

緒言

シビアアクシデント時の炉心溶融などの超大変形を扱う解析においては、従来のメッシュを用いる有限要素法などの場合、メッシュの再構成が必要となり現実的ではない。その点SPH法などの粒子法はメッシュレス法であり、超大変形問題を取り扱うことに適している。特に固体から液体への相転移を伴う溶融現象をこの方法で解析できることを示す。このような背景から、ここでは、SPH法を中心とした解析方法を採用することを提案し、今後の開発に適用することを推奨したい。

I SPH法の理論

SPH 法は、運動量保存則、エネルギー保存則などを表わす偏微分方程式をKernel 積分式によって近似的に解く。SPH 法と、従来のLagrangian 差分法との基本的な違いは、差分法が格子ベースの空間導関数の近似を用いるのに対して、SPH 法は内部にランダムに分布した点(粒子)より近似関数の構築を行うところにある。偏微分方程式を空間格子をもちいて積分する差分法などの格子ベースの方法では、隣接する粒子はそのまま固定され続けるが、SPH 法では評価点である粒子がランダムに分布し時間発展にしたがって移動する。このためSPH 法は格子ベースのLagrangian 法では難しかった超大変形問題を扱うことが可能となるなど、従来の解析手法にはみられなかったいくつかの特色をもち、流体解析のみならず、個体の衝撃解析、大変形解析、熱伝導解析など多くの分野への適用研究が進展しつつある。

(1) Kernel 近似

SPH 法は、物体を有限個の粒子と呼ばれる物体素片に分割し、その任意の点の集合を用いて近似を行うアルゴリズムを持つ。従って格子ベースの近似を行う必要がない。この方法の基礎概念は次のKernel 変換式にある。

$$f(x) = \int f(x')\delta(x-x')dx' \quad (1.1)$$

ここで、 f は三次元位置ベクトル x の関数であり、 dx' は体積、 $\delta(x-x')$ はデルタ関数を表わす。ここで、このデルタ関数がある幅(領域) h をもった適当な重み関数 $W(x-x',h)$ に置き換える、

$$f(x) \approx \int f(x')W(x-x',h)dx' \quad (1.2)$$

上式の右辺はある物理量 $f(x)$ を重み関数によって平均化したKernel 評価となる。この一種の平均化をSmoothing とよびSPH法の最も重要な概念である。

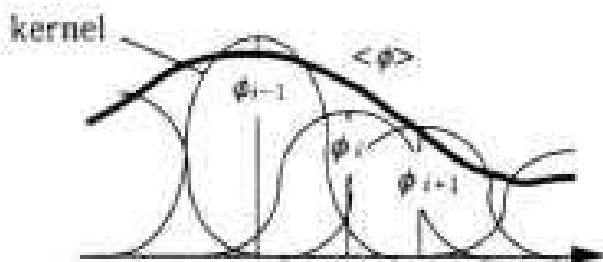


図1.1 カーネルによる重ね合わせ

図1.1に、ある物理量を重み関数(kernel)を用いて重ね合わせ、ある広がりを持った領域に滑らかに分布させる概念(Smoothing 化)をしめす。この操作により、評価点のもつ物理量は連続体の物理量に置き換えられる。言い換えれば粒子という、物質の孤立したモデルから連続体モデルへとSmoothing 化される。したがって、SPH 粒子法は、個別要素法などの離散化した点群によるモデルではなく、連続体モデルとなり、粒子はあくまでSmoothing のための評価位置をしめす存在となることに注意を要する。

図1.2に、連続体を粒子場へ離散化したモデルをしめす。各々の粒子 i は、ある長さ h 内に存在する他の粒子 j

による相互作用を受ける。この一定距離をスムージング長さと呼ぶ。この図における粒子は物理量を評価する一種の評価点であり、有限要素法における節点と積分点の双方の役割をもった存在に近い。ここで $W(x-x',h)$ は影響半径の内部に分布する多くの評価点の重み付けをおこなう関数であり以下のような性質を持たなければならない。

- 1) Kernel 関数の極限がデルタ関数である事
- 2) 規格化されている事
- 3) 影響半径の範囲以外で0 になるコンパクト化が可能である事

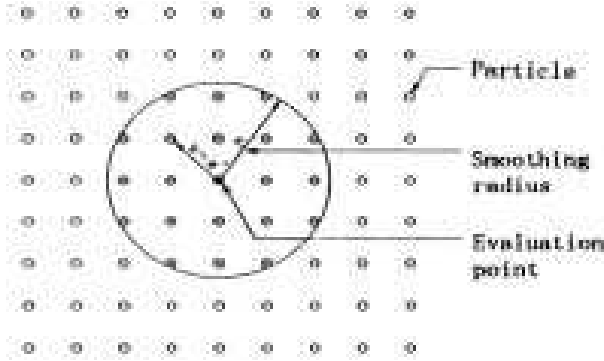


図 1.2 連続体の離散化と影響半径

さて、一般の偏微分方程式にふくまれる1階の空間微分は、式(4.3.2)の $f(x)$ を $\nabla \cdot f(x)$ で置換する事によって得られる式の右辺の積分の中の発散(divergence)を部分積分し、発散の定理により積分領域表面の積分に置き換える事により結局ゼロとなることを利用すると、結局1階の空間微分式は次のように重み関数の空間微分のみによって表現できることになる。

$$\nabla \cdot f(x) \approx - \int f(x') \cdot \nabla W(x-x',h) dx' \quad (1.3)$$

ここで評価する物理量をもつ主体として、連続体を十分細かく分割した物質素片である粒子を考え、次のような式の操作をおこなう。

$$\int \phi(x') dx' = \int \left(\frac{\phi(x')}{\rho} \right) \rho dx' \quad (1.4)$$

$\rho dx'$ は物質素片より作られる体積であると解釈され、したがって左辺の積分は内挿点(粒子)における要素成分の有限個の値を合計して近似することができる。

$$\int \phi(x') dx' \approx \sum_{j=1}^N \frac{\phi(x^j)}{\rho^j} m^j \quad (1.5)$$

ここで、上付きの指数は内挿点 j での数値であり、内挿点の個数である N 個の和を考える。この関係を用いて式(1.2)及び(1.3)を変形すると、以下のようになる。

$$f(x) \approx \sum_{j=1}^N \frac{m^j}{\rho^j} f(x^j) W(x-x^j, h) \quad (1.6)$$

$$\nabla \cdot f(x) \approx - \sum_{j=1}^N \frac{m^j}{\rho^j} f(x^j) \cdot \nabla W(x-x^j, h) \quad (1.7)$$

SPH アルゴリズムの基礎となるのは(1.7)式で示された空間勾配の評価式である。言い換えればMonaghan によって提案されたSPH法は、偏微分方程式の空間勾配の直接近似を粒子場によって(Smoothing 概念を併用し)表現するものであるといえる。したがって(1.7)式はSPH法を適用する様々な問題に用いられる。

(2) Kernel 関数

SPH 法では重み関数を領域積分型の近似解法に用い(Kernel 近似)、ある影響半径 h の内部にある複数の粒子位置の物理量を中心位置の評価点に内挿する。したがってこの積分近似手法の精度は重み関数の精度に大きく依存する。重み関数には多数の候補があるが、よく利用されるのは3 次Spline 関数である。

(3)SPH 法の展開

粒子法の特徴の1つは格子生成が必要ないということである。これにより3次元複雑形状における格子生成の労力が大きく軽減される。自動格子生成技術も研究されているが、例えば未だに任意の3次元空間を六面体要素だけで自動分割するアルゴリズムは見つかっていないなど、格子生成は数値シミュレーションの実行者にとって大きな負担であることに変わりはない。計算精度は生成した格子に依存することもあり、格子生成は計算の中身を熟知したエキスパートによる手作業とならざるを得ない。

SPH法は、宇宙物理における星雲衝突・生成問題など、超高速衝突現象を解析する特殊な手法として認められてきた。しかし全くメッシュを使用しないメッシュレス解析手法であるという側面が近年急速に注目を集めつつある。連続体を密度の濃い粒子群としてデータ化するのは、複雑な形状についても難しいことではない。粒子群として表現された構造物をKernel 積分によってスムージング化し、構造物の解析をおこなう試みが多く分野で始まっている。すなわち、有限要素法などの従来の大規模解析手法を補完する、より一般的な解析ツールとして研究する方向である。もう1つの特徴は、連続体の運動が粒子の運動によって表されるため、界面の大変形のみならずそのトポロジー(位相)まで変化する場合にも適用することができることである。構造の問題では、超大変形解析である。メッシュが破綻してしまう大变形解析にはSPH法は適性があると思われる。また流体解析においても自由液面を有する流れ、気液二相流、融解・凝固などの相変化を伴う熱流動、流体と構造物の相互作用、などへの応用研究が展開すると思われる。

II 溶融物に対する粒子法に基づく非ニュートン流体アニメーション



図 2.1

ここでは溶融し、流れる物体に対する新規の視覚的にリアルなアニメーション技術を示す。例えば金属、プラスチック、ワックス、ポリマーのような物質の粘塑性をシミュレートする。高粘性の非ニュートン流体が低粘性の液体に遷移することにより、物体をモデル化することにこの技術はある。溶融している間、粘性は一般化ニュートン流体モデルによって定式化され、その性質は局所的温度に依存する。それから、相転移は熱方程式によって駆動される。流体シミュレーションフレームワークはスムーズドパーティクルハイドロダイナミクスと呼ばれるラグランジュ法の一つを用いる。

(1)物理法則の定式化

ラグランジュ定式化:

ナビエ-ストークス方程式は質量保存と運動量保存を記述する2つの方程式によって定式化される。後者の式には、重力加速度ベクトル項が含まれるが、これは溶融シミュレーションにおいて基本的な役割を果たす。

一般化ニュートン流体モデル:

非ニュートン流体について、応力テンソルは歪テンソル $\mathbf{D} = \nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T$ の非線形関数である。我々のシミュレーションでは、Mendes et al. によって提案された一般化ニュートン流体モデルを用いる。ここで、応力テンソ

ル \mathbf{S} は $\mathbf{S} = \eta(D)\mathbf{D}$ で与えられる。粘性 η は次の歪に依存する:

$$D = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot \text{trace}(\mathbf{D})^2} \quad (2.1)$$

粘性関数 η は次式で与えられる:

$$\eta(D) = (1 - \exp[-(J+1)D]) \left(D^{n-1} + \frac{1}{D} \right) \quad (2.2)$$

ここで、 n はべき乗則引数の挙動であり、 J はジャンプナンバーである。

ジャンプナンバー J は、例えば発生応力と一致引数のような前のを結合する粘塑性流体の新たな流動学上のパラメーターである。我々のシミュレーションでは、 $n=1/2$ に固定し、ジャンプナンバー J は温度によって変化するものとする。

加熱と溶融:

かさ張った物体の溶融は固体から液体への相転移に対応する。この転移を、各粒子の温度に従って粘性を変化させることによってモデル化することができる。

温度の時間変化は、温度 T と熱拡散定数 k を含む次の熱方程式によって記述される:

$$\frac{dT}{dt} = k\nabla^2 T \quad (2.3)$$

物体のある部分の温度が上昇し、融点に達したら、それは液体になる。ジャンプナンバー J はそのとき温度に従って減少する。ジャンプナンバー J を温度に対して線形に減少するとモデル化する。

$$J(T) = (1-u)J_{\max} - uJ_{\min} \quad (2.4)$$

ここで、 $u = (T - T_{\min}) / (T_{\max} - T_{\min})$ である。注意すべきは、(2.2)式の粘性関数は温度が上昇するときこのように減少するし、逆もある。

SPH 法の適用:

5 次の平滑化カーネル関数を採用する。前の3DCG 図の Bunny で 9727 個の粒子数である。逐次計算あたりの時間は 0.94s であり、図は 500、1060、3000 逐次計算を行った結果である。

III シビアアクシデント時の解析

下図のようなモデルを考える。II の解析に従って、下部ヘッドを超高粘性の非ニュートン流体とし、高温の溶融デブリを中粘性の非ニュートン流体とし、水を非圧縮性流体として、SPH 法を適用する。この解析により、溶融デブリの熱による容器下部ヘッドの超大変形、即ち溶融による溶け落ちの現象を捉えることができるものと思われる。水蒸気については、圧縮性流体を記述する SPH 法の定式化はあるが、界面での液相から気相への相転移(気化)を表現する方法はまだ知られていない。圧縮性流体を記述する SPH 法の定式化を用いて、気化した水蒸気の粒子を表現して、それに伴って沸騰水の量を減少させることで、この問題を記述する方法が考えられる。体積一定の下で圧力変化を記述する状態方程式と、溶融デブリからの熱伝導方程式によって、支配されるとする。冷却水がどんどん気化することによって、溶融デブリの温度はほとんど低下しないのではないか。これも検証する必要があるだろう。

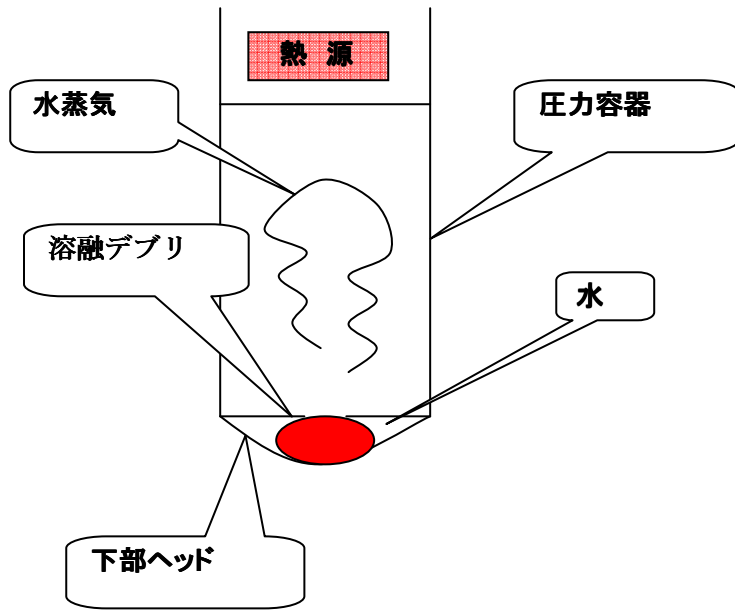


図 3.1 シビアアクシデント時の圧力容器