

## 4

## DSMC法による燃焼反応流解析

○小幡茂男（東大院）、長島利夫（東大工）

## DSMC Method applied for Reacting Gas Flows

Shigeo Obata and Toshio Nagashima (Univ. of Tokyo)

## Abstract

A new reaction molecule model has been proposed for analyzing ignition process in supersonic shear flows. This model called Internal Energy (IE) Model takes into account the effects of internal (rotational) energy upon the reaction occurrence and treats it in the same way as the translation energy in reaction collision process. IE model can simulate reaction process precisely by many elementary reactions and is successful in clarifying the details of weak combustion in two dimensional parallel shear flows between supersonic air and sonic hydrogen. The influence of modified plasma (atomic oxygen) flow upon ignition in the supersonic shear flows has been also discussed.

## 1. 序論

スクラムジェットエンジン燃焼器内部の流動・燃焼形態の中でも、超音速空気流中へ気体燃料を平行に噴射するときに形成される超音速剪断流は、混合に伴う全圧損失を小さく抑ええることが出来る利点を持ち、超音速燃焼を実現させる基本流動形態として有望である。この流動形態においては、空気と燃料の混合開始直後の状態が下流部における混合・燃焼の進行に及ぼす影響は強く、そのために本研究は現象の初期過程を明らかにする必要があると考え、拡散・反応の初期過程を支配する微小領域を対象に、気体分子運動論とボルツマン方程式に基づくDSMC法による2次元超音速剪断流の数値解析を行った。

## 2. 反応分子モデル

流れ場を解くためのDSMC法にはModified Null-Collision法<sup>1</sup>、考慮した化学種8種には表Iの物性値を持った剛体球分子モデルと、Borgnakke-Larsenの内部自由度モデル<sup>2</sup>を用いているが、微細な燃焼反応の解析を行うための反応分子モデルを必要とする。

熱平衡状態にある自由度 $\chi$ の剛体球分子群の衝突頻度 $v_c$ は、衝突断面積 $\sigma_c$ と衝突分子の相対速度 $g$ に関するマクスウェル分布 $f^{(3)}$ を用いて(1)式で表現される。そこで、反応断面積 $\sigma_r$ を(2)式の様に未定定数 $j$ と $\sigma_{ref}$ を用いて定義し、衝突頻度式の $\sigma_c$ に代入して積分すると、(3)式のアレーニウス型の反応速度定数と同型の式が得られる。係数値の比較から $j$ と $\sigma_{ref}$ を決定でき、反応断面積

$$\begin{aligned} v_c &= \int_0^\infty (\sigma_c g) f_{rms}^{(3)}(g) dg & : g = |v_1 - v_2| \\ &= \int_0^\infty \sigma_c f_{rms}^{(3)}(e_g) de_g & : e_g = \frac{1}{2} \mu g^2 \end{aligned} \quad (1)$$

$$= \sqrt{\frac{8}{\pi \mu}} \left( \frac{1}{k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \sigma_c e_g \exp\left(-\frac{e_g}{k_B T}\right) de_g$$

$$\begin{aligned} \sigma_r &= \sigma_{ref} \left( \frac{e_a}{e_g} \right) \left( \frac{e_g - e_a}{e_a} \right)^{j+1} & : e_g > e_a \\ \sigma_r &= 0 & : e_g \leq e_a \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} v_r &= \int_0^\infty \sigma_r f_{rms}^{(3)}(e_g) de_g \\ &= \sqrt{\frac{8}{\pi \mu}} \Gamma(j+2) \sigma_{ref} \frac{(k_B T)^{j-\frac{1}{2}}}{e_a^{j-1}} \exp\left(-\frac{e_a}{k_B T}\right) \\ &\approx A T^n \exp\left(-\frac{e_a}{k_B T}\right) \end{aligned} \quad (3)$$

積値が定まる。反応確率 $P_r = \sigma_r / \sigma_c$ に応じた衝突分子の化学種・化学エネルギーの変化により化学反応を表現出来る。一般的に良く用いられているこのモデル<sup>3</sup>は、衝突分子対の相対運動エネルギー (Kinetic Energy)  $e_g$ のみを考慮するので、KEモデルと呼ぶことにする。KEモデルでは相対運動エネルギーのみが活性化エネルギーとの大小を判断されるため、巨大な活性化エネルギー値を持つ吸熱反応への適応は困難で、本研究で対象とする微弱な燃焼反応解析には不利である。

$$\sigma_r = \sigma_{ref} \left(\frac{e_a}{e_g}\right) \left(\frac{e_a}{e_{i_1}}\right)^{\frac{\chi_1}{2}-1} \left(\frac{e_a}{e_{i_2}}\right)^{\frac{\chi_2}{2}-1} \left(\frac{e_a}{e_g+e_{i_1}+e_{i_2}}\right)^2 \left(\frac{e_g+e_{i_1}+e_{i_2}-e_a}{e_a}\right)^{j+1} \quad : (e_g+e_{i_1}+e_{i_2}) > e_a \quad (4)$$

$$\sigma_r = 0 \quad : (e_g+e_{i_1}+e_{i_2}) \leq e_a$$

KEモデルの欠点を解消するため、衝突分子対の内部エネルギー (Internal Energy)  $e_i$  も  $e_g$  と共に反応に寄与する新しい反応分子モデルを提案・導入する。(4)式、(5)式で定義されるこのモデルをIEモデルと呼ぶ。

$$v_r = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \sigma_r f_{trns}^{(3)}(e_g) f_{inl}^{(\chi_1)}(e_{i_1}) f_{inl}^{(\chi_2)}(e_{i_2}) de_g de_{i_1} de_{i_2}$$

$$= \frac{\chi_1 \chi_2}{\sqrt{8\pi\mu}} \frac{\Gamma(j+2)}{\Gamma\left(\frac{\chi_1}{2}+1\right)\Gamma\left(\frac{\chi_2}{2}+1\right)} \sigma_{ref} \frac{(k_B T)^{j-\frac{\chi_1}{2}-\frac{\chi_2}{2}+\frac{1}{2}}}{e_a^{j-\frac{\chi_1}{2}-\frac{\chi_2}{2}}} \exp\left(-\frac{e_a}{k_B T}\right) \quad (5)$$

KEモデルとIEモデルによる水素-空気の反応過程解析の結果を図1・2 (主要成分時間変化) と図3・4 (温度変化) に載せる。計算対象は定積、断熱、静止している容器内に封じ込めた、同モル濃度の空気 (10%酸素、40%窒素) と水素ガスで、初期温度: 1500[K]、初期圧力: 1[atm]から反応を開始する。化学種は表Iの8種、素反応は表IIの16個<sup>4</sup>を考慮した。ただ、計算時間短縮のための初期ラジカルとしてHとHO<sub>2</sub>を0.005%ずつ、OHを0.01%だけ混入して計算を開始した。共に横軸が時間、◇がDSMCによる解、実曲線が16個の素反応を差分数値計算した理論解を示し、水平実線は最終平衡値を示す。KEモデルは安定分子の分解を記述する吸熱反応に対応出来ないため、理論解との誤差が特に平衡状態で大きく表れている。一

表 I

species	mass [g/mol]	diameter [Å]	internal freedom
H <sub>2</sub>	2.00	2.827	2
O <sub>2</sub>	32.0	3.467	2
N <sub>2</sub>	28.0	3.798	2
H <sub>2</sub> O	18.0	2.800	3
H	1.00	2.070	0
O	16.0	3.050	0
OH	17.0	3.147	2
HO <sub>2</sub>	33.0	3.068	3

表 II

- ①: H<sub>2</sub>+O=H+OH
- ②: O<sub>2</sub>+H=O+OH
- ③: H<sub>2</sub>O+H=H<sub>2</sub>+OH
- ④: H<sub>2</sub>O+O=OH+OH
- ⑤: H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub>=OH+OH
- ⑥: H<sub>2</sub>+O<sub>2</sub>=H+HO<sub>2</sub>
- ⑦: OH+OH=H+HO<sub>2</sub>
- ⑧: H<sub>2</sub>O+O=H+HO<sub>2</sub>
- ⑨: O<sub>2</sub>+OH=HO<sub>2</sub>+O
- ⑩: H<sub>2</sub>O+O<sub>2</sub>=HO<sub>2</sub>+OH
- ⑪: H<sub>2</sub>O+OH=H<sub>2</sub>+HO<sub>2</sub>
- ⑫: H<sub>2</sub>+M=H+H+M
- ⑬: O<sub>2</sub>+M=O+O+M
- ⑭: OH+M=H+O+M
- ⑮: HO<sub>2</sub>+M=H+O<sub>2</sub>+M
- ⑯: H<sub>2</sub>O+M=H+OH+M

16 Reaction System

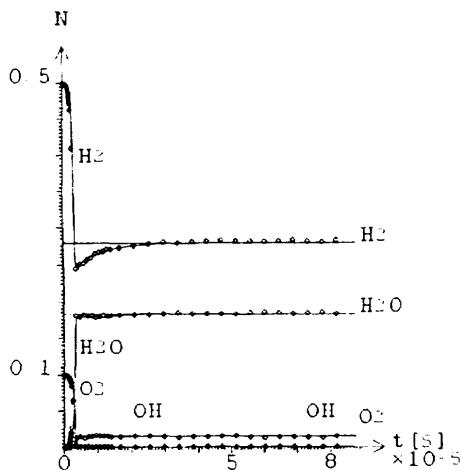


図 1: KEモデルによる化学種変化

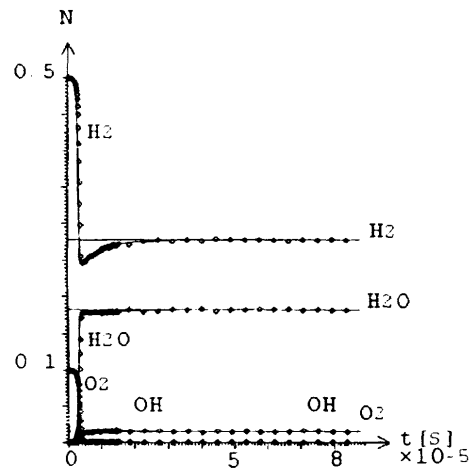


図 2: IEモデルによる化学種変化

方、I Eモデルは成分、温度共に理論解と非常に良い一致を示す事がよくわかる。

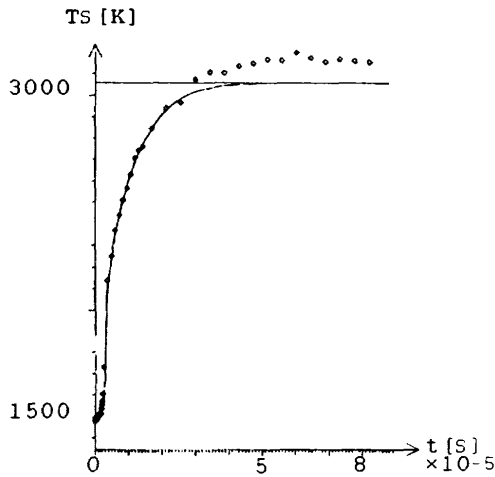


図 3 : K Eモデルによる温度変化

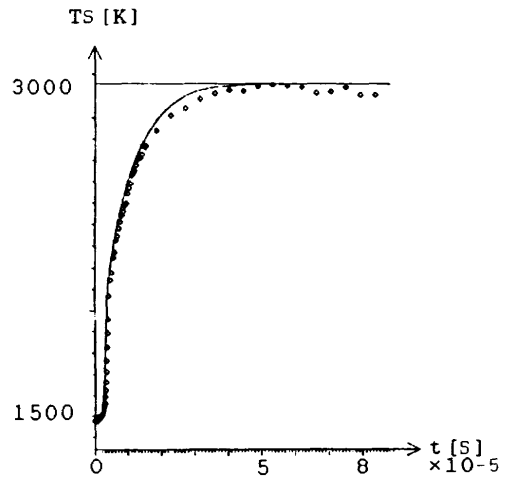


図 4 : I Eモデルによる温度変化

3. 2次元超音速剪断流

対象とした2次元超音速剪断流は図5の様に、上下を超音速の空気に挟まれた音速の水素噴流によって形成される。計算は図6に示すとおり、計算領域の上半分に対してのみ行い、計算領域の下側境界は対称境界、上側境界は超音速空気流条件に固定、出口境界は物理量変化無し超音速流出条件、空気と水素を仕切るリップは厚みなしの滑り境界である。入口境界では空気・水素ともに一様流入で、表Ⅲに示した流入条件を与えられている。空気と比べて水素の温度が非常に低い条件であり、燃焼反応解析にはI Eモデルを用いる。計算領域は一辺が空気流の平均自由行程長を持った立方体セルで流れ方向640個、垂直方向160個に分割されている。入口から出口までを代表長とすると、クヌーセン数は0.0015、レイノルズ数は1600である。

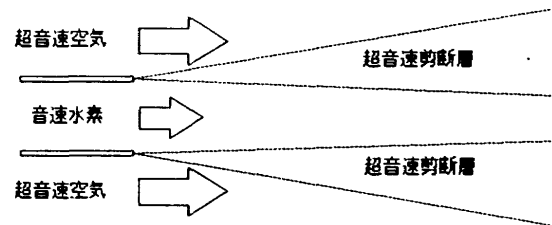


図 5 : 2次元超音速剪断流

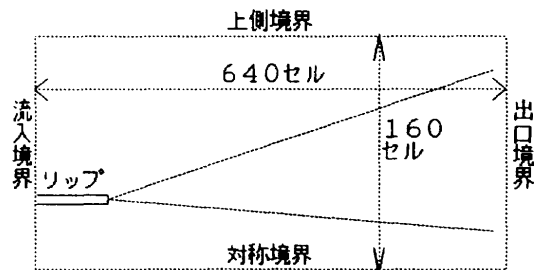


図 6 : 計算領域

表 III

空気流静圧:1.00[atm]	空気流マッハ数:2.44
水素流静圧:1.00[atm]	水素流マッハ数:1.00

空気静温 [K]	水素静温 [K]	速度比	運動量比
1500.0	250.0	1.56	5.95

流れ場の解析結果を図7～図9に示す。図7は0.05[atm]間隔の等圧力線図であり、混合に伴う弱い波がリップ先端から生じている。図8は等渦度線図である。リップ先端で出来る渦の拡散が非常にゆっくりと進行している。また、渦が拡散せずに残っている領域(帯)がリップよりも水素噴流側に寄っている。混合による運動量の交換が主に水素噴流内部で行われている事が分かる。図9は10%間隔の等水素濃度線図である。リップの直後から水素が空気側へ一方的に拡散している。また、水素は下流部でも噴流中心に濃度90%以上の領域を保持しており、混合による物質輸送が主に水素の空気中への浸透により起きていることが分かる。渦度図と水素濃度図を重ねてみると、水素濃度90%の線と渦度帯の中心がほぼ一致している。つまり、低温で数密度の大きな水素が空気中へと輸送されることで物質交換が始まり、一旦空気と

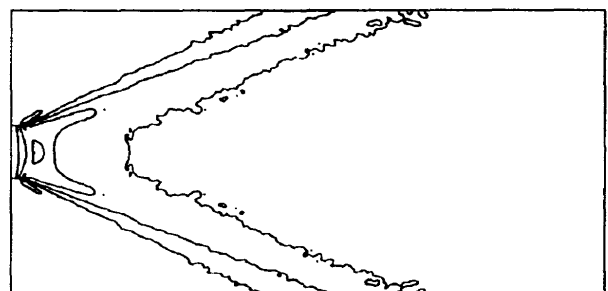


図 7 : 等静圧線図

混合した水素はその軽質量のためすぐに空気の流れに慣らされるので、水素100%の噴流面で運動量交換が行われ、渦が形成しているのである。

次に、燃焼過程解析結果を示す。I Eモデルにより、K Eモデルでは現れなかった微弱な初期反応を捉えることに成功した。図10に等水酸基(OH)数密度線図、図11に等水蒸気(H<sub>2</sub>O)数密度線図を示す。非常に弱い燃焼反応のため、気流中で起きている分枝反応の様子が良く分かる。水酸基は16 Reaction Systemの反応番号⑤を經由して生産されるので、混合開始直後から

存在している。一方、水蒸気はその生成に二つ以上の素反応を經由しなくてはならないため、水酸基と比べてやや時間遅れを伴って生成されている。特徴的なのは初期反応が水素噴流内部の水素濃度の高い領域では全く認められない点である。水素濃度線図を重ねてみると初期反応は水素濃度20%前後の領域でのみ起きている。これは噴射水素の温度の影響である。低温の水素はそのままでは反応を起こすことは無理であるが、空気中へと浸透しながら空気から熱エネルギーを奪って化学活性度を挙げてゆき、十分な熱交換の後で反応を開始している。

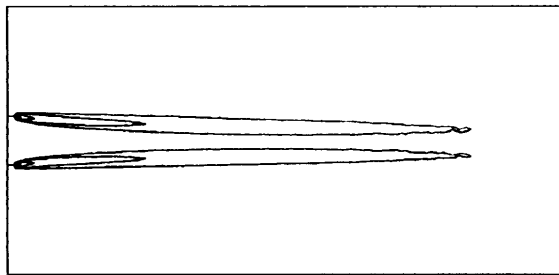


図 8 : 等温度線図

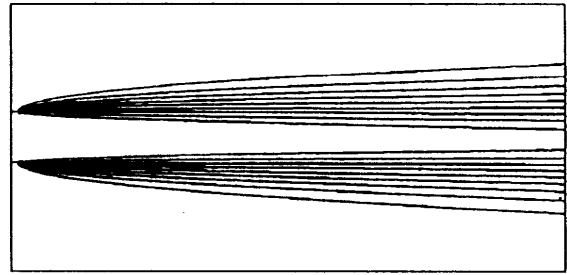


図 9 : 等水素濃度線図

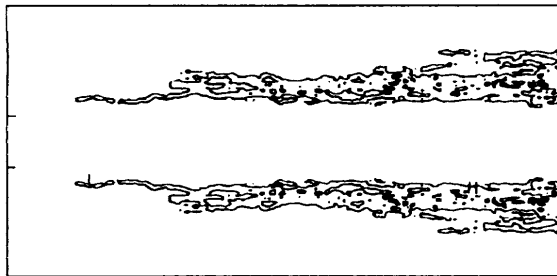


図 10 : 等水酸基密度線図

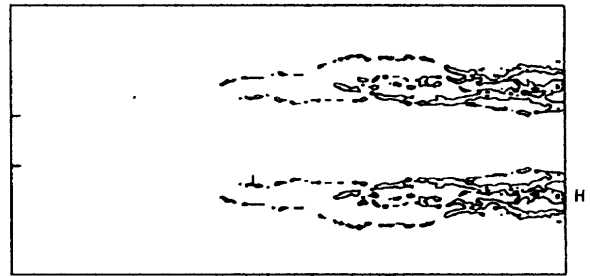


図 11 : 等水蒸気密度線図

#### 4. プラズマトーチ

プラズマトーチは、電気的に中性な高エネルギー気体であるプラズマを火花放電を用いて生産するシステムである。従来宇宙推進機関として開発・研究が行われてきたが、燃焼汚染物質を含まない高温化学活性種のみを多量に生産できる利点を持つので、超音速燃焼の着火・保炎を補助するサブシステムの一つとして近年盛んにその動作特性およびプラズマが燃焼場に及ぼす影響についての研究<sup>5-6</sup>が行われている。本研究では、前節の2次元超音速剪断流内部の微弱な燃焼場にプラズマを注入したときに起こる現象についての解析を行い、プラズマトーチの有効性を確かめた。

プラズマは簡単のため単原子酸素のみで構成されると仮定した。単原子酸素は水素-酸素系の反応において着火に最も敏感に影響を及ぼす<sup>7</sup>からである。プラズ

マトーチは計算領域外の上流部に設置され、噴射されたプラズマは超音速空気と共に流入境界から計算領域中へ流入すると仮定する。プラズマの流入状態の違いによる反応過程の変化を調べる目的から図12に示す通り、2種の流動形態を考慮している。左はトーチの設置位置が上流部のためプラズマが空気流全体に広がって流入する"拡散プラズマ条件"、右は下流部設置による"高密プラズマ条件"である。双方の条件とも、プラズマは超音速空気との混合による熱損失と化学的な物質損失を起こす事なく、等しい総質量流束と総熱流束を保持したまま流入境界から流入すると仮定した。本解析は、プラズマに超音速空気と同じ温度・速度を与えたので、プラズマ流入状態は表IVに示す通りである。

図13・14に等水酸基数密度線図を示す。図15・16は等水蒸気数密度線図である。共に、プラズマ注入の無い

図10・11と比べて格段に激しい反応が起きている。しかし、プラズマ流入条件により反応の進行過程は大きく異なっている。拡散プラズマでは下流部で反応領域の広い反応が起きているのに対して、高密プラズマは反応開始位置がリップ直後にまで大きく前進している。また、拡散プラズマは下流部で広い範囲に渡って急激に多量の水酸基を生成しているが、高密プラズマは下流部まで伸びる絞られた狭い領域で水酸基生成を行っているにも関わらず、その生成量は拡散プラズマほど多くはなく、また生成速度もゆっくりとしている。一方水蒸気生産に関してはその逆の傾向が見られ、拡散プラズマよりも高密プラズマの方が多量の水蒸気を速やかに生成している。さらに、興味深いのは、それぞれが水素濃度の異なる領域で反応を起している点である。拡散プラズマは主に空気流側で反応を進行させているのに対して、高密プラズマは従来反応を起さず事無かった、より水素噴流側へ寄った位置に反応領域を存在させている。水蒸気生産は主に反応番号③と④を経由して行われるが、反応生成物である水酸基同士による反応④よりも安定種である水素が参加する反応③の方が優勢である

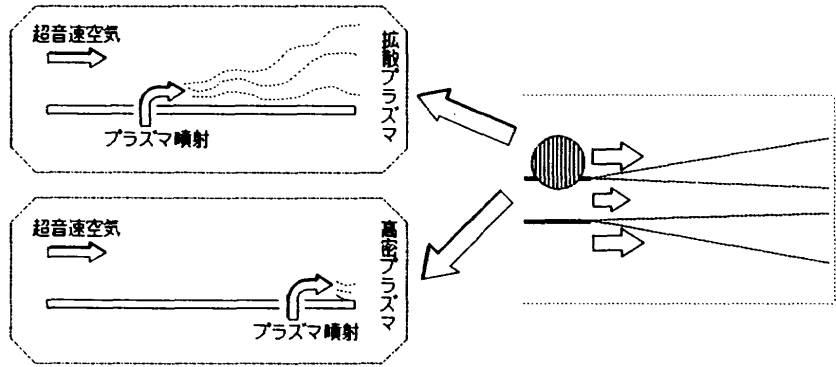


図 12：プラズマトーチ設置モデル

表 IV

	プラズマ 模擬物質	対空気流 混合部分高さ	対空気流 流入質量流速比	対空気流 流入熱量流速比
拡散プラズマ	単原子酸素	0.9231	$9.67 \times 10^{-4}$	$1.25 \times 10^{-3}$
高密プラズマ	単原子酸素	0.0154	$9.67 \times 10^{-4}$	$1.25 \times 10^{-3}$

ため、たとえ水酸基存在量が小さくても大量の水素が存在する水素噴流中で反応を進行させる高密プラズマの方が効率の良い水蒸気生産を行っていることになる。また、単原子酸素プラズマによる反応開始は反応①を経由して起こるので、水素濃度の高いリップ背後の領域にプラズマを集中的に注入する高密プラズマでは拡散プラズマよりも多量の水酸基が生成されるが、高濃度水素中で反応③により即水蒸気へと還元されるので水酸基は足りなくなり、拡散プラズマの方は水酸基を余らせていることになる。以上の結果からプラズマトー

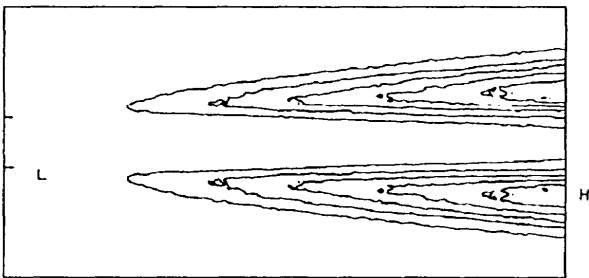


図 13：拡散プラズマによる等水酸基密度線図

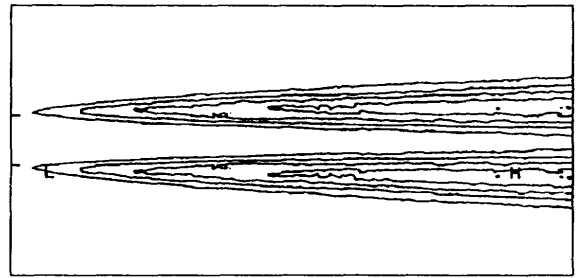


図 14：高密プラズマによる等水酸基密度線図

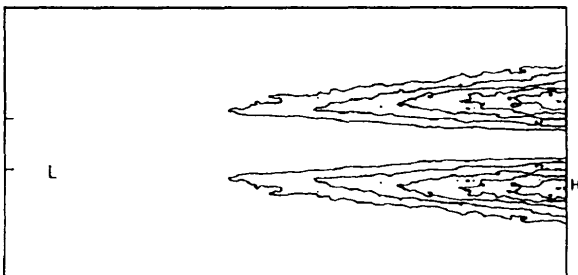


図 15：拡散プラズマによる等水蒸気密度線図

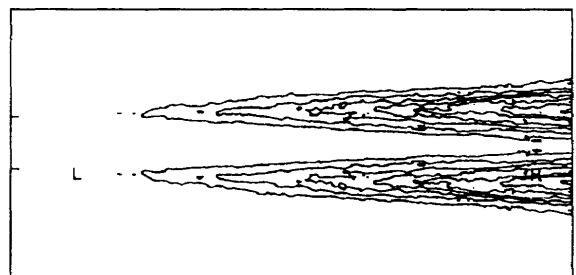


図 16：高密プラズマによる等水蒸気密度線図

チ作動による着火促進が確認でき、また、高密度プラズマ条件の方がより効果的であることが明らかになった。

#### 5. 結論

新しい反応分子モデル（I Eモデル）を導入し、2次元超音速剪断流の解析を行った結果以下の知見を得た。

- ① I Eモデルは微弱な初期燃焼反応解析に有効である。
- ② 混合は水素が空気流中へ浸透することで進行する。
- ③ 微弱な燃焼は高温空気流中でのみ進行する。
- ④ 上流からプラズマを導入することにより効率の良い燃焼が可能となる。

なお本研究結果は航空宇宙技術研究所の数値気体風洞（NWT）上にて16個のプロセッサエレメントを用いて、並列計算を行い得られたものである。

#### 6. 参考文献

1. K.Koura "Null-Collision technique in direct-simulation Monte Carlo Method" Phys. Fluids 29 November 1986 3509-3511
2. C.Borgnakke and P.S.Larsen "Statistical Collision Model for Monte Carlo Simulation of Polyatomic Gas Mixture" J. Comp. Phys. 18 405-420,1975
3. G.A.Bird "Molecular Gas Dynamics" Oxford Univ. Press,London,1976
4. 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.2 188-193,1980.
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
6. Y.Sato, et al "Effectiveness of Plasma Torches for Ignition and Flameholding in Scramjet" J. Prop. Power , Vol.8, No.4, 1992
7. 三谷 徹 "スクラムジェットにおける化学反応簡略化反応系による考察" NAL,TR-1184,1992