

SRK 状態方程式に基づく対向流水素拡散火炎の数値解析

Numerical Analysis of Counter-Flow Hydrogen Diffusion Flame based on SRK Equation of State

- 溝渕 泰寛, JAXA 研開本部 数値解析 G, 東京都調布市深大寺東町 7-44-1, mizo@chofu.jaxa.jp
 平川 香林, アドバンスソフト株式会社, 東京都港区赤坂 1-9-20, hirakawa@advancesoft.jp
 Yasuhiro Mizobuchi, JAXA/ARD Numerical Simulation G, Jindaiji-higashi 7-44-1, Chofu, Tokyo
 Karin Hirakawa, AdvancSoft Corporation, 1-9-20 Akasaka, Minato-ku, Tokyo

The structures of 1-D counter-flow hydrogen/oxygen diffusion flames at 100atm are studied. The 1-D counter-flow flame code OPPDIF is modified to take into account the effects of extremely high pressure. The Soave-Redlich-Kwon (SRK) equation of state is used and the formations of enthalpy and specific heat are modified accordingly, and the transport properties are modified. The results show that the effects of SRK equation of state on the flame internal structure are not so large under the condition investigated in this study, and rather the modification of transport properties has a significant impact on the flame structure and overall flame properties such as heat release rate.

1. はじめに

大出力の化学ロケットエンジン燃焼器内では燃料及び酸化剤の臨界圧力を超えるような高圧での燃焼が起こっている。そのような燃焼流れのモデル化として、気液界面が存在しない单相流的に扱う考え方がある。この仮定が正しいとすると問題は相当に単純化され従来の单相の CFD 技術の適用が可能となり、多くの場合、拡散火炎の計算を行うことになる。しかし通常の CFD 技術が適用できるとしても問題は容易ではない。100 気圧の環境下での反応速度は常圧での速度に比べ 10000 倍程度速いと考えられ、反応帯の厚さは常圧の火炎と比較して 1/10 程度となると予測される。常圧の火炎の解析においても火炎の内部構造を解像することは計算機能力的に容易ではない現状で、更に一桁以上の解像度を要する計算は実用計算には供しえない。この問題を解決し得るシンプルで明解な手法としては Laminar Flamelet の適用が考えられる。流体のスケールと化学反応のスケールを完全に分離するため計算負荷が軽減されるためである。実計算に適用していくためには適用範囲、精度などを確認しておくことが望まれるが、そのためには火炎の内部構造を理解することが必要である。本報では、対向流一次元火炎解析コードに高圧物性を組み込み、高圧条件での一次元拡散火炎の構造について調べた結果を報告する。

2. 対向流拡散火炎

今回取り扱う対向流拡散火炎は Fig.1 に示すように燃料と酸化剤を向かい合わせて噴射し、その間に形成される 1 次元的な拡散火炎である。燃料は水素、酸化剤は酸素とした。解析コードは対向流一次元火炎解析コード OPPDIF⁽¹⁾ に次節のとおり高圧流体物性を加えたものを用いる。

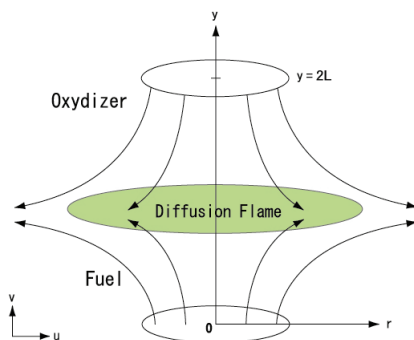


Fig.1: Counter-flow diffusion flame.

3. 高圧物性の導入

高圧での燃焼反応を取り扱うために、反応モデルとしては Li らの反応モデル⁽²⁾を用い 8 化学種 (H_2 , O_2 , OH , H_2O , H , O , H_2O_2 , HO_2) 21 反応を取り扱った。状態方程式、エンタルピ、比熱、輸送係数には以下の修正を施した。

・状態方程式

分子間力を考慮する状態方程式としては Soave-Redlich-Kwon (SRK) 状態方程式⁽³⁾を採用した、

$$p = \frac{R_u T}{M_m V - b} - \frac{a}{M_m V (M_m V + b)} \quad (1)$$

ここに M_m は混合気分子量、 V は比体積 ($1/\rho$) であり、 a, b は化学種の臨界温度・圧力などから求められる変数⁽⁴⁾である。臨界温度および圧力については Ribert ら⁽⁵⁾が用いた値を用いた。

・エンタルピおよび比熱

状態方程式が修正されることによりエンタルピおよび比熱にも実在気体の効果を取り入れる必要がある。それらの理想気体からの偏倚分は熱力学の Maxwell の関係式より以下の通り導くことができる。

$$\Delta H(T) = pV - \frac{R_u}{M_m} T + \frac{1}{M_m b} \left(T \frac{\partial a}{\partial T} - a \right) \ln \left[\frac{M_m V + b}{M_m V} \right] \quad (2)$$

$$\Delta C_p(T) = p \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p - \frac{R_u}{M_m} + \frac{T}{M_m b} \frac{\partial^2 a}{\partial T^2} \ln \left[\frac{M_m V + b}{M_m V} \right] - \left[T \frac{\partial a}{\partial T} - a \right] \frac{1}{M_m V (M_m V + b)} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \quad (3)$$

式(3)中の V および a の温度微分項についての表記は省略する。

・輸送係数

混合気の粘性係数および熱伝導係数については Chung らの方法⁽⁶⁾により、拡散係数については Takahashi の方法⁽⁷⁾が多く用いられるが、ここでは簡単のため、拡散係数を求める際に用いる数密度に SRK 状態方程式から導かれる数密度を用いることで代用した。したがって本計算では密度および拡散係数に SRK 状態方程式使用の効果が反映される。

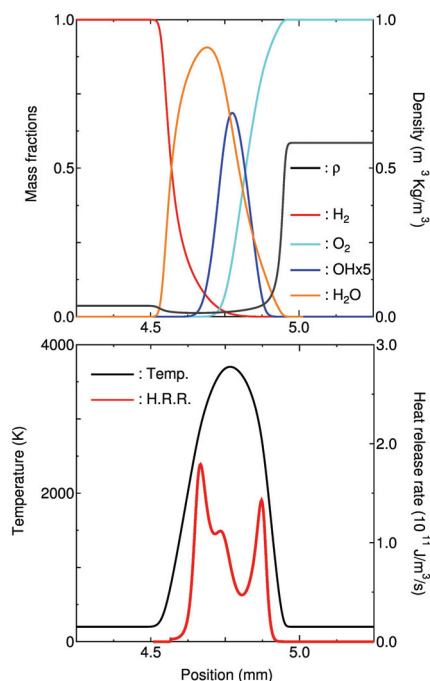


Fig.2: Internal flame structure in Case 1.

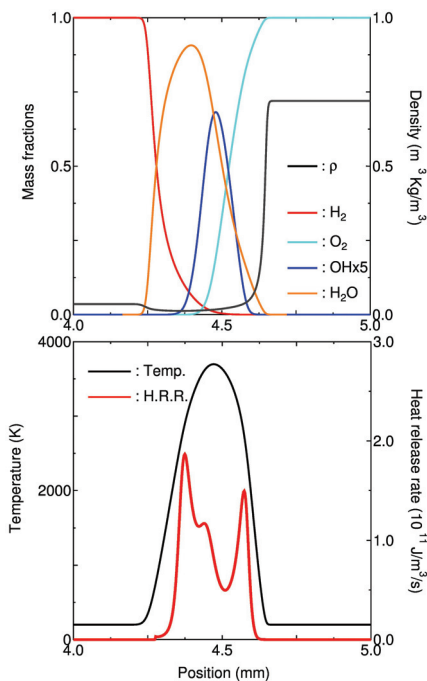


Fig.3: Internal flame structure in Case 2.

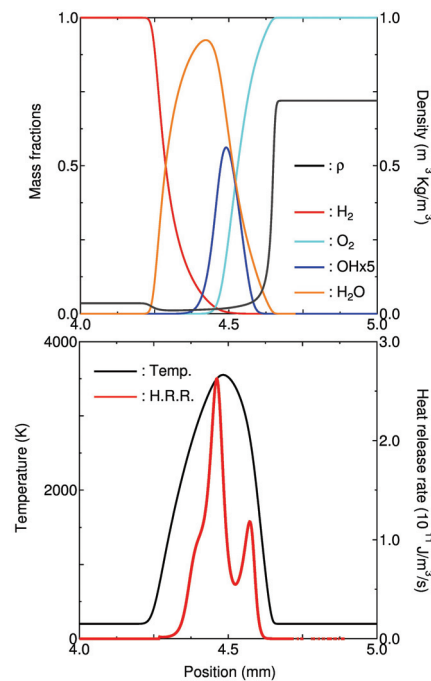


Fig.4: Internal flame structure in Case 3.

4. 計算結果

対向する噴流間の距離 (Fig.1 中では 2L) を 1cm とした。噴射される水素および酸素の温度および圧力は 200K, 100atm で同一とし、速度は水素側で 6.25m/s, 酸素側で 1.75m/s とした。状態方程式の効果と輸送係数の効果をみるために、Case1: 状態方程式、輸送係数とも常圧特性, Case2: 状態方程式のみ SRK 方程式に変更, Case3: 状態方程式と輸送係数とも高圧特性, の 3 ケースについて計算を行った。

Case1~3 の火炎内部構造をそれぞれ Fig.2~4 に示す。それぞれ上図に密度と主要化学種質量分率, 下図に温度と発熱率の分布を示している。Fig.2 と Fig.3 を比較すると、SRK 方程式を用いることにより特に酸素側で密度が大きくなっていることが分かる。しかし燃焼が起こり高温となった領域での内部構造には殆ど差異が認められない。総発熱量では Case2 の一方が約 2% 大きくなったが酸素側の運動量が大きいためにより火炎近傍での歪速度が大きくなったことが要因と考えられる。一方、輸送特性にも修正を加えた Case3 (Fig.4) では火炎内部構造が大きく変化していることが分かる。Fig.5 では酸素側低温部における酸素の拡散係数を Case1 と Case3 とで比較しているが、火炎低温部において拡散係数に大きな違いがあることが分かる。このような輸送係数の変化が反応帯への燃料及び酸化剤の供給量を変化させ、火炎構造を大きく変化させていると考えられる。

5. まとめ

SRK 状態方程式と高圧用に修正した輸送特性を用いて水素・酸素対向流拡散火炎の内部構造を解析した。その結果、本報で用いた条件においては、状態方程式そのものではなく、輸送係数に対する火炎構造の感度が高いことが分かった。超臨界圧極低温の燃料酸化剤の燃焼の予測のためには特に低温での輸送係数の評価が重要な課題ということを示唆している。

今後は別の条件での解析および歪速度に対する火炎応答の解析を行う予定である。

参考文献

- (1) Lutz, A. E., Kee, R. J., Grcar, J. F., Rupley, F. M., Sandia Report, SAND96-8243.
- (2) Li, J., Zhao, Z., Kazakov, A., Dryer, F.L., Int. J. Chem. Kinet. 36 (2004) 566–575.
- (3) Soave, G., Chem. Eng. Sci. 27 (1972) 1197.
- (4) B.E. Poling, J.M. Prausnitz, J.P. O'Connell, The Properties of Gases and Liquids, fifth ed., McGraw-Hill Int., Singapore, 2001.
- (5) Ribert, G., Zong, N., Yang, V., Pons, L., Darabiha, N., Candel, S., Combust. Flame 154(2008)319-330.
- (6) Chung, T. H., Ajlan, M., Lee, L. L., Starling, K. E., Ind. Chem. Eng. Res. 27 (1988) 671–679.
- (7) Takahashi, S., J. Chem. Eng. Jpn. 7 (1974) 417.

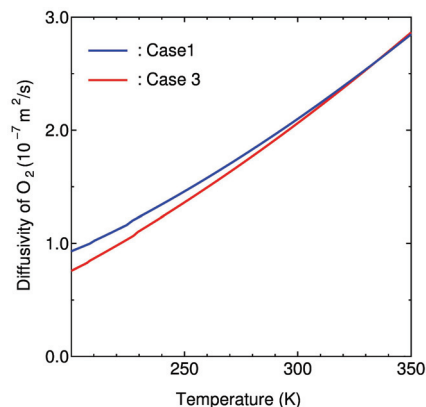


Fig.5: Distributions of O₂ diffusivity at the low temperature side of the flame in Cases 1 and 3.