

11-NA02

## 炭化水素系燃料の超音速乱流燃焼の数値シミュレーション

滝田 謙一（東北大学）

### 概要

本研究は、次世代宇宙輸送システムあるいは大陸間極超音速輸送機に搭載されるスクラムジェットエンジン内の燃焼流を解析する数値シミュレーション技術の確立を目的としている。超音速燃焼場は衝撃波や大規模乱流構造などが存在し、かつエチレンに代表される炭化水素系燃料の詳細反応機構を導入する必要があるなど極めて大規模な計算プログラムが必要となる。本年度は、東北大学サイバーサイエンスセンターとの共同研究によるハイブリッド並列化の導入を行い、プログラムの高速化に成功した。さらに、メタンの詳細反応機構（18 化学種、99 素反応）の導入を実施し、超音速流におけるメタン燃料のプラズマジェットによる着火・燃焼過程のシミュレーションに成功した。さらに超音速流に噴射された燃料流の LES 解析を実施し、実験で観察される燃料噴流の大規模乱流構造を数値シミュレーションにより再現できた。

### 1. 研究の目的と意義

本研究の目的は、次世代宇宙輸送システムあるいは大陸間極超音速輸送（旅客）機に搭載されるエンジンとして有望視されているスクラムジェットエンジンの開発に必要な数値シミュレーション技術を確立することである。スクラムジェットエンジンの開発が成功し、それを搭載した宇宙往還機が実現すればロケットに比べてはるかに高い輸送効率で大量のペイロードを宇宙空間に運ぶことができるようになり、さらに極超音速旅客機の実現は大陸間の航空機による移動時間を大幅に短縮することになる。スクラムジェットエンジン開発における最重要な技術課題は、超音速流中で如何に迅速に燃料の混合、着火、燃焼の完了を達成する技術を獲得することである。そのような技術を実現するために、縦渦を利用した混合促進やプラズマを重畳させて反応を促進する手法等の開発に関する実験的研究が超音速燃焼器を用いて行われている。それら実験的研究は大きな設備を利用する大がかりなものと成らざるを得ず、実験回数、取得データ数は限られたものにならざるを得ない。少ない実験データの解釈および、広い飛行マッハ数でのエンジン性能予測のためには数値シミュレーションによる補完が不可欠となる。エンジン内の超音速流は強い乱流場であり、さらに非

線形現象の代表である衝撃波が入り乱れる極めて複雑な流れ場であり、流体现象のシミュレーションだけでも高精度な計算スキーム、および長時間の計算時間を必要とする。さらにその中での着火・燃焼現象を解析するには多数の化学種の素反応機構、個々の化学種の輸送過程等を考慮する必要があり極めて大規模な計算プログラムが必要となる。本研究では、スクラムジェットエンジン内の燃焼流を模擬できる 3 次元反応流解析コードを作成、計算の実施による現象の解明および効率的な混合・燃焼促進手法の提案を行う。スクラムジェットエンジンの燃焼シミュレーション技術の確立は実機開発における有用なツールとなり、エンジンの開発を大きく前進させることになる。

### 2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した大学名と研究体制

東北大学

計算実施側

滝田謙一（東北大学大学院工学研究科・准教授）

渡辺潤也（東北大学大学院工学研究科・学振特別研究員）

計算機側

小林広明（東北大学サイバーサイエンスセンタ

一・センター長)

江川隆輔 (東北大学サイバーサイエンスセンタ

一・助教)

## (2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

### (3) 当公募型共同研究ならではの事項など

東北大学サイバーサイエンスセンターとの共同研究を行うことにより、計算機科学の視点からコードの高速化、最適化が達成される点が大きな利点である。研究代表者のような航空宇宙工学あるいは燃焼工学の専門家のみでの研究体制では、コードの最適化を実施するのは困難である。

## 3. 研究成果の詳細と当初計画の達成状況

### (1) 研究成果の詳細について

#### (1-1) 水素燃焼反応流コードのチューニングによる最適化

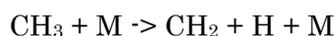
水素燃焼コードの大規模並列実行による高速化を目的に、東北大学サイバーサイエンスセンタースーパーコンピューティング研究部とともに、MPI による並列化に取り組んだ。MPI プロセス間の通信・集団通信によるデータ転送時間が大きいことに着目し、Open MP を用いた MPI とのハイブリット並列化も行った。これらの結果、逐次処理の場合と比較して、32 並列 (4 プロセス x 8 スレッド) で約 20.6 倍の性能向上を実現した。今後の課題としては、更なる集団通信処理の負荷の軽減や、格子点数が並列数で割り切れない為に生じる負荷不均衡の解消などが挙げられる。

#### (1-2) 炭化水素系燃料へのコードの拡張

炭素数が最少の炭化水素系燃料であるメタンについて、その超音速流中でのプラズマジェット (PJ) による着火過程の解析を行うための計算コードを作成し、その解析に成功した。以下に計算手法、計算結果等について述べる。

### ○数値計算法

本数値計算では 3 次元圧縮性 Reynolds 平均 Navier-Stokes 方程式に乱流エネルギー及びその散逸率の輸送方程式、化学種保存式を加えた支配方程式を解く。空間座標は一般曲線座標で、時間積分には陽解法の Euler 法、対流項の評価には MUSCL 法で 3 次精度化した SHUS 法を、粘性項には 2 次精度中心差分を適用した。乱流モデルには  $k-\omega$  SST 2 方程式モデルを用い、乱流 Prandtl 数, 乱流 Schmidt 数をそれぞれ 0.9, 0.5 で与えた。反応モデルには Stahl-Warnatz の C1 スキーム[1] を用いた。ただし、計算が不安定になるのを回避するため、元の反応機構から以下の 2 反応を削除した 18 化学種 99 素反応を用いた。2 反応を削除しても、着火遅れ時間等が変化しないことを確認している。窒素の反応は含んでいない。



### ○計算領域および計算条件

著者らが超音速風洞を用いて行った実験を計算対象とする。実験において強い燃焼が観測された PJ 上流から燃料を噴射させる配置を対象とした。図 1 に計算格子の概略図を示す。計算領域は長さ 170mm、1 辺 30mm の正方形断面を持つ矩形である。計算格子は構造格子であり、x、y、z 方向に 141 x 39 x 45 点である。PJ は下壁面中心軸上の計算領域入口から 70mm の位置に、燃料噴射孔は PJ 噴射孔の上流 24mm の位置に設けられている。境界条件は側面、上面、計算領域出口で自由流出境界、下壁面がすべりなし、290K 等温壁としている。主流流入条件はマッハ数 2.0、総圧 0.1MPa、総温 290K、流入境界層厚さ 2mm とした。

燃料はメタン(CH<sub>4</sub>)とし、直径 1mm の噴射孔から主流に対して垂直に音速で噴射される。総温は 290K、質量流量 0.30g, 噴射圧は 77.4kPa とし、主流に対する全体当量比を実験と同様、0.042 となるように設定している。

○PJ 噴射条件

PJ の作動ガスには  $N_2(90\%)/CH_4(10\%)$  混合ガスおよび  $O_2$  単独ガスを用いた。PJ 噴射条件はトーチノズルスロートでの熱化学平衡状態を仮定して算出した。平衡計算の結果、 $N_2/CH_4$  PJ の熱化学平衡時に多く含まれる  $N_2$  以外の主な化学種は  $H$ 、 $H_2$ 、 $HCN$ 、 $CN$  であった。着火遅れ時間の解析によると  $HCN$ 、 $CN$  は着火過程にほとんど影響を及ぼさないことが明らかだった上、本研究では  $N_2$  の反応を含んでいないため、 $H_2$ 、 $H$  以外の化学種は  $N_2$  として扱い計算を行った。作動ガス流量は  $0.25$  l/s、トーチスロート直径は  $1.5$  mm とした。本計算ではトーチ投入電力をパラメータとし、設定電力にエネルギー変換効率を掛けて作動ガスの総エンタルピー上昇とした。変換効率は桜中らの実験結果[3]をもとに  $0.8$  とした。表 1 に  $N_2/CH_4$  混合作動ガス、表 2 に  $O_2$  作動ガスの各投入電力に対する PJ 噴射静温、静圧、化学種モル分率を示す。

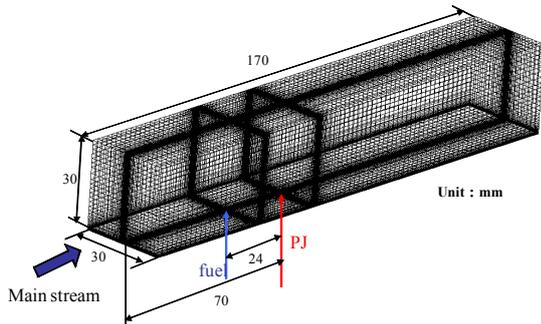


図 1 計算領域

表 1  $N_2(90\%)/CH_4(10\%)$  PJ の噴射条件

$P_{in}$ , kW	$T_{PJ}$ , K	$p_{PJ}$ , kPa	$X_H$	$X_{H_2}$
1.8	2818	146.2	0.028	0.130
2.4	3298	158.4	0.088	0.092
3.0	3697	172.7	0.164	0.057

表 2  $O_2$  PJ の噴射条件

$P_{in}$ , kW	$T_{PJ}$ , K	$p_{PJ}$ , kPa	$X_O$	$X_{O_2}$
1.8	3019	159.7	0.119	0.881
2.4	3307	172.5	0.233	0.767
3.0	3511	184.6	0.344	0.656

○計算結果及び考察

まず、PJ により着火した燃料の燃焼性を比較した。図 2 は、メタンを  $N_2/CH_4$  PJ の上流から噴射

し燃焼させた時の中心断面における  $H_2O$  の質量分率を異なる投入電力で計算した結果を示す。図 3 は  $O_2$  PJ に対する同様な結果を示す。両 PJ とも、投入電力の増加により  $H_2O$  の質量分率が増加するのがわかる。両者を比較すると、 $O_2$  PJ のほうが全ての投入電力で  $H_2O$  が多く生成されており着火性が高いのがわかる。図 4、図 5 には  $N_2/CH_4$  PJ、 $O_2$  PJ に対する中心断面における  $CO$  の質量分率分布を示す。超音速流中においては  $CO_2$  まで完全に酸化されず、 $CO$  のほうが  $CO_2$  より全般に生成量が多い結果が得られた。 $CO$  についても  $H_2O$  同様、投入電力の増加に伴い生成量が増加し、 $O_2$  PJ に対してのほうが生成量が大きくなる結果であった。

$O_2$  PJ の有利性は著者らの実験結果の傾向と一致する。その理由を考察する。PJ の噴射時の特性を比べると噴射温度に大きな差はないが、PJ に含まれるラジカル量は  $O_2$  PJ のほうが大きい。着火遅れ時間の短縮効果はラジカル量に比例するため、 $O_2$  PJ に含まれるラジカル量が多いことが着火性の高い要因の一つと考えられる。また、燃料が PJ と衝突する地点での混合の度合いを調べると、PJ を覆う燃料流の局所当量比は  $2.5$  程度であることがわかった。従って、PJ 周辺はかなり燃料過濃

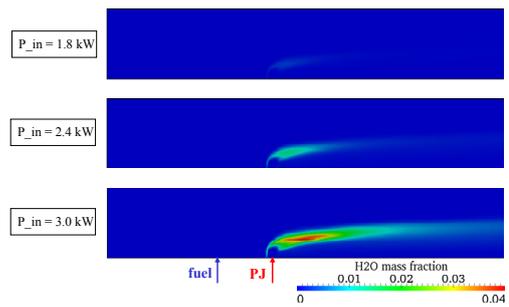


図 2  $N_2/CH_4$  PJ 周辺の  $H_2O$  質量分率分布

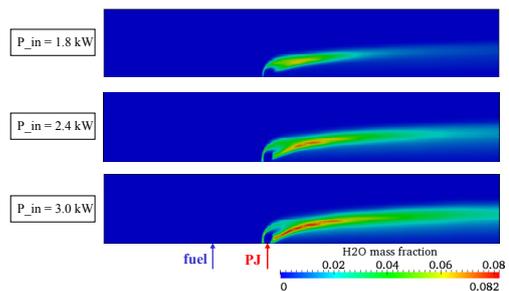


図 3  $O_2$  PJ 周辺の  $H_2O$  質量分率分布

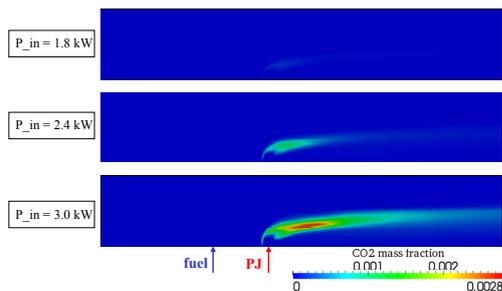


図 4 N<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> PJ 周辺の CO 質量分率分布

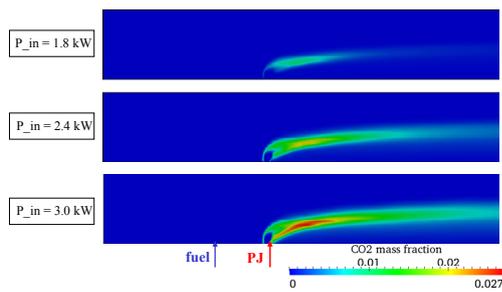


図 5 O<sub>2</sub> PJ 周辺の CO 質量分率分布

な状態である。そこに噴射された O<sub>2</sub>PJ は酸化剤として働き、燃焼性を高めたと考えられる。

PJ 作動ガスつまりは供給ラジカル種が異なれば、着火に至る反応過程も異なると考えられる。H ラジカルを多く含む N<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>PJ に CH<sub>4</sub> が衝突する場合は以下の反応により燃焼反応が開始すると思われる。



一方、O ラジカルを多く含む O<sub>2</sub>PJ の場合は以下の反応で開始すると思われる。



図 6、図 7、図 8 は 2 種類の PJ 周辺の H、H<sub>2</sub>、OH の中心断面での質量分率分布を示す。投入電力は 3.0kW である。N<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>PJ においては、PJ 中に多く含まれていた H が噴射後、速やかに減少し、H<sub>2</sub>に変換されているのがわかる。O<sub>2</sub>PJ 周辺においては H、H<sub>2</sub> の生成はほとんどない。一方、OH は O<sub>2</sub>PJ 周辺においては大量に生成されているが、N<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>PJ 近傍ではほとんど生成されていない。

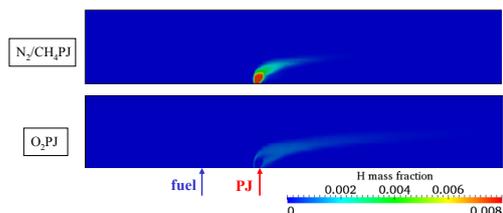


図 6 PJ 周辺の H 質量分率分布の比較

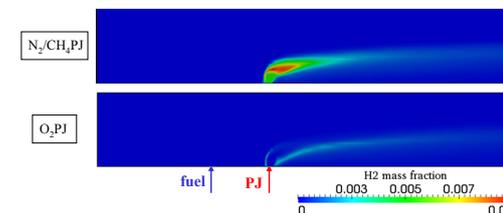


図 7 PJ 周辺の H<sub>2</sub> 質量分率分布の比較

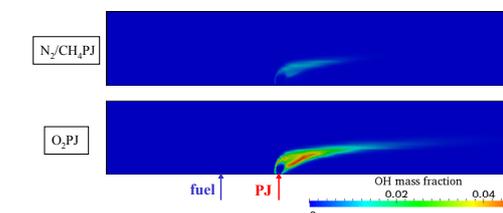


図 8 PJ 周辺の OH 質量分率分布の比較

### (1-3) 窒素の反応の導入

窒素 PJ による着火・燃焼過程のシミュレーションには窒素原子を含む化学種の反応も考慮しなくてはならない。そこで、超音速流中に噴射された水素ジェットの PJ による着火過程を窒素の反応を含んだ反応機構を用いて解析した。

#### ○計算手法および計算条件

計算手法や計算領域、主流条件等は前節(1-2)とほぼ同様である。燃料は水素とし、PJ の上流 24mm の位置から音速噴射とした。PJ 作動ガスとして純窒素、純酸素の 2 種類を計算した。反応機構には N 原子の関わる反応を含む Jachimowski の 13 化学種 32 素反応モデル[3]を用いた。

#### ○計算結果

窒素 PJ、酸素 PJ による水素燃料の着火過程を比較する。それぞれの PJ への投入電力、作動ガス体積流量は 2.5kW, 15L/min. で同じとしている。図 9 には H<sub>2</sub>O 質量分率分布、図 10 には NO 質量分率分布の比較を示す。図 9 からわかるように、

燃焼量は  $O_2$  PJ 周辺のほうが多い。この結果は実験にもよく一致し、また、計算においても N の反応の有無に関わらず同じ結果となる。一方、図 10 の NO の分布は N の反応を考慮することにより初めて得られる結果である。NO は窒素 PJ 周辺に多く生成されているのがわかる。 $N_2$  PJ に含まれる N が主流の  $O_2$  と反応して NO が生成される。NO が水素の着火反応を促進することがよく知られているが、計算結果において、そのような NO の反応促進効果は現れなかった。これは、本計算の主流の静圧が約 0.02MPa であり、NO の触媒効果が現れる圧力範囲よりも低かったためである。

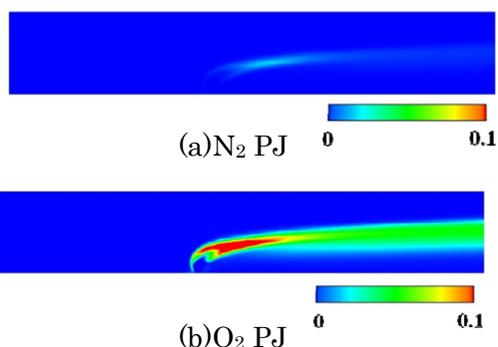


図 9 PJ 周辺の  $H_2O$  質量分率分布の比較

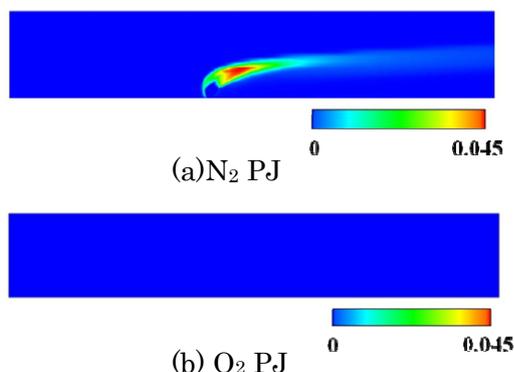


図 10 PJ 周辺の NO 質量分率分布の比較

#### (1-4) LES 法の導入

スクラムジェットエンジン内の極めて非定常性が高い流れ場を解析するために LES 法を導入した数値計算プログラムを作成した。まず、燃料の混合過程に及ぼす燃料種の影響を調べる。水素と炭化水素系燃料では分子量が大きく異なり、噴射速度や密度などの噴射状態も異なるため、燃料噴流の大規模構造も異なることが知られている。本研

究では水素とエチレンを比較し、その混合特性の違いを調べる。尚、本研究では燃料の混合のみに注目し、化学反応は考慮していない。

#### ○数値計算法

支配方程式は空間フィルターを施した質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式および理想気体の状態方程式である。また、空間フィルターを施した主流空気および燃料の成分保存式も同時に解いている。フィルター操作に伴うサブグリットスケール (SGS) 項のモデル化として、SGS 応力は selective mixed scale モデルを、SGS の熱および物質拡散は勾配拡散モデルを用いた。ここでは乱流 Prandtl 数を 0.9、乱流 Schmidt 数を 0.9 と仮定した。対流項は 4 次精度 MUSCL で高次精度化した SLAU で、拡散項は 2 次精度中心差分で評価した。時間積分には 3 次精度 Runge-Kutta 法を用いた。

図 11 に計算格子の (a) 上面図と (b) 側面図を示す。計算領域下面には直径  $D = 2.5$  mm の噴射孔を設け、その中心に座標系の原点を設定した。主流空気は左側境界から流入し、主流方向を x 軸とする。燃料は主流に対して垂直に噴射され、噴射方向を y 軸とする。図中の太線で囲った領域が解析対象で、長さ 26D、高さ 8D、幅 8D の大きさを持つ。計算格子は構造格子で、この領域内の格子点数は  $293 \times 181 \times 153$  点である。解析対象の外側には境界での乱流変動の非物理的な反射を抑制するために緩衝領域を設けた。

主流空気の流入条件は Mach 数  $M_0 = 1.9$ 、総圧  $p_{t0} = 100$  kPa、総温  $T_{t0} = 290$  K とした。D を代表長とする主流 Reynolds 数は  $Re_D = 2.5 \times 10^4$  である。流入乱流境界層は図 11 の点線で囲った領域において Sagaut et al. [4] のリスケージング法を適用することで模擬した。境界層厚さは流入境界で  $\delta_0 = 2.5$  mm として固定した。燃料噴射孔は流入境界から下流 18D の位置にあり、噴射条件として Mach 数  $M_j = 1.0$ 、総温  $T_{tj} = 290$  K、主流に対する噴射運動量流束比  $J = 1.9$  を燃料種によらない固定条件とした。J は噴流スケールを支配する重

要なパラメータであるため、各燃料で  $J$  を一致させて比較した。各燃料に対する噴射条件の違いを表 3 にまとめた。なお、噴射条件は噴射孔断面で一様とし、時間変動もない。また、本計算では下面境界のみが壁面で、すべりなし・断熱条件とした。緩衝領域を設けた上面、側面、出口境界は 0 次外挿とした。

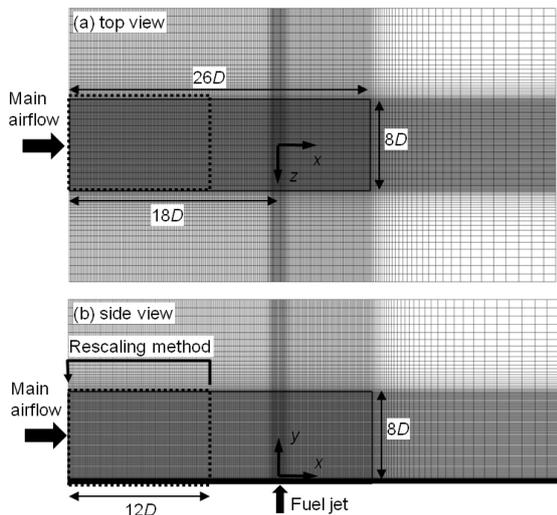


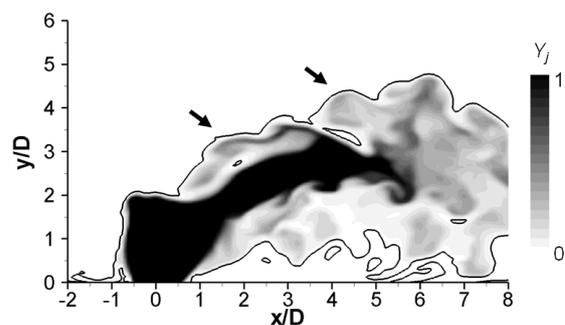
図 11 計算領域 (a) 上面図 (b) 側面図

表 3 燃料噴射条件

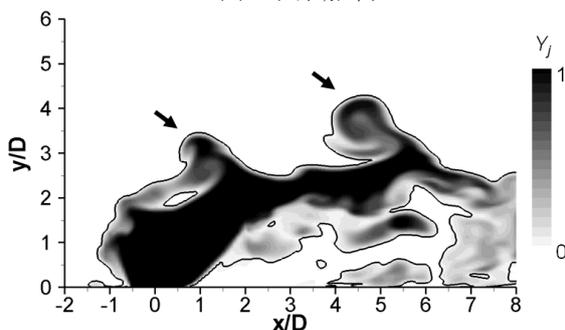
Fuel	H <sub>2</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
Molecular weight: $M_{w_j}$ , g/mol	2	28
Static pressure: $p_j$ , kPa	102.4	116.2
Mass flow rate: $m_j$ , g/s	0.62	2.36
Velocity: $U_j$ , m/s	1183	308
Density: $\rho_j$ , kg/m <sup>3</sup>	0.10	1.51
Specific heat ratio: $\gamma_j$	1.40	1.23

### ○計算結果と考察

燃料噴流の乱流構造を調べるために図 12 に中心断面における瞬間の燃料の質量分率分布を示す。図 12(a) が水素燃料、図 12(b) がエチレン燃料の結果である。量論混合比の濃度に相当する部分を太い線で表示している。また、燃料噴流の主流中への突出を矢印で示している。水素燃料の場合は、大規模構造がエチレンに比べてやや不明瞭で、主流中への突出も小さい。一方、エチレン燃料の場合は、大規模構造が明瞭で、突出が大きく上流側方向へ伸びている。また、各突出部の間には大きな間隔があり、大規模な主流空気の取り込みが生じている。



(a) 水素燃料

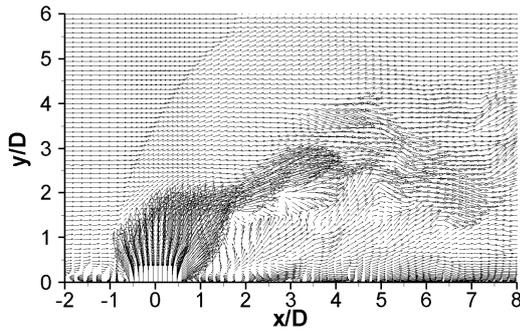


(b) エチレン燃料

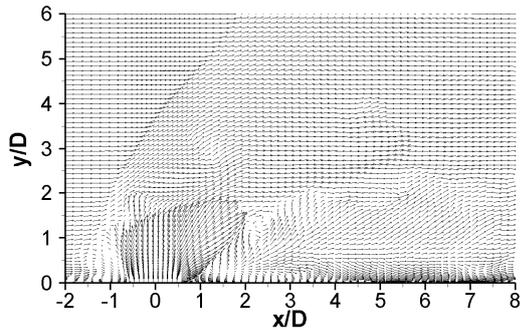
図 12 中心断面における瞬間燃料質量分率分布

図 13(a)、(b)には図 12 に対応する中心断面での瞬間の速度ベクトルの分布を示す。速度ベクトルの長さは速度の大きさを示す。水素燃料の場合は、燃料ジェットと主流との間で大きな伸長率を有する領域が生じており、その大きな伸長により大規模構造が主流方向に引き伸ばされている。一方、エチレンの場合は主流と燃料ジェット間の速度差は小さい。速度場の違いが大規模構造の形状の違いの原因であると考えられる。

次に、横断面（主流方向に垂直断面）内の燃料分布形状および混合状態を調べる。図 14 には  $x/D=4$  の断面における異なる 3 つの瞬間の燃料の質量分率分布を示す。どちらの燃料もジェットの構造は不規則で高い 3 次元性を有していることがわかる。水素燃料とエチレン燃料を比較すると、エチレンのほうが噴流の形状変化が大きく、主流中へ突出する部分も大きいことがわかる。水素は比較的、突出部が小さく、時間的な形状の変化も小さい。ジェットのコア部周囲に存在する混合領域（図中灰色部分）が水素のほうが広いことが一因であると考えられる。



(a) 水素燃料



(b) エチレン燃料

図 13 中心断面における瞬時速度ベクトル分布

エチレンよりも高いのは、燃料ジェットと主流との大きな速度差により生じる大きな乱流エネルギーに起因すると考えられる。実際のスクラムジェットエンジン内においては、その高い主流静温から本研究とは逆にエチレンジェットの場合のほうが主流との速度差が大きくなることが予想され、異なる傾向が得られる可能性がある。

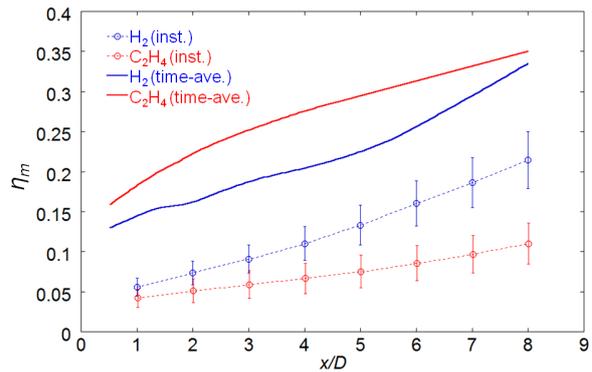
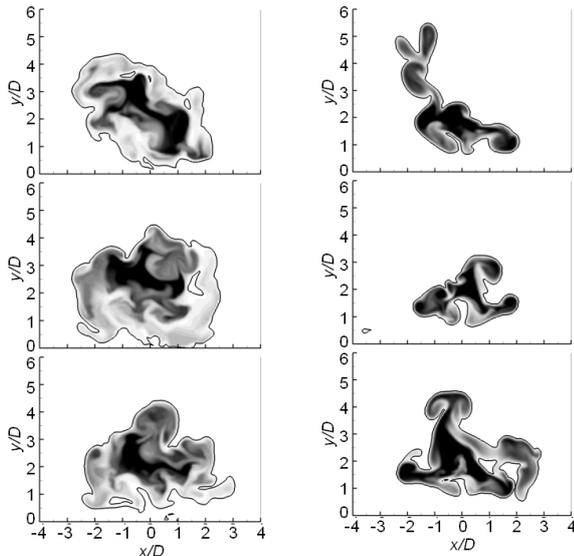


図 15 時間平均と瞬時の混合効率の比較



(a) 水素燃料

(b) エチレン燃料

図 14 x 断面における瞬時燃料質量分率分布

続いて、燃料の混合効率について調べた。図 15 に瞬間および時間平均の両燃料の混合効率を示す。時間平均のエチレンの混合効率は水素より高いが、瞬間の混合効率は逆転し、水素のほうが高くなる。エチレンの混合効率が時間平均と瞬間値との間で大きく異なったのは、エチレンジェットの高い速度差により生じる大きな乱流エネルギーに起因している。水素の瞬間の混合効率が

## (2) 当初計画の達成状況について

当初研究計画に掲げた 4 項目のうち、①水素燃焼反応コードのチューニングによる最適化、④LES 法の導入 に関してはほぼ達成した。②炭化水素系燃料へのコードの拡張に関しては、メタン燃料に対してはコードの完成、解析の実施を達成したが、エチレン燃料の計算までは行えなかった。また、③窒素反応の導入についても水素燃料に対する窒素反応機構の導入には成功し、解析を実施したが、炭化水素系燃料の解析への窒素反応の導入までは至らなかった。今後の課題である。

## 4. 今後の展望

本研究により水素、メタン燃料の超音速燃焼の RANS 解析コード、超音速乱流の LES 解析コードを確立できたので、スクラムジェットエンジン内の燃焼流のシミュレーションを実施することにより、複雑な流れ場、燃焼場を明らかにすることができよう。また、3(2)で述べたように、次のステップとしてエチレン燃料の詳細化学反応機構を用いた解析、LES 手法の反応性流れへの拡張が挙げられる。

## 参考文献

- [1] G. Stahl and J. Warnatz, *Combustion and Flame*, Vol. 85 (1991), pp. 285-299.
- [2] 櫻中登、三谷徹、泉川宗男、佐山正巳、大脇桂, 第 33 回宇宙科学技術連合講演会論文集 (1989), pp. 56-57.
- [3] C. J. Jachimowski, NASA TP-2791 (1988).
- [4] P. Sagaut, E. Garnier, E. Tromeur, L. Larcheveque, and E. Labourasse, *AIAA Journal*, Vol. 42 (2004), pp. 469-477.

## 5. 研究成果リスト

### (1) 学術論文

- 1. J. Watanabe, T. Kouchi, K. Takita, G. Masuya, “Numerical Study on the Turbulent Structure of Transverse Jet into Supersonic Flow,” *AIAA Journal*, Vol. 49, No. 9, pp. 2057-2067 (2011)
- 2. J. Watanabe, T. Kouchi, K. Takita, G. Masuya, “Large-Eddy Simulation of Jet in Supersonic Crossflow with Different Injectant Species,” *AIAA Journal*, in press.
- 3. J. Watanabe, T. Kouchi, K. Takita, G. Masuya, “Characteristics of Hydrogen Jets in Supersonic Crossflow: A Large-Eddy Simulation Study,” *Journal of Propulsion and Power*, 投稿中

### (2) 国際会議プロシーディングス なし

### (3) 国際会議発表

- 1. J. Watanabe, K. Takita, T. Sunami  
“Large-Eddy Simulation of Fuel Mixing Using Streamwise Vortices in a Supersonic Flow”, The 28th International Symposium on Space Technology and Science, 6-8 June 2011, Ginowan, Okinawa, Japan.

- 2. J. Watanabe, T. Kouchi, K. Takita, G. Masuya  
“Large-Eddy Simulations of Hydrogen and Ethylene Injections into a Supersonic Crossflow”, 47th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, 31 July-03 August 2011, San Diego, California, U.S.A.

### (4) 国内会議発表

- 1. 渡部潤也、河内俊憲、滝田謙一、升谷五郎  
“超音速水素噴流の乱流燃焼過程の LES 解析”、第 49 回燃焼シンポジウム、平成 23 年 12 月 5~7 日、慶応大学（横浜市）
- 2. 車田健太郎、渡部潤也、滝田謙一、升谷五郎  
“メタンを作動ガスに含むプラズマジェットによる着火の数値解析”、第 49 回燃焼シンポジウム、平成 23 年 12 月 5~7 日、慶応大学（横浜市）

### (5) その他（特許，プレス発表，著書等） なし