

G 方程式を用いた噴流浮き上がり火炎の数値解析

山本 姫子(早稲田大), 豊永 壘(早稲田大), 溝渕 泰寛(JAXA), 佐藤 哲也(早稲田大)

Numerical analysis of jet lifted flames using G-equation

by

Himeko Yamamoto(Waseda Univ.), Rui Toyonaga(Waseda Univ.), Yasuhiro Mizobuchi(JAXA) and Tetsuya Sato(Waseda Univ.)

ABSTRACT

For the development of fuel-staged aircraft engine combustor, it is necessary to develop a practical combustion calculation code that can reproduce the complex combustion field and the pressure propagation. In this study, the implementation of the combustion calculation code (flamelet approach, G equation) for a complex combustion field to a density-based fluid analysis solver, FaSTAR is conducted. With this calculation code, numerical experiment was conducted for a real-size hydrogen jet lifted flame, and the influence of the two kinds of evaluation method of scalar G in G equation and turbulent burning velocity models on the calculation result is evaluated.

1. はじめに

近年、ガスタービンやジェットエンジンの環境適合性の向上に向けて、従来の安定な拡散燃焼形態に加え、希薄予混合燃焼形態を用いる低 NOx 燃焼器の開発が期待されている。しかし希薄予混合燃焼場ではエンジンの耐久性低下に繋がる強い熱音響自励振動である燃焼振動が発生しやすくなるという問題があり、このような燃焼器を対象とする部分燃焼場を再現するとともに、燃焼振動をはじめとする圧力伝播を再現可能な実用的な計算コストを有する燃焼流体解析コードの開発が求められている。

このような背景を踏まえ、本研究では計算コストの低減のため、Flamelet approach や G 方程式^[1]に基づく燃焼モデルの開発に着目した。前者のモデルでは、乱流火炎中の火炎構造が代表的な層流火炎構造で近似可能であるとして、予混合層流火炎の詳細解析から作成した火炎内部構造データをを用いて乱流火炎を表現する。後者のモデルでは、予混合燃焼場における火炎面を未燃ガスと既燃ガスを分ける面としてスカラー変数Gの輸送として表現し、火炎伝播の影響は一次元層流火炎データベースと乱流燃焼速度モデルを基に与える。これらの手法を組み合わせ複合燃焼場計算に拡張した先行例はいくつかある^[2]が、密度ベースの圧縮性流体解析ソルバに対応させた例は少ない。

そこで本研究では、JAXA で開発された密度ベースの圧縮性流体解析ソルバである FaSTAR^[3]を基盤とし Flamelet approach および G 方程式に基づく化学反応計算コードの開発を行い、代表的な部分予混合火炎である水素噴流浮き上がり火炎を対象に評価を行う。また、G 方程式におけるスカラーGの取り扱いにおいて、Gに反応進行度的な意味合いを持たせる手法(手法 1)^[4]と、Gを火炎面からの距離関数として Level set 法に基づいて評価する手法(手法 2)^[5]の二手法に着目して定式化と実装に取り組み、Gの評価手法が計算結果に与える影響を考察する。

2. 基礎方程式と燃焼モデル

数値解析には FaSTAR を用いた。本ソルバは有限体積法を用い、式(1)に示す無次元化された物理量を取り扱う。式(1)においてチルダは有次元量、無限大(∞)は有次元の代表物理量を示す。無次元化によって理想気体の状態方程式は式(2)となる。支配方程式は三次元 Navier-Stokes 方程式と状態方程式に加え、レイヌ数 $Le = 1$ の仮定のもとに、混合分率の輸送方程式と G 方程式を導入した(式(3)-(15))。

ここで、混合分率は任意の化学種 s の質量分率について、酸化剤側での質量分率を $Y_{s,ox}$ 、燃料側での質量分率を $Y_{s,fuel}$ として、式(14)のように正規化した値とする。

乱流モデルとしては、標準 Smagorinsky モデルの LES を採用した。使用した定数等を式(8)に示す。また、式(6)において、 Y_s は化学種 s の質量分率、 H_s は化学種 s の単位質量あたりのエンタルピである。粘性係数の算出にあたっては Sutherland 則を用いた。各化学種の輸送係数は文献^[6]を参考にした。各化学種の定圧比熱およびエンタルピは NASA 7-term polynomials^[7] による熱力学関数として算出した。対流項の空間勾配離散化には、AUSM 系の全速度スキームである SLAU を採用する。空間精度の高次精度化については、MUSCL 法を用い二次精度とし、Hishida の制限関数を用いる。粘性項および拡散項については 2 次精度中心差分を用いる。時間積分には LU-SGS 陰解法を用いる。

式(4)における G 方程式は、予混合燃焼場の火炎伝播に対し、火炎面位置を表すスカラー方程式である。火炎面は $G = G_0$ の等値面で表され、 $G < G_0$ が未燃領域、 $G > G_0$ が既燃領域を表す。式(12)において、 σ はGの SGS スカラー流束項に勾配拡散を仮定する上で算出されたモデルパラメータであり、数値的不安定が発生する問題を抑制する効果がある。等方乱流中の予混合燃焼解析に関する文献^[8]から $\sigma = 0.25$ とする。式(13)は火炎伝播によるソース項である。 ρ_u は局所の混合分率から算出した未燃混合気密度であり、 n_i はGの等値面がもつ単位法線ベクトルの i 成分、 s_T は乱流燃焼速度である。

s_T は層流燃焼速度 s_{L0} を基に、これまでの実験データや理論解析から標準的なモデルとして紹介されている^[9]、式(15)のモデルを用い算出する。式(15)において、 C_1, C_2 および n はモデル定数、 u' は乱流強度である。モデル定数の値は燃焼場に応じて最適値が異なるが、本計算では実験で取りうる乱流燃焼速度の範囲内で、浮き上がりの再現を試みる数値実験のため、 $C_1 = 10$ 、 $C_2 = 0$ と見積もる。また、参考文献^[10]を基に、可燃領域から外れた G の存在領域において G 移流項の逆流を制限する。

$$x_i = \frac{\tilde{x}}{L}, \quad u_i = \frac{\tilde{u}}{a_\infty}, \quad T = \frac{\tilde{T}}{T_\infty}, \quad p = \frac{\tilde{p}}{\rho_\infty a_\infty^2}, \quad (1)$$

$$E = \frac{\tilde{E}}{\rho_\infty a_\infty^2}, \quad \mu = \frac{\tilde{\mu}}{\mu_\infty}, \quad Re = \frac{\rho_\infty a_\infty L}{\mu_\infty} = \frac{Re_\infty}{M_\infty}$$

$$p = \frac{1}{\gamma} \rho T \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_v Q dv + \int_S [F(Q) - F_v(Q)] \cdot ds - \int_v \Omega dv = 0 \quad (3)$$

$$Q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ E \\ \rho \xi \\ \rho G \end{pmatrix}, \quad F_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_1 u_i + \delta_{1i} p \\ \rho u_2 u_i + \delta_{2i} p \\ \rho u_3 u_i + \delta_{3i} p \\ (E + p) u_i \\ \rho \xi u_i \\ \rho G u_i \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$F_{v_i} = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{1i} \\ \tau_{2i} \\ \tau_{3i} \\ \alpha_i \\ \beta_i \\ \gamma_i \end{pmatrix}, \quad \Omega_i = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \omega_i \end{pmatrix}$$

$$E = e + \frac{1}{2} \rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2) \quad (5)$$

$$e = \sum_s \rho Y_s H_s - p \quad (6)$$

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad (7)$$

$$\mu_t = \frac{Re_\infty}{M_\infty} C_s \Delta |S_{ij}|, \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad C_s = 0.2 \quad (8)$$

$$\alpha_i = -\frac{M_\infty \sum Y_s C p_s}{Re_\infty \gamma} \left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \cdot \left\{ \frac{\gamma}{\rho \sum Y_s R_s} \left(\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{p}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} - \frac{p}{\sum Y_s R_s} \sum Y_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_i} \right) \right\}, \quad (9)$$

$$Pr = Sc = 0.71, \quad Pr_t = Sc_t = 2.0 \quad (10)$$

$$\beta_i = \frac{M_\infty}{Re_\infty} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x_i} \right] \quad (11)$$

$$\gamma_i = \frac{M_\infty}{Re_\infty} \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu_t}{\sigma} \right) \frac{\partial G}{\partial x_i} \right] \quad (12)$$

$$\omega_i = -\rho u_s T n_i \frac{\partial G}{\partial x_i} \quad (13)$$

$$\xi = \frac{Y_s - Y_{s,ox}}{Y_{s,fuel} - Y_{s,ox}} \quad (14)$$

$$\frac{s_T}{s_{L_0}} = C_1 + C_2 \left(\frac{u'}{s_L} \right)^n \quad (15)$$

2. 1 反応進行度による G 値の評価 (手法 1)

スカラー-Gを式(16)の反応進行度 c に一致する厚みを持つ値として取り扱う手法について定式化を行う。ここで、 G を0を未燃、1を既燃とする $0 \leq G \leq 1$ の範囲の値として捉え、中央値である $G_0 = 0.5$ を火炎面位置の目安とする。また、既燃ガスと未燃ガスのスイッチングパラメータ f を反応進行度に相当するパラメータとみなし、質量分率を式(17)でモデル化する。化学種質量分率は混合分率と後述するスカラー消散率のみの関数であると仮定する。本研究では $f(G) = \tilde{G}$ として、 G のSGS変動を無視し質量分率の

GS成分を式(18)と与える。このため、手法1では $G \geq 0$ が反応領域とみなされる。

$$c = \frac{Y_s - Y_{s,unburned}}{Y_{s,burned} - Y_{s,unburned}} \quad (16)$$

$$Y_s = f(G)Y_{s,burned} + (1 - f(G))Y_{s,unburned} \quad (17)$$

$$\tilde{Y}_s = \tilde{G}Y_{s,burned} + (1 - \tilde{G})Y_{s,unburned} \quad (18)$$

2. 2 距離関数による G 値の評価 (手法 2)

主に移動境界面の数値解析に用いられる Level set 法の考え方を導入し、火炎面からの距離関数として G を評価する手法について定式化を行う。本手法では、火炎面近傍の G に対して再初期化と呼ばれる修正を定期的に施すことによって、火炎面を境にした急激な値の変化による数値振動・数値拡散を抑えることができる。ここでは火炎面を $G_0 = 0$ と定義し、火炎面を中心に $-\alpha \leq \tilde{G}_0 \leq \alpha$ を反応領域とする (α は格子幅程度の値とする)。

本研究では、Sussmanの手法^[11]にならい、式(19)の再初期化処理を実装する。計算手順としては、まず、予め火炎面の初期分布として、 $G = 0$ を任意の位置に与え、 $G = 0$ となるセルから一定の勾配を保った距離関数としてその他の G を与える。続いて、計算の進行に伴い式(4)で輸送される G に対し、離散化した式(19)による G の時間発展を繰り返し解くことで、 $G = 0$ となるセルに対し G が一定の勾配(本研究では $\nabla G = 1$ とする)を保つように値を更新し、距離関数としての性質を回復させる(図1に例を示す)。式(20)の $S(\tilde{G})$ は \tilde{G} の符号関数である。また、更新後の G に対し、式(20)となるヘビサイド関数 $H(\tilde{G})$ を定義する。このヘビサイド関数を反応進行の影響因子として化学組成を式(21)と定義することにより、火炎面近傍($-\alpha \leq \tilde{G} \leq \alpha$)でのみ化学反応とそれに伴う発熱を考慮する。

$$\tilde{G}_t = S(\tilde{G})(1 - \nabla G) \quad (19)$$

$$H(\tilde{G}) = \begin{cases} 1 & \text{if } \tilde{G} > \alpha \\ 0 & \text{if } \tilde{G} < -\alpha \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{G}}{\alpha} + \sin \left(\frac{\pi \tilde{G}}{\alpha} \right) \right) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (20)$$

$$\tilde{Y}_s = H(\tilde{G})Y_{s,burned} + (1 - H(\tilde{G}))Y_{s,unburned} \quad (21)$$

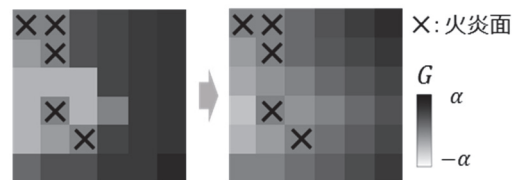


図1 再初期化 (左図: 再初期化前、右図: 再初期化後、 α は格子幅とする)

3. 計算対象

計算対象の火炎は、静止空气中に噴き出された亜音速水素噴流の燃焼によって得られる浮き上がり火炎である。計算条件は Cheng らの実験^[12]に従う。ノズル直径 D は2mm、水素噴出速度は680m/s、ノズル直径に基づくレイノルズ数は13600である。静止空気、噴出する水素はともに、圧力 1.01325×10^5 Pa、温度280Kとする。実験では浮き上がり高さ約7Dの浮き上がり火炎が観察されている。

計算格子は構造格子を用い、計算領域は $-15D \leq X \leq 50D$ 、 $-20D \leq Y \leq 20D$ 、 $-20D \leq Z \leq 20D$ として、格子点数は 8,798,744 とした。反応領域および噴流周辺における格子幅は 0.1mm とする。また、ノズルの助走区間を $-15D \leq X \leq 0$ とする。境界条件としては、ノズル流入部 ($X = 0$) に、静止空気に水素が噴出したときに所定の速度を与える全温全圧に固定し、流入水素にあたる値の $\xi = 1.0$ を与える。噴出速度を計算領域から外挿し、与えられた全温全圧から断熱条件の関係を用いて噴出温度、密度を求める。計算領域外部境界は流出境界を除き、静圧 ($= 1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$) を固定し、その他の各物理量を計算領域から外挿する。ノズル内壁は滑り壁条件、ノズル外壁は断熱壁条件とする。スカラー G については、計算開始時に全計算領域で $G = 0$ を与え、流れ場が安定するまで、混合分率の輸送に対し未燃状態の化学組成のみを与え非燃焼計算を行う。その後、手法 1 ではノズル近傍 ($5D \leq X$) かつ両論混合比近傍 ($0.02 \leq \xi \leq 0.04$) の領域に $G = 0.5$ 、手法 2 では同領域に $G = 0$ を与え、 G 分布の発達を促す。さらに、手法 2 では、再初期化処理を 30step おき (時間刻み $\Delta t \approx 2.98 \times 10^{-8} [\text{s}]$ とする) に行い、再初期化処理の実行領域における G 値の残差の平均が 10^{-7} 以下となるとき収束とみなす。前述の式(21)において $\alpha = 2.0$ とし、先行研究^[13]にならぬ数値的安定性のため火炎面の最近傍 ($|G| < 0.5\alpha$) の再初期化処理は行わない。

非燃焼計算安定後に与える G の初期値は、その物理的意味から、未燃であることが確実な領域に $G = 0$ 、火炎が確実に存在する領域に $G = G_0$ を与えることが理想的となる。しかし、特に手法 1 では、実際には未燃である領域に $G = 0.5$ を与えた場合、そのまま未燃領域に初期 G 値が残り発熱を引き起こすおそれがある。前述の G 初期条件より上流側に $G = 0.5$ を与える条件についてその後の G 分布の発達を比較し、同様の火炎形状を得たことから、本初期条件設定の妥当性を確認している。また、先行研究^[2]にならぬ、手法 1 による計算では、火炎基部に拡散的に広がる G 値による非物理的な発熱を抑えるため、 $X \leq 0.5D$ の領域では $\tilde{Y}_S = Y_{S,unburned}$ とする。

化学反応モデルは 9 化学種 ($\text{H}_2, \text{O}_2, \text{OH}, \text{H}_2\text{O}, \text{H}, \text{O}, \text{H}_2\text{O}_2, \text{HO}_2, \text{N}_2$) 17 反応モデル^[14]を用いる。十分な数の化学種を考慮しており既燃ガスの温度を精度よく予測できること、その反面比較的少ない素反応数すなわち小さな計算負荷で妥当な層流火炎速度を与えることから、このモデルを選択した。分子拡散については、濃度勾配拡散を仮定する。空気の組成は体積分率で O_2 22%、 N_2 78% とした。

Flamelet ライブラリは、FlameMaster^[15]を用い層流対向流拡散火炎の詳細計算を行い作成する。ライブラリ作成におけるスカラー消散率 χ は $0.001 \leq \chi \leq 158.14$ (対向流拡散火炎における消炎時の値) を 18 分割して与えた。なお、ここで混合分率および χ の SGS 変動は考慮していない。 χ は式(22)によって算出され、 ξ とともにライブラリを線形近似で内挿した値から、流れ場に対応する局所質量分率を参照する。式(22)における D は拡散係数である。その後、式(18)または式(21)を用いて修正した局所質量分率に対し、エネルギーバランス式から算出される温度を初期値として、算出する全エネルギーが保存するようにニュートンラフソン法を用い温度を算出する。層流火炎速度 s_L は、本研究で用いた化学反応モデルを一次元層流予混合火炎解析コード PREMIX^[16]に組み込むことで、混合分率に対応する値として層流火炎速度ライブラリを作成した。

$$\chi = 2D|\nabla\xi|^2 \quad (22)$$

4. 結果と考察

計算結果として、手法 1 による結果を図 1・図 2、手法 2 による結果を図 3・図 4 に示す。図 1・図 3 は計算安定後の瞬時の $G = G_0$ 等値面である。図 2・図 4 は主流流速 u ・乱流燃焼速 s_T として、図 1・図 3 の計算結果において $u = s_T$ となる等値面を可視化したものである。

図 1・図 3 において、ノズル噴出部 ($X = 0$) から $G = G_0$ 等値面までの鉛直方向の最短距離 (飛び地のように存在する G は考慮しない) を、火炎の浮き上がり高さとみなす。図 1 では約 13D、図 3 では約 9.5D の浮き上がりがみられた。図 1 と図 3 の比較から、手法 1 では手法 2 に比べ G が拡散的に広がり、火炎が分厚くなる傾向がみられた。さらに、手法 1 では G の拡散により火炎基部の $|\nabla G|$ および火炎伝播によるソース項 (式(13)) が手法 2 よりも小さく見積もられ、浮き上がり高さが大きくなる傾向がみられた。図 2・図 4 から、双方の手法において図 1・図 3 で示す火炎面近傍で主流流速と乱流燃焼速度が釣り合う領域が確認され、火炎浮き上がりのメカニズムが再現されていることが確認できた。

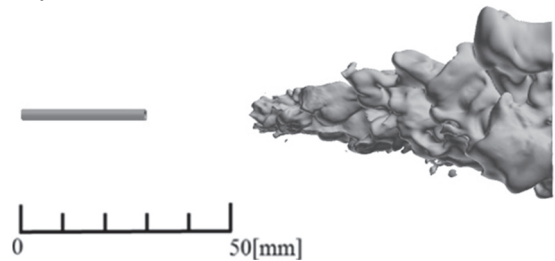


図 1 G 等値面 (手法 1: $G = G_0 = 0.5$)

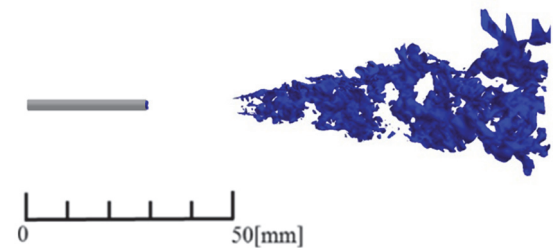


図 2 主流流速と乱流燃焼速度の比較
(手法 1: $u = s_T$ となる可燃領域を可視化)

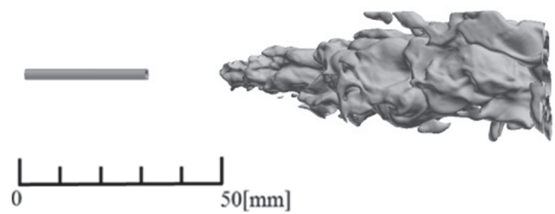


図 3 G 等値面 (手法 2: $G = G_0 = 0$)

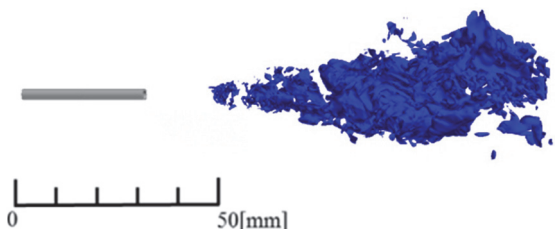


図 4 主流流速と乱流燃焼速度の比較
(手法 2: $u = s_T$ となる可燃領域を可視化)

5. 結論

Flamelet approach/G 方程式に基づく燃焼流体解析コードの開発を行い、乱流燃焼速度モデルとスカラーGの二種類の評価手法に対し、噴流浮き上がり火炎を対象に数値実験を行った結果、以下の知見が得られた。

・手法1および手法2の双方において、主流流速と燃焼速度のつり合いからなる、火炎の浮き上がりを捉えることができた。手法2に比べ手法1では、Gの拡散により火炎伝播によるソース項が小さく見積もられ、浮き上がり高さが大きくなる傾向がみられた。

なお、手法2において式(20)の α が計算結果に与える影響、および火炎最近傍の再初期化処理の取り扱いについては引き続き検討を行う。

6. 謝辞

本解析結果は、宇宙航空研究開発機構が所有する高速流体解析ソフトウェア「FaSTAR」を利用することにより得られたものである。また、本解析を行うにあたって、宇宙航空研究開発機構のスーパーコンピュータシステム(SORA-MA)を利用した。

参考文献

- 1) Williams, F.A., Combustion Theory(2nd ed.), 1985, Addison-Wesley
- 2) 谷口伸行, 日本数値流体学会学会誌, 第11巻, 第4号, 2003
- 3) 橋本敦, 村上桂一, 青山剛史ら, 第42回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 1C9, 2010
- 4) Hirohata, N., Kobayashi, T., N., Taniguchi, Proc. of third international symposium on turbulence and shear flow phenomena, 2003
- 5) Peters, N., Turbulent Combustion, 2000, Cambridge University Press.
- 6) Oran, E., Boris, J., Detailed Modeling of Combustion Systems, Prog. Energy Combustion Sci., 7, pp.I-72
- 7) Burcat, A., Thermochemical Data for Combustion Calculations, Combustion Chemistry(W. C. Gardiner, Ed.), pp.456-504, Springer, 1984
- 8) Smith, T. M, Menon, S. , and MxMurty, P. A. , AIAA 94-0677, 32nd Aerospace Sciences Meeting, 1994
- 9) T. Poinso and D. Veynante, Theoretical and Numerical Combustion, R. T. Edwards, 2001
- 10) K. J. Nogenmyr, P. Petersson, X. S. Bai, et al., Proc. of Combust. Institut., 2007
- 11) Sussman, M., Smereka, P., Osher, S., Journal of computational physics 114(1994)
- 12) Cheng, T. S., Wehrmeyer, J. A. and Pitz, R. W., Combust. Flame, 91:323-345(1992).
- 13) 坪郷浩一, 朝位孝二, 羽田野袈裟義, 応用力学論文集, Vol.6, pp.201-208, 2003
- 14) N. Peters, B. Rogg, Flame Calculations with Reduced Mechanisms in Reduced Kinetic
- 15) H. Pitsch, A C++ Computer Program for 0-D Combustion and 1-D Laminar Flame Flame Calculation, RWTH Aachen, 1998
- 16) Kee, R. J., Grcar, J. F., Smooke, M. D. and Miller, J. A., Sandia Report SAND85-8240(1985)