

水素噴流の着火の計算（乱れの構造）

電総研	高山文雄	( Fumio Takayama )
福井大	滝 史郎	( Shiro Takai )
名大	藤原俊隆	( Toshi Fujiwara )
名大	林 光一	( A.Kouichi Hayashi )
電機大	桜井 明	( Akira Sakurai )

1. はじめに

水素を高温の酸化剤中に噴出させた場合の乱れによる非定常混合および着火現象を、数値的に解析することを目的とする。数値モデルは、現象が乱流であることから、第1段階として工学的によく用いられる  $k-\epsilon$  2方程式モデルを考慮した、圧縮性の Navier-Stokes (N-S) 方程式を用いた。解法は、非定常な現象で急激な化学反応を含むことから、2次の陽的 MacCormack 法と FCT スムーズイング法<sup>1)</sup>によった。初期、境界条件は、実験<sup>2), 3)</sup>に対応したものを扱い、化学反応は簡単な1段階反応を考慮した。解析は、数値モデルの有効性を調べるために、実験結果との比較、水素噴流の乱れの構造、乱れによ

る非定常混合と着火現象などについて行なった。

## 2. 基礎方程式

k-ε 乱流モデルを考慮した軸対称圧縮性N-S方程式は、

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial rF}{\partial r} + \frac{\partial G}{\partial z} + H = 0 \quad (1)$$

で与えられ、ここで f、F、G、Hは、それぞれ

$$f = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \\ \rho Y_j \\ \rho k \\ \rho \varepsilon \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv - \sigma_{rz} \\ \rho v^2 - \sigma_{rr} \\ \rho(e + \frac{p}{\rho})v - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial r} - \sigma_{rr}v - \sigma_{rz}u \\ \rho Y_j v - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_c} \frac{\partial Y_i}{\partial r} \\ \rho kv - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial r} \\ \rho \varepsilon v - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \end{pmatrix}$$

$$G = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p - \sigma_{zz} \\ \rho uv - \sigma_{rz} \\ \rho(e + \frac{p}{\rho})u - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial z} - \sigma_{rz}v - \sigma_{zz}u \\ \rho Y_j u - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_c} \frac{\partial Y_i}{\partial z} \\ \rho ku - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial z} \\ \rho \varepsilon u - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad H = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\sigma_{\phi\phi}}{r} \\ 0 \\ (\dot{\rho}_j)_c \\ \rho(G_{kt} - \varepsilon) \\ \rho \frac{\varepsilon}{k} (C_1 G_{kt} - C_2 \varepsilon) \end{pmatrix}$$

$$G_{kt} = \frac{\mu_T}{\rho} \left\{ 2 \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{v}{r} \right)^2 \right] + \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial r} \right)^2 \right\}$$

である。ρ、p、u、v、e、Y<sub>j</sub>、k、ε、hは、それぞれ密度、圧力、軸方向の速度、半径方向の速度、比エネルギー、j種の密度分率、乱流エネルギー、乱流エネルギー消散率、エンタルピーを表わす。応力は、

$$\sigma_{rz} = \mu_{eff} \left( \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right), \quad \sigma_{rr} = 2\mu_{eff} \frac{\partial v}{\partial r}$$

$$\sigma_{zz} = 2\mu_{eff} \frac{\partial u}{\partial z}, \quad \sigma_{\phi\phi} = 2\mu_{eff} \frac{v}{r} \quad (2)$$

有効粘性率  $\mu_{eff}$  は分子粘性率  $\mu$  と渦粘性率  $\mu_T$  の和

$$\mu_{eff} = \mu_T + \mu \quad (3)$$

で表され、理相気体の状態方程式および、比エネルギー  $e$  は

$$p = \rho T R^0 \sum \frac{Y_j}{w_j} \quad (4)$$

$$e = h - \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2}(u^2 + v^2) + k \quad (5)$$

を用いた。ここで、 $T$ 、 $R^0$ 、 $w_j$  は、それぞれ温度、気体定数、 $j$  種の分子量である。(1)式における  $C_1$ 、 $C_2$ 、 $\sigma_h$ 、 $\sigma_c$ 、 $\sigma_k$ 、 $\sigma_\varepsilon$  は経験定数である。

### 3. 化学反応

実際、酸水素の化学反応は、数十に及ぶ素反応によって構成されるが、ここでは計算時間を考慮して、次の1段階反応(4)を用いた。



$q$  は  $H_2O$  の発熱量であり、 $q = 1.67 \times 10^5$  J/mole の値を用いた。

$H_2O$  の生成率  $W$  は、

$$W = \kappa [H_2]^{1/2} [O_2]^{1/2} \text{ mole/m}^3 \quad (7)$$

で与えられ、反応速度定数  $\kappa$  は

$$\kappa = 1.25 \times 10^8 \rho \exp(-9850/T) \quad 1/s \quad (8)$$

であり、 $[ ]$  は濃度 (mole/m<sup>3</sup>) である。

#### 4. 初期、境界条件

反応器は、基本的には実験<sup>2)</sup>に対応するものを用いた。左端の中央に直径1mmの噴出口があり、右端は開放されているとした(図1)。噴出させる水素は、貯気槽に300k、6atmで満たされ、それが音速ノズルを通り、円筒形の反応器内に噴出するとした。そのときの水素の噴出条件は等エントロピーの計算から、温度、噴出速度は250k、1202m/sであり、これがつねに(計算実行中)噴出しているとした。初期条件として、円筒形の反応器内には酸素と窒素からなる空気(1atm、0m/s)が満たされているとし、その初期温度 $T_a=300$ 、1250、1400kそれぞれについて計算を行った。

反応器の側壁の条件は、実際には粘性流体を扱っているので粘着条件を用いる必要があるが、ここで解析する流れは壁側は重要ではないので、ここでは鏡面反射条件を用いた。

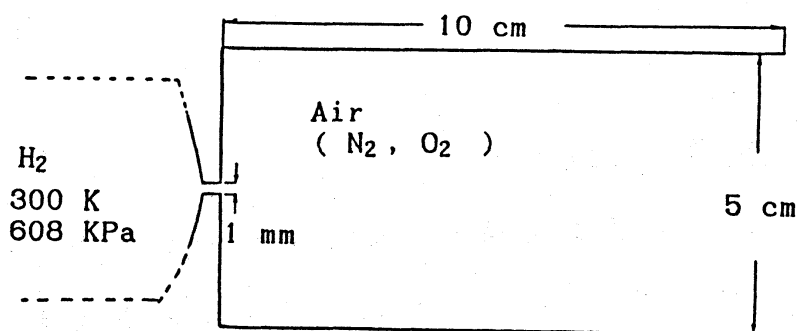


図1 円筒形の反応器

#### 5. 計算スキーム

計算スキームとしては、現象が非定常な流れであり、高速な圧縮波が存在するので、このような場合に有効な2次の陽的MacCormack法を用いた。そして、さらに化学反応による大きな発熱現象に高速で起きる非線形不安定性があり、これを防ぐために、FCTスムージング法を併用した。

時間分割法を用いた陽的MacCormack法は、

(1) 式をz方向、r方向の式に分割する。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial rF}{\partial r} + \Phi = 0 \quad (9)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial z} + \Psi = 0 \quad (10)$$

Lは(9)式、Mは(10)式を基にしたMacCormack-FCT演算子とする。t=(n+1)Δtにおける物理量はnΔtの値を基にして、

$$f^{n+1} = L_{\frac{\Delta t}{2}} M_{\Delta t} L_{\frac{\Delta t}{2}} f^n \quad (11)$$

で与えられる。ここで、Δtは時間刻みである。

計算は、反応器の軸対称性を考慮して上半分を200×50×ツシュで行った。

## 6. 結果

### 乱流への遷移（実験との比較）

数値モデルの有効性を実験結果と比較し調べた。圧縮性N-S方程式で考慮したk-ε2方程式モデルは、乱流状態を表す。ここでの噴出水素による流れの現象は、非定常で層流状態から乱流状態への遷移が存在すると考えられる。われわれは、

簡単に乱流遷移を表すためにパラメータ  $A_T$  を導入して、次のような渦粘性率  $\mu_T$

$$\mu_{T0} = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (12)$$

$$\mu_T = \mu_{T0} [1 - \exp(-A_T \rho k^2 / \varepsilon / \mu)] \quad (13)$$

を用いた。ここで  $C_\mu$  は経験定数で、 $C_\mu = 0.09$  とした。種々の  $A_T$  について計算し水素噴流の位置、および形状に関して実験と比較し、調べた。

図2に  $A_T = 10^{-3}$ 、1.0の場合の密度分布を示す。水素噴流の形状に関しては、 $A_T = 10^{-3}$ の場合、噴流は層流に近い形状であり、一方、 $A_T = 1.0$ の場合に対応する実験のシュリーレン写真<sup>2)</sup>(図3)とよく一致している。

また、水素噴流の時間に対する到達距離の関係を図4に示す。種々の  $A_T$  の値に対し  $t = 20 \mu s - 150 \mu s$  までは、同様な傾向を示すが、 $t = 150 \mu s$  以上になると  $A_T \geq 10^{-1}$  の場合が実験の結果と近い傾向を示すことがわかる。この結果、 $\mu_T \approx \mu_{T0}$  で実験に近い様相を示すことから、流れは始めから十分乱流状態にあると考えられる。このことから、以下の計算においては  $A_T = \infty$  とおき、したがって、渦粘性  $\mu_T$  を

$$\mu_T = \mu_{T0} = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (14)$$

として計算を進めた。

図5に、時間に対する前面衝撃波および水素噴流の中心軸

上での位置を実験と比較して示す。衝撃波は、実験結果とよく一致しており、また水素噴流は、 $t=900\mu\text{s}$ のオーダーまで実験とよく一致していることがわかる。したがって、この数値モデルは十分実験に対応したものであると考えられる。

#### 水素噴流の構造

図6に速度分布を示す。噴流の中心部は速度が大きく、半径方向に小さくなっていることがわかる。また噴出口近くの拡大図(A)を見ると、再循環の流れがあり、空気も噴出流によって運ばれていることが考えられる。一方、噴流のふくらんだ部分の拡大図(B)は、大きな渦の構造を持っていることを示している。

さらに非定常な乱れの様子をストリークラインにより調べた。図7に $Ta=300k$ に対するものを示す。マーカーは噴出口の最近接メッシュ半径方向に5個置いて、ほぼ5サイクル(≒ $2.02\mu\text{s}$ )毎に発生させたものである。5個のマーカーを発生させたにもかかわらず、識別可能は2個のラインであり、これは噴出口に近くの再循環の流れにより、噴流の中心部へ流されたためである。また、マーカーは噴流の内部で運ばれ、先頭部で半径方向に大きく渦巻き、その渦の中心部はマーカーがたまり、乱れが大きいことが考えられる。時間が経過し、噴流が進むにつれ、その渦も主流方向と半径方向に拡がってい

ることが見られる。

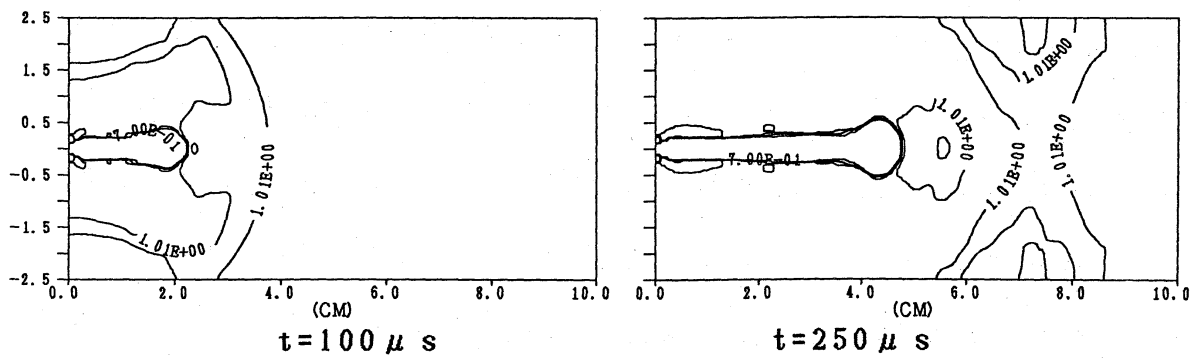
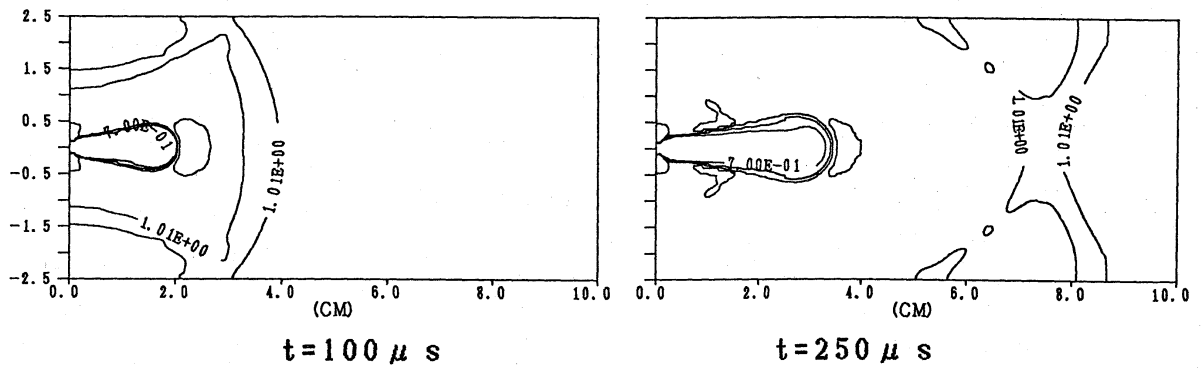
### 着火の解析

初期空気温度  $T_a=1250$ 、 $1400\text{k}$  に対する着火時間  $t_d$  は、それぞれ  $t_d \approx 130$ 、 $200\ \mu\text{s}$  で対応する実験結果<sup>3)</sup>とほぼ一致した(図8)。初期空気温度  $T_a=1400\text{k}$  の場合の種々の時間に対する温度分布と  $\text{H}_2\text{O}$  のモル分率 ( $X_{\text{H}_2\text{O}}$ ) 分布を図9に示す。 $t=141\ \mu\text{s}$  で温度で  $T/T_a \geq 1.5$  ある高温域が現れ、時間の経過とともにそれが噴流の下流と上流域に発展し、さらに時間が進むと高温域が噴流を包むようになる。また、 $X_{\text{H}_2\text{O}} \geq 0.24$  以上の生成された  $\text{H}_2\text{O}$  の領域は、高温域に対応しており、したがって高温域では燃焼が起こっていると考えられる。燃焼域の層は、薄く、拡散燃焼の様相を呈している。

着火が起こる場合に対する乱れの構造を調べた。図10に図8に対するストリークラインを示す。マーカーは、 $T_a=300\text{k}$  の場合(図7)と同様に、噴流の流れによって、先頭部まで運ばれ、そこで半径方向に大きく渦巻いている。しかしながら、 $T_a=300\text{k}$  の場合と比較して、渦の大きさは、時間とともに大きく半径方向に拡がっている。これは、空気の密度が  $T_a=300\text{k}$  よりも  $T_a=1400\text{k}$  のほうが小さく流体が流れやすいことから理解できる。ストリークラインと温度分布を比較してみると、 $t=141\ \mu\text{s}$  で高温域は、渦巻いている部分の噴出口側にあるが、



時間が経過し、 $t=202\mu\text{s}$ では渦内部の乱れている領域は、高温域に入っていることがわかる。したがって、この乱れた部分では、 $\text{H}_2$ と $\text{O}_2$ が乱流拡散により激しく混合し燃焼するものと考えられる。その傾向は時間が経過しても続いていることがわかった。

(A)  $A_T=10^{-3}$ (B)  $A_T=1.0$ 図2 密度分布 ( $T_a=300\text{k}$ )

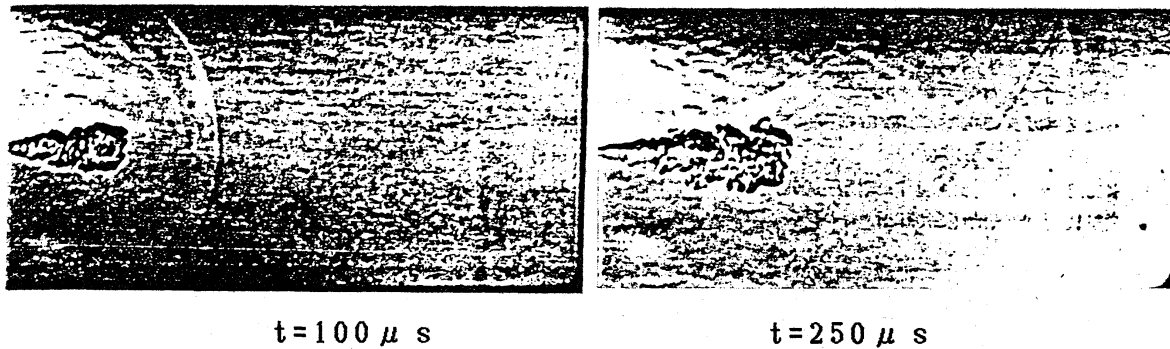


図3 シュリーレン写真（鈴木、足立：文献2による）

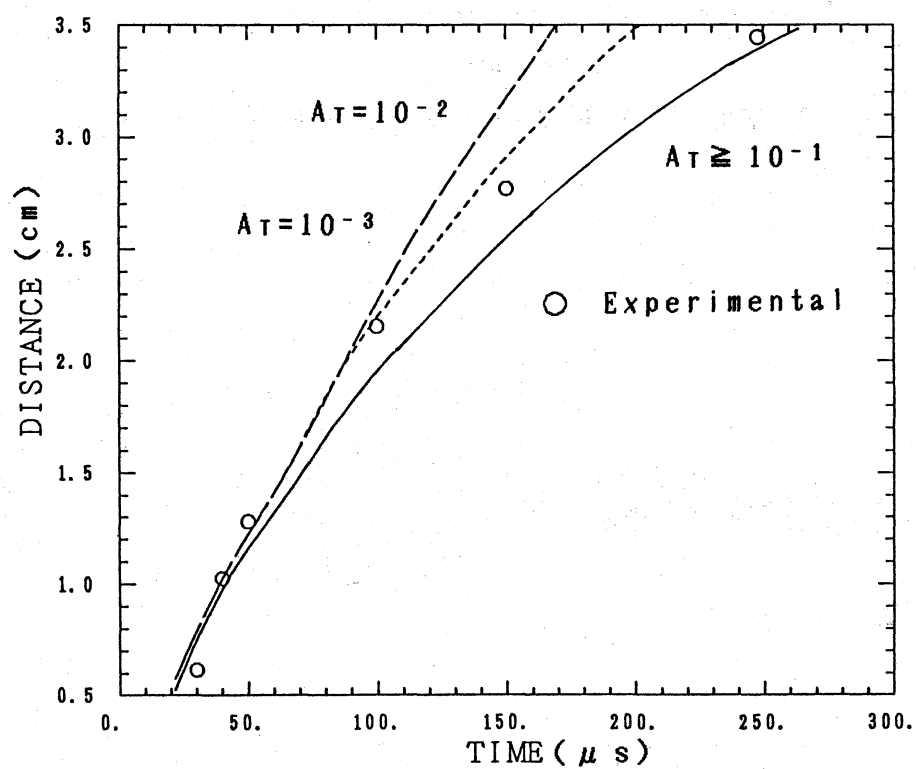


図4  $A_T$ の値に対する水素噴流の到達距離 ( $Ta=300k$ )

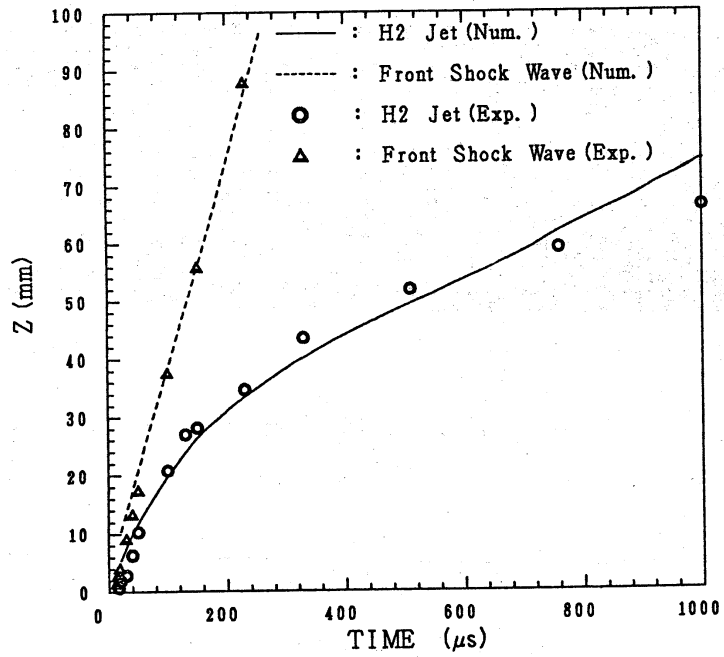
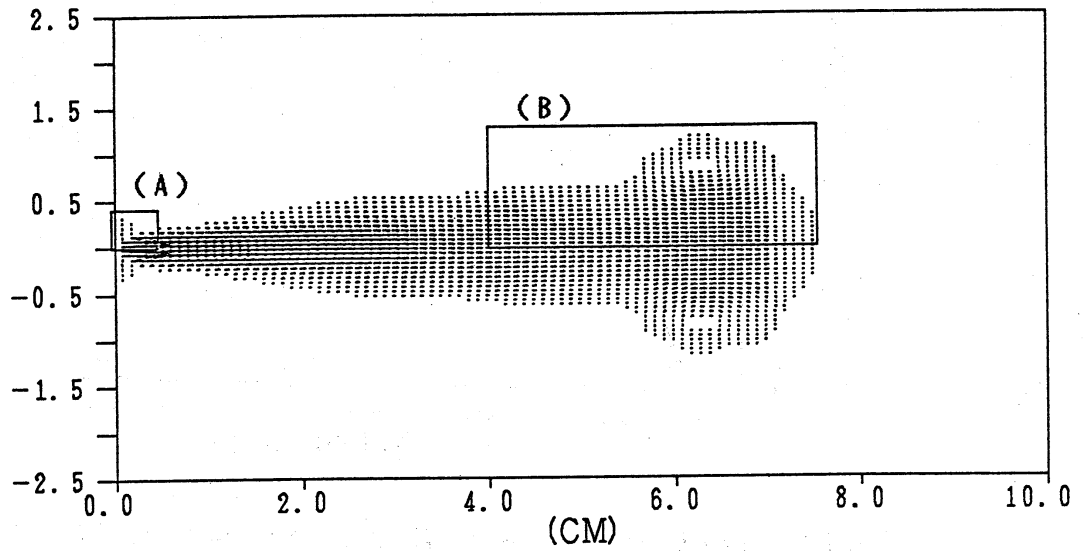
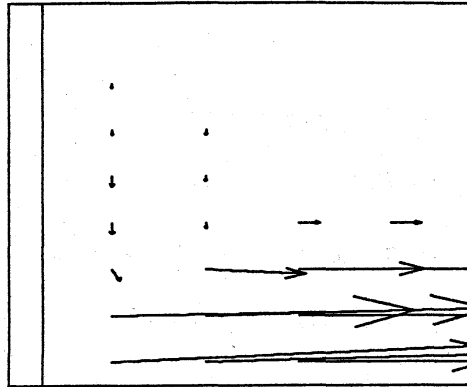


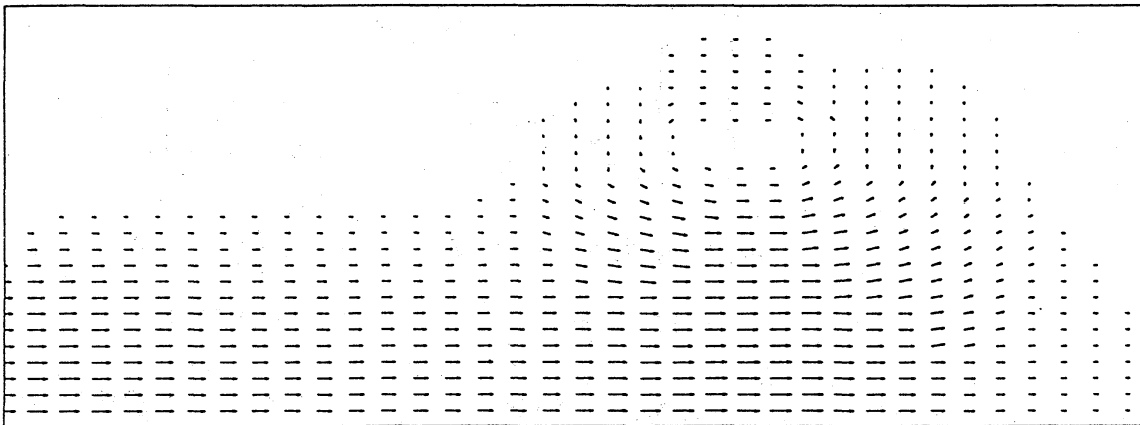
図5 前面衝撃波と水素噴流の時間発展 (Ta=300k)



速度分布 (continue)



(A) 噴出口近傍の拡大図



(B) 水素噴流先頭部の拡大図

図6 速度分布 ( $T_a=300\text{k}$ ,  $t=966\ \mu\text{s}$ )

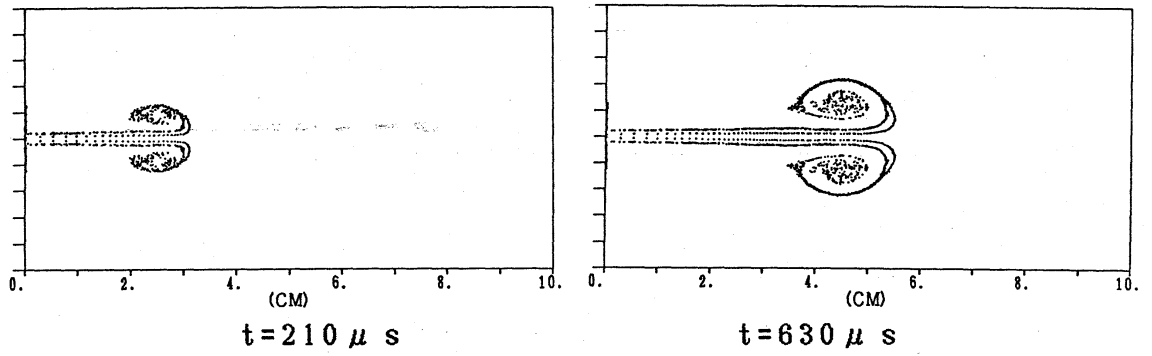


図7 ストリークライン ( $T_a=300k$ )

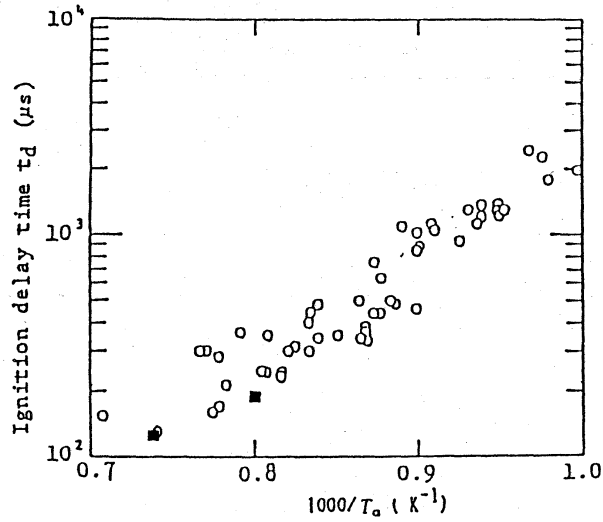
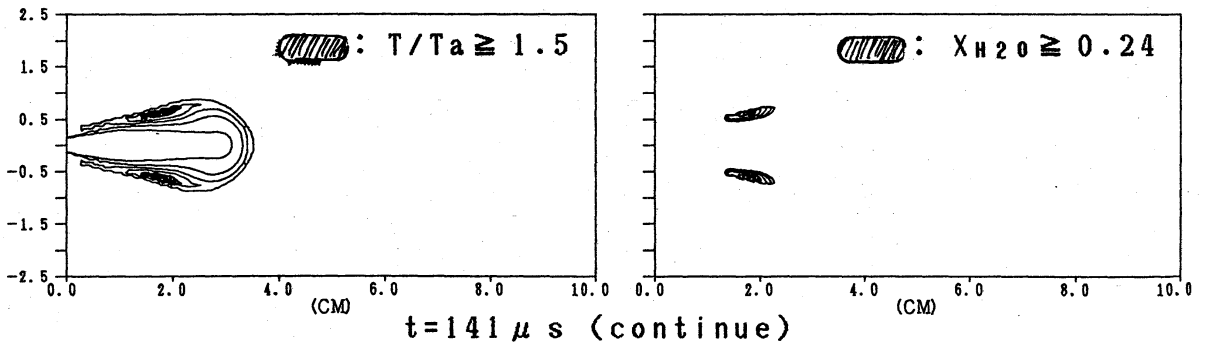


図8 着火時間 (■ : 計算、○ : 実験)

温度分布

$X_{H_2O}$ 分布



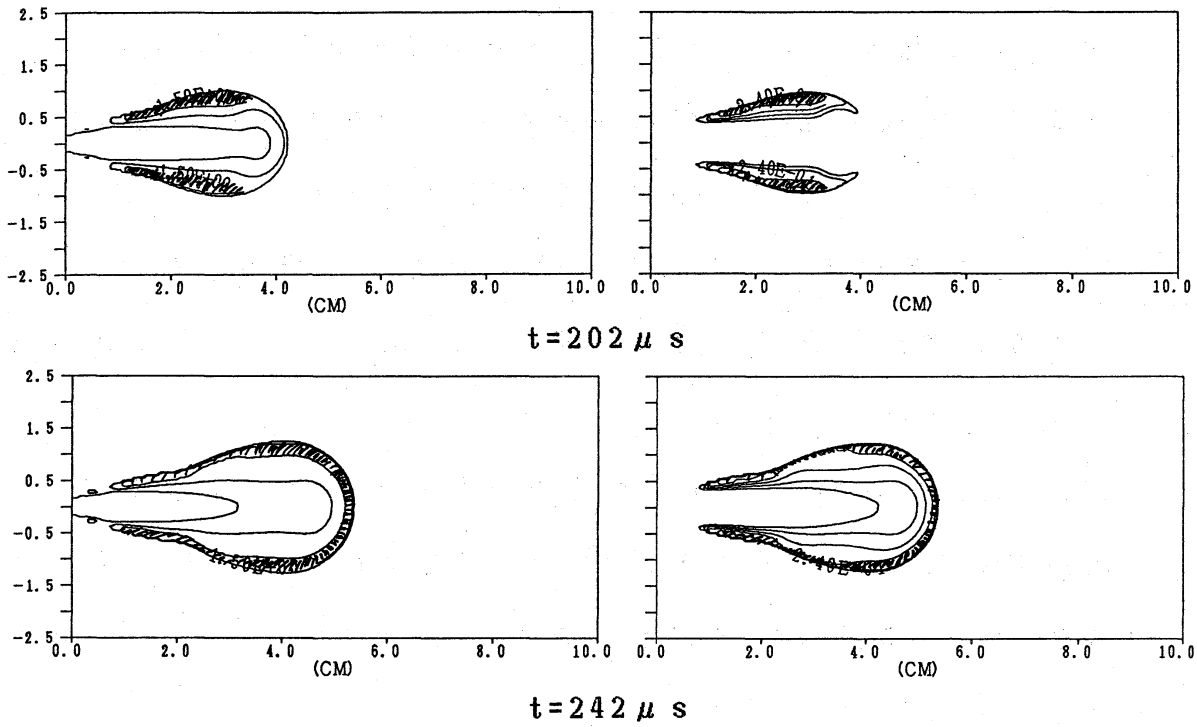


図9 温度分布とH<sub>2</sub>Oモル分率分布 (Ta=1400k)

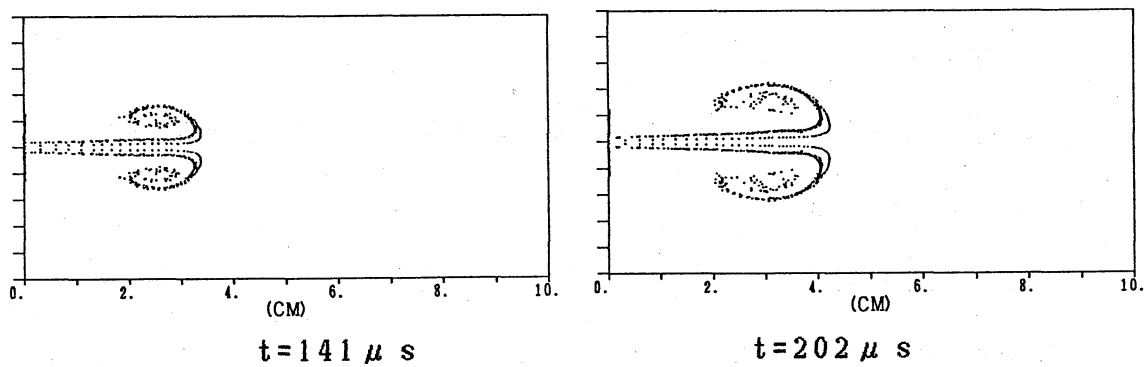


図10 ストリークライン (Ta=1400k)

## 7. 結論

- (1)  $k-\epsilon$  乱流モデルを考慮した数値モデルによる結果と、対応する実験結果は、噴流の形状およびその時間発展に関してよく一致し、モデルの有効性が確かめられた。
- (2) 水素噴出流は、噴出口に強い再循環、噴流の先端部に大きな渦構造がある。そしてその内部は乱れていることが明らかになった。
- (3) 高温の酸化剤への水素噴出現象について、着火燃焼の様相がシュミレートできた。また、燃焼域では水素と酸化剤の乱れによる激しい非定常混合が起こっていることが認められた。

## 参考文献

1. Takayama, F., et al.: Progress in AIAA Series, 1986  
(in print).
2. 鈴木、足立: セコム科学技術振興財団研究成果報告書  
pp.55-61, 1984.
3. 足立、鈴木: セコム科学技術振興財団研究成果報告書  
pp.62-66, 1984.
4. Korobeinikov, V.T., et al.: Astronautica Acta, Vol.17,  
pp.529-538(1972).