

博士学位論文

超音速流れにおけるシート状噴流の
混合と燃焼に関する数値解析

Numerical Simulations on Mixing/Combustion Phenomena of Sheet-like
Jet in Supersonic Crossflow

九州工業大学工学府工学専攻

岩佐 聡洋

Toshihiro Iwasa

2022 年 8 月 8 日

目次

第1章 序論

1.1 工学的背景	1
1.2 本研究に関わる先行研究	3
1.2.1 Jet in Supersonic Crossflow の流れ場	3
1.2.2 Jet in Supersonic Crossflow の混合	4
1.2.3 Jet in Supersonic Crossflow の燃焼	5
1.3 研究目的	7
1.4 本論文の構成	8

第2章 数値解析法

2.1 デカルト座標系における支配方程式.....	9
2.1.1 支配方程式	9
2.1.2 輸送係数の算出	15
2.1.3 化学反応速度論	18
2.1.4 支配方程式の無次元化	21
2.2 一般座標系への座標変換	24
2.3 離散化手法	30
2.3.1 対流項の離散化	30
2.3.2 粘性項の離散化	36
2.3.3 時間積分法	37
2.3.4 生成項の離散化	44
2.4 物理モデル	47
2.4.1 乱流モデル	47
2.4.2 化学反応モデル	50
2.4.3 スパークモデル	54
2.5 解強制置換法	55
2.6 境界条件	56

第3章 検証計算

3.1 非燃焼条件での噴流混合	59
3.1.1 解析条件	59
3.1.2 解析結果	60
3.2 超音速燃焼	62
3.1.1 解析条件	62

3.1.2 解析結果	62
<u>第4章 超音速流れにおけるシート状噴流の混合</u>	
4.1 格子解像度の影響	67
4.2 時間平均場	69
4.3 噴流貫通高さ	74
4.4 噴流混合	75
まとめ	80
<u>第5章 スパークによるシート状噴流の着火</u>	
5.1 解析格子.....	82
5.2 着火条件の検討	84
5.3 火炎挙動	87
まとめ	90
<u>第6章 結論</u>	
6.1 検証計算	91
6.2 超音速流れにおけるシート状噴流の混合	91
6.3 スパークによるシート状噴流の着火	91
<u>参考文献</u>	93
<u>研究業績</u>	96
<u>謝辞</u>	97

第1章 序論

第1章 序論

1.1 工学的背景

現在、人工衛星や探査機、補給機を宇宙へ輸送するため、各国で液体燃料を用いた輸送ロケットが打ち上げられている。液体燃料ロケットの更なる発展には、機体やエンジンの性能だけでなく安全性や信頼性の向上も不可欠である。また今後、活発化が予想される有人宇宙ロケットの開発に対しても高いレベルの安全性や信頼性が要求される。液体燃料ロケットの打ち上げ時には、ハザード源となり得るリスクが多く存在し、これまでも多数の打ち上げ時の事故が起きている。その中でも推進薬タンクは、爆発を引き起こす主要因の一つであり、様々な着火メカニズムを想定した安全性評価の研究が行われている[1]。

ロケットの打ち上げ異常発生時には、一般的に推進薬タンクを指令破壊することで過剰な軌道逸脱や地上落下時の爆発による被害を防ぐ安全化処置を行っている。しかし指令破壊において爆発が発生した場合、破片化した構造物に対して爆発等による添加速度が大きくなれば、地表到達時の分散域は広くなり、その結果、地上被害が発生するリスクが高くなる。そのため、指令破壊時の現象把握や安全性評価を行う必要がある。現在の安全評価法では、試験やワーストケースを想定した物理モデルにより安全性評価を行っており、十分に安全裕度の高い安全性評価法を確立できている。一方で試験費用が高く試験回数が限られること、また試験では詳細な現象把握が困難なことから、数値解析による指令破壊時の現象に関する詳細な把握が求められている[2]。現在の安全性評価における不確かさを低減し、高精度な安全性評価が確立できれば、これまで以上に自由な飛行軌道を選定することができ、ロケットの打ち上げ能力の増加につながる。

指令破壊の後、推進薬タンクにシート状の亀裂をつくり、燃料の水素が噴出される。このシート状水素噴流は Fig. 1.1 に示すように気流と干渉し、混合する。この流れ場は **Jet in supersonic crossflow (JIC)** とみなされる。飛行中のロケット周りには静電気[3]や大きな動圧等の着火源があり、もしこの状況下で着火した場合、爆発に繋がる可能性がある。現在、輸送ロケットの燃料として多く使用されている水素は、広い可燃濃度を持ち、4%から75%までの濃度で着火し得る。このため、液体燃料ロケットの更なる安全性向上にはこれらの流れ場に対して詳細な現象把握が必要となる。本研究では複数の気流条件下で、着火爆発の起きる条件やメカニズムを明確にすることを目指している。

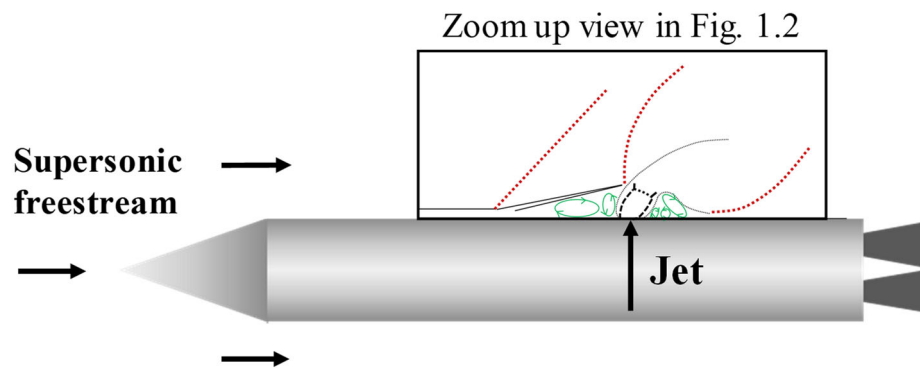
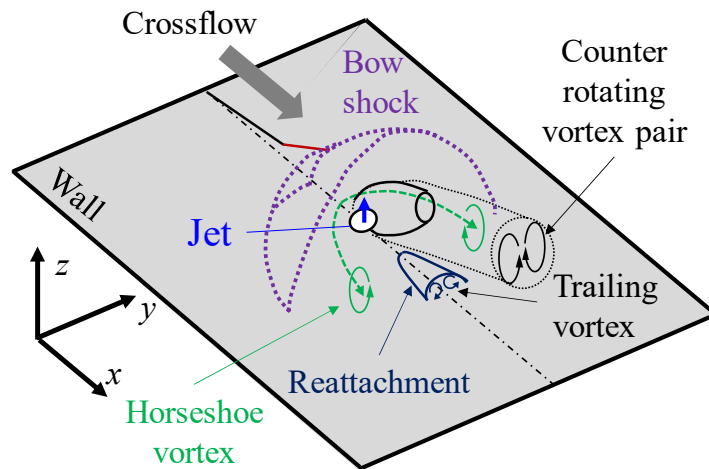


Fig. 1.1. Schematic diagram of flow-field around liquid rocket for flight termination system.

1.2 本研究に関わる先行研究

1.2.1 Jet in supersonic crossflow の流れ場

噴射口形状が円形の場合、JIC はスクラムジェットエンジンや飛翔体の推力制御への応用としてこれまで数値解析、実験の両面から研究がなされており、JIC に関する論文[4–6]に纏められている。Fig. 1.2 に JIC における典型的な流れ場の模式図を示す。それぞれの図は三次元図と対称面上での断面図を示している。噴流は超音速の主流と干渉し、主に大規模構造と呼ばれるせん断渦、噴流の上流側と下流側に形成される剥離渦、噴流断面内に形成される CVP (Counter rotating vortex pair) から構成される渦構造をつくる。また噴流周りには複数の衝撃波が形成される。不足膨張噴流は噴射直後に急激な膨張をすることで樽状衝撃波やマッハディスクを形成する。主流は噴流と衝突し、主流に対する障害物として弓状衝撃波を形成する。壁面近くでは、噴流による逆圧力勾配により剥離領域が存在するため、斜め衝撃波が形成される。Viti ら[7]は、RANS シミュレーションにより時間平均場における 3 次元な衝撃波や渦構造を明らかにしている。



(a) Three-dimensional view

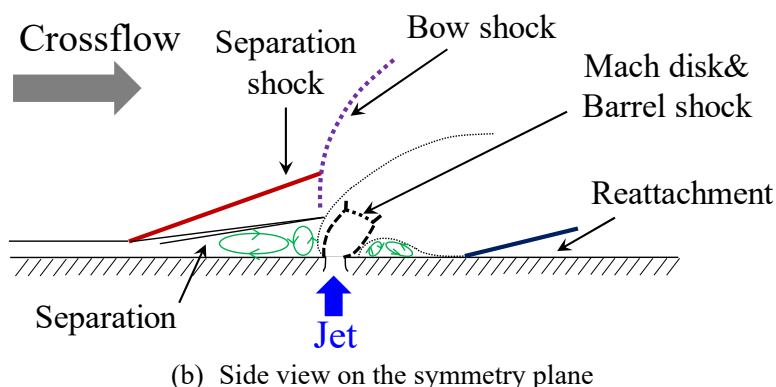


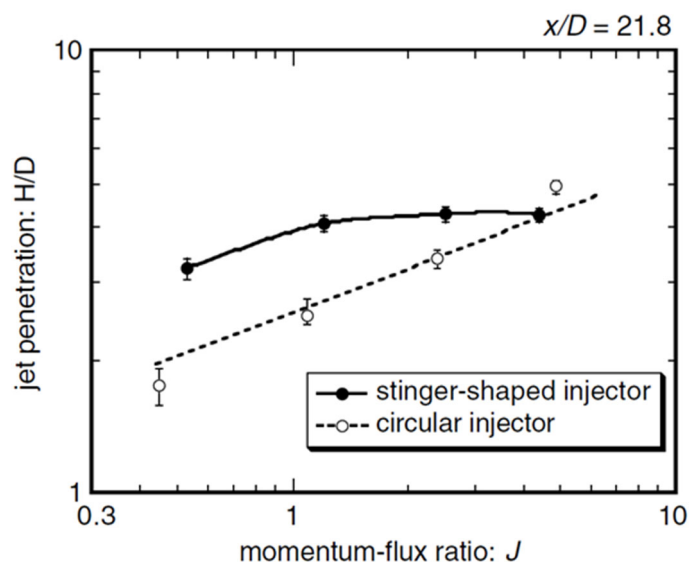
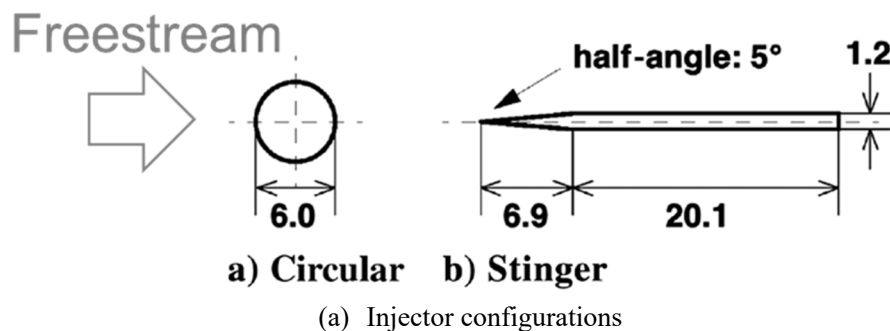
Fig. 1.2. Schematic diagrams of under-expanded round jet in supersonic crossflow.

1.2.2 Jet in supersonic crossflow の混合

JIC の混合場では、噴流は気流との境界で空気を巻き込み混合しながら下流へ流れる[8, 9]. Kawai ら[8]は、高解像度な LES 解析により、樽状衝撃波、弓状衝撃波や風上側せん断渦の非定常挙動や、噴流混合に対する流入乱流境界層の影響といった詳細な流動構造や混合メカニズムを明らかにした。そして、混合に対して重要な役割を果たすものとして、古くから噴流を気流に対して高く貫通させる研究が行われている[10]。これは、超音速気流中での燃焼では滞留時間が短いため噴流を広く拡散させて効率的な混合を行う必要があるため行われてきた。また、噴流の貫通は実験において取得しやすいデータであるため、数値解析の検証としてもよく使われてきた。JIC における噴流貫通はこれまで様々な噴流条件で研究がなされており、最も支配的なパラメータとして運動量流束比 J が知られている[11-14]。運動量流束比 J が高い場合、噴流は主流側に高く貫通し、 J が低い場合、主流に押し曲げられ壁面近くを流れる。これら同一の J の条件において、噴流貫通を強化する方法の一つとして、非円形状に噴射口形状を変える方法がある。非円形噴流での JIC では、噴流の貫通高さや混合特性が変わることが知られている。Gruber ら[15]は運動量流束比を 3 に固定し、円形と楕円の噴射口形状で Rayleigh&Mie 散逸の実験を行い、楕円噴流では円形噴流に比べて側方に広がることや、楕円噴流では円形噴流に比べて噴流の貫通が低下することを明らかにした。Wang ら[16]は $J=1.7$ の条件の下、円形と楕円形状で LES 解析を行い、楕円形状を用いた方が噴流の貫通が低くなることや、風上側せん断渦が放出される周波数やその変化が楕円噴流では小さくなることを示した。そして噴流の貫通に対する噴射口形状の影響は、運動量流束比のレンジにも影響をすることが報告されている[17, 18]。Kouchi ら[18]は、Fig. 1.3 に示すようにスティンガー形状と円形の噴射口を用いて $J = 0.7\sim 2.9$ の運動量流束比の条件

第1章 序論

下で実験を行った結果, $J=0.7\sim 2.5$ の低運動量流束比の条件においてはスティンガー形状を用いた方が噴流の貫通が高くなることを示した.



(b) Effect of injector configuration on the jet penetration

Fig. 1.3. The jet penetration study with different jet port [18].

1.2.3 Jet in supersonic crossflow の燃焼

JIC の燃焼場においては, 流れが高速であり滞留時間が制限されるため燃焼の維持機構無しでは安定した燃焼は持続しない. そのため流動構造によって決定づけられる燃焼の維持機構が先行研究により報告されている. Ben-Yakar ら[19]は, 水素燃料とエチレン燃料を用いて OH-PLIF による実験を行い, 対称面上の分布から大規模構造と呼ばれる噴流の風上側せん断層の渦で燃焼が起きることを示している. また同一運動量流束比においても水素燃料の場合, エチレン燃料に比べて噴流の貫通が浅く, 大規模構造が維持されやすいことを報告している. Gamba ら[20]は, 運動量流束比が 0.3 から 5 の条件で OH-PLIF の実験を行い,

第1章 序論

壁面近傍における燃焼の維持機構を報告している。その実験結果は、Fig.1.4 に示すように運動量流束比によって維持機構が変わる。低運動量流束比の条件では噴流の風下側を通る燃料が下流で燃焼するが、高運動量流束比の条件においては上流側剥離領域を通り側方へ流れる燃料が燃焼することを示している。Kouchi ら[18]は、円形噴流とスティンガー形状噴流で圧力やガスの組成を計測する実験を行っている。スティンガー形状噴流は低当量比条件においては噴流の貫通高さの上昇とともに燃焼性能が上昇することが分かったが、中程度以上の当量比の条件においては噴流前方に衝撃波が形成されるために噴射口形状の効果が大きき影響を与えないことが明らかになっている。JIC の燃焼場に関しては実験だけでなく数値解析による研究も行われている。Liu ら[21, 22]は、詳細化学反応モデルを使用した LES/RANS ハイブリッド解析や LES 解析を行っている。解析結果として風上側せん断の不安定性が大規模構造をつくり、それが燃料混合し、下流へと移流しながら燃焼を促進していることを数値解析的に明らかにしている。また壁面近傍場や風上側せん断層での燃焼が非予混合燃焼に支配されていることを報告している。

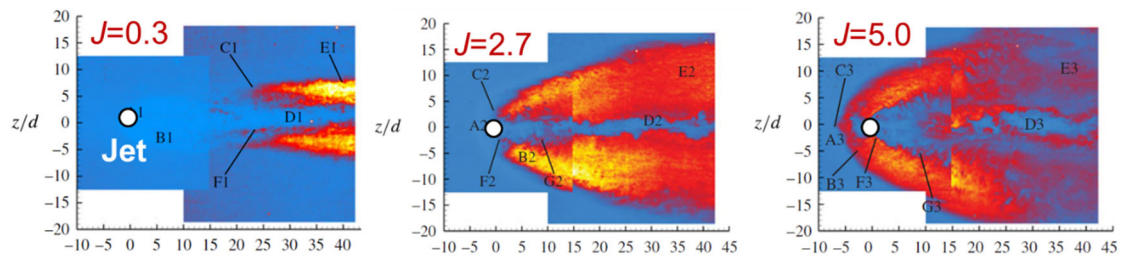


Fig. 1.4. The top view of OH-PLIF images under three momentum flux ratio conditions[20].

第1章 序論

1.3 本研究の目的

これまでの JIC に関する先行研究にから、円形噴流の場合の流れ場、混合特性、高エンタルピー流れにおける燃焼特性については実験や数値解析により理解が進んでいる。しかし、シート状噴流の場合の流動構造、燃焼維持機構についてはまだ明らかになっていない。また本研究では非常に高い運動量流束比の条件を考慮するため、これらに対する高運動量流束比の影響についても不明である。更に高エンタルピー流れによる自着火については解析による詳細な現象把握が行われているが、本研究で対象となる静電気を模擬したスパークによる着火に関しては詳細な現象が分かっていない。

そのため超音速流れと干渉するシート状水素噴流の混合特性とスパーク付加時の火炎挙動を3次元 LES/RANS ハイブリッド解析により明らかにすることを本研究の目的とする。

本研究ではまず数値解析法を構築し、先行研究を模擬することで検証する。その後、シート状噴流の混合特性や着火特性を調べる計算を行う。

第1章 序論

1.4 本論文の構成

本章では、本研究の工学的背景や本研究に関わる先行研究について説明した。

第2章では、本解析で使用するプログラムの元となる支配方程式やその離散化手法、物理モデルについて説明する。

第3章では、本研究で使用する数値解析法の妥当性検証のため、既往研究を模擬した解析を行い、検証する。

第4章では、非燃焼条件下でのシート状噴流について解析を行い、混合特性の把握を行った。

第5章では、燃焼を考慮し、得た流れ場に着火し、火炎挙動を調べた。

第6章では、本論文での主な知見をまとめた。

2.1 デカルト座標系における支配方程式

2.1.1 支配方程式

支配方程式は質量保存則，運動量保存則，エネルギー保存則，各化学種の質量保存則の4つから構成される．デカルト座標系における3次元圧縮性ナビエーストークスは以下のように表される．

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial z} = \frac{\partial \mathbf{E}_v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{G}_v}{\partial z} + \mathbf{S} \quad (2.1)$$

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ e \\ \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_N \end{pmatrix}, \mathbf{E} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ \rho uw \\ (e + p)u \\ \rho_1 u \\ \vdots \\ \rho_N u \end{pmatrix}, \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ \rho vw \\ (e + p)v \\ \rho_1 v \\ \vdots \\ \rho_N v \end{pmatrix}, \mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho w \\ \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 + p \\ (e + p)w \\ \rho_1 w \\ \vdots \\ \rho_N w \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{E}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{xz} \\ \tau_{xx}u + \tau_{xy}v + \tau_{xz}w - q_x \\ -\dot{m}_{x1} \\ \vdots \\ -\dot{m}_{xN} \end{pmatrix}, \mathbf{F}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{yx} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{yx}u + \tau_{yy}v + \tau_{yz}w - q_y \\ -\dot{m}_{y1} \\ \vdots \\ -\dot{m}_{yN} \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

$$\mathbf{G}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{zx} \\ \tau_{zy} \\ \tau_{zz} \\ \tau_{zx}u + \tau_{zy}v + \tau_{zz}w - q_x \\ -\dot{m}_{z1} \\ \vdots \\ -\dot{m}_{zN} \end{pmatrix}, \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega}_1 \\ \vdots \\ \dot{\omega}_N \end{pmatrix}$$

ここで ρ は密度， u, v, w は x, y, z 方向の速度， e は比体積当たりの全エネルギー， i は各化学種のインデックス ($i = 1, 2, \dots, N$)， N は化学種の総数， ρ_i は i 番目の化学種の密度， p は圧力， $\dot{\omega}_i$ は化学反応による i 番目の化学種の生成率である．比体積当たり

第2章 数値解析法

の全エネルギー e は以下のように表される.

$$e = \sum_{i=1}^N \rho_i h_i - p + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2 + w^2) \quad (2.3)$$

ここで h_i は i 番目の化学種の比エンタルピーである.

密度 ρ と i 番目の化学種の密度 ρ_i との関係は以下のようになる.

$$\rho_i = \rho Y_i \quad (2.4)$$

ここで Y_i は i 番目の化学種の質量分率である. せん断応力は

$$\begin{aligned} \tau_{xx} &= \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x}, & \tau_{xy} &= \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \\ \tau_{yy} &= \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y}, & \tau_{yz} &= \tau_{zy} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right), \\ \tau_{zz} &= \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z}, & \tau_{zx} &= \tau_{xz} = \mu \left(\frac{\partial w}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (2.5)$$

である. ここで μ は粘性係数であり, λ は第二粘性係数である. ストークスの仮定より,

$$\lambda + \frac{2}{3} \mu = 0 \quad (2.6)$$

となる. 式 (2.2) における x, y, z 方向の熱流束 q_x, q_y, q_z は

$$\begin{aligned} q_x &= -\kappa \frac{\partial T}{\partial x} - \rho \sum_{i=1}^N D_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x}, \\ q_y &= -\kappa \frac{\partial T}{\partial y} - \rho \sum_{i=1}^N D_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial y}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

第2章 数値解析法

$$q_z = -\kappa \frac{\partial T}{\partial z} - \rho \sum_{i=1}^N D_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial z}$$

と表される. ここで κ は熱伝導率, そして D_i は拡散係数である. 式 (2.2) における i 番目の化学種の質量流束は

$$\begin{aligned} \dot{m}_{xi} &= -\rho D_i \frac{1}{Y_i} \frac{\partial Y_i}{\partial x}, \\ \dot{m}_{yi} &= -\rho D_i \frac{1}{Y_i} \frac{\partial Y_i}{\partial y}, \\ \dot{m}_{zi} &= -\rho D_i \frac{1}{Y_i} \frac{\partial Y_i}{\partial z} \end{aligned} \quad (2.8)$$

と表される. また, これらのシステム方程式を閉じるために以下の完全気体の状態方程式を使用する.

$$p = \rho \bar{R} T = \sum_{i=1}^N \rho_i R_i T = \sum_{i=1}^N \rho_i \frac{R}{W_i} T \quad (2.9)$$

ここで \bar{R} は混合気体の気体定数, R は一般気体定数, T は温度, R_i は i 番目の化学種の気体定数である. i 番目の化学種の気体定数 R_i は

$$R_i = \frac{R}{W_i} \quad (2.10)$$

である. ここで W_i は単位質量当たりの分子量である.

式 (2.3) における i 番目の化学種の比エンタルピーは温度の関数として以下の 5 次の多項式により表される.

$$\frac{h_i}{R_i T} = a_{1i} + a_{2i} T + a_{3i} T^2 + a_{4i} T^3 + a_{5i} T^4 + \frac{a_{6i}}{T} \quad (2.11)$$

同様に i 番目の化学種の定圧比熱 $C_{p,i}$ は温度の関数として以下の 4 次の多項式により表さ

れる.

$$\frac{C_{p,i}}{R_i} = a_{1i} + a_{2i}T + a_{3i}T^2 + a_{4i}T^3 + a_{5i}T^4 \quad (2.12)$$

ここで $a_{1i}, a_{2i}, a_{3i}, a_{4i}, a_{5i}, a_{6i}$ は JANAF tables [23] から計算された係数である.
標準エントロピー s_i^0 は以下のように表される.

$$s_i^0 = h_i^0 + \int_{T_0}^T \frac{C_{p,i}}{T} dT \quad (2.13)$$

そのため式 (2.12) を用いて

$$\frac{s_i^0}{R_i} = a_{1i} \ln T + a_{2i}T + \frac{a_{3i}}{2}T^2 + \frac{a_{4i}}{3}T^3 + \frac{a_{5i}}{4}T^4 + a_{7i} \quad (2.14)$$

となる. 比熱比 γ は

$$\gamma = \frac{\bar{C}_p}{\bar{C}_v} = \frac{1}{1 - \bar{R}/\bar{C}_p} \quad (2.15)$$

である. 混合気の気体定数 \bar{R} , 混合気の定圧比熱 \bar{C}_p , そして混合気の比エンタルピー \bar{h} , は各化学種の値から以下のように計算される.

$$\bar{R} = \sum_{i=1}^N Y_i R_i, \quad \bar{C}_p = \sum_{i=1}^N Y_i C_{p,i}, \quad \bar{h} = \sum_{i=1}^N Y_i h_i \quad (2.16)$$

音速 c は全エンタルピー H を用いて以下の式で計算される.

$$c^2 = p_\rho + \sum_{i=1}^N Y_i p_{\rho_i} + p_e (H - u^2 - v^2) \quad (2.17)$$

このような音速は凍結音速と呼ばれる. ここで

$$p_\rho = \frac{\partial p}{\partial \rho}, \quad p_{\rho_i} = \frac{\partial p}{\partial \rho_i}, \quad p_e = \frac{\partial p}{\partial e}, \quad H = \bar{h} + \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2) \quad (2.18)$$

である。

Table 2.1. Coefficients for the polynomial equation to calculate temperature (1000K~5000K)[23].

	a_{1i}	a_{2i}	a_{3i}	a_{4i}	a_{5i}	a_{6i}
H_2	0.3055812e+1	0.5974040e-3	-0.1674847e-8	-0.212475e-10	0.2519549e-14	-0.8616848e+3
O_2	0.3612214e+1	0.7485317e-3	-0.1982065e-6	0.3374901e-10	-0.239074e-14	-0.1197845e+4
O	0.2534296e+1	-0.1247817e-4	-0.1256272e-7	-0.690298e-11	-0.637971e-15	0.2923111e+5
H	0.2500000e+1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2547439e+5
OH	0.2889781e+1	-0.1000588e-2	0.2204881e-6	0.2019129e-10	-0.394098e-15	0.3885704e+4
HO_2	0.4017306e+1	0.2217588e-2	-0.5771017e-6	0.7137288e-10	-0.364586e-14	-0.1141245e+4
H_2O_2	0.4806790e+1	0.3602835e-2	-0.1096312e-5	0.1443174e-9	-0.651762e-14	-0.1813747e+5
H_2O	0.2634065e+1	0.3112190e-2	-0.9027845e-6	-0.1267305e-9	-0.691647e-14	-0.2987626e+5
N_2	0.2853290e+1	0.1602213e-2	-0.6293689e-6	0.1144102e-9	-0.780575e-14	-0.8900809e+3

Table 2.2. Coefficients for the polynomial equation to calculate temperature (~1000 K)[23].

	a_{1i}	a_{2i}	a_{3i}	a_{4i}	a_{5i}	a_{6i}
H_2	0.2943233e+1	0.3481551e-2	-0.7771382e-5	0.7499750e-8	0.2520338e-11	-0.9769541e+3
O_2	0.3783714e+1	-0.3023363e-2	0.9949275e-5	-0.9818910e-8	-0.330318e-11	-0.1063811e+4
O	0.3030940e+1	-0.2252585e-2	-0.3982454e-5	-0.3260492e-8	0.1015204e-11	0.2913652e+5
H	0.2500000e+1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2547439e+5
OH	0.3873730e+1	-0.1339377e-2	0.1634835e-5	-0.521336e-9	0.4182697e-13	0.3580235e+4
HO_2	0.3596410e+1	0.5250075e-3	0.7511834e-5	-0.956750e-8	0.3659763e-11	-0.8933350e+5
H_2O_2	0.3463709e+1	0.5499139e-2	0.10543617e-5	-0.4756840e-8	0.2190761e-11	-0.1767359e+5
H_2O	0.4167556e+1	-0.1810687e-2	0.59745087e-5	-0.4867087e-8	0.1528414e-11	-0.3028955e+5
N_2	0.3704418e+1	-0.1421875e-2	0.2867038e-5	-0.1202889e-8	-0.139547e-13	-0.1064080e+4

2.1.2 輸送係数の算出

各化学種の分子粘性係数 μ_i^* は、分子運動論的に導出された Chapman-Enskog の近似を使用した。

$$\mu_i^* = 2.6693 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{W_i^* T^*}}{\sigma_i^2 \Omega_v} \left[\frac{\text{kg}}{\text{m} \cdot \text{sec}} \right] \quad (2.19)$$

ここで、 W_i^* 及び σ_i はそれぞれ i 種の分子量及びオングストローム単位で表された衝突直径を、 Ω_v は衝突積分項を表している。

各化学種の層流熱伝達係数 κ_i^* については、まず単原子分子の層流熱伝達係数 $\hat{\kappa}_i^*$ は以下の様になる。

$$\hat{\kappa}_i^* = 8.326 \times 10^{-2} \frac{\sqrt{T^*}}{\sigma_i^2 \Omega_v \sqrt{W_i^*}} \left[\frac{\text{J}}{\text{m} \cdot \text{sec} \cdot \text{K}} \right] \quad (2.20)$$

多原子分子の場合は、内部エネルギーの拡散による輸送を通じて付加的な熱が伝達される。その式を Brokaw の式により考慮すると、結果として単原子分子及び多原子分子の層流熱伝達係数は、以下の様になる。

$$\kappa_i^* = \hat{\kappa}_i^* \left\{ 1 + 0.88 \left(\frac{2 C_{pi}^*}{5 R_i^*} - 1 \right) \right\} \left[\frac{\text{J}}{\text{m} \cdot \text{sec} \cdot \text{K}} \right] \quad (2.21)$$

式(2.19)と式(2.20)に含まれる衝突積分項 Ω_v は次式により近似する。

$$\Omega_v = 1.1147 \left(\frac{T^*}{T_{ei}^*} \right)^{-0.145} + \left(\frac{T^*}{T_{ei}^*} + 0.5 \right)^{-2.0} \quad (2.22)$$

ここで T_{ei}^* は各気体種の有効温度 (Effective temperature) [K]である。各気体種の分子量 W_i^* 、衝突直径 σ_i 、及び有効温度 T_{ei}^* を Table 2.3 に示す。

Table 2.3. Molecular weight W_i^* , collision diameter σ_i and effective temperature T_{ei}^* for various gas species.

化学種	$W_i^* [kg/kmol]$	$\sigma_i [\text{\AA}]$	$T_{ei}^* [K]$
H_2	2.016	2.920	38.0
O_2	31.999	3.458	107.40
O	16.000	2.750	80.0
H	1.008	2.050	145.0
OH	17.007	2.75	80.0
HO_2	33.008	3.458	107.4
H_2O_2	34.016	3.458	107.4
H_2O	18.016	2.605	572.4
N_2	28.013	3.621	97.53

混合気体の平均分子粘性係数 μ_i^* は Wilke の式を用いている.

$$\mu_i^* = \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i^*}{1 + \frac{1}{X_i} \sum_{j \neq i} X_j \psi_{i,j}} \quad (2.23)$$

ここで

$$\psi_{i,j} = \frac{\left[1 + \{(\mu_i^*/\mu_j^*)(\rho_j/\rho_i)\}^{1/2} (W_i/W_j)^{1/4}\right]^2}{2\sqrt{2}\{1 + (W_i/W_j)\}^{1/2}} \quad (2.24)$$

平均熱伝導係数 κ_i^* は Wassiljewa の式を用いて得られる.

$$\kappa_i^* = \sum_{i=1}^N \frac{\kappa_i^*}{1 + \frac{1}{X_i} \sum_{j \neq i} X_j \psi_{i,j}} \quad (2.25)$$

ここで, $\psi_{ij} = 1.065\phi_{ij}$ である. X_i は質量分率を表し,

$$X_i = \frac{Y_i/W_i}{\sum_{j=1}^N (Y_j/W_j^*)} \quad (2.26)$$

である。拡散係数については、2 化学種間の分子拡散係数 D_{ij} は Chapman-Cowling による経験式から求めている。

$$D_{ij}^* = 1.883 \times 10^{-2} \sqrt{\frac{T_{\epsilon ij}^* \left(\frac{W_i^* + W_j^*}{W_i^* W_j^*} \right)}{P^* \sigma_{ij}^2 \Omega_D}} \left[\frac{m^2}{sec} \right] \quad (2.27)$$

ここで

$$\sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j)/2 \quad (2.28)$$

$$T_{\epsilon ij}^* = (T_{\epsilon i}^* T_{\epsilon j}^*)^{1/2} \quad (2.29)$$

である。式(2.27)中の圧力項 P^* の単位は[Pa]である。式(2-47)に含まれている拡散に関する衝突積分項 Ω_D は以下の様に近似する [11]。

$$\Omega_D = \left(\frac{T^*}{T_{\epsilon ij}^*} \right)^{-0.145} + \left(\frac{T^*}{T_{\epsilon ij}^*} + 0.5 \right)^{-2.0} \quad (2.30)$$

各化学種の有効分子拡散係数 D_{ii}^* は、各2 化学種間の分子拡散係数 D_{ij}^* より以下の式を用いて得られる。

$$D_{ii}^* = \frac{1 - Y_i}{\sum_{j \neq i} X_j / D_{ij}^*} \left[\frac{m^2}{sec} \right] \quad (2.31)$$

2.1.3 化学反応速度論

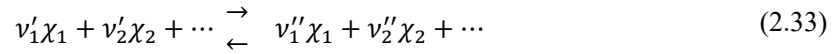
式(2.2)における質量反応速度は、化学反応速度論に基づく修正アレニウスの式によって求められる。化学反応速度論では、分子と分子の衝突によって運動エネルギーと振動エネルギーの相互交換が行われる過程を定式化することで、反応の進行度合いを示すことを目的としている。本解析では水素と酸素の化学反応を対象とした解析を行う。ここで O_2 と H_2 が H_2O になる反応を考える。この反応は反応物と生成物を用いて化学反応式



で表される。しかし、化学反応を詳細に見てみると、OH や H といった分子が中間生成物として生成され、最終的にはボルツマン分布で熱平衡状態となる。反応前と化学平衡となった状態を示した、化学反応式(2.32)のような反応を総括反応と呼び、総括反応を用いた反応モデルを総括反応モデル、または一段階反応モデルと呼ぶ。一方、中間生成物が含まれた化学反応式を素反応と呼び、素反応の重ね合わせから化学反応の過程を示したものを詳細反応モデルと呼ぶ。総括反応モデルを用いた計算は、計算コストを削減して解析することが可能であるが、反応の過程を簡略化しているため、化学反応の微小変化に大きく依存する現象を解析する場合には適さない。詳細反応モデルを用いた数値計算は、化学反応の影響による詳細な現象の評価が可能であるが、膨大な計算量を必要とする。以前は、詳細化学反応モデルが望まれながらもコンピュータの性能の問題から総括反応モデルや、反応を2つの反応段階で示した2段階反応モデルを用いた計算が主流であった。しかし、近年におけるコンピュータの性能向上に伴い、詳細反応モデルを用いた大規模反応計算が行われるようになってきた。本研究では化学反応が活発ではない着火初期から活発になる火炎伝播までの現象を捉えるため、9化学種27素反応のUT-JAXAモデル[24]を用いている。

分子の衝突は2つの分子間で起こる二体反応である場合が多いが、圧力が高いときには分子間の距離が近く、平均自由行程内に複数の分子が存在することが頻繁に生じるため、三体反応が起きる場合がある。本研究においても衝撃波背後などにおいて高圧領域が存在するため、三体反応を考慮する必要がある。

まずは二体反応の化学反応式を導出する。ここで化学量論



を考える. χ_i は i 番目の化学種のシンボル (水素の場合はH₂) v_i は i 番目の化学種 χ_i の化学量論定数である. v'_i は反応前, v''_i は反応後を表している. 詳細反応モデルの場合は, 複数の素反応による化学量論式から構成され, 化学量論式 (2.33) は

$$\sum_{i=1}^N v'_{ik}\chi_{ik} \xrightleftharpoons[k_{b,k}]{k_{f,k}} \sum_{i=1}^N v''_{ik}\chi_{ik} \quad (i = 1, \dots, N, \quad k = 1, \dots, K) \quad (2.34)$$

と示される. k は素反応を表す番号を意味し, $k_{f,k}$, $k_{b,k}$ は k 番目の素反応の前進反応速度定数および後退反応速度定数を表している. k 番目の素反応の前進反応速度定数 $k_{f,k}$ は修正アレニウスの式を用いて

$$k_{f,k} = A_k T^{n_k} \exp\left(-\frac{E_{a,k}}{RT}\right) \quad (2.35)$$

と示される. ここで, A_k , n_k , $E_{a,k}$ は反応モデルによって与えられ, 本解析で用いたモデルの値はTable 2.6 でそれぞれ与えられる. k 番目の素反応の後退反応速度定数 $k_{b,k}$ は, k 番目の素反応の濃度平衡定数 K_{c_k} を用いて

$$k_{b,k} = k_{f,k}/K_{c_k} \quad (2.36)$$

となる. 濃度平衡定数 K_{c_k} は, 圧力平衡定数 K_{p_k} によって

$$K_{c_k} = K_{p_k} \left(\frac{p_{atm}}{RT} \right)^{\sum_{i=1}^N (v''_{ik} - v'_{ik})} \quad (2.37)$$

$$K_{p_k} = \exp \left[\sum_{i=1}^N \left\{ (v''_{ik} - v'_{ik}) \frac{s_i^0}{R_i} \right\} - \sum_{i=1}^N \left\{ (v''_{ik} - v'_{ik}) \frac{h_i}{R_i T} \right\} \right] \quad (2.38)$$

と示される. 式 (2.37) において $p_{atm} = 1$ であり, R はこれに対応する単位を持つ一般気体定数である. 式 (2.38) における比エンタルピー h_i および標準エンタルピー s_i^0 は, 式 (2.11) および式 (2.14) より得ることができる. 以上を用いて, 2体反応の質量反応速度は $\dot{\omega}_i$ は

$$\dot{\omega}_i = W_i \sum_{k=1}^K (v''_{ik} - v'_{ik}) \left\{ k_{f,k} \prod_{i=1}^N (c_{\chi_i,k})^{v'_{ik}} - k_{b,k} \prod_{i=1}^N c_{\chi_i,k}^{v''_{ik}} \right\} \quad (2.39)$$

と示される. 次に三体反応は第三体がエネルギーを奪うことで進行し, 二体反応の反応速度式 (2.39) の右辺に, 第三体のモル濃度 C_M を乗じることで

$$\dot{\omega}_i = W_i C_M \sum_{k=1}^K (v''_{ik} - v'_{ik}) \left\{ k_{f,k} \prod_{i=1}^N (c_{\chi_i,k})^{v'_{ik}} - k_{b,k} \prod_{i=1}^N (c_{\chi_i,k})^{v''_{ik}} \right\} \quad (2.40)$$

と示される. 第三体のモル濃度 C_M は, 素反応 k における i 番目の化学種 χ_i の第三体の衝突係数 α_{ik} を用いて

$$C_M = \sum_{i=1}^N (\alpha_{ik} c_{\chi_i}) \quad (2.41)$$

第2章 数値解析法

と表される．衝突係数 α_{ik} は化学反応モデル UT-JAXA[24]によって与えられる．このことから高圧力条件ではモル濃度が高くなり，三体反応が頻繁に起こる．

2.1.4 支配方式の無次元化

支配方程式中の変数は，一様流等の基準となる物理量及び基準長を用いて無次元化される．“*”のついた変数は有次元量を，無いものは無次元量を表す．無次元パラメータは以下の通りである．

Table 2.4. Non-dimensional parameters.

基準パラメータ	説明
L^*	代表長さ[m]
ρ_{∞}^*	代表密度[kg/m^2]
a_{∞}^*	代表速度[m/s]
μ_{∞}^*	代表とする層流粘性係数[$Pa \cdot s$]
κ_{∞}^*	代表とする層流熱伝導係数[$J/m \cdot s \cdot K$]
D_{∞}^*	代表とする2状態間の層流拡散係数[m^2/s]
R_0^*	普遍気体定数 (= 8.31441[$J/mol \cdot K$])
W_{∞}^*	代表とする平均分子量 [$kg/kmol$]
t_{∞}^*	一様流の特性時間[sec] = L^*/a_{∞}^*
$\rho_{\infty}^* a_{\infty}^{*2}$	代表とする動圧[N/m^2]
Re	Reynolds 数 = $\rho_{\infty}^* a_{\infty}^* L^* / \mu_{\infty}^*$
C_1	パラメータ = $R_0^* T_{\infty}^* / W_{\infty}^* a_{\infty}^{*2} = (R_0^* T_{\infty}^* / W_{\infty}^*) \cdot (1/\gamma_{\infty} R_0^* T_{\infty}^*) = 1/\gamma_{\infty}$ ここで $R_{\infty}^* = R_0^* / W_{\infty}^*$
C_2	パラメータ = $\kappa_{\infty}^* T_{\infty}^* / \mu_{\infty}^* a_{\infty}^{*2}$
C_3	パラメータ = $\rho_{\infty}^* D_{\infty}^* / \mu_{\infty}^*$

第2章 数値解析法

また、無次元変数は以下の通りである。

Table 2.5. Non-dimensional variables.

無次元変数	有次元変数と基準パラメータの関係
ρ	ρ^*/ρ_∞^*
p	$p^*/\rho_\infty^* a_\infty^{*2} = p^*/\gamma_\infty p_\infty^*$
u, v, w	u^*, v^*, w^*
H	h^*/a_∞^{*2}
E	$e^*/\rho_\infty^* V_\infty^{*2} = \sum_i \rho_i h_i - p + \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2 + w^2)$
W	W_i^*/W_∞^*
x, y, z	$x^*, y^*, z^*/L^*$
R_0	$R_0^*/R_0^* = 1$
t	t^*/t_∞^*
R_i	$(R_0^*/W_i^*)/(R_0^*/W_\infty^*) = W_\infty^*/W_i^* = 1/W_i = R_0/W_i$
T	T^*/T_∞^*
C_{p_i}	$C_{p_i}/(R_0^*/W_\infty^*)$
μ	μ^*/μ_∞^*
κ	κ^*/κ_∞^*
D_i	D_i^*/D_∞^*
$\dot{\omega}_i$	$\dot{\omega}_i^*/(\rho_\infty^* a_\infty^*/L^*)$

ここで、

$$a = \frac{a^*}{a_\infty^*} = \frac{\sqrt{\gamma \frac{p^*}{\rho^*}}}{\sqrt{\gamma_\infty \frac{p_\infty^*}{\rho_\infty^*}}} = \sqrt{\frac{p^*}{\gamma_\infty p_\infty^*} \cdot \gamma \cdot \frac{\rho_\infty^*}{\rho^*}} = \sqrt{\gamma \frac{p}{\rho}} \quad (2.42)$$

従って、無次元化を施した支配方程式は、次の通りとなる。

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial z} = \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial \mathbf{E}_v}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{F}_v}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{G}_v}{\partial z} \right) + \mathbf{S} \quad (2.43)$$

2.2 一般座標への座標変換

壁面近傍の速度勾配の大きい流れ場を捉えるために、壁面近傍では密に、壁から離れるに従って幅を広げる様な非等間隔直行直線格子を用いる。支配方程式は物理空間内のデカルト座標系 (x, y, z) から計算空間 (ξ, η, ζ) に変換される。ここで、 $\xi = \xi(x, y, z)$, $\eta = \eta(x, y, z)$, $\zeta = \zeta(x, y, z)$ であるような変換を考える。微分オペレータの関係は、以下の通りとなる。

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_x & \eta_x & \zeta_x \\ \xi_y & \eta_y & \zeta_y \\ \xi_z & \eta_z & \zeta_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta} \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

Jacobian J を以下の様に定義する。

$$J = \begin{vmatrix} \xi_x & \eta_x & \zeta_x \\ \xi_y & \eta_y & \zeta_y \\ \xi_z & \eta_z & \zeta_z \end{vmatrix} = \xi_x \eta_y \zeta_z + \xi_z \eta_x \zeta_y + \xi_y \eta_z \zeta_x - \xi_x \eta_z \zeta_y - \xi_y \eta_x \zeta_z - \xi_z \eta_y \zeta_x \quad (2.45)$$

次に、 (ξ, η, ζ) 空間から (x, y, z) 空間への逆変換を考えると、次のように変形できる。

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \\ \frac{\partial}{\partial \zeta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_\xi & y_\xi & z_\xi \\ x_\eta & y_\eta & z_\eta \\ x_\zeta & y_\zeta & z_\zeta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

ここで、逆変換の Jacobian J^{-1} を次のように定義する。

$$J^{-1} = \begin{vmatrix} x_\xi & y_\xi & z_\xi \\ x_\eta & y_\eta & z_\eta \\ x_\zeta & y_\zeta & z_\zeta \end{vmatrix} = x_\xi y_\eta z_\zeta + x_\eta y_\zeta z_\xi + x_\zeta y_\xi z_\eta - x_\xi y_\zeta z_\eta - x_\eta y_\xi z_\zeta - x_\zeta y_\eta z_\xi \quad (2.47)$$

J と J^{-1} の関係は、式(2.47)において、右辺の行列の逆行列を両辺の左側からかけると、以下の様になる。簡単のため、二次元として表す。

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} = \frac{1}{J^{-1}} \begin{pmatrix} y_\eta & -y_\xi \\ -x_\eta & x_\xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

式(2.44)と式(2.48)を比較すると、次の関係式が得られる。

$$J = \frac{x_\xi y_\eta - x_\eta y_\xi}{(J^{-1})^2} = \frac{1}{J^{-1}} \quad (2.49)$$

また、座標変換に関するマトリックス $(\xi_x, \xi_y, \eta_x, \eta_y)$ と $(x_\xi, x_\eta, y_\xi, y_\eta)$ の関係は以下の様になる。

$$\xi_x = J(y_\eta z_\zeta - z_\eta y_\zeta), \xi_y = J(z_\eta x_\zeta - x_\eta z_\zeta), \xi_z = J(x_\eta y_\zeta - y_\eta x_\zeta) \quad (2.50)$$

$$\eta_x = J(y_\xi z_\zeta - z_\xi y_\zeta), \eta_y = J(z_\xi x_\zeta - z_\zeta x_\xi), \eta_z = J(x_\xi y_\eta - y_\xi x_\eta) \quad (2.51)$$

$$\zeta_x = J(y_\xi z_\eta - z_\xi y_\eta), \zeta_y = J(z_\xi x_\eta - x_\xi z_\eta), \zeta_z = J(x_\xi y_\eta - y_\xi x_\eta) \quad (2.52)$$

$x_\xi, x_\eta, y_\xi, y_\eta$ は (x, y) 座標より中心差分を用いて求め、境界におけるそれらの値は線形内挿を用いて得られる。これらの関係を用いて、支配方程式(2.1)を一般座標系に書き直すと

$$\frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{E}}{\partial x} + \frac{\partial \hat{F}}{\partial y} + \frac{\partial \hat{G}}{\partial z} = \frac{\partial \hat{E}_v}{\partial x} + \frac{\partial \hat{F}_v}{\partial y} + \frac{\partial \hat{G}_v}{\partial z} + \hat{S} \quad (2.53)$$

ここで、各列ベクトルは以下の様にあらわされる。

$$\widehat{\mathbf{Q}} = J^{-1} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ e \\ \rho_i \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

$$\widehat{\mathbf{E}} = J^{-1}(\xi_x \mathbf{E} + \xi_y \mathbf{F} + \xi_z \mathbf{G}) = J^{-1} \begin{pmatrix} \rho U \\ \rho U u + \xi_x p \\ \rho U v + \xi_y p \\ \rho U w + \xi_z p \\ (e + p)U \\ \rho_i U \end{pmatrix} \quad (2.55)$$

$$\widehat{\mathbf{F}} = J^{-1}(\eta_x \mathbf{E} + \eta_y \mathbf{F} + \eta_z \mathbf{G}) = J^{-1} \begin{pmatrix} \rho V \\ \rho V u + \eta_x p \\ \rho V v + \eta_y p \\ \rho V w + \eta_z p \\ (e + p)V \\ \rho_i V \end{pmatrix} \quad (2.56)$$

$$\widehat{\mathbf{G}} = J^{-1}(\zeta_x \mathbf{E} + \zeta_y \mathbf{F} + \zeta_z \mathbf{G}) = J^{-1} \begin{pmatrix} \rho W \\ \rho W u + \zeta_x p \\ \rho W v + \zeta_y p \\ \rho W w + \zeta_z p \\ (e + p)W \\ \rho_i W \end{pmatrix} \quad (2.57)$$

$$\widehat{\mathbf{S}} = J^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega} \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

$$\widehat{\mathbf{E}}_v = J^{-1}(\xi_x \mathbf{E}_v + \xi_y \mathbf{F}_v + \xi_z \mathbf{G}_v) = J^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{\xi\xi} \\ \tau_{\xi\eta} \\ \tau_{\xi\zeta} \\ \tau_{\xi\xi}u + \tau_{\xi\eta}v + \tau_{\xi\zeta}w - q_\xi \\ \dot{m}_{\xi i} \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

$$\widehat{\mathbf{F}}_v = J^{-1}(\eta_x \mathbf{E}_v + \eta_y \mathbf{F}_v + \eta_z \mathbf{G}_v) = J^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{\eta\xi} \\ \tau_{\eta\eta} \\ \tau_{\eta\zeta} \\ \tau_{\eta\xi}u + \tau_{\eta\eta}v + \tau_{\eta\zeta}w - q_\eta \\ \dot{m}_{\eta i} \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

$$\widehat{\mathbf{G}}_v = J^{-1}(\zeta_x \mathbf{E}_v + \zeta_y \mathbf{F}_v + \zeta_z \mathbf{G}_v) = J^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{\zeta\xi} \\ \tau_{\zeta\eta} \\ \tau_{\zeta\zeta} \\ \tau_{\zeta\xi}u + \tau_{\zeta\eta}v + \tau_{\zeta\zeta}w - q_\zeta \\ \dot{m}_{\zeta i} \end{pmatrix} \quad (2.61)$$

ここで,

$$U = \xi_x u + \xi_y v + \xi_z w, V = \eta_x u + \eta_y v + \eta_z w, W = \zeta_x u + \zeta_y v + \zeta_z w, \quad (2.62)$$

$$\tau_{\xi\xi} = \xi_x \tau_{xx} + \xi_y \tau_{xy} + \xi_z \tau_{xz}, \tau_{\xi\eta} = \xi_x \tau_{xy} + \xi_y \tau_{yy} + \xi_z \tau_{zy}, \quad (2.63)$$

$$\tau_{\eta\xi} = \eta_x \tau_{xx} + \eta_y \tau_{xy}, \tau_{\eta\eta} = \eta_x \tau_{xy} + \eta_y \tau_{yy}, \quad (2.64)$$

$$q_\xi = \xi_x q_x + \xi_y q_y + \xi_z q_z, q_\eta = \eta_x q_x + \eta_y q_y + \eta_z q_z, q_\zeta = \zeta_x q_x + \zeta_y q_y + \zeta_z q_z, \quad (2.65)$$

$$\dot{m}_{\xi i} = \xi_x \dot{m}_x + \xi_y \dot{m}_y + \xi_z \dot{m}_z, \dot{m}_{\eta i} = \eta_x \dot{m}_x + \eta_y \dot{m}_y + \eta_z \dot{m}_z, \quad (2.66)$$

$$\dot{m}_{\zeta i} = \zeta_x \dot{m}_x + \zeta_y \dot{m}_y + \zeta_z \dot{m}_z, \quad (2.67)$$

$$\begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{E}}_v \\ \widehat{\mathbf{F}}_v \\ \widehat{\mathbf{G}}_v \end{pmatrix} = J^{-1}(k_x \mathbf{E}_v + k_y \mathbf{F}_v + k_z \mathbf{G}_v) = J^{-1} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \\ \phi_5 \\ \phi_6 \end{pmatrix}$$

$$\phi_1 = 0 \quad (2.68)$$

$$\phi_2 = \mu \left[u_\xi(k_x \xi_x + k_y \xi_y + k_z \xi_z) + u_\eta(k_x \eta_x + k_y \eta_y + k_z \eta_z) \right. \quad (2.69)$$

$$\begin{aligned} & + u_\zeta(k_x \zeta_x + k_y \zeta_y + k_z \zeta_z) + v_\xi \begin{vmatrix} k_y & k_x \\ \xi_y & \xi_x \end{vmatrix} + v_\eta \begin{vmatrix} k_y & k_x \\ \eta_y & \eta_x \end{vmatrix} \\ & + v_\zeta \begin{vmatrix} k_y & k_x \\ \zeta_y & \zeta_x \end{vmatrix} + w_\xi \begin{vmatrix} k_z & k_x \\ \xi_z & \xi_x \end{vmatrix} + w_\eta \begin{vmatrix} k_z & k_x \\ \eta_z & \eta_x \end{vmatrix} + w_\zeta \begin{vmatrix} k_z & k_x \\ \zeta_z & \zeta_x \end{vmatrix} \\ & + \frac{1}{3} k_x \{ (\xi_x u_\xi + \eta_x u_\eta + \zeta_x u_\zeta) + (\xi_y v_\xi + \eta_y v_\eta + \zeta_y v_\zeta) \\ & + (\xi_z w_\xi + \eta_z w_\eta + \zeta_z w_\zeta) \} \end{aligned}$$

$$\phi_3 = \mu \left[v_\xi(k_x \xi_x + k_y \xi_y + k_z \xi_z) + v_\eta(k_x \eta_x + k_y \eta_y + k_z \eta_z) \right. \quad (2.70)$$

$$\begin{aligned} & + v_\zeta(k_x \zeta_x + k_y \zeta_y + k_z \zeta_z) + u_\xi \begin{vmatrix} k_x & k_y \\ \xi_x & \xi_y \end{vmatrix} + u_\eta \begin{vmatrix} k_x & k_y \\ \eta_x & \eta_y \end{vmatrix} \\ & + u_\zeta \begin{vmatrix} k_x & k_y \\ \zeta_x & \zeta_y \end{vmatrix} + w_\xi \begin{vmatrix} k_z & k_y \\ \xi_z & \xi_y \end{vmatrix} + w_\eta \begin{vmatrix} k_z & k_y \\ \eta_z & \eta_y \end{vmatrix} + w_\zeta \begin{vmatrix} k_z & k_y \\ \zeta_z & \zeta_y \end{vmatrix} \\ & + \frac{1}{3} k_y \{ (\xi_x u_\xi + \eta_x u_\eta + \zeta_x u_\zeta) + (\xi_y v_\xi + \eta_y v_\eta + \zeta_y v_\zeta) \\ & + (\xi_z w_\xi + \eta_z w_\eta + \zeta_z w_\zeta) \} \end{aligned}$$

$$\phi_4 = \mu \left[w_\xi(k_x \xi_x + k_y \xi_y + k_z \xi_z) + w_\eta(k_x \eta_x + k_y \eta_y + k_z \eta_z) \right. \quad (2.71)$$

$$\begin{aligned} & + w_\zeta(k_x \zeta_x + k_y \zeta_y + k_z \zeta_z) + u_\xi \begin{vmatrix} k_x & k_z \\ \xi_x & \xi_z \end{vmatrix} + u_\eta \begin{vmatrix} k_x & k_z \\ \eta_x & \eta_z \end{vmatrix} \\ & + u_\zeta \begin{vmatrix} k_x & k_z \\ \zeta_x & \zeta_z \end{vmatrix} + v_\xi \begin{vmatrix} k_y & k_z \\ \xi_y & \xi_z \end{vmatrix} + v_\eta \begin{vmatrix} k_y & k_z \\ \eta_y & \eta_z \end{vmatrix} + v_\zeta \begin{vmatrix} k_y & k_z \\ \zeta_y & \zeta_z \end{vmatrix} \\ & + \frac{1}{3} k_z \{ (\xi_x u_\xi + \eta_x u_\eta + \zeta_x u_\zeta) + (\xi_y v_\xi + \eta_y v_\eta + \zeta_y v_\zeta) \\ & + (\xi_z w_\xi + \eta_z w_\eta + \zeta_z w_\zeta) \} \end{aligned}$$

$$\phi_5 = u\phi_2 + v\phi_3 + w\phi_4 \quad (2.72)$$

$$\begin{aligned} & + \kappa \{ T_\xi (k_x \xi_x + k_y \xi_y + k_z \xi_z) + T_\eta (k_x \eta_x + k_y \eta_y + k_z \eta_z) \\ & + T_\zeta (k_x \zeta_x + k_y \zeta_y + k_z \zeta_z) \} \\ & + \rho \sum_i D_i h_i \{ Y_\xi (k_x \xi_x + k_y \xi_y + k_z \xi_z) + Y_\eta (k_x \eta_x + k_y \eta_y + k_z \eta_z) \\ & + Y_\zeta (k_x \zeta_x + k_y \zeta_y + k_z \zeta_z) \} \\ \phi_6 = & \dot{m}_{\xi i} (k_x \xi_x + k_y \xi_y + k_z \xi_z) + \dot{m}_{\eta i} (k_x \eta_x + k_y \eta_y + k_z \eta_z) \\ & + \dot{m}_{\zeta i} (k_x \zeta_x + k_y \zeta_y + k_z \zeta_z) \end{aligned} \quad (2.73)$$

この変換された支配方程式を差分化して数値解析を行う。

2.3 離散化手法

2.3.1 対流項の離散化

AUSMDVによる流束の評価

空間方向の離散化には AUSM 系のスキームの一種である AUSMDV[25]を用いる。AUSMDV は和田ら によって提案された風上側の一粒子が運ぶ数値流束として定式化されたスキームであり，AUSMV の数値計算における安定性，AUSMD の衝撃波捕捉の良好性を合わせもっている。AUSM 法とは，対流項を圧力項と移流項に分離し，圧力項は FVS 法のままとし，移流項は全て風上法とするものである。AUSMD は，質量流束算出の際，速度分割だけでなく密度，圧力を考慮した分割パラメータを使用している。これは，速度の値のみで分割する場合（AUSM），衝撃波近傍でオーバーシュートする問題を有しているためである。AUSMV は，質量流束に関しては AUSMD と同様であるが，運動量流束に対しては，この節で述べる式(2.88)，式(2.89)，式(2.90)で示す式に変更する。また AUSMD より衝撃波を精度良く捕獲可能であるが，移動する接触不連続面に対しては CFL 条件が厳しく，速度が振動するという問題を有する。また，高次精度化には MUSCL 法(Monotonic Upstream Scheme for Conservation Laws)と呼ばれる内挿法を用いることによって行う。まず， ξ 方向の空間微分項を以下のように離散化する。

$$\partial_{\xi} \hat{H}|_j \simeq \tilde{H}_{j+\frac{1}{2}} - \tilde{H}_{j-\frac{1}{2}} \quad (2.74)$$

例として ξ 方向について取り上げたが， η, ζ 方向についても同様である。ここで $\tilde{H}_{j\pm 1/2}$ は，数値流束(Numerical flux)と呼ばれ，仮想セル領域に流入する流束として表される。ここで $\tilde{H}_{j\pm 1/2}$ を求めるわけであるが，数値流束の評価には AUSMDV を用いる。

AUSM 法の数値流束を以下に示す。

$$\tilde{H}_{j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left[(\rho u_n)_{\frac{1}{2}} (\Phi_L + \Phi_R) - \left| (\rho u_n)_{\frac{1}{2}} \right| (\Phi_R - \Phi_L) \right] + p_{\frac{1}{2}} \quad (2.75)$$

ここで

$$\Phi = \begin{bmatrix} 1 \\ u \\ v \\ w \\ H \\ Y_1 \\ \vdots \\ Y_N \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{p}_{\frac{1}{2}} = \begin{bmatrix} 0 \\ \widetilde{k}_x p_{\frac{1}{2}} \\ \widetilde{k}_y p_{\frac{1}{2}} \\ \widetilde{k}_z p_{\frac{1}{2}} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.76)$$

$$p_{\frac{1}{2}} = p_L^+ + p_R^-,$$

$$u_n = u\widetilde{k}_x + v\widetilde{k}_y + w\widetilde{k}_z, \quad (2.77)$$

$$\widetilde{k}_x = \frac{k_x}{\sqrt{kx^2 + ky^2 + kz^2}},$$

$$\widetilde{k}_y = \frac{k_y}{\sqrt{kx^2 + ky^2 + kz^2}}, \quad (2.78)$$

$$\widetilde{k}_z = \frac{k_z}{\sqrt{kx^2 + ky^2 + kz^2}},$$

$$p^\pm = \begin{cases} \frac{p}{4} \left(\frac{u_n}{c \pm 1} \right)^2 \left(2 \mp \frac{u_n}{c} \right), & \text{if } |u_n| \leq c \\ \frac{p}{2u_n} (u_n \pm |u_n|), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.79)$$

$$u^\pm = \begin{cases} \pm \frac{1}{4c} \left(\frac{u_n}{c \pm 1} \right)^2, & \text{if } |u_n| \leq c \\ \frac{1}{2} (u_n \pm |u_n|), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.80)$$

ここで, k には ξ , η , ζ が相当する.

AUSM 法には, $(\rho u_n)_{1/2}$ の定義に対して様々な提案がある. 接触不連続面に対しては $(\rho u_n)_{1/2} = 0$ とならなければならないが, もし 0 にならないと接触不連続面の解像度が低下する. これを回避するための様々な離散化の方法が提案されている. 今回用いる AUSMDV は AUSMD と AUSMV の組み合わせであるから, まずこれらの手法を示す.

AUSMD は質量流束の算出に, 速度, 密度, 圧力を考慮した分割パラメータを使用している.

$$(\rho u_n)_{\frac{1}{2}} = (u_n)_L^+ \rho_L + (u_n)_R^- \rho_R \quad (2.81)$$

ここで,

$$(u_n)_L^+ = \begin{cases} \alpha_L \left\{ \frac{((u_n)_L + c_m)^2}{4c_m} - \frac{(u_n)_L + |(u_n)_L|}{2} \right\} + \frac{(u_n)_L + |(u_n)_L|}{2}, & \text{if } \left| \frac{(u_n)_L}{c_m} \right| \leq 1, \\ \frac{(u_n)_L + |(u_n)_L|}{2}, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.82)$$

$$(u_n)_R^- = \begin{cases} \alpha_R \left\{ -\frac{((u_n)_R - c_m)^2}{4c_m} - \frac{(u_n)_R - |(u_n)_R|}{2} \right\} + \frac{(u_n)_R - |(u_n)_R|}{2}, & \text{if } \left| \frac{(u_n)_R}{c_m} \right| \leq 1, \\ \frac{(u_n)_R - |(u_n)_R|}{2}, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.83)$$

$$\alpha_L = \frac{2 \left(\frac{p}{\rho}\right)_L}{\left(\frac{p}{\rho}\right)_L + \left(\frac{p}{\rho}\right)_R}, \alpha_R = \frac{2 \left(\frac{p}{\rho}\right)_R}{\left(\frac{p}{\rho}\right)_L + \left(\frac{p}{\rho}\right)_R}, \quad (2.84)$$

$$c_m = \max(c_L, c_R), \quad (2.85)$$

$$p_{\frac{1}{2}} = p_L^+ + p_R^-, \quad (2.86)$$

$$p_{\frac{1}{2}}^\pm = \begin{cases} \frac{p_L}{4} \left(\frac{(u_n)_L}{c_m} \pm 1 \right)^2 \left(2 \mp \frac{(u_n)_L}{c_m} \right), & \text{if } \left| \frac{(u_n)_L}{c_m} \right| \leq 1, \\ \frac{p_L}{2} \frac{\left((u_n)_L \pm |(u_n)_L| \right)}{2(u_n)_L}, & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (2.87)$$

AUSMV は、質量流束に関しては AUSMD と同様であるが、運動量流束に対しては以下の通りになる。

$$(\rho u_n u)_{\frac{1}{2}}^{AUSMV} = (u_n)_L^+ (\rho u)_L + (u_n)_R^- (\rho u)_R \quad (2.88)$$

$$(\rho u_n v)_{\frac{1}{2}}^{AUSMV} = (u_n)_L^+ (\rho v)_L + (u_n)_R^- (\rho v)_R \quad (2.89)$$

$$(\rho u_n w)_{\frac{1}{2}}^{AUSMV} = (u_n)_L^+ (\rho w)_L + (u_n)_R^- (\rho w)_R \quad (2.90)$$

一方、AUSMD の場合、運動量流束 (x 成分) は以下の通りになる。

$$(\rho u_n u)_{\frac{1}{2}}^{AUSMD} = \frac{1}{2} \left[(\rho u_n)_{\frac{1}{2}} (u_L + u_R) - \left| (\rho u_n)_{\frac{1}{2}} \right| (u_R - u_L) \right] \quad (2.91)$$

AUSMDV は、AUSMD と AUSMV を各点において運動量流束を、その圧力勾配に応じて配分したものである。運動量流束 (x 成分) は以下の通りになる。

$$(\rho u_n u)_{\frac{1}{2}}^{AUSMDV} = \left(\frac{1}{2} + s\right) (\rho u_n u)_{\frac{1}{2}}^{AUSMV} + \left(\frac{1}{2} - s\right) (\rho u_n u)_{\frac{1}{2}}^{AUSMD} \quad (2.92)$$

ここで, s は圧力勾配の関数である.

$$s = \frac{1}{2} \min\left(1, \frac{K|p_R - p_L|}{\min(p_L, p_R)}\right), K = 10 \quad (2.93)$$

よく知られているように, エントロピー補正量(entropy fix)を有しない Roe スキームは, 膨張波を生じる. また, Godunov スキームは音速点で段差を生じる. エントロピー補正量を使用しない場合, 上記の AUSMDV でも段差を生じる. セル境界で膨張音速点が存在するケースは以下の2つのタイプがある.

$$\begin{cases} \text{Case A : } (u_n)_L - c_L < 0 \text{ and } (u_n)_R - c_R > 0; \\ \text{Case B : } (u_n)_L + c_L < 0 \text{ and } (u_n)_R + c_R > 0 \end{cases} \quad (2.94)$$

このとき, 単純な膨張波が存在する場合に数値的な散逸を加える. 以下の条件分岐に従って数値散逸を加える.

式(2.94)における Case A と Case B の条件を両方満たす場合, 修正は加えない.

式(2.94)における Case A の条件を満たす場合, 以下の修正を行う.

$$H_{\frac{1}{2}E-Fix} = H_{\frac{1}{2}} - C\Delta(u_n - c)\Delta(\rho\Phi) \quad (2.95)$$

式(2.94)における Case B の条件を満たす場合, 以下の修正を行う.

$$H_{\frac{1}{2}E-Fix} = H_{\frac{1}{2}} - C\Delta(u_n + c)\Delta(\rho\Phi) \quad (2.96)$$

式(2.94)における Case A と Case B の条件を両方満たさない場合, 修正は加えない.

ここで, $\Delta() = ()_R - ()_L$, $C = 0.125$ である. なお, 本研究で使用する AUSMDV には shock fix は導入されていない.

MUSCL 法による高次精度化

Figure 2.1 のような仮想セルを仮定したとき，セル境界での値（下付き L, R であらわされる値）を実現現象に近い値で内挿することで高精度の離散化を行うことができる．この節では，セル境界での物理量を高次精度で評価する MUSCL (Monotonic Upstream Scheme for Conservation Laws) 法について説明する．セル境界での物理量として，MUSCL 法で評価した基本量 Q_L, Q_R が内挿される．基本量 Q は

$$Q = [T \quad u \quad v \quad p \quad Y_1 \quad \dots \quad Y_N]^T \quad (2.97)$$

となり，Shuen の流束評価法[26]を用いて

$$(Q_L)_{j+1/2} = Q_j + \frac{(\varphi_L)_{j+1/2}}{2} \quad (2.98)$$

$$(Q_R)_{j+1/2} = Q_{j+1} - \frac{(\varphi_R)_{j+1/2}}{2} \quad (2.99)$$

となる．ここで

$$(\varphi_L)_{j+1/2} = \max\{0, \min(\Delta_{-j} \operatorname{sgn} \Delta_{+j}, b \Delta_{+j} \operatorname{sgn} \Delta_{-j})\} \operatorname{sgn} \Delta_{-j} \quad (2.100)$$

$$(\varphi_R)_{j+1/2} = \max\{0, \min(\Delta_{+j} \operatorname{sgn} \Delta_{-j}, b \Delta_{-j} \operatorname{sgn} \Delta_{+j})\} \operatorname{sgn} \Delta_{+j} \quad (2.101)$$

$$\Delta_{+j} = Q_{j+1} - Q_j \quad (2.102)$$

$$\Delta_{-j} = Q_j - Q_{j-1} \quad (2.103)$$

である． b は内挿の次数を決めるパラメータであり，

$b = -1$: 2次精度完全風上

$b = 1$: 2 次精度風上バイアス

$b = 1/3$: 3 次精度風上バイアス

となる. 本計算では $1/3$ を用いている.

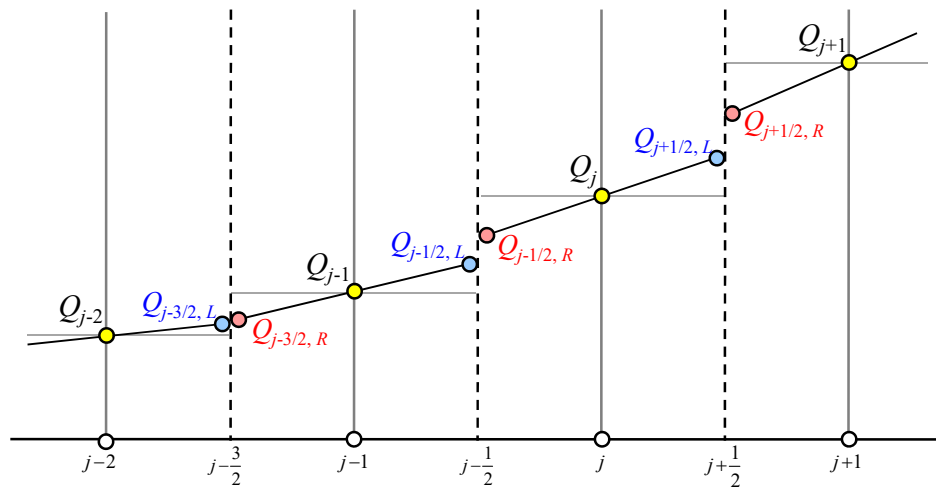


Fig. 2.1. Interpolation of physical quantity at the cell interface.

2.3.2 粘性項の離散化

粘性項の計算は2次精度中心差分を用いて行う。代表として、 ξ 方向に関して表す。Navier-Stokes方程式において、一般的な、 ξ 方向粘性微分項の算出は中心差分を用いると、

$$\frac{\partial \mathbf{E}_{v,j}}{\partial \xi} = \frac{\mathbf{E}_{v,j+1} - \mathbf{E}_{v,j-1}}{2\Delta\xi} \quad (2.104)$$

と定義される。

2.3.3 時間積分法

本研究では、時間積分法には非燃焼の解析には堅牢なスキームである LU-ADI 陰解法 [27]、燃焼の解析には時間精度の高い 3 次精度 TVD-RK 法 [28] を使用した。LUADI 陰解法においては、時間精度を維持するため内部反復法を用いた。これらの手法について説明する。

LU-ADI 法[27]

まず時間的に離散化する。ここでは説明を簡単にするため粘性項と生成項は無視して考える。

$$\hat{Q}^{n+1} - \hat{Q}^n = -\Delta t (\partial_\xi \hat{E} + \partial_\eta \hat{F} + \partial_\zeta \hat{G})^{n+1} \quad (2.105)$$

このうち、例えば \hat{E}^{n+1} について次のような線形化を行う。

$$\hat{E}^{n+1} = \hat{E}^n + \left(\frac{\partial \hat{E}}{\partial \hat{Q}} \right) (\hat{Q}^{n+1} - \hat{Q}^n) + O(\Delta t^2) \quad (2.106)$$

式(2.106)を式(2.105)に代入し、 $\Delta \hat{Q}^n = \hat{Q}^{n+1} - \hat{Q}^n$ と定義し、 $\Delta t = h$ とすると式(2.106)は以下のように表される。

$$[I + h\partial_\xi \hat{A} + h\partial_\eta \hat{B} + h\partial_\zeta \hat{C}] \Delta \hat{Q} = -h(\partial_\xi \hat{E} + \partial_\eta \hat{F} + \partial_\zeta \hat{G}) = RHS^n \quad (2.107)$$

$$\hat{A} = \frac{\partial \hat{E}}{\partial \hat{Q}}, \quad \hat{B} = \frac{\partial \hat{F}}{\partial \hat{Q}}, \quad \hat{C} = \frac{\partial \hat{G}}{\partial \hat{Q}}, \quad (2.108)$$

$\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ はそれぞれ各方向のヤコビアン行列である。ここで左辺に対して近似因数分解を施す。

$$[I + h\partial_\xi \hat{A}][I + h\partial_\eta \hat{B}][I + h\partial_\zeta \hat{C}] \Delta \hat{Q}^n = RHS^n \quad (2.109)$$

第2章 数値解析法

各流束のヤコビアン行列はそれぞれ以下のように対角化される.

$$\hat{A} = R_\xi \hat{\Lambda}_A R_\xi^{-1}, \quad \hat{B} = R_\eta \hat{\Lambda}_B R_\eta^{-1}, \quad \hat{C} = R_\zeta \hat{\Lambda}_C R_\zeta^{-1} \quad (2.110)$$

$$\begin{aligned} \hat{\Lambda}_A &= D \left[U, U, U, U + c(\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)^{\frac{1}{2}}, U - c(\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)^{\frac{1}{2}}, U, \dots, U \right] \\ \hat{\Lambda}_B &= D \left[V, V, V, V + c(\eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2)^{\frac{1}{2}}, V - c(\eta_x^2 + \eta_y^2 + \eta_z^2)^{\frac{1}{2}}, V, \dots, V \right] \\ \hat{\Lambda}_C &= D \left[W, W, W, W + c(\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2)^{\frac{1}{2}}, W - c(\zeta_x^2 + \zeta_y^2 + \zeta_z^2)^{\frac{1}{2}}, W, \dots, W \right] \end{aligned} \quad (2.111)$$

ここで R_ξ は固有ベクトルからなる行列で $\hat{\Lambda}_A$ はヤコビアン行列の固有値からなる対角行列である. このとき, 例えば ξ 方向の因子については

$$[I + h\partial_\xi \hat{A}] = [I + h\partial_\xi (R_\xi \hat{\Lambda}_A R_\xi^{-1})] \doteq R_\xi [I + h\partial_\xi \hat{\Lambda}_A] R_\xi^{-1} \quad (2.112)$$

と近似される. したがって式(2.109)は次のようになる.

$$R_\xi [I + h\partial_\xi \hat{\Lambda}_A] R_\xi^{-1} R_\eta [I + h\partial_\eta \hat{\Lambda}_B] R_\eta^{-1} R_\zeta [I + h\partial_\zeta \hat{\Lambda}_C] R_\zeta^{-1} \Delta \hat{Q}^n = RHS^n \quad (2.113)$$

ここで ξ 方向について, \hat{A} の対角行列 $\hat{\Lambda}_A$ をFVS(Flux Vector Splitting)の考え方を適用し, 次のように分離する.

$$\hat{\Lambda}_A = \hat{\Lambda}_A^+ + \hat{\Lambda}_A^- \quad (2.114)$$

$$\begin{cases} \hat{\Lambda}_A^+ = \frac{(\hat{\Lambda}_A + |\hat{\Lambda}_A|)}{2} \\ \hat{\Lambda}_A^- = \frac{(\hat{\Lambda}_A - |\hat{\Lambda}_A|)}{2} \end{cases} \quad (2.115)$$

$\hat{\Lambda}_A^+$ は固有値の符号が正で情報が左からくる場合を, $\hat{\Lambda}_A^-$ は符号が負で情報が右からくる場合を意味する. したがって $\hat{\Lambda}_A^+$ に対しては後退差分 δ_ξ^b を, $\hat{\Lambda}_A^-$ に対しては前進差分 δ_ξ^f を行う.

$$\begin{aligned}
 I + h\delta_\xi \Lambda_A &\doteq I + h\delta_\xi (\hat{\Lambda}_A^+ + \hat{\Lambda}_A^-) \\
 &= I + h\delta_\xi^b \Lambda_A^+ + h\delta_\xi^f \Lambda_A^- \\
 &= L_A + M_A + N_A
 \end{aligned} \tag{2.116}$$

ここで1次精度の後退・前進差分を用いた場合,

$$\begin{aligned}
 I + h\delta_\xi^b \Lambda_A^+ + h\delta_\xi^f \Lambda_A^- &= I + h(\Lambda_{A_j}^+ - \Lambda_{A_{j-1}}^+) + h(\Lambda_{A_{j+1}}^- - \Lambda_{A_j}^-) \\
 &= (-h\hat{\Lambda}_{A_{j-1}}^+) + \{I + h(\hat{\Lambda}_{A_j}^+ - \hat{\Lambda}_{A_j}^-)\} + (h\hat{\Lambda}_{A_{j+1}}^-)
 \end{aligned} \tag{2.117}$$

となり, L_A, M_A, N_A はそれぞれ次のようになる. 式(2.116)と式(2.117)の対応より

$$\begin{cases} L_A = -h\hat{\Lambda}_{A_{j-1}}^+ \\ M_A = I + (\hat{\Lambda}_{A_j}^+ - \hat{\Lambda}_{A_j}^-) \\ N_A = h\hat{\Lambda}_{A_{j+1}}^- \end{cases} \tag{2.118}$$

式(2.116)の $L_A + M_A + N_A$ に対し, 優対角近似因数分解と呼ばれる操作を施し, 次のように近似する.

$$\begin{aligned}
 L_A + M_A + N_A &\doteq L_A + M_A + N_A + L_A M_A^{-1} N_A + O(h^2) \\
 &= [L_A + M_A][I + M_A^{-1} N_A] + O(h^2) \\
 &= [L_A + M_A] M_A^{-1} [M_A + N_A] + O(h^2)
 \end{aligned} \tag{2.119}$$

よって, ξ 方向については, 最終的に以下のような形となる.

$$\begin{aligned}
 R_\xi [I + h\delta_\xi \Lambda_A] R_\xi^{-1} &\doteq R_\xi [L_A + M_A] M_A^{-1} [M_A + N_A] R_\xi^{-1} \\
 &= R_\xi [I - h\hat{\Lambda}_{A_j}^- + h\delta_\xi^b \hat{\Lambda}_A^+] [I + h\hat{\Lambda}_{A_j}]^{-1} [I + h\hat{\Lambda}_{A_j}^+ + h\delta_\xi^f \hat{\Lambda}_A^-] R_\xi^{-1}
 \end{aligned} \tag{2.120}$$

η, ζ 方向についても同様の操作を行うことで, 式(2.109)は以下のようなになる.

$$\begin{aligned}
 & R_\xi [L_A + M_A] M_A^{-1} [M_A + N_A] R_\xi^{-1} \\
 & R_\eta [L_B + M_B] M_B^{-1} [M_B + N_B] R_\eta^{-1} \\
 & R_\zeta [L_C + M_C] M_C^{-1} [M_C + N_C] R_\zeta^{-1} \Delta \hat{Q} = RHS^n
 \end{aligned} \tag{2.121}$$

これらを解くことによって $\Delta \hat{Q}$ を求めることができる。必要な演算は、3次元の場合は各方向への前進・後退の2つのスイープ（計6回のスカラスイープ）とスカラーの行列演算だけであり、計算時間は非常に少なく済む。実際に解く場合は安定化のために各方向の対角項には人工粘性が付加される。このとき、行列は次のような形となっている。

$$R_k = \begin{pmatrix} \bar{k}_x & \bar{k}_y & \bar{k}_z \\ \bar{k}_x u & \bar{k}_y u - \bar{k}_z \rho & \bar{k}_y u - \bar{k}_z \rho \\ \bar{k}_x v + \bar{k}_z \rho & \bar{k}_y v & \bar{k}_z v - \bar{k}_x \rho \\ \bar{k}_x w - \bar{k}_y \rho & \bar{k}_y w + \bar{k}_x \rho & \bar{k}_z w \\ \left[\bar{k}_x \frac{\phi^2}{\gamma - 1} + \rho(\bar{k}_z v - \bar{k}_y w) \right] & \left[\bar{k}_y \frac{\phi^2}{\gamma - 1} + \rho(\bar{k}_x w - \bar{k}_z u) \right] & \left[\bar{k}_z \frac{\phi^2}{\gamma - 1} + \rho(\bar{k}_y u - \bar{k}_x v) \right] \\ \bar{k}_x Y_1 & \bar{k}_y Y_1 & \bar{k}_z Y_1 \\ \bar{k}_x Y_2 & \bar{k}_y Y_2 & \bar{k}_z Y_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \bar{k}_x Y_N & \bar{k}_y Y_N & \bar{k}_z Y_N \end{pmatrix} \tag{2.122}$$

$$\begin{pmatrix} a & a & 0 & \dots & \dots & 0 \\ a(u + \bar{k}_x c) & a(u - \bar{k}_x c) & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a(v + \bar{k}_y c) & a(v + \bar{k}_y c) & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a(w + \bar{k}_z c) & a(w - \bar{k}_z c) & 0 & \dots & \dots & 0 \\ a \left[\frac{\phi^2 + c^2}{\gamma - 1} + c\bar{\theta} \right] & a \left[\frac{\phi^2 + c^2}{\gamma - 1} - c\bar{\theta} \right] & \frac{-p_{\rho 1}}{\gamma - 1} & \dots & \dots & \frac{-p_{\rho N}}{\gamma - 1} \\ aY_1 & aY_1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ aY_2 & aY_2 & 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ aY_N & aY_N & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$R_k^{-1} = \begin{pmatrix} \bar{k}_x(1 - \phi^2 c^{-2}) - \rho^{-1}(\bar{k}_z v - \bar{k}_y w) & \bar{k}_x(\gamma - 1)uc^{-2} & \bar{k}_z \rho^{-1} + \bar{k}_x(\gamma - 1)vc^{-2} \\ \bar{k}_y(1 - \phi^2 c^{-2}) - \rho^{-1}(\bar{k}_x w - \bar{k}_z u) & -\bar{k}_z \rho^{-1} + \bar{k}_y(\gamma - 1)uc^{-2} & \bar{k}_y(\gamma - 1)vc^{-2} \\ \bar{k}_z(1 - \phi^2 c^{-2}) - \rho^{-1}(\bar{k}_y u - \bar{k}_x v) & \bar{k}_y \rho^{-1} + \bar{k}_z(\gamma - 1)uc^{-2} & -\bar{k}_x \rho^{-1} + \bar{k}_z(\gamma - 1)vc^{-2} \\ \beta(\phi^2 - c\bar{\theta}) & \beta[\bar{k}_x c - (\gamma - 1)u] & \beta[\bar{k}_y c - (\gamma - 1)v] \\ \beta(\phi^2 + c\bar{\theta}) & -\beta[\bar{k}_x c + (\gamma - 1)u] & -\beta[\bar{k}_y c + (\gamma - 1)v] \\ -Y_1 & 0 & 0 \\ -Y_2 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ -Y_N & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

第2章 数値解析法

$$\begin{pmatrix}
 -\bar{k}_y \rho^{-1} + \bar{k}_x (\gamma - 1) w c^{-2} & -\bar{k}_x (\gamma - 1) c^{-2} & -\bar{k}_x p_{\rho_1} c^{-2} & -\bar{k}_x p_{\rho_2} c^{-2} & \cdots & -\bar{k}_x p_{\rho_N} c^{-2} \\
 \bar{k}_x \rho^{-1} + \bar{k}_y (\gamma - 1) w c^{-2} & -\bar{k}_y (\gamma - 1) c^{-2} & -\bar{k}_y p_{\rho_1} c^{-2} & -\bar{k}_y p_{\rho_2} c^{-2} & \cdots & -\bar{k}_y p_{\rho_N} c^{-2} \\
 \bar{k}_z (\gamma - 1) w c^{-2} & -\bar{k}_z (\gamma - 1) c^{-2} & -\bar{k}_z p_{\rho_1} c^{-2} & -\bar{k}_z p_{\rho_2} c^{-2} & \cdots & -\bar{k}_z p_{\rho_N} c^{-2} \\
 \beta [\bar{k}_z c - (\gamma - 1) w] & \beta (\gamma - 1) & \beta p_{\rho_1} & \beta p_{\rho_2} & \cdots & \beta p_{\rho_N} \\
 -\beta [\bar{k}_z c + (\gamma - 1) w] & \beta (\gamma - 1) & \beta p_{\rho_1} & \beta p_{\rho_2} & \cdots & \beta p_{\rho_N} \\
 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & \ddots & \vdots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\
 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1
 \end{pmatrix} \quad (2.123)$$

R_ξ を得るときは $k = \xi$ とおく. η, ζ も同様. このとき

$$\varphi^2 = 0.5(\gamma - 1)(u^2 + v^2 + w^2), \quad \theta = k_x u + k_y v + k_z w, \quad \bar{\theta} = \bar{k}_x u + \bar{k}_y v + \bar{k}_z w \quad (2.124)$$

また, 例えば \bar{k}_x では $\bar{k}_x = k_x / (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)^{1/2}$.

ξ 方向のL, M, Nについては以下のようになる. η, ζ も同様

$$L_{A_{j-1}} = -\frac{h}{2} D \begin{bmatrix}
 U_{j-1} + |U_{j-1}|, U_{j-1} + |U_{j-1}|, U_{j-1} + |U_{j-1}|, \\
 U_{j-1} + c \left(\xi_{x_{j-1}}^2 + \xi_{y_{j-1}}^2 + \xi_{z_{j-1}}^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \left| U_{j-1} + c \left(\xi_{x_{j-1}}^2 + \xi_{y_{j-1}}^2 + \xi_{z_{j-1}}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right|, \\
 U_{j-1} - c \left(\xi_{x_{j-1}}^2 + \xi_{y_{j-1}}^2 + \xi_{z_{j-1}}^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \left| U_{j-1} - c \left(\xi_{x_{j-1}}^2 + \xi_{y_{j-1}}^2 + \xi_{z_{j-1}}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right|, \\
 U_{j-1} + |U_{j-1}|, \dots, U_{j-1} + |U_{j-1}|
 \end{bmatrix}, \quad (2.125)$$

$$M_A = \begin{bmatrix}
 m_1 & m_2 & m_3 & -\mu m_4 & \mu m_4 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
 -m_2 & m_1 & m_4 & \mu m_3 & -\mu m_3 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
 -m_3 & -m_4 & m_1 & -\mu m_2 & \mu m_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
 \mu m_4 & -\mu m_3 & -\mu m_3 & \mu^2(1 + m_1) & \mu^2(1 - m_1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
 -\mu m_4 & \mu m_3 & -\mu m_2 & \mu^2(1 - m_1) & \mu^2(1 + m_1) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1
 \end{bmatrix}, \quad \mu = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (2.126)$$

$$\begin{aligned}
 m_1 &= \bar{k}_x \bar{l}_x + \bar{k}_y \bar{l}_y + \bar{k}_z \bar{l}_z, & m_2 &= \bar{k}_x \bar{l}_y - \bar{k}_y \bar{l}_x \\
 m_3 &= \bar{k}_x \bar{l}_z - \bar{k}_z \bar{l}_x, & m_4 &= \bar{k}_y \bar{l}_z - \bar{k}_z \bar{l}_y
 \end{aligned}$$

$$N_{A_{j-1}} = -\frac{h}{2}D \begin{bmatrix} U_{j-1} + |U_{j-1}|, U_{j-1} + |U_{j-1}|, U_{j-1} + |U_{j-1}|, \\ U_{j-1} + c \left(\xi_{x_{j-1}}^2 + \xi_{y_{j-1}}^2 + \xi_{z_{j-1}}^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \left| U_{j-1} + c \left(\xi_{x_{j-1}}^2 + \xi_{y_{j-1}}^2 + \xi_{z_{j-1}}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right|, \\ U_{j-1} - c \left(\xi_{x_{j-1}}^2 + \xi_{y_{j-1}}^2 + \xi_{z_{j-1}}^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \left| U_{j-1} - c \left(\xi_{x_{j-1}}^2 + \xi_{y_{j-1}}^2 + \xi_{z_{j-1}}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right|, \\ U_{j-1} + |U_{j-1}|, \dots, U_{j-1} + |U_{j-1}| \end{bmatrix} \quad (2.127)$$

内部反復

内部反復法は陰解法において時間精度を維持するため使用される． n ステップと $n+1$ ステップの間で m 回の内部反復をする場合，式(2.105)は以下のようなになる．

$$\hat{Q}^{(m)} - \hat{Q}^n = \Delta \hat{Q}^{(m)} + \hat{Q}^{(m-1)} - \hat{Q}^n = -\Delta t (\partial_\xi \hat{E} + \partial_\eta \hat{F} + \partial_\zeta \hat{G})^{(m)} \quad (2.128)$$

ここで

$$\begin{aligned} \Delta \hat{Q}^{(m)} &= \hat{Q}^{(m)} - \hat{Q}^{(m-1)} \\ m \rightarrow \infty \text{のとき, } \hat{Q}^{(m)} &\rightarrow \hat{Q}^{n+1} \end{aligned} \quad (2.129)$$

である．これを式(2.107)と同様に流束を線形化し， $\Delta t = h$ として整理すると，

$$\begin{aligned} [I + h(\partial_\xi \hat{A} + \partial_\eta \hat{B} + \partial_\zeta \hat{C})^{(m-1)}] \Delta \hat{Q}^{(m)} \\ = -(\hat{Q}^{(m-1)} - \hat{Q}^n) - h(\partial_\xi \hat{E} + \partial_\eta \hat{F} + \partial_\zeta \hat{G})^{(m-1)} \end{aligned} \quad (2.130)$$

になる．仮に $\Delta \hat{Q}^{(m)}$ が収束してゼロになると以下に示すように右辺の式，すなわち Naier-Stokes 方程式が満足されることになる．

$$-(\hat{Q}^{(m-1)} - \hat{Q}^n) - h(\partial_\xi \hat{E} + \partial_\eta \hat{F} + \partial_\zeta \hat{G})^{(m-1)} \approx -(\partial_t \hat{Q} + \partial_\xi \hat{E} + \partial_\eta \hat{F} + \partial_\zeta \hat{G}) \rightarrow 0 \quad (2.131)$$

このように左辺のオペレータがどのように近似されても，内部反復が収束すれば完全に1次精度を達成することができる．本研究においても1次精度を維持するために内部反復を使用した．

TVD-RK 法[28]

Runge-Kutta 法の考え方は、反復を利用することにより安定で高精度のスキームを得ることにある。支配方程式を以下のように表す。

$$\frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial t} = \mathit{RHS}(\mathbf{Q}) \quad (2.132)$$

ここで、 RHS は空間差分量の和を表す。TVD Runge-Kutta 法では、これを以下のように解く。

$$\mathbf{Q}^* = \mathbf{Q}^n + \Delta t \mathit{RHS}(\mathbf{Q}^n) \quad (2.133)$$

$$\mathbf{Q}^{**} = \frac{3}{4} \mathbf{Q}^n + \frac{1}{4} \mathbf{Q}^* + \Delta t \mathit{RHS}(\mathbf{Q}^n) \quad (2.134)$$

$$\mathbf{Q}^{n+1} = \frac{1}{3} \mathbf{Q}^n + \frac{2}{3} \mathbf{Q}^{**} + \Delta t \mathit{RHS}(\mathbf{Q}^n) \quad (2.135)$$

2.3.4 生成項の離散化

本研究で用いたような詳細化学反応モデルは、流体现象に比べて、物理量が微小な領域で急激に変化する。そのため、化学反応を扱う生成項を陽的に解こうとすると、膨大な計算コストを要することになってしまう。そのため、生成項は point implicit 法を使った。

$$\left(I - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \hat{S}}{\partial \hat{Q}} \right)_{i,j}^n \Delta \hat{Q}_{i,j} = \Delta t \hat{S}_{i,j}^n \quad (2.136)$$

$$\hat{Q}_{i,j}^{n+1} = \hat{Q}_{i,j}^n + \hat{Q}_{i,j} \quad (2.137)$$

生成項 \hat{S} の Jacobian は

$$\frac{\partial \hat{S}}{\partial \hat{Q}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & 0 \\ \frac{\partial \omega_1}{\partial \rho} & \frac{\partial \omega_1}{\partial(\rho u)} & \frac{\partial \omega_1}{\partial(\rho v)} & \frac{\partial \omega_1}{\partial e} & \frac{\partial \omega_1}{\partial \rho_1} & \dots & \frac{\partial \omega_1}{\partial \rho_j} & \dots & \frac{\partial \omega_1}{\partial \rho_N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial \omega_{i1}}{\partial \rho} & \frac{\partial \omega_{i1}}{\partial(\rho u)} & \frac{\partial \omega_{i1}}{\partial(\rho v)} & \frac{\partial \omega_{i1}}{\partial e} & \frac{\partial \omega_{i1}}{\partial \rho_1} & \dots & \frac{\partial \omega_{i1}}{\partial \rho_j} & \dots & \frac{\partial \omega_{i1}}{\partial \rho_N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial \omega_{N1}}{\partial \rho} & \frac{\partial \omega_{N1}}{\partial(\rho u)} & \frac{\partial \omega_{N1}}{\partial(\rho v)} & \frac{\partial \omega_{N1}}{\partial e} & \frac{\partial \omega_{N1}}{\partial \rho_1} & \dots & \frac{\partial \omega_{N1}}{\partial \rho_j} & \dots & \frac{\partial \omega_{N1}}{\partial \rho_N} \end{pmatrix} \quad (2.138)$$

となり、 $\dot{\omega}_i$ を評価するため、上式の要素はそれぞれ以下の式で表わされる。ただし、ここでは三体反応に対する式を挙げる。

$$\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial \rho} = \frac{\partial T}{\partial \rho} \cdot W_i \sum_{k=1}^K \left[(v_{ik}'' - v_{ik}') \left\{ \sum_{l=1}^N (\alpha_{lk} c_{\chi l}) \right\} \left\{ \frac{dk_{f,k}}{dT} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k'} - \frac{dk_{b,k}}{dT} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k''} \right\} \right] \quad (2.139)$$

$$\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial (\rho u)} = \frac{\partial T}{\partial (\rho u)} \cdot W_i \sum_{k=1}^K \left[(v_{ik}'' - v_{ik}') \left\{ \sum_{l=1}^N (\alpha_{lk} c_{\chi l}) \right\} \left\{ \frac{dk_{f,k}}{dT} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k'} - \frac{dk_{b,k}}{dT} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k''} \right\} \right] \quad (2.140)$$

$$\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial (\rho v)} = \frac{\partial T}{\partial (\rho v)} \cdot W_i \sum_{k=1}^K \left[(v_{ik}'' - v_{ik}') \left\{ \sum_{l=1}^N (\alpha_{lk} c_{\chi l}) \right\} \left\{ \frac{dk_{f,k}}{dT} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k'} - \frac{dk_{b,k}}{dT} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k''} \right\} \right] \quad (2.141)$$

$$\frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial e} = \frac{\partial T}{\partial e} \cdot W_i \sum_{k=1}^K \left[(v_{ik}'' - v_{ik}') \left\{ \sum_{l=1}^N (\alpha_{lk} c_{\chi l}) \right\} \left\{ \frac{dk_{f,k}}{dT} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k'} - \frac{dk_{b,k}}{dT} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k''} \right\} \right] \quad (2.142)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \dot{\omega}_i}{\partial \rho_j} &= W_i \sum_{k=1}^K \left[(v_{ik}'' - v_{ik}') \left(\frac{\alpha_{jk}}{W_j} \right) \left\{ k_{f,k} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k'} - k_{b,k} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k''} \right\} \right] \\ &+ W_i \sum_{k=1}^K \left[(v_{ik}'' - v_{ik}') \left\{ \sum_{l=1}^N (\alpha_{lk} c_{\chi l}) \right\} \left\{ k_{f,k} \frac{v_{jk}'}{\rho_j} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k'} - k_{b,k} \frac{v_{jk}''}{\rho_j} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k''} \right\} \right] \\ &+ \frac{\partial T}{\partial \rho_j} \cdot W_i \sum_{k=1}^K \left[(v_{ik}'' - v_{ik}') \left\{ \sum_{l=1}^N (\alpha_{lk} c_{\chi l}) \right\} \left\{ k_{f,k} \frac{v_{jk}'}{\rho_j} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k'} - k_{b,k} \frac{v_{jk}''}{\rho_j} \prod_{l=1}^N (c_{\chi l})^{v_k''} \right\} \right] \end{aligned} \quad (2.143)$$

上式(2.139)～(2.143)中に現われる温度 T の偏微分項は、式(2.3)及び(2.9)を用いて次式のようになる。

$$\frac{\partial T}{\partial \rho} = \frac{1}{\sum_{j=1}^N \rho_j R_j} \left[\frac{1}{1 - \frac{\sum_{j=1}^N \rho_j C_{pj}}{\sum_{j=1}^N \rho_j R_j}} \left\{ -\frac{1}{2} (u^2 + v^2) \right\} \right] \quad (2.144)$$

$$\frac{\partial T}{\partial(\rho u)} = \frac{1}{\sum_{j=1}^N \rho_j R_j} \left[\frac{u}{1 - \frac{\sum_{j=1}^N \rho_j C_{pj}}{\sum_{j=1}^N \rho_j R_j}} \right] \quad (2.145)$$

$$\frac{\partial T}{\partial(\rho v)} = \frac{1}{\sum_{j=1}^N \rho_j R_j} \left[\frac{v}{1 - \frac{\sum_{j=1}^N \rho_j C_{pj}}{\sum_{j=1}^N \rho_j R_j}} \right] \quad (2.146)$$

$$\frac{\partial T}{\partial e} = \frac{1}{\sum_{j=1}^N \rho_j R_j} \left[\frac{-1}{1 - \frac{\sum_{j=1}^N \rho_j C_{pj}}{\sum_{j=1}^N \rho_j R_j}} \right] \quad (2.147)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \rho_i} = \frac{1}{\sum_{j=1}^N \rho_j R_j} \left[\frac{1}{1 - \frac{\sum_{j=1}^N \rho_j C_{pj}}{\sum_{j=1}^N \rho_j R_j}} \left\{ h_i - \frac{\sum_{j=1}^N \rho_j C_{pj}}{\sum_{j=1}^N \rho_j R_j} - R_i T \right\} \right] \quad (2.148)$$

更に、反応速度定数の温度微分項は次の形式で求められる。

$$\frac{dk_{f,k}}{dT} = \frac{k_{f,k}}{T} \left(n_k + \frac{E_{ak}}{RT} \right) \quad (2.149)$$

2.4 物理モデル

2.4.1 乱流モデル

本研究の流れ場は乱流場となる。乱流現象は、Navier-Stokes 方程式を厳密に解いて解析することでその現象を捉えることができると考えられている。しかし、解析に必要なとされる最小格子の大きさは乱れの最小の渦を再現できるスケールであり、格子点数はレイノルズ数の 9/4 乗に比例して増大する。本研究で対象とするような、値が 2×10^6 以上となるレイノルズ数について、現在の計算機の能力でそれほどの格子点数を確保することができない。そこで、乱流現象を解析するために乱流モデル（乱流粘性）が導入される。

乱流粘性に関する輸送方程式

本研究で使用する LES/RANS ハイブリッド法[29, 30]においては、壁面近傍では Spalart-Allmaras モデル(SA)[31]による RANS 計算を、壁面から離れた領域では Implicit LES モデル (ILES)[32]の考えを採用した LES 計算を行う。これにより、壁面近傍の微小スケールの乱流は RANS によりモデル化されることで、壁面近傍の格子幅を大きく取ることができ格子点数の制限を緩和することができる。

まず、RANS 領域は Spalart-Allmaras モデルをベースに乱流粘性係数 μ_t を予測する。オリジナルの SA モデルにおいて輸送方程式は以下のように書かれる。

$$\frac{D\tilde{\nu}}{Dt} = C_{b1}\tilde{S}\tilde{\nu} + \frac{1}{\sigma}[\nabla \cdot ((\nu + \tilde{\nu})\nabla\tilde{\nu}) + C_{b2}(\nabla\tilde{\nu})^2] - C_{w1}f_w \left(\frac{\tilde{\nu}}{d_w}\right)^2 \quad (2.150)$$

$$\nu_t = \tilde{\nu}f_{v1}, f_{v1} = \frac{\chi^3}{\chi^3 + C_{v1}^3}, \chi = \frac{\tilde{\nu}}{\nu} \quad (2.151)$$

ここで、 ν_t は乱流動粘性係数、 $\tilde{\nu}$ は乱流動粘性係数に関連した作業変数である。 d_w が計算点から最も近い壁までの距離であり、SA モデルにおける長さスケールに相当する。式(2.147)は、右辺第1項が生成項、第2項が拡散項、第3項が崩壊項を表す。生成項については

$$\tilde{S} = S + \frac{f_{v2}\tilde{\nu}}{\kappa^2 d^2}, f_{v2} = 1 - \frac{\chi}{1 + \chi f_{v1}} \quad (2.152)$$

第2章 数値解析法

S は渦度の絶対値, κ はカルマン定数である. 崩壊項は,

$$f_w = g \left[\frac{1 + C_{w3}^6}{1 + C_{w3}^6} \right]^{\frac{1}{6}}, g = r + C_{w2}(r^6 - r), r = \min\left(\frac{\tilde{v}}{\tilde{S}\kappa^2 d_w^2}, 10\right) \quad (2.153)$$

定数は以下のとおりである.

$$C_{b1} = 0.1355, \sigma = \frac{2}{3}, C_{b2} = 0.622, \kappa = 0.41, \quad (2.154)$$

$$C_{w1} = \frac{C_{b1}}{\kappa^2} + \frac{1 + C_{b2}}{\sigma}, C_{w2} = 0.3, C_{w3} = 2, C_{v1} = 7.1.$$

本ハイブリッドモデルでは, RANS モデルの長さスケールから LES モデルの長さスケールへスイッチさせることで, 流れ場の中でRANSとLESをカップリングさせて計算をする.

ハイブリッドモデルの長さスケール l_{Hyb} を以下のように導入し, この l_{Hyb} を式(2.150)中の d_w と置き換える.

$$l_{Hyb} = l_{RANS} - f_d \max\{0, (l_{RANS} - l_{LES})\} \quad (2.155)$$

ここで, l_{RANS} は RANS モデルの長さスケール, l_{LES} は LES モデルの長さスケールを表す. 関数 f_d は, 次のように定義される.

$$f_d = \tanh [(8r_d)^3] \quad (2.156)$$

$$r_d = \frac{v + v_t}{\kappa^2 d_w^2 [\sum_{ij} (\partial u_i / \partial x_j)^2]^{1/2}} \quad (2.157)$$

r_d は, 乱流境界層の対数領域においては 1 となり, 境界層の縁で消失する. したがって, f_d は壁近傍で 0 となり, 壁から離れるにつれて徐々に 1 へと変化する. これにより, 長さスケールを l_{RANS} から l_{LES} へ滑らかに変化させることができる. l_{RANS} は SA モデルと同様に壁からの距離 d_w とする. l_{LES} は 0 とし, これにより LES 領域では式(2.150)の \tilde{v} は 0 となり乱流粘性が導入されない. すなわち, $l_{Hyb} = l_{RANS} = d_w$ となる壁面近傍では SA モデルにより計算された乱流粘性が導入される. 乱流粘性は壁から離れると連続的に減少して 0 になり, 壁面から十分に離れた大部分の計算領域では乱流粘性の導入されない ILES 計算となる. また, 本

第2章 数値解析法

研究の手法ではLESとRANSの境界は陽的に固定されず局所的な流れ場の状態に応じて変化する。

数値解析手法

乱流モデルの輸送方程式は、流体の支配方程式とは分離して解いている。輸送方程式の対流項は3次精度MUSCLによる高次精度化と、AUSMDVによる数値流束の計算を行っている。生成項、拡散項、崩壊項については陽的に計算している。時間積分にはLU-ADIにより計算している。境界条件として、流入境界と流出境界に $\hat{v} = 3$ となるような作業変数を与えた。壁面境界では $\hat{v} = 0$ とした。

2.4.2 化学反応モデル

本研究で使用する UT-JAXA 詳細化学反応モデル[24]について記述する．これまでに詳細化学反応モデルはいくつか考案されてきたが，従来のモデルにはロケットエンジン内部に代表される高圧条件での予測精度が良くなかった．高圧条件での化学反応を取り扱うには，圧力の影響を考慮しなければならない．圧力依存を含まない反応速度定数は，式 (2.35) で示される．しかし圧力依存を含んだ場合，式(2.158)に示すような三体衝突を含む単原子分子の再結合(分解)反応に影響が及び，再結合の方向で式(2.159)が成り立つ．



$$\frac{d[AB]}{dt} = k_{ref}(T, M)[A][B] \quad (2.159)$$

ここで， $[X_i]$ は化学種 X_i の濃度，もしくはモル分率 y_i に対する $y_i P / RT$ である． $k_{ref}(T, M)$ は Lindemann formula により，次式によって表される．

$$k_{ref}(T, M) = k_{\infty} \left(\frac{k_0[M]}{k_0[M] + k_0} \right) \quad (2.160)$$

$[M]$ は混合気全体の濃度（もしくは，三体物質の濃度）である．三体衝突の効果 α_i を加えると

$$[M] = \sum_{i=1}^N \alpha_i [X_i] \quad (2.161)$$

式(2.160)は factor F によって修正した形で表され，

$$k = k_{\infty} \left[\frac{P_r}{(1 + P_r)} \right] F, P_r = \frac{k_0}{k_{\infty}} [M] = \frac{k_0}{k_{\infty}} \sum_{i=1}^N \alpha_i [X_i] \quad (2.162)$$

第2章 数値解析法

式(2.162)の F は Troe 法により, 次式のようになる.

$$\log F = \left[1 + \left\{ \frac{\log P_r + c}{n - d(\log P_r + c)} \right\}^2 \right]^{-1} \log F_c \quad (2.163)$$

上式の定数は,

$$\begin{aligned} c &= -0.4 - 0.67 \log F_c \\ n &= 0.75 - 1.27 \log F_c \\ d &= 0.14 \end{aligned} \quad (2.164)$$

Troe の変数 F_c は

$$F_c = (1 - a) \exp\left(-\frac{T}{T^{***}}\right) + a \exp\left(-\frac{T}{T^*}\right) + \exp\left(-\frac{T^{**}}{T}\right) \quad (2.165)$$

高圧・低圧領域において, 定数 a, T^{***}, T^{**}, T^* は正確な値を取らなければならない. この技術には Troe の方法を選択する. Table 2.6 の反応式(11)におけるそれぞれの係数は,

$$a = 0.7346, T^{***} = 94, T^{**} = 1756, T^* = 5182 \quad (2.166)$$

となる.

Table. 2.6. Hydrogen-Air detailed reaction model by UT-JAXA[24].

	Reaction	A_k	n_k	E_{ak}	comments
(1)	$\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{H}$	2.160×10^8	1.510	3430	
(2)	$\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$	1.910×10^{14}	0.000	16440	
(3)	$\text{O} + \text{H}_2 = \text{OH} + \text{H}$	5.080×10^4	2.670	6292	
(4)	$\text{OH} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$	2.890×10^{13}	0.000	-500	
(5)	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2 + \text{O}_2$	3.660×10^6	2.087	-1450	
(6)	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{OH} + \text{OH}$	7.080×10^{13}	0.000	300	
(7)	$\text{H} + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	1.340×10^{13}	0.000	1340	
(8)	$\text{O} + \text{HO}_2 = \text{O}_2 + \text{OH}$	3.250×10^{13}	0.000	0	
(9)	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2$	4.200×10^{14}	0.000	12000	
(10)	$\text{HO}_2 + \text{HO}_2 + \text{M} = \text{H}_2\text{O}_2 + \text{O}_2 + \text{M}$	1.320×10^{11}	0.000	-1192	
		6.890×10^{14}	0.000	-1947	
(11)	$\text{OH} + \text{OH} = \text{O} + \text{H}_2\text{O}$	4.330×10^3	2.700	-2485	
(12)	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} = \text{H}_2\text{O} + \text{OH}$	8.190×10^8	1.550	3455	
(13)	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{H} = \text{HO}_2 + \text{H}_2$	8.067×10^{19}	-1.574	16838	k_a, a
		1.042×10^{13}	0.000	6569	k_b, a
(14)	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{HO}_2$	1.700×10^{18}	0.000	29407	k_c, b
		2.000×10^{12}	0.000	427	k_d, b
(15)	$\text{H}_2\text{O}_2 + \text{O} = \text{HO}_2 + \text{OH}$	6.620×10^{11}	0.000	3974	
(16)	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$	1.933×10^{12}	0.560	0	c, d
		4.570×10^{18}	-1.120	0	c, d
(17)	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2 = \text{HO}_2 + \text{H}_2$	1.933×10^{12}	0.560	0	e
		3.520×10^{18}	-0.896	0	e
(18)	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{N}_2 = \text{HO}_2 + \text{N}_2$	1.933×10^{12}	0.560	0	f
		1.750×10^{19}	-1.232	0	f
(19)	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{O}_2$	1.933×10^{12}	0.560	0	g
		1.410×10^{18}	-0.849	0	g
(20)	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$	1.933×10^{12}	0.560	0	h
		3.630×10^{19}	-1.000	0	h
(21)	$\text{H} + \text{O}_2 + \text{He} = \text{HO}_2 + \text{He}$	1.933×10^{12}	0.560	0359.6	i

		2.830×10^{19}	-1.320	0	i
(22)	$H + H + M = H_2 + M$	7.000×10^{17}	-1.000	0	j
(23)	$H + H + H_2 = H_2 + H_2$	1.000×10^{17}	-0.600	0	
(24)	$H + H + N_2 = H_2 + N_2$	5.400×10^{18}	-1.300	0	
(25)	$H + H + H = H_2 + H$	3.200×10^{15}	0.000	0	
(26)	$H + OH + M = H_2O + M$	3.500×10^{22}	-2.000	0	k
(27)	$H + O + M = OH + M$	6.750×10^{18}	-1.000	0	l
(28)	$O + O + M = O_2 + M$	6.160×10^{15}	-0.500	0	m
(29)	$O + O + Ar = O_2 + Ar$	1.890×10^{13}	0.000	-1790	
(30)	$O + O + He = O_2 + He$	1.890×10^{13}	0.000	-1790	
(31)	$O + OH + M = HO_2 + M$	1.350×10^{15}	-0.216	0	
(32)	$H_2O_2 + M = OH + OH + M$	3.000×10^{14}	0.000	48482	n, o
		2.290×10^{16}	0.000	43634	n, o

unit are in col, mol, cm^3 , and s

a: Rate coefficient is non Arrhenius; $k_{13} = k_a + k_b$

b: Rate coefficient is non Arrhenius; $k_{14} = k_c + k_d$

c: M dose not include O_2 , H_2O , H_2 , He or N_2 ; all collision efficiencies = 1.0.

d: Troe parameters for pressure dependent reactions; $a = 0.62$, $T^* = 1.0 \times 10^{10}$, $T^{***} = 1.0 \times 10^{-10}$

e: Troe parameters for pressure dependent reactions; $a = 0.5$, $T^* = 1.0 \times 10^{10}$, $T^{***} = 1.0 \times 10^{-10}$

f: Troe parameters for pressure dependent reactions; $a = 0.67$, $T^* = 1.0 \times 10^{10}$, $T^{***} = 1.0 \times 10^{-10}$

g: Troe parameters for pressure dependent reactions; $a = 0.5$, $T^* = 1.0 \times 10^{10}$, $T^{***} = 1.0 \times 10^{-10}$

h: Troe parameters for pressure dependent reactions; $a = 0.81$, $T^* = 1.0 \times 10^{10}$, $T^{***} = 1.0 \times 10^{-10}$

i: Troe parameters for pressure dependent reactions; $a = 0.59$, $T^* = 1.0 \times 10^{10}$, $T^{***} = 1.0 \times 10^{-10}$

j: Collisions efficiencies for M; $N_2 = 0.0$, $H_2 = 0.0$, $H_2O = 14.4$, $H = 0.0$, and $O_2 = 2.2$, all others =1.0.

k: Collisions efficiencies for M; He = 0.38, $H_2O = 12.0$, and Ar = 0.38, all others =1.0.

l: Collisions efficiencies for M; $H_2O = 5.0$, all others =1.0.

m: Collisions efficiencies for M; $H_2 = 2.5$, $H_2O = 12.0$, and Ar = 0.0, all others =1.0.

n: Collisions efficiencies for M; $N_2 = 3.0$, $H_2 = 3.0$, $H_2O = 15.0$, and $O_2 = 2.2$, all others =1.0.

o: Troe parameters for pressure dependent reactions; $a = 0.44$, $T^* = 1.0 \times 10^{10}$, $T^{***} = 1.0 \times 10^{-10}$

2.4.3 スパークモデル

第5章スパークによるシート状噴流の着火の解析においては、流れ場に人為的なスパークを与えて火炎の挙動を調べる。それに向けて本研究では、単軸噴流やせん断層での先行研究で使用されているエネルギー堆積によるスパークモデル [33] を使用した。このモデルは、直接イオン化やプラズマなどを解く必要のない簡易的なモデルであり、流体のエネルギー保存則におけるエネルギーの授受のみを考えてスパークをモデル化する。エネルギー保存則の生成項においてエネルギー \dot{Q} を次のように陽的に加える。

$$\partial_t \mathbf{E} + \nabla \cdot ((E + p)\mathbf{u} - \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u} - \kappa \nabla T) = \dot{Q} \quad (2.167)$$

ここで、 $\boldsymbol{\tau}$ は粘性応力テンソルであり、以下ようになる。 \mathbf{I} は単位テンソルである。

$$\boldsymbol{\tau} = \mu(2\mathbf{S}) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I}, \quad \mathbf{S} = \frac{1}{2}(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \quad (2.168)$$

与えるエネルギー \dot{Q} は、スパーク中心からの距離 r と時間 t の関数として

$$\dot{Q}(r, t) = \frac{\varepsilon}{4\pi^2 \sigma_s^3 \sigma_t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{\sigma_s}\right)^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_0}{\sigma_t}\right)^2} \quad (2.169)$$

と記述される。 t_0 は与えるエネルギーが最大になる時刻である。 σ_s と σ_t は以下のように定義されている。

$$\sigma_s = \frac{\Delta s}{a}, \quad \sigma_t = \frac{\Delta t}{a} \quad (2.170)$$

ここで $a = 4\sqrt{\ln(10)}$ は与えるエネルギーを一定の値にするモデル係数である。よって、エネルギーに関するパラメータ ε 、スパークサイズに関するパラメータ Δs 、スパーク時間 Δt に関するパラメータの3つを決めることでスパークの強さが時空間的に決まる。使用した値については第5章で説明している。

2.5 解強制置換法

第 5 章 スパークによるシート状噴流の着火では局所的に解像度を高めて火炎を捉えるために着火用格子を使用して解析を行った。複数の格子を持つ場合には、それぞれの領域で計算された物理量は領域の間でお互いに交換または内挿される必要がある。本研究では、格子が重なる領域でやりとりされる物理量 (解) は解強制置換法 (Fortified Solution Algorithm: FSA) [34] を用いて交換・内挿した。解強制置換法では、支配方程式である 3 次元 N-S 方程式 (2.53) を次のように修正する。

$$\partial_t \hat{Q} + \partial_\xi \hat{E} + \partial_\eta \hat{F} + \partial_\zeta \hat{G} = Re^{-1} (\partial_\xi \hat{E}_v + \partial_\eta \hat{F}_v + \partial_\zeta \hat{G}_v) + \hat{S} + \chi (\hat{Q}_f - \hat{Q}) \quad (2.171)$$

右辺第 5 項が強制項である。ここで \hat{Q}_f は他の格子で得られた解であり、予め分かっている値である。この解を現在着目している格子点上のある領域で強制的に与える。強制したい領域においては χ の値を十分に大きく設定し、それ以外の領域においては $\chi = 0$ とする。 $\chi = 0$ の場合、式(2.168)は通常の N-S 方程式が離散化された形式となり、一方で χ が十分大きい場合、 $\hat{Q}^{n+1} \approx \hat{Q}_f$ となり、強制したい領域において \hat{Q}^{n+1} を \hat{Q}_f で置き換えることができる。また、 χ の値には任意性を持たせることができ、値を工夫することで滑らかなやり取りが可能となる。

2.6 境界条件

ここでは本研究での基準ケース（第4章，第5章の基準ケースと同様）での境界条件について説明する．それ以外のケースについては各章で説明する．計算領域の全体図を Fig. 2.2 に示している．計算領域は直方体の形状であり，左から（X 方向）気流が流れ，それに垂直に（Z 方向）噴流を噴射する．Figure 2.3 に断面での計算領域を示す．以下に Fig. 2.3 の番号に対応する境界条件をそれぞれ説明する．

気流流入部 (①)

主流に対してはすべての物理量を固定とした．壁面近傍には流入乱流境界層を再現するため Sagaut らの Rescaling 法 [35] を適用している．

気流流出部 (②)

流出部が亜音速となる場合には圧力以外の物理量を 1 点内側からの 0 次外挿，圧力のみ固定とした．流出部が超音速となる場合にはすべての物理量を 1 点内側からの 0 次外挿とした．

噴流流出部 (③)

すべての物理量を固定とした．

側面 (④)

圧力以外の物理量を 1 点内側からの 0 次外挿，圧力のみ固定とした．

壁面 (⑤)

非すべり面として扱い，250K の等温壁とした．

上面 (⑥)

圧力以外の物理量を 1 点内側からの 0 次外挿，圧力のみ固定とした．

基準ケースの流入条件を Table 2.7 に示す．気流には空気，噴流には水素を用いる．気流マッハは 1.9，噴流マッハ数は 1.0 としている．気流の運動量流束に対する噴流の運動量流

第2章 数値解析法

束の比率を表す運動量流束比は22である。Figure 2.4 に本研究で使用する噴射口形状を示している。噴射口形状は3種類であり、シート状噴流、円形噴流、中間形状噴流である。これら3種類の断面積は質量流量を揃える目的で同じ断面積とした。

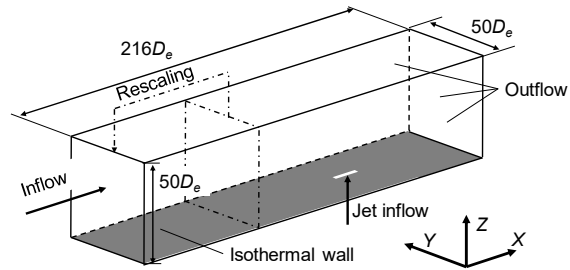


Fig. 2.2. Schematic of jet in crossflow in the present computation.

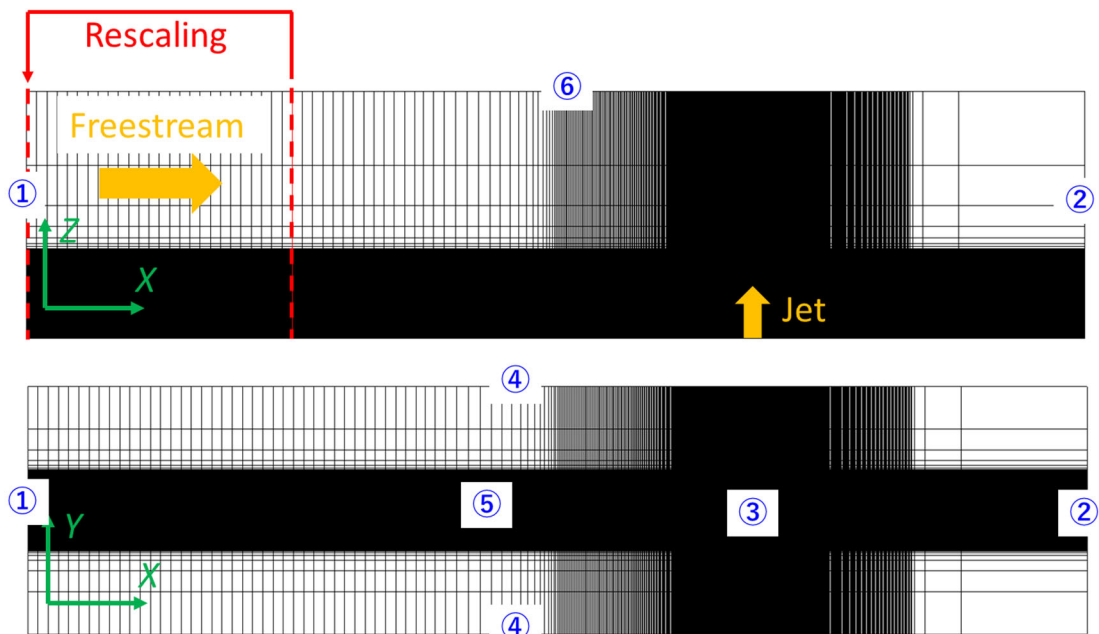


Fig. 2.3. Computational region: side-view at the symmetric plane (Upper), top-view on the wall (Lower).

Table 2.7. Flow conditions.

	Freestream (air)	Jet (hydrogen)
Ma	1.6	1.0
$Re(\times 10^6)$, 1/m	1.9	29.3
T , K	219	249
p , kPa	3.6	197.0
J	22	

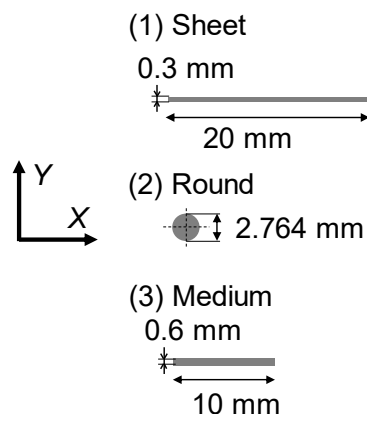


Fig. 2.4. Injector configuration.

第3章 検証計算

本章では、数値計算の妥当性を評価するため、2 ケースの検証計算を行い、実験との比較を行った結果について述べる。本研究の条件に類似の先行研究を参考とした。

3.1 非燃焼条件での噴流混合

まず非燃焼条件での噴流混合に対して妥当性を評価するため、Takahashi ら [36] の円形ヘリウム噴流の実験条件下で解析を行った。噴射気体種の分子量の差は、噴流混合に影響を与えるため、水素の分子量に近いヘリウムを使用した先行研究を使用する。また、同一実験条件で解析された Watanabe ら [37] の先行研究とも比較を行った。

3.1.1 解析条件

解析条件を Table 3.1 に示す。気流マッハ数は 1.9 で噴流マッハ数は 1.0 である。噴射口径は 2 mm であり、これを用いたレイノルズ数は 3.3×10^4 である。気流の運動量流束に対する噴流の運動量流束で記述される運動量流束は 1.9 となる。流入乱流境界層厚みは 2.5 mm で固定した。本計算においては、壁面境界条件は断熱非すべり壁とした。また、時間積分法には LU-ADI 陰解法を使用し、化学反応を考慮しないコールドフローの解析を行った。その他の数値解析手法は第 2 章で説明した手法を用いた。

本解析では格子解像度の影響を把握するため、2 種類の解析格子を用いた。解析格子を Table 3.2 に纏めている。総格子点数は粗い格子で約 900 万点、細かい格子で約 1800 万点となる。どちらの格子も壁面垂直方向第 1 点を $y^+ < 1$ となるように配置している。

Table 3.1. Flow conditions.

	Freestream (air)	Jet (helium)
Ma	1.9	1.0
$Re(\times 10^6)$, 1/m	13.8	10.4
T , K	166	217
p , kPa	14.8	86.0
J	1.9	

Table 3.2. Computational grid systems.

Grid	Total grid points ($\times 10^6$)	Grid points (x, y, z)
Coarse	9.6	291, 173, 191
Fine	18.6	341, 237, 231

3.1.2 解析結果

本解析においては、噴流の貫通高さを実験と比較する。噴流の貫通高さの定義として、各流れ方向位置で最大濃度となる最大ヘリウム濃度と最大濃度の 50% となる 50% ヘリウム濃度を使用する。Figure 3.1 に細かい格子を用いた対称面上での時間平均ヘリウム濃度を示す。図中には最大ヘリウム濃度で定義した噴流の貫通高さを重ねている。中央の高濃度となる噴流コアから風上側や風下側で気流と混合する。Figure 3.2 に最大ヘリウム濃度と 50%ヘリウム濃度で定義した噴流の貫通高さを示す。最大ヘリウム濃度の定義ではどちらの格子の結果も実験や先行研究の計算と一致している。一方で、50%ヘリウム濃度で定義した噴流の貫通高さでは、粗い格子での結果は過小評価しているが、細かい格子での結果は実験と概ね一致していることが分かる。これはより風上側の位置を抽出する 50%ヘリウム濃度の定義では、格子解像度の違いが出やすいせん断渦近傍を抽出するためである。

以上より、本解析手法による噴流混合の数値解析が妥当であることを確認した。

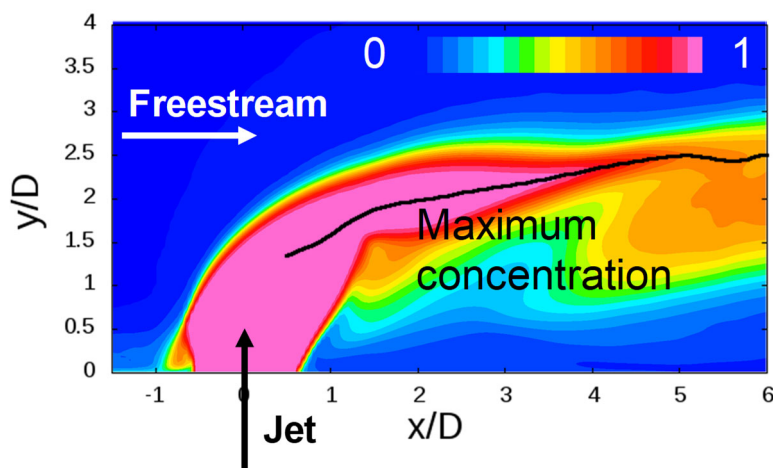


Fig. 3.1. Mean helium molar concentration contour with fine grid at the symmetric plane.

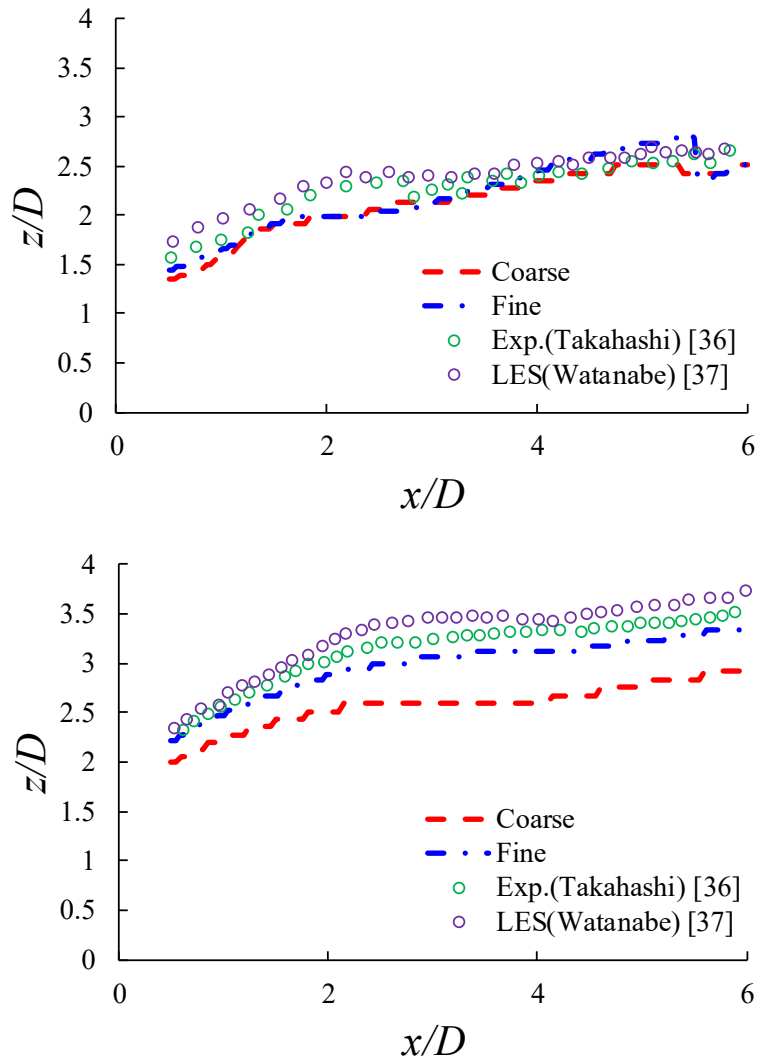


Fig. 3.2. Jet penetration height: mean maximum helium concentration (top), mean 50% helium concentration (bottom).

3.2 超音速燃焼

本研究で対象とする指令破壊では気流は超音速条件となり，その高速流れにおける燃焼を調べる．そのため，超音速燃焼を模擬して数値解析の妥当性評価を行う必要がある．本解析では，Gamba ら [20] の実験を模擬した．また同一実験条件下での解析された Liu ら[22] の LES 結果とも比較を行った．

3.2.1 解析条件

解析条件を Table 3.3 に示す．噴流には水素を用いており，音速で噴射される．気流のマッハ数は 2.4 である．気流の静温は 1400 K であるため，気流の動圧によって自着火する．運動量流束比は 5.0 である．流入乱流境界層厚みは，1.2 mm とした．壁面境界条件には 300 K の等温すべり壁を使用した．時間積分法には時間精度を確保するため TVD-RK を使用した．その他数値解析手法は第 2 章において説明したものをを用いた．

本解析で使用した解析格子を Table 3.4 に示す．粗い格子の格子点数は約 700 万点，細かい格子の格子点数は約 2700 万点である．乱流境界層を捉えるため，どちらの格子も壁面垂直方向第 1 点を $y^+ < 1$ に配置した．本解析における平均場の取得には，無次元時間間隔 $\Delta t^* = 0.02$ で約 300 枚の瞬間場を平均化処理した．

Table 3.3. Flow conditions.

	Freestream (air)	Jet (hydrogen)
Ma	2.44	1.0
$Re(\times 10^6)$, 1/m	3.4	158.0
T , K	1400	250
p , kPa	40	1071
J	5.0	

Table 3.4. Computational grid systems.

Grid	Total grid points ($\times 10^6$)	Grid points (x, y, z)
Coarse	7.0	351, 111, 181
Fine	27.5	401, 311, 221

3.2.2 解析結果

本解析においては，化学反応の中間生成物である OH ラジカルによって定義される火炎の貫通高さを実験と比較する．まず，解析結果の全体的な流れ場を説明する．Figure 3.3 に粗い格子を用いた対称面上での時間平均場の結果を示している．マッハ数コンターにおい

第3章 検証計算

て、衝撃波や剥離領域と言った一般的な JISC の流れ場の特徴が見られる。水素質量分率コンターにおいては、噴流の風上側と風下側のせん断層において気流と混合していることが分かる。静温コンターと熱放出率コンターにおいては、この流れ場での燃焼は衝撃波背後の高温高圧領域で自着火が起き、化学反応が維持されていることが分かる。次に OH ラジカルを実験と比較する。Figure 3.4 に対称面上と壁面近傍の OH 質量分率コンターと OH-PLIF 画像を示す。対称面上コンターを比較すると、風上側せん断渦の非定常性、またそこでの化学反応を捉えることができている。一方で実験と比べて火炎の貫通高さが高いことが分かる。これは、実験で平板先端から形成されている衝撃波や噴射口での噴流境界層を模擬していないこと、格子解像度の不足などが挙げられる。壁面近傍のコンターを比較すると、上流側剥離領域の拡がりや燃焼範囲を正確に予測できていることが分かる。一方で下流側剥離領域付近においては解析で高い OH 質量分率となっているが、実験では OH の高い分布にはなっていない。これは、OH-PLIF と OH 質量分率が必ずしも一致していないことや、火炎の貫通高さの場合と同様に衝撃波等の有無が影響していると考えられる。Figure 3.5 に粗い格子や細かい格子を用いた火炎の貫通高さを示す。火炎の貫通高さは同一条件下での LES の先行研究 [22] と同様に噴流境界における時間平均 OH ラジカル質量分率 0.1% で定義した。図中には実験結果と先行研究の LES 結果を併せて示している。細かい格子での結果は実験と概ね一致していることが分かる。粗い格子においては実験や細かい格子での結果と比べて少し高い貫通高さとなっている。これは数値拡散によってより広範囲に拡散が起きるためである。

以上より、本数値解析による超音速燃焼の結果は実験と定性的には一致していると考えられる。今後、更なる検証が必要であると考えられる。

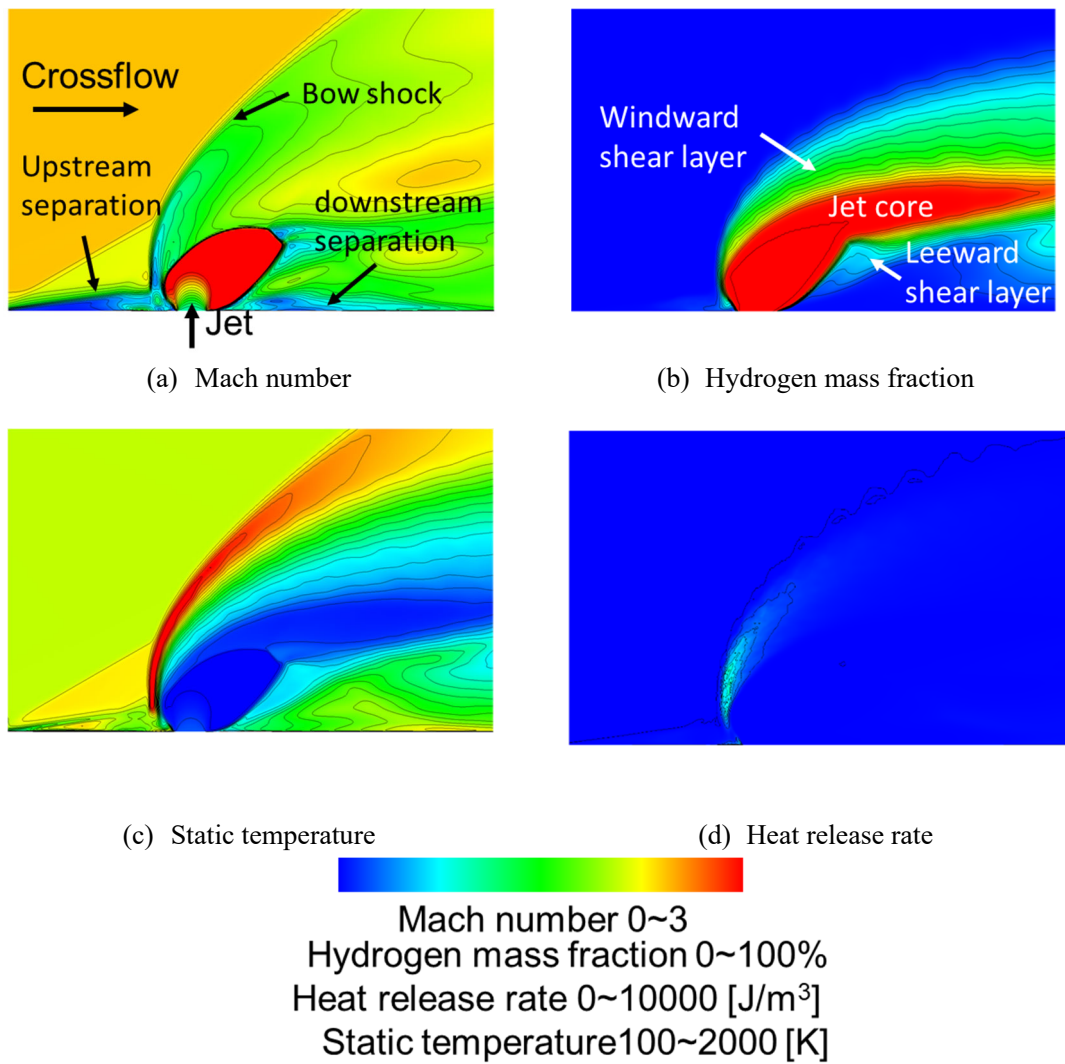
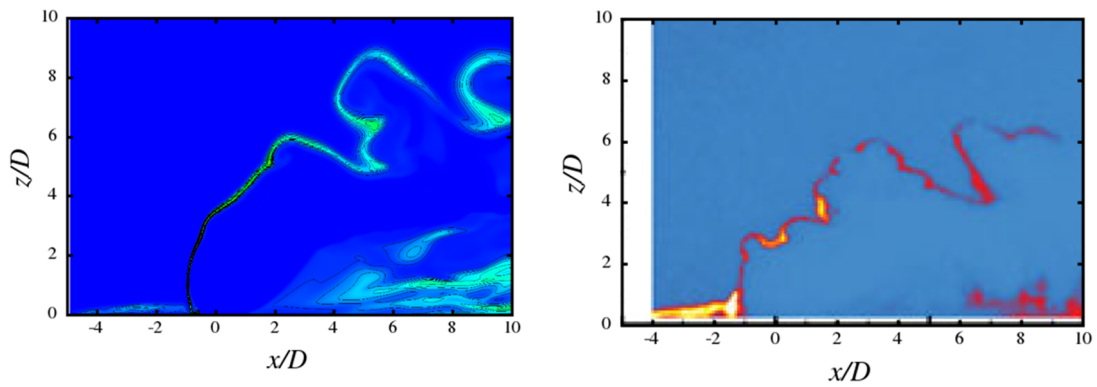
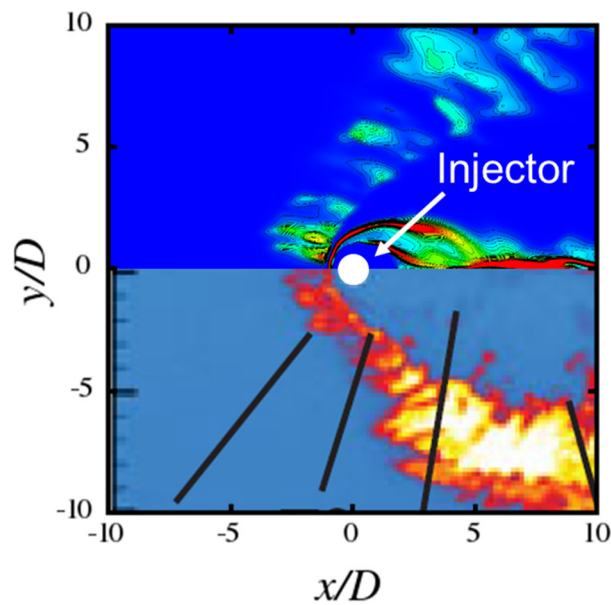


Fig. 3.3. Time-averaged flowfield at the symmetric plane using coarse grid.



(a) Symmetric plane: present numerical simulation using fine grid (left), experiment (right)



(b) Wall parallel plane at $z/D = 0.5$: present numerical simulation using fine grid (upper half), experiment (lower half)

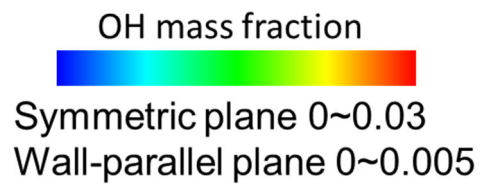


Fig. 3.4. Instantaneous flowfield: OH mass fraction contour (numerical simulation), OH PLIF image (experiment) [20].

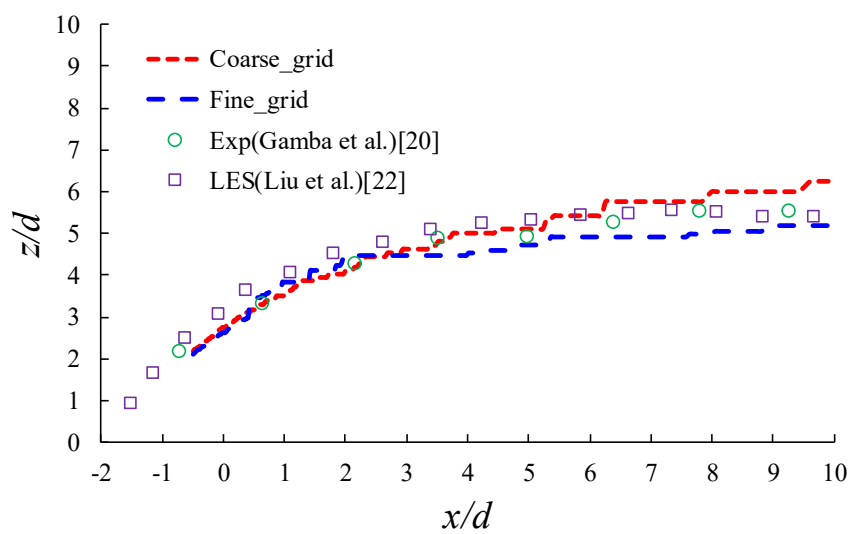


Fig. 3.5. Flame penetration height using time-averaged OH radical.

第4章 超音速流れにおけるシート状噴流の混合

本章で行った解析を Table 4.1 に纏めている。この章で用いるケース名に対して計算格子と噴流出口形状を示している。この章では、まず空間格子解像度の検証をするため解像度の異なる3つの計算格子で解析を行い、検証する。そしてシート状噴流と円形噴流と中間形状噴流の3ケースの解析について議論する。噴流出口形状効果については、シート状噴流と円形噴流の全体的な流れ場の違いについて時間平均の結果を用いて説明する。それから、JICでの混合評価でよく用いられる噴流貫通高さについて議論する。そして最後に噴流混合や乱流特性の違いについて瞬間の結果を用いて説明する。時間平均の結果には、約170無次元時間 $[tU_\infty/D_e]$ に相当する約300枚のスナップショットを用いて統計処理した。また、周波数解析においては、高周波数の流れ変動を捕まえるため 1×10^{-3} の無次元時間幅（これはサンプリング周波数 $St = fd_e / U_\infty = 40$ に相当）で取得した時間連続データ約150,000個を使用した。周波数解析はFFT (fast Fourier transform) アルゴリズムをハニング窓とともに使用した。ハニング窓は使用するデータ数を N とすると式 (4.1) のように示される。

Table 4.1. Present simulation cases.

Case name	Grid	Jet exit geometry
Coarse	Coarse	
Baseline	Baseline	Sheet-like
Sheet		
Medium	Fine	Medium
Round		Round

$$f(n) = 0.5 - 0.5 \cos\left(\frac{2\pi n}{N}\right), 1 \leq n \leq N \quad (4.1)$$

4.1 格子解像度の影響

格子依存性の確認では、現在の気流噴流条件での解析において格子密度の影響を検証する。解析はシート状噴流を想定し、3つの計算格子を使用する。3つの格子の違いについては、Table 4.2 に纏められている。三つの格子は、格子密度以外はすべて同じである。Figure 4.1 に Coarse の計算格子を示す。ターゲットドメインの外側には、バッファ領域を設けており、ターゲットドメインは $72D_e$, $16D_e$, $18D_e$ の長さ、幅、高さの領域となっている。気流流入面から $108D_e$ の領域に Rescaling 法を適用している。底面では、境界層の解像のため、格子を集めており、壁面垂直方向第1点が $y^+ < 1$ となるように配置している。

Figure 4.2 に $x/D_e = 0$ から $x/D_e = 21.6$ の位置での対称面上での時間平均速度プロファイルを示している。3つの解析結果の中で、粗い格子での結果は、基準格子や精細格子の結果と

大きく異なっていることが分かる。これは基準格子の解像度で十分な解像度になっており、格子収束しているためであると考えられる。一方で、乱流運動エネルギープロファイルにおいては基準格子と精細格子で違いが見られる。Fig. 4.3 に同じ位置での対称面上での乱流運動エネルギープロファイルを示す。乱流運動エネルギーは $TKE = ((u'u') + (v'v') + (w'w'))/2/a_\infty^2$ として定義されている。三つの格子での結果を比較すると、プロファイルにおけるピーク的位置は3つの格子でほとんど同じ位置となっているが、ピーク位置における TKE の値の違いがあることが分かる。これは細かい格子ではより高周波数のエネルギーを解像しているためであると考えられる。これらの結果から、平均場だけでなく非定常変動を正確に捉えるためにはより高周波数まで解像している Fine 格子を使用することが望ましいと考えられる。そのため以降のセクションには精細格子での結果を用いる。

Table 4.2. Computational grid systems.

Grid	Total grid points ($\times 10^6$)	Grid point (x, y, z)
Coarse	12	401, 177, 181
Baseline	24	501, 217, 221
Fine	40	601, 313, 277

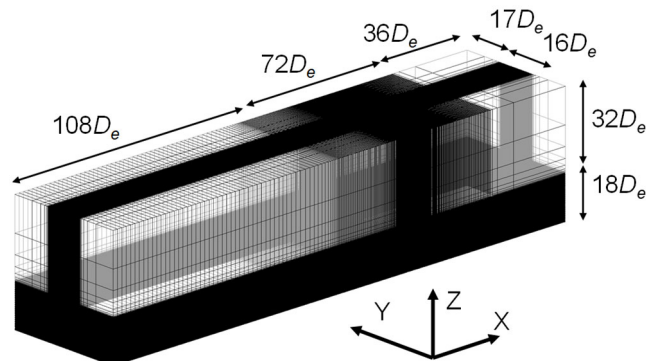
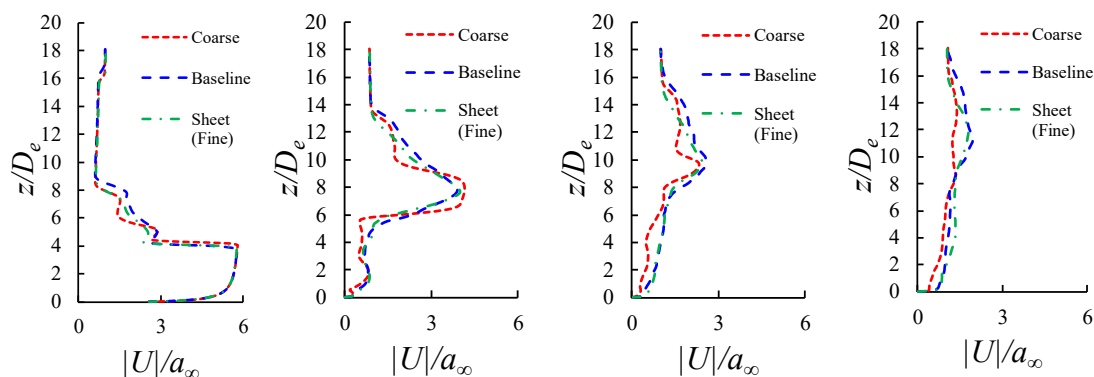
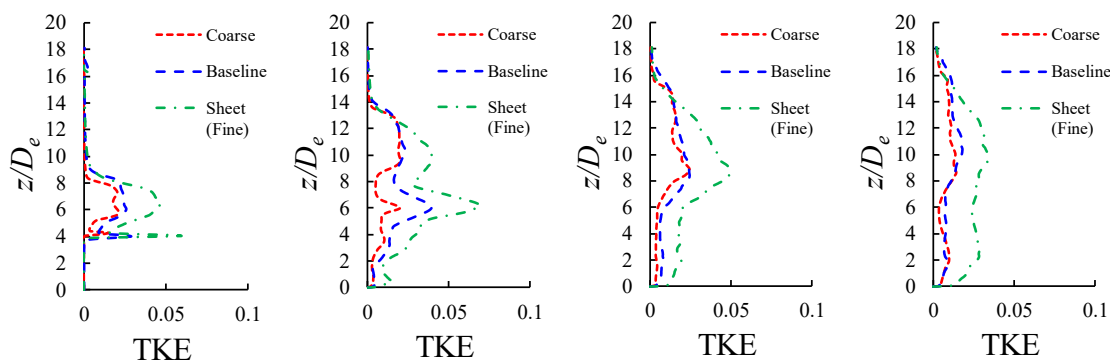


Fig. 4.1. Computational grid on coarse mesh.



(a) $x/D_e = 0$ (b) $x/D_e = 7.2$ (c) $x/D_e = 14.4$ (d) $x/D_e = 21.6$
 Fig. 4.2. Comparison of mean velocity magnitude profiles on the symmetry plane.



(a) $x/D_e = 0$ (b) $x/D_e = 7.2$ (c) $x/D_e = 14.4$ (d) $x/D_e = 21.6$
 Fig. 4.3. Comparison of turbulent kinetic energy profiles on the symmetry plane.

4.2 時間平均場

シート状噴流と円形噴流の時間平均場での違いについて焦点を当てて議論する。Fig. 4.4 に対称面上と断面上でのマッハ数分布を示している。黒い線は2次元流線である。これらの図から、シート状噴流と円形噴流ともに弓形衝撃波、マッハディスク、バレル衝撃波、剥離、再付着等から構成される、JICの典型的な流れ構造になっていることが分かる。シート状噴流と円形噴流を比較すると、シート状噴流では、気流干渉により噴流の風上側が押しつぶされている。これは噴流出口のスパン方向長さが短いため、気流の運動量をより小さい噴流断面積で受け取るためである。また、断面図の壁面近傍を見ると、シート状噴流では、Trailing vortexが存在していない。これは、シート状噴流では、CVPがより低い位置で形成されており、より上流の位置 ($x/D_e = 30$) で Trailing vortex を取り込んでいるためである。この低い位

第4章 超音速流れにおけるシート状噴流の混合

置に形成される CVP が *Trailing vortex* を取り込む現象は先行研究においても報告されている [12] . Fig. 4.5 に対称面上と断面上での水素濃度分布を示す. 図中の黒線は水素濃度 95% の等値線 (Label A) を示しており, 噴流コアに相当する. シート状噴流では, 円形噴流と異なり壁面近傍 (Label B) で水素濃度が高くなっていることが分かる. これはシート状噴流では CVP が壁面近傍まで存在しているためである. また, CVP が壁面近傍に存在することで CVP への空気の巻き込みが少なくなっている. 噴流コアの先端位置を比較すると, シート状噴流では $x/D_e = 10$ の位置, 円形噴流では $x/D_e = 6$ の位置にあることから, シート状噴流の方が噴流コアが下流まで続いていることが分かる. これはシート状噴流において, 気流干渉の影響が比較的弱い噴流の風下側が持続するためであると考えられる. また, Fig. 4.5 でのシート状噴流と円形噴流を比較すると, 気流と噴流の境界となる風上側せん断層 (Label C) での水素濃度がシート状噴流の方が高いことが分かる. 水素濃度は気流を取り込むにつれて低下するため, シート状噴流の風上側せん断層では空気の巻き込みが弱いことを示唆している. Fig. 4.6 に壁面近傍 ($z/D_e = 0.07$) におけるマッハ数と静圧の上面図を示す. マッハ数分布上には二次元流線を重ねて表示している. シート状噴流においても円形噴流においても, 先行研究 [8, 9, 38] と同様に, 噴流上流での高圧領域での剥離, 噴流背後の低圧領域での下流での剥離, 噴流の下流での圧力が回復する再付着点が観察される. 一方で, シート状噴流においてのみ, 噴流の側方に低マッハ数の剥離領域が観察される. Fig. 4.7 にシート状噴流と円形噴流それぞれの噴流出口位置の中心でのマッハ数分布を示している. 図中には速度ベクトルを重ねて表示している. シート状噴流では円形噴流に比べて噴流のスパン方向への広がり強いことが分かる. またシート状噴流では CVP が壁面近くに大きく発達して, 壁面近傍の流れと干渉していることが分かる. これらのことから, シート状噴流における噴流側方での剥離領域は, 気流により押しつぶされた風上側の噴流が壁面近傍で CVP を形成し, その CVP が噴流側方で壁面近傍の流れと干渉することで作られたと考えられる. 噴流出口の気流方向長さを長くした場合に, スパン方向への広がりが大きくなる現象については, 先行研究[15, 16]でも報告されている.

第4章 超音速流れにおけるシート状噴流の混合

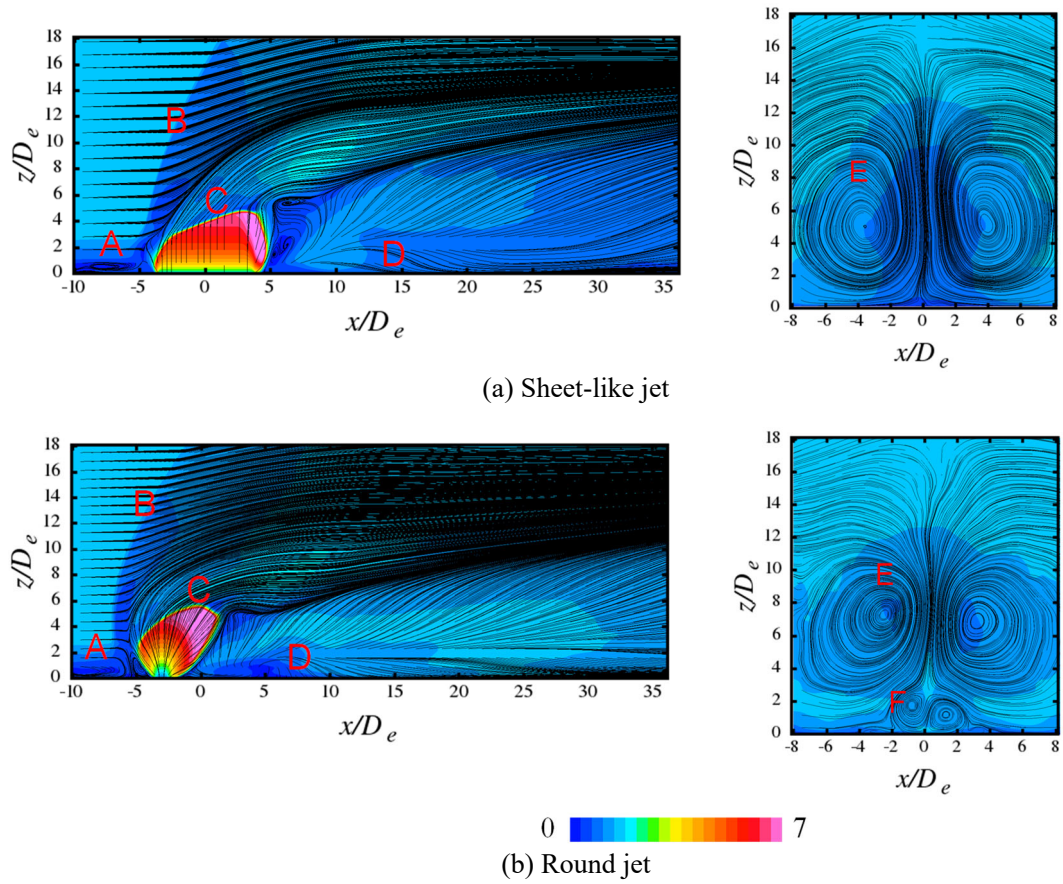


Fig. 4.4. Mean Mach number distributions on the symmetry plane (left) and cross-sectional plane $x/D_e=30$ (right); A: Upstream separation region; B: Bow shock; C: Mach disk & Barrel shock; D: Reattachment; E: CVP; F: Trailing vortex.

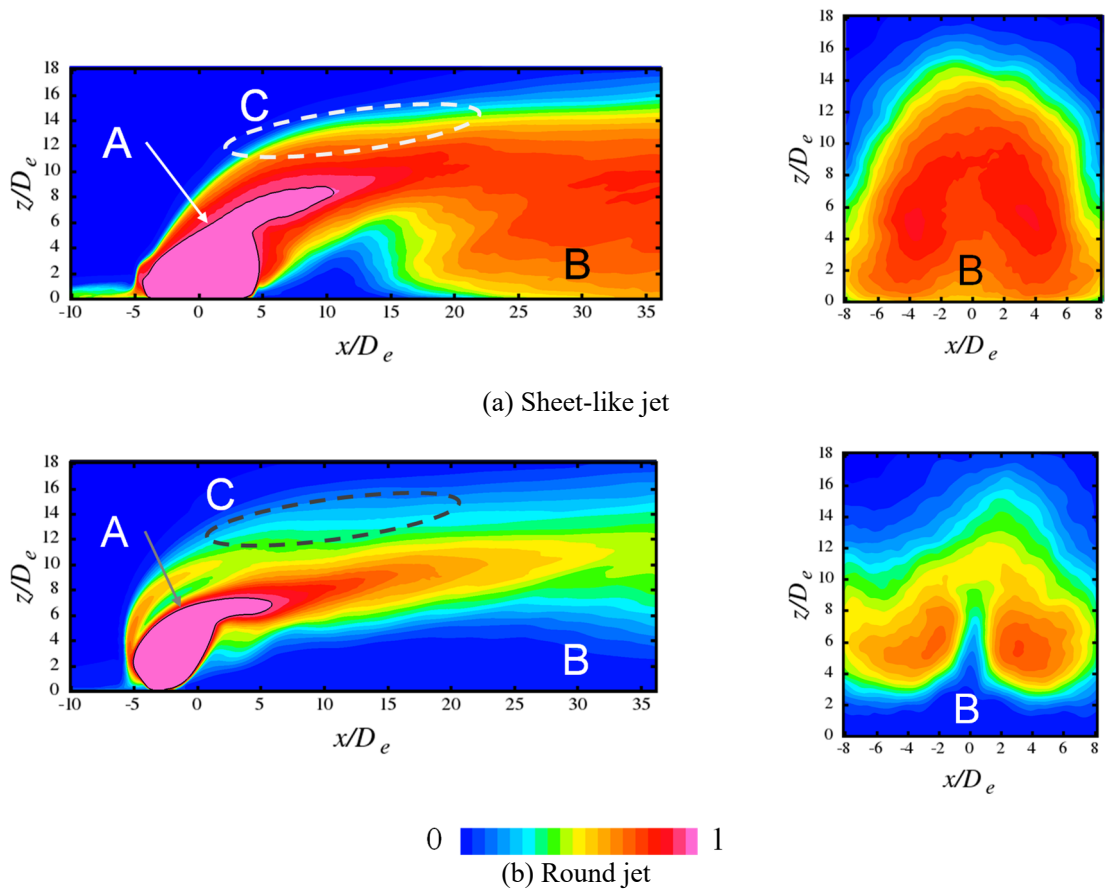


Fig. 4.5. Mean H₂ molar concentration distributions on the symmetry plane (left) and cross-sectional plane $x/D_e=30$ (right); A: 95% H₂ molar concentration line; B: Near-wall region; C: Windward shear layer.

4.3 噴流貫通高さ

噴流貫通高さに対する噴射口形状の影響について議論する．ここでは噴流の貫通高さを先行研究 [39] で適用されている噴射気体濃度を用いて 50%水素濃度と定義した．Figure 4.8 に各噴流出口形状に対する噴流の貫通高さを示す．中間形状噴流やシート状噴流では円形噴流に比べて貫通高さが高いことが分かる．また，貫通高さが円形噴流とその他の2形状とで異なっていることが分かる．これは， $x/D_e = -5$ 付近の衝突部においては円形噴流に比べてシート状噴流や中間形状噴流のスパン方向長さが短く，噴流断面積が小さいため気流干渉を強く受けること，また， $x/D_e > 5$ においてはシート状噴流や中間形状噴流の噴流風下側が衝突部から離れているため，気流干渉を強く受けにくいことに起因していると考えられる．Figure 4.9 に運動量流束比 J でスケーリングした噴流の貫通を示す．噴流の貫通に対するスケーリングは支配的なパラメータを把握するために行われており，主に J やその関数が用いられている [11, 40, 41]．図中には，円形噴流の JIC の実験から得られた経験式を3つ示している [10, 42, 43]．この結果から，Rothstein & Wantuck の経験式に近くなっており，運動量流束比 J によってスケーリングできていることが分かる．

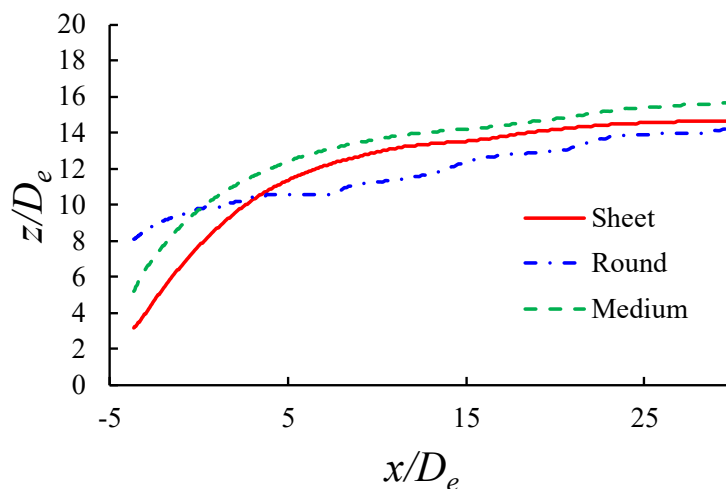


Fig. 4.8. Comparison of jet trajectories for various jet exit geometry.

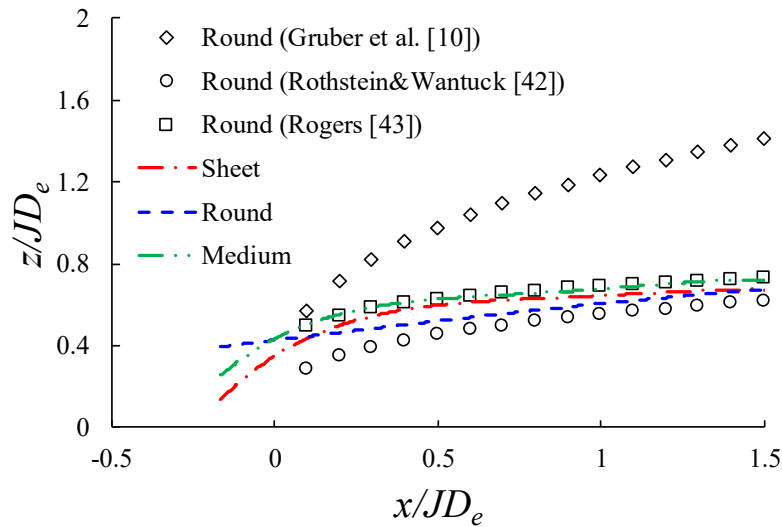


Fig. 4.9. Comparison of scaled jet trajectories for various jet exit geometry.

4.4 噴流混合

シート状噴流, 中間形状噴流, 円形噴流を用いて噴流混合に対する噴流出口形状の影響について議論する. まず, Fig. 4.10 に各噴流出口形状に対する対称面上と断面上での瞬間の水素濃度分布が示される. Figure 4.5 に示している時間平均の水素濃度分布と同様に, 円形噴流では, シート状噴流や中間形状噴流と異なり, 噴流の風上側 (Label A) において約 20% 水素濃度が低いことや, 下流の壁面近傍 (Label B) では水素が輸送されていないことが分かる. 下流での断面図を見るとシート状噴流が最も空気の巻き込みが弱く, 高濃度となっていることが分かる. また, 噴流の風上側に着目すると, せん断渦の周波数のような乱流特性に違いがあるように見える. 乱流特性については以降のセクションで詳しく述べる.

次に混合を評価するため, 混合効率について議論する. 瞬間混合効率と時間平均混合効率は Watanabe らの定義 [37] を用いて以下のように定義される.

$$\eta = \frac{\iint (\rho u Y_j / \varphi') dy dz}{m_j}, \varphi' = \begin{cases} 1 & (\varphi \leq 1) \\ \varphi & (\varphi > 1) \end{cases} \quad (4.2)$$

$$\eta_{ave} = \frac{\iint (\bar{\rho} \bar{u} \bar{Y}_j / \bar{\varphi}') dy dz}{m_j}, \bar{\varphi}' = \begin{cases} 1 & (\bar{\varphi} \leq 1) \\ \bar{\varphi} & (\bar{\varphi} > 1) \end{cases} \quad (4.3)$$

Figure 4.11 に式 (4.3) に示す時間平均混合効率 η_{ave} を示している. 縦軸に時間平均効率, 横軸に流れ方向距離となっている. すべての噴流形状において, 下流になるにつれて混合効率が線形的に上昇していることが分かる. これは, 下流になるにつれて噴流表面積が大きく

第4章 超音速流れにおけるシート状噴流の混合

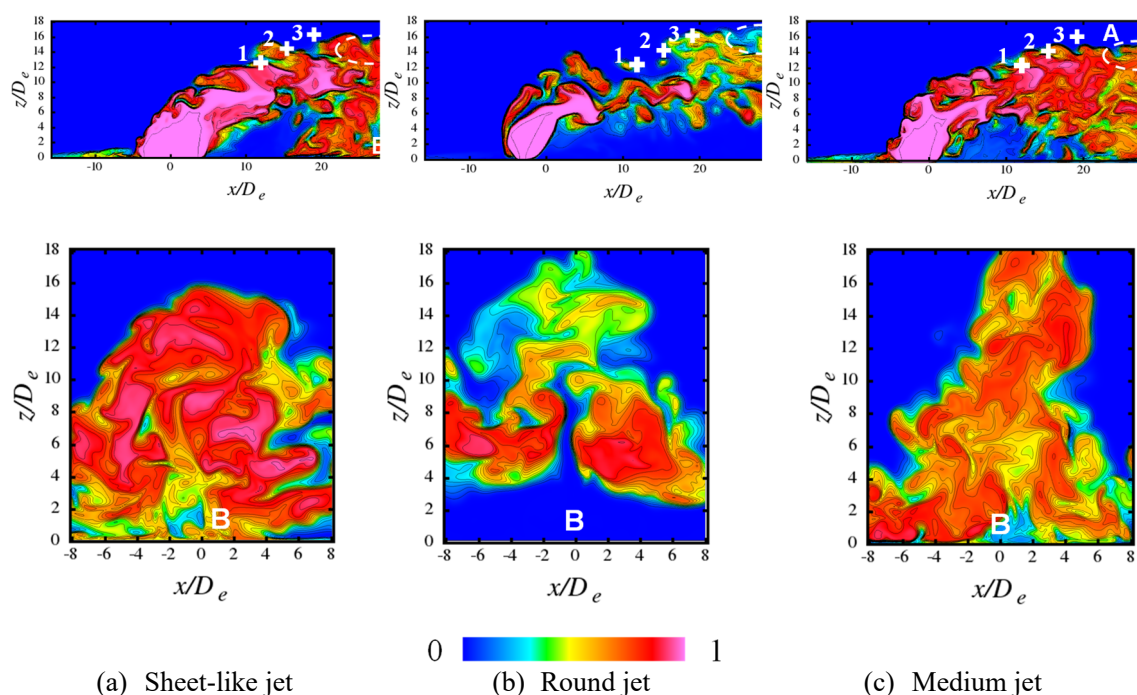
なり気流を巻き込む量が増えることに対応している。これら三つの形状を比較すると、下流領域 ($x/D_e > 15$) においては、中間形状噴流や円形噴流に比べて、シート状噴流の混合効率は低くなっていることが分かる。その理由は Fig. 4.5 で示したようにシート状噴流では空気を取り込みが弱いためであると考えられる。 $x/D_e = 5$ 付近において、中間形状噴流とシート状噴流で混合効率の上昇が抑えられているのは、Fig. 4.5 にも示されているように噴流が壁面に沿うように流れ、噴流の風上側での空気を取り込みが抑えられることに起因していると考えられる。Figure 4.12 に混合効率と噴流断面積の散布図を示す。縦軸は式 (4.1) に示す混合効率 η で、横軸は各気流方向位置での噴流断面積を噴流出口面積で無次元化したものである。噴流断面積は各気流方向位置における当量比 1 以上の領域と定義しており、データはすべて時空間に対して 2 点ずつ間引いている。グラフはシート状噴流と円形噴流、シート状噴流と中間形状噴流をそれぞれ比較している。すべての噴流形状において、噴流断面積が大きくなるにつれて混合効率がほぼ線形的に上昇していることが分かる。また、混合効率と噴流断面積の傾きの上昇やばらつきが増大は、渦構造崩壊によって起きる混合の活発化に対応している。3 つの噴流出口形状を比較すると、シート状噴流や中間形状噴流では、噴流断面積が大きいために、シート状噴流や中間形状噴流では、Fig. 4.4 での時間平均場の結果で示したように、風上側の噴流が気流に押し曲げられ壁面近傍を沿うように流れる一方で、風下側の噴流が気流干渉を強く受けないうえに高く貫通する。そのため、噴流断面積が大きくなったものと考えられる。しかし、混合効率と噴流断面積の傾きを見ると、円形噴流のみ大きな傾きとなっていることが分かる。これはシート状噴流や中間形状噴流に比べて、より近傍で混合が強化されていることを意味しており、乱流特性の違いが影響していると考えられる。

最後に噴流混合に影響を与える乱流特性について議論する。Figure 4.13 に対称面上と断面上での乱流運動エネルギー分布を示している。乱流運動エネルギー (TKE) は $TKE = 0.5(\langle u'u' \rangle + \langle v'v' \rangle + \langle w'w' \rangle) / a_\infty$ として定義している。JIC における先行研究[8, 9, 11, 12]と同様に、3 つの噴流出口形状の計算においても風上側と風下側のせん断層や CVP で TKE が高くなっていることが分かる。3 つの噴流出口形状を比較すると、シート状噴流では、TKE の高い領域が下流まで持続していることが分かる。これはシート状噴流の渦構造の崩壊がより下流になることを示唆している。次に Fig. 4.10 で示している風上側せん断層の中の 3 つの箇所を取得した圧力変動の時系列データに対してスペクトル解析を行った。これらを以下では、Label 1, Label 2, Label 3 と呼ぶ。Fig. 4.14 は 3 つの噴流出口形状に対するスペクトルを示している。横軸はストローハル数 $St = f D_e / U_\infty$ であり、周波数を主流速度 U_∞ と有効直径 D_e で無次元化している。三つの噴流出口形状において Label 1 の位置で、 $St = 0.1 - 0.3$ に

第4章 超音速流れにおけるシート状噴流の混合

てピークが観察される。これは、マッハディスクのストローハル数や風上側せん断層でのストローハル数に対応していると考えられる。Chaiら[41]は、JICの流れ場では、マッハディスク近傍で $St = 0.1-0.4$ 、風上側せん断層での $St = 0.3$ となることを報告している。Fig. 19 (a),(c)に示すシート状噴流や中間形状噴流では Label 2 や Label 3 の位置においても $St = 0.1-0.3$ で同様の傾向が見られる。一方で、Fig. 4.14 (b) に示す円形噴流の Label 2 や Label 3 の位置での結果に着目すると、目立ったピークは観察されない。これは、せん断渦等の組織構造が崩壊し、より複雑で細かい渦構造へと遷移していることを示唆している。したがって、シート状噴流や中間形状噴流に比べて、より上流で乱流が崩壊していると考えられる。

上記での結果から、噴流の下流での混合に対して噴流断面積の大きさや乱流による混合強化が重要な役割を果たしていると考えられる。Table 4.3 に3つの噴流出口形状の TKE 分布の結果と最大噴流断面積の値と時間平均混合効率の値を纏めている。シート状噴流では、中間形状噴流や円形噴流に比べて渦構造の崩壊位置が下流となるため混合に不利となる一方で、噴流断面積は最も大きく混合に有利であると考えられる。またシート状噴流や中間形状噴流のように壁面に沿う流れがある場合、気流の巻き込み量が少なくなり混合に不利に働くと言える。



(a) Sheet-like jet (b) Round jet (c) Medium jet
 Fig. 4.10. Instantaneous H₂ molar concentration contours for various jet geometries on symmetry plane (top) and cross-sectional plane at $x/D_e=30$ (bottom).

第4章 超音速流れにおけるシート状噴流の混合

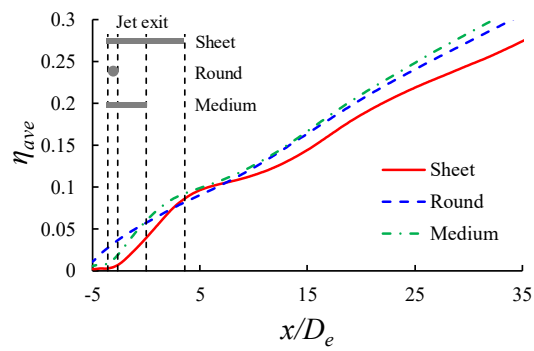


Fig. 4.11. Time-averaged mixing efficiency distributions for various jet exit geometries.

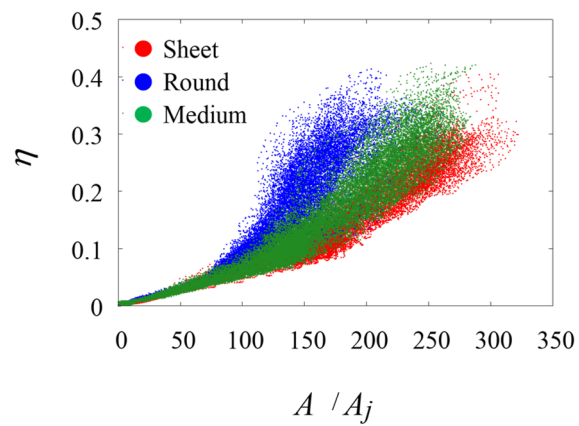


Fig. 4.12. Scatter plots of mixing efficiency and normalized jet area for various jet exit geometries.

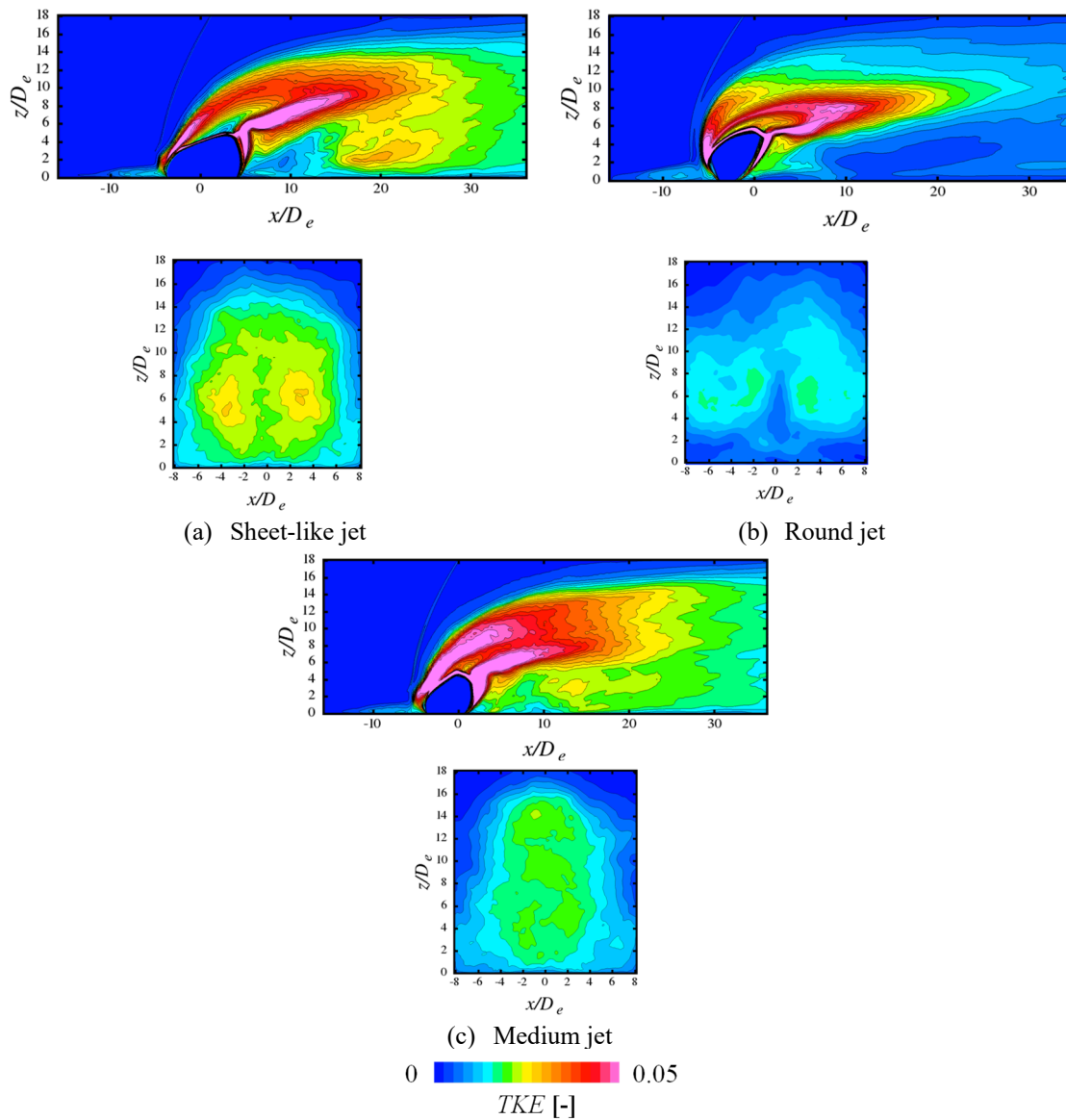


Fig. 4.13. Turbulent kinetic energy contours for various jet exit geometries on symmetry plane (top) and cross-sectional plane at $x/D_e=30$ (bottom).

第4章 超音速流れにおけるシート状噴流の混合

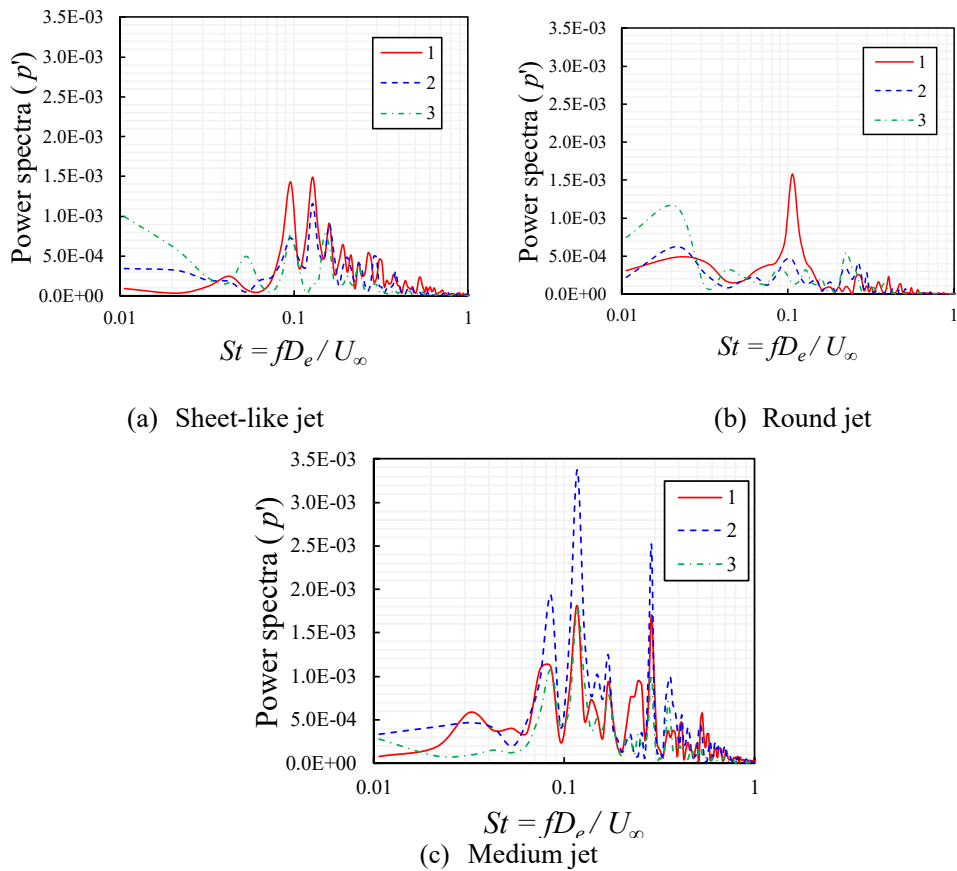


Fig. 4.14. Power spectra of static pressure fluctuation for various jet exit geometries.

Table 4.3. Comparison of mixing efficiency.

Case name	TKE distributions in the downstream region	Maximum jet area [-]	Averaged mixing efficiency [-]
Sheet	Very high	322	0.22
Round	Low	261	0.24
Medium	High	288	0.25

まとめ

超音速流れにおけるシート状噴流の混合に関して3次元数値解析を行い、以下の結果を得た。

- 空間格子解像度の異なる3つの格子により格子解像度の評価を行ったところ、時間平均速度場はBaseline格子とFine格子において格子収束していることが分かった。一方でTKE

第4章 超音速流れにおけるシート状噴流の混合

ロファイルにおいては格子を細かくするにつれてピークが大きくなった。

- ・シート状噴流ではスパン方向に CVP が発達し、下流では壁面近傍を流れる。これは後流渦を取り込むことや噴流側方の剥離領域形成につながることによるものである。
- ・シート状噴流では円形噴流に比べて噴流の貫通が高い。これは気流干渉の弱い風下側噴流が強く貫通するためである。
- ・運動量流束比による噴流の貫通高さのスケージングを行った。また Rothstein らの経験式と概ね一致した。
- ・円形噴流に比べるとシート噴流の混合効率は低い。
- ・円形噴流に比べてシート噴流の噴流の広がりは大いだが、乱流崩壊が遅いため混合の進展が遅いことが分かった。

第5章 スパークによるシート状噴流の着火

第5章 スパークによるシート状噴流の着火

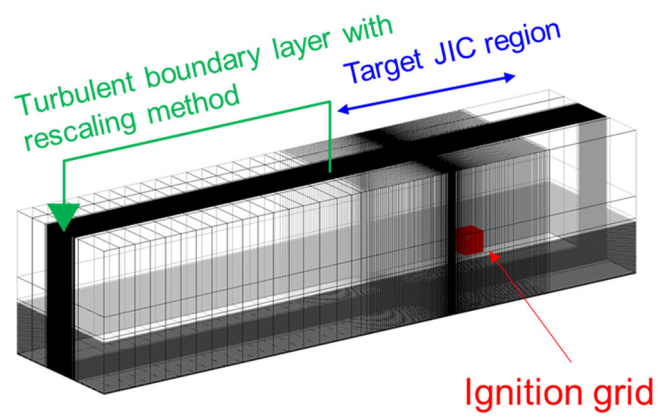
本章で行った解析について Table 5.1 に纏めている。表には、ケース名、着火位置、気流条件をそれぞれ示している。本章の流れとして、まず着火位置やスパークモデルのパラメータを決めるため着火条件の検討を行う。次に超音速流中のシート状噴流に対して静電気を模擬したスパークを与えて火炎挙動を調べる。

Table 5.1. Present simulation cases.

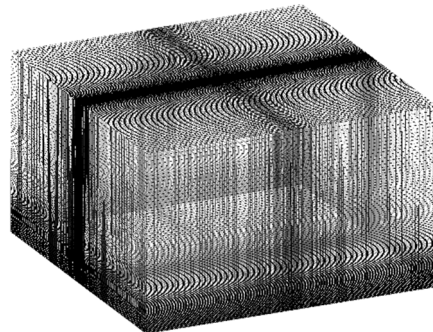
Case name	Ignition location	Freestream condition
Location-1	Location-1	Baseline
Location-2	Location-2	

5.1 解析格子

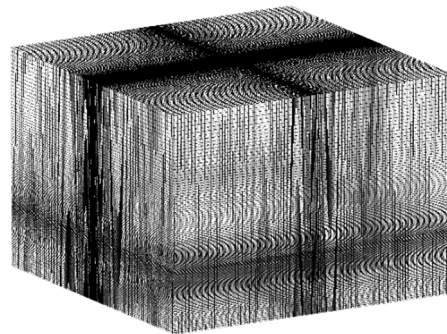
本章で使用した解析格子を Fig. 5.1 に示す。本章の計算では、前章で用いた Fine の全体格子に加えて、着火用格子を用いる。着火用格子は着火箇所において解像度を高めるため使用する。着火用格子は着火位置ごとにそれぞれ用意しており、空間格子解像度を同程度のまま、計算領域の大きさを変えた。格子点数の詳細は Table 5.2 に示している。また全体格子と着火用格子の格子間の計算は解強制置換法 [34] により行われる。



(a) Overall grid



(b) Ignition grid for Location-1



(c) Ignition grid for Location-2

Fig. 5.1. Computational grid.

Table 5.2. Computational grid systems.

Case name	Total grid points ($\times 10^6$)	Grid point (x, y, z)
Location-1	4.7	171, 171, 161
Location-2	4.4	171, 171, 151

5.2 着火条件の検討

着火確率の予測式や当量比と速度の時間履歴を用いて、着火位置とスパークモデルのパラメータを決定する。着火確率の予測式には非燃焼での計算結果を用いている。着火確率の予測式は、Lacaze ら [33] の式を用いた。式は2つあり、当量比のみを考慮した $P_f(x, y, z)$ と当量比と速度を考慮した $P_{f|U}(x, y, z)$ である。式は以下のようになる。

$$P_f(x, y, z) = \frac{1}{\Delta t_{total}} \int_{\Delta t_{total}} H(\varphi - \varphi_{lean}) \cdot \{1 - H(\varphi - \varphi_{rich})\} dt \quad (5.1)$$

$$P_{f|U}(x, y, z) = \frac{1}{\Delta t_{total}} \int_{\Delta t_{total}} H(\varphi - \varphi_{lean}) \cdot \{1 - H(\varphi - \varphi_{rich})\} \cdot H(U - U_c) dt \quad (5.2)$$

ここで、 Δt_{total} は処理をかけたデータの全時間、 H はヘヴィサイドの階段関数、 φ は当量比、 φ_{lean} と φ_{rich} は空気と水素の燃焼における当量比の下限値と上限値、 U_c は空気と水素の燃焼における限界速度である。ただし、本研究では、気流が 400 m/s を超える高速気流のため、オリジナルの定義に比べて大きな値 ($U_c = 100$) を採用している。Figure 5.2 にこれら2つの確率をコンターとして示している。 $P_f(x, y, z)$ コンターにおいては、上流側剥離領域、噴流の風下側せん断層、噴流の風上側せん断層、壁面近傍の再付着領域において高くなっていることが分かる。一方で、 $P_{f|U}(x, y, z)$ においては、上流側剥離領域、噴流の風下側せん断層、壁面近傍の再付着領域が高くなっていることが分かる。噴流の風上側せん断層は高速となるために $P_{f|U}(x, y, z)$ コンターでは低い確率となる。特に本研究では、スパン方向の幅が狭いシート状噴流を使用しているため、風上側せん断層での速度は高速になりやすいものと考えられる。以上のことから広範囲で高い確率となった上流側剥離領域と風下側せん断層での着火を行うことにする。

次に式 (2.166) のスパークモデルのパラメータの選定を行う。パラメータとしては、与えるエネルギーに関する ε 、スパークサイズに関する Δs 、スパーク時間 Δt に関するの3つがある。火炎が消炎せずに発展していく場合、着火の先行研究[33, 44, 45] から火炎核形成、球状火炎として膨張、火炎伝播、火炎の安定化と言ったシナリオとなることが予想される。スパークサイズについては、低速となる壁面近傍を含むサイズを選定した。また、スパーク時間については、流れの特性時間に対して同じオーダーとなるように選定した。Figure 5.3 に2つのスパーク位置における着火していない場合の当量比と速度の時間履歴を示す。図中には黒色の破線で空気水素燃焼における当量比の上限値と下限値を示している。この時間履歴からスパーク時間が流れの変動と同じオーダーとなっていることが分かる。また、上限値と下限値の間に当量比の値が存在していることから可燃当量比となっていることが分かる。与えるエネルギーに関する ε に関しては Lacaze ら[33]の見積もり式(5.3)より算出した。これら3つのパラメータは Table 5.3 に纏めら

れている。

$$T_{max} = \frac{1}{\rho C_p} \int_{-\infty}^{\infty} \dot{Q}(r=0) dt + T_0 = \frac{1}{\rho C_p} \cdot \frac{\varepsilon}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} \sigma_s^3} + T_0 \quad (5.3)$$

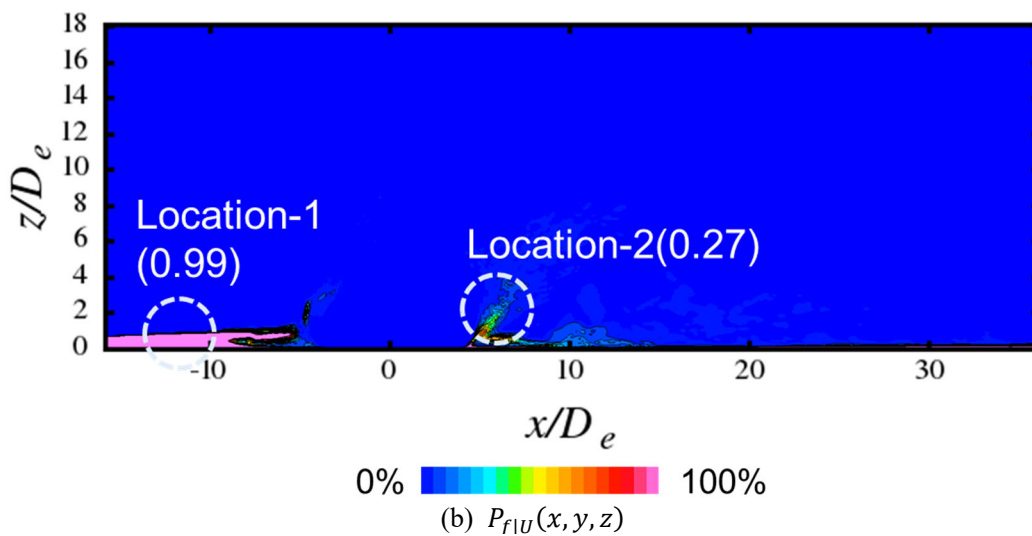
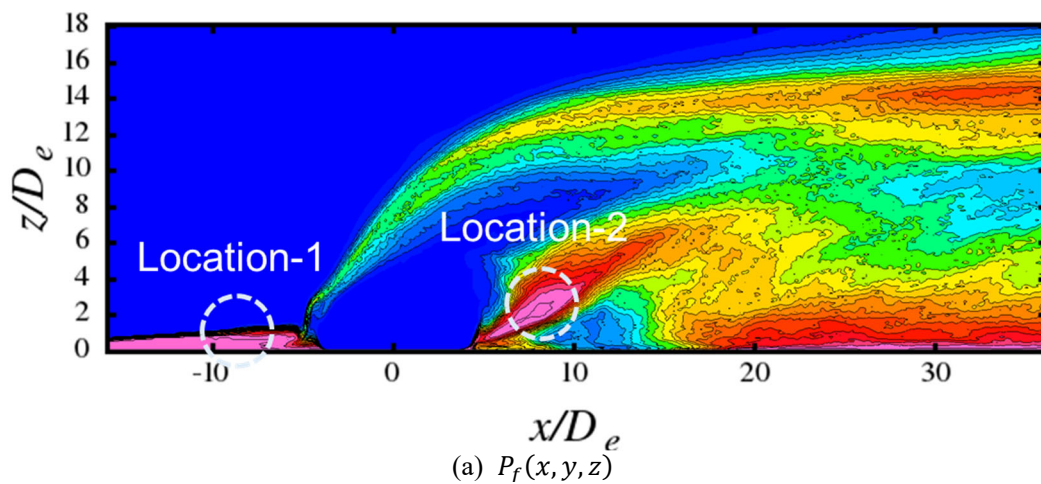


Fig. 5.2. Possibility to search for flammable location

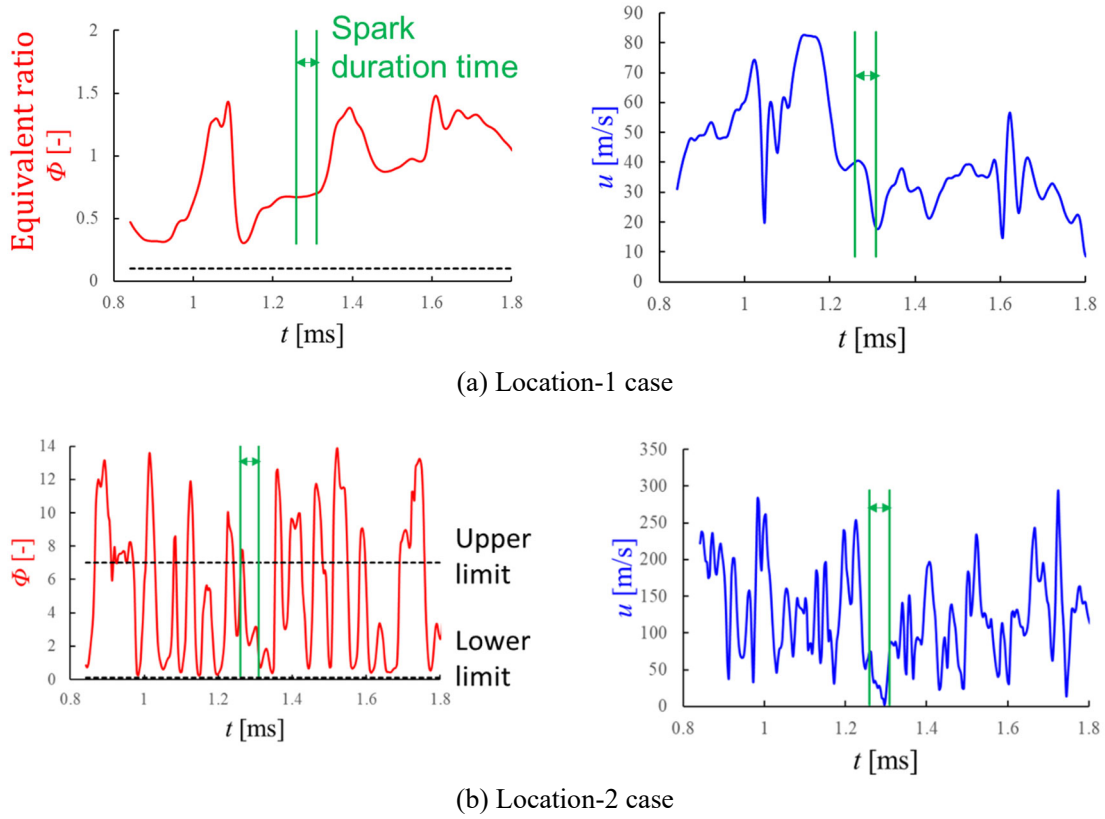


Fig. 5.3. Time-histories of equivalent ratio (left) and velocity magnitude (right).

Table 5.3. Spark parameters.

	Location-1	Location-2
ε [mJ]	0.25	1.00
Δs [mm]	3	5
Δt [ms]	0.05	

5.3 火炎挙動

検討した着火条件下で着火を行い、火炎挙動を調べる。Fig. 5.4 に Location-1 ケースの対称面上での静温コンター、静圧コンター、OH ラジカルの質量分率を示す。図中の赤枠は着火用格子の外枠を表している。このコンターは与えるスパークが最も強くなる瞬間付近の結果である。与えられたスパークにより上流側剥離領域において火炎核が形成されており、500 K を超えて温度上昇していることが分かる。静圧コンターにおいては火炎核の形成とともに圧力波が観察される。また化学反応により約 1% の OH ラジカルの質量分率が生成されている。Fig. 5.5 に Location-2 ケースの対称面上での静温コンター、静圧コンター、OH ラジカルの質量分率を示す。Fig. 5.4 と同様に図中の赤枠は着火用格子の外枠であり、これらの結果は与えるスパークが最も強くなる瞬間付近の結果である。与えられたスパークにより風下側せん断層において温度上昇しているが、その温度は約 1000K 程度である。また OH ラジカルの質量分率は 0.01% 程度しか生成されていないことが分かる。このことから Location-2 においては着火していないと予想される。次にすべての時間に対して化学反応の有無を確認するため、両ケースに対して最大静温の時間履歴を調べた。縦軸は最大静温であり、横軸は、スパークピーク時刻 t_0 とモデルパラメータ σ_t により無次元化された無次元時刻 t^* である。図中には破線によりスパークピーク時刻を表示している。この図から Location-1 と Location-2n の両方の結果で分布が非軸対称となっており、化学反応が開始していることが分かる。Location-1 においては 4000 K 程度まで温度上昇しており、スパーク時間に対してある程度の長さで火炎が伝播、維持されていることが分かる。しかし、Location-2 においては、与えるスパークが小さくなるとともに最大静温も下がっている。静温が最大でも 1000 K 程度であることと、水素空気の断熱火炎温度が 2000K であることを考えると、Location-2 においては着火成功するための十分な火炎核が形成されなかったことを示唆している。次に Location-1 の消炎メカニズムについて調べるために、火炎近傍の流れを調べた。Fig. 5.7 に対称面上での静温コンター、当量比コンター、速度ベクトル付きの速度コンターを示す。図はそれぞれ 3 つの瞬間であり、左端(a)のスパークピーク時刻周辺から一定の無次元時間を経過した瞬間となっている。また当量比のコンターには可燃当量比の下限値である 0.1 の等値線、速度のコンターには速度ベクトルの向きを示す矢印を重ねて載せている。これらの図から(a)の時刻から(b)や(c)の時刻になるにつれて消炎していくことがわかる。当量比コンターから火炎の周辺では、可燃当量比となっている。しかし、速度コンターをみると火炎周辺で 100 m/s を超えて高速流れとなっている。着火しない場合の速度は Fig. 5.3(a)より約 30m/s であった。これは着火により流れとの相互作用で火炎周辺の流れ構造が変化したことを意味する。その高速な流れは火炎に対して移流の影響を強く与えるため、火炎が吹き消えたものと考えられる。

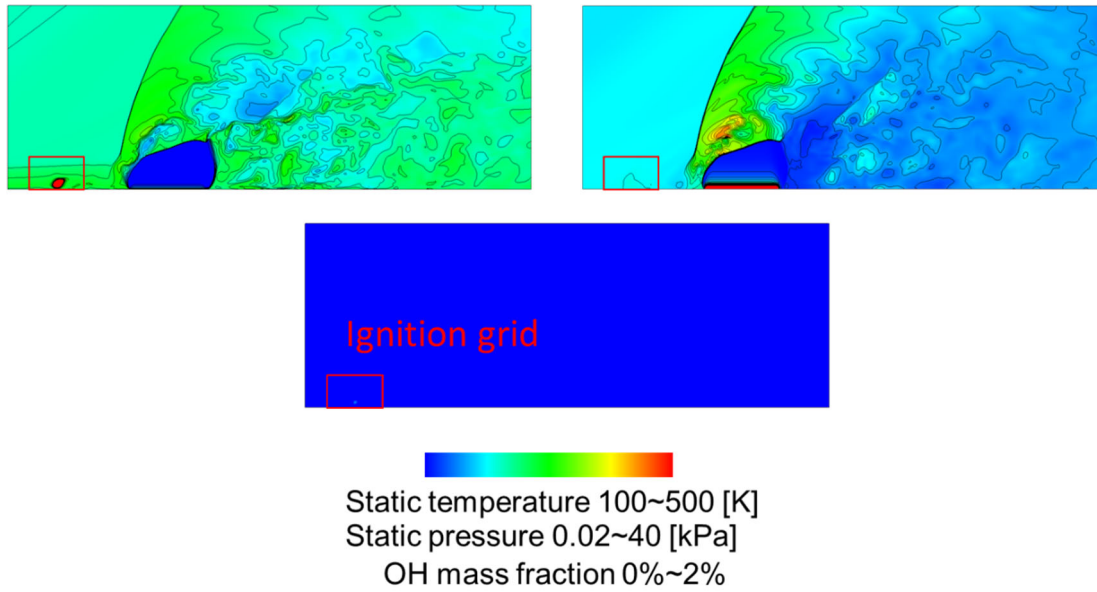


Fig. 5.4. The static temperature (left), static pressure (right) and OH mass fraction (bottom center) contours at the symmetric plane for Location-1 case.

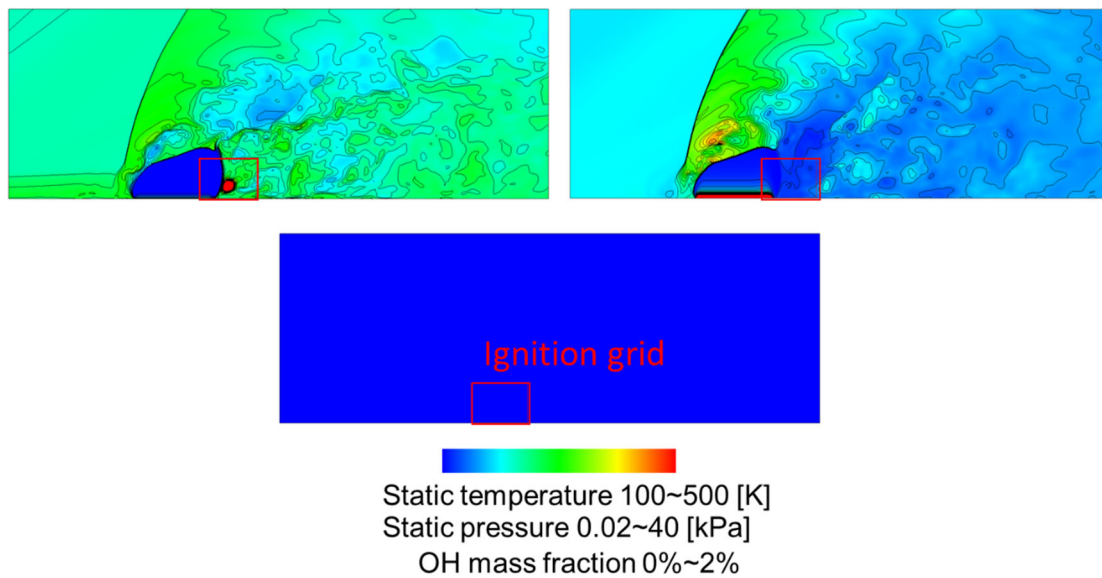


Fig. 5.5. The static temperature (left), static pressure (right) and OH mass fraction (bottom center) contours at the symmetric plane for Location-2 case.

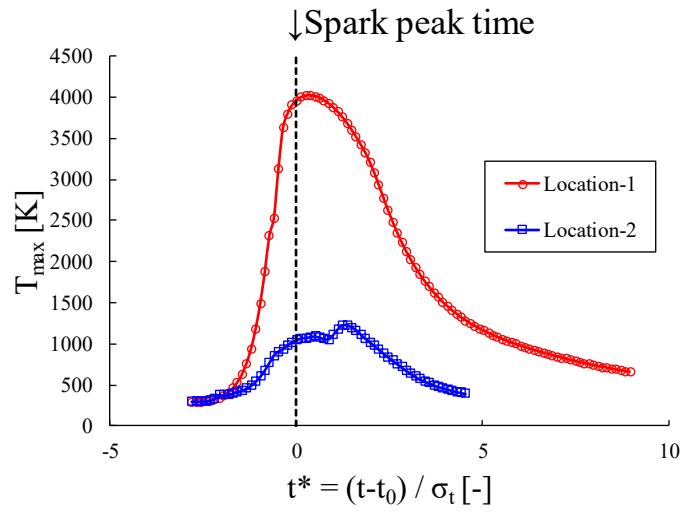


Fig. 5.6. The time histories of the maximum static temperature for each case.

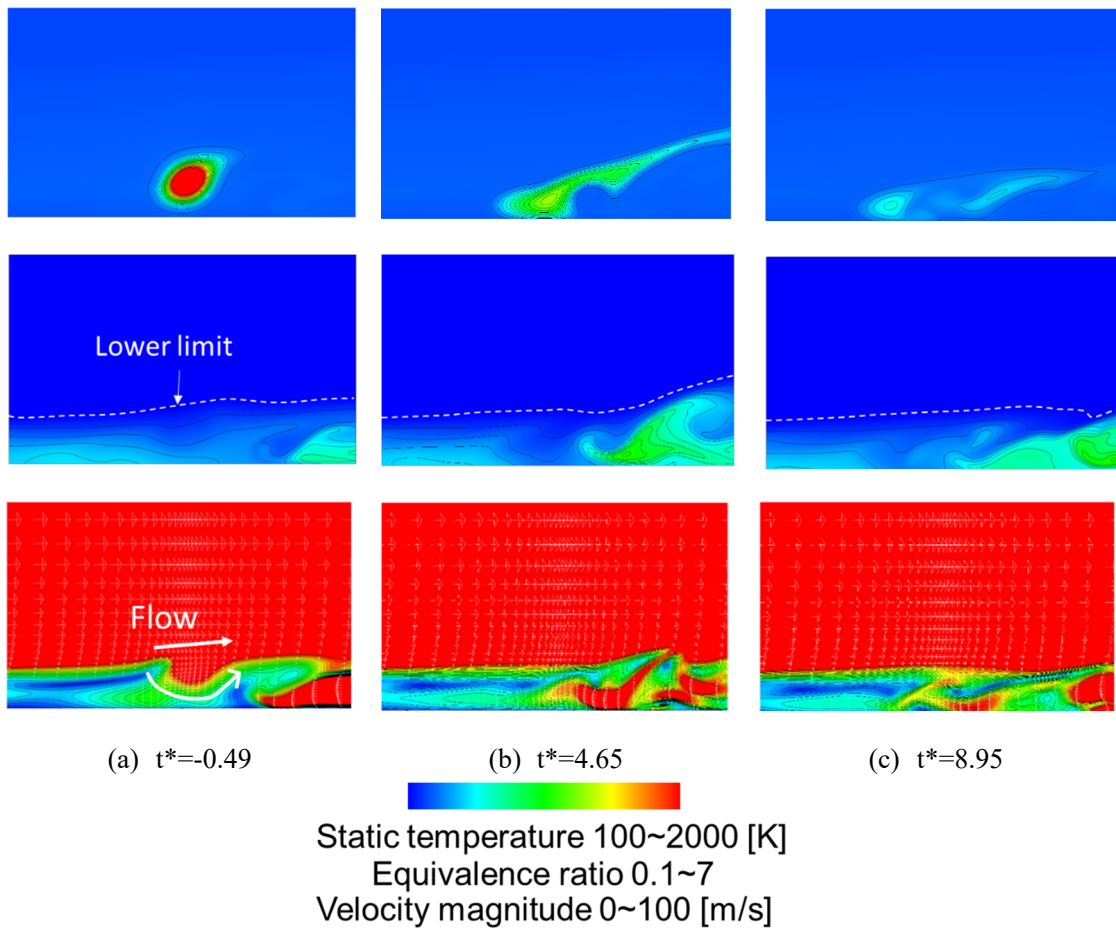


Fig. 5.7. The enlarged view of the static temperature (top), equivalence ratio (middle), and the velocity magnitude (bottom) contours at the symmetric plane for Location-1 case.

まとめ

超音速流れにおけるシート状噴流の燃焼に関して3次元数値解析を行い、以下の結果を得た。

- ・着火確率の予測式から、上流側剥離領域と噴流背後の低速領域で着火確率が高いと推定した
- ・上流側剥離領域の着火においては、スパーク後温度上昇し、化学反応が開始した。火炎の一部が伝播したが、火炎が維持されず消炎した。これは着火により火炎核周辺の流れ構造が変化し、高速の流れが発生した。その結果、移流の影響を強く受け、吹き消えたと考えられる。
- ・噴流背後の低速領域の着火においては、スパーク後温度上昇し、化学反応が開始した。しかし化学反応の開始後すぐに消炎した。これは火炎が発達するための火炎核が十分に形成されなかったからであると考えられる。

第6章 結論

指令破壊時の着火メカニズムを理解するため、超音速流れと干渉するシート状水素噴流の混合特性とスパーク付加時の火炎挙動を3次元 LES/RANS ハイブリッド解析によって調べた。本研究ではまず数値解析法を構築し、先行研究を模擬することで検証した。それからシート状噴流の混合特性を理解するため円形噴流との比較を行った。そして最後に静電気を模擬したスパークを与えて火炎の着火・消炎を調べた。

6.1 検証計算

- 円形ヘリウム噴流を用いた検証計算においては、本数値解析の結果が実験や先行研究での数値解析での結果とよく一致していることを確認した。
- 円形水素噴流での超音速燃焼の検証計算においては、本数値解析の結果が風上側せん断層や上流側剥離領域での燃焼場を十分に予測できていることを確認した。

6.2 超音速流れにおけるシート状噴流の混合

- 空間格子解像度の異なる3つの格子により格子解像度の評価を行ったところ、時間平均速度場は Baseline 格子と Fine 格子において格子収束していることが分かった。一方で TKE プロファイルにおいては格子を細かくするにつれてピークが大きくなった。
- シート状噴流ではスパン方向に CVP が発達し、下流では壁面近傍を流れる。これは後流渦を取り込むことや噴流側方の剥離領域形成につながるによるものである。
- シート状噴流では円形噴流に比べて噴流の貫通が高い。これは気流干渉の弱い風下側噴流が強く貫通するためである。
- 運動量流束比による噴流の貫通高さのスケージングを行った。また Rothstein らの経験式と概ね一致した。
- 円形噴流に比べるとシート噴流の混合効率は低い。
- 円形噴流に比べてシート噴流の噴流の広がり大きいのが、乱流崩壊が遅いため混合の進展が遅いことが分かった。

6.3 スパークによるシート状噴流の着火

- 着火確率の予測式から、上流側剥離領域と噴流背後の低速領域で着火確率が高いと推定した
- 上流側剥離領域の着火においては、スパーク後温度上昇し、化学反応が開始した。火炎の一部が伝播したが、火炎が維持されず消炎した。これは着火により火炎核周辺の

第6章 結論

流れ構造が変化し、高速の流れが発生した。その結果、移流の影響を強く受け、吹き消えたと考えられる。

- 噴流背後の低速領域の着火においては、スパーク後温度上昇し、化学反応が開始した。しかし化学反応の開始後すぐに消滅した。これは火炎が発達するための火炎核が十分に形成されなかったからであると考えられる。

参考文献

1. Osipov, V., Muratov, C., Hafiychuk, H., Ponizovskaya-Devine, E., Smelyanskiy, V., Mathias, D., Lawrence, S., Werkheiser, M.: Explosion hazard from a propellant-tank breach in liquid hydrogen-oxygen rockets. *J. Spacecr. Rockets*. 50, 860–871 (2013). doi:10.2514/1.A32277
2. Fujimoto, K., Sakai, S.: Quantitative Crew Safety Analysis. *JAXA Spec. Publ. Proc. Rocket Spacecr. Model. Lab. Symp.* 2018. JAXA-SP-18, 47–60 (2018)
3. Andrus, P.G., Walkup, L.E.: Electrostatic hazards during launch vehicle flight operations. NASA-CR-11, (1970)
4. Karagozian, A.R.: Transverse jets and their control, (2010)
5. Mahesh, K.: The Interaction of Jets with Crossflow. *Annu. Rev. Fluid Mech.* 45, 379–407 (2013). doi:10.1146/annurev-fluid-120710-101115
6. Huang, W.: Transverse jet in supersonic crossflows, (2016)
7. Viti, V., Neel, R., Schetz, J.A.: Detailed flow physics of the supersonic jet interaction flow field. *Phys. Fluids*. 21, 046101 (2009). doi:10.1063/1.3112736
8. Kawai, S., Lele, S.K.: Large-eddy simulation of jet mixing in supersonic crossflows. *AIAA J.* 48, 2063–2083 (2010). doi:10.2514/1.J050282
9. Rana, Z.A., Thornber, B., Drikakis, D.: Transverse jet injection into a supersonic turbulent cross-flow. *Phys. Fluids*. 23, 046103 (2011). doi:10.1063/1.3570692
10. Gruber, M.R., Nejad, A.S., Chen, T.H., Dutton, J.C.: Mixing and penetration studies of sonic jets in a mach 2 freestream. *J. Propuls. Power*. 11, 315–323 (1995). doi:10.2514/3.51427
11. Watanabe, J., Kouchi, T., Takita, K., Masuya, G.: Characteristics of hydrogen jets in supersonic crossflow: Large-eddy simulation study. *J. Propuls. Power*. 29, 661–674 (2013). doi:10.2514/1.B34521
12. Sun, M. bo, Hu, Z. wei: Mixing in nearwall regions downstream of a sonic jet in a supersonic crossflow at Mach 2.7. *Phys. Fluids*. 30, 106102 (2018). doi:10.1063/1.5045752
13. Bian, Y., Zhao, M., Li, Q., Ye, T.: Characteristics and mixing enhancement of a self-throttling system in a supersonic flow with transverse injections. *Int. J. Hydrogen Energy*. 43, 13550–13562 (2018). doi:10.1016/j.ijhydene.2018.05.114
14. Liang, C. hai, Sun, M. bo, Liu, Y., Li, G. xin, Yu, J. fei: Numerical study of flow structures and mixing characteristics of a sonic jet in supersonic crossflow. *Acta Astronaut.* 166, 78–88 (2020). doi:10.1016/j.actaastro.2019.10.008
15. Gruber, M.R., Nejad, A.S., Chen, T.H., Dutton, J.C.: Transverse Injection from Circular and Elliptic Nozzles into a Supersonic Crossflow. *J. Propuls. Power*. 16, 449–457 (2000). doi:10.2514/2.5609
16. Wang, G.L., Chen, L.W., Lu, X.Y.: Effects of the injector geometry on a sonic jet into a

- supersonic crossflow. *Sci. China Physics, Mech. Astron.* 56, 366–377 (2013).
doi:10.1007/s11433-012-4984-2
17. Tomioka, S., Jacobsen, L.S., Schetz, J.A.: Sonic injection from diamond-shaped orifices into a supersonic crossflow. *J. Propuls. Power.* 19, 104–114 (2003). doi:10.2514/2.6086
 18. Kouchi, T., Masuya, G., Hirano, K., Matsuo, A., Tomioka, S.: Supersonic combustion using a stinger-shaped fuel injector. *J. Propuls. Power.* 29, 639–647 (2013). doi:10.2514/1.B34524
 19. Ben-Yakar, A., Mungal, M.G., Hanson, R.K.: Time evolution and mixing characteristics of hydrogen and ethylene transverse jets in supersonic crossflows. *Phys. Fluids.* 18, 026101 (2006). doi:10.1063/1.2139684
 20. Gamba, M., Mungal, M.G.: Ignition, flame structure and near-wall burning in transverse hydrogen jets in supersonic crossflow. *J. Fluid Mech.* 780, 226–273 (2015). doi:DOI: 10.1017/jfm.2015.454
 21. Liu, C., Wang, Z., Wang, H., Sun, M.: Numerical investigation on mixing and combustion of transverse hydrogen jet in a high-enthalpy supersonic crossflow. *Acta Astronaut.* 116, 93–105 (2015). doi:https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2015.06.023
 22. Liu, C., Yu, J., Wang, Z., Sun, M., Wang, H., Grosshans, H.: Characteristics of hydrogen jet combustion in a high-enthalpy supersonic crossflow. *Phys. Fluids.* 31, 46105 (2019). doi:10.1063/1.5084751
 23. Stull, D.R., Prophet, H.: JANAF Thermochemical Tables -2nd ed.- 37. (1971)
 24. Shimizu, K., Hibi, A., Koshi, M., Morii, Y., Tsuboi, N.: Updated Kinetic Mechanism for High-Pressure Hydrogen Combustion. *J. Propuls. Power.* 27, 383–395 (2011). doi:10.2514/1.48553
 25. Wada, Y., Liou, M.-S.: A flux splitting scheme with high-resolution and robustness for discontinuities. Presented at the January 10 (1994)
 26. Shuen, J.-S.: Upwind differencing and LU factorization for chemical non-equilibrium navier-stokes equations. *J. Comput. Phys.* 99, 233–250 (1992). doi:https://doi.org/10.1016/0021-9991(92)90205-D
 27. Fujii, K., Obayashi, S.: Practical applications of new LU-ADI scheme for the three-dimensional Navier-Stokes computation of transonic viscous flows. Presented at the January 6 (1986)
 28. Gottlieb, S., Shu, C.-W.: Total Variation Diminishing Runge-Kutta Schemes. *Math. Comput.* 67, 73–85 (1998). doi:10.1090/S0025-5718-98-00913-2
 29. Muto, D., Terashima, H., Tsuboi, N.: Characteristics of Jet-Mixing at Supercritical Pressure: Effects of Recess Length and Post Height. *Trans. Japan Soc. Aeronaut. Sp. Sci. Aerosp. Technol. Japan.* 14, 45–52 (2016). doi:10.2322/tastj.14.pa_45
 30. Muto, D., Terashima, H., Araki, T., Tsuboi, N.: Effects of a Recess on Coaxial Cryogenic Injections at Supercritical Pressure. *J. Propuls. Power.* 1–11 (2022). doi:10.2514/1.B38552
 31. Spalart, P.R., Allmaras, S.R.: One-equation turbulence model for aerodynamic flows. *Rech.*

- Aerosp. 5–21 (1994). doi:10.2514/6.1992-439
32. Boris, J.P., Grinstein, F.F., Oran, E.S., Kolbe, R.L.: New insights into large eddy simulation. *Fluid Dyn. Res.* 10, 199–228 (1992). doi:10.1016/0169-5983(92)90023-P
 33. Lacaze, G., Richardson, E., Poinso, T.: Large eddy simulation of spark ignition in a turbulent methane jet. *Combust. Flame.* 156, 1993–2009 (2009). doi:https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2009.05.006
 34. Fujii, K.: Unified Zonal Method Based on the Fortified Solution Algorithm. *J. Comput. Phys.* 118, 92–108 (1995). doi:https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1082
 35. Sagaut, P., Garnier, E., Tromeur, E., Larchevêque, L., Labourasse, E.: Turbulent Inflow Conditions for Large-Eddy Simulation of Compressible Wall-Bounded Flows. *AIAA J.* 42, 469–477 (2004). doi:10.2514/1.3461
 36. Takahashi, H., Masuya, G., Hirota, M.: Effects of injection and main flow conditions on supersonic turbulent mixing structure. *AIAA J.* 48, 1748–1756 (2010). doi:10.2514/1.J050355
 37. Watanabe, J., Kouchi, T., Takita, K., Masuya, G.: Large-eddy simulation of jet in supersonic crossflow with different injectant species. In: *AIAA Journal*. pp. 2765–2778 (2012)
 38. Liang, C. hai, Sun, M. bo, Liu, Y., Yang, Y. xin: Shock wave structures in the wake of sonic transverse jet into a supersonic crossflow. *Acta Astronaut.* 148, 12–21 (2018). doi:10.1016/j.actaastro.2018.04.009
 39. Yang, Y., Wang, H., Sun, M., Wang, Z., Wang, Y.: Numerical investigation of transverse jet in supersonic crossflow using a high-order nonlinear filter scheme. *Acta Astronaut.* 154, 74–81 (2019). doi:10.1016/j.actaastro.2018.10.006
 40. Muppidi, S., Mahesh, K.: Study of trajectories of jets in crossflow using direct numerical simulations. *J. Fluid Mech.* 530, 81–100 (2005). doi:10.1017/S0022112005003514
 41. Chai, X., Iyer, P.S., Mahesh, K.: Numerical study of high speed jets in crossflow. *J. Fluid Mech.* 785, 152–188 (2015). doi:10.1017/jfm.2015.612
 42. Rothstein, A.D., Wantuck, P.J.: A study of the normal injection of hydrogen into a heated supersonic flow using planar laser-induced fluorescence. In: *AIAA/ASME/SAE/ASEE 28th Joint Propulsion Conference and Exhibit, 1992*. American Institute of Aeronautics and Astronautics Inc, AIAA (1992)
 43. Rogers, R.C.: A Study of the Mixing of Hydrogen Injected Normal to a Supersonic Airstream. (1971)
 44. Gurliat, O., Schmidt, V., Haidn, O.J., Oswald, M.: Ignition of cryogenic H₂/LOX sprays. *Aerosp. Sci. Technol.* 7, 517–531 (2003). doi:https://doi.org/10.1016/S1270-9638(03)00059-2
 45. Bilger, R.W., Pope, S.B., Bray, K.N.C., Driscoll, J.F.: Paradigms in turbulent combustion research. *Proc. Combust. Inst.* 30, 21–42 (2005). doi:https://doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.273
-

研究業績

査読論文

○Toshihiro Iwasa, Nobuyuki Tsuboi, “Numerical Simulation of Jet Mixing in Supersonic Crossflow: Effect of Jet Exit Geometry”, Trans. Japan Soc. Aero. Space Sci., Vol. 65, No. 4, pp. 172–184, 2022.

国際会議における発表

(口頭発表・査読あり)

○Toshihiro Iwasa, Keiichiro Fujimoto, Daiki Muto, Nobuyuki Tsuboi, “Numerical Simulations of Transverse Jet in Supersonic Crossflow toward an Understanding of Interaction Mechanism”, 31st ISSW(International Symposium on Shock Wave), SBM000350, Nagoya, Japan, July 2017.

○Toshihiro Iwasa, Keiichiro Fujimoto, Daiki Muto, Nobuyuki Tsuboi, “Mixing characteristics of the slit-shaped hydrogen jet in supersonic crossflow”, 32nd ISSW(International Symposium on Shock Wave), OR-21-357, Singapore, July 2019.

(口頭発表・査読なし)

○Toshihiro Iwasa, Keiichiro Fujimoto, Daiki Muto, Nobuyuki Tsuboi, “Numerical Simulations of Hydrogen Jet Mixing in Supersonic Crossflow for Liquid Rocket Commanded Destruction”, 12th ACFD(Asian Computational Fluid Dynamics Conference), 0104, Yilan, Taiwan, October 2018.

国内学会における発表

(口頭発表 査読なし)

○岩佐聡洋, 武藤大貴, 藤本圭一郎, 坪井伸幸, “液体燃料ロケットタンク破壊時の推進剤ジェット・主流の干渉構造に関する数値解析”, 日本機械学会九州支部第 69 期総会・講演会, D-08, 熊本, 2016 年 3 月.

○岩佐聡洋, 武藤大貴, 藤本圭一郎, 坪井伸幸, “液体燃料ロケットタンク破壊時の推進剤ジェット・主流の干渉メカニズムに関する数値解析”, 日本機械学会 2016 年度年次大会, G0500205, 福岡, 2016 年 9 月.

○岩佐聡洋, 藤本圭一郎, 武藤大貴, 坪井伸幸, “液体ロケットタンク破壊時の燃料噴流と超音速気流の干渉メカニズム”, 平成 29 年度衝撃波シンポジウム, 1A3-4, 宮城, 2018 年 3 月.

謝辞

本研究を行うにあたり，多くの方々にご支援して頂きました．ここに感謝いたします．

九州工業大学の坪井伸幸教授には，学部生の時から長きにわたりご指導頂きました．様々な学びの機会を与えて下さり，誠に感謝しております．

九州工業大学の宮崎康次教授，梅景俊彦教授，豊田和弘教授には，学位審査において多くのご助言を頂きました．誠に感謝しております．

九州工業大学の小澤晃平准教授には，研究室内のセミナーでご指導頂きました．誠に感謝しております．

青山学院大学の林光一名誉教授，岐阜大学の朝原誠助教には，高圧水素噴流の共同研究に参加させて頂き，本研究についてもご助言を頂きました．誠に感謝しております．

宇宙研究開発機構の藤本圭一郎博士と研究室 OB の武藤大貴博士には，本研究の指針を決める際に多くのご助言を頂きました．誠に感謝しております．

反応流体力学研究室の皆様には毎週のセミナーや研究室イベントでお世話になりました．特に博士課程の同期である荒木天秀さんと Nicolas Jourdain くんとは共に切磋琢磨し，有意義な研究室生活を送ることができました．

最後に，長い学生生活を理解して支えてくれた両親に感謝します．

2022 年 2 月 岩佐聡洋