

ISSN 0389-4010
UDC 533.6.011.5
519.6
629.78

航空宇宙技術研究所報告

TECHNICAL REPORT OF NATIONAL AEROSPACE LABORATORY

TR-1407

極超音速非平衡流れの数値解析

高 木 亮 治

2000 年 6 月

航空宇宙技術研究所

NATIONAL AEROSPACE LABORATORY

極超音速非平衡流れの数値解析*

高木 亮治†

Numerical Simulation of a Hypersonic Non-equilibrium Flow

Ryoji Takaki†

ABSTRACT

Numerical simulations of a hypersonic flow with high temperature effect were carried out. Park's two temperature model and a seven species and eighteen finite rate chemical reactions model were used in order to take account of thermally and chemically nonequilibrium effects. AUSMDV scheme was applied for convective terms. An efficient numerical algorithm, LU-SGS scheme and a point implicit method for source terms were used for time integration.

Numerical results of an axis-symmetric flow around a semi-sphere are presented and compared with experimental data. A grid convergency check is also performed. Results indicate that the flow behind the shock tends strongly toward a non-equilibrium flow.

Keywords : CFD, hypersonic flow, non-equilibrium flow

概要

極超音速非平衡流の特徴である高温気体効果を考慮した数値解析を行った。高温気体効果として化学非平衡および熱的非平衡を考慮した。化学反応モデルとして 7 化学種、18 反応モデルを用いた。また熱的非平衡モデルとして Park の二温度モデルを用いた。慣性項の計算には AUSMDV スキームを使用している。時間積分には計算効率の良い LU-SGS 法と局所時間刻法を用いている。またソース項には point implicit 法を用いている。

開発した解析コードを用いて半球周りの軸対称流の解析を行った。実験データと比較することで開発したコードの検証を行った。また格子依存性についても調べた。衝撃波後方の流れが強い非平衡性を持った流れであることを示している。

記号

A_s : τ_s^{MW} の定義で使われる定数
 \tilde{a}_s : σ_{es} を定義する曲線補間の係数
 \tilde{b}_s : σ_{es} を定義する曲線補間の係数
 $C_{p,s}^{tr}$: 化学種 s の並進・回転エンタルピーに対する定圧比熱 [J/(kmol·K)]
 $C_{bn,r}$: 化学反応 r の逆反応速度係数を表す指数関数の係数 ($n=0,1,2$)
 $C_{fn,r}$: 化学反応 r の順反応速度係数を表す指数関数の係数 ($n=0,1,2$)
 \hat{c}_s : 化学種 s の平均粒子速度 [m/s]
 \tilde{c}_s : σ_{es} を定義する曲線補間の係数
 D_s : 化学種 s の有効拡散係数 [m²/s]
 D_{sr} : 化学種 s と r の間の拡散係数 [m²/s]
 \hat{D}_s : 化学種 s の化学反応によって生成する平均振動エネルギー [J/kmol]
 \tilde{D}_s : 化学種 s の化学反応によって生成する解離エネルギー [J/kmol]

D_{ion}^a : イオン種の両極性拡散係数 [m²/s]
 $d\mathbf{S}_j$: ξ_j 方向の面ベクトル
 E : 混合気体の単位体積当りのエネルギー [J/m³]
 e : 混合気体の単位体積当りの内部エネルギー [J/m³]
 e_s : 化学種 s の単位体積当りの内部エネルギー [J/m³]
 e_V : 混合気体の単位体積当りの振動エネルギー [J/m³]
 \mathbf{F}_j : 非粘性流束ベクトル ($j=1,2,3$)
 \mathbf{F}_{Vj} : 粘性流束ベクトル ($j=1,2,3$)
 $g_{0,s}$: 化学種 s の第 0 電子励起準位の縮退度
 $g_{1,s}$: 化学種 s の第 1 電子励起準位の縮退度
 H : 混合気体の単位質量当りのエンタルピー [J/kg]
 h_s : 化学種 s の単位モル数当りのエンタルピー [J/kmol]

*平成 11 年 3 月 10 日受付 (received 10 March 1999)

†計算科学研究部

$h_{s,0}$: 化学種 s の単位モル数当りの生成エンタルピー [J/kmol]
$h_{V,s}$: 化学種 s の単位モル数当りの振動エンタルピー [J/kmol]
\hat{I}_s	: イオン種 s の第 1 次イオン化エネルギー [J/kmol]
k	: Boltzmann 定数 (1.380622×10^{-23} [J/K])
$k_{b,r}$: 化学反応 r の逆反応速度係数
$k_{f,r}$: 化学反応 r の順反応速度係数
M_s	: 化学種 s の分子量 (kg/kmol)
n_s	: 化学種 s の数密度 ($1/\text{m}^3$)
$\dot{n}_{e,s}$: 自由電子の衝突によるイオン種 s のモル生成率 [kmol/($\text{m}^3 \cdot \text{s}$)]
p	: 混合気体の圧力 [Pa]
p_e	: 自由電子の分圧 [Pa]
p_s	: 化学種 s の分圧 [Pa]
q	: 保存量ベクトル
\bar{R}	: 一般気体定数 (8.3144×10^3 [J/(kmol·K)])
$R_{b,r}$: 化学反応 r の逆反応レート [kmol/($\text{m}^3 \cdot \text{s}$)]
$R_{f,r}$: 化学反応 r の順反応レート [kmol/($\text{m}^3 \cdot \text{s}$)]
S	: ソースベクトル
T	: 並進・回転温度 [K]
T_q	: 反応特性温度 [K]
T_{sh}	: 衝撃波直後の並進温度 [K]
T_V	: 振動・電子励起・自由電子の並進温度 [K]
$T_{V,sh}$: 衝撃波直後の振動温度 [K]
t	: 時間 [s]
u_j	: 速度、 $j=1,2,3$ [m/s]
V	: セル体積
\dot{v}_s	: 化学種 s の単位体積当りのモル生成率 [kmol/($\text{m}^3 \cdot \text{s}$)]
$\alpha_{s,r}, \beta_{s,r}$: 化学量論係数
x_j	: 位置、 $j=1,2,3$ [m]
y_s	: 化学種 s のモル分率
γ_s	: 化学種 s のモル質量比 [kmol/kg]
$\varepsilon_{e,s}$: 化学種 s の単位モル数当りの電子励起エネルギー [J/kmol]
$\varepsilon_{r,s}$: 化学種 s の単位モル数当りの回転エネルギー [J/kmol]
$\varepsilon_{t,s}$: 化学種 s の単位モル数当りの並進エネルギー [J/kmol]
$\varepsilon_{v,s}$: 化学種 s の単位モル数当りの振動エネルギー (振動エンタルピー) [J/kmol]
$\varepsilon_{v,s}^*$: 化学種 s の温度 T での単位モル数当りの振動エネルギー (振動エンタルピー) [J/kmol]
δ_{ij}	: Kroneker のデルタ
η	: 混合気体の並進・回転エネルギーの熱伝導係数 [W/(m·K)]
η_e	: 混合気体の電子励起エネルギーの熱伝導係数 [W/(m·K)]
η_v	: 混合気体の振動エネルギーの熱伝導係数 [W/(m·K)]
$\Theta_{dis,s}$: 解離特性温度 [K]

$\Theta_{e,s}$: 第 1 電子励起準位特性温度 [K]
$\Theta_{v,s}$: 振動特性温度 [K]
ξ_j	: 一般曲線座標系 ($j=1,2,3$)
μ	: 混合気体の粘性係数 [N·s/ m^2]
μ_{sj}	: 化学種 s と j の換算質量
$\nu_{e,s}$: 自由電子と重粒子との有効衝突頻度 [1/s]
ρ	: 混合気体の密度 [kg/ m^3]
σ_s	: 有効衝突断面積 [m^2]
τ_{ij}	: 歪みテンソル
$<\tau_s>$: 化学種 s の並進-振動緩和時間 [s]
τ_s^{MW}	: 化学種 s の Millikan, White による並進-振動緩和時間 [s]
τ_s^P	: 化学種 s の Park による並進-振動緩和時間 [s]
τ_s^D	: 化学種 s の拡散的緩和モデルでの並進-振動緩和時間 [s]
τ_s^H	: 化学種 s の高温緩和モデルでの並進-振動緩和時間 [s]
$\psi()$: 制限関数
$\bar{\Omega}_{sr}^{(k,k)}$: 化学種 s と r の衝突断面積 $k=1,2$ [m^2]

添 字

b	: 化学反応における逆反応過程
e	: 自由電子
f	: 化学反応における順反応過程
ion	: イオン化学種
j	: 座標系における j 番目の方向
mol	: 分子化学種
r	: 回転モード
s	: 化学種 s
sh	: 衝撃波直後の状態量
t	: 並進モード
tr	: 2 温度モデルでの並進・回転モード
V	: 2 温度モデルでの振動・電子励起モード
v	: 振動モード
∞	: 一様流状態

略 記

AUSM	: Advection Upstream Splitting Method
FDS	: Flux Difference Splitting scheme
FVS	: Flux Vector Splitting scheme
LU-SGS	: Lower-Upper decomposed Symmetric Gauss Seidel method
LU-ADI	: Lower-Upper decomposed Alternating Direction Implicit scheme

1. はじめに

現在開発が行なわれている HOPE(H-II Orbiting Plane) 等宇宙往還機の大気圏再突入時における極超音速飛行時には、機体表面が受ける空力加熱が非常に重要な問題となり、この極超音速飛行時の表面空力加熱率を精度良く推算することがこういった飛翔体の設計上大変重要となる。同時に再突入時ではブラックアウト現象と呼ばれる通信途絶状態が発生するが、この期間を精度良く予測することも設計および運用上大変重要とな

る。特に極超音速飛行時には高温気体効果、一般に実在気体効果と呼ばれる現象、が発生し機体表面の空力加熱および空力特性に非常に大きな影響を与える。我が国では大気圏再突入等の極超音速飛行分野はこれまで経験がほとんどなく、データの蓄積が不十分であった。そのため近年 H-II ロケット 1 号機を利用した OREX (Orbital Re-Entry Experiment) ¹⁾ や J-1 ロケット 1 号機を利用した HYFLEX (Hypersonic Flight Experiment) ²⁾ 等の飛行実験を始め、これら実験機開発、更には HOPE-X 開発における各種風洞試験等を実施してデータの蓄積を行っている。しかしながらこのような高温気体効果を含む流れの解析を実験的手段だけに頼ることは、コストもさることながら再現性の問題からも非常に困難である。飛行試験は実飛行条件の再現ということでは申し分ないが取得データの質、量に制限があると同時に非常にコストが高く容易に行なうことができない。一方地上の風洞試験は比較的低コストではあるが一樣流の質の問題、一樣流条件の設定及び推定精度の問題、再現できる気流条件が大幅に制限される点、更には化学反応等を考慮すると実飛行を忠実に再現できないといった問題がある。一方計算流体力学 (Computational Fluid Dynamics; CFD) は比較的低コストであり、設計初期段階における空力形状のパラメトリックスタディーに威力を発揮する。それと同時に様々な物理モデルを導入することでより忠実に飛行条件を模擬することが可能である。そのためこういった極超音速飛翔体の開発においては今後かなりの部分を CFD に頼ることになる。そのため筆者は極超音速流の解析を行なう実在気体効果を含んだ CFD 解析コードを構築し、これまで「極超音速流の CFD ワークショップ」³⁾、「高エンタルピー流れ企画セッション及びワークショップ」⁴⁾ 等に参加することで CFD コードの検証を行なってきた。ここでは実在気体効果を含んだ CFD 解析コードの概要及び計算例について紹介し、また実験データを用い

た精度検証を行うとともに、数値解の信頼性を確認するため解析結果の格子依存性を確認したのでその結果について報告する。

2. 支配方程式

2.1 仮定

解析にあたっては、以下のような仮定をした。

- 流れ場は 3 次元圧縮性定常流れとし、流体の粘性を考慮する。
- 流れは層流とする。
- 解析気体は空気を想定し、空気モデルとして以下の 7 化学種モデルを仮定する。すなわち空気を 7 成分気体の混合気体として扱う。
 - 1-5: 電氣的に中性な化学種 O_2, N_2, O, NO, N
 - 6: イオン NO^+
 - 7: 自由電子 e^-
- 各成分気体はそれぞれが熱的完全気体に準じた振るまいをすると仮定する。
- 熱的非平衡状態を考慮するために Park の二温度モデル ⁵⁾ を用いた。Park の二温度モデルとは気体の内部エネルギーとして二つのエネルギーモードを考慮するモデルである。
- 輻射は考慮しない。

以上の仮定から、支配方程式として以下のものを与えた ⁶⁾。

- 混合気体の質量保存の式：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

- 混合気体の運動量保存の式：

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j + p \delta_{ij}) + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (2)$$

- 混合気体のエネルギー保存の式：

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{\partial \rho H u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tau_{ij} u_j - \rho \sum_s h_s D_s \frac{\partial y_s}{\partial x_j} - \eta \frac{\partial T}{\partial x_j} - (\eta_v + \eta_e) \frac{\partial T_v}{\partial x_j} \right) = 0 \quad (3)$$

- 各化学種のモル濃度保存の式：

$$\frac{\partial \rho \gamma_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \gamma_s u_j - \rho D_s \frac{\partial y_s}{\partial x_j} \right) = \dot{w}_s \quad (4)$$

- 振動・電子励起エネルギー保存の式：

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_v}{\partial t} + \frac{\partial e_v u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(-\rho \sum_s h_{v,s} D_s \frac{\partial y_s}{\partial x_j} - (\eta_v + \eta_e) \frac{\partial T_v}{\partial x_j} \right) &= -p_e \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \\ + \sum_{s=mol} \rho \gamma_s \frac{(\varepsilon_{v,s}^* - \varepsilon_{v,s})}{\langle \tau_s \rangle} + 2\rho_e \frac{3}{2} \bar{R}(T - T_v) \sum_s \frac{\nu_{e,s}}{M_s} - \sum_{s=ion} \dot{n}_{e,s} \hat{I}_s + \sum_{s=mol} \dot{w}_s \hat{D}_s \end{aligned} \quad (5)$$

2.2 混合気体の質量保存の式

混合気体の質量保存の式は、混合気体全体での質量保存が保証されており、また各成分気体の拡散速度による質量流束の総和は 0 となるので、単一完全気体の流体方程式に現れる質量保存式と同じである。ここで混合気体の密度 ρ は

$$\rho = \sum_s \rho_s = \sum_s \rho \gamma_s M_s \quad (6)$$

と定義される。また γ_s は化学種 s のモル質量比であり、従って $\rho \gamma_s$ はモル濃度 $[\text{kmol}/\text{m}^3]$ となる。

2.3 混合気体の運動量保存の式

混合気体の運動量保存の式も単一完全気体の流体方程式のものと同じである。ただし混合気体の圧力 p はドルトンの分圧の法則より

$$p = \sum_s p_s \quad (7)$$

と定義され、各化学種の分圧 p_s はそれぞれ熱的完全気体として扱われ、

$$\begin{aligned} p_s &= \rho \gamma_s \bar{R} T & s \neq e \\ p_e &= \rho \gamma_e \bar{R} T_V & \text{electron} \end{aligned} \quad (8)$$

と定義される。また歪みテンソル τ_{ij} はストークスの仮定に従うと、

$$\tau_{ij} = -\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (9)$$

と表される。

2.4 混合気体のエネルギー保存の式

式 (3) と一般の完全気体に対する流体方程式と異なるところは、左辺第 4 項、及び第 6 項である。左辺第 4 項は各化学種の拡散によるエンタルピー輸送項であり、気体を混合気体と仮定し、輸送現象を考慮した結果加わる項である。ここでエンタルピー H は

$$H = \frac{E + p}{\rho} \quad (10)$$

と定義される。混合気体の全エネルギー E は各化学種の内部エネルギー e_s から次式のように定義される。

$$E = \frac{1}{2} \rho u_j^2 + \sum_s e_s = \frac{1}{2} \rho u_j^2 + e \quad (11)$$

ここで、単位体積当りの化学種 s の内部エネルギー e_s は、並進エネルギー $\varepsilon_{t,s}$ 、電子励起エネルギー $\varepsilon_{e,s}$ 、さらに分子種に対しては回転エネルギー $\varepsilon_{r,s}$ 及び振動エネルギー $\varepsilon_{v,s}$ の和として以下のように表される。

$$e_s = \rho \gamma_s (\varepsilon_{t,s} + \varepsilon_{r,s} + \varepsilon_{v,s} + \varepsilon_{e,s}) \quad (12)$$

またここでは二温度モデルを用いているため振動・電子励起・自由電子並進エネルギー e_V が

$$e_V = \sum_{s \neq e} \rho \gamma_s (\varepsilon_{v,s} + \varepsilon_{e,s}) + \rho \gamma_e \varepsilon_{t,e} \quad (13)$$

と定義され、これを用いて混合気体の内部エネルギー e は

$$e = \sum_s \rho \gamma_s (\varepsilon_{t,s} + \varepsilon_{r,s}) + e_V \quad (14)$$

と記述できる。また、第 5 項は熱非平衡を考慮したために加わる、振動・電子励起・自由電子並進エネルギーに対する熱伝導項である。

2.5 各化学種のモル濃度保存の式

さまざまな文献を参照すると、各化学種の質量保存の式においては保存量に各化学種の密度または質量分率が選ばれていることが多いが、ここでは両辺を各化学種の分子量で除して、モル濃度に対する保存式として扱う。式 (4) において第 3 項は拡散による質量輸送を表しており、また右辺は化学反応による質量の生成消滅を表している。また y_s はモル分率であり、次式で定義される。

$$y_s = \frac{\frac{\rho_s}{M_s}}{\sum_r \left(\frac{\rho_r}{M_r} \right)} = \frac{\gamma_s}{\sum_r \gamma_r} \quad (15)$$

2.6 振動・電子励起エネルギー保存の式

仮定においても触れたとおり、本解析では Park の二温度モデル⁵⁾を使用している。このモデルは重粒子の並進、回転エネルギーは常に平衡であるとして一つの温度 T で評価し、他の内部エネルギー、すなわち振動、電子励起、そして自由電子の並進エネルギーがまた別の一つの平衡状態にあるとして振動・電子励起・自由電子並進温度 T_V で評価するモデルである。以下、並進・回転温度を並進温度、また、振動・電子励起・自由電子の並進温度を振動温度と記す。またエネルギーモードの添字規約として、添字 V は上記の振動・電子励起・自由電子の並進の各エネルギーモードを一括して表し、添字 v は振動エネルギーモードのみを表すこととする。

式 (5) の右辺第 1 項は電場による仕事を評価する項であり、下記の仮定とともに自由電子の運動量保存式から得られる近似モデルである。本解析で仮定した空気モデルは電離した場合をも考慮したものであるが、あくまで電離は弱電離であるとし、電荷分離はなく、電場によって電流は誘起されないと仮定され、さらに自由電子の動圧が無視できるほど小さい場合であれば、電場による仕事は自由電子の静圧勾配から近似的にモデル化できる。

右辺第 2 項は粒子の弾性衝突による並進モードと振動モードのエネルギー交換の結果生ずる振動エネルギーの増減を表す。この振動エネルギーの緩和モデルについては後の節でさらに述べる。

右辺第 3 項は粒子の弾性衝突による並進モードと電子励起モード及び電子並進モード間のエネルギー交換の結果生ずる振動エネルギーの増減を表す。

また右辺第 4 項は中性粒子に自由電子が衝突してイオンとさらに別の自由電子を生成する、いわゆる電子衝突電離反応における自由電子の並進エネルギーの消費を表している。しかし、本解析で用いる 7 化学種¹⁸ 反応モデルにおいては電子衝突電離反応は考慮していないので、この項は無視する。

以上述べた基礎方程式を行列式 (保存形ベクトル表示) で表すと以下ようになる。

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathbf{F}_{Vj}}{\partial x_j} = \mathbf{S} \quad (16)$$

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_i \\ E \\ \rho \gamma_s \\ e_V \end{pmatrix}, \mathbf{F}_j = \begin{pmatrix} \rho u_j \\ \rho u_i u_j + p \delta_{ij} \\ (E + p)u_j \\ \rho \gamma_s u_j \\ e_V u_j \end{pmatrix}, \mathbf{F}_{Vj} = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{ij} u_i - \rho \sum_s h_s D_s \frac{\partial y_s}{\partial x_j} - \eta \frac{\partial T}{\partial x_j} - (\eta_v + \eta_e) \frac{\partial T_V}{\partial x_j} \\ -\rho D_s \frac{\partial y_s}{\partial x_j} \\ -\rho \sum_s h_{V,s} D_s \frac{\partial y_s}{\partial x_j} - (\eta_v + \eta_e) \frac{\partial T_V}{\partial x_j} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{w}_s \\ -p_e \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \sum_{s=mol} \rho_s \frac{(\varepsilon_{v,s}^* - \varepsilon_{v,s})}{\langle \tau_s \rangle} + 2\rho_e \frac{3}{2} \bar{R}(T - T_V) \sum_s \frac{\nu_{e,s}}{M_s} + \sum_{s=mol} \dot{w}_s \hat{D}_s \end{pmatrix},$$

実際の問題に適用するためには直交座標系で記述された上記の式を一般曲線座標系 (t, ξ_j) に変換する。また、離散化を行なう際に有限体積法を用いた離散化を行なうため支配方程式を積分形表示に書き換えると以下のような形となる。

$$V \frac{\partial \hat{\mathbf{q}}}{\partial t} + \int_{\partial V} (\hat{\mathbf{F}}_j + \hat{\mathbf{F}}_{Vj}) \cdot d\mathbf{S}_j = V \hat{\mathbf{S}} \quad (17)$$

$$\hat{\mathbf{q}} = \frac{1}{V} \int_V \mathbf{q} dV, \quad \hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{V} \int_V \mathbf{S} dV \quad (18)$$

ここで V はセルの体積、 $d\mathbf{S}_j$ は ξ_j 方向の面ベクトルである。

3. 熱力学特性

内部エネルギー e_s は並進エネルギー $\varepsilon_{t,s}$ 、回転エネルギー $\varepsilon_{r,s}$ 、振動エネルギー $\varepsilon_{v,s}$ 、電子励起エネルギー $\varepsilon_{e,s}$ の和として表される。熱的内部エネルギーは通常、非平衡にある二つの温度 T, T_V の関数として曲線近似で与えられるが、ここではそれぞれ以下のモデルから与え

る。並進エネルギー、回転エネルギーに関しては一般的な問題で考慮される温度範囲では完全励起していると見なせるので、以下の式で与えられる⁶⁾。

$$\varepsilon_{tr,s} = \varepsilon_{t,s} + \varepsilon_{r,s} = C_{p,s}^{tr}(T - T_{ref}) + h_{s,0} - \bar{R}T \quad (19)$$

振動エネルギーについては分子振動モデルとして調和振動子を仮定することで、以下のように与えられる⁷⁾。

$$\varepsilon_{v,s} = \frac{\Theta_{v,s} \bar{R}}{\exp\left(\frac{\Theta_{v,s}}{T_V}\right) - 1} \quad (20)$$

また電子励起エネルギーについては、第1電子励起準位までを考慮すれば、次式のように与えられる⁷⁾。

$$\varepsilon_{e,s} = \frac{\Theta_{e,s} \bar{R} \frac{g_{1,s}}{g_{0,s}} \exp\left(-\frac{\Theta_{e,s}}{T_V}\right)}{1 + \frac{g_{1,s}}{g_{0,s}} \exp\left(-\frac{\Theta_{e,s}}{T_V}\right)} \quad (21)$$

それぞれの定数については表1に示す。

表1：各化学種の定数データ

化学種 s	O_2	N_2	O	NO	N	NO^+	e^-
M_s	32.0	28.02	16.0	30.01	14.01	30.01	5.486×10^{-4}
$h_{0,s}$ [kcal/mol]	0.0	0.0	59.56	21.58	113.0	236.66	0.0
$C_{p,s}^{tr}$ [J/(kmol·K)]	$3.5\bar{R}$	$3.5\bar{R}$	$2.5\bar{R}$	$3.5\bar{R}$	$2.5\bar{R}$	$3.5\bar{R}$	$2.5\bar{R}$
$\Theta_{v,s}$ [K]	2272.0	3392.0	-	2738.0	-	3417.0	-
$\Theta_{e,s}$ [K]	11390.	72216.	22800.	55294.	27700.	75073.	-
$g_{0,s}$	3	1	9	2	4	1	1
$g_{1,s}$	1	3	5	4	10	3	0
$\Theta_{dis,s}$ [K]	5.935×10^4	1.132×10^5	0.0	7.537×10^4	0.0	1.258×10^5	0.0

またエンタルピー h_s については以下の関係式が成り立つ。

$$h_s = C_{p,s}^{tr}(T - T_{ref}) + h_{s,0} + h_{V,s} \quad (22)$$

$$h_{V,s} = \varepsilon_{V,s} = \varepsilon_{v,s} + \varepsilon_{e,s} \quad (23)$$

4. 化学反応モデル

化学反応モデルとしては、7化学種による18反応モデルを用いた。表2に扱う18の素反応を示す。

表 2 : 化学反応モデル

反応物	生成物	順反応特性温度 $T_{q,f}$	逆反応特性温度 $T_{q,b}$
$O_2 + N \rightleftharpoons$	$2O + N$	$\sqrt{TT_V}$	T
$O_2 + NO \rightleftharpoons$	$2O + NO$	$\sqrt{TT_V}$	T
$O_2 + O \rightleftharpoons$	$2O + O$	$\sqrt{TT_V}$	T
$O_2 + O_2 \rightleftharpoons$	$2O + O_2$	$\sqrt{TT_V}$	T
$O_2 + N_2 \rightleftharpoons$	$2O + N_2$	$\sqrt{TT_V}$	T
$N_2 + N \rightleftharpoons$	$2N + N$	$\sqrt{TT_V}$	T
$N_2 + NO \rightleftharpoons$	$2N + NO$	$\sqrt{TT_V}$	T
$N_2 + O \rightleftharpoons$	$2N + O$	$\sqrt{TT_V}$	T
$N_2 + O_2 \rightleftharpoons$	$2N + O_2$	$\sqrt{TT_V}$	T
$N_2 + N_2 \rightleftharpoons$	$2N + N_2$	$\sqrt{TT_V}$	T
$NO + N \rightleftharpoons$	$N + O + N$	$\sqrt{TT_V}$	T
$NO + NO \rightleftharpoons$	$N + O + NO$	$\sqrt{TT_V}$	T
$NO + O \rightleftharpoons$	$N + O + O$	$\sqrt{TT_V}$	T
$NO + O_2 \rightleftharpoons$	$N + O + O_2$	$\sqrt{TT_V}$	T
$NO + N_2 \rightleftharpoons$	$N + O + N_2$	$\sqrt{TT_V}$	T
$O + NO \rightleftharpoons$	$N + O_2$	T	T
$O + N_2 \rightleftharpoons$	$N + NO$	T	T
$O + N \rightleftharpoons$	$NO^+ + e^-$	T	T_V

本解析では、化学反応速度に及ぼす振動温度の影響を考慮するため、Park による反応特性温度モデル⁵⁾を使用した。このモデルは反応を制御する温度として、並進温度と振動温度を適当に平均した温度を用いるモデルである。特に解離反応においては特性温度として

$$T_{q,f} = \sqrt{TT_V} \quad (24)$$

を用いる事を推奨している。式 (24) は経験的なものであるが、比較的良好な結果が報告されている。以上のことにより、反応特性温度として、解離反応には式 (24) で定義された特性温度を用い、自由電子の衝突反応に対しては、自由電子の並進温度及び分子の電子励起エネルギーレベルが反応を特徴付けるので特性温度は振動温度を用いる。その他の反応に関しては粒子の並進温度を特性温度とする。今 r 番目の化学反応は C_s を s 番目の化学種として次式で表現できる。

$$\sum_s \alpha_{rs} C_s \xrightleftharpoons[k_{br}]{k_{fr}} \sum_s \beta_{rs} C_s \quad (25)$$

また化学反応による各化学種の単位時間単位体積当りのモル生成消滅量 \dot{w}_s は以下の式で与えられる。

$$\dot{w}_s = \sum_{r=1}^{N_r} (\beta_{s,r} - \alpha_{s,r})(R_{f,r} - R_{b,r}) \quad (26)$$

ここで $R_{f,r}, R_{b,r}$ は順反応及び逆反応レートで

$$\begin{aligned} R_{f,r} &= 10^3 \left[k_{f,r} \prod_s (10^{-3} \rho \gamma_s)^{\alpha_{s,r}} \right], \\ R_{b,r} &= 10^3 \left[k_{b,r} \prod_s (10^{-3} \rho \gamma_s)^{\beta_{s,r}} \right] \end{aligned} \quad (27)$$

と表される。文献等の反応速度係数のデータは一般に cgs 単位系であることが多い。そのため、式 (27) にある $10^3, 10^{-3}$ は cgs 単位系から MKS 単位系へ変換するためのものである。式 (27) 中でカレット内は cgs 単位系で記述されている。また、通常、反応速度係数に関するデータは熱的平衡を仮定しており、その結果平衡状態を表す一つの温度の関数として表現される。しかしながら熱的非平衡な状態、つまり解離等の化学反応の特性時間と振動緩和の特性時間が同じオーダーである場合は、化学反応に対する振動緩和の影響をも考慮する必要がある。このような化学反応と振動緩和のカップリングに対して、二つのモデルが提唱されている。まず一つめは選択的解離モデルと呼ばれるもので、解離は、振動励起レベルが高いものから優先的に解離すると仮定するモデルである。すなわち、選択的に高い振動準位にある分子が解離し、低い準位にある分子は解離する前に高い準位へと段階的に上がって行く必要があるとするものである。高エンタルピー流れにおいては一つ一つエネルギー準位が上がって行く過程はそれほど重要ではなく、そのような場合には、もう一つのモデルである、非選択的解離モデルの方が現実的である。これら、解離のモデルについては後に詳述する。式 (27) の $k_{f,r}, k_{b,r}$ はそれぞれ順反応及び逆反応の速度係数であり、以下のように与えられる。

$$\begin{aligned} k_{f,r} &= T_{q,f}^{C_{f2,r}} C_{f0,r} \exp \left(-\frac{C_{f1,r}}{T_{q,f}} \right), \\ k_{b,r} &= T_{q,b}^{C_{b2,r}} C_{b0,r} \exp \left(-\frac{C_{b1,r}}{T_{q,b}} \right) \end{aligned} \quad (28)$$

それぞれの定数を表 3 に示す。

表 3: 反応速度定数

反応			C_{f0}	C_{f1}	C_{f2}	C_{b0}	C_{b1}	C_{b2}
$O_2 + N \rightleftharpoons 2O + N$			3.61e18	59400.	-1.0	3.01e15	0.	-0.5
$O_2 + NO \rightleftharpoons 2O + NO$			3.61e18	59400.	-1.0	3.01e15	0.	-0.5
$O_2 + O \rightleftharpoons 2O + O$			9.03e19	59400.	-1.0	7.53e16	0.	-0.5
$O_2 + O_2 \rightleftharpoons 2O + O_2$			3.25e19	59400.	-1.0	2.71e16	0.	-0.5
$O_2 + N_2 \rightleftharpoons 2O + N_2$			7.22e18	59400.	-1.0	6.02e15	0.	-0.5
$N_2 + N \rightleftharpoons 2N + N$			4.15e22	113100.	-1.5	2.32e21	0.	-1.5
$N_2 + NO \rightleftharpoons 2N + NO$			1.92e17	113100.	-0.5	1.09e16	0.	-0.5
$N_2 + O \rightleftharpoons 2N + O$			1.92e17	113100.	-0.5	1.09e16	0.	-0.5
$N_2 + O_2 \rightleftharpoons 2N + O_2$			1.92e17	113100.	-0.5	1.09e16	0.	-0.5
$N_2 + N_2 \rightleftharpoons 2N + N_2$			4.75e17	113100.	-0.5	2.73e16	0.	-0.5
$NO + N \rightleftharpoons N + O + N$			7.94e21	75600.	-1.5	2.02e21	0.	-1.5
$NO + NO \rightleftharpoons N + O + NO$			7.94e21	75600.	-1.5	2.02e21	0.	-1.5
$NO + O \rightleftharpoons N + O + O$			7.94e21	75600.	-1.5	2.02e21	0.	-1.5
$NO + O_2 \rightleftharpoons N + O + O_2$			3.97e20	75600.	-1.5	1.01e20	0.	-1.5
$NO + N_2 \rightleftharpoons N + O + N_2$			3.97e20	75600.	-1.5	1.01e20	0.	-1.5
$O + NO \rightleftharpoons N + O_2$			3.18e9	19700.	1.0	9.63e11	3600.	0.5
$O + N_2 \rightleftharpoons N + NO$			6.75e13	37500.	0.0	1.50e13	0.	0.0
$O + N \rightleftharpoons NO^+ + e^-$			9.03e9	32400.	0.5	1.80e19	0.	-1.0

式 (5) にある右辺最後の項は化学反応、分子の解離・再結合による振動エネルギーの増減を表している。もし解離、再結合反応において選択的解離・結合モデルを用いれば、その反応によって生成・消滅する振動エネルギーは、平均の振動エネルギー $e_{V,s}$ よりも大きくなるので、次式のように考えられる。

$$\hat{D}_s = \hat{c}_2 e_{V,s} = \hat{c}_2 (e_{v,s} + e_{e,s}), \quad \hat{c}_2 \geq 1 \quad (29)$$

ここで \hat{c}_2 は任意定数である。 $\hat{c}_2 = 1$ であれば非選択的解離モデルであり、 $\hat{c}_2 > 1$ ならば選択的解離モデルとなる。また分子の解離エネルギー \tilde{D}_s を用いたモデルでは

$$\hat{D}_s = e_{e,s} + \hat{c}_1 \tilde{D}_s \quad (30)$$

と表せる。ここで \hat{c}_1 は $0 < \hat{c}_1 < 1$ の任意定数であり、解離エネルギー \tilde{D}_s は解離特性温度 $\Theta_{dis,s}$ を用いて以下

$$\tau_{sr}^{MW} = \frac{1}{p} \exp \left[1.16 \times 10^{-3} \sqrt{\mu_{sr}} \Theta_{v,s}^{4/3} (T^{1/3} - 0.015 \mu_{sr}^{1/4}) - 18.42 \right] \quad (32)$$

ここで p の単位は atm である。 μ_{sr} は衝突する粒子 s と r の換算分子量で次式で与えられる。

$$\mu_{sr} = \frac{M_s M_r}{M_s + M_r} \quad (33)$$

モル平均された Landau-Teller 緩和時間は Lee¹⁰⁾ によって次の式で与えられている。

$$\langle \tau_s^{MW} \rangle = \frac{\sum_r y_r}{\sum_r \tau_{sr}} = \frac{\sum_r \rho \gamma_r}{\sum_r \frac{\rho \gamma_r}{\tau_{sr}^{MW}}} \quad (34)$$

8000K 以上の高温領域においては、Landau-Teller 型振動緩和時間を修正するモデルが Park によって二つ提唱されている。その一つは高温領域で振動緩和時間を制限するモデル¹¹⁾ である。これは振動緩和時間が平均衝突時間より短くなることはないという考察に基づくもので

のように表せる。

$$\tilde{D}_s = \Theta_{dis,s} \bar{R} \quad (31)$$

選択的解離モデルは二温度モデルで重要な役割を担うものであるが、任意定数 \hat{c}_1 は解にさほど大きな影響は与えないことが報告されている⁸⁾。本解析では解離エネルギーを用いた式 (30) のモデルを使用することにし、 $\hat{c}_1 = 0.5$ とした。

5. 振動緩和過程

振動緩和は調和振動子を仮定した Landau-Teller 緩和方程式が多く用いられている。Millikan White は 300K から 8000K の範囲で、次式のような振動緩和時間に対する半経験式⁹⁾ を与えている。

ある。Park の提唱する平均衝突時間 τ_s^P は次式で与えられる。

$$\tau_s^P = (\sigma_s \bar{c}_s \gamma_s)^{-1} \quad (35)$$

ここで \bar{c}_s は化学種 s の平均粒子速度で

$$\bar{c}_s = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_s}} = \sqrt{\frac{8\bar{R}T}{\pi M_s}} \quad (36)$$

と表せる。 σ_s は振動緩和の有効衝突断面積であり、弾性衝突断面積よりも小さいと仮定され、やはり Park により次式のように与えられている。

$$\sigma_s = 10^{-21} \times (50000/T)^2 \quad (37)$$

しかしながら、現状では σ_s に対する実験データが少なく、上式も既存の実験観測データから推定されたものに留まっている。従って現段階で σ_s は厳密に見積もれるも

のではなく、たいていの解析においては定数として扱われることが多い。本解析では、19000K 以下の窒素に対する実験データから見積もられた値¹¹⁾を定数として用いることとし、 $\sigma_s = 10^{-20} [\text{m}^2]$ とした。

以上のことから、振動緩和時間は Park による補正を含め、

$$\langle \tau_s \rangle = \langle \tau_s^{MW} \rangle + \tau_s^P \quad (38)$$

となる。Park は 500K から 8000K の温度範囲における酸素分子の振動緩和時間の実験データと比較しこのモデルの有効性を報告している。しかしながら前述のとおり、 $T > 8000\text{K}$ の領域における、よりよい緩和モデルを構築するためにはさらなる実験データが必要である。もう一つは拡散的振動緩和モデル¹²⁾で、高温では非調和振動子の効果が大きくなって、Landau-Teller モデルよりも緩和が遅れる効果を考慮したものである。拡散的振動緩和モデルでの振動緩和時間 τ_s^D は

$$\frac{1}{\langle \tau_s^D \rangle} = \frac{1}{\langle \tau_s \rangle} \left| \frac{T_{sh} - T_V}{T_{sh} - T_{V,sh}} \right|^{(3.5 \exp(-\frac{5000}{T_{sh}}) - 1)} \quad (39)$$

と表せる。ここで $T_{sh}, T_{V,sh}$ はそれぞれ振動緩和過程が始まる衝撃波直後の並進温度、振動温度である。1次元流れの解析であれば、衝撃波直後の温度は一意に定まるが、多次元流れでは衝撃波後方の任意の地点に対してそこから流れを遡って衝撃波直後の情報を特定しなければならず解析上、大きな困難を伴う。そこで本計算では T_{sh} として衝撃波後方の最大温度を充当し、 T_{sh} の値は表面に垂直方向の格子線に沿って一定とした。また $T_{V,sh}$ としては一様流の振動温度とした。また、和田ら⁸⁾は master 方程式から出発して、高温での緩和の遅れを考慮した緩和方程式を導出することを試みた。その結果、得られた振動緩和時間は

$$\frac{1}{\langle \tau_s^H \rangle} = \frac{1}{\langle \tau_s \rangle} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\Theta_{vs}}{T_V}\right) \right\} \quad (40)$$

である。ここではこの緩和モデルを高温緩和モデルと呼ぶ。このモデルにおいて $T_V \ll \Theta_{V,s}$ で式 (38) の振動緩和時間と一致する。 n は 1 に近い定数であるが、 $n = 2$ を用いた場合に Stalker-tube の実験結果と良好な一致を得ている⁸⁾。また、これら緩和モデルの比較計算を行なった結果からは振動温度のプロファイルに関してはモデル間で大きな相違が見られるが、化学種の分布及び空力加熱率に関しては、ほとんど差異は認められないことが報告されている¹³⁾。振動温度のプロファイルに関しては実験データが不足しており、どのモデルが最適なのかは不明である。

6. 電子の並進エネルギー緩和

式 (5) の右辺第 3 項は自由電子と重粒子の弾性衝突によるエネルギー交換を示す項であり、Appleton と Bray

のモデル¹⁴⁾を用いている。このモデルは本来はプラズマ用のモデルであり、分子の内部自由度は考慮していない。自由電子の有効衝突頻度 ν_{es} はイオンとのクーロン衝突の場合

$$\nu_{es} = \frac{8}{3} \sqrt{\frac{\pi}{m_e}} n_s e^4 \frac{1}{(2kT_V)^{\frac{3}{2}}} \ln \left(\frac{k^3 T_V^3}{\pi n_e e^6} \right) \quad (41)$$

また中性粒子との場合

$$\nu_{es} = n_s \sigma_{es} \sqrt{\frac{8kT_e}{\pi m_e}} \quad (42)$$

とされている。ここで有効自由電子-中性粒子間のエネルギー交換断面積は以下の曲線近似式で表される。

$$\sigma_{es} = \tilde{a}_s + \tilde{b}_s T_V + \tilde{c}_s T_V^2 \quad (43)$$

ここで曲線近似の定数を表 4 に示す¹⁵⁾。

表 4：自由電子-中性粒子間エネルギー交換断面積の曲線近似定数

s	\tilde{a}_s	\tilde{b}_s	\tilde{c}_s
O_2	2.e-20	6.e-24	0.
N_2	7.5e-20	5.5e-24	-1.e-28
O	1.2e-20	1.7e-24	-2.e-29
NO	1.e-19	0.	0.
N	5.e-20	0.	0.

7. 輸送特性

輸送係数は、Yos のモデルを多温度熱非平衡モデルに拡張したものから与えている。Yos のモデルは、ボルツマン方程式に対する Chapman-Enskog の第 2 近似式を用い、粒子の衝突積分値から輸送係数をモデリングするものである。その際、重粒子の衝突積分は並進温度 T に、自由電子の衝突積分は振動温度 T_V にそれぞれ基づくものとして算出している。衝突積分値 $\bar{\Omega}_{sr}^{(k,k)}$, $k = 1, 2$ は式 (44) で示すように、温度 2000K 及び 4000K における衝突積分値の線形外挿式で与える。 $\bar{\Omega}_{sr}^{(k,k)} \Big|_{T=2000,4000}$ は表 5 に示す。表 5 の値は自由電子の圧力 $p_e = 0.001 [\text{atm}]$ における値である。一般には衝突積分は自由電子の圧力の変化に応じた補正が必要であり、文献¹⁵⁾によると、自由電子の圧力によって衝突積分値は式 () のように補正される。しかしながら、式 (45) 右辺の分子は $T \sim 150$ で 0 となり特異点が存在する。従って気流温度が比較的低い領域においてはこのモデルは不適当となる。そのため、本解析では式 (45) による補正は行っていない。

$$\begin{aligned} \log_{10} \left(\pi \bar{\Omega}_{sr}^{(k,k)} \right) &= \log_{10} \left(\pi \bar{\Omega}_{sr}^{(k,k)} \right) \Big|_{T=2000} \\ &+ \frac{\log_{10} \left(\pi \bar{\Omega}_{sr}^{(k,k)} \right) \Big|_{T=4000} - \log_{10} \left(\pi \bar{\Omega}_{sr}^{(k,k)} \right) \Big|_{T=2000}}{\ln(4000) - \ln(2000)} \\ &\times [\ln(T) - \ln(2000)] \end{aligned} \quad (44)$$

$$\frac{\pi \bar{\Omega}_{sr}^{(k,k)}(10^{-3})}{\pi \bar{\Omega}_{sr}^{(k,k)}(p_e)} = \frac{\ln \left[20.9 \left(\frac{T}{1000} \right)^4 + 152 \left(\frac{T}{1000} \right)^{\frac{8}{3}} \right]}{\ln \left[0.0209 \left(\frac{T}{1000} \right)^4 p_e^{-1} + 1.52 \left(\frac{T}{1000} \right)^{\frac{8}{3}} p_e^{-\frac{2}{3}} \right]} \quad (45)$$

表 5 : 衝突積分値

対		$\bar{\Omega}_{sr}^{(1,1)}$		$\bar{\Omega}_{sr}^{(2,2)}$	
s	r	$T=2000$ K	$T=4000$ K	$T=2000$ K	$T=4000$ K
N	N	-14.08	-14.11	-14.74	-14.82
N	O	-14.76	-14.86	-14.69	-14.80
N	N_2	-14.67	-14.75	-14.59	-14.66
N	O_2	-14.66	-14.74	-14.59	-14.66
N	NO	-14.66	-14.75	-14.67	-14.66
N	NO^+	-14.34	-14.46	-14.38	-14.50
N	e^-	-15.30	-15.30	-15.30	-15.30
O	O	-14.11	-14.14	-14.71	-14.79
O	N_2	-14.63	-14.72	-14.55	-14.64
O	O_2	-14.69	-14.76	-14.62	-14.69
O	NO	-14.66	-14.74	-14.59	-14.66
O	NO^+	-14.34	-14.46	-14.38	-14.50
O	e^-	-15.94	-15.82	-15.94	-15.82
N_2	N_2	-14.56	-14.65	-14.50	-14.58
N_2	O_2	-14.58	-14.63	-14.51	-14.54
N_2	NO	-14.57	-14.64	-14.51	-14.56
N_2	NO^+	-14.34	-14.46	-14.38	-14.50
N_2	e^-	-15.11	-15.02	-15.11	-15.02
O_2	O_2	-14.60	-14.64	-14.54	-14.57
O_2	NO	-14.59	-14.63	-14.52	-14.56
O_2	NO^+	-14.34	-14.46	-14.38	-14.50
O_2	e^-	-15.52	-15.39	-15.52	-15.39
NO	NO	-14.58	-14.64	-14.52	-14.56
NO	NO^+	-14.18	-14.22	-14.38	-14.50
NO	e^-	-15.30	-15.08	-15.30	-15.08
NO^+	NO^+	-11.70	-12.19	-11.49	-11.98
NO^+	e^-	-11.70	-12.19	-11.49	-11.98
e^-	e^-	-11.70	-12.19	-11.49	-11.98

以上のことより与えられた衝突積分を用いると、混合気体の粘性係数は

$$\mu = \sum_{s \neq e} \frac{m_s \gamma_s}{\sum_{r \neq e} \gamma_r \Delta_{sr}^2(T) + \gamma_e \Delta_{se}^2(T_V)} + \frac{m_e \gamma_e}{\sum_r \gamma_r \Delta_{er}^2(T_V)} \quad (46)$$

と与えられる。ここで $\Delta_{sr}^2(T)$ は次式で与えられる。

$$\Delta_{sr}^2(T) = \frac{16}{5} \sqrt{\frac{2M_s M_r}{\pi R T (M_s + M_r)}} \pi \bar{\Omega}_{sr}^{(2,2)} \quad (47)$$

また重粒子の並進エネルギーによる熱伝導係数 η_t 、分子の回転エネルギーによる熱伝導係数 η_r はそれぞれ次のように与えられる。

$$\eta_t = \frac{15}{4} k \sum_{s \neq e} \frac{\gamma_s}{\sum_{s \neq e} a_{sr} \gamma_r \Delta_{sr}^2(T) + 3.54 \gamma_e \Delta_{sr}^2(T_e)} \quad (48)$$

$$\eta_r = k \sum_{s=mol} \frac{\gamma_s}{\sum_{s \neq e} \gamma_r \Delta_{sr}^1(T) + \gamma_e \Delta_{se}^1(T_V)} \quad (49)$$

$$a_{sr} = 1 + \frac{\left[1 - \left(\frac{m_s}{m_r} \right) \right] \left[0.45 - 2.54 \left(\frac{m_s}{m_r} \right) \right]}{\left[1 + \left(\frac{m_s}{m_r} \right) \right]^2} \quad (50)$$

$$\Delta_{sr}^1(T) = \frac{8}{3} \sqrt{\frac{2M_s M_r}{\pi R T (M_s + M_r)}} \pi \bar{\Omega}_{sr}^{(1,1)} \quad (51)$$

である。これより混合気体における重粒子の並進・回転エネルギーによる熱伝導係数 η は

$$\eta = \eta_t + \eta_r \quad (52)$$

となる。また、振動エネルギーによる熱伝導係数 η_v 、電子エネルギーによる熱伝導係数 η_e はそれぞれ次のように与えられている。

$$\eta_v = k \sum_{s=mol} \frac{\gamma_s \exp\left(-\frac{\Theta_{v,s}}{T_V}\right) \left[\frac{\frac{\Theta_{v,s}}{T_V}}{1 - \exp\left(-\frac{\Theta_{v,s}}{T_V}\right)} \right]^2}{\sum_{s \neq e} \gamma_r \Delta_{sr}^1(T) + \gamma_e \Delta_{se}^1(T_V)} \quad (53)$$

$$\eta_e = \frac{15}{4} k \frac{\gamma_e}{\sum_r 1.45 \gamma_r \Delta_{er}^2(T_V)} \quad (54)$$

重粒子間の相互拡散係数 D_{sr} は

$$D_{sr} = \frac{kT}{p\Delta_{sr}^1(T)} \quad (55)$$

のように定義される。また自由電子と重粒子間の相互拡散係数は

$$D_{er} = \frac{kT_V}{p\Delta_{er}^1(T_V)} \quad (56)$$

のように定義される。これら相互拡散係数から、混合気体中の化学種 s の有効拡散係数 D_s は以下の式から与えられる。

$$D_s = \frac{\gamma_t^2(1 - M_s\gamma_s)}{\sum_{r \neq s} \frac{\gamma_r}{D_{sr}}}, \quad \gamma_t = \sum_s \gamma_s \quad (57)$$

イオンと自由電子の拡散は局所的な電荷分離によって生じる電場によって相互に結びつけられる。電流が誘起されないと思えることができる場合、部分的に電離した気体ではこの効果は次式の両極性拡散係数 D_{ion}^a を定義することで近似的に扱うことができる。

$$D_{ion}^a = 2D_{ion} \quad (58)$$

このモデルによると、混合気体中のそれぞれのイオンは、部分的に電離した気体中においても、あたかも完全電離した気体中にあるときと同様の拡散速度を持つ。また両極性拡散係数を用いる場合、自由電子の有効拡散係数はイオンの拡散速度と自由電子の拡散速度が等しいとして求められ、

$$D_e = D_{NO^+}^a \quad (59)$$

となる。

また別の粘性モデルとして、Blottner 等による、衝突積分を介さず輸送係数を温度の関数として直接与えるようなモデル¹⁶⁾を併用している。このモデルでは各化学種の粘性係数は次式のように与えられる。

$$\mu_s = 0.1 \exp[(A_s \log_{10} T + B_s) \log_{10} T + C_s] \quad (60)$$

式 (60) における曲線近似の係数は表 6 のように与えられている。

表 6 : Blottner の粘性係数モデルにおける諸係数

化学種 s	A_s	B_s	C_s
O_2	0.0449290	-0.0826158	-9.2019475
N_2	0.0268142	0.3177838	-11.3155513
O	0.0203144	0.4294404	-11.6031403
NO	0.0436378	-0.0335511	-9.5767430
N	0.0115572	0.6031679	-12.4327495
NO^+	0.3020141	-3.5039791	-3.7355157
e^-	0.3020141	-3.5039791	-3.7355157

また各化学種の熱伝導係数は、よく知られた Eucken の式から粘性係数を用いて与えることができる。並進・回転エネルギーによる熱伝導係数は、

$$\eta_s = \mu_s \left(\frac{5}{2} C_{v,s}^t + C_{v,s}^r \right) \quad (61)$$

また、振動エネルギーによる熱伝導係数 η_v 、電子エネルギーによる熱伝導係数 η_e はそれぞれ次のように与えられる。

$$\eta_v = \mu_s \frac{\bar{R}}{M_s} \quad (= \mu_s C_{v,s}^r) \quad (62)$$

$$\eta_e = \mu_e \frac{5}{2} C_{v,e}^t \quad (63)$$

これら各化学種の輸送係数より、混合気体の粘性係数と熱伝導率は Wilke の公式¹⁷⁾を用いてそれぞれ次式のように入えられる。

$$\mu = \sum_s \frac{y_s \mu_s}{\phi_s}, \quad \eta = \sum_s \frac{y_s \eta_s}{\phi_s} \quad (64)$$

ここで

$$\phi_s = \sum_r y_r \left[1 + \sqrt{\frac{\mu_s}{\mu_r}} \left(\frac{M_r}{M_s} \right)^{\frac{1}{4}} \right]^2 \left[\sqrt{8} \sqrt{1 + \frac{M_s}{M_r}} \right]^{-1} \quad (65)$$

である。またここで Schmidt 数 $S_c (= \mu/(\rho D))$ を全ての化学種に対して定数 $S_c = 0.5$ と仮定すると相互拡散係数が全て

$$D = \frac{\mu}{S_c \rho} \quad (66)$$

と与えられ、これを用いれば各化学種の拡散係数は次式のようにになる。

$$D_s = \sum_r \gamma_r (1 - \gamma_s M_s) \frac{1}{1 - y_s} D \quad (67)$$

8. 数値計算法

8.1 AUSMDV スキーム

実際の計算においては一般曲線座標における数値流束が必要となる。いま、セルのある面を考える。単位面ベクトルを $\mathbf{n} = (n_j; j = 1, 2, 3)$ で表し、この面ベクトルに対して垂直となる二つのベクトル $\mathbf{l} = (l_j; j = 1, 2, 3)$, $\mathbf{m} = (m_j; j = 1, 2, 3)$ を考える。ここで

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{l} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{m} = \mathbf{l} \cdot \mathbf{m} = 0, \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{l} \cdot \mathbf{l} = \mathbf{m} \cdot \mathbf{m} = 1 \quad (68)$$

である。これらのベクトルを用いるとセル表面に対して垂直方向、接線方向の速度成分が求まり以下のようにになる。

$$U = u_j n_j, \quad V = u_j l_j, \quad W = u_j m_j \quad (69)$$

FVS 系のスキームは、セル表面で数値流束を求める際に必ずしも一般曲線座標に変換された数値流束に対してスキームを適用しなくてもよく、直交座標系で表現された数値流束と同形の数値流束に対してスキームを適用し、その後、一般曲線座標系の数値流束に変換することができる。

まず ξ 方向のセル表面での数値流束を考える。簡単にするため、ここでは単位面積当りの数値流束を考える。

$$\hat{F}_1 = n_j F_j = \begin{pmatrix} \rho U \\ \rho u_1 U + n_1 p \\ \rho u_2 U + n_2 p \\ \rho u_3 U + n_3 p \\ (E + p)U \\ \rho \gamma_s U \\ e_V U \end{pmatrix} \quad (70)$$

いま、次のような変換マトリックス T を考え \hat{F}_j に左からかけると

$$T\hat{F}_j = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_1 & n_2 & n_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & l_1 & l_2 & l_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m_1 & m_2 & m_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho U \\ \rho u_1 U + n_1 p \\ \rho u_2 U + n_2 p \\ \rho u_3 U + n_3 p \\ (E+p)U \\ \rho \gamma_s U \\ e_V U \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho U \\ \rho U^2 + p \\ \rho UV + p \\ \rho UW + p \\ (E+p)U \\ \rho \gamma_s U \\ e_V U \end{pmatrix} \stackrel{def}{=} \bar{F}_1 \quad (71)$$

となる。FVS系のスキームでは単純に \hat{F} を気流の特性方向に従って分離するので

$$\bar{F} = \bar{F}^+ + \bar{F}^- = T(\hat{F}^+ + \hat{F}^-) = T\hat{F}^+ + T\hat{F}^- \quad (72)$$

となり逆行列 $T^{-1} = T^t$ を用いれば

$$\hat{F}^+ = T^{-1}\bar{F}^+, \quad \hat{F}^- = T^{-1}\bar{F}^- \quad (73)$$

となる。ここで逆行列 T^{-1} は以下のとおりである。

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_1 & l_1 & m_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_2 & l_2 & m_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & n_3 & l_3 & m_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (74)$$

すなわち、数値流束としては \bar{F} に対してスキームを構築すればよいことがわかる。この数値流束 \bar{F} は直交座標系での数値流束とほぼ同じ形をしており、異なる点としては速度が通常 x, y, z 成分で表されるところがセル表

面に垂直及び接線方向の速度成分で表されている点である。このようにして作られた数値流束に、以下のように T^{-1} をかけることで最終的なセル表面での数値流束が求まり、次式ようになる。

$$\hat{F} = \begin{pmatrix} \bar{F}_1 \\ x_1 \bar{F}_2 + l_1 \bar{F}_3 + m_1 \bar{F}_4 \\ x_2 \bar{F}_2 + l_2 \bar{F}_3 + m_2 \bar{F}_4 \\ x_3 \bar{F}_2 + l_3 \bar{F}_3 + m_3 \bar{F}_4 \\ \bar{F}_5 \\ F_{5+s} \\ F_{5+s+1} \end{pmatrix} \quad (75)$$

また、和田は従来から人工粘性が過剰であり、境界層内の流れの捕獲に問題があると指摘されていたFVS系のスキームを改良し、特に接触不連続面での人工粘性を小さくすることで境界層内流れの解像度を向上させたAUSMDVスキームを提案した¹⁸⁾。このAUSMDVスキームはFVS系のスキームの特徴である頑丈さを持っているので、特に安定性が要求される非平衡反応流の解析には適したスキームである。AUSMDVスキームでの数値流束は以下のように表せる。

$$\bar{F}_{AUSMDV} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \\ f_{5+s} \\ f_{5+s+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_L^+ \rho_L + U_R^- \rho_R \\ s f_2^{AUSMV} + (1-s) f_2^{AUSMD} + p_L^+ + p_R^- \\ \frac{f_1 + |f_1|}{2} V_L + \frac{f_1 - |f_1|}{2} V_R \\ \frac{f_1 + |f_1|}{2} W_L + \frac{f_1 - |f_1|}{2} W_R \\ \frac{f_1 + |f_1|}{2} H_L + \frac{f_1 - |f_1|}{2} H_R \\ \frac{f_1 + |f_1|}{2} \gamma_s L + \frac{f_1 - |f_1|}{2} \gamma_s R \\ \frac{f_1 + |f_1|}{2} \left(\frac{e_V}{\rho} \right)_L + \frac{f_1 - |f_1|}{2} \left(\frac{e_V}{\rho} \right)_R \end{pmatrix} \quad (76)$$

ここで

$$f_2^{AUSMV} = U_L^+ \rho_L U_L + U_R^- \rho_R U_R \quad (77)$$

$$f_2^{AUSMD} = \frac{f_1 + |f_1|}{2} U_L + \frac{f_1 - |f_1|}{2} U_R \quad (78)$$

$$s = \frac{1}{2} (1 + \min(1, K \frac{|p_R - p_L|}{\min(p_L, p_R)})) \quad (79)$$

$$\alpha_L = \frac{2 \left(\frac{p}{\rho} \right)_L}{\left(\frac{p}{\rho} \right)_L + \left(\frac{p}{\rho} \right)_R}, \quad \alpha_R = \frac{2 \left(\frac{p}{\rho} \right)_R}{\left(\frac{p}{\rho} \right)_L + \left(\frac{p}{\rho} \right)_R} \quad (80)$$

$$p_L^+ = \begin{cases} p_L \left(\frac{u_L}{c_m} + 1 \right)^2 \left(2 - \frac{u_L}{c_m} \right) \frac{1}{4}, & \text{if } \frac{|u_L|}{c_m} \leq 1 \\ p_L \frac{u_L + |u_L|}{2 u_L}, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (81)$$

$$p_R^- = \begin{cases} p_R \left(\frac{u_R}{c_m} - 1 \right)^2 \left(2 + \frac{u_R}{c_m} \right) \frac{1}{4}, & \text{if } \frac{|u_R|}{c_m} \leq 1 \\ p_R \frac{u_R - |u_R|}{2 u_R}, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (82)$$

$$u_L^+ = \begin{cases} \alpha_L \left\{ \frac{(u_L + c_m)^2}{4 c_m} - \frac{u_L + |u_L|}{2} \right\} + \frac{u_L + |u_L|}{2}, & \text{if } \frac{|u_L|}{c_m} \leq 1 \\ \frac{u_L + |u_L|}{2}, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (83)$$

$$u_R^- = \begin{cases} \alpha_R \left\{ -\frac{(u_R - c_m)^2}{4 c_m} - \frac{u_R - |u_R|}{2} \right\} + \frac{u_R - |u_R|}{2}, & \text{if } \frac{|u_R|}{c_m} \leq 1 \\ \frac{u_R - |u_R|}{2}, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (84)$$

であり、 K は通常、 $K = 10$ の値を用いている。また、式 (76) を式 (75) に従ってセル表面での数値流束に変換

$$\hat{\mathbf{F}}_{AUSMDV} = \begin{pmatrix} f_1 \\ n_1 f_2 + l_1 f_3 + m_1 f_4 \\ n_2 f_2 + l_2 f_3 + m_2 f_4 \\ n_3 f_2 + l_3 f_3 + m_3 f_4 \\ f_5 \\ f_{5+s} \\ f_{5+s+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ n_1 f_2 + \frac{f_1 + |f_1|}{2} (u_{1L} - n_1 U_L) + \frac{f_1 - |f_1|}{2} (u_{1R} - n_1 U_R) \\ n_2 f_2 + \frac{f_1 + |f_1|}{2} (u_{2L} - n_2 U_L) + \frac{f_1 - |f_1|}{2} (u_{2R} - n_2 U_R) \\ n_3 f_2 + \frac{f_1 + |f_1|}{2} (u_{3L} - n_3 U_L) + \frac{f_1 - |f_1|}{2} (u_{3R} - n_3 U_R) \\ f_5 \\ f_{5+s} \\ f_{5+s+1} \end{pmatrix} \quad (85)$$

となる。ここで注目すべきは、計算を行うにはセルの面ベクトルのみが必要になるということであり、接線方向のベクトルは数値流束の計算には必要がないことがわかる。

8.2 高次精度化

セル境界での数値流束の評価においては、MUSCL 法を用いて高次精度評価を行った。その際、制限関数を用いることで TVD 条件を満足するようにした。MUSCL 法はセル境界の数値流束を任意次数で高次外挿することで高度精度化を達成する手法であるが、外挿する変数の選び方によって大きく 3 つの方法に分類することができる。すなわち、原始変数 ($\rho, u_j, p, \gamma_s, T_v$) を外挿するもの、特性変数 ($L^{-1} \Delta q$) を外挿するもの、保存変数 (q) を外挿するものの 3 つの外挿法が考えられるが、計算の簡単な原始変数を外挿する方法、もしくは特性変数を外挿す

してやると

る方法がよく用いられる。本コードではこれら両方の外挿方法を組み込んである。いま、外挿する変数を ϕ とすると、セル i と $i+1$ との境界での左側、右側外挿値 $\phi_{i+\frac{1}{2}}^L, \phi_{i+\frac{1}{2}}^R$ は

$$\begin{aligned} \phi_{i+\frac{1}{2}}^L &= \phi_i + \frac{1}{2} \psi(r^L) (\phi_i - \phi_{i-1}), \\ \phi_{i+\frac{1}{2}}^R &= \phi_{i+1} - \frac{1}{2} \psi(r^R) (\phi_{i+2} - \phi_{i+1}) \end{aligned} \quad (86)$$

となる。ここで

$$r^L = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\phi_i - \phi_{i-1}}, \quad r^R = \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\phi_{i+2} - \phi_{i+1}} \quad (87)$$

である。 $\psi(\cdot)$ は制限関数 (limiter function) であり代表的な制限関数として次のような関数が提案されている。

$$\psi(r) = \begin{cases} \frac{r+|r|}{r^2+1} \\ \max[0, \min(1, r)] \\ \max[0, \min(2r, 1), \min(r, 2)] \\ \max[0, \min(\beta r, 1), \min(r, \beta)] \\ \max[0, \min(r, \beta)] \end{cases} \quad \begin{aligned} &: \text{van Leer} \\ &: \text{Van Albada} \\ &: \text{Minmod} \\ &: \text{Superbee} \\ &: \text{General-}\beta \text{ limiter } (1 \leq \beta \leq 2) \\ &: \text{Chakravarthy \& Osher } (1 \leq \beta \leq 2) \end{aligned} \quad (88)$$

これらの制限関数のうち、Chakravarthy & Osher の制限関数以外は全て対称性

$$\psi(r) = r \psi\left(\frac{1}{r}\right) \quad (89)$$

を持っており、この対称性を持った制限関数であれば式 (86) は以下の様に変形することができる¹⁹⁾。

$$\begin{aligned} \phi_{i+\frac{1}{2}}^L &= \phi_i + \frac{1}{2} \psi(r^L) (\phi_i - \phi_{i-1}), \\ \phi_{i+\frac{1}{2}}^R &= 2\phi_{i+1} - \phi_{i+\frac{3}{2}}^L \end{aligned} \quad (90)$$

8.3 Shock-Fix 法

FDS 系のスキームを用いた鈍頭物体周りの極超音速流れの計算においては、前方の離脱衝撃波が強くなると、淀み点付近の衝撃波捕獲の際、カーバンクル現象と呼ばれる

数値的な不安定現象が生ずる恐れがあることが知られている。このカーバンクル現象を抑止するため、和田による Shock-Fix 法¹⁸⁾を適用した。この手法は必要なところ以外には余分な数値粘性が入らないので、特に高レイノルズ数の粘性流れの計算に適している。和田の Shock-Fix 法ではまずセル境界において $u_L - cL > 0$ and $u_R - cR < 0$ もしくは $u_L + cL > 0$ and $u_R + cR < 0$ で定義される圧縮音速点を探しだす。ここでもし ξ 方向に沿ってセル i と $i+1$ の境界が上記の条件を満足した場合 ξ 方向のフラグ $S_{\xi,i} = S_{\xi,i+1} = 1$ をセットし圧縮音速点を特定する。 η, ζ 方向に対しても同じことを行なう。次にセル i と $i+1$ のセル境界における ξ 方向に沿った数値流束の計算を行なう際に先ほどのフラグ S_η, S_ζ が立っているところ、すなわち圧縮音速点 (衝撃波) では人工粘性の強いスキームを適用し、数値不安定を回避する。本コードでは人工粘性の強いスキームとして Hänel のスキームを用いた。すなわち、

$$\begin{cases} \text{Dissipative Scheme (Hänel FVS)} & \text{if } S_{\eta,i} + S_{\eta,i+1} + S_{\zeta,i} + S_{\zeta,i+1} \geq 1 \\ \text{Non-Dissipative Scheme (e.g. Roe FDS)} & \text{otherwise} \end{cases} \quad (91)$$

8.4 時間積分法

化学反応に伴う生成項は時間進行法に基づいた計算において、特に強い硬直性を持つため、point implicit 法の考え方から常に陰的に扱う。さらに、行列反転を効率よく行うために対角化法を併用している。また対流項、輸送項の時間積分についても、解の収束性、安定性をにらみ、陰的に扱う。本コードでは、ベクトル化率が高く、高効率、高安定と言われる LU-SGS 法²⁰⁾を適用し、さらに局所時間刻み法を併用することで定常解への収束の高効率化を図った。

8.5 音速

FVS 系のスキームでは流れの局所マッハ数を用いて数値流束の分離を行なうので、音速を見積もることが必要となる。音速は本来、支配方程式の空力行列の固有値と密接に関係する。非平衡流れにおいては右辺ソース項を無視し、言わば凍結流れの音速として以下のように表される。

$$c^2 = \frac{\partial p}{\partial \rho} + \frac{h}{\rho} \frac{\partial p}{\partial e} + \sum_s \gamma_s \frac{\partial p}{\partial \rho \gamma_s} + \frac{e_V}{\rho} \frac{\partial p}{\partial e_V} \quad (92)$$

ここで気体の圧力 p は完全気体であれば

$$p = (\gamma - 1)e \quad (93)$$

のように内部エネルギーだけの関数として表すことができるが、熱及び化学非平衡状態においては、圧力は内部エネルギーのみの関数とはならない。本解析においては圧力は

$$p = f(\rho, e, \rho \gamma_s e_V) \quad (94)$$

と、化学種濃度、二つのモードのエネルギーの関数となり、式 (92) を用いて音速を計算する際にはそれぞれ圧力の偏微分を評価することが必要となる。

8.6 軸対称流れの計算法

軸対称流れの計算を行なうには、軸対称 Navier-Stokes 方程式を一般曲線座標に変換して定式化するのではなく、3次元(完全)Navier-Stokes 方程式を無限に薄い(中心軸に対して無限小の中心角を持つ)3次元セルに適用することで空間の離散化を行なう。詳細については文献¹³⁾を参照されたい。

9. 計算格子及び並列化手法

解析に使用する計算格子として Multi-Block 型構造格子を用いる。ここで言う「Multi-Block」とは、単一構造格子をブロックとしそれら複数のブロックを組み上げて計算領域を構成する手法であり、それぞれのブロックの中には物体が存在するなどの内部構造は持たない様になっている。Multi-Block 格子を用いることで複雑形状での格子の生成を容易にすることができる。

航技研にある数値風洞 (Numerical Wind Tunnel; NWT) の利用を想定して並列化を行なっている。並列化手法、並列化言語には様々なものが存在するが、ここでは領域分割法とメッセージパッシングライブラリ (Message Passing Library; MPL) を組み合わせた手法で並列化

を行なった。NWT 上では専用の並列化言語である NWT-Fortran が用意されているが、大規模計算を想定したとき、NWT-Fortran の多次元分割手法の性能が PVM 等と同等であること、及び拡張性、開発環境、柔軟性、並列化コストを考えた場合 MPL を用いた並列化が有利と判断した²¹⁾。MPL としては PVM (Parallel Virtual Machine) を用いた。領域分割に関しては前述した Multi-Block 格子を利用しているのでそれぞれのブロックを計算領域の分割に対応させそれぞれのブロックを各要素計算機 (Processor element; PE) に担当させた。つまりブロック数が使用する要素計算機数に一致している。この手法は比較的容易に構築できるが、その半面各ブロックの大きさが不均一な場合計算のロードバランスが取れない、また自由に並列台数を変更できないといったデメリットがある。

10. 数値計算例

解析手法の検証として極超音速流中におかれた半球まわりの流れ⁴⁾の解析を行なった。解析ケースを表 7 に示す。

表 7: 解析ケース

解析ケース	$V_\infty [m/s]$	$T_\infty [K]$	$\rho_\infty [kg/m^3]$	触媒性
A	5939	705	0.00156	FC
B	6180	934	0.0034	FC
C	5151	708	0.0058	FC

表中の FC は完全触媒壁を表している。また物体表面は $T_{wall} = 300[K]$ の等温壁である。また流れは全域層流と考えられ乱流モデルは使用していない。実験データ等詳細に関しては文献⁴⁾を参照されたい。

図 1a, b, c に各ケースでの空力加熱率分布を示す。極超音速流の解析では空力加熱率の推定が非常に重要である。横軸は半球面上位置の淀み点からの角度、縦軸は空力加熱率をそれぞれ表している。全てのケース(とくにケース B)における実験データでは 20 度付近で加熱率の上昇が見られるが、センサー取り付け部の不具合によるものと推定できる。全体的に計算と実験で良い一致を示している。

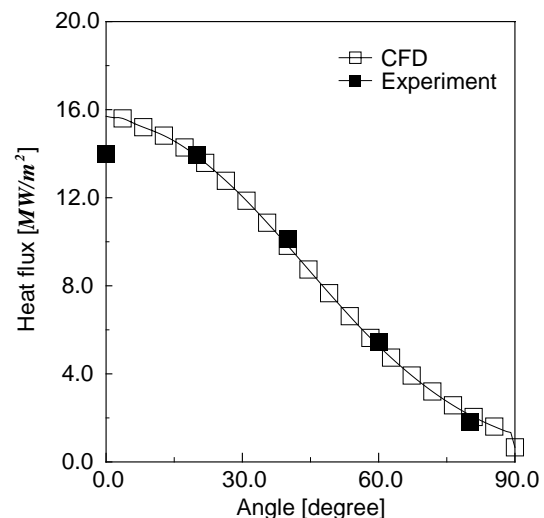


図 1a: 半球表面上の空力加熱率分布 (ケース A)

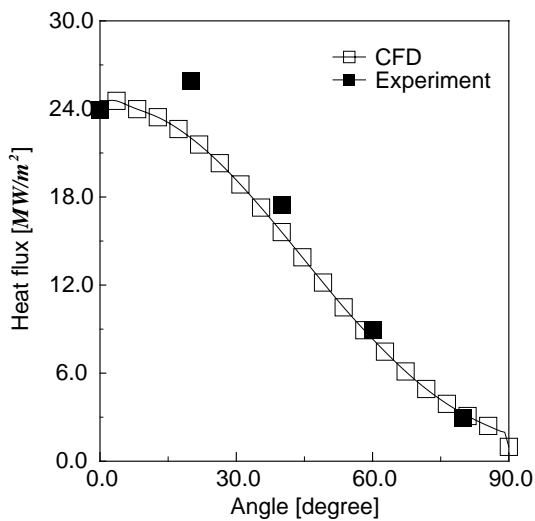


図 1b : 半球表面上の空力加熱率分布 (ケース B)

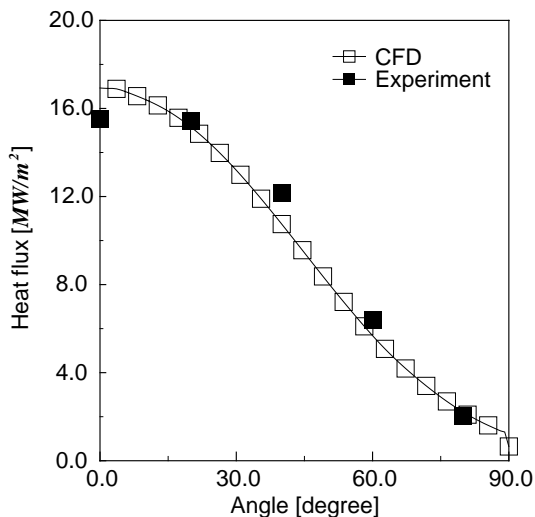


図 1c : 半球表面上の空力加熱率分布 (ケース C)

図 2 に各ケースでの中心線上での並進温度、振動温度、マッハ数、圧力の分布を示す。衝撃波直後での並進温度の上昇、振動緩和によるエネルギーの平衡化、境界層内での急激な温度勾配、等が観測できる。一様流密度が低いケース程非平衡性が強い事もわかる。

図 3 に各ケースでの中心線上での各化学種の分布を示す。ケース C は一様流密度が最も高いが一様流速度が最も小さいため窒素分子の解離があまり進んでいないことがわかる。

極超音速流の解析で重要なのは物体に加わる空力加熱率を正確に推定することである。空力加熱率は境界層の最下層の温度分布で決定されるため十分な解像度を持った格子を用いる必要がある。ここでは最小格子幅の異なる格子を用いて計算を行ない、最小格子幅が空力加熱率の推定に与える影響を調べた。最小格子幅を表す基準として一般に用いられるセルレイノルズ数を用いて表現した。図 4 は各ケースにおけるセルレイノルズ数と球表面での空力加熱率を積分した値及び球が受ける空力抵抗の関係を示している。セルレイノルズ数の減少とともに空力加熱及び空力抵抗の値が一定値に収束していく様子が

わかる。

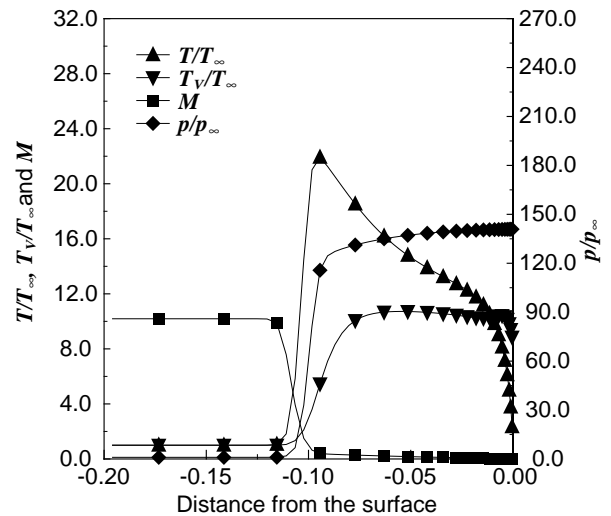


図 2a : 中心線上の各物理量分布 (ケース A)

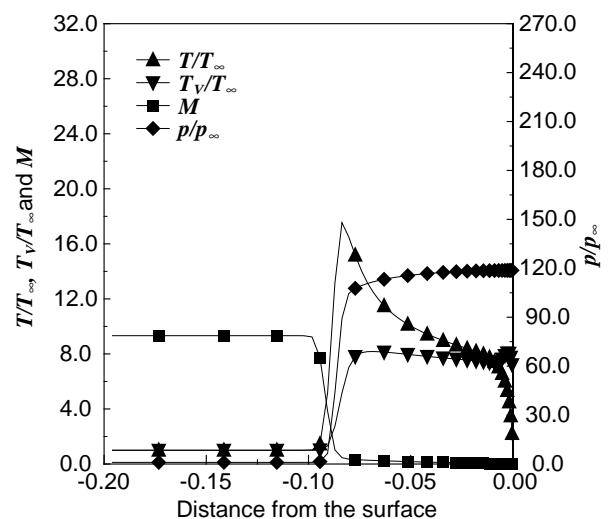


図 2b : 中心線上の各物理量分布 (ケース B)

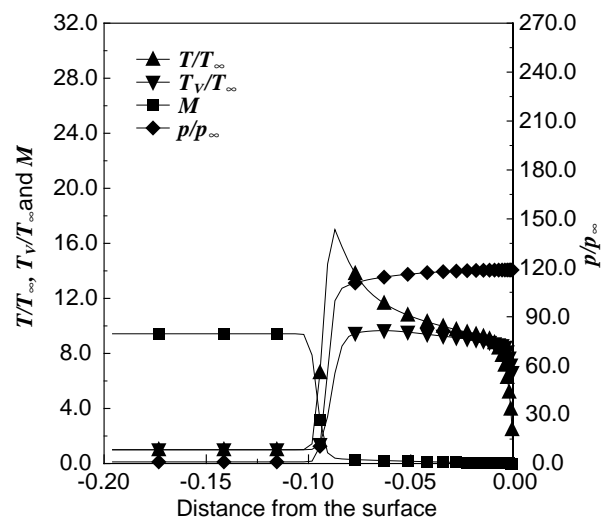


図 2c : 中心線上の各物理量分布 (ケース C)

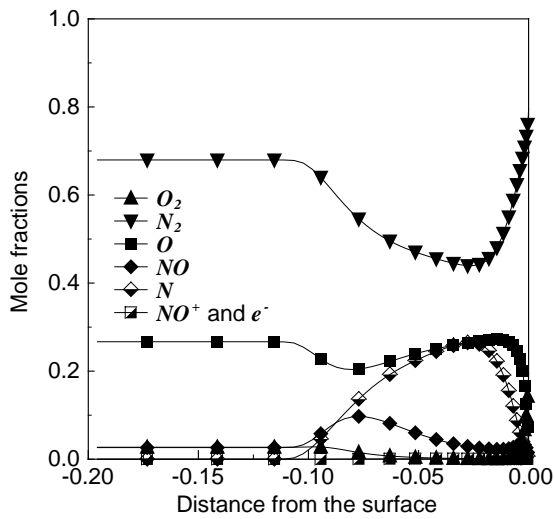


図 3a : 中心線上の各化学種分布 (ケース A)

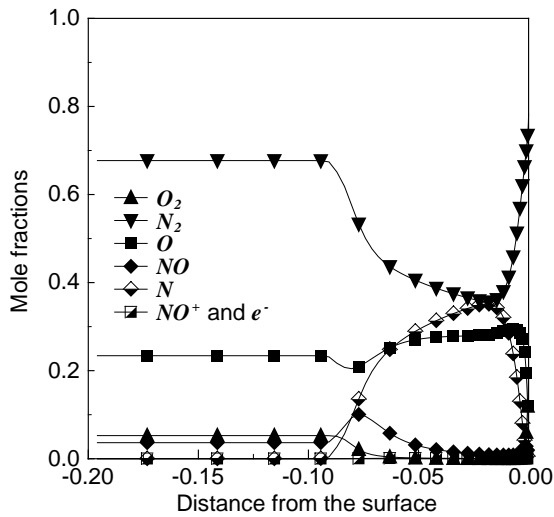


図 3b : 中心線上の各化学種分布 (ケース B)

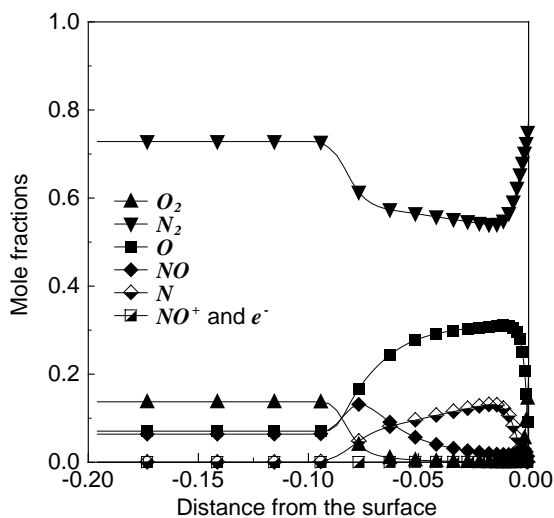


図 3c : 中心線上の各化学種分布 (ケース C)

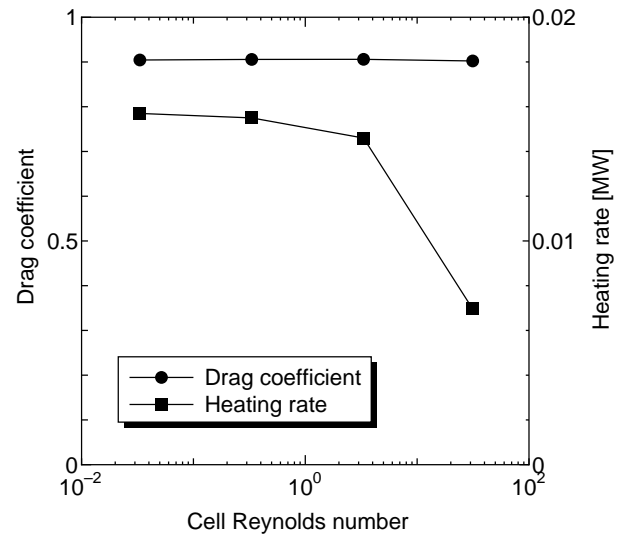


図 4a : セルレイノルズ数と空力加熱、空力抵抗の関係 (ケース A)

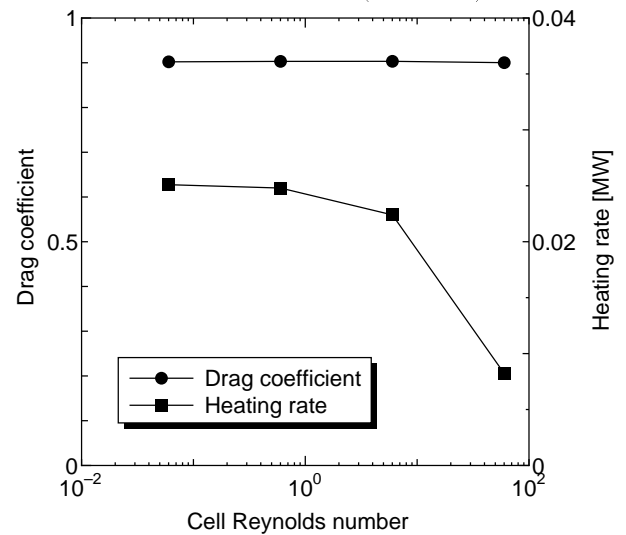


図 4b : セルレイノルズ数と空力加熱、空力抵抗の関係 (ケース B)

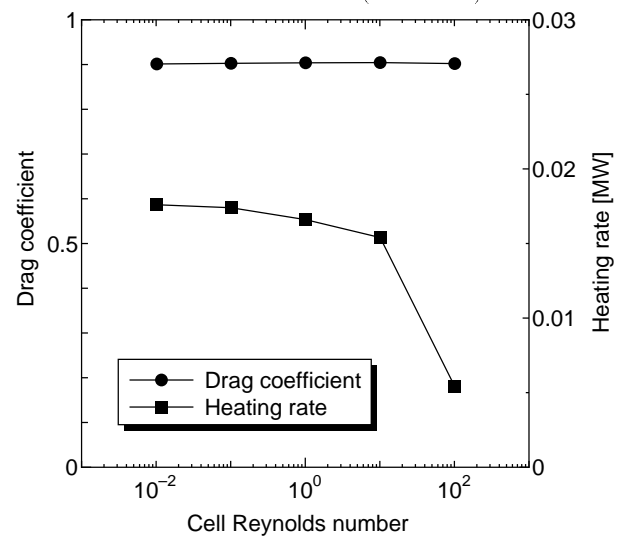


図 4c : セルレイノルズ数と空力加熱、空力抵抗の関係 (ケース C)

11. 終わりに

- 実在気体効果を含んだ解析コードを構築した。実在気体効果を含んだ解析は現在行なわれている宇宙往還機の開発には必要不可欠なものであり、設計ツールとしての実用コードの整備が急がれている。特に実用コードに求められる信頼性に関しては風洞実験、飛行実験等様々な実験データを用いた検証が重要である。
- 軸対称流の解析を行なった。計算結果を実験データと比較したところ空力加熱率等比較的良く一致した。しかしながら各化学種の分布、内部エネルギー分布等計測が困難データに関しては比較ができておらずそういった点での検証はまだ不十分である。また数値解の信頼性を確認するため空力加熱率の格子依存性を確認した。

今後も引き続き検証を行なって行き数値計算技術の信頼性を確立する必要があると考える。実験データとの比較検証が正当な検証方法ではあるが、計測が非常に困難な物理量での比較が要求されており、そのことが高エンタルピー流れの数値計算手法の検証のネックになっていることは否めない。

参考文献

- 1) HOPE/OREX ワークショップ講演論文集, 航空宇宙技術研究所特別資料 SP-24, 1994.
- 2) HYFLEX/HOPE シンポジウム講演論文集, 航空宇宙技術研究所特別資料 SP-32, 1996.
- 3) 第 12 回航空機計算空気力学シンポジウム論文集特別企画「極超音速流の CFD ワークショップ」航空宇宙技術研究所特別資料 SP-26, 1994.
- 4) 第 13 回航空機計算空気力学シンポジウム論文集特別企画「高エンタルピー流れ企画セッション及びワークショップ」航空宇宙技術研究所特別資料 SP-29, 1996.
- 5) C. Park. Assessment of a two-temperature kinetic model for dissociating and weakly-ionizing nitrogen. *AIAA Journal of Thermophysics*, Vol. 2, pp. 8–16, 1988. See also AIAA Paper 86-1247.
- 6) R.N. Gupta P.A. Gnoffo and J.L. Shinn. Conservation equations and physical models for hypersonic air flows in thermal and chemical nonequilibrium. NASA TP- 2867, 1989.
- 7) C. Park G.V. Candler and G.S. Deiwert. Numerical techniques and application. In *AIAA Professional Study Series, Nonequilibrium Gasdynamics*. AIAA, 1989.
- 8) S. Ogawa Y. Wada and H. Kubota. On the thermochemical models for hypersonic flows. *Computers and Fluids*, Vol. 22, pp. 179–187, 1993.
- 9) R.C. Millikan and D.R. White. Systematics of vibrational relaxation. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 39, No. 12, pp. 3209–3213, 1963.
- 10) J.H. Lee. Basic governing equations for the flight regimes of aeroassisted orbital transfer vehicles. *AIAA Paper 84-1729*, 1985.
- 11) C. Park. Problems of rate chemistry in the flight regimes of aeroassisted orbital transfer vehicles. *AIAA Paper 84-1730*, 1984.
- 12) C. Park. Assessment of two-temperature kinetic model for ionizing air. Technical Report 87-1574, 1987.
- 13) 和田安弘. 極超音速流れのワークショップ課題 orex a-1 and a-3. 第 12 回航空機計算空気力学シンポジウム論文集特別企画/極超音速流の CFD ワークショップ NAL SP-26, pp. 71–76, 1994.
- 14) J.P. Appleton and K.N.C. Bray. The conservation equations for a nonequilibrium plasma. *J. Fluid Mech.*, Vol. 20, pt. 4, pp. 659–672, 1964.
- 15) J.M. Yos R.N. Gupta and A.R. Thompson. A review of reaction rates and thermodynamics and transport properties for the 11-species air model for chemical and thermal nonequilibrium calculations to 30000 K. NASA TM- 101528.
- 16) M. Johnson F.C. Blottner and M. Ellis. Chemically reacting viscous flow program for multi-component gas mixtures. Report SC-RR-70-754, Sandia Laboratories, Albuquerque, New Mexico, 1971.
- 17) C.R. Wilke. A viscosity equation for gas mixtures. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 18, No. 4, p. 517, 1950.
- 18) Y. Wada and M.S. Liou. A flux splitting scheme with high-resolution and robustness for discontinuities. *AIAA Paper 94-0083*, 1994.
- 19) C.Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows*, Vol. 2 : Computational Methods for Inviscid and Viscous Flows. John Wiley & Sons, 1989.
- 20) S. Yoon and A. Jameson. An lu-sor scheme for the euler and navier-stokes equations. *AIAA Paper 87-0600*, 1987.
- 21) R. Takaki. A parallelization of an algorithm for reacting flow problems. In *Proceedings of the Sixth Parallel Computing Workshop*, 1996.

航空宇宙技術研究所報告1407号

平成12年6月発行

発行所 科学技術庁航空宇宙技術研究所
東京都調布市深大寺東町7-44-1
電話(0422)40-3075 ㇿ182-8522
印刷所 株式会社廣濟堂
東京都港区芝2-23-13

C 禁無断複写転載

本書(誌)からの複写,転載を希望される場合は,管理部
研究支援課資料係にご連絡ください。

Printed in Japan