

# 前処理法に基づく三次元エアロゾル凝縮解析コードの開発

## Preconditioning Method applied to 3-D Condensate Aerosol Flow Simulations

山本 悟, 東北大学大学院, 〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 01, yamamoto@caero.mech.tohoku.ac.jp  
申 炳 録, 東北大学流体科学研究所, 〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1, shin@ifs.tohoku.ac.jp  
Satoru Yamamoto, Dept. of Aeronautics and Space Engineering, Tohoku University, Aobayama01, Aoba-ku, Sendai 980-8579  
Byeong Rog Shin, Institute of Fluid Science, Tohoku University, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai 980-8577

An implicit preconditioning method is presented in this paper. This method is based on the so-called preconditioning method proposed by Weiss and Smith for solving very low Mach number flows and the higher-order finite-difference method for solving a condensate transonic flow developed by the authors. An implicit flux-splitting form in general curvilinear coordinates has been newly introduced. This form is applicable to the calculations not only for the flux-difference splitting in Roe's Riemann solver but also for the implicit fluxes in the LU-SGS scheme. Several condensate flows in atmospheric flow conditions at very low Mach number have been solved by using this method. We understand that this method would be a very practical and efficient CFD tool for investigating actual condensate flows such as aerosol transportations.

### 1. 緒言

圧縮性流れのCFDは、特に1980年代に提案されたリーマン解法やTVDスキームの普及により、現在実用的な設計ツールにも組み込まれている。しかしながら、大気環境という点に言及すれば、いまだ実際の大気環境を考慮するまでには至っておらず、そのほとんどが理想気体(いわゆる乾燥空気)を仮定した流れの計算にとどまっているのが現状である。ところが、実際の大気中には、空気のみならず様々な微小粒子が浮遊しており、さらにこれらは場合により大気中の水蒸気の凝縮媒体となる。多くの気象現象、たとえば、雲や霧などの発生は、大気中における水蒸気の凝縮に深く関係している。航空機においては飛行機雲が発生する。また、身近なところでは、結露、自動車・煙突からの排気、そして呼吸器系疾患なども大気中の微小粒子ならびにその凝縮体、いわゆるエアロゾルの存在が関係している。本研究の目的は、これらあらゆる凝縮現象を数値計算することができる基本コードを開発することである。

Yamamotoらは、これまでに航空機翼周りに発生する飛行機雲の数値解法を開発し、風洞環境、均一核生成を仮定した大気環境、不均一核生成を仮定した大気環境について、高湿度中における二次元ならびに三次元の翼周りの遷音速流れ、ならびに三次元デルタ翼周りの大規模渦流れを計算した<sup>(1)(2)</sup>。その結果、いわゆる微小粒子が存在した場合の凝縮を支配する不均一核生成を仮定した大気環境中においては、特に風洞環境を仮定した場合の計算結果とは明らかに異なる結果を得ている。ここでいう風洞環境とは、均一核生成が支配的な静止した翼周りの高湿度流れであり、この場合には、風洞内の水蒸気がかなり高い過飽和状態にならないと凝縮の初生は起こらないが、いったん凝縮が始まると急激に液滴が成長することが知られている。一方、実際の航空機は航行しており、かつ翼の寸法も風洞環境に比べるとかなり大きくなる。さらに大気中には微小粒子がすでに存在しているため、実際の大気環境中においては微小粒子を核とした不均一核生成による凝縮が支配的であることがすでに知られている。本数値解法を用いることで、これら実験や実測により得られていた知見と同様の結果が得られる段階にまですでに至っている。

しかしながら、大気中における実際の凝縮現象はむしろこれまでの計算が対象としていたものよりもかなり遅い流れにおいて観察されるものが一般的であり、上記数値解法をそ

のまま利用することは、圧縮性流れの数値解法にとって致命的である、いわゆる‘Stiff’な状態に陥る可能性があり現実的とはいえない。

極めて遅い流れもしくは非圧縮性流れはこれまでに、Mac法に基づく非圧縮性流れ特有の方法、もしくは圧縮性流れの計算コードに基づく擬似圧縮性法などにより解かれてきた。しかしながら、凝縮流れにおいては空気、水蒸気ならびに液滴間の質量変化を正確に計算する点から、密度の時間微分項の欠如は致命的であり、前者による計算には期待できない。一方、後者においても、‘Stiff’問題は通常解決されていない。

そんな中で、Turkel<sup>(3)</sup>やMerkle<sup>(4)</sup>らのグループは、この‘Stiff’問題を解決するために、擬似音速を導入した前処理法(Preconditioning method)を提案している。これは、圧縮性流れの数値解法が、特に極めて遅い流れ(一樣流マッハ数0.01以下)の計算の際に、音速が流速の100倍以上になってしまい、時間刻みを極端に小さくしなければ安定に計算できない状態に陥ってしまういわゆる‘Stiff’な状態にならないように、音速を速度と同じオーダーに強制的に変換する方法である。これは、特性の理論から解釈すれば、音波の伝播を示す特性速度をすべて対流速度に置き換えていることになる。このとき同時に、基礎方程式は非圧縮性流れ特有の方程式系に変換される。Weissらは、この前処理法を非定常流れや自然対流問題に応用している<sup>(5)</sup>。またShinは、前処理法に水の状態方程式を導入することでキャピテーション流れ問題を計算している<sup>(6)</sup>。

本研究では、この前処理法の考え方を忠実に導入して、これまで開発してきた高速流れを対象にした凝縮流れ計算コードをきわめて遅い凝縮流れの計算コードに拡張する。その第一段階として、これまでの計算コードで採用されていたRoeの近似リーマン解法<sup>(7)</sup>ならびにLU-SGS法<sup>(8)</sup>のいずれの計算にも利用することができる、凝縮を考慮した一般曲線座標系の三次元支配方程式における流束ベクトルの陰的流束ベクトル分離式を新たに導出した。次にこの式に基づき、二次元ならびに三次元の計算コードを再構築した。ここでは、まず前処理された三次元基礎方程式ならびにあらたに導出された前処理型流束分離式、前処理型Roeスキームそして前処理型LU-SGSスキームについて簡単に説明した後、すでに計算コードの検証が完了している二次元の場合の、これまでに計算された結果を示すことで、前処理法の有効性を証明したい。三次元計算コードについては、現在検証中であり、

発表当日までには計算結果を示せる予定である。

## 2. 基礎方程式

著者らがこれまでに提案した非平衡凝縮を考慮した三次元圧縮性粘性流れの基礎方程式に、Weiss らが提案した前処理を施せば一般曲線座標系で次式ようになる。

$$\Gamma \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + L(\hat{Q}) = \Gamma \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{\partial F_i}{\partial \xi_i} + S + H = 0 \quad (1)$$

ただし、

$$\hat{Q} = J \begin{bmatrix} p \\ u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ T \\ \rho_v \\ \rho\beta \\ \rho n \end{bmatrix}, \quad F_i = J \begin{bmatrix} \rho U_i \\ \rho u_1 U_i + \partial \xi_i / \partial x_1 p \\ \rho u_2 U_i + \partial \xi_i / \partial x_2 p \\ \rho u_3 U_i + \partial \xi_i / \partial x_3 p \\ (E + p) U_i \\ \rho_v U_i \\ \rho\beta U_i \\ \rho n U_i \end{bmatrix}$$

$$S = -J \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{1j} \\ \tau_{2j} \\ \tau_{3j} \\ \tau_{kj} u_k + \kappa \partial T / \partial x_j \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$H = -J \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -\Gamma_c \\ \Gamma_c \\ \rho I_c \end{bmatrix}$$

ここで、 $\rho, u_i$  ( $i=1,2,3$ ),  $T, \rho_v, \beta, n$  はそれぞれ、静圧、物理速度成分、静温、水蒸気密度、液滴の質量分率、ならびに微小粒子の数密度。さらに、 $\rho, U_i$  ( $i=1,2,3$ ),  $E, \tau_{ij}$  ( $i,j=1,2,3$ ),  $\kappa, \Gamma_c, I_c$  はそれぞれ、混合気体の密度、反変速度成分、全内部エネルギー、粘性応力テンソル、熱伝導率、液滴の質量生成率、凝縮核生成率。

式(1)における  $\Gamma$  は前処理行列で、Weiss らが提案したものと基本的に同じである。

## 3. 流束分離式

式(1)における流束ベクトルを特性の理論に基づき流束分

離式の形で新たに導出した。各一般曲線座標  $\xi_i$  ( $i=1,2,3$ ) における任意の格子点  $\ell$  と  $\ell+1$  の中間点で定義される数値流束  $(F_i)_{\ell+1/2}$  は次式のように流束分離される。

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

ただし、 $M=L$  (or  $R$ ) とおけば、

$$(\hat{A}_i^\pm)_{\ell+1/2} \hat{Q}^M = (\Gamma L_i^{-1} A_i L_i)_{\ell+1/2} \hat{Q}^M \\ = \hat{\lambda}_{i1}^\pm \Gamma \hat{Q}^M + \frac{\hat{\lambda}_{ia}^\pm}{\hat{c}_i \sqrt{g_{ii}}} \hat{Q}_{ia} + \frac{\hat{\lambda}_{ib}^\pm}{\hat{c}_i^2} \hat{Q}_{ib} \quad (3)$$

$$\hat{\lambda}_{i1} = U_i, \quad \hat{\lambda}_{i4} = (1 + \alpha) U_i / 2 + \hat{c}_i \sqrt{g_{ii}}$$

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

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

$$\alpha = U_r^2 (\rho_p + \rho_T / \rho C_p)$$

$$\hat{\lambda}_{ij}^\pm = (\hat{\lambda}_{ij} \pm |\hat{\lambda}_{ij}|) / 2, \quad \hat{\lambda}_{ia}^\pm = (\hat{\lambda}_{i3}^\pm - \hat{\lambda}_{i4}^\pm) / 2$$

$$\hat{\lambda}_{ib}^\pm = (\ell_i^- \hat{\lambda}_{i3}^\pm - \ell_i^+ \hat{\lambda}_{i4}^\pm) / (\ell_i^- - \ell_i^+) - \hat{\lambda}_{i1}^\pm$$

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

$$\hat{Q}_{ia} = \hat{q}_1 \mathbf{Q}_{ic} + \rho \hat{U}_i \mathbf{Q}_d$$

$$\hat{Q}_{ib} = (\rho \hat{U}_i \hat{c}_i^2 / g_{ii}) \mathbf{Q}_{ic} + (\hat{q}_1 \hat{c}_i^2 / U_r^2) \mathbf{Q}_d$$

$$\hat{U}_i = (\partial \xi_i / \partial x_j) \hat{q}_{j+1} \quad (j=1,2,3)$$

$U_r$  は前処理パラメータ。 $\hat{q}_j$  は  $\hat{Q}$  の  $j$  番目未知変数。 $\mathbf{Q}_{ic}$  ならびに  $\mathbf{Q}_d$  は、非平衡凝縮流れ問題の流束分離式ですでに導出されたサブベクトルである<sup>(9)</sup>。

## 4. 前処理型 Roe スキーム

式(3)は簡単に Roe スキームに適用することができる。すなわち、

$$(F_i)_{\ell+1/2} = \frac{1}{2} [F_i(\hat{Q}_{\ell+1/2}^L) + F_i(\hat{Q}_{\ell+1/2}^R) \\ - |(\hat{A}_i)_{\ell+1/2}| (\hat{Q}_{\ell+1/2}^R - \hat{Q}_{\ell+1/2}^L)] \quad (4)$$

における右辺第 2 項の計算に、

$$|(\hat{A}_i)_{\ell+1/2}| \hat{Q}^M = |\hat{\lambda}_{i1}| \Gamma \hat{Q}^M + \frac{|\hat{\lambda}_{ia}|}{\hat{c}_i \sqrt{g_{ii}}} \hat{Q}_{ia} + \frac{|\hat{\lambda}_{ib}|}{\hat{c}_i^2} \hat{Q}_{ib} \quad (5)$$

として、式(3)がそのまま利用できる。

## 5. 前処理型 LU-SGS スキーム

さらに、LU-SGS スキームの計算にも、式(3)が利用できる。いま、ニュートン反復法とクランクニコルソン法が組み込まれた時間最大 2 次精度の LU-SGS スキーム<sup>(10)</sup>に前処理

を施せば、

$$\begin{aligned} \Gamma D \Delta \hat{Q}^{*m} &= RHS^m + \theta_L \Delta t G^+ (\Delta \hat{Q}^{*m}) \\ \Delta \hat{Q}_{i,j}^m &= \Delta \hat{Q}_{i,j}^{*m} - \Gamma^{-1} D^{-1} \theta_L \Delta t G^- (\Delta \hat{Q}^m) \end{aligned} \quad (6)$$

ただし、

$$\begin{aligned} &G^+ (\Delta \hat{Q}^{*m}) \\ &= (\hat{A}_1^+ \Delta \hat{Q}^{*m})_{i-1,j,k} + (\hat{A}_2^+ \Delta \hat{Q}^{*m})_{i,j-1,k} + (\hat{A}_3^+ \Delta \hat{Q}^{*m})_{i,j,k-1} \\ &G^- (\Delta \hat{Q}^m) \\ &= (\hat{A}_1^+ \Delta \hat{Q}^m)_{i+1,j,k} + (\hat{A}_2^+ \Delta \hat{Q}^m)_{i,j+1,k} + (\hat{A}_3^+ \Delta \hat{Q}^m)_{i,j,k+1} \\ D &= I + \theta_L \Delta t [r(\hat{A}_1) + r(\hat{A}_2) + r(\hat{A}_3)] \quad r(\hat{A}) = \alpha \max[\lambda(\hat{A})] \\ \Delta \hat{Q}^m &= \hat{Q}^{m+1} - \hat{Q}^m \\ RHS^m &= -(\hat{Q}^m - \hat{Q}^n) - \Delta t [L^*(\hat{Q}^m) + L^*(\hat{Q}^n)] / 2 \end{aligned}$$

式(6)の  $G^\pm$  における非対称項の計算に式(3)をほぼそのまま利用することができ、その場合には、式(3)における  $\hat{Q}^M$  を  $\Delta \hat{Q}^M$  に置き換えればよい。

## 6. NACA001 翼周りの超低速理想気体流れの計算

前処理法の有効性を示すため、まず理想気体、すなわち相対湿度 0%、主流マッハ数 0.01 での NACA0012 翼周り流れを計算した。レイノルズ数は 20,000、流入角度は 2.0 度。Fig. 1 (a)(b)に、それぞれ前処理なしとありの場合の計算された等マッハ数線図を示す。なお、前処理なしの場合について、収束解を得るために、前処理ありの場合の約 10 倍の計算時間を費やした。両者の違いは明らかであるが、前処理ありの場合には非常になめらかな等高線が得られているのに対し、前処理なしの場合の解にはそもそも境界層が全く成長していない。これは、境界層内では特に 'Stiff' な状態が顕著なために解が全然進行していないためであるといえる。次に、Fig.2(a)(b)に等圧力線図を示す。Fig.1(a)(b)の分布に対応して圧力分布を極めて異なった結果を示している。なかでも、前処理なしの場合には、圧力分布が異なるのと同時に、局所的に非物理的な解(数値振動)が示されている。これをわかりやすくするために翼前縁付近の等圧力線図を拡大したものを Fig.3(a)(b)にそれぞれ示す。前処理ありの解が非常になめらかであるのに対し、前処理なしの解は数値振動により明らかに破綻していることが示されている。

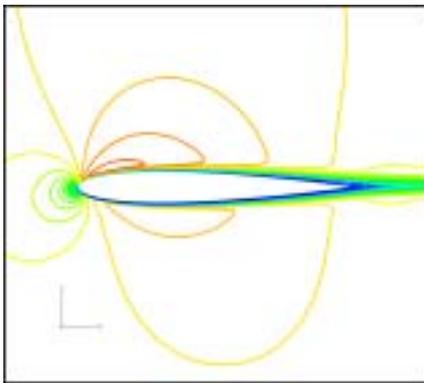


Fig.1(a) 等マッハ数線図 (前処理あり)

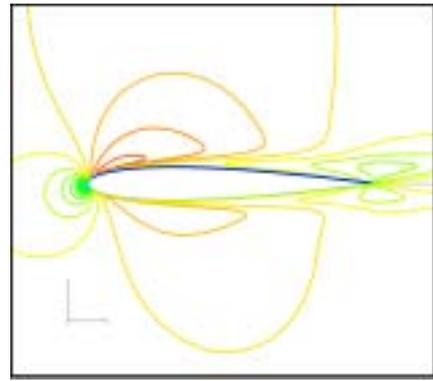


Fig.1(b) 等マッハ数線図 (前処理なし)

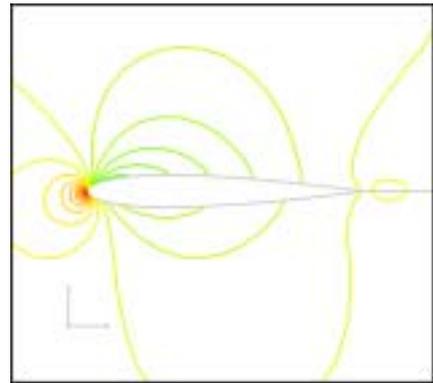


Fig.2(a) 等圧力線図 (前処理あり)

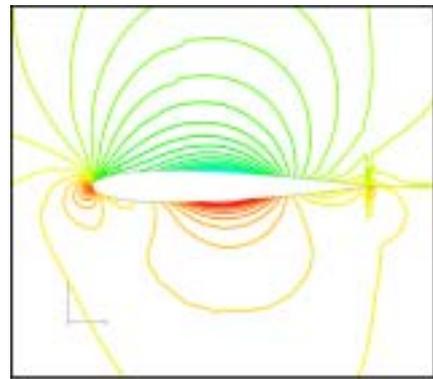


Fig.2(b) 等圧力線図 (前処理なし)

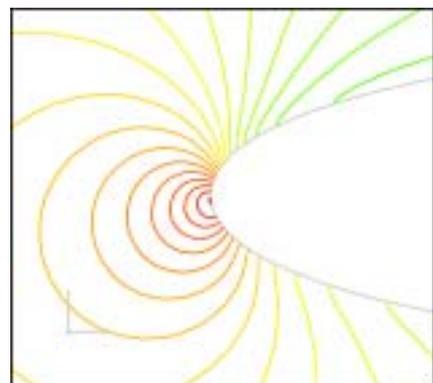


Fig.3(a) 等圧力線図 (Fig.2(a)の局所拡大図)

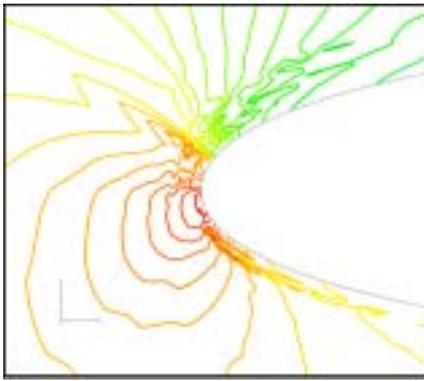


Fig.3(b) 等圧力線図 (Fig.2(b)の局所拡大図)

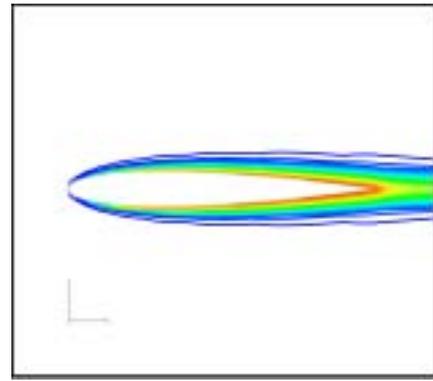


Fig.4(b) 液滴の質量分率分布 (Re=2000)

## 7 . NACA0012 翼周りの超低速凝縮流れの計算

次に、主流マッハ数 0.01、主流温度 293[K]、主流圧力 1 E5[Pa]、主流相対湿度 90%、主流浮遊微粒子径ならびに数密度 0.1[ $\mu\text{m}$ ]、1 E12[1/m<sup>3</sup>]における表面温度 253[K]の NACA0012 翼周り流れを計算した。流入角度は 0 度。翼弦長が 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001 [m] (Re=2E4,2000,200,20 に相当)の 4 段階について冷却された翼が高湿度条件の主流にどのような影響を与えるかについて検討した。

Fig.4(a),(b),(c)にそれぞれ Re=2E4,2000,200 の場合に計算により得られた液滴の質量分率分布を示す。なお、Re=20 の場合には凝縮がほとんど起こらなかったため省略した。

いずれの図においても、翼近傍で大気中の水蒸気が凝縮していることが示されている。液相領域は、レイノルズ数が減少するにつれて広がっているが、その液滴量は逆に減少し、Re=20 の場合にはほとんど凝縮していない。ここで液相領域が広がるのは、境界層厚さが増加することによると考えられ、レイノルズ数が減少するにつれて境界層は厚くなり、それに伴って温度境界層も厚くなって結果的に飽和蒸気圧に直接影響を与えるためであると推測される。一方、液滴量が減少する原因として考えられるのは、レイノルズ数は翼弦長を短くすることにより減少しているが、主流速度は同じであることから、翼弦長が短い方が流れは翼周りをより速く通過する。したがって、液滴の成長時間が翼周りを流れが通過する時間より、長くなればそれだけ凝縮量は少なくなるため、レイノルズ数が減少するにつれて液滴量が減少するという結果になったといえる。

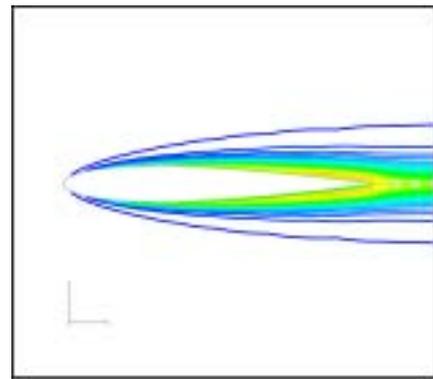


Fig.4(c) 液滴の質量分率分布 (Re=200)

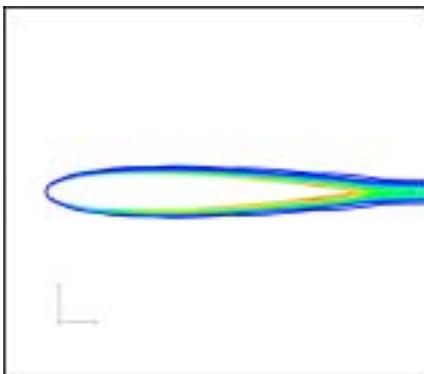


Fig.4(a) 液滴の質量分率分布 (Re=2E4)

## 8 . 結言

前処理法に基づく、超低速凝縮流れの計算コードを開発した。当然のことながら、本計算コードを使用して、これまで的高速凝縮流れも計算することができるので 1 つの計算コードでこれまでに知られているすべての速度における凝縮現象が数値解析できるようになった。本計算コードはあくまで基本コードであるが、その用途は極めて広く、たとえば、マイクロテクノロジーに関連した微小空間における凝縮現象 (微小粒子生成、CVD など) から、マクロスケールの凝縮現象 (雲の生成、エアロゾル輸送など) の数値解析への応用が期待できる。ここでは示さなかったが、たとえば、すでに凝縮している流れ (ミストや雲など) における蒸発現象や、温度場と重力場のみで形成される自然対流問題の数値解析にも本計算コードはすでに適用されており良好な解を得ている。

## 文 献

- 1 . S.Yamamoto et al., Trans. JSASS, **42**(2000), 182-189.
- 2 . S.Yamamoto, AIAA Paper 2001-2651, (2001).
- 3 . E.Turkel, J.Comp.Phys., **72**(1987), 277-298.
- 4 . Y.-H.Choi. and C.L.Merkle, J.Comp.Phys., **105**(1993), 207-223.
- 5 . J.M.Weiss and W.A.Smith, AIAA Journal, **33**(1995), 2050-2057
- 6 . B.-R.Shin , AIAA Paper 2001-2909, (2001).
- 7 . P.L.Roe, J.Comp.Phys., **43**(1981), 357-372.
- 8 . S.Yoon and A.Jameson, AIAA J., **26**(1988), 1025-1026.
- 9 . S.Yamamoto, Proc. 1st ICCFD, (2000), 133-138, Springer.
- 10 . S.Yamamoto and S. Kano, Computers & Fluids, **27**(1998), 571-580.