

セル形状が浮力流れに与える影響の OpenFOAM による検討

Numerical Study of Buoyant Flow Using Different Cell Shapes by OpenFOAM

- 石垣将宏, 原子力機構, 茨城県那珂郡東海村白方白根 2-4, E-mail : ishigaki.masahiro@jaea.go.jp
安部諭, 原子力機構, 茨城県那珂郡東海村白方白根 2-4, E-mail : abe.satoshi@jaea.go.jp
柴本泰照, 原子力機構, 茨城県那珂郡東海村白方白根 2-4, E-mail : sibamoto.yasuteru@jaea.go.jp
与能本泰介, 原子力機構, 茨城県那珂郡東海村白方白根 2-4, E-mail : yonomoto.taisuke@jaea.go.jp
Masahiro ISHIGAKI, JAEA, 2-4, Shirakata-Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki, 319-1195, Japan
Satoshi ABE, JAEA, 2-4, Shirakata-Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki, 319-1195, Japan
Yasuteru SIBAMOTO, JAEA, 2-4, Shirakata-Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki, 319-1195, Japan
Taisuke YONOMOTO, JAEA, 2-4, Shirakata-Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki, 319-1195, Japan

In this research we discussed influence by cell shapes of numerical mesh for buoyant flows. Numerical simulations of buoyant jet were analyzed using hexahedral mesh and tetrahedral mesh by open source CFD code "OpenFOAM". Symmetry of jet using tetrahedral mesh collapsed more rapidly than that by hexahedral mesh. We modified the existing solver in OpenFOAM in order to reduce the influence by non-orthogonality of mesh. The influence by non-orthogonality of mesh can be reduced by modification of pressure equation so as not to include the Laplacian term of density.

1. 研究背景

東京電力福島第一原子力発電所の事故後に整備された新規規制基準ならびに継続的な安全性向上に関する規制要求等を踏まえ、日本原子力研究開発機構 (JAEA) では、シビアアクシデント (重大事故) 時の格納容器熱水力挙動に着目した ROSA-SA プロジェクト⁽¹⁾ を実施している。シビアアクシデント時には、水・ジルコニウム反応で発生した水素により爆燃・爆轟が生じ、原子炉格納容器等の健全性が脅かされる可能性がある。この現象を把握するには、格納容器内の水素挙動や分布を詳細に理解する必要がある。このため ROSA-SA プロジェクトでは、実験および Computational Fluid Dynamics (CFD) 解析を用いた研究を行っている。

格納容器内の CFD 解析の一環として、スイス PSI (Paul Scherrer Institut) の大型格納容器実験装置 PANDA を用いた国際協同ベンチマークテストが行われた⁽²⁾。ベンチマークの対象となった実験はヘリウム・空気の成層中へわずかにヘリウムを含んだ空気をジェットとして貫入させる実験であった。JAEA もこのベンチマークテストに参加し、オープンソース CFD コード OpenFOAM を用いた解析の結果を報告している⁽³⁾。このベンチマークテストでは実験結果が公表されない段階でのブラインド解析が行われ、実験結果公表後のポスト解析が各参加機関により行われた。JAEA の解析では、計算メッシュとして、ブラインド解析ではテトラメッシュ (四面体要素) を適用し、ポスト解析ではヘキサメッシュ (六面体要素) を用いた。解析では同様の解析ソルバ、乱流モデルを用い、メッシュの要素形状のみを変更したにも関わらず、ガス濃度の時間変化に大きな差が生じた。テトラメッシュを用いた結果は実験結果と大きく異なる結果を示したが、ヘキサメッシュでは実験結果とよく一致する結果となった⁽³⁾。

そこで本研究では、密度成層流、熱対流や気液二相流のような浮力が支配的な流れに対して、メッシュのセル形状が与える影響に着目し、CFD コード OpenFOAM⁽⁴⁾ による検討を行った⁽⁵⁾。セル形状の影響が出る原因としてメッシュの非直交性の差が考えられるので、まずはじめに OpenFOAM に実装されている非直交補正⁽⁶⁾ の影響について検討した。次に OpenFOAM の既存の熱流体ソルバを改良し、メッシュの非直交性の影響を緩和するソルバを構築し、解析を行った。解析には Boussinesq 近似を用いるソルバおよび低 Mach 数近似を用いるソルバを適用した。

2. オープンソース CFD コード OpenFOAM

格納容器内の流動に対して相変化は重要な影響をもたらす。一般に、汎用の CFD コードには相変化等のモデルは含まれておらず、ユーザー関数等を用いてモデルを組み込む必要がある。このため、JAEA ではコードの拡張性等を考慮し、オープンソース OpenFOAM を用いた解析を行っている。

OpenFOAM は ESI グループの OpenCFD 社により開発が行われているオープンソースコードであり、ソースコードの閲覧、改良が可能となっている。特徴として、

- (1) 多数の乱流モデル (RANS, LES) が組み込まれている。
- (2) 熱流動解析, 燃焼解析, 混相流解析等のソルバが既存ソルバとして含まれている。
- (3) 数値解析には有限体積法を用いており、任意形状 (テトラメッシュ, ヘキサメッシュ, ポリヘドラルメッシュ等) に対して流動解析を行える。

などの点が挙げられる。

3. Boussinesq 近似を用いた数値解析

OpenFOAM の熱流体解析ソルバには Boussinesq 近似を用いたソルバと低 Mach 数近似を用いたソルバが実装されている。ここでは Boussinesq 近似ソルバについて述べる。

3.1 OpenFOAM の既存ソルバ (buoyantBoussinesqPimpleFoam) の解法

基礎方程式を以下に示す。

$$\rho_{ref} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

ここで \mathbf{u} は流速ベクトル, p は圧力, ρ は密度, ρ_{ref} は基準密度である。 \mathbf{g} は重力加速度である。密度が温度のみに依存するとして、Boussinesq 近似を行う。 β は体膨張係数, T_{ref} は基準温度である。

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla \left(\frac{p}{\rho_{ref}} \right) + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + [1 - \beta(T - T_{ref})] \mathbf{g} \quad (3)$$

ここで $\rho_k = 1 - \beta(T - T_{ref})$ として、さらに変形する。また p/ρ_{ref} を p と書き直す。

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla (p - \rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) + \nu \nabla^2 \mathbf{u} - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho_k \quad (4)$$

\mathbf{x} は位置ベクトルである。圧力の解を精度よく求めるために、このような式変形を行うと考えられる。

OpenFOAM では式 (2), (4) を基礎方程式として、PISO 法⁽⁷⁾ を元にしてソルバを構築している。以下で OpenFOAM の既存ソルバの概要について述べる。

式 (4) の流速に関する部分のみを離散化する。

$$A_p \mathbf{u}_p + \sum_n A_n \mathbf{u}_n = -\nabla (p - \rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho_k \quad (5)$$

添字 p は着目するセル, n はその周囲セルの量であることを示す。 \mathbf{u}_p について整理すると,

$$\mathbf{u}_p = \frac{H}{A_p} - \frac{1}{A_p} \nabla (p - \rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) - \frac{1}{A_p} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho_k \quad (6)$$

$H = -\sum_n A_n \mathbf{u}_n$ とした。式 (2) から以下の圧力の Poisson 方程式が得られる。

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{A_p} \nabla (p - \rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \right) = \nabla \cdot \left(\frac{H}{A_p} - \frac{1}{A_p} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho_k \right) \quad (7)$$

OpenFOAM では $\tilde{\mathbf{u}}_p = H/A_p$ により予測速度を求め、式 (7) から圧力を求め、式 (6) で速度の修正を行う。これに温度の輸送方程式を連立させることで解を求める。

3.2 ソルバの改良

式 (7) には密度 (浮力項) の Laplacian 項が含まれる。メッシュの直交性が悪く、メッシュ内の 2 つのセル中心を結ぶベクトルとセル間のフェイスが直交しない場合、Laplacian 項の計算精度が低くなる可能性がある。これは有限体積法では Laplacian の評価において、セル間のフェイスにおける勾配ベクトルの補間量を計算する必要があるためである。特に浮力流れでは浮力項は流れに大きな影響を及ぼすので、この密度の Laplacian 項を正確に計算する必要があると考えられる。OpenFOAM では非直交なメッシュの影響を抑えるために、非直交補正の処理を Laplacian 項の計算に対して行えるようになっていく。

ここではメッシュの直交性が悪い場合においても、非直交補正を行わずに圧力の Poisson 方程式を高精度に解けるようにするため、圧力の Poisson 方程式に密度の Laplacian 項が含まれないように定式化することを考える。基準位置を \mathbf{x}_{ref} , 圧力変動を p' として、圧力 p を以下のように置き換える。

$$p = p' + \rho_{ref} \mathbf{g} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{ref}) \quad (8)$$

$$\nabla p = \nabla p' + \rho_{ref} \mathbf{g} \quad (9)$$

これを式 (1) に代入すると

$$\rho_{ref} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) \right) = -\nabla p' + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + (\rho - \rho_{ref}) \mathbf{g} \quad (10)$$

ここで Boussinesq 近似を適用すると以下の式が得られる。

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\mathbf{u}) = -\nabla p' + \nu \nabla^2 \mathbf{u} - \beta(T - T_{ref}) \mathbf{g} \quad (11)$$

p'/ρ_{ref} を p' と書き直した。先ほどと同様にして圧力の Poisson 方程式を求めると,

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{A_p} \nabla p' \right) = \nabla \cdot \left(\frac{\rho_k \mathbf{g} - \sum_n A_n \mathbf{u}_n}{A_p} \right) \quad (12)$$

ここで、 $\rho_k = -\beta(T - T_{ref})$ である。上式から分かるようにこの場合には密度の Laplacian 項が含まれていない。この圧力の Poisson 方程式を用いたソルバを構築し、既存ソルバと比較を行った。

4. 低 Mach 数近似を用いた数値解析

密度変化が大きい場合には Boussinesq 近似は適用できない。そのため密度変化が大きく、代表速度が音速に対して小さい場合には、低 Mach 数近似⁽⁸⁾ が適用されることが多い。ここでは低 Mach 数近似を用いたソルバについて述べる。

4.1 OpenFOAM の既存ソルバ (buoyantPimpleFoam) の解法

基礎方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (13)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{3} \mu \nabla D + \rho \mathbf{g} \quad (14)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h \mathbf{u}) = \nabla \cdot (\alpha \nabla h) + \frac{\partial p}{\partial t} \quad (15)$$

ここで h はエンタルピー, $D = \nabla \cdot \mathbf{u}$ である。Boussinesq 近似の場合と同様にして、式 (14) を以下のように変形する。

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla (p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \quad (16)$$

$$+ \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{3} \mu \nabla D - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho \quad (17)$$

さらに流速に関する部分を離散化し、着目するセル p における流速 \mathbf{u}_p について整理すると

$$\frac{A_p}{\rho_p} \rho_p \mathbf{u}_p + \sum_n A_n \mathbf{u}_n = -\nabla (p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) - (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho \quad (18)$$

$$\rho_p \mathbf{u}_p = \rho_p \frac{H}{A_p} - \frac{\rho_p}{A_p} \nabla (p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) - \frac{\rho_p}{A_p} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho \quad (19)$$

$H = -\sum_n A_n \mathbf{u}_n$ とした。式 (19) および (13) より以下の圧力の方程式が得られる。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left(\frac{\rho_p}{A_p} \nabla (p - \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \right) \\ = \nabla \cdot \left(\rho_p \frac{H}{A_p} - \frac{\rho_p}{A_p} (\mathbf{g} \cdot \mathbf{x}) \nabla \rho \right) + \frac{\partial \rho}{\partial t} \end{aligned} \quad (20)$$

$\tilde{u}_p = H/A_p$ により予測速度を求め、上式の圧力から速度を修正する。これに気体の状態方程式と式 (15) を連立させることで密度と温度を更新し、解を求める。

4.2 ソルバの改良

式 (20) から分かるように低 Mach 数近似のソルバにおいても密度の Laplacian 項が含まれる。ここでも圧力の方程式に密度の Laplacian 項が含まれないようにすることを考える。圧力 p を圧力変動 p' および空間的に一様で時間変動する密度 ρ_c を用いて以下のように表す。 ρ_c は実際の解析では計算領域内の瞬時の密度の最大値を取るものとする。

$$p = p' + \rho_c \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \quad (21)$$

式 (21) を式 (14) に代入すると

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p' + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{3} \mu \nabla D + (\rho - \rho_c) \mathbf{g} \quad (22)$$

上式の流速に関する部分を離散化し、整理する。

$$\frac{A_p}{\rho_p} \rho_p \mathbf{u}_p + \sum_n A_n \mathbf{u}_n = -\nabla p' + (\rho - \rho_c) \mathbf{g} \quad (23)$$

$$\rho_p \mathbf{u}_p = \rho_p \frac{H}{A_p} - \frac{\rho_p}{A_p} \nabla p' \quad (24)$$

$H = (\rho - \rho_c) \mathbf{g} - \sum_n A_n \mathbf{u}_n$ とした。式 (13), (24) から圧力の方程式が得られる。

$$\nabla \cdot \left(\frac{\rho_p}{A_p} \nabla p' \right) = \nabla \cdot \left(\rho_p \frac{H}{A_p} \right) + \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (25)$$

この圧力の方程式を用いたソルバも作成し、比較を行った。

5. 試験解析

5.1 問題設定

試験解析として、2次元領域内での温度一様の流体中への加熱ジェットを考える。Fig.1 に計算領域の模式図を示す。水平方向に x 軸、鉛直方向に y 軸を取り、 $-y$ 方向に $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ の重力加速度がはたらくとする。容器の大きさは x 方向に 7m, y 方向に 14m とし、容器底面中央に幅 1m の流入口と底面両端に幅 1m の流出口を設ける。

容器内の初期温度は 300K とし、流入温度は 310K とした。流入速度は 0.1m/s とした。流体の密度は 300K の空気と同等とし、動粘性係数は $10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ とした。Prandtl 数は 0.7 とした。流体は理想気体であるとする。流入速度と流入口の幅から得られる Reynolds 数は 1000 である。

5.2 数値解析手法

壁面ではすべりなし、断熱条件を課した。圧力の境界条件は浮力を考慮して、 $\nabla p \cdot \mathbf{n} = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}$ とした (Boussinesq 近似を用いる場合は $\nabla p \cdot \mathbf{n} = \rho_k \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}$ を境界条件とした)。ここで \mathbf{n} は壁面に対する単位法線ベクトルである。流入部では流速固定とし、圧力は $\nabla p \cdot \mathbf{n} = \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{n}$ の条件を課した。流出部では圧力一定とし、速度勾配を 0 とした。

セル形状の影響を見るため、本解析では乱流モデルを適用しない。時間発展には Euler 陰解法を用いた。勾配項の離散化には linear, 発散項の離散化には 1 次精度の upwind スキームを用いた。

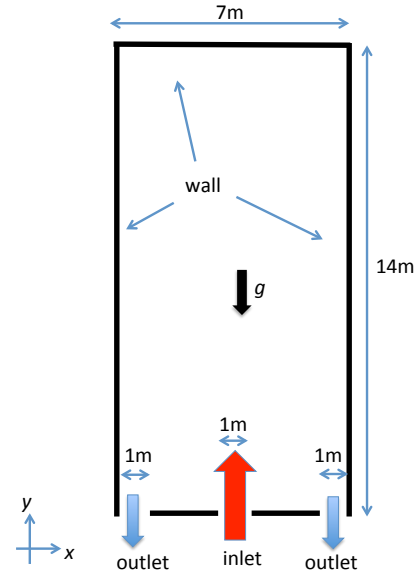


Fig. 1: Schematics of geometry for thermal jet

5.3 計算メッシュ

ANSYS 社のメッシュャである GAMBIT により計算メッシュを生成した。格子幅の代表長さを 0.02m とし、ヘキサメッシュおよびテトラメッシュ (2次元計算なので実際には、 x, y 方向に三角形セルが並び、奥行き方向に 1セルだけあるプリズムメッシュ。便宜上、テトラメッシュと呼ぶことにする) を作成した。格子幅の代表長さを 0.01m としたヘキサメッシュも作成し、解析を行った。テトラメッシュは流出入口での流れが乱れないようにするため、境界面上に境界層を 3 層張った。解析に用いたメッシュのセル数、non-orthogonality を Tab. 1 に示す。non-orthogonality の値は、OpenFOAM のメッシュ品質チェックユーティリティである checkMesh により求めた。

Tab. 1: Characteristics of mesh

mesh type	number of cells	non-orthogonality	
		max	ave
hexahedral mesh	245k (350×700)	0.0	0.0
tetrahedral mesh	545k 980k	12.8	3.0
fine hexahedral mesh	(700×1400)	0.0	0.0

5.4 Boussinesq 近似を用いた解析

Boussinesq 近似を用いて解析を行った結果について述べる。Figs.2-4 に、非直交補正を適用せず、98 万セルのヘキサメッシュ、24.5 万セルのヘキサメッシュ、テトラメッシュを用いた解析結果を示す。ジェットの流入開始から 10 秒後と 20 秒後の温度分布である。98 万セルのヘキサメッシュの結果と比較して、24.5 万セルのヘキサメッシュの結果はジェットの対称性を維持できていることが分かる。一方、テトラメッシュの結果は 10 秒の時点でジェットの対称性が崩れており、20 秒の時点での分布は他の結果と大きく異なっている。

つぎに Fig.5 に、OpenFOAM に実装されている非直

交補正を適用し、テトラメッシュを用いた解析結果を示す。Fig.4 と比較して、非直交補正によりジェット対称性を 20 秒の時点でも維持するようになっていることが分かる。さらに Fig.6 に改良型ソルバを用いて、非直交補正を適用せず、テトラメッシュによって解析した結果を示す。非直交補正を適用していないが、密度の Laplacian 項の計算を含んでいないため、ジェット対称性を維持するようになっていることが分かる。

5.5 低 Mach 数近似を用いた解析

低 Mach 数近似を用いた改良型ソルバを用いて、24.5 万セルのヘキサメッシュおよびテトラメッシュによって解析を行った結果を Figs.7, 8 に示す。低 Mach 数近似の解析においても、解析条件が Boussinesq 近似を用いた解析と同等となるように物性値を設定した。また非直交補正は適用していない。ヘキサメッシュを用いた場合の結果は Fig.3 の Boussinesq 近似を用いた場合の結果とよく一致していることが分かる。また、テトラメッシュを用いた場合でも、20 秒の時点でジェット対称性を維持しており、メッシュの非直交性の影響を緩和できていることが分かる。

6. まとめと今後の課題

本研究ではメッシュのセル形状が浮力流れに与える影響を OpenFOAM を用いて検討した。また OpenFOAM に実装されている熱流体ソルバの詳細を検討し、メッシュの非直交性の影響を緩和するソルバを構築した。改良したソルバは、今回試験解析を行った温度差の小さい場合ではメッシュの非直交性の影響を緩和する結果を示した。今後はより広い条件での解析を行い、実験値との比較を行い、セル形状の与える影響をより詳細に検討する必要がある。例えば、Boussinesq 近似が適用できない温度差が大きく、密度差が大きいような条件での解析が必要だと考えられる。

参考文献

- (1) <http://www-pub.iaea.org/iaeameetings/cn235p/Session3/S3-5-Taisuke-Yonomoto.pdf>
- (2) M. Andreani, A. Badillo, and R. Kapulla, "Synthesis of the OECD/NEA-PSI CFD Benchmark Exercise", CFD4NRS-5 OECD/NEA & IAEA Workshop, (2014), September 9-11, Zurich.
- (3) S. Abe, M. Ishigaki, Y. Sibamoto, and T. Yonomoto, "RANS analyses on erosion behavior of density stratification consisted of heliumair mixture gas by a low momentum vertical buoyant jet in the PANDA test facility, the third international benchmark exercise (IBÉ-3)", Nucl. Eng. Des., 289, (2015), pp. 231-239.
- (4) OpenFOAM, <http://www.openfoam.com>
- (5) ここでは示さないが、OpenFOAM を用いた予備的な解析ではセル形状の影響は浮力がない流れに対してはほとんど見られなかった。
- (6) H. Jasak, "Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows", PhD thesis of the University of London, (1996).
- (7) R.I. Issa, "Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting", J. Comp. Phys., 62, (1985), pp. 40-65.
- (8) R.G. Rehm and H.R. Baum, "The Equations of Motion for Thermally Driven, Buoyant Flows", J. Res. Nat. Bureau Stand., 83, (1978), pp. 297-308.

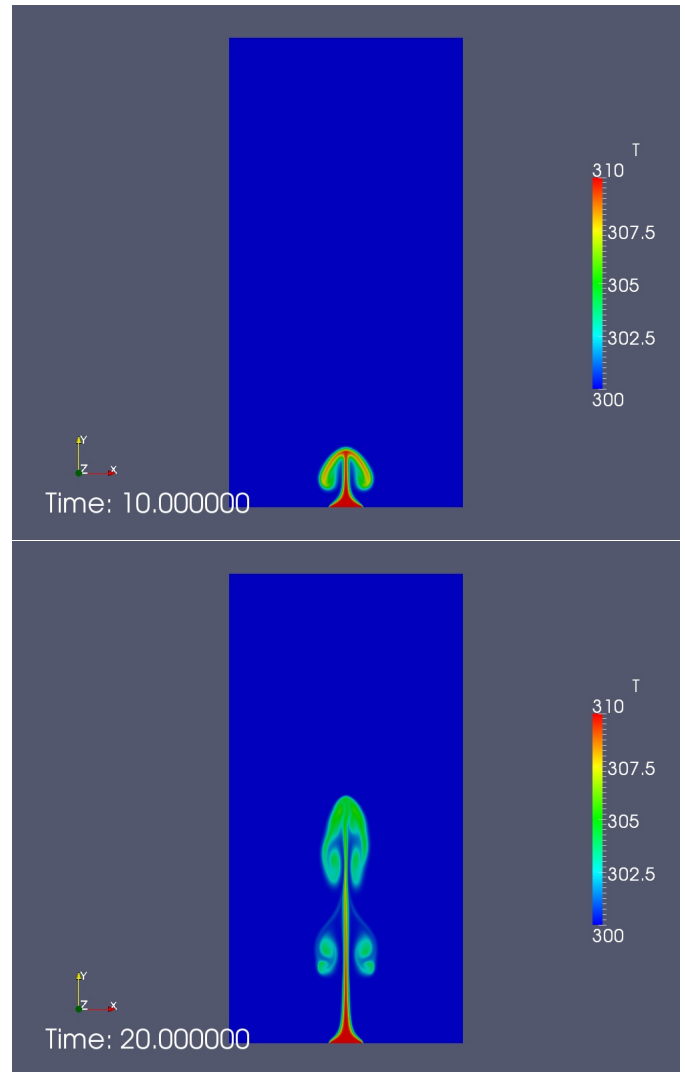


Fig. 2: Temperature field using fine hexahedral mesh (980k cells) without non-orthogonality correction

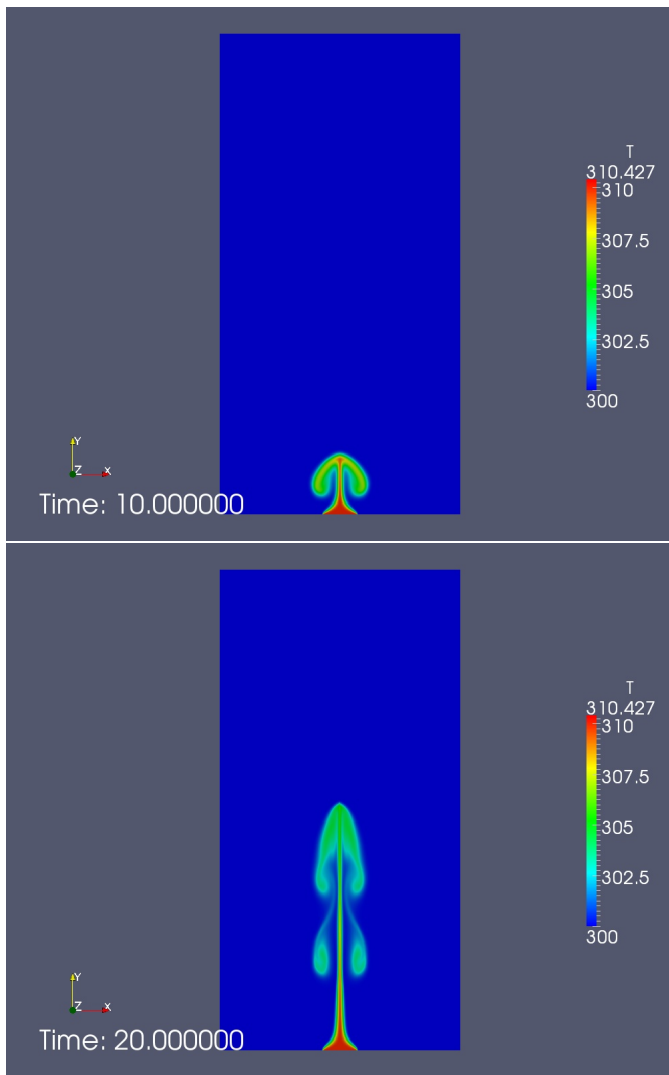


Fig. 3: Temperature field using hexahedral mesh (245k cells) without non-orthogonality correction

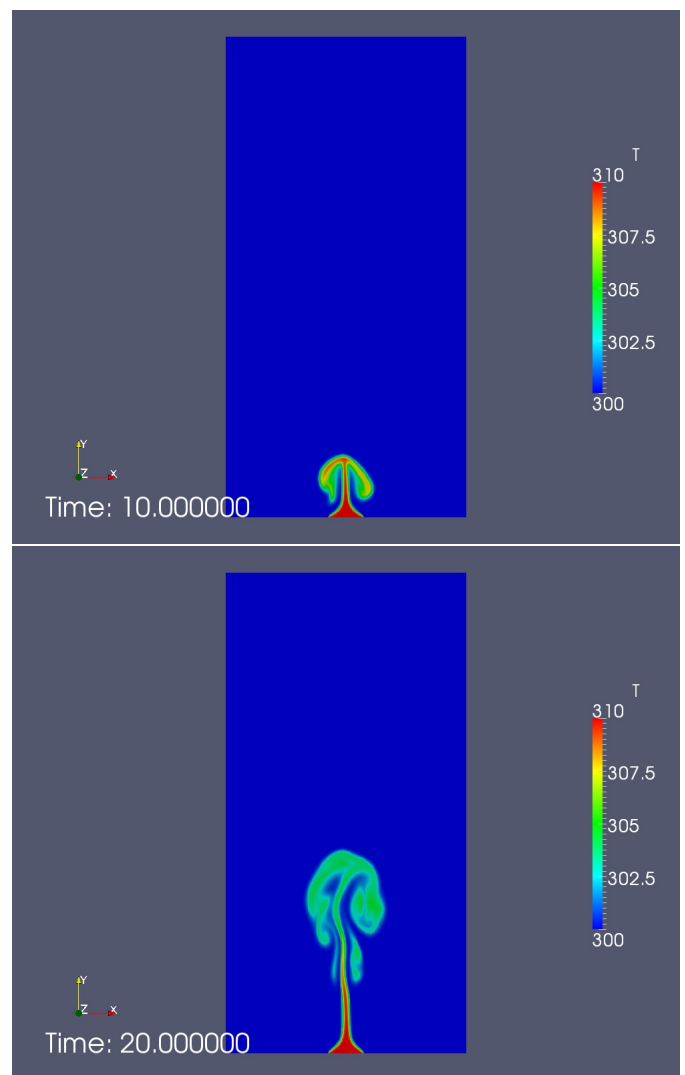


Fig. 4: Temperature field using tetrahedral mesh without non-orthogonality correction

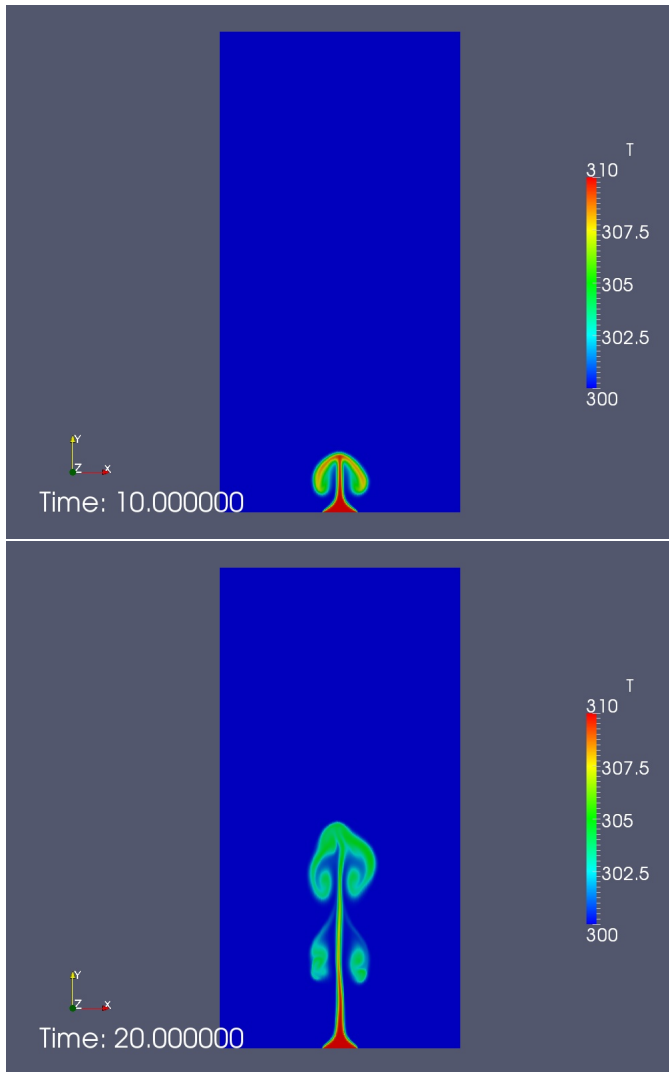


Fig. 5: Temperature field using tetrahedral mesh with non-orthogonality correction

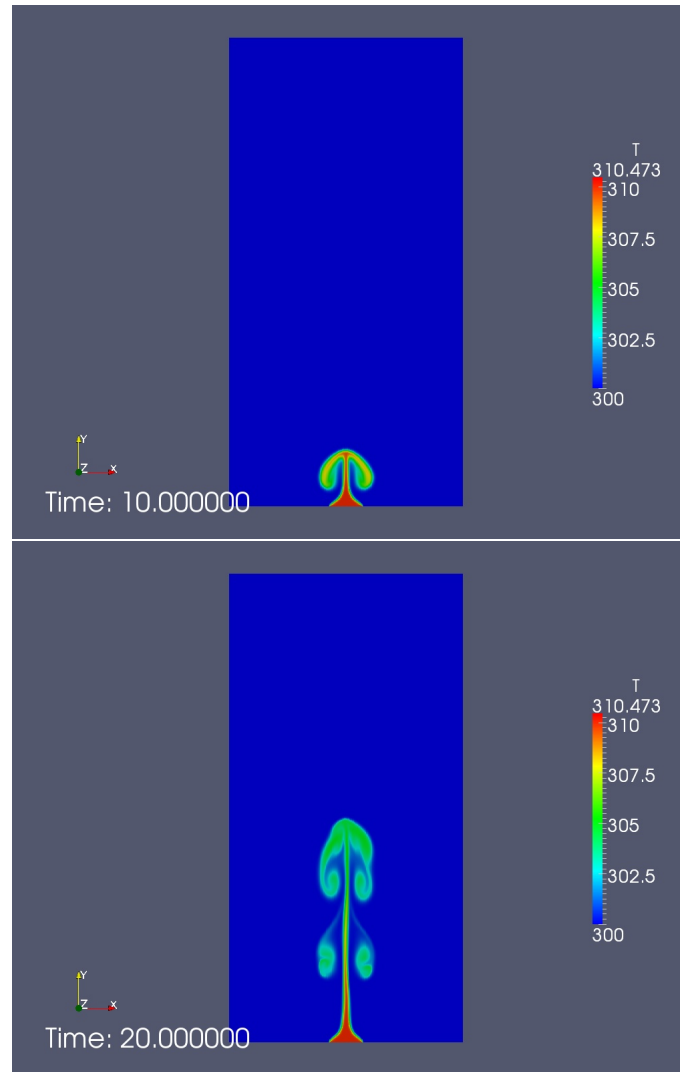


Fig. 6: Temperature field using tetrahedral mesh by modified solver without non-orthogonality correction

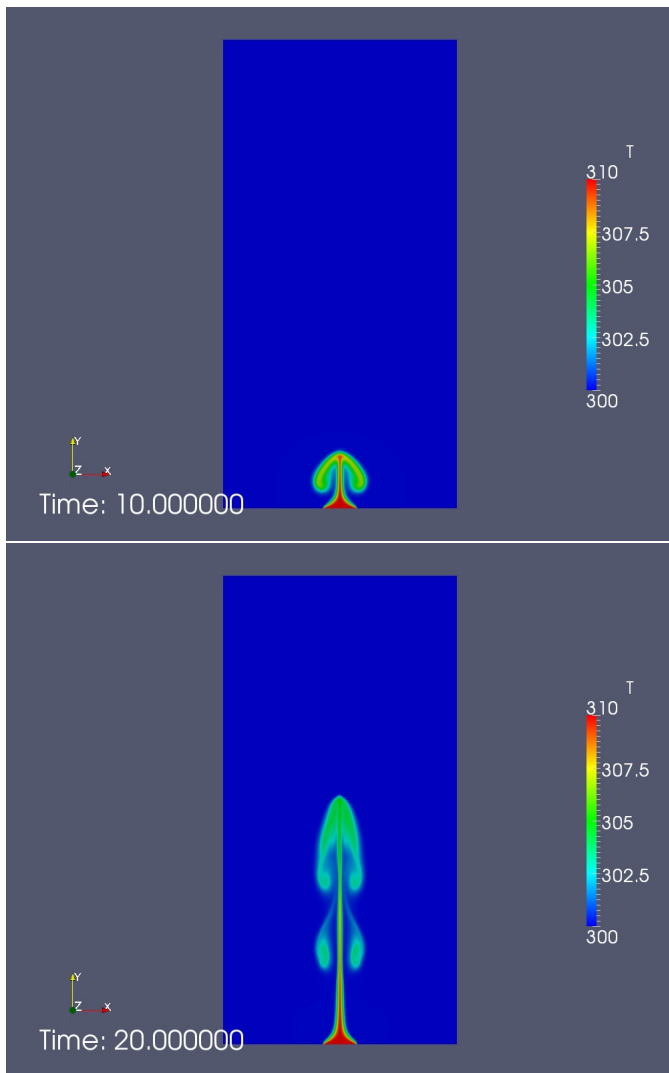


Fig. 7: Temperature field using hexahedral mesh (245k cells) by modified low Mach number approximation solver

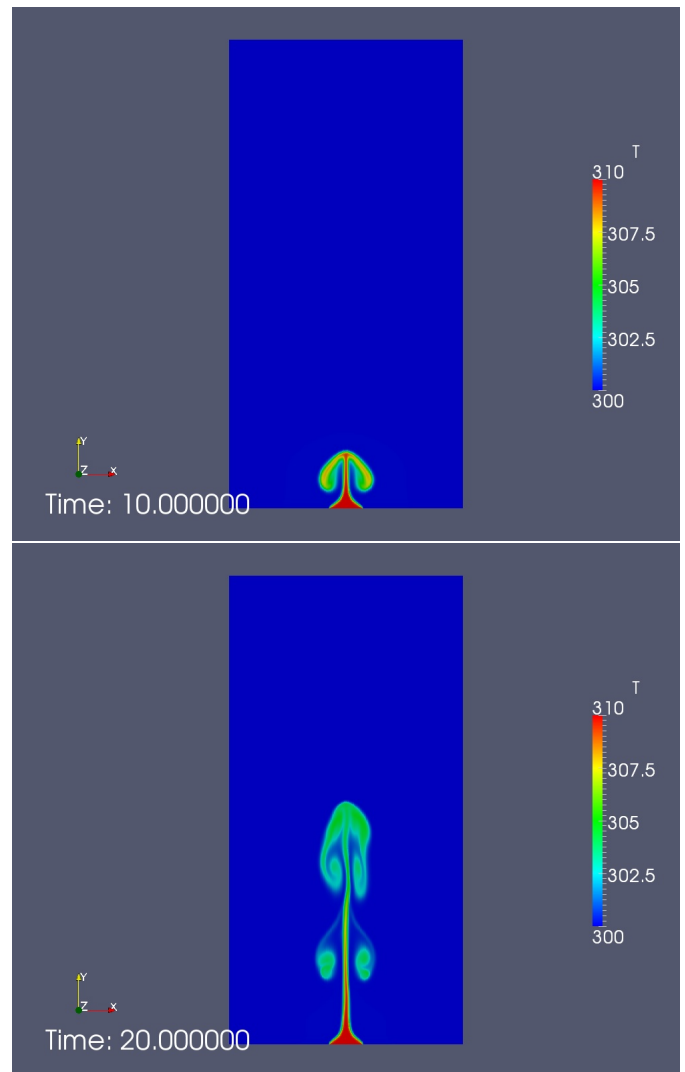


Fig. 8: Temperature field using tetrahedral mesh by modified low Mach number approximation solver