



Title	気体燃料-空気同軸噴流の非定常乱流混合現象に関する数値計算手法の研究
Author(s)	古賀, 和樹
Citation	大阪大学, 2024, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/96062
rights	
Note	

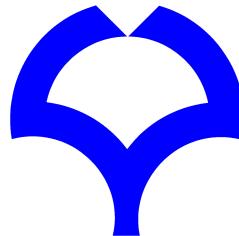
The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

博士学位論文

気体燃料-空気同軸噴流の
非定常乱流混合現象に関する
数値計算手法の研究



古賀 和樹

2023年3月

大阪大学大学院工学研究科
機械工学専攻

目 次

第 1 章	序論	1
1.1	本研究の背景	1
1.2	従来研究の概要	3
1.2.1	気体燃料と空気の二成分気体を扱う計算手法	4
1.2.2	二成分流体に対する急勾配捕獲スキーム	4
1.2.3	二成分流体に対する圧縮性流れの低数値散逸スキーム	5
1.2.4	二成分流体に対する圧縮性流れの乱流計算手法	7
1.3	本研究の目的	8
1.4	本論文の構成	9
第 2 章	数値計算手法	11
2.1	支配方程式	11
2.1.1	单成分流に対する支配方程式	11
2.1.2	二成分流体に対する支配方程式	12
2.2	二成分流体に対する低数値散逸スキーム	13
2.2.1	急勾配捕獲スキームと中心差分の混合スキーム	14
2.2.2	Weighted Compact Nonlinear Scheme(WCNS)	15
2.2.3	HLLC リーマンソルバー	17
2.2.4	速度の急勾配と比熱比の急勾配を検知する混合センサー	18
2.3	時間進行法	20
第 3 章	单成分・二成分圧縮性非粘性流れの検証計算	21
3.1	空間 1 次元の検証計算	22
3.1.1	二成分流体の衝撃波管問題	22

3.1.2 二成分流体の物質界面移流問題	24
3.2 単成分流体の渦-衝撃波干渉問題	26
3.3 二成分流体の気泡-衝撃波干渉問題	33
3.4 二成分流体の Triple-point 問題	38
3.5 まとめ	41
第 4 章 二成分圧縮性乱流の数値計算手法	42
4.1 支配方程式	42
4.2 Semi-explicit LES(SeLES)	43
4.2.1 急勾配センサーによる SGS モデルの修正	46
4.2.2 低数値散逸スキームの空間高次精度化	47
4.3 時間積分法とその他の項の離散化手法	49
第 5 章 非反応 ガス燃料-空気の同軸噴流問題による検証計算	50
5.1 非反応プロパン-空気の同軸噴流における検証計算	50
5.1.1 計算条件	51
5.1.2 計算結果	53
5.2 高マッハ数 非反応水素-空気の同軸噴流における検証計算	60
5.2.1 計算条件	61
5.2.2 計算結果	63
5.3 まとめ	70
第 6 章 結論	72
付 錄 A 物質界面センサーの比較	76
A.1 種々の物質界面センサーの導入	76
A.2 検証計算	78
付 錄 B 化学種濃度センサー	81
B.1 化学種センサーの導入	81
B.2 検証計算	82
付 錄 C 二成分圧縮性流れにおける無反射境界条件	83

C.1	Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition	83
C.1.1	亜音速流入条件	86
C.1.2	亜音速流出条件	86
C.2	Thrree-dimesional NSCBC	87
C.2.1	亜音速流出条件	88
C.3	検証計算	89
	参考文献	94
	関連論文	104
	謝辞	105

第1章 序論

1.1 本研究の背景

発電プラントや輸送機器の稼働時に排出される二酸化炭素 (CO_2) を削減するため、炭素含有量の少ない天然ガスや炭素を含まない水素を燃料とする内燃機関の研究開発が進められている。内燃機関内部では燃焼反応が発生するため、燃料と空気の混合状態をコントロールするノズルやバーナーの設計が重要である。

燃焼時に排出される有害物質である煤や窒素酸化物 (NO_x) を抑制するには、図 1.1 に示すような予混合燃焼^[1]が有効である。燃料と空気の混合を促進するため、燃焼室より上流側で縦渦や旋回流を発生させる機構が設けられる^{[2], [3]}が、この機構によって発生する流れが予混合燃焼を不安定化させる可能性があるため、反応領域前の流れ場と燃料と空気の混合状態を正確に予測し設計する必要がある。

予混合燃焼では、空気や燃料と逆方向に火炎が伝播する逆火現象が発生し、燃焼器を破損する可能性がある。逆火の形態の一つに、境界層逆火^{[5]~[7]}が挙げられる。境界層逆火は、図 1.2 のように壁面近傍の低速域または剥離領域において火炎が流れと逆行する現象である。

上記の技術的な課題の解決のためには、燃料と空気の完全な混合により均一な予

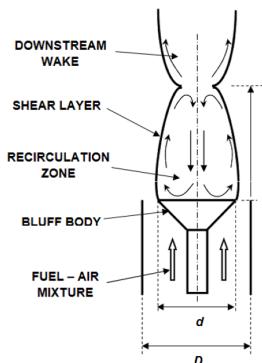


Fig. 1.1: Schematic of flow around a bluff body^[1].

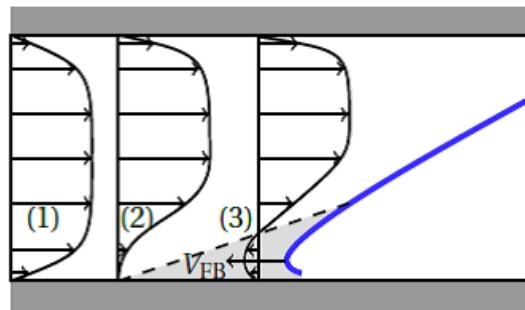


Fig. 1.2: Mechanism of boundary layer flashback of confined turbulent flame^[7].

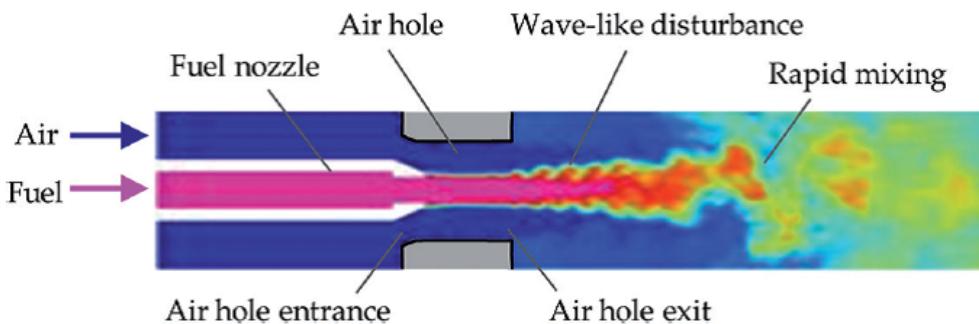


Fig. 1.3: Rapid mixing process in a co-axial jet^[8].

混合気を生成することが大前提となる。その方法のひとつとして、図1.3のような同軸噴流による急速混合方式^[8]が提案されている。この方式は、壁面から離れた領域での乱流による混合促進を利用しておる、技術開発のためには燃料と空気の同軸噴流の挙動の把握が不可欠となる。

同軸噴流による燃料と空気の乱流混合現象を解明するために実験を繰り返し行うことはコストや危険性が高い。一方、数値流体力学 (Computational Fluid Dynamics, CFD) を用いた解析は、コストが低く抑えられ、流れ場の詳細な情報を取得できる。二気体同軸噴流による急速混合方式における現象解明と設計応用に CFD を適用するには、噴流 (燃料) と周囲流 (空気) がノズル出口で接してから乱流遷移に至るまでの物質濃度分布を精度よく再現できる数値計算法および乱流解析法を確立することが不可欠である。

本研究で扱う同軸噴流では、噴流 (燃料) と周囲流 (空気) の間で、流速および物質濃度に差がある。ここで、空気の組成は安定しているため单成分流体とみなし、気

体燃料は单一成分とする。ノズル出口直後では、流速と濃度の分布が急勾配になる薄い層が噴流の外縁に形成される。この層は、ノズル出口から直ちに運動量輸送および物質の分子拡散が始まるため、徐々に厚くなる。しかし、高速同軸噴流の混合は、この層での分子拡散よりも、剪断層の不安定(コア部の円筒形状の崩壊)に続く乱流遷移が支配的である。一方、分子拡散が混合に寄与するのは、主として乱流遷移後、微細な渦の中で濃度が均一になる段階である。

本研究の対象においては、後に第5.1.1項、第5.2.1項で示す通り、分子拡散が及ぶ層の厚みの増加率は小さく、剪断層に不安定が発生する領域に到達する段階では非常に薄い。本研究では、急速な混合が生じる乱流領域の解析に照準を当てて数値計算の格子を設定するため、分子拡散が及ぶスケールは計算格子の幅よりも狭い。そのような背景から、燃料と空気の流速や濃度分布に急勾配がある層に対して、数値計算の観点では不連続面として扱う必要があることを強調するため、以下では分子拡散面と表記する。

燃料と空気の同軸噴流による急速混合方式の研究開発においては、上述の分子拡散面に加えて、高マッハ数の場合には衝撃波の発生を考慮する必要がある。数値計算では、これらはともに不連続面の扱いを要する。一般に、数値計算で不連続分布のある場を扱う場合、その近傍では非物理的な数値振動を生じさせない措置を講じ、それ以外では高精度を維持し、全体的には不連続をシャープに捕獲するスキームが採用される。二成分の圧縮流れにおいて、分子拡散面と衝撃波の混在する場合には、それぞれの急勾配を捕獲するとともに、その措置の影響が急勾配をもたない物理量に及ぼないような計算手法が必要である。また、乱流遷移後は、非定常計算法であるLarge-Eddy Simulation (LES) を適用し、計算格子スケールより細かいSub-Grid Scale (SGS) 変動に対して、運動量と濃度のそれぞれに乱流モデルを加える。以上のことから、本研究の目的に適合する二成分圧縮性流れに対する急勾配捕獲法と乱流計算法を新規に開発する必要がある。

1.2 従来研究の概要

ノズル出口から流れの不安定性によって揺らぎが発生する位置まで分子拡散面の厚みはほとんど発達せず、計算格子幅より狭い分子拡散面をはさんで物理量の分布

を連続的に解像することはできない。そのため、分子拡散面をはさんで物理量の急勾配が発生し、これが原因で数値シミュレーションを破綻させることがある。そのため、この急勾配を連続的に評価する計算手法が提案されている^{[10]~[12]}。計算手法に起因する数値粘性と呼ばれる離散化誤差によって、急勾配の分布を安定的に評価することができる^{[10]~[12]}。

しかし、数値粘性は速度場と物質濃度のいずれかだけに急勾配がある場合、その物理量だけに適切にはたらかせるため、反応を伴わない高マッハ数の気体燃料と空気の同軸噴流場のシミュレーションにおいては、計算結果として得られた速度分布や混合状態が実験結果を再現できない問題^{[13], [14]}がある。数値粘性が計算領域全体に加わることで、流れの不安定性やスケールの小さい渦が減衰するため、定性的に実験結果と異なる速度分布や混合状態になる例が報告されている。

本研究にあたって、密度や比熱の急勾配を安定的に計算できるスキームについて調査する。また、急勾配でない領域の数値粘性はシミュレーション結果の信頼性を低下させると考え、数値粘性が付加される範囲をできるだけ抑えた計算手法についても調査する。

1.2.1 気体燃料と空気の二成分気体を扱う計算手法

気体燃料と空気の二成分の流れ場の支配方程式は、質量保存則、運動量保存則、全エネルギー保存則に加え、流体の種別それぞれの質量分率あるいは比熱比の輸送方程式から構成される^{[10]~[12]}。

計算格子幅より狭い分子拡散面をはさんで発生する密度や比熱の急勾配は数値振動を引き起こし計算を不安定化させる。また、数値振動が発生すると気体燃料と空気の拡散面が乱れるため、混合過程を正しく再現できない。数値振動を発生させることなく、安定的に密度や比熱比の急勾配を捕獲する計算手法の研究が進められてきた^{[16]~[18], [10]}。

1.2.2 二成分流体に対する急勾配捕獲スキーム

圧縮性単成分流れにおいて急勾配を捕獲するスキーム^{[16]~[18]}を二成分圧縮性の流れ場にそのまま適用した場合、計算格子幅より狭い分子拡散面の密度分布の急勾配

は安定的に評価できるが、圧力分布や速度分布は数値振動が発生する課題があった。この課題に対し、Abgrall^[10]は、急勾配捕獲スキームに起因する数値粘性によって分子拡散面の両側で圧力が一定に保たれないことが数値振動の要因であることを示した。急勾配捕獲スキームによって数値粘性が含まれた密度を用いて、状態方程式により圧力を評価するため、分子拡散面の両側で圧力の誤差を発生させる。そこで、Abgrall はこれを克服する Quasi-Conservative 法を提案した。Quasi-Conservative 法は、離散化した方程式に対し質量分率あるいは比熱比の輸送方程式の移流項に対して密度を含めない非保存形で評価し、その他の輸送方程式の移流項は保存形で評価する方法である。密度を含めない非保存形の輸送方程式を用いて得られた質量分率あるいは比熱比を用いることで数値粘性の影響がなくなり、分子拡散面の両側の圧力を一定に保つことができる。

Abgrall が Quasi-Conservative 法を提案して以降は、より空間離散化精度の高い二成分流体の急勾配捕獲スキームが提案されてきた^{[19], [20]}。さらに、Quasi-Conservative 法の欠点である化学種が離散的に保存されない問題を克服するため、Johnsen & Ham^[21]は分子拡散面の両側における数値振動の抑制と化学種の保存を両立する Over-Estimated Quasi-Conservative 方程式を提案した。本来化学成分の変数は 1 つで十分であるところ質量分率と比熱比の 2 つ、化学種の輸送方程式も 2 つ使用するため Over-Estimated と呼ぶ。比熱比は圧力の状態方程式を評価するときのみ用いられる。Johnsen & Ham は、この方程式系に Weighted Essentially Non-Oscillatory(WENO) スキーム^[22]を適用することで高次精度急勾配捕獲スキームを構築した。

Nonomura & Fujii^[23]は Over-Estimated Quasi-Conservative 方程式系において特性波による固有方程式を導き、計算コストの低い高次精度急勾配捕獲スキームである差分法 WENO や Weighted Compact Nonlinear Scheme(WCNS) に拡張し、格子幅以下の分子拡散面捕獲と離散的な化学成分の保存性を両立する計算手法を提案した。

1.2.3 二成分流体に対する圧縮性流れの低数値散逸スキーム

单成分圧縮性流体に対して開発された低数値散逸スキームは、物理量の勾配が大きい領域では数値粘性が働き、勾配が小さな領域では数値粘性のない中心差分で評価する手法である。低数値散逸スキームを構築するには、急勾配を検知するセンサー

を用いて急勾配捕獲スキームと数値散逸のない中心差分スキームをカップリングさせる。高マッハ数の单成分圧縮性流れでは密度・圧力・速度・エネルギーの分布が急勾配となる衝撃波が発生し、衝撃波の発生位置を検知するセンサーが提案されている^{[24]~[26], [28], [29]}。計算コストも低く検知能力に優れた代表的な衝撃波センサーとして Ducros センサー^[26]があり、急勾配捕獲スキームと中心差分の混合スキームが提案されている。

一方で、二成分流体における低数値散逸スキームはまだ確立されていないものの、いくつかの研究例が報告されている。Movahed & Johnsen^[30]は Ducros センサーが化学種の急勾配を検知できないことを指摘し、これを検知する新たなセンサーを考案した。Movahed & Johnsen の低数値散逸スキームは密度の急勾配を検知した場合、化学種が单一の領域では单成分流体用の急勾配捕獲スキーム、混合流体領域では計算格子幅以下の分子拡散面用の急勾配捕獲スキームに切り替わる。急勾配捕獲スキームを单成分流体領域と混合流体領域で切り替える理由は、分子拡散面捕獲用の急勾配捕獲スキームでは单成分流体領域の急勾配を精度よく評価できないためである。急勾配でない領域では中心差分へ切り替わるが、手順が複雑であるため計算コストも高い。Wong & Lele^[31]は Total Variation(全変動)量と分布の滑らかさを検知するセンサーを用いて低散逸 WCNS 法を構築した。Wong & Lele はスキームのロバスト性を向上させるために、Harten-Lax-van Leer Contact (HLLC)^{[32], [33]}と数値散逸がより強い Harten-Lax-van Leer (HLL)^[34]の 2 種類のリーマン解法を適用した。それぞれのリーマン解法は Ducros センサーによって切り替えるのだが、Movahed & Johnsen が指摘しているように Ducros センサーは化学種の急勾配を検知できないため、二成分流体に適したものではない。Capuano et al.^[35]は圧力および密度を用いて評価する高解像度の急勾配センサーを考案し、これを用いて低数値散逸スキームを構築した。Capuano et al. の手法の欠点は、低数値散逸性を重視しているため急勾配捕獲スキームの数値粘性が十分ではなく、急勾配部において僅かに数値振動が発生することである。また、これらの先行研究で提案されている低数値散逸スキームは、Quasi-Conservative 法を用いているため、化学種が離散的に保存されない問題を残している。

1.2.4 二成分流体に対する圧縮性流れの乱流計算手法

同軸噴流ノズル出口から離れた領域では、流れの不安定性に起因する非定常性の強い乱れが生じ、そして乱流によって燃料と空気の混合が進む。乱流を解析する手法として、直接数値計算 (Direct Numerical Simulation, DNS), Reynolds-Averaged Navier-Stokes simulation (RANS), Large-Eddy Simulation (LES) が挙げられる。DNS は高精度ではあるが計算コストが非常に高いため、基礎的な流れ場への適用に限られる。RANS は計算コストが低いものの、非定常的な流れの挙動を把握することには適していない。LES は、DNS と比較して計算コストを抑えながら非定常現象を扱うことができる。本研究では、LES が気体燃料と空気の同軸噴流場の流れの不安定性による非定常的な乱れを再現するのに適していると判断した。

圧縮性乱流に対して適用されている LES は、陽的 LES と Implicit Large-Eddy Simulation (ILES)^{[36], [37]}に大別される。陽的 LES では支配方程式にフィルター操作を加えることで計算格子より大きいスケール (Grid Scale, GS) の渦と計算格子より小さいスケール (Sub-Grid Scale, SGS) の渦に分離する。GS 渦は直接計算し、計算格子で捕らえられない SGS 渦は乱流モデルにより近似する。SGS モデルは、格子で解像できる GS の物理量を用いて、格子サイズ以下の乱流によるエネルギー散逸の効果を与えるものある。一方、ILES は計算スキームに由来する数値粘性が SGS 乱流モデルと同様に格子で解像できない高波数成分を散逸させてるので、陽的な空間フィルター操作や乱流モデルを導入しない手法である。特に単調性を保存する急勾配捕獲スキームを用いた場合は、Monotone Integrated Large-Eddy Simulation(MILES)^[38]と呼ばれ、二成分流体の乱流場の解析にも適用されている。

反応を伴わない気体燃料と空気の同軸噴流場の計算事例^{[13], [14]}では、陽的 LES よりも MILES の方が実験結果をよく再現することが報告されている。しかし、この陽的 LES では急勾配捕獲スキームによる数値粘性が計算領域全体に付加されているため、乱流の SGS モデルによる散逸の影響と数値粘性による乱れの減衰の影響の二つがあると考えられる。数値粘性と SGS 渦粘性の両方の影響により乱れが減衰するため、陽的 LES の計算結果は MILES よりも悪い結果になったと考えられる。一方で、MILES では急勾配捕獲法スキームの離散化精度と格子解像度が計算結果に大きく影響することを報告^{[13], [14]}している。計算手法に由来する数値粘性は急勾配にお

いて適切な散逸を与えるが、乱流の物理的根拠がないため急勾配でない領域における散逸は過剰になることが原因と考えられる。急勾配でない領域の数値粘性による散逸を小さくするには計算格子を細かく設定することが求められるため、MILESは計算コストが高くなる。

1.3 本研究の目的

本研究は、予混合燃焼の安定化に寄与するため、気体燃料と空気の同軸噴流による急速混合法の設計や最適化に応用されるツールとしての数値計算法の確立を目的としている。そのため、本研究の範囲内では、反応を伴わない燃料と空気の同軸噴流場を対象とする。燃焼反応領域を含めた流れを精度よく再現するには、反応直前の乱れや混合状態を精度よく再現することが前提である。燃焼反応領域より上流側の流れと混合状態を正確にシミュレーションできる乱流計算手法を確立することは、乱流と化学反応の相互干渉を考慮した燃焼反応モデル^[39]の検証やモデルの改良に関する研究にも貢献すると考えられる。

本研究で扱う流れ場は、混合前の燃料と空気の境界をはさんで密度や比熱の急勾配を伴う。また、ノズルから離れた領域では流れの不安定が生じ、その後の乱流遷移により急速に混合が進行する。そこで、急勾配を捕獲すると同時に、乱流遷移後の渦構造を再現できる計算手法が必要である。

まず、燃料と空気の混合前の計算格子幅以下の分子拡散面を数値振動なく捕らえかつ化学種を離散的に保存する急勾配捕獲スキームを導入する。急勾配捕獲スキームに起因する数値粘性は物理量の勾配が小さい領域の流れの状態を正しく再現できないと考えられる。そのため本研究では、急勾配が発生する領域では数値粘性を持つ急勾配捕獲スキームで移流項を評価し、物理量の勾配の小さな領域では数値粘性のない中心差分で移流項を評価する低数値散逸スキームを構築する。低数値散逸スキームを構築するために、速度・密度・比熱などの物理量の急勾配発生位置を検知するセンサーを新たに提案する。

次に、計算コストを抑えながら気体燃料と空気の非定常的な流れの挙動と乱流を再現するため、LESを基礎とした計算手法を構築する。低数値散逸スキームによって、密度や比熱の急勾配が発生する領域では数値粘性が付加されるため、そこにSGSモ

モデルによる格子解像度以下の乱流の散逸効果が加わることは、過剰な散逸を与えることになるため計算結果の信頼性を下げると考えられる。数値粘性と乱流SGSモデルによる渦粘性の付加領域の重なりを防ぎ計算結果の信頼性を高めるために、SGSモデルの渦粘性に急勾配センサーを適用し、局所的にSGS渦粘性が付加される新たなLESであるSemi-explicit Large Eddy Simulation (SeLES)を提案する。

新規に提案する低数値散逸スキームとSeLESの従来法に対する改善効果を個別に確認し、これらを総合して、気体燃料と空気の同軸噴流場の検証計算を実施する。特に、水素と空気の同軸噴流場に対して、平均速度分布や質量分率分布について実験結果を正しく再現できていなかった先行研究のMILESよりも、本研究で提案した計算手法の方が精度よく再現できることを示す。

1.4 本論文の構成

本論文は全6章で構成される。第1章は序論であり、本研究の背景、従来研究の概要、および研究目的を述べる。

第2章では、二種類の気体が存在する圧縮性流体の数値計算手法について示す。支配方程式を示した後に、計算手法のベースとなる急勾配捕獲スキームについて述べる。次に、急勾配捕獲スキームと中心差分との混合スキームに対応する数値流束評価法を示す。速度の急勾配と比熱の急勾配をそれぞれ検知するセンサーを導入し、低数値散逸スキームを構築する。最後に時間進行法について記述する。

第3章では、粘性および分子拡散がない単成分および二流体圧縮性流れに対する検証例題を用いて、第2章で構築した計算手法の検証を行う。粘性や分子拡散の影響がないことにより物理量分布の急勾配を拡散させることができないため、計算手法の数値不安定性を純粋に評価が可能となる。また、粘性と分子拡散の影響ではなく純粋に数値粘性の効果による流れの減衰を確認することができるため、低数値散逸スキームの検証に適している。まず、二成分流体における一次元検証計算において、ベースとなる急勾配捕獲スキームが数値振動なく急勾配を捕獲可能であることを示す。次に、急勾配捕獲性能と低数値散逸性を検証するために、単成分流体における二次元渦-衝撃波干渉問題の検証計算を実施する。二次元の二成分流体における気泡-衝撃波干渉問題およびTriple-point問題の検証計算により、提案したセンサーが速

度の急勾配と比熱の急勾配を精度よく検知し、急勾配を数値振動なく捕らえられることを示す。

第 4 章では、二成分圧縮性流体に対する乱流の数値計算手法について述べる。二つの気体が存在する圧縮性流体における粘性項や熱流束、物質拡散項、および混合流体の物性評価方法を示す。次に、LES の基礎式について説明した後に SGS モデルを導入する。そして、新たな乱流計算手法である Semi-explicit LES の構築方法を記述する。

第 5 章では、構築した乱流計算手法を用いて非反応の気体燃料-空気同軸噴流のミュレーションを実施し、得られた計算結果を実験データや従来手法の MILES の計算結果と比較し、考察を行う。水素と空気の同軸噴流場の検証計算においては、速度分布や質量分率分布について実験結果を正しく再現できていなかった従来手法より、本研究で構築した計算手法が精度よく再現できることを確認する。

第 6 章は結論である。本研究を総括し、今後の展望について述べる。

第2章 数値計算手法

本章では、気体燃料と空気の二成分の圧縮性流体の数値計算手法について述べる。本研究では、空気は单成分流体とみなし、気体燃料は单一とする。二成分圧縮性流れの流体挙動は質量保存則、Navier-Stokes 方程式、エネルギー保存則に従う。ただし、重力の影響については考えない。気体燃料と空気の割合が時間的・空間的に変化するので、質量分率あるいは比熱比の輸送方程式を導入する。空気も気体燃料も理想気体を仮定し、状態方程式により状態量が定まる。本研究では、有限差分法をベースとし、二成分圧縮性流体の低数値散逸スキームの構築方法、急勾配捕獲スキーム、急勾配センサー、そして時間進行法について示す。

2.1 支配方程式

2.1.1 单成分流に対する支配方程式

まず本節では、非粘性流体の单成分圧縮性流れの支配方程式として3次元デカルト座標系で記述された質量保存則、運動量保存則、および全エネルギー保存則を示す。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = 0 \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j E}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j p}{\partial x_j} = 0 \quad (2.3)$$

ここで、 t は時間、 $x_i (i=1, 2, 3)$ は空間座標、 u_i は x_i 方向の速度成分、 ρ は密度、 p は圧力、 $E = e + u_i u_i / 2$ は全エネルギーである。なお、 e は内部エネルギーである。これらの方程式系を閉じるために、次式の理想気体の状態方程式を導入する。

$$p = \rho R T = (\gamma - 1) \rho e \quad (2.4)$$

ここで, T は温度, R は気体定数, および γ は比熱比である. C_p と C_v はそれぞれ定圧比熱と定積比熱であり, 比熱比 γ は次の関係式となる.

$$\gamma = \frac{C_p}{C_v} \quad (2.5)$$

2.1.2 二成分流体に対する支配方程式

本研究では, 粘性および分子拡散がない二成分の気体に関する圧縮性流体の方程式について考える. 化学種の移流に関しては次式で表される質量分率の輸送方程式^{[10]~[12]}を用いる.

$$\frac{\partial \rho Y_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_1}{\partial x_j} = 0 \quad (2.6)$$

ここで Y_1 は気体 1 の質量分率である. 気体 0 の質量分率は次式で得られる.

$$Y_0 = 1 - Y_1 \quad (2.7)$$

混合流体における密度, 速度および内部エネルギーは次式のように定義される.

$$\rho = \rho_0 + \rho_1, \quad u_i = Y_0 (u_i)_0 + Y_1 (u_i)_1, \quad e = Y_0 e_0 + Y_1 e_1 \quad (2.8)$$

上記の定義により, 多成分流体における質量保存則, 運動量保存則, 全エネルギー保存則は单成分流の場合と形式的に同じ式になる^[41]. すなわち, 多成分流体における質量保存則, 運動量保存則, 全エネルギー保存則は式 (2.1)-(2.3) である.

格子幅以下の拡散面近傍において数値拡散領域が生じるため, その領域における混合気体の平均比熱比が定義される.

$$\gamma = \frac{1}{\frac{Y_1}{\gamma_1-1} \frac{M}{M_1} + \frac{Y_0}{\gamma_0-1} \frac{M}{M_0}} + 1 \quad (2.9)$$

$$M = \frac{1}{\frac{Y_1}{M_1} + \frac{Y_0}{M_0}} \quad (2.10)$$

ここで, M_0 と M_1 はそれぞれ気体 0 と 1 の分子量である.

本研究では, 質量分率の輸送方程式に加えて, 比熱比の輸送方程式を加えた Over-Estimated Quasi-Conservative 方程式系^{[21], [23], [40]}を用いる. 比熱比の輸送方程式は次式で表される.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\gamma_p - 1} \right) + u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\gamma_p - 1} \right) = 0 \quad (2.11)$$

ここで、比熱比 γ_p は圧力の状態方程式を計算するときに用いることを示している。比熱比の方程式を密度を含まない形で評価することで、急勾配捕獲スキームの数値粘性による格子幅以下の拡散面両側での圧力の数値振動を抑制できる^[10]。上式によって得られた比熱比を用いて状態方程式を評価する。

$$p = (\gamma_p - 1) \rho e \quad (2.12)$$

この方程式系を用いることで化学種の保存も離散的にも保たれる^{[21], [23], [40]}。

2.2 二成分流体に対する低数値散逸スキーム

圧縮性流れの急勾配捕獲スキームを構築する上では、流れの特性波に応じて固有分解を行い、それぞれ左右の固有ベクトルを評価^[42]する必要があるため、支配方程式をベクトル形式でまとめておくと都合がよい。そこで本節以降では、ベクトル形式で表された二成分圧縮性流体における支配方程式について考える。また、急勾配捕獲スキームを検討する上では1次元で考えた方が理解しやすいので、空間1次元に落とし込んだ支配方程式においてスキームを構築する。

まず、Over-Estimated Quasi-Conservative 形式の支配方程式をベクトル形式に置き換えると次のようになる^[23]。

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{M} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0 \quad (2.13)$$

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho E \\ \rho Y_1 \\ \frac{1}{\gamma_p - 1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ 0 & & & & u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(\rho E + p) \\ \rho u Y_1 \\ \frac{1}{\gamma_p - 1} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

Over-Estimated Quasi-Conservative 形式での固有方程式は次式のとおりである。

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{B} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial x} = 0 \quad (2.15)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{M} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Q}} = \mathbf{L} \Lambda \mathbf{R} \quad (2.16)$$

ここで、ベクトル \mathbf{B} に基づいた左右の固有行列と固有値はそれぞれ次式で表される。

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \mathbf{l}_1 \\ \mathbf{l}_2 \\ \mathbf{l}_3 \\ \mathbf{l}_4 \\ \mathbf{l}_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(b_2 + \frac{u}{c}) & -\frac{1}{2}(b_1u + \frac{1}{c}) & \frac{1}{2}b_1 & 0 & -\frac{1}{2}b_1p \\ 1 - b_2 & b_1u & -b_1 & 0 & b_1p \\ \frac{1}{2}(b_2 - \frac{u}{c}) & -\frac{1}{2}(b_1u - \frac{1}{c}) & \frac{1}{2}b_1 & 0 & -\frac{1}{2}b_1p \\ -Y_1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \mathbf{r}_1 & \mathbf{r}_2 & \mathbf{r}_3 & \mathbf{r}_4 & \mathbf{r}_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ u - c & u & u + c & 0 & 0 \\ H - uc & \frac{1}{2}u^2 & H + uc & 0 & p \\ Y_1 & Y_1 & Y_1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

$$\mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \lambda_2 & \\ & & \lambda_3 \\ 0 & & \lambda_4 \\ & & & \lambda_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u - c & & & 0 \\ & u & & \\ & & u + c & \\ 0 & & & u \\ & & & u \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

音速 c , 全エンタルピー H , および b_1 と b_2 はそれぞれ次式で与えられる。

$$c = \sqrt{\frac{\gamma_p p}{\rho}} \quad (2.20)$$

$$H = \frac{c^2}{\gamma_p - 1} + \frac{1}{2}u^2 \quad (2.21)$$

$$b_1 = \frac{\gamma_p - 1}{c^2} \quad (2.22)$$

$$b_2 = \frac{u^2 b_1}{2} \quad (2.23)$$

ここで、音速や全エンタルピーは γ_p 用いて評価することに注意する。

2.2.1 急勾配捕獲スキームと中心差分の混合スキーム

本項では次式で表される空間離散式について考える。

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{M}_i \frac{\mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}}{\Delta x} = 0 \quad (2.24)$$

ここで、 Δx は格子幅、下付き添え字 $i + 1/2$ はセル界面であることを示す。セル界面における急勾配捕獲スキームと中心差分との混合数値流束は次式で与えられる。

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = [\psi_{\text{HS}} \mathbf{F}^{SC} + (1 - \psi_{\text{HS}}) \mathbf{F}^C]_{i+1/2} \quad (2.25)$$

上式において、 \mathbf{F}^{SC} は急勾配捕獲スキームに対応する数値流束、 \mathbf{F}^C は中心差分法に対応する数値流束である。また、 ψ_{HS} は改めて話題にする。最もシンプルな空間2次精度中心差分に対応する数値流束は次式で与えられる。

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^C = \frac{\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1}}{2} \quad (2.26)$$

本研究では、比熱比の輸送方程式を除き支配方程式の移流項は発散型を適用する。

$$(Div.)_\phi \equiv \frac{\partial \rho u_j \phi}{\partial x_j} \quad (2.27)$$

ここで、 ϕ は物理量を示す。比熱比の輸送方程式の移流項の評価には、次式の非保存型(勾配型)を用いる。

$$\begin{aligned} (Adv.)_{\gamma_p} &\equiv u_j \frac{\partial \Gamma_p}{\partial x_j} \\ &= \frac{\partial u_j \Gamma_p}{\partial x_j} - \Gamma_p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\Gamma_p = \frac{1}{\gamma_p - 1} \quad (2.29)$$

本研究では、移流項に対して最もシンプルなエネルギー保存型の中心差分スキーム^[43]に対応する数値流束を適用する。

2.2.2 Weighted Compact Nonlinear Scheme(WCNS)

急勾配捕獲スキーム^{[16]~[18]}を適用した場合、空間離散化精度は1次になるため解像度が低下する。空間解像度の低下を防ぐために急勾配捕獲スキームの高次精度化手法が提案されており、本研究では高次精度化手法のひとつである Weighted Compact Nonlinear Scheme(WCNS)^{[44]~[49]}を導入する。

空間3次精度の非線形補間を構築するために3点のステンシル $S_j = \{j - 1, j, j + 1\}$ について考える。まず WCNS 補間を行うには、次式のように保存量を特性量へ変換する必要がある。

$$q_{n,m} = \mathbf{l}_m \mathbf{Q}_n \quad (n = j - 1, j, j + 1) \quad (2.30)$$

ここで, $q_{n,m}$ は m 次の特性量, \mathbf{l}_m は左固有行列 (式 (2.17)) の m 行のベクトルである. 特性量 $q_{n,m}$ から保存量 \mathbf{Q}_n への変換法を説明する. 特性量の空間 2 次精度補間は次式で得られる.

$$q_{j+1/2,m}^{\text{L},1} = \frac{1}{2}(-q_{j-1,m} + 3q_{j,m}) \quad (2.31)$$

$$q_{j+1/2,m}^{\text{L},2} = \frac{1}{2}(-q_{j,m} + q_{j+1,m}) \quad (2.32)$$

$$q_{j-1/2,m}^{\text{R},1} = \frac{1}{2}(q_{j-1,m} - 3q_{j,m}) \quad (2.33)$$

$$q_{j-1/2,m}^{\text{R},2} = \frac{1}{2}(q_{j,m} - q_{j+1,m}) \quad (2.34)$$

上付き添え字 L および R はセル界面における左側および右側の物理量をそれぞれ示す. この 2 次精度の補間量を用いて次式のように重みを付けて評価することで 3 次精度の補間量が得られる.

$$\tilde{q}_{j+1/2,m}^{\text{L}} = w_1^{\text{L}} q_{j+1/2,m}^{\text{L},1} + w_2^{\text{L}} q_{j+1/2,m}^{\text{L},2} \quad (2.35)$$

$$\tilde{q}_{j-1/2,m}^{\text{R}} = w_1^{\text{R}} q_{j-1/2,m}^{\text{R},1} + w_2^{\text{R}} q_{j-1/2,m}^{\text{R},2} \quad (2.36)$$

$w_k^{\text{L/R}}$ ($k = 1, 2$) は非線形重みであり, 次式で評価される.

$$w_k^{\text{L/R}} = \frac{\alpha_k^{\text{L/R}}}{\alpha_1^{\text{L/R}} + \alpha_2^{\text{L/R}}} \quad (2.37)$$

$$\alpha_k^{\text{L/R}} = \frac{C_k^{\text{L/R}}}{(IS_k + \varepsilon)^2}, \varepsilon = 10^{-6} \quad (2.38)$$

$$C_1^{\text{L}} = C_2^{\text{R}} = \frac{1}{4}, C_2^{\text{L}} = C_1^{\text{R}} = \frac{3}{4} \quad (2.39)$$

スムーズインジケータ IS_k は,

$$IS_1 = (-q_{j-1,m} + q_{j,m})^2, \quad (2.40)$$

$$IS_2 = (-q_{j,m} + q_{j+1,m})^2, \quad (2.41)$$

と計算される. 最後に, 特性量の非線形重み平均値は次式のように物理空間へと変換される.

$$\mathbf{Q}_{j+1/2}^{\text{L}} = \sum_m \mathbf{r}_m \tilde{q}_{j+1/2,m}^{\text{L}} \quad (2.42)$$

$$\mathbf{Q}_{j-1/2}^{\text{R}} = \sum_m \mathbf{r}_m \tilde{q}_{j-1/2,m}^{\text{R}} \quad (2.43)$$

ここで, $\mathbf{r}_{j,m}$ は右固有行列(式(2.18))の m 列のベクトルである. 分布の勾配が大きく変化する領域において重み係数の値が変化することで数値振動を回避する^[44]. 空間3次精度のWCNSによって高次精度化されたセル界面上の物理量を用いて, 次項の急勾配捕獲スキームを評価する.

2.2.3 HLLC リーマンソルバー

Harten-Lax-van Leer Contact(HLLC) リーマンソルバー^{[32], [33]}は静止した衝撃波, 接触不連続, および比熱比や質量分率の急勾配を数値振動なく解けるので, 急勾配を伴う二成分圧縮性流れの数値計算において使用される^[19]ため, 本研究の急勾配捕獲スキームとして導入する.

HLLCスキームによる数値流束は次式で評価される.

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^{SC} = \frac{1 + \text{sign}(s^*)}{2} \left[\mathbf{F}^L + s^- (\tilde{\mathbf{Q}}^L - \mathbf{Q}^L) \right] + \frac{1 - \text{sign}(s^*)}{2} \left[\mathbf{F}^R + s^+ (\tilde{\mathbf{Q}}^R - \mathbf{Q}^R) \right] \quad (2.44)$$

$$\tilde{\mathbf{Q}}^{L/R} = \frac{s^{L/R} - u^{L/R}}{s^{L/R} - s^*} \begin{pmatrix} \rho^{L/R} \\ \rho^{L/R} s^* \\ E^{L/R} + (s^* - u^{L/R}) \left(\rho^{L/R} s^* + \frac{p^{L/R}}{s^{L/R} - u^{L/R}} \right) \\ \rho^{L/R} Y_1^{L/R} \\ \left(\frac{u}{\gamma_p - 1} \right)^{L/R} \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

ここで, 上付き添え字 L および R はセル界面における左側および右側の物理量をそれぞれ示す. 右側および左側の物理量 $\mathbf{Q}^{L/R}$ はWCNS補間されたものが与えられる. 次に, 音波の伝播方向に対する特性速度は次式によって計算される.

$$s^- = \min(0, s^L), s^+ = \max(0, s^R) \quad (2.46)$$

$$s^L = \min((u^{\text{Roe}} - \tilde{c}), u^L - c^L), s^R = \max((u^{\text{Roe}} + \tilde{c}), u^R + c^R) \quad (2.47)$$

$$\tilde{c} = \left[(\gamma_p - 1) \left(H^{\text{Roe}} - \frac{1}{2} (u^{\text{Roe}})^2 \right) \right]^{1/2} \quad (2.48)$$

ここで, ϕ^{Roe} はRoe平均である.

$$\phi^{\text{Roe}} = \frac{\sqrt{\rho^L} \phi^L + \sqrt{\rho^R} \phi^R}{\sqrt{\rho^L} + \sqrt{\rho^R}} \quad (2.49)$$

中間速度 s^* は次のように求められる。

$$s^* = \frac{p^R - p^L + \rho^L u^L (s^L - u^L) - \rho^R u^R (s^R - u^R)}{\rho^L (s^L - u^L) - \rho^R (s^R - u^R)} \quad (2.50)$$

HLLC スキームは特性速度の評価方法によっては数値振動を発生させることが報告されている^{[50], [51]}ため、本研究で使用した HLLC スキームの特性速度の評価方法が適切かどうかを次節の検証計算にて確認する。

比熱比の輸送方程式の移流項は非保存形(勾配型)で評価する。この場合、式(2.28)の第2項である流速の差分に HLLC スキームを適用すると次式となる。

$$\frac{\partial u_j \Gamma_p}{\partial x_j} - \Gamma_p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} = \frac{(u \Gamma_p)_{i+1/2} - (u \Gamma_p)_{i-1/2}}{\Delta x} - \Gamma_p \frac{u_{i+1/2}^{\text{SC}} - u_{i-1/2}^{\text{SC}}}{\Delta x} \quad (2.51)$$

$$u_{i+1/2}^{\text{SC}} = \frac{1 + \text{sign}(s^*)}{2} \left[u^L + s^- \left(\frac{s^L - u^L}{s^L - s^*} - 1 \right) \right] + \frac{1 - \text{sign}(s^*)}{2} \left[u^R + s^+ \left(\frac{s^R - u^R}{s^R - s^*} - 1 \right) \right] \quad (2.52)$$

2.2.4 速度の急勾配と比熱比の急勾配を検知する混合センサー

圧縮性流れにおいて低数値散逸スキームを構築する際には、圧力や速度の急勾配を検知するセンサーが重要な役割を果たす^[25]。ただし、比熱比の急勾配を有する圧縮性流れでは速度の急勾配センサーだけでは化学種の急勾配を検知することはできない。そのため、本研究では比熱比を用いて化学種分布の急勾配を検知する比熱比の急勾配センサーを提案し、速度勾配センサーと組み合わせることで流れ場に生じる急勾配を全て検知する混合センサーを構築する。

本研究では複雑な流れ場においても速度分布の急勾配を精度よく検知する Larsson センサー^[52]を導入する。Larsson センサーは次式のように評価される。

$$\sigma_{\text{LS},i} = \frac{-\nabla \cdot \mathbf{u}}{\max(L_{\text{ss1}}|\nabla \times \mathbf{u}|, L_{\text{ss2}}\frac{c}{\Delta V})} \quad (2.53)$$

$$\phi_{\text{LS},i} = \begin{cases} 1 & (\sigma_{\text{LS},i} > 1) \\ 0 & (\sigma_{\text{LS},i} \leq 1) \end{cases} \quad (2.54)$$

$$\psi_{\text{LS},i+1/2} = \max(\phi_{\text{LS},i}, \phi_{\text{LS},i+1}) \quad (2.55)$$

ここで、空間2次元では $\Delta V = \sqrt{\Delta x \Delta y}$ 、空間3次元では $\Delta V = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$ である。Larsson センサーは、速度の急勾配が存在する領域においては1、急勾配でない領域では0となる。速度勾配が小さいかつ渦が発生する領域では、渦度 $\nabla \times \mathbf{u}$ の方が大きくなるため Larsson センサーは0となる。Larsson センサーは渦度を用いているため空間2次元以上の計算において有効である。

Larsson センサーのパラメータである L_{ss1} と L_{ss2} は流れ場に依存する閾値である。本研究では、 L_{ss1} および L_{ss2} はそれぞれ0.1および 10^{-4} と設定した。これらのパラメータは次章の検証計算問題にて、 $0.001 < L_{ss1} < 5$ と $10^{-4} < L_{ss2} < 0.05$ の範囲で調査した後に決定した。

次に、化学種の急勾配を検知する次式の比熱比の急勾配センサーを導入する。

$$\sigma_i = \frac{|(\Gamma_p)_{i-1} - 2(\Gamma_p)_i + (\Gamma_p)_{i+1}|}{|(\Gamma_p)_{i-1} + 2(\Gamma_p)_i + (\Gamma_p)_{i+1}|} \quad (2.56)$$

$$\eta_i = \frac{(\Gamma_p)_i - \min[(\Gamma_p)_{i-1}, (\Gamma_p)_{i+1}] + \varepsilon}{\max[(\Gamma_p)_{i-1}, (\Gamma_p)_{i+1}] - \min[(\Gamma_p)_{i-1}, (\Gamma_p)_{i+1}] + \varepsilon} \quad (2.57)$$

$$\phi_{GS,i} = \begin{cases} 1 & (\sigma_i > C_{GS} \text{ and } \delta < \eta_i < 1 - \delta) \\ 0 & (\text{others}) \end{cases} \quad (2.58)$$

ここで、 $\varepsilon = 10^{-16}$ 、 $C_{GS} = 10^{-4}$ 、および $\delta = 10^{-6}$ である。式(2.57)は比熱比の急勾配センサーに対するクライテリアであり、Deng et al. の二相流用の高次精度急勾配捕獲スキーム^{[53], [54]}を構築するために導入されたクライテリアを参考にして考案した。式(2.56)により圧力勾配の大きさを求め、式(2.57)のクライテリアによって勾配が空間的に連続で変化しているかを判定するセンサーとした。次節の検証計算例題において、 $C_{GS} = 10^{-4}$ は $10^{-6} < \sigma_i < 0.1$ 、 δ は $10^{-6} < \delta < 10^{-4}$ の範囲で調査した後にそれぞれのパラメータ値を決定した。セル界面におけるセンサーは

$$\psi_{GS,i+1/2} = \max(\phi_{GS,i}, \phi_{GS,i+1}), \quad (2.59)$$

と評価される。なお、上記で提案した比熱比の急勾配センサーとは異なる評価方法についても検討しており、その内容は付録Aに示す。

速度勾配センサーと比熱比の急勾配センサーを次式のように組み合わせることで混合センサーを構築する。

$$\psi_{HS,i+1/2} = \psi_{LS,i+1/2} + \psi_{GS,i+1/2} - \psi_{LS,i+1/2} \psi_{GS,i+1/2} \quad (2.60)$$

速度の急勾配あるいは比熱比の急勾配を検知した場合は混合センサーが $\psi_{HS,i+1/2} = 1$ となり、急勾配でない領域では $\psi_{HS,i+1/2} = 0$ となる。

2.3 時間進行法

本研究では時間進行に陽解法を適用する。急勾配を伴う圧縮性流れの数値計算においては空間離散化手法だけでなく、数値安定性の高い時間進行法が必要となる。流体の数値計算において陽解法を適用する場合は低容量型陽的 Runge-Kutta 法^[55]が広く用いられるが、本研究では急勾配を伴う圧縮性流れにおいてより安定的に時間進行させることができる Total Variation Diminishing (TVD) Runge-Kutta 法^[56]を導入する。

TVD Runge-Kutta 法は次式で示される全変動量 (Total Variation, TV)

$$TV(u^n) = \sum_j |u_{j+1}^n - u_j^n|, \quad (2.61)$$

が時間進行によって増加しない、

$$TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n) \quad , \quad (2.62)$$

という TVD 条件を満たした時間進行法である。

本研究の時間進行法として、計算容量が増加しない 3 段 3 次 TVD Runge-Kutta 法を用いる。3 段 3 次 TVD Runge-Kutta 法を導入するために、変数 $u(t)$ に関する次の常微分方程式の初期値問題の数値時間積分法 (時間進行法) を考える。

$$\frac{du(t)}{dt} = F(t, u(t)) \quad (t > t_0) \quad (2.63)$$

$$u(t_0) = u_0 \quad (2.64)$$

式 (2.63) を時間進行させる 3 段 3 次 TVD Runge-Kutta 法は次式で与えられる。

$$\begin{cases} u^{(1)} = u^n + \Delta t F(t^n, u^n) \\ u^{(2)} = \frac{3}{4}u^n + \frac{1}{4}(u^{(1)} + \Delta t F(t^n + \Delta t, u^{(1)})) \\ u^{n+1} = \frac{1}{3}u^n + \frac{2}{3}\left(u^{(2)} + \Delta t F(t^n + \frac{1}{2}\Delta t, u^{(2)})\right) \end{cases} \quad (2.65)$$

ここで、 Δt は時間刻みである。

第3章 単成分・二成分圧縮性非粘性流れの検証計算

本章では、粘性および分子拡散がない単成分および二成分流体の検証例題を用いて前章で構築した数値計算手法の急勾配捕獲性能と低数値散逸性について検証する。粘性や分子拡散によって急勾配を拡散させることができないため、計算手法に対する数値不安定性を純粋に評価できる。また、粘性と分子拡散の影響ではなく数値粘性の効果によって流れが減衰することを確認できるため、計算手法の低数値散逸性の評価に適している。二成分の気体は分子拡散によって混ざらないため、それぞれの気体が接する面は厚みゼロの界面を生じる。この界面を物質界面とよぶ。

まず、空間1次元の衝撃波管問題および物質界面移流問題において本計算手法のベースとなる急勾配捕獲スキームの検証を行う。

次に、単成分流体の空間2次元渦-衝撃波問題の検証計算において、低数値散逸スキームの急勾配捕獲性能と低数値散逸性が両立できることを確認する。二成分流体における2次元の気泡-衝撃波干渉問題では、急勾配捕獲性能について評価する。

ここまで空間2次元の検証計算は x_2 方向に対称性がある問題であるため、最後の Triple-point 問題においては x_2 方向に対称性がない二成分流体場においても低数値散逸スキームや急勾配センサーが正常に働くかを確認する。本検証計算で用いた計算スキームリストを表3.1に示す。

Table. 3.1: List of schemes and sensors implemented in the numerical tests.

Case	Scheme	Sensor
No sensor	HLLC scheme with WCNS	Without sensor
LS	Low dissipative scheme	Larsson sensor
HS	Low dissipative scheme	Hybrid sensor

3.1 空間1次元の検証計算

3.1.1 二成分流体の衝撃波管問題

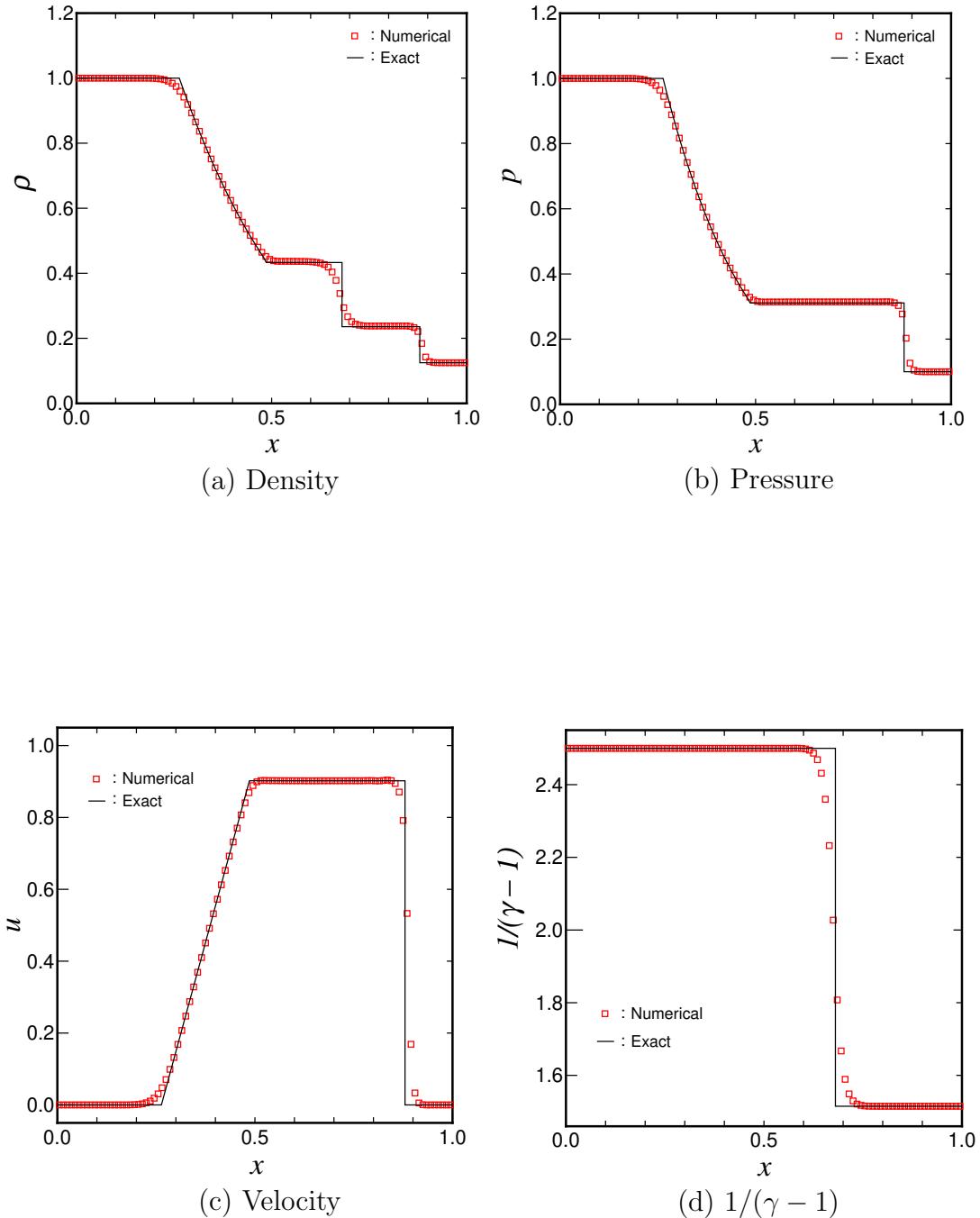
本節では、WCNS補間を用いたHLLCスキームの急勾配捕獲性能を検証するため、空間1次元における二成分流体のSod衝撃波管問題^[11]の計算を実施する。衝撃波管問題は物性の異なる流体が接している状態を初期条件とし、一定時間が経った後の流体の状態を求める問題である。この問題では衝撃波、膨張波、および物質界面を含む流体現象が現れる。理論解を求めることができるため、急勾配捕獲スキームの検証計算に用いられる。

本検証計算の初期条件は下記の通りである。

$$(\rho, u, p, Y_1, \gamma, M) = \begin{cases} (1, 0, 1.0, 0, 1.4, 28) & (x < 0.5) \\ (0.125, 0, 0.1, 1, 1.6, 4) & (x \geq 0.5) \end{cases} \quad (3.1)$$

計算領域は $0 \leq x \leq 1.0$ 、格子幅は一定間隔で格子点数を101点と設定した。代表長さは $L_0 = 1.0$ 、代表流速は $x < 0.5$ 領域流体の音速 $U_0 = c = \sqrt{\gamma p / \rho} = \sqrt{1.4}$ とする。また、時間刻み幅は $\Delta t (U_0 / L_0) = 2.0 \times 10^{-3}$ と設定し、 $t = 0.2$ まで計算を実施した。 x_1 方向の境界条件として、全物理量に対してノイマン条件を設定した。

計算結果として、時間 $t = 0.2$ における密度、圧力、速度、および $1/(\gamma - 1)$ の分布を図3.1に示す。また、それぞれの図には理論解を併せて示す。それぞれの図から、急勾配捕獲スキームで計算された分布は衝撃波面 ($x = 0.88$) や物質界面 ($x = 0.68$)において数値振動を発生させることなく理論解と良い一致を示していることが確認される。計算結果では衝撃波面と物質界面は理論解よりも分布が滑らかであるが、これは数値粘性の影響であり、急勾配捕獲スキームの性能としては従来研究^{[19], [20]}のスキームと同等である。以上より、本研究で構築した計算手法のベースとなる急勾配捕獲スキームの衝撃波捕獲性能と物質界面捕獲性能には問題がないことを確認した。

Fig. 3.1: Result of the two-species shock tube problem ($t = 0.2$).

3.1.2 二成分流体の物質界面移流問題

物質界面の移流現象を長時間計算した場合、計算手法に起因する数値粘性や時間進行法による誤差の蓄積が計算を破綻させることがあるため、独立した物質界面が一定の速さで移流する問題^[21]で急勾配捕獲スキームの物質界面捕獲性能と数値安定性について検証する。

本検証計算の初期条件は下記の通りである。

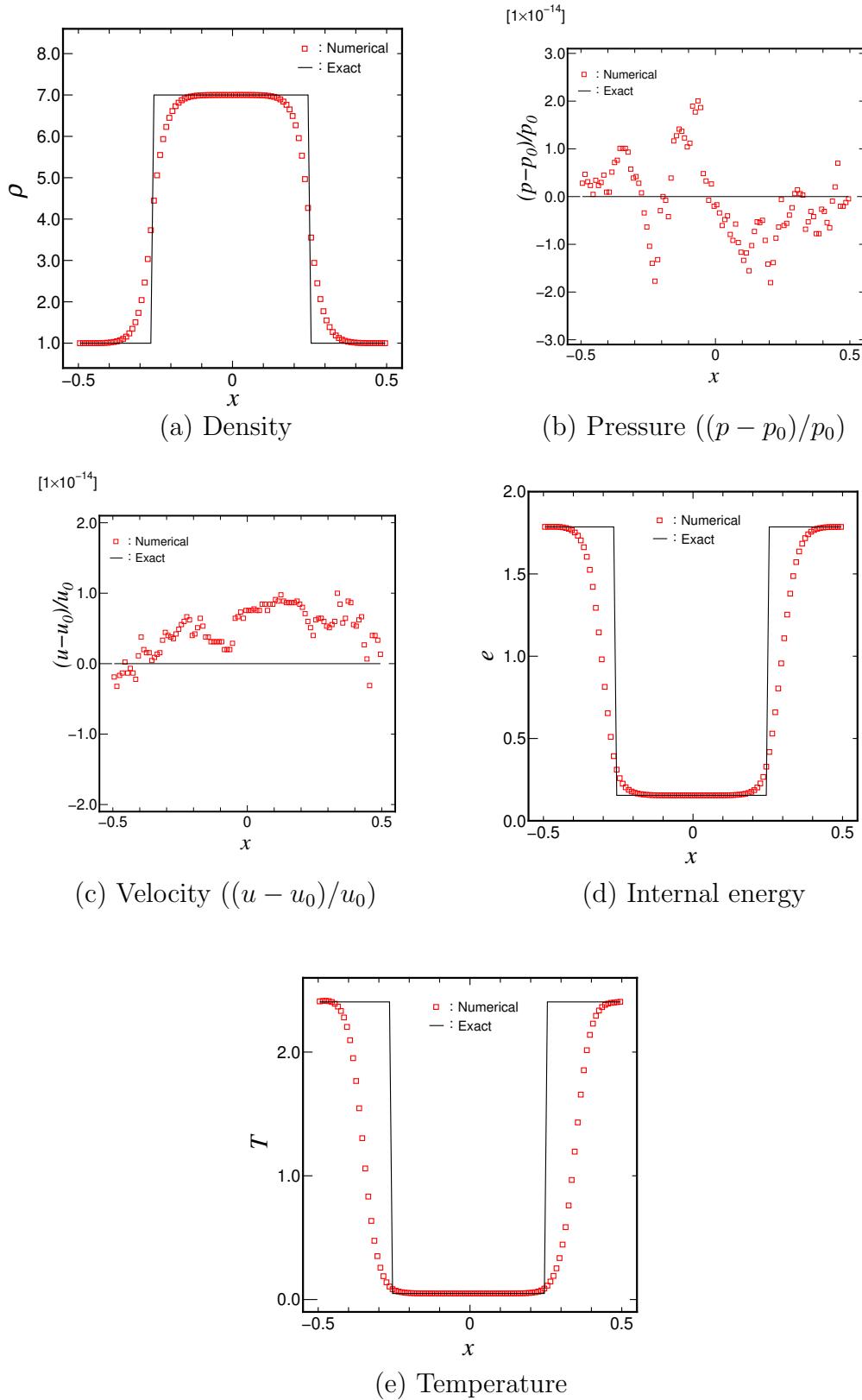
$$(\rho, u, p, Y_1, \gamma, M) = \begin{cases} (7, 1, 1.0/1.4, 1, 1.66, 4) & (-0.25 < x < 0.25) \\ (1, 1, 1.0/1.4, 0, 1.4, 28) & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (3.2)$$

計算領域は $-0.5 \leq x \leq 0.5$ 、格子幅は一定間隔で格子点数を 101 点と設定した。代表長さは計算領域の大きさ $L_0 = 1.0$ 、代表流速は移流速度 $U_0 = 1.0$ とする。また、時間刻み幅は $\Delta t(U_0/L_0) = 2.0 \times 10^{-3}$ と設定し、 $t = 2.0$ まで計算を実施した。 x_1 方向境界条件は周期境界条件とした。

計算結果として、時間 $t = 2.0$ における密度、圧力、速度、内部エネルギー、および温度の分布を図 3.2 に示す。圧力および速度はそれぞれの相対誤差 $(p - p_0)/p_0$ 、 $(u - u_0)/u_0$ を用いて評価する。ここで、下付き添え字 0 は初期値であることを表す。それぞれの図には理論解(初期値)を併せて示す。図 3.2(a), (d), (e) から確認できるように、それぞれの分布は数値振動を発生することなく理論解と良い一致を示している。

また図 3.2(b), (c) より、圧力と速度の相対誤差は計算機の丸め誤差レベル ($10^{-15} - 10^{-14}$ オーダー) に収まっており、計算時間の進行に伴う数値粘性による誤差の蓄積はほとんどないことが確認される。

以上より、本研究で構築した急勾配捕獲スキームは、数値振動なく物質界面を捕獲できることとともに、長時間計算を進展させても数値的に安定であることが確認された。

Fig. 3.2: Result of the material convection problem ($t = 2.0$).

3.2 単成分流体の渦-衝撃波干渉問題

本節では、本研究で構築した計算手法の衝撃波捕獲性能と低数値散逸性を確認するため単成分流体における2次元渦-衝撃波干渉問題^[22]による検証計算を実施する。図3.3のように衝撃波に向かって自由渦が移流し、渦と衝撃波が干渉する流れ場である。急勾配捕獲スキームを適用した場合は衝撃波を通過してから時間が経過した渦は数値粘性によって減衰する。一方で、低数値散逸スキームを適用した場合は時間が経過した場合でも渦の減衰が抑制されることが期待される。

初期条件として、衝撃波の左側の状態量を次のように与える。

$$(\rho, u_1, u_2, p)_L = (1, 1.1\sqrt{\gamma}, 0, 1) \quad (x_1 \leq 1.0), \quad \gamma = 1.4 \quad (3.3)$$

衝撃波右側の状態量はRankine-Hugoniotの式を用いて求められる。次に、自由渦は次式で与える。

$$\begin{cases} \tilde{u}_1 = \varepsilon\tau \exp(1 - \tau^2) \sin \theta \\ \tilde{u}_2 = -\varepsilon\tau \exp(1 - \tau^2) \cos \theta \\ \tilde{\rho} = \left(1 - \frac{(\gamma-1)\varepsilon^2(1-\tau^2)\exp(2\alpha)}{4\alpha\gamma}\right)^{1/(\gamma-1)} - 1 \\ \tilde{p} = \left(1 - \frac{(\gamma-1)\varepsilon^2(1-\tau^2)\exp(2\alpha)}{4\alpha\gamma}\right)^{\gamma/(\gamma-1)} - 1 \end{cases} \quad (3.4)$$

上式の自由渦は静止衝撃波の初期条件に対して重ねて与える。ここで、 ε は渦の強さ、 α は渦の減衰率、および $\tau = r/r_c$ は無次元半径である。また、半径は $r = \sqrt{(x_1 - x_{1c})^2 + (x_2 - x_{2c})^2}$ と表され、 r_c は渦が最大強さとなる臨界半径である。本検証では、 $\varepsilon = 0.3$ 、 $\alpha = 0.204$ 、および $r_c = 0.05$ とそれぞれ設定した。渦の中心座標は $(x_{1c}, x_{2c}) = (0.25, 1.0)$ とする。

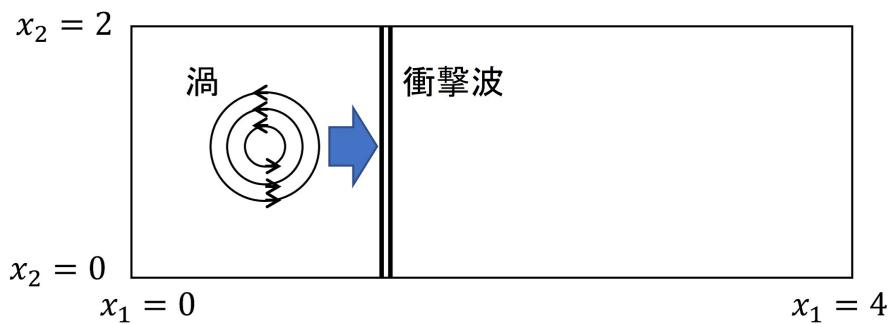


Fig. 3.3: The single-component shock-vortex interaction problem.

計算領域は $0 \leq x_1 \leq 4$ および $0 \leq x_2 \leq 2$, 格子幅は一定間隔で格子点数を 401×201 と設定した. 代表長さは $x_1 = 0$ から静止衝撃波までの距離 $L_0 = 1.0$, 代表流速は $U_0 = 1.1\sqrt{\gamma}$ とする. 時間刻み幅は $\Delta t(U_0/L_0) = 1.0 \times 10^{-3}$ と設定し, $t = 3.0$ まで計算を行った. x_2 方向境界条件には周期境界条件を課した. 左側境界 ($x_1 = 0$) は初期条件の値で固定し, 右側境界 ($x_1 = 4$) には自由流出条件を課した.

図3.4および図3.5に, 時刻 $t = 0.6, 2.6$ における Larsson センサーがない場合とセンサーがある場合の圧力コンターおよび等値線を示す. Larsson センサーがない場合の計算結果(図3.4(a))から, 時刻 $t = 0.6$ においては渦と衝撃波が干渉している状態を数値振動なく捕らえられていることが確認される. Larsson センサーがある場合の計算結果(図3.5(a))では, センサーがない場合と同様に渦と衝撃波が干渉している状態を数値振動なく捕らえられていることが確認される. この結果は, Larsson センサーが衝撃波位置を適切に検知できていることを示唆している.

次に, 渦の低圧部の大きさについて比較する. 時刻 $t = 0.6$ では, Larsson センサーがない場合(図3.4(a))とある場合(図3.5(a))で渦の低圧部の大きさに差はほとんど見られなかったが, 渦が衝撃波を通過した後の状態である時刻 $t = 2.6$ における Larsson センサーがない場合の計算結果(図3.4(b))は, センサーがある場合(図3.5(b))と比較して渦中心部の低圧部領域が小さいことが確認される. センサーがない場合は急勾配捕獲スキームの数値粘性が渦を減衰させるため, 渦の低圧領域が小さくなる. 一方で, Larsson センサーがある場合は急勾配でない領域では数値粘性を含まない中心差分によって評価されるため, 渦の低圧領域の大きさが保たれたと考えられる.

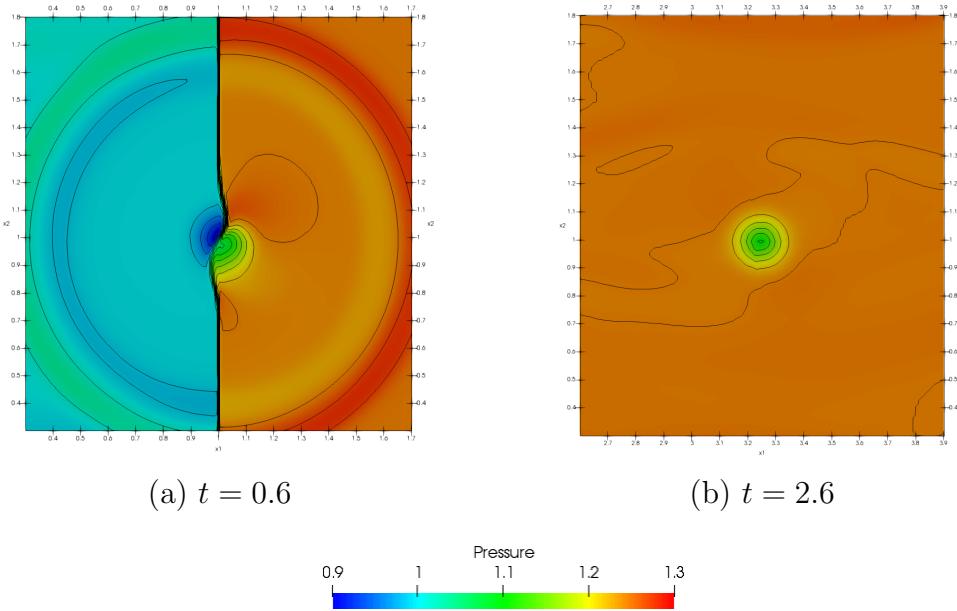


Fig. 3.4: Pressure distribution of the shock-vortex interaction problem in the case of No sensor.

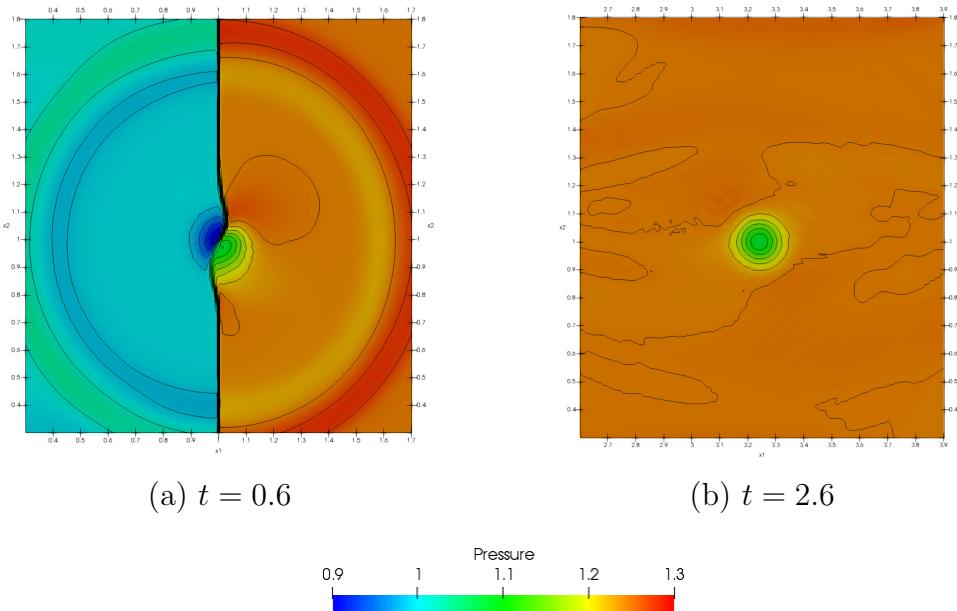


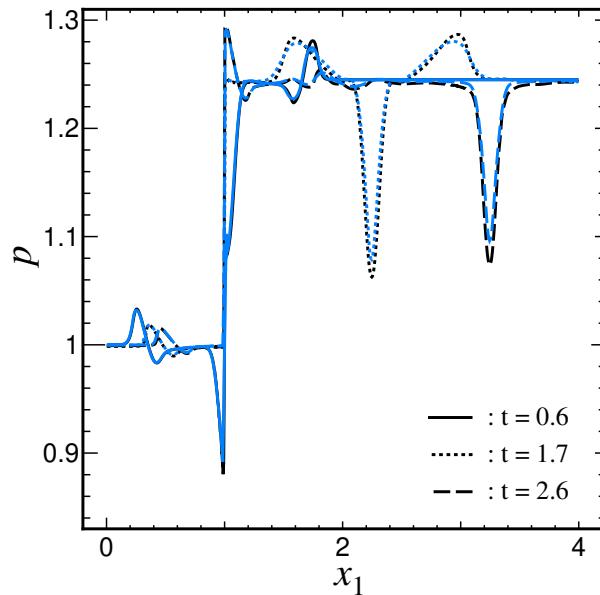
Fig. 3.5: Pressure distribution of the shock-vortex interaction problem in the case of LS.

上記の圧力コンターの減衰を定量的に確認するために、時刻 $t = 0.6, 1.8$ 、および 2.8 における渦中心をとおる領域中央線上 ($x_2 = 1.0$) の圧力分布を図 3.6 にそれぞれ示す。それぞれの図には、より高い格子解像度で計算した結果を参照解として併せて示す。参照解は Larsson センサーがある場合において格子点数を 1201×601 と設定した場合の計算結果である。Larsson センサーがある場合、時刻 $t = 1.8, 2.8$ におけるそれぞれのピーク圧力は参照解とよく一致している。一方で、Larsson センサーがない場合は、参照解のピーク圧力値と差が発生している。特に、時刻 $t = 2.8$ における渦の低圧部 ($x = 3.5$) は Larsson センサーがある場合とセンサーがない場合とでは差が顕著である。

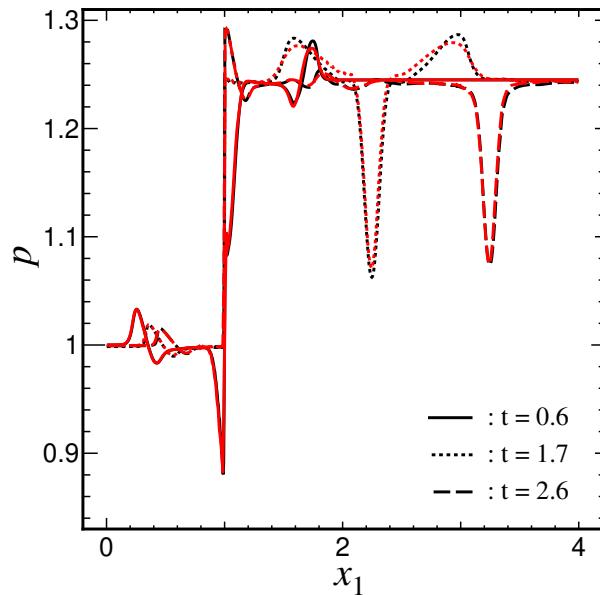
また、Larsson センサーの値について確認するため、時刻 $t = 0.6$ と 2.6 における渦中心をとおる領域中央線上 ($x_2 = 1.0$) の速度の発散 $\nabla \cdot \mathbf{u}$ と Larsson センサーの値を図 3.7 に示す。図 3.7 中の黒線が速度の発散、赤線が Larsson センサーを示している。図 3.7 より、衝撃波が生じている部分 ($x_1 = 1.0$) では速度の急勾配が発生しているため速度の発散も大きくなり、センサーが作用していることが確認される。また、衝撃波以外でも速度の発散が負の値となるときセンサーが反応していることがわかる。

最後に時間刻み幅によって低数値散逸スキームの計算結果が変わらないか確認するため、時間刻み幅を $\Delta t = 1.0 \times 10^{-3}$ と $\Delta t = 5.0 \times 10^{-4}$ としたときの LS の計算結果を確認する。時刻 $t = 0.6, 1.8$ 、および 2.8 における渦中心をとおる領域中央線上 ($x_2 = 1.0$) の圧力分布を図 3.8 にそれぞれ示す。図 3.8 より、時間刻みが異なる場合でも分布は一致している。これより、陽的な時間進行法を用いた低数値散逸スキームは時間刻みによって計算結果は変わらないことが確認された。

以上の結果より、本研究で構築した低数値散逸スキームは急勾配部で数値振動を発生させることなく、急勾配でない領域においては数値粘性を抑制できることを確認した。



(a) No sensor



(b) LS

Fig. 3.6: Comparison of pressure profiles along the vortex centerline ($x_2 = 1.0$) at $t = 0.6, 1.8$, and 2.8 . Black line: reference solution.

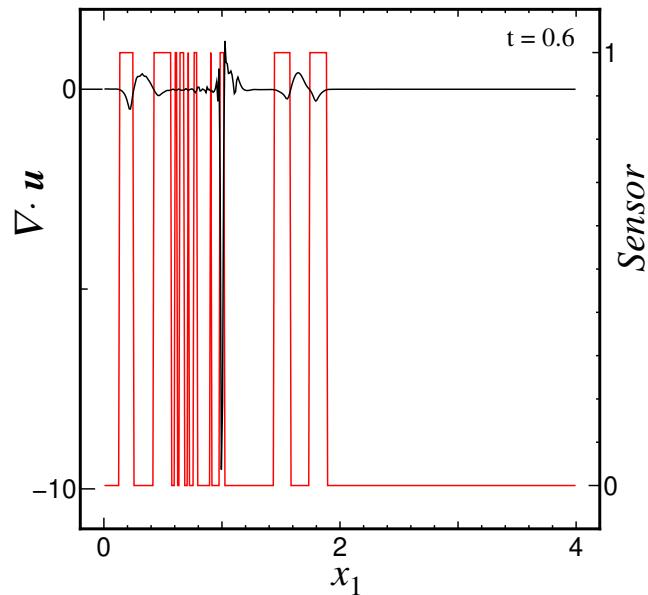
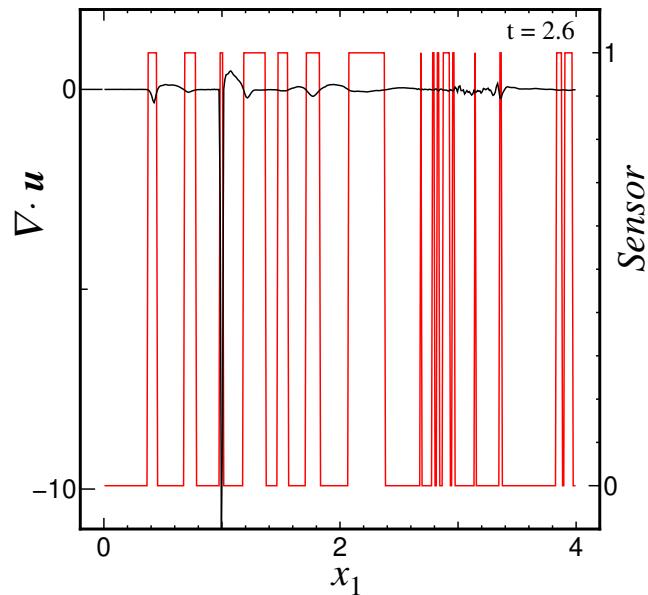
(a) $t = 0.6$ (b) $t = 2.6$

Fig. 3.7: The relation of velocity divergence and Larsson sensor along the vortex centerline ($x_2 = 1.0$) at $t = 0.6$ and 2.6 .

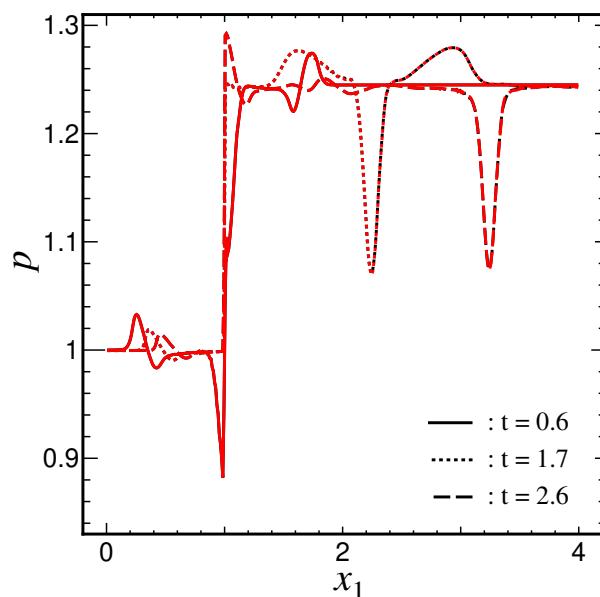


Fig. 3.8: Comparison of pressure profiles along the vortex centerline ($x_2 = 1.0$) at $t = 0.6, 1.8$, and 2.8 . Black line: $\Delta t = 1.0 \times 10^{-3}$. Red line: $\Delta t = 5.0 \times 10^{-4}$.

3.3 二成分流体の気泡-衝撃波干渉問題

空間2次元における二成分流体(空気とヘリウム)の検証計算として、気泡-衝撃波干渉問題^{[19], [20], [40]}を取り上げる。本検証計算では構築した数値計算手法の急勾配捕獲性能および急勾配センサーの有効性を確認する。図3.9のようにヘリウム気泡に向かって衝撃波が移動し、気泡と衝撃波の干渉によって気泡形状が時間とともに変化する流れ場である。音速の違いにより空気の領域よりもヘリウム気泡内部を衝撃波は速く移動する。ヘリウムと空気の物質界面においては、密度差と衝撃波の通過速度差による Kelvin-Helmholtz 不安定性によって徐々に気泡の形状が変化する。気泡の形状が変化しても急勾配センサーが物質界面を正確に検知できるかを確認する。先行研究^[19]から、図3.10(b)のように数値振動が発生した場合は物質界面が乱れることが報告されており、本検証計算でも数値振動の有無を確認する。

ヘリウム気泡-衝撃波干渉問題の初期条件は下記の通りである。

$$\begin{aligned}
 & (\rho, u_1, u_2, p, Y_1, \gamma, M) \\
 &= \begin{cases} (1.3764, -0.3336, 0, 1.5698/1.4, 0, 1.4, 28.8) & (x_1 > 1) \\ (0.1819, 0, 0, 1.0/1.4, 1, 1.667, 4) & (x_1^2 + x_2^2 < 0.5) \\ (1, 0, 0, 1.0/1.4, 0, 1.4, 28.8) & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (3.5)
 \end{aligned}$$

計算領域は $-3.5 \leq x_1 \leq 3$ および $-0.9 \leq x_2 \leq 0.9$ 、格子幅は一定間隔で格子点数を 1301×361 と設定した。代表長さは気泡の初期気泡径 $L_0 = 1.0$ 、代表速度は空気の音速 $U_0 = c = \sqrt{\gamma p / \rho} = 1.0$ とする。また、時間刻み幅は $\Delta t(U_0/L_0) = 8.0 \times 10^{-4}$ と設定し、 $t = 6.0$ まで計算を実施した。 x_2 方向の境界条件として、上壁 ($x_2 = 0.9$)

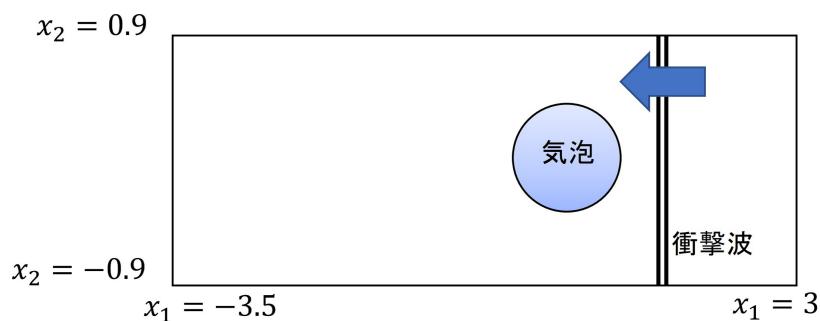
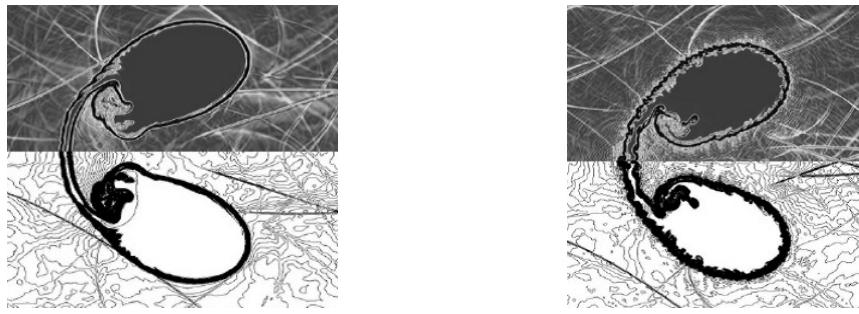


Fig. 3.9: The two-component shock-helium bubble interaction problem.



(a) Without numerical oscillation (b) With numerical oscillation

Fig. 3.10: Idealized Schlieren images and density lines of the shock-vortex interaction problem^[19].

および下壁 ($x_2 = -0.9$) にはすべり壁境界条件を与えた。左側境界 ($x_1 = 0$) と右側境界 ($x_1 = 4$) は初期条件の値で固定した。

図 3.11 に、衝撃波が気泡を通過した後である時刻 $t = 3.6$ における密度コンターを示す。センサーがない場合 (図 3.11 (a)) では、非物理的な振動なく物質界面を捕らえられていることが確認される。対照的に、Larsson センサーを用いた低数値散逸スキーム (図 3.11 (b)) では物質界面において数値振動が発生している様子が確認される。Larsson センサーは速度の急勾配のみしか検知できず物質界面を検知できないため、物質界面では数値粘性が付加されず数値振動を引き起こす。Larsson センサーと比熱比急勾配センサーを組み合わせた混合センサーを用いた低数値散逸スキームの場合 (図 3.11 (c)) は、数値振動は確認されない。この結果は混合センサーが物質界面を検知し、急勾配捕獲スキームと中心差分スキームが急勾配領域において適切に切り替わることを示している。

次に、時刻 $t = 5.6$ における密度コンターを図 3.12 に示す。Larsson センサーを用いた低数値散逸スキーム (図 3.12(b)) では、時刻 $t = 3.6$ のときより数値振動が顕著になっており、2つの流体の混合が促進されている。センサーがない場合 (図 3.12(a)) と混合センサーを用いた場合 (図 3.12(c)) では、数値振動は確認されず、気泡の中に発生する渦を鮮明に捕らえている。

センサーがない場合と混合センサーがある場合 (図 3.12(a), (c)) を比較すると、気泡の後流部分 ($x_1 = -2.4, x_2 = 0$) が僅かに異なることが確認される。センサーがない場合は気泡の後流部分 ($x_1 = -2.4, x_2 = 0$) に若干切り欠きのようなものが確認される。この気泡の崩壊は、HLLC スキームの Grid-aligned 不安定性^{[57], [58]}が原

因だと考えられる。Grid-aligned 不安定性^{[57], [58]}は、格子を横切る方向の局所マッハ数が小さくなるときに音波と流速の比に基づく数値粘性のスケーリングが適切ではなくなることに起因して発生する。Fleischmann et al. は HLLC スキームが格子を横切る方向に対する数値粘性を抑制することで Grid-aligned 不安定性を防げることを示し、改良型である低数値散逸 HLLC スキームを提案した^[58]。本研究で構築した低数値散逸スキームは急勾配領域以外の数値粘性を抑制できることから、低数値散逸 HLLC スキームを適用した場合と同様に数値不安定性が抑制されたと推察される。

図 3.13 に、時刻 $t = 0.4, 0.8, 1.2, 1.6, 3.6$, および 5.6 における混合センサーの ψ_{HS} 分布値を示す。図 3.13 において、混合センサーが反応している領域は黒く表示されている。時刻 $t = 0.4$ (図 3.13(a)) では、速度の急勾配の位置が混合センサーによって検知されていることを確認できる。図 3.13(b)-(d) に示されるように、衝撃波と物質界面が複雑に干渉する場合でも混合センサーが正常に機能することが確認される。図 3.13(c) では、物質界面から離れた広い領域において $\psi_{HS} = 1$ を示している。これは Larsson センサーの影響だと考えられる。Larsson センサーのパラメータを調整することで $\psi_{HS} = 1$ の領域をより狭くすることができるが、数値振動が発生する可能性が高いため、本研究で設定したパラメータ値が適切だと考えられる。図 3.13 (e) および (f) では、気泡が衝撃波を通過した後の状態でも混合センサーが物質界面を検知していることを確認される。

以上の結果から、構築した急勾配センサーが適切に物理量の急勾配を検知し、衝撃波と物質界面を数値振動なく捕らえらえることを確認した。

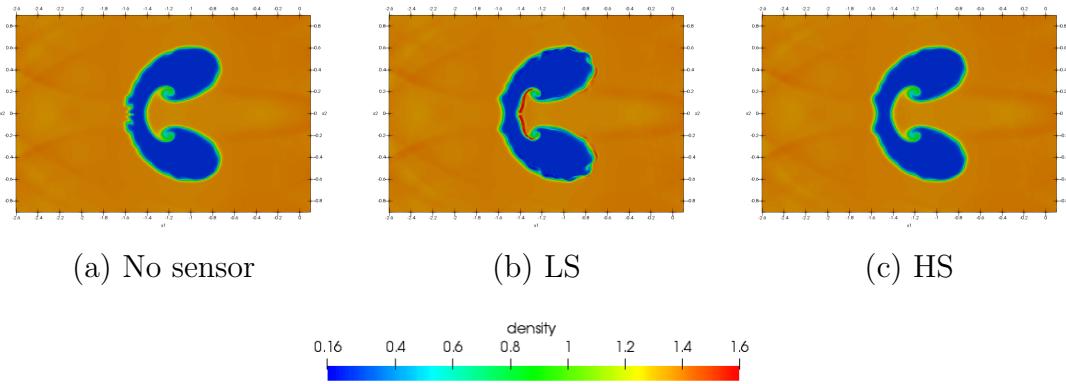


Fig. 3.11: Density distribution of the shock-helium bubble interaction problem at $t = 3.6$.

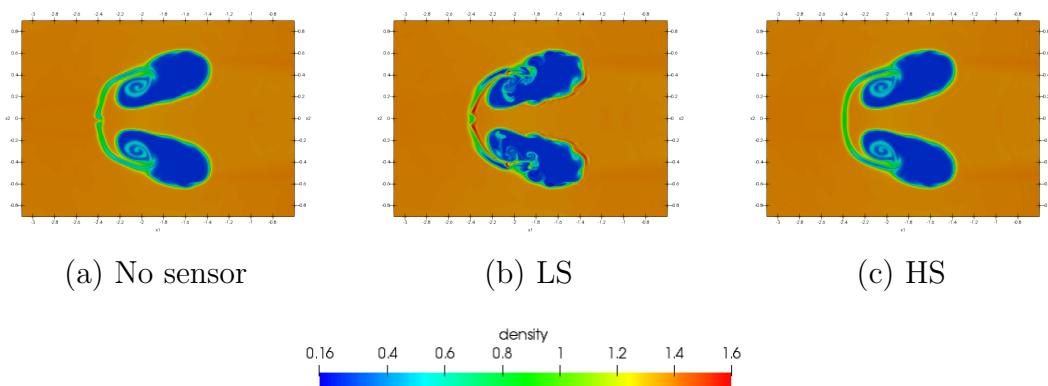


Fig. 3.12: Density distribution of the shock-helium bubble interaction problem at $t = 5.6$.

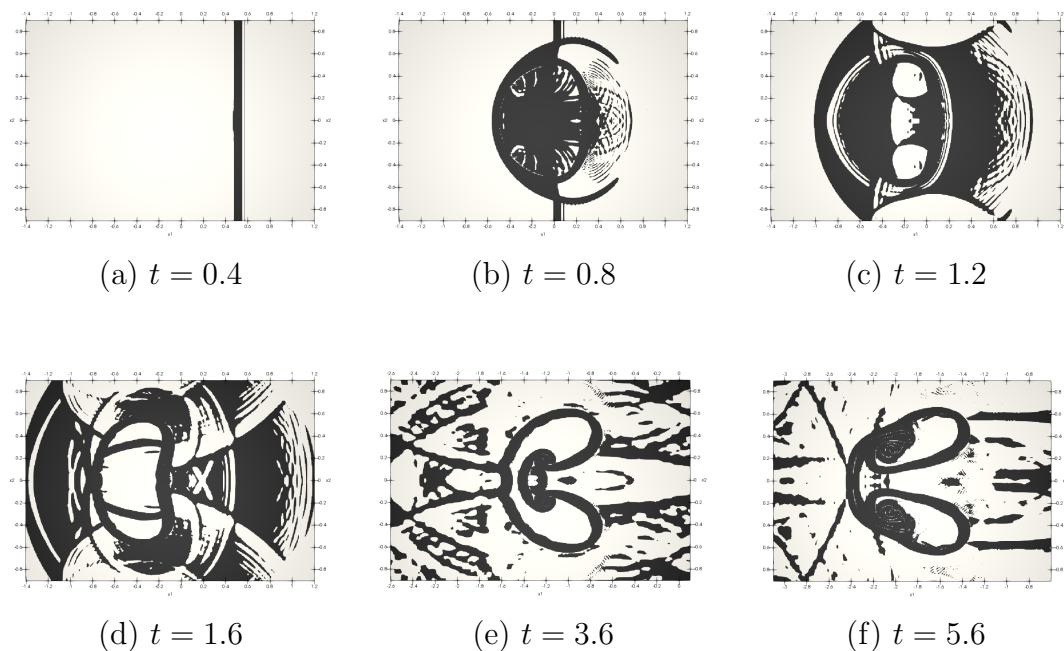


Fig. 3.13: Distribution of the Gradient sensor in the shock-helium bubble interaction problem. The sensor-detected area ($\psi_{HS} = 1$) is plotted as black, and the other is white.

3.4 二成分流体のTriple-point問題

前節の二成分流体の検証計算は x_2 方向に対称性を持つ流れ場である。 x_2 方向に対称性がある流れ場において混合センサーが機能することを確認したが、対称性がない流れ場でもセンサーが機能するかは検証できていない。そこで本節では、図 3.14 のように、2成分流体がそれぞれ異なる状態で非対称的に接する条件を初期値とした Triple-point 問題^{[60]~[62]}で低数値散逸スキームの検証を行う。気体 A と気体 C は同じ流体であるが密度と圧力の状態が異なり、気体 B は気体 A や C と異なる成分の流体である。それぞれ 3 つ気体が異なる状態で接しているため、流れの不安定性により点 $(x_1, x_2) = (1.0, 1.5)$ を中心にローリングする現象が確認される。時間経過とともに非対称的に物質界面が変化していく場合でも、急勾配センサーが検知することによって数値粘性がはたらき、数値振動を抑制できるかを確認する。

本検証計算の初期条件は次式で与える。

$$(\rho, u_1, u_2, p, Y_1, \gamma) = \begin{cases} (1.0, 0, 0, 1.0, 1, 1.5) & (x_1 < 1.0) \\ (1.0, 0, 0, 0.1, 0, 1.4) & (x_1 \geq 1.0 \text{ and } x_2 < 1.5) \\ (0.125, 0, 0, 0.1, 1, 1.5) & (x_1 \geq 1.0 \text{ and } x_2 \geq 1.5) \end{cases} \quad (3.6)$$

計算領域は $0 \leq x_1 \leq 7$ および $0 \leq x_2 \leq 3$ 、格子幅は一定間隔で格子点数を 281×121 と設定した。代表長さは $L_0 = x_1 = 1.0$ 、代表速度は気体 A の音速 $U_0 = c = \sqrt{\gamma p / \rho} = \sqrt{1.5}$ とする。また、時間刻み幅は $\Delta t(U_0 / L_0) = 5.0 \times 10^{-4}$ と設定し、 $t = 3.5$ まで計算を実施した。すべての境界 (x_1, x_2 方向) に滑り壁境界条件を与えた。

低数値散逸スキームの計算結果として、時刻 $t = 3.5$ における密度、内部エネルギー

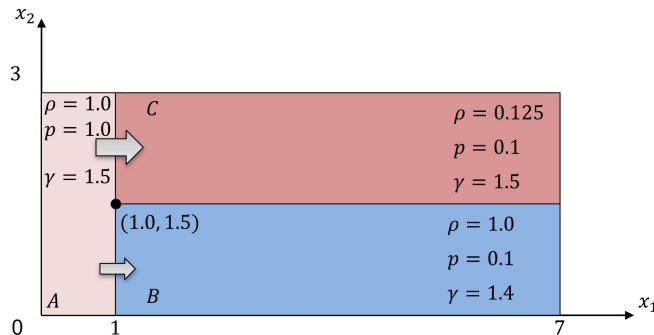
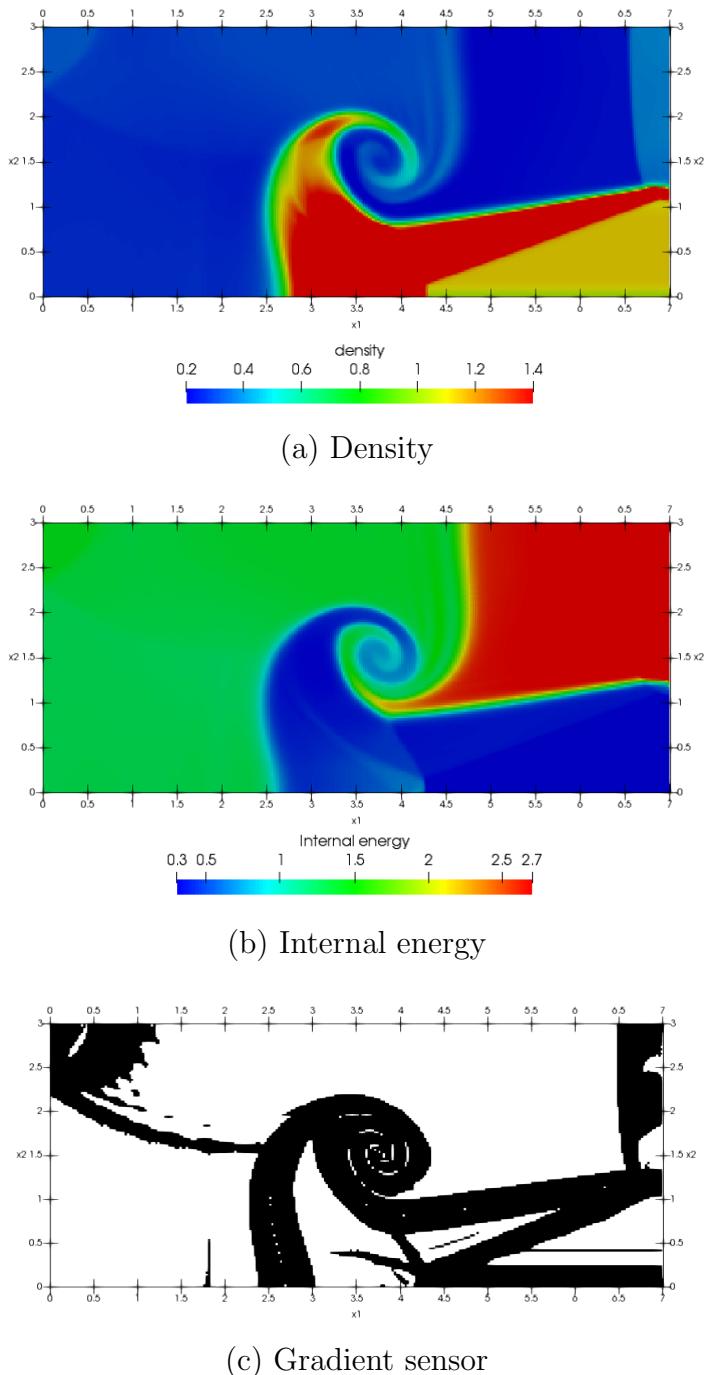


Fig. 3.14: The two-component triple-point problem.

ギー、および混合センサーのセンターを図3.15に示す。図3.15(a)と(b)から確認されるように、計算領域の中心でローリング現象が観察される。密度と内部エネルギーのセンターより、衝撃波と物質界面においては数値振動は発生していないことが確認される。また、図3.15(c)に示されるように、混合センサーによって急勾配領域が正確に検知されていることがわかる。以上より、対称性がない流れ場においても混合センサーが正常に機能することを確認した。これより、対称性がない流れ場においても数値粘性の付加領域を抑制できることが示された。



(The sensor-detected area is plotted as black, and the other is white.)

Fig. 3.15: Result of the triple-point problem at $t = 3.5$.

3.5 まとめ

本章では、前章で構築した数値計算手法の有効性を様々な観点から評価するため検証計算を実施した。その結果は以下のようにまとめられる。

- WCNS補間を用いたHLLCスキームの衝撃波および物質界面の捕獲性能を空間1次元の衝撃波管問題および物質界面移流問題で検証し、それぞれの検証例題の理論解とよく一致することを確認した。これより、本計算手法のベースとなる急勾配捕獲スキームの急勾配捕獲性能が実証された。
- 单成分流における渦-衝撃波干渉問題において、Larssonセンサーを用いた低数値散逸スキームは分布が急勾配でない領域において数値粘性が抑制されるため、渦中心の低圧部の減衰が抑制された。Larssonセンサーがはたらく領域では急勾配捕獲スキームに切り替わり、衝撃波を数値振動なく捕獲できることを確認した。
- 二成分流体における空間2次元の気泡-衝撃波干渉問題では、気泡と衝撃波が複雑に干渉する場合でも速度勾配センサーと比熱比急勾配センサーを組み合わせた混合センサーが速度の急勾配と物質界面をそれぞれ適切に検知することを示した。比較のために実施した急勾配捕獲スキームの計算結果では、HLLCスキームに起因するGrid-aligned不安定性によって数値不安定を引き起こすため、気泡の先端が僅かに崩壊する様子が確認された。一方で、低数値散逸スキームは急勾配でない領域の数値粘性が抑制されるため、HLLCスキームの数値不安定性を克服し、気泡の崩壊が抑制された。
- 流れの対称性がない場合においても混合センサーが適切に機能することを確認するため、Triple-point問題による検証計算を実施した。異なる状態の流体が3つ接する点においてローリング現象が確認された。衝撃波および物質界面においては数値振動は発生せず、対称性がない流れ場の場合でも混合センサーが衝撃波と物質界面を検知することを確認した。

以上より、第2章で構築した数値計算手法が、二成分圧縮性流れにおいて分布の急勾配を捕獲しながらも急勾配でない領域において数値粘性を抑制できることが確認された。

第4章 二成分圧縮性乱流の数値計算手法

本章以降では分子粘性と物質拡散の影響を含めた流れについて考える。本研究では密度分布や化学種分布の急勾配を伴う二成分圧縮性乱流場を対象とする。急勾配捕獲スキームを用いて陽的 Large-Eddy Simulation(LES)を実施した場合は、Sub-Grid Scale(SGS) モデルによる格子サイズ以下の乱流の渦粘性と数値粘性の両方が影響するため、急勾配捕獲スキームのみを用いた Monotone Integrated Large-Eddy Simulation(MILES) よりも計算結果の信頼性は低下する^[13]。また、SGS モデルを導入せず数値粘性を用いて乱流場を計算する MILES は、急勾配でない領域においては数値粘性が過剰な散逸を与えるため、計算格子を細かく設定しないと妥当な結果が得られない^{[13], [14]}。

そこで本研究では、速度勾配センサーと比熱比の急勾配センサーの混合センサーを乱流 SGS 渦粘性に適用することで、陽的 LES と MILES がセンサーによって切り替わる新たな乱流計算手法を提案し、急勾配を伴う二成分圧縮性乱流を正確に再現できる計算手法を構築する。SGS モデルのパラメータは流れ場に応じて値を変更する必要があるが、本研究では混合センサーによる SGS 渦粘性修正の影響を調査するため、各 SGS モデルのパラメータ値は固定する。

本章では、二成分圧縮性乱流に対する数値計算手法について記述する。支配方程式を示した後に、新たな乱流計算手法である Semi-explicit Large-Eddy Simulation(SeLES) の構築方法を記す。

4.1 支配方程式

二成分圧縮性粘性流れの支配方程式として 3 次元デカルト座標系で記述された Over-Estimated Quasi-Conservative 系の質量保存則、運動量保存則、全エネルギー

保存則, 質量分率の輸送方程式, および比熱比の輸送方程式を示す.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j E}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j p}{\partial x_j} = \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial h_j}{\partial x_j} \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_1}{\partial x_j} = -\frac{\partial \rho \alpha_j}{\partial x_j} \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{\gamma_p - 1} \right) + u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{1}{\gamma_p - 1} \right) = -\frac{\partial \alpha_j}{\partial x_j} \quad (4.5)$$

混合流体の比熱比は式(2.9)と式(2.10), 状態方程式は式(2.12)である. また, τ_{ij} と h_j はそれぞれ粘性応力と熱流束であり, 次式で定義される.

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (4.6)$$

$$h_j = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \quad (4.7)$$

ここで μ は粘性係数, κ は熱伝導率, δ_{ij} は Kronecker のデルタである. 質量分率の輸送方程式の右辺の分子拡散 α_j は Fick の拡散法則により次式で与えられる.

$$\alpha_j = -D_1 \frac{\partial Y_1}{\partial x_j} \quad (4.8)$$

ここで, D_1 は気体 0 に対する気体 1 の分子拡散係数である. 混合流体における粘性係数および熱伝導率は Wilke の式^[63]によって求められる.

$$\mu = \sum_{i=0}^1 \frac{X_i \mu_i}{\sum_{j=0}^1 X_j \Phi_{ij}} \quad (4.9)$$

$$\kappa = \sum_{i=0}^1 \frac{X_i \kappa_i}{\sum_{j=0}^1 X_j \Phi_{ij}} \quad (4.10)$$

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j} \right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j} \right)^{1/2} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{1/4} \right]^2 \quad (4.11)$$

ここで, X_i は気体 i のモル分率である.

4.2 Semi-explicit LES(SeLES)

本節では, 二成分圧縮性流れに適した新たな乱流計算手法である Semi-explicit LES(SeLES) を提案する. まず, 二成分圧縮性流体における陽的LESの基礎方程式

について考える。LESにおいては格子サイズで捕らえられる Grid Scale(GS) 湍と格子サイズより小さい Sub-Grid Scale(SGS) 湍とを区別する必要があるためローパスフィルター(グリッドフィルター)が導入される。しかし、圧縮性流れの支配方程式にグリッドフィルターをそのまま適用すると密度変化に関わる項が式に残ってしまうためモデル化が困難になる。そこで、圧縮性流れのLESにおいては次式で表されるFavreフィルターが導入される^[64]。

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}} \quad (4.12)$$

$$\bar{\phi}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} G(x-x')\phi(x')dx' \quad (4.13)$$

ここで、 G はフィルター関数、 $\bar{\phi}(x)$ はフィルター化された物理量を表す。グリッドフィルターおよびFavreフィルターを用いて粗視化された支配方程式は次式となる。

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (4.14)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = \frac{\partial \tilde{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}^{sgs}}{\partial x_j} \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{E}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j \bar{p}}{\partial x_j} = \frac{\partial \tilde{u}_i \tilde{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{h}_j}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} (h_j^{sgs} + D_j^{sgs}) \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_1}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_1}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\alpha}_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{\rho} \alpha_j^{sgs}}{\partial x_j} \quad (4.17)$$

$$\frac{\partial \bar{\Gamma}_p}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \bar{\Gamma}_p}{\partial x_j} = - \frac{\partial \tilde{\alpha}_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \alpha_j^{sgs}}{\partial x_j} \quad (4.18)$$

SGS応力 τ_{ij}^{sgs} 、SGS熱流束 h_j^{sgs} 、SGS乱流拡散 D_j^{sgs} 、およびSGS乱流物質拡散 α_j^{sgs} は次式で与えられる。

$$\tau_{ij}^{sgs} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (4.19)$$

$$h_j^{sgs} = \bar{\rho}(\widetilde{u_j T} - \tilde{u}_j \tilde{T}) \quad (4.20)$$

$$D_j^{sgs} = \bar{\rho} \left(\frac{\widetilde{u_j u_k u_k}}{2} - \frac{\widetilde{\tilde{u}_j u_k u_k}}{2} \right) \quad (4.21)$$

$$\alpha_j^{sgs} = (\widetilde{u_j Y_1} - \tilde{u}_j \tilde{Y}_1) \quad (4.22)$$

上式の各SGS項は直接解けないためSGSモデルを与える必要がある。

式(4.15)のSGS応力 τ_{ij}^{sgs} はGS流れ場の情報を用いてモデル化する必要があり、圧縮性流れの場合は次式のように非等方部分 $\tau_{ij}^{sgs,D}$ と等方部分 $\tau_{kk}^{sgs,I}$ に分けてモ

ル化する。

$$\tau_{ij}^{sgs} = \tau_{ij}^{sgs,D} + \frac{1}{3} \tau_{kk}^{sgs,I} \delta_{ij} \quad (4.23)$$

SGS応力の非等方部分 $\tau_{ij}^{sgs,D}$ には渦粘性仮説に基づく渦粘性型 SGS モデルの Vreman モデル^[65]を導入する。Vreman モデルは壁面減衰係数がなくても壁面近傍では渦粘性が 0 になるモデルであり、乱流遷移を伴う混合層流れでは一般的な Smagorinsky モデル^[66]よりも良好な結果が得られるモデルであるため採用した。SGS応力の非等方部分 $\tau_{ij}^{sgs,D}$ は渦粘性モデルによって次式のようにモデル化する。

$$\tau_{ij}^{sgs,D} = -2\bar{\rho}\nu^{sgs} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (4.24)$$

ここで、ひずみ速度テンソル \tilde{S}_{ij} は次式で定義される。

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.25)$$

Vreman モデルでは渦粘性係数 ν^{sgs} を次のように与える。

$$\nu^{sgs} = C_v \sqrt{\frac{B_\beta}{A_{ij} A_{ij}}} \quad (4.26)$$

ここで、上式中の A_{ij} および B_β は次式で表される。

$$A_{ij} = \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \quad (4.27)$$

$$B_\beta = \beta_{11}\beta_{22} - \beta_{12}^2 + \beta_{11}\beta_{33} - \beta_{13}^2 + \beta_{22}\beta_{33} - \beta_{23}^2 \quad (4.28)$$

$$\beta_{ij} = \sum_{m=1}^3 \overline{\Delta}_m^2 A_{mi} A_{mj} \quad (4.29)$$

$\overline{\Delta}_m$ は m 方向 ($m = 1, 2, 3$) のフィルター幅を示している。本研究では格子幅サイズのフィルターを考えているため、 $\overline{\Delta}_m$ は各方向の格子幅とする。また、モデル定数は $C_v = 0.025$ と設定した。次に、SGS応力の等方部分 $\tau_{kk}^{sgs,I}$ のモデル化については、次式で表される Yoshizawa モデル^[67]を用いる。

$$\tau_{kk}^{sgs,I} = 2\bar{\rho} \left(\frac{\nu^{sgs}}{C_I \overline{\Delta}} \right)^2 \quad (4.30)$$

ここで、 $C_I = 0.086$ である。

式 (4.20) の SGS 熱流束 h_j^{sgs} は次式で与えられる^[68]。

$$h_j^{sgs} = -\frac{\bar{\rho}\nu^{sgs} C_p}{Pr^{sgs}} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \quad (4.31)$$

ここで, Pr^{sgs} は SGS 乱流 Prandtl 数である. 本研究では $Pr^{sgs} = 0.6$ とした^[64]. 式 (4.21) の SGS 乱流拡散項については Knight et al.^[69] による次式のモデルを導入する.

$$D_j^{sgs} = \frac{\bar{\rho}}{2} (\widetilde{u_j u_k u_k} - \tilde{u}_j \widetilde{u_k u_k}) \approx \tilde{u}_j \tau_{jk}^{sgs} \quad (4.32)$$

式 (4.22) の SGS 乱流物質拡散 α_j^{sgs} は, 乱流粘性係数と乱流拡散係数の比である SGS 乱流 Schmidt 数 Sc^{sgs} を用いて次式でモデル化される^[70].

$$\alpha_j^{sgs} = -\frac{\nu_{sgs}}{Sc^{sgs}} \frac{\partial \tilde{Y}_1}{\partial x_j} \quad (4.33)$$

本研究では渦による物質拡散の影響が大きいと考え, SGS 乱流 Schmidt 数 $Sc^{sgs} = 1$ と設定した^[13].

4.2.1 急勾配センサーによる SGS モデルの修正

低数値散逸スキームでは密度や比熱の急勾配が発生する領域では数値粘性が付加される. 急勾配でない領域では散逸のない中心差分によって評価されるため, 格子サイズ以下の乱流による散逸の効果を SGS モデルによって与える必要がある. しかし, 急勾配が検知された領域では数値粘性が渦粘性を陰的に含んでいる MILES が適用されているため, 急勾配の検知領域では SGS 渦粘性は不要だと考えられる. 急勾配センサーを用いて SGS 渦粘性が局所的に付加されるように修正し, 数値粘性と SGS 渦粘性の付加範囲の重なりを抑制することで, 計算結果の信頼性は高まることが期待される.

SGS モデルによる渦粘性を局所的に付加するためには速度急勾配センサーと比熱比の急勾配センサーの混合センサーを用いて SGS 渦粘性係数を次式のように修正する.

$$\phi_{HS} = \phi_{LS} + \phi_{GS} - \phi_{LS}\phi_{GS} \quad (4.34)$$

$$\nu^{sgs,mod} = (1 - \phi_{HS})\nu^{sgs} \quad (4.35)$$

ここで, ϕ_{HS} は式 (2.54) の Larsson センサーと式 (2.58) の比熱比の急勾配センサーで構成されるセル中心の混合センサーである. $\phi_{HS} = 1$ の場合すなわち急勾配領域は, 修正 SGS 渦粘性係数は 0 となるが低数値散逸スキームによって数値粘性が加わ

る。 $\phi_{HS} = 0$ の場合は、修正 SGS 湍粘性係数は ν^{sgs} と等価となる。修正 SGS 湍粘性係数を適用した場合における各 SGS 項は次式のように評価される。

$$\tau_{ij}^{sgs,D} = -2\bar{\rho}\nu^{sgs,mod} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\tilde{S}_{kk}\delta_{ij} \right) \quad (4.36)$$

$$\tau_{kk}^{sgs,I} = 2\bar{\rho} \left(\frac{\nu^{sgs,mod}}{C_I \Delta} \right)^2 \quad (4.37)$$

$$q_j^{sgs} = -\frac{\bar{\rho}\nu^{sgs,mod} C_p}{Pr^{sgs}} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} \quad (4.38)$$

$$\alpha_j^{sgs} = -\frac{\nu^{sgs,mod}}{Sc^{sgs}} \frac{\partial \tilde{Y}_1}{\partial x_j} \quad (4.39)$$

このように混合センサーを用いて局所的に SGS 湍粘性を付加する乱流計算手法を Semi-explicit LES(SeLES) と呼ぶ。

4.2.2 低数値散逸スキームの空間高次精度化

LES の計算結果は格子解像度だけでなく離散化手法の空間精度に大きく依存するため、空間離散化精度はより高次である方が望ましい^[71]。そこで本項では、第2章で構築した空間2次精度の低数値散逸スキームを空間6次精度へ拡張する。Over-estimated quasi-conservative 形式の移流方程式(式(2.13))に空間6次精度中心差分を適用する。

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \mathbf{M}_i \left[\frac{3}{128} \frac{\mathbf{F}_{i+5/2} - \mathbf{F}_{i-5/2}}{5\Delta x} - \frac{25}{128} \frac{\mathbf{F}_{i+3/2} - \mathbf{F}_{i-3/2}}{3\Delta x} + \frac{75}{64} \frac{\mathbf{F}_{i+1/2} - \mathbf{F}_{i-1/2}}{\Delta x} \right] = 0 \quad (4.40)$$

セル界面における急勾配捕獲スキームと中心差分の混合数値流束 $\mathbf{F}_{i+n/2}$ は式(2.25)である。中心差分に対応する数値流束は空間6次精度中心補間を適用する。

$$\mathbf{F}_{i+1/2}^C = \frac{3}{256} (\mathbf{F}_{i-2} + \mathbf{F}_{i+3}) - \frac{25}{256} (\mathbf{F}_{i-1} + \mathbf{F}_{i+2}) + \frac{75}{128} (\mathbf{F}_i + \mathbf{F}_{i+1}) \quad (4.41)$$

次に、急勾配捕獲スキームの空間離散化精度を改善するために空間5次精度WCNSを導入する。空間5次精度の非線形補間を構築するために5点のステンシル $S_j = \{j-2, j-1, j, j+1, j+2\}$ について考える。まず最初に、WCNS補間を行うには次式のように保存量を特性量へ変換する。

$$q_{n,m} = \mathbf{l}_m \mathbf{Q}_n \quad (n = j-2, j-1, j, j+1, j+2) \quad (4.42)$$

ここで, $q_{n,m}$ は m 次の特性量, \mathbf{l}_m は左固有行列(式(2.17))の m 行のベクトルである. 特性量 $q_{n,m}$ から保存量 \mathbf{Q}_n への変換法を説明する. 特性量の空間 3 次精度補間は次式で得られる.

$$q_{j+1/2,m}^{\text{L},1} = \frac{1}{8} (3q_{j-2,m} - 10q_{j-1,m} + 15q_{j,m}) \quad (4.43)$$

$$q_{j+1/2,m}^{\text{L},2} = \frac{1}{8} (-q_{j-1,m} + 6q_{j,m} + 3q_{j+1,m}) \quad (4.44)$$

$$q_{j+1/2,m}^{\text{L},3} = \frac{1}{8} (-3q_{j,m} + 6q_{j+1,m} - q_{j+2,m}) \quad (4.45)$$

$$q_{j-1/2,m}^{\text{R},1} = \frac{1}{8} (-q_{j-2,m} + 6q_{j-1,m} + 3q_{j,m}) \quad (4.46)$$

$$q_{j-1/2,m}^{\text{R},2} = \frac{1}{8} (3q_{j-2,m} + 6q_{j-1,m} - q_{j,m}) \quad (4.47)$$

$$q_{j-1/2,m}^{\text{R},3} = \frac{1}{8} (15q_{j-2,m} - 10q_{j-1,m} + 3q_{j,m}) \quad (4.48)$$

この 3 次精度の補間量に, 次式のように重みを付けて評価することで 5 次精度の補間が得られる.

$$\tilde{q}_{j+1/2,m}^{\text{L}} = w_1 q_{j+1/2,m}^{\text{L},1} + w_2 q_{j+1/2,m}^{\text{L},2} + w_3 q_{j+1/2,m}^{\text{L},3} \quad (4.49)$$

$$\tilde{q}_{j-1/2,m}^{\text{R}} = w_1 q_{j-1/2,m}^{\text{R},1} + w_2 q_{j-1/2,m}^{\text{R},2} + w_3 q_{j-1/2,m}^{\text{R},3} \quad (4.50)$$

ここで, $w_k^{\text{L/R}} (k = 1, 2, 3)$ は非線形重みであり, 次式で評価される.

$$w_k^{\text{L/R}} = \frac{\alpha_k^{\text{L/R}}}{\alpha_1^{\text{L/R}} + \alpha_2^{\text{L/R}} + \alpha_3^{\text{L/R}}} \quad (4.51)$$

$$\alpha_k^{\text{L/R}} = \frac{C_k^{\text{L/R}}}{(IS_k + \varepsilon)^2}, \varepsilon = 10^{-6} \quad (4.52)$$

$$C_1^{\text{L}} = C_3^{\text{R}} = \frac{1}{16}, C_2^{\text{L}} = C_2^{\text{R}} = \frac{5}{8}, C_3^{\text{L}} = C_1^{\text{R}} = \frac{5}{16} \quad (4.53)$$

スムーズインジケータ IS_k は,

$$IS_1 = \frac{1}{4} (-q_{j-2,m} - 4q_{j-1,m} + 3q_{j,m})^2 + (q_{j-2,m} - 2q_{j-1,m} + q_{j,m})^2, \quad (4.54)$$

$$IS_2 = \frac{1}{4} (-q_{j-1,m} + q_{j+1,m})^2 + (q_{j-1,m} - 2q_{j,m} + q_{j+1,m})^2, \quad (4.55)$$

$$IS_3 = \frac{1}{4} (-3q_{j,m} + 4q_{j+1,m} - q_{j+2,m})^2 + (q_{j,m} - 2q_{j+1,m} + q_{j+2,m})^2, \quad (4.56)$$

と計算される. 最後に, 特性量の非線形重み平均値は次式のように物理空間へ変換

される。

$$\mathbf{Q}_{j+1/2}^{\text{L}} = \sum_m \mathbf{r}_m \tilde{q}_{j+1/2,m}^{\text{L}} \quad (4.57)$$

$$\mathbf{Q}_{j-1/2}^{\text{R}} = \sum_m \mathbf{r}_m \tilde{q}_{j-1/2,m}^{\text{R}} \quad (4.58)$$

ここで、 $\mathbf{r}_{j,m}$ は右固有行列 (式 (2.18)) の m 列のベクトルである。高次精度化したセル界面物理量を用いて HLLC スキーム (式 (2.44)-(2.52)) を適用する。ステンシルが確保できない境界近傍においては、第2章で示した空間2次精度の低数値散逸スキームを適用する。

4.3 時間積分法とその他の項の離散化手法

粘性応力、熱流束、分子拡散流束項の空間離散化には6次精度の中心差分を適用する。ただし、ステンシル幅が確保できない境界付近では空間2次精度中心差分を適用する。時間積分は TVD Runge-Kutta 法^[56]を適用した (第2.3節参照)。

第5章 非反応 ガス燃料-空気の同軸噴流問題による検証計算

本章では、前章までに構築した乱流の数値計算手法を用いて非反応場におけるガス燃料と空気の同軸噴流場のシミュレーションを実施する。計算対象は低マッハ数のプロパン (C_3H_8)-空気の同軸噴流場と高マッハ数の水素-空気の同軸噴流場である。燃料の噴出直後では空気と接する領域が生じ、密度や比熱の急勾配が発生する。噴流出口から離れた領域では、流れの不安定性が発生した後に乱流や分子拡散による気体燃料と空気の混合が進む。それぞれの流れ場の実験データと Monotone Integrated Large-Eddy Simulation (MILES) による計算結果と本研究の計算結果を比較し考察を行う。

5.1 非反応プロパン-空気の同軸噴流における検証計算

本節の計算対象は非反応プロパン-空気の同軸噴流場である。プロパン噴流と周囲空気のマッハ数は 0.3 以下であり衝撃波は発生しないが、密度変化に対応して圧縮性流れの解法を採用する。燃料と空気の混合が急速に進む領域は流れの不安定性の発生位置より下流の乱流遷移後であるため、燃料と空気の混合前の分子拡散面は最小格子幅以下に設定する。空気とプロパンの密度比は約 1.6 と小さいが比熱比の差が大きいため、プロパン噴出直後で比熱比の急勾配が発生し計算が不安定になりやすい。本研究で構築した乱流計算手法が安定的に計算が実施できることを確認するとともに、実験データとの比較し考察を行う。

検証には Sandia National Laboratories が公開している実験データを参照する^{[72]~[77]}。Laser Doppler Velocimeter (LDV) のシード粒子を噴流から流入させる場合と周囲空気から流入させる場合の 2 種類の条件で計測が実施されているため、流れの実験データとして 2 つのデータを参照する。また、比較のために不連続捕獲スキーム (空間 5 次精度 WCNS 補間を用いた HLLC スキーム) を用いた MILES の計算

Table. 5.1: List of numerical methods used in the numerical test.

Case	Scheme	SGS model
SeLES-a	Low dissipative scheme	With Hybrid sensor ($C_{GS} = 0.05$)
SeLES-b	Low dissipative scheme	With Hybrid sensor ($C_{GS} = 0.01$)
SeLES-c	Low dissipative scheme	With Hybrid sensor ($C_{GS} = 10^{-4}$)
MILES	HLLC scheme with WCNS	None

結果を併せて示す。本節で用いた計算手法を表5.1にまとめる。

5.1.1 計算条件

プロパンと空気の同軸噴流場のスケッチを図5.1に示す。噴流ノズル径は $D = 5.2 \times 10^{-3}$ m で、ノズルからプロパンが噴出され、その周囲を一定速度の空気が流れている。プロパンの断面平均流速は 53 m/s、周囲空気の断面平均流速は 9.2 m/s とする。

図5.1に示されるように、計算領域は $0 \leq x_1 \leq 70D$, $-9D \leq x_2 \leq 9D$, $-9D \leq x_3 \leq 9D$ と設定し、格子点数は $351 \times 101 \times 101$ とした。 x_1 方向の格子は等間隔に配置した。 x_2 方向および x_3 方向の格子は中心領域 ($|x_2|, |x_3| \leq 3D$) では等間隔とし、境界 ($|x_2|, |x_3| = 9D$) に向かって徐々に格子間隔が広くなるように配置した。最小格子幅は $\delta x_{2,3,min} = 0.0714D$ とした。

モデル化された円形噴流の軸方向速度分布は直交格子系においては滑らかな関数によって与えられる^[9]。また、噴流の乱流遷移を促進するために流入速度には時間的な擾乱を与える^[78]。時間的な擾乱は噴流によって生じる渦輪の周期性を崩すことを意図して導入した^[79]。同軸噴流場の流入速度は $x_1 = 0$ において次式で与えられる。

$$u_1 = \left\{ \frac{V_P + V_A}{2} - \left(\frac{V_P - V_A}{2} \right) \tanh \left[b \left(\frac{r}{r_0} - \frac{r_0}{r} \right) \right] \right\} (1 + A \sin(2\pi ft)) \quad (5.1)$$

ここで、 $V_P = 67.84$ m/s は軸中心におけるプロパン噴流の流速、 $V_A = 9.2$ m/s は周囲空気の流速、 $r = \sqrt{x_2^2 + x_3^2}$ は $x_2 - x_3$ 平面における半径、そして $r_0 = D/2$ はノズル半径である。プロパン噴流と周囲空気とのせん断層に対する厚さパラメータはそれぞれ $b = 1/(4\delta_0 D)$, $\delta_0/D = 0.01$ とした。振幅比は $A = 0.0025$ 、周波数は $f = StV_P/D$ 、Strouhal数は $St = 0.45$ とした。空間3次元的な流れの不安定性を発

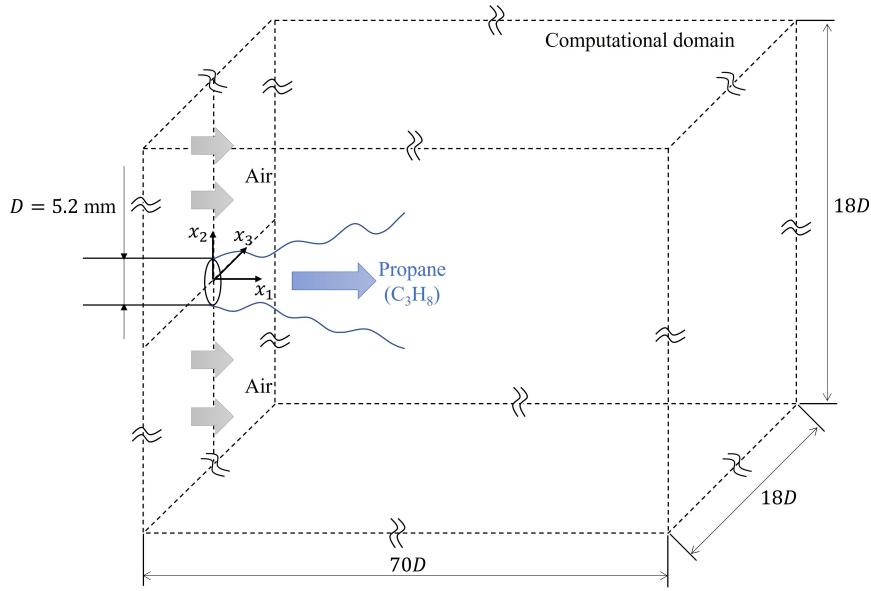


Fig. 5.1: Schematic of a propane-air coaxial jet flow and the computational domain.

生させるために横断方向に微小な乱数を与える^[78].

$$u_2 = u_3 = \left[0.025 V_P \exp \left(-3 \left(1 - \frac{r}{r_0} \right)^2 \right) \right] n_{\text{ran}} \quad (5.2)$$

乱数 n_{ran} は空間的に -0.5 から 0.5 の範囲で生成される。なお、この検証計算ではノズル内で発達する乱流に関しては考慮していない。

密度、圧力、温度、質量分率、および比熱比は次式で与える。

$$(\rho, p, T, Y_1, \gamma) = \begin{cases} (1.890 \text{ kg/m}^3, 104754 \text{ Pa}, 293 \text{ K}, 1, 1.14) & (r \leq D/2) \\ (1.204 \text{ kg/m}^3, 104754 \text{ Pa}, 293 \text{ K}, 0, 1.40) & (r > D/2) \end{cases} \quad (5.3)$$

それぞれの流体の物性値を表 5.2 にまとめた。分子拡散によって発達する混合層の厚みの長さスケールを求める。代表速度 V_P で計算領域 $L_1 = 70D$ を通り抜けるまでの時間は L_1/V_P であるため、分子拡散係数 D_1 によって広がる層の厚みの長さスケールは $L_{D_1} = \sqrt{D_1 L / V_P} = 3.9 \times 10^{-3} D$ である。分子拡散が及ぶ層の厚みは層の厚みの増加率は小さく、剪断層に不安定が発生する領域に到達する段階では非常に薄い。最小格子幅より十分に小さいため、分子拡散面をはさんで物理量の急勾配が発生する。

x_1-x_3 方向の出口境界には Poinsot & Lele の Navier Stokes Characteristic Boundary Conditions (NSCBC)^[80]を拡張した 3D-NSCBC^{[81], [82]}を適用した。3D-NSCBC

Table. 5.2: Physical parameters for nonreacting propan-air jet flow.

	Propane	Air
Density, ρ [kg/m ³]	1.890	1.204
Specific heat ratio, γ	1.14	1.40
Viscosity, μ [kg/(ms)]	1.023×10^{-5}	1.716×10^{-5}
Thermal conductivity, κ [W/(m · K)]	0.1150	0.0241
Molecular diffusion coefficient, D_1 [m ² /s]	1.455×10^{-5}	

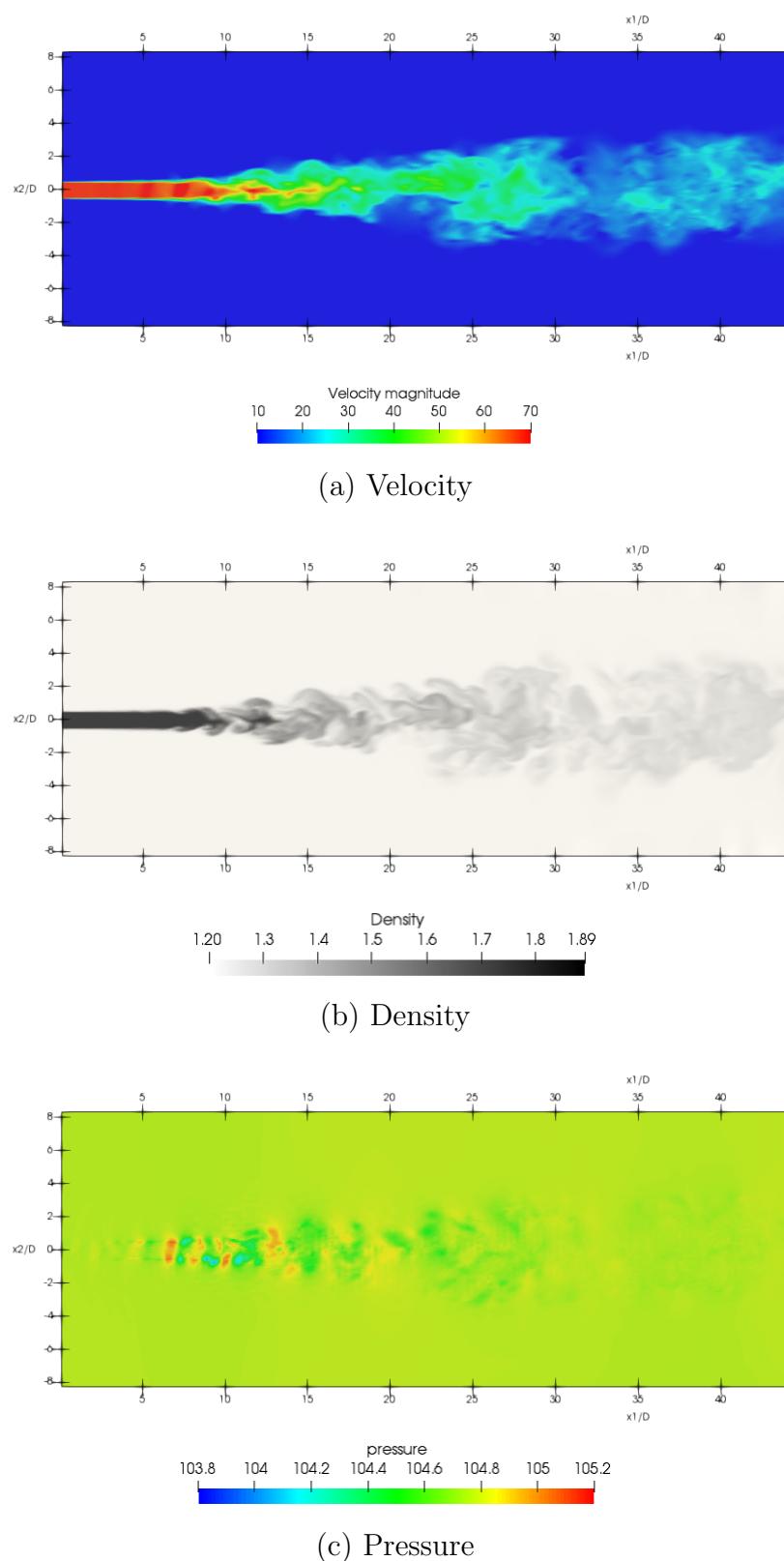
の詳細および検証は付録Cを参照されたい。

時間刻みは最大 Courant-Friedrichs-Lowy (CFL) 数が約 0.4 となるように設定した。初期条件は入口境界を除く全領域に空気の設定値を適用した。初期条件から $400T_0$ ($T_0 = tV_P/D$) まで計算を行い、時間平均値や乱流統計量は $280T_0 - 400T_0$ の期間で求めた。

5.1.2 計算結果

SeLES-b の計算結果として、時刻 $t = 370T_0$ における $x_3 = 0$ 平面上の速度、密度、および圧力の瞬時コンターを図 5.2 に示す。それぞれのコンター図より、数値振動は生じていないことを確認できる。乱流への遷移も捕らえられており計算領域の大きさは十分であることが確認される。速度コンターと密度コンターから、噴流のコア領域はノズル出口から $x_1/D = 10$ より上流側で形成されていることがわかる。コア領域においては、周囲空気と接する領域 ($|x_2/D| = 0.5$) で密度が大きく変化する。 $x_1/D = 10$ より下流では周囲空気との速度差および密度差による Kelvin-Helmholtz 不安定によって流れが乱れ、下流に進むにつれ密度が徐々に減少していることから、周囲空気とプロパンの混合が進行する様子が確認される。

比熱比の急勾配センサパラメータ C_{GS} の影響を確認するために、図 5.2 と同じ時刻・断面における Larsson センサーと比熱比の急勾配センサーの混合センサーの分布を図 5.3 に示す。なお、図 5.3 は急勾配が発生する領域 ($0 \leq x_1 \leq 20$) に絞って示す。全てのケースで、密度が急激に変化する領域 ($x_1/D < 10$, $|x_2/D| = 0.5$) においてセンサーが急勾配を検知していることを確認できる。また、ノズルから離れた領域 ($x_1/D < 10$, $|x_2/D| > 0.5$) ではセンサーがノイズを拾っているように見

Fig. 5.2: Instantaneous distributions on the plane of $x_3 = 0$ at $t = 370T_0$.

受けられる。これは出口境界からの反射波の影響だと考えられる。出口境界には無反射境界条件である 3D-NSCBC^{[81], [82]}を適用しているが、付録 C の検証計算でも確認されるとおり、境界からの反射波は完全には抑制できない。しかし、出口境界からの反射波は計算を不安定にさせるため、センサーがはたらき数値粘性が加わることで計算を安定化させていると考えられる。一方で、コア内部の急勾配でない領域 ($x_1/D < 10$, $|x_2/D| < 0.5$) ではセンサーはほとんどはたらいていない。パラメータ C_{GS} の値が小さい SeLES-c の場合は、センサーがより高感度になるので $x_1/D > 10$ の空気とプロパンの混合が進んだ領域において、広い範囲でセンサーが反応している。パラメータ C_{GS} を大きくするほど $x_1/D > 10$ における検知範囲は小さくなる様子が確認される。

渦構造を確認するために次式で表される速度勾配テンソルの第二不变量を導入する。

$$Q = \frac{1}{2} (\Omega_{ij}\Omega_{ij} - S_{ij}S_{ij}) \quad (5.4)$$

ここで、 S_{ij} と Ω_{ij} は速度勾配テンソル ($\partial u_j / \partial x_i$) の対称部と非対称部である。

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (5.5)$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (5.6)$$

速度勾配テンソルの第二不变量 $Q > 0$ の領域はせん断よりも渦運動が卓越する領域であるため渦管を可視化できる。図 5.4 にそれぞれの計算結果として $Q = 1.0 \times 10^5 \text{ m}^2/\text{s}^2$ の等値面を示す。SeLES-a(図 5.4(a)) の結果から、 $x_1/D < 5$ の領域では大規模な渦輪が確認され、 $5 < x_1/D < 10$ では徐々に渦輪が変形および崩壊していく様子が確認される。 $10 < x_1/D < 40$ の領域では、渦輪が完全に崩壊し 3 次元的な細かい渦構造となっており、乱流へ発達していることがわかる。このような渦構造は空気のみの噴流場に対する LES の結果と定性的に整合している^[83]。図 5.4(b) から、 $10 < x_1/D < 40$ に現れる 3 次元渦構造は SeLES-b の方が SeLES-a よりも少ない。SeLES-c では、 $10 < x_1/D < 40$ における 3 次元渦構造は SeLES-a や SeLES-b より少ないことがわかる。図 5.4(d) より、MILES の結果は SeLES-c とほとんど差がなく、噴流出口から離れた領域の 3 次元渦構造が散逸されている様子が確認できる。SeLES-c は、 $x_1/D > 10$ の空気とプロパンの混合領域において広い範囲でセンサー

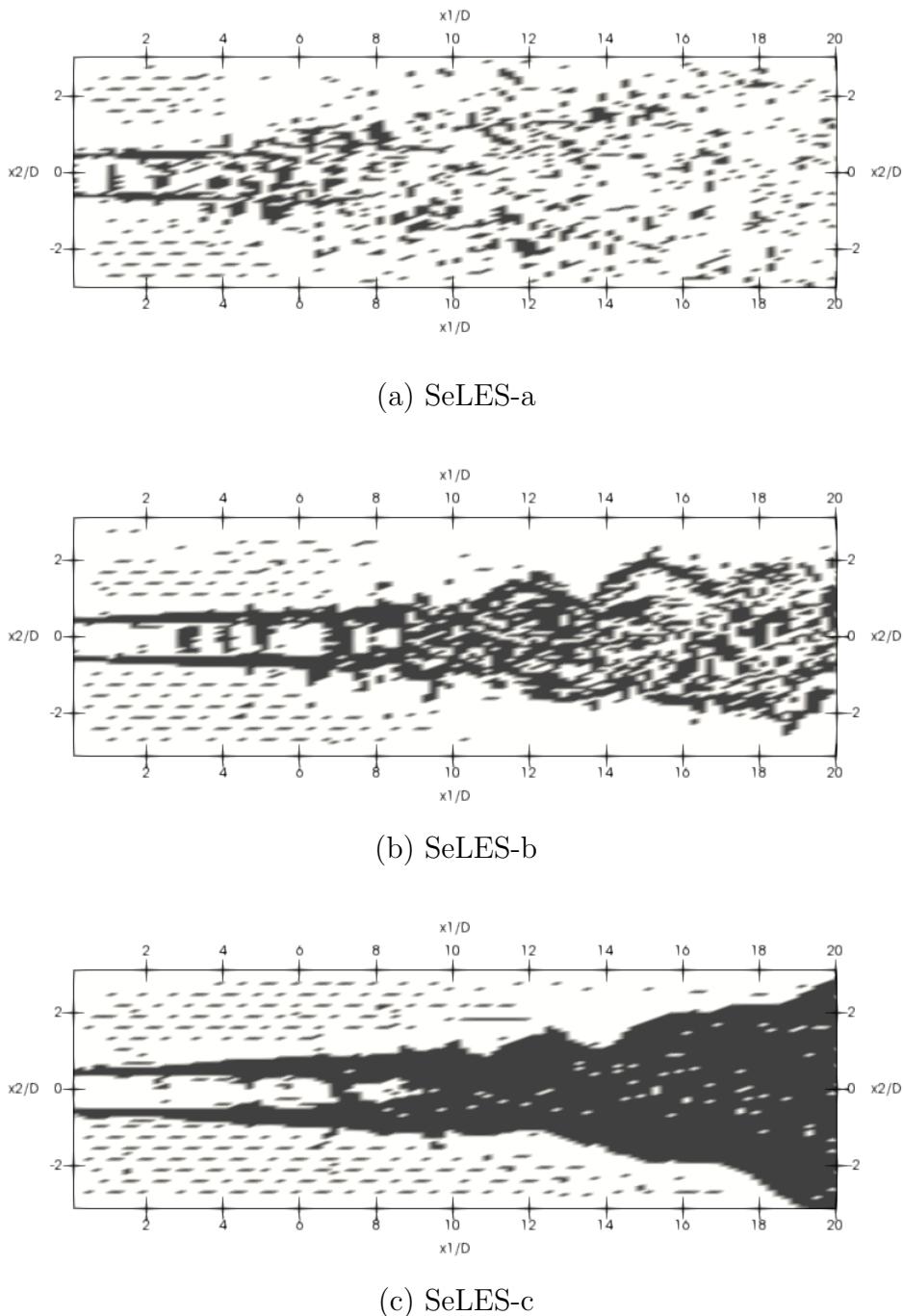


Fig. 5.3: Instantaneous distribution of the discontinuity sensor on the plane of $x_3 = 0$ at $t = 370T_0$ in $x_1/D < 20$. The sensor-detected area is plotted as black, and the other is white.

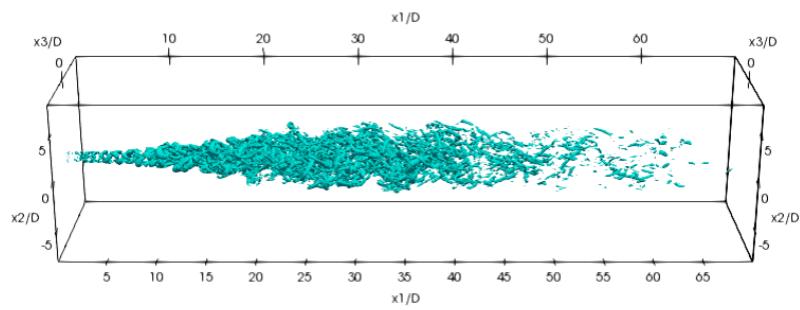
がはたらいている(図5.4(b))ため, 数値粘性が広い範囲で付加される。SeLES-cでは数値粘性の付加範囲が広いため, 全域に数値粘性が加わるMILESと定性的に近い結果になったと考えられる。SeLESとMILESの比較により, ノズル出口から離れた領域において数値粘性が乱流噴流の3次元的な細かい渦を散逸させることが確認された。

次にSeLESの結果として, 中心軸上における主流方向の平均速度と平均混合分率それぞれの分布を図5.5に示す。混合分率 Z は次式で定義される。

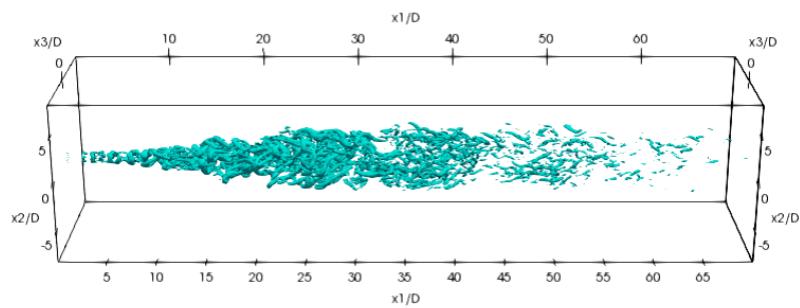
$$Z = \frac{3.63Y_1 - Y_{O_2} + Y_{O_2,0}}{3.63Y_{P,0} + Y_{O_2,0}}, \quad (5.7)$$

ここで, $Y_{O_2,0} = 0.233$, $Y_{P,0} = 1.000$, および $Y_{O_2} = 0.233Y_0$ である。それぞれの図にはSandia National Laboratoriesの実験値とMILESの計算結果を併せて示す。図5.5(a)より, 中心軸上の平均速度は $x_1/D = 60$ において 20 m/s まで減速することがわかる。また, 図5.5(b)より, 混合分率は $x_1/D = 9$ から急激に減少するものの, $x_1/D > 20$ においてその減少率は緩やかになることが確認される。速度と混合分率が減衰し始める位置は, SeLES-cやMILESよりもSeLES-aやSeLES-bの方が上流側に近い。それぞれの計算手法によって分布の減少位置に差が生じるもの, いずれの計算結果も速度と混合分率の平均分布は実験データとよく一致することが確認された。

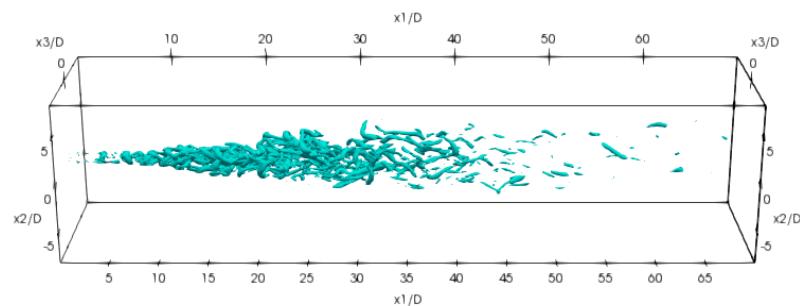
中心軸上における x_1 および x_2 方向の乱流強度成分の分布を図5.6に示す。全ての計算結果において, x_1 方向の乱流強度成分(図5.6(a))は $x_1/D = 2 - 3$ までほぼ 0 である。一方で, 実験データの入口境界付近の乱流強度は約 3.7 程度である。これは計算条件として与えられた入口分布はノズル内で発達した乱流の影響が含まれていないためである。SeLESの x_1 方向乱流強度 $u'_{1,\text{rms}}$ 分布の勾配は $5 < x_1/D < 10$ の領域ではMILESの勾配よりも大きいことがわかる。それぞれの手法による $u'_{1,\text{rms}}$ のピーク値はほぼ同じである。しかし, SeLES-aやSeLES-bの $u'_{1,\text{rms}}$ ピーク位置は, SeLES-cやMILESよりも実験値に近い。図5.6(b)に示すように, $u'_{2,\text{rms}}$ の最大値は全ての計算手法でほぼ同じレベルであることがわかる。SeLES-aとSeLES-bの $u'_{2,\text{rms}}$ ピーク位置は, SeLES-cやMILESよりも上流側にある。高感度センサーパラメータを課した場合(SeLES-c), $x_1/D = 10$ において数値粘性が適用されるため流れが散逸する。一方で, SeLES-aやSeLES-bでは, $x_1/D = 10$ では数値粘性の付加が抑制



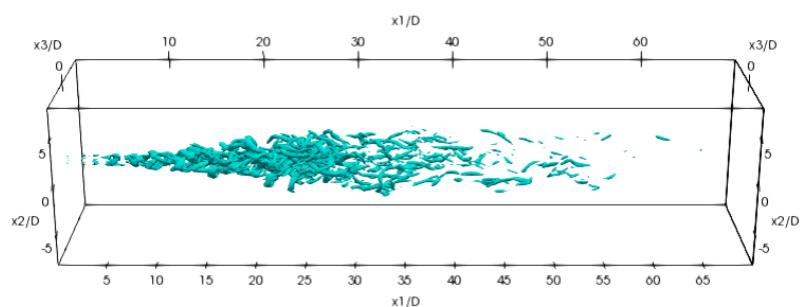
(a) SeLES-a



(b) SeLES-b



(c) SeLES-c



(d) MILES

Fig. 5.4: Instantaneous iso-surface of $Q = 1.0 \times 10^5 \text{ m}^2/\text{s}^2$ at $t = 370T_0$.

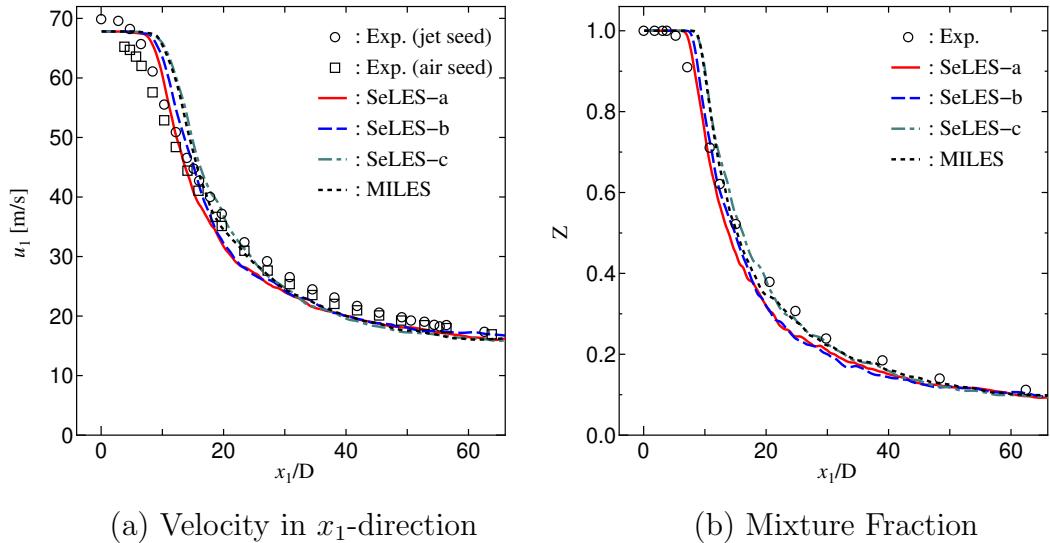


Fig. 5.5: Profiles of mean velocity and mean mixture fraction in the mainstream direction along the central axis.

されSGSモデルによって渦粘性が適切に評価される。

以上より、密度比が小さく比熱比の差が大きい低マッハ数のプロパン-空気乱流噴流場においては、平均速度分布と混合分率分布に関しては提案手法と従来手法のMILESとほとんど差はないが、乱流強度成分のピーク位置に関しては提案手法の方がMILESよりも実験値に近い計算結果を示すことを確認した。

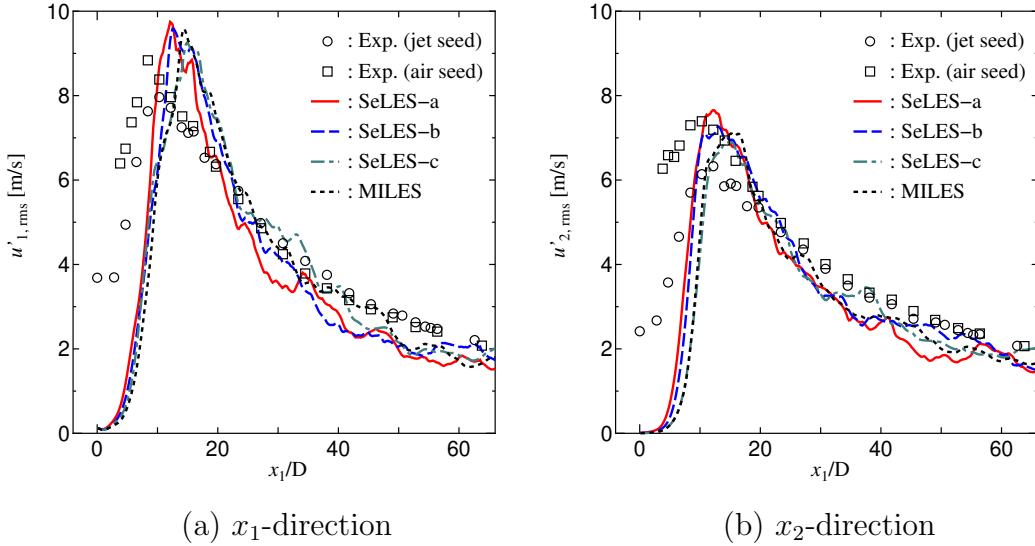


Fig. 5.6: Profiles of turbulence intensity along the center line.

5.2 高マッハ数 非反応水素-空気の同軸噴流における検証計算

二つ目の非反応場の検証計算は水素と空気の高速同軸噴流場^[15]を対象とする。水素噴流および周囲空気のマッハ数はそれぞれ $M_J = 0.886$ および $M_A = 1.32$ である。超音速の周囲空気が存在する流れ場であり、ノズル出口ではノズル断面と周囲空気には圧力差がない^[15]ので、適正膨張噴噴となり衝撃波は発生しない。ノズル出口直後で流れが膨張することも収縮することもないため、ノズル出口断面から下流を計算領域とする。燃料と空気の混合が急速に進む領域は流れの不安定性の発生位置より下流の乱流遷移後であるため、燃料と空気の混合前の分子拡散面は最小格子幅以下に設定する。水素と空気の比熱比の差は小さいが、密度比は大きいので計算が不安定になりやすい流れ場である。

本計算手法を用いて得られた計算結果を Eggers の実験データ^[15]と比較する。また、先行研究である Zhao et al^[14]の Weighted Essentially Non-Oscillatory(WENO) スキームを用いた MILES の計算結果や空間 5 次精度 WCNS 補間を用いた HLLC スキームによる MILES によって得られた計算結果と比較し考察を行う。

5.2.1 計算条件

噴流ノズル径は $D = 11.6 \times 10^{-3}$ m であり、ノズルから水素が噴出しその周囲を超音速の空気が流れている。計算領域は $0 \leq x_1 \leq 50D$, $-5D \leq x_2 \leq 5D$, $-5D \leq x_3 \leq 5D$ と設定した。Eggers の実験データ^[15]から、噴流中心軸上のマッハ数は $x_1 = 42.8D$ で 1.068 となるが、出口境界で十分に超音速とするために主流方向の計算領域は $50D$ と設定した。格子点数は $351 \times 101 \times 101$ とした。 x_1 方向の格子は $0 \leq x_1 \leq 30D$ までは等間隔とし、 $30D \leq x_1 \leq 50D$ では境界に向かって徐々に格子間隔が広がるように配置した。また、 x_2 方向および x_3 方向の格子は中心領域 ($|x_2|, |x_3| \leq 2D$) では等間隔とし、境界 ($|x_2|, |x_3| = 5D$) に向かって徐々に格子間隔が広くなるように配置した。それぞれの方向の最小格子幅は $\Delta x_{1,\min} = 0.0910D$, $\Delta x_{2,\min} = \Delta x_{3,\min} = 0.0477D$ とした。

前節と同様に、噴流の乱流遷移を促進するために流入速度には時間的な擾乱を与える^[78]。同軸噴流の流入速度分布は $x_1 = 0$ において次式を与える。

$$u_1 = \begin{cases} \left(\frac{V_J}{2} - \frac{V_J}{2} \tanh \left[b_1 \left(\frac{r}{r_0} - \frac{r_0}{r} \right) \right] \right) (1 + A \sin(2\pi ft)) & (r \leq D/2) \\ \frac{V_A}{2} - \frac{V_A}{2} \tanh \left[-b_2 \left(\frac{r}{r_0} - \frac{r_0}{r} \right) \right] & (r > D/2) \end{cases} \quad (5.8)$$

ここで、 $V_J = 1074$ m/s は軸中心部における水素噴流の流速、 $V_A = 394.0$ m/s は周囲空気の流速である。せん断層パラメータは $b_1 = 1/(4.0 \times 0.0116)$ および $b_2 = 1/(4.2 \times 0.0121)$ とそれぞれ設定した。振幅比 A および周波数 f は第5.1.1節と同じ値を適用する。式(5.8)の流入速度分布と実験データ^[15]を図5.7に示す。横断方向に対しては前節と同様に3次元的な微小擾乱を式(5.2)によって与えた。

密度、圧力、温度、質量分率、および比熱比は次式で与える。

$$(\rho, p, T, Y_1, \gamma) = \begin{cases} (0.0930 \text{ kg/m}^3, 100 \times 10^3 \text{ Pa}, 260 \text{ K}, 1, 1.41) & (r \leq D/2) \\ (1.32 \text{ kg/m}^3, 100 \times 10^3 \text{ Pa}, 222 \text{ K}, 0, 1.40) & (r > D/2) \end{cases} \quad (5.9)$$

それぞれの流体の物性値は表5.3にまとめた。分子拡散によって発達する混合層の厚みの長さスケールを求める。代表速度 V_J で計算領域 $L_1 = 50D$ を通り抜けるまでの時間は L_1/V_J であるため、分子拡散係数 D_1 によって広がる層の厚みの長さスケールは $L_{D_1} = \sqrt{D_1 L/V_J} = 5.1 \times 10^{-4}D$ である。分子拡散が及ぶ層の厚みは層の厚みの増加率は小さく、剪断層に不安定が発生する領域に到達する段階では非常に

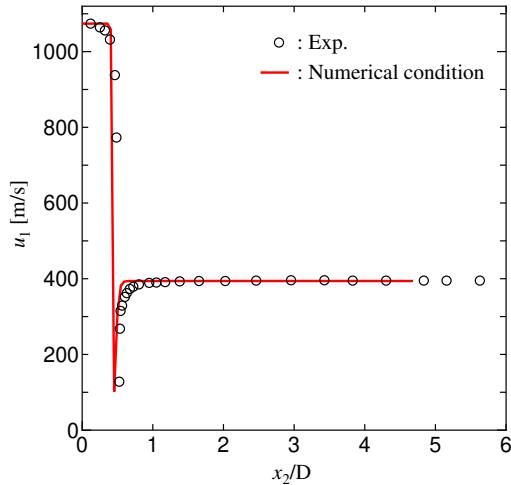


Fig. 5.7: Inlet velocity profile in the nonreacting hydrogen-air jet flow.

Table. 5.3: Physical parameters for nonreacting hydrogen-air jet flow.

	Hydrogen	Air
Density, ρ [kg/m ³]	0.0930	1.32
Specific heat ratio, γ	1.41	1.40
Viscosity, μ [kg/(ms)]	8.087×10^{-6}	1.302×10^{-5}
Thermal conductivity, κ [W/(m · K)]	0.1656	0.0184
Molecular diffusion coefficient, D_1 [m ² /s]	5.682×10^{-6}	

薄い。最小格子幅より十分に小さいため、分子拡散面をはさんで物理量の急勾配が発生する。

それぞれの気体の比熱比はほとんど同じ値であるため比熱比の急勾配センサーが化学種の急勾配を検知できない可能性がある。そこで、本節では比熱比の急勾配センサーの代わりに質量分率の急勾配センサー(付録B参照)を用いたSeLESの検証を行う。質量分率の急勾配センサーを用いたケースをSeLES- α と表す。また比熱比の急勾配センサーの閾値を高感度に設定したケースをSeLES- β と記す。本節で検証した計算スキームを表5.4にまとめた。

Table. 5.4: List of numerical methods used in the hydrogen-air high speeed jet.

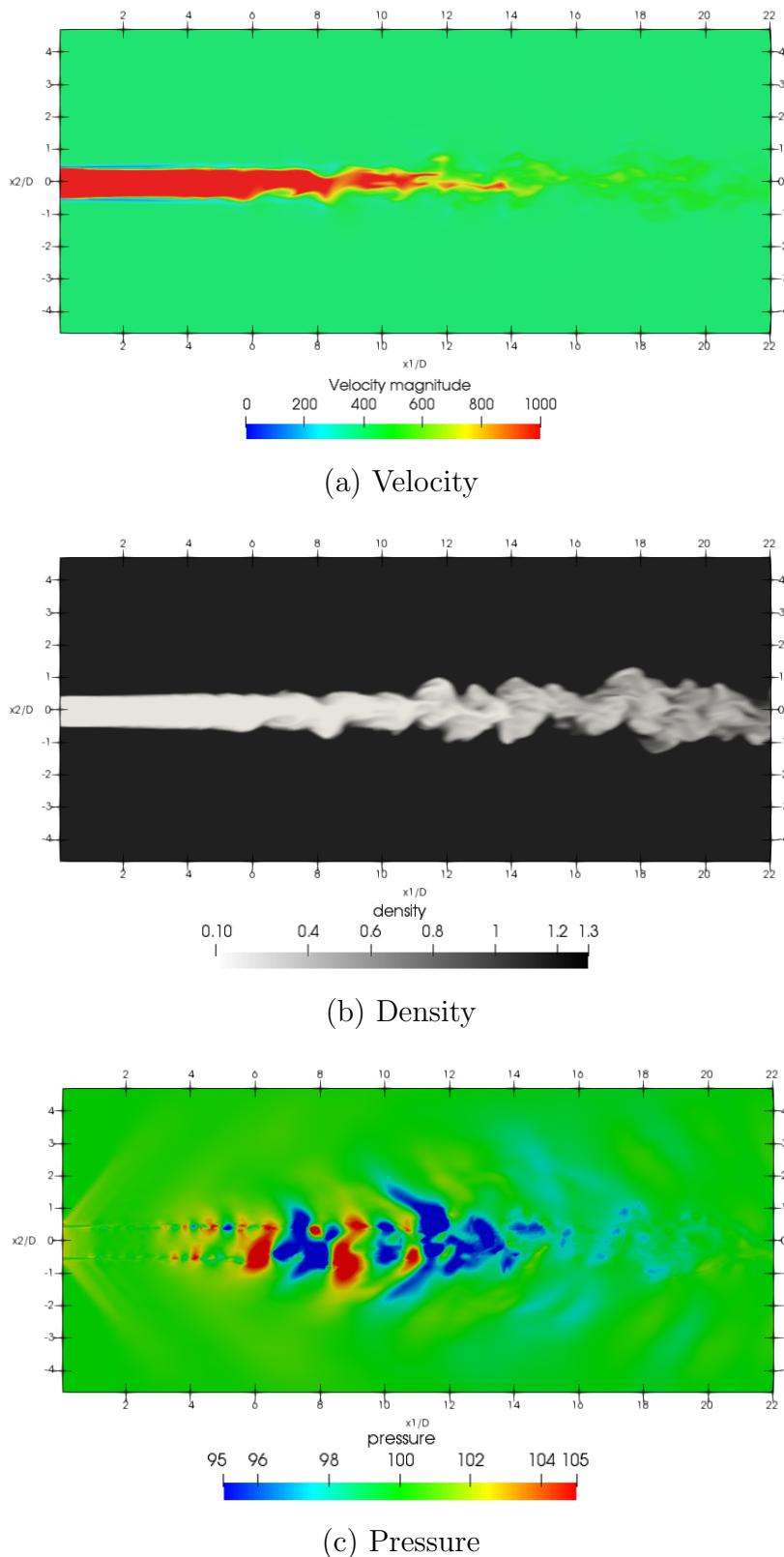
Case	Scheme	Chemical species sensor	SGS model
SeLES- α	Low dissipative scheme	ϕ_{YS} ($C_{YS} = 0.001$)	With sensor
SeLES- β	Low dissipative scheme	ϕ_{GS} ($C_{GS} = 10^{-4}$)	With sensor
MILES(WCNS)	HLLC scheme with WCNS	None	None

x_1 出口境界は超音速流れとなり反射波が存在しないため自由流出境界条件を適用する。 x_2 および x_3 方向の出口境界には 3D-NSCBC^{[80]~[82]}を適用する。時間刻みは最大 CFL 数が約 0.3 となるように設定した。初期条件は入口境界を除く全領域に空気の設定値を適用した。初期条件から $550T_0$ ($T_0 = tV_J/D$) まで計算を行い、時間平均値や乱流統計量は $370T_0 - 550T_0$ の期間で求めた。

5.2.2 計算結果

SeLES- α の計算結果として、時刻 $t = 370T_0$ における $x_3 = 0$ 平面上の速度、密度、および圧力の瞬時コンターを図 5.8 に示す。それぞれのコンター図から、数値振動は発生していないことを確認できる。噴流のコア領域は $x_1/D = 6-8$ より上流側で形成されていることが速度コンターからわかる。 $x_1/D = 10$ より下流では周囲空気との速度差および密度差による Kelvin-Helmholtz 不安定によって流れが乱れ、下流に進むにつれ密度が徐々に増加していることから、周囲空気と水素の混合が進行する様子が確認される。圧力コンターから、ノズル半径 $|x_2/D| = 0.5$ の位置から斜めに向かって圧力が高くなる領域が確認される。水素噴流は亜音速であるため、 $|x_2/D| < 0.5$ においてはショックセル構造は確認されないが、 $x_1/D = 3-6$ では圧力変動が確認される。このような圧力変動現象は空気の遷音速噴流の LES^[84]でも報告されており、定性的に整合する。また、周囲空気は超音速であるが、 $|x_2/D| > 0.5$ における圧力は流入圧力とほぼ同じ 100×10^3 Pa であり適正膨張噴流となるため、衝撃波は発生しなかったと考えられる。 $x_1/D = 6$ より下流で発生する圧力の擾乱は周囲空気の適正膨張噴流によって発生するマッハ波によるものと考えられる。

図 5.8 と同じ時刻・断面における混合センサーのコンターを図 5.9 に示す。SeLES- α および SeLES- β とともに、 $x_1/D < 8$ における噴流のコア領域ではセンサーがオフに

Fig. 5.8: Instantaneous distributions on the plane of $x_3 = 0$ at $t = 370T_0$.

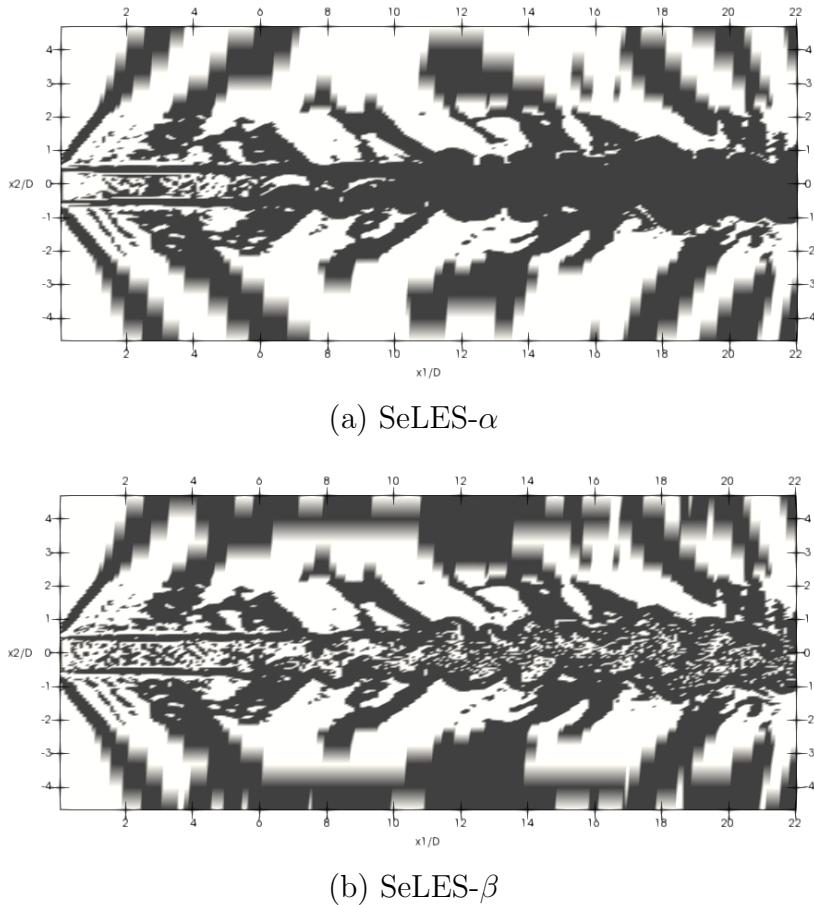


Fig. 5.9: Instantaneous distribution of the discontinuity sensor on the plane of $x_3 = 0$ at $t = 370T_0$ in $x_1/D < 22$. The sensor-detected area is plotted as black, and the other is white.

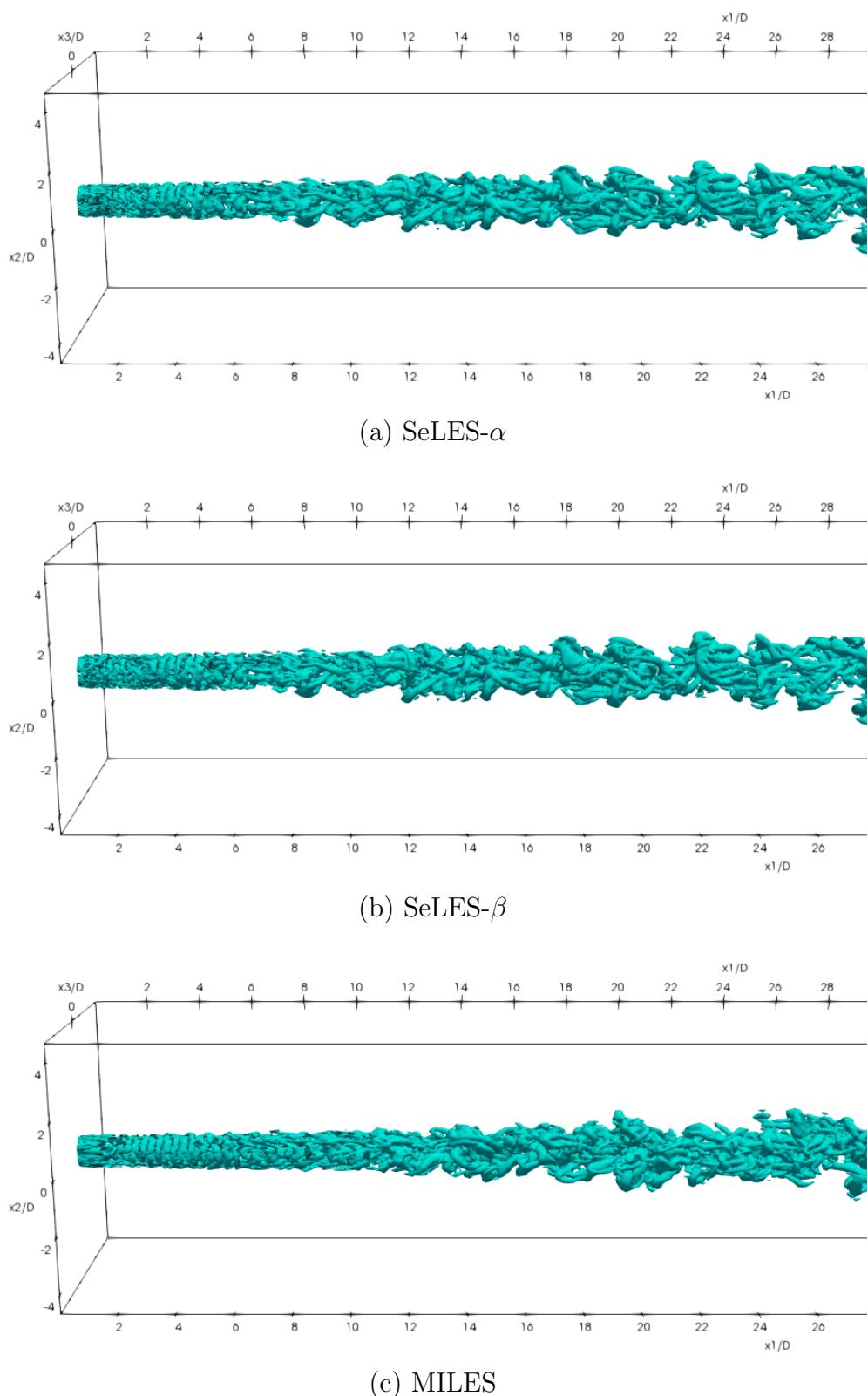
なり, $|x_2/D| = 0.5$ ではオンになることが確認される. 図 5.8(d) で確認された噴流出口から斜めに向かって伸びる高圧力領域でもセンサーがはたらいていることがわかる. SeLES- α では $x_1/D > 10, |x_2/D| < 0.5$ の領域ではセンサーがオンになる. 密度や速度コンターから, この領域で急勾配は発生していないと考えられるが, 乱流混合によって質量分率が複雑に分布しているため質量分率の急勾配センサーが僅かな変動を検知したと考えられる. 一方で, SeLES- β の場合は $x_1/D > 10, |x_2/D| < 0.5$ の領域でもセンサーの反応が抑制されている.

それぞれの計算手法を用いた場合の渦構造について確認するため, 速度勾配テンソルの第二不変量 $Q = 1.0 \times 10^5 \text{ m}^2/\text{s}^2$ の等値面を図 5.10(a) と (b) か

ら, SeLES- α , β それぞれのケースで現れる渦構造に大きな差異はないことが確認される. 噴流出口で発生した渦輪は $x_1/D < 6$ までに徐々に崩壊していき, $x_1/D > 8$ では主流方向に伸びた渦構造が確認される. $x_1/D > 10$ では, 水素噴流と周囲空気とのせん断層において主流と横切る方向 (x_2 , x_3 方向) の渦管が確認される. 一方, MILES(WCNS) の場合は噴流出口で発生した渦輪は $x_1/D < 8$ までに徐々に崩壊していくことが確認される. 主流と横切る方向 (x_2 , x_3 方向) の渦管は $x_1/D > 12$ で見られるが, SeLES- α , β で確認された位置よりも後流側である. これは急勾配でない領域において不連続捕獲スキームの数値粘性が付加されることにより, 3 次元的な渦運動が抑制されたためだと考えられる.

SeLES- α , SeLES- β , および MILES(WCNS) の結果として, 主流方向に対する軸中心上の平均速度分布と質量分率分布を図 5.11 に示す. 図 5.11 には実験データ^[15] および Zhao et al. の MILES 計算結果^[14]を併せて示す. SeLES- α と SeLES- β の場合は, $x_1/D = 7 - 8$ から減速が始まり, $x_1/D = 40$ では周囲空気とほぼ同じ速度になることが図 5.9(a) から確認できる. SeLES- α と SeLES- β の平均速度分布は実験値とよく一致している. 対照的に, MILES(Zhao et al.) の速度分布は噴流出口直後で減速しており, 実験値と乖離が見られる. 噴流においてはノズル出口からある程度の距離まで速度が一定になるポテンシャルコア領域が形成されるが, 減速が発生していることからポテンシャルコアが保たれていないと考えられる. Zhao et al. は Quasi-Conservative 方程式^{[21], [23], [40]}を用いていないため, 比熱比の急勾配で数値振動が発生したと考えられる. これが原因で噴流直後のポテンシャルコアが崩壊したものと推察される. $x_1/D > 10$ では, MILES(Zhao et al.) の速度勾配は SeLES の速度勾配よりも緩やかであり, 実験値より僅かに高い値を示している. MILES(WCNS) では噴流出口から一定の速度が保たれるが, 流速の減速位置は $x_1/D = 11 - 12$ であり, SeLES の計算結果や実験値よりもポテンシャルコアが下流側に伸びている.

図 5.11(b) より, SeLES- α と SeLES- β の場合は, 質量分率分布は $x_1/D = 10$ で急激に減少し, $x_1/D > 15$ では減少率が緩やかになることが確認される. 一方で, MILES(Zhao et al.) は速度分布と同様に質量分率分布の減少率は SeLES- α や SeLES- β よりも緩やかである. ポテンシャルコアの崩壊が確認された MILES(Zhao et al.) では, 質量分率 $Y_1 = 1$ の領域は $x_1/D = 10$ まで維持されているが, 質量分率の減少率は緩やかで実験値よりも水素の割合が多い. MILES(WCNS) では, 質量分率が

Fig. 5.10: Instantaneous iso-surface of $Q = 5.0 \times 10^7 \text{ m}^2/\text{s}^2$ at $t = 370T_0$.

減少し始める位置は SeLES の計算結果よりも下流に伸びることが確認される。計算結果と実験値を比較すると、SeLES- α と SeLES- β の方が MILES(Zhao et al.) や MILES(WCNS) より実験値に近いことが確認される。

次に、 x_1 および x_2 方向に対する軸中心上の乱流強度成分の分布を図 5.12 に示す。図 5.12(a) から、SeLES- α と SeLES- β の主流方向乱流強度 $u'_{1,\text{rms}}$ のピーク値は同程度であることがわかる。 $x_1/D < 8$ の領域では SeLES- β の方が勾配の立ち上がり位置が SeLES- α よりも僅かに上流側であることがわかる。センサーの反応範囲に差が確認された $x_1/D > 10$ の領域では主流方向乱流強度分布に大きな差は見られない。一方で、MILES(WCNS) は $u'_{1,\text{rms}}$ の増加し始める位置が SeLES よりも下流側にあり、ピーク値も少し低い。また、MILES(WCNS) ではポテンシャルコア内の $u'_{1,\text{rms}}$ は単調増加ではなく、 $x_1/D = 9$ の位置で一度増加が止まり、 $x_1/D = 10$ から再び増加に転じる分布が確認される。

図 5.12(b) より、SeLES- α のピーク値が最も高いことがわかる。MILES(WCNS) の $u'_{2,\text{rms}}$ 分布は $x_1/D < 12$ まで徐々に増加していくが、 $x_1/D < 12$ における増加率は SeLES よりも緩くピーク値は低い。これらの計算結果の比較から、ポテンシャルコア内の急勾配でない領域において数値粘性は乱流生成を抑制することが確認された。ポテンシャルコアの崩壊直後である $x_1/D = 10$ で乱流強度分布がピーク値を示すことから、SeLES の方がポテンシャルコア内部の乱れの状態を正しく再現しているものと考えられる。

以上より、本研究で構築した乱流計算手法 (SeLES) は急勾配でない領域では数値粘性を抑制して SGS 乱流モデルの渦粘性を付加するのでポテンシャルコア内の乱流状態を適切に評価できるため、従来手法である MILES よりも速度分布や水素と空気の混合状態が実験値とよく一致することを確認した。

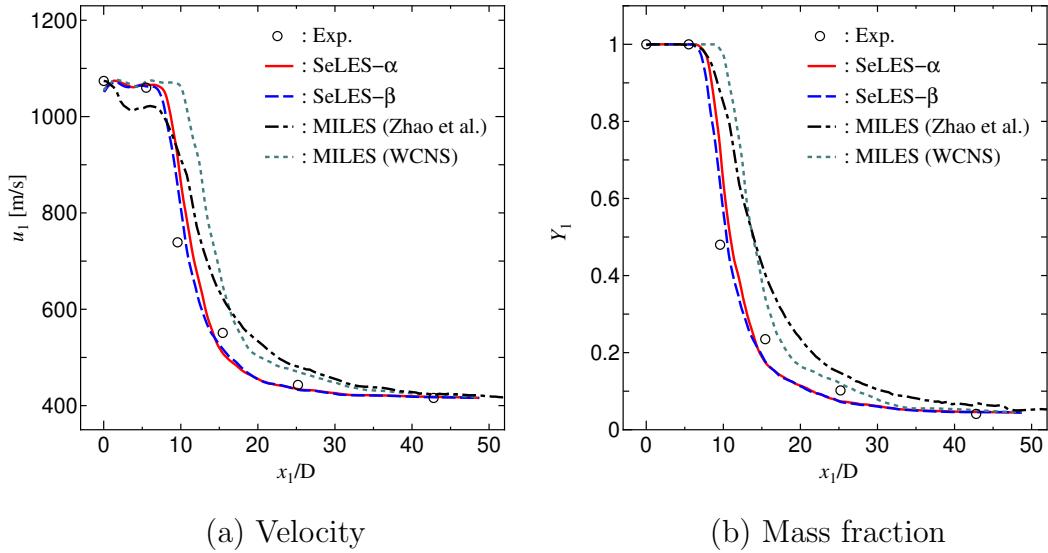


Fig. 5.11: Profiles of mean velocity and mean mass fraction in the mainstream direction along the central axis.

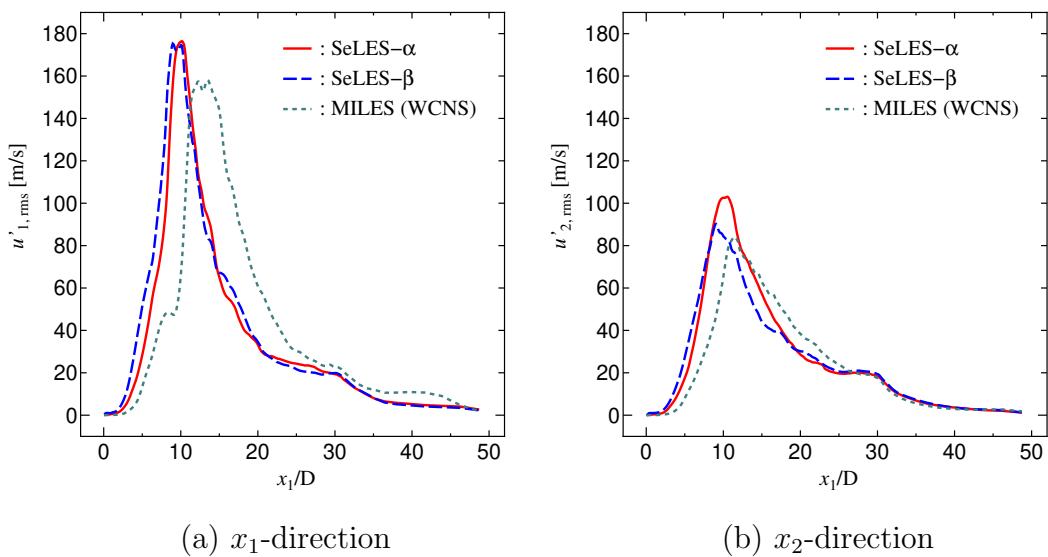


Fig. 5.12: Profiles of turbulence intensity along the center line.

5.3 まとめ

本研究で構築した乱流計算手法である SeLES が多成分圧縮性乱流の噴流現象を精度よくシミュレーションできることを示すため、非反応場における気体燃料と空気との同軸乱流噴流問題を対象に検証計算を実施した。非反応プロパン-空気同軸噴流問題において、SeLES で得られた計算結果を実験データや MILES の計算結果と比較した内容は以下のようにまとめられる。

- 密度と不連続性センサーの瞬時センター画像より、密度が急激に変化する領域で Larsson センサーと比熱比の急勾配センサーの混合センサーは正常に働くことが確認された。混合センサーのパラメータ値が小さい場合は密度が緩やかに変化する急勾配が存在しない領域においてもセンサーが反応するため、パラメータは大きい値に設定する方が望ましい。
- 平均流速と平均混合率の分布に関しては、全ての計算結果において大きな差異は確認されなかったものの実験値とはよい一致を示したことから、MILES と SeLES は平均場においては妥当な結果を与えることが確認された。
- 中心軸上の乱流強度成分の分布においては、計算手法の違いによるピーク値の大きさはほとんど確認されなかった。しかし、適切なセンサーパラメータを用いた場合の SeLES のピーク位置は MILES のピーク位置よりも実験値に近い。

高マッハ数の水素-空気同軸噴流問題において、SeLES の計算結果を実験値や先行研究の MILES による計算結果を比較した内容は以下のようにまとめられる。

- プロパン-空気同軸噴流問題よりも大きな急勾配が発生しているものの、速度センターと密度センターからは非物理的な数値振動は確認されなかった。これより、格子幅以下の分子拡散面を伴う乱流場においても混合センサーが有效地に働くことを確認した。
- SeLES で得られた平均速度分布や質量分率分布は実験値とよく一致していることが確認された。先行研究の MILES や WCNS 法を用いた MILES では、数

値粘性によってポテンシャルコア内の乱れを抑制するため実験値と乖離することが確認された。

- 乱流強度成分の分布から、SeLESでは噴流出口からすぐに乱流強度成分が増加する一方で、MILES(WCNS)ではSeLESよりも下流側で乱流強度が増加し始めることが確認された。また、MILESでは数値粘性によって乱れが抑制されるためポテンシャルコア内の乱流強度はSeLESよりも低い結果になった。

本論文の範囲では、非反応の気体燃料-空気の同軸噴流場において、従来手法のMILESより提案した乱流計算手法が実験結果とよく一致することを確認した。特に、マッハ数が高く密度比が大きい水素-空気の同軸噴流場においては、従来のMILESでは平均速度分布や平均質量分率分布は実験結果と乖離していたが、提案手法により物理現象が適切に再現されたため実験値と一致した。このことから、従来よりも信頼性の高いシミュレーション手法を構築できたと考えられる。しかし、センサーパラメータによっては急勾配がないにも関わらず燃料と空気と混合が進んだ領域で混合センサーが作用する問題がある。さらに正確な気体燃料-空気の同軸乱流噴流場のシミュレーションを実施するためには、下記の点に関して検証や改善が必要だと考えられる。

- 混合センサーに用いられるセンサーパラメータのチューニングは、様々な条件における同軸噴流場において計算を実施し、実験結果の再現性を確認しながら行う必要がある。
- 混合前の燃料と空気が接する急勾配領域は混合センサーによって検知することができるが、パラメータの設定値によっては混合後の領域においてはセンサーが作用した。混合領域のセンサー検知範囲が乱流強度に与える影響については、DNSによる信頼性の高い計算結果と比較し検証が必要だと考えられる。
- 本研究の範囲では別々に供給された燃料と空気の混合過程を正しく再現できる計算手法を構築できたと考えられる。しかし、混合が進んだ領域の乱流をより正確に再現するためには、混合流体に対応できる混合センサーへ改良する必要がある。

第6章 結論

本研究では、気体燃料を用いる燃焼方式の中で、有害物質の排出が少ない利点を有する予混合燃焼に着目した。予混合燃焼器の開発においては、乱流噴流による燃料と空気の混合促進が重要な要素技術のひとつである。予混合装置の最適設計のためには、反応領域より上流の燃料と空気の同軸噴流のふるまいの理解が必須である。特に、測定困難な流れの微細構造と化学種の混合過程の関係を解析する手段として、数値流体力学(CFD)の適用が有望である。ノズル出口の燃料と空気が接した面の不安定挙動から乱流に遷移する過程を把握するツールとして、二成分同軸噴流における乱流混合現象を再現する数値計算手法の確立を目的とする研究を実施した。

本研究の対象となる流れは、物性の異なる2成分からなる高速の同軸噴流であり、数値シミュレーションでは、流体の圧縮性と乱流現象、さらに流れ場の強い非定常性を考慮しなければならない。これに対して、本計算は有限差分法を基礎として、乱流に対してはLarge-Eddy Simulation(LES)を適用した。

気体燃料と空気が接した直後から乱流遷移に至るまでの区間は、物質濃度が急激に変化する薄い層(本文では分子拡散面と表現している)を扱う必要がある。衝撃波および分子拡散面は、いずれも厚みが数値計算の格子幅程度以下であるため、有限差分法では実質的に不連続面である。有限幅の計算格子で急勾配を捕獲するには、非物理的な振動を生じさせないため、数値粘性を効かせる急勾配捕獲スキームが導入される。急勾配でない領域においては数値粘性の影響が及ばないよう中心差分スキームに切り替わり、全体として高解像度を実現する低数値散逸スキームを導入する。本計算の対象については、速度場と濃度場の双方に対して急勾配捕獲スキームを機能させる必要があるため、本研究では新たに速度・密度・比熱比などの物理量の急勾配発生位置を検知するセンサーを開発した。

気体燃料と空気の混合が急速に進展する乱流領域においては、強い非線形性によって、計算格子ではとらえられない微細な渦構造が生成される。これに対しては、従来から、Sub-Grid Scale (SGS) の乱れの効果を表す物理モデルを使用する陽的LES

とともに、計算手法としての数値粘性の効果で代用する Implicit-LES (ILES) が試みられてきた。SGS 乱れは主としてエネルギー散逸を担っているため、陽的 LES の SGS モデル、陰的 LES の数値粘性とともに拡散効果を導入する形式となっている。本研究では、物理的な根拠が明確な SGS モデルによる陽的 LES を採用する。ただし、本計算では、前述の速度場と濃度場に対する急勾配捕獲スキームの数値粘性に加え、乱流の SGS モデルを組み込むことになり、既存の方法の組み合わせでは過剰なエネルギー散逸を招くことが危惧される。そこで本研究では、速度と物質濃度それぞれの急勾配を検知するセンサーを用いて SGS 乱れに対する渦粘性モデルの係数を修正する Semi-explicit LES (SeLES) を新たに開発した。

標準的な検証問題に対して検証を行った後、二成分同軸噴流の問題に適用して本研究で新たに開発した手法の従来法に対する有効性を実証した。結果は以下のように要約される。

第2章では、二成分圧縮性流体における低数値散逸スキームを構築した。Over-Estimated Quasi-Conservative 方程式系における WCNS 補間を用いた HLLC スキームにより、格子幅以下の分子拡散面を数値振動なく捕獲できる急勾配捕獲スキームを構築した。低数値散逸スキームを構築する上で必要となる速度と物質濃度両方の急勾配を検知する混合センサーを新たに考案した。混合センサーは速度急勾配センサーと比熱比急勾配センサーをカップリングすることで構築される。混合センサーを用いて急勾配捕獲スキームと中心差分の数値流束を移流項の型に応じて適切に評価することで、二成分流体における低数値散逸スキームが構築できることを示した。

第3章では、粘性および分子拡散がない単成分・二成分圧縮性流れにおける検証計算を用いて第2章で構築した数値計算手法の検証を行った。粘性や分子拡散の影響がないため物理量分布の急勾配を拡散させることができなく、計算手法の数値不安定性を純粹に評価が可能となる。また、粘性や分子拡散の影響ではなく純粹に数値粘性の効果によって流れの減衰の様子を確認することができるため、低数値散逸スキームの評価に適している。ベースとなる急勾配捕獲スキームの急勾配捕獲性能は、二成分流体における衝撃波管問題と物質界面移流問題にて検証し、数値振動なく理論解とよく一致することを確認した。また、単成分流における渦-衝撃波干渉問題では提案した計算手法が低数値散逸性と急勾配捕獲を両立できることを示した。二成分流体の空間2次元の気泡-衝撃波干渉問題およびTriple-point問題で計算手法の評価

を行った。いずれの検証計算においても、提案した計算手法は数値振動の発生を抑制することが確認された。混合センサーの格子解像度の影響や流れの対称性の影響なども調査し、提案したセンサーが広い範囲で適用可能であることを示した。

第 4 章では、速度や化学種の急勾配が存在する領域では数値粘性のみが付加し、急勾配でない領域では SGS モデルによる渦粘性が付加する、SeLES という新たな乱流計算手法を構築した。構築の過程で、陽的 LES の基礎式、渦粘性型 SGS モデルである Vreman モデル、および各 SGS 項のモデルについて説明した。そして、SeLES を構築するために混合センサーを用いた SGS 渦粘性係数の修正方法を示した。また、LES の計算結果は離散化手法の精度に大きく影響されるため、第 2 章で構築した計算手法の高次精度化を行った。

第 5 章では、第 4 章までに構築した乱流計算手法の検証を行うため、反応を伴わない気体燃料と空気との同軸噴流場を対象とした 2 つの検証計算を実施した。一つ目の検証計算はプロパン-空気の同軸噴流場を対象とし、SeLES の計算結果を実験値や MILES の結果と比較した。SeLES で得られた瞬時可視化画像から、プロパン噴流と空気との界面では密度は急激に変化するが、速度急勾配センサーと比熱比急勾配センサーの混合センサーは急勾配を検知するため、数値振動を抑制できることを確認した。平均速度分布や混合分率はいずれの計算結果も実験値とよく一致し、大きな差異は確認されなかった。しかし、ノズル中心軸上の乱流強度分布のピーク位置は SeLES の方が MILES よりも実験値に近いことが確認された。このことから、全域に数値粘性が付加される MILES よりも、局所的に数値粘性が付加される領域と SGS 渦粘性が付加される領域が切り替わる SeLES の方が同軸噴流場の乱流状態を精度よく再現できることを確認した。二つ目の検証計算は高マッハ数の水素-空気の同軸噴流場を対象とした。SeLES の計算結果を実験値や先行研究の計算結果と比較した。先行研究 (WENO 法を用いた MILES) や WCNS と HLLC スキームによる MILES の計算結果は、平均速度分布と平均質量分率分布に関して実験値と乖離が確認された。一方で、SeLES の計算結果はそれらの平均分布について実験値と良い一致を示した。さらに、SeLES と MILES (WCNS) の乱流強度分布の比較を行った。SeLES と MILES とではポテンシャルコア内の乱流強度成分の増加傾向が大きく異なることを確認した。MILES ではポテンシャルコアの分布が急勾配でない領域における数値粘性によって流れが散逸し、乱流強度が低く評価されたと考えられる。以

上の結果から、従来手法では速度分布や質量分率分布について実験結果を正しく再現できなかったが、本研究で構築した計算手法により物理現象が適切に再現されたため実験結果と一致することが確認された。

以上より、本研究では気体燃料と空気の二成分同軸噴流場に対して高い信頼性をもって解析できる乱流計算手法を提案し、その有効性を様々な検証例題により実証した。今後の展開として、さらに再現性を高める計算手法を構築するためには、混合が進んだ領域において検知範囲がより小さくなるセンサーパラメータの検討や混合流体に対応した急勾配センサーへの改良が必要だと考えられる。また、本乱流計算手法は燃焼反応領域直前の流れ場と混合状態を精度よく計算することができるので、本手法に反応モデルを組み込み拡張することで信頼性の高い反応流シミュレーションを実施できることが期待される。この拡張により、化学反応と乱流の相互干渉の影響が現れる複雑な乱流燃焼のモデルを検討する上でも有用なツールとなり、燃焼モデル研究の更なる発展に寄与するものと考えられる。

付録A 物質界面センサーの比較

本文で導入した物質界面センサー(式(2.56)-(2.58))以外にも、様々な評価方法が考えられる。本付録では、従来研究で提案されている物質界面センサーや提案手法とは異なる物質界面センサーを導入し、それぞれの計算結果の比較を行う。

A.1 種々の物質界面センサーの導入

単成分の圧縮性流体においてはスカラーである圧力を用いた衝撃波センサーが提案されてきた。本付録では、圧力ベースの衝撃波センサーのアナロジーから考えられる物質界面センサーを導入し、それぞれの不連続検知性能について二成分流体の検証計算で比較を行った。

もっともシンプルな物質界面センサーは次式で評価される。

$$\sigma_{\text{SMS},i} = [(\Gamma_p)_{i+1} - (\Gamma_p)_i] [(\Gamma_p)_i - (\Gamma_p)_{i-1}] \quad (\text{A.1})$$

$$\omega_{\text{SMS},i} = \begin{cases} 1 & (\sigma_{\text{SMS},i} > 0) \\ 0 & (\text{others}) \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

空間2次元のセンサーはセル界面において、

$$\phi_{\text{SMS},i} = \max(\omega_{\text{SMS},i}, \omega_{\text{SMS},j}), \quad (\text{A.3})$$

$$\psi_{\text{SMS},i+1/2} = \max(\phi_{\text{SMS},i}, \phi_{\text{SMS},i+1}), \quad (\text{A.4})$$

と評価される。

Jameson et al. は圧力を用いて古典的な衝撃波センサーを提案した^[85]。Jamesonセンサーの評価に用いる変数を圧力から比熱比に入れ替えることで、次のような物

質界面センサーが得られる。

$$\sigma_{JS,i} = \frac{|(\Gamma_p)_{i-1} - 2(\Gamma_p)_i + (\Gamma_p)_{i+1}|}{|(\Gamma_p)_{i-1} + 2(\Gamma_p)_i + (\Gamma_p)_{i+1}|} \quad (A.5)$$

$$\omega_{JS,i} = \begin{cases} 1 & (\sigma_{JS,i} > 10^{-4}) \\ 0 & (\text{others}) \end{cases} \quad (A.6)$$

Jameson ベースのセンサーは一部を除いて本研究で提案したセンサー (式 (2.56)-(2.58)) と同じである。

Bogey et al. はより高解像度な圧力勾配センサーを提案した^[86]。この評価方法を比熱比に適用すると Bogey センサーは次式となる。

$$Dg_i = \frac{1}{4} [-(\Gamma_p)_{i-1} + 2(\Gamma_p)_i - (\Gamma_p)_{i+1}] \quad (A.7)$$

$$Dg_i^{\text{mag}} = \frac{1}{2} [(Dg_i - Dg_{i-1})^2 + (Dg_i - Dg_{i+1})^2] \quad (A.8)$$

$$rg_i = \frac{Dg_i^{\text{mag}}}{(\Gamma_p)^2} + \varepsilon \quad (A.9)$$

$$\sigma_{BS,i} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{rg_{\text{th}}}{rg_i} + \left| 1 - \frac{rg_{\text{th}}}{rg_i} \right| \right) \quad (A.10)$$

$$\omega_{BS,i} = \begin{cases} 1 & (\sigma_{BS,i} > 10^{-6}) \\ 0 & (\text{others}) \end{cases} \quad (A.11)$$

ここで, $\varepsilon = 10^{-16}$ はゼロ割を避けるための微小定数, $rg_{\text{th}} = 10^{-6}$ は閾値である。空間 2 次元におけるセル界面の Jameson センサーおよび Bogey センサーは式 (A.3)-(A.4) と同様に求められる。

Movahed & Johnsen は圧力ではなく $1/(\gamma - 1)$ の Total variation に基づいた物質界面センサーを提案した^[30]。

$$\phi_{TVS,i+1/2} = \sum_{n=-3}^2 \frac{1}{n} (\Gamma_p)_{i+n} - \frac{1}{2} [(\Gamma_p)_{i-1} + (\Gamma_p)_i] \quad (A.12)$$

$$\psi_{TVS,i+1/2} = \begin{cases} 1 & (\phi_{TVS,i+1/2} > 10^{-3}) \\ 0 & (\text{others}) \end{cases} \quad (A.13)$$

式 (A.12) は Γ_p の Total variation である。Movahed & Johnsen^[30] の TV 物質界面センサーは標準的な差分法 WENO と Primitive variable WENO とを切り替えるために使用されている。

A.2 検証計算

第3.3節で実施した衝撃波-ヘリウム気泡干渉問題において、それぞれのセンサーの物質界面検知性能を比較する。本検証計算では Larsson センサーは共通とし、本付録で導入した比熱比急勾配センサーとカップリングした混合センサーを用いる。なお、計算条件や境界条件は第3.3節と同じである。

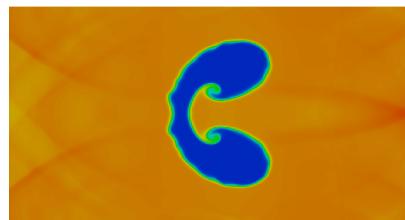
まず、それぞれの物質界面センサーの計算コストを比較する。それぞれのセンサーを用いた場合の 1600-3600 ステップにおける計算時間を表 A.1 に示す。それぞれのセンサーによる計算時間に関して大きな差は確認されないが、Jameson センサーの計算時間が最も短いことがわかる。

図 A.1 に気泡が衝撃波を通過した後の密度コンターと不連続センサーのコンターを示す。密度コンターより、SM センサーと Jameson センサーでは物質界面近傍の数値振動が抑制されていることを確認できる。図 A.1(a) 右図から、SM センサーは他のセンサーより物質界面が厚く評価されていることがわかる。これは低数値散逸性という観点において他のセンサーより劣る点である。Jameson センサーのコンター(図 A.1(b) 右図)は、本研究で提案したセンサーによる結果とほぼ同じであるが(図 3.13(e) 参照)，密度コンターにおいて気泡先端でスパイクの発生が確認される。これは Jameson センサーは評価式にクライテリア(式 (2.57))が追加されていないため、余分な領域まで検知され数値粘性が広い領域で付加されており HLLC スキームの過剰な数値粘性による計算不安定化を抑制できなかったものと考えられる。図 A.1(c), (d) 右図より、Bogey センサーと TV センサーは Jameson センサーよりも物質界面を薄く評価していることがわかる。最も物質界面を薄く評価しているのは Bogey センサーだが、密度コンターから Bogey センサーでは数値振動が発生していることが

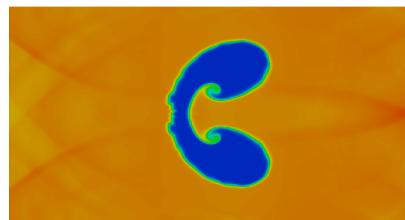
Table. A.1: Computational time of the different material interface sensors in the shock-bubble interaction problem.

The simplest material interface sensor	1.49×10^{-2}
The Jameson-like material interface sensor	1.34×10^{-2}
The Bogey-like material interface sensor	1.67×10^{-2}
The TV material interface sensor	1.39×10^{-2}

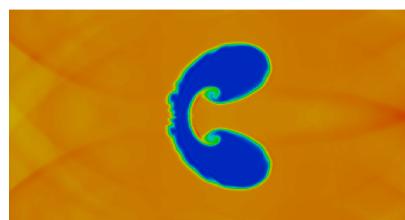
確認される。また、TV センサーでも同様に密度の数値振動が発生している。これらの結果より、物質界面を薄く評価するセンサーは数値振動を引き起こすため、適切な厚みを持って評価できる物質界面センサーが必要であると結論づけられる。



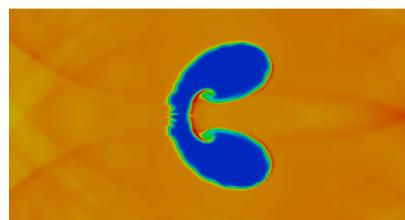
(a) The simplest material interface sensor



(b) The Jameson-like material interface sensor



(c) The Bogey-like material interface sensor



(d) The TV material interface sensor

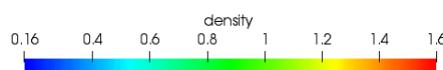


Fig. A.1: Comparison of the different material interface sensors in the shock-bubble interaction problem at $t = 3.6$. Left: density; Right: sensor.

付 錄B 化学種濃度センサー

B.1 化学種センサーの導入

二成分圧縮性流体の数値計算においては、比熱比の急勾配が伴う物質界面で圧力の数値振動が発生する。そのため、この分野では物質界面と衝撃波の両方を捕獲する計算手法の研究が進められてきた。ただし、現実には異なる流体でも比熱比が同じ値となる物質界面も存在する。この場合、物質界面で数値振動が発生しないため研究テーマとして着目されてこなかった。一方、本研究では比熱比を用いた急勾配センサーと Larsson センサーを組み合わせることで低数値散逸スキームを提案した。ただし、この低数値散逸スキームは物質濃度の急勾配を評価する差にに比熱比の値を用いているため、比熱比が同じ値を持つ二成分流体が存在する流れ場では低数値散逸スキームを構築できない。比熱比が同じ場合でも、異なる流体においては物質界面で密度の不連続が生じるのでセンサーは必要である。しかしながら、速度と圧力は界面で同じ値を持つため、速度勾配と渦度で評価する Larsson センサーでは物質界面を検知できない。そこで本節では、代わりとなる化学種濃度センサーを提案し、異なる密度を持つが比熱比が同じ値の二成分流体における低数値散逸スキームを構築する。化学種濃度センサーは比熱比を用いたセンサーの場合と同様に次式で評価される。

$$\sigma_{YS,i} = \frac{|(Y_1)_{i-1} - 2(Y_1)_i + (Y_1)_{i+1}|}{|(Y_1)_{i-1} + 2(Y_1)_i + (Y_1)_{i+1}|} \quad (B.1)$$

$$\omega_{YS,i} = \begin{cases} 1 & (\sigma_{YS,i} > C_{YS} \text{ and } \delta < (Y_1)_i < 1 - \delta) \\ 0 & (\text{others}) \end{cases}, \delta = 10^{-6} \quad (B.2)$$

$$\phi_{YS,i} = \max(\omega_{YS,i}, \omega_{YS,j}) \quad (B.3)$$

$$\psi_{YS,i+1/2} = \max(\phi_{YS,i}, \phi_{YS,i+1}) \quad (B.4)$$

ここで閾値は $C_{YS} = 0.001$ とした。この閾値を用いることで比熱比のセンサーと同程度の界面厚さとなり数値振動を抑制できる。

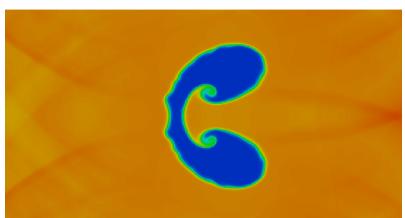
B.2 検証計算

比熱比が同じ場合かつ密度が異なる物質界面が生じる多成分流体の検証計算を実施するため、第3.3節の気泡-衝撃波干渉問題の初期条件を次のように変更する。

$$\begin{aligned}
 & (\rho, u_1, u_2, p, Y_1, \gamma, M) \\
 &= \begin{cases} (1.3764, -0.3336, 0, 1.5698/1.4, 0, 1.4, 28.8) & (x_1 > 1) \\ (0.1819, 0, 0, 1.0/1.4, 1, 1.4, 2) & (x_1^2 + x_2^2 < 0.5) \\ (1, 0, 0, 1.0/1.4, 0, 1.4, 28.8) & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (B.5)
 \end{aligned}$$

計算領域や境界条件は第3.3と同じ設定とした。

図B.1に $t = 3.6$ における密度分布と混合センサー値のコンターをそれぞれ示す。図B.1(a)より、化学種センサーを用いて構築した混合センサーにおいても数値振動を抑制できていることが確認される。また、HLLCスキームの数値不安定性が抑制されているため気泡形状先端(図B.1(a)の左側)は崩壊しておらず、低数値散逸性も比熱比センサーを用いた場合と同程度と考えられる。図B.1(b)より、物質界面後流側(図の右側)のセンサー値は比熱比の場合とは若干異なる。化学種センサーで用いる質量分率 Y_1 は保存形で評価されているためセンサーが過敏に働いていると推察されるが、これはセンサーパラメータによってある程度改善できると考えられる。以上より、化学種センサーを用いて構築した混合センサーにおいても低数値散逸スキームを構築できることが示された。



(a) Density



(b) Sensor

Fig. B.1: Distribution of the density and discontinuity sensor with species sensor in the shock-bubble interaction problem ($\gamma = 1.4$) at $t = 3.6$.

付録C 二成分圧縮性流れにおける無反射境界条件

圧縮性流れの数値計算においては本来発生し得ない境界面からの非物理的な反射波が計算を不安定化させ、時には計算を破綻させてしまう。そのため、この非物理的な境界からの反射波を抑制する無反射境界条件の研究が多くなされてきた^[87]。この反射波を抑制する計算手法は大きく二つに分類される。ひとつは計算空間の内部領域にスponジ領域とよばれる人工的な減衰項を付加することで境界から流入出する非物理的な反射や変動を抑制する方法^{[88]~[90]}。もう一つは圧縮性流れの特性波解析に基づいて計算領域内部の値から境界条件を定める方法^{[80], [91]~[93]}である。後者の手法において、特に Poinsot & Lele によって提案された Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition(NSCBC)^[80]は実装が容易であることから圧縮性流体解析において広く用いられている。そこで本研究では二成分圧縮性流体に対する NSCBC^[70]を導入する。ただし、本付録では二成分流体の支配方程式において定式化を行う。

C.1 Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition

NSCBC では特性波解析に基づいて流れの流入出を特性波によって分解し、反射波に対しては計算領域への侵入を防ぎ、流出波に対してはそのまま流出させる。 x_1 方向に NSCBC を適用すると二成分圧縮性流体の支配方程式は次式のように書き換

えられる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + d_1 + \frac{\partial \rho u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \rho u_3}{\partial x_3} = 0 \quad (C.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_1}{\partial t} + u_1 d_1 + \rho d_3 + \frac{\partial \rho u_2 u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial \rho u_3 u_1}{\partial x_3} = \frac{\partial \tau_{1j}}{\partial x_j} \quad (C.2)$$

$$\frac{\partial \rho u_2}{\partial t} + u_2 d_1 + \rho d_4 + \frac{\partial \rho u_2 u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \rho u_3 u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial p}{\partial x_2} = \frac{\partial \tau_{2j}}{\partial x_j} \quad (C.3)$$

$$\frac{\partial \rho u_3}{\partial t} + u_3 d_1 + \rho d_5 + \frac{\partial \rho u_2 u_3}{\partial x_2} + \frac{\partial \rho u_3 u_3}{\partial x_3} + \frac{\partial p}{\partial x_3} = \frac{\partial \tau_{3j}}{\partial x_j} \quad (C.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{1}{2} (u_k u_k) d_1 + \frac{d_2}{\gamma - 1} + \rho u_1 d_3 + \rho u_2 d_4 + \rho u_3 d_5 \\ + \frac{\partial}{\partial x_2} [(\rho E + p) u_2] + \frac{\partial}{\partial x_3} [(\rho E + p) u_3] = \frac{\partial}{\partial x_i} (u_j \tau_{ij}) - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \end{aligned} \quad (C.5)$$

$$\frac{\partial \rho Y_1}{\partial t} + Y_1 d_1 + \rho d_6 + \frac{\partial \rho u_2 Y_1}{\partial x_2} + \frac{\partial \rho u_3 Y_1}{\partial x_3} = - \frac{\partial \rho \alpha_j}{\partial x_j} \quad (C.6)$$

$$\frac{\partial \Gamma_p}{\partial t} + \frac{\Gamma_p d_1}{\rho} + d_7 + \frac{\partial u_2 \Gamma_p}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3 \Gamma_p}{\partial x_3} = - \frac{\partial \alpha_j}{\partial x_j} \quad (C.7)$$

また, d_1-d_7 は次のように与えられる。

$$\mathbf{d} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \\ d_5 \\ d_6 \\ d_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{c^2} [\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1)] \\ \frac{1}{2} (\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) \\ \frac{1}{2 \rho c} (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}_1) \\ \mathcal{L}_3 \\ \mathcal{L}_4 \\ \mathcal{L}_6 \\ \mathcal{L}_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \rho u_1}{\partial x_1} \\ \frac{\partial (\rho u_1 c^2)}{\partial x_1} + (1 - \gamma) u_1 \frac{\partial p}{\partial x_1} \\ u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_1} \\ u_1 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \\ u_1 \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \\ u_1 \frac{\partial Y_1}{\partial x_1} \\ u_1 \frac{\partial \Gamma_p}{\partial x_1} \end{pmatrix} \quad (C.8)$$

ここで, \mathcal{L}_i は特性速度 λ_i に関する特性波振幅である。特性速度 λ_i は以下のように定義される。

$$\lambda_1 = u_1 - c \quad (C.9)$$

$$\lambda_2 = \lambda_3 = \lambda_4 = \lambda_6 = \lambda_7 = u_1 \quad (C.10)$$

$$\lambda_5 = u_1 + c \quad (C.11)$$

特性波振幅 \mathcal{L}_i は次式で求められる.

$$\mathcal{L}_1 = \lambda_1 \left(\frac{\partial p}{\partial x_1} - \rho c \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) \quad (C.12)$$

$$\mathcal{L}_2 = \lambda_2 \left(c^2 \frac{\partial \rho}{\partial x_1} - \frac{\partial p}{\partial x_1} \right) \quad (C.13)$$

$$\mathcal{L}_3 = \lambda_3 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \quad (C.14)$$

$$\mathcal{L}_4 = \lambda_4 \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \quad (C.15)$$

$$\mathcal{L}_5 = \lambda_5 \left(\frac{\partial p}{\partial x_1} + \rho c \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) \quad (C.16)$$

$$\mathcal{L}_6 = \lambda_6 \frac{\partial Y_1}{\partial x_1} \quad (C.17)$$

$$\mathcal{L}_7 = \lambda_7 \frac{\partial \Gamma_p}{\partial x_1} \quad (C.18)$$

上記の式を用いることで計算領域内から流出する特性波を求めることができるが、計算領域外から流入する特性波は正しく求めることができない。そこで、局所1次元非粘性の関係 (Local One Dimensional Inviscid, LODI) を用いて計算領域外から流入する特性波を推察する。LODI システムは式 (C.1)-(C.7) において横断成分を持つ項と粘性項を無視することで得られる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \left[\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) \right] = 0 \quad (C.19)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) = 0 \quad (C.20)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{1}{2\rho c} (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}_1) = 0 \quad (C.21)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + \mathcal{L}_3 = 0 \quad (C.22)$$

$$\frac{\partial u_3}{\partial t} + \mathcal{L}_4 = 0 \quad (C.23)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{T}{\rho c^2} \left[-\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2}(\gamma - 1)(\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) \right] = 0 \quad (C.24)$$

$$\frac{\partial Y_1}{\partial t} + \mathcal{L}_6 = 0 \quad (C.25)$$

$$\frac{\partial \Gamma_p}{\partial t} + \mathcal{L}_7 = 0 \quad (C.26)$$

上式のLODI システムと物理境界条件を用いることで特性波振幅 \mathcal{L}_i を求めることができる。境界での流速と音速との大小関係によって LODI システムに与える条件が異なる。反射波が生じる流れ場は流入・流出境界において亜音速条件となる。亜音

速条件に対するそれぞれの境界条件については次節以降に示す。なお、 x_2 方向や x_3 方向は x_1 方向と同様に構築できるので割愛する。

C.1.1 亜音速流入条件

流入条件として流速と温度が固定値である場合を考える。亜音速流入条件では境界を通して計算領域外部から流入する特性波は $\mathcal{L}_2, \mathcal{L}_3, \mathcal{L}_4, \mathcal{L}_5, \mathcal{L}_6, \mathcal{L}_7$ となる。計算領域内から流出する特性波は \mathcal{L}_1 のみであり、式 (C.12) より求められる。流速 u_1 は固定された値であるので \mathcal{L}_5 は次式となる。

$$\mathcal{L}_5 = \mathcal{L}_1 \quad (C.27)$$

温度が固定であることから式 (C.24) より \mathcal{L}_2 が得られる。

$$\mathcal{L}_2 = \frac{1}{2}(\gamma - 1)(\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) \quad (C.28)$$

$\mathcal{L}_3, \mathcal{L}_4, \mathcal{L}_6, \mathcal{L}_7$ は物理境界条件から次式となる。

$$\mathcal{L}_3 = \mathcal{L}_4 = \mathcal{L}_6 = \mathcal{L}_7 = 0 \quad (C.29)$$

上式から得られた $\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2, \mathcal{L}_5$ を用いて d_1 を求める。

$$d_1 = \frac{1}{c^2} \left[\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) \right] \quad (C.30)$$

上式で得られた d_1 を用いて式 (C.1) を評価することで入口境界における密度 ρ が定められる。

C.1.2 亜音速流出条件

流出境界では流速や温度を予め境界値として与えることが難しい。亜音速流れの場合、計算領域外から流入する特性波は \mathcal{L}_1 のみである。無限遠方の圧力を p_∞ とすると \mathcal{L}_1 は次式のように求められる。

$$\mathcal{L}_1 = K(p - p_\infty) \quad (C.31)$$

上式の K は次式で表される定数である。

$$K = \sigma \frac{(1 - M_{\max}^2 c)}{L_{ref}} \quad (C.32)$$

ここで, M_{\max} は流れ場の最大マッハ数, L_{ref} は代表長さ, σ は $0.1 < \sigma < \pi$ のパラメータである. 本研究では文献^[70]を参照し $\sigma = 0.15$ と設定した. \mathcal{L}_2 - \mathcal{L}_7 は式 (C.13)-(C.18) より, 計算領域内から片側差分によって求める. そして, 得られた \mathcal{L}_i を式 (C.8) に代入して d_i を求め, 式 (C.1)-(C.7) を時間積分すればよい.

C.2 Three-dimensional NSCBC

境界において流れの三次元性が強い場合には, LODI仮定に基づく従来の NSCBC では非物理的な反射波は抑制できない. また, 境界面に強い対流が存在する場合は圧力やその他の物理的な値が目標値に達しない問題が発生する. これを改善するために境界面の法線方向の項を取り入れた 3D-NSCBC^{[81], [82]}が提案されており, 本研究でもこの手法を導入する. 3D-NSCBC を適用した場合のシステム方程式は次式となる.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \left[\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) \right] - \mathcal{T}_1 = 0 \quad (\text{C.33})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) - \mathcal{T}_5 = 0 \quad (\text{C.34})$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{1}{2\rho c} (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}_1) - \mathcal{T}_2 = 0 \quad (\text{C.35})$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + \mathcal{L}_3 - \mathcal{T}_3 = 0 \quad (\text{C.36})$$

$$\frac{\partial u_3}{\partial t} + \mathcal{L}_4 - \mathcal{T}_4 = 0 \quad (\text{C.37})$$

$$\frac{\partial Y_1}{\partial t} + \mathcal{L}_6 - \mathcal{T}_6 = 0 \quad (\text{C.38})$$

$$\frac{\partial \Gamma_p}{\partial t} + \mathcal{L}_7 - \mathcal{T}_7 = 0 \quad (\text{C.39})$$

ここで, 横断項 \mathcal{T} は次式で与えられる.

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} \mathcal{T}_1 \\ \mathcal{T}_2 \\ \mathcal{T}_3 \\ \mathcal{T}_4 \\ \mathcal{T}_5 \\ \mathcal{T}_6 \\ \mathcal{T}_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \rho u_t}{\partial x_t} \\ u_t \frac{\partial \rho u_1}{\partial x_t} \\ u_t \frac{\partial \rho u_2}{\partial x_t} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_2} \\ u_t \frac{\partial \rho u_3}{\partial x_t} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_3} \\ u_t \frac{\partial p}{\partial x_t} + \gamma p \frac{\partial u_t}{\partial x_t} \\ u_t \frac{\partial Y_1}{\partial x_1} \\ u_t \frac{\partial \Gamma_p}{\partial x_1} \end{pmatrix}, (t = 2, 3) \quad (\text{C.40})$$

このシステム方程式に物理境界条件を与えることによって特性波振幅 \mathcal{L}_i を決定する.

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t} - \rho c \frac{\partial \rho u_1}{\partial t} \right) + \mathcal{L}_1 + \mathbb{T}_1^1 \quad (C.41)$$

$$\left(c^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{\partial p}{\partial t} \right) + \mathcal{L}_2 + \mathbb{T}_1^2 \quad (C.42)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + \mathcal{L}_3 + \mathbb{T}_1^3 \quad (C.43)$$

$$\frac{\partial u_3}{\partial t} + \mathcal{L}_4 + \mathbb{T}_1^4 \quad (C.44)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial t} + \rho c \frac{\partial \rho u_1}{\partial t} \right) + \mathcal{L}_5 + \mathbb{T}_1^5 \quad (C.45)$$

$$\frac{\partial Y_1}{\partial t} + \mathcal{L}_6 + \mathbb{T}_1^6 \quad (C.46)$$

$$\frac{\partial \Gamma_p}{\partial t} + \mathcal{L}_7 + \mathbb{T}_1^7 \quad (C.47)$$

ここで、 \mathbb{T}_k^m は m 番目の特性変数に関連する x_k に垂直な特性横断項である.

$$\mathbb{T}_1^1 = \mathcal{T}_5 - \rho c \mathcal{T}_2 \quad (C.48)$$

$$\mathbb{T}_1^2 = c^2 \mathcal{L}_1 - \mathcal{T}_5 \quad (C.49)$$

$$\mathbb{T}_1^3 = \mathcal{T}_3 \quad (C.50)$$

$$\mathbb{T}_1^4 = \mathcal{T}_4 \quad (C.51)$$

$$\mathbb{T}_1^5 = \mathcal{T}_5 + \rho c \mathcal{T}_2 \quad (C.52)$$

$$\mathbb{T}_1^6 = \mathcal{T}_6 \quad (C.53)$$

$$\mathbb{T}_1^7 = \mathcal{T}_7 \quad (C.54)$$

通常の NSCBC と同様に境界における流速と音速との関係によって、外部から流入する特性波が異なる. 第 5 章で亜音速流出境界を適用しているため、亜音速流出境界について次節に示す.

C.2.1 亜音速流出条件

x_1 方向の計算領域を $0 < x_1 < L_x$ とし、出口境界 $x_1 = L_x$ とした場合の特性波について考える. このとき、計算領域外から流入する特性振幅 \mathcal{L}_1 は次式で求められる.

$$\mathcal{L}_1 = K(p - p_\infty) + (1 - \beta) \mathbb{T}_1^1 \quad (C.55)$$

ここで、 β は $0 < \beta < 1$ の横断項に対する減衰パラメータである。 β の設定値には任意性があり、 β の評価方法を調査している研究がある^[94]。本研究では境界における断面平均マッハ数を用いて、 $\beta = \bar{M}_{\text{outlet}}$ とした。その他の特性波振幅は通常の NSCBC と同様に計算領域内から求め、それぞれの支配方程式を時間積分して境界値を更新する。

C.3 検証計算

無反射境界条件を検証するために、空間2次元の渦移流問題を実施する^{[80], [82]}。渦移流問題は一様流中に存在する自由渦が境界を通り過ぎるときに発生する反射波を確認する検証計算である。本検証計算では单成分圧縮性非粘性流体とし、空間離散化手法は全て2次精度中心差分とした。初期条件である一様流は次式で与える。

$$(\rho, u_1, u_2, p)_L = \left(1, Ma\sqrt{\frac{\gamma\rho}{p}}, 0, \frac{1}{\gamma Ma^2} \right), \gamma = 1.4 \quad (\text{C.56})$$

ここで、 Ma はマッハ数で 0.5 と設定した。次に、自由渦は次式で与える。

$$\begin{cases} \tilde{u}_1 = u_1 - C \frac{c_s}{\rho} \frac{(x_2 - x_{2c})}{r_c^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2(r_c)^2}\right) \\ \tilde{u}_2 = C \frac{c_s}{\rho} \frac{(x_1 - x_{1c})}{r_c^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2(r_c)^2}\right) \\ \tilde{p} = p + \frac{C^2 c_s^2}{r_c^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2(r_c)^2}\right) \\ \tilde{e} = \frac{\tilde{p}}{\rho(\gamma-1)} \end{cases} \quad (\text{C.57})$$

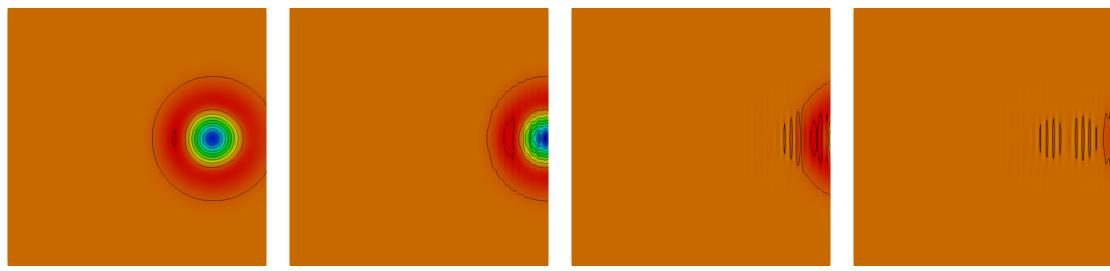
ここで、 c_s は音速、 C は渦の強さ、 $r = \sqrt{(x_1 - x_{1c})^2 + (x_2 - x_{2c})^2}$ は半径、 r_c は臨界半径である。それぞれのパラメータは $C = -0.0005$ 、 $r_c = 0.15$ とそれぞれ設定した。渦の中心座標は $(x_{1c}, x_{2c}) = (1.0, 0.0)$ とした。計算領域は $0 \leq x_1 \leq 2$ および $-1.0 \leq x_2 \leq 1.0$ とし、格子点数は一様に 81×81 と設定した。また、時間刻み幅は $\Delta t = 1.0 \times 10^{-3}$ と設定し、 $t = 2.0$ まで計算を実施した。物理的な流入条件 ($x_1 = 0$) には式 (C.56) を与える。 $x_1 = 2.0$ および x_2 方向境界は流出条件とした。通常の境界条件(流入:ディリクレ条件、流出:ノイマン条件)、NSCBC、3D-NSCBC を適用した場合の計算結果を比較する。

図 C.1 にそれぞれの境界条件を用いた場合における時刻 $t = 0.6, 1.0, 1.2, 1.4$ の渦度 ω_3 コンターを示す。図 C.1(a) より、通常の境界条件では渦が出口境界 ($x_1 = 2.0$) に到達する際に発生する反射波によって数値振動が生じ、渦の形が歪んでいる様子

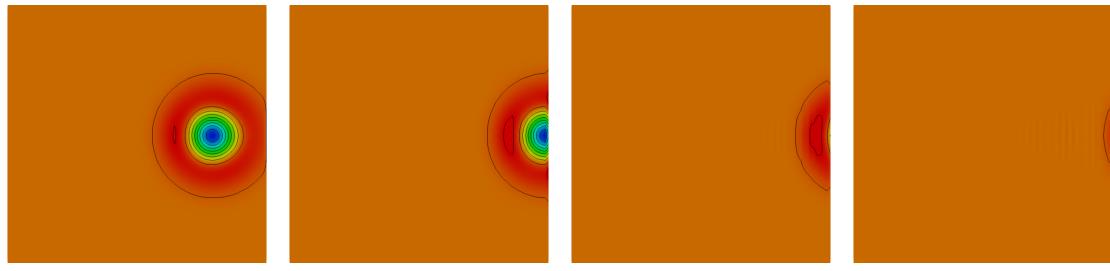
が確認される。完全に通り過ぎる時には、一様流とは逆流する方向で出口境界から非物理的な振動が放出される。一方で図 C.1(b), (c) より、NSCBC および 3D-NSCBC を適用した場合には $t = 1.0$ において数値振動による渦の歪みは確認されない。時刻 $t = 1.2, 1.4$ では若干ではあるが渦度の縞模様が出口境界から確認される。また、NSCBC では時刻 $t = 1.0, 1.2$ において境界面にかかる渦度の等值線が若干崩れてい。一方で、3D-NSCBC では等值線は崩れておらず通常の NSCBC より改善されている。

次に C.2 にそれぞれの境界条件を用いた場合の時刻 $t = 0.6, 1.0, 1.2, 1.4$ における流速コンターを示す。図 C.1(a) より、渦度のときと同様に通常の境界条件では境界への渦の通過に伴い非物理的な振動が放出されている様子が確認できる。NSCBC の場合(図 C.1(b))は、渦の通過に伴って境界から流速分布が発生する。これは渦が境界に対して一様ではなく、2次元性を持って通過することが原因だと考えられる。一方で、3D-NSCBC の場合(図 C.1(c))は NSCBC で見られたような流速の放出はほとんど確認されない。これより、流れが境界に対して横断方向の成分を持つ場合には 3D-NSCBC の方が優れていることを確認した。

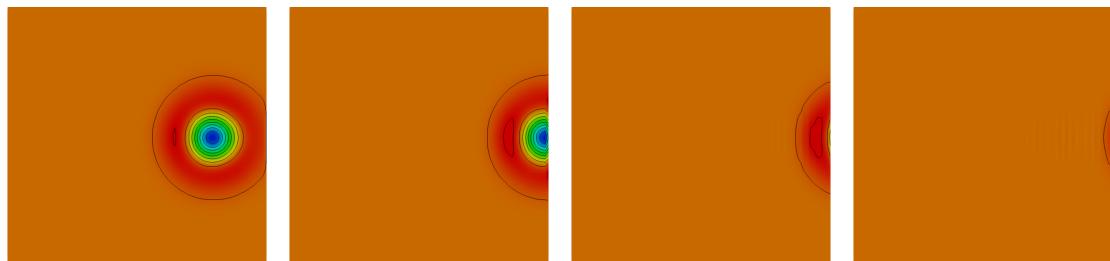
最後に図 C.3 に NSCBC と 3D-NSCBC を用いた場合における時刻 $t = 1.0, 1.2, 1.4, 1.6$ の圧力コンターをそれぞれ示す。図 C.3(a) より、NSCBC の場合は渦の通過により境界から圧力波が放射線状に広がっていく様子が確認される。このような圧力の反射波が他方向の境界まで到達すると計算は不安定化する。これに対し、図 C.3(b) より、3D-NSCBC の場合でも反射波は確認されるものの、非常に小さい値であることが確認される。これらの比較によって、3D-NSCBC を用いることで計算をより安定的に実施することが可能であることを確認した。



(a) Normal BC



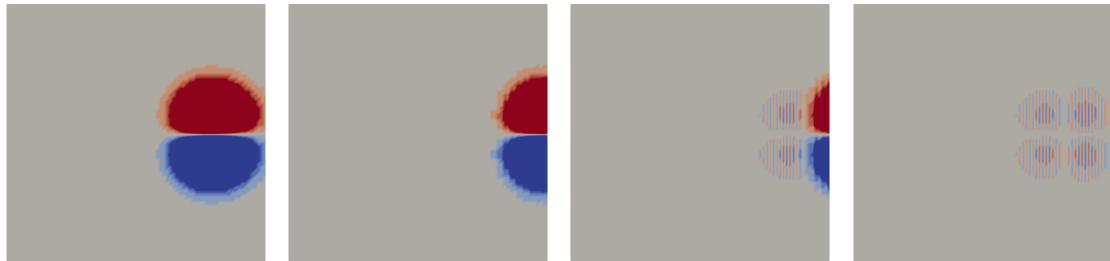
(b) NSCBC



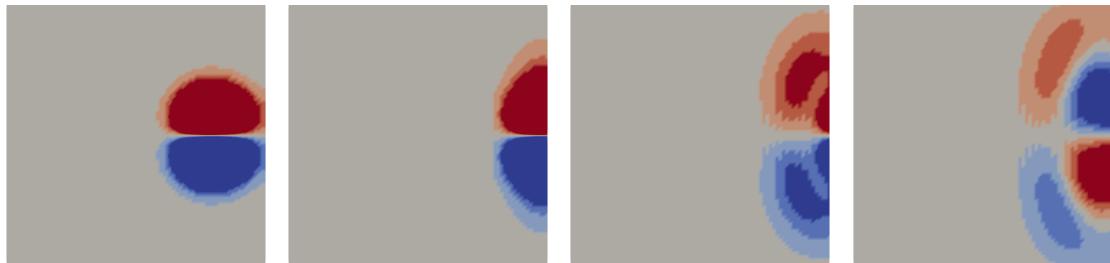
(c) 3D-NSCBC



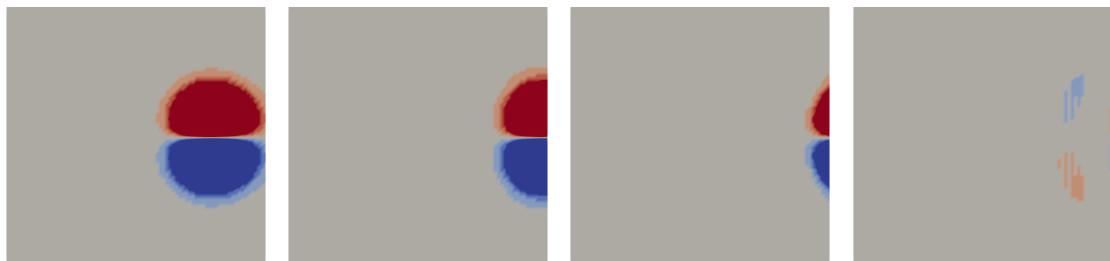
Fig. C.1: Distribution of the vorticity ω_3 in the vortex convection test. Left to right; $t = 0.6, 1.0, 1.2, 1.4$.



(a) Normal BC



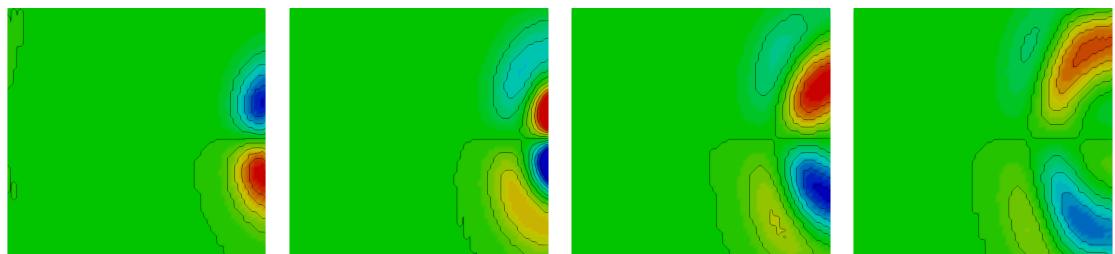
(b) NSCBC



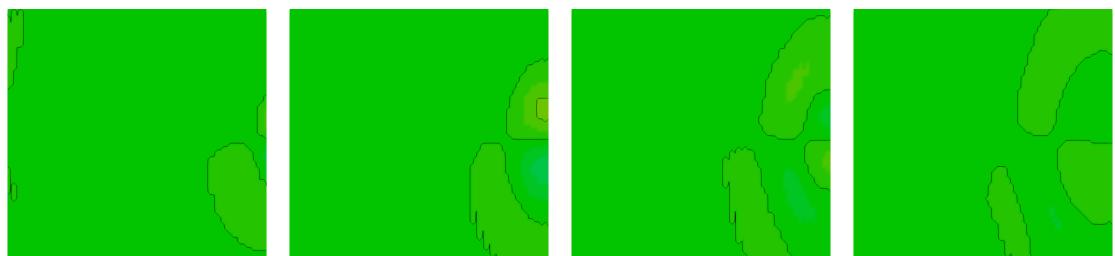
(c) 3D-NSCBC



Fig. C.2: Distribution of the velocity magnitude in the vortex convection test. Left to right; $t = 0.6, 1.0, 1.2, 1.4$.



(a) NSCBC



(c) 3D-NSCBC



Fig. C.3: Pressure distribution in the vortex convection test. Left to right; $t = 1.0, 1.2, 1.4, 1.6$.

参考文献

- [1] J. Kariuki, Turbulent premixed flame stabilization and blow-off, Ph.D. Thesis, University of Cambridge, (2012).
- [2] 金子誠, 内燃機関の筒内「ながれ」解析, 日本流体力学会 ながれ, Vol. 35 (2016), pp. 353-358.
- [3] T. C. Lieuwen, V. Yang, Gas turbine emissions, Cambridge University Press, (2013).
- [4] 井上慶, 宮本健司, 道免昌平, 田村一生, 川上朋, 谷村聰, 水素・天然ガス混焼ガスタービンの開発, 三菱重工技報, Vol. 55, No.2 (2018), pp.1-5.
- [5] G. M. Baumgartner, Flame flashback in premixed hydrogen-air combustion systems, Ph.D. Thesis, Technische Universität München, (2014).
- [6] A. Kalantari, V. McDonell, Boundary layer flashback of non-swirling premixed flames: mechanisms, fundamental research, and recent advances, *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 61, (2017), pp.249-292.
- [7] V. Hoferichter, Boundary layer flashback in premixed combustion systems, Ph.D. Thesis, Technische Universität München, (2017).
- [8] T. Asai, Y. Akiyama, S. Dodo, Development of a state-of-the-art dry low NO_x gas turbine combustor for IGCC with CCS, Recent Advances in Carbon Capture and Storage, Chapter 1, (2016).

- [9] C. Bogey, C. Bailly, D. Juvé, Noise investigation of a high subsonic, moderate Reynolds number jet using a compressible large eddy simulation, *Theoret. Comput. Fluid Dynamics*, Vol. 16 (2003), pp. 273-297.
- [10] R. Abgrall, How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations: A quasi conservative approach, *J. Comput. Phys.*, Vol. 125 (1996), pp. 150-160.
- [11] R. Abgrall, S. Karni, Computations of compressible multifluid, *J. Comput. Phys.*, Vol. 169 (2001), pp. 594-624.
- [12] S. Karni, Multicomponent flow calculation a consistent primitive algorithm, *J. Comput. Phys.*, Vol. 112 (1994), pp. 31-43.
- [13] M. Karaca, N. Lardjane, I. Fefioun, Implicit large eddy simulation of high-speed non-reacting and reacting air/H₂ jets with a 5th order WENO scheme, *Comput. Fluids*, Vol. 62, (2012), pp. 25-44.
- [14] S. Zhao, N. Lardjane, I. Fefioun, Comparison of improved finite-difference WENO schemes for the implicit large eddy simulation of turbulent non-reacting and reacting high-speed shear flows, *Comput. Fluids*, Vol. 95, (2014), pp. 74-87.
- [15] J. Eggers, Turbulent mixing of coaxial compressible hydrogen-air jets, *NASA Tech. Note*, NASA-TN-D-6487 (1971).
- [16] P. L. Roe, Characteristic-based schemes for Euler equations, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 18 (1986), pp. 337-365.
- [17] J. L. Steger, R.F. Warming, Flux vector splitting of the inviscid gasdynamics, equations with application to finite difference methods, *J. Comput. Phys.*, Vol. 40 (1981), pp. 263-293.
- [18] M. S. Liou, C. J. Steffen Jr, A new flux splitting scheme, *J. Comput. Phys.*, Vol. 107 (1993), pp. 23-39.

- [19] E. Johnsen, T. Colonius, Implementation of WENO Schemes in compressible multicomponent flow problems, *J. Comput. Phys.*, Vol. 219 (2006), pp. 715-732.
- [20] T. Nonomura, S. Morizawa, H. Terashima, S. Obayashi, K. Fujii, Numerical (error) issues on compressible multicomponent flows using a high-order differencing scheme: Weighted compact nonlinear scheme, *J. Comput. Phys.*, Vol. 231 (2012), pp. 3181-3210.
- [21] E. Johnsen, F. Ham, Preventing numerical errors generated by interface-capturing schemes in compressible multi-material flows, *J. Comput. Phys.*, Vol. 231 (2012), pp. 5705-5717.
- [22] G. S. Jiang, C. W. Shu, Efficient implementation of weighted ENO scheme, *J. Comput. Phys.*, Vol. 126 (1996), pp. 202-228.
- [23] T. Nonomura, K. Fujii, Characteristic finite-difference WENO scheme for multicomponent compressible fluid analysis: Overestimated quasi-conservative formulation maintaining equilibriums of velocity, pressure, and temperature, *J. Comput. Phys.*, Vol. 340 (2017), pp. 358-388.
- [24] E. Johnsen, J. Larsson, A. V. Bhagatwala, W. H. Cabot, P. Moin, B. J. Olson, P. S. Rawat, S. K. Shankar, B. Sjogreen, H. C. Yee, X. Zhong, S. K. Lele, Assessment of high-resolution methods for numerical simulations of compressible turbulence with shock waves, *J. Comput. Phys.*, Vol. 229 (2010), pp. 1213-1237.
- [25] S. Pirozzoli, Numerical methods for high-speed flows, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 43 (2011), pp. 163-194.
- [26] F. Ducros, V. Ferrand, F. Nicoud, C. Weber, D. Darracq, C. Gacherieu, T. Poinsot, Large-eddy simulation of the shock/turbulence interaction, *J. Comput. Phys.*, Vol. 152 (1999), pp. 517-549.
- [27] F. Ducros, F. Laporte, T. Souleres, V. Guinot, P. Moinat, B. Caruelle, High-order fluxes for conservative skew-symmetric-like scheme in structured meshes:

- Application to compressible flows, *J. Comput. Phys.*, Vol. 161 (2000), pp. 114-139.
- [28] H. M. Darian, V. Esfahanian, K. Hejranfar, A shock-detecting sensor for filtering of high-order compact finite difference schemes, *J. Comput. Phys.*, Vol. 230 (2011), pp. 494-514.
- [29] T. R. Fujimoto, T. Kawasaki, K. Kitamura, Canny-edge-detection/rankine-hugoniot-conditions unified shock sensor for inviscid and viscous flows, *J. Comput. Phys.*, Vol. 396 (2019), pp. 264-279.
- [30] P. Movahed, E. Johnsen, A solution-adaptive method for efficient compressible multifluid simulations, with application to the Richtmyer-Meshkov instability, *J. Comput. Phys.*, Vol. 239 (2013), pp. 166-186.
- [31] M. L. Wong, S. K. Lele, High-order localized dissipation weighted compact nonlinear scheme for shock-and interface-capturing in compressible, *J. Comput. Phys.*, Vol. 339 (2017), pp. 179-209.
- [32] E. F. Toro, M. Spruce, W. Speares, Restoration of the contact surface in the HLL-Riemann solver, *Shock Waves*, Vol. 4 (1994), pp. 25-34.
- [33] E. F. Toro, Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics, third edition, Springer, (2009).
- [34] A. Harten, P. D. Lax, B. van Leer, On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws, *SIAM Review*, Vol. 25, No. 1 (1983), pp. 35-61.
- [35] M. Capuano, C. Bogey, P. D. M. Spelt, Simulations of viscous and compressible gas-gas flows using high-order finite difference schemes, *J. Comput. Phys.*, Vol. 361 (2018), pp. 56-81.
- [36] L. G. Margolin, W. J. Rider, F. F. Grinstein, Modeling turbulent flow with implicit LES, *J. Turbulence*, Vol. 7, No. 15 (2006), pp. 1-27.

- [37]F. F. Grinstein, L. G. Margolin, W. J. Rider, Implicit large eddy simulation: computing turbulent fluid dynamics, Cambridge University Press, (2007).
- [38]J. P. Boris, F. F. Grinstein, E. S. Oran, R. L. Kollbe, New insights into large eddy simulation, *Fluid Dynamics Research*, Vol. 10 (1992), pp. 199-228.
- [39]T. Echekki, E. Mastorakos, Turbulent Combustion Modeling, Springer, (2011).
- [40]H. Terashima, S. Kawai, M. Koshi, Consistent numerical diffusion terms for simulationg compressible multicomponent flows, *Comput. Fluids*, Vol. 88 (2013), pp. 484-495.
- [41]植田利久, 反応系の流体力学, コロナ社, (2002).
- [42]藤井孝藏, 流体力学の数値計算法, 東京大学出版会, (1994).
- [43]Y. Morinishi, Skew-symmetric form of convective terms and fully conservative finite difference schemes for variable density low-Mach number flows, *J. Comput. Phys.*, Vol. 229 (2010), pp. 276-300.
- [44]X. G. Deng, H. Zhang, Developing high-order weighted compact nonlinear schemes, *J. Comput. Phys.*, Vol. 165 (2000), pp. 22-44.
- [45]T. Nonomura, K. Fujii, Effects of difference scheme type in high-order weighted compact nonlinear schemes, *J. Comput. Phys.*, Vol. 228 (2009), pp. 3533-3539.
- [46]X. Hu, Q. Wang, N. Adams, An adaptive central-upwind weighted essentially non-oscillatory scheme, *J. Comput. Phys.*, Vol. 229 (2010), pp. 8952-8965.
- [47]T. Nonomura, K. Fujii, Robust explicit formulation of weighted compact non-linear scheme, *Comput. Fluids*, Vol. 85 (2013), pp. 8-18.
- [48]X. Liu and S. Osher, T. Chan, Weighted essentially non-oscillatory schemes, *J. Comput. Phys.*, Vol. 115 (1994), pp.200-212.

- [49] X. Liu, S. Zhang, H. Zhang, C. W. Shu, A new class of central compact schemes with spectral-like resolution II: hybrid weighted nonlinear schemes, *J. Comput. Phys.*, Vol. 284 (2015), pp. 133-154.
- [50] N. Fleischmann, S. Adami, N. A. Adams, On an inconsistency of the arithmetic-average signal speed estimate for HLL-type Riemann solvers, *J. Comput. Phys. X*, Vol. 8 (2020), 100077.
- [51] E. F. Toro, L. O. Müller, A. Siviglia, Bounds for wave speeds in the Riemann problem: Direct theoretical estimates, *Comput. Fluids*, Vol. 209 (2020), 104640.
- [52] J. Larsson, R. Vicquelin, I. Bermejo-Moreno, Large eddy simulations of the HyShot II scramjet, *Annu. Rev. Briefs, Centor for Turbulence Research*, (2011), pp. 63-74.
- [53] X. Deng, S. Inaba, B. Xie, K-M. Shyue, F. Xiao, High fidelity discontinuity-resolving reconstruction for compressible multiphase flows with moving interfaces, *J. Comput. Phys.*, Vol. 371 (2018), pp. 945-966.
- [54] B. van Leer, A second-order sequel to Godunov's method, *J. Comput. Phys.*, Vol. 32 (1979), pp. 101-136.
- [55] J. H. Williamson, Low-storage Runge-Kutta schemes, *J. Comput. Phys.*, Vol. 35 (1980), pp. 48-56.
- [56] S. Gottlieb, C. -W. Shu, Total variation diminishing Runge-Kutta schemes, *Math. Comput.*, Vol. 67 (1998), pp. 73-85.
- [57] N. Fleischmann, S. Adami, X. Y. Hu, N. A. Adams, A low dissipation method to cure the grid-aligned shock instability, *J. Comput. Phys.*, Vol. 401 (2020), 109004.
- [58] N. Fleischmann, S. Adami, N. A. Adams, A shock-stable modification of the HLLC Riemann solver with reduced numerical dissipation, *J. Comput. Phys.*, Vol. 423 (2020), 109762.

- [59] R. R. Nourgaliev, T. N. Dinh, T. G. Theofanous, Adaptive characteristics-based matching for compressible multifluid dynamics, *J. Comput. Phys.*, Vol. 213 (2006), pp. 500-529.
- [60] M. Kucharik, R. V. Garimella, S. P. Schofield, M. J. Shaskov, A comparative study of interface reconstruction methods for multi-material ALE simulations, *J. Comput. Phys.*, Vol. 229 (2010), pp. 2432-2452.
- [61] S. Galera, P. H. Maire, J. Breil, A two-dimensional unstructured cell-centered multi-material ALE scheme using VOF interface reconstruction, *J. Comput. Phys.*, Vol. 229 (2010), pp. 5755-5787.
- [62] S. Pan, L. Han, X. Hu, N. A. Adams, A conservative interface-interaction method for compressible multi-material flows, *J. Comput. Phys.*, Vol. 371 (2018), pp. 870-895.
- [63] C. R. Wilke, A viscosity equation for gas mixture, *J. Chem. Phys.*, Vol. 18, No. 4, (1950), p. 517.
- [64] E. Garnier, N. Adams, P. Sagaut, Large eddy simulation for compressible flows, Springer, (2009).
- [65] A. E. Vreman, An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow : Algebraic theory and applications, *Phys. Fluids*, Vol. 16 (2004), pp. 3670-3682.
- [66] J. Smagorinsky, General circulation experiments with the primitive equations I. The basic experiment, *Month. Weather Rev.*, Vol. 91, (1963), pp. 99-164.
- [67] A. Yoshizawa, Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling, *Phys. Fluids*, Vol. 29 (1986), pp. 2152-2164.
- [68] P. Moin, K. Squires, W. Cabot, S. Lele, A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport, *Phys. Fluids*, Vol. A3, No. 11 (1991), pp. 2746-2757.

- [69] D. Knight, G. Zhou, N. Okong'o, V. Shukla, Compressible large eddy simulation using unstructured grids, *AIAA Paper*, (1998), No. 98-0535.
- [70] T. Poinsot, D. Veynante, Theoretical and numerical combustion (Second edition), Edwards, (2005).
- [71] S. Ghosal, An analysis of numerical errors in large-eddy simulations of turbulence, *J. Comput. Phys.*, Vol. 125 (1996), pp. 187-206.
- [72] R. W. Schefer, S. C. Johnston, R. W. Dibble, F. C. Gouldin, W. Kollmann, Nonreacting turbulent mixing flows: A literature survey and data base, Sandia Report, Sandia National Laboratories, SAND86-8217 (1985).
- [73] R. W. Schefer, R. W. Dibble, Rayleigh scattering measurements of mixture fraction in a turbulent nonreacting propane jet, *AIAA Paper*, (1986), No. 86-0278.
- [74] R. W. Schefer, V. Hartmann, R. W. Dibble, Conditional sampling of velocity in a turbulent nonpremixed propane jet, Sandia Report, Sandia National Laboratories, SAND87-8610 (1987).
- [75] R. W. Dibble, W. Kollmann, R. W. Schefer, Conserved scalar fluxes measured in a turbulent nonpremixed flame by combined laser Doppler velocimetry and laser Raman scattering, *Combust. Flame*, Vol. 55, Issue 3 (1984), pp. 307-321.
- [76] R. W. Dibble, V. Hartmann, R. W. Schefer, W. Kollmann, Conditional sampling of velocity and scalars in turbulent flames using simultaneous LDV-Raman scattering, *Exp. Fluids*, Vol. 5 (1987), pp. 103-113.
- [77] F. C. Gouldin, R. W. Schefer, S. C. Johnston, W. Kollmann, Nonreacting turbulent mixing flows, *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 12, Issue 4 (1986), pp. 257-303.
- [78] G. Constantinescu, S. K. Lele, Large eddy simulation of a near sonic turbulent jet and its radiated noise, *AIAA Paper*, 2001-0376 (2001).

- [79]B. J. Boersma, S. K. Lele, Large eddy simulations of compressible turbulent jets, *Annual Review of Briefs, Centor for Turbulence Research*, (1999), pp. 365-377.
- [80]T. J. Poinsot, and S. K. Lele, Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows, *J. Comput. Phys.*, Vol. 101 (1992), pp. 104-129.
- [81]C. S. Yoo, Y. Wang, A. Trouv , H. G. Im, Characteristic boundary conditions for direct simulations of turbulent counterflow flames, *Combust. Theory Model.*, Vol. 9, No. 4 (2005), pp. 617-646.
- [82]G. Lodato, P. Domingo, L. Vervisch, Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows, *J. Comput. Phys.*, Vol. 227 (2008), pp. 5105-5143.
- [83]福田勇也, 寺本進, 岡本光司, 中西佑太, 長島利夫, 高亜音速ジェット騒音の Large eddy simulation における入口擾乱の影響, 日本航空宇宙学会論文集, Vol. 58, No. 675 (2010), pp. 109-115.
- [84]Y. Fukuda, S. Teramoto, T. Nagashima, Large eddy simulation of a high subsonic jet and noise generation, *Asian Joint Conference on Propulsion and Power*, Gyeongju, Korea , 2008, 612-621.
- [85]A. Jameson, W. Schmidt, E. Turkel, Numerical solutions of the Euler equations by finite volume methods using Runge Kutta time stepping schemes, *AIAA Papar*, 81-1259 (1981).
- [86]C. Bogey, N. Cacqueray, C. Baily, A shock-capturing methodology based on adaptative spatial filtering for high-order non-linear computations, *J. Comput. Phys.*, Vol. 228 (2009), pp. 1447-1465.
- [87]T. Colonius, Modeling artificial boundary conditions for compressible flow, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 36 (2004), pp. 315-345.
- [88]J. Berenger, A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves, *J. Comput. Phys.*, Vol. 114, Issue 2 (1994), pp. 185-200.

- [89]A. Mani, On the reflectivity of sponge zones in compressible flow simulations, *Annu. Rev. Briefs, Centor for Turbulence Research*, (2010), pp. 117-133.
- [90]A. Mani, Analysis and optimization of numerical sponge layers as a nonreflective boundary treatment, *J. Comput. Phys.*, Vol. 231, Issue 2 (2012), pp. 704-716.
- [91]G. W. Hedstrom, Nonreflecting boundary conditions for nonlinear hyperbolic systems, *J. Comput. Phys.*, Vol. 30, Issue 2 (1979), pp. 222-237.
- [92]K. W. Thompson, Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems, *J. Comput. Phys.*, Vol. 68, Issue 1 (1987), pp. 1-24.
- [93]谷口隆晴, 杉原厚吉, 空間多次元 Navier-Stokes 方程式に対する無反射境界条件, 日本流体力学会 ながれ, Vol. 24 (2005), pp. 81-91.
- [94]V. Granet, O. Vermorel, T. Léonard, L. Gicquel, T. Poinsot, Comparison of non-reflecting outlet boundary conditions for compressible solvers on unstructured grids, *AIAA J.*, Vo. 48, No. 10 (2010), pp.2348-2364.

関連論文

1. K. Koga, T. Kajishima, Low dissipative finite difference hybrid scheme by discontinuity sensor of detecting shock and material interface in multi-component compressible flows, *J. Comput. Phys.*, Vol. 448 (2022), 110757
DOI:10.1016/j.jcp.2021.110757.
2. K. Koga, T. Kajishima, Semi-explicit large eddy simulation in non-reacting air/gas fuel jet flows, *J. Adv. Simulat. Sci. Eng.*, Vol. 10, Issue 1 (2023), pp. 1-20
DOI:10.15748/jasse.10.1.

謝辞

本論文は、大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻 博士後期課程に社会人学生として在籍し、まとめたものであります。大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻 教授 梶島岳夫先生（現：四国職業能力開発大学校 校長）には、指導教員として、本研究の細部にわたり終始懇切丁寧な御指導と御助言をいただきました。社会人として十分な時間を確保することが困難な状況下でも、貴重な時間を割いて熱心に指導していただいたことに深く感謝いたします。また、COVID-19 の蔓延によって直接ご指導いただくことが難しい状況においても、メールで丁寧に御指導いただけたおかげで、論文をまとめあげることができました。ここに心より御礼申し上げます。

大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻 准教授 竹内伸太郎先生には、梶島先生の御退職後に引き継いで主査を引き受けていただき、本論文の仕上げに際する御助言および細部にわたり御指導いただきました。謹んで感謝の意を表します。

大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻 教授 矢野猛先生、大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻 教授 赤松史光先生には、ご多忙の中副査をお引き受けいただき、本論文に対する懇切な御校閲ならびに的確な御指摘をいただきました。改めて御礼申し上げます。

最後に、心身共に私を支えてくれた妻に深く感謝します。論文をまとめる期間と妊娠期間が重なって大変な時期にも関わらず、妻には最後まで応援いただきました。ありがとうございました。