

平成 30 年 5 月 17 日現在

機関番号：11301

研究種目：若手研究(A)

研究期間：2014～2017

課題番号：26709066

研究課題名(和文) 超臨界流体における熱力学物性・流体非線形相互干渉のダイナミクスと不確かさの定量化

研究課題名(英文) Dynamics of interactions between thermodynamic properties and wall turbulence in supercritical fluids and quantification of uncertainty

研究代表者

河合 宗司 (Kawai, Soshi)

東北大学・工学研究科・准教授

研究者番号：40608816

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 16,300,000円

研究成果の概要(和文)：本研究では、超臨界圧条件下における遷臨界乱流境界層の高精度シミュレーションを可能とする高次精度数値計算スキームを開発し、著者の知る限り初めて遷臨界平板乱流境界層のDNSに成功した。また独自に構築したDNSデータベースを解析し、キーとなる超臨界圧・遷臨界乱流境界層特有の熱力学物性と壁乱流との相互干渉現象の詳細や特異な乱流統計量を明らかにした。さらに乱流モデルの構築という観点からも本DNSデータベースを解析し、既存の乱流モデルの問題点を明らかにするとともに、超臨界圧・乱流境界層解析に適した密度変動効果を考慮する乱流モデルの提案に成功した。

研究成果の概要(英文)：In this study, an accurate and robust numerical method for simulating transcritical turbulent flows at supercritical pressure is proposed, and fully-developed transcritical turbulent boundary layers (TBLs) at supercritical pressures are studied by solving the full compressible Navier-Stokes equations using direct numerical simulation (DNS). From the DNS results, besides the mean thermodynamic property variations, different from the conventional ideal-gas TBLs, significant density fluctuations that originate from the strong real fluid effects and the mechanisms of the non-negligible interactions between the real fluid effects and wall turbulence are identified in the transcritical TBLs. Then, based on the DNS analysis, a RANS model that accounts for the effects of density fluctuations is proposed, which improves the prediction accuracy of the TBLs at supercritical pressure, something that existing RANS models fail to do robustly.

研究分野：航空宇宙工学、流体力学、数値流体力学

キーワード：航空宇宙流体力学 数値流体力学 流体工学 超臨界流体 実在流体効果 乱流境界層 DNS 乱流モデル

1. 研究開始当初の背景

超臨界流体特有の温度に対して非線形的な変化を示す熱力学物性と流体との相互干渉を伴う超臨界圧・乱流境界層現象は、液体ロケットエンジンや高効率化を図った超臨界圧蒸気タービンなどに関わる重要な流体现象である。しかし一方で、高圧環境下での詳細な流体計測は技術的に困難であり、また **Direct numerical simulation (DNS)** に代表される超臨界流体の高精度数値シミュレーションは既存の数値計算手法では実施困難であるのが現状である。結果として、これまでの研究では、超臨界圧・乱流境界層現象に関する信頼できる乱流統計量データベースは得られていない。また超臨界圧・乱流境界層現象を十分に理解しているとは言い難いのもまた事実である。

加えて、より工学的な解析では乱流モデルを用いた **Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS)** 計算が中心となるが、既存の理想流体を対象とした乱流モデルでは、超臨界圧・乱流境界層の予測精度には疑問が残り、超臨界乱流現象の流体物理を適切にモデル化した乱流モデルの構築が望まれている。一方で、超臨界圧・乱流境界層の平均速度や温度、乱流統計量などの信頼できるデータは皆無であるため、どのような乱流モデルが良いのか、どう改良すべきなのかという根本的な議論もまた困難なのが現状である。

本研究は、超臨界圧・乱流境界層に対する上記のような現状を鑑み、数値計算手法から工夫することで既存の計算手法では実施困難であった超臨界圧・乱流境界層現象の高精度 DNS 解析を実施可能とし、そこで構築する DNS データベースから熱力学物性と乱流との相互干渉現象の詳細を明らかにすることができれば、工学シミュレーションで重要となる超臨界流体に対する乱流モデルを物理現象に則した形で構築できるのではないかと考えたものである。

2. 研究の目的

本研究では、超臨界圧・乱流境界層に対して独自の高精度 DNS 解析から超臨界流体特有の熱力学物性変化と壁乱流との相互干渉ダイナミクスの詳細を明らかにし、その上で熱力学物性と壁乱流との相互干渉現象を再現しうる乱流モデルを確立することを目的とする。また加えて、今後の乱流モデル開発やその検証のための信頼できる参照データとして、本超臨界圧・乱流境界層 DNS 解析から得られる詳細な乱流統計量データベースを提供することも本研究の一つの目的である。

3. 研究の方法

本研究では、以下の3つのステップで研究を

進める。

(1) 超臨界乱流現象を安定かつ精度良く解析可能な高次精度数値計算スキームの開発

(2) 超臨界圧条件下での空間発展・加熱平板乱流境界層 DNS 解析に基づく熱力学物性変化と壁乱流との相互干渉ダイナミクスの詳細解析

(3) 超臨界流体特有の熱力学物性変化と乱流との相互干渉現象を再現しうる乱流モデルの提案

(1)では、研究代表者等が提案している物理的な視点から支配方程式レベルで矛盾無く工夫する数値計算法の理論を超臨界流体に展開する。これにより、超臨界乱流現象を安定かつ精度良く解析可能な高次精度数値計算スキームの開発を試みる。(2)では(1)で開発する計算スキームによって初めて可能となる超臨界圧・加熱平板乱流境界層の DNS 解析を実施する。ここで構築する DNS データベースの解析から、通常理想流体乱流境界層では見られない、温度に対して非線形的な振る舞いをする熱力学物性変化をはじめとする強い実在流体効果と壁乱流との相互干渉メカニズムや特異な乱流統計量の詳細を明らかにする。さらに(3)では、独自に構築する DNS データベースや(2)で明らかにする詳細な流体物理現象から、既存の乱流モデルの問題点を明らかにするとともに、超臨界圧・乱流境界層の流体物理現象に則した乱流モデルの提案を試みる。

4. 研究成果

以下では、本研究で得られた主な研究成果について、上記3つの研究ステップに沿って記載する。

(1) 安定かつ高次精度な数値計算スキームの開発

圧縮性流体解析では、密度・運動量・全エネルギー保存型の圧縮性流体方程式を用いることが一般的である。しかしこの既存の手法を用いて急激な熱力学物性変化を伴う「界面」を数値的に拡散することで捕獲すると、界面で速度や圧力に非物理的な数値振動が発生することが知られている。またこの数値振動により、非粘性流体では界面をはさんで圧力や速度が一定であるという物理条件(速度平衡や圧力平衡)が破綻し、しばしば問題となる。超臨界流体解析でもこれと全く同じことが起こり問題となる。

超臨界流体では、擬臨界温度をまたいで温度に対して熱力学物性や輸送係数が急激に変化し、理想流体から大きく逸脱する強い実在流体効果があることが知られている。このことから、擬臨界温度をまたぐ温度条件となる超臨界圧・加熱平板乱流境界層の DNS 解析を行う際、既存の一般的な圧縮性流体方程式を用いて解析すると、この非物理的な数値振

動が擬臨界温度付近で発生し、高精度かつ安定な数値シミュレーションが困難となる。以下、この擬臨界温度をまたぐ条件を遷臨界条件と呼び、この遷臨界条件を乱流境界層内に有する境界層を遷臨界乱流境界層と呼ぶことにする。研究代表者も初め、密度・運動量・全エネルギーの保存式を解くことで超臨界圧・加熱平板遷臨界乱流境界層の DNS 解析をスタートした。図 1 左はその時の計算結果である。加熱壁により温度が擬臨界温度付近になると圧力に非物理的な数値振動が発生し計算が不安定になることが示された。また仮に計算が破綻しなかったとしても、非物理的な圧力振動が非物理的な速度変動を誘起し、高精度な DNS 解析が困難となることが明らかになった。研究代表者が思うに、遷臨界乱流境界層の DNS 解析(や LES 解析も含めて)がほとんど行われていない原因は、この数値計算手法的な困難さが故ではと考えている。

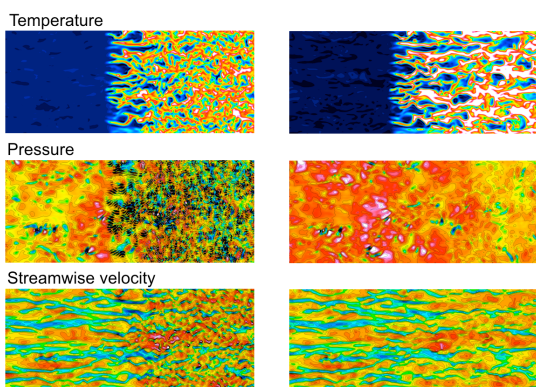


図 1 超臨界圧・加熱平板遷臨界乱流境界層の DNS 解析 (左図: 既存手法、右図: 提案手法)

ここでの数値計算手法としてのチャレンジは、超臨界流体特有の強い実在流体効果を正確に反映した上で、如何にして遷臨界条件での急激な熱力学物性変化を高次精度計算スキームで安定に取り扱うかである。言い換えると、界面のような急激な変化を数値的に安定に捕獲しつつ、かつ非理想性が強い熱力学物性下で物理的な速度平衡や圧力平衡を保ち、ロバストで高精度な数値計算法を如何にして構築するかである。

本研究では、研究代表者等が提案している「物理的に矛盾無く支配方程式レベルで工夫する計算法(LAD 法)」を超臨界流体に対する数値計算法に発展させることで、ロバストで高精度な数値計算法の確立に成功している。詳細については学術雑誌③[Kawai et al., J. Comput. Phys., 2015]を参照して頂くことで割愛するが、本提案手法のポイントは、物理的に矛盾無く人工的な密度拡散項を支配方程式レベルで構築し、かつ既存の全エネルギー保存式を解く代わりに、圧力の時間発展方程式を導き、その圧力の方程式と任意の実在流体効果を正確に反映する NIST テーブル参照法をカップルさせて解くことである。本研究では、これらの圧力ベースの圧縮性

Navier-Stokes 方程式を高次精度コンパクト差分法で空間離散化することで、ロバストかつ高精度な数値計算法を構築している。これにより図 1 右に示すように、非物理的な圧力振動を起こさず擬臨界温度をまたぐ温度条件となる超臨界圧・加熱平板乱流境界層の高精度 DNS 解析が可能となった。

(2) 超臨界圧・乱流境界層現象の DNS 解析

本研究では研究の第 2 ステップとして、(1)で開発した安定かつ高精度な数値計算スキームを用いることで可能となる、圧力勾配無し加熱壁を有する超臨界圧・遷臨界平板乱流境界層の DNS 解析を実施した。ここでは、通常理想流体乱流境界層では見られない、本研究で得られたキーとなる遷臨界乱流境界層特有の熱力学物性と壁乱流との相互干渉現象や特異な乱流統計量のみを示す。また研究代表者の知る限り、(LES も含めて)本 DNS が初めての遷臨界平板乱流境界層解析となっている。より詳細な議論については、国際学術雑誌に投稿・査読中である [Kawai, Heated transcritical and unheated non-transcritical turbulent boundary layers at supercritical pressures, 投稿中] や、学会発表論文⑥を参照頂きたい。また投稿中の論文は、掲載決定し次第、研究代表者のホームページにて論文情報を掲載する。

図 2 は、DNS 解析から得られた超臨界圧条件下における加熱壁・遷臨界乱流境界層のスパン-壁面垂直断面の瞬間の温度および定圧比熱分布を示している。擬臨界温度よりも低温な境界層が加熱壁により擬臨界温度よりも高い温度に加熱され、定圧比熱がピーク値(図中では白)となる遷臨界条件を境界層内に有していることが分かる。また図 3 は加熱壁・遷臨界乱流境界層(赤線)および非加熱壁・非遷臨界乱流境界層(青線)内の密度変動量を示している。これらより加熱壁を持つ遷臨界乱流境界層では、わずかな温度変化で密度が大きく変化する遷臨界条件の強い実在流体効果により、境界層内で非常に大きな密度変動が生じることが明らかとなった。すなわち遷臨界乱流境界層は、実在流体効果によって低マッハ数条件ではあるが、Morkovin の仮定が成立しないほどの密度変動の大きな流れとなる。一方、非加熱壁条件である非遷臨界乱流境界層では、実在流体効果は効いておらず密度変動はほとんど発生しない。

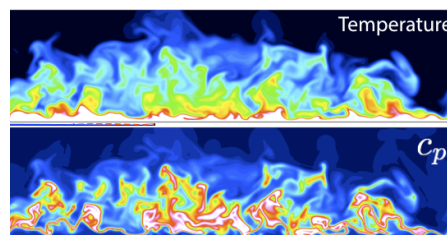


図 2 加熱平板遷臨界乱流境界層のスパン-壁面垂直断面の瞬間流れ場

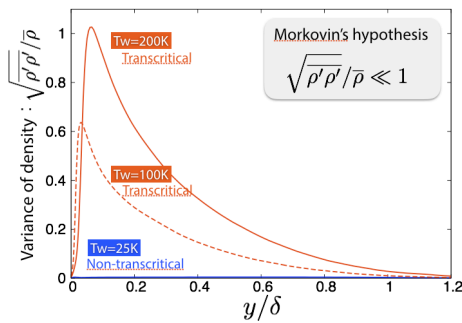


図3 乱流境界層内の密度変動分布

Morkovin の仮定が成立する圧縮性乱流境界層では、平均速度分布に対して、境界層内の平均密度変化を考慮する van Driest 変換を行うことで、非圧縮性流体の乱流境界層と同じ速度の log-law が得られることが知られている。モデリングの観点からは、Morkovin の仮定が成立しない加熱壁を持つ遷臨界乱流境界層の平均速度の log-law がどうなるかが一つの関心事である。図4に van Driest 変換を行った平均速度分布を示す。またここでは Spalart による非圧縮性理想流体の平板乱流境界層 DNS の平均速度分布も比較のため併せて載せている。非常に興味深いことに、実在流体効果の影響を強く受け、Morkovin の仮定が成立しない加熱壁・遷臨界乱流境界層を含めた全ての DNS 解析ケースで、平均密度変化のみを考慮する van Driest 変換を施すことで、平均速度プロファイルは非圧縮性理想流体の log-law と一致することが明らかになった。この事実は、Morkovin の仮定が成立しない遷臨界乱流境界層においても、普遍的な RANS モデルを構築できる可能性を示唆していると考えられる。

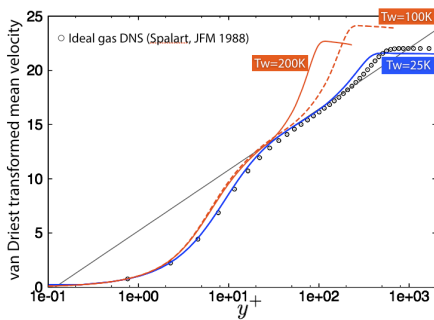


図4 van Driest 変換を施した平均速度分布

遷臨界乱流境界層での大きな密度変動が、平均速度の log-law に影響を及ぼしているのか否かについて、次に圧縮性流体における乱流運動エネルギーの輸送方程式(以下、 k 輸送方程式)を見ていく。DNS 解析の非遷臨界条件と遷臨界条件における k の budget を図5に示す。詳細な式は投稿中の論文や学会発表論文⑥を参照して頂くとして、図中の青線は生成項(P)、オレンジは乱流輸送項(T)、緑は散逸項(D)、赤および水色は圧縮性の効果である乱流質量流速項(M)および Pressure dilatation 項(Pid)である。またシンボルは、Spalart による非圧縮性理想流体の平板乱流

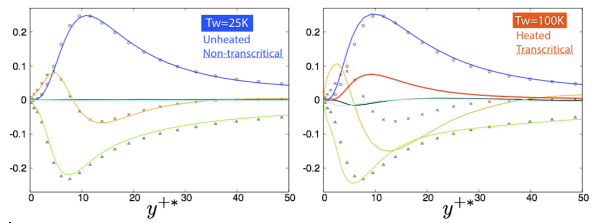


図5 乱流運動エネルギー-budget 方程式分布

境界層 DNS 結果である。まず非遷臨界乱流境界層を見ていくと、圧縮性項である M と Pid は無視できるほど小さく、圧縮性の効果が k に影響を与えていないことが分かる。また平均速度分布でも見られたように超臨界流体特有のものは一切見られず、理想気体の乱流境界層とほぼ完全に一致する。一方で加熱壁・遷臨界乱流境界層では、圧縮性項である M や Pid が値を持っており、特に赤ラインで示された密度変動に関わる乱流質量流速項 M が大きな値を持つことが明らかとなった。すなわち、この密度変動に起因する M を適切にモデル化することが超臨界圧・乱流境界層に対する乱流モデル構築のキーだと本研究では考え研究を進めた。

(3) 超臨界圧・乱流境界層に対する乱流モデルの提案

本研究では、(2)の DNS 解析結果を基に新しい超臨界圧・乱流境界層に対する RANS 乱流モデルの提案を行い、本 DNS 解析結果とダイレクトに比較することでその妥当性を示した。提案乱流モデルの議論に移る前に、まず本研究では図6に示すように本 DNS 解析と同条件で既存の乱流モデルを用いた RANS 解析を実施し、既存の乱流モデルの問題点を明らかにした。DNS データはシンボルで、既存の RANS 解析結果を実線・破線で示し、それぞれ青が非遷臨界乱流境界層、赤が遷臨界乱流境界層である。DNS は van Driest 変換を施すことで遷臨界・非遷臨界共に平均速度 log-law が成立するのに対し、既存の RANS では非遷臨界条件では DNS と良い一致が得られるが、遷臨界条件ではレイノルズせん断応力が過大評価され、平均速度分布が log-law から逸脱するという予測精度の悪化が明らかとなった。本結果は、超臨界流体特有の現象が起こる遷臨界乱流境界層解析では、既存の乱流モデルに改良が必要となることを示唆している。

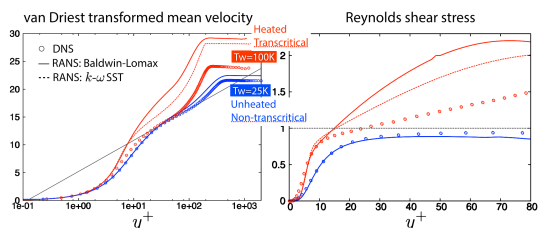


図6 既存 RANS 乱流モデルの予測精度

そこで本研究では、超臨界流体に適した

RANS 乱流モデル構築のためには、図 5 の DNS 解析で示したように遷臨界乱流境界層における密度変動効果(図 5 中の赤線で示す M 項)が k の輸送方程式に大きな影響を及ぼしている事実を踏まえ、この密度変動効果、正確には乱流質量流束の効果を適切にモデル化した乱流モデルを構築する必要があると考え研究を進めた。既存の RANS 乱流モデルのほとんどは、非圧縮性流体の乱流モデルと同一のモデル化が施されることがほとんどであり、基本的にここで注目する密度変動効果のモデル化は無視されている。詳細については割愛するが、本研究で新しく提案する RANS 乱流モデルは、下式 1 に示すように乱流質量流束項 M を乱流の勾配拡散仮定に基づき密度の勾配に比例する形でモデル化し、既存の $k-\omega$ SST モデルの k 輸送方程式に陽的に追加するモデルである。

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} = -C + P + T + D + M$$

Our **idea** is to model the turbulent mass flux **M** using **gradient diffusion hypothesis** and add to $k-\omega$ SST model

$$M = \overline{u_i'' \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}} \rightarrow \overline{u_i''} = -\frac{\overline{\rho' u_i''}}{\bar{\rho}} = \frac{\mu_t}{\bar{\rho}^2 C_{u_i''}} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j}$$

式 1 本研究の提案乱流モデル

本研究で実施した DNS 解析と同条件の加熱壁・遷臨界乱流境界層に対し、提案乱流モデルを用いた RANS 解析を実施した。得られた van Driest 変換を施した平均速度分布およびレイノルズ剪断応力分布を図 7 に示す。DNS データ、既存の Baldwin-Lomax モデルおよび $k-\omega$ SST モデル、本研究で提案する M 項をモデル化し k の輸送方程式に追加した $k-\omega$ SST モデル(以下、 $k-\omega$ SST+M)の比較を示す。結果を見ると、既存の RANS モデルでは遷臨界乱流境界層の予測精度が著しく悪化する中、本研究で提案するように適切に密度変動効果である M をモデル化し、 k 輸送方程式に付加することで、 $k-\omega$ SST+M では DNS で得られた log-law の予想に成功しており、平均速度分布予想の大幅な改善に成功した。またレイノルズ剪断応力分布も DNS データに近づいており、こちらも改善の傾向が見られた。またここでは図を示さないが、非加熱壁・非遷臨界乱流境界層では、境界層内で平均密度がほとんど変化しないことから、 k 輸送方程式に追加したモデル化した M 項は無視できるほど小さくその効果はほとんど現れない。このことから、既存の RANS 乱流モデル同様に本提案モデルは、非遷臨界乱流境界層に対しても良い予測精度を保つことを示した。従って、本モデルは従来の RANS モデルでも予測可能であった非遷臨界条件の解析に悪影響を及ぼさないことも確認できている。

最後に M を追加した $k-\omega$ SST モデルの乱流運動エネルギー k の budget を図 8 に示す。赤色の線で示された M の項がきちんとアクティブに働いていることが分かる。また M の分布

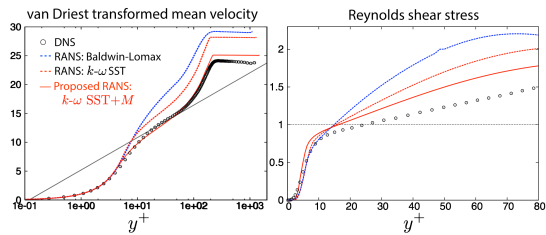


図 7 提案乱流モデルの予測精度検証

も図 5 で確認した DNS 解析の分布と似た分布となることも確認できた。以上より本研究では、DNS データから重要であると明らかになった M 項に対して、RANS 乱流モデルの k 輸送方程式に適切な形でモデル化し加えることで、超臨界圧・乱流境界層解析においても DNS データを高精度に再現できる RANS 乱流モデルの構築が可能であることを示した。本乱流モデルに関する研究成果については、現在、国際学術雑誌に投稿準備中である。

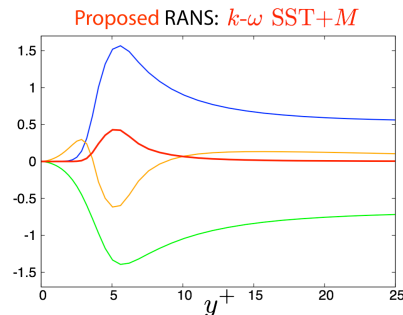


図 8 提案 RANS 乱流モデルの乱流運動エネルギー budget 方程式分布

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 4 件)

- ① 及川義仁, 河合宗司, 超臨界圧・乱流境界層における密度変動効果の RANS モデリングの提案, ながれ(特集), 査読無, 37 (2), 105-110 (2018).
- ② Johan Larsson, Soshi Kawai, Julien Bodart and Ivan Bermejo-Moreno, Large eddy simulation with modeled wall-stress: recent progress and future directions, Mechanical Engineering Reviews, 査読有, 3 (1), 15-00418 (2016).
- ③ Soshi Kawai, Hiroshi Terashima and Hideyo Negishi, A robust and accurate numerical method for transcritical turbulent flows at supercritical pressure with an arbitrary equation of state, Journal of Computational Physics, 査読有, 300, 116-135 (2015).
- ④ Soshi Kawai, Strong real-fluid effects on transcritical turbulent boundary layers at supercritical pressure, Proceedings of Turbulence and Shear

Flow Phenomena, 査読有, 2, 4A-5 (2015).

[学会発表] (計 18 件)

- ① Soshi Kawai, DNS and RANS modeling of transcritical turbulent boundary layers at supercritical pressure, *Fluid Mechanics Seminar* (招待講演), Delft University of Technology, (2018).
- ② 河合宗司, 及川義仁, 超臨界流体の特異な軟粒境界層現象-DNS解析とRANSモデリング, 平成 29 年度航空宇宙空力シンポジウム, (2018).
- ③ 及川義仁, 河合宗司, 超臨界圧・乱流境界層計算に適した RANS モデリングの提案, 日本航空宇宙学会北部支部 2018 年講演会並びに第 19 回再使用型宇宙推進系シンポジウム, (2018).
- ④ 河合宗司, 超臨界圧・遷臨界乱流境界層の流体物理とモデリング, 第 4 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会, (2017).
- ⑤ 及川義仁, 河合宗司, 超臨界圧・乱流境界層における密度変動 効果の RANS モデリングの提案, 第 31 回数値流体力学シンポジウム, (2017).
- ⑥ Soshi Kawai, Direct numerical simulation of transcritical turbulent boundary layers at supercritical pressures with strong real fluid effects, *54th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, AIAA Paper 2016-1934 (2016).
- ⑦ 河合宗司, 超臨界圧・遷臨界乱流境界層の流体物理とモデリング, 第 3 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会 (招待講演), (2016).
- ⑧ 河合宗司, 超臨界流体の乱流境界層: 圧縮性の効果と log-law, 平成 27 年度 航空宇宙空力シンポジウム, (2016).
- ⑨ 及川義仁, 河合宗司, 超臨界流体の乱流境界層における RANS モデリング: 密度変動効果の重要性, 第 48 回流体力学講演会 / 第 34 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, (2016).
- ⑩ Soshi Kawai, Log-law and compressibility effects in transcritical turbulent boundary layers at supercritical pressure, *The 68th Annual Meeting of the American Physical Society's Division of Fluid Dynamics*, (2015).
- ⑪ Koji Shimoyama, Soshi Kawai, Uncertainty quantification approach based on a non-stationary kriging surrogate model, *2nd Frontiers in Computational Physics Conference*, (2015).
- ⑫ Soshi Kawai and Koji Shimoyama, Kriging-model-based uncertainty quantification in computational fluid dynamics, *32nd AIAA Applied Aerodynamics Conference*, AIAA Paper 2014-2737 (2014).
- ⑬ Soshi Kawai, DNS of transcritical turbulent boundary layers at supercritical pressures under abrupt variations in thermodynamic properties, *67th APS Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics*, (2014).
- ⑭ Koji Shimoyama and Soshi Kawai, Kriging-based dynamic adaptive sampling for effective uncertainty quantification, *6th ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conferences*, (2014).
- ⑮ 河合宗司, 超臨界圧条件下における遷臨界乱流境界層の高精度シミュレーション, 第 46 回流体力学講演会, (2014).
- ⑯ 河合宗司, 支配方程式レベルで工夫する高精度計算法: 航空宇宙工学から宇宙理学まで, 第 4 回次世代航空機研究セミナー (招待講演), (2014).
- ⑰ 河合宗司, 遷臨界乱流境界層の DNS: 特異な乱流統計量とその物理的考察, 反応性流動研究グループ第 9 回研究会 (招待講演), (2014).
- ⑱ 河合宗司, 超臨界圧・遷臨界乱流境界層の DNS: 実在気体効果に起因する特異な乱流統計量, 日本機械学会 第 92 期流体工学部門講演会, (2014).

[その他]

ホームページ

<http://www.cfd.mech.tohoku.ac.jp/kawai/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

河合 宗司 (KAWAI, Soshi)

東北大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号: 40608816