

並列計算機を用いた超音速燃焼初期過程のDSMC解析
 ○小幡茂男 (防衛大学校)、長島利夫 (東大工)、山根敬 (航技研)

The analysis of initial supersonic combustion process using the NWT

Shigeo Obata (National Defense Academy), Toshio Nagashima (Univ. of Tokyo)

Takashi Yamane (NAL)

Abstract

The effects of active chemical species supplied from plasma torch system upon initiating hydrogen combustion in a two-dimensional supersonic shear flow have been investigated by molecular gas dynamical numerical approach. Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method based on the Boltzmann equation has been employed with reactive inelastic molecular collision model (IE Model). Parametric study shows that hydrogen initial combustion can be significantly enhanced by an application of plasma supplying atomic oxygen in diffuse mode. And DSMC method has some advantages for using parallel processing system, so that the method of programming for NAL-NWT is introduced.

1. 序論

高温の超音速空気へ低温の気体水素を音速噴射して形成される超音速剪断流中で進行する初期燃焼過程は非常に微弱かつゆっくりと進行するため効率の高い安定な超音速燃焼の実現を困難にしているが、各種反応化学活性基を供給可能なプラズマトーチはこの問題を解決する手段の一つとして期待されている。本研究ではDSMC解析法を用いて気体分子運動論的な立場から、化学活性基による二次元超音速剪断流中の燃焼初期過程促進効果を論じる。併せて、航技研に整備されている並列計算機(NWT)を用いた計算手法について紹介する。

2. 並列計算手法

DSMC解析法¹は、計算領域内部に多数配置した粒子群の移動軌跡と統計物理量から流れ場の把握を行う気体分子運動論的手法であり、最も重要な物理現象である個々の粒子の移動・衝突事象を、様乱数に従う確率過程として処理する。移動・衝突手続きを十分に時間をかけて繰り返した後の粒子群の状態は境界条件に即した流れ場の解を与えるが、DSMC解析法は本質的に非定常解析手法であり、乱数使用による数値変動が残るため、平均操作と呼ばれる手続きを通して精度の高い各種物理量値を得る。通常、図1に示すように、定常解を与える時間平均操作と非定常解を与えるアンサンブル平均操作との二種類が用いられ、時間平均は計算領域の分割により、またアンサンブル平均は乱数系列の分割により容易に計算コードの並列化が可能である。本研究においては、定常解を求める目的から時間平均による領域分割手法を採用した。

本研究で対象とした二次元超音速剪断流は図2と

表1に示す通り、高温・高速の超音速空気と低温・高数密度の音速水素とが形成する矩形の流れ場であり、対称境界を与えた中心線の上半分のみを計算領域とした。これを図3の様に流れと垂直な断面で流れ方向に等領域分割した。各局所領域に存在する粒子データは、NWTが有する多数の計算機要素(P.E.)にそれぞれ分配記憶され、局所領域毎に所属粒子の移動・衝突を並列処理する。流れを横切るこの領域分割法では、タイムステップ毎に局所領域をまたいで移動する粒子数が、流れと平行に分割する場合の局所領域間移動粒子数よりも大きくなることが予想され、P.E.間の通信負荷の点からは不利となる。一方、平行分割の場合、剪断二流の噴射条件の違いからP.E.毎の受持粒子数に大きな差を生じ、また、燃焼場の偏りから反応判定回数もP.E.毎に大きく異なり、結果的に各P.E.の計算負荷の不均一性による並列化効率の低下を招いてしまう難点がある。実際のところ、DSMC解析においては1タイムステップ当りの粒子の平均移動距離はセルサイズの数分の一に制限されるため、垂直分割の場合でもP.E.間の粒子情報の交換は問題になるほど頻繁ではなく、平行分割よりも高い並列化効率を達成することに成功した。計算速度は使用するP.E.台数にほぼ比例した向上率を示し、P.E.使用が1台の時と比べて、8台の使用により6.7倍、16台で13倍、32台で25倍であった。計算速度の向上以上に、DSMC解析法にとって重要なのは、P.E.使用台数に比例する計算記憶容量の増大である。DSMC解析法による常温・常圧条件下の流れ解析は、膨大な記憶容量を要求するため従来は困難であったが、NWTの使用はその障害を克服する可能性を示しており、今後、NWT上でのDSMC解析法の適用分野の拡大が期待される。

表1：超音速剪断流入条件

	Static Pressure	Static Temperature	Mach Number
Supersonic Air	1.0×10^5 [N/m ²]	1500 [K]	2.44
Sonic Hydrogen	1.0×10^5 [N/m ²]	250 [K]	1.00

3. 超音速燃焼初期過程

表1の条件が用いられる二次元超音速剪断流のモデルは図2の通りであるが、一辺長が超音速空気平均自由行程の半分の立方体形の衝突試行用セルを横(x)方向640個、縦(y)方向160個並べて構成されており、水素噴射口高さ(h)を代表長さとするヌーゼン数は $Kn=0.017$ 、レイノルズ数は $Re=21433$ である。これに、微弱な初期燃焼や低温場の反応過程を精度良く解析可能な内部エネルギー型非弾性反応分子衝突モデル(IEモデル²)と水素-酸素反応系を構成する主要な8個の化学種(H, O, OH, H₂, O₂, N₂, H₂O, H₂O)および、それらが参加する表2のような16個の素反応(16 Reaction System³)とを適用し、超音速燃焼初期反応過程の数値解析を行った。

表2：16 Reaction System

1:H+OH=H ₂ +O:2	3:O+OH=O ₂ +H:4
5:H ₂ +OH=H ₂ O+H:6	7:OH+OH=H ₂ O+O:8
9:OH+OH=H ₂ +O ₂ :10	11:H+HO ₂ =H ₂ +O ₂ :12
13:H+HO ₂ =OH+OH:14	15:H+HO ₂ =H ₂ O+O:16
17:HO ₂ +O=O ₂ +OH:18	19:HO ₂ +OH=H ₂ O+O ₂ :20
21:H ₂ +HO ₂ =H ₂ O+OH:22	23:H+H+M=H ₂ +M:24
25:O+O+M=O ₂ +M:26	27:H+O+M=OH+M:28
29:H+O ₂ +M=HO ₂ +M:30	31:H+OH+M=H ₂ O+M:32

水素と空気の混合過程は、水素の超音速空気中への一方的な浸入により支配される⁴。冷たい水素は、空気との界面において運動量交換に伴う渦を発生し、その後、空気と混合することで熱エネルギーを奪い、徐々に自らの温度と化学的活性度を上げ、自発燃焼へと至る。しかしながら、この初期燃焼は非常に遅く、かつ弱い。図4及び図5に示した水酸基(OH)と水蒸気(H₂O)の等数密度線図中には、少量の燃焼生成物しか認められず、H₂Oの生産開始位置がOHと比べてずっと下流に移動していることが分かる。また、反応領域は僅かに超音速空気流側にのみ認められ、空気との混合が進まない冷たい水素噴流内部において反応は凍結したまま残されており、全体として図6のような混合-燃焼場を形成している。

4. 超音速燃焼促進効果

超音速燃焼における着火・保炎を補助するシステムとして期待されているのが、純粋な反応初期化学活性基を電気力で大量に生産することのできるプラズマジェット⁵である。本研究ではDSMC解析法を用い、プラズマジェットから供給される化学活性基を計算領域内部に導入し、前節の微弱な初期超音速燃焼場に対する燃焼促進効果について、H₂O生産の面から評価を行った。プラズマを構成する化学活性基として酸素から生産される単原子酸素:Oと水素から生産される単原子水素:Hとを仮定し、それぞれを図2に示すような二通りの流入条件(拡散:Wと高密:N、WはNの60倍の流入高さ)で使用し、これらの組み合わせ(単原子酸素・拡散:O-W-r、単原子酸素・高密:O-N-r、単原子水素・拡散:H-W-r、単原子水素・高密:H-N-r)による4ケースのプラズマ噴射条件を考慮した。ケースO-W-rの場合、プラズマ流入数流束・熱流束には、超音速空気流の値を基準として表3の比を与えた。

表3：化学活性基流入条件

plasma inlet number flux ratio to air stream	plasma inlet heat flux ratio to air stream
1.72×10^{-3}	1.23×10^{-3}

他の3つのケースには、化学活性基の総流入数および総流入熱量(流束に流入高さを乗じる)をケースO-W-rの場合と等しく与えた。

4ケースそれぞれの燃焼促進効果は、流れと垂直方向の各断面において、式(1)によって定義されるH₂O生産効率ηを用いて比較検討される。理想的な完全反応(添字:pfct)により生産され得る最大H₂O量と実際に生産されたH₂O量との比を基礎として、断面内でy方向に重み平均を行い、ηを得る。H₂O生産に伴う発熱は、当量比Φが1から離れるほど乖離エネルギーや熱非平衡反応により消費され、流体エネルギーへの寄与が小さく、超音速燃焼を用いるエアブリージングエンジンの性能の低下を招く。この効果を考慮するため、重みΩをΦの関数として与えた。さらに、ηのx方向微分を併せて表示し、燃焼促進効果を空間的な燃焼速度としても評価した。

$$\eta(x) = \frac{\int_0^{y_{max}} \left(\frac{n(y)}{n(y)_{pfct}} \times \Omega \right) dy}{\int_0^{y_{max}} \Omega dy} : \begin{cases} \Phi(y) > 1 \rightarrow \Omega = \frac{1}{\Phi(y)} \\ \Phi(y) < 1 \rightarrow \Omega = \Phi(y) \end{cases} \quad (1)$$

図7に、図4及び図5で示したプラズマ噴射無し
の自発燃焼状態と拡散単原子酸素プラズマ噴射による燃焼促進効果との比較を示す。 η の勾配図から、その進行が非常に不安定な自発燃焼の様子と、それと対照的に、プラズマトーチの作動による安定な燃焼促進効果、及び、自発燃焼と比べ4桁近い η の向上が確認できる。自発燃焼の場合、 H_2O の生産開始位置が流入境界よりも $x/h=2$ 程度下流に存在するのに対して、プラズマ噴射有りの時にはリップ後縁直後から速やかに H_2O 生産が行われており、着火距離の短縮が達成されている。

図8に示したのは、単原子酸素プラズマを用いて拡散条件と高密条件との燃焼促進効果の比較を行った結果である。拡散条件による H_2O 生産が活発ではないリップ直後の領域においてさえ、高密条件は速やかな H_2O 生産の開始に成功しており、 η 勾配も一気に立ち上がっている。この高密条件有利な状況は $x/h=7$ 程度の流れ場前半まで続くが、下流部においてその関係は逆転している。特に、拡散条件の $x/h=6$ の地点に現れる η 勾配の急激な上昇が、この後の大規模燃焼への速やかな移行を期待させる。以上の結果から、高密条件は燃焼の即発性に優れ、拡散条件は継続性を有することが明らかであり、これは単原子水素プラズマを使用した場合についても同じ傾向を示した。両流入条件の持つ燃焼促進傾向の差は図9に示す通り、主として空気-水素混合過程に伴う水素の熱的状态の違いから生じている。リップ表面に沿って集中して存在する高密プラズマは空气中へ浸透する水素との遭遇が早く燃焼の即発性に優れるが、空気と十分に混合する以前の低温のままの水素と反応し続けねばならないため、継続性に劣るのである。図8の η 勾配図からも高密条件の燃焼速度が計算領域全体にわたってほとんど変化することのない様子が見える。一方、拡散条件においてはプラズマは流路全体に広がっているため、水素が空气中へ浸透してくるまで待たねばならず、即発性に劣るのであるが、高温空気からエネルギーを獲得し化学的に活性化した後の水素と反応できるため、継続性に優れる。図8の η 勾配図によれば拡散条件は二段階の燃焼速度変化を経て反応を進行させていることが分かる。第一段階は $x/h=2$ 地点から始まる低温水素との低速の燃焼反応であり、第二段階は $x/h=6$ 地点から現れる高温化した水素との高速反応である。

図10は、拡散条件の単原子酸素プラズマと単原子水素プラズマ、それぞれによる燃焼促進効果の比較

を行った結果である。単原子酸素と比べて単原子水素が素早い H_2O 生産を可能とし、リップ後縁の上流においてさえすでに H_2O 生産を行っていることが分かる。これは、単原子水素が空气中の酸素と直接反応して H_2O を生産出来るためである。これに対し、単原子酸素は $x/h=3$ 程度の地点から単原子水素の η 値を上回る燃焼促進効果を発揮している。 η 勾配図からも、二段階に燃焼速度を大きく向上させる単原子酸素に対して、単原子水素がほぼ一定割合の燃焼速度上昇しか示さず、 $x/h=2$ から単原子酸素の燃焼速度が単原子水素のそれを凌駕し始めていることが分かる。この逆転の理由として考えられるのは、両化学活性基が H_2O 生産に際して通る反応経路の違いである。図11及び、図12に示したのは、それぞれ、単原子酸素と単原子水素から始まる主要 H_2O 生産経路である。図中の丸囲数字は表2の素反応番号を示し、横方向の前半が起鎖反応、後半が分枝反応である。縦方向の高さは図11と図12でスケールが異なるが、化学的エネルギーレベルを視覚的に表しており、素反応番号の下の数字が発熱/吸熱の反応熱量を示し、経路線に合わせて傾斜した数字は反応障壁となる活性化エネルギーの値である。単原子水素の場合、 H_2O 生産は、素反応番号29と21及び、4と5の二系統により支配される。前者は大発熱反応ではあるものの起鎖反応が三体反応であるため反応頻度は後者よりも極めて低く、かつ、分枝反応の活性化エネルギーが非常に大きいためこちらの反応頻度も低く、全体として本条件下における H_2O 生産に対する寄与は小さいと考えられる。よって、分枝反応(素反応番号5)を同じくする単原子酸素と単原子水素の H_2O 生産は、それぞれの起鎖反応の影響を大きく受ける。単原子水素の起鎖反応4は単原子酸素と比べてやや大きな活性化エネルギーを持つものの、反応する相手が高温の酸素であるために、単原子酸素の起鎖反応2と同程度の反応頻度を維持する。これは、図10の η 勾配図からも確認でき、単原子水素の方が極僅かに高速な反応である。ところが、素反応4は大吸熱で進行するため、副生成物であり H_2O 生産の原料ともなるOHの化学的活性度を極度に低下させ、続く分枝反応の促進が困難となる。一方、素反応2から生産されたOHは化学的活性度を大きく低下させることなく分枝反応へと続くため、有利に H_2O 生産を行うことが可能となる。さらに、下流部においては単原子酸素と反応する水素自身が空気との混合に伴い熱的に活性化されるため、単原子水素と比べた優劣がより顕著となる。

以上の結果から、超音速燃焼促進のためのプラズマジェット噴射形態として最も有望と考えられるのは、単原子酸素を主成分として、空気流中へ広範に拡散したプラズマであると考えられる。

5. 結論

1. NWT利用によるDSMC法の並列計算は、使用P.E.台数にほぼ比例した向上率を達成した。
2. プラズマジェット作動による燃焼促進は自発燃焼と比べて η 値で4桁近い向上を可能とする。
3. 各種プラズマ噴射条件の中でも拡散単原子酸素プラズマが超音速燃焼促進に最も有望である。

参考文献

1. G.A.Bird "Molecular Gas Dynamics" Oxford Univ. Press, London, 1976
2. 小幡,長島 "DSMC法における反応分子非弾性衝突モデル" Thermal Science and Engineering, Vol.3 No.1, 1995, pp13-19
3. J.S.Evans and C.J.Schexnayder Jr "Influence of Chemical Kinetics and Unmixedness on Burning in Supersonic Hydrogen Flames" AIAA Journal, vol.18 no. 2, 1980, pp188-193
4. 小幡,長島 "DSMC法による燃焼反応流解析" NAL SP-27, p63-68
5. 堀沢,木村,佐山 "スクラムジェットの着火・保炎機構に関する研究" 日本航空宇宙学会誌, 40巻, 460号, 1992

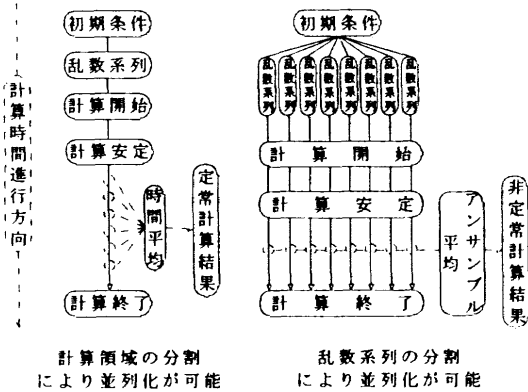


図1：平均操作と並列分割

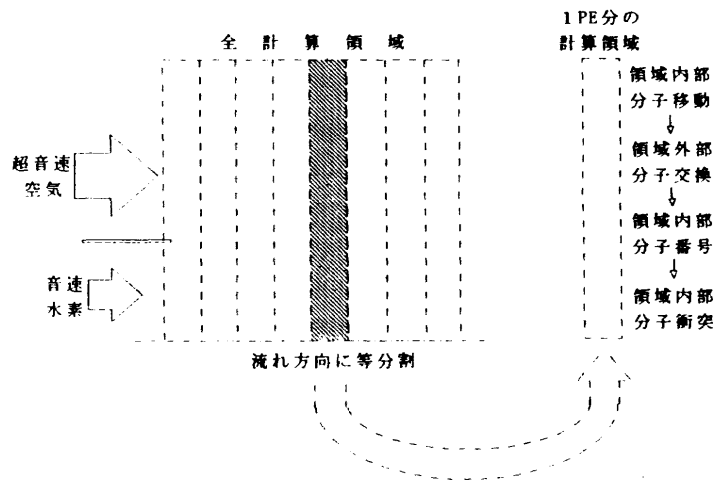


図3：計算領域分割法

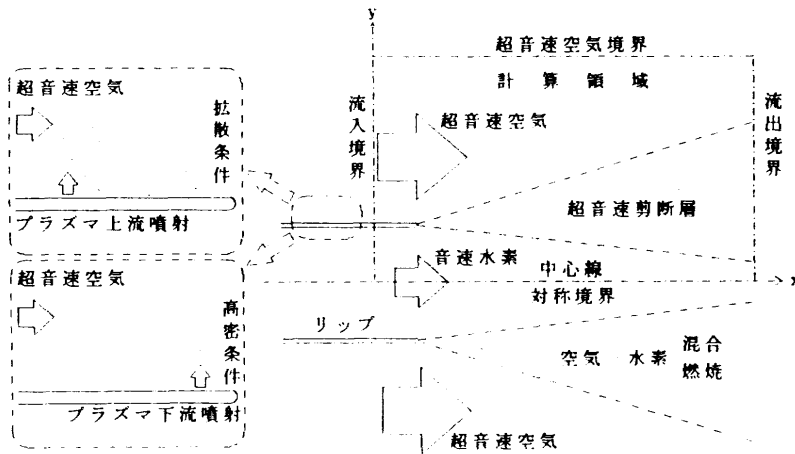


図2：二次元超音速剪断流の計算領域とプラズマ噴射モデル

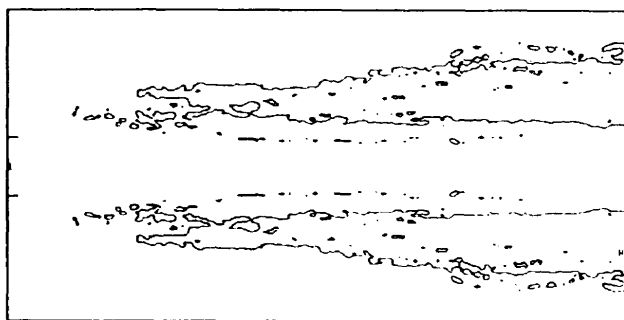


図4：等OH数密度線図

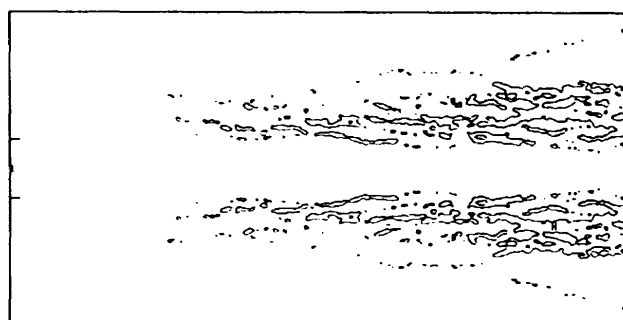


図5：等H₂O数密度線図

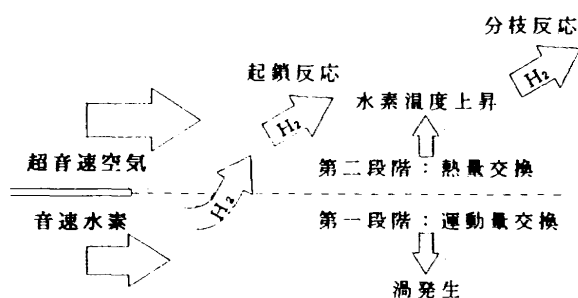


図6：超音速剪断流中の初期燃焼過程

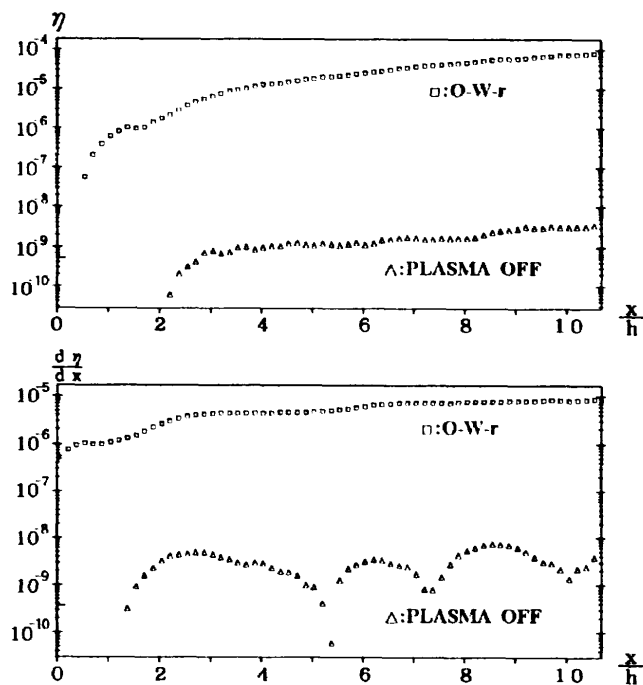


図7：プラズマジェットによる初期燃焼促進

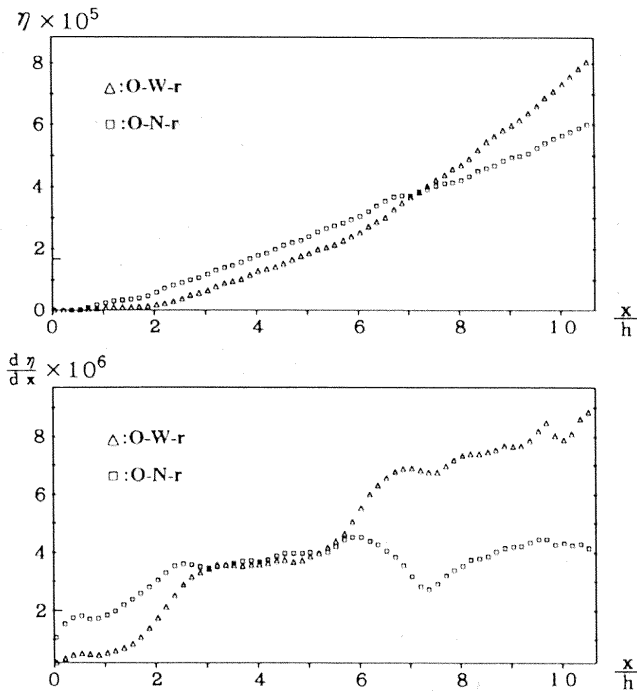


図8：拡散・高密プラズマ（単原子酸素）

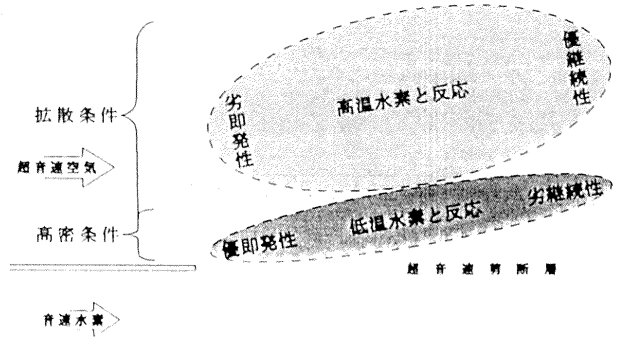


図9：拡散条件と高密条件との比較

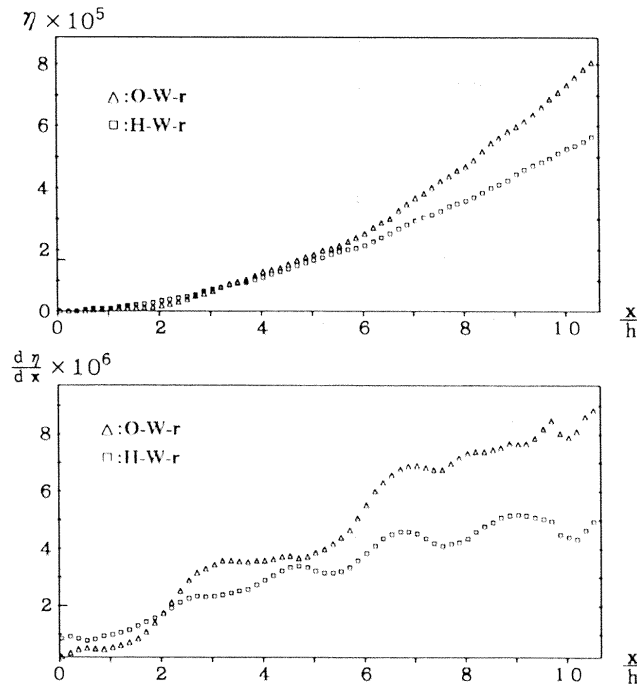


図10：単原子酸素と単原子水素の比較

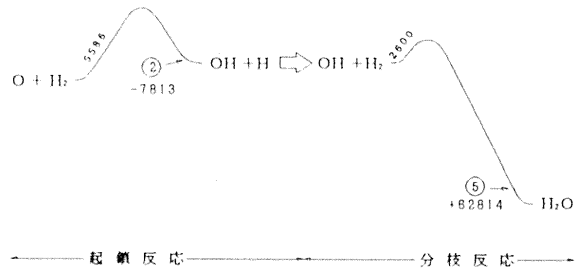


図11：単原子酸素による主要反応経路

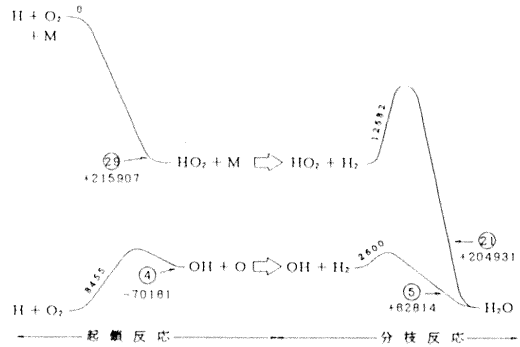


図12：単原子水素による主要反応経路