

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成23年6月14日現在

機関番号：82645

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2010～2012

課題番号：22760160

研究課題名（和文） 代替燃料を対象とした広域空間火炎・圧力波面挙動に関する研究

研究課題名（英文） Numerical simulation of flame and compression wave  
in far field for alternative fuel

研究代表者 大門 優（YU DAIMON）

独立行政法人宇宙航空研究開発機構・情報・計算工学センター・研究員

研究者番号：90415901

### 研究成果の概要（和文）：

本研究は、代替燃料が漏洩・爆発した際のリスク評価における新しい解析手法の提案を行うものである。これまでは経験的手法を用いて爆発事故被害は予測されてきたが、詳細な物理現象を模擬できる数値解析モデルを利用した評価手法を新たに提案した。代替燃料が漏洩した際の漏洩モデルを構築するために、実験的・解析的アプローチを実施した。また、代替燃料が燃焼した際の詳細化学反応モデルの開発・縮退を実施し、燃焼解析に実装し検証した。

### 研究成果の概要（英文）：

A new numerical simulation approach is proposed for a risk assessment of the leak and the explosion of alternative fuel. The explosion damage has been estimated by empirical procedure in previous works. The new approach is based on the detailed physical phenomena and simulation model in this study. The experiment and simulation of the heating test for alternative fuel construct the leak model. The detailed reaction models for the alternative fuel has been developed and reduced. The reaction models are implemented in the combustion simulation and validated with experimental data.

### 交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2011年度	600,000	180,000	780,000
2012年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	2,300,000	690,000	2,990,000

研究分野：熱工学

科研費の分科・細目：機械工学，熱工学

キーワード：数値解析，燃焼モデル，反応モデル，液膜モデル

#### 1. 研究開始当初の背景

地球温暖化，化石燃料の枯渇が叫ばれる今，メタン／エタノール／ジメチルエーテル／水素といった代替燃料に注目が多く集まっ

ている。新しい代替燃料のインフラを整備する際には，大量の輸送および保管が必要であり，その爆発安全性の評価は急務かつ正確性が求められる。発生する圧力波の予測を過大

評価すると必要以上に強固な保護構造や保安距離を生み、一方で過小評価すると人々の生命を脅かし大事故に繋がる可能性をはらんでいる。現在まで主に使われている燃料に対してはその安全性を経験的に判断しているため、データの少ない代替燃料の拡散・爆発特性といった性質は不明な点が多い。それゆえ、従来の手法では代替燃料毎の数多くの実験が必要となる。

欧州では Yellow Book と呼ばれている経験的爆発威力推定基準に代わって水素の爆発数値解析を用いた予測の確立を目指し、ワーキンググループ (Safety of Hydrogen as an Energy Carrier) が立ち上がっている。しかし、数多くの大規模な水素空気爆発実験を繰り返し行うことで経験的にチューニングしているため、十分な予測手法とは言えない。水素に関しては他に米国や日本で数多く研究が進められてきたが、水素以外の代替燃料は研究が少ない。今後経験的手法のみに頼ると以下のような問題が起こると考えられる。

- ・ 予算と時間がかかり、代替燃料のインフラの整備が効率的に行われない。
- ・ 少ない実験では現れない甚大な被害を予測できない。

また、代替燃料の種類によっては爆発威力のみに着目することはできない。たとえば、毒性の強い燃料 (ヒドラジンなど) の場合には漏洩拡散、火炎温度が高く広い範囲に広がる場合には放射熱などの評価が重要となる。

爆発事故は時系列に次に示す 3 つの事象が連続して起こると考えられ、それぞれの現象を理解することで、より正確な爆発威力の見積もりが可能となる。

- ①可燃ガスの漏洩と拡散
- ②爆発 (着火, 燃焼)
- ③広域の圧力伝播

数値解析による予測において、③圧力伝播解析は現在の解析技術でも精度よく解析できる。一方で、①②は物理モデルが確立されていないため、解析精度は十分とは言えない。

## 2. 研究の目的

本研究では可燃混合気の発生から爆発を対象に解析を行い、それらを繋げる評価手法を構築する。特に可燃ガスの漏洩と拡散、爆発 (着火, 燃焼) に関してそれぞれのモデルの開発および高度化を実施する。これにより安全なエネルギー利用の幅を広げることができる。

## 3. 研究の方法

### ①可燃ガスの漏洩と拡散

可燃ガスの漏洩と拡散の見積もりのため、実験的、解析的アプローチを試みた。可燃ガ

スは液体を維持するために低温で保存されることが多く、漏洩時には地面からの熱により蒸発しながら拡散する。この燃料液体の広がり蒸発をモデル化するために、図 1 に示すような試験装置を製作し、エタノールの漏洩・蒸発・拡散特性を観察した。試験装置はセラミックヒータ、銅ブロック、セラミック平板から構成されており、周りを断熱材で覆っている。加熱源としてのセラミックヒータによって銅ブロックを加熱することで、一様加熱を実現かつセラミックヒータからの熱流束を測定する。銅ブロックを通過した熱はセラミック平板を加熱し、上に流れるエタノールを蒸発させる。エタノール液膜が平板内で蒸発しきる熱流束と、エタノール流量を測定することで、漏洩・蒸発・拡散特性を把握した。

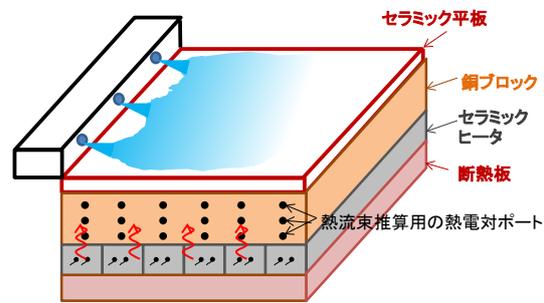


図 1 液膜蒸発試験装置概略図

上記漏洩・蒸発・拡散特性を再現するために、液膜モデルを開発した。図 2 に示すように液膜は壁面からの熱と、蒸発後に発生する火炎など燃焼ガスからの熱を受けながら蒸発する。この液膜モデルは別途解析する燃焼計算の境界条件として組み込むことで、ソース項にて蒸発による質量流束と境界条件にて液膜温度を渡す。また、液膜モデルは燃焼計算と壁面熱伝達計算から熱流束を受け取る。液膜モデルの支配方程式として質量保存 (液膜厚さ  $\delta$ ) とエネルギー保存を解く。

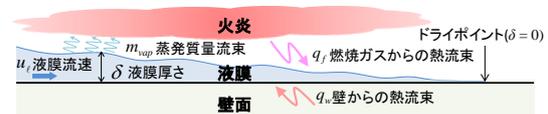


図 2 液膜モデル概念図

### ②爆発 (着火, 燃焼)

爆発現象にて重要な着火と燃焼に関して解析的アプローチを試みた。燃焼解析では、反応モデルの精度が重要となる。特に爆発現象のような着火や火炎伝播は反応モデル依存性が大きい。研究の歴史が長い炭化水素燃料と比較して代替燃料の反応モデルは十分整備されていない。また、反応モデルが存在し

ても化学種が多いため解析負荷が高く燃焼解析に実装できない場合もある。そこで、ヒドラジンの詳細反応モデルの開発とメタン詳細反応モデルの縮退化を行った。

まず、ヒドラジンの反応モデル作成方法について述べる。過去提唱されている反応モデルの特性を調査した。Konnovの熱分解反応機構にDeanらのコンパイルした素反応をマージして $N_2H_4/N_2O_4$ の燃焼反応機構を構築した。この機構は34の化学種と239の素反応を含む。この反応機構を用いて定圧、断熱条件での着火誘導時間を圧力7.54atm、 $N_2H_4/NO_2=0.61/0.39$ の場合について計算した。800K以下では着火誘導時間が100秒を超えていて事実上着火せず、 $N_2H_4$ の低温での自着火性を説明できない(図3)。低温での自着火を説明できない理由として、これまでの反応機構では見落としている反応がある事が考えられる。そこで、これまで考慮されてこなかった $NO_2$ と $N_2H_4$ の直接反応など、量子化学計算によりポテンシャルエネルギー曲面を計算した。計算はB3LYPにより構造最適化(基底関数は6-311++G(3dp,3pf))を行い、エネルギーはCBS-QB3により計算した。そして、遷移状態理論によりこの反応の反応速度定数を求めた。このようにして足りない反応機構を追加していった。

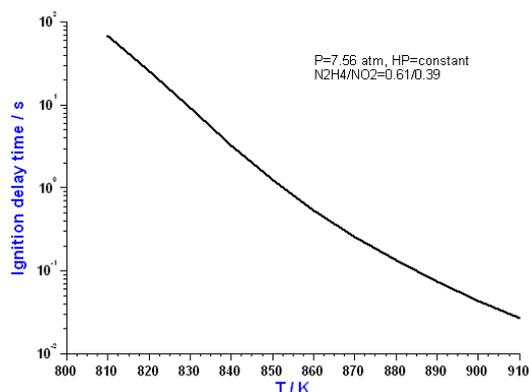


図3 過去の研究結果から作成した反応モデルを用いた場合の着火誘導時間の初期温度依存性

詳細反応モデルは化学種が多く、燃焼解析に膨大な時間を要する。そこで、メタンに関してはDRG-EP (Directed Relation Graph with Error Propagation) を使って65化学種337素反応を23化学種90素反応に縮退した。この反応モデルの妥当性を調べるために、ドイツ航空宇宙センター(DLR)で実施されたメタン/酸素噴流燃焼試験と比較した。

反応モデルのほか、燃焼モデルも爆発解析には大きく影響する。燃焼モデルの検証として、反応モデルによる不確かさを除くためすでに十分確立している水素/酸素詳細反応モデルを用いて、層流有限反応速度モデル、

Flameletモデル、Large Eddyモデル等と比較した。

#### 4. 研究成果

##### ①可燃ガスの漏洩と拡散

エタノールの漏洩・蒸発・拡散特性を観察した。図4に加熱平板にエタノールを漏洩させた際の様子を示す。エタノールは2孔から噴射され加熱平板に衝突する。衝突したエタノールは平板上に2次元的に広がるとともに、蒸発し、下流のある位置においては完全にドライアウトしていることがわかる。すなわち、この距離内で蒸発、一部沸騰し液体から気体へと相変化が起こっている。

開発した液膜モデルでは、このドライアウトポイント位置および壁面の温度上昇を求めることができる。そして、小規模な実験室規模の試験による結果と比較することでモデルパラメータを同定することができ、より正確にドライアウトポイントを予測することが可能となった。これにより、燃料の漏洩範囲、可燃性気体蒸発量分布を知ることができ、爆発解析のインプット条件を作成することが可能となる。またこのモデルは燃焼解析とカップリングできるため、非定常的な漏洩と爆発解析が可能になるなど、さらなる発展が見込まれる。また、準一次元解析のため、解析負荷が小さく大規模空間解析に非常に適している。

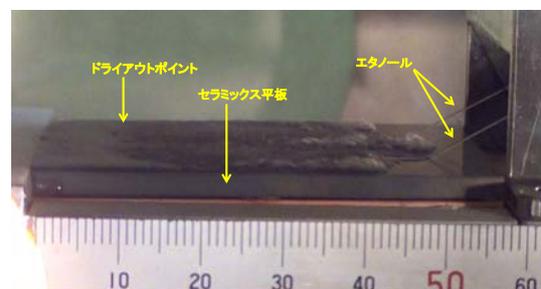


図4 漏洩・蒸発・拡散試験の様子

##### ②爆発(着火, 燃焼)

まず、ヒドラジンの詳細反応について述べる。図3に示したように、初期温度800Kでは着火誘導時間が100秒を超えていたが、新たな反応モデルを構築することで、400Kで2.8msと非常に短い時間で着火することが明らかとなった(図5)。すなわちヒドラジンの自己着火現象を再現することができた。このように、 $N_2H_4$ と $NO_2(N_2O_4)$ の反応系は熱とラジカルの生成が相乗的に影響しあい着火に至る系であると結論できる。これまでに提案されている反応機構が低温着火を説明できなかったのは、 $NO_2+N_2H_4$ の反応を考慮していなかったためである。

このような爆発現象において重要と考えら

れるヒドラジン自己着火現象を表現できる詳細反応モデルは、公開されている論文の中では唯一であり、各方面からの問い合わせや共同研究の打診が来るなどインパクトの大きな成果となった。

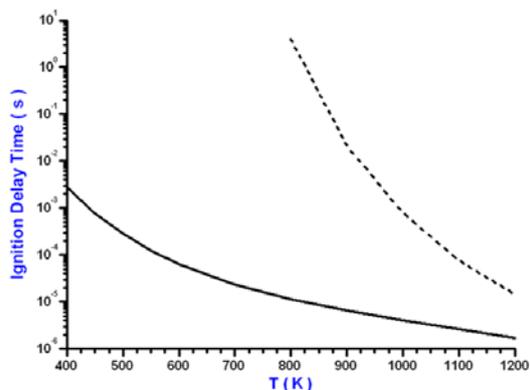


図5 着火誘導時間の初期温度依存性 (過去の研究結果から作成した反応モデル[破線]と新たに提唱した反応モデル[実線]の比較)

次にメタンの詳細反応モデル縮退とその検証に関する結果を述べる。DRG-EP を使って65化学種から23化学種に縮退することによって、燃焼解析にメタン反応モデルを実装することが可能となった。反応モデル自体の検証は図6に示すように対向流拡散火炎の温度分布により確かめている。

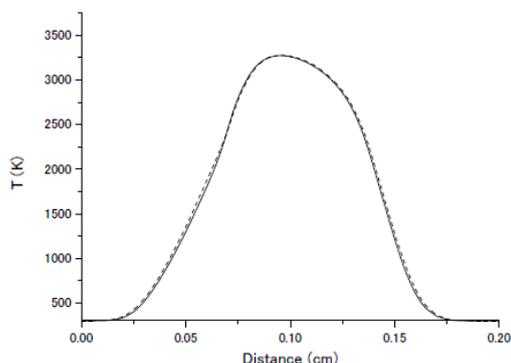


図6 メタン/酸素対向流拡散火炎温度分布 (65化学種[実線]と23化学種[破線]の結果がほぼ一致している)

次に、燃焼解析の検証では、DLRにて実験が行われたメタン/酸素燃焼器の壁面熱流束を燃焼解析により再現した。この燃焼器はメタン/酸素の同軸噴射器とメタンによるフィルムクーリングから構成されており(図7)、フィルムクーリング出口の大きさが熱流束に与える影響について検討されている。図7に壁面熱流束の試験と解析結果の比較を示す。解析は試験を良く再現しており、特にフィルムクーリング出口の大きさが熱流束に

与える影響が明らかとなった。これにより縮退されたメタン反応モデルの実装が検証された。

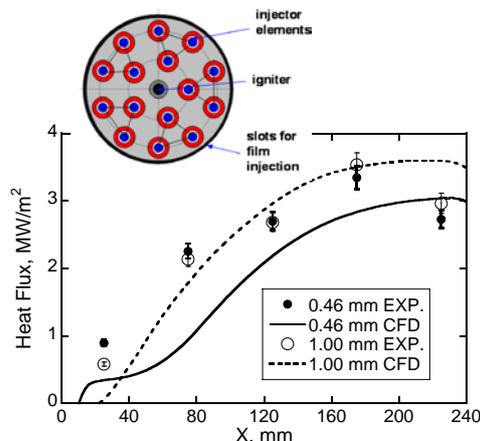


図7 メタン燃焼器における壁面熱流束分布

燃焼モデルに関しては、層流有限反応速度モデル、Flameletモデル、Large Eddyモデルを試行・比較した。層流有限反応速度モデルは乱流の影響を含まないため、格子解像度を非常に高くしなければ、詳細な火炎構造までとらえることはできない。Flameletモデルは格子解像度が十分でなくとも火炎を模擬できるが、濃度分布が存在する場、混合が完了してしまった場、熱の移動が重要となる場に適用するためには改良が必要である。Large Eddyモデルは適用される流れ場に制限はなく、さらに格子点数を低減させることができるが、各格子でサブグリッドの評価をするために解析負荷が大きくなる。爆発解析では着火点近傍はLarge Eddyモデルで、遠方はFlameletモデルで解析することが望ましいと考えられた。

このように①可燃ガスの漏洩と拡散、②爆発(着火、燃焼)に対してそれぞれモデルを開発および高度化した。更なる精度向上と解析高速化が一部必要であるが、代替燃料の漏洩、爆発、圧力伝播(圧力伝播は過去の知見にて解析可能)まで一連の評価が可能となった。

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計1件)

[1] Yu DAIMON, Hiroshi TERASHIMA, and Mitsuo KOSHI, "Origin of hypergolic ignition of N<sub>2</sub>H<sub>4</sub>/NO<sub>2</sub> mixtures," Science and Technology of Energetic Materials, Vol. 74, 2013, pp. 17-22.

〔学会発表〕（計 8 件）

[1] Yu DAIMON, Hideyo NEGISHI and Nobuhiro YAMANISHI, “Combustion and Heat Transfer Modeling in Regeneratively Cooled Thrust Chambers (Heat Flux Analysis of Single Injection Chamber),” 46th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit, July 27th, 2010, Nashville, TN, U.S.

[2] Koichi KISHIDA, Nobuyuki OSHIMA, and Yu DAIMON, “2-scholar Flamelet Approach for the Heat Releasing Chamber,” The Seventh International Conference of Flow Dynamics, Nov. 2nd, 2010, Sendai, Miyagi, Japan.

[3] Yu DAIMON, Hiroshi TERASHIMA, and Mitsuo KOSHI, “Chemical Kinetics of Hypergolic Ignition in Hydrazine/Nitrogen-dioxide Gas Mixtures,” 51st AIAA Aerospace Sciences Meeting including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Jan. 7th, 2013, Texas, U.S.

[4] Yu DAIMON, Hideyo NEGISHI, Mitsuo KOSHI, and Dmitry SUSROV, “Numerical and Experimental Investigation of the Methane Film Cooling in Subscale Combustion Chamber,” 5th European Conference for Aeronautics and Space Sciences, July 1st, 2013, Munich, Germany.

その他 4 本

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

大門 優 (YU DAIMON)

宇宙航空研究開発機構・情報・計算工学センター・研究員

研究者番号：90415901