

单相多次元熱流動解析コード—AQUA—

数値計算説明書

区 分 変 更	
変更後資料番号	PNC TN9520 87-012
決裁年月日	平成10年7月30日

1987年5月

動力炉・核燃料開発事業団
大洗工学センター

この資料は、動燃事業団社内における検討及び周知を目的とする社内資料です。刊行物に引用する場合には、事業団の承認が必要です。

社 内 一 般

PNC N9520 87-012

1987 年 5 月

单相多次元熱流動解析コード—AQUA—

数 値 計 算 説 明 書

前川 勇, 村松 寿晴

松本 雅彦

要 旨

高速炉プラントにおける炉容器,あるいは大型機器内の多次元熱流動解析手法の確立を目的として单相多次元熱流動解析コード AQUA を開発した。

本コードは,1983年,米国アルゴンヌ国立研究所より導入した COMMIX-1A を基本に,実験検証ならびに大幅な数値計算法の改良・整備,機能の拡張,新たな機能の追加の結果を反映して,総合化された汎用多次元コードである。

本コードの, COMMIX-1A に無い主な特徴は次の通りである。

- (1) 対流項の離散化手法として,空間に2次の正確度をもつ QUICK 法, QUICK-FRAM 法を採用した。この結果,従来より解の劣化の大きな原因となっていた数値拡散を防止することを可能にした。
- (2) 最も計算時間のかかる圧力に関するポアソン方程式の解法として,ICCG法を使用し,従来に比べ約2倍の高速化を達成した。
- (3) 乱流モデルとして $k-\epsilon$ 2 方程式モデルを採用し,解析精度,適用範囲の向上を計った。

A Single-Phase Multi-Dimensional Thermal-Hydraulic Analysis Code
AQUA

The Description of the Numerics

Summary

A single-phase multi-dimensional thermal-hydraulic analysis code AQUA has been developed to establish an analytical tool for the thermal-hydraulics in a reactor and the other main components of a LMFBR.

AQUA is based on the reconstruction of COMMIX-1A, introduced from ANL in 1983, which ranges from the improvements of numerics to the implementation of new functions.

Main features of AQUA different from COMMIX-1A are as follows:

- (1) the QUICK and the QUICK-FRAM schemes are used as the discretization methods of the convection terms of transport equations. These schemes are of second-order accuracy in space and effective for the suppression of the numerical diffusion.
- (2) the ICCG method is implemented as the fast elliptic solver and is the alternative of the conventional P-SOR method. The computational time can be generally saved about a half of the time needed with latter method.
- (3) the $k-\epsilon$ turbulence model is used.

This report describes the details of the numerics of AQUA.

Nomenclature

Variables, Emblem	Mean	Unit
A_x	$x(r)$ surface area of a control volume	(m ²)
A_y	$y(\theta)$ surface area of a control volume	(m ²)
A_z	$z(r)$ surface area of a control volume	(m ²)
f	friction factor	(-)
F_x	mass flow rate on $x + \frac{1}{2}\Delta x$ surface of a computational cell (kg/s)	
F_y	mass flow rate on $y + \frac{1}{2}\Delta y$ surface of a computational cell (kg/s)	
F_z	mass flow rate on $z + \frac{1}{2}\Delta z$ surface of a computational cell (kg/s)	
\bar{g}	gravity vector	(m/s ²)
g_x	x-component of \bar{g}	(m/s ²)
g_y	y-component of \bar{g}	(m/s ²)
g_z	z-component of \bar{g}	(m/s ²)
h	enthalpy	(J/kg)
i	N_0 in x direction at a computational cell centre	
J_x	total flux on x-surface of a control volume : $\rho u\phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}$	
J_y	total flux on y-surface of a control volume : $\rho v\phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y}$	
J_z	total flux on z-surface of a control volume : $\rho w\phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z}$	
P	pressure	(Pa)
\bar{q}	heat flux vector	(J/m ²)
Q	heat source or heat sink	(J/m ³)
R_x	distributed resistance coefficient of u-equation	
R_y	" of v-equation	
R_z	" of w-equation	
t	time	(s)
\bar{u}	velocity vector	(m/s)
u	x-component of \bar{u}	(m/s)
v	y-component of \bar{u}	(m/s)
w	z-component of \bar{u}	(m/s)
$V_x(V_r)$	additional viscous term of u-equation	(pa)
$V_y(V_\theta)$	additional viscous term of v-equation	(pa)
$V_z(V_z)$	additional viscous term of w-equation	(pa)

Nomenclature (continued)

Variables, Emblem	Mean	Unit
V	control volume	(m ³)
V _m	momentum control volume	(m ³)
V _l	Liquid volume of a control volume	(m ³)
x(r)	x(r)-coordinates	
y(θ)	y(θ)-coordinates	
z(z)	z(z)-coordinates	
Δx	mesh length in x-direction of a computational cell	(m)
Δy	mesh length in y-direction of a computational cell	(m)
Δz	mesh length in z-direction of a computational cell	(m)
S _p	} Q = S _c - S _p h	
S _c		
γ _v	volume porosity	(-)
γ _A	surface permeability	(-)
γ _x	surface permeability of x-surface of a computational cell	(-)
γ _y	surface permeability of y-surface of a computational cell	(-)
γ _z	surface permeability of z-surface of a computational cell	(-)
Γ _φ	diffusion coefficient of φ	
Γ _h	diffusion coefficient h (= λ/cp)	(kg/m·s)
ρ	density	(kg/m ³)
ρ _m	density of a momentum control volume	(kg/m ³)
δ	mass residual	(kg/m ³ ·s)

Nomenclature

Variables, Emblem	Mean	Unit
Suffix		
e, w, n, s, t, b	each face of a control volume, see Fig. 3.1-1	
$\ell (\ell=1, 2, 3, \dots, 6, \dots)$	No of a computational cell	
	[ex]	
	ϕ_ℓ : ϕ value of a computational cell ℓ , see Fig. 3.1-3	
Emblem		
$^3 \langle \rangle$	volumetric mean value	
$^{3i} \langle \rangle$	intrinsic volumetric mean value	
$^2 \{ \}$	area mean value	
$^{2i} \{ \}$	intrinsic area mean value	
$\langle \phi \rangle_\ell$	ϕ value on surface ℓ of a computational cell using the 1st upwind scheme	
$[\phi]_\ell$	ϕ value on surface ℓ of a computational cell using the QUICK scheme	
$[A, B]$	$\equiv \max(A, B)$: the greater one between A and B	

単相多次元熱流動解析コード—AQUA—数値計算法解説書

目 次

1. 序	1
2. 流れの基礎式	5
2.1 基礎方程式	5
2.2 Porous Body モデル表示式	11
3. 差分方程式	16
3.1 基礎方程式の一般差分表示	16
3.2 対流項の差分式	23
3.3 拡散項の差分式	40
3.4 ソース項の差分式	43
4. 数値計算アルゴリズム	46
4.1 完全陰解法	46
4.2 半陰解法	52
5. 圧力方程式の解法	56
5.1 点SOR法	56
5.2 ICCG法	57
5.3 Wave Front法	77
5.4 マス・リバランシング	83
6. $k-\epsilon$ 乱流モデル	85
7. 結 言	95
Appendix-A Porous Body モデルにおける体積平均量と面積平均量	98
Appendix-B Porous Body モデル表示による流動基礎式	102
Appendix-C 差分一般式の誘導	104

1. 序

原子炉プラント機器内の单相多次元熱流動解析コードとして、AQUA (Advanced Simulation using Quadratic Upstream differencing Algorithm)を開発した。

本コードは、1983年、米国アルゴンヌ国立研究所より導入した单相多次元熱流動解析コード COMMIX-1A⁽¹⁾を基本に、改良、総合化された汎用多次元コードである。総合化にあたって、実験検証ならびに大幅な数値計算法の改良・整備、機能の拡張、新たな機能の追加の結果を反映している。

両コードの特徴を Table 1.1 および Fig. 1.1 に比較する。両コードの数値計算法でもっとも大きく異なるのは、各輸送方程式の対流項の離散化手法の高精度化と、圧力に関するポアソン方程式の解法の高速度化である。

(1) 対流項の離散化手法⁽²⁾⁽³⁾

AQUA では、1次風上差分法他に QUICK 法⁽⁴⁾、QUICK 法に FRAM 法⁽⁵⁾を適用した QUICK-FRAM 法の空間に関し2次の正確度をもつ高次差分法が使用できる。対流項が支配的な流れで、流れが計算メッシュに対し斜交し、しかも流れと直交する方向に、流速、温度あるいはその他の被輸送量の勾配が存在する流れでは、1次風上差分法を使用すると、数値拡散の影響によって、計算結果が劣化する。特に、乱流モデルを使用するときには、この数値拡散の影響は、モデル自体の性能を無意味にしかねない。AQUA では、高次差分法が使用できるため、この数値拡散の問題は、ほぼ解決されている。

(2) ポアソン方程式の解法^{(6)~(8)}

熱流動方程式の数値解法で最も計算時間を費やすのが、圧力に関するポアソン方程式の数値解を求めるところにある。COMMIX-1Aの使用経験から、急激な過渡変化計算や計算メッシュ数が数千以上になると、最も一般的に使用されているP-SOR法は、極端に収束が遅くなることが知られている。そのため AQUA では、ICCG (Incomplete Choleski Conjugate Gradient) 法⁽⁹⁾と直接解法の一つである Wave Front 法⁽¹⁰⁾を使用できるようにした。P-SOR法に比べ、定常計算では約2倍の高速化が可能になった。また非定常計算では、従来ある程度収束条件を緩くするか、あるいは収束しないまま計算を進めなければならないような問題が、ICCG法によって解決された。一方、Wave Front法は、一般的にはP-SORやICCG法に比べて、より多くの計算時間が必要であるが、ICCG法をもってしても十分な収束解が得られない場合(質量残差をかなり厳しく押さえなければならない閉空間の自然対流問題など)、本手法によって正確な数値が得られる⁽¹¹⁾。

物理モデルの改良では、乱流モデルの改良を実施した。

(3) $k-\epsilon$ 2 方程式乱流モデルの採用⁽¹²⁾

乱流の最も単純な記述では、各流速の時間平均値からみた変動成分の 2 乗和で表される乱流運動エネルギー k と、渦の特性長 l で表されてきた。乱流の最も古典的なアプローチは混合長モデルで、 k と l はいずれも代数式で表されており、単純な体形においては実験結果をよく再現できることが知られている。ただし、これらの値は、流れおよび場所の関数であり工学的応用性には限界がある。COMMIX-1A には、より進んだ k 方程式モデルが使用されており、 k についての偏微分方程式を作成し、より一般的に k を求めるようになっているが、 l はやはり、実験から求めざるを得ず混合長モデルの限界を越えるものではない。そのため AQUA では、 l についてもより一般的に求められるように、新たに k の散逸率 ϵ を変数とした偏微分方程式を使用する $k-\epsilon$ 2 方程式モデル⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾を採用した。本モデルの使用によって、広範囲の乱流現象解析の工学的応用が可能になった。

機能の拡張としては、DRACS モデルおよび任意溶融物質輸送モデルを新たに使用できる。

(4) DRACS モデルの組み込み⁽¹⁵⁾

FBR 固有の安全性の観点から、DRACS を使用した炉内自然循環により崩壊熱除去系の成立性が、強く求められている。特に DRACS の性能評価では、通常運転時から崩壊熱除去運転の熱流動挙動の把握と流路形成過程の解析が重要である。この領域での炉内熱流動は DRACS 2 次系 (DHX および 2 次 Na 系、空気冷却器) におけるシステム動特性と密接に関連しており、過渡特性の解析評価においてこの DRACS システム動特性を考慮しなければならない。本モデルは、以上の要請に鑑み、炉内熱交換器、2 次 Na 系ループ、空気冷却器の 1 次元動特性モデルを AQUA に追加したものである。

(5) 物質輸送モデルの組み込み⁽¹⁶⁾

原子炉上部カバーガス中の FP ガス輸送、上部プラグ・アニュラス部でのカバーガス自然対流と Na ミスト移行など FBR 安全設計において物質輸送の解析評価が求められる。本モデルでは、任意の溶融物質の Na あるいはガスによる輸送現象を取り扱うことができる。

本報告書は、単相多次元熱流動解析コード AQUA の数値計算法の詳細を記述したもので、2 章では、流れの基礎方程式として、基本式およびそのポラス・モデル表示式の誘導を、3 章では、それらの基礎式の差分化過程を詳細に説明する。4 章では、圧力に関するポアソン方程式の解法を説明する。また 5 章では、 $k-\epsilon$ 乱流モデルの数値計算モデルで説明する。

単相多次元熱流動解析コード AQUA の総合マニュアルは、本書を含め、3 部作に分けられており、他にコード内の使用変数、各サブルーチンの内容、フロー・チャートなどを記述した AQUA プログラム説明書⁽¹⁷⁾および、本コードを使用するための AQUA 入力マニュアル⁽¹⁸⁾がある。

Table 1.1 Comparison of the Characteristics of COMMIX-1A and AQUA

Items	COMMIX-1A	AQUA
1. Numerics		
Solution Algorithm:	SIMPLEST-ANL M-ICE	SIMPLEST-ANL M-ICE
Finite Difference Schemes of Convection:	1st-Upwind	1st-Upwind QUICK QUICK-FRAM
Poisson Solver:	P-SOR	P-SOR ICCG Wave Front
Coordinates:	Cartesian Cylindrical	Cartesian Cylindrical
2. Physical Models		
Turbulence Model:	k-One Equation	k-ε Two-Equation
Porous Media Approach :	available	available
Distributed Resistance:	available	available
Thermal Structure: Heat Transfer	available	available
Correlations :	$Nu=a+bRe^c$	$Nu=a+bRe^cPr^d$ $Nu=a+bGr^c$
3. Others		
Mass Transport Model :	not available	available
Heat Exchangers & Heat Transport Loops:	not available	available
Maximum Computational Cells in each direction:	99	999

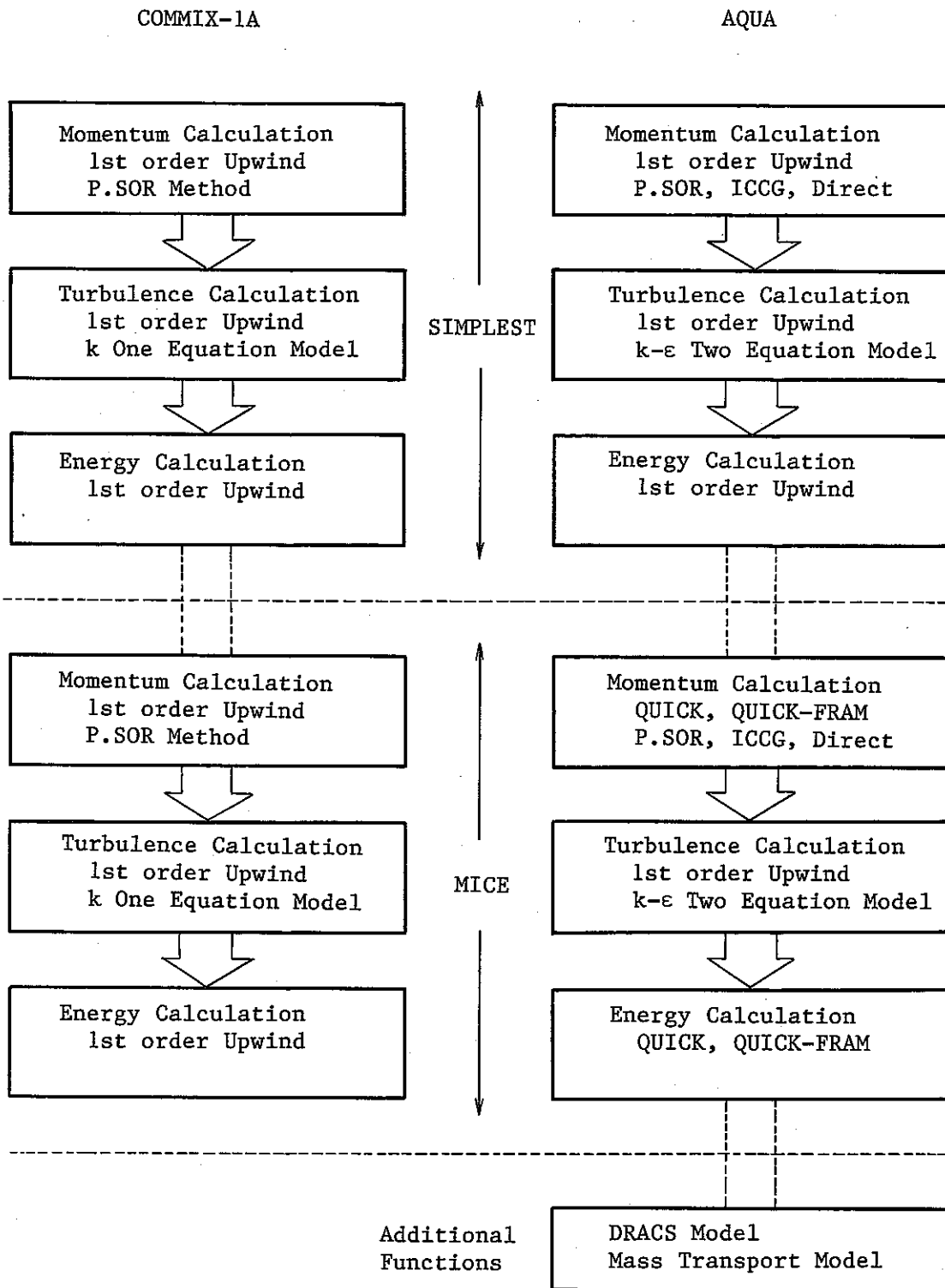


Fig. 1.1 Comparison of Code Structure between COMMIX-1A and AQUA.

2. 流れの基礎式

2.1 基礎式

質量保存式，運動量保存式およびエネルギー保存式は，以下のように示される。

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \rho \bar{u} = 0 \quad (2.1-1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \bar{u} + \nabla \cdot \rho \bar{u} \bar{u} = -\nabla P - \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho \bar{g} \quad (2.1-2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho h + \nabla \cdot \rho \bar{u} h = \frac{dP}{dt} - \nabla \cdot \bar{q} + Q \quad (2.1-3)$$

次に，これらの各式をデカルト直交座標系および円筒座標系で展開した3次元表示をTable 2.1-1に示す。各式の右辺に存在する粘性項にかかわる V_x, V_y, V_z および V_r, V_θ, V_z の具体的表示形と AQUA での処理を Table 2.1-3, -4に示す。これらのモデル化では，この粘性項にかかわる項のみは，非圧縮性 (ρ が一定) で粘性係数 μ も一定の仮定で整理される。単相流解析でも無論 ρ, μ とも変化するが，粘性効果に対するこれらの項の寄与は小さく，また計算が複雑化するため，上記仮定を置いて単純化した。

両座標系に対し，各保存式は以下のような共通の式で表わすことができる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \phi + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} (r J_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (J_y) + \frac{\partial}{\partial z} J_z = S_\phi \quad (2.1-4)$$

ここで， $r = \begin{cases} 1 : \text{デカルト座標系} \\ r : \text{円筒座標系} \end{cases}$

$$J_x = \rho u \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

$$J_y = \rho v \phi - \Gamma_\phi \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)$$

$$J_z = \rho w \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z}$$

ただし円筒座標系の場合， x, y, z はそれぞれ r, θ, z と読み替えるものとする。

本コードで使用しているソース項 S_ϕ は Table 2.1-5 の通りである。エネルギー式における圧力による仕事項 $\frac{dP}{dt}$ は，単相流解析では一般に小さいので無視できる。

Table 2.1-1 Basic Equations in Rectangular Coordinates (x, y, z)

Mass equation :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) = 0 \quad (A)$$

Momentum equation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho u + \frac{\partial}{\partial x}\rho uu + \frac{\partial}{\partial y}\rho vu + \frac{\partial}{\partial z}\rho wu \\ = -\frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial z}\right) + \rho g_x + V_x \end{aligned} \quad (B)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho v + \frac{\partial}{\partial x}\rho uv + \frac{\partial}{\partial y}\rho vv + \frac{\partial}{\partial z}\rho wv \\ = -\frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial z}\right) + \rho g_y + V_y \end{aligned} \quad (C)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho w + \frac{\partial}{\partial x}\rho uw + \frac{\partial}{\partial y}\rho vw + \frac{\partial}{\partial z}\rho ww \\ = -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\mu\frac{\partial w}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\mu\frac{\partial w}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu\frac{\partial w}{\partial z}\right) + \rho g_z + V_z \end{aligned} \quad (D)$$

Energy equation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho h + \frac{\partial}{\partial x}\rho uh + \frac{\partial}{\partial y}\rho vh + \frac{\partial}{\partial z}\rho wh \\ = \frac{dP}{dt} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\Gamma_h\frac{\partial h}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\Gamma_h\frac{\partial h}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_h\frac{\partial h}{\partial z}\right) + Q \end{aligned} \quad (E)$$

Table 2.1-2 Basic Equations in Cylindrical Coordinates (r, θ , z)

Mass equation :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\rho ru + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\rho v + \frac{\partial}{\partial z}\rho w = 0 \quad (\text{A})$$

Momentum equations :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho u + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\rho ru^2 + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\rho vu + \frac{\partial}{\partial z}\rho wu - \frac{1}{r}\rho v^2 \\ = -\frac{\partial P}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu\frac{\partial u}{\partial r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial \theta}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu\frac{\partial u}{\partial z}\right) + \rho g_r + V_r \end{aligned} \quad (\text{B})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho v + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\rho ruv + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\rho v^2 + \frac{\partial}{\partial z}\rho wv + \frac{1}{r}\rho uv \\ = -\frac{1}{r}\frac{\partial P}{\partial \theta} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu\frac{\partial v}{\partial r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial \theta}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu\frac{\partial v}{\partial z}\right) + \rho g_\theta + V_\theta \end{aligned} \quad (\text{C})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho w + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\rho ruw + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\rho vw + \frac{\partial}{\partial z}\rho w^2 \\ = -\frac{\partial P}{\partial z} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu\frac{\partial w}{\partial r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\mu\frac{\partial w}{\partial \theta}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\mu\frac{\partial w}{\partial z}\right) + \rho g_z + V_z \end{aligned} \quad (\text{D})$$

Energy equation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho h + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\rho ruh + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\rho vh + \frac{\partial}{\partial z}\rho wh \\ = \frac{dP}{dt} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\Gamma_h\frac{\partial h}{\partial r}\right) + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\Gamma_h\frac{\partial h}{\partial \theta}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\Gamma_h\frac{\partial h}{\partial z}\right) + Q \end{aligned} \quad (\text{E})$$

Table 2.1-3 Additional Viscous Terms for Rectangular Coordinates

Rigorous Derivation	Model in AQUA
$1. \quad V_x = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} (\mu \nabla \cdot \mathbf{u})$	$V_x = 0$
$2. \quad V_y = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial y} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial y} (\mu \nabla \cdot \mathbf{u})$	$V_y = 0$
$3. \quad V_z = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} (\mu \nabla \cdot \mathbf{u})$	$V_z = 0$

Table 2.1-4 Additional Viscous Terms for Cylindrical Coordinates

$V_r = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial v_r}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\mu r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_\theta}{r} \right) \right]$ $+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) - \frac{2\mu}{r^2} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} - \frac{2\mu v_r}{r^2}$	$V_r = -\frac{2\mu}{r^2} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} - \frac{\mu v_r}{r^2}$
$V_\theta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \right) - \frac{v_\theta}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (\mu r)$ $+ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\mu}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{2\mu v_r}{r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\mu}{r} \frac{v_z}{\partial \theta} \right)$	$V_\theta = -\mu \frac{v_\theta}{r} + \frac{2\mu}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta}$
$V_z = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\mu \frac{\partial v_\theta}{\partial z} \right)$ $+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial v_z}{\partial z} \right)$	$V_z = 0$

Table 2.1-5 Source Terms in the Rectangular and Cylindrical Systems

Equation	Variable	ϕ	Source Term : S_ϕ	
			Cartesian	Cylindrical
<u>Continuity</u>	Scalar	1	0	0
<u>Momentum</u>				
(i)	x(r) direction velocity	u(v_r)	$\rho g_x + V_x - \frac{\partial p}{\partial x}$	$\rho g_r + V_r - \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\rho v_\theta^{2*}}{r}$
(ii)	y(θ) direction velocity	v(v_θ)	$\rho g_y + V_y - \frac{\partial p}{\partial y}$	$\rho g_\theta + V_\theta - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} - \frac{\rho v_r v_\theta^{**}}{r}$
(iii)	z(z) direction	w(v_z)	$\rho g_z + V_z - \frac{\partial p}{\partial z}$	$\rho g_z + V_z - \frac{\partial p}{\partial z}$
<u>Energy</u>		h	Q	Q

* Centrifugal force term

** Coriolis force term

2.2 Porous-Body モデル表示式

2.2.1 固体を含む流動場

流動場に固体障害物が存在する場合、この存在は、流れに2つの影響を与える。すなわち、

- (i) 形状効果：固体の存在によって流体部分が減少することによる流れへの影響
- (ii) 物理的效果：固体の存在が、流体の運動量およびエネルギー輸送に影響

これらの2つの効果を Porous-Body モデルでは、(i)については Surface Permeability r_A (Surface Porosity ともいう) および Volume Porosity r_v の概念を導入してモデル化し、(ii)については、分布抵抗 (distributed resistances) および分布熱源 (distributed heat sources) を導入する。

従来より分布抵抗、分布熱源のモデルは、多次元解析モデルに含まれているが、 r_A および r_v との関係につき独立ではないため、ここで特に明確にしておく必要がある。

2.2.2. Surface Permeability r_A と Volume Porosity r_v

Fig. 2.2-1 のように流体および中に固体障害物が含まれる静止した変形しない有限体系を考える。全体積 V は面積 A によって囲まれている。流体部分体積は V_f で、 A_f は流体部分が通過できる面積、一方 A_{fs} は V に含まれる全流体-固体接触面積をあらわしている。

Volume Porosity r_v は以下のように定義される。

$$r_v = \frac{V_f}{V} \quad (2.2-1)$$

あるいは

$$r_v = \frac{1}{V} \int_V I(\vec{r}) dV \quad (2.2-2)$$

ここで、 \vec{r} : 位置ベクトルで、 $I(\vec{r}) = \begin{cases} 1 & \vec{r} \text{ の終点の位置が流体} \\ 0 & \vec{r} \text{ の終点の位置が固体} \end{cases}$

一方 Surface Permeability r_A は

$$r_A = \frac{A_f}{A} = \frac{1}{A} \int_A I(\vec{r}) dA \quad (2.2-3)$$

として定義される。

2.2.3 流れの基礎式の Porous-body モデルによる表示

(2.1)~(2.3) 式の各式を Porous-body モデルによる表示で表わす前に、以下の平均操作を定義しておく。

体積平均 ${}^3\langle \phi \rangle$

$${}^3\langle \phi \rangle = \frac{1}{V} \int_V \phi dV \quad (2.2-4)$$

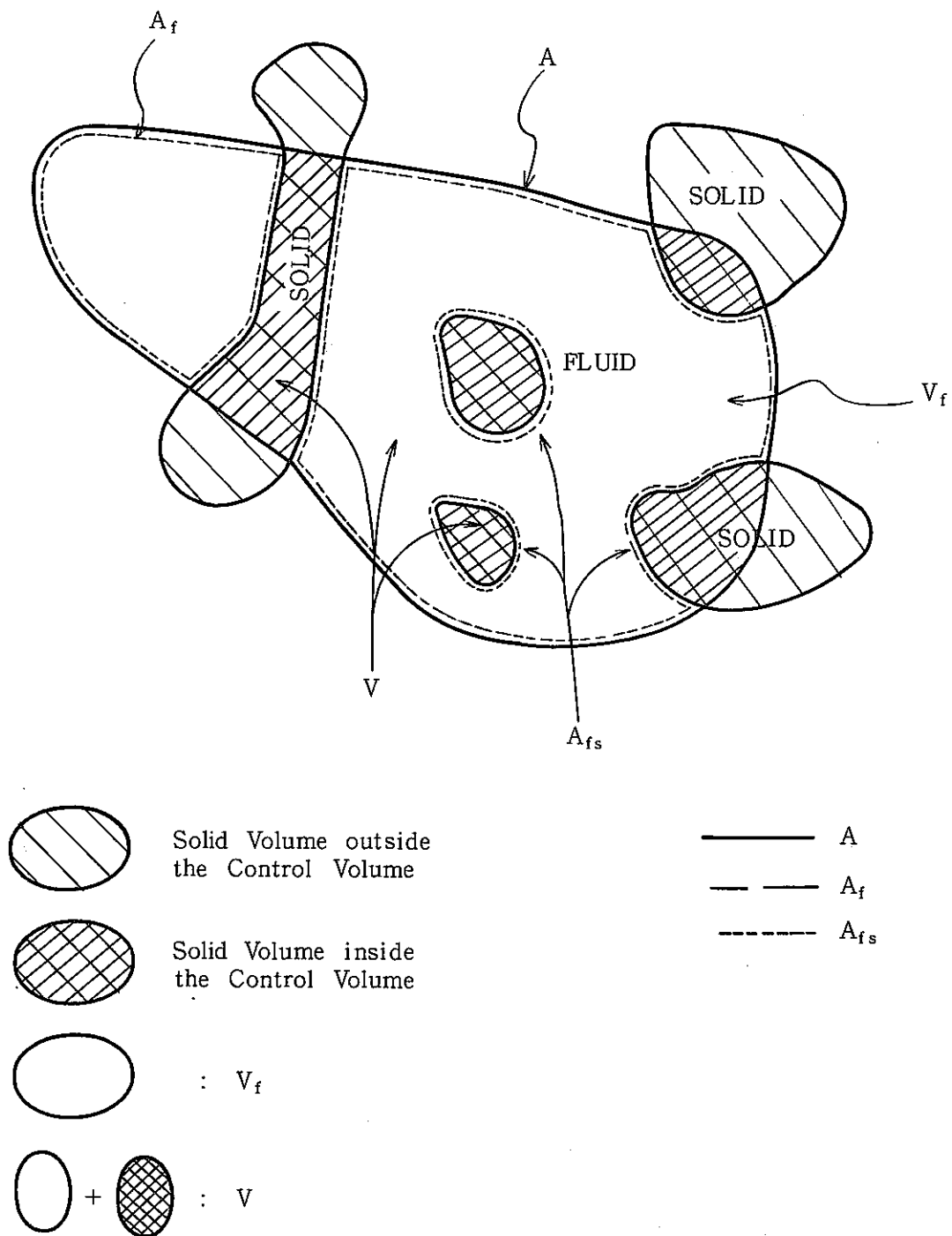


Fig. 2.2-1 Control Volume Containing a Single-Phase Fluid and Solids

正味体積平均: ${}^3i\langle\phi\rangle$

$${}^3i\langle\phi\rangle = \frac{1}{V_f} \int_{V_f} \phi \, dV \quad (2.2-5)$$

面積平均: ${}^2\{\phi\}$

$${}^2\{\phi\} = \frac{1}{A} \int_A \phi \, dA \quad (2.2-6)$$

正味面積平均: ${}^2i\{\phi\}$

$${}^2i\{\phi\} = \frac{1}{A_f} \int_{A_f} \phi \, dA \quad (2.2-6')$$

以上の4平均量に対しては、以下の関係が存在する。

$${}^3\langle\phi\rangle = \frac{1}{V} \int_V \phi \, dV = \frac{V_f}{V} \cdot \frac{1}{V_f} \int_{V_f} \phi \, dV = r_v \cdot {}^3i\langle\phi\rangle \quad (2.2-7)$$

$$(\because \int_V \phi \, dV = \int_{V_f} \phi \, dV)$$

$${}^2\{\phi\} = \frac{1}{A} \int_A \phi \, dA = \frac{A_f}{A} \cdot \frac{1}{A_f} \int_{A_f} \phi \, dA = r_A \cdot {}^2i\{\phi\} \quad (2.2-8)$$

これらの関係を用いて、先に示した Fig. 2.2-1 のコントロール・ボリューム体積 V で積分し、 V で除すと以下の Porous-body モデル表示による基礎式が得られる (誘導は付録 A を参照)。

Mass equation:

$$r_v \frac{\partial}{\partial t} {}^3i\langle\rho\rangle + \frac{1}{V} \int_{A_f} \rho \bar{u} \cdot \bar{n} \, dA = 0 \quad (2.2-9)$$

Momentum equation:

$$\begin{aligned} r_v \frac{\partial}{\partial t} {}^3i\langle\rho\bar{u}\rangle + \frac{1}{V} \int_{A_f} \rho \bar{u} (\bar{u} \cdot \bar{n}) \, dA \\ = \frac{1}{V} \int_{A_f} (-p\bar{n} - \bar{\tau} \cdot \bar{n}) \, dA + \frac{1}{V} \int_{A_{fs}} (-p\bar{n} - \bar{\tau} \cdot \bar{n}) \, dA + r_v {}^3i\langle\rho\rangle \bar{g} \end{aligned} \quad (2.2-10)$$

Energy equation:

$$\begin{aligned} r_v \frac{\partial}{\partial t} {}^3i\langle\rho h\rangle + \frac{1}{V} \int_{A_f} \rho h (\bar{u} \cdot \bar{n}) \, dA \\ = r_v {}^3i\left\langle \frac{dP}{dt} \right\rangle + \frac{1}{V} \int_{A_f} (-\bar{q} \cdot \bar{n}) \, dA + \frac{1}{V} \int_{A_{fs}} (-\bar{q} \cdot \bar{n}) \, dA + r_v {}^3i\langle Q \rangle \end{aligned} \quad (2.2-11)$$

両座標系共通の一般式は、(2.1-4) 式と同様に以下のように表示される。

$$r_v \frac{\partial}{\partial t} \rho\phi + \frac{\partial}{\partial x} (r_x J_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial y} (r_y J_y) + \frac{\partial}{\partial z} (r_z J_z) = S_\phi \quad (2.2-12)$$

ここで、 $r = \begin{cases} 1: \text{デカルト座標系} \\ r: \text{円筒座標系} \end{cases}$

$$J_x = \rho u \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

$$J_y = \rho v \phi - \Gamma_\phi \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)$$

$$J_z = \rho w \phi - \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z}$$

ϕ , S_ϕ は Table 2.1-1 に示されている。

ただし、円筒座標系では、 x, y, z はそれぞれ r, θ, z と読み替えるものとし、また Volume porosity r_v , Surface permeability r_x, r_y, r_z は、それぞれ以下のような再定式化を行なうものとする。

$$\left. \begin{aligned} r_v &= r_v \cdot r \\ r_x &= r_x \cdot \left(r + \frac{1}{2} \Delta r \right) \\ r_y &= r_y \cdot r \\ r_z &= r_z \cdot r \end{aligned} \right\} \quad (2.2-13)$$

Table 2.2-1 ϕ and S_ϕ with Porous Body Model in the Rectangular and Cylindrical Systems

Equation	Variable	ϕ	Source Term : S_ϕ	
			Rectangular	Cylindrical
Continuity	Scalar	1	0	0
Momentum				
(i)	x(r) direction velocity	u	$r_v \rho g_x - r_v \frac{\partial P}{\partial x}$	$r_v \rho g_r - r_v \frac{\partial P}{\partial r} + r_v \frac{\rho v^2}{r} + r_v V_r$
(ii)	y(θ) direction velocity	v	$r_v \rho g_y - r_v \frac{\partial P}{\partial y}$	$r_v \rho g_\theta - r_v \frac{1}{r} \frac{\partial P}{\partial \theta} - r_v \frac{\rho uv}{r} + r_v V_\theta$
(iii)	z(z) direction velocity	w	$r_v \rho g_z - r_v \frac{\partial P}{\partial z}$	$r_v \rho g_z - r_v \frac{\partial P}{\partial z}$
Energy	Enthalpy	h	$r_v Q$	$r_v Q$

3. 差分方程式

3.1 基礎方程式の差分表示一般式

3.1.1 定義

各保存式が離散化される際、その対象とする領域をコントロール・ボリュームと呼ぶ (Fig. 3.1-1)。コントロール・ボリュームの各表面は図のように、w, e, s, n, b, t 面で記述する。

次に計算メッシュに分割する際、それぞれの矩形領域を計算セルと呼ぶ。コントロール・ボリュームと計算セルは後に説明するように必ずしも一致しない。Fig. 3.1-2 に 3次元体系下での計算セルとそのセル番号を示す。

本書で使用される各従属変数および関連形状データ等は、Fig. 3.1-3 に示すように定義される。すなわち、密度 ρ 、エンタルピー h 、圧力 P 、volume porosity r_v 、セル体積 V は、セル中心で定義され、一方セル表面では、流速 u, v, w 、surface permeability r_x, r_y, r_z 、各方向計算セル表面積 A_x, A_y, A_z および質量流量 F_x, F_y, F_z 等が定義される。添字 ℓ は、属する計算セル番号を示す。

3.1.2 差分式の一般表示式

質量保存式、エネルギー保存式等のスカラー量保存式は、Fig. 3.1-4 に示すように計算セル 0 とコントロール・ボリュームは一致する。一方運動量保存式のコントロール・ボリュームは流速が計算セル表面で定義されていることからわかるように、各流速成分がコントロール・ボリュームの中心になるように半メッシュ移動した領域となる (Fig. 3.1-5)。

Porous Body モデルで定式化された質量、運動量、エネルギーの各保存式 (2.2-9), (2.2-10) および (2.2-11) 式を、これらのコントロール・ボリュームのまわりに積分として離散化し、得られる差分一般式を Table 3.1-1 に示す。これらの詳細な誘導は付録 C に示す。これらの Table 3.1-1 をまとめて一般表示形にすると、(2.2-12) 式に対する次のような差分式が得られる。(ここでは以後の検討は便宜上、 J_x, J_y, J_z は対流項と拡散項に分離して表示している。)

$$\begin{aligned}
 & V r_v \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho \phi \rangle + \Delta_x (A_x r_x \{ \rho u \phi \}) + \Delta_y (A_y r_y / r \{ \rho v \phi \}) + \Delta_z (A_z r_z \{ \rho w \phi \}) \\
 & = V \cdot S_\phi + \Delta_x \left(A_x r_x \left\{ \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right\} \right) + \Delta_y \left(A_y r_y / r \left\{ \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right\} \right) + \Delta_z \left(A_z r_z \left\{ \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right\} \right)
 \end{aligned}
 \tag{3.1-1}$$

Table 3.1-1 Difference Equations Using Porous Body Model in Rectangular Coordinates (x, y, z)

Mass equation :

$$Vr_v \frac{\partial}{\partial t} {}^{3i} \langle \rho \rangle + \Delta_x (A_x r_x {}^{2i} \{ \rho u \}) + \Delta_y (A_y r_y {}^{1i} \{ \rho v \}) + \Delta_z (A_z r_z {}^{1i} \{ \rho w \}) = 0 \quad (A)$$

Momentum equation :

$$\begin{aligned} Vr_v \frac{\partial}{\partial t} {}^{3i} \langle \rho u \rangle + \Delta_{x+\frac{1}{2}\Delta x} (A_x r_x {}^{2i} \{ \rho u^2 \}) + \Delta_y (A_y r_y {}^{1i} \{ \rho v u \}) + \Delta_z (A_z r_z {}^{1i} \{ \rho w u \}) \\ = -r_v \Delta_{x+\frac{1}{2}\Delta x} (A_x {}^{3i} \langle P \rangle) + r_v {}^{3i} \langle \rho \rangle g_x V + r_v V {}^{3i} \langle R_x \rangle \\ + \Delta_{x+\frac{1}{2}\Delta x} (A_x r_x {}^{2i} \{ \mu \frac{\partial u}{\partial x} \}) + \Delta_y (A_y r_y {}^{2i} \{ \mu \frac{\partial u}{\partial y} \}) + \Delta_z (A_z r_z {}^{2i} \{ \mu \frac{\partial u}{\partial z} \}) \end{aligned} \quad (B)$$

$$\begin{aligned} Vr_v \frac{\partial}{\partial t} {}^{3i} \langle \rho v \rangle + \Delta_x (A_x r_x {}^{2i} \{ \rho u v \}) + \Delta_{y+\frac{1}{2}\Delta y} (A_y r_y {}^{2i} \{ \rho v^2 \}) + \Delta_z (A_z r_z {}^{2i} \{ \rho v w \}) \\ = -r_v \Delta_{y+\frac{1}{2}\Delta y} (A_y {}^{3i} \langle P \rangle) + r_v {}^{3i} \langle \rho \rangle g_y V + r_v V {}^{3i} \langle R_y \rangle \\ + \Delta_x (A_x r_x {}^{2i} \{ \mu \frac{\partial v}{\partial x} \}) + \Delta_{y+\frac{1}{2}\Delta y} (A_y r_y {}^{2i} \{ \mu \frac{\partial v}{\partial y} \}) + \Delta_z (A_z r_z {}^{2i} \{ \mu \frac{\partial v}{\partial z} \}) \end{aligned} \quad (C)$$

$$\begin{aligned} Vr_v \frac{\partial}{\partial t} {}^{3i} \langle \rho w \rangle + \Delta_x (A_x r_x {}^{2i} \{ \rho u w \}) + \Delta_y (A_y r_y {}^{2i} \{ \rho v w \}) + \Delta_{z+\frac{1}{2}\Delta z} (A_z r_z {}^{2i} \{ \rho w^2 \}) \\ = -r_v \Delta_{z+\frac{1}{2}\Delta z} (A_z {}^{3i} \langle P \rangle) + r_v {}^{3i} \langle \rho \rangle g_z V + r_v V {}^{3i} \langle R_z \rangle \\ + \Delta_x (A_x r_x {}^{2i} \{ \mu \frac{\partial w}{\partial x} \}) + \Delta_y (A_y r_y {}^{2i} \{ \mu \frac{\partial w}{\partial y} \}) + \Delta_{z+\frac{1}{2}\Delta z} (A_z r_z {}^{2i} \{ \mu \frac{\partial w}{\partial z} \}) \end{aligned} \quad (D)$$

Energy equations :

$$\begin{aligned} Vr_v \frac{\partial}{\partial t} {}^{3i} \langle \rho h \rangle + \Delta_x (A_x r_x {}^{2i} \{ \rho u h \}) + \Delta_y (A_y r_y {}^{2i} \{ \rho v h \}) + \Delta_z (A_z r_z {}^{2i} \{ \rho w h \}) \\ = \Delta_x (A_x r_x {}^{2i} \{ \Gamma_h \frac{\partial h}{\partial x} \}) + \Delta_y (A_y r_y {}^{2i} \{ \Gamma_h \frac{\partial h}{\partial y} \}) + \Delta_z (A_z r_z {}^{2i} \{ \Gamma_h \frac{\partial h}{\partial z} \}) + r_v V {}^{3i} \langle Q \rangle \end{aligned} \quad (E)$$

$$\begin{aligned} \Delta_x (\quad) &= (\quad)_{x+\frac{1}{2}\Delta x} - (\quad)_{x-\frac{1}{2}\Delta x} \\ \Delta_y (\quad) &= (\quad)_{y+\frac{1}{2}\Delta y} - (\quad)_{y-\frac{1}{2}\Delta y} \\ \Delta_z (\quad) &= (\quad)_{z+\frac{1}{2}\Delta z} - (\quad)_{z-\frac{1}{2}\Delta z} \\ \Delta_{x+\frac{1}{2}\Delta x} (\quad) &= (\quad)_{x+\Delta x} - (\quad)_x \\ \Delta_{y+\frac{1}{2}\Delta y} (\quad) &= (\quad)_{y+\Delta y} - (\quad)_y \\ \Delta_{z+\frac{1}{2}\Delta z} (\quad) &= (\quad)_{z+\Delta z} - (\quad)_z \end{aligned}$$

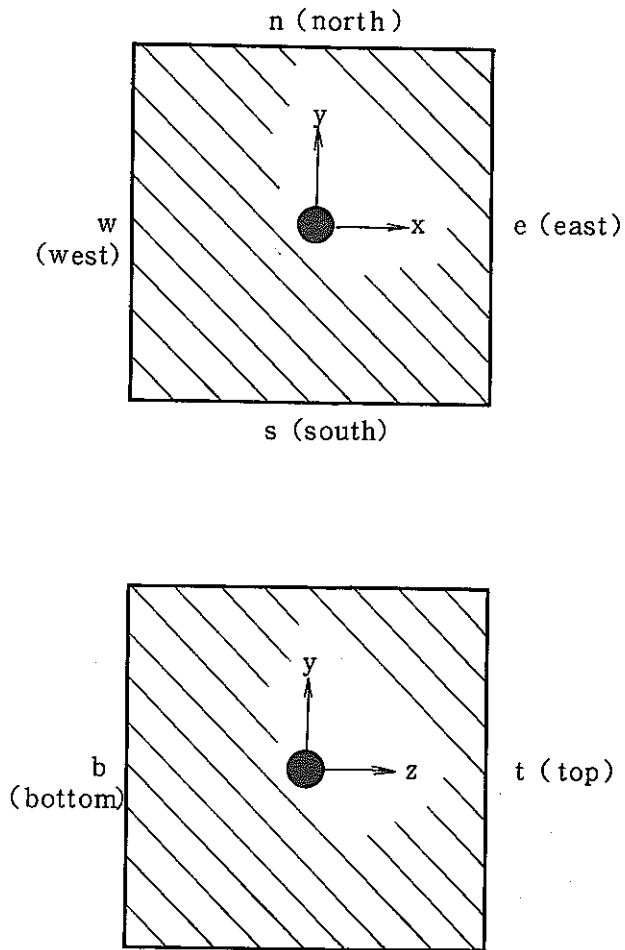


Fig. 3.1-1 Surface Denotation of Control Volume

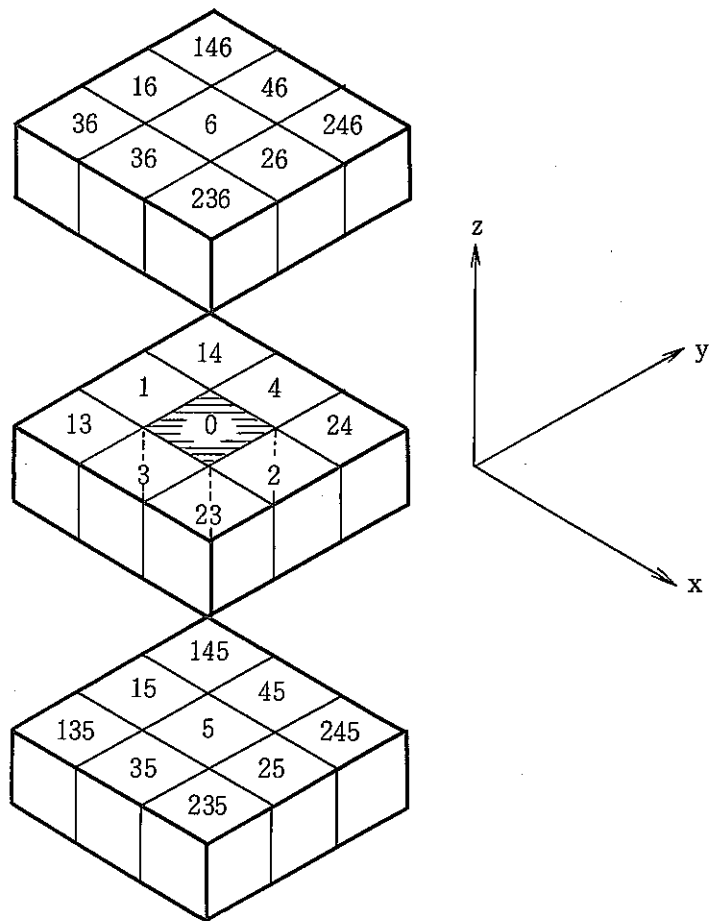


Fig. 3.1-2 Computational Cell 0 and Its Neighbors

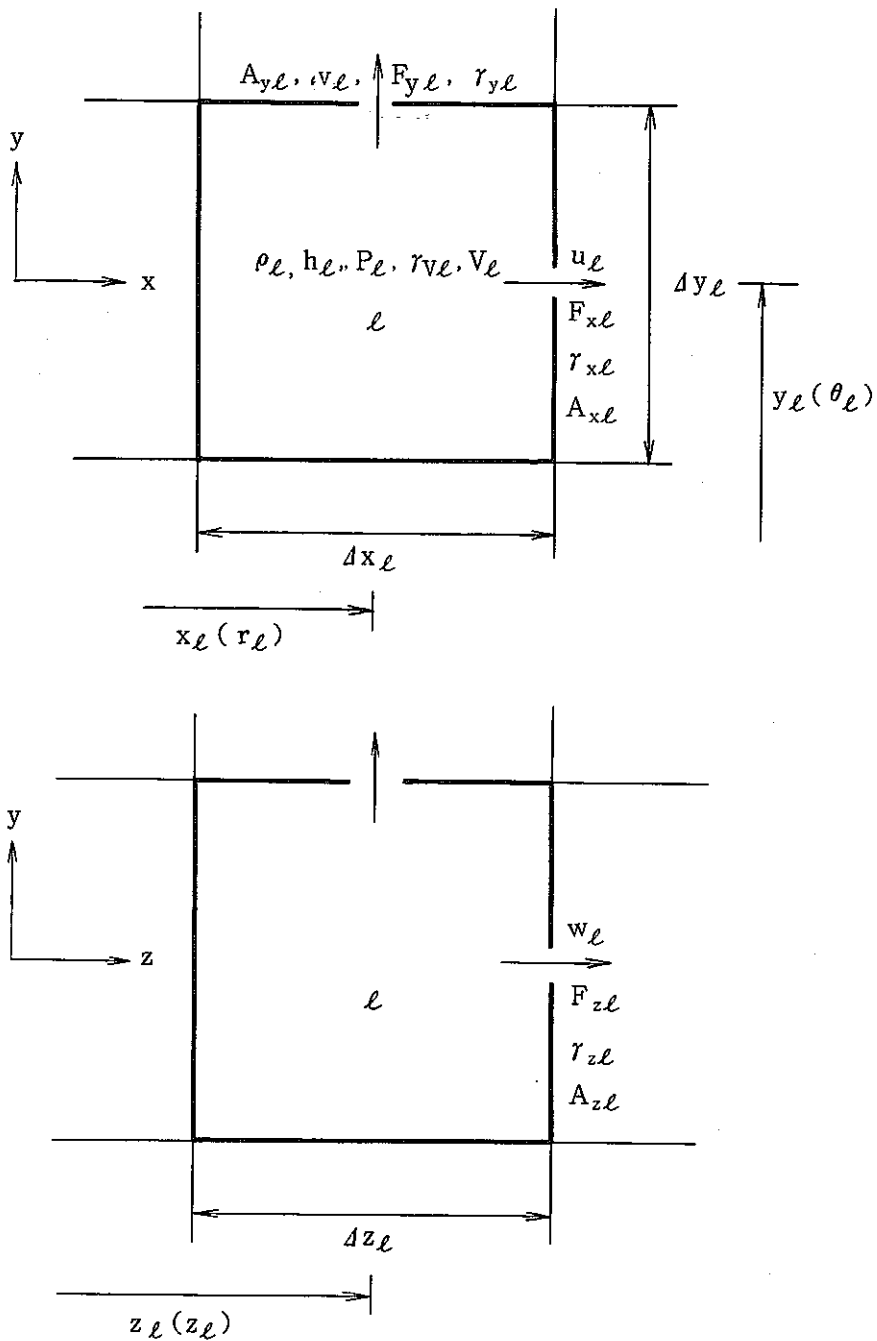


Fig. 3.1-3 Denotation of Variables Around Computational Cell l

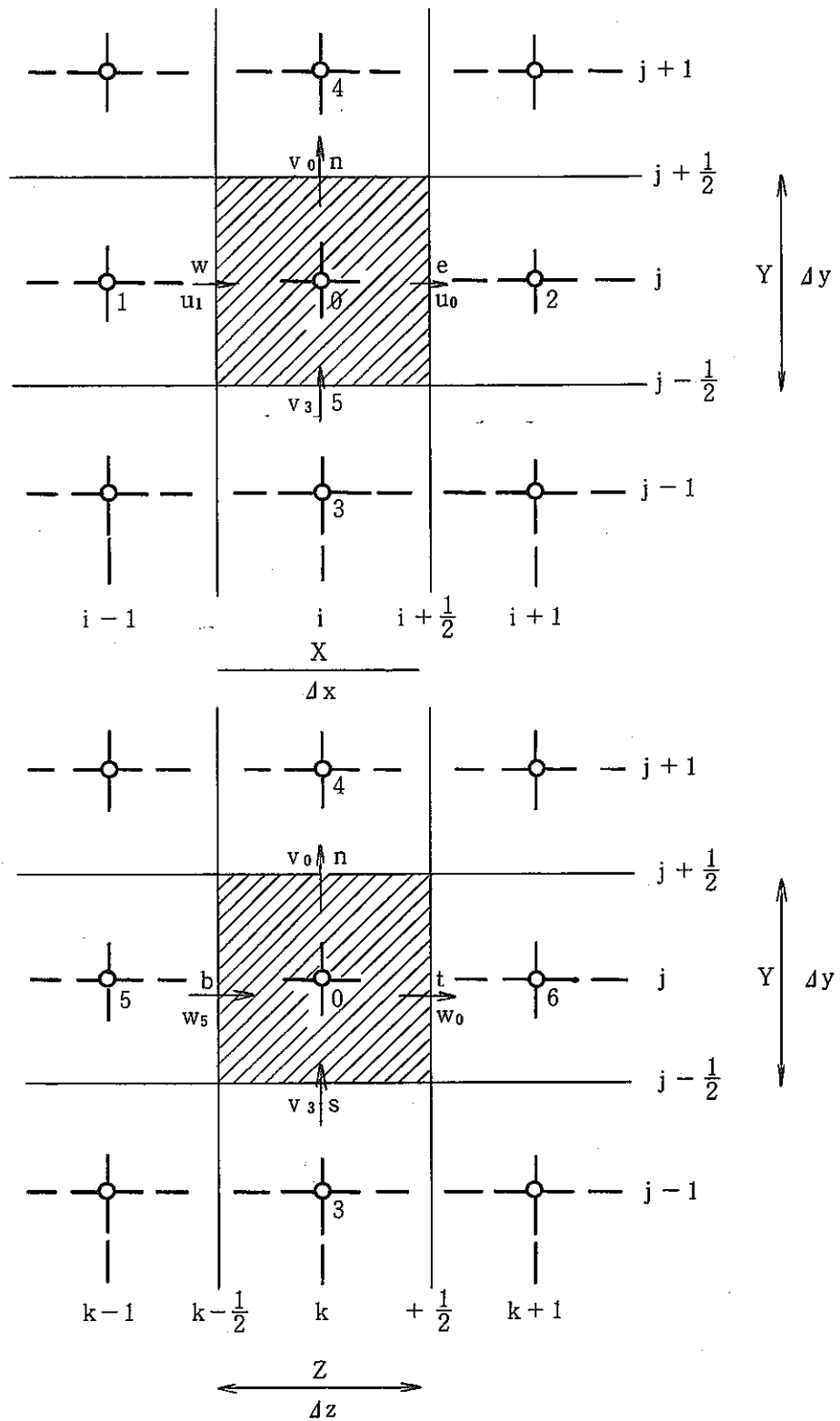
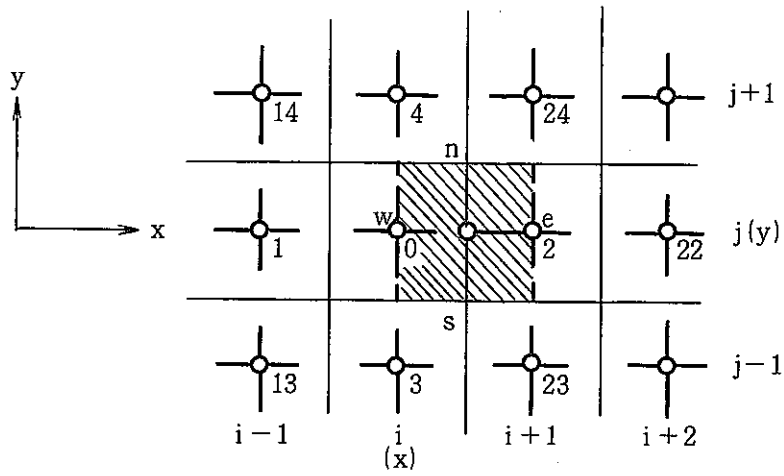
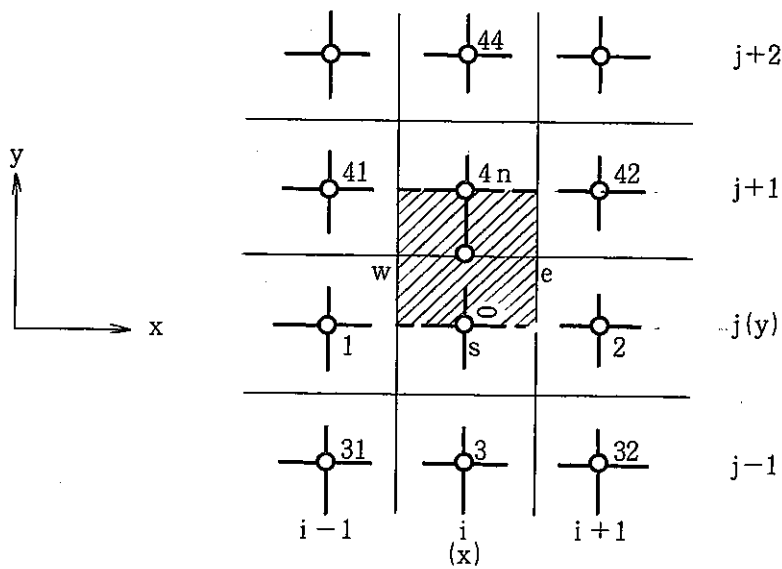


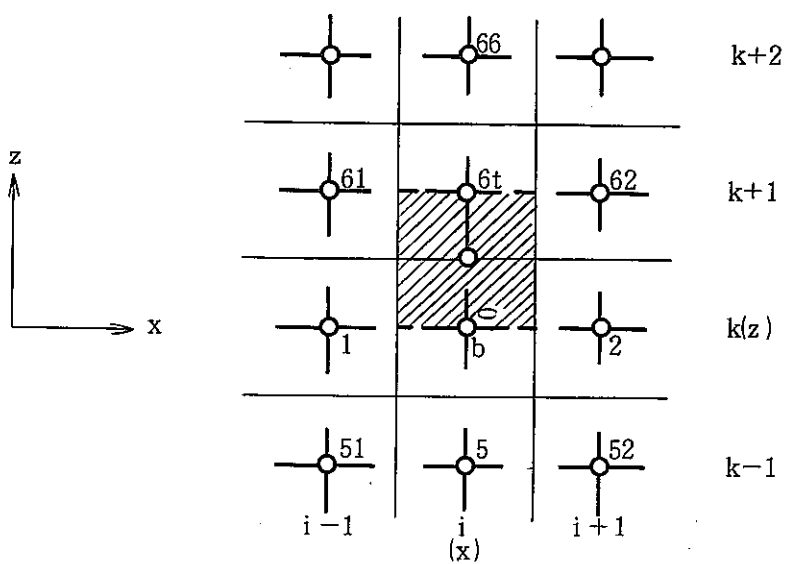
Fig. 3.1-4 Main Control Volume Around Point 0 and Its Neighbors



(a) u-Momentum Control Volume



(b) v-Momentum Control Volume



(c) w-Momentum Control Volume

Fig. 3.1-5 Momentum Control Volume Around Point 0 and Its Neighbors

3.2 対流項に関する差分式

Table 3.1-1 に示した各保存式の対流項, すなわち各式の左辺第 2, 第 3 および第 4 項の具体的展開を行なう。AQUA では, 対流項の離散化法として COMMIX-1A からそのままうけついで 1 次風上差分法と新たに追加した高次差分法が使用される。

3.2.1 1 次風上差分法

(1) スカラー量 (ρ , h など) 保存式の対流項

(3.1-1) 式において, 右辺第 2 項の x 方向差分式を Fig. 3.1-3 のコントロール・ボリューム 0 について展開すると

$$\begin{aligned} \Delta_x(A_x r_x {}^i\{\rho u \phi\}) &= A_{x0} r_{x0} {}^2i\{\rho u \phi\}_e - A_{x1} r_{x1} {}^2i\{\rho u \phi\}_w \\ &= A_{x0} r_{x0} u_0 {}^2i\{\rho \phi\}_e - A_{x1} r_{x1} u_1 {}^2i\{\rho \phi\}_w \end{aligned} \quad (3.2-1)$$

計算セル表面で定義される u を除いて, e 面および w 面上の ρ および ϕ は何らかの内挿計算が必要である。1 次風上差分法では, その表面上の値をその面の流速 (この場合, u_e, u_w) の上流側既知量に等しいとする。すなわち (3.2-1) 式は,

$$\begin{aligned} \Delta_x(A_x r_x {}^i\{\rho u \phi\}) &= A_{x0} r_{x0} u_0 \langle \rho \rangle_e \langle \phi \rangle_e - A_{x1} r_{x1} u_1 \langle \rho \rangle_w \langle \phi \rangle_w \\ &= F_{x0} \langle \phi \rangle_e - F_{x1} \langle \phi \rangle_w \end{aligned} \quad (3.2-2)$$

ここで,

$\langle \phi \rangle_e = \ell$ 表面上の ϕ を 1 次風上差分法によって求める

$$\langle \phi \rangle_e = \begin{cases} \phi_0 & u_e \geq 0 \\ \phi_2 & u_e < 0 \end{cases}$$

$$\langle \phi \rangle_w = \begin{cases} \phi_1 & u_w \geq 0 \\ \phi_0 & u_w < 0 \end{cases}$$

である。

(2) 運動量保存式

u -運動量保存式について考える。Fig. 3.1-5 に示したようにコントロール・ボリュームは図の破線で囲まれた領域となる。流速の場合, ρ や h と異なり, 各場所の surface permeability とは独立ではないため, (3.2-2) 式と同一には扱えない。

AQUA では COMMIX-1A と同様, 運動量束として, 次のようなモデルを使用している。すなわち運動量コントロール・ボリューム 0 の正味体積平均運動量 ${}^3i\langle \rho u \rangle_0$, e 面, w 面での正味面積平均運動量束 ${}^2i\{\rho u\}_e, {}^2i\{\rho u\}_w$ を次のような関係式で表わされるとする (誘導は付録 A を参照)。

$${}^3i\langle \rho u \rangle_0 = \frac{r_{x0} \rho_m u_0}{r_{vm}} \quad (3.2-3)$$

$${}^2i\{\rho u\}_e = \frac{\rho_2 \langle r_x u \rangle_e}{r_{v2}} \quad (3.2-4)$$

$${}^{2i}\{\rho u\}_w = \frac{\rho_0 \langle r_x u \rangle_w}{r_{v0}}$$

$$\text{ここで, } \rho_m = \frac{\Delta x_0 \rho_0 + \Delta x_2 \rho_2}{\Delta x_0 + \Delta x_2}$$

$$r_{vm} = \frac{1}{2}(r_{v0} + r_{v2})$$

たがって x-方向対流項は、次のようになる。

$$\begin{aligned} \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x (A_x r_x) {}^{2i}\{\rho u u\} &= (A_x r_x u)_e \frac{\rho_2}{r_{v2}} \langle r_x u \rangle_e - (A_x r_x u)_w \frac{\rho_0}{r_{v0}} \langle r_x u \rangle_w \\ &= \bar{F}_e \langle r_x u \rangle_e - \bar{F}_w \langle r_x u \rangle_w \end{aligned} \quad (3.2-6)$$

$$\text{ここで, } \bar{F}_e = \frac{1}{2} (A_{x0} r_{x0} u_0 + A_{x2} r_{x2} u_2) \rho_2 / r_{v2}$$

$$\bar{F}_w = \frac{1}{2} (A_{x0} r_{x0} u_0 + A_{x1} r_{x1} u_1) \rho_0 / r_{v0}$$

以上、1次風上差分法によるスカラー量保存式および運動量保存式対流項の基本的差分式を示した。AQUAで使用している各式の対流項差分式(1次風上差分法)を Table 3.2-1 にまとめる。

Table 3.2-1 Discretization of Convection Terms with the 1-st Upwind Scheme

Scalar equation :

$$\begin{aligned}
 & \Delta_x(A_x \gamma_x^{2i} \{\rho u \phi\}) + \Delta_y(A_y \gamma_y^{2i} \{\rho v \phi\}) + \Delta_z(A_z \gamma_z^{2i} \{\rho w \phi\}) \\
 & \equiv \phi_0[-F_{x1}, 0] + \phi_0[F_{x0}, 0] - \phi_1[F_{x1}, 0] - \phi_2[-F_{x0}, 0] \\
 & + \phi_0[-F_{y3}, 0] + \phi_0[F_{y0}, 0] - \phi_3[F_{y3}, 0] - \phi_4[-F_{y0}, 0] \\
 & + \phi_0[-F_{z5}, 0] + \phi_0[F_{z0}, 0] - \phi_5[F_{z5}, 0] - \phi_6[-F_{z0}, 0] \quad (A)
 \end{aligned}$$

Momentum equation (u-equation) :

$$\begin{aligned}
 & \Delta_x + \frac{1}{2} \Delta_x (A_x \gamma_x^{2i} \{\rho u^2\}) + \Delta_y(A_y \gamma_y^{2i} \{\rho v u\}) + \Delta_z(A_z \gamma_z^{2i} \{\rho w u\}) \\
 & \equiv u_0 \gamma_{x0}[-\bar{F}_{x1}, 0] + u_0 \gamma_{x0}[\bar{F}_{x0}, 0] - u_1 \gamma_{x1}[\bar{F}_{x1}, 0] - u_2 \gamma_{x2}[-\bar{F}_{x0}, 0] \\
 & + u_0 \gamma_{x0} \left\{ \left[-\frac{1}{2} \bar{F}_{y3}, 0 \right] + \left[-\frac{1}{2} \bar{F}_{y23}, 0 \right] + u_0 \gamma_{x0} \left\{ \left[\frac{1}{2} \bar{F}_{y0}, 0 \right] + \left[\frac{1}{2} \bar{F}_{y2}, 0 \right] \right\} \right. \\
 & \left. - u_3 \gamma_{x3} \left\{ \left[\frac{1}{2} \bar{F}_{y3}, 0 \right] + \left[\frac{1}{2} \bar{F}_{y23}, 0 \right] \right\} - u_4 \gamma_{x4} \left\{ \left[-\frac{1}{2} \bar{F}_{y0}, 0 \right] + \left[-\frac{1}{2} \bar{F}_{y2}, 0 \right] \right\} \right. \\
 & \left. + u_0 \gamma_{x0} \left\{ \left[-\frac{1}{2} \bar{F}_{z5}, 0 \right] + \left[-\frac{1}{2} \bar{F}_{z25}, 0 \right] \right\} + u_0 \gamma_{x0} \left\{ \left[\frac{1}{2} \bar{F}_{z0}, 0 \right] + \left[\frac{1}{2} \bar{F}_{z2}, 0 \right] \right\} \right. \\
 & \left. - u_5 \gamma_{x5} \left\{ \left[\frac{1}{2} \bar{F}_{z5}, 0 \right] + \left[\frac{1}{2} \bar{F}_{z25}, 0 \right] \right\} - u_6 \gamma_{x6} \left\{ \left[-\frac{1}{2} \bar{F}_{z0}, 0 \right] + \left[-\frac{1}{2} \bar{F}_{z2}, 0 \right] \right\} \quad (B)
 \end{aligned}$$

$$[F, 0] \equiv \max(F, 0)$$

$$F_{x1} = A_{x1} \gamma_{x1} u_1 \langle \rho \rangle_w, \quad F_{x0} = A_{x0} \gamma_{x0} u_0 \langle \rho \rangle_e, \quad F_{y3} = A_{y3} \gamma_{y3} v_3 \langle \rho \rangle_s$$

$$F_{y0} = A_{y0} \gamma_{y0} v_0 \langle \rho \rangle_n, \quad F_{z5} = A_{z5} \gamma_{z5} w_5 \langle \rho \rangle_b, \quad F_{z0} = A_{z0} \gamma_{z0} w_0 \langle \rho \rangle_t$$

$$\bar{F}_{x1} = (A_{x1} \gamma_{x1} u_1 + A_{x0} \gamma_{x0} u_0) \rho_0 / 2 / \gamma_{v0}$$

$$\bar{F}_{x0} = (A_{x0} \gamma_{x0} u_0 + A_{x2} \gamma_{x2} u_2) \rho_2 / 2 / \gamma_{v2}$$

$$\bar{F}_{y3} = F_{y3} / \langle \gamma v \rangle_s, \quad \bar{F}_{y23} = F_{y23} / \langle \gamma v \rangle_{2s}, \quad \bar{F}_{y0} = F_{y0} / \langle \gamma v \rangle_n, \quad \bar{F}_{y2} = F_{y2} / \langle \gamma v \rangle_{2n}$$

$$\bar{F}_{z5} = F_{z5} / \langle \gamma v \rangle_b, \quad \bar{F}_{z25} = F_{z25} / \langle \gamma v \rangle_{2b}, \quad \bar{F}_{z0} = F_{z0} / \langle \gamma v \rangle_t, \quad \bar{F}_{z2} = F_{z2} / \langle \gamma v \rangle_{2t}$$

where suffix $\ell \equiv \ell$ surface of computational cell 0,

$2\ell \equiv \ell$ surface of computational cell 2,

and $\langle \phi \rangle_\ell \equiv \phi$ value on surface ℓ with the 1st upwind scheme.

3.2.2 高次差分法

AQUA コードでは、1次風上差分法のほかに打ち切り誤差が空間に関し2次の QUICK 法 (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics)⁽⁴⁾ および QUICK-FRAM 法⁽²⁾⁽³⁾ が使用できる。QUICK-FRAM 法は、QUICK 法を基本として、流束制限手法として FRAM 法⁽⁵⁾ (Filtering Remedy and Methodology) を使用したものである。以下にそれらの手法の離散化式を示す。

(1) QUICK 法

スカラー量保存式での対流項のうち、 x -方向成分を考える。先に示した Fig. 3.1-1 図のコントロール・ボリュームの e 面および w 面での ϕ の値として、各面の流速をもとに上流側に2点、下流側に1点の計3点での2次曲線内挿によって求めるものが、本手法の基本である。今簡単のために Fig. 3.2-1 のように流速を正として、既知量 ϕ_R 、 ϕ_C および ϕ_L に対し、境界 r の未知数 ϕ_r を求める。QUICK 法では以下の関数 ϕ_Q によって ϕ_r が与えられる。

$$\begin{aligned}\phi_r &= \phi_Q(\phi_R, \phi_C, \phi_L) \\ &= \frac{1}{(X_R - X_C)(X_C - X_L)(X_R - X_L)} \{ X_C \cdot X_L \cdot (X_C - X_L) \cdot \phi_R - X_R \cdot X_L \cdot (X_R - X_L) \cdot \phi_C \\ &\quad + X_R \cdot X_C \cdot (X_R - X_C) \cdot \phi_L \} \quad (3.2-7)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{ここで} \quad X_R &= 0.5 \Delta x_R \\ X_C &= -0.5 \Delta x_C \\ X_L &= -(4x_C + 0.5 \Delta x_L)\end{aligned}$$

である。

等間隔メッシュの場合、(3.2-7)式は

$$\begin{aligned}\phi_r &= \frac{1}{8}(3\phi_R + 6\phi_C - \phi_L) \\ &= \frac{1}{2}(\phi_R + \phi_L) - \frac{1}{8}(\phi_R + \phi_L - 2\phi_C) \quad (3.2-8)\end{aligned}$$

となる。右辺第1項は、中心差分である。右辺第2項は、 $\frac{1}{8}\Delta x^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ を意味しており、(3.2-8)式は中心差分に対し、曲率による補正が行われる内挿法になっていることがわかる。QUICK 法を2次元、3次元に拡張する場合、厳密には2次曲面内挿になるが、AQUA では(3.2-7)式を直接各方向(x, y, z)の内挿式としている。したがって、スカラー量保存式の対流項のうち x -方向成分は次のように表わされる。

$$\Delta_x(A_x \tau_x^i \{\rho u \phi\}) = F_{x0}[\phi]_e - F_{x1}[\phi]_w \quad (3.2-9)$$

ここで、 $[\]$ は QUICK 法による内挿計算を表わすものとする。すなわち、

$$[\phi]_e = \begin{cases} \phi_Q(\phi_2, \phi_0, \phi_1) & u_e \geq 0 \\ \phi_Q(\phi_0, \phi_2, \phi_{22}) & u_e < 0 \end{cases}$$

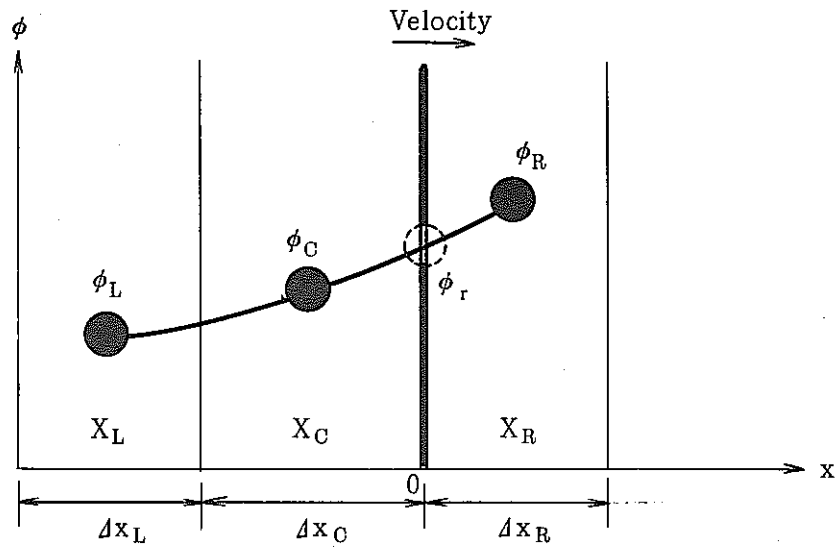


Fig. 3.2-1 A Schematic of the QUICK Method

$$[\phi]_w = \begin{cases} \phi_Q(\phi_0, \phi_1, \phi_{11}) & u_w \geq 0 \\ \phi_Q(\phi_0, \phi_0, \phi_2) & u_w < 0 \end{cases}$$

である。

y 方向, z 方向の対流項も同様に行える。

運動量保存式については, 運動量束は, 先に示した (3.2-3)~(3.2-5) 式のようにモデル化している。したがって, QUICK 法についても同様に e 面, w 面での正味運動量束 ${}^{2i}\{\rho u\}_e, {}^{2i}\{\rho u\}_w$ を次のように仮定する。

$${}^{2i}\{\rho u\}_e = \frac{\rho_2 [r_x u]_e}{r_{v2}} \quad (3.2-10)$$

$${}^{2i}\{\rho u\}_w = \frac{\rho_0 [r_x u]_w}{r_{v0}} \quad (3.2-11)$$

また, 流れ方向 (この場合 x) と直交する方向については, たとえば n 面では,

$${}^i\{\rho u\}_n = \left\langle \frac{\rho}{r_v} \right\rangle_n [r_x u]_n \quad (3.2-12)$$

とする。

したがって, u-運動量式の x-方向対流項は

$$\begin{aligned} \Delta_{x+\frac{1}{2}} \Delta_x (A_x r_x {}^i\{\rho u u\}) &= (A_x r_x \rho u)_e \frac{1}{r_{v2}} [r_x u]_e - (A_x r_x \rho u)_w \frac{1}{r_{v0}} [r_x u]_w \\ &= \overline{F_{x0}} \cdot [r_x u]_e - \overline{F_{x1}} \cdot [r_x u]_w \end{aligned} \quad (3.2-13)$$

また, y-方向の対流項は,

$$\begin{aligned} \Delta_y (A_y r_y {}^i\{\rho v u\}) &= (A_y r_y v)_n \left\langle \frac{\rho}{r_v} \right\rangle_n [r_x u]_n - (A_y r_y v)_s \left\langle \frac{\rho}{r_v} \right\rangle_s [r_x u]_s \\ &= \frac{1}{2} (\overline{F_{y0}} + \overline{F_{y2}}) [r_x u]_n - \frac{1}{2} (\overline{F_{y3}} + \overline{F_{y32}}) [r_x u]_s \end{aligned} \quad (3.2-14)$$

(2) QUICK-FRAM 法

QUICK 法自体は, 精度が高く安定な手法であるが, 高次差分法に特有の被輸送量の急変部での数値的振動からまぬがれているわけではない⁽²⁾。したがって, ここではこの数値的振動を防止する手法として, FRAM 法⁽⁵⁾を併用できるようにした。

FRAM 法は, 数値的振動が対流項の離散化から生じていることに注目し, 逆に対流項を含まないラグランジ座標系表示の保存方程式の解を指標として, 局所的に数値振動の発生する場所を特定し, その場所のみ対流項の離散化式を高次差分から 1 次風上差分に変更するものである。すなわち,

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \phi + \nabla \cdot (\rho \phi \bar{u}) = S_\phi \quad (3.2-15)$$

をラグランジ表示式で表わすと,

$$\begin{aligned}\frac{D}{Dt}\rho\phi &= -\rho\phi V\cdot\bar{u} + S_\phi \\ &= \phi \frac{D}{Dt}\rho + S_\phi\end{aligned}\quad (3.2-16)$$

あるいは

$$\rho \frac{D}{Dt}\phi = S_\phi \quad (3.2-17)$$

となる。

(3.2-17)式をオイラー陽解法で解き、得られた ϕ の値を ϕ^* とすると

$$\phi^* = \phi^n + S_\phi^n / \rho^n \cdot \Delta t \quad (3.2-18)$$

ここで添字 n は、既知量(前の計算ステップでの値)である。

点0のコントロール・ボリュームおよびそのまわりの6コントロール・ボリュームでの ϕ^* を(3.2-18)式より求め、これらを ϕ_i^* ($i=0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$)とする。これらの最大値 ϕ_{\max}^* と最小値 ϕ_{\min}^* 、すなわち

$$\phi_{\max}^* = (\phi_i^*)_{\min} \quad (i=1, \dots, 6) \quad (3.2-19)$$

$$\phi_{\min}^* = (\phi_i^*)_{\max} \quad (i=1, \dots, 6) \quad (3.2-20)$$

および(3.2-15)式の任意の差分式を使用して求められる解を $\tilde{\phi}_0$ として、次のように新しい(3.2-15)式の解 ϕ_0^{n+1} を求める。

$$(i) \phi_{\min}^* \leq \tilde{\phi}_0 \leq \phi_{\max}^* \text{ のとき } \quad \phi_0^{n+1} = \tilde{\phi}_0$$

$$(ii) (i) \text{ 以外のとき } \quad \phi_0^{n+1} = 1 \text{ 次風上差分法による (3.2-15) 式の解}$$

ここで $\tilde{\phi}_0$ は、本コードの場合、QUICK法で求める解を採用する。

本手法の性能については文献(2)を参照されたい。

(3) 非定常計算での取扱い

非定常計算では、空間精度を2次($O(\Delta x^2)$)にしていることにあわせて、時間項についても2次($O(\Delta t^2)$)の手法を採用している。

今 Fig. 3.2-2 のように任意位置 x での時刻 t および $t+\Delta t$ 間の被輸送量 ϕ の変化を考える。時刻 $t+\Delta t$ 間の $x=x_0$ を通過する平均 $\bar{\phi}$ は

$$\begin{aligned}\bar{\phi} &= \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi(\tau, x_0) d\tau \\ &= \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \phi(t, x_0 + u(t-\tau)) d\tau \\ &= \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \left\{ \phi(t, x_0) + u(t-\tau) \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{1}{2} u^2 (t-\tau)^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \dots \right\} d\tau \\ &\doteq \phi(t, x_0) - \frac{1}{2} u \Delta t \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{1}{6} u^2 \Delta t^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\end{aligned}\quad (3.2-21)$$

QUICKEST法(QUICK法の非定常計算法)⁽⁴⁾では、(3.2-21)式のように ϕ の2次微係数まで

を使用しているが、2次微係数を無視しても、精度の劣化がほとんどないこと、また計算の単純さから、本コードでは、

$$\bar{\phi} = \phi(t, x_0) - \frac{1}{2} u \Delta t \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (3.2-22)$$

を採用し、 ϕ に関する1次微係数は、各コントロール・ボリューム中心での値を中心差分で内挿して求め、各表面での値は1次風上差分法をもとに上流側既知量とした。

多次元の場合に拡張すると、(3.2-22)式は、

$$\bar{\phi} = \phi(t, x_0, y_0, z_0) - \frac{1}{2} \Delta t \left(u \frac{\partial \phi}{\partial x} + v \frac{\partial \phi}{\partial y} + w \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \quad (3.2-23)$$

となる。

AQUAにおけるスカラー量保存式および運動量保存式の対流項差分式の実際をTable 3.2-2にまとめる。

Table 3.2-2 Discretization of Convection Terms with the QUICK Scheme (1/3)

(1) Scalar Equations: $\frac{\partial}{\partial x}(\phi u)$ is discretized as a typical discretization

$$\Delta x (A_x \tau_x^{2i} \{\rho \phi\}) = F_{x0} [\bar{\phi}]_e - F_{x1} [\bar{\phi}]_w \quad (\text{A})$$

$$[\bar{\phi}]_e = \begin{cases} \phi_Q(\phi_2, \phi_0, \phi_1) - T_{\text{ran},e} & u_e \geq 0 \\ \phi_Q(\phi_0, \phi_2, \phi_{22}) - T_{\text{ran},e} & u_e < 0 \end{cases} \quad (\text{B})$$

$$[\bar{\phi}]_w = \begin{cases} \phi_Q(\phi_0, \phi_1, \phi_{11}) - T_{\text{ran},w} & u_w \geq 0 \\ \phi_Q(\phi_1, \phi_0, \phi_2) - T_{\text{ran},w} & u_w < 0 \end{cases} \quad (\text{C})$$

$$T_{\text{ran},e} = \frac{1}{2} \Delta t \left(u_e \frac{\partial}{\partial x} \phi_e + v_e \frac{\partial}{\partial y} \phi_e + w_e \frac{\partial}{\partial z} \phi_e \right) \quad (\text{D})$$

$$T_{\text{ran},w} = \frac{1}{2} \Delta t \left(u_w \frac{\partial}{\partial x} \phi_w + v_w \frac{\partial}{\partial y} \phi_w + w_w \frac{\partial}{\partial z} \phi_w \right) \quad (\text{E})$$

$$u_e = u_0, \quad v_e = \frac{1}{4} (v_0 + v_3 + v_2 + v_{23}), \quad w_e = \frac{1}{4} (w_0 + w_5 + w_2 + w_{25})$$

$$u_w = u_1, \quad v_w = \frac{1}{4} (v_0 + v_3 + v_1 + v_{13}), \quad w_w = \frac{1}{4} (w_0 + w_5 + w_1 + w_{15})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \phi_e = \langle GX \rangle_e^{(*)}, \quad \frac{\partial}{\partial y} \phi_e = \langle GY \rangle_e, \quad \frac{\partial}{\partial z} \phi_e = \langle GZ \rangle_e$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \phi_w = \langle GX \rangle_w, \quad \frac{\partial}{\partial y} \phi_w = \langle GY \rangle_w, \quad \frac{\partial}{\partial z} \phi_w = \langle GZ \rangle_w$$

$$GX_0 = \frac{\phi_2 - \phi_0}{\Delta x^2 + \Delta x_0} + \frac{\phi_0 - \phi_1}{\Delta x_0 + \Delta x_1}$$

$$GY_0 = \frac{\phi_4 - \phi_0}{\Delta y_4 + \Delta y_0} + \frac{\phi_0 - \phi_3}{\Delta y_0 + \Delta y_3}$$

$$GZ_0 = \frac{\phi_6 - \phi_0}{\Delta z_6 + \Delta z_0} + \frac{\phi_0 - \phi_5}{\Delta z_0 + \Delta z_5}$$

$$(*) \quad \langle GX \rangle_e \equiv \begin{cases} GX_0, & \text{when } u_e \geq 0 \\ GX_2, & \text{when } u_e < 0 \end{cases}$$

Table 3.2-2 Discretization of Convection Terms with the QUICK Scheme (2/3)

(2) u-Equation: $\frac{\partial}{\partial x}(\gamma_x \rho u u) t_{\text{erm}}$

$$\Delta x + \frac{1}{2} \Delta x (A_x \gamma_x \{ \rho u u \}) = \overline{F_{x0}} [\overline{\gamma_x u}]_e - \overline{F_{x1}} [\overline{\gamma_x u}]_w \quad (\text{F})$$

$$[\overline{\gamma_x u}]_e = \begin{cases} \phi_\theta(\gamma_{x2} u_2, \gamma_{x0} u_0, \gamma_{x1} u_1) - T_{\text{ran},e} & u_e \geq 0 \\ \phi_\theta(\gamma_{x0} u_0, \gamma_{x2} u_2, \gamma_{x22} u_{22}) - T_{\text{ran},e} & u_e < 0 \end{cases} \quad (\text{G})$$

$$[\overline{\gamma_x u}]_w = \begin{cases} \phi_\theta(\gamma_{x0} u_0, \gamma_{x1} u_1, \gamma_{x11} u_{11}) - T_{\text{ran},w} & u_w \geq 0 \\ \phi_\theta(\gamma_{x1} u_1, \gamma_{x0} u_0, \gamma_{x2} u_2) - T_{\text{ran},w} & u_w < 0 \end{cases} \quad (\text{H})$$

$$T_{\text{ran},e} = \frac{1}{2} \Delta t \left(u_e \frac{\partial}{\partial x} (\gamma_x u)_e + v_e \frac{\partial}{\partial y} (\gamma_x u)_e + w_e \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_x u)_e \right) \quad (\text{I})$$

$$T_{\text{ran},w} = \frac{1}{2} \Delta t \left(u_w \frac{\partial}{\partial x} (\gamma_x u)_w + v_w \frac{\partial}{\partial y} (\gamma_x u)_e + w_w \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_x u)_w \right) \quad (\text{J})$$

$$u_e = \frac{1}{2} (u_0 + u_2), \quad v_e = \frac{1}{2} (v_2 + v_{23}), \quad w_e = \frac{1}{2} (w_2 + w_{25})$$

$$u_w = \frac{1}{2} (u_1 + u_0), \quad v_w = \frac{1}{2} (v_0 + v_3), \quad w_w = \frac{1}{2} (w_0 + w_5)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (\gamma_x u)_e = \langle \text{GMX} \rangle_e^{(*)}, \quad \frac{\partial}{\partial y} (\gamma_x u)_e = \langle \text{GMY} \rangle_e, \quad \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_x u)_e = \langle \text{GMZ} \rangle_e$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (\gamma_x u)_w = \langle \text{GMX} \rangle_w, \quad \frac{\partial}{\partial y} (\gamma_x u)_w = \langle \text{GMY} \rangle_w, \quad \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_x u)_w = \langle \text{GMZ} \rangle_w$$

$$\text{GMX}_0 = \left\{ \frac{(\gamma_x u)_2 - (\gamma_x u)_0}{\Delta x_2} + \frac{(\gamma_x u)_0 - (\gamma_x u)_1}{\Delta x_0} \right\} \times 0.5$$

$$\text{GMY}_0 = \frac{(\gamma_x u)_4 - (\gamma_x u)_0}{\Delta y_4 + \Delta y_0} + \frac{(\gamma_x u)_0 - (\gamma_x u)_3}{\Delta y_0 + \Delta y_3}$$

$$\text{GMZ}_0 = \frac{(\gamma_x u)_6 - (\gamma_x u)_0}{\Delta z_6 + \Delta z_0} + \frac{(\gamma_x u)_0 - (\gamma_x u)_5}{\Delta z_0 + \Delta z_5}$$

$$(*) \quad \langle \text{GMX} \rangle_e = \begin{cases} \text{GMX}_0, & \text{when } u_e \geq 0 \\ \text{GMX}_2, & \text{when } u_e < 0 \end{cases}$$

Table 3.2-2 Discretization of Convection Terms with the QUICK Scheme (3/3)

(3) u-Equation : $\frac{\partial}{\partial y}(\gamma_y \rho v u)_{\text{term}}$

$$A_y(A_y \gamma_y^i \{\rho v u\}) = \frac{1}{2}(\overline{F_{y0}} + \overline{F_{y2}})[\overline{\gamma_x u}]_n - \frac{1}{2}(\overline{F_{y3}} + \overline{F_{y23}})[\overline{\gamma_x u}]_s \quad (\text{K})$$

$$[\overline{\gamma_x u}]_n = \begin{cases} \phi_Q(\gamma_{x4} u_4, \gamma_{x0} u_0, \gamma_{x3} u_3) - T_{\text{ran},n} & (\overline{F_n} + \overline{F_{n2}}) \geq 0 \\ \phi_Q(\gamma_{x0} u_0, \gamma_{x4} u_4, \gamma_{x44} u_{44}) - T_{\text{ran},n} & (\overline{F_n} + \overline{F_{n2}}) < 0 \end{cases} \quad (\text{L})$$

$$[\overline{\gamma_x u}]_s = \begin{cases} \phi_Q(\gamma_{x0} u_0, \gamma_{x3} u_3, \gamma_{x33} u_{33}) - T_{\text{ran},s} & (\overline{F_s} + \overline{F_{s2}}) \geq 0 \\ \phi_Q(\gamma_{x3} u_3, \gamma_{x0} u_0, \gamma_{x4} u_4) - T_{\text{ran},s} & (\overline{F_s} + \overline{F_{s2}}) < 0 \end{cases} \quad (\text{M})$$

$$T_{\text{ran},n} = \frac{1}{2} \Delta t \left\{ u_n \frac{\partial}{\partial x}(\gamma_x u)_n + v_n \frac{\partial}{\partial y}(\gamma_x u)_n + w_n \frac{\partial}{\partial z}(\gamma_x u)_n \right\} \quad (\text{N})$$

$$T_{\text{ran},s} = \frac{1}{2} \Delta t \left\{ u_s \frac{\partial}{\partial x}(\gamma_x u)_s + v_s \frac{\partial}{\partial y}(\gamma_x u)_s + w_s \frac{\partial}{\partial z}(\gamma_x u)_s \right\} \quad (\text{O})$$

$$u_n = \frac{1}{2}(u_4 + u_0), \quad v_n = \frac{1}{2}(v_0 + v_2), \quad w_n = \frac{1}{2}(w_0 + w_5 + w_2 + w_{25} + w_4 + w_{24} + w_{45} + w_{245})$$

$$u_s = \frac{1}{2}(u_3 + u_0), \quad v_s = \frac{1}{2}(v_3 + v_{23}), \quad w_s = \frac{1}{8}(w_0 + w_5 + w_2 + w_{25} + w_3 + w_{23} + w_{35} + w_{235})$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\gamma_x u)_n = \langle \text{GMX} \rangle_n, \quad \frac{\partial}{\partial y}(\gamma_x u)_n = \langle \text{GMY} \rangle_n, \quad \frac{\partial}{\partial z}(\gamma_x u)_n = \langle \text{GMZ} \rangle_n$$

$$\frac{\partial}{\partial x}(\gamma_x u)_s = \langle \text{GMX} \rangle_s, \quad \frac{\partial}{\partial y}(\gamma_x u)_s = \langle \text{GMY} \rangle_s, \quad \frac{\partial}{\partial z}(\gamma_x u)_s = \langle \text{GMZ} \rangle_s$$

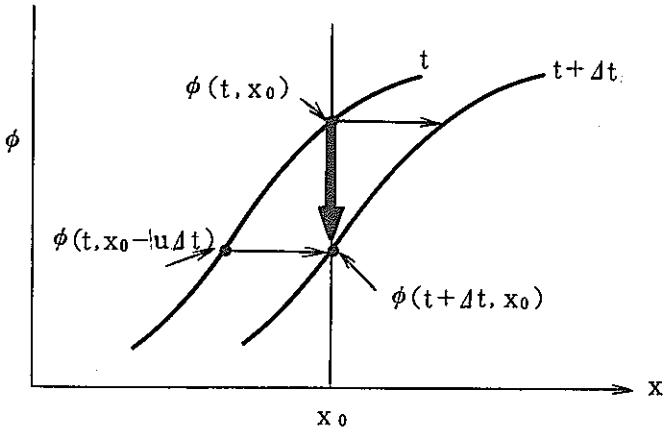


Fig. 3.2-2 Transient Variation of ϕ on x_0

(4) 境界セルの取扱い

QUICK 法では、各コントロール・ボリューム表面の被輸送量 ϕ を、上流側 2 点、下流側 1 点の 2 次曲線で内挿で求めるため、境界近傍の計算セルについては、以下のように取扱う。

各計算コントロール・ボリュームと固体境界の位置関係について、Fig. 3.2-3 のようにセルフラグ IFG を与える IFG の意味は、

$$\text{IFG} = \square \Delta$$

ここで、10 の位 (\square) は注目する表面 (●印) に対し、プラス方向にあるコントロール・ボリューム数を表し、

$$\square \begin{cases} =2 : 2 \text{ 個以上存在} \\ =1 : 1 \text{ 個存在} \\ =0 : \text{境界に接している。} \end{cases}$$

また 1 の位 (Δ) は注目する表面 (●印) に対し、マイナス方向にあるコントロール・ボリューム数を表し、

(自分自身のコントロール・ボリュームも含む)

$$\Delta \begin{cases} =2 : 2 \text{ 個以上存在} \\ =1 : 1 \text{ 個以上存在} \end{cases}$$

このセルフラグは、各コントロール・ボリュームの 3 表面 (e, n および t 面) について、IFGX, IFGY および IFGZ として定義されている。

各計算フラグによる計算処理は次の通りである。

i) IFG=22

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_Q(\phi_2, \phi_0, \phi_1) & u_e \geq 0 \\ \phi_Q(\phi_0, \phi_2, \phi_{22}) & u_e < 0 \end{cases}$$

ii) IFG=21

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_Q(\phi_2, \phi_0, \phi_{0MB}) & u_e \geq 0 \\ \phi_Q(\phi_0, \phi_2, \phi_{22}) & u_e < 0 \end{cases}$$

但し、 $\phi_{0MB} \equiv M0$ コントロール・ボリュームのマイナス側表面 w での値

iii) IFG=12

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_Q(\phi_2, \phi_0, \phi_1) & u_e \geq 0 \\ \phi_Q(\phi_0, \phi_2, \phi_{2PB}) & u_e < 0 \end{cases}$$

但し、 $\phi_{2PB} \equiv M2$ コントロール・ボリュームのプラス側表面の値

iv) IFG=11

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_Q(\phi_2, \phi_0, \phi_{0MB}) & u_e \geq 0 \\ \phi_Q(\phi_0, \phi_2, \phi_{2PB}) & u_e < 0 \end{cases}$$

V) IFG=2 or 1

まず、主コントロール・ボリューム(スカラー量計算の場合)の場合、

$$\phi_e = \phi_{0PB}$$

$\phi_{0PB} \equiv$ M0 コントロール・ボリュームのプラス側表面の値

運動量コントロール・ボリュームの場合、スタンガードメッシュとなり、M0 コントロール・ボリュームの表面と、固体壁表面が一致しないため次のような処理を行なう。

IFG=2 のとき

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_Q(\phi'_{0PB}, \phi_0, \phi_1) & u_e \geq 0 \\ \phi'_{0PB} & u_e < 0 \end{cases}$$

ここで、 $\phi'_{0PB} \equiv$ M0 コントロール・ボリュームのプラス側方向の固体壁表面での値

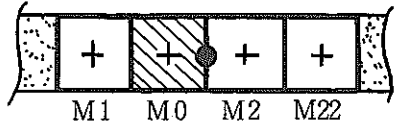
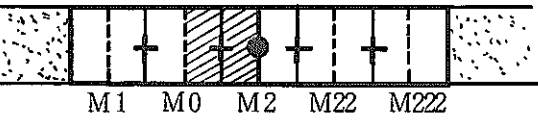
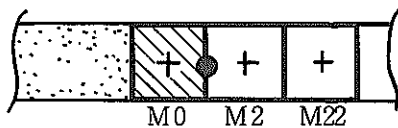

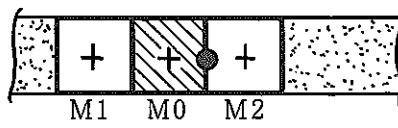
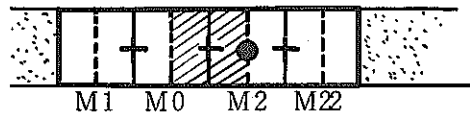
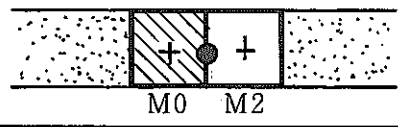
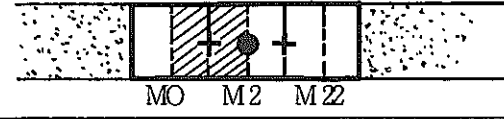
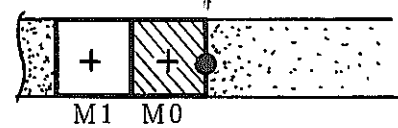
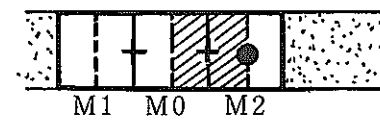
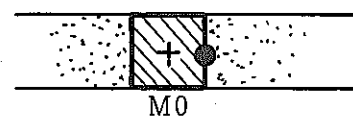
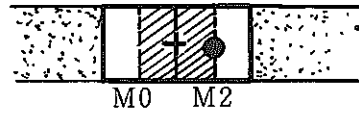
IFG=1 のとき

$$\phi_e = \begin{cases} \phi_Q(\phi'_{0PB}, \phi_0, \phi'_{0MB}) & u_e \geq 0 \\ \phi'_{0MB} & u_e < 0 \end{cases}$$

ここで、 $\phi'_{0MB} \equiv$ M0 コントロール・ボリュームのマイナス側方向の固体壁表面での値

運動量計算の場合、コントロール・ボリュームがスタガード・メッシュになるため、速度の計算方向成分と直交する面での運動量束計算は、固体壁境界が存在する場合、複雑な取扱いとなる (Fig. 3.2-4)。

以下に同図の各セルフラグの場合について、運動量束 ϕ_n および非定部計算時の $\frac{\partial}{\partial x} \phi_n$, $\frac{\partial}{\partial y} \phi_n$ 計算法を Table 3.2-3 にまとめる。

IFG	Scalar Equation	momentum Equation (u)
22	 M1 M0 M2 M22	 M1 M0 M2 M22 M222
21	 M0 M2 M22	 M0 M2 M22 M22
12	 M1 M0 M2	 M1 M0 M2 M22
11	 M0 M2	 M0 M2 M22
2	 M1 M0 M2	 M1 M0 M2
1	 M0 M2	 M0 M2

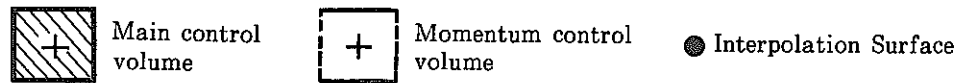


Fig. 3.2-3 Cell Flag Notation of Boundary Fluid Cells

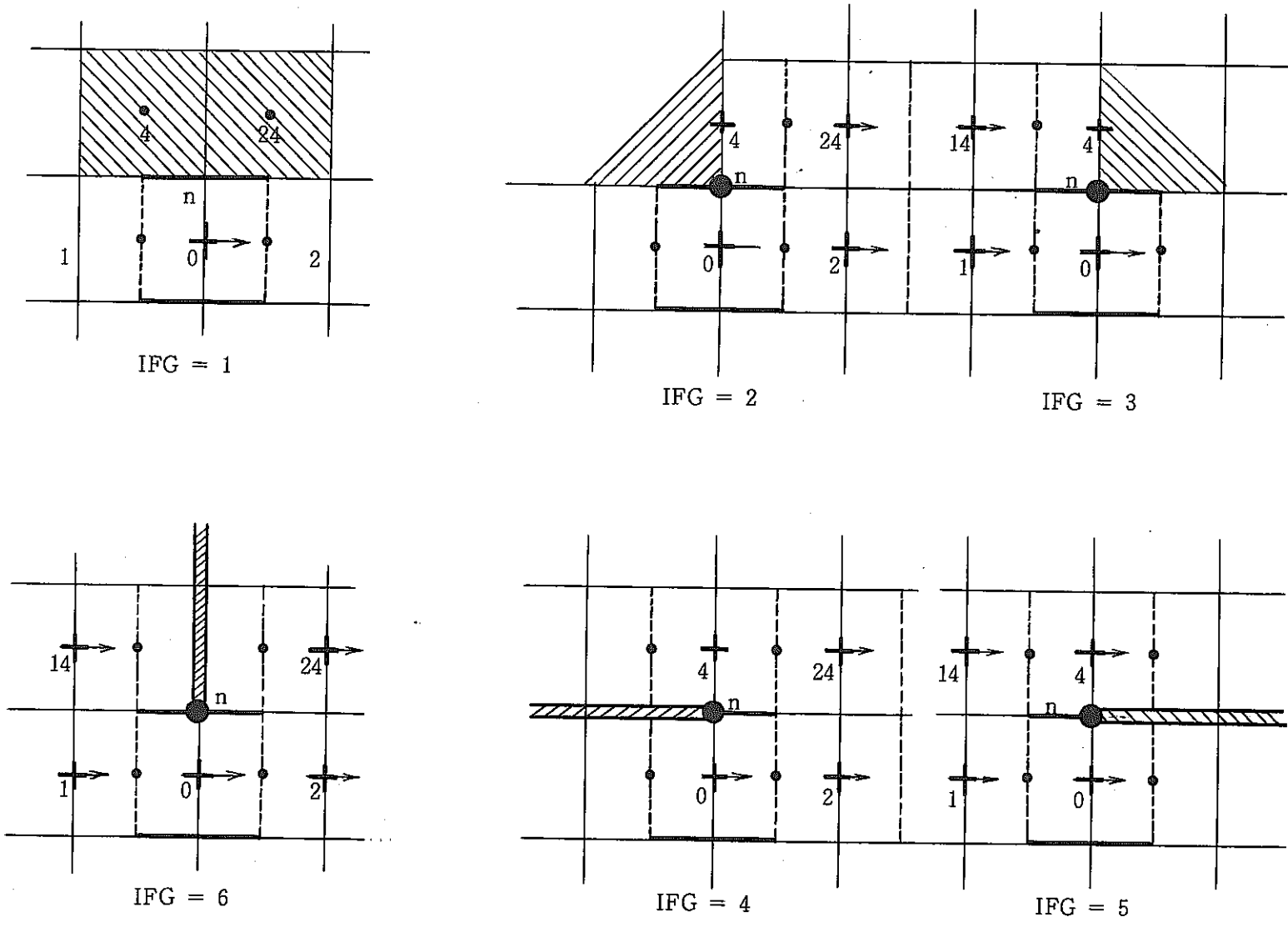


Fig. 3.2-4 Cell Flag Notation of Boundary Momentum Control Volume

Table 3.2-3 Momentum Flux and its Gradient on a Boundary Cell

Cell Flag (IFG)	$\phi_n, \frac{\partial}{\partial x}\phi_n, u_n$
1.	$\phi_n=0$ $\frac{\partial}{\partial x}\phi_n=0, \frac{\partial}{\partial y}\phi_n=\frac{-2}{\Delta y_0}(-\phi_0), \frac{\partial}{\partial z}\phi_n=0.$ $u_n=0, v_n=0, w_n=0.$
2. or 4.	$\phi_n=(\phi_0+\phi_2+\phi_{24}+\phi_4)/4$ $v_n \geq 0.$ $\frac{\partial}{\partial x}\phi_n=GMX_0, \frac{\partial}{\partial y}\phi_n=GM Y_0, \frac{\partial}{\partial z}\phi_n=GMZ_0$ $v_n < 0.$ $\frac{\partial}{\partial x}\phi_n=GMX_{24}, \frac{\partial}{\partial y}\phi_n=GM Y_{24}, \frac{\partial}{\partial z}\phi_n=GMZ_{24}$ $u_n=(u_0+u_2+u_{24}+u_4)/4$ $v_n=v_2/2$ $w_n=(w_2+w_{25}+w_{24}+w_{245})/4$
3. or 5.	$\phi_n=(\phi_0+\phi_1+\phi_{14}+\phi_4)/4$ $v_n \geq 0$ $\frac{\partial}{\partial x}\phi_n=GMX_0, \frac{\partial}{\partial y}\phi_n=GM Y_0, \frac{\partial}{\partial z}\phi_n=GMZ_0$ $v_n < 0$ $\frac{\partial}{\partial x}\phi_n=GMX_{14}, \frac{\partial}{\partial y}\phi_n=GM Y_{14}, \frac{\partial}{\partial z}\phi_n=GMZ_{14}$ $u_n=(u_0+u_1+u_{14}+u_4)/4$ $v_n=v_2/2$ $w_n=(w_0+w_5+w_4+w_{45})/4$
6.	$u_0 \geq 0$ Same Treatment as IFG=3 $u_0 < 0$ Same Treatment as IFG=2

3.3 拡散項に関する差分式

3.3.1 内挿計算セルでの処理

Table 3.3-1 にスカラー量および運動量における拡散項の差分式をまとめる。拡散項は最も一般的な中心差分 ($O(\Delta x^2)$) で離散化される。

3.3.2 境界処理

(1) スカラー量の場合

Fig. 3.3-1 に示す ϕ_0 と境界値 ϕ_B との拡散は、対流項で使用する差分法に応じて、相応する精度で離散化する。

(a) 1次風上差分法が対流項に使用される場合

以下の式が使用される。

$$r_x A_x \left(-\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \Big|_e = -r_{x0} A_{x0} \left(\frac{\Gamma_{\phi,e}}{\Delta x_e} \right) (\phi_B - \phi_0) \quad (3.3-1)$$

$$\text{但し, } \frac{\Gamma_{\phi,e}}{\Delta x_e} = \frac{1}{\frac{\Delta x_0}{2\Gamma_{\phi,0}}}$$

$$\text{すなわち, } -\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \div -\Gamma_{\phi,0} \frac{(\phi_B - \phi_0)}{\frac{1}{2}\Delta x_0} \quad (3.3-2)$$

としている。

(3.3-2) 式の右辺 ϕ_B まわりにテーラー展開すると、

$$-\Gamma_{\phi,0} \frac{\phi_B - \phi_0}{\frac{1}{2}\Delta x_0} = -\Gamma_{\phi,0} \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_B + \frac{1}{4}\Delta x_0 \Gamma_{\phi,0} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Big|_B - \frac{1}{24}\Delta x_0^2 \Gamma_{\phi,0} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \Big|_B \dots \quad (3.3-3)$$

となり、右辺第2項より空間に関し、1次の正確度 $O(\Delta x)$ しかもたないことがわかる。

(b) 高次差分法が対流項に使用される場合

式(3.3-3)より正確度を $O(\Delta x^2)$ にするためには、同式の右辺第2項(曲率による補正項)を(3.3-2)式に追加してやる必要がある。すなわち、

$$-\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \div - \left\{ \Gamma_{\phi,0} \frac{(\phi_B - \phi_0)}{\frac{1}{2}\Delta x_0} + \Gamma_{\phi,0} \frac{(\Delta x_0 + \Delta x_1)\phi_B + \Delta x_0\phi_1 - (2\Delta x_0 + \Delta x_1)\phi_0}{(\Delta x_0 + \Delta x_1)(\Delta x_0 + \frac{1}{2}\Delta x_1)} \right\} \quad (3.3-4)$$

を使用する。

Table 3.3-1 Discretization of Diffusion Terms

Scalar Equations :

$$\begin{aligned}
& \Delta_x \left(A_x r_x^{2i} \left\{ \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right\} \right) + \Delta_y \left(A_y r_y / r^{2i} \left\{ \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right\} \right) + \Delta_z \left(A_z r_z^{2i} \left\{ \Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial z} \right\} \right) \\
& = -\phi_0 (D_e + D_w) + \phi_1 D_w + \phi_2 D_e \\
& \quad -\phi_0 (D_s + D_n) + \phi_3 D_s + \phi_4 D_n \\
& \quad -\phi_0 (D_b + D_t) + \phi_5 D_b + \phi_6 D_t
\end{aligned} \tag{A}$$

Momentum Equation (u) :

$$\begin{aligned}
& \Delta_x \left(A_x r_x^{2i} \left\{ \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right\} \right) + \Delta_y \left(A_y r_y / r^{2i} \left\{ \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right\} \right) + \Delta_z \left(A_z r_z^{2i} \left\{ \mu \frac{\partial u}{\partial z} \right\} \right) \\
& = -u_0 (D_w^u + D_e^u) + u_1 D_w^u + u_2 D_e^u \\
& \quad -u_0 (D_s^u + D_n^u) + u_3 D_s^u + u_4 D_n^u \\
& \quad -u_0 (D_b^u + D_t^u) + u_5 D_b^u + u_6 D_t^u
\end{aligned} \tag{B}$$

$$D_w = A_{x1} r_{x1} / \left(\frac{\Delta x_0}{2\Gamma_{\phi,0}} + \frac{\Delta x_1}{2\Gamma_{\phi,1}} \right), \quad D_e = A_{x0} r_{x0} / \left(\frac{\Delta x_0}{2\Gamma_{\phi,0}} + \frac{\Delta x_2}{2\Gamma_{\phi,2}} \right)$$

$$D_s = A_{y3} r_{y3} / \left(\frac{r_0 \Delta y_0}{2\Gamma_{\phi,0}} + \frac{r_0 \Delta y_3}{2\Gamma_{\phi,3}} \right), \quad D_n = A_{y0} r_{y0} / \left(\frac{r_0 \Delta y_0}{2\Gamma_{\phi,0}} + \frac{r_0 \Delta y_0}{2\Gamma_{\phi,0}} \right)$$

$$D_b = A_{z5} r_{z5} / \left(\frac{\Delta z_0}{2\Gamma_{\phi,0}} + \frac{\Delta z_5}{2\Gamma_{\phi,5}} \right), \quad D_t = A_{z0} r_{z0} / \left(\frac{\Delta z_0}{2\Gamma_{\phi,0}} + \frac{\Delta z_6}{2\Gamma_{\phi,6}} \right)$$

$$D_w^u = \frac{1}{2} (A_{x0} r_{x0} + A_{x1} r_{x1}) \mu_0 / \Delta x_0, \quad D_e^u = \frac{1}{2} (A_{x0} r_{x0} + A_{x2} r_{x2}) \mu_2 / \Delta x_2$$

$$D_s^u = \frac{1}{2} (A_{y3} r_{y3} / r_0 + A_{y23} r_{y23} / r_2) / (r_0 \Delta y_0 / (\mu_0 + \mu_2) + r_0 \Delta y_3 / (\mu_3 + \mu_{23}))$$

$$D_n^u = \frac{1}{2} (A_{y0} r_{y0} / r_0 + A_{y2} r_{y2} / r_2) / (r_0 \Delta y_0 / (\mu_0 + \mu_2) + r_0 \Delta y_4 / (\mu_4 + \mu_{24}))$$

$$D_b^u = \frac{1}{2} (A_{z5} r_{z5} / r_0 + A_{z25} r_{z25} / r_2) / (r_0 \Delta z_0 / (\mu_0 + \mu_2) + r_0 \Delta z_5 / (\mu_5 + \mu_{25}))$$

$$D_t^u = \frac{1}{2} (A_{z0} r_{z0} / r_0 + A_{z5} r_{z5} / r_2) / (r_0 \Delta z_0 / (\mu_0 + \mu_2) + r_0 \Delta z_6 / (\mu_6 + \mu_{26}))$$

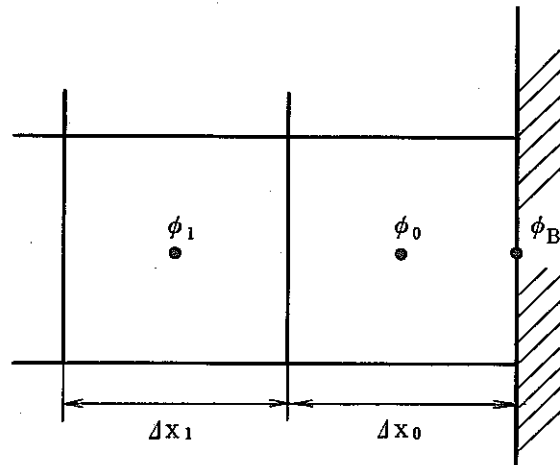


Fig. 3.3-1 Treatment of Diffusion Terms
in Boundary Cells

3.4 ソース項に関する差分式

(1) 圧力項

Table 3.1-1 (B) 式の圧力項 $-r_v \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x (A_x^{3i} \langle P \rangle)$ を運動量コントロール・ボリューム (Fig. 3.1-5) で展開すると

$$-r_v \Delta x + \frac{1}{2} \Delta x (A_x^{3i} \langle P \rangle) = -2V_m r_{vm} (P_2 - P_0) / (\Delta x_0 + \Delta x_2) \quad (3.4-1)$$

$$\text{ここで, } V_m = \frac{1}{2}(V_0 + V_2)$$

$$r_{vm} = \frac{1}{2}(r_{v0} + r_{v2})$$

(2) 重力項

Table 3.1-1 (B) 式の重力項 $r_v^{3i} \langle \rho \rangle g_x V$ を運動量コントロール・ボリュームで展開すると

$$r_v^{3i} \langle \rho \rangle g_x V = V_m r_{vm} \rho_m \cdot g_x$$

$$\text{ここで, } \rho_m = (\Delta x_0 \rho_0 + \Delta x_2 \rho_2) / (\Delta x_0 + \Delta x_2)$$

(3) 分布抵抗項

Table 3.1-1 (B) 式の分布抵抗項 $r_v V^i \langle R_x \rangle$ は、次のようにモデル化される。

$$r_v V^i \langle R_x \rangle = r_{vm} V_m R_x u_0 \quad (3.4-3)$$

$$\text{ここで, } R_x = c_1 \frac{f}{D} \rho_m |u_0| \quad (3.4-4)$$

f : 圧損係数

D : 水力直径

c_1 : 任意定数

(4) 円筒座標系使用時の付加項

(a) 遠心力 (Centrifugal Force)

Table 2.2-1 の円筒座標系で r 方向運動量保存式の S_θ 項に含まれる $r_v \frac{\rho v^2}{r}$ (遠心力) は次のようにモデル化される。

運動量コントロール・ボリューム (Fig. 3.4-1) で積分すると

$$\begin{aligned} V r_v \frac{\rho v^2}{r} &= \int_{v_{\theta f}} \frac{\rho v^2}{r} dV = \int_{v_{\theta f}} \rho v^2 \Delta \theta dA_\theta \\ &= \Delta \theta \rho v r_\theta \Delta r \Delta z \cdot v \Big|_{vm} \\ &= \left\{ -r_{y0} v_0 \left[-\frac{1}{2} \overline{F_{y0}}, 0 \right] - r_{y2} v_2 \left[-\frac{1}{2} \overline{F_{y2}}, 0 \right] \right. \\ &\quad \left. + v_{y0} v_3 \left[\frac{1}{2} \overline{F_{y3}}, 0 \right] + v_{y23} v_{23} \left[\frac{1}{2} \overline{F_{y32}}, 0 \right] \right\} \Delta \theta_0 \end{aligned} \quad (3.4-5)$$

が得られる。

(b) コリオリ力 (Coriolis Force)

同様に θ - 運動量保存式の S_ϕ 項に含まれる $r_v \frac{\rho v u}{r}$ (コリオリ力) (Fig. 3.4-2) は、

$$\begin{aligned}
 V_{r_v} \frac{\rho v u}{r} &= \int_{V_f} \frac{\rho v u}{r} dV = \int_{A_{\theta_f}} \rho v u \Delta \theta dA_{\theta} \\
 &= \Delta \theta \rho v r_{\theta} \Delta r \Delta z \cdot u \Big|_{v_m} \\
 &= -\frac{1}{2} (r_{x14} u_{14} + r_{x14} u_4) [-\overline{F_{y0}}, 0] \Delta \theta_4 \\
 &\quad + \frac{1}{2} (r_{x1} u_1 + r_{x0} u_0) [\overline{F_{y3}}, 0] \Delta \theta_0
 \end{aligned} \tag{3.4-6}$$

(c) r 方向運動量式粘性項の付加項

Table 2.2-1 の r 方向運動量保存式の S_{ϕ} に含まれる $r_v V_v$ 項は,

$$\begin{aligned}
 V_{r_v} V_r &= V_{r_v} \left\{ -\mu \frac{u}{r^2} - \frac{2\mu}{r^2} \left(\frac{\partial v}{\partial \theta} \right) \right\} \Big|_{v_m} \\
 &= -r_{vm} V_m \frac{1}{2} (\mu_0 + \mu_2) u_0 / r_0^2 \\
 &\quad + (\mu_0 + \mu_2) / r_0 \left\{ \frac{1}{2} (r_{y0} v_0 + r_{y2} v_2) - \frac{1}{2} (r_{y3} v_3 + v_{y23} v_{23}) \right\} / (r \Delta \theta) V_m.
 \end{aligned} \tag{3.4-7}$$

(d) θ 方向運動量式粘性項の付加項

同様に θ 方向運動量保存式の S_{ϕ} に含まれる $r_v V_{\theta}$ 項は,

$$\begin{aligned}
 V_{r_v} V_{\theta} &= V_{r_v} \left\{ -\mu \frac{v}{r^2} + \frac{2\mu}{r^2} \left(\frac{\partial u}{\partial \theta} \right) \right\} \Big|_{v_m} \\
 &= -r_{vm} V_m \frac{1}{2} (\mu_0 + \mu_4) v_0 / r_0^2 \\
 &\quad + (\mu_0 + \mu_4) / r_0 \left\{ \frac{1}{2} (r_{x14} u_{14} + r_{x4} u_4) - \frac{1}{2} (r_{x1} u_1 + r_{x0} u_0) \right\} / (r \Delta \theta) \cdot V_m
 \end{aligned} \tag{3.4-8}$$

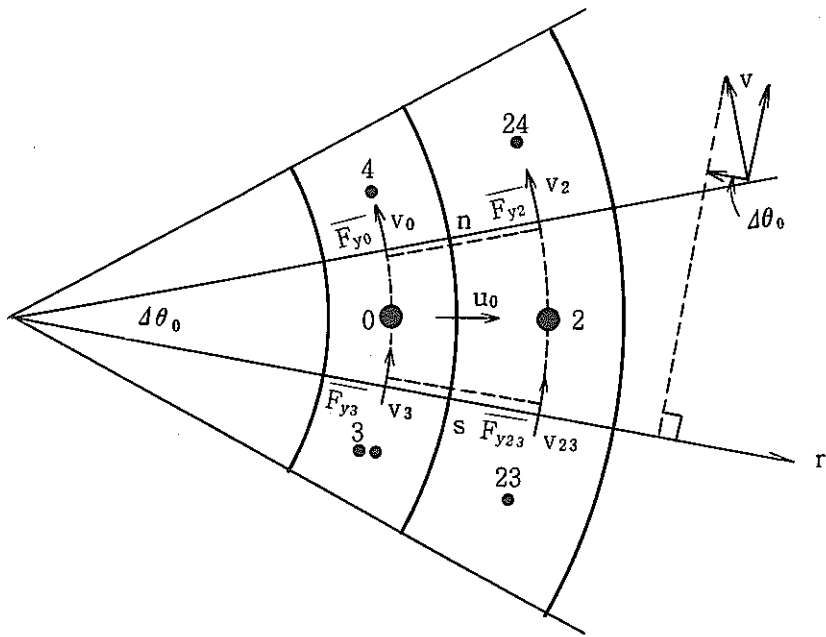


Fig. 3.4-1 r-Momentum Control Volume and Its Neighbors

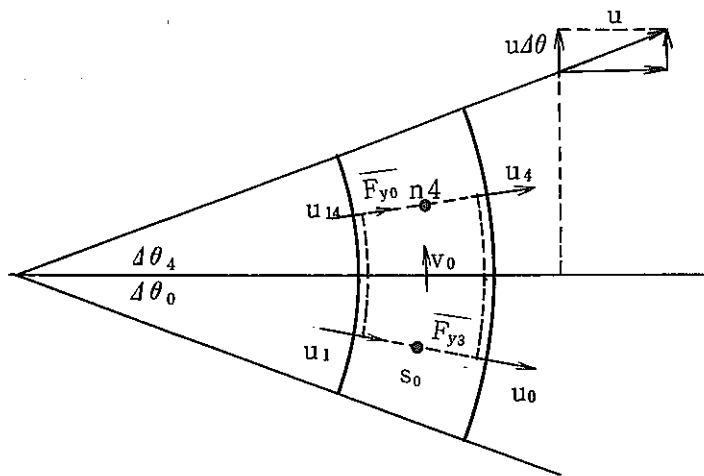


Fig. 3.4-2 θ -Momentum Control Volume and Its Neighbors

4. 数値計算アルゴリズム

AQUA コードでは、COMMIX-1A で使用されている完全陰解法 (SIMPLEST-ANL)⁽¹⁹⁾ および半陰解法 (修正 ICE) をオプションで選択できる。完全陰解法を使用する時は、対流項差分は 1 次風上差分法を使用し、COMMIX-1A と同一のものである。一方、半陰解法では、高次差分法 (QUICK 法、QUICK-FRAM 法は任意に選択) を使用している。完全陰解法と半陰解法の使い分けは、次の事項を考慮して行なえば良い。

- 完全陰解法
 - 問題によって数値拡散の影響が大きく解の劣化があり得る。
(対流が支配的な多次元的流れにおいて顕著である。)
 - 計算時間が少ない。
- 半陰解法
 - 数値拡散の影響がほとんどない解が得られる。
 - 計算時間は、完全陰解法に比べ多くかかる。

以下に各計算手法について説明する。

4.1 完全陰解法

(1) 運動量方程式

Porous Body モデルによる運動量保存式 (Table 3.1-1 (B)~(D)) に、先に示した 1 次風上差分法による差分式等を代入し、整理すると、以下の式が得られる。簡単のため u -運動量保存式を考える。

$$a_0^u u_0 - \sum_{\ell=1}^6 a_{\ell}^u u_{\ell} - b_0^u + r_{vm} \Delta y_0 \Delta z_0 (P_2 - P_0) = 0 \quad (4.1-1)$$

ここで、各係数は、Table 4.1-1 にまとめる。

(4.1-1) 式は、7 個の未知数 u_0, u_1, \dots, u_6 からなる連立方程式となるが、SIMPLEST-ANL 法では、この連立方程式を解かず、 u_0 のみ未知数と考え、(4.1-1) 式を以下のように整理する。

$$u_0 = \frac{1}{a_0^u} \left(\sum_{\ell=1}^6 a_{\ell}^u u_{\ell} + b_0^u \right) + \frac{1}{a_0^u} r_{vm} \Delta y_0 \Delta z_0 (P_2 - P_0) \quad (4.1-2)$$

SIMPLEST-ANL 法では、逐次代入法によって各方程式を線形化しているため、実際には (4.1-2) 式は減速緩和係数 ω^u を含んだ形で解かれる。すなわち、反復計算の新しいレベル ($i+1$) での値 u_0^{i+1} は、

$$u_0^{i+1} = \omega^u u_0^{i+1} + (1 - \omega^u) u_0^i \quad (4.1-3)$$

となる。(4.1-3) 式に (4.1-2) 式を右辺の u_0^{i+1} に置き換えると、

Table 4.1-1 Coefficients of u-momentum difference equation with the
1-st Upwind Scheme

$$a_0^u u_0 - \sum_{\ell=1}^6 a_\ell^u u_\ell - b_0^a + \gamma_{vm} \Delta y_0 \Delta z_0 (P_2 - P_0) = 0 \quad (4.1-1)$$

$$\begin{aligned} a_0^u = & \{ \rho_m \gamma_{x0} / \Delta t + \gamma_{x0} (\partial \rho / \partial t) / 2 \} V_m \\ & + \gamma_{x0} \left\{ [-\overline{F}_{x1}, 0] + [-\overline{F}_{x0}, 0] + \left[-\frac{1}{2} \overline{F}_{y3}, 0 \right] + \left[-\frac{1}{2} \overline{F}_{y23}, 0 \right] + \left[\frac{1}{2} \overline{F}_{y0}, 0 \right] \right. \\ & \left. + \left[\frac{1}{2} \overline{F}_{y2}, 0 \right] + \left[-\frac{1}{2} \overline{F}_{z5}, 0 \right] + \left[-\frac{1}{2} \overline{F}_{z25}, 0 \right] + \left[\frac{1}{2} \overline{F}_{z0}, 0 \right] + \left[\frac{1}{2} \overline{F}_{z2}, 0 \right] \right\} \\ & + D_e^u + D_w^u + D_n^u + D_s^u + D_t^u + \gamma_{vm} V_m R_x \end{aligned}$$

$$a_1^u = \gamma_{x1} [-\overline{F}_{x1}, 0] + D_w^u$$

$$a_2^u = \gamma_{x2} [-\overline{F}_{x0}, 0] + D_e^u$$

$$a_3^u = \gamma_{x3} \left\{ \left[\frac{1}{2} \overline{F}_{y3}, 0 \right] + \left[\frac{1}{2} \overline{F}_{y23}, 0 \right] \right\} + D_s^u$$

$$a_4^u = \gamma_{x4} \left\{ \left[-\frac{1}{2} \overline{F}_{y0}, 0 \right] + \left[-\frac{1}{2} \overline{F}_{y2}, 0 \right] \right\} + D_n^u$$

$$a_5^u = \gamma_{x5} \left\{ \left[\frac{1}{2} \overline{F}_{z5}, 0 \right] + \left[\frac{1}{2} \overline{F}_{z25}, 0 \right] \right\} + D_t^u$$

$$a_6^u = \gamma_{x6} \left\{ \left[-\frac{1}{2} \overline{F}_{z0}, 0 \right] + \left[-\frac{1}{2} \overline{F}_{z2}, 0 \right] \right\} + D_t^u$$

$$b_0^u = \{ \rho_m \gamma_{x0} / \Delta t + \gamma_{x0} (\partial \rho / \partial t) / 2 \} V_m u_0^a + \gamma_{vm} V_m \rho_m g_x$$

$$u_0^{i+1} = \hat{u}_2 - d_2 (P_2^{i+1} - P_0^{i+1}) \quad (4.1-4)$$

ここで,

$$\hat{u}_2 = \frac{\omega^u}{a_0^u} \left(\sum_{\ell=1}^6 a_{\ell}^u u_{\ell}^i + b_0^u + \frac{1-\omega^u}{\omega^u} a_0^u u_0^i \right)$$

$$d_2 = \frac{\omega^u}{a_0^u} \gamma_{vm} \Delta y_0 \Delta z_0$$

が得られる。

計算セル 0 (たとえば Fig. 3.1-4) の各表面流速成分は、同様にして次のようになる。

$$u_1^{i+1} = \hat{u}_1 - d_1 (P_0^{i+1} - P_1^{i+1}) \quad (4.1-5)$$

$$v_3^{i+1} = \hat{v}_3 - d_3 (P_0^{i+1} - P_3^{i+1}) \quad (4.1-6)$$

$$v_0^{i+1} = \hat{v}_4 - d_4 (P_4^{i+1} - P_0^{i+1}) \quad (4.1-7)$$

$$w_5^{i+1} = \hat{w}_5 - d_5 (P_0^{i+1} - P_5^{i+1}) \quad (4.1-8)$$

$$w_0^{i+1} = \hat{w}_6 - d_6 (P_6^{i+1} - P_0^{i+1}) \quad (4.1-9)$$

(2) 質量保存式

Table 3.1-1 (A) 式を Fig. 3.1-4 に示す主コントロールボリュームのまわりで展開すると、次の通りである。

$$\begin{aligned} V_0 \gamma v_0 \left(\frac{\partial}{\partial t} \rho \right)^i - A_{x1} \langle \rho \rangle_w^i \cdot u_1^{i+1} + A_{x0} \langle \rho \rangle_e^i u_0^{i+1} - A_{y3} \langle \rho \rangle_s^i v_3^{i+1} + A_{y0} \langle \rho \rangle_n^i v_0^{i+1} \\ - A_{z5} \langle \rho \rangle_b^i w_5^{i+1} + A_{z0} \langle \rho \rangle_t^i w_0^{i+1} = \delta_0 \gamma v_0 V_0 \end{aligned} \quad (4.1-10)$$

(3) エネルギー保存式

Table 3.1-1 (E) 式を同様に主コントロールボリューム 0 のまわりで展開し、整理すると、

$$a_0^h \cdot h_0^{i+1} - \sum a_{\ell}^h h_{\ell}^{i+1} - b_0^h = 0 \quad (4.1-11)$$

各係数は、Table 4.1-2 にまとめる。

(4.1-11) 式は、そのまま連立方程式として解かれるが、やはり減速緩和係数 ω^h を使用して、実際には以下の式が解かれる。

$$a_0^h / \omega^h \cdot h_0^{i+1} - \sum a_{\ell}^h h_{\ell}^{i+1} + b_0^h + (1 - \omega^h) / \omega^h \cdot a_0^h \cdot h_0^i = 0 \quad (4.1-12)$$

(4) 圧力に関するポアソン方程式

運動量方程式 (4.1-5) ~ (4.1-9) 式を質量保存式 (4.1-10) 式に代入して整理すると、以下の圧力 P_{ℓ} (0, 1, ..., 6) に関するポアソン方程式が得られる。

$$a_0^p P_0^{i+1} - \sum_{\ell=1}^6 a_{\ell}^p P_{\ell}^{i+1} - b_0^p = \delta_0 V_0 \gamma v \quad (4.1-13)$$

ここで、

$$a_1^p = A_{x1} \langle \rho \rangle_w^i \cdot d_1$$

$$a_2^p = A_{x0} \langle \rho \rangle_e^i \cdot d_2$$

$$a_3^p = A_{y3} \langle \rho \rangle_s^i \cdot d_3$$

Table 4.1-2 Coefficients of energy difference equation with 1-st Upwind Scheme

$$a_0^h h_0^{i+1} - \sum_{\ell=1}^6 a_\ell^h h_\ell^{i+1} - b_0^h = 0 \quad (4.1-11)$$

$$a_1^h = [F_{x1}, 0] + D_w$$

$$a_2^h = [-F_{x0}, 0] + D_e$$

$$a_3^h = [F_{y3}, 0] + D_s$$

$$a_4^h = [-F_{y0}, 0] + D_n$$

$$a_5^h = [F_{z5}, 0] + D_b$$

$$a_6^h = [-F_{z0}, 0] + D_t$$

$$a_0^h = \sum_{\ell=1}^6 a_\ell^h + r_{v0} V_0 \rho_0 / \Delta t + r_{v0} V_0 S_p^*$$

$$b_0^h = r_{v0} V_0 \rho_0 / \Delta t \cdot h_0^n + r_{v0} V_0 S_c^*$$

* Source term $Q \equiv S_c - S_p h_0^{i+1}$

$$\begin{aligned}
 a_4^p &= A_{y0} \langle \rho \rangle_n^i \cdot d_4 \\
 a_5^p &= A_{z5} \langle \rho \rangle_b^i \cdot d_5 \\
 a_6^p &= A_{z0} \langle \rho \rangle_i^i \cdot d_6 \\
 a_0^p &= \sum_{e=1}^6 a_e^p \\
 b_0^p &= V_0 r v_0 \left(\frac{\partial}{\partial t} \rho \right)^i + A_1 \langle \rho \rangle_w^i \hat{u}_1 - A_2 \langle \rho \rangle_e^i \hat{u}_2 \\
 &\quad + A_3 \langle \rho \rangle_s^i \hat{v}_3 - A_4 \langle \rho \rangle_h^i \hat{v}_4 \\
 &\quad + A_5 \langle \rho \rangle_b^i \hat{w}_5 - A_6 \langle \rho \rangle_i^i \hat{w}_6
 \end{aligned}$$

である。

(5) 計算手順

Fig. 4.1-1 に SIMPLEST-ANL 法による完全陰解法の計算手順を示す。各手順の内容は以下の通りである。

- ① 運動量保存式 (4.1-4) ~ (4.1-9) につき, $\hat{u}_1, \hat{u}_2, \hat{v}_3, \hat{v}_4, \hat{w}_5, \hat{w}_6, d_1, d_2, d_3, d_4, d_5$ および d_6 を計算する。
- ② 圧力に関するポアソン方程式 (4.1-13) の係数, $a_0^p, a_1^p, \dots, a_6^p, b_0^p$ を計算する。
- ③ 圧力に関するポアソン方程式 (4.1-13) を解く。
- ④ 運動量保存式 (4.1-4) ~ (4.1-9) 式に解かれた圧力を代入して, 流速を計算する。
- ⑤ エネルギー保存式 (4.1-11) の係数 $a_0^h, a_1^h, \dots, a_6^h, b_0^h$ を計算で求める。ここにおいて, 各表面流速は④で得られた最も新しい値を使用する。
- ⑥ エネルギー保存式 (4.1-12) を解く。
- ⑦ 他のスカラー量輸送方程式 (乱流運動エネルギー輸送式, 乱流運動エネルギー散逸率輸送式など) を⑤および⑥の手順で解く。
- ⑧ 収束判定を行なう。収束条件は, 全計算セルのうち各変数の相変変動値 $|(\phi^{i+1} - \phi^i) / \phi^i |$

の最大値が, 指定値より小さくなることである。すなわち,

$$\begin{aligned}
 \max(|(u^{i+1} - u^i) / u^i|) &\leq \epsilon_3 \\
 \max(|(v^{i+1} - v^i) / v^i|) &\leq \epsilon_3 \\
 \max(|(w^{i+1} - w^i) / w^i|) &\leq \epsilon_3 \\
 \max(|(h^{i+1} - h^i) / h^i|) &\leq \epsilon_3 \\
 \max(|(k^{i+1} - k^i) / k^i|) &\leq \epsilon_5 \\
 \max(|(\epsilon^{i+1} - \epsilon^i) / \epsilon^i|) &\leq \epsilon_5 \\
 \max(|\delta_0|) &\leq \epsilon_1 \times \left(\max \left(\frac{\rho \gamma_x u}{\gamma v}, \frac{\rho \gamma_y v}{\gamma v}, \frac{\rho \gamma_z w}{\gamma v} \right) \right)
 \end{aligned}$$

ここで, デフォット値は $\epsilon_1 = 1 \times 10^{-4}$, $\epsilon_3 = 1 \times 10^{-5}$, $\epsilon_5 = 1 \times 10^{-5}$ である。収束条件が満たされた場合は, 次の時刻 $t + \Delta t$ に計算が進められる。満たさない場合は, ①にもどり, ⑧の収束条件が満たされるまで反復計算が続行される。

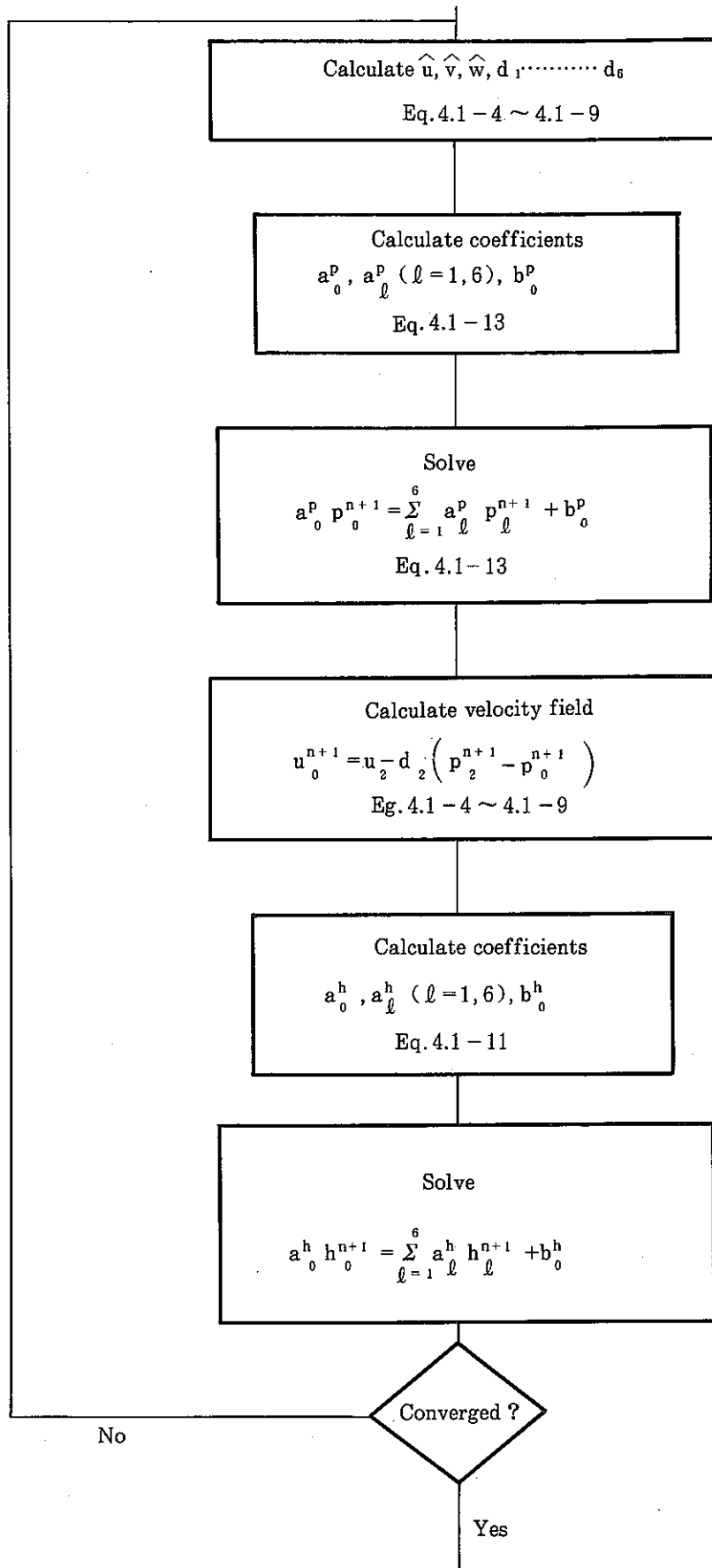


Fig. 4.1-1 Implicit Solution Sequence

4.2 半陰解法

(1) 運動量保存式

運動量保存式 (Table 3.1-1 (B)~(D)) に対し, 対流項差分式は Table 3.2-2 で示される QUICK 法によるものを使用して, 整理すると, 次の式が得られる。

$$a_{m0}^u u_0 - FCONV^u + FDIF^u + b_{m0}^u + \gamma_{vm} \Delta y_0 \Delta z_0 (P_2 - P_0) = 0 \quad (4.2-1)$$

ここで,

$$\begin{aligned} FCONV^u &= \overline{F_{x1}} [\gamma_x u]_w - \overline{F_{x0}} [\gamma_x u]_e \\ &+ \frac{1}{2} (\overline{F_{y3}} + \overline{F_{y23}}) [\gamma_x u]_s - \frac{1}{2} (\overline{F_{y0}} + \overline{F_{y2}}) [\gamma_x u]_n \\ &+ \frac{1}{2} (\overline{F_{z5}} + \overline{F_{z25}}) [\gamma_x u]_b - \frac{1}{2} (\overline{F_{z0}} + \overline{F_{z2}}) [\gamma_x u]_t \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} FDIF^u &= D_w^u (u_0^n - u_1^n) + D_e^u (u_0^n - u_2^n) \\ &+ D_s^u (u_0^n - u_3^n) + D_n^u (u_0^n - u_4^n) \\ &+ D_b^u (u_0^n - u_5^n) + D_t^u (u_0^n - u_6^n) \end{aligned}$$

$$a_{m0}^u = \{ \rho_m^n \gamma_{x0} / \Delta t + \gamma_{x0} (\partial \rho / \partial t)^n / 2 \} V_m + \gamma_{vm} V_m R_x$$

$$b_{m0}^u = \{ \rho_m^n \gamma_{x0} / \Delta t + \gamma_{x0} (\partial \rho / \partial t)^n / 2 \} V_m u_0^n + \gamma_{vm} V_m \rho_m^n g_x$$

(4.2-1) 式を整理すると

$$u_0 = \bar{u}_2 - \bar{d}_2 (P_2 - P_0) \quad (4.2-2)$$

となる。

ここで,

$$\bar{u}_2 = \frac{1}{a_{m0}^u} (FCONV^u - FDIF^u - b_{m0}^u)$$

$$\bar{d}_2 = \frac{1}{a_{m0}^u} (\gamma_{vm} \Delta y_0 \Delta z_0)$$

である。

主コントロール・ボリューム 0 (Fig. 3.1-4) の各表面での流速は, 同様に,

$$u_1 = \bar{u}_1 - \bar{d}_1 (P_0 - P_1) \quad (4.2-3)$$

$$v_3 = \bar{v}_3 - \bar{d}_3 (P_0 - P_3) \quad (4.2-4)$$

$$v_0 = \bar{v}_4 - \bar{d}_4 (P_4 - P_0) \quad (4.2-5)$$

$$w_5 = \bar{w}_5 - \bar{d}_5 (P_0 - P_5) \quad (4.2-6)$$

$$w_0 = \bar{w}_6 - \bar{d}_6 (P_6 - P_0) \quad (4.2-7)$$

(2) 質量保存式

完全陰解法における質量保存式 (4.1-10) と同一である。ただし, 添字 i はいずれも前の時刻での値となり, 添字 n で置換えられる。

すなわち,

$$\begin{aligned}
 V_0 r_{v_0} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^n &- A_{x1} \langle \rho \rangle_w^n \cdot u_1 + A_{x0} \langle \rho \rangle_e^n \cdot u_0 \\
 &- A_{y3} \langle \rho \rangle_s^n \cdot v_3 + A_{y0} \langle \rho \rangle_n^n \cdot v_0 \\
 &- A_{z5} \langle \rho \rangle_b^n \cdot w_5 + A_{z0} \langle \rho \rangle_t^n \cdot w_0 = \delta_0 V_0 r_{v_0}
 \end{aligned} \tag{4.2-8}$$

である。

(3) エネルギー保存式

エネルギー保存式 (Table 3.1-1 (E)) に対し, 対流項差分式は Table 3.2-2 (A) 式で示される QUICK 法によるものを使用して整理すると, 次の式が得られる。

$$a_{m_0}^h \cdot h_0 - FCONV^h + FDIF^h - b_{m_0}^h = 0 \tag{4.2-9}$$

となる。

ここで,

$$FCONV^h = F_w^n \cdot [h^n]_w - F_e^n \cdot [h^n]_e$$

$$+ F_s^n \cdot [h^n]_s - F_n^n \cdot [h^n]_n$$

$$+ F_b^n \cdot [h^n]_b - F_t^n \cdot [h^n]_t$$

$$FDIF^h = D_w (h_0^n - h_1^n) - D_e (h_2^n - h_0^n)$$

$$+ D_s (h_0^n - h_3^n) - D_n (h_4^n - h_0^n)$$

$$+ D_b (h_0^n - h_5^n) - D_t (h_6^n - h_0^n)$$

$$a_{m_0}^h = \frac{\rho^n}{\Delta t} V_0 r_{v_0} + r_{v_0} V_0 r_{v_0} + r_{v_0} V_0 \cdot S_p$$

$$b_{m_0}^h = V_0 r_{v_0} \left(\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^n - \delta_0 \right) h_0^n + \frac{\rho^n}{\Delta t} V_0 r_{v_0} + r_{v_0} \cdot S_c$$

である。

ここにおいて, $b_{m_0}^h$ の中に含まれる質量残差 δ_0 は, 数値計算上, 質量残差の蓄積によるエネルギーの損失を保障するために置かれている。すなわち, エネルギー保存式 (Table 3.1-1 (E)) の時間項は,

$$\begin{aligned}
 V r_v \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \rho h \right\rangle &\equiv V_0 r_{v_0} \frac{\partial}{\partial t} (\rho h) \\
 &= V_0 r_{v_0} \rho_0 \frac{\partial}{\partial t} h + V_0 r_{v_0} h_0 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)
 \end{aligned} \tag{4.2-10}$$

この式の右辺第 2 項の $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ は質量保存式の質量束の対流による残差を表わし, この項全体はその補障とみることができる。

質量保存式 (4.2-8) について,

$$\begin{aligned}
 V_0 r_{v_0} \left\{ \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^n - \delta_0 \right\} &- A_{x1} \langle \rho \rangle_w^n \cdot u_1 + A_{x0} \langle \rho \rangle_e^n \cdot u_0 - A_{y3} \langle \rho \rangle_s^n \cdot v_3 + A_{y0} \langle \rho \rangle_n^n \cdot v_0 \\
 &- A_{z5} \langle \rho \rangle_b^n \cdot w_5 + A_{z0} \langle \rho \rangle_t^n \cdot w_0 = 0
 \end{aligned} \tag{4.2-11}$$

とし,

$$\left(\overline{\frac{\partial \rho}{\partial t}}\right) = \left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)^n - \delta_0$$

とみかけ上の密度変化を(4.2-10)式で $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ と置き換えて考慮しやることで、数値計算上の質量残差のエネルギー式への影響は軽減できることになる。

(4) 圧力に関するポアソン方程式

運動量方程式(4.2-2)～(4.2-7)式を質量保存式(4.2-8)に代入すると,

$$a_{m0}^p \cdot P_0 - \sum_{\ell=1}^2 a_{m\ell}^p \cdot P_{\ell} - b_{m0}^p = \delta_0 V_0 r v \quad (4.2-13)$$

が得られる。

ここで,

$$\begin{aligned} a_{m1}^p &= A_{x1} \langle \rho \rangle_w^n \cdot \bar{d}_1 \\ a_{m2}^p &= A_{x0} \langle \rho \rangle_e^n \cdot \bar{d}_2 \\ a_{m3}^p &= A_{y3} \langle \rho \rangle_s^n \cdot \bar{d}_3 \\ a_{m4}^p &= A_{y0} \langle \rho \rangle_n^n \cdot \bar{d}_4 \\ a_{m5}^p &= A_{z5} \langle \rho \rangle_b^n \cdot \bar{d}_5 \\ a_{m6}^p &= A_{z6} \langle \rho \rangle_t^n \cdot \bar{d}_6 \\ b_{m0}^p &= -V_0 r v_0 \left(\frac{\partial}{\partial t} \rho\right)^n + A_{x1} \langle \rho \rangle_w^n \cdot \bar{u}_1 - A_{x0} \langle \rho \rangle_e^n \cdot \bar{u}_2 \\ &\quad + A_{y3} \langle \rho \rangle_s^n \cdot \bar{v}_3 - A_{y0} \langle \rho \rangle_n^n \cdot \bar{v}_4 \\ &\quad + A_{z5} \langle \rho \rangle_b^n \cdot \bar{w}_5 - A_{z6} \langle \rho \rangle_t^n \cdot \bar{w}_6 \end{aligned}$$

である。

(4.1-13)式との主な相違は、圧力損失項 R_x を除けば、SIMPLETEST法の場合、各圧力の係数マトリクス $a_0^p \sim a_6^p$ は、流速および密度の関数であるが、この修正ICE法では $a_{m0}^p \sim a_{m6}^p$ は密度のみの関数になっていることである。

(5) 計算手順

Fig. 4.2-1に修正ICE法による半陰解法の計算手順を示す。各手順の内容は次の通りである。

- ① 運動量保存式(4.2-2)～(4.2-7)につき、 $\bar{u}_1, \bar{u}_2, \bar{w}_5, \bar{w}_6$ および $\bar{d}_1, \bar{d}_2, \bar{d}_3, \bar{d}_4, \bar{d}_5, \bar{d}_6$ を計算する。
- ② 圧力に関するポアソン方程式(4.2-13)の係数 $\bar{a}_0^p, \bar{a}_1^p, \dots, \bar{a}_6^p, \bar{b}_0^p$ を計算する。
- ③ (4.2-13)式を解く。
- ④ 運動量保存式(4.2-2)～(4.2-7)式に解かれた圧力を代入して、流速を計算する。
- ⑤ エネルギー保存式(4.2-9)式より h_0 を計算する。

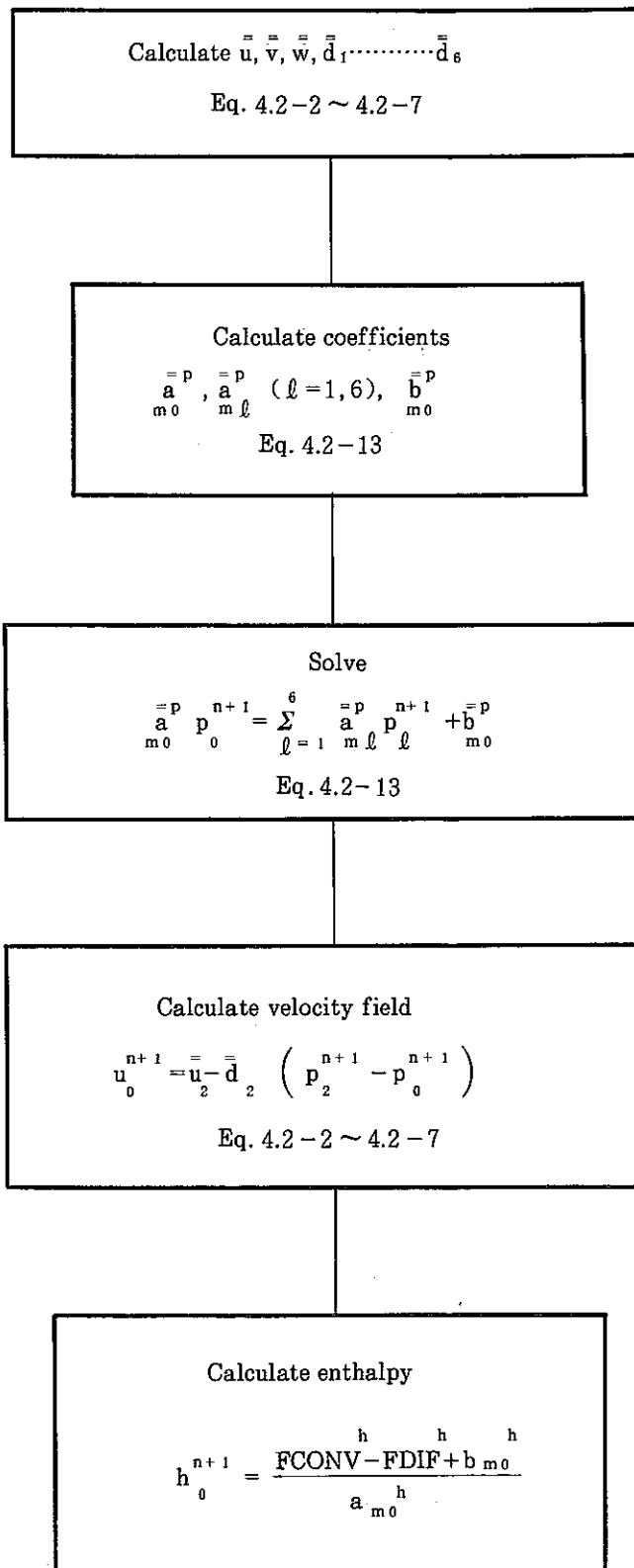


Fig. 4.2-1 Semi-implicit Solution Sequence

5. 圧力方程式の解法

5.1 PSOR法

連立1次方程式

$$\left. \begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned} \right\} \quad (5.1-1)$$

を反復法で解くために、まず第1番目の式の x_1 以外の未知数に近似値を代入して x_1 のさらに良い近似値を求め、第2番目の式の x_2 以外の未知数に近似値を代入して x_2 を求める、という様に、一般的に第 i 番目の式以外の未知数に近似値を代入して x_i を求める方法を考える。第 i 番目の式は、

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{in}x_n = b_i \quad (5.1-2)$$

であるから、これを用いて x_i を求めるためには、

$$x_i = (b_i - a_{i1}x_1 - a_{i2}x_2 - \dots - a_{i,i-1}x_{i-1} - a_{i,i+1}x_{i+1} - \dots - a_{in}x_n) / a_{ii} \quad (5.1-3)$$

とすればよい。これを $i=1$ から $i=n$ まで計算すれば、前よりも更に良い近似値の1組が得られる。さらに精度を高めるために、以上の操作を何度も繰り返し、 k 回繰り返し後の近似値を

$$x_1^k, x_2^k, \dots, x_n^k$$

とする。これをもとに第 $k+1$ 近似解を求めるための反復公式は、

$$\left. \begin{aligned} x_1^{k+1} &= a_{11}^{-1} \{ a_{12}x_2^k + a_{13}x_3^k + \dots + a_{1n}x_n^k \} \\ x_2^{k+1} &= a_{22}^{-1} \{ b_2 - (a_{21}x_1^k + a_{23}x_3^k + \dots + a_{2n}x_n^k) \} \\ &\vdots \\ x_n^{k+1} &= a_{nn}^{-1} \{ b_n - (a_{n1}x_1^k + a_{n2}x_2^k + \dots + a_{n,n-1}x_{n-1}^k) \} \end{aligned} \right\} \quad (5.1-4)$$

となる(以上、ヤコビ法)。

ところで、第 $k+1$ 近似値を $x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \dots$ の順に求めてゆくとすれば、 x_i^{k+1} を計算する段階では、既に $x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \dots, x_{i-1}^{k+1}$ までは計算済みであるからそこまではこの新しい近似値を使って

$$\begin{aligned} x_i^{k+1} &= a_{ii}^{-1} \{ b_i - (a_{i1}x_1^{k+1} + a_{i2}x_2^{k+1} + \dots + a_{i,i-1}x_{i-1}^{k+1} \\ &\quad + a_{i,i+1}x_{i+1}^k + a_{i,i+2}x_{i+2}^k + \dots + a_{in}x_n^k) \} \end{aligned} \quad (5.1-5)$$

と計算する方が有利である。反復公式は、

$$\left. \begin{aligned}
 x_1^{k+1} &= a_{11}^{-1} \{ b_1 - (a_{12} x_2^k + a_{13} x_3^k + \dots + a_{1n} x_n^k) \} \\
 x_2^{k+1} &= a_{22}^{-1} \{ b_2 - (a_{21} x_1^{k+1} + a_{23} x_3^k + \dots + a_{2n} x_n^k) \} \\
 &\vdots \\
 x_n^{k+1} &= a_{nn}^{-1} \{ b_n - (a_{n1} x_1^{k+1} + a_{n2} x_2^{k+1} + \dots + a_{nn-1} x_{n-1}^{k+1}) \}
 \end{aligned} \right\} \quad (5.1-6)$$

となる(以上, ガウス-ザイデル法)。

次に, ガウス-ザイデル法の収束性を加速するために, 逐次過大緩和法(SOR法)を考える。

- ① x^k は, 第 k 近似値(解)とする。
- ② ガウス-ザイデル法を適用したものを \tilde{x}^{k+1} とする。
- ③ 修正ベクトルは $\Delta x^{k+1} = \tilde{x}^{k+1} - x^k$
- ④ この修正量を ω 倍して, 過大修正値 x^{k+1} を作る。

$$x^{k+1} = x^k + \omega \Delta x^{k+1}$$

以上の方法は, 第 i 番目の計算における x_1 から x_{i-1} までは, 最新の過大修正値を用いるというものである。反復公式は,

$$\left. \begin{aligned}
 \tilde{x}_1^{k+1} &= a_{11}^{-1} \{ b_1 - (a_{12} x_2^k + a_{13} x_3^k + \dots + a_{1n} x_n^k) \} \\
 x_1^{k+1} &= x_1^k + \omega (\tilde{x}_1^{k+1} - x_1^k) \\
 \tilde{x}_2^{k+1} &= a_{22}^{-1} \{ b_2 - (a_{21} x_1^{k+1} + a_{23} x_3^k + \dots + a_{2n} x_n^k) \} \\
 x_2^{k+1} &= x_2^k + \omega (\tilde{x}_2^{k+1} - x_2^k) \\
 &\vdots \\
 \tilde{x}_n^{k+1} &= a_{nn}^{-1} \{ b_n - (a_{n1} x_1^{k+1} + a_{n2} x_2^{k+1} + \dots + a_{nn-1} x_{n-1}^{k+1}) \} \\
 x_n^{k+1} &= x_n^k + \omega (\tilde{x}_n^{k+1} - x_n^k)
 \end{aligned} \right\} \quad (5.1-7)$$

となる。ここで ω は, 加速定数であり, デフォルト値は 1.5 である。

5.2 ICCG 法

ICCG 法 (Incomplete Choleski Conjugate Gradient Method) は, Meijerink van der Vorstらにより開発された手法⁽⁹⁾であり, 直接法 ($L \cdot L^T$ 分解) と繰り返し法 (CG 法⁽²⁰⁾) とを混合したものである。この解法は, 理論的には n 次元連立 1 次方程式を高々 n 回の反復で解くことができる CG 法に, 収束性を改善するための前処理 (Pre conditioning) を施したもので, 単相流差分法解析では n 回の反復以内に PSOR 相当以上の精度を持つ解を得ることができるものである。

一般に, 有限差分法での圧力に関するポアソン方程式の係数行列は疎である。この疎な係数行列 A に対し, 完全コレスキー分解 ($L \cdot L^T$ 分解) を行なえば, 分解行列 L はもはや疎ではなく密行列となる。そこで, 行列 L も元の係数行列 A と同程度に疎とし, 計算機格納領

域および演算回数を節約するために不完全コレスキー分解を考える。即ち、もとの係数行列 A において零が入っている場所については何も計算せず零と置いてしまい、計算を続行することである。これにより作成される行列 L ともとの係数行列 A との関係は、

$$L \cdot D \cdot L^T \approx A \quad (5.2-1)$$

となる。この関係を用い、連立 1 次方程式

$$A \cdot x = b \quad (5.2-2)$$

を解く代りに

$$(\tilde{L}^{-1} \cdot A \cdot L^T)(L^T \cdot x) = (\tilde{L}^{-1} \cdot b) \quad (5.2-3)$$

として、これに CG 法を適用する手法が ICCG 法である。ここで、 \tilde{L} は L · D を表わす。

不完全コレスキー分解のアルゴリズムは、以下の通りである。

```

For   i=1 to n
  For   k=1 to i-1
    dii = aii - lik2 dkk
    if aij = 0
      then lij = 0
    else lij = (aij - ∑k=1i-1 (lik ljk) * dkk) / djj
  Next k
Next i
    
```

例えば、以下の様な係数行列 A を考える。

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & & & & a_{15} \\ & a_{22} & & a_{24} & a_{25} \\ & & a_{33} & a_{34} & a_{35} \\ & a_{42} & a_{43} & a_{44} & \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & & a_{55} \end{bmatrix} \quad (\text{注}) \text{ 空白位置は零要素}$$

ここで、第 4 列目まで分解が終了したとすると、 \tilde{L} の中味は、

$$\tilde{L} = \begin{bmatrix} a_{11} & & & & \\ & a_{22} & & & \\ & & a_{33} & & \\ & *_{42} & *_{43} & *_{44} & \\ & & & & \end{bmatrix} \quad (\text{注}) \text{ 空白位置は零要素}$$

----- 分解列

* 対称行列のため、 l_{ik}^2 に置き換え可能

である。ここで、 $*_{42}$ 、 $*_{43}$ 、 $*_{44}$ はそれぞれ

$$*_{42} = a_{42} - (l_{42}^2 d_{44}) / d_{22}$$

$$*_{43} = a_{43} - (l_{43}^2 d_{44}) / d_{33}$$

$$*_{44} = a_{44} - l_{42}^2 d_{22} - l_{43}^2 d_{33}$$

である。

また、以下に ICCG 法のアルゴリズムを示す。

- ① 残差初期値 $r_i^0 = b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^0$
- ② 修正ベクトル初期値 $P_i^0 = (L \cdot L^T)^{-1} r_i^0$

CG ループ

- ③ 修正量 $\alpha_i^k = (r_i^k, (L \cdot L^T)^{-1} r_i^k) / (A \cdot P_i^k, P_i^k)$
- ④ 未知数 $x_i^{k+1} = x_i^k + \alpha_i^k P_i^k$
- ⑤ 残差 $r_i^{k+1} = r_i^k - \alpha_i^k A \cdot P_i^k$
- ⑥ 残差率 $\beta^k = (r_i^{k+1}, (L \cdot L^T)^{-1} r_i^{k+1}) / (r_i^k, (L \cdot L^T)^{-1} r_i^k)$
- ⑦ 修正ベクトル $P_i^{k+1} = (L \cdot L^T)^{-1} r_i^{k+1} + \beta^k P_i^k$
- ⑧ 収束判定 $(\epsilon: \max(r_i^{k+1}))$

$i=1, 2, \dots, n$

ICCG 法のアルゴリズム中に現われる $(L \cdot L^T)^{-1} \cdot r_i$ 項は、以下の様な前進代入および後退代入により評価される。

$$\begin{aligned} L \cdot V &= r_i \\ V &= L^{-1} \cdot r_i \end{aligned} \tag{5.2-4}$$

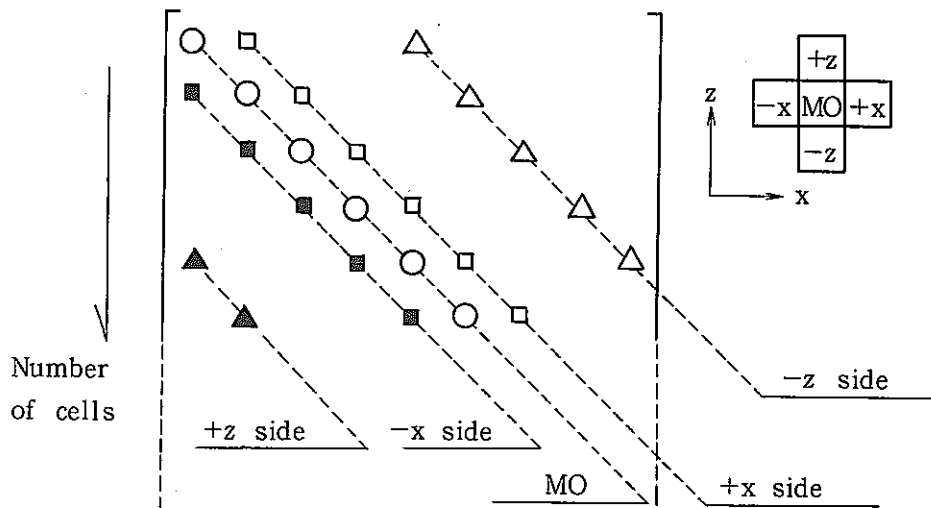
$$\begin{aligned} L^T \cdot u &= V \\ u &= L^{-T} \cdot V \\ &= L^{-1} \cdot L^{-T} \cdot r_i \end{aligned} \tag{5.2-5}$$

ここで、

- L : 下三角行列 (既知)
- L^T : 上三角行列 (既知)
- r_i : 残差 (既知)
- u : $(L \cdot L^T)^{-1} r_i$
- V : 中間作業ベクトル

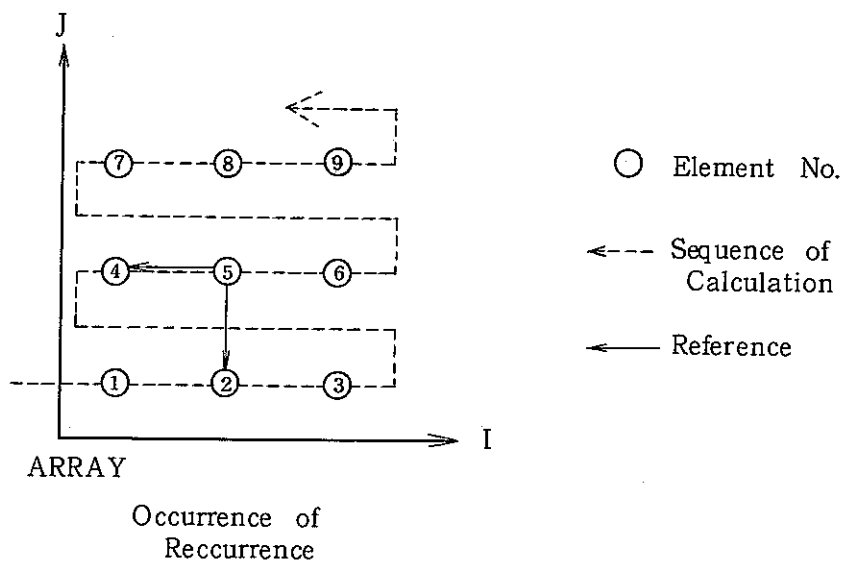
AQUA では、以上の処理をベクトル演算に適した手法で行なうため、ハイパープレーン法を採用している。以下にその概要を述べる。

AQUA に於て、2 次元体系について 5 点差分近似処理を行なった場合に作成される係数行列の形は一般的に、



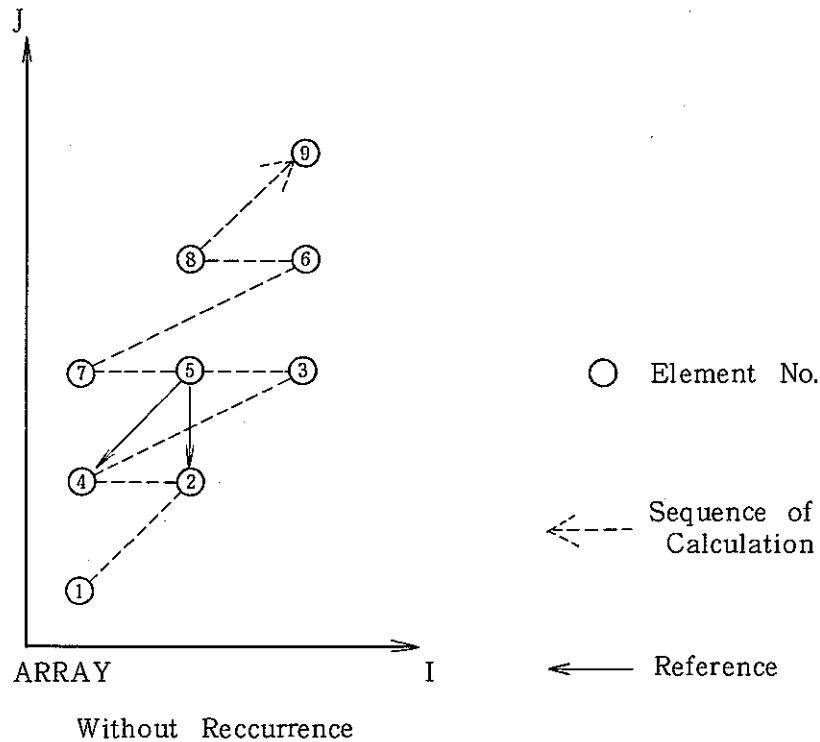
の様に対称形となる。このように、非零要素が現われる場所は対角要素の上下に2本ずつ計5本の線(注目セルMOおよび±x側, ±z側)となる。そこで、これら各線内要素を解析体系形状の2次元配列中に格納し、計5枚の2次元配列で係数行列を表わすことを考える。同様の事を3次元体系について行なう場合には、7点差分近似処理が必要となり、係数行列中の非零要素は対角要素の上下3本ずつ計7本の線となる。このため7枚の2次元配列が必要となる。

ところで、係数行列内の非零要素を前述の2次元配列内に通常最も良く使用される順序で格納して、図の点線の順序で計算してゆくことを考えると、任意の*i*番目の計算では*i*-1番目と*i*-3番目(ここでは②と④の要素)の計算結果を参照する必要があるため、ベクトル計算を実施する上で以下の様な回帰的参照関係が生ずる。すなわち、前の要素の処理が終了しなければ、自分自身の要素の処理に移ることができない。



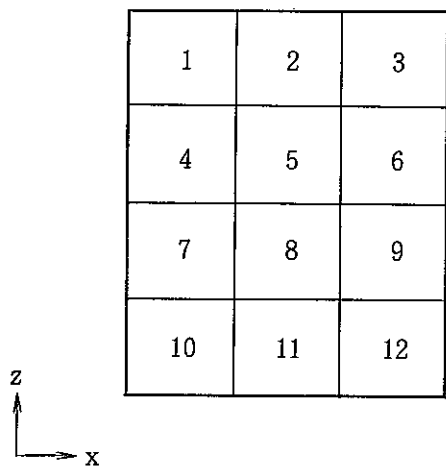
このような回帰的参照関係の存在は、ベクトル演算(並列処理)を不可能にする。すなわち、前に示した例について言えば、⑤の演算を行なうためには、④と②についての演算が終了している必要があり、④と⑤の演算は並列処理ができない。そこで、この回帰的参照関係を回避するため、以下の様に2次元配列への格納を要素①に対して斜めに格納し、縦方向に1段ずらす格納方式に変更することとする。ここで、計算順序は、前出格納法で①要素に対し斜めに行なうことに相当する。

Advanced Storage Scheme
for Vector Processor

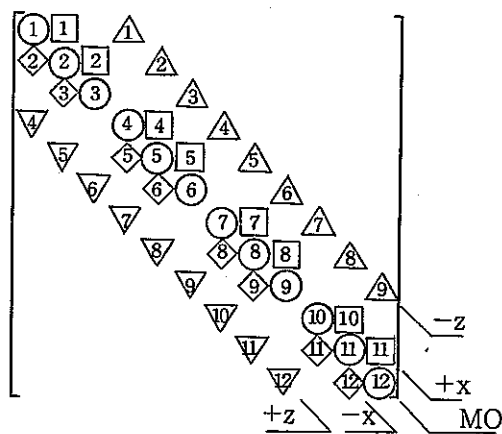


このような格納演算方式では、⑤の演算を行なうためには、前と同様にやはり②と④の要素の計算結果が必要であるが、⑤と③等の要素間には関連がないため、⑤と③の要素の並列処理が可能である。

例として、下図の左に示す様な2次元解析体系と計算セルの番号付けおよび計算順序を考える。この場合の係数行列の非零要素は下図右のようになる。ここで係数行列の非零要素を示す図の記号の中の数字はセル番号を示す。

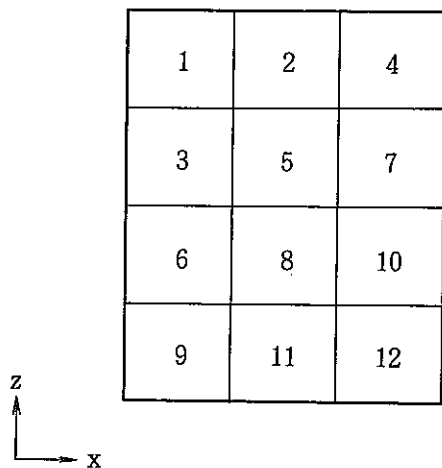


Conventional Sequence of Calculation



Numbering of Matrix Elements

この計算セルの計算順序で計算を実行すると先に述べた通り、回帰的参照関係のある方法となる。このため、計算セルの計算順序を前に述べたように斜めに実行してゆくことを考える。すなわち、計算順序は、



Sequence of Calculation for Vector Processor

の様になり、回帰的参照関係が生じない計算が行なえるようになる。

さらに、インデックス処理なしの演算を行なうため各列を1行ずつ縦に下方にずらし、配列を規定すると係数行列の非零要素の格納はそれぞれの plane について以下の様になる。

MO plane

1	Null	
3	2	
6	5	4
9	8	7
	11	10
Null		12

+X plane

1	Null	
3	2	
6	5	
9	8	
	11	
Null		

-X plane

	Null	
	2	
	5	4
	8	7
		10
Null		

+Z plane

	Null	
3		
6	5	
9	8	7
	11	10
Null		12

-Z plane

1	Null	
3	2	
6	5	4
	8	7
		10

先に示した行列要素の格納を具体的に示すと以下の通りとなる。

MO plane

①	Null	
④	②	
⑦	⑤	③
⑩	⑧	⑥
	⑪	⑨
		⑫

+X plane

1	Null	
4	2	
7	5	
10	8	
	11	
Null		

-X plane

	Null	
	◇2	
	◇5	◇3
	◇8	◇6
	◇11	◇9
Null		◇12

+Z plane

	Null	
▽4		
▽7	▽5	
▽10	▽8	▽6
	▽11	▽9
Null		▽12

-Z plane

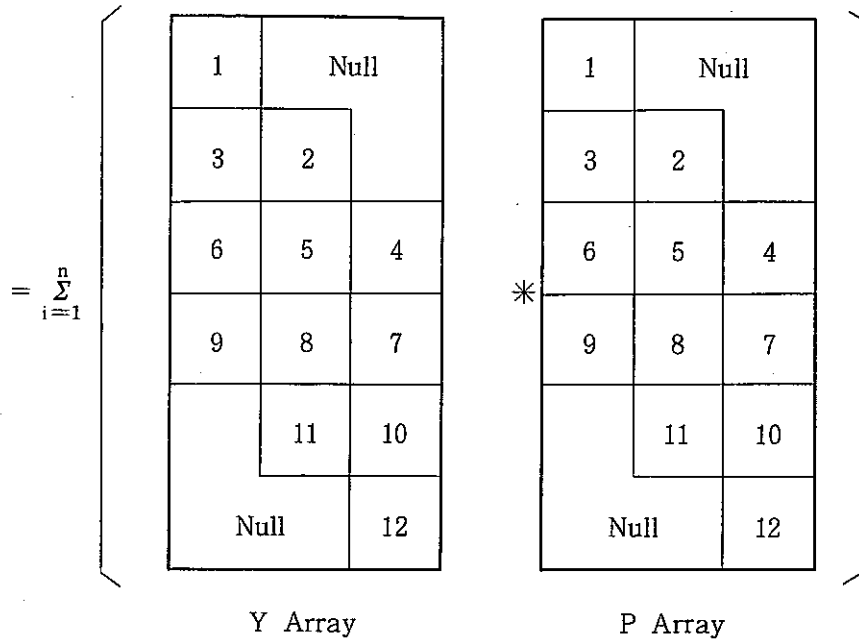
△1	Null	
△4	△2	
△7	△5	△3
	△8	△6
		△9
Null		

この規定された配列のうち Null の位置には 0.0 の値が格納されている。

この様な要素格納方法を用いたことにより、インデックス処理無しの演算が実現される。例えば簡単のためベクトル **Y** とベクトル **P** との内積計算を考えてみると、

$$D = (\mathbf{Y}, \mathbf{P})$$

$$= \sum_{i=1}^n y_i \cdot p_i \quad (n: \text{Array 要素数})$$



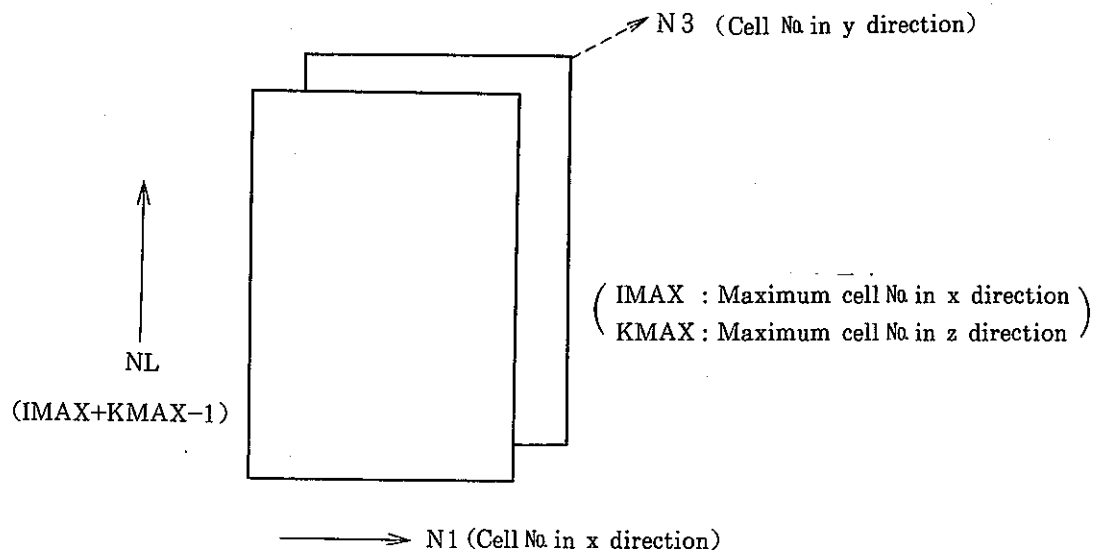
の演算に置き替えられ、プログラミング上は、

```

D=0.0
DO 10 I=1, 6
  DO 10 J=1, 3
    D=D+Y(I, J)*P(I, J)
10 CONTINUE
    
```

の様な単純な記述となり、ベクトル演算に最適 (IF 文無し) なプログラミングとなる。

Fig. 5.2-1~Fig. 5.2-6 に、ハイパープレーン法を用いた各種演算処理の詳細を示す。ハイパープレーン法を用いる場合の変数の意味は次の通りである。



ここに示した規則によって各種変数が規定され、プログラム内では (N1, NL, N3) の配列として扱われる。Table 5.2-1 にプログラム内で使用されている変数群の意味を一覧表として示す。

Table 5.2-1 Main Arrays used in ICCG Algorithms

variables	Region	mean
AA	N1 * NL/plane	Diagonal element in A
APX	"	+x side element in A
APY	"	+y "
APZ	"	+z "
ANX	"	-x "
ANY	"	-y "
ANZ	"	-z "
BBX	"	+x side element of lower triangular matrix after choleski decomposition
BBY	"	+y "
BBZ	"	+z "
BTX	"	Transpose matrix of BBX
BTY	"	" BBY
BTZ	"	" BBZ
D	"	Diagonal element after choleski decomposition
P1	"	Pressure
BT1	"	Load vector
XX	"	Unknown vector in CG loop
RR	"	Residuel vector
PP	"	Direction vector for correction
VV	"	Quantity vector for correction
S1	"	Work vector
YY	"	"

[method of calculation]

$$\begin{cases} d_{ii}^t = (a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^t d_{kk}^t) \\ l_{ij}^t = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^t \cdot l_{jk}^t d_{kk}^t) / d_{jj}^t \end{cases}$$

When $n_x=5$, $n_y=2$ and $n_z=5$ for $A(n_x, n_y, n_z)$ the method to be used in the calculation is

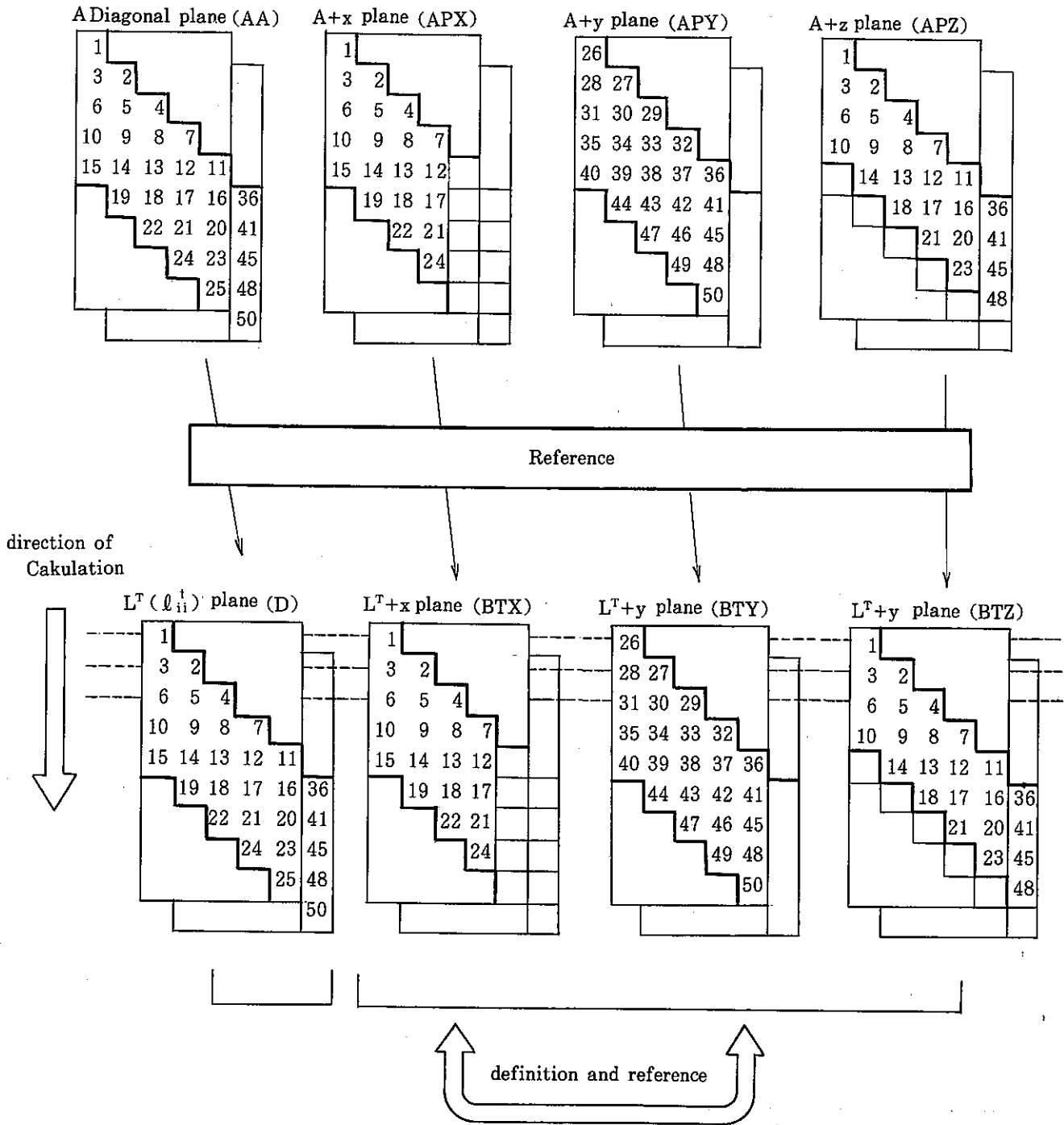


Fig. 5.2-1 Procedures of Incomplete Choleski Decomposition

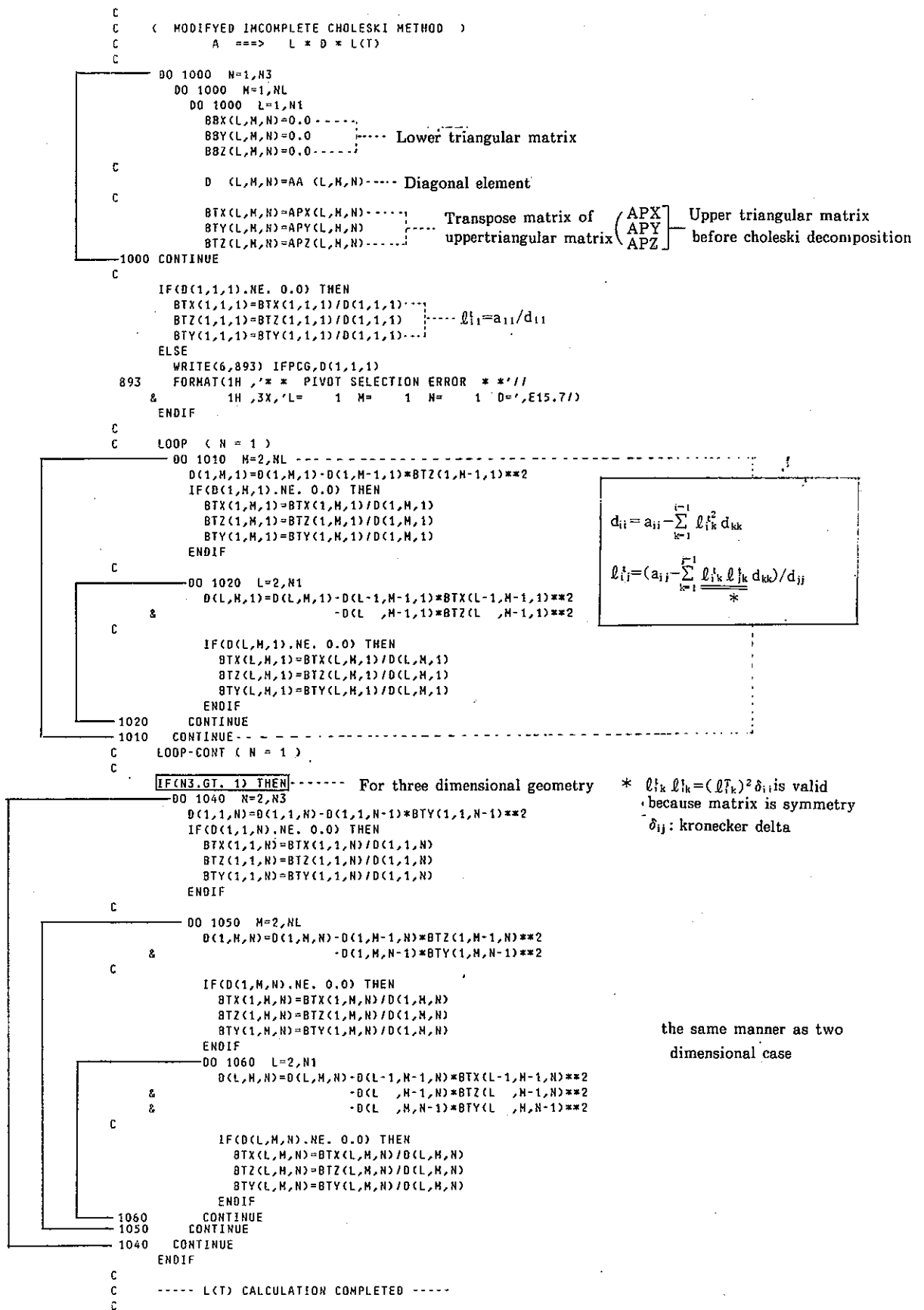


Fig. 5.2-1 Procedures in Incomplete Choleski Decomposition (continued)

(method of calculation)

$$Y_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} P_j$$

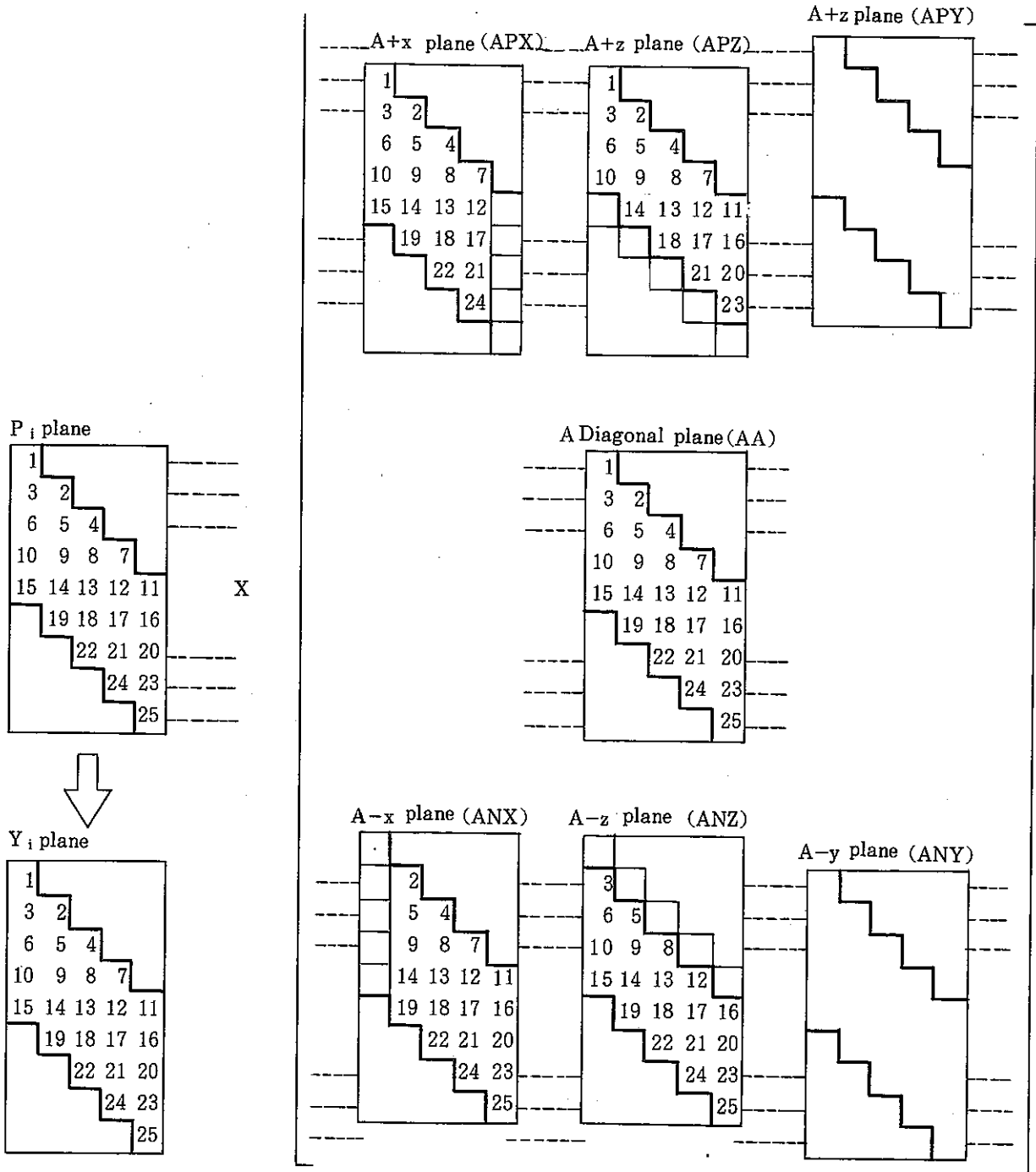


Fig. 5.2-2 Procedures of Vector-Array Product

```

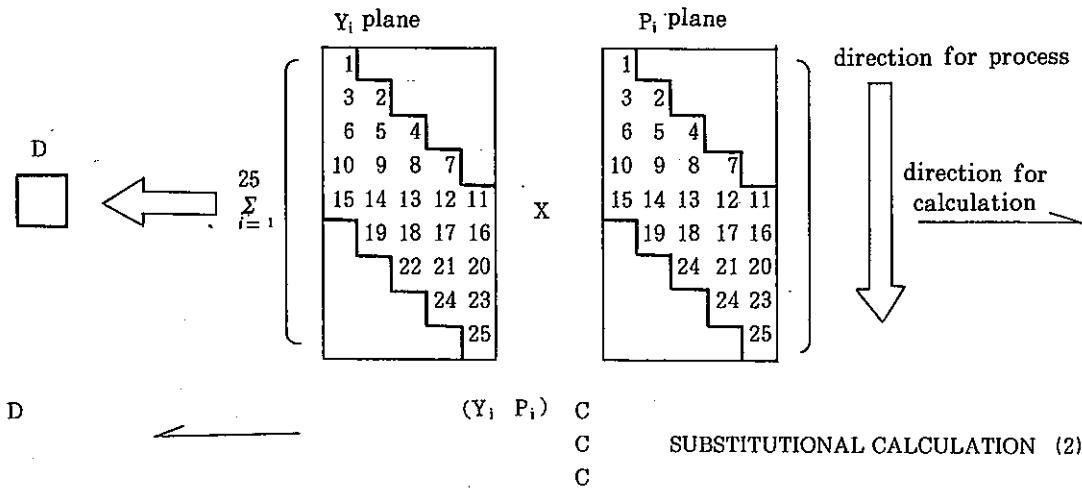
C
C      MULTIPLICATION OF VECTOR & MATRIX (2)
C
      DO 2200 N=1,N3
      DO 2200 M=1,NL
      DO 2200 L=1,N1
      YY(L,M,N)=AA(L,M,N)*PP(L,M,N)
      2200 CONTINUE
      DO 2210 N=1,N3
      DO 2230 M=1,NL-1
      DO 2230 L=1,N1-1
      YY(L,M,N)=YY(L,M,N)+APX(L,M,N)*PP(L+1,M+1,N)      (+X)*P
      YY(L+1,M+1,N)=YY(L+1,M+1,N)+ANX(L+1,M+1,N)*PP(L,M,N)  (-X)*P
      2230 CONTINUE
      C
      DO 2240 M=1,NL-1
      DO 2240 L=1,N1
      YY(L,M,N)=YY(L,M,N)+APZ(L,M,N)*PP(L,M+1,N)      (+Z)*P
      YY(L,M+1,N)=YY(L,M+1,N)+ANZ(L,M+1,N)*PP(L,M,N)  (-Z)*P
      2240 CONTINUE
      2210 CONTINUE
      C
      IF(N3.GT.1) THEN----- for three dimensional geometry
      DO 2250 N=1,N3-1
      DO 2260 M=1,NL
      DO 2260 L=1,N1
      YY(L,M,N)=YY(L,M,N)+APY(L,M,N)*PP(L,M,N+1)      (+Y)*P
      YY(L,M,N+1)=YY(L,M,N+1)+ANY(L,M,N+1)*PP(L,M,N)  (-Y)*P
      2260 CONTINUE
      2250 CONTINUE
      ENDIF

```

Fig. 5.2-2 Procedures of Vector-Array Product (continued)

[method of calculation]

$$D = (Y_i \ P_i) = \sum_{i=1}^n Y_i \cdot P_i$$



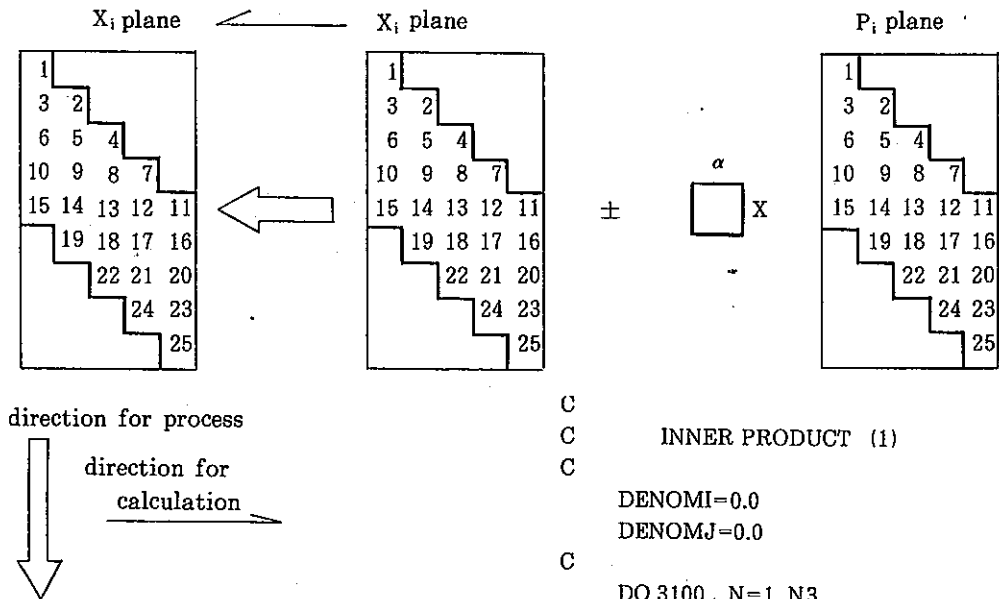
```

DO 4200 N=1,N3
DO 4200 M=1,NL
DO 4200 L=1,N1
RR(L,M,N)=RR(L,M,N)-ALPHA*YY(L,M,N)
4200 CONTINUE
    
```

Fig. 5.2-3 Procedures of Scalar Product

[method of calculation]

$$X_i = X_i \pm \alpha P_i$$



```

DENOMI=0.0
DENOMJ=0.0
C
DO 3100 N=1,N3
DO 3100 M=1,NL
DO 3100 L=1,N1
DENOMJ=DENOMJ+S1(L,M,N)*RR(L,M,N)
DENOMI=DENOMI+YY(L,M,N)*PP(L,M,N)
3100 CONTINUE
    
```

Fig. 5.2-4 Procedures of Substitutional Computation

[method of calculation]

$$V_i = (r_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} \cdot V_j) / l_{ii}$$

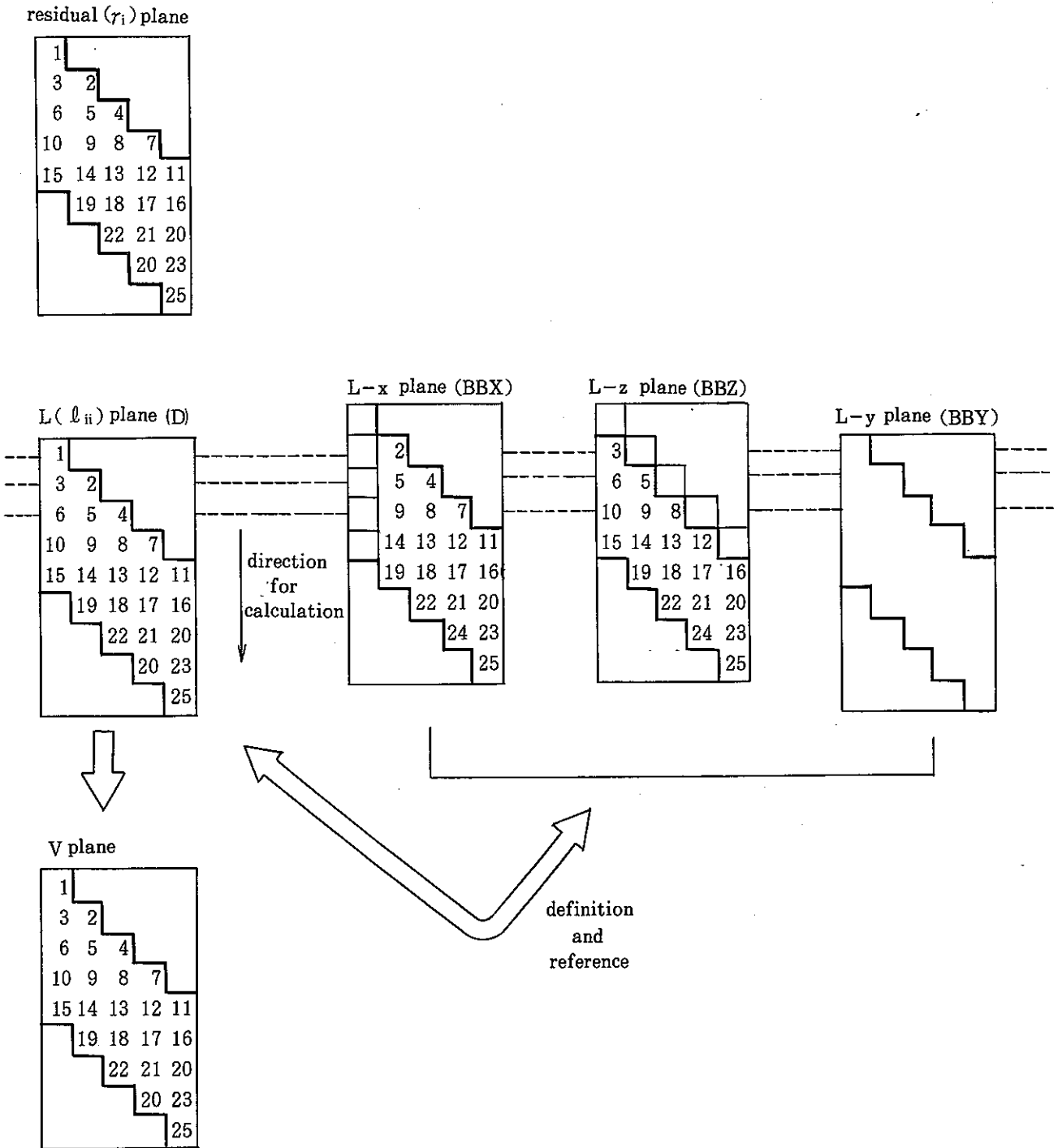


Fig. 5.2-5 Procedures of Forward Substitution

```

C
C   BACKWARD SUBSTITUTION (1)
C
C   ESTIMATE U (= V * INVERSE(L(T)) )
C
      DO 6100 N=1,N3
      DO 6100 M=1,NL
      DO 6100 L=1,N1
      PP(L,M,N)=VV(L,M,N)
      6100 CONTINUE
C
C   BBT(*,*,*)=1
C
      DO 6110 M=NL-1,1,-1
      DO 6120 L=1,N1-1
      PP(L,M,N3)=PP(L,M,N3)-BTX(L,M,N3)*PP(L+1,M+1,N3)
      &                                     -BTZ(L,M,N3)*PP(L,M+1,N3)
      6120 CONTINUE
      PP(N1,M,N3)=PP(N1,M,N3)-BTZ(N1,M,N3)*PP(N1,M+1,N3)
C
      6110 CONTINUE
C
      IF(N3.GT. 1) THEN----- for three dimensional geometry
      DO 6140 N=N3-1,1,-1
      PP(N1,NL,N)=PP(N1,NL,N)-BTY(N1,NL,N)*PP(N1,NL,N+1)
      DO 6150 M=NL-1,1,-1
      DO 6160 L=1,N1-1
      PP(L,M,N)=PP(L,M,N)-BTX(L,M,N)*PP(L+1,M+1,N)
      &                                     -BTZ(L,M,N)*PP(L,M+1,N)
      &                                     -BTY(L,M,N)*PP(L,M,N+1)
      C
      6160 CONTINUE
      PP(N1,M,N)=PP(N1,M,N)-BTZ(N1,M,N)*PP(N1,M+1,N)
      1                                     -BTY(N1,M,N)*PP(N1,M,N+1)
      6150 CONTINUE
      6140 CONTINUE
      ENDIF

```

Fig. 5.2-5 Procedures of Forward Substitution

[method of calculation]

$$P_i = (V_i - \sum_{j=i+1}^n l_{ij}^t P_j) / l_{ii}^t$$

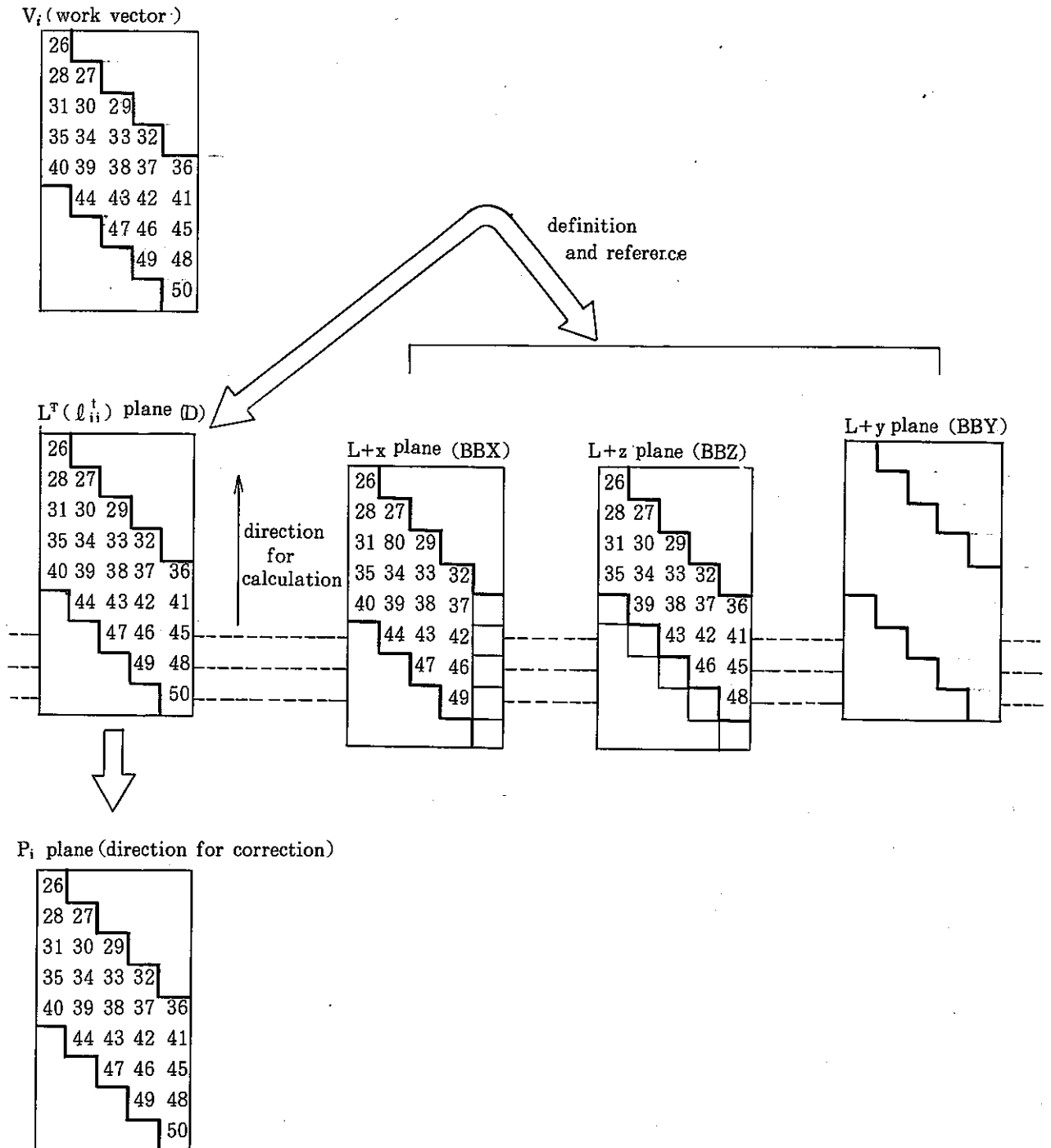


Fig. 5.2-6 Procedures of Backward Substitution

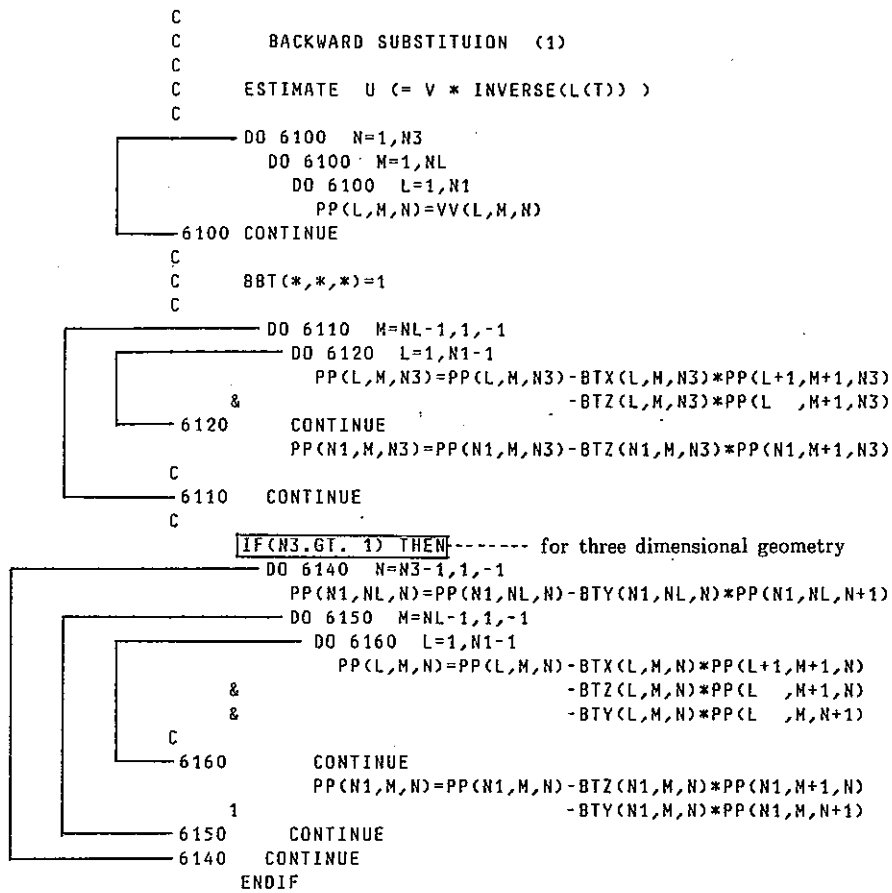


Fig. 5.2-6 Procedures of Backward Substitution

5.3 直接解法

AQUA での直接解法は、ガウスの消去法にウェーブ・フロント法的手法を取り入れたものであるが、基本的には外部ファイルは使用せず、In-Core処理のみで対応するものである。

解くべき連立1次方程式を

$$\left. \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{array} \right\} \quad (5.3-1)$$

とする。

計算の手順は、まず第1番目の式の $(-a_{21}/a_{11})$ 倍を第2番目の式に加える。この結果第2番目の式は、

$$\begin{aligned} & \left(a_{21} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{11} \right) x_1 + \left(a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{12} \right) x_2 + \cdots + \left(a_{2n} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{1n} \right) x_n \\ & = \left(b_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}} b_1 \right) \end{aligned} \quad (5.3-2)$$

になり、第2番目の式の x_1 の係数を零にすることができる。次に、第3番目の式について同様な処理を行なって a_{31} の値を零にする。以下同様にして、 $i=2, 3, \dots, n$ 行に対し処理を施すと、方程式は x_2, x_3, \dots, x_n に関する $n-1$ 元の連立1次方程式に縮約される。この処理後の方程式の形は、

$$\left. \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ 0 \cdot x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ 0 \cdot x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{array} \right\} \quad (5.3-3)$$

となっている。

第2番目の方程式以下の部分につき、同様の操作を施すと方程式のサイズをまた一つ小さくすることができる。すなわち、今度は第2番目の式の $(-a_{i2}/a_{22})$ 倍を i 番目の式に加える($i=3, 4, \dots, n$)。この結果、 x_3, x_4, \dots, x_n に関する $n-2$ 元の方程式となる。

以下同様で、一般に x_{K-1} までが消去された段階では、未知数 x_K が消去でき、残りは $(n-K)$ 元の連立1次方程式になる。

このようにして、 $K=1$ から $K=n-1$ まで計算すると、 x_{n-1} が消去されて、

$$a_{nn}x_n = b_n \quad (5.3-4)$$

という簡単な方程式が導びかれる。ただし、 a_{nn}, b_n は最初の係数ではなく書き替られた値で

ある。ここまでの段階が前進消去であり、前進消去が終了した時点の方程式は以下の様になっている。

$$\left. \begin{aligned}
 a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1,n-2}x_{n-2} + a_{1,n-1}x_{n-1} + a_{1n}x_n &= b_1 \\
 a_{22}x_2 + \dots + a_{2,n-2}x_{n-2} + a_{2,n-1}x_{n-1} + a_{2n}x_n &= b_2 \\
 \vdots & \\
 a_{n-2,n-2}x_{n-2} + a_{n-2,n-1}x_{n-1} + a_{n-2,n}x_n &= b_{n-2} \\
 a_{n-1,n-1}x_{n-1} + a_{n-1,n}x_n &= b_{n-1} \\
 a_{n,n}x_n &= b_n
 \end{aligned} \right\} \quad (5.3-5)$$

この式の第 n 番目の式は容易に解くことができ、

$$x_n = b_n / a_{n,n} \quad (5.3-6)$$

になる。 x_n が求められると、第 $n-1$ 番目の式を解くことができ、

$$x_{n-1} = (b_{n-1} - a_{n-1,n}x_n) / a_{n-1,n-1} \quad (5.3-7)$$

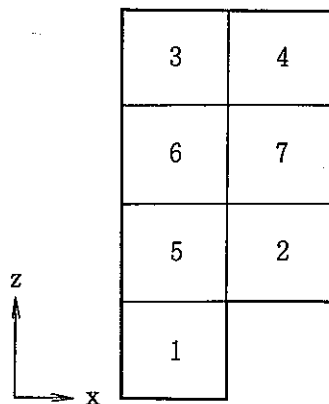
となる。以下この操作を繰り返すことにより全未知数を求めることができる。公式は、

$$x_i = (b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j) / a_{ii} \quad (5.3-8)$$

であり、 $i=n-1, n-2, \dots, 3, 2, 1$ の順に x_i が求められる。

AQUA では、上記の手法をベースとし、これに解くべき連立1次方程式の係数行列が疎行列であることを利用し、係数行列非零要素のみを1次元配列中に格納する手法を用いている。

簡単のため、以下の様な2次元解析体系とセルの番号付けを考える。



これにより作成される係数行列の形は、

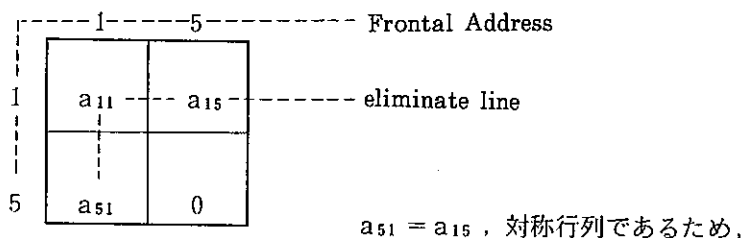
	1	2	3	4	5	6	7
1	a_{11}				a_{15}		
2		a_{22}			a_{25}	a_{27}	
3			a_{33}	a_{34}		a_{36}	
4			a_{43}	a_{44}			a_{47}
5	a_{51}	a_{52}			a_{55}	a_{56}	
6			a_{63}		a_{65}	a_{66}	a_{67}
7		a_{72}		a_{74}		a_{76}	a_{77}

となる。この係数行列中の非零要素のみを係数値と位置情報とに分け1次元配列中にそれぞれ格納する。ただし、係数行列が対称形であることを利用して、上三角行列分のみを格納する。

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
ELM=	a_{11}	a_{15}	a_{22}	a_{25}	a_{27}	a_{33}	a_{34}	a_{36}	a_{44}	a_{47}	a_{55}	a_{56}	a_{66}	a_{67}	a_{77}
LST=	1	5	2	5	7	3	4	6	4	7	5	6	6	7	7

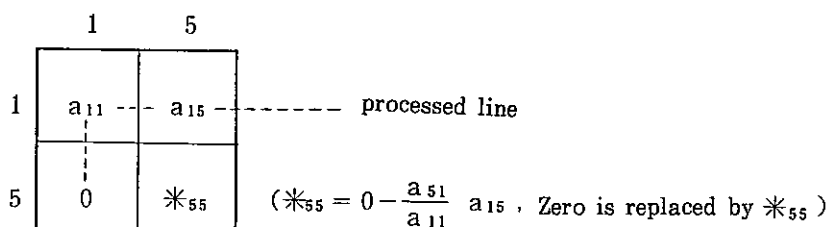
上記の1次元配列情報を用い、零要素を除いた形のフロントマトリックス上で前進消去および後退代入を処理してゆく。プログラム内では、この処理を1次元配列のまま行なうが、以下では説明のため2次元配列を用いる。

前出の係数行列(2次元表示)において、1行1列中の非零要素を消去するため、フロントマトリックス配列内にELM(1), ELM(2)の要素、すなわち a_{11} , a_{15} を以下の様に格納する。

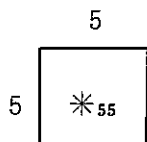


また、フロントマトリックスでのアドレス(フロントアドレス)としてLST(1), LST(2)の値、1および5が設定される。

ここで、(4.4.2)式を用いて消去計算を行なうと、フロントマトリックスは、



の様に書き換えられる。このうち、上記の処理済みラインに有る要素 (a_{11}, a_{15}) は、以降の処理ではもう利用されることは無く、フロントマトリックス内に保存しておく必要は無い。そこで、これらの要素を外部配列に掃き出し保存するとともに、フロントマトリックスを圧縮する。つまり、この操作はフロントアドレスの付け替えを意味する。この圧縮操作により、フロントマトリックスは次の様になる。



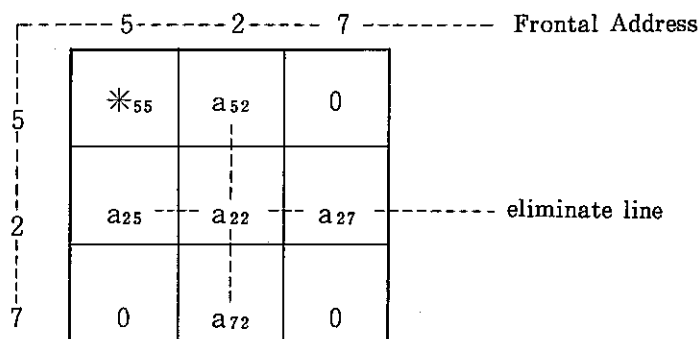
一方、荷重ベクトル b_5 も以下の様に置き換えられる。

$$b_5^* = b_5 - \frac{a_{51}}{a_{11}} b_1$$

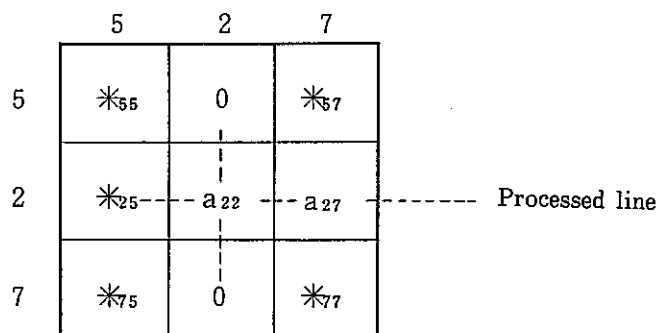
$$b_5 = b_5^*$$

ここで、*は、処理により値が初期のものから変更されたことを示す。以上の処理で、第5番目の式の x_1 の係数 (a_{51}) を零にすることができた。

次に、2行2列の非零要素を消去するために、ELM内から a_{22}, a_{25}, a_{27} の非零要素をフロントマトリックスに格納し、フロントアドレスを LST より設定する。この時点でのフロントマトリックスは、以下の様になっている。



前と同様にして、2行2列の消去処理を行なうと、



となる。ここで、各要素は以下の様書き換えられている。

$$*_{57} = -\frac{a_{52}}{a_{22}} a_{27}$$

$$*_{25} = *_{55} - \frac{a_{52}}{a_{22}} a_{25}$$

$$*_{75} = -\frac{a_{72}}{a_{22}} a_{25}$$

$$*_{77} = -\frac{a_{72}}{a_{22}} a_{27}$$

先と同様にして、フロントマトリックス内の2行2列の要素を外部配列に掃き出し、圧縮すると、

	5	7
5	$*_{55}$	$*_{57}$
7	$*_{75}$	$*_{77}$

の様な内容のフロントマトリックスとなる。荷重ベクトルは、

$$b_5^* = b_5 - \frac{a_{52}}{a_{22}} b_2 \qquad b_7^* = b_7 - \frac{a_{72}}{a_{22}} b_2$$

$$b_5 = b_5^* \qquad b_7 = b_7^*$$

の様に変更される。

以上の操作を続行してゆき、6行6列の消去の段階では、

	7	6	
7	$*_{77}$	a_{76}	
6	a_{67}	$-a_{66}$	----- eliminate line

の様なフロントマトリックスが形成されている。消去を行なうと、

	7	6	
7	$*_{77}$	0	
6	a_{67}	$-a_{66}$	----- processed line

となる。ここで、

$$*_{77}^{\nabla} = *_{77} - \frac{a_{76}}{a_{66}} a_{67}$$

である。圧縮操作を行なった後のフロントマトリックスは、以下の様になる。

$$7 \quad \begin{array}{|c|} \hline *_{77}^{\nabla} \\ \hline \end{array}$$

また、荷重ベクトルは、

$$b_7^* = b_7 - \frac{a_{76}}{a_{66}} b_6$$

$$b_7 = b_7^*$$

の様に変更されている。

この最終のフロントマトリックスと荷重ベクトルの関係は、

$$a_{77}^{\nabla} \cdot x_7 = b_7$$

であり、(4.4.4)式に相当する。以上が、前進消去の計算の流れである。上式は、簡単に解けて、

$$x_7 = b_7 / a_{77}^{\nabla}$$

により x_7 が求まる。

以下後退代入であり、前進消去の段階で外部配列に掃き出していた非零要素の値が用いられる。例えば、第6番目の式については、

$$x_6 = \frac{b_6 - a_{67} x_7}{a_{66}}$$

で解 x_6 が求められるが、ここで必要な情報はフロントマトリックスから掃き出した非零要素の a_{66} と a_{67} 、荷重ベクトル b_6 要素および後退代入の前ステップで求まる未知数 x_7 である。ここで示した式は、前に示した(4.4.8)式に相当する。この処理は、後退代入の前ステップで未知数が求めれば、前進消去での処理と逆の順番に各未知数が代数的処理で求めることができる。

ところで、解析体系が定めれば作成される係数行列の形、すなわち非零要素の出現位置が一意的に決定される。これによって、各処理段階(前進消去、後退代入)で、フロントマトリックス内に配置される非零要素の位置、フロントマトリックス内のどの非零要素を用いるかといった処理内容、処理された数値の外部配列への掃き出し位置、フロントマトリックスの圧縮操作内容等が固定されたものとなる。このことから、一度処理手順を規定しておくことによって、以降の処理は処理手順を参照することにより目的が達成される。すなわち、実行列(係数行列)に現われる非零要素、例えば a_{51} は、処理第1段階でフロントマトリックス内の $(2^i, 1^j)$ に格納され、同フロントマトリックス内の係数 a_{11} を用いて $\frac{a_{51}}{a_{11}} a_{15}$ を計算した後外部配列の1番目のアドレスに格納するといった具合である。

以上が、AQUA 内で使用されている手法の概要である。

5.4 Mass-Rebalancing

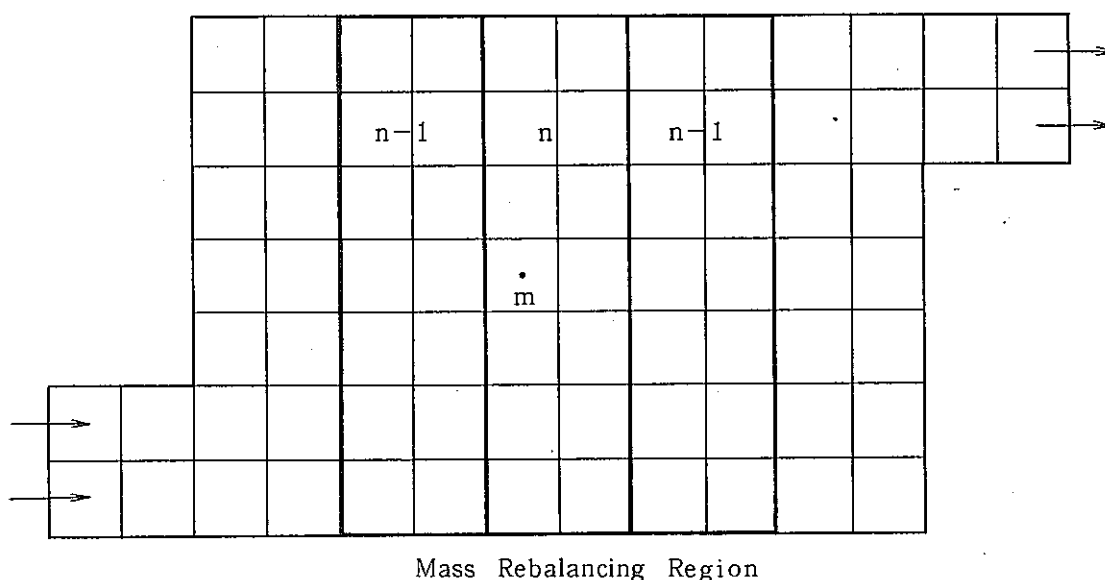
圧力に関するポアソン方程式を短時間に効率良く解くために、Mass Rebalancing と呼ばれる解法オプションが用意されている。このオプションは、粗メッシュ領域に分割された Rebalancing 領域内の修正圧力値の最適化を計るもので、圧力に関するポアソン方程式を解く際の繰り返し回数の大幅な減少が期待される。

以下に示す様な計算領域と Rebalancing 領域（太線表示領域）を考える。

計算セル m に対する圧力方程式は、

$$a_m P_m^* - \sum_{\ell=1}^6 a_{m\ell} P_\ell^* - b_m = \delta_m^* \quad (5.4-1)$$

となる。ここで、 P^* は連続の式を満足していない状態での圧力分布、



δ^* は上記条件での質量残差、 ℓ はセル m を取り囲む 6 個の計算セルである。Rebalancing 領域 n について総和を取ると、

$$\sum_{m \in n} (a_m P_m^* - \sum_{\ell=1}^6 a_{m\ell} P_\ell^* - b_m) = \sum_{m \in n} \delta_m^* \quad (5.4-2)$$

となる。また、Rebalancing 領域内各セルの修正圧力値を $\Delta P_1, \Delta P_2, \dots, \Delta P_n$ とすると新圧力分布値は、

$$P_m = P_m^* + \Delta P_n \quad (m \in n) \quad (5.4-3)$$

の様になり、新圧力分布値が連続の式を満足しているものとする、

$$\sum_{m \in n} (a_m P_m - \sum_{\ell=1}^6 a_{m\ell} P_\ell - b_m) = \sum_{m \in n} \delta_m = 0 \quad (5.4-4)$$

が得られる。 $P_m = P_m^* + \Delta P_m$ を上式に代入して整理すると、

$$\begin{aligned} \sum_{m \in n} (a_m P_m^* - \sum_{\ell=1}^6 a_{m\ell} P_\ell^* - b_m) + \Delta P_n [\sum_{m \in n} (a_m - \sum_{\ell \in n} a_{m\ell})] \\ - \Delta P_{n-1} [\sum_{m \in n} (\sum_{\ell \in n-1} a_{m\ell})] - \Delta P_{n+1} [\sum_{m \in n} (\sum_{\ell \in n+1} a_{m\ell})] = 0 \end{aligned} \quad (5.4-5)$$

となり、Rebalancing 領域 n につき、質量残差の総和を零にする様な ΔP 群を求める処理に帰着する。すなわち、

$$A_0^n \Delta P_n - A_1^n \Delta P_{n-1} - A_2^n \Delta P_{n+1} - B^n = 0 \quad (5.4-6)$$

ここで、

$$A_1^n = \sum_{m \in n} \sum_{m \in n} a_{m\ell} = A_2^{n-1}$$

$$A_2^n = \sum_{m \in n} \sum_{\ell \in n+1} a_{m\ell}$$

$$A_0^n = A_1^n + A_2^n$$

$$B^n = \sum_{m \in n} \delta_m^*$$

である。

これらの方程式は、上流側 Rebalancing 領域についての修正圧力値 ΔP_{n-1} の値が求まれば TDMA 等の簡単な代数的操作により解くことが可能である。ここで求めた各 Rebalancing 領域内修正圧力値 ΔP_n は、各 Rebalancing 領域内の各セル圧力値 P_m^* に修正を施すことになる。

6. k-ε 乱流モデル

6.1 基礎式

[乱流運動エネルギー k]

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \cdot k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \cdot u_i \cdot k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right) + \mathbf{P} + \mathbf{G} - \rho \cdot \epsilon \quad (6.1-1)$$

ここで,

$$\mathbf{P} = \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)$$

$$\mathbf{G} = g_j \beta \frac{\mu_t}{P_{rt}} \frac{\partial T}{\partial x_j}$$

[乱流運動エネルギー-散逸率 ε]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \cdot \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \cdot u_i \cdot \epsilon) = & \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) + C_1 \frac{\epsilon}{k} (\mathbf{P} + \mathbf{G}) \left(1 - C_3 \frac{\mathbf{G}}{\mathbf{P} + \mathbf{G}} \right) \\ & - C_2 \frac{\epsilon^2}{k} \end{aligned} \quad (6.1-2)$$

ここで,

C_1 : 入力定数 (=1.44)

C_2 : 入力定数 (=1.92)

C_3 : 入力定数 (=0.70)

σ_k : 入力定数 (=1.0)

σ_ϵ : 入力定数 (=1.3)

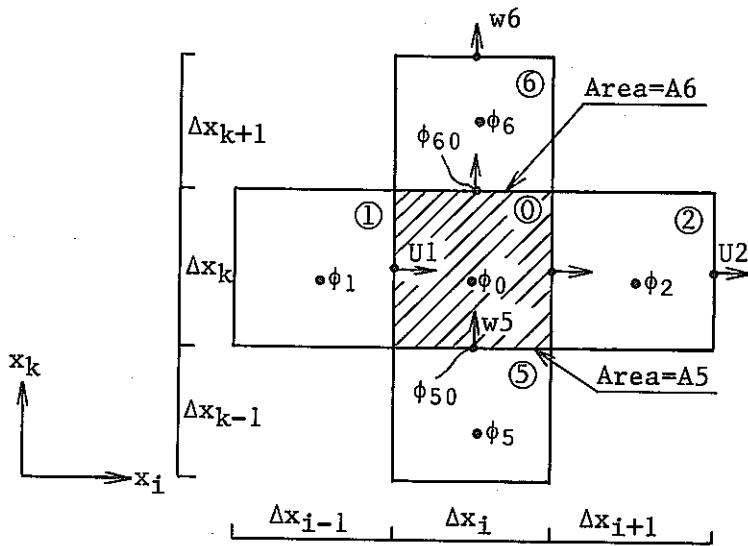
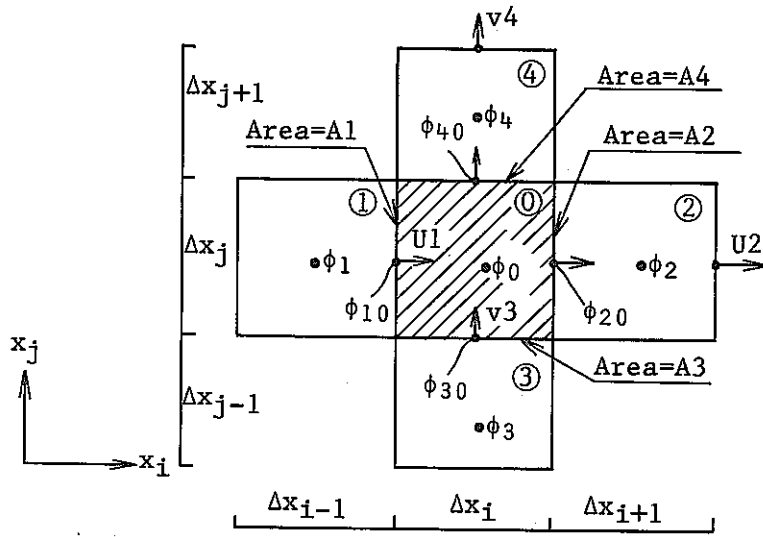
6.2 離散化

完全陰解法 (SIMPLEST-ANL) と半陰解法 (M-ICE) での取扱いの差は、4.1 と 4.2 におけるエネルギー保存式と同様であるため、ここでは完全陰解法に沿って説明し、半陰解法については割愛する。

k および ε についての支配方程式の離散化は、文献 3) をベースに Figure 5.1 の様なコントロール・ボリュームを用いて行なった。

[時間項]

(6.1-1) 式および (6.1-2) 式内の時間項を Figure 6.1-1 に示すセル ① 回りで積分を行なうと、



$\phi : k \text{ or } \epsilon$

Fig. 6.1-1 Finite Control Volume in Cartesian Coordinates

$$\int_V \frac{\partial}{\partial t} (\rho \cdot \phi) dV = V_0 \left[\rho_0^I \frac{\phi_0 - \phi_0^n}{\Delta t} + \phi_0 \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^I \right] \quad (6.1-3)$$

で表わされる。

ここで、

ϕ : 被輸送量 (k, ϵ)

V_0 : 実効体積 ($= r_v \cdot \Delta x_i \cdot \Delta y_j \cdot \Delta z_k$)

ρ : 密度

I : 前 iteration の値

n : 前 time step の値

〔対流・拡散項〕

(6.1-1) 式および (6.1-2) 式内の対流および拡散項を 3 次元表示すると、

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \cdot u_i \cdot \phi) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\mu}{\sigma_{ke}} \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \cdot u_j \cdot \phi) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{\sigma_{ke}} \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho \cdot u_k \cdot \phi) - \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\mu}{\sigma_{ke}} \frac{\partial \phi}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_\ell} (J_\phi)_\ell \end{aligned} \quad (6.2-1)$$

となる。ここで、Figure 6.1-1 に示すセル ① 回りで積分を行なうと、

$$\begin{aligned} & \int_V \frac{\partial}{\partial x_\ell} (J_\phi)_\ell dV \\ & = \{ (\rho \cdot u_2 \cdot A_2 \cdot \phi_{20}) - (\rho \cdot u_1 \cdot A_1 \cdot \phi_{10}) \} - \left\{ \left(\frac{\mu}{\sigma_{ke}} \cdot A_2 \cdot \frac{\partial \phi_{20}}{\partial x_{20}} \right) - \left(\frac{\mu}{\sigma_{ke}} \cdot A_1 \cdot \frac{\partial \phi_{10}}{\partial x_{10}} \right) \right\} \\ & + \{ (\rho \cdot v_4 \cdot A_4 \cdot \phi_{40}) - (\rho \cdot v_3 \cdot A_3 \cdot \phi_{30}) \} - \left\{ \left(\frac{\mu}{\sigma_{ke}} \cdot A_4 \cdot \frac{\partial \phi_{40}}{\partial x_{40}} \right) - \left(\frac{\mu}{\sigma_{ke}} \cdot A_3 \cdot \frac{\partial \phi_{30}}{\partial x_{30}} \right) \right\} \\ & + \{ (\rho \cdot w_6 \cdot A_6 \cdot \phi_{60}) - (\rho \cdot w_5 \cdot A_5 \cdot \phi_{50}) \} - \left\{ \left(\frac{\mu}{\sigma_{ke}} \cdot A_6 \cdot \frac{\partial \phi_{60}}{\partial x_{60}} \right) - \left(\frac{\mu}{\sigma_{ke}} \cdot A_5 \cdot \frac{\partial \phi_{50}}{\partial x_{50}} \right) \right\} \end{aligned} \quad (6.2-3)$$

ここで、座標軸 i について風上差分を行なうと、

$$\begin{aligned} & (\rho u_2 A_2 \phi_{20}) - (\rho u_1 A_1 \phi_{10}) - \left(\frac{\mu}{\sigma_{ke}} A_2 \frac{\partial \phi_{20}}{\partial x_{20}} \right) - \left(\frac{\mu}{\sigma_{ke}} A_1 \frac{\partial \phi_{10}}{\partial x_{10}} \right) \\ & = [0, F_2] \phi_0 - [0, -F_2] \phi_2 - [0, F_1] \phi_1 + [0, -F_1] \phi_0 - D_2 (\phi_2 - \phi_0) + D_1 (\phi_0 - \phi_1) \\ & = \phi_0 \{ [0, F_2] + D_2 + [0, -F_1] + D_1 \} - \phi_2 \{ [0, -F_2] + D_2 \} - \phi_1 \{ [0, F_1] + D_1 \} \end{aligned} \quad (6.2-4)$$

となる。式中の $[A, B]$ は、 A と B のうちから大きな値を取り出す操作を意味する。

同様に、他座標についても風上差分を行ないまとめると、

$$\begin{aligned}
& \int_V \frac{\partial}{\partial x_\ell} (J\phi)_\ell \\
&= \phi_0 \{ [0, F_2] + D_2 + [0, -F_1] + D_1 \\
&\quad + [0, F_4] + D_4 + [0, -F_3] + D_3 \\
&\quad + [0, F_6] + D_6 + [0, -F_5] + D_5 \} \\
&\quad - \{ \phi_2 \{ [0, -F_2] + D_2 \} + \phi_1 \{ [0, F_1] + D_1 \} \\
&\quad + \phi_4 \{ [0, -F_4] + D_4 \} + \phi_3 \{ [0, F_3] + D_3 \} \\
&\quad + \phi_6 \{ [0, -F_6] + D_6 \} + \phi_5 \{ [0, F_5] + D_5 \} \}
\end{aligned} \tag{6.2-5}$$

になる。ここで、

$$\begin{aligned}
F_1 &= \langle \rho_1 \rangle u_1 A_1 & D_1 &= A_1 / \left\{ \left(\frac{\Delta x_{i-1}}{2\mu_1} + \frac{\Delta x_i}{2\mu_0} \right) \cdot \sigma_{k\epsilon} \right\} \\
F_2 &= \langle \rho_2 \rangle u_2 A_2 & D_2 &= A_2 / \left\{ \left(\frac{\Delta x_i}{2\mu_0} + \frac{\Delta x_{i+1}}{2\mu_2} \right) \cdot \sigma_{k\epsilon} \right\} \\
F_3 &= \langle \rho_3 \rangle v_3 A_3 & D_3 &= A_3 / \left\{ \left(\frac{\Delta x_{j-1}}{2\mu_3} + \frac{\Delta x_j}{2\mu_0} \right) \cdot \sigma_{k\epsilon} \right\} \\
F_4 &= \langle \rho_4 \rangle v_4 A_4 & D_4 &= A_4 / \left\{ \left(\frac{\Delta x_j}{2\mu_0} + \frac{\Delta x_{j+1}}{2\mu_4} \right) \cdot \sigma_{k\epsilon} \right\} \\
F_5 &= \langle \rho_5 \rangle w_5 A_5 & D_5 &= A_5 / \left\{ \left(\frac{\Delta x_{k-1}}{2\mu_5} + \frac{\Delta x_k}{2\mu_0} \right) \cdot \sigma_{k\epsilon} \right\} \\
F_6 &= \langle \rho_6 \rangle w_6 A_6 & D_6 &= A_6 / \left\{ \left(\frac{\Delta x_k}{2\mu_0} + \frac{\Delta x_{k+1}}{2\mu_6} \right) \cdot \sigma_{k\epsilon} \right\}
\end{aligned}$$

$\langle \rho_n \rangle$: Upwind Density

(生成項 (Re 応力))

Re 応力による R の生成項をコントロール・ボリュームで積分すると、

$$\begin{aligned}
\int_V P_k dV &= V_0 \cdot \mu_t \left\{ 2 \left(\frac{du_i}{dx_i} \right)^2 + 2 \left(\frac{du_j}{dx_j} \right)^2 + 2 \left(\frac{du_k}{dx_k} \right)^2 \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{du_j}{dx_i} + \frac{du_i}{dx_j} \right)^2 + \left(\frac{du_k}{dx_j} + \frac{du_j}{dx_k} \right)^2 + \left(\frac{du_i}{dx_k} + \frac{du_k}{dx_i} \right)^2 \right\}
\end{aligned} \tag{6.2-6}$$

ここで、

$$\begin{aligned}
\frac{du_i}{dx_i} &= \frac{u_0 - u_1}{\Delta x_i}, \quad \frac{du_j}{dx_j} = \frac{v_0 - v_3}{\Delta x_j}, \quad \frac{du_k}{dx_k} = \frac{w_0 - w_5}{\Delta x_k} \\
\frac{du_j}{dx_i} &= \left\{ \frac{1}{2} (v_2 + v_{23}) - \frac{1}{2} (v_1 + v_{13}) \right\} / 2\Delta x_i \\
\frac{du_i}{dx_j} &= \left\{ \frac{1}{2} (u_4 + u_{14}) - \frac{1}{2} (u_3 + u_{13}) \right\} / 2\Delta x_j \\
\frac{du_k}{dx_j} &= \left\{ \frac{1}{2} (w_4 + w_{45}) - \frac{1}{2} (w_3 + w_{35}) \right\} / 2\Delta x_j
\end{aligned}$$

$$\frac{du_j}{dx_k} = \left\{ \frac{1}{2}(v_6 + v_{36}) - \frac{1}{2}(v_5 + v_{35}) \right\} / 2\Delta x_k$$

$$\frac{du_i}{dx_k} = \left\{ \frac{1}{2}(u_6 + u_{16}) - \frac{1}{2}(u_5 + u_{15}) \right\} / 2\Delta x_k$$

$$\frac{du_k}{dx_i} = \left\{ \frac{1}{2}(w_2 + w_{25}) - \frac{1}{2}(w_1 + w_{15}) \right\} / 2\Delta x_i$$

$$u_{13} = u_{i-1/2, j-1, k}, \quad u_{14} = u_{i-1/2, j+1, k}, \quad u_{15} = u_{i-1/2, j, k-1}, \quad u_{16} = u_{i-1/2, j, k+1}$$

$$v_{13} = v_{i-1, j-1/2, k}, \quad v_{23} = v_{i+1, j-1/2, k}, \quad v_{35} = v_{i, j-1/2, k-1}, \quad v_{36} = v_{i, j-1/2, k+1}$$

$$w_{15} = w_{i-1, j, k-1/2}, \quad w_{25} = w_{i+1, j, k-1/2}, \quad w_{35} = w_{i, j-1, k-1/2}, \quad w_{45} = w_{i, j+1, k-1/2}$$

また、(6.1-2)式の Re 応力による ε の生成項をコントロール・ボリュームで積分すると、

$$\int_V P_\varepsilon dV = C_1 \frac{\varepsilon}{k} \int_V P_k dV \quad (6.2-7)$$

となる。

(生成項(浮力))

(6.1-1)式の浮力による k の生成項をコントロール・ボリュームで積分すると、

$$\int_V S_{Gk} dV = V_0 \beta \frac{\mu_t}{P_{rt}} \left(\frac{\Delta T_i}{\Delta x_i} \cdot g_i + \frac{\Delta T_j}{\Delta x_j} \cdot g_j + \frac{\Delta T_k}{\Delta x_k} \cdot g_k \right) \quad (6.2-8)$$

ここで、

$$\frac{\Delta T_i}{\Delta x_i} = \frac{T_2 - T_1}{\Delta x_i}, \quad \frac{\Delta T_j}{\Delta x_j} = \frac{T_4 - T_3}{\Delta x_j}, \quad \frac{\Delta T_k}{\Delta x_k} = \frac{T_6 - T_5}{\Delta x_k}$$

また、(6.1-2)式の浮力による ε の生成項をコントロール・ボリュームで積分すると、

$$\int_V S_{G\varepsilon} dV = C_3 \frac{\varepsilon}{k} \int_V S_{Gk} dV \quad (6.2-9)$$

になる。

(散逸項)

(6.1-1)式の粘性による k の散逸項をコントロール・ボリュームで積分すると、

$$\int_V \rho \varepsilon dV = V_0 \cdot \rho \cdot \varepsilon \quad (6.2-10)$$

また、(6.1-2)式の粘性による ε の散逸項をコントロール・ボリュームで積分すると、

$$\int_V \varepsilon_D dV = V_0 C_2 \cdot \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (6.2-11)$$

になる。

以上を総合し、まとめると k の方程式は、

$$A_0 k_0 = \sum_{\ell=1}^6 A_\ell k_\ell + B_0 \quad (6.2-12)$$

ここで,

$$A_0 = \frac{1}{\omega} \{V_0 \cdot \rho_0 / \Delta t + a_0\}$$

$$a_0 = \sum_{\ell=1}^6 A_{\ell}$$

$$F_{\ell} = \langle \rho_{\ell} \rangle A_{r\ell} \cdot u_{\ell}$$

$$A_{\ell} = [0, (-1)^{\ell+1} \cdot F_{\ell}] + D_{\ell}$$

$$B_0 = \frac{\rho_0 \cdot V_0}{\Delta t} k_0^n - \rho_0 \epsilon_0 V_0 + (P_k + S_{Gk}) V_0 + (1 - \omega) A_0 k_0^l$$

ω : 加速定数

また, ϵ の方程式は,

$$A_0 \epsilon_0 = \sum_{\ell=1}^6 A_{\ell} \epsilon_{\ell} + B_0 \tag{6.2-13}$$

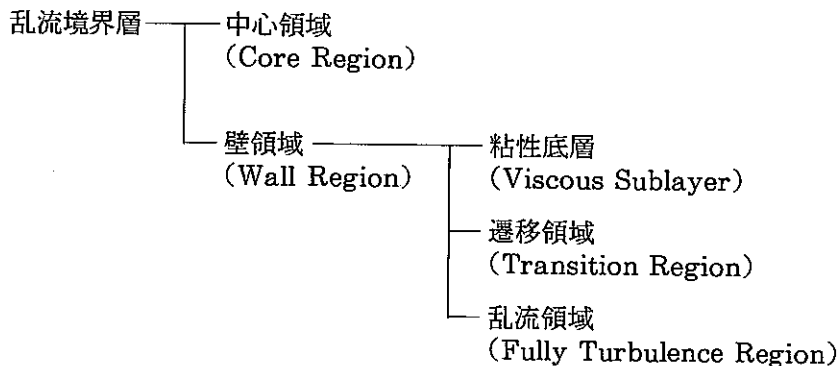
ここで,

$$A_0 = \frac{1}{\omega} \left\{ V_0 \cdot \rho_0 / \Delta t + a_0 + C_2 \frac{\epsilon^l}{k^l} S_0 \right\}$$

$$B_0 = \frac{\rho_0 \cdot V_0}{\Delta t} \epsilon_0^n + (P_{\epsilon} + S_{G\epsilon}) V_0 + (1 - \omega) A_0 \epsilon_0^l$$

6.3 壁面近傍での取扱い

乱流境界層は、一般に以下の様に分類される。



AQUA では、乱流領域については対数速度分布則により、また、粘性底層については層流底層分布および遷移領域については固体壁からの無次元距離の関数として剪断応力を与える手法を用いている。

壁領域では、局部剪断応力は壁での剪断応力から大きく変化しない領域で乱流粘性係数 μ_t と剪断応力 τ_w は、

$$\mu_t \frac{\partial u}{\partial y} = \tau_w \quad (6.3-1)$$

で表わされ、(6.3-1)式はほぼ

$$\frac{u}{y} = \frac{\tau_w}{\mu_t} \quad (6.3-2)$$

となる。また剪断応力 τ_w は、

$$\tau_w = \rho \cdot u^{*2} \quad (6.3-3)$$

で表わされ、以上より(6.3-4)式が導びかれる。

$$\frac{u}{u^*} = \frac{u^* y}{\mu_t / \rho} = \frac{u^* y}{\nu_t} \quad (6.3-4)$$

ここで、 u^* : 摩擦速度

ν_t : 乱流動粘性係数

一方、乱流領域では、剪断応力が大きく、粘性底層と変化がないと仮定すると、

$$\mu_t \frac{\partial u}{\partial y} = \tau_w \quad (6.3-5)$$

また、拡散距離が小さい時は、拡散係数は距離に対して線形に変化するとして、

$$\mu_t = \rho \cdot \kappa \cdot u^* y \quad (6.3-6)$$

が導びかれる。(6.3-6)式を(6.3-5)式に代入して整理すると、

$$\rho \cdot \kappa \cdot u^* \cdot y \cdot \frac{\partial u}{\partial y} = \rho \cdot u^{*2} \quad (6.3-7)$$

$$\kappa \cdot y \cdot \frac{\partial(u/u^*)}{\partial y} = 1 \quad (6.3-8)$$

$$\kappa \left(\frac{u^* y}{\nu} \right) \frac{\partial(u/u^*)}{\partial(u^* y / \nu)} = 1 \quad (6.3-9)$$

$$\frac{u}{u^*} = \frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{u^* y}{\nu} \right) + C \quad (6.3-10)$$

が得られ、(6.3-4)式および(6.3-10)式が Wall Function として定義される。ここで κ はカルマン定数 (≈ 0.4) である。

乱流運動エネルギー k は、壁近傍で局所平衡状態が成立するとし、 k の生成量と散逸量の平衡が仮定される。すなわち、

$$P_k - \rho \epsilon = 0 \quad (6.3-11)$$

である。また、生成量 P_k は、

$$\begin{aligned}
 P_k &= \mu_t \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) \\
 &= \tau_w \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right) \\
 &= \tau_w^2 / \mu_t \quad \left(\because \tau_w = \mu_t \frac{\partial u}{\partial y} \right)
 \end{aligned} \tag{6.3-12}$$

一方、乱流粘性係数 μ_t は、 k と ϵ を用いて、

$$\mu_t = \rho \cdot C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \tag{6.3-13}$$

で表わされる。したがって、局所平衡状態では、(6.3-12)式および(6.3-13)式を(6.3-11)式に代入すると、

$$\tau_w^2 = \rho^2 \cdot C_\mu \cdot k^2 \tag{6.3-14}$$

$$\tau_w = \rho \cdot C_\mu^{1/2} \cdot k \tag{6.3-15}$$

が得られる。一方先に求めた(6.3-10)式より

$$u^* = \frac{u}{\frac{1}{\kappa} \ln \left(C_1 \frac{u^* y}{\nu} \right)} \tag{6.3-16}$$

この両辺に $\rho \cdot u^*$ を掛けると、

$$\begin{aligned}
 \rho \cdot u^{*2} &= \frac{\rho \cdot u^* u}{\frac{1}{\kappa} \ln \left(C_1 \frac{u^* y}{\nu} \right)} \\
 &= \tau_w
 \end{aligned} \tag{6.3-17}$$

また、 u^* は(6.3-15)式より

$$u^* = C_\mu^{1/4} k^{1/2} \tag{6.3-18}$$

以上をまとめると、

$$\tau_w = \frac{\rho \cdot C_\mu^{1/4} \cdot k^{1/2} \cdot u}{\frac{1}{\kappa} \ln \left(C_1 \frac{C_\mu^{1/4} k^{1/2} y}{\nu} \right)} \tag{6.3-19}$$

したがって、 k の生成量は、(6.3-11)式より

$$\begin{aligned}
 P_k &= \tau_w \frac{\partial u}{\partial y} \\
 &= \tau_w \frac{u}{y}
 \end{aligned} \tag{6.3-20}$$

乱流エネルギーの散逸量 ϵ は、局所平衡条件式(6.3-11)式と(6.3-16)式より、

$$\epsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{Ky} \left(\frac{1}{k} \ln \left(C_1 \frac{u^* y}{\nu} \right) \right) \quad (6.3-21)$$

が導びかれる。

一方、粘性底層については、(6.3-4)式より

$$\tau_w = \mu \frac{u}{\left(\frac{u^* y_p}{\nu} \right)} \quad (6.3-22)$$

が導びかれる。

遷移領域については、

$$\tau_w = \frac{\rho \cdot C_\mu^{1/4} k_p^{1/2} u}{u/u^*} \quad (6.3-23)$$

を用いて実験値を再現している。

以上の壁領域3種の使い分けは、固体壁から隣接セル中心までの無次元距離 y^+ により振り分けている(21)。

$y^+ < 3.165$ 層流底層

$3.165 \leq y^+ < 70.0$ 遷移領域

$y^+ \geq 70.0$ 乱流領域

ここで、

$$y^+ = \frac{\rho \cdot C_\mu^{1/4} k_p^{1/2} y_p}{\mu} \quad (6.3-24)$$

である。

Fig. 6.3-1 が以上説明してきた壁面近傍での流速分布と距離との関係であり、実線がAQUAで使用しているものである。

AQUAでは、乱流運動エネルギー k につき(6.3-20)式を固体隣接セルに適用して生成量を計算し、また壁方向の勾配は $\partial k / \partial y = 0$ として内部セルとともに k の値を計算する。一方、 k の散逸率 ϵ については、(6.3-21)式を適用して ϵ の値そのものを計算し、内部セルとともに解かない。

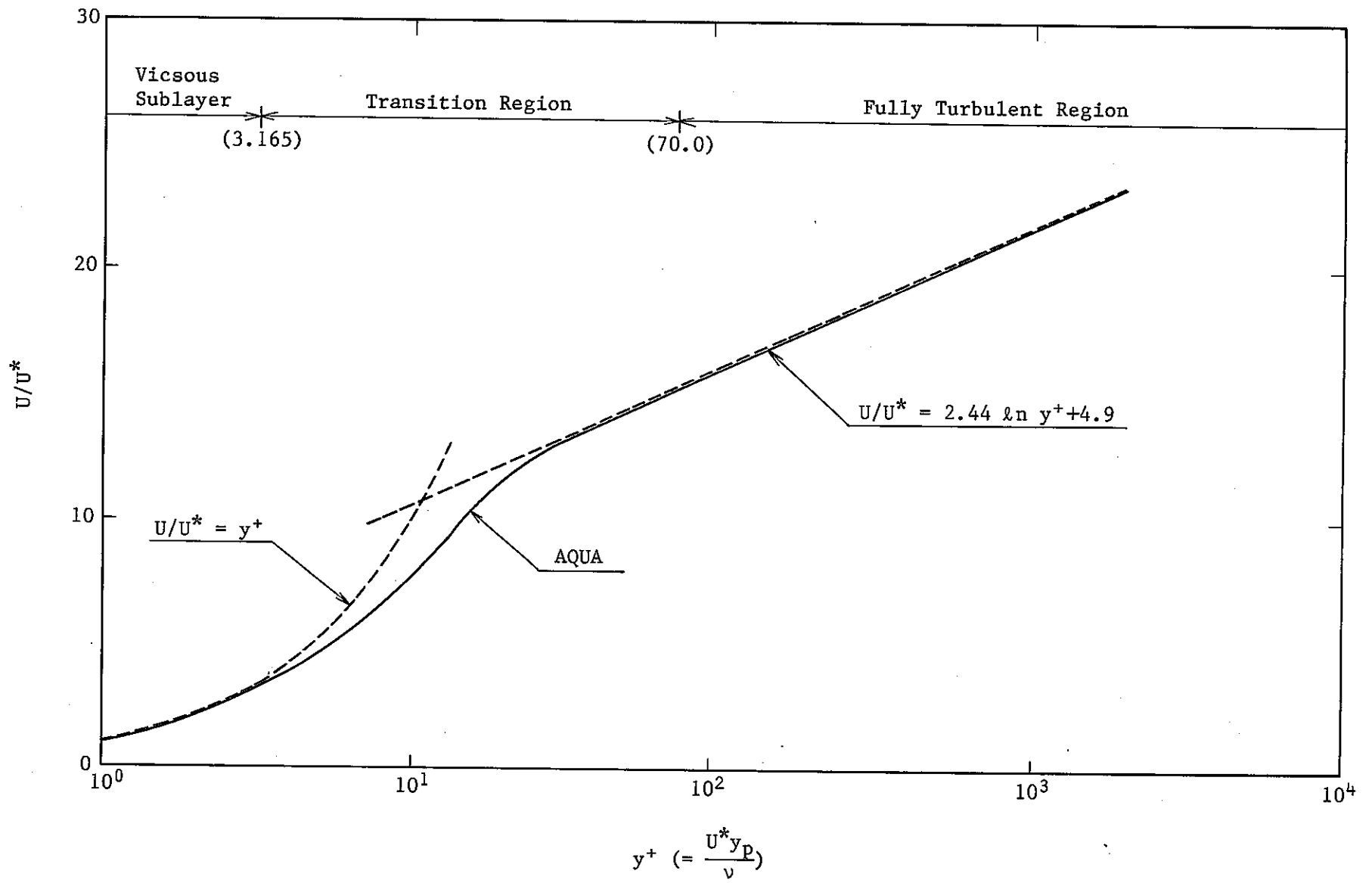


Fig. 6.3-1 Mean Velocity Distribution near the Wall

7. 結 言

単相多次元熱流動解析コード AQUA の数値計算法の詳細を説明した。本コードは、COMMIX-1A の基本性能を継承し、さらに解析精度の向上と、解析機能の強化のために以下の機能が新たに使用できる。

- (1) 対流項の離散化手法として、従来からの 1 次風上差分法の他に、QUICK 法および QUICK-FRAM 法が使用できる。
- (2) 圧力に関するポアソン方程式の解法として、従来の P-SOR 法の他に、ICCG 法および Wave Front 法が使用できる。
- (3) 乱流モデルとして、従来の $k-1$ 方程式乱流モデルをやめて、 $k-\epsilon$ 2 方程式乱流モデルを新たに採用した。
- (4) DRACS 1次元動特性モデルの使用が可能になった。
- (5) 任意物質の輸送モデルの使用が可能になった。

本コードによって、数値計算上の誤差(数値拡散)の影響が無い意味のある乱流解析が初めて可能になった。また大規模な計算体形の計算あるいは極低流量の自然循環状態での計算で問題になる収束性の悪化についても、新たに追加した解法によって解決できる見通しを得た。今後、さらに実験解析への応用と検証・改良を行ない、実機設計の熱流動評価に適用した場合の精度評価を可能ならしめることが必要である。

本コードの数値計算モデル上の今後の課題としては、

- (1) 高次差分法の完全陰解法への組み込み、
- (2) 複雑境界形状の取り扱いの改良

が挙げられる。(1)は、本来、高精度化と完全陰解法の使用による時間刻み幅の増加には合い入れない要素があるが、定常計算あるいは穏やかな過渡計算では、計算時間の節約に完全陰解法が勝っている。また大規模計算などでは、完全陰解法によって精度を少々犠牲にしても、短時間に解を求めることが可能ならば、解析の効率化の面で有効かもしれない。(2)は、今後最も、解析精度の向上に重要になってくることが予想される課題である。従来から複雑形状のモデル化では、たとえば、曲面壁では、矩形計算セルによる階段状のモデル化がとられているが、このモデルの妥当性ははなはだ疑問である。計算スキームの高精度化とバランスの取れた解析形状のモデル化が必要である。有力な手法には実空間の境界形状に沿った曲線座標格子を生成し、正方格子の写像空間で偏微分方程式を解く Boundary-Fitted Coordinate Transformation Technique (Boundary-Fit 曲線座標変換法)⁽²³⁾がある。

参 考 文 献

- (1) Domanus, H.M., et al., COMMIX-1A : A Three-Dimensional Transient Single-Phase Computer Program for Thermal Hydraulic Analysis of Single and Multi-component Systems, ANL 82-25, NUREG/CR-2896 (1983)
- (2) Maekawa, I., et al., "Improvement and Validation of Multi-Dimensional Thermal-Analysis Code (II), Task 2 : Study on Differencing Schemes Free from Numerical Diffusion," PNC N9410 86-008 January (1986).
(in Japanese)
- (3) Maekawa, I., et al., "Higher Order Differencing Schemes in Fluid Flow Analysis and Their Applications to In-Vessel Thermal-Hydraulics," Presented at the 5th IAHR Liquid Metal Working Group Meeting, Grenoble, France, June 23-27 (1986)
- (4) Leonard, B.P., A Stable and Accurate Convective Modeling Procedure based on Quadratic Upstream Interpolation, Comp. Methods Appl. Mech. Eng., 19, (1979) 59
- (5) Chapman, M., FRAM-Nonlinear Damping Algorithms for the Continuity Equation J. Comput. Phys., 44, (1981) 84
- (6) Muramatsu, T., et al., "Improvement and Validation of Multi-Dimensional Thermal-Analysis Code (II), Task 3 : Investigation of PCG method," PNC N941 85-90 May (1985) (in Japanese)
- (7) Muramatsu, T., et al., "Improvement and Validation of Multi-Dimensional Thermal-Analysis Code (II), Task 3 : Investigation of Fast Elliptic Solver," PNC N9410 86-008 November (1985)
- (8) Muramatsu, T., et al., "Improvement of Fast Elliptic Solver in Single-Phase Thermal-Hydraulic Analysis," PNC N9410 87-040 March (1987)
- (9) Meijerink, J.A. and Van Der Vorst, H.A., An Iterative Solution Method for Linear Systems of Which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-Matrix, Math. Comp., 31, (1977) 148
- (10) Simizu, T., et al., "Development of Detailed Three-Dimensional Thermo-Hydraulic Analysis Code in LMFBR Fuel Subassembly Using Finite Element Method-SPIRAL-," PNC N9410 86-097 August (1986)
- (11) Maekawa, I., "Usage Experiences with COMMIX-1A and Efforts in improving the Analytical Capabilities," Presented at PNC/DeBeNe/CEA specialists Meeting on Sodium Boiling and Thermohydraulics, Oarai, Japan, September 30-October 4 (1985)

- (12) Muramatsu, T., et al., "Improvement and VALIDation of Multi-Dimensional Thermal-Analysis Code (II), Task 1 : Implementation of k-Two Equation Turbulence Model to COMMIX-1A," PNC N941 85-14 February (1985) (in Japanese)
- (13) Launder, B.E. & Spalding, D.B., "The Numerical Computation of Turbulence Flows," Comp. Methods Appl. Mech. Eng., 3, (1974) 269
- (14) Rodi, W., Turbulence Models for Environmental Problems, Prediction Method for Turbulent Flows, Hemisphere (1980)
- (15) Maekawa, I., et al., "Study on In-Vessel Thermal-Hydraulics in Pool-Type LMFBRs, Phase 2 : DRACS model implementation, Phase 3 : Demonstration Analysis," PNC N941 85-168 November (1985)
- (16) Muramatsu, T., et al., "Monju Shield Plug Gas Blow Down Test (II)-Validation of COMMIX-PNC ver. MT and Application to Monju," PNC N9410 87-056 March (1987)
- (17) Muramatsu, T. et al., "A Single-Phase Multi-Dimensional Thermal-Hydraulic Analysis Code AQUA-Program Description-," PNC N9520 87-013 May (1987)
- (18) Muramatsu, T. et al., "A Single-Phase Multi-Dimensional Thermal-Hydraulic Analysis Code AQUA-Input Manual-," PNC N9520 87-011 May (1987)
- (19) Domanus, H.M., et al., A New Implicit Numerical Solution Scheme in the COMMIX-1A Computer Program, ANL 83-64, NUREG/CR-3435 (1983)
- (20) Hestenes, M.R. and Stiefel, E., Method of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems, J. Res. NBS, 49, (1952) 409
- (21) Hinze, J.O., "Turbulence," 2nd-ed. McGraw-Hill (1975)
- (22) Ro, T.S. & Todreas, N.E., "Porous Body Analysis of Vertical Rod Bundles under Mixed Convection Conditions," PNC/MIT-19TR, February (1986)
- (23) Sha, W.T., "Boundary-Fitted Coordinate Transformation for Thermo-hydraulic Analysis in Arbitrary Three-Dimensional Geometries," ANL 81-54, NUREG/CR-2313 (1981)
- (24) Sha, W.T. and Chao, B.T., "Local Volume-Averaged Transport Equations for Single-Phase Flow in Regions Containing Fixed, Dispersed Heat-Generating (or Absorbing) Solids," ANL 80-124, NUREG/CR-1969 (1981)

付録 A. Porous Body モデルにおける体積平均量と面積平均量⁽²⁴⁾

(1) スカラー量における体積平均量と面積平均量

スタガード・メッシュ系では、密度、エネルギーなどのスカラー量は Fig. A-1 のいわゆる主コントロール・ボリュームの中心点 (i, j, k) で定義される。

$$\begin{aligned}
 r_{vi} &= \frac{1}{\Delta x_j \Delta y_j \Delta z_k} \iiint I(\bar{p}) dx dy dz \\
 &= \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x_i}^{x+\frac{1}{2}\Delta x_i} dx \frac{1}{\Delta y_j \Delta z_k} \iint I(\bar{p}) dy dz \\
 &= \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x_i}^{x+\frac{1}{2}\Delta x_i} r_x(x) dx \\
 &= \ell^{(x)} [r_x(x)]_{\Delta x_i}
 \end{aligned} \tag{A-1}$$

ここで $\ell^{(x)} [\quad]_{\Delta x_i}$ は区間 Δx_i での線平均量を表わす。

したがって、 $r_y(y)$, $r_z(z)$ についても (A-1) 式が成立するから、

$$r_{vi} = \ell^{(x)} [r_x(x)]_{\Delta x_i} = \ell^{(y)} [r_y(y)]_{\Delta y_j} = \ell^{(z)} [r_z(z)]_{\Delta z_k} \tag{A-2}$$

今任意のスカラー量 ϕ を考えると、

$$\begin{aligned}
 {}^{3i}\langle \phi_i \rangle &= r_{vi} {}^{3i}\langle \phi_i \rangle \equiv \frac{1}{\Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k} \iiint I(\bar{p}) \phi dx dy dz \\
 &= \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x_i}^{x+\frac{1}{2}\Delta x_i} dx \frac{1}{\Delta y_j \Delta z_k} \iint I(\bar{p}) \phi dy dz \\
 &= \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x_i}^{x+\frac{1}{2}\Delta x_i} dx r_x(x) {}^i\{\phi\} \\
 &= \ell^{(x)} [r_x(x) {}^{2i}\{\phi\}]_{\Delta x_i} \\
 &= \ell^{(y)} [r_y(y) {}^{2i}\{\phi\}]_{\Delta x_j} \\
 &= \ell^{(z)} [r_z(z) {}^{2i}\{\phi\}]_{\Delta z_k}
 \end{aligned} \tag{A-3}$$

ϕ は r_x , r_y , r_z に独立とすると、 r_x では、

$$\ell^{(x)} [r_x(x) {}^i\{\phi\}] = \ell^{(x)} [r_x(x)]_{\Delta x_i} \ell^{(x)} [{}^i\{\phi\}]_{\Delta x_i} \tag{A-4}$$

r_y , r_z も同様である。(A-3) 式を r_{vi} で両辺を除すと、(A-4) 式より

$${}^{3i}\langle \phi_i \rangle = \ell^{(x)} [{}^{2i}\{\phi\}]_{\Delta x_i} = \ell^{(y)} [{}^{2i}\{\phi\}]_{\Delta y_j} = \ell^{(z)} [{}^{2i}\{\phi\}]_{\Delta z_k} \tag{A-5}$$

すなわち、計算セル i の正味体積平均は、各方向 (x, y, z) の正味面積平均量の線平均に等しくなることをいっている。計算セル中心 (i, j, k) での正味面積平均量が線平均に等しいと仮定すると、

$${}^{3i}\langle \phi_i \rangle = {}^{2i}\{\phi_i\} \tag{A-6}$$

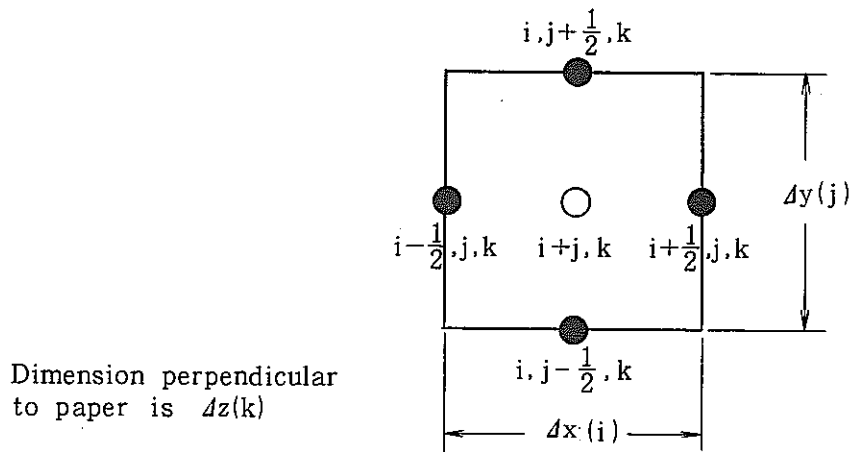


Fig. A-1 Computational Cell for Mass/Energy Conservation

(2) 運動量における体積平均量と面積平均量

運動量計算では、Fig. A-2に示すように、主コントロールボリュームの表面 $(i + \frac{1}{2}, i, j)$ で流速が定義されている。計算セルとしては (i, j, k) と $(i+1, j, k)$ の主コントロールボリュームにまたがってとられるために、この運動量コントロールボリュームの正味体積平均量 ${}^{3i}\langle \rho u_{i+\frac{1}{2}} \rangle$ とこの面積平均量 ${}^{3i}\langle \rho u_{i+\frac{1}{2}} \rangle$ の間の関係は (A-6) には必ずしもならない。すなわち、

$$\begin{aligned}
 {}^{3i}\langle \phi_{i+\frac{1}{2}} \rangle &= r_{v_{i+\frac{1}{2}}} {}^{3i}\langle \phi_{i+\frac{1}{2}} \rangle \\
 &\equiv \frac{1}{\frac{1}{2}(\Delta x_i + \Delta x_{i+1}) \Delta y_j \Delta z_k} \iiint I(\vec{p}) \phi dx dy dz \\
 &= \frac{2}{(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} \left[\int_x^{x+\frac{1}{2}\Delta x_i} dx \frac{1}{\Delta y_j \Delta z_k} \int I(\vec{p}) \phi dy dz \right. \\
 &\quad \left. + \int_{x+\frac{1}{2}\Delta x_i}^{x+\frac{1}{2}(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} dx \frac{1}{\Delta y_j \Delta z_k} \int I(\vec{p}) \phi dy dz \right] \\
 &= \frac{\Delta x_i}{(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} \left[\frac{1}{\frac{1}{2}\Delta x_i} \int_x^{x+\frac{1}{2}\Delta x_i} dx r_x(x) {}^{2i}\{\phi\} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\Delta x_{i+1}}{(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} \frac{1}{\frac{1}{2}\Delta x_{i+1}} \int_{x+\frac{1}{2}\Delta x_i}^{x+\frac{1}{2}(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} dx r_x(x) {}^{2i}\{\phi\} \right] \\
 &= \frac{1}{(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} \left\{ \Delta x_i \int_{\frac{1}{2}\Delta x_i}^{\ell(x)} [r_x(x) {}^{2i}\{\phi\}] dx + \Delta x_{i+1} \int_{\ell(x)}^{\frac{1}{2}\Delta x_{i+1}} [r_x(x) {}^{2i}\{\phi\}] dx \right\}
 \end{aligned} \tag{A-7}$$

したがって

$${}^{3i}\langle \phi_{i+\frac{1}{2}} \rangle = \frac{\Delta x_i \int_{\frac{1}{2}\Delta x_i}^{\ell(x)} [r_x(x) {}^{2i}\{\phi\}] dx + \Delta x_{i+1} \int_{\ell(x)}^{\frac{1}{2}\Delta x_{i+1}} [r_x(x) {}^{2i}\{\phi\}] dx}{[r_{v_{i+\frac{1}{2}}}(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})]} \tag{A-8}$$

今、

$$\int_{\frac{1}{2}\Delta x_i}^{\ell(x)} [r_x(x) {}^{2i}\{\phi\}] dx \approx r_{x_{i+\frac{1}{2}}} \cdot {}^{2i}\{\phi_{i+\frac{1}{2}}\} \tag{A-9}$$

$$\int_{\ell(x)}^{\frac{1}{2}\Delta x_{i+1}} [r_x(x) {}^{2i}\{\phi\}] dx \approx r_{x_{i+\frac{1}{2}}} \cdot {}^{2i}\{\phi_{i+\frac{1}{2}}\} \tag{A-10}$$

と仮定すると、(A-8)式は

$${}^{3i}\langle \phi_{i+\frac{1}{2}} \rangle = \frac{r_{x_{i+\frac{1}{2}}} \cdot {}^{2i}\{\phi_{i+\frac{1}{2}}\}}{r_{v_{i+\frac{1}{2}}}} \tag{A-11}$$

ここで、

$$r_{v_{i+\frac{1}{2}}} = \frac{\Delta x_i r_{v_i} + \Delta x_{i+1} r_{v_{i+1}}}{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}$$

(A-8)式と比べて(A-11)式では、定義点が*i*点から $i + \frac{1}{2}$ 点に移動していることから発生しているが、あくまで(A-9)および(A-10)式の仮定にもとずいている。したがって(A-11)式については、今後とも妥当性を検討する必要がある。

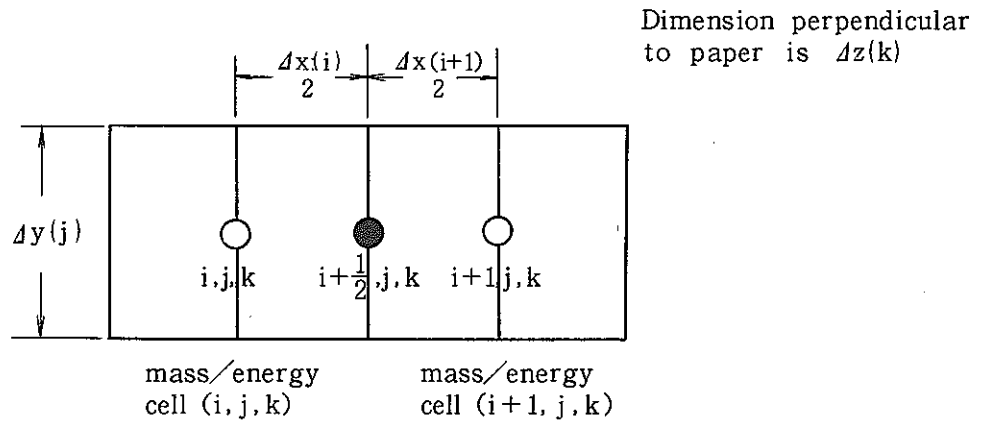


Fig. A-2 Computational Cell for x^+ -Momentum Equation

$$\text{Volume} = V_{(x^+)} = V_{i+1/2} = \frac{\Delta x(i) + \Delta x(i+1)}{2} \Delta y \Delta z$$

付録 B Porous Body モデル表示による流動基礎式

(1) 質量保存式

(2.1-1)式に対し、先に示したコントロールボリューム体積 V (Fig. 2.2-1) で積分し、 V で除すと、

$${}^3\left\langle\frac{\partial}{\partial t}\rho\right\rangle+{}^3\langle\nabla\cdot\rho\bar{u}\rangle=0 \quad (\text{B-1})$$

また、

$${}^3\left\langle\frac{\partial}{\partial t}\rho\right\rangle=-\frac{\partial}{\partial t}{}^3\langle\rho\rangle=r_v\frac{\partial}{\partial t}{}^3i\langle\rho\rangle \quad (\text{B-2})$$

$$\begin{aligned} {}^3\langle\nabla\cdot\rho\bar{u}\rangle &= \nabla\cdot{}^3\langle\rho\bar{u}\rangle = \nabla\cdot\frac{1}{V}\int_V\rho\bar{u}dV \\ &= \frac{1}{V}\int_{A_f}\rho\bar{u}\cdot\bar{n}dA + \frac{1}{V}\int_{A_{fs}}\rho\bar{u}\cdot\bar{n}dA \\ &= \frac{1}{V}\int_{A_f}\rho\bar{u}\cdot\bar{n}dA \end{aligned} \quad (\text{B-3})$$

したがって、(B-1)式は、

$$r_v\frac{\partial}{\partial t}{}^3i\langle\rho\rangle + \frac{1}{V}\int_{A_f}\rho\bar{u}\cdot\bar{n}dA = 0 \quad (\text{B-4})$$

(2) 運動量保存式

(2.1-2)式をやはり V で積分し、 V で除すと、

$${}^3\left\langle\frac{\partial}{\partial t}\rho\bar{u}\right\rangle+{}^3\langle\nabla\cdot\rho\bar{u}\bar{u}\rangle=-{}^3\langle\nabla p\rangle+{}^3\langle\rho\rangle\bar{g}-{}^3\langle\nabla\cdot\bar{\tau}\rangle \quad (\text{B-5})$$

左辺第1項は、

$${}^3\left\langle\frac{\partial}{\partial t}\rho\bar{u}\right\rangle=\frac{\partial}{\partial t}{}^3\langle\rho\bar{u}\rangle=r_v\frac{\partial}{\partial t}{}^3i\langle\rho\bar{u}\rangle \quad (\text{B-6})$$

また、

$$\begin{aligned} {}^3\langle\nabla\cdot\rho\bar{u}\bar{u}\rangle &= \frac{1}{V}\int_V\nabla\cdot\rho\bar{u}\bar{u}dV = \frac{1}{V}\int_A\rho(\bar{n}\cdot\bar{u})\bar{u}dA \\ &= \frac{1}{V}\int_{A_{fs}}\rho(\bar{n}\cdot\bar{u})\bar{u}dA + \frac{1}{V}\int_{A_f}\rho(\bar{n}\cdot\bar{u})\bar{u}dA \\ &= \frac{1}{V}\int_{A_f}\rho(\bar{n}\cdot\bar{u})\bar{u}dA \end{aligned} \quad (\text{B-7})$$

$${}^3\langle\nabla p\rangle = \frac{1}{V}\left\{\int_{A_{fs}}p\bar{n}dA + \int_{A_f}p\bar{n}dA\right\} \quad (\text{B-8})$$

$${}^3\langle\rho\rangle\bar{g} = r_v{}^3i\langle\rho\rangle\bar{g} \quad (\text{B-9})$$

$$\langle \nabla \cdot \bar{\varepsilon} \rangle = \frac{1}{V} \left\{ \int_{A_{fs}} (\bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\varepsilon}) dA + \int_{A_f} (\bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\varepsilon}) dA \right\} \quad (\text{B-10})$$

したがって,

$$\begin{aligned} r_v \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho \bar{\mathbf{u}} \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_f} \rho \bar{\mathbf{u}} (\bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{n}}) dA \\ = \frac{1}{V} \int_{A_f} (-p \bar{\mathbf{n}} - \bar{\varepsilon} \cdot \bar{\mathbf{n}}) dA + \frac{1}{V} \int_{A_{fs}} (-p \bar{\mathbf{n}} - \bar{\varepsilon} \cdot \bar{\mathbf{n}}) dA + r_v \langle \rho \rangle \bar{\mathbf{g}} \end{aligned} \quad (\text{B-11})$$

(3) エネルギー保存式

$${}^3 \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \rho h \right\rangle + {}^3 \langle \nabla \cdot \rho \bar{\mathbf{u}} h \rangle = {}^3 \left\langle \frac{dp}{dt} \right\rangle - {}^3 \langle \nabla \cdot \bar{\mathbf{q}} \rangle + {}^3 \langle Q \rangle \quad (\text{B-12})$$

ここで,

$${}^3 \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \rho h \right\rangle = r_v \frac{\partial}{\partial t} {}^3 \langle \rho h \rangle \quad (\text{B-13})$$

$${}^3 \langle \nabla \cdot \rho \bar{\mathbf{u}} h \rangle = \frac{1}{V} \int_{A_f} \rho h (\bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{n}}) dA \quad (\text{B-14})$$

$$\begin{aligned} {}^3 \left\langle \frac{dp}{dt} \right\rangle &= r_v {}^3 \left\langle \frac{dp}{dt} \right\rangle \\ &= r_v \left\{ \frac{\partial}{\partial t} {}^3 \langle p \rangle + \nabla \cdot {}^3 \langle \rho \bar{\mathbf{u}} \rangle - {}^3 \langle p \nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} \rangle \right\} \end{aligned} \quad (\text{B-15})$$

$${}^3 \langle \nabla \cdot \bar{\mathbf{q}} \rangle = \frac{1}{V} \int_A \bar{\mathbf{q}} \cdot \bar{\mathbf{n}} dA = \frac{1}{V} \left\{ \int_{A_f} \bar{\varepsilon} \cdot \bar{\mathbf{n}} dA + \int_{A_{fs}} \bar{\mathbf{q}} \cdot \bar{\mathbf{n}} dA \right\} \quad (\text{B-16})$$

よって, (B-12)式は,

$$\begin{aligned} r_v \frac{\partial}{\partial t} {}^3 \langle \rho h \rangle + \frac{1}{V} \int_{A_f} \rho h (\bar{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{n}}) dA \\ = r_v \left\langle \frac{dp}{dt} \right\rangle - \frac{1}{V} \int_{A_f} \bar{\mathbf{q}} \cdot \bar{\mathbf{n}} dA - \frac{1}{V} \int_{A_{fs}} \bar{\mathbf{q}} \cdot \bar{\mathbf{n}} dA + r_v \langle Q \rangle \end{aligned} \quad (\text{B-17})$$

となる。

付録 C 差分一般式の誘導

(1) 質量保存式

Porous Body モデル表示による質量保存式 (2.2-9) を主コントロールボリューム (Fig. 3.1-4) について展開すると,

$$\begin{aligned} Vr_v \frac{\partial}{\partial t} \langle \rho \rangle + \frac{1}{V} \left[\int_{A_{flx+\frac{1}{2}\Delta x}} \rho u dA_x - \int_{A_{flx-\frac{1}{2}\Delta x}} \rho u dA_x \right. \\ \left. + \int_{A_{fly+\frac{1}{2}\Delta y}} \rho v dA_y - \int_{A_{fly-\frac{1}{2}\Delta y}} \rho v dA_y \right. \\ \left. + \int_{A_{flz+\frac{1}{2}\Delta z}} \rho w dA_z - \int_{A_{flz-\frac{1}{2}\Delta z}} \rho w dA_z \right] \end{aligned} \quad (C-1)$$

ここで,

$$A_x = \Delta y \Delta z \quad (C-2)$$

$$A_y = \Delta x \Delta z \quad (C-3)$$

$$A_z = \Delta x \Delta y \quad (C-4)$$

また, (2.6-6) 式の定義より

$$\int_{A_{flx+\frac{1}{2}\Delta x}} \rho u dA_x = A_{flx+\frac{1}{2}\Delta x} {}^{2i}\{\rho u\} = A_x \cdot r_{x+\frac{1}{2}\Delta x} {}^{2i}\{\rho u\} \quad (C-5)$$

したがって, 各項につき同様に展開すると, (3.1-1) 式は次のようになる。

$$Vr_v \frac{\partial}{\partial t} {}^{3i}\langle \rho \rangle + \Delta_x (A_x \cdot r_x {}^{2i}\{\rho u\}) + \Delta_y (A_y \cdot r_y {}^{2i}\{\rho v\}) + \Delta_z (A_z \cdot r_z {}^{2i}\{\rho w\}) = 0 \quad (C-6)$$

ここで,

$$\left. \begin{aligned} \Delta_x (\quad) &\equiv (\quad)_{x+\frac{1}{2}\Delta x} - (\quad)_{x-\frac{1}{2}\Delta x} \\ \Delta_y (\quad) &\equiv (\quad)_{y+\frac{1}{2}\Delta y} - (\quad)_{y-\frac{1}{2}\Delta y} \\ \Delta_z (\quad) &\equiv (\quad)_{z+\frac{1}{2}\Delta z} - (\quad)_{z-\frac{1}{2}\Delta z} \end{aligned} \right\} \quad (C-7)$$

(2) エネルギー保存式

(2.2-11) 式について, やはり質量保存式と同一のコントロールボリュームについて差分表示すると,

$$\begin{aligned} Vr_v \frac{\partial}{\partial t} {}^{3i}\langle \rho h \rangle + \Delta_x (A_x \cdot r_x {}^{2i}\{\rho u h\}) + \Delta_y (A_y \cdot r_y {}^{2i}\{\rho v h\}) + \Delta_z (A_z \cdot r_z {}^{2i}\{\rho w h\}) \\ = -\Delta_x (A_x \cdot r_x {}^{2i}\{q_x\}) - \Delta_y (A_y \cdot r_y {}^{2i}\{q_y\}) - \Delta_z (A_z \cdot r_z {}^{2i}\{q_z\}) \\ - V \cdot r_v \{ {}^{3i}\langle q_{fs} \rangle + {}^{3i}\langle Q \rangle \} \end{aligned} \quad (C-8)$$

ここで ${}^{3i}\langle q_{fs} \rangle = \frac{1}{V_f} \int_{A_{fs}} (\bar{q} \cdot \bar{n}) dA$ は, 流体単位体積あたりの流体・固体境界面からの熱損失をあらわしている。

また,

$$q_x = -\Gamma_h \frac{\partial h}{\partial x}, \quad q_y = -\Gamma_h \frac{\partial h}{\partial y}, \quad q_z = -\Gamma_h \frac{\partial h}{\partial z} \quad (\text{C-9})$$

で流体-流体境界: A_f での熱伝導をあらわしている。

(3) 運動量保存式

Porous Body モデル表示による運動量保存式 (2.2-10) において u -流速成分について、運動量コントロールボリューム (Fig. 3.1-5) のまわりに展開すると、

(a) 対流項

$$\begin{aligned} & \int_{A_f} \rho \bar{u} (\bar{u} \cdot \bar{n}) dA \Big|_x \\ &= \left[\int_{A_{fx'/x+\Delta x}} \rho u^2 dA_x - \int_{A_{fx'/x}} \rho u^2 dA_x \right. \\ & \quad + \int_{A_{fy'/y+\frac{1}{2}\Delta y}} \rho uv dA_y - \int_{A_{fy'/y-\frac{1}{2}\Delta y}} \rho uv dA_y \\ & \quad \left. + \int_{A_{fz'/z+\frac{1}{2}\Delta z}} \rho uw dA_z - \int_{A_{fz'/z-\frac{1}{2}\Delta z}} \rho uw dA_z \right] \\ &= \Delta_{x+\frac{1}{2}\Delta x} (A_x \tau_x^i \{\rho u^2\}) + \Delta_y (A_y \tau_y^i \{\rho uv\}) + \Delta_z (A_z \tau_z^i \{\rho uw\}) \end{aligned} \quad (\text{C-10})$$

ここで,

$$\Delta_{x+\frac{1}{2}\Delta x} \equiv (\quad)_{x+\Delta x} - (\quad)_x \quad (\text{C-11})$$

(b) 拡散項

$$\int_{A_f} \bar{\tau} \cdot \bar{n} dA = \Delta_{x+\frac{1}{2}\Delta x} (A_x \tau_x^i \{\tau_{xx}\}) + \Delta_y (A_y \tau_y^i \{\tau_{yx}\}) + \Delta_z (A_z \tau_z^i \{\tau_{zx}\}) \quad (\text{C-12})$$

一方、周体障害物から受ける剪断応力は、ここではそのまま展開せず、

$\frac{1}{V} \int_{A_{fs}} (\bar{n} \cdot \bar{\tau}) dA$ のままにひとまずしておく。

(c) 圧力項

(2.2-10) 式を忠実に展開散化すると、

$$\begin{aligned} {}^3\langle \nabla P \rangle &= \frac{1}{V} \int_{A_{fs}} P \bar{n} dA + \frac{1}{V} \int_{A_f} P \bar{n} dA \\ &= \frac{1}{V} \int_{A_{fs}} P \bar{n} dA + \frac{1}{V} \Delta_{x+\frac{1}{2}\Delta x} (A_x \tau_{A_x}^{2i} \{P\}) \end{aligned} \quad (\text{C-13})$$

となるが、COMMIX-1A と同様、AQUA でも P をあたかも体積力のように考え、

$$\begin{aligned} {}^3\langle \nabla P \rangle &= \frac{1}{V} \int_V \nabla P dV = \nabla \left(\frac{1}{V} \int_V P dV \right) = \nabla \left(\frac{V_f}{V} \frac{1}{V_f} \int_{V_f} P dV \right) \\ &= \nabla {}^3\langle \tau_{V_f} P \rangle \end{aligned} \quad (\text{C-14})$$

とモデル化している。(C-13)式の右辺第1項は、固体障害物から受ける力を意味している。この力は、流れが静止している時は静水圧分布として、また流れが存在する時は、障害物による流れの剥離などによって流体境界とは異なった圧力分布として作用する。通常後者の力は、分布抵抗としてモデル化されるが、前者の静水圧としての力は、この中に含まれない。(何故ならば、流速がない時、分布抵抗は存在しない。)すなわち、固体障害物表面圧力は以下のような2つの項に分解できる⁽²²⁾。

$$P \equiv P_{\text{no wake}} - \Delta P_{\text{wake}}$$

$P_{\text{no wake}}$: 障害物後流に乱水(wake)が発生しない理想流れでの圧力分布

ΔP_{wake} : $P_{\text{no wake}}$ と実際の圧力との圧力差

したがって、(C-13)式と(C-14)式を考えると、

$$\begin{aligned} \langle \nabla P \rangle + \langle \nabla \cdot \bar{\tau} \rangle &= \frac{1}{V} \int_{A_f} (P \bar{n} + \bar{n} \cdot \bar{\tau}) dA \\ &+ \frac{1}{V} \int_{A_{fs}} P_{\text{no wake}} \bar{n} dA \\ &+ \frac{1}{V} \int_{A_{fs}} (-\Delta P_{\text{wake}} \bar{n} + \bar{n} \cdot \bar{\tau}) dA \end{aligned} \quad (C-15)$$

と表現される。AQUAでは、

$$\frac{1}{V} \left(\int_{A_f} P \bar{n} dA + \int_{A_{fs}} P_{\text{no wake}} \bar{n} dA \right) \doteq \nabla^{3i} \langle r_v P \rangle \quad (C-16)$$

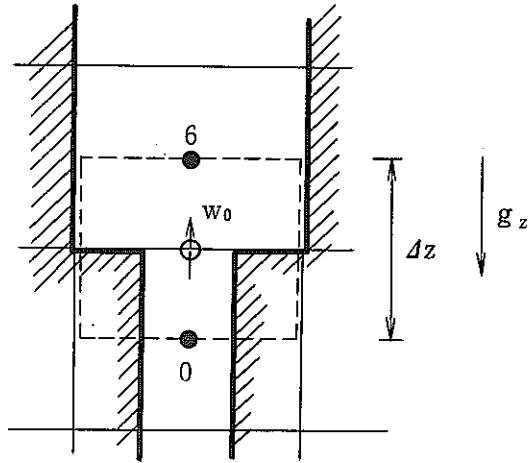
$$\frac{1}{V} \int_{A_{fs}} (-\Delta P_{\text{wake}} \bar{n} + \bar{n} \cdot \bar{\tau}) dA \equiv r_v^{3i} \langle \bar{R} \rangle \quad (C-17)$$

ここで、 $\bar{R} = \frac{1}{V_f} \int_{A_{fs}} (-\Delta P_{\text{wake}} \bar{n} + \bar{n} \cdot \bar{\tau}) dA$ として、圧力項および固体障害物による形状および摩擦圧力損失を表す分布抵抗 \bar{R} を用いている。(C-13)式を使用せず(C-14)式を用いる利点は、たとえば Fig. C-1 のような静止流体(重力のみ作用する。)中垂直方向に断面積が変化する場合、(C-13)式では、 $\frac{1}{V} \int_{A_{fs}} P \bar{n} dA$ をモデル化しない限り、流れが発生するが、(C-14)式では静水圧項 $r_v^{3i} \langle \rho \rangle g$ と $\nabla r_v^{3i} \langle \rho \rangle$ が均り合い、新たなモデル化は不要になることがわかる。

以上より運動量方程式を離散化して得られた式をまとめると、X-方向では、

$$\begin{aligned} V r_v \frac{\partial}{\partial t} {}^{3i} \langle \rho u \rangle + \Delta_{x+\Delta x/2} (A_x r_x {}^{2i} \langle \rho u^2 \rangle) + \Delta_y (A_y r_y {}^{2i} \langle \rho uv \rangle) + \Delta_z (A_z r_z {}^{2i} \langle \rho uw \rangle) \\ = -r_v \Delta_{x+\Delta x/2} (A_x {}^{3i} \langle P \rangle) + r_v {}^{3i} \langle P \rangle g_x V \\ + \Delta_{x+\frac{1}{2}\Delta x} \left(A_x r_x {}^{2i} \left\{ \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right\} \right) + \Delta_y \left(A_y r_y {}^{2i} \left\{ \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right\} \right) + \Delta_z \left(A_z r_z {}^{2i} \left\{ \mu \frac{\partial u}{\partial z} \right\} \right) \\ + r_v {}^{3i} \langle R_x \rangle V \end{aligned} \quad (C-18)$$

ここで $R_x = \frac{1}{V_f} \int_{A_{fs}} (-\Delta P_{\text{wake}} + \bar{n} \cdot \bar{\tau}) dA$: 分布抵抗
Y, Z方向も同様である。



if $w_0=0$, then

$\langle \nabla \cdot P \rangle = r_v^{3i} \langle \nabla \cdot P \rangle$ model :

$$-\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g \Rightarrow -r_{vm} \frac{P_6 - P_0}{\Delta z} + r_{vm} \rho g_z \equiv 0$$

$$r_{vm} = \frac{1}{2} (r_{v6} + r_{v0})$$

$\langle \nabla \cdot P \rangle = {}^{3i} \langle \nabla \cdot r_z P \rangle$ model :

$$-\frac{\partial P}{\partial x} + \rho g \Rightarrow \frac{r_{z6} P_6 - r_{z0} P_0}{\Delta z} + r_{vm} \rho g_z \neq 0$$

Fig. C-1 Porous Body Modeling of Pressure Term and Static Pressure Balance Problem