

# 1B02 高次精度の流速再構築法による超臨界圧乱流拡散火炎の 解像度向上に向けて

○芳賀臣紀（宇宙航空研究開発機構）

Toward resolution improvement of turbulent diffusion flames at supercritical pressure by high-order flux-reconstruction method

Takanori Haga (JAXA)

Key Words : Flux-reconstruction, Limiter, Supercritical Pressure, Turbulent Diffusion Flame

## Abstract

The biggest challenge in applying high-order accuracy schemes to high-pressure combustion in rocket engine combustors is numerical instability near the LOX-combustion gas interface, where the density ratio is several hundred times higher. In this study, the Flux Reconstruction method is employed, the Flamelet tabulated model is used for the turbulent diffusion flame, and the SRK equation of state is used to account for the real fluid effects. The performance of the positivity-preserving limiter and the entropy limiter are compared in order to improve the resolution of high-pressure combustion by the Flux Reconstruction method with spatial third-order accuracy or higher.

## 1. はじめに

液体ロケットエンジンの燃焼器は、ロケットの成立性や寿命を決める最重要コンポーネントであり、開発コストや期間を大きく左右する。特に注意すべきリスクは燃焼器内壁での局所熱負荷による溶損と燃焼振動であるが、これらの事象を燃焼試験前に予測可能な技術が求められている。

JAXAでは実機スケール燃焼器（噴射器500本以上）におけるこれらの現象の再現を目指し、圧縮性LESソルバー「LS-FLOW-HO」[1]を開発している。計算アルゴリズムには高次精度スキームFlux Reconstruction (FR)法[2]を採用し、燃焼モデルには、液体酸素(LOX)と燃料（水素またはメタンを想定）の乱流拡散火炎を対象としてFlamelet Progress Variable (FPV) モデル[3]を用いる。高コストなSRK方程式や輸送係数モデルの多項式近似、高速化チューニングを適用することで計算時間を大幅に短縮し、シングルエレメント噴射器であれば数日で燃焼特性や燃焼振動の解析が可能である（JAXAスパコンのFujitsu FX1000を250 CPU使用）。実機スケール燃焼器のLES（約30億点）をスパコン富岳の産業利用課題で実施し、これまでに燃焼圧を概ね再現し、噴射面接線方向の燃焼不安定を可視化することに成功している[4]。

しかし、数値安定性や実効解像度に課題がある高次精度スキーム（空間3次精度以上）は実問題に十分適用できておらず、FR法の特長を発揮できていない。高次精度スキームを高圧燃焼に適用する際の最大の課題は、密度比が数百倍になるLOX-燃焼ガス界面近

傍の数値不安定である。非物理的な数値振動を抑える様々な手法が提案されているが、圧力発展方程式を解く手法や非保存型のdouble flux (DF)スキーム[5]などの手法ではエネルギーが保存しないため火炎温度の誤差が大きいという問題がある。本研究では界面における速度・圧力の虚偽振動の問題はあるが、燃焼流れの解析が可能な完全保存型（fully conservative, FC）スキームを採用する。不連続捕獲手法としては局所人工拡散（localized artificial diffusivity, LAD）[6]と再構築リミッターの大きく2つのアプローチがあるが、人工粘性の使用は陽解法の時間ステップ幅を小さく制限し計算時間が増大する問題がある。近年、高次精度のFR法でも高解像度が得られるリミッターがHuynh [7]により提案されており、本手法の拡張が期待される。本稿では従来タイプのリミッターとして、密度や圧力の正值性を維持するリミッター[8]およびエントロピーリミッター[9]の性能について比較する。

## 2. 支配方程式と物理モデル

本研究で対象とする超臨界圧の拡散火炎では、表面張力および蒸発潜熱の影響は十分小さいと仮定し、液相と気相を区別せず単一気相として扱う。燃焼モデルにはFlamelet Progress Variable (FPV) モデル[3]を用いる。低マッハ数、高速反応、およびレイス数1の仮定に注意する必要があるが、流体計算と反応を分離することで計算負荷は劇的に小さくなる。LESソルバーで解く支配方程式は圧縮性Navier-Stokes方程式

であり、密度  $\rho$ 、運動量  $\rho \mathbf{u}$ 、全エネルギー  $\rho e_t$  の保存則に加え、燃料と酸化剤の混合分率  $Z$  および反応進行変数  $C$ （本研究ではH2Oの質量分率）の輸送方程式を解く。LESのサブグリッドスケールは陽にモデル化せず、風上数値流束の数値粘性でその効果を代替する陰的LESを採用する。平均を表す上付きバーなどを省略すると、表式は直接数値計算（DNS）と同じとなる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P \underline{\delta} - \underline{\tau}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho e_t \mathbf{u} + (P \underline{\delta} - \underline{\tau}) \mathbf{u} + \mathbf{q}] &= 0 \quad (1) \\ \frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Z - \rho D \nabla Z) &= 0 \\ \frac{\partial \rho C}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} C - \rho D \nabla C) &= \rho \dot{\omega}_C \end{aligned}$$

ここで  $P$  は圧力、 $\underline{\delta}$  は単位テンソル、 $\underline{\tau}$  は粘性応力、 $\mathbf{q}$  は熱流束、 $D$  はスカラー拡散係数であり、ルイス数 1 を仮定している。 $\dot{\omega}_C$  は反応進行変数の生成速度であり、 $Z$  および  $C$  をパラメータとしてテーブル参照する。エネルギー保存を解く圧縮性ソルバーとFlameletを組み合わせる場合、温度はテーブルから参照せずに流れ場の内部エネルギーとテーブル参照した化学種組成が整合するように温度を逆算する。高圧・極低温状態における実在気体効果を考慮するため、Soave-Redlich-Kwong (SRK) 状態方程式[10]を用いる。LOXの粘性係数・熱伝導係数については、Chungらのモデル[11]を用いる。

### 3. 数値計算法

#### 3. 1. FRスキーム

FR法では各セル内に導入した解の定義点（Solution Point, SP）により空間高次精度化に必要な多項式近似を行う。六面体セルの場合、デカルト座標の各軸方向のSPを  $K$  個とすると、 $K-1$  次の選点多項式により、局所解の再構築を得る。

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_i(\xi, \eta, \zeta) \\ = \sum_{j,k,l=1}^K \mathbf{w}_{ij,kl} \phi_j(\xi) \phi_k(\eta) \phi_l(\zeta), \end{aligned} \quad (2)$$

ここで  $\mathbf{w}$  は保存量のベクトルであり、 $i$  はセルインデックス、 $j,k,l$  はデカルト座標のSPインデックスを表し、 $\phi$  は計算空間（ $-1 \leq \xi, \eta, \zeta \leq 1$ ）で定義された一次元のラグランジュ多項式である。 $K-1$  次の多項式近似により空間  $K$  次精度となる（PKスキーム）。

セル境界面のFlux Point (FP)で必要となる非粘性、

粘性の数値流束にはそれぞれSLAU2 [12], BR2を用いる。オリジナルのSLAU2をLOX/GH2界面に適用すると数値的に不安定化したため、本稿ではセル境界音速の評価を左右の平均値ではなく最大値に修正した。計算に必要な物理量は、セル内SPの保存量を基に計算し、化学種組成のテーブル参照もSP毎に行う。時間積分には時間ステップを大きく取ることができる4段-3次精度の4-SSP-RK[13]を用いる。

#### 3. 2. 不連続捕獲スキーム

衝撃波やLOX界面などの不連続近傍では、再構築解の数値振動により計算が不安定化しやすい。数値振動を抑えるために人工粘性を加える、または再構築解の密度や圧力が負にならないように分布を制限するリミッターを適用する必要がある。

圧力・密度の正值性を保持するリミッター（FC-PPスキームと呼ぶ）は理想気体において高い堅牢性で知られる[8]。本研究では、混合分率および反応進行変数についても、非負かつ1以下という制限を課した。リミッター自体は、FR法のセル内再構築（多項式） $\mathbf{w}_i$  とセル平均値  $\bar{\mathbf{w}}_i$  をブレンドする単純なものである。

$$\hat{\mathbf{w}}_i(\xi, \eta, \zeta) = \theta \mathbf{w}_i(\xi, \eta, \zeta) + (1 - \theta) \bar{\mathbf{w}}_i \quad (3)$$

ブレンディング係数の  $\theta$  は次式で計算する。

$$\theta = \min(1, \theta^+, \theta^-) \in [0, 1] \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \theta^+ &= \frac{\mathbf{u}(\bar{\mathbf{u}}_i) - \mathbf{u}^{sup} - \varepsilon}{\mathbf{u}(\bar{\mathbf{u}}_i) - \mathbf{u}_i^{max} - \varepsilon}, \\ \theta^- &= \frac{\mathbf{u}(\bar{\mathbf{u}}_i) - \mathbf{u}^{inf} + \varepsilon}{\mathbf{u}(\bar{\mathbf{u}}_i) - \mathbf{u}_i^{min} + \varepsilon} \end{aligned} \quad (5)$$

ここで、 $\mathbf{u} = (\rho, P, Y_k, s)$  は制約変数のベクトルであり、 $\mathbf{u}^{sup}$ ,  $\mathbf{u}^{inf}$  はその上・下限値である。

$$\{\rho > 0, P > 0, 0 \leq Y_k \leq 1, s \geq s_i^{min}\} \quad (6)$$

$\mathbf{u}_i^{max}$ ,  $\mathbf{u}_i^{min}$  はセル内部（SP, FP）における最大・最小値であり局所的に評価できる。ゼロ割と一様流でリミッターが掛かることを防ぐため  $\varepsilon = 1e-8$  としている。

FC-PPスキームは上式において密度、圧力および質量分率のみを制約変数とするが、本研究で提案するエントロピーリミッター（FC-ELスキームと呼ぶ）は、これらの変数に加えてエンタルピーも制限する。 $s_i^{min}$  は各セル  $i$  で定義された最小エントロピーであり、セル  $i$  とその隣接セル（面を共有）の集合  $\mathcal{A}(i)$  について、各セル内部（SP, FP）における最小値を探索する。

$$s_i^* = \min_{k \in S(SP, FP)} s(w_i^{m-1}(\xi_k)),$$

$$s_i^{\min} = \min_{j \in \mathcal{A}(i)} s_j^* \quad (7)$$

時間発展によるエントロピー減少を制限するので、直前の時間ステージ  $m-1$  (ルンゲ・クッタ法の場合) における値を参照する点に注意されたい[9].

エントロピー減少を制限するFC-ELスキームは任意パラメータが無くロバストな手法であるが、密度変化が数百倍と大きいLOX/GH2拡散火炎のケースでは数値不安定が発生することがあった. そこで燃焼ケースではセル内の密度変化を制限するため、以下の制約を加える.

$$\rho^{sup} = (1 + c_{VB}) \max_{j \in \mathcal{A}(i)} (\bar{\rho}_j),$$

$$\rho^{inf} = (1 - c_{VB}) \min_{j \in \mathcal{A}(i)} (\bar{\rho}_j) \quad (8)$$

ここで  $c_{VB}$  は何割の変化を許容するか調整するパラメータであり、実用的には 0.15~0.2 とする.

## 4. 計算結果

### 4. 1. 遷臨界窒素界面の移流問題

遷臨界条件における窒素界面移流のベンチマーク問題について、界面の解像度、速度と圧力の平衡について比較する. 計算領域は  $0 \leq x \leq 1$  であり、分割セル数は100とした. 初期条件は、圧力5 MPa, 流速50 m/sとし、低温領域( $0.25 \leq x \leq 0.75$ )で82.4 K, それ以外で332.2 Kである. 窒素の臨界温度および圧力は126.2 K, 3.40 MPaであり、本条件は超臨界圧力下で臨界温度をまたぐ条件となっている. 左右の境界は周期境界条件とし、1周期( $t = 0.02$  s)の計算を行った.

FC-PPスキームによる計算結果を図1に示す. 密度および温度分布については、わずかな数値振動が見られる. 近似次数を上げて解像度の改善は見られず、P4（5次精度）については逆に誤差が増加してしまった. 保存型スキームのため速度および圧力の平衡は維持できておらず変動の振幅は数十パーセントと誤差が大きい. 本稿では割愛するが、FC-PPスキームは超臨界圧のLOX/GH2拡散火炎では数値不安定が顕在化した.

FC-ELスキームによる計算結果を図2に示す. 密度および温度分布については、界面でわずかな振動が見られるが、近似次数を上げることで解像度の改善が見られる. こちらも保存型スキームのため、速度および圧力の平衡は維持できていないが、変動の振幅はFC-PPスキームと比べると格段に小さくなっている. 近似次数を上げて変動振幅が減少しない点は改良の余地がある.

### 4. 2. 2次元LOX/GH2せん断層火炎のLES

超臨界圧の2次元LOX/GH2せん断層火炎のLESを行う. 本ケースは同軸型噴射器のポスト先端部分を切り出した2次元問題であり、非燃焼ケース[14]はベンチマークとしてよく用いられる. 本稿では、超臨界圧燃焼のケースとして、液体酸素の噴射温度・速度は100 K・15 m/s, 水素の噴射温度・速度は90 K・360 m/sと設定した. 出口面は圧力固定（10 MPa）の流出条件である. ポスト先端の厚さは  $h = 0.5$  [mm] とし、分割数を変えて格子を作成した. 表1に計算格子の一覧を示す. ポスト先端のセル数100の結果を参照解とし、セル数10の粗い格子について、近似次数を変えた結果を比較する.

図3にP1スキーム(空間2次精度) で計算した参照解の温度分布(瞬時場)を示す. 計算領域の左側が流入境界で、上側からガス水素、下側から液体酸素が噴射される. 大きな速度差によるせん断層の混合で拡散火炎が形成されており、ポスト背後の循環領域で保炎されている. 図4に温度の時間平均場を示す. 噴射面下流  $5h$  における位置(図中の白線)における温度の平均と変動を図5に示す. 本ケースは密度変化が数百倍と非常に大きく、セル内の密度変動に制限を掛けないと安定に計算ができなかった. 制限の係数を変えた結果を同一プロットで比較している.

ポスト先端に10セルではP1, P2ケースともに解像度は不十分で、参照解とは乖離が見られる. P1ケース（2次精度）で密度変動の制限を緩める( $c_{VB}$ を大きくする) と、平均温度の最大値やRMS変動の幅が参照解に近づいていく傾向が見られる. 一方、P2ケース（3次精度）では平均温度の最大値がP1よりも大きく参照解からずれており、密度変動の制限係数を緩めてもあまり改善しなかった. 大きな密度変化がある超臨界燃焼のケースでは、P2以上の高次精度スキームの解像度を損なわないリミッターの改良が必要である. 今後、理想気体のベンチマークケースで有効性が示されているHuynhのリミッター[7]を多成分化学種および実在流体モデルに拡張し、性能を調査する予定である.

表1. 2次元LOX/GH2せん断層火炎の計算格子

ポスト先端 のセル数	$\Delta x_{cell}$ [ $\mu$ m ]	次数 P	総 計 算 点 数 #SPs
100	5	1	4,495,500
10	50	1	44,960
10	50	2	101,160

## 5. まとめ

液体ロケットエンジンの超臨界圧燃焼のLESソルバーとして開発したLS-FLOW-HOについて、高密度比界面における高次精度FR法の数値安定化手法であるリミッターの性能を比較した。

- ・ 圧力・密度の正值性を保持するリミッター（FC-PPスキーム）は高次精度化しても解像度の向上が得られず、速度と圧力の虚偽振動も大きい。
- ・ FC-PP にエントロピー制約を課した FC-EL リミッターは、遷臨界室界面の移流問題（非燃焼）では高次精度化による解像度の向上が見られた。しかし、2次元 LOX/GH2 せん断層火炎では、P1 スキームに対する P2 スキームによる解像度向上は見られず、課題が残る結果となった。

高次精度の多項式近似と1次精度のセル平均値を単純にブレンドするこれらのリミッターは、修正前の多項式の分布を大きく変えてしまうことが性能劣化の原因と考えられるため、数値安定化に最小限必要な修正を与えるリミッターの改良を検討していく必要がある。

## 謝辞

本研究の一部は科研費 21K03889 の助成を受けた。計算にはJAXAのスーパーコンピュータ「JSS3」を使用した。FPVモデルの導入には京都大学 黒瀬良一教授からご指導を頂いた。高圧燃焼のLESについてはJAXA 松山新吾氏からご助言を頂いた。エントロピーリミッターの導入についてはテキサスA&M大学 Freddie Witherden教授からご助言を頂いた。SLAU2の改良についてはJAXA 嶋英志氏および横浜国立大学 北村圭一教授からご助言を頂いた。ここに記して謝意を表す。

## 参考文献

- (1) 芳賀, 福島, 熊畑, 根岸, 清水, 液体ロケットエンジンの実機スケール燃焼器 LES に向けた取り組み, 日本燃焼学会誌, 64(208), 126-135 (2022).
- (2) Huynh, H.T., AIAA Paper 2007-4079, 2007.
- (3) Pierce, C., Moin, P., J. Fluid Mech 504: 73-97 (2004).
- (4) 黒瀬, 実機液体ロケットエンジン燃焼器内乱流燃焼場の超大規模解析: 燃焼振動メカニズムの検討, 令和6年度 HPCI利用報告書
- (5) Ma, P.C., Lv, Y. and Ihme, M., J. Comput. Phys., 340:330 – 357, 2017.
- (6) Kawai, S., Terashima, H., and Negishi, H., J. Comput. Phys., 300:116 – 135, 2015.
- (7) Huynh, H. T., Shock Capturing Via Limiting for High-Order Methods Including Discontinuous Galerkin and

Flux Reconstruction, ICCFD2024.

- (8) Wang, C., Zhang, X., Shu, C-W., Ning, J., J. Comput. Phys., 231: 653-665 (2012).
- (9) Dzanic, T. and Witherden, F.D., J. Comput. Phys., 468:111501, (2022).
- (10) Soave, G., Chemical Engineering Science, 27:1197-1203, 1972.
- (11) Chung, T.H., Ajlan, M., Lee, L.L., and Starling, K.E., Ind. Eng. Chem. Res., 27:671 – 679, 1988.
- (12) Kitamura, K. and Shima, E., J. Comput. Phys., 245:62-83, 2013.
- (13) Ferracina, L. and Spijker, M.N., “An extension and analysis of the Shu-Osher representation of Runge-Kutta methods,” Mathematics of Computation 74, 201-220, 2004.
- (14) Ruiz, A.M., Lacaze, G., Oefelein, J.C., Mari, R., Cuenot, B., Selle, L., and Poinso, T., AIAA Journal, 54:1445 – 1460, 2016.

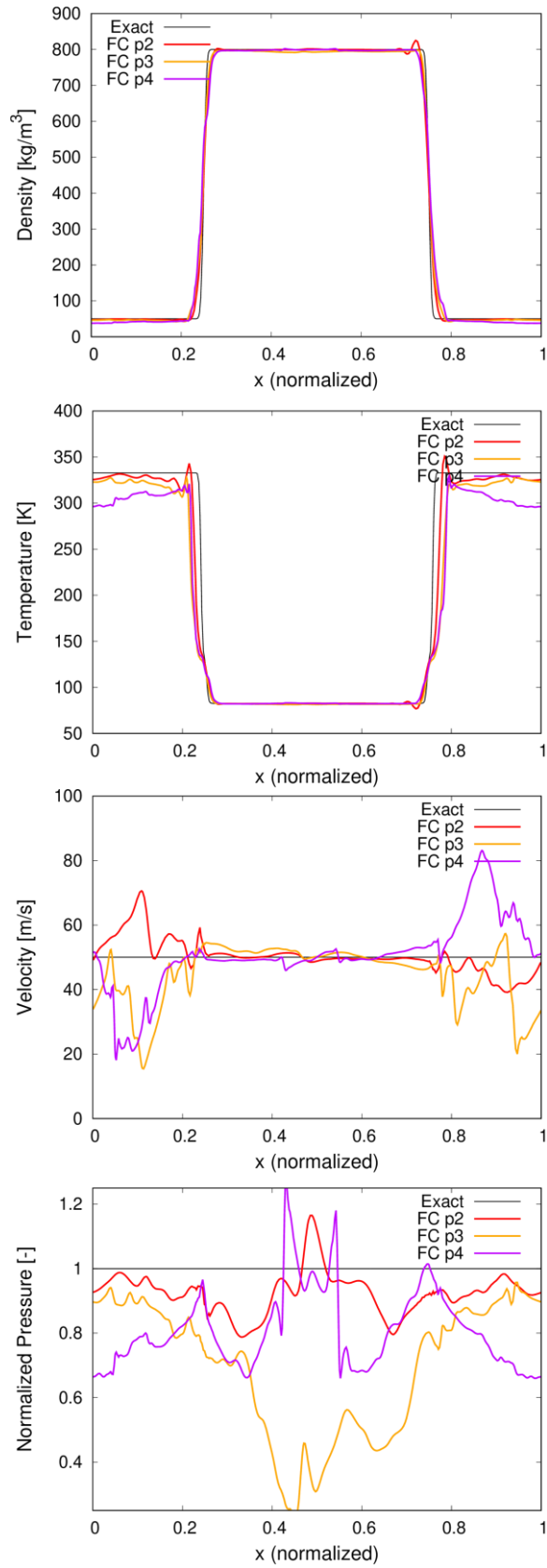


図1 遷臨界窒素界面の移流問題. FC-PPスキームの結果.

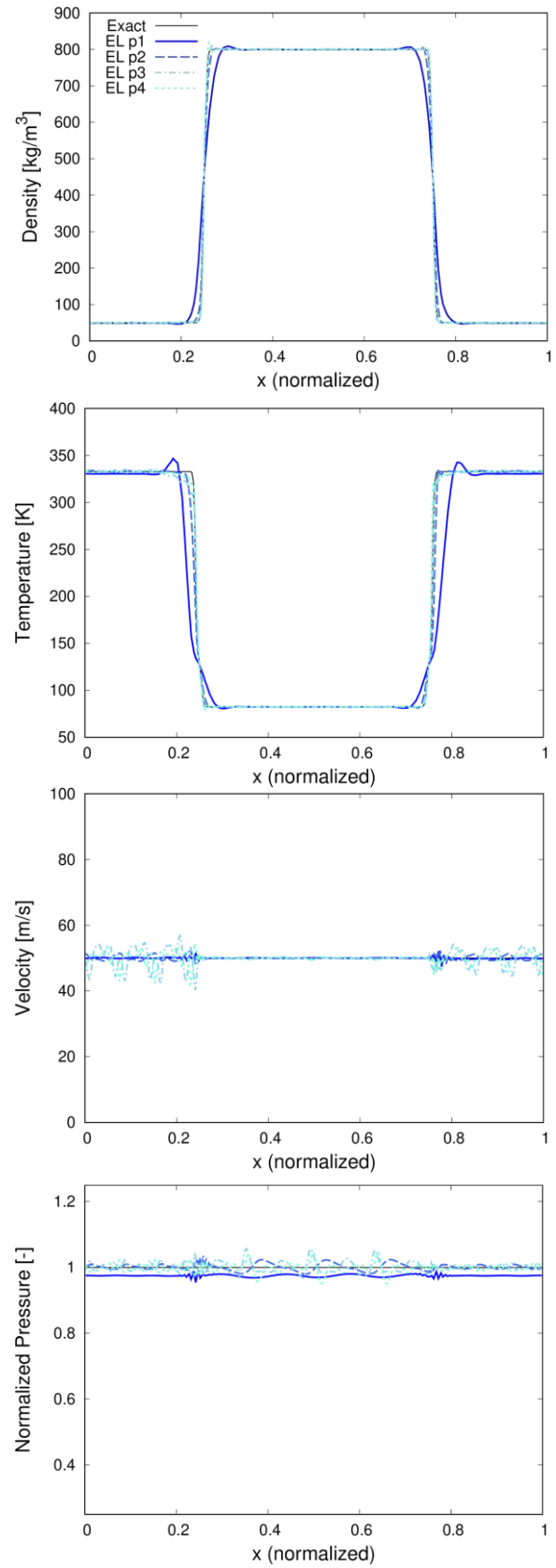


図2 遷臨界窒素界面の移流問題. FC-ELスキームの結果.

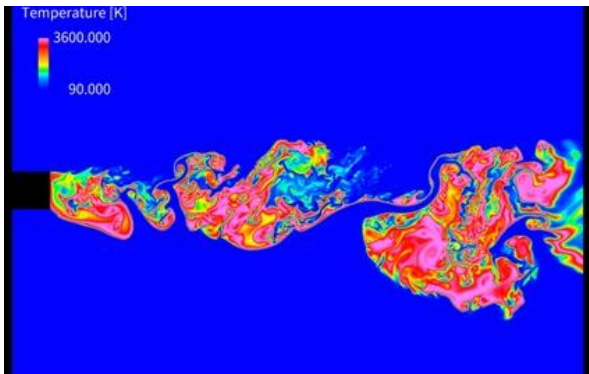


図3 2次元LOX/GH2せん断層火炎のLES計算結果(瞬時場の温度分布, 計算格子はh100).

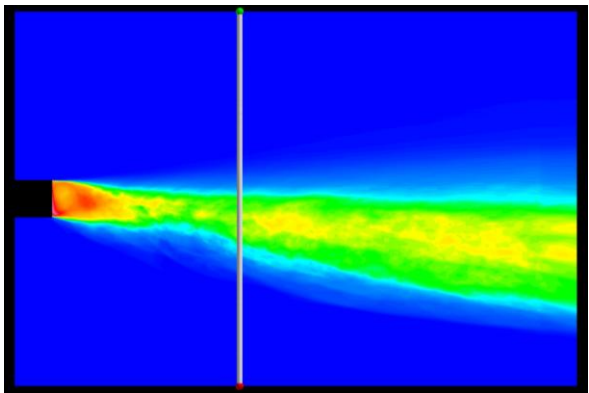


図4 2次元LOX/GH2せん断層火炎のLES計算結果(時間平均した温度分布, 計算格子はh100).

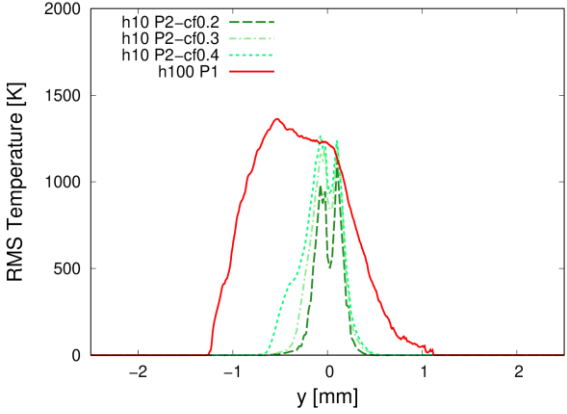
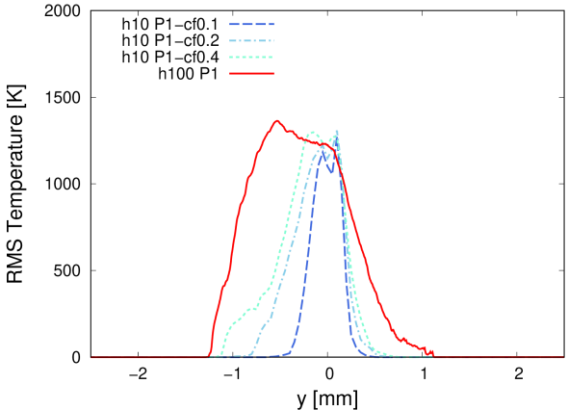
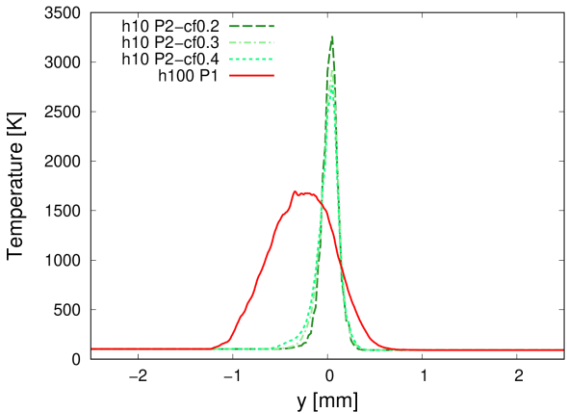
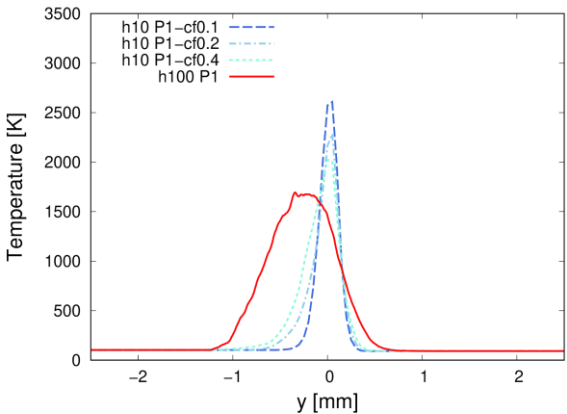


図5 噴射面下流  $x = 5h$  における温度の時間平均および変動RMSの比較.