極超音速熱・化学非平衡を考慮した鈍頭物体後流の高解像度数値解析*

長 友 英 夫*¹, 山 本 悟*², 大宮司 久明*²Numerical Simulation of Hypersonic Non-Equilibrium Wake Flow
Using a Higher-Resolution Method

Hideo NAGATOMO, Satoru YAMAMOTO and Hisaaki DAIGUJI

An object which flies hypersonic speed, such as an aeroassisted orbital transfer vehicle, is affected greatly by not only the bow shock but also the expansion around the shoulder and the recompression of separated flow. Though the experiments to analyze this flow have been performed by some groups recently, there are some difficulties in measuring the flow because of limitations of instrumentation. Both experimental and numerical approaches are necessary to analyze the phenomena. The efficient numerical code which has been developed by the authors for hypersonic thermochemical non equilibrium flow is applied to simulate the problem. The calculated results of different accuracies in space, the perfect gas and the experimental data are compared.

Key Words: Numerical Analysis, Hypersonic Flow, Non Equilibrium Flow, Wake, Axisymmetric Flow, FDM, Flux-Vector Splitting Scheme

1. はじめに

大気圏に再突入する極超音速飛行体を設計する際、飛行体の上流に発生する強い離脱衝撃波が大きな問題となる⁽¹⁾。その一方で物体後方での再圧縮による影響も無視できない。これは物体に沿った流れが肩口で急激に膨張し、後方背面に流れ込むことによって加速された流れが物体後方で再び圧縮されたためであり、この再圧縮される点付近の物体表面では熱流束が極大値をとる。このため実験とともに数値シミュレーションによる解析が欠かせない⁽²⁾⁽³⁾。しかしながら、計算量、衝撃波捕獲、膨張・再循環領域の解像度等の問題から熱・化学非平衡を考慮した極超音速流の後流の数値解析はまだ十分な行なわれていないようである。一方、実験に関しても近年DLR(ドイツ航空研究所)で実在気体効果を考慮した鈍頭物体周りの実験⁽⁴⁾を行なっているがまだ十分なデータが得られおらず、このような流れ場の解明には実験、数値解析双方の努力が必要となっている。

著者らは最近極超音速熱・化学非平衡流れのための高解像度を有する高効率陰的差分スキームを開発した

(5)。ここで用いられる数値解法は流束分離法に基づいており強い離脱衝撃波を捕らえることが可能である。また空間方向4次精度のコンパクトMUSCL TVDスキームを用いていることで衝撃波渦干渉を含むような複雑な流れをより鮮明にシミュレーションできる⁽⁶⁾。さらに流束分離法に基づく陰的アルゴリズムを用いることで計算の効率を改善することができる。

数値計算例として、後流域を考慮した鈍頭円錐物体周りの計算結果を行い、空間精度の違いや反応の有無による計算結果の比較を行い、かつ既存の実験結果と比較することで本解法の妥当性を検証する。

2. 数値解法

2・1 基礎方程式 ここで用いる一般曲線座標系の極超音速熱・化学非平衡流の基礎方程式は、各々の化学種(N_2 , O_2 , NO , NO^+ , N , O , Ar , e^-)の連続の式、運動方程式、エネルギー式、分子振動・電子励起エネルギー方程式から成っており、未知変数ベクトル Q 、流束 F_i 、拡散項 S 、生成項 H 、変換のヤコビアン J 、変換のメトリックス ξ_i などを用いて次式のように表される。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F_i}{\partial \xi_i} + S + H = 0 \quad (1)$$

ただし、

* 原稿受付 1995年8月25日。

*¹ 正員、東北大学大学院(〒981 仙台市青葉区荒巻字青葉)。*² 正員、東北大学工学部。

$$Q = J \begin{bmatrix} \rho_s \\ \rho u_i \\ \rho u_j \\ E \\ E_v \end{bmatrix}, \quad F_i = \begin{bmatrix} \rho_s U_i \\ \rho u_i U_i + \partial \xi_i / \partial x_i p \\ \rho u_j U_i + \partial \xi_j / \partial x_j p \\ (E+p)U_i \\ E_v U_i \end{bmatrix},$$

$$S = -J \frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial \xi_i} \begin{bmatrix} -\rho_s v_{sj} \\ \tau_{ij} \\ \tau_{2j} \\ \tau_{ij} u_i - q_j - \sum_{s \neq e} \rho_s v_{sj} h_s \\ -q_{vj} - \sum_{s \neq e} \rho_s e_{vs} v_{sj} \end{bmatrix}, \quad H = -J \begin{bmatrix} w_s \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ w_v \end{bmatrix}$$

$$(s = 1, \dots, n, i = 1, 2)$$

ここでは並進温度と回転温度は等しく、一方、すべての分子振動温度ならびに電子励起温度が等しいと仮定した。また輻射は考慮しない。さらに、化学反応などについては主にParkら(7)のモデルを用いた。 n は化学種の種類の数、 m は2原子分子の種類の数である。 Q と F_i に含まれる ρ_s 、 u_i 、 E 、 E_v 、 U_i 、 p はそれぞれ、化学種 s の密度、速度成分、全エネルギー、振動・電子エネルギー、反変速度、圧力である。拡散項 S に含まれる τ_{ij} 、 q_j 、 q_{vj} 、 h_s 、 v_{sj} 、 e_{vs} はひずみテンソル、熱流束、振動熱流束、化学種 s のエンタルピー、拡散速度、化学種 s の振動エネルギーである。生成項 H の中の化学種 s の生成 w_s と生成エネルギー w_v は主に文献(7)(8)から引用した。岐点エネルギー E と圧力 p は次式のように定義される。

$$E = \sum_{s \neq e} \rho_s C_{vs} T + \frac{1}{2} \rho u_i u_i + E_v + \sum_{s \neq e} \rho_s h_s^0 + \sum_{s \neq e} \rho_s e_{els}$$

$$p = \sum_{s \neq e} \rho_s \frac{R}{M} T + p_e, \quad \bar{R} = \sum_{s \neq e} \frac{\rho_s R}{\rho M_s}$$

ただし、 C_{vs} 、 h_s^0 、 e_{els} はそれぞれ化学種 s の定積比熱比、生成エンタルピー、電子エネルギーである。 R 、 M_s 、 p_e は気体定数、化学種 s の分子量、そして電子の分圧である。

2・2 化学反応モデル 本解法で考慮した化学反応は以下の通りである。

ただし、 M は電子 e を除く各化学種を意味する。反応 m の反応生成速度を決める順反応速度係数 $k_{fm}(\bar{T})$ 及び逆反応速度係数 $k_{bm}(\bar{T})$ は以下のArrhenius

の式から求めた。ただし、 $\bar{T}$ は並進・回転温度と分子振動温度の幾何平均 $\bar{T} = \sqrt{T T_v}$ とする。

$$k_{fm}(\bar{T}) = C_{fm} \bar{T}^m \exp(-\theta_m / \bar{T})$$

$$k_{bm}(\bar{T}) = \frac{k_{fm}(\bar{T})}{K_{eqm}(\bar{T})}$$

ここで、反応定数 C_{fm} 、特性温度 θ_m 、化学平衡定数 $K_{eqm}(\bar{T})$ はParkのモデル関数(7)を用いた。

式(1)に必要なひずみテンソル、熱流束、分子振動熱流束は次のように表される。

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

$$q_j = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_j}, \quad q_{vj} = -\kappa_v \frac{\partial T_v}{\partial x_j}$$

拡散に関わる係数、粘性係数 μ および熱伝導率 κ を求めるには、まず次式で表されるBlottnerの提案した温度の関数式から各々の化学種 s の粘性係数 μ_s を求める。

$$\mu_s = 0.1 \exp[(A_s \ln T + B_s) \ln T + C_s]$$

また、各化学種の熱伝導率 κ_s は並進および回転の定積比熱比 $C_{v,trans}$ 、 $C_{v,rot}$ を用いて次式から求める。

$$\kappa_s = \mu_s \left(\frac{5}{2} C_{v,trans} + C_{v,rot} \right)$$

各化学種ごとの粘性係数及び熱伝導率をWilkeの式に代入することによって混合気体の粘性係数が求まる。すなわち

$$\mu = \sum_s \frac{X_s \mu_s}{\phi_s}, \quad \kappa = \sum_s \frac{X_s \kappa_s}{\phi_s}$$

ここで

$$X_s = \frac{\rho_s M}{\rho M_s}, \quad M = \left(\sum_s \frac{\rho_s}{\rho M_s} \right)^{-1}$$

$$\phi_s = \sum_{r \neq s} X_r \left[1 + \sqrt{\frac{\mu_r}{\mu_s}} \left(\frac{M_r}{M_s} \right)^{1/4} \right]^2 \left[\sqrt{8 \left(1 + \frac{M_r}{M_s} \right)} \right]^{-1}$$

一方、拡散速度 v_{sj} は次式であたえられる。

$$\rho_s v_{sj} = \rho D_s \frac{\partial (\rho_s / \rho)}{\partial x_j}$$

ただし、拡散速度係数 D_s はLeeによるモデル関数(8)を用いた。

2・3 離散化 流束の空間方向の離散化には著者らによって開発された流束分離法が用いられる(6)。この場合、数値流束ベクトルは正及び負のみの固有値からなるヤコビ行列、 $(A_i^+)^{1/2}$ 、 $(A_i^-)^{1/2}$ を用いて次のように線形化および上流化される。

$$(F_i)_{i+1/2}^n = (A_i^+)_{i+1/2} Q_{i+1/2}^L + (A_i^-)_{i+1/2} Q_{i+1/2}^R \quad (2)$$

ここで、 $Q_{i+1/2}^L$ 、 $Q_{i+1/2}^R$ は4次精度コンパクトMUSCL TVD スキーム⁽⁵⁾によってそれぞれ左右から補間される。すなわち、

$$Q_{i+1/2}^L = Q_i + \frac{1}{6} \Delta^+ Q_{i+1/2} + \frac{1}{3} \Delta^- Q_{i+1/2}$$

$$Q_{i+1/2}^R = Q_{i+1} - \frac{1}{6} \Delta^- Q_{i+3/2} - \frac{1}{3} \Delta^+ Q_{i+1/2}$$

ただし、 $\Delta^+ Q_{i+1/2}$ などは Q の4次精度の項までを考慮し、またTVD安定性を確保するためにminmod関数を用いて変数の勾配、曲率を制限して求めている。

次にこの方程式系の定常解を効率よく求めるための陰解法について示す。既存の数値解法ではGauss-Seidalに基づいた陰的緩和法が数多く利用されているが、本解法ではその中で対流項にはYoonら⁽⁹⁾の提案した近似的な対角化LU-SGS法、生成項にはEberhardt⁽¹⁰⁾の提案した対角化点陰解法などを用いる。すると式(1)は Q の時間微分 δQ を用いて次式ようになる。

$$[I + \Delta t \{ \beta \alpha(A_i) + \text{diag}(\frac{1}{\tau}) + \text{diag}(\alpha_j) \}] \delta Q = RHS - \Delta t \{ (A_j^-)_{i+1/2} \delta Q_{i+1} - (A_j^+)_{i-1/2} \delta Q_{i-1} \} \quad (3)$$

ここで、

$$RHS = \Delta t (\Delta F_i^n + S^n + H^n) \quad (4)$$

ただし、 $\alpha(A_i)$ はヤコビ行列 A_i のスペクトル半径で、ここでは A_i の固有値の絶対値の最大値とする。 τ は文献⁽¹⁰⁾で提案されたもの、また α_j は $2\mu g_{ji}/(Re \rho \Delta \xi_j)$ とした。この式(3)は次式のように完全に対角化される。

$$\begin{aligned} \delta Q^* &= D^{-1} [RHS - \Delta t \{ (A_j^+)_{i-1/2} \delta Q_{i-1} \}] \\ \delta Q &= \delta Q^* - D^{-1} \Delta t \{ (A_j^-)_{i+1/2} \delta Q_{i+1} \} \\ D &= [I + \Delta t \{ \beta \alpha(A_i) + \text{diag}(\frac{1}{\tau}) + \text{diag}(\alpha_j) \}] \end{aligned}$$

この式は独立した代数方程式系になっており、計算時間を大幅に節約できる。

また、本解法で用いる流束分離法では、流束 $A_i^+ Q$ と $A_i^- \Delta Q$ が次式のように統一された形で表される。

$$A_i^+ Q = J \begin{bmatrix} \bar{q}_s \\ \bar{q}_{u_1} \\ \bar{q}_{u_2} \\ \bar{q}_E \\ \bar{q}_{E_1} \end{bmatrix} \lambda_{ii}^+ + \frac{J}{c \sqrt{g_{ii}}} \begin{bmatrix} 0 & + & \bar{q}_s / \bar{q}_0 \cdot \Delta U_i \\ \xi_{i,1} \bar{p} & + & \bar{q}_{u_1} / \bar{q}_0 \cdot \Delta U_i \\ \xi_{i,2} \bar{p} & + & \bar{q}_{u_2} / \bar{q}_0 \cdot \Delta U_i \\ U_i \bar{p} & + & (\bar{\chi}^2 + c^2) / \bar{\gamma} \cdot \Delta U_i \\ 0 & + & \bar{q}_{E_1} / \bar{q}_0 \cdot \Delta U_i \end{bmatrix} \lambda_{ia}^+$$

$$+ \frac{J}{c^2} \begin{bmatrix} \bar{q}_{u_1} / \bar{q}_0 \cdot \bar{p} & + & 0 \\ \bar{q}_{u_1} / \bar{q}_0 \cdot \bar{p} & + & \xi_{i,1} c^2 / g_{ii} \cdot \Delta U_i \\ \bar{q}_{u_2} / \bar{q}_0 \cdot \bar{p} & + & \xi_{i,2} c^2 / g_{ii} \cdot \Delta U_i \\ (\bar{\chi}^2 + c^2) / \bar{\gamma} \cdot \bar{p} & + & U_i c^2 / g_{ii} \cdot \Delta U_i \\ \bar{q}_{E_1} / \bar{q}_0 \cdot \bar{p} & + & 0 \end{bmatrix} \lambda_{ib}^+ \quad (5)$$

ただし、

$$\bar{p} = \bar{q}_0 \bar{\phi}^2 - (\bar{\gamma} \bar{q}_0 \bar{q}_{u_1} - \bar{q}_0 \bar{q}_E - \bar{q}_0 \bar{q}_{E_1}) / \bar{q}_0$$

$$\bar{\phi}^2 = \bar{\gamma} (\bar{q}_{u_1} \bar{q}_{u_2} / 2 \bar{q}_0^2 - \sum_{s \neq e} \bar{q}_s h_s^0 / \bar{q}_0 - \sum_{s \neq e} \bar{q}_s e_{els} / \bar{q}_0)$$

$$\bar{\chi}^2 = \bar{\gamma} (\bar{q}_{u_1} \bar{q}_{u_2} / 2 \bar{q}_0^2 - \bar{q}_{E_1} / \bar{q}_0 + \sum_{s \neq e} \bar{q}_s h_s^0 / \bar{q}_0 + \sum_{s \neq e} \bar{q}_s e_{els} / \bar{q}_0)$$

$$\Delta U_i = \xi_{i,j} \bar{q}_{u_j} - \bar{q}_0 \xi_{i,j} \bar{q}_{u_j} / \bar{q}_0$$

λ_{ii}^+ 、 λ_{ii}^- 、 λ_{ij}^+ は固有値 λ_{ij} を用いて次式のように表される。

$$\lambda_{ij}^{\pm} = (\lambda_{ij} \pm |\lambda_{ij}|) / 2 \quad (j = 1, 3, 4)$$

$$\lambda_{ia}^+ = (\lambda_{i3}^+ - \lambda_{i4}^+) / 2, \quad \lambda_{ib}^+ = (\lambda_{i3}^+ + \lambda_{i4}^+) / 2 - \lambda_{ii}^+$$

式(5)を右辺に用いる場合は、 $\bar{Q} = (\bar{q}_s, \bar{q}_{u_1}, \bar{q}_{u_2}, \bar{q}_E, \bar{q}_{E_1})$ を Q と置き、一方、左辺の計算の場合には $\bar{Q}$ を δQ に置き換えられる。このため、必要以上の固有ベクトル行列などの計算が省略できる。なお、流束分離法で極超音速流れの計算を行なう際に問題となる境界層内の過度の数値粘性は、Rocの平均化の操作などを適用することによって回避できる。なお、離脱衝撃波の位置、よどみ点流線における温度、化学種の分布など物体の前方に関する検証は文献⁽⁶⁾で行った。

3. 計算結果

図1に示す鈍頭円錐物体周り流れの数値シミュレーションを行なった。

Fig. 1 Configuration of blunted cone

計算条件はDLRの実験データ(4)をもとにした値を用いた。すなわち、一様流ではマッハ数 $M_\infty = 10.12$ 、流速 $u_\infty = 4539.5$ [m/s]、圧力 $p_\infty = 588.42$ [Pa]、並進・回転温度および分子振動温度 $T_\infty = T_{v,\infty} = 489.89$ [K]、また物体表面は等温壁で $T_w = T_{v,w} = 295$ [K] と仮定する。さらに一様流のモル質量比は表1の通りである。計算格子を図2に示す。格子点数は 161×241 で軸対称を仮定して計算する。なお、この計算格子は航空宇宙技術研究所主催の高エンタルピー流れのCFDワークショップで配布された標準的な計算格子である。

Table 1 Molar concentration of freestream

species	molar concentration
N ₂	2.57383E10 ⁻² mol/g
O ₂	5.21726E10 ⁻³ mol/g
NO	2.37145E10 ⁻³ mol/g
NO+	1.27306E10 ⁻⁹ mol/g
N	1.69675E10 ⁻⁸ mol/g
O	1.69159E10 ⁻³ mol/g
Ar	3.45180E10 ⁻⁴ mol/g
e ⁻	1.27306E10 ⁻⁹ mol/g

Fig. 2 Computational mesh (161 × 241 grid points)

図3, 4に、熱化学非平衡を考慮した空間2次精度スキームと本解法による回転・並進温度を示す。なお、今回の流れ場の計算では3次精度および4次精度の計算結果に大きな違いは見られなかった。ただし、流れ場によっては4次精度を用いることによって渦や接触不

連続面などを鋭く捕えることができ、また計算量も大差ないことから4次精度による計算を行った(5)。図5には4次精度コンパクトMUSCL TVDスキームによる反応を無視した場合の流れの温度分布を示す。これらの図を比較すると、図3の場合は物体の肩口でせん断層が一様流に対して約25度の角度をなしているのに対し本解法を用いた図4の場合はこの角度が約20度となっている。その結果、図3では物体背部で膨張した流れが再圧縮される位置は本解法の場合よりかなり前方に位置している。一方、反応を考慮しない場合は反応を考慮した場合に比べてかなり後方で再圧縮され、また衝撃波もほとんど捕えられていない。図6に最大値で無次元化した物体表面の熱流束($Q/Q_{\max}$)を示す。ただし、図中の実験はLaRC(11)及びDLR(4)のデータを引用した。また、 S_{surf} は物体前方の中心から表面に沿った距離をnose半径38.1mmで無次元化した長さである(図1参照)。数値計算結果、実験ともに反応なしの場合の方が反応を考慮したときより再付着点および熱流束の極大値をとる点が後方 $S_{surf} = 8.5$ 付近に位置するのが確認できる。反応を考慮した場合、2次精度では熱流束が極大値になる位置が実験結果よりやや前方であるのに対して、高次精度の場合は実験とほぼ同じ位置、 $S_{surf} = 8.0$ で極大値を取り、定性的には一致した。ただし、その値は実験値の約半分であった。これは実験では壁面条件を非触媒性としていたが、実際には触媒性になっていた可能性がある点(4)、計算条件が実験条件と完全に一致していなかったことが考えられる。また、拡大ノズルを通る化学反応を伴った流れのように膨張領域を含む極超音速流れでは実験と数値解析による結果が一致しないことが指摘されている(12)。これは、現在までに提案されている化学反応モデルが膨張領域に十分適応できないためと考えられている。今回の流れ場でも膨張領域が含まれることから、同様の影響があった可能性がある。なお、数値計算による離脱衝撃波の位置は反応がない場合が物体前方の淀み点から14.8mm、反応を考慮した場合が8.6mmであった。文献(11)には実験での距離が記述されておらず、定量的な比較はできなかった。

Fig. 3 Translational-rotational temperature contours
(2nd-order)

Fig. 4 Translational-rotational temperature contours
(4th-order)

Fig. 5 Temperature contours (non-reactive, 4th-order)

Fig. 6 Heat flux distribution on the surface

図6および図3-5での比較により、本解法が既存の解法に比べ定性的ではあるが良好な解を与えていることが示された。次に図7に本解法で計算された分子振動・電子温度分布を示す。物体前方で上昇した分子振動・電子温度は肩口で膨張し、凍結流れとなるために下流域まで高温を維持し続ける。また、図8に酸素原子の質量分率分布を示す。物体表面に影響を及ぼすとされている酸素原子の大半は後方に流れ、再循環領域には0.07以下となる。図9に等マッハ数分布を示す。この図において興味深いのは、再循環領域内に後方から前方(図の右から左)に向かう超音速領域ができることである。この流れは最大でマッハ数1.5に達する。その後衝撃波が発生して亜音速となっている。これは実験においては観察されていない現象であり、今後その存在の有無をさらに検討する必要がある。

図10に再循環領域の速度ベクトルを示す。今回の計算では全体を支配する大きな逆流領域とともに、さらに小さなスケールの渦が捕獲された。ただし、可視化した実験結果がないのでこの存在の有無も確認はできない。このように、小さなスケールの渦が確認されたことからこのような流れ場は乱流を伴った非定常流れとなっている可能性がある。ただし、本研究では軸対称を仮定しているため定常を仮定して計算した。

Fig. 7 Vibrational temperature contours

Fig. 8 O mass concentration

Fig. 9 Mach number contours

Fig. 10 Velocity vectors in the base region

4. まとめ

極超音速流れの中に置かれた鈍頭物体まわりの物体前方のみならず後方の再圧縮される領域までも含め、かつ熱・化学非平衡を考慮して、著者らによって開発された高効率陰的差分スキームにより数値解析が行われた。その結果、定性的ではあるが離脱衝撃波の離脱距離ならびに再圧縮衝撃波の位置の予測に本スキームが有効であることが示された。今後、定量的な比較を行うためには信頼できる実験データの入手に併せて、本解法の反応モデル、計算スキームの改良ならびに三次元への拡張などが必要であると思われる。

最後に本研究においては航空宇宙技術研究所で行われた高エンタルピー流れのCFDワークショップで配布された計算格子を使用しました。関係方々に深く感謝いたします。

文 献

- (1) Anderson, J.D., Jr., Hypersonic and High Temperature Gas Dynamics, McGraw-Hill, (1989).
- (2) Lees, L, AIAA Journal, **2** (1964), 417-428
- (3) Gnoffo, P.A., Price, J.M. and Braun, R.D., J. Spacecraft and Rockets, **29** (1991), 182-189.
- (4) Kastell, D., Horvath, T.J., Eitelberg, G., Proc. of Second European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, esa SP-367 (1995), 383-389.
- (5) Yamamoto, S., and Daiguji, S., J. Comput. & Fluids, **2/3** (1993), 259-270.
- (6) Yamamoto, S., Nagatomo, H. and Daiguji, H., Proc. of the 14th ICNMF, Lecture Notes in Phys., Springer-Verlag, (1995), pp.314-319.
- (7) Park, C. and Yoon, S., J. Spacecraft, **28** (1991), 31-40
- (8) Candler, G.V., Ph.D Thesis, Stanford Univ., (1988).
- (9) Yoon, S. and Jameson, A., AIAA Journal, **26**, (1988), 1025-1026.
- (10) Eberhardt, S. and Imlay, S.T., J. Thermophysics and Heat Transfer, **6** (1992), 208-216.
- (11) Miller, Ch.G., AIAA paper, 86-0741-CP
- (12) Deiwert, G., Proc. of Second European Symposium on Aerothermodynamics for Space Vehicles, esa SP-367 (1995), 263-270.