

非平衡凝縮・超臨界流体の数値モデリング

東北大学大学院情報科学研究科

山本 悟

1. はじめに

今世紀中にも石油が枯渇しそうな地球の現状を救うために、再利用可能なエネルギー源が模索されている。また、化石燃料の燃焼により発生する二酸化炭素が地球温暖化を加速している可能性が懸念されている。地球環境を保全しながら持続可能な社会を実現するための努力が、研究者には求められている。我々も環境・エネルギー問題の解決のため、数値計算技術を駆使した研究を推進している。

最近、経済産業省は「エネルギー基本計画」として、2030年までに1990年比で温室効果ガスを30%削減するための試算を発表した。それによれば、再利用可能エネルギーの導入に加えて、原子力発電所を14基以上新たに増設しなければならない。温室効果ガスの排出量削減目標を定めた京都議定書では、2008-2012年の間に日本は1990年基準における温室効果ガス全排出量の6%を削減しなければならない。現実的には、総排出量が1990年時点よりも6%以上すでに増加していることから、計約12%を削減しなければならない。2010年における国内の温室効果ガス排出量は約13.1億トンと予想されており、このうちの12%は1.57億トンにあたる。また4.8%分にあたる6290万トンが省エネルギー・新エネルギーによる年間削減目標値に設定されている。一方、2010年度の年間発電電力量は、約1兆kWhと予想されており、そのうち火力、原子力、地熱など約90%の発電方式にはいずれも蒸気タービンが使用されている。蒸気タービンの効率を1%向上させるとタービン1基当たり年間燃費節約量は約3.3億円と見積もられ、約1.4万kL/年の省エネルギー効果量が期待される。国内のタービン基数を60台とすれば、85万kL/年に相当する。また、国内だけで年間約160万トンのCO₂削減効果があるとされている。世界全体ではこの約40倍の効果が見積もられる。蒸気タービン全体損失の約40%は湿りによる損失であることが知られているが、そのメカニズムは未だよく解明されていない。したがって、この湿り損失のメカニズムを解明することにより蒸気タービン性能のさらなる向上が可能であり、結果的にエネルギー節約ならびにCO₂削減につながる。

筆者らは現在、マルチフィジックス CFD 研究としてまず、水蒸気が作動流体である蒸気タービンの非定常流動解析ソフトウェア、「数値タービン、Numerical Turbine (NT)」を開発している。そこで、まず蒸気タービン翼列の湿り蒸気流れを数値計算するために必要である典型的な非平衡凝縮モデルについて、

その由来と現状について概説する。なお、この解説はこれまで掲載された筆者の解析記事[1]-[4]から再構成したものである。

主な記号

e	: 単位体積当たりの全内部エネルギー
g_{ij}	: 測度(= $\nabla \xi_i \cdot \nabla \xi_j$)
h	: 全内部エンタルピー
I	: 凝縮核生成率
J	: 変換のヤコビアン
k	: 乱流運動エネルギー もしくはボルツマン定数
n	: 液滴の数密度
p	: 静圧
r	: 回転流面もしくは液滴の半径
r^*	: 臨界核半径
R	: 気体定数
T	: 静温
t	: 時間
v_u	: 絶対速度の周方向成分
w_i	: 相対流れの物理速度成分
W_i	: 相対流れの反変速度成分
x_i	: デカルト座標系成分
β	: 液相の質量分率
γ	: 理想気体の比熱比(=1.4)
Γ_c	: 液相の質量生成率
δ	: Dirac のデルタ関数
ξ_i	: 一般曲線座標系成分
κ	: 熱拡散係数
ρ	: 混合物質の密度

2. 非平衡凝縮流れの数値解法

非平衡凝縮流れの研究は、1887年に von Helmholtz が湿り蒸気の過飽和現象を発見した辺りに始まる。その後、1897年に Wilson が非平衡凝縮現象を発見した。その非平衡凝縮が初生する点は Wilson Point と呼ばれている。また、1939年には Prandtl が湿り蒸気中の凝縮衝撃波を撮影している。その後、1950年から1980年にかけて、数多くの実験データや凝縮モデルが発表されている。非平衡凝縮流れの数値計算も凝縮モデルの提案に合わせて同時期に数多く発表されたが、いずれも1次元問題に限定されたものであった。1980年から1990年前半にかけて、二次元問題の数値計算法もいくつか提案されており、Bakhtarら[5]、Young[6]、Schnerr[7]らによる研究がよく知られている。

これらの研究で用いられている支配方程式は、微小な粒子の運動・凝縮・凝集等を支配する一般力学方程式として知られている General Dynamic Equation (GDE) から導出することができる。

2. 1 General Dynamic Equation(GDE)

微小な液滴もしくは粒子の生成・消滅、成長・蒸発、ブラウン運動に伴う凝集・分離、凝縮過程での凝集・分離、を支配する GDE は、次のように定義されている [8]。

$$\frac{Df}{Dt} = I\delta(r-r^*) + S_{coag} + S_{cond} \quad (1)$$

ただし、 f は、時間 t 、空間 x_j 、ならびに球形を仮定した微小な液滴や粒子（いわゆるエアロゾル）の半径 r を未知変数に持つ関数、すなわち、 $f = f(r, x_j, t)$ で定義される分布関数 (Distribution function) で、式 (1) の左辺は次式のように展開される。

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial r}{\partial t} f \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j f) \quad (2)$$

また、式 (1) の右辺第 1 項は、均一核生成率 I 、Dirac のデルタ関数 δ 、臨界核半径 r^* からなり、エアロゾルの核 (nuclei) の生成項である。 S_{coag} と S_{cond} はそれぞれ、ブラウン運動に伴う凝集・分離、ならびに凝縮過程での凝集・分離を支配する項で定義される。特に、 S_{coag} と S_{cond} は大気中を浮遊するエアロゾルにおいては重要な項に位置づけられて関連した研究分野では深い議論がなされているが、湿り蒸気流れの研究では未だ考慮している研究は見当たらない。ここでは、これら凝集ならびに分離は起きないとして以下省略する。

2. 2 モーメント法 (Method of moments)

式 (1) の GDE を解く方法としては、モーメント法と呼ばれる方法が一般的に用いられている [9]。これは、分布関数 f からなる式 (1) の両辺を r のべき乗で重み付けして、さらに r で積分した次式で定義される。

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_0^\infty r^\ell f dr \right) + \int_0^\infty r^\ell \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial r}{\partial t} f \right) dr + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(u_j \int_0^\infty r^\ell f dr \right) = I \int_0^\infty r^\ell \delta(r-r^*) dr \quad (3)$$

ここで、右辺は Dirac のデルタ関数の積分であり、 $I \int_0^\infty r^\ell \delta(r-r^*) dr = Ir^{*\ell}$ になる。

いま、 $\rho n_\ell = \int_0^\infty r^\ell f dr$ とおいて、式 (3) を変形すれば、

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho n_\ell) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho n_\ell u_j) = Ir^{*\ell} + \ell \int_0^\infty r^{\ell-1} \frac{\partial r}{\partial t} f dr \quad (4)$$

となる。ただし、 ρ は場における流体の密度、 n_ℓ は ℓ 番目のモーメント (ℓ th moment) と呼ばれる。なお、右辺第 2 項は式 (3) の左辺第 2 項の部分積分を実行すると導出できる。Hi11 [10] はこの右辺第 2 項の積分を近似的に実行するために、エアロゾルの平均半径として、 $\bar{r} = \sqrt{n_2/n_0}$ を新たに導入して、エアロゾル

の成長率 $\partial r/\partial t$ を $\partial \bar{r}/\partial t$ と近似した。これにより、式(4)の右辺第2項内にある $\partial r/\partial t$ はその積分から分離されることで、式(4)は結局、次式のように変形することができる。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho n_\ell) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho n_\ell u_j) = I r^{*\ell} + \ell \rho n_{\ell-1} \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} \quad (5)$$

さらに式(5)は、 $\ell = 0, 1, 2, 3$ からなる次の4つの式に展開することができる。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho n_0) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho n_0 u_j) = I \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho n_1) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho n_1 u_j) = I r^* + \rho n_0 \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho n_2) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho n_2 u_j) = I r^{*2} + 2\rho n_1 \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho n_3) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho n_3 u_j) = I r^{*3} + 3\rho n_2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} \quad (9)$$

ところで、半径 r の液滴の質量は、液滴の質量分率 β 、水の密度 ρ_{liq} を用いて、

$$\rho \beta = \frac{4}{3} \pi \rho_{liq} \int_0^\infty r^3 f dr = \frac{4}{3} \pi \rho_{liq} \rho n_3$$

と表せる。したがって、式(9)は次式のように書き換えられる。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \beta) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \beta u_j) = \frac{4}{3} \pi \rho_{liq} \left(I r^{*3} + 3\rho n_2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} \right) \quad (10)$$

式(10)は液滴の質量保存式になっており、右辺は液滴の成長速度をモデル化した生成項からなる。

蒸気タービン翼列を通る湿り蒸気流れの数値解析はすでに広く実施されているが、そのほとんどの数値解法においては、流れの支配方程式に加えて、上記の式(6) (7) (8)そして(10)が連立して解かれており、数値解法としてはほぼ定着している。そのような中で、Ishizaka ら[11]は式(10)の右辺第2項を近似することで、上記4つの式を次の2つの式に簡略化した数値解法を提案した。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho n) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho n u_j) = I \quad (11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \beta) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \beta u_j) = \frac{4}{3} \pi \rho_{liq} \left(I r^{*3} + 3\rho n \bar{r}^2 \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} \right) \quad (12)$$

なお、ここで式(11)は液滴核の保存式になり、 n は液滴核の数密度に相当する。この際に平均半径 \bar{r} は場の値から、

$$\bar{r} = \left(\frac{3\rho\beta}{4\pi\rho_{liq}n} \right)^{1/3} \quad (13)$$

により逆算することで求められる。筆者らは、式(11) (12)に基づく凝縮モデルを用いている。

2. 3 凝縮核の生成と成長モデル

式(6) (7) (8) (10)、もしくは式(11) (12)を解く際にまだ定義されていないものは、臨界核半径 r^* 、凝縮核生成率 I 、そして凝縮核成長率 $\partial r/\partial t$ である。既存のほとんどの数値解法においては、古典凝縮理論(Classical condensation theory)に基づく凝縮モデルが用いられている。

水蒸気の凝縮形態には大きく分けて二種類あり、無核状態から急激に凝縮する均一核生成(Homogeneous nucleation)による凝縮、核がすでに存在してその周りに凝縮する不均一核生成(Heterogeneous nucleation)による凝縮がある。前者は高い過飽和(過冷却)状態から起きる非平衡性の強い凝縮であることから、非平衡凝縮(Nonequilibrium condensation)と呼ばれる。蒸気タービン翼列内では、水蒸気のみによるこの非平衡凝縮が支配的である。一方、大気中の凝縮は微小浮遊粒子を核とした後者の凝縮が支配的である。液滴が成長(蒸発)するためには、液滴周囲の蒸気圧が液滴と水蒸気との間の平衡状態における蒸気圧よりも高く(低く)ならなければならない。

半径 r の液滴と水蒸気との間の平衡状態における蒸気圧 p_r は、Gibbs-Thomson Equation もしくは Kelvin Equation として知られており平面の水に対する飽和蒸気圧 p_∞ から次式のように定義される。

$$p_r = p_\infty \exp\left(\frac{2\sigma}{r\rho_{liq}RT}\right) \quad (14)$$

ただし、 σ は水の表面張力、 R は気体定数、 T は温度である。 r が小さいほど p_r は大きくなり、 r が大きいほど p_r は p_∞ に近づく。逆に式(14)から、場の蒸気圧 p_v による平衡状態の液滴半径、すなわち、臨界核半径 r^* を次式のように導出できる。

$$r^* = \frac{2\sigma}{\rho_{liq}RT \ln(S)} \quad (15)$$

$S = p_v/p_\infty$ は飽和比(Saturation ratio)であり、 $S > 1$ のときに過飽和(Super saturation)となる。液滴の半径がこの臨界核半径より大きくなるとますます液滴は成長し、逆に小さくなると蒸発するというのが、古典凝縮理論の根底にある極めて単純な理論である。

凝縮核生成率 I は、均一核生成で生成される凝縮核の生成速度を算出するための均一核生成モデルである。Volmer[12]は、過飽和状態での均一核生成による核の生成が、エントロピーと系のとりうる状態の関係を定義した Boltzmann の関係式で同様に模擬できることを見出した。すなわち、凝縮核生成率 I を次式のように定義した。

$$I = C \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) \quad (15)$$

ただし、 W は核生成に必要な仕事、 k は Boltzmann constant、 C は定数である。その後、多くの研究者が式(15)に基づく均一核生成モデルを提案している。その中で、最も広く用いられている均一核生成モデルは Frenkel [13] が提案したもので、次式のように定義される。

$$I = q_c \left(\frac{2\sigma}{\pi m^3}\right)^{1/2} \frac{\rho_v^2}{\rho_{liq}} \exp\left(-\frac{4\pi r^* \sigma}{3kT}\right) \quad (16)$$

ここで、 q_c は凝縮係数 ($q_c \leq 1.0$)、 m は水の分子量、 ρ_v は水蒸気の密度である。式(16)をさらに補正したものも提案されている [14]。

次に、液滴の成長率 $\partial \bar{r} / \partial t$ は先に記したように、液滴の半径 r が臨界核半径 r^* より大きく (小さく) なれば、正 (負) の値になるようにモデル化される。液滴は周りの水蒸気分子の衝突 (離脱) により成長 (蒸発) し、かつ液滴の大きさが分子の自由行程 (Mean-free path) よりも十分小さいと仮定して、個体への分子衝突を定義した Hertz-Knudsen 則に従うとして近似されている。すなわち、

$$\rho_v \frac{\partial \bar{r}}{\partial t} = q_c \left(\frac{p_v}{\sqrt{2\pi RT}} - \frac{p_r(T_r, r)}{\sqrt{2\pi RT_r}} \right) \quad (17)$$

ただし、 T_r は液滴の温度、 p_r は温度 T_r で計算された平衡状態における蒸気圧で式(14)から求められる。この成長率についても、場の条件に合わせて修正された Young らの式 [5]、 $T = T_r$ として単純化された Schnerr らの式 [7] などがある。特に蒸気タービン内の凝縮では、Hertz-Knudsen 則に基づく式(17)では必ずしも妥当な解が得られないことが知られており、大幅に改良した Gyarmathy のモデル [15] などもあり、筆者らも現在それを用いて液滴の成長率 $\partial \bar{r} / \partial t$ を計算している

式(14)-(17)では、これら以外にも、水の表面張力 σ 、水の密度 ρ_{liq} 、平面の水に対する飽和蒸気圧 p_∞ なども明確に定義する必要がある。凝縮モデルに関する詳細については、さらにいくつか著名な書籍 [16]-[18] や解説 [19] を紹介するので、入手可能ならばこれらもご参照いただきたい。

2. 4 非平衡凝縮を伴う流れの支配方程式

蒸気タービン翼列流れは水蒸気の圧縮性粘性流れであり、圧縮性ナビエ・ストークス方程式に支配される。したがって、圧縮性流れの典型的な数値解法をほぼそのまま用いることができる。厳密に言えば、理想気体の仮定から逸脱するような圧力ならびに温度条件の水蒸気では、理想気体の状態方程式は使えないのに加え、理想気体を仮定して構築されている圧縮性解法、たとえば近似リーマン解法なども不正

確になる。幸い、蒸気タービン内の湿りを伴う蒸気流れは大部分が亜臨界状態であるため、必ずしも分子間力などを考慮した非理想気体の状態方程式を用いる必要はない。結局、圧縮性ナビエ・ストークス方程式と先の非平衡凝縮モデルを連立して既存の圧縮性解法により解けば良いことになる。ただし、式(6)-(12)は蒸気流れの速度に基づく移流方程式になっているため、凝縮液滴はあくまで流れの流線に沿って移動するのが大前提である。その仮定を満足するためには、液滴の最大径が十分小さく ($r < O(1)\mu m$)、かつ液滴の質量分率 β が場の流体に対して 10%程度以下 ($\beta < 0.1$) であるべきとされている。さらに、液滴の数は極めて多い ($10^{10} \sim 10^{14} / m^3$) ため、水蒸気と液滴の二流体問題をまともに解くことはできない。したがって、水蒸気と液滴が均一に混ざった均質流を仮定して、液滴の質量分率 β を介してそれぞれの熱物性値が線形補間される。これらに加えて基礎方程式には、凝縮(蒸発)に伴う潜熱放出(吸収)のエネルギーバランスを考慮する必要がある。それからターボ機械流れにおいては、当然のことながら遠心力・コリオリ力も付加しなければならない。

これらの仮定から導出された三次元の支配方程式は、湿り蒸気のみならず湿り空気も考慮した Ishizaka ら[11]の非平衡凝縮モデル、ならびに S S T 乱流モデル[20]とともに一般曲線座標系で次式のように定義される。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_i}{\partial \xi_i} + S + H = 0 \quad (i=1,2,3) \quad (18)$$

ただし、

$$Q = J \begin{bmatrix} \rho \\ \rho w_1 \\ \rho w_2 \\ \rho w_3 \\ e \\ \rho_v \\ \rho\beta \\ \rho n \\ \rho k \\ \rho\omega \end{bmatrix}, F_i = J \begin{bmatrix} \rho W_i \\ \rho w_1 W_i + \partial \xi_i / \partial x_1 p \\ \rho w_2 W_i + \partial \xi_i / \partial x_2 p \\ \rho w_3 W_i + \partial \xi_i / \partial x_3 p \\ (e + p) W_i \\ \rho_v W_i \\ \rho\beta W_i \\ \rho n W_i \\ \rho k W_i \\ \rho\omega W_i \end{bmatrix}, S = -J \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{1j} \\ \tau_{2j} \\ \tau_{3j} \\ \tau_{kj} w_k + \kappa \partial T / \partial x_j \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sigma_{kj} \\ \sigma_{\omega j} \end{bmatrix}, H = -J \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \rho(\Omega^2 x_2 + 2\Omega w_3) \\ \rho(\Omega^2 x_3 - 2\Omega w_2) \\ 0 \\ -\Gamma_c \\ \Gamma_c \\ I \\ S_k \\ S_\omega \end{bmatrix}$$

式(18)は、混合物質の質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式、蒸気の質量保存式、凝縮液滴の質量保存式、液滴の数密度保存式、乱流エネルギー保存式、乱流エネルギー比散逸率の保存式からなり、 Q は未知変数ベクトル、 F_i は流束ベクトル、 S は粘性ベクトル、 H は生成ベクトルである。

$w = (w_1 \ w_2 \ w_3)$ は相対速度ベクトルであり、絶対速度ベクトルを $v = (v_1 \ v_2 \ v_3)$ とすれば、 $v = w + \Omega \times r$ の関係がある。相対速度系への変換により、生成ベクトル H には遠心力とコリオリ力が付加される。生成

ベクトル H 内の凝縮による液滴の質量生成率 Γ_c は、Ishizaka らが導出したモデルを用いる。また、均一核生成による凝縮核生成率 I は Kantrowitz[14]補正された Frenkel[13]に基づくモデルを採用する。 Γ_c 内における液滴の成長率 $\partial\bar{r}/\partial t$ は、湿り空気の場合には Hertz-Knudsen 則に基づく Schnerr らのモデル[7]、湿り蒸気の場合には Gyarmathy のモデル[15]を採用する。乱流エネルギー保存則ならびに乱流エネルギー比散逸率の保存則の σ_{kj} 、 $\sigma_{\omega j}$ は SST モデル[20]に基づく拡散項で、 S_k 、 S_{ω} はそれらの生成項である。

既存の非平衡凝縮モデルの数値解法としては、Bakhtar ら[5]や Young[6]らの研究が知られているが、これらでは凝縮液滴の成長を流線に沿って積分しながら計算する手法が採用された。この手法は、液滴の成長を流線に沿って計算するため実現象に即している。しかしながら、液滴の数は膨大であるため、すべての液滴について積分するのは計算コストの点から非現実的である。現在むしろ主流になっている手法は、式(6)-(9)を圧縮性ナビエ・ストークス方程式と連立してすべて時間進行法で解く手法で、Schnerr[7]の方法である。この論文では航空機翼周りの湿り空気流れが計算対象であった。その後、蒸気タービンの湿り蒸気流れ[21]にも拡張しているが、その際には Ishizaka ら[11]の簡略化された式(11)(12)が採用された。国内では、Senoo ら[22]が Bakhtar ら[23]のタービン翼形状に対して非平衡凝縮流れを計算して実験との比較を行っている。この翼形状は、湿り蒸気流れの計算コードを検証するためのベンチマークテスト用の翼形状として広く利用されており、筆者らもコード検証に利用した経緯がある。また、標準的な凝縮モデルは汎用 CFD コードにも組み込まれつつあり、一般ユーザーもいずれ簡単に利用できるようになると予想される。

蒸気タービン翼列を通る蒸気流れは、流動自体もかなり複雑である。特に低圧最終段動翼は長翼であり、翼端付近の回転による周方向速度はかなり速くなり、マッハ数に換算して2を超えている場合もある。そのため、衝撃波と翼境界層ならびに二次流れとの複雑な干渉が生じている。そのような流動を数値解析するためには、Robust でかつ高解像度の計算スキームを用いる必要がある。

2. 5 状態方程式の定式化

既存の圧縮性流れの数値解法では、流れは理想気体を仮定して、その状態方程式である $p = \rho RT$ を基礎方程式と連立して解く。NT においては、回転によるロータルピーを考慮して次式のように変形される。

$$p = \rho RT = (\gamma - 1) \left[e - \rho \left(w^2 - r^2 \Omega v_u \right) / 2 \right] \quad (19)$$

非平衡凝縮を伴う流れでは、液滴が考慮できる状態方程式が必要である。Ishizaka ら[11]は、上記の

ように液滴の最大径が十分小さく ($r < O(1)\mu m$)、かつ液滴の質量分率 β が場の流体に対して 10%程度以下 ($\beta < 0.1$) であるという仮定で、近似的に新たな状態方程式を導出した。凝縮に伴う潜熱の放出も考慮して式(19)は次式のように拡張される。

$$p = \rho R_m T (1 - \beta) = \frac{(1 - \beta) R_m}{C_{pm} - (1 - \beta) R_m} \left[e - \rho (w^2 - r^2 \Omega v_u) / 2 - \rho h_{0m} \right] \quad (20)$$

ただし、 h_{0m} 、 R_m 、 C_{pm} は液滴の質量分率 β により、気体と液体のそれぞれの値から線形結合により求められた生成エンタルピー、気体定数、ならびに定圧比熱である。

2. 6 数値解法

さて、筆者らはこれまでに数多くの湿り空気流れ[24][25]ならびに湿り蒸気流れ[26]–[29]を数値計算してきた。これらに用いた非平衡凝縮モデルは前節で説明した通りであるが、一方、差分法に基づく空間差分には流束差分法[30]と4次精度コンパクト MUSCL TVD スキーム[31]を用い、粘性項は2次精度中心差分で近似した。

いま、区分的領域 ℓ ならびに $\ell + 1$ の境界面において、 F_i の数値流束を $(F_i)_{\ell+1/2}$ と定義すれば、 $(F_i)_{\ell+1/2}$ は境界面左の区分的領域 ℓ と、境界面右の区分的領域 $\ell + 1$ から伝播して来る特性に基づく数値流束 F_i^\pm の和として次式のように表される。

$$(F_i)_{\ell+1/2} = (F_i^+)_{\ell+1/2} + (F_i^-)_{\ell+1/2} = (A_i^+)_{\ell+1/2} Q_{\ell+1/2}^L + (A_i^-)_{\ell+1/2} Q_{\ell+1/2}^R \quad (21)$$

A_i^\pm は F_i^\pm のヤコビ行列。 Q^L ならびに Q^R は、左右の区分的領域において高次補間された未知変数ベクトルである。式(21)の $(A_i^\pm)_{\ell+1/2} Q_{\ell+1/2}^M$ は、流束分離式として次式のように導出される。

$$(A_i^\pm)_{\ell+1/2} Q^M = (L_i^{-1} \Lambda_i^\pm L_i)_{\ell+1/2} Q^M = \lambda_{i1}^\pm Q^M + \frac{\lambda_{ia}^\pm}{c \sqrt{g_{ii}}} Q_{ia} + \frac{\lambda_{ib}^\pm}{c^2} Q_{ib} \quad (22)$$

上添え字 M は、 L もしくは R に置き換えられる。 L_i ならびに A_i は、左固有ベクトルと固有値(特性速度)からなる行列である。 λ_{ia}^\pm と λ_{ib}^\pm は次式で定義される。

$$\lambda_{ia}^\pm = (\lambda_{i4}^\pm - \lambda_{i5}^\pm) / 2 \quad (23)$$

$$\lambda_{ib}^\pm = (\lambda_{i4}^\pm + \lambda_{i5}^\pm) / 2 - \lambda_{i1}^\pm \quad (24)$$

ここで、 λ_{ij}^\pm ($j=1, 4, 5$) は、

$$\lambda_{ij}^\pm = (\lambda_{ij} \pm |\lambda_{ij}|) / 2 \quad (25)$$

λ_{ij} ($j=1, 4, 5$) は固有値(特性速度)であり、

$$\lambda_{i1} = W_i \quad (26)$$

$$\lambda_{i4} = W_i + c\sqrt{g_{ii}} \quad (27)$$

$$\lambda_{i5} = W_i - c\sqrt{g_{ii}} \quad (28)$$

ただし、 c は音速。 Q_{ia} と Q_{ib} は導出されたサブベクトルで、

$$Q_{ia} = \bar{p}Q_{ic} + \Delta\bar{m}_iQ_d \quad (29)$$

$$Q_{ib} = (\Delta\bar{m}_i c^2 / g_{ii})Q_{ic} + \bar{p}Q_d \quad (30)$$

$$\bar{p} = Q_p \cdot Q^M \quad (31)$$

$$\Delta\bar{m}_i = Q_{im} \cdot Q^M \quad (32)$$

ここで、サブベクトル Q_{ic} 、 Q_p 、 Q_{im} 、 Q_d はそれぞれ次のようなベクトルで導出される。

$$Q_{ic} = [0 \quad \partial\xi_i/\partial x_1 \quad \partial\xi_i/\partial x_2 \quad \partial\xi_i/\partial x_3 \quad W_i \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T \quad (33)$$

$$Q_p = [\phi^2 \quad -\tilde{\gamma}w_1 \quad -\tilde{\gamma}w_2 \quad -\tilde{\gamma}w_3 \quad -\tilde{\gamma} \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T \quad (34)$$

$$Q_{im} = [-W_i \quad \partial\xi_i/\partial x_1 \quad \partial\xi_i/\partial x_2 \quad \partial\xi_i/\partial x_3 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T \quad (35)$$

$$Q_d = [1 \quad w_1 \quad w_2 \quad w_3 \quad (e+p)/\rho \quad \rho_v/\rho \quad \beta \quad n \quad k \quad \omega]^T \quad (36)$$

また、 $\tilde{\gamma} = \gamma - 1$ 、 $\phi^2 = \tilde{\gamma}w_j w_j / 2 - h_{0m}$ 。

式(21)は、Roe の近似リーマン解法[30]に基づく流束差分式に変換すれば、数値流束 $(F_i)_{\ell+1/2}$ は次式のようになる。

$$(F_i)_{\ell+1/2} = \frac{1}{2} [F_i(Q_{\ell+1/2}^L) + F_i(Q_{\ell+1/2}^R)] - |(A_i)_{\ell+1/2}| (Q_{\ell+1/2}^R - Q_{\ell+1/2}^L) \quad (31)$$

$|(A_i)_{\ell+1/2}| Q_{\ell+1/2}^M$ ($i = 1, 2, 3; M = L, R$) はRoe平均を施して次式で計算される。

$$|(A_i^\pm)_{\ell+1/2}| Q^M = |\bar{\lambda}_{i1}| Q^M + \frac{|\bar{\lambda}_{ia}|}{\bar{c} \sqrt{g_{ii}}} Q_{ia} + \frac{|\bar{\lambda}_{ib}|}{\bar{c}^2} Q_{ib} \quad (32)$$

ただし、

$$|\bar{\lambda}_{ia}| = (|\bar{\lambda}_{i4}| - |\bar{\lambda}_{i5}|) / 2 \quad (33)$$

$$|\bar{\lambda}_{ib}| = (|\bar{\lambda}_{i4}| + |\bar{\lambda}_{i5}|) / 2 - |\hat{\lambda}_{i1}| \quad (34)$$

また、

$$\bar{Q}_{ia} = \bar{p}\bar{Q}_{ic} + \Delta\bar{m}_i\bar{Q}_d \quad (35)$$

$$\bar{Q}_{ib} = (\Delta\bar{m}_i \bar{c}^2 / g_{ii})\bar{Q}_{ic} + \bar{p}\bar{Q}_d \quad (36)$$

$$\bar{p} = \bar{Q}_p \cdot \bar{Q}^M \quad (37)$$

$$\Delta\bar{m}_i = \bar{Q}_{im} \cdot \bar{Q}^M \quad (38)$$

ここで、オーバーラインの付いた変数がRoe平均される。

また Q^L , Q^R は 4 次精度 Compact MUSCL TVD スキーム (Compact MUSCL) [31] により物理変数が外挿される。
 具体的には以下のようになる。

$$Q_{\ell+1/2}^L = Q_\ell + \frac{1}{6}\bar{\Delta}Q_\ell^L + \frac{1}{3}\bar{\Delta}Q_\ell^R \quad (39)$$

$$Q_{\ell+1/2}^R = Q_{\ell+1} - \frac{1}{6}\bar{\Delta}Q_{\ell+1}^R - \frac{1}{3}\bar{\Delta}Q_{\ell+1}^L \quad (40)$$

ただし、

$$\bar{\Delta}Q_\ell^L = \min\text{mod}(\bar{\Delta}Q_{\ell-1/2}, b_1\bar{\Delta}Q_{\ell+1/2}) \quad (41)$$

$$\bar{\Delta}Q_\ell^R = \min\text{mod}(\bar{\Delta}Q_{\ell+1/2}, b_1\bar{\Delta}Q_{\ell-1/2}) \quad (42)$$

$$\bar{\Delta}Q_{\ell+1/2} = \Delta Q_{\ell+1/2} - \frac{1}{6}\Delta^3 Q_{\ell+1/2} \quad (43)$$

$$\Delta Q_{\ell+1/2} = Q_{\ell+1} - Q_\ell \quad (44)$$

$$\Delta^3 Q_{\ell+1/2} = \Delta\tilde{Q}_L - 2\Delta\tilde{Q}_M + \Delta\tilde{Q}_R \quad (45)$$

$$\Delta\tilde{Q}_L = \min\text{mod}(\Delta Q_{\ell-1/2}, b_2\Delta Q_{\ell+1/2}, b_2\Delta Q_{\ell+3/2}) \quad (46)$$

$$\Delta\tilde{Q}_M = \min\text{mod}(\Delta Q_{\ell+1/2}, b_2\Delta Q_{\ell+3/2}, b_2\Delta Q_{\ell-1/2}) \quad (47)$$

$$\Delta\tilde{Q}_R = \min\text{mod}(\Delta Q_{\ell+3/2}, b_2\Delta Q_{\ell-1/2}, b_2\Delta Q_{\ell+1/2}) \quad (48)$$

$1 < b_1 \leq 4$, $b_2 \equiv 2$ 。また $\min\text{mod}$ は制限関数で、次式のように定義される。

$$\min\text{mod}(a_1, \dots, a_n) = \text{sign}(a_1) \max\{0, \min(|a_1|, \text{sign}(a_1) \cdot a_2, \dots, \text{sign}(a_1) \cdot a_n)\} \quad (49)$$

時間積分には LU-SGS スキーム [32] を採用する。LU-SGS スキームは陰解法であり、次の 2 段階の式で計算される。

$$D\Delta Q^* = RHS + \Delta t G^+(\Delta Q^*) \quad (50)$$

$$\Delta Q = \Delta Q^* - D^{-1}\Delta t G^-(\Delta Q) \quad (51)$$

ただし、

$$G^+(\Delta Q^*) = (A_1^+ \Delta Q^*)_{i-1,j,k} + (A_2^+ \Delta Q^*)_{i,j-1,k} + (A_3^+ \Delta Q^*)_{i,j,k-1} \quad (52)$$

$$G^-(\Delta Q) = (A_1^- \Delta Q)_{i+1,j,k} + (A_2^- \Delta Q)_{i,j+1,k} + (A_3^- \Delta Q)_{i,j,k+1} \quad (53)$$

RHS は式 (18) を陽的に計算した各時間ステップの解、 Δt は時間間隔で、 $Q^{n+1} = Q^n + \Delta Q$ として解が更新される。添字 i, j, k は三次元格子点番号、 D は LU-SGS 特有の対角化項である。また、 $A_\ell^\pm \Delta Q (\ell = 1, 2, 3)$ は式 (22) の左辺に相当する $A_\ell^\pm Q (\ell = 1, 2, 3)$ の Q を ΔQ に置き換えことで計算できる。

最近では、蒸気タービン内の静動翼列干渉による流れの非定常性が湿り蒸気の凝縮にどのような影響を与えるかという点に着目して、三次元多段静動翼列を通る非定常湿り蒸気流れをスパコンにより大規

模計算している[28][29]。この際、大規模計算を効率よく実行するためには計算コードの並列化・ベクトル化が極めて重要である。タービン翼列流れの特質上、各流路は周期境界条件のデータ通信を除けば、ほぼ独立に計算することができるので、たとえば各流路を各 CPU に割り当てて MPI により並列計算ができる。したがって、数千 CPU クラスの次世代スパコンが完成すれば、湿りを考慮した蒸気タービン全段全周流れの大規模計算も十分可能であると期待している。一方、各流路内では、採用されている数値解法にもよるが並列処理にも限界がある。筆者らも陰解法に基づく時間進行法を採用しているため、完全に並列計算はできない。ただし、陰的計算を領域分割してパイプライン処理を施すことにより、4 から 8 CPU 程度で並列性の高い計算が実行できる数値解法なども提案している[28]。

3. 非平衡凝縮流れの数値計算例

3.1 二次元単独流路流れの計算と実験結果との比較

蒸気タービンの流動解析コードを開発する上で最大の難関は、凝縮モデルの選択よりも、むしろ実験データの稀少さである。通常、理想気体を仮定した流れ解析では、相似則が成り立つことから、風洞実験による実験データが数多く提供されて利用されている。ところが、凝縮現象は時間・空間に依存しているため、相似則が成り立たない。したがって、蒸気タービンの流動解析コードを検証するためには、実機サイズの実験によるデータがぜひとも必要になる。少なくとも、筆者らの研究室では実施不可能であるが、タービンメーカーにおいても解析コード検証に使用できそうなデータを提供するのはかなり難しい。そんな状況の中で、実機サイズではないものの、Bakhtar らのグループが貴重な実験データを提供している[23]。蒸気タービンの流動解析コードを開発している他研究グループも、この実験データをコード検証のベンチマーク計算用によく利用している。

Fig. 1 (a)に Bakhtar らの実験翼形状ならびに実験条件に対して計算した場合の翼周り圧力分布を示す。凝縮が起きる場合の計算結果であるが、凝縮に伴う潜熱の放出から起因する翼負圧面における圧力上昇が良く捕らえられている。Fig. 1(b)には液滴の質量分率分布を示す。均一核生成に伴う非平衡凝縮が起こり、翼流路内で液滴が生成されて下流に流れていく様子が示されている。

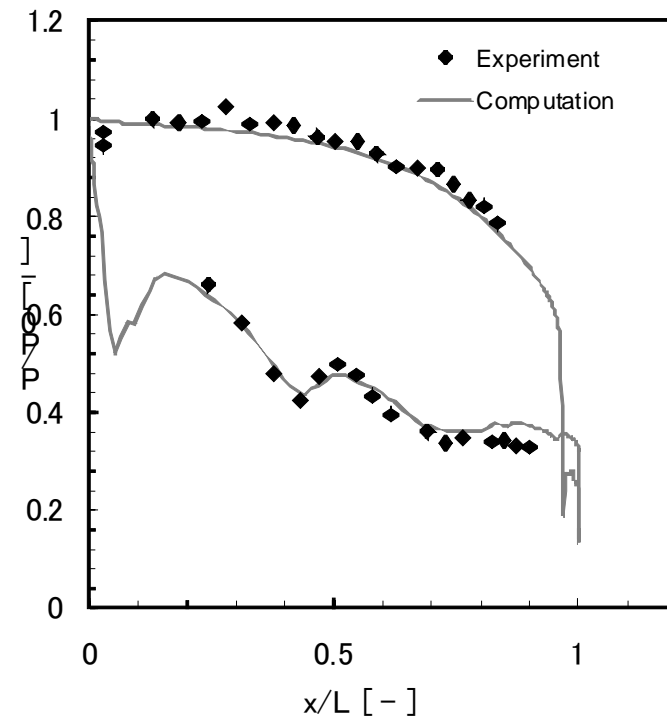


Fig.1(a) Pressure distributions on blade surface (with condensation)

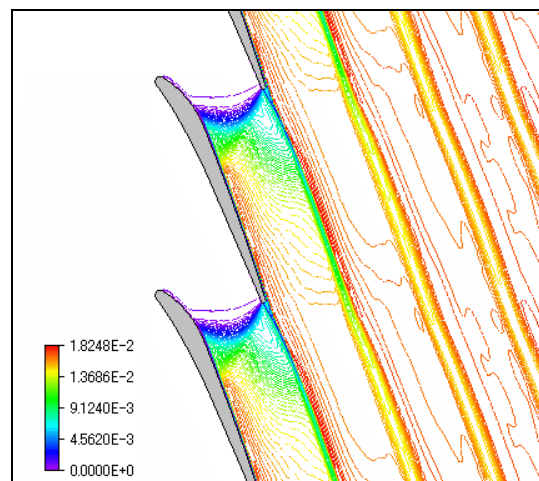


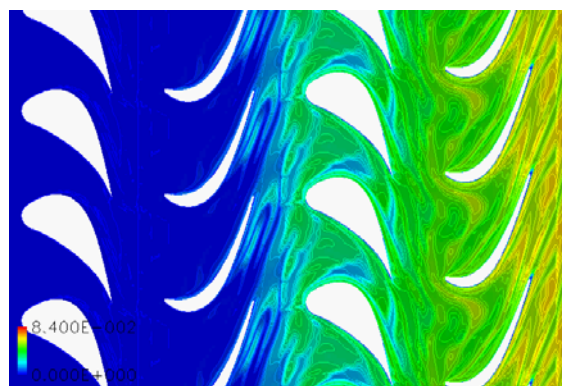
Fig.1(b) Condensate mass fraction contours

3.2 二次元多段静動翼列流れ[28]

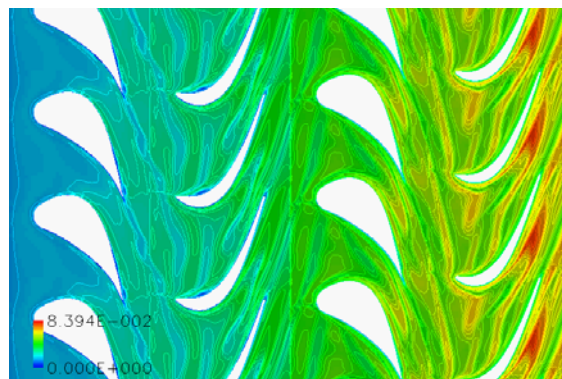
蒸気タービン中圧段における二段静動翼列を通る二次元湿り蒸気流れを計算した。翼列翼は三菱重工高砂製作所で設計されたものを用いた。計算条件は入口境界で岐点圧力を 1.71×10^5 [Pa]、岐点温度を389 [K]、入口湿り度 β_{in} を0.00%および2.44%とし、出口静圧を 0.71×10^5 [Pa]とした。計算格子は格子点数48x96からなる入口-出口境界用のH型格子2種類と、格子点数96x96からなる静翼-動翼用の拡張H型格子4種類の計6種類によって構成されている。動翼は静翼1ピッチ間を5000 時間ステップで通過と仮定した。また、翼の枚数比は1とした。

Fig. 2に $\beta_{in}=0.00\%$ ならびに $\beta_{in}=2.44\%$ での液滴の質量分率分布を示す。 $\beta_{in}=0.00\%$ の場合では1段目動翼より下流側で液滴の生成が開始している。液滴は主に主流で生成され、各流路間のご部付近で急激に成長している。また、液滴を含んだ一段目動翼後流が周期的に後置静翼流路内に流れ込んでいる様子も示されている。

一方、 $\beta_{in}=2.44\%$ の場合には、一段目静翼流路内から液滴の成長はすでに始まっており、後段の動翼、静翼を通過するにつれて液滴はさらに成長し続けている。特に、 $\beta_{in}=0.00\%$ の場合と比較して二段目動翼流路内においては、液滴の質量分率分布における局所性が際立っている。入口に湿りを考慮することで、液滴の質量分率分布の周期的な変動が助長される計算結果となっている。



(a) $\beta_{in}=0.00\%$



(b) $\beta_{in}=2.44\%$

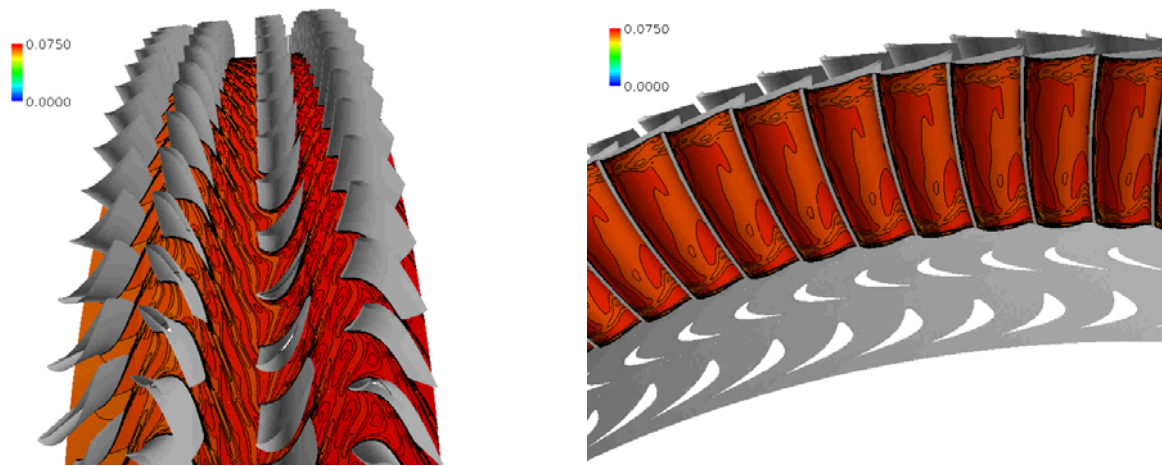
Fig. 2 Instantaneous condensate mass fractions

3.3 蒸気タービン二段静動翼列を通る非定常三次元湿り蒸気流れの数値解析[33]

2010年6月にグラスゴーで開催された ASME Turbo Expo において報告された三菱重工との共同研究の成果についてその一部をここでは紹介する。詳細については文献[33]を参照いただきたい。計算対象の

タービン翼ならびに実験計測は、三菱重工高砂製作所で設計・実施された。実験装置は、ピッチが同じ二段静動翼列からなり、ボイラーから蒸気が供給される。特徴的なことは、ボイラーから供給される飽和状態の乾き蒸気に μ 径のノズルから微小液滴を噴射することで湿りを与えることができ、タービン段入口における湿りの有無による蒸気流動を作り出すことができる実験装置である。実験では、湿りの有無による各段の静動翼列後方における時間・空間平均された全圧、静圧、ならびに流出角度を計測した。筆者らは、数値タービンによりこれらと同じ条件で数値計算して、全圧、静圧、ならびに流出角度を実験結果と比較したところ、ハブおよびチップ近傍を除いて湿りの有無にかかわらず、いずれも実験と良い一致を示す計算結果を得ることに成功した。あいにく、今回の条件では湿りが直接蒸気流れの流出角度に影響を与えるような結果を得ることはできなかったが、圧力場への湿りの影響を捕獲することに成功した。静圧ならびに全圧は、タービンの場合には段下流に行くにつれて徐々に降下するが、湿りを考慮したケースでは、乾き蒸気に比べて圧力の降下量が相対的に少ない結果となった。これは、湿り蒸気内の微小液滴が段下流に向かうにつれて徐々に成長するため、乾き蒸気から液滴が生成される際の潜熱が周りに放出され、結果的に温度ならびに圧力を上昇させているものと推測される。実験により測定されたこのわずかな圧力上昇を数値タービンでも正確に計算することに成功した。数値タービンを用いる最大の利点は、実験では測定が困難な非定常性を捉えることができる点であり、今回の報告では、計算により得られた液滴の質量分率（湿り度）の時系列データから動画を作成して、翼列後流や二次流れが湿り度にどのような影響を与えているかを分析した。

Fig. 3(a)は、二段静動翼列のミッドスパンにおける瞬間湿り度分布である。湿り度の分布が翼列干渉ならびに前置翼列から来る後流の影響を受けていることがよくわかる。また、Fig. 3(b)は一段目動翼後方断面における瞬間湿り度分布である。この図だけではわかりにくいですが、前置静翼で後流や二次流れにより空間的に偏在させられた液滴が、さらに後続の動翼と周期的に干渉することにより、周期的に変動する複雑な湿り度分布が形成されていることが示されている。特にコーナー渦では、液滴は遠心力により渦外側へ飛ばされて渦中心付近では湿り度が相対的に低くなる分布が得られている。これらの結果から、乾き蒸気流れ以上に湿り蒸気流れは翼列後流や二次流れの影響を受けていることが考えられ、蒸気タービンの湿り蒸気流れを正確に解明するためには、非定常解析が重要であることが示唆される。



(a) Mid-span

(b) Cross section at outlet of first-stage rotor

Fig. 3 Calculated results by NT (Instantaneous condensate mass fraction)

4. NTにおける今後の課題

最も大きな問題は、凝縮液滴が成長・凝集して既存の数値解法の仮定を逸脱した大きさになった場合である。既存の数値解法では、そのほとんどで液滴の径が十分小さく、かつ液滴の質量分率も十分少ないという仮定により、液滴は流線に沿って成長するとして凝縮モデルが構築されている。しかしながら、低圧タービン最終段付近では、液滴径が大きくなって流れから逸脱して運動することが知られており、この液滴が翼列に衝突して翼表面が壊食する原因にもなっている。液滴を粒子単位で計算する手法には Young ら[6]も採用していた粒子法に基づく方法が考えられるが、先にも示したように蒸気タービン内に発生する液滴の数は粒子法で対応できる数をはるかに凌駕している。したがって、流れ場における水蒸気と液滴はあくまで均質として計算せざるを得ないと考えられる。その場合の一つの手法としては、速度すべりを考慮する手法が考えられる。ただし、この手法においても、結局のところその速度すべり自体をモデル化するためには、実現象の十分な把握が前提である。

さらに解決しなければならない問題としては、その液滴が凝集して翼端付近で液膜化する問題をいかにして計算するかという点である。ここに至るともはや、自由境界面を持った気液二相流れを解かなければならず、二流体モデルなどの導入の必要性が示唆される。当然のことながら、解くべき方程式の数も増えるので、計算負荷はかなり増大する。

5. 臨界点を跨ぐ超臨界流体の数値解法

筆者らがマルチフィジックス CFD 研究として開発しているもう一つは、臨界点を跨いだ超臨界流体の

解析ソフトウェア「超臨界流体シミュレータ、Supercritical-fluids Simulator(SFS)」である。以下には超臨界流体を計算するために必要な数値解法ならびに熱物性モデルについて概説する。

5.1 超臨界流体の特徴

流体を高温・高圧にすると気体もしくは液体から超臨界流体に相変化する。超臨界流体は、特に相変化を起こす臨界点の近傍で特異な性質、たとえば、熱物性にピーク値、溶解度が急激に変化、反応速度が極大、などを呈することが知られている。化学工学の分野ではこれらの特異性を利用した有害物質・廃棄物の分解や材料合成の技術が研究開発されている。これら技術には、環境に無害で再利用可能な水や二酸化炭素の超臨界流体が溶媒として用いられている。したがって、超臨界流体研究は環境にやさしい新たな技術開発のブレイクスルーに繋がる可能性を秘めている。しかしながら、超臨界流体の実験には高温・高圧環境を実現する必要があり、実験装置の設計上、流動部分における可視化が困難であるため、超臨界流体の流体化学(Fluid Chemistry)的性質は未だ十分に解明されていない。加えて、超臨界流体の数値解法の開発は、特に臨界点近傍における熱物性値の特異性から、現在も模索中の状態にある。

超臨界流体は、気体と液体双方の特徴を有した「サラサラ」した流体であるとよく言われる。 μm スケールの隙間にまで入り込める性質から、半導体装置の洗浄などにも利用されている。超臨界領域では、亜臨界領域とは異なった熱物性を有しているため、これまで理想気体を仮定して構築された圧縮性流れの数値解法もそのままでは利用できない。したがって、正確な熱物性値を計算するためには、状態方程式をはじめ、分子粘性率、熱伝導係率、またこれらから派生する熱物性値、たとえば定圧比熱なども超臨界域の熱物性モデルに交換する必要がある。

たとえば、非理想気体の状態方程式には、Cubic型とVirial型の状態方程式がある。Cubic型は、van der Waalsの状態方程式を基本とした三次方程式で記述された状態方程式である。この式は比較的単純な形をしているので、計算負荷はそれほどない。筆者らは本研究とは別に超臨界流体を計算するための数値解法も開発しており、Cubic型方程式の一つである、Peng-Robinson状態方程式[34]を用いて超臨界二酸化炭素の熱対流を計算したことがある[35]。得られた解は理想気体の状態方程式の解とは基本的に異なり、特に温度場・密度場の解の違いが顕著であった。その後、Peng-Robinson状態方程式を超臨界水にも応用しようとしたことがあるが、その過程でPeng-Robinson状態方程式などCubic型の状態方程式が、超臨界水には必ずしも正確ではないことがわかった。現在は、九州大学が開発したPROPATH[36]と呼ばれる熱物性データベースを採用しており、たとえば超臨界水は、IAPWS[37]で定義されたVirial型の状態

方程式がプログラムされている。これは、多項式近似された状態方程式であり、項がたくさんあるため計算負荷は大きい。現存する状態方程式の中では最も信頼のおける値を得ることができる。蒸気表を作成する基になっている状態方程式でもある。

5. 2 前処理型方程式の導出

圧縮性ナビエ・ストークス方程式は、圧縮性オイラー方程式の数値解法がほぼそのまま適用されて解かれているのが現状である。その際に、流れ場の特性速度の符号に応じて上流化が施される。ところが、この方法をそのまま低速な流れに適用すると音速と流速の比がかなり大きくなってしまい、解がなかなか収束せず、かつおかしな計算をしてしまう、いわゆる Stiff な状態に陥る。前処理法はこれを解決するための方法である。この方法では、音速を擬似音速に置き換え、遅い流れの場合には擬似音速が流速のオーダーに減速されて、かつ方程式は非圧縮性ナビエ・ストークス方程式（厳密には、擬似圧縮項を伴う連続の式と温度方程式を含む）に変換される。一方、速い流れでは擬似音速はそのまま音速となり、通常の圧縮性ナビエ・ストークス方程式になる。したがって、衝撃波を伴う流れから自然対流のような遅い流れまでを同一の基礎方程式で解くことができるようになる。

いま、式(18)を前処理型に変換すれば次式のようなになる。

$$\Gamma \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{\partial F_i}{\partial \xi_i} + S + H = 0 \quad (i=1,2,3) \quad (54)$$

ここで、 \hat{Q} は前処理型方程式の未知変数ベクトルであり、 $\hat{Q} = J[p \ w_1 \ w_2 \ w_3 \ T \ \rho_v/\rho \ \beta \ n \ k \ \omega]^T$ のように初期変数から構成される。また、 Γ は前処理行列で、一般状態方程式へ適用できる一般形で次式のように定義される。

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \theta & 0 & 0 & 0 & \rho_T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta w_1 & \rho & 0 & 0 & \rho_T w_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta w_2 & 0 & \rho & 0 & \rho_T w_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta w_3 & 0 & 0 & \rho & \rho_T w_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta h - (1 - \rho h_p) & \rho w_1 & \rho w_2 & \rho w_3 & \rho_T h + \rho h_T & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta \rho_v / \rho & 0 & 0 & 0 & \rho_T \rho_v / \rho & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \theta \beta & 0 & 0 & 0 & \rho_T \beta & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 \\ \theta n & 0 & 0 & 0 & \rho_T n & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 \\ \theta k & 0 & 0 & 0 & \rho_T k & 0 & 0 & 0 & \rho & 0 \\ \theta \omega & 0 & 0 & 0 & \rho_T \omega & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho \end{bmatrix} \quad (55)$$

ρ_T 、 h_T 、 h_p は、温度もしくは圧力による密度もしくはエンタルピーの偏導関数。 θ は前処理パラメータであり、次式を用いる。

$$\theta = \frac{1}{U_r^2} - \frac{\rho_T(1 - \rho h_p)}{\rho h_T} \quad (56)$$

U_r はスイッチングパラメータで、流れの速度により擬似音速の値が切り替えられる。

5. 3 前処理型差分スキーム[38]

式(54)への変換に伴い、式(18)で用いていた差分スキームも前処理型に変換される[38]。いま、区分的領域 ℓ ならびに $\ell+1$ の境界面において、 F_i の数値流束を $(F_i)_{\ell+1/2}$ と定義すれば、 $(F_i)_{\ell+1/2}$ は境界面左の区分的領域 ℓ と、境界面右の区分的領域 $\ell+1$ から伝播して来る特性に基づく数値流束 F_i^\pm の和として次式のように表される。

$$(F_i)_{\ell+1/2} = (F_i^+)_{\ell+1/2} + (F_i^-)_{\ell+1/2} = (\hat{A}_i^+)_{\ell+1/2} \hat{Q}_{\ell+1/2}^L + (\hat{A}_i^-)_{\ell+1/2} \hat{Q}_{\ell+1/2}^R \quad (57)$$

\hat{A}_i^\pm は前処理された F_i^\pm のヤコビ行列、 \hat{Q}^L ならびに \hat{Q}^R は、左右の区分的領域において高次補間された未知変数ベクトルである。式(57)の $(\hat{A}_i^\pm)_{\ell+1/2} \hat{Q}_{\ell+1/2}^M$ は、前処理型流束分離式として次式のように導出される。

$$(\hat{A}_i^\pm)_{\ell+1/2} \hat{Q}^M = (\Gamma L_i^{-1} \Lambda_i^\pm L_i)_{\ell+1/2} \hat{Q}^M = \hat{\lambda}_{i1}^\pm \Gamma \hat{Q}^M + \frac{\hat{\lambda}_{ia}^\pm}{\hat{c}_i \sqrt{g_{ii}}} \hat{Q}_{ia} + \frac{\hat{\lambda}_{ib}^\pm}{\hat{c}_i^2} \hat{Q}_{ib} \quad (58)$$

上添え字 M は、 L もしくは R に置き換えられる。 L_i ならびに Λ_i は、前処理された左固有ベクトルと固有値(特性速度)からなる行列である。 $\hat{\lambda}_{ia}^\pm$ と $\hat{\lambda}_{ib}^\pm$ は次式で定義される。

$$\hat{\lambda}_{ia}^\pm = (\hat{\lambda}_{i4}^\pm - \hat{\lambda}_{i5}^\pm)/2 \quad (59)$$

$$\hat{\lambda}_{ib}^\pm = (\ell_i^- \hat{\lambda}_{i4}^\pm - \ell_i^+ \hat{\lambda}_{i5}^\pm)/(\ell_i^- - \ell_i^+) - \hat{\lambda}_{i1}^\pm \quad (60)$$

ここで、 $\hat{\lambda}_{ij}^\pm$ ($j=1, 4, 5$) ならびに ℓ_i^\pm は、

$$\hat{\lambda}_{ij}^\pm = (\hat{\lambda}_{ij}^\pm \pm |\hat{\lambda}_{ij}^\pm|)/2 \quad (61)$$

$$\ell_i^\pm = \rho U_r^2 / (W_i(1 - \alpha)/2 \pm \hat{c}_i \sqrt{g_{ii}}) \quad (62)$$

$\hat{\lambda}_{ij}$ ($j=1, 4, 5$) は前処理された固有値(特性速度)であり、

$$\hat{\lambda}_{i1} = W_i \quad (63)$$

$$\hat{\lambda}_{i4} = (1 + \alpha)W_i/2 + \hat{c}_i \sqrt{g_{ii}} \quad (64)$$

$$\hat{\lambda}_{i5} = (1 + \alpha)W_i/2 - \hat{c}_i \sqrt{g_{ii}} \quad (65)$$

\hat{c}_i は擬似音速であり次式のように導出される。

$$\hat{c}_i = \sqrt{W_i^2(1 - \alpha)^2/g_{ii} + 4U_r^2}/2 \quad (66)$$

ただし、 $\alpha = U_r^2[\rho_p + \rho_T(1 - \rho h_p)]/\rho h_T$ 、 $\rho_p = \partial\rho/\partial p$ 。もし、 U_r が音速に等しければ α は1になり、式(66)

は本来の音速に等しくなる。 \hat{Q}_{ia} と \hat{Q}_{ib} は導出されたサブベクトルで、

$$\hat{Q}_{ia} = \hat{q}_1^M \hat{Q}_{ic} + \rho \hat{W}_i \hat{Q}_d \quad (67)$$

$$\hat{Q}_{ib} = \left(\rho \hat{W}_i \hat{c}_i^2 / g_{ii} \right) \hat{Q}_{ic} + \left(\hat{q}_1^M \hat{c}_i^2 / U_r^2 \right) \hat{Q}_d \quad (68)$$

ここで、 \hat{q}_j^M と $\hat{W}_j [= (\partial \xi_j / \partial x_j) \hat{q}_{j+1}^M \ (j=1,2,3)]$ は高次補間された \hat{Q} の j 番目の要素ならびに反変速度である。さらに \hat{Q}_{ic} と \hat{Q}_d は次のようなベクトルになる。

$$\hat{Q}_{ic} = [0 \ \partial \xi_i / \partial x_1 \ \partial \xi_i / \partial x_2 \ \partial \xi_i / \partial x_3 \ W_i \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0]^T \quad (69)$$

$$\hat{Q}_d = [1 \ w_1 \ w_2 \ w_3 \ (e+p)/\rho \ \rho_v/\rho \ \beta \ n \ k \ \omega]^T \quad (70)$$

また、時間積分に用いるLU-SGSスキームも次式のような前処理型LU-SGSに変換される[38]。

$$\Gamma D \Delta \hat{Q}^* = RHS + \Delta t G^+ (\Delta \hat{Q}^*) \quad (71)$$

$$\Delta \hat{Q} = \Delta \hat{Q}^* - \Gamma^{-1} D^{-1} \Delta t G^- (\Delta \hat{Q}^*) \quad (72)$$

ただし、

$$G^+ (\Delta \hat{Q}^*) = \left(\hat{A}_1^+ \Delta \hat{Q}^* \right)_{i-1,j,k} + \left(\hat{A}_2^+ \Delta \hat{Q}^* \right)_{i,j-1,k} + \left(\hat{A}_3^+ \Delta \hat{Q}^* \right)_{i,j,k-1} \quad (73)$$

$$G^- (\Delta \hat{Q}^*) = \left(\hat{A}_1^- \Delta \hat{Q}^* \right)_{i+1,j,k} + \left(\hat{A}_2^- \Delta \hat{Q}^* \right)_{i,j+1,k} + \left(\hat{A}_3^- \Delta \hat{Q}^* \right)_{i,j,k+1} \quad (74)$$

RHS は式(54)を陽的に計算した各時間ステップの解、 Δt は時間間隔で、 $\hat{Q}^{n+1} = \hat{Q}^n + \Delta \hat{Q}$ として解が更新される。添字 i, j, k は三次元格子点番号、 D はLU-SGS特有の対角化項である。また、 $\hat{A}_\ell^\pm \Delta \hat{Q}^* (\ell=1,2,3)$ は式(58)の左辺に相当する $\hat{A}_\ell^\pm \hat{Q}^* (\ell=1,2,3)$ の \hat{Q}^* を $\Delta \hat{Q}^*$ へ置き換えことにより計算できる。

5. 4 超臨界流体の熱物性モデル

超臨界流体は、通常の気体や液体と異なった特異な熱物性を有しているため、これまで理想気体を仮定して構築された圧縮性流れの数値解法もそのままでは利用できない。したがって、正確な熱物性値を計算するためには、状態方程式をはじめ、分子粘性率、熱伝導係率、またこれらから派生する熱物性値、たとえば定圧比熱なども超臨界流体の熱物性モデルに交換する必要がある。SFS では九州大学が開発したPROPATH[36]にプログラムされている熱物性モデルを用いる。

たとえば、二酸化炭素の状態方程式は、IUPAC [39]に準拠した熱物性値に対する多項式近似によって以下のような式で定義される。

$$p = \rho RT \left[1 + \phi \sum_{i=0}^9 \sum_{j=0}^{J_i} a_{ij} (\phi-1)^j (\phi-1)^i \right] \quad (75)$$

ただし、 $\phi = \rho / \rho^*$ 、 $\varphi = T^* / T$ 。具体的に二酸化炭素の場合、 $\rho^* = 468 [\text{kg/m}^3]$ 、 $T^* = 304.21 [\text{K}]$ 。なお、 a_{ij} ならびに J_i は IUPAC に定義されている。この状態方程式に基づき定積比熱ならびに定圧比熱は、次式より計算される。

$$C_v = \int_0^{\rho} \frac{T}{\rho^2} \left(\frac{\partial^2 p}{\partial T^2} \right)_{\rho} d\rho + C_v^{ideal} \quad (76)$$

$$C_p = C_v + \frac{T}{\rho^2} \frac{(\partial p / \partial T)_{\rho}^2}{(\partial p / \partial \rho)_T} \quad (77)$$

ただし、 C_v^{ideal} は理想気体の定積比熱である。

水(過熱水蒸気)の場合にはIAPWS IF97[37]で定義された次の一般状態方程式が知られている。

$$\frac{G(p, T)}{RT} = \ln \phi + \sum_{i=1}^9 n_i^o \phi^{J_i^o} + \sum_{i=1}^{43} n_i \phi^{I_i} (\phi - 0.5)^{J_i} \quad (78)$$

ここで、 G は無次元ギブス自由エネルギー、 $\phi = p/10^6$ 、 $\varphi = 540/T$ である。 n_i^o 、 n_i 、 J_i^o 、 I_i 、 J_i は係数であり、IF97に定義されている。密度は式(78)の偏導関数から構成された式により計算する。

これら状態方程式を自らプログラムするのは大変な作業であるが、幸いなことにPROPATHには48種類の物質について必要な熱物性値がほぼすべてがすでにプログラムされており、外部関数としてSFSに読み込むことができる。したがって、水のみならず二酸化炭素、メタン、アンモニア、窒素、酸素、水素、ヘリウムなど主な物質は、各物質のライブラリファイルを交換するだけで、簡単にその流動をSFSで計算することができる。さらに、PROPATHを用いることで、一般状態方程式から密度が計算できるだけでなく、これから派生する定圧比熱や偏導関数までも計算することができる。さらに、分子粘性係数や熱伝導率などもすでに外部関数として組み込まれている。なお、PROPATHを使用する際に計算時間短縮のため、筆者らはPROPATHの精度を落とさずに並列計算できる参照テーブルも開発した[40]。

6. 数値計算例

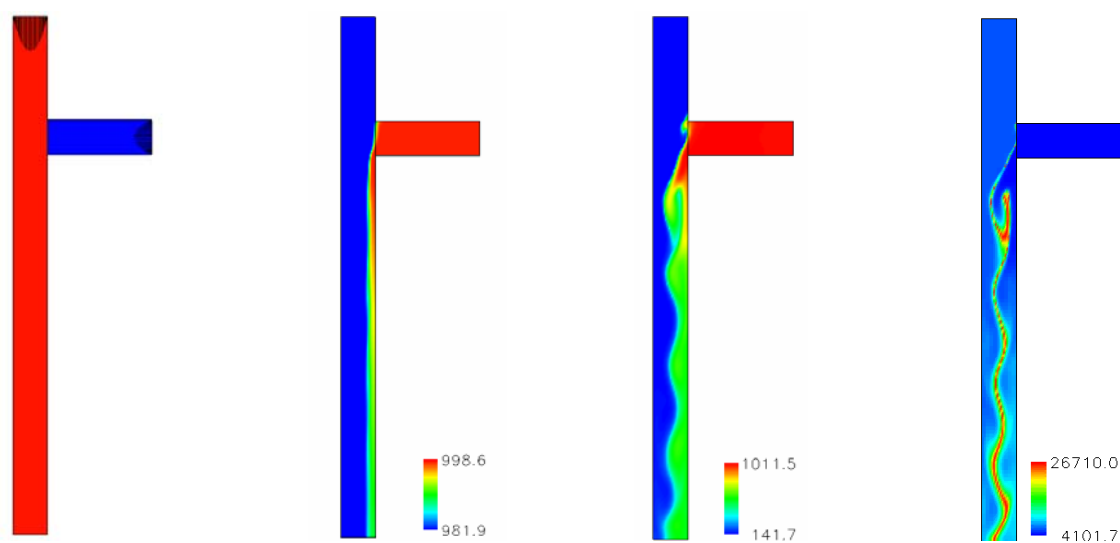
6. 1 臨界点を跨ぐ超臨界水熱合成の数値解析

本研究は、NEDO プロジェクト「超ハイブリット材料技術開発」に研究参画して現在実施している研究であり、その一部の成果はすでに文献[41]に報告している。ここでは、文献[41]に発表した中で典型的な計算例について紹介する。

超臨界水を用いた流通式の水熱合成反応による酸化金属微粒子の生成手法が提案されている[42]。この方法では、流路内で常温の金属塩水溶液と高温の超臨界水を混合させ、急激な温度上昇による誘電率、溶解度の変化によって微粒子を生成させる。この時、微粒子の生成や成長は反応容器内の温度や流速により大きく影響される。そのため、超臨界流体と液体との混合による温度分布や流速分布等の詳細な解析が必要になるが、高温・高圧での実験が必要な点や実験装置の管路が細い点などから、超臨界流体の光学的な観測が困難であり、実験による反応器内の流動場の評価はこれまでほとんど行われていない。

一方で、この問題を数値計算により解明するためには、臨界点を跨ぐ超臨界流体を計算しなければならない。この問題は基本的に遅い流れであるため、通常の圧縮性流れの数値解法では Stiffness が生じて計算できない。ところが、遅い流れであるにもかかわらず臨界点近傍で急激に熱物性値が変化するため、非圧縮性流れの数値解法でも計算できない。前処理法と PROPATH が組み合わされた SFS はまさにこの問題を計算する唯一の方法であるかもしれない。

典型的な計算例として、混合反応管内における混合流動を計算した結果を紹介する。Fig. 4(a)は、混合反応管の模式図である。主管（縦管）の上部ならびに副管（横管）の右入口からそれぞれ流体が流入して、管の結合部分で混合が起こる。バルク圧力を常圧として、主管に 343K の水、副管に 293K の水が流入するケース (CASE1) と、バルク圧力を超臨界圧 30MPa にして、主管に 730K の超臨界水、副管に 293K の水が流入するケース (CASE2) について、計算結果を比較した。Fig. 4(b)は、CASE 1 の場合に計算された瞬間密度分布である。密度差がほとんどない通常の水の混合による流動場が得られた。一方、Fig. 4(c)は CASE2 の場合に計算された瞬間密度分布である。管結合部分から流れ場の周期的な変動が生じている。密度差はほぼ 1 ケタ違う結果が得られた。この大きな密度差が流れ場を不安定にしているものと推測される。さらに興味深いのは、Fig. 4(d)に示された CASE2 の場合に計算された定圧比熱であり、最大値と最小値の違いが 6 倍以上あり、重ねて擬臨界温度部分で極大値になっている。超臨界流体の特異性の一つとして、定圧比熱が臨界点で極大値を持つことがあげられる。超臨界流体の熱物性を正確に評価しなければ、正確な定圧比熱を計算により求めることはできない。また、正確な定圧比熱が計算できないと、超臨界流体を正確に計算することはできないことになる。



(a) T-shaped channel (b) Density (CASE1) (c) Density (CASE2) (d) Isobaric specific heat (CASE2)

Fig. 4 Calculated results of flows through T-shaped channel

7. あとがき

マルチフィジックス CFD のための数値解法として、筆者らが取り組んでいる非平衡凝縮、ならびに臨界点を跨ぐ超臨界流体の数値モデルについて説明した。現在これらに基づき、数値タービン(NT)と超臨界流体シミュレータ(SFS)の2種類の解析ソフトウェアを開発している。なお、解説中に記述されている流束分離式を理解するためには、偏微分方程式論から始まって、特性方程式、特性の理論、流束分離、リーマン解法、流束制限関数などを理解していた方がより良い。

参考文献

1. 山本 悟, 笹尾泰洋, 特集: 非定常流動特性を考慮したターボ機械性能向上技術, 数値タービンのスーパーコンピューティング, ターボ機械, 34-9 (2006), 23-28.
2. 山本悟, 特集: マルチフィジックス CFD シミュレーションの産業応用, タービン多段静動翼列を通る湿り蒸気流れの大規模計算, 日本流体力学会誌「ながれ」, 27, (2008), 121-126.
3. 山本悟, 展望・解説: 蒸気タービン翼列における湿り蒸気流れの数値解法の現状, ターボ機械, 37-4(2009), 229-236.
4. 山本悟, 特集: ターボ機械・エネルギー機器に関する先端マルチフィジックスシミュレーション, 非平衡凝縮・超臨界流体の数値解法とその応用, ターボ機械, 38(2010-11), 掲載予定.
5. Bakhtar, F. and Mohammadi Tochai, M. T., An Investigation of Two-Dimensional Flows of Nucleating and Wet Steam by the Time-Marching Method, *Int. J. Heat Fluid Flow*, 2-1(1980), 5-18.
6. Young, J.B., The Spontaneous Condensation of Steam in Supersonic Nozzle, *PhysicoChemical Hydrodynamics*, 3-1(1982), 57-82.
7. Schnerr, G. H. and Dohrmann, U., Transonic Flow Around Airfoils with Relaxation and Energy Supply by Homogeneous Condensation, *AIAA Journal*, 28-7 (1990), 1187-1193.
8. Seinfeld, J.H., Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution, (1986), Wiley.
9. Pratsinis, S.E., Simultaneous Nucleation, Condensation, and Coagulation in Aerosol Reactors, *J. Colloid and Interface Science*, 124-2(1988), 416-427.
10. Hill, P. G., Condensation of Water Vapour during Supersonic Expansion in Nozzles, *J. Fluid Mech.*, 25-3 (1966), 593-620.

11. Ishizaka, K., Ikohagi, T. and Daiguji, H., A High-Resolution Numerical Method for Transonic Non-Equilibrium Condensation Flow through a Steam Turbine Cascade, *Proc. of the 6th ISCFD*, 1, (1995), 479-484.
12. Volmer, M., *Kinetik der Phasenbildung*, (1939), Steinkopff.
13. Frenkel, J., *Kinetic Theory of Liquids*, (1955), Dover.
14. Kantrowitz, A., Nucleation in Very Rapid Vapour Expansions, *J. Comp. Phys.*, 19, (1951), 1097-1100.
15. Gyarmathy, G., Bases for a Theory for Steam Turbine, *Bulletin, Institute for Thermal Turbomachines, Federal Technical University, Zurich, Switzerland*, 6, (1964).
16. Wegener, P.P., Nonequilibrium Flows I, *Gasdynamics*, ed. by P.P.Wegener, (1969), 162-243, Marcel Dekker Publishers.
17. Wegener, P.P. and Mack, L.M., Condensation in Supersonic and Hypersonic Wind Tunnels, *Advances in Applied Mechanics*, eds. by H.L.Dryden and T.von Karman, (1969), 307-447, Academic Press.
18. Abraham, F.F., *Homogeneous Nucleation Theory*, (1974), Academic Press.
19. Kotake S. and Glass, I.I., Flow with Nucleation and Condensation, *Progress of Aerospace Sciences*, 19(1981), 129-196.
20. Menter, F. R., Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications, *AIAA Journal*, 32(1994), 1598-1605.
21. Schnerr, G.H. and Heiler, M., Two-phase Flow Instabilities in Channels and Turbine Cascades, *Computational Fluid Dynamics Review 1998*, eds. by M.Hafez and K.Oshima, II, (1998), 668-690, World Scientific.
22. Senoo, S. and Shikano, Y., Two-dimensional Analysis for Non-equilibrium Homogeneous Condensing Flows through Steam Turbine Cascade, *JSME Int. J.*, 45-4(2002), 865-871.
23. Bakhtar, F., Ebrahimi, M. and Webb, R. A., On the performance of a Cascade of Turbine Rotor Tip Section in Nucleating Stream. Part 1: Surface Pressure Distributions, *Proc. Instn. Mech. Engrs*, Part C, 204, (1995), 115-124.
24. Yamamoto, S., Hagari, H. and Murayama, M., Numerical Simulation of Condensation around the 3-D Wing, *Trans. the Japan Society of Aeronautical and Space Science*, 42-138 (2000), 182-189.

25. Yamamoto, S. , Onset of Condensation in Vortical Flow over Sharp-edged Delta Wing, *AIAA Journal*, 41-9 (2003), 1832-1835.
26. Sasao, Y. and Yamamoto, S. , Numerical Prediction of Unsteady Flows through Turbine Stator-rotor Channels with Condensation, *Proceedings of ASME Fluids Engineering Summer Conference*, (FEDSM2005-77205), (2005), CD-ROM.
27. 笹尾泰洋, 山本悟, 石坂浩一, 大山宏治, 多段タービン翼列を通る湿り蒸気流れの数値シミュレーション, *日本機械学会論文集 B 編*, 73-728(2007), 936-941.
28. Yamamoto, S. , Sasao, Y. , Sato, S. and Sano, K. , Parallel-Implicit Computation of Three-dimensional Multistage Stator-Rotor Cascade Flows with Condensation, *Proc. 18th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, AIAA Paper 2007-4460, (2007).
29. Yamamoto, S. , Sasao, Y. , Sano, K. , Satsuki, H. , Ishizaka K. , Ooyama, H. , Parallel Computation of Condensate Flows through 2-D and 3-D Multistage Turbine Cascades, *Proc. International Gas Turbine Congress 2007 Tokyo*, (2007), CD-ROM.
30. Roe, P. L. , Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes, *J. Comp. Phys.*, 43 (1981), 357-372.
31. Yamamoto, S. and Daiguji H. , Higher-Order-Accurate Upwind Schemes for Solving the Compressible Euler and Navier-Stokes Equations, *Computers and Fluids*, 22-2/3 (1993), 259-270.
32. Yoon, S. and Jameson, A. , Lower-upper Symmetric-Gauss-Seidel Method for the Euler and Navier-Stokes Equations, *AIAA Journal*, 26 (1988), 1025-1026.
33. Yamamoto, S. , Sasao, Y. , Kato, H. , Satsuki, H. , Ooyama, H. and Ishizaka, K. , Numerical and Experimental Investigations of Unsteady 3-D Wet-steam Flows through Two-stage Stator-rotor Cascade Channels, *ASME Turbo Expo*, ASME Paper GT2010-22796(2010).
34. Peng, D. -Y. and Robinson, D. B. , A New Two-Constant Equation of State, *Ind. Eng. Chem., Fundam*, 15 (1976), 59-64.
35. Yamamoto, S. , Toratani, M. and Sasao, Y. , Preconditioning Method Applied to Near-Critical Carbon-Dioxide Flows in Micro-Channel, *JSME Int. J., Series B*, 48, (2005) , 532-539.
36. A PROGRAM PACKAGE FOR THERMO-PHYSICAL PROPERTIES OF FLUIDS by PROPATH group.
37. Japan Society of Mechanical Engineers, 1999 JSME Steam Tables, (1999).

38. Yamamoto, S., Preconditioning Method for Condensate Fluid and Solid Coupling Problems in General Curvilinear Coordinates, *J. Comp. Phys.*, 207-1(2005), 240-260.
39. Angus, S., et al., International Thermodynamic Table of the Fluid State-3 Carbon Dioxide, IUPAC, 3 (1976)
40. Furusawa, T., Sasao, Y., Sano, K. and Yamamoto, S., Acceleration of Supercritical-fluid Flow Computation using an Accurate Look-up Table of Thermophysical Properties, *Proc. of the 8th Asian Computational Fluid Dynamics Conference*, (2010), CD-ROM.
41. 古澤卓・山本悟, 相変化を伴う超臨界水熱合成の数値シミュレーション, *日本機械学会論文集 B 編*, 764-765(2010), 771-777.
42. Adschiri, T., Kanazawa, K. and Arai, K., Rapid and Continuous Hydrothermal Crystallization of Metal Oxide Particles in Supercritical Water, *Journal of the American Ceramic Society*, 75-4(1992), 1019-1022.