

有限差分法を用いた自由表面を持つ気液二相流の数値シミュレーションプログラム

馬場, 紀彰

九州大学大学院工学研究科化学システム工学専攻化学プロセス教室

小森, 悟

九州大学大学院工学研究科化学システム工学専攻化学プロセス教室

<https://doi.org/10.15017/1470316>

出版情報：九州大学大型計算機センター広報. 30 (4), pp.317-322, 1997-12. 九州大学大型計算機センター

バージョン：

権利関係：

有限差分法を用いた自由表面を持つ気液二相流の
数値シミュレーションプログラム馬場紀彰¹ 小森 悟¹

1. 概要

自由表面のある流れを解析できる数値計算プログラムは化学工学や機械工学等といった流れを扱う工学の広い分野で重要とされている。しかし、自由表面の移動や変形も含めて、その流れを数値的に計算するプログラムの開発は難しく、自由表面を扱うための高精度でしかも汎用性のある数値計算手法の開発が望まれている。そこで、有限差分法を用いた二次元 Navier-Stokes 方程式の直接数値シミュレーションによる自由表面流れの解析プログラムの開発を試みた。その結果、気液界面の形状をも含めた二次元気液二相流を計算するプログラムを開発し、今回九州大学大型計算機センターのライブラリプログラムとして公開するに至った。

このプログラムは、計算領域の上半分が気流（空気）、下半分が液流（水）であり、その間に自由に移動変形する気液界面を持つ。気流側に推進力として圧力勾配を与えることで、そのエネルギーが気液界面を通して液流に伝わり、風波が発達する。流体の運動を解く計算手法としては、MAC(Marker and Cell)法を用いた。

2. 登録形式

- ・プログラム名 : 有限差分法を用いた自由表面を持つ気液二相流の数値シミュレーションプログラム
- ・プログラム形式 : コンプリートプログラム
- ・作成者 : 馬場紀彰、小森 悟 (九州大学大学院工学研究科)
- ・製作年月日 : 1997年2月
- ・使用言語 : Fortran
- ・ソースの公表 : ww2d.f (WindWave 2-Dimension)
- ・使用OS : UXP

3. 数値解法

非圧縮性流体の運動の支配方程式は、以下に示す連続の式と Navier-Stokes(NS) 方程式である。

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x_i} + \nu \left(\frac{\partial^2 v_i}{\partial x_i \partial x_i} \right) \quad (2)$$

ここで \mathcal{P} は $\mathcal{P} = P - \rho g_i(x_3 - x_3^0)$ で表され重力の効果を取り入れた圧力を示す。支配方程式を解く計算手法としては、MAC法を用いた。MAC法ではNS式、及び連続の式とNS式から得られる圧力 Poisson(PP) 方程式を連立させて解く。圧力PP式は以下のようにして導き出される。

¹九州大学大学院工学研究科化学システム工学専攻化学プロセス教室
baba@apex.chem-eng.kyushu-u.ac.jp komori@apex.chem-eng.kyushu-u.ac.jp

まず式 (1)、(2) を代表速度、代表長さで無次元化する。

$$\frac{\partial v_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial t} + v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 v_i}{\partial x_i \partial x_i} \right) \quad (4)$$

次に式 (4) の発散を取ると次式となる。

$$\frac{\partial^2 \mathcal{P}}{\partial x_i \partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{1}{Re} \frac{\partial^2 D}{\partial x_i \partial x_i} - \frac{\partial D}{\partial t} \right) \quad (5)$$

$$D = \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (6)$$

次に式 (5) を $t = n\Delta t$ から $t = (n+1)\Delta t$ の区間で積分する。

$$\frac{\partial^2 \mathcal{P}}{\partial x_i \partial x_i} \Delta t = -\Delta t \frac{\partial}{\partial x_i} \left(v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \left\{ \frac{\Delta t}{Re} \frac{\partial^2 D}{\partial x_i \partial x_i} - (D^{n+1} - D) \right\} \quad (7)$$

連続の式より

$$D^{n+1} = 0 \quad (8)$$

であるから、式 (7) は次式となる。

$$\frac{\partial^2 \mathcal{P}}{\partial x_i \partial x_i} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(v_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{1}{Re} \frac{\partial^2 D}{\partial x_i \partial x_i} + \frac{D}{\Delta t} \right) \quad (9)$$

D は理想的には 0 であるが離散化誤差や数値的な誤差が蓄積するのを防ぐための修正項として残す。この式 (4)、式 (9) を境界条件を適用しながら交互に解き速度及び圧力の時間発展解を求め方法が MAC 法である。ただし式 (4)、式 (9) には非線形項が含まれるため、移流項は 5 次精度風上差分、圧力項は 2 次精度中心差分、他の項は 4 次精度中心差分を用いて離散化した。また時間積分には 1 次精度の完全陰解法を用いた。

気液界面の形状は、気流側及び液流側から働く各種法線応力及び接線応力の釣り合いをとることとで決定される。

計算領域は、代表長さ $\delta (= 1.25 \times 10^{-2} [\text{m}])$ を基準として、

大きさ (X × Y) : 46 × 26

格子数 (X × Y) : 101 点 × 121 点

計算領域の下半分 (格子点 1~61 番目) が液流、上半分 (格子点 62~121 番目) が気流
61 番目の格子が気液界面

である。(図 1 参照。中央のラインが 61 番目の格子。)

計算格子は、気液界面が曲線であることから境界適合格子を用いた。毎ステップ界面の形状が変わるので、その都度格子を設定し直している。格子間隔は、X 方向は等間隔、Y 方向は気側液側ともに界面に近くなるにつれ狭くなるように設定した。

4. 入力データの意味

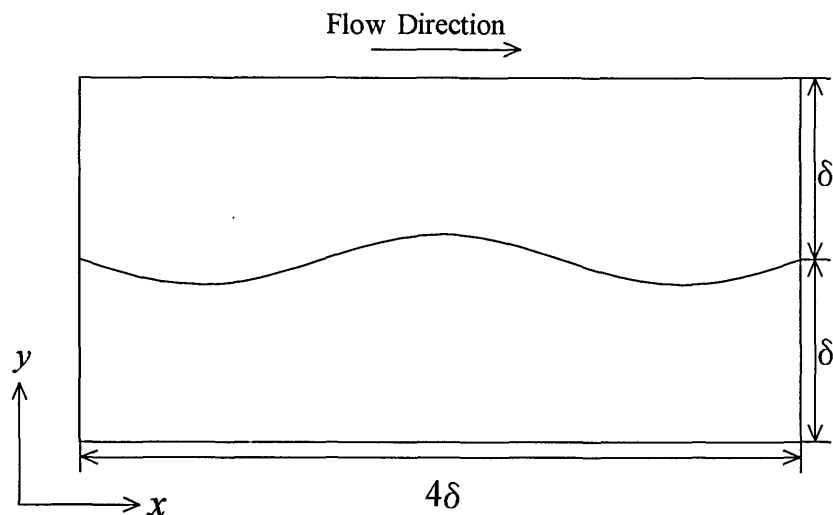


図 1: 計算領域の概略図

コンプリートプログラムであるので、利用者はジョブコントロール（バッチリクエスト）ファイルを作り、バッチジョブとしてサブミットする。

まず適当なディレクトリにソースファイルをコピーする。

```
kyu-vpp% cp /usr/local/WW2D/ww2d.f .
```

入力データファイルは必要としない。初期データはコピーしたソースファイルの代入式を書き換えることで設定する。

初期データは以下の通りである。気流の一樣流速は5m/s以上に設定すると誤差が大きくなるので注意が必要である。

U0D	: 気流の一樣流速 [m/s]
WN	: 自由表面の波数 [-]
WH	: 自由表面の波高 [m]
NNSTEP	: 最大ステップ数 [-]
CPUMAX	: 最大 CPU 時間 [s]

プログラム内部では以下のようにになっている。

```

*****
*           PARAMETER
*
*   UOD      :  MEAN VELOCITY
*   WH       :  WAVE HEIGHT
*   WN       :  WAVE NUMBER
*   NNSTEP   :  MAXIMUM STEP
*   CPUMAX   :  MAXIMUM CPUMAX
*****
*
*   UOD      =  5.0
*   WN       =  2.0
*   WH       =  8.75E-4
*   NNSTEP   = 1000
*   CPUMAX   = 100.
*
*****

```

上の例では

気流の一様流速 : 5m/s
 自由表面の波数 : 2
 自由表面の波高 : 8.75×10^{-4} m
 最大ステップ数 : 1000 ステップ
 最大 CPU 時間 : 100 秒

となっている。すなわち、それぞれを書き換えることで任意の設定に変更できる。

5. 出力データ

出力データは計算領域全ての点の物理座標、及び速度、圧力である。ただし物理座標及び速度は無次元化してあるので、物理座標に関しては 1.25×10^{-2} [m]、速度に関しては与えた一様流速を掛けることで実次元となる。圧力は計算の都合上相対圧力となっているため、絶対値を直接使用することはできない。気液界面は計算領域において Y 方向の 61 番目のデータとなっているので、たとえば気液界面の形状を追跡するには物理座標のデータから Y 方向の 61 番目のデータを抜き出せばよい。

U2,P2 : 速度、圧力のデータ (101 × 121) (出力ファイル名: WINDFR.DATA)
 ZP : 物理座標のデータ (101 × 121) (出力ファイル名: WINDGR.DATA)
 ZP(2,X,61) : 気液界面の物理座標

出力データの配列は U2(L,X,Y), ZP(L,X,Y) に対して

L : 1 の時 X 方向、2 の時 Y 方向の成分
 X : X 座標
 Y : Y 座標

である。たとえば ZP(1,25,61) は、原点 (図 1 の一番左下) から X 方向に 25 番目、Y 方向に 61 番

目の格子点の X 方向無次元距離を表す。

また、出力形式はバイナリである。出力のフォーマットは、
物理座標のデータ (WINDGR.DATA)

```
WRITE(10) MX,MY
WRITE(10) ((ZP(1,I,J),I=1,MX),J=1,MY)
WRITE(10) ((ZP(2,I,J),I=1,MX),J=1,MY)
```

速度、圧力のデータ (WINDFR.DATA)

```
WRITE(20) NT,TIME
WRITE(20) ((U2(1,I,J),I=1,MX),J=1,MY)
WRITE(20) ((U2(2,I,J),I=1,MX),J=1,MY)
WRITE(20) ((P2(I,J),I=1,MX),J=1,MY)
```

である。

データ処理のプログラム例

このプログラムでは界面に相当する物理座標を取り出し、散布としてグラフでプロットできるように出力するものである。

```

      IMPLICIT REAL(A-H,O-Z)
      PARAMETER(NX=101,NY=121)
      REAL ZP(2,NX,NY)
C
      OPEN(10,FILE='WINDGR.DATA',STATUS='OLD'
1          ,FORM='UNFORMATTED')
      OPEN(20,FILE='I-F.DAT',STATUS='UNKNOWN'
1          ,FORM='FORMATTED')
C
      ALOD=1.25E-2
C
      READ(10) MX,MY
      READ(10) ((ZP(1,I,J),I=1,MX),J=1,MY)
      READ(10) ((ZP(2,I,J),I=1,MX),J=1,MY)
      WRITE(6,*) ' READ GRID DATA ',MX,MY
C
      DO 100 I=1,MX,1
          X=ZP(1,I,61)*ALOD
          Y=ZP(2,I,61)*ALOD
          WRITE(20,*) X,Y
100  CONTINUE
C
      CLOSE(10)
      CLOSE(20)
      END

```

詳しい解説は省略するが、ポイントはDOループ内部において、X、Y方向無次元距離に代表長さをかけることで実スケールに変換している点である。

6. 制限事項

本プログラムの制限事項は、先にも述べたが、

1. 気流の一樣流速を5m/s以上にすると誤差が大きくなる。
2. 圧力が相対圧力であるため絶対圧力は得られない。

の2点である。また、一樣流速にもよるが解が収束するまでだいたい700ステップ回す必要がある。

7. 著作権について

本プログラムの著作権は九州大学大学院工学研究科の小森 悟が保有しています。本プログラムの使用はUXPのみとし、UXP外への持ち出しを禁止します。再配布も禁止します。また初期データ変更以外の改変を禁止します。本プログラムを使った計算で論文を発表する場合は、プログラム名、作者名を明記してください。UXP外への持ち出しや改変を希望される方は、作者までE-mailにてお問い合わせください。