

ロケットエンジン燃焼関連シミュレーション

松山新吾, 新城淳史, 溝渕泰寛, 小川哲
宇宙航空研究開発機構 総合技術研究本部

Numerical Simulation on Rocket Engine Combustion

by

Shingo Matsuyama, Junji Shinjo, Yasuhiro Mizobuchi, Satoru Ogawa

ABSTRACT

Numerical simulation of liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket engine combustor is conducted to investigate the flame structure under supercritical pressure. A preliminary result by an axisymmetric numerical simulation with detailed chemistry is shown for a single shear coaxial injector element which follows the experiment by Mayer and Tamura. A real gas effect under supercritical pressure is accounted for by Soave-Redlich-Kwong equation of state. Thermodynamic and transport properties are evaluated based on departure functions and the corresponding state principle. A fine mesh system with minimum mesh spacing of $1\mu\text{m}$ is employed to resolve a thin reaction layer under high pressure environment. The present simulation has succeeded to capture the unsteady flame with very thin reaction layer at supercritical pressure. By the analysis of the simulated flame, fundamental features of the LOX/GH₂ flame are clarified. Small eddies, which are generated intermittently at the upper corner of the LOX post tip, interact and coalescence with their neighboring eddies while convecting downstream. A recirculation zone near the LOX post tip drives the GH₂ flow toward the LOX stream, which anchors the flame and results in a stationary combustion. The flame edge attaches to the LOX post tip and non-premixed combustion occurs. The flame thickness is less than 0.1mm, and no local extinction is observed during the simulation.

1. はじめに

H-IIA, Delta IV, Ariane V などの打ち上げシステムには、主に液酸/液水ロケットエンジンが採用されている。これらの打ち上げシステムの第一段エンジンである LE-7A, RS-68, Vulcain エンジンも、現在比較的安定して運用されているものの、ロケットエンジン燃焼器の内部で生じている燃焼過程に対する理解は未だ不十分である。その要因は、燃焼器内部では液体酸素の微粒化、蒸発、混合、燃焼といった複雑な過程を伴うためである。これらの複雑な過程を伴う燃焼を理解すべく、これまでに多くの研究が行われてきたが⁽¹⁻¹¹⁾、いまだ十分なレベルに達しているとは言いがたい。したがって、実際の燃焼器設計では試験の積み重ね、試行錯誤の繰り返しによって得られたノウハウに頼るところが大きく、エンジン性能の向上・新規エンジンの開発を行う上で、開発期間を長期化し、開発コストを増大する要因となっている。

一方で、近年の著しい計算機能力の向上によって、詳細反応機構を用いた燃焼シミュレーションが行われ、火炎の構造を理解する上で重要なツールになってきている^(12,13)。今後、ロケットエンジン燃焼器の設計・開発においても、数値シミュレーションが重要なツールとなりうると思われる。しかしながら、ロケットエンジン燃焼器のシミュレーションを実現する上で困難となるのは、まず酸素が液体の状態で噴射されるため、基本的には気液二相流としての取り扱いが必要なことである。また、燃焼器のサイズが数十 cm のスケールであることに対し、高圧力条件下での燃焼で生じる火炎の厚さは 1mm 以下のスケールになることである。このようなごく薄い火炎を高解像度の計算格子を用いて DNS 的にとらえながら、燃焼器全体のシミュレーションを実行することは、現状の計算機性能では完全に不可能である。そのため、今のところロケットエンジンの燃焼器シミュレーションは必然的に LES もしくは RANS に火炎モデルを用いたアプローチに頼らざるを得ない。すでに、ロケットエンジン燃焼器をターゲットとした LES がいくつか行われ始めてはいるが⁽¹⁻⁵⁾、乱流燃焼のモデリングや、実験との比較によるシミュレーション結果の検証など、まだまだ解決すべき問題は多い。

著者らも、ロケットエンジン燃焼器内部で生じる火炎の基本的な構造を把握することを目指して、基礎的な燃焼シ

ミュレーションを開始している⁽¹⁴⁾。本報では、ロケットエンジン燃焼器の基本要素である、同軸型噴射エレメントについて燃焼シミュレーションを行った結果について報告する。最終的には火炎モデルを用いた LES を視野に入れているが、本解析では、火炎モデルと乱流モデルを用いずに、高解像度の計算格子を用いて詳細な素反応機構を解くことによって火炎を直接模擬した。シミュレーションによって得られた非定常データから火炎構造、保炎メカニズムなどを検討した。

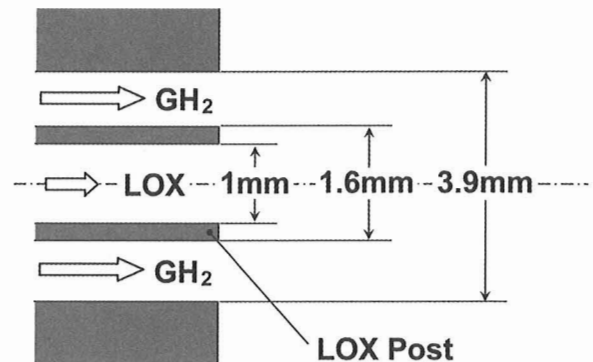


図1 同軸型噴射エレメント

表1 噴射ノズル・燃焼器サイズ, LOX/GH₂ 噴射条件

液体酸素噴射ノズル内径	1 mm
液体酸素噴射ノズル外径	1.6 mm
水素噴射ノズル直径	3.9 mm
燃焼器直径	40 mm
燃焼器全長	400 mm
液体酸素噴射速度	30 m/sec
液体酸素噴射温度	100 K
水素噴射速度	300 m/sec
水素噴射温度	300 K
燃焼器内圧力	10 MPa

2. 解析対象

解析対象は図 1 に示す同軸型噴射エレメントである。同軸型噴射エレメントでは、液体酸素 (LOX) 噴射ノズルの外周に円環状の気体水素 (GH₂) 噴射ノズルが配置されており、気相-液相間の相互作用によって燃料と酸化剤の混合・拡散を促進して燃焼させる。このような同軸型噴射エレメントは多くの液酸/液水ロケットエンジンに採用されており、LE-7A エンジンでは約 300 本用いられている。

計算条件は、Mayer and Tamura が行った LOX/GH₂ 燃焼・可視化試験⁽⁶⁾を模擬したものである。燃焼器サイズ、噴射条件などを表 1 に示す。

3. 数値計算手法

3. 1 支配方程式

支配方程式には軸対称を仮定した以下の Navier-Stokes 方程式を用いた。

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = \frac{\partial F_v}{\partial x} + \frac{\partial G_v}{\partial y} + H \quad (1)$$

ここで、各ベクトル成分は以下のように定義される。

$$Q = y \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \\ \rho z_s \end{bmatrix},$$

$$F = y \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + P \\ \rho uv \\ (E + P)u \\ \rho z_s u \end{bmatrix}, \quad G = y \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho v^2 + P \\ \rho uv \\ (E + P)v \\ \rho z_s v \end{bmatrix},$$

$$F_v = y \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xx} \\ \tau_{yx} \\ \tau_{xx}u + \tau_{yx}v + \kappa \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_s \rho D_s H_s \frac{\partial z_s}{\partial x} \\ \rho D_s \frac{\partial z_s}{\partial x} \end{bmatrix},$$

$$G_v = y \begin{bmatrix} 0 \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ \tau_{xy}u + \tau_{yy}v + \kappa \frac{\partial T}{\partial y} + \sum_s \rho D_s H_s \frac{\partial z_s}{\partial y} \\ \rho D_s \frac{\partial z_s}{\partial y} \end{bmatrix},$$

$$H = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{2}{3} \mu v \right) \\ P - \frac{3}{4} \frac{\mu v}{y} + \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} v \frac{\partial \mu}{\partial y} \\ -\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{2}{3} \mu uv \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{2}{3} v^2 \right) \\ y w_s \end{bmatrix}.$$

ここで、 z_s は化学種 s の単位質量あたりのモル数 [mol/kg] である。その他の記号は慣用に従う。

化学種として H₂, O₂, OH, H₂O, H, O, H₂O₂, HO₂ の 8 化学種を考慮し、化学反応モデルには Petersen and Hanson による 19 反応モデルを用いた⁽¹⁵⁾。

通常の気液二相流では気相-液相界面には表面張力が働き、密度などの不連続を伴う相変化が生じる。そのためシミュレーションでは、相界面を定義しラグランジュ的手法によって追跡して質量、運動量およびエネルギーの流入出を扱う必要がある。しかし、本解析が対象とする Mayer and Tamura による燃焼試験の条件では、燃焼室圧力が酸素の臨界圧力 (5.04MPa) を超えるため、液相-気相間には密度などの不連続は伴わない。また、表面張力、蒸発潜熱も小さくなることから、液相と気相 (超臨界流体) を区別せず単一相的に扱う。

支配方程式は有限体積的手法により離散化し、対流流束は空間 3 次精度の AUSM-DV スキーム⁽¹⁶⁾により求める。粘性流束は中心差分的手法により求め、化学種の質量保存を保つように修正を施している⁽¹⁷⁾。時間積分には Euler 法による完全陽解法を用いる。本解析では、計算格子幅が非常に小さいことから時間刻みが制限されるため、化学反応による化学種の生成項は陽的に扱う。また、計算では格子幅数 μm 程度の高解像度の計算格子を用い、乱流モデルは用いない。乱流の取り扱いに関しては今後の課題とする。

3. 2 状態方程式、熱力学諸量、輸送係数

液体酸素は高圧 (10MPa) ・極低温 (100K) 状態で燃焼室に噴射されるため、実在気体効果が無視できなくなる。そこで、状態方程式には理想気体の状態方程式ではなく、Soave-Redlich-Kwong 状態方程式 (SRK EoS) を用いる⁽¹⁸⁾。

$$P = \frac{R_u T}{V - b_m} - \frac{a_m}{V^2 + b_m V}, \quad (2)$$

ここで、 R_u は一般気体定数、 V はモル体積 [m³/mol] を表す。また、混合気体のパラメータ a_m , b_m は以下のように求める。

$$a_m = \sum_i \sum_j X_i X_j (a_i a_j)^{1/2} (\alpha_i \alpha_j)^{1/2}, \quad b_m = \sum_i X_i b_i$$

$$a_i = \frac{0.08664 R_u T_{c,i}}{P_{c,i}}, \quad \alpha_i = \left\{ 1 + f(\omega_i) (1 - T_{r,i}^{1/2}) \right\}$$

$$f(\omega_i) = 0.48 + 1.574 \omega_i - 0.176 \omega_i^2, \quad T_{r,i} = \frac{T}{T_{c,i}}$$

$$b_i = \frac{0.08664 R_u T_{c,i}}{P_{c,i}}.$$

ここで、 $X_i, P_{c,i}, T_{c,i}$ はそれぞれ、化学種*i*のモル分率、臨界圧力、臨界温度である。

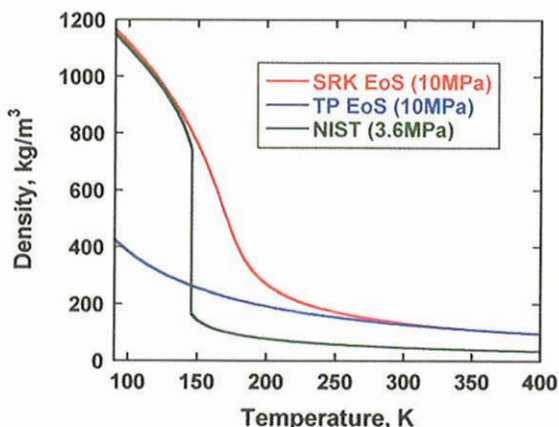


図2 圧力 10MPa における O₂ の密度変化

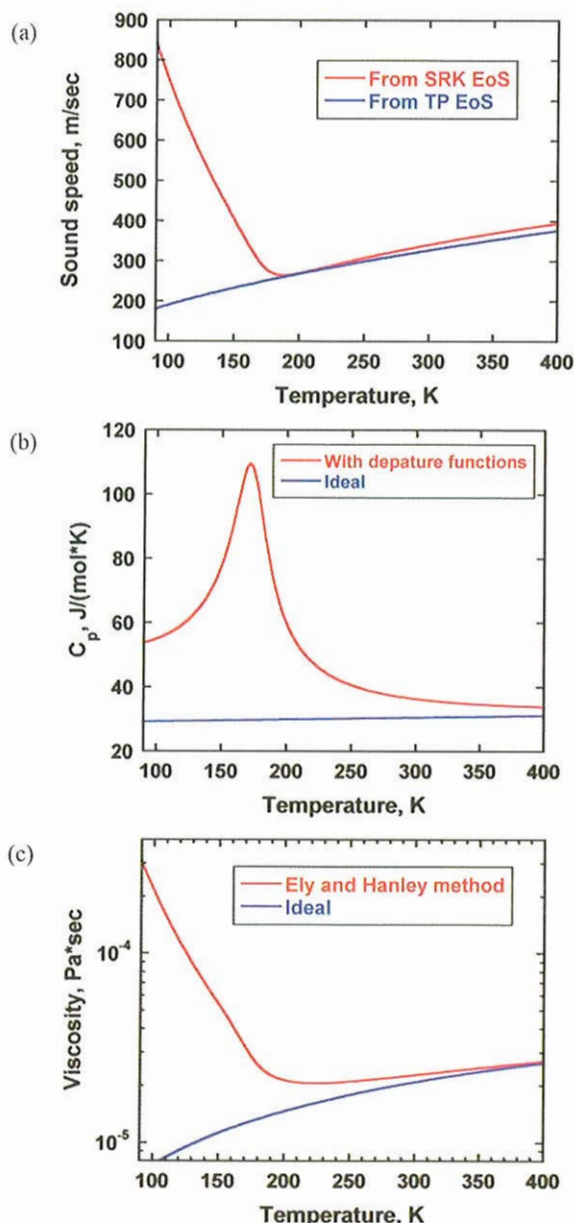


図3 圧力 10MPa における O₂ の物性値 (a) 音速 (b) 定圧モル比熱 (c) 粘性係数

図2に、SRK 状態方程式を用いて計算した、圧力 10MPa における O₂ の密度変化を示す。参考として、理想気体の状態方程式 (TP EoS) を用いて計算した場合と、亜臨界圧力での密度変化も示している (3.6MPa, NIST⁽¹⁸⁾によるデータ)。理想気体の状態方程式を用いた場合、300K 以下の低温領域で密度をかなり小さく評価していることがわかる。また、亜臨界圧力条件では密度の不連続 (相変化) が存在しているのに対し、超臨界圧力では液相と気相 (超臨界流体) との間に密度の不連続は存在しないことがわかる。

音速は SRK 式から直接導出した。また、エンタルピ、モル比熱などの物性値では、departure function を用いて標準状態からのずれを評価した⁽¹⁹⁾。粘性係数・熱伝導係数は、Ely and Hanley による、対応状態原理に基づいた手法によって評価した^(20,21)。拡散係数は、通常の Chapman-Enskog 理論により評価しているが、化学種の数密度は SRK 状態方程式から求めた。

図3に圧力 10MPa における O₂ の物性値の例を示す。参考として、理想状態を仮定して計算した物性値も示している。やはり低温領域では、理想状態との食い違いがかなり大きくなっていることがわかる。

3. 3 計算格子

図4に、噴射ノズル出口近傍の計算格子を示す。計算領域は、LOX/GH₂ 噴射ノズル部と燃焼器部からなる。噴射ノズルの出口付近に形成される薄い火炎を捉えるために、LOX ポスト近傍に計算格子を集中して分布させている。LOX ポスト背後の領域 (0.5 < y < 0.8 mm) には半径方向に 161 点の格子点を配置した。また、LOX ポスト壁面での最小格子幅は 1μm としている。軸方向には格子幅を 2% ずつ増加させながら格子点を分布させている。全格子点数は軸方向、半径方向にそれぞれ 571 × 401 点である。計算は領域分割により並列化し、並列計算は宇宙航空研究開発機構 (JAXA) 総合技術研究本部 (IAT) に設置されている中央 NS システム (CeNSS) 上で 80CPU を用いて行った。並列計算の実効性能は約 50Gflops を実現している。

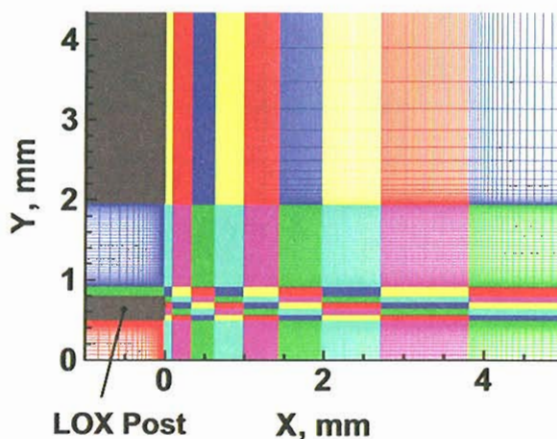


図4 計算格子例

3. 4 境界条件

境界条件は、以下の通りである：LOX/GH₂ の流入条件は管内乱流速度分布を仮定し、人工的な擾乱などは加えない。壁面ではすべりなしで等温壁、非触媒性条件を仮定した。壁面温度は、高温ガスが接触する LOX ポスト壁面で 600K、それ以外では 300K とした。流出境界には無反射条件を用いた⁽²²⁾。

4. 計算結果

本解析では初期条件として、一次元対向流拡散火炎の計算から得られた温度・化学種の分布を水素噴流と酸素噴流の間に配置した。計算を開始し、しばらくして安定した状態の火炎が得られた後、実時間にして約 1msec の間、火炎構造の解析を実施した。

図 5 に $t=0.5\text{msec}$ における温度分布を示す。黒の実線は当量比 1 の等値線を示す。火炎端は LOX ポストに付着した状態で保炎されており、水素噴流と酸素噴流は高温燃焼ガスをはさんで完全に分離されている。このような火炎の特徴は Mayer and Tamura⁽⁶⁾による可視化結果、Oefelein and Yang⁽¹⁻³⁾による LES の結果と一致している。火炎温度は H_2/O_2 の断熱火炎温度にほぼ等しい 3800K 弱に達している。水素噴流側では LOX ポスト上端から渦が間欠的に発生している。ここで発生した渦は隣接する渦と合体して、発達しながら下流へ流れていく。下流領域では、発達した渦によって火炎が引き伸ばされ火炎が非常に薄くなっているが、局所的な消炎によって分断されることはなく、安定して火炎が維持されている。

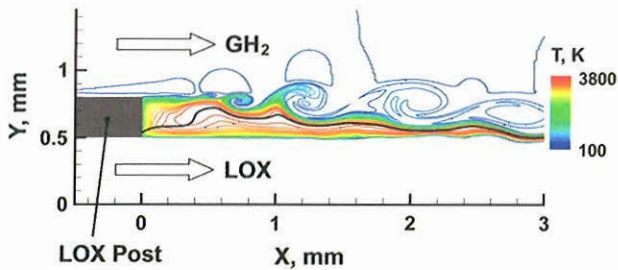


図 5 温度分布 ($t=0.5\text{msec}$, 黒の実線は当量比 1 の等値線を示す)

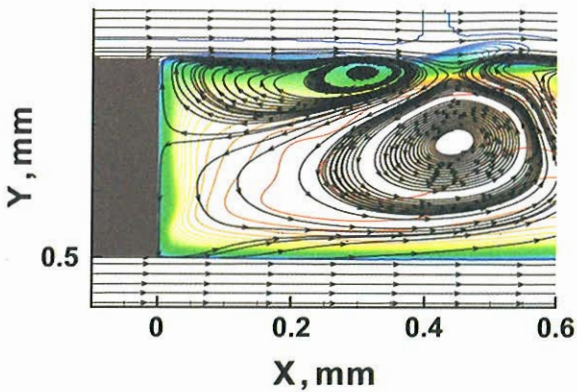


図 6 LOX ポスト近傍での温度分布および瞬間流線 ($t=0.5\text{msec}$)

図 6 に同じ時間の LOX ポスト近傍における温度分布および瞬間流線を示す。LOX ポストの背後には循環領域が存在していることがわかる。この循環領域の存在により流速が低下することで火炎端が下流に流されることがなく、LOX ポストに付着した状態で安定した燃焼を維持している。

図 7 に H_2 , O_2 , OH , H_2O の質量分率分布を示す。ここでも、当量比 1 の等値線を黒の実線で示してある。OH ラジカル分布の端も LOX ポストにほぼ付着しており、燃料 (H_2) と酸化剤 (O_2) は完全に分離され、拡散火炎が形成されている。下流領域において渦によって火炎が引き伸ばされている場所では、OH ラジカルの分布も非常に薄くなっていることがわかる。水素噴流は、発達した渦によって燃焼生成物 (H_2O) と混合しながら下流へ流れていくのに対し、

酸素噴流はほとんど混合せずに流れていく。また LOX ポスト近傍では、 H_2O が部分的に循環している様子がわかる。

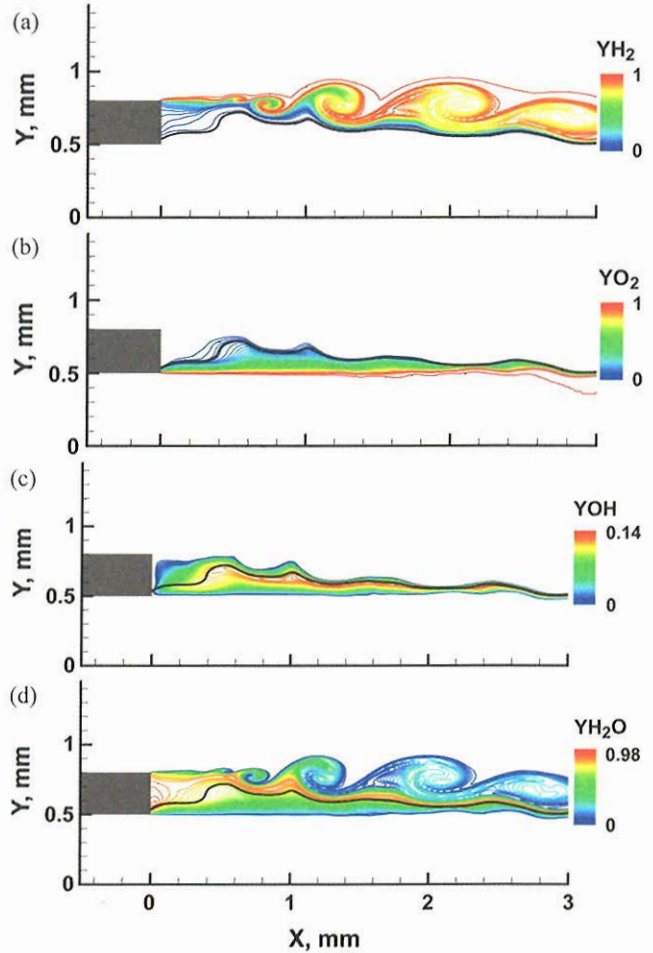


図 7 化学種の質量分率分布 (a) H_2 (b) O_2 (c) OH (d) H_2O ($t=0.5\text{msec}$, 黒の実線は当量比 1 の等値線を示す)

図 8 に $x=2\text{mm}$ における火炎の局所構造を示す。化学種の分布から拡散火炎が形成されていることがわかる。火炎温度は約 3700K に達している。この場所では火炎が渦によって引き伸ばされており、OH ラジカル分布の厚さは非常に薄く、約 0.06mm 程度である。水素噴流側で H_2 と H_2O が渦により混合されている様子がわかる。

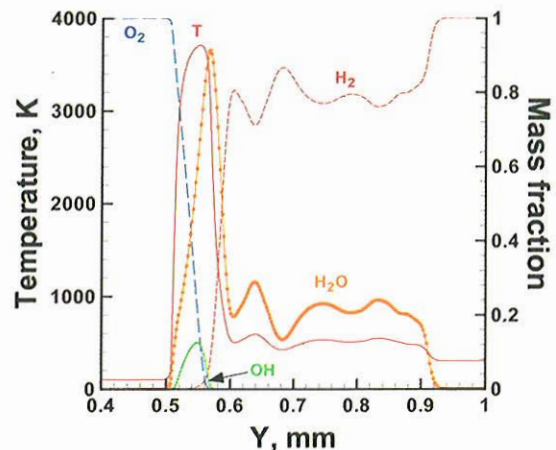


図 8 火炎の局所構造 ($x=2.0\text{mm}$)

図9に化学反応による発熱率分布を示す。化学反応は当量比1の等値線に沿って生じていることがわかる。下流領域では渦によって火炎が引き伸ばされ、非常に高い発熱が生じている。LOXポスト付近の循環領域と比較して、下流領域での発熱率は10~100倍程度高くなっていることがわかる。

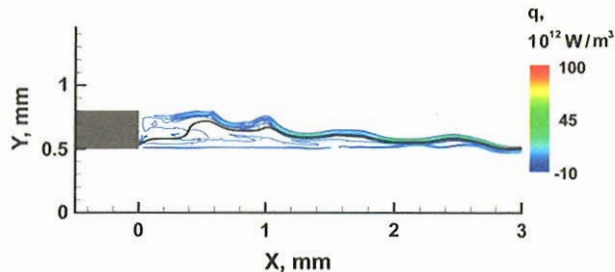


図9 発熱率分布 ($t=0.5\text{msec}$, 黒の実線は当量比1の等値線を示す)

図10に $t=0.5\text{msec}$ における渦度分布、さらに、時系列データから得られた半径方向速度の時間変動のスペクトル分布を示す。速度の変動は図中の3箇所で見測した。各観測位置における変動のピーク周波数は、それぞれ450, 147, 97.7kHzであった。ピーク周波数の値は下流へいくにしたがって減少し、最終的には約100kHzに近づいていく。ピーク周波数に対応するストローハル数は、それぞれ0.45, 0.147, 0.097である。ストローハル数はLOXポストの厚さ(0.3mm)と水素噴流の平均流速(300m/sec)によって定義した。Weeらによる、バックステップ流れに対する二次元シミュレーション⁽²³⁾の結果によると、変動ピークのストローハル数は下流へいくにしたがって減少していき、 $O(0.1)$ 程度に収束していくことが報告されている。本解析によって得られた結果も同様で、流れ場がバックステップ流れと類似した構造になっていることがわかる。

5. まとめ

ロケットエンジン燃焼器の基本要素である同軸型噴射器を模擬して、超臨界圧力下でのLOX/GH₂燃焼シミュレーションを行った。本解析では、火炎モデルを用いず、高解像度の計算格子を用いて詳細反応機構を解くことにより火炎を直接とらえることに成功した。シミュレーションの結果から以下のような火炎の様子が明らかになった。

- (1) 火炎端はLOXポストの下端に付着しており、火炎形態はほぼ完全に拡散火炎である。下流領域では渦により火炎が引き伸ばされるものの、局所的な消炎による火炎の分断は観測されなかった。
- (2) LOXポスト近傍には循環領域が存在しており、流速が低下することで火炎端が下流に流されることなく、LOXポストに付着した状態で安定した燃焼を維持している。
- (3) 渦によって火炎が引き伸ばされている領域では強い発熱が生じている。引き伸ばされた火炎の厚さは非常に薄く0.1mm以下である。
- (4) 水素噴流側のLOXポスト上端からは渦が間欠的に生成される。流れの構造はバックステップ流れと類似した構造になっている。

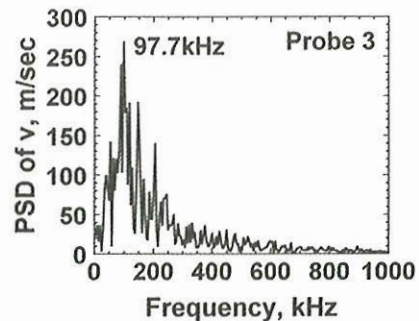
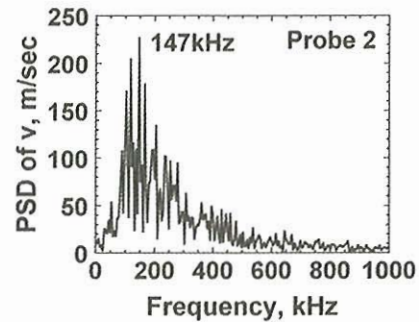
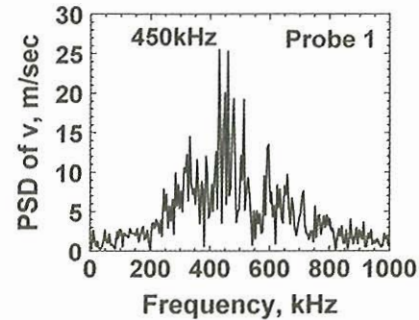
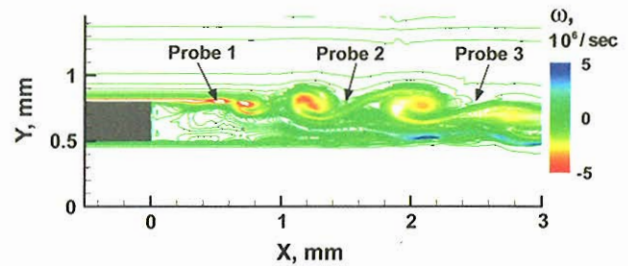


図10 渦度分布 ($t=0.5\text{msec}$)、時系列データから得られた半径方向速度の時間変動のスペクトル分布

参考文献

- 1) Oefelein, J. C., and Yang, V., *J Propul. Power*, 14 (1998) 843-857.
- 2) Oefelein, J. C., AIAA Paper 2003-0479.
- 3) Oefelein, J. C., *Proc. of Combust. Inst.*, 30 (2005) 2929-2937.
- 4) Zong, N., et al., *Phys. Fluids*, 16 (2004) 4248-4261.
- 5) Zong, N. and Yang, V., *Proc. of Combust. Inst.*, 31 (2006).
- 6) Mayer, W., and Tamura, H., *J Propul. Power*, 12 (1996) 1137-1147.
- 7) Mayer, M., et al., *J Propul. Power*, 16 (2000) 823-828.
- 8) Mayer, W., et al., *J Propul. Power*, 17 (2001) 794-799.
- 9) Candel, S., et al., *J Propul. Power*, 14 (1998) 826-834.
- 10) Singla, G., et al., *Combust. Flame*, 144 (2006) 151-169.
- 11) Kendrick, D., et al., *Combust. Flame*, 118 (1999) 327-339.

- 12) Mizobuchi, Y., et al., *Proc. of Combust. Inst.*, 29 (2002) 2009-2015.
- 13) Mizobuchi, Y., et al., *Proc. of Combust. Inst.*, 30 (2005) 611-619.
- 14) Matsuyama, S., et al., AIAA Paper 2006-761.
- 15) Petersen, E. L., and Hanson, R. K., *J Propul. Power*, 15 (1999) 591-600.
- 16) Wada, Y. and Liou, M. S., NASA TM-106452, 1994.
- 17) Mizobuchi, Y., and Ogawa, S., AIAA Paper 2000-0184.
- 18) Polling, B. E., and Prausnitz, J. M., and O'Connell, J. P., *The Properties of Gases and Liquids*, McGraw-Hill, 5th ed., 2001.
- 19) Thermophysical Properties of Fluid Systems,
<http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>.
- 20) Ely, J. F., and Hanley, H. J. M., *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 20 (1981) 323-332.
- 21) Ely, J. F., and Hanley, H. J. M., *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 22 (1981) 90-97.
- 22) Poinot, T. J., and Lele, S. K., *J Comput. Phys.*, 101 (1992) 104-129.
- 23) Wee, D., et al., *Phys. Fluids*, 16 (2004) 3361-3373.