

jh180030

## Large scale simulation on detonation propagation in disk-shaped rotating detonation engine combustor

松尾亜紀子（慶應義塾大学）

超音速で伝播する燃焼波であるデトネーションを燃焼器に応用する事で高効率なエンジンとして期待される回転デトネーションエンジン(RDE)に関する基礎研究に取り組んだ。本研究課題では、不活性気体と壁面に挟まれて伝播するデトネーションと水液滴を含む混合気中を伝播するデトネーションの伝播機構解明を目指した。水液滴を含む混合気中を伝播するデトネーションでは、気相および水液滴に関して特性長を算出する事で気相デトネーションとの構造を比較しつつ、気相と水液滴が密接に関連している事を示した。不活性気体と壁面に挟まれて伝播するデトネーションに関しては、デトネーションの伝播速度が理論値よりも低下する事を確認した。衝撃波から音速線までの距離と衝撃波から理論的な速度で伝播した際における水素質量分率の平衡値に達するまでの距離を比較することによって、伝播速度減少は音速線外で水素のエネルギーが放出されるためであると特定した。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同研究を実施した拠点名

東北大学サイバーサイエンスセンター

#### (2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

#### (3) 参加研究者の役割分担

- ・ 松尾亜紀子（慶應塾大学理工学部）  
研究総括
- ・ Ashwin Chinnayya (ENSMA)  
研究総括
- ・ 江川隆輔（東北大学サイバーサイエンスセンター）並列化処理
- ・ 小林広明（東北大学サイバーサイエンスセンター）並列化処理
- ・ 磯部洋子（東北大学サイバーサイエンスセンター）並列化処理
- ・ 渡部広吾輝（慶應義塾大学理工学研究科）  
計算実行および分析
- ・ 大平直矢（慶應義塾大学理工学研究科）  
計算実行および分析
- ・ 岡田崇宏（慶應義塾大学理工学研究科）  
計算実行および分析

- ・ Said Taileb (ENSMA)

計算実行および分析

- ・ Josue Melguizo-Gavilanes (CNRS)

計算実行および分析

### 2. 研究の目的と意義

燃焼を利用する工学機器は主に燃焼速度が遅いデフラグレーションを用いている。これに対して、衝撃波を伴い超音速で伝播する燃焼波であるデトネーションは理論熱効率を向上させ燃焼器を単純小型化できる利点を有している。このため、デトネーションを推進機関に応用しようとする研究が盛んに行われ、パルスデトネーションエンジンや回転デトネーションエンジン (RDE) が開発されている。一般にデトネーション燃焼器では逆火を防ぐため燃焼器内に燃料と酸化剤を別々に供給し、デトネーションが超音速で伝播するために短時間で混合させる必要がある。また、RDE では二重円筒形状の燃焼器内部をデトネーションが周回伝播する事でデトネーションは燃焼器内部に常に存在し熱負荷の問題が生じる。そのため、RDE はこう熱効率といった利点があるものの現在は開発段階であり、実用化に向けて多くの基礎研究が求められている。

前述の通り一般的な RDE 内では同軸二重円筒から構成される燃焼器内を燃料酸化剤供給面に沿ってデトネーションは伝播をする。燃料と酸化剤を別々に供給する事で不均一性を生じ、その混合気は前回のサイクルでデトネーションが伝播した時に生じた既燃ガスによって囲まれる状態となる。このような条件ではデトネーションの伝播に関する理論的な解析が困難となり、RDE の性能を予測する事が出来ない。さらに、燃焼器の曲率と混合気不均一性はデトネーションの伝播を不安定化させ、理論熱効率ほどの性能を発揮させる事ができなくなる。上記の理由から、RDE の性能の最適化のためにはデトネーションの伝播が燃焼器の曲率と燃料と酸化剤の別々供給によって引き起こされる混合気不均一性によってどのように影響されるかを明らかにする必要がある。また、RDE の実用化のためにはエネルギー密度の高い液体燃料を使用する事が必須である。しかし、液体燃料を用いたデトネーションに関する知見は少ない。液体燃料を用いたデトネーションでは燃料液滴の蒸発と燃焼と二つの過程が存在するため複雑である。燃料液滴を用いたデトネーションの現象解明に向け、水液滴とデトネーションの相互干渉に関する知見は重要である。そこで、本研究では、燃焼器の曲率および燃料と酸化剤の供給によって形成される混合気の不均一性が RDE 内を伝播するデトネーションに与える影響および水液滴が噴霧された混合気中を伝播する気相デトネーションの伝播挙動を大規模数値解析によって調査する。

### 3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

混合気不均一性と燃焼器曲率が RDE 内を伝播するデトネーションに与える影響を調査するためには、三次元数値解析が必須となる。本研究で対象とするスケールは  $\mu\text{m}$  オーダーであるデトネーションの反応距離から  $\text{cm-m}$  オーダーの燃焼器と幅広い。その結果、本研

究課題を実施するためには大規模数値解析が必要となる。

本研究課題では、慶應義塾大学、東北大学およびフランスにある École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique / Centre National de la Recherche Scientifique (ENSMA / CNRS) の 3 つの組織が協力し研究課題に取り組む。慶應義塾大学と東北大学は既に拠点公募型共同研究を実施した経験があり、計算プログラムを高速化最適化して研究成果を挙げている (jh160020, jh170040)。本研究課題においても共同研究を行う事でさらなる計算プログラムの高速化最適化を実施する事ができ、現象解明に繋がると考える。ENSMA は今回から共同研究に参加するが、ENSMA はこれまで独自に RDE の基礎研究に関して数値解析および実験により現象解明を行なった実績がある。慶應義塾大学と ENSMA は数値解析を実施してきたが、用いている計算モデルが異なっている。ENSMA では、一段階の簡略化反応モデルを用いて、不活性ガスに挟まれたデトネーション伝播を二次元数値解析によって解明している。これに対して、慶應義塾大学では、素反応を考慮する詳細化学反応モデルを用いて、不活性ガスと未燃ガスが交互に配置された混合気中を伝播するデトネーションを解析している。一段階反応モデルでは計算コストが低いため、実スケールの燃焼器での解析が行える他、デトネーションの伝播に影響を与える要素である活性化エネルギーを変化させやすい。これに対して、詳細化学反応モデルでは素反応を考慮するために、デトネーションが伝播するか消滅するか再現する事ができる。このように二つの異なる計算手法を用いる事で一長一短を補い合い研究を推進していく事ができる。

以上より、慶應義塾大学、東北大学およびフランスにある École Nationale Supérieure de Mécanique et

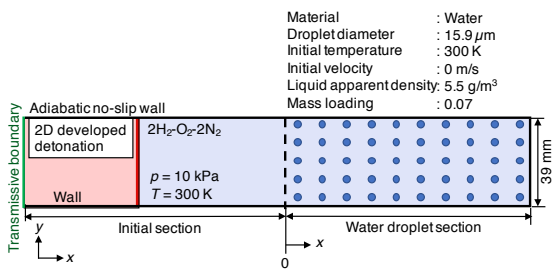


図 1 計算対象と計算条件

d' Aérotechnique / Centre National de la Recherche Scientifique (ENSMA / CNRS)が共同研究を行う事により, RDE 内を伝播するデトネーションに混合気不均一性と燃焼器曲率を与える影響を解明する事ができる. そして, 本研究課題で得られた知見は RDE の実現に向けた大きな一歩になる.

#### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

新規課題のため該当なし

#### 5. 今年度の研究成果の詳細

上半期および下半期を通じては水液滴が噴霧された混合気中を伝播するデトネーションの伝播挙動に関する数値解析を実施した. また, 下半期には RDE 内を伝播するデトネーションに与える影響を理解するため, 片側を不活性な気体に挟まれたデトネーションの伝播挙動に関して数値解析を実施した.

まず, 水液滴が噴霧された混合気中を伝播するデトネーションに関して得られた成果に関して, 論文に投稿した内容について概要を示す. 計算対象は図 1 に示すように二次元直管内において十分に発達した気相デトネーションが水液滴が噴霧された未燃混合気中を伝播する事を計算対象としている. 対象とする混合気は量論窒素 40%希釈 H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 混合気であり, 初期圧力および温度はそれぞれ 0.01 MPa, 300 K とした. 管幅は 39 mm であり, 管幅あたりのセル数は 1.5 となる. 計算領域は初期区間と水液滴区間の 2 つに分割される. 予備計算で得られた十分に発達した

二次元デトネーションが初期区間から水液滴区間へと伝播する. 水液滴区間では, 静止した均一な直径 15.9 μm の水液滴が量論窒素 40%希釈 H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 混合気中に均一に配置され, その見かけの密度は 5.5 g/m<sup>3</sup> である.

水液滴が噴霧された H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 混合気中を伝播する気相デトネーションは気液二相流現象の一つである. 本研究では, 水液滴が噴霧された H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 混合気中を伝播する気相デトネーションを解析するため, Eulerian-Lagrangian 手法を適用した. 気相は粘性かつ圧縮性を有し, 化学反応をする熱的に完全な理想気体と仮定する. 気相に対する支配方程式には気相の体積分率を考慮した連続の式・運動量保存の式・エネルギー保存の式・化学種保存の式を用いた. 系を閉じるために理想気体の状態方程式を用いている. H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> 系の化学反応の模擬には Hong *et al.*によって提案された 9 化学種(H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, H, O, OH, H<sub>2</sub>O, HO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>)20 素反応を考慮する詳細化学反応モデルを使用した.

粒子に対しては, 粒子追跡法によって解析を行う. 粒子に対する支配方程式はニュートンの運動方程式, エネルギー保存式と質量保存式である. 液滴の蒸発を考慮し, B. Abramzon *et al.*によって提案されたモデルにより算出した. 本解析では, 粒子計算に対して代表粒子モデル (Representative particle model)を用いた. 代表粒子モデルでは, 複数の粒子を粒子群として一つにまとめ, 粒子群に含まれる実在粒子は代表粒子と同じ挙動を示すと仮定する. また, 代表粒子は代表領域の中心に位置し, 流体抵抗力などの算出は代表粒子点において行う.

得られた計算結果に対して, Favre 平均による統計的な一次元プロファイルを取得し, 気相と水液滴の関係性について特性長に着目して整理を行った. 気相デトネーションの特性長としては, 反応誘導長, 発熱反応長さ, 先頭衝撃波から平均音速線までの距離であ

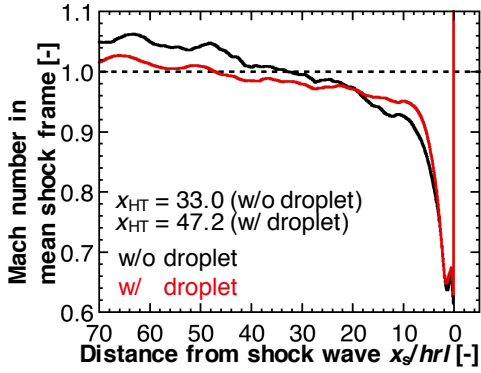


図 2 マッハ数分布

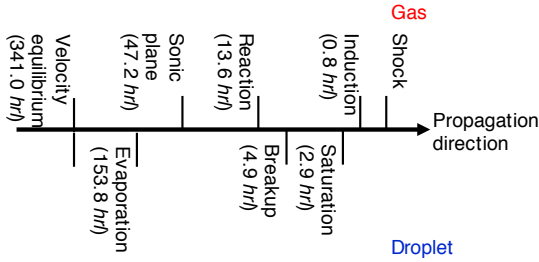


図 3 本計算条件における水液滴を含む気相デトネーションの構造の概要図

る Hydrodynamic thickness の 3 つがある。また、水液滴の現象としては、速度平衡、温度平衡、蒸発および分裂の 4 つの現象が存在し、それぞれの現象に対して特性長を計算結果より算出した。得られた計算結果に対して、Favre 平均による統計的な一次元プロファイルの一例として、Hydrodynamic thickness を算出するために用いるマッハ数分布について図 2 に示す。図 2 より水液滴の存在による運動量交換による気相速度の低下と水液滴による吸熱により、衝撃波からマッハ数が 1 になるまでの距離である Hydrodynamic thickness は水液滴を含む場合では増加した事が確認できる。同様にして、他の気相および水液滴の特性長について算出し、それらの関係性について示した概要図を図 3 に示す。水液滴を含む場合においても、気相デトネーションは水液滴を含まない場合と同様の構造を示す事が分かった。また、水液滴の特性長に関して、蒸発が生じるため水液滴と気相は温度平衡には到達せず、水液滴が飽和温度に到達する事が最も速いプロセスである事

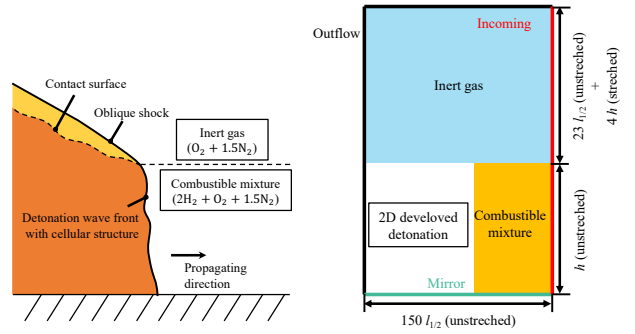


図 4 計算対象と計算条件の概要図

が分かった。反応誘導距離の後方にて水液滴は分裂を完了する事で、水液滴の蒸発が促進される。本計算条件では、水液滴は音速線内では蒸発を完了せず、音速線の後方において完了すると推測できた。速度平衡に関しては、最も遅く平衡に至るプロセスであり、本研究では最も後方において速度平衡に至ると考えられる。以上より、得られた気相および水液滴の特性長の関係は密接に関係している事が分かった。

次に下半期に行った片側を不活性な気体に挟まれたデトネーションの伝播挙動に関して数値解析の結果を示す。図 4 に計算対象と計算条件の概要図を示す。対象とする混合気は初期圧 1 atm 初期温度 298 K の  $2\text{H}_2\text{-O}_2\text{-}1.5\text{N}_2$  混合気である。図 4 に示すように片側を壁面とし、もう片方を初期圧 1 atm 初期温度 298 K の  $\text{N}_2$  で囲われた未燃混合気内を伝播するデトネーションの解析を行う。混合気層の厚さは半反応距離  $l_{1/2}$  で無次元化して 182 と設定した。

支配方程式には、2次元圧縮性 Euler 方程式と 9 化学種 ( $\text{H}_2, \text{O}_2, \text{H}, \text{O}, \text{OH}, \text{H}_2\text{O}, \text{HO}_2, \text{H}_2\text{O}_2, \text{N}_2$ ) の保存式を用いた。系を閉じるために理想気体の状態方程式を用いている。 $\text{H}_2\text{-O}_2$  系の化学反応の模擬には Hong *et al.* によって提案された 9 化学種 20 素反応を考慮する詳細化学反応モデルを使用した。対流項の離散化には 5 次精度 WENO によって高精度化された AUSM-DV を用いた。

図 5 に理論的な伝播速度である CJ 速度  $u_{CJ}$

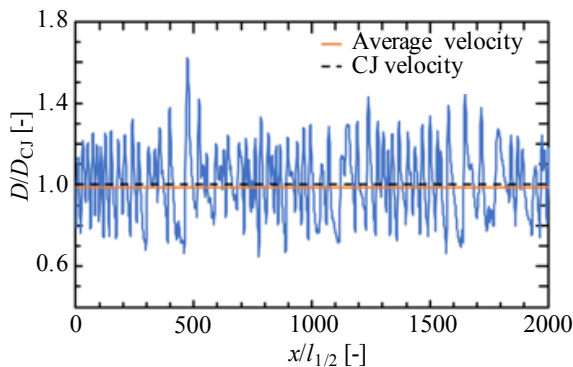


図 5 伝播速度履歴

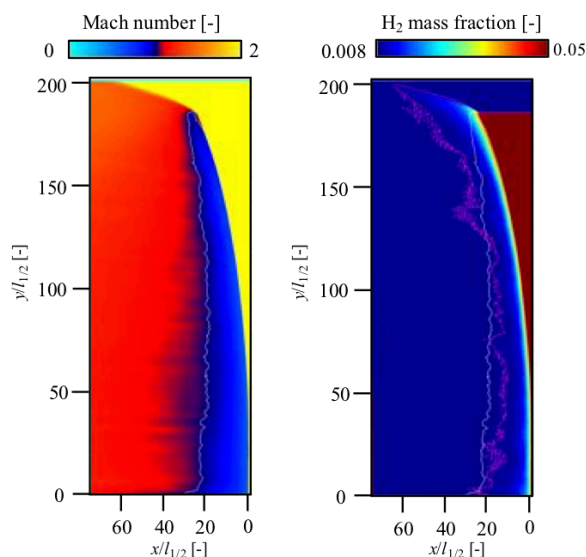


図 6 Favre 平均化されたマッハ数分布と H<sub>2</sub> 質量分率分布 (図中の白線は音速線を示し、ピンクの線は CJ 速度で伝播した際における H<sub>2</sub> 質量分率の平衡値を示す.)

を用いて無次元化した伝播速度履歴を示す。図 5 より、片側が N<sub>2</sub> で囲われているにもかかわらず安定に伝播を継続し、CJ 速度と比較して 1.4% の速度減少を確認した。伝播速度が減少した原因について考察するため、Favre 平均化されたマッハ数分布と H<sub>2</sub> 質量分率分布を図 6 に示す。図 6 のマッハ数分布より、衝撃波面から音速線までの距離は底面が最も長く、y が増加するほど減少した。また、H<sub>2</sub> 質量分率分布より、y = 130 I<sub>1/2</sub> 以下では H<sub>2</sub> 質量分率の平衡値は音速線内に存在している。従って、化学反応によって生じたエネルギーはデトネーションの伝播に使われている。し

かし、不活性気体 N<sub>2</sub> 側では H<sub>2</sub> 質量分率の平衡値は音速線外に位置している。音速線外で放出されるエネルギーはデトネーションの伝播に寄与しない。

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

今年度は概ね申請書通りに計算機の利用および研究が進展している。また、計算プログラムに関しても、共同研究者の江川、小林、磯部に加え東北大学サイバーサイエンスセンター情報部情報基盤共同研究支援係を交えた議論の場を 9 月と 3 月に 1 回ずつ設け、現状の計算プログラムの高速化方針について検討を行なった。今年度得られた成果に関して、現在学術論文を 1 本投稿中であり、引き続き論文を投稿し成果を広める予定である。

## 7. 研究成果リスト

### (1) 学術論文

- [Hiroaki Watanabe](#), [Akiko Matsuo](#), [Ashwin Chinnayya](#), Ken Matsuoka, Akira Kawasaki, Jiro Kasahara, Numerical Analysis of the Mean Structure of Gaseous Detonation with Dilute Water Spray, Journal of Fluid Mechanics, Submitted on 23rd March, 2019

### (2) 国際会議プロシーディングス

- [Hiroaki Watanabe](#), [Akiko Matsuo](#), [Ashwin Chinnayya](#), Ken Matsuoka, Akira Kawasaki, Jiro Kasahara, Numerical Investigation on Characteristic Lengths for Gaseous Detonation with Dilute Water Spray, AIAA Propulsion and Energy Forum and Exposition (AIAA Propulsion and Energy 2019), Indiana, USA, August 19th-22nd, 2019 (発表予定, 口頭発表決定済み)
- [Hiroaki Watanabe](#), [Akiko Matsuo](#), [Ashwin Chinnayya](#), Ken Matsuoka, Akira Kawasaki, Jiro Kasahara, Numerical Investigation on Effect of Dilute Water Spray on Mean

Structure for Gaseous Detonation, 27<sup>th</sup>  
International Colloquium on the Dynamics  
of Explosion and Reactive Systems,  
Beijing, China, July 28th - August 2nd,  
2019 (発表予定, 口頭発表決定済み)

(3) 国際会議発表

(4) 国内会議発表

- 渡部広吾輝, 松尾亜紀子, Ashwin Chinnayya,  
松岡健, 川崎央, 笠原次郎, 水液滴を含む混  
合気中を伝播する気相デトネーションの特  
性長に関する数値解析, 平成 30 年度衝撃波  
シンポジウム, 横浜, 2019 年 3 月
- 岡田崇宏, 松尾亜紀子, 発散円筒デトネーシ  
ョンの伝播挙動・構造およびセル分岐機構に  
対する反応性の影響, 平成 30 年度衝撃波シ  
ンポジウム, 横浜, 2019 年 3 月
- 大平直矢, 松尾亜紀子, 川崎央, 松岡健, 笠  
原次郎, セルサイズオーダーの希釈率擾乱が  
H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub>-Ar デトネーションの内部構造に与え  
る影響に関する数値解析, 平成 30 年度衝撃  
波シンポジウム, 横浜, 2019 年 3 月
- 渡部広吾輝, 松尾亜紀子, 松岡健, 川崎央,  
笠原次郎, 水液滴が噴霧された混合気中を伝  
播する気相デトネーションに液滴の蒸発挙  
動が与える影響に関する数値解析, 第 50 回  
流体力学講演会/第 36 回航空宇宙数値シミュ  
レーション技術シンポジウム, 宮崎, 2018 年  
7 月
- 岡田崇宏, 松尾亜紀子, 発散円筒デトネーシ  
ョンの伝播挙動に起爆エネルギーとセル不  
安定性が与える影響に関する数値解析, 第 50  
回流体力学講演会/第 36 回航空宇宙数値シミュ  
レーション技術シンポジウム, 宮崎, 2018  
年 7 月

(5) その他 (特許, プレス発表, 著書等)