

JNC TY9400 2001-009

粒子法を用いたナトリウム漏洩燃焼解析手法の研究

(先行基礎工学研究 最終詳細報告書)



2001年3月

東京大学大学院 工学系研究科附属原子力工学研究施設
核燃料サイクル開発機構 大洗工学センター

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,
Technology 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)
東京大学 (The University of Tokyo)
2001

粒子法を用いたナトリウム漏洩燃焼解析手法の研究 (先行基礎工学研究 最終詳細報告書)

越塚誠一*、向原 民*、
岡野 靖**、山口 彰**

要 旨

液体ナトリウムの漏洩燃焼挙動の解析には、ナトリウム液滴やナトリウムプールの燃焼、床に落下したナトリウムの広がり、燃焼生成物の堆積、ジェットブレークアップなど、様々な現象を複合して解析する必要がある。

核燃料サイクル開発機構では、こうした複雑な液体ナトリウムの漏洩燃焼挙動解析のため、粒子法による計算コードを開発している。粒子による熱流動解析手法は東京大学において本研究者らによって開発されたもので、従来の差分法などと比較して、流体の分裂・合体や堆積・凝固を容易に扱うことが可能である。本研究では、ナトリウムの凝固や燃焼生成物の堆積挙動を解析するため、固相の粒子計算モデルの開発、これを利用した凝固・堆積の粒子計算モデルの開発、表面張力の粒子計算モデルの開発をおこなった。

固相の解析のため、ヤング率とボアッソン比で記述される弾性体の運動を、粒子間相互作用で計算するモデルを新たに開発した。この方法では、従来の有限要素法における要素分割の必要がないので、弾性体の大変形のみならず、破壊なども容易に解析できる。特に、粒子に回転の自由度を持たせたことで、角運動量の保存性が得られた。弾性体に正弦波状の変位を与え本計算モデルを適用したところ、応力分布や圧力分布は解析解と良く一致した。

凝固を伴う熱流動解析法として、熱流動をこれまでの粒子法 (MPS 法) で、凝固した後の固相を弾性体として解析するモデルを開発した。初期に幅 10cm 高さ 20cm の 2 次元矩形状の液体ナトリウムが、厚さ 1cm 長さ 1m のステンレス板上での広がり挙動を、本手法を用いて計算した。仮にナトリウムおよびステンレスの熱伝導率や粘性を実際よりも大きな値を用いると、先端が凝固することにより、ナトリウムの広がりが抑制されるという結果が得られた。なお、本計算モデルは燃焼生成物の堆積挙動にも適用できる。

表面張力の効果を取り入れるため、その粒子計算モデルを開発した。液面形状を描かずに粒子数密度から曲率など必要な微分幾何の諸量を計算するアルゴリズムとし、流体が分裂や合体をする場合にも適用できるようにした。エタノール液滴の振動の計算をおこない、従来の VOF 法による結果と良い一致を得、モデルが妥当であることを示した。さらに、表面張力が卓越する場合の流体の広がり挙動を解析し、広がった流体が複数の液滴に分裂するという結果が得られた。

MPS 法を用いてジェットブレークアップ挙動を解析した。連続的なジェットは、計算条件に依存してある距離を進んだ後、液滴に分裂する。ジェットブレークアップ距離はウェーバー数の増加とともに長くなり、これは従来の相関式と定性的に一致した。

本研究は、東京大学と核燃料サイクル開発機構との共同研究として実施したものである。

* 東京大学大学院工学系研究科附属原子力工学研究施設

** 核燃料サイクル開発機構 大洗工学センター システム技術開発部 熱流体技術開発グループ

Numerical Analysis for Sodium Leakage and Combustion using Particle Method (Final Report)

Seiichi Koshizuka*, Tami Mukohara*, Yasushi Okano** and Akira Yamaguchi**

Abstract

Leakage and combustion behavior of liquid sodium can be analyzed by considering combustion of sodium droplets and pools, spreading on the floor and accumulation of combustion products, and jet breakup.

Japan Nuclear Cycle Development Institute (JNC) has been developing a code using a particle method to analyze complicated behavior of sodium leakage and combustion. The particle method for thermal-hydraulic analysis was developed by the authors. Compared with the conventional finite difference method, the particle method is useful for solidification and accumulation as well as fluid separation and merging. In this study, development of particle models for solid motion and solidification for the purpose of sodium solidification and accumulation of the combustion products.

A new particle interaction model of elastic materials is developed. The elastic properties are described by Young's modulus and Poisson's ratio. In this model, elements, which the finite element method is based on, are not necessary, so that fracture as well as large deformation of elastic materials is easily analyzed. Particles have a degree of freedom concerning rotation, which leads to conservation of the angular momentum. In a test problem of assuming a sine distribution of displacement, the present model provides correct distributions of stress and pressure with those of analytical solutions.

Next, a particle interaction model for analyzing solidification by combining the usual MPS method for thermal-hydraulics and the new model of elastic material for the solid are developed. We apply the present methods to the analysis of spreading of liquid sodium, which is initially located as a two-dimensional column of 10cm wide and 20cm high on a stainless steel floor of 1cm thick and 1m long. When the viscosity and the heat conductivity are artificially enhanced, the spreading is suppressed by viscosity and solidification at the front. This model is also available for accumulation of the combustion products.

A particle model of surface tension is developed to incorporate its effect. Quantities of differential geometry, such as curvature, are evaluated from the particle number density without the shape of interfaces, so that this algorithm can be applied to fluid separation and coalescence. Vibration of an ethanol droplet is calculated and the result agrees with that of VOF method. This shows that the developed model is proper. Liquid spreading is analyzed when the surface tension is strong. The result shows that the spreading liquid is divided to droplets by surface tension.

Jet breakup behavior is analyzed by the MPS method. A continuous jet is dispersed to droplets after traveling a certain length depending on the calculation conditions. The jet breakup length is longer when Weber number is larger, which qualitatively agrees with the existing correlations.

* Nuclear Engineering Research Laboratory, Graduate School of Engineering, The University of Tokyo

** Japan Nuclear Cycle Development Institute, O-arai Engineering Center,

System Engineering Technology Division, Thermal-Hydraulic Research Group

目 次

要旨	i
Abstract	ii
目次	iii
図表リスト	v
 1. 序論	1
1.1 研究の背景	3
1.1.1 ナトリウムの漏洩燃焼	3
1.1.2 M P S法	3
1.1.3 M P S法によるナトリウムの漏洩燃焼解析	3
1.1.4 燃焼生成物の堆積挙動	4
1.1.5 広がり挙動	5
1.1.6 ジェットブレークアップ	5
1.2 本研究の目的	6
 2. 厚肉構造物の解析手法の開発	11
2.1 従来の方法	13
2.2 支配方程式	14
2.3 粒子計算モデル	16
2.3.1 粒子間相対変位	16
2.3.2 ひずみテンソル成分	16
2.3.3 圧力	17
2.3.4 応力テンソル成分	17
2.3.5 粒子の運動	17
2.3.6 粒子の回転	19
2.4 検証計算	21
2.4.1 構造物中の弾性波	21
2.4.2 2つの弾性体の衝突	23
2.4.3 衝突による弾性体の破壊	25
2.5 考察	25

3. 凝固の粒子計算モデルの開発	47
3.1 支配方程式	49
3.2 MPS法による計算モデル	50
3.2.1 重み関数	50
3.2.2 粒子数密度	51
3.2.3 勾配モデル	51
3.2.4 ラプラシアンモデル	52
3.2.5 非圧縮条件	53
3.2.6 計算アルゴリズム	54
3.3 凝固の計算モデル	54
3.4 液体の広がり挙動の計算条件	55
3.5 液体の広がり挙動の計算結果および考察	56
 4. 表面張力の粒子計算モデルの開発	83
4.1 表面張力の粒子計算モデル	85
4.2 液滴の振動の解析	87
4.3 表面張力が卓越する場合の液体の広がり挙動の計算	88
 5. ジェットブレークアップの解析	95
5.1 解析条件	97
5.2 解析結果	98
5.3 ジェットブレークアップ距離の考察	98
 6. 結論	121
 参考文献	125

図表リスト

表

2.1	角運動量保存の検証	27
3.1	計算に用いた物性値	59
3.2	計算パラメータ	59
5.1	ジェットブレークアップの解析に用いた流体の物性値	101

図

1.1	漏洩燃焼解析における諸現象	7
1.2	ナトリウム漏洩・燃焼挙動の解析体系	8
1.3	粘性の温度・組成依存性モデル	9
1.4	ジェットブレークアップ距離	10
2.1	粒子相対位置ベクトル	28
2.2	相対変位ベクトル	29
2.3	剪断応力によるモーメントの発生	29
2.4	弾性波の計算体系	30
2.5	弾性体中の圧力分布 (n=64 の場合)	31
2.6	弾性体中の圧力分布 (n=32 の場合)	32
2.7	弾性体中の圧力分布 (n=16 の場合)	33
2.8	弾性体中の圧力分布 (n=8 の場合)	34
2.9	弾性体中の圧力分布 (n=4 の場合)	35
2.10	弾性体中の圧力分布の計算結果 (すべての場合)	36
2.11	弾性体中を伝播する圧力波の計算結果	37
2.12	変位分布の比較	38
2.13	速度分布の比較	39
2.14	圧力分布の比較	40
2.15	垂直応力分布の比較	41
2.16	2つの弾性体の衝突の計算体系	42
2.17	2つの弾性体の衝突の計算結果	43
2.18	衝突による弾性体の破壊の計算体系	44

2.19 衝突による弾性体の破壊の計算結果(ヤング率:10 ⁴ , ポアソン比 0.3, 密度:10 ³)	45
3.1 近傍粒子との相互作用	60
3.2 MPS 法における勾配モデルの概念	61
3.3 MPS 法におけるラプラシアンモデルの概念	62
3.4 計算アルゴリズム	63
3.5 凝固の粒子計算モデル	64
3.6 温度、固相率、エンタルピの関係	65
3.7 計算体系	66
3.8 条件 1 の計算結果	67
3.9 条件 1 の温度分布	68
3.10 崩壊する液柱の先端位置	69
3.11 崩壊する液柱の先端位置に関する条件 1 の結果と文献との比較	70
3.12 条件 2 の計算結果 (液体ナトリウムの粘性係数を 10 ³ 倍)	71
3.13 条件 2 の温度分布	74
3.14 条件 3 の計算結果 (液体ナトリウムの粘性係数 : 10 ³ 倍、液相 ナトリウム、固相ナトリウムおよびステンレスの熱伝導率 : 10 倍、液体ナトリウムの初期温度 : 98°C)	75
3.15 条件 3 の温度分布	78
3.16 条件 3 の固相率分布	79
3.17 凝固による広がりの抑制: 条件 3 での先端位置付近の固相率分布	80
3.18 崩壊する液柱の先端位置の変化 (条件 1, 2, 3 の比較)	81
4.1 表面張力の粒子計算モデル	89
4.2 MPS 法によるエタノール液滴の振動の計算結果	90
4.3 VOF 法によるエタノール液滴の振動の計算結果	91
4.4 液体の広がり挙動の計算の体系	92
4.5 表面張力が卓越する場合の液体の広がり挙動の計算結果	93
4.6 広がりの先端位置の変化	94
5.1 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=2$ 、水銀、ノズル無し、 粒子間距離 0.0013m)	102
5.2 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=5.6$ 、水銀、ノズル無し、 粒子間距離 0.0013m)	103

5.3 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=12$ 、水銀、ノズル無し、 粒子間距離 0.0013m)	104
5.4 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=24$ 、水銀、ノズル無し、 粒子間距離 0.0013m)	105
5.5 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=88$ 、水銀、ノズル無し、 粒子間距離 0.0013m)	106
5.6 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=2$ 、水銀、ノズル 0.0572m、 粒子間距離 0.0013m)	107
5.7 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=5.6$ 、水銀、ノズル 0.0572m、 粒子間距離 0.0013m)	108
5.8 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=12$ 、水銀、ノズル 0.0572m、 粒子間距離 0.0013m)	109
5.9 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=24$ 、水銀、ノズル 0.0572m、 粒子間距離 0.0013m)	110
5.10 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=88$ 、水銀、ノズル 0.0572m、 粒子間距離 0.0013m)	111
5.11 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=2$ 、水、ノズル無し、 粒子間距離 0.0013m)	112
5.12 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=5.6$ 、水、ノズル無し、 粒子間距離 0.0013m)	113
5.13 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=12$ 、水、ノズル無し、 粒子間距離 0.0013m)	114
5.14 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=24$ 、水、ノズル無し、 粒子間距離 0.0013m)	115
5.15 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果 ($We=88$ 、水、ノズル無し、 粒子間距離 0.0013m)	116
5.16 ジェットブレイクアップ距離のノズル長さによる影響	117
5.17 ジェットブレイクアップ距離の物性値による影響	118
5.18 ジェットブレイクアップ距離の粒子間距離による影響	119

第1章

序論

1.1 研究の背景

1.1.1 ナトリウムの漏洩燃焼

高速増殖原型炉「もんじゅ」の2次系ナトリウム漏洩事故では、漏洩したナトリウムがダクトやグレーチングに衝突・飛散しながら床ライナ上に落下した。ナトリウムは落下途中においては液滴の状態で燃焼反応を生じ、床ライナに落下した後はプール燃焼を生じたと考えられる。また、床ライナ上にはナトリウムの燃焼生成物が堆積する。このように、ナトリウムの漏洩燃焼は様々な現象が複合したものである（図1.1）。プラントの安全性の観点からは床ライナの健全性が重要であり、その評価にはこうした複雑なナトリウム漏洩燃焼挙動を精度良く解析する必要がある。

複雑なナトリウムの漏洩燃焼挙動の評価のため、核燃料サイクル開発機構では解析コード群の体系的な開発を行っている[1]。そこではナトリウムの化学反応の解析、空气中を落下する単一液滴の燃焼挙動解析、粒子法によるナトリウムの飛散および燃焼解析、室内の空気流の解析、実機評価のためのマルチセルコード解析などが含まれている。そして、これらの解析は相互に補完する関係を有している（図1.2）。

1.1.2 MPS法

MPS(Moving Particle Semi-implicit)法は、東京大学によって独自に開発された新しい数値解析法で、流体を粒子の集まりとして表現する。勾配・発散・ラプラスアンなどの微分演算子と等価な粒子間相互作用モデルを用い、流れを支配する偏微分方程式を粒子間相互作用に置き換える。分子動力学やLGA(Lattice Gas Automaton)といったようなミクロな粒子法に対して、MPS法はマクロな粒子法であり、連続体を離散化して解くということに関しては従来の差分法や有限要素法と同じである。従って、連続体の解析においては、必要なメモリや計算時間が従来の差分法や有限要素法とほぼ同等である。MPS法では格子を全く必要としないので、流体のトポロジーが変化するような大変形に対しても容易に適用できる。さらに、水やナトリウムなどの液体の流れは通常非圧縮性であり、MPS法では半陰的なアルゴリズムを用いることによりこれを解析することができる。これまでに、流体の分裂・合体を伴うダム崩壊問題[2, 3]、斜面上での碎波[4]、蒸気爆発過程[5, 6]、容器内の液面振動[7]などの計算が行われた。

1.1.3 MPS法によるナトリウムの漏洩燃焼解析

1.1.1に示したように、核燃料サイクル開発機構ではMPS法に基づいた3次元ナト

リウム漏洩燃焼解析コードを開発している。飯田-山口はMPS法の3次元化、ナトリウムの燃焼モデルおよび堆積モデルの開発を行い、もんじゅにおける事故およびナトリウム微小漏洩実験の解析を行った[1, 8, 9, 10]。微小漏洩実験の解析では、床ライナ上をナトリウムが燃焼しながら広がっていく様子が解析され、一点近似的な従来の手法では評価できなかった3次元過程が示された。床ライナー上で燃焼を伴いながらのナトリウムの広がり挙動を知ることは、床ライナーの温度分布を知りその健全性を評価するために重要である。液体の広がり挙動は、一般的には、粘性、凝固、表面張力の影響を受ける。

また越塚-岡は、ナトリウムがダクトに衝突して飛散する現象を、水を用いて模擬実験を行った。同時に、核燃料サイクル開発機構で開発された3次元粒子法コードを用いてこの実験の解析も行った。ダクト表面を伝ってダクト直下に落下するものについては、こうした現象の計算モデルが導入されていなかったため計算できなかったが、それ以外のダクト前方に飛散するものについては、実験とおおよそ一致した[11]。

1.1.4 燃焼生成物の堆積挙動

ナトリウムの漏洩燃焼では、燃焼に伴い化学組成が変化し、最終的に生じる燃焼生成物は固体として堆積する。これを飯田-山口は、燃焼生成物の割合によって粘性を変化させることでモデル化した。すなわち、金属ナトリウムの分率を f_i とすると、これがある閾値 f_b を越えるまでは線形に粘性を増加させ、 f_b 以下になつたら粘性としてある大きな一定値 $F_v v_{NA}$ を与えるというものである(図1.3)。ここで F_v は粘性増加係数と呼ばれる。また、金属ナトリウムの温度が凝固点まで低下した場合にも粘性を増加させる。粘性が増加すれば、同じ流れの支配方程式を解いていたとしても運動が停止する。そのためこの計算モデルでは、堆積したり凝固した粒子に対して、特別な計算をする必要がなく、他の流体粒子と同じ扱いができるという利点がある。一方、粘性を増加させると数値的な不安定性が生じやすくなり、タイムステップを小さくするかあるいは粘性項を陰的に解くようにする必要がある。これは計算時間の増大につながる。また、ナトリウム粒子が床ライナ上に落下すると、床を構成している粒子と近づきすぎ、大きな反発力が生じて粒子が飛び散ってしまうという計算手法上の問題点も指摘されている。

こうした問題点を根本的に解決するためには、まず固相の粒子計算モデルを開発することが望まれる。固体は運動力学的には一般的には弾性体あるいは塑性体としてふるまうが、これに対する粒子計算モデルはこれまで無かった。堆積や凝固は、流体粒子が固体粒子に変化し、固体粒子は弾性体などの粒子間相互作用を行うようことで解析

することができる。この方法が開発されれば、一般的な相変化を伴う固体と液体の同時解析が可能になる。

1.1.5 広がり挙動

表面張力は、粒子間ポテンシャルを用いる計算モデルが白川らによって提案されて、MPS 法の中に組み込まれて用いられている[12]。しかしながら、物性としての表面張力とポテンシャルの決め方の対応が難しいという問題がある。粒子法で表面張力の計算が難しい理由は、表面張力が曲率などの界面の幾何形状に依存する一方で、粒子法では界面の幾何形状をそもそも計算しないためである。界面に係る問題に対して、界面形状を特定せずに計算ができることが粒子法の大きな特徴であり、そのため流体の分裂や合体が容易に扱える。従来の手法を踏襲するために界面形状を特定してから表面張力を計算しようとすると、粒子法の利点が損なわれることになる。従って、表面張力の粒子計算モデルでは、界面形状を定めずに曲率などの微分幾何の諸量を計算するアルゴリズムが必要となる。

なお、高温溶融物の広がり挙動は、軽水炉のシビアアクシデント、特に EPR (European Pressureized Reactor) のコアキャッチャーに関連して、多くの研究がおこなわれている。溶融炉心の広がり挙動も、粘性、凝固、表面張力の影響を受けることが知られている[13]。

1.1.6 ジェットブレークアップ

さらに、ナトリウム漏洩燃焼事故では、破断口でのナトリウムの噴出挙動も重要である。漏洩の流量が微小であれば、ナトリウムは破断口より間欠的に滴となって落下する。流量が増加すると、連続ジェットとして破断口より流出し、ジェットの状態をしばらく維持した後、液滴に分裂する。さらに流量が増加すると破断口直後から細かな液滴になりスプレー状に噴出する。こうした噴出挙動は、漏洩流量だけでなく、破断口の大きさや形状にも依存する。

高温の液体ナトリウムは空気中で燃焼反応を生じ、その反応量は液体ナトリウムの液滴径に依存するので、どのような液滴径でどのような空間分布として噴出するのか予測することも重要である。サイクル機構ではスプレーノズルからの水、油およびナトリウムの噴出実験をおこない、様々な位置での粒子径分布を測定している[14]。

噴出したジェットが維持される距離をジェットブレークアップ距離と呼ぶ(図 1.4)。ジェットブレークアップによって液滴が生じ、この液滴もさらに細かい液滴へと分裂を

繰り返す。こうした液滴の分裂過程は液滴ブレークアップと呼ぶ。従って、液滴径を予測するためには、ジェットブレークアップおよび液滴ブレークアップを精度良く予測することが必要である。

ジェットブレークアップ距離に関しては、斎藤らの相関式[15]がよく使われている。ただしこの相関式のもととなる実験の条件では、ジェット流体と霧囲気流体の相互作用が支配的である。また、Kolev[16]や Vierow[17]がジェットブレークアップ距離に関するこれまでの相関式についてまとめている。流量があまり大きくない小規模漏洩では、霧囲気流体の影響は相対的に小さくなり、ジェット流体の条件でジェットブレークアップ距離が決定されるようになる。こうした条件での相関式としては、Grant-Middleman のものがある[18]。

1.2 研究の目的

本研究では、粒子法によるナトリウム漏洩燃焼事故の詳細解析手法の確立のため、複雑な現象を構成する個々の過程の粒子計算モデルを開発する。具体的には、固体の弾性挙動の粒子計算モデルと数値的に安定な凝固の計算手法の開発、表面張力の粒子計算モデルの開発と液体の広がり挙動の解析、およびジェットブレークアップの解析をおこなう。

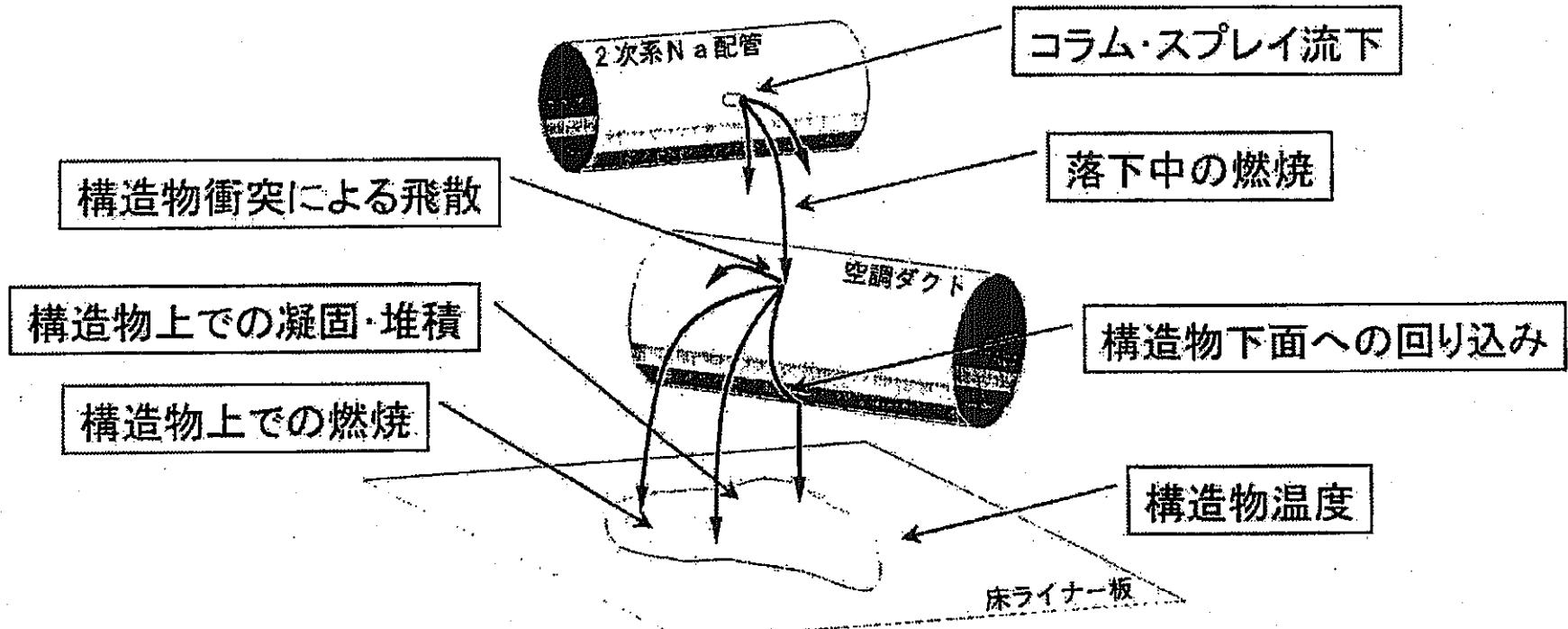


図1.1 漏洩燃焼解析における諸現象（飯田, 1998）

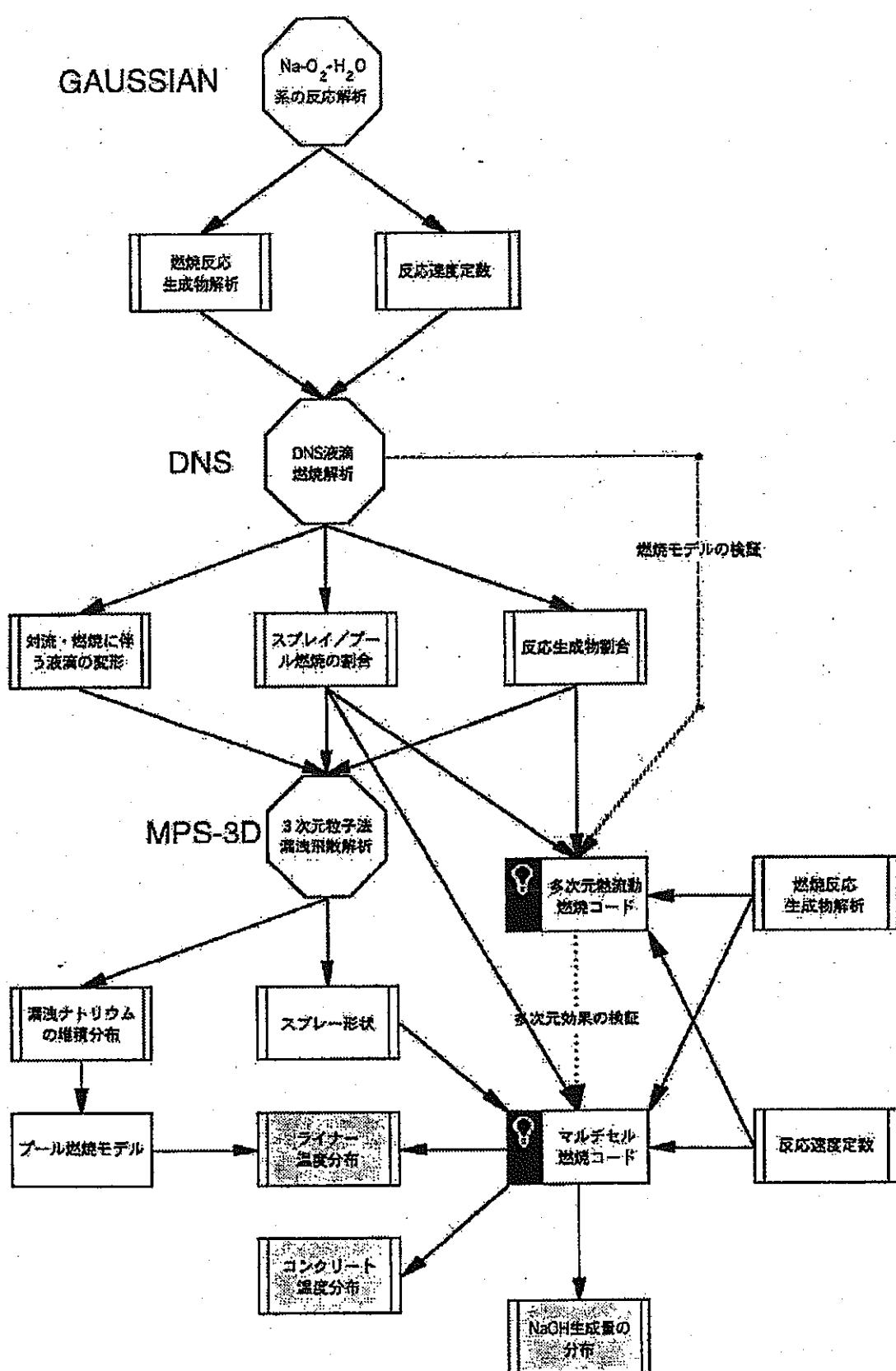


図 1.2 ナトリウム漏洩・燃焼挙動の解析体系 [1]

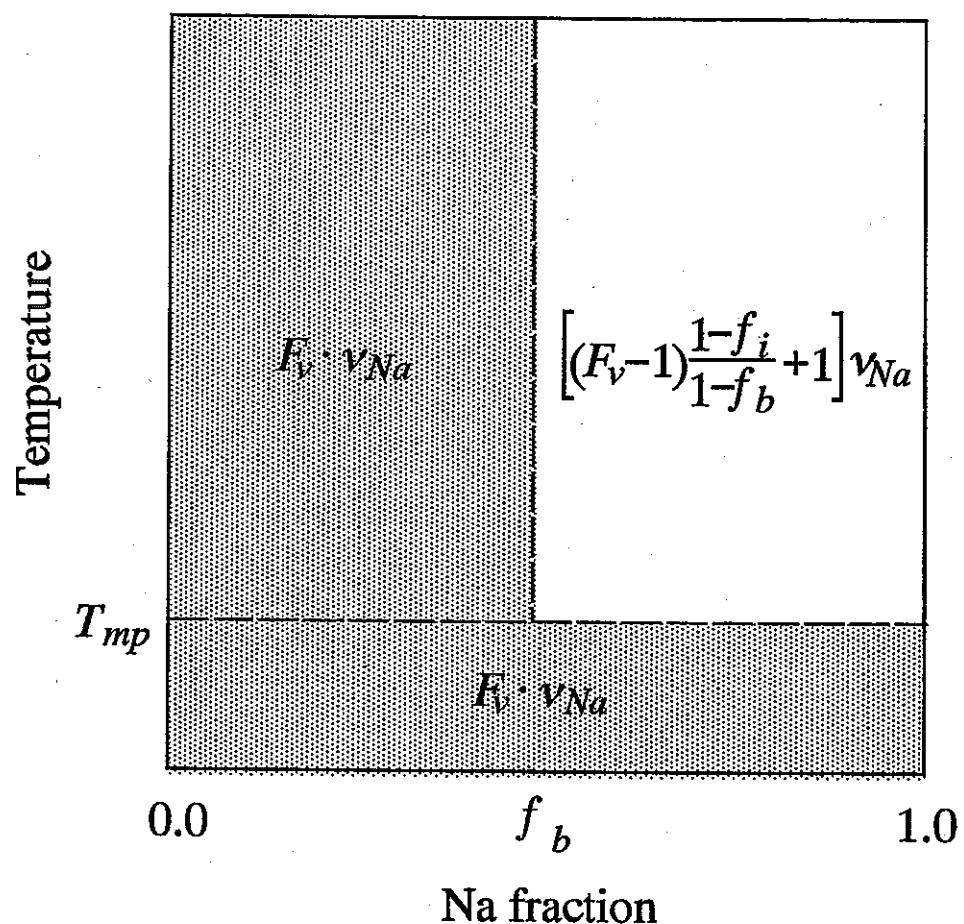


図1.3 粘性の温度・組成依存性モデル[1]

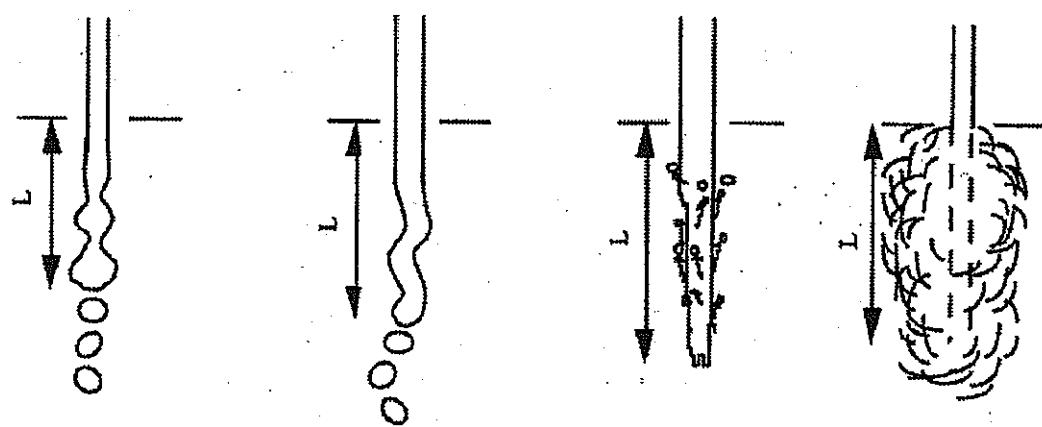


図1.4 ジェットブレーキアップ距離[17]

第2章

厚肉構造物の解析手法の開発

2.1 従来の方法

構造物の解析には従来有限要素法を用いるのが一般的である。しかしながら、有限要素法では構造物を要素分割することが必要であり、大変形を伴う問題では要素分割が困難になったり、著しく歪んだ要素が生じることで数値安定性や計算精度が悪化する。そこで、要素分割を必要としない計算手法の研究が近年盛んになってきている。こうした研究の方向は熱流動解析と同じである。

Nayroles らは最小二乗法で変位を内挿し、これにガラーキン法を適用した[19]。Belytschko らはこの方法を Element-free Galerkin (EFG) 法と名付け、亀裂進展問題に適用した[20]。一方、Yagawa-Yamada は要素を一時的かつ局所的に生成することで、節点主体の有限要素法を提案した[21]。これはフリーメッシュ法 (Free Mesh Method, FMM) と名付けられた。FMM は非圧縮性流れ解析にも適用されている[22]。また、流れ解析に用いられていた Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) を動的な構造解析に適用した例もある[23, 24]。

粒子間相互作用モデルとしてバネとダッシュポットを与えた Distinct Element Method (DEM) は、始め土壤の構造解析に適用されたが[25]、現在は粉体の解析に多く用いられている[26]。特に、固気二相流において、粉体を DEM、流動を差分法で解くことにより、流動層の流動様式を再現することに成功している[27]。DEM では粒子に回転の自由度があるという特徴がある。ただし、連続体としての構造物の支配方程式を離散化したモデルにはなっていない。

これまで MPS 法においては、固体に対する粒子として次の 3 種類があった。

- (1) 流体解析における壁境界条件
- (2) 流体力を受けて移動する剛体
- (3) 薄肉構造物

MPS 法では流体解析における壁境界条件として、位置を固定した粒子を配置していた。この壁境界粒子は他の移動する流体粒子と同じ変数を持つが、座標は固定されている。剛体粒子では、各時間ステップにおいて通常の流体粒子と同じ計算をした後に、剛体粒子の運動量および角運動量を保存しながら剛体粒子間の相対位置を初期値に戻すという計算をする。薄肉構造粒子では接続関係を固定した粒子間で、薄肉構造物の支配方程式を解いている。流体との相互作用は圧力を介している。しかしながら、最も一般的な厚肉構造物の粒子計算モデルはまだ開発されていない。そこで、ここでは MPS 法に基づいた厚肉構造物の粒子計算モデルを開発する。この計算モデルによって、壁境界粒子および剛体粒子も統一して扱えるようになる。さらに、堆積や凝固によって流体粒子が計算

途中で固体粒子に変化する場合にも対応できる。

2.2 支配方程式

2次元における厚肉構造物の変位 u とひずみ ϵ の関係は、

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{Bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \gamma_{xy} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_x \\ u_y \end{Bmatrix} = \mathbf{u} \quad (2.1)$$

ひずみと応力 σ の関係は、

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \tau_{xy} \end{Bmatrix} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \gamma_{xy} \end{Bmatrix} = \boldsymbol{\epsilon} \quad (2.2)$$

ここで

E : ヤング率

ν : ポアソン比

静的な解析では式(2.1), (2.2)で十分だが、大変形を含めた動的解析のためには、次の運動方程式が必要になる。

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.3)$$

式(2.3)は連続体に対して一般的に成り立つもので、対流項を無視した流れの運動方程式も同じである。弾性体と流体の違いは、式(2.3)の右辺にある応力テンソルの構成式である。式(2.3)を弾性体に対する方程式として、右辺をひずみテンソルを用いて書けば、

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\lambda' \epsilon_{kk} \delta_{ij} + 2\mu \epsilon_{ij} \right] \quad (2.4)$$

$$\lambda' = \frac{E\nu}{1-\nu^2} : \text{ラメの定数} \quad (2.5)$$

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)} : \text{ラメの定数} \quad (2.6)$$

ただし、ラメの定数のうち λ' は、2次元での値を意味している。3次元における定数 λ は、

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (2.7)$$

式(2.4) は次のように書くこともできる。

$$\rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} \quad (2.8)$$

$$p = -\lambda' \varepsilon_{kk} : \text{圧力} \quad (2.9)$$

$$\sigma_{ij} = 2\mu \varepsilon_{ij} \quad (2.10)$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] : \text{ひずみテンソル} \quad (2.11)$$

式(2.8) の右辺第1項は圧力勾配による力を表しており、流れの運動方程式における圧力勾配項と同じである。ただし、弾性体における圧力は、式(2.9) のように、ひずみテンソルの対角成分の和にラメの定数 λ' を掛けたものである。

さらに、構造物の回転の運動も考慮する必要がある。ひずみテンソルと回転テンソルは変位を用いると次のように書ける。

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] : \text{ひずみテンソル} \quad (2.12)$$

$$w_{ij} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right] : \text{回転テンソル} \quad (2.13)$$

これらのテンソルを用いると、変位は次のようになる。すなわち、変位はひずみによる成分と回転による成分から構成される。

$$u_i(x_i + \Delta x_i) = u_i(x_i) + \Delta u_i(x_i) \quad (2.14)$$

$$\Delta u_i(x_i) = \Delta u_i^e(x_i) + \Delta u_i^w(x_i) \quad (2.15)$$

$$\Delta u_i^e(x_i) = \varepsilon_{ij} \Delta x_j : \text{ひずみによる変形} \quad (2.16)$$

$$\Delta u_i^w(x_i) = w_{ij} \Delta x_j : \text{回転による変形} \quad (2.17)$$

剛体の回転運動の支配方程式は、2次元の場合に次のようになる。

$$I \frac{\partial^2 \theta}{\partial t^2} = M \quad (2.18)$$

$$\theta : \text{回転角度 (反時計回り)} \quad w_{xy} = \frac{1}{2} \theta \quad (2.19)$$

$$I = m \frac{l_0^2}{6} : \text{剛体の慣性モーメント} \quad (2.20)$$

$$m = \rho l_0^2 : \text{剛体の質量} \quad (2.21)$$

2.3 粒子計算モデル

2.3.1 粒子間相対変位

2個の粒子 i, j の初期座標をそれぞれ $\vec{r}_{i0}, \vec{r}_{j0}$ 、現在の座標を \vec{r}_i, \vec{r}_j とすると、初期の相対位置は $\vec{r}_{ij0} = \vec{r}_{j0} - \vec{r}_{i0}$ 、現在の相対位置は $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i$ となる（図 2.1）。

ここで、回転テンソルは応力に何ら影響を与えないから、相対変位のうち回転による分を除く必要がある。初期の相対位置に対し、角度 θ_{ij} の回転があった場合の相対位置は次のようになる。

$$\vec{r}_\theta = T \cdot \vec{r}_{ij0} \quad (2.22)$$

$$T = \begin{bmatrix} \cos \theta_{ij} & -\sin \theta_{ij} \\ \sin \theta_{ij} & \cos \theta_{ij} \end{bmatrix} \quad (2.23)$$

$$\theta_{ij} = \frac{\theta_i + \theta_j}{2} \quad (2.24)$$

ここで θ_i, θ_j は、それぞれ粒子 i, j が変数として持っている回転角度とする。

現在の相対位置から式(2.22)によって求めた \vec{r}_θ を引くと、ひずみによって生じた変位が得られる。

$$\Delta u_{ij}^e = \Delta u_{ij} - \Delta u_{ij}^w = \vec{r}_{ij} - \vec{r}_\theta \quad (2.25)$$

さらに、この変位を垂直成分と剪断成分に分ける（図 2.2）。

$$\Delta u_n^e = \Delta u_{ij}^e \cdot \frac{\vec{r}_{ij}}{|\vec{r}_{ij}|} \quad (2.26)$$

$$\Delta u_s^e = \Delta u_{ij}^e - \Delta u_n^e \quad (2.27)$$

2.3.2 ひずみテンソル成分

粒子 i, j 間におけるひずみの、粒子間相対位置ベクトルを主軸とする垂直成分と剪断成分は、前項の変位の垂直成分と剪断成分からそれぞれ得られる。

$$\varepsilon_n = \frac{\Delta u_n^\varepsilon}{r_{ij}} \quad (2.28)$$

$$\varepsilon_s = \frac{\Delta u_s^\varepsilon}{r_{ij}} \quad (2.29)$$

後に示す運動方程式の計算モデルでは、ひずみテンソルの全ての成分が必要なわけではなく、ここに示した垂直成分と剪断成分があればよい。

2.3.3 圧力

弾性体における圧力は式(2.9)に示されている。圧力を求めるためには、まずひずみ成分の対角和が必要である。これは式(2.12)より変位の発散(divergence)になる。

$$\varepsilon_{kk} = \operatorname{div}(u) = \operatorname{div}(u^\varepsilon) \quad (2.30)$$

これに Yoon らが開発した発散の粒子間相互作用モデル[28]を適用すると、

$$\varepsilon_{kk} = \operatorname{div}(u) = \operatorname{div}(u^\varepsilon) = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{(u_j^\varepsilon - u_i^\varepsilon) \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{r_{ij}^2} w(r_{ij}) \quad (2.31)$$

式(2.26), (2.28)より、これをひずみの垂直成分で表すことができる。

$$\operatorname{div}(u^\varepsilon)_i = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{(\Delta u_n^\varepsilon)_{ij}}{r_{ij}} w(r_{ij}) = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} (\varepsilon_n)_{ij} w(r_{ij}) \quad (2.32)$$

式(2.32)を式(2.9)に代入すると、粒子 i の位置における圧力が得られる。

$$p_i = -\lambda'(\varepsilon_{kk})_i \quad (2.33)$$

2.3.4 応力テンソル成分

粒子 i, j 間で応力テンソル成分を計算する。ただし、粒子間相対位置ベクトルを主軸とする垂直応力および剪断応力成分のみとする。

$$(\sigma)_{ij} = 2\mu(\varepsilon_n)_{ij} \quad (2.34)$$

$$(\tau)_{ij} = 2\mu(\varepsilon_s)_{ij} \quad (2.35)$$

2.3.5 粒子の運動

式(2.3)で粒子の運動は記述される。

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \nabla \cdot \sigma \quad (2.3)$$

これに発散の粒子間相互作用モデルを適用すると、

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{2d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{\sigma \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{r_{ij}^2} w(r_{ij}) \quad (2.36)$$

ここで式(2.36)の右辺の $\sigma \cdot \frac{\vec{r}_j - \vec{r}}{r_{ij}}$ は、ベクトル $(\vec{r}_j - \vec{r}_i)$ に垂直な面にかかる力である。こ

れを F_{ij} とすると、その垂直成分と剪断成分はそれぞれ $(\sigma)_{ij}$ と $(\tau)_{ij}$ になる。

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{2d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{F_{ij}}{r_{ij}} w(r_{ij}) \quad (2.37)$$

それぞれの成分について分けて書けば次のようになる。

$$\rho \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = \frac{2d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{(\sigma)_{ij}}{r_{ij}} w(r_{ij}) \quad (2.38)$$

$$\rho \frac{\partial^2 u_s}{\partial t^2} = \frac{2d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{(\tau)_{ij}}{r_{ij}} w(r_{ij}) \quad (2.39)$$

粒子 i にかかる力の垂直成分（式(2.38)）の向きは $\vec{r}_j - \vec{r}$ の方向になる。また、剪断成分（式(2.39)）の向きは上記方向の 90 度反時計回りに回転させた方向になる。すなわち、

$$\vec{c} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \frac{\vec{r}_j - \vec{r}}{r_{ij}} \quad (2.40)$$

このように、応力テンソルについては、粒子間相対位置ベクトルとの内積およびこれと垂直な方向ベクトルとの内積が分かっていればよい。

圧力については、垂直応力と同じ取り扱いとする。

$$\rho \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = \frac{2d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{p_{ij}}{r_{ij}} w(r_{ij}) \quad (2.41)$$

$$p_{ij} = \frac{p_i + p_j}{2} \quad (2.42)$$

あるいは、流体の圧力項と同じく、MPS 法の勾配(gradient)モデルを用いて次のように扱うこともできる。

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -grad(p) = -\frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{(p_j - p_i) \cdot (\vec{r}_j - \vec{r}_i)}{r_{ij}^2} w(r_{ij}) \quad (2.43)$$

前者のモデルでは、粒子 i と j の圧力の平均を取り、これが粒子 $i j$ 間で垂直応力と

して働くという定式化になっている。実はこれは SPH における圧力項の計算方法と同じである。前者による圧力の取り扱いは絶対圧力としての意味を持っており、正の値であれば粒子間に斥力が働き、負の値であれば引力が働く。SPH は圧縮性流れに主に適用されている方法で、流体の密度から圧力を計算する。従って、この圧力は絶対圧力であり、必ず正の値を持つ。しかしながら、非圧縮性流れでは密度変化が無くとも圧力は変化し得る。また、圧力の絶対値には意味がない。前者のモデルでは負の圧力が生じると粒子間に引力が生じることになるが、非圧縮性流れの計算ではこの場合に粒子が局所的に集まってしまい、計算が不安定になる。また、前者のモデルでは、圧力が領域全体で一様に変化した場合に、結果が異なるという性質がある。例えば、圧力を領域全体で一様に上昇させると、粒子間の斥力は増加する。これは非圧縮性流れにおける圧力の相対性にとって好ましいとは言えない。そこで、MPS 法では、負の圧力が生じたとしても粒子間引力が発生しないようにするために、および、圧力の一様な変化の影響を受けないようにするため、後者の計算モデルを採用している。後者のモデルでは粒子間の圧力差によって力が生じるという定式化になっているので、2つの粒子の圧力が共に同じ値だけ変化しても粒子間相互作用は影響を受けない。

弾性体では、変位の発散によって圧力が決まる。これは、その圧力が絶対圧力であることを意味しており、圧縮性流れの状況と類似である。さらに、弾性体では圧縮性流れと異なり負の圧力も生じうる。そして、負の圧力が生じた場合には粒子間に引力が生じることが物理的にも妥当である。従って、本研究では弾性体の圧力の計算モデルとして、前者のモデルを採用することにする。

各粒子の運動は式(2.38), (2.39), (2.41)を合わせたものになる。

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^n + \Delta t \left[\mathbf{a}_\sigma^n + \mathbf{a}_\tau^n + \mathbf{a}_p^n \right] \quad (2.44)$$

$$\mathbf{r}^{n+1} = \mathbf{r}^n + \Delta t \mathbf{u}^{n+1} \quad (2.45)$$

式(2.44)右辺のかっこの中の項はそれぞれ、垂直応力、剪断応力、圧力による加速度である。弾性構造物の計算でも、粒子法の完全ラグランジアンであるという特徴を活かすため、式(2.45)のように粒子位置を修正する。

2.3.6 粒子の回転

前項に示した粒子の運動では、垂直応力、剪断応力、圧力のいずれも、例えば粒子 $i j$ の間では、それぞれの粒子に対し絶対値は等しいが互いに逆の方向の力として働く。垂直応力と圧力による力については、粒子間相対位置ベクトルの方向であるため、粒子 $i j$

の間で打ち消される。しかしながら、剪断応力による力の場合には偶力になり、回転モーメントが発生する（図2.3）。

$$M_{ij} = (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \cdot \Delta \vec{F}_{ij} \quad (2.46)$$

式(2.39)より、剪断応力により粒子 i にかかる力 $\Delta \vec{F}_{ij}$ は、

$$\Delta \vec{F}_{ij} = \frac{m}{\rho n^0} \frac{d}{r_{ij}} w(r_{ij}) \cdot \vec{c} \quad (2.47)$$

となる。角運動量保存の観点から、これを打ち消すように、粒子 i, j にそれぞれ半分ずつモーメントを与えることにする。

$$I \frac{\partial w_i}{\partial t} = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} M_{ij} \quad (2.48)$$

I は粒子1個の慣性モーメントである。ここでは、方眼紙状に粒子を並べて計算することを考えて、その粒子間距離を d とした時の正方形に対する値を用いる。

$$I = m \frac{d^2}{6} = \rho \frac{d^4}{6} \quad (2.49)$$

ここで、 m は粒子1個の質量である。

さて、式(2.48)は次のように離散化し、角速度 w と回転角 θ を求める。

$$w^{n+1} = w^n + \Delta t (wa)^n \quad (2.50)$$

$$\theta^{n+1} = \theta^n + \Delta t w^{n+1} \quad (2.51)$$

ここで式(2.50)右辺の wa は角加速度である。

これまでの流れ解析に用いられてきた粒子法では、MPS法に限らず DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) や SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) でも、粒子には回転の自由度が無かった。MPS法では Navier-Stokes 方程式における粘性項を速度ベクトルの交換という粒子間相互作用で離散化しているが、これは偶力になり回転モーメントを発生させる。そして、この回転モーメントは計算モデルにおいて無視されているので、角運動量は保存されていない。DSMCでも確率的に2粒子間の衝突を考えることで速度ベクトルが交換され回転モーメントが発生するが、これを無視しているために角運動量が保存されないということが以前より指摘されている[29]。一方、DEM (Distinct Element Method) では粒子が回転の自由度を持っており、粒子間で角運動量を交換する。そのため、DEMでは角運動量を保存させることができる。

ここで開発した弾性体の粒子計算モデルでは、各粒子が回転の自由度を持っており、剪断応力によって生じる回転モーメンを打ち消すよう粒子を回転させている。そのため、本計算モデルでは、動的な弾性拳動解析において角運動量が保存される。

2.4 検証計算

2.4.1 構造物中の弾性波

細長い弾性体中に正弦波状の変位を与え、応力分布が正しく計算されるかどうかを確認する。計算体系を図2.4に示す。幅0.2m、長さ1.0mの弾性体とし、20x100個の粒子で表す。従って粒子間隔は0.01mとなる。幅の方向をx座標、長さ方向をy座標で表す。ヤング率は10³、ポアソン比は0.3、密度は10³とする。

y方向の変位uとして、次のものを与えた。

$$u = A \sin(\omega y) \quad (2.52)$$

ここでAは振幅、ωは角振動数である。また、速度vを、

$$v = -\omega c A \cos(\omega y) \quad (2.53)$$

で与えた。ここでcは、無限媒質中を平面波状の弾性波の伝わる速度、

$$c = \left(\frac{\lambda' + 2\mu}{\rho} \right)^{1/2} \quad (2.54)$$

とする。

方眼紙状に粒子が配置されている場合に、本研究で開発した弾性体の粒子計算モデルを十分な粒子数で計算すれば、圧力や応力の分布は解析解と一致する。そこで、粒子数を変化させて計算精度がどのように変化するかを調べる。正弦波の1周期を64, 32, 16, 8, および4個の粒子で表した場合について考える。変位を式(2.52)で与えたときの圧力分布の解析解は式(2.9)より、

$$p = -\omega \lambda' A \cos(\omega y) \quad (2.55)$$

と得られるので、これを計算結果と比較する。なお、本研究の計算条件では、種々のパラメータは次の値になる。

$$\lambda' = \frac{E\nu}{1-\nu^2} = 329.67 \quad (2.56)$$

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)} = 384.62 \quad (2.57)$$

$$c = 1.04828 \quad (2.58)$$

1周期をn個の粒子で表すと、角振動数は次のようになる。

$$\omega = 2\pi \frac{1}{0.01n} \quad (2.59)$$

また、振幅Aには次の値を入力する。

$$A = 10^{-4} \frac{n}{64} \quad (2.60)$$

また、粒子間相互作用における重み関数には、MPS 法と同じものを用いる。

$$w(r) = \begin{cases} \frac{r_e}{r} - 1 & r < r_e \\ 0 & r \geq r_e \end{cases} \quad (2.61)$$

重み関数の半径 r_e は、

$$r_e = 4.0d \quad (2.62)$$

とする。ただし d は初期配置における粒子間隔で、ここでは 0.01 とする。

それぞれの解像度における計算結果を図 2.5? 2.9 に示す。図中で実線が解析解で、白丸が計算結果である。 $n=64$ では多少の違いはあるが、解析解とよく一致していることが分かる。 $n=32$ でも解析解と計算結果とは良く一致している。 $n=16$ になると、圧力の最大値と最小値が絶対値としてやや小さくなっている。これは粒子数が不足していることを示している。 $n=8, 4$ と粒子数が少なくなるにつれて圧力の振幅は小さく計算されていることがわかる。とはいえ、相互作用の及ぶ半径が $4.0d$ と大きいにもかかわらず圧力分布は少ない粒子数でもあまり解析解からはずれることなく計算されていることがわかる。計算結果をまとめて図 2.10 に示す。ピーク値を解析解 (0.324) と比較してみると、 $n=64$ の場合に 102% とやや大きいが、 $n=32$ では 100%、 $n=16$ では 97%、 $n=8$ では 91%、 $n=4$ では 63% と、だいに小さくなっていくことがわかる。粒子数が少ないと振幅が小さくなるよう誤差が生じる。

また、全ての計算結果において両端で解析解と大きく違っているのは、近傍粒子が端よりも外側に無いためである。本粒子計算モデルにおける境界条件についてはまだ詳細に検討しておらず、今後の検討課題である。

次に、 $n=64$ の場合に？ $t=2.0 \times 10^{-4}$ として 0.2sec まで計算を進めた。この場合、無限媒質中であれば解析解があり、

$$u(y, t) = A \sin(\omega(y - ct)) \quad (2.63)$$

$$v(y, t) = -\omega c A \cos(\omega(y - ct)) \quad (2.64)$$

$$p(y, t) = -\omega \lambda' A \cos(\omega(y - ct)) \quad (2.65)$$

となる。計算結果における圧力分布の変化の様子を図 2.11 に示す。波が上方に伝わっている様子が計算されていることがわかる。ただし、2つの問題点がある。1つは、計算体系の幅が 0.2 と有限であるので、中心部と周辺部で多少圧力が異なっている。周辺部では応力は小さくなりやすく、これによって圧力波の伝播速度も小さくなる。もう1つ

は、上端と下端の影響である。境界条件はここでは単純な自由端にしている。そのため、反射波が生じる。特に、 $t=0.2\text{sec}$ において、上端付近に低い圧力が現れて、下方に伝播しているのが見える。

$t=0\text{ sec}$ と 0.2 sec における計算結果と解析解の比較を図 2.12? 15 に示す。ここでは、なるべく端の影響が少ない弾性体の内部 ($x=0.1$) における y 方向の分布を計算結果として用いた。図 2.12, 2.13 は変位分布および速度分布の比較である。伝播速度と振幅についてどちらもあまり一致していない。ただ、図 2.14 に示す圧力分布については伝播速度と振幅はともに良く一致している。図 2.15 の垂直応力分布については、応力は 2 粒子間で定義されるものなので、1 つの粒子に対してその近傍粒子との組み合わせの数だけ存在する。そのため、図では 1 つの y 座標に対してたくさんの点が打たれている。 $t=0\text{ sec}$ においては、ほぼ 3 種類の曲線に乗る。最も振幅が大きいのは、 x 座標が同じ近傍粒子との間の垂直応力で、おおよそ解析解に一致している。(図中には解析解における振幅の範囲が線で示されている。) これよりも振幅の小さい曲線、および、殆ど振幅が無い曲線については、 x 座標が異なる近傍粒子とのもので、斜め方向の垂直応力になっているものである。 $t=0.2\text{ sec}$ については、変位分布や速度分布と同様に、伝播速度が小さくかつ振幅が大きくなっているが、解析解との一致は良くない。

伝播速度が計算において遅れるのは、弾性体の幅が有限であるためと考えられる。ちなみに、ポアソン比がゼロの場合には、横方向の変形が無くなり弾性体の幅が有限であることの影響が消え、伝播速度は解析解と一致するようになる。また、振幅が初期値よりも大きくなるのは、1 次精度の時間差分スキームの誤差の影響と考えられる。一般的に振動問題の解析において、低次の時間差分スキームを陽的にすると振動エネルギーは大きくなり、陰的になると逆に小さくなる。本計算モデルでは、陽的に応力を求め、粒子速度の修正はこれに基づいて行う。また、粒子の移動については更新された速度を用いている。どちらも 1 次精度であるため、誤差によって振幅が増幅されるものと考えられる。本計算モデルにおいて振動のエネルギーを一定に保てるような時間差分スキームについては今後の研究課題である。

2.4.2 2つの弾性体の衝突

2つの弾性体が衝突する計算を行い、角運動量が保存されていることを確認する。計算体系を図 2.16 に示す。5x5 個の粒子より構成される正方形形状の弾性体を左下と右上の 2箇所に配置し、互いに衝突するような初期速度を与える。左下の弾性体では、底面に接する 5 つの粒子にのみ 0.1m/s の初期速度を与える。従って、この弾性体は内部にひず

みを生じつつ全体が回転運動する。右上の弾性体の粒子には全てに-0.2m/s の初期速度を与えるので、そのまま内部にひずみを生じることなく移動する。また、全ての粒子において、初期の角速度はゼロである。

構造物は初期状態において互いの相対位置を記憶しているので、そのままだと2つの構造物が衝突しても、お互いに干渉することなくすりぬけてしまう。そこで、粒子数密度から弾性体の密度を計算し、そこからも圧力を計算する。質量保存則より、

$$\frac{\Delta \rho}{\rho_0} = -\operatorname{div}(u) \quad (2.66)$$

これを粒子数密度で書くと、

$$\frac{n^0 - n}{n^0} = \operatorname{div}(u) \quad (2.67)$$

これより圧力が得られる。

$$p_n = -\lambda' \operatorname{div}(u) \quad (2.68)$$

式(2.33)を用いて変位の発散より計算した圧力 p と、粒子数密度より式(2.68)を用いて計算した圧力 p_n を比較し、大きい方をその粒子の圧力とする。

弾性体の衝突では、圧縮による正の圧力は発生するが、引張りでは互いに離れてしまうので負の圧力は発生しない。本計算モデルではこれをうまく計算することができる。また、流体でも圧力場を計算するので、圧力を介した流体との相互作用に対しても本計算モデルを適用することが可能である。しかしながら、弾性体同士が接触すると、等方的な圧力だけでなく垂直応力も発生する。また、表面での摩擦によって剪断応力も発生する。しかしながら、本計算モデルではこれらは無視されている。

弾性体の物性として、ヤング率は 10^3 、ポアソン比は 0.3、密度は 10^3 とし、計算を行った。結果を図 2.17 に示す。0sec では粒子の初期配置および初期速度が示されている。0.2sec では、右上の弾性体では全ての粒子が初期速度を保ったままもう一方の弾性体に近づいている。左下の弾性体は、初期速度分布が局所的であるので、弾性体内部のひずみを介して全体の運動に変化し、ゆっくりとした並進運動および回転運動が生じている。0.3sec では弾性体同士が重心から離れた位置で衝突している。0.6 および 0.8sec では、2つの弾性体が衝突後に回転運動を伴いながら離れていく様子がわかる。回転運動はどちらの弾性体でも反時計回りである。

この計算における弾性体全体の角運動量の変化を表 2.1 に示す。粒子の並進運動による角運動量は、個々の粒子の速度ベクトルについて座標の原点を中心とした角運動量を計算し和を取ったものである。粒子の回転運動による角運動量は、個々の粒子の回転に

よる角運動量の和をとったものである。時刻 0.0sec では、粒子の並進運動による角運動量しかない。0.2sec では、左下の弾性体が回転運動を始めるため、粒子の回転による角運動量がわずかながら発生している。この角運動量は $4.5 \times 10^{-5} \text{ kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ であるが、合計の角運動量は 10^{-6} の桁まで初期値と一致しているので、本計算モデルによって角運動量が保存されていることがわかる。0.4sec 以降では、弾性体の衝突により粒子の回転運動による角運動量が $2.2 \times 10^{-4} \text{ kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ 程度まで増加しているが、この場合も全体の角運動量は 10^{-4} の桁まで初期値と一致しているので、角運動量が保存されていると言える。なお、並進運動の運動量も保存されていることを確かめている。

2.4.3 衝突による弾性体の破壊

最後に、本計算手法の可能性を見るために、板状の弾性体に正方形形状の弾性体を速い速度で衝突させ、板が折れる様子を計算する。計算体系を図 2.18 に示す。物性は、ヤング率 10^4 、ポアソン比 0.3 、密度 10^3 とした。初期速度として、右にある正方形形状の弾性体に -1.0 m/s を与えた。

計算結果を図 2.19 に示す。図中の粒子の色は圧力を表している。正方形形状の弾性体の衝突により、高い圧力が生じ、その後、板が大きく変形している。特に、衝突と反対側では圧力が負になり引張り応力が生じるが、衝突による力がこれに打ち勝ち粒子は離れていく。本計算では応力の計算に重み関数が掛けられていて、これが粒子間距離が遠くなるほど小さくなるため、ある程度距離が離れてしまうと引張り応力が働くくなり、そこで切れてしまう。実際の弾性体の破壊挙動は歪み-応力曲線に従うので、その曲線を入れて計算しなければ物理的に正しい計算とは言えない。しかしながら本計算により、ここで開発した弾性体の粒子計算モデルを用いれば、弾性体の動的大変形挙動のみならず、破壊挙動も容易に扱うことができる事が示された。

2.5 考察

本章では、弾性体の粒子計算モデルを新たに開発した。ヤング率とポアソン比で規定される弾性体の運動方程式を粒子間相互作用によって離散化し、陽的な計算アルゴリズムにより弾性体の動的大変形挙動の解析が可能である。ただし、堅い構造物における静的な弾性挙動の解析には、陰的なアルゴリズムを用いた方がはるかに効率的であるので、これについては今後の開発課題である。構造物中に正弦波状の変位を与え、圧力や応力の分布が解析解と一致することが示された。ただし、弾性波の伝播の計算では、振幅が波の進行とともに大きくなるなど、時間差分スキームにまだ改良すべき点がある

ことがわかった。

粒子に回転の自由度を与えることにより、ひずみの中の回転成分を除去するとともに、角運動量の保存性が実現できた。これは2つの弾性体の衝突の計算例によって確かめられた。また、粒子数密度に基づいた圧力計算を考慮することで、衝突による衝撃力の計算を可能にした。この計算法については流体-弾性体相互作用の計算にも用いることができる。また、衝撃が大きい場合には弾性体の破壊が計算できることが示された。ただし、実際の弾性体のひずみ-応力の関係はまだ考慮されていないので、物理的に正しい破壊挙動の解析についてはこの関係をコードに組み込まなくてはならない。

表 2.1 角運動量保存の検証

時刻 [sec]	角運動量 [$\text{kg}\cdot\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$]		
	粒子の並進運動	粒子の回転運動	合計
0.0	2.5×10^{-2}	0.0	2.5×10^{-2}
0.2	2.49545×10^{-2}	4.51327×10^{-5}	2.49997×10^{-2}
0.4	2.48194×10^{-2}	2.17453×10^{-4}	2.50369×10^{-2}
0.6	2.48043×10^{-2}	2.17573×10^{-4}	2.50219×10^{-2}
0.8	2.47871×10^{-2}	2.19177×10^{-4}	2.50062×10^{-2}

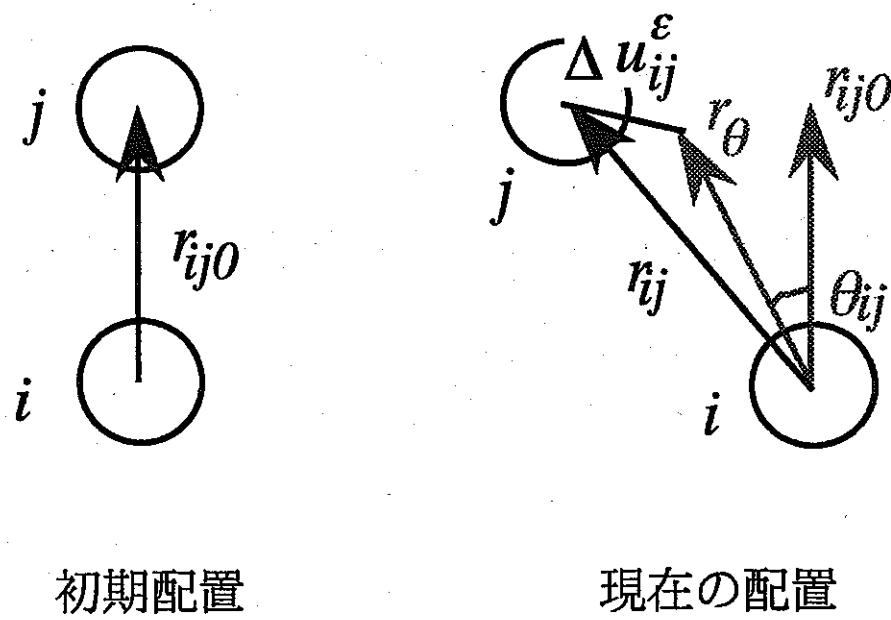


図 2.1 粒子相対位置ベクトル

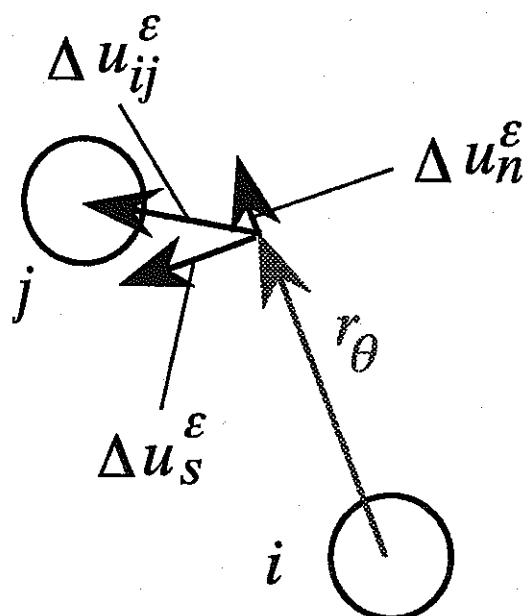


図 2.2 相対変位ベクトル

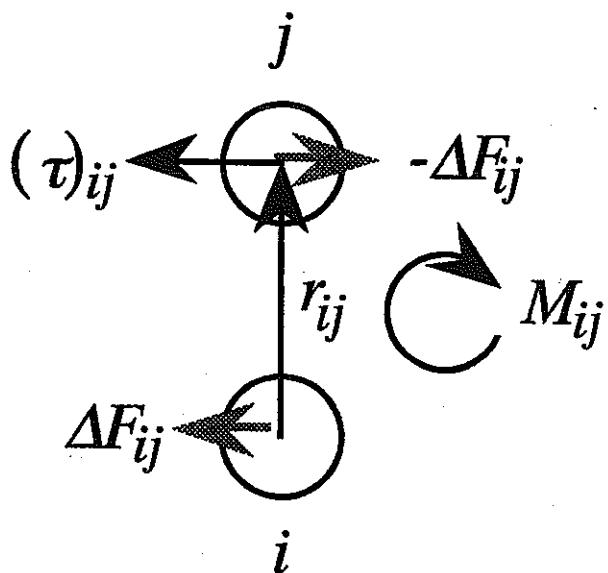


図 2.3 剪断応力によるモーメントの発生

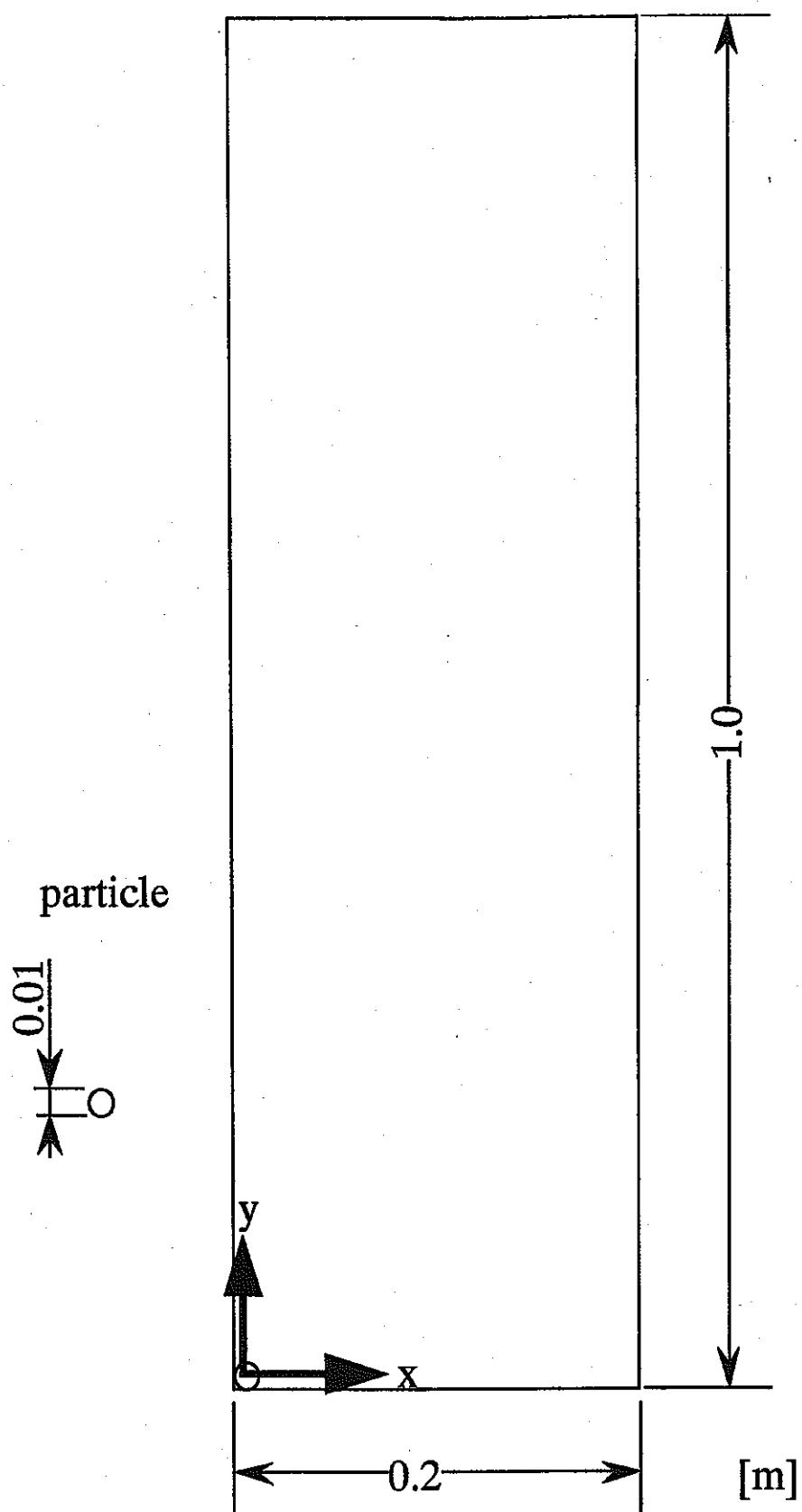


図 2.4 弾性波の計算体系

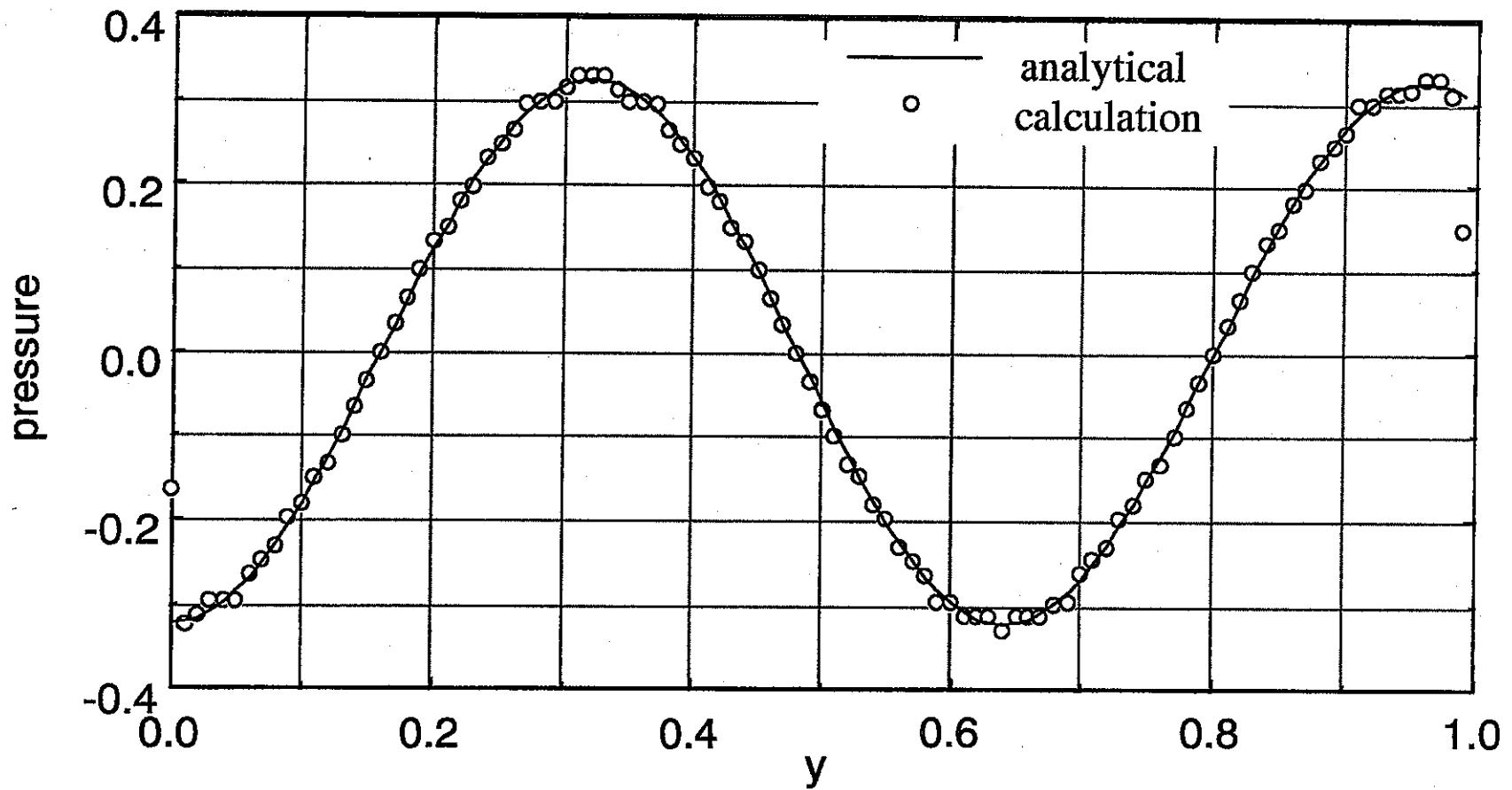


図2.5 弾性体中の圧力分布 (n=64の場合)

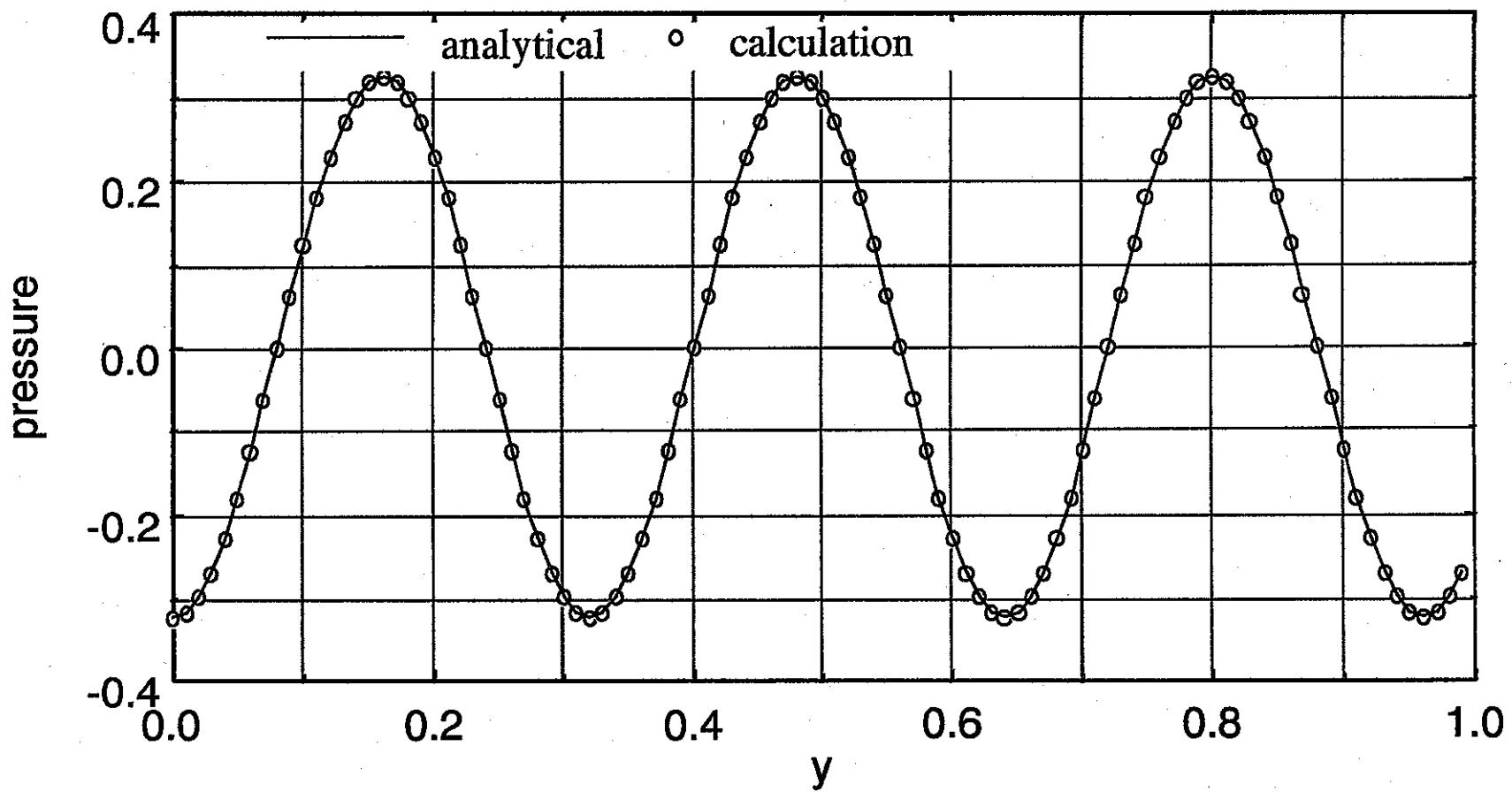


図2.6 弾性体中の圧力分布 (n=32の場合)

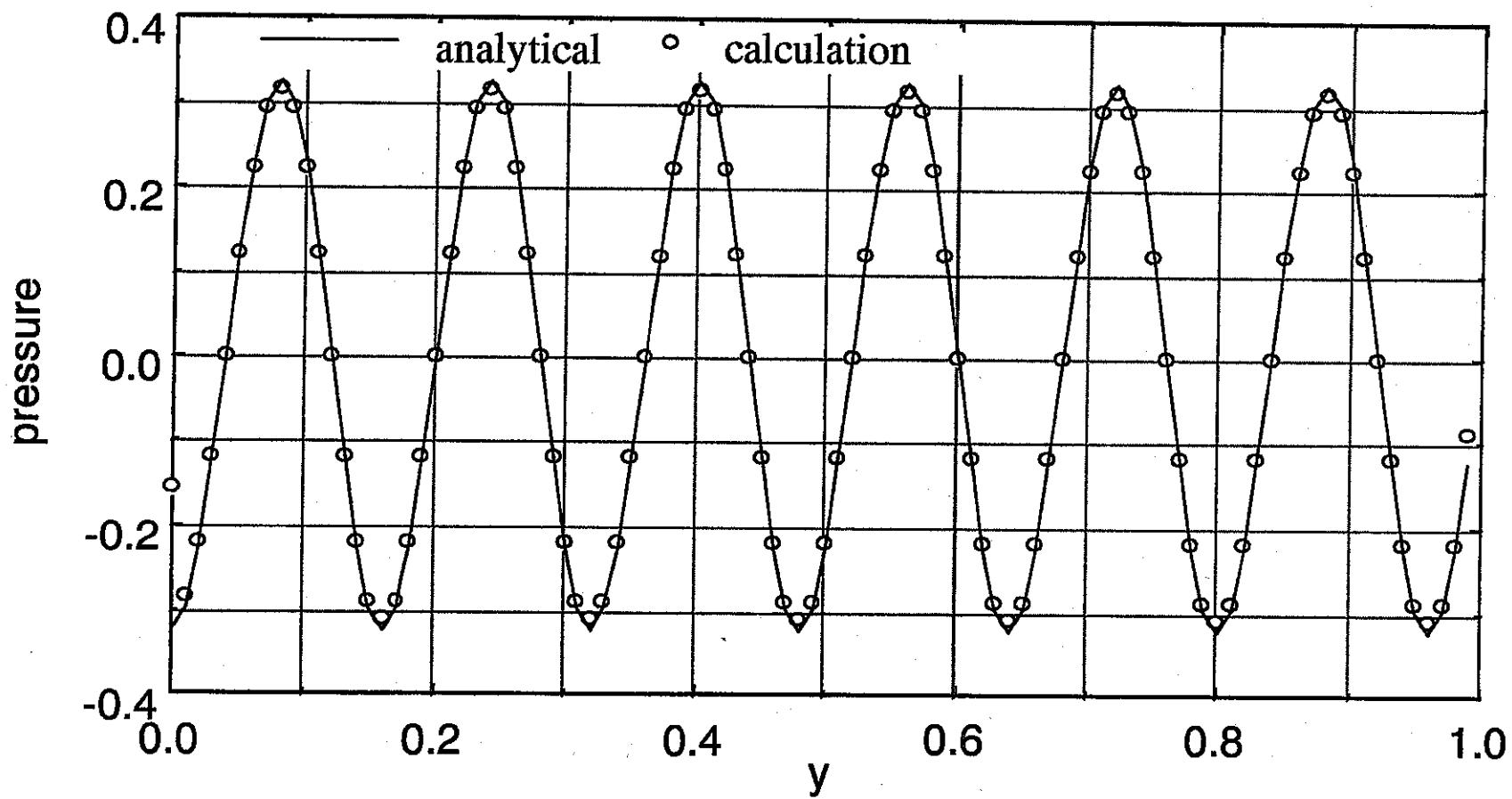


図2.7 弾性体中の圧力分布 (n=16の場合)

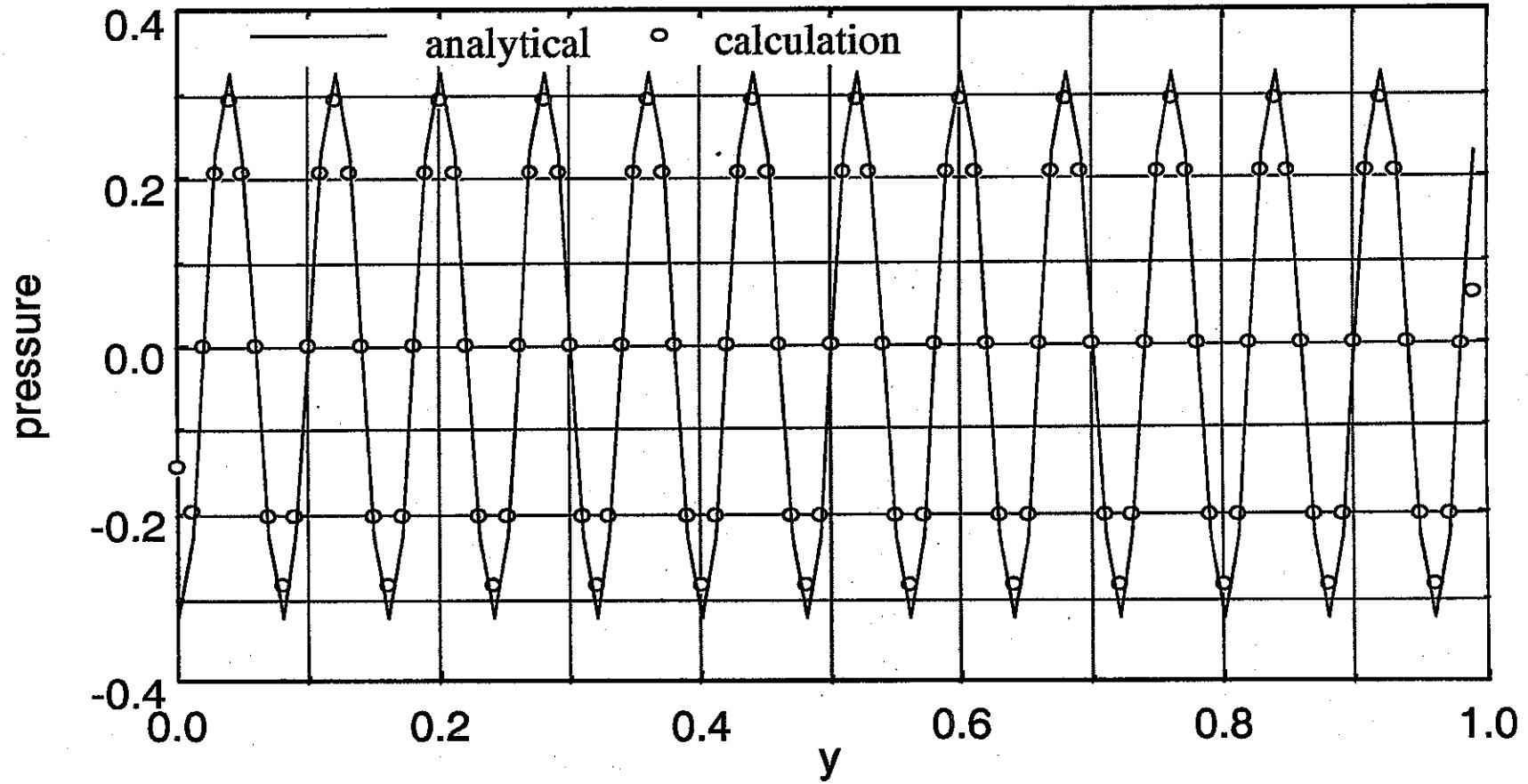


図2.8 弾性体中の圧力分布 (n=8の場合)

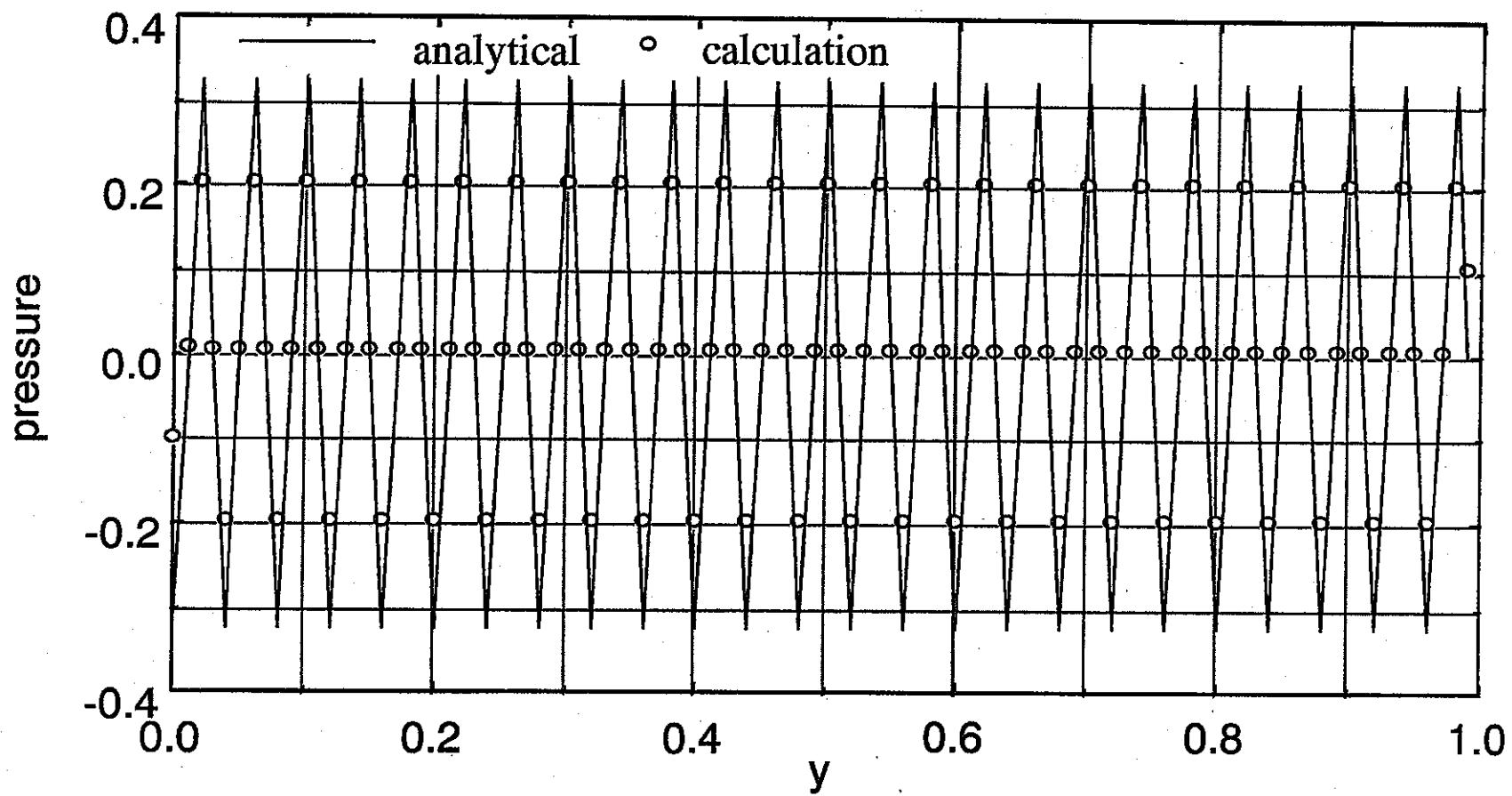


図2.9 弾性体中の圧力分布 (n=4の場合)

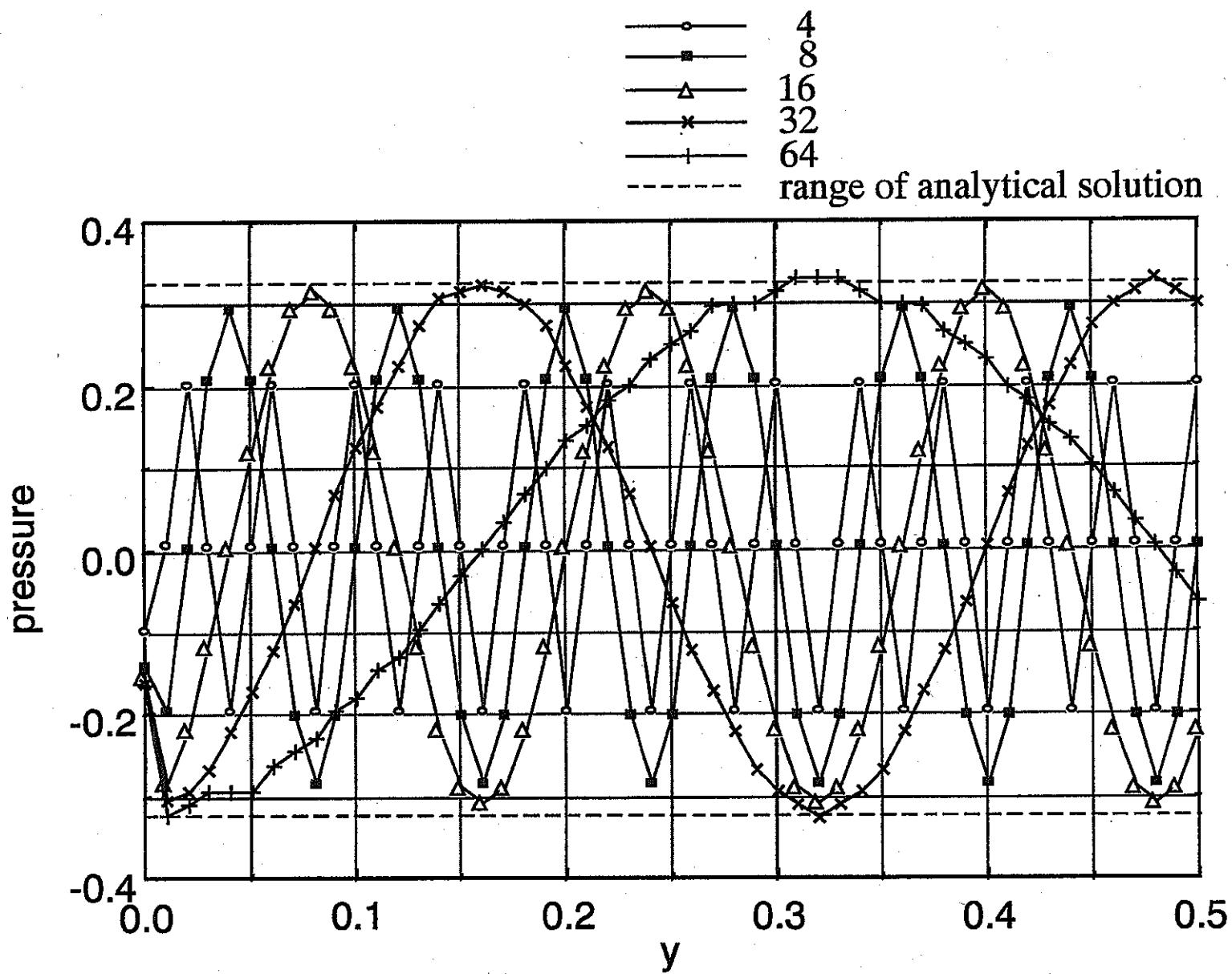


図2.10 弾性体中の圧力分布の計算結果（すべての場合）

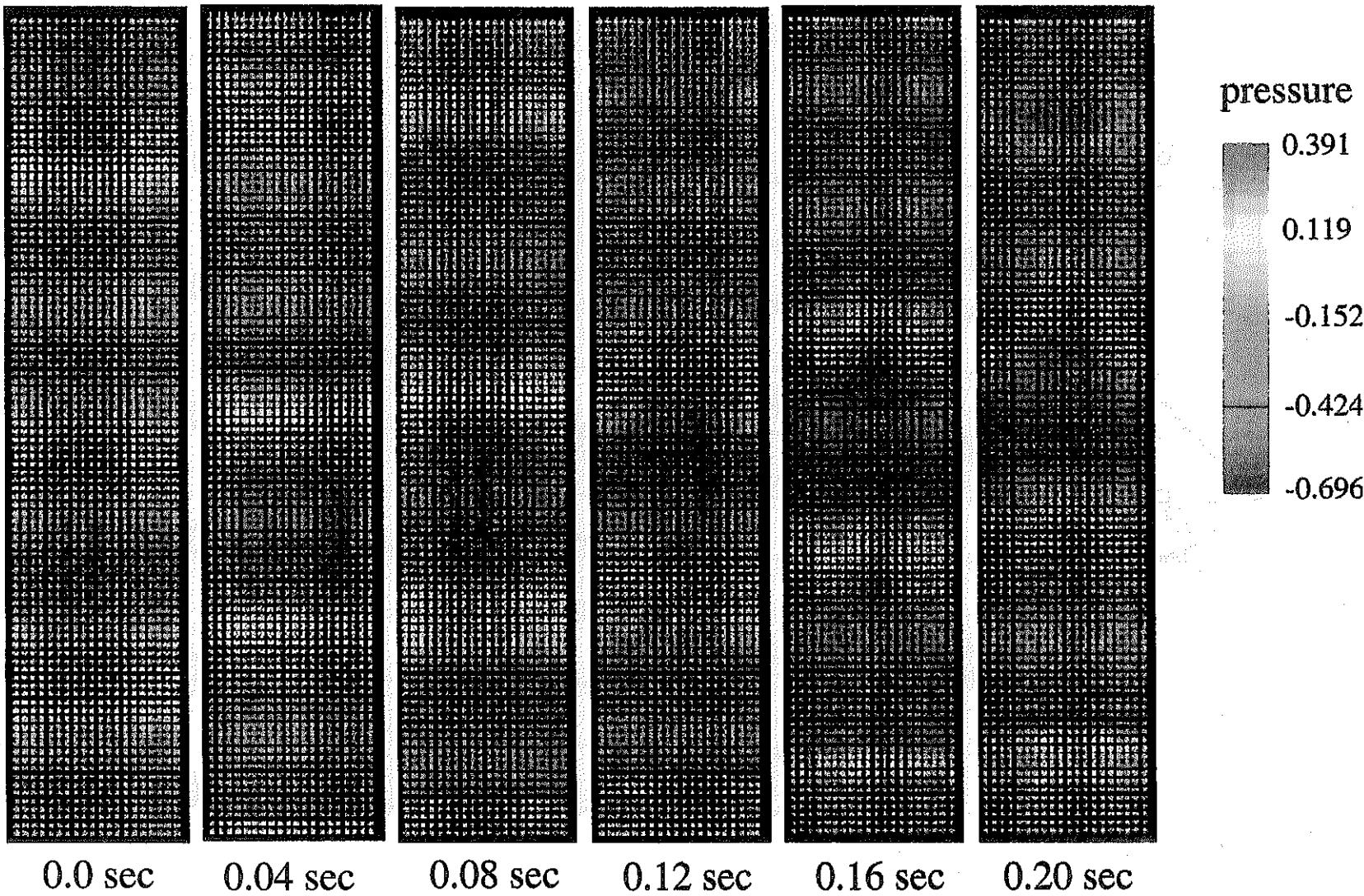


図2.11 弾性体中を伝播する圧力波の計算結果

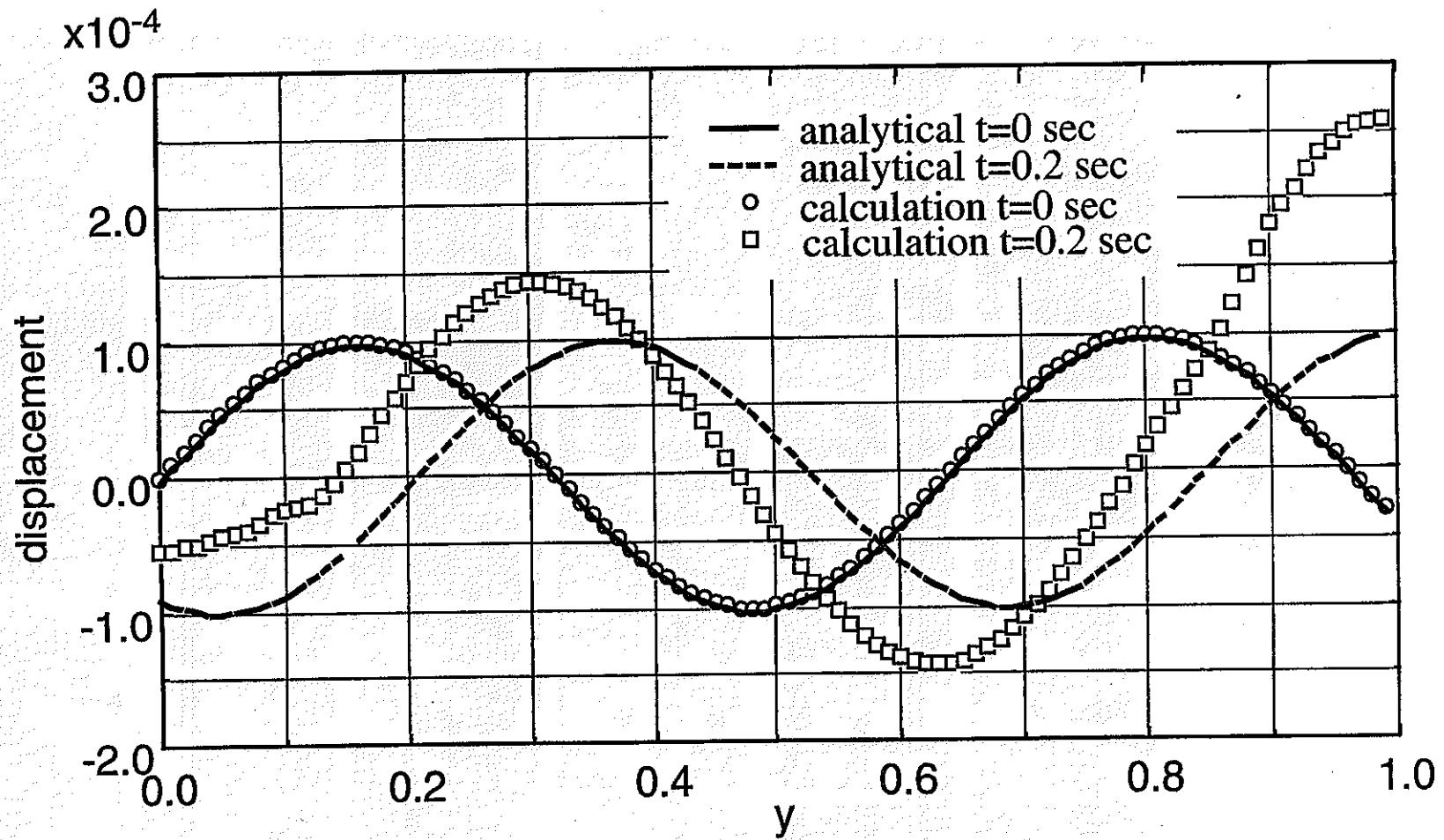


図2.12 変位分布の比較

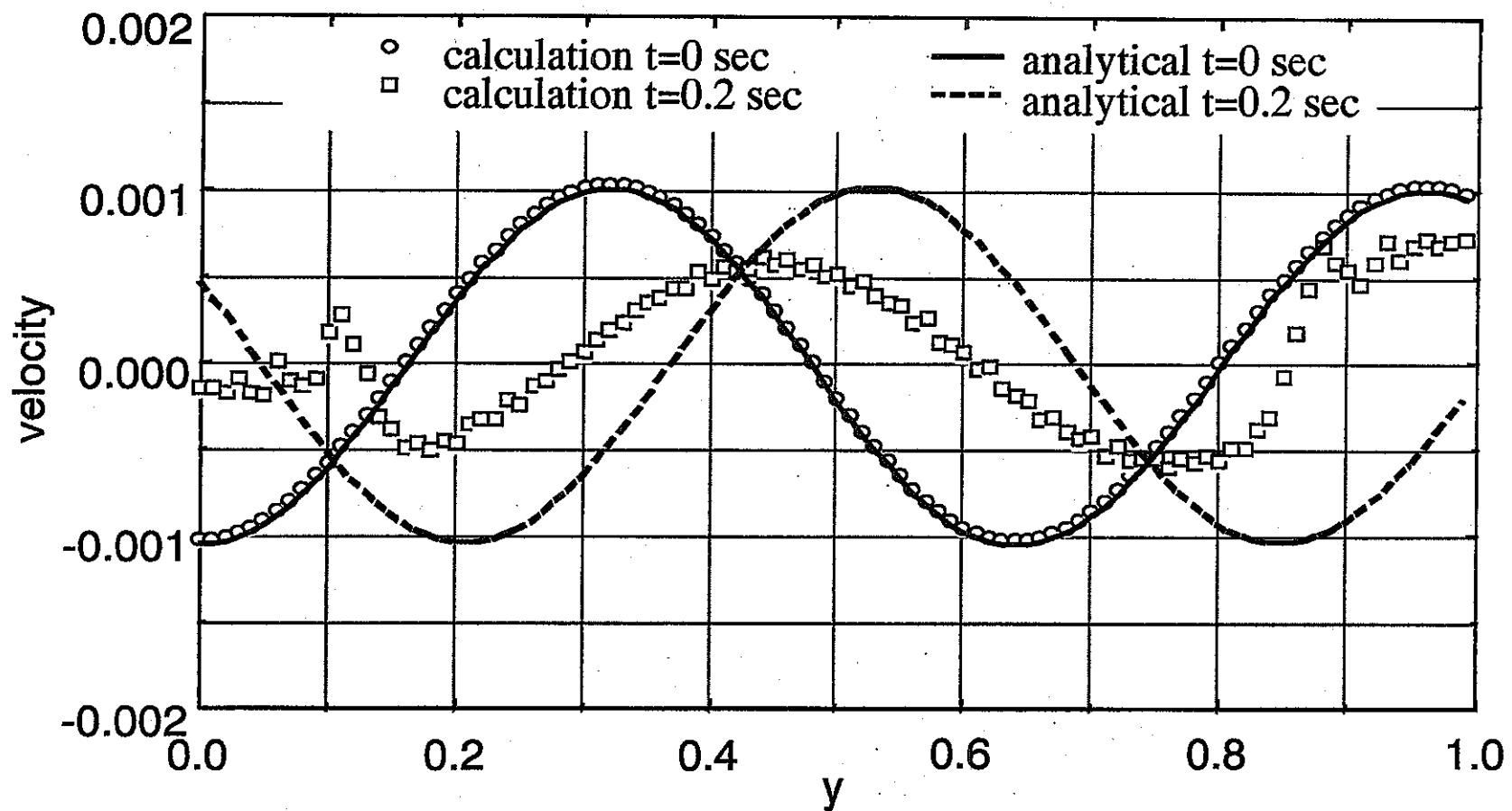


図2.13 速度分布の比較

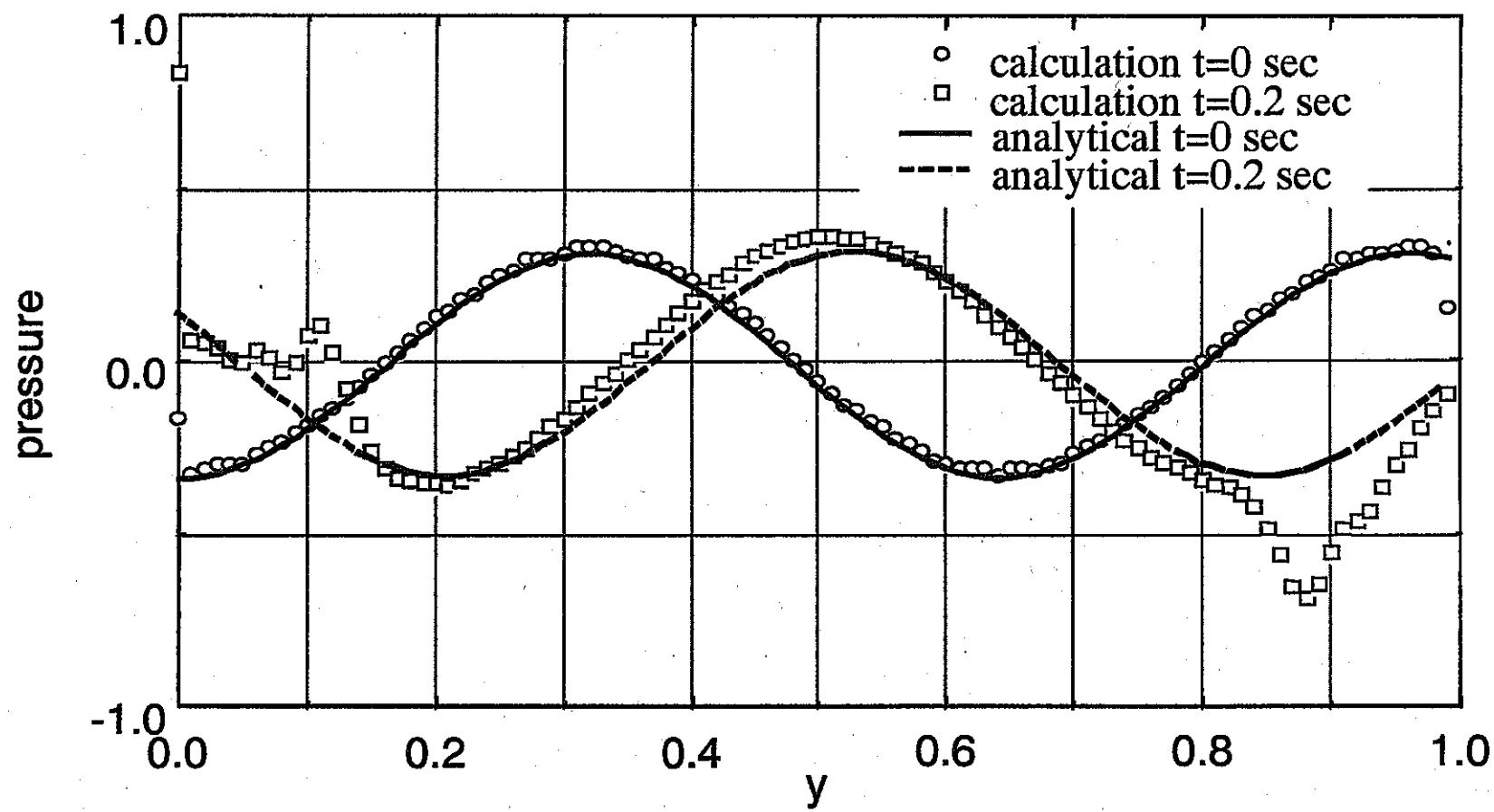


図2.14 圧力分布の比較

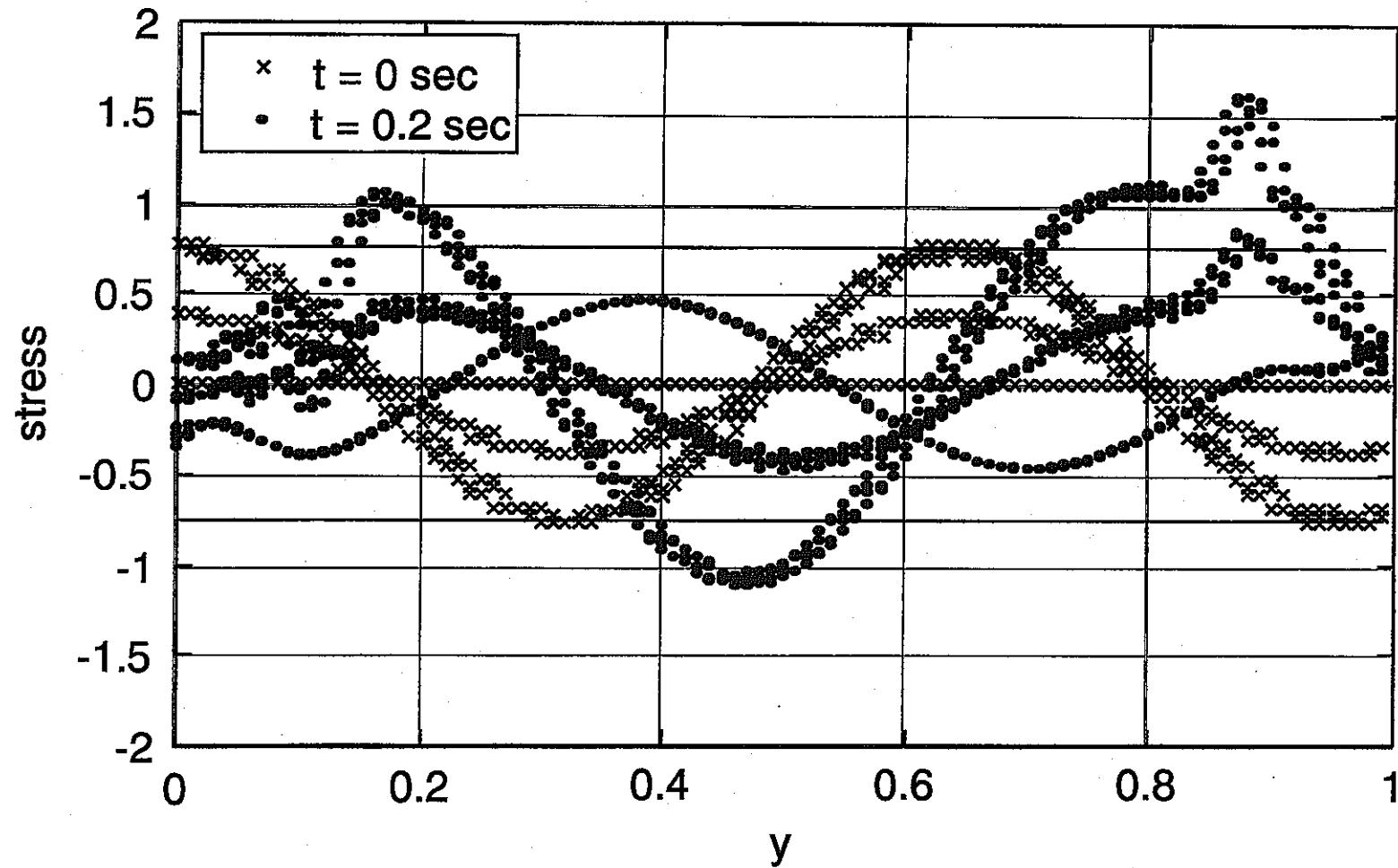


図2.15 垂直応力分布の比較

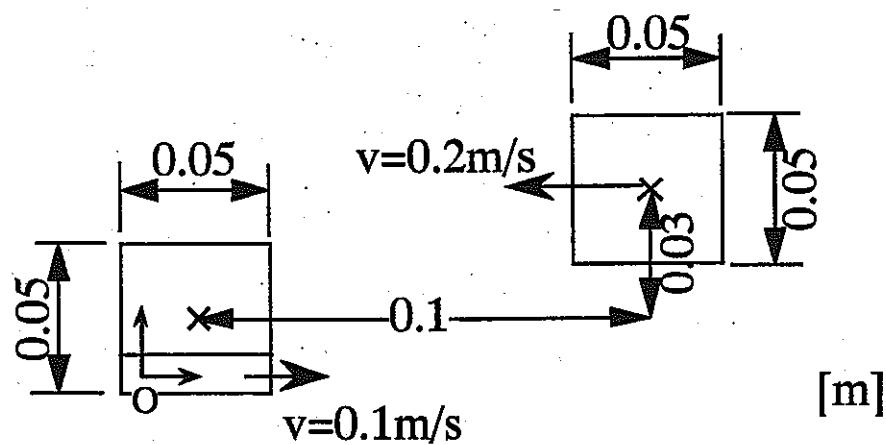


図 2.16 2つの弾性体の衝突の計算体系

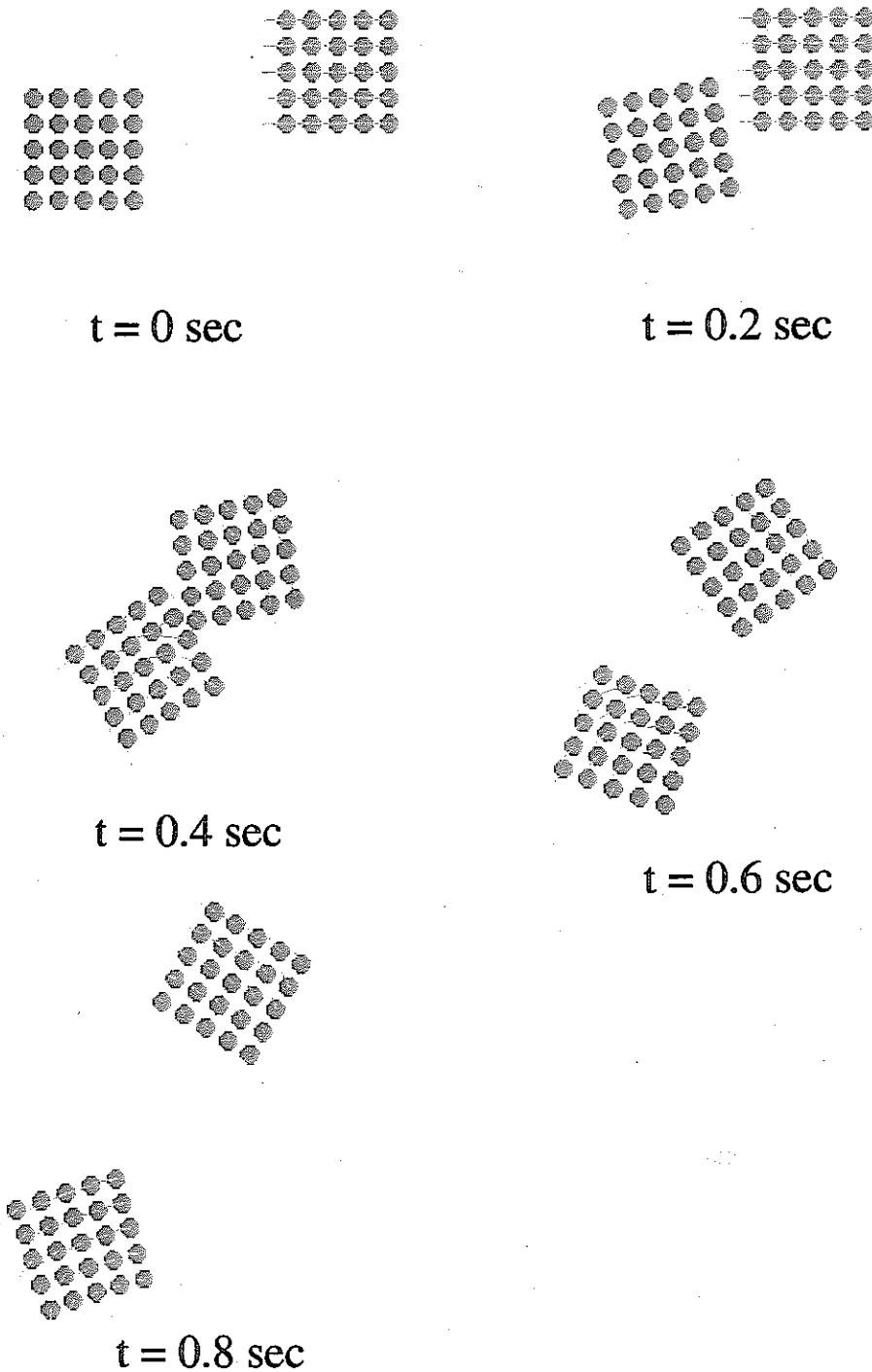


図 2.17 2つの弾性体の衝突の計算結果

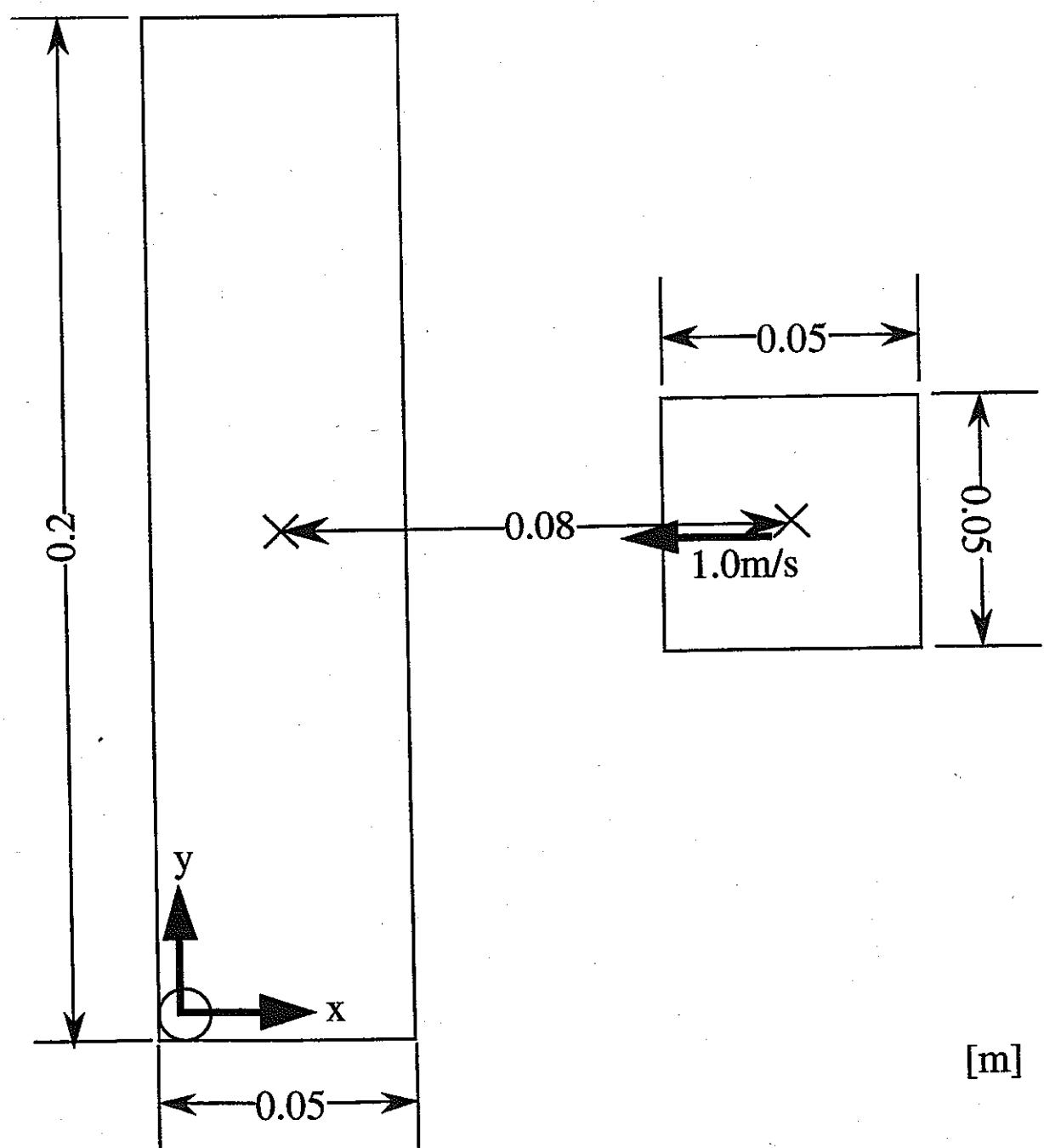


図 2.18 衝突による弾性体の破壊の計算体系

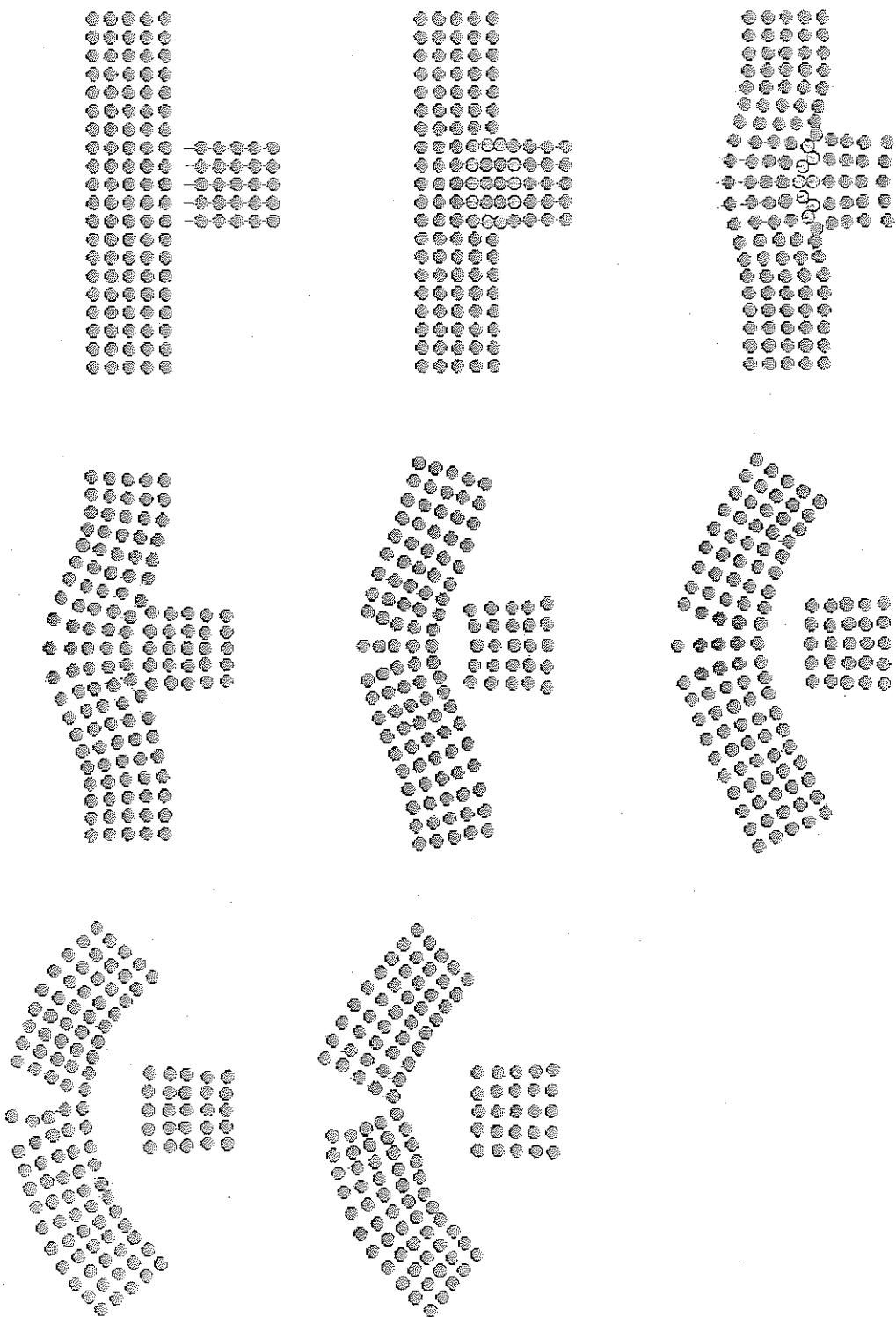


図 2.19 衝突による弾性体の破壊の計算結果
(ヤング率:10⁴, ポアッソン比:0.3, 密度:10³)

第3章

凝固の粒子計算モデルの開発

3.1 支配方程式

支配方程式には、非圧縮性流れに対する連続の式、ナビア・ストークス方程式、及び熱輸送方程式を用いる。

- ・連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (3.1)$$

- ・ナビア・ストークス方程式

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = -\frac{\nabla P}{\rho} + \nu \nabla^2 \vec{u} + \frac{1}{\rho} \vec{F} \quad (3.2)$$

- ・熱輸送方程式

$$\frac{Dh}{Dt} = k \nabla^2 T \quad (3.3)$$

ここで、

ρ : 密度 [kg/m^3]

\vec{u} : 流速 [m/s]

P : 圧力 [Pa]

ν : 動粘性係数 [m^2/s]

\vec{F} : 外力 [N/m^3]

h : エンタルピ [J]

T : 温度 [$^\circ \text{C}$]

k : 热伝導率 [$\text{W}/\text{m}/\text{K}$]

連続の式では、密度の時間微分をゼロとしており、非圧縮条件を直接表したものになっている。従来の差分法では、質量保存則に式(3.1)を代入して、速度の発散がゼロであるという式を導き、これを用いている。

ナビア・ストークス方程式および熱輸送方程式では、左辺の時間微分がラグランジュ微分になっている。これは移流項を含んだおり、次のように書くことができる。

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \quad (3.4)$$

式(3.4)の右辺の第1項が時間微分項で第2項が移流項である。MPS法では粒子がそれ自身の流速ベクトルに従って移動するのでラグランジュ系である。粒子位置の更新によってラグランジュ微分、すなわち式(3.4)の左辺、が計算されるため、移流項を別に計算する必要はない。従来の差分法では移流項の差分スキームによって数値拡散や数値振動が生じ、数値解析上の大きな問題点であったが、粒子法ではこの問題が生じない。

温度輸送方程式では、相変化を考慮できるように、各粒子はエンタルピと温度の両方の変数を持ち、温度はエンタルピの関数として与えるようにする。

3.2 MPS法による計算モデル

3.2.1 重み関数

各粒子は重み関数の与える重みで近傍の粒子とのみ相互作用する。重み関数 $w(r)$ は以下の式で与える。

$$w(r) = \begin{cases} \frac{r_e}{r} - 1 & (0 \leq r < r_e) \\ 0 & (r_e \leq r) \end{cases} \quad (3.4)$$

ここで、

r : 重み関数の半径

r_e : 粒子間距離

である。

重み関数の範囲内での近傍の粒子との相互作用の概念を図3.1に示す。重み関数の半径 r_e を有限の値とすることで相互作用する粒子の数が制限される。例えば、ガウス関数のように無限遠方まで値を持つ関数を重み関数として用いると、粒子数の2乗に比例して相互作用の組合せが増加するので、大規模計算では著しく不利になる。また、粒子間距離 r が 0 では重み関数が無限大になる。この性質は非圧縮条件モデルにおける数値安定性に優れている。

MPS法においては重み関数の半径 r_e が重要な計算パラメータである。この値が小さいと相互作用する近傍粒子数が減るので計算は速くなるが、計算精度が悪くなる。これまでの研究で、計算精度上の最適な r_e を求める研究がなされており[3]、後で述べる粒子数密度や勾配モデルでは $2.1 I_0$ 、ラプラシアンモデルでは $4.0 I_0$ が適切であるとされており、本研究でもこの数値を用いるものとする。ただし、 I_0 は初期粒子配置における粒

子間距離である。

3.2.2 粒子数密度

ある粒子 r の位置 \vec{r}_i の粒子数密度 n_i は近傍粒子の重み関数の値の和として定義される。

$$\langle n \rangle_i = \sum_{j \neq i} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \quad (3.5)$$

ここで、添字 j は粒子 i の近傍にある粒子である。

ある粒子の物理量 $\langle f(\vec{r}_i) \rangle$ は近傍の粒子の物理量を重み関数に従って足しあわせ、粒子数密度 n_i を用いて規格化することで表現することができる。

$$\langle f(\vec{r}_i) \rangle = \frac{\sum_{j \neq i} f_j w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|)}{n_i} \quad (3.6)$$

従って、一般的に $\langle f(\vec{r}_i) \rangle$ は、

$$\langle f(\vec{r}_i) \rangle = \langle f \rangle_i \neq f_i \quad (3.7)$$

である。

単位体積中に含まれる粒子の数密度 $\langle N \rangle_i$ は、

$$\langle N \rangle_i = \frac{\langle n \rangle_i}{\int_V w(r) dv} \quad (3.8)$$

と書くことができ、これを用いると流体の密度 $\langle \rho \rangle_i$ は、

$$\langle \rho \rangle_i = m \langle N \rangle_i = \frac{m \langle n \rangle_i}{\int_V w(r) dv} \quad (3.9)$$

となる。ただし、 m は粒子 1 個分の質量である。 r_e が一定であれば重み関数の積分値も一定である。さらに全ての粒子の質量が等しければ、流体の密度は粒子数密度に比例する。

非圧縮性流れでは連続の式より流体の密度が一定であるという条件になる。これは式 (3.9) より粒子数密度一定の条件に変換できる。この粒子数密度の一定値を n_0 と書くことにする。

3.2.3 勾配モデル

物理量 ϕ_i を持つ粒子 i から物理量 ϕ_j を持つ粒子 j への物理量 ϕ の勾配は、粒子間の単純な差分によって、

$$\nabla \phi_{i \rightarrow j} = \frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2} (\vec{r}_j - \vec{r}_i) \quad (3.10)$$

と表すことができる。これを重み関数の重みに従って足しあわせ、規格化することにより、粒子 i の位置における勾配(gradient)の計算モデルとする。概念を図 3.2 に示す。

$$\langle \nabla \phi \rangle_i = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{\phi_j - \phi_i}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|^2} w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \right] \quad (3.11)$$

ただし、

d : 空間次元数

なお、近傍粒子との差分の足しあわせの際、粒子 i 自身との差分は除外する。

本勾配モデルは、ナビア・ストークス方程式の圧力勾配項に用いられる。

3.2.4 ラプラシアンモデル

ラプラシアンは物理的には拡散現象を意味しているので図 3.3 に示すように、粒子 i が持つ物理量の一部を周囲の粒子へ重み関数の重みに従って分配する。図 3.3 では非定常拡散の概念を表しているが、演算子としてのラプラシアンは、

$$\langle \nabla^2 \phi \rangle_i = \frac{2d}{n^0 \lambda} \sum_{j \neq i} \left[(\phi_j - \phi_i) w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \right] \quad (3.12)$$

と書くことができる。ここで、 λ は拡散による物理量分布の分散の増分を解析解と一致させるための係数で、

$$\lambda = \frac{\int_V w(r) r^2 dv}{\int_V w(r) dv} \quad (3.13)$$

である。

本ラプラシアンモデルは、ナビア・ストークス方程式の粘性項、温度輸送方程式の拡散項、後述する圧力のポアッソン方程式における圧力のラプラシアンに用いられる。これらの計算では物理量の保存性を保つために、拡散係数を粒子間で与える必要がある。すなわち、拡散係数が掛けられている場合のラプラシアンの粒子間相互作用モデルを、

$$\langle k \nabla^2 \phi \rangle_i = \frac{2d}{n^0 \lambda} \sum_{j \neq i} \left[k_{ij} (\phi_j - \phi_i) w(|\vec{r}_j - \vec{r}_i|) \right] \quad (3.14)$$

とする。こうすることで、粒子 i と j に対して対称になり、 ij 間で粒子 i の失う物理量と粒子 j が得る物理量とが等しくなる。2つの粒子が違う物質で拡散係数が異なってい

る場合には、逆数の平均によって粒子間の値を与える。

$$\frac{1}{k_{ij}} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{k_i} + \frac{1}{k_j} \right] \quad (3.15)$$

1次元拡散問題では、2つの物質の厚さがそれぞれ等しければ、平均した拡散係数は式(3.15)になる。この計算を行う必要のある物理量は、動粘性係数と熱伝導係数である。

3.2.5 非圧縮条件

非圧縮条件は流体の密度が一定であることであり、連続の式で表される。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (3.1)$$

3.2.2 節で示したように、粒子の質量がすべて等しいとすると、流体の密度と粒子数密度は比例する。よって、非圧縮条件は粒子数密度一定の条件となり、その一定値を n^0 とする。今、粒子数密度が n^* で、 n^0 とは異なっているとする。そして、粒子の流速と座標をそれぞれ \vec{u}_i^* および \vec{r}_i^* だけ修正することで粒子数密度を n^0 に回復させることを考える。

$$\vec{u}_i^{n+1} = \vec{u}_i^* + \vec{u}_i \quad (3.16)$$

$$\vec{r}_i^{n+1} = \vec{r}_i^* + \vec{u}_i \Delta t \quad (3.17)$$

$$n^0 = n_i^* + n'_i \quad (3.18)$$

流体の質量保存則より、流速の修正量と粒子数密度の修正量には以下の関係がある。

$$\frac{\partial \vec{u}^i}{\partial t} = -\frac{\nabla P^{n+1}}{\rho} \quad (3.19)$$

また、ナビア・ストークス方程式の陰的な圧力勾配項によって流速が修正されるとすると、

$$\nabla^2 P^{n+1} = -\frac{\rho}{\Delta t^2} \frac{n_i^* - n^0}{n^0} \quad (3.20)$$

が得られる。式(3.18)を式(3.19)に代入し、その結果を式(3.20)の発散を取ったものに代入すると、以下の圧力のボアッソン方程式が得られる。

$$\nabla^2 P^{n+1} = -\frac{\rho}{\Delta t^2} \frac{n_i^* - n^0}{n^0} \quad (3.21)$$

左辺のラプラシアンは、3.2.4 節に示したラプラシアンモデルによって連立一次方程式に離散化することができる。これを解いて得られた圧力場を式(3.20)に代入すれば流速の修正値が得られる。ただし、式(3.20)の右辺の圧力勾配には、3.2.3 節に示した勾配モデルを用いる。流速の修正値を式(3.16)と(3.17)に代入すれば、新しい時刻 $n+1$ の

流速と粒子位置が最終的に得られる。

3.2.6 計算アルゴリズム

MPS 法における計算アルゴリズムのフローチャートを図 3.4 に示す。非圧縮性ながれの計算は半陰的なアルゴリズムとなっている。まずナビア・ストークス方程式の圧力勾配項を除いた粘性項と外力項、ここでは重力項のみであるが、を陽的に計算し、粒子の流速及び位置を更新する。その後、陰的な圧力のポアッソン方程式を計算して圧力を更新するとともに、修正する。ここで、離散化された圧力のポアッソン方程式は不完全コレスキーフォルム解法 (ICCG 法, Incomplete Cholesky decomposition conjugate gradient) を用いて解く。流れの計算の後、熱輸送方程式を計算し、エンタルピを更新する。温度はエンタルピの関数として求める。ただし、ここで液相と固相の間の相変化を考慮する。

3.3 凝固の計算モデル

これまでの MPS 法では、液相と固相の間の相変化では体積変化無視し、同じ粒子が固相あるいは液相を表すような計算モデルとなっていた。一方、液相から気相への相変化に関しては、極めて大きな体積膨張を伴うため、新しい気相粒子を発生させることでモデル化していた。ここでも、従来と同様に、固相率 α を各粒子が変数として持ち、その値によって粒子を固相あるいは液相と見なす（図 3.5）。境界の固相率を α_{crit} とする。

2.1 節に示したように、各粒子は温度とエンタルピのどちらも変数として持っている。そして、熱輸送方程式（式(3.3)）を計算するとエンタルピが更新される。この更新されたエンタルピより温度と固相率を計算する。粒子が液相の場合は次式に従って温度と固相率を計算する。

$$T_i = \begin{cases} T_m + \frac{h_i - h_{melt,l}}{Cp_l} & h_i > h_{melt,l} \\ T_m & h_i \leq h_{melt,l} \end{cases} \quad (3.22)$$

$$\alpha_i = \begin{cases} 0 & h_i > h_{melt,l} \\ \frac{h_{melt,l} - h_i}{h_{lat}} & h_i \leq h_{melt,l} \end{cases} \quad (3.23)$$

また、粒子が固相の時は次の式を用いる。

$$T_i = \begin{cases} T_m & h_i \geq h_{melt,s} \\ T_m + \frac{h_i - h_{melt,s}}{Cp_s} & h_i < h_{melt,s} \end{cases} \quad (3.24)$$

$$\alpha_i = \begin{cases} 1 - \frac{h_i - h_{melt,s}}{h_{lat}} & h_i \geq h_{melt,l} \\ 1 & h_i < h_{melt,s} \end{cases} \quad (3.25)$$

ここで、

$$h_{lat} = h_{melt,l} - h_{melt,s} : \text{潜熱} \quad (3.26)$$

T_m : 凝固点温度

$h_{melt,l}$: 凝固点温度における液相のエンタルピ

$h_{melt,s}$: 凝固点温度における固相のエンタルピ

液相粒子において、固相率 α_i が境界値 α_{crit} より小さくなった場合には、その粒子を固相粒子に変化させる。また、固相粒子において、固相率が境界値より大きくなった場合には逆に液相粒子に変化させる。これらの関係を図 3.6 にまとめて示す。

固相粒子では、これまで動粘性係数を大きくすることで、液相粒子と同じ扱いをしていた。ここでは、第 2 章で示した弾性体粒子に変化させるものとする。ただし、座標は固定されたものとする。座標の固定された弾性体粒子は、弾性挙動解析においては境界条件として用いられるものである。

以下に示す計算では、流れの計算の際に用いる壁境界も、同じ固相粒子として扱う。液相粒子の圧力を計算する時は、固相粒子の圧力もいっしょに連立一次方程式に組み込んで計算する。粒子数密度によるソース項は、固相粒子でも液相粒子と同じ式を用いる。熱輸送方程式は液相粒子と固相粒子の区別をせずに計算する。

3.4 液体の広がり挙動の計算条件

図 3.7 に計算体系を示す。体系は 2 次元とし、初期に幅 10 cm 高さ 20 cm の液体ナトリウムの液柱が、長さ 1 m 厚さ 1 cm のステンレス板の左端の上に乗っているものとする。液柱の左側はステンレス板で支えられており、液柱は右側にのみ崩れていくものとする。

標準とする計算条件では、液体ナトリウムの初期温度を 480°C、ステンレスの初期温度を底面では 15°C、左側面では液体ナトリウムと同じ 480°C とする。ナトリウムの凝固温度を 98°C とし、その他計算に用いた粘性係数や熱伝導率などの物性値を表 3.1 にまとめる。これらの物性値は本来温度依存性があるのだが、ここでは無視した。固相および液相のナトリウムの物性値はおおよそ凝固点温度のものである。また、用いた計算

パラメータを表 3.2 にまとめる。初期配置における粒子間距離は 2.5 mm、液相と固相の境界の固相率は 0.5、相粒子数は 5216 個、そのうちナトリウムは 3200 個である。この標準とする計算条件を「条件 1」とする。

「条件 1」では、次節に示されるように、凝固の効果が殆ど現れなかった。そこで、仮想的に液体ナトリウムの粘性係数を 10^3 倍した「条件 2」および、液体ナトリウムの粘性係数を 10^3 倍するだけでなく液相ナトリウム、固相ナトリウムおよびステンレスの熱伝導率も 10 倍にし、さらに液体ナトリウムの初期温度を 98°C とした「条件 3」についても計算した。なお、「条件 3」では垂直なステンレス板の温度も 98°C とした。

3.5 液体の広がり挙動の計算結果および考察

図 3.8 に「条件 1」の計算結果を 0.0 sec から 0.4 sec まで示す。液体ナトリウムは約 0.46 sec で右端に達する。本計算では床の長さを 1 m しか設けていないため、右端に達したナトリウムは 0.46 sec 以降こぼれ落ちてしまう。図 3.9 に時刻 0.0 sec と 0.4 sec における温度分布を示す。底面のすぐ近傍のナトリウムの温度が低下しているだけで、殆どの液体ナトリウムは初期温度を保ったままである。一方、ステンレス板でも表面の温度が上昇している。ナトリウムの先端は、冷たいステンレス板上を滑っていくため、他よりも冷やされていることがわかる。

図 3.10 は崩壊する液柱の先端位置に関する説明図である。実際には、計算結果より各時刻における最も x 座標の大きなナトリウム粒子を見つけて、その x 座標を先端位置としている。従って、「条件 2」や「条件 3」のような粘性が大きい場合には、先端部分が粘性によって丸くなり、床面よりやや上方に先端位置が現れる。図 3.11 に「条件 1」における先端位置の変化を文献値[2, 3, 30, 31]と比較したものを示す。本計算結果は、従来の差分法による自由液面解析法である VOF(Volume of Fluid) 法の計算結果[30]、およびこれまでの MPS 法による計算結果[3]と良く一致している。また、Martin-Moyce の実験[31]、および Koshizuka らの実験[2]よりもやや速い。実験で先端位置の移動が計算よりも遅いのは、床の濡れ性により底面と液体の間に反発力が働くためであると考えられる。これより、本研究で開発した計算コードによる自由液面解析が妥当であることがわかる。

次に、仮想的に液体ナトリウムの粘性係数を 10^3 倍にした「条件 2」の結果を図 3.12 に示す。「条件 1」の結果と比較して、粘性の効果でナトリウムの先端形状が丸くなっていることがわかる。また、先端位置の移動速度も遅くなっている。時刻 0.0 sec と 1.0 sec の温度分布を図 3.13 に示す。時刻 1.0 sec の温度分布を「条件 1」における 0.4 sec

の温度分布と比較すると、より後の時刻であるためナトリウムはより冷却され、ステンレス板はより加熱されていることが分かる。しかしながら、ステンレス板の表面温度はナトリウムの凝固点を越えてしまうので、凝固は生じない。温度分布に関して「条件1」と異なる傾向がナトリウムの先端位置で見られる。「条件1」では、常に冷たいステンレス板と接触している先端部が、底面と接している他のナトリウムよりも冷却されている。一方、「条件2」では逆に先端部のナトリウムの方が熱い。この理由は、「条件2」では大きな粘性のため先端形状が丸くなり、底面の濡れは上方からナトリウムがかぶさってくることで進んでいくため、上方の熱いナトリウムが床面に供給されるからである。

「条件3」の計算結果を図3.14に示す。この図では粒子の種類を色で表している。「条件3」では凝固の影響が出るように、液体ナトリウムの粘性係数を 10^3 倍するだけでなく、液相ナトリウム、固相ナトリウムおよびステンレスの熱伝導率も10倍、さらに液体ナトリウムの初期温度を 98°C とした。底面と接している部分の凝固が時刻0.1 secより見られるが、前の段落で述べたように、ナトリウムの先端部には上方の熱いナトリウムが供給されるため、先端部ではあまり凝固していない。時刻0.2 ~ 0.4 secでは、局所的に凝固したところが障害物となり、流れてくる液体ナトリウムが床から剥離しているのが見られる。次第にナトリウムの先端部が細くなるとともに粘性によって速度も遅くなるので、時刻0.6 sec頃には先端が凝固し、広がりが止まる。そのまま時刻0.8 secまで広がりは停止しているが、後方より熱いナトリウムが先端部に押し寄せ、時刻0.9 secには凝固した先端よりこぼれ落ちる。最後の時刻1.0 secでは、初期の液体ナトリウムのおよそ半分が、ほぼ一様な厚さで凝固している。

時刻0.0 secと1.0 secの温度分布を図3.15に示す。熱伝導率を実際の10倍にしているので、ナトリウムの温度低下およびステンレスの温度上昇が「条件1」や「条件2」と比較して大きくなっていることがわかる。固相率分布(図3.16)はほぼ粒子の種類の色分けと同じになる。ただし、液相と固相のナトリウムが接している狭い領域では0と1の中間の値が見られる。ナトリウムの先端付近の拡大図を図3.17に示す。図中の色は固相率である。時刻0.6 sec頃に先端部が凝固するが、後続の熱いナトリウムが押し寄せるなどで時刻0.9 secから1.0 secにかけてあふれ落ちていることが分かる。

「条件1, 2, 3」におけるナトリウムの先端位置の移動の様子を図3.18にまとめる。前述したように、「条件1」の結果は非圧縮非粘性流体のダム崩壊問題における文献値と良く一致している。「条件2」と「条件3」は無次元時間で6.0まではほぼ同じであり、どちらも「条件1」よりも先端位置の移動が遅いのは粘性の影響である。「条件3」ではその後移動速度が遅くなり、無次元時間で7.5より12.0まで完全に停止している。これ

は先端部の凝固が原因である。その後、再び先端部が移動を始めるのは、熱い液体ナトリウムが凝固した先端部を乗り越えたためである。一方、「条件2」では先端の移動速度は次第に遅くなるものの停止することはない。

Huppert は粘性が卓越する場合の液体の広がり挙動の解析解を近似的に求めた[32]。

$$Z = 1.411 \left(\frac{gq^3}{3\nu} \right)^{1/5} t^{1/5} \quad (3.27)$$

ここで q は液体の体積で、本計算では $q=Lx2L=0.02$ である。「条件2」の粘性では $\frac{8q^3}{3\nu} = 0.0355$ となる。図3.14に「条件2」におけるHuppertの理論解も示す。初期には理論解の方が計算結果よりも広がり速度が速いが、これは、理論では慣性を無視しているためである。時間の経過とともに慣性の効果は小さくなり、重力と粘性のバランスで広がり速度が決まるようになり、理論で用いた近似が成り立つようになる。無次元時間5.0以降では、理論解と計算結果はほぼ一致している。

これらの計算により、幅10cm高さ20cmの矩形状で480°Cの液体ナトリウムが15°Cのステンレス板上を広がっていく場合、1mの距離まで広がる場合には粘性や凝固の影響はなく、ほぼ非圧縮非粘性流れとしてふるまう。液体ナトリウムの粘性が仮に10³倍程度まで大きくなると、粘性の影響によって広がり速度が遅くなる。さらに、熱伝導率が10倍程度まで大きくなり、液体ナトリウムの初期温度もほぼ凝固点付近であれば、先端の凝固による広がりの抑制が生じる。ここでは、液体ナトリウムの温度が低下して凝固する計算を行ったが、本手法はナトリウムの燃焼によって燃焼生成物が堆積する挙動の解析にもほぼそのまま適用できる。その場合には、固相率の代りに燃焼率を変数として各粒子に与え、これが境界値を越えたら固相になるとすればよい。

表 3.1 計算に用いた物性値

	液体ナトリウム	固体ナトリウム	ステンレス
密度 [kg/m ³]	927.5	951.4	8.0x10 ³
動粘性係数 [m ² /s]	7.37x10 ⁻⁷	-	-
熱伝導率 [W/m/K]	87.3	134.0	16.0
比熱 [J/kg/K]	1.327x10 ³	2.0x10 ³	0.5x10 ³
凝固温度 [°C]	98.0		-
凝固潜熱 [J/kg]	113.0x10 ³		-

表 3.2 計算パラメータ

総粒子数	5216
ナトリウム	3200
ステンレス	2016
最大タイムステップ幅 [sec]	1.0x10 ⁻³
相変化の境界固相率	0.5

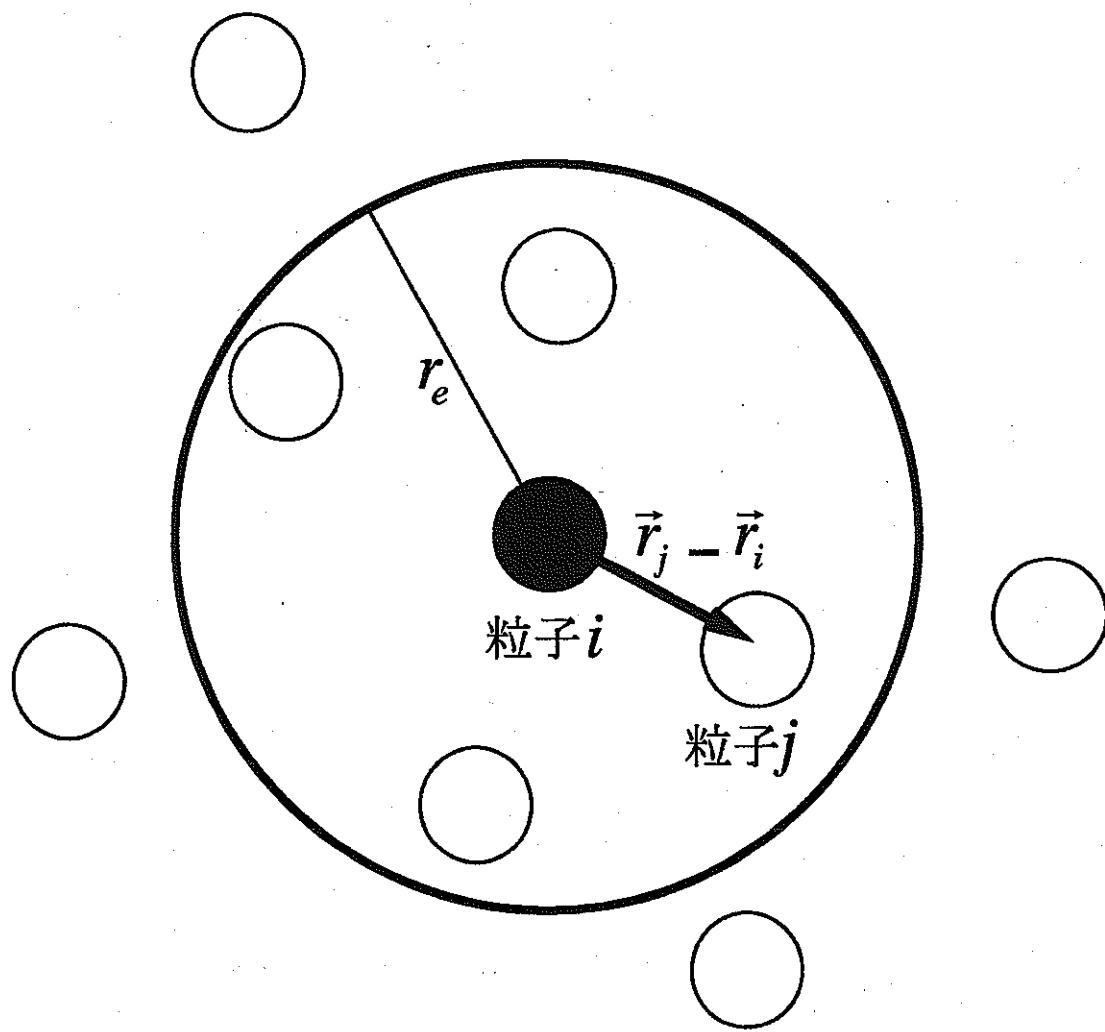


図 3.1 近傍粒子との相互作用

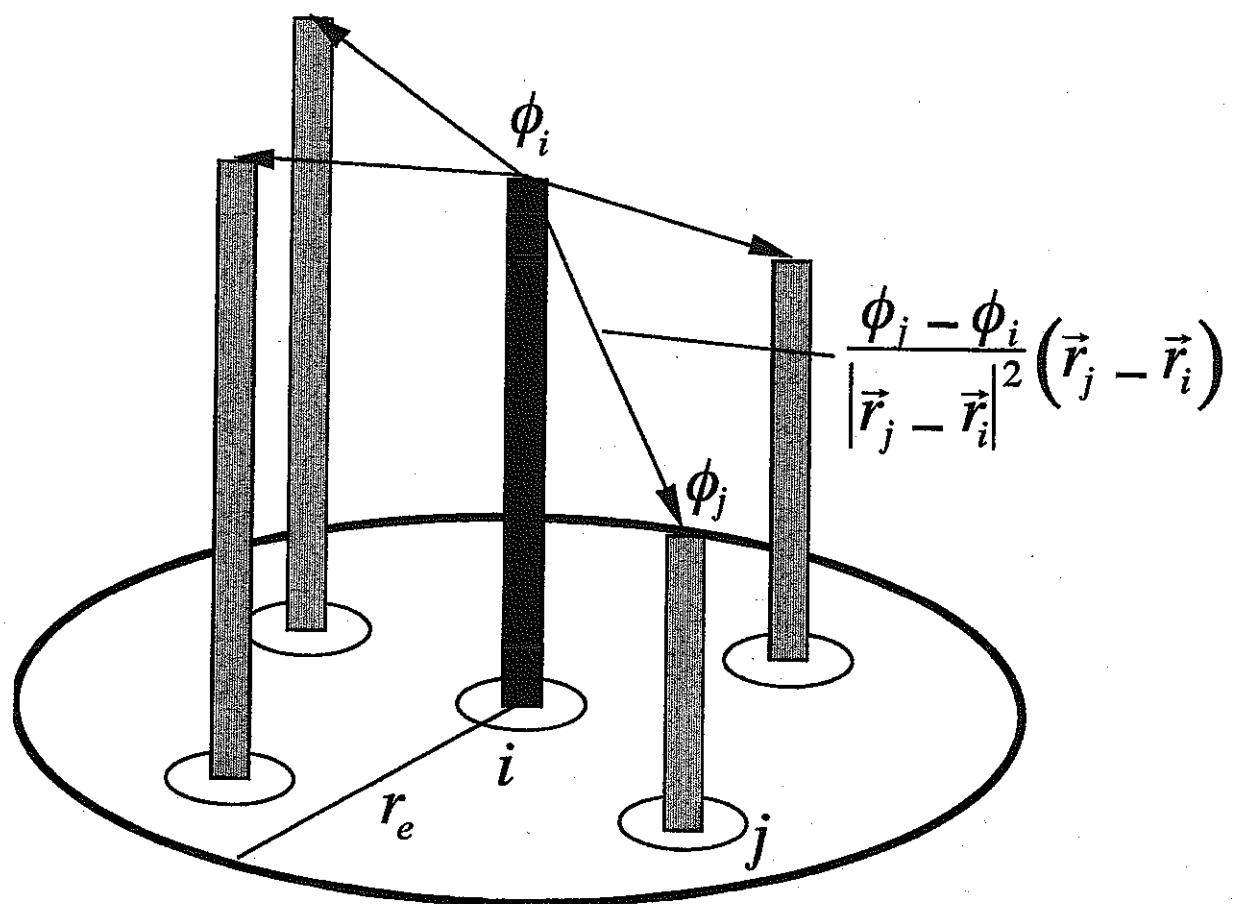


図 3.2 MPS 法における勾配モデルの概念

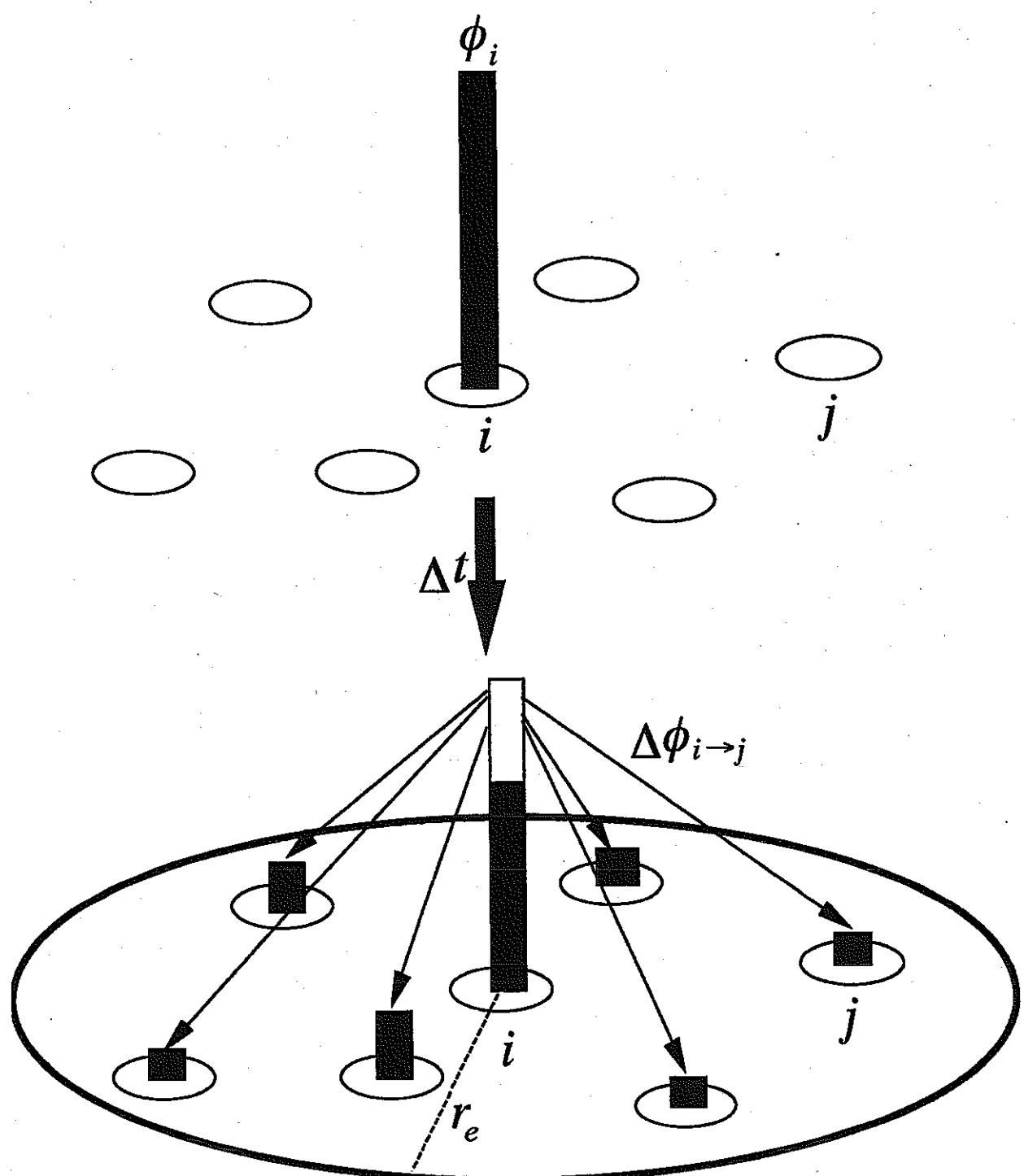


図 3.3 MPS 法におけるラプラスアンモデルの概念

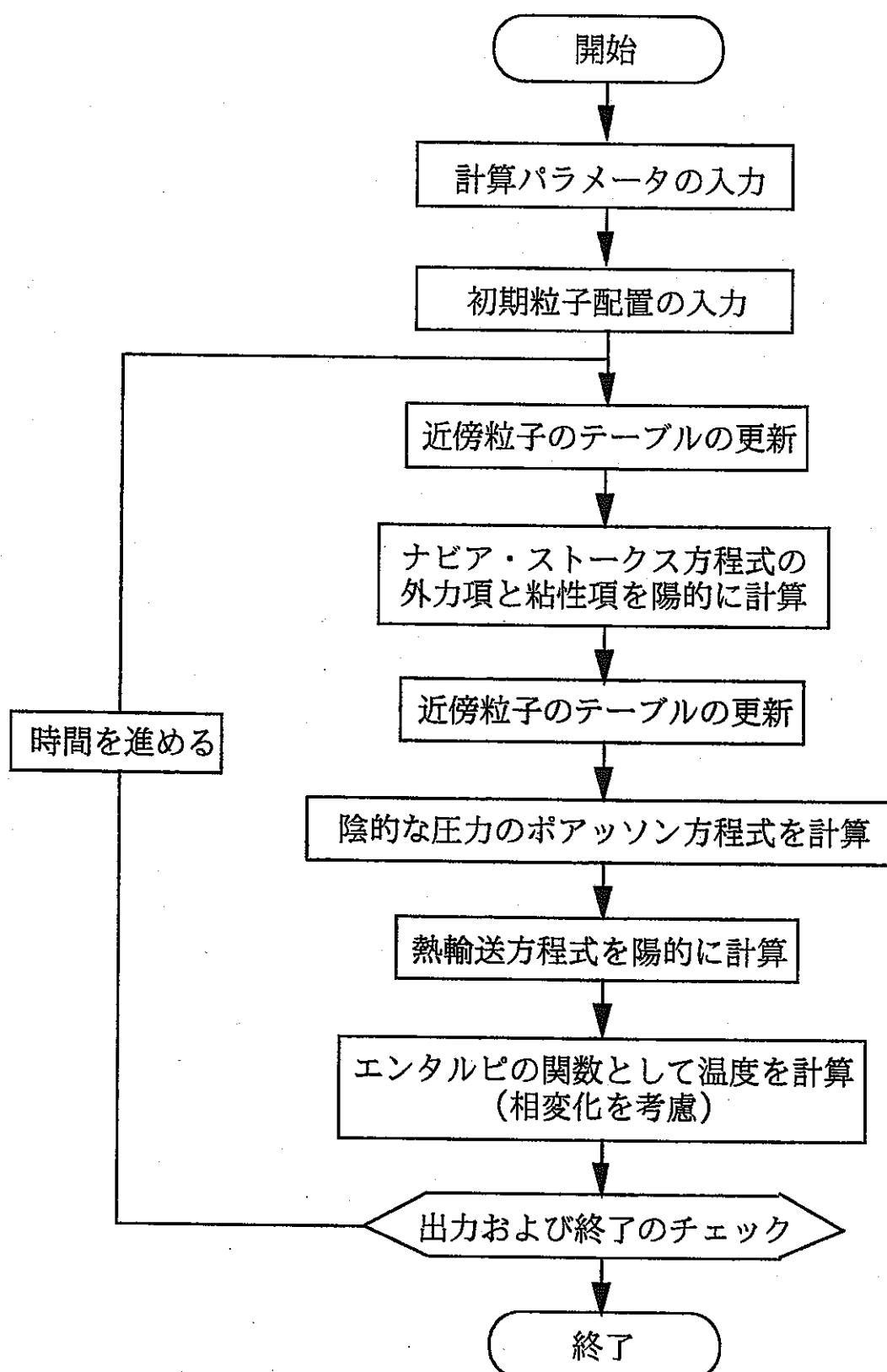


図 3.4 計算アルゴリズム

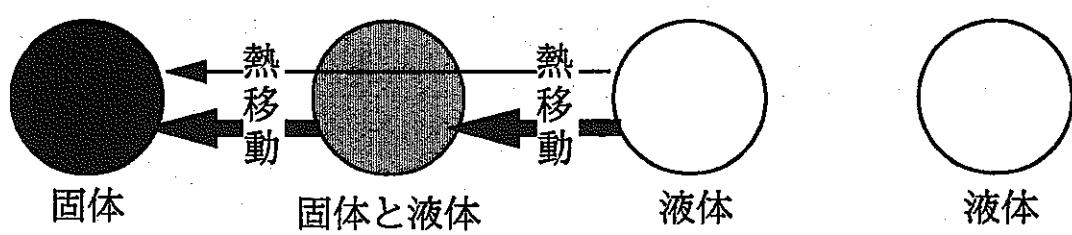


図 3.5 凝固の粒子計算モデル

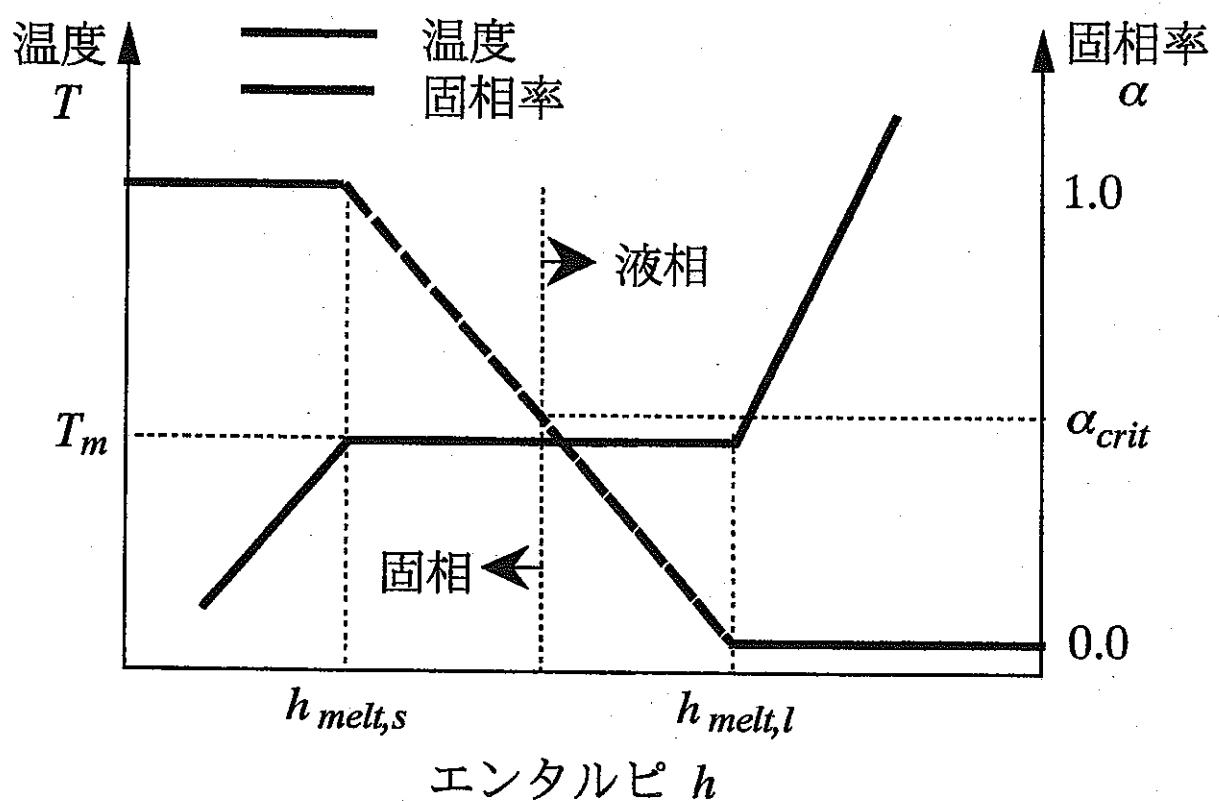


図 3.6 溫度、固相率、エンタルビの関係

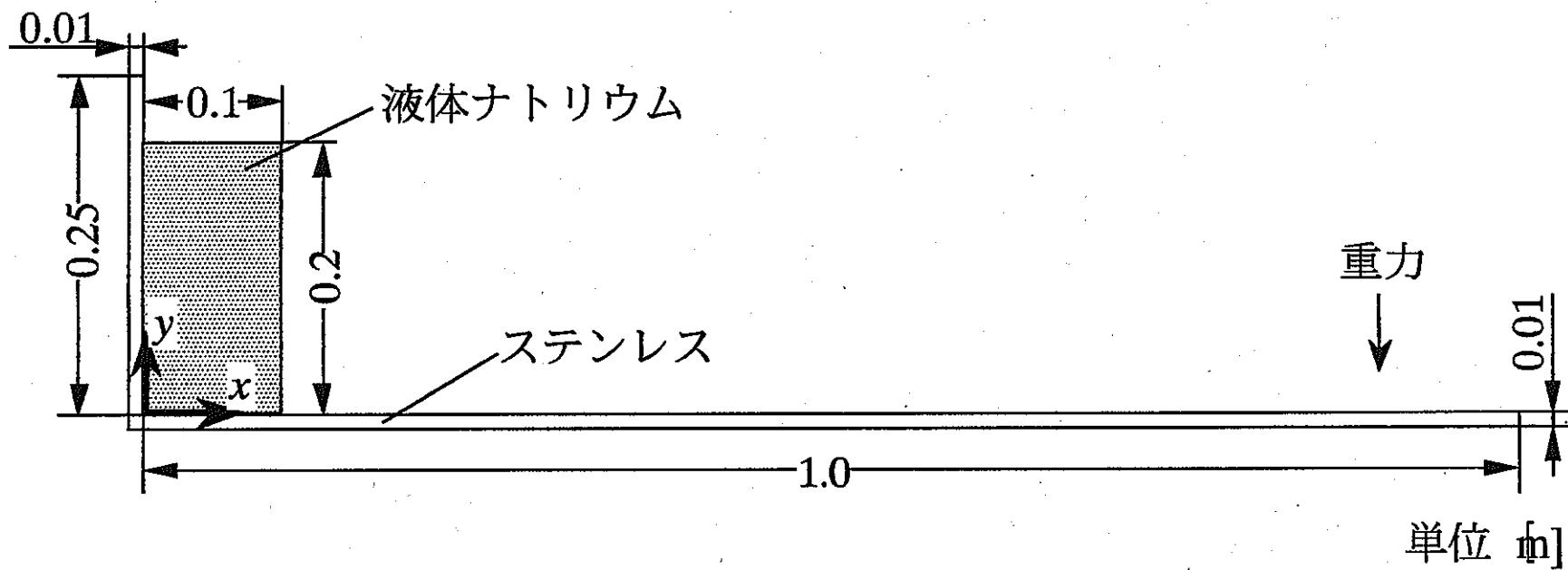


図3.7 計算体系

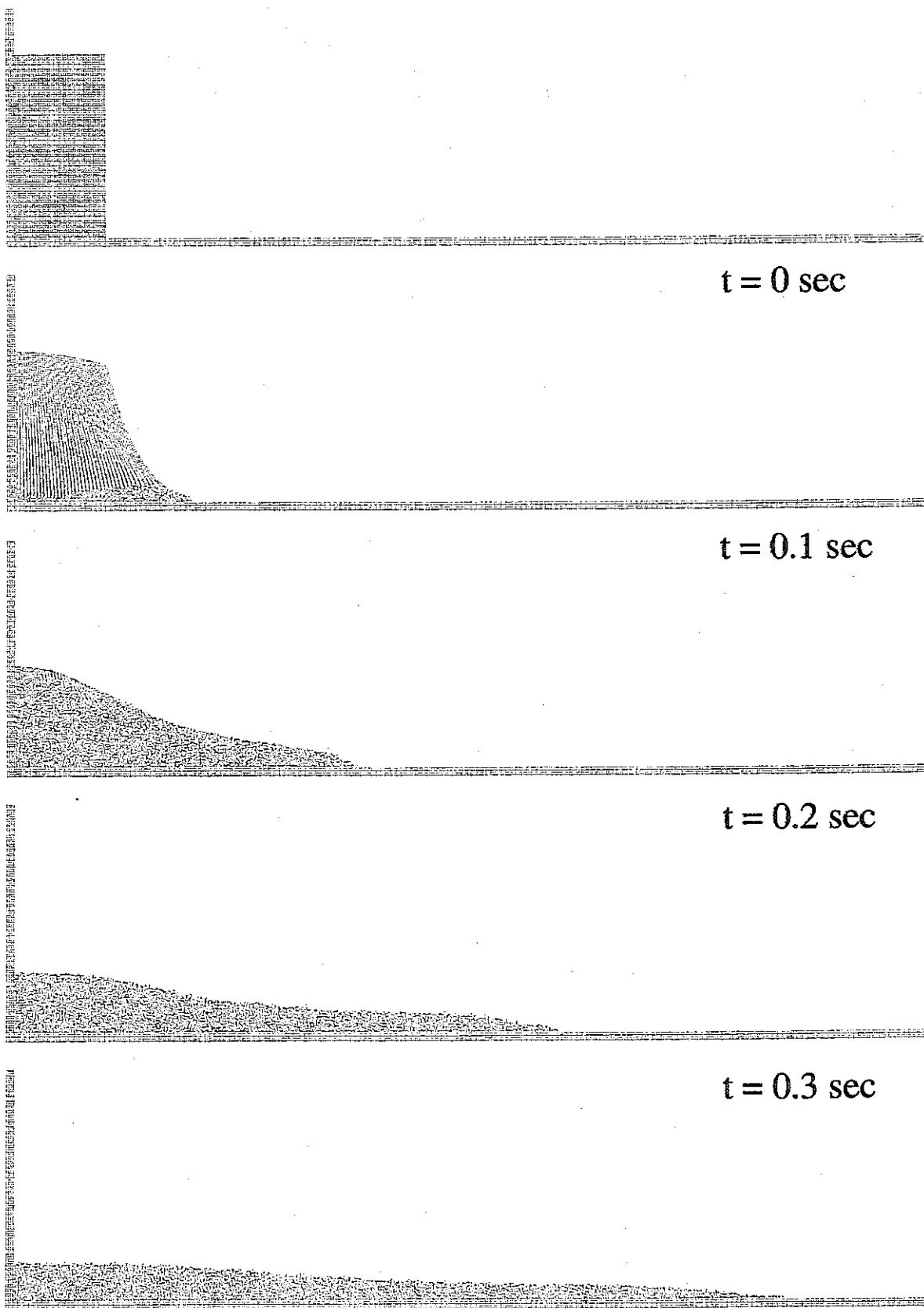


図 3.8 条件 1 の計算結果

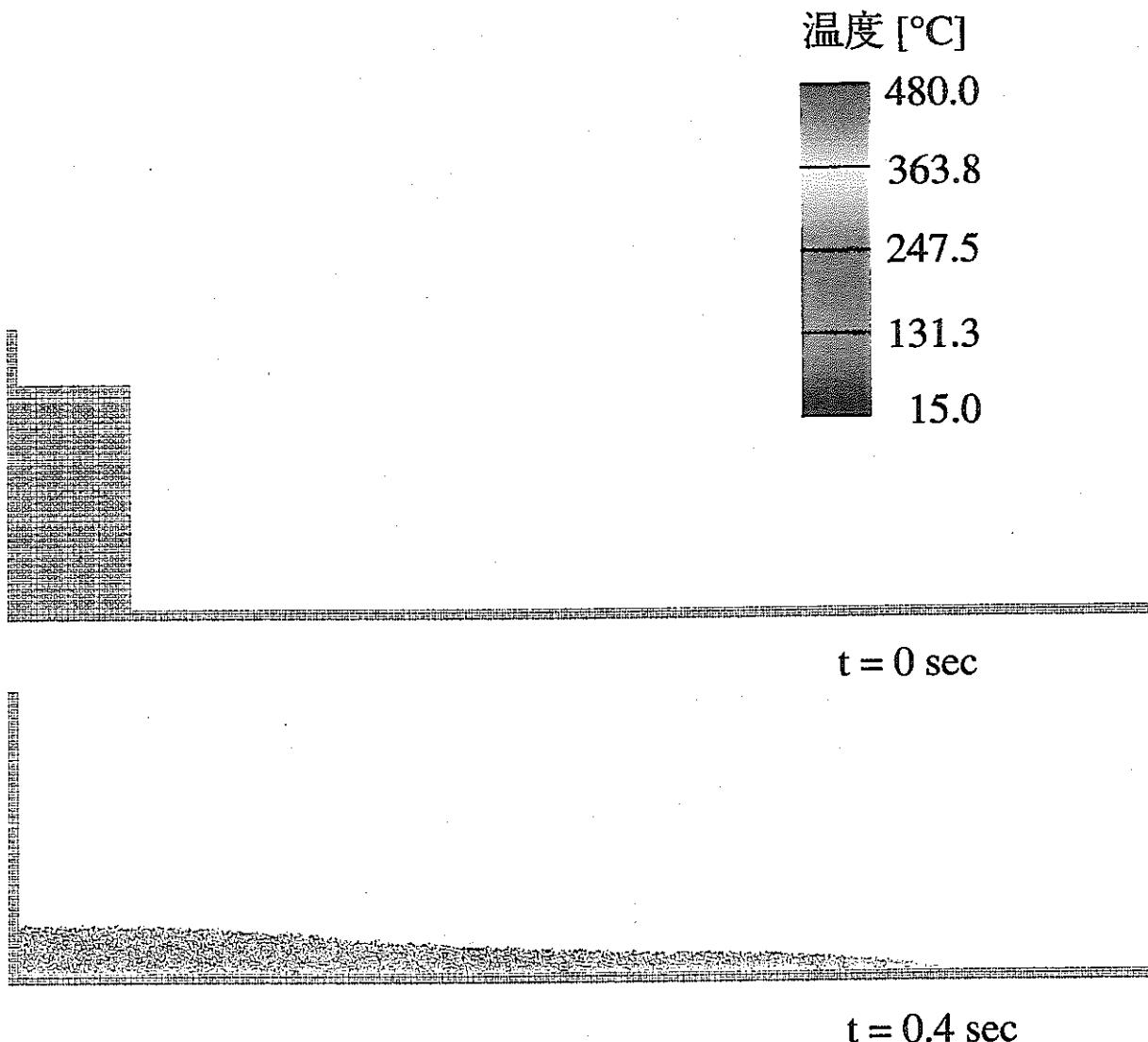


図 3.9 条件 1 の温度分布

$$L = 10 \text{ cm}$$

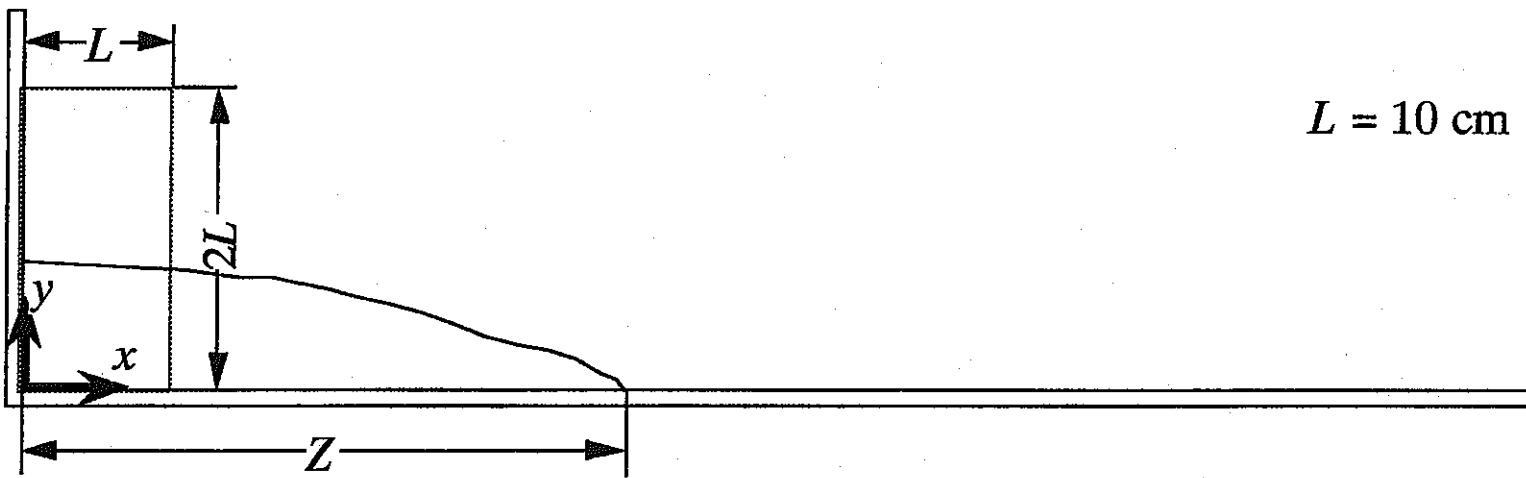


図3.10 崩壊する液柱の先端位置

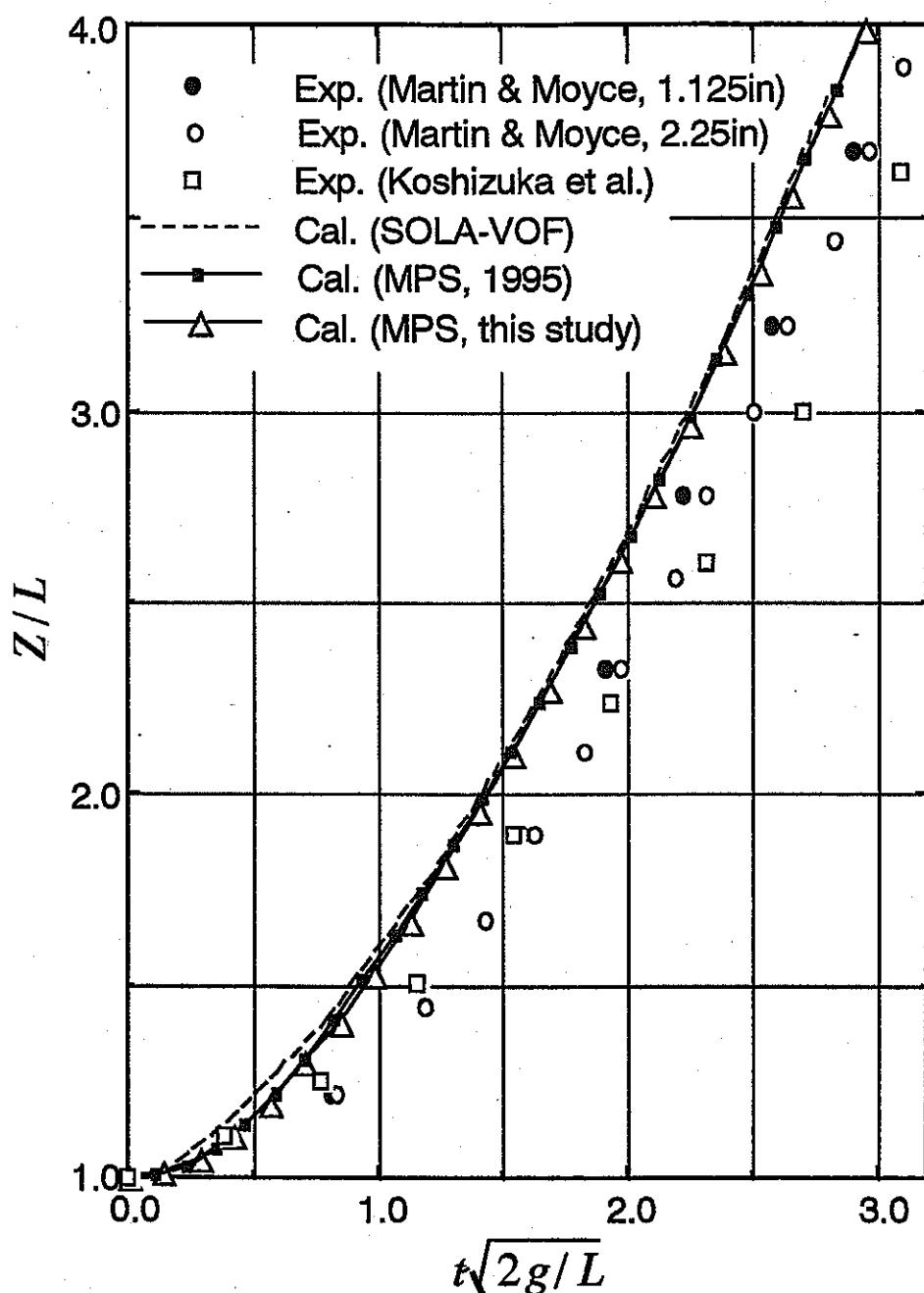


図 3.11 崩壊する液柱の先端位置に関する条件 1 の結果と文献との比較

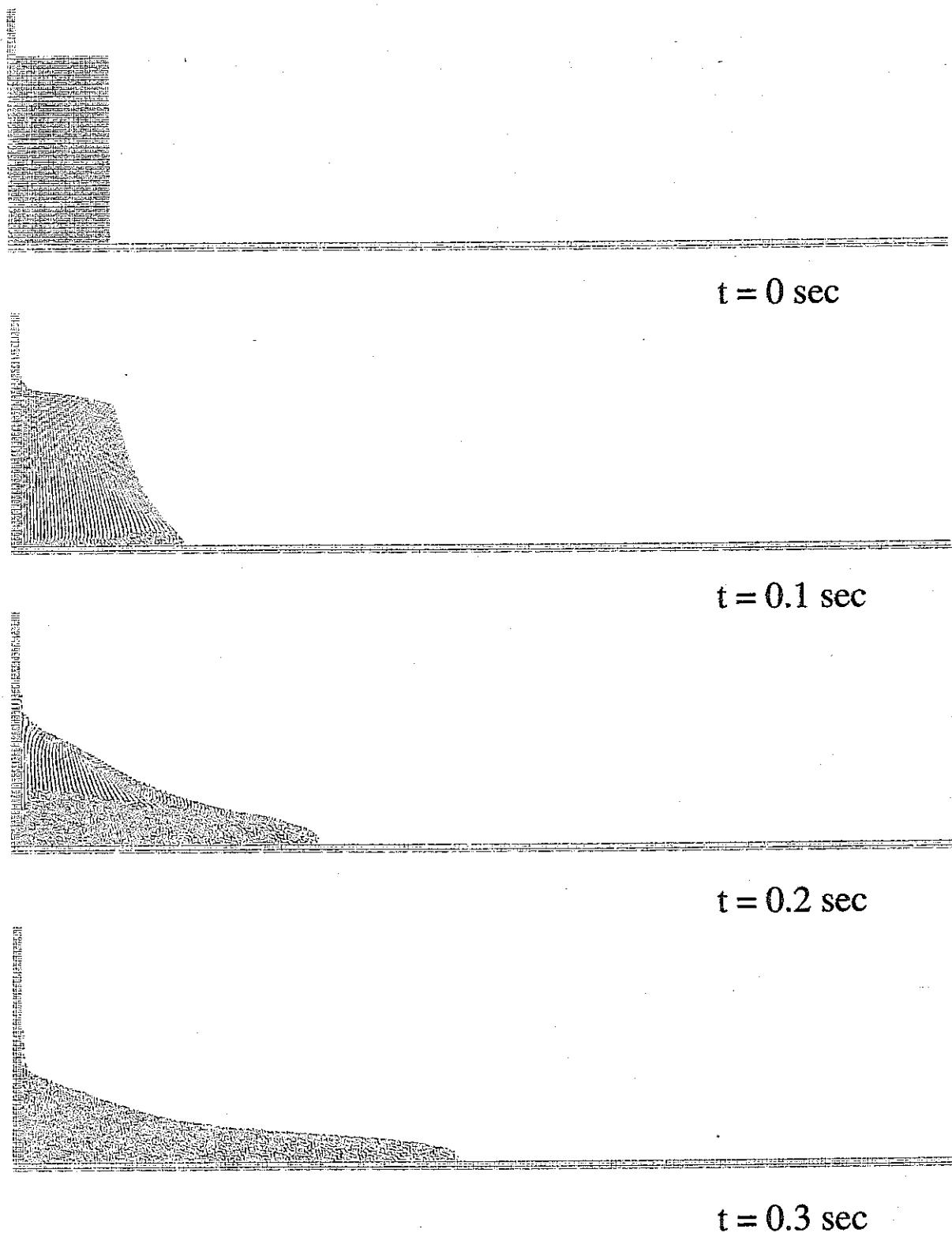


図 3.12 条件 2 の計算結果（液体ナトリウムの粘性係数を 10^3 倍）

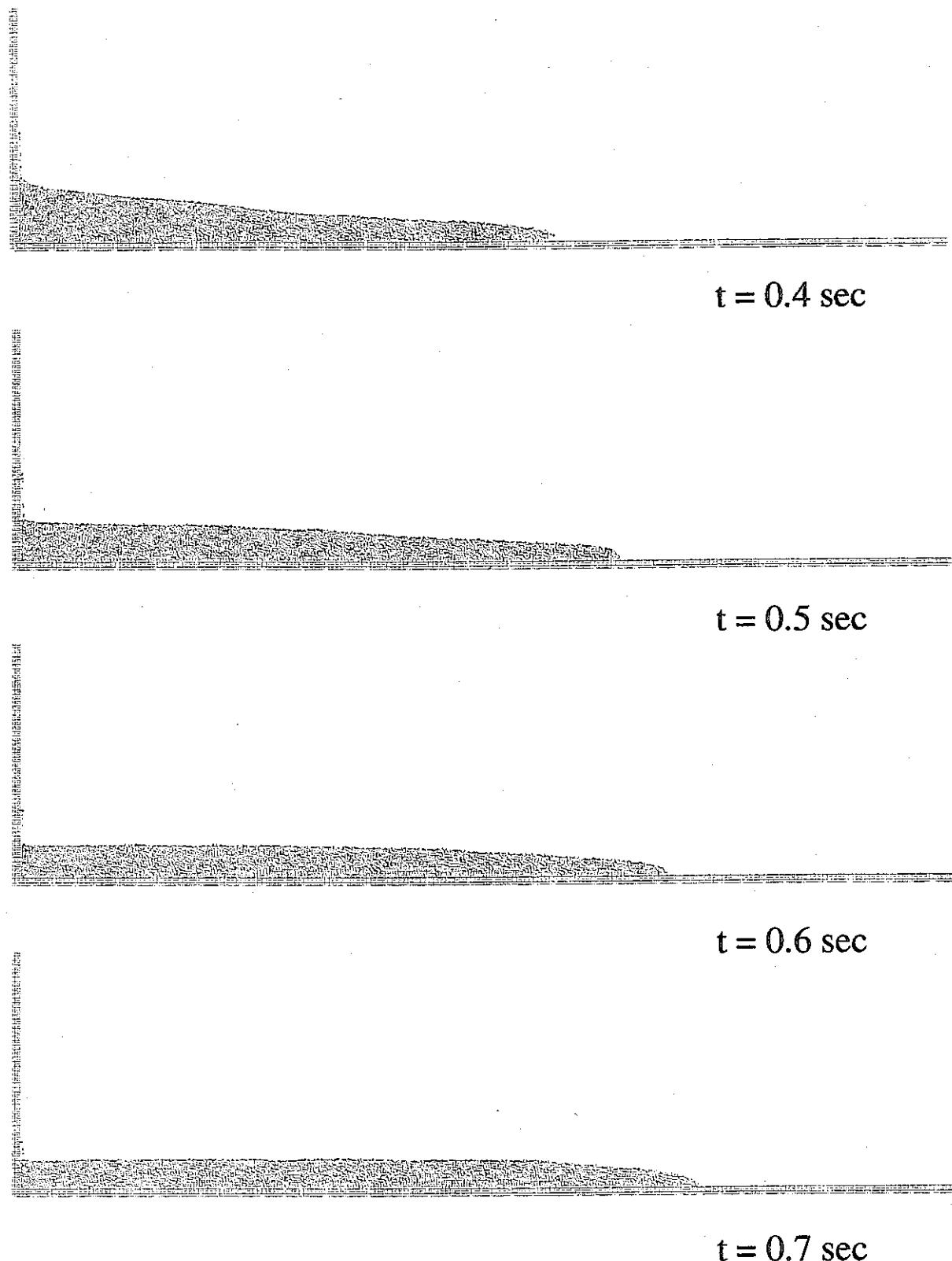


図 3.12 条件 2 の計算結果 (液体ナトリウムの粘性係数を 10^3 倍) (続き)

図3.12は、条件2の計算結果を示す。図には、時間t=0.8sec、t=0.9sec、t=1.0secにおける液面変動のシミュレーション結果が示されている。



$t = 0.8 \text{ sec}$



$t = 0.9 \text{ sec}$



$t = 1.0 \text{ sec}$

図3.12 条件2の計算結果（液体ナトリウムの粘性係数を 10^3 倍）（続き）

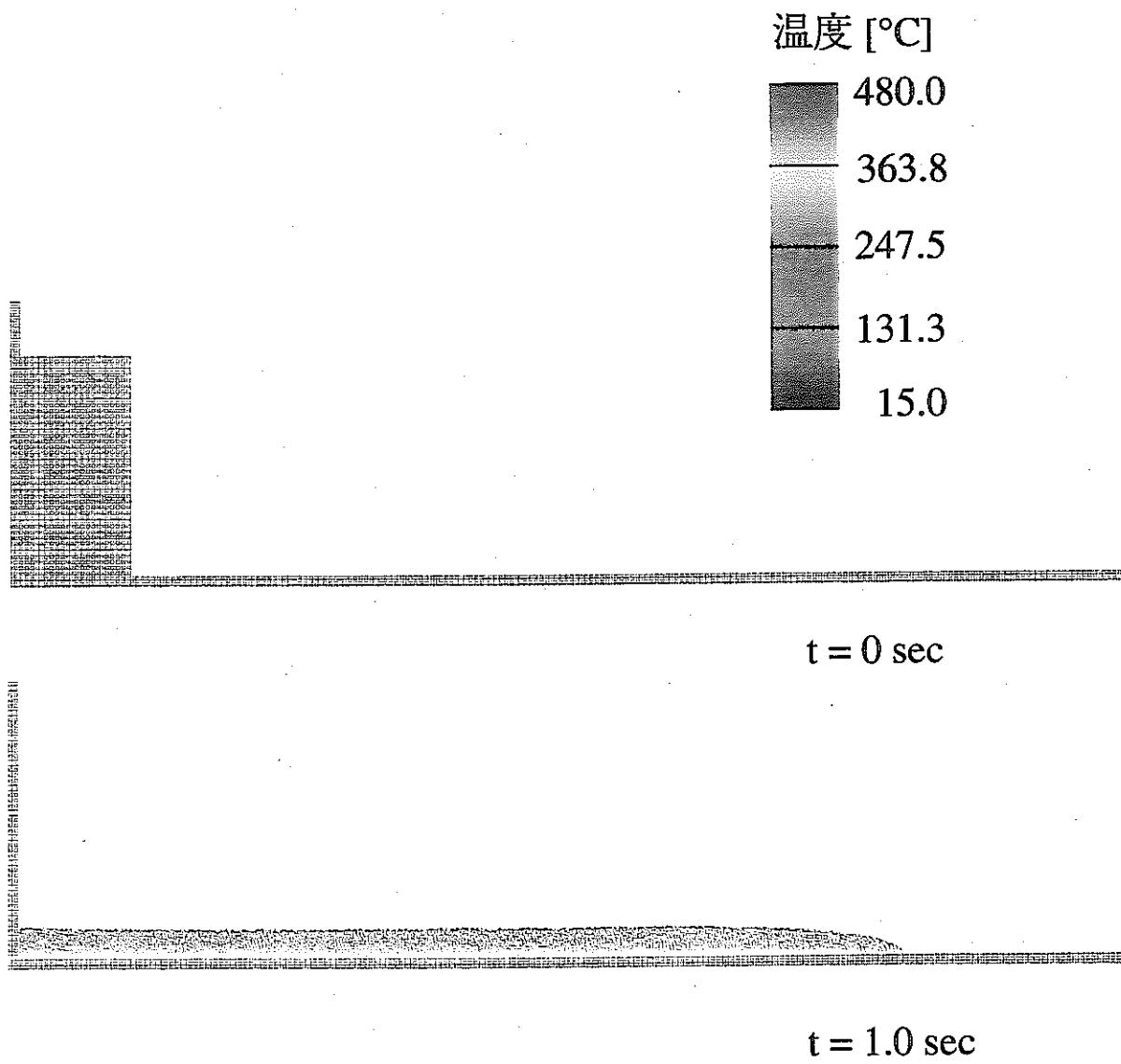


図 3.13 条件 2 の温度分布

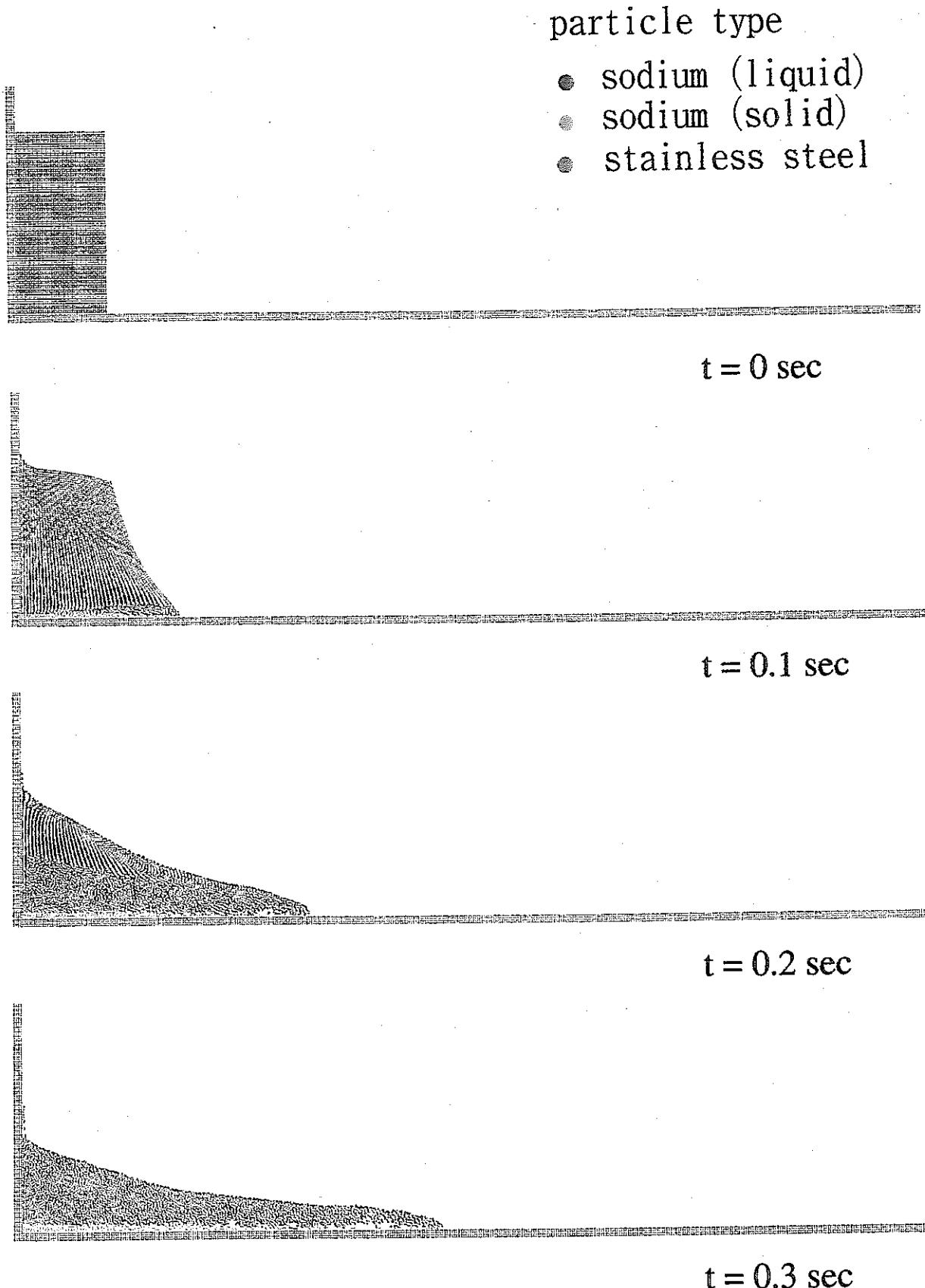


図 3.14 条件 3 の計算結果（液体ナトリウムの粘性係数 : 10^3 倍、液相ナトリウム、固相ナトリウムおよびステンレスの熱伝導率 : 10 倍、液体ナトリウムの初期温度 : 98°C ）

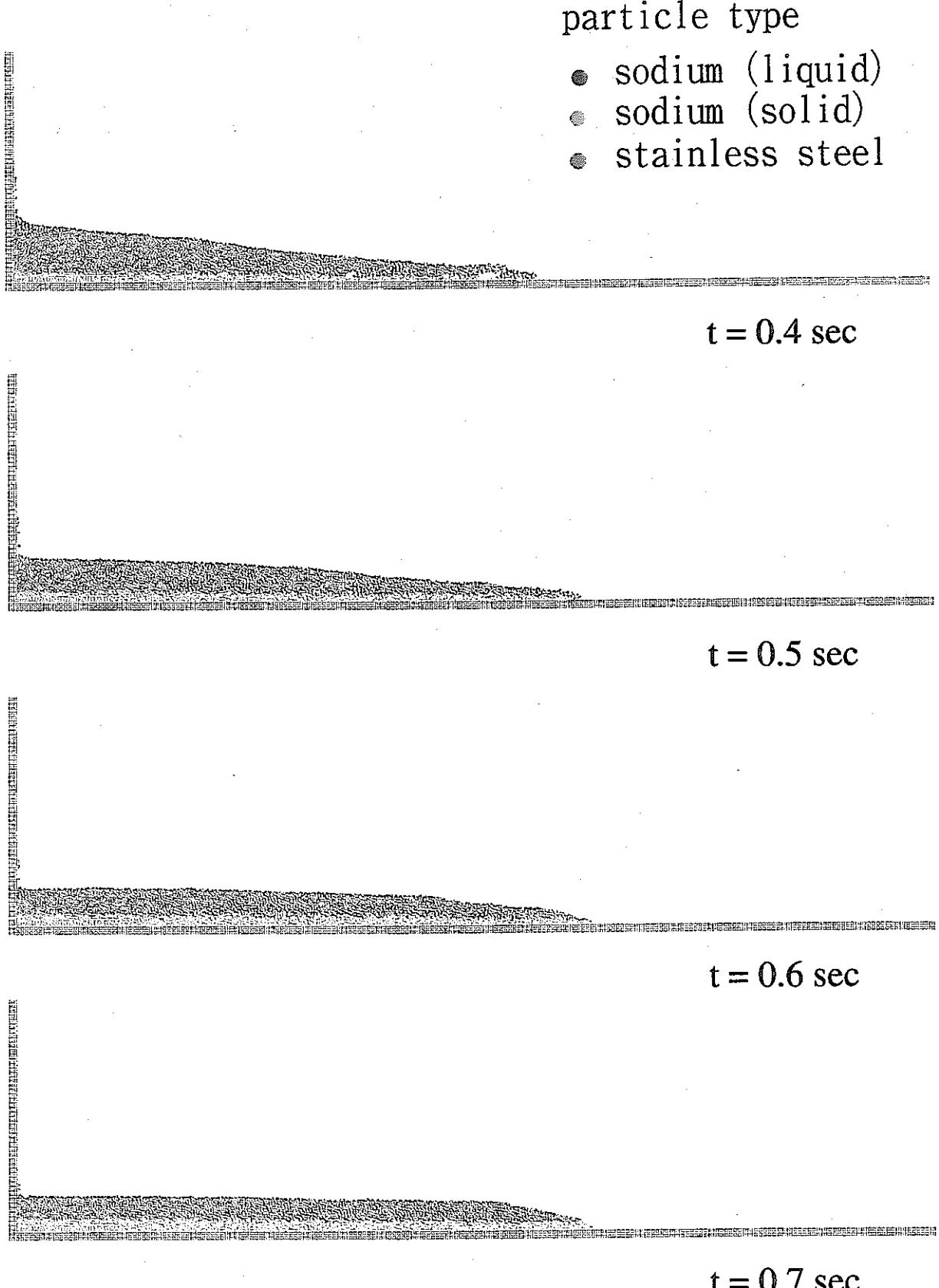


図 3.14 条件 3 の計算結果（液体ナトリウムの粘性係数:10³ 倍、液相ナトリウム、固相ナトリウムおよびステンレスの熱伝導率:10 倍、液体ナトリウムの初期温度:98°C）（続き）

particle type

- sodium (liquid)
- sodium (solid)
- stainless steel

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80 81 82 83 84 85 86 87 88 89 90 91 92 93 94 95 96 97 98 99 100

$t = 0.8 \text{ sec}$

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80 81 82 83 84 85 86 87 88 89 80 81 82 83 84 85 86 87 88 89 90 91 92 93 94 95 96 97 98 99 90 91 92 93 94 95 96 97 98 99 100

$t = 0.9 \text{ sec}$

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25 26 27 28 29 30 31 32 33 34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44 45 46 47 48 49 50 51 52 53 54 55 56 57 58 59 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 60 61 62 63 64 65 66 67 68 69 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 70 71 72 73 74 75 76 77 78 79 80 81 82 83 84 85 86 87 88 89 80 81 82 83 84 85 86 87 88 89 90 91 92 93 94 95 96 97 98 99 90 91 92 93 94 95 96 97 98 99 100

$t = 1.0 \text{ sec}$

図 3.14 条件 3 の計算結果（液体ナトリウムの粘性係数:10³ 倍、液相ナトリウム、固相ナトリウムおよびステンレスの熱伝導率:10 倍、液体ナトリウムの初期温度:98°C）（続き）

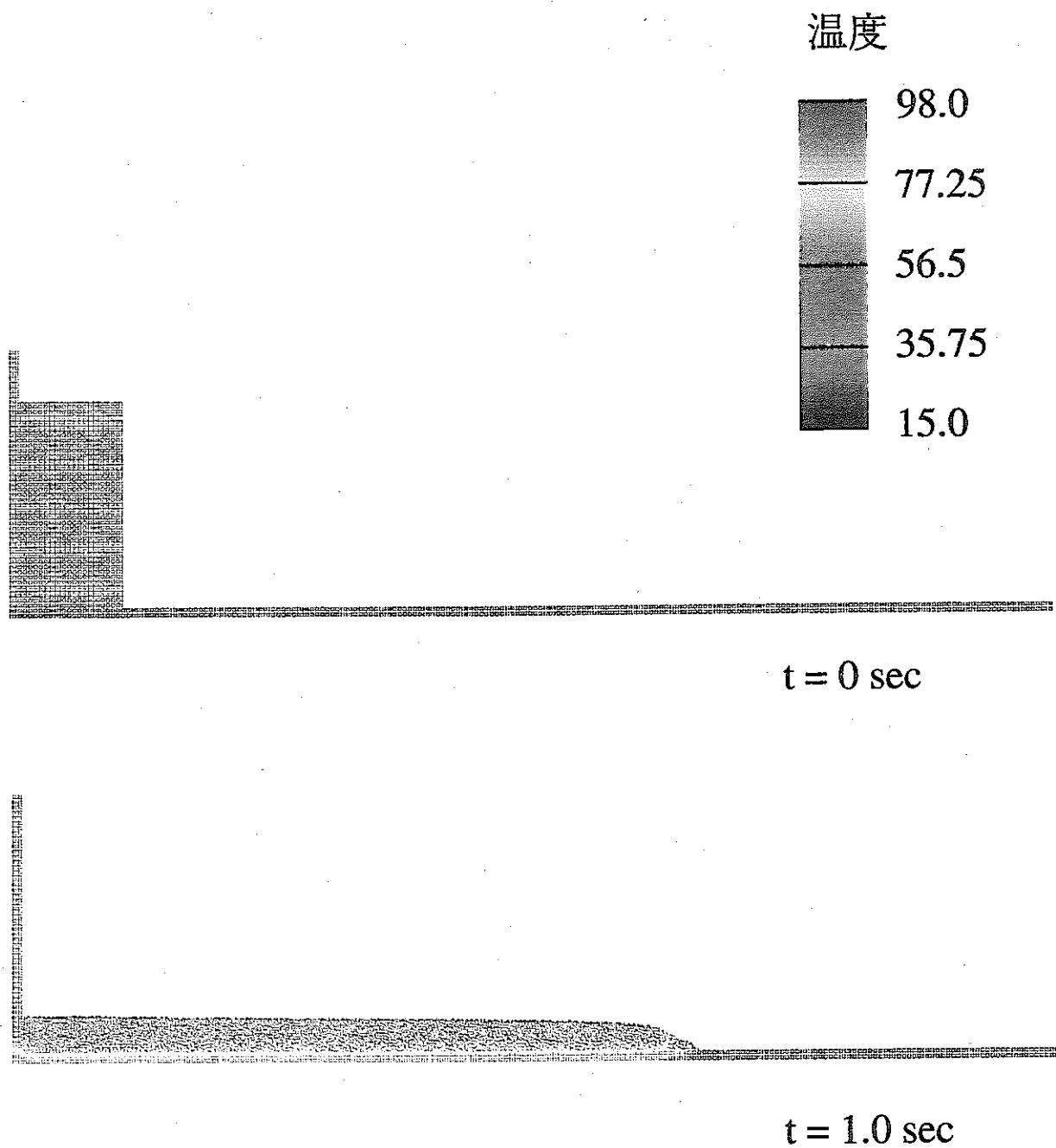


図 3.15 条件 3 の温度分布

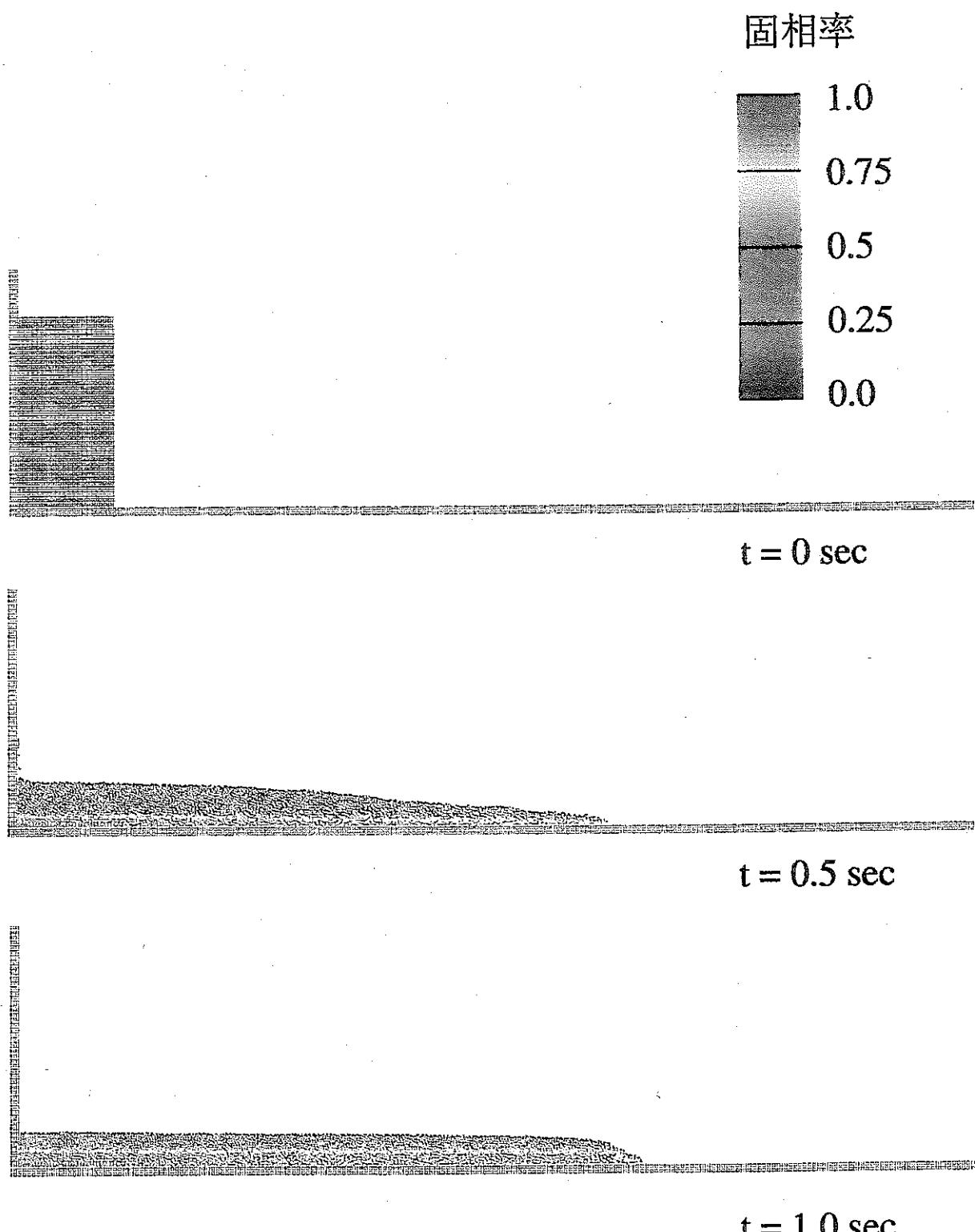


図 3.16 条件 3 の固相率分布

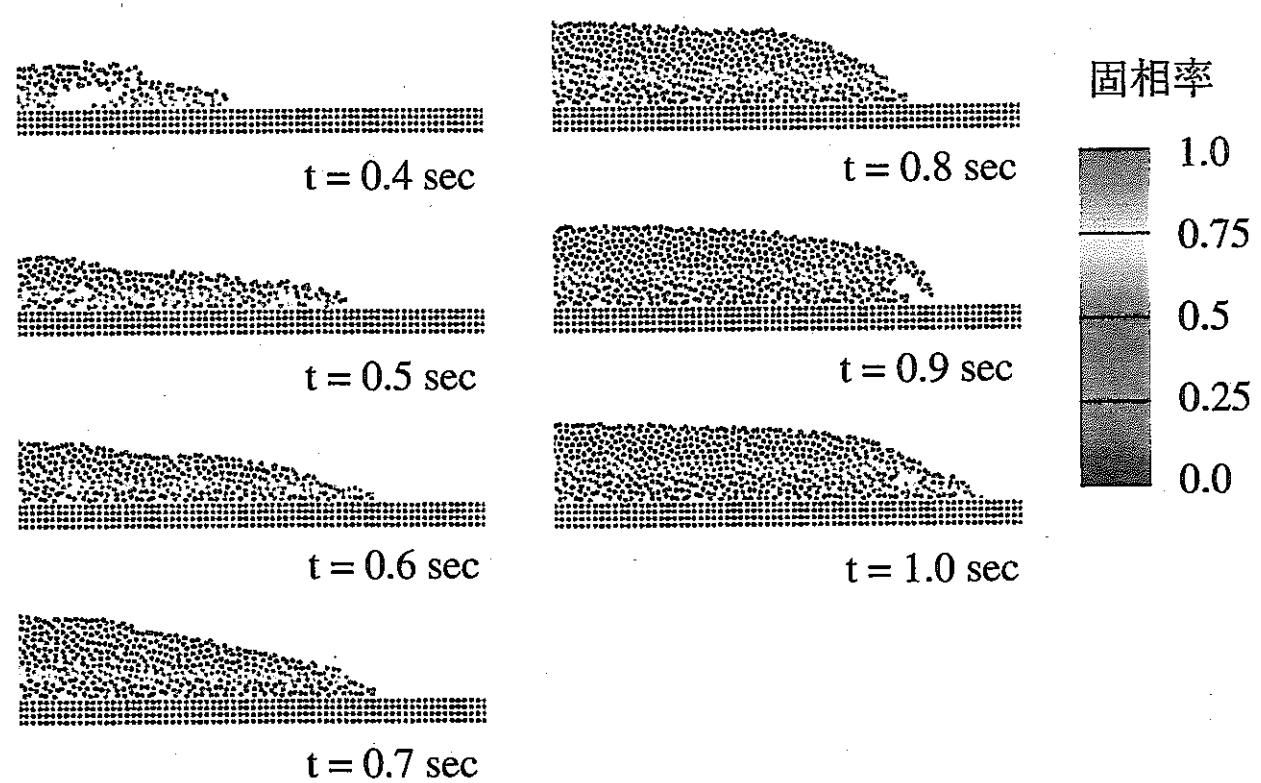


図 3.17 凝固による広がりの抑制：条件 3 での先端位置付近の固相率分布

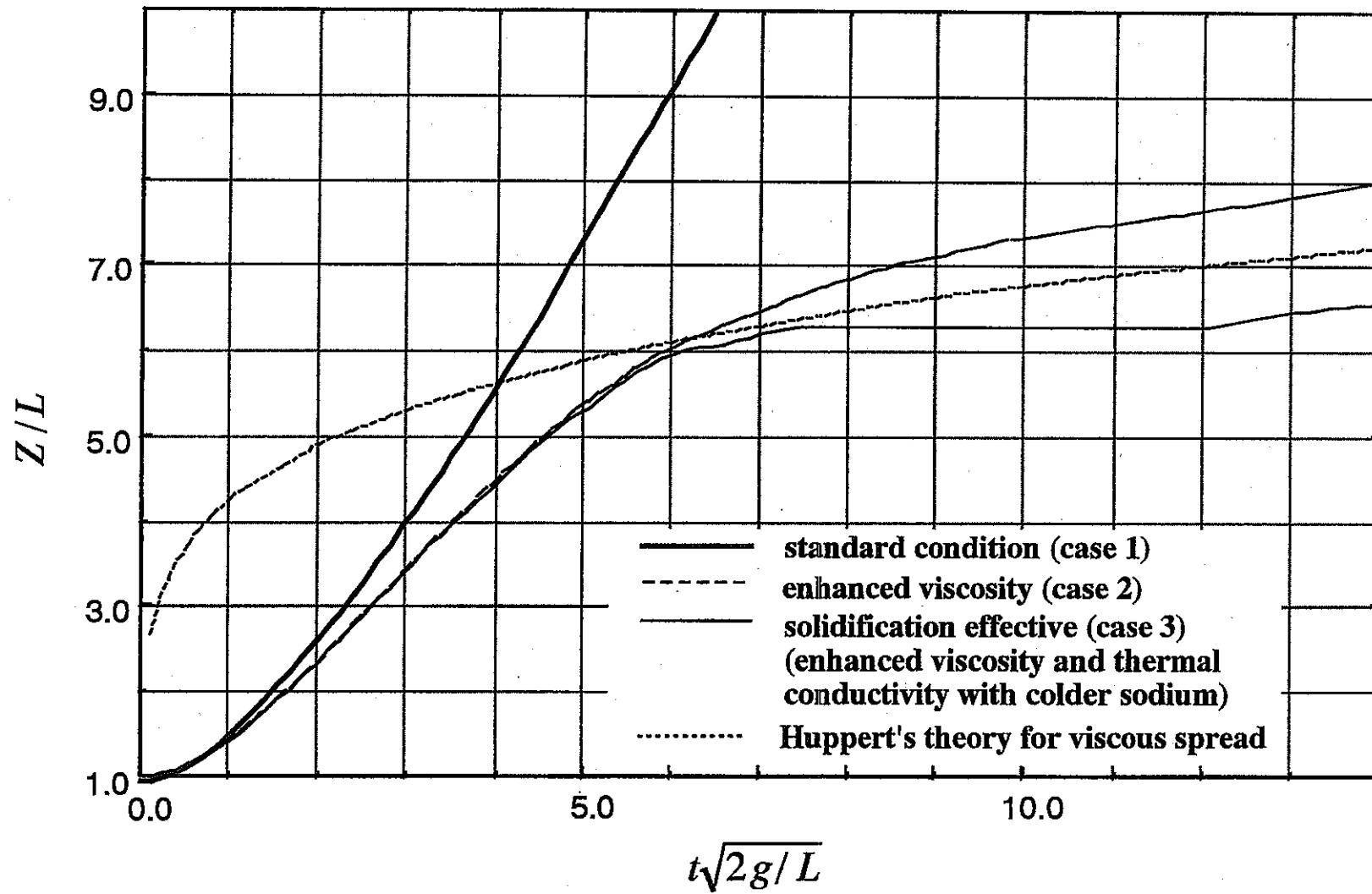


図3.18 崩壊する液柱の先端位置の変化（条件1，2，3の比較）

第4章

表面張力の粒子計算モデルの開発

4.1 表面張力の粒子計算モデル

表面張力が作用する場合の流体の運動量保存則は、

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} + \sigma \kappa \delta(d) \mathbf{n} \quad (4.1)$$

σ : 表面張力係数

κ : 表面の曲率

$\delta(d)$: デルタ関数

d : 表面からの距離

\mathbf{n} : 表面の垂直方向単位ベクトル

式(4.1)の右辺第4項が表面張力項である。

MPS 法では自由液面を粒子数密度により判定する。すなわち、それぞれの粒子 i で、まず粒子数密度

$$n_i = \sum_{j \neq i} w(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \quad (4.2)$$

を計算する。ここで w は重み関数で式(3.4)を使う。重み関数は、粒子間距離が離れるに従って小さくなり、 r_e 以上ではゼロになる。従って、粒子数密度は近傍にどのくらい他の粒子が存在するかという指標になる。非圧縮性条件より、MPS 法では粒子数密度一定の条件を課す。この一定の粒子数密度を βn^0 と書く。自由液面では液面の外に液体粒子がないから、粒子数密度は小さくなる。そこで、次の条件を満たす粒子は自由液面上にあるものと見なす。

$$n_i < \beta n^0 \quad (4.3)$$

ここで β はパラメータで、本計算では 0.97 とする。自由液面上にあると判定された粒子は、圧力のポアッソン方程式を解く際に、圧力一定（通常はゼロ）のディリクレ境界条件を与える。

MPS 法における自由液面の判定条件は、それぞれの粒子の粒子数密度を計算すればよく、液面形状を描く必要がない。これは、液体の分裂や合体が生じた場合にも特別な取り扱いをする必要がない。例えば、流体の分裂では、内部にある粒子であっても近傍の粒子と離れれば粒子数密度が低下し、自由液面上にあると判定されるようになる。一方、合体においては、これまで粒子数密度が小さいため自由液面にあると判定されていた粒子が、互いに接近することによって粒子数密度が増加し、式(4.3)を満たさなくなった時点で自由液面上にあるとは見なされなくなる。従来の差分法や有限要素法における自由液面の取り扱いでは、自由液面形状を描く必要があったり、あるいは自由液面にちょう

ど格子線が来るようしなければならず、液面の大変形を扱うことが本質的に難しかった。

自由液面の計算におけるこのような MPS 法の特徴は、表面張力の計算にはかえって不都合になる。式(4.1)に示されているように、表面張力は表面の曲率に比例し、その力の方向は表面の垂直方向である。表面張力の計算のために表面形状を描くアルゴリズムを加えると、これまでの MPS 法の利点が失われてしまう。従って、表面形状を描かずにこうした幾何学量を計算するアルゴリズムを開発することが望ましい。

本研究では、粒子数密度を用いて必要な幾何学量を計算するアルゴリズムをあらたに提案する。図 4.1 に表面付近の様子を示す。自由液面上にあると判定された粒子の近傍で、下記の重み関数に従つた粒子数密度 n_i^{st1} を計算する。

$$w^{st1}(r) = \begin{cases} 1 & 0 \leq r < r_e^{st} \\ 0 & r_e^{st} \leq r \end{cases} \quad (4.4)$$

$$n_i^{st1} = \sum_{j \neq i} w^{st1}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \quad (4.5)$$

ここで r_e^{st} は重み関数の半径で、本研究では $r_e^{st}=3.1l_0$ とする。さらに、その結果を用いて再度粒子数密度を計算する。

$$w^{st2}(r) = \begin{cases} 1 & 0 \leq r < r_e^{st} \text{ and } n_j^{st1} > n_i^{st1} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4.6)$$

$$n_i^{st2} = \sum_{j \neq i} w^{st2}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \quad (4.7)$$

これらの値を用いて、曲率は、

$$2\theta = \frac{n_i^{st2}}{n_0^{st}} \pi \quad (4.8)$$

$$\kappa = \frac{1}{R} = \frac{2\cos\theta}{r_e^{st}} \quad (4.9)$$

と計算する。ここで、 n_0^{st1} は一定値で、平面における式(4.5)の値とする。

式(4.8)では、式(4.7)で得られた粒子数密度が n_0^{st1} よりも小さければ 2θ は鋭角になり、逆に大きければ鈍角になる。また、MPS 法において表面上にあると判定される粒子は、図 4.1 に示すように、ある厚さ d^{st} の範囲内に存在すると考えられる。もし式(4.8)の分子を n_i^{st1} にすると、やや内側にある表面上の粒子の場合に値が大きくなり、鈍角

になりやすくなる。そこで、外側の粒子の寄与を排除するために式(4.6)と(4.7)によって粒子数密度を再計算するのである。

また、曲率の計算では、重み関数として1または0の関数を用い、他の粒子間相互作用に使っている重み関数（式(3.4)）は用いない。これは、式(3.4)では粒子間距離が近い粒子ほど重み関数が大きくなるが、この性質は幾何的な形状を計算する場合には好ましくないためである。

次に表面の垂直方向を決めるアルゴリズムを説明する。まず、粒子*i*の前後左右の近傍4点における粒子数密度を計算する。近傍は粒子*i*の位置から距離*l₀*だけ離れたところとする。*l₀*は粒子間距離を表すパラメータである。重み関数には式(4.4)を用いる。

こうして得られた粒子数密度を、 $n_i^{\pm x}(r_i \pm l_0 n_x)$ および $n_i^{\pm y}(r_i \pm l_0 n_y)$ と書く。これらの粒子数密度から次のようにして単位垂直ベクトルを計算する。

$$\mathbf{a}_i = \frac{n_i^{+x} - n_i^{-x}}{2l_0} \mathbf{n}_x + \frac{n_i^{+y} - n_i^{-y}}{2l_0} \mathbf{n}_y \quad (4.10)$$

$$\mathbf{n}_i = \frac{\mathbf{a}_i}{|\mathbf{a}_i|} \quad (4.11)$$

このアルゴリズムは単純に粒子数密度が大きくなる方向を算出している。ただし、式(4.4)を用いる粒子数密度は整数値しか取らないため、取りうる垂直方向ベクトルは離散的になる。そこで、実際の計算では、近傍の表面粒子の垂直方向ベクトルを用いてスムージングする。

先に述べたように、MPS法では表面上にあると判定される粒子が、パラメータ?に依存してある厚さの *dst* 中に存在することになる。そこで、各粒子で計算された表面張力を、*dst/l₀*で割ることで、規格化する必要がある。

4.2 液滴の振動の解析

無重力場における液滴の振動を4.1節の表面張力モデルを用いて計算する。2次元で、初期粒子を20×20個で正方形に配置し、粒子1個の辺の長さを3.75 mmとする。液体はエタノールで、 $\rho=7.98\times 10^2$ kg/m³、 $\sigma=2.361\times 10^{-2}$ N/mの値を用いた。粘性はゼロとする。

計算結果を図4.2に示す。初期に角である4ヶ所の曲率が大きいため、そこから変形していく(0.1 sec)、ちょうど元の形状を90°回転したものなる(0.2 sec)。もう一度これと同じ運動をすると元の形状に戻る(0.4 sec)。0.4 secの液滴では角がやや丸くなっている。

なっており、完全に元の粒子配置に戻るわけではない。また、振動を繰り返すうちにだんだん振幅が小さくなり、振動は減衰していく。

図 4.3 に VOF による計算結果を示す[33]。液滴の形状の変化や振動周期が本計算の結果と良く一致していることがわかる。

4.3 表面張力が卓越する場合の液体の広がり挙動の計算

本研究で開発した表面張力の粒子計算モデルを用いて、表面張力が卓越する場合の液体の広がり挙動の数値解析をおこなった。計算体系を図 4.4 に示す。液体の密度は 1,000 kg/m³ とし、ボンド数は $Bo = \frac{\rho g H^2}{\sigma} = 157$ とした。

計算結果を図 4.5 に示す。0.2 sec 後では、表面張力の影響により、先端の形状が丸くなっている。これは、粘性が卓越する場合の広がり挙動と似ている。一方、左の垂直壁に接している液体の上端も丸くなっているが、粘性が卓越している場合には逆に壁面にへばりつくように鋭角になっている。本研究では壁面との接触角は考慮しなかったので、壁に接する液面と自由液面で、同じように表面張力が働いている。そのため、壁に接する液面でも自由液面と同様に角が丸くなる。0.4 sec では底面上にほぼ平らに液体が広がっている。0.6 sec では表面張力により流体が左壁面から離れてしまう。0.8 secになると、一様に引き伸ばされた流体が不安定になり、分裂を始める。また、底面の右端に達した流体は、こぼれ落ち始めている。1.0 sec では分裂が終了し、液滴となって底面上を滑っている。

表面張力により、広がりの先端の形状は丸くなり、これは粘性の効果と似ている。しかしながら、広がり速度は殆ど抑制されない。図 4.6 に、第 3 章の結果を含めて崩壊の先端位置の変化を示す。表面張力が卓越する場合には、標準の条件（粘性及び表面張力なし）と比較しても、先端位置の移動速度はあまり遅くならない。これは、粘性が卓越する場合と対照的である。また、広がりとともに液体は薄く引き伸ばされていくが、やがて不安定になり液滴に分裂する。ただし、粘性と表面張力がともに大きい場合には、広がり速度も抑制されるため、分裂には至らない場合もあると考えられる。

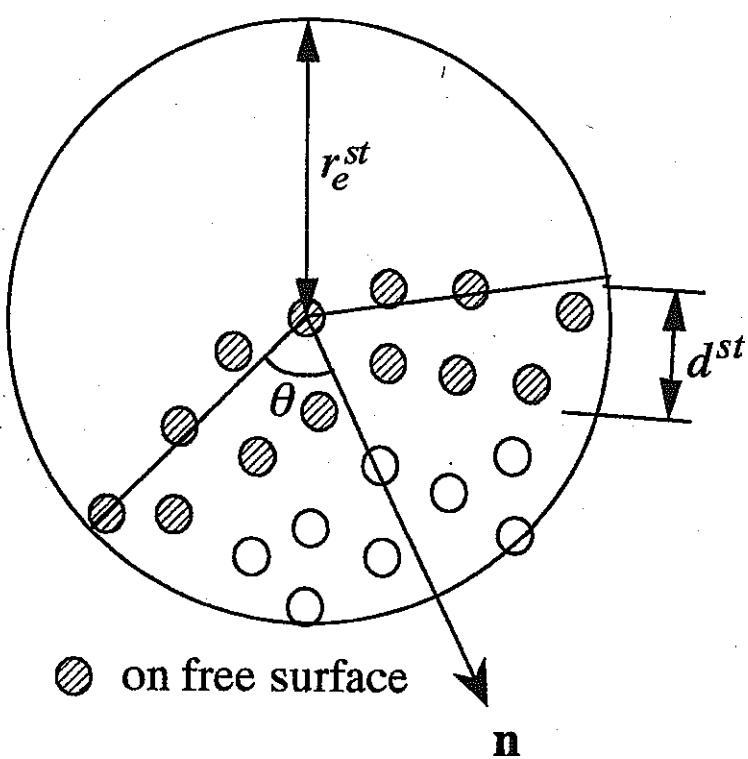


図 4.1 表面張力の粒子計算モデル

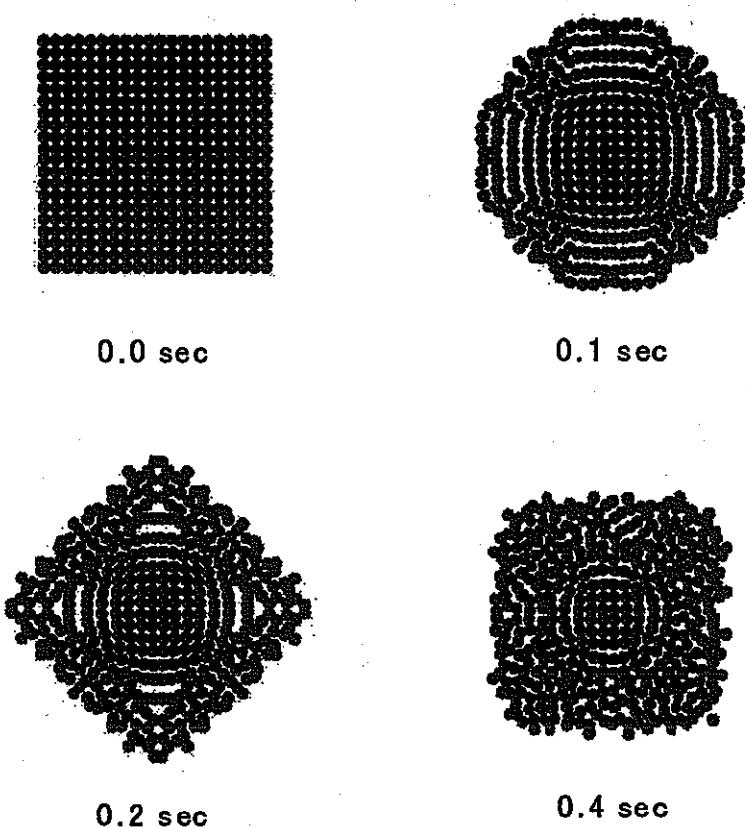


図4.2 MPS法によるエタノール液滴の振動の計算結果

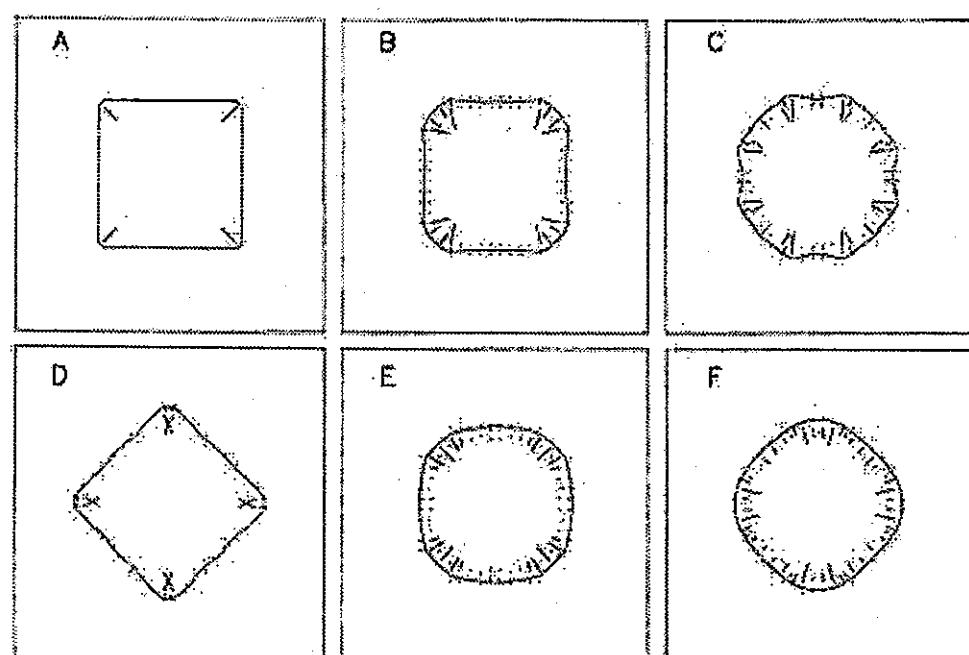


図4.3 VOF法によるエタノール液滴の振動の計算結果
(A : 0.0, B : 0.05, C : 0.10, D : 0.20, E : 1.0, F : 2.0 sec) 33)

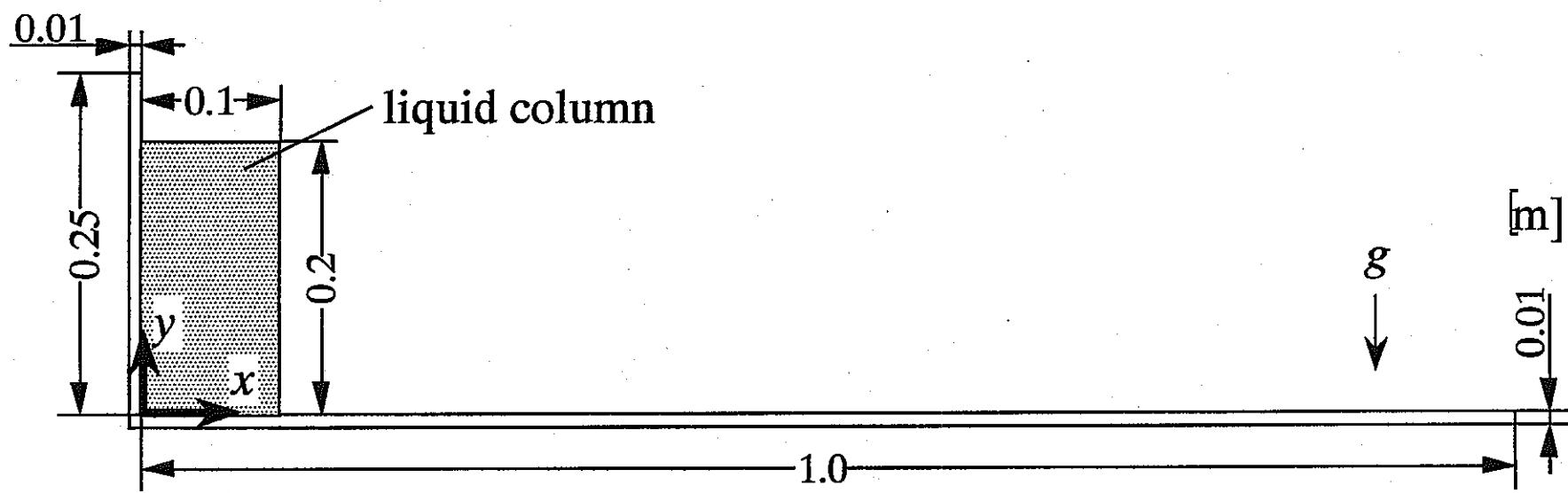


図4.4 液体の広がり挙動の計算の体系

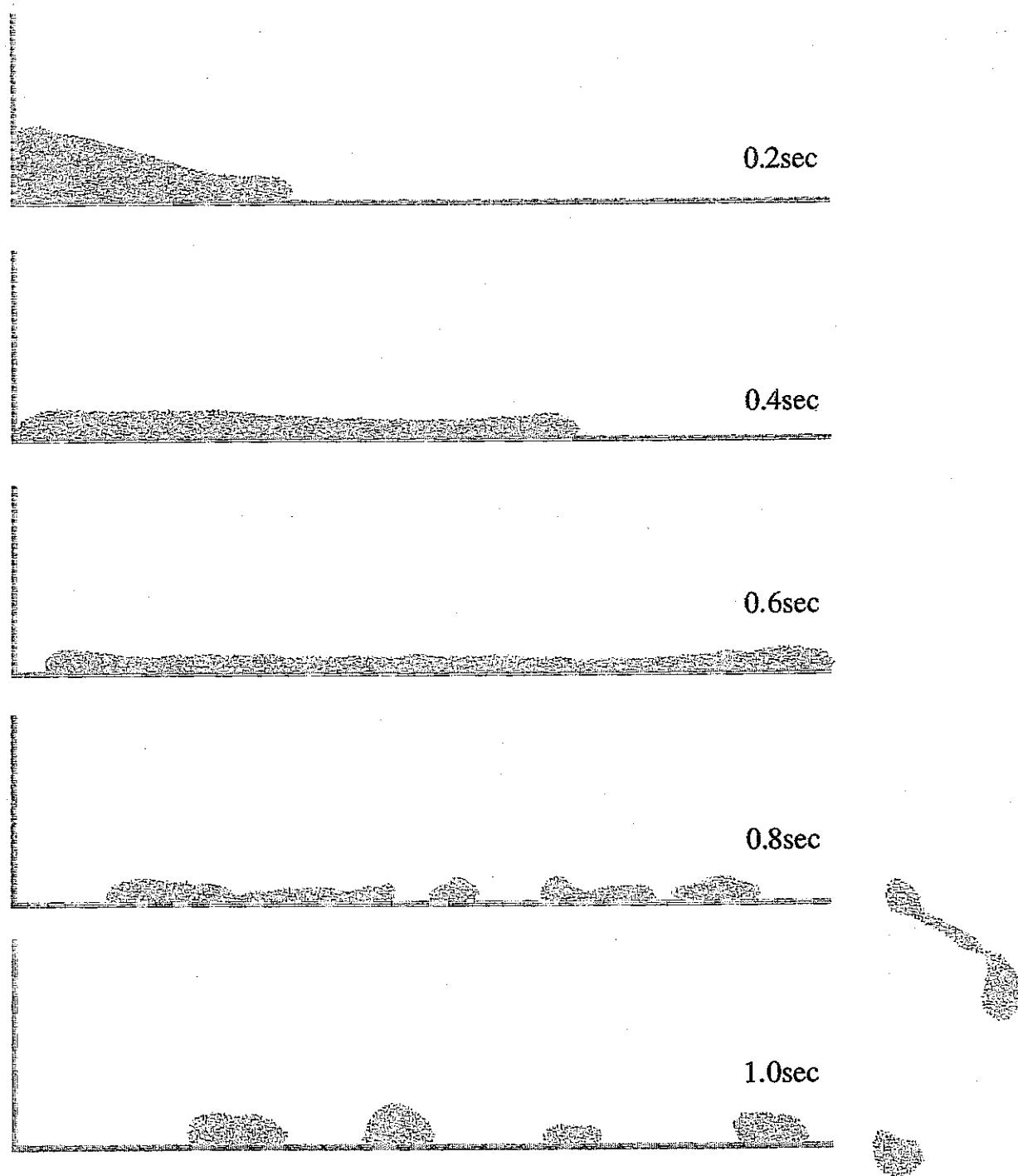


図 4.5 表面張力が卓越する場合の液体の広がり挙動の計算結果

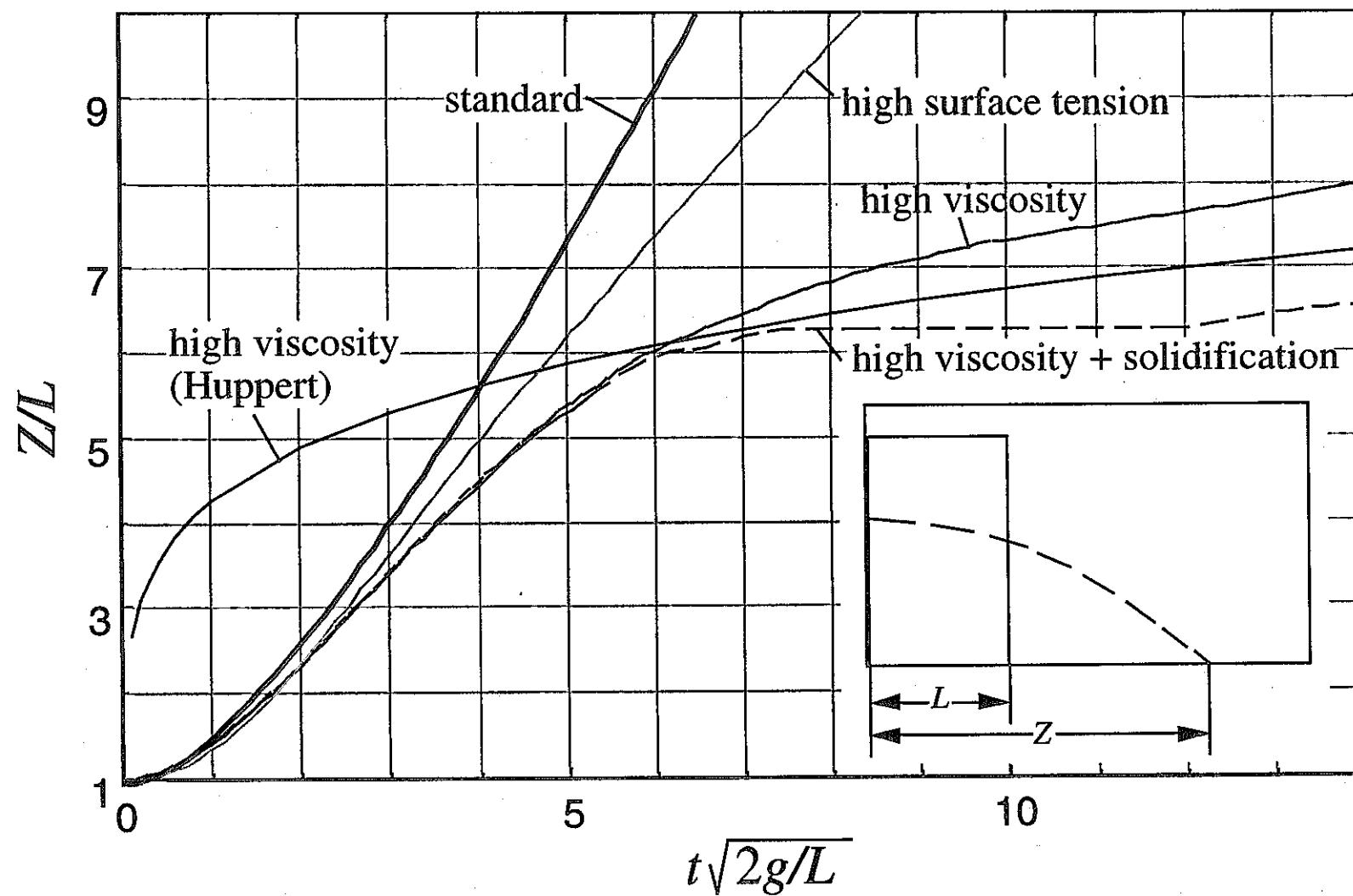


図4.6 広がりの先端位置の変化

第5章

ジェットブレークアップの解析

5.1 解析条件

ジェットブレークアップの2次元解析をおこなった。周囲の流体は無視した。また、流速が比較的遅いため、粘性も無視した。従って、流体に作用する力は、移流項、重力項および表面張力項である。

ノズルは内側の幅 d は 0.013m で一定とする。ノズルの長さを 3 種類(0.0572m, 0.0286m、ノズル無し)、流体の物性値を 2 種類(ほぼ水銀と水に相当)、粒子間距離を 2 種類(0.0013m, 0.00065m)に変化させた。なお、用いた流体の物性を表 5-1 にまとめる。

それぞれの条件で、流体の流入速度を変化させ、様々なウェーバー数(We)を実現した。

$$We = \frac{\rho u^2 d}{\sigma} \quad (5.1)$$

ここで、

- ρ : 密度
- u : 流速
- d : ノズル幅
- σ : 表面張力係数

初期にノズル出口まで流体を満たし、ノズルを垂直下向きにして液体を流出させる。重力は考慮する。粒子法は完全ラグランジアンであるので、流入と流出の境界条件を工夫する必要がある。ここでは、流入境界では移動する壁粒子を設定し、その移動速度を流入速度と一致させる。壁粒子の移動距離が、初期設定値である粒子間距離より長くなったら、最内列の流入境界壁粒子を流体粒子に変更するとともに、最外列に流入境界壁粒子を 1 列追加する。流体粒子に変更された粒子は、今度は通常の流体粒子と同じ扱いとする。従って、計算の進行とともに扱う粒子数が増加することになる。流入粒子の流速分布は本計算では一様とする。

一方、流出境界では計算領域外に流出した流体粒子を消去することで表現する。本計算では計算領域として最長落下距離を設定する。流体粒子が最長落下距離以上に落下した場合には消去する。流体粒子を消去すると、計算で扱うべき粒子数が減少するので、計算時間が短くなる。ジェットブレークアップ距離は計算条件によって異なるので、ジェットブレークアップ距離が確認できるだけの十分な最長落下距離を問題に依存して与えることにする。消去された粒子は、流入境界で新しい粒子が必要となった時に再利用し、粒子数が際限なく増加しないようにする。

5.2 解析結果

計算結果を図 5.1~5.15 に示す。図 5.1~5.5 には、水銀、ノズルなし、粒子間距離 0.0013m で、We=2, 5.6, 12, 24, 88 の場合を示す。ウェーバー数が小さい場合には、流出後ただちにジェット幅は狭くなり、すぐにちぎれて液滴に分裂する。また、流量が少ないため、液滴の間隔が広くなっている。ウェーバー数が大きくなるにつれて、ジェットブレークアップ距離が長くなり、より下流で液滴に分裂していることがわかる。また、液滴同士の間隔は短くなっていく。しかし、液滴径はウェーバー数にはあまり影響を受けず、ほぼノズル幅になっている。液滴形状は、ウェーバー数が小さい場合にはほぼ円形を保っているが、ウェーバー数が大きくなるにつれて扁平な形状が現れるようになる。液滴の臨界ウェーバー数が 12 程度であることを考えると、ノズル幅の径を持つ液滴はウェーバー数が 24 あるいは 88 の場合は不安定であり、扁平な形状をした大きな液滴はさらに細かな液滴に分裂すると考えられる。

次にノズル長を 0.0572m とした場合の計算結果を図 5.6~5.10 に示す。ウェーバー数による影響については、定性的にはノズルの無い場合と同じであった。ただし、ジェットブレークアップ距離はやや短くなる傾向が見られた。

流体を水とした場合の計算結果を図 5.11~5.15 に示す。水銀の場合と比較すると、液滴が大くなる傾向がある。また、ウェーバー数が大きい場合に、ジェットブレークアップ距離が長くなる傾向が見られた。

5.3 ジェットブレークアップ距離の考察

図 5.16 に、流体として水銀を用いた場合の計算結果をまとめる。比較として、Grant のジェットブレークアップ距離の相関式も載せる[18]。Grant は層流と乱流の両方について異なる式を与えており、ここでは両者ともに示す。

$$\text{層流: } \frac{L}{d} = 19.5 \left(We^{0.5} + 3 \frac{We}{Re} \right)^{0.85} \quad (5.2)$$

$$\text{乱流: } \frac{L}{d} = 8.51 \left(We^{0.5} \right)^{0.64} \quad (5.3)$$

層流ではウェーバー数(We)の他にレイノルズ数(Re)にも依存するが、粘性を無視しているのでレイノルズ数は無限大であるとすると、かっこの中の第 2 項は消える。

図 5.16 より、ウェーバー数の増加とともにジェットブレークアップ距離は長くなるという傾向は定性的には本計算結果と相関式で一致しているが、定量的には計算の方がジェットブレークアップ距離が短い。この理由については現在のところ特定できていない。

計算におけるノズルの長さの影響については、ノズルが長いほどジェットブレークアップ距離が短くなる傾向がある。これは、流入境界で一様な流速分布で流入した流体が、ノズル内を流れることで流速分布が変化するためであると考えられる。実験でも、層流と乱流では乱流の方がジェットブレークアップ距離が短くなる。ジェットブレークアップは流体内の乱れや非一様性に敏感であることがわかる。全般的に粒子法でジェットブレークアップ距離が短くなる傾向になった理由も同様であることが考えられる。

図 5.17 に水銀と水の場合の計算結果の比較を示す。どちらもノズルが無い場合の結果である。ジェットブレークアップ距離はウエーバー数の大きな領域で水の方が長くなつた。2種類の流体では表 5.1 に示したように、密度と表面張力係数が異なる。同じウエーバー数では、水の方が流速が速くなる。そのため、水の方が相対的に重力項の影響が小さくなる。重力項は流体を加速するので、ジェット幅が狭くなる効果も加わり、ジェットの下流では実効的なウエーバー数は増加していく。この効果は水銀の方が大きくなるため、ジェットブレークアップ距離が短くなると考えられる。ウエーバー数が小さい領域では、流入流速が小さいために流体の落下速度は重力項によって決まるようになり、重力加速度は流体によらず一定なので、水銀と水でジェットブレークアップ距離が一致するようになると考えられる。ところで、ウエーバー数が大きい場合に水のジェットブレークアップ距離は長くなり、相関式に接近している。これは、Grant の相関式がこうした条件、すなわち重力項が相対的に小さい場合、で得られている可能性がある。そしてこれが全般的なジェットブレークアップ距離が計算と相関式で定量的に一致しない原因である可能性がある。

図 5.18 に粒子間距離の違いによる結果の比較を示す。流体は水銀でノズルが無い条件である。粒子法における粒子間距離は、差分法における格子間隔に相当するので、これは空間解像度が計算結果に与える影響をみたものである。図では粒子間距離による違いは見られない。これは、ここでの計算の空間解像度が十分であることを示している。

表5.1 ジェットブレークアップの解析に用いた流体の物性値

	密度 [kg/m ³]	表面張力係数 [N/m]
流体1（水銀）	13,500	1,000
流体2（水）	0.498	0.1625

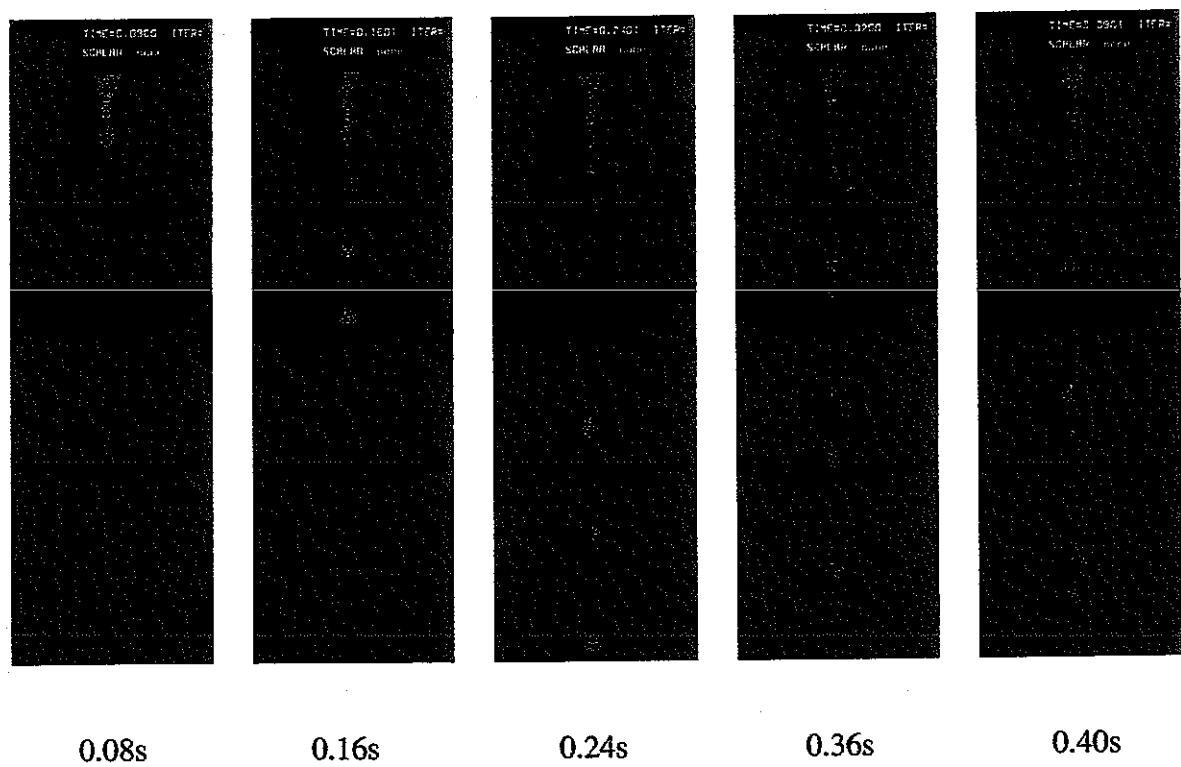


図 5.1 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=2$ 、水銀、ノズル無し、粒子間距離 0.0013m)

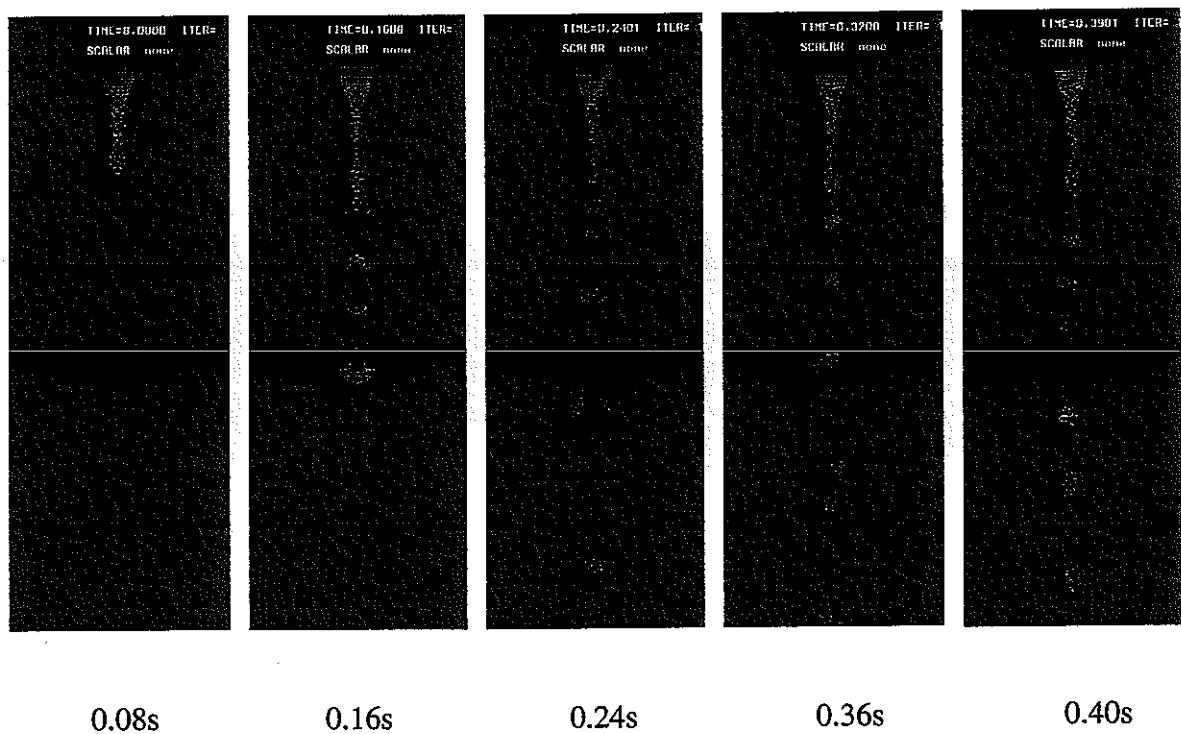


図 5.2 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=5.6$ 、水銀、ノズル無し、粒子間距離 $0.0013m$)

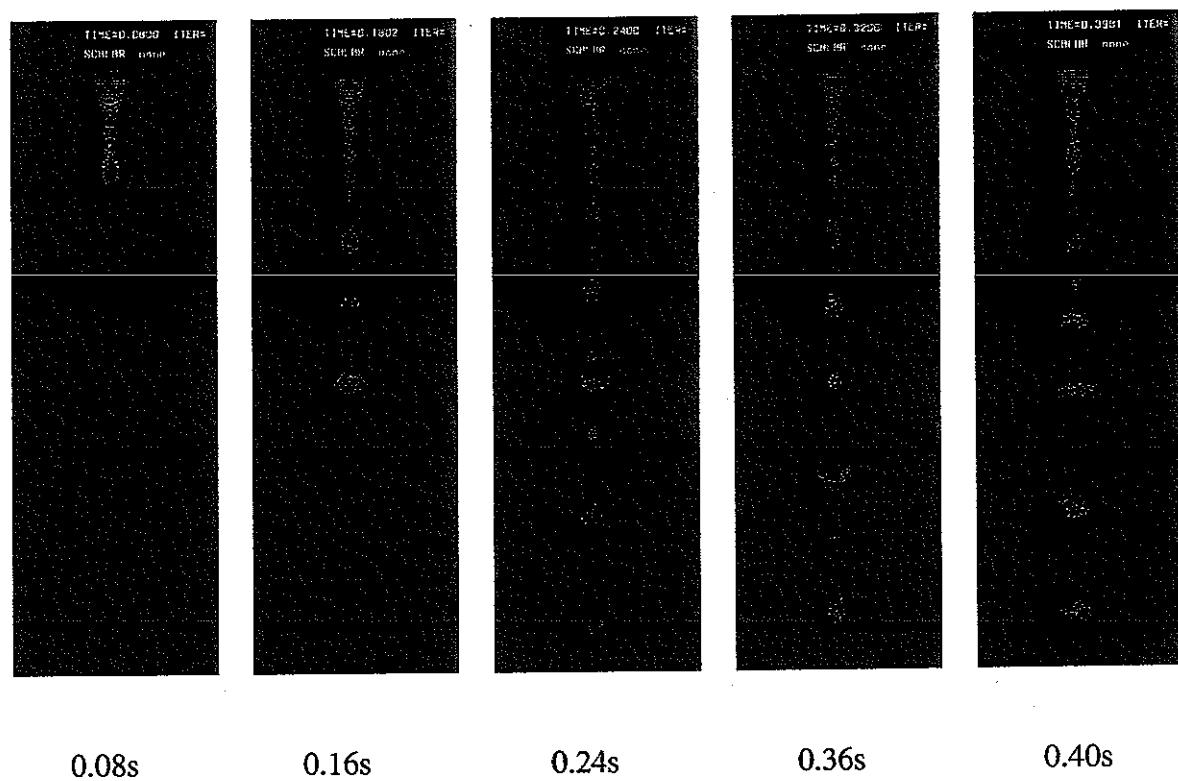


図 5.3 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=12$ 、水銀、ノズル無し、粒子間距離 0.0013m)

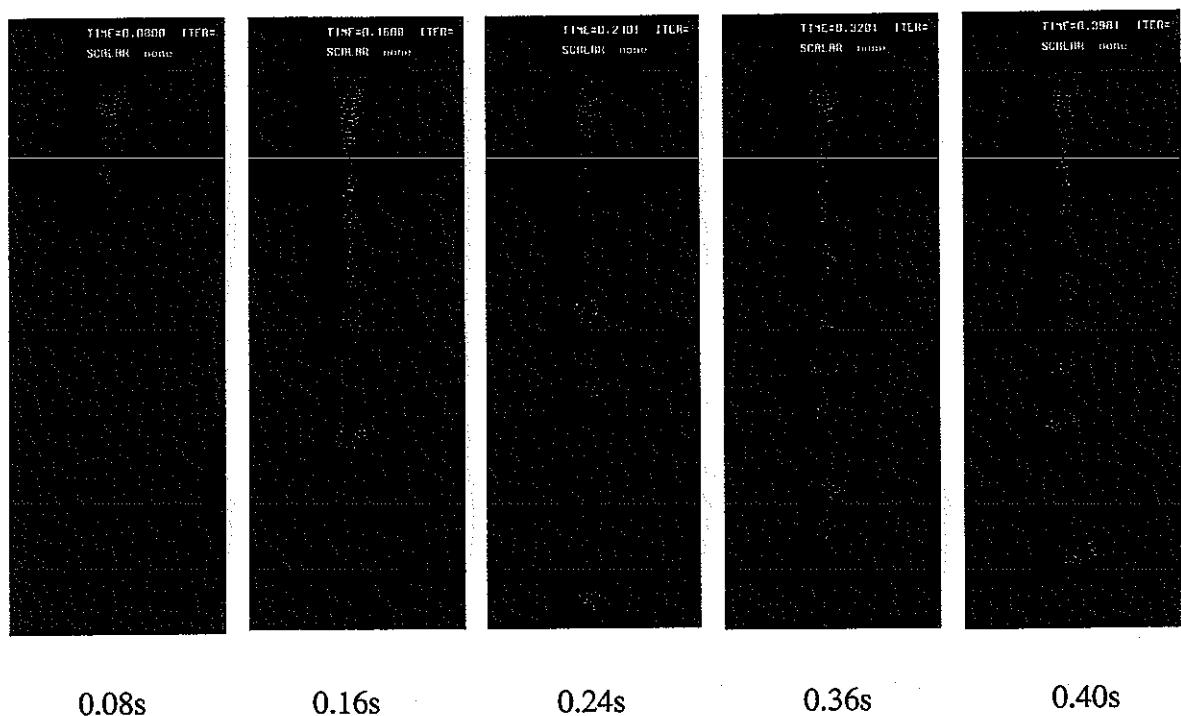


図 5.4 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=24$ 、水銀、ノズル無し、粒子間距離 $0.0013m$)

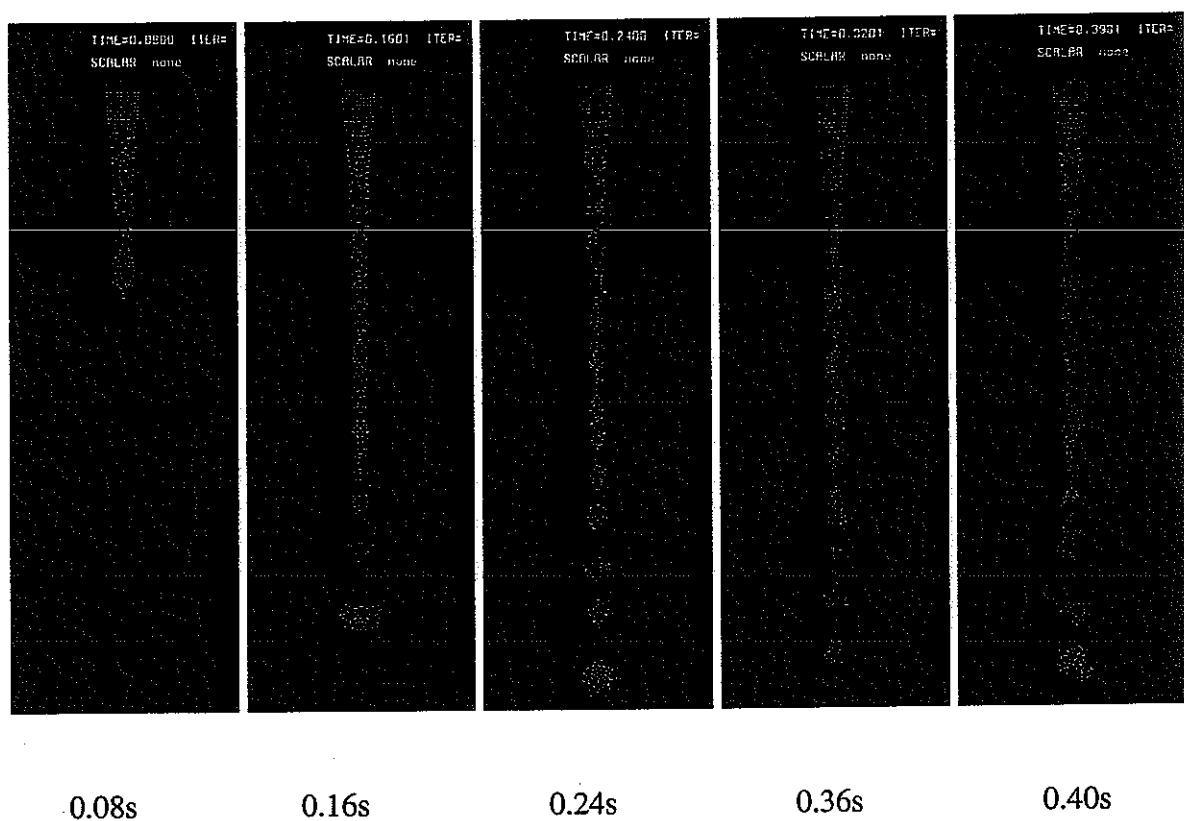


図 5.5 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=88$ 、水銀、ノズル無し、粒子間距離 0.0013m)

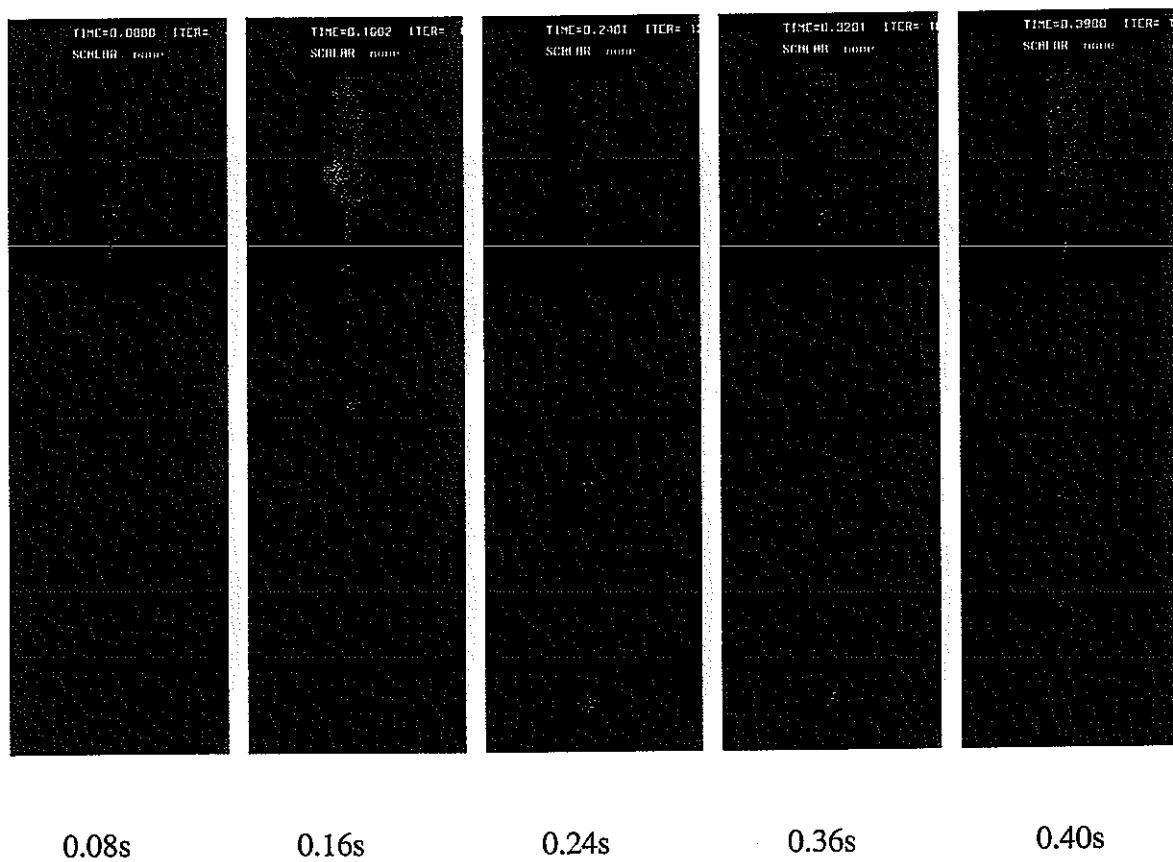


図 5.6 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=2$ 、水銀、ノズル $0.0572m$ 、粒子間距離 $0.0013m$)

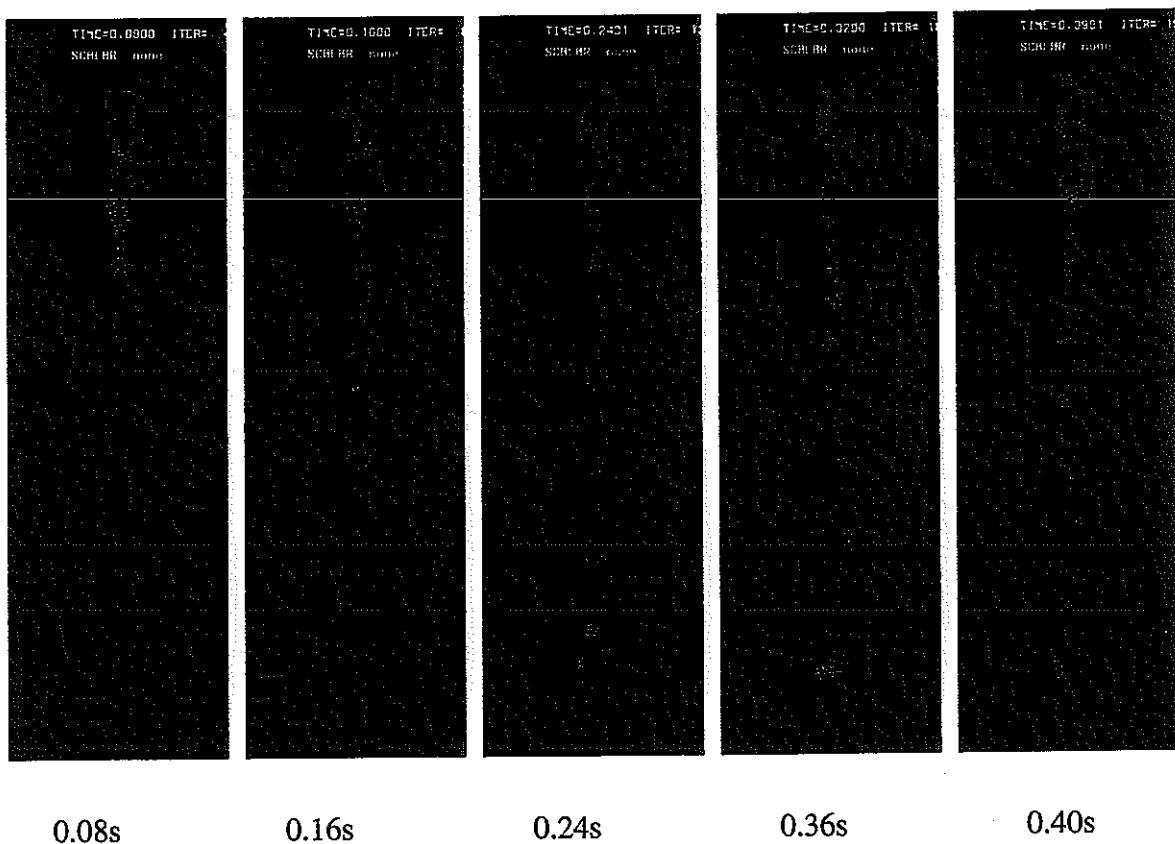


図 5.7 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=5.6$ 、水銀、ノズル $0.0572m$ 、粒子間距離 $0.0013m$)

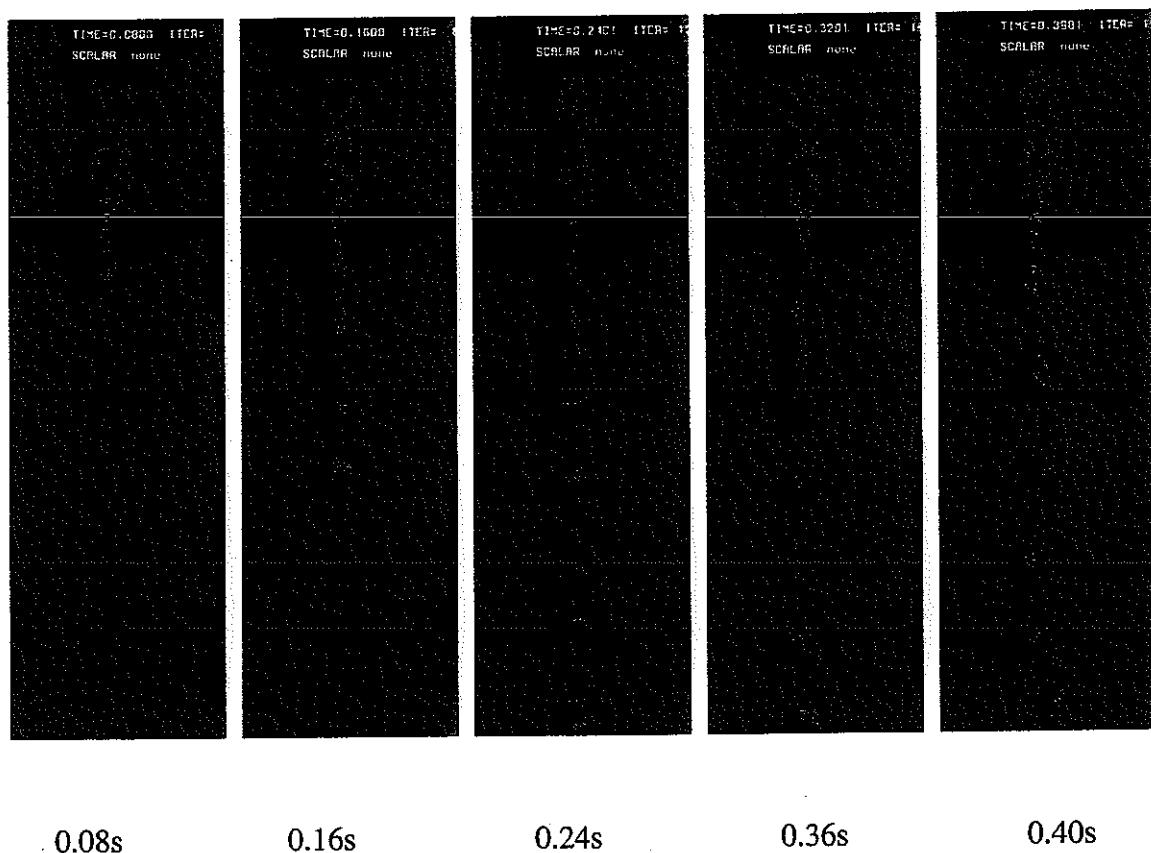


図 5.8 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=12$ 、水銀、ノズル 0.0572m 、粒子間距離 0.0013m)

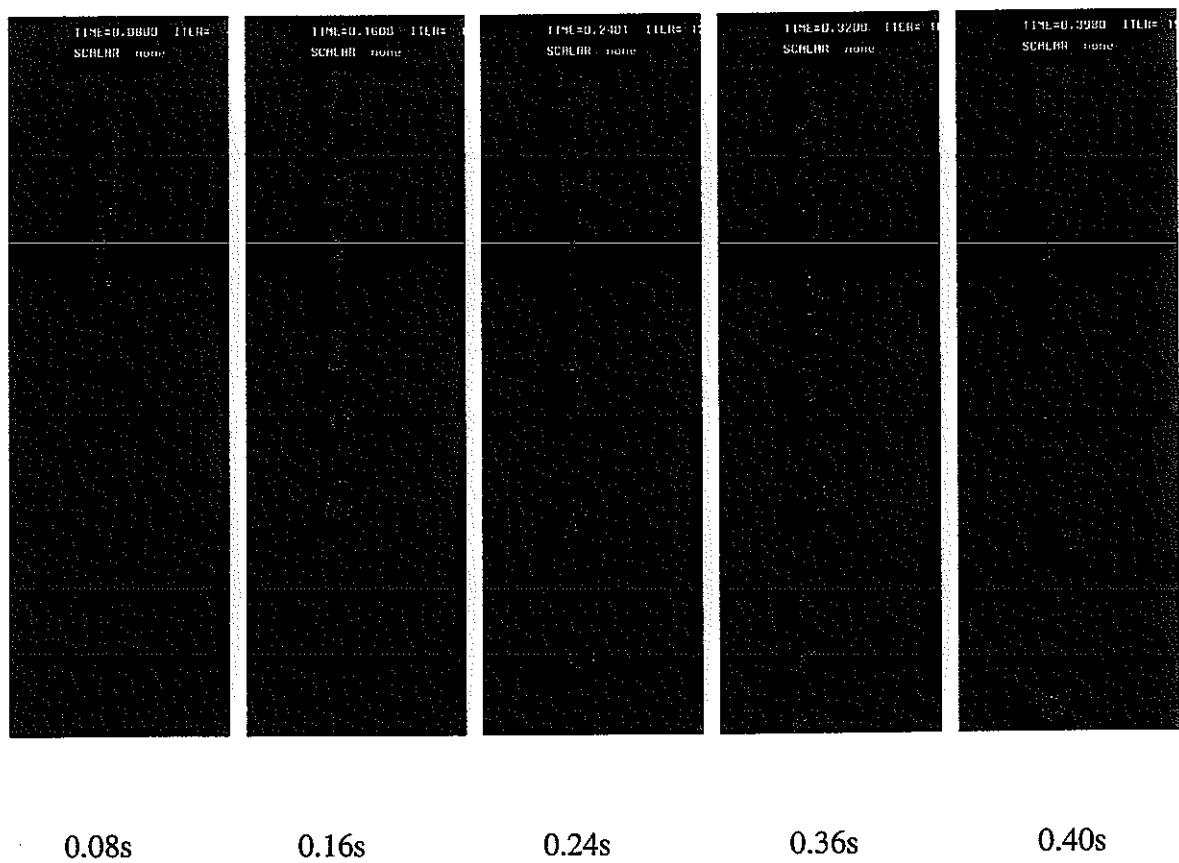


図 5.9 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=24$ 、水銀、ノズル 0.0572m 、粒子間距離 0.0013m)

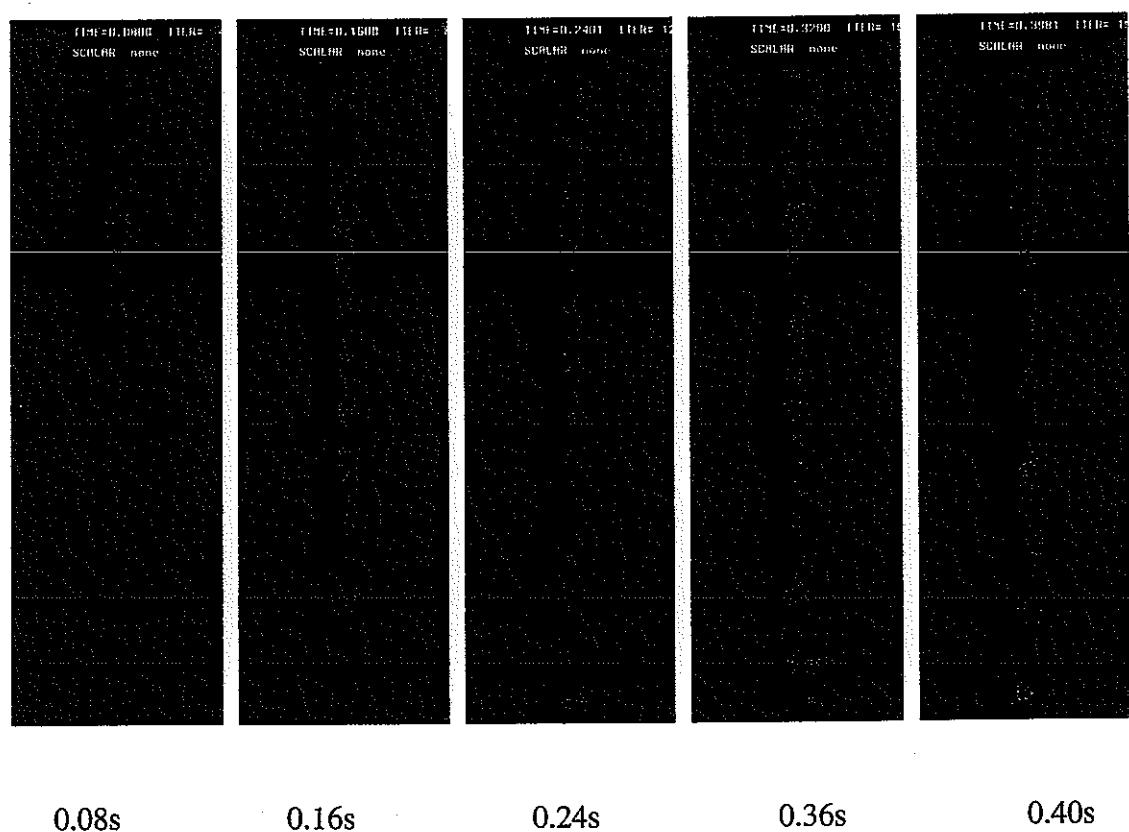


図 5.10 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=88$ 、水銀、ノズル $0.0572m$ 、粒子間距離 $0.0013m$)

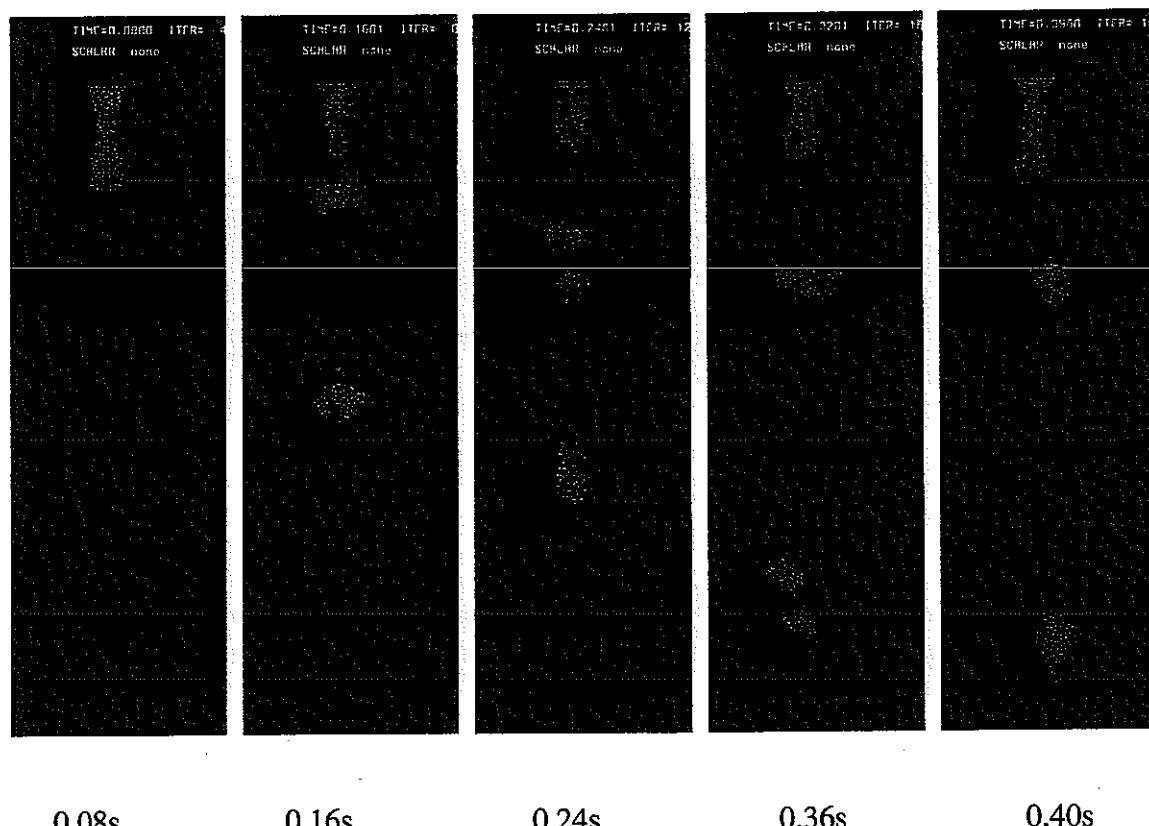


図 5.11 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=2$ 、水、ノズルなし、粒子間距離0.0013m)

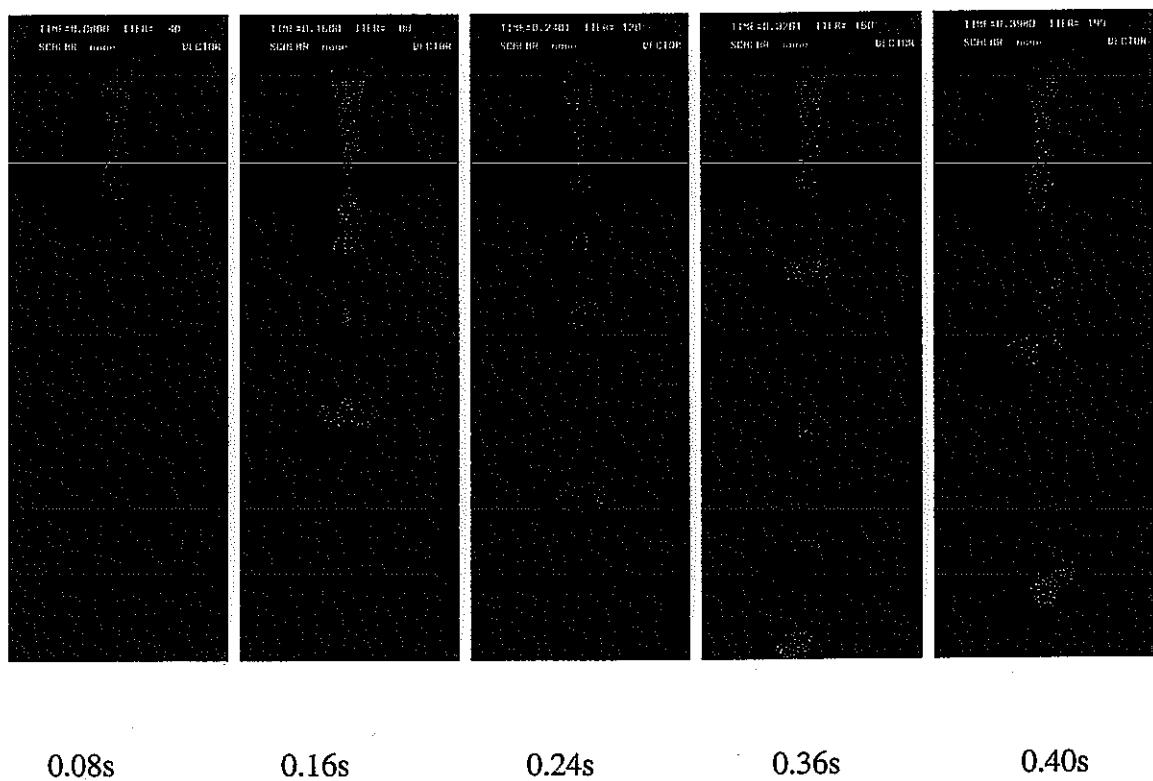


図 5.12 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=5.6$ 、水、ノズルなし、粒子間距離 $0.0013m$)

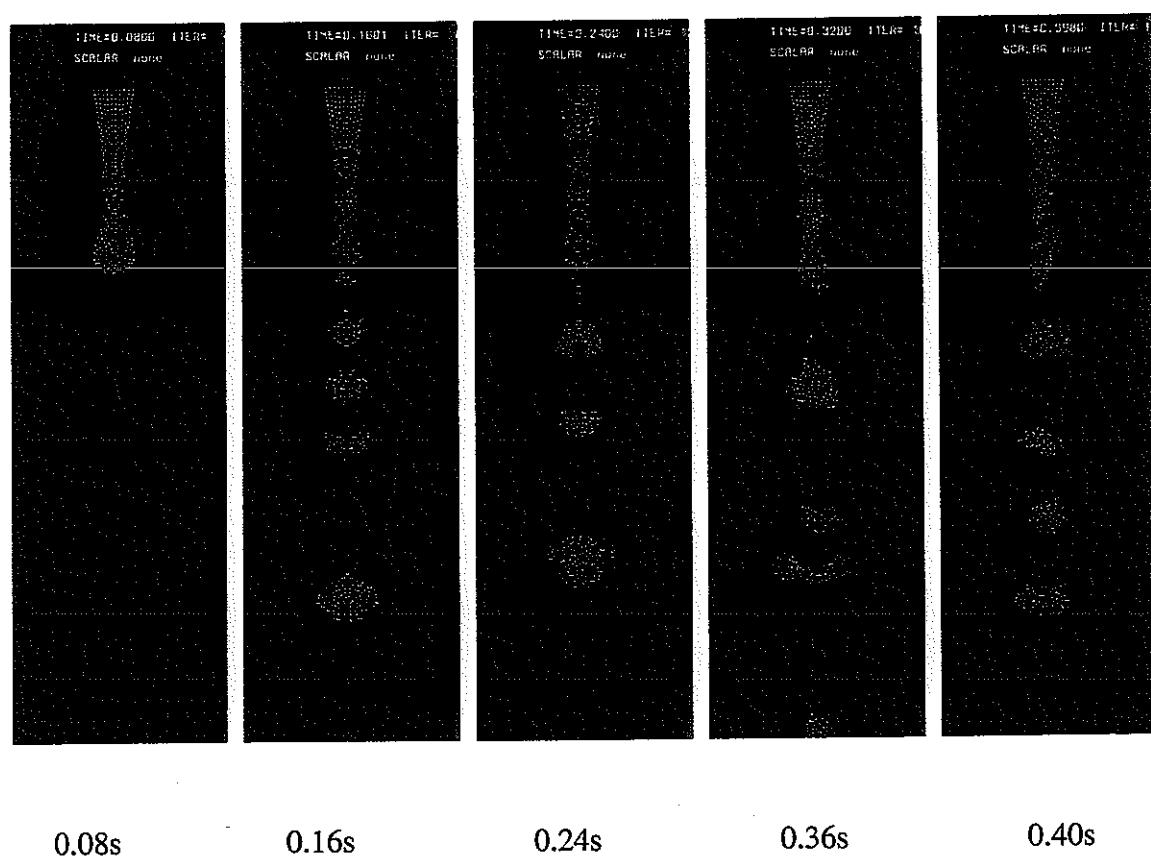


図 5.13 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果

($We=12$ 、水、ノズルなし、粒子間距離 $0.0013m$)

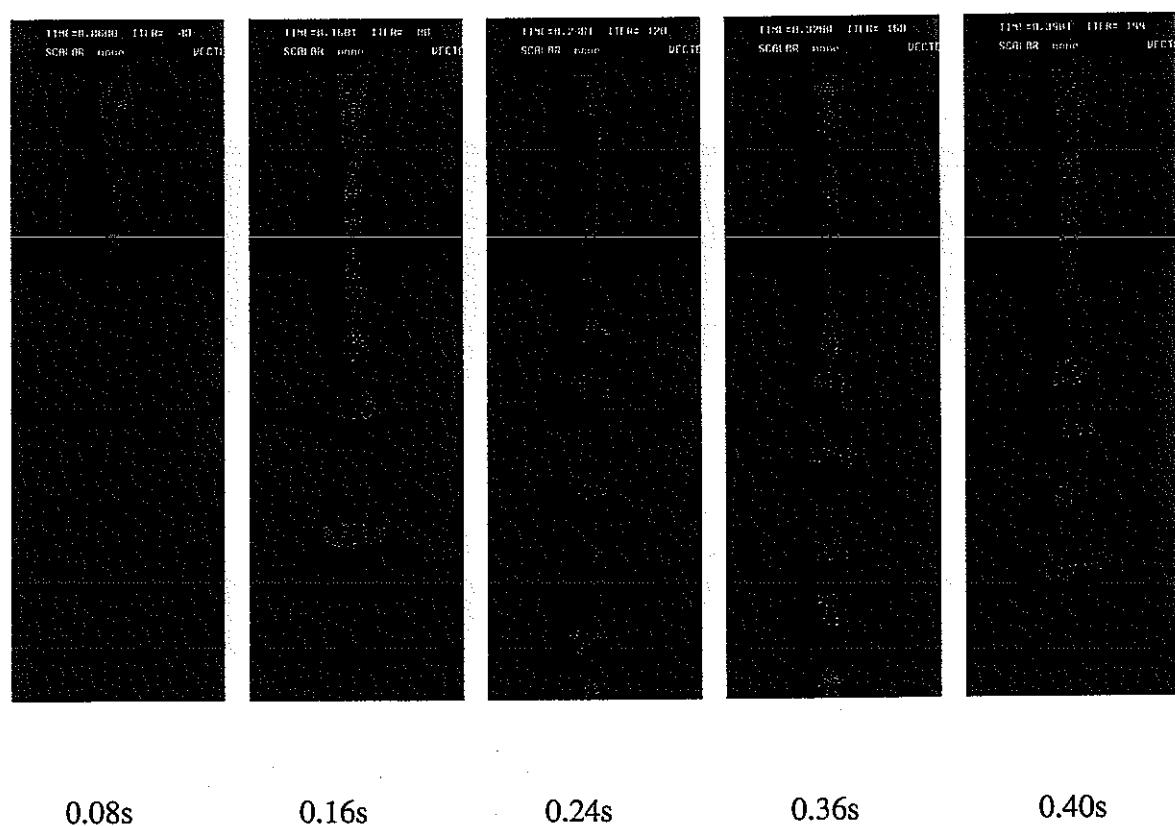


図 5.14 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=24$ 、水、ノズルなし、粒子間距離 0.0013m)

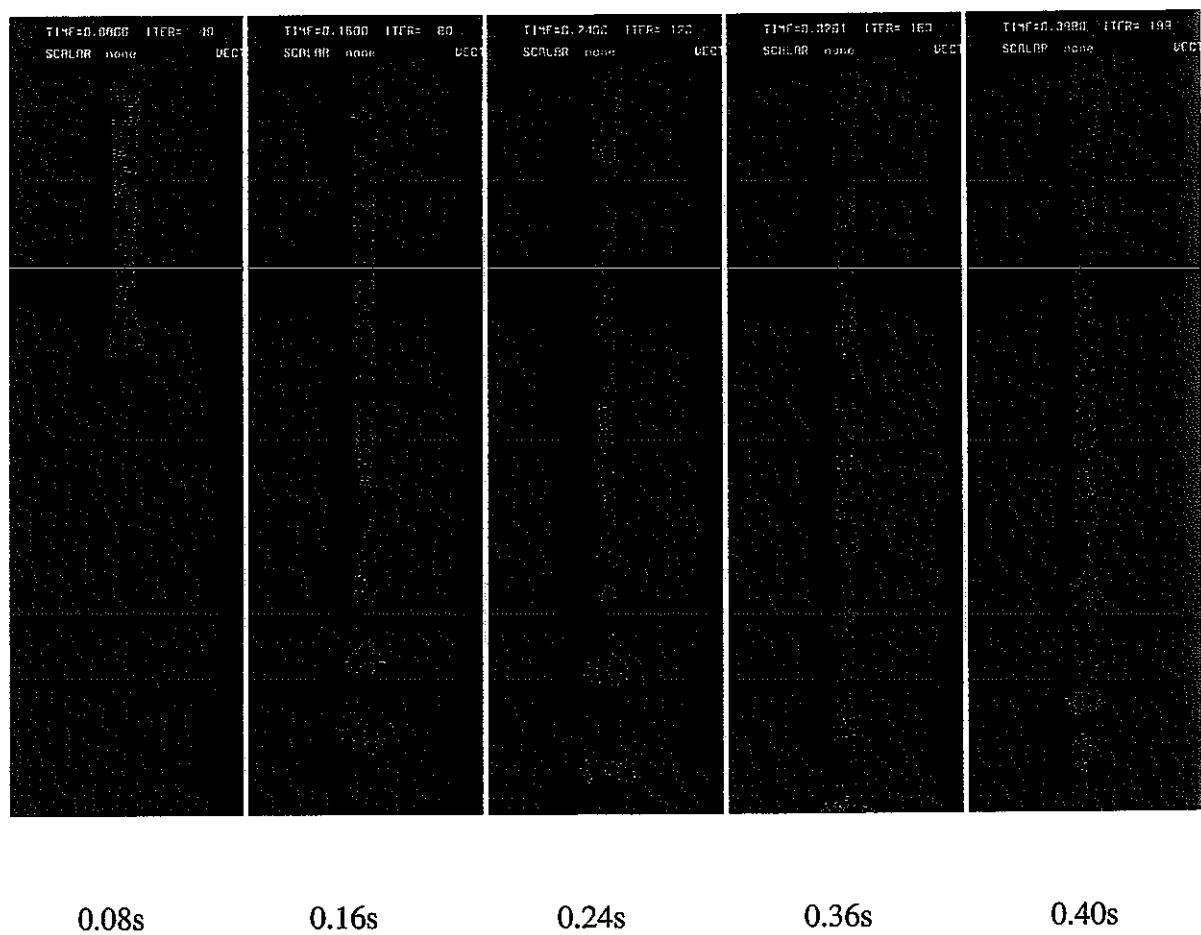


図 5.15 ジェットブレイクアップのシミュレーション結果
($We=88$ 、水、ノズルなし、粒子間距離 0.0013m)

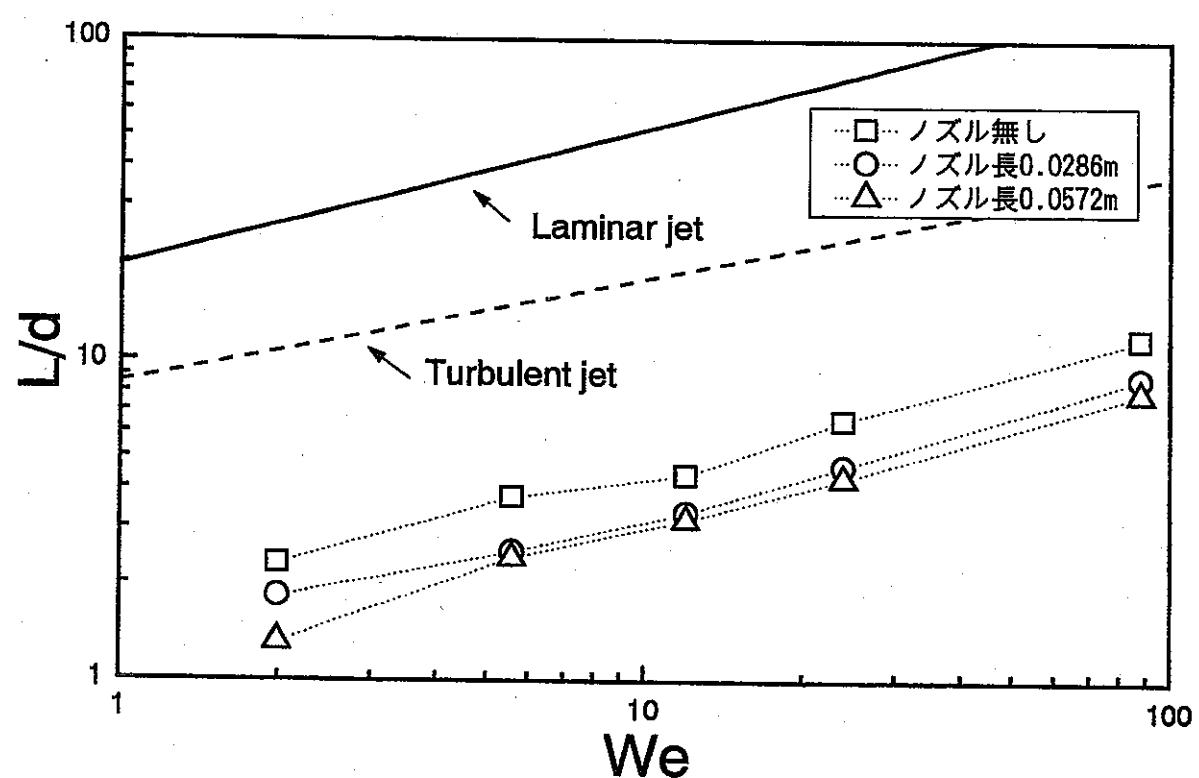


図 5.16 ジェットブレイクアップ距離のノズル長さによる影響

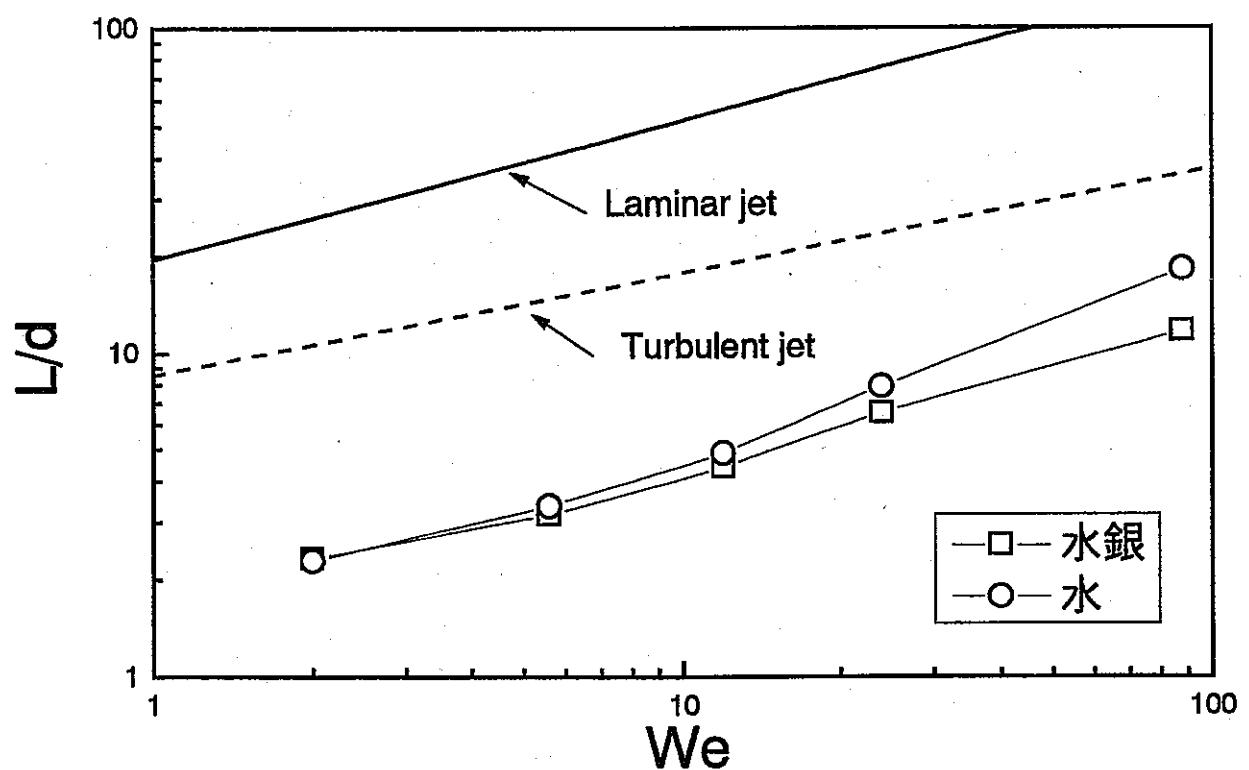


図 5.17 ジェットブレイクアップ距離の物性値による影響

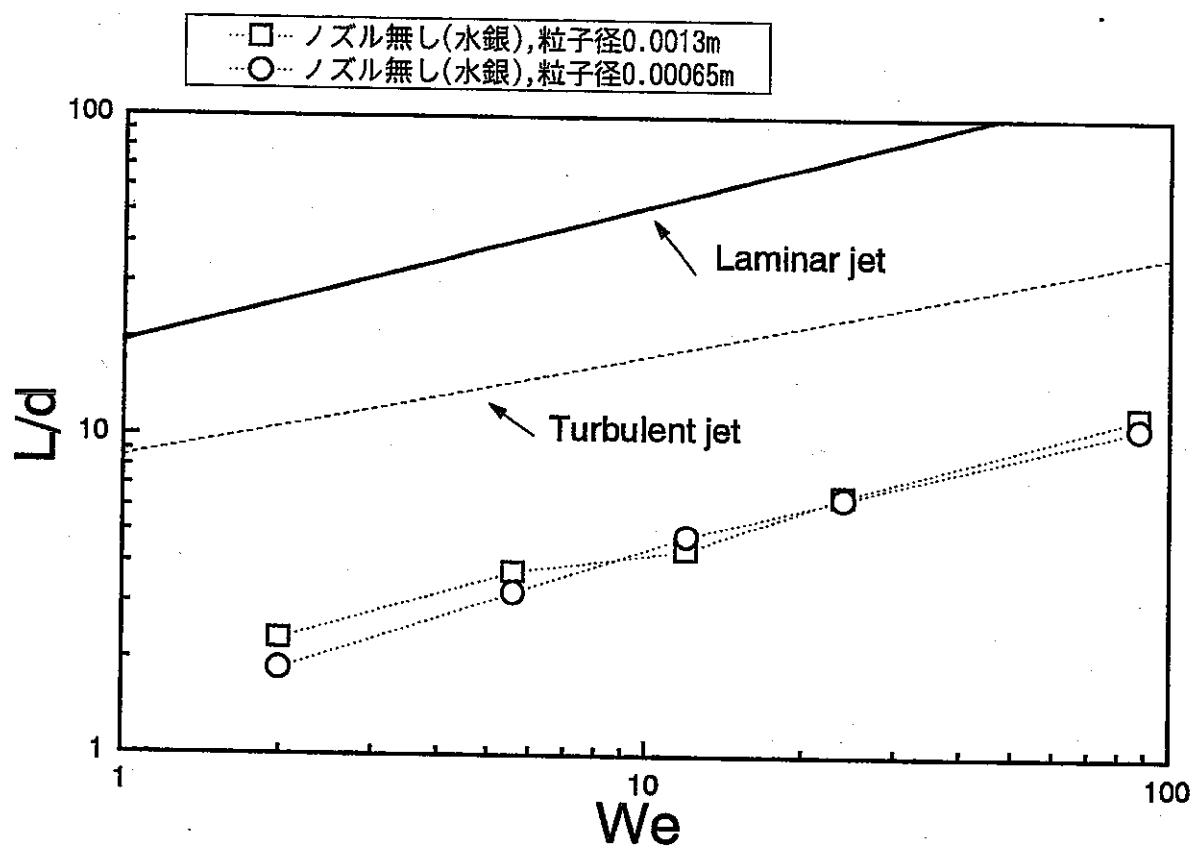


図 5.18 ジェットブレイクアップ距離の粒子間距離による影響

第5章

結論

本研究では、粒子法によるナトリウムの漏洩燃焼解析のための基礎計算技術として、弾性体の粒子計算モデルの開発、これを用いたナトリウムの凝固を伴う熱流動解析法の開発、表面張力の粒子計算モデルの開発、液体の床上での広がり挙動の解析、破断口で見られるジェットブレークアップ挙動の解析をおこなった。

まず、ヤング率とポアッソン比で記述される弾性体の運動を、粒子間相互作用で計算するモデルを新たに開発した。この方法では、従来の有限要素法における要素分割の必要がないので、弾性体の大変形のみならず、破壊なども容易に解析できる。特に、粒子に回転の自由度を持たせたことで、角運動量の保存性が得られた。正弦波状の変位を与え本計算モデルを適用したところ、圧力分布や応力分布は解析解と良く一致した。ただし、弾性波の伝搬では、振幅が大きくなるという問題点があり、これは時間差分スキームが陽的な1次精度であるからだと考えられる。2つの弾性体の衝突の計算では、片方の弾性体が破壊されることが結果として得られた。しかしながら、この計算ではまだ弾性体の破断に至るまでの塑性領域での応力-ひずみの関係は組み込まれておらず、この関係を考慮すれば本計算モデルにより実際の破壊現象の解析が可能であると考えられる。また、複数の弾性体を同時に扱う場合には、変位からだけでなく粒子数密度からも変位の発散を計算し、両者のうち大きい方の値より圧力を計算することで、衝突による反発力をうまくモデル化することができた。このモデルは流体と弾性体との間の相互作用にも適用できる。なお、ここで開発した方法は陽的なアルゴリズムを用いており、弾性体の動的挙動の解析に適用できるが、静的な弾性挙動の解析のためには陰的なアルゴリズムを開発する必要がある。

次に、凝固を伴う熱流動解析法として、熱流動をこれまでの粒子法(MPS法)で、凝固した後の固相を弾性体として解析するモデルを開発した。各粒子に、温度、エンタルピ、固相率を変数として与える。温度と固相率はエンタルピの関数として与えることで、固液が共存する領域の物性をうまく組み込むことができる。また、固相率のある値を境にして、液相と固相を分けるものとした。気相と液相の間の相変化と異なり、固相と液相の間では密度変化が小さいので、相変化によって粒子の数は変化させない。初期に幅10cm 高さ 20cm の2次元矩形状の液体ナトリウムが、厚さ 1cm 長さ 1m のステンレス板状を広がる様子を本手法を用いて計算した。液体ナトリウムおよびステンレス板の初期温度をそれぞれ 480°C および 15°C すると、粘性や凝固の効果は全く見られず、非圧縮非粘性流体のダム崩壊のベンチマーク解とよく一致した。液体ナトリウムの粘性を仮想的に実際の 10^3 倍にすると、粘性の効果によりナトリウムの広がりが多少抑制される。さらに、ナトリウムの初期温度を 98°C とし、ナトリウムおよびステンレスの熱伝導率

を実際の 10 倍の値にすると、先端が凝固することにより、ナトリウムの広がりがさらに抑制されるという結果が得られた。なお、本計算モデルは燃焼生成物の堆積挙動にも適用できる。

さらに、表面の曲率や垂直方向ベクトルを粒子数密度より計算する新たな表面張力の粒子計算モデルを開発した。表面形状を描く必要がないため、流体の分裂や合体にも適用できるという MPS 法の利点を損なうことが無い。エタノール液滴の振動の問題に本計算モデルを適用し、従来の VOF 法と一致する結果を得た。表面張力が卓越する場合の液体の広がり挙動を解析した。表面張力により広がりの先端形状は丸くなるが、広がり速度はあまり減速されなかった。また、薄く広がった液体はやがて不安定になり、複数の液滴に分裂した。

MPS 法を用いてジェットブレークアップ挙動の解析をおこなった。計算は 2 次元とし、ノズル幅を一定とし、ノズル長さを 3 種類、流体の物性を 2 種類、空間解像度を 2 種類として、流速を変えることによりウェーバー数を 2 から 88 まで変化させた。ウェーバー数が大きくなるに従いジェットブレークアップ距離が長くなり、これは従来の実験相関式と定性的に一致する。定量的には計算におけるジェットブレークアップ距離は短かかった。

本研究により、これまでの MPS 法では扱えなかった凝固と表面張力の計算モデルが新に開発された。さらに、表面張力や凝固の影響がある場合の床上での広がり挙動を解析するとともに、破断口からの液体の噴出の際に見られるジェットブレークアップ挙動の解析をおこなった。これらの諸現象は、ナトリウムの漏洩事故において生じるものであるが、いずれも従来の差分法などの数値解析手法では解析が困難であった。本研究では必要となる新しい計算モデルを開発するとともに、それぞれの現象について実際に MPS 法によって解析できることを示した。

参考文献

- [1] 山口彰、村松寿晴、大平博昭、飯田将雄「ナトリウム漏洩・燃焼挙動の機構論的解析手法の開発」 PNC TN9410 97-040 (1997).
- [2] S. Koshizuka, H. Tamako, and Y. Oka, "A Particle Method for Incompressible Viscous Flow with Fluid Fragmentation", Computational Fluid Dynamics J. 4, 29-46 (1995).
- [3] S. Koshizuka and Y. Oka, "Moving-Particle Semi-Implicit Method for Fragmentation of Incompressible Fluid" Nucl. Sci. Eng. 123, 421-434 (1996).
- [4] S. Koshizuka, A. Nobe and Y. Oka, "Numerical Analysis of Breaking Waves Using the Moving Particle Semi-implicit Method" Int. J. Numer. Meth. Fluids 26, 751-769 (1998).
- [5] S. Koshizuka, H. Ikeda and Y. Oka, "Numerical Simulation of Fragmentation Processes in Vapor Explosions Using Moving Particle Semi-implicit Method" Proc. Int. Meet. Advanced Reactors Safety (ARS'97), Orlando, June 1-5, 1997, p.872-879.
- [6] 池田博和、松浦文生、越塚誠一、岡芳明「MPS 法による蒸気爆発の液体金属細粒化過程の数値解析」日本機械学会論文集（B） 64, 2431-2437 (1998).
- [7] Y. Chikazawa, S. Koshizuka and Y. Oka, "Numerical Calculation of Sloshing in a Tank with Elastic Walls Using a Particle Method" Proc. 6th Int. Conf. Nucl. Eng. (ICON-6), San Diego, May 10-15, 1998, ICON-6215.
- [8] 飯田将雄、山口彰「ナトリウム燃焼解析評価手法の開発(2) 粒子法による 3 次元ナトリウム漏洩漏洩燃焼挙動解析コードの開発」日本原子力学会 1997 年秋の大会予稿集, 沖縄, September 14-17, 1998, G60.
- [9] 飯田将雄、山口彰「ナトリウム燃焼解析評価手法の開発(14) 3 次元粒子法コードによるナトリウム微小漏洩解析」日本原子力学会 1998 年秋の大会予稿集, 福井, September 28-30, 1998, G15.
- [10] M. Iida, "Three Dimensional Particle Method Code for Sodium Leakage Analysis in Liquid Metal Reactor," Proc. 7th Int. Conf. Nucl. Eng., Tokyo, April 19-23, 1999, ICON-7202.
- [11] 越塚誠一、岡芳明「ナトリウム燃焼解析評価手法の開発(3) 水の飛散実験による 3 次元粒子法コードの検証」日本原子力学会 1997 年秋の大会予稿集, 沖縄, October 14-17, 1997, G61.

- [12] N. Shirakawa, H. Horie and Y. Yamamoto, "A Study on the Evaluation Method of Flow Regimes with the Particle Interaction Method," Proc. 7th Int. Conf. Nucl. Eng., Tokyo, April 19-23, 1999, ICONE-7278.
- [13] J. J. Foit and A. Veser, "Spreading with Variable Viscosity, CORFLOW Validation and Analysis of KATS Experiments," OECD Workshop on Ex-Vessel Debris Coolability, Karlsruhe, November 15-18, 1999.
- [14] 永井桂一、平林勝、小野島貴光、大木義久、軍司稔、荒邦章「ナトリウム漏洩燃焼試験ースプレーノズルによる液滴径分布測定試験及び評価ー」JNC TN9400 99-030 (1999).
- [15] M. Saito, K. Sato and S. Imahori, "Experimental Study on Penetration Behaviors of Water Jet into Freon-11 and Liquid Nitrogen," ANS Proc. 1988 National Heat Transfer Conf., Houston, July 24-27, 1988, p.173-183
- [16] N. I. Kolev, "Fragmentation and Coalescence Dynamics in Multiphase Flows," Experimental Thermal and Fluid Science **6**, 211-251 (1993).
- [17] K. Vierow, "Integrated Steam Explosion Analysis with VESUVIUS Code," Ph.D. Thesis, The University of Tokyo (1999).
- [18] R. P. Grant and S. Middleman, "Newtonian Jet Stability," A. I. Ch. E. J. **12**, 669-678 (1966).
- [19] B. Nayroles, G. Touzot and P. Villon, "Generalizing the Finite Element Method: Diffuse Approximation and Diffuse Elements" Comput. Mech. **10**, 307-318 (1992).
- [20] T. Belytschko, Y. Y. Lu and L. Gu, "Element-free Galerkin Methods" Int. J. Num. Methds. Eng. **37**, 229-256 (1994).
- [21] G. Yagawa and T. Yamada, Comput. Mech. **18**, 383-386 (1996).
- [22] 矢川元基、白崎実、日本機械学会第 74 期全国大会講演会論文集, 96-15(I), 1996, p.25-26.
- [23] A. G. Petschek and L. D. Libersky, "Cylindrical Smoothed Particle Hydrodynamics" J. Comput. Phys. **109**, 76-83 (1993).
- [24] 酒井譲、佐々木達也、「粒子法による大変形衝撃解析」第 10 回計算力学講演会講演論文集, 1997, p.435-436.
- [25] P. A. Cundall and O. D. L. Strack, "A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies" Géotechnique **29**, 47-65 (1979).
- [26] 辻裕「粉粒体流動のシミュレーション」流れの計測 **14**, 11-22 (1997).

- [27] T. Tanaka, T. Kawaguchi and Y. Tsuji, "Discrete Particle Simulation of Flow Patterns in Two-dimensional Gas Fluidized Beds" *Int. J. Modern Phys. B*, **7**, 1889-1898 (1993).
- [28] H. Y. Yoon, S. Koshizuka and Y. Oka, "A Particle-Gridless Hybrid Method for an Arbitrary Lagrangian Eulerian Calculation" *Proc. 6th Int. Conf. Nucl. Eng. (ICON-E-6)*, San Diego, May 10-15, 1998, ICONE-6231.
- [29] E. Meiburg, "Comparison of the Molecular Dynamics Method and the Direct Simulation Monte Carlo Technique for Flows Around Simple Geometries" *Phys. Fluids* **29**, 3107-3113 (1986).
- [30] C. W. Hirt and B. D. Nichols, "Volume of Fluid (VOF) Method for the Dynamics of Free Boundaries" *J. Comput. Phys.* **39**, 201-225 (1981).
- [31] J. C. Martin and W. J. Moyce, "An Experimental Study of the Collapse of Liquid Columns on a Rigid Horizontal Plate" *Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A*, **244**, 312-324 (1952).
- [32] H. E. Huppert, "The Propagation of Two-dimensional and Axisymmetric Viscous Gravity Currents over a Rigid Horizontal Surface" *J. Fluid Mech.* **121**, 43-58 (1982).
- [33] J. U. Brackbill, D. B. Kothe and C. Zemach, "A Continuum Method for Modeling Surface Tension," *J. Comput. Phys.* **100**, 335-354 (1992).

謝辞

本研究の実施に際し、飯田将雄博士に貴重な助言をいただきました。ここに記して感謝いたします。