急激な熱力特性変化を有する超臨界圧流体の高精度かつ堅牢な数値モデリング

寺島　洋史*

A High-resolution and Robust Method for Supercritical Fluids With Large Density Contrasts

Hiroshi Terashima*

Key words: Supercritical Fluid, Cryogenic Fluids, Contact Discontinuity, Numerical Method, Transcritical Injection

1. 緒言

液体ロケットエンジンの燃焼圧は，3-20 MPa と非常に高く，使用される酸化剤と燃料は共にそれらの臨界圧力を超えた状態で燃焼室へ噴射される．また，液体ロケットエンジン噴射の特徴の 1 つとして，酸化剤が 100 K 程度の極低温状態で噴射され，燃料との混合と燃焼過程において，その臨界温度を跨ぐことが挙げられる．この噴射条件は，通称，遷臨界噴射といわれ[1]，臨界温度を跨ぐ際には，熱物性や輸送物性の急激な変化を伴うことが知られている．**図 1** に，超臨界圧窒素の熱力特性図を示す．例えば，遷臨界噴射を想定し（窒素の臨界温度は 126.2 K），噴射流体温度が 100 K，雰囲気流体温度が 300 K という条件を想定すると，それらの流体間には，大きな密度差と変化が存在し，定圧比熱においては最大ピーク値を示すことがわかる．このように，液体ロケットエンジン燃焼器で見られる超臨界圧下の流体は，特に極低温領域において，非理想性が強く，常圧下の流体とはその熱物性値の振る舞いが大きく異なる．

上記した超臨界圧流体を数値解析手法の観点で考えると，噴射された極低温酸化剤と比較的高温である燃料もしくは燃焼器内流体との間で形成される接触面は，急激な物性変化を伴うため，一般的に，高精度かつ堅牢な解析は難しい．これは，比熱比が異なる 2 流体接触面解析や密度や音速が大きく異なる気液界面解析に，圧縮性流体方程式を適用した際に指摘される問題点[2~3]からも理解することができる．そのため，これまでの解析では，レイノルズ平均方程式（RANS）の適用や Large-eddy simulation（LES）においても過度の数値粘性を有する低次精度解法の適用，もしくは急激な物性変化を伴う極低温条件を避けた解析に留まっていた[4~5]．

ここでは，流体接触面において速度・圧力平衡という概念を取り入れることにより構築された超臨界圧流体に対する数値解析法を紹介する．本手法の適用により，臨界温度を大きく下回る数値的に非常に厳しい極低温噴射条件を含め，様々な超臨界圧流体条件に対しても，高次精度手法の堅牢な適用が可能である．本稿では，構築した数値解析手法の導出を中心に説明し，適用問題として 1 次元移流問題の結果のみを示すが，多次元噴流問題への適用性は確認済みであり，著者らの文献[6~9]を併せて参照いただきたい．また，本稿は，第 28 回数値流体力学シンポジウム講演原稿を加筆修正したものであることを明記する[10]．

2. 数値解析法

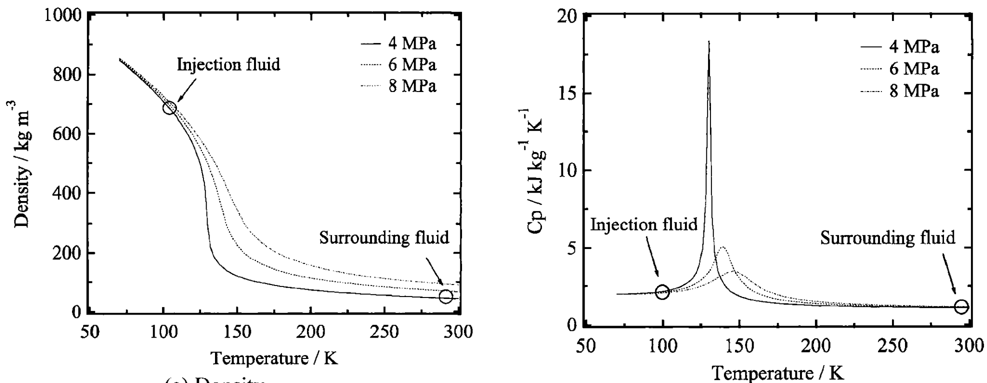
2.1　状態方程式

非理想性の強い超臨界圧極低温流体を数値解析する際に必要となるのが，適切な状態方程式である．本研究では，次に示す 3 次型 Soave-Redlich-Kwong（SRK）状態方程式[11]を用いた．但し，下記で議論していく数値解析手法は，どの状態方程式にも適用可能である．

$$p = \frac{RT}{V-b} + \frac{a(T)}{V^2+bV} \tag{1}$$

ここで，p は圧力，T は温度，V は比体積，R は気体

*　東京大学大学院工学系研究科航空宇宙工学
Department of Aeronautics and Astronautics, University of Tokyo



(a) Density

(b) Specific heats at constant pressure

図 1　Thermodynamic properties for nitrogen under supercritical pressure, where the critical values for nitrogen are ρ_{cr} = 313.3 kg/m^3, ρ_{cr} = 3.4 MPa" , T_{cr} = 126.2 K, respectively

定数 (JK^{-1}kg^{-1}) である．$a(T)$ は分子引力に関する関数，b は斥力に関する定数である．熱量的完全気体の状態方程式とは異なり，圧力，温度，そして体積の関係が線形ではないことがポイントである．

2.2　流体接触面圧力平衡

著者らの超臨界圧流体解析の経験[6,7,12]において，数値不安定性は 2 流体接触面から発生するため，流体の接触不連続面について考える．非粘性圧縮性流体の接触不連続面では，一切の擾乱が無ければ，接触面を挟んだ 2 流体の圧力と速度が平衡，つまり数値的には圧力と速度が一定に維持される[2,3]．ここでは，圧力平衡という言葉を，時間 n と $n+1$ の間で，$p^n = p^{n+1}$ が維持されるという意味で使用している．これは，言い換えると，接触不連続面において，時間 n において $(\partial p/\partial x)^n = 0$ が満たされる場合，時間 $n+1$ においても $(\partial p/\partial x)^{n+1} = 0$ が維持されることを意味する．速度平衡についても同様である．

接触不連続面を想定し，ある時間 n において，$(\partial p/\partial x)^n = (\partial u/\partial x)^n = 0$ が満足されていると仮定すると，時間 n から $n+1$ に格子点 j 上で離散化された 1 次元非粘性圧縮性流体の質量とエネルギ保存方程式は，次のように記述できる：

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u^n \overline{D}_j[\rho^n] \tag{2}$$

$$(\rho e)_j^{n+1} = (\rho e)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u^n \overline{D}_j[(\rho e)^n] \tag{3}$$

ここで，u は速度，e は内部エネルギ，Δt は時間刻み幅，そして Δx は格子幅である．$\overline{D}_j$ は格子点 j における差分オペレーターである（例えば，中心差分を用いた場合，変数 f に対して，$\overline{D}_j[f] = (f_{j+1} - f_{j-1})/2$ を意味する）．

ここで，便宜上，ある状態方程式において，内部エネルギが陽に分離した型式で書けると仮定する：

$$p(\rho,\ e) = F(\rho)\rho e + G(\rho) \tag{4}$$

上式中の $F(\rho)$ と $G(\rho)$ は，任意の関数とする．この状態方程式の型式は一般的なものとはいえないが，Mie-Grüneisen 型の状態方程式[13]と一致し，圧力，温度，そして体積の関係が線形ではない点で，本研究で用いる式(1)の 3 次型状態方程式の近似と考えることができる．式(4)を式(3)に代入すると，

$$\left(\frac{p}{F(\rho)} - \frac{G(\rho)}{F(\rho)}\right)_j^{n+1} = \left(\frac{p}{F(\rho)} - \frac{G(\rho)}{F(\rho)}\right)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u^n \bar{D}_j\left[\left(\frac{p}{F(\rho)} - \frac{G(\rho)}{F(\rho)}\right)_j^n\right] \tag{5}$$

が得られる．この式(5)により，圧力平衡，つまり $p^n = p^{n+1}$ を維持するためには，

$$\left(\frac{1}{F(\rho)}\right)_j^{n+1} = \left(\frac{1}{F(\rho)}\right)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u^n \bar{D}_j\left[\left(\frac{1}{F(\rho)}\right)_j^n\right] \tag{6}$$

$$\left(\frac{G(\rho)}{F(\rho)}\right)_j^{n+1} = \left(\frac{G(\rho)}{F(\rho)}\right)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u^n \bar{D}_j\left[\left(\frac{G(\rho)}{F(\rho)}\right)_j^n\right] \tag{7}$$

がそれぞれ満足される必要がある．つまり，接触不連続面における圧力平衡を満たすためには，状態方程式中の任意関数 $F(\rho)$ と $G(\rho)$ が，流体の支配方程式と同様に，式(6)と(7)に従いつつ移流されなければいけないことを示している．但し，単成分の熱量的完全気体の場合には，任意関数は定数のため，圧力平衡は自動的に満たされることに注意いただきたい．

ここでの議論が示している重要な点は，非線形型の状態方程式を用いた場合，ある時間 n において，接触不連続面の圧力平衡（速度平衡も同様）が満足していたとしても，次の時間 $n+1$ において，それは必ずしも保証されないということである．また，この事象が，単成分系でも起こり得るという点も重要である．この接触不連続面における圧力の振る舞いは，特に高次精

度手法を採用した場合，虚偽圧力振動を生む原因となり，計算不安定性へとつながる恐れがある[6,9,12]．

また，多成分系の場合には，任意関数の変数として各化学種の質量分率 Y_i が加わり(添字 i は化学種 i を示す)，$F(\rho, Y_i)$ や $G(\rho, Y_i)$ となる．多成分系熱量的完全気体の場合には，比熱比を γ_i として，$F(\rho, Y_i) = \gamma_i - 1$，$G(\rho, Y_i) = 0$ となるため，式(6)は，

$$\left(\frac{1}{\gamma_i - 1}\right)_j^{n+1} = \left(\frac{1}{\gamma_i - 1}\right)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} u^n \bar{D}_j \left[\left(\frac{1}{\gamma_i - 1}\right)_j^n\right] \quad (8)$$

と書け，多成分系熱量的完全気体の数値解析法でよく知られた比熱比の移流方程式[2,3]に帰着する．

ここまでの定式化と議論によって，状態方程式の形を原因とする圧力平衡のくずれ，虚偽圧力振動発生の一因を示してきたが，これは状態方程式が式(4)のように記述できる場合に限られる(内部エネルギ項 ρe が陽に書き出せる場合)．この場合には，式(6)と(7)で示された関数群の移流によって圧力平衡は満たされる．一方で，今回，実際の解析で使用した式(1)の 3 次型状態方程式，高精度ではあるが複雑なビリアル型状態方程式の場合には，内部エネルギ項 ρe を陽に書き出すことは難しく，式(6)と(7)のような移流方程式の導出は自明ではない．また，テーブル参照によって熱物性を決定する場合には，本質的に圧力平衡を満たすことは困難である．また，後述するように，圧力平衡が満たされない場合には，運動量方程式を介して，速度平衡も満たされないことにも注意が必要である．

2.3 圧力発展方程式

圧力は，一般的に 2 つの熱力変数で記述でき，ここでは圧縮性流体方程式を使用することを念頭にし，密度と内部エネルギを独立変数と仮定すると，

$$p = f(\rho, e) \quad (9)$$

と書くことができる．

本研究では，一般的な状態方程式，またテーブル参照する場合においても，接触不連続面における圧力平衡を満たす方法として，圧力発展方程式[14,15]の使用を提案する．つまり，一般状態方程式に対する圧力発展方程式を導出し，エネルギ保存方程式の代わりとして解くことにする．式(9)に基づき，圧力の移流方程式は次のように表すことができる．

$$\frac{Dp}{Dt} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_e \frac{D\rho}{Dt} + \left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_\rho \frac{De}{Dt} \quad (10)$$

非粘性流体を仮定すれば，熱力関係式を利用することで，最終的な圧力発展方程式は，

$$\frac{\partial p}{\partial t} + u\frac{\partial p}{\partial x} = -\rho c^2 \frac{\partial u}{\partial x} \quad (11)$$

と導出され，音速は，

$$c = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_e + \frac{p}{\rho^2}\left(\frac{\partial p}{\partial e}\right)_\rho \quad (12)$$

と求められる．s はエントロピである．

式(11)に示されているように，この圧力発展方程式を用いることで，時間 n において圧力と速度平衡が維持されていれば，時間 $n+1$ においても，その平衡が自動的に維持されることがわかる(接触面において，圧力と速度の空間勾配はゼロであり，圧力は時間変化しない)．ここで重要な点は，エネルギ保存方程式の使用から視点を変えた圧力発展方程式の使用により，式(1)の 3 次型状態方程式をはじめ，どのような形の状態方程式においても，接触不連続面における圧力平衡が自動的に満たされるということである．

2.4 人工粘性項と接触面速度平衡

前節で示したように，圧力発展方程式を用いれば，接触不連続面における圧力平衡を維持し，虚偽圧力振動に起因する数値不安定性を避けることが期待できる一方で，超臨界圧下の極低温流体と比較的高温の流体との接触不連続面においては，**図 1** に熱力特性が示されたように，最大 2 桁程度の密度や音速の違いが存在し，これが数値不安定性の原因の 1 つとなる．

この問題に対処するため，大きな勾配を持つ密度を未知変数とする質量保存式への人工粘性項の付加が考えられる．特に空間差分として中心差分法を使う場合には，数値不安定性の抑制によく使用される．ここで，接触不連続面において圧力と速度平衡が満たされていると仮定し，質量および運動量保存方程式を書くと，

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

$$\rho\frac{\partial u}{\partial t} = -u\left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + u\frac{\partial \rho}{\partial x}\right) = 0 \quad (14)$$

が得られる．つまり，この式の上では，人工粘性項が付加されていない場合，圧力平衡が満たされていれば，速度平衡も自動的に維持されることがわかる(式(14)により速度は時間変化しない)．これを逆に言い換えると，人工粘性項を人為的に付加することで，本来維持されていた速度平衡を崩す可能性があることを意味している．

そこで，本研究では，接触不連続面において速度平衡を維持することができる人工粘性項を構築する．式(2)と(3)で記述したように，質量と運動量保存式の離散化形式を次のように書く．

$$\rho_j^{n+1} = \rho_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\bar{D}_j\left[(\rho u)^n - \hat{A}_\rho\right] \tag{15}$$

$$(\rho u)_j^{n+1} = (\rho u)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\bar{D}_j\left[(\rho uu)^n - \hat{A}_{\rho u}\right] \tag{16}$$

ここで，人工粘性流束 $\hat{A}$ が加えられていることに注意いただきたい．また，上式では圧力平衡は満足されていると仮定する．これらの式から，時間 $n+1$ において，接触不連続面における速度平衡 ($u^n = u^{n+1}$) を維持するためには，

$$\hat{A}_{\rho u} = u\hat{A}_\rho \tag{17}$$

という関係式を満たしていれば良いことがわかる[9]．つまり，質量保存式に付加した人工粘性流束 $\hat{A}_\rho$ に対して，式(17)を満足する一貫性ある人工粘性流束 $\hat{A}_{\rho u}$ が運動量保存式に付加されなければいけない．この関係に従わない場合，圧力平衡は維持されている一方で，速度平衡が維持されず．それに起因する虚偽振動が発生する可能性がある．人工粘性流束の具体的な形は後述する．

2.5 単成分系流体に対するまとめ

以上の議論により，大きな密度差を伴う超臨界圧流体解析に対する支配方程式モデルとして，接触不連続面における圧力・速度平衡に着目し，

- 一般的な状態方程式に対して，圧力平衡を満足するための圧力発展方程式(式(10))
- 質量と運動量保存式に対して，速度平衡を満足するための人工粘性流束(式(17))

を提案した．

2.6 多成分系流体

多成分系流体に対しても一貫性を有する人工粘性流束を導くことができる．多成分系流体では，各化学種 i の質量保存式

$$(\rho Y_i)_j^{n+1} = (\rho Y_i)_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\bar{D}_j\left[(\rho u Y_i)^n - \hat{A}_{\rho Y_i}\right] \tag{18}$$

が加わり，人工粘性流束 $\hat{A}_{\rho Y_i}$ を決定する必要がある．

多成分系では，満足すべき条件として，質量分率の和が，

$$\sum_{i=1}^{N} Y_i = 1 \tag{19}$$

であり，式(18)の化学種に対する総和が，式(15)にならなければいけないことを考慮すると，質量と各化学種質量保存式における人工粘性流束の満足すべき関係として，

$$\hat{A}_\rho = \sum_{i=1}^{N} \hat{A}_{\rho Y_i} \tag{20}$$

が得られる．N は化学種数である．すなわち，多成分系の特徴として，式(17)で示された質量と運動量保存式における人工粘性流束の関係と同様に，質量と各化学種質量保存式における人工粘性流束も，式(20)に従い構築される必要がある．

2.7 人工粘性流束

ここまでの議論により，人工粘性流束の関係として，式(17)と(20)が得られた．いずれにも質量保存式に対する人工粘性流束 $\hat{A}_\rho$ が含まれており，この人工粘性流束 $\hat{A}_\rho$ の形が与えられれば，その他2つの人工粘性流束 $\hat{A}_{\rho u}$ と $\hat{A}_{\rho Y_i}$ を決定できる．

人工粘性流束の構築は任意性を持つが，ここでは大きな密度差を伴う超臨界圧流体を対象としていること，質量保存式の未知変数が密度であることを考慮すると，密度を用いた人工粘性流束の構築が妥当といえる．そこで，密度の2階微分が人工粘性となるように，質量保存式に対する人工粘性流束 $\hat{A}_\rho$ を

$$\hat{A}_\rho = \alpha\bar{D}_j[\rho] \tag{21}$$

と与える．ここで，α は任意定数である．この場合，運動量保存，各化学種質量保存式に対する人工粘性流束は，それぞれ，

$$\hat{A}_{\rho u} = \alpha u\bar{D}_j[\rho] \tag{22}$$

及び，

$$\hat{A}_{\rho Y_i} = \alpha\bar{D}_j[\rho Y_i] \tag{23}$$

と決定できる．

一方，各化学種質量保存式に対する人工粘性流束 $\hat{A}_{\rho Y_i}$ を最初に決めることも可能であり，例えば，分子拡散項と類似した形式で，$\hat{A}_{\rho Y_i} = \alpha\rho\bar{D}_j[Y_i]$ と与えることも考えられる．しかし，この場合，質量保存式の人工粘性流束 $\hat{A}_\rho$ が，式(20)の関係により，$\hat{A}_\rho = \alpha\rho$ となるため，質量保存式に対する人工粘性の役目を果たさないことに注意していただきたい(2階微分項にならない)．

任意係数 α は，本研究では局所人工拡散[16,17]の考え方を適用し，

$$\alpha = C_\rho \frac{c}{\rho}\overline{\left|\frac{\partial^4\rho}{\partial x^4}\right|\Delta x^5} \tag{24}$$

と与えた．ここで，定数 C_ρ の値については，以降の結果で議論する．式(24)の4階微分項は，陽的4次精度差分で評価し，上付きバーは近似ガウシアンフィルタである．式(24)と異なる評価式でも構わない．

2.8 人工拡散係数

ここまで示してきた数値モデル(式(21)，(22)，そして(23))により，接触不連続面における虚偽振動を

抑えることが可能であるが，多成分系流体解析では，虚偽の温度振動を抑えられない場合がある．これは，各化学種質量分率の小さな振動，すなわち $0 \le Y_i \le 1$ からずれる僅かな誤差が，状態方程式を介して，大きな温度振動として現れるためである（後ほど示す**図6**をご覧いただきたい）．

本研究では，この温度振動を避けるため，人工拡散係数 D_i^* を付加することを提案している．すなわち，分子拡散項における各化学種 i の拡散係数 D_i を

$$D_i = D_i^0 + D_i^* \tag{25}$$

とモデル化する．ここで，D_i^0 は物理拡散係数であり，人工拡散係数 D_i^* は，局所人工拡散に関する研究[16,17]を参考に，

$$D_i^* = C_Y c\overline{[(Y_i - 1)H(Y_i - 1) - Y_i\{1 - H(Y_i)\}]\Delta x} \tag{26}$$

とし，質量分率が $0 \le Y_i \le 1$ になるような制限をかける．H はヘビサイド関数，定数 C_Y は $C_Y = 100$ と設定している．

2.9 提案方程式モデル

本研究で提案する接触不連続面における圧力・速度平衡を維持する方程式モデルを1次元形式でまとめると，

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\hat{A}_\rho\right) \tag{27}$$

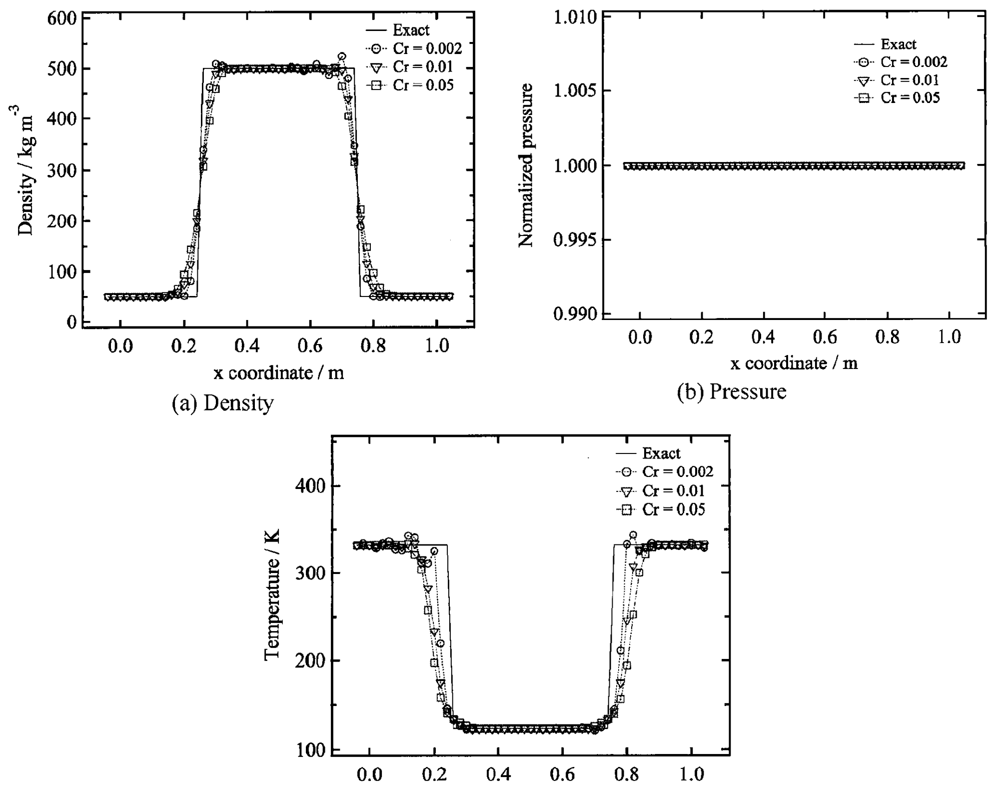
$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho uu)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\hat{A}_{\rho u}\right) \tag{28}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + u\frac{\partial p}{\partial x} = -\rho c^2 \frac{\partial u}{\partial x} \tag{29}$$

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Y_i)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x} + \hat{A}_{\rho Y_i}\right) \tag{30}$$

ここで，各人工粘性流束は，式(21)，(22)，そして(23)により，拡散係数は，式(25)により得られる．圧力発展方程式には陽的な人工粘性は加えない．この圧力・速度平衡を維持する数値モデルを採用することで，非常に厳しい熱力条件においても，高次精度手法が堅牢に適用できる．一方で，圧力発展方程式の使用により，全エネルギが保存されない欠点を有するが，エネルギ保存の誤差はそれほど大きくなく[6]，堅牢性を保持できる利点のほうが解析上有利であると考えている．粘性項などを含めた支配方程式は，文献[6,7]を参照いただきたい．

下記の結果を得るために，状態方程式にはSRK状態方程式，物理拡散係数 D_i^0 にはRiazi and Whitson model[18]を採用した．空間差分には6次精度コンパクト差分法[19]を用いた．高周波成分を取り除くため，



(a) Density (b) Pressure (c) Temperature

図2 Profiles of the advection of a contact discontinuity at $t = 0.02$ with the effect of a user-defined constant C_ρ

ρ，ρu，p，そしてρY_iに対して，時間積分の最終段で8次精度コンパクトフィルタ[20]をかけている．時間積分は3次精度TVD Runge-Kutta法[21]で行った．いずれの問題でもCFL数を0.4とした．

3. 結果

本稿では，1次元移流問題を用いて，提案モデルの有効性を検証する．多次元問題への適用については，著者らの既報[6,8]を参照いただきたい．

3.1 単成分系流体

作動流体を窒素とする．窒素の臨界密度は $\rho_{cr}=313.3$ kg/m^3，圧力は $\rho_{cr}=3.4$ MPa，温度は$T_{cr}=126.2$ K である．以降，表記が無い場合には，単位は，密度kg/m^3，速度m/s，圧力MPa，温度K，長さmとなる．本問題では，圧力は超臨界圧の5 MPa，速度は50 m/sとして，密度と温度は，

$$(\rho,\ T)=\begin{cases}(500,123.8), & 0.25<x<0.75\\(50,332.2), & \text{otherwise}\end{cases} \tag{31}$$

と設定した．この条件設定により，低温と高温窒素の接触面において，臨界温度を跨ぐ遷臨界噴射条件が模擬される．計算領域は，$0\leq x\leq 1$の周期境界とし，格子点は51点である．初期接触面は1点ジャンプ条件で与えられている．

図2に，$t=0.02$における密度，圧力，そして温度分布を示す．圧力は初期圧5 MPaで無次元化されている．まず，図2(b)から，接触面における圧力平衡が維持されるため，虚偽振動は一切見られないことがわかる．また，密度や温度分布から，式(24)の任意定数C_ρを大きくすることで，接触面で発生するwiggleを抑制できることが示されている(中心差分法の使用と初期接触面を1点ジャンプ条件としていることに留

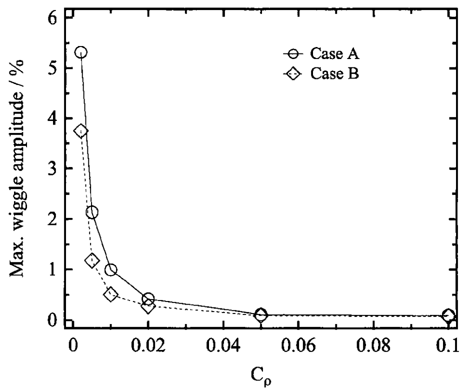
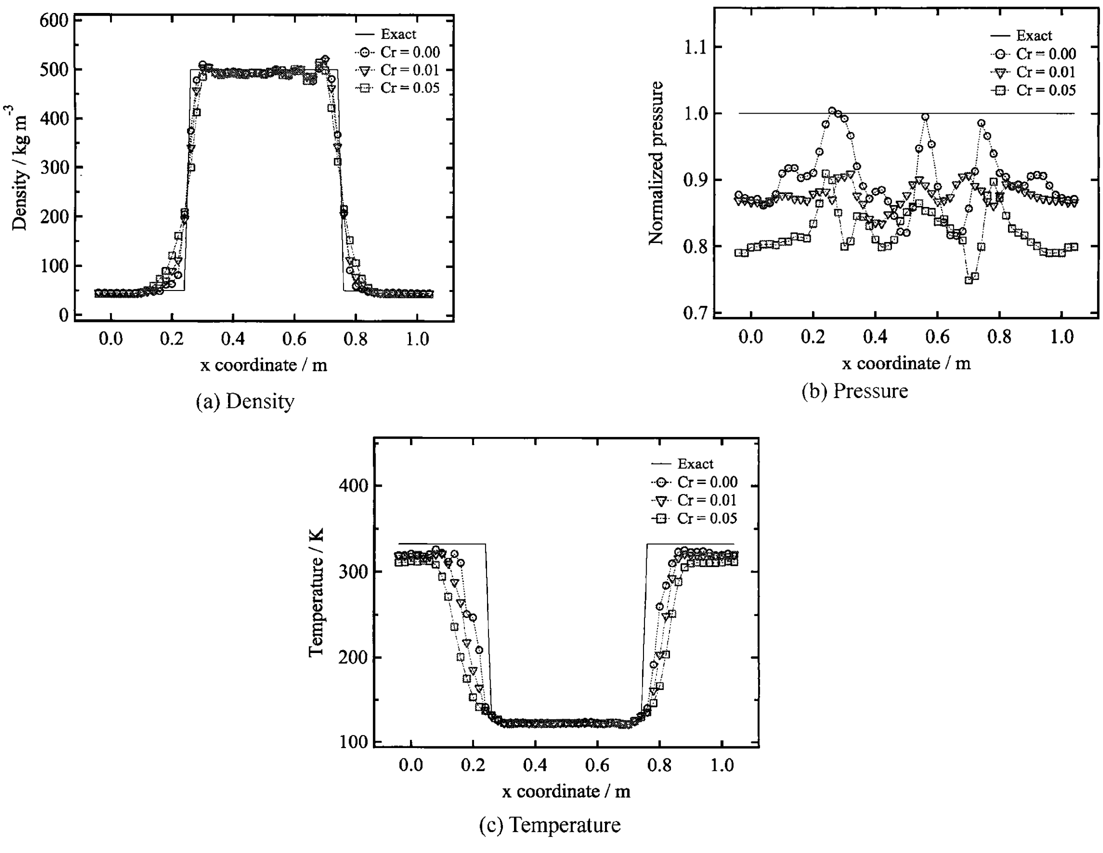


図3　Effects of a user-defined constant C_ρ of the artificial diffusion flux on the maximum wiggle amplitudes of density



(a) Density

(b) Pressure

(c) Temperature

図4　Profiles of the advection of a contact discontinuity at $t=0.02$ with a conservative method

意いただきたい）．ここには示していないが，速度平衡も維持され，一切の振動は発生していない．この結果から，大きな密度差を伴う接触面を捉えるために導入した人工粘性流束が，接触面における圧力・速度平衡を維持しつつ，密度や温度の wiggle 抑制に効果的であることがわかる．

図 3 は，人工粘性流束の大きさを調整する任意定数 C_ρ と密度分布における最大 wiggle 振幅の関係を示したものである．**図 2** で議論した条件（Case A とする）に加えて，高密度部分を 800 kg/m^3（82.4 K）と更に高密度かつ極低温化し，数値的に厳しい条件（Case B とする）の結果を追加している．いずれの条件においても，C_ρ を大きくすることにより，最大 wiggle 振幅は，単調かつ急激に減少していき，$C_\rho \geq 0.01$ の使用により，最大 wiggle 振幅は 1.0% 以下に抑えられる．温度分布においても同様のことが得られている．この結果は，付加した人工粘性流束が wiggle 抑制に効果的かつ狙い通りに働いていることを示すものである．

次に，同様の問題を完全保存系（式(29)に代わりに，全エネルギ保存式を用いる）で解いた結果を，**図 4** に示す．本提案モデルで得られた結果と比べ，非常に大きな虚偽圧力振動が見られる（**図 4(b)** を参照）．これは，接触面において圧力平衡が維持されないために発生した数値振動である．全体の圧力値も下がり，密度や温度値にも影響している．また，完全保存系を用いた場合，Case B の条件では，計算が破綻したことを明記する．

図 5 に，完全保存系における，任意定数 C_ρ と最大 wiggle 振幅の関係を示した．本提案モデルを適用した **図 3** の結果と異なり，C_ρ の大きさと共に wiggle 振幅は減少しないだけでなく，逆に大きくなる傾向を示

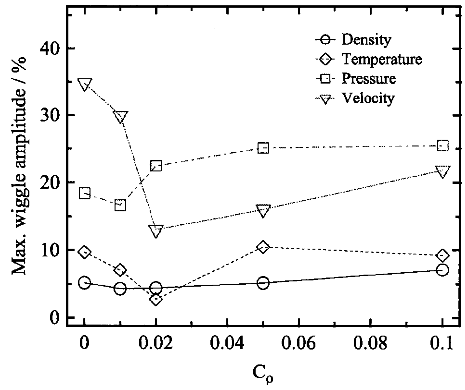


図 5　Effects of a user-defined constant C_ρ on the maximum wiggle amplitudes for a conservative method

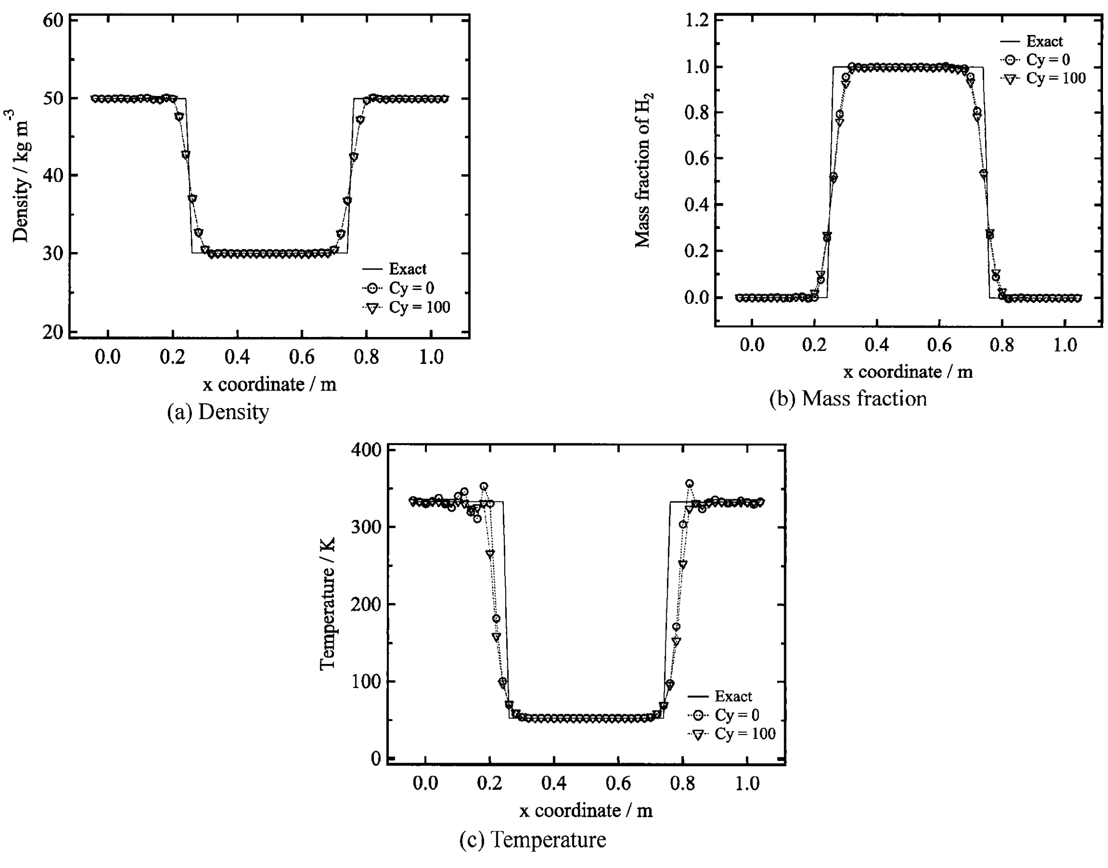


図 6　Profiles of the advection of a contact discontinuity at $t = 0.02$ for a multi-species case

す．また，振幅誤差値が非常に大きい．この結果は，完全保存系を用いた場合，計算安定を目的に導入した人工粘性が，逆に計算不安定性を増加させていることを意味するものである．接触面における圧力・速度平衡維持の考え方が重要であることを明確に示す結果といえる．

3.2 多成分系流体

超臨界圧下において，極低温水素が窒素中を移流する条件を設定する．水素の臨界密度は $\rho_{cr} = 31.4$ kg/m^3，圧力は $p_{cr} = 1.3$ MPa，温度は $T_{cr} = 33.2$ K である．本問題では，圧力は窒素，水素いずれも超臨界圧の 5 MPa，速度は 50 m/s として，密度と温度は，

$$(\rho, T) = \begin{cases} (30, 52.8)_{\mathrm{H_2}}, & 0.25 < x < 0.75 \\ (50, 332.2)_{\mathrm{N_2}}, & \text{otherwise} \end{cases} \tag{32}$$

と設定した．その他の計算条件は前問題と同じである．$C_\rho = 0.02$とした．

図6は，$t = 0.02$ における密度，水素の質量分率，そして温度分布である．密度分布を見ると，大きな wiggle も無く，滑らかな分布が得られており，導入した人工粘性流束が多成分系流体においても効果的に働いていることがわかる．一方で，**図6(c)**の温度分布を見ると，式(26)において $C_Y = 0$ とし人工拡散係数を使用しない場合，接触面付近において数値振動が発生している．これは，質量分率分布が僅かに振動していることが原因であり，多成分系流体における特有の問題といえる．$C_Y = 100$とすることで，数値振動は抑制されており，人工粘性係数の有効性が示されている（$C_Y = 50$でもほぼ同じ解が得られている）．ここには示していないが，圧力と速度は平衡が維持されているため，一切の振動は無く，一定値が保たれる．単成分系流体問題と同様に，完全保存系方程式を用いた場合には，大きな虚偽圧力・速度振動が発生し，計算不安定性につながることを明記する．

4. 結言

液体ロケットエンジン作動環境下を想定し，大きな密度差を伴う超臨界圧極低温流体に対する高精度かつ堅牢な数値解析モデルを提案した．本モデルは，接触不連続面における圧力・速度平衡の考えを導入し，圧力発展方程式と一貫性を有する人工粘性流束を使用する点に特徴を有する．解析結果により，保存性を維持する従来法では解析が困難である流体条件においても，高次精度中心差分法を採用しつつ，堅牢な解析が可能であることを示した．

参 考 文 献

1) V. Yang, M. Habiballah, J. Hulka, and M. Popp: Liquid rocket thrust chambers: aspects of modeling, analysis, and design. *Progress in astronautics and aeronautics*, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc. (2004)

2) R. Abgrall:. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations: a quasi conservative approach, *Journal of Computational Physics*, **125**-1, 150/160 (1996)

3) R. Abgrall and S. Karni: Computations of compressible multifluids, *Journal of Computational Physics*, **162**-1, 594/623 (2001).

4) N. Zong and V. Yang: Cryogenic fluid jets and mixing layers in transcritical and supercritical environments, *Combustion Science and Technology*, **178**, 193/227 (2006)

5) T. Schmitt, L. Selle, A. Ruiz, and B. Cuenot: Large-eddy simulation of supercritical-pressure round jets, *AIAA Journal*, **48**-9, 2133/2144 (2010)

6) H. Terashima and M. Koshi: Approach for simulating gas–liquid-like flows under supercritical pressures using a high-order central differencing scheme, *Journal of Computational Physics*, **231**-20, 6907/6923 (2012)

7) H. Terashima and M. Koshi: Corrigendum to "Approach for simulating gas–liquid-like flows under supercritical pressures using a high-order central differencing scheme"[J. Comput. Phys. 231-20, 6907–6923 (2012)], *Journal of Computational Physics*, **283**, 609/610 (2015)

8) H. Terashima and M. Koshi: Unique Characteristics of Cryogenic Nitrogen Jets Under Supercritical Pressures, *Journal of Propulsion and Power*, **29**-6, 1328/1336 (2013)

9) H. Terashima, S. Kawai, and M. Koshi: Consistent numerical diffusion terms for simulating compressible multicomponent flows, *Computers & Fluids*, **88**, 484/495 (2013)

10) 寺島洋史：液体ロケットエンジンにおける超臨界圧極低温単軸・同軸噴流の数値解析：急激な熱力特性変化を有する流体の高精度モデリング，第 28 回数値流体力学シンポジウム講演論文集，東京，(2014)

11) G. Soave: Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state, *Chemical Engineering Science*, **27**-6, 1197/1203 (1972)

12) H. Terashima, S. Kawai, and N. Yamanishi: High-resolution numerical method for supercritical flows with large density variations, *AIAA Journal*, **49**-12, 2658/2672 (2011)

13) K. M. Shyue: A fluid-mixture type algorithm for compressible multicomponent flow with Mie–Grüneisen equation of state, *Journal of Computational Physics*, **171**-2, 678/707 (2001)

14) S. Karni, S: Hybrid multifluid algorithms, *SIAM Journal on Scientific Computing*, **17**-5, 1019/1039 (1996)

15) R. Fedkiw, X. D. Liu, and S. Osher: A general technique for eliminating spurious oscillations in conservative schemes for multiphase and multispecies Euler equations, *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation*, **3**-2, 99/106 (2002)

16) A. W. Cook: Artificial fluid properties for large-eddy simulation of compressible turbulent mixing, *Physics of Fluids*, **19**-5, 055103 (2007)

17) S. Kawai and S. K. Lele: Localized artificial diffusivity scheme for discontinuity capturing on curvilinear meshes, *Journal of Computational Physics*, **227**-22, 9498/9526 (2008)

18) M. R. Riazi and C. H. Whitson: Estimating diffusion coefficients of dense fluids, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **32**-12, 3081/3088 (1993)
19) S. K. Lele: Compact finite difference schemes with spectral-like resolution, *Journal of Computational Physics*, **103**-1, 16/42 (1992)
20) D. V. Gaitonde and M. R. Visbal: Padé-Type Higher-Order Boundary Filters for the Navier-Stokes Equations, *AIAA Journal*, **38**-11, 2103/2112 (2000)
21) S. Gottlieb and C. W. Shu: Total variation diminishing Runge-Kutta schemes, *Mathematics of Computation of the American Mathematical Society*, **67**-221, 73/85 (1998)