

■原著論文/ORIGINAL PAPER■

水素空気過濃予混合火炎の曲率が火炎構造に与える影響

Curvature Effects on Flame Structure of Hydrogen/Air Rich Premixed Flame

溝淵 泰寛*・竹野 忠夫・松山 新吾・新城 淳史・小川 哲

MIZOBUCHI, Yasuhiro*, TAKENO, Tadao, MATSUYAMA, Shingo, SHINJO, Junji, and OGAWA, Satoru

宇宙航空研究開発機構 研究開発本部 〒182-8522 調布市深大寺東町7-44-1
Japan Aerospace Exploration Agency, 7-44-1 Jindaiji-higashi, Chofu, Tokyo 182-8522, Japan

2011年4月19日受付; 2011年8月22日受理/Received 19 April, 2011; Accepted 22 August, 2011

Abstract : The effects of flame curvature on the fuel consumption rate has been studied by means of 2-D numerical calculation with detailed chemical kinetics and accurate transport properties for a rich hydrogen-air mixture. It has been found that the local fuel consumption rate increases at the low-temperature side of flame portion where the flame develops curvature. The full use of the numerical data has been made to understand the cause of this increase. It has been found that the supply rate of H by molecular diffusion to the reaction zone is accelerated, which eventually produces the increase in OH concentration leading to this increase. The same trend of increase of fuel consumption rate with the flame curvature has been observed in the detailed 3-D simulation of a hydrogen jet lifted flame, and then the mechanism discussed in this study is one of the key mechanisms to understand the structures of turbulent premixed flames.

Key Words : Rich premixed flame, Flame curvature, Fuel consumption rate, Elementary reactions

1. 緒言

実在燃焼における火炎は殆どの場合、流体の乱れや幾何学的境界条件により湾曲しており、その影響は小さくない。火炎が湾曲し、曲率をもつ時の燃焼構造変化の原因は、多くの場合、選択拡散による局所的な濃度変化と説明されてきた。例えば水素・空気拡散火炎が局所歪みを受ける場合には選択拡散の効果により理論混合比となる位置での燃料混合分率が変化し、燃焼状態が変化することが詳細な数値計算により報告されている[1]。一方、予混合火炎についても理論混合比にない場合には、成分間の拡散速度の差異により局所当量比が変化する[2,3]ことにより燃焼速度が変化し、セル状火炎[4]が形成される原因ともなることが説明されてきた。しかしその効果は必ずしも十分に解明されているとは言い難い。特に実際の火炎内での反応が複雑な詳細反応を伴う場合に、個々の素反応がどのような役割を果たしているかは殆ど解明されていない。それらの解析を行う手段としては現時点では、詳細物理モデルを用いた高解像度の数値シミュレーションに依る以外ない。

著者らは詳細な数値シミュレーションによって再現した

* Corresponding author. E-mail: mizo@chofu.jaxa.jp

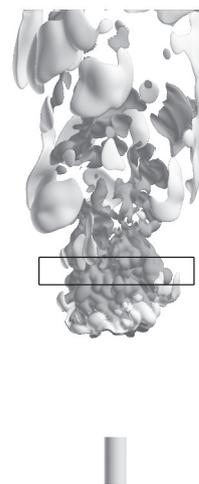


Fig.1 Hydrogen jet lifted flame reproduced by highly resolved detailed simulation [5]. Iso-surface of hydrogen consumption rate, with surface colors indicating combustion modes, black: lean premixed, gray: rich premixed, white: diffusive.

水素噴流浮き上がり火炎[5]の内側に形成された乱流過濃予混合火炎中に通常の火炎とは異なる構造が存在することを示した[5,6]。そこでは局所的に平面1次元火炎を大きく上

回る燃料消費速度が観察され、特に低温領域における燃料消費速度増加が特徴的である。そのような平面1次元火炎よりも大きな燃料消費速度は、未燃ガスが火炎に食い込むことによって火炎が大きく湾曲、変形したように見える箇所において多く観察され、火炎形状の大きな変化が火炎内部構造に影響を与えていることが推察された。

本報では水素・空気層流過濃予混合火炎に未燃混合気塊を衝突させる簡単な2次元数値実験を行うことにより、火炎が大きく湾曲した際の火炎内部構造の変化を解析した。特に火炎曲率に注目し、曲率の増減に伴う火炎内部構造の変化、および、火炎構造が変化する過程において素反応過程や輸送過程が果たす役割について調べた。

2. 水素噴流火炎の詳細シミュレーションにおいて観察された1次元火炎を上回る燃料消費速度

著者らが詳細なシミュレーションによって再現した水素噴流浮き上がり火炎の構造を Fig.1 に示す。図は水素消費速度 $10^4 \text{ mol/m}^3/\text{s}$ の等値面であり、表面の色は Flame Index [7] によって判別した燃焼モード (黒: 希薄予混合, 灰色: 過濃予混合, 白: 拡散) を示している。この浮き上がり火炎は、三重火炎の形態をもつ先端火炎、外側に島状に分布する拡散火炎、火炎内側の過濃予混合火炎からなる。そのうち内側の過濃予混合火炎は水素噴流の乱れの影響を大きく受けており、通常の平面1次元火炎構造とは異なる特徴が観察されている[5,6]。しかし、その構造の詳細は十分には理解されていない。

Fig.2 は Fig.1 に四角枠で示す領域に含まれる過濃予混合火炎のうち燃料混合分率 Z [8] が $0.11 < Z < 0.13$ の範囲にある体積について横軸を火炎内の任意の位置での温度、縦軸

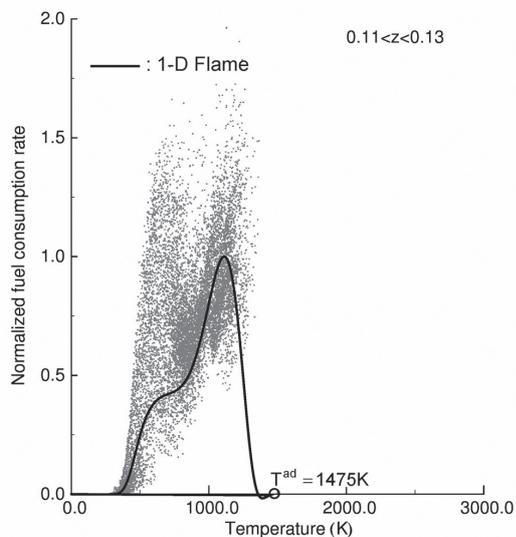


Fig.2 Extra-ordinary hydrogen consumption rate observed in turbulent rich premixed flame in the numerically reproduced lifted flame [5]. Plots are taken from premixed-mode combustor of mixture fraction 0.11-0.13.

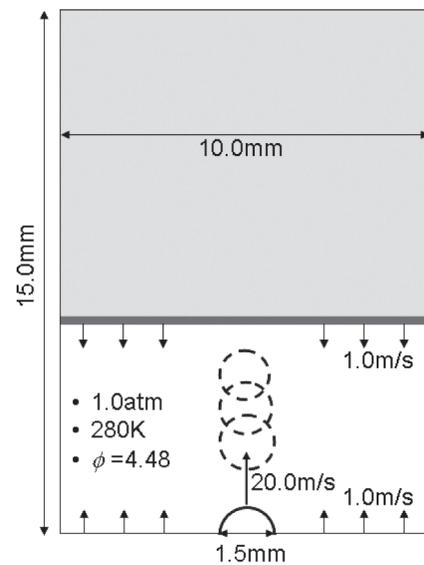


Fig.3 Problem configurations.

をその位置での局所的な燃料 (H_2) 消費速度とした散布図である。燃料消費速度は $Z = 0.12$ の平面1次元予混合火炎[9]における燃料消費速度の最大値で無次元化している。この図の長所としては火炎全体の点を図中にプロットすることにより全体の様子を俯瞰できること、また特に化学反応による生成消費を解析する際には、横軸を温度にしているため Arrhenius 型の反応速度を考える時には縦軸上の差異は化学種濃度の差異に帰着させることができる点があげられる。

散布図を実線で示された $Z = 0.12$ の平面1次元予混合火炎での分布と比較すると、特に低温側にみられる平面1次元火炎を大きく上回る燃料消費速度が特徴的である。そのような大きな燃料消費速度は、予混合火炎が大きく湾曲し、未燃ガスが既燃ガス内部に食い込んでいるように見える箇所において多く観察された。それらは水素噴流の強い乱れにより作り出された未燃ガスの塊が予混合火炎に衝突した際に形成されているのではないかと推察される。

3. 問題設定および数値シミュレーション

前章で述べた浮き上がり火炎の詳細シミュレーションでの観察結果を受け、本報では水素 / 空気過濃予混合火炎が湾曲していく過程を2次元詳細シミュレーションによる簡単な数値実験で再現し、火炎が大きく湾曲した時の火炎内部構造の変化および、その過程において素反応や輸送過程が果たす役割について調べた。

計算モデルを Fig.3 に示す。定在している平面1次元の水素・空気過濃予混合火炎に同一の当量比の未燃混合気塊を高速で噴射することにより予混合火炎の形状を変化させる。混合気の圧力は 1 atm, 温度は 280 K, 当量比は 4.48 (燃料混合分率では $Z = 0.12$) であり、この混合気の層流燃焼

Table 1 Chemical reaction mechanism [10].

R1	$H + O_2 = O + OH$
R2	$H_2 + O = H + OH$
R3	$H_2O + O = OH + OH$
R4	$H_2O + H = H_2 + OH$
R5	$H_2O_2 + OH = H_2O + HO_2$
R6	$H_2O + M = H + OH + M$
R7	$H + O_2 + M = HO_2 + M$
R8	$HO_2 + O = OH + O_2$
R9	$HO_2 + H = OH + OH$
R10	$HO_2 + H = H_2 + O_2$
R11	$HO_2 + OH = H_2O + O_2$
R12	$H_2O_2 + O_2 = HO_2 + HO_2$
R13	$H_2O_2 + M = OH + OH + M$
R14	$H_2O_2 + M = HO_2 + M$
R15	$O + H + M = OH + M$
R16	$O_2 + M = O + O + M$
R17	$H_2 + M = H + H + M$

速度は約 1 m/s である。噴射する高速流体塊の径は 1.5 mm, 速度は 20 m/s であり, これらは水素噴流浮き上り火炎のシミュレーション結果における乱流過濃予混合火炎中の代表的な渦の大きさおよび速度変動の観察結果にもとづいて決めた。

水素・空気反応機構および輸送係数には浮き上り火炎のシミュレーションに用いたモデルと同一のもの[10,11,12]を

用いた。化学反応機構を Table 1 に示す。計算領域入り口から 1 m/s の未燃予混合気を流入させることにより 1 次元状の過濃予混合火炎を定在させる。その後, 計算領域流入境界から高速の混合気塊を流入させ, 予混合火炎に衝突させる。流入および流出境界条件には NSBC [13]を用い, 左右の境界には対象条件を用いた。計算格子幅は 25 μm で一定である。

4. 計算結果および解析

4.1. 火炎形状の変化

Fig.4 に高速の混合気塊の衝突による火炎形状の時間変化を燃料消費速度分布により示す。未燃混合気塊は予混合火炎を大きく湾曲させた後, 予混合火炎を通り過ぎ, その後, 既燃ガス中で島状の反応体を形成する。島状の反応体は時間とともにその中の酸素が消費し尽くされ消滅する。一方湾曲した予混合火炎は時間とともに元の平面 1 次元の形状に戻っていく。この過程のうち, 本研究では火炎が大きく湾曲し水滴のような形状となった瞬間 b) を取り上げ, その瞬間の火炎構造について検討する。

4.2. 曲率による火炎低温側での燃焼消費速度増加

従来の考えでは, 火炎の曲率が火炎構造に影響を与えるのは, 成分間の拡散速度の差異による局所当量比の変化, 或いは熱と成分の拡散速度の違い, いわゆるルイス数効果, などによるものとして説明されて来た。しかしこの説明は, 基本的には反応に関与する成分は反応物である燃料成分と酸化剤成分, それに生成物のみとする簡単な一段の総括反応に基づいている。ところが実際の火炎では, 幾つかの反

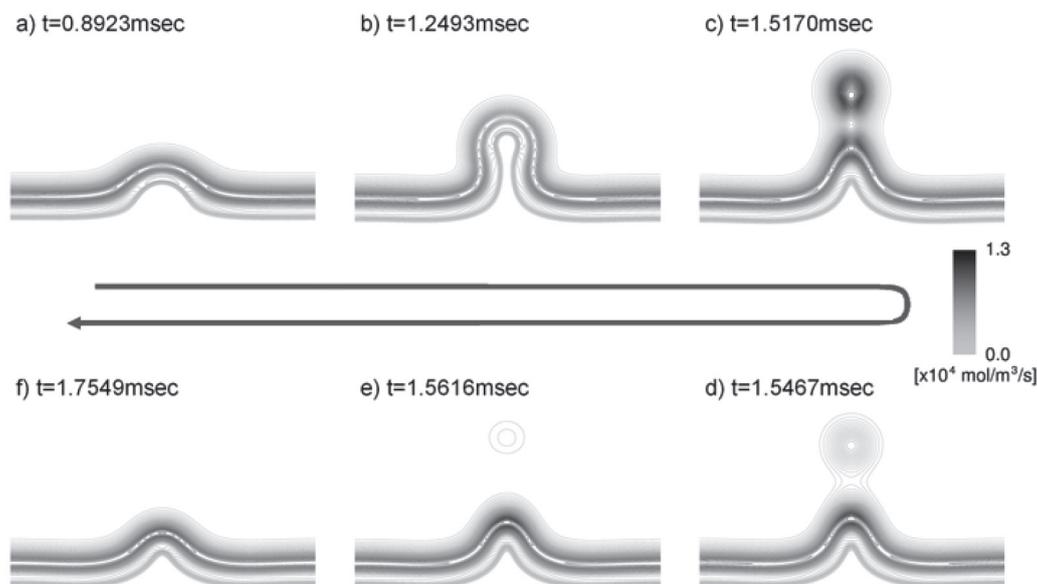


Fig.4 Time-sequent change of flame shape.

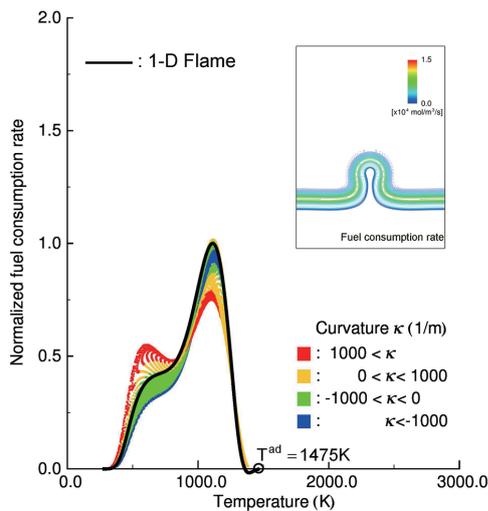


Fig.5 Increase of fuel consumption rate at lower temperature side with increase of flame curvature.

応活性基を始め中間生成物など数多くの成分が関与する。また化学反応は簡単な一段反応ではなく多数の素反応群からなる複雑な反応機構によって進行する。このような場合でも従来の簡単な考えで説明出来るのか、以下の数値解析によって検討する。

まず予混合火炎形状が Fig.4 b) の瞬間における燃料消費速度を調べた。Fig.5 は Fig.2 と同様に横軸を温度、縦軸を燃料消費速度とした散布図である。実線は当量比 4.48 の平面 1 次元予混合火炎における温度と燃料消費速度との関係を示している。プロットの色は局所の火炎曲率を表している。ここで火炎曲率 κ は温度分布の勾配を用いて評価している。すなわち

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = \text{grad}T / |\text{grad}T| \quad (1)$$

である。正の符号は火炎面が既燃側に凸、負は未燃側に凸になっている事を表している。火炎低温部に注目すると、曲率が負の方向に大きい部分では 1 次元火炎よりも燃料消費速度が小さくなっている。一方で正の方向に大きい部分、すなわち火炎が水滴状に大きく既燃側に湾曲した部位では燃料消費速度が 1 次元火炎よりも増加しており、曲率とともに増加量が大きくなっていることが分かる。なお Fig.4 において計算領域両端付近の湾曲していない部分での火炎構造は 1 次元火炎とほぼ同一であるため Fig.5 において 1 次元火炎での分布を示す実線上に存在する。

上記の火炎低温側での 1 次元火炎を越える燃料消費速度は Fig.2 に示されるように水素噴流浮き上がり火炎の詳細計算においても観察された現象である。以下においては、火炎低温側での燃料消費速度が火炎曲率にしたがって増加する過程において、化学反応過程や輸送現象が果たしている役割について調べる。

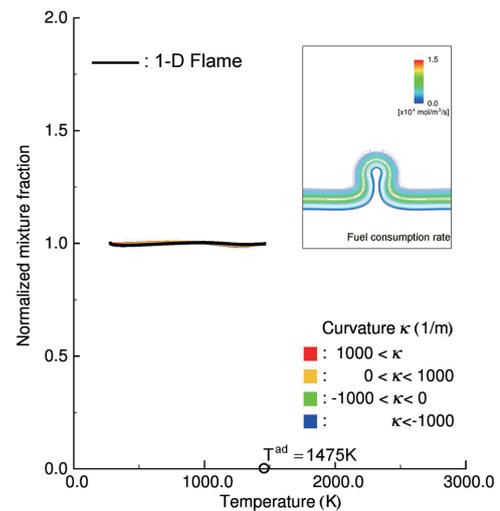


Fig.6 Effects of preferential diffusion. Mixture fraction is plotted as a function of temperature.

4.3. 選択拡散の効果

従来の選択拡散の考え方にもとづけば、燃料が酸化剤よりも軽い水素過濃予混合火炎では、火炎先端部への酸化剤の供給が相対的に加速されることにより、局所的な当量比が 1 に近づく。特に今回取り扱うような理論混合比から大きくはずれた混合気においては局所当量比が 1 に近づくことにより燃料消費速度が増加することになる[2]。もしこの選択拡散の効果により局所の燃料消費速度が大きくなっているとすると、曲率の変化に従って、燃料混合分率が理論混合比に向かって減少しているはずである。Fig.6 は燃料混合分率を縦軸とした散布図である。平面 1 次元火炎からのズレは極めて小さく、Fig.5 に示された局所的な燃料消費速度の変化を説明するには不十分であることが分かる。従って、今回観察された、曲率の変化に従う局所的な燃料消費速度の変化は従来の選択拡散の効果によるものではなく、より詳細なレベルの過程に原因があると考えられる。

なお、火炎低温側で局所的に燃料消費速度が上昇しているが、軸方向の積分値としての燃焼消費は減少している。Fig.7 は計算領域中心線上の燃料消費速度と 1 次元平面火炎における燃料消費速度分布の比較である。高温側では 1 次元火炎を下回るため中心軸上の燃料消費速度の積分値としては 1 次元火炎を下回る。これはルイス数が 1 よりも小さい場合に、火炎が既燃側に凸であれば反応物の供給よりも熱の損失が大きくなるため燃焼が弱くなると説明されるルイス数効果を示していると考えられる。

4.4. OH 濃度増加による R4 の加速

まず、火炎低温側での火炎曲率に従った燃料消費速度の増加が、どの素反応過程が加速されることによってもたらされているかを調べる。全ての素反応過程について Fig.5 と同様に横軸を温度として散布図を作り平面 1 次元火炎と比較することにより、どの素反応過程が低温側で加速され

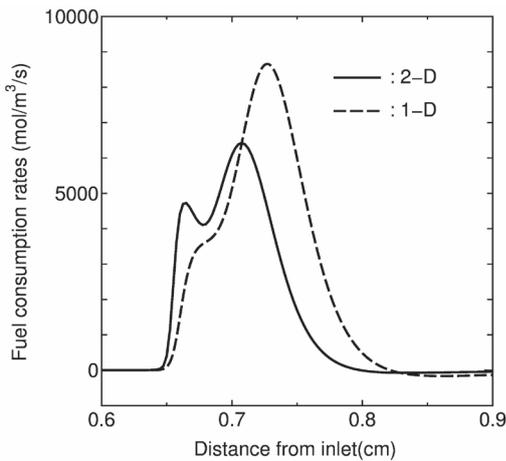


Fig. 7 Axial profiles of the fuel consumption rate, comparison of 1-D and 2-D flames.

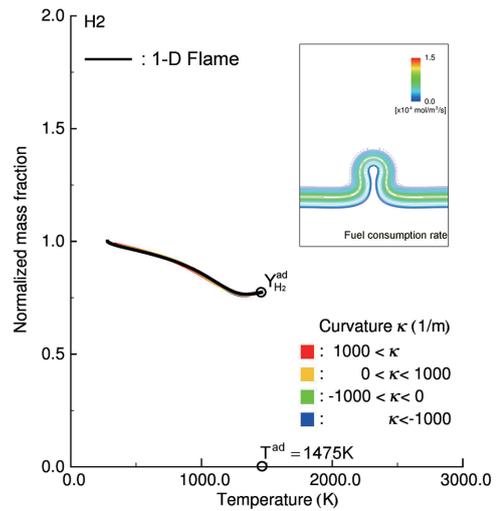


Fig.9 H₂ mass fraction as a function of temperature.

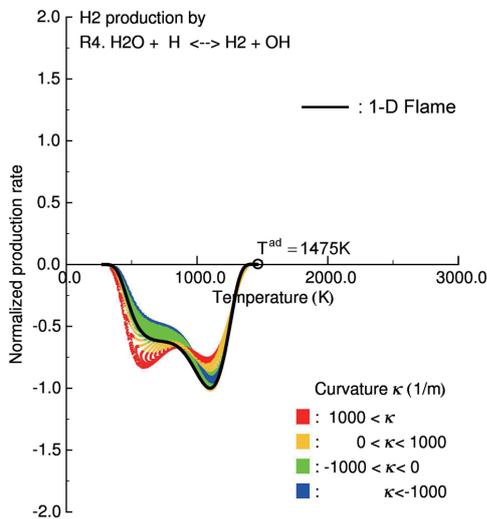


Fig.8 Acceleration of R4 with increase of flame curvature at lower temperature side.

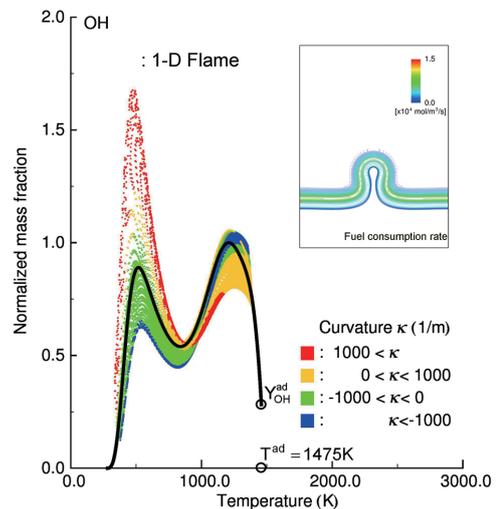


Fig.10 Increase of OH mass fraction with flame curvature at lower temperature side.

ているかを知ることができる。その結果、Fig.8に示すように R4: $H_2O + H \leftrightarrow H_2 + OH$ による H₂ の消費が火炎曲率に従って加速されていることが分かった。なお、同図では縦軸が生成速度であるため燃料消費速度は負値として示されている。

R4 が加速される原因としては OH あるいは H₂ の局所的な濃度増加が考えられる。H₂ および OH の質量分率の散布図が Fig.9 と Fig.10 である。H₂ の質量分率のプロットはほぼ 1 次元火炎中の分布を示す線の上についている一方で OH の質量分率は低温側で極端に大きくなっており、この OH 濃度の増加が R4 を加速していることが分かる。

4.5. H の分子拡散供給の増加による R9 の加速

次に OH 濃度の増加がもたらされる要因について調べる。Fig.11 は OH の生成速度の散布図であるが、低温部で

正の曲率とともに生成速度が大幅に増加していることが分かる。この生成速度増加がどの素反応の加速によってもたらされているかを調べると、Fig.12 に示すように R9: $H + HO_2 = OH + OH$ が加速されていることが分かった。

R9 を加速させる要因は H および HO₂ の濃度増加であるが、それらの質量分率の散布図が Fig.13 および 14 である。HO₂ は低温部では平面 1 次元火炎を最大で 30 % 程度上回っていることが分かる。一方 Fig.14 中の拡大図に見られるように H の質量分率は低温部で 1 次元火炎の 2 倍程度となっている。このように HO₂, H とともに 1 次元火炎を上回る質量分率となっているが、以下に述べる理由から R9 加速の主たる原因は H の供給増加にあると考えられる。

H の生成速度 (Fig.15) を見ると低温側では負の生成速度、すなわち消費速度が火炎曲率に従って増加している。この曲率に従った消費増加を補い H の質量分率を平面 1 次元火

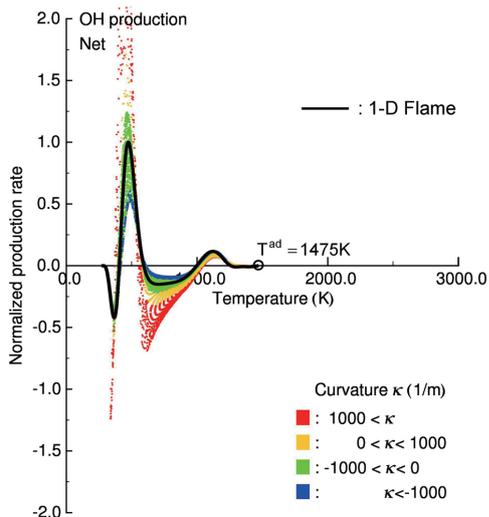


Fig. 11 Increase OH production rate with flame curvature at lower temperature side.

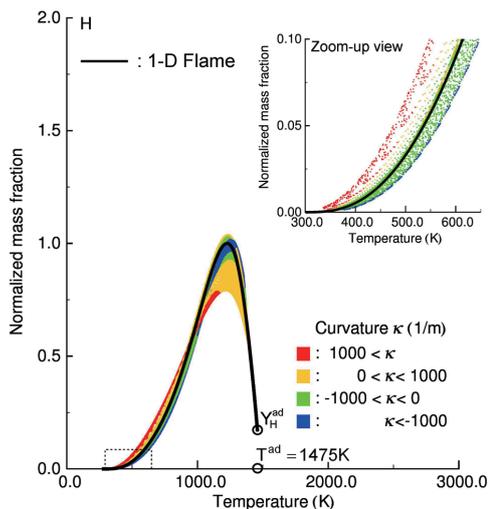


Fig. 14 H mass fraction as a function of temperature.

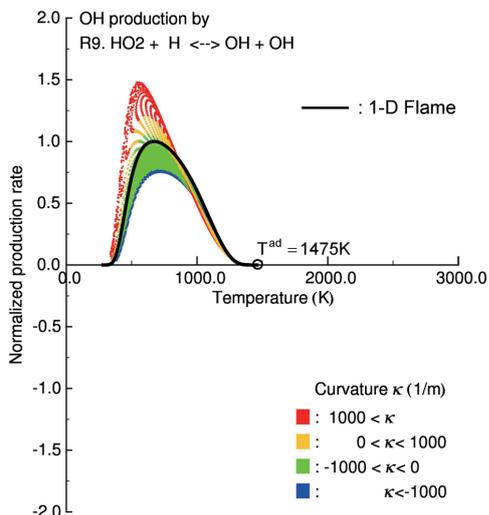


Fig. 12 Acceleration of R9 with flame curvature at lower temperature side.

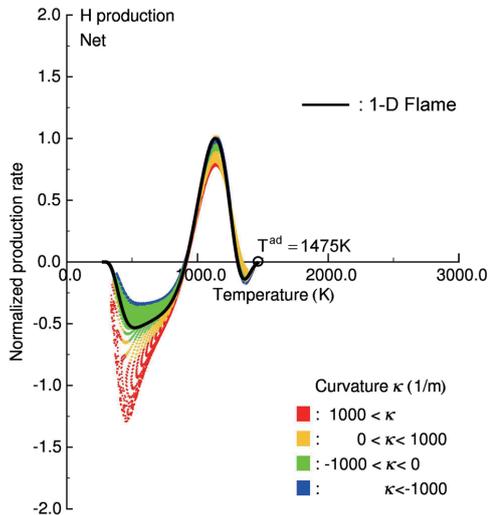


Fig. 15 Increase of H consumption with flame curvature at lower temperature side.

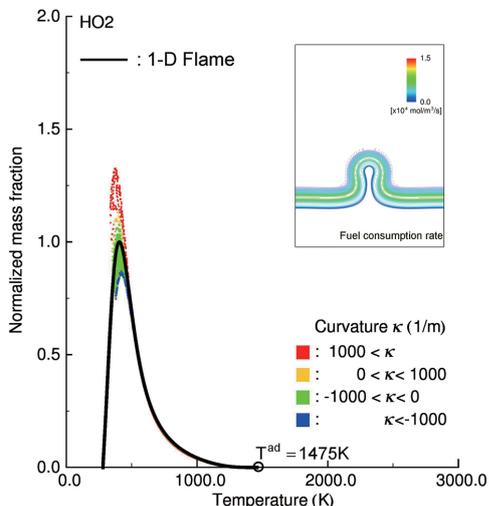


Fig. 13 HO₂ mass fraction as a function of temperature.

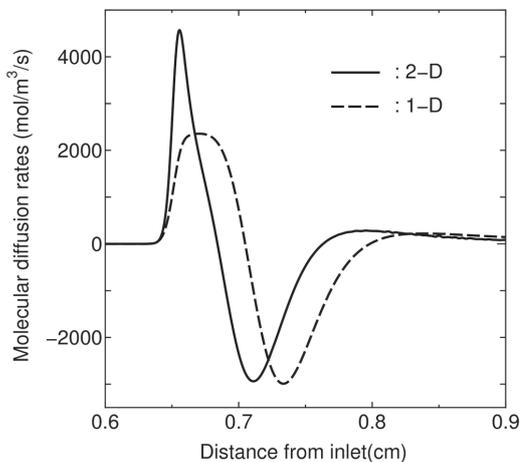


Fig. 16 Axial profiles of the supply rate of H species by the molecular diffusion process, in the conservation equation of H species, comparison of 1-D and 2-D flames.

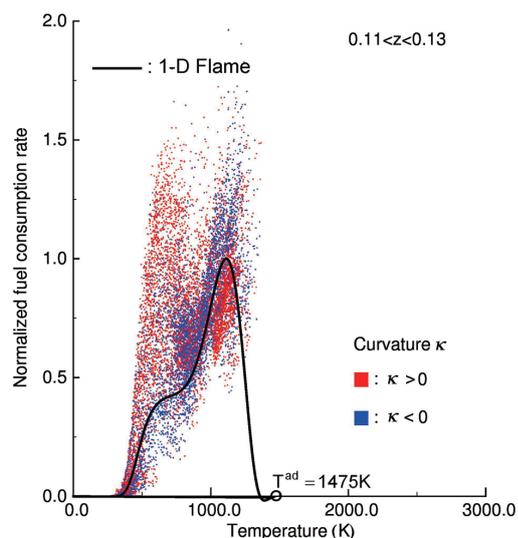


Fig.17 Increase of hydrogen consumption rate at low temperature side of flame portion where the flame is convex to burnt side. Plots are taken from premixed-mode combustor volume of mixture fraction 0.11-0.13 in the numerically reproduced lifted flame[5]. Colors of plots show the sign of the curvature, red: convex to burnt side, blue: convex to unburnt side.

炎よりも大きな値に保つ機構があるはずである。Fig.16 は計算領域中心線上での分子拡散による H の供給速度である。実線が今回議論している瞬間における分布、破線が平面 1 次元火炎における分布である。未燃側すなわち低温側において、H の分子拡散による供給が大きく加速していることが分かる。これは火炎が湾曲することにより拡散層が薄くなること、曲率をもつことにより曲率の中心に向かって周囲から H が拡散してくることが原因である。一方、火炎低温側で質量分率がピークとなる HO_2 は曲率とともに分子拡散による損失が増加し、生成速度の増加がそれを補っている。生成速度の増加は主として $\text{R7: H} + \text{O}_2 + \text{M} = \text{HO}_2 + \text{M}$ の加速によるものであり (図は省略)、これもまた H の濃度増加によりもたらされている。H と同様、その他の成分についても分子拡散による輸送は増加しているが、その中で H の供給増加が燃料消費速度増加に寄与しているということである。

5. 実在火炎における曲率効果

最後に、以上で調べられた火炎曲率に従った燃料消費速度増加が浮き上がり火炎詳細シミュレーション中の乱流過濃予混合火炎でも起こっているかどうかを調べた。Fig.17 は Fig.2 のプロットを式 (1) で定義する平均曲率の符号によって色分けした図であり、赤が正、青が負である。Fig.5 と同様、低温側で平面 1 次元火炎を上回る燃料消費速度を示す点の大部分では火炎が既燃側に凸であることが分かる。また高温側での燃料消費速度に注目すると Fig.5, Fig.17 と同様に、低温側とは逆に、曲率が負すなわち火炎が未

燃側に凸な部分で燃料消費速度が大きくなるという傾向を示している。

高温側のメカニズムについては今後の課題であること、3 次元曲面の凹凸の解析にはより注意深い取り扱いが必要であること、浮き上がり火炎中の過濃予混合火炎には燃料濃度勾配が存在するためその影響も無視できないことなど留意点はあるものの、今回の簡単なシミュレーションにおいて観察された現象が実在火炎においても起こっていると考えられる。未燃ガス塊の衝突により火炎が大きく湾曲する際の燃焼特性の変化は乱流予混合火炎を理解するための重要な現象の一つといえることができる。

6. まとめ

火炎形状の変化が水素過濃予混合火炎に与える影響を 2 次元詳細計算によって調べた。その結果、火炎曲率に従って局所の燃料消費速度が変化する過程において、素反応過程および輸送現象が果たす役割について下記のことが分かった。

- 既燃側に凸となる火炎部位の低温側においては、曲率に従って燃料消費速度が大きくなる。
- その燃料消費速度の増加は従来考えられてきた選択拡散の効果ではない。
- 燃料消費速度増加は OH 濃度増加による素反応 R4 の加速によりもたらされている。
- OH 濃度の増加は素反応 R9 の加速によりもたらされ、R9 の加速は H の分子拡散による供給の増加により維持されている。
- 火炎が変形した際の燃焼状態の変化を議論するためには、詳細反応レベルの過程まで考慮した解析が必要である。
- 今回議論した火炎変形過程は乱流予混合火炎の構造を理解する上で重要な現象の一つである。

本報で説明されたメカニズムはシミュレーションに用いる物理化学モデルに依存する可能性がある。同様のシミュレーションを別の 9 化学種 21 反応からなる詳細反応機構 [14] および CHEMKIN [9] の熱物性、輸送係数を用いて実施した結果においても、同一のメカニズムにより、火炎低温側において曲率に従って燃料消費速度が増大することが確認されていることを付記する。

本報では、水素噴流浮き上がり火炎の研究[5]に対応させて当量比で 4.48 という極端に過濃な予混合火炎を対象とした。同様の結論が理論混合比付近あるいは希薄条件においても得られるかという点については今後の課題としたい。

References

1. 吉田憲司, 高城敏美, “局所歪を伴う拡散火炎に関する研究 (第 2 報, 火炎構造と消炎現象の解析),” 日本機械学会論文集 B, 64 巻, 623 号, 2348-2356 (1998).

2. Law, C. K., Ishizuka, S. and Cho, P., "On the Opening of Premixed Bunsen Flame Tips," *Combust. Sci. Tech.* 28:89-96 (1982).
3. Strehlow, R. A., "Combustion Fundamentals," McGraw-Hill Series in Energy. McGraw-Hill, New York, p.344 (1984)
4. Gaydon, A.G. and Wolfhard, H.G., "FLAMES, Their structure, radiation and temperature," Third Edition Revised, Chapman and Hall Ltd. London, p.32 (1970).
5. Mizobuchi, Y., Tachibana, S., Shinjo, J., Ogawa, S. and Takeno, T., "A Numerical Analysis on Structure of Turbulent Hydrogen Jet Lifted Flame," *Proc. Combust. Inst.* 29: 2009-2015 (2002).
6. 溝淵泰寛, 岡秀行, "火炎詳細シミュレーションにみられる非 Flamelet 的火炎について," 日本マリンエンジニアリング学会誌, 第42巻, 第1号, 126-130 (2007).
7. Yamashita, H., Shimada, M. and Takeno, T., "A Numerical Study on Flame Stability at the Transition Point of Jet Diffusion Flames," *Proc. Combust. Inst.*, 26:27-34 (1996).
8. Bilger, R. W., "Structure of turbulent nonpremixed flames," *Proc. Combust. Inst.* 22:475-488 (1988).
9. Kee, R. J., Grcar, J. F., Smooke, M. D. and Miller, J. A., "FORTRAN program for modeling steady one dimensional flames," Sandia Report SAND85-8240 (1985).
10. Westbrook, C. K., "Hydrogen Oxidation Kinetics in Gaseous Detonations," *Combust. Sci. Tech.*, 29:67-81 (1982).
11. Chapman, S. and Cowling, T.G., "The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases," Cambridge University Press (1970).
12. JANAF Thermochemical Tables, Clearinghouse for Federal Scientific and Technical Information, Washington, DC (1965)
13. Poinso, T. J., and Lele, S.K., "Boundary Conditions for Direct Simulations of Compressible Viscous Flows," *J. Comp. Phys.* 101:104-129 (1992).
14. Saxena, P. and Williams, F.A., "Testing a small detailed chemical-kinetic mechanism for the combustion of hydrogen and carbon monoxide," <http://www.mae.ucsd.edu/~combustion/cermech/>, *Combust. Flame*, 145: 316-323 (2006).