

■原著論文／ORIGINAL PAPER■

乱流予混合火炎における乱流強度と燃料種の影響

Effects of Turbulence Intensities and Fuel Species in Turbulent Premixed Flames

齋藤 敏彦*・店橋 護・宮内 敏雄

SAITO, Toshihiko*, TANAHASHI, Mamoru, and MIYAUCHI Toshio

東京工業大学大学院理工学研究科 〒152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1
Tokyo Institute of Technology, 2-12-1, Ookayama, Meguro, Tokyo 152-8552, Japan

2002年9月10日受付, 2002年10月28日受理 / Received 10 September 2002; Accepted 28 October 2002

Abstract : Direct numerical simulations of methane-air turbulent premixed flames propagating in two-dimensional homogeneous isotropic turbulence are conducted to investigate the effects of turbulence intensities and fuel species on the structure of turbulent premixed flames. Detailed kinetic mechanism including 49 reactive species and 279 elementary reactions is used to simulate $\text{CH}_4\text{-O}_2\text{-N}_2$ reaction in turbulence. DNS are conducted for the case of turbulence intensities of about 10, 20 and 30 times of the laminar burning velocity, and the results of DNS are compared with those of the hydrogen-air turbulent premixed flames with same turbulence intensity. At the same turbulence intensity, the enhancement ratio of the burning velocity of methane-air premixed flame is lower than that of hydrogen-air premixed flame. This low enhancement is caused by local flame structure in turbulence. In the case of hydrogen-air turbulent premixed flame, local heat release rate becomes higher than the maximum heat release rate of a laminar flame on the average, because local flame thickness decreases in turbulence and molecular diffusion of O_2 is enhanced. On the other hand, in the case of methane-air turbulent premixed flame, the local heat release rate decreases with the increase of the turbulence intensity and become lower than that of laminar flame on the whole. This decrease is mainly caused by H atom reactions in the preheat zone. In turbulence, the local flame thickness decreases due to the large strain rate at the flame front and H atom diffusion into the preheat zone is enhanced. The defection of H atom suppresses the reaction which has a large contribution on the total heat release rate.

Key Words : Direct Numerical Simulation, Turbulent Combustion, Premixed Flame, Detailed Kinetic Mechanism

1. 緒論

乱流予混合火炎は、ガスタービン燃焼器等の多くの燃焼器で用いられており、その詳細な構造の解明と高精度乱流燃焼モデルの構築は、高効率燃焼器の設計・開発において非常に重要である。従来、乱流予混合火炎の特性は、層流燃焼速度 (S_L) に対する乱流強度 (u'_{rms}) の比及び層流火炎厚さ (δ_L) に対する乱流場の特性長さ (積分長: l) の比を用いて分類可能であると考えられてきた。 u'_{rms}/S_L と l/δ_L の関係から、乱流予混合火炎の形態は wrinkled laminar flames, distributed reaction zone, thin reaction zone 等に分類されている[1][2][3][4]。wrinkled laminar flames の領域では、局所的な火炎要素の特性は層流火炎と同じであり、火炎面積の増大によって乱流燃焼速度が増加すると考えられている。こ

れに対して、distributed reaction zone の領域では局所的な火炎要素の特性は層流火炎とは全く異なっており、もはや火炎面と呼べる構造は存在しないと考えられている。しかし、実際に distributed reaction zone 等が存在するかどうかは検証されておらず、それらの詳細な構造も明らかにされていない。これは、 u'_{rms}/S_L と l/δ_L の関係を系統的に変化させて、局所的な火炎構造を計測することが困難なためである。

近年、計算機の高速・大容量化に伴い、詳細化学反応機構と輸送係数・物性値の温度依存性を考慮に入れた乱流燃焼の直接数値計算 (DNS) が可能となり、乱流中での火炎構造を詳細に検討することが可能となってきた。Baumら[5]は詳細化学反応機構を用いて水素・空気乱流予混合火炎の DNS を行い、局所火炎構造に対する化学反応機構の影響を明らかにすると共に、乱流強度や乱流の特性長さ等の乱流場の特性と火炎の局所構造との関係を明らかにしている。店橋らは、詳細化学反応機構を用いて水素・空気乱流予混合火炎の DNS を行い、局所火炎構造と化学種の拡

* Corresponding author. E-mail: tosaito@mes.titech.ac.jp

散係数との関係[6][7]や火炎面のフラクタル特性[6]などを明らかにするとともに、それらに対する当量比や予熱温度の影響[8][9]を明らかにした。また、乱流燃焼の DNS では比較的容易に u'_{rms}/S_L と l/δ_L の関係を変化させることが可能であるため、店橋ら[10][11]は u'_{rms}/S_L 及び l/δ_L を独立に変化させた高乱流強度の水素・空気乱流予混合火炎の DNS 結果から、 u'_{rms}/S_L と l/δ_L が燃焼速度や火炎構造に与える影響を明らかにしている。最近では、詳細化学反応機構を考慮に入れた水素・空気乱流予混合火炎の 3 次元 DNS が行われており、乱流中の微細渦が火炎構造に与える影響などが明らかにされている[12]。

実用的な燃焼器の多くは、メタンなどの炭化水素を燃料として用いている。炭化水素の拡散係数は水素に比べて著しく小さく、形成される反応帯の構造も水素を燃料とした場合とは大きく異なることが予測される。そのため、水素・空気乱流予混合火炎の結果をそのまま炭化水素を燃料とした乱流予混合火炎に適用することは困難であり、炭化水素を燃料とした乱流予混合火炎の DNS 結果等からそれらの火炎構造の詳細を明らかにすることが必要不可欠である。しかし、炭化水素を燃料とした場合、莫大な数の化学種と素反応を考慮に入れる必要があるため、炭化水素火炎の DNS は従来困難とされてきた。ところが、並列計算機などの発達により、最近では炭化水素を燃料とした DNS が可能となってきた。Echehki と Chen[13]は、4 段階の簡略化学反応機構を用いたメタン・空気乱流予混合火炎の DNS 結果を用いて、それらの局所火炎構造を明らかにしている。さらに、彼ら[14]は Cl Chemistry を含む詳細化学反応機構を用いてメタン・空気乱流予混合火炎の DNS を行い、既燃ガス中での未燃予混合気ポケットの生成機構を明らかにしている。店橋ら[15]は詳細化学反応機構を用いてメタン・空気乱流予混合火炎の DNS を行い、局所的な消炎機構や乱流中での NO_x 生成機構を明らかにした。しかし、乱流強度や積分長などの乱流特性の違いがメタン・空気乱流予混合火炎の局所構造に与える影響の詳細は未だ明らかにされておらず、燃料種が火炎構造に与える影響も解明されていない。また、最近では、プロパン燃料を対象とした DNS[16]についても報告されている。

本研究では、詳細化学反応機構 (49 化学種, 279 素反応) と物性値・輸送係数の温度依存性を考慮に入れたメタン・空気乱流予混合火炎の DNS を乱流強度の異なる複数の条件について行い、それらの結果と以前の水素・空気乱流予混合火炎の DNS 結果[10]を比較することで、乱流強度及び燃料種が火炎構造に与える影響を明らかにすることを目的としている。

2. 乱流予混合火炎の直接数値計算

2.1. 基礎方程式及び計算方法

本研究では、外力、Soret 効果、Dufour 効果、圧力勾配拡散及び放射熱流束が無視できるものと仮定して導かれる質量、運動量、エネルギー及び化学種の保存方程式と状態方

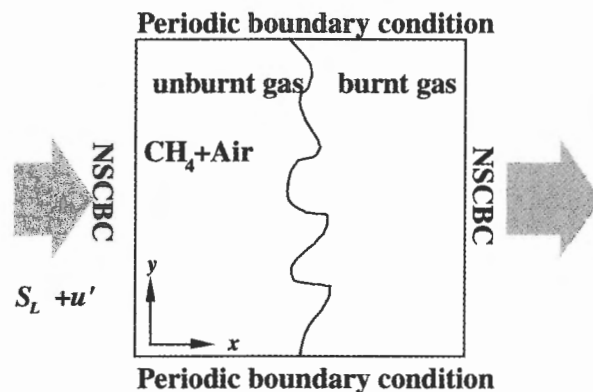


Fig. 1 Geometry of the flow field used in the present study.

程式を基礎方程式とした。基礎方程式の詳細については店橋らの以前の研究[7][8][10]を参照のこと。

本研究では、図 1 に示されるような二次元一様等方性乱流中を伝播するメタン・空気乱流予混合火炎を対象としており、化学反応機構としては 49 の化学種と 279 の素反応から構成される詳細化学反応機構 (GRI-Mech 2.11)[17]を用いた。反応速度と物性値及び輸送係数の温度依存性は Chemkin[18][19]を用いて与えた。ここで、Chemkin にはベクトル化と並列化が施されており、高速な演算が可能となっている。離散化は流れ方向 (x 方向) には 4 次精度中心差分法を、流れと垂直方向 (y 方向) にはスペクトル法を用いて行い、時間前進には 2 次精度 Adams-Bashforth 法を用いた。境界条件としては、 x 方向に NSCBC[20][21]を、 y 方向に周期境界条件を用いた。

流入境界における混合気としては 0.1 (MPa), 700 (K), 当量比 1.0 のメタンと空気の予混合気を与えた。流入速度条件 (u_{in}) は以下のようにして与えた。

$$u_{in}(y, t) = S_L + u'(y, t) \quad (1)$$

ここで、 u' は十分に発達した二次元一様等方性乱流の速度場である。また、次のように定義される層流燃焼速度は 1.75 (m/sec) であり、一次元層流予混合火炎の予備計算により決定した。

$$S_L = -\frac{1}{\rho_u Y_{\text{CH}_4, u}} \int w_{\text{CH}_4} dx \quad (2)$$

ここで、 ρ は密度を、 Y_{CH_4} 及び w_{CH_4} はそれぞれ CH_4 の質量分率と反応速度を示しており、下付添え字 u は未燃側の物理量を示している。また、以下のように定義される層流火炎厚さは 2.9×10^{-4} (m) である。

$$S_L = (T_b - T_u) / \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right)_{\max} \quad (3)$$

ここで、 T は温度を、下付添え字 b は既燃側の物理量を示している。一様等方性乱流の速度場としては、非反応性一

Table I. Numerical parameters of direct numerical simulations of turbulent premixed flames.

Case	u'_{rms}/S_L	l/δ_L	Re_l	Re_λ
CH ₄ -1	9.25	5.03	350	116
CH ₄ -2	18.89	4.95	705	225
CH ₄ -3	28.92	4.93	1074	334
H ₂ -1	10.0	4.88	635	203
H ₂ -2	20.0	4.84	1303	401
H ₂ -3	30.0	4.82	1971	595

様等方性乱流の DNS 結果を用いた。ただし、初期条件の影響が無くなり十分に発達した 1.5 eddy turnover time ($\tau = l_0/u'_{rms,0}$) における結果を用いている。ここで、 l_0 は初期積分長、 $u'_{rms,0}$ は初期二乗平均変動速度である。二方向に周期境界条件のもとで計算された乱流場を、Taylor の仮説と位相シフト法を用いて初期及び流入乱流場に変換した。

2.2. 計算条件

本研究では、燃料種が火炎構造に与える影響を検討するために、店橋らによって以前行われた水素・空気乱流予混合火炎の DNS[10]と同様な u'_{rms}/S_L 及び l/δ_L となる初期乱流場を設定して、メタン・空気乱流予混合火炎の DNS を行った。表 1 は計算に用いた乱流場の条件を示している。乱流場の積分長と層流火炎厚さの比を約 5 に固定し、層流燃焼速度と乱流強度の比が約 10, 20 及び 30 の三つの条件について計算を行った。表中の Re_l は積分長に基づくレイノルズ数であり、 Re_λ はテイラー・マイクロスケールに基づくレイノルズ数である。また、1.05 (cm) × 1.05 (cm) の領域を対象として 1281 × 768 点の格子点を用いて計算を行った。比較のために、表 1 には以前の水素・空気乱流予混合火炎の計算条件 [10]を示した。この場合の流入予混合気は N₂ で希釈した水素と空気の予混合気であり、当量比 1.0, 298.15 (K), 0.1 (MPa), 窒素と酸素のモル分率比は 9.37 である。この水素と空気の予混合気の層流燃焼速度は 0.462 (m/s) であり、2.0 (cm) × 2.0 (cm) の計算領域を対象として最大で 1537 × 768 の格子点がい用いられている。

本研究では、火炎構造に対する乱流強度及び燃料種の影響をより明確に議論できるように、大規模スケールの運動がほぼ相似な乱流場を一樣等方性乱流の予備計算より求め、それらを初期乱流場として与えた。すなわち、一樣等方性乱流の予備計算の初期エネルギー・スペクトル分布に同じ関数を用い、同一の乱数を用いて各波数成分の位相を与えた。このようにして作成した初期乱流場から一樣等方性乱流の予備計算を行うことにより、ほぼ相似な乱流場を得ることができる。

3. 乱流予混合火炎の構造

3.1. 火炎構造

図 2 は次のように定義される乱流燃焼速度の時間変化を

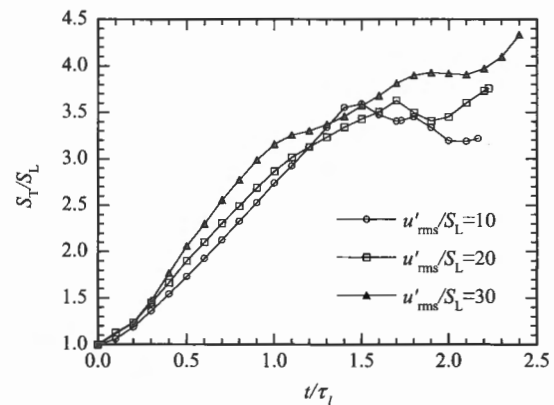


Fig. 2 Developments of turbulent burning velocity.

示している。

$$S_T = -\frac{1}{\rho_u Y_{CH_4,u} L_y} \iint w_{CH_4} dx dy \quad (4)$$

ここで、 L_y は y 方向の計算領域長を示している。また、時間 t は初期条件として用いた乱流場の eddy turnover time (τ) を用いて無次元化されている。 $t < 1.5\tau$ までは、時間の経過と共に乱流燃焼速度は単調に増加しているが、 $u'_{rms}/S_L \approx 10$ の場合、 $t = 1.5\tau$ でピークを示した後緩やかな減少に転じ、 $t = 2.0\tau$ において $S_T/S_L \approx 3.2$ となる。一方、 $u'_{rms}/S_L \approx 20, 30$ の場合は本計算の計算時間内では燃焼速度は増加し続けているが、 $t = 2.0\tau$ においてそれぞれ $S_T/S_L = 3.5, 3.9$ を示す。この値は、同時刻における水素・空気乱流予混合火炎[10]の場合の値 ($u'_{rms}/S_L = 10, 20, 30$ について、それぞれ $S_T/S_L = 5.0, 7.1, 6.4$) よりも小さな値である。時刻によって大小が逆転する場合はあるが、十分時間が経過すると乱流強度が高いほど燃焼速度は大きくなる。本研究では、 $t = 2.0\tau$ の計算結果を用いて、乱流予混合火炎の諸特性に対する乱流強度の影響を検討する。

図 3 は、 $t = 2.0\tau$ における渦度、熱発生率、温度及び密度の分布を示している。ここで、渦度 (ω_z) の等値線は実線が正の値を、破線が負の値を示している。また、等値線の間隔は、 $u'_{rms}/S_L \approx 10$ の場合 $\Delta\omega = 25000$ (1/s), $u'_{rms}/S_L \approx 20$ の場合 $\Delta\omega = 50000$ (1/s), $u'_{rms}/S_L \approx 30$ の場合は $\Delta\omega = 75000$ (1/s) である。熱発生率、温度及び密度の分布は、白が最小値に、黒が最大値に対応する。全ての条件について、未燃側に存在する渦は火炎面を通過する際に急速に減衰しているが、一部の渦は既燃側深くまで侵入し火炎面を大きく湾曲させている。 $u'_{rms}/S_L \approx 10$ の場合、火炎面は大きく湾曲しているが、小さなスケールでは比較的なめらかで連続的に変化している。 u'_{rms}/S_L の増加と共に、火炎面は火炎面付近に存在する強い渦に巻き込まれるようになり、より複雑な形状を示している。特に、 $u'_{rms}/S_L \approx 30$ の場合、火炎面後方に火炎が幾重にも折り畳まれた複雑な構造が形成されている。このように u'_{rms}/S_L の増加と共に局所的な火炎面の複

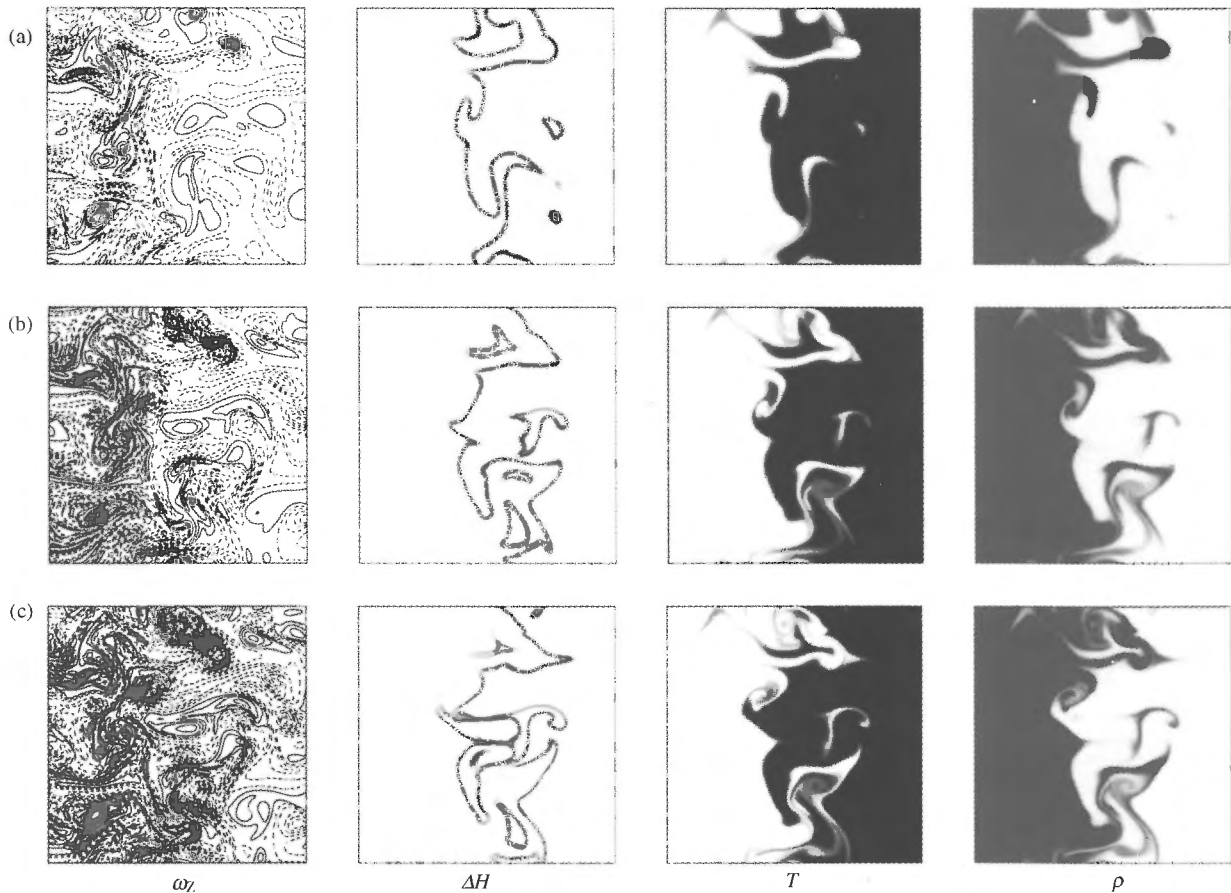


Fig. 3 Distributions of vorticity, heat release rate, temperature and density at $t=2.0\tau_i$. (a): $u'_{rms}/S_L \approx 10$, (b): $u'_{rms}/S_L \approx 20$, (c): $u'_{rms}/S_L \approx 30$.

雑さは増すが、時刻 $t=2.0\tau_i$ において火炎面が存在している火炎帯の幅は u'_{rms}/S_L に大きく依存していない。また、全ての条件で既燃側に分離された未燃予混合気塊が形成されており、 u'_{rms}/S_L が大きいほど未燃予混合気塊の形状は複雑になっている。さらに、 $u'_{rms}/S_L \approx 30$ の場合には火炎が大きく湾曲した部分で熱発生率が急激に減少し、局所的な消炎に至っている部分が多く観察される。これは火炎面に作用する大きな歪み速度によって引き起こされている[15]。

3.2. 火炎要素の統計的性質

局所的な火炎構造に対する乱流強度と燃料種の影響を明らかにするために、DNS 結果から局所的な火炎要素を抽出し、それらの統計的性質を検討する。本研究では温度勾配が極大となる位置 $(\partial T / \partial n)_{max}$ を火炎面と定義した。ここで、 n は火炎面に対して法線方向の単位ベクトルである。

図 4 は、局所熱発生率の確率密度関数を示している。ここで、局所熱発生率は抽出された火炎要素内の最大熱発生率であり、層流火炎の熱発生率の最大値 (ΔH_L) を用いて無次元化されている。以下 * を付した物理量は層流燃焼速度、層流火炎厚さ及び層流火炎の最大熱発生率を用いて無次元化されている。水素・空気乱流予混合火炎の場合[10]、局所熱発生率の最頻値は、全ての条件で層流火炎の最大熱発生率よりも大きな値を示した。しかし、図 4 からわかるようにメタン・空気乱流予混合火炎では、局所熱発生率の最

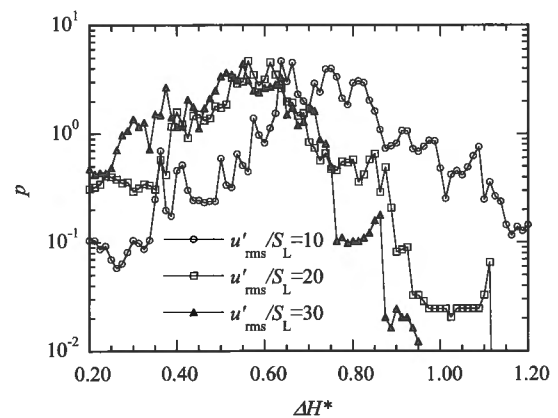
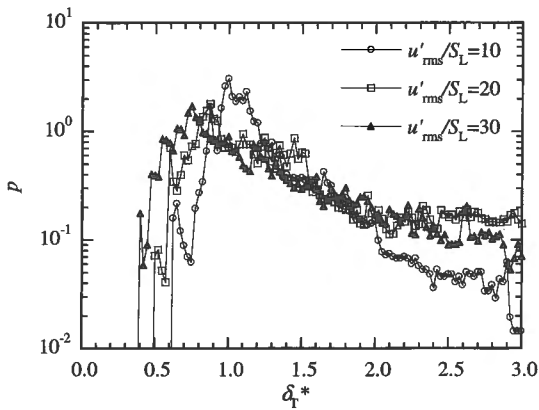
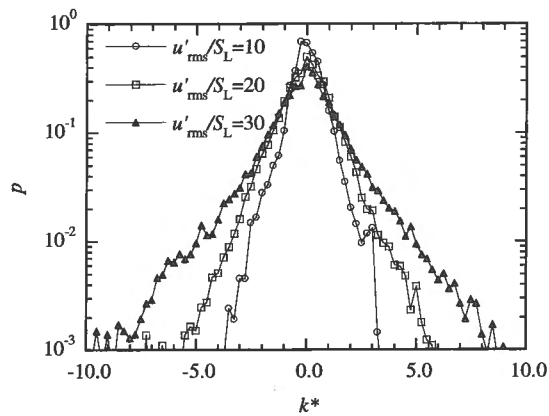


Fig. 4 Probability density functions of local heat release rate.

頻値は層流火炎よりも小さな値を示している。 $u'_{rms}/S_L \approx 30$ で比較すれば、水素・空気乱流火炎では局所熱発生率の最頻値は層流火炎の最大熱発生率の 1.2 倍程度と大きな値を示すのに対して、メタン・空気乱流予混合火炎の場合は約 0.55 倍と非常に小さな値となる。また、水素・空気乱流予混合火炎の場合、 u'_{rms}/S_L の増加とともに、局所熱発生率の分散が大きくなり、極めて小さな熱発生率を示す火炎要素と層流火炎の数倍程度の非常に大きな熱発生率を示す火炎要素の存在確率が共に増加する。しかし、メタン・空気乱

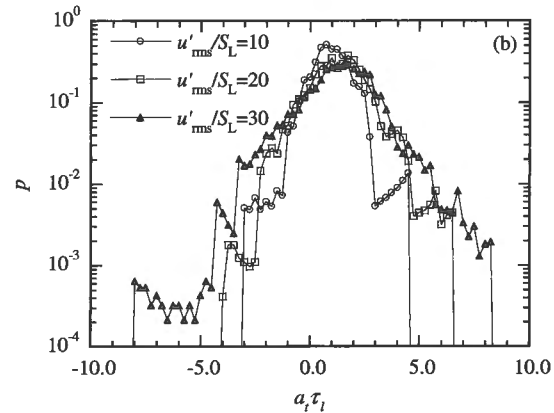
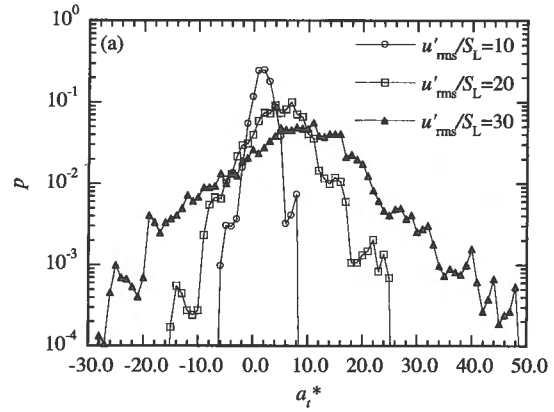

 Fig. 5 Probability density functions of the flame thickness of the local flame element in turbulence at $t=2.0\tau_t$.

 Fig. 6 Probability density functions of curvature of flame front in turbulence at $t=2.0\tau_t$.

流予混合火炎の場合, 局所熱発生率の最頻値だけでなく, u'_{rms}/S_L の増加とともにその最大値も低下している. $u'_{rms}/S_L \approx 30$ の場合, 最大値は層流火炎の最大熱発生率の 0.95 倍程度である. このように, 高乱流強度のメタン・空気乱流予混合火炎では火炎全体が, 層流の場合よりも小さな熱発生率を有している. 同じ u'_{rms}/S_L の場合, 火炎長さは燃料種に大きく依存しないため, この火炎全体の熱発生率の低下が前述の水素・空気乱流予混合火炎に比べてメタン・空気乱流予混合火炎の乱流燃焼速度が著しく小さな値を示す原因と考えられる.

図 5 は次のように定義される局所火炎厚さ (δ_t) の確率密度関数を示している.

$$\delta_t = (T_b - T_u) / \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{\max} \quad (5)$$

図中の火炎厚さは層流火炎の値を用いて無次元化されている. 乱流中の火炎厚さの最頻値は $u'_{rms}/S_L \approx 10$ の場合では層流火炎厚さ程度であるが, 水素・空気乱流予混合火炎の場合と同様に乱流強度が増加するにつれて火炎厚さの最頻値は小さくなり, $u'_{rms}/S_L \approx 30$ の場合では層流火炎の 0.75 倍程度まで低下している. すなわち, 乱流強度が高い場合


 Fig. 7 Probability density functions of the tangential strain rate at the flame front in turbulence at $t=2.0\tau_t$. (a): the tangential strain rate is normalized by the flame time, (b): is normalized by the eddy turnover time.

ほど, 薄い火炎要素が形成されるようになる. さらに, 火炎厚さの最小値も u'_{rms}/S_L の増加と共に小さくなり, $u'_{rms}/S_L \approx 30$ の場合には層流火炎の半分以下の火炎厚さを持つ非常に薄い火炎要素が形成されている.

図 6 は火炎面の曲率 (k^*) の確率密度関数を示している. ここで, 曲率は既燃側に凸を正とした. 水素・空気乱流予混合火炎の場合と同様に全ての条件で曲率はほぼ零でピークを示している. また, u'_{rms}/S_L の増加と共に曲率の大きな火炎要素の存在確率が増加し, 曲率分布の分散が大きくなっている.

図 7(a) は, 乱流運動により火炎面の接線方向に作用する歪み速度 (a_t^*) の確率密度関数を示している. 接線方向歪み速度は次のように定義される.

$$a_t = \mathbf{t} \cdot \nabla \mathbf{u}, \quad (6)$$

ここで, \mathbf{u} は速度ベクトルを示しており, \mathbf{t} は火炎面に対して接線方向の単位ベクトルである. 接線方向歪み速度は伸張を正とし, 層流火炎厚さと層流燃焼速度を用いて無次元化されている. 火炎面に作用する接線方向歪み速度の確率密度関数は水素・空気乱流予混合火炎と同様に正の値で

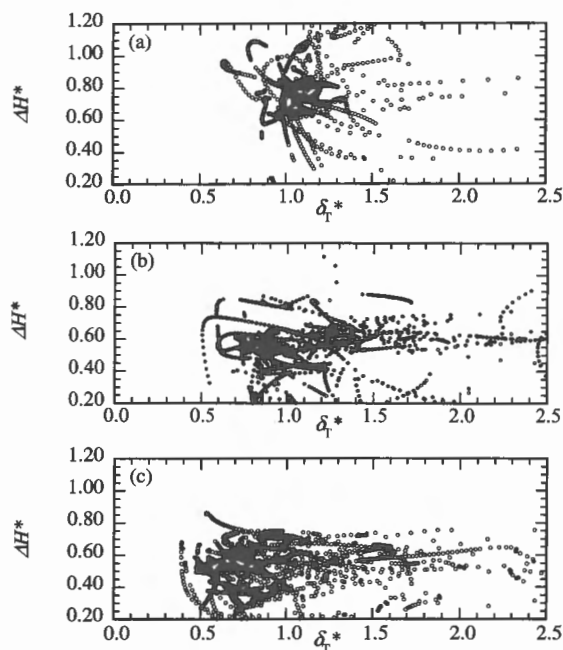


Fig. 8 Scatter plots of local flame thickness and the local heat release rate at $t=2.0\tau_L$. (a): $u'_{rms}/S_L \doteq 10$, (b): $u'_{rms}/S_L \doteq 20$, (c): $u'_{rms}/S_L \doteq 30$.

ピークを示しており、平均的に火炎面が接線方向に伸張を受けていることがわかる。また、 u'_{rms}/S_L の増加と共に接線方向の歪み速度の最頻値とその分散は大きくなる。図 7(b) は、接線方向歪み速度を乱流強度と積分長で無次元化した場合の確率密度関数を示している。水素・空気乱流予混合火炎の場合と同様に乱流強度が異なる場合でも、接線方向歪み速度の最頻値は乱流場の時間スケールを用いて整理することができ、ほぼ $a_t=1/\tau_L$ でピークを示すことがわかる。このことから、火炎に作用する歪み速度は燃料種によらず乱流場の特性によって決定されることができると考えることができる。

図 8 は局所熱発生率と火炎厚さの関係を示している。水素・空気乱流予混合火炎の場合、薄い火炎要素ほど大きな熱発生率を示し、乱流強度の増加とともに局所的な消炎により薄い火炎厚さで小さな熱発生率を示す火炎要素の存在確率が高くなる。本研究で対象としたメタン・空気乱流予混合火炎の場合は、火炎厚さと熱発生率の間には明確な相関は観察されない。また、乱流強度の増加に伴い、薄い火炎要素において熱発生率の分散が大きくなっている。

図 9 は火炎厚さと歪み速度の関係を示している。水素・空気乱流予混合火炎と同様に、乱流中での火炎要素の厚さは火炎面に作用する接線方向歪み速度と強い相関があり、薄い火炎要素ほど接線方向に強い伸張を受けている。ただし、 u'_{rms}/S_L が大きいほど、同じ大きさの接線方向歪み速度が作用している火炎要素であっても火炎厚さの分散は大きくなる。また、水素・空気乱流予混合火炎では、伸張を受けた火炎要素ほど大きな熱発生率を示す傾向が観察されたが、メタン・空気乱流予混合火炎では接線方向歪み速度と

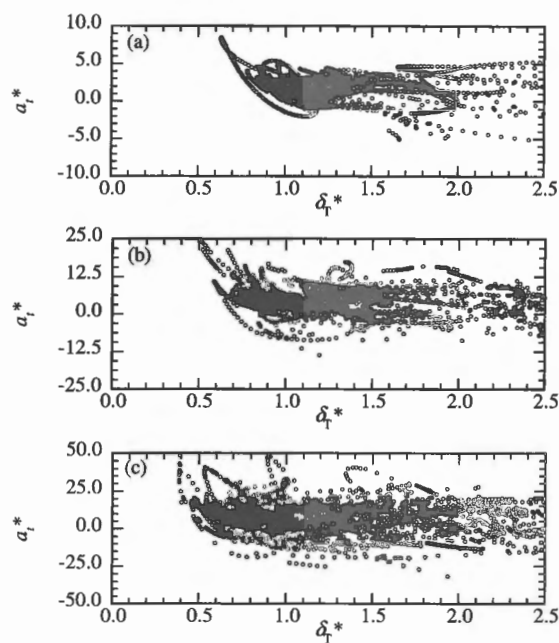


Fig. 9 Scatter plots of tangential strain rate and the local flame thickness at $t=2.0\tau_L$. (a): $u'_{rms}/S_L \doteq 10$, (b): $u'_{rms}/S_L \doteq 20$, (c): $u'_{rms}/S_L \doteq 30$.

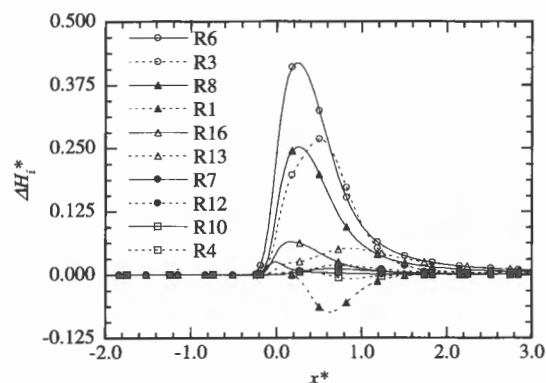


Fig. 10 Contributions of elementary reactions to heat release rates in hydrogen-air laminar premixed flame.

熱発生率の間には明確な相関は観察されなかった。このことは、歪みを受けた予混合火炎を対象とした実験結果[22]の傾向とほぼ一致している。さらに、水素・空気乱流予混合火炎と同様に曲率と局所熱発生率の間にも明確な相関は存在しない。

3.3. 乱流運動が素反応に与える影響

前述のように、乱流強度の増加に対して水素・空気乱流予混合火炎とメタン・空気乱流予混合火炎では熱発生率の変化が大きく異なる。本節では、化学反応機構に注目して乱流強度に対する熱発生率変化の燃料種依存性を検討する。

3.3.1. 水素・空気乱流予混合火炎の場合

図 10 は水素・空気層流予混合火炎における各素反応の熱発生率への寄与を示している。ここで、各素反応による

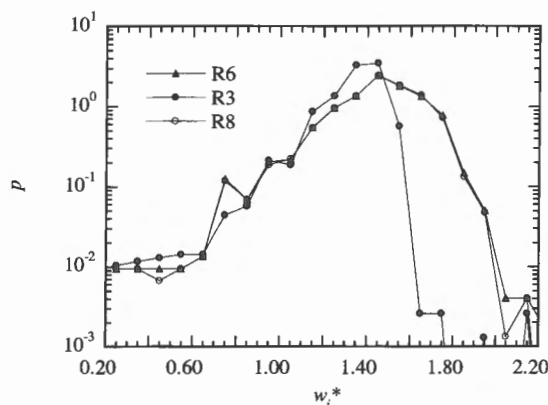
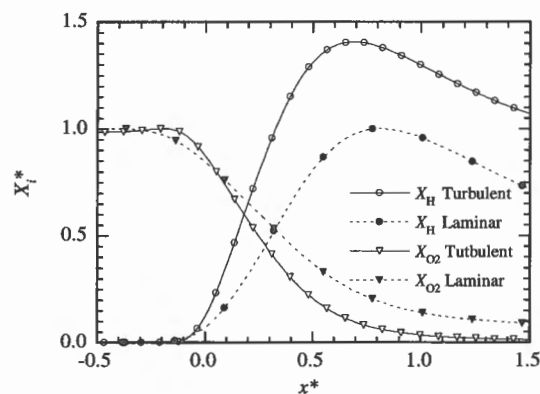
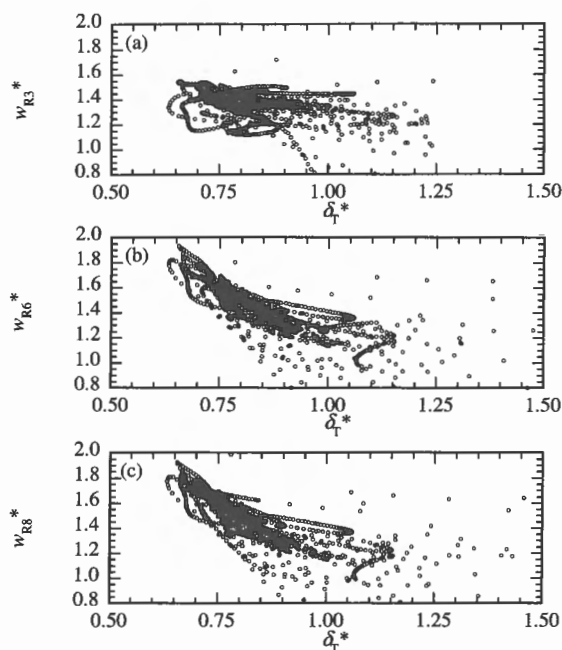
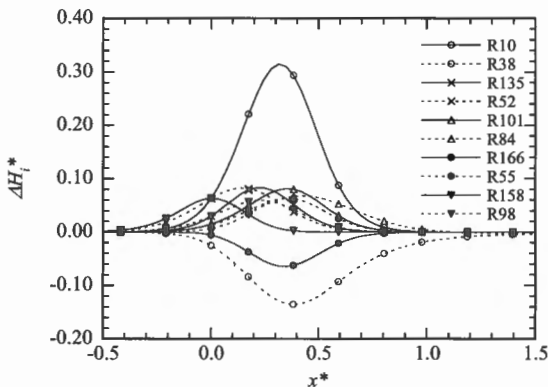
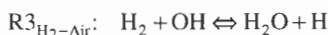
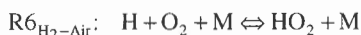

 Fig. 11 Probability density functions of local maximum reaction rates in hydrogen-air turbulent premixed flame ($u'_{rms}/S_L=10$).

 Fig. 13 Distributions of H atom and O₂ mole fractions in the flame elements in hydrogen-air turbulent premixed flame ($u'_{rms}/S_L=10$).

 Fig. 12 Scatter plots of reaction rate and local flame thickness at the flame front in hydrogen-air turbulent premixed flame ($u'_{rms}/S_L=10$). (a):R3, (b):R6, (c):R8.


Fig. 14 Contributions of elementary reactions to heat release rate in methane-air laminar premixed flame.

熱発生率 ΔH_i^* は層流火炎の最大熱発生率で無次元化されており, 火炎面 $(\partial T / \partial n)_{\max}$ からの位置 x^* は層流火炎厚さで無次元化されている. 水素・空気乱流予混合火炎の場合, 発熱は主として以下の素反応によって生じている[6].



このような素反応に対する乱流運動の影響を明らかにするために, $u'_{rms}/S_L = 10$ の条件において各火炎要素における素反応の反応速度の最大値を求め, その統計的特性を検討した. 図 11 は各火炎要素における素反応の最大値の確率密度関数を示している. ここで, 反応速度は層流火炎の最

大値で無次元化されている. 素反応 $R6_{H_2-Air}$, $R8_{H_2-Air}$ 及び $R3_{H_2-Air}$ はそれぞれ層流火炎の約 1.41 倍でピークを示している. $R6_{H_2-Air}$ と $R8_{H_2-Air}$ の確率密度関数は非常に良く一致しており, $R3_{H_2-Air}$ よりもこれらの反応速度が大きな値を示す確率は高い. 図 12 は火炎厚さと反応速度の関係を示している. 火炎厚さと反応速度との間には相関があり, 薄い火炎要素ほど大きな反応速度を示している $R6_{H_2-Air}$ と $R8_{H_2-Air}$ の分布はほぼ一致しており, $R3_{H_2-Air}$ に比べて火炎厚さの変化に敏感である.

図 13 は $u'_{rms}/S_L=10$ の乱流予混合火炎における典型的な火炎要素の H 原子と O₂ のモル分率分布を示している. 比較のために層流火炎の値を点線で示した. ここで, H 原子と O₂ のモル分率はそれぞれ層流火炎のモル分率の最大値を用いて無次元化されている. H 原子のモル分率は層流火炎の約 1.4 倍もの大きな値を示し, 火炎面付近に H 原子が十分に存在していることがわかる. また, 前述のように, 乱流火炎では, 火炎厚さが層流火炎よりも薄くなるため O₂ の濃度勾配は急峻となっている. そのため, 拡散による O₂ の供給が層流火炎よりも大きくなると考えられる. これらの十分な H 原子と O₂ により, $R6_{H_2-Air}$ の反応は層流火炎の場合より促進されるようになる. さらに, $R6_{H_2-Air}$ の反応により生成される HO₂ と潤沢に存在す

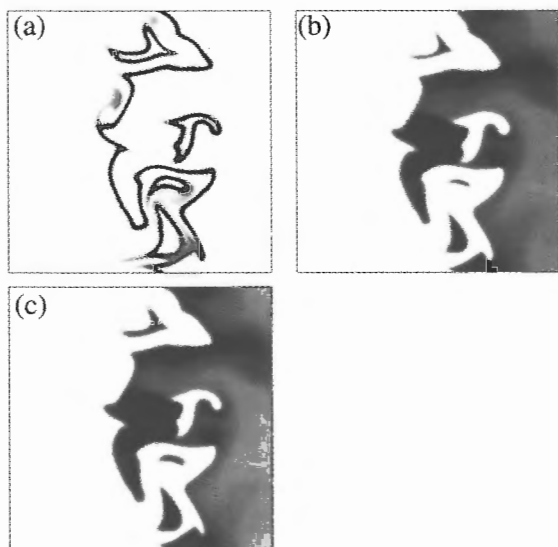


Fig. 15 Distributions of X_{CH_3} (a), X_O (b), and X_H (c) in methane-air turbulent premixed flame ($u'_{rms}/S_L \approx 20$).

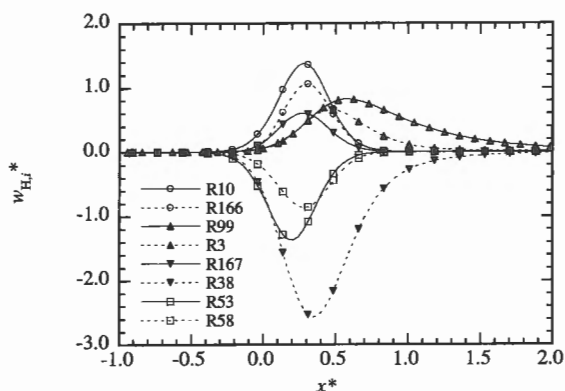


Fig. 16 Contributions of elementary reactions to H atom reaction in methane-air laminar premixed flame.

る H 原子との反応により R_{H_2-Air} を介して OH が生成される。この OH と未燃側から供給される H_2 から、 R_{H_2-Air} 反応により H 原子が生成され、この H 原子を用いて再び R_{H_2-Air} の反応が繰り返される。このように、水素・空気乱流予混合火炎では火炎厚さの薄い火炎要素で熱発生率に大きく寄与する素反応が促進されるため、層流火炎よりも大きな熱発生率を示す。

3.3.2. メタン・空気乱流予混合火炎の場合

図 14 は、メタン・空気層流予混合火炎の熱発生率に対する各素反応の寄与を示している。ここで、 x^* は火炎面からの距離を示し、層流火炎厚さで無次元化されている。水素・空気予混合火炎と同様に、素反応の熱発生率への寄与は層流火炎の最大熱発生率を用いて無次元化されている。ただし、図 14 には熱発生率への寄与の大きい主要な素反応のみを示した。メタン・空気層流予混合火炎の場合、次に示す素反応による熱生成が最も大きいことがわかる。

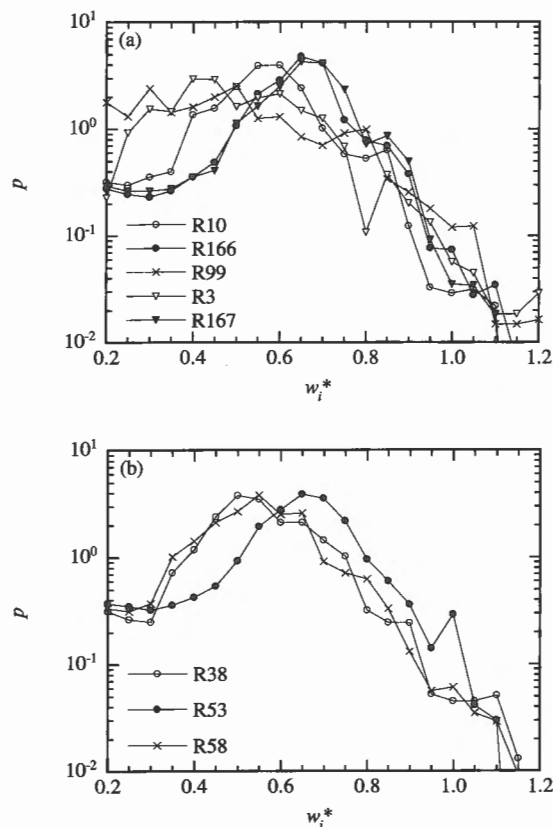


Fig. 17 Probability density functions of local maximum reaction rates in methane-air turbulent premixed flame ($u'_{rms}/S_L \approx 20$). (a): H atom production process, (b): H atom consumption process

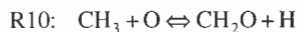
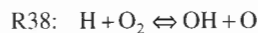


図 15(a) と (b) は、 $u'_{rms}/S_L \approx 20$ のメタン・空気乱流予混合火炎における CH_3 と O 原子のモル分率分布を示している。ここで、モル分率分布は、層流火炎の最大値を用いてそれぞれ無次元化されており、黒色が最大値、白色が最小値を示している。 CH_3 の濃度は火炎面付近でピークを示しており、層流の場合と比べてわずかに低い値を示している。これに対して、O 原子の濃度は局所的に高い値を示すものの全体的に層流火炎よりも低い値を示している。そのため、R10 の反応は主に O 原子によって律速されていると考えられる。この O 原子は、主に連鎖分岐反応である



によって生成される。図 15(c) は H 原子のモル分率分布を示している。H 原子の分布は O 原子の分布と非常に良く一致している。 O_2 は火炎面において未燃側から拡散によって潤沢に供給されていることから、H 原子が R38 の素反応を通して O 原子の生成に大きな影響を与えていると考えられる。そこで、H 原子の生成消費反応に注目して乱流運動が熱発生率に与える影響を検討する。

図 16 は、層流火炎における H 原子の反応速度に対する

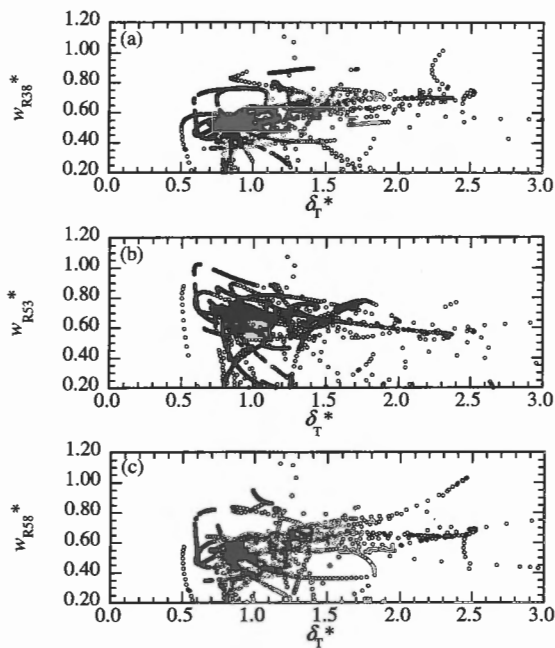
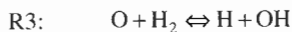
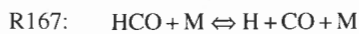
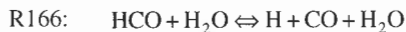


Fig. 18 Scatter plots of reaction rate and local flame thickness in methane-air turbulent premixed flame ($u'_{rms}/S_L \approx 20$). (a):R38, (b):R53, (c):R58

各素反応の寄与を主要な素反応について示したものである。生成反応では R10 が、消費反応では R38 が最も寄与が大きい。図 17(a) と (b) はメタン・空気乱流予混合火炎 ($u'_{rms}/S_L \approx 20$) の火炎要素において H 原子の生成及び消費に寄与する主要な素反応の反応速度の確率密度関数を示している。ここで、各素反応の反応速度 w_i^* はそれぞれ層流火炎の最大値を用いて無次元化されている。生成反応では、すべての素反応の反応速度の最頻値が層流火炎の 0.65 倍以下の値を示しており、層流火炎に比べて著しく減少している。特に、



の反応速度の低下は著しく、層流火炎の半分以下となっている。HCO の分解反応である



の反応速度は比較的減少幅が小さく、それらの最頻値は層流火炎の 0.65 倍程度である。H 原子の生成速度に最も寄与する R10 の反応速度の最頻値は、層流火炎の 0.6 倍まで低下している。H 原子の消費反応に関しては、R38 と次の R58 の反応速度が低下しており、その最頻値は層流火炎の 0.55 倍程度である。

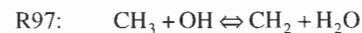


これに対して、



の反応速度は層流火炎の 0.65 倍程度でピークを示しており、R38 の反応に比べてその減少幅は小さい。

図 18 は H 原子の消費反応と局所火炎厚さの関係を示している。局所火炎厚さと R38 及び R58 との間には相関があり、火炎厚さが厚いほど反応速度が高く、火炎厚さが薄いほど低くなる傾向にある。これに対して、R53 の反応は、火炎厚さが薄くなるほど反応速度が増加し、R38 と R58 とは逆の傾向を示している。つまり、火炎厚さが薄くなるにつれて、H 原子が消費される反応が R38 から R53 へ変化する。R53 の反応は火炎面前縁の予熱帯における CH_4 の分解反応である。薄い火炎要素における R53 による H 原子の消費反応の促進は、火炎厚さの低下によって H 原子の勾配が増加し、分子拡散による予熱帯への H 原子供給量が増加したことが原因と考えられる。また、同様な機構により、OH ラジカルも火炎面に供給されるため、R53 により生成された CH_3 により、次の反応が促進される。



この反応も R53 と同様に薄い火炎要素ほど大きな反応速度を示す傾向にある。以上のような、R53 を経て R97 へと至る反応では、R10 を経て R38 へ至るような反応とは異なり H 原子の放出がないため、R38 による O 原子生成量が減少する。その結果、発熱量の大きな R10 の反応が抑えられ、熱発生率は低下する。

4. 結論

本研究では、乱流予混合火炎の火炎構造に対する乱流強度及び燃料種の影響を明らかにするために、メタン・空気乱流予混合火炎の直接数値計算を行い、以下の結論を得た。

- (1) メタン・空気乱流予混合火炎の乱流燃焼速度は乱流強度とともに増加するが、 S_T/S_L の値は同じ u'_{rms}/S_L の水素・空気乱流予混合火炎よりも著しく小さな値を示す。
- (2) 水素・空気乱流予混合火炎の場合、局所熱発生率の最頻値は層流火炎の最大熱発生率よりも大きな値を示すが、メタン・空気乱流予混合火炎の場合、局所熱発生率の最頻値は層流火炎の最大熱発生率よりも小さな値を示す。また、メタン・空気乱流予混合火炎の場合、局所熱発生率の最大値は乱流強度の増加とともに減少し、火炎全体が層流火炎よりも小さな熱発生率を示すようになる。
- (3) 乱流強度の増加と共に、火炎面に作用する強い歪み速度により局所火炎厚さは薄くなる。水素・空気乱流予混合火炎では、濃度勾配の増加による O_2 の拡散速度の増大により熱発生率への寄与の大きな素反応が促進され、層流火炎よりも高い熱発生率を示す火炎要素の存在する確率が高

くなる。これに対して、メタン・空気乱流予混合火炎では H 原子の予熱帯への拡散により、H 原子の消費反応における $R53: CH_4 + H \rightleftharpoons CH_3 + H_2$ の寄与が大きくなり、連鎖分岐反応で生成される O 原子濃度が低くなる。そのため、熱発生率への寄与の大きな $R10: CH_3 + O \rightleftharpoons CH_2O + H$ が抑制され、火炎全体で熱発生率が層流火炎の場合よりも低下する。

謝辞

本研究の一部は科学研究費基盤研究 (A) (No.12305015) により行われたものである。ここに記して謝意を表す。

References

- Williams, F. A., *Combustion Theory*, 2nd Ed, Benjamin Cummings, 1985.
- Poinsot, T. J., Veynante, D. and Candel, S., *Proc. Combust. Inst.* 23: 613-619 (1990).
- Borghi, R., *Recent Advances in Aeronautical Science* (Bruno, C. and Caseci, C. eds.), Pergamon, 1984.
- Peters, N., *J. Fluid Mech.* 384: 107-132 (1999).
- Baum, M., Poinsot, T. J., Haworth, D. C. and Darabiha, N., *J. Fluid Mech.* 281: 1-32 (1994).
- Miyauchi, T., Tanahashi, M., Imamura, Y. and Nada, Y., *Proc. 1st Asia-Pacific Conf. Combust.*, 1997, pp.278-281.
- Tanahashi, M., Miyauchi, T., Nada, Y. and Imamura, Y., *JSME Trans. B.* (in Japanese) 64: 2662-2668 (1998).
- Tanahashi, M., Miyauchi, T. and Nada, Y., *Nensho no kagaku to gisyutsu* (in Japanese) 6 suppl.: 13-22 (1999).
- Miyauchi, T., Tanahashi, M. and Nada, Y., *Proc. 34th National Heat. Trans. Symp. Japan* (in Japanese) 1997, pp.583-584.
- Tanahashi, M., Yu, Y. and Miyauchi, T., *JSME Trans. B* (in Japanese) 67: 536-543 (2001).
- Tanahashi, M., Yu, Y. and Miyauchi, T., *Thermal Sci. Eng.* (in Japanese) 9 (1): 39-48 (2001).
- Tanahashi, M., Fujimura, M. and Miyauchi, T., *Proc. Combust. Inst.* 28: 529-535 (2000).
- Echekki, T. and Chen, J. H., *Combust. Flame* 106: 184-202 (1996).
- Chen, J. H., Echekki, T. and Kollmann, W., *Combust. Flame* 116: 15-48 (1998).
- Tanahashi, M., Miyauchi, T., Saito, T. and Shimamura, M., *Proc. 2nd Asia-Pacific Conf. Combust.*, 1999, pp.500-503.
- Haworth, D., Blint, R., Poinsot, T. and Cuenot, B., *Combust. Flame* 121: 395-417 (2000).
- http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- Kee, R. J., Rupley, F. M. and Miller, J. A., *Sandia Report*, SAND89-8009B (1989).
- Kee, R. J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., Coltrin, M. E. and Miller, J. A., *Sandia Report*, SAND86-8246 (1986).
- Poinsot, T. J. and Lele, S. K., *J. Comput. Phys.* 101: 104-129 (1992).
- Baum, M., Poinsot, T. and Thevenin, D., *J. Comput. Phys.* 116: 247-261 (1994).
- Wu, C. K., Law, C. K., *Proc. Combust. Inst.* 20: 1941-1949 (1984).