

熱流体シミュレーションについて

システム計測技術班
矢野祐樹

はじめに

実験において実際に試料を作製し、試験、研究することは重要なプロセスである。しかし、思ったような試料ができない、時間や費用がかかるなどの理由でうまくいかないこともある。この解決策として、シミュレータを用い、どのような条件で試料を作製すればいい試料が短時間で作製できるのか調べることが1つの手段として考えられる。

今回のシミュレータはカルコパイライト型の試料の解析を目的とする。定常状態を計算、温度分布の途中変化は計算途中の温度分布を解とし、現時点での問題点を把握することを目標とする。このため、今回は非定常状態の温度分布の計算は考えないものとする。

キーワード：熱流体 シミュレート カルコパイライト 連続の式

1. 実験環境

今回のシミュレーションは以下のスペックのパーソナルコンピュータで開発、シミュレートを行っている。

システム：Windows XP Pro SP2

CPU: Intel(R) Celeron(R) M 1.4GHz

MEMORY: 448MB

コンパイラ：Intel(R) FORTRAN Compiler 7.1

(Microsoft VISUAL C++ 6.0 上で起動)

2. 理論

今回のシミュレートにおいて基本となる式は以下の通りである。

- ・連続の式
- ・運動方程式
- ・エネルギー方程式

連続の式は質量保存の法則を式にしたもので、単位体積への流入量と流出量の差によって密度が変わってくる、というものであり、運動方程式は流体中の分子は外力に応じて運動量を変化させることを示す。また、エネルギー方程式は熱力学第1法則の通り、単位体積に加えられた熱とエネルギーにより単位体積の蓄積エネルギーが変化することを表し、拡散方程式は着目成分の質量保存則であり、この成分がどのように拡散していくのかを表す。

これらの式を連立させてシミュレートを行う。

連続の式

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) = 0$$

運動方程式

x成分

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho uw) \\ &= \frac{\partial}{\partial x}(\mu \frac{\partial u}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu \frac{\partial u}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\mu \frac{\partial u}{\partial z}) - \frac{\partial p}{\partial x} \end{aligned}$$

y成分

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uv) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho vw) \\ &= \frac{\partial}{\partial x}(\mu \frac{\partial v}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu \frac{\partial v}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\mu \frac{\partial v}{\partial z}) - \frac{\partial p}{\partial y} \end{aligned}$$

z成分

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho w) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho uw) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho vw) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w^2) \\ &= \frac{\partial}{\partial x}(\mu \frac{\partial w}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu \frac{\partial w}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\mu \frac{\partial w}{\partial z}) - \frac{\partial p}{\partial z} \end{aligned}$$

エネルギー方程式

$$\begin{aligned} & \rho C \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uT) + \frac{\partial}{\partial y}(vT) + \frac{\partial}{\partial z}(wT) \right) \\ &= \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \end{aligned}$$

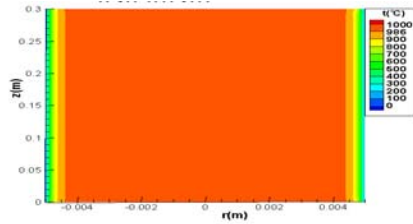


FIG 1: LOOP 10

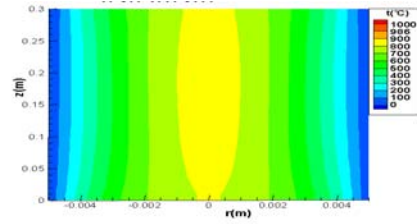


FIG 3: LOOP 1000

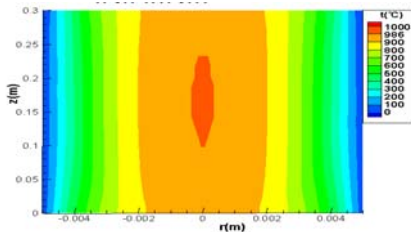


FIG 2: LOOP 500

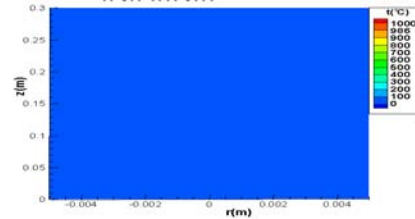


FIG 4: LOOP 5000

シミュレート条件は以下の通りである。

試料：カルコパイライト(分からない物性値についてはシリコンのデータを用いる)
 形状：半径 5mm、高さ 300mm の円柱状
 温度：100°Cに加熱した試料を室温で自然冷却した際の温度変化をシミュレートする

ただし、 u, v, w は運動量、 t は時間、 T は温度、 ρ は密度、 μ は粘性係数、 C は比熱、 λ は熱伝導率、 g は重力加速度とする

今回のシミュレートは円柱状の物質(カルコパイライト)を高温状態から冷却した時の温度変化を調べるためのものなので、上の式を円柱座標系に変換して計算する。また、離散化には SIMPLE 解法を用いる。

これは、圧力 p 、速度 u, v, w の推定値(p', u', v', w')を決め、その値と推定値の誤差がなくなるように計算するものであり、半陰的解法を用いることにより正確さ、スピードのバランスを取った計算手法である。

3. 結果

試料の温度変化のシミュレート図を示す。FIG 1～4 はそれぞれ計算回数 10,500, 1000, 5000 回に対応し、

これらの図より試料の温度変化がシミュレートできていることが伺える。(この図からは対流がうまく計算できていないように見えるが、実際は x 軸方向が半径 5mm、 y 軸方向が 30cm の円柱状の試料をシミュレートしていることを考えると説明が可能である。) これにより、問題はあるものの結果をシミュレートすることができるようになったといえ、目標である問題点を調べることができた。今回のシミュレートで明らかになった問題点は以下の通りである。

- 1 カルコパイライト型の物性値の一部(密度、熱拡散係数など)のデータが見つからなかった。今回は見つからなかった部分はシリコンの物性値で代用した。
- 2 凝固について考慮していない。このシミュレーションでは試料を単位体積に分割してそれぞれで温度変化を熱流体として計算しているため、温度が凝固点を下回ったら固体として計算をするように変更することで対応は可能であると考えられる。
- 3 時間について考慮していない。SIMPLE 法では計算時に時間を無限大にとって非定常項を無視することで短時間で定常解を求めているが、これらの項を計算することにより計算時間は増大するが計算は可能である。

参考文献

- 1) 荒川忠一, 数値流体工学, 東京大学出版会, 2003(第 6 版)
- 2) 平野博之, 第 2 版流れの数値計算と可視化, 丸善株式会社, 2004