

分置

冷却材温度ゆらぎ現象の解析的評価手法の開発(VIII)

— モンテカルロ直接法コードの開発 —

1994年4月

動力炉・核燃料開発事業団
大洗工学センター

複製又はこの資料の入手については、下記にお問い合わせください。

〒311-13 茨城県東茨城郡大洗町成田町4002

動力炉・核燃料開発事業団

大洗工学センター システム開発推進部・技術管理室

Enquires about copyright and reproduction should be addressed to: Technology Management Section O-arai Engineering Center, Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation 4002 Narita-cho, O-arai-machi, Higashi-Ibaraki, Ibaraki-ken, 311-13, Japan

動力炉・核燃料開発事業団 (Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation)

冷却材温度ゆらぎ現象の解析的評価手法の開発 (VIII)
～モンテカルロ直接法コードの開発～

要 旨

村松 壽晴*

サーマルストライピング現象を評価する場合には、時間的に不規則に変動する流体から構造への非定常熱伝達係数を定義する必要がある。しかしながら、このような時間的に不規則に変動する熱輸送挙動を解析的に取り扱うためには、流体中での温度ゆらぎ挙動の時系列評価に直接シミュレーションコードが必要であったように、構造材との相互作用を考慮した流体-構造系を対象とした微視的かつ直接的なアプローチが必要になる。

本研究では、分子運動論でのボルツマン方程式をモンテカルロ直接法により解く汎用コード THEMIS (Time-dependent Heat transfer Evaluation by Monte Carlo Direct Simulation) を開発して 2 次元ダクト流れ問題を用いた基本的検証を行い、以下の結果を得た。

- (1) Kn 数を連続流の条件である 0.0002 とした場合の分子流速分布は、Navier-Stokes 方程式による結果と良好な一致を示す。
- (2) 1500 個の計算セルを用いた計算において、ベクトル化による加速率 (VP-2600) として約 12 倍が得られた。

今後は、温度の異なる流体系での適用性、複雑形状下での適用性などについて検討を進めると共に、実験データを用いた詳細な検証作業を行う予定である。

*：大洗工学センター安全工学部原子炉工学室

Development of Analytical Model for Evaluating Temperature Fluctuation in Coolant (VIII)

~Development of a Monte Carlo Direct Simulation Code THEMIS~

Toshiharu MURAMATSU *

Abstract

Thermal striping phenomena are characterized by stationally random temperature fluctuations and observed in the region immediately above the core exit of LMFBRs due to the interactions of cold and hot sodium. To evaluate the phenomena, it is necessary to consider a time-dependent heat transfer coefficient to structures from fluid, in the same manner as a evaluation of a stationally temperature fluctuation in fluid.

For this purpose, a computer program THEMIS (Time-dependent Heat transfer Evaluation by Monte Carlo Direct Simulation) has been developed for the thermohydraulic analysis based on the Boltzmann equation. A two-dimensional duct flow problem has been solved to check the fundamental performance of the THEMIS code. The main results are as follows:

- (1) Axial distribution of molecular velocity U has shown good agreement with the solution of the Navier-Stokes equation under the condition of $Kn = 0.0002$.
- (2) An acceleration on the VP-2600 vector processor is about 12 times as the VP-2600 scalar processor.

Future works of the THEMIS code development are (1) investigation of the applicabilities in a non-isothermal fluid system and in a complex geometry system and (2) verification with detailed experimental results.

* : Reactor Engineering Section, Safety Engineering Division, OEC, PNC

冷却材温度ゆらぎ現象の解析的評価手法の開発 (VIII)

～ モンテカルロ直接法コードの開発 ～

目 次

第1章 緒 言	1
第2章 ボルツマン方程式の確率解法	3
2.1 準 備	3
2.2 支配方程式	3
2.3 モンテカルロ直接法	5
2.4 分子境界条件	7
2.5 ランダムサンプリング	9
第3章 2次元ダクト流れによる基本検証	10
3.1 計算条件	10
3.2 計算結果	10
3.3 検 討	12
3.3.1 一様算術乱数の統計的性質	12
3.3.2 Navier-Stokes 方程式解との比較	13
3.3.3 ベクトル演算性能	13
第4章 結 言	15
参考文献	16

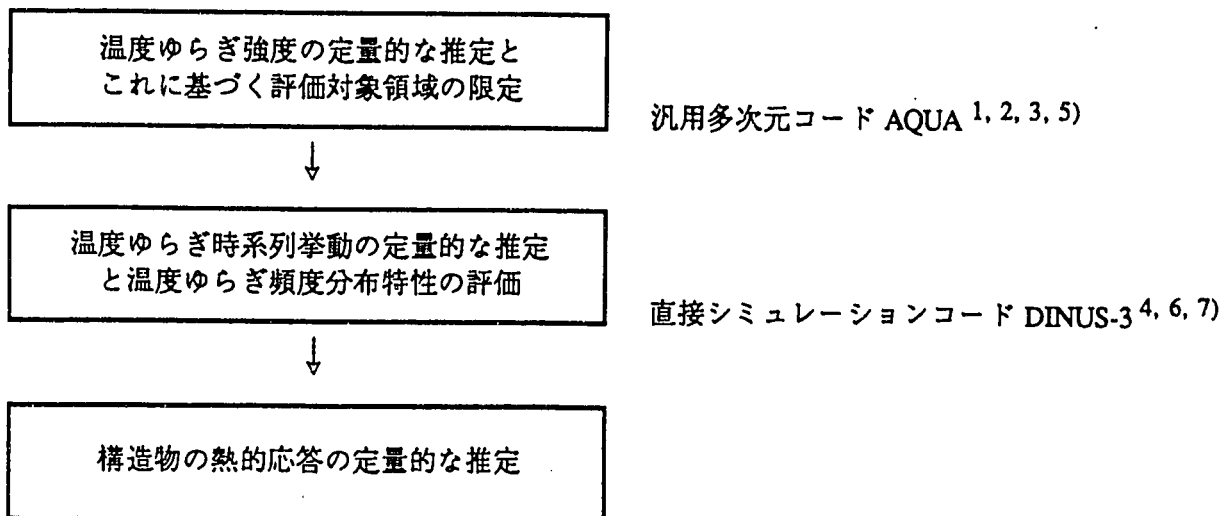
List of Figures

- Fig. 3. 1 Calculation Condition for Two-Dimensional Duct Flow With a MCDS Code
- Fig. 3. 2 Calculated Fields of Molecular velocity U , Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of $Kn = 0.2$
- Fig. 3. 3 Calculated Fields of Molecular velocity U , Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of $Kn = 0.02$
- Fig. 3. 4 Calculated Fields of Molecular velocity U , Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of $Kn = 0.002$
- Fig. 3. 5 Calculated Fields of Molecular velocity U , Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of $Kn = 0.0002$
- Fig. 3. 6 Calculated Fields of Molecular velocity U , Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of $Kn = 0.00002$
- Fig. 3. 7 Comparison of Instantaneous Axial Distributions of Molecular velocity U , Molecular Density and Molecular Temperature Under the Various Conditions of Knudsen Number
- Fig. 3. 8 Calculated Molecular Velocity U Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$
- Fig. 3. 9 Calculated Molecular Density Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$
- Fig. 3. 10 Calculated Molecular Temperature Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$
- Fig. 3. 11 Comparison of Molecular velocity U Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$ ($J = 10$)
- Fig. 3. 12 Comparison of Molecular velocity U Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$ ($J = 20$)
- Fig. 3. 13 Comparison of Molecular velocity U Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$ ($J = 30$)
- Fig. 3. 14 Comparison of Molecular velocity U Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$ ($J = 40$)
- Fig. 3. 15 Comparison of Molecular velocity U Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$ ($J = 50$)

第1章 緒言

高速炉の炉心出口近傍では、炉心構成要素毎の熱流力特性 (集合体発熱量、集合体流量) の違いから、炉心燃料集合体間あるいは炉心燃料集合体 - 制御棒集合体間などで冷却材に温度差が生じ、それらが混合する過程で不規則な温度ゆらぎ挙動が発生する。この温度ゆらぎを伴った冷却材が炉心上部機構各部 (整流筒、制御棒上部案内管、炉心出口温度計装ウエルなど) の表面近傍を通過すると、冷却材中の不規則な温度ゆらぎが構造材中に伝播し、その材料は高サイクル熱疲労を受ける (サーマルストライピング)。特に、冷却材として液体金属ナトリウムを使用する高速炉では、大きな熱伝導率を持つナトリウムの性質から、重大な熱疲労の発生が懸念されている。従来では、サーマルストライピングによる熱疲労の影響を実寸大ナトリウムモックアップ実験を通じて確認し、原子炉構造設計に反映させる手段が取られていた。しかしながら、このモックアップ実験にかかる費用と実験時間の節約、さらには設計の見直しを効率良く行うことを目的として、解析的評価手法の確立が原子炉設計側より強く求められている。また、原子炉工学室においても、従来より上記課題に対して、実証炉以降の原子炉構造設計では大型モックアップ実験に依ることなく解析的アプローチによる設計 (Design by Analysis) がなされるべきと主張してきているところである。この背景には、これまで原子炉構造設計の段階で、とかく受身になりがちであったサーマルストライピングに対する対策を、解析的評価手法を用いることによって積極的に原子炉設計に反映し、経済性を向上させようとする意図がある。

サーマルストライピングに対する評価を解析的手法のみによって完結するためには、原子炉構造物の熱疲労の程度を評価する上で不可欠となる、構造物表面での温度ゆらぎ挙動の時系列情報が必要となる。原子炉工学室では、現存する計算機能力との調和を考慮した以下に示す解析的評価手法と解析コードをこれまで開発し、その有効性を報告してきた。



上記解析的評価手法の特徴は、工学問題に一般的に用いられてきている汎用多次元コードの役割と直接シミュレーションコードの役割を明確に分離し、直接シミュレーションコードが計算機に要求する性能を可能な限り低減させていることにある。すなわち、汎用多次元コードに温度ゆらぎ強度の定量的な推定とこれに基づく評価対象領域の限定の役割を持たせることによってサーマルストライピング評価上の解析対象領域を狭め、これを受けて直接シミュレーションコードが境界層内での温度ゆらぎ減衰効果を考慮した温度ゆらぎ時系列挙動の推定と温度ゆらぎ頻度分布特性の評価を行うものである。これによって、評価すべき原子炉構造物表面での温度ゆらぎ挙動の時系列挙動を、現存する計算機能力の範囲内で得ることができ、構造物の定量的な熱的応答を推定することが可能となる。しかしながら、境界層による温度ゆらぎ減衰効果と構造物の熱容量を考慮した直接シミュレーションコードによる温度ゆらぎ時系列挙動の評価では、時間的に不規則に変動する温度ゆらぎ場における熱伝達係数を定義する必要が生じる。従来、工学問題を対象に用いられている熱伝達係数は、強制あるいは自然対流場における時間平均量として定義されていることから、サーマルストライピングで対象とするような境界層厚さや温度差が時間的に不規則に変動する挙動の評価には用いることができない。このような時間的に不規則に変動する熱量輸送を取り扱うためには、流体中での温度ゆらぎ時系列挙動の評価に直接シミュレーションコードが必要であったように、構造物との相互作用を考慮した流体 - 構造系を対象とした微視的かつ直接的なアプローチが不可欠となる。

本報では、流体と構造物との相互作用を微視的に取り扱えるようにするため、新たに開発を行った分子運動論でのボルツマン方程式 (Boltzmann Equation) をモンテカルロ直接法 (Monte Carlo Direct Simulation Method; MCDS 法)⁸⁾ により解く汎用コード THEMIS (Time-dependent Heat transfer Evaluation by Monte Carlo Direct Simulation) の数値計算法と基本検証結果について述べる。この MCDS 法は、もともと低密度の希薄気体流の解析手法として発展してきた経緯を持つものである。しかしながら、昨今の計算機能力の飛躍的な向上によって、現在では連続流、すなわち Navier-Stokes 方程式 (ボルツマン方程式の摂動解に相当) の解析も可能になりつつある。MCDS 法の特徴は、従来の差分法などと異なり、偏微分方程式についての知識は全く不要で、単に分子の位置と速度をある確率法則に従って時々刻々決定してゆくだけで求解が可能な点にある。また、境界条件についても、境界壁に入射した分子の反射法則をモデル化するだけでその規定が可能で、差分法などでの取り扱いに比べて極めて取り扱いが容易なことにある。

第2章 ボルツマン方程式の確率解法

2.1 準備

流れ場の希薄度は、(2.1)式により定義されるクヌーゼン数 (Knudsen number) K_n で表される。

$$K_n = \frac{\lambda}{L} \quad (2.1)$$

ここで、 λ は注目分子が他の分子との衝突から次の衝突までに移動した距離の平均値、すなわち平均自由行程、 L は代表長さである。 K_n 数と流れ場の希薄度との関係は、一般的に次のように規定される。

$$K_n < 10^{-2} \quad : \text{連続流}$$

$$10^{-2} < K_n < 10 \quad : \text{中間流}$$

$$K_n > 10 \quad : \text{希薄流}$$

自由平均行程 λ は、(2.2)式で表される。

$$\lambda = \frac{k \cdot T}{\sqrt{2} \pi d^2 \cdot P} \quad (2.2)$$

ここで、 k はボルツマン定数 ($= 1.38 \times 10^{-23}$ [J/K])、 T は絶対温度、 d は分子直径、 P は圧力である。また、粘性係数 μ と平均自由行程 λ の間には、(2.3)式の関係が成立する。

$$\mu = \rho \lambda \sqrt{\frac{2RT}{\pi}} \quad (2.3)$$

ここで、 ρ は密度 ($= m n$)、 R は単位質量当りの気体定数 ($= k / m$)、 m は分子1個の質量、 n は 1 cm^3 に含まれる分子数 (数密度) である。

2.2 支配方程式⁹⁾

数密度 n は、位置ベクトルを x とすると $n(x)$ と記述でき、これは点 x を含む単位体積中に含まれる分子数を表す。この n 個の分子速度 c は全て異なる。 c の直角座標成分を (c_1, c_2, c_3) とする。また、流れ場の1点 x を含む体積 $dx = dx_1 dx_2 dx_3$ の中にある分子個数は、 $n(x) dx$ である。ここで、流れ場 (物理空間) を等しい体積 dx のセルに分割すると、 $n(x)$ の分布を把握することができる。このセルに含まれる n 個の分子について、速度ベクトル c の先端を c_1, c_2, c_3 を座標軸とする速度空間を考える。更に、速度空間のあるベク

トル c の先端に体積 $dc = dc_1 dc_2 dc_3$ の直方体を考える。このセル中の密度は、 n と dc に比例することから、比例定数を f とすると $f n dc$ と記述できる。つまり、 $f n dc$ は、 n 個の分子の内、速度 c の成分が $c_1 \sim c_1 + dc_1$ 、 $c_2 \sim c_2 + dc_2$ 、 $c_3 \sim c_3 + dc_3$ の間にある分子の個数を表していることになる。ここで、 f は速度分布関数であり、速度空間の位置によって変化するから c の関数である。速度空間の全てのセル内の点を加えると、 n に等しくなければならない、(2.4) 式を要求する。すなわち、

$$\int \int \int n f dc_1 dc_2 dc_3 = n \quad (2.4)$$

である。これより、 f は規格化の条件として、

$$\int f dc = 1 \quad (2.5)$$

を満たすことになる。

一般的に、 n は時間 t によっても変化する。すなわち、 $n(x, t)$ と記述できる。速度分布関数 f は、 $n(x, t)$ 個の分子の速度に関する情報であることから、 n が x と t に依存すれば、当然 f も x と t に依存することになる。したがって、 $n(x, t) f(c, x, t) dc dx$ は、時刻 t で物理空間の点 x を含む体積 dx の中にあって、速度ベクトルが速度空間の点 c を含む体積 dc に入る分子の数を表す。このような分子の数を支配する方程式が、次のボルツマン方程式である。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(n f(c, x, t))}{\partial t} + c \cdot \frac{\partial(n f(c, x, t))}{\partial x} \\ & = n^2 \int \int [f(c', x, t) f(\zeta', x, t) - f(c, x, t) f(\zeta, x, t)] g \sigma d\Omega d\zeta \end{aligned} \quad (2.5)$$

(2.5) 式において、速度 c' および ζ' は、速度 c および ζ を持つ一対の分子の衝突後の速度であり、これらは衝突前の速度 c および ζ と 2 つの角 χ および ε の関数¹⁰⁾ となる。すなわち、

$$c' = c + \frac{1}{2}[g(1 - \cos \chi) + h \sin \chi] \quad (2.6 a)$$

$$\zeta' = \zeta + \frac{1}{2}[g(1 - \cos \chi) + h \sin \chi] \quad (2.6 b)$$

である。ここで、 g は衝突前の相対速度であり、

$$g = \zeta - c \quad (2.7)$$

と定義される。また、 h の直角座標成分は、

$$h_1 = \sqrt{g^2 - g_1^2} \cos \epsilon \quad (2.8 a)$$

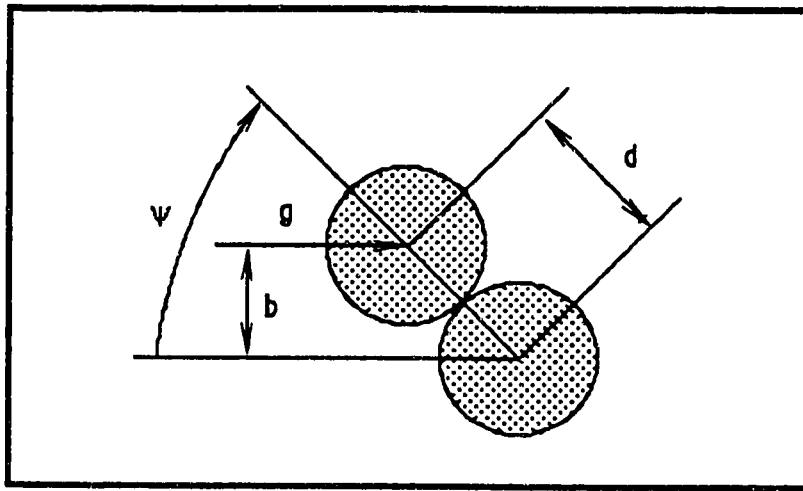
$$h_2 = - \frac{g_1 g_2 \cos \epsilon + g g_3 \sin \epsilon}{\sqrt{g^2 - g_1^2}} \quad (2.8 b)$$

$$h_3 = - \frac{g_1 g_3 \cos \epsilon + g g_2 \sin \epsilon}{\sqrt{g^2 - g_1^2}} \quad (2.8 c)$$

である。(2.5) 式中の $d\Omega$ は $\sin \chi d\chi d\epsilon$ であり、 $\sigma d\Omega$ は微分断面積である。ここで、 σ は、

$$\sigma = \frac{b}{\sin \chi} \left| \frac{\partial b}{\partial \chi} \right| \quad (2.9)$$

で定義される。ここで、 b は衝突径数であり、下図のように定義する。

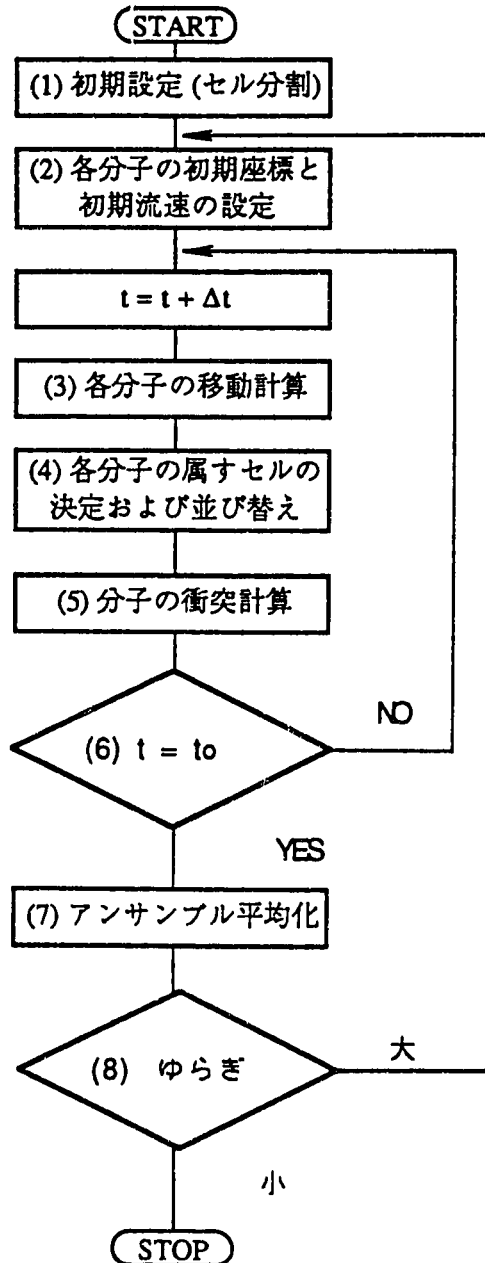


一般に、 χ は b と g の関数であり、その関数形は2つの分子の間に働く力の法則によって決定される。例えば、 g が増すと分子間力の働く時間が短くなるため、 χ は小さくなる。 $b \rightarrow \infty$ では分子間力が働かないため $\chi \rightarrow 0$ となり、 $b \rightarrow 0$ では2つの分子が正面衝突するため $\chi \rightarrow \pi$ となる。

2.3 モンテカルロ直接法

MCDS 法は、速度分布関数を有限個のシミュレーション分子で表現し、各分子を分子運動、分子間衝突および固体壁との干渉を通して時間ステップ Δt 間で一斉に追跡することにより、時刻 t の速度分布関数から時刻 $t + \Delta t$ のそれを求める方法である。なお、MCDS 法は、従来のモンテカルロ法と同様に3体以上の衝突を無視すると共に、Bird¹¹⁾により導入された「分離の原理 (the principle of uncoupling)」を基礎としている。この原理は、分子が平均自由行程を移動するのに要する時間を平均自由時間と定義すると、時間ステップ

Δt を平均自由時間よりも十分に小さく選定すれば、分子の移動と衝突とを分離して取り扱うことが許されるというものである。この原理の基に、MCDS法では、全ての分子を時間ステップ Δt 間自由に移動させ、次に分子の位置を固定させて分子間衝突を計算する手順が取られる。以下に、非定常計算を行う場合のフローチャートを示す。



分子の衝突計算では、各セル単位で独立に計算（次節参照）し、衝突した分子に対してはその速度を衝突後の速度に置き換える操作を行う。ただし、セル内での衝突パラメータ（衝突後の速度成分など）の決定や衝突分子ペアの選択は一様乱数を用いて行うため、衝突計算ではセル内における分子の位置は全く考慮する必要はない。このような分子の移動と衝突の計算を交互に行いながら時間を進め、定期的に各セル内での巨視的な物理量（圧力、密度、温度、巨視的速度）を計算する。なお、MCDS法は確率解法であることから、巨視的な物理量は常に平均値の回りで変動する。このため、一様乱数に起因したゆらぎを抑制するため、平均化処理としてアンサンブル平均を行う。

2.4 分子境界条件

分子と干渉を起こす境界として、固体壁、対称軸および流出入境界の3種類を考える。

(1) 固体壁境界

(i) 鏡面反射モデル

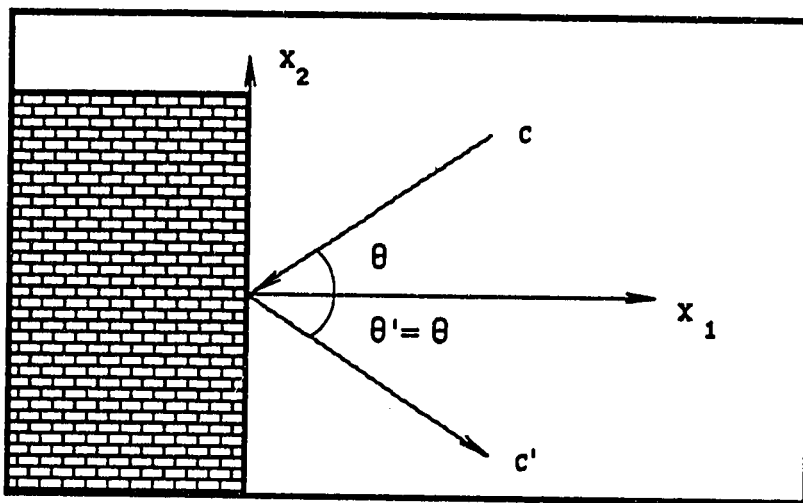
分子の速度成分の内、壁表面に対する垂直方向成分を反転させ、接線方向成分はそのまま維持する(下図参照)。すなわち、

$$c_1' = -c_1 \tag{2.10 a}$$

$$c_2' = c_2 \tag{2.10 b}$$

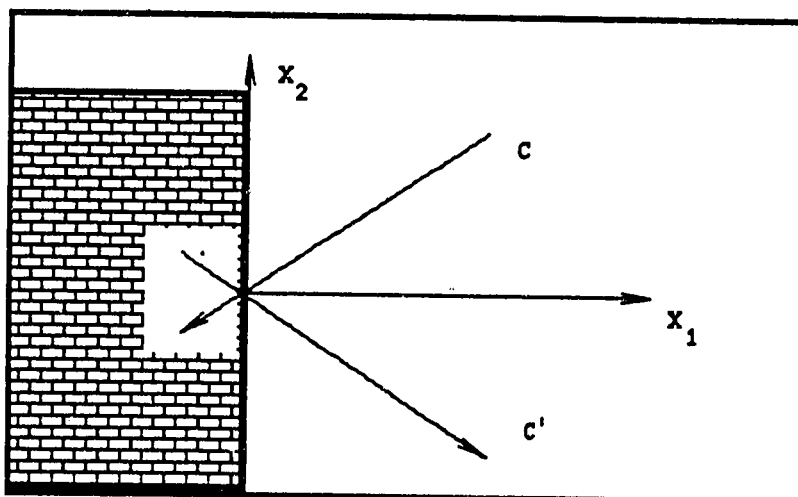
$$c_3' = c_3 \tag{2.10 c}$$

とする。



(ii) 拡散反射モデル

反射後の分子の速度ベクトルを、全くランダムなものとする(下図参照)。反射分子の速度は、壁表面から温度 T_f で放出される半面マクスウェル分布 (half-range equilibrium Maxwellian distribution) を取る。



反射分子の温度 T_r は、壁温 T_w と異なる値を取ることを許し、この温度差の程度は、適応係数 α を導入することにより次のように定義する。

$$\alpha = \frac{q_i - q_r}{q_i - q_w} \quad (2.11)$$

ここで、 q_i は入射分子のエネルギー束、 q_r は反射分子のエネルギー束、 q_w は等温度条件で拡散反射した場合の分子のエネルギー束である。

反射分子の速度を規定する反面マクスウェル分布は、次式により規定する。

$$f_v = 2 \frac{v}{C_m^2} \exp\left(-\frac{1}{C_m^2} v^2\right) \quad (2.12)$$

$$C_m = \sqrt{2RT_r}$$

ここで、速度成分 v は、一様乱数 R^* を用いて次のように定義する。

$$v = C_m (-\ln R^*)^{0.5} \quad (2.13)$$

(iii) 付着モデル

固体壁に入射する分子の数に対して、固体壁に吸着する分子の数の比率が付着確率として定義されるが、本研究で対象とする固体壁が研磨度の高い金属面であることから付着確率を零と仮定する。

(2) 対称軸境界

流れ場の対称面を考える場合の境界モデルであり、本研究では固体壁鏡面反射モデルを使用する。

(3) 流出入境界

解析の対象となる領域の上流側および下流側の流れが、一様な速度を持つ平衡状態と仮定したモデルを適用する。この場合に必要となる境界条件は、(i) 分子流入速度、(ii) 分子流入個数および (iii) 分子流入位置である。

(i) 分子流入速度

一様な流速 U の流れに対し、これに垂直な断面を通過して流入する分子の速度 $C(u, v, w)$ の確率密度 $f_{in}(C)$ は、次式で表される。

$$f_{in}(C) = \frac{2u}{\pi C_m^4 K(U/C_m)} \exp\left\{-\frac{1}{C_m^2} [(u-U)^2 + v^2 + w^2]\right\} \quad (2.14)$$

ここで、

$$K(s) = \exp(-s^2) + \sqrt{\pi} \cdot s [1 + \text{erf}(s)] \quad (2.15)$$

であり、 erf は誤差関数を表す。この確率密度に従う分子速度 $C(u, v, w)$ のそれぞれ

れの速度は、次式のマクスウェル分布から規定する。

$$u = C_m (-\ln R_1^*)^{0.5} \cos(2\pi R_2^*) \quad (2.16 a)$$

$$v = C_m (-\ln R_1^*)^{0.5} \sin(2\pi R_2^*) \quad (2.16 b)$$

$$w = C_m (-\ln R_3^*)^{0.5} \cos(2\pi R_4^*) \quad (2.16 c)$$

(ii) 分子流入個数

流入分子の個数 N_{in} は、時間ステップ Δt 間における単位断面積当りの個数として次式で与える。

$$N_{in} = \frac{n C_m}{2\sqrt{\pi}} K(U/C_m) \cdot \Delta t \quad (2.17)$$

ここで、 n は、上流または下流における分子数密度である。

(iii) 分子流入位置

上流側から時間ステップ Δt 間に流入してくる分子は、上流側の任意の位置から飛んでくると仮定し、上流側境界では分子の位置と時間ステップに一様乱数を用いてランダムな値を与える。すなわち、上流側境界 $x = x_0$ での分子の位置と時間ステップ Δt_r は、2個の一様乱数 R_1^* および R_2^* を用いて以下のように与える。

$$\Delta t_r = \Delta t \cdot R_1^* \quad (2.18)$$

$$x = x_0, y = H \cdot R_2^* \quad (2.19)$$

2.5 ランダムサンプリング

流れ場中のサンプル分子の座標 x_i と速度 C_i から、巨視的な物理量を算出する。まず、基準体積 dx_∞ を考え、この中に N_∞ 個のサンプル分子を置く。数密度 n_∞ は N_∞/dx_∞ に比例することから、体積 dx の任意セルに N 個のサンプル分子が存在するとすれば、数密度 n は次の関係より求められる。

$$\frac{n}{n_\infty} = \frac{N dx_\infty}{N dx} \quad (2.20)$$

ここで、あるセルに N 個のサンプル分子が存在する場合を考え、分子の速度を c_1, c_2, \dots, c_N とすると、巨視的な流速および温度は次式のようにになる。

$$V = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i \quad (2.21)$$

$$T = \frac{N}{3R(N-1)} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i^2 - V^2 \right) \quad (2.22)$$

第3章 2次元ダクト流れによる基本検証

3.1 計算条件

本章では、Fig. 3.1 に示す 2次元ダクト内剛体球の非定常流を計算する。ノズルの下流側長さは、入口高さ h を基準として 6 倍 ($L = 6h$) とする。x 方向の計算セル分割では、密度の低下する下流方向でセル長が大きくなるように、

$$x_i = \frac{\exp(0.04 i) - 1}{\exp(0.04 I) - 1} L \quad (i = 0, 1, \dots, 30) \quad (3.1)$$

とする。ここで、 $x_0 = 0$, $x_I = L$ である。一方、y 方向については、等間隔でセル分割する。以下に、計算ケースをまとめる。

		Knudsen Number, Kn				
		Quasi-Continuous Flow		Continuous Flow		
		0.2	0.02	0.002	0.0002	0.00002
Number of Cell in y-Direction	10				Case - 6	
	20				Case - 7	
	30	Case - 1	Case - 2	Case - 3	Case - 4	Case - 5
	40				Case - 8	
	50				Case - 9	

初期条件 ($t=0$) は、以下を仮定する。すなわち、ダクト内は密度 ρ_0 および温度 T_0 で一様であり、各計算セルに 100,000 個の剛体分子を均質に配置する。ここで、計算セル j 内の分子の y 座標を、

$$y = y_i + \left(R^* - \frac{1}{2}\right) \Delta y \quad (3.2)$$

とする。ここで、 y_i は計算セル重心の座標、 Δy は y 方向の計算セル幅である。一方、各剛体分子の速度は、マクスウェル分布 (2.16) に従うものとする。

3.2 計算結果

y 方向計算セル数を 30 に固定し、Kn 数を 0.2 から 0.00002 に変化させた場合 (Cases 1 - 5) の、x 方向分子流速、分子濃度および分子温度の空間分布 ($t = 70$ 秒) を Fig. 3.2 - Fig. 3.6 に示す。なお、各図中の結果は、入口断面における各諸量で規格化を施した (3.3 式)。

$$U^* = U / U_{IN} \quad (3.3 a)$$

$$\rho^* = \rho / \rho_{IN} \quad (3.3 b)$$

$$T^* = T / T_{IN} \quad (3.3 c)$$

また Fig. 3. 7 に、出口断面における x 方向分子流速、分子濃度および分子温度の瞬時垂直分布を示す。図中に示した 1 から 5 の番号は、計算ケースに対応する。

Fig. 3. 2 - Fig. 3. 6 に示した結果より分かる通り、Kn 数が低下し、連続流 ($Kn < 0.02$) の条件範囲に入るようになると、各状態量の空間分布の乱れ (ゆらぎ) が大きくなる。これは、Kn 数が小さく、連続流に近づく程、分子間衝突の割合が増加したためであると解釈できる。また、x 方向分子流速の空間分布の変化より分かる通り、Kn 数が比較的大きく、中間流の条件範囲では、固体壁による分子流速減衰の影響が対称面にまで連続的に及んでいるのに対し、Kn 数が小さく、連続流の条件範囲においては、その影響は固体壁近傍のみに限定される。これは、Kn 数が増加するに従い、シミュレーション分子が起こす分子間衝突の割合が、固体壁間衝突の割合を上回るようになるためであると解釈できる。以上に示した傾向は、Fig. 3. 7 に示した各状態量の瞬時垂直分布より明かである。すなわち、x 方向分子流速分布について言えば、Kn 数が増加して連続流条件になるに従い、固体壁による減衰効果が固体壁近傍に限定されるようになる。一方、固体壁から離れた領域では、分子間衝突による不規則挙動が支配的となり、そのゆらぎが大きなものとなる。

Fig. 3. 8 - Fig. 3. 10 に、Kn 数を 0.0002 とした場合 (Case - 4) の出口断面における各状態量ゆらぎの垂直分布を示す。各図中に示した Contour 図は、Fig. 3. 5 に示した 70 秒時点での結果であり、各状態量ゆらぎの垂直分布図は、60 秒から 70 秒までの 10 秒間におけるゆらぎ範囲である。なお、各状態量のサンプリングは 0.1 秒間隔で行っていることから、各垂直位置でのサンプリング点数は 100 点となる。まず、Fig. 3. 8 に示した x 方向分子流速のゆらぎ分布では、固体壁に隣接する領域 (0.9 - 1.0) と対称面に近い領域 (0.0 - 0.8) でゆらぎ幅が大きく、この両者に挟まれた領域 (0.8 - 0.9) でゆらぎ幅が若干小さくなっている。これは、固体壁に隣接する領域では分子の固体壁間衝突が優勢であり、対称面に近い領域では、分子間衝突が優勢であることに起因してゆらぎ幅が大きくなったものと解釈できる。一方、両者に挟まれた領域では、固体壁間衝突の影響と分子間衝突の影響が伝播する過程で、それぞれのゆらぎが相殺された結果であると考えられる。Fig. 3. 9 に示した分子濃度の分布では、垂直方向に大きなゆらぎの分布は発生していない。これは、ここで対象とした流れが連続流の条件範囲に含まれ、分子が比較的密に分布しているためであると判断できる。すなわち、入口境界での分子流入は均質を仮定しており、また平均自由行程が短いことから、体系内の分子は上流側から押し出されるためであると考えられる。したがって、体系内の分子密度は垂直方向に分布が発生せず、またゆらぎの大きさも垂直位置に依存しないものとなる。Fig. 3. 10 に示した分子温度の分布は、固体壁に隣接する領域で若干分子温度が上昇しているが、これは固体壁温を入口境界での流入分子温度よりも 10% 大きく設定したことに起因する。

3.3 検 討

3.3.1 一様算術乱数の統計的性質

ここでは、MCDS 法の計算に用いた一様算術乱数の統計的性質について検討する。本報では、長周期の乱数列を効率良く発生させることが可能な Fibonacci 法を採用している。この方法は、線形漸化式

$$x_{n+1} = a_0 x_n + a_1 x_{n-1} + \dots + a_j x_{n-j} + b \pmod{P} \quad (4.1)$$

によって乱数列を発生させる方法の内、下式による最も簡単な方法に相当するものである。

$$x_{n+1} = x_n + x_{n-1} \pmod{P} \quad (4.2)$$

ここで、 $\text{mod } P$ は、 P の整数倍の値を取り除く操作を表す。したがって、 x_{n+1} の値は、常に P よりも小さい値を取ることになる。なお、 P は、2 バイトの計算機語長で表現し得る最大の整数値 (32767) に 1 を加えた値とした。つまり、32767 を越えた値は、桁溢れとして無視したことと同等になる。計算過程では、Fibonacci 法により生成した乱数列を 1 に規格化し、 $0 < R^* < 1$ の範囲の乱数列として使用する。

以下に、発生する乱数列の個数 N を変化させた場合の統計的性質を示す。

	Mean E	Variance σ^2	Standard Deviation σ	Root-Mean-Square
	Eq. (4. 3)	Eq. (4. 4)	Eq. (4. 5)	Eq. (4. 6)
10^1	0.59253	0.11302	0.33641	0.67526
10^2	0.51024	0.08626	0.29643	0.58443
10^3	0.48879	0.08472	0.29040	0.56792
10^4	0.50042	0.08443	0.29066	0.57849
10^5	0.50021	0.08354	0.28904	0.57765
10^6	0.50003	0.08324	0.28844	0.57762
10^∞	0.5	0.083333	0.288687	0.57735

$$E(x) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n \quad (4.3)$$

$$\sigma^2 = E x^2 - \{E(x)\}^2 \quad (4.4)$$

$$\sigma = \sqrt{\sigma^2} \quad (4.5)$$

$$\text{rms} = \sqrt{E(x^2)} \quad (4.6)$$

以上に示した結果より、発生する乱数列の個数を 10^5 以上とした場合、モンテカルロ計算に必要な一様性の条件を満たすようになることが分かる。

3.3.2 Navier-Stokes 方程式解との比較

Kn 数を連続流条件範囲に含まれる 0.0002 に固定し、y 方向計算セル数を 10 から 50 まで変化させた場合 (Cases - 6, - 7, - 4, - 8 and - 9) の、出口境界における x 方向分子流速の垂直分布を Navier-Stokes 方程式解と Fig. 3.11 - Fig. 3.15 に比較する。なお、Navier-Stokes 解は、大気圧条件下での空気の音速 (336.3 m/s at 280 K) を入口境界条件として AQUA コード (圧縮性効果無視) により求めたものである。結果より分かる通り、本研究で開発した MCDS 法による結果は、固体壁近傍以外の領域で若干の統計的な過大評価傾向を与えるものの、固体壁近傍領域に発生する流速低下挙動を的確に捉えている。なお、この固体壁近傍での挙動は、y 方向計算セル数の大小によって局所解像度に差異が現れるものの、同位置での分子流速絶対値は大きく変化していない。すなわち、軸方向位置 0.95 に着目した場合、y 方向の計算セル数を 10、30、50 とした結果は概ね等しくなる。このことは、差分法を用いた計算で大きな問題となるメッシュ効果が、MCDS 法を用いる場合には無視できる程度に小さいものであることを裏付けている。固体壁近傍以外の分子間衝突が顕著となる領域においては、ゆらぎ幅に大きな差が発生しているものの、y 方向計算セルを 40 以上とすることで概ね同一の結果が得られることが分かる。

3.3.3 ベクトル演算性能

MCDS 法コードで最も計算時間のかかる処理は、(1) 境界との干渉および (2) 分子衝突ペアの抽出である。境界との干渉計算は、分子番号についての DO ループであり、各種の速度を持つ分子に対して、時間ステップ間にそれぞれ異なる回数でさまざまな境界との干渉・反射や通過を計算するものである。衝突ペアの抽出計算は、計算セル番号の DO ループであり、棄却法により衝突ペアを抽出するため、一様乱数を発生させるための試行回数は、それぞれのペアに対して大きなばらつきが存在する。本研究で開発した MCDS 法コードでは、ベクトル演算性能の向上を図るため、DO ループ内の IF 文の数を減少させることを念頭にベクトル化コーディングを行った。

以下に、計算セル数を変化させた場合の 1 時間ステップ当りのベクトル演算性能をまとめる。

Number of Cells	Knudsen Number	VP-2600 Scalar (s)	VP-2600 Vector (s)	Vectorized Ratio (%)	Acceleration Ratio (S/V)	Note
300	0.0002	0.61	0.088	88.3	6.93	
600		1.29	0.145	88.8	8.85	
900		1.94	0.188	91.7	10.3	
1200		2.32	0.209	92.6	11.1	
1500		3.22	0.259	93.2	12.4	

上に示したように、計算セル数を増加させるに従いベクトル長が増すため、ベクトル化による加速率が向上している。なお、各計算条件でのベクトル化率が 88 % 以上となり、十分なベクトル化が行われたことを示している。なお、今回計算を行った最大計算セル条件では、ベクトル化による加速率が約 12 倍となり、MCDS 法を含む粒子系コードがベクトル計算機に適していることが分かる。

第4章 結 言

サーマルストライピング現象の評価で必要となる流体から構造への非定常熱伝達挙動を解析的に評価できるようにするため、ボルツマン方程式をモンテカルロ直接法により解く汎用コード THEMIS (Time-dependent Heat transfer Evaluation by Monte Carlo Direct Simulation) を開発し、2次元ダクト流れ問題により基本検証を行った。この結果、以下の点が明らかとなった。

- (1) Kn 数を連続流の条件である 0.0002 とした場合の分子流速分布は、Navier-Stokes 方程式による結果と良好な一致を示す。
- (2) 1500 個の計算セルを用いた計算において、ベクトル化による加速率 (VP-2600) として約 12 倍が得られた。

今後は、温度の異なる系での適用性、複雑形状下での適用性などについて検討を進めると共に、実験データを用いた詳細な検証作業を行う予定である。

参考文献

- 1) 村松 壽晴、二ノ方 壽、冷却材温度ゆらぎ現象の解析的評価手法の開発 (I)、温度ゆらぎ強度評価手法の開発、PNC N9410 90-029 (1990)
- 2) 村松 壽晴、二ノ方 壽、冷却材温度ゆらぎ現象の解析的評価手法の開発 (II)、温度ゆらぎ強度評価手法の検証と実機体系予備解析、PNC N9410 91-119 (1991)
- 3) 松本 英一、もんじゅ性能試験結果を用いた AQUA コードの検証、実炉におけるサーマルストライピング現象の解析、PNC PJ9383 94-002 (1994)
- 4) 村松 壽晴、冷却材温度ゆらぎ現象の解析的評価手法の開発 (IV)、直接シミュレーションによる温度ゆらぎ周期評価手法の開発、PNC N9410 92-105 (1992)
- 5) 村松 壽晴、冷却材温度ゆらぎ現象の解析的評価手法の開発 (V)、高速原型炉「もんじゅ」におけるサーマルストライピング条件の解析的検討、PNC N9410 92-363 (1992)
- 6) 村松 壽晴、冷却材温度ゆらぎ現象の解析的評価手法の開発 (VI)、直接シミュレーションによる温度ゆらぎ周期評価手法の検証、近日発行 (1994)
- 7) 村松 壽晴、冷却材温度ゆらぎ現象の解析的評価手法の開発 (VII)、温度ゆらぎ低減化方策の解析的検討、近日発行 (1994)
- 8) Nanbu, K., Direct Simulation Scheme Derived from the Boltzmann Equation, Journal of Physics Society of Japan, 49: 2042-2049 (1980)
- 9) Reif, F., Berkeley Physics Course Volume 5, Statistical Physics, McGraw-Hill (1965)
- 10) Vincenti, W. G. and Kruger, C. H., Jr., Introduction to Physical Gas Dynamics, John Wiley & Sons (1967)
- 11) Bird, G. A., Molecular Gas Dynamics, Oxford University Press (1976)

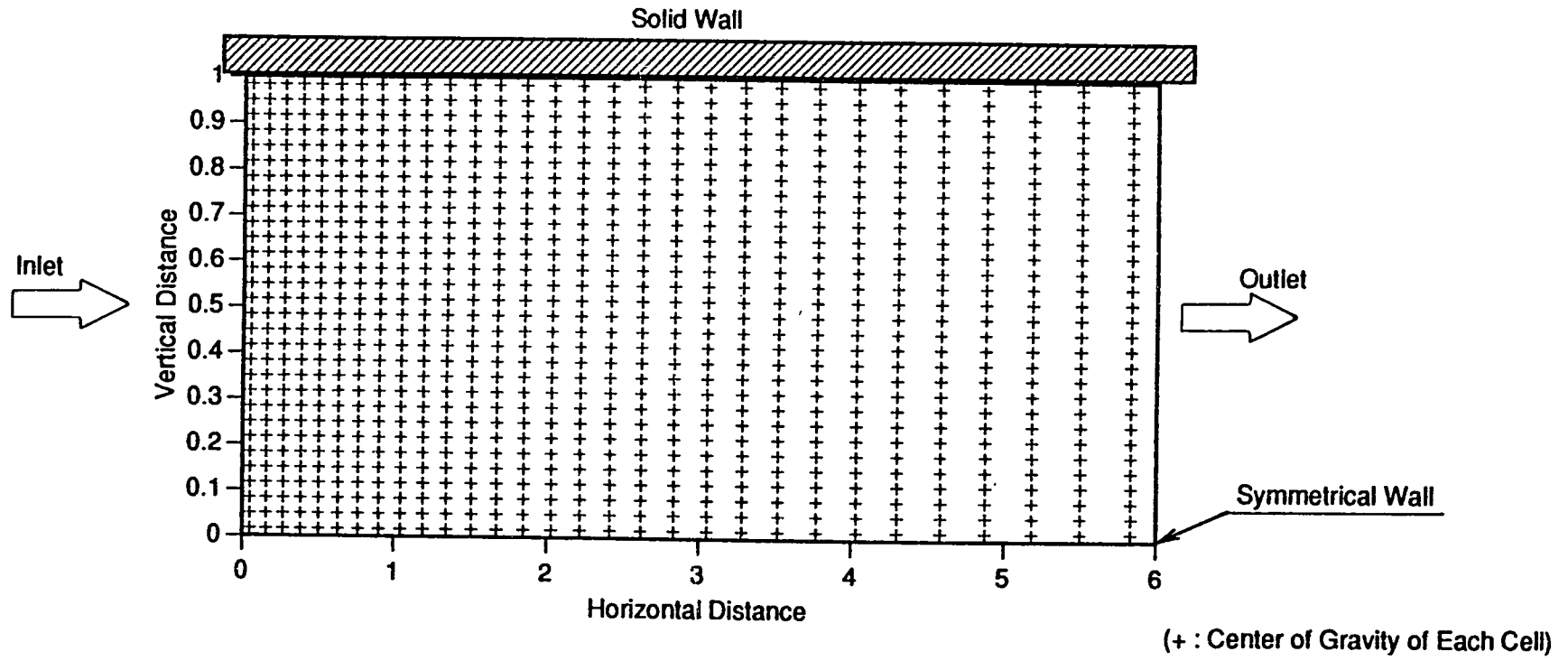


Fig. 3.1 Calculation Condition for Two-Dimensional Duct Flow With a MCDS Code

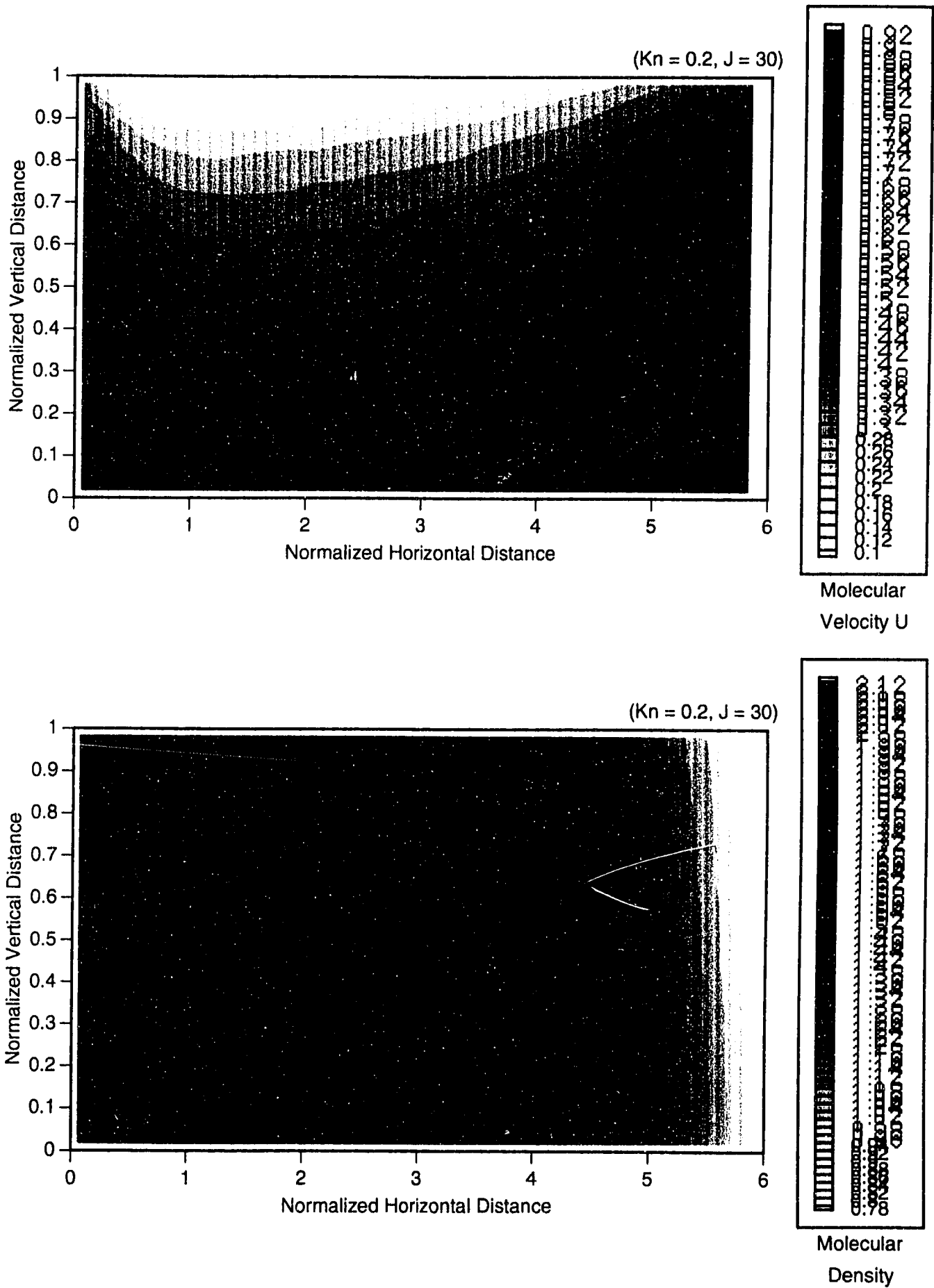


Fig. 3.2 Calculated Fields of Molecular Velocity U, Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of $Kn = 0.2$ ($1/2$)

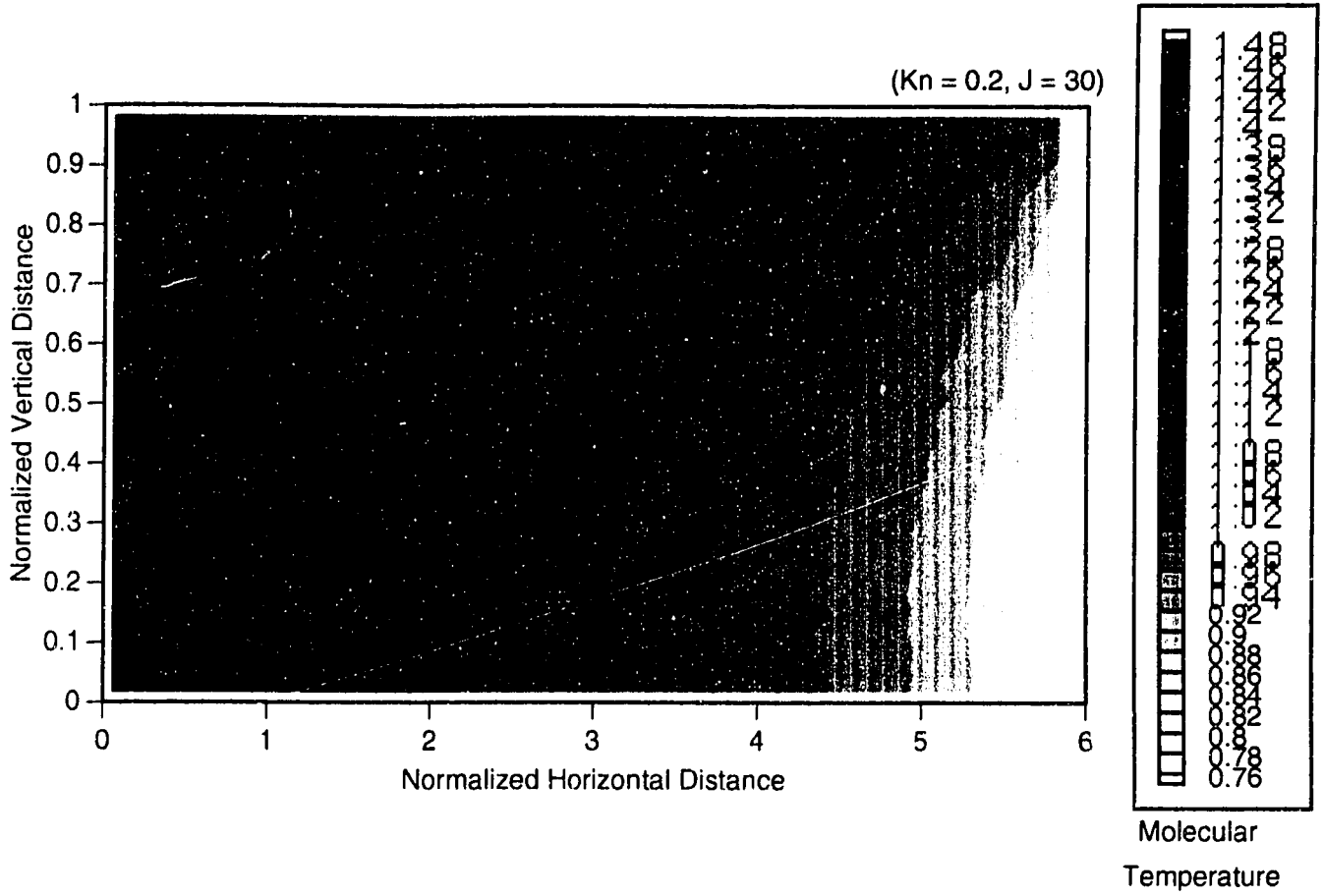


Fig. 3.2 Calculated Fields of Molecular Velocity U, Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of Kn = 0.2 (2/2)

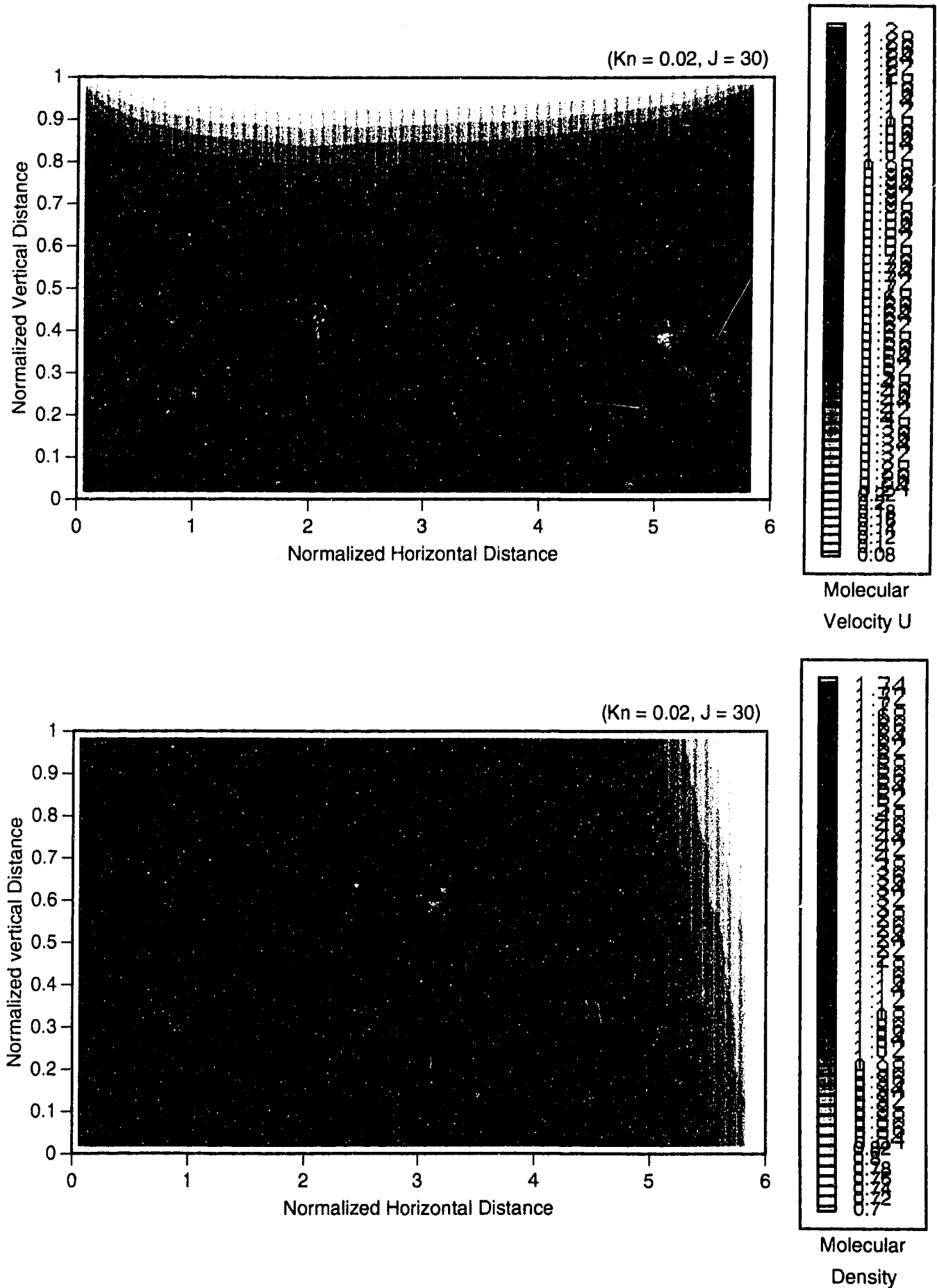


Fig. 3.3 Calculated Fields of Molecular Velocity U, Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of $Kn = 0.02$ (1/2)

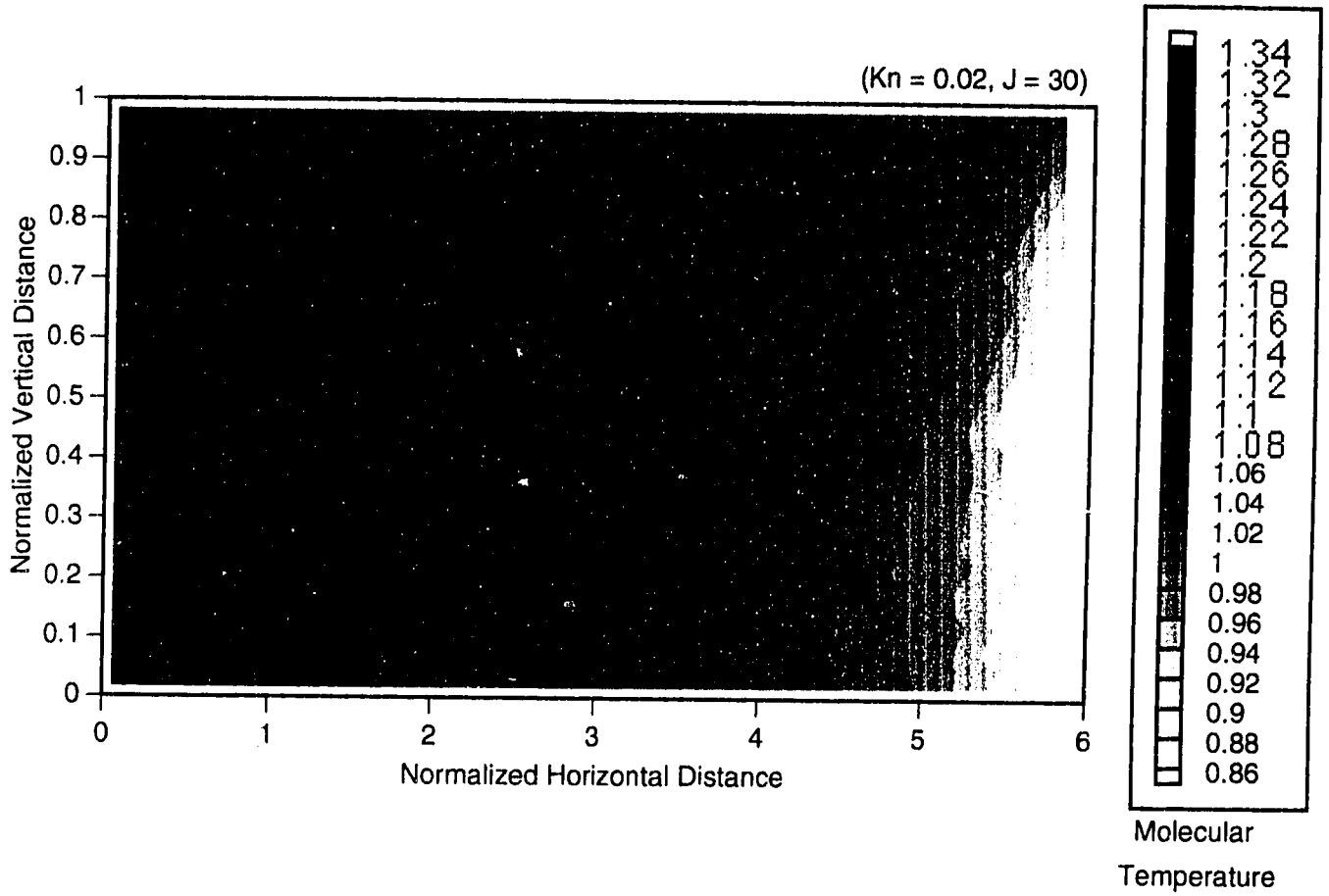


Fig. 3.3 Calculated Fields of Molecular Velocity U, Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of Kn = 0.02 (2/2)

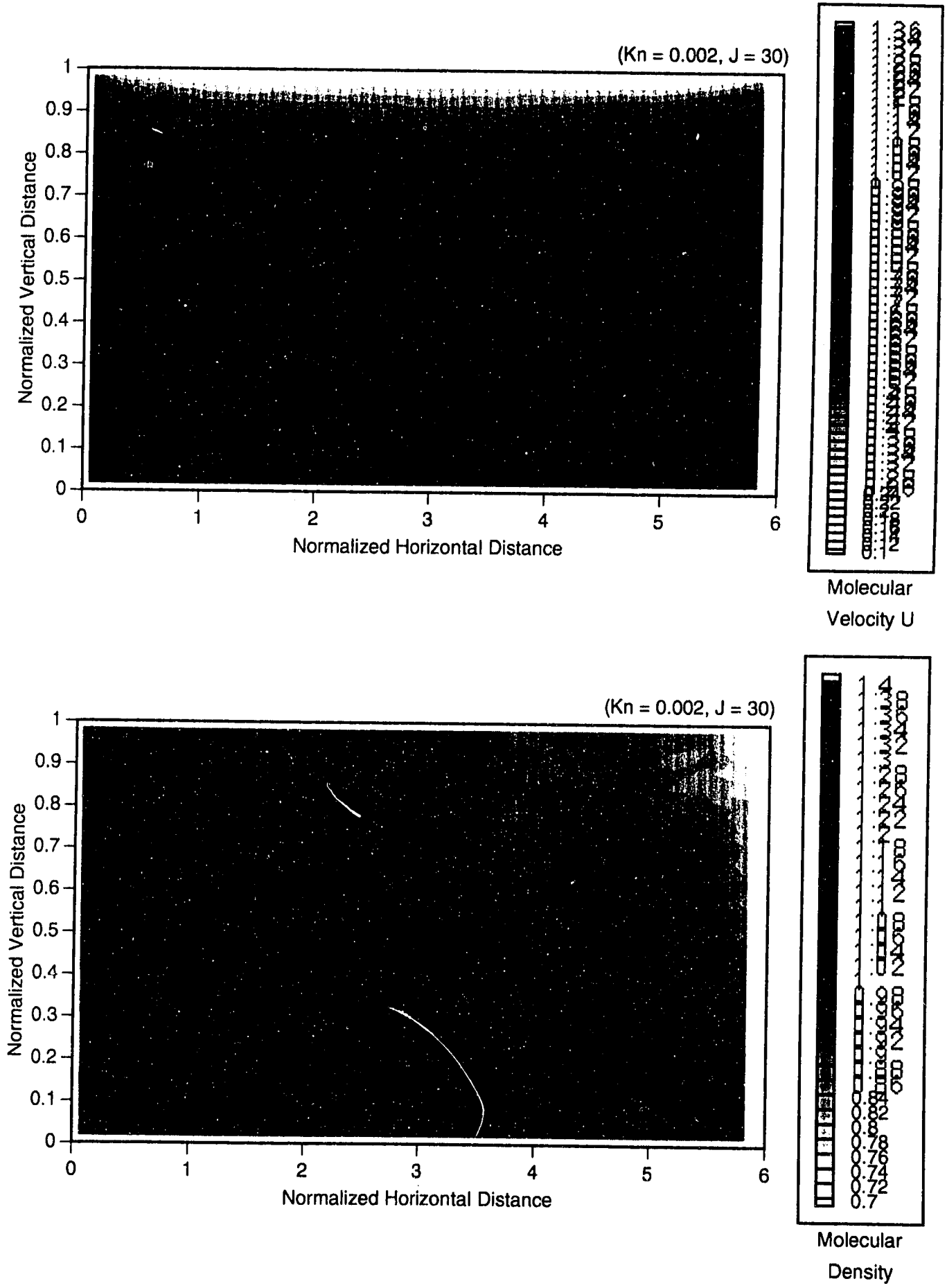


Fig. 3.4 Calculated Fields of Molecular Velocity U, Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of $Kn = 0.002$ (1/2)

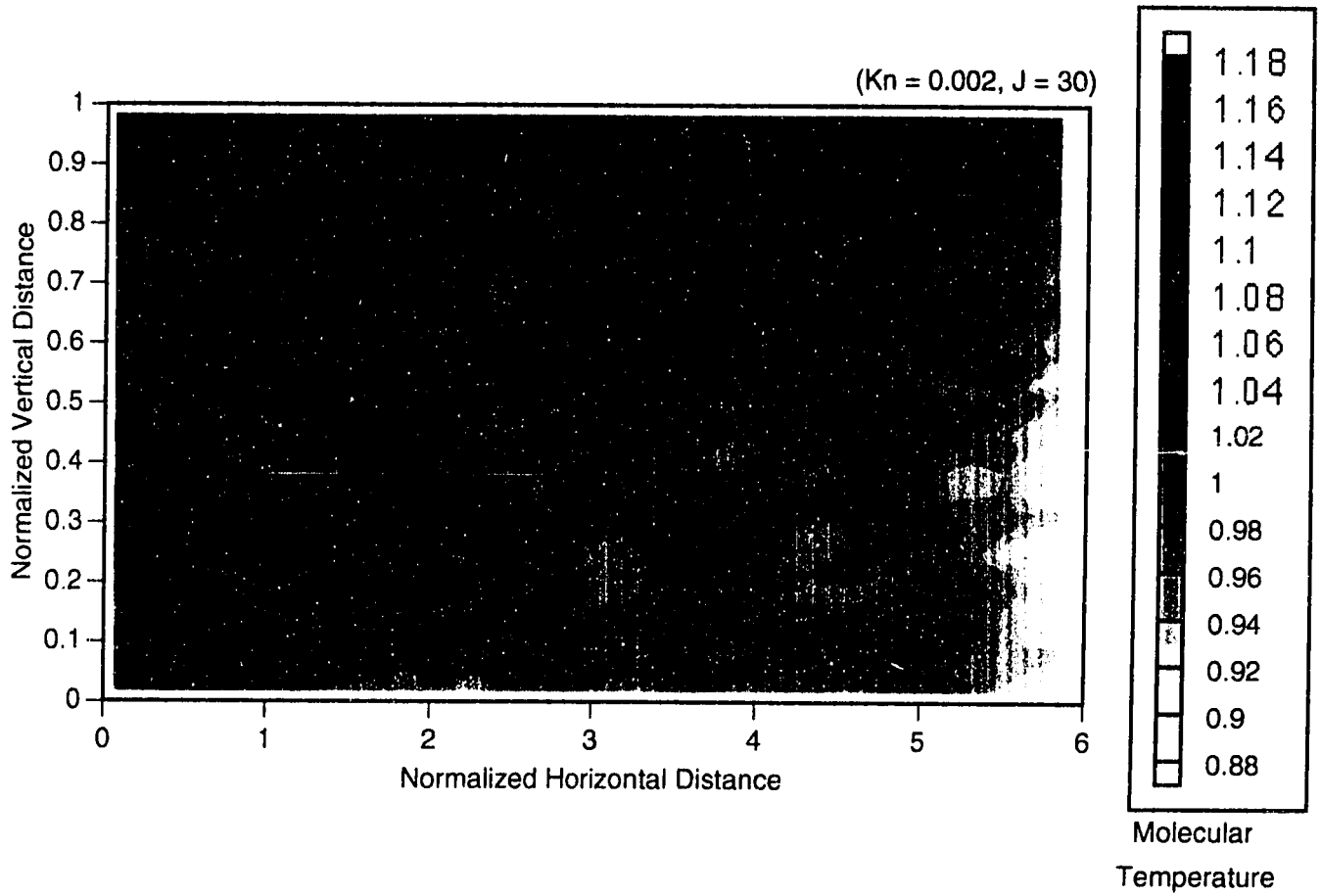
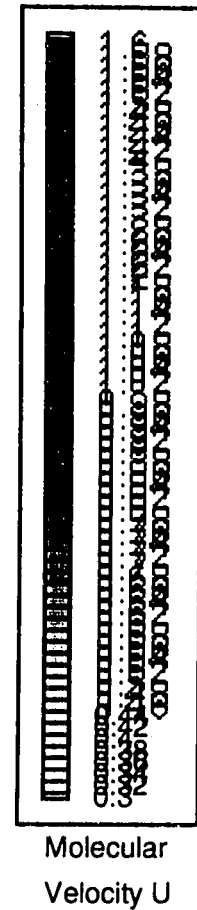
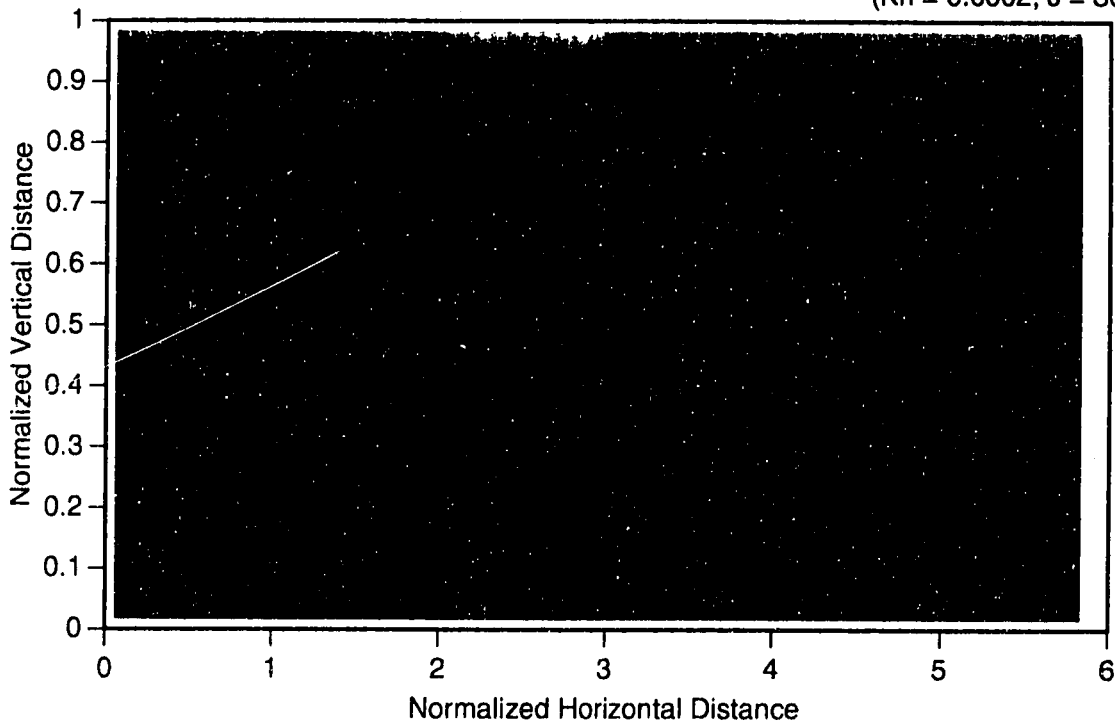


Fig. 3.4 Calculated Fields of Molecular Velocity U, Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of Kn = 0.002 (2/2)

(Kn = 0.0002, J = 30)



(Kn = 0.0002, J = 30)

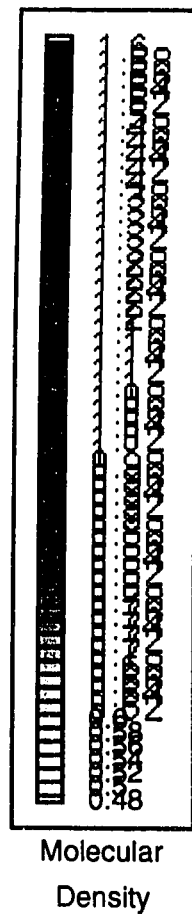
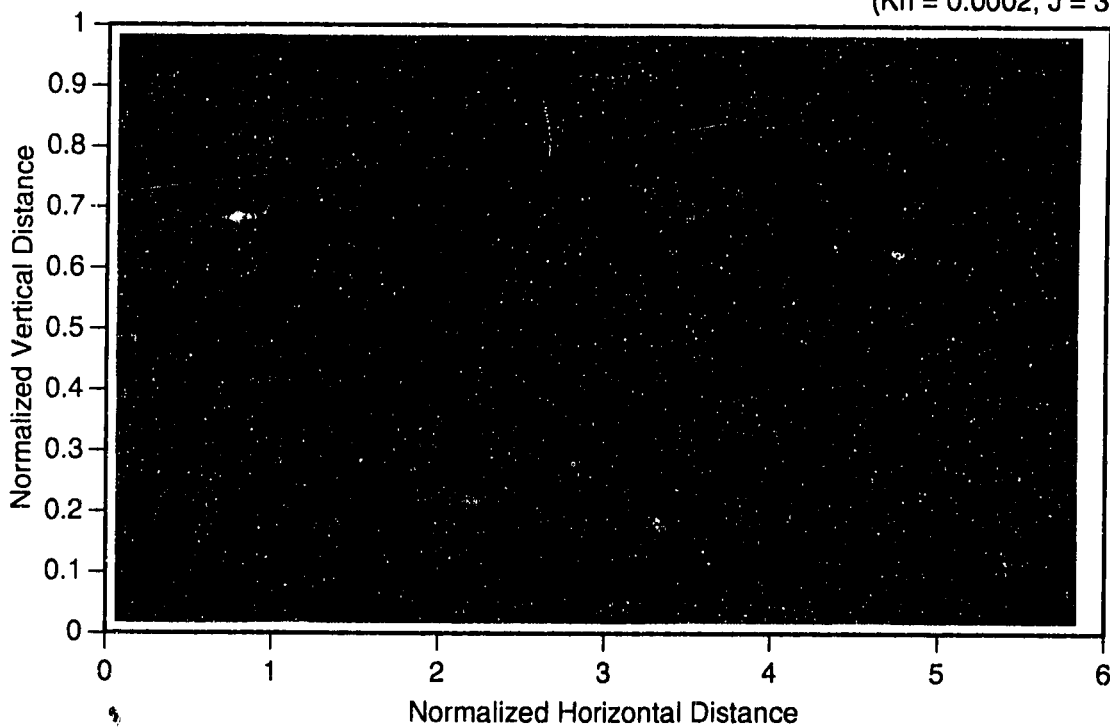


Fig. 3.5 Calculated Fields of Molecular Velocity U, Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of Kn = 0.0002 (1/2)

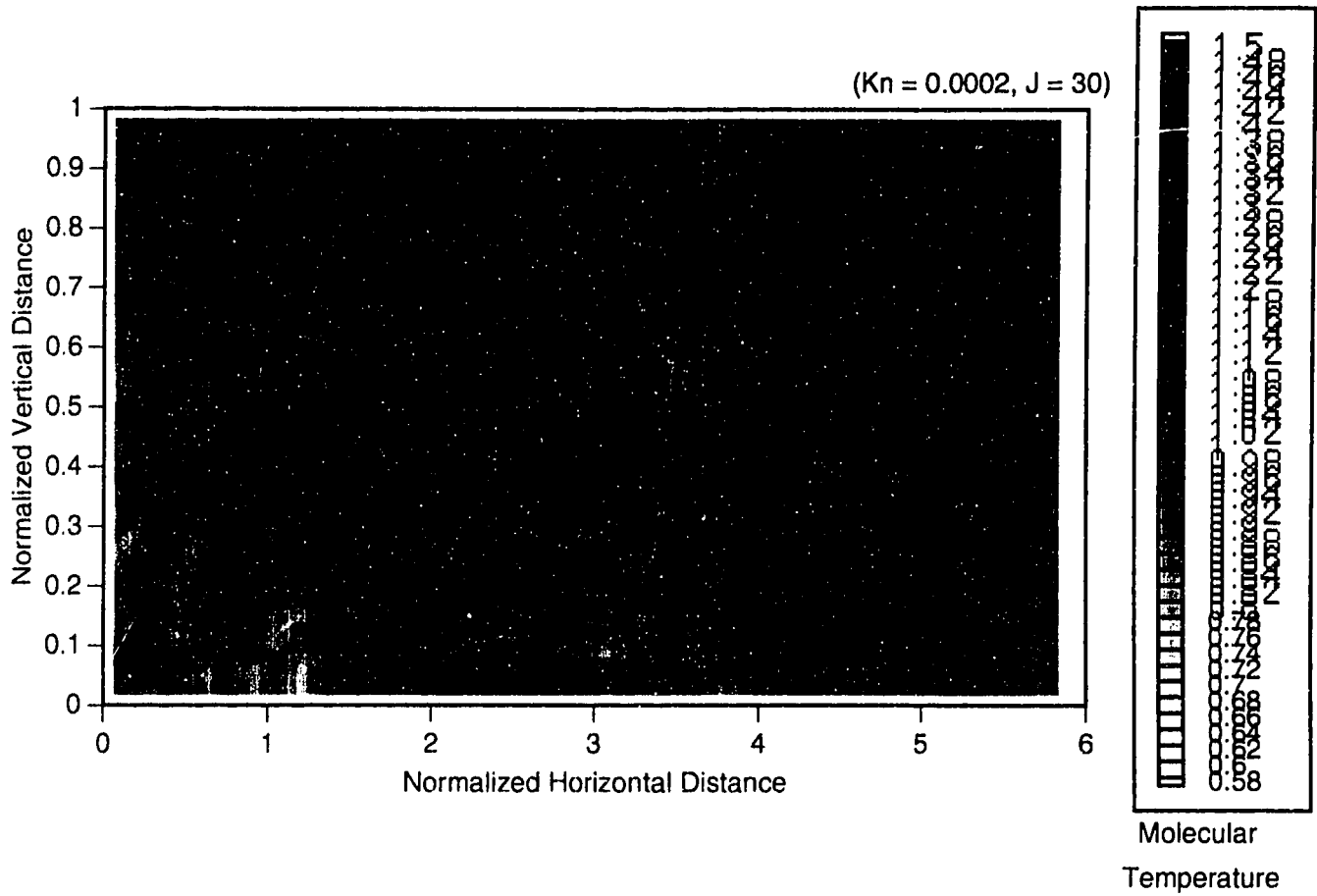


Fig. 3.5 Calculated Fields of Molecular Velocity U, Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of Kn = 0.0002 (2/2)

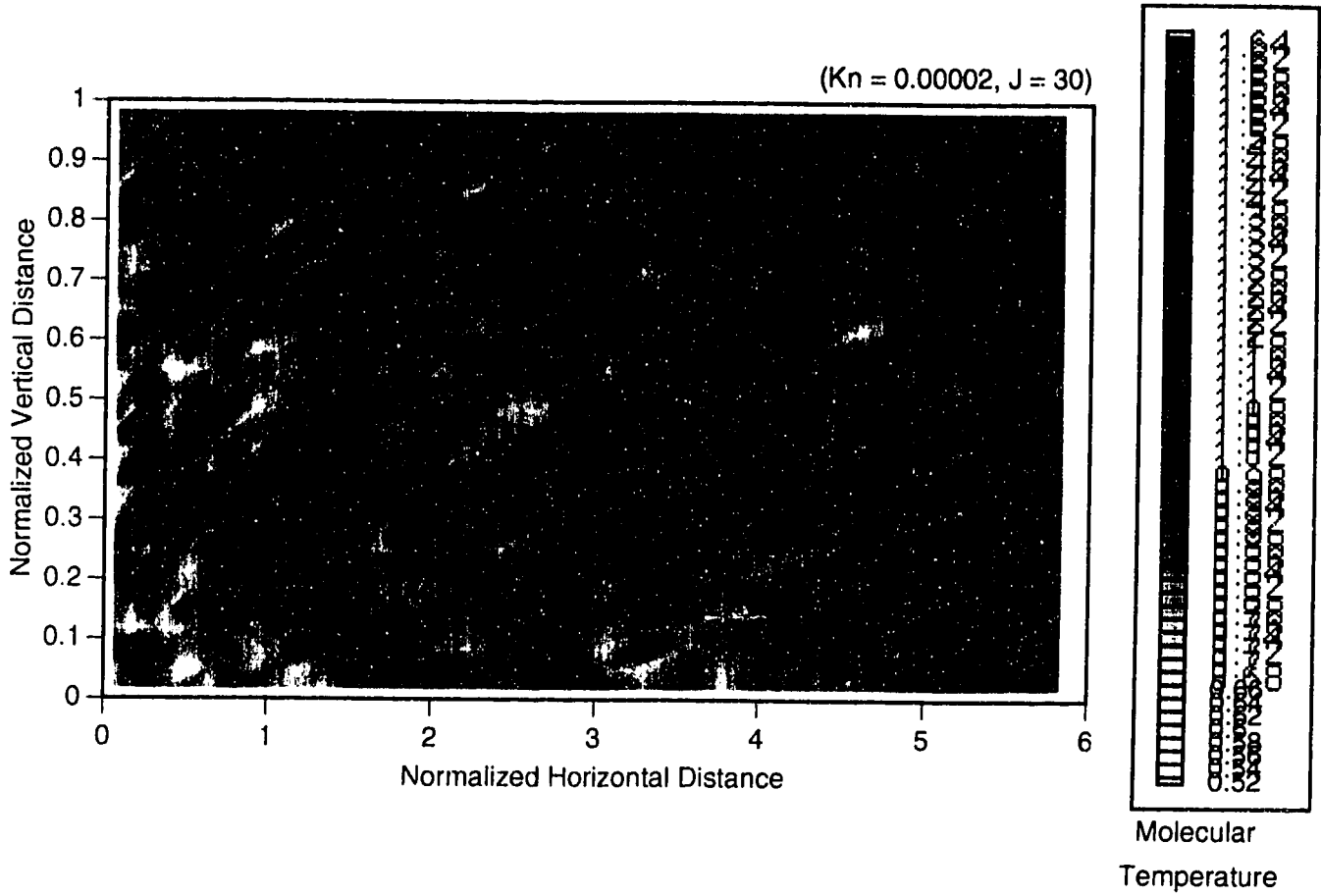
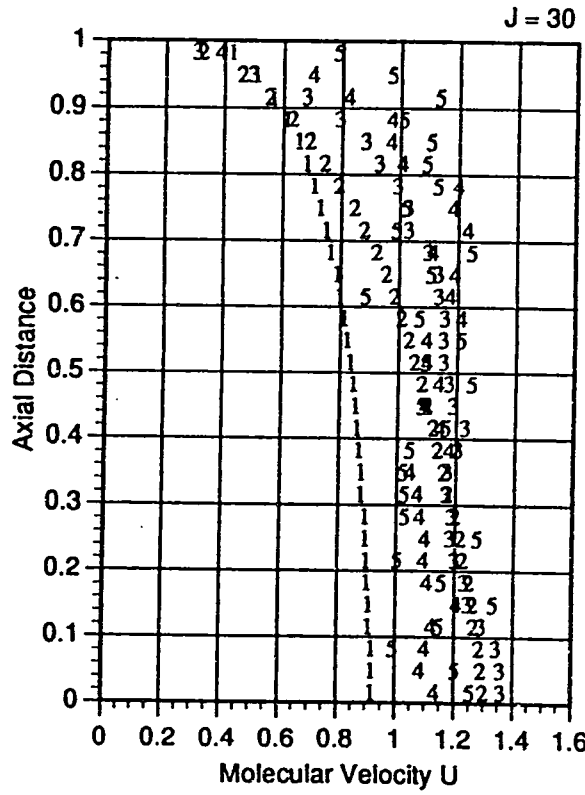
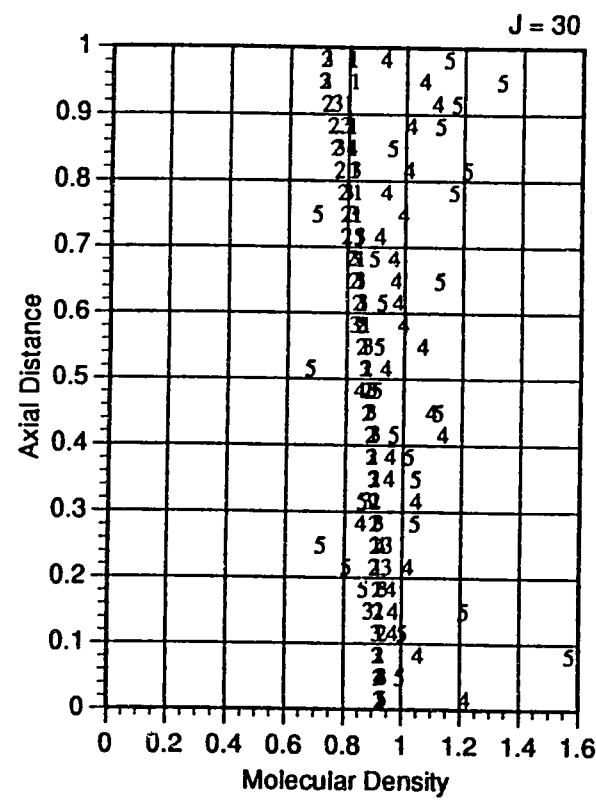


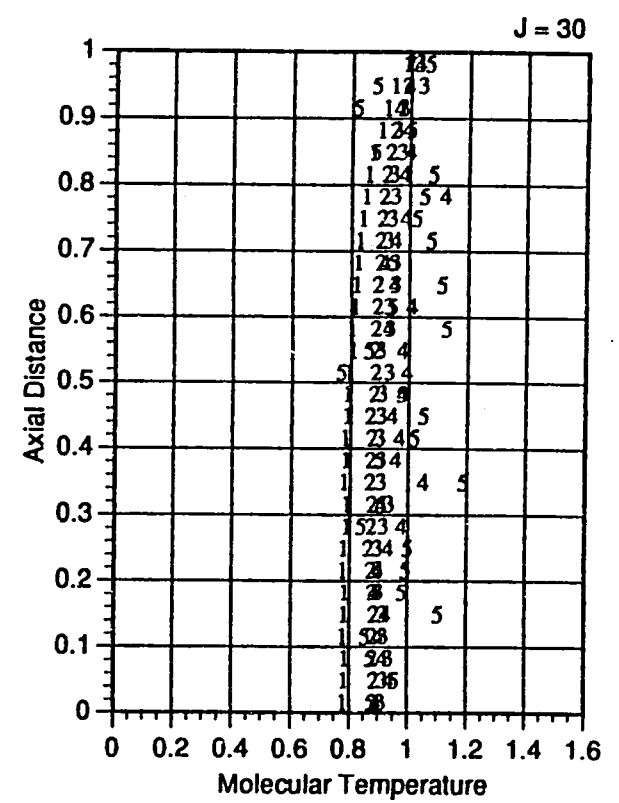
Fig. 3.6 Calculated Fields of Molecular Velocity U, Molecular Density and Molecular Temperature Under the Condition of Kn = 0.00002 (2/2)



(a) Molecular Velocity U

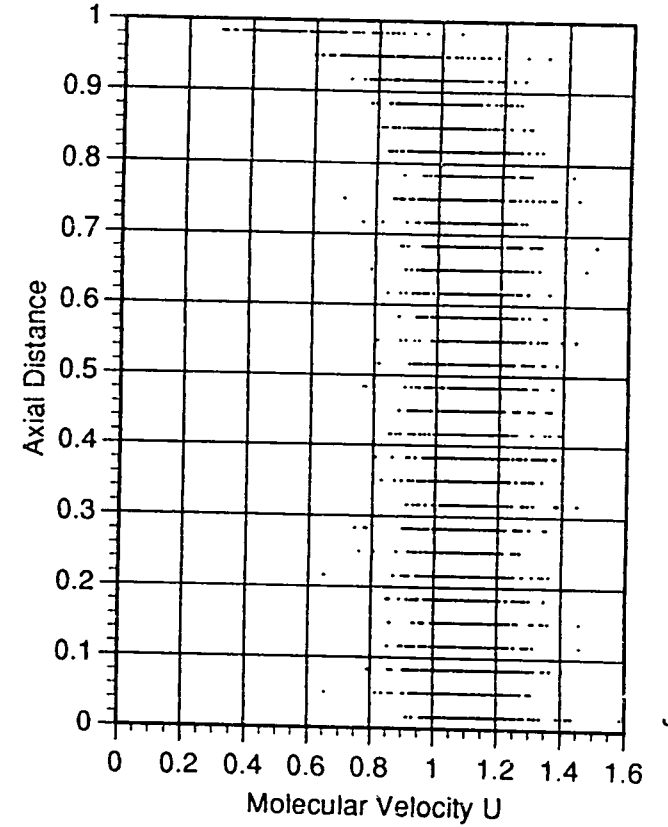
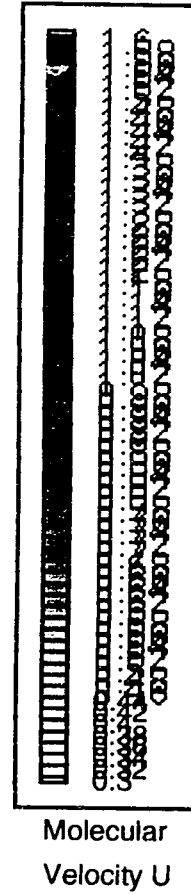
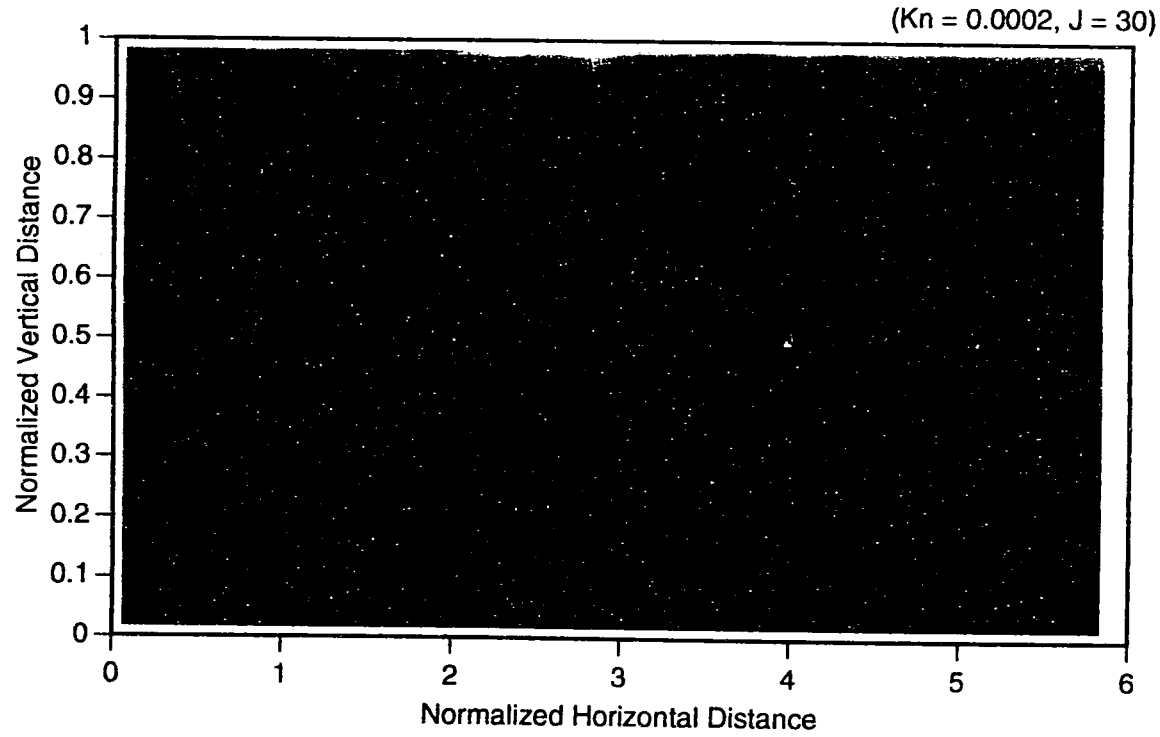


(b) Molecular Density



(c) Molecular Temperature

Fig. 3.7 Comparison of Instantaneous Axial Distributions of Molecular Velocity U, Molecular Density and Molecular Temperature Under the Various Conditions of Knudsen Number



(a)

(b)

Fig. 3.8 Calculated Molecular Velocity U Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$ ($J = 30$)
(a) Velocity U Contour, (b) Axial Distribution at the Outlet Plane

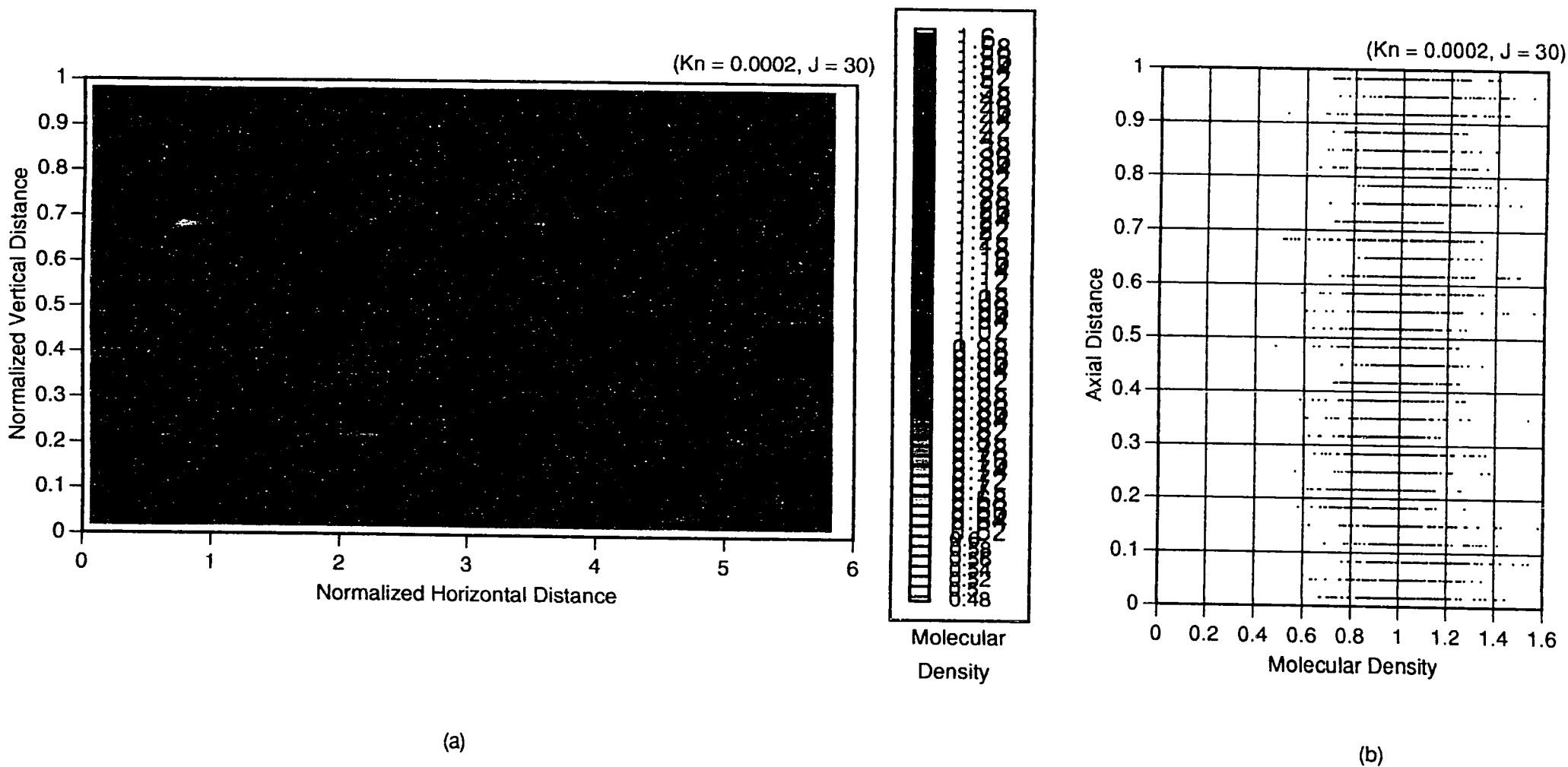


Fig. 3.9 Calculated Molecular Density Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$ ($J = 30$)
(a) Density Contour, (b) Axial Distribution at the Outlet Plane

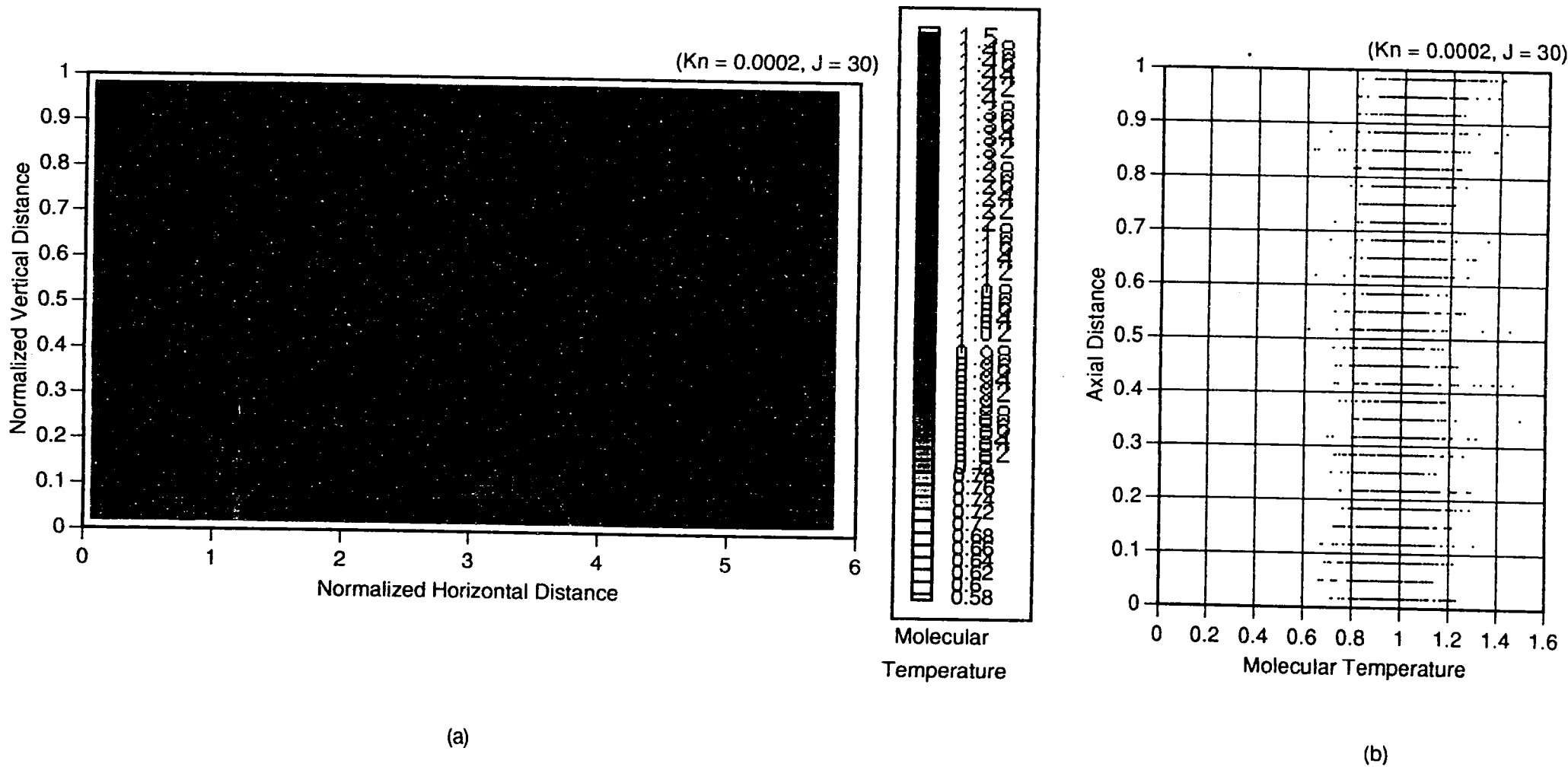
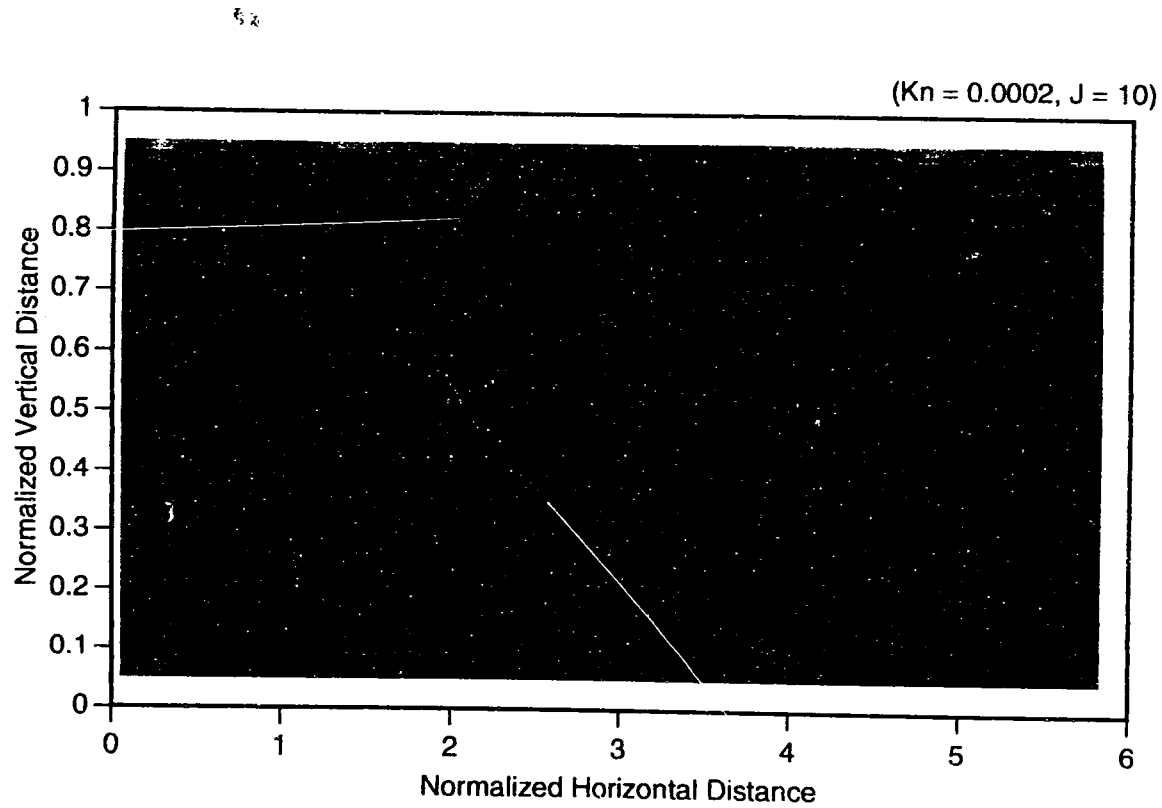
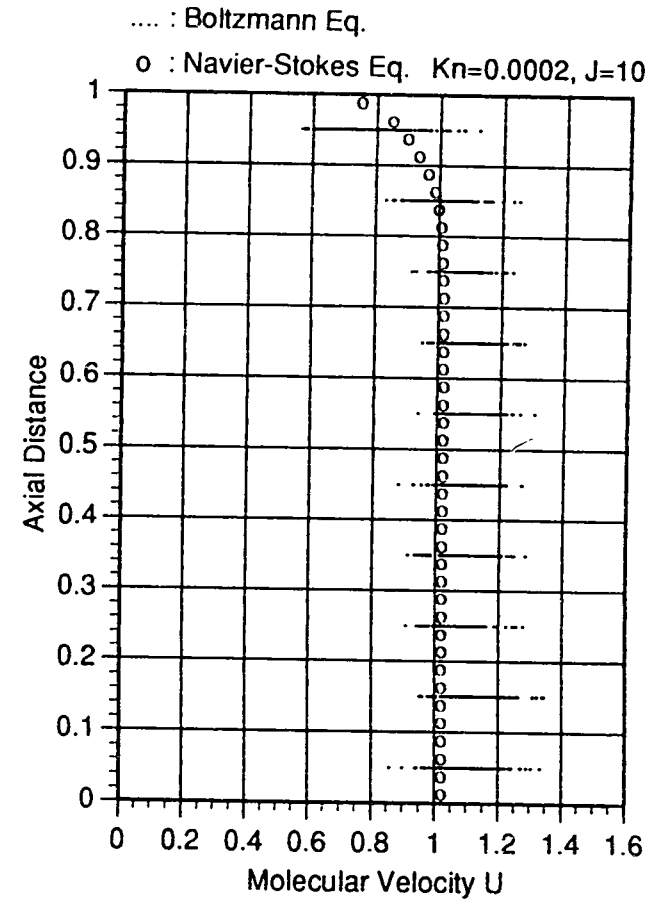


Fig. 3.10 Calculated Molecular Temperature Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$ ($J = 30$)
 (a) Temperature Contour, (b) Axial Distribution at the Outlet Plane



(a)



(b)

Fig. 3.11 Comparison of Molecular Velocity U Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$ ($J = 10$)
 (a) Velocity U Contour, (b) Axial Distribution at the Outlet Plane

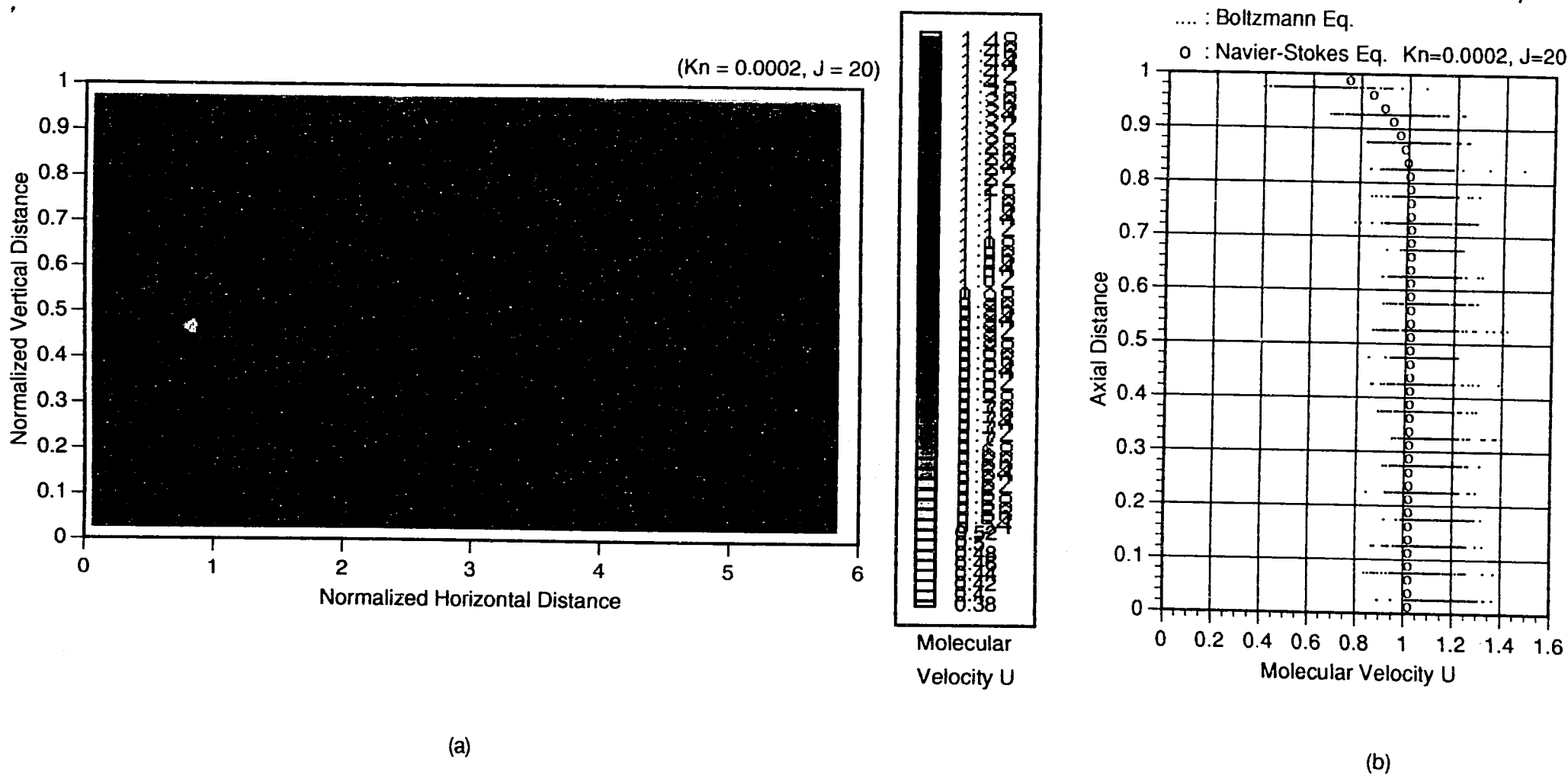


Fig. 3.12 Comparison of Molecular Velocity U Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$ ($J = 20$)
 (a) Velocity U Contour, (b) Axial Distribution at the Outlet Plane

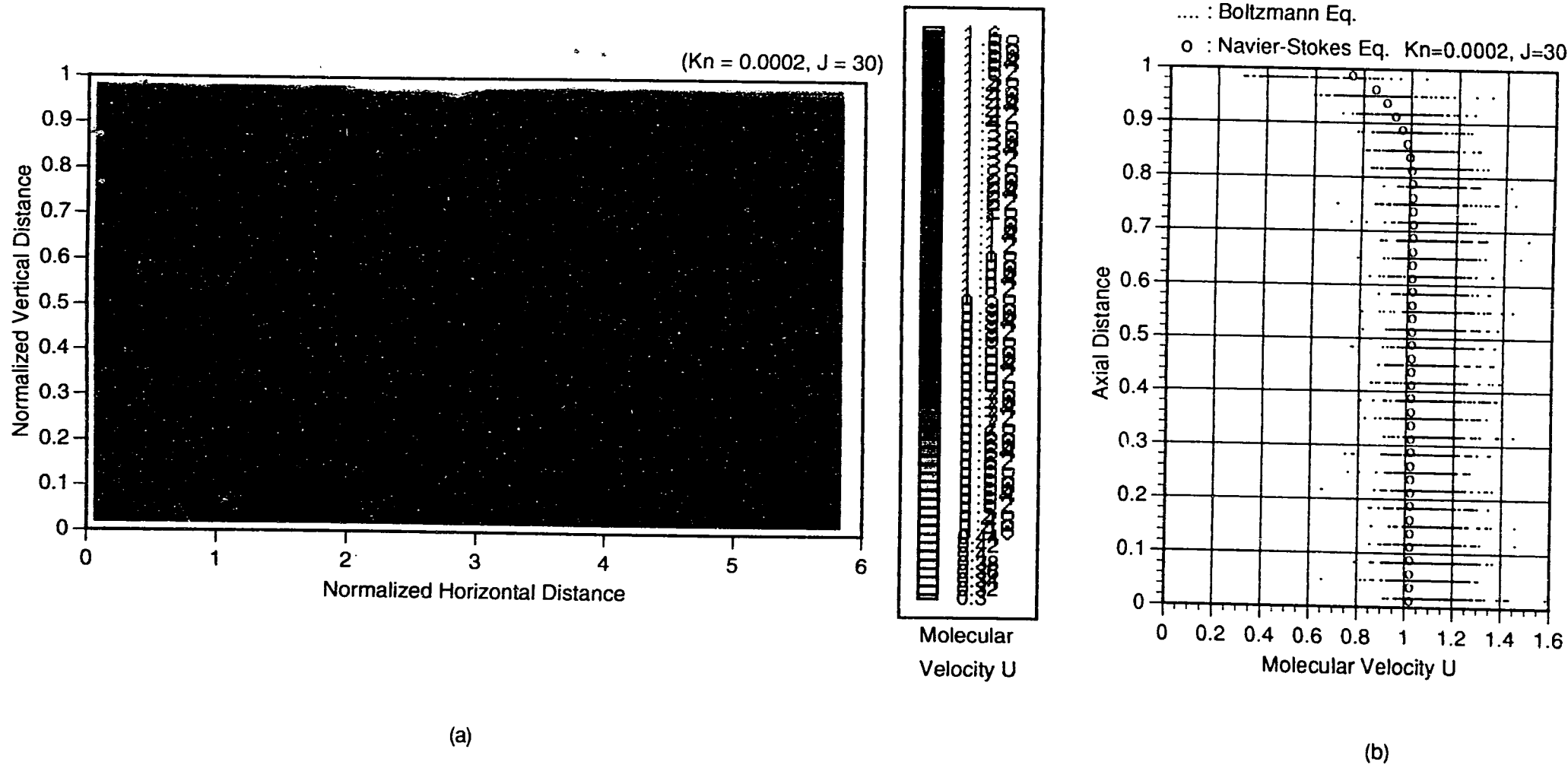
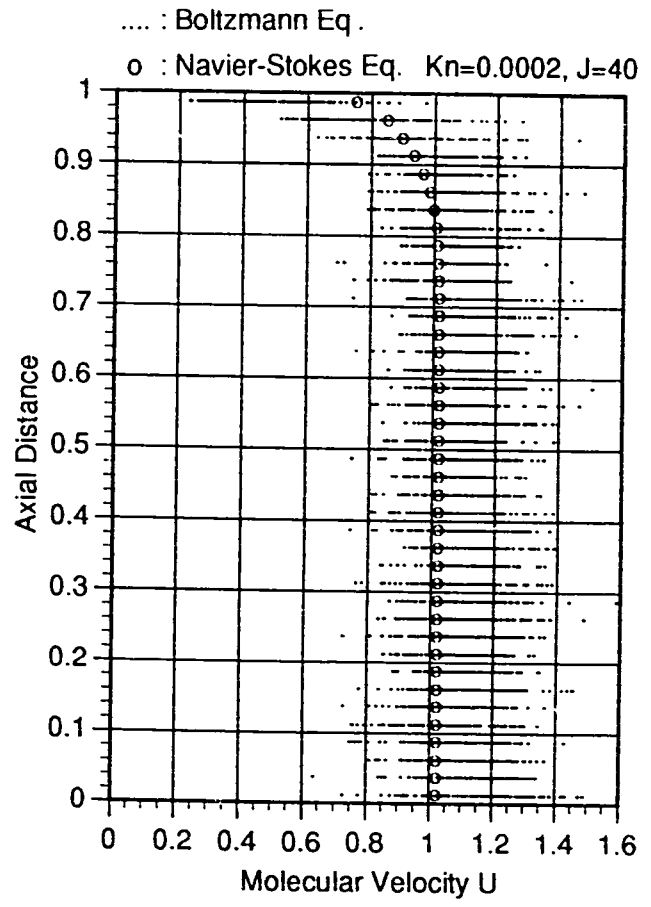
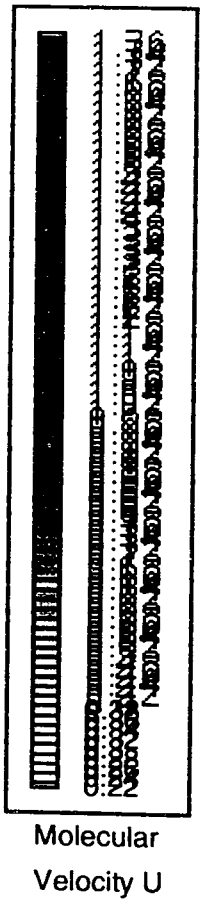
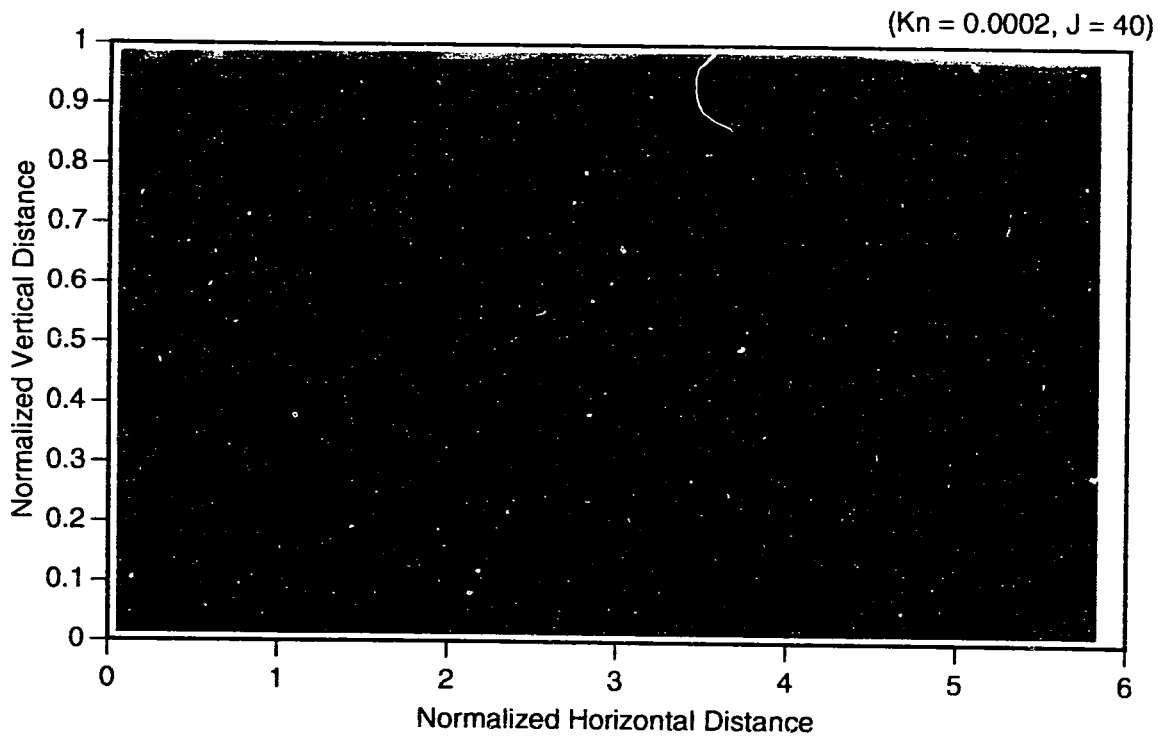


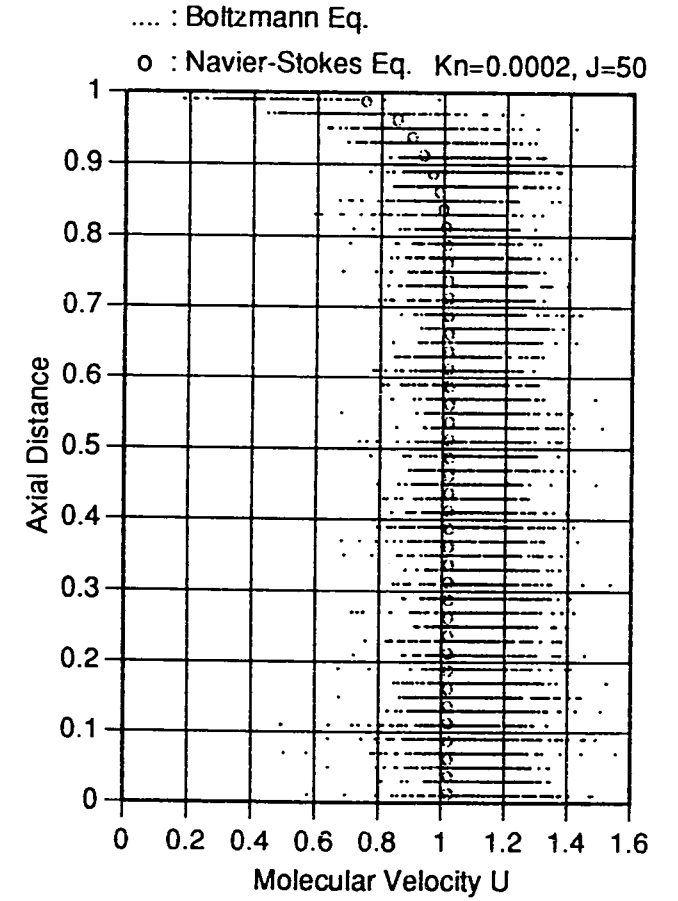
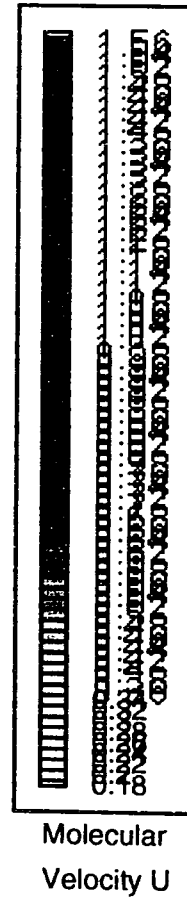
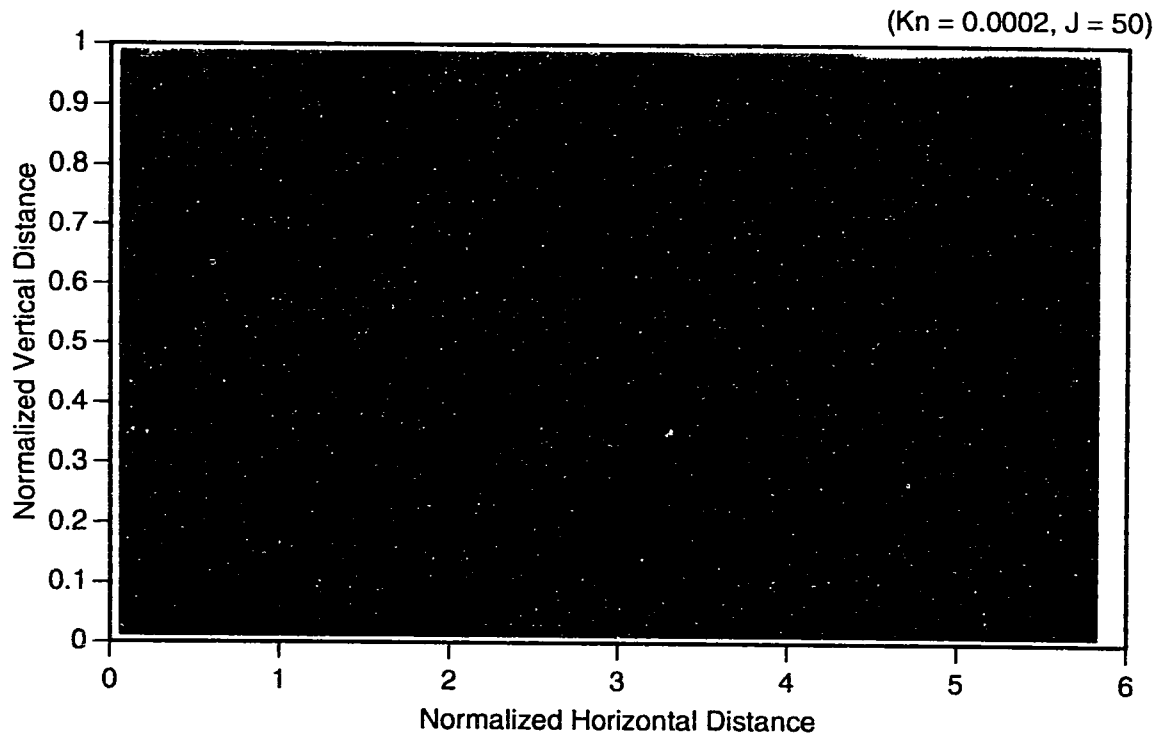
Fig. 3.13 Comparison of Molecular Velocity U Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$ ($J = 30$)
 (a) Velocity U Contour, (b) Axial Distribution at the Outlet Plane



(a)

(b)

Fig. 3.14 Comparison of Molecular Velocity U Distribution Under the Condition of Kn = 0.0002 (J = 40)
(a) Velocity U Contour, (b) Axial Distribution at the Outlet Plane



(a)

(b)

Fig. 3.15 Comparison of Molecular Velocity U Distribution Under the Condition of $Kn = 0.0002$ ($J = 50$)
(a) Velocity U Contour, (b) Axial Distribution at the Outlet Plane