水素/空気噴流火炎の直接数値シミュレーション

Direct Numerical Simulations of Hydrogen/Air Jet Flames

相澤 寛朗, 電通大院, 〒182-8585 調布市調布ヶ丘 1-5-1, E-mail: hiro@maekawa.mce.uec.ac.jp
前川 博, 電通大, 〒182-8585 調布市調布ヶ丘 1-5-1, E-mail: maekawa@mce.uec.ac.jp
Hiroaki AIZAWA, The University of Electro-Communications, 1-5-1 Chofugaoka, Chofu, Tokyo 182-8585
Hiroshi MAEKAWA, The University of Electro-Communications, 1-5-1 Chofugaoka, Chofu, Tokyo 182-8585

DNS (Direct Numerical Simulation) has become a vital tool to understand turbulent combustion and check the new models recently. And many investigations have been made in this field. An investigation of combustion processes by DNS is the main purpose of this study. Two-dimensional premixed hydrogen/air flames in a shear layer with a disturbance have been calculated and transport phenomena in combustion have been studied here. As a result, generation of acoustic wave has been found in the process of vortex development.

１．緒言

近年，DNS（直接数値シミュレーション）は，乱流燃焼を理解し，モデル化するための重要なツールになって来た．

最近の研究は，乱流燃焼モデルについては Klimenko[1]によって詳細にまとめられている．また，燃焼による音響場の研究も最近注目されており，燃焼システムの非線形音響効果についての研究が Caltech[2]で行われている．

本研究では，時間発展 DNS により燃焼過程を調べることを目的とし，せん断層を作り，そこへ線形安定性理論から計算した粘性圧縮性撹乱を加えて 2 次元予混合火炎の計算を行った．その結果，渦の生成による音波の発生を捕らえ，渦による物質輸送の過程を確認した．

２．計算法

2.1. 支配方程式

計算は 2 次元で水素と空気の化学反応を伴う．外力，ソレ(Soret)効果，デュフォ(Dufour)効果，圧力勾配拡散，体積粘性，放射熱流束は無視できると仮定した[3]．連続の式，運動量保存式，エネルギー方程式，種の連続の式を次に示す[3, 4]．

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\nabla\cdot[\rho \boldsymbol{u}]=0$$

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{u}}{\partial t}+\nabla\cdot[\rho \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}]=-\nabla\cdot\boldsymbol{P}$$

$$\frac{\partial \rho T}{\partial t}+\nabla\cdot[\rho \boldsymbol{u}T]=-\frac{1}{\bar{c}_v}[\nabla\cdot\boldsymbol{q}-\boldsymbol{P}:(\nabla\boldsymbol{u})]$$

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t}+\boldsymbol{u}\cdot\nabla Y_i=\frac{w_i}{\rho}-\frac{1}{\rho}\nabla\cdot(\rho Y_i \boldsymbol{V}_i)$$

ただし，

$$\boldsymbol{P}=\left[p+\frac{2}{3}\mu(\nabla\cdot\boldsymbol{u})\right]\boldsymbol{U}-\mu[(\nabla\boldsymbol{u})+(\nabla\boldsymbol{u})^T]$$

$$\boldsymbol{q}=-\lambda\nabla T+\rho\sum_{i=1}^{N}h_i Y_i \boldsymbol{V}_i$$

$$h_i=h_i^0+\int_{T^0}^{T}c_{p,i}dT$$

$$\bar{c}_v=\sum_{i=1}^{N}c_{v,i}\frac{Y_i}{W_i}$$

$$\bar{c}_p=\sum_{i=1}^{N}c_{p,i}\frac{Y_i}{W_i}$$

$$w_i=W_i\sum_{k=1}^{M}(n''_{i,k}-n'_{i,k})B_k T^{a_k}\exp\left(-\frac{E_k}{R^0T}\right)\prod_{j=1}^{N}\left(-\frac{X_j p}{R^0T}\right)^{n'_{j,k}}$$

$$\boldsymbol{V}_i=-\frac{1}{X_i}D_{im}\nabla X_i$$

$$p=\rho RT=\rho R^0T\sum_{i=1}^{N}\frac{Y_i}{W_i}$$

$$X_i=\frac{Y_i/W_i}{\sum_{j=1}^{N}(Y_j/W_j)}$$

$$i=\mathrm{H,O,OH,H_2,O_2,H_2O}$$

以上の式で，Y_i は質量分率，ρ は質量混合密度，W_i は分子量，R は気体定数，R^0 は一般気体定数，μ は混合粘性率，D_{im} は拡散係数，$\bar{c}_v$ は混合気体定積比熱，$\bar{c}_p$ は混合気体定圧比熱である．プラントル数は

$$\mathrm{Pr}=\frac{\mu\bar{c}_p}{\lambda}$$

で定義され，λ は混合気の熱伝導率である．粘性率は温度Tの指数法則に従うとするサザランドの公式を用いる．

$$\mu=\mu_0(T/T^0)^{2/3}$$

2.2. 初期条件

初期条件は，y 方向主流マッハ数を 0.7 とした Co-flow jet 内部速度をガウス分布で与えてせん断層を作り，温度場は速度分布を用いてクロコブズマン(Crocco-Busemann)の関係式

$$\frac{\partial^2 T}{\partial v^2}=-M^2(\gamma-1)$$

から求めた．ただし，M はマッハ数、γ は比熱比である．ここで，線形安定性理論から粘性圧縮性撹乱を計算し，不安定撹乱の成長率が最大となる基本波数α を選び，主流方向 y に波数αを持つ撹乱を与えた．各固有関数（$\hat{\rho},\hat{u},\hat{v},\hat{T}$）は，主流方向速度成分 vの振幅の最大値で規格化した．計算ではこの規格化した撹乱の 10%程度を使用した．予混合気として，圧力 0.1MPa，温度T^0=1300K，当量比 1.0 の水素と空気を与えた．

また，同じ圧力，温度で空気のみの計算も行い反応を含む場合と比較した．

2.3. 計算方法

空間微分にフーリエ級数を用い，非線形項の計算はフーリエ擬スペクトル法を,エイリアシング誤差除去にパディング(Padding)法を使用した．時間積分には 4 次精度ルンゲクッタ

Copyright © 2000 by JSCFD

法を用いた．境界条件は x，y 両方向共に周期境界条件である．考慮されたラジカル，分子は H, O, OH, H_2, O_2, H_2O, N_2 だが，N_2 は第三体としてのみ反応に関与するものと仮定した．化学反応はアレニウスの式に従うものとし，7 化学種 10 素反応からなる化学反応機構 Table 1 を用いた[5]．

No.	反 応	B_k	β_k	E_k
1	$H+O_2=OH+O$	2.24E+14	0.00	70300
2	$O+H_2=OH+H$	1.80E+10	1.00	39600
3	$H_2+OH=H+H_2O$	2.19E+13	0.00	21600
4	$OH+OH=H_2O+O$	5.75E+12	0.00	3270
5a	$H+H+H_2=H_2+H_2$	9.20E+16	-0.60	0
5b	$H+H+N_2=H_2+N_2$	1.00E+18	-1.00	0
5c	$H+H+O_2=H_2+O_2$	1.00E+18	-1.00	0
5d	$H+H+H_2O=H_2+H_2O$	6.00E+19	-1.25	0
6	$O+O+N_2=O_2+N_2$	2.62E+16	-0.84	0
7	$OH+H+M=H_2O+M$	1.17E+17	0.00	0
$M=H_2O+0.25H_2+0.25O_2+0.2N_2$				

Table 1 化学反応機構

単位：cm，s，K，mol，J

3．計算結果

Fig. 1 に t=4.3E-6[s] での渦度と div $\boldsymbol{u}$ の一部の様子を示す．この時点では不安定撹乱によって渦が生成される途中であるが div $\boldsymbol{u}$ に四重極音源の発生を見ることができる．この後の時間発展によって音波の発達を見ることができると予想されるが，本研究では x 方向に周期境界を適用しているため時間発展させると初期値のせん断層部分から出る波の反射のため観察できない．

そこで，時刻 t の圧力 p について y 方向へ 1 次元フーリエ変換を各 x の値について掛け，波数 0 の場合についてグラフにすると Fig. 2 の様になる．縦軸に時間，横軸に x を取り，波数 0 は平均場の値である．この図から音速で伝播していく波が確認できるため，これは音波であると思われる．

Fig. 3 は Fig. 2 と同様に x 方向速度について波数 0 の場合，Fig. 4 は波数 1 の場合について表わしたものであり，波数 1 は基本モードの振幅を示している．

div $\boldsymbol{u}$ に四重極の形が出た Fig. 1 の時刻 t=4.3E-6[s]で Fig. 3, 4 を切ってみると，Fig. 3 からも音速で伝播していく波が確認できる．また，Fig. 4 から，この付近で撹乱が最大となることも分かる．つまり，渦が巻き上がるところで撹乱が最大となり，そのときに音波が発生している様子が分かる．

時刻 t=7.5E-6[s]以降は周期境界のために波が内側に入り込んでくるため音波を追うことは困難だが，それ以前においては音波の伝播を見ることができる．

まず，Fig. 1 から渦が巻き上がる直前に音源が発生し，Fig. 3,4 から撹乱が最大となるところで巻き上がりを確認することができ，Fig. 2 から渦の巻き上がり完了後に高圧力の部分が見えることより，音波が外に出て行く様子が観察できる．

Fig. 5 は反応の無い空気だけの計算をしたときの Fig. 3 と同様の図で，反応がある場合のときとほぼ同じように音波の発生を確認できる．音波の出ていく傾きが異なるのは，反応混合気体と空気とで音速が異なるためである．

Fig. 6 には Fig. 1 と同じ時間，Fig. 7 はさらに時間発展し，渦が最も巻き上がるところでの渦度と温度，H_2O 質量分率を示す．Fig. 6 の時点では渦が巻き上がる途中であり，H_2O は高温の中心ジェットのあった部分に生成を見ることができるが，Fig. 7 では渦の縁の部分で反応による発熱が確認でき，また H_2O が発熱部で生成され，その後渦によって渦中心へ輸送される様子も確認できる．

4．まとめ

水素と空気の燃焼反応を含む 2 次元コードを用いて撹乱を入れた予混合せん断層の DNS を行い，渦の生成による音波の発生を捕らえた．また，渦による物質輸送を確認した．

初期値の温度が十分に高く設定しなかったため，音波発生への反応の影響を見ることは難しかった．中心ジェットの部分の温度を十分に高くして計算し，反応の影響を調べる予定である．

参考文献

(1) A.Y. Klimenko & R.W. Bilger, “Conditional moment closure for turbulent combustion,” *Prog. Energy Combust. Sci.* **25** (1999) pp. 595-687

(2) http://www.its.caltech.edu/~culick/research.html

(3) F.A. Williams, “COMBUSTION THEORY, ” 2nd ed., 1985

(4) 店橋，宮内，名田，今村, "水素・空気乱流予混合火炎の局所構造," 日本機械学会論文集 B 編 **64** 巻 624 号 (1998) pp. 2662-2668

(5) "5 燃焼・希薄流・混相流・電磁流体の解析," 数値流体力学編集委員会編，東京大学出版会

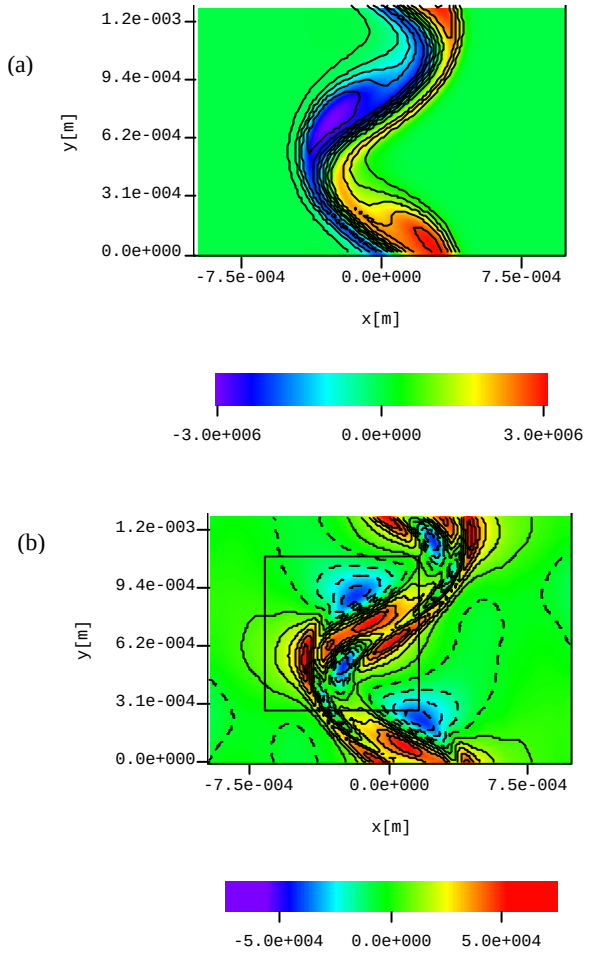

Fig. 1 Contour plots of (a) Vorticity and (b) div $\boldsymbol{u}$ with reaction at t=4.3E-6[s]. The contour increments are ±6.0E5 and ±1.85E4 respectively.

Copyright © 2000 by JSCFD

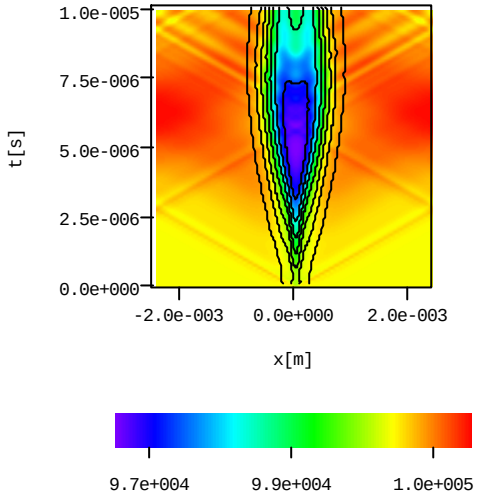

Fig. 2 Amplitude of mean pressure distribution with reaction. The contour increments are 100.

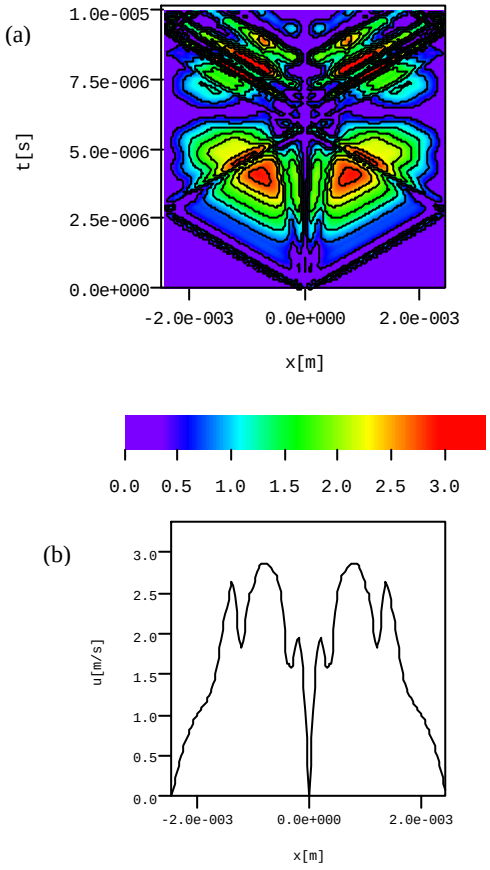

Fig. 3 Amplitude of mean normal velocity distribution with reaction. (a) Time series. The contour increments are 0.4, (b) at t=4.3E-6[s].

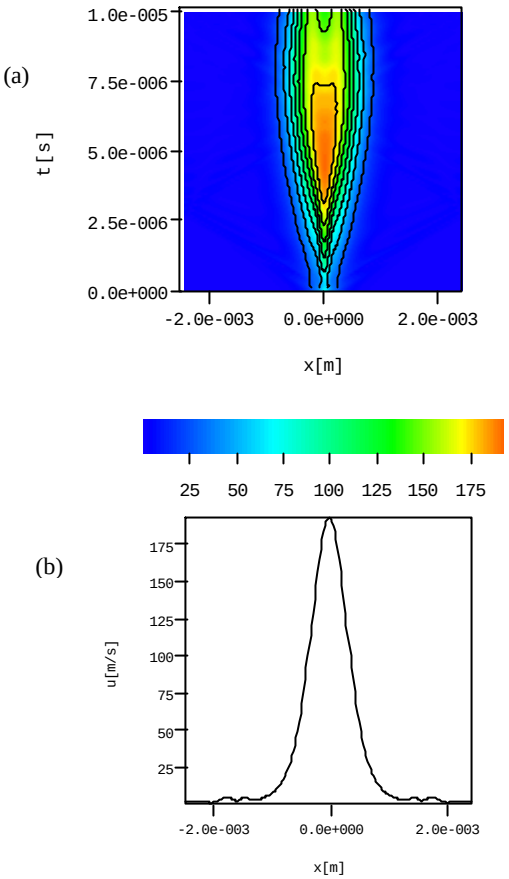

Fig. 4 Normal velocity amplitude distribution of fundamental mode with reaction. (a) Time series. The contour increments are 25, (b) at t=4.3E-6[s].

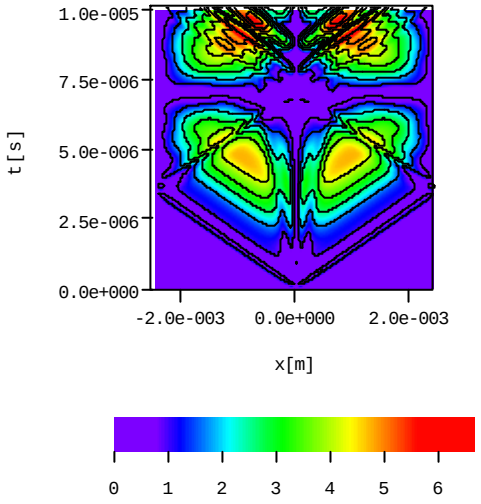

Fig. 5 Amplitude of mean normal velocity distribution without reaction. The contour increments are 1.0.

Copyright © 2000 by JSCFD

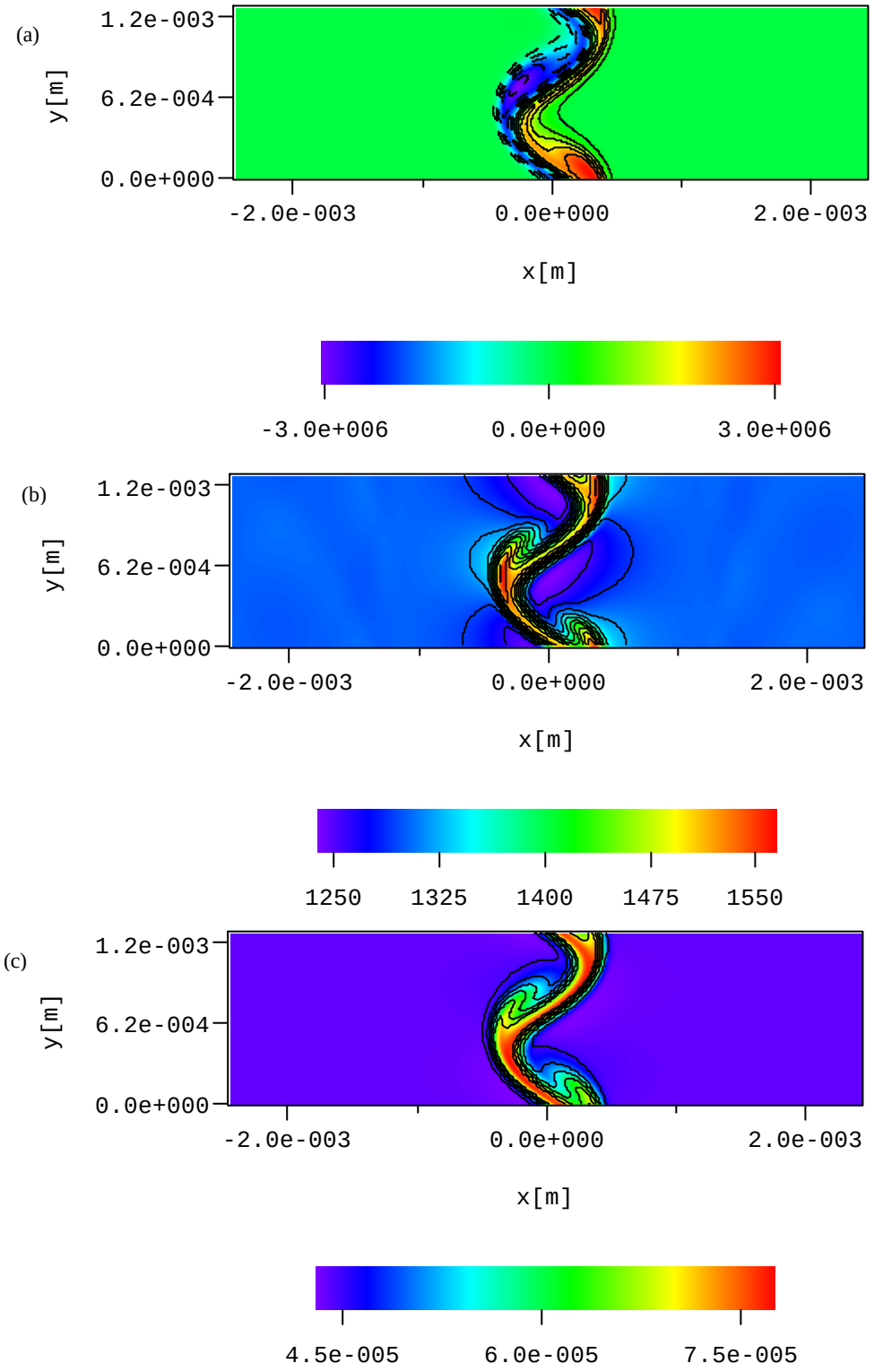

Fig. 6 Distribution of (a) Vorticity, 6.0E5, (b) Temperature, 30, (c) H_2O Mass fraction, 5.0E-6 at t=4.3E-6[s]. The number indicates the contour increments.

Copyright © 2000 by JSCFD

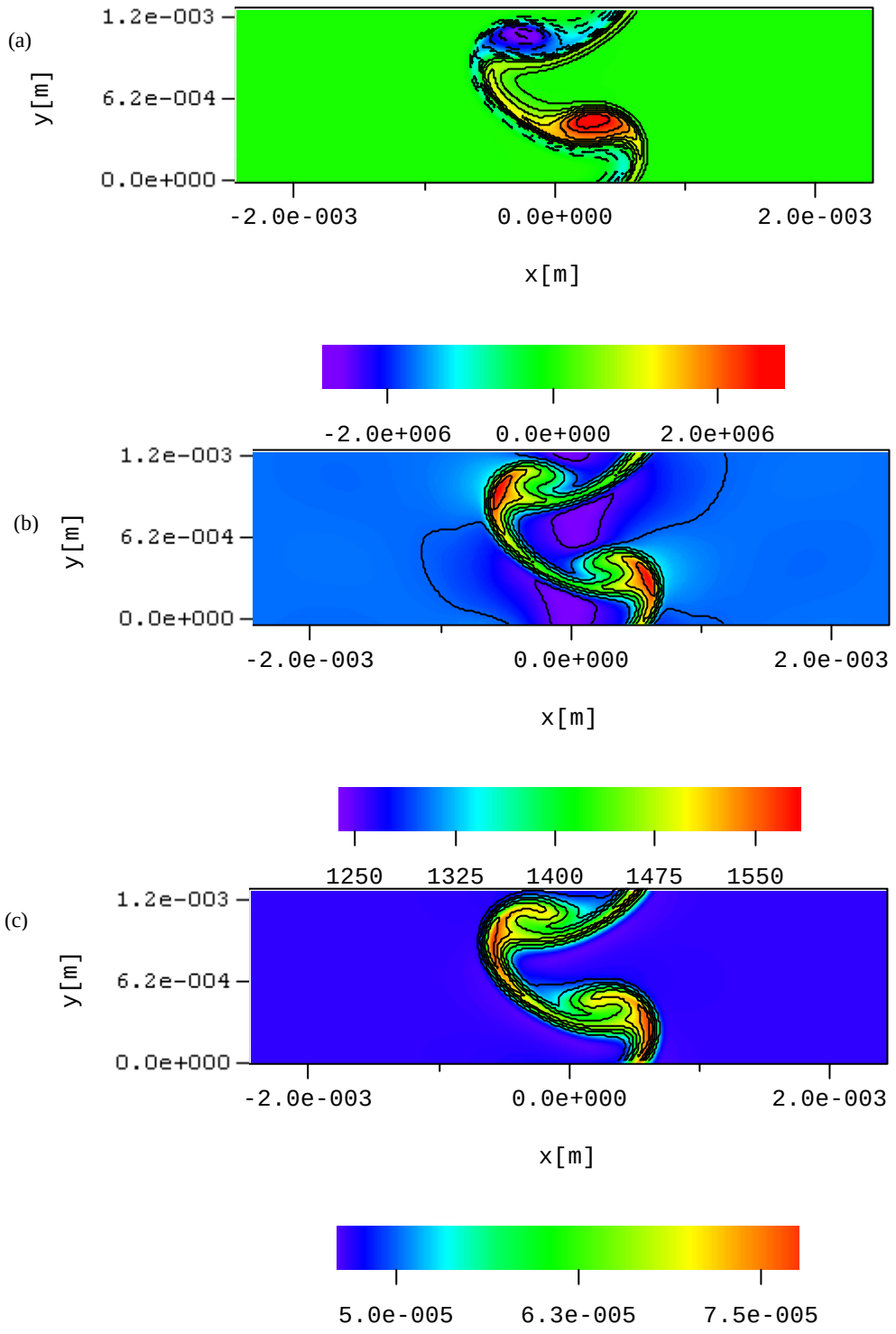

Fig. 7 Distribution of (a) Vorticity, 4.0E5, (b) Temperature, 50, (c) H_2O Mass fraction, 5.0E-6 at t=7.0E-6[s]. The number indicates the contour increments.

Copyright © 2000 by JSCFD