

水素・空気三次元乱流予混合火炎の構造に対する乱流強度の影響

Effects of Turbulence Intensity on Structure of Three-dimensional Hydrogen-Air Turbulent Premixed Flames

店橋 護, 東工大工, 〒152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1, E-mail: mtanahas@mes.titech.ac.jp
伊藤 喜和, 東工大院, 〒152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1, E-mail: yoito@mes.titech.ac.jp
宮内 敏雄, 東工大工, 〒152-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1, E-mail: tmiyauch@mes.titech.ac.jp
Mamoru TANAHASHI, Yoshikazu ITO and Toshio MIYAUCHI
Dept. of Mechanical and Aerospace Engineering, Tokyo Institute of Technology,
2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo 152-8552, JAPAN

Direct numerical simulations of hydrogen-air turbulent premixed flames propagating in high-intensity three-dimensional homogeneous isotropic turbulence are conducted to investigate the effect of turbulence intensity on the local flame structures. Calculations are conducted for the two cases: the one corresponds to the condition on the boarder of distributed reaction zone and well-stirred reaction zone, and the other corresponds to the well-stirred reaction zone in a combustion diagram. A detailed kinetic mechanism is used to represent the hydrogen-air reaction in turbulence. Although the flame condition is classified into well-stirred reaction zone, the geometry of the region with high-heat release rate shows a thin sheet-like structure. Flame element that is convex toward the burned side with large curvature tends to show a high heat release rate for both cases. However, the correlation between the curvature and the heat release rate becomes weaker in the case of high turbulence intensity compared with that with lower intensity turbulence.

1. 緒論

実用燃焼器の開発・設計において, 数値予測を用いることは開発コストを削減するための非常に有効な手段である. 近年, さまざまな乱流燃焼モデル¹⁾⁻³⁾が提案されているが, 乱流燃焼場の詳細な計測は困難であることから, これら乱流燃焼モデルの定量的評価はほとんどなされていない. このようなことから, 実際の乱流燃焼場の詳細構造の解明が課題となっている.

乱流燃焼場において, 乱流予混合燃焼は最も基本的な燃焼形態のひとつであり, 乱流予混合火炎の構造及びその特性を解明することは, 高精度乱流燃焼モデルを構築する上で必要不可欠である. 乱流予混合火炎の特性は, 層流燃焼速度に対する乱流強度の比(u'_{rms}/S_L)及び層流火炎厚さに対する乱流場の特性長さの比(l/δ_L)を用いて分類可能であると考えられている. 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), well-stirred reaction zone 等に分類される⁴⁾⁻⁶⁾. 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 や well-stirred reaction zone 等の領域では, 局所的な火炎要素の特性は層流火炎とまったく異なっており, 特に well-stirred reaction zone の領域では, 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, この領域の火炎構造は実験的に検証されておらず, その詳細な構造は未だ明らかにされていない.

そこで本研究では, 三次元一様等方性乱流中を伝播する水素・空気予混合火炎を対象として, 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直接数値計算を行い, 高強度乱流中の予混合火炎の構造を明らかにすることを目的としている.

2. 水素・空気乱流予混合火炎の直接数値計算

本研究では, 以前の研究⁷⁾と同様に, 外力, Soret 効果, Dufour 効果, 圧力勾配拡散, 体積粘性及び放射熱流束が無視できるものと仮定して導かれる, 次のような質量, 運動量, エネルギー及び化学種の保存方程式と, 理想気体の状態方程式を基礎方程式として用いた.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla \cdot \mathbf{P}, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) &= \frac{1}{\bar{c}_v} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) \\ &\quad - \frac{1}{\bar{c}_v} \sum_i (\rho Y_i V_i c_{p,i} \nabla T) - \frac{T}{\bar{c}_v} \sum_i [R_i \nabla \cdot (\rho Y_i V_i)] \\ &\quad - \frac{1}{\bar{c}_v} \mathbf{P} : (\nabla \mathbf{u}) - \frac{1}{\bar{c}_v} \sum_i (h_i w_i) + \frac{T}{\bar{c}_v} \sum_i (R_i w_i), \quad (3) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla Y_i = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho Y_i V_i) + \frac{w_i}{\rho} \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (4)$$

$$p = \rho R^0 T \sum_i \left(\frac{Y_i}{W_i} \right), \quad (5)$$

ここで,

$$\mathbf{P} = \left[p + \frac{2}{3} \lambda (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] \mathbf{U} - \mu [(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T], \quad (6)$$

$$\bar{c}_v = \sum_i (c_{v,i} Y_i), \quad (7)$$

である.

計算は三次元一様等方性乱流中を伝播する水素・空気乱流予混合火炎を対象とし, 化学反応機構としては, H_2 , O_2 , H_2O , H , O , OH , HO_2 , H_2O_2 , N , NO_2 , NO , N_2 の 12 種類の化学種と 27 の素反応からなる詳細化学反応機構を用いた. 計算領域は以前の研究⁷⁾とは異なり, $5.0\text{mm} \times 2.5\text{mm} \times 2.5\text{mm}$ の領域を対象とし, $513 \times 128 \times 128$ の格子点を用いた. 離散化は, x 方向に 4 次精度中心差分法を, y 方向と z 方向にはスペクトル法を用いて行い, 時間積分には低記憶容量型 3 次精度 Runge-Kutta 法を用いた. 境界条件としては, x 方向の流入・流出境界条件には NSCBC を用い, y 方向と z 方向には周期境界条件を用いた. 流入混合気は, 0.1MPa , 当量比 $=1.0$, 予熱温度 700K の水素と空気の予混合気であり, 流入速度 $\mathbf{u}_m(y, z, t) = S_L + \mathbf{u}'(y, z, t)$ で流入するものとした. ここで, S_L は一次元層流予混合火炎の予備計算により求めた層流燃焼速度であり, 本条件下においては $S_L = 10.32\text{m/s}$ である. また, \mathbf{u}' は

Table 1 Numerical parameters for DNS of hydrogen-air turbulent premixed flames

	Re_λ	Re_l	l/δ_L	u'_{rms}/S_L	Da	$L_x \times L_y \times L_z$	$N_x \times N_y \times N_z$
case 1	37.4	143.6	1.69	1.70	1.09	5.0mm \times 5.0mm \times 5.0mm	257 \times 128 \times 128
case 2	37.4	143.6	0.85	3.41	0.27	5.0mm \times 2.5mm \times 2.5mm	513 \times 128 \times 128

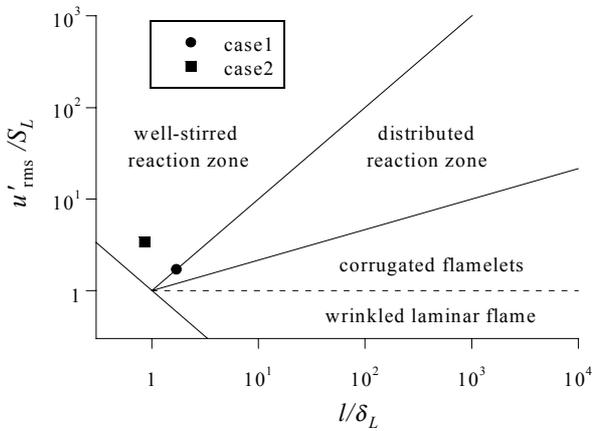


Fig. 1 Turbulent combustion diagram

十分発達した三次元一様等方性乱流の変動速度を示しており、一様等方性乱流のDNSによって求めた。その他の主要な計算条件を表1に示す。ただし、case 1は以前の研究⁷⁾で行ったDNSである。ここで、 Re_l と Re_λ はそれぞれ積分長とテイラー・マイクロスケールに基づくレイノルズ数であり、 Da は次式で定義される乱流ダムケラ数である。

$$Da = \frac{\tau_l}{\tau_F} = \left(\frac{l}{u'_{rms}} \right) \left/ \left(\frac{\delta_L}{S_L} \right) \right. \quad (8)$$

乱流燃焼ダイアグラム上の両ケースの位置を図1に示す。case 1はdistributed reaction zoneとwell-stirred reaction zoneの境界、すなわち $Da=1$ の直線上に位置し、case 2はwell-stirred reaction zoneに分類される。

3. 三次元水素・空気乱流予混合火炎の局所構造

図2と図3は、case 1およびcase 2における速度勾配テンソルの第二不変量(Q^+)と密度及び熱発生率の等値面を示している。ただし、図に示した領域はcase 1とcase 2で異なっており、case 1については5.0mm \times 5.0mm \times 5.0mm、case 2については2.5mm \times 2.5mm \times 2.5mmである。速度勾配テンソルの第二不変量 Q は以下の式で定義され、未燃予混合気のコルモゴロフ・スケール η と二乗平均変動速度を用いて無次元化されている。

$$Q = \frac{1}{2} (W_{ij}W_{ij} - S_{ij}S_{ij}) \quad (9)$$

$$Q^+ = Q \left/ \left(\frac{u'_{rms}}{\eta} \right)^2 \right. \quad (10)$$

ここで、 S_{ij} と W_{ij} はそれぞれ速度勾配テンソルの対称成分と非対称成分である。また、熱発生率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。

乱流の微細構造に関する研究から、 $Q^+ > 0$ の領域はcoherent微細渦と非常に良く対応することが明らかにされている^{8),9)}。両ケースともに未燃側には多くのcoherent微細渦が存在しており、火炎背後での急激な温度上昇による粘性の増加と膨張のため、渦構造は急激に減衰している。密度および熱発生率のいずれの等値面も、乱流運動によって著しく湾曲している。特に密度の等値面は、coherent微細渦に対して平行になるように湾曲していることがわかる。また、coherent微細渦に沿うように高熱発生率の領域が形成されており、そのスケールはcoherent微細渦のスケールとよく対応している。このように、乱流中に存在するcoherent微細渦と

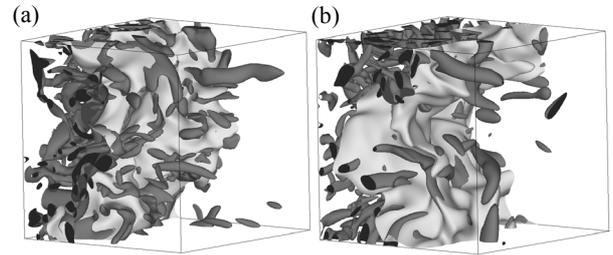


Fig. 2 Contour surfaces of second invariant with density for the case 1 (a) and the case 2 (b). (dark gray: $Q^+ = 0.003$, gray: $(\rho - \rho_b) / (\rho_u - \rho_b) = 0.50$).

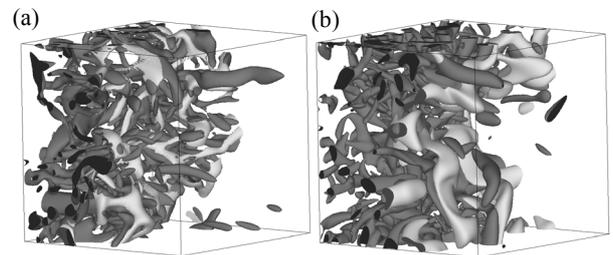


Fig. 3 Contour surfaces of second invariant with heat release rate for the case 1 (a) and the case 2 (b). (dark gray: $Q^+ = 0.003$, gray: $\Delta H^* = 1.00$).

乱流予混合火炎の火炎構造との間には密接な関係が存在することがわかる。

図4は、case 2の特徴的なx-y断面における火炎構造を示している。すべての図において、白は低い値を、黒は高い値を示しており、図に示した領域は2.5mm \times 2.5mmである。HやOなどの主要な化学種の反応速度が高い領域は、薄く連続的に分布しており、それに伴って熱発生率が高い領域も連続的に分布していることがわかる。一方、OHの反応速度が高い領域は比較的広い範囲にわたっている。また、図中ので示した様に、 HO_2 の反応速度が高い領域は熱発生率が高い領域よりも未燃側に存在し、その反応帯幅は非常に薄く、熱発生率の分布よりも滑らかである。このように、case 2では予熱帯での反応に関与する化学種の反応は主要な反応帯と分離する傾向にあり、局所火炎構造は層流火炎と異なる。しかし、熱発生率や主要な化学種の反応速度が高い領域はシート状で連続的な分布を示す。すなわち、well-stirred reaction zoneにおいても主要な火炎構造は乱流運動によって壊れることはなく、薄いシート状の構造を維持する。これは、従来予測されているwell-stirred reaction zoneにおける燃焼形態の概念とは異なっている。

4. 高強度三次元乱流予混合火炎の統計的性質

高強度乱流中を伝播する予混合火炎の性質を明らかにするために、DNS結果から火炎面を決定し、火炎要素の統計的性質について検討する。火炎面は、温度勾配が最大となる位置として以下のように定義した。

$$\left\{ \zeta(x, y, z) \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_{\max} \right\} \quad (11)$$

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5は、case 2の特徴的な断面において決定された火炎面と

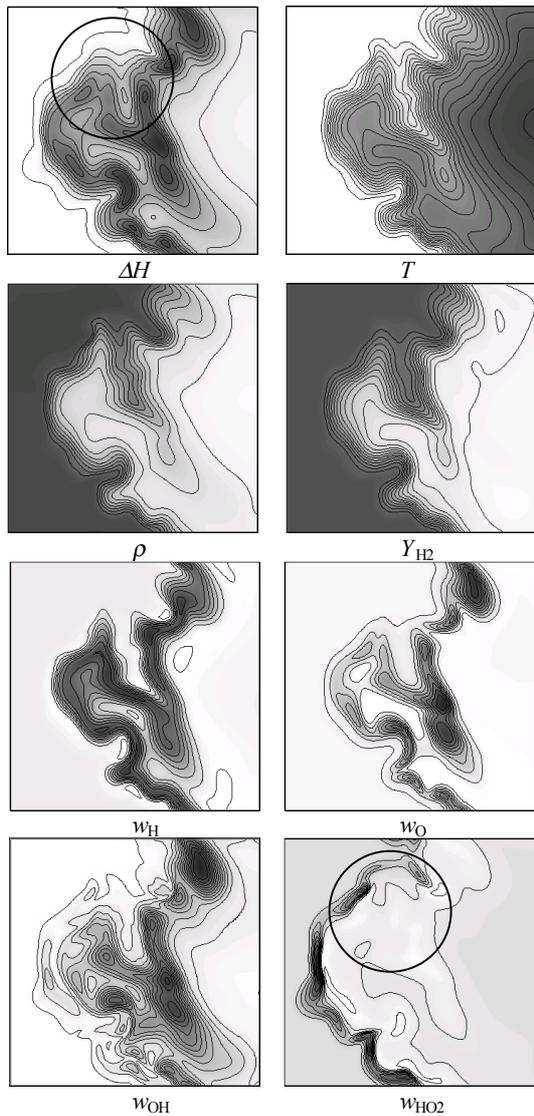


Fig. 4 Local flame structure on a typical x - y cross section for case 2. ΔH : heat release rate, T : temperature, ρ : density, w_H , w_O , w_{OH} and w_{HO_2} : reaction rate of H, O, OH and HO_2 .

温度および熱発生率分布を示している。決定された火炎面は高熱発生率の領域と比較的よく一致している。そこで、case 2 についても case 1 と同様に火炎面の統計的性質を検討し、以前の研究で得られた case 1 における火炎面の統計的性質と比較する。図 6 は case 1 と case 2 の二つの DNS 結果から抽出した火炎要素の局所熱発生率と局所火炎厚さの確率密度関数を示している。ただし、局所火炎厚さは次のように定義され、層流火炎厚さで無次元化されている。

$$\delta = \frac{T_b - T_u}{(\partial T / \partial n)_{\max}} \quad (12)$$

ここで、 T_u と T_b は火炎面から十分遠方の未燃側と既燃側の温度である。局所熱発生率の確率密度関数は case 1 では $1.0\Delta H_L$ 程度でピークを持つが、case 2 では $0.94\Delta H_L$ から $1.07\Delta H_L$ の間で平坦な分布を示している。また、局所熱発生率の最大値は case 1 では約 $1.25\Delta H_L$ であるのに対して、case 2 では約 $1.30\Delta H_L$ に増加するが、小さな熱発生率を持つ火炎要素の確率も case 2 では増加している。また、乱流強度が強くなると、火炎厚さの最頻値は $0.85\delta_L$ から $0.74\delta_L$ へと、火炎厚さの最小値は $0.62\delta_L$ から $0.50\delta_L$ へと小さくなっていく。すなわち、乱流強度が強い場合、非常に大きな温度勾配を持つ薄い火炎要素が形成されている。また、乱流強度が

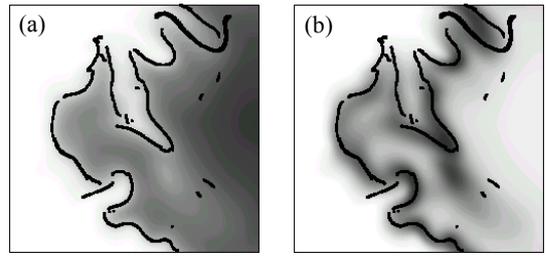


Fig. 5 Flame front defined by the local temperature gradients (solid line) with temperature (a) and heat release rate (b).

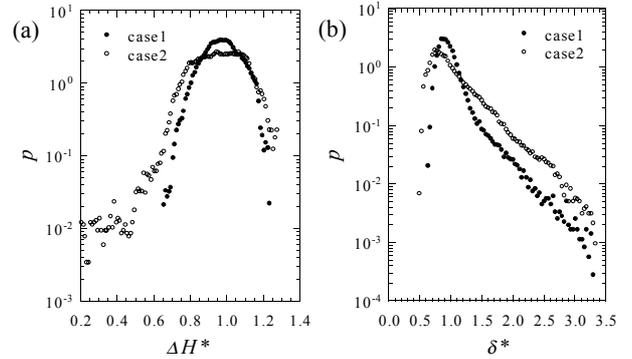


Fig. 6 Probability density functions of the local heat release rate (a) and the local flame thickness (b) for case 1 and case 2.

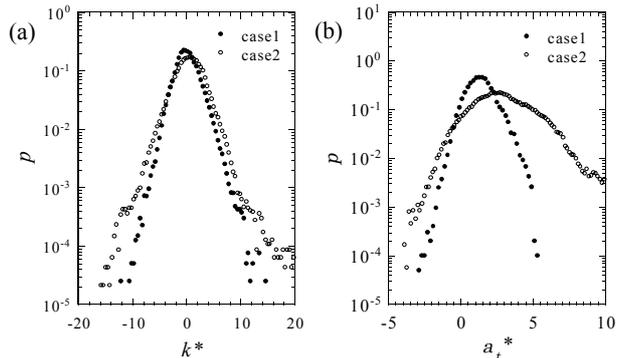


Fig. 7 Probability density functions of the flame front curvature (a) and the tangential strain rate at the flame front (b) for case 1 and case 2.

強くなると厚い火炎要素の存在確率も高くなる。

図 7 は、火炎面の曲率と火炎面に作用する接線方向歪み速度の確率密度関数を示している。火炎面の曲率は次のように定義される。

$$k = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \quad (13)$$

ここで、 R_1 と R_2 は火炎面の主曲率半径を示している。また、火炎面の曲率は既燃側に凸を正とし、層流火炎厚さを用いて無次元化されている。曲率の確率密度関数は両ケース共にほぼ $k^*=0$ でピークを持ち、ほぼ同じ形状を示している。このことから、火炎面の曲率は乱流強度にほとんど依存しないことがわかる。火炎面に作用する接線方向歪み速度は以下のように定義され、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。

$$a_t = t_1 t_1 : \nabla u + t_2 t_2 : \nabla u \quad (14)$$

ここで、 t_1 と t_2 は火炎面に平行で互いに直交する単位ベクトルである。両ケース共に火炎要素の多くは乱流運動によって接線方向に伸張を受けていることがわかる。接線方向歪み速度の最頻値は、case 1 で約 $a_t^*=1.5$ 、case 2 で約 $a_t^*=2.7$ であり、

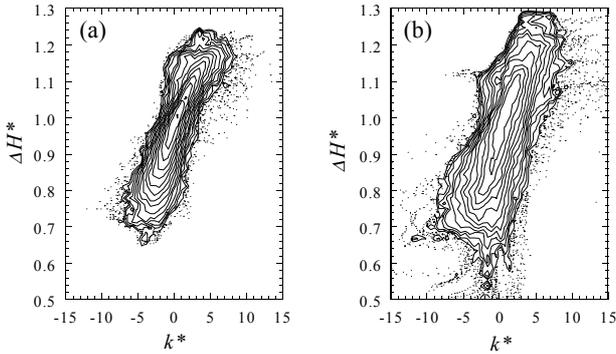


Fig. 8 Joint probability density functions of the curvature and the local heat release rate for the case 1 (a) and the case 2 (b).

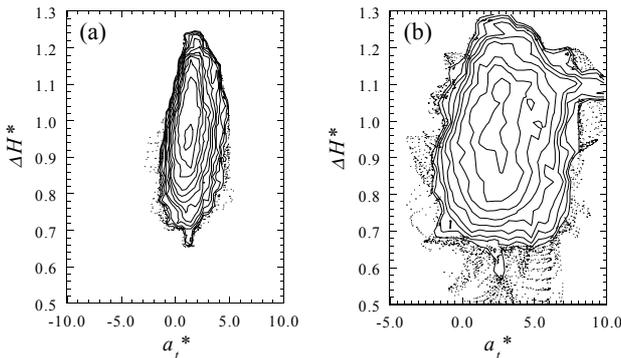


Fig. 9 Joint probability density functions of the tangential strain rate and the local heat release rate for the case 1 (a) and the case 2 (b).

乱流強度が強くなると火炎要素はより強い伸張を受けるようになるが、圧縮を受ける火炎要素の存在確率も僅かに高くなる。

図8は、火炎面の曲率と局所熱発生率の結合確率密度関数を示している。両ケース共に火炎面の曲率と局所熱発生率の間には明確な相関が存在し、既燃側に凸の火炎要素で局所熱発生率は高くなり、逆に未燃側に凸の火炎要素で低くなる傾向にある。ただし、乱流強度が強くなるとその相関は弱くなる。図9は、接線方向歪み速度と局所熱発生率の結合確率密度関数を示している。case 1では、接線方向歪み速度と局所熱発生率の間にも弱い相関が存在し、接線方向歪み速度の増加と共に局所熱発生率は増加するが、case 2では相関はほとんどない。

図10は各火炎要素における第二不変量の正負によって条件付けされた局所熱発生率の確率密度関数を示している。 $Q > 0$ の領域は乱流中の coherent 微細渦に対応し、 $Q < 0$ の領域は歪み速度が大きく、エネルギー散逸が支配的な領域に対応している。case 1では、局所熱発生率の最頻値は第二不変量の符号によって明らかに異なり、 $Q > 0$ では約 $1.1\Delta H_L$ 、 $Q < 0$ では約 $0.9\Delta H_L$ である。すなわち、散逸が支配的な領域で熱発生率は低下する。また、 $Q > 0$ と $Q < 0$ の場合におけるそれぞれの確率密度関数の形状はほぼ一致している。一方 case 2では、熱発生率が小さいところでは第二不変量の正負によって確率密度関数の分布はほとんど変わらないが、 $1.0\Delta H_L$ 付近では、 $Q > 0$ の場合には明確なピークを示すのに対して、 $Q < 0$ の場合は平坦な分布を示す。すなわち、 $Q < 0$ の領域では $0.8 \sim 1.0\Delta H_L$ 程度の熱発生率を持つ火炎要素の存在確率がほぼ等しいが、 $Q > 0$ の領域では $1.1\Delta H_L$ 程度の大きな熱発生率を示す火炎要素の存在確率が高く、 $Q > 0$ の領域で熱発生率が高くなる傾向は case 2でも変化しない。

5. 結論

本研究では、高強度乱流中における乱流予混合火炎の詳細

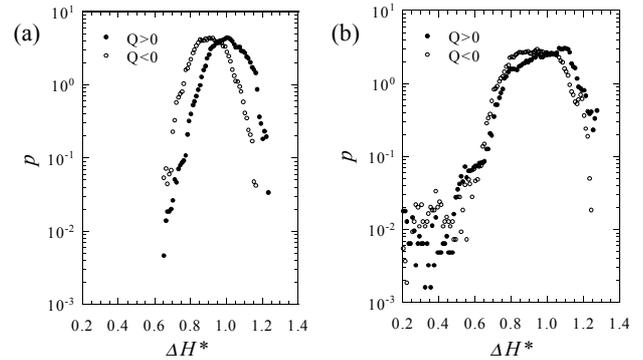


Fig. 10 Probability density functions of the local heat release rate for the case 1 (a) and the case 2 (b) conditioned with the sign of second invariant at the flame front.

な火炎構造を明らかにするために、三次元一様等方性乱流中を伝播する水素・空気乱流予混合火炎の直接数値計算を行い、以下のような結論を得た。

1. well-stirred reaction zone の領域に分類される乱流予混合火炎であっても、熱発生率やそれに関する主要な化学種の反応速度が高い領域はシート状で連続的な分布を示している。これは、従来の well-stirred reaction zone における燃焼形態の概念とは異なっている。
2. 乱流強度が強くなると局所熱発生率の確率密度関数は明確なピークを持たなくなり、 $1.0\Delta H_L$ 付近で平坦な分布を示す。また、乱流強度が強いほど局所火炎厚さの最頻値は小さくなる。
3. 火炎面の曲率と局所熱発生率の間には明確な相関があり、既燃側に凸の大きな曲率を持つ火炎要素ほど熱発生率は高くなるが、乱流強度が強くなるとその相関は弱くなる。また、接線方向歪み速度と局所熱発生率の間にも弱い相関が存在し、接線方向歪み速度の増加とともに局所熱発生率は増加するが、乱流強度が強くなると明確な相関は存在しなくなる。
4. 乱流中では、剛体回転が支配的な領域で熱発生率が大きくなる傾向にあり、well-stirred reaction zone の領域においてもその傾向は依然として存在する。

謝辞：本研究の一部は科学研究費基盤研究（A）及び開放的融合研究「乱流制御による新機能熱流体システムの創出」により行われた。また DNS を行うにあたり、東京大学情報基盤センターの多大なご協力を頂いた。ここに記して謝意を表す。

参考文献

- (1) O. Colin, F. Ducros, D. Veynante and T. Poinso: *Physics of Fluids*, 12 (2000), pp.1843-1863
- (2) Jaber, F. A., Colucci, P. J., James, S., Givi, P., and Pope, S. B.: *J. Fluid Mech.*, 401 (1999), pp.85-121
- (3) N. Peters, H. Wenzel and F. A. Williams: *Proc. Combust. Inst.*, vol.28 (2000), pp.235-243
- (4) F. A. Williams: *Combustion Theory*, 2nd Ed, Benjamin Cummings, (1985).
- (5) N. Peters, *Lect. Notes Eng.*, 40 (1989), pp.242-256.
- (6) N. Peters, *J. Fluid Mech.*, 384 (1999), pp.107-132.
- (7) Tanahashi, M., Fujimura, M. and Miyauchi, T.: *Proc. Combust. Inst.*, vol.28 (2000), pp.529-535
- (8) Tanahashi, M., Miyauchi, T. and Ikeda, J.: *Proc. 11th Symp. Turbulent Shear Flows*, 1(1997), pp.4-17
- (9) Tanahashi, M., Miyauchi, T. and Matsuoka, K.: *Turbulence, Heat and Mass Transfer*, 2(1997), p.461, Delft University Press.