

スプレー燃焼の数値シミュレーション Numerical Simulation of Spray Combustion

大野洋史, 青学大院, 世田谷区千歳台 6-16-1, ohno@cow.me.aoyama.ac.jp:
林光一, 青学大理工, 世田谷区千歳台 6-16-1, hayashi@mensa.me.aoyama.ac.jp:
宮本武史, 株式会社 ボッシュ オートモーティブ システム, 渋谷区渋谷 3-6-7:
鶴島理史, 新 A.C.E., 茨城県つくば市苅間 2530, ttsuru@olive.ocn.ne.jp:
Hiroshi OHNO, Aoyama Gakuin University, 6-16-1 Chitosedai Setagaya-ku Tokyo Japan
Koichi A. HYASHI, Aoyama Gakuin University, 6-16-1 Chitosedai Setagaya-ku Tokyo Japan
Takeshi MIYAMOTO, Bosch Automotive Systems Corporation, 3-6-7 Shibuya Shibuya-ku Tokyo Japan
Tadashi TSURUSHIMA, NEW.A.C.E. Institute Co. Ltd., 2530 Karima Tsukuba-shi Ibaraki Pref. 305 Japan

Spray combustion is numerically simulated using the Euler equations for the solid and droplet phases assuming a continuous, and the gas phase. Both solid or droplet and gas phases are connected through mass, momentum and energy exchange equations. The equations are integrated simultaneously by a TVD scheme for the convective terms of the both phase. Chemical reactions occur in the gas phase and Arrhenius type reaction rates are employed. we could show the ignition of dust in the high pressure atmosphere.

1. はじめに

現在の地球環境問題やエネルギー問題の解決において、燃焼技術への期待はきわめて大きい。限られた燃料を有効に、しかも環境を汚染させないで燃焼させるには、燃焼過程の精密な制御に基づいた新しい燃焼技術の開発が必要であり、それを支える燃焼学の役割も極めて重要といえる。従来の燃焼学は複雑な燃焼現象の解明が中心であり、現象の観察に基づいた経験的な学問であった。しかし近年の燃焼学の著しい発展により、燃焼現象の物理及び化学過程に対する我々の理解が増し、これらの過程を数学的に記述する事が可能となった。

また、最近のソフトとハード両面における数値計算技術の進歩は素晴らしく、従来は不可能であった複雑な流れの計算が、比較的簡単に計算できるようになった。これに伴って新たに数値実験の概念が導入され、実験や理論解析と並んで、燃焼現象を解明するための有効な研究手段が与えられることになった。

この燃焼科学の最新の成果を新しい燃焼技術の開発に活かすには燃焼過程を正確に記述できる理論的モデルを構築することである。すなわち、このモデルに基づいて個々の燃焼過程を数値計算によって再現して、その正確な予測を可能にする手法を確立する。これによって燃焼機器の設計に携わる多くの燃焼技術者に比較的簡単に、有効な予測手段を与えることになる。それに伴って新しい技術の開発は比較的容易に行われるものと考ええる。

そこで、本研究では噴霧燃焼で見られる気体と液体もしくは固体粉末燃焼で見られる気体と固体の組み合わせである二相流の燃焼について各々の現象に対して簡単に仮定し、質量・運動量・エネルギーの保存式を立てることにより二相流⁽¹⁾モデルとして、数値シミュレーションを行い、二相流の燃焼を解明するための有効な手段となる数値モデルを構築することを目的とする。

2. スプレー燃焼モデル

二相流としての噴霧の燃焼現象を数値計算によって完全にシミュレートしようとするとは非常に複雑な式が必要になり膨大な時間がかかるので、ここでは簡略化のために以下の仮定を用いた。

- (1) 2次元の流れ場とする。
- (2) 気液(固気)二相流を非粘性とする。
- (3) 液(固)相種はヘキサン: C_6H_{14} (コーンスターチ: $C_6H_{10}O_5$) の

み、気相種は主流中の N_2, O_2 及び蒸発によって生成される C_6H_{14} ($C_6H_{10}O_5$) 及び化学反応によって生成される CO_2, H_2O の5種の気体とする。

- (4) 気体は半完全気体(比熱は温度の多項式、状態方程式は理想気体)であるとする。
- (5) 液滴(固体)粒子は球形で、表面は滑らかであり変形や粉砕はなく、互いに衝突しない。
- (6) Bulk viscosity, Soret 効果, Dufour 効果, 圧力拡散, 重力は無視する。
- (7) 化学反応は気体中のみで起こり, single step reaction に従う。
- (8) 圧力は気相・液(固)相の体積分率に比例する。

噴霧ジェットの燃焼を考えるに当たって、液滴の蒸発をどのように扱うかが重要な問題となってくる。実際の蒸発機構は燃焼による効果等があって複雑であるが、簡潔で一般的な蒸発モデルを考えることにし、また蒸発そのものは実験⁽²⁾でみられるように準定常モデルのいわゆる“ d^2 法則”に従うと考え、以下のような仮定を用いる。

- (1) 液滴は球対称である。
- (2) 蒸発は準定常に行われる。
- (3) 液滴の内部は一樣であり、密度その他の勾配はない。
- (4) 圧力は一定とする。
- (5) Lewis 数 $Le = \kappa / (\rho D C_p) = 1$ が成り立つ。
- (6) 輻射は考えない。
- (7) 液滴表面においては、熱平衡が成立している。

この仮定に基づいて液滴表面での連続の式・エネルギー方程式を考えると液滴粒径の時間変化率は次のように表される⁽³⁾。

$$\dot{r}_l = -r_g \frac{D}{m_l r_l} \ln(1+B)$$

となり、 B は質量輸送係数と呼ばれ次の形で表される⁽⁴⁾。

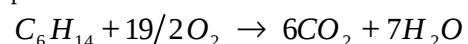
$\phi < 1$: Group combustion

$$B = \left\{ C_p (T_\infty)(T_\infty - T_s) + Y_{\infty} \left(X_f / X_o \right)_{stoich} \Delta h_{r,f} \right\} / L$$

$\phi > 1$: Envelope combustion

$$B = \left\{ C_{p(T_\infty)} (T_\infty - T_s) \right\} / L$$

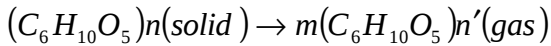
また今回の解析では反応機構として、簡略化のため以下の single step reaction を用いる。



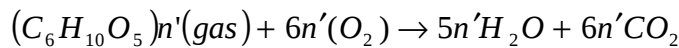
固体燃料であるコーンスターチでは反応固体を粒子と想定しているが、実際の燃焼は固体、気化、気体中での燃焼などから成りかなり複雑である。よって現時点では、この反応を素反応モデルを用いて流れ場とともに解くのは不可能である。さらに素の細かい反応機構すら解っていないので、ある程度反応を簡略化した化学反応モデルを用いる必要がある。

そこで、反応固体を固体粒子とした固・気二相流の問題を解くために考えられた 2-step 化学反応モデルを用いる。これは、まず固体粒子が気化し、それが気相内で酸素と反応するというモデルである。この気化燃料は活性種 (radical) の役割をし、反応速度を制御する要因となる。ただし、この酸化反応は完全燃焼のみで不完全燃焼は扱っていない。

1st - step



2nd - step



3. 支配方程式と数値解析法

液(固)体粒子群を連続体として扱い、気相・液(固)相の両相について Euler 方程式を立てる。気相と液(固)相の両相は質量、運動量、エネルギーの交換によって結び付けられ、液(固)相には液(固)体粒子の数密度保存式をそして気相には化学種の保存式を加えることにより以下の支配方程式系を構成した。

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = \frac{\partial E_v}{\partial x} + \frac{\partial F_v}{\partial y} + H + P$$

ここで U は保存量ベクトル, E・F は対流項, $E_v \cdot F_v$ は粘性項, H は相互干渉項, P は生成項であり、それぞれ以下のように表される。

$$U = \begin{pmatrix} c_g \\ c_g u_g \\ c_g v_g \\ e_g \\ c_{gi} \\ c_k \\ c_k u_k \\ c_k v_k \\ e_k \\ N_p \end{pmatrix}, E = \begin{pmatrix} c_g u_g \\ c_g u_g^2 + e_g P \\ c_g u_g v_g \\ (e_g + e_g P) u_g \\ c_{gi} u_g \\ c_k u_k \\ c_k u_k^2 + e_k P \\ c_k u_k v_k \\ (e_k + e_k P) u_k \\ N_p u_k \end{pmatrix}, G = \begin{pmatrix} c_g v_g \\ c_g u_g v_g \\ c_g v_g^2 + e_g P \\ (e_g + e_g P) v_g \\ c_{gi} v_g \\ c_k v_k \\ c_k u_k v_k \\ c_k v_k^2 + e_k P \\ (e_k + e_k P) v_k \\ N_p v_k \end{pmatrix}$$

$$, E = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -e_g q_x \\ cD_i \frac{\partial Y_i}{\partial x} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -e_g q_y \\ cD_i \frac{\partial Y_i}{\partial y} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, P = \begin{pmatrix} \Gamma \\ \Gamma u_k \\ \Gamma v_k \\ \Gamma \frac{e_k}{c_k} \\ \dot{w}_i \\ -\Gamma \\ -\Gamma u_k \\ -\Gamma v_k \\ -\Gamma \frac{e_k}{c_k} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$H = \begin{pmatrix} 0 \\ -c_k A(u_g - u_k) \\ -c_k A(v_g - v_k) \\ -c_k B(T_g - T_k) - c_k A\{u_k(u_g - u_k) + v_k(v_g - v_k)\} \\ 0 \\ 0 \\ c_k A(u_g - u_k) \\ c_k A(v_g - v_k) \\ c_k B(T_g - T_k) + c_k A\{u_k(u_g - u_k) + v_k(v_g - v_k)\} \end{pmatrix}$$

ここで添え字 k=(liquid) or (solid), g=gas を表す。

また気相液(固)相の両対流項の差分に対しては、Explicit Harten-Yee Non-MUSCL Modified-flux type TVD-Upwind Scheme を用い 時間差分は Strang type fractional step を採用する⁽⁵⁾。また、拡散項には二次精度の中心差分法を適用し、二相間の相互干渉項、生成項には完全に陽的に計算する。

4. 計算条件

今回、気液二相流のスプレー燃焼の前段階として固気二相流のスプレー燃焼をシミュレーションした。以下に今回の数値シミュレーションに用いた各計算条件を記す。

Tab1.1 Spray Condition

Pressure	60 atm
Gas Temperature	850 K
Solid Temperature	293.15 m/s
Velocity	480 m/s
Solid Radius	7.25 μm
Void Ratio	025

Tab1.2 Test Condition

Pressure	40 atm
Gas Temperature	850 K
Solid Temperature	293.15 m/s
N ₂ /O ₂ Ratio	3.762
Solid Radius	7.25 × 10 ⁻² μm

また計算領域は 10cm x 10cm、計算格子は i x j = 101 x 101、噴霧口の座標は (i,j)=(1,49) から (i,j)=(1,53)、さらに境界条件は噴霧口の流入条件は 0 次外挿によって与え、噴霧される両脇の境界は断熱・滑りなし・非触媒性の壁条件を与え、その他の 2 面は自由流出とした。

5. 計算結果と考察

今回の計算では、コーンスターチを使った固気二相流の燃焼についてシミュレーションした。Fig.1 からは T=0.695msec から燃焼・爆発とみられる急激な温度上昇が確認され、気相温度が非常に高い温度に達する様子が確認できる。さらに詳しく調べるために Fig.2 は T=0.695msec から T=0.757msec の間の気相等温度線図上に気相速度ベクトルを書き出したものである。これからやはり T=0.695msec における温度上昇が確認できる点での速度ベクトルが急激に高くなり、燃焼・爆発が始まろうとすることが観察できる。また流れ場の気相の流れはスプレーされている噴出口に向かっており、この流れ場では気相が噴出口に吸い寄せられる様子が見られる。Fig.3 は T=0.757msec での混合気体を構成する各気体種の密度であり、

気相の等温度線図とあわせてみると O_2 は気相温度が高くなって赤くなっている部分ではその存在が確認されない。これはつまり O_2 は化学反応式の $C_6H_{10}O_5$ との反応で使われる反応物であり $C_6H_{10}O_5$ との化学反応で使われていると言える。また CO_2 、 H_2O が生成されている範囲はこの O_2 が存在しない部分であるということからも、この範囲において化学反応が行われていると言える。Fig.4 と Fig.5 はスプレーされた初期の状態の $T=0.056\text{msec}$ と $T=0.094\text{msec}$ における等密度線図および等圧力線図である。この図からスプレーの先端には密度波ないしは圧力波らしきものが確認される。これは二相流を Euler 法で解いたものによるもので Lagrangian 法では見られないものである。しかしこのときに音速を超えてないことから実験などで見られる衝撃波にはなっていないことがわかった。

以上のことから今回スプレー燃焼について、スプレーを二相流として扱い、二流体モデルとして考えることによりスプレー燃焼を数値的にシミュレーションする事が出来た。その結果としてわかったことは蒸発したコーンスターチは下流に流れて燃焼することと、流れ場の気相の流れが対流していること、また実験⁽⁶⁾で見られるスプレー先端の衝撃波のような現象を再現することができた。しかしながら四方を壁にすることや今回シミュレーション出来なかった原因として考えられる気液二相流のヘキサンの蒸発モデルの改良など今後の課題も見つかった。

参考文献

- (1) 牧田光正, 林光一, “ 噴霧と燃焼の数値解析 ”
名古屋大学修士論文(1992)
- (2) T.Takagi, “ Numerical Simulation of Evaporation, Ignition and Combustion of Transient Sprays “ ,
Comb.Sci. and Tech.,Vol.75,p.1,(1991)
- (3) C.T.Crowe, “ The Particle-Source-In Cell Model for Gas-Droplet Flows ” J.Fluids Engi.,p.325(1977)
- (4) Kenneth Kuan-yun Kuo, “ Principles of Combustion ”
A Wiley-Interscience Publication(1986)
- (5) 久津川荘, 林光一, “ 固気二相デトネーションの研究 ”
青山学院大学修士論文(1997)
- (6) “ シュリーレン撮影による高圧噴霧周辺の衝撃波の観察 ” ACE 噴霧・燃焼写真集(1992)

