水素ガス噴流の自発着火に関する直接数値シミュレーション*
(続報)上 島 光 浩^{*1}, 渡 邊 宏 之^{*2}
野 田 進^{*3}, 小 沼 義 昭^{*3}Direct Numerical Simulation on the Spontaneous Ignition
of Hydrogen Gas Jets
(Further Report)Mitsuhiro UEJIMA^{*4}, Hiroyuki WATANABE,
Susumu NODA and Yoshiaki ONUMA^{*4} Department of Mechanical Engineering, Tokyo Metropolitan College of Technology,
1-10-40 Higashiooi, Shinagawa-ku, Tokyo, 140-0011 Japan

In order to examine the ignition process, direct numerical simulations have been carried out on spontaneous ignition of hydrogen gas jets injected parallel to a steady hot air stream. The simulations are based on a modified HSMAC method. Full chemical kinetics was used in the calculations. All the calculations were conducted under atmospheric pressure, in air flow velocity of 4 m/s and temperature of 1 000 K. The spouting velocities of fuel jets are 50 m/s and 10 m/s, respectively. Calculated results revealed that the ignition point moves from the peripheral region in the upstream of a fuel jet to its top region with a decrease in the jet velocity. The ignition takes place in the fuel-lean layer, where mixture fraction is 0.01 and scalar dissipation rate is suitable for the ignition.

Key Words: Combustion, Ignition, Gaseous Fuel, Direct Numerical Simulation, Ignition Condition, Scalar Dissipation Rate

1. ま え が き

高温空气中へ燃料ガスを噴出すると、(1)燃料ガスと高温空気との混合、(2)混合気中における化学反応による活性化学種や熱の生成、(3)生成された活性化学種や熱の周囲への拡散、などの現象が発生し、ある場所において活性化学種の濃度あるいは温度がある限界値を超えたとき着火に至るものと考えられる。この現象は、ガスディーゼル機関のシリンダ内において見られる現象であるが、実用ディーゼル機関における燃料噴霧の着火にも密接な関連をもつ工学的に重要な現象である。

燃料ガス噴流の自発着火は、乱流場での流動・混合と化学反応の相互干渉効果によって支配される。この現象を厳密に解析するためには、詳細な素反応機構に基づく化学動力学を考慮しながら、高速で変化する燃料噴流内の速度場、温度場および濃度場を解かなければ

ならない。燃料ガス噴流の着火を理論的に扱った研究として、層流の平行噴流の自発着火を解析したもの⁽¹⁾、確率密度関数を用いて高速噴流の着火を解析したもの⁽²⁾⁽³⁾、可燃性気体と酸化剤の対向流場の着火に対して活性化エネルギー漸近展開法を用いた解析⁽⁴⁾、乱流混合層内の着火解析⁽⁵⁾があるが、いずれも反応機構に総括反応を使用している。しかしながら、燃料ガス噴流の着火においては化学反応過程が重要であり、特に着火限界に近い低温時において反応機構の影響力は大きくなる。したがって、総括反応の仮定のもとに得られた結果が、広範な温度範囲に対して生ずる着火現象をどの程度説明しうるか疑問である。

近年、計算機の発達に伴って、詳細な素反応機構を考慮した層流場のガス噴流の着火解析が可能となった。例えば、Law-Williamsの研究グループでは常温水素と高温空気の対向流場において、簡略反応機構あるいは詳細反応機構を用い、さらに多成分拡散を考慮した計算を行った⁽⁶⁾⁻⁽⁸⁾。そして、この解析において空気温度、雰囲気圧力、ひずみ速度と着火限界の関係について検討している。しかしながら、詳細反応機構および多成分拡散を考慮して高速噴流を解析した研究は、著者の知る限りにおいて報告されていない。

一方、著者ら⁽⁹⁾は大気圧下での高温空気流に対して

* 原稿受付 2002年8月8日。

^{*1} 正員、東京都立工業高等専門学校(〒140-0011 東京都品川区東大井1-10-40)。^{*2} 豊橋技術科学大学大学院(〒441-8580 豊橋市天伯町字雲雀ヶ丘1-1)。^{*3} 正員、豊橋技術科学大学。

E-mail: uejima@tokyo-tmct.ac.jp

平行に水素ガスを間欠噴射した場合の自発着火を対象として、詳細反応機構を考慮した直接数値シミュレーションを行った。この解析において、着火はつねに混合層内の希薄混合気中で生じることを明らかにした。また、条件によって着火位置が噴流基部から噴流頭部へ変化することがわかった。しかし、この現象の発生理由については不明であった。そこで本研究では、着火位置が変化する理由ならびに着火条件など着火過程の詳細について調べることを目的とし、着火初期における混合と化学反応の干渉効果について検討した。

2. 解析モデルおよび解析方法

解析モデルおよび解析方法は前報⁽⁹⁾と同様であるので、要点のみを以下に記述する。解析対象は、円筒ノズルから常温(300 K)の水素ガスを高温空気流に対して平行に噴射した場合に生ずる自発着火である。計算においては、二次元円筒座標系を用い、現象は軸対称に起こるものと仮定した。空気温度および流速はそれぞれ1000 K、4 m/sであり、ノズル径は2 mm、燃料噴射速度は10、50 m/sである。計算領域の大きさは、燃料ノズル先端の中心を原点として噴射方向(z)に20 mm、半径方向(r)に10 mmである。計算で用いた格子は z 方向に等間隔格子、また r 方向には着火位置近傍で格子間隔が密になる不等間隔格子を用いた。格子数は z 方向に370、 r 方向に100である。なお、ノズルリムの厚さは無視した。また、計算におけるタイムステップは 5×10^{-8} sとした。一方、燃料と周囲空気の流入条件は矩形の流速分布をもつとした。計算領域の半径方向周囲境界での境界条件は、半径方向速度を零とし、他の物理量はこう配零とした。下流端では、主流方向速度は連続の条件から与え、圧力については圧力こう配が1空間ステップ上流での圧力こう配と等しくなるように与えた。他の物理量についてはこう配を零とした。

本解析では、次の仮定を設けている。

- (1) 気体は理想気体である。
- (2) 外力は無視する。
- (3) 放射、体積粘性、Soret効果、Dufour効果、圧力こう配拡散は無視する。
- (4) エネルギー保存式における粘性項は無視する。

支配方程式⁽⁹⁾は、質量保存式、運動量保存式(軸方向、半径方向)、成分保存式およびエネルギー保存式である。支配方程式は有限差分法で離散化し、HSMAC法で解いた。ただし、非定常項には一次精度のオイラー法、対流項にはQUICK法、それ以外の項には二次

精度の中心差分法を用いた。支配方程式を連立して解く際、補助方程式として理想気体の状態方程式と温度とエンタルピーの関係式を用いた⁽¹⁰⁾。

化学種としては、 H_2 、 O_2 、 H_2O 、 H 、 O 、 OH 、 HO_2 、 H_2O_2 および不活性な N_2 の9成分を考慮した。反応機構には、正逆合せて54の素反応を有するGRIメカニズム1.2⁽¹¹⁾を用いた。また、各化学種や混合気の物性値および輸送係数はCHEMKIN⁽¹²⁾⁽¹³⁾により算出した。

3. 計算結果および検討

3.1 温度・化学種生成速度の分布

図1および図2は、噴射開始から着火後までの等温線の経時変化を示している。図1は燃料噴射速度 $U_f=50$ m/s、図2は $U_f=10$ m/sの結果であり、 t は噴射開始からの経過時間を表す。図1、2ともに空気温度 T_a は1000 Kであり、等温線は、図(a)、(b)においては425 Kから100 K刻みで、図(c)においては425 Kから200 K刻みで表した。着火開始の定義は、噴流内の最高温度が周囲空気温度より25 K温度上昇した時点とし、着火位置を矢印で示した。

Fig. 1 Temporal evolution of temperature profile ($U_f = 50$ m/s)

Fig. 2 Temporal evolution of temperature profile ($U_f = 10$ m/s)

図1の $U_f=50$ m/s の場合には、噴流の発達に伴い、噴流境界では高温空気と低温燃料の混合が進み、 $t=0.297$ ms [図1(b)] のときに噴流上流の周辺部で温度上昇する領域が現れて自発着火が生じたことがわかる。一方、図2の $U_f=10$ m/s の場合には、噴流頭部で着火が開始している [図2(b)]。また、前報において上記二つの噴流を対象に着火位置近傍の火炎構造を調べたところ、着火位置が異なるにもかかわらず、着火はともに混合層内において高温空気側の乱れの弱い

希薄領域で生ずることが明らかになった。しかし、噴射速度の違いによって着火位置が変化する理由について、明確な結論は得られなかった。この現象の発生理由を明らかにするためには、着火過程を詳細に検討する必要がある。そこで、まず着火前に反応が活発化するガス塊の条件について調べた。

図3は噴流内の各位置における化学種 OH, H_2 , H の生成速度 R と混合分率 f との関係、図4はガス塊温度 T と f の関係を示している。図3, 4ともに着火前 ($t=0.258$ ms) の状態で、噴射速度 $U_f=50$ m/s であり、反応が活発な $f=0\sim0.03$ の範囲のみを示した。ただし、混合分率 f は窒素質量分率 Y_{N_2} を基準に次式で定義している。

$$f = \frac{Y_{N_2} - Y_{N_2,0}}{Y_{N_2,F} - Y_{N_2,0}} \dots\dots\dots (1)$$

ここで、添字の F と O は初期の燃料と酸化剤を示す。

図3および図4より、混合層内において周囲空気温度を超える温度上昇は見られないが、この時点ですでに反応が進行していることがわかる。また、混合分率が同じガス塊に対しても反応進行度が異なるため、各化学種の生成速度およびガス塊温度にばらつきが生じている。一方、OH の生成速度 R_{OH} が最大値を示す混合分率は約 0.007 [図3(a)] であり、 H_2 の消費速度 R_{H_2} と H の生成速度 R_H のそれはともに約 0.012 [図3(b), (c)] である。水素-空気火炎に対する量論混合分率 f_{ST} は 0.0282 であるから、ガス噴流の着火前においてはかなり希薄な領域で反応が活発化していることがわかる。図4を見ると、量論条件 ($f_{ST}=0.0282$) でのガス塊温度の最大値は約 940 K と低い値をとるのに対し、OH の生成が最も活発な混合分率 $f=0.007$ での最高温度は約 997 K であることがわかる。このことは周囲空気温度 (1000 K) に近い温度をもつ燃料希薄なガス塊が着火核を形成することを示唆している。

以上、図3および図4に現れた現象は、高温空気と常温燃料が混合する場合の燃料ガス噴流の着火においては、ガス塊の燃料濃度より温度のほうが化学反応速度に対する影響力が大きいため、高温ガス塊が存在する希薄側で着火が開始することを示している。

3・2 OH 生成速度の挙動 図1および図2で示したように、噴射速度を変えると着火位置に大きな変化が生じる。この現象の発生理由を調べるため、これら二つの噴流に対して、OH 生成速度 R_{OH} と混合分率 f の関係について経時変化を比較した。図5および図6に噴射速度 $U_f=50, 10$ m/s の結果を示す。図5, 6

Fig. 3 Scatter plots of reaction rate of species before auto-ignition ($U_f=50$ m/s, $t=0.258$ ms)

Fig. 4 Scatter plots of temperature before auto-ignition ($U_f=50$ m/s, $t=0.258$ ms)

Fig. 5 Scatter plots of reaction rate of OH radical for times between before and after auto-ignition ($U_f=50$ m/s, ignition time ≈ 0.297 ms)

ともに、図(a)は温度上昇が見られない着火前の結果で、図(b)～(f)は噴流内の最高温度 T_{MAX} が周囲空気温度 (1 000 K) よりそれぞれ 25 K (着火時), 50, 75, 100, 125 K 上昇した時点の結果である。

噴流基部で着火する図5(噴射速度 $U_f=50$ m/s)を見ると、反応の進行に伴い OH 生成速度は全体的に増加するが、OH の生成が最も活発な混合分率 f_{MR} は、図(a)の着火前で 0.008、図(b)の着火時には 0.01 となり、その後時間の経過とともに増加する傾向を示すことがわかる。しかしながら、3・1節で述べたように水素-空気炎に対する量論混合分率 f_{st} は 0.0282 であるから、着火前から 100 K 程度の温度上昇が現れる着火初期においては希薄な領域で反応が活発化していることになる。一方、図6($U_f=10$ m/s)は噴流頭部で着火する結果である。図6(b)より着火時の f_{MR} は 0.01 であり、この値は図5(b)の結果と一致する。また図5および図6を全体的に比較すると、各温度上昇に対する分布形状、すなわち局所の混合分率と OH 生成速度の対応関係には大きな差異がないことがわかる。

3・3 着火核と同じ混合分率をもつガス塊の特性

前述のごとく、着火は噴流基部あるいは噴流頭部の混合層内における高温空気側で生じている。ただし、着火したガス塊と同じ燃料濃度をもつガス塊が、着火

Fig. 6 Scatter plots of reaction rate of OH radical for times between before and after auto-ignition ($U_f=10$ m/s, ignition time ≈ 0.32 ms)

の瞬間に噴流内のほかにも存在しており、これらのガス塊が着火核に成長しない理由が不明である。次に、この現象について検討した。

図7(a)の点線は、着火時($t=0.297$ ms)において着火核と同じ混合分率($f_{MR}=0.01$)をもつガス塊の存在位置を示している。図7(a)より、これらのガス塊が噴流の基部から先端部にかけて存在していることがわかる(以下にこの線分を f_{MR} ラインと呼ぶ)。なお、噴射速度 U_f は 50 m/s であり、横軸および縦軸は半径方向距離 r 、軸方向距離 z である。また図7(b), (c)には、 f_{MR} ライン上のガス塊温度 T 、OH 生成速度 R_{OH} 、ひずみ速度 S_t 、渦度 ω そしてスカラー散逸速度 SDR をプロットした。ただし、 SDR は次式⁽¹⁴⁾で定義した。

$$SDR = 2D \nabla f \cdot \nabla f \dots\dots\dots (2)$$

ここで、 D は混合気の拡散係数である。なお横軸は、ノズルリムを原点にとったときの f_{MR} ライン上の距離 s で、右端が噴流先端(中心軸上)にあたる。図7(b), (c)における横軸上の●とローマ数字は、図(a)の各位置と対応している。

図7(b)より、温度 T の上昇は着火位置である噴流基部(I 付近)でのみ観測され、また温度ピークの位置と OH 生成速度 R_{OH} ピークの位置が一致していることがわかる。一方図7(c)のスカラー散逸速度 SDR を

Fig. 7 Ignition characteristics for mixture with most reactive mixture fraction. (a) Contours of most reactive mixture fraction. (b) Temperature and reaction rate of OH radical. (c) Vorticity, strain rate and scalar dissipation rate ($U_f=50$ m/s)

Fig. 8 Ignition characteristics for mixture with most reactive mixture fraction. (a) Contours of most reactive mixture fraction. (b) Temperature and reaction rate of OH radical. (c) Vorticity, strain rate and scalar dissipation rate ($U_f=10$ m/s)

見ると、噴流基部では SDR は約 0.62 s^{-1} と小さいが噴流先端に向かって増加する傾向を示し、噴流頭部 (V 付近) では約 9 s^{-1} と大きな値に達している。またひずみ速度 S_r および渦度 ω を比較すると、噴流基部ではその値がともに小さく乱れが少ないが、頭部では大きな値を示している。すなわち、噴流頭部では混合が極端に早く、反応によって生じた熱や活性化学種の拡散速度が大きいいため着火条件を満たせないものと考えられる。

図 8 は噴射速度 $U_f = 10 \text{ m/s}$ の結果であり、着火位置は噴流頭部 (III 付近) で、 f_{MR} は 0.01 である。図 8(b) より、着火時には噴流基部 (I 付近) と噴流頭部 (III 付近) に二つの温度ピークが現れていることがわかる。なおこの後、噴流頭部が急激な温度上昇をするのに対し、噴流基部では温度上昇は起こらず、着火核に発達しない現象が観測された。図 8(c) よりスカラ散逸速度を比較すると、着火位置である噴流頭部においてその値は約 0.75 s^{-1} であり、基部の値 (約 0.56

s^{-1}) と同程度まで小さくなっている。一方、ひずみ速度および渦度を見ると、噴流頭部の値は基部と同程度に小さい値を示している。すなわち、 $U_f = 10 \text{ m/s}$ とし、噴流全体の乱れを小さくした場合には、噴流頭部の乱れおよびスカラ散逸速度も小さくなり、噴流基部の状態に近づくことはわかるが、着火点が頭部に移動する理由は明らかでない。

以上、着火時において着火核と同じ混合分率をもつガス塊を比較したところ、スカラ散逸速度が極端に大きい場合には着火条件を満たすことができず、またスカラ散逸速度が小さい場合にも着火核にはならないことがわかった。これより、着火位置の決定にはスカラ散逸速度が大きな影響力をもっていることが推察されるが、図 7 および図 8 を見ると、着火位置と同じスカラ散逸速度をもちながら着火点にはならない場所も存在していることがわかる。これは、ある瞬間のスカラ散逸速度だけで着火位置を特定することはできないことを意味している。そこで、次に着火位置付近に存在

Fig. 9 Streak lines near the ignition point

するガス塊に着目し、その時間履歴を検討した。

3・4 着火核の時間履歴 噴射開始から着火に至るまでの噴流全体の速度に関する計算結果から着火位置およびその近傍に到達するガス塊を探した。図9にそれらガス塊の軌跡すなわち流脈線を示す。図9(a), (b)は、燃料噴射速度 $U_f = 50, 10$ m/s の場合で、横軸が半径方向距離 r 、縦軸が軸方向距離 z である。図9中の▲は着火位置を示し、流脈線2は着火核を形成するガス塊の軌跡である。また、比較のために混合速度が異なるガス塊として、着火位置より燃料側あるいは空気側のガス塊の軌跡を、それぞれ流脈線1, 3に示した。これら流脈線上の各位置におけるガス塊に関する計算結果を図10と図11に示す。なお、横軸 t は噴射開始からの経過時間であり、軸上に示した垂線(破線)は着火時刻を示している。

図10は噴射速度 $U_f = 50$ m/s の結果である。いずれの流脈線の場合にも、スカラ散逸速度 SDR は時間の経過に伴って増加する傾向を示すが、その増加率に違いが生じていることがわかる。図10(a)を見ると、燃料側の流脈線1においては、スカラ散逸速度の増加率が大きく混合が速いため、早期に ($t = 0.23$ ms) 着火

Fig. 10 Temporal change in temperature, reaction rate of OH radical, strain rate, scalar dissipation rate and mixture fraction along each streak lines ($U_f = 50$ m/s) Fig. 11 Temporal change in temperature, reaction rate of OH radical, strain rate, scalar dissipation rate and mixture fraction along each streak lines ($U_f = 10$ m/s)

位置と同じ混合分率($f_{MR}=0.01$)に到達しているが、低温燃料との速い混合により $t=0.2$ ms 付近からガス塊温度が低下している。一方、図 10(c)の空気側の流脈線 3 では、スカラ散逸速度の増加率が小さく混合が遅いため、混合分率が増加せず燃料希薄な状態が持続しており、この場合は反応が進まず温度上昇が遅れている。図 10(b)の着火核となる流脈線 2 においては、スカラ散逸速度の増加率は流脈線 1 のそれより小さく、また流脈線 3 より大きい。そして、 $t=0.27$ ms 付近から温度上昇するとともに、当然着火時($t=0.298$ ms)における混合分率は f_{MR} に達している。

図 11 は噴射速度 $U_f=10$ m/s の結果である。図 10($U_f=50$ m/s)と比較すると、着火位置が異なるにもかかわらず着火核となるガス塊に関するデータの時間履歴は同様の結果が得られていることがわかる [図 10 および図 11 の各(b)]。また、着火位置周辺に存在するガス塊の履歴 [図 10 および図 11 の各(a), (c)] も同じ傾向を示していることが興味深い。

以上のガス塊の履歴に関する検討より、高温空気流中に平行に噴出された燃料ガス噴流の着火過程において、スカラ散逸速度で評価される分子混合過程が着火核を形成する一つの条件を与える可能性のあることがわかった。すなわち、スカラ散逸速度が着火条件の値に対して大きすぎる場合には伸長効果によりガス塊は冷却され、一方その値が小さすぎる場合には分子混合が遅れ、着火遅れ時間が長くなることが明らかとなった。

4. ま と め

大気圧下での高温空気流に対して平行に水素ガスを噴射した場合に生ずる自発着火を対象として、反応動力学と多成分拡散を考慮した直接数値シミュレーションを行った。空気温度および流速はそれぞれ 1 000 K, 4 m/s 一定で、燃料噴射速度を 10, 50 m/s に変化させて着火過程および着火条件について検討を行った。その結果、次の結論を得た。

(1) 噴射速度が小さい場合には着火は噴流頭部で発生するが、噴射速度が大きく噴流頭部のスカラ散逸速度が大きくなると、着火位置は噴流基部に変化する。

混合速度の異なるこの二つの噴流を対象に、混合分率空間における OH 生成速度の経時変化を比較したところ、着火位置が異なっているにもかかわらず、着火時の OH の生成が最も活発な混合分率はともに 0.01 と等しいことが判明した。なお、水素-空気火炎に対する量論の混合分率は 0.028 2 であるから、希薄なガス塊が着火核を形成していることになる。

(2) 着火の瞬間には、着火核と同じ混合分率を有するガス塊が噴流内の他の場所にも存在しているが、これらすべての位置において同時に反応が活発化することはなく、スカラ散逸速度が極端に大きい位置、あるいはそれが小さい位置においては着火しない。

(3) 着火位置およびその周辺に存在するガス塊の時間履歴を追跡したところ、スカラ散逸速度は増加する傾向を示し、その増加率が大きすぎる場合あるいは小さすぎる場合には着火核にならないことが明らかになった。

文 献

- (1) 北野三千雄・大塚芳郎, 機論, **43**-366 (1977), 683-691.
- (2) Lakshmisha, K. N., Rogg, B. and Blay, K. N. C., *Combust. Sci. Technol.*, **105** (1995), 229-243.
- (3) Zhang, Y., Rogg, B. and Blay, K. N. C., *Combust. Sci. Technol.*, **105** (1995), 211-227.
- (4) Niioka, T., *Proc. 18th Symp. (Int.) Combust.*, (1981), 1807-1813.
- (5) Mastorakos, E., Baritaud, T. A. and Poinso, T. J., *Combust. Flame*, **109** (1997), 198-223.
- (6) Balakrishnan, G., Smoke, M. D. and Williams, F. A., *Combust. Flame*, **102** (1995), 329-340.
- (7) Kreutz, T. G. and Law, C. K., *Combust. Flame*, **104** (1996), 157-175.
- (8) Fotache, C. G., Kreutz, T. G., Zhu, D. L. and Law, C. K., *Combust. Sci. Technol.*, **109** (1995), 373-393.
- (9) 上島光浩・ほか 3 名, 機論, **64**-626, B (1998), 3457-3463.
- (10) 野田進・ほか 2 名, 機論, **60**-572, B (1994), 1436-1442.
- (11) Frenklach, M., ほか 11 名, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech.
- (12) Kee, R. J., Rupley, F. M. and Miller, J. A., SAND 87-8215 B (1990).
- (13) Kee, R. J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., Coltrin, M. E. and Miller, J. A., SAND 86-8246 (1986).
- (14) Williams, F. A., *Combustion Theory*, 2nd eds., (1985), 398, Benjamin/Cummings.