

■原著論文/ORIGINAL PAPER■

二次元水素-空気予混合火炎の固有不安定におよぼす微小擾乱の影響に関する
直接数値シミュレーションDirect Numerical Simulations for the Effects of Small Perturbation on the Intrinsic Instabilities
of Two-dimensional Hydrogen/air Premixed Flames

坪井 和也*・升谷 五郎

TSUBOI, Kazuya*, and MASUYA, Goro

東北大学大学院工学研究科 〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉01
Tohoku University, 01 Aramaki-aza-Aoba, Aoba-ku, Sendai 980-8579, Japan

2003年5月1日受付；2003年7月17日受理／Received 1 May 2003; Accepted 17 July 2003

Abstract : Direct numerical simulations were implemented and studied for the intrinsic instabilities of two-dimensional hydrogen/air premixed planar flames. The 6th-order compact finite difference scheme was used for the spatial discretization, and the 3rd-order Runge-Kutta method for the time advancement. The boundary conditions were based on the Navier-Stokes characteristic boundary conditions. The hydrogen/air detailed kinetics, which contains 9 species and 35 elementary reactions, was used. Small perturbation was imposed at the upstream boundary of the calculation domain (a rectangle), and then the perturbation grew up when it reached a planar flame. The flame became unstable due to the intrinsic instabilities. Afterwards, a cusp, which was a concave part towards the unburned gas, appeared, and developed rapidly. It is considered to be due to the diffusive-thermal instability. And then, the cusp was closing, while a convex part towards the unburned gas appeared. This is considered as a cellular structure. The dispersion relation between the wave number and the growth rate of the perturbation was obtained and compared with a theoretical prediction. The behaviour of the flame was qualitatively similar to one obtained in past experiments. Furthermore the results with the perturbation imposed continuously and in a limited time were compared.

Key Words : Direct numerical simulation, Flame instability, Premixed planar flame

1. 緒言

予混合火炎には主として3種の固有不安定、すなわち流体力学的不安定 (Darrieus - Landau 不安定)、拡散-熱的不安定および浮力不安定があることが知られており、これまで数多くの理論的、実験的および数値的な研究がなされてきた[1-4]。それらの研究によると、予混合火炎の固有不安定のうち、Darrieus - Landau 不安定あるいは拡散-熱的不安定が火炎の自己乱流化を引き起こすものと考えられている。Sivashinsky[2]は、球状火炎を中心にそのセル状構造と自己乱流化について、拡散-熱的火炎面モデルを用いた漸近的手法により理論的および数値的に検討した。しかしこの際、例えば素反応を考慮せず、また反応帯を非常に薄い面と仮定する等の近似を行っている。そのため熱と物質そ

れぞれの流束と火炎の不安定との関係、反応帯中のどこで不安定の端緒が生じるか等を含め、自己乱流化の発生機構の詳細は明らかになっていない。

近年になって、計算機性能の急速な発達とそれに伴う高次精度の離散化手法の開発により、流れを支配する Navier-Stokes 方程式をモデル化せずに厳密に解く、DNS (Direct Numerical Simulation) が登場し、まず非反応性乱流に対して適用された。その後、1983年に Ashurst と Barr[5]により密度一定・一段総括反応を仮定した二次元予混合火炎の DNS が報告された。以来 DNS は、モデルを含まないため、火炎の基本的特性を研究するのに有力な手法となってきた。しかし、超音速燃焼器をはじめ実用燃焼装置レベルでは、計算コストの制限から計算格子よりも小さなスケールの渦をモデル化した LES (Large Eddy Simulation) が徐々に用いられてきている。ただ、反応流に対する DNS は既存の反応流モデルの検証だけにとどまらず、より優れた高精度の反応流モデルを開発する上で極め

* Corresponding author. E-mail: pro904@cc.mech.tohoku.ac.jp

て重要であり, 実用燃焼器の高性能化を実現するためにも非常に有用であると考えられる。

本研究では火炎の基本的な特性を研究するのに有利な DNS を用いて, 平面予混合火炎の自己乱流化の発生機構を明らかにするため, 自己乱流化と密接な関係があると考えられる固有不安定のうち, 拡散-熱的不安定および Darrieus - Landau 不安定が火炎におよぼす影響について調べる基礎的研究として, 初期の微小擾乱とその後火炎で発展する擾乱の成長率との関係について調べた。

2. 計算方法

2.1. 数値スキーム

反応流中においては, 熱と各化学種成分の対流や拡散, 伝導による輸送および化学反応による熱や物質の生成が同時に進行しているため, そのメカニズムは非常に複雑である。反応流の支配方程式は, 各化学種の質量保存式, 全運動量保存式および全エネルギー保存式である。それらを連立して構成される無次元化された二次元反応流の Navier-Stokes 方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial y} = \frac{\partial E_V}{\partial x} + \frac{\partial F_V}{\partial y} + S$$

ここで, U は保存ベクトル, E , F は対流流束ベクトル, E_V , F_V は拡散流束ベクトル, S は反応生成項で, 以下に示される。

$$U = \begin{bmatrix} \rho_i \\ \rho u \\ \rho v \\ e \end{bmatrix}, \quad E = \begin{bmatrix} \rho_i u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ (e+p)u \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \rho_i v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ (e+p)v \end{bmatrix}$$

$$E_V = \frac{1}{Re} \begin{bmatrix} \rho D_i \frac{df_i}{dx} \\ \tau_{xx} \\ \tau_{xy} \\ u\tau_{xx} + v\tau_{xy} + q_x \end{bmatrix}, \quad F_V = \frac{1}{Re} \begin{bmatrix} \rho D_i \frac{df_i}{dy} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yy} \\ u\tau_{xy} + v\tau_{yy} + q_y \end{bmatrix}$$

$$S = Da \begin{bmatrix} \omega_i \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

ここで, u , v はそれぞれ x 方向および y 方向速度, f_i , D_i , ω_i はそれぞれ化学種 i の質量分率, 拡散係数, 反応速度である。また Re , Da は参照 Reynolds 数および参照 Damköhler 数で以下のように定義される。

$$Re = \frac{c_0 l_0}{\mu_0 / \rho_0}, \quad Da = \frac{\omega_0}{(\rho_0 c_0) / l_0}$$

ただし l_0 は計算領域長さ, c_0 , μ_0 , ρ_0 はそれぞれ水素-空気予混合気未燃および既燃状態における平均音速, 平均粘性係数, 平均密度, また ω_0 は基準反応速度である。さ

らに粘性応力 τ_{xy} , τ_{xx} , τ_{yy} および熱流束 q_x , q_y は, それぞれ以下のようなものである。

$$\tau_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad \tau_{xx} = \frac{2}{3} \mu \left(2 \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{\partial v}{\partial y} \right), \quad \tau_{yy} = \frac{2}{3} \mu \left(2 \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial u}{\partial x} \right)$$

$$q_x = k \frac{\partial T}{\partial x} + \rho \sum_{i=1}^N D_i h_i \frac{\partial f_i}{\partial x}, \quad q_y = k \frac{\partial T}{\partial y} + \rho \sum_{i=1}^N D_i h_i \frac{\partial f_i}{\partial y}$$

ここで, μ は粘性係数, k は熱伝導率, T は温度, また, i は各化学種を表し, N は化学種の数である。 h_i は化学種 i のエンタルピで, JANAF thermochemical tables[6]による。また, 各輸送係数の値は CHEMKIN[7,8]のデータベースを用いた。さらに全体のエネルギー e , 圧力 p および密度 ρ は以下に示される。

$$e = \sum_{i=1}^N \rho_i h_i - p + \frac{1}{2} \rho (u^2 + v^2), \quad p = \sum_{i=1}^N \rho_i R_i T, \quad \rho = \sum_{i=1}^N \rho_i$$

化学反応機構には, 9 化学種, 35 素反応を考慮した Stahl and Warnatz の詳細反応モデル[9]を用いる。空間の離散化には 6 次精度 compact 有限差分スキーム[10], 時間進展には 3 次精度 Runge-Kutta 法を用いる。

境界条件として, 計算領域上流では無反射流入条件, 下流では NSCBC (Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions)[11,12]に基づく無反射流出条件を用いる。側面の境界条件として, 流れの周期性あるいは相似性が仮定できる場合, 一般に周期境界条件がよく用いられる。しかし火炎の不安定や自己乱流化といった現象においては, 周期性や相似性の仮定は適切ではないと考えられる。また周期境界条件を用いた場合, 流れ場の長さスケールが計算領域によって制限されてしまう。これらの理由により, 本研究では周期境界条件は用いず, 境界を横切る波の特性速度により, 境界から流入あるいは流出がある場合は NSCBC 無反射条件が, 流入も流出もない場合は y 方向速度成分を 0 として, NSCBC に基づき y 方向運動量保存式を消去して得られる修正無反射条件が, それぞれ自動的に選択される流入・流出自動選択条件を構築して用いた。

2.2. 計算条件

計算条件を Table 1 および Table 2 に示す。ここで, ϕ は当量比, \bar{u}_{in} は上流境界から流入する未燃混合気の平均流速で, 上流境界で課される速度の空間的な微小擾乱を \bar{u}_d とすると未燃気体の流入速度 u_{in} は, 以下で表される。

$$u_{in} = \bar{u}_{in}(1 + \bar{u}_d), \quad \bar{u}_d = A_0 \sin(2\pi\kappa), \quad \kappa = \frac{y}{\lambda}$$

なお, \bar{u}_{in} は火炎を計算領域内に定在させるために一次元での計算より得られた層流燃焼速度 S_u に等しくされる。また Le は Lewis 数, β は Zel'dovich 数であり, それぞれ以下のように定義される。

$$Le = \frac{k}{c_p \rho D_d}, \quad \beta = \frac{E_A(T_b - T_u)}{R_0 T_b^2}$$

ただし κ は波数, c_p は定圧比熱, E_A は総括反応での活性化エネルギー, T_u, T_b は未燃および既燃気体の温度, R_0 は一般気体定数であり, D_d は不足成分の拡散係数である. また, δ_L は予熱帯厚さで, 以下のように定義される.

$$\delta_L = \frac{k_i}{c_{pm} \rho_u S_u}$$

ここで, k_i は予熱帯と反応帯の境界での熱伝導率, c_{pm} は予熱帯全域での平均定圧比熱, ρ_u は未燃気体の密度, S_u は層流燃焼速度である. また λ, A_0 は上流境界で与えられる微小擾乱の波長および振幅であり δ_L で規格化されている. *Perturbed time* は微小擾乱を課す計算開始時からの時間で, 予熱帯通過時間 δ_L / u_{in} で無次元化されている. ∞ は計算時間に渡り擾乱を課すことを示している.

なお既燃気体の各状態量の初期分布は, 一次元および二次元での予備計算の結果より与えられる. 本研究での計算対象は二次元水素-空気平面予混合火炎, 計算領域は $4[\text{mm}] \times 2[\text{mm}]$ ($71.35\delta_L \times 35.67\delta_L$), $4[\text{mm}] \times 4[\text{mm}]$ ($71.35\delta_L \times 71.35\delta_L$), 計算格子は正方格子で, 格子点数はそれぞれ $257 \times 129, 257 \times 257$ とする. Fig. 1 に計算領域および諸条件を示す. なお, 本研究での計算には, 東北大学情報シナジーセンター 大規模科学計算システム スーパーコンピュータ SX-4/128 H4 を用いた.

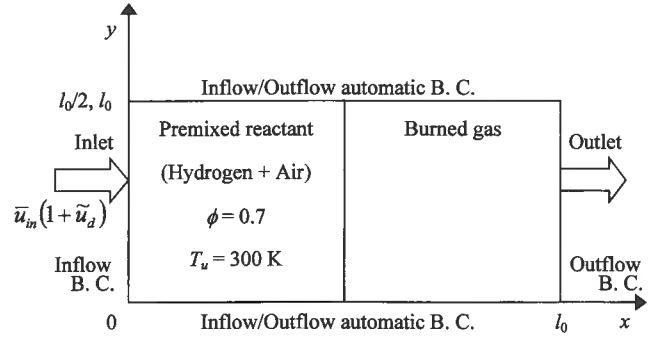


Fig. 1. Computation domain and conditions.

3. 数値スキームおよび化学モデルの検証

3.1. 各種問題への適用

本研究で用いる数値スキームを検証するため, 一次元の Shock tube, 音響波, 拡散火炎および二次元渦流出[12]と, 一次元予混合火炎および二次元拡散火炎の各問題が解かれた. 特に, NSCBC に基づいて構築された, 修正無反射境界条件について検証が行われた.

この際, 側面境界では流入および流出が自動的に選択される境界条件が用いられるが, 全ての保存式を解いた場合, 主流に直交する流れが生じて, 側面境界から流出していく. また火炎近傍では, 火炎があたかも計算領域外には存在しないような流れ, つまり計算領域内に存在する火炎を迂回していくような流れが生じる. そこで, 側面境界条件およびその他の境界条件は, 2.1 節後段で述べたように設定する. その結果, 形成段階にある火炎を計算領域内から領域外に流出させても, 計算領域上流および下流境界, また側面境界において, 数値的な反射, つまり非物理的挙動は観察されなかった. このことから, 境界条件については適切であるとえられる.

Table 1. Computation conditions in all cases

ϕ	\bar{u}_{in} [m/s]	Le	β	Le_c
0.7	0.8379	0.42	13.15	0.8479

Table 2. Computation conditions in each case

Case	(a)	(b)	(c)	(d)	(e)	(f)	(g)
λ	11.42	2.85	5.71	17.12	22.83	11.42	11.42
A_0	0.0713	0.0713	0.0713	0.0713	0.0713	0.0713	0.00713
<i>Perturbed time</i>	∞	∞	∞	∞	∞	1	1

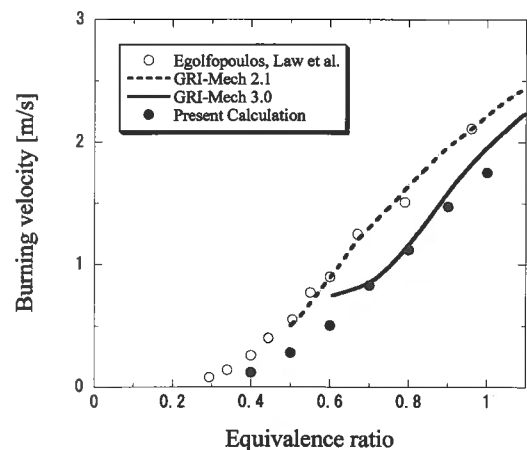


Fig. 2. Comparison between experiments and calculations for the laminar burning velocity.

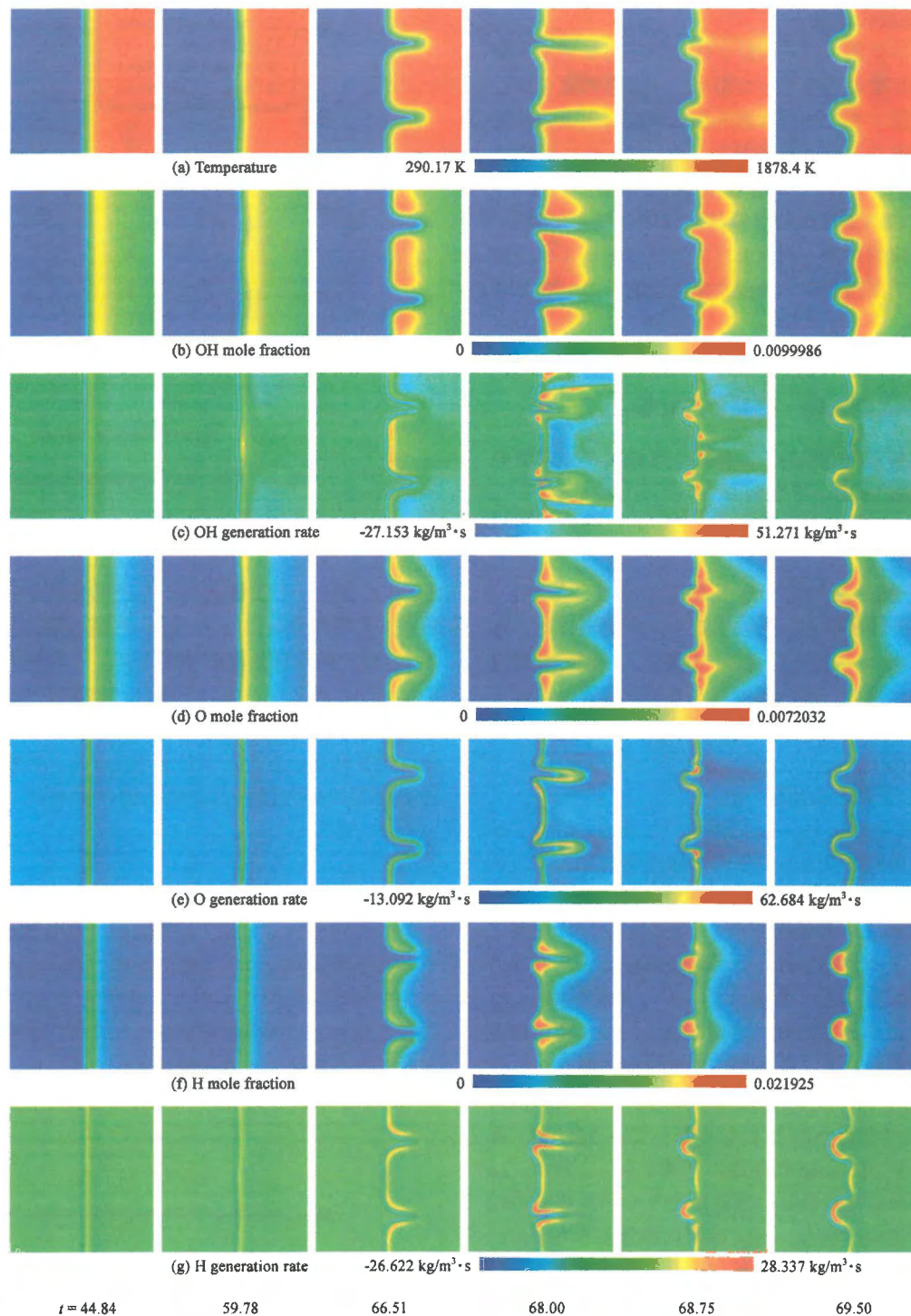


Fig. 3a. Calculation results (Case (c), 4 mm × 4 mm).

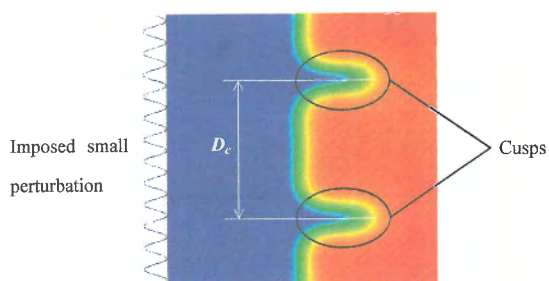


Fig. 3b. Sample of calculation results. Amplitude of the imposed perturbation drawn here is 200 times the actual size.

3.2. 層流燃焼速度の比較

本研究で用いる数値スキームおよび化学反応モデルが現実の反応流に対して妥当なものでかつ、十分な精度を有していることを検証するため、水素-空気予混合火炎の層流燃焼速度を当量比を変化させて計算した。Fig. 2 に計算結果と他の実験値[13-15]および計算値[16]を示す。図より、計算結果は実験値および他の計算値とほぼ一致しており、本研究で用いる数値スキームおよび化学反応モデルは現実の反応流に対して妥当でかつ十分な精度を有していると考えられる。

4. 計算結果および実験・計算との比較

Sivashinsky の線形理論[17]によれば、火炎は不足成分の Lewis 数が十分低いとき、すなわち

$$Le < Le_c = 1 - 2/\beta$$

のとき、拡散-熱的効果により不安定となる。ただし、 Le_c は火炎の安定限界の Lewis 数である。本研究における計算条件では、Table 1 より $Le < Le_c$ であり、今回の計算対象とした火炎は、拡散-熱的効果による不安定領域にあることがわかる。

4.1. 実験および計算との比較

Case (c) の計算結果を Fig. 3a に示す。ここで、時刻 t は上流境界で微小擾乱が課されてからの経過時間であり、予熱帯通過時間 δ_L / u_{in} で無次元化されている。Fig. 3b に、Fig. 3a のサンプルとその説明を示す。ただし、図の左側に描かれている、上流で課される微小擾乱の振幅は、実際の大きさの 200 倍に拡大して表示している。上流で課された微小擾乱は火炎に到達した後に増幅され、 $t = 60$ 頃には火炎の平面構造は失われる。その後、既燃気体に向かって凸の部分 (cusp) を伴ったセル状構造が現れる。この火炎形状は、実験で観察されたものとよく一致している[1,18]。その後、 $t = 68$ 頃までに cusp が急速に発達する。これは、 $Le < 1$ の場合、すなわち混合気の熱拡散よりも不足成分の物質拡散が卓越している場合、cusp は他の部分よりも少ない燃料しか受け取れず、反応速度がより一層低下するという、拡散-熱的効果によるものと考えられる。 $t = 69$ 頃には、cusp の周りからの熱拡散が曲率の大きい cusp 先端に集中することにより、拡散-熱的効果のためにいったん低下した反応速度が再び増加していき、cusp は閉じていく。それと同時に未燃気体に向かって凸の部分が現れ、拡散-熱的効果、すなわち cusp の場合とは逆に、他の部分よりも多くの燃料を受け取るため、反応速度は増加し、曲率半径は一層大きくなっていく。また、H や O のモル分率分布より、中間生成物について選択拡散が起こっている様子が捉えられている。

セル状構造におけるセル間隔について、Mitani and Williams の実験[3]および門脇の計算[19]と比較した結果を

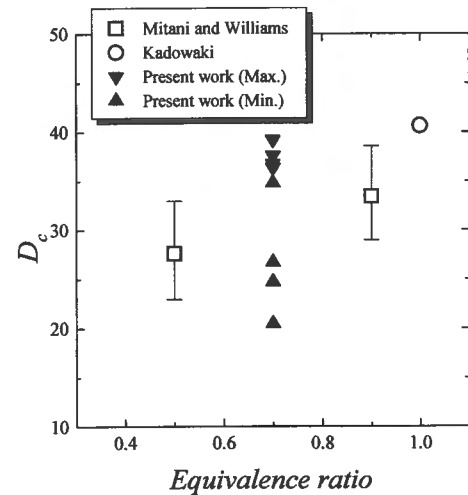


Fig. 4. Cell size and equivalence ratio.

Fig. 4 に示す。ここで D_c は δ_L で規格化されたセル間隔である。本研究では、 D_c を cusp 先端の間隔とした。また D_c は、時々刻々変化するため、その最大値と最小値を示した。これより、 D_c は当量比の増加につれて単調に増加する傾向が見られ、本研究において得られた結果もその傾向に含まれていることがわかる。また、実験誤差の範囲と計算結果の最大値および最小値の範囲は、ほぼ一致している。

4.2. 初期の微小擾乱の波長および振幅の影響

他の条件を一定として初期に課される微小擾乱の波長 λ を、高波数領域において変化させた Case (a), (c), (d), (e) において形成された火炎のセル状構造におけるセル間隔 D_c の最大値および最小値を Fig. 5 に示す。計算領域上流で課される微小擾乱の波長を変化させても、 D_c の最大値は 35 ~ 40 となっており、 D_c は課される微小擾乱の波長にはよ

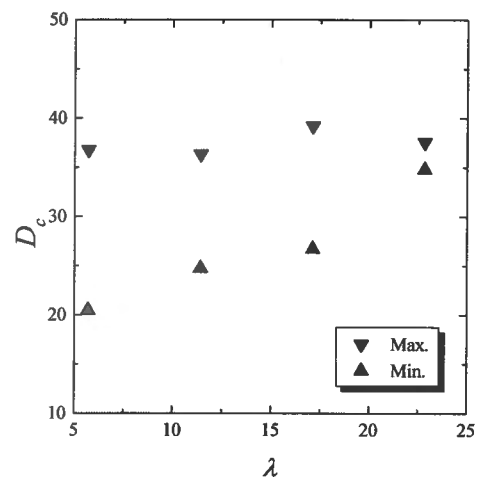


Fig. 5. Effect of initial perturbation scale on cell size.

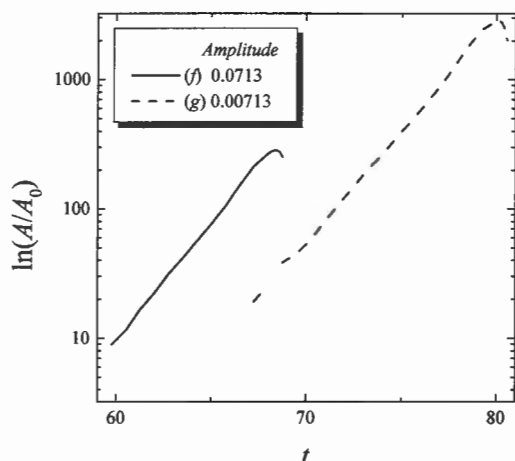


Fig. 6. Effect of initial perturbation amplitude on cellular structure.

らないことがわかる。また、 D_c の最小値は波長とともに増大しているように見える。

また、上流で課される微小擾乱の振幅を、予熱帯厚さの $1/10 \sim 1/100$ のオーダの範囲で変化させたときの擾乱の振幅の増幅率を Fig. 6 に示す。図より、擾乱の振幅の成長率は、極大値までは線形理論に従って指数関数的に増幅していくことがわかる。微小擾乱の振幅を Case (f) の $1/10$ とした Case (g) の場合、擾乱の振幅の同時刻での値および極大値は Case (f) のほぼ 10 倍であり、線形理論に従っているものと考えられる。また、振幅が増幅するタイミングは、Case (g) は Case (f) よりも、およそ 5 程度遅れているが、擾乱の成長率を示すグラフの傾きはほぼ等しい。したがって、擾乱の成長率は、初期に課される微小擾乱の振幅の大きさによらないことがわかる。

4.3. 微小擾乱を課す時間の影響

Case (a) と (f) の擾乱の振幅の増幅率を比較した結果を Fig. 7 に示す。図より各時刻における振幅の大きさは Case (a), すなわち計算領域上流で微小擾乱を連続的に課した場合が Case (f), すなわち短時間だけ課した場合の約 1.70 倍になっている。これは、上流で課された微小擾乱が、火炎帯に到達するまでの間の、減衰の仕方の違いによるものと考えられる。一方、擾乱の成長率を示すグラフの傾きはほぼ等しい。このことより、微小擾乱を連続的に課さずに短時間だけ課しても、擾乱が火炎まで到達して固有不安定を励起すれば、その後、擾乱の成長率は微小擾乱を課す時間にはよらないことがわかる。

5. 結言

二次元水素-空気予混合火炎の固有不安定について、DNS により調べた結果、以下の知見を得た。

1. 本研究で計算された火炎の不安定性による振舞いは、

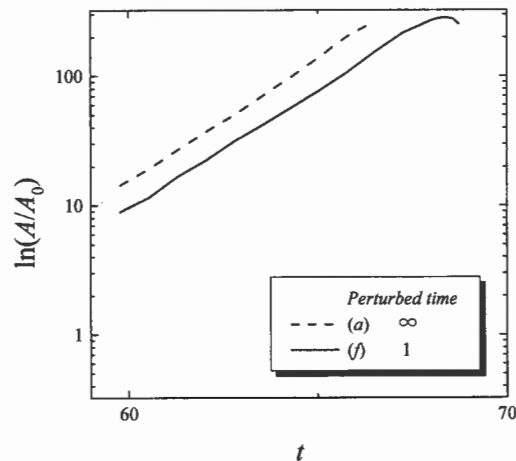


Fig. 7. Effect of perturbed time on cellular structure.

実験と定性的によく一致する。また、火炎のセル状構造におけるセル間隔の大きさおよびその傾向は、実験および他の計算とよく一致する。

2. 計算開始時に課す微小擾乱の波長を、高波数領域において変化させても、その後のセル状構造におけるセル間隔の大きさはほとんど変化せず、微小擾乱の波長による影響はないものと考えられる。
3. 計算開始時に課す微小擾乱の振幅を変化させても、その後の擾乱の振幅の極大値や成長率は変化せず、線形理論に従っているものと考えられる。
4. 微小擾乱を連続的に課すと、火炎帯到達までの擾乱の減衰過程の違いにより、短時間だけ課すよりも同時刻での擾乱の成長率は大きくなるが、固有不安定が励起されれば、擾乱の成長率そのものは微小擾乱を課す時間には影響されない。

謝辞

本研究を遂行するのに当たり、長岡技術科学大学 門脇敏 助教授、東北大学 滝田 謙一 助教授には、貴重な御示唆ならびに御助言を頂いた。心より感謝の意を表す。また東北大学 廣田 光智 助手とは熱心な御議論をさせて頂いた。ここに記して謝意を表す。

References

1. Markstein, G. H., *Non-steady Flame Propagation*, Pergamon Press, New York, 1964.
2. Sivashinsky, G. I., *Acta Astronautica* 6: 569-591 (1979).
3. Mitani, T., and Williams, F. A., *Combust. Flame* 39: 169-190 (1980).
4. Kadowaki, S., *Int. J. Heat Fluid Flow* 17: 557-566 (1996).

5. Ashurst, W. T., and Barr, P. K., *Combust. Sci. Technol.* 34: 227-256 (1983).
6. Chase, M. W., Jr., Davies, C. A., Downey, J. R., Jr., Frurip, D. J., McDonald, R. A., and Syverud, A. N., *JANAF Thermochemical Tables 3rd Edition, J. Phys. Chem. Ref. Data* 14, Suppl. 1, the American Chemical Society and the American Institute of Physics for the National Bureau of Standards, 1985.
7. Kee, R. J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., Coltrin, M. E., and Miller, J. A., *Sandia National Laboratories Report SAND86-8246* (1986).
8. Kee, R. J., Rupley, F. M., and Miller, J. A., *Sandia National Laboratories Report SAND89-8009* (1990).
9. Stahl, G., and Warnatz, J., *Combust. Flame* 85: 285-299 (1991).
10. Lele, S. K., *J. Comput. Phys.* 103: 16-42 (1992).
11. Poinot, T. J., and Lele, S. K., *J. Comput. Phys.* 101: 104-129 (1992).
12. Kobayashi, H., Ju, Y., Takita, K., and Masuya, G., *Proc. 36th Symp. (Japanese) on Combust.* (in Japanese) 1998, pp.43-45.
13. Egolfopoulos, F. N., and Law, C. K., *Proc. the Combust. Inst.* 23: 333-340 (1990).
14. Egolfopoulos, F. N., Zhu, D. L., and Law, C. K., *Proc. Combust. Inst.* 23: 471-478 (1990).
15. Vagelopoulos, C. M., Egolfopoulos, F. N., and Law, C. K., *Proc. Combust. Inst.* 25: 1341-1347 (1994).
16. Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Song, S., Gardiner, W. C., Jr., Lissianski, V. V., and Qin, Z., http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
17. Sivashinsky, G. I., *Annual Rev. Fluid Mech.* 15: 179-199 (1983).
18. Clanet, C., and Searby, G., *Phys. Rev. Letters* 80: 3867-3870 (1998).
19. Kadowaki, S., *Trans. JSME, Ser. B*, (in Japanese) 61: 362-367 (1995).