

水素拡散火炎の LES と NO 生成予測

A Nitric Oxide Prediction Method for Large Eddy Simulation of Hydrogen Jet Non-Premixed Flame

谷口 伸行, 東大 情報基盤センター, 〒 113-8658 東京都文京区弥生 2-11-16, E-mail:ntani@iis.u-tokyo.ac.jp
井上 克哉, 東大 生産技術研究所, 〒 153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1, E-mail:inoue@icebeer.iis.u-tokyo.ac.jp
弘畑 幹鐘, 東大 生産技術研究所, 〒 153-8505 東京都目黒区駒場 4-6-1, E-mail:miki@icebeer.iis.u-tokyo.ac.jp
Nobuyuki TANIGUCHI, Information Technology Center, the Univ. of Tokyo, 2-11-16, Yayoi Bunkyo-ku, Tokyo
Katsuya INOUE, Institute of Industrial Science, Univ. of Tokyo, 4-6-1 Komaba Meguro-ku, Tokyo
Mikikane HIROHATA, Institute of Industrial Science, Univ. of Tokyo, 4-6-1 Komaba Meguro-ku, Tokyo

In this research, a Large Eddy Simulation (LES) of hydrogen jet non-premixed flame was carried out and a prediction method for nitric oxide (NO) applicable to LES was proposed. Combustion model in LES is based on conserved scalar approach and laminar flamelet model. In NO prediction method, NO source term is calculated using temperature and species concentration predicted by LES and the transport of mass fraction of NO is calculated as a passive scalar, which does not affect flow field. Computed results are found in overall agreement with experimental data in velocity and temperature field. The trend of distribution of NO concentration was predicted reasonably by using this method, however the amount is underestimated.

1. はじめに

近年, 環境問題への配慮から, NO_x などの燃焼汚染排出物を低減することは非常に重要な課題となっており, 数値解析による NO_x 生成の予測にかけられる期待は大きい. 燃焼流れにおいて NO_x などの化学種の生成を予測するためには, 速度場や温度場を正確に予測する必要がある. LES は比較的高波数まで流れの解析を行うことができるため, 時間平均型モデルに比べ燃焼場解析に適した手法であると考えられ, 工学的にもガスタービン燃焼器や, ボイラの火炉等の燃焼場解析手法としての応用が期待されている. 実用の大型燃焼器における火炎は, 大量の燃料を効率よく燃焼することのできる拡散燃焼の形態をとっているものが多い. ここ数年, 乱流拡散火炎の LES モデリング^[1]や噴流火炎への LES 適用^[2]が行われており, 噴流の流入条件設定法の改善^[3]等によりその予測精度は向上している.

NO などの化学種の反応は, 燃焼反応や乱流混合の時間スケールに対し反応速度が遅いため, 火炎面の予測のように単純に混合分率に対する関数としてその生成量を予測することは難しい. しかし, 工学的に適用することを考えた場合, 膨大な計算負荷をかけて詳細な燃焼反応計算と乱流計算を連成するような予測手法は現実的ではない. 本研究では, 保存スカラーモデルによる乱流拡散火炎の LES から得られる温度, 主な化学種の濃度の予測値を用いた NO 生成予測手法を提案する. 第 1 段階として, 主たる生成機構として Zeldovich NO のみを考慮した解析を行う. 解析, 比較の対象として, M.M.Tacke らによる水素噴流拡散火炎 (H3 Flame Data1998^{[9][10]}) を採用した. 本論文では水素拡散火炎に LES を応用し, 実験結果との比較によってモデルの妥当性や問題点を議論する.

2. 基礎方程式と燃焼モデル

LES の基礎方程式は, 連続の式, 運動方程式に空間フィルタ操作を施すことによって得られる. 密度変化を考慮する際のフィルタ操作として Favre 平均 (密度加重平均) を採用した ($\bar{\phi}$:体積平均, $\tilde{\phi}$:Favre 平均).

連続の式:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1)$$

運動方程式:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \tilde{\tau}_{ij}^{u,u}}{\partial x_j} \quad (2)$$

$$\tilde{\tau}_{ij}^{u,u} = -2\mu \left(\tilde{D}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{D}_{kk} \right) + \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$$

$$D_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$$

SGS 応力:

$$\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -2\mu_{\text{sgs}} \left(\tilde{D}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{D}_{kk} \right) \quad (3)$$

ここで u_i は速度, ρ は密度, μ は粘性係数である.

本研究では, 化学種およびエネルギーの輸送を考慮する際に conserved scalar approach を適用した. 以下の仮定, (I) すべての種の拡散係数は等しい (II) ルイス数 $Le = 1$, の下では元素質量分率の保存式とエンタルピ保存式が同形となるため, 1 つの保存スカラー量 (conserved scalar) ξ が定義できる. 保存スカラーの方程式についても同様に空間フィルタを施すと以下ようになる.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\xi}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\xi} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial \tilde{J}_j^{\xi,u}}{\partial x_j} \quad (4)$$

$$\tilde{J}_j^{\xi,u} = - \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_j} + \bar{\rho} (\tilde{\xi} \tilde{u}_j - \tilde{\xi} \tilde{u}_j)$$

SGS スカラ流束：

$$\bar{\rho} \left(\widetilde{\xi u_j} - \widetilde{\xi} \widetilde{u_j} \right) = - \frac{\mu_{\text{sgs}}}{Sc_{\text{sgs}}} \frac{\partial \widetilde{\xi}}{\partial x_j} \quad (5)$$

ここで Sc はシュミット数, Sc_{sgs} は乱流シュミット数である．今後, 保存スカラ量 ξ は混合分率と呼ぶ．

SGS モデルには Smagorinsky model を用い, SGS スカラ流速のモデルには勾配拡散型のモデルを用いた．SGS モデル定数については Smagorinsky 定数 $C_s = 0.109$, 乱流プラントル数 $Pr_{\text{sgs}} = 0.5$ とした．ルイス数 1 の仮定より $Sc_{\text{sgs}} = 0.5$ となる．粘性係数の温度依存性はサザランドの式 $\mu = \mu_e (\bar{T}/T_e)^{0.76}$ で与える．ここで μ_e, T_e はそれぞれノズル出口での粘性係数, 温度である．

式 (4) から得た混合分率と各スカラ変数を結びつけるために燃焼モデルが必要となる．燃焼モデルは, 火炎面を層流火炎の集合であると考える Laminar Flamelet Concept に基いて, 温度, 密度, 主な化学種濃度を一次元対向拡散火炎の数値計算による値を保存スカラの関数として与えた．

これらの平均値を求める場合, 保存スカラの乱流変動の影響を考慮するために推定確率密度関数 (Presumed Probability Density Function) として beta 関数を用いた．このときの保存スカラの変動成分はスケール相似則を用いて与えた．化学種濃度, 温度の Favre 平均は以下のように与えられる．

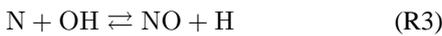
$$\widetilde{\phi} = \int_0^1 \phi(\zeta) \widetilde{P}(\zeta, \widetilde{\xi}, \widetilde{\xi}^{\prime 2}) d\zeta \quad (6)$$

ここで $\phi(\xi)$ は flamelet data であり, 21 次の多項式として近似した．

3. NO 反応モデル

空気中の N_2 との酸化により生じる thermal NO には Zeldovich NO と prompt NO があるが, prompt NO は炭化水素系燃料を使用した場合に C-H-O-N 系における反応で生成するため, ここでは Zeldovich NO のみについて考慮する．

Zeldovich NO は拡大 Zeldovich 機構と呼ばれる以下の反応



により生成する．Zeldovich NO は, 燃焼反応に比べ生成速度が遅く主に火炎下流の高温域で生成するため, 燃焼反応と切り離して近似計算することができる．反応式 (R1)~(R3) より, $[NO]$ と $[N]$ の生成速度について次の式を得る．

$$\begin{aligned} \frac{d[NO]}{dt} &= k_{+1}[N_2][O] - k_{-1}[NO][N] + k_{+2}[O_2][N] \\ &\quad - k_{-2}[NO][O] + k_{+3}[N][OH] - k_{-3}[NO][H] \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d[N]}{dt} &= k_{+1}[N_2][O] - k_{-1}[NO][N] - k_{+2}[O_2][N] \\ &\quad + k_{-2}[NO][O] - k_{+3}[N][OH] + k_{-3}[NO][H] \quad (8) \end{aligned}$$

ここで, $d[N]/dt \simeq 0$ とする N 原子の準定常近似, $[N_2]$, $[O_2]$ にくらべ, $[NO]$ は十分小さいので, $[NO] \simeq 0$ の仮定をすると $[NO]$ の生成速度は次の式ようになる^[4]．

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{+1}[N_2][O] \quad (9)$$

$[O_2]$ と $[O]$ の間で, $[O] = K_{fO}[O_2]^{1/2}$ なる部分平衡が成り立っているとすれば,

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{+1}K_{fO}[N_2][O_2]^{1/2} \quad (10)$$

となる．ここで, k_{+1} は反応式 (R1) における順反応速度定数で, $k_{+1} = 6.63 \cdot 10^7 \exp(-37765/T)$ [$m^3/(mol \cdot s)$] とした^{[4][5]}． K_{fO} は平衡定数であり, 文献 [6] を参照した． $[N_2]$ と $[O_2]$ は燃焼計算により得られた値を用いる．

NO は微量であるので, 流れ場に影響を与えないパッシブスカラとして以下の式を用いた．

$$\frac{\partial \rho Y_{NO}}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_{NO} u_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Y_{NO}}{\partial x_j} \right) + \omega_{NO} \quad (11)$$

ω_{NO} は生成項で, 式 (10) から計算される．LES における生成項以外の SGS モデルは, 保存スカラのものと同様とした．生成項についての SGS モデルは無視し, LES による燃焼場の計算から得られた $\bar{\rho}$, \bar{T} , \bar{Y}_{O_2} , \bar{Y}_{N_2} を直接用いた．

4. 解析対象および解析条件

解析対象として M.M.Tacke らによる H3 Flame Data(1998)^{[9][10]}を用いた．実験条件諸量を Tab. 1 に示す．

Tab.1: Experimental Parameters

Fuel	$H_2 : N_2 = 50 : 50$ (vol.)
co-flow	Air
Diameter of fuel nozzle D	8mm
Bulk velocity at fuel nozzle U_e	34.5m/s
co-flow velocity	0.2m/s
Reynolds number $Re = U_e d / \nu$	10000

計算領域は, 主流方向に $30D$, 直径 $16D$ とした．壁面境界条件は速度に対して free slip, スカラに対して勾配 0, 流出部は対流流出条件とした．中心軸の境界条件は中心軸に

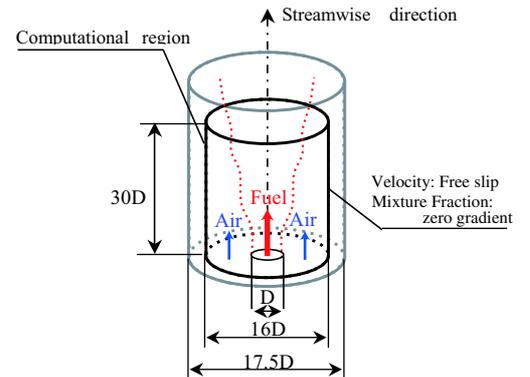


Fig.1: Concept of Computational Domain

対して対称となる点との平均値を中心軸上の点の値として用いた。燃料の流入は充分発達した円管内乱流として主流方向速度を $1/7$ 乗則で与えた。燃料流入部には村田らの手法^[3]に基づいて不安定周波数による攪乱を導入してある。Fig.1 に計算領域、計算条件の概念図を示す。計算座標系は正規円筒座標系とし、スタガード格子を用いた。計算格子数は、主流方向、半径方向、周方向にそれぞれ $200 \times 68 \times 36$ のおよそ 49 万点である。解析は $Re = 8200$ で行った。解析に用いた計算手法^[8]を Tab.2 に示す。

Tab.2: Computational Method

Coupling algorithm	fractional step method
Spatial differential scheme	
Velocity field	2nd-order central differential scheme
Advection term for scalar	SMART scheme
Diffusion term for scalar	2nd-order central differential scheme
Time integration scheme	3rd-order Runge-Kutta method

十分に発達した燃焼流れ場において速度場を一時的に固定し、NO のみの計算を 1000step 行い、NO 濃度が平衡に近づいたところで速度場と連成して NO の計算を開始させた。

5. 解析結果

前述の手法を用いて数値解析を行い、実験結果との比較を行った。計算時間は、東京大学情報基盤センター HITACHI SR8000, 1node(8CPU) を使用し、1000step あたりおよそ 10 時間を要した。NO 反応計算の計算全体に占める割合は数パーセントである。本論文では、無次元時間刻みを 3×10^{-3} とし、16000step の解析を行った結果を示している。

Fig.2 に主流方向速度 u 、混合分率 ξ 、温度 T の統計量とそれらの変動の RMS 値の中心軸上分布、Fig.3 に $x/D = 5$ における半径方向分布、Fig.4 に $x/D = 20$ における半径方向分布を示す。それぞれのグラフにおいて、点で表されているのが実験値である。これらのグラフをみると、速度、混合分率、温度とそれらの変動の全体的な傾向は比較的精度よく予測されているが、噴流の拡散が過小評価されていることがわかる。Fig.2 における混合分率の中心軸上分布、Fig.3 における主流方向速度の $x/D = 5$ における半径方向分布をみるとその傾向を顕著に見ることができる。拡散の過小評価のために燃料の混合が遅れ、中心軸上における温度の増加が遅れて分布の傾向が下流にずれてしまっている。噴流の拡散が過小評価されている原因としては、実験との数値解析のレイノルズ数の違い、付加した不安定擾乱の強度が弱すぎるということがあげられる。

Fig.3 の温度分布を見ると、 $x/D = 5$ における温度統計量の最大値が約 400K 過小評価されていることがわかる。火炎温度は量論混合値面を横切って大きく変動するため、わ

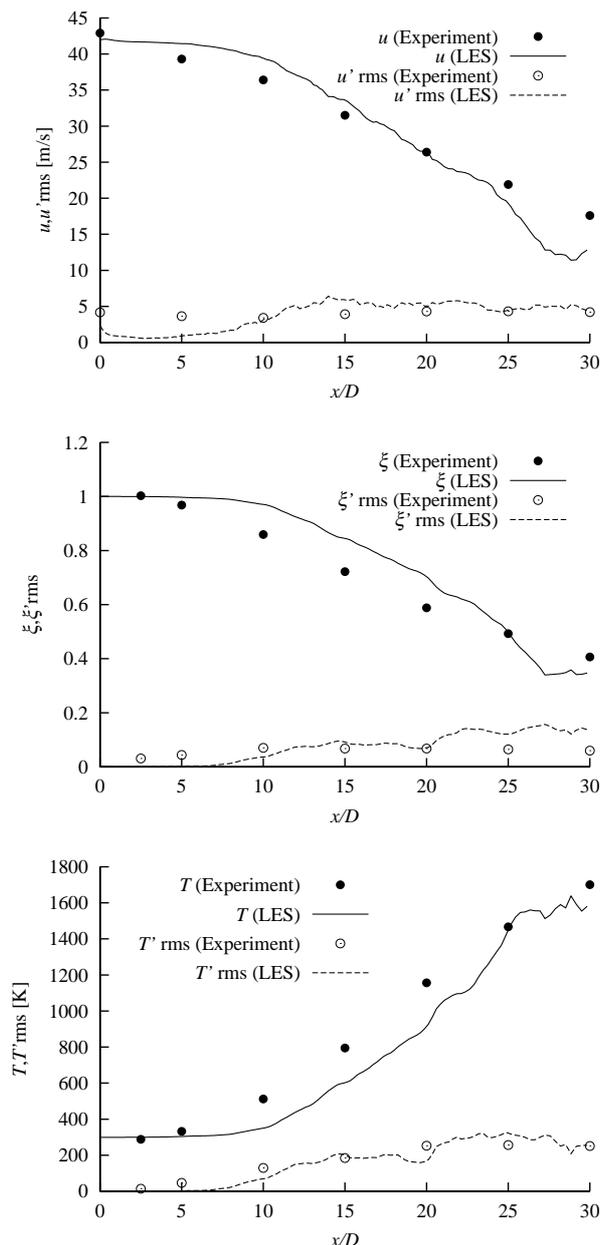


Fig.2: Axial distribution of streamwise velocity, mixture fraction, temperature and their fluctuation

ずかな混合分率のずれが温度の予測に対して大きな影響を与える。 $x/D = 5$ における火炎面付近における ξ の変動がわずかに過大評価されていること、火炎面付近における格子解像度の不足などが、この過小評価の原因であると考えられる。この領域における今回用いた火炎データの適用性についても議論の余地がある。Fig.4 の $x/D = 20$ における温度分布を見ると、これらの影響は弱まり、温度分布を精度よく予測できている。

Fig.7 に NO 濃度の瞬時分布の遷移を示す。各画像は左から右へ NO 濃度の瞬時値の 2000step (無次元時間 6) おきの分布を示している。Fig.7 から NO 濃度が高温域に滞留しながら増加していく様子が見られ、どのような位置で NO が

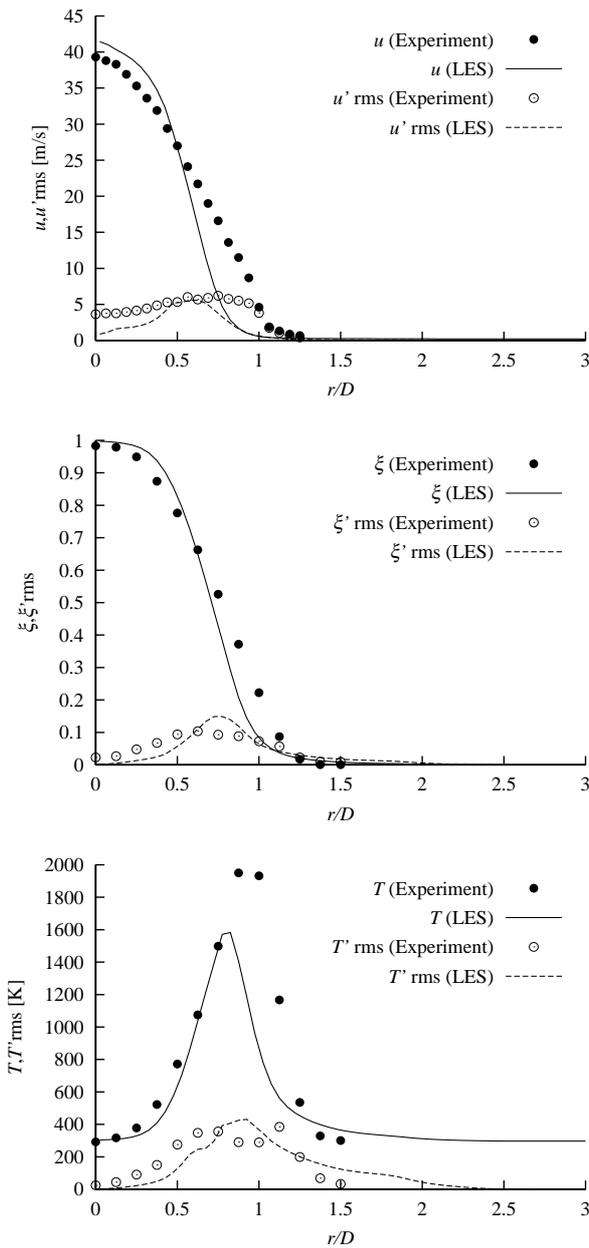


Fig.3: Radial distribution of streamwise velocity, mixture fraction, temperature and their fluctuation ($x/D = 5$)

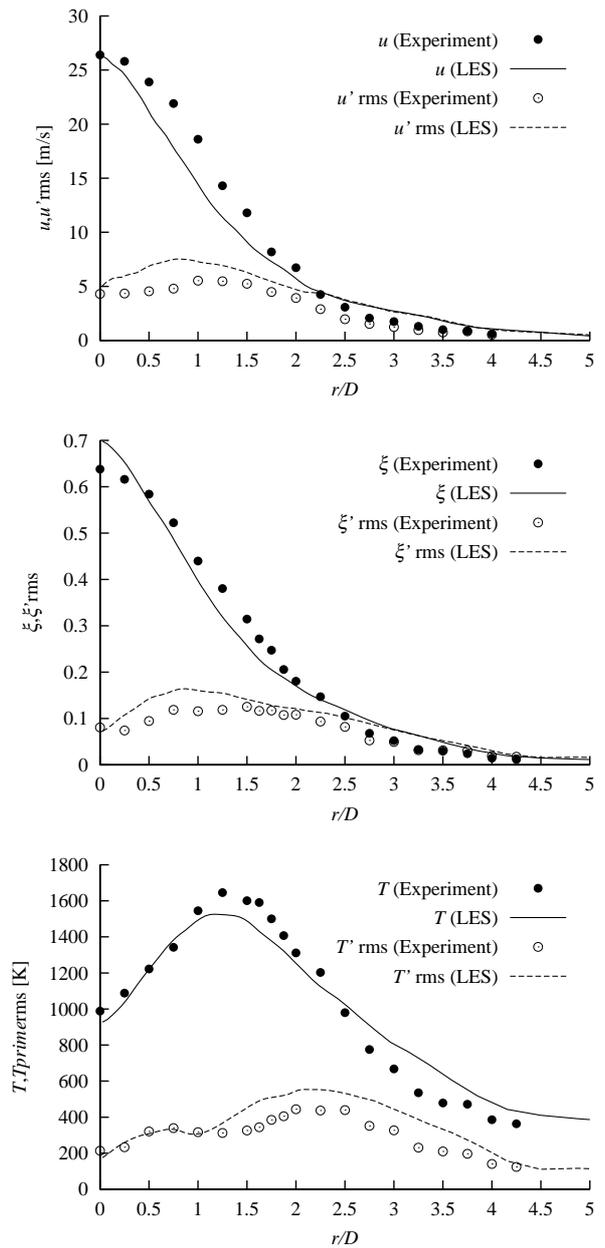


Fig.4: Radial distribution of streamwise velocity, mixture fraction, temperature and their fluctuation ($x/D = 20$)

瞬間的に高濃度になるかを観察することができる。

Fig.5 に NO 濃度の統計量の中心軸上分布, Fig.6 に $x/D = 20$ における半径方向分布を示す. グラフを見ると, 火炎下流に向かうにつれ滞留とともに NO 濃度が増加していく様子を表現することはできているが, NO 濃度は全体に過小評価されている. 特にノズル近傍 ($x/D < 20$) においてその傾向が著しい. Fig.6 をみると LES による NO 濃度の予測値は, 実験値のおよそ 1/4 程度となっている. NO の生成量は温度に強く依存するため, 前述した温度の過小評価の影響が現れていると考えることができる. また, 本研究で用いた NO 反応計算では反応式 (R1)~(R3) において, $[N]$ の準定常近似を仮定している. この条件は O_2 濃度

が高く温度が高い場合は十分に満足されるが, O_2 濃度が低く温度が低い場合は検討を要する. また, 当量比 1 の予混合火炎において, full kinetics と N 原子の準定常近似による NO の挙動を比較すると, 反応が平衡に達するまで N 原子の準定常近似による計算は, full kinetics に対し NO 濃度が過小評価され, 特に反応初期の段階においてその傾向は著しい^[7]. Fig.5 を見ると, NO 反応の初期段階であり, 燃料過濃となるノズル近傍において, NO 濃度の過小評価が著しい. Fig.6 と Fig.4 の温度分布を見比べると, 温度の予測値のピークに対し NO 濃度の予測値のピークが燃料希薄側にずれている. これらの結果は, N 原子の準定常近似による影響が現れていると考えてよいだろう.

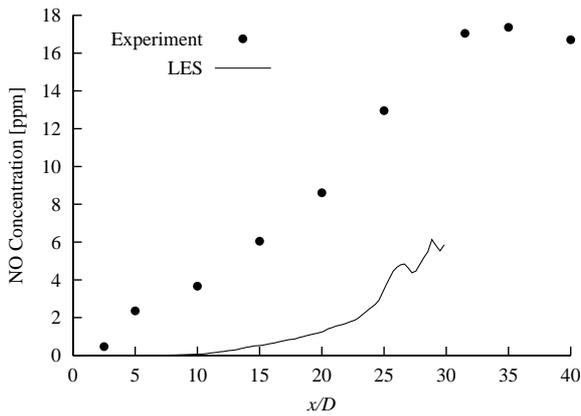


Fig.5: Axial distribution of NO concentration

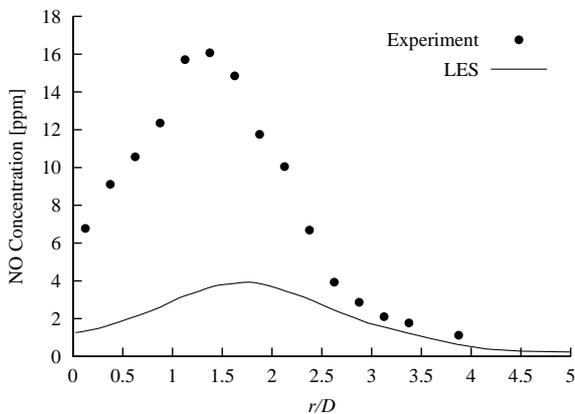


Fig.6: Radial distribution of NO concentration ($x/D = 20$)

今回の解析では、主流方向の計算領域を $30D$ までしかとっていないが、Fig.5 を見るように下流に向かうにしたがって NO 濃度の過小評価は少なくなっており、NO 生成の大部分を占める火炎下流の高温域での NO 生成予測の精度は、ノズル近傍に比べ向上することが期待できる。

6. まとめ

保存スカラーモデルに基いた水素噴流拡散火炎の LES を行い、LES によって予測された温度、化学種濃度を用いた NO 生成予測手法を提案した。燃焼場の解析において、速度、温度場は噴流の拡散の過小評価、 $x/D = 5$ における温度の過小評価が見られるものの、全体的に実験結果との良い一致を見ることができた。提案した手法によって NO 生成の分布の傾向は予測されたが、全体的に濃度を過小評価しており、とくにノズル近傍において過小評価が著しく現れた。火炎下流においては過小評価の影響は減少した。

今後、NO の予測精度を向上させるためには、速度場、温度場の予測精度をさらに高めた上で、N 原子の準定常近似の影響、格子解像度の影響などを検証することが必要である。また、NO 濃度の高い領域を十分含んだ広い計算領域を用いた解析を行う必要がある。

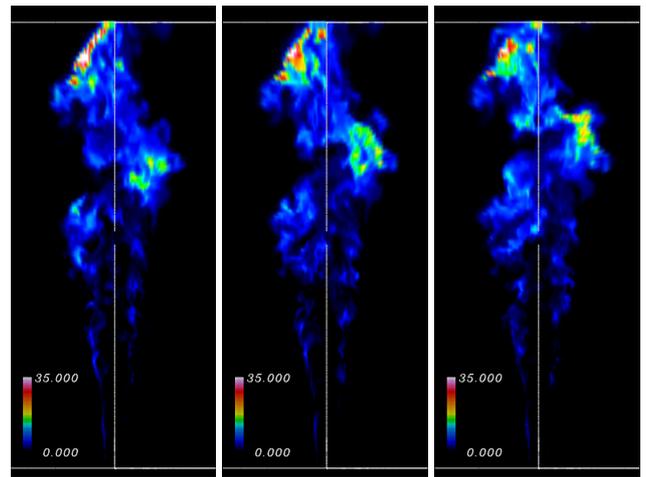


Fig.7: Transition of instantaneous distribution of NO concentration (Each figure is at an interval of 2000 steps, 6 non-dimensional time scale)

参考文献

- [1] Cook, A. W. and Riley, J. J. , Combustion and Flame 112, pp.593-596, 1998
- [2] Kempf, A. , Schneider, C. , Sadiki, A. , Janica, J. , Turbulence and Shear Flow Phenomena, Second International Symposium, Vol3, pp.315-320, 2001
- [3] 村田 史仁, 弘畑 幹鐘, 谷口 伸行, 日本機械学会年次大会講演論文集, Vol.2, pp.123-124, 2001
- [4] 水谷幸夫, 燃焼工学, pp.215, 森北出版, 1989
- [5] Miyauchi, T., Mori , Y. and Imamura, A. , Sixteenth Symposium (International) on Combustion, 1977
- [6] 燃焼工学ハンドブック, pp.293, 日本機械学会, 1995
- [7] 燃焼に伴う環境汚染物質の生成機構と抑制法, pp.50, 日本機械学会, 1980
- [8] 弘畑 幹鐘, 伊藤 裕一, 坪倉 誠, 谷口 伸行, 小林 敏雄, 生産研究 52-1(2000),pp.63-66
- [9] Tacke, M.M. , Cheng, T. C. , Hassel, E. P. , Janicka, J. , Twenty-sixth Symposium (International) on Combustion (1996), pp.169-175, 1996
- [10] Tacke, M.M. , Linow, S. , Geiss, S. , Hassel, E. P. , Janicka, J. , Chen, J.Y. , Twenty-seventh Symposium (International) on Combustion (1998), 1998