

## 着火燃焼を伴う噴出水素流の数値解析

高山文雄\* 滝 史郎\*\* 藤原俊隆\*\*\*  
林 光一\*\*\* 桜井 明\*\*\*\*

Numerical Simulation of Ignition of Hydrogen  
Jet in Hot Air

by

Fumio TAKAYAMA  
*Iwaki Meisei University*

Shirou TAKI  
*Fukui University*

Toshitaka FUJIWARA, Koichi HAYASHI  
*Nagoya University*

Akira SAKURAI  
*Tokyo Denki University*

ABSTRACT

The purpose of this study is to clarify the nonsteady aspects of mixing and ignition of hydrogen jets injected into air heated by rapid compression. A numerical model for hydrogen jets undergoing chemical reaction is developed on the basis of experimental findings. Basic equations for an axisymmetric and turbulent reacting gas flow are discretized by the application of the second order explicit MacCormack method and the Flux-Corrected Transport smoothing technique. The turbulence is modeled by the k- $\epsilon$  two equations model.

General patterns of the computed density distribution of the jet compare favorably with the corresponding experimental results deduced from Schlieren photographs. The ignition time obtained from the rise in temperature and the amount of water production in the computation are generally consistent with those of hydrogen jet in the experiments.

1. はじめに

水素を高温の空気中に噴出させ自己着火させる

現象は、ディーゼルサイクル式の水素エンジンの開発の基礎と関連して興味ある問題である。これは、非定常混合と急激な発熱反応をともなう複雑な現象であるが、これまでにいくつかの研究が行われている。実験の研究では、衝撃波管でレーザー破膜を利用した鈴木、足立<sup>1)</sup>によるもの、反射衝撃波を利用した石井ら<sup>2)</sup>によるもの、ピストン圧縮を利用したHigashino<sup>3)</sup>

---

\* いわき明星大学  
\*\* 福井大学  
\*\*\* 名古屋大学  
\*\*\*\* 東京電機大学

らによるものなどがある。理論的研究としては、筆者ら<sup>4)</sup>の古典的乱流モデルを考慮した数値計算によるものがある。

ここでは、さらに高精度の解析を行うために  $k-\varepsilon$  2 方程式乱流モデルを考慮した圧縮性 Navier-stokes 方程式にたいして数値計算を行った。数値計算は、2 次の陽的 MacCormack 法と FCT 法スムーズイング法を用いた。諸条件は鈴木、足立の実験<sup>1)</sup>に対応したものをを用いた。解析は、実験結果との比較による数値計算の有効性の検証、水素噴流の構造、着火時間および着火燃焼の構造などについて行った。

## 2. 基礎方程式

$k-\varepsilon$  乱流モデルを考慮した軸対称圧縮性 Navier-Stokes 方程式は

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial rF}{\partial r} + \frac{\partial G}{\partial z} + H = 0 \quad (1)$$

で与えられる。ここに  $f, F, G, H$  はそれぞれ

$$f = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ \rho e \\ \rho Y_j \\ \rho k \\ \rho \varepsilon \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho v \\ \rho u v - \sigma_{rz} \\ \rho v^2 - \sigma_{rr} \\ \rho \left( e + \frac{p}{\rho} \right) v - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial r} - \sigma_{rr} v - \sigma_{rz} u \\ \rho Y_j v - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_e} \frac{\partial Y_i}{\partial r} \\ \rho k v - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial r} \\ \rho \varepsilon v - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_e} \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p - \sigma_{zz} \\ \rho u v - \sigma_{rz} \\ \rho \left( e + \frac{p}{\rho} \right) u - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_h} \frac{\partial h}{\partial z} - \sigma_{rz} v - \sigma_{zz} u \end{bmatrix},$$

$$H = \begin{bmatrix} \rho Y_j u - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_e} \frac{\partial Y_i}{\partial z} \\ \rho k u - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial z} \\ \rho \varepsilon u - \frac{\mu_{eff}}{\sigma_e} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\sigma_{\phi\phi}}{r} \\ 0 \\ (\dot{\rho}_j)_c \\ \rho(G_{kt} - \varepsilon) \\ \rho \frac{\varepsilon}{k} (C_1 C_{kt} - C_2 \varepsilon) \end{bmatrix}$$

$$G_{kt} = \frac{\mu_T}{\rho} \left\{ 2 \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + \left( \frac{v}{r} \right)^2 \right] + \left( \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial r} \right)^2 \right\}$$

である。 $\rho, p, u, v, e, Y_j, k, \varepsilon, h$  は、それぞれ密度、圧力、軸方向の速度、半径方向の速度、比エネルギー、化学種  $j$  の密度分率、乱流エネルギー、乱流エネルギー消散率、エンタルピーを表す。また、 $(\dot{\rho}_c)_j$  は化学反応による化学種  $j$  の生成率である。

応力は

$$\sigma_{rz} = \mu_{eff} \left( \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right), \quad \sigma_{rr} = 2 \mu_{eff} \frac{\partial v}{\partial r}$$

$$\sigma_{zz} = 2 \mu_{eff} \frac{\partial u}{\partial z}, \quad \sigma_{\phi\phi} = 2 \mu_{eff} \frac{v}{r} \quad (2)$$

で与えられる。

有効粘性率  $\mu_{eff}$  は分子粘性率  $\mu$  と渦粘性  $\mu_T$  の和

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_T \quad (3)$$

で与えられる。渦粘性率は

$$\mu_T = C_T \frac{\rho k^2}{\varepsilon} \quad (4)$$

で定義される。 $C_T$  および(1)式に現れる  $C_1, C_2, \sigma_k, \sigma_e, \sigma_h, \sigma_c$  は乱流輸送の経験定数である。

理想気体の状態方程式および比エネルギー  $e$  は

$$p = \rho T R^0 \sum \frac{Y_j}{w_j} \quad (5)$$

$$e = h - \frac{p}{\rho} + \frac{1}{2} (u^2 + v^2) + k \quad (6)$$

を用いた。ここで、 $T$ ,  $R^0$ ,  $w_j$  はそれぞれ温度、気体定数、化学種  $j$  の分子量である。

エンタルピー  $h$  は

$$h = \sum_j (C_{pj}T + h_j^0) \quad (7)$$

で定義される。ここに、 $C_{pj}$  は化学種  $j$  の定圧比熱、 $h_j^0$  は化学種  $j$  の生成エンタルピーである。

### 3. 計算スキーム

計算スキームとしては、現象が非定常な流れであり、高速な圧縮波が存在するので、このような場合に有効な2次の陽的MacCormack法を用いた。そしてさらに化学反応による大きな発熱現象に高速で起きる非線形不安定性があり、これを防ぐためにFCTスムーズイング法を併用した。時間分割法を用いた陽的MacCormack法では、(1)式を  $r$  方向、 $z$  方向の式に分割する。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial rF}{\partial r} + \Phi = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial z} + \Psi = 0 \quad (9)$$

$L$  は(8)式、 $M$  は(9)式を基にしたMacCormack-FCT演算子とすると、 $t = (n+1)\Delta t$  における物理量  $f$  は  $t = n\Delta t$  の値を基にして

$$f^{n+1} = L_{\frac{\Delta t}{2}} M_{\Delta t} L_{\frac{\Delta t}{2}} f^n \quad (10)$$

で与えられる。ここで、 $\Delta t$  は時間刻みである。

### 4. 初期・境界条件

初期・境界条件は、基本的には実験<sup>1)</sup>に対応するものを用いた。円筒形の反応器は、左端の中央に直径1mmの噴出口があり、右端は開放されているとした(図1)。噴出させる水素は、貯気槽から音速ノズルを通り、円筒形の反応器内に噴出するとした。

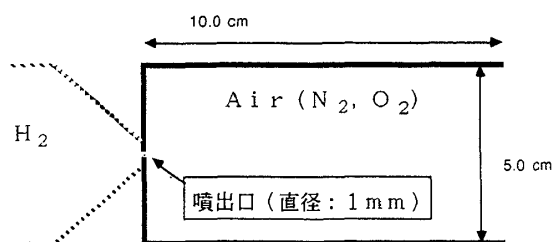


図1 円筒形の反応器

表1 初期・境界条件

位置	温度 K	圧力 atm	速度 m/s
貯気槽 *1	300.0	6.0	$u=0$ $v=0$
噴出口 *1	250.0	3.21	$u=1202.$ $v=0$
反応器内 *2	300.0 1250.0 1400.0	1.0	$u=0$ $v=0$

\*1: 境界条件

\*2: 初期条件 ( $t=0$ )

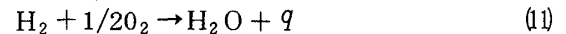
噴出口での水素の噴出条件は、等エントロピーの計算によった。また、反応器内には酸素と窒素からなる空気が満たされているとし、表1に示す初期・境界条件にたいして計算を行った。

反応器の側壁の境界条件は、実際には粘性流体を扱っているので粘着条件を用いる必要があるが、ここで解析する流れは壁側は重要でないので、鏡面反射条件を用いた。

計算は、円筒形の反応器内について、その対称性を考慮して上半分を ( $z=$ ) 200  $\times$  ( $r=$ ) 50 の等間隔メッシュで行った。

### 5. 化学反応

実際、酸水素の化学反応は、十数個に及ぶ素反応によって構成されるが、ここでは計算時間を考慮して、次の1段階反応<sup>5)</sup>を用いた。



$q$  は水の発熱量であり、 $q = 1.67 \times 10^5$  J/mole の値を用いた。水の生成率  $W$  は、

$$W = \kappa [H_2]^{1/2} [O_2]^{1/2} \text{ mole/m/s} \quad (12)$$

で与えられ、反応速度定数  $\kappa$  は

$$\kappa = 1.25 \times 10^8 \rho \exp(-9850/T) \text{ 1/s} \quad (13)$$

であり、 $[ ]$  は濃度 (mole/m) である。したがって、

(1)式の  $(\dot{\rho}_c)_j$  は水の生成率  $W$  を用いて

$$\begin{aligned} (\dot{\rho}_c)_{O_2} &= -1/2 w_{O_2} W \\ (\dot{\rho}_c)_{H_2} &= -w_{H_2} W \\ (\dot{\rho}_c)_{H_2O} &= w_{H_2O} W \end{aligned} \quad (14)$$

となる。

### 6. 熱力学定数と輸送係数

各化学種に対する分子量と定圧比熱を表 2 に示す。  
乱流輸送係数は、経験的に

$$C_T = 0.09, C_1 = 1.44, C_2 = 1.95,$$

$$\sigma_k = 1.00, \sigma_\epsilon = 1.30, \sigma_h = 0.70, \sigma_c = 0.60$$

(15)

とした。

### 7. 解析結果

#### (1) 水素噴流の解析

貯気槽にある水素を表 1 の条件のもとで、初期空気温度  $T_a = 300\text{K}$  の反応器内に噴出させた場合に対して、計算による密度分布の結果とこれに対応する実験シュリーレン写真を図 2 に示す。この密度分布図から、前面衝撃波が発生し時間と共に下流方向へ発展していることがわかる。また、反応器の側壁に前面衝撃波が反射し、反射衝撃波となって発展していくことが認められる。一方、これに対応した実験シュリーレン写真においても前面衝撃波、反射衝撃波が発展している。

水素噴流に対しては、計算結果および実験シュリーレン写真のどちらも同様な形状を示している。さらに、定量的に数値計算の有効性を調べるために時

表 2 計算に利用した化学種の諸定数

物理量	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O
分子量 W <sub>i</sub> (g/mole)	28.0	32.0	2.0	18.0
定圧比熱 C <sub>p i</sub> (erg/g/K)	1.23 × 10 <sup>7</sup>	1.13 × 10 <sup>7</sup>	1.59 × 10 <sup>8</sup>	2.93 × 10 <sup>7</sup>

間に対する中心軸上での前面衝撃波および水素噴流の先端部の位置について解析した(図 3)。この図から、前面衝撃波の時間発展は実験の結果と良く一致している。また、水素噴流はほぼ 1000 μs まで実験の結果と一致した時間発展を示している。

#### (2) 水素噴流の構造

乱れの場合の構造についてストリークラインにより解析を行った。図 4 のストリークラインは初期空気温度  $T_a = 300\text{K}$  のもので、これは反応器の左端の壁の最近接メッシュに中心軸から半径方向に 1 メッシュおきに 5 個のマークをおき、これを 5 サイクル (=2.02 μs) 毎に発生させ表示したものである。5 個のマークを発生させたにもかかわらず、ストリークラインは 2 本しか識別できない。これは、外側 3 個のマークが噴出口付近の再循環流により中心部に流されるからである。2 つのラインは噴流中心部を通り先頭部で大きく渦を巻いていることがわかる。さ

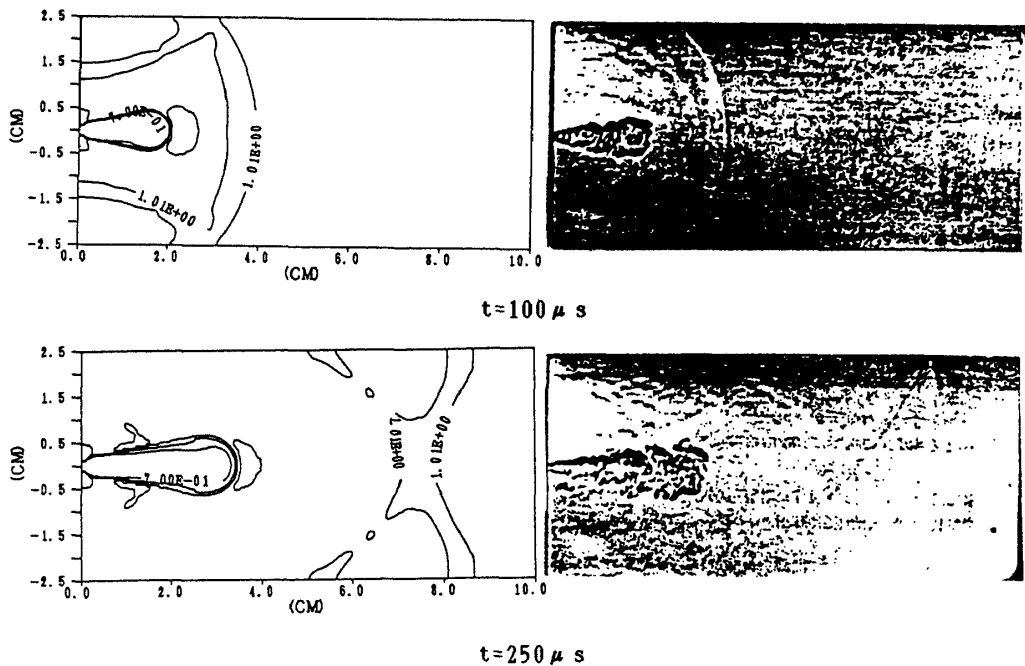


図 2 数値計算による密度分布と実験シュリーレン写真 ( $T_a = 300\text{K}$ )

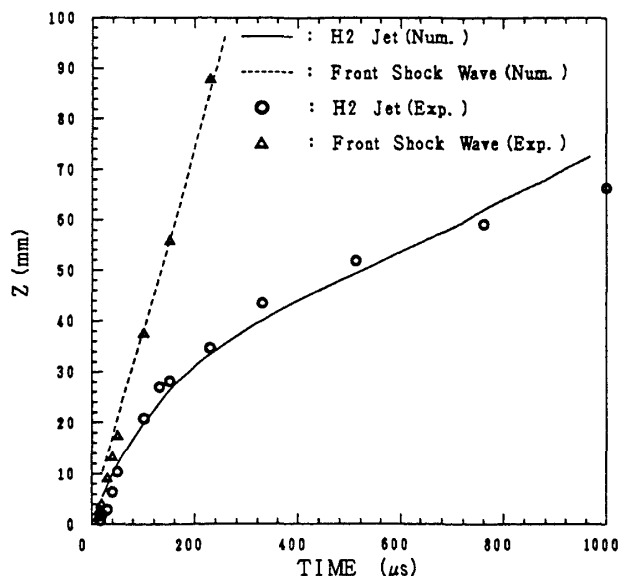


図3 中心軸上での前面衝撃波と水素噴流の時間発展 ( $T_a = 300\text{K}$ )

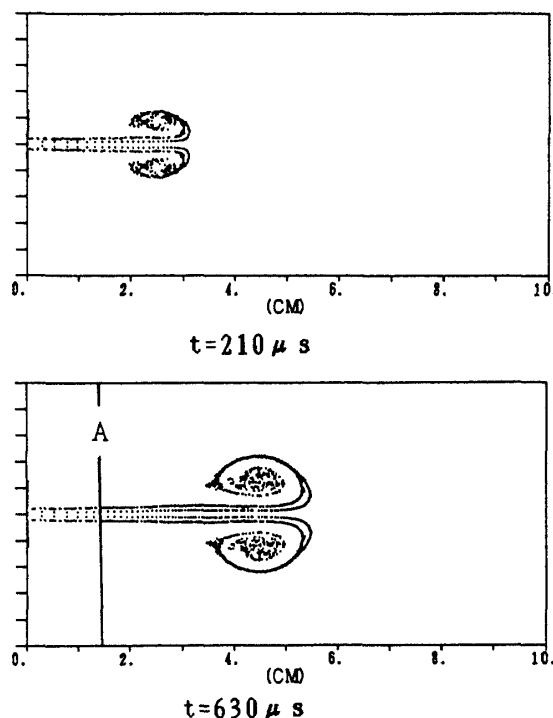


図4 ストリークライン ( $T_a = 300\text{K}$ )

らに、その渦の内部には渦巻状にマークが混在している。この領域で、水素噴流と再循環流によって運ばれた空気、および周囲の空気が渦により激しく混合していることが考えられる。そして時間の経過と共に渦は半径方向に大きくなるが、噴流の構造に変化は見られない。

ここで、この水素噴流の軸方向の速度分布と噴流の理論との比較を行い、その一致性について調べた。噴流の理論は、定常噴流に対するもので、

$$u/u_0 = \exp(-0.693 r^2/b^2) \quad (16)$$

で与えられる。ここで、 $u_0$  は中心軸上の  $z$  方向の速度、 $b$  は速度  $1/2 u_0$  となる半径 (半値幅)。この式は定常流に対する式であるから、図4においてすでに定常に達しているA線上における分布について調べた (図5)。この図より、噴流中心部と端部を除けばほぼ一致していることがわかる。これは、他の定常な場所でも同様な傾向を示した。

(3) 着火燃焼の解析

初期空気温度  $T_a = 1250, 1400\text{K}$  の場合について着火時間および着火燃焼構造について解析した。図6に  $T_a = 1400\text{K}$  の場合の温度分布、 $\text{H}_2\text{O}$  モル分率分布 ( $X_{\text{H}_2\text{O}}$ ) を示す。  $t = 141\mu\text{s}$  で  $T/T_a \geq 1.5$  の領域が現われ、時間の経過と共に下流方向に大きくかつ上流方向に小さく広がっている。また、これに対応して、水の量が  $X_{\text{H}_2\text{O}} \geq 0.24$  となる領域が増大

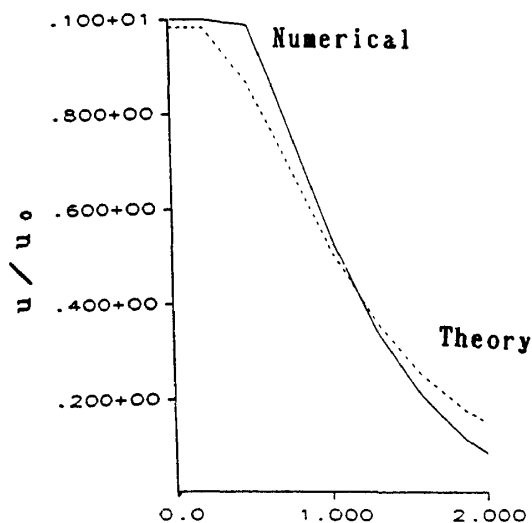


図5 水素噴流の速度分布 (計算結果と理論の比較)

している。これは化学反応による発熱現象、すなわち着火と燃焼の伝播である。

ここで、最初に温度が  $T/T_a \geq 1.5$  となった点を、着火点と定義して、そこでの温度、酸素、水素、水の各物理量の時間発展を図7に示す。温度上昇、水の生成量の増加は酸素が減少していくのに対応している。また、温度上昇が起こる  $t = 80 \sim 130\mu\text{s}$  では水素が見られないが、それは燃焼により水となっ

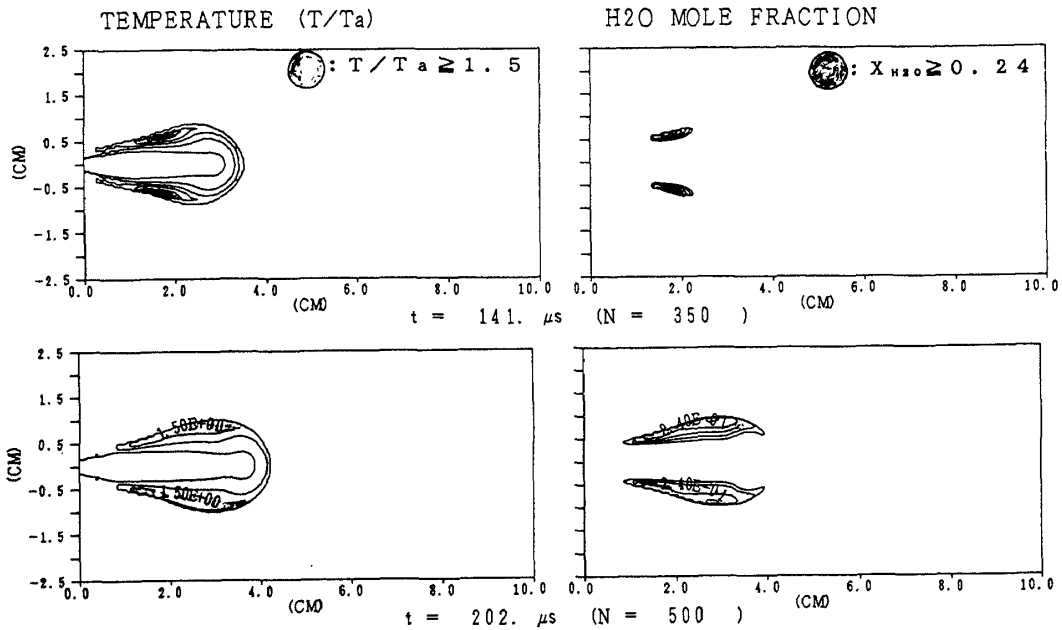


図 6 温度分布と H<sub>2</sub>O モル分率分布 (T<sub>a</sub> = 1400 K)

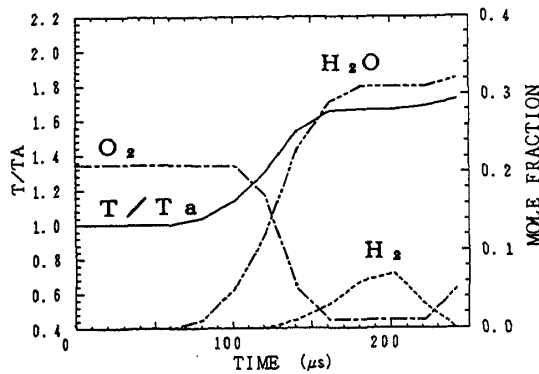


図 7 着火点における各種物理量の時間発展 (T<sub>a</sub> = 1400 K)

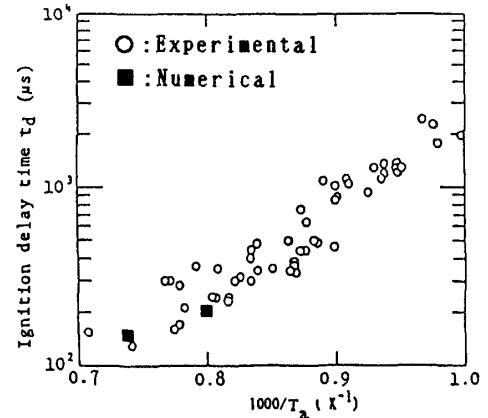


図 8 着火時間

たものと考えられる。さらに、温度、水が 2 回 ( $t = 130 \mu s$  と  $200 \mu s$ ) 上昇傾向を示していることから燃焼の振動が起こっていることが見られ、興味ある結果である。これは、 $T_a = 1250 K$  の場合でも同様な傾向を示した。着火時間  $t_d$  は温度曲線で時間微分が最大値をとる時間とする。 $T_a = 1400 K$  では、 $t_d = 130 \mu s$ 、 $1250 K$  では  $t_d = 200 \mu s$  で、これは対応する実験結果の着火時間<sup>6)</sup>と一致した(図 8)。

着火燃焼構造として、 $T_a = 1400 K$  の場合のストリークラインを図 9 に、また着火点を通る半径方向の物理量の分布を図 10 にそれぞれ示した。 $t = 100 \mu s$  では、図 7 に示すようにまだ着火点における温

度は高くなく、着火には至っていない。しかし、図 9 を見るとその点でマーカが混在しており、水素、噴流によって運ばれた空気、および周囲の高温の空気が激しく混合し、徐々に化学反応が進み着火に至ると考えられる。図 9 の  $t = 202 \mu s$  は着火時間を過ぎた後のものであるが、噴流の先頭は進み着火点での大きな乱れは見られない。ここで、図 10 で着火点を通る半径方向の線(図 9 の直線)上での各種物理量の分布を調べると、高温領域が水の生成量と対応して着火点より外側に広がっており、拡散火炎の様相を呈している。

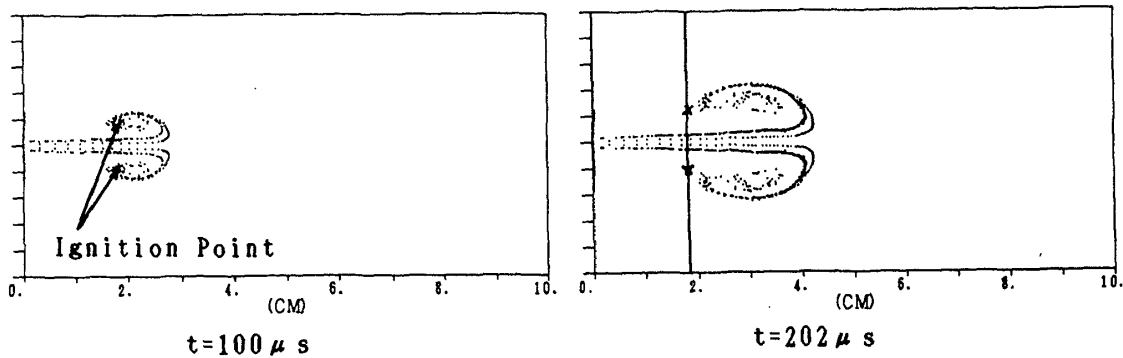


図9 ストリークライン ( $T_a = 1400\text{ K}$ )

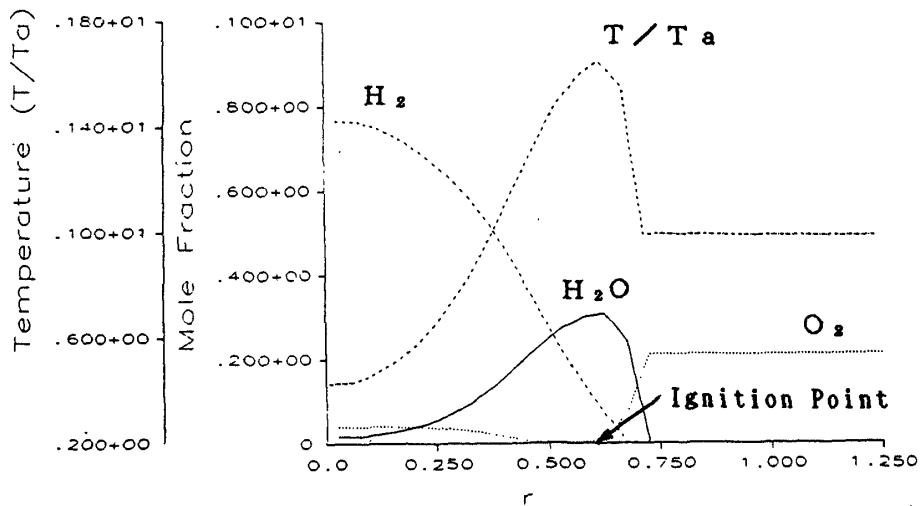


図10 着火点半径方向線上での各種物理量の分布  
( $T_a = 1400\text{ K}$ ,  $t = 202\ \mu\text{s}$ )

### 8. おわりに

### 参考文献

$k-\epsilon$  乱流モデルを考慮した数値モデルを数値計算した結果、次のことが明らかになった。

水素噴流の形状、およびその時間発展は、対応する実験結果と一致し、モデルの有効性が示された。

水素噴流の内部構造として、その先頭部に大きな渦があり、その内部には渦巻き状の乱れ場がある。

着火燃焼解析では、着火時間は対応する実験結果と一致した。また、着火点における各種物理量の時間発展の解析で燃焼の振動現象が見られた。

- 1) 鈴木, 足立: セコム科学技術振興財団研究成果報告書, 1984, p.55.
- 2) 石井, 他: 機論, 52-474, B(1985), p.965
- 3) Higashino, F., et al.: Dynamics of Reactive Systems, 105, 1986, p. 407.
- 4) Takayama, F., et al.: Dynamics of Reactive Systems, 105, 1986, p. 25.
- 5) Krobeinikov, V.T., et al.: Astronautica Acta, 17, 1972, p. 529.
- 6) 足立, 鈴木: セコム科学技術振興財団研究成果報告書, 1984, p.62.

