

5

化学反応を含む圧縮流の数値計算

石黒登美子* 小川哲* 和田安弘*

Numerical Calculation of Chemically Reacting
Compressible Flow

by

Tomiko ISHIGURO, Satoru OGAWA
and Yasuhiro WADA*National Aerospace Laboratory*

ABSTRACT

A summary of our solver-code which is being developed for the purpose of analyzing chemically reacting compressible flows numerically is presented. The code solves the two or three-dimensional Reynolds time average complete Navier-Stokes equations including species transport equations, and has two strong points. The first point is that the system of governing equations for the flow computation contains a total mass conservation equation and transport equations of all species taking account of total mass conservation and impartial numerical treatment of every chemical species. Therefore, the correction of mass ratios of all species is made so that the summation of them equals to 1 after every time step integration. The second point is that the TVD difference scheme is used in order to capture strong discontinuous surfaces clearly and efficiently which are apt to appear in supersonic flow fields.

Applying this solver, shock-induced chemically reacting flows and flow fields for the case of transverse sonic injection of H_2 fuel into a supersonic airstream are analyzed numerically.

1. ま え が き

宇宙往還機の研究開発計画においては、スクラムジェットエンジンに関し超音速化学反応流の数値シミュレーションに大きな期待が寄せられている。それは実際の作動条件に合わせた実験が非常に困難であり、もし優秀な流れソルバーのコードがあれば危険を伴わないでパラメトリックに、かつ、容易に高

高度・高温度・高速度における燃焼器内外の流れ場を数値的に模擬できると考えられるからである。これを目標にして実在気体の超音速化学反応流の空間2次元及び3次元完全Navier-Stokes方程式のソルバー作りを開始した。その際、このソルバーに次の二つの特長を備えさせることにした。

先ず一つは基礎方程式となる弱保存型偏微分方程式系の従属変数に関することである。 n 個の化学種の反応流の数値計算法においては、従属変数として全体の質量及び $n-1$ 個の化学種の質量を用いる方

* 航空宇宙技術研究所

法¹⁾又は、全体の質量ではなく n 個の化学種の質量を用いる方法²⁾が一般的であるが、本ソルバーでは全体の質量保存を重視し、かつ、各化学種を平等に扱う。つまり、数値誤差等を一つの化学種に集中させないことを考慮して従属変数として全体の質量及び n 個の化学種の質量を用いる。そのため、各時間刻みの積分の後に化学種の質量分率の総和が1になるように各分率に対し定率修正を行う³⁾。

第二の特長はTVDスキームの適用である。超音速流に関しては、化学反応と共に非常に跳びの大きい不連続面を捕えるために安定で、かつ、高解像度のスキームが要求される。既に理想気体に関しTVDスキームの良さは保証されている⁴⁾。和田ら⁵⁾は上述の従属変数をもつ偏微分方程式系の空気力学行列が対角化可能であることを証明したので容易にTVDスキームを構成できる。

本論文では本ソルバーの概略を説明し、水素・酸素反応に関する四つの試計算例を紹介する。一つは予混合気体が衝撃波に誘起されて着火する場合であり、残り三つは酸素・窒素混合超音速流の主流に垂直に水素が吹き出す場合の流れ場を捕える。

2. 基礎方程式

簡単のため、空間二次元で記述する。 n 個の化学種の輸送方程式を含む時間従属なレイノルズ時間平均完全 Navier-Stokes 方程式は物理座標系 (x, y) において次式で与えられる。なお、化学種の拡散係数に対し Fick の法則が用いられている。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = \mathbf{S}$$

ここで (類似式は記述省略, i は化学種 ($i = 1 \sim n$))

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \\ \rho f_i \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P - \tau_{xx} \\ \rho u v - \tau_{xy} \\ (\rho e + P)u - u\tau_{xx} - v\tau_{xy} + q_x \\ \rho u f_i - \rho D \frac{\partial f_i}{\partial x} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{S} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{w}_i \end{bmatrix}$$

$$\tau_{xx} = \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x},$$

$$\tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right),$$

$$q_x = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x} - \rho D \sum_i h_i \frac{\partial f_i}{\partial x}.$$

但し, t ; 時間, ρ ; 密度, P ; 圧力, u, v ; 夫々 x, y 方向の速度成分, e ; 全内部エネルギー, f_i ; 密度分率, \dot{w}_i ; 生成率, μ ; 有効粘性率, T ; 温度, D ; 拡散係数, κ ; 熱伝導係数, h_i ; エンタルピー。

なお、次の関係式が成り立つ。

$$e = \sum_i h_i f_i - P/\rho + \frac{1}{2}(u^2 + v^2),$$

$$P = \rho \bar{R} T \text{ (状態方程式)},$$

$$\bar{R} = R^0 \sum_i f_i / M_i,$$

$$\kappa = \bar{C}_p (\mu_l / P_{T_l} + \mu_t / P_{T_t}), \quad \bar{C}_p = \sum_i C_{p_i} f_i,$$

$$h_i = h_i^R + \int_{T^R}^T C_{p_i} dT,$$

$$\rho D = (\mu_l / P_{T_l} + \mu_t / P_{T_t}) / L_e \text{ (仮定 } L_e = 1),$$

$$\lambda = -\frac{2}{3} \mu \text{ (Stokes 仮定)}, \quad \mu = \mu_l + \mu_t.$$

但し, h_i^R, T_i^R ; 夫々, 参照エンタルピーと温度, R^0 ; 気体定数, M_i ; 分子量, C_{p_i} ; 定圧比熱, L_e ; ルイス数, μ_l ; 分子粘性率, μ_t ; 渦粘性率, P_{T_l} ($=0.72$), P_{T_t} ($=0.9$); 夫々層流及び乱流プラントル数。

ここで温度に従属な変数として μ_l, C_{p_i}, h_i が挙げられるが, μ_l は Sutherland 公式で与え, h_i は JANAF Thermochemical Table を元に最小自乗近似によって作った温度の4次多項式で与える。それ故、微係数の C_{p_i} は3次多項式で与えられる。なお, h_i^R も同 Table の定数を使う。

さて、実際に計算で用いる基礎方程式は上述のものを一般曲線座標系 (ξ, η) に変換し、かつ、参照長

さ、主流の密度、音速を基準にして無次元化したものである。簡単のため以下では無次元変数を有次元変数と同記号で示し、スキーム説明をしやすいするため、 \mathbf{F} 、 \mathbf{G} を対流項(添字 E)と粘性項(N)に関するものに分ける。基礎方程式は次式で与えられる。

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{U}}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_E}{\partial \xi} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_E}{\partial \eta} = \hat{\mathbf{S}} - \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_N}{\partial \xi} - \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_N}{\partial \eta} \equiv \mathbf{R}$$

ここに、 J を変換のヤコビアンとして

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{U}} &= J^{-1} \mathbf{U}, \quad \hat{\mathbf{F}}_E = J^{-1} (\mathbf{F}_E \xi_x + \mathbf{G}_E \xi_y), \\ \hat{\mathbf{G}}_N &= J^{-1} (\mathbf{F}_N \eta_x + \mathbf{G}_N \eta_y), \quad \hat{\mathbf{S}} = J^{-1} \mathbf{S} \text{等。} \end{aligned}$$

3.1 差分スキーム

化学反応を伴う流れでは反応と流れの特性時間が混在しているため反応生成項を陽的に時間積分すると硬直し計算が続行不可能となるので、格子点毎にその項を陰的に扱う point implicit 法を適用する。さらに対角化 IAF 法を適用して時間積分する。又、空間の離散化については Harten-Yee の Numerical Flux に改良を加えた TVD スキーム⁴⁾を用いる。この差分構成で重要なことは \mathbf{F}_E と \mathbf{G}_E のヤコビアン行列の線形結合が対角化可能であることである。つまり、次式が成立する(詳細な式は和田ら⁶⁾を参照)。

$$\xi_x \frac{\partial \mathbf{F}_E}{\partial \mathbf{U}} + \xi_y \frac{\partial \mathbf{G}_E}{\partial \mathbf{U}} = R^\xi A^\xi R^{\xi^{-1}},$$

$$\eta_x \frac{\partial \mathbf{F}_E}{\partial \mathbf{U}} + \eta_y \frac{\partial \mathbf{G}_E}{\partial \mathbf{U}} = R^\eta A^\eta R^{\eta^{-1}}$$

ここに、 A^ξ 、 A^η は夫々固有値 λ_f^ξ 、 λ_f^η を元にもつ対角行列、 R^ξ 、 R^η は固有ベクトルの行列である。

\mathbf{R} の空間微分は中心差分で近似し、同じ \mathbf{R} で示すと基礎方程式に対する差分スキームは次式になる(i, j 略)。

$$\begin{aligned} & \left[I - \Delta t \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{U}} \right] R^\xi \left[I + \frac{\Delta t}{\Delta \xi} D^\xi \right] R^{\xi^{-1}} R^\eta \\ & \times \left[I + \frac{\Delta t}{\Delta \eta} D^\eta \right] R^{\eta^{-1}} (\hat{\mathbf{U}}^{N+1} - \hat{\mathbf{U}}^N) \\ & = -\frac{\Delta t}{\Delta \xi} (\tilde{\mathbf{F}}_{Ei+\frac{1}{2},j}^N - \tilde{\mathbf{F}}_{Ei-\frac{1}{2},j}^N) \\ & - \frac{\Delta t}{\Delta \eta} (\tilde{\mathbf{G}}_{Ei,j+\frac{1}{2}}^N - \tilde{\mathbf{G}}_{Ei,j-\frac{1}{2}}^N) + \Delta t \mathbf{R}^N \end{aligned}$$

ここに

$$D^\xi = \frac{1}{2} (A_{i+1}^\xi - A_{i-1}^\xi) + \frac{1}{2} (\Omega_{i+\frac{1}{2}}^\xi - \Omega_{i-\frac{1}{2}}^\xi),$$

$$\Omega^\xi = \text{diag}[-\max_i \psi(\lambda_i^\xi)] \Delta,$$

Δ ; 中心差分演算子, $\tilde{\mathbf{F}}_{Ei+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{F}}_{Ei} + \hat{\mathbf{F}}_{Ei+1} + J_{i+\frac{1}{2}}^{-1} R_{i+\frac{1}{2}}^\xi \Phi_{i+\frac{1}{2}})$, ψ 及び Φ は TVD 条件を満たすための Harten の固有の関数で夫々、 λ_i^ξ 及び λ_i^η 、 R^ξ に従属する(詳細; 文献^{4,7)})。

3.2 境界条件

流入, 流出, 対称, 周期境界は通常の方法を用いる。壁境界は no-slip 条件 ($u=v=0$), $\partial P / \partial n = 0$, $\partial f_i / \partial n = 0$ (n ; 壁に垂直な方向)を与え, 更に断熱壁ならば $\partial T / \partial n = 0$, 等温壁ならば $T = \text{定数}$ を与える。

3.3 化学反応モデル

本論文では水素-酸素反応のみを取り扱う。本ソルバーは次の四つの化学反応モデルを含み, 計算実行の際一つを選択する。説明のため化学種 $\text{N}_2, \text{H}_2, \text{O}_2, \text{OH}, \text{H}_2\text{O}, \text{H}, \text{O}, \text{H}_2\text{O}_2, \text{HO}_2$ を前から順に $i = 1, 2, \dots, 9$ と対応づける。

- 1) Rogers モデル⁸⁾; $i = 1 \sim 5$ の化学種, 2 段階反応。
- 2) Oran モデル⁹⁾; $i = 1 \sim 9$ の化学種, 24 段階反応。
- 3) Westbrook モデル¹⁰⁾; $i = 1 \sim 9$ の化学種, 17 段階反応。
- 4) Evans モデル¹¹⁾; $i = 1 \sim 7$ の化学種, 8 段階反応。

勿論, 1 段階の中に順方向及び逆方向の反応が含まれる。

3.4 乱流モデル

渦粘性率 μ_t を計算する乱流モデルとして, Baldwin-Lomax の代数渦粘性モデル¹²⁾ と SGS (Subgrid Scale) 渦粘性モデル¹³⁾ をソルバーに組み込む。

4. 数値計算例

4.1 衝撃波に誘起される反応（各種反応モデルの比較）

H₂と空気の前混合流をマッハ数4.1, 1ATM, 900K, 当量比1で断熱管の中に流入させると, 10度の傾きをもつ下壁によって衝撃波が誘起され, 温度が上がり反応が起こる(図1(b)左下)。この計算をBaldwin-

Lomax 乱流モデルと 73×103の格子を用いて各種反応モデルについて行った。図1(a)は下壁から0.13cm離れた層(図1(b)白線)における質量分率(H₂, O₂, OH, H₂O)と流入値で正規化された圧力と温度の分布である。Rogers反応モデルの結果は同モデルを用いたChitsomboonら¹⁴⁾, Uenishiら¹⁵⁾の結果に近いのでソルバーのこのモデルの検証はなされたと考える。実験結果がないのでどのモデルの結果

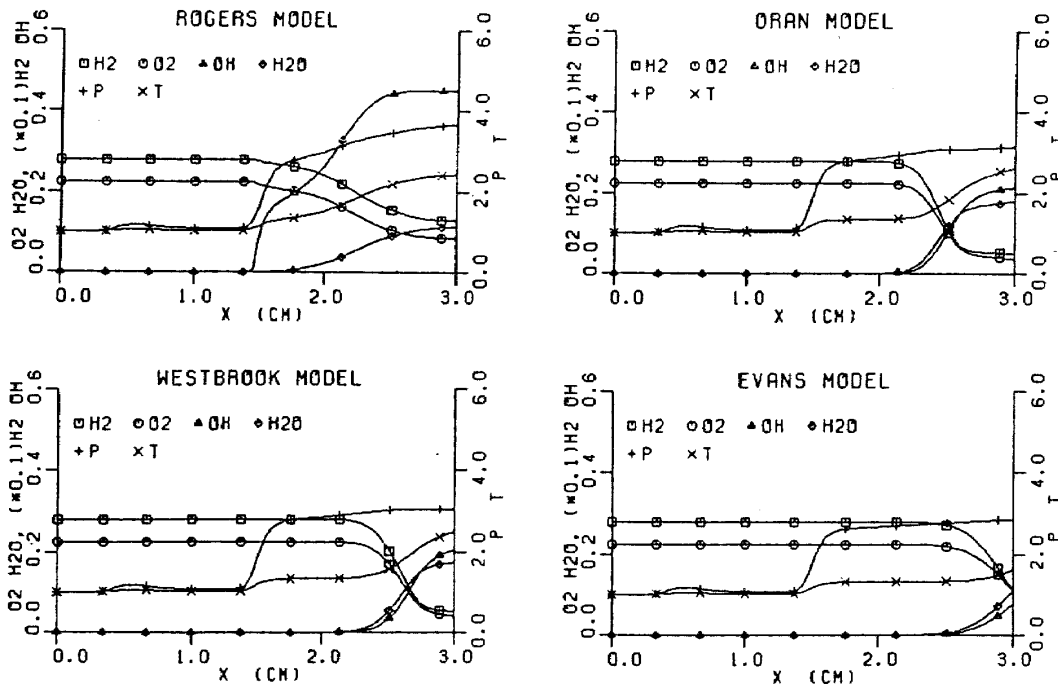


図1(a) 下壁から0.13cm層におけるH₂, O₂, OH, H₂Oの質量分率及び流入値で正規化された圧力と温度の分布

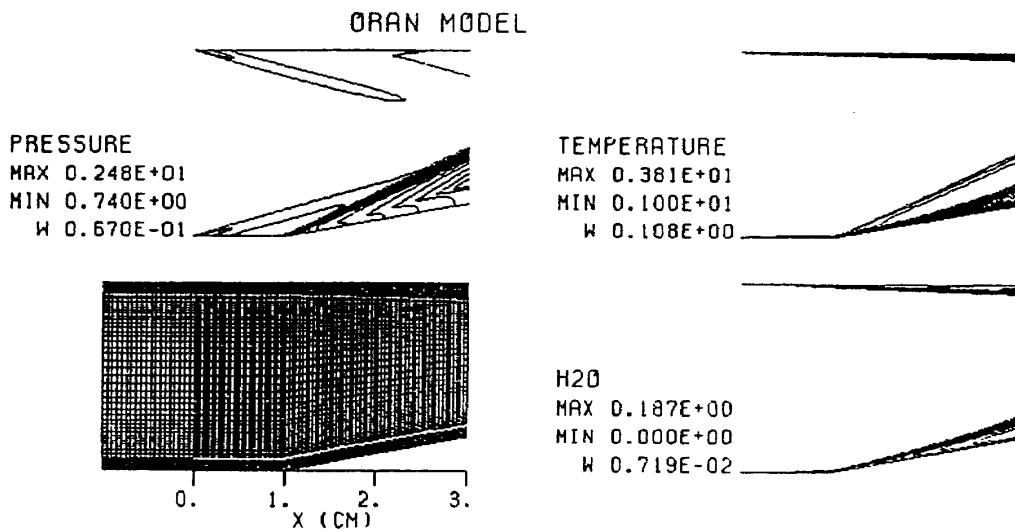


図1(b) 計算モデル(左下)とOran反応モデルによる圧力, 温度及びH₂Oの質量分率の等高線図

が良いか言えないが、着火位置が衝撃波に近いのは前から順に並べると Rogers, Oran, Westbrook, Evans である。又、反応時間は Rogers が最も長い。図 1(b) は Oran 反応モデルによる圧力、温度、 H_2O 質量分率の等高線図である。衝撃波から離れた後方で反応が起きていることがわかる。

4.2 不燃の場合における主流空気・垂直噴射 H_2 の流れ場

Drummond ら¹⁶⁾の論文には、主流の空気(マッハ数 2.5, 130 K, 0.0169 MPa) に対し 0.02 cm 幅の穴から垂直に H_2 (マッハ数 1, 243 K, 0.728 MPa) を噴射させた場合の不燃の流れ場が spark shadow graph によって示されている。ここでは、数値計算

($\mu_t = 0$ と仮定) によってその流れ場を実現させる。格子は粗, 中, 細の三段階を用い, 最終的に噴射口に 16 格子胞を含む 481×162 の格子を使った。図 2 A は等圧線図であり, 左から separation shock, bow shock, jet shock, reattachment shock が捕えられている。又, 図 2 B の流線図から噴射口の両脇における separation 及び H_2 と空気の mixing boundary を, 図 3 C の等マッハ線図から噴射口に被る Mach disk を識別できる。

4.3 二次元スクラムジェットエンジン内部における反応流れ場

Drummond ら¹⁶⁾の形状と条件を用いて 1 ストラットのスクラムジェットエンジン(取入口前縁幅 15 cm,

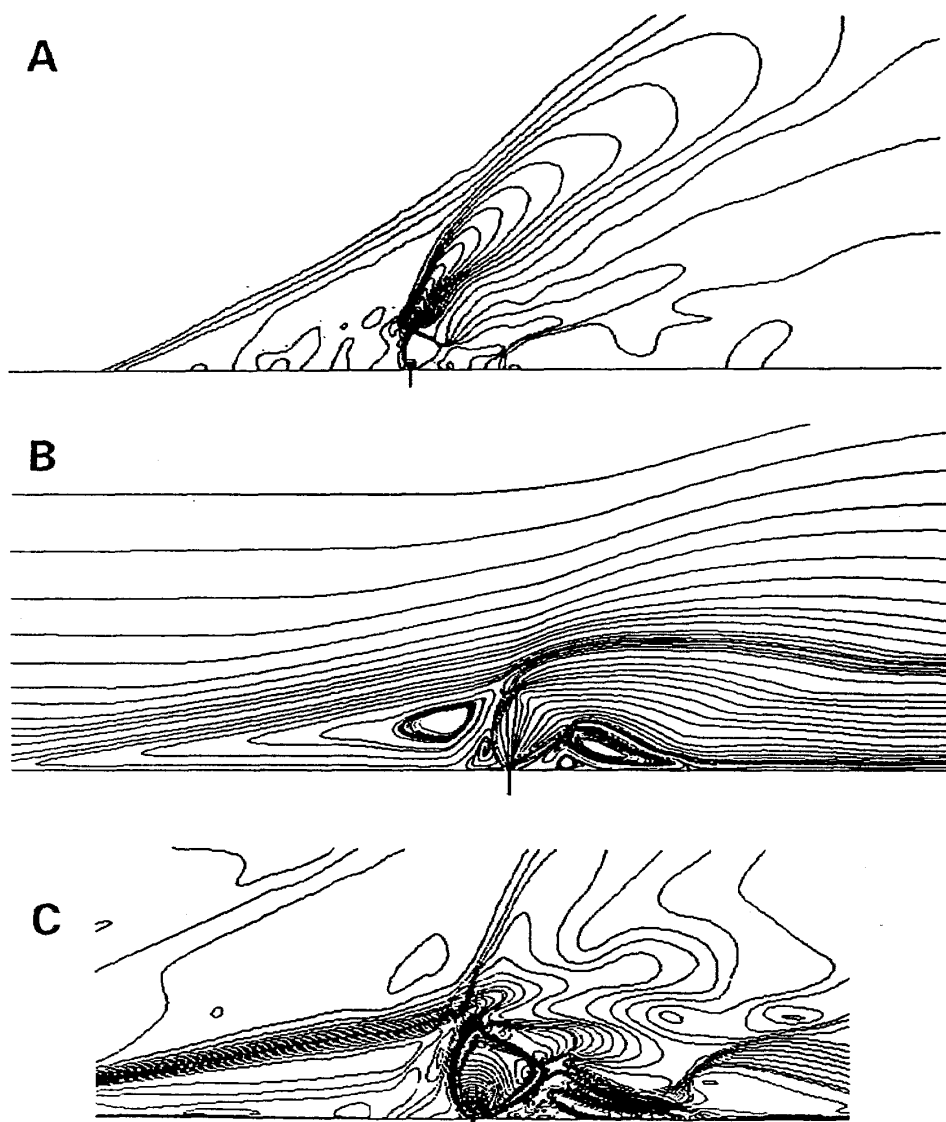


図 2 A: 等圧線図, B: 流線図, C: 等マッハ線図

壁に対し0.1cm幅の垂直な噴射口, 図3の一番上が全体図)内の主流空気・噴射 H_2 の流れ場を計算する。計算条件は, 主流(マッハ数5.03, 335K, 3546 Pa), 噴射(マッハ数1.05, 246K, 254824 Pa), 725Kの等温壁, 格子 241×81 , 噴射口の中に8格子胞, Oran 反応モデル, Baldwin-Lomax 乱流モデルを用いた。図3の二番目以下が一番上の図の重要部分を拡大したもので圧力, 温度, 質量分率 H_2 ,

H_2O , OHの等高線図である。等圧線図では取入口壁とストラットによる特有の反復反射衝撃波が見られる。噴射口の上流側の剝離域及び H_2 と空気の混合層の縁で, 温度が高く, 反応の度合も高い。このモデルでは不十分な H_2 の浸透により対向している混合層の縁が交差していない。より大きな反応を起こさせるためには交差できるようにデザイン又は, 吹出し条件を変更する必要がある。

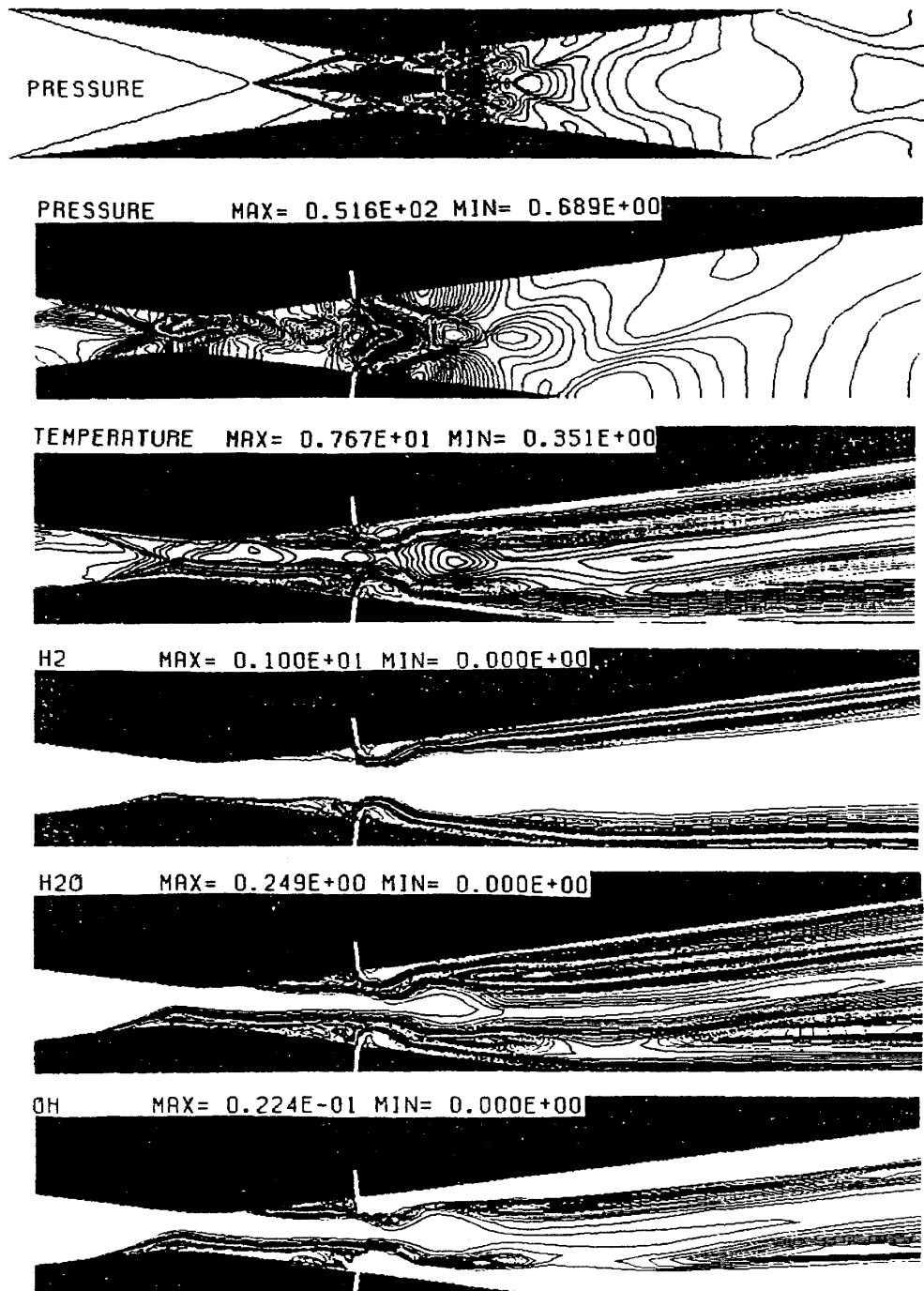


図3 スクラムジェットエンジン内部における反応流の等高線図, 一番上が全体図, 他は拡大図

4.4 三次元燃焼器内の反応流

航技研の鎮西，升谷両氏から提供を受けた実験装置形状及び条件を使って三次元の燃焼流の計算をWestbrook 反応モデルとSGS乱流モデルを用いて行った。燃焼器は放射状に18個の H_2 の噴射口(孔の面積 1.5mm^2)をもつ直径79mmと100mmの連結管である(図4)。主流条件は O_2 と N_2 の質量分率，夫々，0.255，0.745，56KPa，1054K，マッハ数

2.5，吹出し条件は414KPa，240K，マッハ数1である。計算の対象領域は全管の1/18とし， $160 \times 15 \times 80$ の格子を使い，断熱壁とした。図4は同一時刻における等密度線図(A)と H_2 及び H_2O の等質量分率図(夫々，B，C)である。図Aの切断面では上流側から順に separation shock，bow shock，mixing boundary，recirculation region，shear layer，recompression shockが捕えられている。

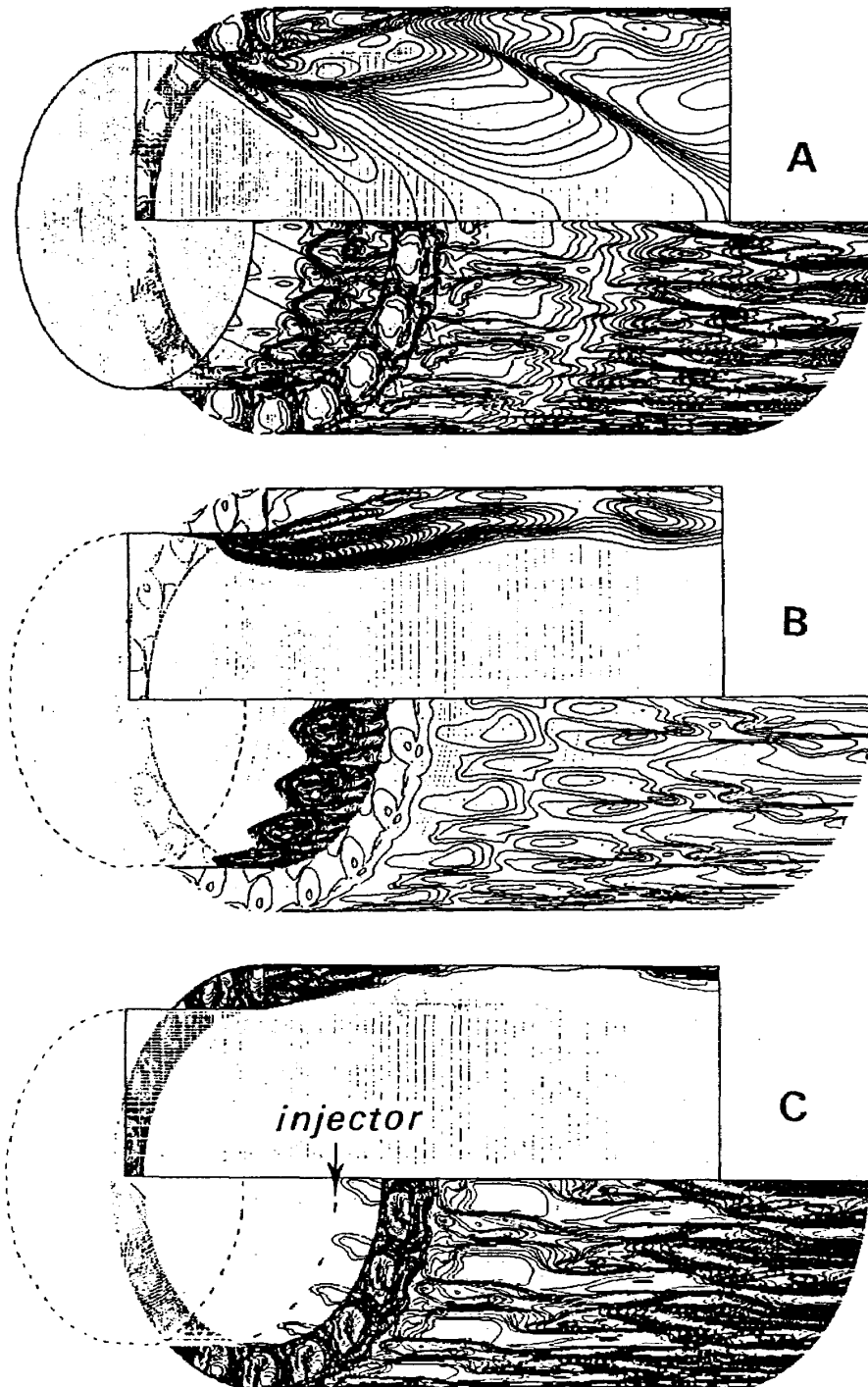


図4 A：等密度線図，B： H_2 の等質量分率図，C： H_2O の等質量分率図

図 4 C では step の背後と下流域で H_2O 分率が大きく反応が盛んであるが肝心の mixing layer では反応が起こっていない。

5. ま と め

化学種の輸送方程式を含む非定常 2/3 次元 Navier-Stokes 方程式を解くための計算手法を提示し、それを適用した“衝撃波に誘起される反応”の数値計算を通じて 4 つの反応モデルによる結果の比較を行った。更に主流空気・垂直噴射 H_2 の複雑な不連続面を含む流れ場を TVD スキームによって鮮明に捕えることができることを示し、又、反応の様子を図示した。1 ケースの所要時間については、前者は 5 ~ 10 分ですむが、後者は噴射口の中に入れる格子胞数、つまり噴射近辺の流れの解像度に依存し、本論文の計算では 10 時間以上かかった。次の課題は実験結果のあるモデルにつき計算を試み、実験結果に合わせるためには乱流及び燃焼モデルを如何に適用すべきかを考えることである。

最後に、計算モデルのデータを提供して下さった航技研・鎮西技官、升谷技官に感謝の意を表す。

参 考 文 献

- 1) Drummond, J.P. and Hassaini, M.Y., "Numerical Simulation of a Supersonic Reacting Mixing Layer," AIAA Paper 87-1325.
- 2) Shinn, J.L., Yee, H.C. and Uenishi, K., "Extension of a Semi-Implicit and Fully Implicit Shock-Capturing Algorithm for 3-D Fully Coupled, Chemically Reacting Flows in Generalized Coordinates," AIAA Paper 87-1577.
- 3) Park, C., "On Convergence of Computation of Chemically Reacting Flows," AIAA Paper 85-0247.
- 4) Takakura, Y., Ishiguro, T. and Ogawa, S., "On the Recent Difference Scheme for the Three-Dimensional Difference Schemes," AIAA Paper 87-1151.
- 5) Wada, Y., Kubota, H., Ogawa, S. and Ishiguro, T., "A Diagonalizing Formula-
tion of General Real Gas-Dynamic Matrices with a New Class of TVD Schemes," National Fluid Dynamics Congress July, 1988.
- 6) Wada, Y., Kubota, H., Ishiguro, T. and Ogawa, S., "Fully Implicit High-Resolution Scheme for Compressible Chemically Reacting Flows," HYPERBOLIC PROBLEMS, Second International Conference, Aachen, March, 1988.
- 7) Yee, H.C. and Shinn, J.L., "Semi-Implicit and Fully Implicit Shock-Capturing Methods for Hyperbolic Conservation Laws with Stiff Source Terms," AIAA Paper 87-1116CP.
- 8) Rogers, R.C., "On the Use of a Global Hydrogen-Air Combustion Model in the Calculation of Turbulent Reacting Flows," AIAA Paper 82-0112.
- 9) Oran, E.S., Young, T.R., Boris, J.P. and Cohen, A., "Weak and Strong Ignition. I. Numerical Simulations of Shock Tube Experiments," Combustion and Flame Vol. 48, 1982, pp. 135-148.
- 10) Westbrook, C.K., "Hydrogen Oxidation Kinetics in Gaseous Detonations," Combustion Science and Technology, Vol. 29, 1982, pp. 67-81.
- 11) Evans, J.S. and Schexnayder, C.J., "Influence of Chemical Kinetics and Unmixedness of Burning in Supersonic Hydrogen Flames," AIAA J., Vol. 18, 1980, pp. 188-193.
- 12) Baldwin, B.S. and Lomax, H., "Thin Layer Approximation and Algebraic Model for Separated Turbulent Flows," AIAA Paper 78-257.
- 13) Murakami, S., Mochida, A. and Hibi, K., "Numerical Simulation of Air Flow around Cubic Model", ISCFD-Tokyo, 1985.
- 14) Chitsomboon, T., Kumar A. and Tiwari, S.N., "Numerical Study of Finite-Rate Supersonic Combustion Using Parabolized Equations," AIAA Paper 87-0088.

- 15) Uenishi, K., Rogers, R.C. and Northam, G.B., "Three Dimensional Numerical Predictions of the Flow behind a Reward-Facing-Step in a Supersonic Combustor," AIAA Paper 87-1962.
- 16) Drummond, J.P. and Weidner, E.H., "Numerical Study of a Scramjet Engine Flow Field," AIAA Paper 81-0186.

