

■原著論文 / ORIGINAL PAPER ■

流体力学的効果と拡散・熱的效果による予混合火炎の不安定挙動

Unstable Behavior of Premixed Flames Generated by Hydrodynamic and Diffusive-Thermal Effects

門脇 敏^{1*}・益子 敬幸²・小林 秀昭³KADOWAKI, Satoshi^{1*}, MASHIKO, Takayuki², and KOBAYASHI, Hideaki³¹ 長岡技術科学大学機械系 〒940-2188 長岡市上富岡町1603-1

Department of Mechanical Engineering, Nagaoka University of Technology, Kamitomioka, Nagaoka 940-2188, Japan

² 長岡技術科学大学大学院工学研究科 〒940-2188 長岡市上富岡町1603-1

Graduate School of Engineering, Nagaoka University of Technology, Kamitomioka, Nagaoka 940-2188, Japan

³ 東北大学流体科学研究所 〒980-8577 仙台市青葉区片平2-1-1

Institute of Fluid Science, Tohoku University, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai 980-8577, Japan

2003年3月13日受付; 2003年6月17日受理 / Received 13 March 2003; Accepted 17 June 2003

Abstract : Unstable behavior of premixed flames generated by hydrodynamic and diffusive-thermal effects is studied by two-dimensional unsteady calculations of reactive flows. In the present numerical simulation, the compressible Navier-Stokes equation including a one-step irreversible chemical reaction is employed. We consider two basic types of phenomena to account for the intrinsic instability of premixed flames, i.e., hydrodynamic and diffusive-thermal effects. The hydrodynamic effect is caused by the thermal expansion through flame fronts; the diffusive-thermal effect is caused by the preferential diffusion of mass and heat. A disturbance with several wavelengths is superimposed on a stationary planar flame, and the formation of cellular flames generated by hydrodynamic and diffusive-thermal effects is numerically simulated. After the cellular-flame formation, the division and combine of cells are observed at low Lewis numbers. The cell size changes with time, and its mean value is greater than the critical wavelength. At the Lewis number unity, on the other hand, the division of cells is not observed but the combine is. Thus, the diffusive-thermal effect has an important role in the appearance of unstable behavior of premixed flames. The flame velocity of a cellular flame depends on the length of computational domain. As the domain length increases, the flame velocity becomes larger. This is because the long-wavelength components of disturbances have a great influence on the unstable behavior of cellular flames.

Key Words : Premixed flame, Intrinsic instability, Unstable behavior, Cellular flame, Numerical simulation

1. 緒言

我々は使用するエネルギーの大半を、化石燃料の燃焼に依存している。この燃焼の際、地球温暖化の一つの要因である二酸化炭素と、大気汚染の発生に密接に拘わる窒素酸化物を、大気中に多量に排出している。二酸化炭素と窒素酸化物の排出量を削減するために、最も有効な手段の一つと考えられているのが、水素-空気混合気およびメタン-空気混合気の希薄燃焼である。このとき、水素とメタンは空気より軽いので、これらの火炎は不安定になり易いことが知られている[1-6]。それゆえ、工業的に水素およびメタンの

希薄燃焼を利用するためには、火炎の不安定挙動のメカニズムを調べ、それを制御する手法を確立する必要がある。

予混合火炎の固有不安定性を引き起こす最も重要な因子は、流体力学的効果と拡散・熱的效果である[7-9]。流体力学的効果は気体の熱膨張に起因するもので、火炎の不安定性を考える上で不可欠な因子である。また、拡散・熱的效果は物質拡散と熱伝導の相互作用によるもので、不足成分のルイス数(熱拡散率/拡散係数)が1より小さいときに火炎を不安定化させる[10]。水素やメタンの希薄燃焼では、この効果が不安定性の重要な因子になっている。流体力学的効果と拡散・熱的效果は、セル状の火炎面の形成機構や、そのセルの分割や合体などの挙動に多大の影響を及ぼす。したがって、火炎の不安定挙動を制御する手法を確立するためには、これらの効果による不安定性を詳細に調べる必要がある。

* Corresponding author. E-mail: kadowaki@mech.nagaokaut.ac.jp

火炎の不安定挙動のメカニズムを調べるために、化学反応を含む圧縮性ナビエ・ストークス方程式を基にした数値計算が数多く行われている[11-14]。そして、セル状火炎の形成機構やその不安定挙動が調べられている。しかし、従来の数値計算は比較的狭い計算領域におけるものが多く、実際の燃焼場での不安定挙動を知るには不十分である。

著者らはこれまで、圧縮性ナビエ・ストークス方程式を基にし、比較的狭い計算領域を用いた数値計算を行ってきた[15-17]。そして、予混合火炎の固有不安定性とセルの形成、およびセル状火炎の横方向への移動について調べてきた。本研究では、これまでより広い計算領域を用いて数値計算を遂行し、流体力学的効果と拡散・熱的效果により生じる予混合火炎の不安定挙動を調べる。そして、計算領域の広さが予混合火炎の不安定性に及ぼす影響を調べ、火炎の不安定挙動のメカニズムを明らかにする。

2. 支配方程式

本研究では、酸化剤が過多で、不足成分である燃料が全体の反応を支配する予混合火炎を想定する。そして、化学反応は一段不可逆の発熱を伴う反応であり、気体としては未燃ガスと既燃ガスのみが存在すると仮定する。反応速度はアレニウスの法則に従い、未燃ガスと既燃ガスは同じ分子量及び同じルイス数を持ち、理想気体の状態方程式を満たすものとする。輸送係数及び比熱は全領域で一定であるとする。また、外力、ソレ効果、デュフォー効果、圧力勾配拡散、体積粘性、及び放射は無視する。

支配方程式として二次元の圧縮性ナビエ・ストークス方程式を採用する。デカルト座標を用い、気体の主流方向を x 方向とし、火炎面の接線方向を y 方向とする。流れ場の変数は、平面火炎の燃焼速度、予熱域厚さ (= 熱拡散率 / 燃焼速度)、未燃ガスの圧力及び温度を用いて無次元化する。支配方程式は、以下の通りである。

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} = \mathbf{S} \tag{1}$$

方程式中のベクトルは、

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ e \\ \rho Y \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + \frac{p}{\gamma M_u^2} - Pr \left(\frac{4}{3} \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{2}{3} \frac{\partial v}{\partial y} \right) \\ \rho uv - Pr \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ (e+p)u - \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{\partial T}{\partial x} \\ \rho Yu - \frac{1}{Le} \frac{\partial Y}{\partial x} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv - Pr \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) \\ \rho v^2 + \frac{p}{\gamma M_u^2} - Pr \left(\frac{4}{3} \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{2}{3} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \\ (e+p)v - \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{\partial T}{\partial y} \\ \rho Yv - \frac{1}{Le} \frac{\partial Y}{\partial y} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ QB\rho Y \exp(-E/T) \\ -B\rho Y \exp(-E/T) \end{pmatrix}$$

である。ここで、 t は時間、 ρ は密度、 (u,v) は速度の (x,y) 方向成分、 e は全エネルギー、 Y は未燃ガスの質量分率、 p は圧力、 T は温度、 γ は比熱比、 M_u は燃焼速度のマッハ数、 Pr はプラントル数、 Le はルイス数、 Q は発熱量、 B は頻度因子、 E は活性化エネルギーである。

理想気体の状態方程式は、

$$p = \rho T \tag{2}$$

となる。

3. 数値計算方法

支配方程式中の物理的パラメーターは、燃焼速度と断熱火炎温度が 3.93 m/s と 2086 K である予混合火炎を想定して与えられる。本数値計算で採用した燃焼速度は、炭化水素-空気予混合火炎の燃焼速度と較べるとかなり大きい。音速と比較すると充分小さい ($M_u = 1 \times 10^{-2}$)。したがって、燃焼速度を変更して計算を行った場合でも、 $M_u = 3 \times 10^{-2}$ 程度までなら[18]、無次元化された計算結果は殆んど変わらない。また、想定された火炎の無次元断熱火炎温度は、 $T_f = 7.0$ である。

数値計算で用いられる物理的パラメーターの値は、 $Pr = 1.0$ 、 $\gamma = 1.4$ 、 $Q = 21$ 、 $E = 70$ である。拡散・熱的效果が火炎の不安定挙動に与える影響を調べるために、 $Le = 0.5 \sim 1.0$ とする。反応速度の頻度因子は、計算で得られる平面火炎の燃焼速度が設定値になるように定める。

定在平面火炎に、 y 方向に周期的な擾乱を加え、それを初期値として計算を遂行する。ここでは、種々の波長成分をもつ擾乱を採用する。擾乱を平面火炎に加えることによる火炎面の x 方向への変位は、

$$\sum_j a_j \sin(2\pi y / \lambda_j)$$

$$\lambda_j = L_y / j \quad (j = 1, 2, 3, \dots, n) \tag{3}$$

である。ここで、 a_j は定数、 L_y は y 方向の計算領域、 n は

正の整数である。このとき、火炎に加えられる擾乱は、 L_y/n から L_y までの波長成分をもっている。また、本計算では、 $|a_j|=0.1$ とする。

火炎の上流側(未燃ガス側)と下流側(既燃ガス側)における境界では、流れ場の変数の x 方向の勾配を零とする。このとき、境界で圧力の反射が生じるが、計算領域が充分広いので、現象に本質的な影響を与えることはない。上流側境界における未燃ガスの流入速度は、平面火炎の燃焼速度と一致させる。また、 y 方向の境界では、周期条件を用いて変数の値を与える。

計算スキームとして、時間および空間の両方において二次精度をもつ陽的マッコーマック法を採用する。計算領域は、 x 方向へは予熱域厚さの 400 倍とし、 y 方向へは特性波長(擾乱の増幅率が最大になる波長) λ_c の整数倍とする。計算格子は、 x 方向へは不等間隔格子を用い、最小格子間隔は予熱域厚さの 1/5 とする。一方、 y 方向へは等間隔格子を用い、格子間隔は $\lambda_c/64$ とする。 y 方向の格子間隔を半分にして計算を行っても、得られる結果に本質的な差異は見られない。格子数は y 方向の計算領域が $8\lambda_c$ の場合、 1201×513 である。時間ステップは CFL 条件を満足させるために、 $\Delta t = 2 \times 10^{-4}$ とする。また、無次元計算時間は、 $t = 72 \sim 150$ である。

本数値計算は、スカラー並列型計算機 SGI Origin 2000 (本計算では 32 CPU を占有)を用いて遂行した。数値計算に要する時間は、 $t = 150$ までの計算の場合、約 24 時間である。

4. 結果および考察

4.1. 特性波長

平面予混合火炎に正弦波の微小擾乱を加えると、その振幅は時間に対して指数関数的に増大する。擾乱の増幅率 ω とその波数 k との関係(分散関係)を求めると、増幅率が最大になる波数の存在が確認される(図 1)。この波数が特性波数 k_c であり、これに対応する波長が特性波長 $\lambda_c (= 2\pi/k_c)$ である。 $Le = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0$ における特性波長は、それぞれ 11.5, 12.8, 14.3, 17.4, 25.0, 34.1 である。

4.2. セル状火炎の不安定挙動

初めに、 $L_y = 8\lambda_c$ の場合の計算を行う。図 2 は、 $Le = 0.5$ における火炎面形状の時間変化 ($t = 0, 4, 8, \dots, 72$) を示したものである。ここでは、反応速度が最大のところを火炎面と定義している。未燃ガスは図の左側(上流側)から平面火炎の燃焼速度と等しい速度で流入し、既燃ガスは右側へ流出する。平面火炎に加えられた擾乱は、流体力学的効果と拡散・熱的效果により増幅し、火炎面はセル状へと変化する。その後、セル状火炎は上流側へ移動する。これは、火炎面積の増加により、セル状火炎の火炎速度が平面火炎のそれより大きくなるからである。セルは合体と分割を繰り返しており、火炎面は複雑な形状を呈している。また、

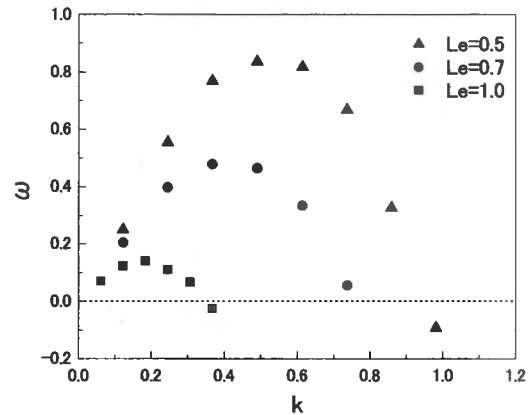


Fig. 1 Dispersion relations at $Le = 0.5, 0.7,$ and 1.0 .

現象に現れるセルの数は 4 から 8 まで変化している。つまり、それらのセルの平均サイズは、 λ_c から $2\lambda_c$ の間を行き来している。本数値計算で得られる火炎の不安定挙動は、上流側の流れ場が乱れない一様流であるので、正に固有不安定性に起因するものである。

図 3 と図 4 は、 $Le = 0.7$ と $Le = 1.0$ における計算結果を示したものである。 $Le = 0.7$ においては、 $Le = 0.5$ の場合と同様に、セルの合体と分割が観察される。しかし、その頻度は減少している。これは、拡散・熱的效果が小さくなり、固有不安定性の強度が低下したためと考えられる(図 1 参照)。また、セルの数は 3 から 6 まで変化している。 $Le = 1.0$ においては、計算開始後は複数のセルが形成されるが、その後合体し、計算終了時には 2 個のセルが形成されている(セルサイズは $4\lambda_c$)。この計算以降にセルの分割が生じるか否かは明白でないが、得られる火炎は比較的安定したセル状火炎である。

図 5 は、 $Le = 0.5, 0.7, 1.0$ におけるセルの数(既燃ガス側に突き出たカスプの数で算定)の時間変化を示したものである。 $Le = 0.5$ のとき、セルの数が時々刻々変化している。つまり、セルの合体と分割が頻繁に繰り返されている。 $Le = 0.7$ のとき、セルの数は変化しているが $Le = 0.5$ の場合より緩やかな変化である。一方、 $Le = 1.0$ のとき、セルは合体するのみで、最終的に 2 個のセルが形成される。これらのことから、ルイス数の 1 からのずれ、つまり拡散・熱的效果が、セル状火炎の不安定挙動において重要な役割を演じていることが分かる。

図 6 は、 $Le = 0.5, 0.7, 1.0$ における火炎速度 S_{cf} の時間変化を示したものである。ここで、セル状火炎の火炎速度は、全領域の反応速度の和を平面火炎のそれで除して求めている。得られる火炎速度は、時間と共に変化している。この変化はセルの合体と分割に密接に関連しており、セルが合体するときに火炎速度が増大することが多い。これは、セルの合体により火炎面積が大きくなるからである。平均的な S_{cf} の値は、 $Le = 0.5, 0.7, 1.0$ において、2.80, 1.89, 1.29 である。ルイス数の低下と共に、火炎速度の平均

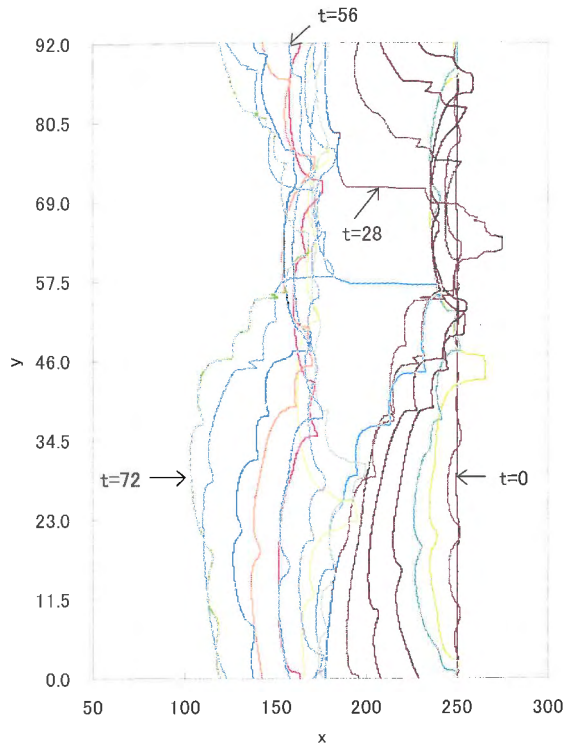


Fig. 2 Unstable behavior of the cellular flame at $Le = 0.5$, $L_y = 8\lambda_c$, and $n = 10$ ($t = 0, 4, 8, \dots, 72$).

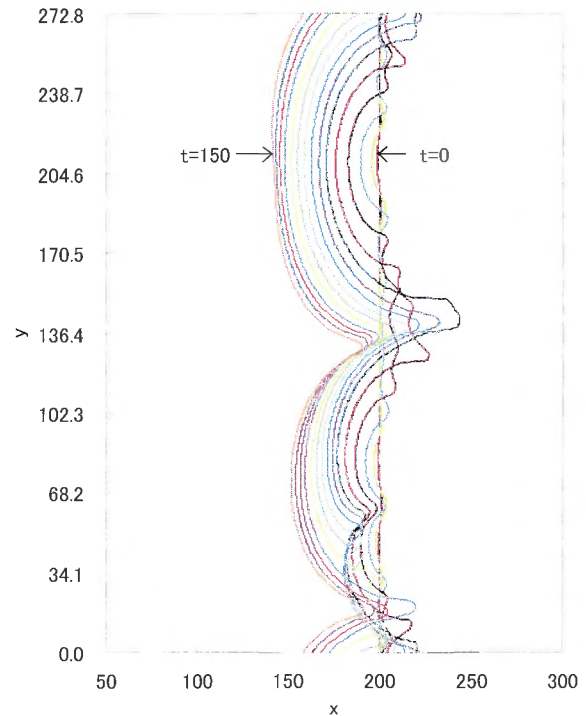


Fig. 4 Unstable behavior of the cellular flame at $Le = 1.0$, $L_y = 8\lambda_c$, and $n = 10$ ($t = 0, 10, 20, \dots, 150$).

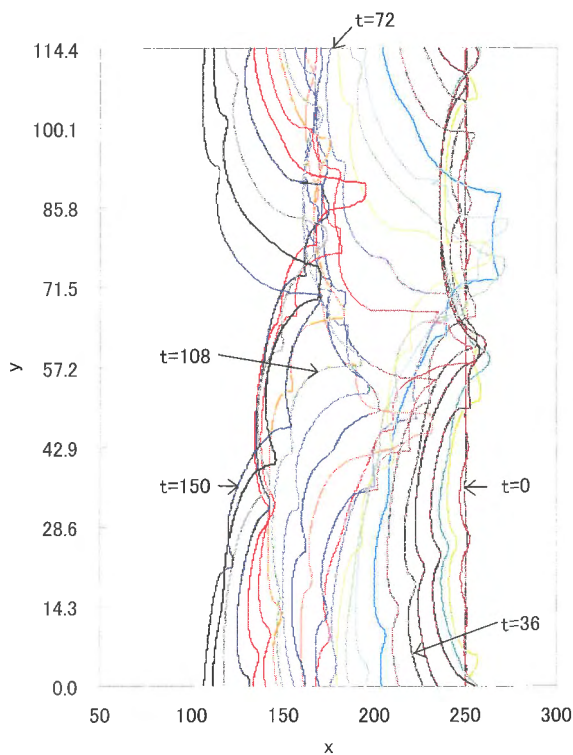


Fig. 3 Unstable behavior of the cellular flame at $Le = 0.7$, $L_y = 8\lambda_c$, and $n = 10$ ($t = 0, 6, 12, \dots, 150$).

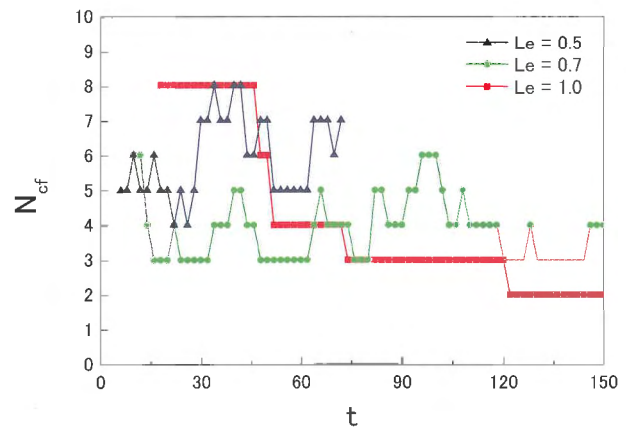


Fig. 5 Numbers of cells at $Le = 0.5, 0.7$, and 1.0 ($t = 0-150$).

値は増大する。これは、火炎の不安定性が強くなるからである。そして、今回の計算で得られた $L_y = 8\lambda_c$ における値は、著者が以前に求めた $L_y = \lambda_c$ における S_{cf} の値 ($Le = 0.5, 0.7, 1.0$ において、2.08, 1.42, 1.24)[19]と較べるとかなり大きい。

次に、 $L_y = 4\lambda_c$ の場合の計算を行う。図 7 は、 $Le = 0.5$ における計算結果を示したものである。 $L_y = 8\lambda_c$ の場合と同様に、セルの合体と分割が生じている。そして、セルの数は 2 から 4 まで変化している。つまり、セルサイズの平均値は λ_c から $2\lambda_c$ まで変化している。この現象は、 $L_y = 8\lambda_c$ の場合と同様である。一方、火炎速度の平均値は、 $L_y = 8\lambda_c$ の場合よりやや小さくなっている。図 8 は、 $Le =$

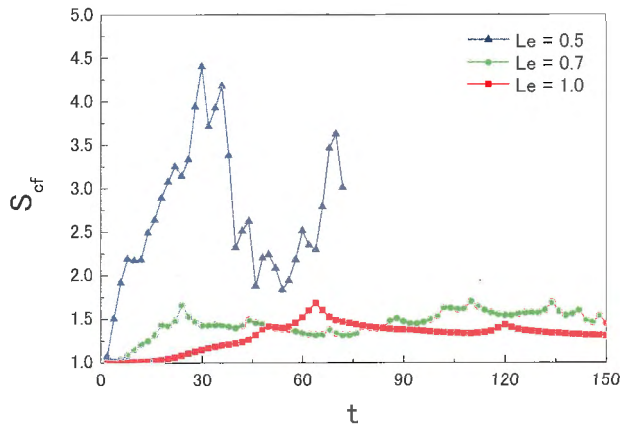


Fig. 6 Flame velocities at $Le = 0.5, 0.7,$ and 1.0 ($t = 0-150$).

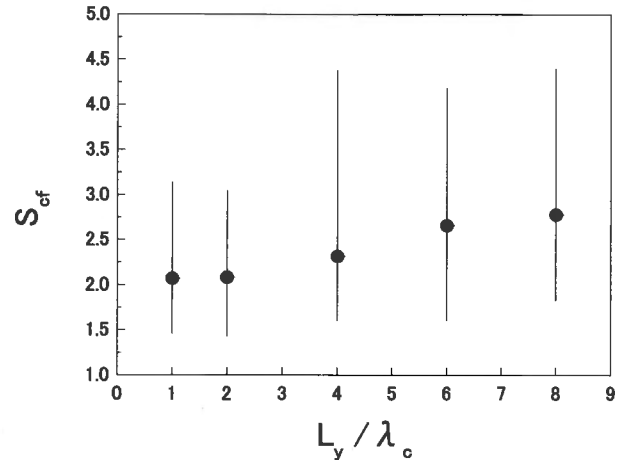
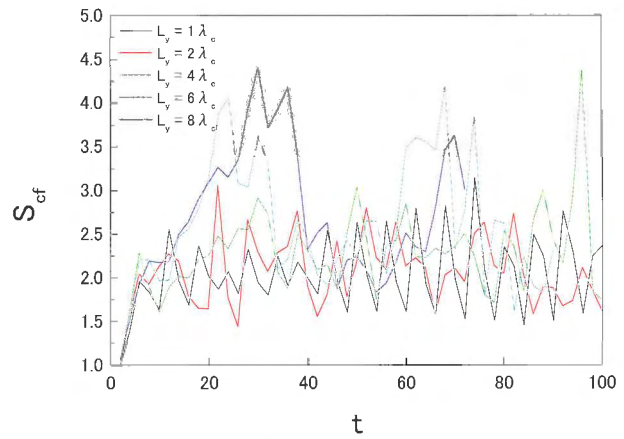


Fig. 9 Flame velocities at $Le = 0.5,$ and $L_y = \lambda_c, 2\lambda_c, 4\lambda_c, 6\lambda_c,$ and $8\lambda_c.$

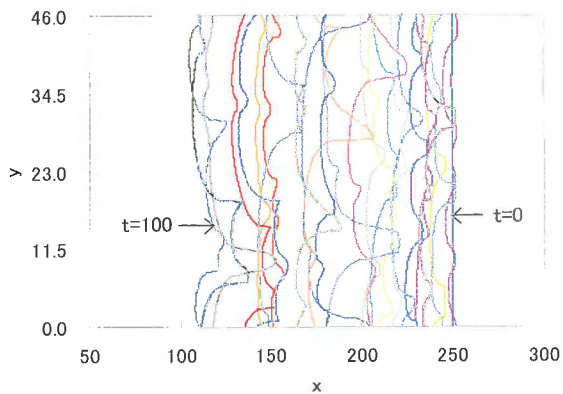


Fig. 7 Unstable behavior of the cellular flame at $Le = 0.5, L_y = 4\lambda_c,$ and $n = 6$ ($t = 0, 4, 8, \dots, 100$).

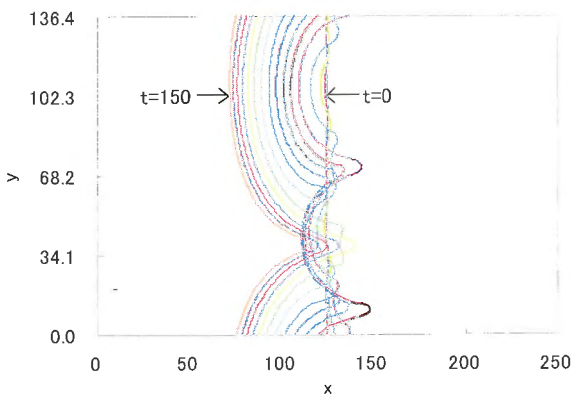


Fig. 8 Unstable behavior of the cellular flame at $Le = 1.0, L_y = 4\lambda_c,$ and $n = 6$ ($t = 0, 10, 20, \dots, 150$).

1.0 における計算結果を示したものである。計算開始後に現れる複数のセルが合体し、最終的に一つのセルが形成される。計算終了時のセルサイズは $4\lambda_c$ であり、 $L_y = 8\lambda_c$ の場合と一致している。

4.3. 火炎速度

前節の結果から、固有不安定性により生じるセル状火炎のセルサイズの平均値は L_y に依存しないが、火炎速度は L_y に依存することが推察される。そこで、 $L_y = \lambda_c \sim 8\lambda_c$ における計算 ($Le = 0.5$) を遂行し、計算領域の違いによる火炎速度の変化を調べる。図 9 は、 $L_y = \lambda_c, 2\lambda_c, 4\lambda_c, 6\lambda_c, 8\lambda_c$ における火炎速度の時間変化とその平均値を示したものである。全ての場合において火炎速度は大きく変動するが、その平均値は計算領域の拡大と共に増加する。図 10 は、 $L_y = \lambda_c, 4\lambda_c, 8\lambda_c$ における火炎速度の平均値とルイス数の関係を示したものである。ルイス数の低下と共に火炎速度は大きくなる。また、計算領域の拡大と共に火炎速度は増加し、その増加の割合はルイス数が低いほど大きくなる傾向がある。

火炎速度が計算領域に依存し、その拡大と共に増加することを、以下で考察する。図 11 は、 $Le = 0.5, L_y = 8\lambda_c$ における計算結果 ($t = 0, 8, 16, \dots, 72$) である。平面火炎に加えられた擾乱が固有不安定性により発達し、セル状火炎が形成される。そして、長波長成分の擾乱が増大し、大きなセルの上に小さなセルが乗った様なセル状火炎が形成される ($t = 32$)。その後、長波長成分が減衰し、小さなセルが横

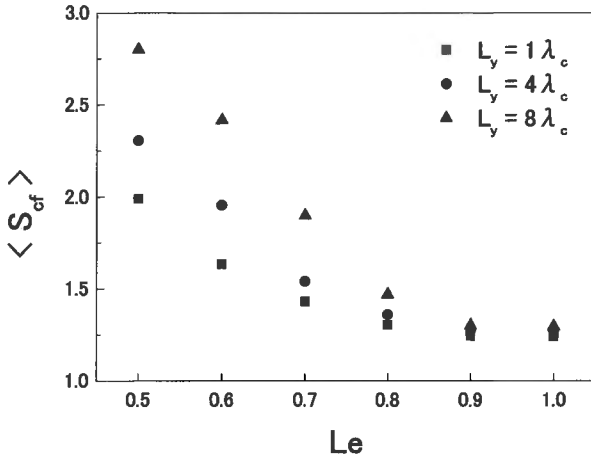


Fig. 10 Mean flame velocities at $L_y = \lambda_c$, $4\lambda_c$, and $8\lambda_c$, depending on the Lewis number.

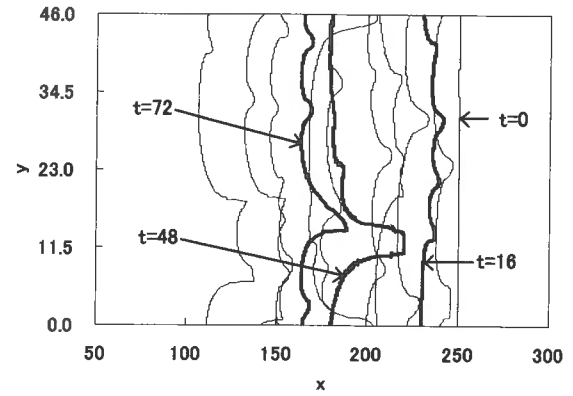


Fig. 12 Unstable behavior of the cellular flame at $Le = 0.5$, $L_y = 4\lambda_c$, and $n = 6$ ($t = 0, 8, 16, \dots, 96$).

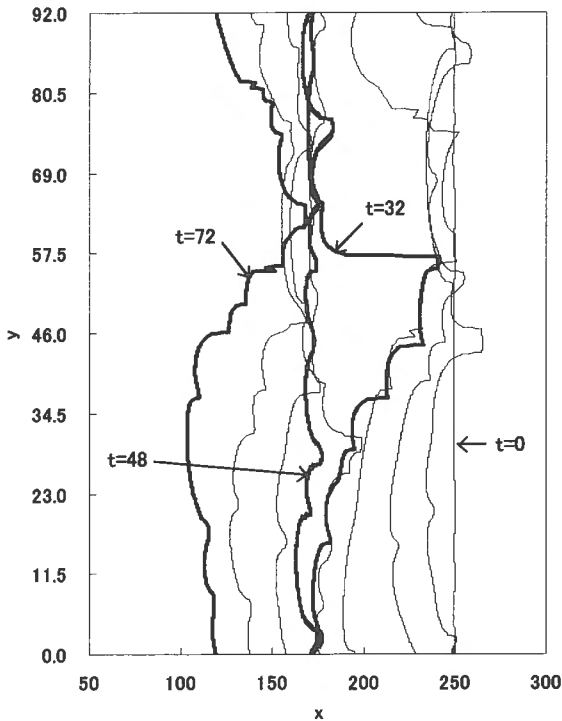


Fig. 11 Unstable behavior of the cellular flame at $Le = 0.5$, $L_y = 8\lambda_c$, and $n = 10$ ($t = 0, 8, 16, \dots, 72$).

に並ぶ状態になる ($t=48$).そして、再度、大きなセルの上に小さなセルが乗ったセル状火炎になる ($t=72$). 大小のセルが存在するとき ($t=32, 72$), 火炎面積は広がるので、火炎速度は大きくなる。これと同様な現象は $L_y = 4\lambda_c$ の場合にも見られる (図 12)。この場合は、 y 方向の計算領域が短いので、火炎の不安定挙動に与える長波長成分の寄与が小さくなる。それゆえ、火炎速度は $L_y = 8\lambda_c$ の場合より小さくなる。この様に、擾乱の長波長成分が火炎の不安定挙動に影響を及ぼし、より大きいサイズのセルが現れるので、火炎面積が計算領域に依存し、火炎速度が計算領域の拡大と共に増加すると考えられる。

5. 結言

圧縮性ナビエ・ストークス方程式を基にした二次元非定常反応流れの数値計算を行い、流体力学的効果と拡散・熱的效果による予混合火炎の不安定挙動、並びに火炎速度に及ぼす計算領域の影響を調べた。

平面火炎に加えられた擾乱が固有不安定性により発達し、セル状火炎が形成される。ルイス数が 1 より小さいとき、つまり流体力学的効果と拡散・熱的效果が生じるとき、セルは合体と分割を繰り返す。一方、ルイス数が 1 のとき、つまり流体力学的効果のみが現象を支配するとき、セルの分割は現れず、合体のみが見られる。これは、拡散・熱的效果が、セル状火炎の不安定挙動において重要な役割を演じているからである。

セルサイズの平均値は、全ての場合において、計算領域に依存しない。一方、火炎速度は、計算領域に依存し、 L_y の拡大と共に増加する。これは、擾乱の長波長成分が火炎の不安定挙動に影響を及ぼし、より大きいサイズのセルが現れ、その結果として火炎面積の増大が生じるからである。

謝辞

本研究を遂行するにあたり、東北大学流体科学研究所のスーパーコンピュータ SGI Origin 2000 を使用した。ここに記して謝意を表す。

References

1. Bregeon, B., Gordon, A., and Williams, F. A., *Combust. Flame* 33: 33-45 (1978).
2. Mitani, T., and Williams, F. A., *Combust. Flame* 39: 169-190 (1980).
3. Hertzberg, M., *Prog. Energy Combust. Sci.* 15: 203-239 (1989).

4. Searby, G., and Quinard, J., *Combust. Flame* 82: 298-311 (1990).
5. Qin, X., and Kobayashi, H., *Exper. Thermal Fluid Sci.* 21: 58-63 (2000).
6. Ogami, Y., and Kobayashi, H., *J. Combust. Soc. Japan* (in Japanese) 44: 58-66 (2002).
7. Williams, F. A., *Combustion Theory, 2nd ed.*, Addison-Wesley, 1985, pp.349-365.
8. Clavin, P., *Prog. Energy Combust. Sci.* 11: 1-59 (1985).
9. Sivashinsky, G. I., *Philos. Trans. R. Soc. London A* 332: 135-148 (1990).
10. Frankel, M. L., and Sivashinsky, G.I., *Combust. Sci. Technol.* 29: 207-224 (1982).
11. Patnaik, G., and Kailasanath, K., *Combust. Flame* 99: 247-253 (1994).
12. Denet, B., and Haldenwang, P., *Combust. Sci. Technol.* 104: 143-167 (1995).
13. Bychkov, V. V., Golberg, S. M., Liberman, M. A., and Eriksson, L. E., *Phys. Rev. E* 54: 3713-3724 (1996).
14. Bychkov, V. V., Golberg, S. M., Liberman, M. A., Kleev, A. I., and Eriksson, L. E., *Combust. Sci. Technol.* 129: 217-242 (1997).
15. Kadowaki, S., *Phys. Fluids* 11: 3426-3433 (1999).
16. Kadowaki, S., *Combust. Flame* 124: 409-421 (2001).
17. Kadowaki, S., *Phys. Rev. E* 63: 026303 (2001).
18. Kadowaki, S., *Phys. Fluids* 7: 220-222 (1995).
19. Kadowaki, S., *Combust. Sci. Technol.* 162: 223-234 (2001).