非平衡流れの CFD、基礎と最近の話題

東北大学大学院航空宇宙工学専攻 山本 悟

工学・理学ならびに医学の分野における流れ問題で未だ未解決なものは多い。これらを解決することが、21 世紀における CFD 研究者の責務の一つであるといえる。非平衡流れ問題もその一つである。一言で非平衡流れといっても、かたや乱流から反応流までと幅広い。本資料においては、筆者がこれまで研究してきた熱化学非平衡流れ、非平衡凝縮流れに焦点を絞り、これらの流れを数値計算するための基礎的な知識を講義する。また具体的な応用例として非平衡凝縮流れを取り上げ、凝縮モデル、数値解法について概説し、さらに最近取り組んでいる前処理法の導入方法についても触れる。

1　基礎方程式の基礎

熱化学非平衡流れや非平衡凝縮流れは、複数の化学種間の反応、分子振動温度、相変化などを考慮する必要があり、通常の圧縮性ナビエ・ストークス方程式では正確に解くことができない。ここでは、まずこれら基礎方程式を導出する前に基本的に知っておくべきことについて簡単に説明する。

1.1　3 次元圧縮性ナビエ・ストークス方程式 ＋ 生成項

圧縮性ナビエ・ストークス方程式では完結することのできない流れ問題を取り扱うためには、数理モデルや外力を生成項として付加される場合が多い。ここでは、3 次元圧縮性ナビエ・ストークス方程式に生成項を付加した場合の基礎方程式をデカルト座標系で示す。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_j}{\partial x_j} + H = 0 \tag{1}$$

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho\, u_1 \\ \rho\, u_2 \\ \rho\, u_3 \\ E \end{bmatrix}, \quad F_j = \begin{bmatrix} \rho\, u_j \\ \rho\, u_1 u_j + \delta_{1j} p - \tau_{j1} \\ \rho\, u_2 u_j + \delta_{2j} p - \tau_{j2} \\ \rho\, u_3 u_j + \delta_{3j} p - \tau_{j3} \\ (E + p)\, u_j - \tau_{jk} u_k - \kappa \frac{\partial T}{\partial x_j} \end{bmatrix}, \quad H = -\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \\ w_5 \end{bmatrix}$$

ここで、$\rho, u_i (i = 1,2,3), E$ はそれぞれ、密度、物理速度成分、単位体積当りの全内部エネルギー。$p, \tau_{jk} (j,k = 1,2,3), \kappa, T$ はそれぞれ、全圧、粘性応力テンソル成分、熱伝導率、静温。$w_i (i = 1,\cdots,5)$ は各方程式の生成項成分である。

1.2　無次元化された基礎方程式

生成項は、それ自身が次元を持っている場合が多く、無次元化には注意が必要である。ここでは、生成項を構成する各変数を個々に無次元化するのではなく、生成項全体を無次元化する方法について説明する。まず、各変数を次のように $^-$ の付いた量として無次元化する。

$$\begin{aligned} \bar{x}_j &= \frac{x_j}{L}, & \bar{t} &= \frac{t}{t_{ref}}, & \bar{\rho} &= \frac{\rho}{\rho_\infty} \\ \bar{u}_j &= \frac{u_j}{V_\infty}, & \bar{e} &= \frac{e}{\rho_\infty V_\infty^2}, & \bar{p} &= \frac{p}{\rho_\infty V_\infty^2} \\ \bar{T} &= \frac{T}{T_\infty}, & \bar{\mu} &= \frac{\mu}{\mu_\infty}, & \bar{\kappa} &= \frac{\kappa}{\kappa_\infty} \end{aligned}$$

ただし、$t_{ref}=L/V_\infty$ であり、L、ρ_∞、V_∞、T_∞、μ_∞、κ_∞ はそれぞれ、代表寸法[m]、基準密度 [kg/m^2]、基準速度 [m/s]、基準温度 [K]、基準分子粘性係数 [Ns/m^2]、基準熱伝導率 [N/sK]。

最終的に無次元化された基礎方程式は次のようになる。

$$\frac{\partial \bar{Q}}{\partial \bar{t}} + \frac{\partial \bar{F}_j}{\partial \bar{x}_j} + \bar{H} = 0 \tag{2}$$

$$\bar{Q} = \begin{bmatrix} \bar{\rho} \\ \bar{\rho}\bar{u}_1 \\ \bar{\rho}\bar{u}_2 \\ \bar{\rho}\bar{u}_3 \\ \bar{E} \end{bmatrix}, \quad \bar{F}_j = \begin{bmatrix} \bar{\rho}\bar{u}_j \\ \bar{\rho}\bar{u}_1\bar{u}_j + \delta_{1j}\bar{p} - \bar{\tau}_{j1}/Re \\ \bar{\rho}\,\bar{u}_2\bar{u}_j + \delta_{2j}\bar{p} - \bar{\tau}_{j2}/Re \\ \bar{\rho}\,\bar{u}_3\bar{u}_j + \delta_{3j}\bar{p} - \bar{\tau}_{j3}/Re \\ (\bar{E} + \bar{p})\,\bar{u}_j - (\bar{\tau}_{jk}\bar{u}_k + \frac{\bar{\kappa}}{(\gamma-1)M_\infty^2 Pr}\frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{x}_j})/Re \end{bmatrix}$$

$$\bar{H} = -\frac{L}{\rho_\infty V_\infty}\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2/V_\infty \\ w_3/V_\infty \\ w_4/V_\infty \\ w_5/V_\infty^2 \end{bmatrix}$$

γ, Pr, Re は、それぞれ比熱比、プラントル数、レイノルズ数。M_∞ は基準マッハ数。対流項と粘性項に分離し、$^-$ をはずしてしまえば次式のように分かりやすい形になる。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_j}{\partial x_j} + \frac{1}{Re}\frac{\partial F_{vj}}{\partial x_j} + H = 0 \tag{3}$$

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho\ u_1 \\ \rho\ u_2 \\ \rho\ u_3 \\ E \end{bmatrix}, \quad F_j = \begin{bmatrix} \rho\ u_j \\ \rho\ u_1u_j + \delta_{1j}p \\ \rho\ u_2u_j + \delta_{2j}p \\ \rho\ u_3u_j + \delta_{3j}p \\ (E + p)\ u_j \end{bmatrix}$$

$$F_{vj} = \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{j1} \\ \tau_{j2} \\ \tau_{j3} \\ \tau_{jk}u_k + \frac{\kappa}{(\gamma-1)M_\infty^2 Pr}\frac{\partial T}{\partial x_j} \end{bmatrix}, \quad H = -\frac{L}{\rho_\infty V_\infty}\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2/V_\infty \\ w_3/V_\infty \\ w_4/V_\infty \\ w_5/V_\infty^2 \end{bmatrix}$$

これより、生成項の無次元化は、次元を持った生成項 $w_i(i=1,\cdots,5)$ にそれぞれ基準値からなるパラメータを掛けてやれば良いことがわかる。

2　一般曲線座標系

任意形状物体周りの流れを差分法で計算するために、デカルト座標系の基礎方程式は一般曲線座標系に変換される。以下には、一般曲線座標系の変換のヤコビアンならびに基礎方程式を示す。

2.1　変換のためのヤコビアン

３次元の一般曲線座標 (ξ, η, ζ) は次のように定義される。

$$\xi \;=\; \xi(x,y,z), \quad \eta \;=\; \eta(x,y,z), \quad \zeta \;=\; \zeta(x,y,z) \tag{4}$$

したがって、これらの式から次の関係が成り立つ必要がある。

$$\begin{bmatrix} \xi_x & \xi_y & \xi_z \\ \eta_x & \eta_y & \eta_z \\ \zeta_x & \zeta_y & \zeta_z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_\xi & x_\eta & x_\zeta \\ y_\xi & y_\eta & y_\zeta \\ z_\xi & z_\eta & z_\zeta \end{bmatrix} \;=\; \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{5}$$

ここで、変換のためのヤコビアン J は次式で定義される。

$$J \;=\; \frac{\partial(x,\ y,\ z)}{\partial(\xi,\ \eta,\ \zeta)} \;=\; \begin{vmatrix} x_\xi & x_\eta & x_\zeta \\ y_\xi & y_\eta & y_\zeta \\ z_\xi & z_\eta & z_\zeta \end{vmatrix} \tag{6}$$

2.2　基礎方程式の一般曲線座標系への変換

測度と呼ばれる $\xi_x, \xi_y, \cdots$ などの関係式と変換のヤコビアン J を用いて、デカルト座標系の基礎方程式 (1) は以下のように変形される。なおこれ以降の方程式に無次元化は特に施さない。

$$\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \;+\; \frac{\partial \hat{F}_j}{\partial \xi_j} \;+\; \hat{S} + \hat{H} \;=\; 0 \tag{7}$$

$$\hat{Q} \;=\; J \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ E \end{bmatrix}, \quad \hat{F}_j \;=\; J \begin{bmatrix} \rho U_j \\ \rho u_1 U_j \;+\; (\partial\xi_j/\partial x_1)p \\ \rho u_2 U_j \;+\; (\partial\xi_j/\partial x_2)p \\ \rho u_3 U_j \;+\; (\partial\xi_j/\partial x_3)p \\ (E+p)U_j \end{bmatrix}$$

$$\hat{S} \;=\; -J\frac{\partial \xi_i}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial \xi_i} \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{1j} \\ \tau_{2j} \\ \tau_{3j} \\ \sigma_j \end{bmatrix}, \quad H \;=\; -J \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \\ w_5 \end{bmatrix}$$

$U_i (i = 1, 2, 3)$ は反変速度で、$U_i = (\partial\xi_i/\partial x_j)u_j$。また、$\sigma_j = \tau_{j\ell}u_\ell + \kappa\frac{\partial T}{\partial x_j}$。

3　基礎方程式の追加

熱化学非平衡ならびに非平衡凝縮流れを解くためには、上述の生成項が付加された圧縮性ナビエ・ストークス方程式 (7) に新たな支配方程式を追加して解く必要がある。これら基礎方程式を一般形で次のように記述する。なお、簡単化のため ˆ ははずして記述する。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \mathcal{F}(Q) = \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_j}{\partial \xi_j} + S_P + S_{NP} + H_{NP} = 0 \tag{8}$$

$$
Q = J \begin{bmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_s \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ E \end{bmatrix}, \quad F_j = J \begin{bmatrix} q_1 U_j \\ \vdots \\ q_s U_j \\ \rho u_1 U_j + \partial\xi_j/\partial x_1 p \\ \rho u_2 U_j + \partial\xi_j/\partial x_2 p \\ \rho u_3 U_j + \partial\xi_j/\partial x_3 p \\ (E+p)U_j \end{bmatrix}, \quad S_P = -J \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \tau_{1j} \\ \tau_{2j} \\ \tau_{3j} \\ \sigma_j \end{bmatrix}
$$

Q は未知変数ベクトル。 F_j ならびに S_P は流束ベクトルならびに拡散ベクトル。S_{NP} ならびに H_{NP} は追加された支配方程式の拡散ベクトルならびに生成ベクトル。未知変数ベクトル Q は、それぞれの非平衡流れ問題に応じて、異なる未知変数が定義される。ここでは、熱化学非平衡流れ (THC) ならびに非平衡凝縮流れ (CON) について未知変数 q_s を次のように定義する。

$$
\begin{aligned}
&\text{THC:} \quad s = 6, \quad (q_1, q_2, q_3, q_4, q_5, q_6) = (\rho_{N_2}, \rho_{O_2}, \rho_{NO}, \rho_N, \rho_O, E_v) \\
&\text{CON:} \quad s = 4, \quad (q_1, q_2, q_3, q_4) = (\rho, \rho_v, \rho\beta, \rho n)
\end{aligned}
$$

ρ_{N_2} から ρ_O は、化学種 N_2, O_2, NO, N, O の密度であり、E_v は 2 温度モデルに基づく分子振動エネルギー。一方、ρ_v は水蒸気の密度。β は液滴の質量分率。n は液滴の数密度。S_{NP} ならびに H_{NP} は以下のように定義される。

THC:

$$
S_{NP} = -J \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \begin{bmatrix} q_1 v_{1j} \\ \vdots \\ q_5 v_{5j} \\ q_{vj} + q_k e_{vk} v_{kj} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ q_k v_{kj} h_k \end{bmatrix}, \quad H_{NP} = -J \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_5 \\ W_v \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}
$$

v_{sj} は化学種 s の拡散速度。q_j ならびに q_{vj} は並進回転ならびに分子振動に伴う熱流束。e_{vj} は単位質量当りの分子振動エネルギー。h_j は単位質量当りのエンタルピー。w_s ならびに W_v は、化学反応ならびに分子振動に伴う生成項。

CON:

$$
H_{NP} = -J \begin{bmatrix} 0 \\ -\Gamma \\ \Gamma \\ \rho I \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}
$$

Γ は凝縮により発生した液滴の質量生成率。I は均一核生成率。 S_{NP} は均質流の仮定から省略できる。

4　流束ベクトル分離

THC ならびに CON の支配方程式は、時間進行法により連立して解かれる。各座標方向 $(i = 1, 2, 3)$ における区分的領域 ℓ と $\ell + 1$ のインターフェース $\ell + 1/2$ で、数値流束 $(F_i)_{\ell+1/2}$ は、特性速度の符号によ

り、$(F_i^{\pm})_{\ell+1/2}$ に流束分離することができる。F_i と Q の間には１次の同次関係が成り立つので, $F_i = A_i Q$ ならびに $\delta F_i = A_i \delta Q$。ただし、$A_i$ はヤコビ行列。このとき、数値流束 $(F_i^{\pm})_{\ell+1/2}$ ならびに $(\delta F_i^{\pm})_{\ell+1/2}$ は、$(A_i^{\pm})_{\ell+1/2}$ ならびに Q^M を用いて一般形で表すことができる. Q^M の添え字 M は、MUSCL 補間の方向 L もしくは R を意味する。$(A_i^{\pm})_{\ell+1/2}Q^M$ は、最終的には３つのサブベクトルの和により次式のように変形される。なお、これら式変形の詳細については、文献 [1][2] に説明しているのでご参照ください。

$$
\begin{aligned}
&(A_i^{\pm})_{\ell+1/2}Q^M = \lambda_{i1}^{\pm}Q^M + \frac{\lambda_{ia}^{\pm}}{c\sqrt{g_{ii}}}Q_{ia} + \frac{\lambda_{ib}^{\pm}}{c^2}Q_{ib} \qquad (9)\\
&\lambda_{i1} = U_i, \quad \lambda_{i3} = U_i + c\sqrt{g_{ii}}, \quad \lambda_{i4} = U_i - c\sqrt{g_{ii}}\\
&\lambda_{ij}^{\pm} = (\lambda_{ij} \pm \mid \lambda_{ij} \mid)/2, \quad \lambda_{ia}^{\pm} = (\lambda_{i3}^{\pm} - \lambda_{i4}^{\pm})/2\\
&\lambda_{ib}^{\pm} = (\lambda_{i3}^{\pm} + \lambda_{i4}^{\pm})/2 - \lambda_{i1}^{\pm}\\
&\\
&Q_{ia} = \bar{p}Q_{ic} + \Delta\bar{m}_i Q_d, \quad Q_{ib} = (\Delta\bar{m}_i c^2/g_{ii})Q_{ic} + \bar{p}Q_d\\
&\bar{p} = Q_p \cdot Q^M, \quad \Delta\bar{m}_i = Q_{im} \cdot Q^M
\end{aligned}
$$

ここで、$g_{ii} = \nabla\xi_i \cdot \nabla\xi_i$。サブベクトル Q_{ic}, Q_p, Q_{im} ならびに Q_d は、THC ならびに CON に関して、それぞれ以下のように定義される。
THC:

$$
\begin{aligned}
&Q_{ic} = [0 \ \cdots 0 \ \ 0 \ \ \partial\xi_i/\partial x_1 \ \ \partial\xi_i/\partial x_2 \ \ \partial\xi_i/\partial x_3 \ \ U_i]^T\\
&Q_p = [\phi_{N_2}^2 \ \ \cdots \phi_O^2 \ \ \tilde{\gamma} \ \ -\tilde{\gamma}u_1 \ \ -\tilde{\gamma}u_2 \ \ -\tilde{\gamma}u_3 \ \ \tilde{\gamma}]^T\\
&Q_{im} = [-U_i \ \cdots - U_i \ \ 0 \ \ \partial\xi_i/\partial x_1 \ \ \partial\xi_i/\partial x_2 \ \partial\xi_i/\partial x_3 \ \ 0]^T\\
&Q_d = [\rho_{N_2}/\rho_0 \ \cdots \rho_O/\rho_0 \ \ E_v/\rho_0 \ \ u_1 \ \ u_2 \ \ u_3 \ \ (\chi^2 + c^2)/\tilde{\gamma}]^T
\end{aligned}
$$

$\tilde{\gamma} = \gamma - 1$。$\rho_0$ は全密度. ϕ_s^2 ならびに χ^2 は、

$$
\begin{aligned}
\phi_s^2 &= (\frac{R_u}{M_s} - R\frac{C_{vs}}{C_v})T + \tilde{\gamma}(u_j u_j/2 - h_s^0)\\
\chi^2 &= \tilde{\gamma}(u_j u_j/2 + e_v + \sum_{s=N_2}^{O}\rho_s h_s^0/\rho_0)
\end{aligned}
$$

R_u は気体定数。M_s は化学種 s の分子量。$R = \sum_{s=N_2}^{O}\rho_s R_u/\rho_0 M_s$。$C_{vs}$ は化学種 s の並進回転定積比熱。$C_v = \sum_{s=N_2}^{O}\rho_s C_{vs}/\rho_0$。$\gamma = 1 + \bar{R}/C_v$。$h_s^0$ は化学種 s の生成エンタルピー。
一方、
CON:

$$
\begin{aligned}
&Q_{ic} = [0 \ \ 0 \ \ 0 \ \ 0 \ \ \partial\xi_i/\partial x_1 \ \ \partial\xi_i/\partial x_2 \ \ \partial\xi_i/\partial x_3 \ \ U_i]^T\\
&Q_p = [\phi^2 \ \ 0 \ \ 0 \ \ 0 \ \ -\tilde{\gamma}u_1 \ \ -\tilde{\gamma}u_2 \ \ -\tilde{\gamma}u_3 \ \ \tilde{\gamma}]^T\\
&Q_{im} = [-U_i \ \ 0 \ \ 0 \ \ 0 \ \ \partial\xi_i/\partial x_1 \ \ \partial\xi_i/\partial x_2 \ \ \partial\xi_i/\partial x_3 \ \ 0]^T\\
&Q_d = [1 \ \ \rho_v/\rho \ \ \beta \ \ n \ \ u_1 \ \ u_2 \ \ u_3 \ \ (\chi^2 + c^2)/\tilde{\gamma}]^T
\end{aligned}
$$

$\phi^2 = \tilde{\gamma}u_j u_j/2 - h_{0m}$. h_{0m} は凝縮に伴う生成エンタルピー、いわゆる潜熱。$(\chi^2 + c^2)/\tilde{\gamma} = (E + p)/\rho$。なお、非平衡凝縮に関する参考文献や筆者らの最新の研究は、文献 [3]-[5] に説明してありますのでご参照ください。

5　非平衡凝縮問題

　地球上の大気には、有限の水蒸気が含まれており、大気循環、雲や雨の形成に重要な役割を果たしている。さらに自然現象の中でも、たとえば竜巻や台風などは地球規模の渦を形成し、かつ渦中に凝縮（雲）

を観察することができる。水蒸気は凝縮すると潜熱を放出する。この潜熱が自然現象に多大なる影響を与えていることが示唆される。流体機械内部ならびに航空機周りにおいても、凝縮により潜熱が放出される場合がある。蒸気タービンが前者、飛行機雲が後者の典型的な例として上げられる。蒸気タービンの最終段付近では、タービン流路を通過してきた水蒸気が温度の低下に伴って凝縮し液滴に相変化する。さらに、発生した液滴によりタービン翼は腐食に伴う損傷を受け、また液滴自体がタービン全体の効率を悪化させていることが知られている。一方、航空機翼周りの凝縮現象は大きく分けて二種類からなり、ひとつはいわゆる飛行機雲で、航空機エンジン排気が大気中で凝縮を起こす場合で最近地球温暖化を助長しているという研究が報告されている。もうひとつは、超音速域の急激な空気の膨張に伴って大気中の水蒸気の過度の過冷却状態により発生した、いわゆる非平衡凝縮が上げられる。ただし、実際の航空機翼周りに発生する凝縮は、不均一核生成により支配されていることがすでに知られている。この場合、ある固有の物質が核となり凝縮の初生を支配している。たとえば、大気中のすす、NOx、SOxやこれらから化学反応により生成された硝酸・硫酸エアロゾルなどの微小な浮遊粒子が核となり、その核の周りに凝縮による液相が生成される。これに関連して、自動車排気中のすすや煙突からのエアロゾル、またこれらの呼吸器系への沈着なども凝縮現象と密接に関係しており、凝縮は21世紀のエネルギー・環境問題を左右する重要なキーワードである。

ここでは、これまでに筆者らが開発してきた非平衡凝縮を伴った流れを数値計算するための数値解法について概要を説明する。

まず、非平衡凝縮を伴う圧縮性湿り空気流れの支配方程式には、前述のように均質流を仮定した質量、運動量、エネルギー保存式に、新たに蒸気の質量、液滴の質量および液滴の数密度の保存式が加えられる。

5.1　湿り空気の状態方程式と音速

高速の湿り空気流れ、もしくは蒸気タービン内の湿り蒸気流れでは、$\beta < 0.1$ であると仮定できる。本研究では、この仮定に基づき近似した次式の状態方程式を用いる。

$$
\begin{aligned}
p &= \rho RT(1-\beta) \\
&= \frac{(1-\beta)R}{C_{pm}-(1-\beta)R}(E-\frac{1}{2}\rho u_i u_i-\rho h_{0m}) \qquad (10)\\
R &= (\frac{\rho_a R_u}{\rho_g M_a}+\frac{\rho_v R_u}{\rho_g M_v})
\end{aligned}
$$

ここで、ρ_a、ρ_g は乾燥空気および気相の密度、M_a、M_v は、空気の分子量ならびに蒸気の分子量である。C_{pm} ならび h_{0m} は、水と気相の定圧比熱ならびに生成エンタルピーを質量分率 β で次式のように線形結合することにより求められる。

$$
\begin{aligned}
C_{pm} &= \beta C_{p\ell}+(1-\beta)C_{pg} \\
h_{0m} &= \beta h_{0\ell}+(1-\beta)h_{0g}
\end{aligned}
$$

また湿り空気の密度は液相の質量分率 β を用いれば、

$$
\frac{1}{\rho}=\frac{1-\beta}{\rho_g}+\frac{\beta}{\rho_\ell}
$$

もしくはボイド率 α を用いれば、

$$
\rho=\alpha\rho_g+(1-\alpha)\rho_\ell
$$

音速は次式のように近似される。

$$
\begin{aligned}
c^2 &= \frac{(1-\beta)R}{C_{pm}-(1-\beta)R}C_{pm}T \\
&= \frac{C_{pm}}{C_{pm}-(1-\beta)R}\ \frac{p}{\rho} \qquad (11)
\end{aligned}
$$

また、粘性係数 μ も気相と水の粘性係数 μ_g, μ_ℓ をボイド率 α により線形結合した次式を用いる。

$$\mu = \alpha\mu_g + (1-\alpha)\mu_\ell$$

5.2 非平衡凝縮モデル

非平衡凝縮における液相の質量生成率 Γ は、古典凝縮論に基づいて、凝縮核生成と液滴の成長による質量増加の和で表される。さらに液滴の成長を液滴の数密度を関数にした式で近似した。すなわち、

$$\Gamma = \frac{4}{3}\pi\rho_\ell I r_*^3 + 4\pi\rho_\ell n r^2 \frac{dr}{dt} \tag{12}$$

ここで、I は均一核生成に伴う凝縮核生成率で、Frenkel[6] により定式化された次式を用いる。

$$I = q_c(\frac{2\sigma}{\pi m^3})^{1/2}\frac{\rho_g^2}{\rho_\ell}\exp(-\frac{4\pi r_*^2\sigma}{3kT})$$

ただし、q_c、σ、m、ならびに k はそれぞれ、凝縮係数、液滴の表面張力、水の分子量、そしてボルツマン定数。r_* は Kelvin-Helmholtz の凝縮核臨界半径で次式により計算する。

$$r_* = \frac{2\sigma}{\rho_\ell RT\ln(s)}$$

ここで、$s = p/p_s(T)$ は過飽和蒸気圧率で、$p_s(T)$ は飽和蒸気圧。1 個の液滴の成長率 dr/dt は Hertz-Knudsen モデルにより与える。

5.3 流束差分離法

非平衡凝縮流れの基礎方程式に Roe の近似リーマン解法 [7] に基づく流束差分離法を適用してみる。その際、前述の流束ベクトル分離式 (9) に基づき数値流束 $(F_i)_{\ell+1/2}$ は簡単に次式のように導出できる。

$$(F_i)_{\ell+1/2} = \frac{1}{2}[F_i(Q^L_{\ell+1/2}) + F_i(Q^R_{\ell+1/2}) - \mid (A_i)_{\ell+1/2} \mid (Q^R_{\ell+1/2} - Q^L_{\ell+1/2})] \tag{13}$$

$\mid (A_i)_{\ell+1/2} \mid Q^M (i = 1,2,3, M = L,R)$ は Roe 平均を施して次式で計算される。

$$\mid (A_i)_{\ell+1/2} \mid Q^M = \mid \bar{\lambda}_{i1} \mid Q^M + \frac{\mid \bar{\lambda}_{ia} \mid}{\bar{c}\sqrt{g_{ii}}}\bar{Q}_{ia} + \frac{\mid \bar{\lambda}_{ib} \mid}{\bar{c}^2}\bar{Q}_{ib} \tag{14}$$

ただし、

$$\mid \lambda_{ia} \mid = \frac{1}{2}(\mid \lambda_{i4} \mid - \mid \lambda_{i5} \mid), \quad \mid \lambda_{ib} \mid = \frac{1}{2}(\mid \lambda_{i4} \mid + \mid \lambda_{i5} \mid) - \mid \lambda_{i1} \mid$$

また、

$$\bar{Q}_{ia} = \bar{p}\bar{Q}_{ic} + \Delta\bar{m}_i\bar{Q}_d, \quad \bar{Q}_{ib} = (\Delta\bar{m}_i\ \bar{c}^2/g_{ii})\bar{Q}_{ic} + \bar{p}\bar{Q}_d$$
$$\bar{p} = \bar{Q}_p \cdot Q^M \quad \Delta\bar{m}_i = \bar{Q}_{im} \cdot Q^M$$

ここで、$^-$ の付いた変数は Roe 平均される。

5.4 LU-SGS スキーム

Yoon らにより提案された LU-SGS スキーム [8] にニュートン反復法とクランク・ニコルソン法を組み込んだ、時間最大２次精度 LU-SGS スキームを時間積分に適用してみると、次式が導出される。

$$
\begin{aligned}
D\Delta Q^{*m} &= RHS^m + \theta_L \Delta t G^+(\Delta Q^{*m}) \\
\Delta Q^m &= \Delta Q^{*m} - D^{-1}\theta_L \Delta t G^-(\Delta Q^m) \\
G^+(\Delta Q^{*m}) &= (A_1^+ \Delta Q^{*m})_{i-1,j,k} + (A_2^+ \Delta Q^{*m})_{i,j-1,k} + (A_3^+ \Delta Q^{*m})_{i,j,k-1} \\
G^-(\Delta Q^m) &= (A_1^- \Delta Q^m)_{i+1,j,k} + (A_2^- \Delta Q^m)_{i,j+1,k} + (A_3^- \Delta Q^m)_{i,j,k+1}
\end{aligned}
\tag{15}
$$

ただし、

$$
\begin{aligned}
D &= I + \theta_L \Delta t[r(A_1) + r(A_2) + r(A_3)] \\
r(A) &= \alpha \max[\lambda(A)]
\end{aligned}
$$

α は経験定数で、$\alpha \geq 1.0$。式 (15) の右辺における非対角項の計算にも、前述の流束ベクトル分離式を用いることができる。この場合、$A_i^{\pm}\Delta Q$ の計算において、式 (9) の Q^M を ΔQ に置き換えた式を使用する。

流束ベクトル分離式 (9) は、上述のようにきわめて汎用性の高い式であり、導出のノウハウを一旦身に付けてしまえば、新たな非平衡流れ問題を解くための支配方程式の追加の際にも簡単に式を導出することができる。筆者らは、熱化学非平衡流れ、非平衡凝縮流れに加えて、電磁プラズマ流れの流束ベクトル分離式もすでに導出して実際の流れを計算している。この場合には、マクスウェル方程式とオームの法則から導出される磁場の誘導方程式が新たに支配方程式として追加される。

6 前処理法

ごく最近、非平衡凝縮流れの基礎方程式を非圧縮流れもしくは非常に遅い流れに適用するために、前処理法に基づく流束ベクトル分離式を導出したので紹介する。非圧縮性流れの数値計算には、これまで MAC 法に基づく方法が一般的に使用されて、食い違い格子上で運動方程式から導出された圧力のポアソン方程式が解かれた。一方では、圧縮性流れの計算コードに擬似密度を導入した擬似圧縮性法なども使用されているが、Choi and Merkle[9] は、擬似圧縮性法をさらに改良した前処理法を提案している。Weiss and Smith[10] は、この方法をさらに一般化した。ここでは、Weiss らの方法に忠実に一般曲線座標系の三次元基礎方程式の流束から導出された Roe スキームに基づく流束差分離式を示す。

いま、$Q = J[\rho \;\; \rho u_1 \;\; \rho u_2 \;\; \rho u_3 \;\; E \;\; \rho_v \;\; \rho\beta \;\; \rho n]^T$、ならびに、$\hat{Q} = J[p \;\; u_1 \;\; u_2 \;\; u_3 \;\; T \;\; \rho_v/\rho \;\; \beta \;\; n]^T = (\hat{q}_1, \cdots, \hat{q}_8)$ とおけば、前処理行列 Γ を用いて、前処理を施した基礎方程式は次式のように定義される。

$$
\Gamma \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \mathcal{F}(\hat{Q}) = \Gamma \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{\partial F_j}{\partial \xi_j} + S + H = 0 \tag{16}
$$

ただし、

$$
\Gamma = \begin{bmatrix}
\theta & 0 & 0 & 0 & \rho_T & 0 & 0 & 0 \\
\theta u_1 & \rho & 0 & 0 & \rho_T u_1 & 0 & 0 & 0 \\
\theta u_2 & 0 & \rho & 0 & \rho_T u_2 & 0 & 0 & 0 \\
\theta u_3 & 0 & 0 & \rho & \rho_T u_3 & 0 & 0 & 0 \\
\theta H - 1 & \rho u_1 & \rho u_2 & \rho u_3 & \rho_T H + \rho C_p & 0 & 0 & 0 \\
\theta \rho_v/\rho & 0 & 0 & 0 & \rho_T \rho_v/\rho & \rho & 0 & 0 \\
\theta\beta & 0 & 0 & 0 & \rho_T \beta & 0 & \rho & 0 \\
\theta n & 0 & 0 & 0 & \rho_T n & 0 & 0 & \rho
\end{bmatrix}
$$

ただし、θ は前処理パラメータで、$\theta = (1/U_r^2 - \rho_T/\rho C_p)$ で定義される。Roe の近似リーマン解法に基づく流束差分離式をベクトル形で導出すると、数値流束 $(F_i)_{\ell+1/2}$ は次式で表される。

$$(F_i)_{\ell+1/2} = \frac{1}{2}[F_i(Q^L_{\ell+1/2}) + F_i(Q^R_{\ell+1/2}) - |(\hat{A}_i)_{\ell+1/2}|(\hat{Q}^R_{\ell+1/2} - \hat{Q}^L_{\ell+1/2})] \tag{17}$$

$|(\hat{A}_i)_{\ell+1/2}|\hat{Q}^M (i=1,2,3, M=L,R)$ はサブベクトルの和の形で次式のように導出される。

$$|(\hat{A}_i)_{\ell+1/2}|\hat{Q}^M = |\hat{\lambda}_{i1}|\Gamma\hat{Q}^M + \frac{|\hat{\lambda}_{ia}|}{\hat{c}_i\sqrt{g_{ii}}}\hat{Q}_{ia} + \frac{|\hat{\lambda}_{ib}|}{\hat{c}_i^2}\hat{Q}_{ib} \tag{18}$$

ただし、

$$\begin{aligned}
\hat{\lambda}_{i1} &= U_i \\
\hat{\lambda}_{i4} &= \frac{(1+\alpha)U_i}{2} + \hat{c}_i\sqrt{g_{ii}} \\
\hat{\lambda}_{i5} &= \frac{(1+\alpha)U_i}{2} - \hat{c}_i\sqrt{g_{ii}} \\
|\hat{\lambda}_{ia}| &= \frac{1}{2}(|\hat{\lambda}_{i4}| - |\hat{\lambda}_{i5}|), \quad |\hat{\lambda}_{ib}| = \frac{(\ell_i^- |\hat{\lambda}_{i4}| - \ell_i^+ |\hat{\lambda}_{i5}|)}{\ell_i^- - \ell_i^+} - |\hat{\lambda}_{i1}| \\
\hat{c}_i &= \frac{1}{2}\sqrt{U_i^2(1-\alpha)^2/g_{ii} + 4U_r^2} \\
\ell_i^\pm &= \frac{\rho U_r^2}{U_i(\alpha-1)/2 \pm \hat{c}_i\sqrt{g_{ii}}} \\
\alpha &= U_r^2(\rho_p + \frac{\rho_T}{\rho C_p})
\end{aligned}$$

また、

$$\begin{aligned}
\hat{Q}_{ia} &= \hat{q}_1 Q_{ic} + \rho\hat{U}_i Q_d \\
\hat{Q}_{ib} &= (\rho\hat{U}_i\hat{c}_i^2/g_{ii})Q_{ic} + (\hat{q}_1\hat{c}_i^2/U_r^2)Q_d \\
\hat{U}_i &= (\partial\xi_i/\partial x_j)\hat{q}_{j+1} \ (j=1,2,3)
\end{aligned}$$

Q_{ic}, Q_d は、式 (9) で使用しているものと同様のものが使用できる。

文 献

1. 山本悟・大宮司久明, 4.2 特性の理論と流束分離, 乱流の数値流体力学, 東京大学出版会, 1998.
2. 山本悟, 特集・熱流体の数値計算, 数値解析手法, 日本ガスタービン学会誌, Vol.26, No.102, 1998.
3. 山本悟, CFD 特集-2, タービン翼列内流れの非定常解析, ターボ機械協会誌, Vol.28, No.12, 2000.
4. Yamamoto, S., Hagari, H. and Murayama, M., "Numerical Simulation of Condensation around the 3-D Wing," *Trans. JSASS*, Vol.42, 2000, pp.182-189.
5. Yamamoto, S., "Onset of Condensation in Vortical Flow over Sharp-edged Delta Wing," Proc. of AIAA 15th CFD Conf., AIAA Paper 2001-2651, 2001.
6. Frenkel, J. Kinetic Theory of Liquids, 1955, Dover.
7. Roe, P.L., "Approximate Riemann Solver, Parameter Vector and Difference Schemes," *J. Comp. Phys.*, Vol.43, 1981, pp.357-372.
8. Yoon, S. and Jameson, A., "Lower-upper Symmetric-Gauss-Seidel Method for the Euler and Navier-Stokes Equations," *AIAA J.*, Vol.26, 1988, pp.1025-1026.
9. Choi, Y.-H. and Merkle, C.L., "The Application of Preconditioning in Viscous Flows," *J. Comp. Phys.*, Vol.105, 1993, pp.207-223.
10. Weiss, J.M. and Smith, W.A., "Preconditioning Applied to Variable and Constant Density Flows," *AIAA J.*, Vol.33, 1995, pp.2050-2056.