濃度はん点に起因する予混合火炎の非定常挙動*

和久智裕^{*1}, 山下博史^{*2}, 竹野忠夫^{*2}Time-Dependent Behavior of Premixed Flame Caused
by a Concentration Spot

Tomohiro WAKU, Hiroshi YAMASHITA and Tadao TAKENO

A numerical analysis was performed on the time dependent behavior of a premixed flame due to a concentration spot placed in front of a steadily propagating one-dimensional flame. As the flame passes through the spot, the burning velocity increases temporarily. In the one-dimensional flow field, the resulting time-dependent flame behavior disappears when sufficient time has elapsed, and the flame propagates steadily again. In a two-dimensional flow field, the induced interaction between flow field and flame configuration produces deformation of the flame configuration, which develops with time.

Key Words: Premixed Combustion, Numerical Analysis, Burning Velocity, Unsteady Flow, Concentration Spot

1. 緒 言

乱流場の火炎への影響を理解する目的で、渦を乱流の基本要素とみなして、渦と火炎の相互作用についての実験、あるいは数値計算による研究が行われてきた⁽¹⁾⁽²⁾。すなわち、渦が一様な火炎に到達すると火炎が変形し、さらにそれによって流れ場も変化するが、この過程を明らかにしようとする試みである。ところがこのような相互作用は、一様な未燃混合気中の異なった組成をもつはん点(以下、濃度はん点と呼ぶ)によってもたらされる。一次元的に伝ばしている火炎が濃度はん点に遭遇すると、火炎は変形するとともに流れ場も変化するはずである。このような非定常過程を調べた研究は著者の知る限りではない。これを明らかにすることが本研究の目的である。

一般に定常な一次元の火炎伝ばに対しては、それを理論的に解析する手段として、一次元火炎理論が確立されている⁽³⁾。しかしこの理論は、濃度はん点によって引き起こされる非定常の二次元、三次元の現象に適用することはできない。また、不連続面としての火炎

面、あるいは有限厚さの火炎帯の二次元不安定を調べる線形安定理論⁽⁴⁾も適用できない。さらに火炎伸長や曲率の効果を検討した理論解析⁽⁵⁾も、曲率半径が火炎帯厚さに比べ十分大きい場合に限られ、そのままの形では濃度はん点の問題に適用することはできない。したがって本研究では数値解析によって調べることにした。

次に本解析の基礎となる定常一次元火炎構造につい

Fig. 1 Schematic illustration of one-dimensional flame structure

* 原稿受付 1996年1月16日.

^{*1} 正員, 名古屋大学大学院 (〒464-01 名古屋市千種区不老町).

^{*2} 正員, 名古屋大学大学院工学研究科.

て図1の模式図を用いて説明する。火炎は空間座標 x の負の方向へ、混合気の物理量として決まる燃焼速度 S_{u0} で伝ばしている。太線は温度、細線は反応速度(単位時間、単位体積当たり消費される未燃ガスの質量)を表す。火炎帯を代表する長さとして予熱帯厚さ δ を線分 de で定義する。線分 ac は温度の x に関する二階微分が零となる点 b で温度を表す曲線に接し、点 a で無限上流での未燃ガス温度 T_u 、点 c で無限下流の燃焼ガス温度 T_b に一致する。 S_{u0} に無限上流での密度 ρ_0 をかけたものは単位時間、単位面積の火炎が消費する未燃ガスの質量すなわち質量燃焼速度である。質量の収支を考えるとこの量は反応速度を全空間で積分したものと同しくなる。混合気中の燃料成分の反応速度 RR_F は反応速度に比例するから、 S_{u0} は RR_F を全空間で積分したものに比例する。以下、反応速度は燃料成分の反応速度を表すものとする。

記 号

- A : 頻度因子 $\text{cm}^6/(\text{mol}^2 \cdot \text{s})$
 C_i : i 成分のモル濃度 mol/cm^3
 E : 総括反応活性化エネルギー kJ/mol
 l_x : x 方向の変形のスケール cm
 l_y : y 方向の変形のスケール cm
 R : 一般ガス定数
 RR_F : 燃料成分の反応速度(単位体積、単位時間当たり消費される燃料の質量)
 RR_n : 無次元反応速度(ϕ が 0.7 の定常一次元火炎の RR_F の最大値が 1 となるよう無次元化した量)
 S_{u0} : 燃焼速度 cm/s
 S_u : 局所燃焼速度(見かけの燃焼速度) cm/s
 t : 時間 s
 T : 温度 K
 T_n : 無次元温度(ϕ が 0.7 の定常一次元火炎の燃焼ガス温度が 1、未燃ガス温度が零となるように規格化したもの)
 u : x 方向速度成分 cm/s
 v : y 方向速度成分 cm/s
 W_F : 燃料の分子量 g/mol
 x, y : 主流方向およびそれに垂直方向の座標 cm
 Y_i : i 成分の質量分率
 Z : 混合分率⁽⁶⁾
 δ : 予熱帯厚さ cm (1章で定義)
 x : 無次元曲率(ϕ が 0.7 の δ で無次元化)
 ϕ : 当量比

下付き添字

F : 燃料(メタン)

O : 酸化剤

2. 解析モデル

本研究では未燃混合気として、希薄なメタン空気予混合気を考え、化学反応は一段不可逆の総括反応で記述できるものとする。一様な未燃混合気の当量比は 0.7 とし、それに対する濃度はん点の当量比は 1.0 とした。すなわち、当量比 0.7 の一様な予混合気中を一次元火炎が定常に伝ばしている。時刻 0 s において、その前方未燃混合気中に当量比 1.0 の濃度はん点を与えて、その後の火炎のふるまいを調べる。当量比 0.7 と 1.0 に対する燃焼速度 S_{u0} はそれぞれ 21.0 cm/s と 39.3 cm/s である。また、図1で定義した予熱帯厚さは当量比 0.7 と 1.0 に対してそれぞれ 0.053 cm と 0.041 cm である。

濃度はん点の初期位置と大きさは、正確な数値計算ができる計算領域において、濃度はん点の影響ができるだけ大きく現れるように決めた。すなわち、初期位置はその存在が初期の伝ば火炎の正常な火炎構造に影響を与えるほど近くてはいけな。逆に遠すぎると火炎に到達する前に分子拡散によって濃度はん点が消滅して、火炎伝ばに影響を与えなくなる。本研究では濃度はん点の初期の大きさは 0.1 cm、初期の中心位置は、初期伝ば火炎の反応速度最大位置($x=0$)の前方 0.2 cm とした。

計算は一次元流れ場と二次元流れ場の二つについて行った。一次元の場合の計算モデルを図2に示す。左から S_{u0} に等しい速度 u で未燃混合気火炎に流入するが、濃度はん点が存在しなければ火炎は空間的に静止している。流れに乗って矩形波状のはん点が火炎に流入すると、燃焼速度が変化して、火炎が一次元的な非定常応答を示す。図3に濃度はん点が直径 0.1 cm

Fig. 2 Initial concentration and temperature-fields and boundary conditions for one-dimensional flame

Fig. 3 Initial concentration field and boundary conditions for two-dimensional flame

の円形をしている二次元流れ場における計算モデルを示す。この場合の火炎の応答は二次元的なものとなる。

境界条件を図2および図3に示す。図2, 3において, u および v は速度ベクトルの x 方向成分および y 方向成分, Y_F は燃料の質量分率, Z は混合分率, ϕ は当量比である。

数値計算において以下の仮定を採用した。

(1) 反応は一段の不可逆総括反応とした。

(2) 反応速度 RR_F (単位体積, 単位時間当たり消費される燃料の質量) には次式で与えられるアレニウス形を用いた。

$$RR_F = A W_F C_F C_O^2 \exp(-E/RT)$$

ここで, C_F , C_O は燃料, 酸化剤のモル濃度, R は一般ガス定数, W_F はメタンの分子量である。総括反応活性化エネルギー E は 131 kJ/mol⁽⁶⁾, 頻度因子 A は当量比 0.7 に対し燃焼速度が 21.0 cm/s となるように 2.14×10^{21} cm⁶/(mol²·s) とした。

(3) 各化学種の拡散係数は等しく, ルイス数は 1 とする。

(4) 全成分の定圧比熱は等しくかつ一定とする。

(5) Soret 効果, Dufour 効果および圧力拡散の効果は無視できるものとする。

(6) 外力は考えない。

(7) 混合気は理想気体とする。

(8) 熱力学的圧力は一定とする。

(9) 体積粘性係数は零とする。

(10) エネルギー式において粘性散逸の項を無視す

Fig. 4 Time traces of positions of maximum reaction rate for one-dimensional flame (1) and two-dimensional flame (2)

る。

(11) 動粘性係数, 拡散係数は窒素の値を採用し, 温度が 300 K のとき, それぞれ 0.157, 0.220 cm²/s とした。また温度の 1.7 乗に比例して増加するとした。

仮定(3)~(10)のもとで, 基礎方程式は連続の式と運動量の保存式, 燃料の化学種の保存式と混合分率に関する式, 理想気体の状態方程式に帰着される⁽⁷⁾。

3. 数値計算方法

基礎方程式を有限体積法で離散化し, 対流項には等間隔近似のもとで QUICK 法⁽⁸⁾, 時間に関しては陰解法を適用した。また運動量保存式と連続の式の結合には SIMPLE 法⁽⁹⁾を用いた。計算格子の最小格子間隔は 0.004 cm である。一次元場においては, 格子数は 200, 計算領域は x 方向に 1.312 cm である。二次元場における格子数は, 200×200, 計算領域は x 方向に 1.312 cm, y 方向に 1.9914 cm である。時間刻みは 0.1 ms で計算を行った。

4. 計算結果

4.1 非定常挙動 一次元場の反応速度最大位置の時間変化を図4に点線で示す。濃度はん点の流入によって火炎は静止座標系からみて, いったん前進した後には火炎は後退しながら定常位置へと向かう。

二次元場における, 時刻 $t=1, 8$ ms および 15 ms の燃料質量分率分布を図5(a), (b)および図5(c)に示す。図5の上を示した矢印は, 濃度はん点が S_{u0} で移動したときの位置を表す。濃度はん点が火炎に達していない時刻では, 火炎は変化していない[図5(a)]。濃度はん点が火炎に達すると, その部分の火炎の伝ば速度が大きくなる[図5(b)]。その後火炎はさらに前進し, その影響が横方向にも広がる[図5(c)]。図4に $y=0$ での反応速度最大位置の時間変化を実線

Fig. 5 Changes with time of concentration fields for two-dimensional flame

Fig. 6 Time evolution of flame configuration
 $t=0\sim 20$ ms, $\Delta t=2$ ms

で示す。時刻 $t=20$ ms においては、一次元火炎はほぼ定常位置に近づいているが、二次元火炎はなお前進し続けている。図6に火炎形状(x 方向に反応速度を調べ、その最大位置を結んだもの)の時間変化を示す。火炎は濃度はん点の通過後、半円の形となり、その半径は時間とともに増大する。時刻 $t=20$ ms では、その半径は元の濃度はん点の約10倍にもなる。

このように、火炎を乱す原因が濃度はん点の場合には、他の場合(例えば渦による速度変動の場合⁽²⁾)とは異なった独特の非定常挙動が観察される。

4・2 火炎構造 本研究で扱う火炎においては反応速度分布が反応帯構造を代表すると思われる。図7

Fig. 7 Changes with time of the reaction rate distribution for one-dimensional flame

に一次元火炎における反応速度分布の時間変化を時刻 $t=0$ ms から 5 ms おきに示す。以下、反応速度は当量比 0.7 の定常一次元火炎の反応速度の最大値で規格化し RR_n で表す。なお、当量比 1.0 のときの無次元反応速度の最大値は 3.4 である。 RR_n の分布は時刻 $t=0$ ms で当量比 0.7 の定常火炎のものと同じであるが、時刻 $t=5$ ms では最大値で約2倍になっている。これは濃度はん点の影響と考えられ、1章で述べたように燃焼速度の過渡的増大に対応している。この増大によって図4でみられるように反応速度最大位置が時刻 $t=0$ ms から時刻 $t=5$ ms において x の負の方向(火炎の進行方向)へ移動する。その後、時刻 $t=15$ ms にはこの過渡的影響が消えて反応帯はほぼ元の構造になっていることがわかる。

次に二次元場の火炎構造を考察する。

時刻 $t=1, 8$ ms および 15 ms における火炎形状および速度ベクトル分布の拡大図を図8(a), (b)および図8(c)に示す。ここで無次元温度 T_n は、当量比が

Fig. 8 Changes with time of flame and flow configurations for two-dimensional flame

Fig. 9 Changes with time of reaction rate distribution for two-dimensional flame on the central axis

0.7の定常一次元火炎の火炎温度が1, 未燃ガス温度が零となるよう規格化したものである。

図8の T_n が0.1, 無次元反応速度 RR_n が0.5, 0.9を表す等高線の間隔から大まかな火炎構造(予熱帯と反応帯構造)を観察する。濃度はん点が火炎に到達すると, RR_n が0.9を表す等高線の間隔は広がり, 一方 RR_n が0.5を表す等高線との間隔が狭まり, 反応帯構造が大きく変化していることがわかる[図8(b)]。しかし濃度はん点が通過すると, 火炎の多くの部分で局所的反応帯構造は結局は元の構造と近いものに落ち着く[図8(c)]。より詳しく反応帯構造をみるため, 図9に中心軸上($y=0$)の反応速度の分布を時刻 $t=0$ msから5 msおきに示す。 $t=5$ msにおいて濃度はん点の影響で一度大きく変化した反応帯構造は, 時刻 $t=15$ msには, ほぼ元の構造になることがみてとれる。

本研究は特に濃度はん点が引き金となる火炎の非定常挙動を調べるものであるが, 曲率を有する火炎の局所の燃焼速度を明らかにする必要がある。濃度はん点通過後の火炎は変形するが, そこでの火炎伸長や火炎曲率によって, 燃焼速度が変化する可能性があることが知られているからである⁽⁹⁾。また現在, 曲率を有する火炎の局所燃焼速度, 特に大きな曲率を有する火炎の燃焼速度についてはよくわかっていないからである。ここで, 火炎曲率を調べることは比較的容易であるが火炎伸長を正確に調べることは極めて難しい。したがって, ここでは曲率のみを調べることにする。図9で $y=0$ での反応速度分布が $t=15$ msにはほぼ元に戻ることを示した。すなわち, 定常一次元火炎理論を適用するなら, 燃焼速度がほぼ元に戻っていることになる。これは中心軸上では, 火炎の曲率の効果が小さいためと考えられる。そこで曲率の最も大きいとこ

ろを調べることにする。図 10 は時刻 $t=18\text{ ms}$ における反応速度最大位置で定義した火炎形状を示す。ここで実線 AB は火炎の曲率が最大となる点を通り、そこで等温度線と垂直に交わる直線となるように定義した。この直線上での反応速度および温度分布を図 11 に実線で示す。横軸は反応速度最大位置からの距離を表す。また比較のために、当量比 0.7 の平面一次元定常火炎の反応速度および温度分布を点線で示す。未燃側で少し反応速度が大きくなっていることがわかる。これは火炎が既燃側に凸になっていることにより、未燃混合気が平面火炎のときよりも周囲の高温既燃ガスによって予熱されるためである。定常一次元火炎理論を適用すると、この曲率をもった火炎の局所燃焼速度と当量比 0.7 の定常火炎との燃焼速度の比は、図 11 の

Fig. 10 Instantaneous flame configuration and definitions of l_x and l_y

反応速度分布の面積比になっており、燃焼速度の増加は約 7% 程度となる。さらに本計算結果を使い、広範囲の無次元曲率(当量比 0.7 の定常一次元火炎の予熱帯厚さで無次元化した)に対する見かけの局所燃焼速度の変化を調べた。その結果を図 12 に示す。ここでも局所燃焼速度は定常一次元火炎理論を適用して反応速度の積分から求めた。既燃側に凸となった火炎(丸印)では、曲率の増大とともに局所燃焼速度は増大していることがわかる。既燃側に凹となった火炎(四角印)については本計算では燃焼速度の変化はみられなかった。これは曲率が小さいためと考えられる。また、既燃側に凸の火炎に対するデータがばらついていることから、曲率だけでは整理できないことがわかる。しかし、二次元の非定常火炎伝ばの過程において、曲率に対し燃焼速度がどの程度変化しているかをみる目安にはなるものと考えられる。

4.3 火炎形状 ここでは、濃度はん点が完全に

Fig. 11 Reaction rate distributions for two-dimensional flame along line AB (2), and for steady plane flame (1)

Fig. 12 Effect of curvature on apparent burning velocity

Fig. 13 Propagating flame sheet and stream lines

通り過ぎた後の火炎形状を考察する。

一般に火炎形状の変化は局所燃焼速度と流れ場の変化に応じて定まる。まず局所燃焼速度については4・2節の結果から、既燃側に凸の領域で燃焼速度は最大で約15%程度の増加があることがわかる(図12)。

次に流れ場を観察する。図8(c)は濃度はん点が完全に火炎を通ったあとの流れ場であるが、火炎が平面であったときの流れ場[図8(a)]に比べるとかなり変化している。まず、この流れ場の変化の程度は燃焼速度の変化に比べてかなり大きいことがみてとれる。このため火炎形状の変化は流れ場の変化によってもたらされるものと考えられる。これをふまえ、さらに濃度はん点が火炎を通ったあとの流れ場[図8(c)]を観察し、火炎形状の変化を考察する。中心軸近傍の未燃側につき出した火炎の前方では、流れは両わきにそれ、火炎に垂直に流入する流速は小さくなっている。このため火炎の伝ば速度は元より増大している。また、既燃側に凸部の領域には、燃焼速度の場合に比べてはるかに大きな流速の増加がある。このため火炎の伝ば速度は元よりも減少している。

このように、二次元場では、火炎は流れとの相互作用によってその形状を変化させ、その変化のスケールは時間とともに大きくなっている。

文献(4)で、流体力学的不安定を説明するのに使われた考え方を適用し、今扱っている現象を理解することを試みる。火炎帯は十分薄く火炎面とみなし、燃焼速度が一定のモデルを考える(図13)。火炎がなんらかの原因で、未燃側へ凸になったとする。火炎面に平行な方向の速度成分は火炎面前後で一定に保たれるが、火炎面に垂直な方向の速度は膨張した分だけ加速される。さらに燃焼ガスの流れが全体として x 軸にほぼ平

Fig. 14 Increase with time in scales of flame deformation

行に向かうこと、および未燃ガスも x 軸に平行に入ってくることから、流線は図13のAaA', BbB'のような形状になる。これによって中心部での流管が広がるので、そこでの流速は小さくなり、そのため火炎はより未燃側へと移動する。逆に周辺部では、火炎面は未燃側に凹になるが、ここでは流管が狭まり、混合気流速は加速される。このため火炎はより既燃側へと移動する。すなわち、一度火炎がこの形状になると、それによって図13の流れ場がもたらされ、さらにその流れ場が火炎形状にフィードバックされ、この形状がますます発達することになる。今述べた説明で、火炎形状の変化のスケールが時間とともに大きくなることをある程度理解できたと考える。

しかし、以上の説明からは、火炎形状の発達の詳細は見いだすことはできない。そこで本計算結果をもとに考えると、次のことは火炎形状の発達の特徴と思われる。図10で x 軸方向の火炎変形を代表する長さを最も未燃側に位置する火炎の位置と最も既燃側に位置する火炎の位置の x 座標の差 l_x を定義し、 y 軸方向の火炎形状の変形を代表する長さを既燃側に突き出した二つの山の y 座標の差 l_y で定義する。 l_x , l_y の時刻 $t=15$ ms(反応帯構造がほぼ元に戻る時刻)からの増加分と時間の関係を示したものを図14に示す。時刻 $t=15$ ms以降、 l_y のほうが増加の割合が大きいという特徴をもつことがわかる。

5. 結 論

一次元および二次元流れ場において、未燃混合気中に濃度はん点を付加し、それが火炎の非定常挙動に与える効果について検討した。その結果以下のことが明らかになった。

(1) 濃度はん点は燃焼速度を変化させ、この変化が流れ場の変化の引き金となる。火炎はこれらの変化に応じた非定常挙動を示す。

(2) 一次元場においては、濃度はん点を通りすぎ

た一定時間後には再び定常火炎に戻る。

(3) 二次元場においては、濃度はん点により燃焼速度は変化するが、一定時間後には元とほぼ同じ値に戻る。しかし、濃度はん点が燃焼速度に与える効果よりも、流れ場の変動に与える効果のほうが時間的に長く、燃焼速度の変動が治まる時刻になっても流れ場の変動は元に戻らない。さらに流れ場の変動は、一次元場が定常火炎に向かう時刻になっても元に戻らない。これは一次元場に比べて流れ場の自由度が大きいため、流れ場が火炎との相互作用によって変化し続けるからと思われる。

(4) 二次元場で、火炎形状の変形のスケールは元の濃度はん点のスケールよりもはるかに大きい。

文 献

- (1) Roberts, W. L., Driscoll, J. F., Drak, M. C. and Goss, L. P., *Combust. Flame*, **94** (1993), 58-68.
- (2) Poinso, T., Veynante, D. and Candel, S., *J. Fluid Mech.*, **228** (1991), 561-606.
- (3) Willams, F. A., *Combustion Theory*, 2nd ed., (1985), 135-165, Addison-Wesley, Reading, MA.
- (4) 文献(3)の341-349.
- (5) Matalon, M. and Matkowsky, B. J., *J. Fluid Mech.*, **124** (1982), 239-259.
- (6) Coffee, T. P., Kotlar, A. J. and Miller, M. S., *Combust. Flame*, **54** (1983), 155-169.
- (7) Yamashita, H., Kusida, G. and Takeno, T., *Proc. R. Soc., London, Ser. A*, **431** (1990), 301-314.
- (8) Leonard, B. P., *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, **19** (1979), 59-98.
- (9) Patankar, S. V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, (1980), 126-131, McGraw-Hill, New York.