

噴流火炎における大規模渦構造の動的効果

同志社大学エネルギー変換研究センター 横山直人 (Naoto YOKOYAMA)¹
同志社大学工学部 齋藤加奈 (Kana SAITO)
水島二郎 (Jiro MIZUSHIMA)

1 はじめに

燃焼時に燃料と酸化剤が拡散・混合して混合気を形成する拡散火炎は、燃料と酸化剤と異なる経路で供給するので安全であるため古代から広く使用されてきた。たとえば、ろうそくのような炭化水素系の燃料では拡散時にすすが生じ、人類はこのすすからの放射を光源や熱源として利用してきた。

燃焼の数値計算では、流体のもつ時間スケールと化学反応のもつ時間スケールの隔たりが大きいことに由来し、乱流場の瞬時的局所火炎構造は定常層流火炎によって模擬できるとする層流火炎片モデル (Peters, 1984) が、広く用いられてきた。しかしながら、物質線の伸長 (Kida and Goto, 2002)、反応面の厚さの増大 (Donbar *et al.*, 2001)、カオス混合による化学反応の促進 (植田, 2002) など流れの性質は、化学反応に多大な影響を及ぼすことが予想される。実際、近年の計算機の発達により、乱流予混合燃焼の直接数値計算が可能になると、Navier-Stokes 方程式および素反応からなる詳細化学反応機構により記述される予混合燃焼において、乱流微細渦が予混合火炎にもたらす影響が明らかになりつつある (Nada *et al.*, 2004)。

噴流火炎の実験的研究では、Everest *et al.* (1995) が平面 Rayleigh 散乱法によりメタン-空気乱流拡散火炎の瞬時 2 次元温度分布を測定し、高温領域の空気側への張り出し、火炎内への空気の巻き込み、高温領域における空気の存在などを可視化し、流体の渦構造の火炎における役割を述べた。一方、数値計算では山下ら (1998) はメタン-空気 Skeletal 反応機構に基づく数値計算を行い、局所消炎の生じる機構を検証し、層流火炎片モデルを支持する結果を得た。また、木下ら (2004) は簡略反応機構による水素/窒素-空気の拡散燃焼における数値計算を行い、渦構造は火炎面に曲率をもたせ、この火炎面の局率によって生じる化学種間の選択拡散が温度特性など火炎に大きく影響することを明らかにした。

拡散火炎は、予混合火炎と異なり伝播速度をもたないために、流れ場、特に火炎面の伸長に対して敏感になる。したがって、従来の $k-\epsilon$ 法や Large Eddy Simulation によって流れ場を記述する場合や以前の空間解像度が低い数値計算では、化学反応の持つ長さスケールを計算することができないために火炎面を十分に捉えることができない。本研究では、メタン-空気噴流火炎において 6 種 4 段階簡略反応機構に基づく、流れ場に対して近似を用いない数値計算を行い、火炎面近傍の動力学を流れ場と化学反応の相互作用を調べ、火炎片モデルを検証する。

¹e-mail: nyokoyam@mail.doshisha.ac.jp

表 1: 各化学種の Lewis 数 Le_i .

化学種	CH ₄	CO	CO ₂	H ₂	H ₂ O	N ₂	O ₂
Le_i	0.97	1.10	1.39	0.30	0.83	1.0	1.11

2 数値計算法

燃焼場の支配方程式は、質量、運動量、エネルギー、化学種の保存方程式を用いて表される。本研究では、運動方程式において外力と体積粘性を無視し、エネルギー方程式において運動エネルギー、圧力仕事、外力、Dufour 効果 (質量分率勾配による熱流)、輻射、粘性散逸を無視する。さらに、化学種方程式において圧力、Soret 効果 (温度勾配による化学種の拡散) を無視すると、密度 ρ 、速度 \mathbf{u} 、温度 T 、化学種 i の質量分率 Y_i に対する支配方程式は以下のようになる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1a)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (1b)$$

$$\frac{\partial (\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) - \frac{1}{c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = -\frac{1}{c_p} \sum_i h_i \omega_i, \quad (1c)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) - \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) = \omega_i. \quad (1d)$$

ここで、圧力 p は、気体定数 R 、化学種 i の分子量 W_i を用いて状態方程式により $p = \rho RT \sum_i Y_i / W_i$ と表せ、粘性応力テンソル $\boldsymbol{\tau}$ は \mathbf{I} を単位テンソルとして $\boldsymbol{\tau} = \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - 2/3 (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I})$ 、平均定圧比熱 \bar{c}_p は化学種 i の定圧比熱を $c_{p,i}$ として $\bar{c}_p = \sum_i Y_i c_{p,i}$ 、化学種 i のエンタルピー h_i は $h_i = h_i^0 + \int_{T_0}^T c_{p,i}(T) dT$ と与えられる。ここで、定圧比熱の温度依存性には CHEMKIN (Kee *et al.*, 1996) を用いた。また、 ω_i は化学反応による化学種 i の生成項である。熱伝導係数 λ 、 i 種の拡散係数 D_i 、粘性係数 μ は、簡略輸送モデル (Smooke *et al.*, 1991) を用い、それぞれ、 $\lambda / \bar{c}_p = A (T/T_0)^{0.7}$ 、 $\rho D_i = Le_i^{-1} (\lambda / \bar{c}_p)$ 、 $\mu = Pr (\lambda / \bar{c}_p)$ により与える。ここで、比例係数を $A = 2.58 \times 10^{-5} \text{kg}/(\text{m} \cdot \text{sec})$ 、Prandtl 数を $Pr = 0.75$ とした。また、Lewis 数 Le_i は表 1 のように与える。

化学反応には 6 種 4 段階簡略反応機構 (Jones and Lindstedt, 1988),



表 2: 反応定数. 単位系には m, kg, sec, mol を用いた.

反応番号	A_i	E_i
(a)	4.4×10^{11}	1.26×10^5
(b)	3×10^8	1.26×10^5
(c)	2.5×10^{16}	1.67×10^5
(d)	2.75×10^9	8.38×10^4

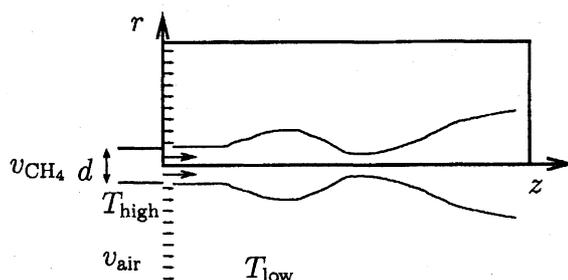


図 1: 境界条件.

を用いた. ここで各反応の反応速度 Ω_j は, Arrhenius 型の

$$\Omega_a = A_a [\text{CH}_4]^{1/2} [\text{O}_2]^{5/4} \exp(-E_a/RT), \quad (3a)$$

$$\Omega_b = A_b [\text{CH}_4] [\text{H}_2\text{O}] \exp(-E_b/RT), \quad (3b)$$

$$\Omega_c = A_c [\text{H}_2]^{1/2} [\text{O}_2]^{9/4} [\text{H}_2\text{O}]^{-1} T^{-1} \exp(-E_c/RT), \quad (3c)$$

$$\Omega_d = A_d [\text{CO}] [\text{H}_2\text{O}] \exp(-E_d/RT) \quad (3d)$$

で与えられる. ここで $[\cdot]$ はモル濃度を表し, 各反応定数 A_i および E_i は表 2 のように与える. このとき ν_{ij} を式 (2) の j 段階における i 種の反応係数として, 式 (1) に表れる化学反応による生成項は $\omega_i = \sum_j \nu_{ij} \Omega_j$ で与えられる.

本研究では, 空間微分は 6 次コンパクト差分法 (Lele, 1992) を用い, 境界条件には Navier-Stokes 特性境界条件 (Baum *et al.*, 1994) を適用した. 流入条件は, 図 1 に示すように, 直径 $d = 2 \times 10^{-3} \text{m}$ のノズルから温度 $T_{\text{low}} = 300 \text{K}$, 質量分率 $Y_{\text{CH}_4,0} = 1$ の純メタンが, 速度 $v_{\text{CH}_4} = 40 \text{m/sec}$ で流入し, その周囲から温度 T_{low} , $Y_{\text{O}_2,0} = 0.232$, $Y_{\text{N}_2,0} = 0.768$ で混合された空気が $v_{\text{air}} = 4 \text{m/sec}$ で流入するとした. また, 燃焼器内は静止した空気で満たされていたとした. さらに, 流入境界直後での吹き飛びを防ぐために, ノズルは高温 $T_{\text{high}} = 2000 \text{K}$ であるとした. ただし, $t < 5.0 \times 10^{-4} \text{sec}$ の初期段階では着火を引き起こすためにノズル温度は $T_{\text{high,init}} = 2250 \text{K}$ とし, 段階的に T_{high} まで下げた. また, 軸対称性を仮定し, 図 1 中の矩形領域のみを計算対象とする. この系の特徴的な無次元数は, Reynolds 数 $Re \sim 8 \times 10^3$ および流れと化学反応の時間スケールの比である Damköhler 数 $Da \sim 4 \times 10^7$ である. また, 時間積分には 4 次 Runge-Kutta 法を用いた.

3 数値計算結果

3.1 燃焼場の概観

本研究では、メタン-空気噴流拡散火炎の数値計算を行った。時刻 $t = 4.8 \times 10^{-3}$ sec における燃焼場を図2に示す。計算領域は噴流の流下にしたがって拡大させ、時刻 $t = 4.8 \times 10^{-3}$ sec での計算領域は、 $0 \leq r \leq 1.2 \times 10^{-2}$, $0 \leq z \leq 9.5 \times 10^{-2}$ である。本稿では、初期条件および境界条件の影響を受けない $5 \times 10^{-3} \leq z \leq 2.25 \times 10^{-2}$ の領域での火炎の挙動を調べる。

本稿で対象としない下流域では、この時刻において流入するメタンの先頭は、ノズル先端から $z \sim 8 \times 10^{-3}$ m に到達し、その近傍で非圧縮性に由来する渦構造を形成する様子が見られる。また、 $2 \times 10^{-3} \leq z \leq 4 \times 10^{-3}$ の領域に大きな既燃領域が存在する (図2(c)-(g))。この領域では、初期時刻から着火まで時間差が存在するため、その間に形成されたメタン-空気の予混合域が部分的に予混合燃焼していると考えられる。また、この領域の最下流にこの時刻における最も反応の激しい領域を見ることができる。反応の激しい領域での速度勾配が大きいことは、燃焼領域で流れと化学反応の相互作用を正当に評価する必要があることを示唆する (図2(a),(b))。

3.2 層流火炎片モデルとの比較

火炎片モデルでは Bilger (1988) によって定義された混合分率

$$Z = \frac{2Y_{\text{CH}_4}/W_{\text{CH}_4} + (Y_{\text{O}_2,0} - Y_{\text{O}_2})/W_{\text{O}_2} + (Y_{\text{CO}}/W_{\text{CO}} + Y_{\text{H}_2}/W_{\text{H}_2})/2}{2Y_{\text{CH}_4,0}/W_{\text{CH}_4} + Y_{\text{O}_2,0}/W_{\text{O}_2}} \quad (4)$$

を用いて流れと化学反応の相互作用が記述される。混合分率は純酸化剤領域で0、純燃料領域で1の値をとる化学反応に対する保存量²である。また、化学量論比によって火炎面は

$$Z = \frac{Y_{\text{O}_2,0}/W_{\text{O}_2}}{2Y_{\text{CH}_4,0}/W_{\text{CH}_4} + Y_{\text{O}_2,0}/W_{\text{O}_2}} = Z_{\text{st}} \quad (5)$$

で定義される。実際、図3に示すように、本研究で得られた大きな熱発生率をもつ面はこの化学量論的混合分率 Z_{st} によって定義される火炎面とよい一致を示す。

全ての化学種の拡散係数 D_i が同一の D であるならば、混合分率の時間発展は

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla Z = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) \quad (6)$$

と表される。火炎片モデルは、まず式(6)により全空間で混合分率を求め火炎面 $Z = Z_{\text{st}}$ を決定する。次に火炎面近傍で火炎片方程式、

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\rho \chi}{Le_i} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \omega_i \quad (7)$$

によって反応拡散構造を記述する。ここで、スカラー散逸率 χ は $\chi = 2D|\nabla Z|^2$ である。

²実際には D_i が全て等しいと仮定し、式(6)を認めてはじめて保存する。

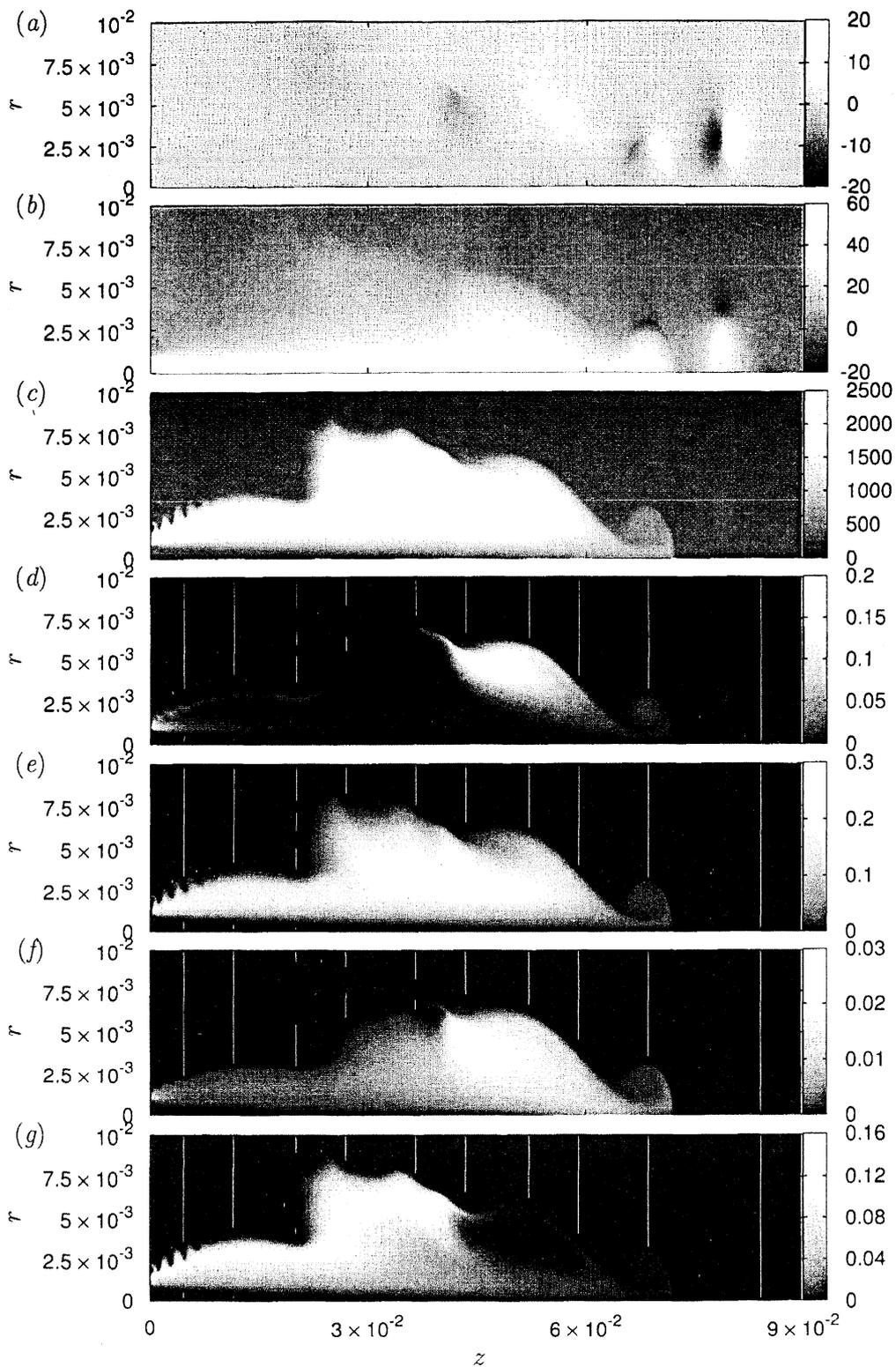


図 2: 燃焼場 ($t = 4.8 \times 10^{-3}$). (a) 動系方向速度場, (b) 軸方向速度場, (c) 温度場, (d) 一酸化炭素, (e) 二酸化炭素, (f) 水素, (g) 水の各質量分率場. 縦軸 r は動径方向座標, 横軸 z は対称軸方向座標である.

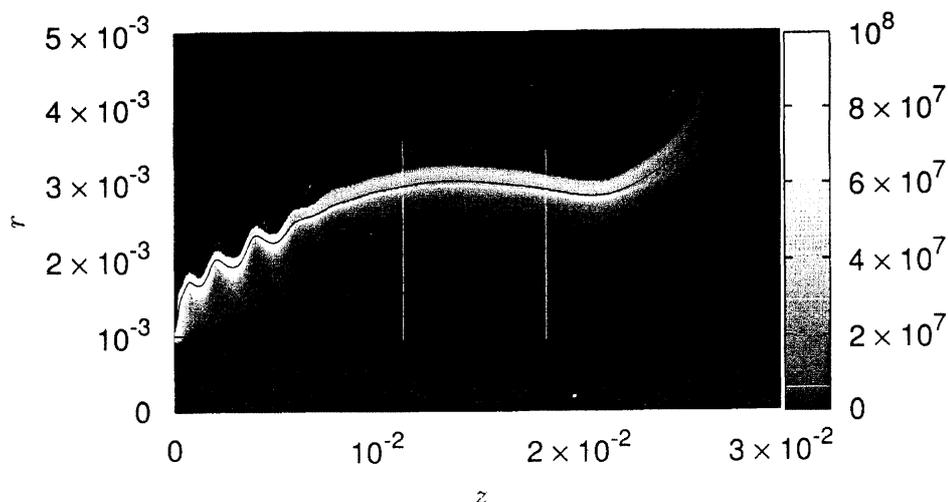


図 3: 熱発生率 $-\sum_i h_i \omega_i$ と化学量論的混合分率 Z_{st} によって定義される火炎面 (実線). ($t = 4.8 \times 10^{-3}$)

化学反応は反応速度無限大の総括一段階不可逆反応とし、すべての Lewis 数が 1 とすると温度および質量分率を混合分率の関数として Burke-Schumann 解

$$Y_F = \begin{cases} 0, & Z \leq Z_{st} \\ Y_{F,0}(Z - Z_{st})/(1 - Z_{st}), & Z > Z_{st} \end{cases}, \quad (8a)$$

$$Y_{O_2} = \begin{cases} Y_{O_2,0}(1 - Z/Z_{st}), & Z \leq Z_{st} \\ 0, & Z > Z_{st} \end{cases}, \quad (8b)$$

$$T - T_{low} \propto \begin{cases} Z, & Z \leq Z_{st} \\ 1 - Z, & Z > Z_{st} \end{cases}, \quad (8c)$$

が得られる。本研究で得られた $t = 4.8 \times 10^{-3}$ における温度および質量分率の分布を図 4 に示す。温度分布は、吹き飛びを防ぐための高温ノズルのために Burke-Schumann 解とは定性的な一致を示すに留まるものの、メタンおよび酸素の質量分率分布は Burke-Schumann 解と非常によく一致する。

ここまで、混合分率を用いて拡散燃焼場を記述し、火炎片モデルは火炎を俯瞰的に眺める道具としてはよい道具であることがわかった。ここからは、火炎面近傍の詳細な統計的性質を調べる。図 4 において、 $Z = Z_{st}$ の火炎面近傍では、温度の最大値およびメタンの質量分率が 0 となる混合分率の値が化学量論的混合分率と比較してわずかに大きい。これは有限反応時間化学反応機構によって火炎面が厚さをもつことに由来する。また、この結果は図 3 において高熱発生領域が化学量論的混合分率によって定義された火炎面よりもメタン側に張り出していることと一致する。また、温度分布の最大値近傍では、2 種の解が見られる。これは図 3 において、火炎面は 2 層構造をもつことと一致する。この構造は多段の反応機構を用いたことによるものと考えられる。

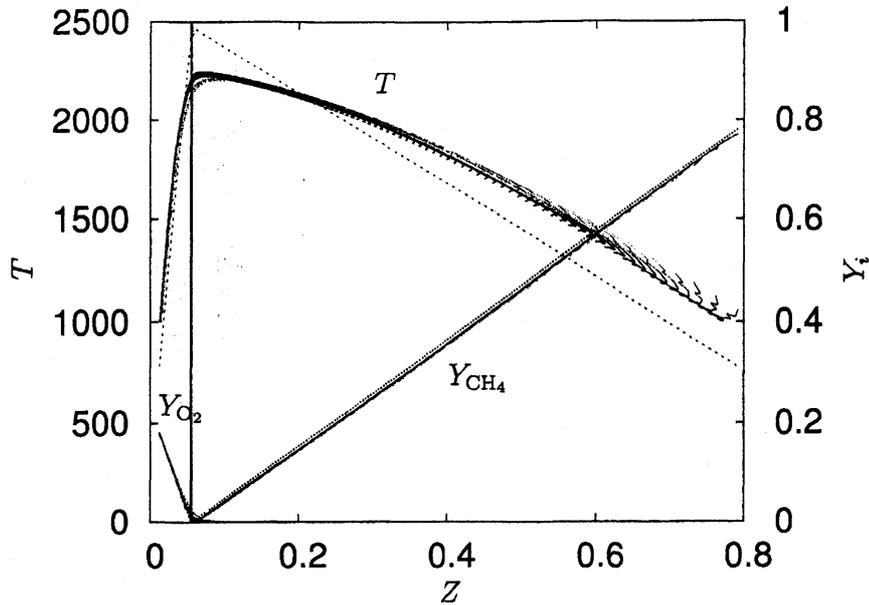


図 4: 温度 T , メタン質量分率 Y_{CH_4} および酸素質量分率 Y_{O_2} の散布図. 横軸は混合分率 Z . 破線, 点線, 一点鎖線は, それぞれ, 温度, メタン質量分率, 酸素質量分率の Burke-Schumann 解を表す. 実線は, 火炎面 $Z = Z_{\text{st}}$ を表す ($t = 4.8 \times 10^{-3}$).

火炎片方程式 (7) は質量分率 Y_i は混合分率 Z , 火炎面上でのスカラー散逸率 χ_{st} , および時刻の関数であることを示している. すなわち, ある時刻においてスカラー散逸率の規定された関数形に対して等混合分率面にそって各質量分率が一定であることを意味する. したがって, 火炎面近傍では質量分率場は混合分率場とともに流れ場によって流され, 同様の分布を示すことを火炎片方程式は意味する. 図 5 は, $Z = Z_{\text{st}}$ で定義された火炎面上の自然座標 ξ の関数として (a) メタン, 一酸化炭素, 二酸化炭素, 水素, 水, 酸素の質量分率および (b) 火炎面内歪み速度, 温度を示したものである. ここで $\xi = 0$ は火炎面と r 軸との交点に対応する. また, 火炎面の法線ベクトルを \mathbf{n} として火炎面内歪み速度 φ は $\varphi = \nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$ で定義される. このとき, 図 5(a) の各質量分率に見られる $\xi \lesssim 8 \times 10^{-3}$ 領域の大きな振動は, 図 2 と図 3 における $z \lesssim 7 \times 10^{-3}$ の領域の流入境界付近で生じた火炎面厚さと同程度の大きさをもつ渦構造によるものと考えられる. この渦構造は図 5(b) の火炎面内歪み速度分布にも反映されている. 火炎片モデルは, 火炎の厚さが流体の乱れの長さスケールよりも小さいときに成り立つとしているので, $\xi \lesssim 8 \times 10^{-3}$ の大きな振動は, 火炎片モデルと矛盾するものではない. また, 図 5(a) $10^{-2} \lesssim \xi \lesssim 2.5 \times 10^{-2}$ における各質量分率が比較的一定の領域では, 図 5(b) の火炎面内歪み速度の変動も小さく, 図 2 と図 3 における $10^{-2} \lesssim z \lesssim 2.25 \times 10^{-2}$ の滑らかな火炎面に対応することがわかる. この領域での各質量分率の小さい振動は火炎面の厚さに由来するものであるが, それとは異なる緩やかな振動を図 5(a) に見ることが出来る.

図 3 に見られる熱発生率の火炎面の不均一性を調べるために, 図 6(a) に示す火炎面が

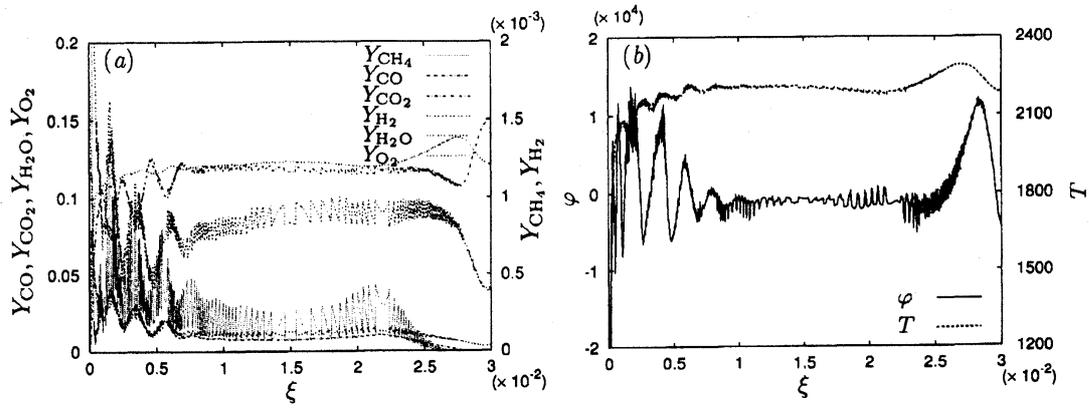


図 5: 混合分率によって定義された火炎面 $Z = Z_{\text{st}}$ 上での (a) メタン, 一酸化炭素, 二酸化炭素, 水素, 水, 酸素の質量分率および (b) 火炎面内歪み速度, 温度.

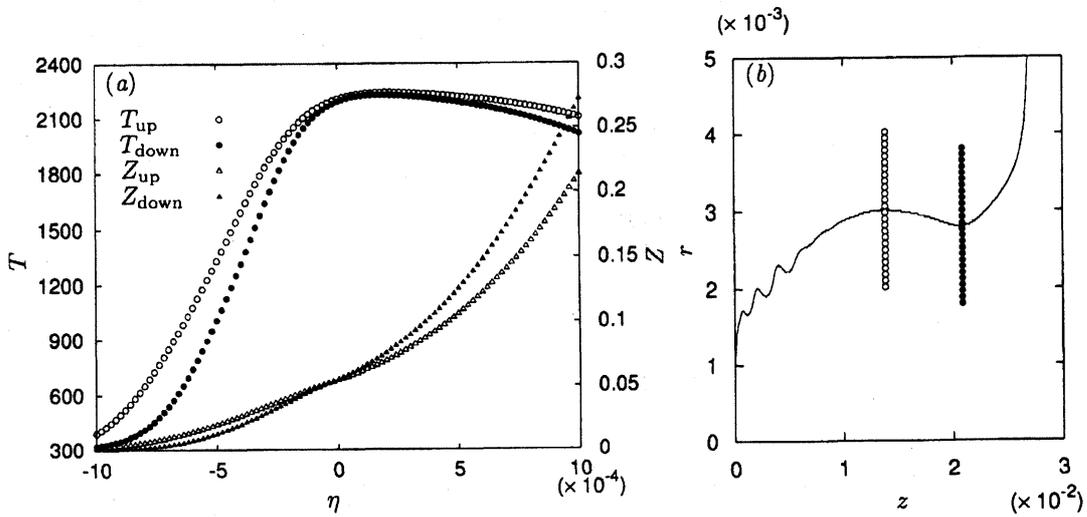


図 6: (a) 火炎面に垂直な自然座標系での温度および混合分率分布. (b) 火炎面 (実線) と垂直に交わる 2 本の自然座標系. up は動径方向に凸の座標系 (白), down は対称軸方向に凸の座標系 (黒) 上での温度ならびに混合分率の分布を表す.

動径方向に凸の点 $(r, z) = (2.8 \times 10^{-3}, 2.088 \times 10^{-2})$ ($\xi \sim 1.499 \times 10^{-2}$) ならびに火炎面が対称軸方向に凸の点 $(r, z) = (3.02 \times 10^{-3}, 1.388 \times 10^{-2})$ ($\xi \sim 2.201 \times 10^{-2}$) における法線方向の自然座標系 η 上の燃焼場を調べる. ここで $\eta = 0$ は火炎面を表す. 図3が示すように, 火炎面が対称軸方向に凸の点における熱発生率は火炎面が動径方向に凸の点における熱発生率よりも大きい値をとる. これは, この2点での温度はほぼ同じ値ではあるものの, 図6(b)が示すように火炎面からわずかに離れた領域における温度および混合分率の分布がこの2点で異なることによる. 対称軸方向に凸の点において混合分率の変化の割合が大きく, スカラー散逸率 $\chi_{st} = 2D|\nabla Z|_{st}^2$ が大きくなりこの点近傍での高熱発生率を説明することができる. 流れ場の移流によってもたらされる混合分率の空間構造は, 熱発生率に影響を与え, 流れから化学反応へのフィードバックと言える.

4 まとめ

本研究では, メタン-空気の噴流拡散燃焼において, 熱発生率の大きな面が化学量論的混合分率によって定義される火炎面とよい一致を示すことを6種4段階簡略化学反応機構による流体運動に関して一切の近似を用いない数値計算により確認した. また, 化学反応機構に有限時間・多段の機構を用いたことによって火炎面が層構造をもつことが明らかとなった. 火炎面の構造は古典的な Burke-Schumann 解によって大筋でよく記述されることも確認された.

しかしながら, 火炎面上で質量分率が一定値をとる結果は得られなかった. これは火炎面上のみではなく火炎面近傍の混合分率の空間構造が, 火炎構造に大きな影響を与えていることを意味する. さらに, この火炎面近傍の混合分率の空間構造が火炎面が燃料域に凸の領域で高スカラー散逸率, さらに, 高熱発生率を生じさせることが示された. このことは火炎片モデルの示唆することと定性的には一致するが, 定量的な比較が求められる.

今後の目標としては, 混合分率の空間構造を決定する渦構造の動力学を詳細に調べる必要がある. それにより火炎構造, 特に燃料の過消費によって起こるとされる局所消炎を引き起こす燃焼場を同定することは興味深い. また, 今回触れていない種々の統計量を調べることにより, Lagrangian 火炎片モデル (Pitsch, 2000) との比較を行う. さらに, 流れおよび化学反応のもつ長さ・時間スケールが広範囲にあることからその多様性を考えることも必要である. 今後, 拡散火炎全体の振る舞いを調べるためには3次元性を考慮した数値計算が待たれる.

本研究の一部は, 文部科学省学術フロンティア推進事業「次世代ゼロエミッション・エネルギー変換システム」の支援を受けた. また, 本研究の数値計算は京都大学基礎物理学研究所ならびに東北大学情報シナジーセンターの計算設備にて行った.

参考文献

- Baum, M., Poinso, T., and Thévenin, D. (1994). Accurate boundary condition for multicomponent reactive flows. *J. Comput. Phys.* **116**, 247–261.

- Bilger, R. (1988). The structure of turbulent nonpremixed flames. In *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, pp. 475–488. The Combustion Institute, Pittsburgh.
- Donbar, J. M., Driscoll, J. F., and Carter, C. D. (2001). Strain rates measured along the wrinkled flame contour within turbulent non-premixed jet flame. *Combust. Flame* **125**, 1239–1257.
- Everest, D. A., Driscoll, J. F., Dahm, W. J. A., and Feikema, D. A. (1995). Images of the two-dimensional field and temperature gradients to quantify mixing rates within a non-premixed turbulent jet flame. *Combust. Flame* **101**, 58–68.
- Jones, W. P. and Lindstedt, R. P. (1988). Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combust. Flame* **73**, 233–249.
- Kee, R. J., Rupley, F. M., Meeks, E., and Miller, J. A. (1996). Chemkin-III: A fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics. Technical Report SAND96-8216, Sandia National Laboratories.
- Kida, S. and Goto, S. (2002). Line statistics: Stretching rate of passive lines in turbulence. *Phys. Fluids* **14**, 352–361.
- 木下進一, 高城敏美, 小宮山正治, 脇田将寛 (2004). 大規模渦の干渉を受ける噴流拡散火炎の数値解析. 日本機械学会論文集 (B編) **70**, 773–779.
- Lele, S. K. (1992). Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *J. Comput. Phys.* **103**, 16–42.
- Nada, Y., Tanahashi, M., and Miyauchi, T. (2004). Effect of turbulence characteristics on local flame structure of H₂-air premixed flames. *J. Turbulence* **5**, 16.
- Peters, N. (1984). Laminar diffusion models in non-premixed turbulent combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.* **10**, 319–339.
- Pitsch, H. (2000). Unsteady flamelet modeling of differential diffusion in turbulent jet diffusion flames. *Combust. Flame* **123**, 358–374.
- Smooke, M. D., Wess, J., Ruelle, D., Jaffe, R. L., and Ehlers, J. (Eds.) (1991). *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*, pp. 1–28. Springer-Verlag.
- 植田利久 (2002). 反応系の流体力学 (6章). コロナ社.
- 山下博史, Djamrak, D., 竹野忠夫 (1998). 2次元燃料噴流拡散火炎の火炎構造と非定常挙動に対する素反応の役割. 日本機械学会論文集 (B編) **64**, 318–325.