

超臨界圧高密度比流れに対するエネルギー/圧力発展ハイブリッド法

An Energy-Pressure Hybrid Approach for Accurate and Robust Simulations of Supercritical Fluids with Large Density Contrasts

- 荒木天秀, 九工大, 福岡県北九州市戸畑区仙水町 1-1, E-mail: araki.takahide869@mail.kyutech.jp
 武藤大貴, JAXA, 茨城県つくば市千現 2-1-1, E-mail: muto.daiki@jaxa.jp
 寺島洋史, 北大, 北海道札幌市北区北 13 条西 8 丁目, E-mail: htera@eng.hokudai.ac.jp
 坪井伸幸, 九工大, 福岡県北九州市戸畑区仙水町 1-1, E-mail: tsuboi.nobuyuki318@mail.kyutech.jp
 Takahide Araki, Kyushu Institute of Technology, 1-1 Sensuicho, Tobata-ku, Kitakyushu, Fukuoka
 Daiki Muto, Japan Aerospace Exploration Agency, 2-1-1 Sengen, Tsukuba, Ibaraki
 Hiroshi Terashima, Hokkaido University, N13 W8, Kita-ku, Sapporo, Hokkaido
 Nobuyuki Tsuboi, Kyushu Institute of Technology, 1-1 Sensuicho, Tobata-ku, Kitakyushu, Fukuoka

A numerical approach for robust and accurate simulation of supercritical cryogenic flows is proposed. The compressible energy-based flow equations are conventionally used for simulations of supercritical fluids in liquid rocket engine. However, the problem of using the energy-based equations is that a contact surface with a large density/temperature contrasts often lead to unphysical pressure oscillations. The use of pressure-based equations has been proposed in order to prevent such unphysical pressure oscillations, although there is a significant issue of poor energy conservation property. In the present study, we thus propose a hybrid numerical approach to achieve oscillation-free and energy conservation properties for supercritical cryogenic flows. A one-dimensional advection problem of a contact discontinuity is simulated to demonstrate the performance of the hybrid approach. The proposed hybrid approach successfully suppresses severe pressure oscillations and makes the conservation error smaller compared to the pressure-based method.

1. 序論

液体ロケットエンジンは、高い推進効率を得るために推進剤の臨界圧力を超えるような高い燃焼圧力に設定する。燃焼室内では、数 100 K の水素と臨界温度を下回る 100 K 程度の極低温酸素が超臨界圧力下で噴射、混合、燃焼して推力を得る。しかし、このような極低温かつ高圧という極限環境下での実験は困難であり、計測による定量的なデータは少なく、実験による流れ場の理解は十分ではない。したがって、数値解析により液体ロケットエンジン推進剤の混合・燃焼現象について調査が行われている⁽¹⁾⁽²⁾。超臨界圧力下の流体は、表面張力や潜熱により気相と液相の区別がなくなり、その結果、密度の異なる気体同士の混合のような乱流混合が支配的となる⁽³⁾⁽⁴⁾。また、Fig. 1 に示すように、熱力学特性 (p - V - T 関係) は理想気体と大きく異なり非線形性が強く、液体的な低温領域と気体的な高温領域との間では、僅かな温度変化で密度は大きく変化する。

超臨界流体に対する数値解析の多くは、質量・運動量・エネルギー保存則から成る完全保存形の支配方程式を適用した圧縮性流体解析が多く用いられる。しかし、圧縮性多成分流体解析で問題となる異種流体間の接触面で起こる非物理的な圧力振動問題⁽⁵⁾が、

超臨界流体解析では、高温/低温流体間において同様に発生する。このような非物理的な圧力振動は、流れ場の予測に悪影響を与えるだけでなく、数値的不安定性により解析そのものが困難となる。この問題に対して、Terashima ら⁽⁶⁾は圧力発展方程式を用いる手法を超臨界流体解析にも適用することで、圧力振動が抑えられることを示した。しかし、この手法はエネルギー方程式の代わりに圧力方程式を用いるため、場合によってはエネルギー保存が満たされないことも言及されている。また、Lacaze ら⁽⁷⁾のも、圧力発展方程式を用いた手法では、圧力振動を生じない安定な解析を行えるものの混合気温度の予測が正確でないことを示している。

本研究では、超臨界流体解析における数値振動やエネルギー保存問題の改善を目指して、エネルギー/圧力発展ハイブリッド法を提案する。本手法は、計算領域の大部分ではエネルギー方程式をベースとする支配方程式（以下エネルギーベース）で解きつつ、密度勾配の大きい接触面ではエネルギー方程式を圧力発展方程式に切り替えることで、数値安定性を向上しつつエネルギー保存誤差を最小限にできると期待できる。本稿では超臨界圧下の密度接触面の移流問題に対して、まず従来のエネルギーベースの数値安定性や性質を示す。次に、エネルギー/圧力発展ハイブリッド法を導入し、安定性やエネルギー保存性について議論する。

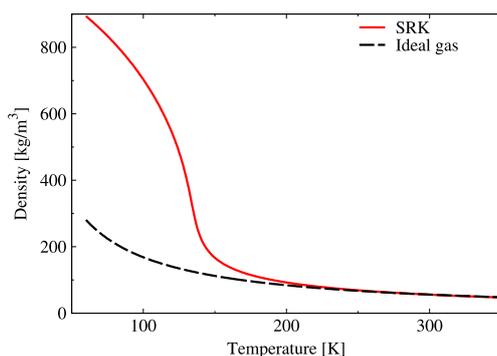


Fig. 1. Density-temperature diagram at supercritical pressure.

2. 数値解析手法

2-1. 支配方程式

完全保存形の Euler 方程式は以下のように表される。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \delta) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot ((e + p) \mathbf{u}) = 0 \quad (3)$$

ここで、 ρ , \mathbf{u} , p , e , ρ_i および δ はそれぞれ密度、速度ベクトル、圧力、単位体積当たりの全エネルギー、化学種 i の密度および単位テンソルを表す。また、全エネルギー e は単位質量あたりの内部エネルギー \bar{e} より、 $e = \rho\bar{e} + \rho(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u})/2$ である。

また、圧力発展方程式はエネルギー方程式 (Eq.(3)) の代わりに解かれ、非粘性を仮定すると以下のように表される。

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla p + \rho c^2 \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4)$$

となる。ここで、 c は音速である。Kitamura ら⁽⁸⁾ は Eq.(4) を有限体積的な離散手法に適した以下の形に書き直した。

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{p}\mathbf{u}) + (\rho c^2 - p) \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (5)$$

本研究では、Eq.(5) の形を用いた。

極低温・超臨界圧力下の熱力学特性を評価するために、実在気体効果を考慮した状態方程式として Soave-Redlich-Kwong (SRK) 状態方程式⁽⁹⁾を用いた。

2-2. スキーム

本解析では、1次元・非粘性を仮定する。完全保存形 (エネルギーベース: EB method) は質量、運動量、エネルギー方程式を用いる。圧力発展方程式を用いる場合 (圧力ベース: PB method) は、エネルギー方程式の代わりにそれを用いる。エネルギーベースの対流項の空間離散化には AUSM 系スキームの一種である SLAU2⁽¹⁰⁾、圧力ベースの空間離散化には Pressure-Equation-Based SLAU2⁽⁸⁾ を適用した。高次精度化には、MUSCL 法と van-Albada limiter を用いて 3 次精度とした。時間積分には陽解法として TVD Runge-Kutta 法を使用した。

3. 結果および考察

超臨界圧力下における密度接触面の移流問題の 1次元解析を実施した。作動流体には窒素および水素を用いた。計算領域は 1 m で Fig. 2 に示すように $x=0.25$ m と $x=0.75$ m の位置に接触面を用いた。計算格子は等間隔の 51 点とした。左右の境界条件は周期境界とした。すべての計算条件において、圧力は窒素および水素の超臨界圧力となる 5 MPa、移流速度を 50 m/s と与えた。接触面を構成する流体は、Case A を極低温窒素/高温窒素、Case B を極低温水素/高温水素とした。詳細な計算条件は Table 1 に示す。CFL 数が 0.4 となるように時間刻みを設定した。

3-1. エネルギーベースにおける接触面解像度の影響

初めに、接触面の初期分布がステップ状に与えられた場合と滑らかに与えられる場合に対して、エネルギーベースの解析を実施し、圧力振動への接触面解像度の影響を調べた。滑らかな接触面の初期分布は、Kawai ら⁽¹¹⁾ を参考にし、以下の式で与えられる。

$$q = q_L(1 - f_{sm}) + q_R f_{sm} \quad (6)$$

$$f_{sm} = (1 + \text{erf}[\Delta R / (C_\epsilon \Delta x)]) / 2 \quad (7)$$

ここで、 q は任意の物理量、 f_{sm} はスムージング関数を表し、添字 L, R はそれぞれ接触面の左側と右側の流体を意味する。また、 ΔR は接触面からの距離、 Δx は格子幅、 C_ϵ は接触面の滑らかさを調整するパラメータである。erf は誤差関数であり、 C_ϵ を大きくするほど接触面は多くの格子点で解像される。本解析では、 $C_\epsilon = 1, 2, 3, 4$ を与えた。上記のスムージング関数で与えられる接触面の初期分布とステップ状の初期分布を Fig. 2 に、 C_ϵ と初期接触面厚さの関係を示す Fig. 3 に示す。接触面の厚さは、

$$\frac{\delta}{\Delta x} = \frac{\Delta q}{\Delta x \left(\frac{\partial q}{\partial x} \right)_{\max}} \quad (8)$$

によって定義され、 δ は接触面を解像する格子幅であり、 $\delta/\Delta x$ は接触面を解像するおおよその格子点数を示す。ここで、 Δq は接触面を構成する 2 流体の q の差である。本解析では、物理量 q は、圧縮因子 Z を用いた。

Case A の解析結果を Fig. 4 に示す。ここで示されるのは、接触面が計算空間を 1 周して元の位置に戻ってきた時 ($t=0.02$ s) の密度、圧力および速度分布である。Fig. 4(a) の密度分布は、接触面の初期分布によって $t=0.02$ s での接触面の厚さに違いはあるものの、すべての初期条件において解析解と良い一致を示している。Fig. 4(b), (c) の圧力および速度分布をみると、ステップ状の初期分布を与えた場合、大きな圧力・速度振動が発生している。さらに、解析空間全体の圧力減少が見られる。滑らかに初期分布を与えた場合、ステップ状の初期分布に比べて圧力・速度振動および圧力減少が小さくなっている。計算開始時から $t=0.02$ s の間における圧力の最大振幅と初期接触面厚さの関係を Fig. 5 にまとめる。また、圧力

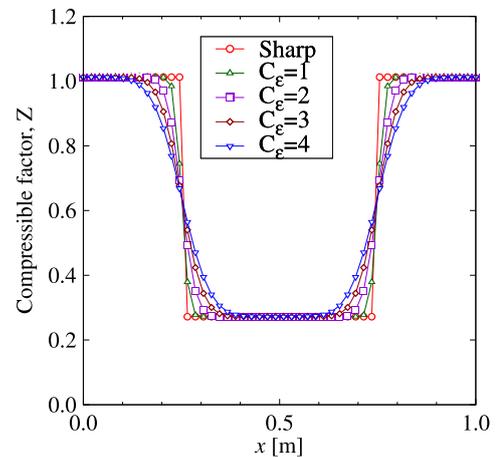


Fig. 2. Initial profiles of compressible factor.

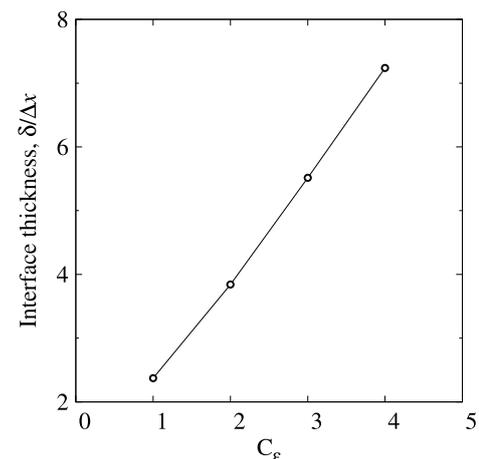


Fig. 3. Interface thickness corresponding to smoothing parameter C_ϵ .

Table 1. Initial conditions for advection problem.

Case	Species, ρ [kg/m ³], T [K], Z		ΔZ
	$0.25 \leq x$ [m] ≤ 0.75	Otherwise	
A	N ₂ , 500, 124, 0.27	N ₂ , 50, 333, 1.01	0.74
B	N ₂ , 500, 124, 0.27	H ₂ , 4.0, 295, 1.03	0.76

の最大振幅は、 $t=0.02$ s 以降大きくはならない。Fig. 5 からは、接触面厚さが厚くなるほど、圧力の最大振幅は小さくなることがわかる。すなわち、接触面がある程度の格子点数で解像されている場合、ステップ状の接触面から発生するような大きな圧力振動は抑えられる。したがって、エネルギーベースでは、接触面を十分に解像できていれば、数値的に安定な解析ができることがわかる。

3-2. エネルギー/圧力発展ハイブリッド法の導入

超臨界流体は、特に熱力学的臨界点の近傍や臨界温度を下回るような極低温の状態では非理想性が強くなり、比較的低温な領域では理想気体的な状態量の変化をする。前述したように、超臨界流体解析では、低温流体と高温流体のように理想性の大きく異なる流体で接触面が構成される場合に圧力振動が生じる。低圧の理想気体同士（単一気体）で構成される接触面では、圧力振動は発生しない。したがって、本ハイブリッド法では、流体の理想性を表す圧縮因子 $Z=PV/RT$ をパラメータとして用い、圧力振動が発生するような領域では圧力発展方程式 (Eq. (5)) が適用され、その他の領域ではエネルギー方程式 (Eq. (3)) が解かれるようなスイッチングを施し、数値的な不安定を抑えつつ圧力発展方程式におけるエネルギー保存エラーを最小限にできないか試みた。

本手法は以下の式により、次の時間ステップの全エネルギー e^{n+1} が決定される。

$$e^{n+1} = e_{EB}^{n+1} + \chi [e_{PB}^{n+1} - e_{EB}^{n+1}] \quad (9)$$

$$\chi = 0.5 + \text{sign}(0.5, \left| \Delta \xi \left(\frac{dZ}{d\xi} \right) / \Delta Z \right| - C_{sw}) \quad (10)$$

ここで、添字 EB 、 PB はそれぞれ、Eq. (3) を用いたエネルギーベースの支配方程式および Eq. (5) を用いた圧力ベースの支配方程式による解であることを表す。また、 $(dZ/d\xi)$ は格子間の圧縮因子 Z の勾配、 ΔZ は接触面を構成する 2 流体の圧縮因子の差、 $\Delta \xi$ は一般座標系における格子幅を示す。通常、 $\Delta \xi$ は 1 とする。Eq. (10) より、以下の条件で圧力ベースの方程式に切り換る。

$$\left| \Delta \xi \left(\frac{dZ}{d\xi} \right) / \Delta Z \right| \geq C_{sw} \quad (11)$$

Eq. (11) と一般座標系に変換した Eq. (8) から、以下のようにスイッチングパラメータ C_{sw} と接触面厚さの関係が得られる。

$$\frac{\delta}{\Delta x} \leq \frac{1}{C_{sw}} \quad (12)$$

本手法は、 C_{sw} を与えることで、方程式が切り換る接触面厚さが決まり、これ以下のときは圧力ベースを解いて圧力振動を抑え、十分な格子幅で接触面が解像されると、エネルギーベースを用いてエネルギー保存を満たすように方程式が切り換る設計となる。Fig. 6 に C_{sw} と方程式が切り換る接触面厚さとの関係を示す。Fig. 6 に示す点よりも接触面厚さが小さい (図左側の領域) と圧力ベース、それより大きい (図右側の領域) とエネルギーベースで解かれることを示す。

本解析では、Eq. (10) における圧縮因子の勾配は、計算点 j で、

$$(dZ/d\xi)_j = \max[(Z_{j+1} - Z_j), (Z_j - Z_{j-1})] / \Delta \xi$$

と与えた。

3-3. ハイブリッド法を用いた密度接触面の移流問題

超臨界圧下における密度接触面の移流問題に対して、本ハイブリッド法を用いて解析を実施し、その性能を調べた。

ハイブリッド法におけるスイッチングパラメータ C_{sw} の効果を調べるため、 $C_{sw} = 0.5, 0.25, 0.167$ について解析を行った。ここ

で、これらの C_{sw} は、Eq. (12) よりそれぞれ接触面厚さが 2 点、4 点、6 点で解像されると、接触面がエネルギーベースで計算される。また、接触面の初期分布はステップ状に与えた。

まず、極低温窒素/高温窒素が接触面を構成する Case A について、Fig. 7 に時刻 $t=0.02$ s におけるエネルギーベース、圧力ベースおよびハイブリッド法の密度、圧力および速度分布を示す。ハイブリッド法の導入により、エネルギーベースで見られるような大きな圧力・速度振動が抑制されている。また、解析空間全体の圧力低下も抑えられている。それぞれの C_{sw} について比較すると、 C_{sw} が小さいほど、圧力振動および圧力減少が抑えられている。これは、 C_{sw} の値が小さいほど、接触面がなまって数点の格子点で解像されてからエネルギーベースで解かれるようになるため、3-1 章に示される初期の接触面厚さを大きくした結果と同様に圧力振動を抑えられている。

また、Fig. 8 にエネルギー保存誤差と接触面厚さの時間推移を示す。エネルギー誤差は、解析空間全体の初期エネルギー e_0 を用いて、 $|e/e_0 - 1|$ で表す。ここでは、全エネルギーの基準を低温部の全エネルギーとしている。Fig. 8(a), (b) を見ると、接触面が C_{sw} により与えられる接触面厚さに達すると、自動的にエネルギーベースに切り換り、エネルギー保存誤差がそれ以上増加しなくなっている。また、圧力ベースによるエネルギー保存誤差は、ハイブリッド法の導入によって改善されている。Fig. 9 に C_{sw} に対する最大圧力振動とエネルギー保存誤差についてまとめる。エネルギー保存誤差は、 $t=0.20$ s の時の値を示している。このとき、ハイブリッド法では、いずれの C_{sw} の結果についてもエネルギー保存誤差がこれ以上増加しない。また、 $C_{sw} = 0$ にエネルギーベースの結果、 $C_{sw} = 1$ に圧力ベースの結果を載せている。エネルギーベースでの最大圧力振動と比較して、 $C_{sw} = 0.50$ で 20.7%、 $C_{sw} = 0.25$ で 7.5%、 $C_{sw} = 0.167$ で 5.0% に減少している。したがって、 $C_{sw} = 0.50$ より小さく設定すると、効果的に圧力振動の抑制が可能である。一方で、 C_{sw} が小さくなるとエネルギー保存誤差が大きくなるが、 $C_{sw} \geq 0.4$ で 10% 程度に保存誤差を抑えられる。したがって、 $C_{sw} = 0.4$ 付近の値を設定することで、圧力振動およびエネルギー保存誤差の双方の改善が見込まれる。

3-4. 超臨界圧下における窒素/水素接触面の移流問題

3-3 章では、窒素単成分の密度接触面に対して解析を行い、ハイブリッド法の性能を評価した。本章では、Case B に示す低温窒素/高温水素の接触面を対象として、多成分系の超臨界流体解析へのハイブリッド法の適用性について調査する。

計算条件は Case B とし、接触面の初期分布はステップ状に与えた。3-3 章と同様に $t=0.02$ s における密度、圧力および速度の分布を Fig. 10 に、エネルギー保存誤差の時間推移を Fig. 11 に示す。また、Fig. 12 に C_{sw} に対する最大圧力振動とエネルギー保存誤差を示す。これらの結果から、単一成分の移流問題と同様に、ハイブリッド法を適用することで 2 流体間の接触面から発生する圧力振動を抑えることができる。エネルギー保存誤差に関しても圧力ベースと比べて改善され、 C_{sw} により与えられる接触面厚さに達するとエネルギー保存誤差は増加しなくなる。 C_{sw} による最大圧力振動とエネルギー保存誤差は 3-3 章 Fig. 9 と同様の傾向を示す。

本ハイブリッド法は、多成分系の超臨界流体解析に対しても、単成分系と同様に圧力振動およびエネルギー保存誤差を改善する。また、 C_{sw} の効果についても単成分系と多成分系で同様である。

結論

超臨界流体解析における数値振動やエネルギー保存問題の改善を目的に、エネルギー/圧力発展方程式ハイブリッド法を導入し、超臨界圧下における密度接触面の移流問題を実施し、その性能を

調べた。

- ハイブリッド法の導入により、エネルギーベースにおける大きな圧力振動は抑制された。また、圧力ベースと比較してエネルギー保存誤差が改善される。
- 非理想性の強い高圧かつ極低温の流体を含む接触面に対して、圧縮因子を用いた方程式の切り換えを施すことで、接触面を自動的に圧力ベースで解像することが出来る。
- 多成分の超臨界流体解析に対しても、単一成分の密度接触面と同様に圧力振動を抑え、エネルギー保存誤差を改善することができる。

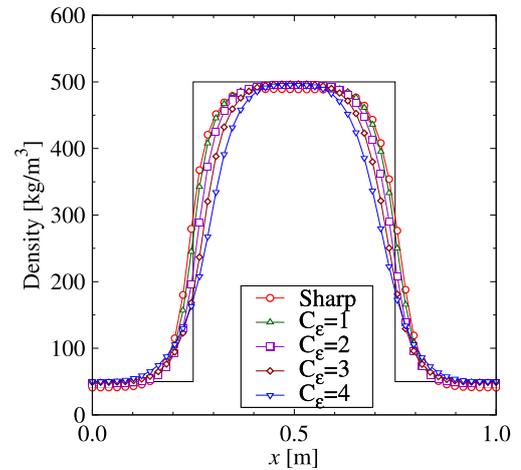
以上より、本ハイブリッド法は超臨界流体解析に対して、安定かつ保存誤差を最小に抑えた解析の可能性が示唆された。今後の課題として、本ハイブリッド法の超臨界燃焼解析への適用を考え、多成分系への拡張および混合層となる接触面近傍での温度の見積もりについて調べることを予定している。

参考文献

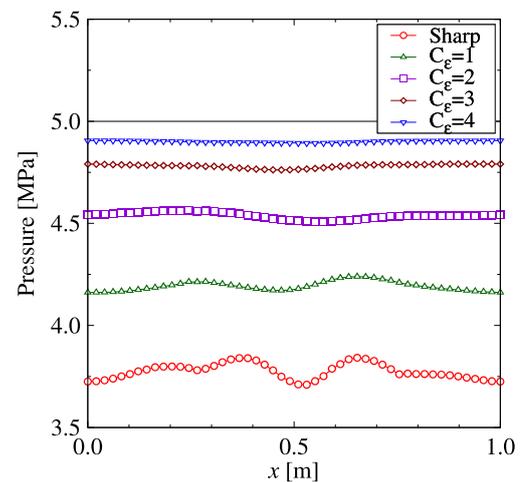
- (1) Oefelein, J. and Yang, V., "Modeling High-Pressure Mixing and Combustion Processes in Liquid Rocket Engines," *Journal of Propulsion and Power*, 14 (5) (1998), pp. 843-857.
- (2) Zong, N., Meng, H., Hsieh, S. and Yang, V., "A numerical study of cryogenic fluid injection and mixing under supercritical conditions," *Physics of Fluids* 16 (12) (2004), pp. 4248-4261.
- (3) Mayer, W., Schik, H., Vielle, B., Golalp, I., Talley, D. and Woodward, R., "Atomization and Breakup of Cryogenic Propellants Under High-Pressure Subcritical Supercritical Conditions," *Journal of Propulsion and Power* 14 (5) (1998), pp. 835-842.
- (4) Chehroudi, B., Cohn, R. and Talley, D., "Cryogenic shear layers: experiments and phenomenological modeling of the initial growth rate under subcritical and supercritical conditions," *International Journal of Heat and Fluid Flow* 23 (2002), pp. 554-563.
- (5) Abgrall, R. and Kami, S., "Computations of Compressible Multifluids," *Journal of Computational Physics* 169 (2001), pp. 594-623.
- (6) Terashima, H. and Koshi, M., "Approach for simulating gas-liquid-like flows under supercritical pressures using a high-order central differencing scheme," *Journal of Computational Physics* 231 (2012), pp. 6907-6923.
- (7) Lacaze, G., Schmitt, T., Ruiz, A. and Oefelein, J., "Comparison of energy-, pressure- and enthalpy-based approaches for modeling supercritical flows," <http://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01831423> (2018).
- (8) Kitamura, K. and Shima, E., "Pressure-equation-based SLAU2 for oscillation-free, supercritical flow simulations," *Computers and Fluids* 163 (2018), pp. 86-96.
- (9) Soave, G., "Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state," *Chemical Engineering Science* 27 (1972), pp. 1197-1203.
- (10) Kitamura, K. and Shima, E., "Towards shock-stable and accurate hypersonic heating computations: A new pressure flux for AUSM-family schemes," *Journal of Computational Physics* 245 (2013), pp. 62-83.
- (11) Kawai, S. and Terashima, H., "A high-resolution scheme for compressible multicomponent flows with shock waves," *International Journal for Numerical Methods in Fluids* 66 (2011), pp. 1207-1225.

謝辞

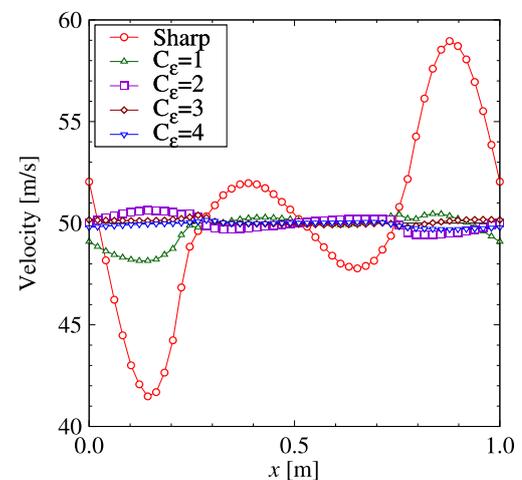
本研究は科学研究費補助金 (15H04202) の支援を受けて実施した。



(a) Density



(b) Pressure



(c) Velocity

Fig. 4. Results of advection of a contact discontinuity with sharp and smooth initial interface using the EB method.

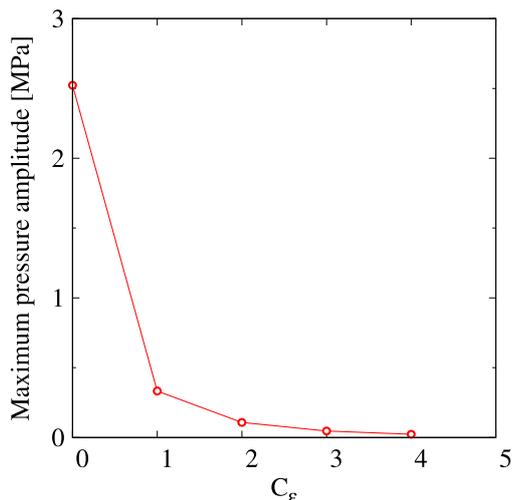


Fig. 5. Effect of C_ϵ on the maximum pressure amplitude for the EB method.

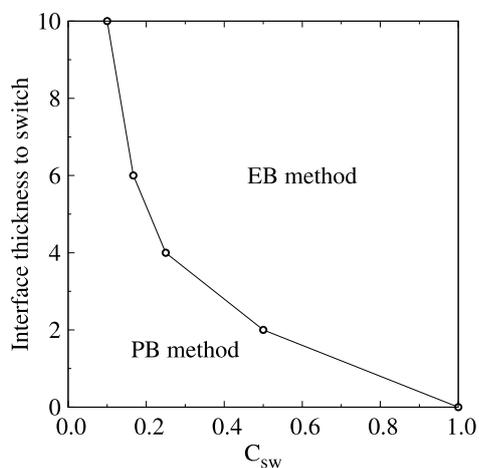
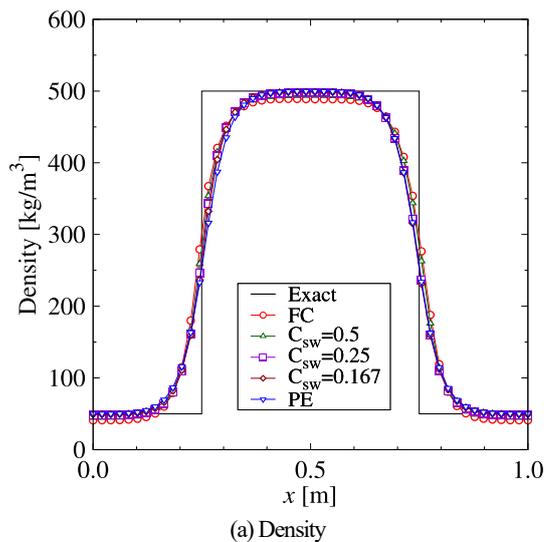
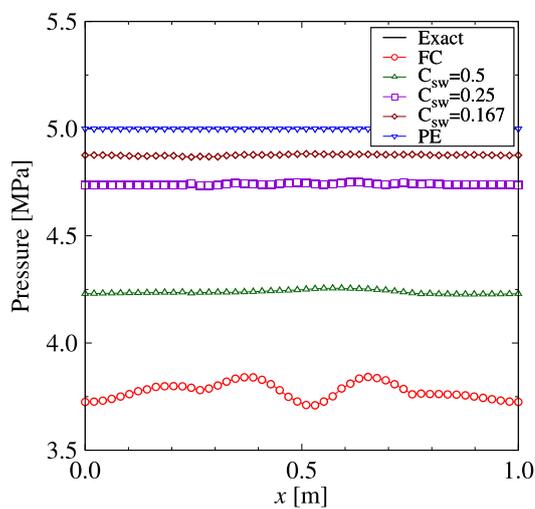


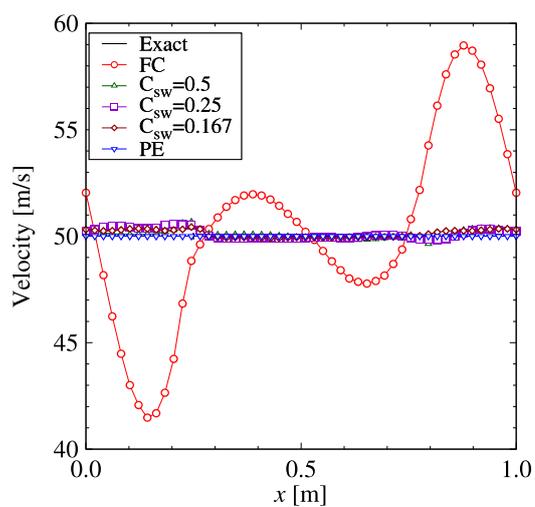
Fig. 6. Interface thickness corresponding to C_{sw} .



(a) Density

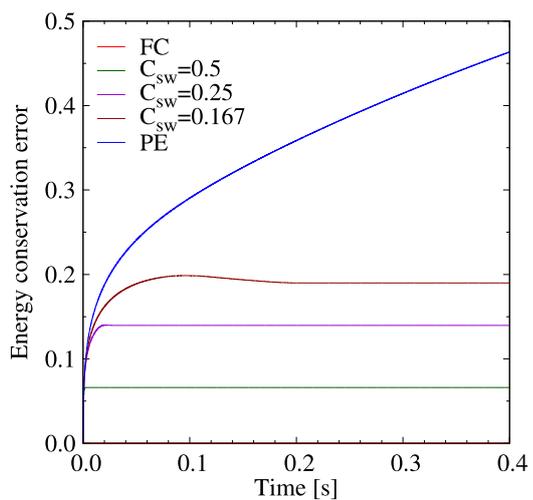


(b) Pressure

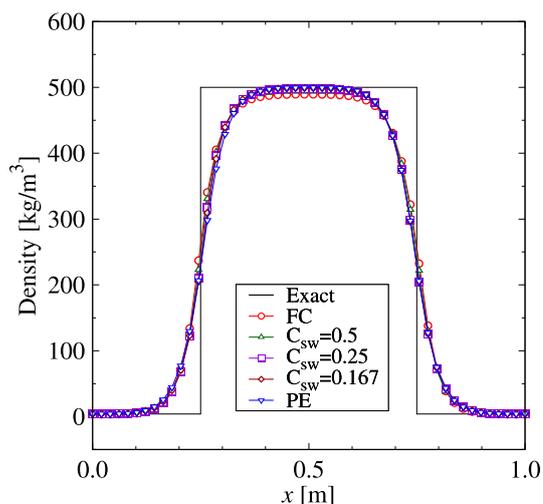


(c) Velocity

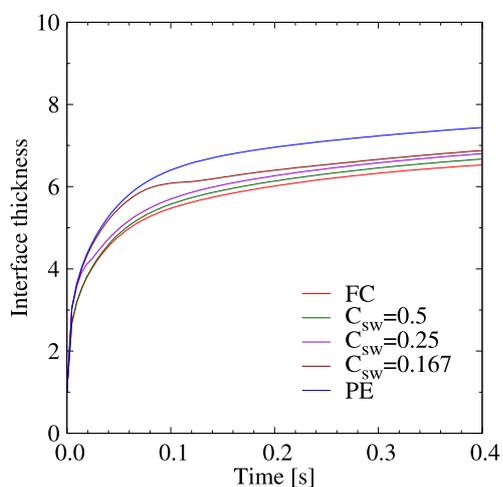
Fig. 7. Results of advection of a contact discontinuity with sharp initial interface using the EB, PB and hybrid method in case A.



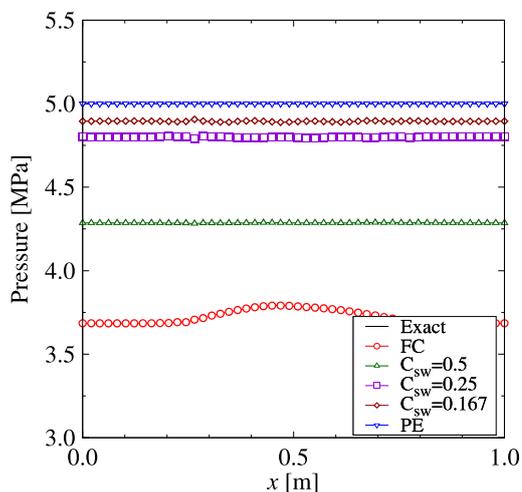
(a) Energy conservation errors



(a) Density



(b) Interface thickness



(b) Pressure

Fig. 8. Time history with sharp initial interface using the EB, PB and hybrid method in case A.

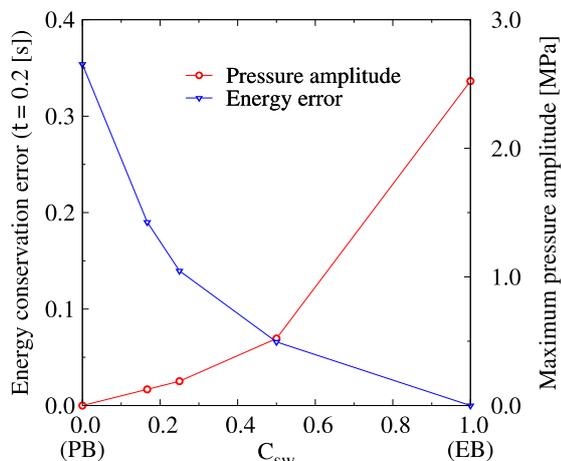
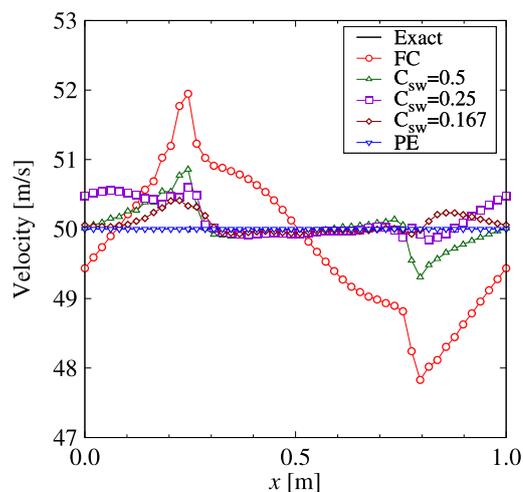


Fig. 9. Effect of C_ϵ on the maximum pressure amplitude and the energy conservation error for the hybrid method in case A. $C_\epsilon = 0$ and 1 mean the PB and EB method.



(c) Velocity

Fig. 10. Results of advection of a contact discontinuity with sharp initial interface using the EB, PB and hybrid method in Case B.

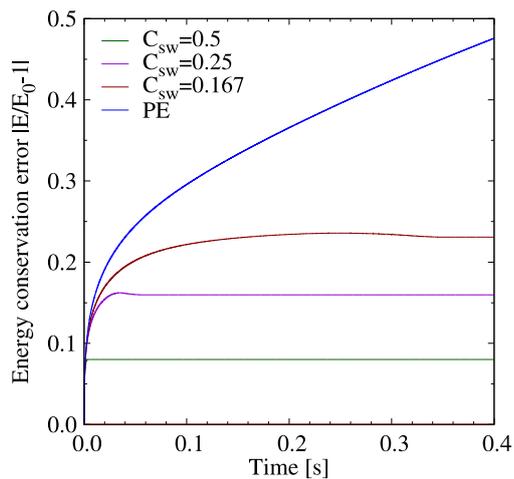


Fig. 11. Time history of energy conservation in case B.

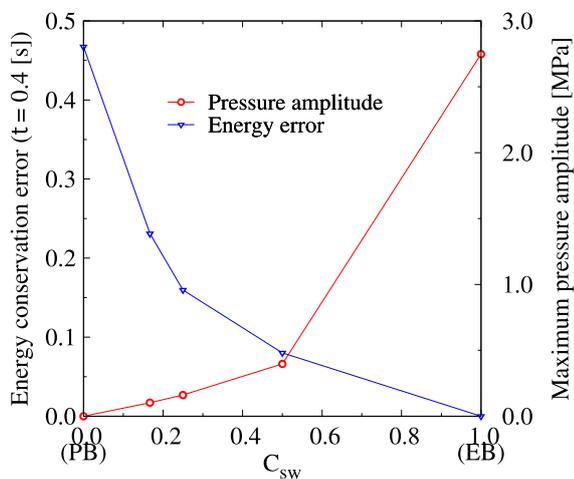


Fig. 12. Effect of C_e on the maximum pressure amplitude and the energy conservation error for the hybrid method in case B. $C_e = 0$ and 1 mean the PB and EB method.