

CeNSS を用いた水素噴流浮き上がり火炎詳細シミュレーション

溝淵泰寛、新城淳史、小川哲

JAXA IT センター

Detailed simulation of a hydrogen jet lifted flame by CeNSS

by

Yasuhiro Mizobuchi, Junji Shinjo, Satoru Ogawa

ABSTRACT

A hydrogen jet lifted flame is numerically simulated by DNS (Direct Numerical Simulation) approach using CeNSS (Central Numerical Simulation System) at JAXA. A detailed chemistry and rigorous transport properties are used. A hugely massive simulation with about 200 million grid points is conducted to see the dependency of the flame structure on the grid density comparing with the previous simulation with 23 million grid points. The present simulation reproduces almost the same flame global structure as obtained by the previous one, telling that the lifted flame consists of three elements, leading edge flame, inner rich premixed flame, outer diffusion flame islands, although improvement of resolution is observed in some locations, and indicates that the data obtained with the resolution of the previous simulation is worth analysis. A long-term simulation is conducted with 23 million grid points in order to look into the details of the phenomena of rather long time scales. The term is long enough to observe several fluctuations penetrating into the leading edge flame. The observation reveals two production (or amplification) processes of the outer diffusion flame islands. One is by the vigorously turbulent behavior of the inner rich premixed flame formed inside the lifted flame. The other takes place when a rather large perturbation penetrates into the leading edge flame. The later process is strongly related to the stabilization mechanism of the leading edge flame.

1. はじめに

噴流浮き上がり火炎は燃焼にかかわる様々な現象を含んでおり、その詳細構造および安定化機構の解明は燃焼研究のなかでも大きな興味の対象となっている。著者らは航技研 NWT(Numerical Wind Tunnel)を用いて、詳細化学反応機構と厳密な輸送特性による数値シミュレーションを行うことにより、水素噴流浮き上がり火炎の全体的な構造を把握してきた[1]。Flame Index [2]を用いた解析により水素噴流浮き上がり火炎は単なる一つの火炎ではなく、先端火炎、内側にある乱流過濃予混合火炎、外側にある島状拡散火炎という三つの火炎要素から構成されていることが明らかとなった。それら火炎要素にはそれぞれ重要な研究課題が存在している。先端火炎においては空間的には極めて三次元的で時間的にはゆっくりと非定常な火炎の安定化機構の問題、内側乱流予混合火炎においては従来の層流火炎理論が適応できないような火炎構造についての問題、外側島状拡散火炎においては離散的な反応体積の生成過程および燃焼過程の問題が存在する。これらの問題を詳細に検討するためには、十分長い時間燃焼場を観察すること、また特に乱流火炎についてはより細かい計算格子を用いて現象を解像することが望ましい。しかしながら、従来のシステムでは、例えば、先端火炎に擾乱が加わった場合の火炎の挙動を理解するのに十分な時間を観察しデータを保存することは極めて困難であった。また計算機メモリの制限により、計算格子は火炎先端周辺で密であり下流に行くに従って、また中心軸から離れるに従って粗となっていた。これは先端火炎が火炎全体の安定性を支配しており、当量比1付近の予混合火炎が存在するため密な格子が必要であったこと、また外側の拡散火炎は歪み速度が極めて小さく火炎が比較的厚いと予想されたためである。しかしながら火炎内側では乱れが極めて強く火炎の位置は激しく移動し、予混合火炎が格子が粗な領域にまで達する場合も観察された。

一昨年度 NWT の 30 倍の性能を持つ CeNSS (Central Numerical Simulation System) が導入されたことにより、解像度を上げた計算の実行、および火炎をより長時間にわたって観察することが可能となった。従来の計算は約 2300 万点の格子点を用いていたが、乱流火炎を更に詳細に調べるため、また結果の格子依存性を調べるため、新しく 2 億点の格子点を用いた計算を行った。また長い時間火炎を観察することが可能になったことにより、比較的大きな時間スケールで起こっている火炎の挙動を理解することも可能

となった。その結果、2 種類の島状拡散火炎の生成過程が明らかとなった。またその一つは火炎安定化機構という点から見ても重要な現象である事が分かった。本報告ではこれらの結果について報告する。

2. 計算対象

対象とする火炎は、亜音速水素噴流を静止空气中に噴き出すことにより形成される浮き上がり火炎である。噴射ノズル径は 2mm、噴射速度は 680m/sec であり、空気および噴き出す水素の温度および圧力は、280K、1atm である。実験では浮き上がり高さ 14mm の浮き上がり火炎が観察されている [3]。

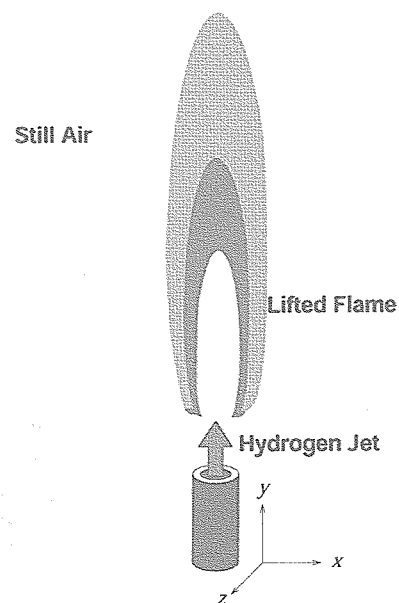


図 1: 計算対象

3. 計算手法

3. 1. 計算モデル

気体は熱的に平衡とする。各化学種の輸送係数は Lennard-Jones の分子間ポテンシャル[4]を用いて評価し、Wilke の法則[5]によって混合気体の輸送係数を求める。分子拡散は二成分系の拡散係数と Fick の法則で評価する。化学反応モデルとしては 9 化学種 (H_2 , O_2 , OH , H_2O , H , O , H_2O_2 , HO_2 , N_2) 17 反応モデル[6]を用いた。各化学種のエンタルピーは JANAF テーブル[7]から引用した。空気の組成は体積分率で O_2 22%、 N_2 78%とした。

3. 2. 支配方程式と離散化

支配方程式は三次元ナビエーストックス方程式と 9 化学種の保存式および状態方程式である。全密度の保存式も補助的に解いている。

支配方程式の離散化には有限体積法を用いる。対流項の離散化には風上三次精度の TVD (Total Variation Diminishing) 数値流束[8,9]を用いている。数値流束の高精度化は特性量を外挿することによって行い、特性量の勾配の符号が変化する場所でも二次精度を維持するように流束制限関数を設定している[10]。粘性および拡散流束は二次精度中心差分で評価している。なお、3 化学種以上の系で二成分系の拡散係数と Fick 則から拡散流束を評価する場合は、拡散による質量流束の総和が有限値となり質量保存則が壊れてしまう。そのため本計算では計算セル境界で拡散流束を補正することにより全質量の保存を確保している[11]。

3. 3. 境界条件

計算領域外部境界には無反射条件[12]を与える。ただし流出境界においては完全には無反射とせず、圧力が 1atm の周りで変動するような特性量の変化を加えている[13]。ノズル出口においては完全乱流管内流れを仮定した全温全圧分布を与え、ノズル壁は滑り壁とする。なおノズル内部は計算しない。

3. 4. 計算格子

従来の計算では計算格子は火炎基部に集中している。計算格子は矩形格子でジェットを中心近傍での格子幅は 0.05mm である。これは実験で測定された着火点まわりでの Kolmogorov スケール[3]の 2~3 倍となっている。また PREMIX[14]を用いて計算した当量比 1 の水素/空気層流混合火炎の水素消費層厚さの約 1/10 である。計算領域はノズル出口中心を原点、ジェット軸方向を y 軸、それに垂直な方向を x, z 軸として、 $-3D < y < 21D$, $-12D < x, z < 12D$ である。格子間隔は不等間隔で中心軸から離れたところ、また下流域においては粗くなっている。ノズルは形状は直方体とし、ノズル上面においてのみ相互に補間しながら計算を進める。総計算格子点数は約 2300 万点である。

これに対し、新しい計算では火炎のほぼ全領域が同じ格子密度 ($\Delta = 0.05\text{mm}$) で覆われている。また吹き出しノズル周りに円筒座標格子を配置し、ノズル形状を再現している。主計算格子である直交格子とノズル周りの円筒格子は y 方向には完全に一致しており、 x - z 平面においてのみ相互に補間しながら計算を進める。総格子点数は約 2 億点である。

3. 5. 並列計算

MPI と OpenMP を組み合わせることによって効率的な並列計算を実現している。以下に 2 億点を用いた計算について説明する。図 2 は領域分割および並列化を示している。

主計算格子である直交格子 (図 2a) 中黒線) は 72 個のサブブロックに、ノズル周りの円筒格子 (図 2b) 中赤線) は 3 個のサブブロックに分割され、それぞれのサブブロックに 1 プロセスが割り当てられる。これらプロセス間の通信は MPI を用いて行われる。各プロセス内での計算は OpenMP を用いたスレッド並列化が行われている。約 290 万点の計算格子点が含まれる主計算格子サブブロックに割り当てられたプロセスには 4 台の CPU が割り当てられている。なお約 13 万点の格子が含まれている円筒格子サブブロックに割り当てられたプロセスではスレッド並列化は行っていない。

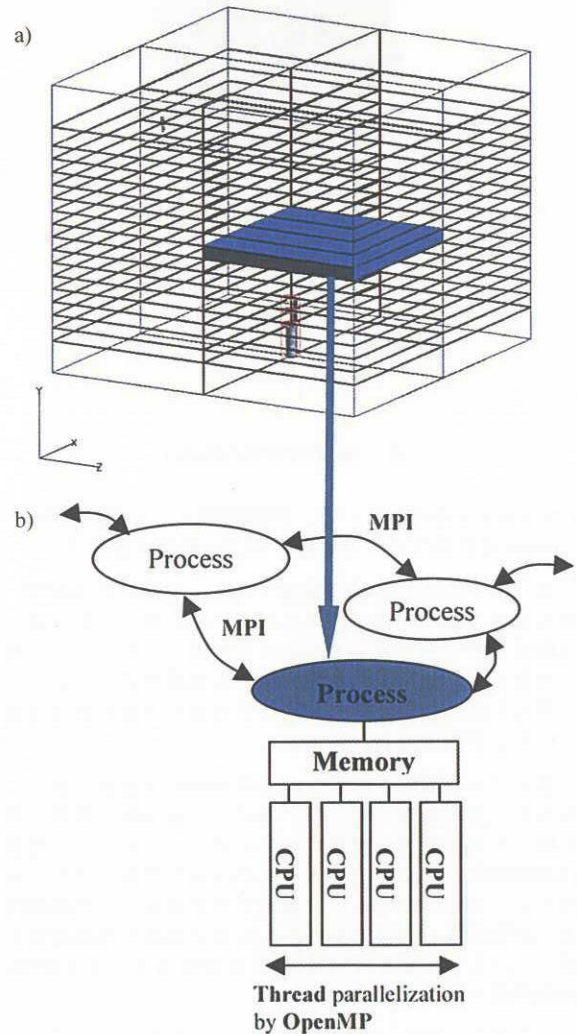


図 2: 領域分割と並列計算

4. 結果および考察

ここでは、まず火炎全体をほぼ同じ格子密度で解像した 2 億点を用いた計算結果を解析し、その全体的な火炎構造を従来得られた火炎構造と比較する。その後、従来の格子密度を用いた長時間にわたった計算を行うことにより明らかになった外側拡散火炎の生成過程について説明する。

4. 1. 2 億点の計算による火炎の構造解析

2 億点を用いた計算は、従来の 2300 万点の計算結果を内挿して得られたデータを初期条件として行われた。使用 CPU 数は 291、計算メモリは約 230GB、計算速度では約

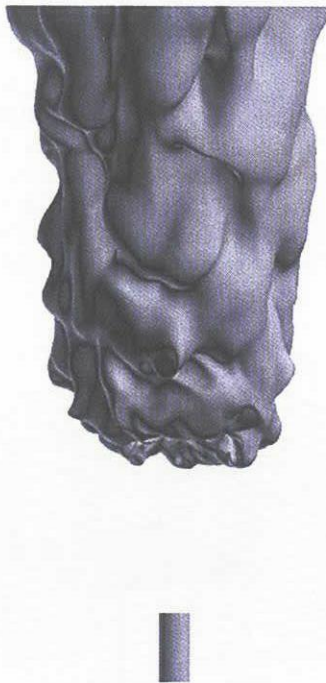


図 3: 温度等値面(1500K)

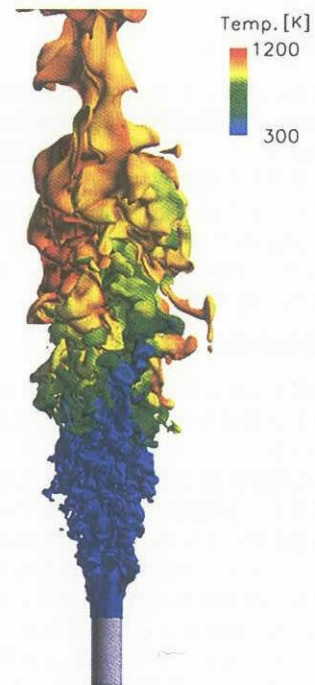


図 4: 水素モル分率等値面(60%) 表面の色は温度分布

120Gflopsを達成している。計算時間としては実時間0.1msecを計算するために約150CPU時間を要する。

図3は1500Kの温度等値面である。従来の計算同様、安定な浮き上がり火炎が捉えられている。浮き上がり高さは実験値よりもやや低く5.5-6.0Dである。しかしながら現象の複雑さや計測結果のあいまいさを考慮すると十分な一致と考えられ、シミュレーションが現象の主要な部分は捉えていると予想される。

図4はある瞬間の水素モル分率60%の等値面であり、表面の色は温度を表している。極めて三次元的で複雑な構造を持った乱流噴流が再現されていることが分かる。燃焼後は拡散係数が急激に上昇するため小さな乱れのスケールは消えてしまい比較的大きな構造だけが残る。この傾向は従来の計算結果と同様であるが、火炎下流域では解像度が上がっているため従来の計算[1]と比較すると、より鮮明に火炎構造が捉えられている。

火炎構造の解析にはFlame Index (以下F.I.) [2]を用いた。F.I. は以下のように定義される。

$$F.I. = \nabla Y_{H_2} \cdot \nabla Y_{O_2} \quad (1)$$

F.I. が正值であれば局所的な火炎モードは予混合火炎、負値であれば拡散火炎である。図5はある瞬間での水素消費速度 $10^4 \text{ mol/m}^3/\text{sec}$ の等値面を示している。表面の色は局所的なF.I.およびmixture fraction [15]によって定義される燃焼モードを表している。赤は過濃予混合火炎、青は希薄予混合火炎、緑は拡散火炎である。従来の計算結果[1]と比較すると火炎下流では格子解像度が上がっているため内側過濃予混合火炎の形状が鮮明に捉えられている。外側拡散火炎では従来の計算に比べ解像度が3倍以上となっているが、その構造は従来の計算と比べてほぼ変化なく島状の火炎が浮き上がり火炎外側に形成されている。また先端火炎は従



図 5: 浮き上がり火炎の全体構造 等値面は水素消費速度 $10^4 \text{ mol/m}^3/\text{sec}$ の等値面であり、表面の色は燃焼モード、赤: 過濃予混合火炎、青: 希薄予混合火炎、緑: 拡散火炎を表している

来の計算と同様、過濃／希薄予混合火炎と拡散火炎から形成されている。

これらのことから、全体的な火炎の構造については従来の計算で十分に表現できていると考えられる。また特に先端火炎および外側予混合火炎については、得られた時系列データを解析することにより詳細な現象を理解できると期待される。以下に時系列データを観察することにより明らかとなった島状拡散火炎の生成／活性化過程について説明する。

4. 2. 内側予混合火炎による島状拡散火炎の活性化および生成

図6は二次元断面内の酸素質量分率分布を示している。図中黒線は当量比1の等値線であり、水素消費速度5000 mol/m³/sec以上の部分が島状拡散火炎として灰色に塗られている。酸素は火炎上流で水素噴流に取り込まれるが、当量比1から過濃条件にある混合気中の酸素の大部分は先端火炎付近で消費されてしまい、先端火炎後流には酸素が存在しない層が形成されている。この層と外側の静止空気間に酸素分子拡散層が形成され、その酸素分子拡散層に沿って島状拡散火炎が分布していることが分かる。



図6: 酸素分子拡散層と島状拡散火炎 色付き等値線は酸素質量分率、黒線は当量比1の等値線、灰色に塗られた部分は水素消費速度5000mol/m³/sec以上の部分を表す

内側予混合火炎は噴流の不安定性が大きく反映された、極めて乱れの強い火炎である。そのため時折、半径方向に大きく突き出ることがあり、外側にある酸素分子拡散層に達したときに島状の拡散火炎を生成し、またそこに島状拡散火炎が存在すればその燃焼を活性化する。

図7は内側予混合火炎が島状拡散火炎の燃焼を活性化する過程の一例を示している。図a)において青矢印で示された内側予混合火炎の一部が黒矢印で示された島状拡散火炎を活性化する過程であり、図a)、b)、c)の間の時間間隔は47.6μsecである。図8はその過程における二次元断面内の

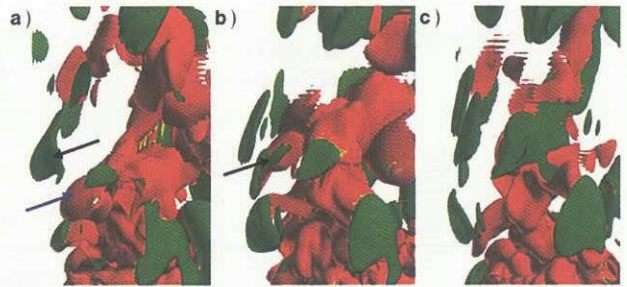
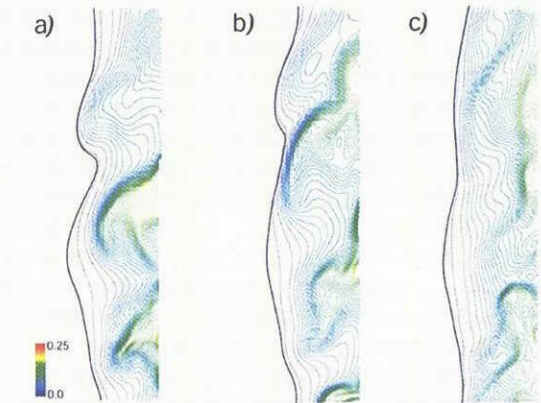
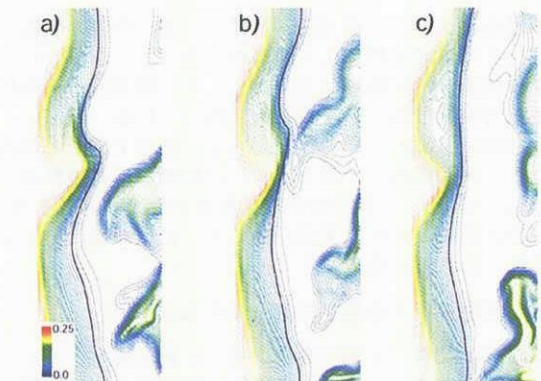


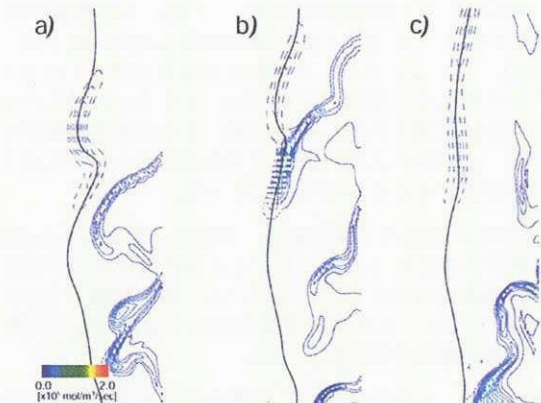
図7: 島状拡散火炎活性化過程 (Δt=47.6μsec)



水素質量分率分布



酸素質量分率分布



水素消費速度分布

図8: 島状拡散火炎活性化時の水素質量分率(上)、酸素質量分率(中)、水素消費速度(下)の時間変化

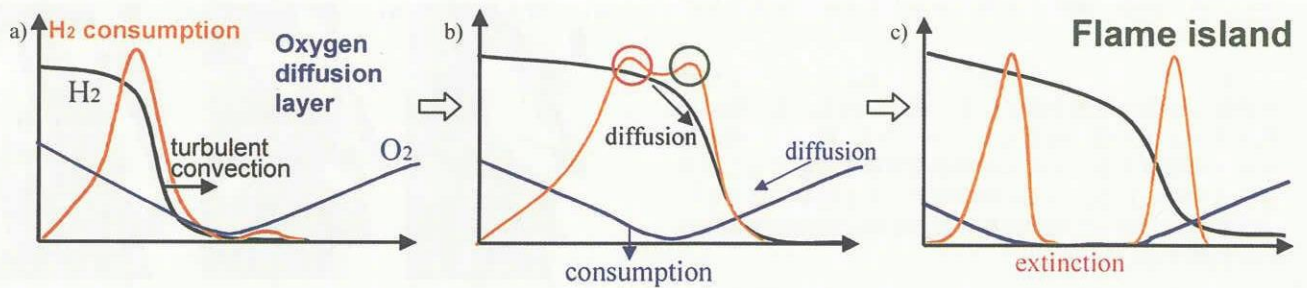


図9: 島状拡散火炎の生成/活性化過程の模式図

水素質量分率（上）、酸素質量分率（中）、水素消費速度（下）の変化を示している。図中黒線は当量比1の等値線であり、水素消費速度分布において予混合燃焼は実線で拡散燃焼は破線で描かれている。時刻 a) で島状拡散火炎に近づきつつある内側予混合火炎は時刻 b) において島状拡散火炎と接触する。この時、内側予混合火炎中の未燃水素が外側の酸素分子拡散層に運ばれることにより拡散火炎付近で大きな水素濃度勾配が現れている。これはそこで水素の分子拡散が増加していることを示している。この水素分子拡散の増加に伴い、拡散火炎における燃焼が活性化され水素消費速度が増加している。その後時刻 c) になると拡散火炎は内側予混合火炎から切り離され再び島状拡散火炎となる。これは酸素質量分率分布を見れば分かるように拡散火炎と予混合火炎の接合部において酸素が消費し尽くされ予混合火炎が局所的に消滅してしまうためである。

この過程をまとめた模式図が図9である。内側の予混合火炎が、その不安定性によって外側に運ばれる (a)。予混合火炎は酸素分子拡散層にまで達し、その時予混合火炎に接した形で拡散燃焼が生成または活性化される (a→b)。その後拡散火炎には外側の空気から分子拡散で酸素が供給されるが、内側にある予混合火炎には酸素が供給されない (b)。このため、予混合火炎中の酸素が燃え尽きてしまい予混合火炎に局所的な消滅が起こり、拡散燃焼部分が切り離されて島状の拡散火炎となる (b→c)。

4. 3. 先端火炎での島状拡散火炎の生成

先端火炎は過濃/希薄予混合火炎、拡散火炎から成っている。先端火炎中には先端火炎全体を安定化させる非常に安定な部分が存在しており、その様な部分では三重火炎 [16] と呼ばれる火炎構造が形成され、外側にある希薄予混合火炎において火炎速度と混合気体の流入速度が釣り合っている [1]。しかしながら、その様な安定な状態はいつまでも続くわけではなく噴流の不安定性により大きな擾乱が加わった場合は三重火炎的な構造は壊れて火炎形状が遷移する。今回、その際に先端火炎付近で島状拡散火炎が生成する過程が存在することが明らかとなった。

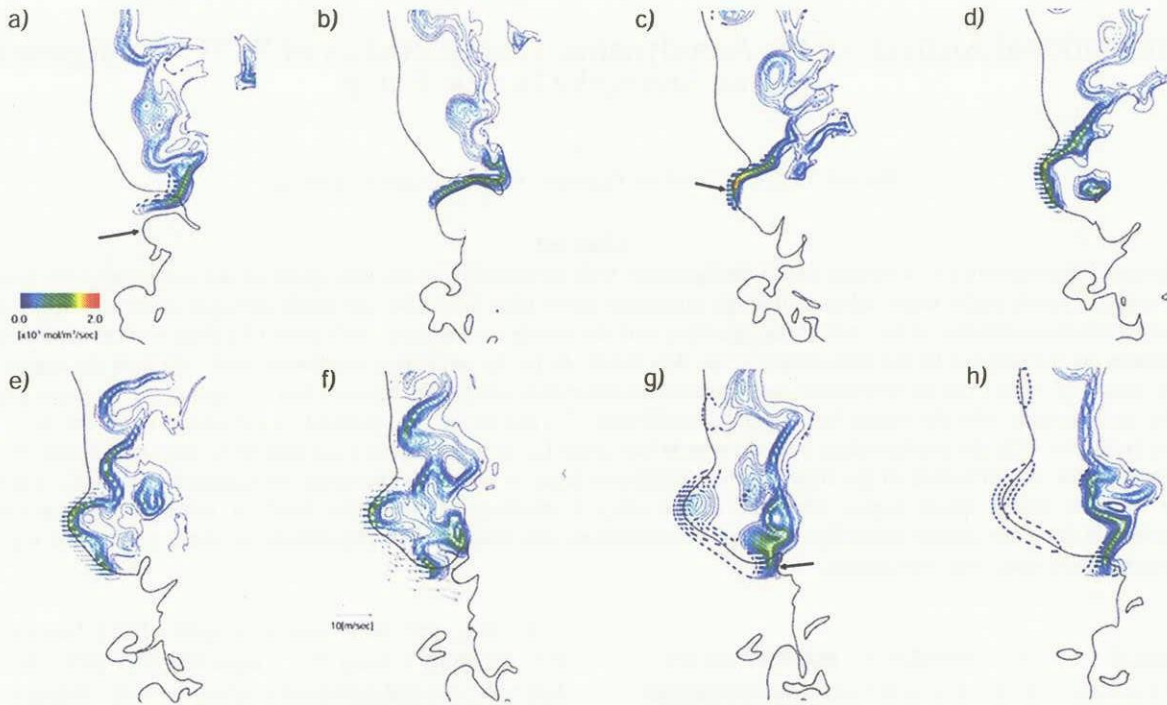
図10はその過程の一例である。安定な先端火炎から島状拡散火炎が生成される過程における水素消費速度の時間変化が時間間隔 $23.8\mu\text{sec}$ で示されている。図中黒線は当量比1の等値線であり、水素消費速度分布は予混合燃焼が実線で拡散燃焼が破線で描かれている。

時刻 a) では、火炎内側から、過濃予混合火炎/弱い拡散火炎/希薄予混合火炎という構造を持つ安定な先端火炎構造が形成されている。その上流には矢印で示すように当量比1の等値線に大きな突起が見られる。これは大きな擾乱、すなわち過濃な未燃混合気の塊が先端火炎に迫っているこ

とを示している。時刻 b) において未燃混合気塊は先端火炎に侵入し先端火炎の形状を変化させ、希薄予混合火炎を当量比1もしくは過濃な火炎へと遷移させている。その後時刻 c) になると矢印で示した当量比1の線の外側に拡散燃焼部分が内側の予混合火炎に接した形で現れる (破線による等値線)。この拡散燃焼の出現はその時の酸素質量分率分布を見ると容易に理解できる。図11は図10における時刻 b)、d)、f)、g) における酸素質量分率分布を示している。時刻 b) においては火炎を挟んで酸素質量分率の勾配は内側から外側である。すなわち酸素の分子拡散の方向は図中矢印で示すとおり内側から外側である。水素質量分率の勾配は内側から外側であるので、この時は酸素と水素が同じ方向に拡散していて燃焼モードは予混合火炎である。一方拡散火炎が現れた後の時刻 d) になると酸素質量分率の勾配は火炎を挟んで外側から内側に変化している。これは、火炎内側では酸素は予混合燃焼により消費されるだけで供給されないのに対し、火炎外側では外部空気からの分子拡散により常に供給されているため、時間が経つとともに濃度分布が逆転したためである。従って酸素分子拡散は外側から内側へ向いており燃焼モードは拡散火炎となる。酸素消費による酸素分子拡散の方向の変化が燃焼モードの変化を起し拡散燃焼を出現させている。

その後、時間の経過とともに火炎内側では酸素消費が進み (図11 f))、拡散燃焼部の内側にある予混合火炎は徐々に消えていく (図10 f))。一方拡散燃焼部では外部空気から分子拡散により酸素が供給されるため燃焼が継続する。ついには拡散火炎に接していた予混合火炎はほぼ全て消えて無くなり拡散火炎部分だけが島状拡散火炎として先端火炎から放出される (図10 g))。

以上が先端火炎における島状拡散火炎生成の過程であるが、この過程は先端火炎の安定性という点から見ても重要である。拡散火炎が形成され、その内側に接した予混合火炎が消滅していく過程において、火炎の先端は、未燃混合気塊が通り抜けることによって誘起された流れ (図10 f) 中の矢印) に乗って、内側にまたやや上流に移動して行く。当量比1の等値線の突起根元まで達した時、酸素質量分率勾配が再び火炎内側から外側へと変化する (図11 g))。この時当量比1の等値線の外側に希薄予混合火炎が現れ、擾乱が与えられる前の火炎構造と同様の、過濃予混合火炎/弱い拡散火炎/希薄予混合火炎という構造が再び形成されている。すなわち未燃混合気塊の侵入により一度変形した先端火炎は島状拡散火炎を放出したあと、その未燃混合気塊の侵入によって誘起された流れによって、元の構造に戻っており、この過程は火炎安定機構の一つであると考えられる。

図 10 : 先端火炎の変形と島状拡散火炎の生成 ($\Delta t = 23.8 \mu\text{sec}$)

4. 結論

CeNSS を用いて水素噴流浮き上がり火炎のシミュレーションを行った。格子密度を上げた 2 億点を用いた計算は MPI と OpenMP を組み合わせた並列化手法により効率的に行われた。従来の計算と比較すると細部においては解像度の向上が見られたが全体的な構造としては従来の計算と同様の構造であった。

従来の格子密度で、より長時間のシミュレーションを行うことにより、火炎外側にある島状拡散火炎の生成/活性化過程が明らかになった。一つは内側の予混合火炎の非定常な挙動による過程であり、一つは先端火炎に擾乱が加わった際の火炎形状変化に伴う過程である。いずれの場合も噴流の不安定性がその発端となっており、その時間スケールが現象を支配していると考えられる。後者の過程は火炎安定化機構という点から見ても重要な過程であり、今後詳細に調べていく必要がある。

参考文献

- 1) Y. Mizobuchi et al., *Proc. Combust. Inst.* 29:2009-2015, 2002.
- 2) H. Yamashita et al., *Proc. Combust. Inst.* 26(2):7-34, 1996.
- 3) T. S. Cheng et al., *Combust. Flame*, 91:323-345, 1992.
- 4) S. Chapman, T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge University Press, 1970.
- 5) C. R. Wilke, *J. Chem. Phys.*, 18(4):517-519, 1950.
- 6) C. K. Westbrook, *Combust. Sci. Tech.*, 29:67-81, 1982.
- 7) *JANAF Thermo-chemical Tables*, Clearinghouse for Federal Scientific and Technical Information, Washington, DC, 1965.
- 8) P. L. Roe, *J. Comp. Phys.*, 43:357-372, 1981.
- 9) Y. Wada, S. Ogawa, T. Ishiguro, *AIAA paper 89-0202*, 1985.
- 10) Y. Wada, *Numerical Simulation of High-Temperature Gas Flows by Diagonalization of Gasdynamic Matrices*, Ph.D. thesis, the University of Tokyo, 1955.
- 11) Y. Mizobuchi, S. Ogawa, *AIAA paper 2000-0184*, 2000.

- 12) K. W. Thompson, *J. Comp. Phys.*, 68:1-24, 1987.
- 13) T. J. Poinsot, S. K. Lele, *J. Comp. Phys.* 101:104-129, 1992.
- 14) R. J. Kee, J. F. Grcar, M. D. Smooke, and J. A. Miller, *Sandia Report SAND85-8240*, 1985.
- 15) R. W. Bilger, *Proc. Combust. Inst.* 22:475-488, 1988.
- 16) V. Favier, L. Vervisch, *Proc. Combust. Inst.* 27:1239-1245, 1999.

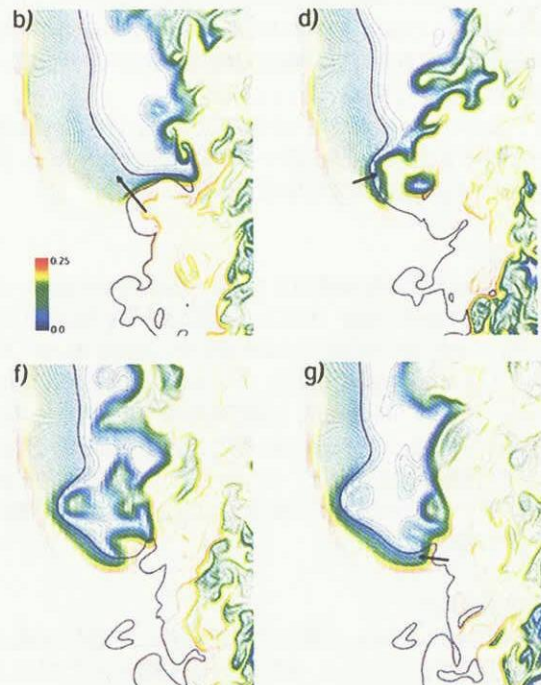


図 11: 酸素質量分率分布の変化