

■原著論文／ORIGINAL PAPER■

予混合～拡散燃焼場に適用可能な統一的燃焼モデルの提案とその評価 (第三報 多成分燃料系への拡張)

A Proposal of United Combustion Model for Premixed and Diffusion Flames and Its Evaluation (3rd Report: Expansion for the Multi Component Fuel System)

Muhammet EBRET¹・稻毛 真一^{2*}・阿部 一幾²

EBRET, Muhammet¹, INAGE, Shin-ichi^{2*}, and ABE, Kazuki²

¹ INSA de Rouen, Avenue de l'Université — BP8, 76801 Saint-Etienne-du Rouvray Cedex, France

² 日立製作所電力・電機開発研究所 ターボ機械研究開発センタ 〒312-0034茨城県ひたちなか市堀口832-2
Hitachi, Ltd. Power & Industrial Systems R & D Laboratory, 832-2 Horiguchi, hitachinaka-shi Ibaraki-ken, 312-0034 Japan

2007年11月5日受付；2008年1月15日受理／Received 5 November, 2007; Accepted 15 January, 2008

Abstract : A combustion model for the multi fuel system was proposed based on author's previous model[1]. Recently, customer requirement for dual fuel combustor of gas turbine is increasing. To simulate a combustion phenomena at the switching of fuels, the combustor model which includes the chemical reaction of mixing fuels is required. On the 1st and 2nd report, a united combustion model which is applied to premixed and diffusion flames [1,2] was proposed. The present model is natural expansion of the previous model. As the model includes the laminar flame speed S_u and thickness of flame δ , the database of S_u and δ on the multi component fuel was built due to CHEMKIN results. Especially, the database was estimated to the CH₄-C₃H₈ fuel systems.

Key Words : United combustion model, Numerical simulation, Multi fuel, Database, Laminar flame speed

1. 緒言

著者らは、層流～乱流の予混合～拡散燃焼に統一的に適用可能な燃焼モデルを提案してきた[1,2]。その導出の前提として、燃料種は基本的に一種類であるとした。一方、現実のガスタービン燃焼器他では、例えば最も頻繁に用いられる天然ガスの場合でも、その産地により構成成分が異なる為に、火炎安定性や NO_x 等の排出量に関わる燃焼特性が変化する場合が少なくない。また、デュアル燃料焚き、高炉ガス等、複数成分を含有する燃料へのニーズも高まっている。それらを実際に燃焼する前に、燃焼解析により燃焼特性を把握できれば、開発において大きな加速が期待できる。その要求に応えるために、本研究では、先に述べた統一的な燃焼モデルの多成分燃料系への拡張を図った。同時に、拡張したモデルにおいては、燃料中の構成成分比及び混合分率の関数としての燃焼速度の情報が必要となるので、混合燃料に対する実用的なデータベースを合わせて検討した。混合燃料の燃焼速度を系統的に評価した実験は見

当たらないので、その評価には CHEMKIN を用いることとした。使用した素反応メカニズムは GRI-Mech Ver.3.0 である。但し、燃料の構成成分として水素がある場合には、選択拡散の効果が顕著になるため、本研究では、第一段階として拡散係数の差異が水素に比して小さい炭化水素同士の混合に限定して検討している。加えて、ガスタービン燃焼器の評価において、特に重要となる層流燃焼速度への予混合気温度、圧力の影響も調べた。

2. 統一的燃焼モデルの概要

火炎内の各種成分の質量分率は、レイス数が 1 の場合には混合分率(燃料の質量分率) f と反応進行度 c を導入する事により評価できる。著者らが以前導出した、反応進行度 c による層流及び乱流予混合燃焼モデル[3-6]を以下に示す。反応は総括反応を仮定している。 c 式の反応項を ω とすると、層流燃焼モデルとして、

$$\omega = \frac{8\rho_u S_u}{\delta} c^2 (1-c) \quad (1)$$

* Corresponding author. E-mail: shinichi.inage.wk@hitachi.com

を得ている。ここに, ρ_u : 未燃焼ガスの密度, Su : 層流燃焼速度, δ : 層流火炎の厚みであり, 次の関係が成立する。

$$Su = \frac{4\lambda_i}{\rho_u Cp_i \delta} \quad (2)$$

ここに, λ_i : 熱伝導率, Cp_i : 定圧比熱であり, i は未燃焼ガス温度と断熱火炎温度の平均温度での物理量である。また, 時間或いは空間平均の反応進行度 C 式の反応項を ω_t とすると, 乱流予混合燃焼モデル ω_t としては,

$$\omega_t = \frac{8\rho_u S_t}{\delta_t} C^2 (1 - C) \quad (3)$$

を得ている。ここに, S_t : 乱流燃焼速度, δ_t : 乱流火炎帶の厚み, C : 時間或いは空間平均の c である。 S_t と δ_t の間にも, (2) と類似の以下の関係が成立する。

$$S_t = \frac{4(\lambda_i + \lambda_t)}{\rho_u Cp_i \delta_t} \quad (4)$$

ここに, λ_t : 乱流熱伝導率である。*Wrinkled laminar flame* のように乱れが比較的小さい場合には, (3)において, $(S_t/\delta_t) \approx (Su/\delta)$ が成立し, (1) の反応速度にて層流～乱流の予混合燃焼に適用可能となる。その場合, 陽に乱流の効果は含まれないが, 乱流の効果は, 反応進行度 C の輸送式中の乱流拡散係数により考慮される。これから, (1) は *Wrinkled laminar flame* は乱流モデルに依存せず, 乱流拡散係数が, $k-\varepsilon$ モデルのような時間平均, LES のような空間平均, 更に直接シミュレーションのいずれの場合に対しても適用可能である。(1) で層流燃焼速度 Su を評価する必要があるが, Su は理論式で与えても, 実験値を用いても良い。なお, 燃焼場の圧力及び未燃焼ガスの温度及び予混合気の燃料の質量分率が決まれば, Su は一義的に決定され, 燃焼に対する圧力, 温度, 燃空比の影響を全て包含したモデルである。

次いで著者らは, (1) をベースに層流拡散燃焼に適用可能なように拡張した[1-2]。その概念を以下説明する。火炎に直交する座標を x とする。予混合燃焼の場合は火炎中のある位置における反応は, その位置の反応進行度のみで決定される。混合分率 f は一定値であり, f により決定される厚み δ を経て燃焼が完了する。それに対して, 拡散火炎帶中では, 混合分率 f が変化, すなわち勾配を持つため, 燃焼が完了するのに必要な火炎厚み δ の距離の間に $(df/dx) \cdot \delta$ だけ f が変化する。変化率を Δf とし, f の分布関数から Δf だけ変化する微小距離 Δx を逆算する。その微小距離 Δx 内の平均の反応速度をその位置での f における燃焼反応速度と考える。すなわち,

$$\omega_{mean} \cdot \Delta x = \int_x^{x+\Delta x} \omega dx \quad (5)$$

$$\therefore \omega_{mean} = \frac{1}{\Delta x} \int_x^{x+\Delta x} \omega dx \quad (5')$$

予混合燃焼の場合は, $\Delta f = 0$ なので, $\Delta x = 0$ と解釈する。

(5') の ω に (1) を用いると,

$$\omega_{mean}(x) = 4 \frac{\rho_u Su}{\Delta x} c^2 (1 - c) \frac{\hat{\alpha}(1 + \hat{\alpha}c)}{(1 + \hat{\alpha}(2c - 1))^2} \quad (6)$$

ここに,

$$\hat{\alpha} = \tanh\left(\frac{2\Delta x}{\delta}\right) \quad (7)$$

である。 $\Delta x \rightarrow 0$ の時, $\hat{\alpha} \rightarrow 2\Delta x/\delta \rightarrow 0$ であり, ω_{mean} が (1) へ漸近することは, 容易に確認できる。すなわち, $\Delta f \rightarrow 0$ で, 予混合燃焼へ戻る。 Δx を適切に評価することにより, ω_{mean} を改めて ω と書けば, 最終的なモデルとして, 以下を得ている。

$$\begin{aligned} \omega(x) &= \frac{4\rho_u Su}{\delta} c^2 (1 - c) \frac{\hat{\alpha}(1 + \hat{\alpha}c)}{(1 + \hat{\alpha}(2c - 1))^2} \\ &\times \left(\frac{df}{dx} + \frac{\delta}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \right) \left(\frac{df}{dx} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (8)$$

ここで,

$$\hat{\alpha} = \tanh\left(\frac{2 \frac{df}{dx}}{\frac{df}{dx} + \frac{\delta}{2} \frac{d^2 f}{dx^2}}\right) \quad (9)$$

$df/dx \rightarrow 0$ の極限では, (8), (9) は予混合燃焼モデル (1) へと漸近する。(8), (9) を新たな層流場の統一的な燃焼モデルと考える。これは, Su 及び δ を通じて, 燃焼場の圧力, 未燃焼ガスの温度の効果を含み, 拡散～予混合燃焼に統一的に適用できるモデルとなっている。乱流拡散燃焼の場合には, (8), (9) において, $Su \rightarrow S_t$, $\delta \rightarrow \delta_t$ と置き換えるべきである。但し, 上記のように *Wrinkled laminar flame* のように乱れが比較的小さい場合には, (3)において, $(S_t/\delta_t) \approx (Su/\delta)$ が成立するので, 実質, (9)において, $\delta \rightarrow \delta_t$ と置き換えるだけで良い。予混合燃焼に適用できるモデルを著者は HTA モデルと呼んできたが, 今回のモデルは, 反応進行度 c 及び混合分率 f に依存するモデルとなっているので, 今後 TSHTA (*Two Scalar Hyperbolic Tangent Approximation*) モデルと呼ぶことにする。

上記 (8), (9) を用いて, 反応進行度の輸送式を解けば, 乱流～拡散燃焼場を統一的に解析可能である。しかし, 予混合燃焼場において定義された反応進行度を拡散燃焼場に適用すると, 反応進行度の輸送式は f の勾配を含み, c 単独の方程式としては閉じない。そこで, 拡散燃焼場では, 以下の様に反応進行度を再定義する。

$$\hat{c} = \frac{f}{f_{T_{max}}} \quad (f \leq f_{st} : \text{燃料希薄側}) \quad (10)$$

$$\hat{c} = \frac{1-f}{1-f_{T_{max}}} \quad (f > f_{st} : \text{燃料過濃側}) \quad (11)$$

上式で、 $f_{T\max}$ は f が分布する中で、最大火炎温度となる混合分率を意味する。通常の空気・燃料系の拡散燃焼であれば、 $f_{T\max} = f_{st}$ である。本研究では、例えば、空気と燃料の予混合気と空気との燃焼(部分予混合拡散燃焼)も想定しているので、一般には $f_{T\max} = f_{st}$ とは限らないために、 $f_{T\max}$ を定義している。この定義によれば、 \hat{c} の輸送方程式は以下のように、 \hat{c} に関して閉じた式となる。

$$\frac{\partial \rho \hat{c}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \hat{c}}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 \rho \hat{c}}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{f}{f_{T\max}} \omega \quad (f \leq f_{st}) \quad (12)$$

$$\frac{\partial \rho \hat{c}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \hat{c}}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 \rho \hat{c}}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{1-f}{1-f_{T\max}} \omega \quad (f > f_{st}) \quad (13)$$

ここで、 D ：拡散係数である。この定義によれば、予混合～拡散燃焼の範囲で同一の混合分率及び反応進行度の輸送式を用いる事ができる。以下では、(12), (13)を統一モデルにおける反応進行度の輸送式とする。メタン・空気を例にすると、 \hat{c} を用いれば、各成分の質量分率は以下で求めることができる。

燃料希薄側($f \leq f_{st}$)：

$$Y_{CH_4} = f - f_{T\max} \hat{c} \quad (14)$$

$$Y_{O_2} = A_{O_2} \left\{ (1-f) + f_{T\max} \left(1 - \frac{1}{f_{st}} \right) \hat{c} \right\} \quad (15)$$

$$Y_{CO_2} = \frac{M_{CO_2}}{M_{Fu}} f_{T\max} \hat{c} \quad (16)$$

$$Y_{H_2O} = \frac{2M_{H_2O}}{M_{Fu}} f_{T\max} \hat{c} \quad (17)$$

$$Y_{N_2} = 1 - Y_{CH_4} - Y_{O_2} - Y_{CO_2} - Y_{H_2O} \quad (18)$$

燃料過濃側($f > f_{st}$)：

$$Y_{CH_4} = f - \frac{f_{st}(1-f_{T\max})}{1-f_{st}} \hat{c} \quad (19)$$

$$Y_{O_2} = A_{O_2} \{(1-f) - (1-f_{T\max}) \hat{c}\} \quad (20)$$

$$Y_{CO_2} = \frac{A_{O_2} M_{CO_2}}{2M_{O_2}} (1-f_{T\max}) \hat{c} \quad (21)$$

$$Y_{H_2O} = \frac{A_{O_2} M_{H_2O}}{M_{O_2}} (1-f_{T\max}) \hat{c} \quad (22)$$

$$Y_{N_2} = 1 - Y_{CH_4} - Y_{O_2} - Y_{CO_2} - Y_{H_2O} \quad (23)$$

ここに、 M_k ($k = CO_2, Fu, H_2O, \dots$)：各成分分子量、 A_{O_2} ：空気中の酸素の質量分率である。

3. 多成分燃料系への拡張

本研究では、反応進行度の輸送式を解く代わりに、各ガス成分の質量分率の輸送式を考える。その場合の各質量分率輸送式におけるモデル(8), (9)の表現を、メタン・空気系において考察する。以下、乱流系で考える。

燃焼場の解析をする場合には、

1) 混合分率 f の輸送式：

$$\frac{\partial \rho f}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j f}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \quad (24)$$

ここに、 u_j : j 方向の流速、 Sc : Schmidt 数、 Sc_t : 乱流 Schmidt 数で定数、 μ : 粘性係数、 μ_t : 涡粘性係数である。

2) 各ガス成分の質量分率：

$$\frac{\partial \rho Y_x}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_x}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_x}{\partial x_i} \right) + \omega_x \quad (25)$$

以下、一般化反応進行度の輸送式(12), (13)を元に、各成分の質量分率輸送式に対する反応項 ω_x の表現を検討する。まず、希薄燃料側、すなわち、 $f \leq f_{st}$ の場合を考える。(12)の両辺に $f_{T\max}$ を掛けると、 $f_{T\max}$ は座標に依存しないので、

$$\frac{\partial \rho f_{T\max} \hat{c}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i f_{T\max} \hat{c}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left((D + D_t) \frac{\partial \rho f_{T\max} \hat{c}}{\partial x_j} \right) + f \omega \quad (26)$$

ここに、 D_t ：乱流拡散係数である。(24)から(26)を差し引くと、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho (f - f_{T\max} \hat{c})}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j (f - f_{T\max} \hat{c})}{\partial x_j} \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial (f - f_{T\max} \hat{c})}{\partial x_i} \right) - f \omega \end{aligned} \quad (27)$$

ここで、乱流拡散係数 D_t を用いて、

$$(D + D_t) = \left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \quad (28)$$

(27)は、 Y_{CH_4} の輸送式そのものであり、

$$\frac{\partial \rho Y_{CH_4}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_{CH_4}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_{CH_4}}{\partial x_i} \right) - f \omega \quad (29)$$

よって、 Y_{CH_4} の反応項 ω_{CH_4} は、反応進行度の反応モデル ω に $f_{T\max}$ を乗じて、負値としたものである。更に、 ω 中に含まれる c を Y_{CH_4} で書き直すことにする。そこで、(8)を次のように書き直す。

$$\omega = \Omega \cdot c^2 (1-c) \frac{\hat{c}(1+\hat{c}c)}{(1+\hat{c}(2c-1))^2} \quad (30)$$

ここに,

$$\Omega = \frac{4\rho_u S u}{\delta} \left(\frac{df}{dx} + \frac{\delta}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \right) \left(\frac{df}{dx} \right)^{-1} \quad (31)$$

また, (10) より,

$$c = \frac{f_{T \max}}{f} \hat{c} \quad (32)$$

であるから, (30) に用いて,

$$\begin{aligned} \omega &= \Omega \cdot \left(\frac{f_{T \max}}{f} \hat{c} \right)^2 \left(1 - \frac{f_{T \max}}{f} \hat{c} \right) \\ &\times \frac{\hat{\alpha} \left(1 + \hat{\alpha} \frac{f_{T \max}}{f} \hat{c} \right)}{\left(1 + \hat{\alpha} \left(2 \frac{f_{T \max}}{f} \hat{c} - 1 \right) \right)^2} \end{aligned} \quad (33)$$

更に, (14) より,

$$f_{T \max} \hat{c} = f - Y_{CH_4} \quad (34)$$

これを (33) に適用すると,

$$\omega = \Omega \cdot \frac{Y_{CH_4}}{f} \left(1 - \frac{Y_{CH_4}}{f} \right)^2 \frac{\hat{\alpha} \left(1 + \hat{\alpha} \left(1 - \frac{Y_{CH_4}}{f} \right) \right)}{\left(1 + \hat{\alpha} \left(1 - 2 \frac{Y_{CH_4}}{f} \right) \right)^2} \quad (35)$$

これから, 最終的な拡散燃焼モデルとしては, 次のように表現できる.

$$\omega_{CH_4} = -f\Omega \cdot \frac{Y_{CH_4}}{f} \left(1 - \frac{Y_{CH_4}}{f} \right)^2 \frac{\hat{\alpha} \left(1 + \hat{\alpha} \left(1 - \frac{Y_{CH_4}}{f} \right) \right)}{\left(1 + \hat{\alpha} \left(1 - 2 \frac{Y_{CH_4}}{f} \right) \right)^2} \quad (36)$$

同様に, Y_{O_2} , Y_{CO_2} , Y_{H_2O} について考えると,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Y_{O_2}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_{O_2}}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_{O_2}}{\partial x_i} \right) \omega \\ &+ A_{O_2} f \left(1 - \frac{1}{f_{st}} \right) \omega \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Y_{CO_2}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_{CO_2}}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_{CO_2}}{\partial x_i} \right) \\ &+ \frac{M_{CO_2}}{M_{CH_4}} f \omega \end{aligned} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Y_{H_2O}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_{H_2O}}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Y_{H_2O}}{\partial x_i} \right) \omega \\ &+ \frac{M_{H_2O}}{M_{CH_4}} f \omega \end{aligned} \quad (39)$$

以上を纏めると,

$$\omega_{CH_4} = -f \omega \quad (40)$$

$$\omega_{O_2} = A_{O_2} f \left(1 - \frac{1}{f_{st}} \right) \omega \quad (41)$$

$$\omega_{CO_2} = \frac{M_{CO_2}}{M_{CH_4}} f \omega \quad (42)$$

$$\omega_{H_2O} = \frac{2M_{H_2O}}{M_{CH_4}} f \omega \quad (43)$$

ただし,

$$\omega = \Omega \cdot \frac{Y_{CH_4}}{f} \left(1 - \frac{Y_{CH_4}}{f} \right)^2 \frac{\hat{\alpha} \left(1 + \hat{\alpha} \left(1 - \frac{Y_{CH_4}}{f} \right) \right)}{\left(1 + \hat{\alpha} \left(1 - 2 \frac{Y_{CH_4}}{f} \right) \right)^2} \quad (44)$$

である. 燃料過濃側では, (11) を用いて,

$$c = \frac{1 - f_{T \max}}{1 - f} \hat{c} \quad (45)$$

これを, (30) に適用すると,

$$\begin{aligned} \omega &= \Omega \cdot \left(\frac{1 - f_{T \max}}{1 - f} \hat{c} \right)^2 \left(1 - \frac{1 - f_{T \max}}{1 - f} \hat{c} \right) \\ &\times \frac{\hat{\alpha} \left(1 + \hat{\alpha} \frac{1 - f_{T \max}}{1 - f} \hat{c} \right)}{\left(1 + \hat{\alpha} \left(2 \frac{1 - f_{T \max}}{1 - f} \hat{c} - 1 \right) \right)^2} \end{aligned} \quad (46)$$

また, (19) より,

$$(1 - f_{T \max}) \hat{c} = \frac{1 - f_{st}}{f_{st}} (f - Y_{CH_4}) \quad (47)$$

(46)に用いて、

$$\omega = \Omega \cdot \left(\frac{1-f_{st}}{f_{st}} \frac{f-Y_{CH_4}}{1-f} \right)^2 \left(1 - \frac{1-f_{st}}{f_{st}} \frac{f-Y_{CH_4}}{1-f} \right) \\ \times \hat{\alpha} \left(1 + \hat{\alpha} \frac{1-f_{st}}{f_{st}} \frac{f-Y_{CH_4}}{1-f} \right) \\ \times \left(1 + \hat{\alpha} \left(2 \frac{1-f_{st}}{f_{st}} \frac{f-Y_{CH_4}}{1-f} - 1 \right) \right)^2 \quad (48)$$

(40)～(43)同様に纏めると、

$$\omega_{CH_4} = -\frac{f_{st}(1-f)}{1-f_{st}} \omega \quad (49)$$

$$\omega_{O_2} = -A_{O_2}(1-f)\omega \quad (50)$$

$$\omega_{CO_2} = \frac{A_{O_2}M_{CO_2}}{2M_{O_2}}(1-f)\omega \quad (51)$$

$$\omega_{H_2O} = \frac{A_{O_2}M_{H_2O}}{M_{O_2}}(1-f)\omega \quad (52)$$

以上から、混合分率 f 及び各ガス成分の輸送式より、解析することが可能となる。 f は輸送式を解かなくても、窒素の輸送式の解から以下のように代数的に評価できる。

$$f = 1 - \frac{Y_{N_2}}{1 - A_{O_2}} \quad (53)$$

以上の形式であれば、(10), (11)にて導入した f_{Tmax} が不要な表現となる。以下、これをベースに多成分系へと拡張する。

本研究では、多成分系として、メタンとプロパンの混合燃料を例に構築する。各成分の反応は、以下である。



多成分燃料中の燃料 1 モル当たりのメタンのモル比を α とすると、プロパンのモル比は $(1-\alpha)$ である。よって、多成分燃料 1 モルの反応式は、 α を用いて以下となる。



これから、各成分の質量分率の輸送式の反応項は、混合燃料の希薄側では以下となる。

$$\omega_{(CH_4+C_3H_8)} = -f\omega \quad (57)$$

$$\omega_{O_2} = A_{O_2} f \left(1 - \frac{1}{f_{st}} \right) \omega \quad (58)$$

$$\omega_{CO_2} = \frac{(3-2\alpha)M_{CO_2}}{M_{Fuel}} f\omega \quad (59)$$

$$\omega_{H_2O} = \frac{(4-2\alpha)M_{H_2O}}{M_{Fuel}} f\omega \quad (60)$$

同様に、混合燃料過濃側では、

$$\omega_{(CH_4+C_3H_8)} = -\frac{f_{st}(1-f)}{1-f_{st}} \omega \quad (61)$$

$$\omega_{O_2} = -A_{O_2}(1-f)\omega \quad (62)$$

$$\omega_{CO_2} = \frac{A_{O_2}(3-2\alpha)M_{CO_2}}{(5-3\alpha)M_{O_2}}(1-f)\omega \quad (63)$$

$$\omega_{H_2O} = \frac{A_{O_2}(4-2\alpha)M_{H_2O}}{(5-3\alpha)M_{O_2}}(1-f)\omega \quad (64)$$

ただし、

燃料希薄側 ($f \leq f_{st}$)

$$\omega = \Omega \cdot \frac{Y_{Fuel}}{f} \left(1 - \frac{Y_{Fuel}}{f} \right)^2 \frac{\hat{\alpha} \left(1 + \hat{\alpha} \left(1 - \frac{Y_{Fuel}}{f} \right) \right)}{\left(1 + \hat{\alpha} \left(1 - 2 \frac{Y_{Fuel}}{f} \right) \right)^2} \quad (65)$$

燃料過濃側 ($f > f_{st}$)

$$\omega = \Omega \cdot \left(\frac{1-f_{st}}{f_{st}} \frac{f-Y_{Fuel}}{1-f} \right)^2 \left(1 - \frac{1-f_{st}}{f_{st}} \frac{f-Y_{Fuel}}{1-f} \right) \\ \times \frac{\hat{\alpha} \left(1 + \hat{\alpha} \frac{1-f_{st}}{f_{st}} \frac{f-Y_{Fuel}}{1-f} \right)}{\left(1 + \hat{\alpha} \left(2 \frac{1-f_{st}}{f_{st}} \frac{f-Y_{Fuel}}{1-f} - 1 \right) \right)^2} \quad (65')$$

(65), (65')において

$$\Omega = \frac{4\rho_u Su}{\delta} \left(\frac{df}{dx} + \frac{\delta}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \right) \left(\frac{df}{dx} \right)^{-1} \quad (66)$$

$$M_{Fuel} = \alpha M_{CH_4} + (1-\alpha) M_{C_3H_8} \quad (67)$$

上記同様に、 f は輸送式を解かなくても、窒素の輸送式の解から以下のように代数的に評価できる。

$$f = 1 - \frac{Y_{N_2}}{1 - A_{O_2}} \quad (68)$$

ここで、一般に多成分燃料系の燃焼場は、図 1 のように大別される。図 1a) は、既混合された多成分燃料であり、上式の形式により評価可能である。一方、図 1b) のように、メタン、プロパンが個別に供給され、それぞれ混合しつつ、多成分系燃料になる状況を考察する。その場合、 α が空間的に分布し、上記の f_{st} が局所的に変化することに注意を要

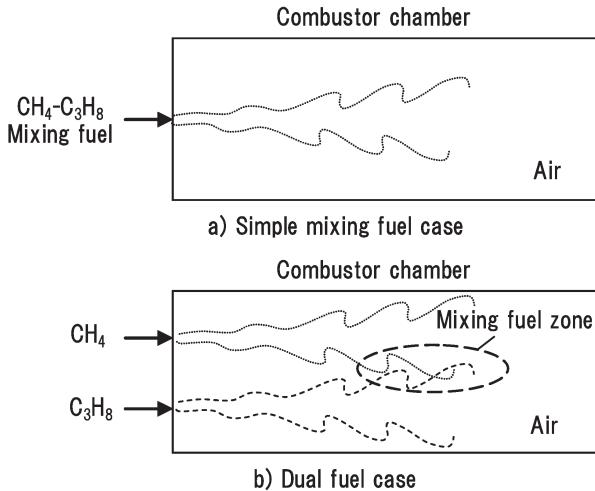


Fig.1 Mixing Fuel Systems

する。メタンに関する混合分率 f_{CH_4} の輸送式を導入すると、混合燃料 1 モル当たりのメタンのモル比 α は、以下で算出できる。

$$\alpha = \frac{1}{1 + \left(\frac{f}{f_{CH_4}} - 1 \right) \frac{M_{CH_4}}{M_{C_3H_8}}} \quad (69)$$

よって、メタンに関する混合分率 f_{CH_4} の輸送式により局所の混合燃料のメタンのモル比が評価でき、各位置での f_{st} は以下となる。

$$f_{st} = \frac{A_{O_2}}{A_{O_2} + (5 - 3\alpha) \frac{M_{O_2}}{M_{Fuel}}} \quad (70)$$

これより、局所の (66) 中の混合燃料に対する Su/δ が評価できれば、多成分燃料の燃焼場を評価できることになる。以下に CHEMKIN により作成した Su/δ のデータベースを纏める。

4. 混合燃料における Su/δ の評価

まず、メタン・プロパン単独での Su/δ を考える。既報[2]では、常温・常圧下の Su/δ として CHEMKIN 及び既存実験データを元に、混合分率の代数式として与えた。バージョンは CHEMKIN-2 である。予混合気温度及び圧力が変化しても Su/δ の評価が可能なように、本研究ではより一般的な形式を考える。著者らは、先に予混合燃焼モデルを提唱した際に、 Su/δ と f の関係式を以下で与えた[3]。

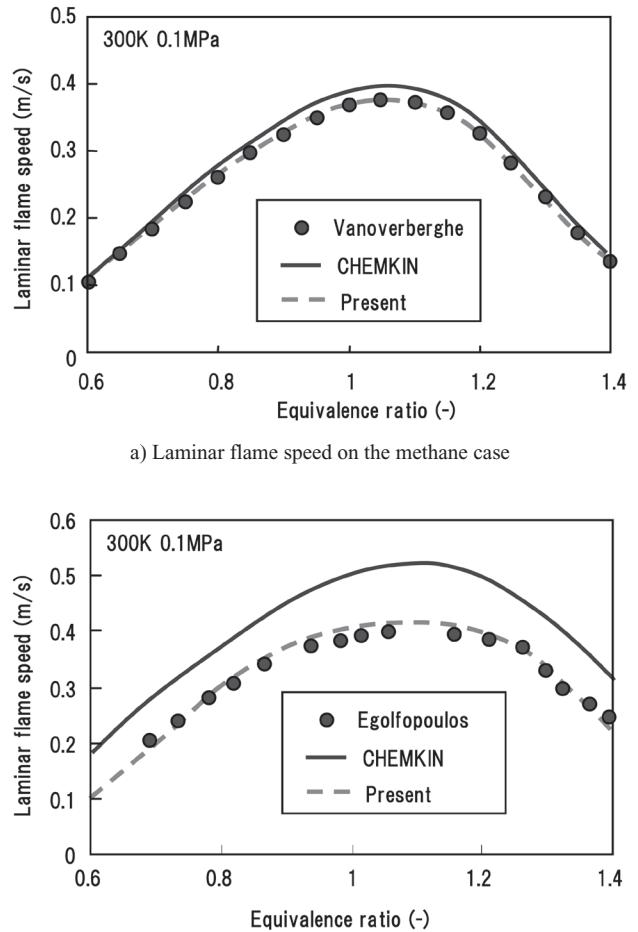


Fig.2 Comparison of laminar flame speed

1) 燃料希薄側 ($f \leq f_{st}$)

$$\frac{Su}{\delta} = \frac{F \cdot A_{O_2} \rho_u}{4 M_{O_2}} \left\{ \frac{1-f}{\tau^2} \left(\frac{RT_b}{E} \right)^2 + \left(1 - \frac{f}{f_{st}} \right) \frac{1}{\tau} \left(\frac{RT_u}{E} \right) \right\} \exp \left(- \frac{E}{RT_b} \right) \quad (71)$$

2) 燃料過濃側 ($f > f_{st}$)

$$\frac{Su}{\delta} = \frac{F \cdot A_{O_2} \rho_u}{4 M_{O_2}} \frac{1-f_{st}}{f_{st}} \left\{ \frac{f}{\tau^2} \left(\frac{RT_b}{E} \right)^2 + \left(1 - \frac{1-f}{1-f_{st}} \right) \frac{1}{\tau} \left(\frac{RT_u}{E} \right) \right\} \exp \left(- \frac{E}{RT_b} \right) \quad (72)$$

ここに、 F 、 E ：反応式に Arrhenius 型モデルを適用した場合の頻度因子及び活性化エネルギー、 T_b ：既燃焼ガス温度、 τ ：発熱パラメータ ($= (T_b - T_u)/T_u$) である。また、 M_{O_2} ：酸素の分子量、 $R = 8.314472 (m^2 kg s^{-2} K^{-1} mol^{-1})$ で气体定数である。(2) を用いれば、厚みを式から除去し、層流燃焼速度単独として表現できる。

本研究では、まず、メタン及びプロパン単独での(71), (72)中の頻度因子 F 及び活性化エネルギー E をCHEMKINの結果を元に決定した。なお、各混合分率の断熱火炎温度が必要であるが、同じくCHEMKINに拠った。使用した素反応メカニズムはGRI-Mech Ver.3.0であり、53化学種325素反応が考慮できる。図2にメタン及びプロパンの層流燃焼速度のVanoverberghen及びEgolfopoulosの実験値[7,8]とCHEMKINの結果の比較を示す。図より、メタンの場合は実験を良く再現する事がわかる。一方、プロパンは実験値に比して過大評価している。このプロパンの過大評価の傾向は、同一の反応メカニズムを用いたVagelopoulos及びEgolfopoulosにより報告[7]されており、現状の反応メカニズムにおける限界と考える。(71), (72)にCHEMKINで求めたメタン、プロパンの各混合分率での断熱火炎温度を代入し、層流燃焼速度は図2中の実験値[8,9]と比較により決定した頻度因子 F の値(一定値とする)と、混合分率の関数としての活性化エネルギー E の近似式を以下に示す。

メタン：

$$F = 4.45 \times 10^{12} \text{ (mol/m}^3/\text{s}) \quad (73)$$

$$E = 268000 + \frac{34000}{2} \cdot \left(1 + \tanh \frac{2(f - 0.068)}{0.014} \right) \text{ (J/mol)} \quad (74)$$

プロパン：

$$F = 4.45 \times 10^{12} \text{ (mol/m}^3/\text{s}) \quad (75)$$

$$E = 270000 + \frac{39000}{2} \left(1 + \tanh \frac{2(f - 0.081)}{0.018} \right) \text{ (J/mol)} \quad (76)$$

実際に活性化エネルギー E が f の関数であるかは不明であるが、本モデルが総括反応をベースにしている(現実は総括反応のArrhenius型モデルは存在しない)事や、(71), (72)を、燃焼速度を表現する連続な関数と見なせば、問題はないと考える。図2a), b)中の破線は、(71), (72)に(73)~(76)を適用して評価した燃焼速度を示す。本式を用いれば、十分な精度で、常温・常圧下での燃焼速度を評価可能である。図3には、(71)~(74)に対して、予混合気温度をパラメータとして求めた断熱火炎温度を適用し、予測したメタンの燃焼速度の予混合気温度依存性をCHEMKINの結果との比較を示す。条件は理論当量比である。図より、予測式(71), (72)は十分な精度でCHEMKINの結果を再現する。これより、上記の頻度因子、活性化エネルギーの汎用性は広いものと考える。但し、(71), (72)により燃焼速度を求める際に、 f_{st} 近傍では断熱火炎温度に対する感度が非常に大きいので、その点において注意を要する。

次に、燃焼速度の圧力依存性を大気圧から2MPaの範囲

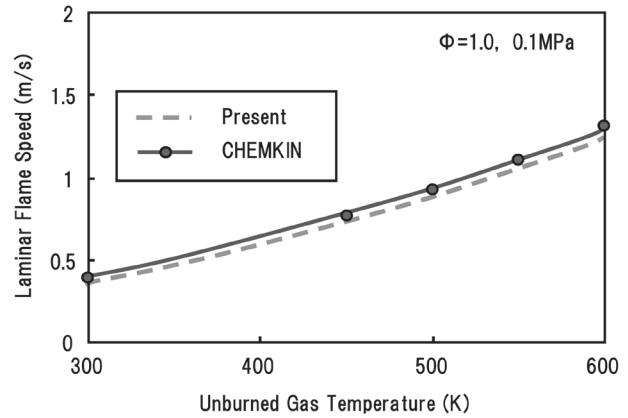


Fig.3 Effect of temperature of the premixed gas on flame speed of methane case

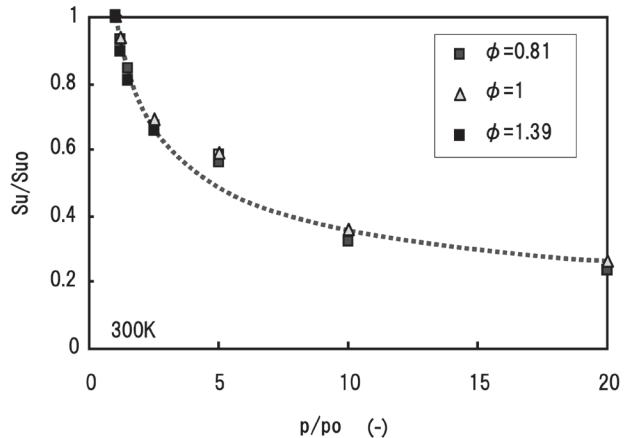


Fig.4 Effect of pressure on flame speed of methane case

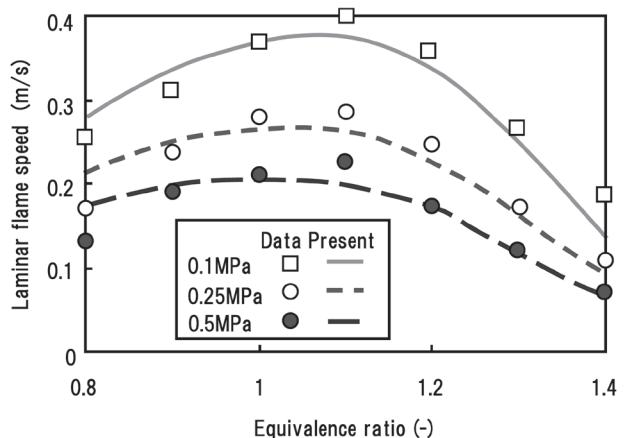


Fig.5 Comparison laminar flame speed on methane case

で、当量比 ϕ をパラメータにCHEMKINにて評価した結果を図4に示す。対象はメタンで、予混合気温度は300 Kである。縦軸は、各圧力 P での燃焼速度を大気圧 P_0 での燃焼速度で規格化したものである。図より、当量比 $\phi = 0.8 \sim 1.4$ 、圧力 $P = 0.1 \sim 2$ MPaの範囲では、近似式は以下のよ

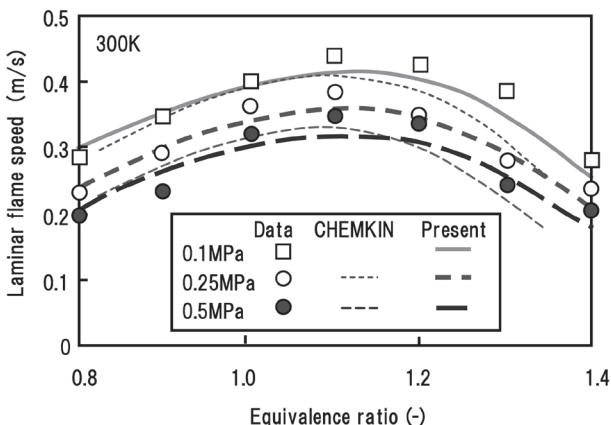


Fig.6 Comparison laminar flame speed on propane case

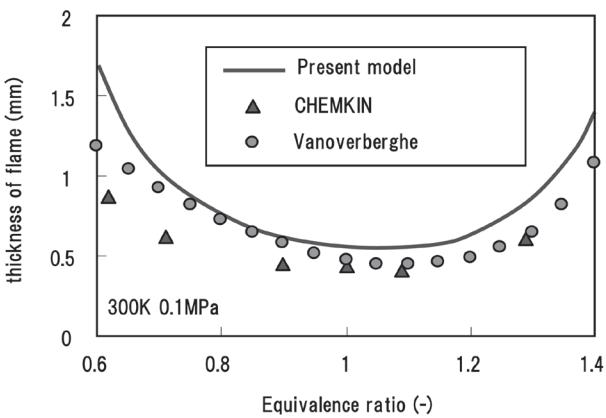


Fig.7 Comparison of thickness of flame

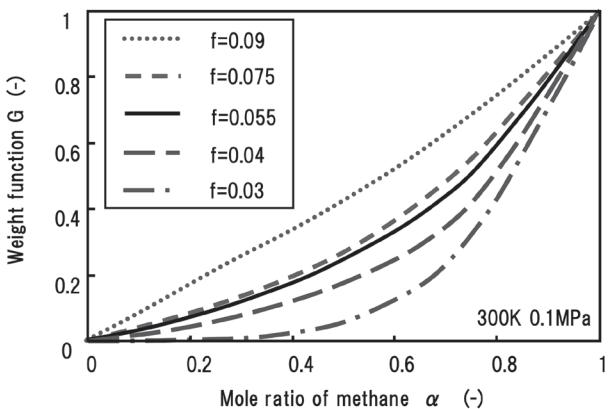


Fig.8 Comparison of flame speed on mixing fuel case

うに与えられる。

$$Su = Su_0 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{-0.36\phi} = Su_0 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\tau_{CH_4}} \quad (77)$$

(2)の関係と(71), (72)より燃焼速度を評価すると、密度の項は消え、また断熱火炎温度の圧力依存性も小さいので、層流燃焼速度式は圧力依存性を含まない。そのため、大気

圧での層流燃焼速度を元にした(77)の形式を採用する。上記データベース関数を用いれば、メタンの温度、圧力をパラメータとして、層流燃焼速度を評価可能である。(77)中の Su_0 に、(71), (72)の理論式及び頻度因子、活性化エネルギー(73), (74)を用いて評価したメタンの層流燃焼速度の圧力依存性をKitagawaらの実験データ[10]と共に、図5に示す。図より、CHEMKINより求めた(77)の指数は、十分な精度を有すると考える。

プロパンの場合は、図2b)のように、CHEMKINと実験値との差異が大きいため、CHEMKINでなく実験値から求めた指数[9]を用いる事とし、プロパンの層流燃焼速度への圧力依存性として当量比 ϕ の関数として以下で与えた。実験条件の当量比 ϕ は0.8~1.4であり、また圧力は0.1~0.5MPaであり、これを次式における有効範囲とする。

$$Su = Su_0 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{-0.75\phi^2 + 1.65\phi - 1.07} = Su_0 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\tau_{C_3H_8}} \quad (78)$$

メタン同様に、 Su_0 に(71), (72)の理論式及び頻度因子、活性化エネルギー(75), (76)を用いて評価したプロパンの層流燃焼速度の圧力依存性をKitagawaらの実験データ[10]と共に、図6に示す。図より、(78)中の圧力指数は、実験を良く再現することが判る。参考に、図中にCHEMKINにて、プロパンの燃焼速度の圧力依存性を評価した結果も示した。図2のよう、大気圧下でのプロパンの燃焼速度は過大評価されるが、0.25 MPa, 0.5 MPaの高圧側では、実験と比較的良い対応を示す。

単体燃料の最後として、燃焼速度を(2)に適用し、求めた火炎の厚みと、Vanoverbergheのデータ[8]及びCHEMKIN結果から評価した火炎の厚みの比較を図7に示す。CHEMKINでは温度分布を求め、以下の式にて火炎の厚みを算出した。

$$\delta = \frac{(T_b - T_u)}{\left(\frac{dT}{dx} \right)_{max}} \quad (79)$$

図より、CHEMKIN及び(2)は、Vanoverbergheのデータ[8]と良い一致を示す。これより、(2)の妥当性を確認できたものと考える。

次いで、メタン・プロパンの混合燃料に対して、燃料中のメタンのモル比 α をパラメータにして燃焼速度を評価した。また、本研究では、混合燃料での燃焼速度を以下の様に評価した。

$$Su_{(CH_4+C_3H_8)} = G(\alpha)Su_{(CH_4)} + (1-G(\alpha))Su_{(C_3H_8)} \quad (80)$$

ここに、 $G(\alpha)$: メタンのモル比 α に依存する重み関数である。燃焼速度は混合分率 f に依存するため、本来は(80)中の $Su_{(CH_4)}$ 及び $Su_{(C_3H_8)}$ に対して、混合燃料の混合分率 f を適用できないとも考えられるが、本研究では一つのデータ

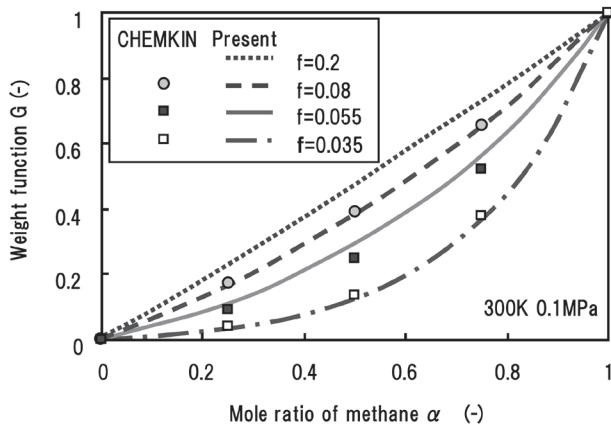


Fig.9 Comparison of weight function

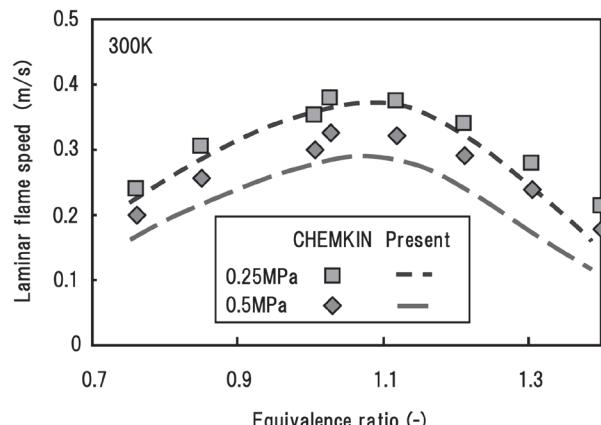


Fig.11 Effect of pressure on flame speed of mixing fuel case

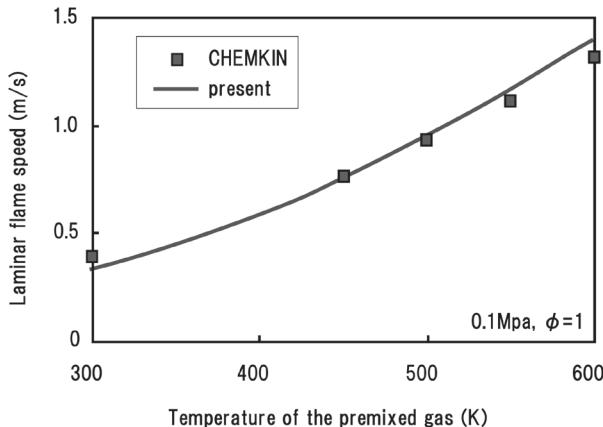


Fig.10 Effect of temperature on flame speed of mixing fuel case

ベース関数と見なして適用している。混合燃料の層流燃焼速度と、メタン・プロパン単独の燃焼速度から求めた、(80)の重み関数と混合分率の関係を図8に示す。ここで、 α を変えた場合、理論当量比での混合分率の値が変化することに注意を要する。更に、図2の様に、プロパンの場合は、実験に比して過大評価することも留意すべき点である。図より、混合分率 f が大きくなると、重み関数が α と比例関係に近づくよう見える。 f が小さい場合には、 α が0.6程度から重み関数が急速に立ち上がる傾向となった。この図8の結果を元に評価した重み関数 G と α の関係を図9に示す。その近似式を α 及び f の関数として以下に示す。

$$G(\alpha) = \frac{1 - \exp(0.0121f^{-1.7217}\alpha)}{1 - \exp(0.0121f^{-1.7217})} \quad (81)$$

図2b)の通り、プロパンにおいて実験に比して過大評価をしている燃焼速度を元に算出した重み関数であるので注意を要するが、現状としては、(75), (76)の頻度因子及び活性化エネルギーを元に(71), (72)で算出したプロパンの燃焼速度に(80)及び(81)を適用するのが現実に近いものと考える。

以上、当量比、予混合気温度、圧力及び混合燃料の影響を個別に評価してきたので、最後に混合燃料に対する予混合気温度、圧力を予測結果とCHEMKINの結果について比較する。これにより、データベースとしての総合的な精度を検証する。

先ず、混合燃料における層流燃焼速度に対する予混合気温度の影響を評価する。当量比は1.0とし、メタン、プロパンの各単独の層流燃焼速度の予混合気温度依存性を用いて、(80)より大気圧条件での混合燃料の層流燃焼速度を評価した。なお、ここでの当量比1.0は、全て混合燃料により定義された値であるので、注意を要する。混合燃料中のメタンのモル比 α を0.5とした場合の、層流燃焼速度の予混合気温度依存性の比較を図10に示す。図より、データベース関数による予測値は、CHEMKINによる評価結果と比較的良い対応を示す。

次に、混合燃料における燃焼速度に対する圧力の影響を評価する。(80)中のメタン及びプロパンの層流燃焼速度の圧力依存性は、それぞれ(77), (78)を適用した。圧力指数中の当量比は、混合燃料で定義された当量比を用いているので、注意を要する。予混合気温度は300(K)とした。上述のように、プロパンの圧力指数の検証が0.5 MPaまでしか検証できていないので、評価も0.5 MPaまでとした。混合燃料中のメタンのモル比 α を0.5とした場合の、層流燃焼速度の圧力依存性の比較を図11に示す。図より、データベース関数による予測値は、CHEMKINによる評価結果と比較的良い対応を示す。大気圧の場合、プロパンの層流燃焼速度は実験に比して過大評価傾向にあったが、図6で説明したように、圧力が高い場合には、プロパンの層流燃焼速度も実験及び予測モデルの結果と比較的良い一致を示すので、混合燃料においても圧力が高い場合には、予測モデルをそのままCHEMKINの結果と比較しても良いと考える。

本モデルに必要なのは、混合燃料における Su/δ なので、(2)と(80)の表現を用いると、最終的には、

$$\left(\frac{Su}{\delta}\right)_{(CH_4 + C_3H_8)} = \left(G \sqrt{\left(\frac{Su}{\delta}\right)_{(CH_4)}} + (1-G) \sqrt{\left(\frac{Su}{\delta}\right)_{(C_3H_8)}}\right)^2 \quad (82)$$

を得る。なお、層流燃焼速度の圧力依存性を(78), (79)のように与えた場合には、 Su/δ は、(2)の関係式で、 (λ_i/Cp_i) の圧力依存性を無視すれば、各成分 j に対して次式で表される。

$$\left(\frac{Su}{\delta}\right)_{(j)} = \left(\frac{Su_0}{\delta_0}\right)_{(j)} \left(\frac{P}{P_0}\right)^{2\tau_{(j)}+1} \quad (83)$$

ここに、 $\tau_{(j)}$ は、(77), (78)に示した圧力指数である。

以上、メタン、プロパン単体及び混合燃料での当量比、圧力、予混合気温度の影響を評価した。全体的に実験及びCHEMKINの結果と整合性のある、データベース関数を作成できた。但し、プロパンの燃焼速度の過大評価があるので、より進んだ反応メカニズムを適用して、今後とも $G(\alpha)$ を精査していく必要があると考える。

5. 結言

多成分系の燃料による燃焼場をシミュレーションするための燃焼モデルを提案した。更に、モデル中に含まれる混合燃料での燃焼速度を、混合燃料を構成する各燃料成分ガス単独の燃焼速度から評価できるように、CHEMKINによる計算結果を元に、データベースを作成した。以下に結論を纏める。

- (1) 多成分燃料として、既混合の多成分燃料系及び個別に供給された燃料が混合する系、両者に適用可能なように、燃焼モデルを一般化した。
- (2) CHEMKINを用いて、メタン、プロパン単独の層流燃焼速度評価式及び、その混合燃料の層流燃焼速度及び Su/δ の評価式を構築した。

以上、混合燃焼系の燃焼モデルとして閉じた形式を提案できたので、今後、本モデルを実際の燃焼場解析に適用し、モデルの検証を進める予定である。

References

1. 稲毛真一, 日本燃焼学会誌, 第49巻150号, 47, (2007)
2. 稲毛真一, 日本燃焼学会誌, 第49巻150号, 57, (2007)
3. 稲毛, 大塚, 機論B編61巻586号, 2290, (1995)
4. 稲毛, 大塚, 機論B編63巻609号, 1806, (1997)
5. 稲毛他, 機論B編63巻612号, 2351, (1997)
6. 稲毛他, 機論B編63巻615号, 263, (1997)
7. Vagelopoulos, C.N. and Egolfopoulos, F.N., *Twenty-seventh Symposium (International) on Combustion*, p.513, 1998.
8. Koen Vanoverberghe, 'Flow, turbulence and combustion of premixed swirling jet flames' *Thesis of Katholieke Universiteit Leuven*, 2004, 180.
9. Egolfopoulos, F.N. et al., *Combust. Flame.* 76 (1989), 377.
10. T. Kitagawa et al., *The 6th International Symposium on Diagnostics and Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines*, CD-ROM, (2004)., 2004.08.