

超臨界流体による熱対流の数値シミュレーション

Simulation of Thermal Convection of Supercritical Fluid

- 小紫 誠子, 日大理工, 東京都千代田区神田駿河台 1-8-14, Email: satoko@math.cst.nihon-u.ac.jp
Satoko Komurasaki, Nihon University, Kanda-Surugadai, Chiyoda-ku, Tokyo 101-8308

Eruption of geothermally heated water from the hydrothermal vent in deep oceans of depth over 2,000 m is numerically simulated. The hydrostatic pressure of water is assumed to be over 200 atmospheres, and temperature of heated water occasionally more than 400°C. Under these conditions, a part of heated water can be in the supercritical state, where the physical properties can change significantly by the temperature. To investigate the mechanism of a supercritical hydrothermal-convection including transition to the subcritical state, the compressible Navier-Stokes equations are solved using a method for the incompressible equations under the assumption that the pressure is almost constant at the hydrostatic pressure and the density is a function of only the temperature. The equations are approximated by the multidirectional finite difference method. For the highly-unsteady-flow computation, KK scheme is used to stabilize the high-accuracy computation. To treat high temperature gradients in the computation, the energy equation is solved which is derived by transformation of thermodynamic variable ϕ into φ using logarithmic function. Solving the equation about φ instead of ϕ allows the sharp boundaries of ϕ to be properly preserved in the computation. As the result of the computation, highly complicated and unsteady flow is obtained.

1. 緒言

海底の広範囲から少しずつ浸み込んだ海水は、地熱によって温められながら海底下を流れて集まり、海底熱水噴出孔から噴出して海に戻る。とくにマグマが海底面近くまで上昇してくる海嶺付近では、極めて高温で活発な熱水活動が観察される。深海の熱水活動域では、熱水とともに噴出する海底地殻内の鉱物類をエネルギー源とする生物群が太古の昔から変わらぬ姿で生息しており、調査が進められている。一方、海底地殻内の鉱物類を溶け込ませた高温熱水は、条件が整った環境下で海底熱水鉱床と言われる鉱床を形成する。この鉱床からは希少金属も見つかっており、今後の開発が期待されている。しかしながら、一般に深海で見られる熱水活動については、その過酷な環境ゆえに未知の領域も多い。

水深 2000m を越える深海底において、とくに海嶺付近では、その温度が 400 °C にも達する高温熱水噴出孔が多数確認されている。水の臨界圧力と臨界温度はそれぞれおよそ 22MPa および 374 °C であり、深海の高温熱水の中にはその臨界点を越えて超臨界状態にあるものもあると考えられる。超臨界流体は、密度や粘性などの物性値が液体と気体の間にあり、流体力学的には両者の中間的な特徴をもつものと考えられる。しかしながら臨界点付近においては、熱力学量は発散し、その他の物性値も大きく変化する。また噴出した超臨界状態の熱水は、低温の深海の水に接し、極めて大きな温度変化を伴いながら亜臨界状態～液体に移行するため、その流れは非常に複雑な構造を持つと考えられる。

本研究の目的は、このような未知なる深海の高温熱水噴出流れを、数値計算によって捉えることである。熱水系での熱などの物質輸送量解析などを目的とした大スケールでの数値解析は行われているが、熱水の局所的な流れの解析を目的とした計算はほとんど行われていない。深海の熱水噴出流の流れ場の解析は、熱水噴出のメカニズムの解明から、深海の海底熱水系の全体像の理解に至るまで、その有用性は大きい。

複雑な流れ場を伴う深海の熱水噴出流であるが、流速は音速に比べて小さく、深海の水圧に比べて流れ場の圧力変化は十分小さいと考えられる。したがって数値計算においては、流体の非圧縮性を仮定し、非圧縮性方程式の解法を用いて圧縮性 NS 方程式を解く。ここでは、密度やその他の物性値は温度のみの関数として扱う。本計算では、計算を高精度かつ安定に進めるべく、KK スキームを適用する。とくに、流れ場において極めて大きな温度勾配が現れるため、熱力学変数の log 関数を用いた変換を行って変形したエネルギー方程式を計算に用いることで、勾配を維持しつつ安定に計算を進める。

2. 計算方法

2.1 支配方程式

支配方程式は圧縮性 NS 方程式およびエネルギー方程式から成る。

$$\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = -\frac{\partial u_j}{\partial x_j} \quad (1)$$

$$\frac{Du_i}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) - g_i \quad (2)$$

$$(g_1, g_2, g_3) = (0, 0, g)$$

$$\frac{DH}{Dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\kappa}{C_p} \frac{\partial H}{\partial x_j} \right). \quad (3)$$

H : 比エンタルピー, κ : 熱伝導率, C_p : 定圧比熱

$T = T(H)$: 温度, $\rho = \rho(T)$: 密度

本計算では、深海の高圧一定の環境でかつ流れが音速に比べて十分遅いことから、圧力の変化は静水圧 p_b に比べて十分小さいものとして、流体を非圧縮性流体として扱う。すなわち、流れ場において密度は温度のみによって変化するものとする。

本計算で扱う流れ場では超臨界状態から亜臨界状態へと相転移が起こることから、エネルギー方程式では、定圧条件の下でエンタルピーを計算し、その値から対応する温度を求める。さらにその温度によって、密度や粘性率などの物性値を定める。Fig. 1 は圧力 23MPa (> 水の臨界圧力) 時の比エンタルピーと温度の関係図である。Fig. 1 においてグラフが水平となる温度は、臨界点を越えた超臨界状態における圧力 23MPa のときの擬似臨界温度 T_{cp} (~651K) となっている。

δp を静水圧 p_b からの変化分 ($p = p_b + \delta p$) とすると、静水圧平衡の式 $\partial p_b / \partial x_3 = -\rho_0 g$ (ρ_0 : 周囲の海水の密度) を用いて式 (2) は以下のように書き換えられる。

$$\frac{Du_i}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \delta p}{\partial x_i} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \frac{\rho_0 - \rho}{\rho} g_i \quad (4)$$

最終的に、以下の無次元化された支配方程式を得る。

$$\tilde{\rho} \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{\tilde{\rho}} \right) = \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial \tilde{x}_j} \quad (5)$$

$$\frac{D\tilde{u}_i}{Dt} = -\frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial \tilde{\delta p}}{\partial \tilde{x}_i} + \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_j} \left(\frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial \tilde{x}_j} \right) + \left(\frac{1}{\tilde{\rho}} - 1 \right) \tilde{g}_i \quad (6)$$

$$\frac{D\tilde{H}}{Dt} = \frac{1}{\tilde{\rho}} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_j} \left(\frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{x}_j} \right) \quad (7)$$

$$u_i = U\tilde{u}_i, H = H_0\tilde{H}, \delta p = (U^2\rho_0)\tilde{\delta p}, 1/\rho = (1/\rho_0) \cdot (1/\tilde{\rho}),$$

$$x_i = L\tilde{x}_i, t = \frac{L}{U}\tilde{t}, g_i = \frac{U^2}{L}\tilde{g}_i, \text{Re} = \frac{UL\rho_0}{\mu}, \text{Pr} = \frac{\mu}{\kappa/C_p}$$

の付いた量は無次元量であるが、以降は $\tilde{\cdot}$ を省略する。また、 $\tilde{\delta p}$ も $\tilde{\delta}$ を省略して p を用いて表す。 μ, κ および C_p は温度の関数であるため、レイノルズ数 Re やプラントル数 Pr も温度の関数となる。

支配方程式は非圧縮性方程式を解くときと同様に、projection法を用いて圧力のポアソン方程式(8)を導いて解く。

$$\text{div} \frac{1}{\rho} \text{grad} p = F + \frac{1}{\Delta t} \left(\text{div}^* \mathbf{u} - \rho \frac{D^*}{Dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) \right) \quad (8)$$

$$F = \text{div} \left[-u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\text{Re}} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{1}{\rho} - 1 \right) g_i \right]$$

式(8)において*付きの演算子が掛かる項は、適当な方法で離散化された近似式を表し、それらを含む右辺 $1/\Delta t$ の項は連続の式(5)を近似した $\left[\text{div}^* \mathbf{u} - \rho \frac{D^*}{Dt} \left(\frac{1}{\rho} \right) \right]$ を常に小さな値にとどめておくための補正項である。

これらの支配方程式は多方向差分によって離散化する。また高レイノルズ数流れの計算を安定に進めるために、NS方程式(6)の移流項には3次精度上流差分スキームのひとつであるKKスキームを採用する。時間積分は2次精度クランク-ニコルソン陰解法を用いて行う。

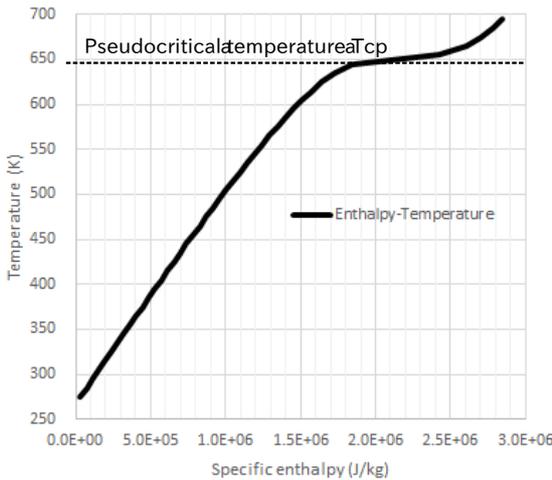


Fig. 1: Enthalpy-temperature diagram for water at $P = 23$ MPa.

2.2 エネルギー方程式の変換

本計算では高温差を伴う高レイノルズ数流れを扱うが、このような非圧縮性流れの計算においては高精度かつ計算を安定的に進めることが可能な計算スキームが不可欠である。本計算では物理粘性と同じ形の数値粘性を

持つ1次精度上流差分を用いずに、高精度スキームであるKKスキームを用いて高レイノルズ数流れの安定な計算を実現するが、流れ場における超臨界-亜臨界状態の境界面を高精度で捉え、計算上の安定性確保のため、本計算ではエネルギー方程式(7)で扱うエンタルピー H を以下のEq.(9)を用いて $h = h(H)$ に変換して h について解く。Yabeら⁽³⁾は \tan 関数を用いた変換を行っているが、本計算では結果として現れる余計な関数の計算時間を省く目的で、変換式Eq.(9)を用いる。

$$h = \frac{1}{2} (\log(\alpha + H) - \log(\alpha - H)) \quad (9)$$

$$(\alpha \geq 1, \quad -\alpha < H < \alpha)$$

ゆえに、 $\frac{d^2 H}{dh^2}$ を求めると

$$\frac{d^2 H}{dh^2} = -\frac{2H}{\alpha} \cdot \frac{dH}{dh}$$

となるので、

$$\frac{d^2 H}{dh^2} \Big/ \frac{dH}{dh} = -2 \tanh h \approx -2 \text{sgnh} \quad (10)$$

$$\text{ただし} \quad \text{sgnh} \triangleq \begin{cases} 1 & (h > 0) \\ 0 & (h = 0) \\ -1 & (h < 0) \end{cases}$$

一方、エネルギー方程式(7)は以下のように h についての方程式に書き換えられる。

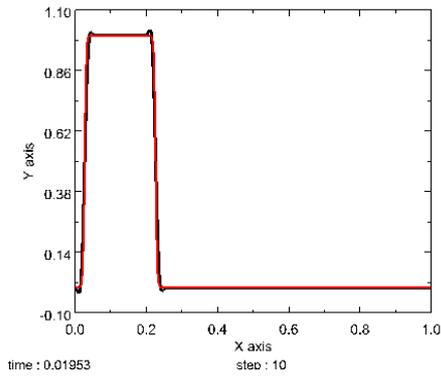
$$\frac{Dh}{Dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{d^2 H}{dh^2} \Big/ \frac{dH}{dh} \right) \frac{1}{\rho \cdot \text{Re} \cdot \text{Pr}} \left[\left(\frac{\partial h}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial x_3} \right)^2 \right]$$

式(10)を使うと、方程式(11)が得られる。

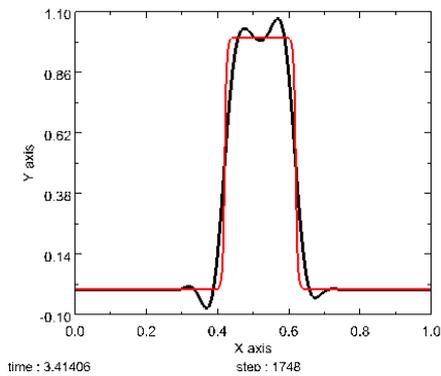
$$\frac{Dh}{Dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\text{Re} \cdot \text{Pr}} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + \frac{-2 \text{sgnh}}{\rho \cdot \text{Re} \cdot \text{Pr}} \left[\left(\frac{\partial h}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial h}{\partial x_3} \right)^2 \right] \quad (11)$$

本計算では、 $\alpha = 1$ とにおいて、エンタルピー H を $-0.999 < H < 0.999$ の範囲に正規化してから変換した。

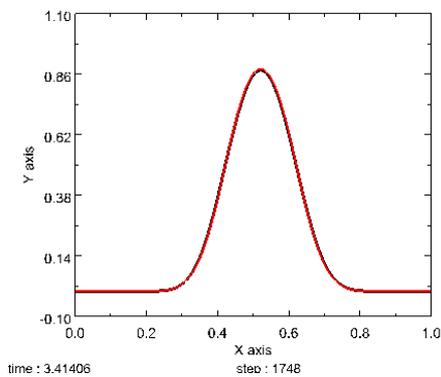
Fig.2は1次元移流拡散方程式の数値計算において、元の方程式にKKスキームを適用した場合(黒線)と、方程式を式(11)の形に変換してKKスキームを適用(赤線)した場合の計算結果である。Fig.2(a)は初期値として与えられた矩形波を示しており、拡散係数=0(移流方程式の解)の場合をFig.2(b)に、拡散係数を与えた場合をFig.2(c)に、ある程度時間が経過したときの結果をそれぞれ示している。Fig.2から、方程式を式(11)の形に変換してから計算を行った場合は極めて良好な結果が得られることを示している。なお、方程式を式(11)の形に変換して計算すること自体には数値粘性を発生させるメカニズムはなく、高周波成分を完全に取り除くことはできないため、KKスキーム等の高精度スキームと組み合わせる必要がある。また、正規化された H が $\pm\alpha$ に近いところでは計算上の高周波振動が縮小されるため良好な結果を得られるが、 $\pm\alpha$ から離れる(例えば0付近など)とその限りではない。



(a) : Initial rectangular wave.



(b) : Computation of an advection equation.



(c) : Computation of an advection diffusion equation.

Fig. 2 : Computation of an advection diffusion equation using the translation Eq.(9).

2.3 計算の試行

本計算で扱う深海の超臨界熱水噴出流は、高圧一定の低温の海中に臨界温度を超える高温熱水が噴出する現象であり、実験室内での再現は極めて困難である。そこで、比較的臨界点が低い二酸化炭素を臨界圧力付近の高圧の状態にした上で、ホットワイヤーを挿入して超臨界状態への移行を伴う自然対流を再現した実験⁽²⁾を参考に、同様の条件で本計算スキームを用いた計算を行った。

Fig. 3は、Tambaら⁽²⁾の実験で観察された、二酸化炭素中のホットワイヤー（プラチナ、直径0.1mm）から発生する熱対流の流れ場の様子である。ホットワイヤー表面の温度 T_w 、周囲の流体の温度 T_b 、圧力 p 、二酸化炭素の臨界温度 $T_c(=304.21\text{K})$ および臨界圧力 $p_c(=7.38\text{MPa})$ を用いて、 $T_w^* = T_w/T_c$ 、 $T_b^* = T_b/T_c$ 、 $p^{ast} = p/p_c$ とすると、Fig. 3では $p^*=1.016$ 、 $T_b^*=0.9921$ 、 $T_w^*=2.307$ であり、同様の条件で計算を行った。Fig. 4は計算結果を、渦

の存在を示す速度勾配テンソルの第2不変量 Q の正值の等値面を表示したものである。ホットワイヤー表面では、流れに早期に非対称性を与えるため、ワイヤー周方向およびスパン方向に周期的に局所的に温度が低くなるように境界条件を与えており、その温度分布も表示している。圧力が臨界圧力より高く、とくにワイヤー温度が臨界温度を大きく上回る本ケースでは、ホットワイヤーから少し層流状態で上昇し、上方で乱流となる熱対流の特徴を、計算においてもある程度捉えられていると思われる。

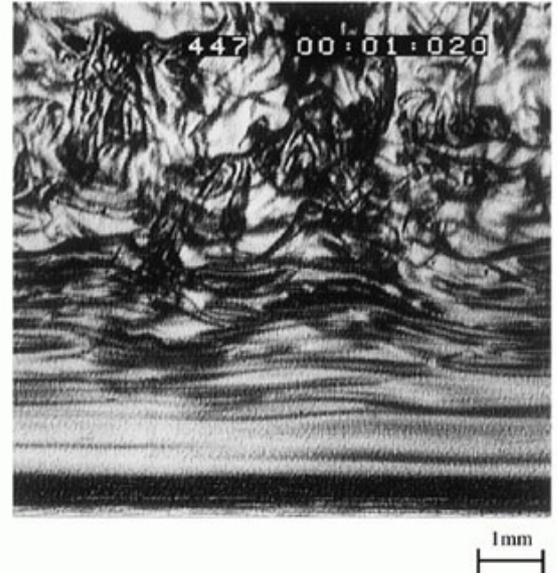


Fig. 3 : Experiment of thermal convection using supercritical carbon dioxide⁽²⁾.

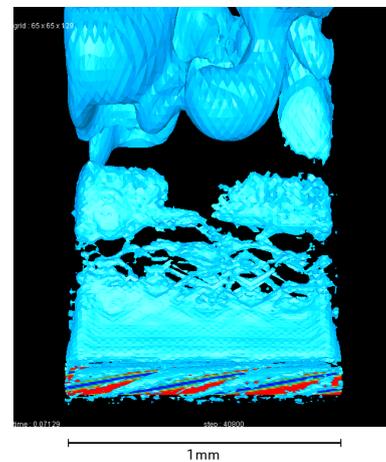


Fig. 4 : Computation using the present scheme for thermal convection in supercritical carbon dioxide.

2.4 熱水噴出流の境界条件

地殻内で熱せられた水は熱水噴出孔を通して海洋に排出され、一方海水は海底から再び地殻内へ染み込んでいく。このように海洋と海底を巡る水の大循環では、海底下においても十分な量の水が存在し、それが熱せられて熱水噴出孔から噴出していく。

本計算では、熱水噴出孔から噴出する熱水の流れの構造を捉えることを目的としているため、噴出孔を中心とした比較的小さいスケールの領域で計算を行う。Fig. 5は、本計算で用いた計算領域を示したものである。下部に熱水プールを配置し、海底に見立てた水平板で海洋と仕切り、中心に熱水噴出孔として直径5cmの円形孔を開けている。計算格子は熱水噴出孔に格子点が集まるように分割した

不等間隔直交格子を用い、格子分割数は $192 \times 192 \times 160$ とした。また、熱水プールへは底面および横の壁面より 1m/s の速度で強制的に熱水を流入させている。計算領域内の流体は、上部および海底面より上の側方境界から流出する。

熱水噴出孔は水深 2000m 以上の深海海底にあるものとして、噴出孔付近の水圧を $p_0 = 23\text{MPa}$ とする。これは水の臨界圧力 $p_c = 22.1\text{MPa}$ を越える値である。また、海水温度は $T_0 = 275\text{K}$ とし、熱水の温度は、擬臨界温度 $T_{pc} = 651\text{K}$ より高い $T_M = 675\text{K}$ とする。熱水は超臨界状態で噴出し、周囲の海水によって冷やされて液体に転移することになる。Fig. 6 に温度と圧力による水の状態遷移図を示す。

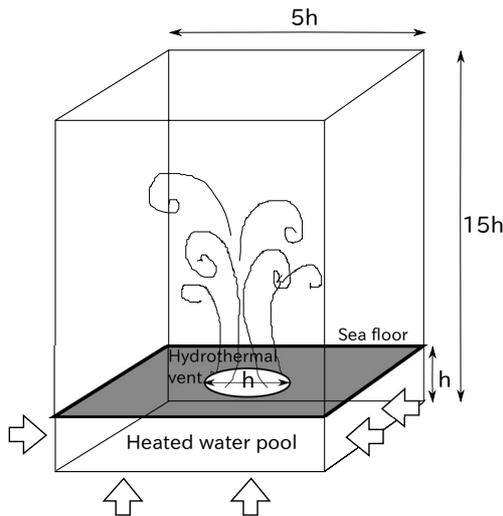


Fig. 5 : Computational domain for hydrothermal convection.

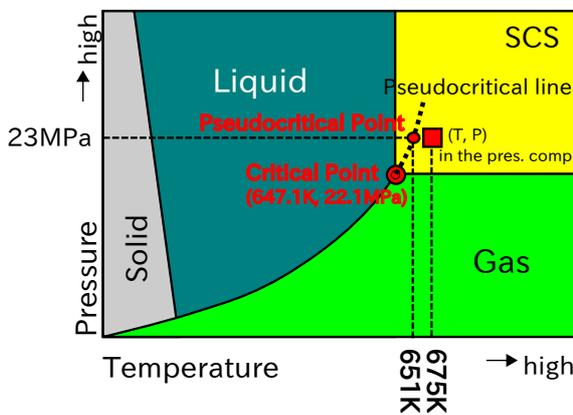


Fig. 6 : Pressure-temperature phase diagram of water.

2.5 液体-超臨界状態の物性

本計算では低温の海水から臨界温度を越える高温熱水までの、極めて大きな温度差を伴う熱対流を扱うため、密度などの物理量が流れ場において大きく変化する。Fig. 7 は圧力 23MPa 下での水の密度、動粘度、熱拡散係数と温度との関係のグラフである。臨界温度付近では僅かな温度変化で密度などの物理量が大きく変化する。

3. 計算結果

水深 2000m 以上の深海の高温熱水噴出を想定した、超臨界状態から噴出後に亜臨界状態へ転移する熱水の 3 次元計算の結果を Fig. 8 に示す。Fig. 8 は、噴出開始後の

初期からの流れの時間発展の様子を 290K の等温面で示したものである。各図間は同じ時間間隔となっており、とくに初期において上昇流が速く、ブルームが短時間で発達する様子が示されている。また、初期の早い段階で流れが乱れ、複雑な流体構造となっていることもわかる。

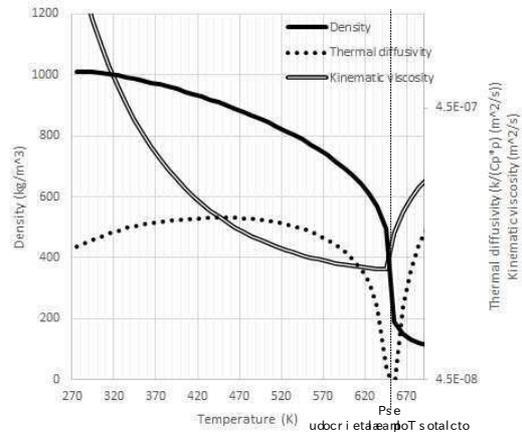


Fig. 7 : Physical properties depending on temperature for water at $P = 23\text{MPa}$.

4. 結言

深海の、亜臨界状態～液体に移行する超臨界熱水噴出流れの 3 次元計算を行った。水の臨界点を越える高压高温の環境で、熱水は超臨界状態で低温の海洋中に噴出し、急冷されて亜臨界状態～液体に転移する。このような物性値の大きな変化を伴う流れ場を捉えるために、エネルギー方程式における熱力学変数の \log 関数を用いた変換など、スキームを新たに構築し、安定的に高精度で計算を進めた。本計算において、初期の段階から多くの縦渦構造を伴い大きく変化する超臨界熱水噴出時の複雑な流れが再現された。

5. 謝辞

本研究の一部は文部科学省科研費 (26610119) の助成を受けて実施された。

参考文献

- (1) Komurasaki, S., "A Hydrothermal Convective Flow at Extremely High Temperature," Proc. 7th Int. Conf. on Computational Fluid Dynamics, (2012), ICCFD7-2012-3001.
- (2) Tamba, J., Takahashi, T., Ohara, T. and Aihara, T., "Transition from boiling to free convection in supercritical fluid," Experimental Thermal and Fluid Science 17 (1998), pp. 248-255.
- (3) Yabe, T. and Xiao, F., "Description of complex and sharp interface during shock wave interaction with liquid drop," J. Phys. Soc. Jpn. Letters, 62 (1993), pp. 2537-2540.
- (4) Kawamura, T. and Kuwahara, K., "Computation of high Reynolds number flow around a circular cylinder with surface roughness," AIAA paper (1984), 84-0340.
- (5) Suito, H., Ishii, K. and Kuwahara, K., "Simulation of Dynamic Stall by Multi-Directional Finite Difference Method," AIAA paper (1995), 95-2264.
- (6) Hahne, E. and Neumann, R. T., "Boiling-like phenomena in free-convection heat transfer at supercritical pressures," Heat and Mass Transfer, 15 (1981), pp. 171-180.

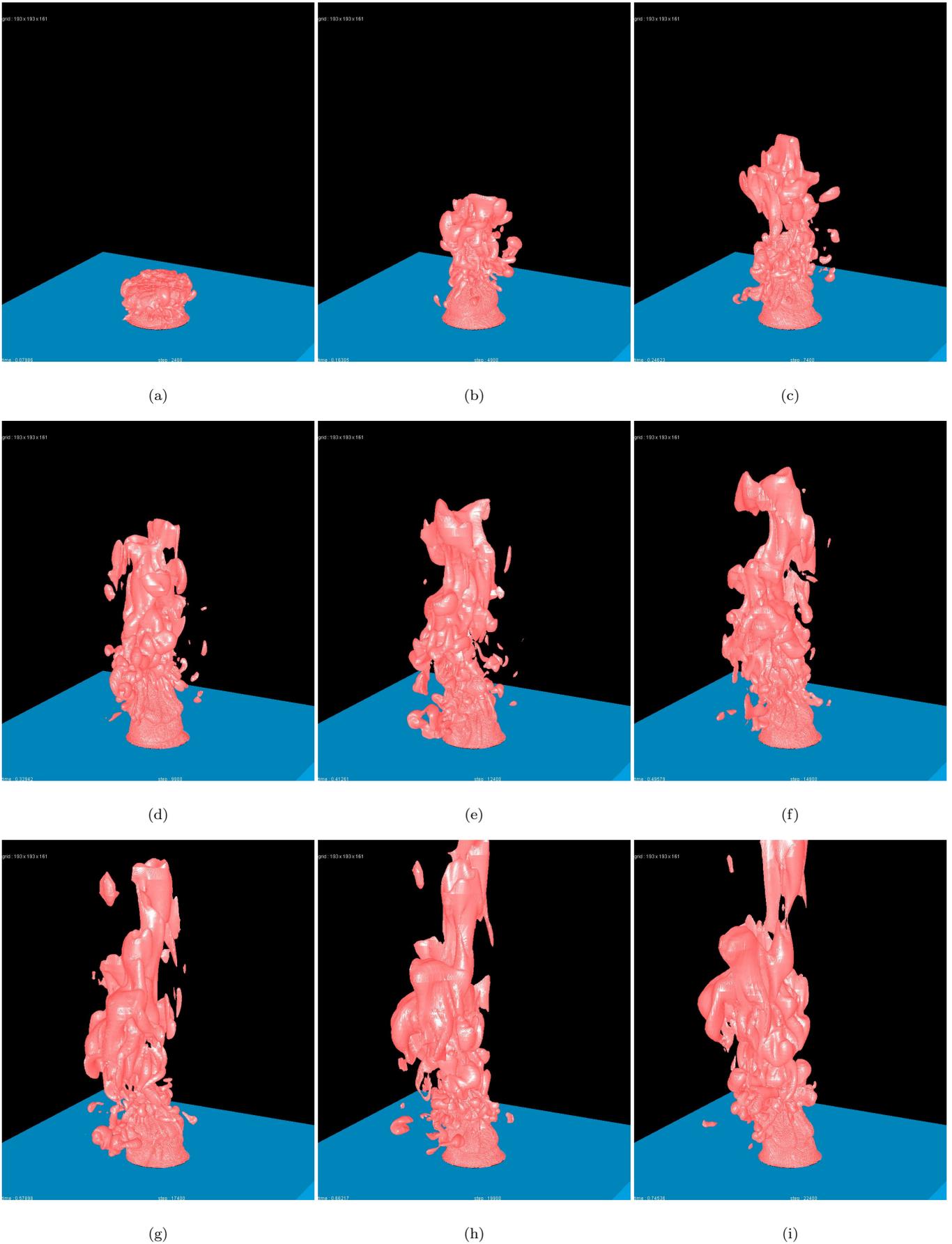


Fig. 8 : Time development of temperature field visualized by isothermal surface of 290K.