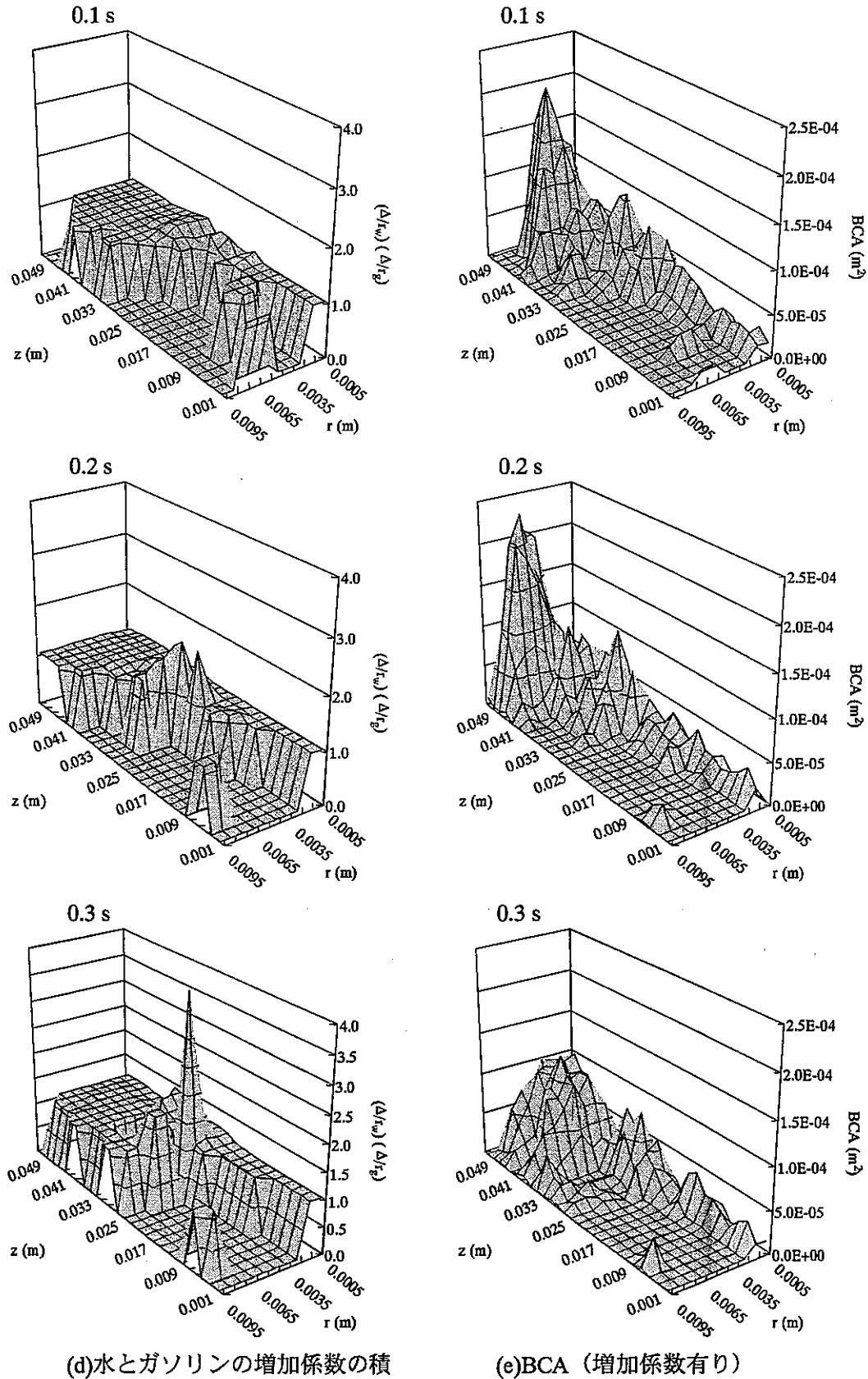


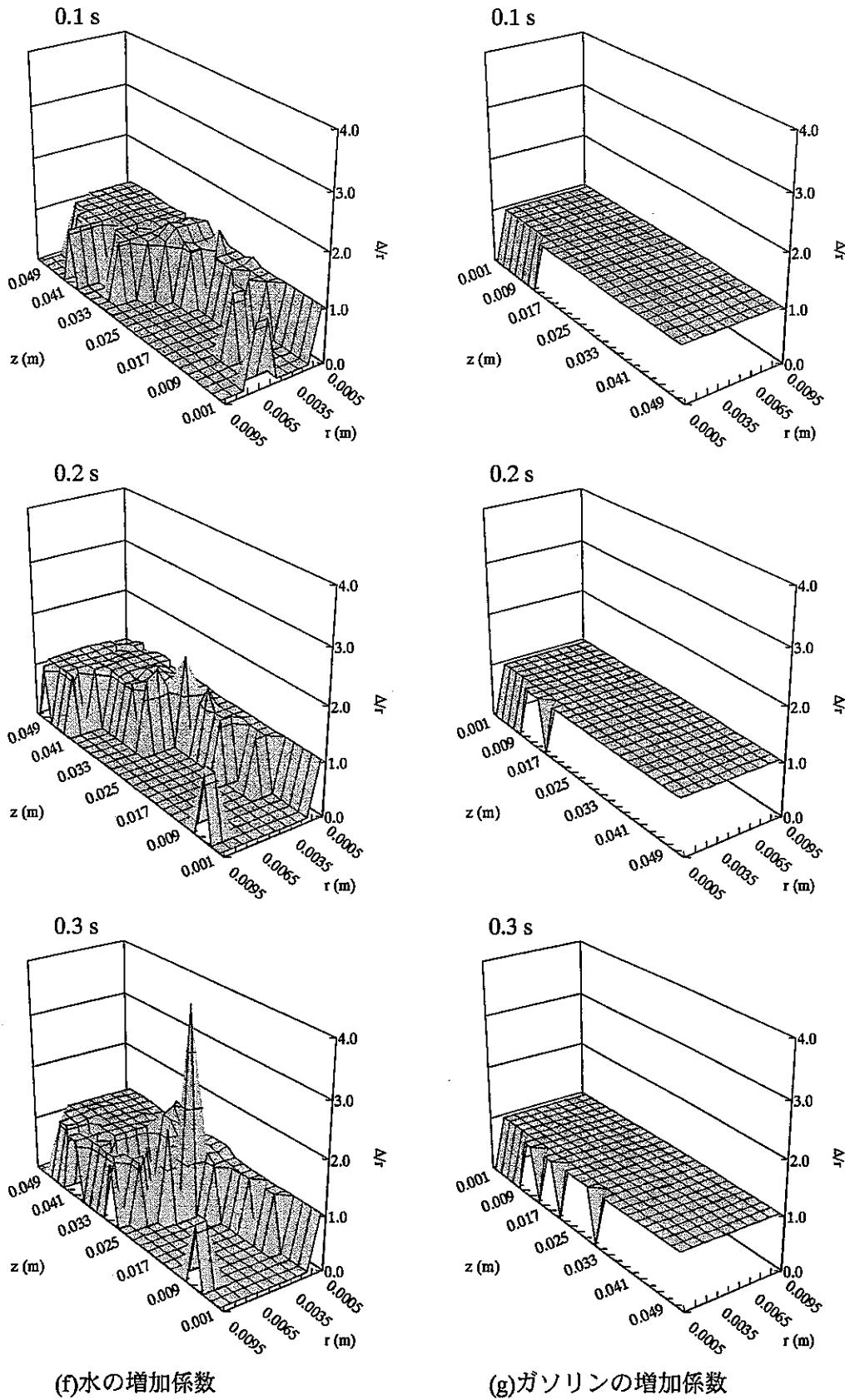
図2. 2-8 case1-1 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ ,  $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮)

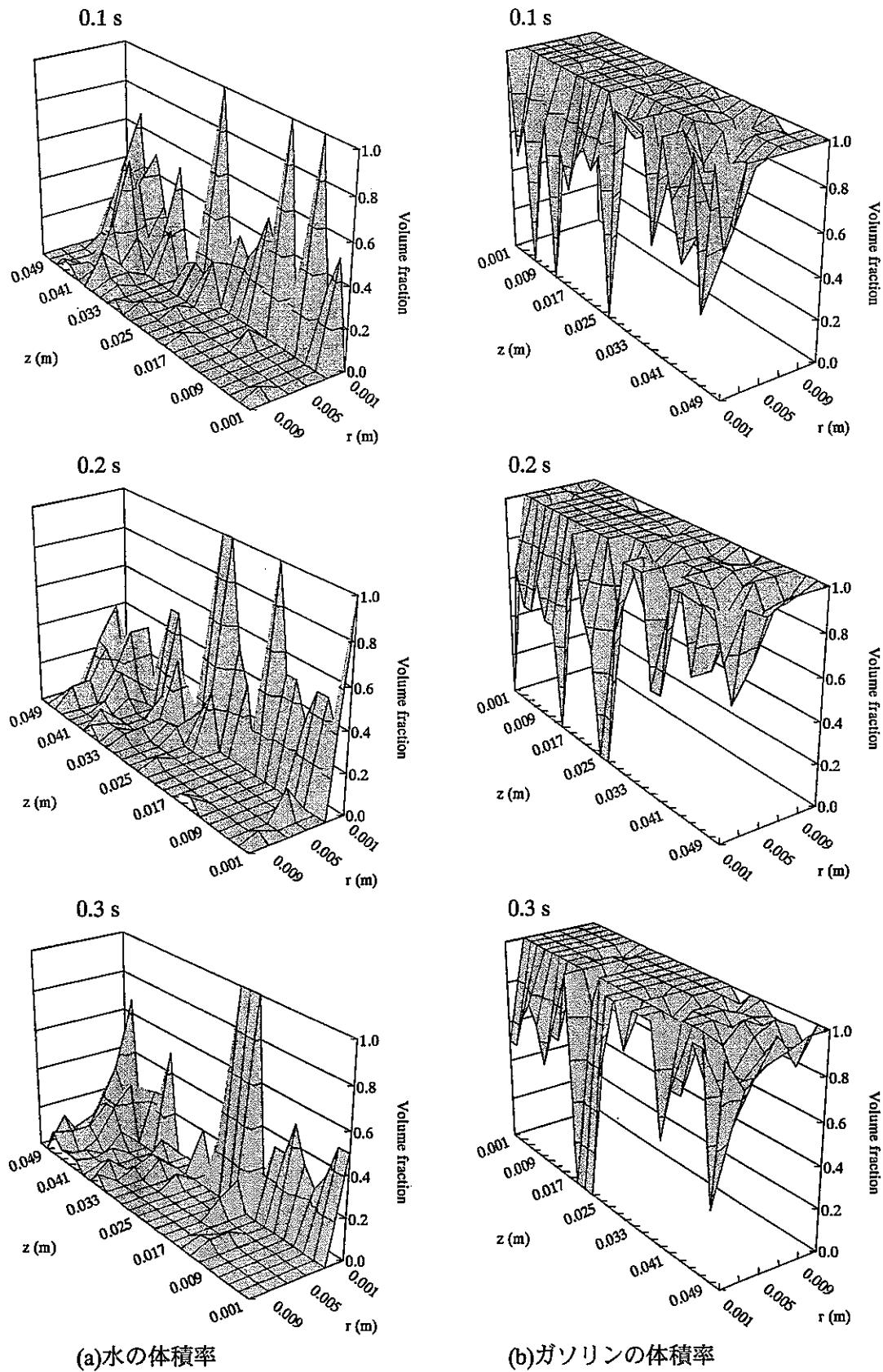


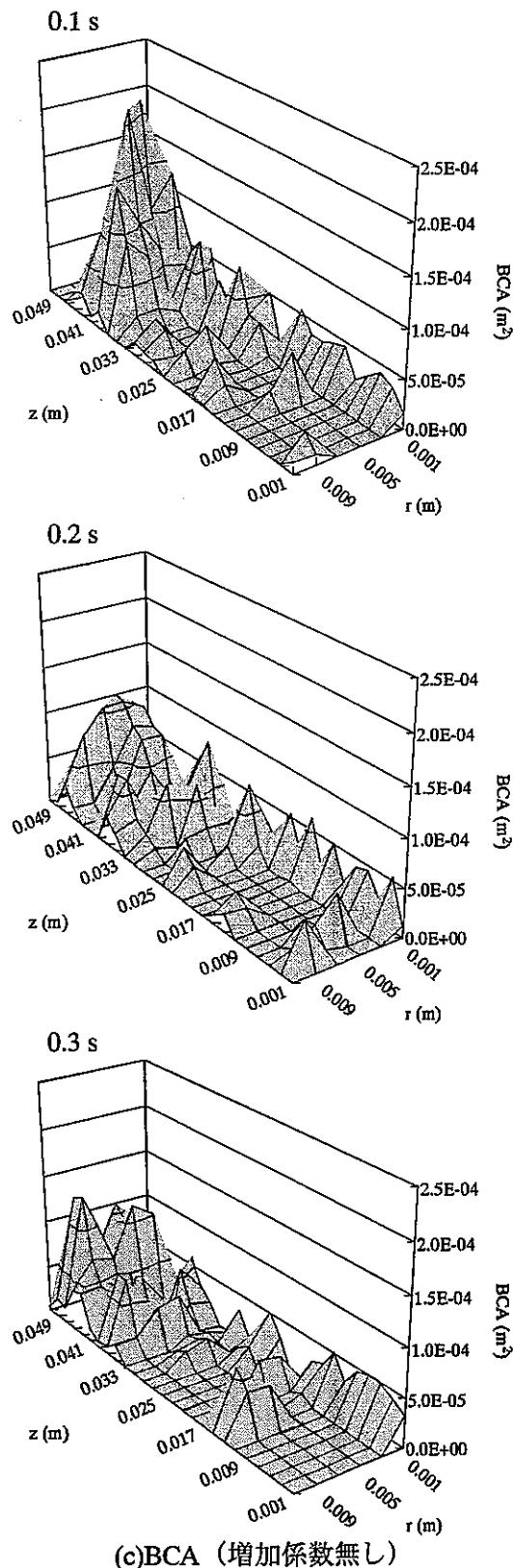
(c)BCA (増加係数無し)

図 2. 2-8 case1-1 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ ,  $\Delta = 1 \text{ mm}$ , sub-particle を考慮) 続き

図2. 2-8 case1-1 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ ,  $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮) 続き

図2. 2-8 case1-1 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ ,  $\Delta = 1 \text{ mm}$ , sub-particle を考慮) 続き

図2. 2-9 case2-0 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ ,  $\Delta = 2 \text{ mm}$ , sub-particle を考慮しない)



(c)BCA (増加係数無し)

図 2 . 2 - 9 case2-0 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 2 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮しない) 続き

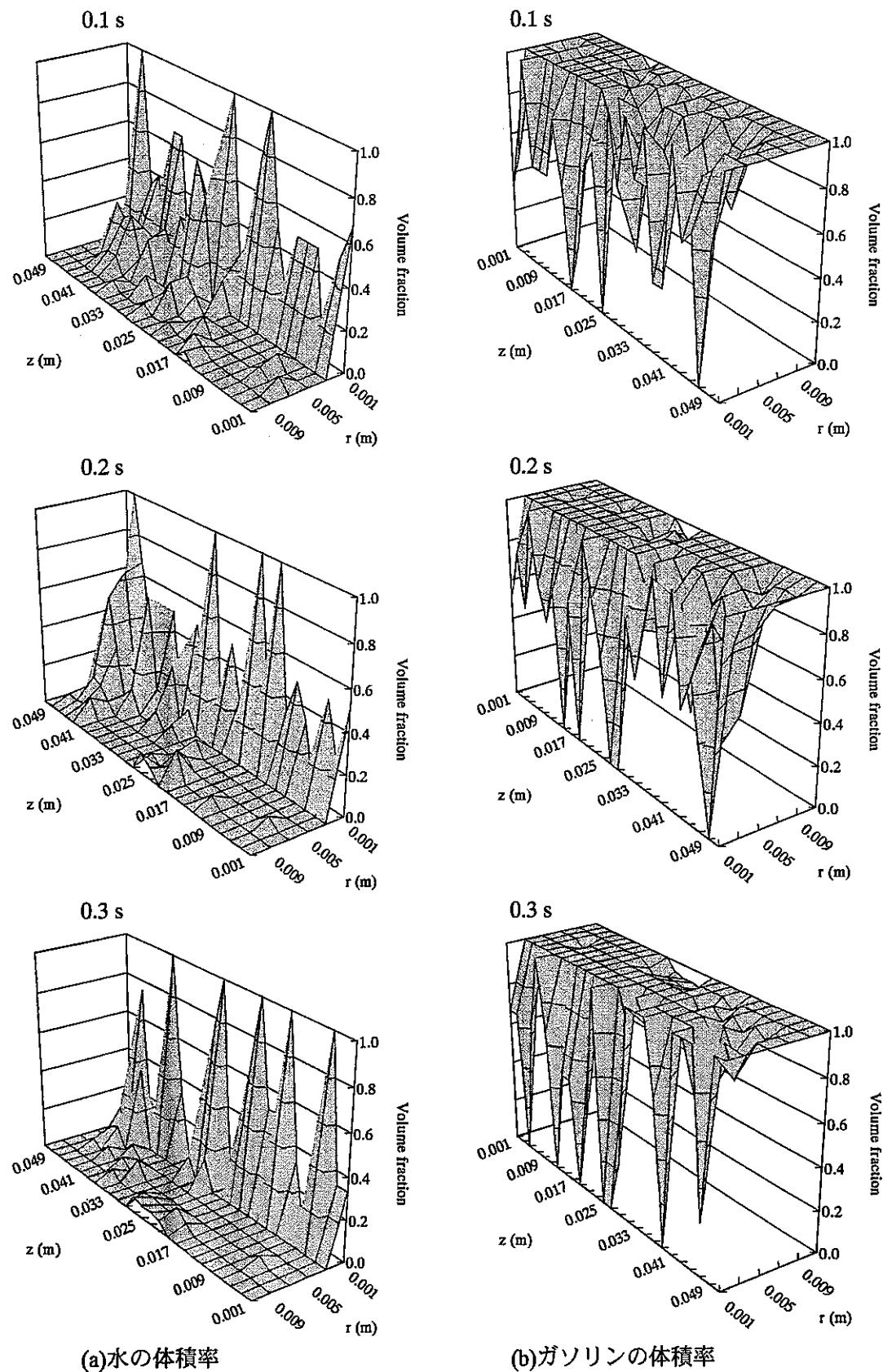
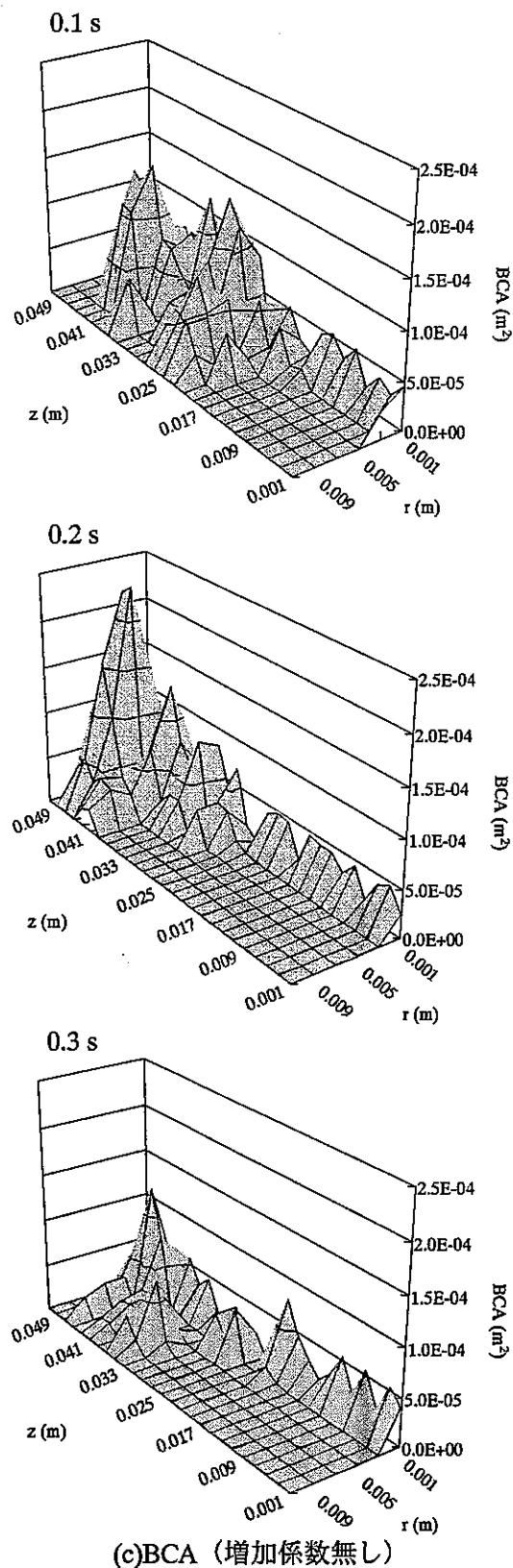
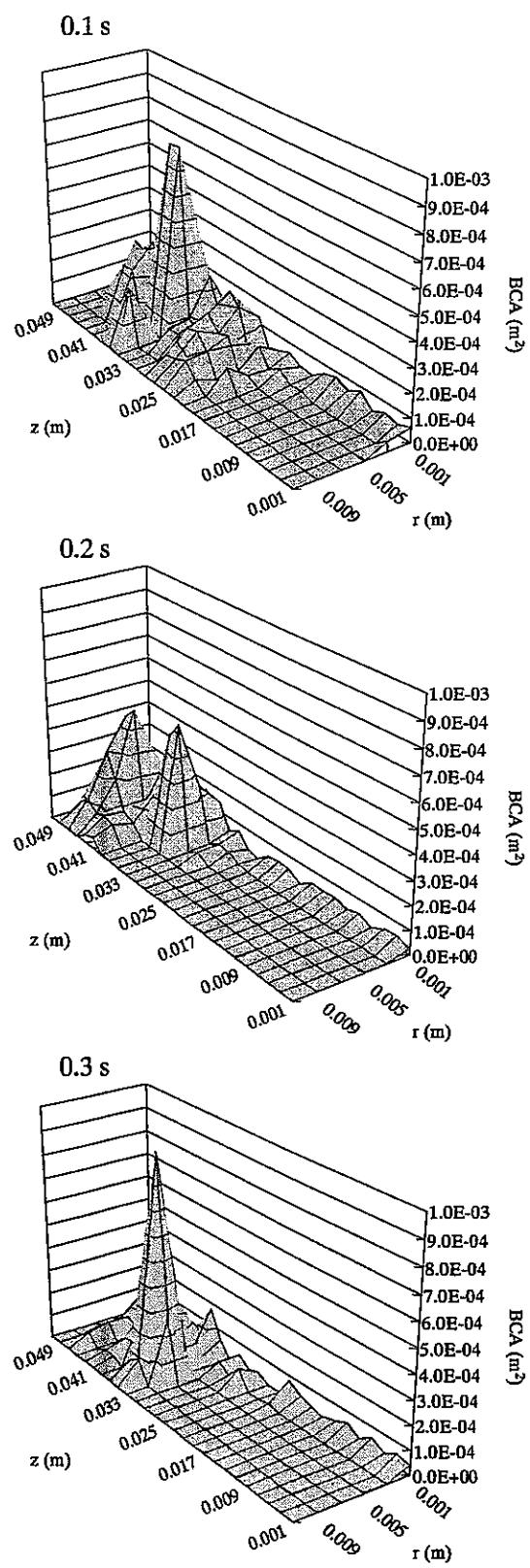
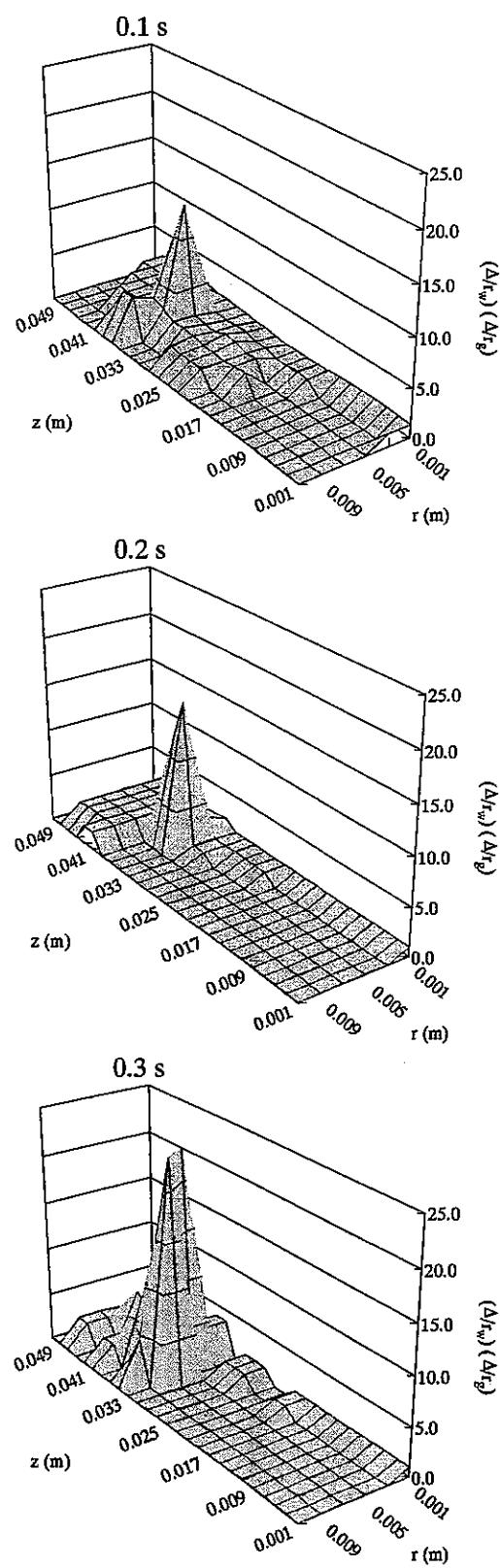


図2. 2-10 case2-1 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ ,  $\Delta = 2 \text{ mm}$ , sub-particle を考慮)

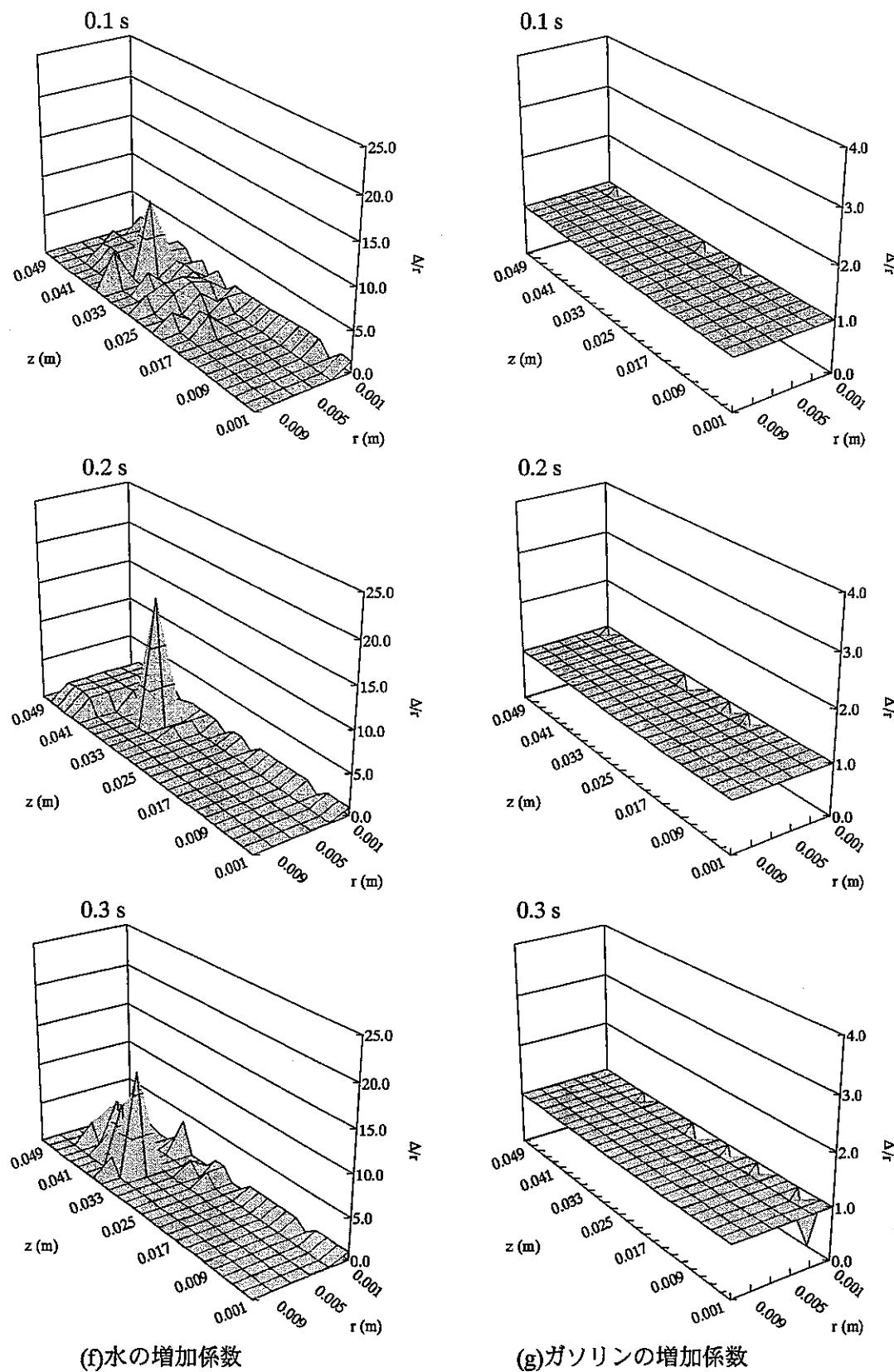
図2. 2-10 case2-1 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ ,  $\Delta = 2 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮) 続き

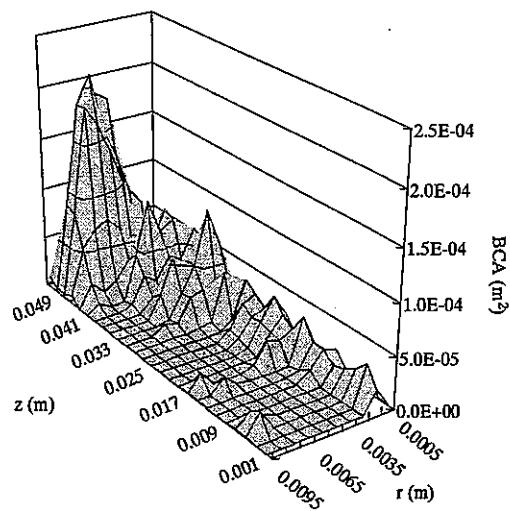


(d)水とガソリンの増加係数の積

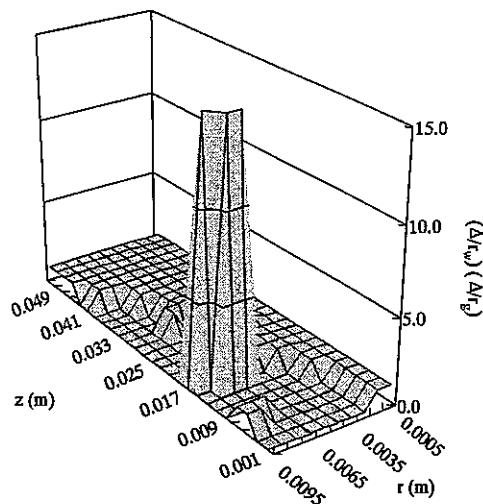
(e)BCA (増加係数有り)

図2. 2-10 case2-1の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $\Delta = 2 \text{ mm}$ 、sub-particleを考慮) 続き

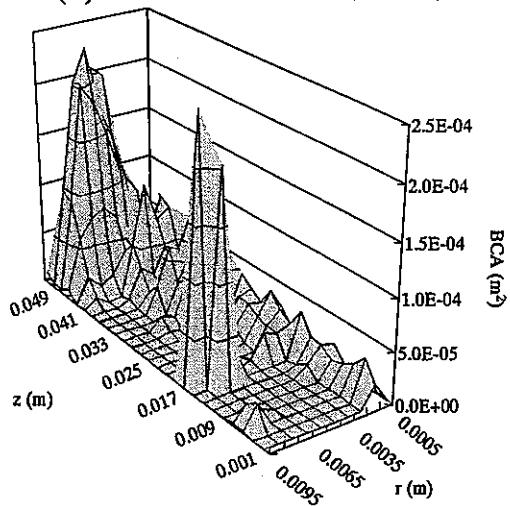
図2. 2-10 case2-1の解析結果 ( $u = 2.0\text{ m/s}$ ,  $\Delta = 2\text{ mm}$ , sub-particleを考慮) 続き



(A)BCA (増加係数無し)



(B)水とガソリンの増加係数の積



(C)BCA (増加係数有り)

図2. 2-11 ジェットから分離した粒子のBCAの例  
(case1-1、 $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $t = 0.2 \text{ s}$ 、 $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particleを考慮)

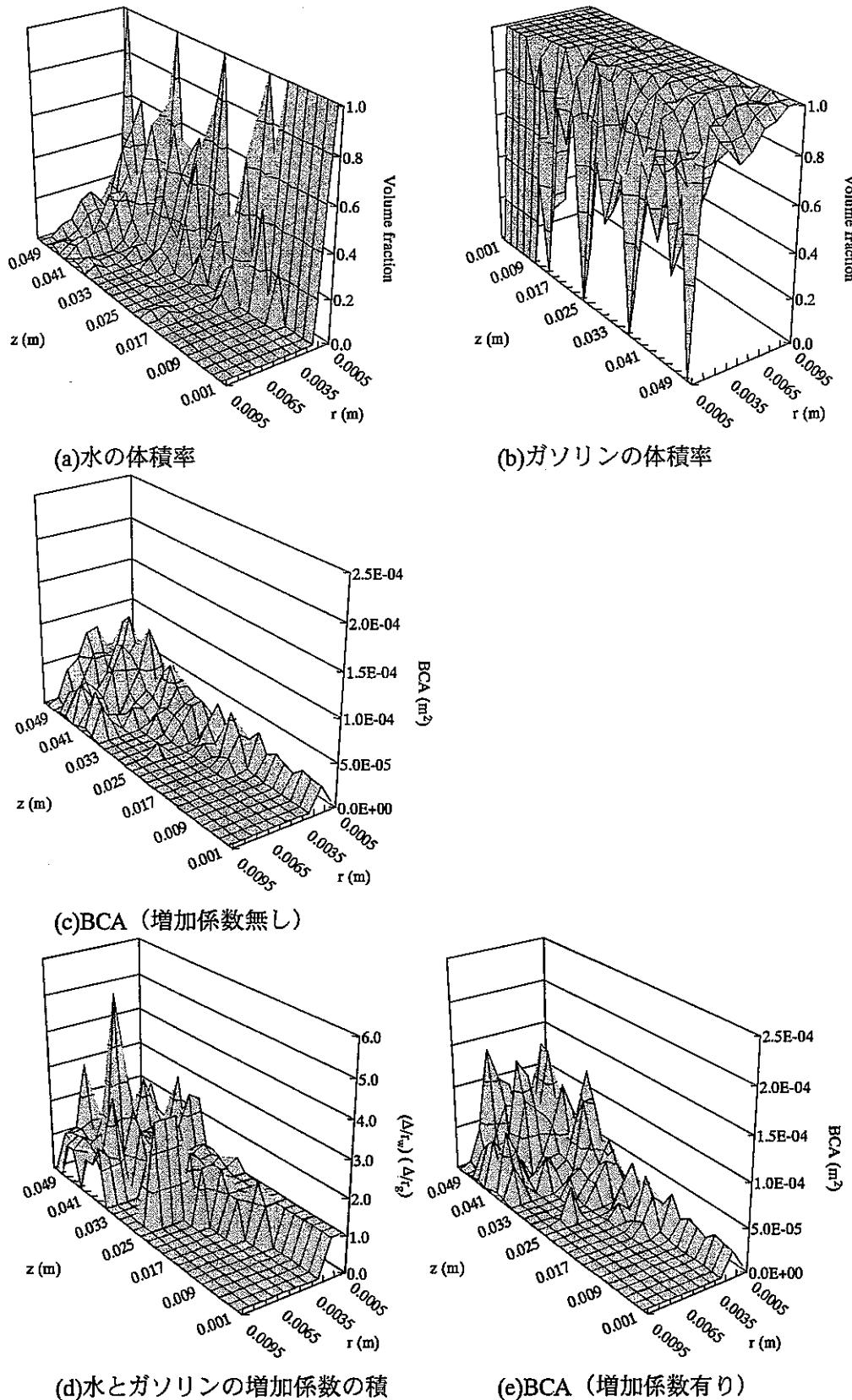
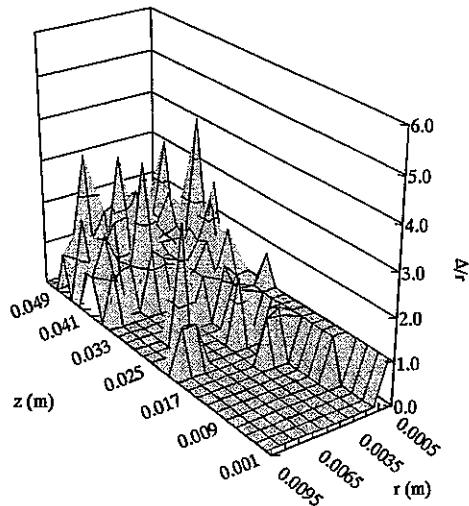
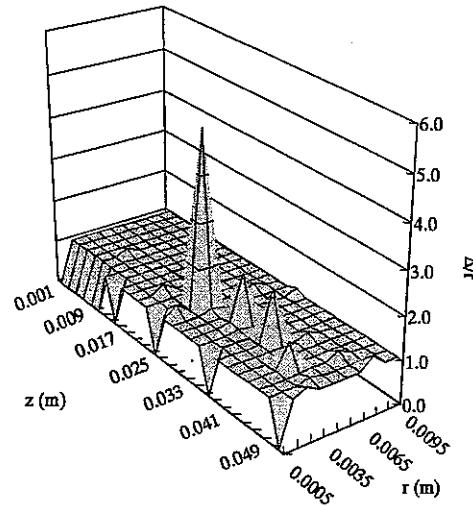


図2. 2-1-2 case1-2 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ ,  $t = 0.3 \text{ s}$ ,  $\Delta = 1 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮、sub-particle 半径の平均操作無し)



#### (f) 水の増加係数



(g) ガソリンの増加係数

図2. 2-12 case1-2の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ ,  $t = 0.3 \text{ s}$ ,  $\Delta = 1 \text{ mm}$ , sub-particleを考慮、sub-particle半径の平均操作無し) 続き

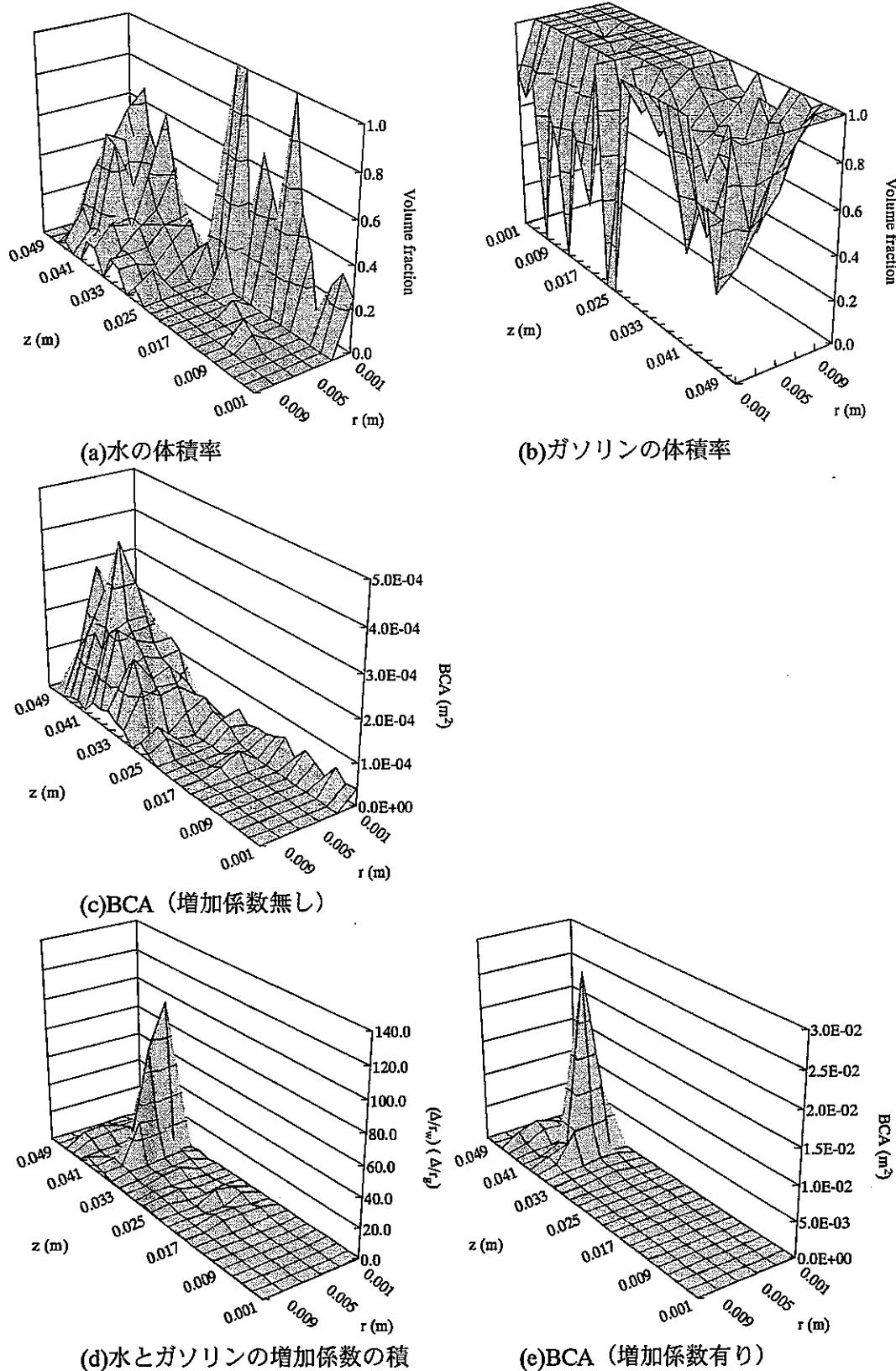


図2. 2-13 case2-2 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ 、 $t = 0.3 \text{ s}$ 、 $\Delta = 2 \text{ mm}$ 、sub-particle を考慮、sub-particle 半径の平均操作無し)

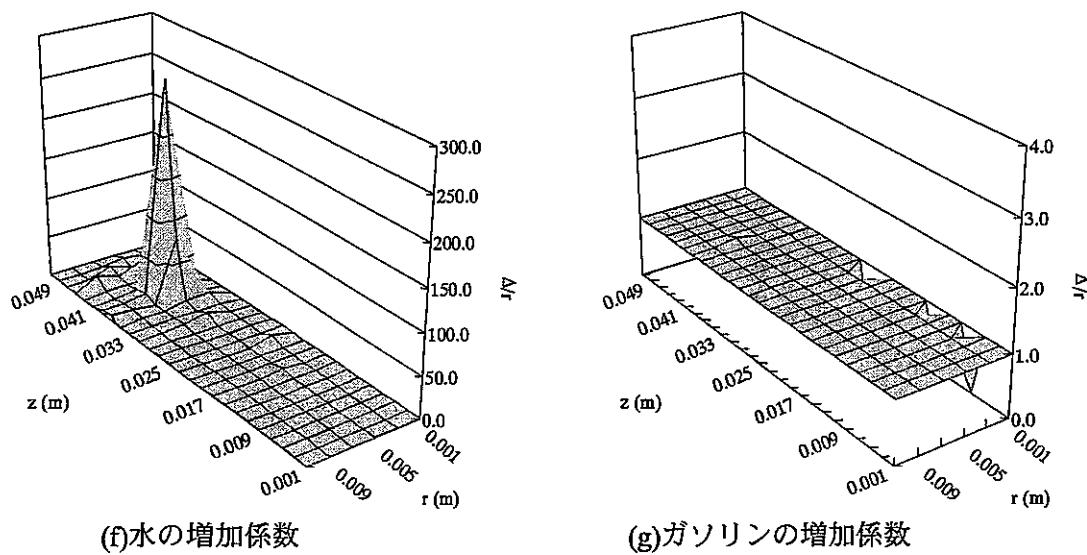


図2. 2-13 case2-2 の解析結果 ( $u = 2.0 \text{ m/s}$ ,  $t = 0.3 \text{ s}$ ,  $\Delta = 2 \text{ mm}$ , sub-particle を考慮、sub-particle 半径の平均操作無し) 続き

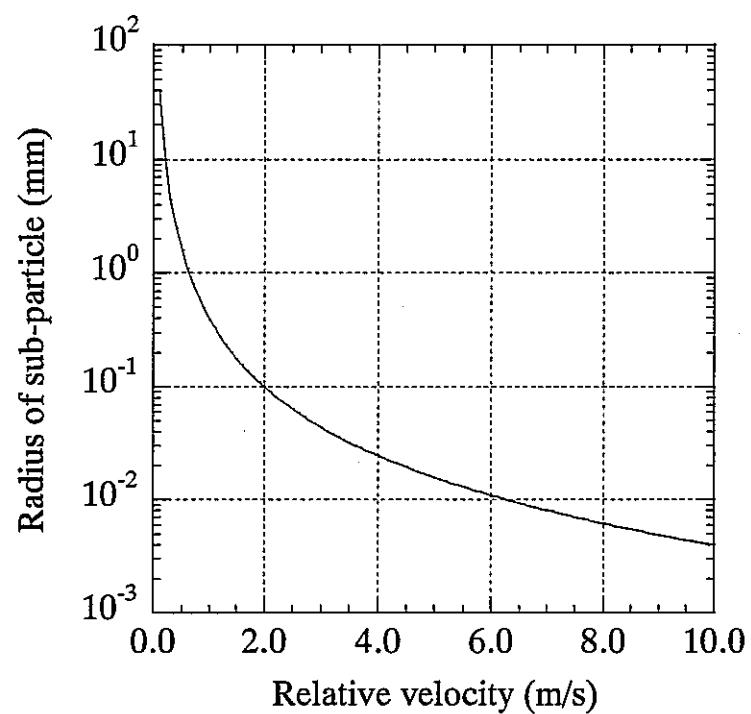


図 2. 2-14 2流体の相対速度と sub-particle 半径の関係

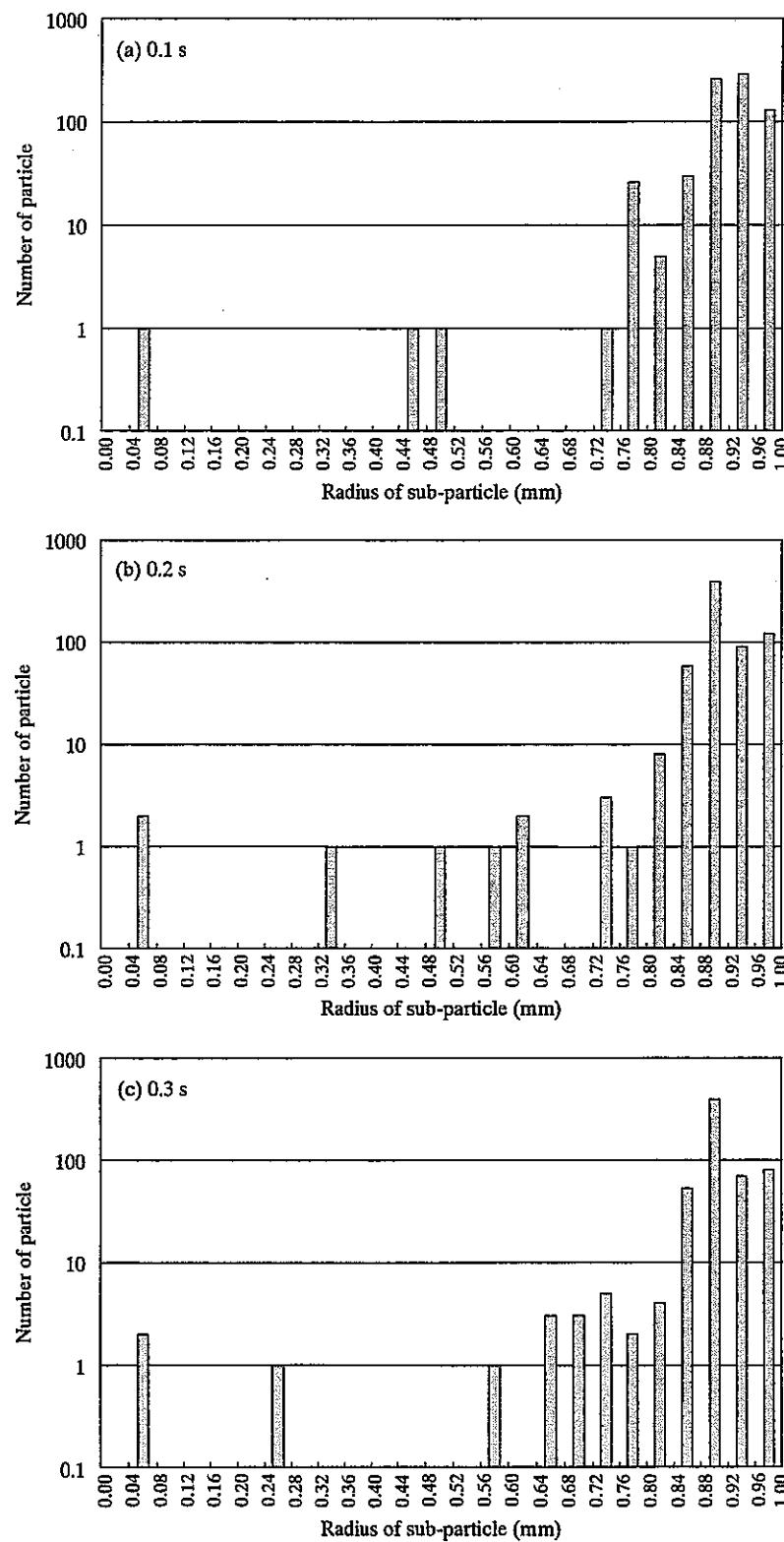


図 2 . 2 - 1 5 sub-particle 半径の分布 (case1-1)

### 3. 相変化評価モデルの開発

#### 3. 1 相変化評価モデルの定式化

熱伝導・熱伝達および相変化過程の定式化を以下に記す。

同種粒子間の熱伝導は、つぎの熱伝導方程式で表される。

$$\frac{De}{Dt} = \frac{k}{\rho} \nabla^2 T \quad (3.1-1)$$

ここで、e は比内部エネルギー、k は熱伝導率である。粒子法ではラプラシアンをカーネル関数を用いて離散化し、タイムステップ  $n+1$  での値をタイムステップ  $n$  の値から

$$e_i^{n+1} = e_i^n + \frac{k}{\rho n^0 \lambda} \sum_{j \neq i} \left[ (T_j^n - T_i^n) w(|r_j - r_i|) \right] \Delta t \quad (3.1-2)$$

と計算する。

相変化過程は界面温度を基準としたヒートフラックスに基づく非平衡伝熱律速モデルにより取り扱う[1-8]。以下に、粒子法のフレームワークにおける定式化を記す。

(1) 高温物質（高温の構造体や他の高温流体）に接している液体粒子  $i$  の蒸発気相への熱移行率は次式で与えられる。

$$q_{l,i \rightarrow g} = \frac{a^0}{n^0} \sum_j^N w(|r_{s,j} - r_{l,i}|) [h_s(T_{s,j} - [T]) - h_l([T] - T_{l,i})] \quad (3.1-3)$$

ここで、 $a^0$  は単位体積当りの伝熱面積係数、 $[T]$  は界面温度であり液体粒子  $i$  の圧力における飽和温度とする。式 (3.1-3) の各項の概念図を図 3. 1-1 に示す。

$q_{l,i \rightarrow g} > 0$  の場合

液相から気相への質量移行率は次式で与えられる。

$$\Gamma_{l,i \rightarrow g} = \frac{q_{l,i \rightarrow g}}{[i]_{vapor} - i_{l,i}} \quad (3.1-4)$$

ここで、 $[i]_{vapor}$  は飽和蒸気の比エンタルピ、 $i_{l,i}$  は水の比エンタルピである。発生気体粒子数は次式で評価する。

$$N_{l,i \rightarrow g} = \frac{\Gamma_{l,i \rightarrow g} \Delta t}{\rho_g} \quad (3.1-5)$$

発生気体粒子の圧力は液体粒子の圧力とする。

$q_{l,i \rightarrow g} < 0$  の場合

相変化は起こらないとし伝熱過程のみを計算する。その場合の界面温度は、

$$[T] = \frac{h_s T_{s,j} + h_l T_{l,i}}{h_s + h_l} \quad (3.1-6)$$

で与えられる。

$N_{l,i \rightarrow g}$  が 1.0 に達しない場合もあるため、式 (3.1-4)、(3.1-5) は以下のアルゴリズムで取り扱う。まず、式 (3.1-3) で計算される熱移行率を時間積分量した量  $\bar{q}_{l,i \rightarrow g}$  を、液体粒子  $i$  が蓄積していく、すなわち、

$$\bar{q}_{l,i \rightarrow g} \leftarrow \bar{q}_{l,i \rightarrow g} + q_{l,i \rightarrow g} \cdot \Delta t \quad (3.1-7)$$

とする。つぎに、各タイムステップにおいて移行質量（質量移行率ではない）

$$\bar{\Gamma}_{l,i \rightarrow g} = \frac{\bar{q}_{l,i \rightarrow g}}{[i]_{vapor} - i_{l,i}} \quad (3.1-8)$$

を評価し、次式で発生気体粒子数を計算する

$$N_{l,i \rightarrow g} = \frac{\bar{\Gamma}_{l,i \rightarrow g}}{\rho_g} \quad (3.1-9)$$

発生気体粒子数  $N_{l,i \rightarrow g}$  が 1.0 以上であれば気体粒子を発生させ、その分を蓄積量から減じる、

$$\bar{q}_{l,i \rightarrow g} \leftarrow \bar{q}_{l,i \rightarrow g} - [i]_{vapor} - i_{l,i}] \rho_g \quad (3.1-10)$$

$N_{l,i \rightarrow g}$  が 1.0 未満である場合は気体粒子の発生は行わず、蓄積量  $\bar{q}_{l,i \rightarrow g}$  は引き続くタイムステップでさらに蓄積される。

## (2) 液体粒子と気体粒子間での蒸発／凝縮

液体粒子  $i$  と気体粒子  $j$  の間で評価される相変化にともなう熱移行率は次式で与えられる。

$$q_{l,i \leftrightarrow g,j} = \frac{a^0}{n^0} w \left( r_{g,j} - r_{l,i} \right) \left[ h_g ([T] - T_{g,j}) + h_l ([T] - T_{l,i}) \right] \quad (3.1-11)$$

$q_{l,i \leftrightarrow g,j} < 0$  の場合、

相変化は蒸発過程であり、

$$\Gamma_{l,i \rightarrow g} = -\frac{q_{l,i \leftrightarrow g,j}}{[i]_{vapor} - i_{l,i}} \quad (3.1-12)$$

$q_{l,i \leftrightarrow g,j} > 0$  の場合、

相変化は凝縮過程であり

$$\Gamma_{g,j \rightarrow l} = \frac{q_{l,i \leftrightarrow g,j}}{i_{g,j} - [i]_{liquid}} \quad (3.1-13)$$

ここで、 $i_{g,j}$  は蒸気の比エンタルピ、 $[i]_{liquid}$  は飽和水の比エンタルピである。

以下に、実際のアルゴリズムに即して定式化を説明する。

$q_{l,i \leftrightarrow g,j} < 0$  の場合、式 (3.1-11) の熱量を液体粒子  $i$  の蓄積熱量（蒸発によって気相へ移行する熱量）に加える。すなわち、

$$\bar{q}_{l,i \rightarrow g} \leftarrow \bar{q}_{l,i \rightarrow g} + q_{l,i \leftrightarrow g,j} \cdot \Delta t \quad (3.1-14)$$

$q_{l,i \leftrightarrow g,j} > 0$  の場合、式 (3.1-11) の熱量を気体粒子  $j$  の蓄積熱量（凝縮によって液相へ移行する熱量）に加える。すなわち、

$$\bar{q}_{g,j \rightarrow l} \leftarrow \bar{q}_{g,j \rightarrow l} + q_{l,i \leftrightarrow g,j} \cdot \Delta t \quad (3.1-15)$$

次に、液体粒子に対して、気相への移行質量と（蒸発による）発生気体粒子数を次式で評価する。

$$\bar{\Gamma}_{l,i \rightarrow g} = -\frac{\bar{q}_{l,i \rightarrow g}}{[i]_{vapor} - i_{l,i}} \quad (3.1-16)$$

$$N_{l,i \rightarrow g} = \frac{\bar{\Gamma}_{l,i \rightarrow g}}{\rho_g} \quad (3.1-17)$$

$N_{l,i \rightarrow g}$  が 1.0 に達したら気体粒子を発生させ、その分の熱量を蓄積熱量から減じる。1.0 未満であれば気体粒子は発生させず、さらに熱量を蓄積していく。

また、気体粒子に対して、液相への移行質量と（凝縮による）消滅気体粒子数を次式で評価する。

$$\bar{\Gamma}_{g,j \rightarrow l} = \frac{\bar{q}_{g,j \leftrightarrow l}}{i_{g,j} - [i]_{liquid}} \quad (3.1-18)$$

$$N_{g,j \rightarrow l} = \frac{\bar{\Gamma}_{g,j \rightarrow l}}{\rho_g} \quad (3.1-19)$$

$N_{g,j \rightarrow l}$  が 1.0 に達したら気体粒子を消滅させる。1.0 未満であれば気体粒子は消滅せず、熱量をさらに蓄積していく。

蒸発・凝縮による液体粒子の質量の変化はカーネル径の変化で模擬する。質量の変化分を  $\Delta \bar{r}$ 、変化前のカーネル関数径を  $r_e$  とすると、変化後のカーネル関数径  $r'_e$  は次式を解く

て決める。

$$\int_0^{r_e} \rho_l w_{r_e}(r) dr^3 - \int_0^{r_e} \rho_l w_{r_e}(r) dr^3 = \Delta \bar{V} \cdot V \quad (3.1-20)$$

ここで、 $w_{r_e}(r)$ は径 $r_e$ のカーネル関数であり、 $V$ は1粒子の占める体積である。また、液体粒子の巨視的密度を初期カーネル径 $r_e^0$ を用いて、

$$\bar{\rho}_l = \int_0^{r_e^0} \rho_l w_{r_e^0}(r) dr^3 / \int_0^{r_e^0} w_{r_e^0}(r) dr^3 \quad (3.1-21)$$

で定義し、巨視的密度は、

$$\frac{1}{2} \bar{\rho}_l^0 \leq \bar{\rho}_l \leq 2 \bar{\rho}_l^0 \quad (3.1-22)$$

の範囲にあるものとする。ここで、 $\bar{\rho}_l^0$ は初期カーネル径を用いて計算した巨視的密度である。 $\frac{1}{2} \bar{\rho}_l^0$ 以下なら、その質量は隣接する液体粒子に吸収させる。一方、 $2 \bar{\rho}_l^0$ 以上なら、2つの液体粒子に分裂させる。これら2つの過程においては運動量とエネルギーを保存させる。蒸発現象のように急激に粒子数密度が増加する過程においては、計算不安定性が生じる。そのため、以下のような新しい距離関数を導入する、

$$\Delta_{i,j} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 + \eta_{i,j}^2} \quad (3.1-23)$$

ここで、

$$\eta_{i,j} = \max(\eta_i, \eta_j) \quad (3.1-24)$$

である。式(3.1-24)において、 $\eta_i$ 、 $\eta_j$ は仮想的に粒子*i*と*j*に付加した実空間からの距離である。この距離変数はすべての粒子に持たせ、初期状態では0とする。蒸発により発生した粒子に対しては、ある決まった値 $\eta_i^{(0)}$ を与え、速度cで仮想的な次元にそって移動するものとする、すなわち、

$$\eta_i^{(n+1)} = \eta_i^{(n)} - c \cdot \Delta t \quad (3.1-25)$$

とする。

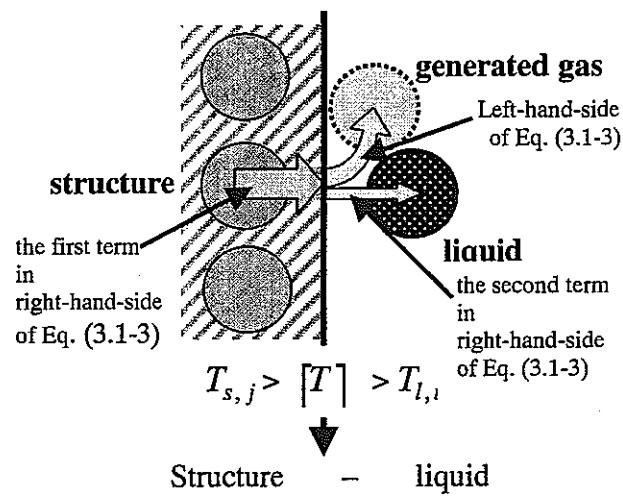


図 3. 1-1 移行熱量の概念図

### 3. 2 コーディングと機能検証

相変化モジュールを組み込んだ粒子法コードの機能検証として垂直沸騰管解析を行ってきた[1-8]。

ここでは、SWAT3/Run19[1-10,1-11]の予備解析を通して伝熱管を含む複雑な計算領域に対する相変化コードの機能検証を実施した。考慮している相変化過程は噴出した水が高温のナトリウムと接触して蒸気になる過程であり、解析は相変化を含む液液気 3 流体モデルの検証となる。なお、sub-particle モデルは本計算では使用していない。

解析体系は前年度に実施した液液 2 流体解析と同じである。すなわち、#79, #80, #71, #72, #63, #63 の伝熱管を含む領域に対して、初期粒子間隔を 0.0025 m とし、ナトリウムの初期粒子配置を( $nx, ny, nz$ ) = (40, 10, 66)と設定した。解析体系サイズは、(x, y, z) = (0.1, 0.025, 0.165) m となる。ただし、ここには伝熱管も含まれている。さらにすべての外面を構造体により囲む。これにより、粒子数は液体 20,000、構造体（壁と伝熱管）15,000 となる。

水ジェットは#79 伝熱管の 1 cm<sup>2</sup> の孔から 1.85 kg/s でリークする。温度は 675 K、噴出角度は x 軸から反時計回りに 66° である。

境界条件は 3 流体全てを非圧縮性として扱うため、計算体系内の流体粒子数を保存させるようとする。すなわち、水粒子の計算領域への侵入と相変化による蒸気の発生にしたがって上部からナトリウム粒子を全流体粒子数を保存するように取り去っている。また、計算領域の外部に移動する水及び蒸気粒子は全粒子を保存するように計算から除外している。圧力境界条件は体系を囲む壁粒子の外側でナトリウムの圧力  $1.3 \times 10^5$  Pa を課す。

熱伝達率は各流体の熱伝導率を境界層厚さで割った量を用いる。水-ナトリウムに関してはこの境界層厚さは初期粒子間隔とした。この値に関してはある程度チューニングが必要になると考えられる。

図 3. 2-1 に本解析における水及び蒸気粒子の挙動を示す。同図はナトリウム粒子を除いて水および蒸気粒子のみを可視化したものである。色の濃い部分が水、薄い部分が水蒸気である。水ジェットの先端で激しく水蒸気が発生している様子が分かる。

図 3. 2-2 と図 3. 2-3 にそれぞれ水と蒸気の体積率のコンター図を示す（2通りの視点で表示）。体積率は、x, z 軸方向を 0.005 m 刻みで区切ってできる直方体の分割領域内で計算した。図中の白抜きの部分は伝熱管であり、矢印は水ジェットの噴出孔の位置を指している。ジェットの先端付近での蒸気の体積率は 0.7 程度まで上昇している。この時刻で蒸気が占める体積は、解析領域の体積  $4.1 \times 10^{-4}$  m<sup>3</sup> の 6 %程度の  $2.5 \times 10^{-5}$  m<sup>3</sup> である。

これにより、定性的には伝熱管群を含む複雑体系におけるジェット流動現象においても、相変化を含んだ液液気 3 流体粒子法の適用性が確認できた。

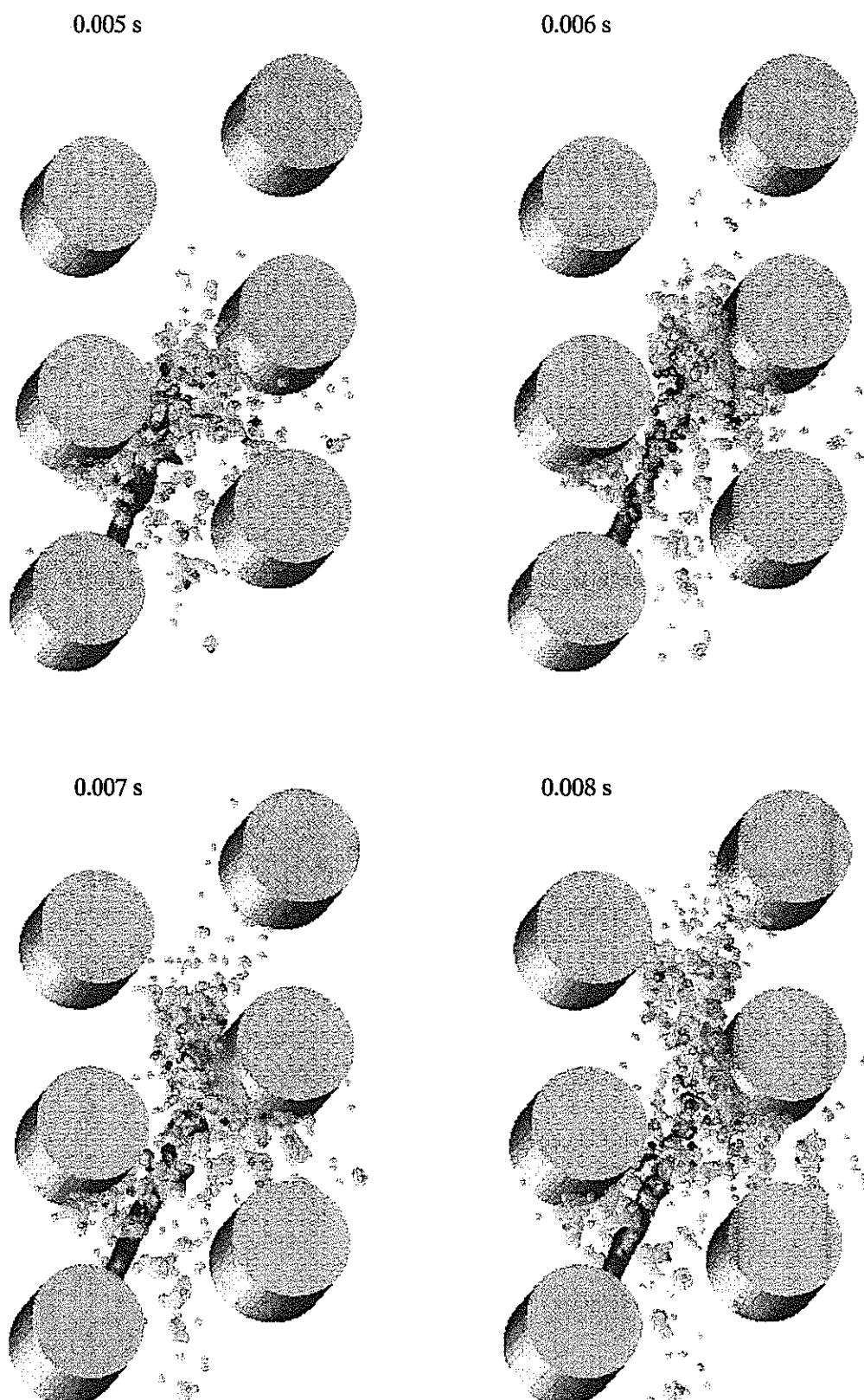


図3. 2-1 SWAT3/Run19 解析における水及び蒸気の流動状態

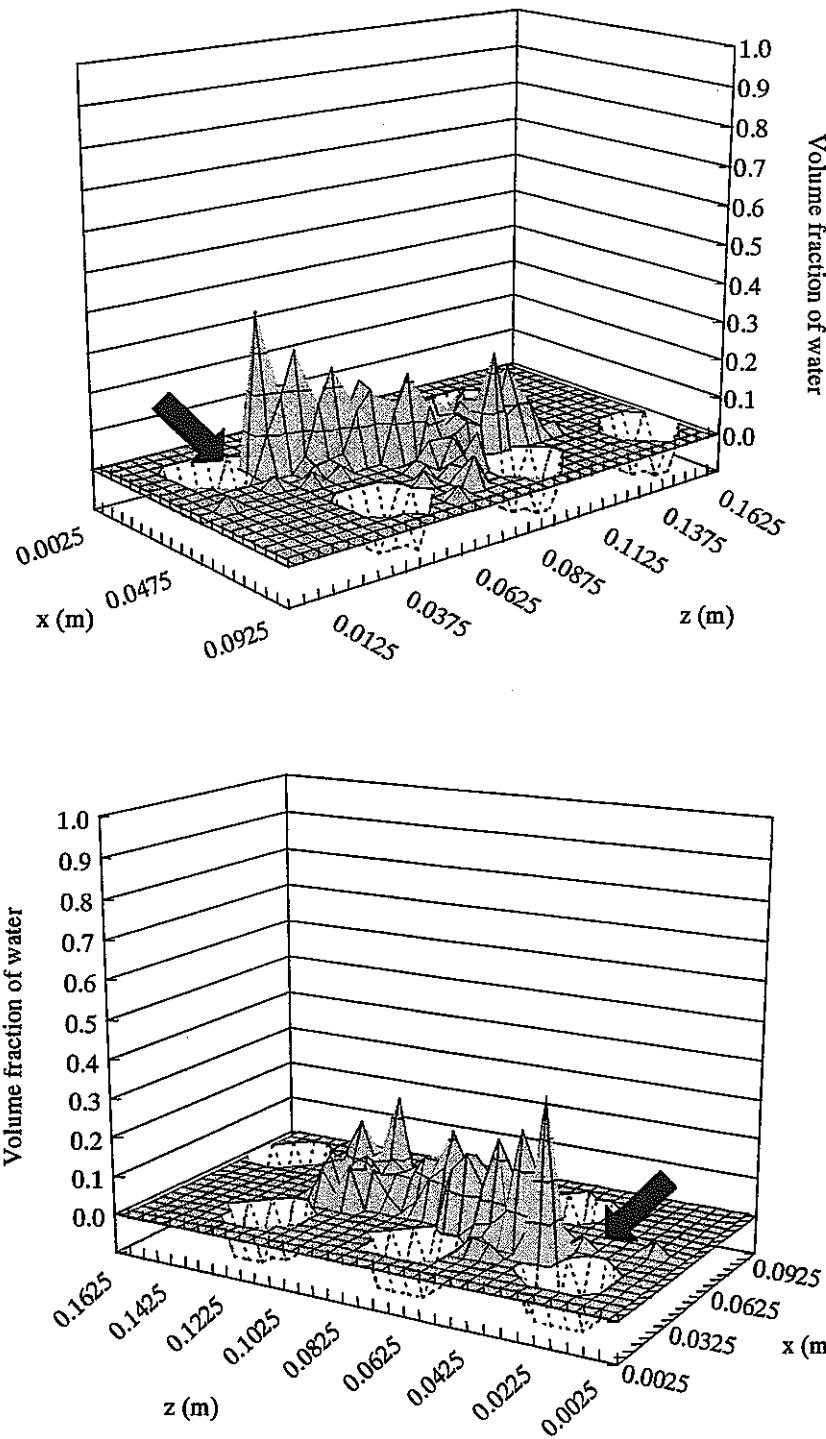


図3. 2-2 SWAT3/Run19 解析における水の体積率 ( $t = 0.008$  s)  
矢印は水ジェットの噴出孔を示す。

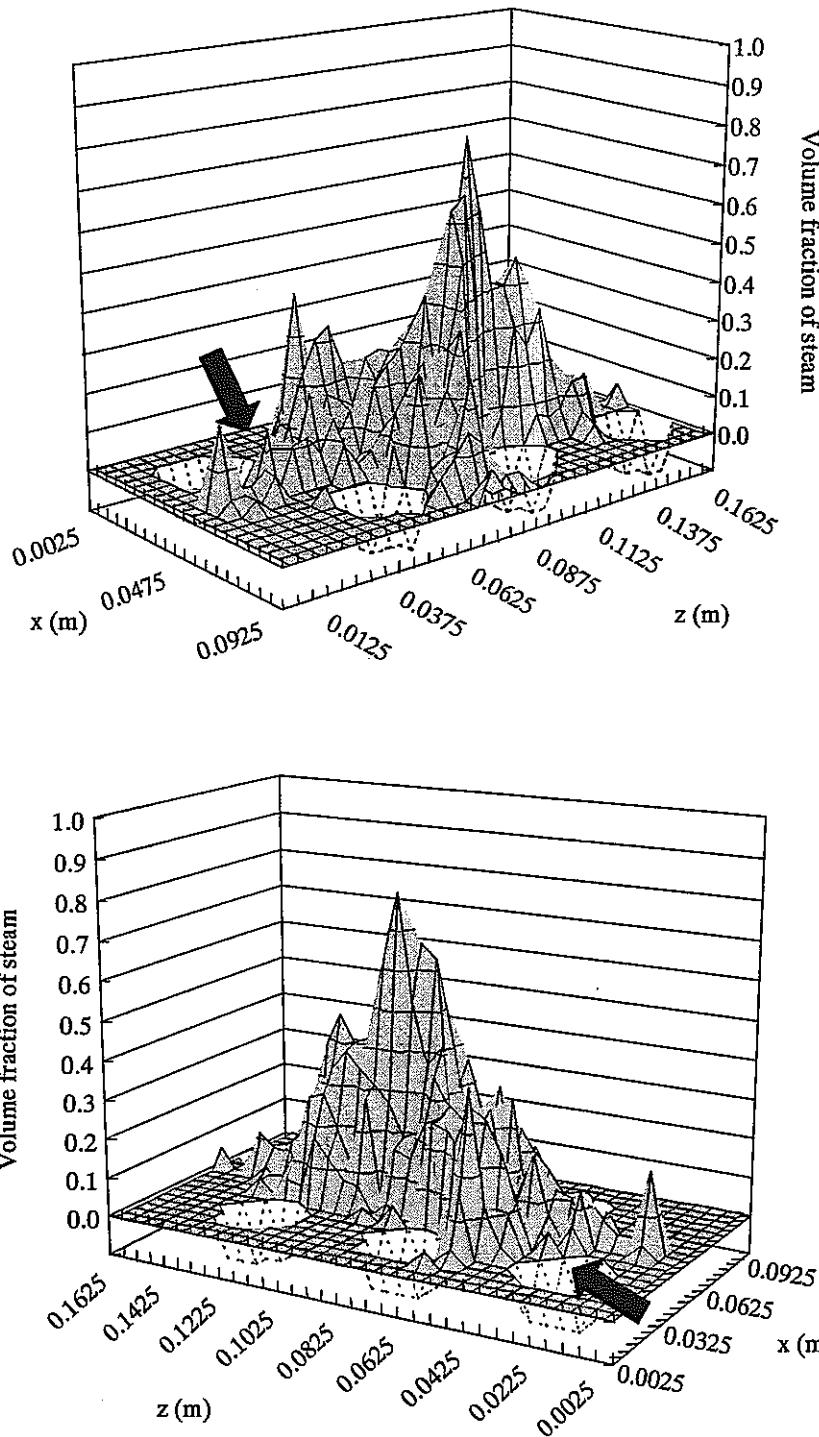


図3. 2-3 SWAT3/Run19 解析における蒸気の体積率 ( $t = 0.008$  s)  
矢印は水ジェットの噴出孔を示す。

#### 4. 調査検討

粒子法における BCA(Binary contact area)を定量的に検証するためには、相変化速度や化学反応速度、および BCA が評価されている実験が必要となる。多数の文献を調査したが、目的に合致する実験はなかった。このため、多成分蒸発／凝縮現象に関して詳細なデータが得られている一連の実験（九州大学）を検討した[4-1～4-3]。これらの実験では、非凝縮ガスを含まない場合の蒸発／凝縮現象、非凝縮性ガスを含む場合の多成分蒸発／凝縮現象や、回転系・障害物插入系での気液二相流実験が実施されている。これらの中で凝縮過程に関する実験を以下にまとめ、本研究の目的に利用できる実験データを検討する。

##### (1) 乾き蒸気中に置かれた銅球表面への蒸気凝縮実験

乾き蒸気中に置かれた銅球表面への蒸気凝縮による銅球の温度上昇データを測定している。実験条件を図 4-1 に、測定結果を図 4-2 に示す（同図の解析の結果は[4-2]参照）。実験では蒸気に含まれる非凝縮性ガスの量をパラメータとしているが、凝縮性ガスが無い場合も測定されている。

##### (2) 水プールへ蒸気を吹き込む実験

水プールへ吹き込まれた蒸気の凝縮の様子を観測している。実験では蒸気の水プールへの侵入距離及び気泡径を測定している。侵入距離は蒸気の凝縮率を反映している。実験体系を図 4-3 に示す。蒸気の流入量は 400 L/h であり、これは流速 81 m/s に対応する。蒸気の挙動を撮影した写真を図 4-4 に示す。図中の温度差は水プールと蒸気の温度差である。実験では蒸気に混合させて水プールに吹き込む非凝縮性ガスの流量をパラメータとしているが、凝縮性ガスが無い場合も測定されている。

複雑に変化する界面における BCA を評価するという目的のためには、「水プールへ蒸気を吹き込む実験」が適している。蒸気は比較的高速で吹き込まれていることから、水-蒸気界面は時間的にも空間的にも複雑に変化していると考えられる。蒸気の最大侵入距離の再現性より、凝縮速度すなわち BCA の大きさの妥当性を確認することができる。また、ここでの目的のためには非凝縮性ガスは流入させない場合の実験を解析することとなる。

Superheated steam

408 K, 1.1 bar

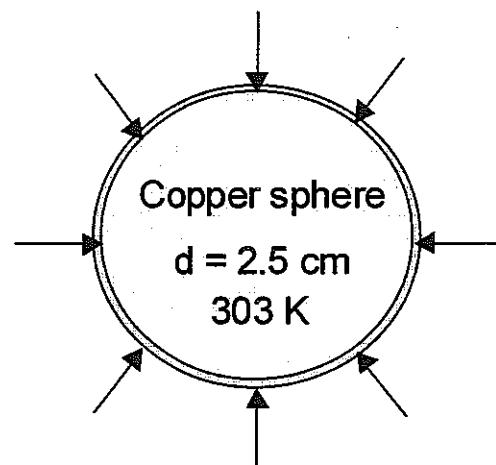


図 4-1 乾き蒸気中に置かれた銅球表面への蒸気凝縮実験の実験条件

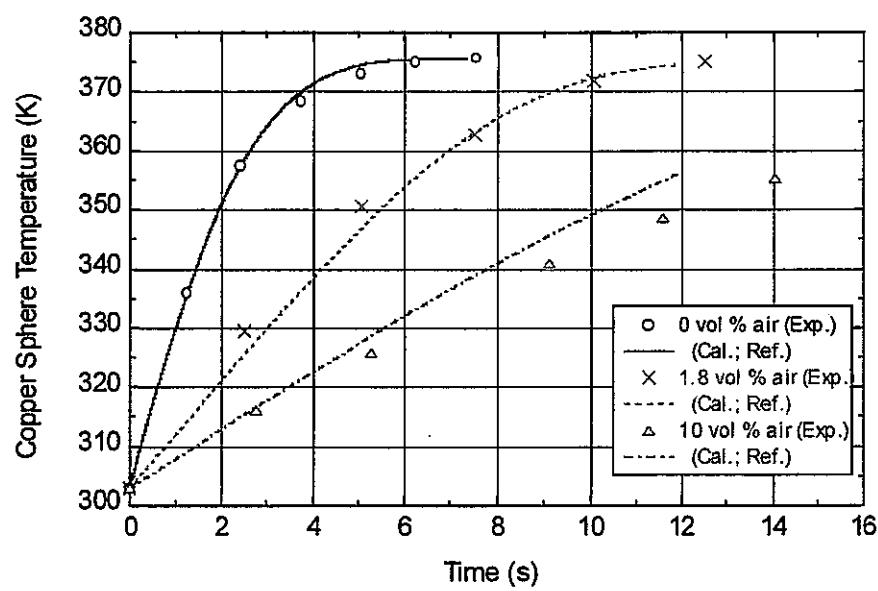


図 4-2 乾き蒸気中に置かれた銅球表面への蒸気凝縮実験での銅球の温度測定結果

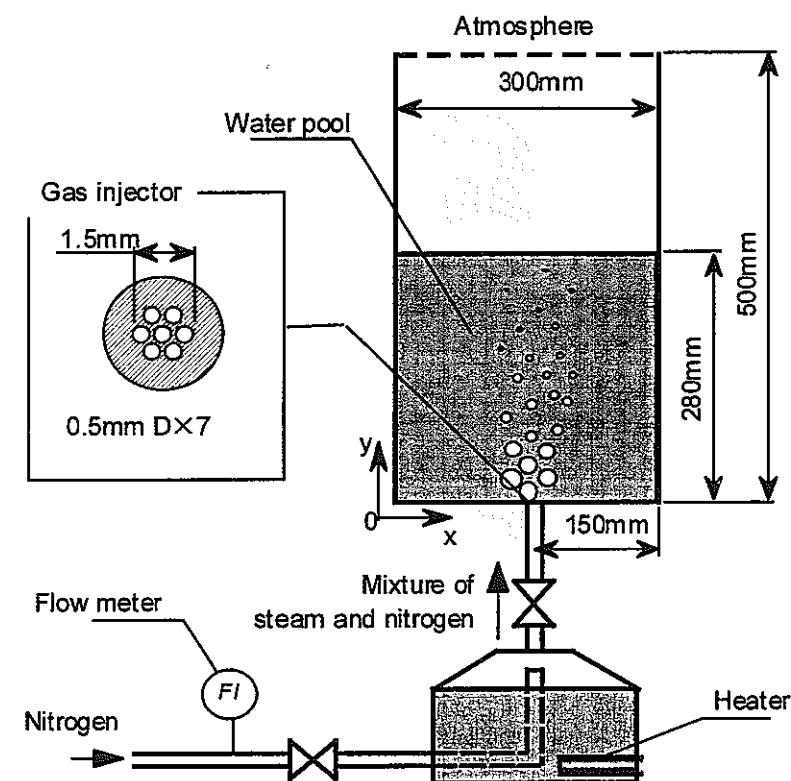


図4-3 水プールへ蒸気を吹き込む実験の実験体系

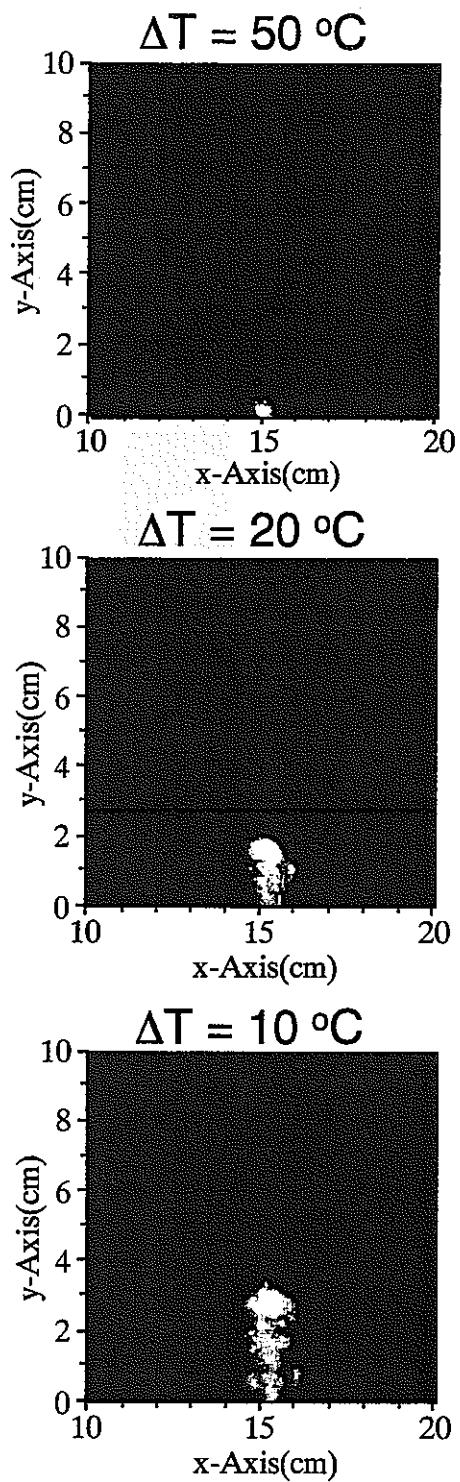


図 4-4 水プールへ蒸気を吹き込む実験の実験写真

## 5. まとめ

ナトリウムー水反応に代表される現象が高速炉を構成する機器に及ぼす影響を、伝熱流動数値実験により評価するには、反応の発生個所のみならず機器全体を解析対象とする必要がある。このためには、相変化・化学反応を伴う多相・多成分の反応性流体の挙動を適切にモデル化し、解析コードに組み込む必要がある。

反応性流体の挙動の内、相変化量・化学反応量は、反応の生じている界面の面積に依存しており、この面積は界面の形状により大きく変化する。しかしナトリウムー水反応における界面挙動に関し、まとまった知見は現在のところ得られていない。

本件は、微視的・直接的な解析手法である粒子法を用いて、上記分野における伝熱流動数値実験において必要とされる反応性流体の流動様式・界面濃度に関する知見を得ること目的として開始された。

しかしながら、粒子法を含む微視的手法に共通することであるが、物理現象に適したサイズの粒子を扱うと粒子数が膨大となり、計算時間の制約から何らかの方策が必要であった。本件では、水・ナトリウム反応を扱うために必要となる界面積挙動の評価の解像度を向上させることを目的として、計算粒子サイズ以下のスケールへの液滴の分裂現象を、粒子に作用する動圧（慣性力）、表面張力、粘性せん断力によって（実験式ベースで）評価する sub-particle モデルを開発し基本的機能の検証解析を実施した。対象は前年度にも解析した、ガソリンプールに水を噴出させる実験である。

その結果、おそらく用いた粒子サイズが十分小さくなかったためと考えられるが、sub-particle モデルの流体力学的効果を明らかにするには至らなかった。これは、粒子サイズを倍にしても、sub-particle モデルを用いれば、もとの粒子サイズによる結果と同程度の流体力学的挙動が得られると予想したが、粒子サイズを倍にして sub-particle モデルを用いない結果ともとの粒子サイズによる結果との間に大差が見られなかったという意味であり、結果が妥当でないということではない。

しかし、sub-particle モデルを用いたケースでは、水ジェットの主流から離れた水粒子は大きな界面積(BCA)を有すること等の知見が得られた。

粒子法による界面積の定式化にはいくつかの比較的任意性のあるパラメータが含まれているため、解析精度を向上するためにはさらに実験解析が必要となる。

また、これまで開発してきた相変化モデルを組み込んだジェット解析粒子法コードにより、SWAT3/Run19 の予備解析を実施し、伝熱管を含む複雑な計算領域に対する相変化モデルの機能検証を実施した。この解析においては噴出した水が高温のナトリウムと接触して蒸気になる相変化過程を扱い、相変化を含む液液気 3 流体コードの基本的機能が確認できた。

## 謝辞

本業務を遂行するにあたり、サイクル機構大洗工学センターシステム技術開発部 山口 彰殿、および岡野 靖殿には研究の進め方、現象の解釈等にわたりコメントを頂きました。ここに深く感謝致します。

## 参考文献

- [1-1] Koshizuka, S., Tamako, H., and Oka, Y., "A Particle Method for Incompressible Viscous Flow with Fluid Fragmentation," *Comput. Fluid Dynamics J.*, VOL. 4, 29, (1995).
- [1-2] Koshizuka, S., and Oka, Y., "Moving-Particle Semi-Implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid," *Nucl. Sci. and Eng.*, VOL. 123, July (1996).
- [1-3] 白川, 堀江, 山本, "粒子法による気液2相流動様式の研究," 粒子法研究会(弥生研究会), 1999年3月
- [1-4] 白川, 堀江, 山本, "粒子法による流動様式評価手法の研究," 日本原子力学会, 春の年会, 1999年3月
- [1-5] Shirakawa, N., Horie, H., and Yamamoto, Y., "A Study on the Evaluation Method of Flow Regimes with the Particle Interaction Method," ICONE-7278, 7th Int. Conf. on Nucl. Eng., Tokyo, Japan, April 19-23, (1999),
- [1-6] 白川, 堀江, 山本, "気液2流体粒子法による流動様式実験解析," 日本原子力学会, 秋の大会, 1999年9月
- [1-7] 白川, 堀江, 山本, "気液2流体粒子法による流動様式実験解析2," 日本原子力学会, 春の年会, 2000年4月
- [1-8] Shirakawa, N., Horie, H., Yamamoto, Y., and Tsunoyama, S. :Development and Verification Study of the Two-Fluid Particle Interaction Method – Two-Phase Flow Analysis Free from Experimental Correlation –, *Comput. Fluid Dynamics J.* vol. 9, No. 4 Jan. (2001).
- [1-9] Shirakawa, N., Horie, H., Yamamoto, Y., and Matsumiya, H. : A feasibility study of the particle interaction method for the flow regimes with the chemical reaction, JNC TJ9440 2000-008, March 2000.
- [1-10] 田辺, 渡辺, "蒸気発生器安全性総合試験装置(SWAT-3)による破損伝播試験(V)", PNC TN9410 86-104, 1986年9月
- [1-11] 浜田広次, "蒸気発生器伝熱管の高温ラプチャ型破損評価手法の整備と適用", PNC TN9410 98-029 1998年6月
  
- [2-1] Brodkey, R. S., *The Phenomena of Fluid Motions*, Addison-Wesley Pub. Co. (1967).
- [2-2] Hinze, J. O., "Fundamental of the Hydrodynamic Mechanism of splitting in Dispersion Processes," *AIChE J.*, vol.1, 289 (1955).
- [2-3] Pilch, M. and Erdman, C. A., "Use of Breakup Time Data and Velocity History Data to Predict the Maximum Size of Stable Fragments for Acceleration-Induced Breakup of a Liquid Drop," *Int. J. Multiphase Flow*, vol.13, no.6, 741 (1987).
  
- [4-1] 福田研二, 守田幸路, 藤本登, 饒燕飛, 中川清, "多次元・混相流解析におけるドリフトモデルの検証", 日本原子力学会, 秋の大会, 1999年9月

- [4-2] 守田幸路, 藤本登, 福田研二, 飛田吉春, 山野秀将, 近藤悟, "炉心損傷時の多成分蒸発／凝縮現象のモデル化手法に関する研究", 日本原子力学会, 春の年会, 2000 年 3 月
- [4-3] Matsumoto, T., Kamesako, N., Seki, T., Uchibori, A., Akasaka, R., Fujimoto, N., Nakagawa, K., Morita, K., and Fukuda, K., "Analytical and Experimental Studies of Two Phase Flows in 2-D Rectangular Box with Obstacles Inserted,"NTHAS2: Second Japan-Korea Symposium on Nuclear Thermal Hydraulics and Safety, Fukuoka, Japan, Oct. 15-18, 2000

## 付録 解析プログラムの説明

## 付録目次

1. コード機能概要	A1-1
2. 実行方法	A2-1
2. 1 コンパイル方法	A2-1
2. 2 入出力ファイル	A2-1
3. モジュール構成	A3-1
3. 1 モジュール構成図	A3-1
3. 2 モジュール概要	A3-2
3. 3 アルゴリズム概要	A3-3
4. 入力データ	A4-1
4. 1 説明の形式	A4-1
4. 2 変数の説明	A4-1
4. 3 入力データ（ガソリンプールへの水ジェットの噴射解析）	A4-4
5. コモン変数	A5-1
5. 1 parameter 文	A5-1
5. 2 common 文	A5-1
6. コードの説明	A6-1
6. 1 解析対象の変更	A6-1
6. 2 初期粒子設定 1	A6-1
6. 3 初期粒子設定 2	A6-2
6. 4 液体の表面張力	A6-3
6. 5 BCA の計算	A6-3

## 1. コード機能概要

本コードは粒子法による複数液体解析コードである。ここで言う粒子法とはいわゆる MPS 法(Moving Particle Semi-implicit Method)である。それぞれの液体を区別する量は、質量密度、粘性係数、表面張力の強さである。表面張力は粒子間相互作用としてモデリングされていて、同一液体の粒子間にのみに作用する。

## 2. 実行方法

### 2. 1 コンパイル及び実行方法

make ファイル「make\_jet1」を実行すると、実行形式ファイル「pim.jet1」ができる。  
実行スクリプト「run」を実行する。

### 2. 2 入出力ファイル

入出力関連ファイルを以下に示す：

inp	入力ファイル
out	タイムステップ数、時刻出力ファイル (標準出力書き出し用ファイル)
fort.22	粒子位置出力ファイル
frest#####	リスタートファイル (#####は 6 桁の数字 (入力変数説明参照))

### 2. 3 出力ファイルの形式

粒子位置座標の出力ファイル fort.22 の出力形式は、各出力タイムステップ毎に以下の形式である。

			Format
時刻			e17.5
粒子数			i6
1 (粒子番号)			i6
粒子 1 の x 座標	粒子 1 の y 座標	粒子 1 の z 座標	f7.2,3x,f7.2,3x,f7.2
粒子 1 の R	粒子 1 の G	粒子 1 の B	f4.1,3x,f4.1,3x,f4.1
2 (粒子番号)			
粒子 2 の x 座標	粒子 2 の y 座標	粒子 2 の z 座標	
粒子 2 の R	粒子 2 の G	粒子 2 の B	
3 (粒子番号)			
粒子 3 の x 座標	粒子 3 の y 座標	粒子 3 の z 座標	
粒子 3 の R	粒子 3 の G	粒子 3 の B	
.			
.			
.			
(粒子の個数分続く)			

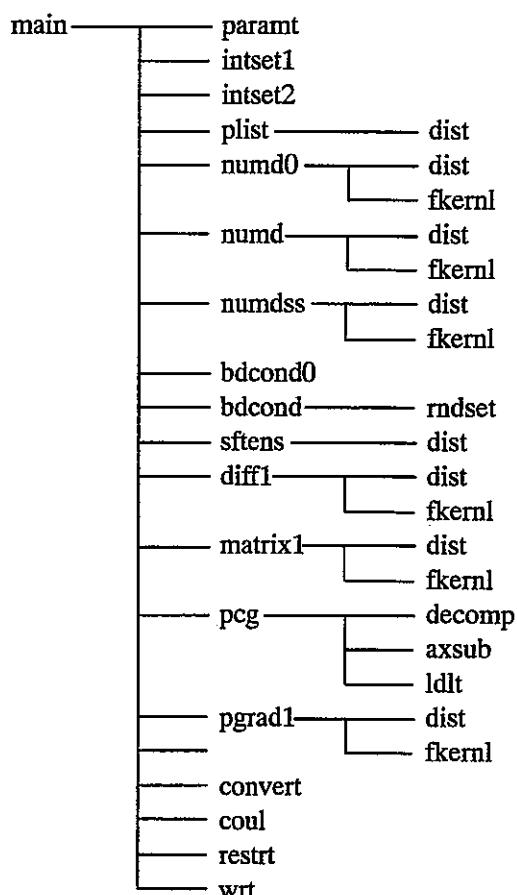
R, G, B は結果を可視化ツール等ですぐに可視化できるように液体を色で区別するための値であり、それぞれ Red, Green, Blue の成分である。色と粒子の対応は以下の通りである。

	R	G	B
液体 1 (水)	0.2	0.2	0.6
液体 2 (ガソリン)	0.2	0.5	0.5
構造体	0.4	0.8	0.2

粒子番号は粒子の追加・削除がある毎に付け直し、配列の節約を図っている。出力時刻が違えば粒子番号が同じでも一般には違う粒子である。

## 3. モジュール構成

## 3. 1 モジュール構成図



### 3. 2 モジュール概要

モジュール名	機能
axsub	行列とベクトルの積の計算 (ICCG 法)
bdcond0	初期状態設定のための粒子削除等
bdcond	粒子の追加・削除に関する境界条件の設定
blockd	ブロックデータ
convert	陰計算の収束判定
coul	クーラン条件による時間刻みの設定
decomp	行列の不完全コレスキー分解 (ICCG 法)
diff1	液体の拡散項の計算
dist	2 粒子間距離の計算
fkernl	カーネル関数の計算
intset1	初期状態設定
intset2	初期状態設定
ldlt	三角行列方程式を解く (ICCG 法)
main	メインルーチン
matrix1	液体圧力方程式の行列作成 (ICCG 法用)
numd	粒子数密度の計算
numd0	初期粒子数密度の計算
numdss	構造体 - 構造体間の粒子数密度の計算
paramt	パラメータの設定
pcg	ICCG 法メインルーチン
pgrad1	液体の圧力勾配項の計算
plist	近傍粒子リストの作成
restrt	リスタートファイルの入／出力
sftens	表面張力項の計算
wrt	結果の出力

### 3. 3 アルゴリズム概要

以下に、各モジュールのフローチャート示す。

図 3-1 全体のフローチャート

図 3-2 初期設定のフローチャート

図 3-3 explicit ステージのフローチャート

図 3-4 implicit ステージのフローチャート

図 3-5 ICCG 法による圧力方程式解法のフローチャート

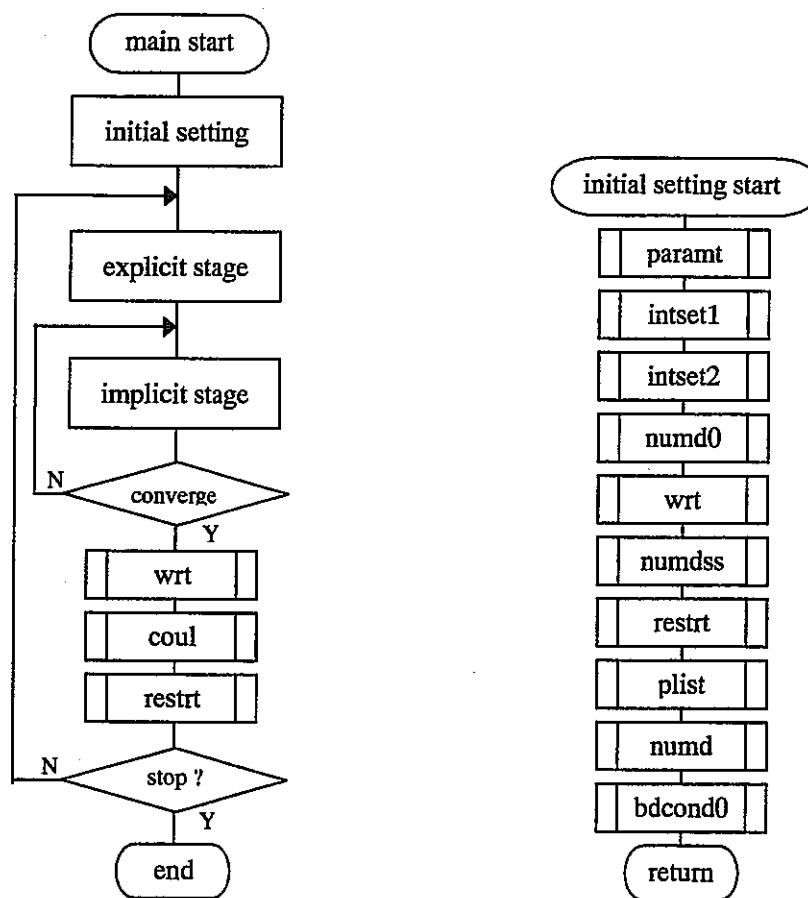


図 3-1 全体のフローチャート

図 3-2 初期設定

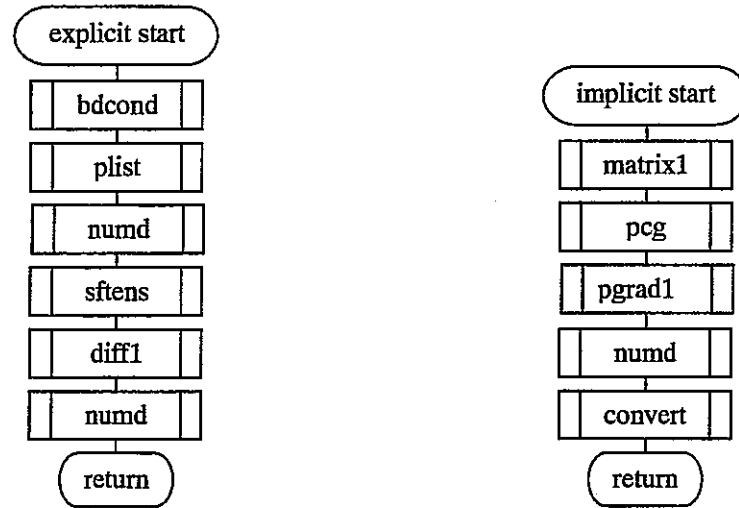


図 3-3 explicit ステージ

図 3-4 implicit ステージ

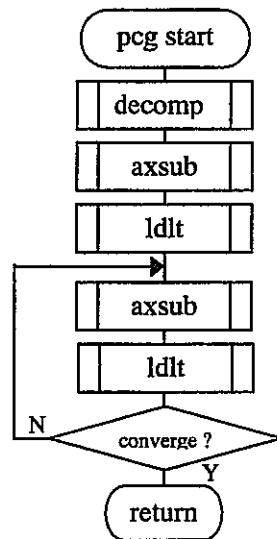


図 3-5 ICCG 法による圧力方程式解法

#### 4. 入力データ

##### 4. 1 説明の形式

本章では、入力データの説明を行う。各変数に対する説明は以下の形式で与えられている。

入力変数名	意味	単位	配列
<b>詳細説明</b>			

##### 4. 2 入力変数の説明

dms	物理空間次元数	—	—
2	: 2 次元計算		
3	: 3 次元計算		
time	計算開始時刻	s	—
tend	計算終了時刻	s	—
dt	時間刻み初期値	s	—
dtout	結果の出力時間間隔	s	—
eps	陰的計算収束判定用微小量	—	—
icmax	タイムステップ数最大値	—	—
iskip	近傍粒子リスト更新タイムステップ間隔	—	—

iskip 回ごとに近傍粒子リストを更新する。

impmax	陰的計算の繰返し最大回数	—	—
impsta1	液体圧力補正開始繰返し数	—	(infl1)

陰的計算において液体に対して圧力補正を開始する繰返し回数。その回数までは、速度及び位置をそのタイムステップでの陽的計算終了時点の値に固定する。液体の種別ごとに設定する。

irest	リスタートフラグ	—	—
0	: 通常スタート		
1	: リスタート		

irestw	リスタートファイル出力タイムステップ間隔	—	—
--------	----------------------	---	---

irestw 回ごとにリスタートファイルを書き出す。書き出すファイル名は、'frest#####' であり、#####は 6 柄で表示したタイムステップ数である。irestw は iskip の倍数でなければならない。

inrest	読み込みリスタートファイル番号	—	—
--------	-----------------	---	---

ファイル番号はリスタートファイルを出力したタイムステップ数に対応している。例えば、 $\text{inrest} = 1000$ とした場合、リスタートファイル ‘frest001000’ を読み込む。

rho1a	液体密度	g/cm <sup>3</sup>	(infl1)
-------	------	-------------------	---------

nula	液体動粘性係数	cm <sup>2</sup> /s	(infl1)
------	---------	--------------------	---------

grav	重力加速度	cm/s <sup>2</sup>	—
------	-------	-------------------	---

ren1	液体カーネル関数径係数	—	—
------	-------------	---	---

カーネル関数径の初期値  $\text{ren1a}$  は次式で与えられる

$$\text{ren1a} = \text{ren1} * \text{dx}$$

relap1	液体カーネル関数径係数 (圧力ラプラシアン)	—	—
--------	---------------------------	---	---

カーネル関数径の初期値  $\text{renlp1a}$  は次式で与えられる

$$\text{renlp1a} = \text{relap1} * \text{dx}$$

renstr	構造体カーネル関数径係数	—	—
--------	--------------	---	---

カーネル関数径の初期値  $\text{rensa}$  は次式で与えられる

$$\text{rensa} = \text{renstr} * \text{dx}$$

relaps	構造体カーネル関数径係数 (圧力ラプラシアン)	—	—
--------	----------------------------	---	---

カーネル関数径の初期値  $\text{renpsa}$  は次式で与えられる

$$\text{renpsa} = \text{relaps} * \text{dx}$$

rfacls	近傍粒子リスト登録範囲係数	—	—
--------	---------------	---	---

近傍粒子リストに登録する粒子の探索を行う領域の半径をカーネル関数径の何倍とするかを設定する。コード内では領域の半径を、 $\text{ren1a} * \text{rfacls}$  としている。

beta1	界面液体粒子判定用係数	—	—
-------	-------------	---	---

粒子数密度  $n_i$  が、 $n_i < \text{beta1} * n^0$  の範囲にある液体粒子を界面粒子と判定する。ここで、 $n^0$  は初期粒子密度である。

clf	クーラン数	—	—
-----	-------	---	---

icdt1	時間刻み最大／最小値切替えたタイムステップ数	—	—
dtmax1	時間刻み最大値 1	s	—
dtmin1	時間刻み最小値 1	s	—
dtmax2	時間刻み最大値 2	s	—
dtmin2	時間刻み最小値 2	s	—

時間刻み  $\Delta t$  の取り得る範囲を、タイムステップ数が  $\text{icdt1}$  までは、

$$\text{dtmax1} > \Delta t > \text{dtmin1}$$

それ以後は

$$\text{dtmax2} > \Delta t > \text{dtmin2}$$

とする。

rrep1a	液体表面張力の斥力範囲係数	—	(infl1)
ratr1a	液体表面張力の引力範囲係数	—	(infl1)
frep1a	液体表面張力の斥力	cm/s <sup>2</sup>	(infl1)
fatr1a	液体表面張力の引力	cm/s <sup>2</sup>	(infl1)

表面張力を表わす 2 粒子間の相互作用は、2 粒子間の距離により、

$$0 \sim rrep1a * dx \text{ (cm)} \quad \text{の場合、絶対値 frep1a の斥力}$$

$$rrep1a * dx \sim ratr1a \text{ (cm)} \quad \text{の場合、絶対値 fatr1a の引力}$$

とする。

ixmax	初期配置における x - 軸方向の格子点 最大数	—	—
iymax	初期配置における y - 軸方向の格子点 最大数	—	—
izmax	初期配置における z - 軸方向の格子点 最大数	—	—

dx	x - 軸方向の初期粒子間隔	cm	—
dy	y - 軸方向の初期粒子間隔	cm	—
dz	z - 軸方向の初期粒子間隔	cm	—

現状のコードでは、 $dx = dy = dz$  とする必要がある。

iumax	不使用	—	—
iu	粒子の初期速度	cm/s	(iumx, idm)

粒子種別 i の粒子の初期速度の (x, y, z) 成分を、

$$( ui(i, 1), ui(i, 2), ui(i, 3) )$$

とする。

rngh1	体系の高さ (y - 軸方向の長さ)	cm	—
rngd1	体系の内径	cm	—
theta	鉛直上向きと y 軸正方向のなす角度	°	—

鉛直方向は x - y 平面内に限られている。

inzl	ノズルの長さ s	個	—
------	----------	---	---

粒子の個数で指定する。

## 4. 3 入力データ（ガソリンプールへの水ジェットの噴射解析）

ガソリンプールへの水ジェットの噴射解析にたいする入力データを以下に示す。

```

&intcnd
dms = 3.d0,
time=0.d0,tend=0.3d+00,dt=1.d-4,dtout=5.d-3,eps=1.d-6,
icmax=100000,iskip=5,
impmax=20,
impsta1(1)=11,impsta1(2)=1,
irest=0, irestw=1000,inrest=0,
rho1a(1)=1.0d0,rho1a(2)=0.787d0,
nu1a(1) = 0.01,nu1a(2) =0.01,
grav=980.0,
ren1= 1.5d0,relap1=1.5d0,
renstr=1.5d0,relaps=1.5d0,
rfacts=1.5,
beta1=1.0d0,
clf=0.2d0,icdt1=-1,
dtmax1=1.d-4,dtmin1=1.d-4,dtmax2=1.d-3,dtmin2=1.d-7,
rrep1a(1)=1.0, rrep1a(2)=1.0,
ratr1a(1)=2.0, ratr1a(2)=2.0,
frep1a(1)=22.5, frep1a(2)=7.61175,
fatr1a(1)=112.5, fatr1a(2)=38.05875,
&end
&sys1
ixmax=22,iymax=64,izmax=22,dx=0.1,dy=0.1,dz=0.1,iu=7,
ui(1,1)=0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,
ui(1,2)=0.0,-200.0, 0.0, 0.0, 0.0,-200.0, 0.0,
ui(1,3)=0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,
&end
&sys2
rngl1=6.0 ,rngd1=1.9,,theta=0.0,inzl=10,
&end

```

## 5. common データ

com.h の内容について説明する。

## 5. 1 parameter 文

parameter 文により値を定義すべき変数を以下に示す。

(例)

```
parameter (idm=3)
parameter (il1=16600,is=8100,i50=90,j50=90)
parameter (ixmx=50,iymx=150,izmx=50,iumx=10)
parameter (infl1=2,infs=1)
parameter (ina = 7, inamax = 6000)
parameter (ils=il1+is)
```

変数名 (配列)	意味	単位	備考
idm	物理空間次元数	—	常に 3 とする
il1	液体粒子数 (最大値)	—	
is	構造体粒子数 (最大値)	—	
i50	近傍粒子数最大値 (行列以外)	—	
j50	近傍粒子数最大値 (行列作成用)	—	
ixmx	初期配置における x - 軸方向の格子点最大数	—	
iymx	初期配置における y - 軸方向の格子点最大数	—	
izmx	初期配置における z - 軸方向の格子点最大数	—	
iumx	初期速度を設定する粒子種別最大数	—	
infl1	液体種類数	—	1 以上の値とする
infs	構造体種類数	—	1 以上の値とする
ina	近傍粒子リスト作成用領域分割数	—	y - 軸方向の分割
inamax	近傍粒子リスト用領域分割における各領域の粒子数最大値	—	

## 5. 2 common 文

c mesh

common /sys0/ icycle

変数名 (配列)	意味	単位	備考
icycle	タイムステップ数	—	

common /sys1/ dms,dx,dy,dz,ixmax,iymax,izmax

変数名 (配列)	意味	単位	備考
dms	解析対象の空間次元数	—	
dx	x - 軸方向の初期粒子間隔	cm	dx = dy = dz とする
dy	y - 軸方向の初期粒子間隔	cm	dx = dy = dz とする
dz	z - 軸方向の初期粒子間隔	cm	dx = dy = dz とする
ixmax	初期配置における x - 軸方向の格子点最大数	—	ixmax ≤ ixmx が必要

iymax	初期配置における y - 軸方向の格子点最大数	—	iymax ≤ iymx が必要
izmax	初期配置における z - 軸方向の格子点最大数	—	izmax ≤ izmx が必要

common /isys2/ time,tend,dtout,timout,  
& dt,dtmax1,dtmin1,dtmax2,dtmin2,icdt1

変数名 (配列)	意味	単位	備考
time	実時間	s	
tend	計算終了時間	s	
dtout	結果の出力間隔	s	
timout	結果出力用時間カウンター	s	
dt	時間刻み	s	
dtmax1	時間刻み最大値 1	s	入力変数説明参照
dtmin1	時間刻み最小値 1	s	入力変数説明参照
dtmax2	時間刻み最大値 2	s	入力変数説明参照
dtmin2	時間刻み最小値 2	s	入力変数説明参照
icdt1	時間刻み最大／最小値切替えたタイムステップ数	—	入力変数説明参照

common /isys3/ n1,onen1

変数名 (配列)	意味	単位	備考
n1	液体初期粒子数密度	—	
onen1	液体初期粒子数密度の逆数	—	

common /isys4/ inl1,inl3,ins,in1,iinl1

変数名 (配列)	意味	単位	備考
inl1	液体粒子数	個	
inl3	境界での挿入粒子数	個	同時に挿入する数
ins	構造粒子数	個	
in1	(液体 + 構造体) 粒子数	個	
iinl1	液体粒子数の初期値	個	

common /isys5/ ren1,relap1,renstr,relaps

変数名 (配列)	意味	単位	備考
ren1	液体カーネル関数径係数	—	
relap1	液体カーネル関数径係数 (圧力ラプラスアン)	—	
renstr	構造体カーネル関数径係数	—	
relaps	構造体カーネル関数径係数 (圧力ラプラスアン)	—	

## common /isys6/ renl1(il1),renlp1(il1),rens(is),renlps(is)

変数名 (配列)	意味	単位	備考
renl1(il1)	液体カーネル関数径	cm	
renlp1(il1)	液体カーネル関数径 (圧力ラプラスアン)	cm	
rens(is)	構造体カーネル関数径	cm	
renlps(is)	構造体カーネル関数径 (圧力ラプラスアン)	cm	

## common /isys7/ beta1

変数名 (配列)	意味	単位	備考
beta1	界面液体粒子判定用係数		入力変数説明参照

## common /isys8/ conv1,eps

変数名 (配列)	意味	単位	備考
conv1	液体粒子数密度の初期粒子数密度からのはずれの2乗和の平方根	—	
eps	陰的繰返し計算収束判定用微小量	—	

## common /isys9/ clf

変数名 (配列)	意味	単位	備考
clf	クーラン数	—	

## common /isys11/ nep

変数名 (配列)	意味	単位	備考
nep	微小量	—	未使用

## common /isys12/ iskip,jskip

変数名 (配列)	意味	単位	備考
iskip	近傍粒子リスト更新タイムステップ間隔		入力変数説明参照
jskip	近傍粒子リスト作成フラグ		

## common /isys13/ impmax,impsta1(infl1)

変数名 (配列)	意味	単位	備考
impmax	陰的計算の繰り返し回数最大値	—	
impsta1(infl1)	液体圧力補正開始繰返し数	—	入力変数説明参照

## common /isys14/ renl1a,renlp1a,rensa,renlpsa

変数名 (配列)	意味	単位	備考
renl1a	液体カーネル関数径初期値	cm	
renlp1a	液体カーネル関数径初期値	cm	

	(圧力ラプラシアン)		
rensa	構造体カーネル関数径初期値	cm	
renlpsa	構造体カーネル関数径初期値 (圧力ラプラシアン)	cm	

**c parameter**

common /para0/ minus,minus1,half,zero,one,two,three,four,pi

変数名 (配列)	意味	単位	備考
minus	定数 -1.0	—	
minus1	定数 -1.0	—	
half	定数 0.5	—	
zero	定数 0.0	—	
one	定数 1.0	—	
two	定数 2.0	—	
three	定数 3.0	—	
four	定数 4.0	—	
pi	定数 $\pi$	—	

common /para1/ dims,grav,exforc,theta

変数名 (配列)	意味	単位	備考
dims	空間次元数	—	
grav	重力加速度	cm/s <sup>2</sup>	
exforc	単位体積当たりの重力	cm/s <sup>2</sup>	
theta	鉛直上向きと y 軸正方向のなす角度	°	入力変数説明参照

common /para2/ clamd

変数名 (配列)	意味	単位	備考
clamd	ラプラシアン用係数	—	

common /para3/ nu1a(infl1),mu1(il1),nu1(il1),cef1(il1)

変数名 (配列)	意味	単位	備考
nu1a(infl1)	液体動粘性係数初期値	cm <sup>2</sup> /s	
mu1(il1)	液体粘性係数	g/cm/s	
nu1(il1)	液体動粘性係数	cm <sup>2</sup> /s	
cef1(il1)	液体ラプラシアン用係数	—	拡散項

common /para4/ cl1(il1+is)

変数名 (配列)	意味	単位	備考
cl1(il1+is)	液体ラプラシアン用係数	—	圧力方程式

## c frags

common /frag1/ itable(is),  
 & ir(ixmx,iymx,izmx),ui(iumx,idm),iu(ixmx,iymx,izmx)

変数名(配列)	意味	単位	備考
itable(is)	移動境界粒子識別フラグ	—	
ir(ixmx,iymx,izmx)	初期粒子位置設定変数	—	
ui(iumx,idm)	初期粒子速度	—	入力変数説明参照
iu(ixmx,iymx,izmx)	初期粒子速度設定変数	—	

## common /frag2/ ifl1(il1)

変数名(配列)	意味	単位	備考
ifl1(il1)	液体粒子の種別番号フラグ	—	

## common /var0/ dr(idm)

変数名(配列)	意味	単位	備考
dr(idm)	2 粒子間距離の(x, y, z)方向成分	cm	

## c positin, velocity, number density

common /var1/  
 & rl1(idm,il1), ul1(idm,il1), nl1(il1),  
 & rl1a(idm,il1),ul1a(idm,il1),nl1a(il1),  
 & nl1i(il1),nl1ia(il1),  
 & rs(idm,is),us(idm,is),  
 & ns1(is),nst1(is),nss(is), ns21(is),  
 & rli(idm,ixmx\*izmx),uli(idm,ixmx\*izmx),rsi(idm,is)

変数名(配列)	意味	単位	備考
rl1(idm,il1)	液体位置座標	cm	
ul1(idm,il1)	液体速度	cm/s	
nl1(il1)	液体粒子数密度	—	液体と構造体からの寄与の和
rl1a(idm,il1)	液体位置座標の仮の更新値	cm	
ul1a(idm,il1)	液体速度の仮の更新値	cm/s	
nl1a(il1)	液体粒子数密度の仮の更新値	—	液体と構造体からの寄与
nl1i(il1)	液体粒子数密度	—	同種液体からの寄与
nl1ia(il1)	液体粒子数密度の仮の更新値	—	同種液体からの寄与
rs(idm,is)	構造体粒子の位置座標	cm	
us(idm,is)	構造体粒子の速度	cm/s	
ns1(is)	構造体粒子密度	—	液体と構造体からの寄与
nst1(is)	構造体粒子密度	—	構造粒子と仮想構造粒からの寄与
nss(is)	構造体粒子密度	—	仮想構造体からの寄与

ns21(is)	構造体粒子密度	—	液体粒子からの寄与
rli(idm,ixmx*izmx)	境界での挿入粒子の初期位置保存変数	cm	
uli(idm,ixmx*izmx)	境界での挿入粒子の初期速度保存変数	cm/s	
rsi(idm,is)	移動境界粒子の初期位置保存変数	cm	

仮の更新値は explicit 計算終了時点の値である。

仮想構造体とは、実際に配置している構造体粒子の粒子数密度を計算するために仮想的に計算体系の外部にあると見なしている構造体粒子である（6. 3 参照）。

#### c particle table

```
common /var2/
&      rfacls,darea,
&      itb1(il1,i50),itbs1(il1,i50),
&      itbn1(il1),itbns1(il1),
&      itbs(is,i50),itb1s(is,i50),
&      itbns(is),itbn1s(is),
&      iatbn1(ina),iatbns(ina),
&      iatb1(ina,inamax),iatbs(ina,inamax)
```

変数名 (配列)	意味	単位	備考
rfacls	近傍粒子リスト登録範囲係数	—	入力変数説明参照
darea	近傍粒子リスト作成用分割領域の長さ	cm	
itb1(il1,i50)	液体粒子近傍の液体粒子番号	—	
itbs1(il1,i50)	液体粒子近傍の構造体粒子番号	—	
itbn1(il1)	液体粒子近傍の液体粒子数	個	
itbns1(il1)	液体粒子近傍の構造体粒子数	個	
itbs(is,i50)	構造体粒子近傍の構造体粒子番号	—	
itb1s(is,i50)	構造体粒子近傍の液体粒子番号	—	
itbns(is)	構造体粒子近傍の構造体粒子数	個	
itbn1s(is)	構造体粒子近傍の液体粒子数	個	
iatbn1(ina)	各分割領域内の液体粒子数	個	
iatbns(ina)	各分割領域内の構造体粒子数	個	
iatb1(ina,inamax)	各分割領域内の液体粒子番号	—	
iatbs(ina,inamax)	各分割領域内の構造体粒子番号	—	

#### c diffusion term

```
common /var3/
&      df11(idm,il1),ul1d(idm,il1)
```

変数名 (配列)	意味	単位	備考
df11(idm,il1)	液体の拡散項	cm/s <sup>2</sup>	
ul1d(idm,il1)	液体の圧力項	g/cm <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>	係数 $d / \rho$ が掛かっていない値

## c surface tension

```

common /var4/
&      rrep1a(infl1),ratr1a(infl1),frep1a(infl1),fatr1a(infl1),
&      fpot(idm,il1),
&      inum1,istbn1(il1),istbns1(il1)

```

変数名 (配列)	意味	単位	備考
rrep1a(infl1)	粒子間相互作用 (表面張力) の斥力部の到達範囲係数	—	入力変数説明参照
ratr1a(infl1)	粒子間相互作用 (表面張力) の引力部の到達範囲係数	—	入力変数説明参照
frep1a(infl1)	粒子間相互作用 (表面張力) の斥力部の強さ	cm/s2	入力変数説明参照
fatr1a(infl1)	粒子間相互作用 (表面張力) の引力部の強さ	cm/s2	入力変数説明参照
fpot(idm,il1)	粒子間相互作用項 (表面張力項)	cm/s2	
inum1	初期位置での粒子間相互作用 (表面張力) 範囲内にいる粒子数	個	粒子の種類は問わない
istbn1(il1)	各液体粒子の粒子間相互作用 (表面張力) 範囲内にいる同種液体粒子数	個	
istbns1(il1)	各液体粒子の粒子間相互作用 (表面張力) 範囲内にいる構造体粒子数	個	

## c iccg input

```

common /var5/
&      a(j50,ils),b(ils),
&      pl1(ils),pl1o(ils),
&      p(ils),q(ils),r(ils),dd(ils),ap(ils),
&      jcp(ils),ksp(j50,ils),
&      inwbd(ils)

```

変数名 (配列)	意味	単位	備考
a(j50,ils)	圧力方程式係数行列	—	
b(ils)	圧力方程式ソース項ベクトル	dyn/cm <sup>2</sup>	
pl1(ils)	液体、構造体粒子の圧力	dyn/cm <sup>2</sup>	
pl1o(ils)	液体、構造体粒子の圧力の前回値	dyn/cm <sup>2</sup>	
p(ils)	ICCG 法ルーチンで用いる内部変数		
q(ils)	ICCG 法ルーチンで用いる内部変数		
r(ils)	ICCG 法ルーチンで用いる内部変数		
dd(ils)	ICCG 法ルーチンで用いる内部変数		
ap(ils)	ICCG 法ルーチンで用いる内部変数		
jcp(ils)	係数行列の各行のノンゼロ要素の数	—	
ksp(j50,ils)	係数行列の各行のノンゼロ要素の列番号	—	
inwbd(ils)	境界粒子フラグ	—	

圧力の絶対値は境界での値 plbd を加えて pl1 + plbd である。

## c mass density

common /var6/ rho1a(infl1),rho1(il1)

変数名（配列）	意味	単位	備考
rho1a(infl1)	液体密度の初期値	g/cm3	
rho1(il1)	液体密度	g/cm3	

現状のコードでは初期値から変化しない。

## c for boundary condition

common /var7/ rref

変数名（配列）	意味	単位	備考
rref	移動境界の移動量カウンター	cm	

## c vertical dimension

common /var11/ rvl1(il1),rvs(is)

変数名（配列）	意味	単位	備考
rvl1(il1)	—	cm	0を与えておく
rvs(is)	—	cm	0を与えておく

## c boundary conditon for pressure

common /var13/ plbd

変数名（配列）	意味	単位	備考
plbd	圧力の境界条件値	dyn/cm2	

## 6. コードの説明

### 6. 1 解析対象の変更

本コードは円管内部の液体プールへの液体ジェットの噴射を解析するためのコードであり、体系の長さ・径・噴射ノズルの位置等は入力データにより変更できる。しかし、解析する体系の形状、扱う液体の初期配置設定、境界条件等は入力データにより変更できるようには汎用化されていない。これらの変更を行うには、以下のモジュールをユーザが変更する必要がある。

`intset1` 粒子初期配置設定モジュール

`bdcond0` 初期状態設定のための粒子削除モジュール（6. 2 参照）

`bdcond` 粒子の追加・削除に関する境界条件設定モジュール

現状のジェット解析においては、これらのファイルは、`intset1_jet1.f` `bdcond0_jet1.f` `bdcond_jet1.f` となっている。

### 6. 2 初期粒子設定 1

本コードでは、サブルーチン `intset1` において初期粒子設定を行う。ここでいう初期粒子設定とは計算体系に張られた直交座標系の各格子点にどの粒子を配置するかを指定することと、それぞれの粒子に対して初期速度を設定することである。また、6. 3で説明する理由により計算体系内に何も粒子を配置しない空間があってはならない。何も無い空間を設定したい場合は、仮に粒子を設定しておき `bdcond0` にてその粒子の削除を行う。

初期粒子配置は、体系内に直交座標系 ( $x, y, z$ ) を仮に設定し、各格子点に配置する粒子の種類を変数  $ir(i,j,k)$  に与えることで行う。ここで、 $i, j, k$  はそれぞれ  $x, y, z$  方向の格子点番号である。 $j$  の増加する方向は図 6-1 に示したように上から下に向かう方向であり、 $y$  軸の方向とは逆である。

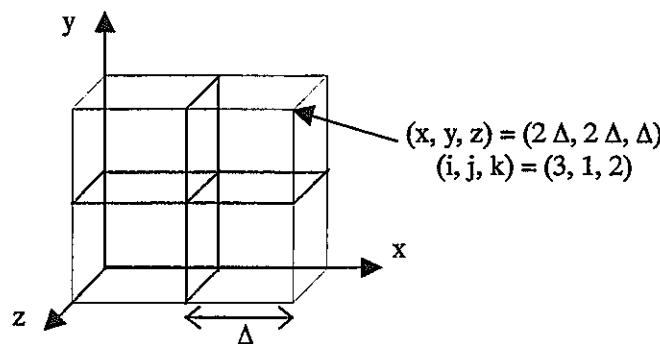


図 6-1 初期粒子配置用直交座標系における( $x, y, z$ )と( $i, j, k$ )の関係

変数  $ir$  に与える粒子種別番号を表 6-1 に示す。それぞれの粒子に対して初期速度種別番号を変数  $iu(i, j, k)$  に与える。 $iu$  に与えた番号は入力変数  $ui$  を区別するために用いられる。すなわち、初期速度はコード内部で( $ui(iu(i, j, k), 1)$ ,  $ui(iu(i, j, k), 2)$ ,  $ui(iu(i, j, k), 3)$ ) と設定される。

表 6-1 粒子種別番号

粒子種別番号	設定される粒子	備考
1	構造体粒子	
2	液体粒子	種別 1 (例 水)
-2	液体粒子	種別 2 (例 ガソリン)
3	未使用	
4	未使用	
5	未使用	
6	移動境界構造体粒子	
7	未使用	

### 6. 3 初期粒子設定 2

体系を取り囲む構造体が正しい粒子密度を持つために、流体に接している構造体粒子のさらに外側に数層（層数はカーネル関数径による）の構造体を配置する必要がある。しかし、3次元計算ではこのための構造体粒子の数が膨大な数になってしまふ。これを避けるため、構造体は必要最小限の層だけ配置し、外側には構造体粒子が仮想的に配置されるとみなし構造体粒子の粒子数密度の計算を行う。実際の計算手順は以下のようである。初期配置における各構造体粒子の粒子密度の流体からの寄与と実際に配置されている構造体からの寄与をそれぞれ  $n_{l \rightarrow s}$ 、 $n_{s \rightarrow s}$  とする。すると、

$$\Delta n = n^0 - (n_{l \rightarrow s} + n_{s \rightarrow s})$$

がさらに外側に設定すべき構造体粒子からの寄与となる。そこで、この量をあらかじめ全ての構造体粒子に対して計算しておき（サブルーチン `numdss` で行う）、以後の構造体粒子数密度の計算においてはこの量を必ず加えるようにする。

この方法により構造体粒子の数を大幅に減らすことができる。ただし、この方法を正確に用いるために、計算領域に粒子が無い空間をつくってはならない。

## 6. 4 液体の表面張力

分子動力学における粒子間引力  $F$  と表面張力係数  $\gamma$  の関係を粒子法に適用すると次式が得られる。

$$F = \frac{40}{\pi} \frac{\Delta}{m^5 - 1} \gamma$$

ここで、 $\Delta$ は初期粒子間である。粒子間引力の到達距離は  $m$  により  $m\Delta$  と表される。粒子法で用いる引力は単位質量当たりの強さであるので、それを  $f$  とすると、

$$f = \frac{F}{\rho \Delta^3} = \frac{40}{\pi} \frac{1}{(m^5 - 1)\rho \Delta^2} \gamma$$

となる。よって、粒子間引力は  $1/\Delta^2$  に比例することが分かる。

水粒子の粒子間相互作用の値を決めた実験解析においては  $\Delta x = 0.05 \text{ cm}$  を用いて斥力  $90 \text{ cm/s}^2$ 、引力  $450 \text{ cm/s}^2$  を得た。そこで、 $\Delta$ を変えた解析を行う場合は相互作用の強さが  $1/\Delta x^2$  依存性を持つとして強さを決める。例えば  $\Delta x = 0.1 \text{ cm}$  の場合は斥力  $22.5 \text{ cm/s}^2$ 、引力  $112.5 \text{ cm/s}^2$  とする。

## 6. 5 BCA の計算

BCA の計算はプログラム dist.jetbca.f において位置座標ファイル (fort.22) を読み込んで計算する。dist.jetbca.f で指定すべき変数は以下に示す。ガソリンプールへの水ジェットの噴射解析用のものである。

変数	値	単位	意味
cent	1.05	cm	体系の中心座標 (x 座標 = z 座標)
dr	0.1	cm	半径方向の刻み (領域分割用)
dry	0.2	cm	鉛直方向の刻み (領域分割)
dmz1	(56-1)*0.1	cm	ノズルの先端部の高さ
dx	0.1	cm	初期粒子間隔
re	1.5*dx	cm	カーネル関数径
area	4.0*3.1415926*dx**2	cm <sup>2</sup>	BCA の面積係数 $A^0$
n0	3.7279	-	初期粒子密度

出力 (fort.50) は各時刻での、水の体積率、ガソリンの体積率、BCA(m2)であり、2次元データである。横が半径方向、縦がノズル先端からの距離である。