

化学反応を伴う流れ場の数値解析

平井 研一*

Numerical Simulations of Chemically Reacting Flow

by

Kenichi HIRAI
Nissan Motor Co., Ltd.

ABSTRACT

A summary of our numerical method which has been developed to compute chemically reacting flows is described. The results of the computations show that our method is able to predict the basic phenomena induced by fuel injection in a combustor flowfield.

1. はじめに

空気吸い込みエンジンの燃焼性能予測を目標として、乱流拡散火炎解析に対応しうるCFDコードの開発を進めている。

現状は、「衝撃波に誘起される化学反応」の数値解析等において文献値（計算値）との比較検討により、コードの基礎部分の検証がほぼ終了し、次のステップとして、本コードの適用範囲を拡大するために数値的安定性及び計算効率の向上について検討を加えている段階である。

本論文では、現状の計算方法を紹介するとともに、乱流拡散火炎の計算例として、スクラムジェット燃焼室内流れ場を始めとする数値解析結果について報告する。

2. 計算法

① 基礎方程式及び物性値

化学種の保存及び輸送方程式を含む、空間2次元のレイノルズ平均完全Navier-Stokes方程式を基礎方程式とし、更にStokes仮定及びFickの法則を用いた。方程式中の熱物性値については、定

圧比熱と分子種エンタルピーとをJANAF熱化学データ¹⁾に基づき、各々温度の3次、4次関数（最小2乗法近似）で与え、また輸送係数である（層流）粘性係数及び熱伝導率については、Lennard-Jonesポテンシャルに基づく計算値²⁾を用いている。尚、拡散係数はルイス数=1として推定した。

② 計算スキーム

化学反応を伴う流れ場においては、化学反応項及び対流項（特に流れの合流部及び境界層内部）による方程式系の硬直化対策とともに、化学反応速度が温度に対して極めて敏感であるために数値的振動の抑制が重要となる。この対策として、Point-Implicit法³⁾、対角化IAF法⁴⁾⁵⁾、Harten-Yeeスキーム⁶⁾を組み合わせた計算手法により、CFDコードを構成した。但し、本報告では計算セル界面の状態量を単純平均で見積るとともに、エントロピー修正項を下記の様にヤコビアンマトリックスのスペクトル半径の関数にしている⁷⁾。

$$\psi(z) = \begin{cases} |z| & |z| \geq \delta_1 \\ (z^2 + \delta_1^2)/2\delta_1 & |z| < \delta_1 \end{cases}$$

$$\delta_1 = \tilde{\delta} (|U| + |V| + c) \quad (\tilde{\delta} = 0.15)$$

U, V は反変速度成分

また計算時間刻みは熱伝導項及び拡散項の効果も考慮したグローバルタイムステップにより設定し

* 日産自動車(株)

た。

③ 数学モデル

乱流モデルは、下記の Prandtl Mixing Length モデルを使用した。

$$\mu_t = K \rho l^2 |w|$$

K : 定数値 (=0.02 とした)

l : 混合長, $|w|$: 渦度の大きさ

本モデルの混合長の代表値としては、噴流速度の半値幅を選ぶのが普通であるが、噴流間の干渉問題のように、流れ場内に発生する衝撃波により速度の空間分布に単調性が失われる場合には、噴流速度の代わりに分子濃度の半値幅を選ぶ方がより適切とされている⁸⁾。本報告では、全水素濃度の半値幅により、混合長を評価した。

一方、化学反応モデルは、17段階反応、9化学種から構成される Westbrook モデル⁹⁾を用いた。

④ 初期条件及び境界条件

対角化 IAF 法では、Implicit 項の精度を犠牲にして計算効率の向上を図っているため、Impulsive Start を行った場合には数値不安定に陥ることがある。本計算では、RRK 等の Explicit スキームを用いて化学平衡凍結流の状態である程度計算を進めた後、対角化 IAF 法による化学反応流計算へと乗り替えている。

また流入出、対称境界は通常の方法で与え、壁境界は、 $\partial P / \partial n = 0$, $\partial T / \partial n = 0$ (断熱壁), $\partial f_i / \partial n = 0$ (非触媒壁)により設定している。

3. 数値解析例

① 主流空気に水素を垂直噴射した場合の流れ場

この問題は「衝撃波に誘起される化学反応」の発展形として捉えることができる。高さ 5 cm の断熱管内を流れる主流空気 (1 atm, 900 K, M4) に対して、幅 2 mm の噴射孔から当量比 = 1 の水素 (700 K, M1) を垂直噴射する。この時、燃料噴射により衝撃波が誘起され着火が起こる。

この計算を、乱流モデルなし、Westbrook モデル、110×91 の格子で行った。不燃時 (化学反応計算 OFF) 及び燃焼時の流れ場計算結果を図 1, 図 2 に各々示す。図 1 より、mixing, boundary, bow

shock, jet shock, reattachment 等の燃料噴射時の流れ場に特有な現象が識別できる。また、図 2 から、燃焼反応は、噴射孔上流の再循環領域から発生し、下流に向けて帯状の領域で起こることがわかる。

② 2次元スクラムジェット燃焼室内部の流れ場

ストラット後端から燃料を平行噴射した場合の流れ場を計算する。計算条件は、主流 (空気, M 5.3, 5322 Pa, 275 K), 燃料 (水素, M1, 700 K, 当量比 = 1), 断熱壁, Prandtl mixing length モデル, Westbrook モデル, 計算格子 (81×61) である。

不燃時及び燃焼時の流れ場計算結果を図 3, 図 4 に各々示す。同図から、ストラット先端から生じた衝撃波が壁面で反射し、更に燃焼噴流と干渉することにより、強い再循環領域が形成されることがわかる。そこでは流速が遅くしかも燃料と空気との混合が良好であるために着火源となっているようである。

4. まとめ

化学反応流の計算手法を紹介すると共に、計算例を通して燃料噴射が燃焼室内流れ場に及ぼす影響を定性的に把握できることを示した。このことは、空気吸い込みエンジンを設計する上で大きな武器になるものと思われる。

但し、現状ではどうにか計算できるという程度であり (メモリーの制限もある)、今後、数値安定性の向上 (特に、エントロピー修正項、セル界面値、壁境界値の各評価方法の再検討) 及び計算効率の向上 (マルチグリッド法の採用等) を計る必要がある。

また、本論文では計算技術にしか言及しなかったが、化学反応流解析コードを設計ツールとして玉成していく上で、数学モデル及び (高温) 物性値の見直しが必要となる。このためには、着火状況の可視化及び分子種濃度と温度の非接触計測による検証実験が必要不可欠であると考えられる。

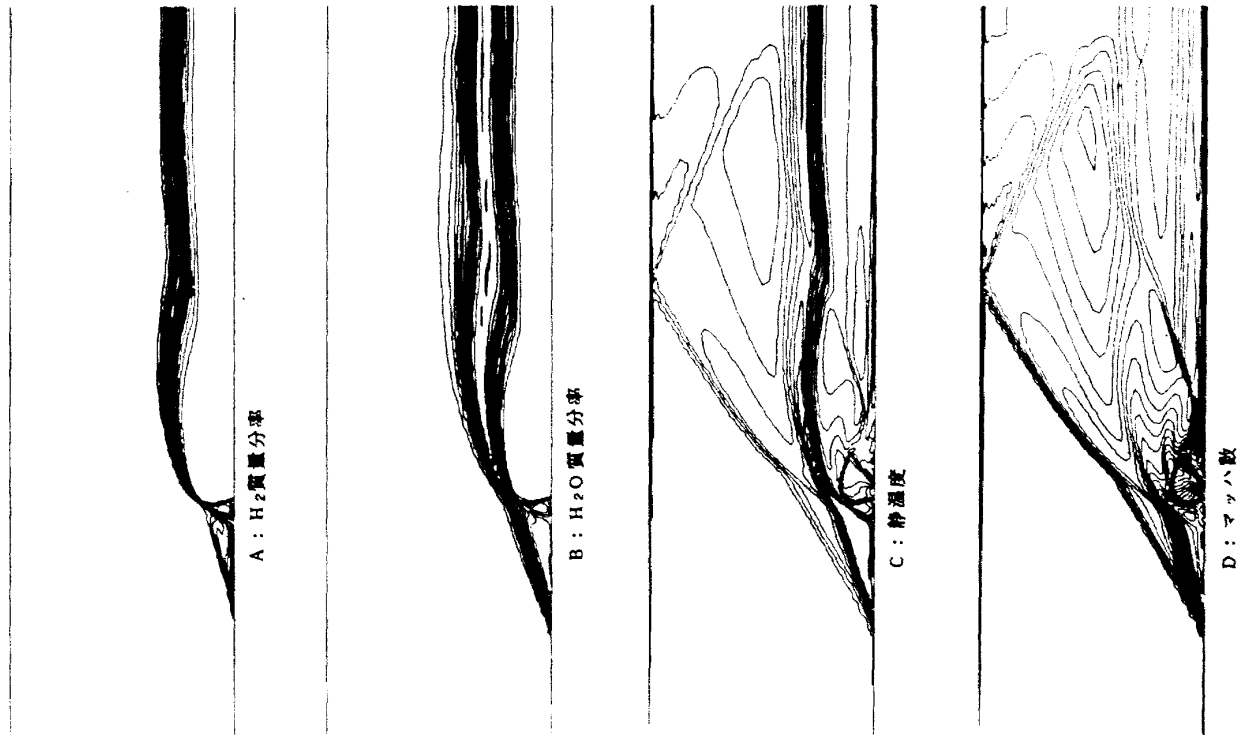


図2 主流空気に水素を垂直噴射した場合の流れ場(燃焼時)

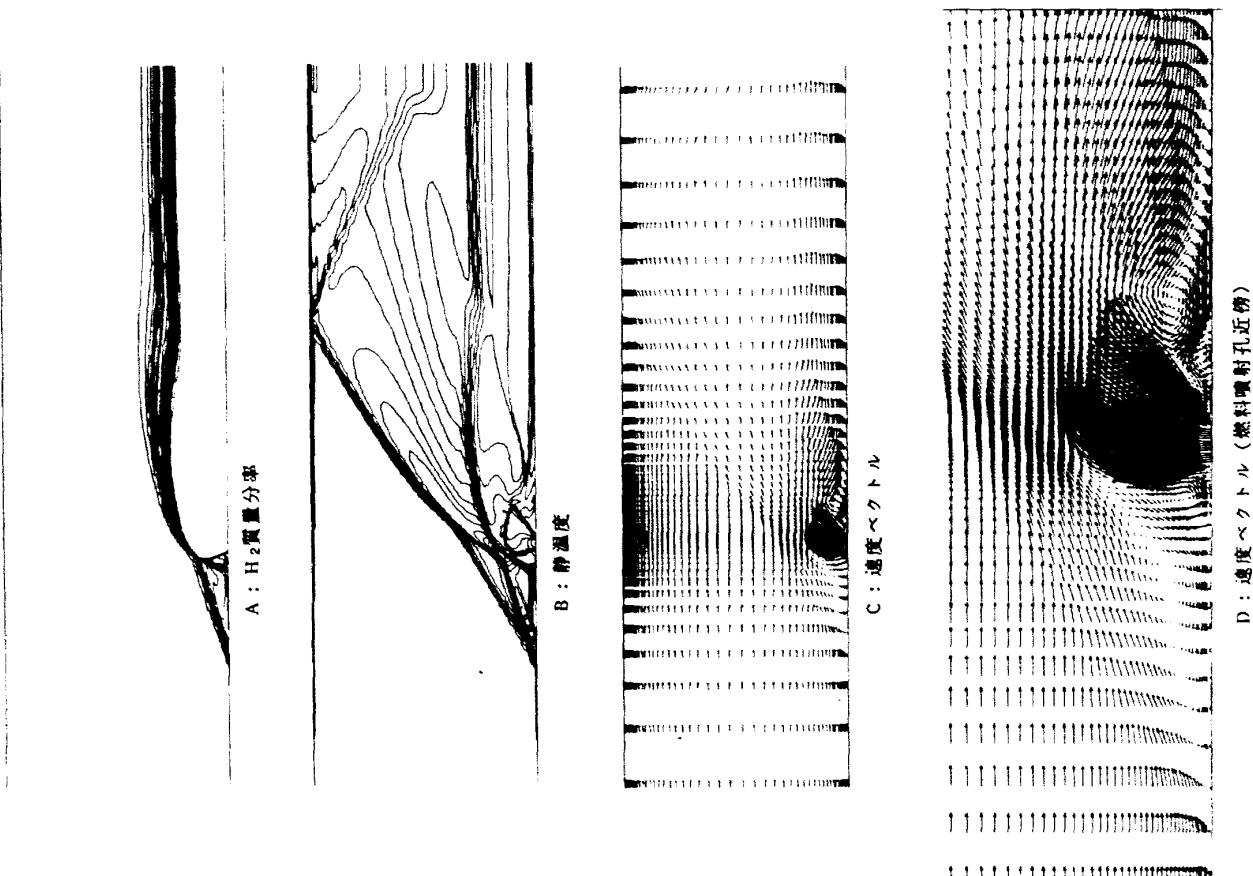


図1 主流空気に水素を垂直噴射した場合の流れ場(不燃時)

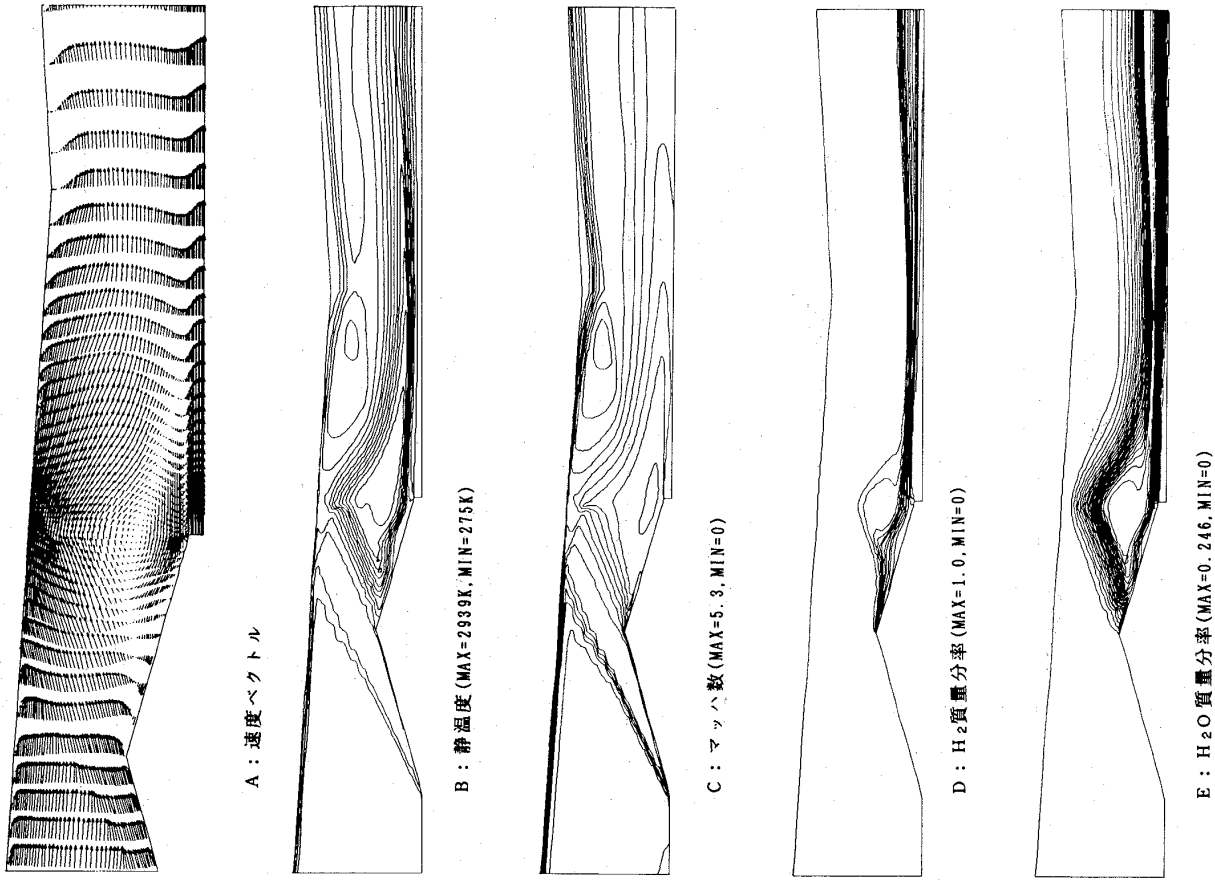


図4 2次元スクラムジェット燃焼室内部の流れ場 (燃焼時)

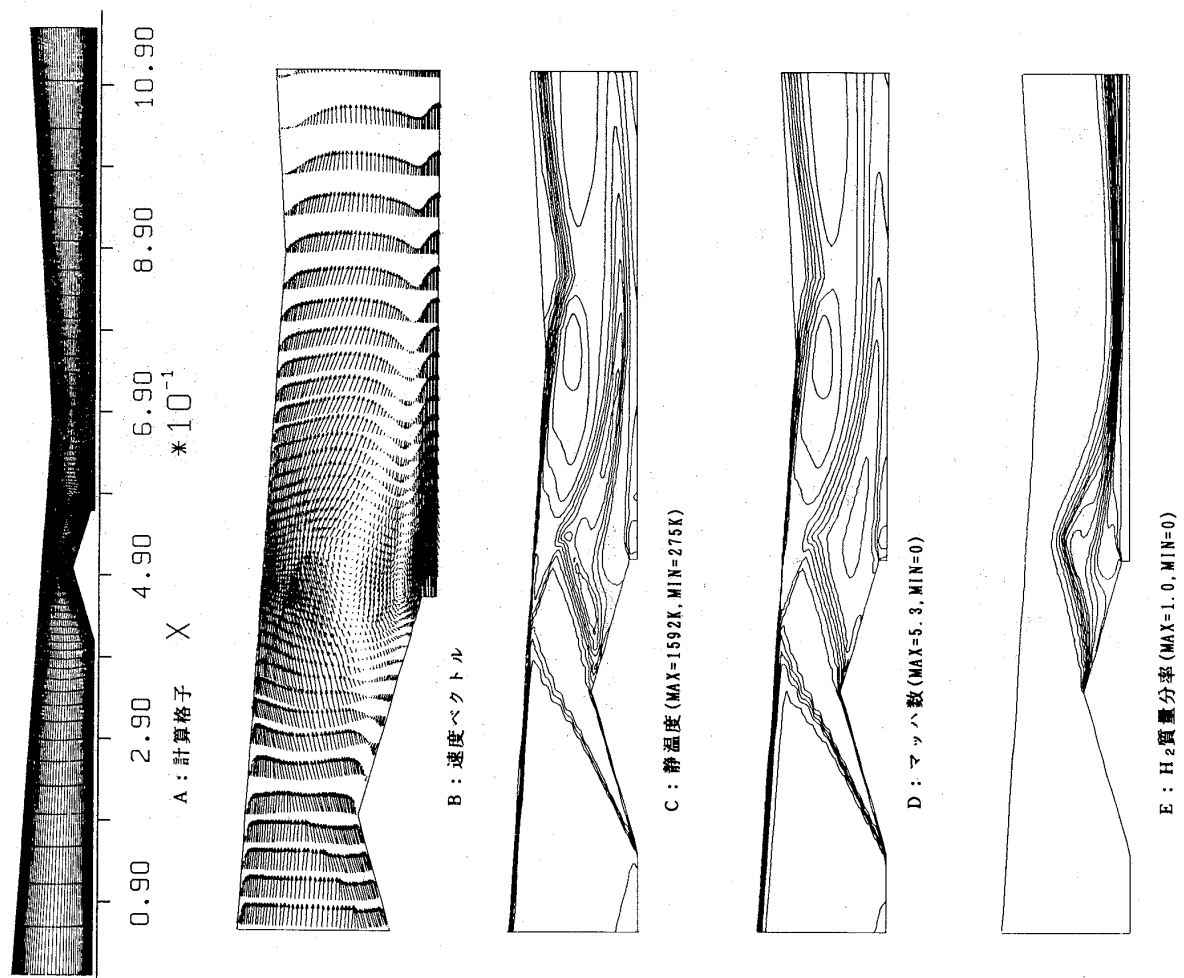


図3 2次元スクラムジェット燃焼室内部の流れ場 (不燃時)

参考文献

- 1) Gordon, S. and McBride, B.J., "Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouguet Detonations," NASA S-273, 1976.
- 2) Svehla, R.A., "Estimated Viscosities and Thermal Conductivities of Gases at High Temperatures," NASA TR R-132, 1962.
- 3) Bussing, T.R.A. and Murman, E.M., "A Finite Volume Method for the Calculation of Compressible Chemically Reacting Flows," AIAA Paper 85-0331.
- 4) Pulliam, T.H. and Chaussee, D.S., "A Diagonal Form of an Implicit Approximate Factorization Algorithm," J. Comp. Phys., Vol. 39, pp. 347-363, 1981.
- 5) Wada, Y., Kubota, H., Ishiguro, T., and Ogawa, S., "A Fully Implicit High-Resolution Scheme for Chemically Reacting Flows," HYPERBOLIC PROBLEM, Second International Conference, Aachen, March, 1988.
- 6) Yee, H.C. and Harten, A., "Implicit TVD Schemes of Hyperbolic Conservation Laws in Curvilinear Coordinates," AIAA Paper 85-1513.
- 7) Yee, H.C., Klopfer, G.H., and Montagné, J.-L., "High-Resolution Shock-Capturing Schemes for Inviscid and Viscous Hypersonic Flows," J. Comp. Phys., Vol. 88, pp. 31-61, 1990.
- 8) Chitsomboon, T., Northam, G.B., Rogers, R.C. and Diskin, G.S., "CFD Prediction of the Reacting Flowfield Inside a Subscale Scramjet Combustor," AIAA paper 88-3259.
- 9) Westbrook, C.K., "Hydrogen Oxidation Kinetics in Gaseous Detonations," Combustion Science and Technology, Vol. 29, pp. 67-81, 1982.

