

## 既燃ガスに進入する未燃予混合気の燃焼について Combustion of unburnt gas mixture penetrating into burnt gas

- 溝渕泰寛, JAXA/ARD, 東京都調布市深大寺東町 7-44-1, mizo@chofu.jaxa.jp
- 竹野忠夫, JAXA/ARD, 東京都調布市深大寺東町 7-44-1
- 松山新吾, JAXA/ARD, 東京都調布市深大寺東町 7-44-1
- 新城淳史, JAXA/ARD, 東京都調布市深大寺東町 7-44-1
- 小川 哲, JAXA/ARD, 東京都調布市深大寺東町 7-44-1
- Yasuhiro Mizobuchi, JAXA/ARD, 7-44-1 Jindaiji-higashimachi, Chofu, Tokyo
- Tadao Takeno, JAXA/ARD, 7-44-1 Jindaiji-higashimachi, Chofu, Tokyo
- Shingo Matsuyama, JAXA/ARD, 7-44-1 Jindaiji-higashimachi, Chofu, Tokyo
- Junji Shinjo JAXA/ARD, 7-44-1 Jindaiji-higashimachi, Chofu, Tokyo
- Satoru Ogawa JAXA/ARD, 7-44-1 Jindaiji-higashimachi, Chofu, Tokyo

The combustion of unburnt gas mixture thrown into burnt gas of premixed flame 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 in the low temperature side of the flame when the unburnt volume develops the flame curvature, and in the center of the volume after it has passed through the flame. The trend coincides with the observation about the highly turbulent rich premixed flame in a detailed numerical simulation of a hydrogen jet lifted flame, where the non-flamelet-like structure is observed.

### 1. はじめに

流体の輸送現象と化学反応が密接に干渉する燃焼流れを理解、整理するために基礎的な火炎形状の研究が実施されてきた。予混合火炎であれば平面 1 次元予混合火炎が、拡散火炎であれば対向流拡散火炎が代表的である。それらから導かれた知見は実問題においても、局所的には 1 次元火炎的な構造を仮定することにより、有効に適用されてきたところである。例えば予混合火炎のシミュレーションでは、パラメトリックな 1 次元火炎計算から作成された火炎伝播速度のテーブルを用いて計算負荷が大幅に低減され、実用機器のシミュレーションにおいて成功が収められ始めている。しかしながら実存する火炎においては様々な状況が存在し、必ずしも局所的にも 1 次元火炎的な構造があるとはいえない。著者らは詳細なシミュレーションにより水素噴流浮き上がり火炎を数値的に再現し、その内部に 1 次元火炎とは全く異なる構造を持つ過濃予混合火炎の存在を観察した<sup>1)</sup>。そこでは発熱層が燃料消費層から大きく分離し、燃料消費が分子拡散による燃料供給と全く因果関係を示さないなど、従来の火炎の概念からはかけ離れた特徴が観察された<sup>2)</sup>。本報では通常の火炎とは異なる構造が形成される原因の一つとして既燃ガスに放り込まれた未燃ガス塊周りの燃焼を取り上げ、既燃ガスに未燃ガス塊が進入する 2 次元計算を実施することにより、形成過程および形成された構造の特徴について議論する。

### 2. 水素噴流浮き上がり火炎中の乱流過濃予混合火炎

著者らは詳細な数値シミュレーションにより水素噴流浮き上がり火炎を再現することに成功した。直径 2mm のノズルから 680m/s で水素を噴射・燃焼させることによって得られる浮き上がり火炎であり、浮き上がり高さは直径の 7 倍程度である<sup>3)</sup>。図 1 は詳細シミュレーションによって得られた水素噴流浮き上がり火炎の構造を示している。水素消費速度  $10^4 \text{ mol/m}^3/\text{s}$  の等値面上に局所の燃焼モードを色で表している、赤が過濃予混合燃焼、青が希薄予混合燃焼、緑が拡散燃焼である。Flame Index この浮き上がり火炎は 3 つの要素すなわち、火炎最上流で火炎全体の安定性をコントロールしている先端火炎、火炎外側に島状に分布する拡散火炎、火炎内側で水素噴流の影響を強く受ける乱流過濃予混合火炎から

構成されていることを示した<sup>1)</sup>。3 つの火炎要素のうち内側に存在する乱流過濃予混合火炎中では通常の火炎とは異なる構造が観察された。発熱層形状が燃料消費形状とは大きく異なり、流体の渦運動が内部構造に影響を及ぼしていることが考えられる。また対流や拡散の輸送現象と燃焼反応の明確な相関も認められなかった<sup>2)</sup>。

その様な従来の火炎の概念とは燃焼状態の特徴を抽出するために、以下に示すようなデータ処理法を用いた。すなわち、火炎を図 1 に示すように幾つかの領域に分割し、その領域に含まれる体積を局所燃料濃度（ここでは mixture fraction  $z$  を用いる）によって分類する。それぞれの分類に含まれる全ての体積について、横軸を局所の温度、縦軸を燃料消費速度や化学種濃度などの燃焼に

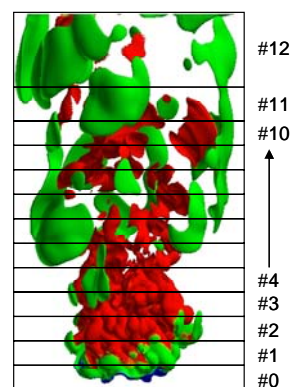


Fig. 1: Structure of a hydrogen jet lifted flame reproduced by a detailed numerical simulation. Iso-surfaces of hydrogen consumption rate at  $10^4 \text{ mol/m}^3/\text{s}$  are presented with surface colors indicating local combustion modes, red:rich premixed, blue:lean premixed, green:diffusive.

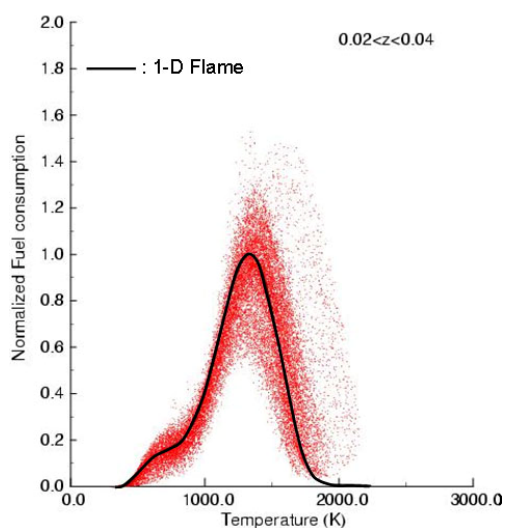


Fig. 2: Fuel consumption rate as a function of temperature in the combustion volume of  $0.02 < z < 0.04$  in the region #1 in Fig.1. The black line is the profile in the 1-D flame of  $z=0.0295$ .

関わる諸量とした scatter plot を作成し、対応する燃料濃度の層流 1次元火炎における温度と諸量の関係と比較する。この手法のメリットは、全体的な傾向を俯瞰出来ること、横軸を温度とすることで反応の差異が組成の差異に直接関連付けられることなどがあげられる。

図 2 は図 1 中領域 #1 において  $0.02 < z < 0.04$  となる体積について燃料消費速度の scatter plot を作成し、1次元火炎での分布<sup>4)</sup>と比較したものである。ただし燃料消費速度は1次元火炎における最大値で無次元化されている。領域 #1 は先端火炎の領域であり、予混合燃焼は主として理論混合比付近、 $z$  では  $0.0295$  付近で起こっている。そのため図には  $0.02 < z < 0.04$  の範囲を示している。比較に用いている層流 1次元火炎の当量比は  $1$  ( $z=0.0295$ ) である。先端火炎での予混合燃焼はほぼ層流予混合火炎での分布に沿って

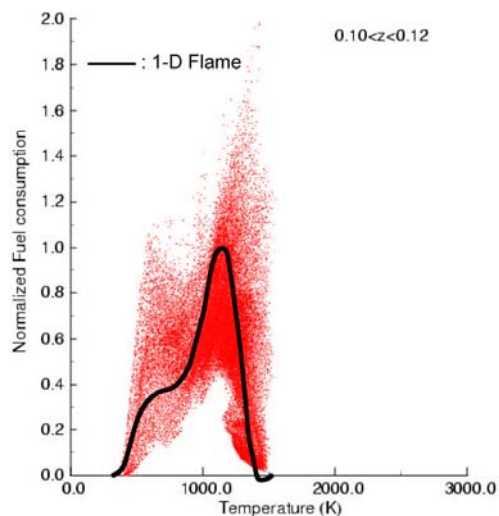


Fig. 3: Fuel consumption rate as a function of temperature in the combustion volume of  $0.10 < z < 0.12$  in the region #3 in Fig.1. The black line is the profile in the 1-D flame of  $z=0.109$ .

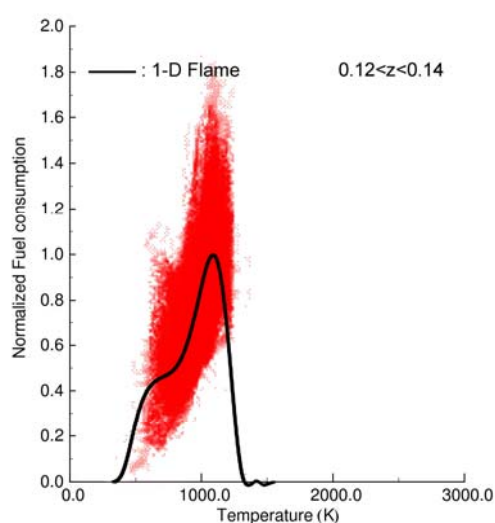


Fig. 4: Fuel consumption rate as a function of temperature in the combustion volume of  $0.12 < z < 0.14$  in the region #4 in Fig.1. The black line is the profile in the 1-D flame of  $z=0.128$ .

いることが分かる。これは先端火炎付近の予混合火炎は水素噴流の影響をそれほど受けていないことを示している。

図 3, 4 は通常の火炎と異なる構造が観察される領域 #3 および #4 での plot である。これらの領域では当量比にして  $4$  ( $z=0.109$ ) を超える極めて過濃混合気の予混合燃焼が主であり、図 3 においては  $0.10 < z < 0.12$  の範囲、図 4 においては  $0.12 < z < 0.14$  の範囲について燃料消費速度の plot を示している。図 3 においては反応帯の低温側で 1次元火炎よりも大きな燃料消費が発生していることが特徴的であり、また高温側においても大きな燃料消費が発生している。図 4 では高温側での大きな燃料消費が特に特徴的である。

図 3, 4 に見られるような特徴を示す部位を探索してみたところ、既燃ガスに周りを囲まれた未燃ガスの付近に多く観察されることが分かった。図 5 は低温領域において比較的大きな燃料消費が起こっている部位の例を示している。噴流中心を含む平面内の温度分布を色塗りで、燃料消費速度分布を等値線で示している。拡大図左を見ると円で囲まれたポケット状の領域では温度が低いにも関わらず比較的大きな燃料消費がある。一方、背景を水

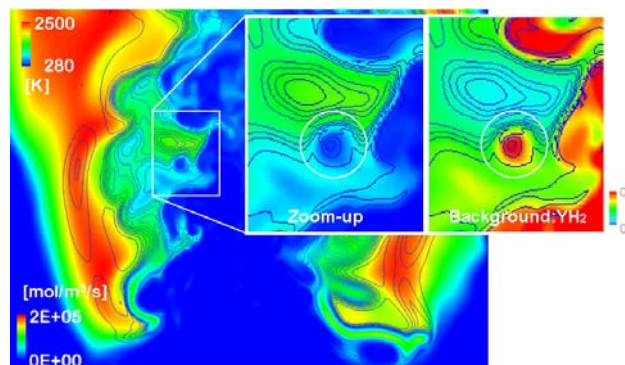


Fig. 5: Unburnt gas volume burning in burnt gas of premixed flame observed in a detailed numerical simulation of a hydrogen jet lifted flame.

素質量分率とした拡大図右を見ると同領域には未燃の水素が大量に残っている。これは未燃の水素過多混合気が既燃ガス中で燃えていることを示している、このような状況が形成される一因としては、噴流の乱れによって未燃混合気が既燃ガスに放り込まれることが考えられる。

### 3. 2次元数値実験

本報では前章で示した乱流過濃予混合火炎で観察された構造が、未燃混合気が既燃ガスに飛び込んで行く際に形成されるという仮説のもと、問題を単純化した2次元数値実験を行いその結果を解析する。

問題設定を図6に示す。まずは当量比 4.48 ( $z=0.12$ ) の水素空気過濃予混合気中に予混合火炎を定在させる。同予混合火炎の伝播速度は約 1m/s なので計算領域入り口で 1m/s の流入速度を与えて火炎を安定化させる。そこに同じ組成の未燃ガス塊を 20m/s で進入させることにより予混合火炎の形状を変化させ、その間の燃焼構造の変化を観察する。未燃混合気塊の大きさは直径 1.5mm の円形とし、その形状となるように流入条件を時間的に変化した。この大きさは図5で観察されスポット状の構造の大きさに相当し、また詳細シミュレーション結果の統計処理によって得られた積分長と同程度である。また流入速度は詳細シミュレーションでの速度変動と同程度となっている。

物理モデルおよび数値計算手法としては詳細シミュレーションに用いた手法<sup>1)</sup>と同一とした。反応モデルには表1に示す9化学種17素反応モデル<sup>4)</sup>を用いた。格子点間隔は 25  $\mu\text{m}$  とし、過濃予混合火炎の内部構造を解像している。

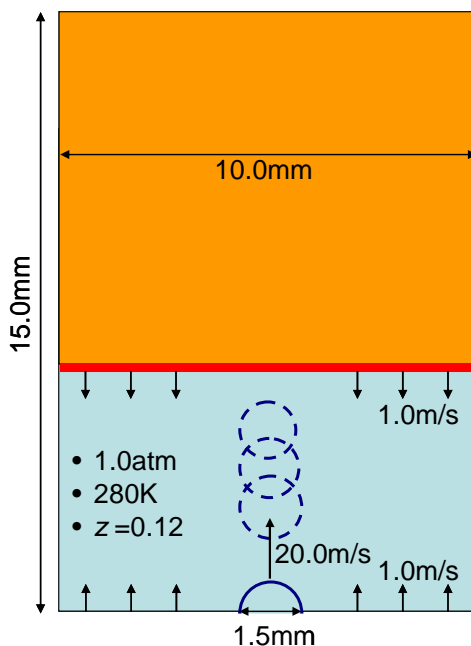


Fig. 6: Problem configurations.

### 4. 結果と考察

未燃混合気塊が予混合火炎に進入し、火炎形状を変化させていく過程を図7に示す。未燃混合気塊が進入することにより火炎は湾曲され、時刻 b) においては大きな曲率を持った火炎形状が形成されている。未燃混合気塊は予混合火炎を通過し時刻 c) においては既燃ガス中で燃焼している様子が分かる。その後、未燃混

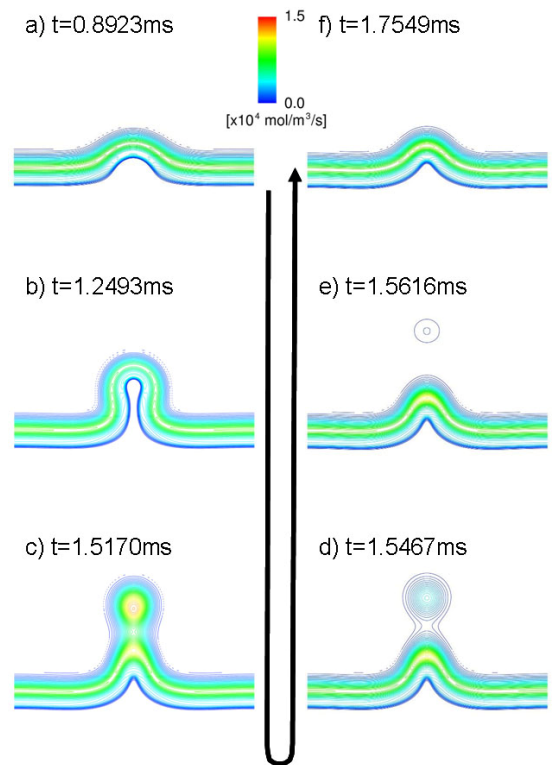


Fig. 7: Time-sequent change of flame shape. The distribution of hydrogen consumption rate at each time stage is shown.

合気塊中の酸素が全て消費され燃焼反応は停止し、予混合火炎の形状も元に戻っていく。

図8に図7における時刻 b) での温度と燃料消費速度の関係を scatter plot したものを示す。なお、ここでは全ての計算点上の値を plot している。前述の図と同様、黒線は1次元層流火炎での関係である。湾曲していない部位の plot はほぼ黒線上に分布しているため、この図から確認することは難しいが1次元火炎と同じ構

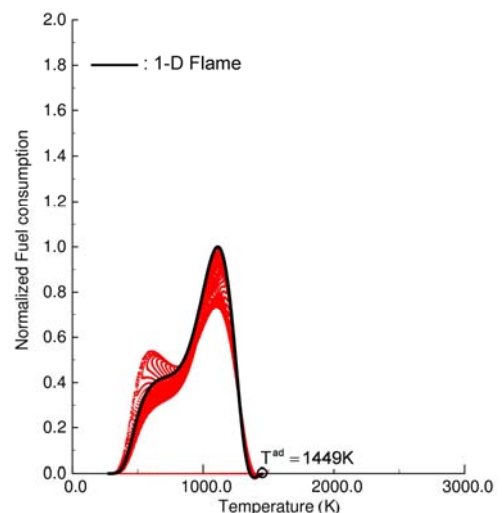


Fig. 8: Fuel consumption rate as a function of temperature at the time stage b) in Fig.7. The black line is the profile in the 1-D flame of  $z=0.12$ .

造を持っている。黒線から外れた plot が湾曲した火炎の部位に対応している。低温側 (500K 辺り) では層流 1 次元火炎よりも大きな燃料消費が生じており、未燃混合気塊が予混合火炎に進入を始め火炎形状を大きく湾曲させる時に、図 3 で観察された特徴が再現されていることがわかる。また温度分布から火炎曲率  $\kappa$  を定義し ( $\kappa = -\nabla \cdot n$ ,  $n = \text{grad}(T) / |\text{grad}(T)|$ ), 既燃ガスに凸の曲率を正とすると、曲率が正の方向に大きいほど燃料消費速度は 1 次元火炎と比較して大きくなり、負の方向に大きいほど小さくなっている。曲率が正の部位は未燃混合気塊が進入した先端付近であり、負の部位は火炎が湾曲し始める裾の部分である。

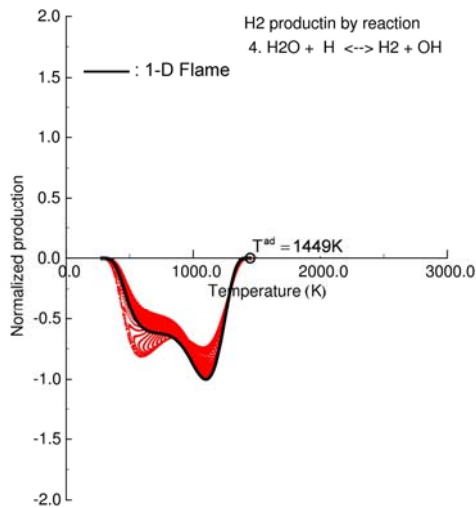


Fig. 9: H<sub>2</sub> production rate by reaction 4 as a function of temperature at the time stage b) in Fig.7. The black line is the profile in the 1-D flame of  $z=0.12$ .

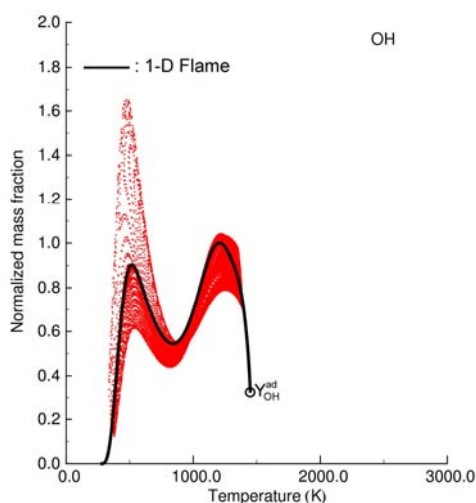


Fig. 10: OH mass fraction as a function of temperature at the time stage b) in Fig.7. The black line is the profile in the 1-D flame of  $z=0.12$ .

水素生成に関与する素反応の変化を調べると、図 9 に示すように反応 4 による水素の消費が加速されていることが分かった。反応 4 では OH との反応によって水素が消費される。OH ラジカル質量分率の scatter plot を 1 次元火炎と比較したものが図 10 であるが、燃料消費速度が増大している温度範囲で OH ラジカルが増加しており、それによって反応 4 による水素消費が加速されている。

図 11 は図 7 における時刻 c) での温度と燃料消費速度の関係の scatter plot である。図 7 c) から分かるとおり、この瞬間には未燃混合気塊の中心で非常に大きな燃料消費が発生している。scatter plot では、1 次元火炎において燃料消費速度が最大となる温度 (約 1200K) 付近において、1 次元火炎よりも大きな燃料消費速度が発生していることが分かる。この特徴は図 3 および図 4 の高温側における特徴と一致している。この瞬間における水素生成に関わる全ての素反応を調べると、素反応 2 および 4 が水素消費を加速している。それぞれの素反応による水素の生成速度の scatter plot を図 12 および 13 に示す。それぞれの素反応において 1200K 付近で 1 次元火炎を大きく上回る水素消費が起こっていることが分かる。反応 2 では O との反応により、反応 4 では OH との反応により水素が消費される。図 14, 15 に O および OH の質量分率の scatter plot を示す。いずれにおいても水素と反応するラジカルの濃度が 1 次元火炎よりも大きくなっており、それが高温部での水素消費速度増加に寄与していることが分かる。

## 5. まとめ

2 次元詳細シミュレーションにより、水素空気過濃予混合火炎に未燃混合気塊が進入する数値実験を行い、火炎形状が変化する際の火炎構造の変化を観察した。その結果、以下のことが明らかとなった。

- ・ 未燃混合気塊が予混合火炎に進入し火炎形状を湾曲させる時、反応帯低温部において 1 次元火炎よりも大きな燃料消費が発生する。
- ・ その際には、反応 4 が加速されることにより水素消費が増加しており、反応 4 の加速は OH ラジカルの増加によってもたらされている。
- ・ 未燃混合気塊が予混合火炎を通過し、既燃ガス内で燃焼する時には、燃料消費速度最大となる温度付近で燃料消費速度が増加する。
- ・ その際には、反応 2 および 4 が加速されており、それぞれの素反応の加速は、O および OH ラジカルの増加によってもたらされている。

いずれの燃料消費速度増加も局所的なラジカルの増加によってもたらされているが、その増加はおおよそ火炎曲率に比例している。しかしながら何故ラジカル濃度が増加するかは今後の検討課題である。

今回の数値実験において観察された燃料消費速度の増加の傾向は、著者らが実施した水素噴流浮き上がり火炎のシミュレーション結果中で観察された従来の火炎の概念が適用できない乱流過濃予混合火炎における観察結果に類似している。今回取り上げた、既燃ガスに飛び込んだ未燃混合気塊の燃焼が乱流予混合火炎の中で起こっている現象を理解する上で重要な過程の一つではないかと考えている。

また、今回、進入させる未燃混合気塊の大きさおよび速度を詳細シミュレーションにおける典型的な値としたが、パラメトリックに大きさおよび速度を選択し数値実験を行うことにより、様々な領域の乱流予混合火炎の挙動を観察することも可能なのではないかと考えている。

参考文献

- (1) Mizobuchi, Y. et al., "A numerical study of the structure of a turbulent hydrogen jet lifted flame," Proc. Combust. Inst. 29 (2002), pp. 2009-2015.
- (2) 溝渕, 岡, "火災詳細シミュレーションにみられる非 Flamelet 的 火災について," 日本マリンエンジニアリング学会誌 Vol.42, No.1(2007), pp.126-130.
- (3) Cheng, T. S., Wehrmeyer, J. A. and Pitz, R. W., "Simultaneous Temperature and Multispecies Measurement in a Lifted Hydrogen Diffusion Flame," Combust. Flame, 91:323-345 (1992).
- (4) Westbrook, C.K., "Hydrogen Oxidation Kinetics in Gaseous Detonations," Combust. Sci. Tech., 29:67-81 (1982).
- (5) 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).

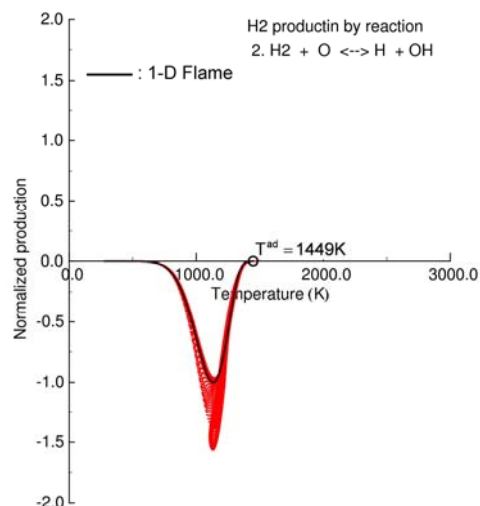


Fig. 12: Fuel consumption rate as a function of temperature at the time stage b) in Fig.7. The black line is the profile in the 1-D flame of  $z=0.12$ .

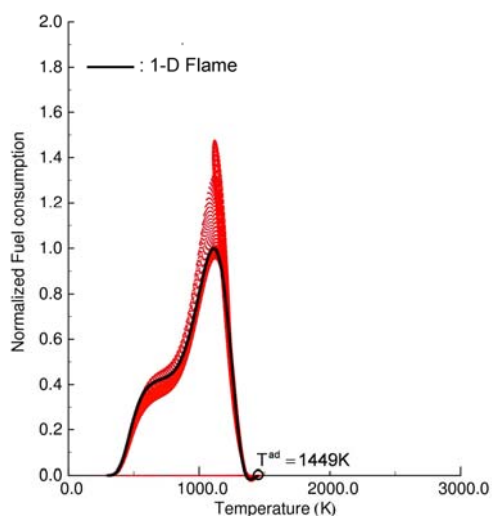


Fig. 11: Fuel consumption rate as a function of temperature at the time stage b) in Fig.7. The black line is the profile in the 1-D flame of  $z=0.12$ .

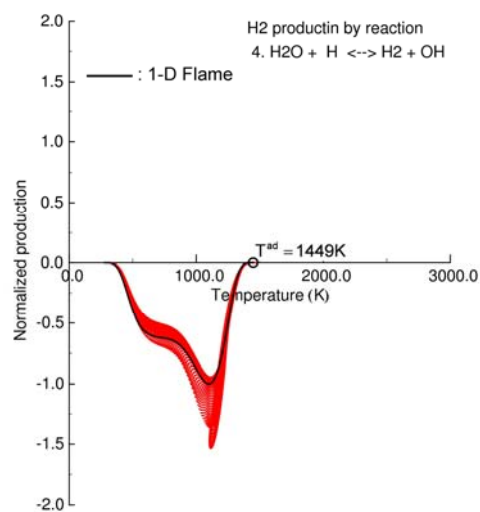


Fig. 13: Fuel consumption rate as a function of temperature at the time stage b) in Fig.7. The black line is the profile in the 1-D flame of  $z=0.12$ .

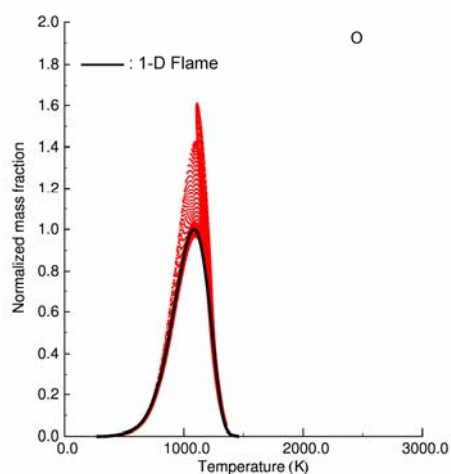


Fig. 14: Fuel consumption rate as a function of temperature at the time stage b) in Fig.7. The black line is the profile in the 1-D flame of  $z=0.12$ .

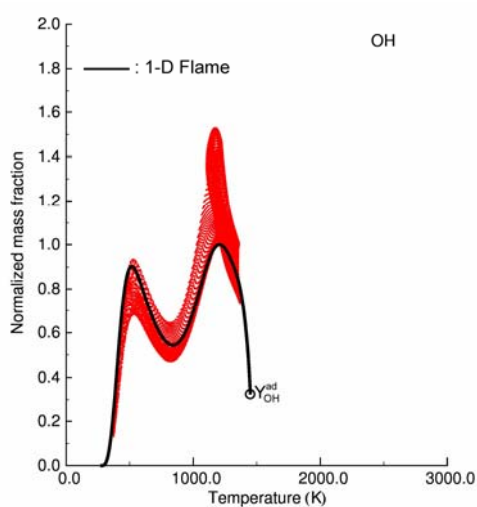


Fig. 15: OH mass fraction as a function of temperature at the time stage b) in Fig.7. The black line is the profile in the 1-D flame of  $z=0.12$ .

Table 1 : Chemical mechanism <sup>4)</sup>

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	$H_2O_2 + H = HO_2 + H_2$
R15	$O + H + M = OH + M$
R16	$O_2 + M = O + O + M$
R17	$H_2 + M = H + H + M$