

## 高解像度コンパクト差分法を用いた超臨界圧極低温流体の乱流混合解析に向けて

寺島洋史 (JAXA), 河合宗司 (Stanford University), 山西伸宏 (JAXA)

A high-resolution scheme for cryogenic turbulent mixing flows under supercritical pressure environments

Hiroshi Terashima (JAXA), Soshi Kawai (Stanford University), and Nobuhiro Yamanishi (JAXA)

## Abstract

A high-resolution methodology using a compact differencing scheme is introduced in the aim of simulating cryogenic turbulent mixing flows under supercritical pressure environments. The present method takes a strategy to add non-linear localized artificial diffusivity to capture different types of discontinuities such as shock waves or material interfaces, while using a compact difference scheme. One-dimensional advection and modified Shu-Osher problems in supercritical flows are proposed in this study to assess the performance of the present method, in addition to an existing shock tube problem. Results for the advection problem show that the present method can be applied successfully to supercritical flows, including a trans-critical state, without any significant spurious oscillations, if initial startup errors are properly avoided. A localized artificial diffusivity, especially artificial thermal conductivity for temperature gradients, can effectively work on reducing numerical wiggles produced due to high density/temperature gradients. The modified Shu-Osher problem demonstrates the superiority of the present method in resolving high-frequency waves behind the shock wave even in a supercritical pressure condition, relative to a conventional low-order upwind-biased scheme. Results for a two-dimensional cryogenic plane jet in a supercritical pressure condition also demonstrate the capability of the present method for simulating the unsteady jet flow structures and the superiority for resolving the fluctuations with reasonable grid resolutions.

## 1. Introduction

液体ロケットエンジンでは、高い推力性能を得るため、燃焼圧力を高める傾向にあり、酸化剤や燃料の臨界圧力値を超える高圧環境下において、流体混合や燃焼現象が生じる [1]。流れ場は、酸化剤が低速で噴射される一方で密度が高く、一般的には噴射出口直径基準で  $O(5)$  のレイノルズ数となる。そのため、噴流界面における特有の熱力学的変化とそれと干渉する乱流混合現象を取り扱う必要がある。

これまでの研究 [2, 3] を概観すると、RANS では平均値は測定データと一致するものの、噴流の非定常性は欠落するため、噴流構造の詳細解明には LES に期待が寄せられている。しかしながら、LES においても、超臨界圧流体解析で使用される低次精度スキームは散逸性が強く、乱流構造の解像をはじめ計算格子や計算時間削減の点からも、散逸性を極限まで抑え、かつ分散誤差の少ない高解像度手法が今後益々望まれるであろう。スキームの高解像度化として中心差分ベース、特にコンパクト差分法の導入が考えられるが、比較的大きな密度/温度勾配や特有の熱力学的変化が含まれる超臨界圧極低温流れ場では、虚偽の数値振動など計算安定性に関する問題が発生する可能性があり、今後の適用にあたっては手法の評価が必要不可欠である。また、熱力学的特性が異なる界面の数値計算には特有の数値振動問題がある [4]。

以上を背景に、本研究では、超臨界圧極低温流問

題に対し、6次精度コンパクト差分法 [5] に局所人工粘性法 [6, 7, 8, 9] を用いた高解像度スキームを導入し、1, 2次元問題を通して、その評価を行った。本研究は、多成分理想気体に対して実施した我々の先行研究 [10] がベースとなっており、併せて参照いただきたい。また、本研究内容の更なる詳細は、[11] を参照いただきたい。

## 2. Numerical method

支配方程式として、一般曲線座標系の圧縮性 Euler もしくは Navier-Stokes 方程式を用いた。状態方程式には、超臨界圧状態や極低温流体の熱力学的物性を再現するため、3次型 Soave-Redlich-Kwong (SRK) 方程式 [12] を採用した。粘性係数には Zeberg-Mikkelsen らの model [13]、熱伝導係数には Vasserman and Nedostup model [14] を用いた。

移流項、粘性項、また metrics は 6次精度コンパクト差分法 [5] で評価した。時間積分は 3次精度 TVD Runge-Kutta 法 [15] で行った。時間積分の最終ステージでは、保存量に対してコンパクトフィルタ [5, 16] を適用している。本研究では、6次精度フィルタを用い、フィルタ係数は  $\alpha_f = 0.495$  とした。

超臨界圧下極低温噴流の特徴として、衝撃波などの不連続が発生しない一方で、大きな密度/温度勾配が流体界面に存在することが挙げられる。そのため、中心差分法であるコンパクト差分法をそのまま適用することは、界面における虚偽の数値振動や計

算不安定性につながる可能性がある。

このような問題を避けるため、我々は、初め Cook により提案され [17], その後、一般座標系に拡張、性能向上のため改良が行われた Localized Artificial Diffusivity (LAD) method [7, 9] を採用し、超臨界流体解析に対する評価を行った。

LAD では、各輸送係数に対して、以下のようにモデル化される人工的輸送係数を加える。

$$\mu^* = C_\mu \rho \left[ \sum_{l=1}^3 \frac{\partial^r \mathbf{S}}{\partial \xi_l^r} \Delta \xi_l^r \Delta_l^2 \right], \quad (1)$$

$$\beta^* = C_\beta \rho \left[ \sum_{l=1}^3 \frac{\partial^r \nabla \cdot \mathbf{u}}{\partial \xi_l^r} \Delta \xi_l^r \Delta_l^2 \right], \quad (2)$$

$$\kappa^* = C_\kappa \frac{\rho c^3}{T^2} \left[ \sum_{l=1}^3 \frac{\partial^r T}{\partial \xi_l^r} \Delta \xi_l^r \Delta_l \right]. \quad (3)$$

ここで、 $\rho$  は密度、 $c$  は音速、 $T$  は温度、 $\mathbf{u}$  は速度ベクトル、 $\mathbf{S}$  は歪み速度テンソルである。添え字  $l (= 1, 2, 3)$  は各格子方向を表わしている。 $\Delta \xi_l$  は一般曲線座標系、 $\Delta_l$  はデカルト座標系における格子幅である。本研究では、微分次数を  $r = 4$  とし、陽的な 4 次精度中心差分により微分項を評価した。また、上付きバーはフィルター操作を意味しており、近似 Gaussian filter を用いた。式 (1)~(3) の無次元係数は、 $C_\mu = 0.0, C_\beta = 0.0, C_\kappa = 0.01$  と設定した。本研究では、対象を 1, 2 次元に限定しているため、粘性項の sub-grid scale term として働く式 (1) は導入していない。一方で、温度勾配により評価される式 (3) は、本研究対象において効果的に働く項となる。温度以外にも内部エネルギーを用いる [7] など、幾つかのモデル選択が可能であるが、界面における温度勾配に効果的に働くことを狙い、本研究では温度を選択した。式 (2) に関しては、衝撃波が存在する 1 次元計算例 (衝撃波管問題と Shu-Osher 問題) では必要となり、 $C_\beta = 1.75$  と設定している (それ以外では  $C_\beta = 0.0$  であることに注意いただきたい)。LAD に関する定式化、評価、適用例などは [6, 7, 9, 18] に見られる。

### 3. Results and Discussions

本手法の適用性を評価するため、超臨界流体用に 1, 2 次元問題を設定し、解析を行った。本論文では、1 次元衝撃波管問題を除き、流体として窒素を設定した。窒素の臨界密度は  $\rho_{cr} = 313.3 \text{ kg/m}^3$ 、臨界圧力は  $p_{cr} = 3.4 \text{ MPa}$ 、臨界温度は  $T_{cr} = 126.2 \text{ K}$  である [19]。

### 3-1 One-dimensional problems

いずれの問題でも CFL 数は 0.4 とした。

#### Advection problem

最初の解析例として、超臨界圧噴流を想定した単純な移流問題を設定した。噴流実験 [20, 21] を参考にして、密度比 10、界面速度 10m/s、臨界圧を超える 4MPa と 8MPa の 2 つの圧力状態を設定した。SRK 状態方程式を用いた場合、4MPa の場合の初期状態は： $\rho_L = 450.0 \text{ kg/m}^3, T_L = 124.6 \text{ K}$  for  $0 \leq x < 0.3 \text{ m}$ ,  $\rho_R = 45.0 \text{ kg/m}^3, T_R = 298.5 \text{ K}$  for  $0.3 \leq x \leq 1.0 \text{ m}$ 。4MPa のケースは、界面近傍において臨界温度をまたぐ遷臨界噴射に相当する条件となる。計算格子は 101 点とした。以下に示す結果は  $t = 0.04 \text{ s}$  におけるものである。

ここでは、我々が先の研究 [10] で行ったように、初期界面 (sharp or smooth initial interfaces) の効果を併せて調べている。Smooth interface は、primitive variables  $q_{L/R} = (\rho, u, p, Y)_{L/R}$  に対して行い、error function を用いて次のように発生させた： $q = q_L (1 - f_{sm}) + q_R f_{sm}$ ,  $f_{sm} = (1 + \text{erf}[\Delta R/\epsilon]) / 2$ 。ここで、添え字の  $L/R$  は左右の状態を意味する。 $\Delta R$  は初期界面からの距離、 $\epsilon = C_\epsilon \Delta x$  であり、 $C_\epsilon = 1.0 \sim 5.0$  をパラメータとしてその効果を調べた。 $\Delta x$  は格子幅である。

Figure 1 に  $C_\epsilon$  の効果を含めた密度分布を示す。Sharp interface と  $C_\epsilon = 1.0$  の場合には界面付近で小さな wiggles が生じており、initial startup error の影響が出ている。一方で、 $C_\epsilon = 3.0, 5.0$  とした場合は、スムーズな物理量分布が維持されており、その厳密解とよく一致している。

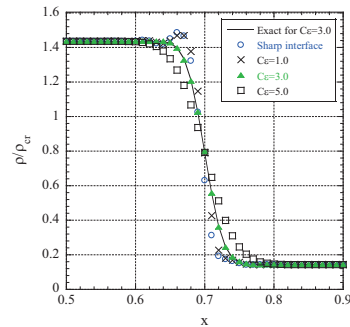


Figure 1: Density profiles at  $t = 0.04 \text{ s}$  with the effect of smooth initial interfaces in case of 4MPa.

厳密解からの最大ずれ幅を maximum wiggles amplitude と定義し、 $C_\epsilon$  に対してプロットしたも

のを Fig. 2 に示す。いずれの物理量においても、初期界面をスムーズ ( $C_\epsilon$  が大) にすることにより、maximum wiggles amplitude が効果的に減少していくことがわかる。すなわち、initial startup error の影響を適切に避ければ、コンパクト差分法を用いた本手法により、虚偽の数値振動無く、超臨界圧下の極低温流れ場を解析することが可能といえる。

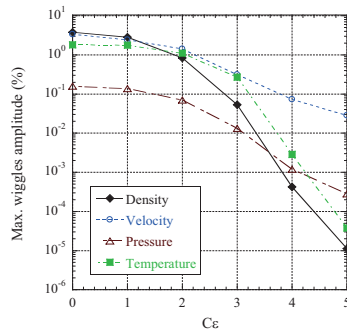


Figure 2: Maximum wiggles amplitudes.

次に、LAD の係数 ( $C_\kappa$ ) の影響について、 $C_\kappa = 0.001$  とした場合の温度分布を Fig. 3 に示す。密度、速度、そして圧力分布に大きな違いは見られなかったが、温度分布には明確な影響があり、sharp initial interface と  $C_\epsilon = 1.0$  の場合には、 $C_\kappa = 0.01$  では見られなかった大きな wiggles が発生している。ゆえに、LAD ( $\kappa^*$ ) は、温度分布に対して効果的に働き、initial startup error による数値振動を低減できているといえる。因みに、 $C_\kappa = 0.0$  とした場合、どの初期界面でも、界面の非物理的な振動により計算が破綻した。すなわち、何かしらの界面捕獲法が必要であることを明記しておく。

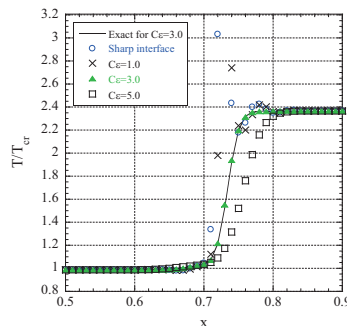


Figure 3: Temperature profiles with  $C_\kappa = 0.001$ .

最後に、MUSCL scheme との比較を Fig. 4 に示す。AUSM 系の SHUS[22] と van Albada limiter[23]

を用いた。SHUS では、sharp initial interface においてもスムーズな分布が維持されており、計算初期においても wiggles は発生しない。但し、Fig. 5 に示されるように、その散逸性から界面は人工的に時間とともに厚くなる (界面厚さは、 $\frac{\delta}{\Delta x} = \frac{\Delta \rho}{\Delta x \partial \rho / \partial x}|_{\max}$  と定義した)。一方、本手法は若干 wiggles が発生するが、より界面をシャープに保ったまま移流している。この結果と傾向から、本手法では、たとえスムーズな初期界面を仮定したとしても、時間が経過するにつれ、シャープな初期界面を用いた SHUS よりも界面をシャープに解像することに注意したい。

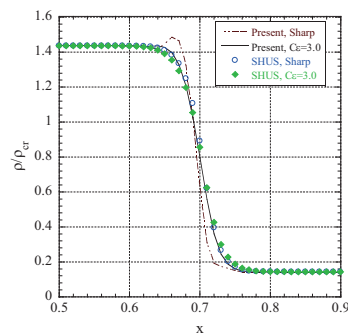


Figure 4: Comparison with SHUS.

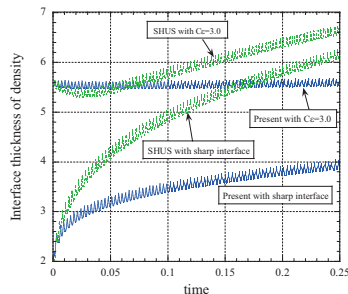


Figure 5: Time histories of interface thickness with comparison between the present and SHUS.

8MPa のケースでは、4MPa の結果と大きな違いは見られなかった。

### Shock tube problem

続いて、衝撃波を含む超臨界圧流れ場に対する本手法の評価を行うため、衝撃波管問題 [24] の計算を行った。参照解や Arina の結果 [24] とも良く一致しており、本手法が、衝撃波を含む超臨界流体に対しても有効であることが示された。詳細は [11] を参照いただきたい。



### A modified Shu-Osher problem

最後の例として、衝撃波と乱流干渉流れに対する本手法の適用性を調べるため、Shu-Osher 問題 [25] を超臨界圧流体用に拡張した。密度比、圧力比、そして衝撃波 Mach 数をオリジナルの Shu-Osher 問題に一致させつつ、移流問題と同様の考えで超臨界圧状態を設定した。計算空間を  $-5\text{m} \leq x \leq 5\text{m}$  として、左右の初期条件は次のように設定した： $\rho_R = \rho_0(1.0 + 0.2 \sin 5x)$ ,  $p_R = p_0$ ,  $u_R = 0.0\text{m/s}$  for  $x \geq -4\text{m}$ ,  $\rho_L = 3.857143\rho_0$ ,  $p_L = 10.33333p_0$ ,  $u_L = M_{ref}c_L$  for  $x < -4\text{m}$ . ここで、 $\rho_0 = 50.0\text{kg/m}^3$ ,  $p_0 = 4.0\text{MPa}$ , 衝撃波 Mach 数  $M_{ref}$  は、 $M_{ref} = 1.3577$  である。格子は 201 点とし、参照解として格子 2001 点の解を採用した。以下に示す計算結果は、 $t = 5.9 \times 10^{-3}\text{s}$  のものである。

Figure 6 に密度分布を示す（速度と圧力分布には違いがほとんどない）。本手法では、格子 201 点の結果が、参照解とした格子 2001 点の結果とほぼ一致しており、超臨界圧下衝撃波背後に生じる高周波変動を正確に解像している。一方で、SHUS では、数値粘性の影響により、この高周波変動が解像できていない（格子 2001 点の場合、SHUS の結果は本手法と同じになる）。以上の結果は、選択した手法によって、超臨界圧噴流などにおける乱流変動の見積もり、さらには噴流構造に大きな違いが出る可能性を示唆している。以上から、本手法は、超臨界圧下乱流混合現象などで生じうる高周波変動を解像する上で非常に有効なものといえる。

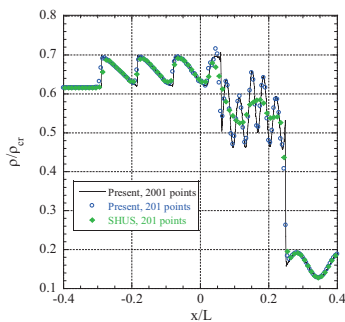


Figure 6: Density profiles.

### 3-2 Two-dimensional problems

多次元問題への適用として、2次元超臨界圧極低温平面噴流問題を取り上げた。平面噴流に関する測定データが存在しないため、1次元問題と同様に、

過去の実験 [21] を参考に、計算条件を設定した。噴射入口条件は： $\rho_i = 236.3\text{kg/m}^3$ ,  $u_i = 10.0\text{m/s}$ ,  $p_i = 3.97\text{MPa}$ ,  $T_i = 130\text{K}$ , 燃焼室内は： $\rho_c = 45.46\text{kg/m}^3$ ,  $u_c = 0.0\text{m/s}$ ,  $p_c = 3.97\text{MPa}$ ,  $T_c = 298\text{K}$  である。入口速度分布は、文献 [26] に示された双曲線関数を用いた。初期擾乱は導入していない。その他の物理量 (primitive variables) は、 $C_\epsilon = 3.0$  とした error function で与えた。噴射直径は  $D = 2.2 \times 10^{-3}\text{m}$  であり、これを基準としたレイノルズ数は約  $4.0 \times 10^5$  である。計算領域は  $400D \times 100D$  とし、境界条件として、上下は slip wall, 出口は圧力固定とした。格子解像度の影響を調べるため、4つの計算格子：Grid1(195 × 185), Grid2(369 × 345), Grid3(689 × 645), Grid4(1309 × 1185) を用いた。最小格子幅はいずれの格子でも一定とし、入口せん断層の半径方向に  $\Delta s = 1.0 \times 10^{-5}\text{m}$  と設定した。CFL 数は 0.8 とした。平均量と変動量は、噴流コアの平均位置がほとんど変化しなくなる時点（約 20ms）から約 80ms までのデータをサンプルしたものである。

Figure 7 に、Grid4 で得られた密度の瞬間分布図を示す。まず、噴流先端が上下に巻きあがり、噴流界面と干渉し、Kelvin-Helmholtz 不安定とともに、噴流界面を不安定にさせる。この不安定性により、せん断層が発達し、噴流そのものが蛇行を始める。この蛇行した動きにより、周囲の流体が噴流に巻き込まれ、混合が促進される。



Figure 7: Instantaneous density distribution.

Figure 8 に、 $x/D = 5.0$  における密度の変動成分の分布を示す ( $x/D = 2.5, 10.0$  においてもほぼ同じ傾向が見られる)。平均成分は、いずれの格子においても、ほぼ一致する一方で（ここでは誌面の都合上示さない、[11] を参照下さい）、変動成分には違いが見られる。変動成分は、噴流せん断層においてピーク値を持ち、格子解像度の増加とともに、その値も大きくなる。Grid4 を参照解と仮定すると、

本計算条件では Grid3 によって、噴流の平均ならびに変動成分が十分に解像されているといえる。

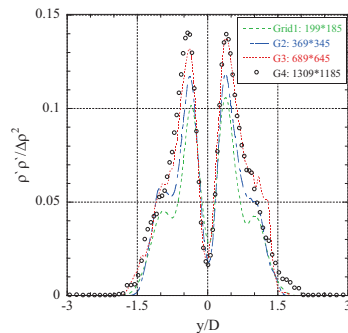


Figure 8: Profiles of density fluctuation at  $x/D = 5.0$  with the effect of grid resolution.

Figure 9 は、 $x/D = 5.0$  における速度変動量を用いて、本手法と SHUS の比較を示したものである。SHUS の Grid2 は、他の結果に比べて非常に薄いせん断層となっており、流体不安定性によるせん断層の発達と混合が適切にとらえられていない。Grid3 においても、せん断層厚さ並びに変動量の大きさが、本手法の結果に比べて過小評価されている。一方で、本手法では、せん断層厚さに関しては、Grid1 によってほぼ参照解 (Grid4) と同じ分布が得られており、本手法の優れた低散逸性と少ない分散誤差特性が示されている。Figure 10 は、ほぼ同時刻の瞬間密度分布を比較しており、SHUS では、スキームの過渡の散逸性から、Grid2, 3 いずれにおいても、せん断不安定性の発達する位置が比較的下流となっている。特に Grid2 では、上流側のせん断不安定性並びに噴流非定常性が完全に欠落している。対照的に、本手法では、Grid2 によって非定常構造がとらえられており、本手法の優れた特性が明らかである。因みに、SHUS で制限関数を使用しない場合、界面で非物理的な over/undershoot が発生し、計算が破綻した。すなわち、風上スキームにおいても、超臨界圧極低温流れの解析には、制限関数のような何かしらの界面捕獲が必要と示唆される。

#### 4. Conclusions

超臨界圧極低温噴流の乱流混合解析に向けて、コンパクト差分法に LAD 法で衝撃波や界面を捕獲する高解像度スキームを導入し、1, 2次元問題を通して、本手法の評価を行った。1次元移流問題では、

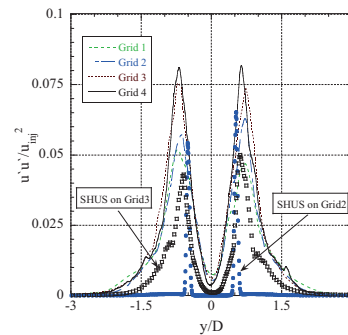


Figure 9: Profiles of streamwise velocity fluctuation at  $x/D = 5.0$ , comparing between the present method and SHUS.

適切に initial startup error を避けることにより、虚偽の数値振動無く、遷臨界状態を含む超臨界圧流体を解析できることを示した。LAD、特に人工熱伝達係数は、界面での急激な温度勾配に対して効果的に働き、非物理的な wiggles を抑制できる。超臨界圧流体用に修正した Shu-Osher 問題では、密度や温度の高周波変動を解像する上で優れた性能を持つことが示された。2次元超臨界圧極低温噴流解析に適用できることを示し、噴流の非定常詳細構造や変動量の評価が、適度な格子解像度で可能となることを示した。

#### 参考文献

- [1] V. Yang, M. Habiballah, J. Hulka, M. Popp, Liquid rocket thrust chambers: aspects of modeling, analysis, and design, Progress in astronautics and aeronautics.
- [2] G. Cheng, R. Farmer, Real fluid modeling of multiphase flows in liquid rocket engine combustors, Journal of propulsion and power 22 (6) (2006) 1373–1381.
- [3] N. Zong, V. Yang, Cryogenic fluid jets and mixing layers in transcritical and supercritical environments, Combustion Science and Technology 178 (1) (2006) 193–227.
- [4] R. Abgrall, S. Karni, Computations of compressible multifluids, Journal of Computational Physics 169 (2) (2001) 594–623.
- [5] S. Lele, Compact finite difference schemes with spectral-like resolution, Journal of Computational Physics 103 (1) (1992) 16–42.
- [6] A. Cook, Artificial fluid properties for large-eddy simulation of compressible turbulent mixing, Physics of fluids 19 (2007) 055103.
- [7] S. Kawai, S. Lele, Localized artificial diffusivity scheme for discontinuity capturing on curvilinear

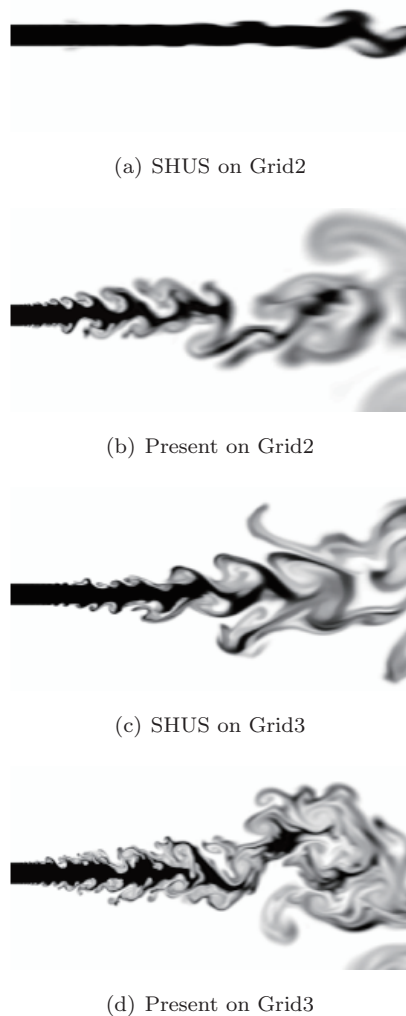


Figure 10: Comparison between the present method and SHUS with the effect of grid resolution using density distributions.

- ear meshes, *Journal of Computational Physics* 227 (22) (2008) 9498–9526.
- [8] A. Mani, J. Larsson, P. Moin, Suitability of artificial bulk viscosity for large-eddy simulation of turbulent flows with shocks, *Journal of Computational Physics* 228 (19) (2009) 7368–7374.
- [9] S. Kawai, S. Shankar, S. Lele, Assessment of localized artificial diffusivity scheme for large-eddy simulation of compressible turbulent flows, *Journal of Computational Physics* 229 (2010) 1739–1762.
- [10] S. Kawai, H. Terashima, A high-resolution scheme for compressible multicomponent flows with shock waves, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, accepted for publication (available online, DOI: 10.1002/flid.2306).
- [11] H. Terashima, S. Kawai, N. Yamanishi, A high-resolution numerical method for supercritical flows with large density variations, under review, or proceedings of ANSS2010 (JSASS-2010-2033-A).
- [12] G. Soave, Equilibrium constants from a modified redlich-kwong equation of state, *Chemical Engineering Science* 27 (6) (1972) 1197–1203.
- [13] C. Zeberg-Mikkelsen, S. Quinones-Cisneros, E. Stenby, Viscosity modeling of light gases at supercritical conditions using the friction theory, *Ind. Eng. Chem. Res* 40 (17) (2001) 3848–3854.
- [14] A. Vasserman, V. Nedostup, An equation for calculation of the thermal conductivity of gases and liquids, *Journal of Engineering Physics and Thermophysics* 20 (1) (1971) 89–92.
- [15] S. Gottlieb, C. Shu, Total variation diminishing runge-kutta schemes, *Mathematics of Computation* 67 (221) (1998) 73–85.
- [16] D. Gaitonde, M. Visbal, Pade-Type Higher-Order Boundary Filters for the Navier-Stokes Equations, *AIAA Journal* 38 (2000) 2103–2112.
- [17] A. Cook, W. Cabot, A high-wavenumber viscosity for high-resolution numerical methods, *Journal of Computational Physics* 195 (2) (2004) 594–601.
- [18] A. Cook, Enthalpy diffusion in multicomponent flows, *Physics of Fluids* 21 (2009) 055109.
- [19] E. Lemmon, M. Huber, M. McLinden, NIST Standard Reference Database 23: Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties-REFPROP, Version 8.0, National Institute of Standards and Technology, Standard Reference Data Program, Gaithersburg, MD.
- [20] B. Chehroudi, D. Talley, E. Coy, Visual characteristics and initial growth rates of round cryogenic jets at subcritical and supercritical pressures, *Physics of Fluids* 14 (2002) 850.
- [21] R. Branam, W. Mayer, Characterization of cryogenic injection at supercritical pressure, *Journal of Propulsion and power* 19 (3) (2003) 342–355.
- [22] E. Shima, T. Jounouchi, Role of CFD in Aeronautical Engineering (No. 14)-AUSM type Upwind Schemes, in: *Proceedings of the 14th NAL Symposium on Aircraft Computational Aerodynamics*, 1997, pp. 7–12.
- [23] G. Van Albada, B. Van Leer, W. Roberts, A comparative study of computational methods in cosmic gas dynamics, *Astronomy and Astrophysics* 108 (1) (1982) 76–84.
- [24] R. Arina, Numerical simulation of near-critical fluids, *Applied Numerical Mathematics* 51 (4) (2004) 409–426.
- [25] C. Shu, S. Osher, Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes, II, *Journal of Computational Physics* 83 (1) (1989) 32–78.
- [26] A. Hilgers, Control and optimization of turbulent jet mixing, *Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research* (2000) 45–54.