前処理法に基づく相変化を伴う気・液・固体の数値解法

1.はじめに

気・液・固体を統一的に解こうとする方法はすでにいくつか提案されており、たいへん興味深い計算 結果がいくつも示されている¹。ただし、これらのほとんどは、いわゆる異相界面の挙動(自由界面挙動 など)をうまく捉えることが主目的となっている。しかしながら、実際の物理挙動は界面のみならず、 各相内個々に存在し、たとえば固体内においては、応力・ひずみや熱伝導などが起こる。さらには各相 で相変化を伴う場合もある。流体・構造連成問題はこれまでにそれぞれの挙動を独立にそれぞれの支配 方程式に基づき解かれてきた。一方、相変化問題の解法はそれ自体まだまだ発展途上にある。仮にこれ らすべての挙動、すなわち相変化を伴う気・液・固体問題が、同一の支配方程式で解くことができる統 一的な解法を構築することができれば工学的な実用性が飛躍的に高まる。本資料では、筆者らがこれま でに行ってきた前処理法(Preconditioning method)²⁻⁴に基づく相変化を伴う気・液・固体の数値解法 構築への取り組みについて簡単にまとめた。また本数値解法に、一般状態方程式である Peng-Robinson 状態方程式⁵を組み込むことにより、超臨界流体を解析するための新たな試みについても紹介する。

前処理法に関連して、非圧縮性粘性流れは食い違い格子を用いる MAC 法⁵から派生してきた数値解法で 非圧縮性ナビエ・ストークス方程式ならびにそれらより導出された圧力のポアソン方程式を解いて解析 するのが一般的である。これとは別に,圧縮性ナビエ・ストークス方程式の質量保存則に,擬似密度の 時間微分を付加して非圧縮性粘性流れを解くいわゆる擬似圧縮性法も提案されている。.いずれにも共通 していることは,密度の時間・空間変化が無視できる流れを解析するための手法であるという点である. ところが,たとえば自然対流をともなう熱対流問題などは,極めて遅い流れにもかかわらず,温度変化 に伴う密度変化が生じる.このような流れは,上記いずれの手法においても正確な解析が困難である. Turkel²や Merkle³らのグループは,擬似圧縮性法に擬似音速を導入することで極めて遅い流れが解析で きる前処理法(Preconditioning method)を提案した.これは,極めて遅い流れ(一様流マッハ数0.01以 下)の計算の際に音速を速度と同じオーダーに強制的に変換する方法である.すなわち,音波の伝播を 示す特性速度をすべて対流速度に置き換えていることになる.このとき同時に,基礎方程式は非圧縮性 流れ特有の方程式系に変換される、Weiss らは、この前処理法を非定常流れや自然対流問題に応用してい る⁴。我々は、Weiss らの方法にほぼ忠実に、これまで開発してきた遷音速凝縮流れの数値解法^{7.8}を前 処理型の解法に拡張した。その際、前処理型流束分離式。を新たに導出することで、すでに圧縮性流れの 解法に使用している流束分離スキーム ¹⁰を最小限の改良により前処理型スキームへ拡張することに成功 した。これは、本来そのアルゴリズムの煩雑さから、前処理法の計算コードを新たに開発するのには多 大な労力を要するのに対し、我々はこの前処理型流束分離式を用いることにより、比較的簡単に短時間 で前処理型の新たな計算コードを開発することができたということを意味している。

以下には、まず前処理型流束分離式導出の過程を簡単に説明する。次に前処理型流束分離スキームの 固体熱伝導問題への応用例を示し、最後にPeng-Robinson状態方程式の組み込み方法について紹介する。

主な記号

- q = 未知変数
- *C_p* = 定圧比熱
- *Q* = 未知変数ベクトル
- *E_i* = 流束ベクトル(*i* = 1,2)
- *F_i* = 一般曲線座標系の流束ベクトル(*i* = 1,2)
- $h = 全内部エンタルピー(=(e+p)/\rho)$

$$J = 変換のためのヤコビアン$$

 $S = 拡散ベクトル$
 $U_i = 反変速度成分(i = 1,2)$
 $t = 時間$
 $x_i = デカルト座標系(i = 1,2)$
 $i = 一般曲線座標系(i = 1,2)$
 $Re = レイノルズ数$
 $= 前処理行列$
 $= 密度$
 $\mu = 分子粘性$
 $= 前処理パラメータ$
 $U_i = 物理速度(i = 1,2)$
 $e = 全内部エネルギー$
 $p = 静圧$
 $T = 静温$
 $ij = クロネッカデルタ$
 $ij = 粘性応力テンソル(i, j=1,2)$
 $= 熱伝導係数$

2. 基礎方程式

まず、本研究の基になる二次元圧縮性ナビエ・ストークス方程式は、デカルト座標系で次式のように なる。

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial E_i}{\partial x_i} + \frac{1}{Re}S = 0 \tag{1}$$

ここで、

$$q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ e \end{bmatrix}, \quad E_i = \begin{bmatrix} \rho u_i \\ \rho u_1 u_i + \delta_{i1} p \\ \rho u_2 u_i + \delta_{i2} p \\ (e+p) u_i \end{bmatrix}, \quad S = -\frac{\partial}{\partial x_i} \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{1i} \\ \tau_{2i} \\ \tau_{ki} u_k + \kappa \partial T / \partial x_i \end{bmatrix}$$
(2)

さらに、式(1)を一般曲線座標系に変換すれば、

$$Q_t + L(Q) = \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_i}{\partial \xi_i} + \frac{1}{Re}S = 0$$
(3)

ただし、

$$Q = Jq, F_i = J(\partial \xi_i / \partial x_j) E_j, J = \partial (x_1 x_2) / \partial (\xi_1 \xi_2)$$
(4)

粘性応力テンソル // は層流を仮定して、

$$\tau_{ij} = \mu \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right]$$
(5)

次に、式(3)にWeissらの前処理法⁴を適用すれば、

$$\Gamma \hat{Q}_{t} + L \left(\hat{Q} \right) = \Gamma \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{\partial F_{i}}{\partial \xi_{i}} + \frac{1}{Re} S = 0$$
(6)

ここで、 Г は前処理行列であり次式で定義される。

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \theta & 0 & 0 & \rho_T \\ \theta u_1 & \rho & 0 & \rho_T u_1 \\ \theta u_2 & 0 & \rho & \rho_T u_2 \\ \theta h - 1 & \rho u_1 & \rho u_2 & \rho_T h + \rho C_p \end{bmatrix}$$
(7)

また、 は前処理パラメータであり、

$$\theta = 1/U_r^2 - \rho_T / \rho C_p \tag{8}$$

 ρ_T は、温度による密度の偏導関数で、 $\rho_T = \partial \rho / \partial T$.理想気体の場合には、 $\rho_T = -\rho / T$. U_r は切替パラメータ。仮に、 U_r が音速に等しければ、 u_γ / c^2 になり、式(6)は、式(3)に帰着する。 \hat{Q} は初期変数からなる未知変数ベクトルで、 $\hat{Q} = \begin{bmatrix} p & u_1 & u_2 & T \end{bmatrix}^T$ 。

3. 前処理型流束分離式

Eq.(6)の流束ベクトルを特性の理論に基づき流束分離する。

区分的領域 ℓ ならびに ℓ +1の境界面において、 F_i の数値流束を $(F_i)_{\ell+1/2}$ と定義すれば、 $(F_i)_{\ell+1/2}$ は境界面左の区分的領域 ℓ と、境界面右の区分的領域 ℓ +1から伝播して来る特性に基づく数値流束 F_i^{\pm} の和として次式のように表される。

$$(F_i)_{\ell+1/2} = (F_i^+)_{\ell+1/2} + (F_i^-)_{\ell+1/2} = (\hat{A}_i^+)_{\ell+1/2} \hat{Q}_{\ell+1/2}^L + (\hat{A}_i^-)_{\ell+1/2} \hat{Q}_{\ell+1/2}^R$$
(9)

 \hat{A}_i^{\pm} は前処理された F_i^{\pm} のヤコビ行列。 \hat{Q}^L and \hat{Q}^R は、左右の区分的境域において MUSCL 補間された未知変数ベクトル。我々は、 $\left(\hat{A}_i^{\pm}\right)_{\ell+1/2}\hat{Q}_{\ell+1/2}^M$ を前処理型流束分離式として次式を導出した。

$$\left(\hat{A}_{i}^{\pm}\right)_{\ell+1/2}\hat{Q}^{M} = \left(\Gamma L_{i}^{-1}\Lambda_{i}L_{i}\right)_{\ell+1/2}\hat{Q}^{M} = \hat{\lambda}_{i1}^{\pm}\Gamma\hat{Q}^{M} + \frac{\hat{\lambda}_{ia}^{\pm}}{\hat{c}_{i}\sqrt{g_{ii}}}\hat{Q}_{ia} + \frac{\hat{\lambda}_{ib}^{\pm}}{\hat{c}_{i}^{2}}\hat{Q}_{ib}$$
(10)

上添え字*M*は、*L*もしくは*R*に置き換えられる。 $g_{ii} = \nabla \xi_i \cdot \nabla \xi_i$. L_i ならびに Λ_i は、前処理された左固有ベクトルと固有値(特性速度)からなる行列。 $\hat{\lambda}_{ia}^{\pm}$ と $\hat{\lambda}_{ib}^{\pm}$ は次式で定義される。

$$\hat{\lambda}_{ia}^{\pm} = \left(\hat{\lambda}_{i3}^{\pm} - \hat{\lambda}_{i4}^{\pm}\right)/2 \tag{11}$$

$$\hat{\lambda}_{ib}^{\pm} = \left(\ell_i^- \hat{\lambda}_{i3}^{\pm} - \ell_i^+ \hat{\lambda}_{i4}^{\pm}\right) / \left(\ell_i^- - \ell_i^+\right) - \hat{\lambda}_{i1}^{\pm}$$
(12)

ここで、
$$\hat{\lambda}_{ij}^{\pm}$$
 (*j*=1,3,4) ならびに ℓ_i^{\pm} は、
 $\hat{\lambda}_{ij}^{\pm} = \left(\hat{\lambda}_{ij} \pm \left|\hat{\lambda}_{ij}\right|\right)/2$
(13)

$$\ell_{i}^{\pm} = \rho U_{r}^{2} / (U_{i}(1-\alpha)/2 \pm \hat{c}_{i}\sqrt{g_{ii}})$$
(14)

 $\hat{\lambda}_{ij}(j=1,3,4)$ は前処理された固有値(特性速度)であり、

$$\hat{\lambda}_{i1} = U_i \tag{15}$$

$$\hat{\lambda}_{i3} = (1+\alpha)U_i / 2 + \hat{c}_i \sqrt{g_{ii}}$$
(16)

$$\lambda_{i4} = (1+\alpha)U_i / 2 - \hat{c}_i \sqrt{g_{ii}}$$
(17)

ここで、
$$\hat{c}_i$$
は擬似音速(もしくは数値音速とも呼ばれている)で、

$$\hat{c}_{i} = \sqrt{U_{i}^{2} (1-\alpha)^{2} / g_{ii} + 4U_{r}^{2} / 2}$$
(18)

ただし、 $\alpha = U_r^2 (\rho_p + \rho_T / \rho C_p)$ 。 ρ_p は、圧力による密度の偏導関数で、 $\rho_p = \partial \rho / \partial p$. 理想気体の場合は、 $\rho_p = 1 / (RT)$ 。Rはガス定数。 もし、 U_r が音速に等しければ α は1になり、擬似音速である式(18)も音速に等しくなる。 $\hat{Q}_{ia} \ge \hat{Q}_{ib}$ は導出されたサブベクトルで、

$$\hat{\boldsymbol{Q}}_{ia} = \hat{q}_1^M \boldsymbol{Q}_{ic} + \rho \hat{U}_i \boldsymbol{Q}_d \tag{19}$$

$$\hat{\boldsymbol{Q}}_{ib} = \left(\rho \hat{U}_i \hat{c}_i^2 / \boldsymbol{g}_{ii}\right) \boldsymbol{Q}_{ic} + \left(\hat{q}_1^M \hat{c}_i^2 / \boldsymbol{U}_r^2\right) \boldsymbol{Q}_d$$
(20)

ここで、 \hat{q}_{j}^{M} ならびに \hat{U}_{i} [= $(\partial \xi_{i} / \partial x_{j})\hat{q}_{j+1}^{M}$ (*j*=1,2)]は、MUSCL 補間された、 \hat{Q} の *j*番目の要素、ならび反変速度。 $Q_{ic} \geq Q_{d}$ は、

 $\hat{\boldsymbol{Q}}_{ic} = \begin{bmatrix} 0 & \partial \boldsymbol{\xi}_i / \partial \boldsymbol{x}_1 & \partial \boldsymbol{\xi}_i / \partial \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{U}_i \end{bmatrix}^T$ $\hat{\boldsymbol{Q}}_{ic} = \begin{bmatrix} 0 & \partial \boldsymbol{\xi}_i / \partial \boldsymbol{x}_1 & \partial \boldsymbol{\xi}_i / \partial \boldsymbol{x}_2 & \boldsymbol{U}_i \end{bmatrix}^T$ (21)

$$\boldsymbol{Q}_{d} = \begin{bmatrix} 1 & u_{1} & u_{2} & h \end{bmatrix}^{T}$$
(22)

4. 前処理型流束差分離式

前処理型流束分離式は、流束差分離スキームに適用することができる。たとえば、Roe スキーム¹¹に 基づく数値流束は次式のように表される。

$$(\mathbf{F}_{i})_{\ell+1/2} = \frac{1}{2} \Big[\mathbf{F}_{i} \left(\hat{\mathbf{Q}}_{\ell+1/2}^{L} \right) + \mathbf{F}_{i} \left(\hat{\mathbf{Q}}_{\ell+1/2}^{R} \right) - \left| \left(\hat{\mathbf{A}}_{i} \right)_{\ell+1/2} \right| \left| \left(\hat{\mathbf{Q}}_{\ell+1/2}^{R} - \hat{\mathbf{Q}}_{\ell+1/2}^{L} \right) \right|$$
(23)

左辺第二項は、式(10)から次式により計算することができる。

$$\left|\left(\hat{A}_{i}\right)_{\ell+1/2}\right|\hat{\boldsymbol{\mathcal{Q}}}^{M} = \left|\hat{\lambda}_{i1}\right| \Gamma \hat{\boldsymbol{\mathcal{Q}}}^{M} + \frac{\left|\hat{\lambda}_{ia}\right|}{\hat{c}_{i}\sqrt{g_{ii}}} \hat{\boldsymbol{\mathcal{Q}}}_{ia} + \frac{\left|\hat{\lambda}_{ib}\right|}{\hat{c}_{i}^{2}} \hat{\boldsymbol{\mathcal{Q}}}_{ib}$$

$$\tag{24}$$

5. 前処理型 LU-SGS スキーム

我々が導出した前処理型流束分離式は、陰解法にも有用である。いま、LU-SGS スキームに前処理法を 適用すれば、

$$\Gamma D \Delta \hat{\boldsymbol{Q}}^* = \boldsymbol{R} \boldsymbol{H} \boldsymbol{S}^{\dagger} + \Delta t \boldsymbol{G}^+ \left(\Delta \hat{\boldsymbol{Q}}^* \right)$$

$$\Delta \hat{\boldsymbol{Q}}^{\dagger} = \Delta \hat{\boldsymbol{Q}}^* - \Gamma^{-1} \boldsymbol{D}^{-1} \Delta t \boldsymbol{G}^- \left(\Delta \hat{\boldsymbol{Q}}^{\dagger} \right)$$
(25)
(26)

ここで、*RHS* は陽的オイラー前進法による解を与える。 Δt は時間間隔。D は前処理された特性速度の スペクトル半径で近似された LU-SGS スキームの対角化項。 G^+ and G^- は、前処理された特性速度の 符号に基づき計算される非対角化項からなるベクトルで、

$$G^{+}(\Delta \hat{Q}^{*}) = (\hat{A}_{1}^{+} \Delta \hat{Q}^{*})_{i-1,j} + (\hat{A}_{2}^{+} \Delta \hat{Q}^{*})_{i,j-1}$$

$$G^{-}(\Delta \hat{Q}) = (\hat{A}_{1}^{-} \Delta \hat{Q})_{i+1,j} + (\hat{A}_{2}^{-} \Delta \hat{Q})_{i,j+1}$$
(27)
(28)

添え字i,jは非対角化項が位置する格子点。この非対角化項の計算に、式(10)を用いることができる。すなわち、式(10)における $\hat{m{Q}}^M$ を $\varDelta\hat{m{Q}}$ に置き換えさえすればよい。

6. 固体の熱伝導問題

固体の熱伝導問題は、2階放物型偏微分方程式である熱伝導方程式で支配される。二次元の場合次式のようになる。

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right)$$
(29)

ただし、*T* は温度。 *K* は熱伝導係数。前処理法では極めて遅い流れの場合に支配方程式が非圧縮性ナビ エ・ストークス方程式に変換される。正確には、擬似密度の時間微分項を持った質量保存則、各座標方 向の運動量保存則、そして温度を未知変数に持ったエネルギー方程式である。いま、流れ場が静的、す なわち流れの速度が至るところでゼロであるとすれば、速度が掛けられている項はすべてゼロになる。 結果的に、質量保存則の擬似密度の時間微分項、運動量保存則の圧力項、そしてエネルギー方程式の温 度微分項と温度拡散項が残る。圧力はそもそも極めて遅い流れの場合にはほとんど一定であるため、結 果的に、エネルギー方程式内に存在する式(29)のみが残される。したがって、速度成分を強制的にゼロ におくことにより、前処理法を用いて固体の熱伝導問題も解けるはずである。

簡単な検証例として、矩形の一様な固体領域における熱伝導問題を、本解法ならびに Crank-Nicolson 法とSOR法を用いた放物型解法で計算して解を比較する。境界条件として、一辺を 373[K]で加熱し、 それ以外の辺の温度は 273[K]で固定した。図1(a)(b)にそれぞれ計算された温度分布を示す。結果的に これらの解は完全に一致した。

7. 凝縮を伴う熱対流と固体熱伝導の連成問題

簡単な連成問題として、湿度のある空気中に置かれた円管周りの熱対流凝縮問題を円管の固体部分の 熱伝導を考慮して数値解析する。支配方程式は、式(1)に加えて水蒸気、液滴の保存式⁷が同時に解かれ る。図2にその模式図ならびに境界条件を示す。円管内に253[K]の冷却液体で流れている場合を想定す る。空気は温度293[K]で相対湿度はゼロならびに70[%]。レイリー数はRa=3.1x10⁵。空気中には半径 0.1µmの一様な微小浮遊粒子が1.0×10¹²個/m³すでに存在していると仮定し、不均一核生成に基づく凝縮 に支配される。発生する凝縮は十分微小であるとして、円管表面張力による液膜は発生しない。円管固 体部分の熱伝導係数は、空気の10倍と設定する。

図3(a)(b)に乾燥空気ならびに湿り空気の場合の計算された温度分布を示す。円管内の冷却液体の影響で空気は冷やされて密度変化に伴う重力効果により円管下方に温度プルームを形成している。同時に 円管固体部分にも温度分布が得られているのが示されている。円管周りの温度境界層の厚さは両者でほ とんど違いは見られないが、温度勾配に顕著な違いが現れている。これは、湿り空気の場合に、円管周 りにおいて水蒸気の凝縮が起こり、それに伴い放出された潜熱により円管表面近傍における空気の温度 が相対的に高くなっているのが原因である。図4に湿り空気の場合の計算された液滴の質量分率分布を 示す。凝縮境界層は温度境界層よりも薄く、その値も 10⁻³のオーダーでありごく微量の液滴が発生して いる。それにもかかわらず温度分布に影響を与えている点は興味深い。

8.一般状態方程式の導入と音速の定式化

相変化を伴う気・液・固体問題においては、各相間での物質移動に伴う極端な密度変化が生じるため、 基本的に密度変化が考慮できる支配方程式を解く必要がある。あいにく相変化現象自体の多くが未知の ものであるが、非平衡性を伴わない気液の相変化については一般状態方程式を導入することで解ける場 合がある。ここで言う一般状態方程式とは、いわゆる理想気体の状態方程式である $p = \rho RT$ に代わる状 態方程式を意味する。一般状態方程式は大きく分けて、ビリアル展開型と三次方程式型があるが、簡易 性と実用性から、後者の状態方程式を導入することを考える。これの代表的なものとしては、

・van der Waals 状態方程式(WA)

$$(p+a\rho^2)(1-b\rho) = \rho RT \tag{30}$$

・Redlich-Kwong 状態方程式(RK)

6

$$(p + \frac{a\rho^2}{1 + b\rho})(1 - b\rho) = \rho RT$$
(31)

・Peng-Robinson 状態方程式(PR)

$$(p + \frac{a\rho^2}{1 + 2b\rho - b^2\rho^2})(1 - b\rho) = \rho RT$$
(32)

などが挙げられる。これら一般状態方程式は、分子間力や分子の大きさが考慮されている。パラメータ*a*が掛かった項は分子間力による圧力減少を、またパラメータ*b*は分子の大きさを考慮した排除体積である。これらパラメータは、気・液・固体の実測値などに基づき経験的に決定されているため、式(30)-(32)はこれら三相を区別することなく超臨界領域も含む三相間の状態変化を、その精度はともかく1つの方 程式で記述することができる。ここでは特に臨界点近傍の超臨界水を解析することを目的に、上式の各 パラメータを次のように設定した。

$$a = a(T) = a_c D(\omega, T_r), \quad a_c = 0.4572 R^2 T_c^2 / p_c$$

$$D^{0.5} = 1 + m(1 - T_r^{0.5}), \quad T_r = T/T_c$$

$$m = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2, \quad b = 0.0778 RT_c / p_c$$
(33)

ただし、 T_c は臨界温度、 p_c は臨界圧力で、水の場合には、 $T_c = 647.250$ [K]、 $p_c = 22.09299$ [MPa] であることから、

 $m = 0.8786, a_c = 1847.5, b = 0.001052$

が算出される。いま、

$$\alpha = \begin{cases} a\rho^2 & (WA) \\ a\rho^2/(1+b\rho) & (RK) \\ a\rho^2/(1+2b\rho-b^2\rho^2) & (PR) \end{cases}$$
(34)

のように置けば、

$$(p+\alpha)(1-b\rho) = \rho RT \tag{35}$$

高温・高圧の超臨界領域においては、密度ならびにエンタルピーは温度のみならず圧力に依存している。 すなわち、 $\rho = \rho(p,T)$ 、h = h(p,T)。したがって、それらの全微分は次式のように定義されなければならない。

$$d\rho = \rho_p dp + \rho_T dT, \quad dh = h_p dp + h_T dT$$
(36)

一方、等エントロピ仮定より、
$$Tds = dh - \frac{dp}{\rho} = 0$$
であり、 $dh = \frac{dp}{\rho}$ となる。これを式(36)に代入すれば、

$$\frac{dp}{\rho} = h_p dp + h_T dT \quad \texttt{tl} < \texttt{lt}, \quad dT = \frac{1 - \rho h_p}{\rho h_T} dp \tag{37}$$

さらに代入して結局、

$$d\rho = \rho_p dp + \rho_T \frac{1 - \rho h_p}{\rho h_T} dp = \frac{\rho \rho_p h_T + \rho_T (1 - \rho h_p)}{\rho h_T} dp$$
(38)

これより、

$$\frac{dp}{d\rho} = \frac{\rho h_T}{\rho_T \left(1 - \rho h_p\right) + \rho \rho_p h_T}$$
(39)

となるから、一般状態方程式から導出される音速は式(39)を用いて、 $c = \sqrt{\frac{dp}{d\rho}}$ と計算される。

WA、RK ならびに PR から求められた音速式を用いて超臨界水の音速を計算し実測値と比較した。 図 5 (a)(b)(c)にそれぞれの計算結果を示す。臨界点近傍において超臨界水は極めて特異な物性を示すこ とが知られており音速は極小値になる。計算結果もその極小値を再現しており、WA、RK ならびに PR と状 態方程式を拡張するにしたがってより実測値に近づく傾向が示されている。しかしながら、臨界点より 亜臨界の領域における音速は実測値からかなりずれでおり、これら一般状態方程式の限界を示している。 したがって、この中でも最も実測値に近い解を示した、Peng-Robinsonの一般状態方程式を臨界点近傍か ら超臨界流域における超臨界水の相変化に今後適用することを計画している。

ところで、これまでに構築された前処理法に基づく数値解法へ具体的に上式を適用する際には、前処 理行列ならびに前処理パラメータを次式のように置き換えさえすればよい。

$$\Gamma = \begin{bmatrix} \theta & 0 & 0 & \rho_T \\ \theta u_1 & \rho & 0 & \rho_T u_1 \\ \theta u_2 & 0 & \rho & \rho_T u_2 \\ \theta h - (1 - \rho h_p) & \rho u_1 & \rho u_2 & \rho_T h + \rho h_T \end{bmatrix}$$
(40)
$$\theta = (\frac{1}{U^2} - \frac{\rho_T (1 - \rho h_p)}{\rho h_T}), \quad \alpha_{pre} = U_r^2 (\rho_p + \frac{\rho_T (1 - \rho h_p)}{\rho h_T})$$
(41)

前処理法は圧力と温度が未知変数になっているので、一般状態方程式を組み込む上でもたいへん都合の いい形をしている。ちなみに、

$$\Gamma^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\rho h_{T} - \rho_{T}(2\phi - h)}{\rho h_{T}\theta + \rho_{T}(1 - \rho h_{p})} & \frac{u_{1}\rho_{T}}{\rho h_{T}\theta + \rho_{T}(1 - \rho h_{p})} & \frac{u_{2}\rho_{T}}{\rho h_{T}\theta + \rho_{T}(1 - \rho h_{p})} & \frac{-\rho_{T}}{\rho h_{T}\theta + \rho_{T}(1 - \rho h_{p})} \\ -u_{1}/\rho & 1/\rho & 0 & 0 \\ -u_{2}/\rho & 0 & 1/\rho & 0 \\ \frac{1 - \rho h_{p} + \theta(2\phi - h)}{\rho h_{T}\theta + \rho_{T}(1 - \rho h_{p})} & \frac{-u_{2}\theta}{\rho h_{T}\theta + \rho_{T}(1 - \rho h_{p})} & \frac{\theta}{\rho h_{T}\theta + \rho_{T}(1 - \rho h_{p})} \end{bmatrix}$$

References

- 1. VOF法, CIP法, Level-Set法など.
- 1. E.Turkel, J.Comp.Phys., 72(1987), 277-298.
- 2. Y.-H.Choi. and C.L.Merkle, J.Comp.Phys., 105 (1993), 207-223.
- 3. J.M.Weiss and W.A.Smith, AIAA Journal, **33**(1995), 2050-2057.
- 4. D.-Y.Peng and D.B.Robinson, Ind. Eng. Chem. Fundam, 15(1976), 59-64.
- 5. F.H.Harlow and J.E.Welch, Phys. Fluids, 8(1965), 2182-2189.
- 6. S.J.Chorin, J.Comp.Phys., 2(1967), 12-26.
- S.Yamamoto, H.Hagari and M.Murayama, Trans. of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences, 42 (2000), 182-189.
- 8. S.Yamamoto, AIAA Journal, 41 (2003-9), in press.
- S.Yamamoto and B.-R. Shin, Proc. of 2nd Int. Conf. on Computational Fluid Dynamics-Sydney, Computatinoal Fluid Dynamics 2003, (2002), 112-117, Springer.
- 10. S.Yamamoto and H.Daiguji, Computers & Fluids, 22(1993), 259-270
- 11. P.L.Roe, J.Comp.Phys., 43(1981), 357-372.
- 12. S.Yoon and A.Jameson, AIAA J., 26(1988), 1025-1026.





(a) Present Equations

(b) Equation of Heat Conduction

















Fig.4 Calculated condensate mass fraction contours



(b) Redlich-Kwong equation of state



Fig.5 Calculated speed of sound in supercritical water