






執行期間：2000 年 8 月 1 日至 2001 年 7 月 31 日

本成果報告包括以下應繳交之附件：

- 赴國外出差或研習心得報告一份
- 赴大陸地區出差或研習心得報告一份
- 出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份
- 國際合作研究計畫國外研究報告書一份

中華民國九十年八月

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫成果報告

延展率、曲率及物種間的擴散對預混本生火焰的影響

計畫類別：☒個別型計畫 ☐整合型計畫

計畫編號：NSC 89-2212-E-002-139-

執行期間：2000年8月1日至2001年7月31日

計畫主持人：馬小康 教授

執行單位：國立臺灣大學機械工程學系暨研究所

中華民國九十年八月

摘 要

一般火焰尺寸的估算常會用到可燃氣的性質，但分析指出以未燃溫度（或燃氣溫度）來計算會過度低估（或高估）其值，所以此兩種溫度並不適於描述火焰特性。如果採用縮減反應機構的觀點，以可燃氣開始發生化學反應的內層溫度作為描述火焰特性的基準溫度，除了可降低燃燒計算上的誤差外，對細微、不易量測的火焰結構變化情形亦可深入瞭解。但時至今日，有關內層溫度方面的研究，合理而適切的推論，目前尚付之闕如。

本文主要是探討預混碳氫火焰，火焰速度是採用精簡的理論式來進行模擬。壓力、溫度以及惰性氣體等效應對火焰速度的影響，將會以理論式中的模擬參數來加以描述：一為內層溫度，以貧極限作為傳播機構的終點，外插至速度為零並視此時的火焰溫度為反應是否能持續的基準溫度，理論上它扮演著描述壓力效應的參數。另一為能量參數，理想值是以層流火焰速度作為模擬對象，此參數可用於描述火焰速度因預熱或熱損失等溫度效應所導致的變化。至於惰性氣體，則從貧極限和減少氧氣劑量來進行討論。此外，實驗將針對本生式火焰，觀測回火、吹熄等現象，在惰性氣體與流場的改變下，分析火焰錐結構和穩定性的變化情形。本研究將引用大量速度的文獻資料，嘗試以內層溫度、能量參數來描述各種燃燒狀況下的火焰特性和傳播行為。

另外，以燃燒速度與絕熱火焰溫度間的變化來決定燃燒系統的活化能溫度，此溫度可應用於反應快慢的討論上，對於研究火焰焰面的起皺、破碎等方面是相當的重要。至此，整個理論模式將以較少的參數、精簡的形式來預測預混碳氫火焰，而火焰行為的分析是藉由巨觀、可量測的傳播速度，適當的決定內層溫度和活化能溫度，以瞭解微觀的火焰尺寸與反應快慢的變化情形。

ABSTRACT

The flame thickness is usually calculated by the properties of the combustible gases. Past analysis has shown that estimated value by unburnt or burnt temperature often leads to under-estimation or over-estimation. In other words, those temperatures are not well suited in describing gas property. Adopting the reduced reaction mechanism, if we regard the inner layer temperature of the combustible gases as it's beginning of chemical reaction, it could be helpful not only in reducing calculation inaccuracy but also in deeper understanding flame structure. However, until the moment, there are limited amount of studies concerning inner layer temperature.

This report mainly discusses the behavior of the premixed hydrocarbon flame. Simulation of the propagation velocity is undertaken by simple theoretical formula. Two simulation parameters of the formula, inner layer temperature and energy parameter, that are used to describe effects of the pressure, temperature, and inert gas to propagation velocity. The inner layer temperature is determined by velocity vanish, where flame temperature regards as standard temperature of beginning of chemical reaction and acts as the pressure effect. The energy parameter acts as the temperature effect (such as preheat the combustible mixtures, heat loss...etc.), the favorite value simulated by the laminar flame speed. Inert gas studies with lean limit and reduced oxygen. In the experimental works, the Bunsen flame phenomena can be observed like as flashback, stability, and blowoff under different aerodynamic condition and inert gas. A large amount of available velocity data will be used for calculating flame properties and propagation, which could be expressed well by inner layer temperature and energy parameter in the predictions.

In addition, the activation energy temperature is determined by the variations of burning velocity and adiabatic flame temperature, which could be used in chemical reaction discussion and is of great importance to the study of wrinkled (or corrugated) flame in premixed combustion. In all, the whole theoretical model, at less number of parameters and in simpler forms, predicts burning velocity and flame behaviors by inner layer temperature and activation energy temperature.

目 錄

中文摘要.....	i
英文摘要.....	ii
目 錄.....	iii
表目錄.....	vii
圖目錄.....	viii
符號表.....	xv
章節	頁碼
第一章 導 論.....	1
1.1 文獻回顧.....	2
1.1.1 氣體的熱力性質.....	2
1.1.2 氣體的傳輸性質.....	4
1.1.3 縮減反應機構.....	7
1.1.4 火焰特徵溫度.....	10
1.1.5 層流火焰速度.....	12
1.1.6 可燃極限.....	15
1.1.7 延展對火焰傳播的影響.....	18
1.1.8 火焰熄滅現象.....	23
1.2 研究動機與目的.....	27
1.3 研究方法簡述.....	28

第二章 氣體性質的計算.....	29
2.1 理論背景.....	29
2.2 熱力性質.....	30
2.3 傳輸性質.....	33
2.4 無因次參數- Le.....	36
第三章 火焰行為的分析.....	41
3.1 理論背景.....	41
3.2 火焰的特徵溫度.....	42
3.2.1 絕熱火焰溫度.....	43
3.2.2 活化能溫度.....	44
3.2.3 內層溫度.....	45
3.3 火焰結構.....	48
3.4 層流火焰速度.....	51
3.5 火焰的傳播行為.....	61
3.5.1 延展對火焰速度的影響.....	61
3.5.2 壓力對火焰速度的影響.....	73
3.5.3 溫度對火焰速度的影響.....	73
3.5.4 惰性氣體對火焰速度的影響.....	75
第四章 實驗設備與方法.....	77
4.1 實驗動機與目的.....	77
4.2 實驗裝置.....	78
4.2.1 燃燒器系統.....	78
4.2.2 氣體輸送系統.....	79

4.2.3 其他設備.....	79
4.3 操作條件.....	80
4.4 誤差修正.....	81
4.4.1 火焰溫度.....	81
4.4.2 氣體流量.....	81
4.5 實驗原理與方法.....	82
4.5.1 觀測不同燃料的差異.....	82
4.5.2 觀測稀釋氣體的影響.....	83
4.5.3 流場的觀測.....	85
4.5.4 火焰吹熄的觀測.....	87
4.5.5 火焰穩定性的觀察.....	88
4.5.6 火焰溫度的量測.....	90
4.5.7 火焰錐尺寸的量測	90
4.6 綜合討論.....	91
第五章 結果與討論.....	95
5.1 探討主題.....	95
5.2 無因次參數- Le	96
5.3 絕熱火焰溫度.....	98
5.4 燃燒速度.....	100
5.4.1 可燃極限.....	100
5.4.2 層流火焰速度.....	101
5.4.3 壓力對火焰速度的影響.....	103
5.4.4 溫度對火焰速度的影響.....	105

5.4.5 惰性氣體對火焰速度的影響.....	108
5.5 火焰結構.....	110
5.5.1 內層溫度.....	111
5.5.2 預熱厚度.....	111
5.5.3 火焰厚度.....	114
5.5.4 無因次參數- Ze	116
5.6 火焰熄滅.....	117
5.6.1 無因次參數- Le 的影響.....	118
5.6.2 應變率的影響.....	119
5.6.3 曲率的影響.....	119
5.6.4 優先擴散效應.....	120
5.6.5 活化能溫度.....	121
5.7 綜合討論.....	125
第六章 結 論.....	131
6.1 總結.....	131
6.2 未來展望.....	134
參考文獻.....	135
附表.....	147
附圖.....	153
附錄.....	247

表目錄

表號	頁碼
1	可燃氣的燃燒特性.....147
2	氣體擴散性、延展及熱損失等效應對預混火焰的影響.....148
3	氣體傳輸性質.....149
4	不同稀釋氣體下路易士數的極值.....150
5	火焰特性的模擬結果.....151
6	火焰傳播速度的模擬結果.....152

圖目錄

圖號	頁碼
1-1	探討壓力、溫度以及惰性氣體對火焰行為的影響.....153
1-2	氣體之定壓比熱 C_p 與溫度間的變化.....154
1-3	氣體之生成熱 ΔH_f^0 與溫度間的變化.....155
1-4	氣體之平衡常數 $\text{Log}(K_f)$ 與溫度間的變化.....156
1-5	研究流程.....157
2-1	碳氫燃料的熱傳導與溫度間的變化.....158
2-2	不同氣體的質量擴散性與溫度間的變化.....159
2-3	碳氫燃料在不同氣體的稀釋下分子碰撞直徑與分子量間的變化.....160
2-4	碳氫燃料在不同氣體的稀釋下平均動能與分子量間的變化..161
3-1	火焰結構示意圖(Peters & Williams, 1987; Götting, 1992)...162
3-2	漸近分析火焰結構與傳播行為.....163
3-3	不同燃料之內層溫度與壓力間的變化(圖上符號: Götting, 1992; Müller, 1997).....164
3-4	解析火焰傳播的示意圖.....165
3-5	氫氣-空氣火焰的層流火焰速度計算值與實驗值 (Law, 1994; Glassman, 1996) 之比較.....166
3-6	甲烷-空氣火焰的層流火焰速度計算值與實驗值 (Law, 1986, 1994; Tseng, 1993; Vagelopoulos, 1998) 之比較.....167

3-7	乙炔-空氣火焰的層流火焰速度計算值與實驗值 (Law, 1994; Glassman, 1996) 之比較.....	168
3-8	乙烯-空氣火焰的層流火焰速度計算值與實驗值 (Tseng, 1993; Law, 1994) 之比較.....	169
3-9	乙烷-空氣火焰的層流火焰速度計算值與實驗值 (Tseng, 1993; Law, 1994; Vagelopoulos, 1998) 之比較.....	170
3-10	丙烷-空氣火焰的層流火焰速度計算值與實驗值 (Law, 1986; Tseng, 1993; Vagelopoulos, 1998) 之比較.....	171
3-11	甲烷-空氣火焰的 Ma 計算值與實驗值 (Searby, 1990; Taylor, 1991; Tseng, 1993) 之比較.....	172
3-12	乙烯-空氣火焰的 Ma 計算值與實驗值 (Searby, 1990; Taylor, 1991; Tseng, 1993) 之比較.....	173
3-13	乙烷-空氣火焰的 Ma 計算值與實驗值 (Taylor, 1991; Tseng, 1993) 之比較.....	174
3-14	丙烷-空氣火焰的 Ma 計算值與實驗值 (Searby, 1990; Taylor, 1991; Tseng, 1993) 之比較.....	175
4-1	實驗設備佈置圖.....	176
4-2	比較氫氣、丙烷-空氣火焰結構的差異.....	177
4-3	甲烷在不同氣體稀釋下比較火焰結構的變化.....	178
4-4	丙烷在不同氣體稀釋下比較火焰結構的變化.....	179
4-5	甲烷在不同管徑流速下比較火焰結構的變化.....	180
4-6	丙烷在不同管徑流速下比較火焰結構的變化.....	181
4-7	甲烷、丙烷在不同氣體稀釋下比較熄滅當量值與最小流速間的變化.....	182
4-8	甲烷、丙烷在不同氣體稀釋下比較熄滅之 Le 值的變化.....	183
4-9	觀測本生式火焰被吹離管口甚至熄滅的裝置.....	184

4-10	以氮氣、氬氣吹離丙烷火焰比較所需的流量.....	185
4-11	丙烷在不同氣體稀釋下觀察火焰的吹離行為.....	186
4-12	甲烷、丙烷在不同氣體稀釋下比較吹熄火焰最小流速的變化.....	187
4-13	觀察本生式明亮火焰錐的發展情形.....	188
4-14	甲烷在不同管徑、不同氣體稀釋下比較火焰形態與當量值間的變化.....	189
4-15	甲烷在不同管徑、不同氣體稀釋下比較平均流速與當量值間的變化.....	190
4-16	丙烷在不同管徑、不同氣體稀釋下比較火焰形態與當量值間的變化.....	191
4-17	丙烷在不同管徑、不同氣體稀釋下比較平均流速與當量值間的變化.....	192
4-18	標註本生式火焰錐尺寸.....	193
4-19	丙烷可燃氣在管徑為 1.8 公分時比較火焰溫度與當量值間的變化.....	194
4-20	丙烷可燃氣在管徑為 3.0 公分時比較火焰溫度與當量值間的變化.....	195
4-21	甲烷在不同管徑、不同氣體稀釋下比較火焰錐高度與當量值間的變化.....	196
4-22	丙烷在不同管徑、不同氣體稀釋下比較火焰錐高度與當量值間的變化.....	197
5-1	可燃氣當量值為 1.0 時比較 Le 值與稀釋氣體種類、氧化劑組成間的變化.....	198
5-2	氧化劑組成仿空氣時比較 Le 值與稀釋氣體種類、當量值間的變化.....	199
5-3	可燃氣當量值為 1.0 時比較 Le 值與燃料種類、氧化劑組成間的	

變化.....	200
5-4 可燃氣當量值為 1.0 時比較絕熱火焰溫度與稀釋氣體種類、氧化劑組成間的變化.....	201
5-5 可燃氣當量值為 1.0 時比較絕熱火焰溫度與燃料種類、氧化劑組成間的變化.....	202
5-6 丙烷在固定氣體的稀釋下比較絕熱火焰溫度與當量值、氧化劑組成間的變化.....	203
5-7 燃料在氮氣的稀釋下比較絕熱火焰溫度與當量值、氧化劑組成間的變化.....	204
5-8 燃料在氬氣的稀釋下比較絕熱火焰溫度與當量值、氧化劑組成間的變化.....	205
5-9 燃料在二氧化碳的稀釋下比較絕熱火焰溫度與當量值、氧化劑組成間的變化.....	206
5-10 氫氣-空氣火焰在考量可燃極限下模擬層流火焰速度 (圖上符號: Law, 1994; Glassman, 1996).....	207
5-11 甲烷-空氣火焰在考量可燃極限下模擬層流火焰速度 (圖上符號: Law, 1994; Glassman, 1996; Vagelopoulos, 1998).....	208
5-12 乙炔-空氣火焰在考量可燃極限下模擬層流火焰速度 (圖上符號: Law, 1994; Glassman, 1996).....	209
5-13 乙烯-空氣火焰在考量可燃極限下模擬層流火焰速度 (圖上符號: Law, 1994; Glassman, 1996).....	210
5-14 乙烷-空氣火焰在考量可燃極限下模擬層流火焰速度 (圖上符號: Law, 1994; Glassman, 1996; Vagelopoulos, 1998).....	211
5-15 丙烷-空氣火焰在考量可燃極限下模擬層流火焰速度 (圖上符號: Law, 1994; Glassman, 1996; Vagelopoulos, 1998).....	212
5-16 甲烷-空氣火焰在不同壓力作用下比較傳播速度與當量值間的變化(圖上符號: Egolfopoulos & Law, 1990).....	213
5-17 甲烷-空氣火焰在不同壓力作用下比較活化能的預測結果 (圖上	

符號 :Egolfopoulos & Law, 1990).....	214
5-18 甲烷-空氣火焰在不同當量值下比較質量燃燒率與壓力間的變化(圖上符號:Egolfopoulos & Law, 1990).....	215
5-19 當量值為 1.0 的碳氫-空氣火焰比較質量燃燒率與壓力間的變化(圖上符號:Egolfopoulos & Law, 1990; Glassman, 1996).....	216
5-20 當量值為 1.0 的碳氫-空氣火焰比較傳播速度與壓力間的變化(圖上符號:Egolfopoulos & Law, 1990; Glassman, 1996).....	217
5-21 碳氫火焰在不同預熱溫度下比較傳播速度與氧氣劑量間的變化(圖上符號:Dugger & Graab, 1953).....	218
5-22 當量值為 1.0 的碳氫-空氣火焰在定壓下比較燃燒速度與未燃溫度間的變化(圖上符號:Dugger, 1955; Kanury, 1975)	219
5-23 當量值為 1.0 的碳氫-空氣火焰在定壓下比較能量參數 E 與未燃溫度間的變化(圖上符號:Dugger, 1955; Kanury, 1975)	220
5-24 火焰在定壓下比較燃燒速度與火焰溫度間的變化(圖上符號:Bartholome (1949); Kanury, 1975)	221
5-25 當量值為 1.0 的火焰在定壓下比較能量參數 E 與火焰溫度間的變化(圖上符號:Bartholome (1949); Kanury, 1975)	222
5-26 甲烷在不同氣體稀釋下比較火焰傳播速度與燃料劑量間的關係(圖上符號:Clingman, 1953)	223
5-27 甲烷-氧氣-氮氣火焰在不同氮氣劑量下比較傳播速度與當量值間的變化(圖上符號:Egolfopoulos & Law, 1990)	224
5-28 當量值為 1.0 的甲烷-氧氣-氮氣火焰在不同氮氣劑量下比較質量燃燒率與壓力間的變化(圖上符號:Egolfopoulos & Law, 1990)	225
5-29 當量值為 1.0 的甲烷-氧氣-氮氣火焰在不同氮氣劑量下比較傳播速度與壓力間的變化(圖上符號:Egolfopoulos & Law, 1990)	226
5-30 氫氣在不同氣體稀釋下比較傳播速度與氧氣劑量間的變化(圖	

上符號：Morgan & Kane, 1953)	227
5-31 甲烷在不同氣體稀釋下比較傳播速度與氧氣劑量間的變化 (圖上符號：Morgan & Kane, 1953)	228
5-32 乙炔在不同氣體稀釋下比較傳播速度與氧氣劑量間的變化 (圖上符號：Morgan & Kane, 1953)	229
5-33 丙烷在不同氣體稀釋下比較傳播速度與氧氣劑量間的變化 (圖上符號：Morgan & Kane, 1953)	230
5-34 比較不同燃料之預熱區厚度與當量值間的變化	231
5-35 當量值為 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰比較預熱區厚度與壓力間的變化	232
5-36 當量值為 1.0 的甲烷火焰觀察預熱區厚度受稀釋氣體劑量的影響	233
5-37 比較不同燃料之火焰厚度與當量值間的變化	234
5-38 當量值為 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰比較火焰厚度與壓力間的變化	235
5-39 當量值為 1.0 的甲烷火焰觀察火焰厚度受稀釋氣體劑量的影響	236
5-40 比較不同燃料之 Ze 值與當量值間的變化	237
5-41 當量值為 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰比較 Ze 值與壓力間的變化	238
5-42 當量值為 1.0 的甲烷火焰觀察 Ze 值受稀釋氣體劑量的影響	239
5-43 流體與擴散效應在不同火焰前緣的作用情形 (Law & Ma, 2001)	240
5-44 預混燃燒相圖 (Ma & Law, 1997)	241
5-45 當量值為 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰比較活化能溫度與壓力間的變化	242
5-46 當量值為 1.0 的甲烷火焰觀察活化能溫度受稀釋氣體劑量的影	

響.....	243
5-47 比較不同燃料之 Da 值與當量值間的變化.....	244
5-48 當量值為 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰比較 Da 值與壓力間的變化.....	245
5-49 當量值為 1.0 的甲烷火焰觀察 Da 值受稀釋氣體劑量的影響.....	246

符號表

a_i	火焰溫度的模擬常數， $i=0,1,2,3,4$
A	火焰面積 [cm^2]
AIT	自燃溫度 [K]
b	火焰速度的模擬變數 [bar]
B	反應率係數 k_i 的常數
c	火焰速度的模擬變數 [K]
C	反應率通式的常數項
C_p	定壓比熱 [J/mol K]
d	燃燒器管徑 [cm]
D	質量擴散性 [cm^2/s]
Da	丹可數 (Damköhler Number)， $\alpha / (S_L^0)^2 / \tau_c$
dc	氣體傳輸性質與溫度關係的指數項次
d_T	熄滅距離 [mm]
e	火焰速度的模擬變數 [K]
E	火焰燃燒速度理論式中的能量參數 [KJ/mol]
E_a	活化能 [KJ/mol]
f	火焰速度的模擬變數 [cm/s]
F	Ma 解析式中的關鍵變數
Fr	福祿數 (Froude Number)， $(S_L^0)^2 / \alpha / g$

g	重力加速度, 981 [cm/s ²]
G	Ka_{max} 解析式中的關鍵變數
h	無因次的火焰熱損失, $h = (l/2\beta) \cdot Pr^2 \cdot \lambda \cdot (S_L^0/\nu)^2$
k	波茲曼常數, 1.38×10^{-23} [J/K]
k_I, k_{II}, k_{III}	三步驟反應機構的反應率係數
k_i	反應率係數
K	火焰延展率 [s ⁻¹]
K_i, K_f	平衡常數
Ka	卡爾威茲數 (Karlovitz Number), $K (S_L^0)^2 / \alpha$
Ka_{max}	最大之 Ka 值
l	熱損失估算因子
L	流體特徵尺寸
$L_i()$	微分運算子, $d/dx - 1/Le \cdot d^2/dx^2$
LL	貧可燃極限 (Lean Limit)
Le	路以士數 (Lewis Number), α/D
Le^*	臨界的 Le , 一般視為 1.0
n	模擬內層溫度, 壓力項的指數變數
np	火焰燃燒速度與壓力間變化的指數項次
M	分子量 [g/mol]
M'	不參與反應的觸媒
Ma	馬克斯坦數 (Markstein Number), $\mathcal{L}/\delta_L$
MIE	最小點火能量 [mJ]
o	火焰速度的模擬變數

P	壓力 [$1 \text{ bar} = 0.987 \text{ atm} = 10^6 \text{ g/cm s}^2$]
P ₀	流量計的入口壓力 [$1 \text{ psi} = 6.895 \times 10^3 \text{ N/m}^2 = 6.895 \times 10^{-2} \text{ bar}$]
Pr	普朗數 (Prandtl Number), ν / α
q	反應熱釋放, $(T_{\text{ad}} - T_u) \cdot (C_p / Y_u)$ [J/mol]
Q _{gas}	流量計的真實流量 [$1 \text{ NL/min} = 16.67 \text{ cm}^3/\text{s}$]
Q _{gas} '	流量計的視流量 [$1 \text{ NL/min} = 16.67 \text{ cm}^3/\text{s}$]
r	管徑方向
R	通用氣體常數, 8.314 [J/mol K]
R _C	火焰前緣的局部曲率半徑 [cm]
RL	富可燃極限 (Rich Limit)
s	火焰速度的模擬變數
Sc	史卡特數 (Schmidt Number), ν / D
S _L ⁰	層流火焰速度 (Laminar Flame Speed) [cm/s]
S _L	火焰燃燒速度 (Burning Velocity) [cm/s]
S _{L,min}	最小火焰速度, 一般視可燃氣在貧極限時的速度 [cm/s]
t	時間 [s]
t _q	火焰熄滅時間 [s]
T	溫度 [K]
T ₀	流量計的入口溫度 [K]
T _a	活化能溫度, E_a / R [K]
T _{ad}	絕熱火焰溫度, $T_u + q \cdot Y_u / C_p$ [K]
T _b	燃氣溫度 [K]
T _i	點火溫度 [K]

T_{in}	內層溫度 (Inner Layer Temperature) [K]
T_E	能量參數 E 所致的溫度, $ E /R$ [K]
T_f	火焰溫度, $T_u + (T_{ad} - T_u) \cdot Le^{-1/2}$ [K]
T_u	未燃溫度 [K]
u'	渦流的擾動速度 [cm/s]
U	可燃氣的平均流速 [cm/s]
V	吹熄火焰所需的環流流速 [cm/s]
vol	體積百分比 [%]
x	距離尺寸 [cm]
x_f	火焰位置
X	莫耳分率 (Mole Fraction)
Y	質量分率 (Mass Fraction)
z	軸心方向
z_0	分析反應區尺寸的變數
Ze	Zel'dovich Number, δ_L / δ

希臘字

α	熱擴散性, $\lambda / \rho C_p$ [cm^2/s]
α_0	反應步驟 II. $CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$ 所定義的簡化變數, $(Le_{H_2}/Le_{CO})(X_{CO_2}/X_{H_2O})/K_{II}$
β	熱損失估算因子中參數
γ	溫度比, $(T_b - T_u) / T_b$
δ	反應區厚度 [mm]
δ_L	火焰厚度 (預熱區加上反應區的總厚度) [mm]

δ_{pre}	預熱厚度 [mm]
θ	無因次化的溫度， T/T_u
$\theta_1, \theta_2, \dots$	分析反應區所使用的溫度變數
Θ	Lennard-Jones 位能 [J]
$\mathcal{L}$	馬克斯坦長度 (Markstein Length) [mm]
λ	熱傳導係數 [$1 \text{ mW/m K} = 10^{-5} \text{ J/cm s K}$]
$\lambda/\lambda_{\text{mono}}$	無因次的熱傳導係數
μ	黏滯係數 [$1 \text{ }\mu\text{Pa s} = 10^{-5} \text{ poise} = 10^{-5} \text{ g/cm s}$]
ν	動力黏滯性， μ/ρ [cm^2/s]
π	圓周率常數，3.14159
ρ	密度 [g/cm^3]
ρ_b	燃氣密度 [g/cm^3]
ρ_{in}	內層溫度所計算氣體密度 [g/cm^3]
ρ_u	未燃氣密度 [g/cm^3]
σ, σ_0	Lennard-Jones 位能中距離參數 [$1 \text{ }\text{\AA} = 10^{-8} \text{ cm}$]
τ_c	化學反應時間 [s]
ε	用於分析反應區尺度， $T_{\text{ad}}^2/(T_a \cdot q Y_u/C_p)$
ϵ	Lennard-Jones 位能中的能量參數 [J]
ϵ_0	漸近分析反應區尺度的數階變數
ζ	反應率係數通式中溫度的指數項
Ψ	氧氣的莫耳分率， $\text{O}_2/(\text{O}_2 + \text{N}_2)$
ϕ	當量值，燃料-空氣比與化學計量時的比值
$\phi_{1,w}$	反應物的洩漏量

$\phi_1, \phi_2, \dots$ 分析反應區所使用的濃度變數

Φ 燃料體積分率的比值, $(\text{vol} - \text{vol}_{\text{lean}})/(\text{vol}_{\text{stoich}} - \text{vol}_{\text{lean}})$

$\Omega_\mu, \Omega_\lambda, \Omega_D$ 氣體傳輸性質碰撞常數

$\dot{w}$ 化學反應率 $[\text{g}/\text{cm}^3 \text{ s}]$

$\hat{w}$ 無因次化後的化學反應率, $\dot{w}/(\rho_u S_L^0)^2/(C_p/\lambda)/(Y_{F,u}/M_F)$

Δ 溫度比, $(T_{\text{in}} - T_u)/T_u$

ΔH_f^0 生成熱 $[\text{KJ}/\text{mol}]$

Λ 熱傳導比, $(\lambda/C_p)/(\lambda/C_p)_u$

上標

0 初始狀態或平面未受延展的火焰狀況

' 無因次化或非真實的視流量

$\sim, -$ 無因次化或預熱區

+ 停滯面

下標

298 室溫時的狀況值

79%, 82%, 84% 氧化劑中氮氣的劑量, $N_2/(O_2 + N_2)$

A 反應物種

ad 絕熱

Argon 氬氣

b 已燃或反應步驟之逆向反應

B 反應物種

c	化學反應
CH ₄	甲烷
C ₂ H ₂	乙炔
C ₂ H ₄	乙烯
C ₂ H ₆	乙烷
C ₃ H ₈	丙烷
CO ₂	二氧化碳
critical	臨界值
dilute	稀釋氣體
f	火焰或反應步驟之正向反應
fuel, F	燃料
gas	氣體
H ₂ O	水氣
H ₂	氫氣
He	氦氣
I, II, III	縮減反應機構的反應步驟
in	以內層溫度所求得的值
L	層流
lean	貧燃燒狀況
Limit	貧可燃極限狀況
N ₂	氮氣
m	平均
min	最小

mono 單原子氣體，如氮氣

oxygen 或 O_2 氧氣

oxidant 氧化劑

p 定壓

pre 預熱區

st or stoich 化學計量值 (Stoichiometric Value)

T 溫度 T 的狀況值

u 未燃

第一章 導 論

不易看見且永遠在運動的氣體，是物質中最不穩定的形式。但是混亂之中，又顯示它可預期的行為模式，使得人類能利用它的能量作功。而能量的釋放以燃燒的形式最具代表性，火焰可視為發生在不連續反應區內快速、自足的化學反應。火焰現象的研究，又以火焰的傳播行為，需要結合流力、化學以及分子動力學等方面的相關知識，此亦是燃燒中極具挑戰的領域。本文將採用縮減反應機構，以可燃氣開始發生化學反應的內層溫度來分析火焰結構和傳播行為，特別是以解析的觀點，考慮各種影響火焰速度的效應（壓力、溫度以及惰性氣體），進而研究對微觀、不易量測火焰特性的影響。因此，對於預混碳氫火焰，將從二方面著手進行討論：

- 理論模擬- 首先，對氣體性質隨溫度的變化情形做廣泛的探討，具體的以指數形式表示其變化，合理估算無因次參數 Le 的值。另外，採用漸近分析的方式，嘗試以貧極限、火焰速度以及絕熱火焰溫度等特性來討論相關的火焰結構和燃燒反應，建立一個預測預混碳氫火焰行為的理論式。
- 實驗觀測- 主要是針對本生式預混燃燒器的一些火焰現象如回火、吹離等，在不同惰性氣體與流場的改變下，觀測明亮火焰錐的塌陷、吹熄行為，以判斷氣體性質對火焰穩定性、火焰結構的影響。

而研究的目的和範圍，如圖 1-1 所示。

1.1 文獻回顧

最近幾年，不論理論發展或是實驗量測，有很多學者都曾對火焰的傳播行為做過深入的研究。而且，在工業與航太的發展需求下，燃燒除了燃燒器改良的實際應用外，也有越來越多的研究者願意投入於火焰行為的基礎研究（如燃氣性質、反應機構、火焰速度、可燃極限以及熄滅現象等）。本節將針對這些發展的具體成果，做一重點式的回顧。

1.1.1 氣體的熱力性質

碳氫化合物中，碳原子間以單價鍵結者稱之飽和，屬烷系；碳原子間以二價鍵結者稱之烯；如以三價鍵結者稱之為炔，其中烯系及炔系皆屬於不飽和狀態。碳氫化合物甚至有機物之所以能由幾個簡單元素形成這麼多化合物，均是靠碳原子間強烈的共價鍵鍵能，這個獨特性質所致。在燃燒中，氣體熱力性質以定壓比熱、生成熱（Enthalpy of Formation）及反應常數等最常被提出來討論火焰行為。圖 1-2、1-3 及 1-4 分別就定壓比熱、生成熱及平衡常數等常見氣體的熱力性質與溫度間的變化關係（David, 1995）做廣泛比較：

1. 定壓比熱

其大小的變化順序是有一定的規則存在，一般而言，多分子氣體的比熱是大於單原子氣體。除了氧原子、氫原子氣體外，大部分氣體

的比熱均隨溫度增加而增加，而且多分子氣體又比單原子氣體對溫度變化的靈敏度來的高。分析比熱值隨溫度的變化情形，發現溫度高於 1000 K 的比熱變化幅度不如 1000 K 以下來的劇烈（此特性意謂著用單一函數來描述氣體性質，不如針對不同溫度區段以簡單的數學形式模擬來的有規則性）。

2. 形成熱

熱是一種能量的形式，它與分子運動成正比，可藉由輻射、傳導或對流來傳送；顯熱會伴隨著溫度的變化，但潛熱則否。燃燒反應有幾種熱的定義必須加以釐清：

燃燒熱 - 定量物質完全氧化（燃燒）所放出的熱量。

形成熱 - 元素在標準溫度、壓力下生成化合物時，所放出或吸收的熱量。

反應熱 - 在反應前後的溫度、壓力相同的條件下，所放出或吸收的熱量。

一般而言，形成熱隨溫度的變化順序就無法像比熱般來的有規則性。對大部分的氣體，形成熱可視為溫度的弱函數。而形成熱的主要功用，除了可將熱力學第一定律逕行用於燃燒問題的分析外，對於絕熱火焰溫度的計算上，有必要將所有參與反應的氣體形成熱都列入考慮。茲將其在燃燒方面的應用，說明如下：

- (1) 形成熱多由統計熱力學計算而得。
- (2) 形成熱為反應熱之一，而後者可適用於各種的化學變化。
- (3) 元素或化合物在標準狀態下，可因相的存在，而使得形成熱有不

同的值。

3. 平衡常數

發生化學反應的獨立系統，當其熵值達到最大時，其必為化學平衡的狀態點。在某一定溫度下，平衡常數值通常近似乎一常數；當平衡常數、反應物濃度已知的情況下，可進一步的預測出產物濃度。而平衡常數在燃燒方面的應用甚多，茲列舉如下：

- (1) 平衡常數與反應物及生成物的分壓有關，可藉以決定系統平衡時混合氣的組成。
- (2) 平衡常數僅為溫度函數，故可用來預測絕熱火焰溫度。
- (3) 藉由氣體分壓變化預測反應進行的方向，稀釋氣體雖然不參與燃燒，亦可藉其平衡常數來影響平衡狀態的改變。

空氣中氮、氧的平衡常數可視為零；碳氫燃料除了苯、乙炔外，大部分是隨溫度的增加而遞減；產物中常見的二氧化碳、水，其平衡常數值最大且隨溫度的增加而減少。

1.1.2 氣體的傳輸性質

流體力學中，有三種傳輸性質是用來處理流體的質量、動量及能量方面的平衡。當所探討的流體，其濃度、速度或是溫度產生很大的梯度變化時，此時傳輸現象將變的異常重要。在這樣的情況下，產生明顯的質量傳輸、動量傳輸及能量傳輸方面的行為，而其量與其驅動力有一比例係數存在，稱之為質量擴散性、黏滯係數與熱傳導。

Smooke & Giovangigli (1991)對大部分在定壓下的燃料混合氣，熱傳導是採用如下的通式估算

$$\frac{\lambda}{C_p} = \rho \cdot \alpha = 2.58 \times 10^{-4} \left(\frac{T}{298 K} \right)^{0.7} \quad [\text{g/cm s}] \quad (1-1)$$

上式常被應用於燃燒數值模擬中，特別是針對氣體傳輸性質的預測上。但本文研究重點，在於改變稀釋氣體、氧化劑組成來研究火焰結構、傳播行為的變化情形，所以將不採此種方式來估算氣體性質。

由於分子碰撞位能能適當的解釋氣體的某些行為，並且其預測值與真實氣體的傳輸性質亦非常吻合。因此，本文將採用氣體動力學中的碰撞位能觀點，以此討論各種氣體傳輸行為的合理預測式。由於真實氣體間的碰撞，必須考慮分子間交互作用的位能狀況，而此種能量的描述又以 Lennard-Jones 位能最具代表性 (Hirshfelder, 1954; Strehlow, 1979)

$$\frac{\Theta(\sigma)}{\epsilon} = 4 \left[\left(\frac{\sigma_0}{\sigma} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_0}{\sigma} \right)^6 \right] \quad (1-2)$$

式中 σ_0 為位能為零時的碰撞直徑；能量參數 ϵ 可進一步無因次化為 $k \cdot T / \epsilon$ ，而 k 為波茲曼常數 ($1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$)。對於上述位能，可進一步的應用於黏滯、熱傳導以及質量擴散的碰撞常數 (Ω_μ 、 Ω_λ 以及 Ω_D) 的探討上，並將其值依不同的能量參數 $k \cdot T / \epsilon$ 列表，供查詢使用 (Chapman-Enskog 理論)。對描述氣體分子傳輸性質的理論通式，可具體的表示如下：

黏滯性-

$$\mu = 2.67 \times 10^{-5} \frac{\sqrt{M \cdot T}}{\sigma_0^2 \cdot \Omega_\mu} \quad [\text{g/cm s}] \quad (1-3)$$

上式 M 表示分子量。

熱傳導-

$$\text{單原子氣體 } \lambda_{mono} = 8.33 \times 10^{-4} \frac{\sqrt{T/M}}{\sigma_0^2 \cdot \Omega_\lambda} \quad [\text{J/cm s K}] \quad (1-4)$$

$$\text{一般氣體 } \lambda = \lambda_{mono} \left[1 + \frac{1}{Le_{mono}} \left(\frac{2}{5} \frac{C_p}{R} - 1 \right) \right] \quad [\text{J/cm s K}] \quad (1-5)$$

式中下標 mono 表單原子氣體，Le 為路易士數， C_p 為定壓比熱。

質量擴散性-

$$D_{12} = 1.86 \times 10^{-3} \frac{\sqrt{T^3(1/M_1 + 1/M_2)}}{P \cdot \sigma_{0,12}^2 \cdot \Omega_{D,12}} \quad [\text{cm}^2/\text{s}] \quad (1-6)$$

上式 P 表示為壓力，其中混合氣平均性質的估算可採用

$$\sigma_{0,12} = \frac{\sigma_{0,1} + \sigma_{0,2}}{2} \quad [\text{\AA}],$$

$$\Omega_{D,12} = \sqrt{\Omega_{D,1} \cdot \Omega_{D,2}}$$

而這三種傳輸性質的因次分析指出，它們之間比值所定義的無因次參數，對於探討氣體行為是非常的簡便且重要：Pr (Prandtl Number)，定義為動力黏滯性與熱擴散性的比；Sc (Schmidt Number)，定義為動力黏滯性與質量擴散性的比；Le (Lewis Number)，定義為熱擴散性與質量擴散性的比。由上述傳輸性質的理論公式推知，要計算

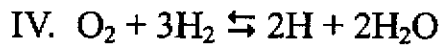
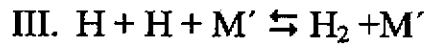
氣體的黏滯性、熱傳導及質量擴散性，必須先求得碰撞的能量和距離參數（ ϵ/k 與 σ_0 ），再經由查表得出碰撞常數（ Ω_μ 、 Ω_λ 以及 Ω_D ），經此演算過程可得到氣體的傳輸性質。

本文對氣體傳輸性質的研究，直接將碰撞常數以能量參數（ $k \cdot T/\epsilon$ ）表示外，對於傳輸性質的理論式，除了保留質量與碰撞直徑的數學形式外，對不同氣體性質隨溫度的變化將做更深入探討與分類。在此強調的是，不同於先前對氣體性質的討論，針對常見的可燃氣體，將三種常用的傳輸性質化簡為溫度的精確表示式，除了利於分析比較外，在討論稀釋氣體、氧化劑組成對混合氣平均性質的計算上，不同氣體間更易於做化簡、比對。

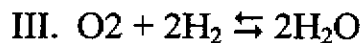
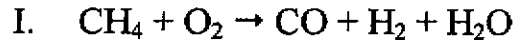
1.1.3 縮減反應機構

Peters (1985, 1987) 採用縮減的反應機構，以漸近的方式來探討火焰結構，依此確認影響火焰燃燒速度的動力參數。Williams (1985, 1988, 1991) 曾詳細的對甲烷火焰，以單一步驟至四步驟的化學反應機構，漸近分析火焰結構、探討相關的燃燒速度和最高的火焰溫度。Göttgens (1992) 研究化學當量值小於 1.0 的碳氫火焰燃燒，討論燃燒速度與火焰厚度的解析表示式。歸結以上對火焰結構的研究，甲烷火焰完整的四步驟反應機構可廣泛的應用於一般碳氫火焰反應的描述上，茲將其重要的反應步驟表示如下：





如果氫原子濃度達到穩態、局部平衡時，上述反應可進一步化簡成三步驟化學動力機構



這些反應機構將做為分析火焰結構的基礎，而近期所發展的碳氫燃料氧化機構亦是以三個區間來描述火焰的特性：

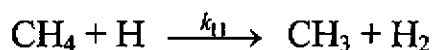
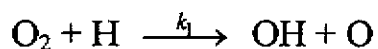
(1) 預熱區 (Preheat Zone)：

$$\text{預熱厚度 } \delta_{pre} = \left[\frac{\lambda}{(\rho_u C_p) \cdot S_L^0} \right]_{in}$$

其中 λ 、 ρ 、 C_p 分別表示燃氣熱傳播、密度以及定壓比熱， S_L^0 為層流火焰速度，最右邊 in 的下標符號表示以內層溫度所計算的值。在求解反應區特性與物種成份方面：是以未燃氣體流向火焰區和逆向於未燃氣流方向的擴散效應來做考慮，而氫原子主控著這樣的擴散行為。結果將導致明顯數量的 HO_2 形成在此低溫預熱區，其化學反應為 $\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{M}' \rightarrow \text{HO}_2 + \text{H} + \text{M}'$ 。

(2) 燃料消耗層 (Fuel Consumption Layer)：含煙消耗層 (Radical Consumption Layer)

在此層關鍵的化學反應為



，而反應區厚度的估算式可採如下

$$\delta = \frac{k_1[O_2]_{in}}{k_{11}[CH_4]_u}$$

其中下標 in、u 分別表示此燃料消耗層和未燃狀況， k_1 、 k_{11} 為反應率係數。 HO_2 接著形成過氧化氫 (H_2O_2)，此過氧化氫將被氣流送進反應區內。反應區的高溫將形成 OH 根，其反應機構為 $HO_2 + H_2 \rightarrow H_2O_2 + H \rightarrow 2OH + H$ 。在反應區的前期，由於 OH 的濃度相對於 O 與 H 而言要來的多，OH 會攻擊燃料，而此乃造成燃料衰減的主要理由。因為 OH 的反應常數與抽取自燃料的 H 與 O 是在相同的數階範圍，因此 H 與 O 的抽取反應在此視為最主要的反應機制。

(3) H_2 -CO 氧化層 (H_2 -CO Oxidation Layer)：含 H_2 -CO 非平衡層 (H_2 -CO Non-equilibrium Layer)

在反應區的後期，燃料分子的中間物被消耗、CO 轉變成 CO_2 ，而 CO 的轉變結果是系統熱釋放的主要來源，熱釋放率曲線的頂點是接近最大溫度處。濃度曲線的快速掉落，乃因 CO 快速的消失，而餘下的盡是燃料的中間物。溫度分布循著平順且指數般的上升，是因為熱能擴散回較冷的氣體所致，而重組反應將落在已燃氣體或後火焰區。

本生式火焰的現象觀察，指出隱藏在火焰錐後的區域為將進入明亮區（該處反應、熱釋放發生，其厚度小於 1 公釐）未燃的預混氣體。明亮區（為反應區的部分）處的溫度為最高，而事實上大部分的反應和熱釋放均發生在該處，明亮區的色澤會隨燃料-空氣比而改變。對

碳氫燃料-空氣混合氣而言：貧燃料時，因激態的 CH 基會有深紫色的輻射；為富燃料時，因激態的 C_2 分子將導致藍綠色的輻射出現。 C_2 分子是個簡單的雙原子分子，只含兩個碳原子，本身並不穩定，在火焰中 C_2 受到火焰中的熱激發而以激態呈現，在它回到基態的過程中會放出藍光。高溫的燃氣通常為 CO_2 和水蒸汽，其顯現帶有紅色的灼熱光。當混合氣調整至非常高的富燃料狀況時，由於固體碳粒子的存在，將導致強烈的黃光出現。然而，對於不含碳的氫-空氣，火焰是近乎不可視的。

有了上述反應機構的基本認知，本研究將以此出發，除了推導火焰特徵溫度、燃燒速度外，將壓力、溫度以及氣體性質等效應與理論式做更緊密的結合。實驗觀測亦針對惰性氣體如何改變本生式火焰結構、火焰穩定性做討論。透過這些研究，可深入瞭解各種效應在預混燃燒中所扮演的角色。

1.1.4 火焰的特徵溫度

在探討燃燒的理論過程中，有三種溫度是常被提及的：一為絕熱火焰溫度（Adiabatic Flame Temperature）、另一為活化能溫度（Activation Energy Temperature）以及內層溫度（Inner Layer Temperature）。由於絕熱火焰溫度的計算，本質上是屬於化學平衡的問題，由於涉及到非常複雜的反應機構與成份分析。發展至今，有很多相關的數值模擬理論面諸於世，但為了有一依循比較的標準，在此僅採用可在網路上自由下載、原始程式碼公開之 Gordon & McBride (1971, 1994) 的 CEC、CEA 程式。此數值理論的特點，是基於最小自

由能、採用 JANAF 熱化學資料，而數值方面則採用降格 Newton-Raphson 法來求解方程式的疊代。

活化能溫度的討論：一者從縮減反應機構的理論出發，將燃燒系統的活化能以火焰結構內的特徵溫度加以表示。另一者從火焰的傳播速度出發，在定壓下，將燃燒系統的活化能視燃燒速度與絕熱火焰溫度間的關係來加以決定 (Egolfopoulos & Law, 1990)。

至於內層溫度的探討，則延續前一節有關 Peters & Williams (1987) 採用縮減的反應機構來探討火焰結構，並進一步將化學反應縮減至三步驟化學反應機構，而反應率係數與內層溫度的關係可表示如下：

$$\frac{k_I^2(T_{in})}{k_{II}(T_{in})k_{III}(T_{in})} = f(T_{in}) = \frac{15}{16} \left(\frac{Le_F}{Le_{O_2}} \right) P \quad (1-7)$$

其中 k_I 、 k_{II} 及 k_{III} 為三步驟反應機構的反應率係數，而 Le 、 P 分別表示路以士數和壓力。分析上式得知，內層溫度僅與三個反應率係數、壓力及 Le 的比值有關外，與未燃溫度、外界流體的干擾均無關。因為內層厚度 (Inner Layer Thickness) 是小於鄰近的 H_2 -CO 氧化層厚度，而此厚度又小於預熱區 (內層厚度上游無化學反應區)，因此可視化學反應發生在內層溫度附近或此溫度以上。在這樣的觀點下，內層溫度可解釋為反應發生的臨界溫度。Kennel (1990)、Göttgens (1992) 等人曾對氣態碳氫燃料、氫氣的內層溫度隨壓力的變化關係做深入的討論。本文對內層溫度的研究：

- 首先，嘗試是否能將三步驟的反應率係數明確的決定出來？如果不行的話，是否能避免複雜的反應物種平衡計算，另尋更簡

易的方式求解。

- 採用縮減反應機構的觀點，推導以內層溫度所表示的速度理論式。討論是否能透過物化性質的層流火焰速度和貧極限，間接的決定內層溫度大小？

1.1.5 層流火焰速度

層流火焰速度，定義為均勻流場中穩態、一維層流傳播之平面絕熱燃燒波。忽略熱損失與浮力的效應下，雖然這樣的火焰是難於以實驗求得，但此種速度定義，卻是非常適於使用在數值理論的討論中，對於火焰厚度的定義亦同。層流火焰速度 (S_L^0 , Laminar Flame Speed) 是火焰行為的重要特性之一，對於引擎設計、紊流燃燒的模擬及確認化學動力機制等研究，關於火焰速度的精確知識是有其必要性。對於層流火焰速度的分析，將分成以下幾個部分做討論

1. 理論分析

早期，Mallard & Le Chatelier (1883) 描述從燃燒區傳導出的熱必須足夠供未燃氣體提高至點火溫度 T_i 所需之量，而火焰速度被表示成

$$S_L^0 = \left[\left(\frac{\lambda}{\rho_u C_p} \right) \left(\frac{\dot{w}}{\rho_u} \right) \left(\frac{T_b - T_i}{T_i - T_u} \right) \right]^{1/2} \sim \left(\alpha \frac{\dot{w}}{\rho_u} \right)^{1/2} \quad [\text{cm/s}] \quad (1-8)$$

式中 ρ_u 為未燃氣體密度 (g/cm^3)、 α 為熱擴散性 (cm^2/s)。 $\dot{w}$ 為化學反應率 ($\text{g/cm}^3 \text{s}$)，對於火焰的反應區厚度為 $\delta \sim (\alpha/S_L^0)$ 。

直至近期，Liñán & Williams (1994) 假設反應區內的熱釋放等於自熱產物到冷反應物的傳導能量，而整個能量平衡方程式為

$$C_p(T_b - T_u) \cdot \dot{w} \delta_L = \lambda \frac{(T_b - T_u)}{\delta_L} \quad [\text{J/cm}^2 \text{ s}] \quad (1-9)$$

式中 δ_L 為完整的火焰厚度。如果可燃氣的消耗率為 $\rho_u S_L^0 = \dot{w} \delta_L$ ，則火焰速度的表示式可化簡如下

$$S_L^0 = \left(\alpha \cdot \frac{\dot{w}}{\rho_u} \right)^{1/2} \quad [\text{cm/s}] \quad (1-10)$$

以下就縮減反應機構的觀點，以漸近的方式分析火焰傳播的具體成果整理如下：Peters & Williams (1987) 依據縮減反應機構，漸近分析當量值為 1.0 的甲烷/空氣火焰，對於未燃混合氣的火焰速度表示為

$$S_L^0 = \left(\frac{8 k_I^2 Y_{F,u}/M_F \lambda}{15 k_{II} q^4 X_{H_2O} C_p} \right)^{1/2} \left(\frac{Le_{O_2}^5 \cdot Le_{H_2}^3 K_{IV}}{Le_F^2 2^5 (1 + \alpha_0)^3} \right)^{1/4} \cdot \frac{T_u}{T_{in}} \left(\frac{T_b - T_{in}}{T_b - T_u} \right)^2 \quad (1-11)$$

式中有關內層火焰溫度的求解，依三步驟反應機構的假設可化簡為

$$\frac{k_I^2(T_{in})}{k_{II}(T_{in}) \cdot k_{III}(T_{in})} = f(T_{in}) = \frac{15}{16} \left(\frac{Le_F}{Le_{O_2}} \right) P$$

Seshadri & Peters (1990)、Seshadri & Göttgens (1991) 都曾陸續發表對甲烷火焰的研究，對內層溫度做過詳細的討論，並將此種理論分析推廣至其他貧的氣態碳氫燃料。Göttgens (1992) 主要是針對貧的氫氣、甲烷、乙炔、乙烯、乙烷以及丙烷-空氣火焰等做討論，火焰速度是採用半經驗半理論的預測通式

$$S_L^0 = f \cdot Y_{F,u}^0 \text{EXP}(-c/T_{in}) \cdot \frac{T_u}{T_{in}} \left(\frac{T_b - T_{in}}{T_b - T_u} \right)^t \quad (1-12)$$

式中內層溫度 T_{in} 的求解如下

$$P = b \cdot \text{EXP}(-e/T_{in})$$

對不同碳氫燃料，式中的模擬參數表示如下

燃 料 模擬參數	氫氣	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷
f [cm/s]	1.29×10^6	22.2	3.78×10^4	9979	1900	1275
c [K]	2057	-6444	1032	263	-507	-1325
s	1.09	0.565	0.908	0.771	0.431	0.582
o	3.54	2.52	2.59	2.40	2.18	2.40
e [K]	1.02×10^4	2.39×10^4	1.13×10^4	1.44×10^4	1.89×10^4	1.72×10^4
b [bar]	3.00×10^4	3.16×10^8	5.68×10^4	3.70×10^5	4.32×10^6	2.25×10^6

Müller (1997)則延續上述研究，將燃料推廣至甲醇、庚烷以及辛烷-空氣火焰的行為預測

燃 料 模擬參數	甲醇	庚烷	辛烷
f [cm/s]	10000	7956	2926
c [K]	1089	912	-25.6
s	0.91	0.52	0.558
o	2.26	2.30	2.52
e [K]	1.77×10^4	1.75×10^4	2.09×10^4
b [bar]	2.11×10^6	1.70×10^6	3.80×10^7

本文對火焰速度的研究亦類似於上述方式，但考慮氣體性質的變化，而氣體的平均性質將採其耳分率、內層溫度來估算其值。另外，在第五章將深入討論在溫度、壓力以及惰性氣體等效應影響下的火焰速度，並以模擬參數來描述其變化。

2. 氣體擴散、流力等廣泛的影響

Wu (1984)研究甲烷、丙烷、丁烷以及氫氣等燃料的燃燒，在 Le 值大於或小於 1.0 時，觀察停滯（正延展）、本生式（負延展）火焰的行為。研究結果指出延展率會透過二種方式去影響火焰速度：其一為優先擴散（Preferential Diffusion），其效應會改變火焰溫度、燃燒

率，與 Le 值的大小有關；另一為流場擴散 (Flow Divergence)，因流線面積使得上游預熱區的質量流率大於反應區，所以火焰傳播速度會提高。

對衝、平面延展的火焰研究方面：Lewis & Von Elbe (1987) 指出隨著正延展率的增加將會降低火焰溫度與減低火焰速度，但 Williams (1975)、Tien & Matalon (1991) 則認為增加延率實際上會增加溫度梯度，並使火焰厚度變薄。Matalon & Matkowsky (1982)、Law (1988) 曾考慮熱擴散、質量擴散的影響下，分析火焰結構，並進一步的探討因延展率而改變的火焰位置。Chung & Law (1989) 指出火焰溫度、厚度以及燃燒所需的流量並不會因延展率而有所改變，其流量僅只會因流場擴散而降低。

對於氫-空氣混合氣而言，最大的火焰速度值顯著落於化學計量附近的富燃料區，且偏移的比碳氫-空氣火焰更為顯著。此乃因大量的氫氣會增加混合氣的平均熱擴散性，所以氫氣在空氣中的最大火焰速度要比其它碳氫燃料要來的大。預混燃料-空氣混合氣的未燃溫度對火焰傳播的影響，可透過火焰溫度來解釋，由於化學能的釋放往往會大於反應物實質的能量，雖然預熱溫度小量的改變對火焰溫度的變化有限，但往往這種火焰溫度的少量變化卻常常造成火焰傳播方面的明顯改變。

1.1.6 可燃極限

對於預混燃燒，氣態燃料與氧化劑在點燃前充分的混合，點燃需

要提供充分的能量在適當的形式，如火花產生火焰（或爆燃）傳播通過混合氣的燃燒過程。此種反應率一般而言是非常的快速，可由化學氧化機構來求解，不同於擴散火焰可藉由燃料與氧化劑相對慢的混合過程來求解火焰結構和行爲。對於可燃氣，如甲烷、丙烷等，它們與空氣的混合氣僅能在界限明確的燃料濃度（所謂的貧極限、富極限）內燃燒。而用來確認混合氣是否可燃或有能力傳播火焰的實驗標準：內徑 5 公分，長 150 公分的垂直圓管，內部引入組成百分比確定、預混的混合氣。點火源（可產生小火花）被安置於圓管的下端，火焰至少要能向上傳播 75 公分以上，混合氣才可被視為可燃。

一般可燃極限大部分都表示成 25°C 的體積百分比，雖然它們會受壓力、溫度的影響。早期的研究指出，圓管直徑會影響可燃極限，雖然對於管徑大於 5 公分以上的貧極限影響有限，而太過狹小的圓管會因損失至壁面的熱而使可燃終止。事實上，管徑縮減到所謂的熄滅直徑（Quenching Diameter），火焰將無法傳播甚至通過大部分可反應的混合氣。以向上傳播火焰所量測的可燃極限範圍要比向下傳播者來的大，差異的產生是因為已燃氣體的浮力運動方向是相反於向下傳播的火焰。另外，有趣的討論主題是要用多少的能量才能夠點燃可燃混合氣？一般而言，引燃混合氣的最小點燃能量會隨組成百分比而改變，在混合氣濃度的變化過程中，此種點燃能量會有最小值的出現，稱為最小點火能量（MIE, Minimum Ignition Energy），對大部分可反應的混合氣，此 MIE 落於化學計量附近的富燃料區。前述的點火極限（Ignitability Limits）會隨點火源的強度而改變，不同於可燃極限（Flammability Limits），因為後者量測所使用的點火源強度遠遠大於

引燃混合氣所需之量。Coward & Jones (1952)、Zabetakis (1965)曾對各種燃料-空氣-惰性氣體的混合狀況，分析、整理可燃極限的範圍。可燃極限的資料常見於 Lewis & von Elbe (1987)的附錄中，但大部分都可在 Zabetakis (1965)的回顧整理中找到，本研究將火焰相關重要的燃燒特性、資料彙整在表 1。

貧極限 (Lean Limit) 如果以質量濃度來表示： C_1 - C_3 直鏈烷類相當於 $43 \times 10^{-6} \text{ g/cm}^3$ ； C_4 - C_{10} 直鏈烷類則相當於 $48 \times 10^{-6} \text{ g/cm}^3$ 。烷類單位質量的燃燒熱接近常數 ($\sim 45 \pm 1 \text{ KJ/g}$)，貧極限可被定義為“能量密度 (Energy Density)”，其值約為 2.16 J/cm^3 。對於求解碳氫燃料與其氧化之衍生物的貧極限範圍，臨界的能量密度 (Critical Energy Density) 觀點可廣泛的應用，大部分落在 $2.05 \pm 0.15 \text{ J/cm}^3$ 。

貧極限會隨溫度的提高而減少，而經驗關係式可採用如下 (Zabetakis, 1965)

$$\begin{aligned} LL_T / LL_{298} &= 1 - 7.21 \times 10^{-4} (T - 298K) , \\ RL_T / RL_{298} &= 1 + 7.21 \times 10^{-4} (T - 298K) \end{aligned} \quad (1-13)$$

式中 LL 表示貧極限，RL 表示為富極限，下標 T、298 為溫度方面的變化。壓力增加超過一大氣壓時，可明顯的改變富極限，但對貧可燃極限的影響幾乎可忽略不計。Clingman (1953)以氦氣、氬氣及氮氣來稀釋甲烷燃料，氧化劑組成仿空氣比率，研究不同燃料濃度下火焰燃燒速度。Morgan & Kane (1953)曾使用三種不同管徑，氧化劑的氧氣與氮氣在不同劑量下，討論氬氣、甲烷、乙炔及丙烷等燃料的火焰速度。Egolfopoulos & Law (1990)曾探討甲烷燃料，氮氣劑量從 79%變

化至 85.6%，壓力變化範圍介於 0.25~4.5 大氣壓力，研究火焰的層流火焰速度。對於以空氣為氧化劑的火焰，添加惰性氣體來稀釋空氣的組成，會讓可燃範圍的縮小，比壓力、溫度效應來的顯著。對於以體積百分比表示的可燃極限，可使用下述表示式加以換算成當量值

$$\phi = \left(\frac{vol}{vol_{st}} \right) \cdot \frac{100 - vol_{st}}{100 - vol} \quad (1-14)$$

，其中 vol 表示燃料所佔的體積百分比，下標 st 表示燃料在計量混合時的體積百分比。

1.1.7 延展對火焰傳播的影響

火焰於非均勻流場中傳播時，焰面會同時受到應變率(Strain Rate)、曲率(Curvature)的影響，此將導致火焰焰面的變化，而面積的改變率即為火焰的延展率 (Williams, 1975, 1985)。延展率的概念首先是由 Karlovitz (1953)所提出，並用以修正火焰熄滅機制和描述紊流火焰結構。Markstein (1951, 1964)則研究由焰面曲率所引起的火焰延展對火焰不穩定的影響。Lewis (1961)曾利用火焰延展的觀念來瞭解火焰穩定性、熄滅機制。Wu (1991)指出火焰的延展對層流燃燒速度的影響會顯著的改變在薄火焰片範圍內紊流火焰的性質，對於大部分實際的預混紊流火焰而言，這些在層流所討論火焰延展影響的結果對紊流火焰同樣的重要。而延展機構對火焰傳播的影響必須綜合考量以下諸項效應（列於表 2）：Le、優先擴散效應及延展率（應變率和曲率）等。

在延展率的理論分析中，可視火焰的厚薄程度對某些影響效應有所取舍：

- 關於一定火焰厚度、自由傳播的火焰 - 爲了建立燃燒速度與火焰延展間交互作用的理論完整性，必須考慮曲率、不穩定的效應。
- 對於火焰厚度非常薄的火焰 - 由於有較大的曲率半徑(對火焰的延展緩慢)，因此可將曲率、不穩定的效應忽略不計。

層流燃燒速度與火焰延展間的關係，經由 Markstein (1964)、Taylor (1990, 1991)、Matalon (1982, 1983)、Law (1986, 1988)、Peters (1986)、Deshaies (1990)、Bradley (1996)、Brown (1996)及 Müller (1997)等人有系統的發展下，可視觀察座標的選定有不同形式的表示法：

(1) 球形的火焰 (Strehlow, 1979; Kwon, 1992; Tseng, 1993; Aung, 1997)

$$\frac{S_L^0}{S_L} = 1 - \left(\frac{\mathcal{L}}{\delta_D} \right) \left(\frac{K \cdot \delta_D}{S_L} \right) = 1 + Ma \cdot Ka \quad (1-15)$$

，其中

$$S_L = \left(\frac{\rho_b}{\rho_u} \right) \cdot \frac{dr_f}{dt}, \quad K = \frac{2}{r_f} \cdot \frac{dr_f}{dt}, \quad \delta_D = \frac{D_{12,u}}{S_L}$$

上式中 r_f 表示火焰的位置， δ_D 爲考慮質量擴散的火焰厚度。

(2) 平面延展的火焰 (Clavin, 1985; Law, 1986, 1988; Searby, 1990)

$$\frac{S_L}{S_L^0} = 1 - \left(\frac{\mathcal{L}}{S_L} \right) \left(\frac{K \cdot \delta_L}{S_L^0} \right) = 1 - Ma \cdot Ka \quad (1-16)$$

，其中

$$K = -\frac{du}{dx}, \quad \delta_L = \frac{\alpha}{S_L^0}$$

式中 S_L 為火焰燃燒速度，而 S_L^0 為未受延展效應的層流火焰速度。Clavin (1985) 視係數 $\mathcal{L}$ 為火焰對延展反應量測，稱為馬克斯坦長度 (Markstein Length)。對於火焰的不穩定性或流體延展對於火焰傳播的影響，表示成如下的無因次參數：

- 馬克斯坦數 (Ma, Markstein Number)

Markstein (1951) 首先針對預混火焰的局部燃燒速度與火焰前緣曲率間的關係，建構其傳播速度的理論式

$$\frac{S_L - S_L^0}{S_L^0} = Ma \frac{(\alpha/S_L^0)}{R_C} \quad (1-17)$$

式中的 R_C 表示為火焰前緣的曲率半徑。早期的研究指出，Ma 值被定義為 $\mathcal{L}/\delta_L$ 。Markstein (1964) 則進一步確認以發散流場來修正局部燃燒速度。發展至今，Clavin (1985) 對火焰燃燒速度受流體延展修正的完整描述

$$\frac{S_L - S_L^0}{S_L^0} = Ma \left(\frac{(\alpha/S_L^0)}{R_C} + \frac{1}{S_L^0} \vec{n} \cdot \nabla u \right) \quad (1-18)$$

Clavin & Williams (1982) 曾使用單一步驟的化學反應來討論大活化能、低延展的火焰，將熱傳導、黏滯性以及定壓比熱等氣體性質視為固定不變情況下，Ma 的理論預測式表示如下

$$Ma = \frac{1}{\gamma} \cdot \text{LOG} \left(\frac{1}{1-\gamma} \right) + \frac{Ze}{2} (Le-1) \frac{1-\gamma}{\gamma} \int_0^{\gamma/(1-\gamma)} \frac{\text{LOG}(1+x)}{x} dx \quad (1-19)$$

，其中 γ 為

$$\gamma = \frac{T_b - T_u}{T_b}$$

Clavin & Garcia (1983)曾考慮氣體性質在非定值時（溫度的函數），推導出能更廣泛適用的 Ma 表示式

$$Ma = \frac{1}{\gamma} \cdot \int_{T_u}^{T_b} \frac{\Lambda(T)}{T} dT + \frac{Ze}{2} (Le - 1) \frac{1 - \gamma}{\gamma} \int_{T_u}^{T_b} \text{LOG} \left(\frac{T_b - T_u}{T - T_u} \right) \frac{\Lambda(T)}{T} dT \quad (1-20)$$

式中的擴散項 Λ 在先前的研究是使用氣態氦氣的性質。

Searby & Clavin (1986)曾討論穩定性（重力效應， Fr_c 與 Farrius-Landau 流力不穩定性， ρ_u/ρ_b ）對火焰傳播的影響，所推出的 Ma 表示式如下

$$Ma = \frac{\gamma}{(\gamma + 2)} \left[\frac{Fr_c}{4(1 - \gamma)} + \frac{2}{\gamma} \int_{T_u}^{T_b} \frac{\Lambda(T)}{T} dT - \Lambda(T_b) - (2 \cdot \text{Pr} - 1) \int_{T_u}^{T_b} \frac{\Lambda(T_b) - \Lambda(T)}{T_b - T_u} dT \right] \quad (1-21)$$

，其中 Fr_c 為未受擾動的層流火焰中首度出現瞬間非穩定結構時的臨界數。

Liñán & Clavin (1987)曾在縮減的反應機構（氫氣-鹵素間的反應）、擴散係數固定不變的條件下，討論火焰的傳播行為，所推的 Ma 表示式亦與上述理論相似，差異僅在於 $Ze \cdot (Le - 1)$ 的項次上。Peters (1987)使用四步驟化學反應機構，漸近分析延展的甲烷/空氣火焰之傳播行為，在可燃氣性質固定不變下，將 Ma 表示如下

$$Ma = \frac{\mathcal{L}}{\delta_L} = \frac{1 + \Delta}{\Delta} \left[\text{LOG}(1 + \Delta) + \frac{Ze}{2} \frac{(Le - 1)}{Le} \int_0^1 \frac{\text{LOG}(1 + x)}{x} dx \right] \quad (1-22)$$

，其中 Δ 定義為

$$\Delta \equiv \frac{T_{in} - T_u}{T_u}$$

上式與之前研究最大的差異，在於特徵溫度已由燃氣溫度改為內層溫度。

Kwon (1992) 對 L 做了一個正比於特徵火焰厚度 δ_L 的假設，由於二者均代表火焰內發生質量與熱能擴散的距離尺度。對向外傳播的球形火焰而言，愈低的 Ma 值表示火焰不穩定愈早發生，Bradley (1994) 指出當 $Ma \leq 1.5$ 時，火焰焰面就會有不穩定發生。球形火焰傳播之初，在高的延展率、熱擴散等的影響下，具有穩定火焰焰面的作用，去對抗由燃氣與未燃氣間密度差異所導致的不穩定性。最後，向外傳播的火焰焰面終將變得不穩定。而這樣的火焰行為的觀察記錄，對於提供我們瞭解不穩定性發展的詳細過程有莫大的助益。

愈大的 Ma ，在火焰傳播之初會有愈大的穩定作用，使火焰表面保持平滑。在充分小 Ma ，特別是當它為負值時，熱擴散效應不再有穩定火焰的作用，而焰面開始出現裂紋等不穩定的現象，甚至到最後焰面發展成細胞狀（或鬱金香狀）結構的火焰。火焰前緣在負的延展加上負的 Ma 值作用下，將會導致局部火焰的熄滅與火焰前緣的破裂。特別是對於 Ma 為負值例子，熱擴散效應在很小的長度尺度（接近火焰厚度）有破裂火焰焰面的作用。

Le 可藉由以下方式控制火焰的穩定性：對充分低的 Le 值，火焰將變得不穩定而呈現起皺的火焰結構；對充分大的 Le 值，並不會有這些起皺的火焰行為。如前所述，對於紊流火焰前緣被流體的不均勻性連續扭曲，帶有較小 Le 值的火焰要比大的 Le 值火焰更易於出現焰

面起皺的行爲。

- 卡爾威茲數 (Ka, Karlovitz Number)

火焰延展的無因次參數 (Ka)，該數為局部特徵火焰駐留時間與火焰延展時間的比值 ($K/(S_L/\delta_L)$)。Bradley (1994, 1996, 1998) 以照相記錄分析火焰的速度 (量測提供我們瞭解應變率與曲率效應對火焰傳播的影響)，而受延展的火焰行爲可直接從它未受延展的火焰性質作修正。在這樣的觀點下，提供一個便利的方式去求解層流火焰速度與 Ma。

延續前節層流火焰速度的討論，進一步針對的流場的延展 (對衝平面、延展火焰) 或非平面的球形火焰等燃燒狀況的傳播速度作修正。在討論有關 Ma 的解析表示式，與之比較的實測數據將採用向外傳播的球形火焰為主，而平面延展火焰的數據為輔。主要是因為平面延展火焰求取速度分佈所採用的參考坐標，將導致其 Ma 值均為正，無負值的 Ma 發生。負值的 Ma 是有其特殊物理意義，特別是對於球形火焰，其所代表的物理意義為火焰焰面開始顯現不穩定的現象 (起皺、裂紋等)，而此不穩定性會改變火焰的傳播速度。分析造成火焰不穩定的原因，一般相信與流力的膨脹(ρ_u/ρ_b)與擴散效應(Le)非常有關。所以，對於 Ma 的理論探討，亦將從上述二個變因做出發，適宜的修正預測式中的常數，以期與量測值有更佳的吻合性。

1.1.8 火焰熄滅現象

燃燒熄滅，包含著複雜的化學、流體及擴散機構等方面的效應，但拜科技的進步，已有很多有關燃燒系統內反應機構的預測模式被提出。Buckmaster (1976)、Joulin & Clavin (1976)以漸近展開法分析單一步驟化學反應機構，在非常大的活化能條件下，考慮熱能的影響。Williams (1981)、Nishioka (1994)等人則研究一維燃燒之熄滅現象，得C形曲線，而熄滅視為該曲線之反趨點處。Sato (1982, 1983)、Tsuji & Yamaoka (1982)、Libby (1983) 以及 Abdel-Gayed (1984)等人曾提出，在忽略熱損失、完全反應下，預混紊流火焰的熄滅可由Le值來加以控制。預混對衝、平面火焰於正延展率的作用下：燃料的Le值小於1.0時，會導致火焰溫度與反應率的增加，熄滅時火焰與停滯面間並沒有間距存在；Le值大於1.0，反應溫度與反應率會減少，延展率的增加將使火焰向停滯面移去，熄滅時火焰與停滯面間是有間距的。

Ishizuka & Law (1982)、Libby & Williams (1984)主張火焰的延展率與不完全反應將導致火焰熄滅。Poinsot (1991)則提出火焰熄滅應該是由熱損失所造成。Roberts (1993)則將此歸咎於複雜的化學反應機構。事實上，影響火焰熄滅之因素包含有火焰延展率、熱損失、可燃氣性質、不完全反應機構等效應所造成。因此，以不同的實驗設備、方法及流場佈置來量測火焰熄滅的範圍，將會深深受到火焰形式、實驗設施的影響，導致熄滅的量測會有顯著的差異存在。Sato & Tsuji (1982, 1983)指出當Le大於其臨界值時，在充分大的延展率下，火焰在停滯面前某一定的距離熄滅掉。另外，當Le小於其臨界值時，隨著延展率持續的加大會將火焰推靠至停滯面上，而造成其熄滅的原因是由於不完全反應所致 (Law, 1988)。

(1) Le 值大於 1.0 的火焰在完全反應下熄滅

Liñán (1974) 推得延展率參數為

$$Ka = \left[Le \left(\frac{T_f}{T_{ad}} \right)^2 I(\sqrt{Ka \cdot Le} \tilde{x}_f) \right]^2 \exp \left[T_a \left(\frac{1}{T_{ad}} - \frac{1}{T_f} \right) + (Ka \cdot Le) \tilde{x}_f^2 \right] \quad (1-23)$$

其中 $\tilde{x}_f$ 為火焰位置，而熄滅狀態可從條件式 $dKa/d\tilde{x}_f = 0$ 得到。

(2) Le 值小於 1.0 的火焰在不完全反應下熄滅

Joulin & Clavin (1976, 1979) 推得延展率參數為

$$Ka = \frac{\pi}{2} \left[Le \left(\frac{T_f}{T_{ad}} \right)^2 \right]^2 \left[1 + \left(\frac{T_{ad}}{T_f} \right)^2 \frac{\phi_{1,w}}{Le} \right] \exp \left[T_a \left(\frac{1}{T_{ad}} - \frac{1}{T_f} \right) - \left(\frac{T_{ad}}{T_f} \right)^2 \frac{\phi_{1,w}}{Le} \right] \quad (1-24)$$

，其中火焰溫度可表示如下

$$T_f = T_u + \frac{T_{ad} - T_u}{\sqrt{Le}} \quad [K]$$

當上游的擾動被抑制時，火焰總是在反應物洩漏量 $\phi_{1,w,E} = 0$ 時熄滅，此意謂當火焰一接觸到停滯面火焰立即熄滅。

Law (1992) 則進一步對上式作修正如下

$$Ka = \frac{\pi}{2} \left[Le \left(\frac{T_f}{T_{ad}} \right)^2 \right]^2 \left[1 + \left(\frac{T_{ad}}{T_f} \right)^2 \frac{\phi_{1,w}}{Le} \right] \exp \left[T_a \left(\frac{1}{T_{ad}} - \frac{1}{T_f} \right) - \left(\frac{T_{ad}}{T_f} \right)^2 \frac{\phi_{1,w}}{\sqrt{Le}} \right] \quad (1-25)$$

其中反應物的洩漏量， $\phi_{1,w}$ ，而熄滅發生在一定量的反應物洩漏

$$\phi_{l,w,E} = (T_f/T_{ad})^2 (\sqrt{Le} - Le) \quad (1-26)$$

本研究主要是討論當量值小於 1.0 的貧燃料，而 Le 值的討論集中在大於 1.0 的氣態碳氫-空氣火焰，因此對 Ka 的研究將以公式 1-23 的理論式出發。

Libby & Williams (1982)、Bray (1984) 等人指出紊流燃燒中，受延展的預混層流火焰扮演著重要的角色，因為可將火焰面視為許多小的層流火焰所組成。火焰熄滅發生在火焰前緣遭受外部擾動所引起，像是熱損失或流力的延展等，當它們的強度足夠到讓火焰前緣的反應率降低至維持火焰的臨界值，甚至在某些情況可完全壓制燃燒過程。在反應物與產物之反向、對衝的平面延展火焰，Libby & Williams (1982)、Libby (1983) 等人漸近分析指出延展率可明顯降低火焰速度，在非絕熱或 Le 值大於 1.0 時，僅以延展效應就可導致火焰熄滅。而這些研究結果可經由使用簡單或複雜化學機構的數值計算 (Darabiha, 1986; Giovangigli & Smooke, 1987) 或實驗 (Ishizuka & Law, 1982; Sato, 1982; Law, 1986) 來加以驗證。所以，延展機構在預混紊流的部分或完全熄滅是扮演重要的角色，特別是在近期有很多模式 (Bray, 1987; Darabiha, 1988; Candel & Poinso, 1990) 均將其視為影響傳播速度的重要參數。關於預混紊流燃燒的範圍，目前所採用的定義仍有很多的問題存在，特別是對於熄滅判斷的選定。對由流體擾動導致所謂的熄滅，有以下幾點是需要被考慮到的：

- (1) 擾動尺度比起它所要延展的火焰厚度要小的多 (Peters, 1986)。
- (2) 對於所有擾動尺度，當其尺度接近於火焰尺度，黏滯消散將變

得異常重要。熄滅前，擾動的能量將被黏滯性所消散。

(3) 當擾動尺寸小於火焰前緣的厚度時，將導致非常大的局部曲率和相關的熱擴散效應，而這些效應會妨礙延展的影響。

(4) 渦流與火焰前緣的交互作用，實質上是非穩態的，火焰的反應視延展的時間進展、渦流的存在週期而定。

對於火焰熄滅的詳細機構，本文並不打算涉獵太多。至於有關熄滅的延展效應討論，雖然不能以層流火焰所推導的理論直接應用、解釋之，但爲了要對火焰傳播的界限有所瞭解，有必要對火焰所能承受的最大延展做深入的探討。

1.2 研究動機與目的

預混層流火焰的行爲，一直以來是被視爲挑戰紊流火焰的基礎，透過流力、反應機構以及稀釋氣體的探討使得我們對火焰的傳播行爲與火焰結構有著更深入的瞭解。本文的動機，乃根基於縮減反應機構的理論基礎，將貧極限視爲傳播機構的終點(ϕ_{Limit} , $S_{L,min}$)，透過內層溫度、活化能溫度來探討火焰結構與燃燒反應，對於火焰傳播速度將尋求以更精簡的理論式來表示，特別是對於內層溫度的研究，將採用不同於縮減反應的另法來求解。目的就是希望藉由巨觀、可量測的火焰速度來決定微觀、不易觀察的火焰特性，將各種影響火焰傳播速度的效應，如壓力、溫度以及惰性氣體等，擴展至微觀火焰特性的討論上。

1.3 研究方法簡述

檢視上述這些研究的預期目標後，對於預混碳氫火焰，本研究將從二方面著手，研究流程如圖 1-5 所示：

- (1) 火焰結構 - 首先，對於火焰傳播的分析，將以理想的層流火焰速度進行討論，對一般常見的氣態碳氫燃料，找出預測傳播速度的理論通式。以貧極限、層流火焰速度與當量值間的關係，適當的決定內層溫度和能量參數，並將內層溫度應用至火焰相關尺寸的討論上。
- (2) 燃燒系統 - 以燃燒速度與絕熱火焰溫度間的變化，適當的決定活化能溫度，並將此溫度用於燃燒系統之無因次參數- Ka 或 Da 的估算上，以期對反應快慢有著更深入的瞭解。

第二章氣體研究將廣泛討論氣體性質與溫度間的變化，考慮在不同混合狀況下， Le 的估算式；第三章將採用縮減反應、傳播機構的觀點，以內層溫度和活化能溫度，漸近的分析火焰傳播速度、火焰尺寸以及燃燒系統的 Ka_{max} 和 Da ；第四章主要是觀測甲烷、丙烷燃料的本生式火焰，在氦氣、氬氣及氮氣等氣體的稀釋下，研究火焰塌陷、吹熄以及明亮火焰錐的變化情形；第五章將探討稀釋氣體種類與氧化劑組成對 Le 、絕熱火焰溫度的影響，以內層溫度、活化能溫度及能量參數討論各種效應對火焰特性和傳播行為的影響；第六章將對火焰傳播速度、火焰結構以及燃燒系統等的預測結果做一總結。

第二章 氣體性質的計算

2.1 理論背景

燃氣性質的研究，對於瞭解火焰的行為是非常具有啓發性，在某些方面甚至可提供火焰現象的合理解釋。在這樣的想法下，建立一個能廣泛預測可燃氣行為的理論模式是有其必要，而這種描述可燃氣體行為的理論，除了可供我們瞭解氣體性質對火焰的影響外，亦可應用於分析火焰結構、傳播速度的討論上。因此，對氣體熱力、傳輸性質與溫度間的變化有必要做更深入的研究，本文將針對不同的氣體，具體的以溫度、分子質量及碰撞等變數來精確表示其性質。對於碳氫可燃氣，在不同的稀釋氣體、氧化劑組成的變化下，推導出能考慮不同混合狀況的 Le 值估算式。

一般對火焰厚度的研究，常使用 $\delta_L = \nu / S_L^0$ 來估算，但對真實的火焰，往往是被低估的。

- 早期有 Jamel (1984) 修正為 $50\nu / S_L^0$ 。
- 近期有 Roberts (1993)、Chung (1995) 等人修正至 $6 \sim 7.4\nu / S_L^0$ 。

檢視誤差的來源發現：氣體的 Pr 值約介於 0.7~0.8，而碳氫燃料的層流火焰速度介於 20~70 公分/秒，所以使用黏滯性或熱擴散性或速度所造成的差異應該不大。除非氣體性質不該使用未燃或已燃的溫度來估算，而需在燃氣溫度與未燃溫度間另擇一有特殊意義的溫度來計

算。在此，是採用可燃氣開始發生化學反應的溫度（內層溫度）來估算氣體性質，以有效減少此種低估的誤差。因此，瞭解氣體在非室溫狀況的相關訊息對精確的燃燒計算是有其必要性，以下將對氣體性質與溫度間的變化做深入探討。

2.2 熱力性質

燃燒計算中，如果可燃氣性質為非定值時，往往在理論式中會有對氣體性質做溫度積分的項次出現。而氣體性質中，又以熱擴散性、定壓比熱及密度最常被提出來討論。特別是本文在探討火焰結構方面，將以縮減的反應機構出發，透過熱擴散性、內層溫度來研究火焰尺寸的变化，尤其是相關尺寸的計算會大量使用到氣體性質。所以，對於熱擴散性、定壓比熱等性質將更具體的以溫度來表示，尤其是在溫度介於 300~1200 K 間（此為一般氣體碳氫燃料預熱溫度範圍）。另外，為了使推導的理論式更精簡、易讀，在做四則運算、微積分時能更易於化簡預測式，氣體性質的函數將採用溫度的指數形式。以下就常見的氣體性質，在不同的溫度區段，以最佳的函數模擬之：

氣體的定壓比熱-

甲烷 (CH_4): $C_p/R = 4.24(T/298\text{K})^{0.6}$ ，適用溫度範圍 298~1000 K

$C_p/R = 4.89(T/298\text{K})^{0.5}$ ，適用溫度範圍 1000~1500 K

乙炔 (C_2H_2): $C_p/R = 5.41(T/298\text{K})^{0.35}$ ，適用溫度範圍 298~1000 K

$C_p/R = 5.67(T/298\text{K})^{0.3}$ ，適用溫度範圍 1000~1500 K

乙烯 (C_2H_4): $C_p/R = 5.32(T/298\text{K})^{0.65}$ ，適用溫度範圍 298~1000 K

$$C_p/R = 7.19(T/298K)^{0.38}, \text{適用溫度範圍 } 1000\sim 1500 \text{ K}$$

乙烷 (C_2H_6): $C_p/R = 6.42(T/298K)^{0.7}$, 適用溫度範圍 298~1000 K

$$C_p/R = 9.19(T/298K)^{0.4}, \text{適用溫度範圍 } 1000\sim 1500 \text{ K}$$

丙烷 (C_3H_8): $C_p/R = 9.22(T/298K)^{0.7}$, 適用溫度範圍 298~1000 K

$$C_p/R = 13.22(T/298K)^{0.4}, \text{適用溫度範圍 } 1000\sim 1500 \text{ K}$$

氫氣 (H_2): $C_p/R = 3.67(T/298K)^{0.04}$, 適用溫度範圍 298~500 K

$$C_p/R = 3.25(T/298K)^{0.03}, \text{適用溫度範圍 } 500\sim 1000 \text{ K}$$

$$C_p/R = 10.93(T/298K)^{0.4}, \text{適用溫度範圍 } 1000\sim 1500 \text{ K}$$

氮氣 (N_2): $C_p/R = 90.0(T/298K)^{0.6}$, 適用溫度範圍 298~500 K

$$C_p/R = 3.28(T/298K)^{0.15}, \text{適用溫度範圍 } 500\sim 1500 \text{ K}$$

氧氣 (O_2): $C_p/R = 3.49(T/298K)^{0.15}$, 適用溫度範圍 298~1000 K

$$C_p/R = 3.63(T/298K)^{0.12}, \text{適用溫度範圍 } 1000\sim 1500 \text{ K}$$

一氧化碳 (CO): $C_p/R = 3.50(T/298K)^{0.04}$, 適用溫度範圍 298~500 K

$$C_p/R = 3.32(T/298K)^{0.15}, \text{適用溫度範圍 } 500\sim 1000 \text{ K}$$

二氧化碳(CO_2): $C_p/R = 4.50(T/298K)^{0.32}$, 適用溫度範圍 298~1000 K

$$C_p/R = 5.26(T/298K)^{0.18}, \text{適用溫度範圍 } 1000\sim 1500 \text{ K}$$

水氣 (H_2O): $C_p/R = 4.04(T/298K)^{0.09}$, 適用溫度範圍 298~500 K

$$C_p/R = 3.58(T/298K)^{0.28}, \text{適用溫度範圍 } 500\sim 1500 \text{ K}$$

惰性氣體 (如 He、Argon 等): $C_p/R = 2.50$

氣體的密度 -

甲烷 (CH₄): $\rho_u/\rho = 0.992(T/298K)$, $\rho_u = 0.64 \times 10^{-3} \text{ [g/cm}^3\text{]}$

適用溫度範圍 298~600 K

乙烷 (C₂H₆): $\rho_u/\rho = 0.983(T/298K)$, $\rho_u = 1.20 \times 10^{-3} \text{ [g/cm}^3\text{]}$

適用溫度範圍 298~600 K

丙烷 (C₃H₈): $\rho_u/\rho = 1.013(T/298K)$, $\rho_u = 1.80 \times 10^{-3} \text{ [g/cm}^3\text{]}$

適用溫度範圍 298~600 K

氫氣 (H₂): $\rho_u/\rho = 0.992(T/298K)$, $\rho_u = 0.08 \times 10^{-3} \text{ [g/cm}^3\text{]}$

適用溫度範圍 298~400 K

氮氣 (N₂): $\rho_u/\rho = 0.998(T/298K)$, $\rho_u = 1.12 \times 10^{-3} \text{ [g/cm}^3\text{]}$

適用溫度範圍 298~1500 K

氧氣 (O₂): $\rho_u/\rho = 0.992(T/298K)$, $\rho_u = 1.28 \times 10^{-3} \text{ [g/cm}^3\text{]}$

適用溫度範圍 298~380 K

水氣 (H₂O): $\rho_u/\rho = 0.811(T/298K)$, $\rho_u = 0.59 \times 10^{-3} \text{ [g/cm}^3\text{]}$

適用溫度範圍 373~2000 K

氦氣 (He): $\rho_u/\rho = 0.998(T/298K)$, $\rho_u = 0.16 \times 10^{-3} \text{ [g/cm}^3\text{]}$

適用溫度範圍 298~1500 K

氬氣 (Argon): $\rho_u/\rho = 0.992(T/298K)$, $\rho_u = 1.60 \times 10^{-3} \text{ [g/cm}^3\text{]}$

適用溫度範圍 298~380 K

在具備了這些氣體性質的知識後，除了對可燃氣（由碳氫燃料、氧氣及稀釋氣體所構成的混合氣）相關性質的平均值做更合理的估算外，對可燃氣性質在開始發生化學反應（該狀況的溫度為內層溫度）時的值更能精確求得。

2.3 傳輸性質

Strehlow (1979)在氣體的傳輸研究中，對於分子碰撞位能是採用 Lennard-Jones 位能來描述

$$\frac{\Theta(\sigma)}{\epsilon} = 4 \left[\left(\frac{\sigma_0}{\sigma} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_0}{\sigma} \right)^6 \right]$$

式中 σ 為分子間碰撞的直徑，當其等於 σ_0 時位能為零，能量參數 ϵ 則進一步無因次化為 kT/ϵ ，其中 k 為波茲曼常數 (1.38×10^{-23} J/K)。

Chapman-Enskog 理論對傳輸性質的研究結果整理如下

$$\text{黏滯性-} \quad \mu = 2.67 \times 10^{-5} \frac{\sqrt{M \cdot T}}{\sigma_0^2 \cdot \Omega_\mu} \quad [\text{g/cm s}] \quad (2-1)$$

$$\text{熱傳導-} \quad \lambda = \lambda_{mono} \left(1 + \frac{1}{Le_{mono}} \left(\frac{2}{5} \frac{C_p}{R} - 1 \right) \right) \quad [\text{J/cm s K}]$$

$$\lambda_{mono} = 8.33 \times 10^{-4} \frac{\sqrt{T/M}}{\sigma_0^2 \cdot \Omega_\lambda} \quad [\text{J/cm s K}] \quad (2-2)$$

$$\text{質量擴散性-} \quad D_{12} = 1.86 \times 10^{-3} \frac{\sqrt{T^3 (1/M_1 + 1/M_2)}}{P \cdot \sigma_{0,12}^2 \cdot \Omega_{D,12}} \quad [\text{cm}^2/\text{s}] \quad (2-3)$$

先前對氣體傳輸性質的研究，是針對不同氣體查表找出相關的 σ_0 、 ϵ 以及碰撞常數 (Ω_μ 、 Ω_λ 及 Ω_D)，將其代入公式 2-1、2-2 及 2-3 求得相關的傳輸性質。根據這些研究結果，本文除了以實驗數據修正其相關的係數外，研究的重點將集中在氣態碳氫燃料、稀釋氣體的研究上。茲將本研究與之前討論的相異處整理如下：

- 將碰撞常數 (Ω_μ 、 Ω_λ 及 Ω_D) 直接表示成以 kT/ϵ 為變數的函數。
- 針對不同的氣體分子，找出最適宜的溫度函數。
- 理論預測值除了以實驗值做修正外，將參與燃燒的氣體整理於表 3，利查詢比較。

在此，氣體的傳輸性質（黏滯性、熱擴散性及質量擴散性），本研究將在碰撞位能的理論基礎上，以分子量 (M)、碰撞直徑 (σ_0)、平均動能 (kT/ϵ) 及溫度具體的表示相關的傳輸性，並討論其適用的範圍。對不同的氣體種類，修正其常係數、溫度的指數值，將其值與實驗值模擬至最佳的吻合度為止。茲將修正後的理論式整理如下：

1. 動力黏滯性- 依氣體與溫度間的變化，分成以下二大類

- 碳氫燃料、二氧化碳

$$\mu = 1.60 \times 10^{-5} \sigma_0^{-2} M^{1/2} \left(\frac{kT}{\epsilon} \right)^{1/2} \cdot T^{1/2} \quad [\text{g/cm s}]$$

$$\nu \equiv \frac{\mu}{\rho} = 1.30 \times 10^{-3} \sigma_0^{-2} M^{-1/2} \left(\frac{kT}{\epsilon} \right)^{1/2} \cdot T^{3/2} \quad [\text{cm}^2/\text{s}] \quad (2-4)$$

- 簡單的多原子氣體

$$\mu = 1.78 \times 10^{-5} \sigma_0^{-2} M^{1/2} \left(\frac{kT}{\epsilon} \right)^{3/10} \cdot T^{1/2} \quad [\text{g/cm s}]$$

$$\nu \equiv \frac{\mu}{\rho} = 1.46 \times 10^{-3} \sigma_0^{-2} M^{-1/2} \left(\frac{kT}{\epsilon} \right)^{3/10} \cdot T^{3/2} \quad [\text{cm}^2/\text{s}] \quad (2-5)$$

氣體性質中的黏滯性在層流火焰中較少提及，但紊流火焰會有黏滯消散效應的存在，此種氣體性質在該處的重要性將被突顯。

2. 熱擴散性- 依氣體與溫度間的變化，分成以下二大類

- 碳氫燃料

$$\lambda = 2.2 \times 10^{-4} \sigma_0^{-2} M^{-1/2} \left(\frac{kT}{\epsilon} \right)^{1/2} \cdot \left[\frac{T^{0.42}}{(C_p/R)^{-1.108}} \right] \quad [\text{J/cm s K}]$$

$$\alpha \equiv \frac{\lambda}{\rho C_p} = 2.15 \times 10^{-3} \sigma_0^{-2} M^{-1/2} \left(\frac{kT}{\epsilon} \right)^{1/2} \cdot \left[\frac{T^{1.42}}{(C_p/R)^{-0.108}} \right] \quad [\text{cm}^2/\text{s}] \quad (2-6)$$

- 簡單的多原子氣體

$$\lambda = 2.1 \times 10^{-4} \sigma_0^{-2} M^{-1/2} \left(\frac{kT}{\epsilon} \right)^{3/10} \cdot \left[\frac{T^{1/2}}{(C_p/R)^{-0.97}} \right] \quad [\text{J/cm s K}]$$

$$\alpha \equiv \frac{\lambda}{\rho C_p} = 2.07 \times 10^{-3} \sigma_0^{-2} M^{-1/2} \left(\frac{kT}{\epsilon} \right)^{3/10} \cdot \left[\frac{T^{3/2}}{(C_p/R)^{0.03}} \right] \quad [\text{cm}^2/\text{s}] \quad (2-7)$$

氣體的熱傳導與溫度非常有關係。圖 2-1 是針對一般碳氫燃料，使用氬氣的熱性質加以無因次化後，得到一個非常具規則性的變化趨勢。

3. 質量擴散性 - 依氣體與溫度間的變化，分成以下二大類

- 多原子氣體

$$D_{12} = 0.95 \sim 1.20 \times 10^{-3} \sigma_{0,12}^{-2} \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^{1/2} \left(\frac{kT}{\epsilon} \right)_{12}^{1/2} \cdot T^{3/2} \quad [\text{cm}^2/\text{s}] \quad (2-8)$$

- 輕質、簡單的氣體

$$D_{12} = 1.10 \sim 1.40 \times 10^{-3} \sigma_{0,12}^{-2} \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^{1/2} \left(\frac{kT}{\epsilon} \right)_{12}^{3/10} \cdot T^{3/2} \quad [\text{cm}^2/\text{s}] \quad (2-9)$$

上述質量擴散性的常數項，係根據 David (1995) 所提供的相關資料模

擬而得。圖 2-2 在大量空氣的條件下，以公式 2-8、2-9 來模擬氣體的質量擴散性，分析指出以不同的能量項 (kT/ϵ) 指數來描述氣體種類的差異。

2.4 無因次參數-Le

Le，定義為未燃混合氣的熱擴散與質量擴散的比值，為了對 Le 值的範圍有一概略性的了解，以下將針對極貧、極富二種燃燒特例做討論。

對於極貧燃料而言，此燃燒狀況之 Le (熱擴散性以氧化劑的性質近似；質量擴散性則須綜合考量燃料-氧氣和燃料-稀釋氣體間的效應) 可表示如下

$$\begin{aligned}
 Le &= \frac{\alpha_{oxidant}}{D_{fuel-oxidant}} = const. \frac{\sigma_{0,oxidant}^{-2} \cdot M_{oxidant}^{-1/2} \cdot (\epsilon/k)_{oxidant}^{-3/10}}{\sigma_{0,fuel-oxidant}^{-2} \cdot \left(1/M_{fuel} + 1/M_{oxidant}\right)^{1/2} \cdot (\epsilon/k)_{fuel-oxidant}^{-1/2}} \\
 &= const. \left(\frac{\sigma_{0,fuel}}{\sigma_{0,oxidant}} + 1 \right)^2 \left(\frac{1/M_{fuel}}{1/M_{oxidant}} + 1 \right)^{-1/2} \left[\frac{(\epsilon/k)_{fuel}}{(\epsilon/k)_{oxidant}^{1/5}} \right]^{1/4} \\
 &= f(\bar{\sigma}_0, \bar{M}, \bar{\epsilon/k}) \quad (2-10)
 \end{aligned}$$

在不同稀釋氣體的作用下，碳氫燃料的分子碰撞參數 σ_0 、 ϵ/k ，其無因次結果顯示於圖 2-3、圖 2-4。對於極貧燃料之 Le 值的完整計算結果則列於表 4，而氧化劑組成是仿空氣的比率。碳氫燃料在不同氣體的稀釋下，比較極貧燃料之 Le 值的大小順序為

- CH_4 與氧化劑 (21% O_2 和 79%稀釋氣體)

$$\text{Le}_{\text{H}_2\text{O}} < \text{Le}_{\text{CO}_2} < \text{Le}_{\text{N}_2} (\doteq 1.0) < \text{Le}_{\text{Argon}} (< 2.0) < \text{Le}_{\text{He}}$$

- C_2H_2 與氧化劑 (21% O_2 和 79%稀釋氣體)

$$\text{Le}_{\text{H}_2\text{O}} < \text{Le}_{\text{CO}_2} (< 1.0) < \text{Le}_{\text{N}_2} < \text{Le}_{\text{Argon}} (< 2.0) < \text{Le}_{\text{He}}$$

- C_2H_4 與氧化劑 (21% O_2 和 79%稀釋氣體)

$$\text{Le}_{\text{H}_2\text{O}} < \text{Le}_{\text{CO}_2} (\doteq 1.0) < \text{Le}_{\text{N}_2} < \text{Le}_{\text{Argon}} (< 2.0) < \text{Le}_{\text{He}}$$

- C_2H_6 與氧化劑 (21% O_2 和 79%稀釋氣體)

$$\text{Le}_{\text{H}_2\text{O}} (< 1.0) < \text{Le}_{\text{CO}_2} < \text{Le}_{\text{N}_2} < \text{Le}_{\text{Argon}} (< 2.0) < \text{Le}_{\text{He}}$$

- C_3H_8 、 C_4H_{10} 、 C_5H_{12} 及 C_6H_{14} 與氧化劑 (21% O_2 和 79%稀釋氣體)

$$1.0 < \text{Le}_{\text{H}_2\text{O}} < \text{Le}_{\text{CO}_2} < \text{Le}_{\text{N}_2} < \text{Le}_{\text{Argon}} (< 3.0) < \text{Le}_{\text{He}}$$

對於極富燃料而言，此燃燒狀況之 Le 值（混合氣體的熱擴散性以燃料的近似，質量擴散性則須綜合考量燃料-氧氣和燃料-稀釋氣體間的效應）可表示如下

$$\begin{aligned} \text{Le} &= \frac{\alpha_{\text{fuel}}}{D_{\text{fuel-oxidant}}} = \text{const.} \cdot \frac{\sigma_{0,\text{fuel}}^{-2} \cdot M_{\text{fuel}}^{-1/2} \cdot (\epsilon/k)_{\text{fuel}}^{-1/2}}{\sigma_{0,\text{fuel-oxidant}}^{-2} \cdot (1/M_{\text{fuel}} + 1/M_{\text{oxidant}})^{1/2} \cdot (\epsilon/k)_{\text{fuel-oxidant}}^{-1/2}} \\ &= \text{const.} \cdot \left(\frac{\sigma_{0,\text{oxidant}}}{\sigma_{0,\text{fuel}}} + 1 \right)^2 \left(\frac{1/M_{\text{oxidant}}}{1/M_{\text{fuel}}} + 1 \right)^{-1/2} \left[\frac{(\epsilon/k)_{\text{oxidant}}}{(\epsilon/k)_{\text{fuel}}} \right]^{1/4} \\ &= f(\bar{\sigma}_0, \bar{M}, \bar{\epsilon/k}) \end{aligned} \quad (2-11)$$

針對不同稀釋氣體，碰撞參數 σ_0 、 ϵ/k 的無因次結果則顯示於圖 2-3、圖 2-4，而極富燃料之 Le 值的完整計算結果，亦列於表 4。碳氫燃料

在不同氣體的稀釋下，比較極富燃料之 Le 值的大小順序為

- CH_4 與氧化劑 (21% O_2 和 79%稀釋氣體)

$$Le_{He} \ll Le_{H_2O} (< 1.0) < Le_{N_2} < Le_{Argon} < Le_{CO_2} (< 2.0)$$

- C_2H_2 與氧化劑 (21% O_2 和 79%稀釋氣體)

$$Le_{He} \ll Le_{H_2O} < Le_{N_2} < Le_{Argon} < Le_{CO_2} (< 1.0)$$

- C_2H_4 與氧化劑 (21% O_2 和 79%稀釋氣體)

$$Le_{He} \ll Le_{H_2O} < Le_{N_2} (< 1.0) < Le_{Argon} < Le_{CO_2}$$

- C_2H_6 與氧化劑 (21% O_2 和 79%稀釋氣體)

$$Le_{He} \ll Le_{H_2O} < Le_{N_2} < Le_{Argon} (< 1.0) < Le_{CO_2}$$

- C_3H_8 、 C_4H_{10} 、 C_5H_{12} 及 C_6H_{14} 與氧化劑 (21% O_2 和 79%稀釋氣體)

$$Le_{He} \ll Le_{H_2O} < Le_{N_2} < Le_{Argon} < Le_{CO_2} (< 1.0)$$

一般而言，可燃氣的有效 Le 值可有以下兩種方式來進行估算：

1. 與混合氣濃度無關

混合氣體的平均傳輸性質，視參與的氣體種類直接使用代數運算求取平均值。

$$Le = \frac{\alpha_m}{D_{fuel-oxidant}} = \frac{\sqrt{\alpha_{fuel} \cdot \alpha_{oxidant}}}{D_{fuel-oxidant}} \quad (2-12)$$

，其中 $\alpha_{oxidant}$ 、 $D_{fuel-oxidant}$ 可由以下方式求得

$$\sigma_{0,oxidant} = \frac{\sigma_{0,oxygen} + \sigma_{0,dilute}}{2}, \quad \sigma_{0,fuel-oxidant} = \frac{\sigma_{0,fuel} + \sigma_{0,oxygen} + \sigma_{0,dilute}}{2}$$

$$(\epsilon/k)_{oxidant} = \sqrt{(\epsilon/k)_{oxygen} \cdot (\epsilon/k)_{dilute}},$$

$$(\epsilon/k)_{fuel-oxidant} = \sqrt{(\epsilon/k)_{fuel} \cdot (\epsilon/k)_{oxygen} \cdot (\epsilon/k)_{dilute}}$$

上述方式雖然可快速的估算出混合氣的平均傳輸性質、Le 值，一旦要討論在不同當量值或氧化劑組成的變化時，則無法提供令人滿意的答案。

2. 與混合氣濃度有關

如考慮可燃氣的混合狀況，假設碳氫燃料 (C_xH_y) 在當量值 (ϕ)、氧化劑中氧氣的莫耳百分比為 z 的情況，可燃氣的 Le 值表示式為

$$Le = \frac{\alpha_m}{D_{fuel-oxidant}}$$

，可燃氣當量值為 ϕ 的碳氫化學反應為



由於混合氣熱擴散性，必須綜合考量燃料與氧化劑的氣體性質，所以其理論式可表示如下

$$\alpha_m = \frac{\phi}{\phi + (x + 0.25y)} \alpha_{fuel} + \frac{(x + 0.25y)}{\phi + (x + 0.25y)} \alpha_{oxidant}$$

最後，考量可燃氣混合狀況的 Le 值表示式

$$\text{碳氫燃料} - Le = \frac{\alpha_{oxidant}}{D_{fuel-oxidant}} \left[\frac{\phi}{\phi + (x + 0.25y)} \frac{\alpha_{fuel}}{\alpha_{oxidant}} + \frac{(x + 0.25y)}{\phi + (x + 0.25y)} \right],$$

$$\text{氫氣} - Le = \frac{\alpha_{oxidant}}{D_{fuel-oxidant}} \left[\frac{2\phi}{2\phi+1} \frac{\alpha_{fuel}}{\alpha_{oxidant}} + \frac{1}{2\phi+1} \right] \quad (2-13)$$

，其中氧化劑的氣體性質可進一步表示如下

$$\alpha_{oxidant} = z \cdot \alpha_{oxygen} + (1-z) \cdot \alpha_{dilute}$$

$$D_{fuel-oxidant} = z \cdot D_{fuel-oxygen} + (1-z) \cdot D_{fuel-dilute}$$

以空氣為氧化劑的例子，

當量值 Le、燃料		0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
Le	甲烷	1.0034	1.0052	1.0069	1.0084	1.0098
	乙炔	1.0285	1.0145	1.0013	0.9889	0.9772
	乙烯	1.1523	1.1473	1.1426	1.1382	1.1340
	乙烷	1.2386	1.2298	1.2215	1.2136	1.2060
	丙烷	1.5758	1.5603	1.5454	1.5309	1.5170
	氫氣	1.2650	1.3330	1.3913	1.4409	1.4839

本文採用考慮氣體混合狀況的估算式，研究氧化劑組成或可燃氣當量值變化對氣體平均性質的影響。在第三章有關火焰傳播速度的計算或是估算火焰尺寸，相關的可燃氣性質亦採用此種方式來求取平均，並以內層溫度計算其值。在第五章中將依此理論，考慮在不同的惰性氣體、氧化劑組成以及當量值的變化下，深入討論對 Le、絕熱火焰溫度的影響。

第三章 火焰行爲的分析

3.1 理論背景

對於能預測污染物形成、點火現象以及熄滅極限的燃燒模式，這樣的理論往往必須考慮更詳細的化學反應機構與更複雜的傳輸行爲。但隨著反應物種和計算區間複雜幾何的增加，將大大的增加模擬計算上的負擔。雖然平行處理與數值技巧上的改進，能有效的增進我們求解問題的能力，但時至今日，對於三維空間、詳細的氣體性質、隨時間變動的燃燒系統依舊尚待克服。求解這類燃燒問題的主要困難，是源自於所考量的反應物種數量和必要的計算格點數。雖然對某些燃燒例子，可藉由降低計算格點區間的維度來加以研究，但對大部分的燃燒問題，此種簡化既不適宜、也不符合科學的精神。

由此可知，假如我們能夠在降低參與反應物種數目的同時、又能兼顧到對反應機構的預測能力話。此種縮減反應機構的好處，在於可以利用現存的技巧解決更多問題，而且目前個人電腦計算能力又有長足的進步，對於解決大量格點數的計算問題，已無難處。Peters (1985)、Peters & Kee (1987)、Peters & Williams (1987)以及 Bilger (1990)等人都曾深入討論如何以縮減反應機構 (Reduced Reaction Mechanism) 來描述火焰行爲。相對於 Dixon-Lewis (1979)、Warnatz (1984)、Westbrook & Dryer (1979)及 Miller (1982, 1983)等人的研究是考慮以更詳細的反應機構來討論火焰行爲。此種縮減的反應機構曾被

成功的描述預混層流甲烷-空氣火焰，尤其是將詳細的化學反應有系統的縮減至四步驟反應，此種處理技巧（附錄 B）將被本文所採用。

縮減的化學反應，本質上，是將火焰的基本結構假設成由不同層所構成（如圖 3-1 所示）：內層（Inner Layer）與氧化層（Oxidation Layer）。所有碳氫燃料的化學反應是假設發生於內層（為合併燃料與煙基消耗層的結構）中，在此層，燃料被煙基（Radicals）攻擊以形成 CO 和 H_2 。在氧化層，則將前述形成的 CO 和 H_2 進一步氧化成 CO_2 與 H_2O 。如果煙基消耗層（Radical Consumption Layer）的厚度遠小於燃料消耗層（Fuel Consumption Layer）的厚度，在這樣的條件下，除了在煙基消耗層（可視為埋入燃料消耗層內）外，氫離子濃度在反應區內可假設為穩態平衡。此一氫離子穩態平衡的假設，可將四步驟化學動力機構進一步縮減至三步驟。

本研究是建構在這樣的理論基礎上，除了以內層溫度深入討論火焰結構和傳播行為外，並對活化能溫度、Da、Ma 以及 Ka_{max} 等研究主題亦有涉獵，如圖 3-2 所示，以漸近的方式分析、推導理論模式。

3.2 火焰的特徵溫度

在火焰結構的漸近分析中，除了未燃溫度外，另有幾種特徵溫度是需要經由數值模擬求得：一為絕熱火焰溫度（Adiabatic Flame Temperature）、另一為活化能溫度（Activation Energy Temperature）以及內層溫度（Inner Layer Temperature）。以下就這幾種溫度的求解方

式與條件做一描述：

3.2.1 絕熱火焰溫度

Müller (1997)討論有關燃氣溫度時，將化學平衡的燃氣溫度視為絕熱火焰溫度。對於穩定物種的化學平衡，乃使用疊代方式求解非線性的代數方程式。一般而言，壓力對化學平衡溫度的影響極其有限，以空氣為氧化劑的貧碳氫火焰，燃氣溫度可表示為如下多項式

$$T_{ad} = a_0 T_u + a_1 + a_2 \phi + a_3 \phi^2 + a_4 \phi^3 \quad [K] \quad (3-1)$$

式中 ϕ 表混合氣的當量值， T_u 為未燃溫度。上述研究特色是將不同燃料的 a_0 、 a_1 、 a_2 、 a_3 以及 a_4 等係數值列表，以方便查詢使用。

本文是以 Gordon & McBride (1971, 1994)的 CEC、CEA 程式做為求解火焰溫度的理論基礎，改變不同燃料和稀釋氣體種類，氧化劑並不僅僅只限於空氣的例子。

採用下述氣體的生成焓（溫度 298 K）進行計算：

燃 料 形成焓	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷	二氧化碳	水氣
ΔH_f^0 [KJ/mol]	-74.6	227.4	52.4	-84.0	-103.8	-393.5	-241.8

至於氫氣、氧氣、氮氣、氦氣以及氬氣等形成焓均視為零

以空氣為氧化劑的絕熱火焰溫度-

當量值		0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
火焰溫度						
T_{ad} [K]	甲烷	1665	1838	1997	2134	2226
	乙炔	2007	2208	2363	2470	2540
	乙烯	1807	1997	2163	2291	2370
	乙烷	1695	1873	2034	2172	2260
	丙烷	1701	1880	2042	2180	2267
	氫氣	1838	2014	2169	2298	2382

* 壓力與未燃溫度設為一大氣壓、298 K，進行數值計算。

另外，改變氧化劑中的稀釋氣體種類，選擇以氮氣、氫氣、氦氣、二氧化碳以及水氣等做替換，氧化劑的測試範圍從 5 % 的氧含量到純氧的狀況為止。在當量值、稀釋氣體以及氧化劑組成等的改變下，求解絕熱火焰溫度，而詳細的數值結果將在第五章做深入分析、比較。

3.2.2 活化能溫度

除了絕熱火焰溫度外，另有一特徵溫度-活化能溫度，對於探討燃燒反應快慢的相關討論上異常重要。如果將質量反應率表示成壓力和絕熱火焰溫度的函數

$$\dot{m} = \rho_u S_L^0 = f(P, T_{ad}) \sim P^{np/2} \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{2RT_{ad}}\right) \quad [\text{g/cm}^2 \text{ s}] \quad (3-2)$$

，其中隨壓力變化的指數大小可用下式估算

$$np = 2 \left[\frac{d\text{LOG}(\dot{m}/\dot{m}_{atm})}{d\text{LOG}(P/atm)} \right]_{T_{ad}} \quad (3-3)$$

，而隨火焰溫度變化的活化能可表示如下

$$T_a \equiv \frac{E_a}{R} = -2 \left[\frac{d\text{LOG}(\dot{m}/\dot{m}_{\phi=1.0})}{d(1/T_{ad} - 1/T_{ad,\phi=1.0})} \right]_P = -2 \left[\frac{d\text{LOG}(S_L/S_{L,st})}{d(1/T_{ad} - 1/T_{ad,st})} \right]_P \quad [\text{K}] \quad (3-4)$$

分析上式得知，活化能溫度可由燃燒速度與火焰溫度間的變化求得。第五章將延續現在的討論，以燃燒速度、貧極限與火焰溫度間的關係，不同的碳氫燃料在壓力、惰性氣體的改變下，討論活化能溫度和 Da 的變化。

3.2.3 內層溫度

本研究延續著 Peters & Williams (1987) 的結果出發，希望能從公式 1-7 直接求解出內層溫度值，因此有必要對相關反應的反應率係數做深入探討。在此，對反應率係數 k_i 採用如下形式表示

$$k_i = BT^\zeta \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) = BT^\zeta \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right)$$

其中 B 、 ζ 及 E_a 視不同的反應會有不同的常數值，以下就三步驟反應機構所涉及的相關化學反應，分析、列表比較如下。

反應步驟 I. $CH_4 + O_2 \rightarrow CO + H_2 + H_2O$

此步驟必須綜合考慮 C_1 鏈的快速反應和部分平衡反應。

C_1 鏈相關的快速反應：

化學反應 \ 常數	反應率係數， k_i			
	i	B	ζ	E_a
$CH_4 + H \rightarrow CH_3 + H_2$	11	2.2×10^4	3.0	-36.6
$CH_3 + O \rightarrow CH_2O + H$	13	7.0×10^{13}	0.0	0.0
$CH_2O + H \rightarrow CHO + H_2$	17	2.5×10^{13}	0.0	-16.7
$CHO + M' \rightarrow CO + H + M'$	22	7.1×10^{14}	0.0	-70.3

*單位：cm、mol、s、K、KJ

部分平衡反應：

化學反應 \ 常數	反應率係數， k_i			
	i	B	ζ	E_a
$O + H_2 \rightarrow H + OH$	2b	6.73×10^6	2.0	-22.35
$OH + H_2 \rightarrow H + H_2O$	3b	4.62×10^8	1.6	-77.5

*單位：cm、mol、s、K、KJ

上述 C_1 鏈與部分平衡反應並無特慢的決定性反應，所以反應率係數

k_I 必須綜合考量中間物種濃度的平衡得到。

反應步驟 II. $CO + H_2O \rightleftharpoons CO_2 + H_2$

化學反應 \ 常 數	反應率係數, k_i			
	i	B	ζ	E_a
$CO + OH \rightarrow CO_2 + H$	10	4.4×10^6	1.5	3.10
$CO_2 + H \rightarrow CO + OH$	10b	4.96×10^8	1.5	-89.7
$OH + H_2 \rightarrow H + H_2O$	3b	4.62×10^8	1.6	-77.5
$H + H_2O \rightarrow OH + H_2$	3	1.0×10^8	1.6	-13.8

*單位: cm、mol、s、K、KJ

上述平衡反應亦無特慢的決定性反應, 所以反應率係數 k_{II} 必須綜合考量中間物種濃度平衡得出。

反應步驟 III. $O_2 + 2H_2 \rightarrow 2H_2O$

此反應可使用 Warnatz (1984) 的催化反應所取代

化學反應 \ 常 數	反應率係數, k_i			
	i	B	ζ	E_a
$H + O_2 + M' \rightarrow OH_2 + M'$	5	2.3×10^{18}	-0.8	0

*單位: cm、mol、s、K、KJ

$$\text{步驟 III 的反應率係數 } k_{III}(T) = 1.6 \left(\frac{k_5}{RT} \right) = 4.49 \times 10^{16} T^{-1.8} \quad (3-5)$$

分析上述反應率係數得知, 內層溫度的求解必須考慮中間物種的濃度平衡, 不可避免的會進行複雜的化學反應運算。Seshadri & Peters (1990)、Kennel (1990)、Seshadri & Göttgens (1991) 等人都曾對決定內層溫度的反應機構做探討。Göttgens (1992) 則更進一步的將上述研究應用至氣態碳氫-空氣火焰的討論上, 並將內層溫度的複雜求解結果以較簡單的數學式表示如下

$$P = b \cdot \text{EXP} \left(-\frac{e}{T_{in}} \right) \quad [\text{bar}] \quad (3-6)$$

式中 P 和 T_{in} 分別表示壓力與內層溫度，模擬常數： b （壓力單位）、 e （溫度單位）則視不同燃料給定不同的值。

在一大氣壓下，內層溫度建議值(Göttgens, 1992)：

燃 料 內層溫度	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷	氫氣
T_{in} [K]	1206	1029	1118	1228	1167	977

Müller (1997)亦延續著此種內層溫度的計算方式，對不同種類的碳氫-空氣火焰，探討壓力和未燃溫度對火焰傳播速度的影響。以下就這些學者對內層溫度的研究結果整理如下：圖 3-3 則對不同燃料與壓力間的變化做討論，以空氣為氧化劑，將內層溫度更具體的表示如下

$$T_{in} = T_{in,1bar} \cdot \left(\frac{P}{1bar} \right)^n \quad [K] \quad (3-7)$$

對不同燃料的模擬值、誤差整理如下

模擬參數 燃料種類	$T_{in,1bar}$ [K]	n	最大誤差*
氫氣, H_2	978	0.119	$\pm 1.5\%$
甲烷, CH_4	1217	0.0565	$\pm 0.4\%$
甲醇, CH_3OH	1206	0.0790	$\pm 0.6\%$
乙炔, C_2H_2	1026	0.111	$\pm 1.1\%$
乙烯, C_2H_4	1113	0.0917	$\pm 0.8\%$
乙烷, C_2H_6	1229	0.0747	$\pm 0.6\%$
丙烷, C_3H_8	1171	0.0786	$\pm 0.6\%$
正庚烷, $n-C_7H_{16}$	1214	0.0804	$\pm 0.6\%$
異辛烷, $i-C_8H_{18}$	1194	0.0643	$\pm 0.4\%$

* 與 Göttgens (1992)、Müller (1997)等人的預測值做比較

推論至此，由縮減反應機構所引入的內層溫度，會受反應係數、氣體性質以及壓力等效應的影響，以縮減反應來探討此內層溫度的困難有以下二點：

- 三步驟反應機構，其中反應步驟 I 和步驟 II 的反應率係數並不容易決定。
- 並不是所有燃料都能縮減至三步驟反應機構，儘管能縮減至三步驟，不同燃料反應率係數的差異亦不易明確決定。

所以，對此溫度目前合理而令人信服的求解尚非常的缺乏。在此觸發了一個研究念頭，是否有更容易的計算方法，既可避免反應中間物的討論，而又能驗證之前內層溫度的研究結果？本研究所提供的方法是以巨觀、可量測的層流火焰速度和貧極限來決定可燃氣開始發生化學反應的溫度。

以下將以漸近的方式分析內層溫度在火焰結構和傳播理論中所扮演的角色，並具體的推導出能廣泛應用於預測火焰速度的通式。

3.3 火焰結構

檢視了關於氣體的 Le、火焰特徵溫度等的基本燃燒變數後，對於大部分燃燒的具體行為常藉助這些基本變數來加以表示，在此節將深入討論有關火焰結構的變化。

1. 預熱厚度

首先，對於預熱區溫度分佈的討論，引進無因次的座標 x'

$$x' = \int_0^x \frac{\rho u}{(\lambda/C_p)} dx = (\rho_u S_L^0) \int_0^x \frac{C_p}{\lambda} dx \quad (3-8)$$

代入能量守恆程式中，整理得溫度的函數如下

$$T(x') = T_u + (T_{in} - T_u) \exp(x') \quad (3-9)$$

在此，將內層溫度視為可燃氣開始發生反應的臨界溫度（而非燃氣溫度），內層溫度之前的區域視為不發生反應的預熱區。上述溫度分布中，以微分求其在內層溫度該點的斜率，將該切線與未燃溫度水平線的交點所切出的距離，視為預熱區厚度(δ_{pre})。

$$\left[\frac{dT}{dx'} \right]_{in} = (T_{in} - T_u) (\rho_u S_L^0) \left(\frac{C_p}{\lambda} \right)_{in}$$

$$\delta_{pre} = \frac{(\lambda/C_p)_{in}}{\rho_u S_L^0} = \left[\frac{\lambda}{(\rho_u C_p) S_L^0} \right]_{in} \quad (3-10)$$

由上述推論得知，當可燃氣溫度達到內層溫度時，可燃氣開始發生化學反應，而此內層溫度可視為估算氣體性質的基準點。在這樣的理論假設下，燃燒計算中所使用的氣體性質如密度、比熱及熱擴散性等是被建議採用內層溫度而非未燃溫度來計算其性質。

2. 火焰厚度

根據圖 3-1 火焰結構的示意圖，火焰尺才是以上述定義的預熱厚度為基礎，進一步的使用幾何的比例關係，推得一般所謂的火焰厚度

$$\delta_L = \left(\frac{T_b - T_u}{T_{in} - T_u} \right) \delta_{pre} = \left(\frac{T_b - T_u}{T_{in} - T_u} \right) \left[\frac{\lambda}{(\rho_u C_p) S_L^0} \right]_{in} \quad (3-11)$$

此厚度可廣泛的應用至燃燒問題的相關討論上，為火焰尺才方面重要的基本燃燒變數之一。

3. 無因次參數- Ze

Peters & Williams (1987) 曾討論有關活化能方面的問題，活化能可從燃氣溫度的指數形式所表示的火焰速度推得

$$E_a = 2RT_b \frac{d[\text{LOG}(\rho_u S_L)]}{dT_b} = \frac{4RT_b^2}{(T_b - T_u)} \left[\frac{T_{in} - T_u}{T_b - T_{in}} + \frac{dT_u}{dT_b} \right]$$

對於火焰結構的研究，可進一步將火焰厚度與反應區厚度的比值，定義為無因次參數- Ze (亦視為評估火焰尺寸的重要參數)。如果忽略微分項 dT_u/dT_b 的影響，則有效的 Ze (Williams, 1985; Peters, 1993) 可進一步表示如下

$$Ze = \frac{\delta_L}{\delta} = \frac{E_a(T_b - T_u)^2}{RT_b^2(T_{in} - T_u)} = 4 \left(\frac{T_b - T_u}{T_b - T_{in}} \right) \quad (3-12)$$

式中 δ 表示火焰反應區的厚度。至此，只要知道氣體性質（密度和熱擴散性）、火焰速度以及特徵溫度（內層溫度與燃氣溫度）等的相關訊息，就可將預熱厚度、火焰厚度及 Ze 等抽象的火焰尺寸分別定量出來。

火焰結構的研究動機，除了希望瞭解熱擴散性、火焰傳播速度、內層溫度以及燃氣溫度等變數對火焰尺寸的影響外，在討論層流火焰速度或 Ma 等預測式時亦會大量使用相關尺寸的資訊。第五章的討論，將會深入分析壓力、溫度以及惰性氣體等效應如何去影響火焰相關尺寸的變化。

3.4 層流火焰速度

層流火焰速度 (S_L^0 , Laminar Flame Speed) 是燃燒的重要火焰特性之一，對於引擎設計、紊流燃燒的模擬以及確認反應機構等研究上，瞭解火焰速度的相關知識是有其必要性。對於層流火焰速度的討論，將以漸近的方式分析影響火焰傳播的各種因素，推導出火焰傳播速度的精簡預測通式，並以一般碳氫-空氣火焰的實驗值來加以比對。統御方程式：

(1) 質量守恆方程式-

$$\dot{m} = \rho u = \rho_u S_L^0 \quad [\text{g/cm}^2 \text{ s}] \quad (3-13)$$

式中 ρ_u 為未燃氣密度， S_L^0 為層流火焰速度。

(2) 動量守恆方程式-

由於小馬赫數(Mach Number)的限制下，整個火焰區的壓力可視為常數

$$P = \text{constant} \quad [\text{atm}] \quad (3-14)$$

(3) 成份物種守恆方程式

反應物種 i 的平衡

$$\rho_u S_L^0 \frac{dY_i}{dx} - \frac{1}{Le_i} \frac{d}{dx} \left(\frac{\lambda}{C_p} \frac{dY_i}{dx} \right) = M_i \sum_{k=1}^{III} \nu_{ik} \dot{w}_k, \quad i = 1, 2, \dots, N-1 \quad (3-15)$$

式中 λ 、 C_p 表熱傳導和定壓比熱， M 、 $\dot{w}$ 分別為分子量和化學反應率，而下標 k 表示反應步驟。另外，引進空間坐標

$$x' = \int_0^x \left(\frac{\rho u}{\lambda / C_p} \right) dx$$

質量分率 Y_i 可進一步無因次化為成份物種 i 的莫耳分率

$$X_i = \frac{Y_i/M_i}{Y_{F,u}/M_F}$$

下標 F 、 u 表示燃料和未燃狀況。物種 i 的守恆方程式可無因次化簡如下

$$\frac{dX_i}{dx'} - \frac{1}{Le_i} \frac{d}{dx'} \left(\frac{dX_i}{dx'} \right) = \sum_{k=1}^{III} \nu_{ik} \frac{\dot{w}_k}{(\rho_u S_L^0)^2 (C_p/\lambda) (Y_{F,u}/M_F)} = \sum_{k=1}^{III} \nu_{ik} \dot{\omega}_k,$$

$$L_i(X_i) = \sum_{k=1}^{III} \nu_{ik} \dot{\omega}_k, \quad i = 1, 2, \dots, N-1 \quad (3-16)$$

上式中 $L_i()$ 表示微分運算子，化學反應率將以內層溫度為基準，並引入反應率係數的一般表示式。而反應率係數除了採用下述通式外，且以泰勒對內層溫度 T_{in} 進行展開

$$k = B \cdot T^\zeta \exp\left(-\frac{T_a}{T}\right) \approx B \cdot T_{in}^\zeta \left(\frac{T}{T_{in}}\right)^\zeta \exp\left(-\frac{T_a}{T_{in}} + \frac{T_a}{T_{in}} \log\left(\frac{T}{T_{in}}\right)\right)$$

$$= B \cdot T_{in}^\zeta \left(\frac{T}{T_{in}}\right)^{T_a/T_{in} + \zeta} \exp\left(-\frac{T_a}{T_{in}}\right) \quad (3-17)$$

將已燃氣的熱擴散對內層溫度 T_{in} 展開

$$\text{多原子氣體} \quad \left(\frac{\lambda}{\rho C_p}\right)_b = \left(\frac{\lambda}{\rho C_p}\right)_{in} \left(\frac{T_b}{T_{in}}\right)^{2.0}$$

$$\text{輕質氣體} \quad \left(\frac{\lambda}{\rho C_p}\right)_b = \left(\frac{\lambda}{\rho C_p}\right)_{in} \left(\frac{T_b}{T_{in}}\right)^{1.75}$$

對於反應物 1、2 的化學反應率可表示如下

$$\dot{\omega}_k = \frac{1}{S_L^0{}^2} \left(\frac{Y_{F,u}}{M_F}\right) \left(\frac{\lambda}{\rho C_p}\right)_{in} \left(\frac{T_b}{T_{in}}\right)^2 \cdot C X_1 X_2 T_{in}^\zeta \left(\frac{T}{T_{in}}\right)^{T_a/T_{in} + \zeta - j} \exp\left(-\frac{T_a}{T_{in}}\right),$$

$$C = B \left[\frac{PM}{RT_{in}} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\eta_i Y_i}{M_i} \right) \right]^j \quad (3-18)$$

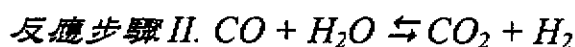
上述化學反應率的表示式係將物種守恆方程式無因次化和引進反應率係數通式而求得，如果想要更進一步得到火焰速度的詳細關係式，就必須深入探討火焰反應區的變化。

(4) 以縮減反應機構分析化學反應率

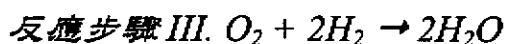
對於四步驟反應機構：



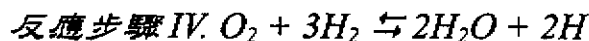
此步驟必須考慮 C_1 鏈的快速反應和部分平衡反應，相關的反應同前所述。



相關的反應亦如前所述。



相關的反應亦如前所述。



化學反應 \ 常數	反應率係數， k_i			
	i	B	ζ	E_a
$O_2 + H \rightarrow OH + O$	1	2.0×10^{14}	0.0	-70.3
$OH + O \rightarrow O_2 + H$	1b	1.4×10^{13}	0.0	-3.2
$O + H_2 \rightarrow H + OH$	2b	6.73×10^6	2.0	-22.35
$H + OH \rightarrow O + H_2$	2	1.5×10^7	2.0	-31.6
$OH + H_2 \rightarrow H + H_2O$	3b	4.62×10^8	1.6	-77.5
$H + H_2O \rightarrow OH + H_2$	3	1.0×10^8	1.6	-13.8

*單位：cm、mol、s、K、KJ

以上述縮減反應機構來探討化學反應率

$$\dot{w}_I = k_{11} [CH_4] [H] \quad (3-19)$$

$$\dot{w}_{II} = k_{10}[CO][OH] - k_{10}[CO][OH] \times \frac{[H_2O]}{[H_2O]} = \frac{k_{10}}{K_3} \frac{[H]}{[H_2]} \left([CO][H_2O] - \frac{[CO_2][H_2]}{K_{II}} \right) \quad (3-20)$$

$$\therefore \text{部分平衡的結果 } K_2 = \frac{[H][OH]}{[O][H_2]} = 2.23 \exp\left(-\frac{1112}{T}\right),$$

$$K_3 = \frac{[H_2O][H]}{[OH][H_2]} = 0.216 \exp\left(\frac{7658}{T}\right)$$

$$\text{步驟 II 的平衡常數 } K_{II} = \frac{[CO_2][H_2]}{[CO][H_2O]} = \frac{X_{CO_2} X_{H_2}}{X_{CO} X_{H_2O}} = 0.035 \exp\left(\frac{3652}{T}\right)$$

$$\dot{w}_{III} = k_5[O_2][H][M'] = k_{III}P[O_2][H] \quad (3-21)$$

$$\therefore \text{第三物 } M' \text{ 的濃度 } [M'] = \frac{P\bar{M}}{RT} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\eta_i Y_i}{M_i} \right)$$

爲了避免混淆，式中 $\bar{M}$ 、 M_i 分別表示平均分子量和分子 i 的分子量， η_i 爲分子 i 的催化效率 (Catalytic Efficiency)。

$$\text{步驟 III 的反應率係數 } k_{III} = \frac{k_5[M']}{P} = 1.6 \frac{k_5}{RT}$$

$$\dot{w}_{IV} = k_1[H][O_2] - k_1[H][O_2] \times \frac{[H_2]^3[H_2O]^2}{[H_2]^3[H_2O]^2} = k_1[H] \left([O_2] - \frac{1}{K_{IV}} \frac{[H]^2[H_2O]^2}{[H_2]^3} \right) \quad (3-22)$$

$$\therefore \text{步驟 IV 的平衡常數 } K_{IV} = \frac{[H_2O]^2[H]^2}{[O_2][H_2]^3} = 1.48 \exp\left(\frac{6133}{T}\right)$$

如果氫原子達到穩態平衡， $\dot{w}_{IV} = \dot{w}_I + \dot{w}_{III}$ ，氫原子濃度

$$[H] = \left(1 - \frac{k_{III}P}{k_1} - \frac{k_{11}[CH_4]}{k_1[O_2]} \right)^{1/2} K_{IV}^{1/2} \frac{[O_2]^{1/2}[H_2]^3}{[H_2O]^2} \quad (3-23)$$

將公式 3-23 代入公式 3-21，整理得

$$\dot{w}_{III} = \left(1 - \frac{k_{III}}{k_1} P - \frac{k_{11}}{k_1} \frac{[CH_4]}{[O_2]} \right)^{1/2} \cdot P \cdot k_{III} \cdot K_{IV}^{1/2} \frac{[O_2]^{3/2} [H_2]^{3/2}}{[H_2O]},$$

$$\dot{w}_{III} \approx P \cdot k_{III} \cdot K_{IV}^{1/2} \frac{[O_2]^{3/2} [H_2]^{3/2}}{[H_2O]} \quad (3-24)$$

以公式 3-16 來表示物種 H_2 和 CO 間的平衡

$$L_{H_2}(X_{H_2}) + L_{CO}(X_{CO}) = 2(\dot{w}_I - \dot{w}_{III}) \quad (3-25)$$

定義變數

$$\alpha_0 = \frac{1}{K_{II}} \left(\frac{Le_{H_2}}{Le_{CO}} \right) \left(\frac{X_{CO_2}}{X_{H_2O}} \right)$$

使用上述變數，則步驟 II 的平衡常數可化簡如下

$$\frac{X_{CO}}{Le_{CO}} = \alpha_0 \left(\frac{X_{H_2}}{Le_{H_2}} \right)$$

在燃料消耗層 (Fuel-consumption Layer)，忽略對流項，令 $\dot{w}_I = 0$ ，則

公式 3-25 可整理如下

$$\frac{d}{dx^2} \left[(1 + \alpha_0) \frac{X_{H_2}}{Le_{H_2}} \right] = 2\dot{w}_{III} \quad (3-26)$$

引入新變數放大反應區尺寸

$$2q \cdot x' = \epsilon_0 \cdot \eta, \quad \frac{X_{O_2}}{Le_{O_2}} = \epsilon_0 \frac{z}{2q}, \quad (1 + \alpha_0) \cdot \frac{X_{H_2}}{Le_{H_2}} = \epsilon_0 \frac{z}{q}$$

結合公式 3-18、公式 3-24 以及上述新變數，可將化學反應率無因次化爲

$$\dot{\omega}_{III} = \frac{P}{(S_L^0)^2} \left(\frac{Y_{F,u}}{M_F} \right) \left(\frac{\lambda}{\rho C_p} \right)_{in} \left(\frac{T_b}{T_{in}} \right)^2 \left[2q \cdot k_{III} \cdot K_{IV}^{1/2} \frac{Le_{O_2}^{3/2} \cdot Le_{H_2}^{3/2}}{2^{5/2} \cdot q^4 (1 + \alpha_0)^{3/2} X_{H_2O}} (\epsilon_0 \cdot z)^3 \right]_{in} \quad (3-27)$$

另外，化學反應率以反應區尺寸、 Da_{III} 表示如下

$$\dot{\omega}_{III} = 2q \cdot Da_{III} \cdot (\epsilon_0 \cdot z)^3 \quad (3-28)$$

對公式 3-26 進一步表示成如下無因次的形式

$$\frac{d^2 z}{d\eta^2} = (Da_{III} \cdot \epsilon_0^4) z^3$$

由數階分析得知

$$\epsilon_0 = Da_{III}^{-1/4} \quad (3-29)$$

因為反應區尺寸的無因次表示式

$$\epsilon_0 \cdot z_0 = \left(\frac{T_b - T_{in}}{T_b - T_u} \right) \quad (3-30)$$

，結合公式 3-29、公式 3-30，可推得無因次參數 Da_{III} 的表示式

$$Da_{III} = \left(\frac{T_b - T_{in}}{T_b - T_u} \cdot \frac{1}{z_0} \right)^4 \quad (3-31)$$

由公式 3-27 和 3-28 得 Da_{III}

$$Da_{III} = \frac{P}{S_L^0{}^2} \left(\frac{Y_{F,u}}{M_F} \right) \left(\frac{\lambda}{\rho C_p} \right)_{in} \left(\frac{T_b}{T_{in}} \right)^2 \left[\frac{k_{III} K_{IV}^{1/2} (Le_{O_2} Le_{H_2})^{3/2}}{2^{5/2} q^4 (1 + \alpha_0)^{3/2} X_{H_2O}} \right]_{in} \quad (3-32)$$

最後，由公式 3-31 和 3-32 化簡推得火焰傳播速度的表示式

$$S_L^0 = \alpha_{in}^{1/2} Y_{F,u}^{1/2} \frac{T_b}{T_{in}} \left(\frac{T_b - T_{in}}{T_b - T_u} \right)^{2.0} \left[\frac{P^{1/2} k_{III}^{1/2} K_{IV}^{1/4} (Le_{O_2} Le_{H_2})^{3/4}}{2^{5/4} q^2 (1 + \alpha_0)^{3/4} M_F^{1/2} X_{H_2O}^{1/2} z_0^2} \right]_{in} \quad [cm/s] \quad (3-33)$$

式中下標 in 表示以內層溫度為基準所求得的值。

由上述的理論推導知，火焰速度可視為內在燃氣的熱擴散性與熱釋放所呈現的巨觀火焰行為。對於反應所釋放出的熱量，大部分的研究還是藉由燃料質量分率與火焰溫度來加以量化、模擬。本研究對於層流火焰速度將從公式 3-33 出發，令化學反應的特徵時間

$$\tau_c \sim \frac{2^{5/2} q (1 + \alpha_0)^{3/2} M_F X_{H_2O} z_0^4}{P \cdot k_{III} \cdot K_{IV}^{1/2} (Le_{O_2} Le_{H_2})^{3/2}} \quad [s]$$

公式 3-33 中方括號內的複雜項次，其大小將採用類似公式 3-2 活化能的數學形式來表示，單位為 $s^{-1/2}$ ，則火焰傳播速度可化簡如下

$$S_L^0 = \alpha_{in}^{1/2} Y_{F,u}^{1/2} \frac{T_b}{T_{in}} \left(\frac{T_b - T_{in}}{T_b - T_u} \right)^{2.0} \left[EXP \left(-\frac{E'}{2RT} \right) \right]_{in} \quad [cm/s] \quad (3-34)$$

比較得知，上式與先前 Göttgens (1992)、Müller (1997) 等人研究（公式 1-12）的差異有三：

- 考慮氣體的熱擴散性。
- 對於火焰速度而言，燃氣溫度比未燃溫度更適於描述火焰傳播行為。
- 模擬的參數由五個縮減至二個，但速度預測的準確性絲毫不減。

另外，採用可燃極限的觀點(火焰傳播速度低於 5 公分/秒，視為不可傳播)，引進最小的火焰速度，並將熱擴散性無因次化為路易士數。

$$\alpha_{in}^{1/2} \left[\exp\left(-\frac{E'}{2RT}\right) \right]_{in} = S_{L,min} \left(\frac{\alpha}{D} \right)_{in}^{1/2} \left[\frac{D^{1/2}}{S_{L,min}} \exp\left(-\frac{E'}{2RT}\right) \right]_{in} = S_{L,min} Le^{1/2} \exp\left(-\frac{E^*}{2RT_{in}}\right) \quad [\text{cm/s}]$$

經由上述無因次化的處理，公式 3-34 的層流火焰速度可進一步表示如下

$$S_L^0 = S_{L,min} Le^{1/2} Y_{F,u}^{1/2} \exp\left(-\frac{E^*}{2RT_{in}}\right) \frac{T_b}{T_{in}} \left(\frac{T_b - T_{in}}{T_b - T_u} \right)^2 \quad [\text{cm/s}]$$

另外，式中有關火焰尺寸的温度比有更簡易的無因次參數-Ze（公式 3-12）可供替換

$$\frac{S_L^0}{S_{L,min}} = Le^{1/2} Y_{F,u}^{1/2} \exp\left(-\frac{E^*}{2RT_{in}}\right) \left(\frac{\rho_{in}}{\rho_b} \right) \left(\frac{Ze}{4} \right)^{-2}$$

整理得

$$\frac{S_L^0}{S_{L,min}} = Le^{1/2} Y_{F,u}^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{2RT_{in}}\right) Ze^{-2} \left(\frac{\rho_{in}}{\rho_b} \right) \quad (3-35)$$

，其中

$$Le^{1/2} Y_{F,u}^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{2RT_{in}}\right) Ze^{-2} \left(\frac{\rho_{in}}{\rho_b} \right) \geq 1.0 \quad \text{火焰可傳播（點燃）}$$

$$Le^{1/2} Y_{F,u}^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{2RT_{in}}\right) Ze^{-2} \frac{\rho_{in}}{\rho_b} < 1.0 \quad \text{火焰不可傳播（點燃）}$$

式中臨界的傳播速度 $S_{L,min}$ 採用 5 公分/秒，Le 值的計算採用公式 2-13，重要的模擬參數 E 和 T_{in} 則視混合氣、燃燒狀態而變。仔細檢視上述傳播機構潰散的關鍵項次，乃在於無因次參數-Ze 表示式中的 $(T_b - T_{in})$ ，當化學當量值從 1.0 慢慢遞減時，火焰的燃氣溫度 T_b 亦減小。如果沿著層流火焰速度變化至速度為零處，將該處的火焰溫度視為傳

播機構是否潰散的基準溫度。對縮減反應機構而言，此種基準溫度被名為內層溫度，火焰溫度高於此溫度混合氣才會開始發生化學反應。

本研究的特色是將貧極限視為傳播機構的終點(ϕ_{Limit} , $S_{L,min}$)，沿層流火焰速度的變化外插至速度為零，並將該處的火焰溫度視為反應是否能持續的基準溫度，如圖 3-4 所示。以此種方式所求得的基準溫度具有唯一性，相對的，能量參數 E 的值卻會隨著所採用的傳播速度預測通式（如公式 3-35）的不同而有所差異。

對於一大氣壓、當量值為 1.0，以空氣為氧化劑，速度預測式中的重要參數可整理如下：

燃 料 模擬參數	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷	氫氣
$T_{in} [K] *$	1206	1023	1118	1228	1167	977
$D_{fuel-air}(T_{in}) [cm^2/s]$	3.03	1.90	2.17	2.39	1.67	6.38
$\alpha(T_{in}) [cm^2/s]$	3.06	1.85	3.04	2.31	1.05	9.46
Le	1.01	0.98	1.13	1.21	1.52	1.48
$Y_{F,u}$	0.055	0.071	0.063	0.059	0.060	0.028
$T_{ad} [K]$	2226	2540	2370	2260	2267	2382

* Göttings (1992) 所建議的內層溫度值

分析公式 3-35 發現，理論式中的關鍵常數為 T_{in} 、 E ，其大小可用速度的實驗值修正至有最佳的吻合度為止（最小平方根誤差）。圖 3-5~3-10 則針對氫氣、常見的碳氫燃料，以空氣為氧化劑，使用公式 3-35 來模擬火焰的傳播速度。圖上的符號表實驗值，其操作的條件分別如下：

- Tseng (1993) 主要是觀測向外傳播的球形火焰，其操作的當量值介於 0.60 與 1.35 之間，反應物與產物的密度比介於 4.33 到 5.93 間，質量擴散係數為 0.219 平方公分/秒，最大的 Ka 介於 0.09

和 0.30 之間， Ma 則介於 -1.90 與 7.2 間。

- Law (1986, 1994) 係使用上、下對衝式的燃燒器，週遭使用 N_2 氣流護罩著，其燃燒器管徑從 0.7 到 3 公分。利用氧化鎂 (MgO)、TSI 離子雷射量測流速，層流火焰速度的求解係利用外插至延展率為零的速度值。
- Vagelopoulos (1998) 係利用本生式火焰（負延展）漸漸吹離管口延上方停滯平板延展開來（正延展），在這樣轉變過程中會有延展率為零的狀況出現，而他也是唯一使用實驗法量出層流火焰速度值。

在此，本節僅對層流火焰速度的實驗值做最佳的數值模擬，找出最吻合的 E 和 T_{in} ，而貧極限的觀點則留待第五章再詳加討論。

對層流火焰速度的最佳化，關鍵參數 T_{in} 、 E 的模擬結果：

燃 料		甲烷	乙炔	乙炔	乙烷	丙烷	氫氣
重要參數	平面火焰	-139	-116	-115	-117	-95	-102
	球形火焰	-163	-	-158	-119	-67	-
T_{in} [K]	平面火焰	1213	974	1032	1083	956	810
	球形火焰	1326	-	1310	1099	748	-

由於內層溫度屬於可燃氣的物化性質，與火焰形態無關，上表中的溫度差異表示實驗方面的誤差，在第五章將透過貧極限的觀點選擇最合理的實驗數據做模擬。本節對火焰傳播的研究，係採用半經驗半理論的預測通式，以較少的變數、較精簡的數學式來模擬理想的火焰速度。在下一節火焰的傳播行為，將廣泛的針對各種影響火焰速度的效應，如延展、壓力、溫度以及惰性氣體等進行合理而適切的分析。

3.5 火焰的傳播行爲

3.5.1 延展對火焰速度的影響

延展率的概念，首先是由 Karlovitz (1953) 所提出，是用來修正火焰熄滅機制和描述紊流火焰結構。Clavin & Williams (1982)、Matalon & Matkowsky (1982) 等人曾使用漸近的方式討論流場擾動尺度大於火焰厚度的狀況，研究起皺火焰對延展的反應，並指出平面、延展火焰的燃燒速度是不同於未受延展的狀況，其間的差異可具體的用下列公式表示：

$$S_L = S_L^0 - \mathcal{L} \cdot K = S_L^0 - \delta_L \cdot Ma \cdot K = S_L^0 (1 - Ma \cdot Ka) \quad (3-36)$$

式中 $\mathcal{L}$ 為馬克斯坦長度 (Markstein Length)，可將 $\mathcal{L}$ 與火焰厚度的比值定義為馬克斯坦數 (Ma , Markstein Number)； K 為延展率 (Stretch, s^{-1})，相當於火焰面積隨時間的變化率，一般將其視為應變率 (Strain Rate) 與曲率 (Curvature) 之合。

1 無因次參數- Ma

Markstein (1951) 首先針對預混火焰的局部燃燒速度與火焰前緣曲率間的關係，建構其傳播速度的理論式

$$\frac{S_L - S_L^0}{S_L^0} = Ma \cdot \frac{(\alpha / S_L^0)}{R_C} \quad (3-37)$$

上式 R_C 表示火焰前緣的曲率半徑。早期的研究指出， Ma 定義為 $\mathcal{L} / \delta_L$ 。Markstein (1964) 則進一步的以發散流場來修正局部燃燒速度。Clavin & Williams (1982) 曾使用單一步驟化學反應機構來討論大活化能、低延展的火焰，將熱傳導、黏滯性以及定壓比熱等氣體性質視為固定不

變的情況下，推導 Ma 的理論預測式。Clavin & Garcia (1983)曾考慮氣體性質在非定值時，推出能更廣泛適用的 Ma 表示式。發展至今，Clavin (1985) 對火焰燃燒速度受流體延展修正的完整描述

$$\frac{S_L - S_L^0}{S_L^0} = Ma \cdot \left(\frac{(\alpha/S_L^0)}{R_C} + \frac{1}{S_L^0} \vec{n} \cdot \nabla u \right) \quad (3-38)$$

Searby & Clavin (1986)曾討論穩定性（重力效應與流力不穩定效應）對火焰傳播的影響，推出的 Ma 表示式。Liñán & Clavin (1987)曾在縮減的反應機構、擴散係數固定不變的條件下，討論火焰的傳播行為。Peters (1987)使用四步驟化學反應機構，在可燃氣性質固定不變下，漸近分析延展的甲烷/空氣火焰之傳播行為。

在研究火焰不穩定現象方面，探究其產生原因，一般相信與燃氣的膨脹、擴散效應等非常有關，因此有相當多的關係式或判別式都以這些效應來發展其理論表示式，其中又以 Le 的影響討論最多。最近幾年來，有關向外傳播、球形的火焰，火焰焰面的觀測結果指出，當 Ma （由量測速度、曲率逆推求得）小於其臨界值時，火焰面將出現裂紋，如果火焰支續發展下去，最後火焰焰面顯現細胞狀結構。在這些討論火焰傳播行為的相關研究， Ma 值可用來描述火焰面結構的發展情形。爲了要更具體的描述氣體性質如何的影響它，此處，將使用火焰尺寸、流力不穩定（ ρ_u/ρ_b ）以及氣體性質來具體的描述這些效應對穩定火焰所扮演的角色。

1. 氣體性質固定不變 (Peters, 1987)

$$Ma \equiv \frac{\mathcal{L}}{\delta_L} = \frac{1+\Delta}{\Delta} \left[\ln(1+\Delta) + \frac{Ze(Le-1)}{2Le} \int_0^\Delta \frac{\ln(1+x)}{x} dx \right] \quad (3-39)$$

，其中 Δ 定義為

$$\Delta \equiv \frac{T_{in} - T_u}{T_u}$$

2. 氣體性質隨溫度而改變 (Clavin & Garcia, 1983)

$$Ma = \frac{1}{\gamma} \int_{T_u}^{T_m} \frac{\Lambda(T)}{T} dT + \frac{Ze}{2} (Le - 1) \frac{1 - \gamma}{\gamma} \int_{T_u}^{T_m} \text{LOG} \left(\frac{T_b - T_u}{T - T_u} \right) \frac{\Lambda(T)}{T} dT \quad (3-40)$$

，其中 γ 、 Λ 定義為

$$\gamma = \frac{T_b - T_u}{T_b}, \quad \Lambda = (\lambda C_p) / (\lambda C_p)_u$$

本研究將從考慮氣體性質的公式出發，進一步化簡關於可燃氣性質對溫度的積分函數。利用縮減反應機構的觀點，引進內層溫度來描述可燃氣開始發生化學反應的狀態。對大部分的氣體而言，傳輸性質可約略的表示為溫度 T^2 指數形式。在這樣的處理下，可進一步簡化關於可燃氣性質對溫度的積分函數

$$\int_{T_u}^{T_m} \frac{\Lambda(T)}{T} dT = \frac{(T_{in} - T_u)}{T_u},$$

$$\int_{T_u}^{T_m} \text{LOG} \left(\frac{T_b - T_u}{T - T_u} \right) \frac{\Lambda(T)}{T} dT = \left[\text{LOG} \left(\frac{T_{in} - T_u}{T_b - T_u} \right) - 1 \right] \frac{(T_{in} - T_u)}{T_u}$$

將上述溫度積分的近似函數代入 Ma 的理論式中，整理得

$$Ma = \left(\frac{T_b}{T_b - T_u} \right) \left(\frac{T_{in} - T_u}{T_u} \right) + \frac{Ze}{2} (Le - 1) \left[\text{LOG} \left(\frac{T_{in} - T_u}{T_b - T_u} \right) - 1 \right] \left(\frac{T_{in} - T_u}{T_b - T_u} \right) \quad (3-41)$$

將式中相同的項次提出

$$Ma = \left(\frac{T_{in} - T_u}{T_b - T_u} \right) \left[\frac{T_b}{T_u} + \frac{Ze}{2} (Le - 1) \left[\text{LOG} \left(\frac{T_{in} - T_u}{T_b - T_u} \right) - 1 \right] \right],$$

$$Ma = \left(1 - \frac{4}{Ze}\right) \left[\frac{\rho_u}{\rho_b} + \frac{1}{2} \left(\text{LOG} \left(1 - \frac{4}{Ze}\right) - 1 \right) \cdot Ze(Le - 1) \right],$$

$$Ma = \frac{\rho_u}{\rho_b} \left(1 - \frac{4}{Ze}\right) \left[1 + \frac{1}{2} \left(\text{LOG} \left(1 - \frac{4}{Ze}\right) - 1 \right) \cdot Ze \frac{(Le - 1)}{\rho_u / \rho_b} \right]$$

令新參數為

$$Ma' = (\rho_u / \rho_b) (1 - 4/Ze), \quad F = \frac{1}{2} [\text{LOG}(1 - 4/Ze) - 1]$$

則 Ma 的表示式可進一步化簡如下

$$\frac{Ma}{Ma'} = 1 + F \cdot Ze \frac{(Le - 1)}{\rho_u / \rho_b} \quad (3-42)$$

將參數 F 視為氣體性質隨溫度變動所需要的修正值，可適當的調整其大小來模擬真實的 Ma 值。公式 3-42 對於一般的碳氫火焰的預測是非常的吻合，但對 Le 值接近 1.0 的甲烷/空氣火焰則有一定的誤差存在，因為理論式右邊第二項的效應幾乎消失不見。分析 Ma 的理論發現，除了火焰尺吋的無因次參數- Ze 外，另有二種效應會影響 Ma 值：其一為流力的不穩定 (ρ_u/ρ_b)，另一為可燃氣性質 (Le)。只要不是考慮較少見的效應（如浮力等）的話，Ma 都可藉由 Le、Ze、燃氣溫度及內層溫度來加以模擬。對於一般碳氫燃料，以空氣作為氧化劑：

內層溫度範圍約為 1000~1300 K

Ze 數可表示為 $4(T_b - T_u)/(T_b - T_{in})$

在此，模擬 Ma 值的實驗數據是採用向外傳播的球形火焰。圖 3-11~3-14 則針對常見的碳氫燃料，以空氣作為氧化劑，使用公式 3-42 來模擬火焰的 Ma 值。圖上的符號表實驗值，其操作的條件分別如下：

- Searby (1990) 使用起皺火焰燃燒器 (Wrinkled Flame Burner,

8x20 公分長方形耐熱玻璃) 量測火焰速度換算得出 Ma 值，其操作的當量值範圍在 0.6 與 1.05 之間。

- Tseng (1993) 其實驗裝置和操作條件亦如前所述。
- Taylor (1991) 發表其博士論文中，所觀測的當量值範圍約為 0.7 與 1.4 之間。

比較特別的是，Müller (1997) 跟本論文一樣是嘗試以理論通式來預測 Ma 的行為，但與本文最大的不同，可燃氣性質是固定不變的，且 Ma 理論式對不同碳氫燃料的修正係數，不像現在所推導的式子那麼有規則性。本研究根據公式 3-42，對上述火焰速度實驗值做更精確的模擬，並找出使其最吻合的 F 值。

將 Ma 值的最佳模擬結果整理在下表：

燃 料		甲烷	乙烯	乙烷	丙烷
模擬參數	T _{in} (K) *	1206	1118	1228	1167
	F	-0.047	-1.53	-2.01	0.53
	T _{in} (K)	1206	1250	1100	750
	F	-0.047	-2.13	-1.94	3.77

* Göttings (1992) 所建議的內層溫度值

Bradley (1994) 指出當 $Ma \leq 1.5$ 時，火焰焰面會有不穩定開始發生

$$\left(1 - \frac{4}{Ze}\right) \left[\frac{\rho_u}{\rho_b} + F \cdot Ze \cdot (Le - 1) \right] \leq \frac{3}{2} \quad (3-43)$$

$$F \cdot (Le - 1) \leq \frac{3/2}{(Ze - 4)} - \frac{\rho_u / \rho_b}{Ze}$$

$$\frac{\rho_u / \rho_b}{Ze} = \left(\frac{\delta}{\delta_L} \right) \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} \right) \leq \frac{3/2}{(Ze - 4)} - F \cdot (Le - 1) \quad (3-44)$$

由分析上式得知，火焰反應區愈厚（ δ 大）在相同的操作條件下，只需要輕微的流力不穩定性（ ρ_u/ρ_b ）的作用，就可讓火焰表面產生裂紋。

就不同當量值，發生不穩定性的臨界值：

燃 料		甲烷 ($T_{in} = 1206K$)	乙烯 ($T_{in} = 1250K$)	乙烷 ($T_{in} = 1100K$)	丙烷 ($T_{in} = 750K$)
不穩定的狀況					
$F_{critical}$	$\phi = 0.6$	-0.0163	-2.23	-1.37	-0.310
	$\phi = 0.7$	-0.0268	-3.00	-1.78	-0.337
	$\phi = 0.8$	-0.0377	-3.71	-2.17	-0.362
	$\phi = 0.9$	-0.0478	-4.30	-2.53	-0.383
	$\phi = 1.0$	-0.0561	-4.73	-2.81	-0.400

在這樣的數值討論下，向外傳播、球形的碳氫/空氣火焰，焰面開始有裂紋的產生，可透過 F 的臨界值來加以表示。數階分析指出其變化具有相當規則性存在。

2. 無因次參數- Ka

由於火焰所受的延展，會隨燃燒器與流場佈置的不同有很大差異存在，在此僅對造成熄滅時的最大延展參數 Ka_{max} 來詳加討論。Bradley (1992)曾建議經由 Le 所修正過的 Ka ，可適當的預測在真實引擎內火焰完全熄滅的狀態，而該 Ka 可視為化學反應時間（ δ_L/S_L ）與流體時間（ K^{-1} ）之比。雖然在理論判定上，所建議的火焰熄滅是發生在 Ka 等於 1.0 時，但真實燃燒器的熄滅研究指出， Ka_{max} 的範圍大約是落在 0.03 至 20 之間(Chomiak, 1982)。

1. 統御方程式

爲了瞭解流場對火焰的影響，本研究將對反應區的結構做一般性

的分析討論，特別是針對單一步驟的反應機構，推導理想狀況的延展表示式。

無因次的統御方程式：

$$\tilde{\rho} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \tilde{\rho} \tilde{v} \cdot \nabla \tilde{T} - \nabla^2 \tilde{T} + h(\tilde{T}) = \tilde{\omega}(\tilde{T}, \tilde{Y}) \quad (3-45)$$

$$\tilde{\rho} \frac{\partial (\tilde{T} + \tilde{Y})}{\partial t} + \tilde{\rho} \tilde{v} \cdot \nabla (\tilde{T} + \tilde{Y}) - \nabla^2 \left(\tilde{T} + \frac{\tilde{Y}}{Le} \right) + h(\tilde{T}) = 0 \quad (3-46)$$

式中 h 為單位體積的熱損失，反應率函數 $\tilde{\omega}(\tilde{T}, \tilde{Y}) = Da(\tilde{\rho} \tilde{Y}) \exp(-\tilde{T}_a/\tilde{T})$ ， Le (Lewis Number, α/D)， Da 數 (Damköhler Number, $\alpha/(S_L^0)^2/\tau_c$)。上述統御方程式中的反應物質量分率 Y 與密度 ρ ，可使用未燃的 Y_u 和 ρ_u 來加以無因次化，而溫度則使用 qY_u/C_p 來加以無因次化，絕熱火焰溫度 T_{ad} 可視為 $T_u + qY_u/C_p$ ，距離、時間則採用熱擴散的長度 (α/S_L^0) 和時間 ($\alpha/(S_L^0)^2$) 來加以無因次化。對於上、下對稱的停滯流火焰，考慮 Le 的變化，一維、穩態的守恆方程式

$$Ka \cdot \tilde{x} \frac{d\tilde{T}}{d\tilde{x}} + \frac{d^2 \tilde{T}}{d\tilde{x}^2} = - \left(Ka \cdot \tilde{x} \frac{d\tilde{Y}}{d\tilde{x}} + \frac{1}{Le} \frac{d^2 \tilde{Y}}{d\tilde{x}^2} \right) = -Da \cdot \tilde{Y} \exp\left(-\frac{\tilde{T}_a}{\tilde{T}}\right),$$

$$\tilde{x} \rightarrow -\infty : \quad \tilde{T} \rightarrow \tilde{T}_u, \quad \tilde{Y} \rightarrow 1$$

$$\text{停滯面上：} \quad \frac{d\tilde{T}}{d\tilde{x}} = \frac{d\tilde{Y}}{d\tilde{x}} = 0 \quad (3-47)$$

式中延展率的無因次參數- Ka 乃使用熱擴散時間 ($\alpha/(S_L^0)^2$) 來加以無因次化。

(1) 內部區域 (Inner Region)

使用 $(\tilde{x} - \tilde{x}_f)/\varepsilon$ 放大化學反應區尺度，溫度與濃度變數的形式如下

$$\tilde{T} = \tilde{T}_f - \varepsilon \cdot \theta_1 - \varepsilon^2 \cdot \theta_2 + \dots$$

$$\tilde{Y} = \varepsilon \cdot \varphi_1 + \varepsilon^2 \cdot \varphi_2 + \dots$$

式中 $\varepsilon = \tilde{T}_{ad}^2 / \tilde{T}_a$ ，則統御方程式為

$$\theta_1 - \varphi_1 / Le = \theta_1(0) - \varphi_1(0) / Le + A1 \cdot \xi \quad ,$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \left(\theta_2 - \frac{\varphi_2}{Le} \right) + Ka \cdot \tilde{x}_f \frac{d}{d\xi} (\theta_1 - \varphi_1) = 0 \quad ,$$

$$\frac{d^2 \varphi_1}{d\xi^2} = \Lambda_0 \cdot \varphi_1 \cdot \text{EXP} \left[- \left(\frac{\tilde{T}_{ad}}{\tilde{T}_f} \right)^2 \left(\frac{\varphi_1}{Le} + A1 \cdot \xi \right) \right] \quad (3-48)$$

，其中

$$\Lambda_0 = \frac{Le}{2} \cdot \text{EXP} \left[\tilde{T}_a \left(\frac{1}{\tilde{T}_{ad}} - \frac{1}{\tilde{T}_f} \right) - \left(\frac{\tilde{T}_{ad}}{\tilde{T}_f} \right)^2 \left(\theta_1(0) - \frac{\varphi_1(0)}{Le} \right) \right]$$

(2) 外部區域(Outer Region)

在上游預熱區-

$$\tilde{T}^- = \tilde{T}_u + (a_0^- + \varepsilon \cdot a_1^- + \dots) \cdot I(\sqrt{Ka} \tilde{x}) \quad , \quad \tilde{Y}^- = 1 + (b_0^- + \varepsilon \cdot b_1^- + \dots) \cdot I(\sqrt{Ka \cdot Le} \tilde{x}) \quad ,$$

$$I(x) = \int_{-\infty}^x \text{EXP} \left(-\frac{x'^2}{2} \right) dx'$$

在停滯面上-

$$\tilde{T}^+ = \tilde{T}_f + \varepsilon \cdot a_1^+ + \dots,$$

$$\tilde{Y}^+ = 0$$

為了使外部解(Outer Solution)與內部解(Inner Solution)吻合，令

$$a_0^- = (\tilde{T}_f - \tilde{T}_u) / I(\sqrt{Ka} \tilde{x}_f), \quad b_0^- = -1 / I(\sqrt{Ka \cdot Le} \tilde{x}_f),$$

$$a_1^+ = a_1^- I(\sqrt{Ka} \tilde{x}_f) + \frac{b_1^-}{Le} I(\sqrt{Ka \cdot Le} \tilde{x}_f) = \frac{\varphi_1(0)}{Le} - \theta_1(0)$$

引進下述的邊界條件

$$\theta_1(-\infty) = -a_1^- I(\sqrt{Ka} \tilde{x}_f) - a_0^- \sqrt{Ka} \text{EXP}\left(-Ka \tilde{x}_f^2 / 2\right) \Big|_{\xi \rightarrow -\infty},$$

$$\frac{d\theta_2(-\infty)}{d\xi} = -\sqrt{Ka} \text{EXP}\left(-Ka \tilde{x}_f^2 / 2\right) (a_1^- - a_0^- Ka \tilde{x}_f \xi) \Big|_{\xi \rightarrow -\infty},$$

$$\frac{d\varphi_1(-\infty)}{d\xi} = b_0^- \sqrt{Ka \cdot Le} \text{EXP}\left(-Ka \cdot Le \tilde{x}_f^2 / 2\right),$$

$$\frac{d\varphi_2(-\infty)}{d\xi} = \sqrt{Ka \cdot Le} \text{EXP}\left(-Ka \cdot Le \tilde{x}_f^2 / 2\right) (b_1^- - b_0^- Ka \cdot Le \tilde{x}_f \xi) \Big|_{\xi \rightarrow -\infty};$$

$$\theta_1(0) = -a_1^+, \quad \frac{d\theta_2(0)}{d\xi} = 0, \quad \varphi_1(0) = 0, \quad \frac{d\varphi_2(0)}{d\xi} = 0$$

則統御方程式可化簡如下

$$\tilde{T}_f = \tilde{T}_u + \frac{I(\sqrt{Ka} \tilde{x}_f)}{\sqrt{Le} I(\sqrt{Ka \cdot Le} \tilde{x}_f)} \text{EXP}\left(\frac{Ka(1-Le)}{2} \tilde{x}_f^2\right),$$

$$a_1^- I(\sqrt{Ka} \tilde{x}_f) + b_1^- \frac{I(\sqrt{Ka \cdot Le} \tilde{x}_f)}{Le} = \frac{\varphi_1(0)}{Le} - \theta_1(0) = a_1^+,$$

$$\int \left[\frac{d^2}{d\xi^2} \left(\theta_2 - \frac{\varphi_2}{Le} \right) + Ka \tilde{x}_f \frac{d}{d\xi} (\theta_1 - \varphi_1) \right] d\xi = 0,$$

$$a_1^- \text{EXP}\left(-\frac{Ka \tilde{x}_f^2}{2}\right) + b_1^- \left[\frac{\text{EXP}\left(-Ka \cdot Le \tilde{x}_f^2 / 2\right)}{\sqrt{Le}} + \left(1 - \frac{1}{Le}\right) \sqrt{Ka} \tilde{x}_f I(\sqrt{Ka \cdot Le} \tilde{x}_f) \right] = 0,$$

$$\int \left[\frac{d^2 \varphi_1}{d\xi^2} = \Lambda_0 \varphi_1 \text{EXP}\left(-\left(\frac{\tilde{T}_{ad}}{\tilde{T}_f}\right)^2 \left(\frac{\varphi_1}{Le} + A1 \cdot \xi\right)\right) \right] d\xi,$$

$$Ka = \left[Le \left(\frac{T_f}{T_{ad}} \right)^2 I(\sqrt{Ka \cdot Le \tilde{x}_f}) \right]^2 \exp \left(T_a \left(\frac{1}{T_{ad}} - \frac{1}{T_f} \right) + (Ka \cdot Le) \tilde{x}_f^2 + \left(\frac{\tilde{T}_{ad}}{\tilde{T}_f} \right)^2 a_1^+ \right) \quad (3-49)$$

如果令 $a_1^- = a_1^+ = b_1^- = 0$ ，而 Ka 與發生反應之火焰位置 ($\tilde{x}_f$) 的關係可表示為

$$Ka = \left[Le \left(\frac{T_f}{T_{ad}} \right)^2 I(\sqrt{Ka \cdot Le \tilde{x}_f}) \right]^2 \exp \left(T_a \left(\frac{1}{T_{ad}} - \frac{1}{T_f} \right) + (Ka \cdot Le) \tilde{x}_f^2 \right) \quad (3-50)$$

令熄滅狀態為 $dKa/d\tilde{x}_f = 0$ ，則上式的微分表示如下

$$\begin{aligned} \frac{dKa}{d\tilde{x}_f} = 0 &= \frac{Le^2}{T_{ad}^4} \frac{d \left(T_f^4 I^2(\sqrt{Ka \cdot Le \tilde{x}_f}) \right)}{d\tilde{x}_f} \exp \left(T_a \left(\frac{1}{T_{ad}} - \frac{1}{T_f} \right) + (Ka \cdot Le) \tilde{x}_f^2 \right) \\ &+ Le^2 \left(\frac{T_f}{T_{ad}} \right)^4 I^2(\sqrt{Ka \cdot Le \tilde{x}_f}) \frac{d \exp \left(T_a \left(\frac{1}{T_{ad}} - \frac{1}{T_f} \right) + (Ka \cdot Le) \tilde{x}_f^2 \right)}{d\tilde{x}_f}, \\ \frac{d\tilde{T}_f}{d\tilde{x}_f} &= \frac{\sqrt{Ka}}{\sqrt{Le}} \frac{\exp(-Ka \cdot Le \tilde{x}_f^2 / 2)}{I(\sqrt{Ka \cdot Le \tilde{x}_f})} - \sqrt{Ka} \frac{I(\sqrt{Ka \tilde{x}_f})}{I^2(\sqrt{Ka \cdot Le \tilde{x}_f})} \exp \left(\frac{Ka(1-2Le)}{2} \tilde{x}_f^2 \right) \\ &+ \frac{Ka(1-Le)}{\sqrt{Le}} \frac{I(\sqrt{Ka \tilde{x}_f})}{I(\sqrt{Ka \cdot Le \tilde{x}_f})} \tilde{x}_f \exp \left(\frac{Ka(1-Le)}{2} \tilde{x}_f^2 \right) \end{aligned} \quad (3-51)$$

由上述 $\tilde{x}_f$ 的隱函數，可求得熄滅時火焰位置。對於火焰跳觸在停滯面 ($\tilde{x}_f=0$) 的特例，最大 (或熄滅) 的 Ka 可表示為

$$Ka_{\max} = \frac{\pi}{2} Le^2 \left(\frac{T_f}{T_{ad}} \right)^4 \exp \left(T_a \left(\frac{1}{T_{ad}} - \frac{1}{T_f} \right) + G \right),$$

$$T_f = T_u + \frac{(q \cdot Y_u / C_p)}{\sqrt{Le}} = T_u + \frac{(T_{ad} - T_u)}{\sqrt{Le}} \quad (3-52)$$

上式適用於 Le 值大於 1.0 為完全反應的貧火焰例子，其中修正常數 G 用於表示推導過程中許多被忽略的效應。對縮減反應機構而言，活化能溫度可定義如下

$$T_a \equiv \frac{E_a}{R} = Ze \frac{T_{ad}^2 (T_{in} - T_u)}{(T_{ad} - T_u)^2} = 4 \frac{T_{ad}^2 (T_{in} - T_u)}{(T_{ad} - T_{in})(T_{ad} - T_u)} \quad (3-53)$$

在第五章的數值討論，將以火焰燃燒速度、貧極限與火焰溫度的變化來推求活化能溫度，而非直接使用上述公式求得。由火焰的延展分析得知，理論式中的變數 G 可具體表示成

$$G = \text{LOG} \left(\frac{Ka_{\max}}{\pi/2 \cdot Le^2 (T_f/T_{ad})^4} \right) + T_a \left(\frac{1}{T_f} - \frac{1}{T_{ad}} \right) \quad (3-54)$$

因此，在已知 Le、絕熱火焰溫度的條件下，可透過火焰的傳播行為來確認活化能溫度與最大延展參數間的變化關係。

Law (1992) 曾將 Da 以絕熱火焰溫度、活化能溫度等特徵溫度，具體表示如下

$$Da = \frac{T_a^2 (T_{ad} - T_u)^2}{2T_u T_{ad}^3} \text{EXP} \left(\frac{T_a}{T_{ad}} \right) \quad (3-55)$$

根據 Tseng (1993) 的實驗資料，嘗試與上述理論做一結合。以下就不同的碳氫-空氣火焰，將其模擬結果整理列表。

甲烷-空氣火焰：

當量值 火焰特性	0.6	0.7	0.9
T_a [K]	16047	12607	9708

Ka_{max}	22.80	4.23	2.25
Da	2.68×10^6	9.70×10^4	5.19×10^3
G	1.175	0.444	0.171

乙烯-空氣火焰：

當量值 火焰特性	0.8	0.9	1.0
T_a [K]	10463	9634	9217
Ka_{max}	1.61	1.19	1.16
Da	7.96×10^3	3.45×10^3	2.25×10^3
G	0.278	0.108	0.073

乙烷-空氣火焰：

當量值 火焰特性	0.8	1.0
T_a [K]	8185	7199
Ka_{max}	1.28	1.17
Da	2.25×10^3	701
G	0.242	0.118

丙烷-空氣火焰：

當量值 火焰特性	0.8	1.0
T_a [K]	3346	3111
Ka_{max}	0.46	0.62
Da	34.5	21.3
G	-0.264	-0.186

本節對碳氫-空氣燃燒系統的研究，由上述理論分析得知，決定性的關鍵參數為活化能溫度。雖然縮減反應機構的理論，對活化能溫度曾嘗試以公式 3-53 來求解，但本研究所採用的方法是在定壓下，以貧極限、燃燒速度與火焰溫度間的變化關係，適當的決定活化能溫度。

3.5.2 壓力對火焰速度的影響

檢視公式 3-2 得知，對於各種影響火焰傳播速度的效應，如壓力、溫度等，理論分析是慣於將其一一抽離成獨立的項次，來詳加討論。

$$S_L^0 \sim P^{np/2-1} \text{EXP}\left(-\frac{E_a}{2RT_{ad}}\right)$$

由於本研究採用公式 3-35 作為預測火焰速度的通式，以內層溫度和能量參數來考慮各種燃燒狀況下的傳播行為。

$$\frac{S_L^0}{S_{L,\min}} = Le^{1/2} Y_{F,u}^{1/2} \text{EXP}\left(-\frac{E}{2RT_{in}}\right) Ze^{-2\left(\frac{\rho_{in}}{\rho_b}\right)}$$

加上先前 Seshadri & Peters (1990)、Seshadri & Göttgens (1991)、Göttgens (1992) 以及 Müller (1997) 等人以縮減反應機構討論碳氫-空氣火焰的內層溫度得知，此基準溫度會深受壓力的影響。Egolfopoulos & Law (1990)曾研究當量值為 1.0 的烷類-空氣火焰，量測壓力從 0.25 變化至 3.0 時，層流火焰速度的變化情形。因此，本研究的數值模擬，將以內層溫度來考慮壓力對於火焰傳播速度的影響，詳細的數值結果則留待在第五章討論。

3.5.3 溫度對火焰速度的影響

預熱所供應的未燃氣或因熱損失（加熱）造成火焰溫度的改變，會間接的造成火焰速度的變化。對燃燒而言，熱損失的來源有二：一為燃氣 CO_2 、 H_2O 以及 CO 等的氣體輻射，另一為傳導至冷壁面的熱能。大多數的氣體輻射位於紅外線區，其輻射量和分壓、行徑路徑以及溫度等有關，相對於冷壁面的熱損失而言，輻射熱不易收集、不易量測得到，對小型的燃燒系統輻射熱值幾乎可忽略。因此，對於這方

面相關的研究有很多是討論冷壁面的熱損失，尤其是以對衝、平面延展的火焰，或是直接衝擊壁面的停滯火焰等模式的討論（將停滯面設定在不同的溫度條件下）。Williams (1985)曾考慮一維的預混層流火焰，熱損失對火焰傳播的影響，可具體的表示如下

$$\left(\frac{S_L}{S_L^0}\right)^2 \text{LOG}\left(\frac{S_L}{S_L^0}\right) + \frac{l}{2} = 0 \quad (3-56)$$

因此，以上述理論估算燃燒系統熱損失對火焰傳播的影響，關鍵在於參數 l 值的拿捏是否適當。

絕熱例子：

$l = 0.00$ ，燃燒速度等於層流火焰速度。

Poinsot (1991)：探討熱輻射對火焰熄滅機制（過度高估）

$l = 0.30$ ，燃燒速度 $S_L \approx 0.783 \times S_L^0$

Roberts (1993)：使用渦流來探討紊流火焰熄滅機構

$l = 0.027$ ，燃燒速度 $S_L \approx 0.986 \times S_L^0$

Samaniego (1999)：研究火焰與渦流間的交互作用，並討論紊流火焰傳播的基本機構

$l = 0.008$ ，燃燒速度 $S_L \approx 0.996 \times S_L^0$

但實際應用上，熱損失的分析可從公式 3-2 的活化能出發

$$S_L^0 \sim \text{const} \cdot \text{EXP}\left(-\frac{E_a}{2RT_{ad}}\right)$$

如果燃燒系統因冷卻而導致絕熱火焰溫度 T_{ad} 將降至 T_f ，而火焰速度亦隨之減少，其修正後的速度為

$$S_L \sim \text{const} \cdot \text{EXP}\left(-\frac{E_a}{2RT_{ad}}\right) \text{EXP}\left(-\frac{T_{ad}-T_f}{2RT_{ad}^2} E_a\right) \sim \text{const} \cdot \text{EXP}\left(-\frac{E_a'}{2RT_{ad}}\right),$$

$$E_a' = E_a \left[1 + (T_{ad} - T_f)/T_{ad}\right] \quad (3-57)$$

由上述討論得知，預熱未燃氣或熱損失所造成的溫度變化都可由活化能的變化來考慮其效應。Dugger (1955)、Kanury (1975)曾討論化學當量值為 1.0 的烷類-空氣火焰，將未燃氣溫度預熱至 200K~620K 間，觀察火焰速度的變化情形。Bartholome (1949)曾對氫氣、碳氫-空氣火焰，在一大氣壓下，研究火焰溫度對燃燒速度的影響。雖然，本研究是採用公式 3-35 的火焰速度預測式，但對於溫度效應所造成的速度改變，亦以能量參數 E 來模擬，而詳細的數值結果則留待第五章討論。

3.5.4 惰性氣體對火焰速度的影響

討論氧化劑組成對火焰傳播行為的影響，可從三方面進行討論：一為空氣添加惰性氣體使氧氣缺量，係利用惰性氣體的添加降低氧化劑中的氧氣原本所佔有的劑量；二為改變稀釋氣體種類；三為增加氧氣劑量至純氧狀況時的燃燒行為。當惰性氣體被用來控制火焰時，它的主要功能是用來預防爆炸蒸汽-空氣混合物的形成（附錄 C）。由於惰性氣體的添加，會明顯的改變火焰速度和貧可燃極限，以致於數值模擬上，必須同時考慮以內層溫度、能量參數來模擬其變化。Egolfopoulos & Law (1990)曾對甲烷-空氣火焰添加氫氣來稀釋氧化劑中氧氣的劑量，觀察層流火焰速度的變化情形。Clingman (1953)曾研究甲烷燃料，使用氫氣、氫氣以及氮氣等三種稀釋氣體，氧化劑組成仿空氣，討論稀釋氣體種類對火焰傳播速度的影響。Morgan &

Kane (1953)曾量測氫氣、甲烷、乙炔以及丙烷等燃料，在不同管徑、不同稀釋氣體（氦氣、氬氣及氮氣）作用下，氧氣濃度從一般的空氣組成到純氧狀況，火焰燃燒速度的變化情形。Shchetinkov (1965)曾討論己烷-氧氣-氮氣火焰，氧化劑中氧氣濃度從 16.4%改變至純氧狀況，研究火焰速度與燃料濃度間的關係。這些實驗數據，將在第五章中做更深入的分析

本文是建構在已有縮減反應的理論基礎上，引進所謂的內層溫度來探討火焰尺寸、傳播速度以及火焰行為。對於該溫度值，則另行採用傳播的觀點來決定：層流火焰速度沿當量值遞減至零，將該處的火焰溫度視為是否發生化學反應的基準溫度（確切值尚須考慮質極限，此將留待在第五章中討論）。理論分析除了 Le 、絕熱火焰溫度、層流火焰速度以及火焰厚度等基本燃燒變數的研究外，對於描述火焰行為的無因次參數（諸如 Ma 、 Ka_{max} 及 Da 等）亦有討論。另外，在第五章中將透過壓力、溫度以及惰性氣體的改變，觀察這些效應對火焰特性和傳播行為的影響。

第四章 實驗設備與方法

4.1 實驗動機與目的

本實驗的動機在於使用不同的惰性氣體、不同管徑的燃燒器，在氣體性質與流速的改變下，觀察本生式預混碳氫火焰的行為，諸如明亮火焰錐、回火以及吹熄等現象。透過氣體性質的研究，搭配火焰觀測所提供的相關火焰現象，將觀察到不同 Le 值下所對應火焰行為。而火焰速度的分析，亦指出流體對火焰焰面的延展，需要更多有關燃氣、流場的相關資料來加以確認。因此，本實驗將從二方面進行火焰的觀察：

- (1) 氣體傳輸行為方面的觀測- 對甲烷、丙烷等氣體燃料，以不參與反應的氮氣、氬氣及氦氣來稀釋，調整氧化劑中的氧氣分率與空氣的組成相同，而惰性氣體的含量則類似於空氣中的氮氣量。在這樣的混合條件下，分析惰性氣體種類對本生式火焰結構、傳播行為的影響。
- (2) 流場方面的觀測- 燃燒器管徑共有 1.2/1.8/2.4/3.0 公分等四組可供選用，將空氣流量固定為 9.0 升/分鐘，然後視情況使用粗調（0.3~3.0 升/分鐘）和微調（0.1~1.0 升/分鐘）的流量計來控制燃料的流量。利用此四種燃燒器管徑所產生的流速差異，觀察火焰駐留在管口的穩定性。另外，以環流惰性氣體吹離火焰，觀測火

焰停駐在管口的強弱。特別是以三種氣體（如氮氣、氬氣及氦氣等）所稀釋的可燃氣做測試、比較火焰從吹離至吹熄時的行為差異，記錄火焰結構受環流氮氣拔離管口所需流量和可燃氣當量值的變化情形。

實驗目的，除了以不同惰性氣體所稀釋的可燃氣做為研究火焰結構、傳播行為的對象外，並對本生式明亮火焰錐塌陷、吹熄等行為的影響做詳細的觀察與記錄。

4.2 實驗裝置

實驗佈置圖如圖 4-1 所示，它們包括本生式燃燒器、三軸自動定位平台、燃料輸送系統、數位攝影系統、冷卻水系統及抽風設備等。其功能詳述如下：

4.2.1 燃燒器系統

燃燒器系統是以本生式燃燒器為主體，且由以下數個部分所組成：

- (1) 混合室：其形狀為鑄鐵擴散形圓柱體，內部充以鋼珠且出口鋪上整流效果之細格鐵絲網。
- (2) 加速區：燃料和空氣經過混合室預混後，再經過噴嘴（Nozzle）噴出。
- (3) 管口區：讓混合氣在管內穩態發展（Steady Develop），使用四

種長度約 10 公分，而管徑分別為 1.2/1.8/2.4/3.0 公分來改變流速，觀察流力對預混本生式火焰的影響。

4.2.2 氣體輸送系統

氣體輸送系統，是由以下幾個部分所構成：

- (1) 鋼瓶：主要除了提供氫氣、甲烷及丙烷等氣體燃料外，另有鋼瓶是提供類似空氣組成的混合氣(21% O_2 + 79% Dilute)，以觀察氣體傳輸性質對本生式火焰的影響。
- (2) 空氣壓縮機：主要功能除了供應空氣外，並能過濾空氣中的水氣，避免讓其通過流量計時影響結果。
- (3) 浮球式流量計：二支燃料流量計(一用於微調，其範圍為 0.1~1.0 升/分；另一用於粗調，其範圍為 0.3~3.0 升/分鐘)，一支空氣流量計(其範圍為 3~30 升/分鐘)。
- (4) 調壓錶：分別顯示鋼瓶內及出口端之壓力，配合流量計來控制系統的供氣狀況。

4.2.3 其他設備

- (1) 三軸自動定位平台：利用電腦控制熱電偶作 x-y-z 三度空間的移動，精確測定火焰溫度。
- (2) 熱電偶：使用 R-Type 熱電偶，其最高測定溫度為 1800 K，為防止熱電偶發生觸媒反應，所以熱電偶外層覆上陶瓷管套。

(3) 數位攝影系統：使用柯達生產之變焦數位相機，針對不同當量值、稀釋氣體管徑作用下所產生的火焰，記錄其變化過程甚至熄滅。

(4) 抽風設備：採用多翼式抽風機，並利用變頻器來控制抽風機轉速，用於將已燃氣抽離。

4.3 操作條件

- (1) 檢查燃料、空氣及混合器接頭是否鬆動，以防任何氣體的洩漏。
- (2) 先啟動空氣壓縮機、打開抽風機，清除管道中的餘氣。再裝妥洩氣閥、水氣過濾等裝置，使乾燥空氣入口壓力穩定的維持 $\Delta P=2$ 磅/平方英寸附近、氧化劑流量控制在 9.0 升/分鐘。
- (3) 燃料鋼瓶則利用調壓錶微調其壓力在 $\Delta P=0.5\sim 1.0$ 磅/平方英寸左右，配合流量計控制供應的燃料量。
- (4) 流量計之後安裝具止逆閥的氣體混合器，除了有均勻混合氣體的功用外，並具有防止因燃燒的驟烈改變所導致的回壓（特別是對於氫氣火焰）。
- (5) 點燃火焰後，直到一切運作條件穩定後，關閉抽風機、封閉玻璃罩及拉啓布幕（阻絕任何外界的干擾）。試燒 10 分鐘後（先將玻璃罩內的空氣耗盡），再進行實驗數據的記錄。
- (6) 記錄實驗數據：以數位相機拍攝火焰燃燒的狀況，並移動裝置在三軸平台上熱電偶、氣體分析儀等裝置記錄本生式火焰結構內的

燃燒狀況。

4.4 誤差修正

4.4.1 火焰溫度

對於 R、K-Type 的熱電偶修正是與水銀溫度計（範圍從室溫至 200°C）作比對，調整溫度顯示器其將熱電偶電位差轉溫度值的誤差幅度在 5°C 以內。

4.4.2 氣體流量

由於實驗會大量的使用不同的氣體作研究，而燃燒狀況的改變往往是透過所供應的燃料混合氣比率，為得精確的比率值必須更審慎的檢視所記錄的流量值。但大部分市售的流量計刻度指標是針對空氣而設計，一旦使用其他氣體，則必須進一步對氣體性質、入口壓力 P_0 及入口溫度 T_0 作修正

$$Q_{gas} = \frac{Q'_{gas}}{\sqrt{G \cdot \frac{T_0}{298} \cdot \frac{14.7}{P_0}}} \quad [\text{NL/min}] \quad (4-1)$$

其中係數 G 表相對於空氣的比重(條件為一大氣壓、室溫)

氣體 比重	H ₂	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	He	Argon	N ₂	CO ₂
G	0.069	0.552	1.036	1.557	0.138	1.380	0.967	1.519

Q_{gas} 為氣體真實的流量， Q'_{gas} 表流量計上的刻度值。入口溫度取用室

溫 298 K，空氣壓縮機送至流量計的入口壓力維持在 2 磅/平方英寸附近，而燃料或稀釋氣體鋼瓶利用調壓閥控制在 0.5~1.0 磅/平方英寸左右。

4.5 實驗原理與方法

本實驗是爲了要觀測流力、氣體性質及化學反應對本生式預混火焰行爲的影響，研究主要是透過以下三種方式來達成：

- (1) 使用不同的燃燒器管徑去改變可燃氣的流速。
- (2) 將空氣中的氮氣改用其他稀釋氣體如氦、氬等取代。
- (3) 燃料選用氫氣、甲烷及丙烷。

4.5.1 觀測不同燃料的差異

由氣體的熱力與傳輸性質分析指出，除了甲烷外（除了質量輕外，且無一般碳氫燃料 C_2 鍵的特性），餘下的碳氫燃料氣體的行爲傾向是類似的。因此，有必要再選擇另一種氣體燃料，其氣體性質最好是完全不同於上述碳氫氣體燃料，好讓我們易於觀測不同燃料間，反應機構所造成的火焰差異。本實驗是使用氫氣-空氣、甲烷-空氣及丙烷-空氣等三種可燃氣做為研究燃料差異對火焰結構的影響，並討論所呈現的火焰光譜其可能的反應中間物、產物種類。

圖 4-2 就是使用氫氣/空氣、丙烷/空氣火焰來研究其差異性，而觀測結果指出氫氣火焰不僅流速快、沒有明亮的火焰錐、火焰表面有很多的小火花出現，而且只能看到由水蒸汽所放射的紅光。熄滅前會有瞬間的回壓，此將造成巨大的爆炸聲響，是一種很容易被吹離管口、高燃燒性及爆炸性（爆炸極限空氣中 4 至 75%）的不穩定火焰。相反的，丙烷火焰由於有 C_2 的反應，火焰中心有由其所放射出的藍綠色的火焰錐，而大部分的反應均在此火焰錐區間完成，是高度可燃（爆炸極限 2.4 至 9.5%）、結構比較密實且穩定的火焰。

4.5.2 觀測稀釋氣體的影響

對於甲烷、丙烷的預混火焰，利用氦氣、氫氣等稀釋氣體改變可燃氣的擴散性，對氧化劑中的氧氣劑量調整至 0.21，而稀釋氣體部分則約為 0.79。在這樣的條件下，這些化學反應所釋放的熱量應該與該燃料和空氣作用所提供的反應熱相近，而火焰行為上的差異，可歸咎於不參與反應的稀釋氣體（附錄 B 中有更詳細的反應物種分析）。圖 4-3 為使用甲烷燃料，以氦氣、氫氣及氬氣等稀釋氣體來改變可燃氣的 Le 值，觀察火焰明亮區結構的變化情形。比較發現，火焰結構上的差異是受以下數種氣體性質的綜合影響：

- 黏滯性

$$\nu_{He} > \nu_{N_2} > \nu_{Argon} \quad (8.37 : 1.10 : 1.00)$$

- 熱擴散性

$$\alpha_{He} > \alpha_{Argon} > \alpha_{N_2} \quad (8.42 : 1.01 : 1.00)$$

- 質量擴散性

$$D_{CH_4-He} > D_{CH_4-N_2} > D_{CH_4-Argon} \quad (3.21 : 1.02 : 1.00)$$

- 比熱

$$C_{p,N_2} > C_{p,He} = C_{p,Argon}$$

同理，對於圖 4-4 使用丙烷燃料的例子亦同。對甲烷、丙烷火焰而言，使用上述惰性氣體做為稀釋氣體，可採 Le 的觀點來解釋其火焰行為：

1. 以氫氣、氦氣來稀釋甲烷燃料，其 Le 值接近 1.0 的火焰行為；用氮氣來稀釋時，可觀察到 Le 值超過 2.0 以上的火焰行為；而用水氣、二氧化碳來稀釋時，可觀察到 Le 值小於 1.0 的火焰行為。
2. Le 值愈低的火焰，焰面對流體的延展非常的靈敏。一旦操作條件稍有改變，使用氮氣、氫氣要比氦氣稀釋的火焰，更能延展其焰面。
3. Le 值愈高的火焰，火焰錐面光亮、結構密實且受外界干擾較不靈敏。因此，以氮氣來稀釋可燃氣，會使火焰持續到非常低的當量值才熄滅。
4. Le 值低的火焰在接近其熄滅時，焰面起皺、抖動的非常厲害且火焰尖端有明顯的缺口出現（火焰受干擾的靈敏度高）。此種不穩定的火焰現象，將是以水氣、二氧化碳所稀釋的火焰最為顯著。

特別的是，甲烷燃料使用氮氣作為稀釋氣體時，當混合氣的當量值大於 2.0 以上，因可燃氣流速過快，火焰會有吹離管口的現象出現。雖然氫氣與氮氣有著相近的熱擴散性，但氫氣為單原子氣體，其比熱要比氮氣低的多。在相同的熱釋放條件下，可燃氣以氫氣稀釋比以氮

氣稀釋的燃燒速度、火焰溫度要來的高。氫氣與氦氣均為單原子氣體，然而氦的熱擴散是遠大於氫氣（因為氦有較高的熱傳導且較低的密度）。結果造成可燃氣以氦氣稀釋的燃燒速度要比氫氣所稀釋大的多，但火焰溫度卻低的多。

4.5.3 流場的觀測

燃燒器管口直徑有 1.2/1.8/2.4/3.0 公分等四組，操作時固定空氣流量為 9.0 升/分鐘，然後視情況使用粗調及微調的流量計來控制燃料的供給量。因此，在相同的流量、相同的稀釋氣體作用下，流速與管截面積成反比，而它們之間的比率如下所示

$$6.25 : 2.78 : 1.56 : 1$$

圖 4-5、圖 4-6 為使用四種管徑的燃燒器，甲烷、丙烷燃料在不同惰性氣體的稀釋下，觀測因回火而致熄滅前火焰結構與當量值、流速間的變化情形。分析得知，不論甲烷或是丙烷燃料均因所使用的稀釋氣體不同，其熄滅當量亦隨之不同。當管徑小於 1.3 公分時，其熄滅當量值的依序為

$$\phi_{Argon} > \phi_{He} > \phi_{N_2}$$

，但對於管徑大於 1.3 公分時，其熄滅當量值的依序為

$$\phi_{He} > \phi_{Argon} > \phi_{N_2}$$

甲烷、丙烷/空氣火焰在不同的管徑下，觀察流速改變對火焰結構

的影響：

1. 至熄滅前，流速快（小管徑燃燒器）依舊可保有良好火焰錐外型。
2. 至熄滅前，流速慢（大管徑燃燒器）其中心火焰錐易縮回燃燒器內且僅餘擴散層在燃燒器的管口上。最後，此擴散層轟隆一聲就突然消失掉。
3. 在燃氣流速慢的情況下，丙烷燃料要比甲烷燃料焰面更易出現起皺、抖動的現象且在火焰錐上端有缺口出現。

當燃燒器管徑大於 2.4 公分以上熄滅當量值的改變非常有限，相反的一旦管徑縮小，因流速變快會使熄滅當量降低。另外，對小管徑的燃燒器，而所使用的稀釋氣體具輕質性（如氦氣，本身除重量輕外且具強黏滯性），將使得該火焰可降至更低的當量值才熄滅。除了上述當量值與流速的研究外，將甲烷、丙烷燃料使用氮氣、氫氣及氦氣等氣體的稀釋下，發生熄滅現象時的當量值、流速及 Le 值的範圍表示在圖 4-7、圖 4-8。分析比較發現：

- 燃燒器尺寸、操作條件可使我們對熄滅之當量值作廣泛的觀察。停駐管口的火焰速度一般是保持在吹離火焰與回火之臨界流速間，藉由改變可燃氣當量值來降低火焰速度，當其低於臨界流速將導致回火（Flashback），使火焰消失於管口處。
- 透過不同的稀釋氣體，可觀察到 Le 值介於 1.0~3.0 間的火焰行為。使用氮氣、氫氣來稀釋甲烷和丙烷燃料，其 Le 分別約為 1.0 與 1.65；如果用水氣、二氧化碳來稀釋可燃氣，則會降低上述的 Le 值；如果用氦氣來稀釋可燃氣，上述的 Le 值約可提高，其值在 2 到 3 之間。

4.5.4 火焰吹熄的觀測

本生式火焰因壁的冷卻效應而使火焰停駐在出口處，當燃燒器外部外加一個以同心軸方向不參與反應的惰性氣體環流(如圖 4-9 所示)來吹離中心的火焰錐，研究主要是為了觀察火焰停駐在管口的強度。為了此觀測目的，圖 4-10 主要是先測試所使用的環流氣體種類(氮氣與氦氣)對丙烷/空氣火焰吹離的差異，而比較發現環流氣體種類對吹離火焰所需的流量，並無顯著的不同。所以，以下有關吹離研究，將特別注重於火焰吹離甚至吹熄的環流氣體流量的記錄上，並調整中心明亮火焰錐在不同當量值、不同稀釋氣體的操作條件下做討論：

圖 4-11 是針對丙烷可燃氣在不同氣體的稀釋下，研究氮氣、氦氣及氫氣等稀釋氣體對火焰駐留管口強度的影響：

- 使用一般空氣稀釋可燃氣 (Le 值約在 1.8 附近)，隨著環流量的流量加大，火焰吹熄的形式- 離開管口浮盪在空中，焰面被干擾而碎裂最後導致熄滅。
- 使用氮氣來稀釋可燃氣 (Le 值在 3.0 附近)，當環流的氣體流量加大，火焰吹熄的形式- 火焰輕微的漂浮在管口上，在該位置會出現強烈上下振盪導致有嗡嗡的聲響，最後瞬間熄滅。
- 使用較重的氫氣來稀釋可燃氣 (Le 值在 1.7 附近)，當環流的氣體流量加大，火焰吹熄的形式- 火焰除了會吹離管口外，在空中火焰錐與擴散層會漸漸的分離開來，隨著環流氣體流速加大，此種效應將隨環流流速的加大而更趨顯著甚至其中屬火焰錐的火焰會再度降回管內另一依舊漂浮在空中，最後無論我怎

麼加大環流流速都無法使管內的紅黃色的火焰吹熄。

以上這些火焰現象僅對有明顯火焰錐的預混火焰所做的觀察，接著，將針對不同當量值進行廣泛的吹熄試驗。圖 4-12 主要是在管徑 2.4 公分的本生式燃燒器，對甲烷與丙烷燃料使用氮氣、氦氣及氫氣等三種氣體來稀釋，將吹熄之環流氮氣的最小流量與當量值間的變化做一比較。圖上的符號，主要是根據不同的燃料和稀釋氣體的組合，符號的上方表示可讓火焰吹熄的環流氣之流速。由於觀測火焰吹熄行為是使用大管徑的燃燒器（流速慢），以致所觀察到的火焰行為大部分屬富燃燒狀況。

4.5.5 火焰穩定性的觀察

由之前觀察氫氣、丙烷火焰的現象得知，火焰中心明亮錐的形成對於碳氫燃料火焰的穩定性具有非常顯著的影響。所以本單元，將針對甲烷、丙烷燃料在不同管徑、稀釋氣體作用下，觀察明亮錐形成的當量範圍和火焰結構的變化情形。以圖 4-13 火焰錐的發展情形做為判斷火焰行為的依據，主要將火焰的結構分成三大部分：

- 當明亮火焰錐消失潛回管內，只剩外部擴散層，由於焰面易於起皺、抖動甚至瞬間突然消失，將此類火焰的行為歸類為不穩定。
- 隨著當值的加大中心火焰錐會漸漸地與外部擴散層合併，抓取週遭的空氣反應，而火焰錐與外部擴散的分隔不再明顯。將此類無法區隔火焰錐和擴散層的火焰視為穩定火焰的結束，而火焰呈紅黃光且強烈的受周遭空氣的影響而左右漂盪著。
- 介於前述二種現象之間，為有穩定結構的明亮錐火焰。

藉由此一系列火焰結構影像的記錄分析，茲將甲烷燃料的結果展示如圖 4-14，有以下幾點是值得討論：

- 中心火焰錐的穩定性是由可燃氣的流速、火焰傳播速度二種速度平衡下的結果

$$\text{火焰傳播速度} - S_{L,He} > S_{L,Argon} > S_{L,N_2}$$

$$\text{相同流量下的平均流速} - U_{He} > U_{N_2} > U_{Argon}$$

此種平衡解釋了火焰明亮錐先後消失的原因，其順序為：以氫氣稀釋的火焰最快熄滅，其次是以氦氣稀釋的火焰，最後才是氮氣稀釋的火焰。

- 可燃氣的流速愈快（管徑愈小），火焰愈能穩定的駐留在管口處且明亮火焰錐出現的當量值範圍也愈大，相對的回火出現的機率也愈小。一般來說，以氦氣稀釋的火焰，火焰錐出現的當量值範圍大，所以此種火焰較不易有回火的現象出現。

圖 4-15 則將甲烷可燃氣的流量換算成平均流速，比較流速與當量值間的變化情形。同理，對於圖 4-16、4-17 則針對丙烷火焰，亦有相似的觀測結果。討論火焰的穩定性，除了利用上述明亮火焰錐出現範圍做判斷外，燃燒對火焰不穩定的發生原因，有三點是值得被提出供大家討論：

- 優先擴散不穩定性（Preferential-diffusion Instability）
- 流力的不穩定性（Hydrodynamic Instability）
- 浮力的不穩定性（Buoyant Instability）。

其中優先擴散效應留待到後面在熄滅現象討論，其餘二種不穩定性均可由上述火焰吹熄現象的研究中觀察得到，像是火焰表面出現不規則細胞或破碎的結構就是流力的不穩定性所造成(Groff, 1982)。至於浮力的不穩定性到目前為止還沒有明確的定論，研究至今，尚無人將其影響有系統的自其他效應中抽離出。本研究是透過極輕的氦氣來吹離以較重的氬氣為稀釋氣體的碳氫火焰，將火焰吹浮在空中觀察火焰結構的變化情形。

4.5.6 火焰溫度的量測

使用 R 型熱電偶，其裸線直徑約為 0.2 公釐，最高量測溫度限制為 1800 K，透過數位式顯示器將熱電偶的電位差轉成溫度值。配合水銀溫度計校正其量測值，結果顯示其誤差在 $\pm 3^{\circ}\text{C}$ 。假設火焰溫度分佈可視為軸對稱，依圖 4-18 所標註的火焰尺寸，沿不同截面（r 方向）、高度（z 方向）進行溫度量測：

圖 4-19、圖 4-20 分別使用本生式燃燒器管徑為 1.8、3.0 公分，在不同當量值的丙烷/空氣火焰下，量測火焰結構內的溫度變化。

4.5.7 火焰錐尺寸的量測

火焰高度的數據，乃使用可變焦的數位相機擷取火焰尺寸變化的影像，再將影像資料傳送至電腦做圖形分析。依此種處理手續，可得到在不同當量值、不同流速條件下，明亮火焰錐尺寸的變化資料。圖 4-21、圖 4-22 為本生式預混甲烷和丙烷火焰，使用氦氣、氬氣及氮氣來稀釋可燃氣，適時的調整可燃氣的當量值來改變火焰，記錄回火焰

明亮火焰錐高度的變化情形。

4.6 綜合討論

可燃氣性質、流場觀測可用來解釋一些火焰現象，特別是對於傳播行為方面，茲將其影響整理如下：

- 燃料所致的差異-

火焰速度的順序 $S_{L,H_2} > S_{L,C_3H_8} > S_{L,CH_4}$ (6.4 : 1.2 : 1.0)

熱擴散性的順序 $\alpha_{H_2} > \alpha_{CH_4} > \alpha_{C_3H_8}$ (18.4 : 2.6 : 1.0)

絕熱火焰溫度（相當於燃料的反應率）的順序

$$T_{ad,H_2} > T_{ad,C_3H_8} \approx T_{ad,CH_4}$$

由於火焰傳播速度相當於 $S_L \sim (\alpha \cdot \omega)^{1/2}$ ，雖然氫氣的火焰溫度並不顯著的高於碳氫燃料，但其傳播速度卻遠高於碳氫火焰的主要原因就是輕質氣體的高熱擴散性所致。本生式火焰的觀測亦指出氫氣火焰不僅流速快、沒有明亮的火焰錐、焰面有很多的小火花，只能觀察到由水蒸汽所放射的紅光，熄滅瞬間會有由回壓所造成的巨大爆炸聲響，是一種很容易被吹離管口、高燃燒性及爆炸性，受熱或過火焰時很危險、很不穩定的火焰。相對的，丙烷火焰由於有 C_2 碳鍵的反應，火焰中心有由其所放射出的藍綠色火焰錐，而大部分的反應均在此錐完成，是一種高度可燃，而火焰結構較密實且穩定。

- 稀釋氣體所致的差異-

火焰速度的順序 $S_{L,He} > S_{L,Argon} > S_{L,N_2}$ (3.4 : 2.4 : 1)

熱擴散性的順序 $\alpha_{He} > \alpha_{Argon} > \alpha_{N_2}$ (8.42 : 1.01 : 1.00)

絕熱火焰溫度 (相當於燃料的反應率) 的順序

一般將燃燒的反應率視為相同，但由於混合氣比熱的不同

$$C_{p,N_2} > C_{p,He} = C_{p,Argon}$$

將導致火焰溫度的不同，其大小為

$$T_{ad,Argon} > T_{ad,N_2} > T_{ad,He}。$$

對於同一種燃料，改變氧化劑中的稀釋氣體，其速度亦會因為氣體的熱擴散性而使其有傳播上的快慢。Le 值高的火焰 (以氦氣稀釋)，火焰焰面光亮、結構密實且受外界干擾較不靈敏，火焰可持續在較廣的當量值範圍。Le 值低的火焰 (以氮氣、氬氣稀釋)，火焰對流場的延展非常靈敏，受干擾時焰面起皺、抖動的非常厲害且火焰錐尖端有明顯的缺口出現。

- 可燃氣的流速

流速快 (小管徑燃燒器)，熄滅前，火焰錐依舊可保持良好的外形。流速慢 (大管徑燃燒器)，熄滅前，火焰錐易塌陷回燃燒器內且擴散層易被吹離。相同管徑、質量流率下，可燃氣流速與密度成反比-

燃料： $\rho_{C_3H_8} > \rho_{CH_4} > \rho_{H_2}$ (22.6 : 8.0 : 1.0)

稀釋氣體： $\rho_{Argon} > \rho_{N_2} > \rho_{He}$ (10.0 : 7.0 : 1.0)

- 火焰的吹離

用環流惰性氣體吹離本生式火焰錐，觀察火焰停駐在管口強

度，並使火焰懸浮在空中，瞭解流力、浮力作用下焰面的吹熄形態。對於碳氫-空氣火焰，火焰吹熄是浮盪在空中，焰面被干擾而碎裂最後導致熄滅。碳氫燃料如果以輕質、高擴散性的氦氣來稀釋，火焰輕微漂浮在管口上，在該位置會出現上下強烈振盪導致噹噹聲響，最後瞬間熄滅。碳氫燃料如果以重質、低擴散性的氬氣來稀釋，火焰懸浮在空中且火焰錐與擴散層隨環流惰性氣體流量的加大漸漸分離開來，最後火焰錐降回管內、擴散層浮盪在空中。

- 火焰穩定性

以本生式碳氫火焰錐出現範圍決定火焰是否穩定，而中心明亮火焰穩定的停駐在管口是由可燃氣流速、火焰燃燒速度間的平衡結果。

火焰傳播速度 $S_{L,He} > S_{L,Argon} > S_{L,N_2}$

可燃氣平均流速 $U_{m,He} > U_{m,N_2} > U_{m,Argon}$

由重質的氬氣所稀釋的碳氫火焰，因流速慢，火焰錐隨當量值調降最快消失。氦氣或氬氣所稀釋的火焰，何者最穩定還須視燃燒器管徑的大小而定。小管徑（1.2 公分）燃燒器，輕質氦氣所稀釋的火焰，由於流速非常的快，火焰錐隨當量值調降最晚消失，其次才是氬氣所稀釋的火焰。但隨當量值的調升，中心明亮火焰與擴散層間區分不再明顯，以氬氣所稀釋的火焰可使明亮火焰錐在非常富燃料的混合氣下受周遭空氣的影響而左右漂盪，其次是氬氣，最後才是氦氣。但大管徑（大於 1.8 公分）燃燒器，輕質氦氣所稀釋的火焰，流速與火焰燃燒速度間差異

並不如氫氣所稀釋的火焰來的明顯，所以火焰錐隨當量值調降以碳氫-空氣火焰最晚消失，其次才是氦氣所稀釋的火焰。隨當量值的調升，以氦氣所稀釋的火焰可使明亮火焰錐在非常富燃料的混合氣下才受周遭空氣的強烈影響而左右漂盪，其次是氫氣，最後才是氦氣。

第五章 結果與討論

5.1 探討主題

對於氣體的研究，除了討論傳輸性質、熱力性質與溫度間的變化外，並對不同的稀釋氣體分類做表。而反應熱能與質量間的擴散行為將以無因次參數- Le 來表示其狀況，為判定燃燒狀況的重要參數之一，如表 2 所示。本章節將對不同的燃料在稀釋氣體、氧化劑組成的改變下，討論 Le 、絕熱火焰溫度的變化情形。

對於預混燃燒的研究，除了探討惰性氣體對 Le 、絕熱火焰溫度的影響外，對於可燃氣開始發生化學反應的內層溫度將以層流火焰速度和貧極限來討論其大小，而此內層溫度可用以決定相關的火焰尺寸。另外，燃燒速度與絕熱火焰溫度間的變化，將可適當的決定活化能、活化能溫度的大小。至此，有了燃燒系統的 Le 、絕熱火焰溫度、層流火焰速度、火焰厚度、 Ze 以及活化能溫度等基本燃燒變數的詳細資料後，對於描述火焰行為的無因次參數如 Ma 、 Ka_{max} 及 Da 等都可藉由這些基本燃燒特性所構成的函數來加以表示。所以，本章節將透過壓力、溫度以及惰性氣體，討論這些效應對基本燃燒變數的影響，以便瞭解火焰行為受這些效應的可能變化情形。

5.2 無因次參數- Le

以氣體的微觀行為來看，分子間的位能和碰撞狀態造成了所謂的氣體擴散性質。為了研究氣體性質在燃燒中所扮演的角色，有必要檢視相關熱力、傳輸性質的表示式。特別是對於氣體受溫度影響下的行為，以期能對混合氣的平均性質做更合理的估算。為了觀察 Le 的界限值，將分別對 Le 理論式中的熱擴散項採用不同定義描述（極貧燃料的熱擴散性採用 $\alpha \approx \alpha_{oxidant}$ ，而極富燃料的熱擴散性則採用 $\alpha \approx \alpha_{fuel}$ ），對氧化劑組成仿空氣的例子，其詳細的計算結果列示於表 4 中。一般而言，只要氧化劑組成不要太接近純氧狀況或以氬氣來稀釋可燃氣的話，其 Le 值的變動範圍有限。以下就燃料種類、稀釋氣體以及氧化劑組成對 Le 值的影響做討論：

圖 5-1 主要探討貧燃燒狀況之甲烷、乙炔、乙烷以及丙烷等四種碳氫燃料在改變氧化劑中的稀釋氣體：氬氣、氫氣、氮氣、二氧化碳及水氣等，其中亦包括氧化劑組成的變化，探討對 Le 值的影響。在可燃氣當量值為 1.0 時，碳氫可燃氣的 Le 值依公式 2-13 表示如下

$$\text{甲烷 (CH}_4\text{)} - Le = \frac{\alpha_{mixture}}{D_{fuel-oxidant}} = \frac{1/3 \cdot \alpha_{fuel} + 2/3 \cdot \alpha_{oxidant}}{D_{fuel-oxidant}}$$

$$\text{乙炔 (C}_2\text{H}_2\text{)} - Le = \frac{\alpha_{mixture}}{D_{fuel-oxidant}} = \frac{1/4 \cdot \alpha_{fuel} + 3/4 \cdot \alpha_{oxidant}}{D_{fuel-oxidant}}$$

$$\text{乙烷 (C}_2\text{H}_6\text{)} - Le = \frac{\alpha_{mixture}}{D_{fuel-oxidant}} = \frac{2/9 \cdot \alpha_{fuel} + 7/9 \cdot \alpha_{oxidant}}{D_{fuel-oxidant}}$$

$$\text{丙烷 (C}_3\text{H}_8\text{)} - Le = \frac{\alpha_{mixture}}{D_{fuel-oxidant}} = \frac{1/6 \cdot \alpha_{fuel} + 5/6 \cdot \alpha_{oxidant}}{D_{fuel-oxidant}}$$

比較圖 5-1 的差異發現：以氦氣作稀釋氣體則呈現漸減變化，接近純氧時劇烈改變；以氫氣、氮氣稀釋的可燃氣，其 Le 值的變動並不顯著；至於其他稀釋氣體如二氧化碳和水氣等的 Le 值均隨氧化劑向純氧靠攏呈漸增態勢；甲烷燃料使用二氧化碳、水氣來稀釋，可觀察到 Le 值小於 1.0 的火焰現象，至於其他碳氫燃料無論使用何種稀釋氣體、何種氧化劑組成均只能觀察到 Le 值大於 1.0 的火焰現象。

氧化劑組成仿空氣的條件下，在不同氣體的稀釋下，討論可燃氣當量值對 Le 值的影響。分析圖 5-2 的變化知，當量值的變化不如稀釋氣體種類對 Le 值的影響來的大。除了氦氣的 Le 值會明顯的隨可燃氣當量值的增加而遞減外（變動量約為 0.6），對其他稀釋氣體而言，Le 值受當量值變化的影響幾乎可視為定值（變動量約為 0.15）。

圖 5-3 是比較燃料種類對 Le 值的影響，有幾點是值得提出來討論：

- 不同燃料的 Le 值依稀釋氣體的不同，比較其大小順序為

氦氣- $\text{C}_3\text{H}_8 > \text{C}_2\text{H}_6 > \text{CH}_4 > \text{C}_2\text{H}_4 > \text{C}_2\text{H}_2$

氮氣- $\text{C}_3\text{H}_8 > \text{C}_2\text{H}_6 > \text{C}_2\text{H}_4 > \text{CH}_4 > \text{C}_2\text{H}_2$

二氧化碳- $\text{C}_3\text{H}_8 > \text{C}_2\text{H}_6 > \text{C}_2\text{H}_4 > \text{CH}_4 \div \text{C}_2\text{H}_2$

水氣- $\text{C}_3\text{H}_8 > \text{C}_2\text{H}_6 > \text{C}_2\text{H}_4 > \text{C}_2\text{H}_2 > \text{CH}_4$

所以，在不同氣體的稀釋下，甲烷的 Le 值是明顯迥異於一般的碳氫燃料。

- 對於當量值等於 1.0 的碳氫燃料，如果想要要討論 Le 值範圍介於

0.6~1.0 間的火焰行為，則使用水氣當稀釋氣體；如果要討論 Le 值範圍介於 0.8~1.4 間的火焰行為，則使用二氧化碳當稀釋氣體；如果要討論 Le 值範圍介於 0.9~1.5 間的火焰行為，則使用氬氣或氫氣當稀釋氣體；如果要討論 Le 值於 1.5 以上的火焰行為，則使用氦氣當稀釋氣體。

因此，在可燃氣中參與氣體種類、氧化劑組成固定下，Le 值受燃燒操作條件改變的影響極其有限。所以在燃燒理論或數值模擬研究中，常將 Le 值視為描述可燃氣性質的重要基本燃燒特性之一。

5.3 絕熱火焰溫度

延續第三章對絕熱火焰溫度所做的理論分析，本單元將進一步的針對火焰溫度隨燃料種類、稀釋氣體以及氧化劑組成變化的數值結果做討論。圖 5-4 主要探討燃燒的當量值為 1.0 時，使用甲烷、乙炔、乙烷及丙烷等四種碳氫燃料，在改變氧化劑中的稀釋氣體（氬氣、氫氣、氮氣、二氧化碳及水氣等）、氧化劑組成，來探討其對絕熱火焰溫度的影響。茲將圖 5-4 的分析結果，整理如下：

- 絕熱火焰溫度依稀釋氣體的不同，其大小順序為

$$T_{ad,Argon} > T_{ad,N_2} > T_{ad,CO_2} > T_{ad,H_2O} > T_{ad,He}$$

- 在實際的應用上，使用氬氣來稀釋可燃氣的話，只要非常少的氧氣劑量，火焰溫度就可達到在純氧燃燒狀況相近的高溫。

另外，圖 5-5 則對當量值為 1.0 時，研究燃料種類、氧化劑組成對火焰溫度的影響。比較發現，不同碳氫燃料間的溫度趨勢是相近且相似。但以氮氣所稀釋的火焰溫度隨氧化劑組成的變化方式是明顯異於其他氣體所稀釋的火焰溫度。接著，圖 5-6 亦使用氮氣、氬氣、二氧化碳及水氣等四種稀釋氣體，選定丙烷燃料做為研究的對象，在改變氧化劑組成、當量值的影響下，觀察可燃氣的混合狀況對火焰溫度的影響。除了可觀察整個溫度數階的變化情形外，比較特別的是，使用二氧化碳、水氣的稀釋氣體在高劑量（氧含量較少）時，火焰溫度在貧燃燒狀況（ $\phi < 1.0$ ）會衰減的非常快。

圖 5-7 是以氮氣來稀釋氫氣、碳氫燃料（甲烷、乙炔、乙烯、乙烷及丙烷等），觀察當量值、氧化劑組成對火焰溫度的影響。同理，圖 5-8 則是以氬氣（氫氣性質與其相似）為稀釋氣體，圖 5-9 則是以二氧化碳（水氣性質與其類似）為稀釋氣體。茲將其重要結果的比較、整理如下：

- 以燃料種類來比較火焰溫度的大小順序 -

乙炔燃料最高，其次為氫氣與乙烯燃料（二者差距不大），再次為乙烷、丙烷及甲烷等燃料（三者火焰溫度很相近）。

- 當量值、稀釋氣體對火焰溫度的影響 -

比較火焰溫度在當量值為 0.6、1.0 間的差異，以二氧化碳、水氣為稀釋氣體的火焰遠比其他稀釋氣體來的大。相同燃料、混合程度下，欲使燃氣能達其最大溫度則使用氫氣、氬氣作稀釋氣體效果最好，其次為氮氣，再次為二氧化碳、水氣。

5.4 燃燒速度

5.4.1 可燃極限

可燃極限，定義為預混可燃氣可以被點燃且傳播之濃度極限值。不像火焰熄滅現象，可燃極限與系統裝置（包括有熱損失、流場延展、重力等效應）無關，僅單純的由可燃氣的物化性質就可決定。在此，可燃極限乃採用燃燒速度如果小於 5 公分/秒的話就可視為不可點燃（或傳播）。且視燃料與氧化劑間的貧、富燃燒狀況，而有不同的濃度極限值。Egolfopoulos & Law (1990) 採化學動力標準（主要連鎖終止反應的最大速度等於主要連鎖分支反應速度）研究 C-H-O 的可燃極限，並以實驗加以佐證，其研究認為可燃極限受連鎖分支（Chain-Branching）與連鎖終止(Chain-Termination)反應控制。上述研究結果，啟發本文想透過火焰傳播的潰散（可燃極限）來討論化學反應是否延續的內層溫度。

一般碳氫燃料或氫氣-空氣火焰所提供的貧極限（Lean Limit）：

燃料	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷	氫氣
貧極限						
當量值， ϕ	0.50	0.31	0.40	0.52	0.56	0.10

以下將針對不同碳氫-空氣火焰，以公式 3-35 中 E 、 T_{in} 來模擬層流火焰速度和貧極限，並討論壓力、溫度以及稀釋氣體等效應對火焰特性和傳播速度的影響。

5.4.2 層流火焰速度

層流火焰速度 (S_L^0 , Laminar Flame Speed) 是分析火焰傳播行為的基本燃燒特性之一。對此速度的研究，將以先前研究所建議的重要影響因子，進而推論出可廣泛應用於預測一般貧燃燒狀況的速度通式

$$\frac{S_L^0}{S_{L,\min}} = Le^{1/2} \cdot Y_{F,u}^{1/2} \cdot \exp\left(-\frac{E}{2RT_{in}}\right) \cdot Ze^{-2} \cdot \frac{\rho_{in}}{\rho_b} \quad (\text{模擬參數為 } T_{in} \text{ 和 } E)$$

$$\text{或 } S_L^0 = \frac{1}{16} S_{L,\min} \cdot Le^{1/2} \cdot Y_{F,u}^{1/2} \cdot \exp\left(-\frac{E}{2RT_{in}}\right) \cdot \frac{T_b}{T_{in}} \left(\frac{T_b - T_{in}}{T_b - T_u}\right)^2 \quad [\text{cm/s}] \quad (3-35)$$

由先前對火焰速度的分析得知，此速度與可燃氣的熱擴散性、反應的熱釋放非常有關。以下就層流火焰速度的實驗數據，考慮混合氣的貧極限，討論 T_{in} 和 E 的最佳模擬值：

圖 5-10~5-15 則針對氫氣、常見的碳氫燃料，以空氣為氧化劑，使用上述火焰速度的求解公式，來模擬真實火焰的傳播行為。圖上的符號表實驗值，其操作的條件分別如下：

- Tseng (1993) 主要是觀測向外傳播的球形火焰，其操作的當量值介於 0.60 與 1.35 之間，反應物與產物的密度比 (ρ_u/ρ_b) 介於 4.33 到 5.93 間，質量擴散係數為 0.219 平方公分/秒，最大的 Ka 介於 0.09 和 0.30 之間， Ma 則介於 -1.90 與 7.2 間。
- Law (1986, 1994) 係使用上、下對衝式的燃燒器，週遭使用氮氣流護罩著，其燃燒器管徑從 7 到 30 公釐。利用氧化鎂 (MgO)、TSI 離子雷射量測流速，層流火焰速度的求解係利用外插至延展率為零的速度值。

- Glassman (1996)整理有關一大氣壓，溫度為 25°C 與 100°C 的燃燒速度。資料來源有 Gibbs & Calcote (1959)、Law (1993, 1994) 等人，火焰的形態包括有對衝、雙火焰與本生式火焰。
- Vagelopoulous (1998)係利用本生式火焰（負延展）漸漸吹離管口延上方停滯平板延展開來（正延展），在這樣轉變過程中會有延展率為零的狀況出現，也是目前唯一使用實驗量測層流火焰速度值，而非以外插法求得。

圖 5-10 的氫氣-空氣火焰，由於火焰無法傳播的貧極限當量值為 0.10，雖然當量值 0.10 與 0.70 間尚無完整的實驗值以供驗證，目前以 Law (1994)的實心方形符號較吻合層流火焰速度、貧極限的限制。

圖 5-11 的甲烷-空氣火焰，由於火焰無法傳播的貧極限當量值為 0.50，雖然 Vagelopoulous (1998)的速度值要比 Law (1994)的空心三角符號值來的低，但考量貧極限的限制，模擬對象還是以空心三角符號為佳。

圖 5-12 的乙炔-空氣火焰，由於火焰無法傳播的貧極限當量值為 0.31，雖然 Law (1994)的空心三角符號值要比 Gibbs & Calcote (1959)的速度值低，但考量貧極限的限制，模擬對象是以實心方形符號為佳。

圖 5-13 的乙烯-空氣火焰，由於火焰無法傳播的貧極限當量值為 0.40，二組模擬的實驗值間的差異並不明顯，在此以速度較低的空心三角符號為佳。

圖 5-14 的乙烷-空氣火焰，由於火焰無法傳播的貧極限當量值為 0.52，雖然 Vagelopoulous (1998)與 Law (1994)間的速度值差異並不大，在此還是以速度值低(Vagelopoulous, 1998)的實心圓形符號值作為最佳的模擬對象。

圖 5-15 的丙烷-空氣火焰，由於火焰無法傳播的貧極限當量值為 0.56，雖然實驗值的分佈與貧極限並不十分吻

合，在此是選用速度值低(Vagelopoulos, 1998)的實心圓形符號值作為最佳的模擬對象。本研究則對這些火焰速度的實驗值做最佳的模擬，找出最吻合的 E 和 T_{in} 。

整理上述不同燃料的討論，關鍵變數 T_{in} 和 E 對層流火焰速度的最佳模擬結果列示如下：

燃 料 模擬參數	甲烷	乙炔	乙炔	乙烷	丙烷	氫氣
E [KJ/mol]	-126	-128	-123	-136	-145	-46
T_{in} [K]	1130	1051	1077	1197	1266	430

內層溫度屬於可燃氣的物化性質，與火焰形態無關。

5.4.3 壓力對火焰速度的影響

一般來說，壓力的加大會造成傳播速度的降低。圖 5-16 為甲烷-空氣火焰，在不同壓力下採用前述速度理論式的 E 值 (-126 KJ/mol)，可觀察到內層溫度隨壓力的增加而變大，以使預測值與實驗值有最佳的吻合度。另外，在固定壓力下，採用下述的活化能定義

$$\dot{m} = \rho_u \cdot S_L^0 \sim P^{np/2} \cdot \text{EXP}\left(-\frac{E_a}{2RT_{ad}}\right) \quad [\text{g/cm}^2 \text{ s}] \quad (3-2)$$

$$E_a = -2R \left[\frac{d\text{LOG}(S_L/S_{L,st})}{d(1/T_{ad} - 1/T_{ad,st})} \right]_P \quad [\text{KJ/mol}] \quad (3-4)$$

圖 5-17 為甲烷-空氣火焰，在不同壓力下求解活化能 E_a 值，可觀察到活化能亦隨壓力的增加而減少。以下就不同當量值的甲烷-空氣火焰，在不同壓力下，求解重要的氣體性質：

當量值 0.6 的甲烷-空氣火焰 -

壓力[atm]	0.50	1.0	2.0	3.0
火焰特性*				
S_L^0 [cm/s]	19.5	12	7.5	6
T_{in} [K]	1106	1130	1175	1204
$D_m(P, T_{in})$ [cm ² /s]	4.92	2.66	1.44	1.00
$\alpha_m(P, T_{in})$ [cm ² /s]	4.94	2.67	1.44	1.01
T_{ad} [K]	1665	1665	1665	1666
$\rho_u \times 10^3$ [g/cm ³]	0.521	1.041	2.082	3.123
E_a [KJ/mol]	153	145	132	121

* 模擬的速度資料：Egolfopoulos & Law (1990)

當量值 0.8 的甲烷-空氣火焰 -

壓力[atm]	0.25	0.50	1.0	2.0	3.0
火焰特性*					
S_L^0 [cm/s]	45	38	28	20	15
T_{in} [K]	1088	1106	1130	1170	1204
$D_m(P, T_{in})$ [cm ² /s]	9.10	4.92	2.66	1.44	1.00
$\alpha_m(P, T_{in})$ [cm ² /s]	9.16	4.96	2.68	1.45	1.01
T_{ad} [K]	1989	1993	1997	1999	2001
$\rho_u \times 10^3$ [g/cm ³]	0.253	0.506	1.012	2.024	3.036
E_a [KJ/mol]	183	153	145	132	121

* 模擬的速度資料：Egolfopoulos & Law (1990)

當量值 1.0 的甲烷-空氣火焰 -

壓力[atm]	0.25	0.50	1.0	2.0	3.0
火焰特性*					
S_L^0 [cm/s]	59	52	40	29	23
T_{in} [K]	1088	1106	1130	1170	1204
$D_m(P, T_{in})$ [cm ² /s]	9.10	4.92	2.66	1.44	1.00
$\alpha_m(P, T_{in})$ [cm ² /s]	9.19	4.97	2.69	1.45	1.01
T_{ad} [K]	2191	2210	2226	2241	2249
$\rho_u \times 10^3$ [g/cm ³]	0.247	0.494	0.987	1.974	2.961
E_a [KJ/mol]	183	153	145	132	121

* 模擬的速度資料：Egolfopoulos & Law (1990)

圖 5-18 為甲烷-空氣火焰，在一定絕熱火焰溫度（相當於當量值

固定)下,質量燃燒率與壓力指數間的關係,分析發現壓力指數的大小會隨當量值的增加而變大。圖 5-19 則針對甲烷、乙烷及丙烷-空氣火焰,在固定當量值下,分析指出乙烷與丙烷燃料其質量燃燒率隨壓力的變化是相似且隨壓力增加而加大。但對甲烷燃料,其質量燃燒率隨壓力的變化就無前述二種碳氫燃料來的顯著。圖 5-20 亦是對甲烷、乙烷及丙烷-空氣這三種火焰,在當量值為 1.0 下,觀察火焰傳播速度隨壓力變化。為使預測值有最佳吻合度,模擬內層溫度與壓力間的表示式如下:

$$\begin{aligned}(T_{in} / T_{in,1atm})_{CH_4} &= 0.959 + 0.036 (P / 1atm), \\(T_{in} / T_{in,1atm})_{C_2H_6} &= 0.976 + 0.020 (P / 1atm), \\(T_{in} / T_{in,1atm})_{C_3H_8} &= 0.973 + 0.022 (P / 1atm)\end{aligned}\quad (5-1)$$

5.4.4 溫度對火焰速度的影響

圖 5-21 則是針對乙烷、丙烷及辛烷等燃料,反應前先將可燃氣預熱至 311K 和 422 K,觀察火焰傳播速度在不同氧化劑量的變化情形。一般而言,將可燃氣預熱對傳播速度的增強有正面的意義,且在愈高的氧氣劑量,溫度效應對火焰速度的影響愈趨明顯。所以,在不同預熱溫度下,最大的火焰速度與氧化劑量間的關係可表示如下:

$$\text{乙烷- } (S_L / S_{L,\Psi=0.21})_{311K} = -1.3 + 11 \Psi,$$

$$(S_L / S_{L,\Psi=0.21})_{422K} = -1.1 + 10 \Psi$$

$$\text{丙烷- } (S_L / S_{L,\Psi=0.21})_{311K} = -2.0 + 14.2 \Psi,$$

$$(S_L / S_{L,\Psi=0.21})_{422K} = -1.5 + 12 \Psi$$

辛烷- $(S_L / S_{L,\Psi=0.21})_{311K} = -1.5 + 12 \Psi,$

$$(S_L / S_{L,\Psi=0.21})_{422K} = -1.2 + 10.5 \Psi \quad (5-2)$$

，其中 Ψ 為氧氣的莫耳分率， $O_2/(O_2 + N_2)$ 。

一般整理所謂的燃燒速度是指未燃混合氣在室溫狀況所量測得到的值，但隨著所供應未燃氣溫度的增加，火焰速度亦會跟著改變。圖 5-22 則對甲烷、乙烯及丙烷-空氣火焰，未燃氣體溫度介於 200K 至 600K 間，觀察火焰燃燒速度的變化情形，茲將其變化整理如下

$$(S_L / S_{L,298K})_{CH_4} = (T_u / 298K)^{1.95},$$

$$(S_L / S_{L,298K})_{C_2H_4} = (T_u / 298K)^{1.28},$$

$$(S_L / S_{L,298K})_{C_3H_8} = (T_u / 298K)^{1.42} \quad (5-3)$$

，其中 T_u 為所供應的未燃氣溫度。

甲烷-空氣火焰-

T_u [K]	195	298	365	420	485	530	620
火焰特性*							
S_L [cm/s]	16	32	50	63	82	97	130
Ze	7.41	7.04	6.79	6.59	6.35	6.19	5.86
E [KJ/mol]	-111.6	-122.6	-129.7	-132.9	-136.5	-138.6	-142.1

* 模擬的速度資料：Dugger (1955)、Kanury (1975)

乙烯-空氣火焰-

T_u [K]	200	298	365	420	480	530	620
火焰特性*							
S_L [cm/s]	44	70	85	100	128	148	190
Ze	6.71	6.41	6.20	6.03	5.85	5.69	5.41
E [KJ/mol]	-116.6	-123.2	-125.5	-127.5	-130.8	-132.4	-135.1

* 模擬的速度資料：Dugger (1955)、Kanury (1975)

丙烷-空氣火焰-

T_u [K]	198	295	365	415	475	525	620
火焰特性*							
S_L [cm/s]	28	48	60	72	92	108	145
Ze	8.27	7.88	7.60	7.40	7.16	6.96	6.58
E [KJ/mol]	-138.2	-147.5	-150.7	-153.4	-157.1	-159.3	-163.2

* 模擬的速度資料：Dugger (1955)、Kanury (1975)

圖 5-23 則對甲烷、乙烷及丙烷-空氣火焰，未燃氣體溫度介於 200 至 600K 間，以上表能量參數的模擬值，將其變化情形整理如下

$$\begin{aligned}
 (E / E_{298K})_{CH_4} &= 1.002(T_u / 298K)^{0.21}, \\
 (E / E_{298K})_{C_2H_4} &= 0.996(T_u / 298K)^{0.13}, \\
 (E / E_{298K})_{C_3H_8} &= 0.993(T_u / 298K)^{0.14}
 \end{aligned} \tag{5-4}$$

，其中 T_u 為所供應的未燃氣溫度。

另外，火焰溫度對燃燒速度亦有相同效應，圖 5-24 則對氫氣、碳氫-空氣火焰，火焰溫度介於 1300 至 2500K 間，觀察火焰燃燒速度的變化情形，茲將其變化整理如下

$$\begin{aligned}
 (S_L / S_{L,min})_{H_2} &= 3.3(T_f / 630K)^{2.5}, \\
 (S_L / S_{L,min})_{CH_4} &= 0.79(T_f / 1479K)^{7.7}, \\
 (S_L / S_{L,min})_{C_2H_6} &= 1.09(T_f / 1543K)^{7.7}, \\
 (S_L / S_{L,min})_{C_3H_8} &= 1.62(T_f / 1625K)^{7.7}
 \end{aligned} \tag{5-5}$$

氫氣-空氣火焰-

火焰特性* \ T_f [K]	1300	1400	1600	1750	1800	1850
S_L [cm/s]	106	120	160	200	240	260
E [KJ/mol]	-41.7	-42.6	-44.6	-46.2	-47.5	-48.1

* 模擬的速度資料：Bartholome (1949)、Kanury (1975)

碳氫-空氣火焰-

火焰特性* \ T_f [K]		2000	2180	2330	2400	2460	2500
S_L [cm/s]		40	80	120	160	200	227
E [KJ/mol]	甲烷	-126.8	-139.8	-147.5	-152.9	-157.1	-159.4
	乙烷	-134.7	-148.5	-156.6	-162.3	-166.7	-169.3
	丙烷	-143.6	-158.2	-166.7	-172.8	-177.5	-180.1

* 模擬的速度資料：Bartholome (1949)、Kanury (1975)

圖 5-25 則對氫氣、碳氫-空氣火焰，火焰溫度介於 1300 至 2500K 間，觀察火焰燃燒速度受火焰溫度的變化情形，茲將其變化整理如下

$$(E/R)_{CH_4} = 0.0637 T_f,$$

$$(E/R)_{C_2H_6} = 0.0676 T_f,$$

$$(E/R)_{C_3H_8} = 0.0720 T_f \quad (5-6)$$

，其中 T_f 為火焰溫度。

5.4.5 惰性氣體對火焰速度的影響

圖 5-26 則使用氦氣、氫氣及氮氣稀釋甲烷燃料，氧化劑則仿空氣組成，調整甲烷燃料的濃度觀察火焰傳播速度的變化情形，其變化關係式整理如下

$$(S_L / S_{L,st})_{He} = 0.07 + 1.9 \Phi - \Phi^2,$$

$$(S_L / S_{L,st})_{Argon} = 0.08 + 1.5 \Phi - 0.6 \Phi^2,$$

$$(S_L / S_{L,st})_{N_2} = 0.12 + 0.9 \Phi \quad (5-7)$$

，其中 Φ 為甲烷燃料體積分率的比值， $(vol-5)/(9.47-5)$ 。圖 5-27 則以空氣添加惰性的氮氣觀察火焰速度的變化情形，由於混合氣的可燃極限的範圍、傳播速度會隨稀釋氣體的大量存在而減小。在此，透過傳播理論的 E 、 T_{in} 來描述稀釋氣體對火焰速度的影響，並將一些重要的計算結果整理在下面的列表中。

當量值 1.0 的甲烷/(18% O_2 + 82% N_2)火焰：

壓力[atm] 火焰特性*	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0
S_L^0 [cm/s]	25	20.5	16	13	11
T_{in} [K]	1130	1156	1175	1190	1202
$D_m(P, T_{in})$ [cm ² /s]	2.66	1.86	1.44	1.18	1.00
$\alpha_m(P, T_{in})$ [cm ² /s]	2.68	1.87	1.45	1.19	1.01
T_{ad} [K]	2085	2090	2093	2096	2097
$\rho_u \times 10^3$ [g/cm ³]	0.979	1.469	1.958	2.448	2.938

* 模擬的速度資料：Egolfopoulos & Law (1990)

當量值 1.0 的甲烷/(16% O_2 + 84% N_2)火焰：

壓力[atm] 火焰特性*	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0
S_L^0 [cm/s]	17	13	10	7.5	6.5
T_{in} [K]	1130	1156	1175	1190	1202
$D_m(P, T_{in})$ [cm ² /s]	2.67	1.86	1.44	1.18	1.01
$\alpha_m(P, T_{in})$ [cm ² /s]	2.68	1.87	1.45	1.19	1.01
T_{ad} [K]	1969	1972	1973	1975	1976
$\rho_u \times 10^3$ [g/cm ³]	0.977	1.466	1.954	2.443	2.931

* 模擬的速度資料：Egolfopoulos & Law (1990)

圖 5-28 則討論當量值為 1.0 的甲烷-氧氣-氮氣火焰，可燃氣的質量反

應率會因稀釋氣體的大量存在，而漸漸不受壓力的影響。圖 5-29 亦討論當量值為 1.0 的甲烷-氧氣-氮氣火焰，火焰速度會因稀釋氣體的大量存在而降低。在此，將討論氧化劑中的氮氣以三種不同劑量，來研究內層溫度與壓力間的關係。

$$(T_{in} / T_{in,1atm})_{79\%} = 0.959 + 0.036 (P / 1atm),$$

$$(T_{in} / T_{in,1atm})_{82\%} = 0.960 + 0.04 (P / 1atm),$$

$$(T_{in} / T_{in,1atm})_{84\%} = 0.962 + 0.04 (P / 1atm) \quad (5-8)$$

圖 5-30 到圖 5-33 則分別討論氫氣、甲烷、乙炔及丙烷等燃料，使用氧氣、氫氣及氮氣來稀釋，觀察其火焰傳播速度與氧劑量間的關係。

在不同稀釋氣體的作用下，火焰速度與氧劑量間的關係整理如下：

稀釋氣體 速度、燃料		氧氣	氫氣	氮氣
$S_L(\psi)/S_L(\psi=0.21)$	氫氣	$-0.94+6.0\psi+18\psi^2$	$0.012+3.3\psi+5.5\psi^2$	$-0.82+8.8\psi-1.9\psi^2$
	甲烷	$-2.4+18.8\psi-10.4\psi^2$	$-1.25+11.5\psi$	$-14+67\psi$
	乙炔	$-0.75+9.3\psi-5.6\psi^2$	$-0.75+8.9\psi-2.6\psi^2$	$-1.16+10.3\psi$
	丙烷	$-0.73+10.1\psi-6.1\psi^2$	$-0.86+10\psi-3.9\psi^2$	$-2.5+17.3\psi-5.4\psi^2$

* ψ 表示氧氣的莫耳分率， $O_2/(O_2 + Dilute)$ 。

5.5 火焰結構

有了氣體擴散性、絕熱火焰溫度以及層流火焰速度等詳細的燃燒知識後，再次將研究焦點置於火焰結構內部相關厚度的探討上，特別是透過內層溫度來探討火焰尺寸的變化。

5.5.1 內層溫度

對火焰溫度的研究，除了絕熱火焰溫度、活化能溫度外，另一重要特徵溫度為內層溫度，它可用來描述可燃氣在預熱區內是否發生反應的臨界溫度。在步驟反應機構的理論分析，將此內層火焰溫度表示成壓力的函數，受當量值的影響甚微。以下將延續此方面的研究，進一步應用此內層溫度來討論火焰結構：

碳氫-空氣火焰，在一大氣壓下，內層溫度值-

燃 料 內層溫度	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷	氫氣
$T_{in,1atm}$ [K]	1130	1062	1077	1197	1266	430

烷類燃料-空氣火焰，內層溫度與壓力間的關係-

燃 料 內層溫度	甲烷	乙烷	丙烷
$T_{in} / T_{in,1atm}$	$0.959+0.036(P/1atm)$	$0.976+0.020(P/1atm)$	$0.973+0.022(P/1atm)$

甲烷-氧氣-氬氣火焰，空氣添加惰性的氬氣，內層溫度與壓力間的關係-

添加量 內層溫度	0 %	14 %	24 %
$T_{in,1atm}$ [K]	1130	1244	1368
$T_{in} / T_{in,1atm}$	$0.959+0.036(P/1atm)$	$0.960+0.04(P/1atm)$	$0.962+0.04(P/1atm)$

分析內層溫度的變化指出，壓力、燃料種類及氧化劑比率等都對內層溫度具有巨大的影響。

5.5.2 預熱厚度

在討論火焰厚度前，先從所謂的預熱厚度的界定開始

$$\delta_{pre} = \frac{(\lambda/C_p)_{in}}{\rho_u S_L^0} = \left[\frac{\lambda}{(\rho_u C_p) S_L^0} \right]_{in} \quad [\text{mm}] \quad (3-10)$$

注意的是，計算混合氣性質所用的溫度不是採用未燃溫度或燃氣溫度，而是採用可燃氣開始發生反應的內層溫度來估算。

燃料-空氣火焰 -

當量值 燃料、火焰特性		0.7	0.8	0.9	1.0
甲烷	S_L^0 [cm/s]	17	25	33	38
	$\alpha_m/(\rho_u/\rho)$ [cm ² /s]	0.708	0.709	0.711	0.712
	δ_{pre} [mm]	0.416	0.284	0.215	0.187
乙炔	S_L^0 [cm/s]	-	107	130	144
	$\alpha_m/(\rho_u/\rho)$ [cm ² /s]	-	0.576	0.569	0.562
	δ_{pre} [mm]	-	0.054	0.044	0.039
乙烯	S_L^0 [cm/s]	37	48	60	66
	$\alpha_m/(\rho_u/\rho)$ [cm ² /s]	0.640	0.637	0.635	0.632
	δ_{pre} [mm]	0.173	0.133	0.106	0.096
乙烷	S_L^0 [cm/s]	20	29.4	35	40.5
	$\alpha_m/(\rho_u/\rho)$ [cm ² /s]	0.698	0.694	0.689	0.685
	δ_{pre} [mm]	0.349	0.236	0.197	0.169
丙烷	S_L^0 [cm/s]	21	29.3	35.5	38.5
	$\alpha_m/(\rho_u/\rho)$ [cm ² /s]	0.722	0.715	0.708	0.701
	δ_{pre} [mm]	0.344	0.244	0.199	0.182
氫氣	S_L^0 [cm/s]	124	150	187	210
	$\alpha_m/(\rho_u/\rho)$ [cm ² /s]	1.336	1.393	1.442	1.485
	δ_{pre} [mm]	0.108	0.093	0.077	0.071

* 模擬的速度資料：Glassman (1996)、Vagelopoulos (1998)

圖 5-34 則針對不同燃料以空氣作為氧化劑，在一大氣壓下，討論火焰預熱厚度隨當量值的變化情形。分析發現，預熱厚度會隨當量值的增加而減少，且不同燃料其厚度的大小順序如下：

$$\delta_{pre,CH_4} > \delta_{pre,C_3H_8} \approx \delta_{pre,C_2H_6} > \delta_{pre,C_2H_4} > \delta_{pre,H_2} > \delta_{pre,C_2H_2}$$

當量值為 1.0 的烷類燃料-空氣火焰，預熱厚度與壓力間的關係-

壓力 [atm]		0.25	0.5	1.0	2.0	3.0
燃料、火焰特性						
甲烷	S_L^0 [cm/s]	55.5	47	38	27	21
	T_{in} [K]	1088	1106	1130	1170	1204
	$\alpha_m/(\rho_u/\rho)$ [cm ² /s]	2.740	1.393	0.712	0.368	0.253
	δ_{pre} [mm]	0.494	0.296	0.187	0.136	0.120
乙烷	S_L^0 [cm/s]	51.5	46	40.5	35	28.5
	T_{in} [K]	1169	1183	1197	1215	1239
	$\alpha_m/(\rho_u/\rho)$ [cm ² /s]	2.676	1.354	0.685	0.348	0.236
	δ_{pre} [mm]	0.520	0.294	0.169	0.099	0.083
丙烷	S_L^0 [cm/s]	52	45	38.5	31	27
	T_{in} [K]	1231	1248	1266	1293	1310
	$\alpha_m/(\rho_u/\rho)$ [cm ² /s]	2.728	1.383	0.701	0.358	0.242
	δ_{pre} [mm]	0.525	0.307	0.182	0.115	0.090

* 模擬的速度資料：Glassman (1996)

圖 5-35 則針對當量值 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰，在壓力的變化下，觀察火焰預熱厚度的變化。分析發現，預熱厚度會隨壓力的增加而減少，且其變化循下述關係變化

$$(\delta_{pre} / \delta_{pre,1atm})_{CH_4} = 1.1 (P / 1atm)^{-0.6},$$

$$(\delta_{pre} / \delta_{pre,1atm})_{C_2H_6} = 1.0 (P / 1atm)^{-0.75},$$

$$(\delta_{pre} / \delta_{pre,1atm})_{C_3H_8} = 1.0 (P / 1atm)^{-0.7} \quad (5-9)$$

甲烷-氧氣-氮氣火焰，空氣添加惰性的氮氣，壓力對火焰厚度的影響-

壓力 [atm]		1.0	1.5	2.0	2.5	3.0
添加量、火焰特性						
0 %	S_L^0 [cm/s]	38	32	27	24	21
	T_{in} [K]	1130	1145	1170	1185	1204
	$\alpha_m/(\rho_u/\rho)$ [cm ² /s]	0.712	0.481	0.368	0.298	0.253
	δ_{pre} [mm]	0.187	0.150	0.136	0.124	0.120
14 %	S_L^0 [cm/s]	25	20.5	16	13	11
	T_{in} [K]	1244	1267	1297	1322	1342
	$\alpha_m/(\rho_u/\rho)$ [cm ² /s]	0.783	0.532	0.408	0.333	0.282
	δ_{pre} [mm]	0.313	0.260	0.255	0.256	0.256
24 %	S_L^0 [cm/s]	17	13	10	7.5	6.5
	T_{in} [K]	1368	1397	1426	1458	1473
	$\alpha_m/(\rho_u/\rho)$ [cm ² /s]	0.861	0.586	0.449	0.367	0.309
	δ_{pre} [mm]	0.506	0.451	0.449	0.489	0.475

* 模擬的速度資料：Egolfopoulos & Law (1990)

圖 5-36 則針對當量值 1.0 的甲烷火焰，在壓力的變化下，觀察火焰預熱厚度受氮氣劑量的影響。分析發現，預熱厚度會隨氮氣劑量的增加而變厚，壓力大於一大氣壓時，壓力效應不如惰性氣體對厚度的影響來的明顯。

5.5.3 火焰厚度

延續預熱厚度的討論，進一步透過縮減反應機構中溫度與尺寸的比例關係，以下述公式來推導完整的火焰厚度

$$\delta_L = \left(\frac{T_b - T_u}{T_{in} - T_u} \right) \left[\frac{\lambda}{(\rho_u C_p) S_L^0} \right]_{in} \quad [\text{mm}] \quad (3-11)$$

燃料-空氣火焰 -

當量值		0.7	0.8	0.9	1.0
燃料、火焰特性					
甲烷	$(T_b - T_u)/(T_{in} - T_u)$	1.851	2.042	2.207	2.317
	δ_L [mm]	0.770	0.580	0.475	0.433
乙炔	$(T_b - T_u)/(T_{in} - T_u)$	-	2.703	2.843	2.935
	δ_L [mm]	-	0.146	0.125	0.114
乙烯	$(T_b - T_u)/(T_{in} - T_u)$	2.181	2.394	2.558	2.660
	δ_L [mm]	0.377	0.318	0.271	0.255
乙烷	$(T_b - T_u)/(T_{in} - T_u)$	1.752	1.931	2.085	2.182
	δ_L [mm]	0.611	0.456	0.411	0.369
丙烷	$(T_b - T_u)/(T_{in} - T_u)$	1.634	1.802	1.944	2.034
	δ_L [mm]	0.562	0.440	0.387	0.370
氫氣	$(T_b - T_u)/(T_{in} - T_u)$	13	14.174	15.152	15.788
	δ_L [mm]	1.404	1.318	1.167	1.121

* 模擬的速度資料：Glassman (1996)、Vagelopoulos (1998)

圖 5-37 則針對不同燃料以空氣作為氧化劑，在一大氣壓下，討論火焰厚度隨當量值的變化情形。分析發現，火焰厚度會隨當量值的增加而減少，且不同燃料其厚度的大小順序如下：

$$\delta_{L,H_2} > \delta_{L,CH_4} > \delta_{L,C_2H_6} \approx \delta_{L,C_3H_8} > \delta_{L,C_2H_4} > \delta_{L,C_2H_2}$$

當量值為 1.0 的烷類燃料-空氣火焰，火焰厚度與壓力間的關係-

壓力 [atm]		0.25	0.5	1.0	2.0	3.0
燃料、火焰特性						
甲烷	$(T_b - T_u)/(T_{in} - T_u)$	2.396	2.366	2.317	2.228	2.153
	δ_L [mm]	1.184	0.700	0.433	0.303	0.258
乙烷	$(T_b - T_u)/(T_{in} - T_u)$	2.212	2.220	2.187	2.162	2.118
	δ_L [mm]	1.150	0.647	0.370	0.214	0.176
丙烷	$(T_b - T_u)/(T_{in} - T_u)$	2.072	2.057	2.038	2.001	1.977
	δ_L [mm]	1.088	0.631	0.371	0.230	0.178

* 模擬的速度資料：Glassman (1996)

圖 5-38 則針對當量值 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰，在壓力的變化下，觀察火焰厚度的變化。分析發現，火焰厚度會隨壓力的增加而減少，且其變化關係亦與預熱厚度隨壓力的變化相似。

甲烷-氧氣-氬氣火焰，空氣添加惰性的氬氣，壓力對火焰厚度的影響-

壓力 [atm]		1.0	1.5	2.0	2.5	3.0
添加量、火焰特性						
0 %	$(T_b - T_u)/(T_{in} - T_u)$	2.317	2.287	2.228	2.195	2.153
	δ_L [mm]	0.433	0.343	0.303	0.272	0.258
14 %	$(T_b - T_u)/(T_{in} - T_u)$	1.889	1.848	1.797	1.755	1.723
	δ_L [mm]	0.591	0.481	0.458	0.449	0.441
24 %	$(T_b - T_u)/(T_{in} - T_u)$	1.564	1.526	1.488	1.448	1.431
	δ_L [mm]	0.792	0.688	0.668	0.708	0.680

* 模擬的速度資料：Egolfopoulos & Law (1990)

圖 5-39 則針對當量值 1.0 的甲烷火焰，在壓力的變化下，觀察火焰厚度受氮氣劑量的影響，分析發現，火焰厚度會隨氮氣劑量的增加而變厚。

5.5.4 無因次參數-Ze

有關反應區間的尺寸研究，亦將透過縮減反應機構中溫度與尺寸的比率關係，以下述公式來具體的表示

$$Ze = 4 \left(\frac{T_b - T_u}{T_b - T_{in}} \right) \quad (3-12)$$

本質上，此無因次參數-Ze 可視為燃氣溫度、內層溫度研究的延續。

燃料-空氣火焰 -

Ze、燃料 \ 當量值		0.7	0.8	0.9	1.0
Ze	甲烷	8.70	7.84	7.31	7.04
	乙炔	-	6.35	6.17	6.07
	乙烯	7.39	6.87	6.57	6.41
	乙烷	9.32	8.30	7.69	7.38
	丙烷	10.31	8.99	8.24	7.87
	氫氣	4.33	4.30	4.28	4.27

* 模擬的速度資料：Glassman (1996)、Vagelopoulos (1998)

圖 5-40 則針對不同燃料以空氣作為氧化劑，在一大氣壓下，討論 Ze 值隨當量值的變化情形。分析發現，Ze 值會隨當量值的增加而減少，且不同燃料其 Ze 值的大小順序如下：

$$Ze_{C_3H_8} > Ze_{C_2H_6} > Ze_{CH_4} > Ze_{C_2H_4} > Ze_{C_2H_2} > Ze_{H_2}$$

當量值為 1.0 的烷類燃料-空氣火焰，Ze 值與壓力間的關係-

壓力 [atm]		0.25	0.5	1.0	2.0	3.0
Ze、燃料						
Ze	甲烷	6.86	6.93	7.04	7.26	7.47
	乙烷	7.30	7.33	7.37	7.44	7.58
	丙烷	7.73	7.78	7.85	8.00	8.09

* 模擬的速度資料：Glassman (1996)

圖 5-41 則針對當量值 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰，在壓力的變化下，觀察 Ze 值的變化。分析發現，Ze 值會隨壓力的增加而加大，且其變化關係如下：

$$\begin{aligned}
 (Ze / Ze_{1\text{atm}})_{\text{CH}_4} &= 1.01 (P / 1\text{atm})^{0.035}, \\
 (Ze / Ze_{1\text{atm}})_{\text{C}_2\text{H}_6} &= 1.005 (P / 1\text{atm})^{0.015}, \\
 (Ze / Ze_{1\text{atm}})_{\text{C}_3\text{H}_8} &= 1.005 (P / 1\text{atm})^{0.02}
 \end{aligned}
 \tag{5-10}$$

甲烷-氧氣-氮氣火焰，空氣添加惰性的氮氣，壓力對 Ze 值的影響-

壓力 [atm]		1.0	1.5	2.0	2.5	3.0
Ze、添加量						
Ze	0 %	7.04	7.11	7.26	7.35	7.47
	14 %	8.50	8.72	9.02	9.30	9.53
	24 %	11.09	11.61	12.19	12.92	13.29

* 模擬的速度資料：Egolfopoulos & Law (1990)

圖 5-42 則針對當量值 1.0 的甲烷火焰，在壓力的變化下，觀察 Ze 值受氮氣劑量的影響，分析發現，Ze 值會隨氮氣劑量的增加而變大。

5.6 火焰熄滅

一般對於火焰熄滅現象的討論，由於所涉及的機構太過複雜超出本文的研究範圍，在此，由預混層流火焰的一些重要論點如表 2（影響火焰傳播的各種效應）和圖 5-43（對各種火焰前緣的延展、擴散效應）做出發，結合圖 5-44 的預混燃燒相圖的重要論述。以下，將針對造成火焰熄滅的可能因素，分別簡述之，並討論在 Ka_{max} 的理論式中所扮演的角色。

5.6.1 無因次參數- Le 的影響

分析層流火焰指出，局部火焰結構可以使用流體的發散流場、火焰前緣的曲率來加以修正，火焰的延展強烈的因熱能、可燃氣的 Le 值而改變。有效的 Le 值，定義為熱擴散性與反應物質擴散性之比。綜合文獻中對氫氣與碳氫燃料的研究指出，預混火焰行為隨熱能、 Le 值的不同，有以下的差異存在：

- Le 值大於 1.0 時（對應的可燃氣請參考表 4），研究平面、延展的火焰指出，火焰熄滅可因延展效應完全壓制過火焰的化學反應所造成。
- Le 值等於 1.0 時（相當於使用甲烷燃料/空氣或用氫氣稀釋的例子），延展效應對火焰結構的影響並不是那麼顯著，沿著火焰前緣的速度是近似均勻，火焰速度可近似平面未受延展的層流火焰速度來表示。
- Le 值小於 1.0 時（對應的可燃氣亦請參考表 4），研究平面、延展的火焰指出，火焰熄滅主要是因不完全的化學反應所造成。

5.6.2 應變率的影響

對於平面、延展的層流火焰，延展效應中的曲率可忽略不計。對於不同 Le 值的火焰，延展效應對反應機構有著以下的影響：

- Le 值小於 1.0 的火焰，延展率的增加將導致單位火焰面反應物消耗的增加。
- Le 值大於 1.0 的火焰，延展率的增加將導致單位火焰面反應物消耗的減少。

而這些研究結果指出，帶有高延展率的流體， $Le > 1.0$ 的火焰將易於熄滅。在熄滅極限的探討中，隨火焰所受延展率的持續加大，可燃氣通過火焰面的滯留時間將隨之減短。如此，火焰的可供反應的區間將變小，若火焰延展率再持續增加當大過其臨界值時，化學反應將無法持續，火焰熄滅。至於其熄滅過程中，流體的渦流與火焰相關尺寸間的變化情形，可用燃燒相圖中的 Ka 來解釋對火焰延展強度的表現。在預混燃燒，火焰的不同特性端視各種的反應區、渦流的尺寸而定，而尺度的分析將透露出火焰片從均勻反應區轉變到良好攪拌的反應等範圍的燃燒模式 (Borghi, 1985; Williams, 1985; Peters, 1986; Poinso, 1991)。

5.6.3 曲率的影響

曲率效應對於層流火焰的不穩定性是有關的，對此現象將使用圖 5-43 作定性的解釋，配合表 2 描述其效應。圖 5-43 解釋層流火焰的結構，並顯示反應物分子擴散向上、熱傳導向下，而這些擴散相對間

的平衡受火焰前緣幾何形狀的影響甚鉅。對於圖 5-43 中的凸形火焰，火焰前緣的鼓起將使更多的反應物進入而排出更多的熱；相對於圖 5-43 中的本生式火焰，火焰前緣由於局部熱能的增加將使反應物耗盡。而此種局部火焰溫度與反應率的相關變化，可依可燃氣的 Le 值判斷如下：

1. 當 Le 值小於 1.0 時，由於反應物擴散比起熱能來的迅速，二種效應平均後對於凸形火焰的局部反應率是增加的，但對本生式火焰的局部反應率是減少的。
2. 當 Le 值大於 1.0 時，與上面論述則恰恰相反。

所以 Le 值小於 1.0 的火焰要比上大於 1.0 的，來得更加的不穩定且火焰表面有更多的皺摺。

5.6.4 優先擴散效應

此效應乃是因為反應物成份間其質量擴散係數的不同所致，此將造成反應物的供應與原本可燃氣所應供給有所差異。當可燃氣中不足量的反應成份物之質量擴散係數大於過量反應成份物的質量擴散係數時，在火焰反應區中不足量的反應成份物可經由質量擴散而得到額外的供給，而使原本可燃氣中不足量的反應成份物所佔比例增加，進而影響反應區的反應速率；若可燃氣中不足量的反應成份物之質量擴散係數小於過量反應成份物的質量擴散係數時，在火焰反應區中不足量的反應成份物可經由質量擴散而減少供給，使原先可燃氣中不足量的反應成份物所佔比例更顯降低。

實驗與理論證據指出，很多工業上的重要流體是發生在火焰片燃燒模式。火焰片燃燒相對化學反應而言，是發生在較快的時間尺度且較短的長度尺度，所以火焰是被限制於相當小的薄層。表 2 針對不同 Le 值的火焰與流體延展的各種效應，以整體、局部二種觀點來描述火焰行為：除了層流火焰現象的討論外，紊流的主要作用以擾動讓火焰起皺來增加它的火焰焰面，使得火焰的燃燒率增大，在某些狀況下，局部的火焰結構會因此受到改變。所以，紊流的擾動效應必須被考慮進局部反應率、傳播速度的變化中。

5.6.5 活化能溫度

上述僅對延展、 Le 、火焰前緣幾何以及優先擴散等效應造成火焰熄滅的可能原因做討論。對於 Le 值小於 1.0 的火焰熄滅機構，理論式會使用反應物洩漏量來描述不完全反應所造成的熄滅。對於 Le 值大於 1.0 的火焰熄滅機構，火焰熄滅前所受的最大延展可表示如下

$$Ka_{\max} = \frac{\pi}{2} \cdot Le^2 \cdot \left(\frac{T_f}{T_{ad}} \right)^4 \cdot \exp \left(T_a \left(\frac{1}{T_{ad}} - \frac{1}{T_f} \right) + G \right) \quad (3-52)$$

，其中修正常數 G 已在第三章討論過外，在此，將對活化能溫度 T_a 的變化，在可燃氣的壓力、溫度及稀釋氣體劑量等效應的影響下做深入討論。一般而言，活化能溫度可由燃燒速度與火焰溫度間的變化來加以表示

$$T_a \equiv \frac{E_a}{R} = -2 \left[\frac{d \log(S_L/S_{L,st})}{d(1/T_{ad} - 1/T_{ad,st})} \right]_p \quad (3-4)$$

有了關於火焰速度與絕熱火焰溫度的詳細資料，活化能和活化能溫度

依序可被決定出來。

燃料-空氣火焰，在一大氣壓下-

燃料 活化能溫度	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷	氫氣
T_a [K]	17661	17413	16845	19223	20614	6448

* 模擬的速度資料：Glassman (1996)、Vagelopoulos (1998)

上表則針對不同燃料以空氣作為氧化劑，在壓力固定下，討論活化能溫度的變化情形。分析發現，不同燃料其 T_a 的大小順序如下：

$$T_{a,C_3H_8} > T_{a,C_2H_6} > T_{a,CH_4} > T_{a,C_2H_2} > T_{a,C_2H_4} > T_{a,H_2}$$

烷類燃料-空氣火焰， T_a 與壓力間的關係-

壓力 [atm]		0.25	0.5	1.0	2.0	3.0
T_a 、燃料	甲烷	22466	20592	18439	15292	12801
	乙烷	23957	22321	20738	18961	16936
	丙烷	29531	27109	24847	21960	20226
	T_a [K]					

* 模擬的速度資料：Glassman (1996)

圖 5-45 則針對當量值 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰，在壓力的變化下，觀察 T_a 值的變化。分析發現， T_a 會隨壓力的增加而減小，其變化關係如下：

$$\begin{aligned} (T_a / T_{a,1atm})_{CH_4} &= 0.94 (P / 1atm)^{-0.22}, \\ (T_a / T_{a,1atm})_{C_2H_6} &= 0.98 (P / 1atm)^{-0.13}, \\ (T_a / T_{a,1atm})_{C_3H_8} &= 0.97 (P / 1atm)^{-0.15} \end{aligned} \quad (5-11)$$

甲烷-氧氣-氮氣火焰，空氣添加惰性的氮氣，壓力對 T_a 的影響-

壓力 [atm]	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0
T_a 、添加量					

T_a [K]	0 %	18330	16763	15292	14293	13185
	14 %	21615	18834	15431	12638	10397
	24 %	27769	21494	15503	9043	5835

* 模擬的速度資料：Egolfopoulos & Law (1990)

圖 5-46 則針對當量值 1.0 的甲烷火焰，在壓力的變化下，觀察 T_a 受氮氣劑量的影響。分析發現，，隨氮氣劑量的增加， T_a 將隨壓力的遞增而減小，但變化較為激烈，其變化關係如下：

$$\begin{aligned}
 (T_a / T_{a,1atm})_{79\%} &= 1.125 - 0.14 (P / 1atm), \\
 (T_a / T_{a,1atm})_{82\%} &= 1.25 - 0.26 (P / 1atm), \\
 (T_a / T_{a,1atm})_{84\%} &= 1.38 - 0.40 (P / 1atm)
 \end{aligned} \tag{5-12}$$

瞭解以上這些影響活化能溫度的因素後，本文將進一步探討有關火焰行為的重要參數-Da (Damköhler Number)。Law (1992)曾討論有關火焰熄滅機構，將 Da 以絕熱火焰溫度、活化能溫度表示如下

$$Da = \frac{1}{2} \frac{T_a^2 (T_{ad} - T_u)^2}{T_u \cdot T_{ad}^3} \exp\left(\frac{T_a}{T_{ad}}\right) \tag{3-55}$$

所以，有了關於活化能溫度與絕熱火焰溫度的詳細資料，Da 就可被決定。

燃料-空氣火焰 -

當量值		0.7	0.8	0.9	1.0
Da、燃料	甲烷	2.977	1.315	0.713	0.492
	乙炔	-	0.261	0.184	0.148
Da x 10 ⁻⁶	乙烯	0.795	0.395	0.245	0.188
	乙烷	6.708	2.824	1.483	1.022
	丙烷	15.524	6.169	3.116	2.110
	氫氣	0.000618	0.000468	0.000380	0.000336

* 模擬的速度資料：Glassman (1996)、Vagelopoulos (1998)

圖 5-47 則針對不同燃料以空氣作為氧化劑，在一大氣壓下，討論 Da 值隨當量值的變化情形。分析發現，Da 值會隨當量值的增加而減少，且不同燃料其 Da 值的大小順序如下：

$$Da_{C_3H_8} > Da_{C_2H_6} > Da_{CH_4} > Da_{C_2H_4} > Da_{C_2H_2} > Da_{H_2}$$

當量值為 1.0 的烷類-空氣火焰-

壓力 [atm]		0.25	0.5	1.0	2.0	3.0
Da、燃料	Da x 10 ⁻⁶	8.191	2.683	0.761	0.121	0.027
	甲烷	15.4	5.824	2.285	0.814	0.258
	乙烷	275.99	69.671	19.432	3.924	1.497
	丙烷					

* 模擬的速度資料：Glassman (1996)

圖 5-48 則針對當量值 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰，在壓力的變化下，觀察 Da 值的變化。分析發現，Da 值會隨壓力的增加而減少，其變化關係如下：

$$\begin{aligned} (Da / Da_{1atm})_{CH_4} &= 0.65 (P / 1atm)^{-2.2}, \\ (Da / Da_{1atm})_{C_2H_6} &= 0.85 (P / 1atm)^{-1.5}, \\ (Da / Da_{1atm})_{C_3H_8} &= 0.85 (P / 1atm)^{-2.0} \end{aligned} \quad (5-13)$$

甲烷-氧氣-氮氣火焰，空氣添加惰性的氮氣-

壓力 [atm]		1.0	1.5	2.0	2.5	3.0
Da、添加量	Da x 10 ⁻⁶	0.716	0.287	0.121	0.067	0.034
	0 %	8.780	1.724	0.223	0.039	0.009
	14 %	616.9	15.073	0.374	0.0048	0.0004
	24 %					

* 模擬的速度資料：Egolfopoulos & Law (1990)

圖 5-49 則針對當量值 1.0 的甲烷火焰，在壓力的變化下，觀察 Da 值受氮氣劑量的影響，分析發現，隨氮氣劑量的增加，Da 值將隨壓力

的遞增而減小，但變化更為劇烈，其變化關係如下：

$$\begin{aligned}(Da / Da_{1atm})_{79\%} &= 1.1 (P / 1atm)^{-2.7}, \\(Da / Da_{1atm})_{82\%} &= 1.5 (P / 1atm)^{-6.5}, \\(Da / Da_{1atm})_{84\%} &= 2.2 (P / 1atm)^{-13}\end{aligned}\quad (5-14)$$

上述研究主要探討在燃料種類、壓力以及惰性氣體劑量等效應的作用下，藉由燃燒速度與絕熱火焰溫度間的變化適當的估算活化能溫度，並進而分析上述效應對反應快慢的影響。

5.7 綜合討論

藉由稀釋氣體、氧化劑組成來改變可燃氣的 Le 和絕熱火焰溫度，以貧極限、燃燒速度與絕熱火焰溫度間的關係，適當的決定內層溫度和活化能溫度，漸近的分析火焰尺寸和燃燒反應。並利用 Le 、絕熱火焰溫度、層流火焰速度以及火焰厚度等燃燒變數來表示火焰行為的無因次參數（如 Ma 、 Da 、 Ka_{max} ..），以瞭解壓力、溫度及惰性氣體如何去影響火焰特性和傳播行為。茲將其重要結果整理如下：

1. 可燃氣之 Le 表示式

$$\begin{aligned}\text{碳氫燃料} - Le &= \frac{\alpha_{oxidant}}{D_{fuel-oxidant}} \left[\frac{\phi}{\phi + (x + 0.25y)} \frac{\alpha_{fuel}}{\alpha_{oxidant}} + \frac{(x + 0.25y)}{\phi + (x + 0.25y)} \right], \\ \text{氫氣} - Le &= \frac{\alpha_{oxidant}}{D_{fuel-oxidant}} \left[\frac{2\phi}{2\phi + 1} \frac{\alpha_{fuel}}{\alpha_{oxidant}} + \frac{1}{2\phi + 1} \right]\end{aligned}\quad (2-13)$$

稀釋氣體種類、氧化劑組成對 Le 的影響方面，有以下幾點是值得被

提出來討論的-

- 對於甲烷可燃氣：如要觀察 Le 範圍介於 0.6~1.0 間的火焰行為，可使用水氣當稀釋氣體；如要觀察 Le 範圍介於 0.8~1.4 間的火焰行為，可使用二氧化碳當稀釋氣體；如要觀察 Le 範圍介於 0.9~1.5 間的火焰行為，可使用氮氣或氫氣當稀釋氣體；如要觀察 Le 於 1.5 以上的火焰行為，可使用氦氣當稀釋氣體。
- 以 Le 觀點來看不同燃燒狀況的火焰行為-
貧的甲烷可燃氣以水氣、二氧化碳來稀釋，富的甲烷可燃氣以氮氣、水氣來稀釋，較易得到低 Le 值，也易觀察到火焰的不穩定行為。雖然貧的丙烷可燃氣，無論使用何種稀釋氣體均無法使 Le 小於 1.0，火焰不易出現不穩定的現象。相反的，對富的丙烷可燃氣，無論是使用何種氣體來稀釋，均可使其 Le 小於 1.0，所以富燃燒狀況的丙烷火焰非常的不穩定。

2. 火焰傳播速度

Göttgens & Peters (1992)、Müller (1997) 等人計算層流火焰速度採用-

$$S_L = f \cdot Y_{F,u}^0 \exp(-c/T_{in}) \frac{T_u}{T_{in}} \left(\frac{T_b - T_{in}}{T_b - T_u} \right)^t \quad (\text{五個模擬參數}) \quad (1-12)$$

燃 料	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷	甲醇	氫氣
模擬參數*							
f [cm/s]	22.18	37747	9979	1900	1275	9996	1.29x10 ⁶
c [K]	-6444	1032	263	-507	-1325	1089	2057
o	0.57	0.91	0.77	0.43	0.58	0.91	1.09
t	2.52	2.59	2.40	2.18	2.40	2.26	3.54

T_{in} [K]	1220	1036	1121	1234	1178	1213	989
--------------	------	------	------	------	------	------	-----

* 模擬值雜亂而無規則存在

本研究所採用的火焰速度預測式-

$$\frac{S_L^0}{S_{L,min}} = Le^{1/2} Y_{F,u}^{1/2} EXP\left(-\frac{E}{2RT_{in}}\right) Ze^{-2\left(\frac{\rho_{in}}{\rho_b}\right)} \quad (\text{模擬參數 } T_{in} \text{ 和 } E) \quad (3-35)$$

(1) 內層溫度採用 Götting (1992) 所建議的值，僅修正 E 來最佳化：

燃 料	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷	氫氣
模擬參數						
E [KJ/mol]	-138	-125	-129	-141	-128	-130

(2) E、 T_{in} 依層流火焰速度和貧極限值做最佳化：

燃 料	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷	氫氣
重要參數						
E [KJ/mol]	-126	-131	-123	-136	-145	-46
T_{in} [K]	1130	1062	1077	1197	1266	430

- 藉由大量有關碳氫燃料/空氣火焰的層流火焰速度和貧極限來修正火焰傳播預測式中的參數，而內層溫度可進一步應用至火焰結構的探討上。

3. 火焰尺寸

貧極限除了為傳播機構的終點(ϕ_{Limit} , $S_{L,min}$)外，層流火焰速度隨當量值遞減至速度消失止，將該處的火焰溫度視為判斷化學反應是否能延續的基準溫度，而此溫度對於討論火焰相關的尺寸變化是相當的便捷。

$$\text{火焰厚度- } \delta_L = \left(\frac{T_b - T_u}{T_{in} - T_u} \right) \cdot \left[\frac{\lambda}{(\rho_u C_p) S_L^0} \right]_{in} \quad (3-11)$$

$$\text{無因次參數- } Ze = \frac{\delta_L}{\delta} = 4 \left(\frac{T_b - T_u}{T_b - T_{in}} \right) \quad (3-12)$$

- 火焰厚度、Ze 值因燃料差異，其大小順序為

$$\delta_{L,H_2} > \delta_{L,CH_4} > \delta_{L,C_2H_6} \approx \delta_{L,C_3H_8} > \delta_{L,C_2H_4} > \delta_{L,C_2H_2}$$

$$Ze_{C_3H_8} > Ze_{C_2H_6} > Ze_{CH_4} > Ze_{C_2H_4} > Ze_{C_2H_2} > Ze_{H_2}$$

- 火焰厚度、Ze 值會隨可燃氣當量值的增加而降低，但壓力效應可使火焰厚度變薄，卻會使 Ze 值變大（表示反應區尺寸亦變小，但受壓力的影響比起預熱區更為靈敏）。稀釋氣體劑量的增加，會使火焰厚度、Ze 值加大（表示預熱區尺寸受稀釋氣體劑量的影響比起反應區較為靈敏）。

4. 燃燒反應

由於火焰所受的延展，會隨燃燒器與流場佈置的不同有很大差異存在，在此僅對延展參數 Ka 中活化能溫度的估算，且對燃燒系統的 Da（Damköhler Number）來詳加討論。

一般而言，活化能溫度、Da 值可定義如下

$$T_a = \frac{E_a}{R} = -2 \left[\frac{d \log(S_L / S_{L,st})}{d(1/T_{ad} - 1/T_{ad,st})} \right]_P \quad (3-4)$$

$$Da = \frac{T_a^2 (T_{ad} - T_u)^2}{2T_u \cdot T_{ad}^3} \exp\left(\frac{T_a}{T_{ad}}\right) \quad (3-55)$$

- 對不同燃料-空氣火焰，其 T_a 、 Da 值的大小順序如下：

$$T_{a,C_3H_8} > T_{a,C_2H_6} > T_{a,CH_4} > T_{a,C_2H_2} > T_{a,C_2H_4} > T_{a,H_2}$$

$$Da_{C_3H_8} > Da_{C_2H_6} > Da_{CH_4} > Da_{C_2H_4} > Da_{C_2H_2} > Da_{H_2}$$

- 壓力、稀釋氣體的效應： T_a 、 Da 值會隨壓力的增加而減少，隨稀釋氣體劑量的增加， T_a 、 Da 值將隨壓力的遞增而更劇烈的減小。

本研究討論火焰巨觀行為，諸如傳播、穩定性、熄滅等現象，對其行為的分析和解釋乃採用「內外」、「相對」的觀點：

內- 討論比熱、熱擴散性、絕熱火焰溫度、可燃極限等的內在強度。

外- 分析對延展、壓力、溫度以及惰性氣體等效應的外在靈敏性。

相對- 視討論主題決定所要突顯的特質

- 討論不穩定性，以輕質、高傳播、易引燃、無中心明亮錐穩定火焰結構的氫氣燃料較易於觀察。
- 研究優先擴散效應則採用燃料與氧化劑間質傳差異性大的氣體。
- 討論熱損失效應，則以二氧化碳、水氣等所稀釋的火焰為優。

不出現的並不表示就不曾存在過，而顯現的火焰現象亦不代表就能持續下去，許多火焰行為就是在內在適當的可燃氣組合兼具外界各種效應適時的作用下，才被凸顯出來。在這樣的想法下，本文將各種影響火焰行為的效應、燃燒特性整理在表 1 和表 2 中，而可燃氣的性質彙整在表 3 和附錄 A。文章中將廣泛的討論稀釋氣體和氧化劑組成對基本燃燒變數（如 Le 、絕熱火焰溫度等）的影響，並以貧極限、燃燒速度與絕熱火焰溫度間的關係，適當的決定內層溫度和活化能溫

度，且以此種特徵溫度討論火焰結構和燃燒系統。而許多描述火焰行為的無因次參數（如 Ma 、 Ka_{max} 以及 Da 等），絕大部分都可利用這些基本燃燒特性來表示其關係式。透過這樣的研究，可瞭解壓力、溫度以及惰性氣體等效應如何的去影響、改變火焰特性和傳播行為。

第六章 結 論

6.1 總結

本文主要是採用縮減反應機構、變化的傳輸性質，以可燃氣開始發生化學反應的內層溫度來研究預混燃燒，目的是為了建立一個可預測碳氫燃料之火焰結構、傳播速度的理論模式。對於火焰現象如傳播速度、火焰尺寸以及反應快慢等，將具體的透過火焰特性來詳加描述。

- 火焰速度的分析- 以貧極限、層流火焰速度與當量值間的關係適當的決定內層溫度和能量參數，研究壓力、溫度以及惰性氣體等效應對火焰速度的影響，並透過理論式中的模擬參數來加以討論。
- 燃燒反應- 研究對象以 Le 大於 1.0、完全反應之貧的碳氫-空氣火焰為主，而燃燒速度與絕熱火焰溫度間的關係可適當的決定活化能溫度，此溫度可廣泛應用於燃燒系統的討論，對於瞭解反應的快慢、研究焰面起皺（或破碎）等行為是相當的重要。

茲將其重要的結果，整理如下：

$$\text{層流火焰速度- } \frac{S_L^0}{S_{L,\min}} = Le^{1/2} Y_{F,u}^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{2RT_{in}}\right) Ze^{-2\left(\frac{\rho_{in}}{\rho_b}\right)}, \quad Ze = 4\left(\frac{T_b - T_u}{T_b - T_{in}}\right)$$

$$\text{火焰厚度- } \delta_L = \left(\frac{T_b - T_u}{T_{in} - T_u}\right) \left[\frac{\lambda}{(\rho_u C_p) S_L^0} \right]_{in} \quad [\text{mm}]$$

$$\text{活化能溫度- } T_a = -2 \left[\frac{d \log(S_L / S_{L,st})}{d(1/T_{ad} - 1/T_{ad,st})} \right]_P \quad [\text{K}]$$

速度預測式中的模擬參數為 T_{in} 、 E ，理論上它們扮演著描述因壓力和溫度改變所導致的速度變化，而惰性氣體則從貧極限和減少氧氣劑量來進行討論。至於因素流（或渦流）延展焰面所造成火焰傳播速度的改變，則從理想的層流火焰速度出發，以無因次參數-Ma、Ka 來討論其變化。

一般燃料-空氣火焰的貧極限（Lean Limit）：

燃 料	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷	氫氣
貧極限						
ϕ_{Limit}	0.50	0.31	0.40	0.52	0.56	0.10
$T_{b,Limit}$ [K]	1479	1282	1379	1543	1625	630

使用公式 3-35，模擬貧極限、層流火焰速度的最佳結果：

燃 料	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷	氫氣
重要參數						
E [KJ/mol]	-126	-131	-123	-136	-145	-46
T_{in} [K]	1130	1062	1077	1197	1266	430

- 相對縮減反應機構以內層溫度做為混合氣開始發生化學反應的臨界溫度，本研究將貧極限視為傳播機構的終點(ϕ_{Limit} , $S_{L,min}$)，沿層流火焰速度的變化外插至速度為零，並將此處的火焰溫度視為反應是否能延續的基準溫度，如圖 3-4 所示。

燃 料	甲烷	乙炔	乙烯	乙烷	丙烷	氫氣
內層溫度						
T_{in} [K]						
縮減機構	1220	1036	1121	1234	1178	989
傳播機構	1130	1062	1077	1197	1266	430

比較上表得知，此兩種觀點對碳氫燃料所求取的基準溫度差異並不大，在考量計算的容易性和理論的適用性，本文建議以傳播的觀點（公式 3-35）取代縮減反應的觀點（公式 1-7）來求取此溫度值。

以上述理論來分析內層溫度的優點有三：

- 由於不涉及反應機構的探討，除了可避免複雜的反應物種計算外，又可推廣、應用至更多燃料的行為預測上，包括使用添加劑者或混合氣含多種燃料成份的火焰。
- 預測所使用的貧極限、層流火焰速度資料，已有大量的文獻可供查詢，因此不必重做相關的實驗。
- 以速度模擬曲線與傳播終點(ϕ_{Limit} , $S_{L,min}$)間的偏離程度作為判斷火焰速度實驗誤差是否在可接受的合理範圍內。

雖然目前所探討的主題在燃燒領域中，僅限於層流火焰，但是透過傳播機構的觀點，層流火焰速度遞減至貧極限處（傳播終點），並外插至速度消失點，視該處的火焰溫度為判斷可燃氣開始發生反應的基準溫度，進而將此溫度應用至火焰尺寸的相關討論上。另外，燃燒速度與絕熱火焰溫度間的關係可適當的決定活化能溫度，此溫度為評估反應快慢的重要參數。對預混碳氫火焰結構和傳播行為，以內層溫度、活化能等特徵溫度做有系統的分析，此有助於我們瞭解在壓力、溫度以及惰性氣體等效應的作用下，相關火焰特性和火焰傳播速度的變化情形，本研究將最佳的數值模擬結果（最小平方根誤差）整理在表 5、表 6。

6.2 未來展望

本文所採用的燃燒模式是建構在已有縮減反應機構和貧極限的理論基礎上，以內層溫度和活化能溫度來討論傳播速度、火焰尺寸以及火焰行為，理論適用的範圍雖然只局限於貧燃燒到當量值等於 1.0 的狀況。展望未來，希望能有機會延續現在的研究，對燃料的反應機構和富燃燒狀況的火焰行為做更深入的討論，特別是當所加入的稀釋氣體會參與反應時，以期對火焰傳播機構的瞭解能更趨完整。

参考文献

1. Abdel-Gayed, R. G., Bradley, D., Hamid, M. N., and Lawes, M., "Lewis Number Effects on Turbulent Burning Velocity," *Twentieth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.505-512 (1984).
2. Aung, K. T., Hassan, M. I., and Faeth, G. M., "Flame Stretch Interactions of Laminar Premixed Hydrogen/Air Flames at Normal Temperature and Pressure," *Combust. Flame* 109:1-24 (1997).
3. Bartholome, E., *Naturwissenschaften*, 36:171 (1949).
4. Bilger, R. W., Starnes, S. H., and Kee, R. J., "On Reduced Mechanisms for Methane-Air Combustion in Non-Premixed Flames," *Combust. Flame* 80:135-149 (1990).
5. Borghi, R., "On the Structure and Morphology of Turbulent Premixed Flames," *In Recent Advances in the Aerospace Science*, Ed. C. Casci, pp.117-138 (1985).
6. Bradley, D., "How Fast Can We Burn," *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.247-262 (1992).
7. Bradley, D., and Harper, C. M., "The Development of Instabilities in Laminar Explosion Flames," *Combust. Flame* 99:562-572 (1994).
8. Bradley, D., Gaskell, P. H., and Gu X. J., "Burning Velocities, Markstein Lengths, and Flame Quenching for Spherical Methane-Air Flames: A Computational Study," *Combust. Flame* 104:176-198 (1996).
9. Bradley, D., Hicks, R. A., Lawes, M., Sheppard, C. G. W., and Woolley, R., "The Measurement of Laminar Burning Velocities and Markstein Numbers for Iso-octane-Air and Iso-octane-n-Heptane-Air Mixtures at Elevated Temperatures and Pressures in an Explosion Bomb," *Combust. Flame* 115:126-144 (1998).
10. Bradley, D., Sheppard, C. G. W., Woolley, R., Greenhalgh, D. A., and

- Lockett, R. D., "The Development and Structure of Flame Instabilities and Cellularity at Low Markstein Numbers in Explosions," *Combust. Flame* 122:195-209 (2000).
11. Bray, K. N. C., Libby, P. A., and Moss, J. B., "Flamelet Crossing Frequencies and Mean Reaction Rates in Premixed Turbulent Combustion," *Combust. Sci. and Tech.* 41:143-172 (1984).
 12. Bray, K. N. C., Champion, M., and Libby, P. A., "The Turbulent Boundary Layer with Variable Enthalpy," *Combust. Sci. Tech.* 55:139-162 (1987).
 13. Brown, M. J., Mclean, I. C., Smith, D. B., and Taylor, S. N., "Markstein Lengths of H_2 /Air Flames, Using Expanding Spherical Flames," *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp.875-881 (1996).
 14. Buckmaster, J. D., "The Quenching of Deflagration Wave," *Combust. Flame* 26:151 (1976).
 15. Candel, S., and Poinso, T., "Flame Stretch and Balance Equation for the Flame Area," *Combust. Sci. Tech.* 70:1-15 (1990).
 16. Calvin, P., and Williams, F. A., "Effects of Molecular Diffusion and Thermal Expansion on The Structure and Dynamics of Premixed Flames in Turbulent Flows of Large Scales and Low Intensity," *J. Fluid Mech.* 116:251-282 (1982).
 17. Clavin, P., and Garcia, P., "The Influence of Temperature Dependence of Diffusivities on the Dynamics of Flame Fronts," *J. Theor. Appl. Mec.* 2:245-263 (1983).
 18. Clavin, P., "Dynamic Behavior of Premixed Flame Fronts in Laminar Turbulent Flows," *Prog. Ener. Combust. Sci.* 11:1-59 (1985).
 19. Clingman, W. H., Brokaw, R. S., and Pease, R. N., "Burning Velocities of Methane with Nitrogen-Oxygen, Argon-Oxygen, and Helium-Oxygen Mixtures," *Fourth Symposium (International) on Combustion*, Williams & Wilkins, Baltimore, pp.310-313 (1953).
 20. Chomiak, J., and Jarosiński, J., "Flame Quenching by Turbulence," *Combust. Flame* 48:241-249 (1982).
 21. Chomiak, J., *Combustion: A Study in Theory, Fact and Application*,

- Energy and Engineering Science Series, pp.33-62 (1990).
22. Chung, S. H., and Law, C. K., "Analysis of Some Nonlinear Premixed Flame Phenomena," *Combust. Flame* 75:309-323 (1989).
 23. Chung, S. H., Chung, D. H., Fu, C., and Cho, P., *Proc. Seminar on Combustion Phenomena in I. C. Engines*, Korean Society of Mechanical Engineers, Seoul p.21 (1995).
 24. Chung, S. H., Chung, D. H., Fu, C., and Cho, P., "Local Extinction Karlovitz Number for Premixed Flames," *Combust. Flame* 106:515-520 (1996).
 25. Coward, H. F., and Jones, G. W., "Limits of Flammability of Gases and Vapors," *US Bureau of Mines, Bulletin* 503 (1952).
 26. Darabiha, N., Candel, S., and Marble, F. E., "The Effect of Strain Rate on a Premixed Laminar Flame," *Combust. Flame* 64:203-217 (1986).
 27. Darabiha, N., Candel, S. M., Giovangigli, V., and Smooke, M. D., "Extinction of Strained Premixed Propane-air Flames with Complex Chemistry," *Combust. Sci. and Tech.* 60:267-285 (1988).
 28. David, R. L.: CRC, Handbook of Chemistry and Physics (75th Edition), pp.5-48~6-255 (1913-1995).
 29. Desai, B., and Cambray, P., "The Velocity of a Premixed Flame as a Function of the Flame Stretch: An Experimental Study," *Combust. Flame* 82:361-375 (1990).
 30. Dixon-Lewis, G., "Kinetic Mechanism, Structure, and properties of Premixed Flames in Hydrogen-Oxygen- Nitrogen Mixtures", *Phil. Trans. of the Royal Soc. London*, 292:45 (1979).
 31. Djavdan, E., Darabiha, N., Giovangigli, V., and Candel, S. M., "Strained Propane-Air Flames With Detailed and Reduced Kinetic Schemes," *Combust. Sci. and Tech.* 76:287-309 (1991).
 32. Drysdale, D.: *An Introduction to Fire Dynamics*, 2nd Ed., John Wiley & Sons, p.75-108 (1999).
 33. Dugger, G. L., and Graab, D. D., "Flame Velocities of Hydrocarbon-Oxygen-Nitrogen Mixtures," *Fourth Symposium (International) on Combustion*, Williams & Wilkins, Baltimore,

- pp.302-310 (1953).
- 34.Dugger, G. L., and Weast, R. C., and Heime, S., "Flame Velocity of Pre-flame Reaction in Heated Propane-air Mixtures," *Industrial and Engineering Chemistry*, 47:114-116 (1955).
 - 35.Egolfopoulos, F. N., and Law, C. K., "Chain Mechanisms in the Overall Reaction Orders in Laminar Flame Propagation," *Combust. Flame* 80:7-16 (1990).
 - 36.Egolfopoulos, F. N., Zhang, H., and Zhang, Z., "Wall Effects on the Propagation and Extinction of Steady, Strained, Laminar Premixed Flames," *Combust. Flame* 109:237-252 (1997).
 - 37.Friedman, R., "Theory of Fire Extinguishment," *Fire Protection Handbook*, US National Fire Protection Association 1:72-82 (1991).
 - 38.Glassman, I.: *Combustion*, 3rd edition, Academic Press, New York, pp.119-219 (1996).
 - 39.Gibbs, G. J., and Calcote, H. F., "Effect of Molecular Structure on Burning Velocity," *J. Chem. Eng. Data* 4:226-237 (1959).
 - 40.Giovangigli, V., and Smooke, M., "Calculation of Extinction Limits for Premixed Laminar Flames in a Stagnation Point Flow," *J. of Computational Physics* 68:327-345 (1987).
 - 41.Gordon, S., and McBride, B. J., "Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket performance, Incident and Reflected Shocks, and Chapman-Jouguet Detonations," *NASA Lewis Research Center*, NASA Report NASA SP-273 (1971).
 - 42.Gordon, S., and McBride, B. J., "Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications," *NASA Lewis Research Center*, NASA Reference Publication 1311 (1994).
 - 43.Göttgens, J., Mauss, F., and Peters, N., "Analytic Approximations of Burning Velocities and Flame Thickness of Lean Hydrogen, Methane, Ethylene, Ethane, Acetylene, and Propane Flames," *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, pp.129-135 (1992).
 - 44.Groff, E. G., "The Cellular Nature of Confined Spherical Propane-Air

- Flames," *Combust. Flame* 48:51-62 (1982).
45. Gu., X. J., Haq, M. Z., Lawes, M., and Woolley, R., "Laminar Burning Velocity and Markstein Lengths of Methane-Air Mixtures," *Combust. Flame* 121:41-58 (2000).
 46. Haworth, D., Drake, M., Pope, S., and Blint, R., "The Importance of Time-Dependent Flame Structures in Stretched Laminar Flamelet Models for Turbulent in Jet Diffusion Flames," *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.589-597 (1988).
 47. Hirshfelder, J. O., Curtiss, C. F., and Bird, R. B.: *Molecular Theory of Gases and Liquid*, New York, Wiley (1954).
 48. Ishizuka, S., and Law, C. K., "An Experimental Study on Extinction and Stability of Stretched Premixed Flames," *Nineteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.327-335 (1982).
 49. Ishizuka, S., Miyasaka, K., and Law, C. K., "Effect of Heat Loss, Preferential Diffusion and Extinction of Propane/Air Mixtures," *Combust. Flame* 45:293-308 (1982).
 50. Jamel, M. A. M., *Ph. D. thesis*, University of Leeds (1984).
 51. Joulin, G., and Clavin, P., "Analyses Asymptotic Des Condition Extinction Flames Luminaries," *Acta Astronautica* 3:223 (1976).
 52. Joulin, G., and Clavin, P., "Linear Stability Analysis of Nonadiabatic Flames: a Thermal-diffusional Model," *Combust. Flame* 35:139 (1979).
 53. Kanury, A. M.: *Introduction to Combustion Phenomena*, *Gordon and Breach*, New York pp.270-315 (1975).
 54. Karlovitz, B., Denniston, J. W., Knapschaefer, D. H., and Wells, F. E., "Studies on Turbulent Flames: A. Flame Propagation Across Velocity Gradients; B. Turbulence Measurement in Flame," *Fourth Symposium (International) on Combustion*, Williams & Wilkins, Baltimore, pp.613-620 (1953).
 55. Kennel, C., Götting, J. and Peters, N., "The Basic Structure of Lean Propane Flames," *Twenty-Third Symposium (International) on*

- Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.315-325 (1990).
56. Kennel, C., Mauss, F., and Peters, N., "Reduced Kinetic Mechanisms for Premixed Propane-Air Flames," *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems* (Peters, N. and Rogg, B., Ed.), *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, pp.123-141 (1993).
 57. Kutz, M.: *Mechanical Engineers' Handbook* (2nd Edition), John Wiley & Sons Inc., pp.1245-1287 (1998).
 58. Kwon, S., Tseng, L.-K., and Faeth, G. M., "Laminar Burning Velocities and Transition to Unstable Flame in $H_2/O_2/N_2$ and $C_3H_8/O_2/N_2$ Mixtures," *Combust. Flame* 90:230-246 (1992).
 59. Kwon, O. C., Aung, K. T., Tseng, L. I., and Ismail, M. A., "Comment on "Approximations for Burning Velocities and Markstein Numbers for Lean Hydrocarbon and Methanol Flames" by U. C. Müller, M. Bollig and N. Peters," *Combust. Flame* 116:310-312 (1999).
 60. Law, C. K., Zhu, D. L., and Yu, G., "Propagation and Extinction of Stretched Premixed Flames," *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.1419-1426 (1986).
 61. Law, C. K., "Dynamics of Stretched Flames," *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.1381-1402 (1988).
 62. Law, C. K., and Egolfopoulos, F. N., "A Kinetic Criterion of Flammability Limits: the C-H-O-Inert system," *Twenty-Third Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.413-421 (1990).
 63. Law, C. K., Chao, B. H., and Umemura, A., "On Closure in Activation Energy Asymptotics of Premixed Flames," *Combust. Sci. and Tech.* 88:59-88 (1992).
 64. Law, C. K., Sung, C. J., Yu, G., and Axelbaum, R. L., "On the Structural Sensitivity of Purely Strained Planar Premixed Flames to Strain Rate Variations," *Combust. Flame* 98:139-154 (1994).
 65. Law, J. Y., and Ma, H. K., "Asymptotic Analysis of Transport Properties and Burning Velocities for Premixed Hydrocarbon Flames," *International Journal of Thermal and Fluid Sciences* 10:170-175

(2001).

66. Lewis, B., and von Elbe, G.: Combustion Flames and Explosions of Gases, 2nd edition, Academic Press, New York pp.381 (1961).
67. Lewis, B., and von Elbe, G.: Combustion Flames and Explosions of Gases, 3rd edition, Academic Press, New York (1987).
68. Libby, P. A., and Williams, F. A., "Structure of Laminar Flamelets in Premixed Turbulent Flames," *Combust. Flame* 44:287-303 (1982).
69. Libby, P. A., Liñán, A., and Williams, F. A., "Strained Premixed Laminar Flames with Nonunity Lewis Numbers," *Combust. Sci. and Tech.* 34:257-293 (1983).
70. Libby, P. A., and Williams, F. A., "Strained Premixed Laminar Flames with Two Reaction Zones," *Combust. Sci. and Tech.* 37:221-252 (1984).
71. Libby, P. A., and Williams, F. A.: Turbulent Reacting Flows, Academic Press, New York, pp.84-113 (1994)
72. Liñán, A., "The Asymptotic Structure of Counterflow Diffusion Flames for Large Activation Energies", *Acta Astronautica* 1:1007 (1974).
73. Liñán, A., and Clavin, P., "Premixed Flames with Nonbranching Chain-Reaction (Structure and Dynamics)," *Combust. Flame* 70:137-159 (1987).
74. Liñán, A., and Williams, F. A., "Fundamental Aspects of Combustion," *Oxford Univ. Press*, Oxford, England (1994).
75. Ma, H. K., and Law, J. Y., "Theoretical Study of the Wrinkled Mechanism of Turbulent Premixed Flamelet," *The 1st Asia-Pacific Conference on Combustion (ASPACC 97)* pp.282-285 (1997).
76. Ma, H. K., and Law, J. Y., "Numerical Simulation on the Velocity and Preferential Diffusion for a Premixed Flame," *The 2nd Asia-Pacific Conference on Combustion (ASPACC 99)* pp.104-109 (1999).
77. Mallard, E., and Le Chatelier, H. L., *Ann. Mines* 4:379 (1883).
78. McBride, B. J., and Gordon, S., "Computer Program for Calculating and Fitting Thermodynamic Functions," *NASA Lewis Research Center*,

NASA RP-1271 (1992).

79. Markstein, G. H., *J. Aerospace Sci.* 18:199 (1951).
80. Markstein, G. H., "Non-Steady Flame Propagation," Pergamon Press, Oxford, pp.22 (1964).
81. Matalon, M., and Matkowsky, B. J., "Flames as Gas Dynamic Discontinuities," *J. Fluid Mech.* 124:239-259 (1982).
82. Matalon, M., "On Flame Stretch," *Combust. Sci. and Tech.* 31:169-181 (1983).
83. Meneveau, C., and Poinso, T., "Stretching and Quenching of Flamelets in Premixed Turbulent Combustion," *Combust. Flame* 86: pp. 311-322 (1991).
84. Miller, J. A., Mitchell, R. E., Smooke, M. D., and Kee, R. J., "Toward a Comprehensive Chemical Kinetic Mechanism for the Oxidation of Acetylene: Comparison of Model Predictions with Results from Flame and Shock Tube Experiments," *Nineteenth Symposium (international) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.181-196 (1982).
85. Miller, J. A., Smooke, M. D., Green, R. M., and Kee, R. J., "Kinetic Modeling of the Oxidation of Ammonia in Flames," *Comb. Sci. and Tech.* 34:149-176 (1983).
86. Modest, M. F.: Radiative Heat Transfer, Mc Graw-Hill, pp.323-436 (1993).
87. Morgan, G. H., and Kane, W. R., "Some Effects of Inert Diluents on Flame Speeds and Temperatures," *Fourth Symposium (International) on Combustion*, Williams & Wilkins, Baltimore, pp.313-320 (1953).
88. Müller, U. C., Bollig, M., and Peters, N., "Approximation for Burning Velocities and Markstein Numbers for Lean Hydrocarbon and Methanol Flames," *Combust. Flame* 108:349-356 (1997).
89. Nishioka, M., Law, C. K., and Takeno, T., "A Flame-Controlling Continuation Method for Generating S - Curve Responses with Detailed Chemistry," *Combust. Flame* 104:328-342 (1994).
90. Paczko, G., Lefdal, P. M., and Peters, N., "Reduced Reaction Schemes

for Methane, Methanol and Propane Flames," *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.739-748 (1986).

91. Peters, N., "Numerical and Asymptotic Analysis of Systematically Reduced Reaction Schemes for Hydrocarbon Flames", In Numerical Simulation of Combustion Phenomena (Glowinski R., Ed.), *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, pp.90 (1985).
92. Peters, N., "Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion," *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.1231-1250 (1986).
93. Peters, N., and Kee, R. J., "The Computation of Stretched Laminar Methane-Air Diffusion Flames Using a Reduced Four-Step Mechanism," *Combust. Flame* 68:17-29 (1987).
94. Peters, N., and Williams, F. A., "The Asymptotic Structure of Stoichiometric Methane-Air Flames," *Combust. Flame* 68:185-207 (1987).
95. Peters, N., "Reducing Mechanisms," Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames (Smooke, M. D., Ed.), *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, pp.48-67 (1991).
96. Peters, N., "Flame Calculations with Reduced Mechanism- An Outline," Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems (Peters, N. and Rogg, B., Ed.), *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, pp.3-14 (1993).
97. Poinso, T., Veynante, D., and Candel, S., "Quenching Processes and Premixed Turbulent Combustion Diagrams," *J. Fluid Mech.* 228:561-605 (1991).
98. Roberts, W. L., Driscoll, J. F., Drake, M. C., and Goss, L. P., "Images of the Quenching of a Flame by a Vortex-To Quantify Regimes of Turbulent Combustion," *Combust. Flame* 94:58-69 (1993).
99. Rutland, C. J., and Trounev, A., "Direct Simulations of Premixed Turbulent Flames with Nonunity Lewis Numbers," *Combust. Flame* 94:41-57 (1993).
100. Rutland, C. J., and Ferziger, J. H., "Simulations of Flame-vortex Interactions," *Combust. Flame* 84:343-360 (1991).

101. Sato, J., "Effects of Lewis number on Extinction Behavior of Premixed Flames in a Stagnation Flow," *Nineteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.1541-1548 (1982).
102. Sato, J., and Tsuji, H., "Extinction of Premixed Flames in a Stagnation Flow Considering General Lewis Numbers," *Combust. Sci. and Tech.* 33:193-205 (1983).
103. Samaniego, J. M., and Mantel T., "Fundamental Mechanism in Premixed Turbulent Flame Propagation via Flame-Vortex Interactions Part I: Experiment," *Combust. Flame* 118:537-556 (1999).
104. Searby, G., and Clavin, P., "Weakly Turbulent, Wrinkled Flames in Premixed Gases," *Combust. Sci. Tech.* 46:167-193 (1986).
105. Searby, G., and Quinard, J., "Direct and Indirect Measurements of Markstein Numbers of Premixed Flames," *Combust. Flame* 82:298-311 (1990).
106. Senecal, J. A., "Explosion Prevention and Protection," *Fire Protection Handbook*, US National Fire Protection Association 6:184-201 (1991).
107. Seshadri, K., and Peters, N., "The Inner Structure of Methane-Air Flames," *Combust. Flame* 81:96 (1990).
108. Seshadri, K., and Göttgens, J., "Structure of the Oxidation Layer for Stoichiometric and Lean Methane-Air Flames," Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames (Smooke, M. D., Ed.), *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, pp.111-133 (1991).
109. Seshadri, K., "Multistep Asymptotic Analyses of Flame Structures," *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.831-846 (1996).
110. Shchetinkov, Y. S.: *Physics of Combustion Gases*, Izd. Nauka, Moscow (1965).
111. Smooke, M. D., and Giovangigli, V., "Formation of the Premixed and Nonpremixed Test Problems," Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames (Smooke,

- M. D., Ed.), *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, pp.1-28 (1991).
112. Strehlow, R. A.: *Fundamentals of Combustion*, Robert, E. K. Publishing Company, Huntington, New York (1979).
 113. Sun, C. J., and Law, C. K., "On the Nonlinear Response of Stretched Premixed Flames," *Combust. Flame* 121:236-248 (2000).
 114. Sung, C. J., and Law, C. K., "Extinction Mechanisms of Near-Limit Premixed Flames and Extended Limits of Flammability," *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.865-873 (1996).
 115. Taylor, S. C.: Ph. D thesis, University of Leeds (1991).
 116. Tien, J. H., and Matalon, M., "On the Burning Velocity of Stretched Flames," *Combust. Flame* 84:238-248 (1991).
 117. Tseng, L. K., Ismail, M. A., and Faeth, G. M., "Laminar Burning Velocities and Markstein Numbers of Hydrocarbon/Air Flames," *Combust. Flame* 95:410-426 (1993).
 118. Tsuji, H., and Yamaoka, I., "Structure and Extinction of Near-Limit Flames in a Stagnation Flow," *Nineteenth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.1533-1540 (1982).
 119. Vagelopoulos, C. M., and Egolfopoulos, F. N., "Further Considerations of the Determination of Laminar Flame Speeds with the Counterblow Twin-Flame Technique," *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.1341-1347 (1994).
 120. Vagelopoulos, C. M., and Egolfopoulos, F. N., "Direct Experimental Determination of Laminar Flame Speed," *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.513-519 (1998).
 121. Warnatz, J., In *Combustion Chemistry* (Gardiner, W. C., Ed.), *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, New York, pp.197-360 (1984).
 122. Westbrook, C. K., and Dryer, F. L., "A Comprehensive Mechanism

- for Methanol Oxidation," *Combust. Flame* 20:125 (1979).
123. Williams, F. A., "A Review of Some Theoretical Considerations of Turbulent Flame Structure," In *AGARD Conference Proceedings* 164:1-25 (1975).
 124. Williams, F. A., "A Review of Flame Extinction," *Fire Safety J.* 3:163 (1981).
 125. Williams, F. A.: *Combustion Theory*, Addison Wesley, CA (1985).
 126. Williams, F. A., "Asymptotic Methods for Flames with Detailed Chemistry," *Mathematical Modeling in Combustion Science* (Buckmaster, J. D. & Takeno, T., Ed.), Springer-Verlag, p:44 (1988).
 127. Williams, F. A., "Overview of Asymptotic for Methane Flames," Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames (Smooke, M. D., Ed.), *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, pp.68-85 (1991).
 128. Wu, C. K., and Law, C. K., "On The determination of Laminar Flame Speeds From Stretched Flames," *Twentieth Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.1941-1949 (1984).
 129. Wu, M. S., Kwon, S., Driscoll, J. F., and Faeth, G. M., "Preferential Diffusion Effects on the Surface Structure of Turbulent Premixed Hydrogen/Air Flames," *Combust. Sci. Tech.* 78:69-96 (1991).
 130. Zabetakis, M. G., "Flammability Characteristics of Combustible Gas and Vapors," *US Bureau of Mines, Bulletin* 627 (1965).
 131. 林俊宏,「本生式火焰現象觀察與熄滅極限之探討」,國立台灣大學碩士論文,民國八十九年。
 132. 黃榮茂、王禹文、林聖富及楊得仁:化學化工百科辭典,曉園出版社,民國七十六年。
 133. 翁國鈞,「液態燃料預混火焰之實驗分析與數值模擬」,國立台灣大學博士論文,民國八十七年。
 134. 羅居勇,「預混紊流火焰片之熱傳、起皺研究」,國立台灣大學碩士論文,民國八十四年。

表 1 可燃氣的燃燒特性

燃料種類	燃燒特性 $S_{L,max}$ [cm/s]	$T_{f,max}$ [K]	點火極限			可燃極限		
			最小點火能量 MIE [mJ]	熄滅距離 d_T [mm]	自燃溫度 AIT [K]	貧極限 ϕ_{Limit}	添加惰性氣體 $vol_{inert,max}$ [%]	
							N ₂	CO ₂
氫 氣	325	2380	$(0.01)_{\phi=0.8}$	0.50	853	0.10	75 %	60 %
甲 烷	44.8	2236	$(0.26)_{\phi=0.9}$	2.00	810	0.50	39 %	25 %
甲 醇	52	-	$(0.14)_{\phi=1.3}$	1.50	737	0.51	46 %	29 %
乙 炔	155	2600	$(0.02)_{\phi=1.0}$	0.59	608	0.31	-	-
乙 烯	73.5	-	0.07	0.97	816	0.40	50 %	40 %
乙 烷	47.6	2244	$(0.24)_{\phi=1.2}$	1.80	788	0.52	45 %	32 %
乙 醇	-	-	-	-	695	0.48	47 %	35 %
丙 烷	46.4	2250	$(0.25)_{\phi=1.3}$	1.80	740	0.56	44 %	29 %
環丙烷	55.6	2328	$(0.18)_{\phi=1.1}$	1.42	770	0.53	43 %	31 %
丙 酮	44.4	-	$(1.1)_{\phi=1.0}$	2.98	810	0.51	33 %	24 %
丁二烯	57.2	-	$(0.125)_{\phi=1.4}$	1.23	688	0.53	50 %	36 %
丁 烷	44.9	2256	$(0.26)_{\phi=1.5}$	1.80	678	0.57	40 %	29 %
戊 烷	43	2250	$(0.22)_{\phi=1.3}$	1.80	581	0.54	44 %	30 %
己 烷	43	2239	$(0.23)_{\phi=1.7}$	1.80	533	0.55	42 %	30 %
庚 烷	42.8	2214	$(0.24)_{\phi=1.8}$	1.8	495	0.56	44 %	32 %
辛烷 (100°C)	58.2	-	0.28	1.69	493	0.58	42 %	28 %
苯 (100°C)	47.6	2365	$(0.22)_{\phi=1.8}$	1.8	835	0.47	46 %	32 %

1. 以空氣為氧化劑、壓力維持在一大氣壓。
2. 點火極限 (Ignitability Limits) 會隨點火源的強度而改變，不同於可燃極限 (Flammability Limits)，因後者使用的點火強度遠大於引燃混合氣所需之量。
3. 引燃混合氣的最小點燃能量會隨組成百分比而改變，在混合氣濃度的變化過程中，此種點燃能量會有最小值的出現，稱為最小點火能量 (MIE)。
4. 熄滅距離 (或直徑) d_T ，可視為預防回火 (Flashback) 的管徑。對大部分可反應的混合氣，熄滅距離與最小點火能量間的關係為

$$d_T \approx 2.82 \text{ MIE}^{0.4} \text{ [mm]}$$
5. 惰性氣體添加量：Inert % = 100 % - Fuel % - Air %。
6. 資料來源：NFPA Fire Protection Handbook (1991)、Glassman (1996)。

表 2 氣體擴散性、延展及熱損失等效應對預混火焰的影響

影響 效應 火焰 類型	氣體擴散性		流體的延展		熱損失
	黏滯、質量擴散	路易士數	曲率	應變率	
層流火焰	優先擴散： • 不足量之反應物的質傳大於過量反應物質傳：反應速率加快，火焰溫度隨之提升。	$Le < 1$ • 火焰熄滅是由不完全反應所致。	• 焰面凸向未燃氣（曲率為正）： 可接受更多的燃料但損耗熱能較少，所以局部反應率增加。 • 焰面凹向未燃氣（曲率為負）： 接受較少的燃料但損耗更多熱能，所以局部反應率減少。	• 應變率的增加將導致單位火焰面反應物消耗的增加，火焰傳播速度加快。	• 散失的熱傳量小於反應物因質傳所提供的化學能，火焰溫度增加，導致火焰傳播速度亦加快。
	• 不足量之反應物的質傳小於過量反應物質傳：反應速率減緩，火焰溫度隨之降低。	$Le > 1$ • 火焰可在充分大的延展作用下熄滅。	• 焰面凸向未燃氣（曲率為正）： 接受較少的燃料但損耗更多熱能，所以局部反應率減少。 • 焰面凹向未燃氣（曲率為負）： 可接受更多的燃料但損耗熱能較少，所以局部反應率增加。	• 應變率的增加將會引起單位火焰面反應物消耗的減少，火焰傳播速度減緩。	• 散失的熱傳量大於反應物因質傳所提供的化學能，火焰溫度降低，導致火焰傳播速度減緩。
紊流火焰	紊流會突顯熱氣黏滯性的重要性，導致研究的方向有 • 以雷諾數、卡爾威茲數等將流體的擾動程度作分類。 • 能量的黏滯消散方面，估算渦流尺寸與火焰面的起皺關係，進而求出紊流燃燒速度。	$Le < 1$	• 曲率在紊流火焰面有著近似於零的平均值。 • 反應物消耗速度與曲率間有正的關係存在。	• 應變率在紊流火焰面有著非零的平均值。 • 受應變率影響的紊流火焰速度變大。	• 火焰溫度高於絕熱火焰溫度。
		$Le > 1$	• 曲率在紊流火焰面有著近似於零的平均值。 • 反應物消耗速度與曲率間有負的關係存在。	• 應變率在紊流火焰面有著非零的平均值。 • 受應變率影響的紊流火焰速度變小。	• 火焰溫度小於絕熱火焰溫度。

表 3 氣體傳輸性質

氣體種類	動力黏滯性 $\nu = \mu/\rho$ [cm ² /s]	熱擴散性 $\alpha = \kappa/\rho C_p$ [cm ² /s]	質量擴散性 D_{1-2} [cm ² /s]					
			氧 氣	氫 氣	氮 氣	氬 氣	二氧化碳	水 氣
碳氫燃料-								
甲 烷	0.148	0.194	0.179	0.186	0.672	0.178	0.164	0.276
乙 炔	0.094	0.093	0.155	0.163	0.588	0.150	0.127	0.204
乙 烯	0.085	0.149	0.148	0.155	0.560	0.143	0.121	0.195
乙 烷	0.072	0.123	0.135	0.142	0.513	0.130	0.109	0.178
丙 烷	0.044	0.075	0.104	0.110	0.397	0.099	0.083	0.139
丁 烷	0.031	0.050	0.088	0.094	0.339	0.083	0.070	0.119
戊 烷	0.023	0.037	0.075	0.080	0.289	0.069	0.059	0.099
己 烷	0.018	0.029	0.067	0.073	0.264	0.063	0.053	0.091
輕質氣體-								
氫 氣	1.061	1.625	0.801	0.773	1.508	0.839	0.653	0.984
多原子氣體-								
空 氣	0.131	0.186	0.172	0.172	0.705	0.162	0.146	0.230
氬 氣	0.130	0.182	0.173	-	0.698	0.164	0.147	0.226
氧 氣	0.135	0.186	-	0.173	0.725	0.160	0.142	0.232
二氧化碳	0.079	0.110	0.144	0.148	0.580	0.138	-	0.198
水 氣	0.140	0.150	0.247	0.253	1.237	0.242	0.198	-
惰性氣體-								
氦 氣	1.195	1.824	0.725	0.727	-	0.710	0.580	1.011
氖 氣	0.314	0.482	0.179	0.275	1.038	0.261	0.224	0.385
氬 氣	0.119	0.183	0.162	0.169	0.710	-	0.136	0.220
氪 氣	0.066	0.101	0.131	0.133	0.620	0.121	0.103	0.179

附註 1：粗體數據表示有溫度範圍介於 298~700K 的實驗值佐證

附註 2：氣體擴散性的模擬主要是針對 25℃、一大氣壓，至於對溫度、壓力的變化需修正如下

$$\text{動力黏滯性 } \nu = \nu_u (T/298K)^{dc} (P/1\text{atm})^{-1} \quad [\text{cm}^2/\text{s}]$$

$$\text{熱擴散性 } \alpha = \alpha_u (T/298K)^{dc} (P/1\text{atm})^{-1} \quad [\text{cm}^2/\text{s}]$$

$$\text{質量擴散性 } D_{1-2} = D_{1-2,u} (T/298K)^{dc} (P/1\text{atm})^{-1} \quad [\text{cm}^2/\text{s}]$$

混合氣中含輕質氣體（如氫氣或氦氣），dc 為 1.75；若氣體成份為一般多原子分子，dc 為 2.00。式中的下標 u 表標準的狀況（25℃、一大氣壓）

表 4 不同稀釋氣體下路易士數的極值

氣體混合 狀況 參與反 應的氣體	路易士數, $Le = \alpha / D_{l-oxidant}$									
	氫 氣		氮 氣		氫 氣		二氧化碳		水 氣	
	極貧	極富	極貧	極富	極貧	極富	極貧	極富	極貧	極富
碳氫燃料-										
甲 烷	0.99	1.05	2.58	0.40	1.03	1.09	0.75	1.16	0.62	0.76
乙 炔	1.14	0.58	2.27	0.17	1.21	0.62	0.95	0.70	0.81	0.48
乙 烯	1.19	0.97	2.34	0.28	1.27	1.04	1.00	1.18	0.85	0.80
乙 烷	1.30	0.87	2.56	0.25	1.40	0.94	1.10	1.07	0.94	0.73
丙 烷	1.68	0.69	3.16	0.19	1.84	0.76	1.44	0.86	1.20	0.58
丁 烷	1.97	0.54	3.59	0.14	2.19	0.59	1.71	0.67	1.40	0.44
戊 烷	2.32	0.47	4.20	0.13	2.61	0.53	2.01	0.60	1.67	0.40
己 烷	2.55	0.41	4.57	0.11	2.87	0.46	2.24	0.52	1.84	0.34
輕質氣體-										
氫 氣	0.28	2.09	1.09	1.20	0.26	1.96	0.22	2.38	0.20	1.72
氧化劑-										
氧 氣	1.06	1.08	2.42	0.36	1.13	1.14	0.85	1.25	0.72	0.85
誤差分析					小於 ± 5%					

1. 氧化劑中氧氣與稀釋氣體的比率則依據空氣的組成為例。
2. 極貧表示可燃混合氣性質以氧化劑來主導，極富表示可燃混合氣性質以燃料來主導。

表 5 火焰特性的模擬結果

壓力、溫度以及惰性氣體的影響	
內層溫度-	
$(T_{in} / T_{in,1atm})_{CH_4-Air} = 0.959 + 0.036(P / 1atm)$	$(T_{in} / T_{in,1atm})_{CH_4, 79\%} = 0.959 + 0.036(P / 1atm)$
$(T_{in} / T_{in,1atm})_{C_2H_6-Air} = 0.976 + 0.020(P / 1atm)$	$(T_{in} / T_{in,1atm})_{CH_4, 82\%} = 0.960 + 0.040(P / 1atm)$
$(T_{in} / T_{in,1atm})_{C_3H_8-Air} = 0.973 + 0.022(P / 1atm)$	$(T_{in} / T_{in,1atm})_{CH_4, 84\%} = 0.962 + 0.040(P / 1atm)$
火焰厚度-	
$(\delta_L / \delta_{L,1atm})_{CH_4-Air} = 1.1(P / 1atm)^{-0.60}$	$(\delta_L / \delta_{L,1atm})_{CH_4, 79\%} = 1.00(P / 1atm)^{-0.49}$
$(\delta_L / \delta_{L,1atm})_{C_2H_6-Air} = 1.0(P / 1atm)^{-0.75}$	$(\delta_L / \delta_{L,1atm})_{CH_4, 82\%} = 0.96(P / 1atm)^{-0.26}$
$(\delta_L / \delta_{L,1atm})_{C_3H_8-Air} = 1.0(P / 1atm)^{-0.70}$	$(\delta_L / \delta_{L,1atm})_{CH_4, 84\%} = 0.96(P / 1atm)^{-0.12}$
Ze (Zel'dovich Number)-	
$(Ze / Ze_{1atm})_{CH_4-Air} = 1.01(P / 1atm)^{0.035}$	$(Ze / Ze_{1atm})_{CH_4, 79\%} = 0.97 + 0.03(P / 1atm)$
$(Ze / Ze_{1atm})_{C_2H_6-Air} = 1.005(P / 1atm)^{0.015}$	$(Ze / Ze_{1atm})_{CH_4, 82\%} = 0.94 + 0.06(P / 1atm)$
$(Ze / Ze_{1atm})_{C_3H_8-Air} = 1.005(P / 1atm)^{0.020}$	$(Ze / Ze_{1atm})_{CH_4, 84\%} = 0.90 + 0.10(P / 1atm)$
活化能溫度-	
$(T_a / T_{a,1atm})_{CH_4-Air} = 0.94(P / 1atm)^{-0.22}$	$(T_a / T_{a,1atm})_{CH_4, 79\%} = 1.125 - 0.14(P / 1atm)$
$(T_a / T_{a,1atm})_{C_2H_6-Air} = 0.98(P / 1atm)^{-0.13}$	$(T_a / T_{a,1atm})_{CH_4, 82\%} = 1.250 - 0.26(P / 1atm)$
$(T_a / T_{a,1atm})_{C_3H_8-Air} = 0.97(P / 1atm)^{-0.15}$	$(T_a / T_{a,1atm})_{CH_4, 84\%} = 1.380 - 0.40(P / 1atm)$
丹可數-	
$(Da / Da_{1atm})_{CH_4-Air} = 0.65(P / 1atm)^{-2.2}$	$(Da / Da_{1atm})_{CH_4, 79\%} = 1.1(P / 1atm)^{-2.7}$
$(Da / Da_{1atm})_{C_2H_6-Air} = 0.85(P / 1atm)^{-1.5}$	$(Da / Da_{1atm})_{CH_4, 82\%} = 1.5(P / 1atm)^{-6.5}$
$(Da / Da_{1atm})_{C_3H_8-Air} = 0.85(P / 1atm)^{-2.0}$	$(Da / Da_{1atm})_{CH_4, 84\%} = 2.2(P / 1atm)^{-13}$
能量參數-	
$(E / E_{298K})_{CH_4-Air} = 1.002(T_u / 298K)^{0.21}$	$(E / R)_{CH_4-Air} = 0.0637 T_f$
$(E / E_{298K})_{C_2H_6-Air} = 0.996(T_u / 298K)^{0.13}$	$(E / R)_{C_2H_6-Air} = 0.0676 T_f$
$(E / E_{298K})_{C_3H_8-Air} = 0.993(T_u / 298K)^{0.14}$	$(E / R)_{C_3H_8-Air} = 0.0720 T_f$

1. 下標 79 %、82 % 以及 84 % 為氧化劑中氮氣的劑量， $N_2 / (O_2 + N_2)$ 。
2. 符號 ψ 定義為氧化劑中氧氣的劑量， $O_2 / (O_2 + Dilute)$ 。符號 Φ 定義為甲烷-空氣混合氣中燃料的劑量， $(vol - vol_{lean}) / (vol_{stoich} - vol_{lean})$ 。
3. 烷類-空氣火焰的數值模擬適用範圍 0.25~3.0 大氣壓。燃燒速度受氧氣劑量影響的模擬範圍從 0.21 (空氣中的含量) 到 1.0 (純氧)。

表 6 火焰傳播速度的模擬結果

壓力、溫度以及惰性氣體的影響	
壓力效應-	
$(S_L^0 / S_{L,1atm}^0)_{CH_4-Air} = 0.91(P / 1atm)^{-0.39}$	$(S_L^0 / S_{L,1atm}^0)_{CH_4, 79\%} = 0.91(P / 1atm)^{-0.39}$
$(S_L^0 / S_{L,1atm}^0)_{C_2H_6-Air} = 0.96(P / 1atm)^{-0.22}$	$(S_L^0 / S_{L,1atm}^0)_{CH_4, 82\%} = 1.05(P / 1atm)^{-0.76}$
$(S_L^0 / S_{L,1atm}^0)_{C_3H_8-Air} = 0.96(P / 1atm)^{-0.26}$	$(S_L^0 / S_{L,1atm}^0)_{CH_4, 84\%} = 1.05(P / 1atm)^{-0.90}$
火焰溫度-	
$(S_L / S_{L,min})_{H_2-Air} = 3.3(T_f / 630K)^{2.5}$	$(S_L / S_{L,min})_{C_3H_8-Air} = 1.62(T_f / 1625K)^{7.7}$
$(S_L / S_{L,min})_{CH_4-Air} = 0.79(T_f / 1479K)^{7.7}$	
$(S_L / S_{L,min})_{C_2H_6-Air} = 1.09(T_f / 1543K)^{7.7}$	
預熱未燃氣-	
$(S_L / S_{L,298K})_{CH_4-Air} = (T_u / 298K)^{1.95}$	
$(S_L / S_{L,298K})_{C_2H_6-Air} = (T_u / 298K)^{1.28}$	
$(S_L / S_{L,298K})_{C_3H_8-Air} = (T_u / 298K)^{1.42}$	
預熱未燃氣、氧化劑的劑量-	
$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{C_2H_6-O_2-N_2, 311K} = -1.3 + 11\psi$	$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{C_8H_{18}-O_2-N_2, 311K} = -1.5 + 12\psi$
$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{C_2H_6-O_2-N_2, 422K} = -1.1 + 10\psi$	$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{C_8H_{18}-O_2-N_2, 422K} = -1.2 + 10.5\psi$
$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{C_3H_8-O_2-N_2, 311K} = -2.0 + 14.2\psi$	
$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{C_3H_8-O_2-N_2, 422K} = -1.5 + 12\psi$	
稀釋氣體、氧化劑的劑量-	
$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{H_2-O_2-N_2} = -0.94 + 6\psi + 18\psi^2$	$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{C_2H_2-O_2-N_2} = -1.16 + 10.3\psi$
$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{H_2-O_2-Argon} = 0.012 + 3.3\psi + 5.5\psi^2$	$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{C_2H_2-O_2-Argon} = -0.75 + 8.9\psi - 2.6\psi^2$
$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{H_2-O_2-He} = -0.82 + 8.8\psi - 1.9\psi^2$	$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{C_2H_2-O_2-He} = -0.75 + 9.3\psi - 5.6\psi^2$
$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{CH_4-O_2-N_2} = -14 + 67\psi$	$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{C_3H_8-O_2-N_2} = -2.5 + 17.3\psi - 5.4\psi^2$
$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{CH_4-O_2-Argon} = -1.25 + 11.5\psi$	$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{C_3H_8-O_2-Argon} = -0.86 + 10\psi - 3.9\psi^2$
$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{CH_4-O_2-He} = -2.4 + 18.8\psi - 10.4\psi^2$	$(S_L / S_{L,\psi=0.21})_{C_3H_8-O_2-He} = -0.73 + 10.1\psi - 6.1\psi^2$
燃料的劑量-	
$(S_L / S_{L,st})_{CH_4-O_2-He} = 0.07 + 1.9\Phi - \Phi^2$	
$(S_L / S_{L,st})_{CH_4-O_2-Argon} = 0.08 + 1.5\Phi - 0.6\Phi^2$	
$(S_L / S_{L,st})_{CH_4-O_2-N_2} = 0.12 + 0.9\Phi$	

1. 下標 79%、82%以及 84%為氧化劑中氮氣的劑量， $N_2 / (O_2 + N_2)$ 。
2. 符號 ψ 定義為氧化劑中氧氣的劑量， $O_2 / (O_2 + Dilute)$ 。符號 Φ 定義為甲烷-空氣混合氣中燃料的劑量， $(vol - vol_{lean}) / (vol_{stoich} - vol_{lean})$ 。
3. 燒類-空氣火焰的數值模擬適用範圍 0.25~3.0 大氣壓。燃燒速度受氧氣劑量影響的模擬範圍從 0.21（空氣中的含量）到 1.0（純氧）。

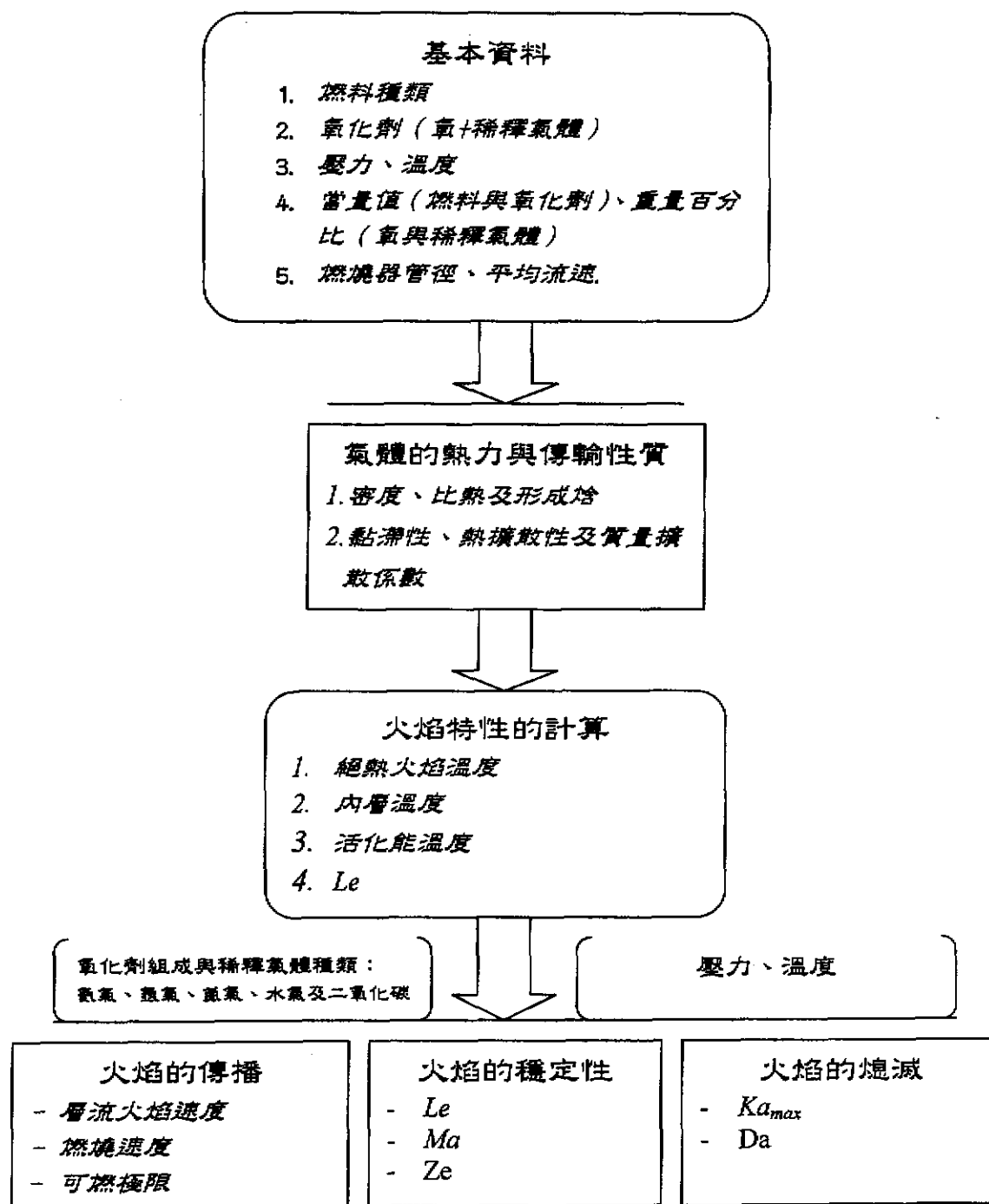


圖 1-1 探討壓力、溫度以及惰性氣體對火焰行為的影響

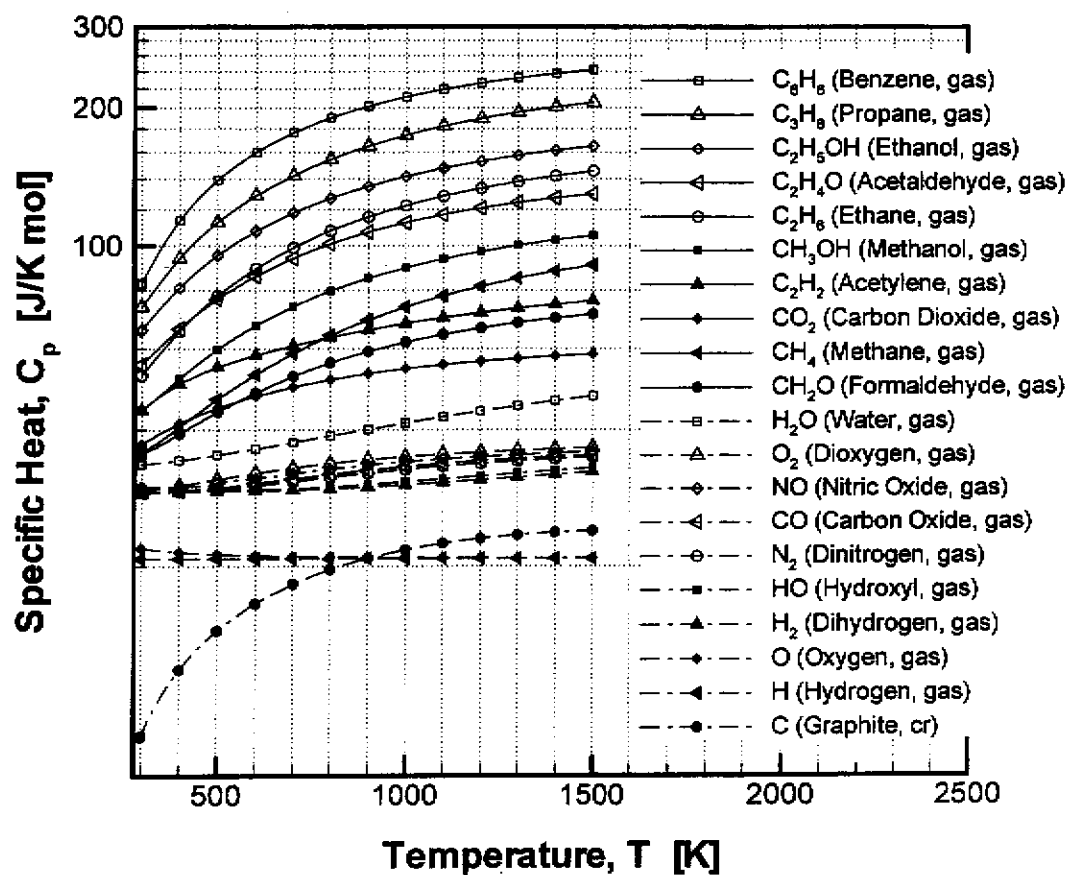


圖 1-2 氣體之定壓比熱 C_p 與溫度間的變化

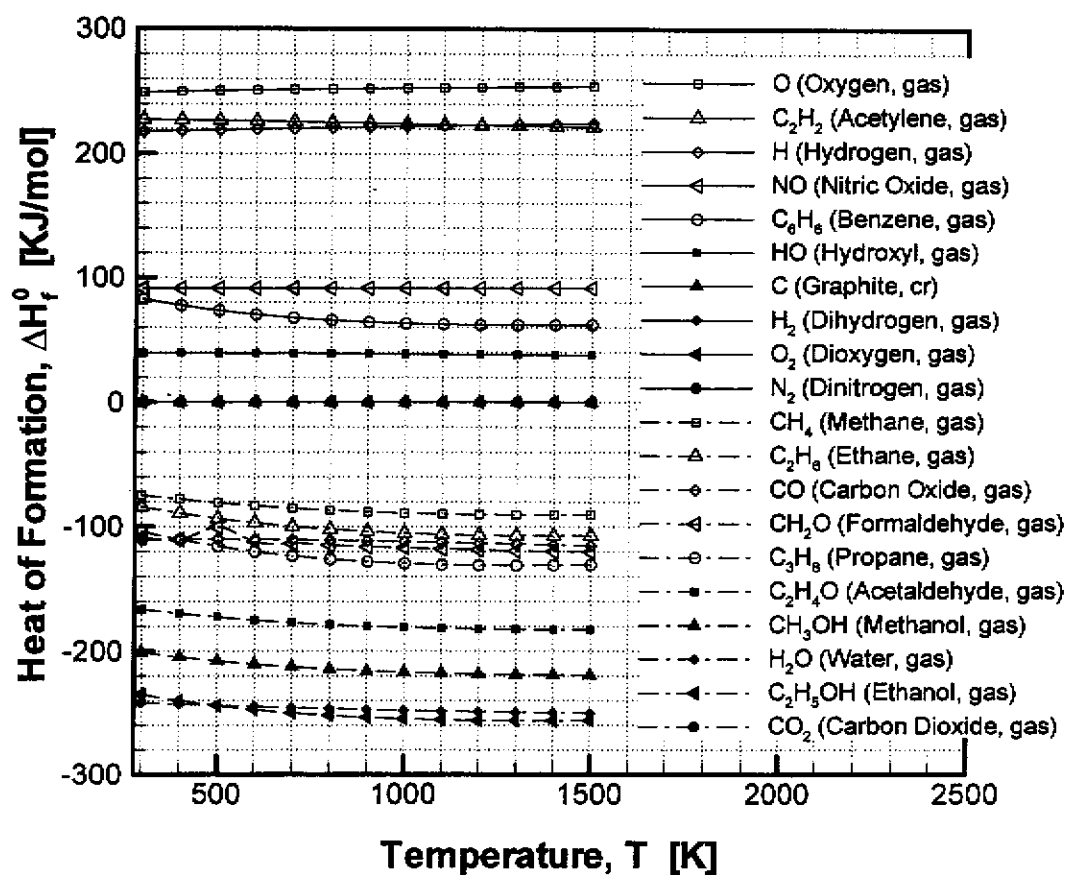


圖 1-3 氣體之生成熱 ΔH_f^0 與溫度間的變化

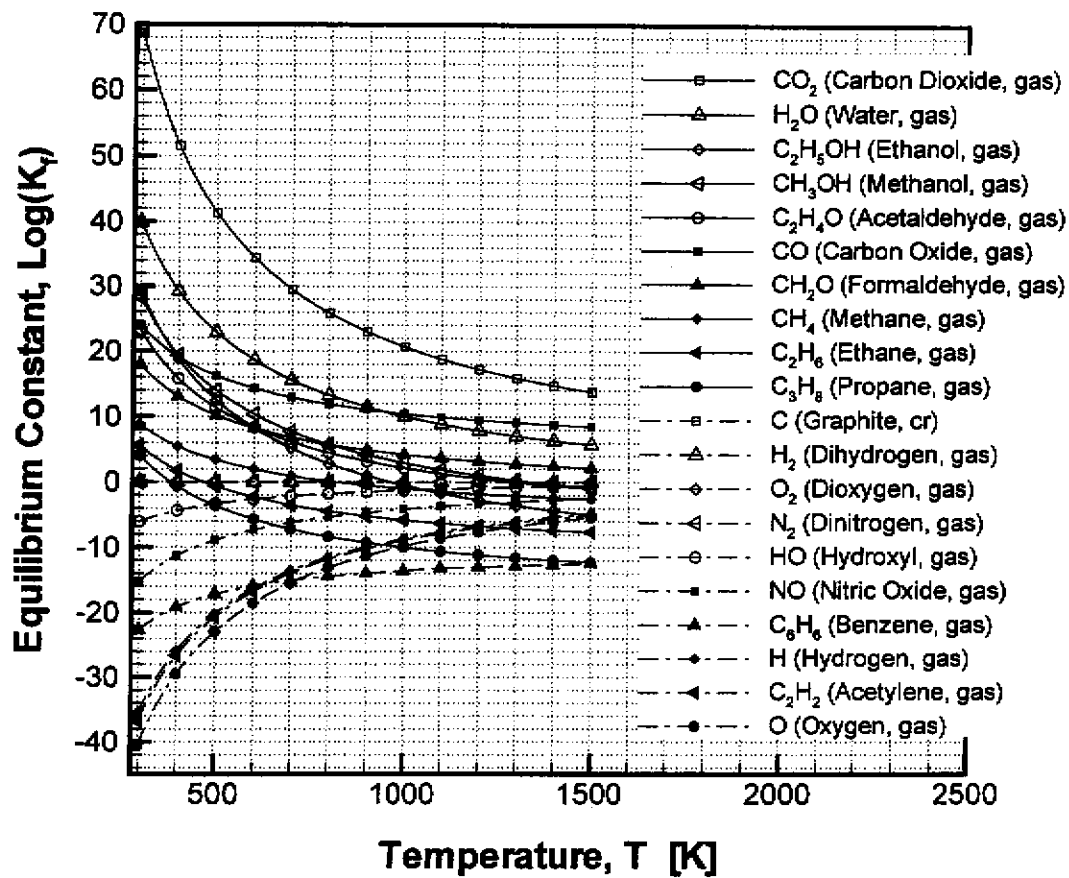


圖 1-4 氣體之平衡常數 $\text{Log}(K_f)$ 與溫度間的變化

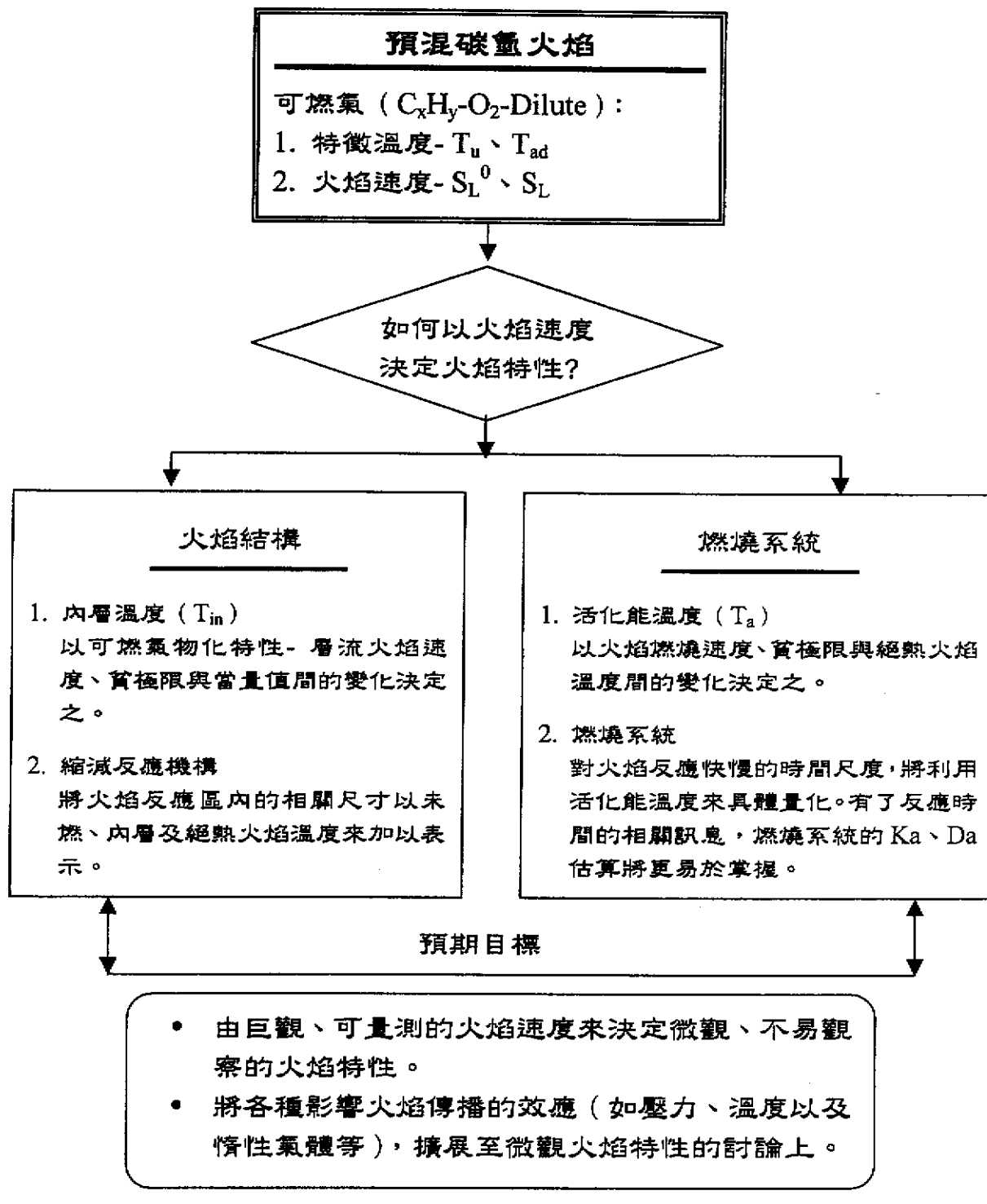


圖 1-5 研究流程

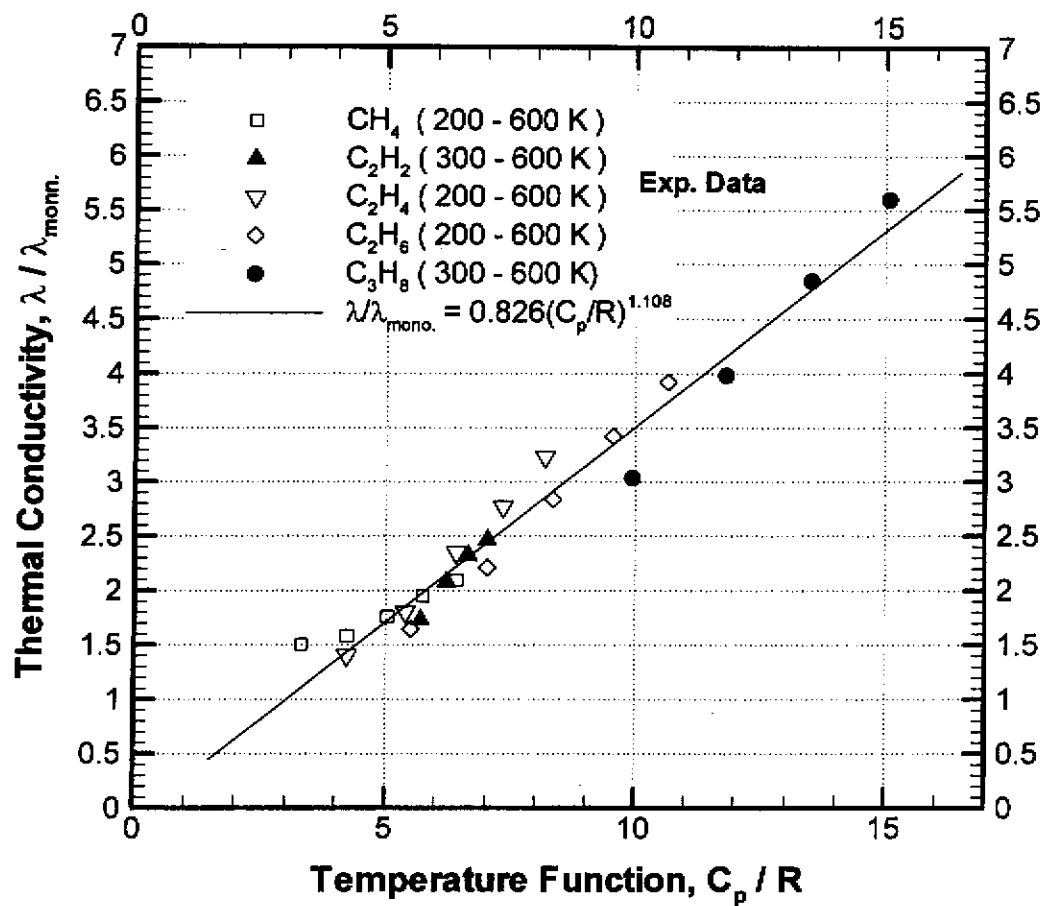


圖 2-1 碳氫燃料的熱傳導與溫度間的變化

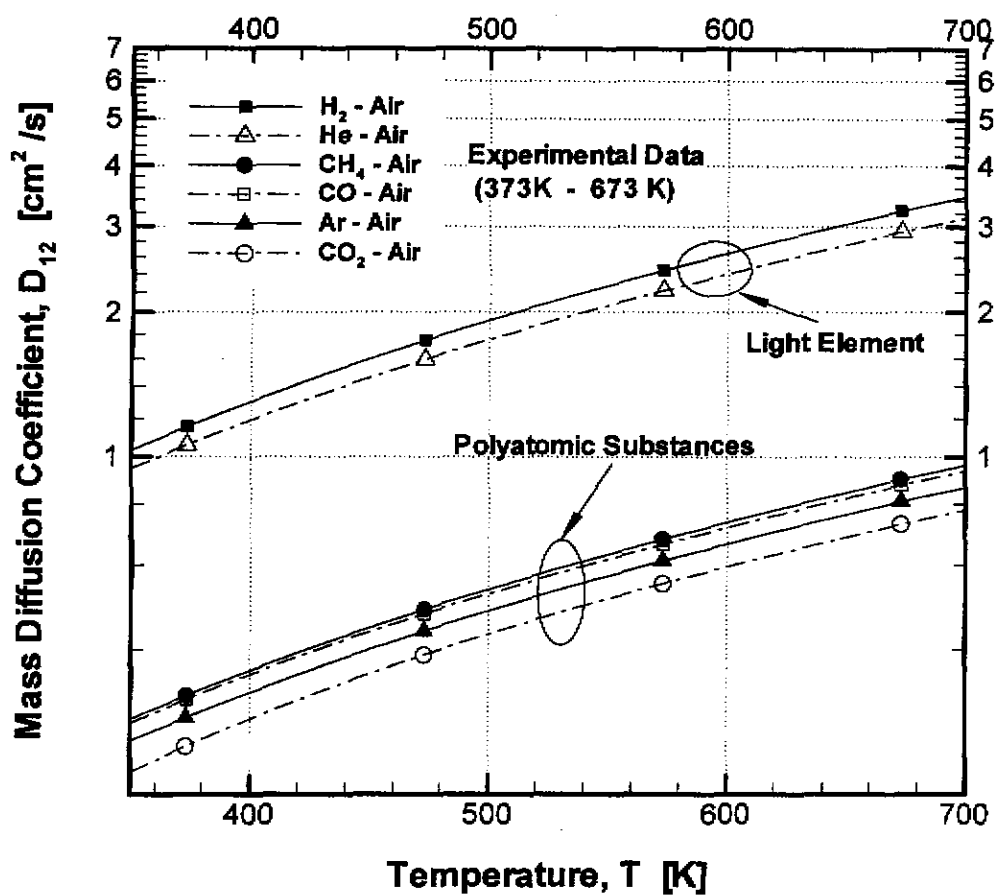


圖 2-2 不同氣體的質量擴散性與溫度間的變化

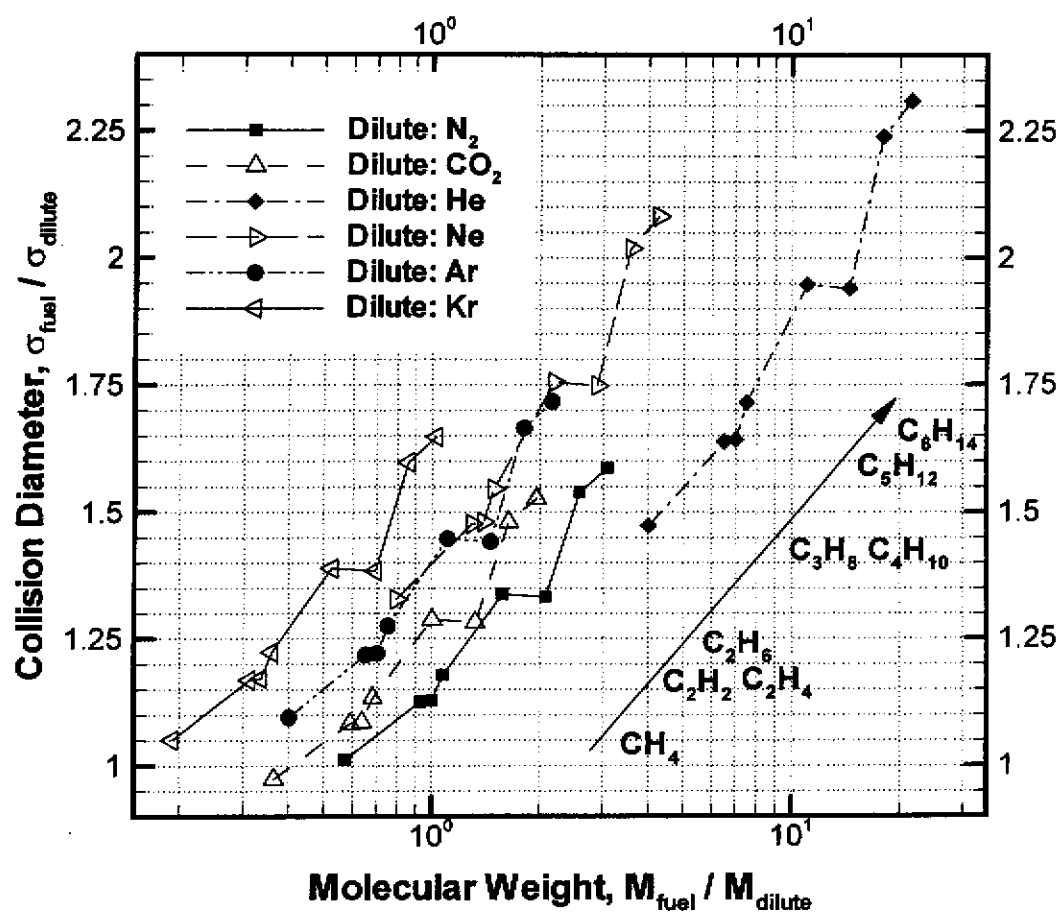


圖 2-3 碳氫燃料在不同氣體的稀釋下分子碰撞直徑與分子量間的變化

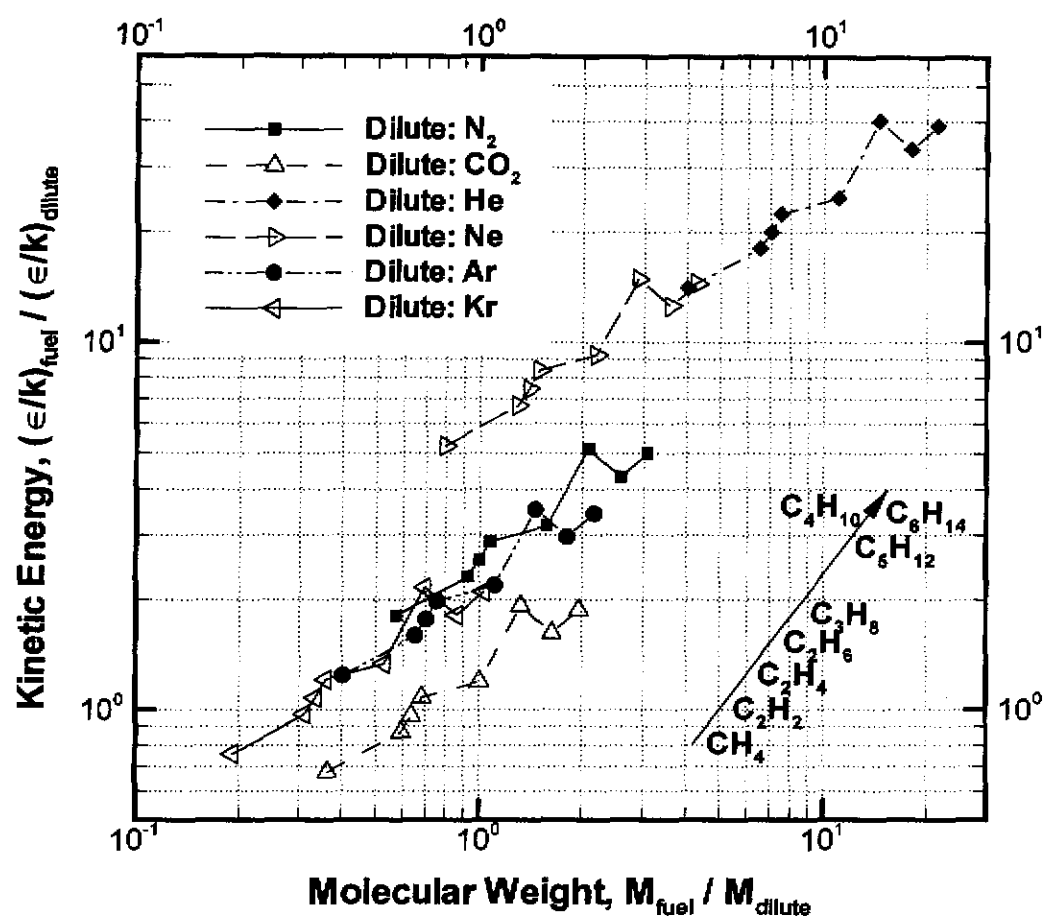


圖 2-4 碳氫燃料在不同氣體的稀釋下平均動能與分子量間的變化

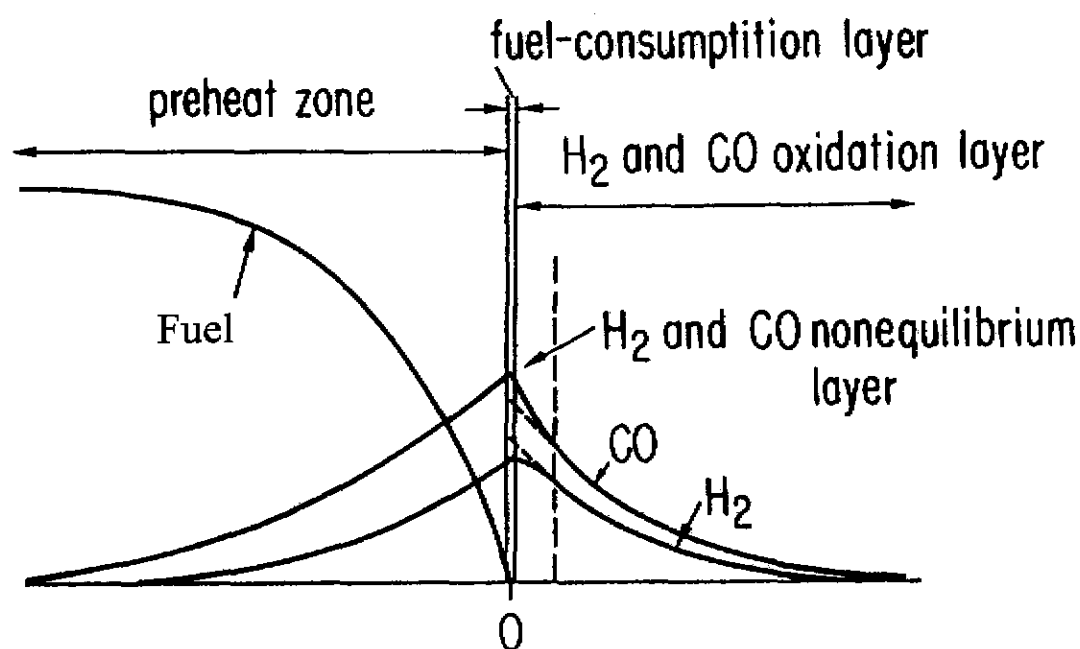
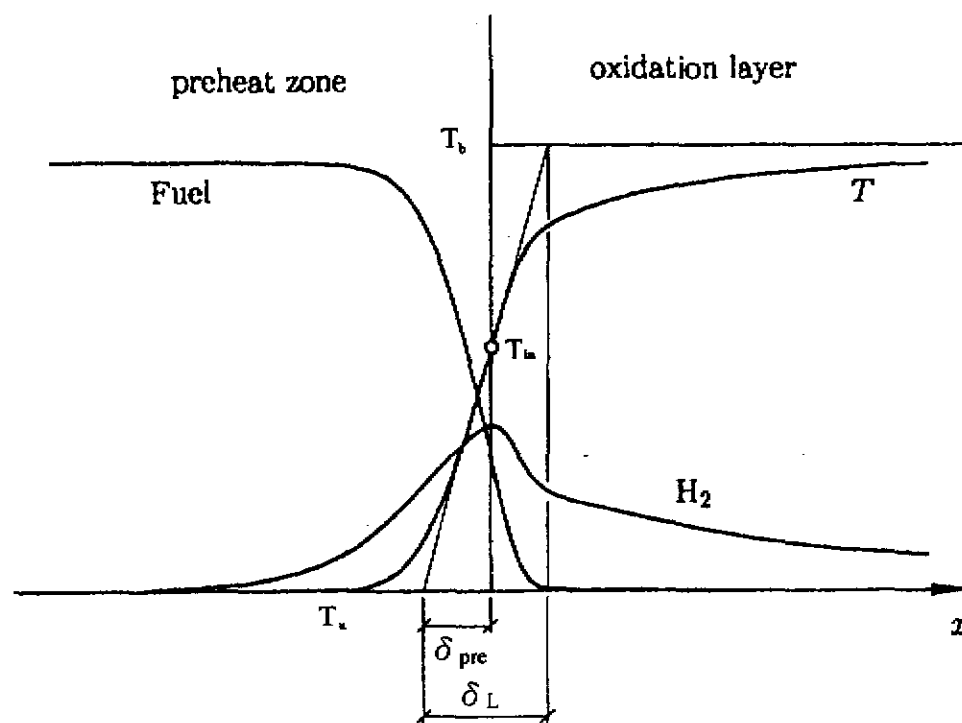


圖 3-1 火焰結構示意圖 (Peters & Williams, 1987 ;
Göttgens, 1992)

火焰結構 -

特徵火焰溫度：

T_{ad} - 由 CEC、CEA 程式求得

T_{in} - 由 S_L^0 、貧極限與當量值變化來決定

T_a - 由 S_L 、貧極限與絕熱火焰溫度變化來決定



火焰尺寸：

火焰厚度- $\delta_L = (T_{ad} - T_u) / (T_{in} - T_u) [\lambda / (\rho_u C_p) S_L^0]_{in}$

Zel'dovich Number- $Ze = 4(T_{ad} - T_u) / (T_{ad} - T_{in})$

火焰傳播 -

火焰燃燒速度(S_L)：

採用變化的傳輸性質，引進縮減反應機構的概念

$$S_L / S_{L,min} = Le^{1/2} Y_{F,u}^{1/2} \exp(-E/2RT_{in}) (\rho_{in} / \rho_b) Ze^{-2}$$

其中 $S_{L,min}$ 為可燃氣濃度降至貧極限時的臨界速度值

壓力、稀釋
氣體效應



內層溫度 T_{in}

二個模擬參數

溫度、稀釋
氣體效應



能量參數 E

圖 3-2 漸近分析火焰結構與傳播行為

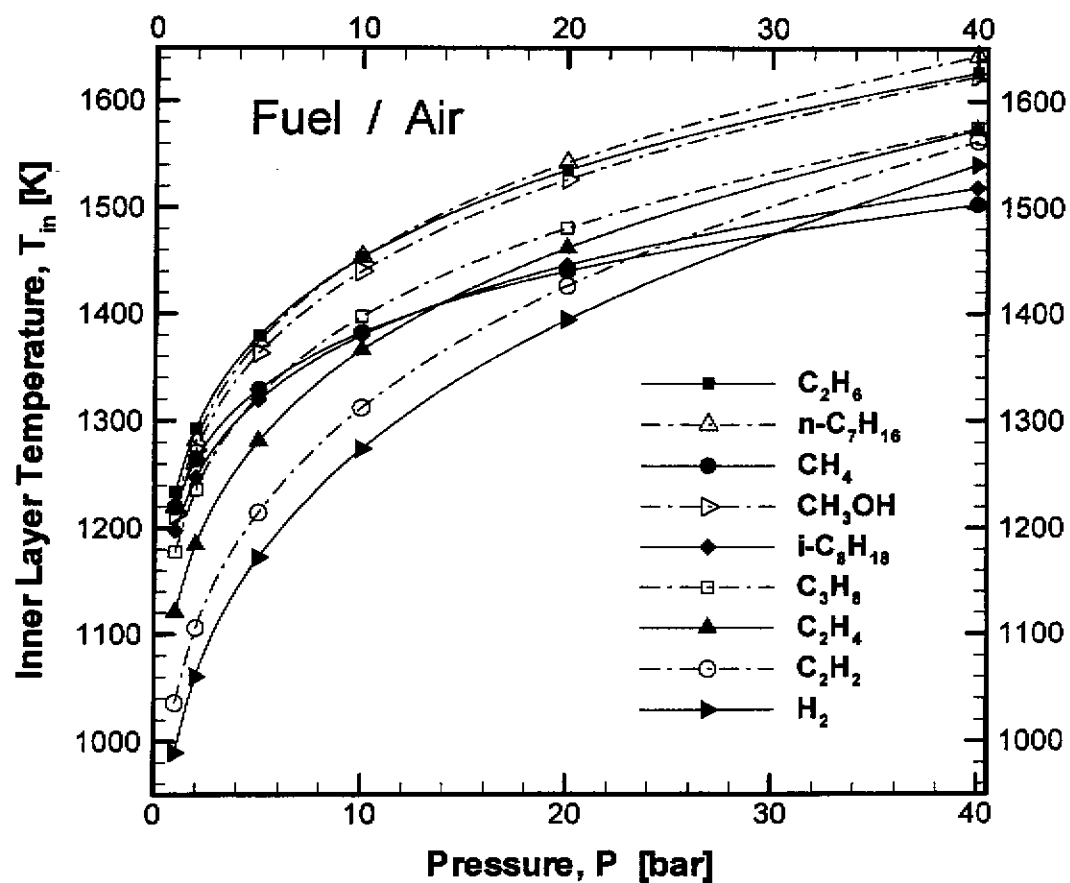


圖 3-3 不同燃料之內層溫度與壓力間的變化 (圖上符號 : Göttgens, 1992; Müller, 1997)

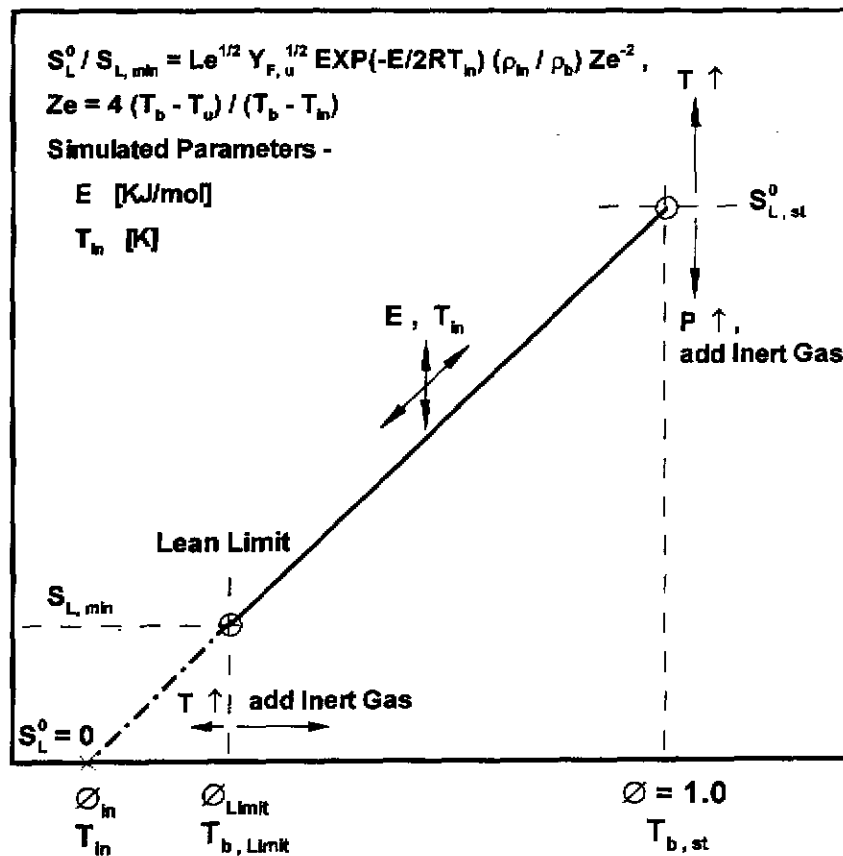


圖 3-4 解析火焰傳播的示意圖

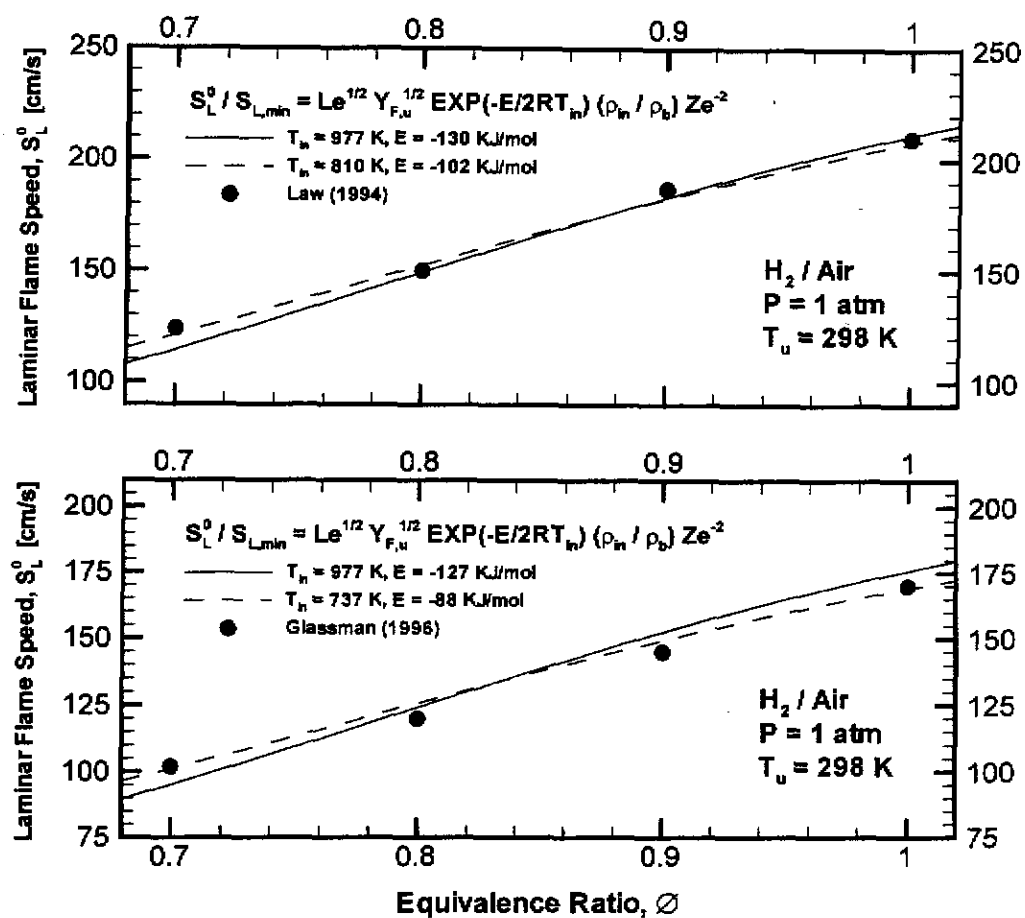


圖 3-5 氫氣-空氣火焰的層流火焰速度計算值與實驗值 (Law, 1994; Glassman, 1996) 之比較

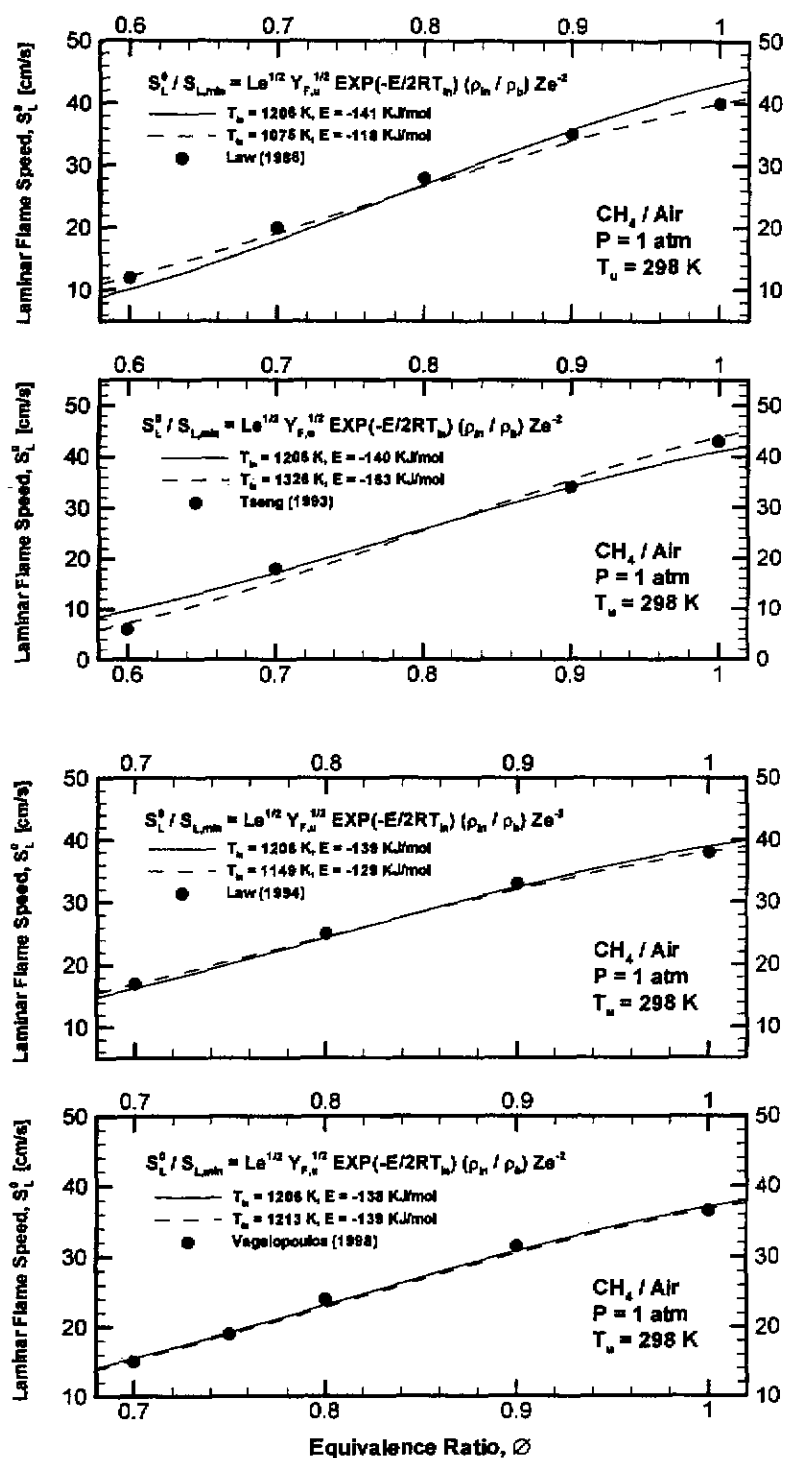


圖 3-6 甲烷-空氣火焰的層流火焰速度計算值與實驗值 (Law, 1986, 1994; Tseng, 1993; Vagelopoulos, 1998) 之比較

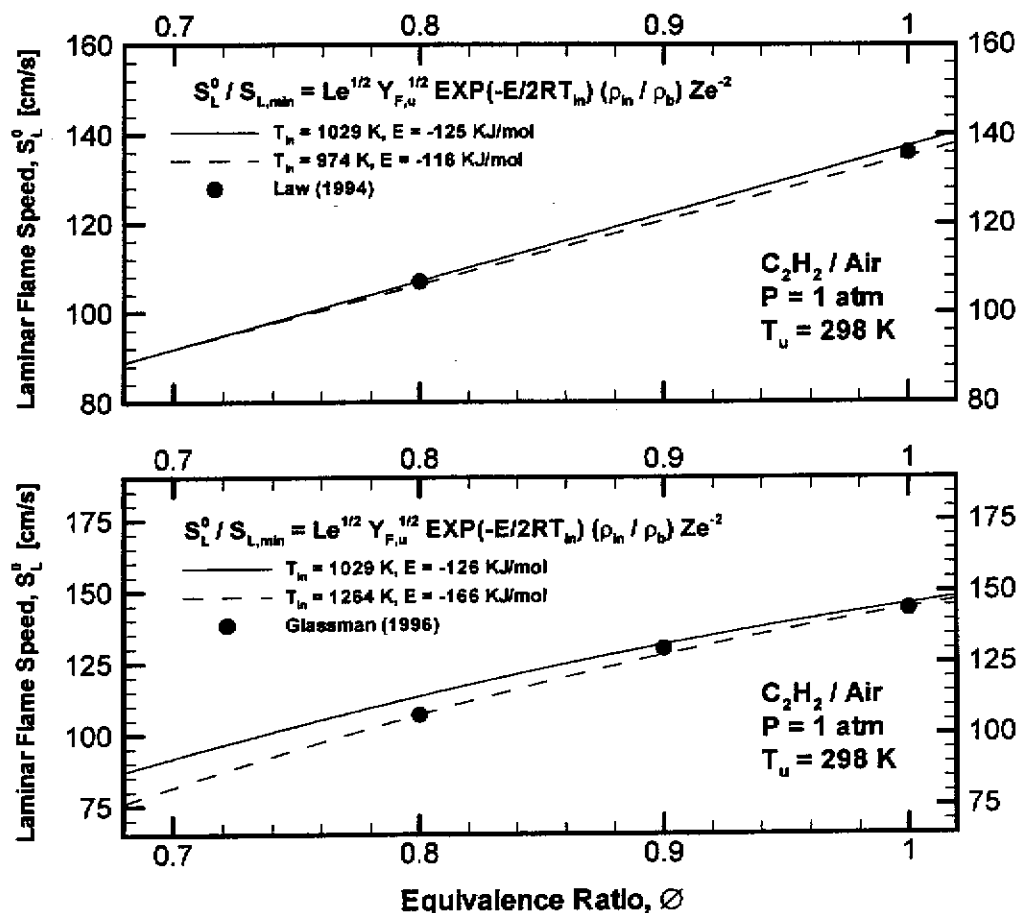


圖 3-7 乙炔-空氣火焰的層流火焰速度計算值與實驗值 (Law, 1994; Glassman, 1996) 之比較

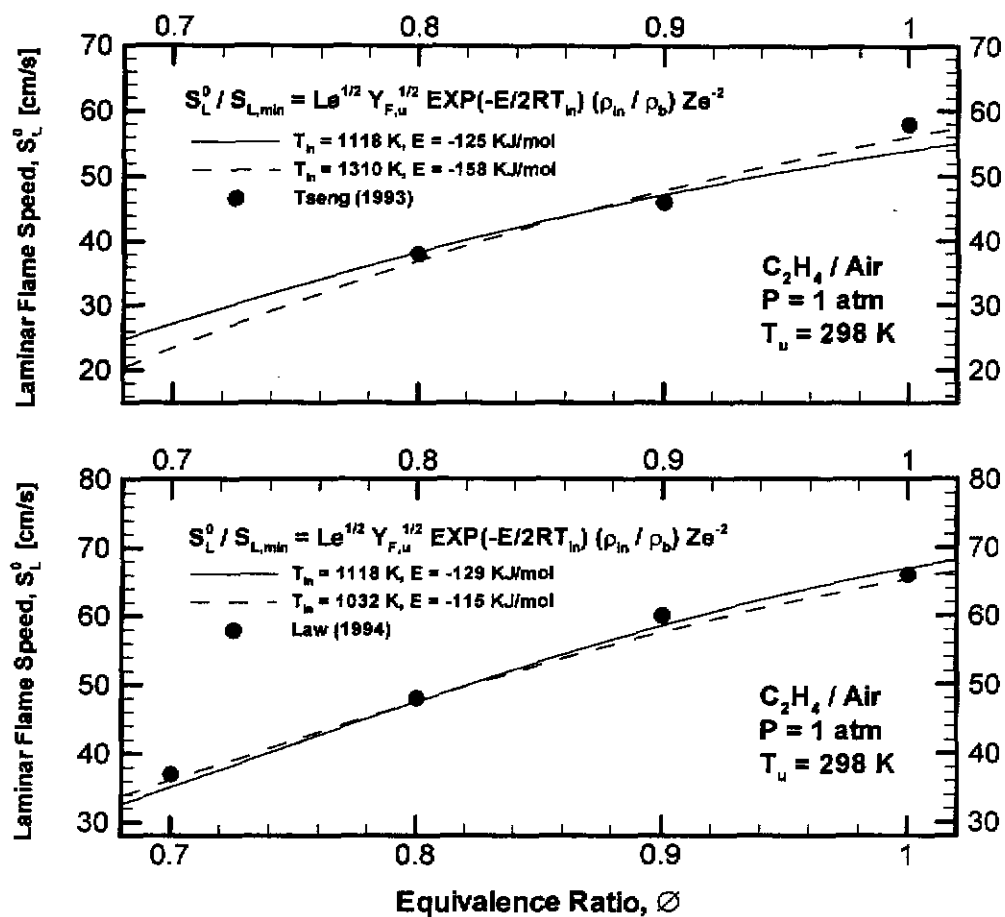


圖 3-8 乙烯-空氣火焰的層流火焰速度計算值與實驗值 (Tseng, 1993; Law, 1994) 之比較

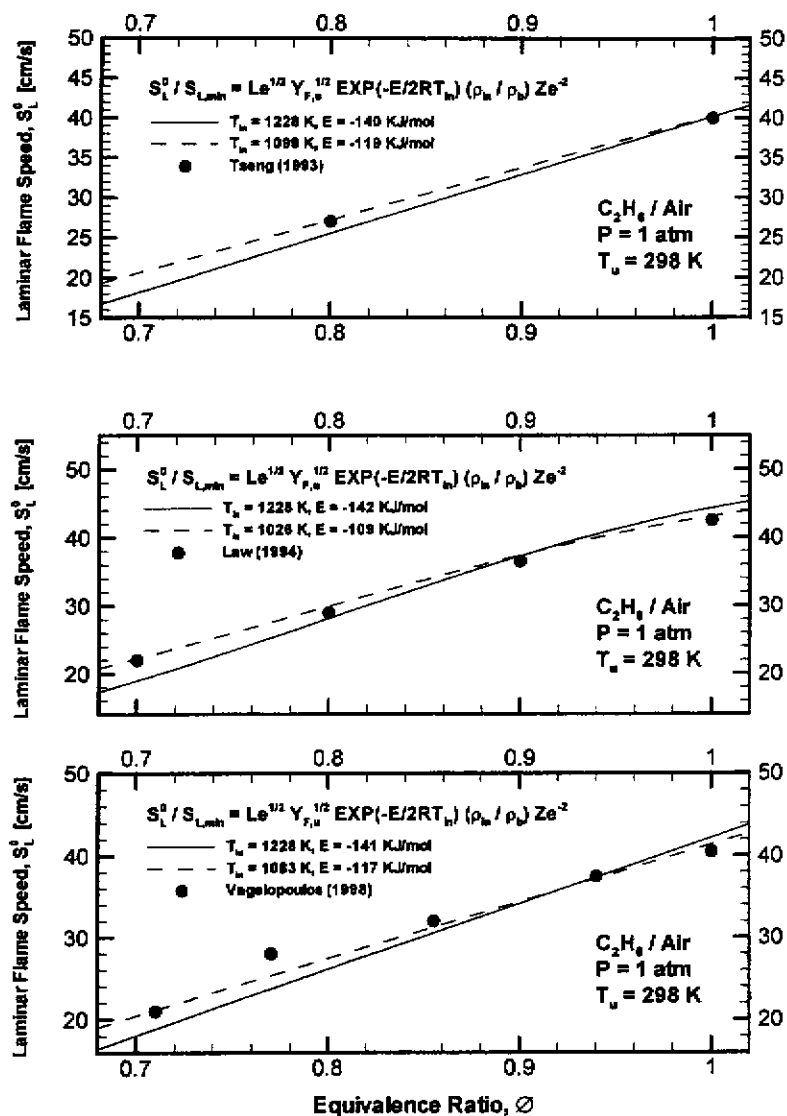


圖 3-9 乙烷-空氣火焰的層流火焰速度計算值與實驗值 (Tseng, 1993; Law, 1994; Vagelopoulos, 1998) 之比較

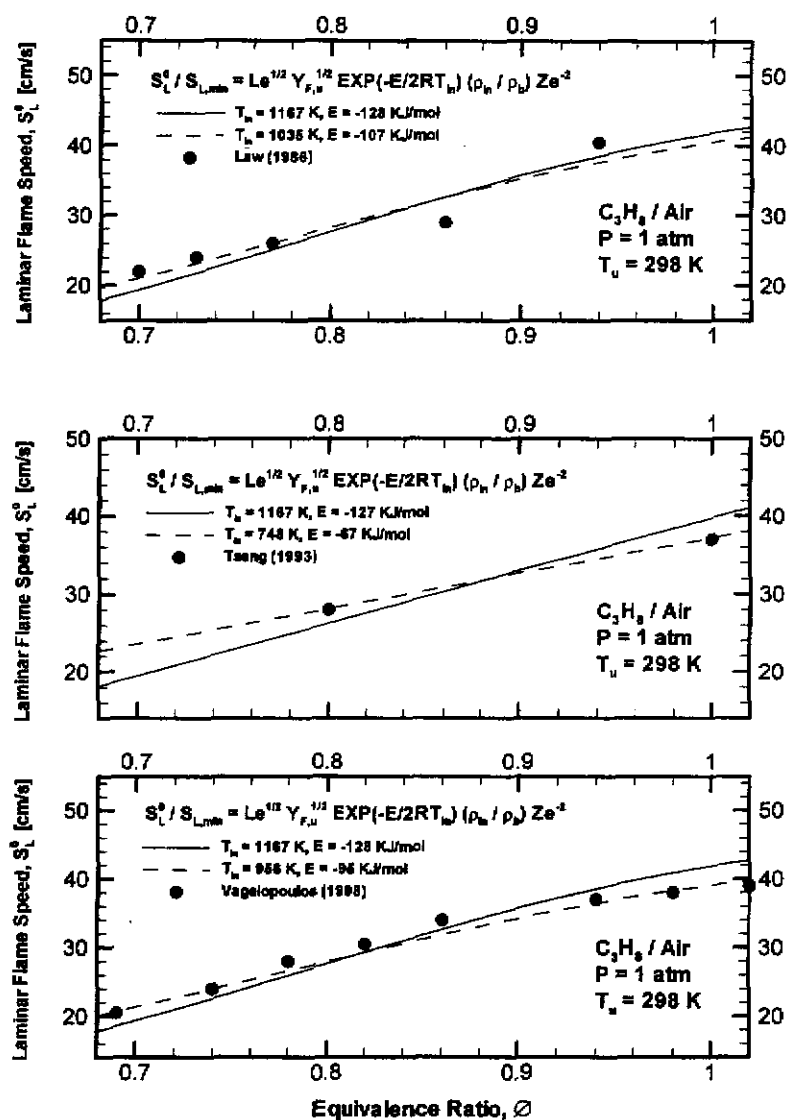


圖 3-10 丙烷-空氣火焰的層流火焰速度計算值與實驗值（Law, 1986; Tseng, 1993; Vagelopoulos, 1998）之比較

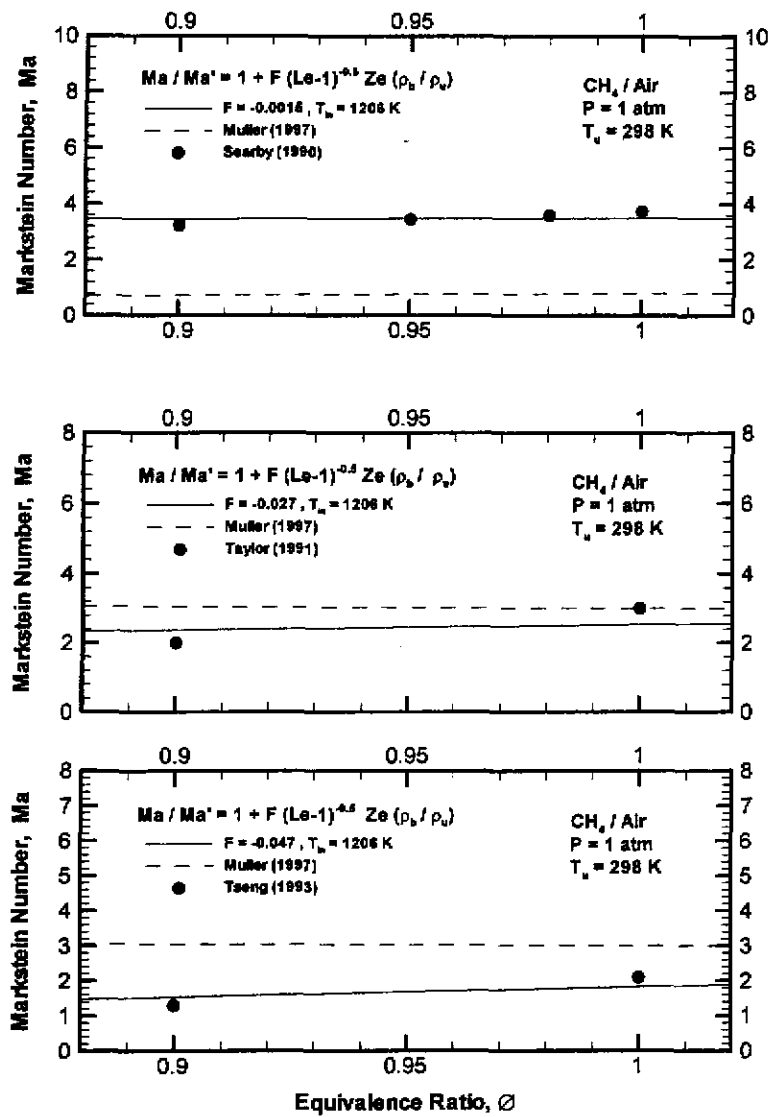


圖 3-11 甲烷-空氣火焰的 Ma 計算值與實驗值 (Searby, 1990; Taylor, 1991; Tseng, 1993) 之比較

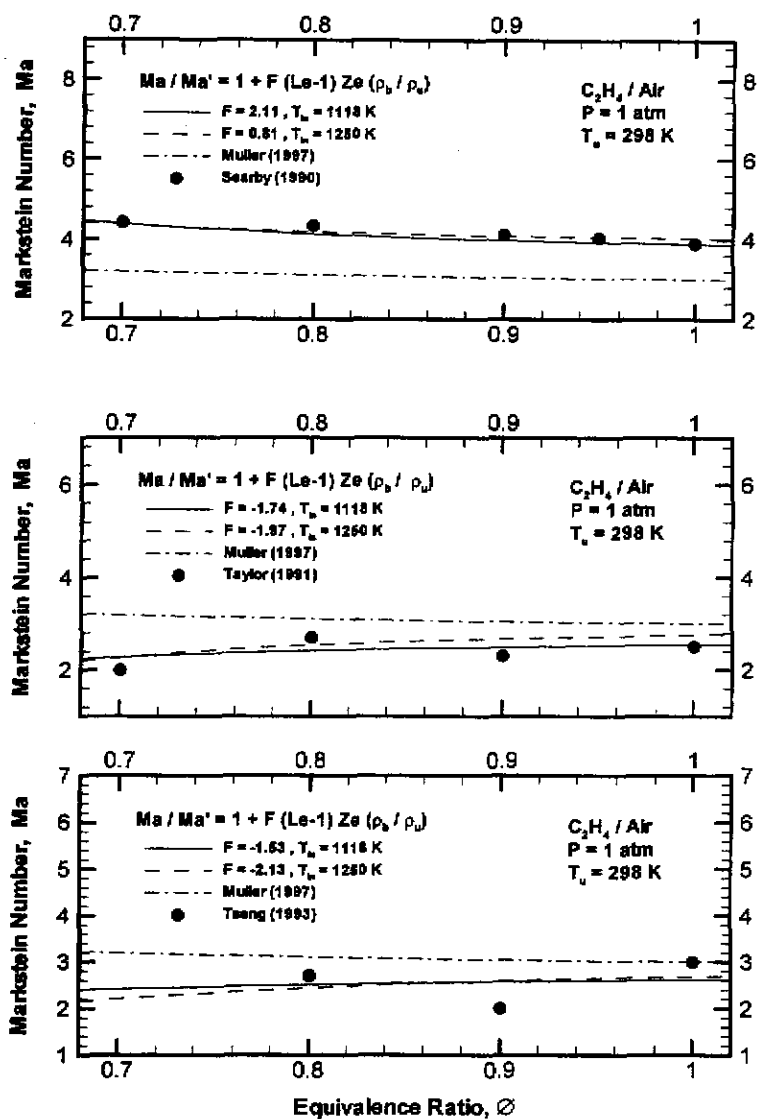


圖 3-12 乙炔-空氣火焰的 Ma 計算值與實驗值 (Searby, 1990; Taylor, 1991; Tseng, 1993) 之比較

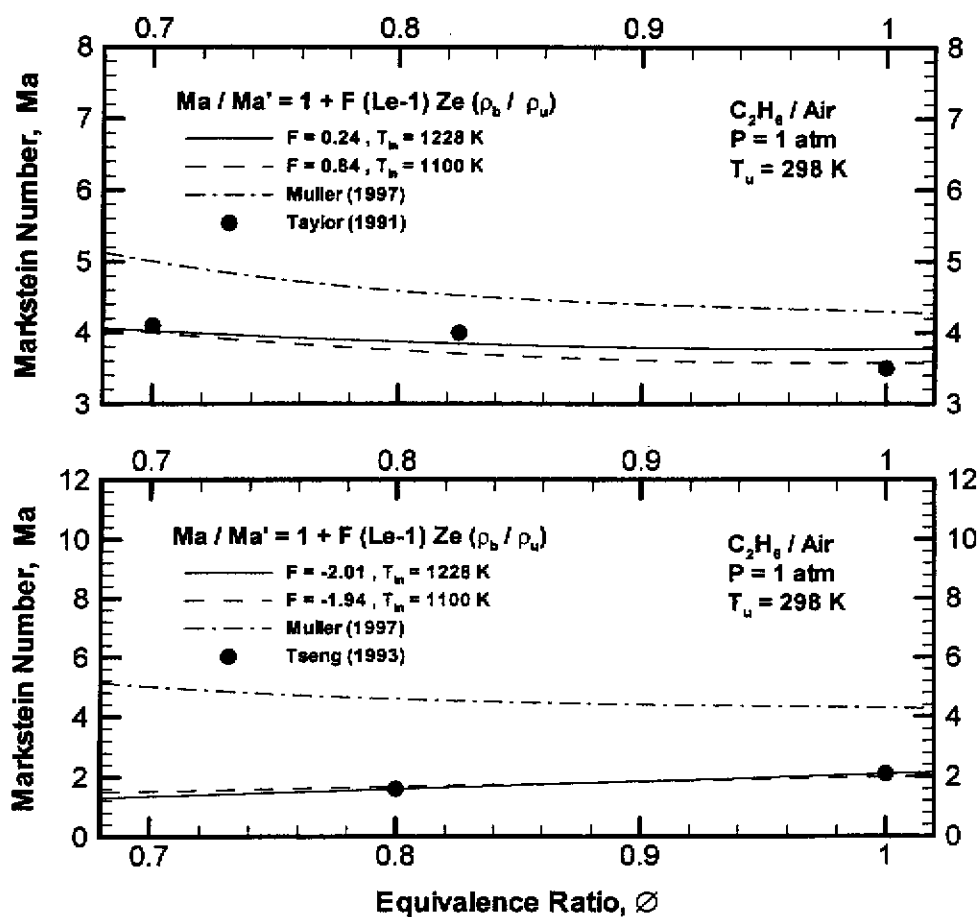


圖 3-13 乙烷-空氣火焰的 Ma 計算值與實驗值 (Taylor, 1991; Tseng, 1993) 之比較

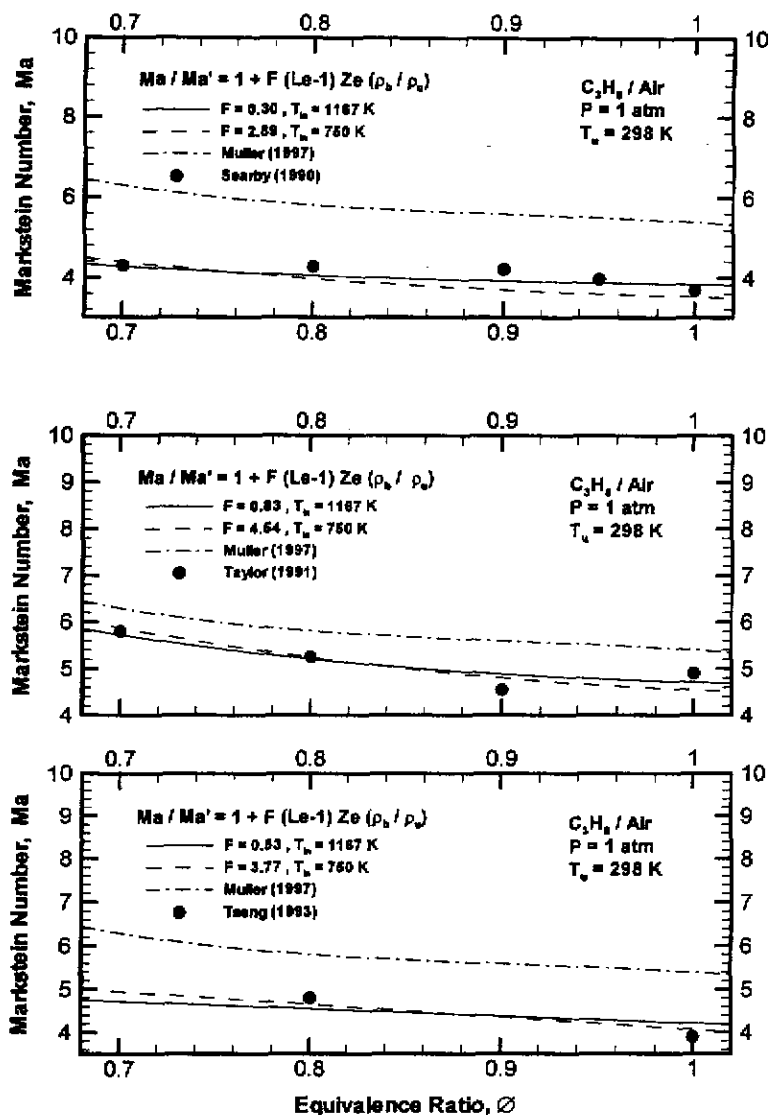


圖 3-14 丙烷-空氣火焰的 Ma 計算值與實驗值 (Searby, 1990; Taylor, 1991; Tseng, 1993) 之比較

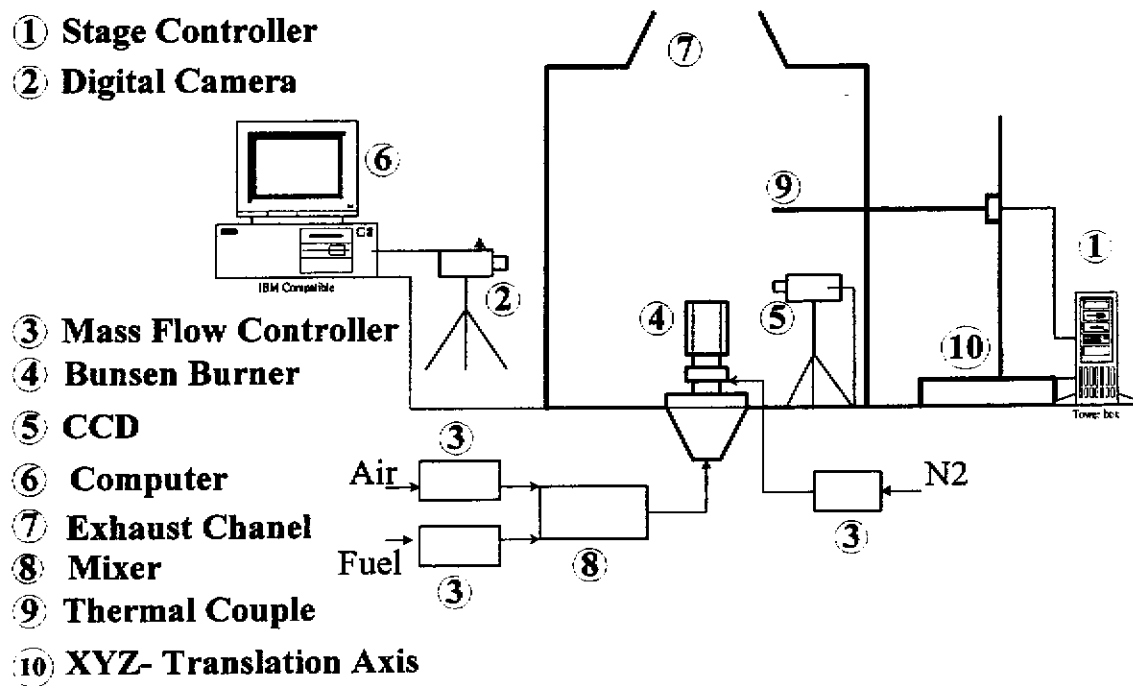
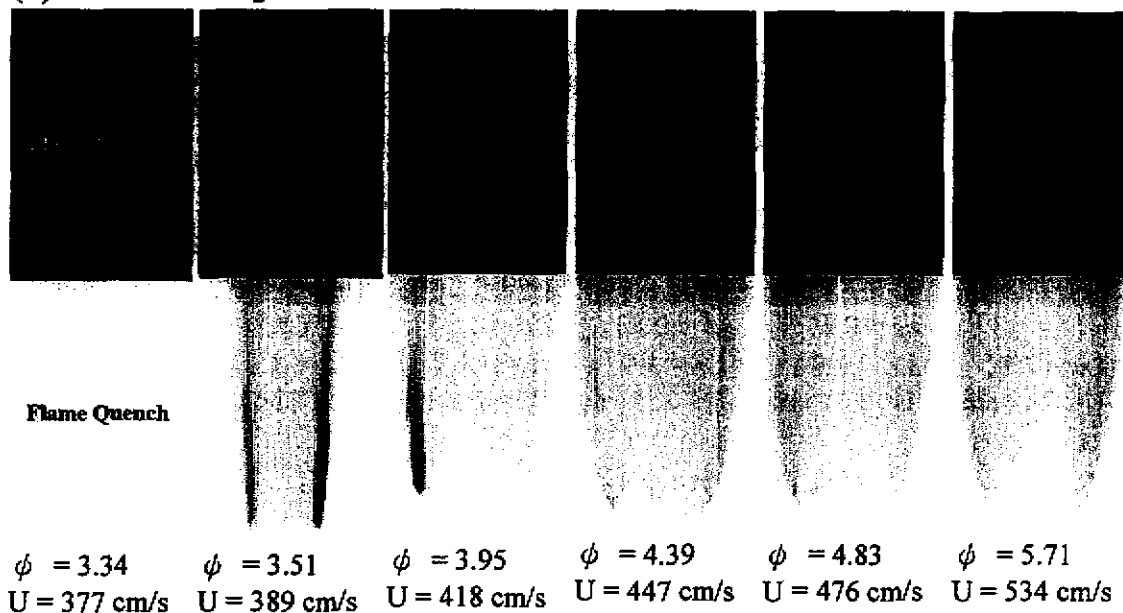


圖 4-1 實驗設備佈置圖

(a) 可燃氣： H_2 / Air



(b) 可燃氣： C_3H_8 / Air

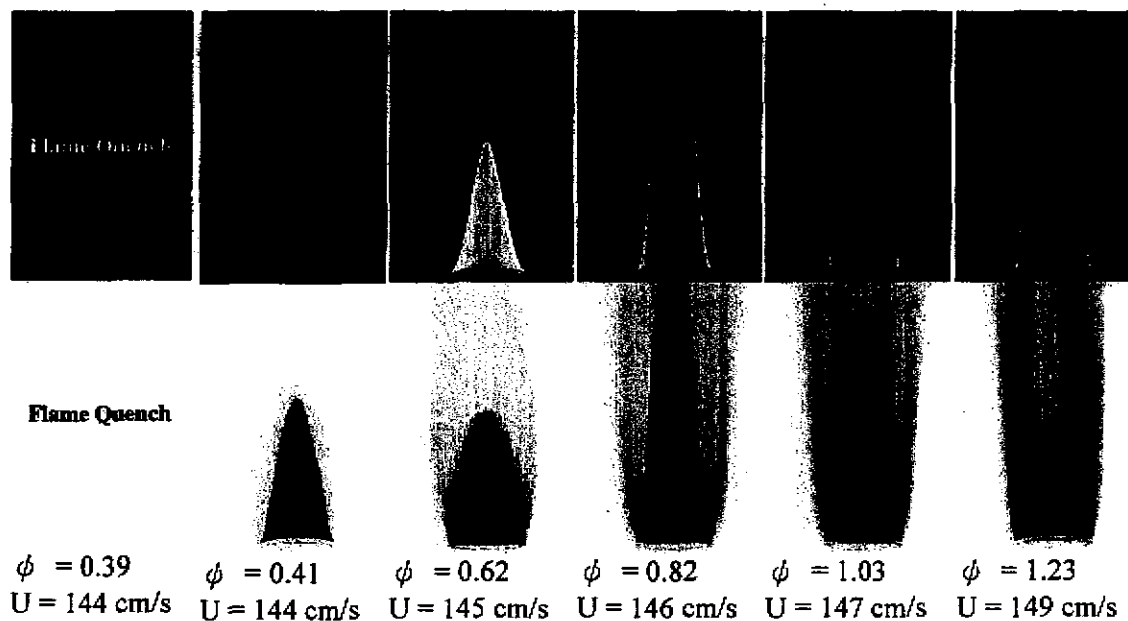
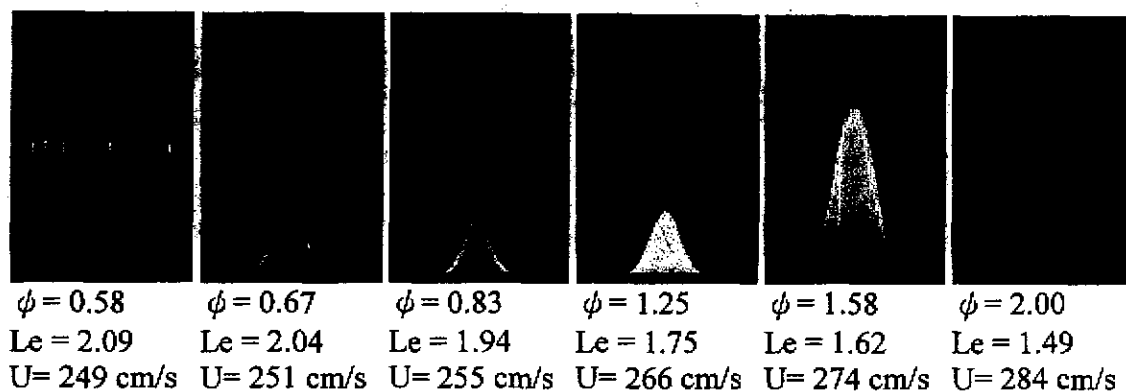
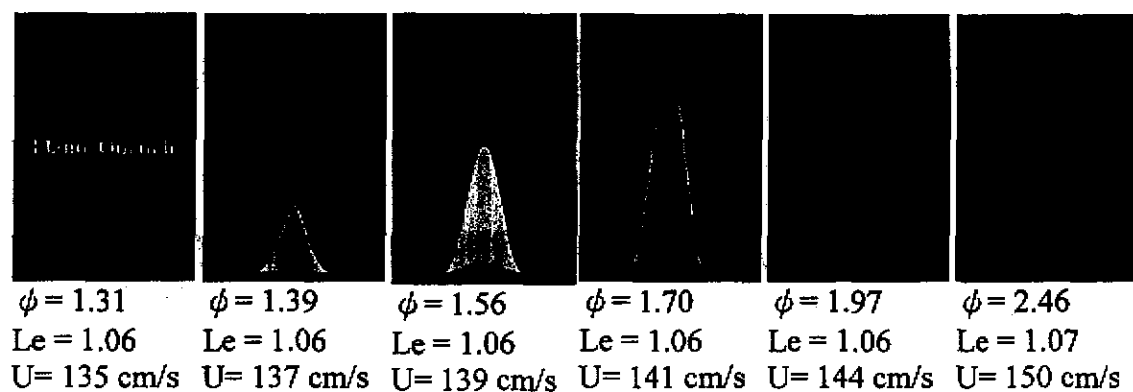


圖 4-2 比較氫氣、丙烷/空氣火焰結構的差異

(a) 氧化劑：(21% O₂ + 79% Helium)



(b) 氧化劑：(21% O₂ + 79% Argon)



(c) 氧化劑：空氣

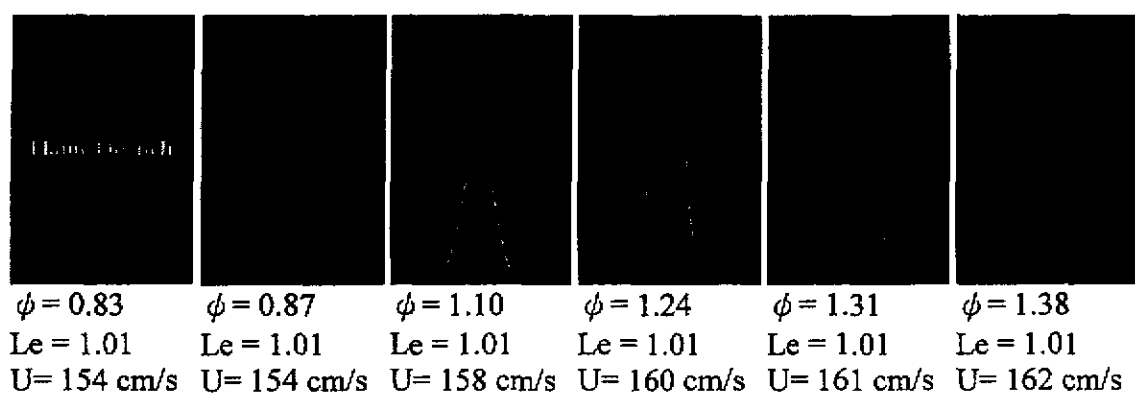
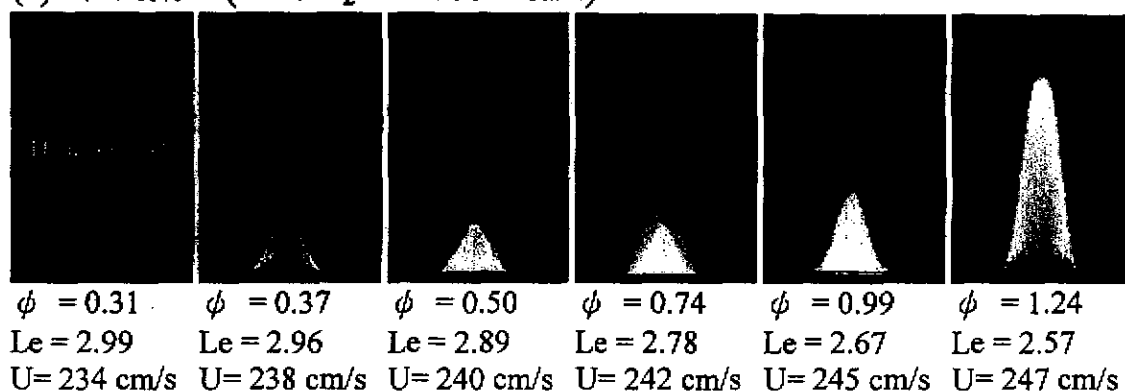
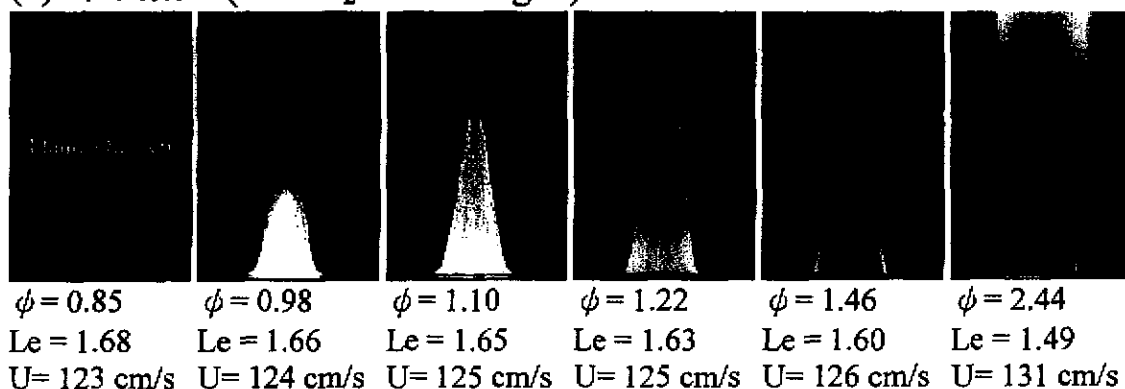


圖 4-3 甲烷在不同氣體稀釋下比較火焰結構的變化

(a) 氧化劑：(21% O₂ + 79% Helium)



(b) 氧化劑：(21% O₂ + 79% Argon)



(c) 氧化劑：空氣

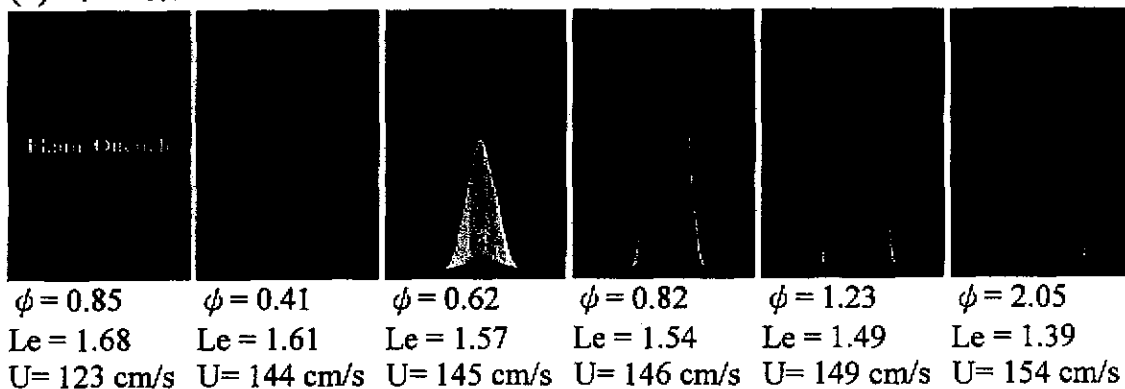
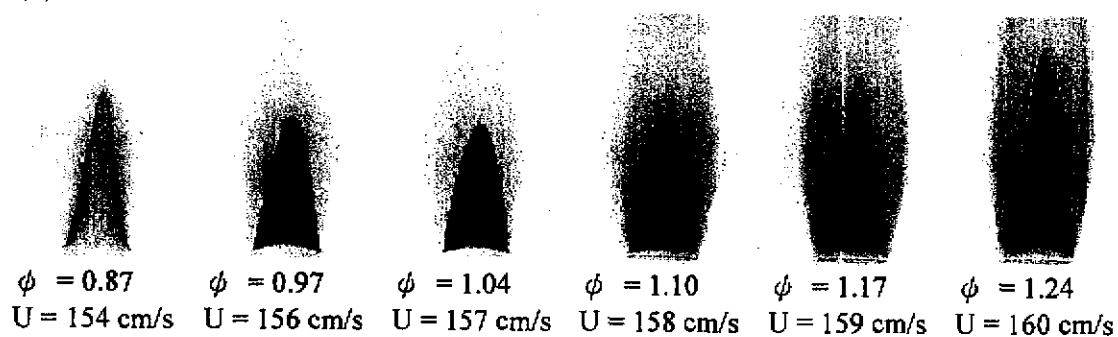
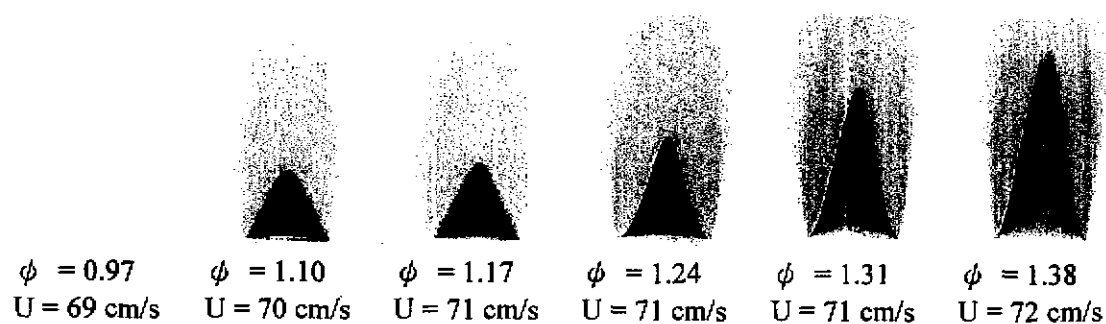


圖 4-4 丙烷在不同氣體稀釋下比較火焰結構的變化

(a) 管徑 1.2 公分



(b) 管徑 1.8 公分



(c) 管徑 3.0 公分

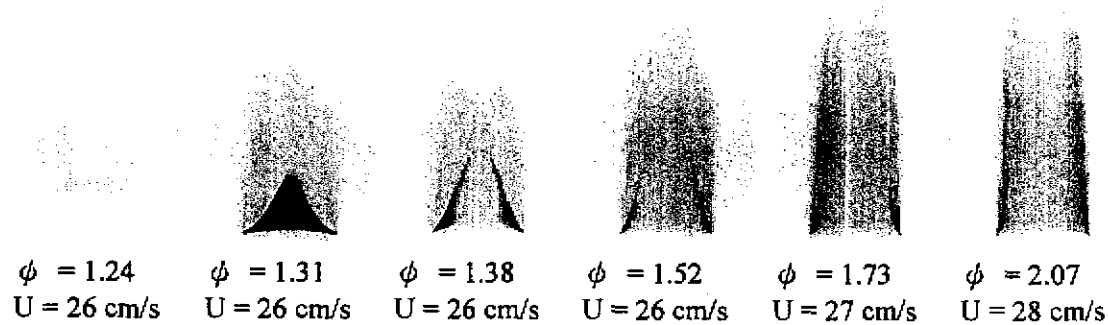
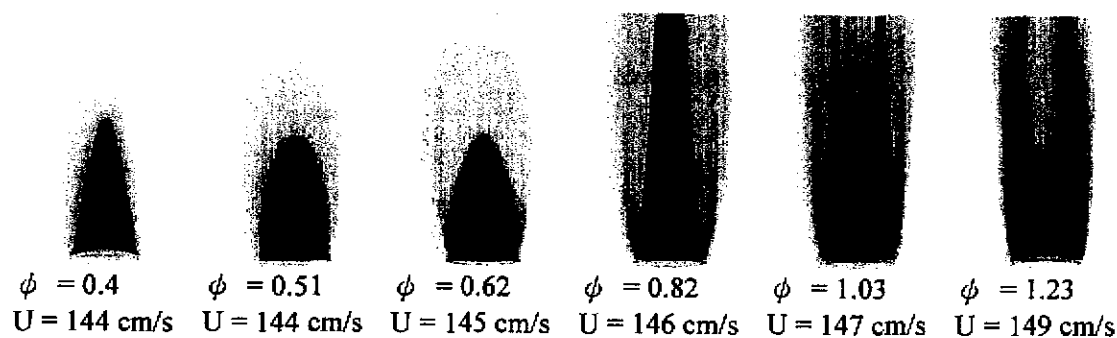
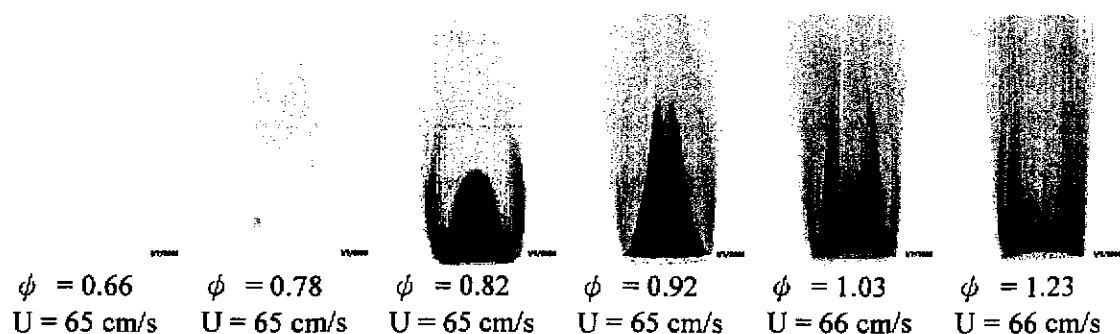


圖 4-5 甲烷在不同管徑流速下比較火焰結構的變化

(a) 管徑 1.2 公分



(b) 管徑 1.8 公分



(c) 管徑 2.4 公分

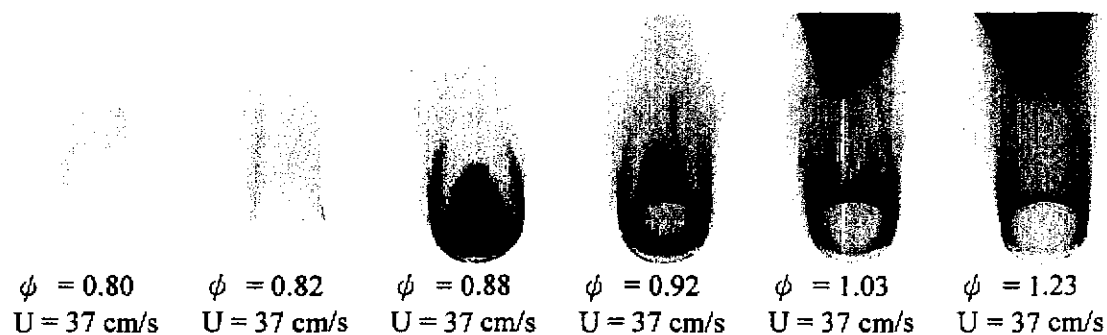


圖 4-6 丙烷在不同管徑流速下比較火焰結構的變化

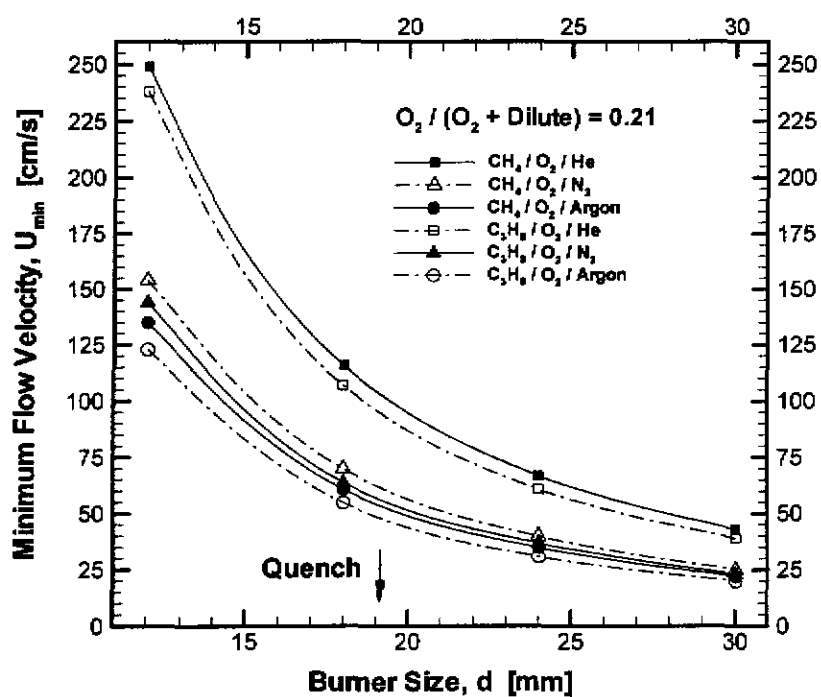
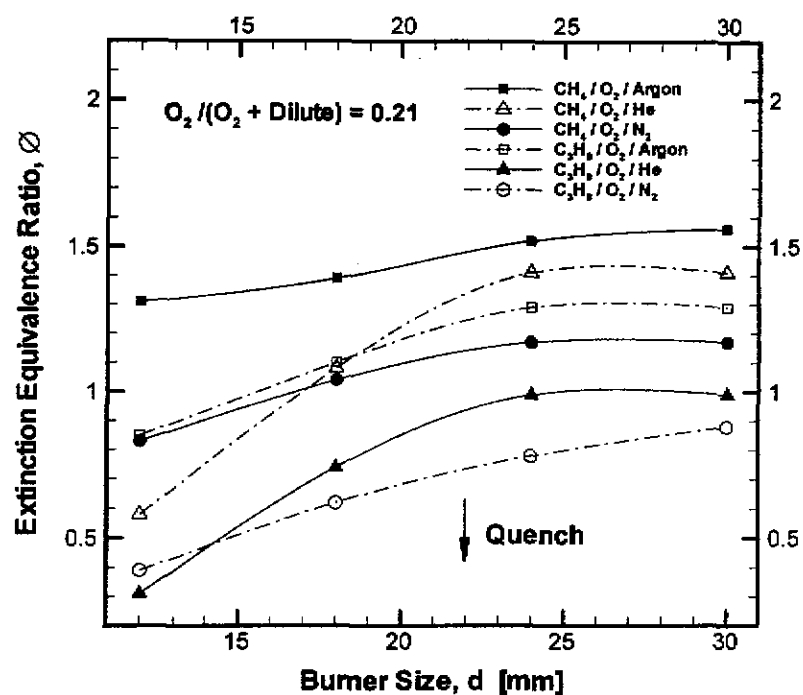


圖 4-7 甲烷、丙烷在不同氣體稀釋下比較熄滅當量值與最小流速的變化

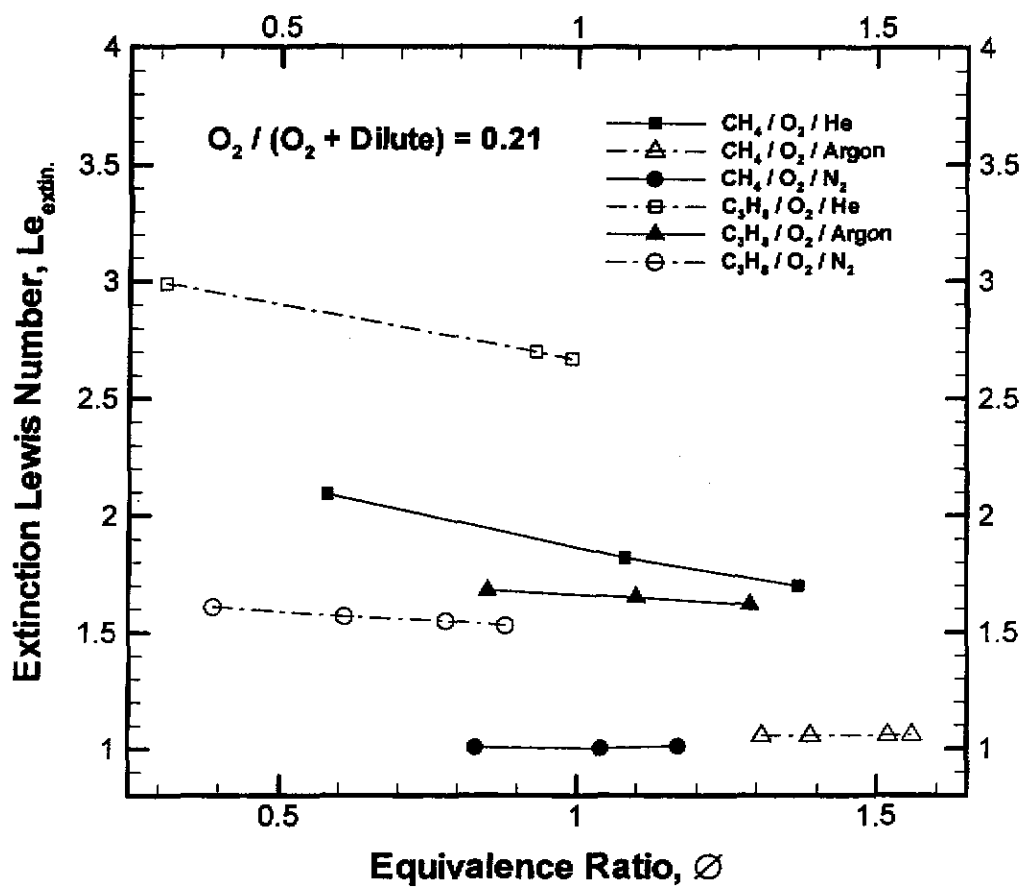


圖 4-8 甲烷、丙烷在不同氣體稀釋下比較熄滅之 Le 值的變化

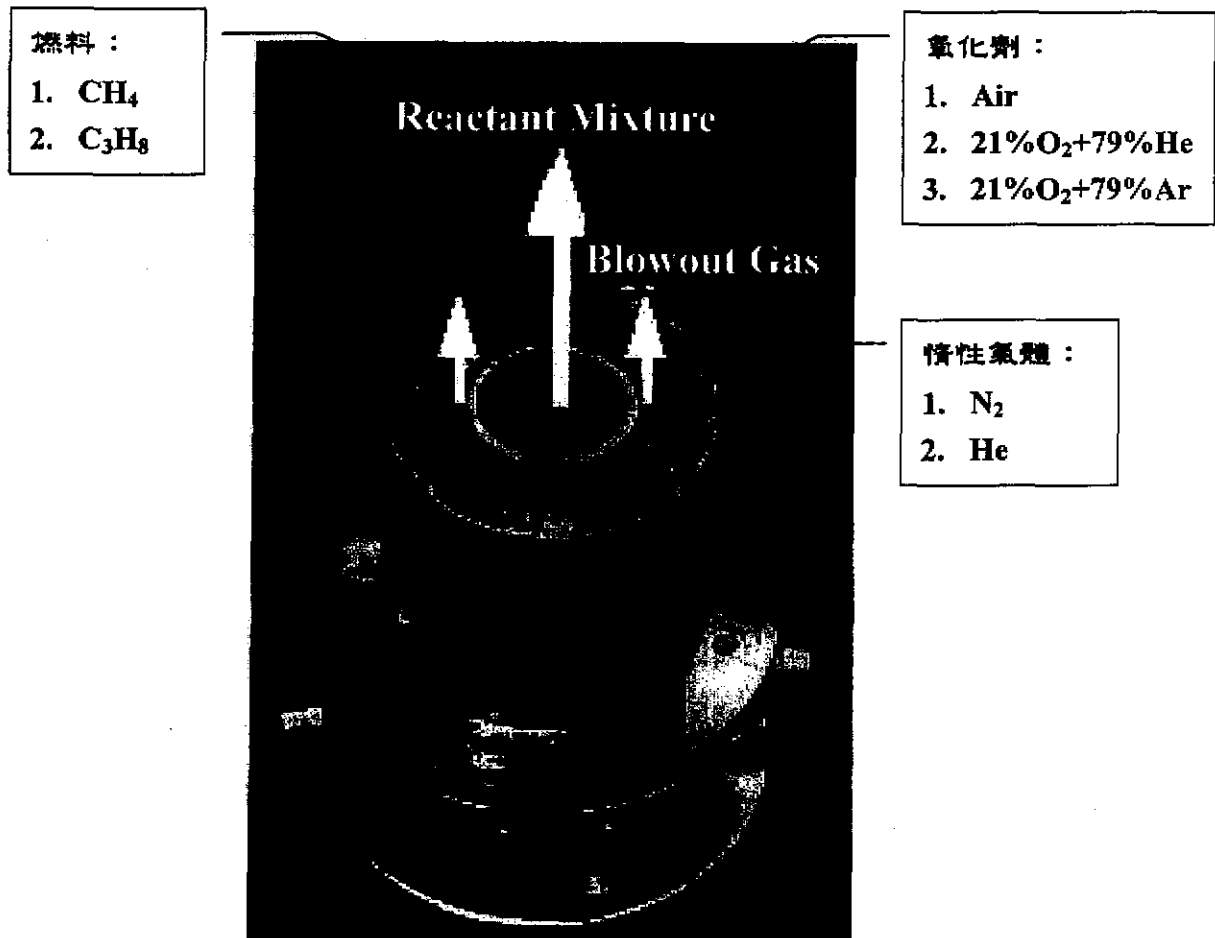
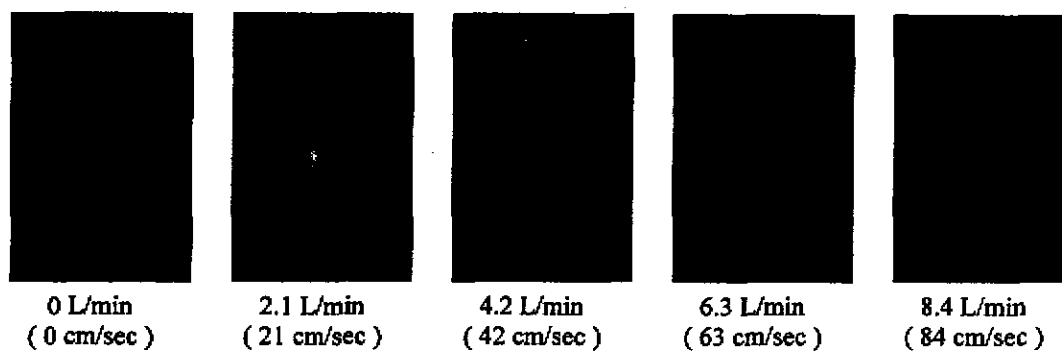


圖 4-9 觀測本生式火焰被吹離管口甚至熄滅的裝置

(a) 以氮氣吹離火焰



(b) 以氦氣吹離火焰

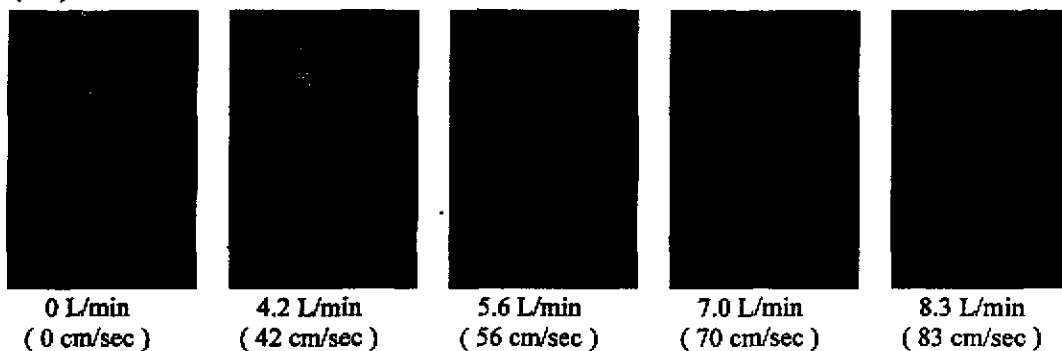
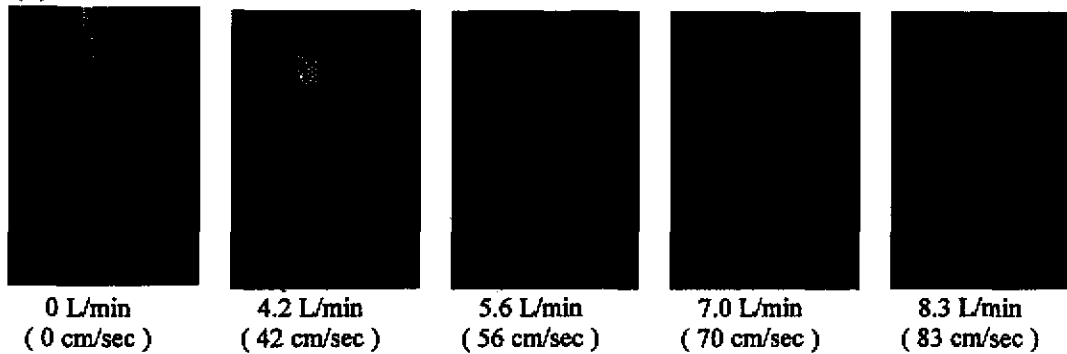
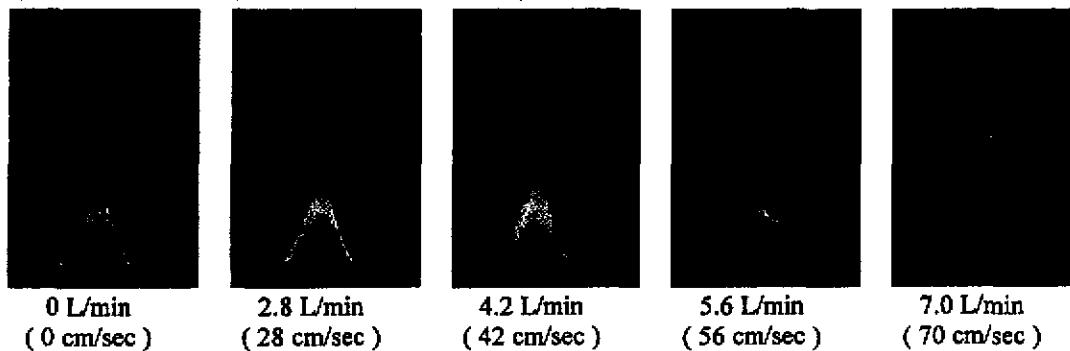


圖 4-10 以氮氣、氦氣吹離丙烷火焰比較所需的流量

(a) 氧化劑：空氣



(b) 氧化劑：(21% O₂ + 79% He)



(c) 氧化劑：(21% O₂ + 79% Argon)

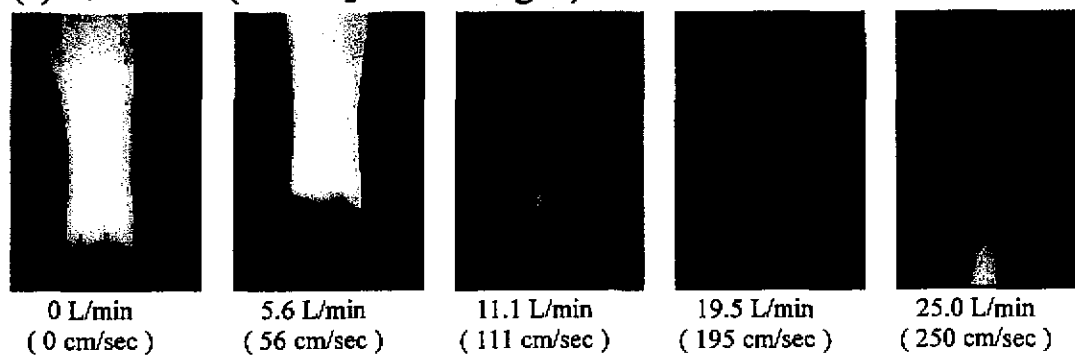


圖 4-11 觀察丙烷在不同氣體稀釋下火焰的吹離行為

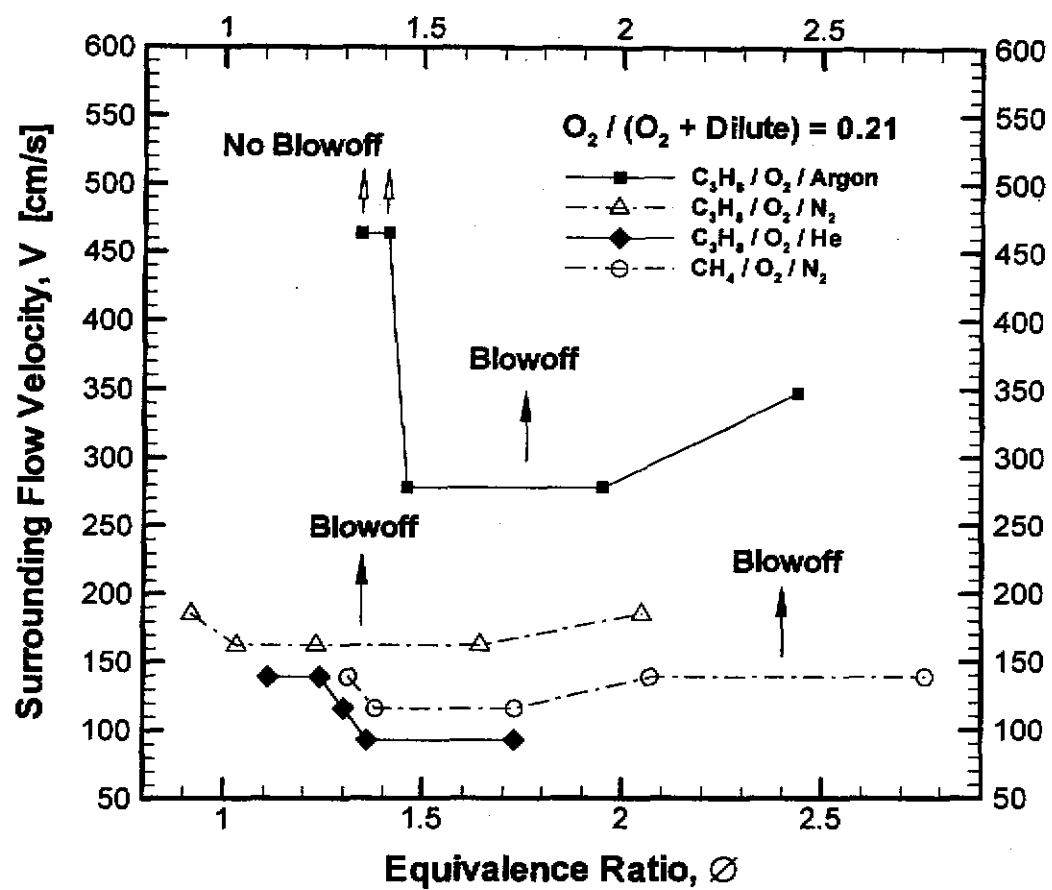


圖 4-12 甲烷、丙烷在不同氣體稀釋下比較吹熄火焰最小流速的變化

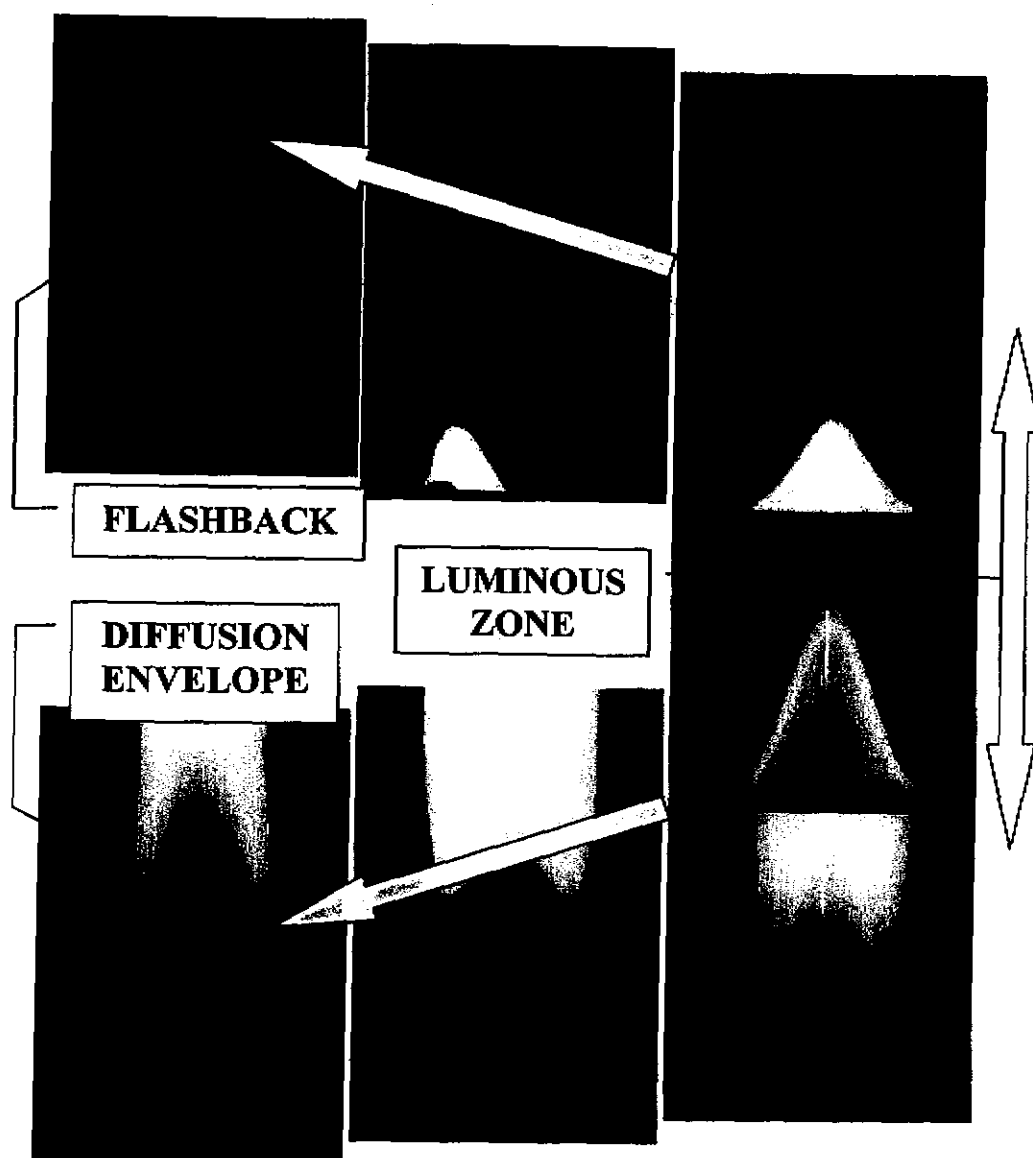


圖 4-13 觀察本生式明亮火焰錐的發展情形

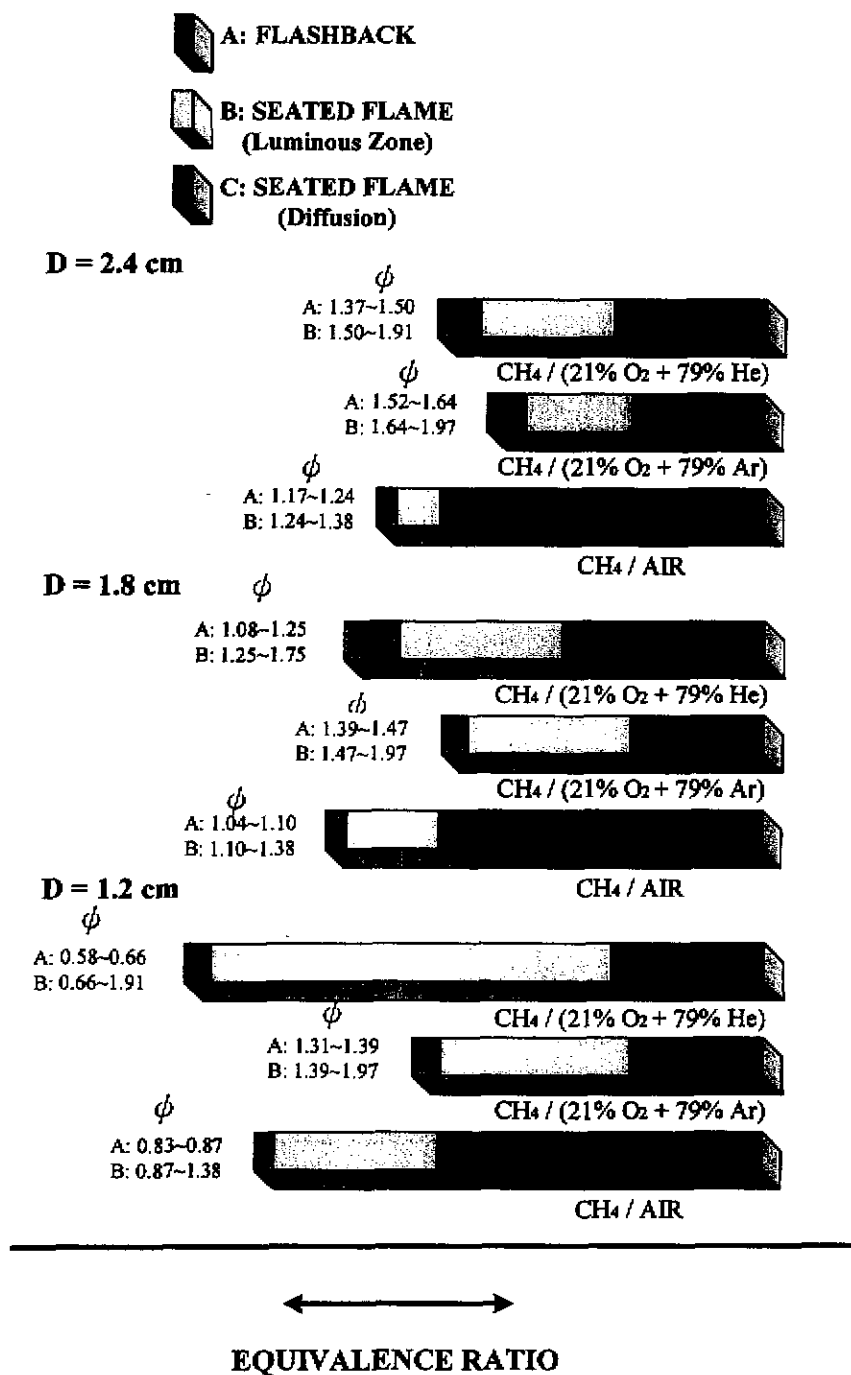


圖 4-14 甲烷在不同管徑、不同氣體稀釋下比較火焰形態與當量值間的變化

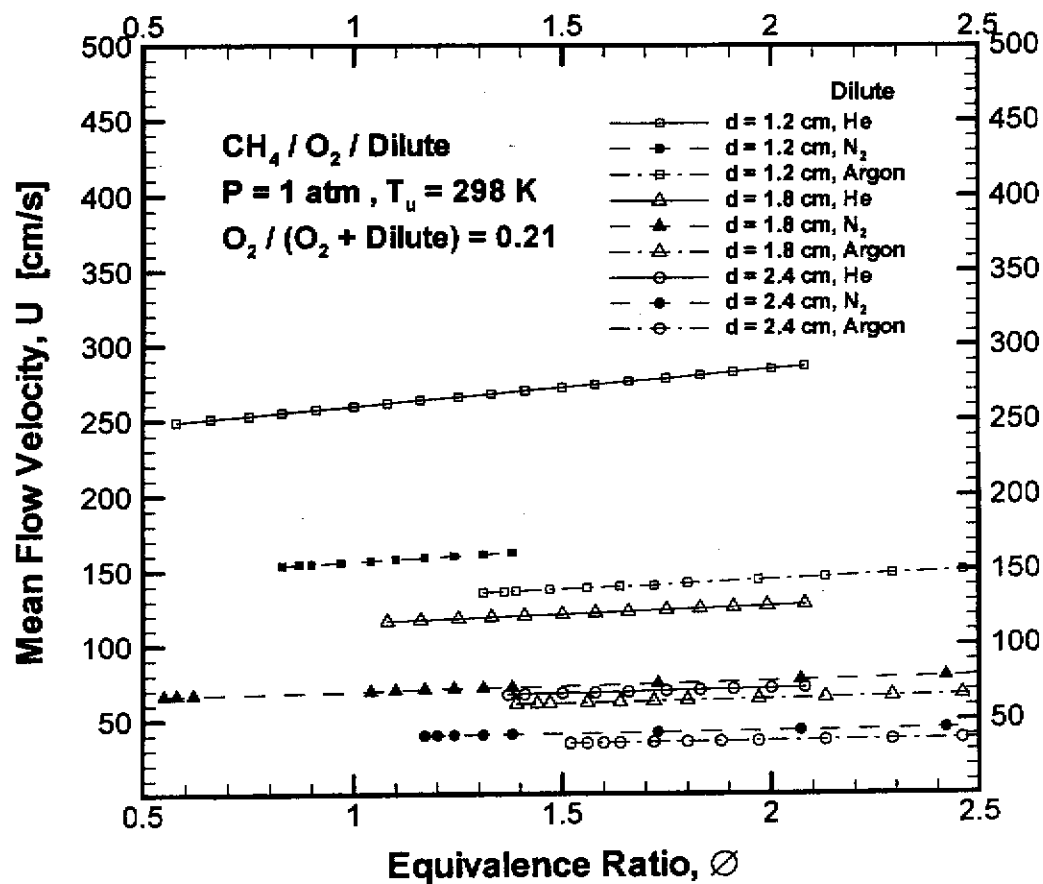


圖 4-15 甲烷在不同管徑、不同氣體稀釋下比較平均流速與當量值間的變化

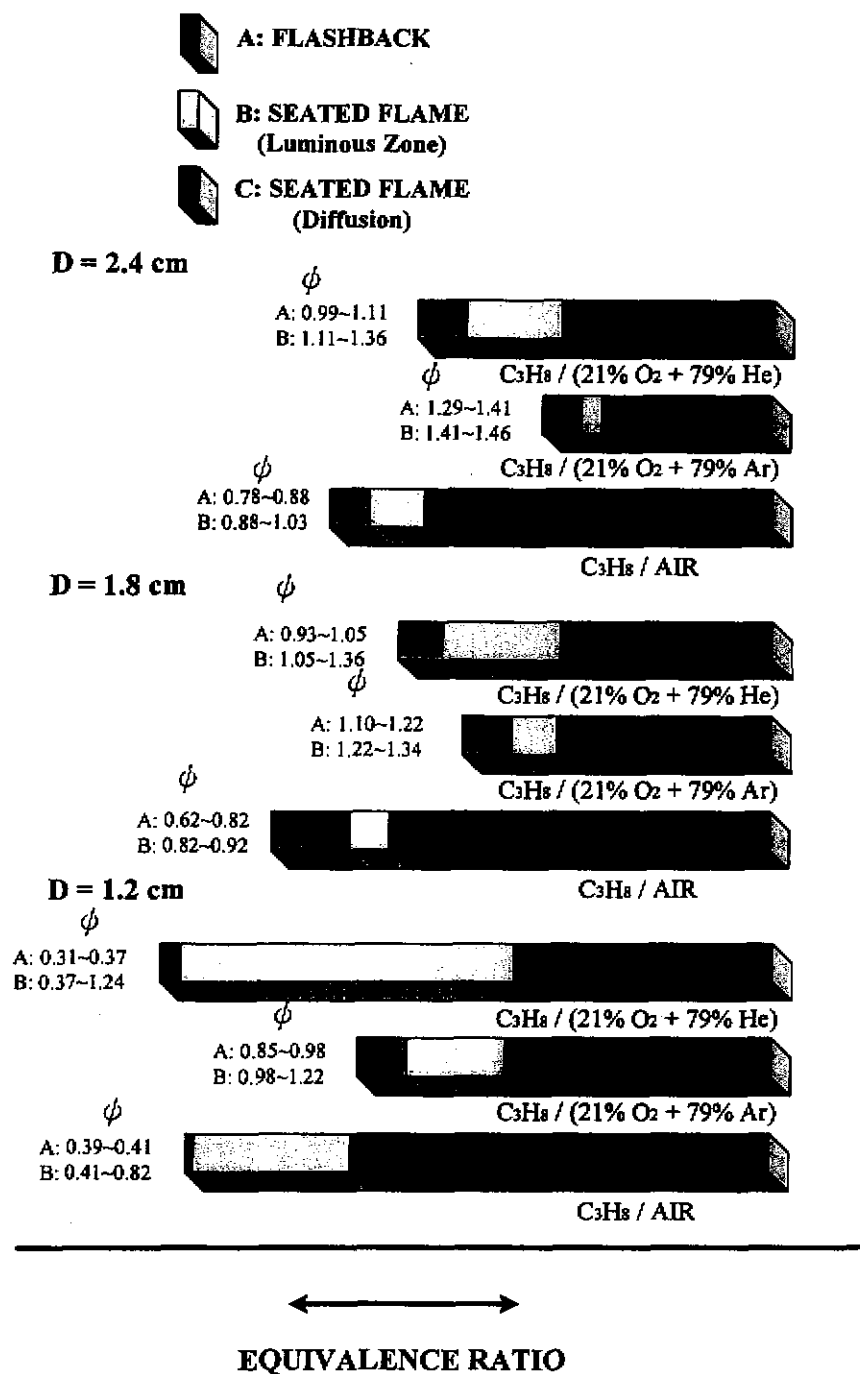


圖 4-16 丙烷在不同管徑、不同氣體稀釋下比較火焰形態與當量值間的變化

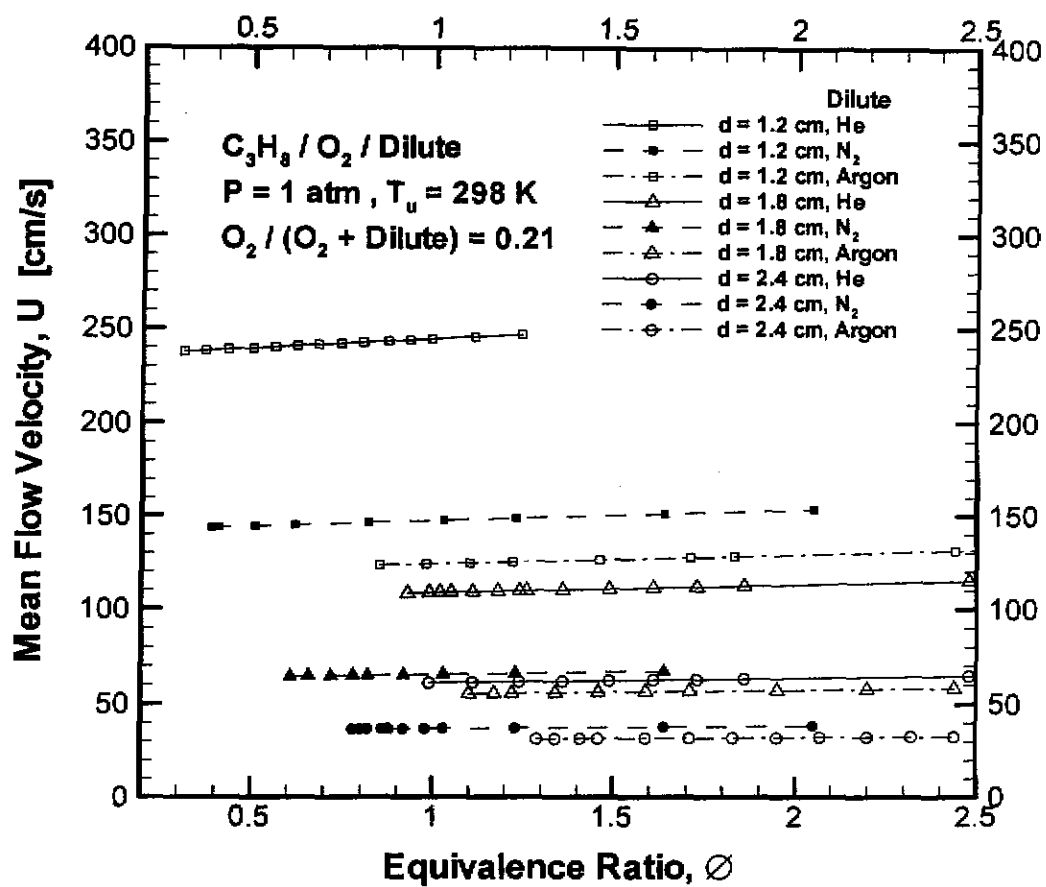


圖 4-17 丙烷在不同管徑、不同氣體稀釋下比較平均流速與當量值間的變化

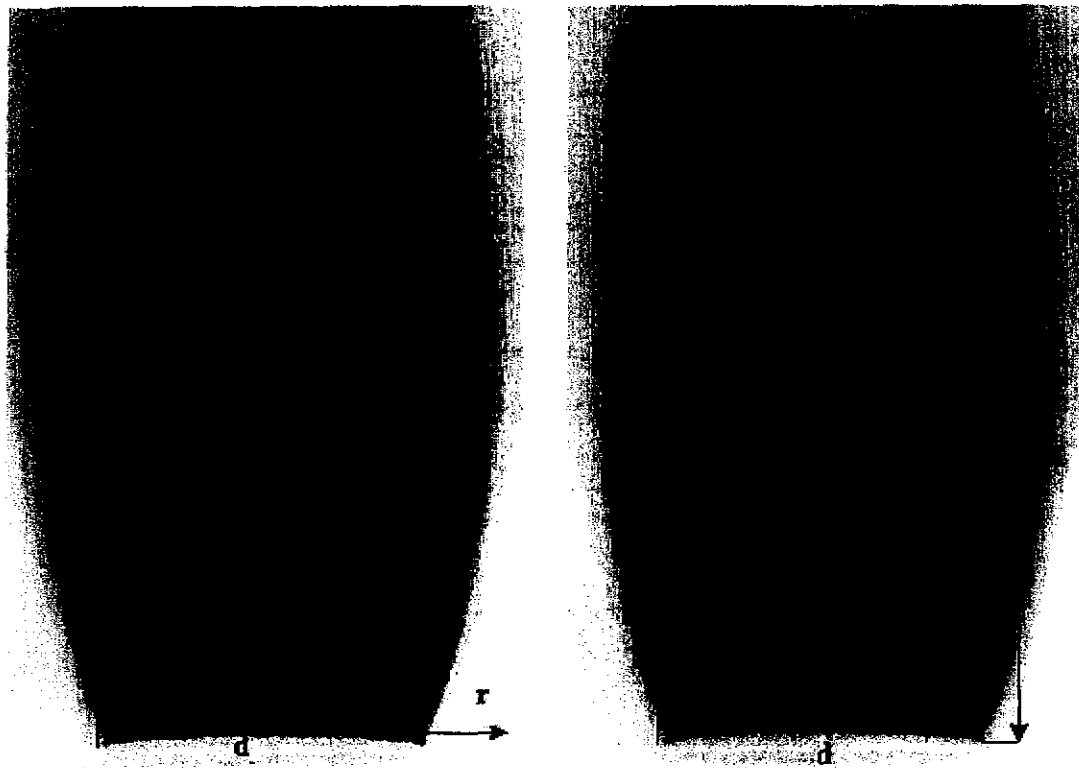


圖 4-18 標註本生式火焰錐尺寸

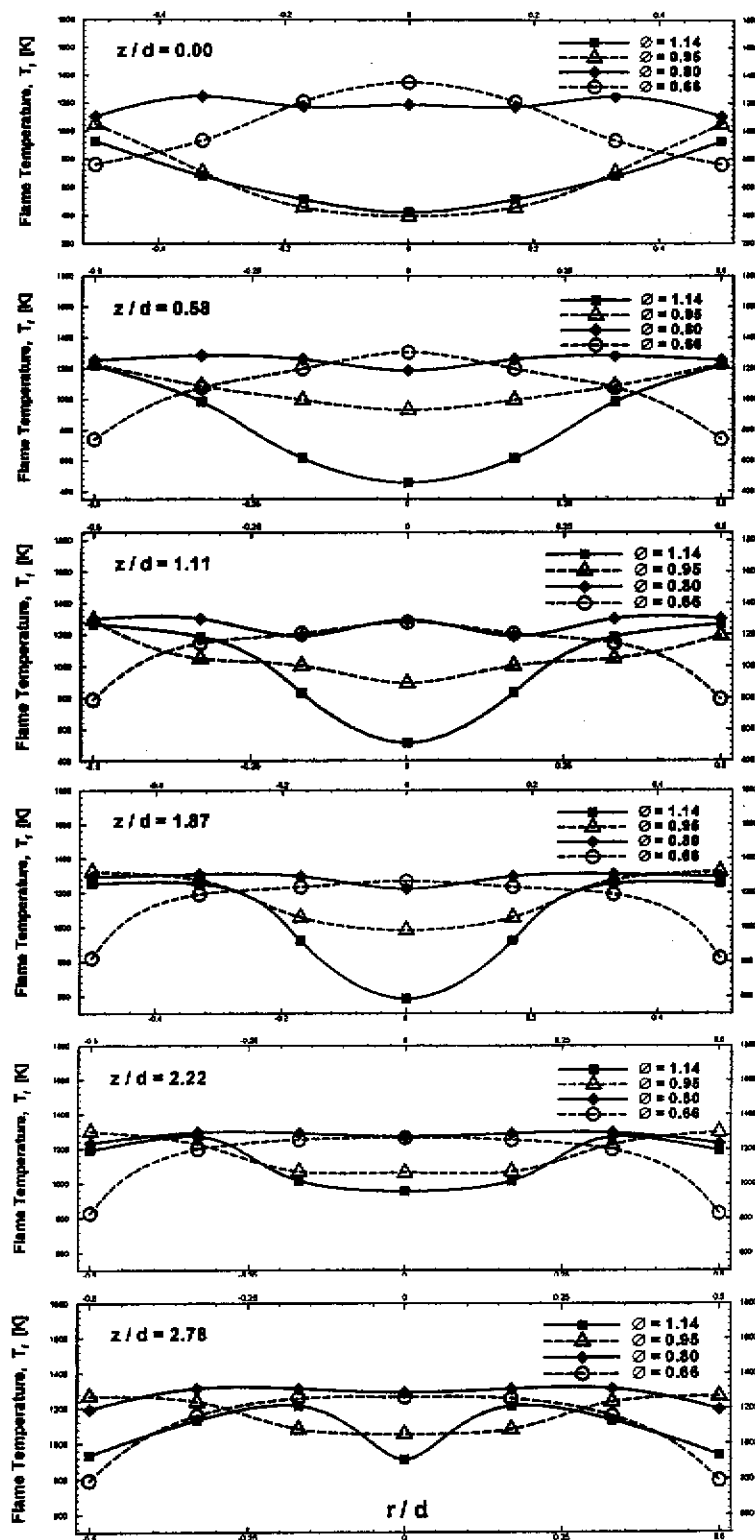


圖 4-19 丙烷可燃氣在管徑為 1.8 公分時比較火焰溫度與當量值間的變化

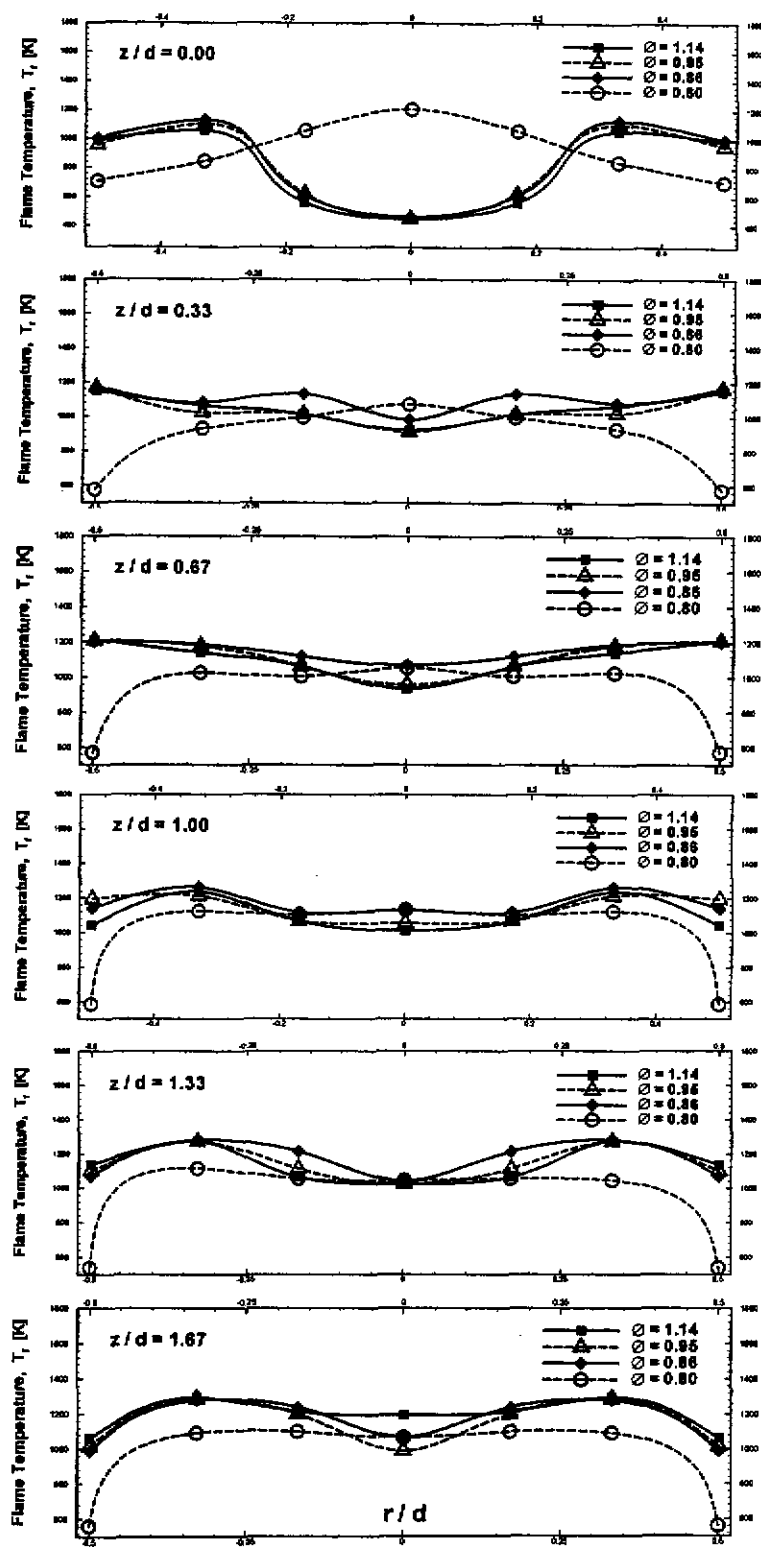


圖 4-20 丙烷可燃氣在管徑為 3.0 公分時比較火焰溫度與當量值間的變化

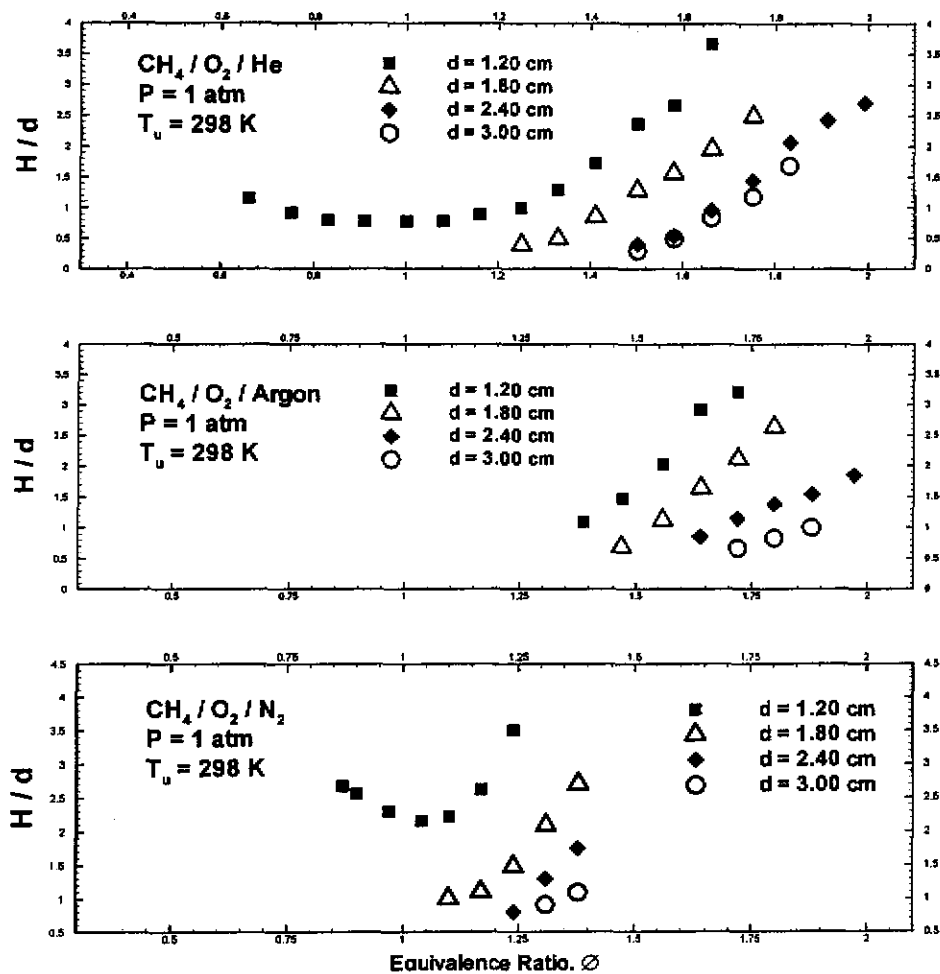


圖 4-21 甲烷在不同管徑、不同氣體稀釋下比較火焰錐高度與當量值間的變化

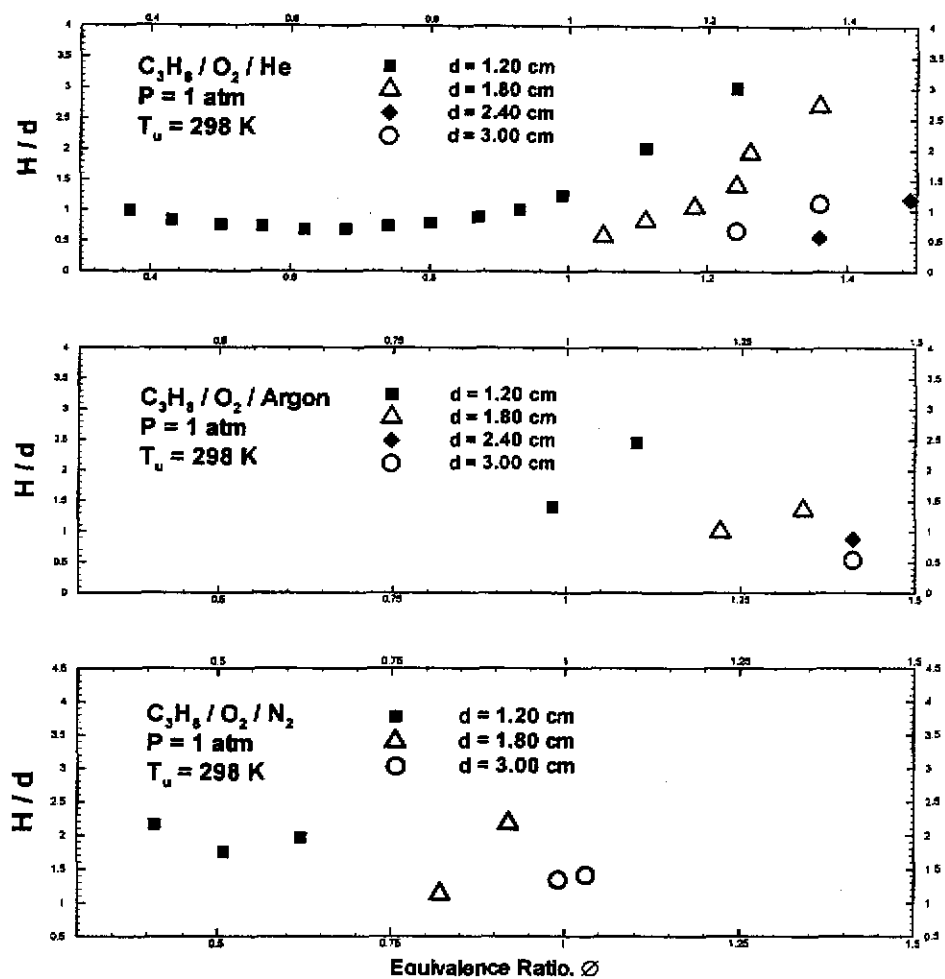


圖 4-22 丙烷在不同管徑、不同氣體稀釋下比較火焰錐高度與當量值間的變化

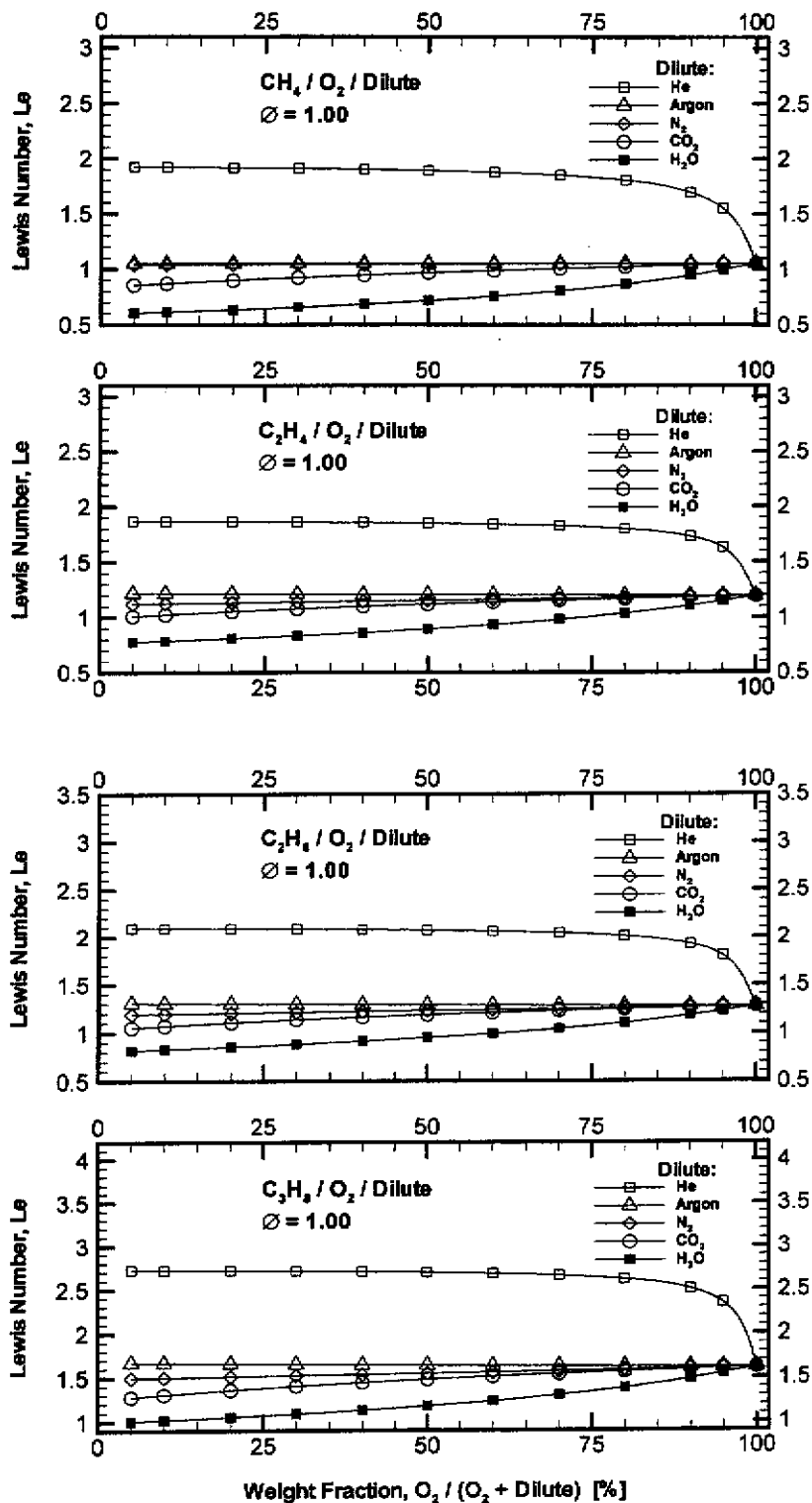


圖 5-1 可燃氣當量值為 1.0 時比較 Le 值與稀釋氣體種類、氧化劑組成間的變化

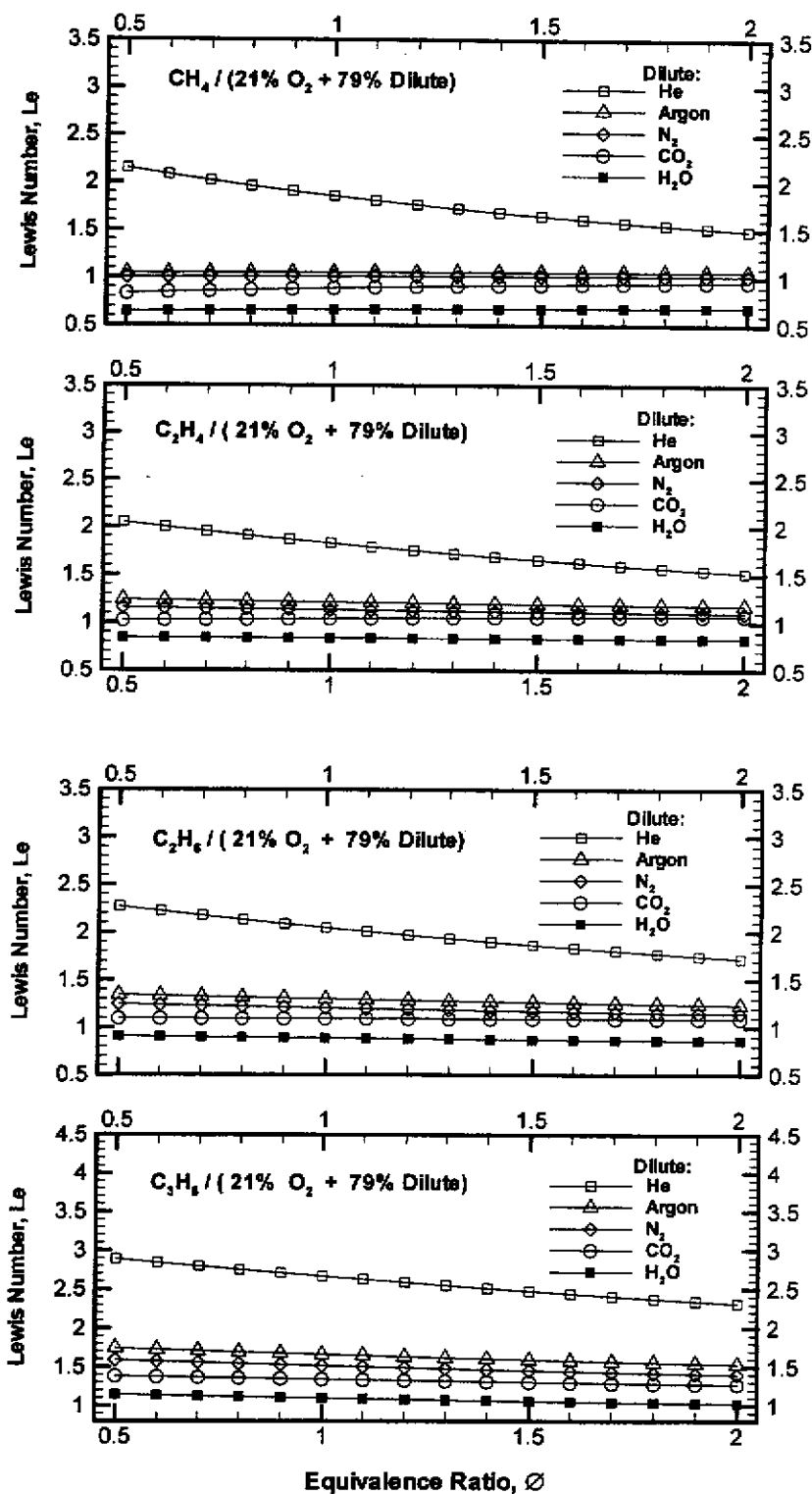


圖 5-2 氧化劑組成仿空氣時比較 Le 值與稀釋氣體種類、當量值間的變化

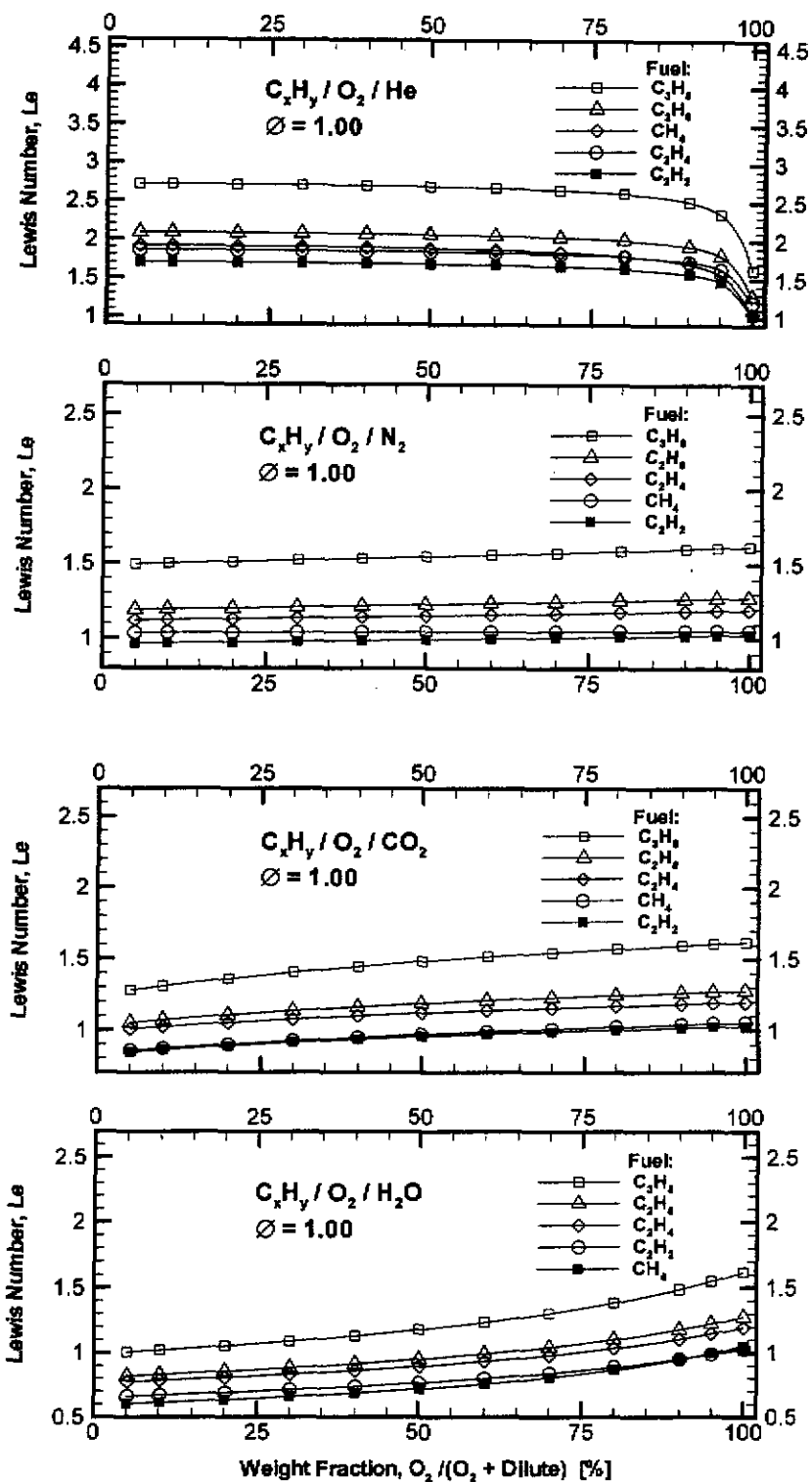


圖 5-3 可燃氣當量值為 1.0 時比較 Le 值與燃料種類、氧化劑組成間的變化

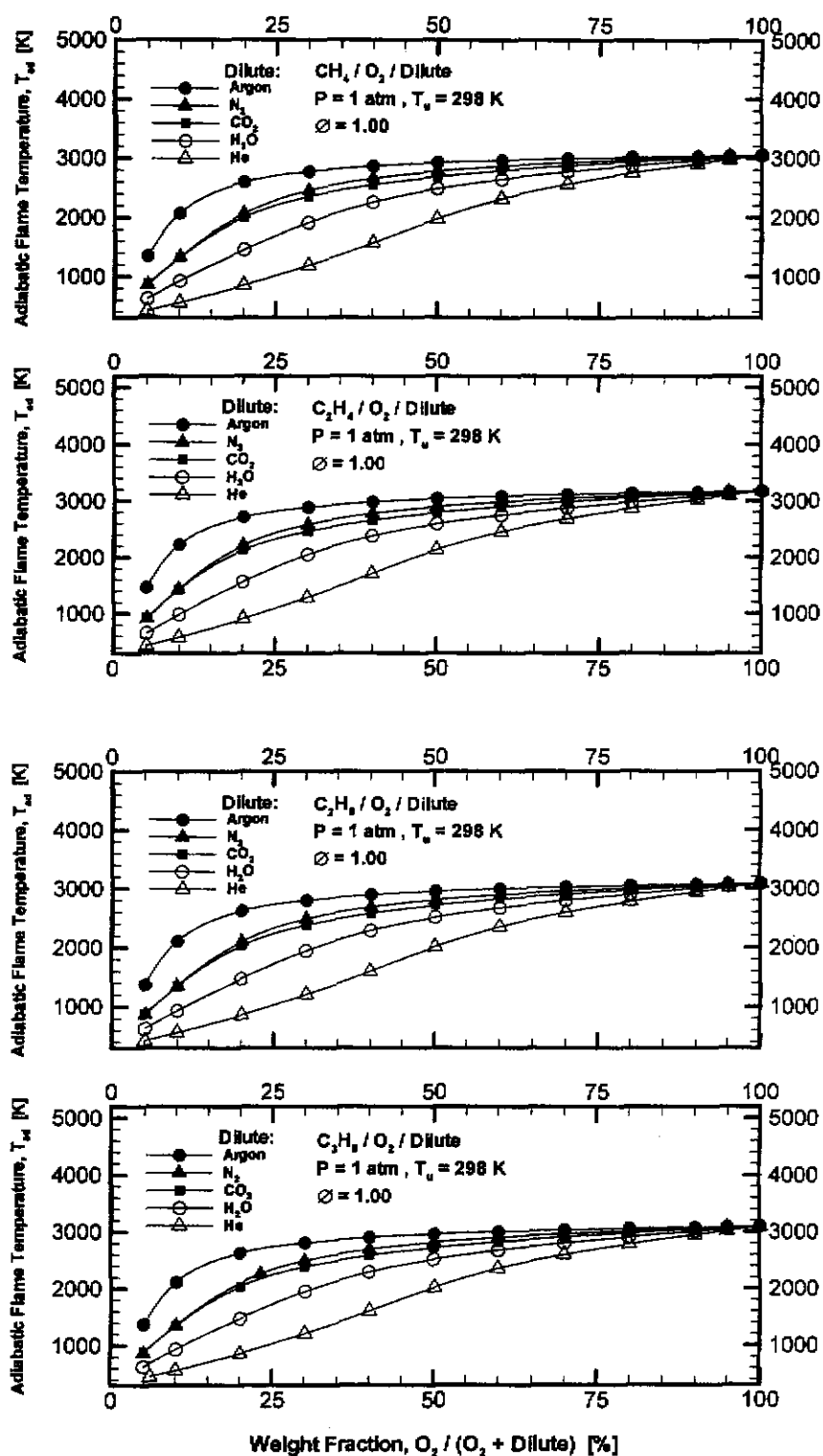


圖 5-4 可燃氣當量值為 1.0 時比較絕熱火焰溫度與稀釋氣體種類、氧化劑組成間的變化

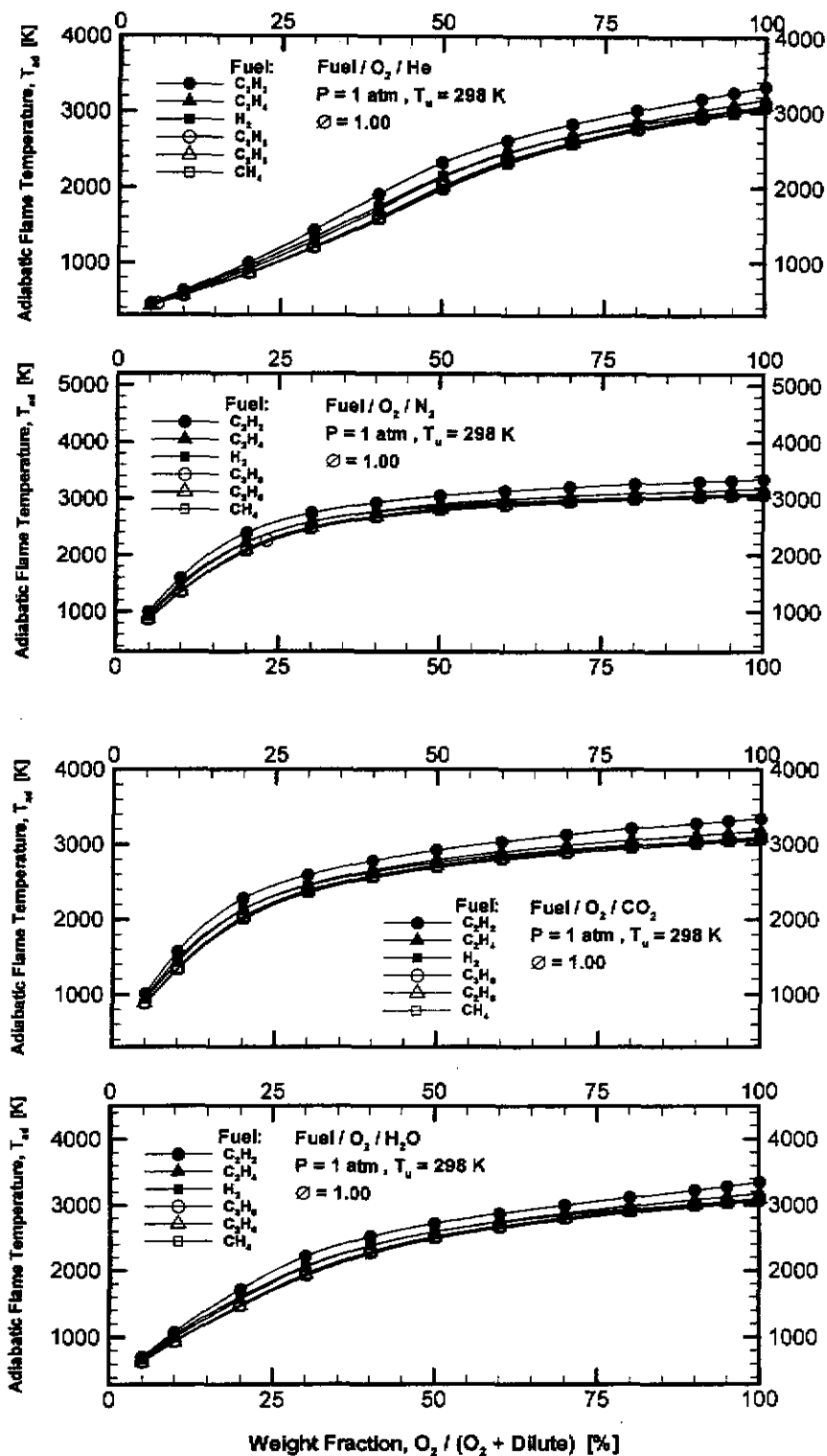


圖 5-5 可燃氣當量值為 1.0 時比較絕熱火焰溫度與燃料種類、氧化劑組成間的變化

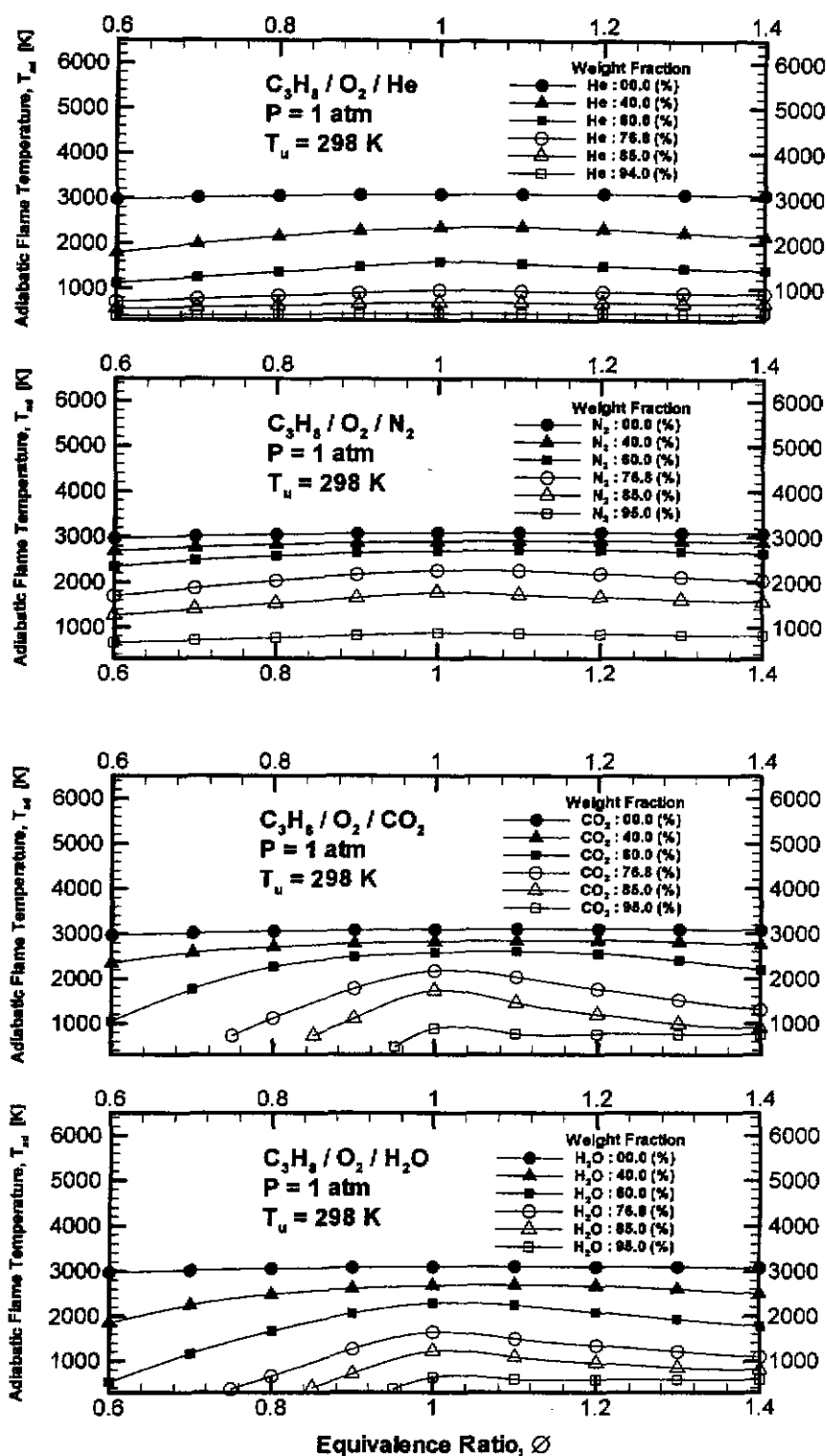


圖 5-6 丙烷在固定氣體的稀釋下比較絕熱火焰溫度與當量值、氧化氣組成間的變化

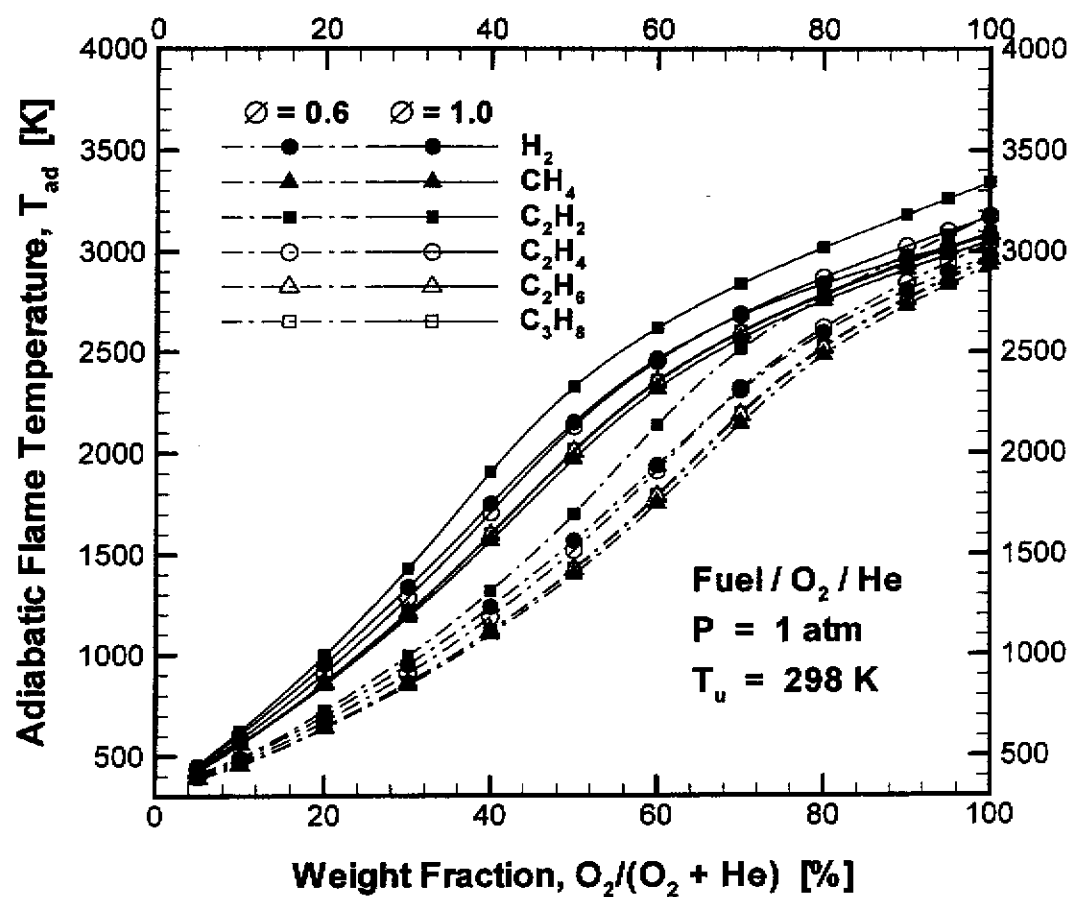


圖 5-7 燃料在氦氣的稀釋下比較絕熱火焰溫度與當量值、氧化劑組成間的變化

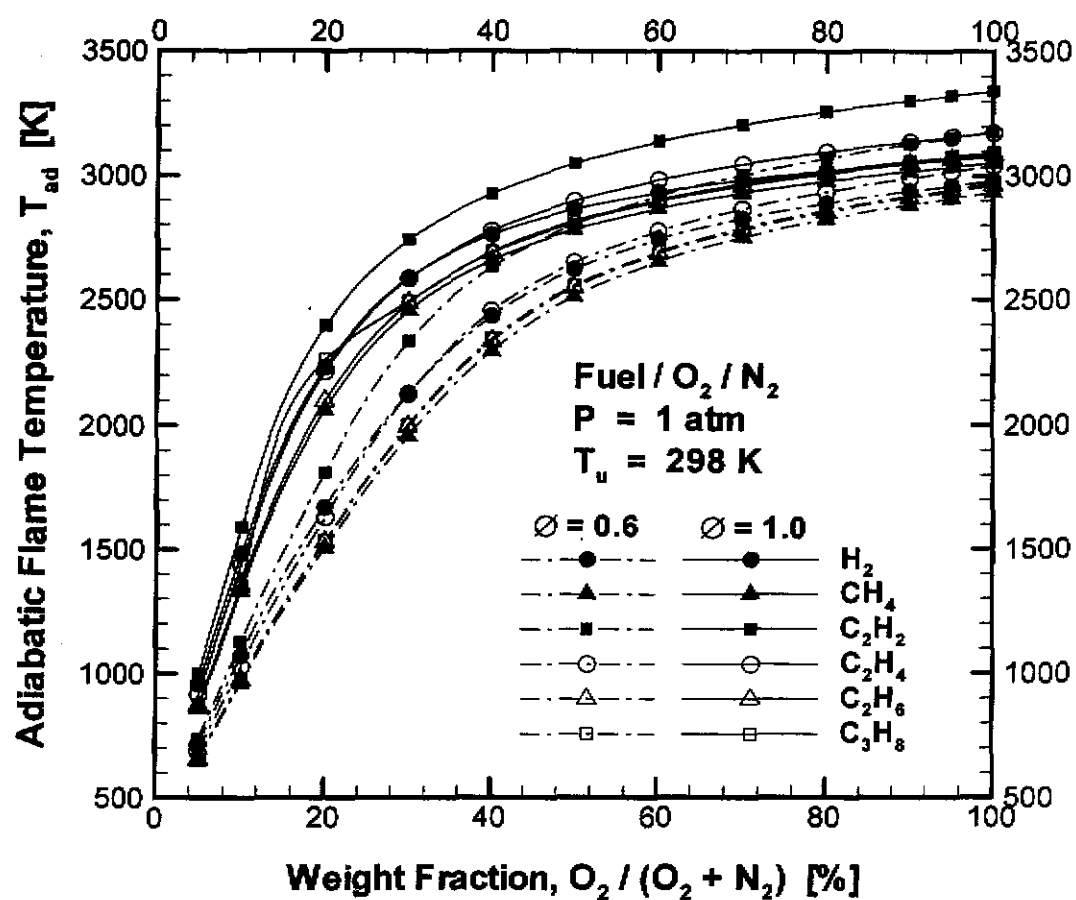


圖 5-8 燃料在氮氣的稀釋下比較絕熱火焰溫度與當量值、氧化劑組成間的變化

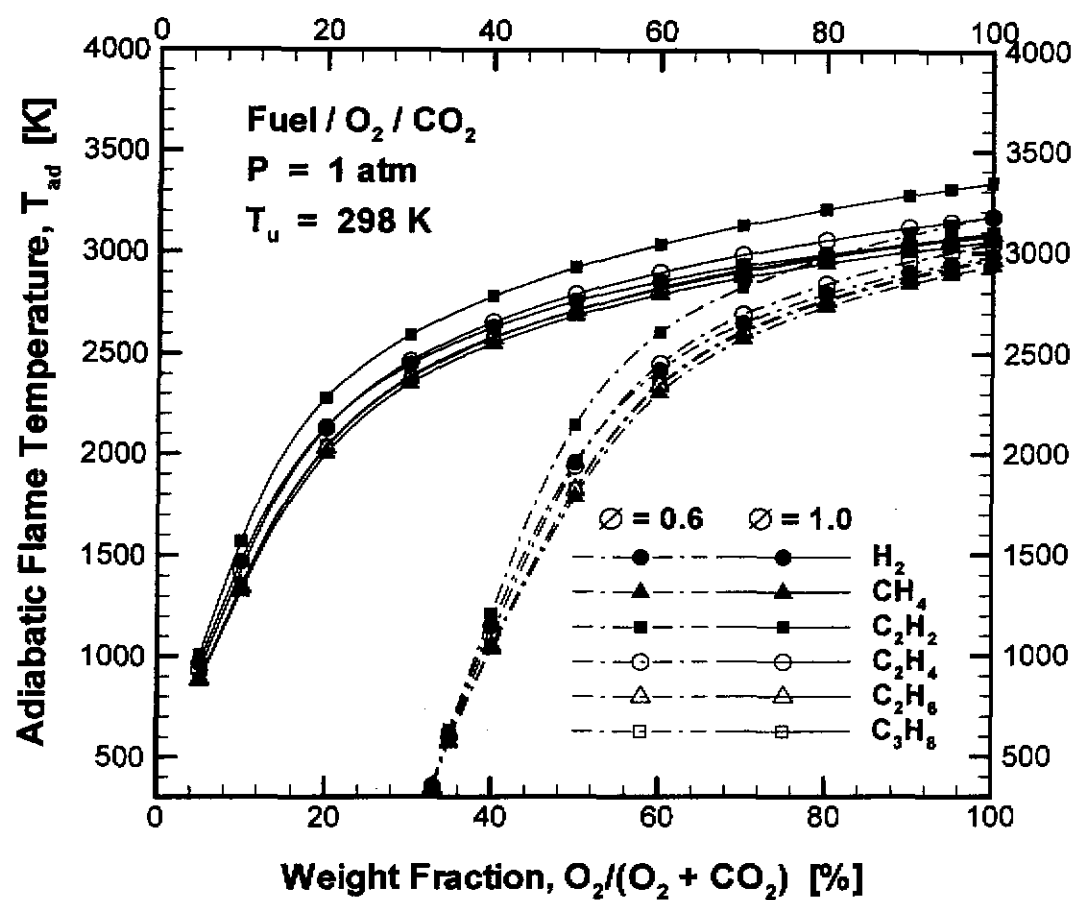


圖 5-9 燃料在二氧化碳的稀釋下比較絕熱火焰溫度與當量值、氧化劑組成間的變化

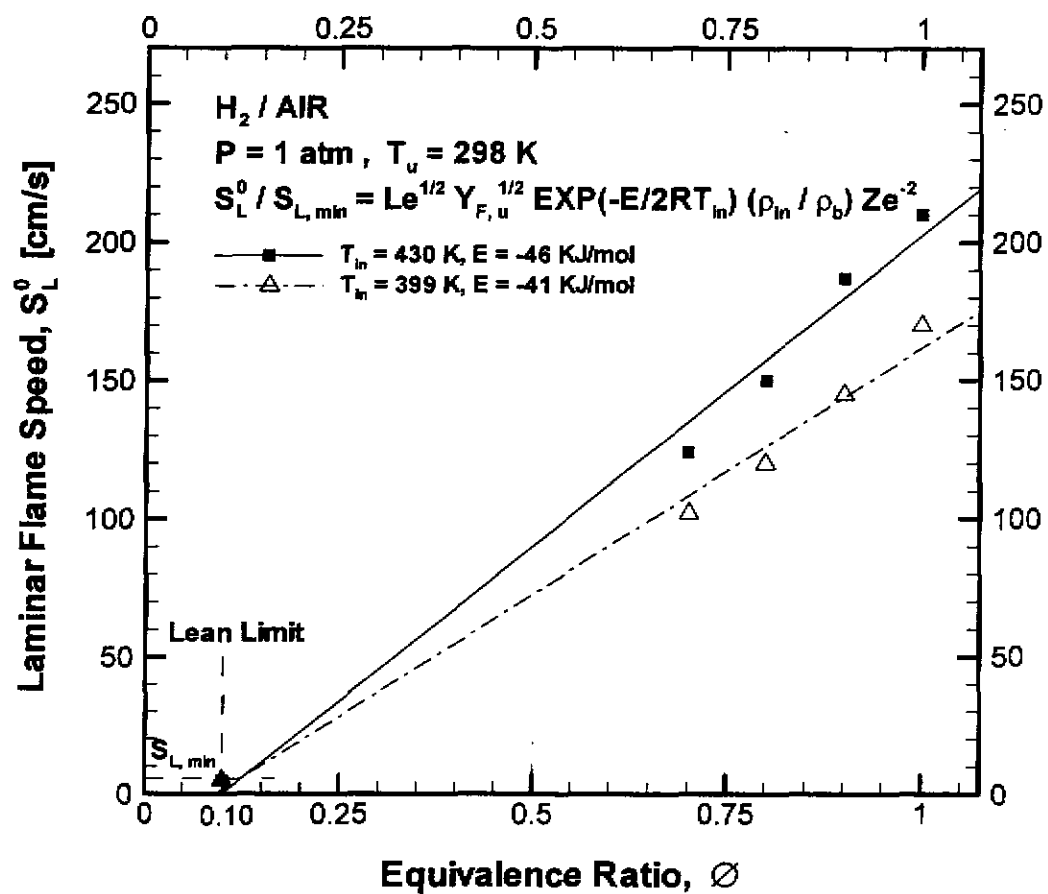


圖 5-10 氫氣-空氣火焰在考量可燃極限下模擬層流火焰速度 (圖上符號：Law, 1994; Glassman, 1996)

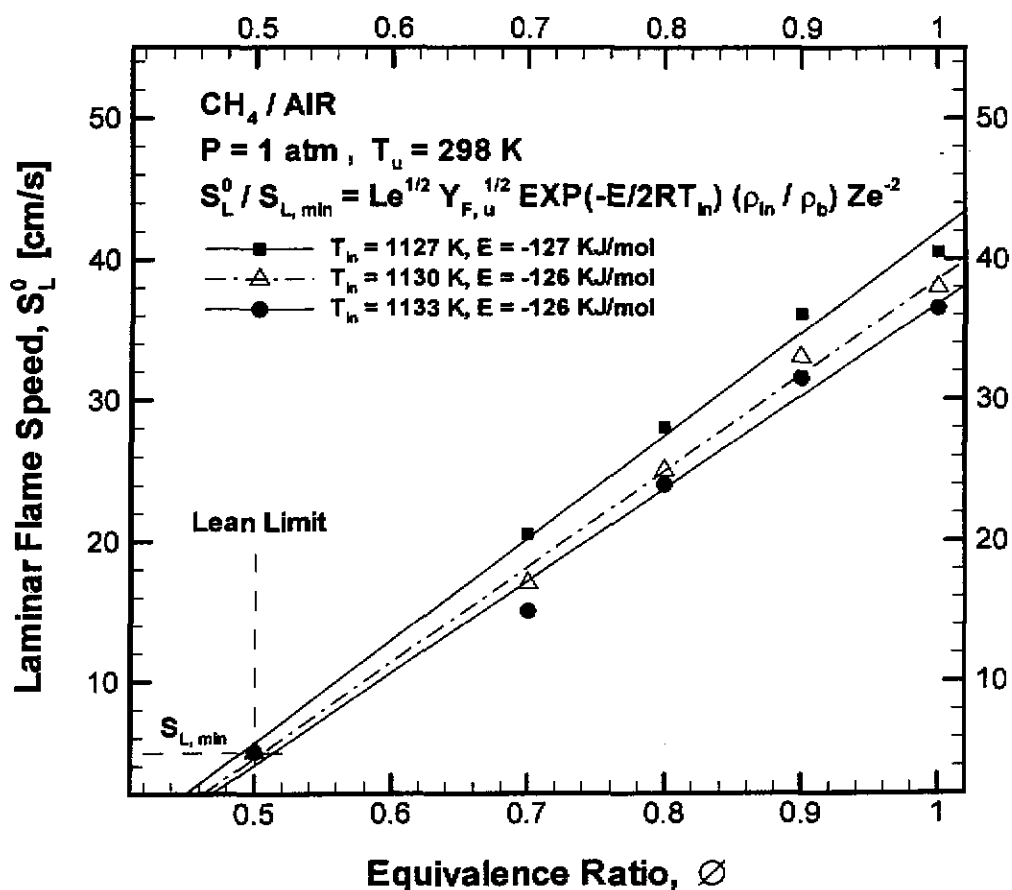


圖 5-11 甲烷-空氣火焰在考量可燃極限下模擬層流火焰速度 (圖上符號 : Law, 1994; Glassman, 1996; Vagelopoulos, 1998)

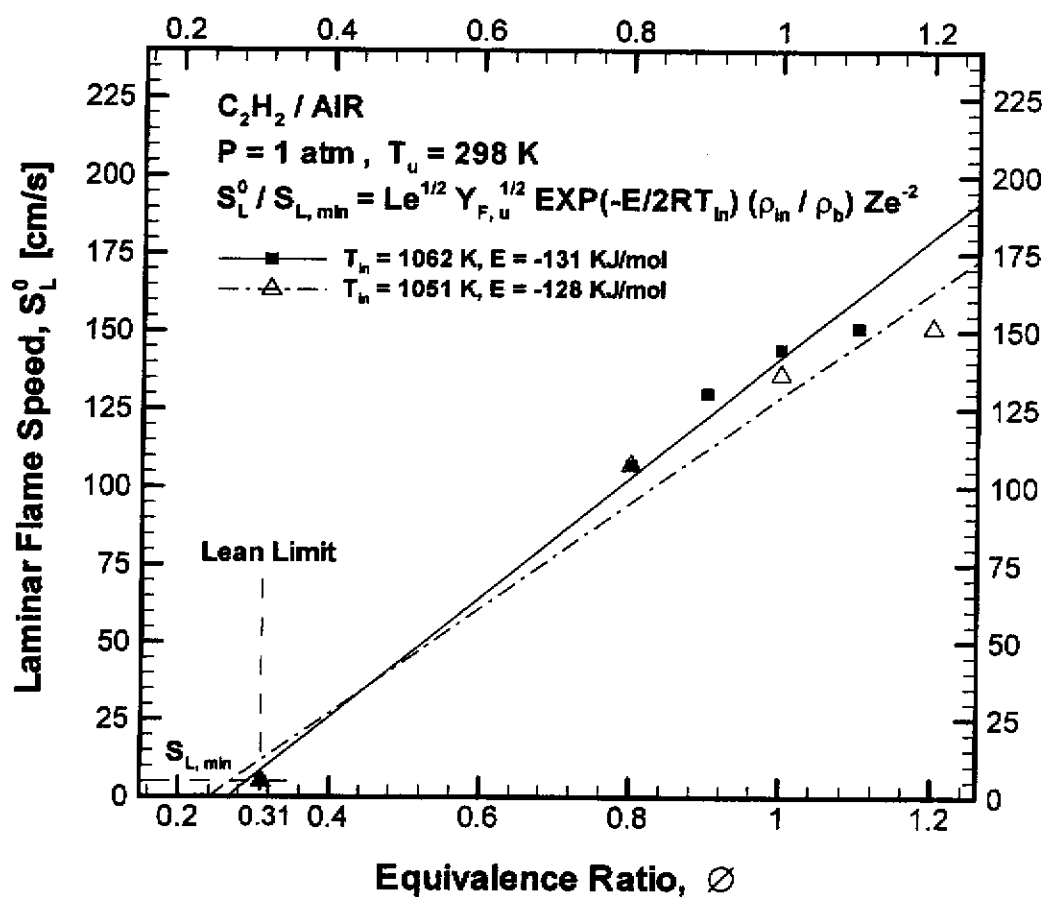


圖 5-12 乙炔-空氣火焰在考量可燃極限下模擬層流火焰速度 (圖上符號: Law, 1994; Glassman, 1996)

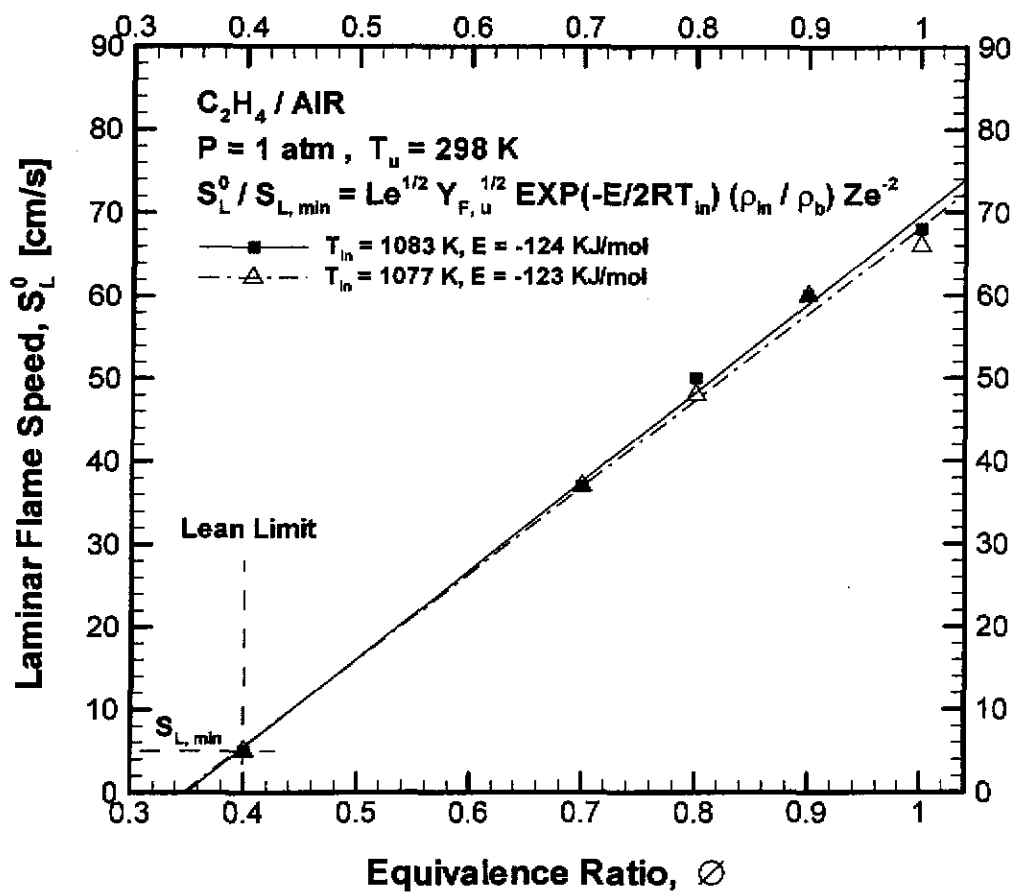


圖 5-13 乙烯-空氣火焰在考量可燃極限下模擬層流火焰速度 (圖上符號 : Law, 1994; Glassman, 1996)

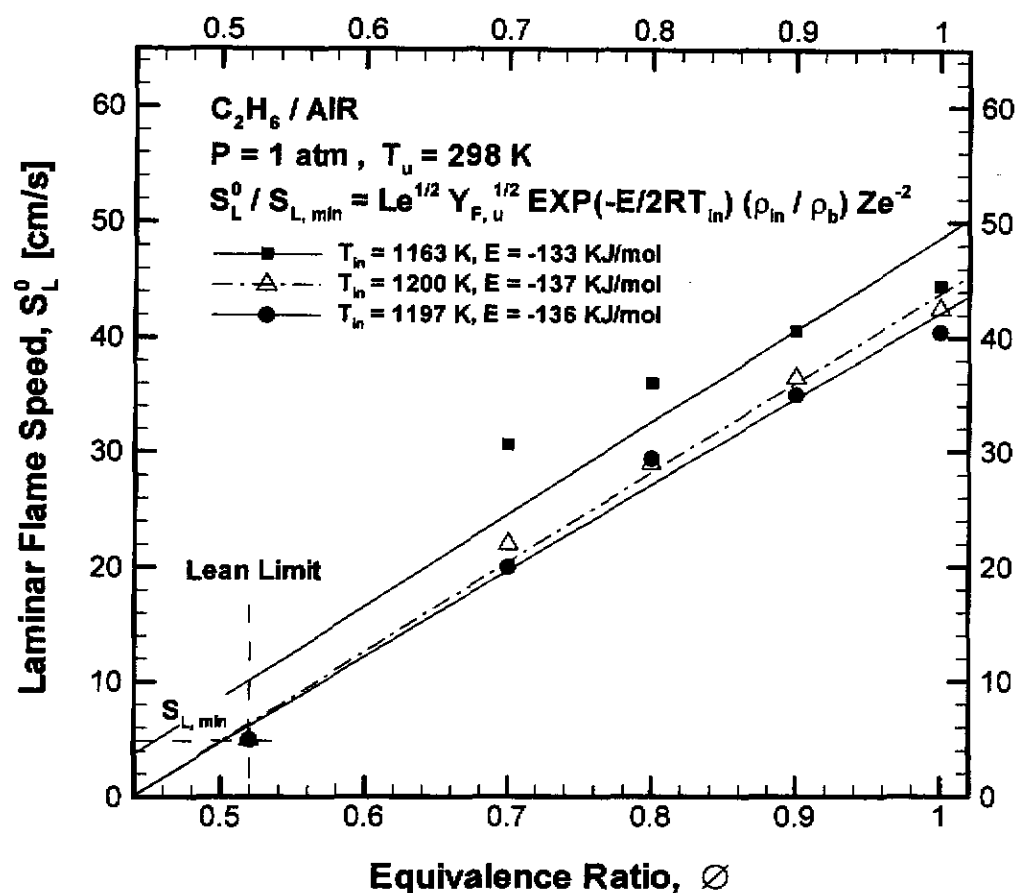


圖 5-14 乙烷-空氣火焰在考量可燃極限下模擬層流火焰速度 (圖上符號 : Law, 1994; Glassman, 1996; Vagelopoulos, 1998)

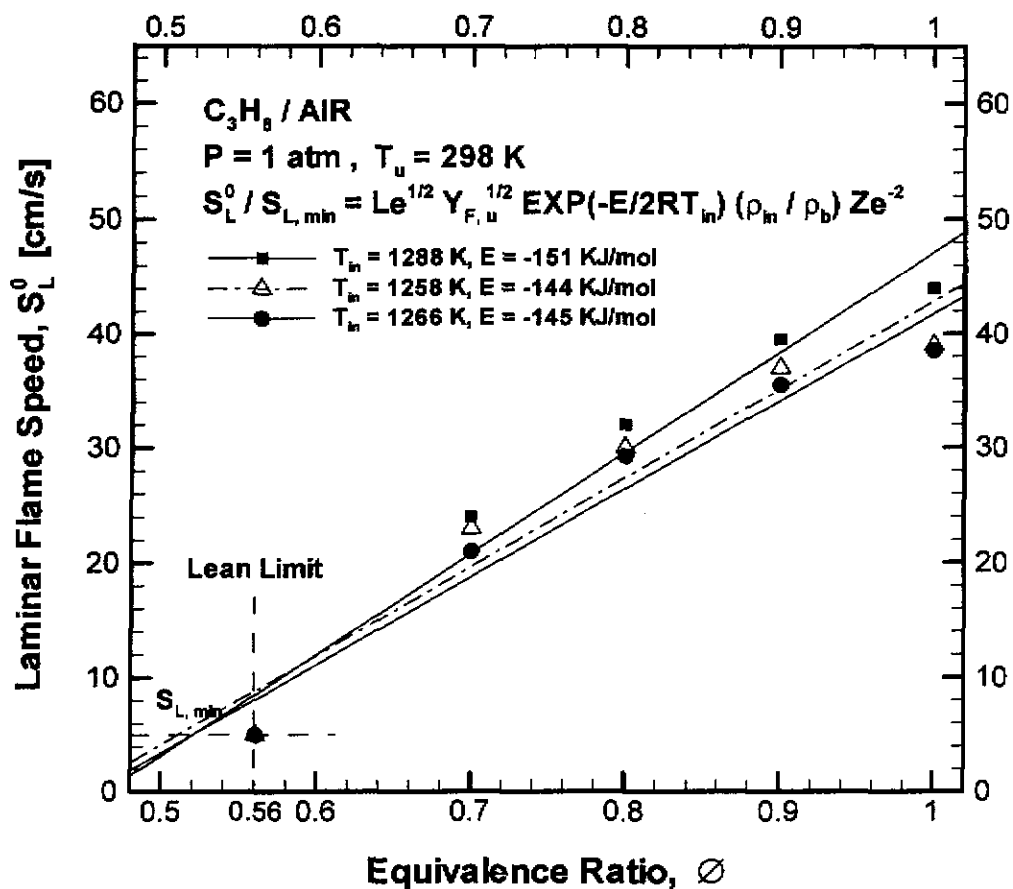


圖 5-15 丙烷-空氣火焰在考量可燃極限下模擬層流火焰速度 (圖上符號 : Law, 1994; Glassman, 1996; Vagelopoulos, 1998)

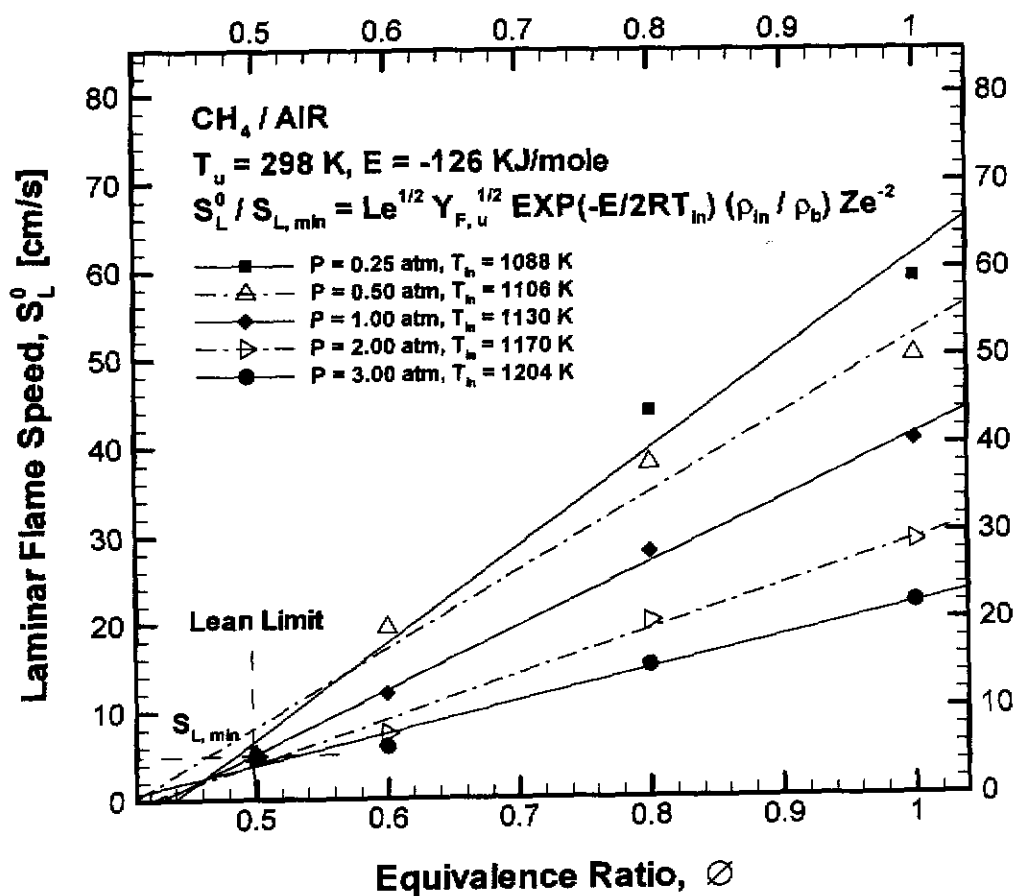


圖 5-16 甲烷-空氣火焰在不同壓力作用下比較傳播速度與當量值間的變化（圖上符號：Egolfopoulos & Law, 1990）

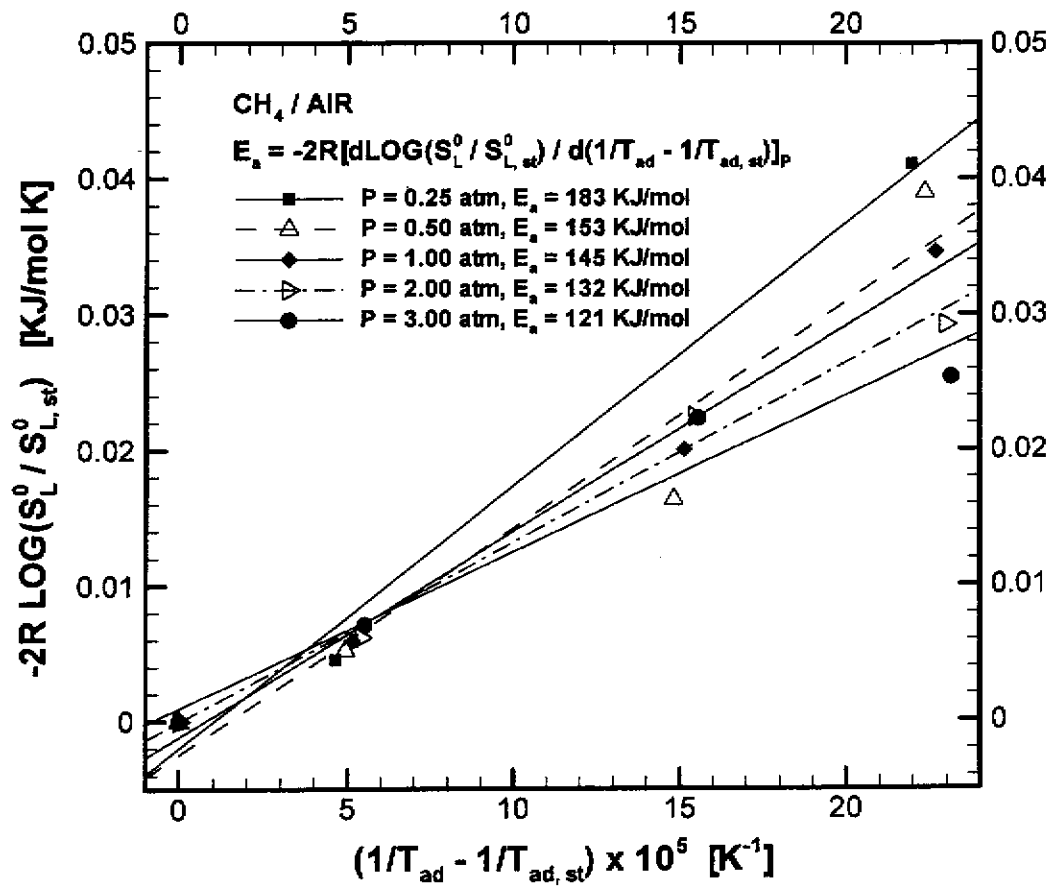


圖 5-17 甲烷-空氣火焰在不同壓力作用下比較活化能的預測結果（圖上符號：Egolfopoulos & Law, 1990）

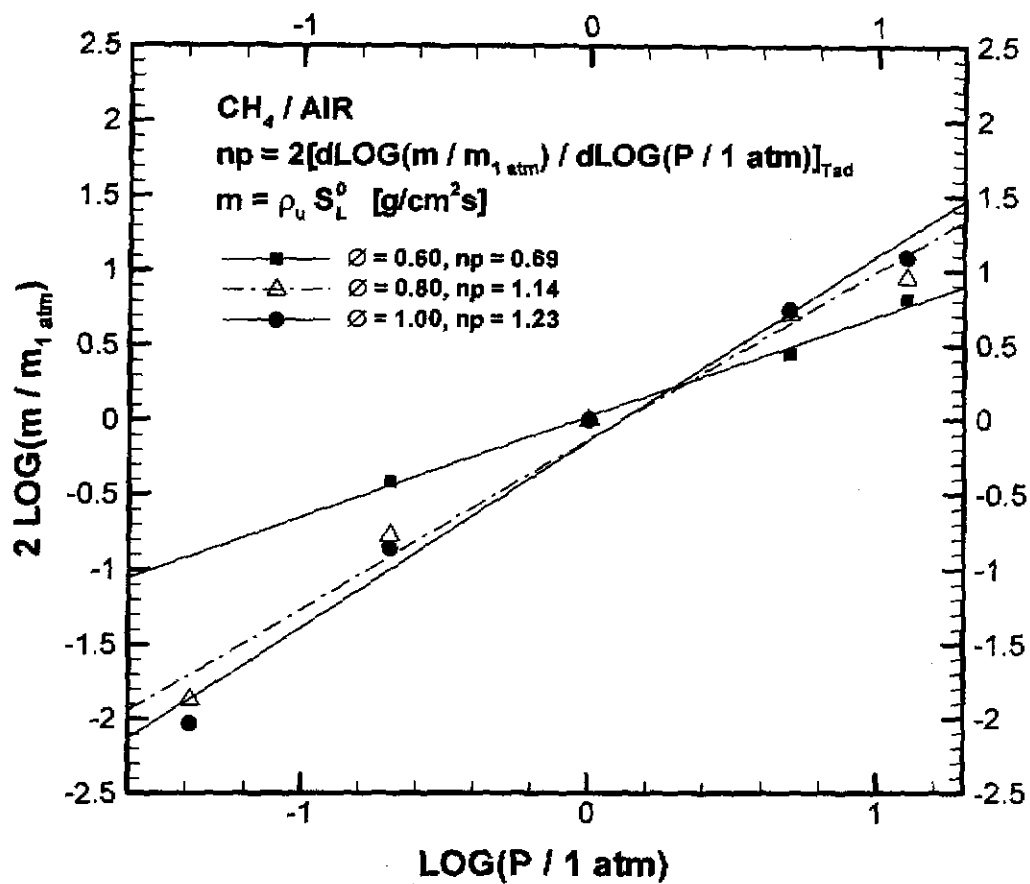


圖 5-18 甲烷-空氣火焰在不同當量值下比較質量燃燒率與壓力間的變化(圖上符號:Egolfopoulos & Law, 1990)

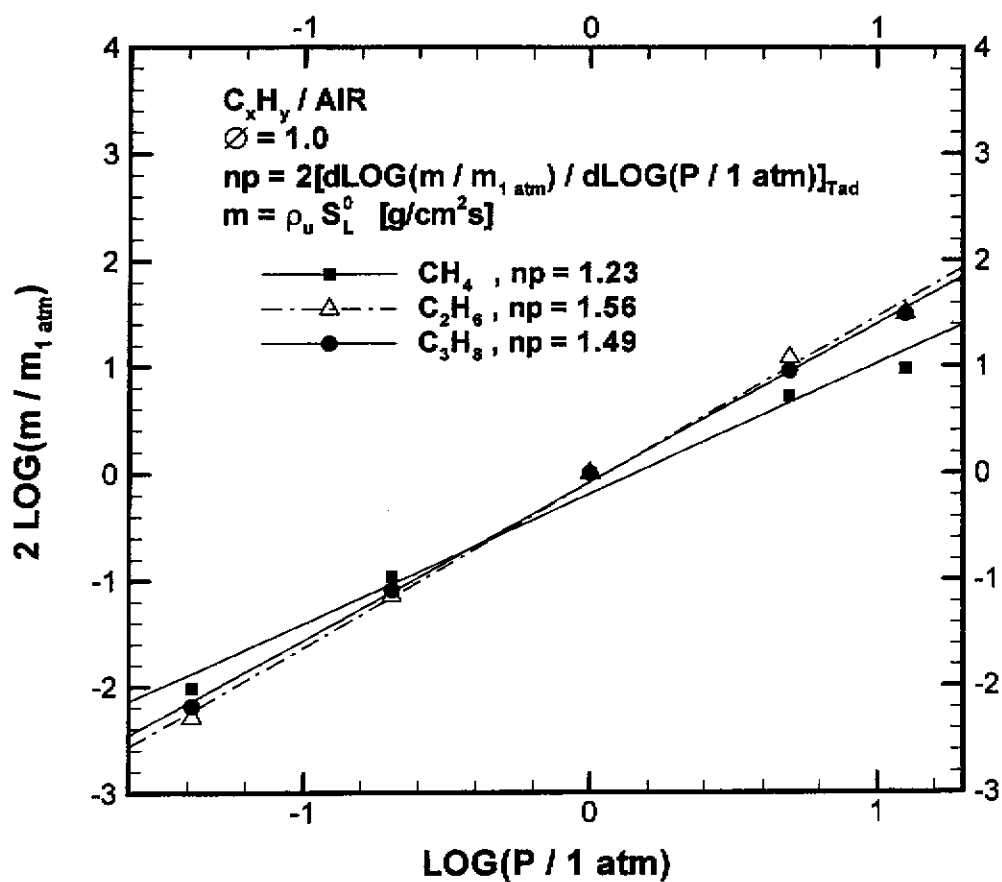


圖 5-19 當量值為 1.0 的碳氫-空氣火焰比較質量燃燒率與壓力間的變化 (圖上符號: Egolfopoulos & Law, 1990; Glassman, 1996)

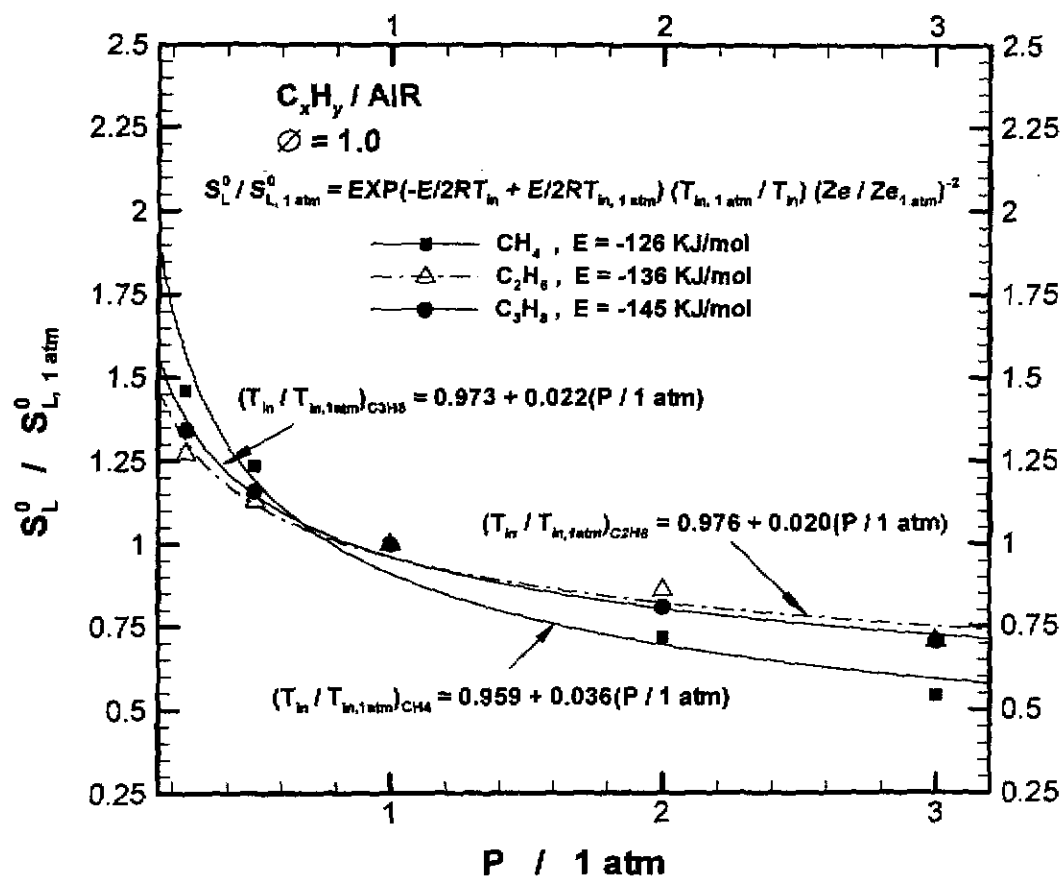


圖 5-20 當量值為 1.0 的碳氫-空氣火焰比較傳播速度與壓力間的變化 (圖上符號: Egolfopoulos & Law, 1990; Glassman, 1996)

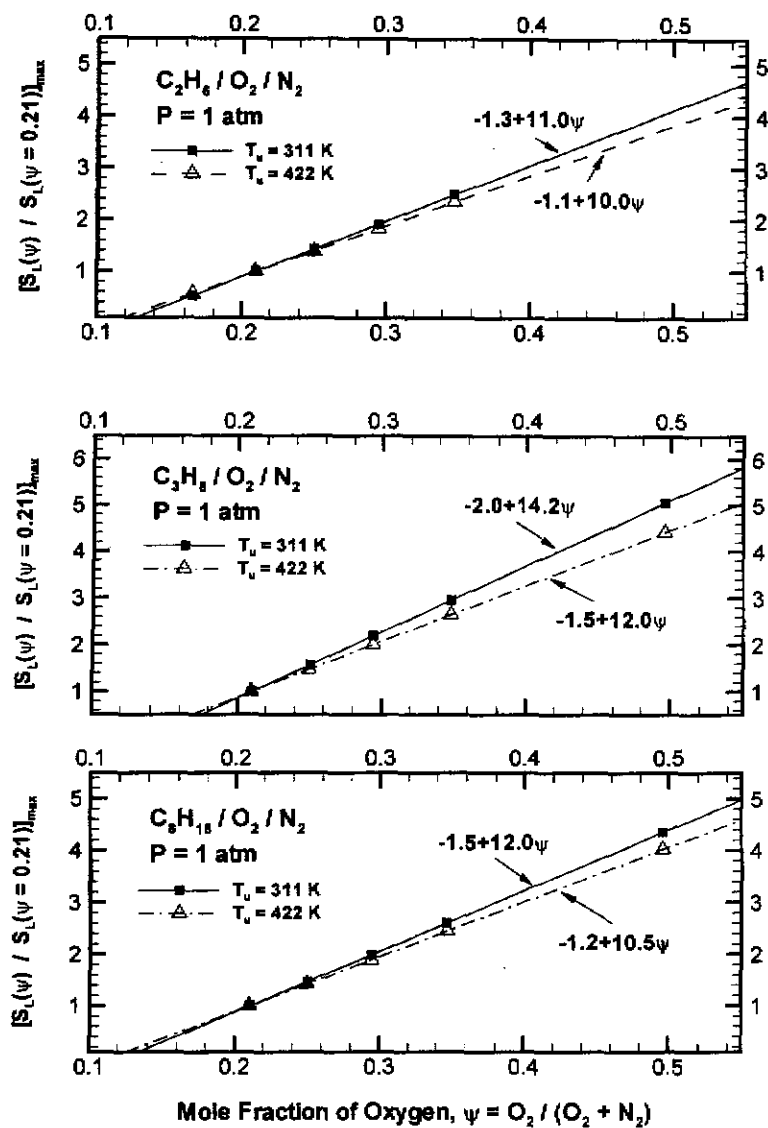


圖 5-21 碳氫火焰在不同預熱溫度下比較傳播速度與氧氣劑量間的變化 (圖上符號: Dugger & Graab, 1953)

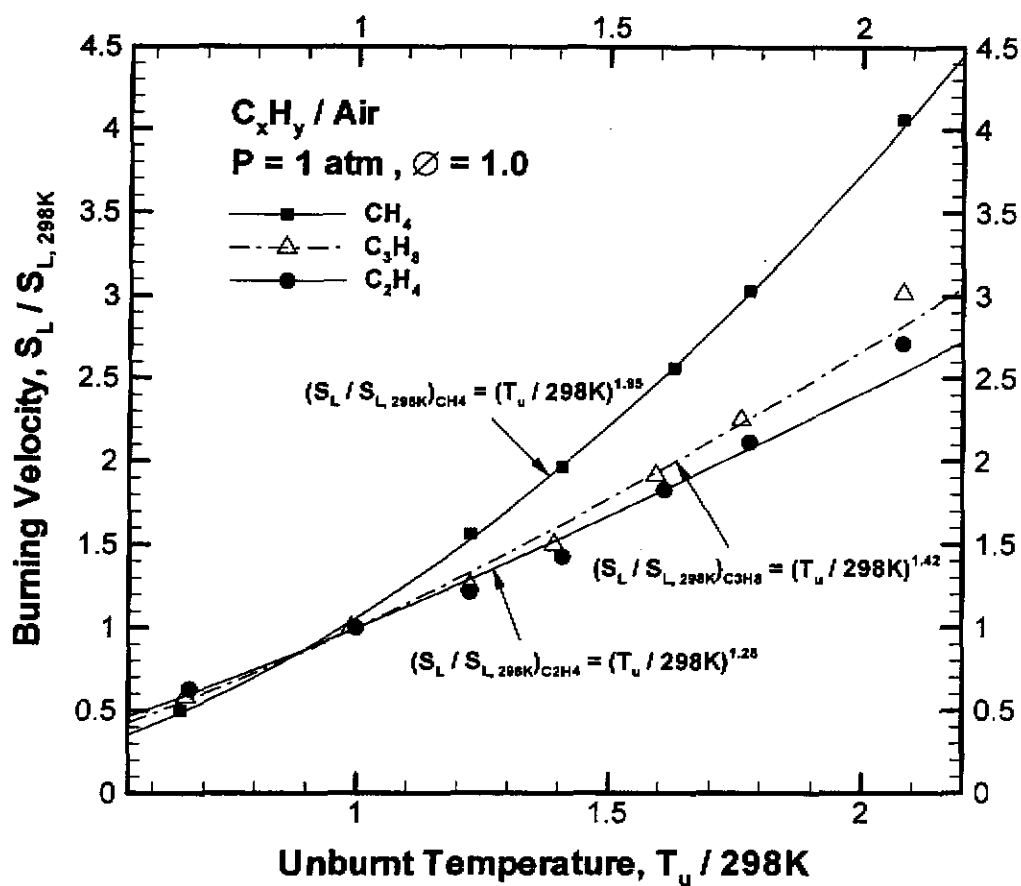


圖5-22 當量值為1.0的碳氫-空氣火焰在定壓下比較燃燒速度與未燃溫度間的變化（圖上符號：Dugger, 1955; Kanury, 1975）

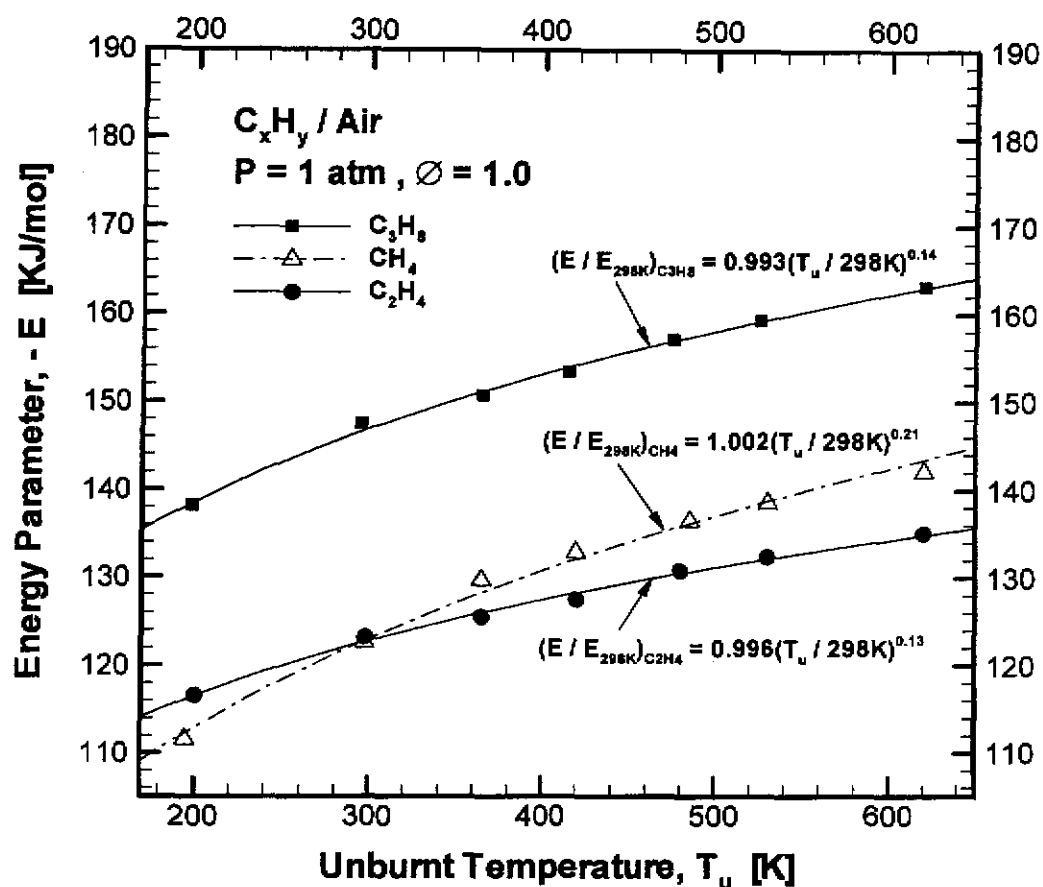


圖 5-23 當量值為 1.0 的碳氫-空氣火焰在定壓下比較能量參數 E 與未燃溫度間的變化(圖上符號:Dugger, 1955; Kanury, 1975)

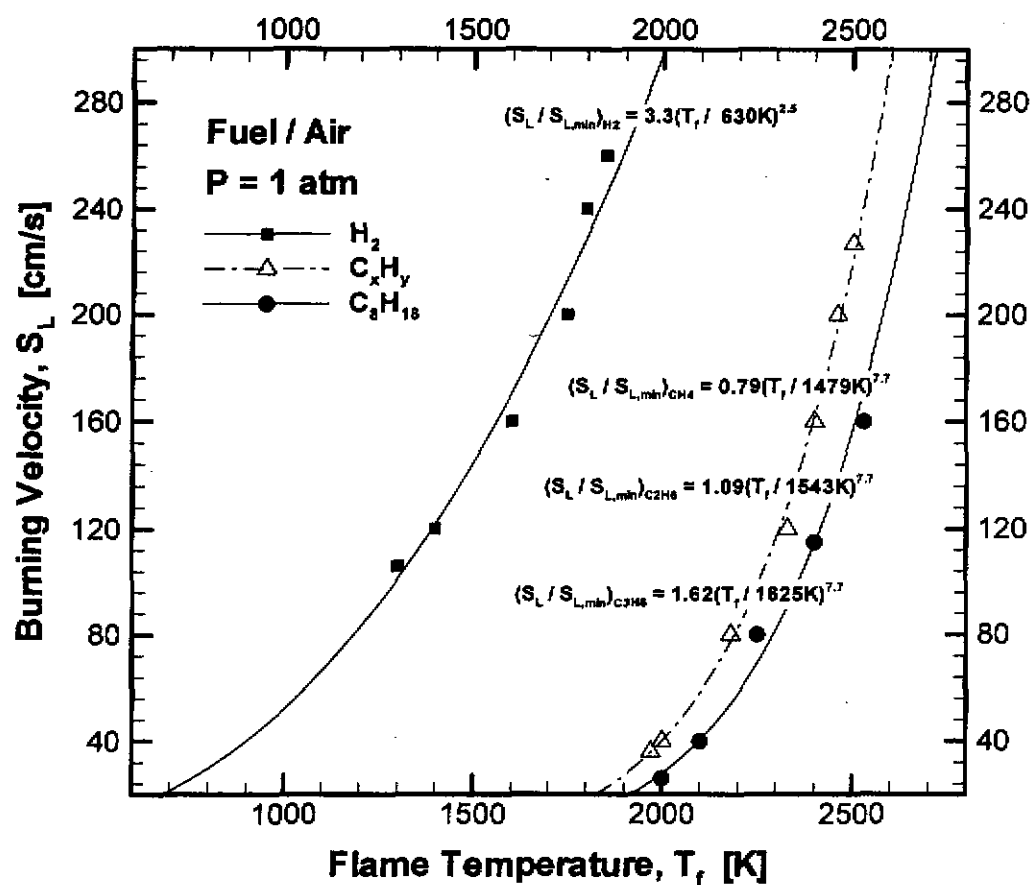


圖 5-24 火焰在定壓下比較燃燒速度與火焰溫度間的變化
(圖上符號：Bartholome (1949); Kanury, 1975)

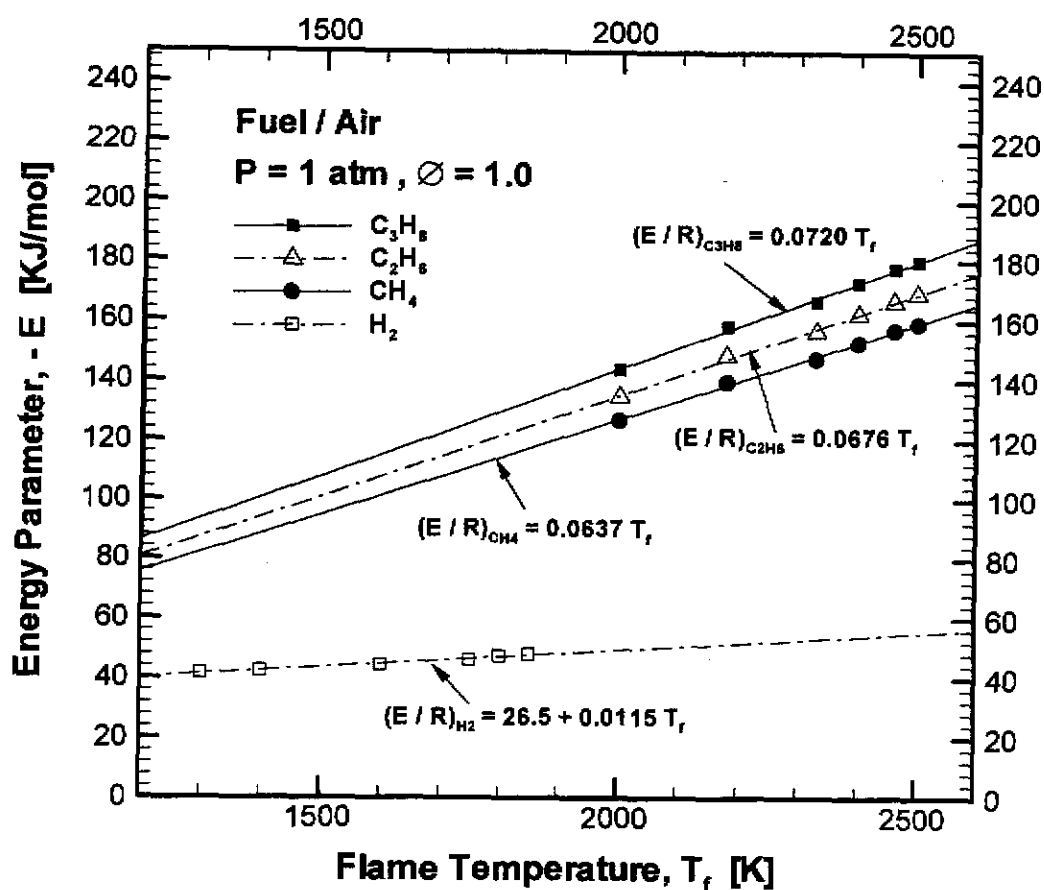


圖 5-25 當量值為 1.0 的火焰在定壓下比較能量參數 E 與火焰溫度間的變化 (圖上符號: Bartholome (1949); Kanury, 1975)

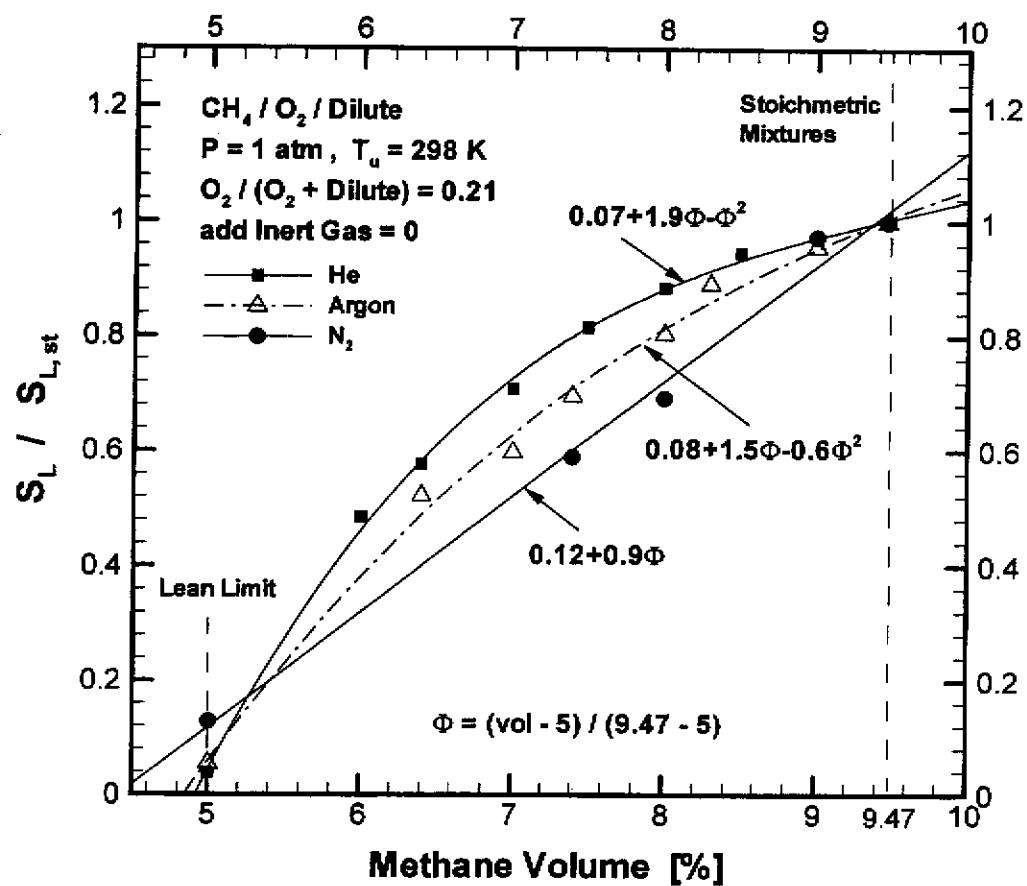


圖 5-26 甲烷在不同氣體稀釋下比較火焰傳播速度與燃料劑量間的關係（圖上符號：Clingman, 1953）

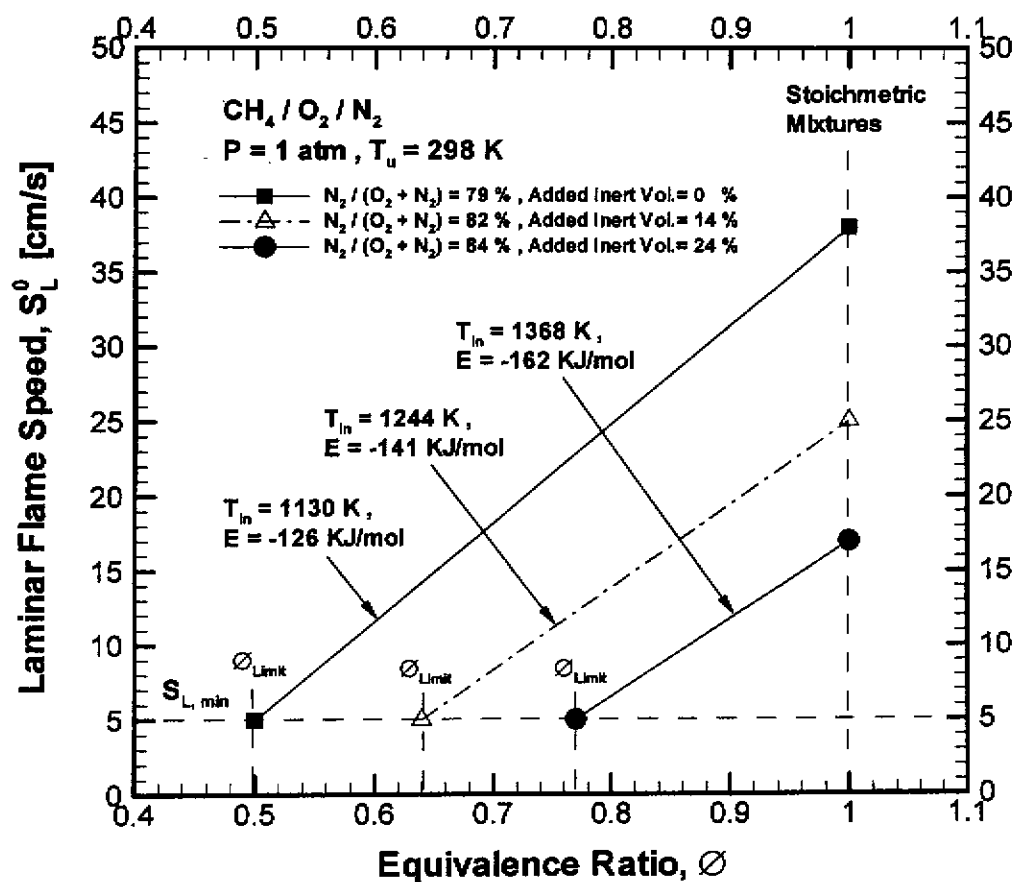


圖 5-27 甲烷-氧氣-氮氣火焰在不同氮氣劑量下比較傳播速度與當量值間的變化 (圖上符號: Egolfopoulos & Law, 1990)

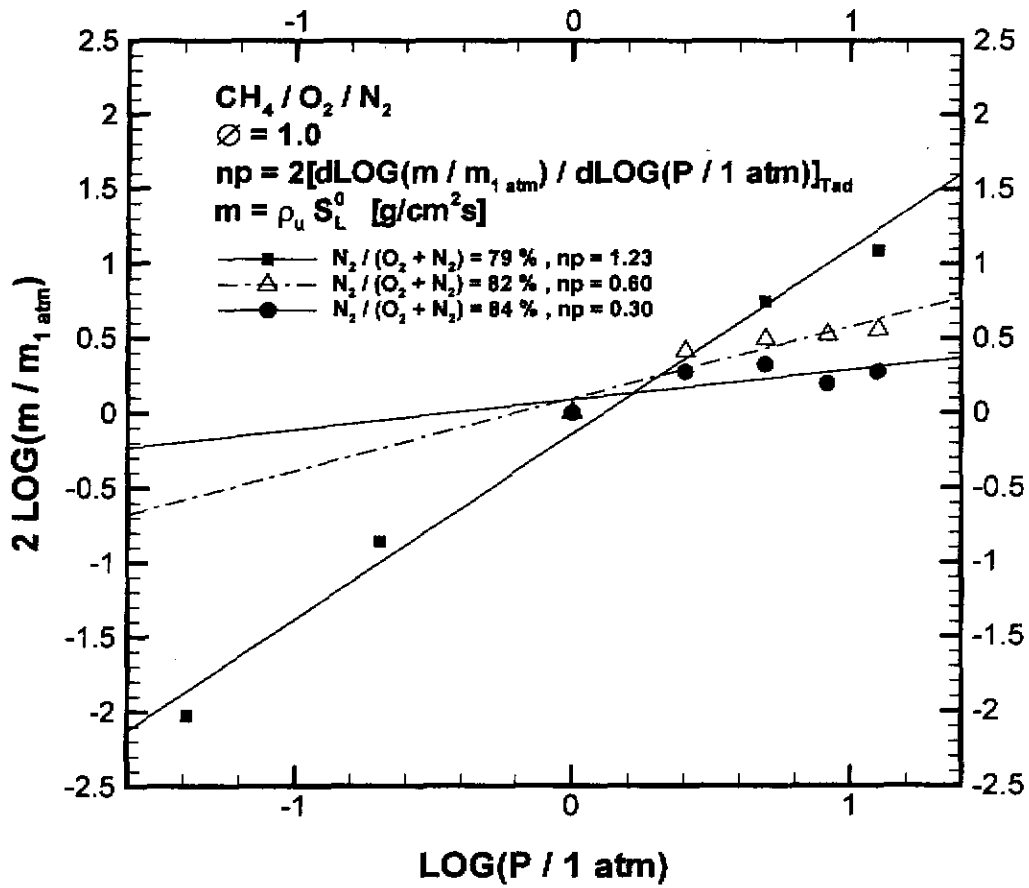


圖 5-28 當量值為 1.0 的甲烷-氧氣-氮氣火焰在不同氮氣劑量下比較質量燃燒率與壓力間的變化（圖上符號：Egolfopoulos & Law, 1990）

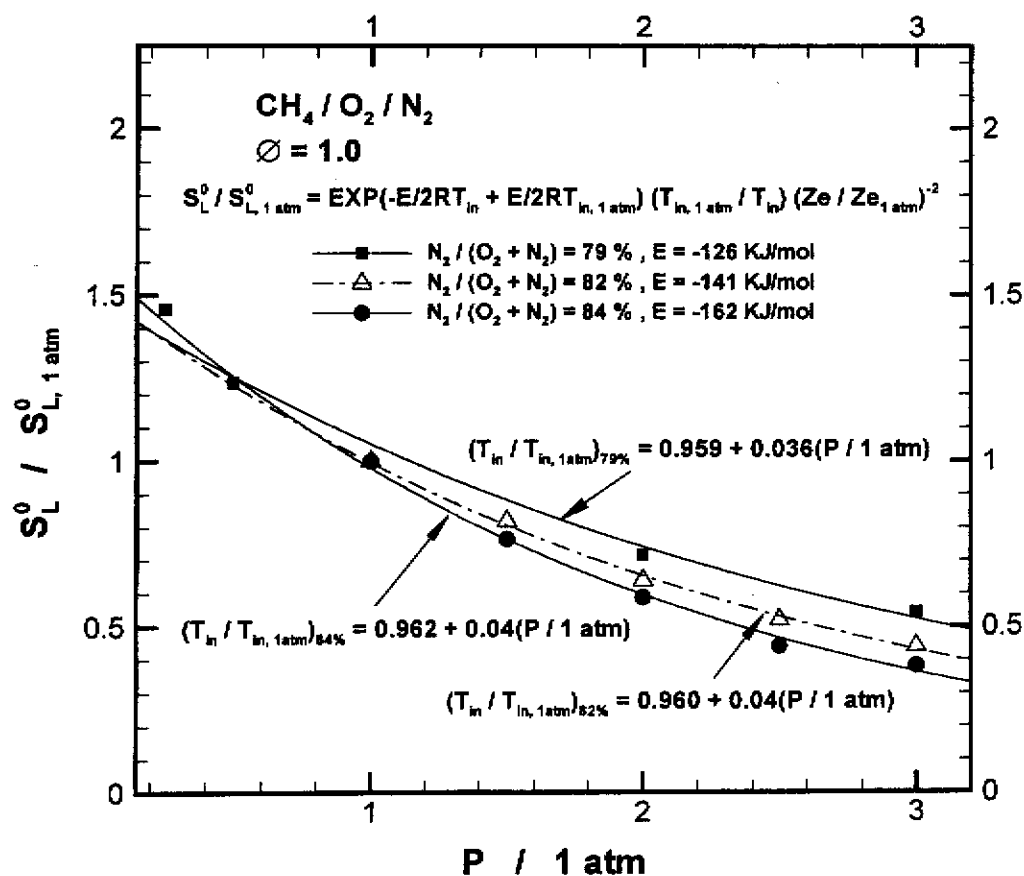


圖 5-29 當量值為 1.0 的甲烷-氧氣-氮氣火焰在不同氮氣劑量下比較傳播速度與壓力間的變化（圖上符號：Egolfopoulos & Law, 1990）

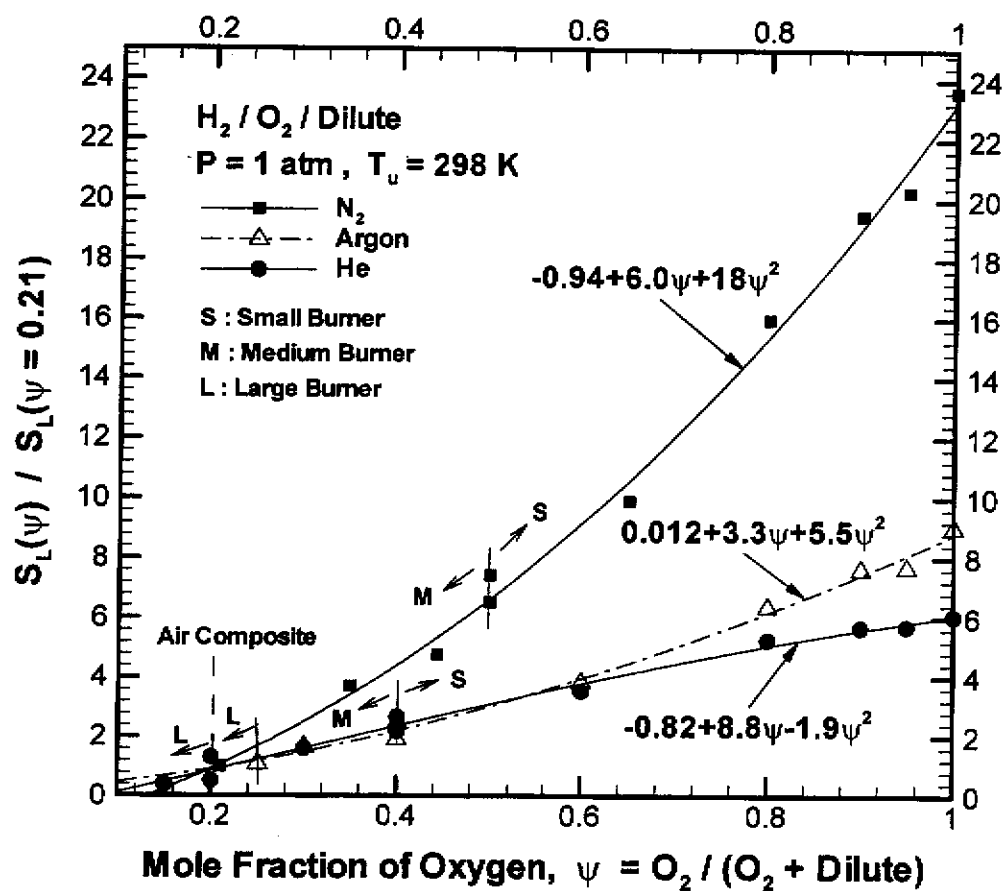


圖 5-30 氫氣在不同氣體稀釋下比較傳播速度與氧氣劑量間的變化 (圖上符號: Morgan & Kane, 1953)

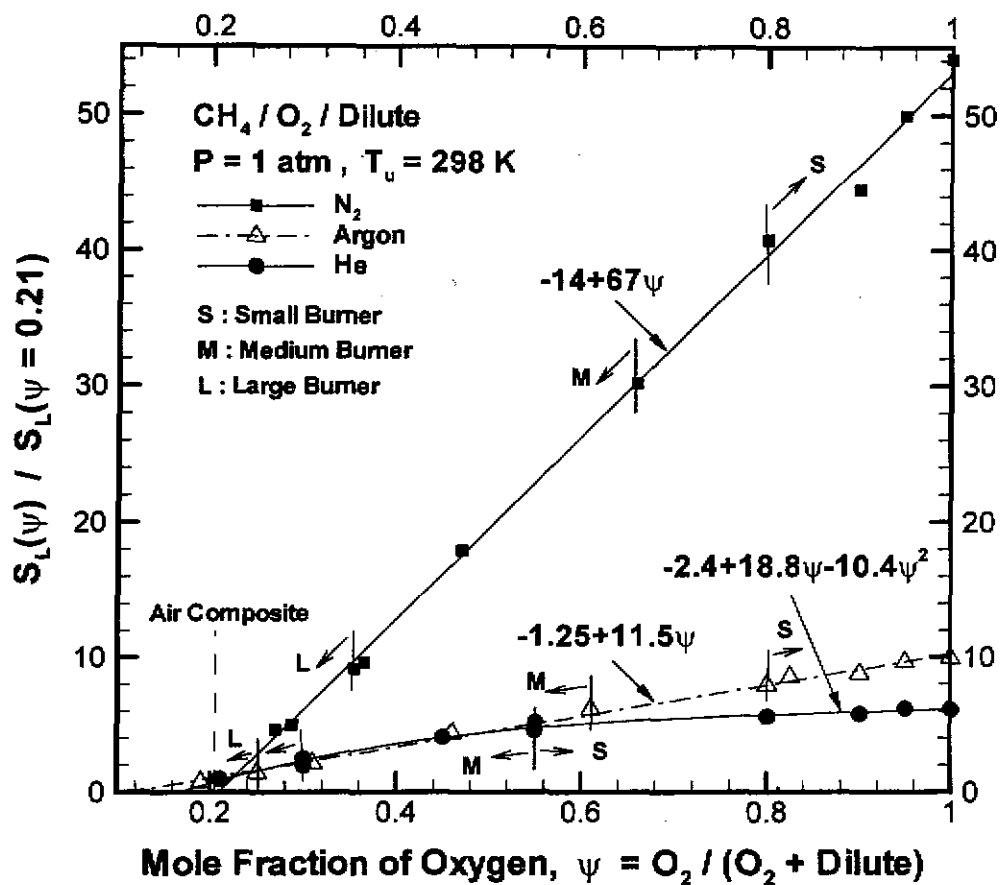


圖5-31 甲烷在不同氣體稀釋下比較傳播速度與氧氣劑量間的變化 (圖上符號: Morgan & Kane, 1953)

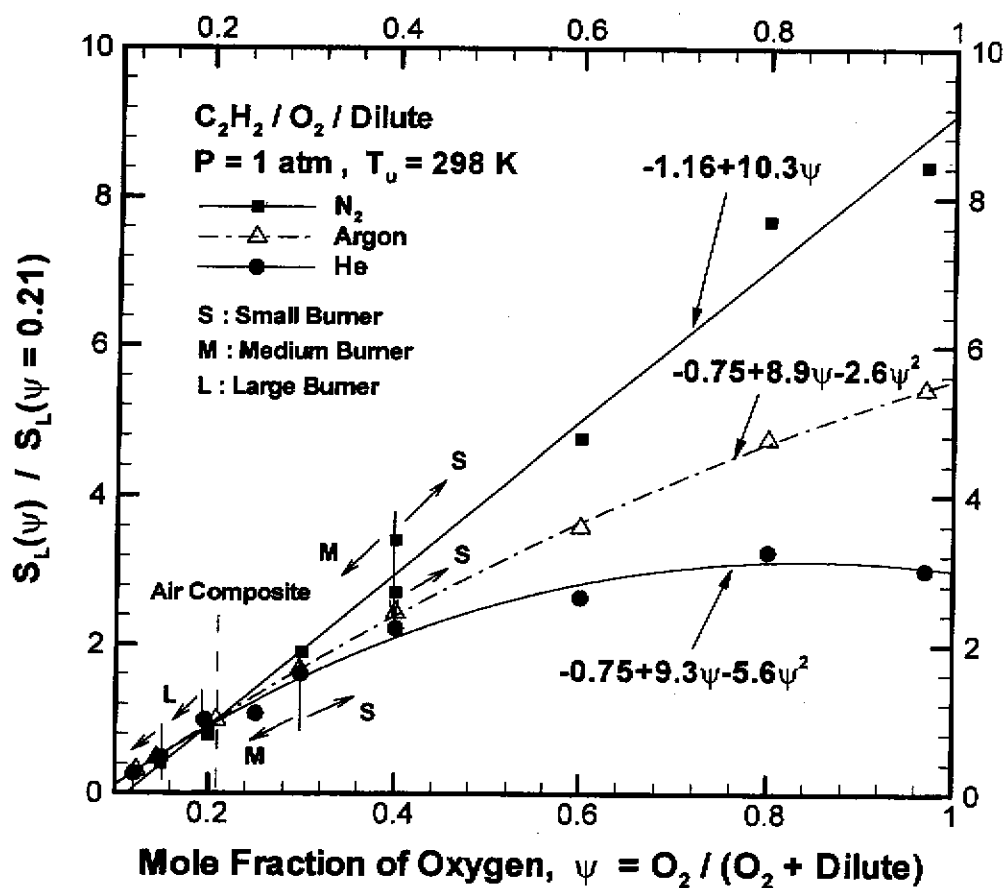


圖 5-32 乙炔在不同氣體稀釋下比較傳播速度與氧氣劑量間的變化 (圖上符號: Morgan & Kane, 1953)

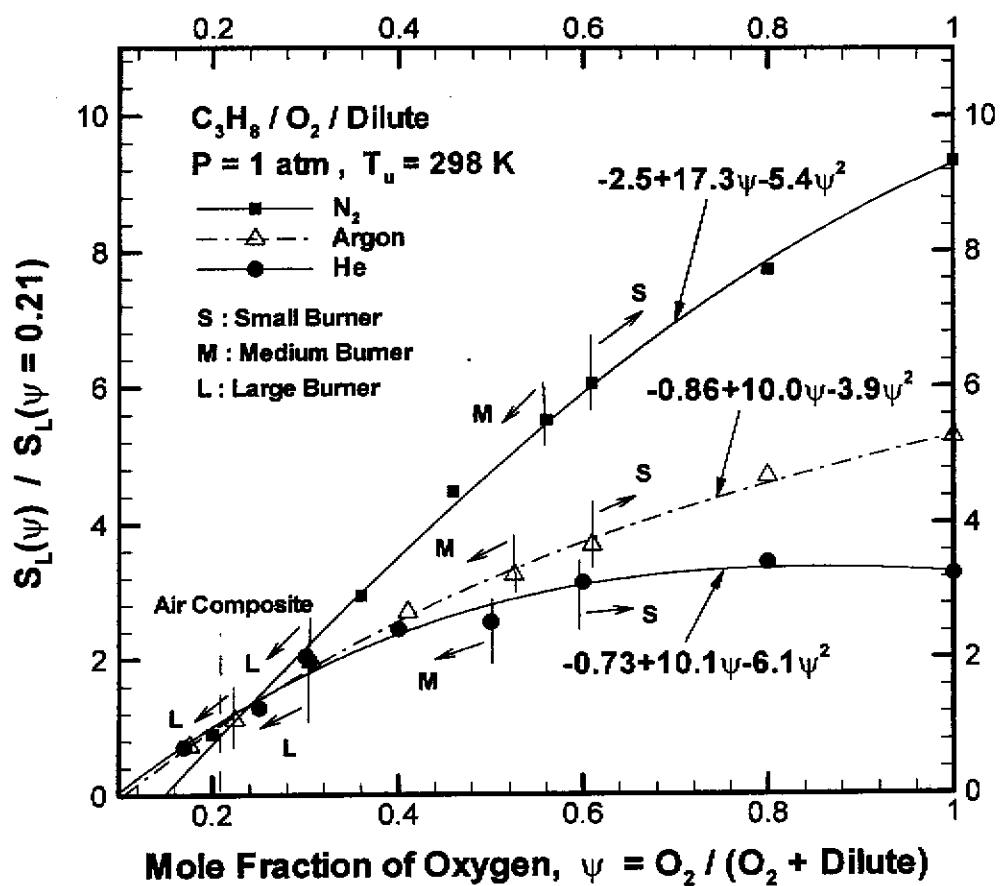


圖 5-33 丙烷在不同氣體稀釋下比較傳播速度與氧氣劑量間的變化 (圖上符號: Morgan & Kane, 1953)

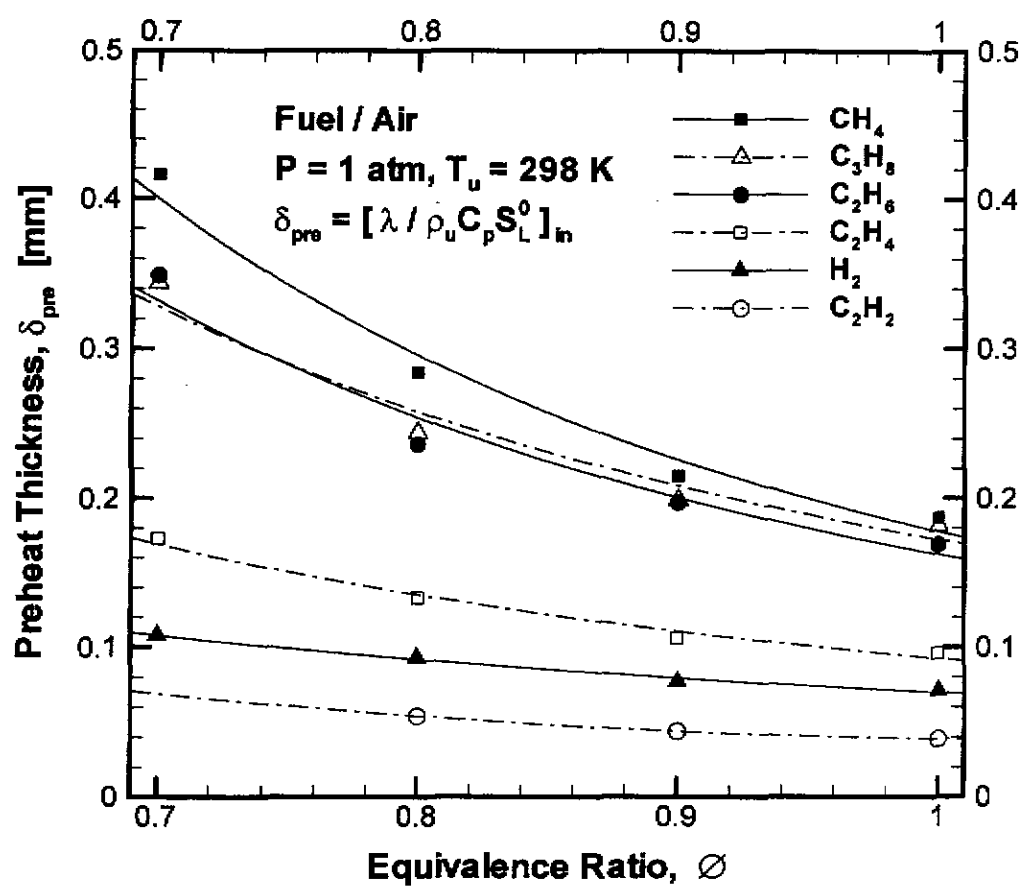


圖 5-34 比較不同燃料之預熱區厚度與當量值間的變化

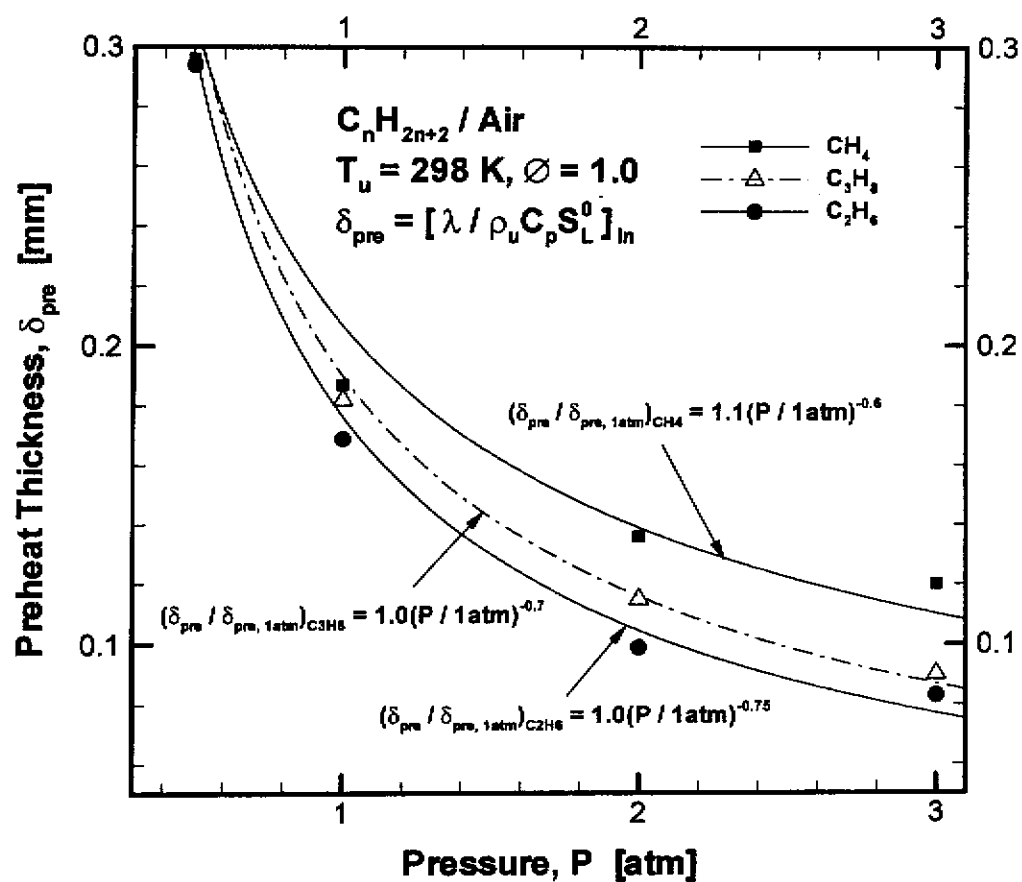


圖 5-35 當量值為 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰比較預熱區厚度與壓力間的變化

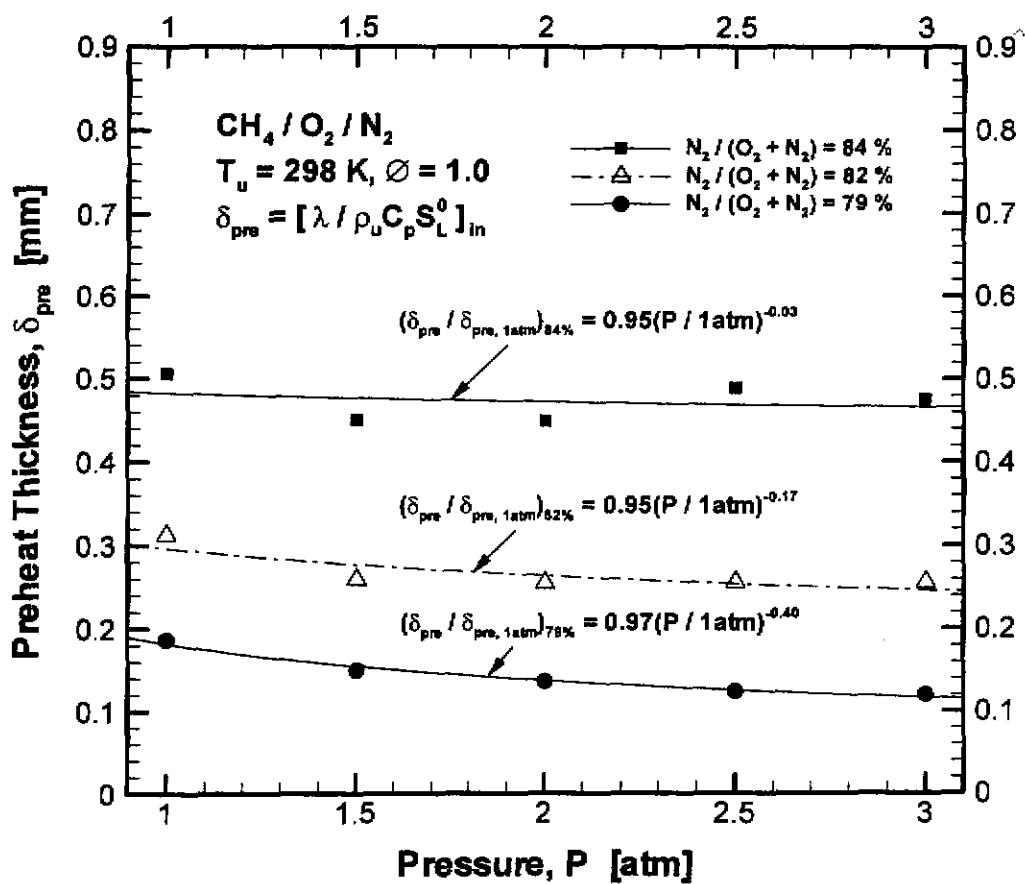


圖 5-36 當量值為 1.0 的甲烷火焰觀察預熱區厚度受稀釋氣體劑量的影響

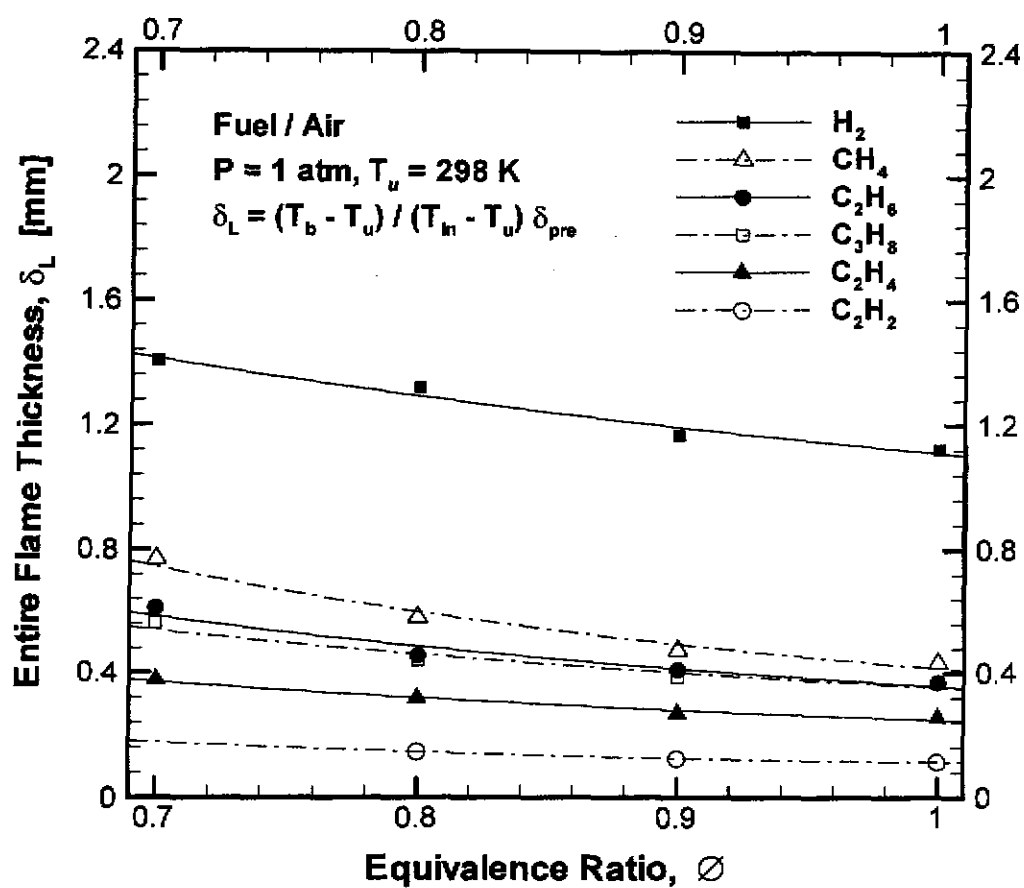


圖 5-37 比較不同燃料之火焰厚度與當量值間的變化

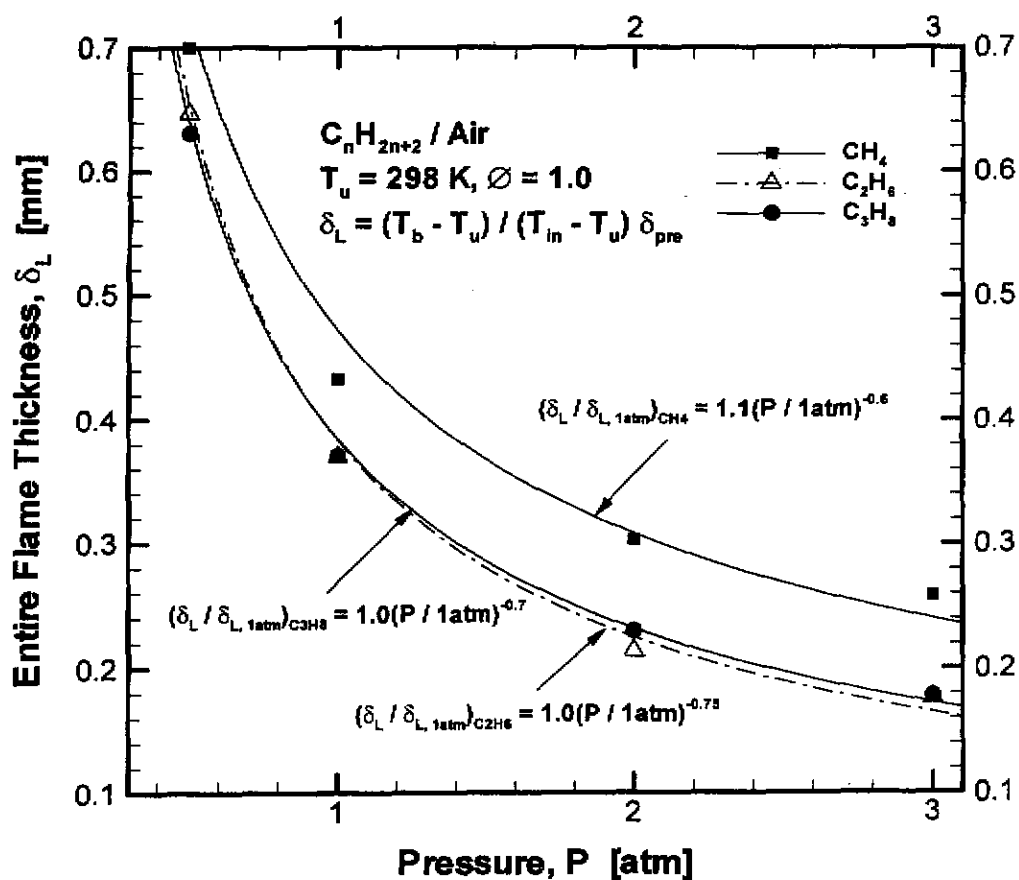


圖 5-38 當量值為 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰比較火焰厚度與壓力間的變化

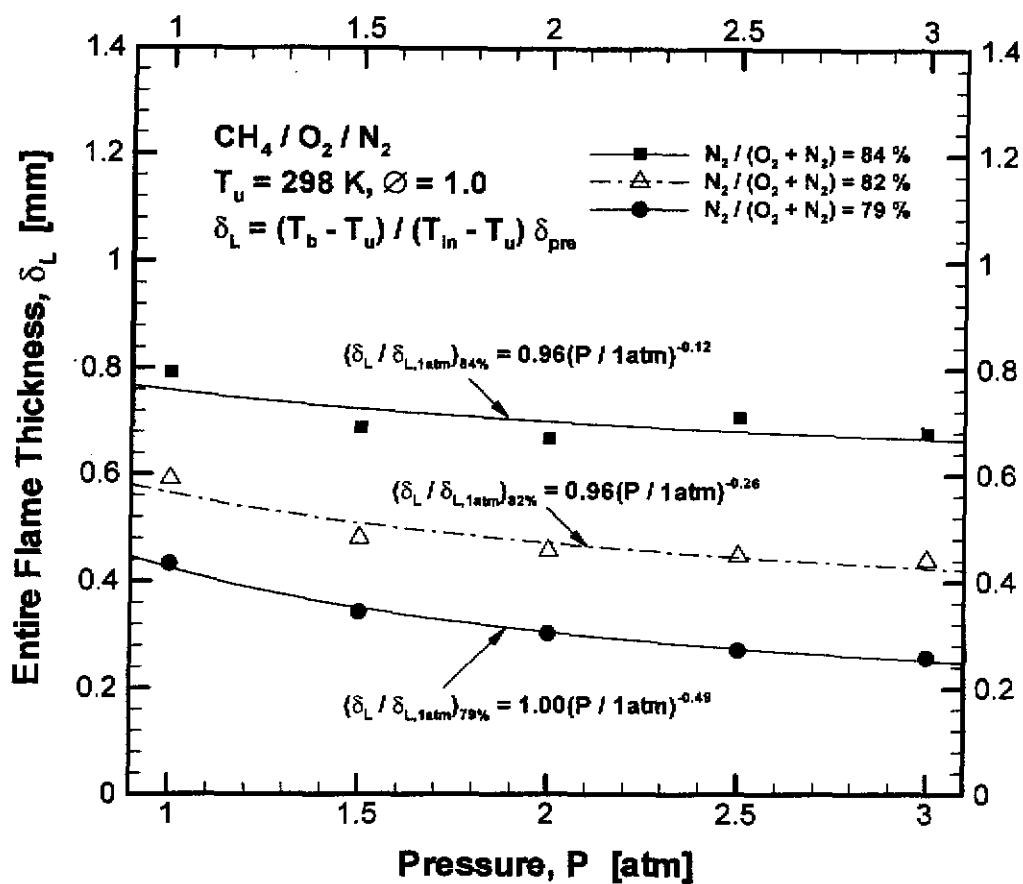


圖 5-39 當量值為 1.0 的甲烷火焰觀察火焰厚度受稀釋氣體劑量的影響

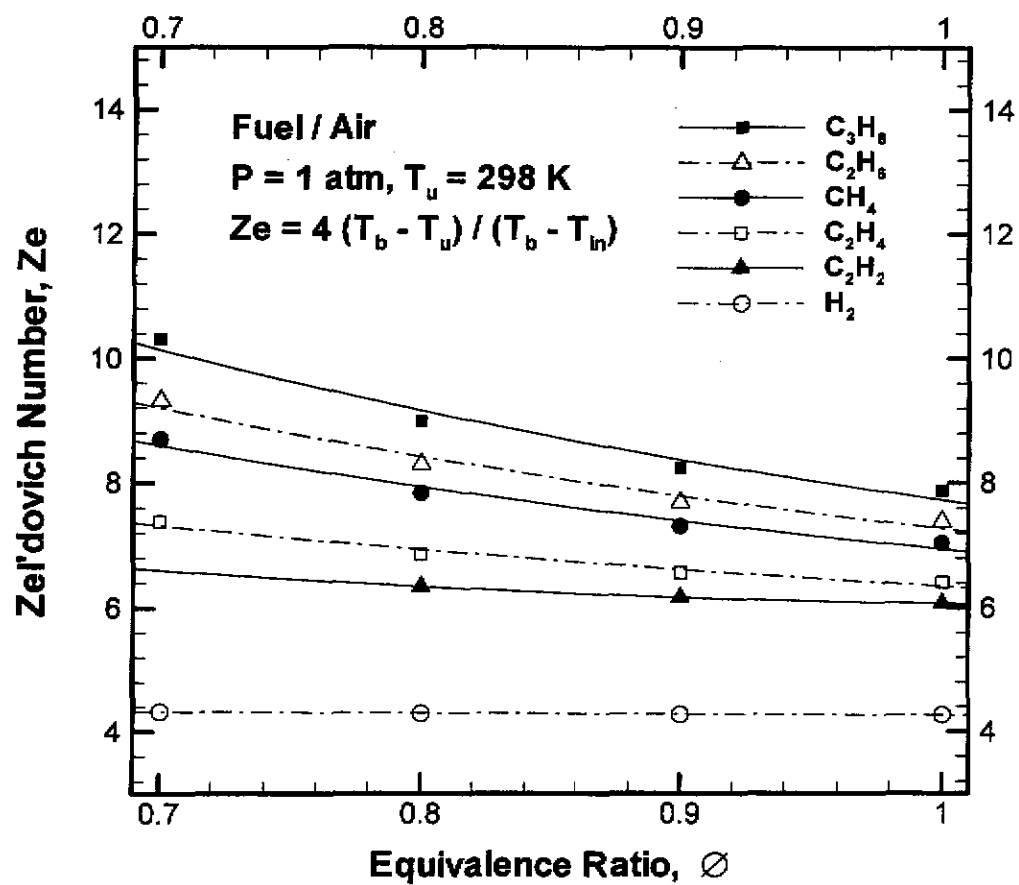


圖 5-40 比較不同燃料之 Ze 值與當量值間的變化

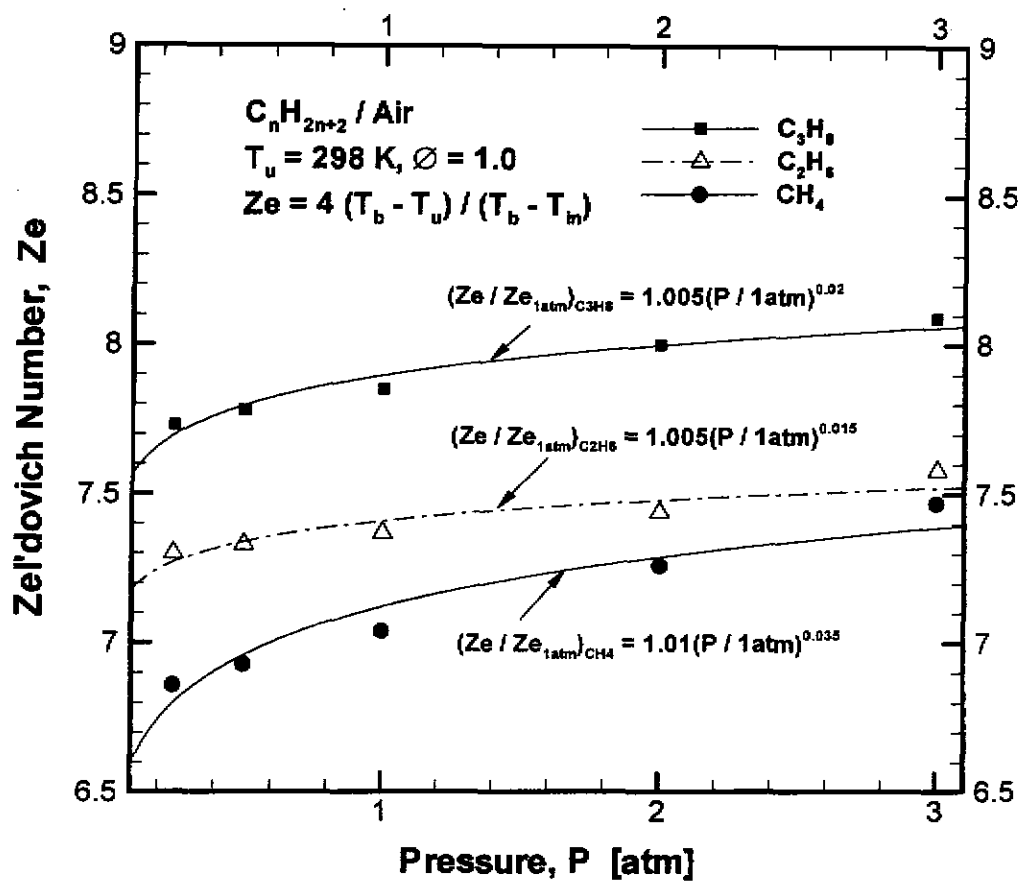


圖 5-41 當量值為 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰比較 Ze 值與壓力間的變化

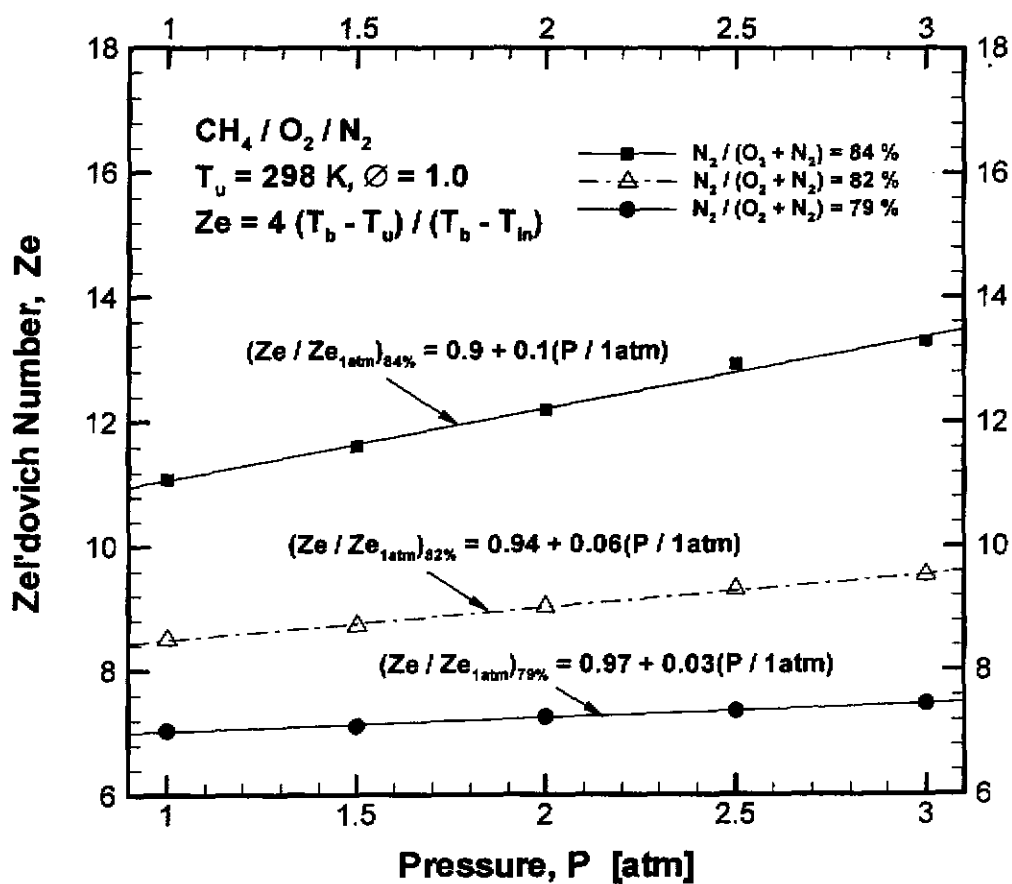


圖 5-42 當量值為 1.0 的甲烷火焰觀察 Ze 值受稀釋氣體劑量的影響

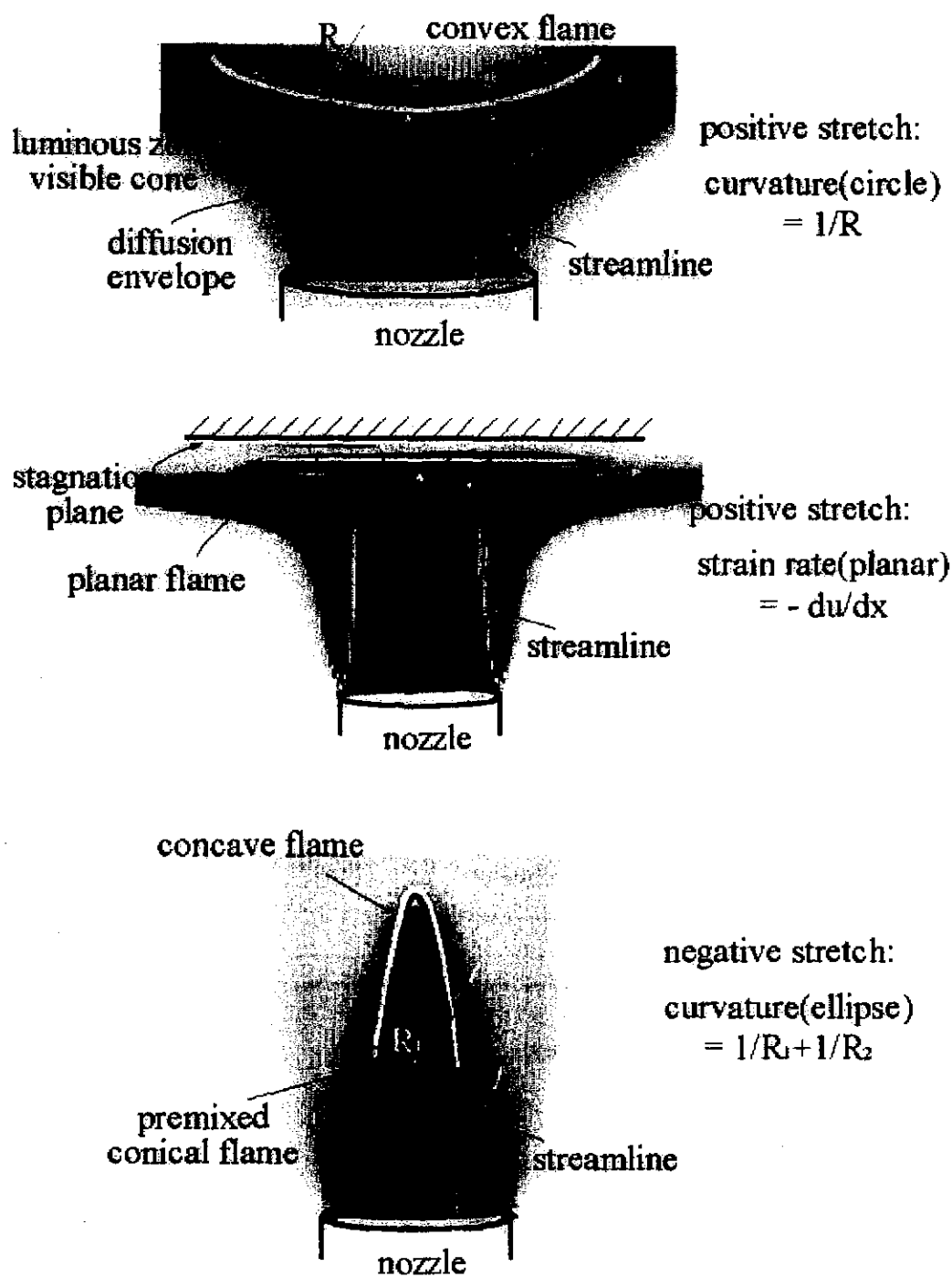


圖 5-43 流體與擴散效應在不同火焰前緣的作用情形
(Law & Ma, 2001)

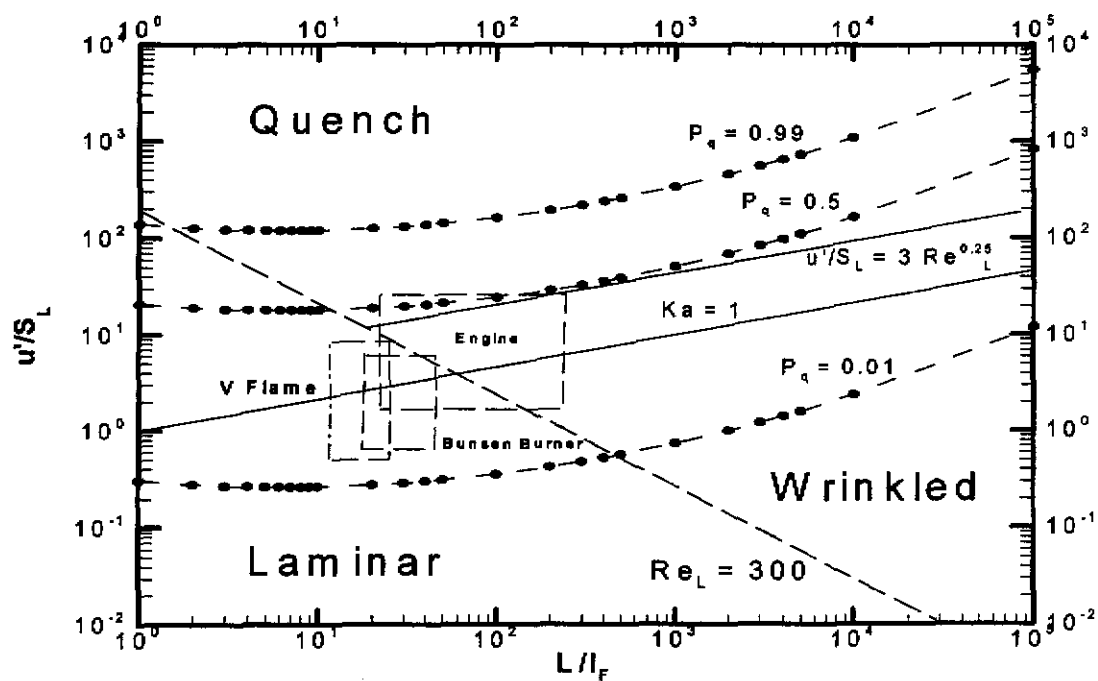


圖 5-44 預混燃燒相圖 (Ma & Law, 1997)

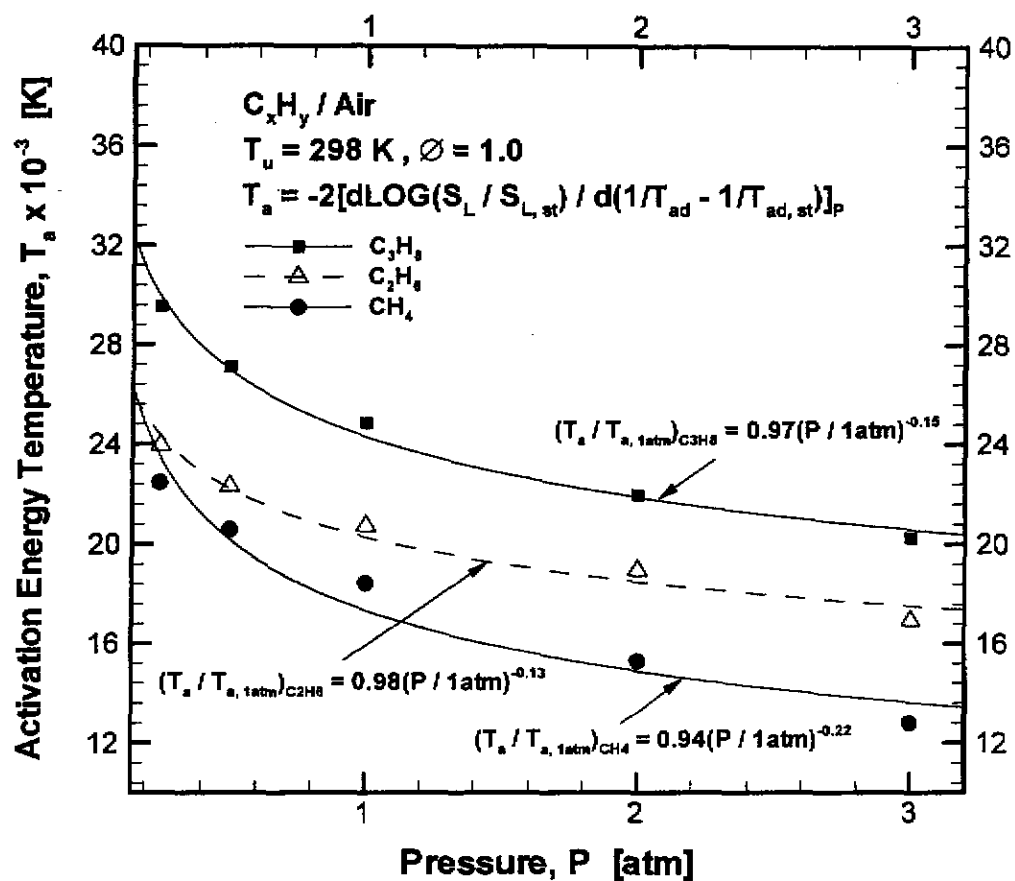


圖5-45 當量值為1.0的烷類碳氫-空氣火焰比較活化能溫度與壓力間的變化

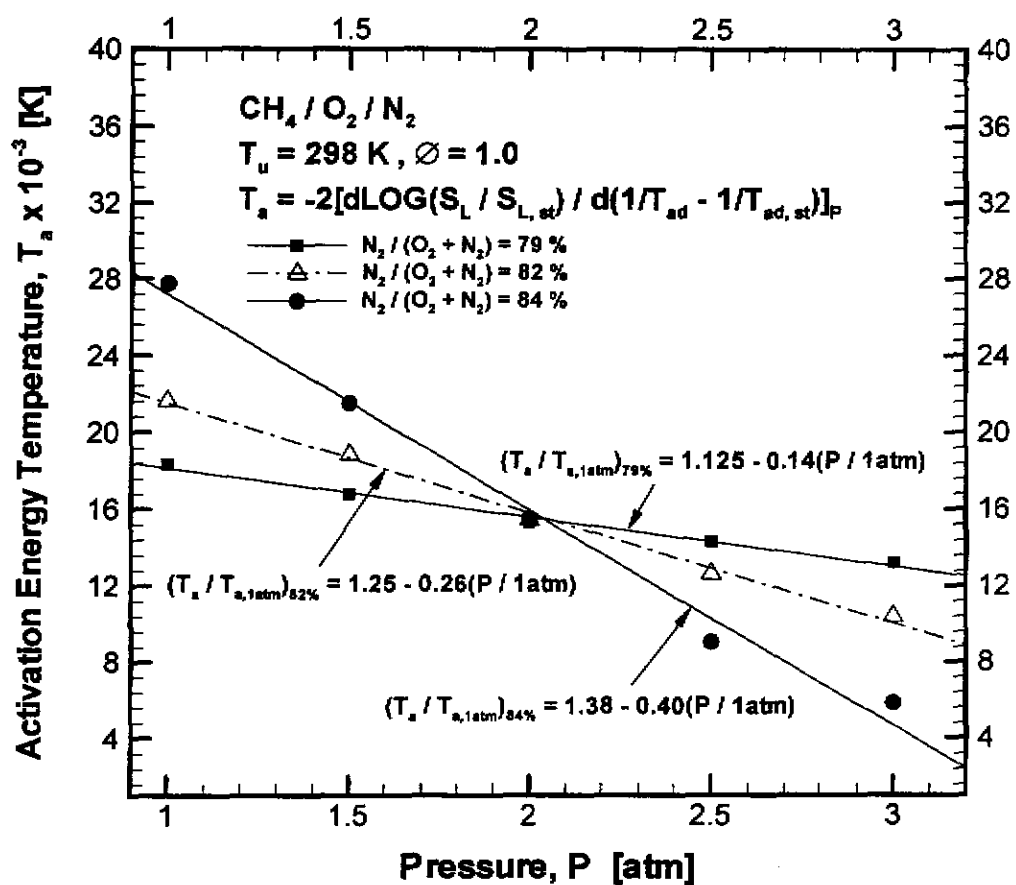


圖 5-46 當量值為 1.0 的甲烷火焰觀察活化能溫度受稀釋氣體劑量的影響

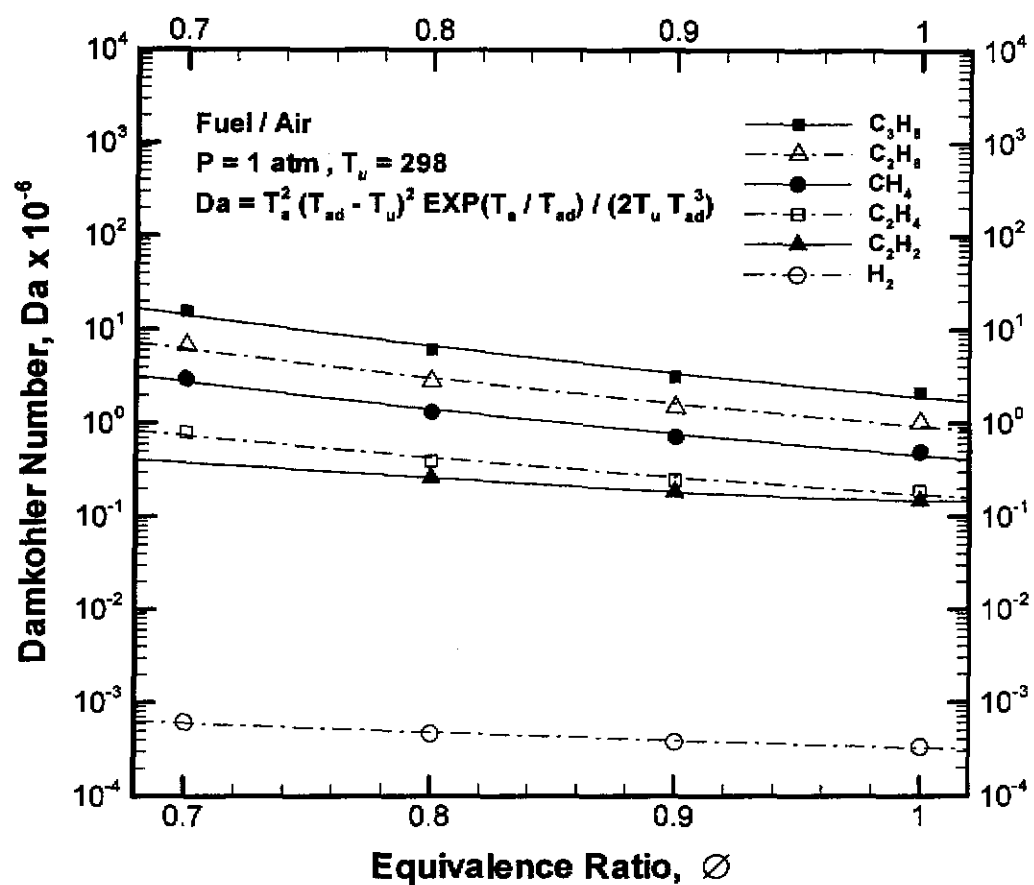


圖 5-47 比較不同燃料之 Da 值與當量值間的變化

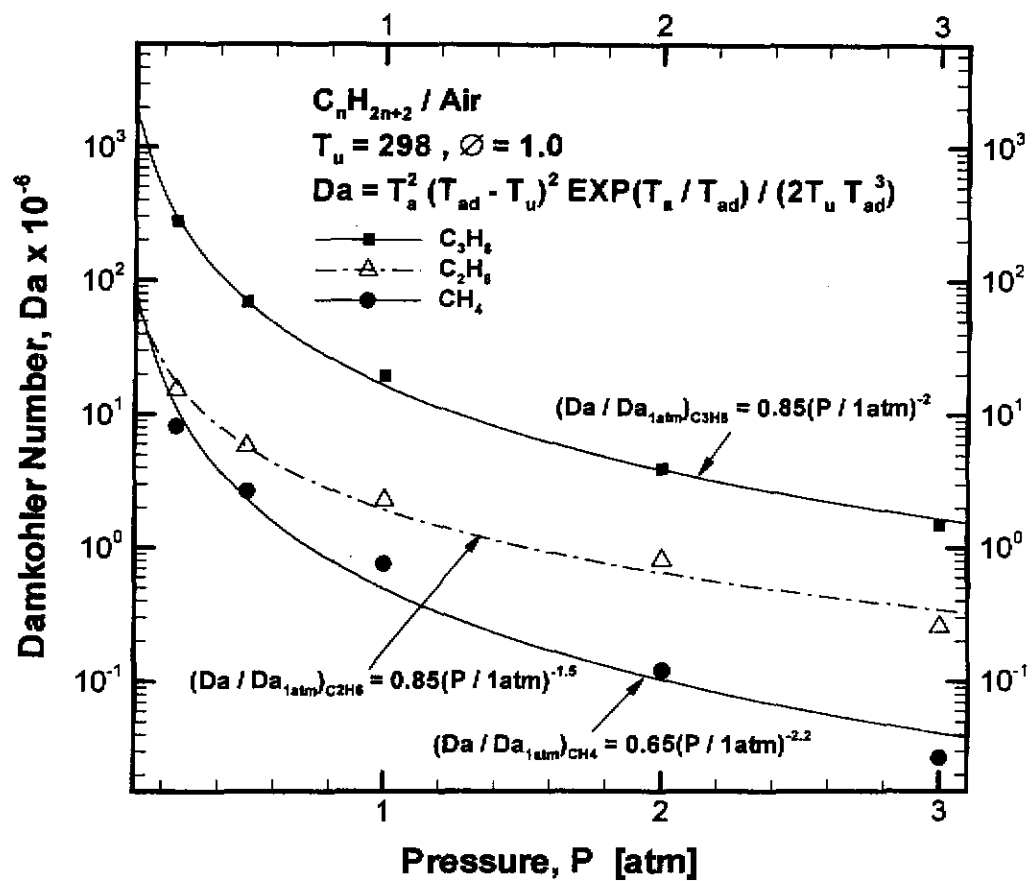


圖 5-48 當量值為 1.0 的烷類碳氫-空氣火焰比較 Da 值與壓力間的變化

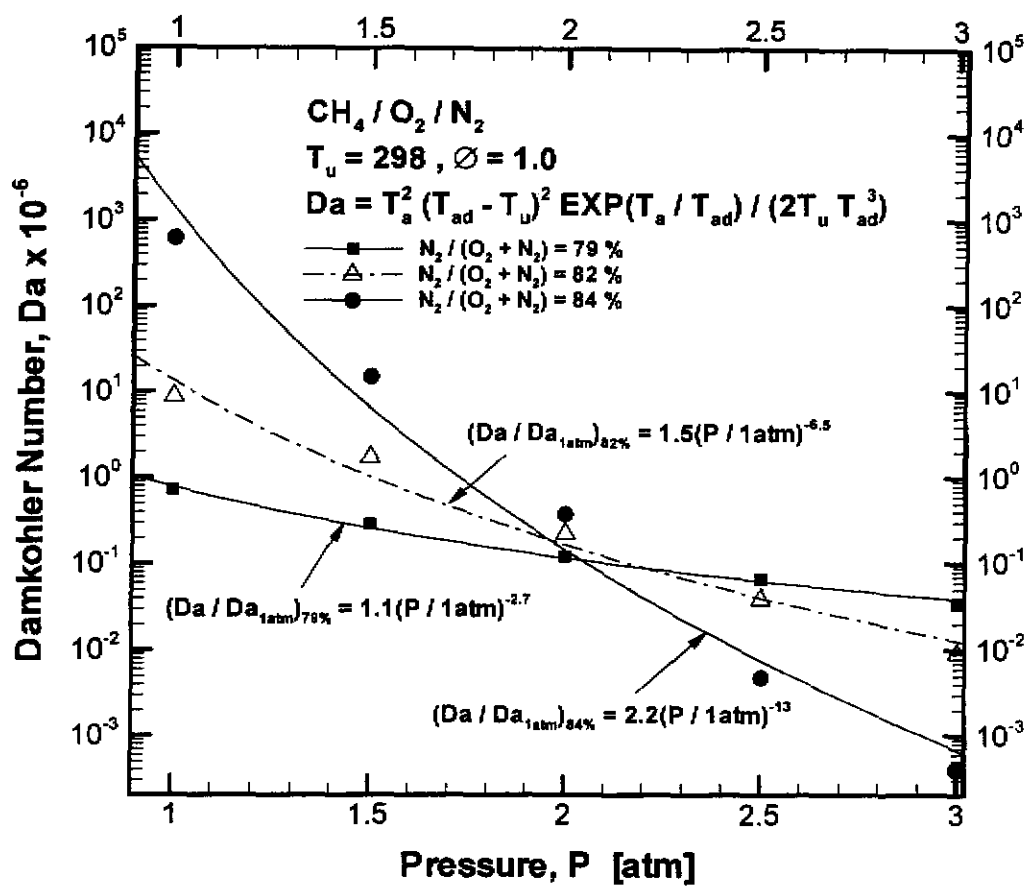


圖 5-49 當量值為 1.0 的甲烷火焰觀察 Da 值受稀釋氣體劑量的影響

附錄 A

傳輸性質 (Transport Property)

本附錄將針對廣泛的氣體種類，將燃燒研究上常用的黏滯性、熱傳導以及質量擴散性整理列表，而資料的主要來源

1. Kanury, A. M.: *Introduction to Combustion Phenomena*, Gordon and Breach, New York pp.382-387 (1975).
2. David, R. L.: *Handbook of Chemistry and Physics (75th Edition)*, pp.5-48~6-255 (1995).

A.1 黏滯性

常見氣體的黏滯性可視為溫度的函數，除非另外註明，這些數據是針對壓力 101 kPa (1 bar)。符號 P=0 表示黏滯性的低壓極限值，一般而言它與一大氣壓的值相差不超過 1%。

性質、溫度 氣體種類	黏滯性， $\mu \times 10^5$ [g/cm s]							Ref.
	300 K	400 K	500 K	600 K	800 K	1000 K	1200 K	
Air	18.6	23.1	27.1	30.8	36.9	41.4	44.4	1, 2
Argon	22.9	28.8	34.2	39	47.0	52.8	56.4	2
HCl	14.6	19.7	24.3	28.4	35.1	39.8	42.5	2
SF ₆ (P=0)	15.3	19.8	23.9	27.7	34.2	39.3	43.0	2
H ₂ (P=0)	9.0	10.9	12.7	14.4	17.5	20.2	22.5	1, 2
H ₂ O	10.0	13.3	17.3	21.4	31.1	42.3	55.2	2
He (P=0)	20.0	24.4	28.4	32.3	39.2	45.1	50.1	2
Kr (P=0)	25.6	33.1	39.8	45.9	55.9	63.1	67.6	2
NO	19.2	23.8	28.0	31.9	38.6	43.9	47.8	2
N ₂ (P=0)	17.9	22.2	26.1	29.6	35.4	39.6	42.2	1, 2
N ₂ O	15.0	19.4	23.6	27.4	34.2	39.8	44.2	2

Ne (P=0)	32.1	38.9	45.0	50.8	60.7	68.7	74.6	2
O ₂ (P=0)	20.8	26.1	30.8	35.1	42.1	47.1	50.2	2
SO ₂	12.9	17.5	21.7	25.5	31.9	36.7	39.9	2
Xe (P=0)	23.2	30.7	37.6	44.0	55.1	64.0	70.7	2
CO	17.8	22.1	25.8	29.1	34.1	37.1	38.2	2
CO ₂	15.0	19.7	24.0	28.0	34.9	40.4	44.5	1, 2
CHCl ₃	10.2	13.7	16.9	20.1	25.9	31.1	35.8	2
CH ₄	11.2	14.3	17.0	19.4	23.1	25.4	26.3	1, 2
CH ₃ OH	-	13.2	16.5	19.6	25.2	30.0	34.0	2
C ₂ H ₂	10.4	13.5	16.5	19.4	24.9	30.0	34.7	2
C ₂ H ₄	10.4	13.6	16.5	19.1	23.4	26.5	28.4	2
C ₂ H ₆	9.5	12.3	14.9	17.3	21.5	24.9	27.5	2
C ₂ H ₅ OH	-	11.6	14.5	17.0	20.8	23.0	23.6	2
C ₃ H ₆	8.8	11.4	14.3	17.8	-	-	-	1
C ₃ H ₆ O	6.2	10.2	13.1	15.3	-	-	-	1
C ₃ H ₈	8.3	10.9	13.4	15.8	20.3	24.4	28.1	2
C ₄ H ₁₀	7.5	10.0	12.3	14.6	18.8	22.6	26.1	2
C ₄ H ₁₀ O	7.6	10.1	12.4	14.5	18.1	20.9	22.9	2
C ₅ H ₁₂	6.7	9.2	11.4	13.4	16.6	18.8	20.0	2
C ₆ H ₆	7.9	10.3	12.6	15.2	-	-	-	1
C ₆ H ₁₄	-	8.6	10.8	12.8	16.2	18.8	20.6	2
C ₈ H ₁₈	-	7.3	8.9	10.4	-	-	-	1

(續)

A.2 熱傳導

常見氣體的熱傳導亦可視為溫度的函數，除非另外註明，這些數據是針對壓力 101 kPa (1 bar)。符號 P=0 表示熱傳導的低壓極限值，一般而言它與一大氣壓的值相差不超過 1%。

性質、溫度 氣體種類	熱傳導， $\lambda \times 10^5$ [J/cm s K]							
	300 K	400 K	500 K	600 K	800 K	1000 K	1200 K	Ref.
Air	26.2	33.3	39.7	45.7	55.9	63.9	69.8	1, 2
Argon	17.9	22.6	26.8	30.6	36.8	41.2	43.8	1, 2
HCl	14.5	19.5	24.0	28.1	34.9	39.9	43.1	2

SF ₆ (P=0)	13.0	20.6	27.5	33.8	44.4	52.4	57.8	2
H ₂ (P=0)	186.7	230.4	281.7	331.1	429.8	528.5	627.2	1, 2
H ₂ O	18.7	27.1	35.7	47.1	73.2	105.5	143.8	1, 2
SH ₂	14.6	20.5	26.4	32.4	44.5	56.8	69.3	2
NH ₃	24.4	37.4	51.6	66.8	100.6	138.8	181.4	2
He (P=0)	156.7	190.6	222.3	252.4	306.6	353.3	392.4	1, 2
Kr (P=0)	9.5	12.3	14.8	17.1	20.9	23.7	25.5	2
NO	25.9	33.1	39.6	46.2	58.1	68.9	78.5	2
N ₂ (P=0)	26.0	32.3	38.3	44.0	54.5	63.8	71.9	1, 2
N ₂ O	17.4	26.0	34.1	41.8	55.8	68.0	78.4	2
Ne (P=0)	49.8	60.3	69.9	78.7	93.7	105.3	113.5	2
O ₂ (P=0)	26.3	33.7	41.0	48.1	61.9	75.1	87.7	1, 2
SO ₂	9.6	14.3	20.0	25.6	38.6	53.4	70.0	2
Xe (P=0)	5.5	7.3	8.9	10.4	12.9	14.8	16.1	2
CCl ₂ F ₂	9.9	15.0	20.1	25.2	35.4	45.6	55.8	2
CF ₄ (P=0)	16.0	24.1	32.2	39.9	54.9	69.0	82.4	2
CO	25.0	32.2	39.2	45.7	57.5	67.7	76.3	1, 2
CO ₂	16.8	25.1	33.5	41.6	57.7	73.3	88.6	2
CHCl ₃	7.5	11.1	15.1	19.5	29.5	41.1	54.3	2
CH ₄	34.1	49.1	66.5	84.1	124.2	169.4	219.8	2
CH ₃ OH	-	26.2	38.6	53.0	87.8	130.6	181.4	1, 2
C ₂ ClF ₄	10.3	15.7	21.1	26.5	37.0	47.4	57.5	2
C ₂ Cl ₃ F ₃	9.0	13.6	18.3	23.1	33.0	43.3	54.0	2
C ₂ H ₂	21.4	33.3	45.4	56.8	79.3	100.7	121.1	2
C ₂ H ₄	20.5	34.6	49.9	68.6	111.9	164.5	226.4	2
C ₂ H ₆	21.3	35.4	52.2	70.5	113.9	165.7	225.9	1, 2
C ₂ H ₅ OH	14.4	25.8	38.4	53.2	87.5	128.6	176.5	1, 2
C ₃ H ₆ O	11.5	20.2	30.6	42.7	72.0	108.1	151.0	1, 2
C ₃ H ₈	18.0	30.6	45.5	61.9	100.8	147.2	201.2	1, 2
C ₄ H ₁₀	16.4	28.4	43.0	59.1	97.9	144.9	200.1	1, 2
C ₄ H ₁₀ O	15.1	25.0	37.1	51.4	86.6	130.6	183.4	1, 2
C ₅ H ₁₂	14.4	24.9	37.8	52.7	89.3	134.6	188.8	1, 2
C ₅ H ₁₁ OH	12.8	21.7	32.7	45.6	77.3	-	-	1
C ₆ H ₆	10.9	18.5	27.9	38.9	65.9	-	-	1
C ₆ H ₅ CH ₃	15.3	25.9	39.0	54.5	92.2	-	-	1
C ₆ H ₁₄	-	23.4	35.4	48.7	79.2	114.9	155.8	1, 2
C ₇ H ₁₆	-	21.6	32.4	45.3	76.7	-	-	1
C ₈ H ₁₈	-	19.6	29.5	41.2	69.8	-	-	1

(續)

A.3 質量擴散性

常見氣體的質量擴散性一般為壓力、溫度函數，在此是針對與溫度的變化關係做探討，以下這些數據的壓力條件為 101 kPa (1 bar)。

性質、溫度 氣體種類	質量擴散性, D_{12} [cm^2/s]							Ref.
	300 K	400 K	500 K	600 K	800 K	1000 K	1200 K	
Air-Argon	0.165	0.320	0.487	0.667	1.065	1.512	2.008	1, 2
Air-CH ₄	0.137	0.345	0.548	0.747	1.132	1.499	1.848	2
Air-CH ₃ OH	0.111	0.198	0.310	0.446	0.793	1.239	1.784	1
Air-CO	0.216	0.356	0.523	0.717	1.186	1.764	2.450	2
Air-CO ₂	0.167	0.288	0.431	0.595	0.988	1.467	2.033	1, 2
Air-H ₂	0.686	1.283	1.942	2.663	4.288	6.161	8.279	2
Air-Ether	0.081	0.144	0.225	0.324	0.577	0.901	1.297	1
Air-O ₂	0.182	0.301	0.445	0.613	1.013	1.498	2.060	1
Air-H ₂ O	0.253	0.466	0.696	0.943	1.491	2.110	2.800	1, 2
Air-He	0.633	1.175	1.770	2.417	3.871	5.537	7.415	1, 2
Air-SF ₆	0.098	0.171	0.258	0.357	0.595	0.885	1.227	2
Air-C ₆ H ₆	0.081	0.144	0.225	0.324	0.577	0.901	1.297	1
Argon-CH ₄	0.207	0.347	0.515	0.713	1.196	1.795	2.509	2
Argon-CO	0.196	0.327	0.484	0.666	1.105	1.644	2.284	2
Argon-CO ₂	0.100	0.257	0.413	0.569	0.880	1.190	1.498	2
Argon-H ₂	0.828	1.394	2.069	2.855	4.754	7.093	9.870	2
Argon-He	0.755	1.224	1.773	2.402	3.900	5.717	7.853	2
Argon-Kr	0.140	0.239	0.357	0.494	0.823	1.228	1.707	2
Argon-N ₂	0.198	0.328	0.484	0.666	1.108	1.654	2.303	1, 2
Argon-Ne	0.326	0.535	0.779	1.058	1.719	2.520	3.460	2
Argon-O ₂	0.196	0.322	0.473	0.649	1.076	1.603	2.230	2
Argon-SF ₆	0.081	0.147	0.225	0.315	0.534	0.802	1.121	2
Argon-Xe	0.113	0.195	0.292	0.406	0.679	1.017	1.417	2
CH ₄ -H ₂	0.796	1.240	1.807	2.496	4.243	6.481	9.210	1, 2
CH ₄ -He	0.735	1.134	1.645	2.267	3.844	5.866	8.331	2
CH ₄ -N ₂	0.226	0.360	0.527	0.726	1.220	1.843	2.594	2
CH ₄ -O ₂	0.222	0.386	0.579	0.799	1.324	1.960	2.708	2
CH ₄ -H ₂ O	0.284	0.504	0.788	1.135	2.018	3.153	4.540	1

CH ₄ -SF ₆	0.110	0.190	0.284	0.393	0.655	0.974	1.352	2
CO-CO ₂	0.169	0.284	0.425	0.593	1.008	1.531	2.160	2
CO-H ₂	0.803	1.311	1.917	2.621	4.324	6.420	8.908	2
CO-He	0.726	1.186	1.733	2.366	3.891	5.761	7.977	2
CO-Kr	0.153	0.257	0.381	0.526	0.877	1.311	1.826	2
CO-N ₂	0.239	0.376	0.538	0.725	1.177	1.731	2.388	2
CO-O ₂	0.210	0.346	0.508	0.696	1.148	1.704	2.363	1, 2
CO-C ₂ H ₄	0.132	0.234	0.366	0.527	0.937	1.464	2.108	1
CO-CO ₂	0.142	0.234	0.346	0.476	0.788	1.165	1.603	1
CO-SF ₆	0.092	0.165	0.251	0.351	0.591	0.885	1.233	2
CO ₂ -C ₃ H ₈	0.088	0.152	0.232	0.329	0.572	0.880	1.254	1, 2
CO ₂ -H ₂	0.484	1.057	1.651	2.265	3.556	4.930	6.387	2
CO ₂ -H ₂ O	0.171	0.345	0.558	0.811	1.439	2.228	3.178	2
CO ₂ -He	0.535	0.963	1.477	2.078	3.540	5.349	7.504	2
CO ₂ -N ₂	0.167	0.289	0.433	0.599	0.996	1.479	2.050	2
CO ₂ -N ₂ O	0.118	0.202	0.306	0.432	0.746	1.145	1.627	2
CO ₂ -Ne	0.247	0.441	0.666	0.920	1.519	2.239	3.079	2
CO ₂ -O ₂	0.166	0.282	0.420	0.580	0.966	1.440	2.002	1, 2
CO ₂ -SF ₆	0.058	0.114	0.170	0.226	0.338	0.450	0.562	2
H ₂ -He	1.551	2.546	3.734	5.114	8.452	12.560	17.437	2
H ₂ -nC ₄ H ₁₀	0.384	0.636	0.940	1.293	2.140	3.162	4.350	1
H ₂ -Kr	0.711	1.194	1.773	2.447	4.082	6.099	8.498	2
H ₂ -N ₂	0.803	1.311	1.917	2.621	4.324	6.420	8.908	2
H ₂ -Ne	0.530	1.770	2.902	3.927	5.656	6.955	7.826	2
H ₂ -O ₂	0.794	1.338	1.975	2.706	4.445	6.556	9.039	1, 2
H ₂ -SF ₆	0.270	0.705	1.128	1.540	2.329	3.073	3.770	2
H ₂ -Xe	0.244	0.930	1.547	2.096	2.986	3.601	3.941	2
H ₂ O-N ₂	0.256	0.452	0.648	0.844	1.237	1.629	2.022	2
H ₂ O-O ₂	0.242	0.481	0.719	0.957	1.434	1.911	2.388	2
He-Kr	0.654	1.060	1.542	2.098	3.434	5.068	7.002	2
He-N ₂	0.726	1.186	1.733	2.366	3.891	5.761	7.977	2
He-Ne	1.108	1.789	2.591	3.513	5.720	8.410	11.584	2
He-O ₂	0.732	1.229	1.806	2.464	4.020	5.899	8.099	2
He-SF ₆	-	0.664	0.954	1.282	2.052	2.974	4.048	2
He-Xe	0.560	0.908	1.317	1.787	2.909	4.273	5.879	2

Kr-N ₂	0.155	0.257	0.381	0.526	0.879	1.318	1.841	2
Kr-Ne	0.269	0.442	0.645	0.876	1.426	2.090	2.870	2
Kr-Xe	0.076	0.133	0.200	0.279	0.471	0.709	0.991	2
N ₂ -Ne	0.284	0.536	0.813	1.113	1.782	2.545	3.402	2
N ₂ -O ₂	0.210	0.346	0.508	0.696	1.148	1.704	2.363	2
N ₂ -SF ₆	0.095	0.169	0.256	0.356	0.592	0.879	1.215	2
N ₂ -Xe	-	0.213	0.317	0.439	0.736	1.106	1.548	2
Ne-Xe	0.228	0.375	0.547	0.743	1.208	1.772	2.433	2
O ₂ -C ₆ H ₆	0.061	0.108	0.169	0.243	0.432	0.676	0.973	1
O ₂ -SF ₆	0.101	0.176	0.263	0.361	0.596	0.878	1.210	2

(續)

附錄 B

縮減反應機構 (Reduced Kinetic Mechanisms)

所謂的火焰現象，可視為在很小的長度尺寸下發生的化學反應，對流與分子擴散的交互作用結果。此種交互作用可使用連續、動量、能量及反應物種的質量分率平衡方程式來加以描述，此平衡方程式為高度非線性的微分方程式，需要特殊的數值求解技巧。對於一維火焰問題，此種數值技巧發展至今已非常的成熟，隨著碳氫火焰的詳細化學反應機構的持續改進，導致探討化學反應和成份物種數量上持續的增加。對於碳氫燃料的氧化機構，有上百個化學反應和將近有三十幾種的成份物種需要充分精確的計算。一旦將此種處理方式推廣至多維或紊流的研究，即使是超級電腦的效能亦不足以求解這三十幾個非線性偏微分方程式。因此，將詳細的反應機構縮減至少數幾個有關反應物、產物或甚至是中間物的關鍵反應，以此，就能具體的描述火焰行為，而此種縮減反應機構的想法在燃燒領域引起高度的重視。

B.1 統御方程式

考慮平面、未受延展、穩態的預混火焰，火焰正向於 x 軸方向 (未燃混合氣在 $x \rightarrow -\infty$ ，已燃氣在 $x \rightarrow +\infty$)，對於低馬赫數 (Mach Number) 的流體可將壓力視為定值。有關連續、動量、能量及反應物種的平衡方程式列舉如下：

連續方程式 -

$$\frac{d(\rho u)}{dx} = 0, \quad \rho u = \rho_u S_L \quad (\text{B-1})$$

能量方程式 -

$$\rho u C_p \frac{dT}{dx} = \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - \sum_{i=1}^n \dot{m}_i h_i - \sum_{i=1}^n (\rho_i V_i) C_p \frac{dT}{dx} \quad (\text{B-2})$$

反應物種方程式 -

$$\rho u \frac{dY_i}{dx} = - \frac{d(\rho_i V_i)}{dx} + \dot{m}_i \quad (\text{B-3})$$

式中下標 u 表示狀態在未燃混合氣中，下標 i 表示反應物種的種類。
 S_L 表示燃燒速度， Y_i 表物種 i 的質量分率， ρ 表密度 ($\rho_i = \rho Y_i$ 表部分密度)， C_p 為定壓比熱， h_i 為物種 i 的比焓， V_i 為擴散速度 (Diffusion Velocity)， λ 為熱傳導。化學反應產生率 $\dot{m}_i$ (Chemical Production Rate) 為所有反應所提供，相當於

$$\dot{m}_i = M_i \sum_{k=1}^r \nu_{ik} w_k \quad (\text{B-4})$$

其中 M_i 為反應物種 i 的分子量，而反應率

$$w_k = k_{fk}(T) \prod_{j=1}^n \left(\frac{\rho Y_j}{M_j} \right)^{\nu'_{kj}} - k_{bk}(T) \prod_{j=1}^n \left(\frac{\rho Y_j}{M_j} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (\text{B-5})$$

上式 ν'_{kj} 、 ν''_{kj} 表示在反應 k 中的物種 j 前向反應與逆向反應步驟的計量係數 (Stoichiometric Coefficients)，而反應率係數 $k_{fk}(T)$ 、 $k_{bk}(T)$ 可採用如下的形式

$$k_k = A_k \cdot T^{n_k} \cdot \exp\left(-\frac{E_{a,k}}{RT}\right) \quad (\text{B-6})$$

上式 A_k 為頻率因子 (Frequency Factor)，其單位視反應種類而定

單分子反應 (Uni-molecular Reaction) $[1/s \cdot (K)^{n_k}]$

雙分子反應 (Bi-molecular Reaction) $[(\text{cm}^3/\text{mol})/s \cdot (K)^{n_k}]$

三分子反應 (Tri-molecular Reaction) $[(\text{cm}^3/\text{mol})^2/s \cdot (K)^{n_k}]$

n_k 為溫度的指數， $E_{a,k}$ 為反應 k 的活化能 (Activation Energy，單位為 KJ/mol)，通用氣體常數 R 為 8.3146 J/mol K。對於某些特殊的反應，反應係數是表示成 Lindemann 形式

$$k_k = F \cdot k_\infty \cdot k_L, \quad k_L = \frac{k_0 \cdot [M]/k_\infty}{1 + k_0 \cdot [M]/k_\infty} \quad (\text{B-7})$$

式中 k_L 和 F 對正向和逆向反應均相等； $[M] = \sum_{i=1}^n \rho \cdot Y_i / M_i = p/RT$ 表混合氣的莫耳密度； F 的詳細求解可參考 Peters (1993)。

B.2 縮減的反應機構 (Reduced Kinetic Mechanisms)

B.2.1 氫氣的化學反應機構

對於 $\text{H}_2\text{-O}_2$ 的反應系統，靈敏性分析指出 H_2O_2 的形成與消耗並不重要，其重要的十三步驟化學反應機構 (又稱啓始機構，Starting Mechanism) 列述如下

H₂/O₂ 的鏈反應 (Chain Reactions) -

化學反應 \ 常數	反應率係數, k_i			
	i	B	ζ	T_a
$O_2 + H \rightleftharpoons OH + O$	1f	2.0×10^{14}	0.0	8455
	1b	1.568×10^{13}	0.0	423
$H_2 + O \rightleftharpoons OH + H$	2f	5.06×10^4	2.67	3163
	2b	2.222×10^{13}	2.67	2200
$H_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + H$	3f	1.0×10^8	1.60	1660
	3b	4.312×10^8	1.60	9196
$OH + OH \rightleftharpoons H_2O + O$	4f	1.50×10^9	1.14	50.5
	4b	1.473×10^{10}	1.14	8550

*單位: cm、mol、s、K、KJ

HO₂ 的形成與消耗 -

化學反應 \ 常數	反應率係數, k_i			
	i	B	ζ	T_a
$O_2 + H + M' \rightleftharpoons HO_2 + M'$	5f	2.30×10^{18}	-0.8	0
	5b	3.19×10^{18}	-0.8	23499
$HO_2 + H \rightarrow OH + OH$	6	1.50×10^{14}	0.0	505
$HO_2 + H \rightarrow H_2 + O_2$	7	2.5×10^{13}	0.0	349
$HO_2 + OH \rightarrow H_2O + O_2$	8	6.0×10^{13}	0.0	0.0
$HO_2 + H \rightarrow H_2O + O$	9	3.0×10^{13}	0.0	866
$HO_2 + O \rightarrow OH + O_2$	10	1.80×10^{13}	0.0	204

*單位: cm、mol、s、K、KJ

重組反應 (Recombination Reaction) -

化學反應 \ 常數	反應率係數, k_i			
	i	B	ζ	T_a
$H + H + M' \rightarrow H_2 + M'$	11	1.80×10^{18}	-1.0	0.0
$OH + H + M' \rightarrow H_2O + M'$	12	2.20×10^{22}	-2.0	0.0
$O + O + M' \rightarrow O_2 + M'$	13	2.90×10^{17}	-1.0	0.0

*單位: cm、mol、s、K、KJ

考慮七種反應物種: H₂、O₂、H₂O、H、O、OH 及 HO₂, 對中間物 O、OH 及 HO₂ 採用穩態平衡的近似法 (Steady-state Approximation), 將可得到非穩態的物種: H、H₂、O₂ 及 H₂O 的平衡方程式。

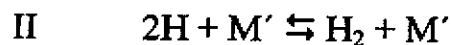
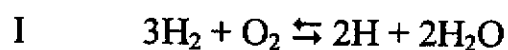
$$L([H]) = 2(\dot{\omega}_1 + \dot{\omega}_6 + \dot{\omega}_9 - \dot{\omega}_{13}) - 2(\dot{\omega}_5 + \dot{\omega}_{11} + \dot{\omega}_{12} + \dot{\omega}_{13}),$$

$$L([H_2]) = -3(\dot{\omega}_1 + \dot{\omega}_6 + \dot{\omega}_9 - \dot{\omega}_{13}) + (\dot{\omega}_5 + \dot{\omega}_{11} + \dot{\omega}_{12} + \dot{\omega}_{13}),$$

$$L([O_2]) = -(\dot{\omega}_1 + \dot{\omega}_6 + \dot{\omega}_9 - \dot{\omega}_{13}),$$

$$L([H_2O]) = 2(\dot{\omega}_1 + \dot{\omega}_6 + \dot{\omega}_9 - \dot{\omega}_{13})$$

式中 $L([X_i])$ 表示平衡方程式中對流-擴散運算子 (Convective-diffusive Operator)，此將進一步化簡為二步驟反應機構：



，而其反應率為

$$\dot{\omega}_I = \dot{\omega}_1 + \dot{\omega}_6 + \dot{\omega}_9 - \dot{\omega}_{13}$$

$$\dot{\omega}_{II} = \dot{\omega}_5 + \dot{\omega}_{11} + \dot{\omega}_{12} + \dot{\omega}_{13}$$

可利用此二步驟化學動力機構的反應率來表示四種物種的質量產生率

$$\dot{\omega}_{O_2} = -\dot{\omega}_I, \quad \dot{\omega}_{H_2} = -3\dot{\omega}_I + \dot{\omega}_{II}, \quad \dot{\omega}_{H_2O} = -2\dot{\omega}_I,$$

$$\dot{\omega}_H = 2\dot{\omega}_I - 2\dot{\omega}_{II} \quad (B-8)$$

B.2.2 甲烷的化學反應機構

甲烷的氧化進行是透過快速的 C_1 的主鏈(Main Chain)機構

化學反應 \ 常數	反應率係數, k_i			
	i	B	ζ	T_a
$CH_4 + H \rightarrow CH_3 + H_2$	14	2.20×10^4	3.0	4402
$CH_3 + O \rightarrow CH_2O + H$	15	7.0×10^{13}	0.0	0.0
$CH_2O + H \rightarrow CHO + H_2$	16	2.50×10^{13}	0.0	2008

$\text{CHO} + \text{M}' \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{M}'$	17	7.10×10^{14}	0.0	8455
---	----	-----------------------	-----	------

*單位： cm、mol、s、K、KJ

邊鏈(Side Chain)是透過 C_2 機構進行-

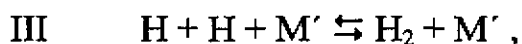
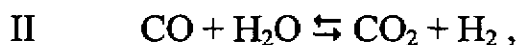
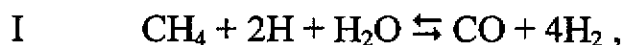
化學反應 \ 常 數	反應率係數, k_i			
	i	B	ζ	T_a
$\text{CH}_3 + \text{CH}_3 + \text{M}' \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6 + \text{M}'$	18, ∞	3.613×10^{13}	0.0	0.0
	18,0	1.27×10^{41}	-7.0	1390
$\text{C}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	19	5.40×10^2	3.5	2622
$\text{C}_2\text{H}_5 + \text{M}' \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} + \text{M}'$	20, ∞	2.0×10^{13}	0.0	19965
	20,0	1.0×10^{17}	0.0	15996
$\text{C}_2\text{H}_4 + \text{H} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$	21	1.50×10^{14}	0.0	5135
$\text{C}_2\text{H}_3 + \text{M}' \rightarrow \text{C}_2\text{H}_2 + \text{H} + \text{M}'$	22, ∞	2.0×10^{14}	0.0	20000
	22,0	1.187×10^{42}	-7.5	22899
$\text{C}_2\text{H}_2 + \text{O} \rightarrow \text{CH}_2 + \text{CO}$	23	4.10×10^8	1.5	854
$\text{CH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{CH} + \text{H}_2$	24	8.40×10^9	1.5	168
$\text{CH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CHO} + \text{O}$	25	3.0×10^{13}	0.0	0.0
$\text{CHO} + \text{M}' \rightarrow \text{CO} + \text{H} + \text{M}'$	26	7.10×10^{14}	0.0	8455

*單位： cm、mol、s、K、KJ

假如中間物是穩態的 (Steady State), 可將反應 18 到 26 加總起來得



假如將上式視為快速的邊反應(Side Reaction), 那麼 C_2 鏈機構實質上並沒有產生或消耗烴離子(Radical)。接著, 將對穩態物種做進一步的確認, 除了 O、OH、 HO_2 及 H_2O_2 可視為穩態外, 此處對 CH、 CH_2 、CHO、 CH_2O 、 CH_3 、 C_2H_2 、 C_2H_3 、 C_2H_4 、 C_2H_5 及 C_2H_6 亦採用穩態的假設, 再加上 CHCO 和 C_2H 消耗的極為快速。在這些假設下, 甲烷的氧化機構可進一步簡化為四步驟化學反應機構

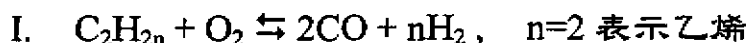




反應率視值考慮 C_1 機構或把 C_2 機構亦列入考量，而有所差異。利用此四步驟機構的反應率來表示七種物種的質量產生率

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_{\text{CH}_4} &= -\dot{\omega}_I, & \dot{\omega}_{\text{O}_2} &= -\dot{\omega}_{\text{IV}}, & \dot{\omega}_{\text{CO}} &= \dot{\omega}_I - \dot{\omega}_{\text{II}}, \\ \dot{\omega}_{\text{H}_2} &= 4\dot{\omega}_I + \dot{\omega}_{\text{II}} + \dot{\omega}_{\text{III}} - 3\dot{\omega}_{\text{IV}}, & \dot{\omega}_{\text{H}_2\text{O}} &= -\dot{\omega}_I - \dot{\omega}_{\text{II}} + 2\dot{\omega}_{\text{IV}}, \\ \dot{\omega}_{\text{CO}_2} &= \dot{\omega}_{\text{II}}, & \dot{\omega}_{\text{H}} &= -2\dot{\omega}_I - 2\dot{\omega}_{\text{III}} + 2\dot{\omega}_{\text{IV}} \end{aligned} \quad (\text{B-9})$$

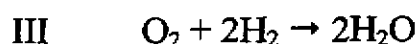
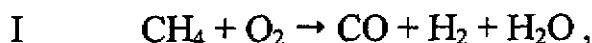
對乙烯、乙烷的氧化機構研究，亦指出有此種四步驟反應機構，與上述的差異乃在步驟 I



亦可使用此四步驟化學反應機構的反應率，來表示七種物種的質量產生率

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_{\text{C}_2\text{H}_{2n}} &= -\dot{\omega}_I, & \dot{\omega}_{\text{O}_2} &= -\dot{\omega}_I - \dot{\omega}_{\text{IV}}, & \dot{\omega}_{\text{CO}} &= 2\dot{\omega}_I - \dot{\omega}_{\text{II}}, \\ \dot{\omega}_{\text{H}_2} &= n\dot{\omega}_I + \dot{\omega}_{\text{II}} + \dot{\omega}_{\text{III}} - 3\dot{\omega}_{\text{IV}}, & \dot{\omega}_{\text{H}_2\text{O}} &= -\dot{\omega}_{\text{II}} + 2\dot{\omega}_{\text{IV}}, \\ \dot{\omega}_{\text{CO}_2} &= \dot{\omega}_{\text{II}}, & \dot{\omega}_{\text{H}} &= -2\dot{\omega}_{\text{III}} + 2\dot{\omega}_{\text{IV}} \end{aligned} \quad (\text{B-10})$$

Peters & Williams (1987) 則進一步的將氫離子也視為穩態平衡，則甲烷-空氣火焰的四步驟化學動力機構將簡化至三步驟的反應機構



可使用此三步驟化學反應機構的反應率，來表示六種物種的質量產生

率

$$\begin{aligned}\dot{\omega}_{CH_4} &= -\dot{\omega}_I, & \dot{\omega}_{O_2} &= -\dot{\omega}_I - \dot{\omega}_{III}, & \dot{\omega}_{CO} &= \dot{\omega}_I - \dot{\omega}_{II}, \\ \dot{\omega}_{H_2} &= \dot{\omega}_I + \dot{\omega}_{II} - 2\dot{\omega}_{III}, & \dot{\omega}_{H_2O} &= \dot{\omega}_I - \dot{\omega}_{II} + 2\dot{\omega}_{III}, & \dot{\omega}_{CO_2} &= \dot{\omega}_{II}\end{aligned}\quad (B-11)$$

B.2.3 丙烷的化學反應機構

在討論丙烷的氧化機構前，先對乙炔的 C_3 的鍵斷裂（Chain Breaking）機構做探討：

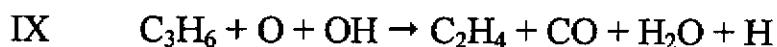
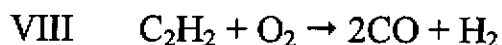
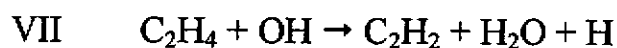
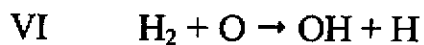
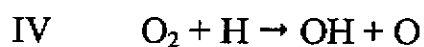
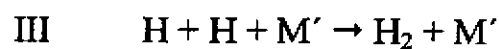
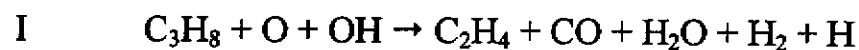
化學反應 \ 常數	反應率係數， k_i			
	i	B	ζ	T_a
$C_2H_2 + CH \rightarrow C_3H_3$	27	2.10×10^{14}	0.0	-60
$C_3H_3 + O \rightarrow C_2H_3 + CO$	28	3.80×10^{13}	0.0	0.0
$C_2H_3 + M' \rightarrow C_2H_2 + H + M'$	22, ∞	2.0×10^{14}	0.0	20000
	22,0	1.187×10^{42}	-7.5	22899

*單位：cm、mol、s、K、KJ

大部分複雜的碳氫燃料燃燒，會快速裂解成 C_1 - C_3 小的碳氫分子，接著他們的氧化以複雜的鏈機構（Chain Mechanism）進行。Paczko (1986) 首先採用六十八個反應來描述丙烷氧化機構的啓始機構（Starting Mechanism）。Djavdan (1991)、Kennel (1993) 以八十二個化學反應作為啓始機構，深入的探討丙烷-空氣火焰的縮減機構。

以下就對丙烷-空氣火焰的氧化機構，描述如何縮減反應機構：對 C_3H_8 、 C_3H_6 、 C_2H_4 、 C_2H_2 、 O_2 、 CO 、 H_2 、 H_2O 、 CO_2 、 H 、 O 及 OH 等十二個物種視為非穩態（Non-steady State），對 n - C_3H_7 、 i - C_3H_7 、 C_3H_5 、 C_3H_4 、 C_3H_3 、 C_2H_6 、 C_2H_5 、 C_2H_3 、 $CHCO$ 、 C_2H 、 CH_4 、 CH_3 、 CH_2O 、 CH_2 、 CH 、 CHO 、 H_2O_2 及 HO_2 等十八個物種視為穩態（Steady

State)。在這樣的假設下，丙烷-空氣火焰的氧化機構可縮減至九步驟的反應機構



上述十二個非穩態物種的質量產生率，可用九步驟化學反應機構的反應率來加以表示

$$\dot{\omega}_{\text{C}_3\text{H}_8} = -\dot{\omega}_{\text{I}}, \quad \dot{\omega}_{\text{C}_3\text{H}_6} = -\dot{\omega}_{\text{IX}}, \quad \dot{\omega}_{\text{C}_2\text{H}_4} = \dot{\omega}_{\text{I}} - \dot{\omega}_{\text{VII}} + \dot{\omega}_{\text{IX}},$$

$$\dot{\omega}_{\text{C}_2\text{H}_2} = \dot{\omega}_{\text{VII}} - \dot{\omega}_{\text{VIII}}, \quad \dot{\omega}_{\text{O}} = -\dot{\omega}_{\text{I}} + \dot{\omega}_{\text{IV}} - \dot{\omega}_{\text{VI}} - \dot{\omega}_{\text{IX}},$$

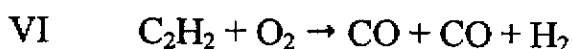
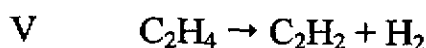
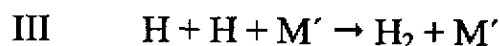
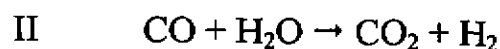
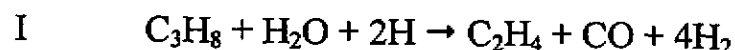
$$\dot{\omega}_{\text{O}_2} = -\dot{\omega}_{\text{IV}} - \dot{\omega}_{\text{VIII}}, \quad \dot{\omega}_{\text{H}_2} = \dot{\omega}_{\text{I}} + \dot{\omega}_{\text{III}} - \dot{\omega}_{\text{V}} - \dot{\omega}_{\text{VI}} + \dot{\omega}_{\text{VIII}},$$

$$\dot{\omega}_{\text{H}_2\text{O}} = \dot{\omega}_{\text{I}} + \dot{\omega}_{\text{V}} + \dot{\omega}_{\text{VII}} + \dot{\omega}_{\text{IX}}, \quad \dot{\omega}_{\text{CO}} = \dot{\omega}_{\text{I}} - \dot{\omega}_{\text{II}} + 2\dot{\omega}_{\text{VIII}} + \dot{\omega}_{\text{IX}},$$

$$\dot{\omega}_{\text{CO}_2} = \dot{\omega}_{\text{II}}, \quad \dot{\omega}_{\text{OH}} = -\dot{\omega}_{\text{I}} - \dot{\omega}_{\text{II}} + \dot{\omega}_{\text{IV}} - \dot{\omega}_{\text{V}} + \dot{\omega}_{\text{VI}} - \dot{\omega}_{\text{VII}} - \dot{\omega}_{\text{IX}},$$

$$\dot{\omega}_{\text{H}} = \dot{\omega}_{\text{I}} + \dot{\omega}_{\text{II}} - 2\dot{\omega}_{\text{III}} - \dot{\omega}_{\text{IV}} + \dot{\omega}_{\text{V}} + \dot{\omega}_{\text{VI}} + \dot{\omega}_{\text{VII}} + \dot{\omega}_{\text{IX}} \quad (\text{B-12})$$

如果進一步，將物種 O、OH 及 C₃H₆ 也視為穩態，則九步驟的反應機構將簡化至六步驟的反應機構



上述九個非穩態物種的質量產生率，可用六步驟化學反應機構的反應率來加以表示

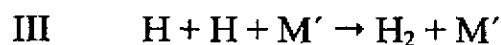
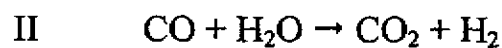
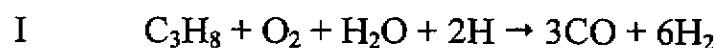
$$\dot{\omega}_{\text{C}_3\text{H}_8} = -\dot{\omega}_{\text{I}}, \quad \dot{\omega}_{\text{C}_2\text{H}_2} = \dot{\omega}_{\text{V}} - \dot{\omega}_{\text{VI}}, \quad \dot{\omega}_{\text{C}_2\text{H}_4} = \dot{\omega}_{\text{I}} - \dot{\omega}_{\text{V}},$$

$$\dot{\omega}_{\text{O}_2} = -\dot{\omega}_{\text{IV}} - \dot{\omega}_{\text{VI}}, \quad \dot{\omega}_{\text{CO}} = \dot{\omega}_{\text{I}} - \dot{\omega}_{\text{II}} + 2\dot{\omega}_{\text{VI}},$$

$$\dot{\omega}_{\text{H}_2} = 4\dot{\omega}_{\text{I}} + \dot{\omega}_{\text{II}} + \dot{\omega}_{\text{III}} - 3\dot{\omega}_{\text{IV}} + \dot{\omega}_{\text{II}} + \dot{\omega}_{\text{III}}, \quad \dot{\omega}_{\text{CO}_2} = \dot{\omega}_{\text{II}},$$

$$\dot{\omega}_{\text{H}_2\text{O}} = -\dot{\omega}_{\text{I}} - \dot{\omega}_{\text{II}} + 2\dot{\omega}_{\text{IV}}, \quad \dot{\omega}_{\text{H}} = -2\dot{\omega}_{\text{I}} - 2\dot{\omega}_{\text{III}} + 2\dot{\omega}_{\text{IV}} \quad (\text{B-13})$$

如果進一步，將物種 C_2H_2 和 C_2H_4 也視為穩態，則六步驟的反應機構將簡化至四步驟的反應機構



而上述七個非穩態物種的質量產生率，可用四步驟化學反應機構的反應率來加以表示如下

$$\dot{\omega}_{\text{C}_3\text{H}_8} = -\dot{\omega}_{\text{I}}, \quad \dot{\omega}_{\text{O}_2} = -\dot{\omega}_{\text{I}} - \dot{\omega}_{\text{IV}}, \quad \dot{\omega}_{\text{CO}} = 3\dot{\omega}_{\text{I}} - \dot{\omega}_{\text{II}},$$

$$\begin{aligned}\dot{\omega}_{H_2} &= 6\dot{\omega}_I + \dot{\omega}_{II} + \dot{\omega}_{III} - 3\dot{\omega}_{IV}, & \dot{\omega}_{H_2O} &= -\dot{\omega}_I - \dot{\omega}_{II} + 2\dot{\omega}_{IV}, \\ \dot{\omega}_{CO_2} &= \dot{\omega}_{II}, & \dot{\omega}_H &= -2\dot{\omega}_I - 2\dot{\omega}_{III} + 2\dot{\omega}_{IV}\end{aligned}\quad (B-14)$$

B.3 物種的靈敏性分析 (Sensitivity Analysis)

B.3.1 氧化劑為空氣

有了上節關於氫氣、碳氫/空氣火焰反應機構的基本瞭解後，在圖 B-1，將對氫氣、甲烷及丙烷燃料燃燒產生的物種，以數值模擬來分析比較其生成物濃度的變化情形：

氫氣/空氣火焰-

除了稀釋氣體-氮氣外，主要物種水氣與氧氣的生成量視燃燒的當量值而定。在當量值等於 1.0 時，水氣相對多於氧氣的生成量，易生成 NO、H₂ 以及 OH 等；當量值等於 0.6 時，大量剩餘的氧氣將使生成的水氣量大減，氮氣不易生成氮氧化物。

甲烷/空氣火焰-

稀釋氣體為氮氣，主要物種除了水氣、氧氣外，還包括 CO 和 CO₂，生成物種的種類要比氫氣/空氣火焰來的豐富。在當量值等於 1.0 時，水氣、CO 以及 CO₂ 相對於貧燃燒狀況來的多，稀釋氣體亦消耗甚多來產生 NO，此時剩餘的氧氣量並不多；當量值等於 0.6 時，會剩餘大量的氧氣並使生成的水氣、CO、CO₂ 量大減，其他物種如 OH、H 及 H₂ 等的生成量，幾乎可忽略。

丙烷/空氣火焰-

狀況類似前述的甲烷/空氣火焰，只有水氣的劑量比前述火焰低，但二氧化碳的劑量反而高於前述火焰。

B.3.2 氧化劑非一般的空氣

此處，是本文所要探討的重點，藉由可燃氣中大量稀釋氣體的改變，觀察對燃燒生成物種的增進或抑制情形。以下，將使用氮氣、氫氣、氬氣、二氧化碳及水氣等五種稀釋氣體，包括在氧化劑中劑量上的改變，觀察對甲烷和丙烷燃料燃燒所生成物種的影響：

甲烷/氧氣/稀釋氣體 -

首先，甲烷與氧化劑混合的當量值則維持在 0.60 和 1.00 二種燃燒狀況。圖 B-2 是以氮氣為稀釋氣體，氧化劑中所佔的莫耳濃度分別控制在 0.30、0.60 及 0.90。圖 B-3 是以氫氣為稀釋氣體，氧化劑中所佔的莫耳濃度分別控制在 0.30、0.60 及 0.90。圖 B-4 是以氬氣為稀釋氣體，氧化劑中所佔的莫耳濃度分別控制在 0.30、0.60 及 0.90。圖 B-5 是以二氧化碳為稀釋氣體，對貧燃燒（當量值等於 0.6）時，其在氧化劑中所佔的莫耳濃度分別控制在 0.15、0.45 及 0.60；對當量值等於 1.0 時，其在氧化劑中所佔的莫耳濃度分別控制在 0.15、0.45 及 0.75。圖 B-6 是以水氣為稀釋氣體，在氧化劑中所佔的莫耳濃度分別控制在 0.15、0.45 及 0.75。由稀釋氣體對燃燒生成物種的零敏性分析指出：

- 氮氣和氫氣是完全不參與燃燒物種的生成反應，對燃燒物種的濃

度影響是相同的。

- 氮氣中有少量會參與 NO 、 NO_2 的生成反應，對其他物種的生成並無影響，而分析發現只有在不完全燃燒與較低的氮氣含量下，此種氮氧化物的生成量才會高。
- 水氣在上節討論的四步驟化學動力機構中，反應步驟有所涉及，為了能明確比較出對物種濃度變化的影響，將以氦氣、氬氣稀釋下的生成物濃度做為比較的標準。比較發現，不完全燃燒時，以過量的水氣稀釋會有凝結水的現象出現，除了剩餘的氧氣外其他物種的生成幾乎可忽略。一般來說，稀釋的水氣劑量在 75% 左右就會明顯的抑制反應的進行，使整個反應機構終止 (Termination)。
- 二氧化碳所稀釋的例子，亦使用氦氣、氬氣稀釋下的生成物濃度做為比較的標準。一般來說，二氧化碳的劑量在 60~75 間就會明顯的抑制反應的進行，使整個反應終止 (Termination)。

丙烷/氧氣/稀釋氣體 -

圖 B-7~B-11 有關氮氣、氬氣、氦氣、二氧化碳及水氣等稀釋氣體對丙烷反應機構的影響，亦與上述甲烷火焰的行為相似。

參考文獻：

1. Djavdan, E., Darabiha, N., Giovangigli, V., and Candel, S. M., "Strained Propane-Air Flames With Detailed and Reduced Kinetic

- Schemes," *Combust. Sci. and Tech.* 76:287-309 (1991).
2. Kennel, C., Mauss, F., and Peters, N., "Reduced Kinetic Mechanisms for Premixed Propane-Air Flames," *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems* (Peters, N., and Rogg, B., Ed.), *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, pp.123-141 (1993).
 3. Paczko, G., Lefdal, P. M., and Peters, N., "Reduced Reaction Schemes for Methane, Methanol and Propane Flames," *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, pp.739-748 (1986).
 4. Peters, N., and Williams, F. A., "The Asymptotic Structure of Stoichiometric Methane-Air Flames," *Combust. Flame* 68:185-207 (1987).
 5. Peters, N., "Flame Calculations with Reduced Mechanism- An Outline," *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems* (Peters, N., and Rogg, B., Ed.), *Lecture Notes in Physics*, Springer-Verlag, pp.3-14 (1993).

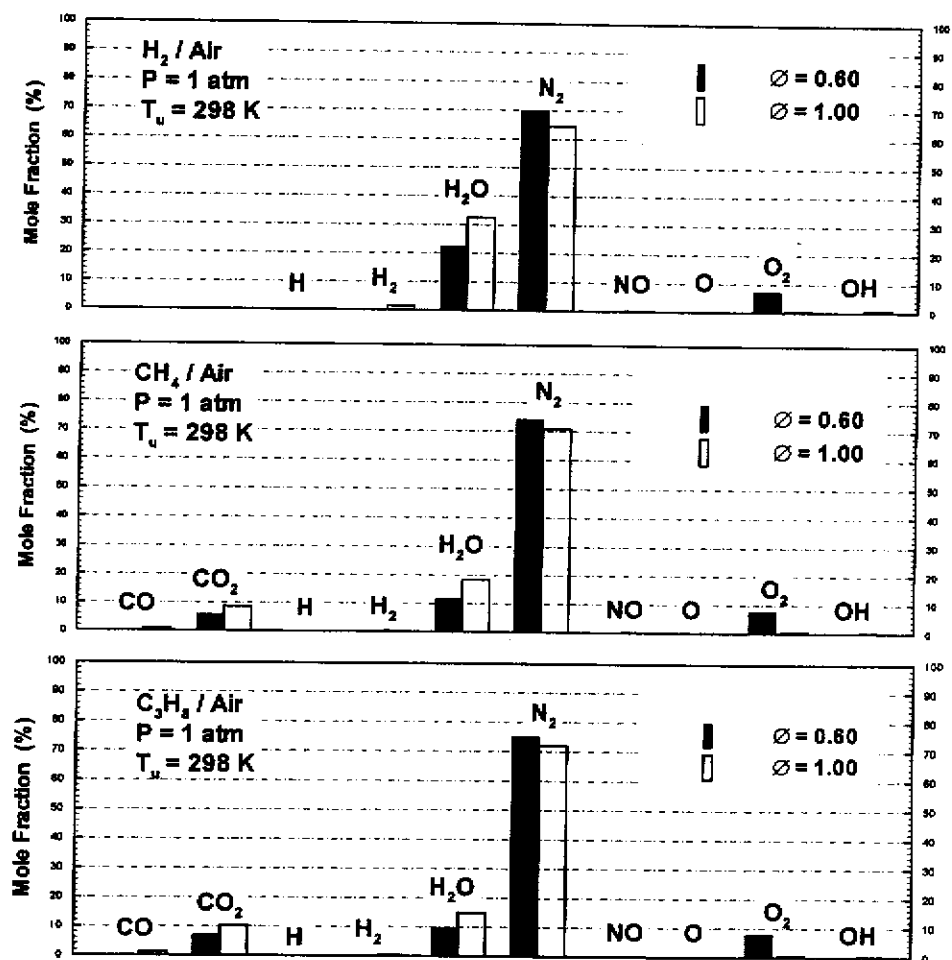


圖 B-1 當量值為 0.6、1.0 的可燃氣比較燃燒生成物種的濃度變化

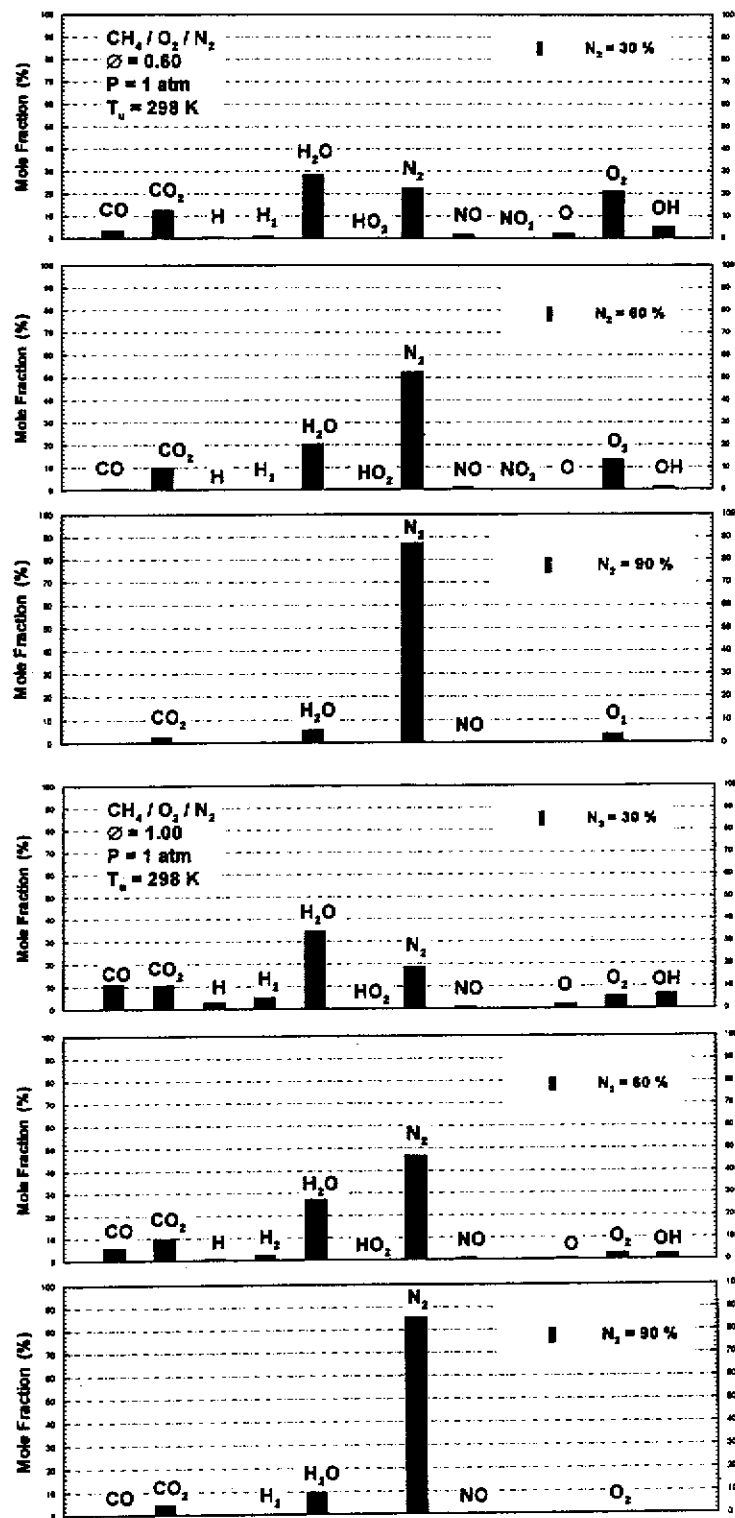


圖 B-2 當量值為 0.6、1.0 的甲烷在氮氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

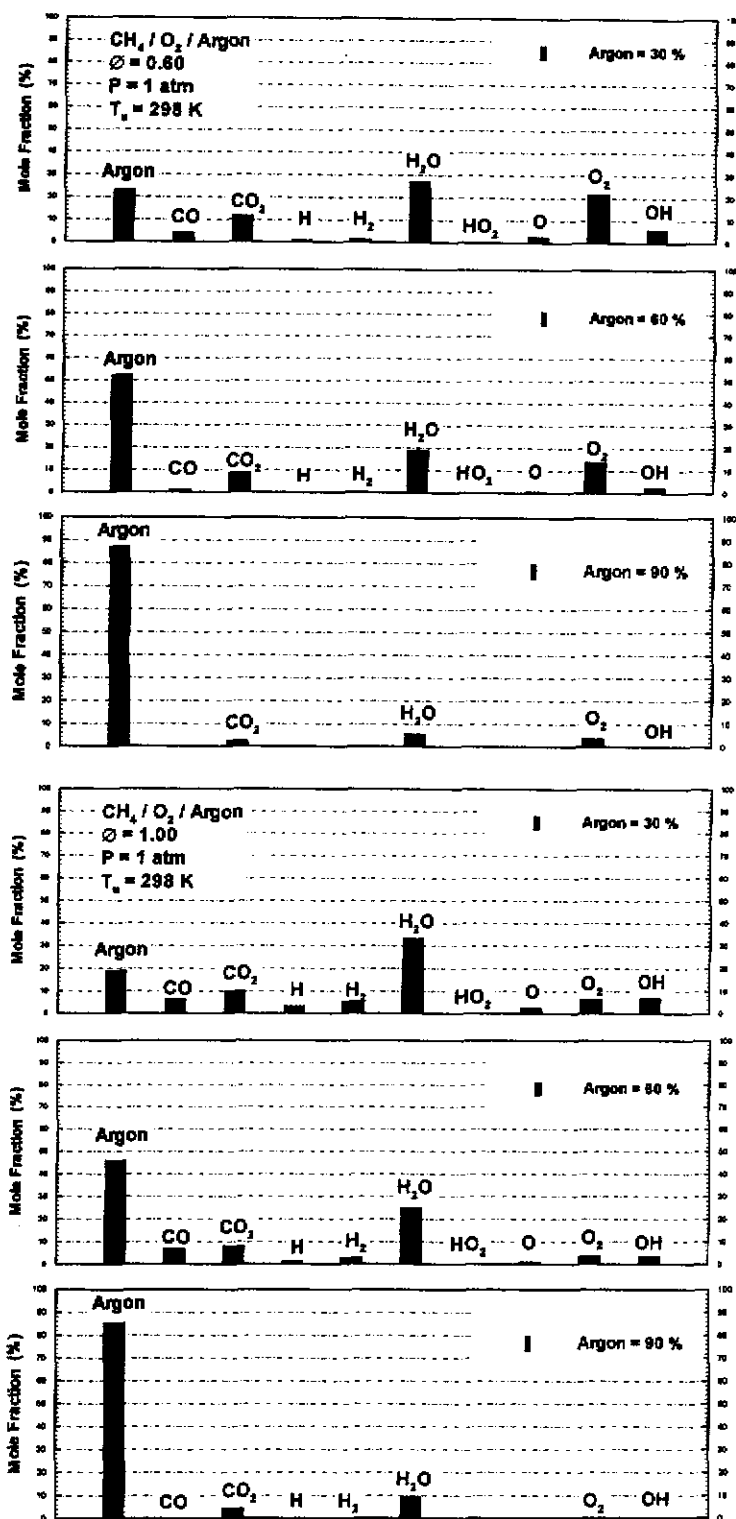


圖 B-3 當量值為 0.6、1.0 的甲烷在氫氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

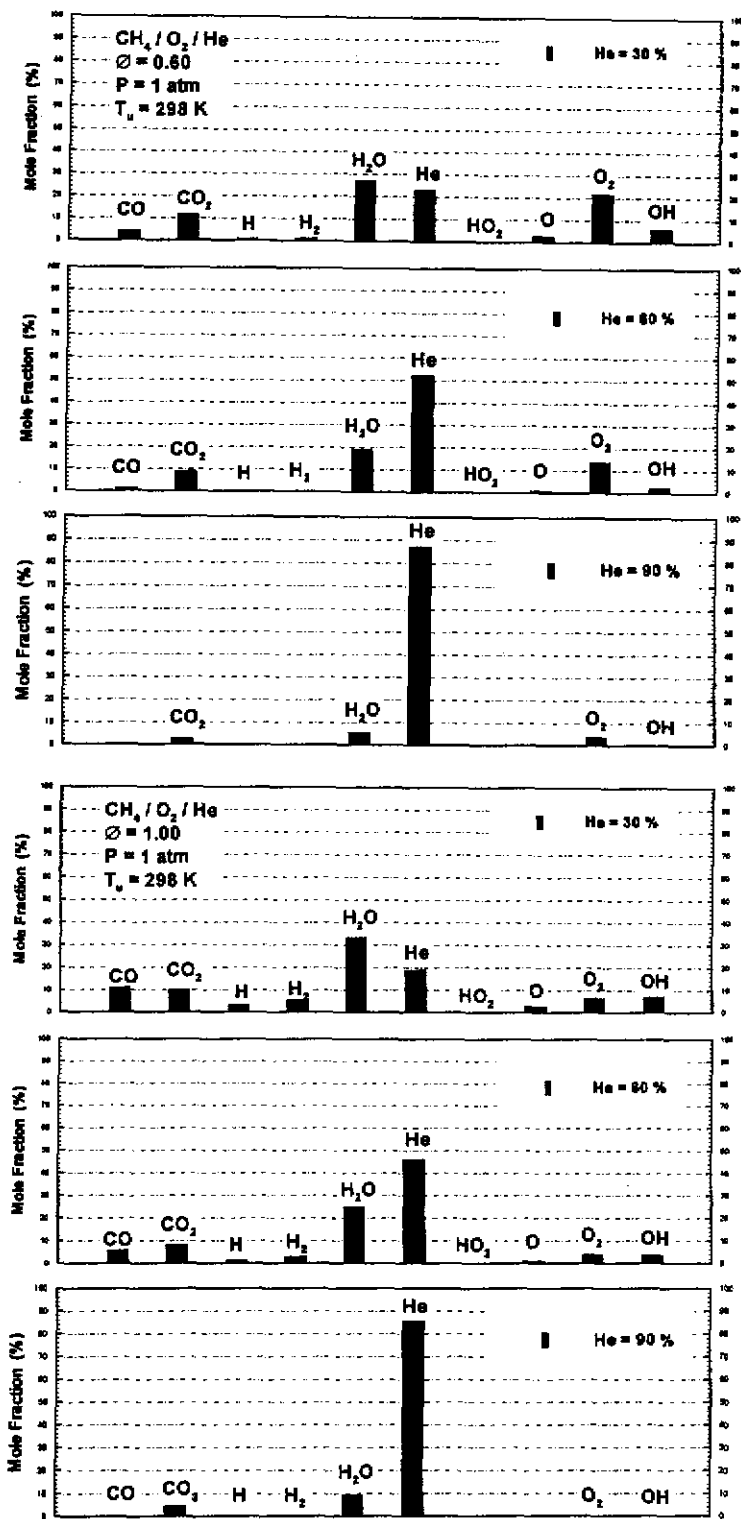


圖 B-4 當量值為 0.6、1.0 的甲烷在氦氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

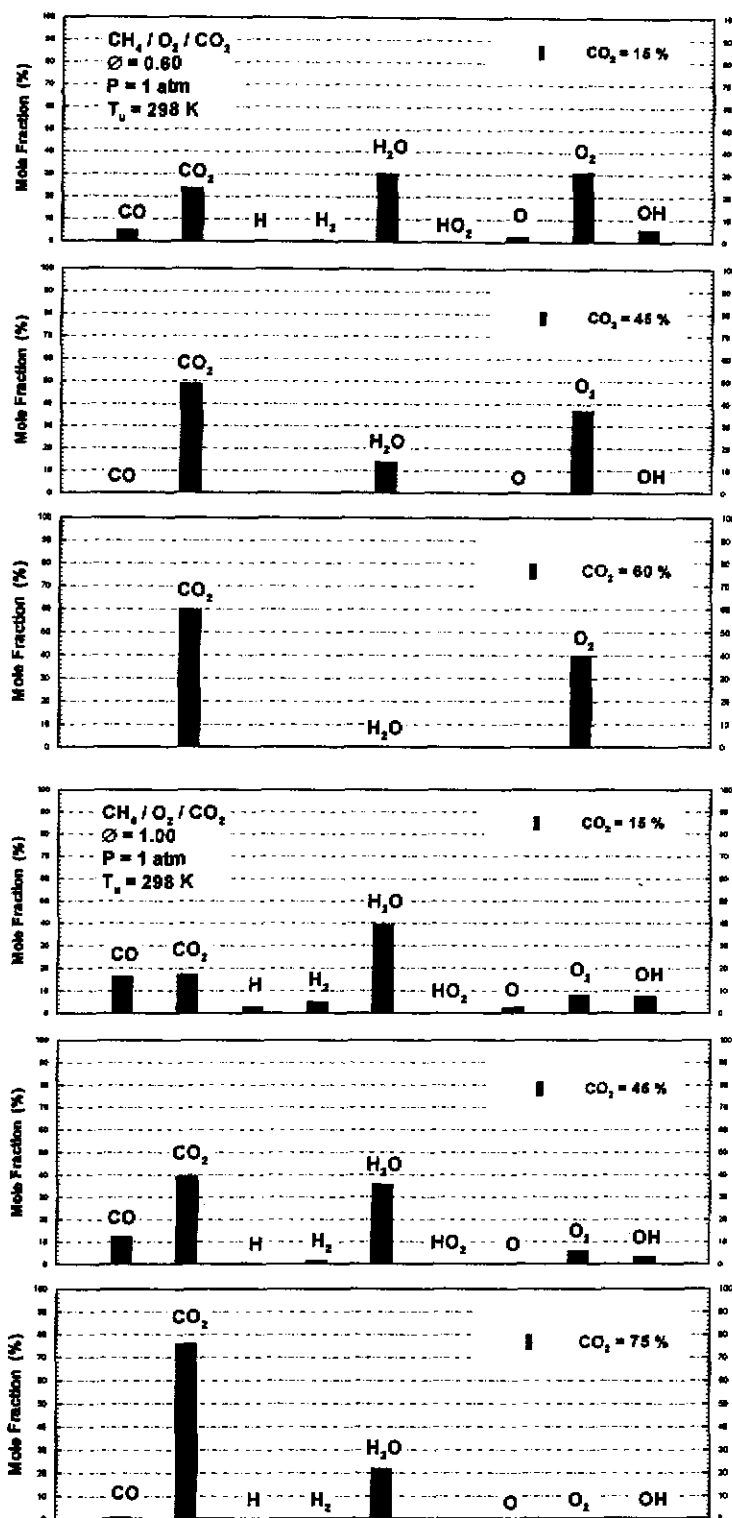


圖 B-5 當量值為 0.6、1.0 的甲烷在二氧化碳的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

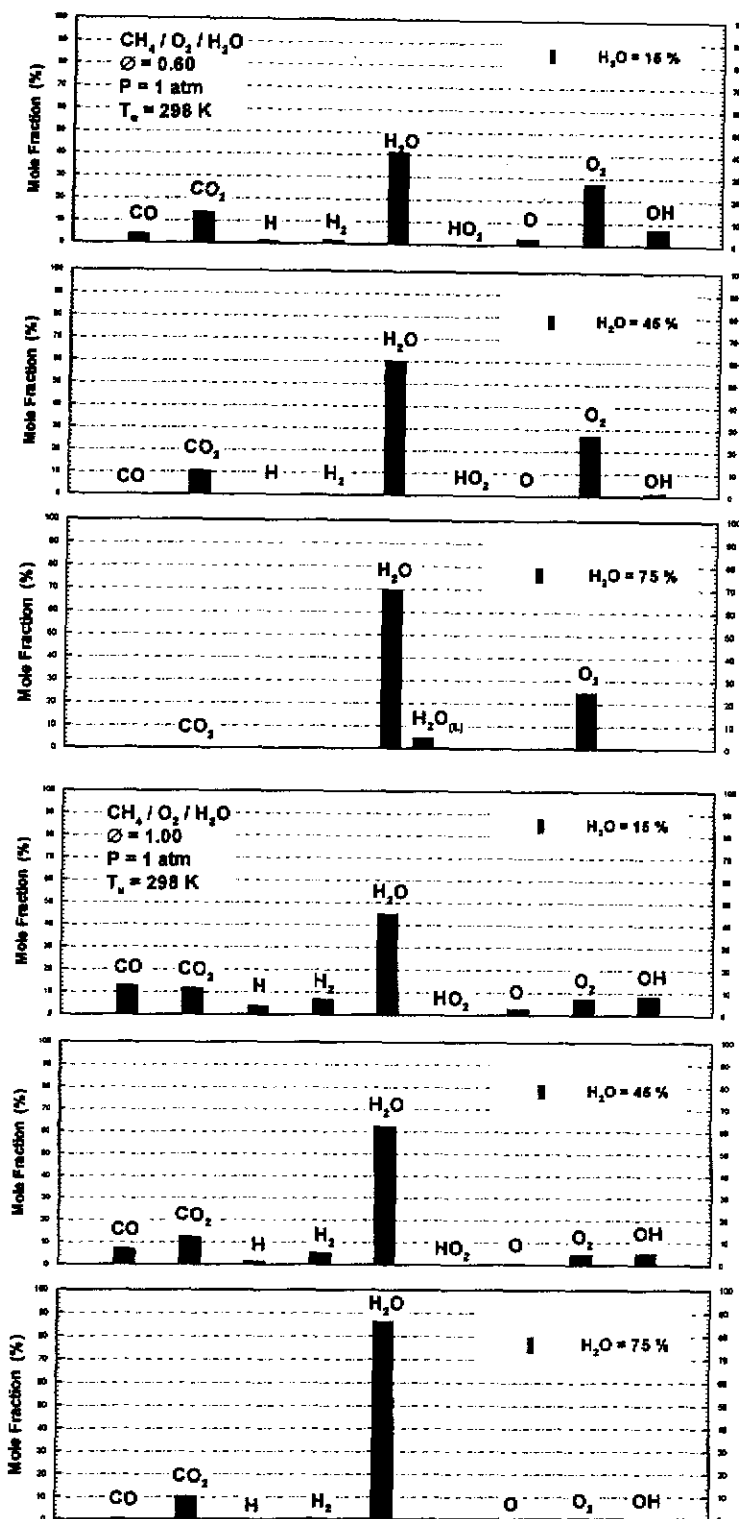


圖 B-6 當量值為 0.6、1.0 的甲烷在水氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

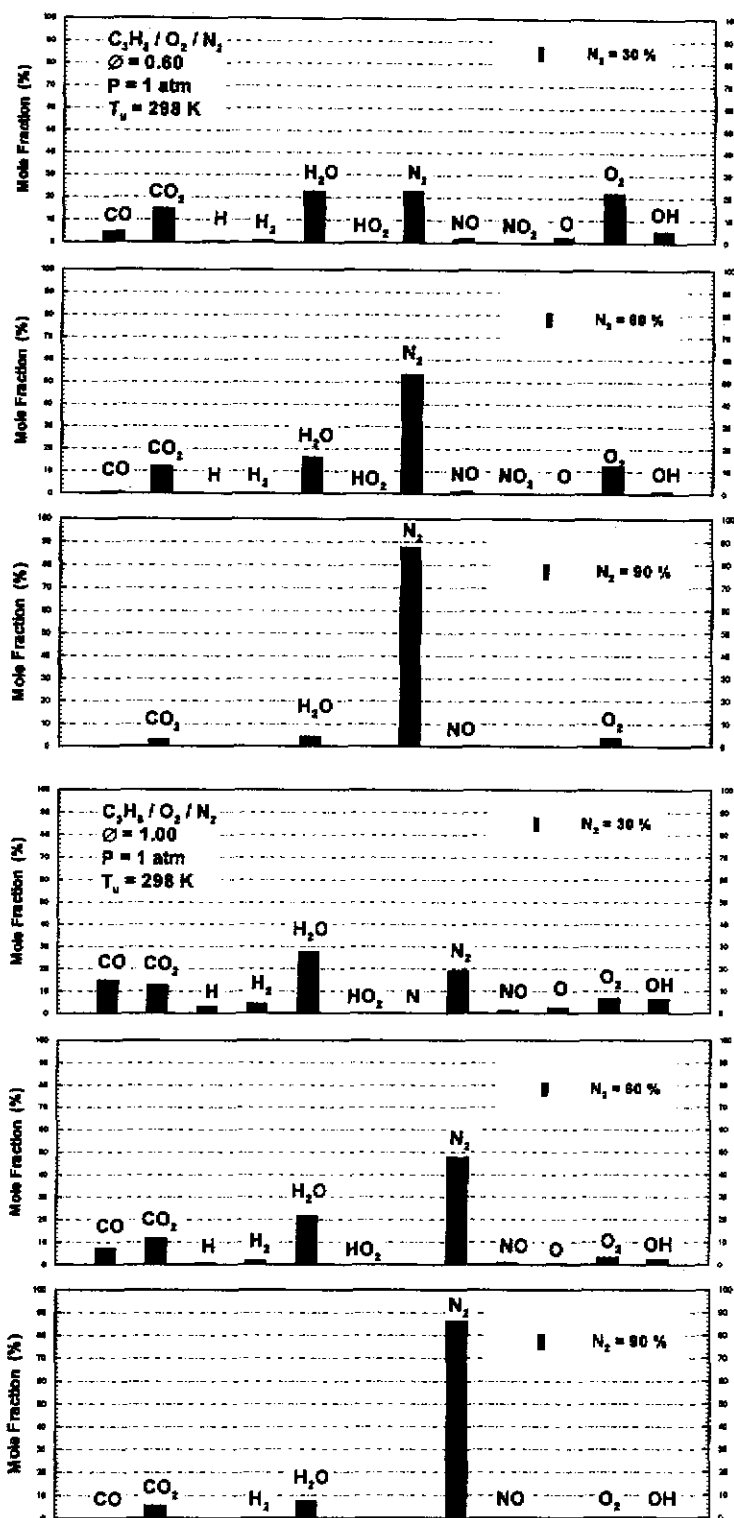


圖 B-7 當量值為 0.6、1.0 的丙烷在氮氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

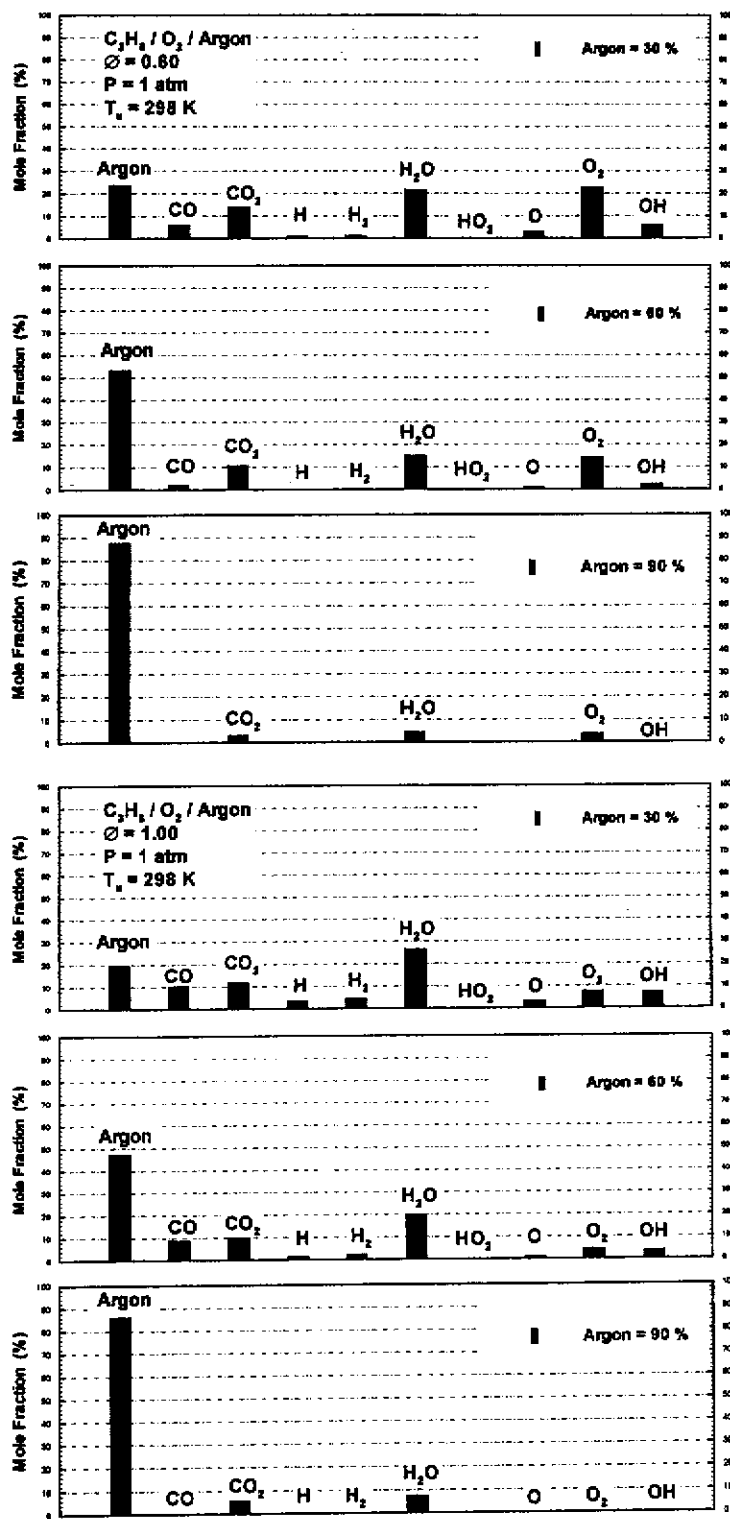


圖 B-8 當量值為 0.6、1.0 的丙烷在氮氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

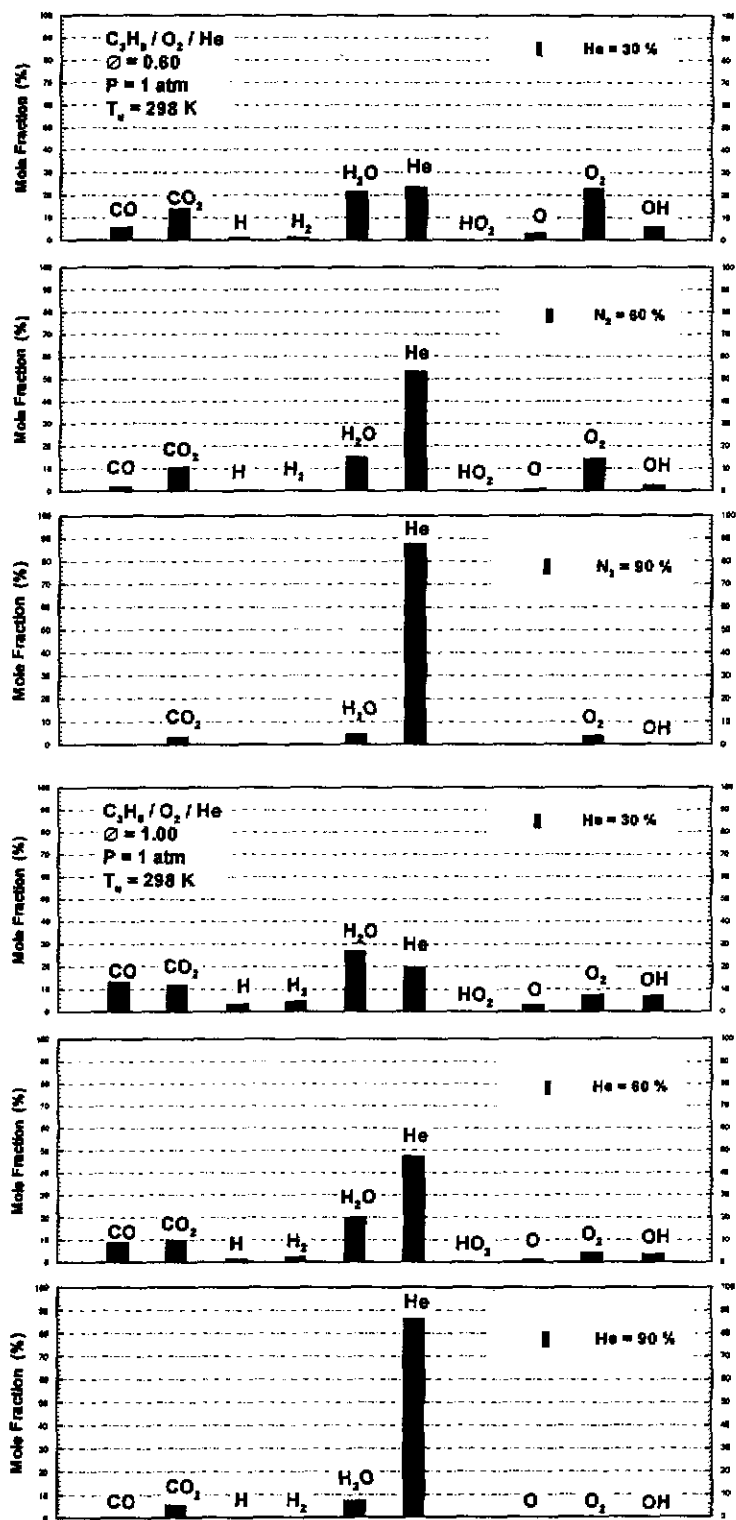


圖 B-9 當量值為 0.6、1.0 的丙烷在氦氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

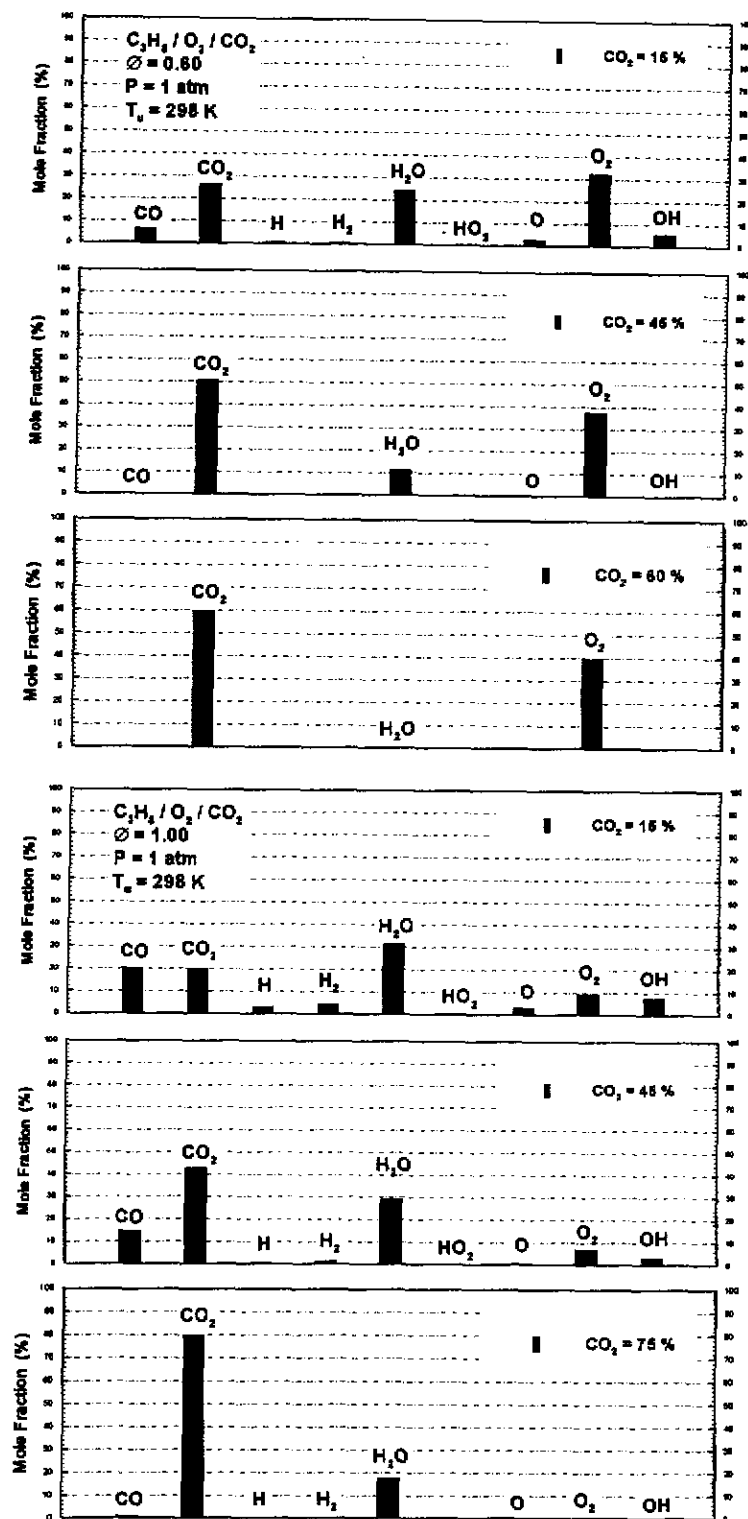


圖 B-10 當量值為 0.6、1.0 的丙烷在二氧化碳的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

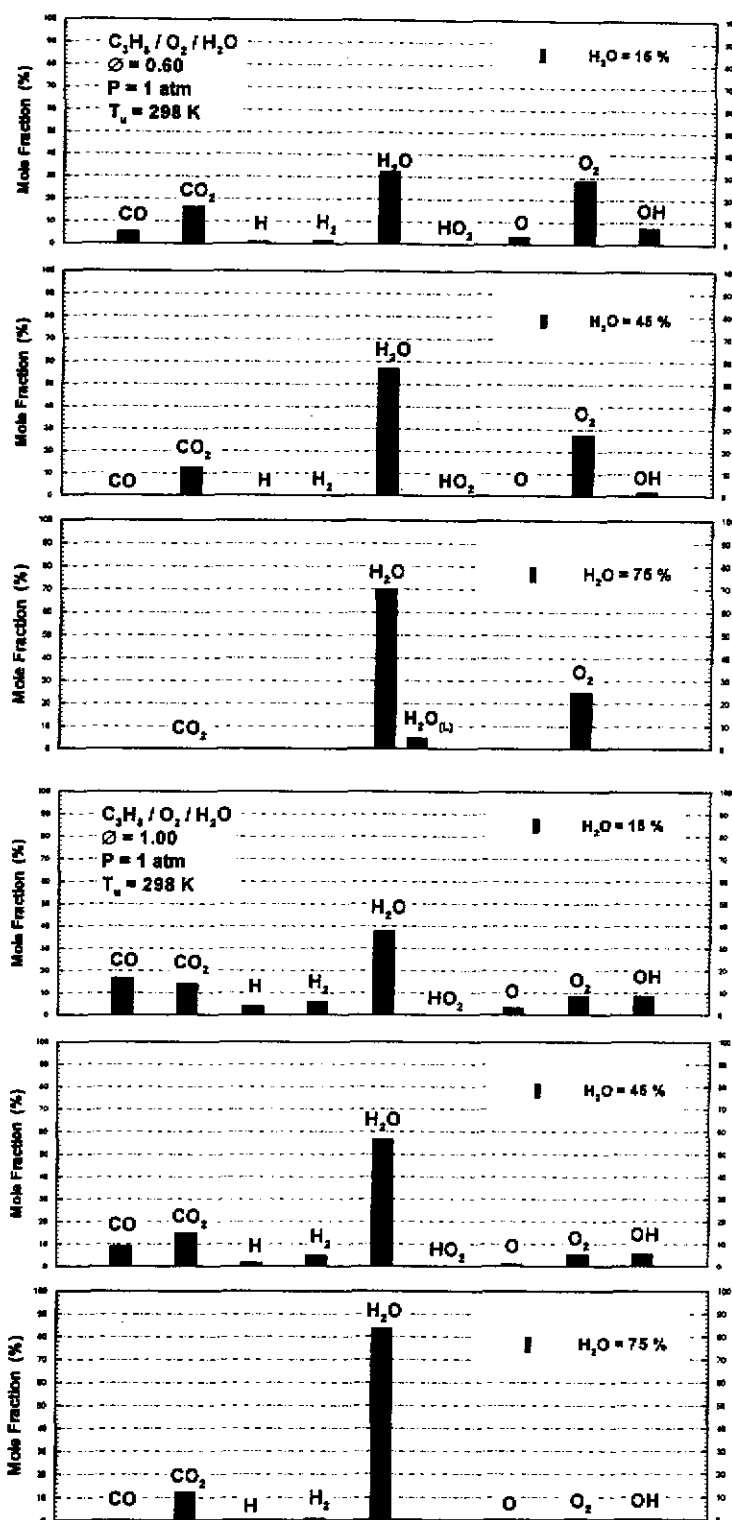


圖 B-11 當量值為 0.6、1.0 的丙烷在水氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

附錄 C

可燃極限 (Flammability Limits)

雖然氣體-空氣可燃極限的資料很方便查得，但在某些狀況下對複雜的氣體組合，如碳氫燃料、氧氣以及氮氣的混合氣，瞭解相關可燃極限的知識是有其必要性。甚至添加火焰抑制劑，討論混合氣可燃極限的變化，而此種研究對於防火工程、工廠運作等方面是非常的重要。

C.1 縮減氧氣濃度

縮減氧氣濃度的一般方法是藉由惰性氣體使氧氣缺量，係利用惰性氣體的添加降低氧化劑中的氧氣原本所佔的劑量。如果添加二氧化碳、氮氣、氬氣以及氫氣等化學上為惰性的氣體，這些氣體將會影響混合氣的物性，如下

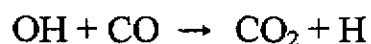
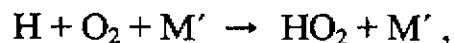
- 可燃氣可被點燃（或傳播）的範圍變窄。
- 使火焰燃燒的最大速度往貧燃料區偏移。
- 明顯改變混合氣的熱擴散性、比熱，進而影響火焰的溫度和傳播速度。因此添加氮氣（或氬氣）則會增加火焰溫度與速度。

當惰性氣體被用來控制火焰時，它的主要功能是用來預防爆炸蒸汽-空氣混合物的形成。如果添加的氣體會參與反應時，像是 CO-Air 火焰加入氫氣（此氣體會與空氣反應），由於鏈反應（Chain Reaction）

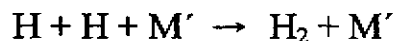
的影響將導致火焰速度的增加。氫原子在 CO-Air 火焰中所扮演的角色，可藉由下述反應機構來加以釐清：

在燃氣之初- H_2 解離成 2H ，而 H 原子向未燃氣方向擴散。

鏈連續 (Chain Continuation) 反應-



終止 (Termination) 反應-



對於碳的燃燒，氫氣扮演著類似催化的效應，所以反應系統中氫原子濃度愈高，反應愈激烈，火焰傳播速度愈快。相同的解釋理由，CO/Air 火焰添加 CH_4 ，其中導致火焰速度變快的氫原子乃源自於甲烷。

C.2 可燃極限相圖

以下將對一些常見的燃料，推導能快速估算添加惰性氣體的貧極限的當量值大小：

圖 C-1 為氫氣-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 28.57 - 0.2857 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 4 + 0.0419 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 75$

$$\text{vol} = 4 + 0.1238 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 60 \quad (\text{C-1})$$

圖 C-2 為甲烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 9.47 - 0.0947 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 5 + 0.02 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 39$

$$\text{vol} = 5 + 0.084 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 25 \quad (\text{C-2})$$

圖 C-3 為甲烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 12.18 - 0.1218 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 6.7 - 0.0026 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 46$

$$\text{vol} = 6.7 + 0.0672 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 29 \quad (\text{C-3})$$

圖 C-4 為乙烯-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添

加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 6.59 - 0.0659 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

$$\text{其中 } \text{vol} = 2.7 + 0.012 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 50$$

$$\text{vol} = 2.7 + 0.0313 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 40 \quad (\text{C-4})$$

圖 C-5 為乙烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 5.66 - 0.0566 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

$$\text{其中 } \text{vol} = 3 - 0.0024 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 45$$

$$\text{vol} = 3 + 0.0266 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 32 \quad (\text{C-5})$$

圖 C-6 為乙醇-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 6.6 - 0.066 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

$$\text{其中 } \text{vol} = 3.3 + 0.0043 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 47$$

$$\text{vol} = 3.3 + 0.0283 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 35 \quad (\text{C-6})$$

圖 C-7 為環丙烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，

觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 4.44 - 0.0444 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 2.4 + 0.003 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 43,$

$$\text{vol} = 2.4 + 0.0213 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 31 \quad (\text{C-7})$$

圖 C-8 為丙烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 3.68 - 0.0368 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 2.1 - 0.0009 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 44$

$$\text{vol} = 2.1 + 0.0176 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 29 \quad (\text{C-8})$$

圖 C-9 為丙酮-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 5 - 0.05 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 2.6 + 0.0227 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 33$

$$\text{vol} = 2.6 + 0.050 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 24 \quad (\text{C-9})$$

圖 C-10 為丁二烯-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 3.7 - 0.037 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 2.0 - 0.003 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 50$

$$\text{vol} = 2.0 + 0.0103 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 36 \quad (\text{C-10})$$

圖 C-11 為丁烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 3.1 - 0.031 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 1.8 + 0.0015 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 40$

$$\text{vol} = 1.8 + 0.0138 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 29 \quad (\text{C-11})$$

圖 C-12 為戊烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 2.55 - 0.0255 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 1.4 + 0.0007 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 44$

$$\text{vol} = 1.4 + 0.0127 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 30 \quad (\text{C-12})$$

圖 C-13 為苯-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 2.71 - 0.0271 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

$$\text{其中 } \text{vol} = 1.3 + 0.0035 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 46$$

$$\text{vol} = 1.3 + 0.0169 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 32 \quad (\text{C-13})$$

圖 C-14 為己烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 2.14 - 0.0214 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

$$\text{其中 } \text{vol} = 1.2 + 0.001 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 42$$

$$\text{vol} = 1.2 + 0.01 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 30 \quad (\text{C-14})$$

圖 C-15 為庚烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 1.88 - 0.0188 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 1.05, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 44$

$$\text{vol} = 1.05 + 0.007 \text{vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 32 \quad (\text{C-15})$$

圖 C-16 為辛烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 1.64 - 0.0164 \text{vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 0.95, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 42$

$$\text{vol} = 0.95 + 0.0082 \text{vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 28 \quad (\text{C-16})$$

參考文獻：

1. Friedman, R., "Theory of Fire Extinguishment," *Fire Protection Handbook*, US National Fire Protection Association 1:72-82 (1991).
2. Glassman, I.: *Combustion*, 3rd edition, Academic Press, New York (1996).
3. Lewis, B., and von Elbe, G.: *Combustion Flames and Explosions of Gases*, 3rd edition, Academic Press, New York (1987).
4. Senecal, J. A., "Explosion Prevention and Protection," *Fire Protection Handbook*, US National Fire Protection Association 6:184-201 (1991).

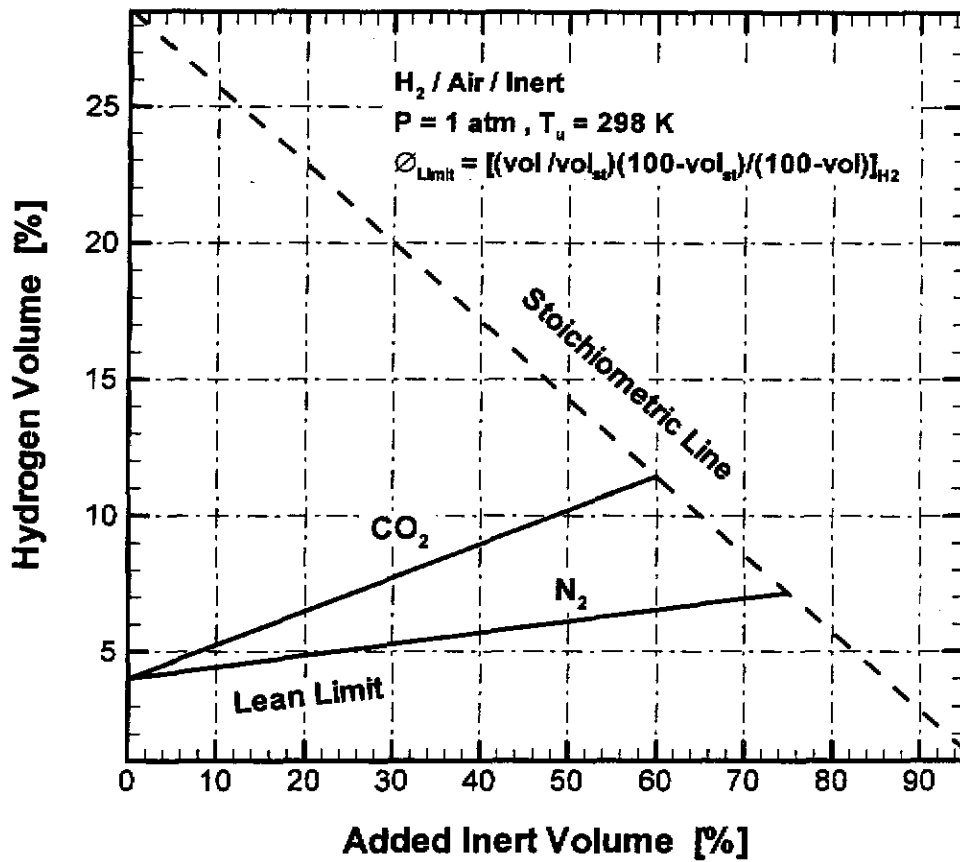


圖 C-1 氫氣-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

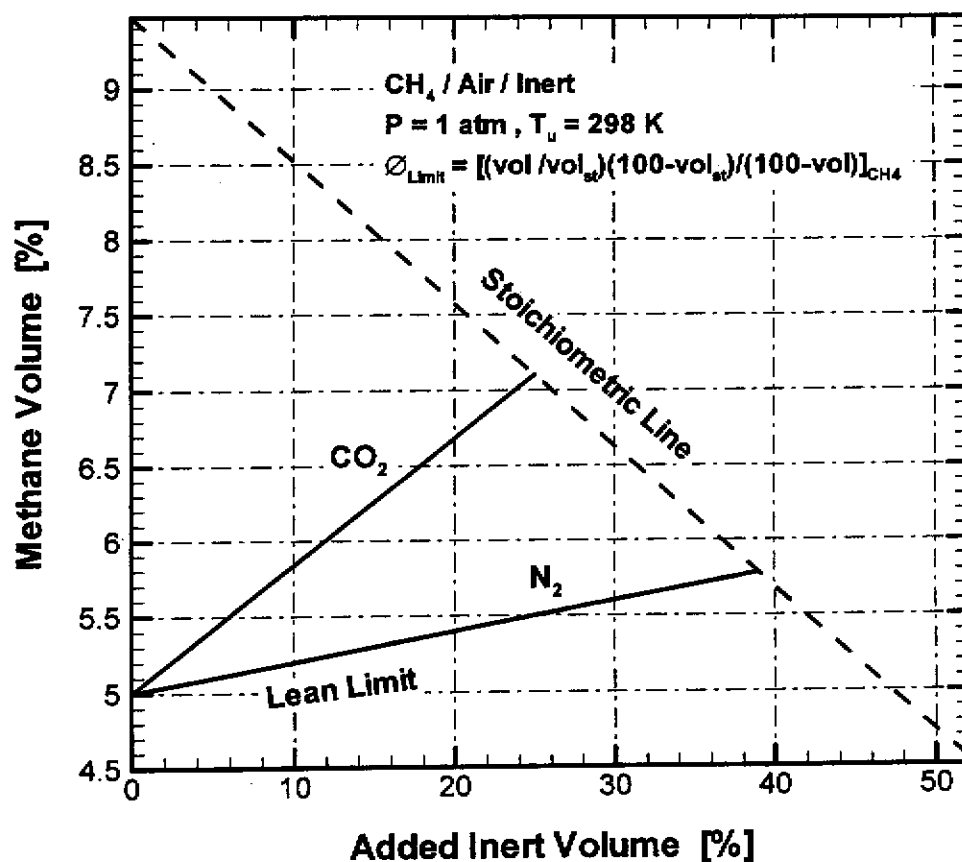


圖 C-2 甲烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

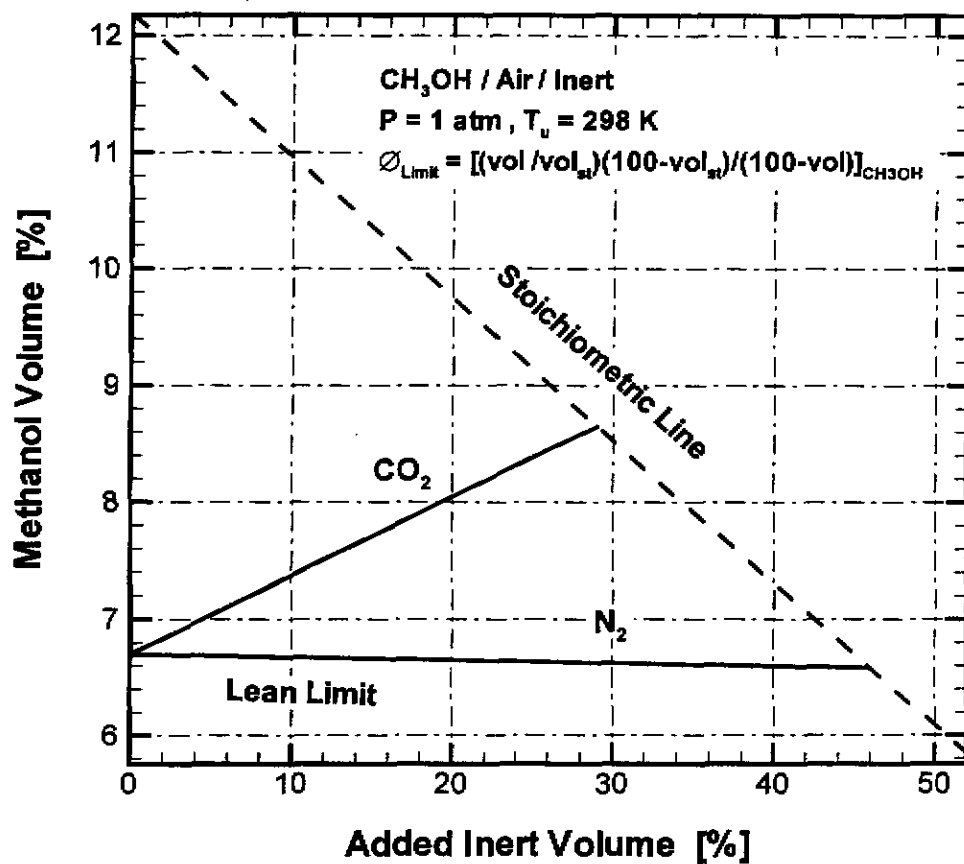


圖 C-3 甲醇-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

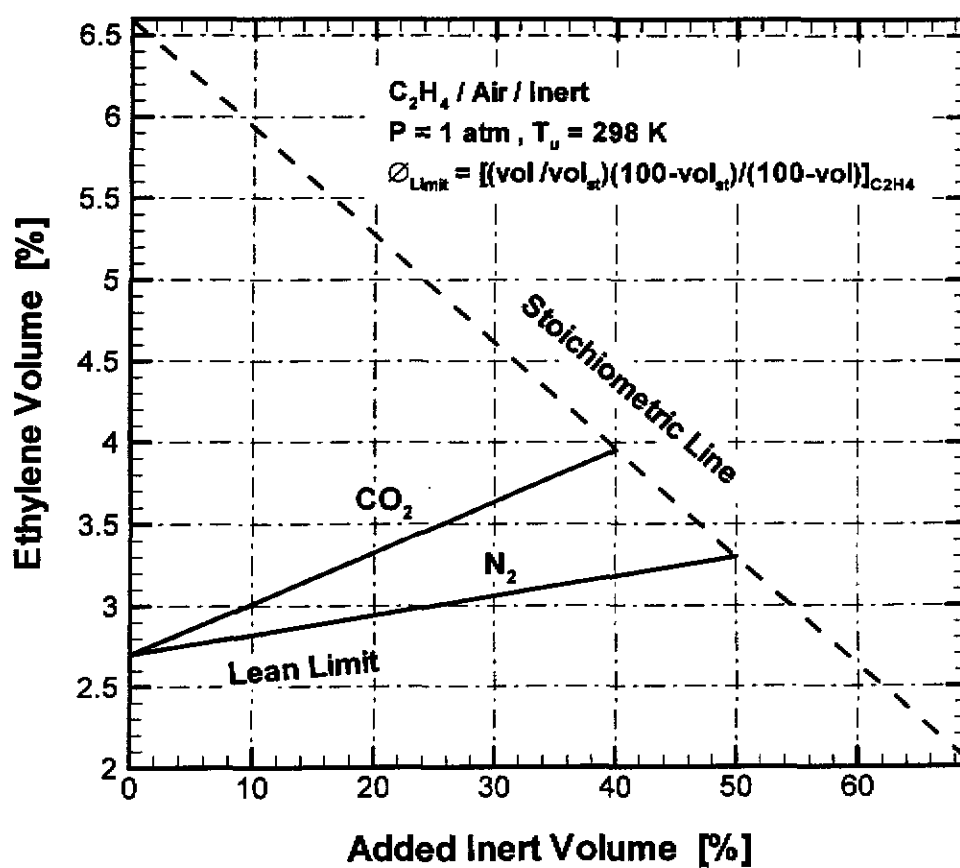


圖 C-4 乙炔-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

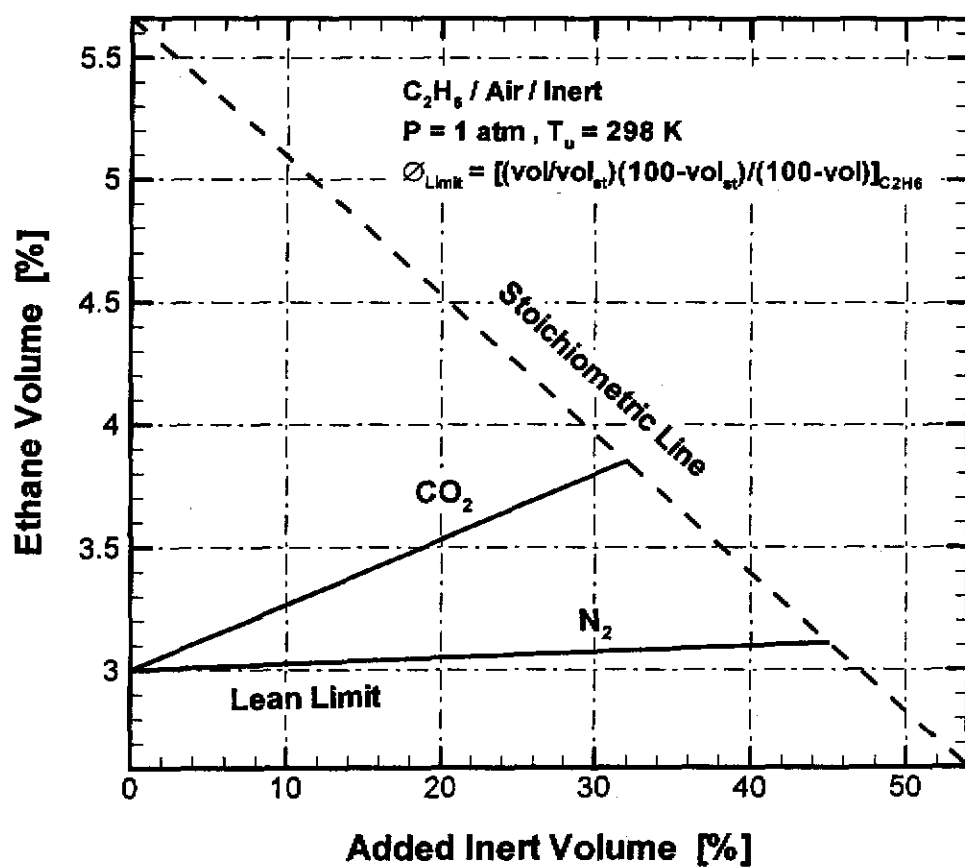


圖 C-5 乙烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

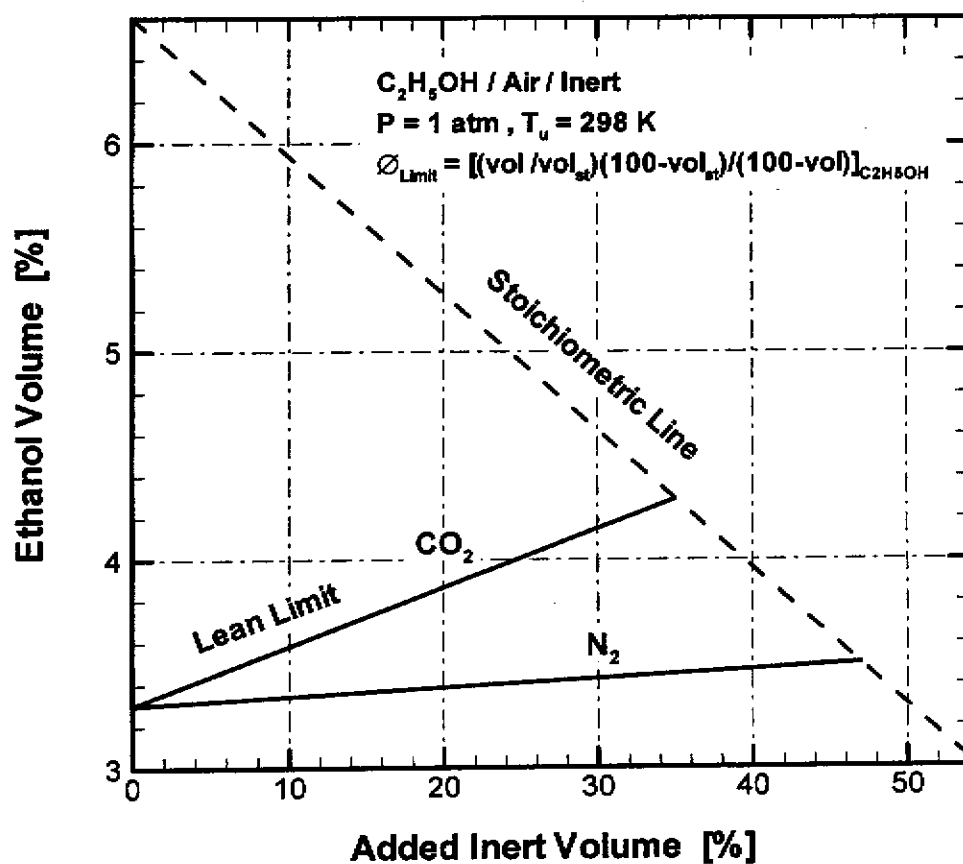


圖 C-6 乙醇-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

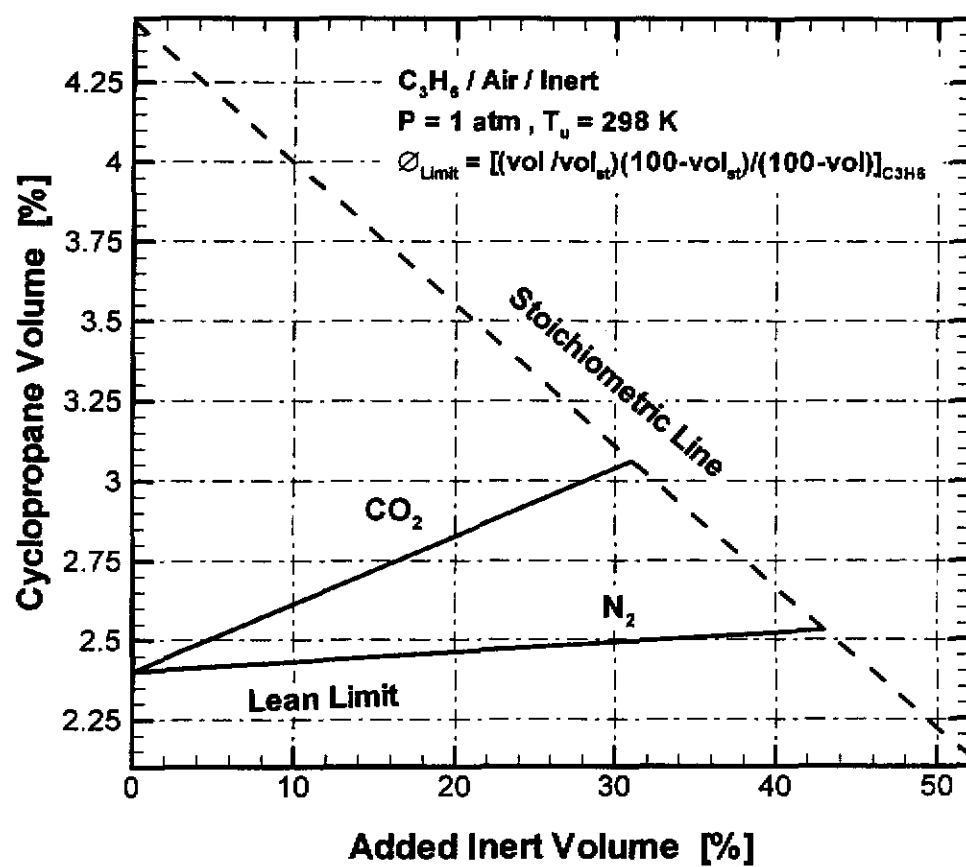


圖 C-7 環丙烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

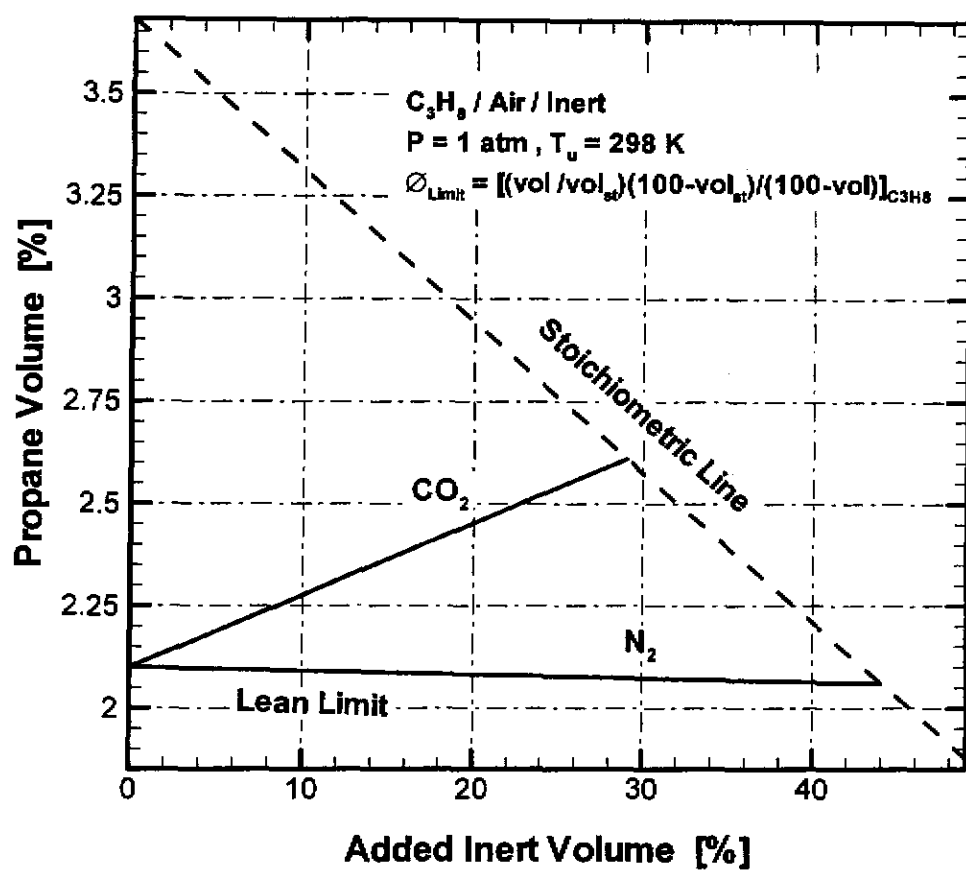


圖 C-8 丙烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

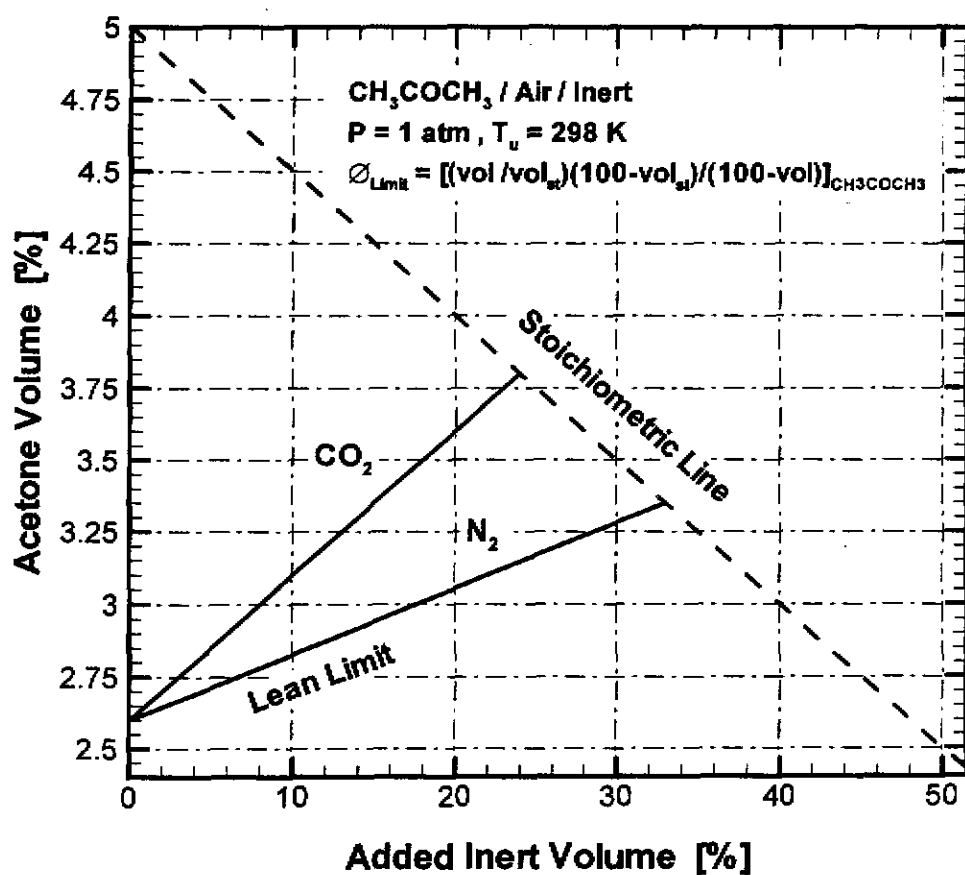


圖 C-9 丙酮-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

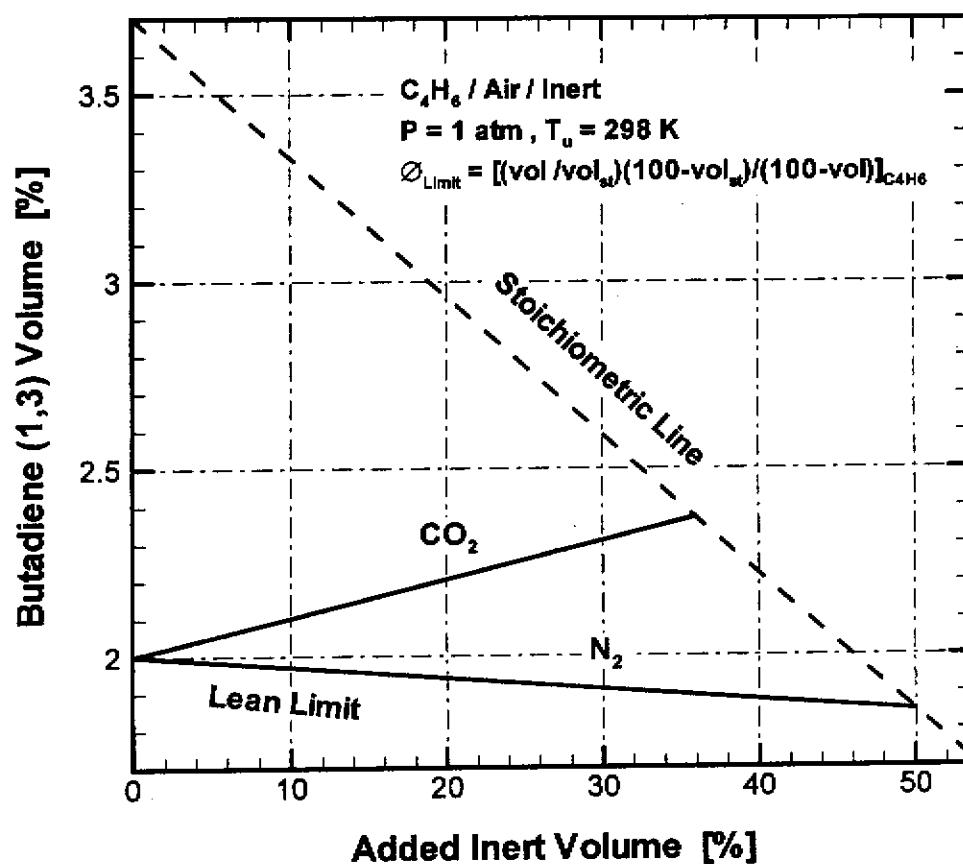


圖 C-10 丁二烯-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

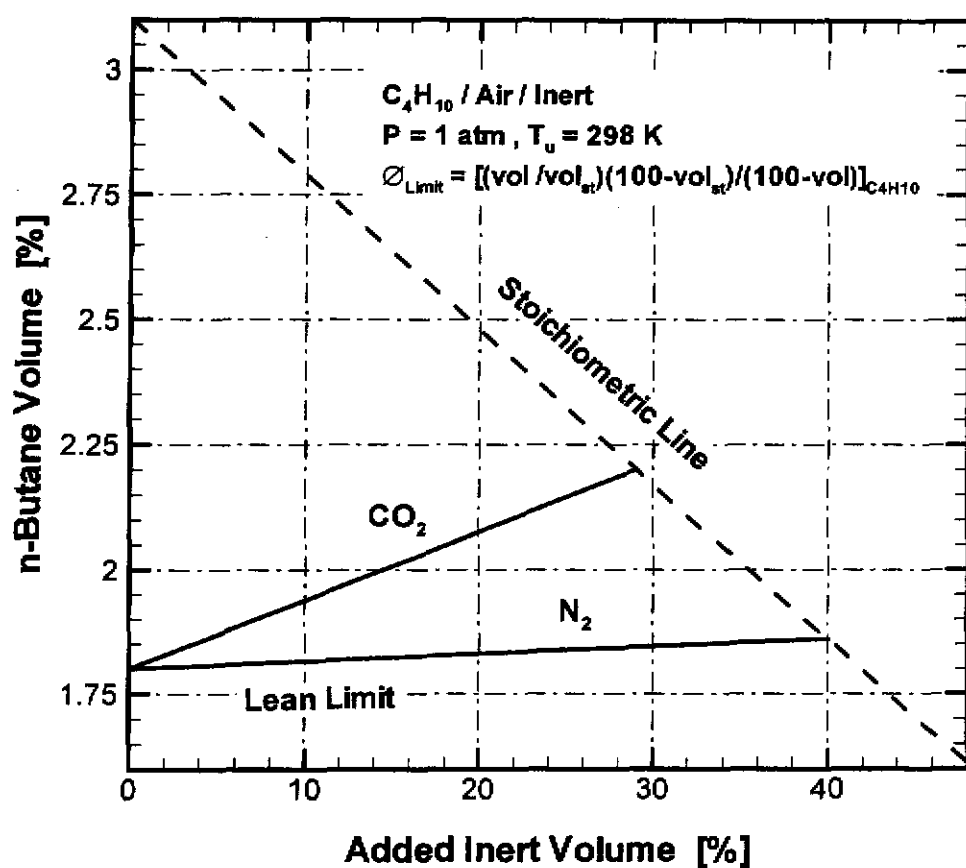


圖 C-11 丁烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

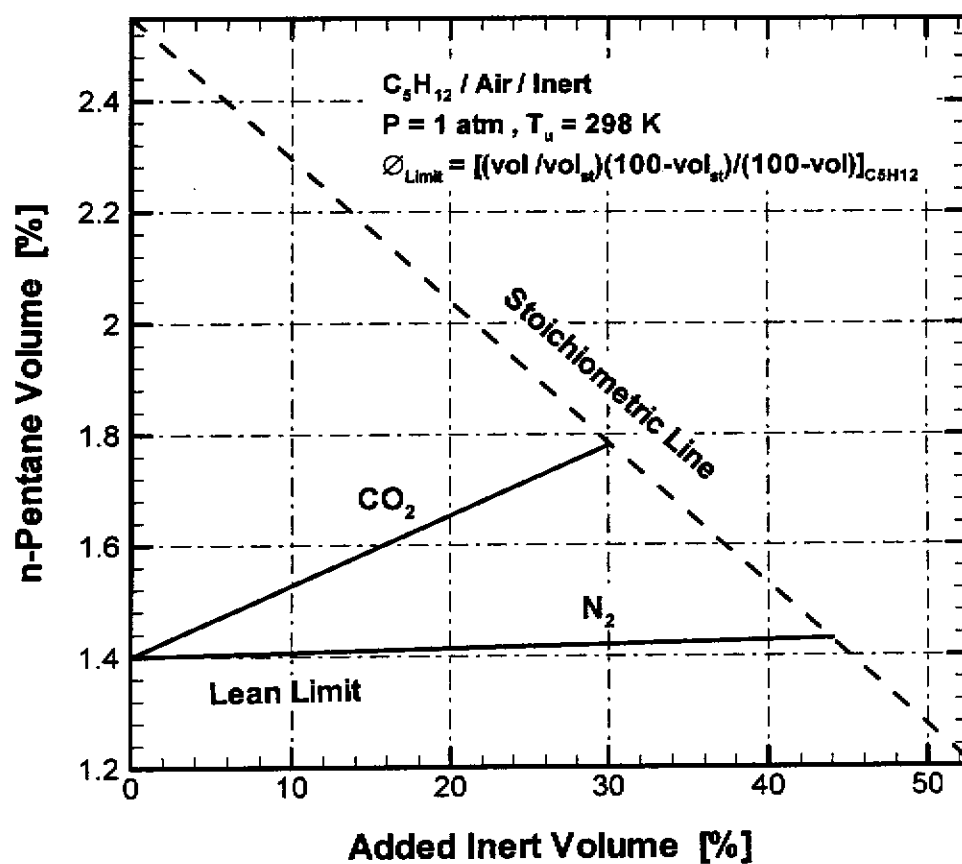


圖 C-12 戊烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

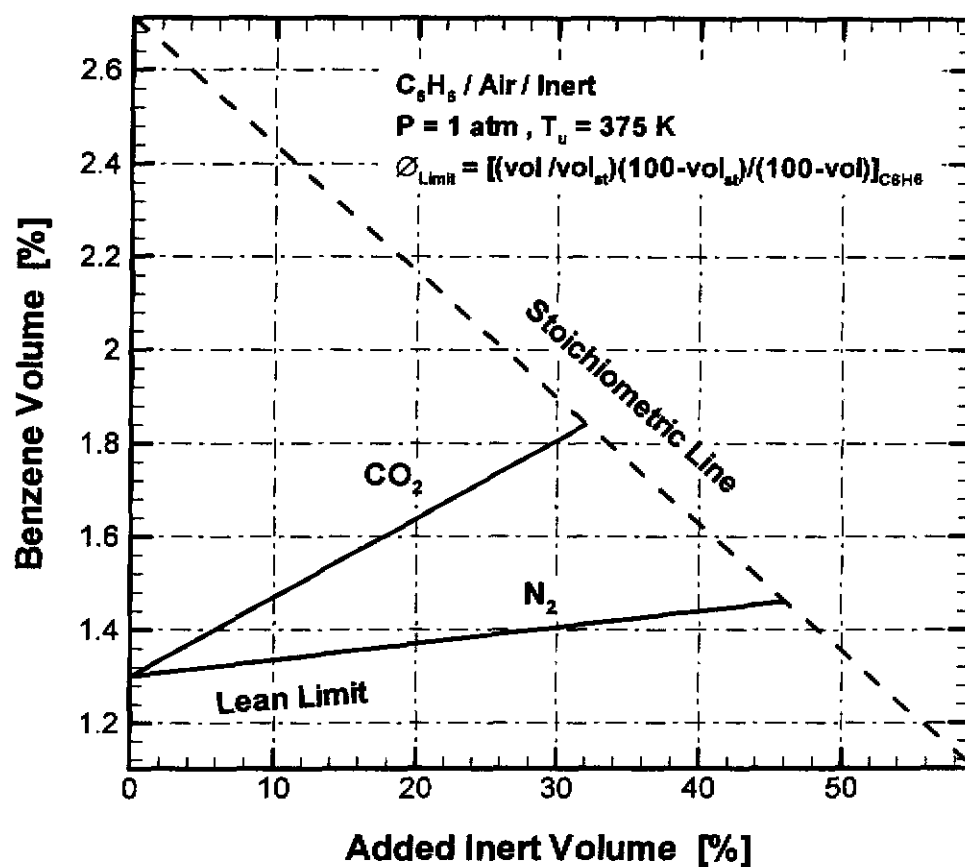


圖 C-13 苯-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

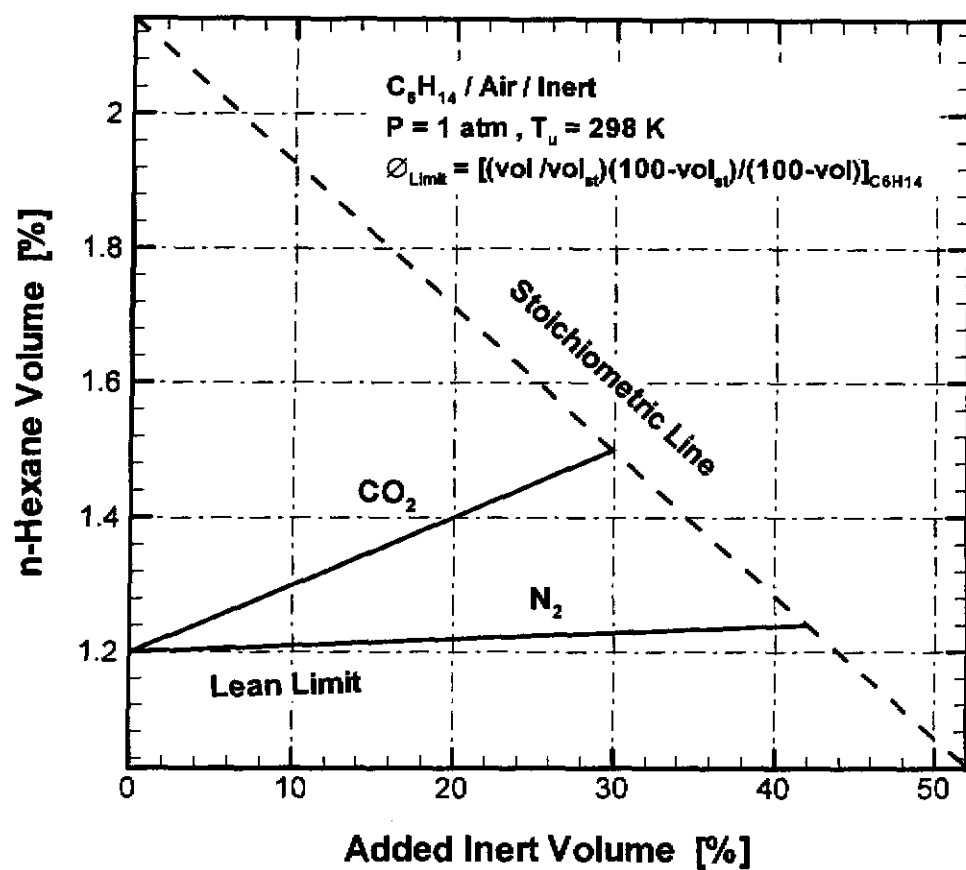


圖 C-14 己烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

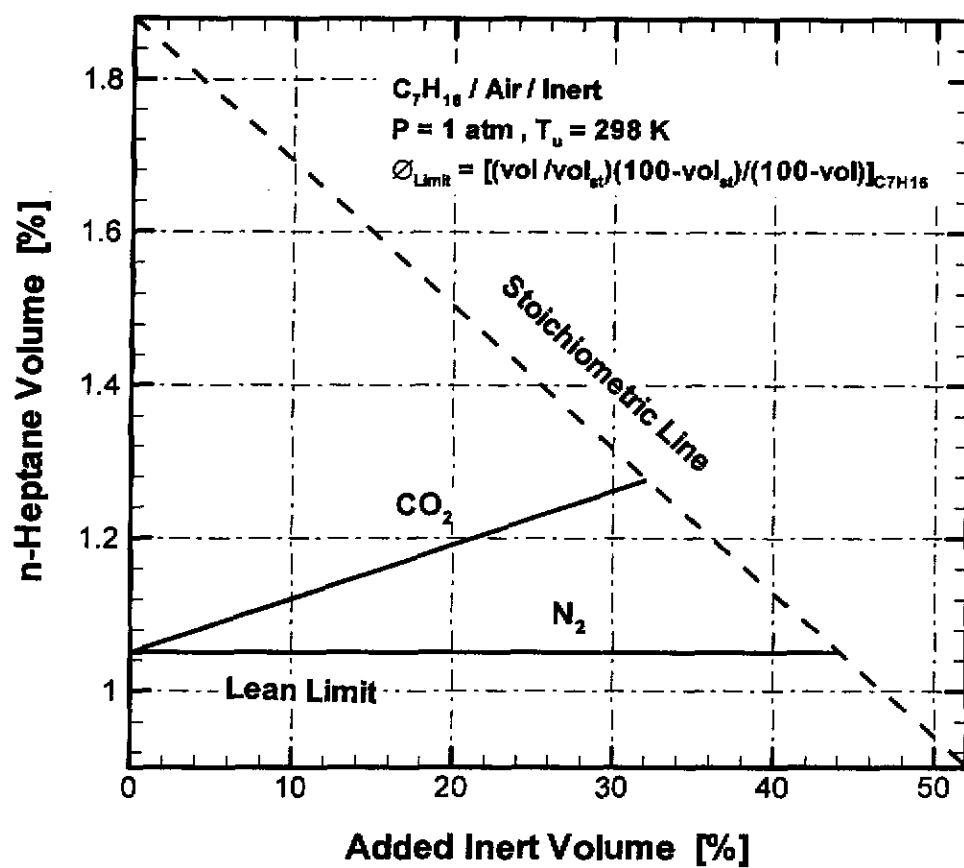


圖 C-15 庚烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

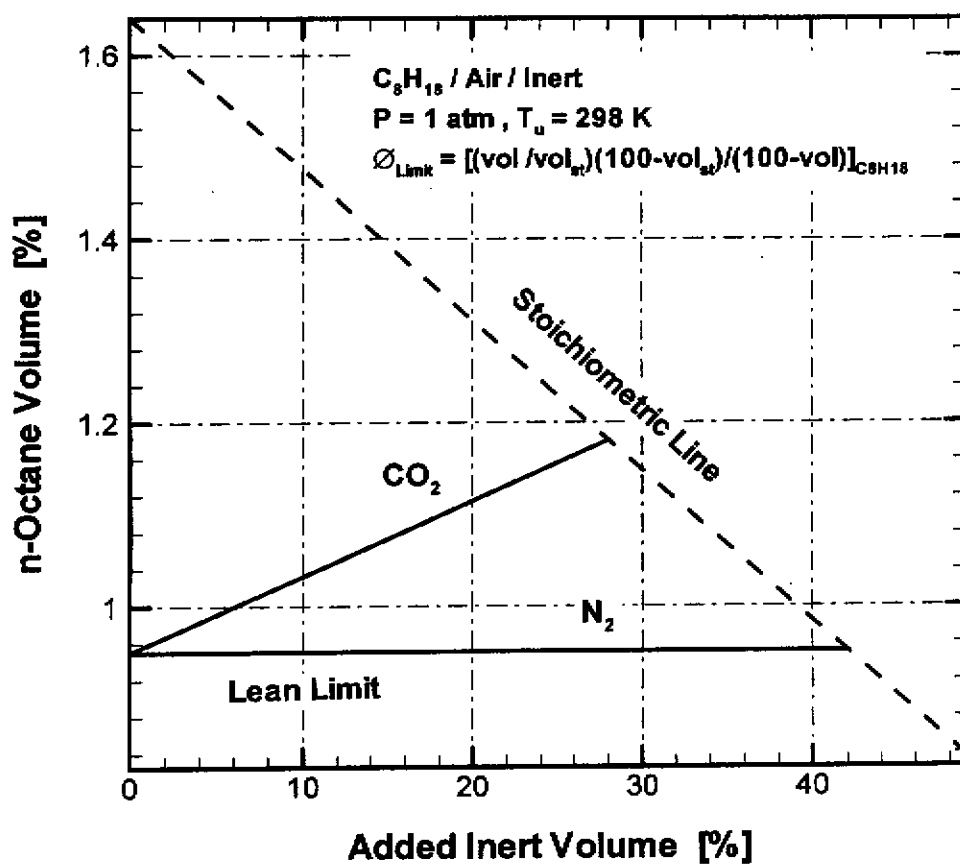


圖 C-16 辛烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

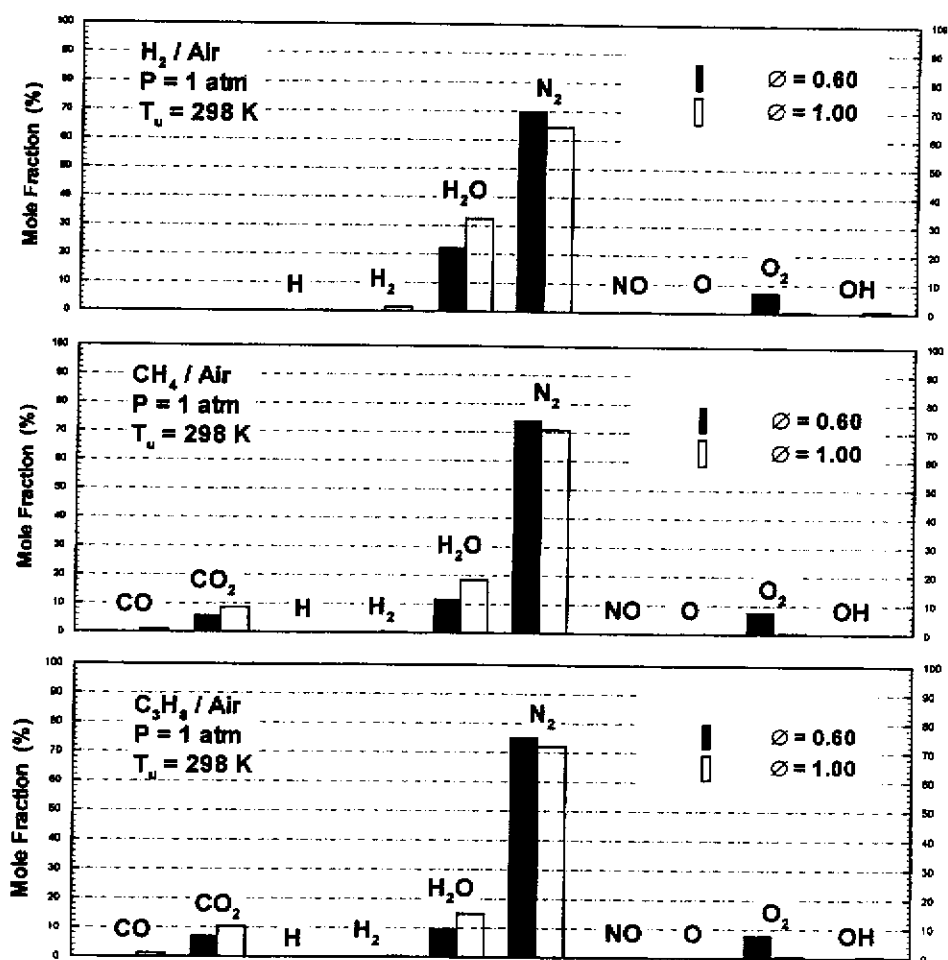


圖 B-1 當量值為 0.6、1.0 的可燃氣比較燃燒生成物種的濃度變化

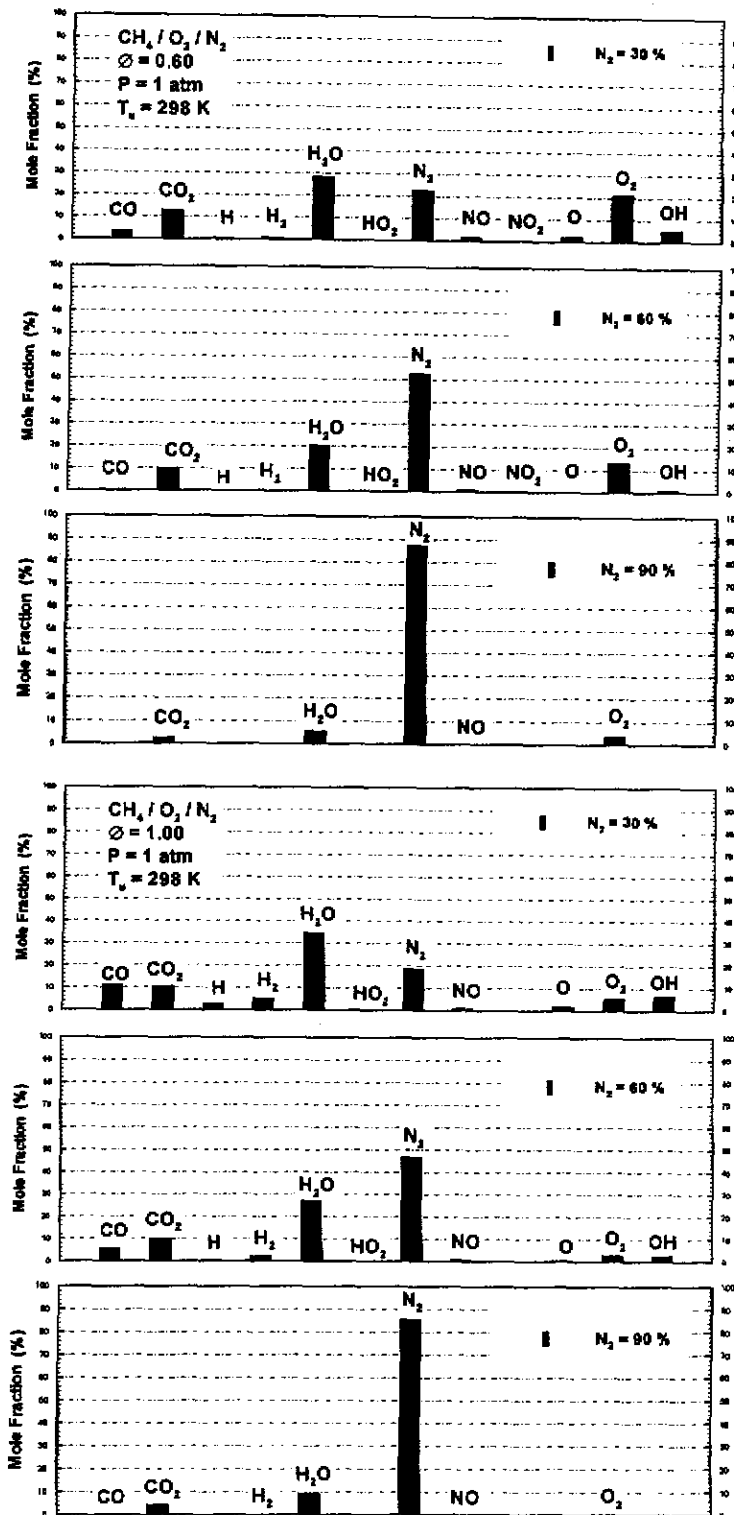


圖 B-2 當量值為 0.6、1.0 的甲烷在氮氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

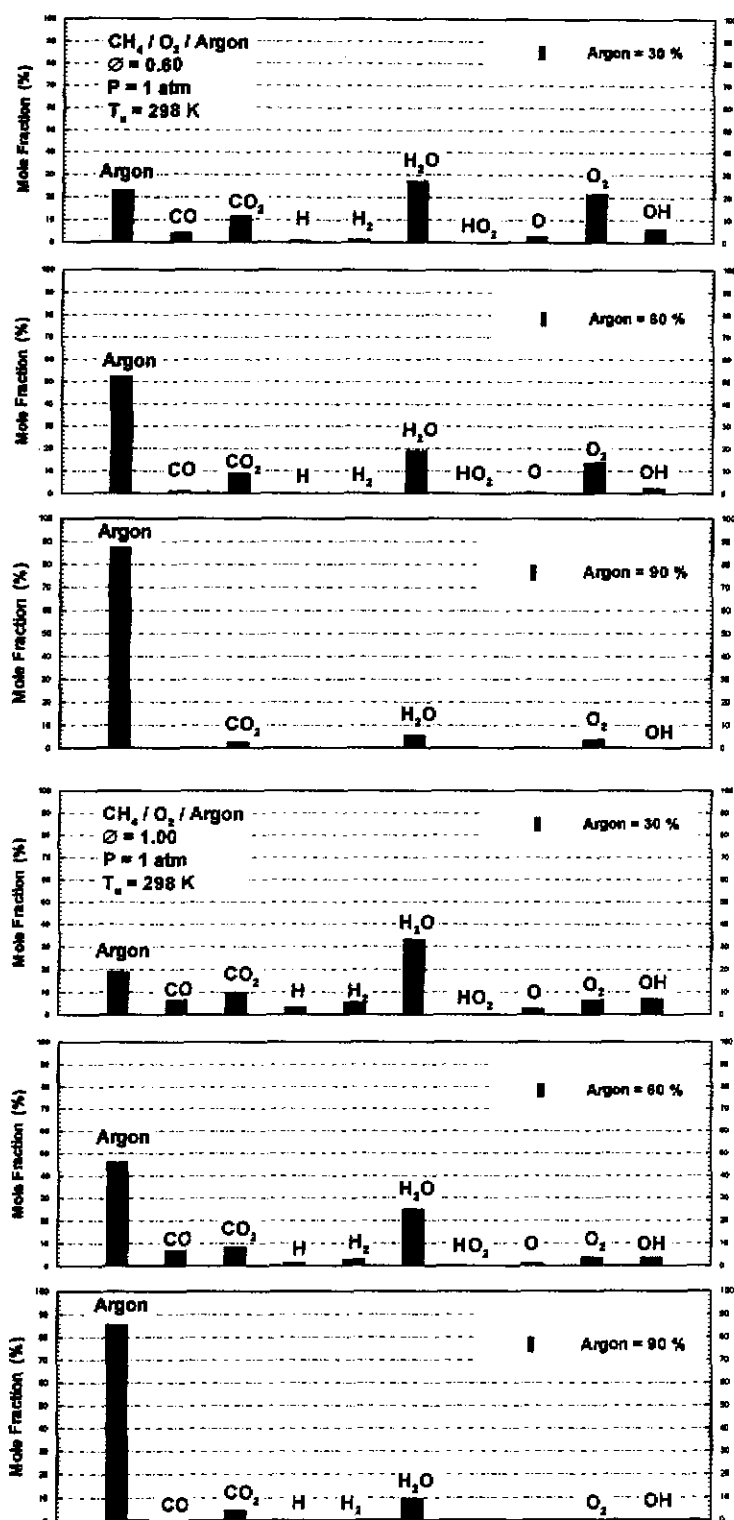


圖 B-3 當量值為 0.6、1.0 的甲烷在氬氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

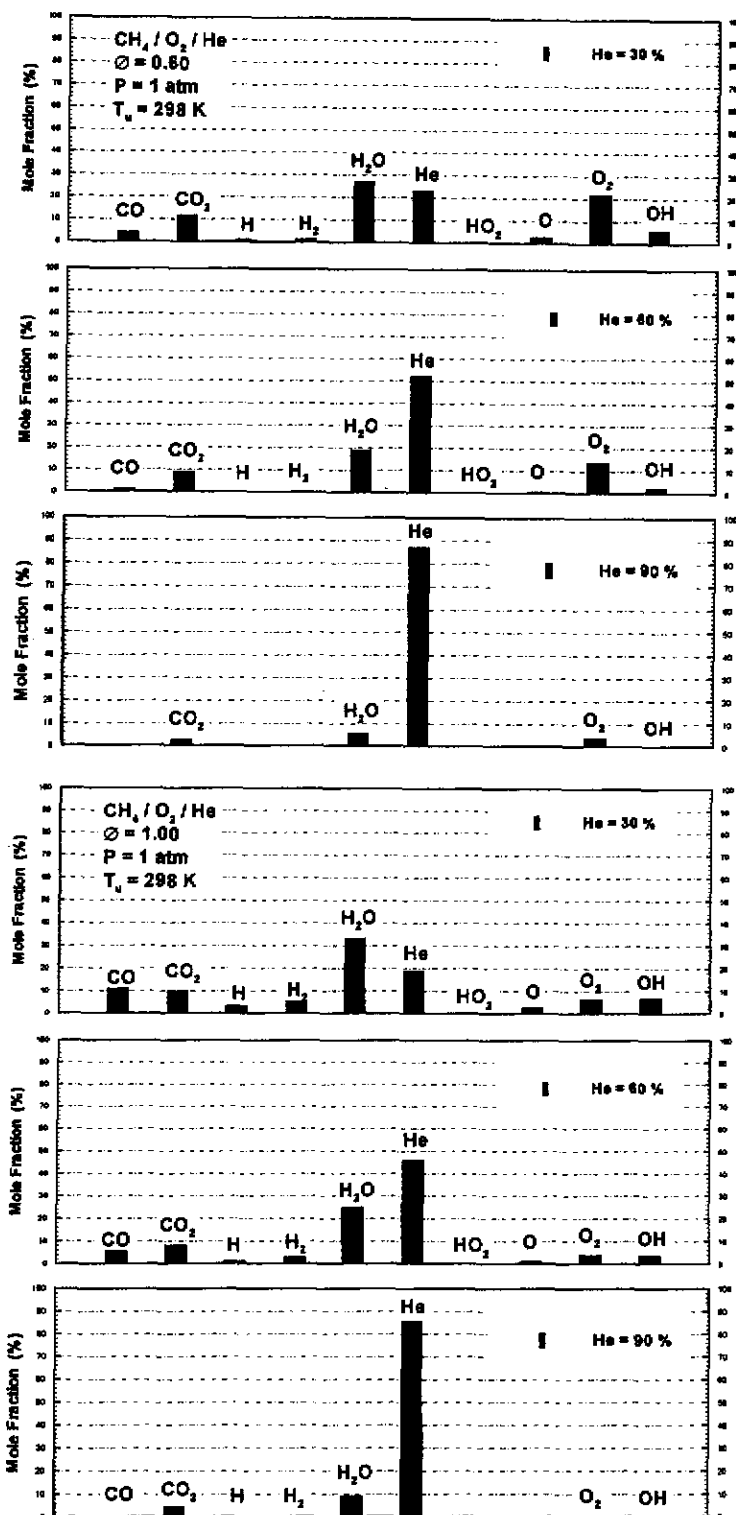


圖 B-4 當量值為 0.6、1.0 的甲烷在氦氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

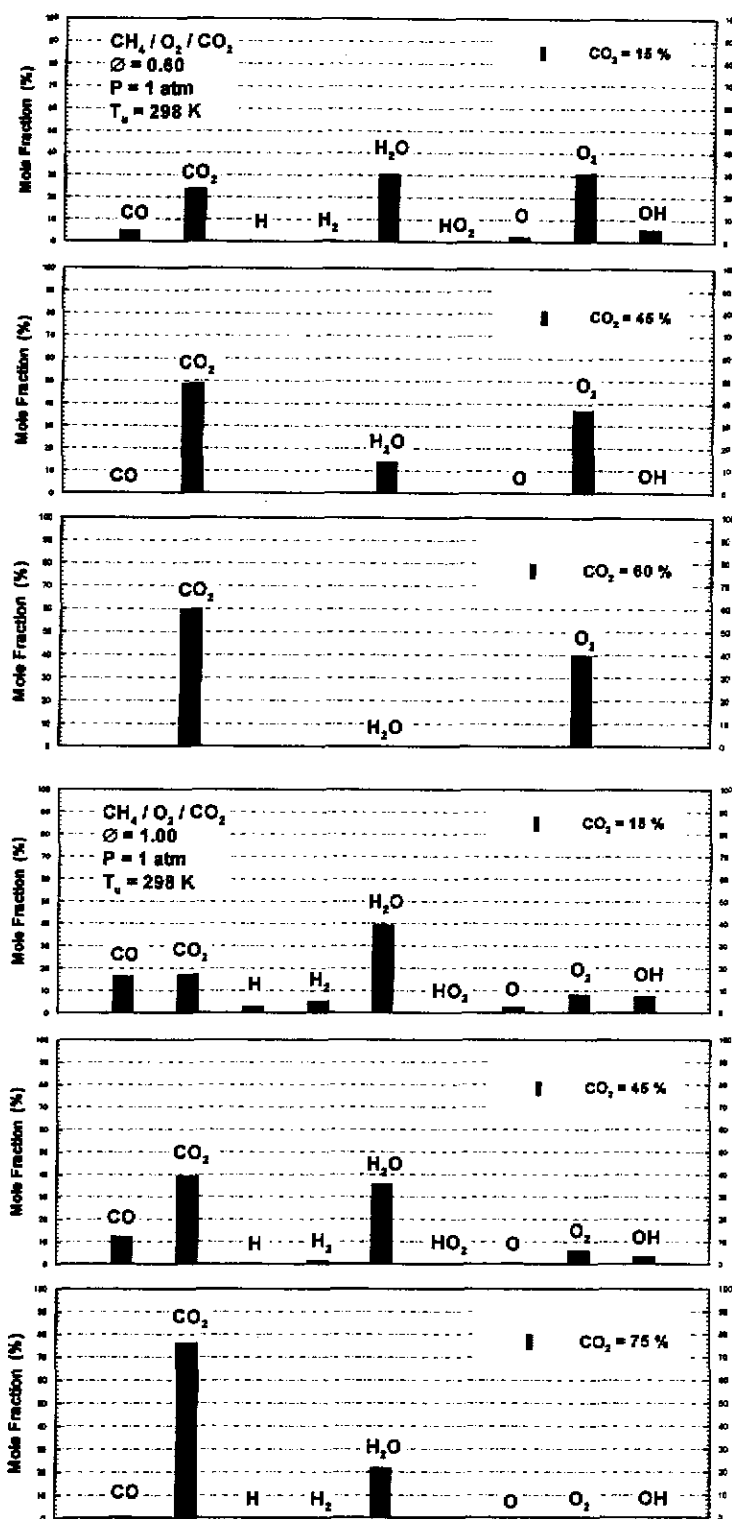


圖 B-5 當量值為 0.6、1.0 的甲烷在二氧化碳的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

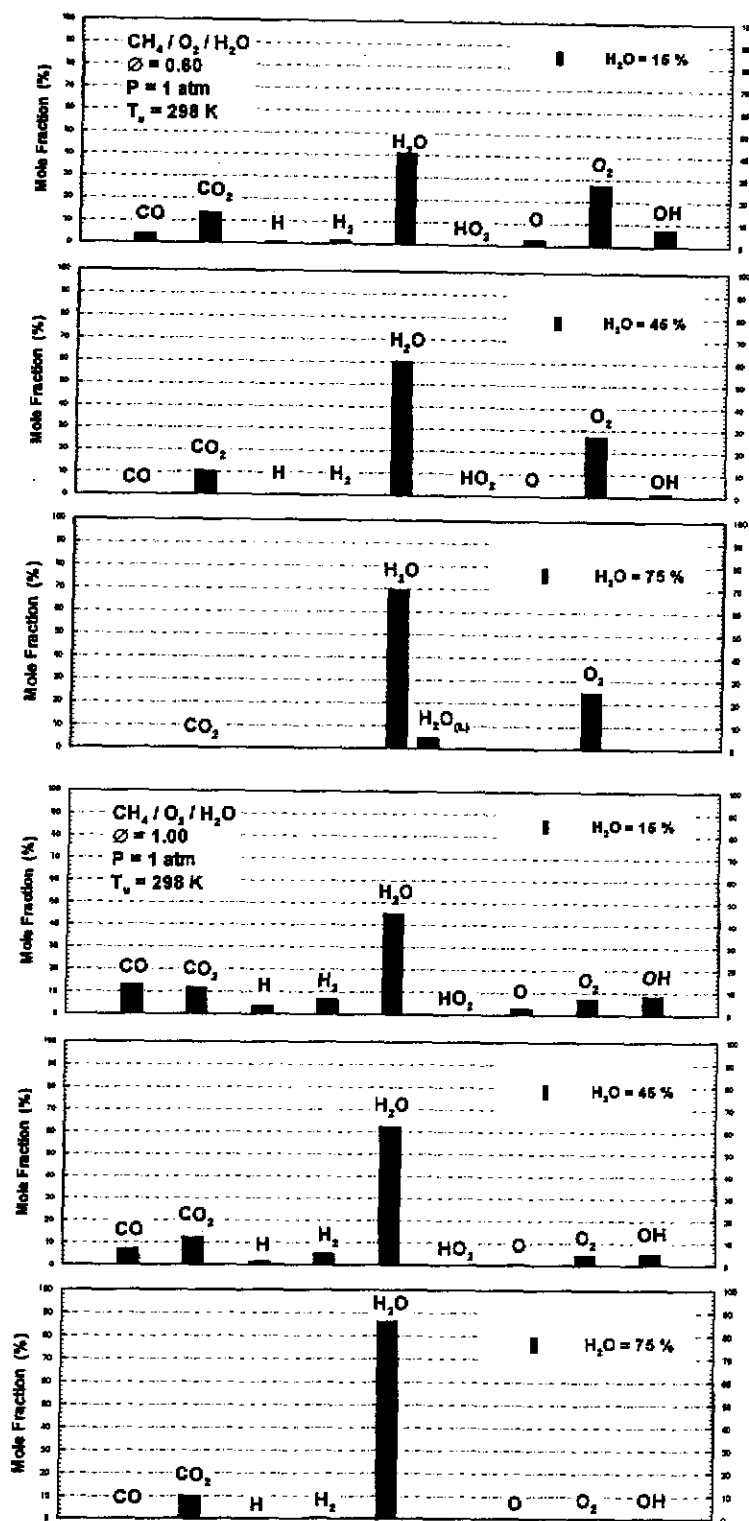


圖 B-6 當量值為 0.6、1.0 的甲烷在水氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

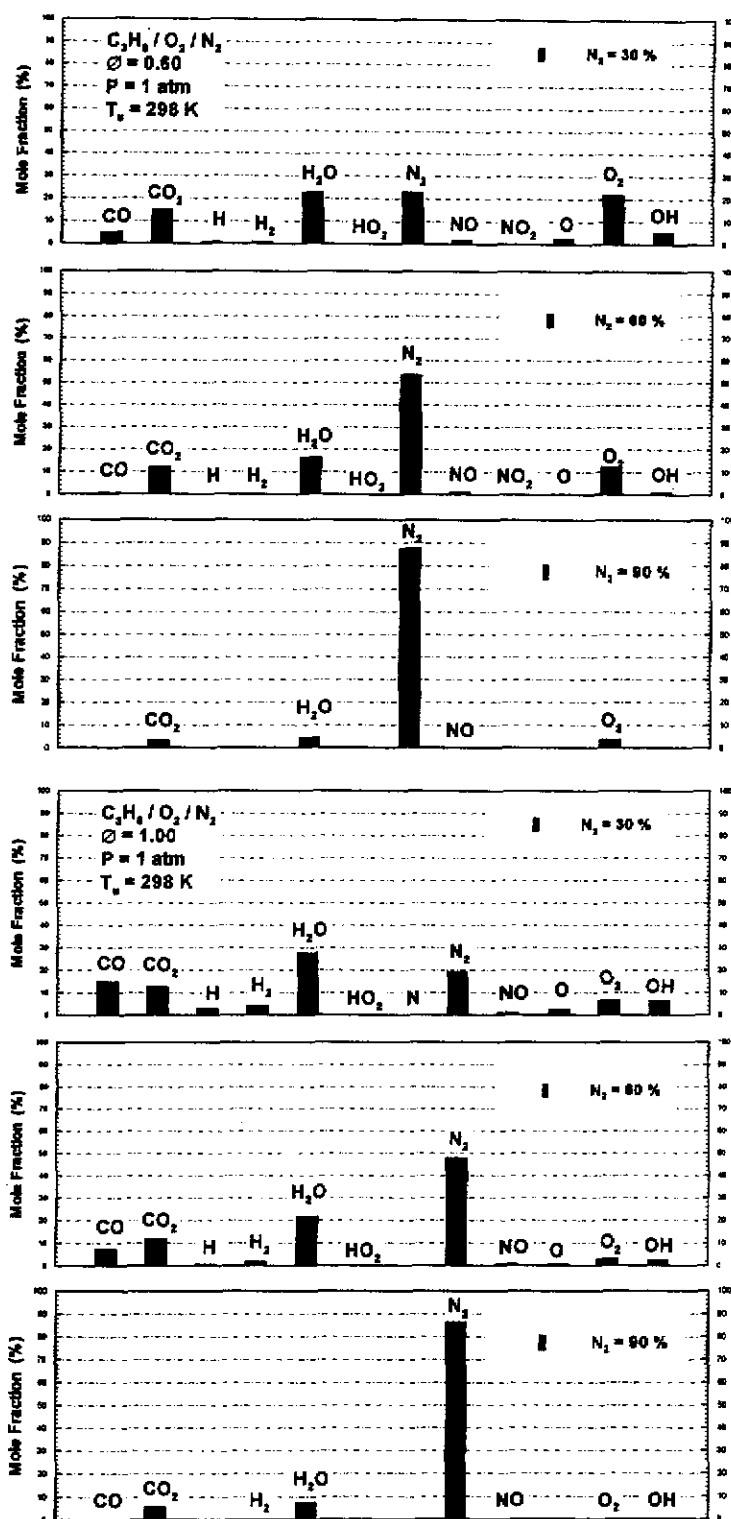


圖 B-7 當量值為 0.6、1.0 的丙烷在氮氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

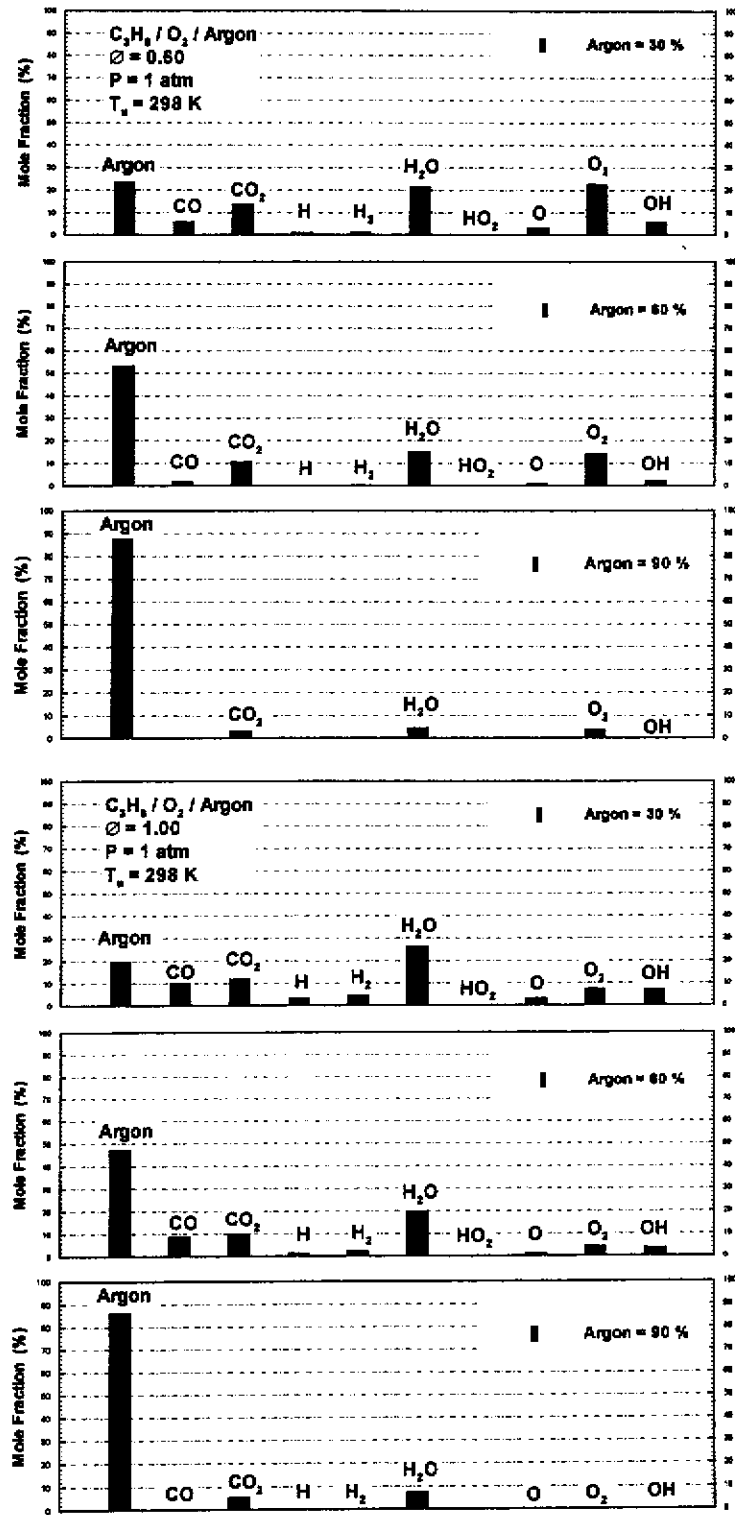


圖 B-8 當量值為 0.6、1.0 的丙烷在氬氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

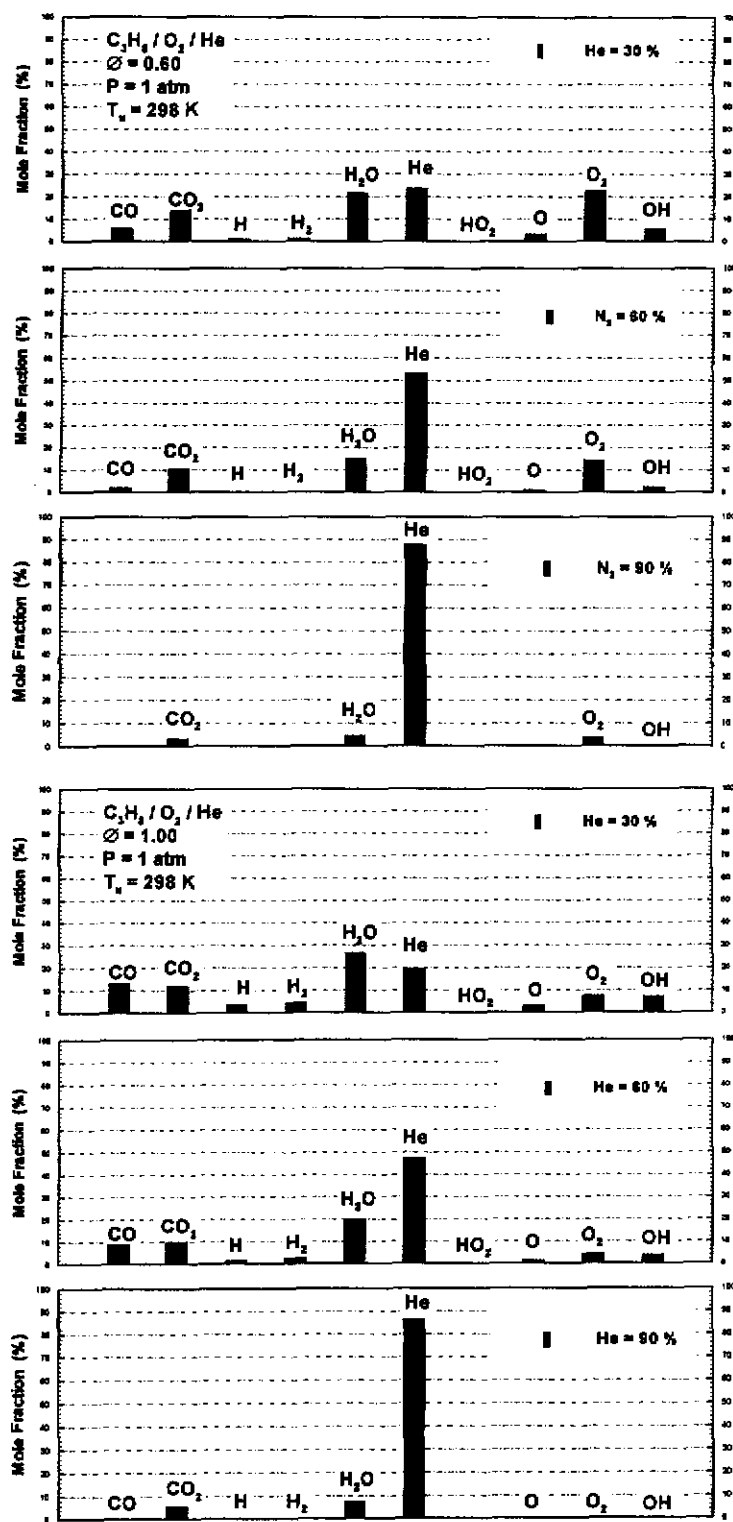


圖 B-9 當量值為 0.6、1.0 的丙烷在氦氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

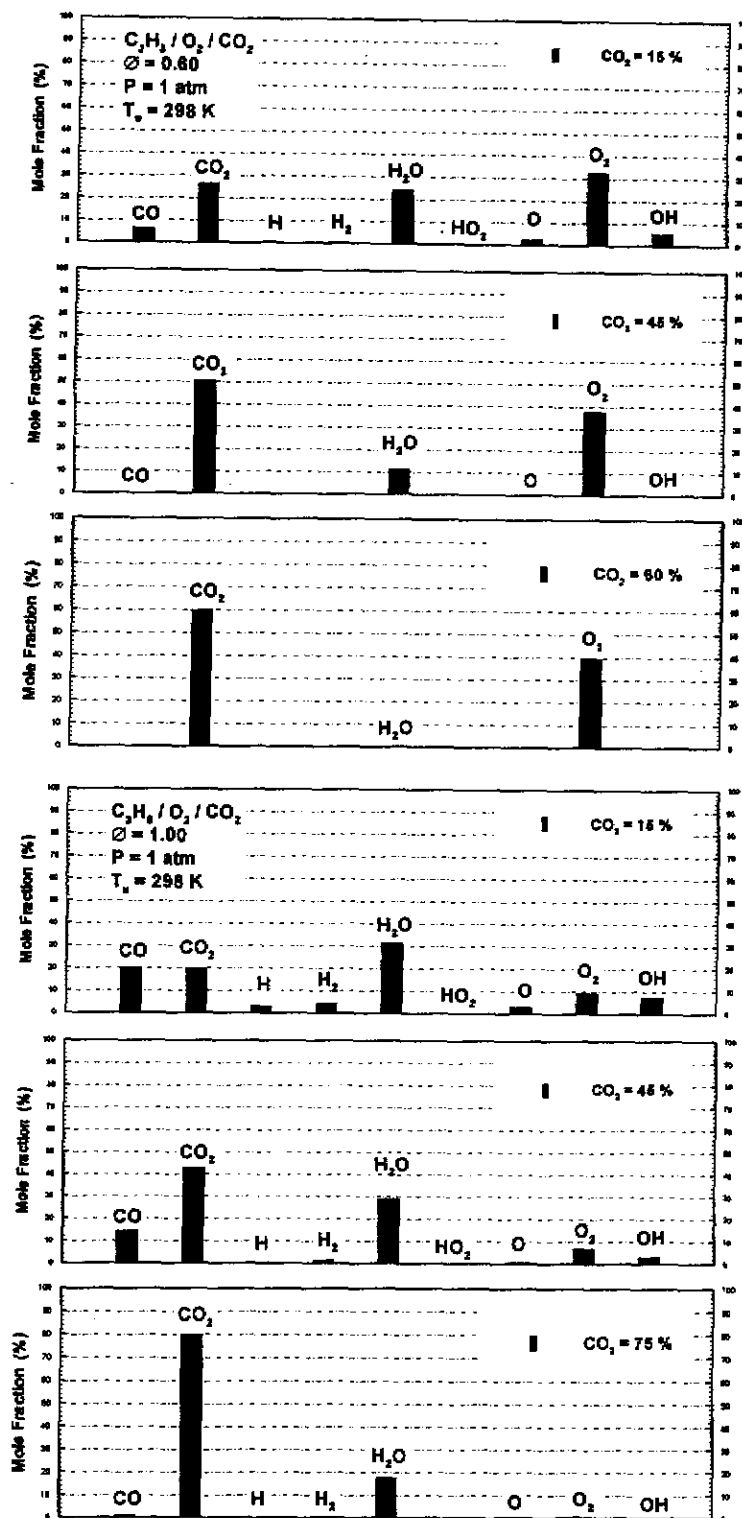


圖 B-10 當量值為 0.6、1.0 的丙烷在二氧化碳的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

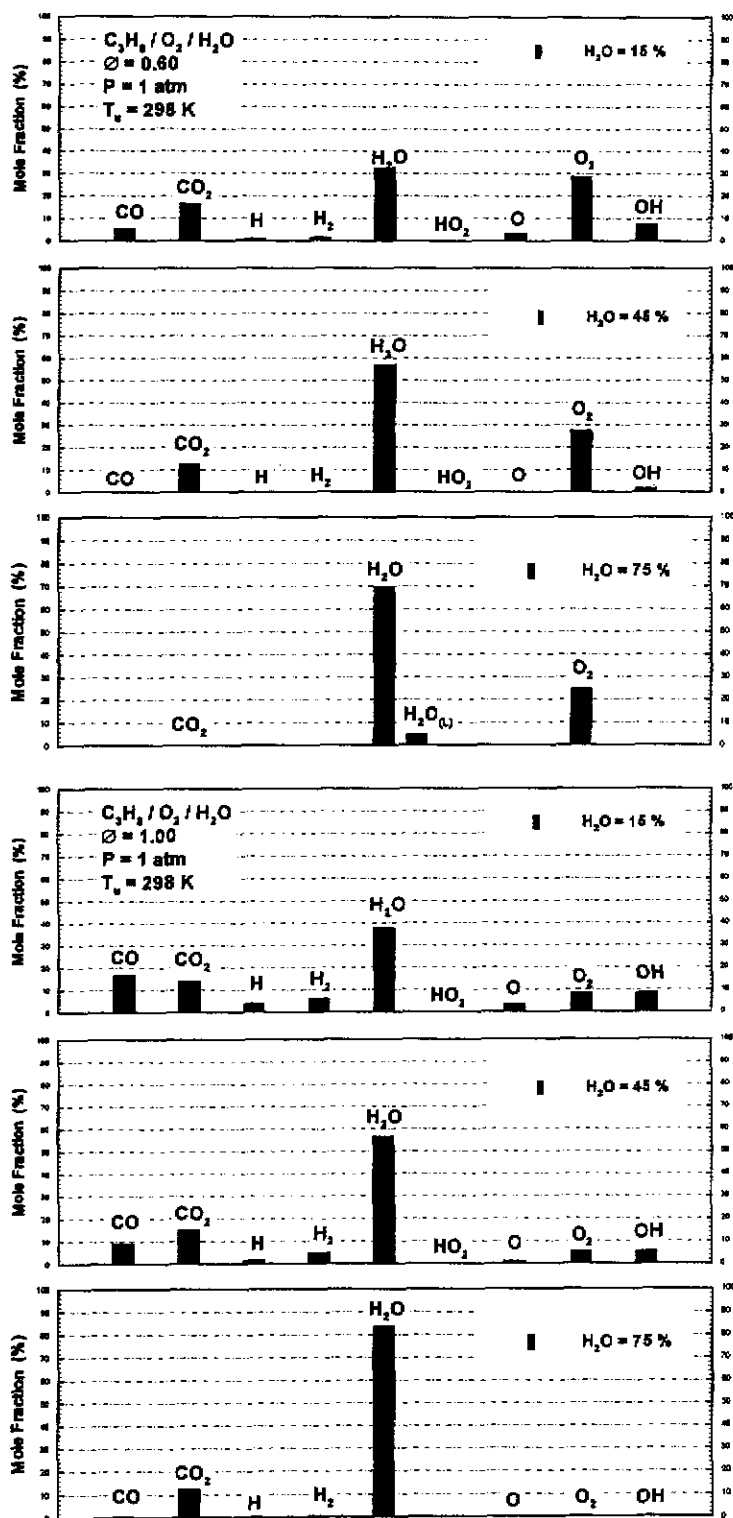


圖 B-11 當量值為 0.6、1.0 的丙烷在水氣的稀釋下比較物種濃度與氧化劑組成的變化

附錄 C

可燃極限 (Flammability Limits)

雖然氣體-空氣可燃極限的資料很方便查得，但在某些狀況下對複雜的氣體組合，如碳氫燃料、氧氣以及氮氣的混合氣，瞭解相關可燃極限的知識是有其必要性。甚至添加火焰抑制劑，討論混合氣可燃極限的變化，而此種研究對於防火工程、工廠運作等方面是非常的重要。

C.1 縮減氧氣濃度

縮減氧氣濃度的一般方法是藉由惰性氣體使氧氣缺量，係利用惰性氣體的添加降低氧化劑中的氧氣原本所佔的劑量。如果添加二氧化碳、氮氣、氦氣以及氬氣等化學上為惰性的氣體，這些氣體將會影響混合氣的物性，如下

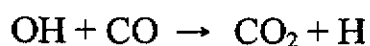
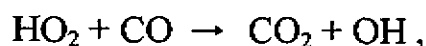
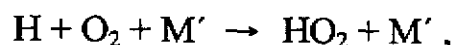
- 可燃氣可被點燃（或傳播）的範圍變窄。
- 使火焰燃燒的最大速度往貧燃料區偏移。
- 明顯改變混合氣的熱擴散性、比熱，進而影響火焰的溫度和傳播速度。因此添加氮氣（或氬氣）則會增加火焰溫度與速度。

當惰性氣體被用來控制火焰時，它的主要功能是用來預防爆炸蒸汽-空氣混合物的形成。如果添加的氣體會參與反應時，像是 CO-Air 火焰加入氫氣（此氣體會與空氣反應），由於鏈反應（Chain Reaction）

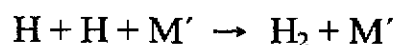
的影響將導致火焰速度的增加。氫原子在 CO-Air 火焰中所扮演的角色，可藉由下述反應機構來加以釐清：

在燃氣之初- H_2 解離成 2H ，而 H 原子向未燃氣方向擴散。

鏈連續 (Chain Continuation) 反應-



終止 (Termination) 反應-



對於碳的燃燒，氫氣扮演著類似催化的效應，所以反應系統中氫原子濃度愈高，反應愈激烈，火焰傳播速度愈快。相同的解釋理由，CO/Air 火焰添加 CH_4 ，其中導致火焰速度變快的氫原子乃源自於甲烷。

C.2 可燃極限相圖

以下將對一些常見的燃料，推導能快速估算添加惰性氣體的貧極限的當量值大小：

圖 C-1 為氫氣-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 28.57 - 0.2857 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 4 + 0.0419 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 75$

$$\text{vol} = 4 + 0.1238 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 60 \quad (\text{C-1})$$

圖 C-2 為甲烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 9.47 - 0.0947 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 5 + 0.02 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 39$

$$\text{vol} = 5 + 0.084 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 25 \quad (\text{C-2})$$

圖 C-3 為甲烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 12.18 - 0.1218 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 6.7 - 0.0026 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 46$

$$\text{vol} = 6.7 + 0.0672 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 29 \quad (\text{C-3})$$

圖 C-4 為乙烯-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添

加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 6.59 - 0.0659 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

$$\text{其中 } \text{vol} = 2.7 + 0.012 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 50$$

$$\text{vol} = 2.7 + 0.0313 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 40 \quad (\text{C-4})$$

圖 C-5 為乙烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 5.66 - 0.0566 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

$$\text{其中 } \text{vol} = 3 - 0.0024 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 45$$

$$\text{vol} = 3 + 0.0266 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 32 \quad (\text{C-5})$$

圖 C-6 為乙醇-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 6.6 - 0.066 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

$$\text{其中 } \text{vol} = 3.3 + 0.0043 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 47$$

$$\text{vol} = 3.3 + 0.0283 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 35 \quad (\text{C-6})$$

圖 C-7 為環丙烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，

觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 4.44 - 0.0444 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 2.4 + 0.003 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}$, $\text{vol}_{\text{N}_2} \leq 43$,

$$\text{vol} = 2.4 + 0.0213 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 31 \quad (\text{C-7})$$

圖 C-8 為丙烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 3.68 - 0.0368 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 2.1 - 0.0009 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}$, $\text{vol}_{\text{N}_2} \leq 44$

$$\text{vol} = 2.1 + 0.0176 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 29 \quad (\text{C-8})$$

圖 C-9 為丙酮-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 5 - 0.05 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 2.6 + 0.0227 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}$, $\text{vol}_{\text{N}_2} \leq 33$

$$\text{vol} = 2.6 + 0.050 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 24 \quad (\text{C-9})$$

圖 C-10 為丁二烯-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 3.7 - 0.037 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

$$\text{其中 } \text{vol} = 2.0 - 0.003 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 50$$

$$\text{vol} = 2.0 + 0.0103 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 36 \quad (\text{C-10})$$

圖 C-11 為丁烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 3.1 - 0.031 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

$$\text{其中 } \text{vol} = 1.8 + 0.0015 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 40$$

$$\text{vol} = 1.8 + 0.0138 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 29 \quad (\text{C-11})$$

圖 C-12 為戊烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 2.55 - 0.0255 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

$$\text{其中 } \text{vol} = 1.4 + 0.0007 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 44$$

$$\text{vol} = 1.4 + 0.0127 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 30 \quad (\text{C-12})$$

圖 C-13 為苯-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 2.71 - 0.0271 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 1.3 + 0.0035 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 46$

$$\text{vol} = 1.3 + 0.0169 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 32 \quad (\text{C-13})$$

圖 C-14 為己烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 2.14 - 0.0214 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 1.2 + 0.001 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{N}_2}, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 42$

$$\text{vol} = 1.2 + 0.01 \text{ vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 30 \quad (\text{C-14})$$

圖 C-15 為庚烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 1.88 - 0.0188 \text{ vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 1.05, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 44$

$$\text{vol} = 1.05 + 0.007 \text{vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 32 \quad (\text{C-15})$$

圖 C-16 為辛烷-空氣火焰，在添加氮氣、二氧化碳等惰性氣體後，觀察混合氣貧可燃範圍變窄的情形，貧極限當量值的估算視惰性氣體添加劑量表示如下

$$\phi_{\text{Limit}} = (\text{vol} / \text{vol}_{\text{st}}) (100 - \text{vol}_{\text{st}}) / (100 - \text{vol}),$$

$$\text{vol}_{\text{st}} = 1.64 - 0.0164 \text{vol}_{\text{Inert}}$$

其中 $\text{vol} = 0.95, \text{vol}_{\text{N}_2} \leq 42$

$$\text{vol} = 0.95 + 0.0082 \text{vol}_{\text{Inert}=\text{CO}_2}, \text{vol}_{\text{CO}_2} \leq 28 \quad (\text{C-16})$$

參考文獻：

1. Friedman, R., "Theory of Fire Extinguishment," *Fire Protection Handbook*, US National Fire Protection Association 1:72-82 (1991).
2. Glassman, I.: *Combustion*, 3rd edition, Academic Press, New York (1996).
3. Lewis, B., and von Elbe, G.: *Combustion Flames and Explosions of Gases*, 3rd edition, Academic Press, New York (1987).
4. Senecal, J. A., "Explosion Prevention and Protection," *Fire Protection Handbook*, US National Fire Protection Association 6:184-201 (1991).

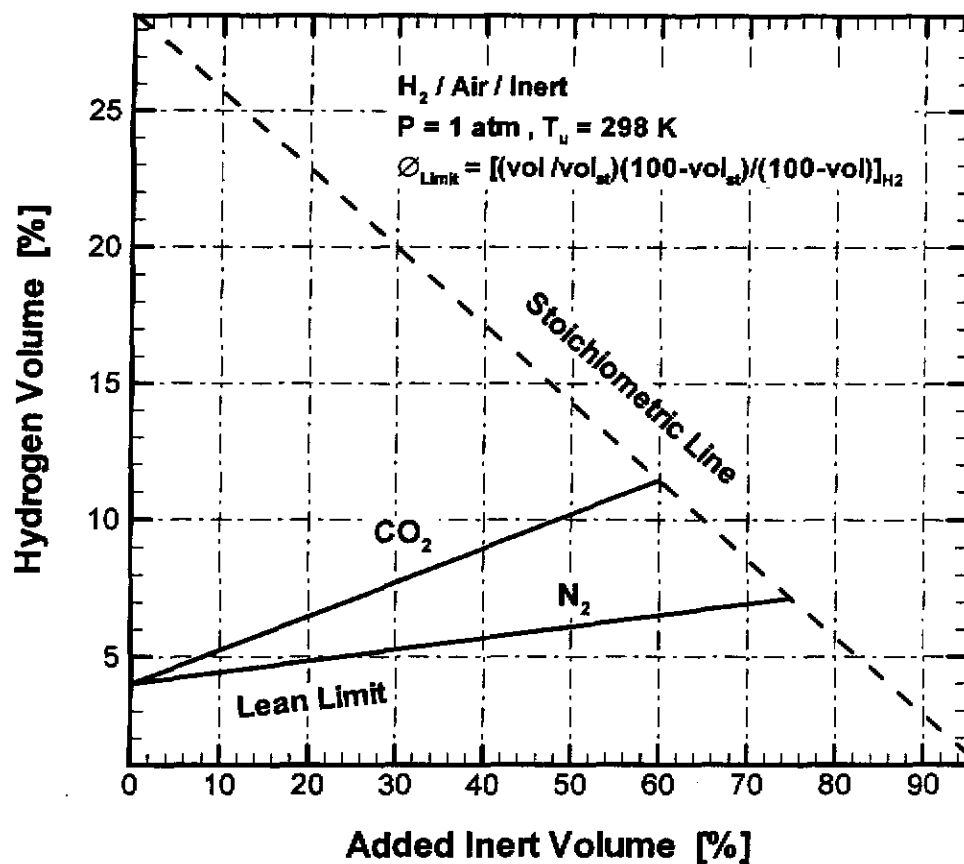


圖 C-1 氫氣-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

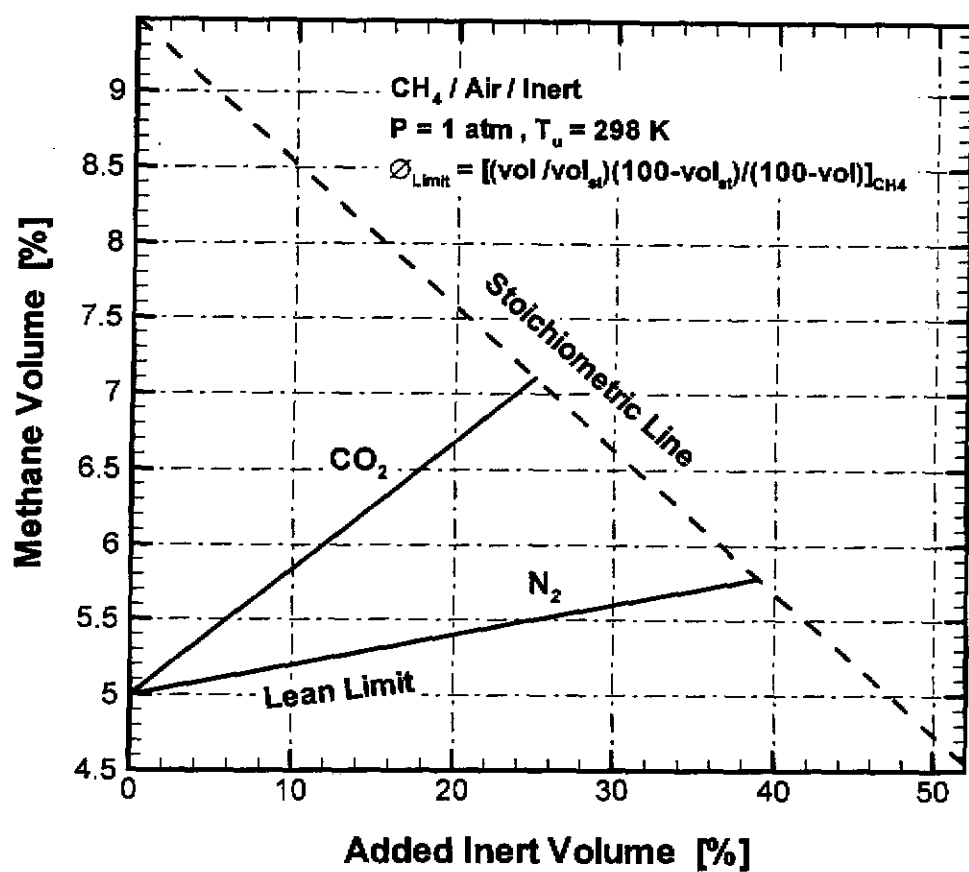


圖 C-2 甲烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

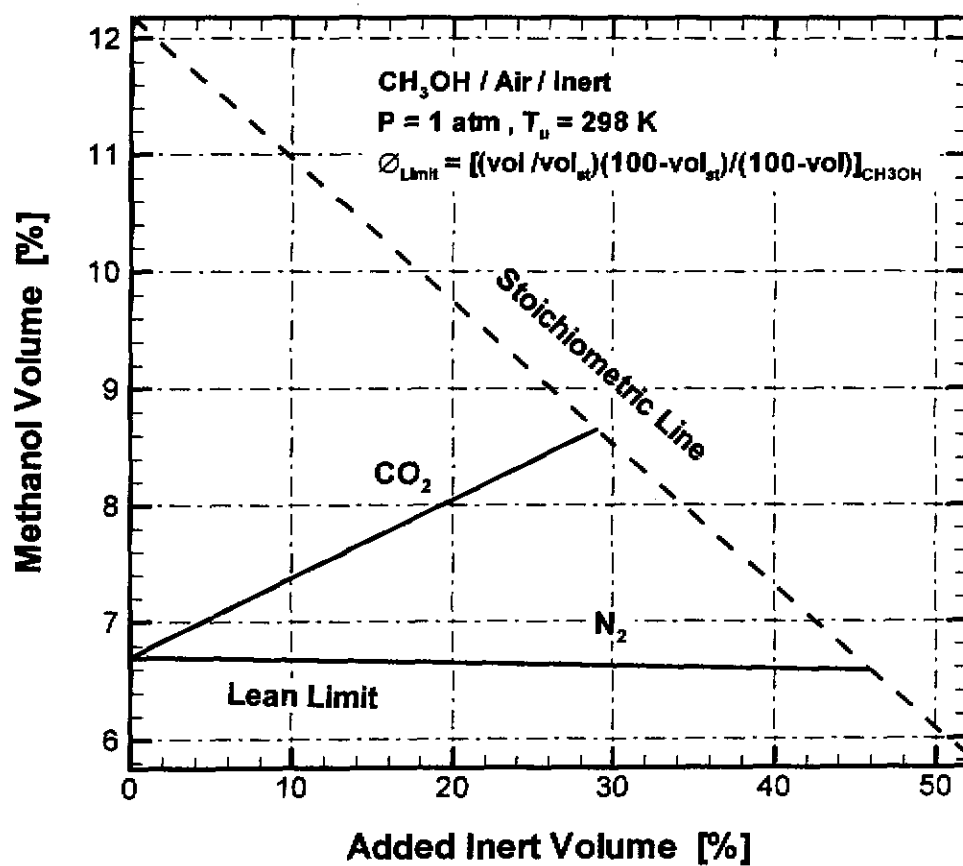


圖 C-3 甲醇-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

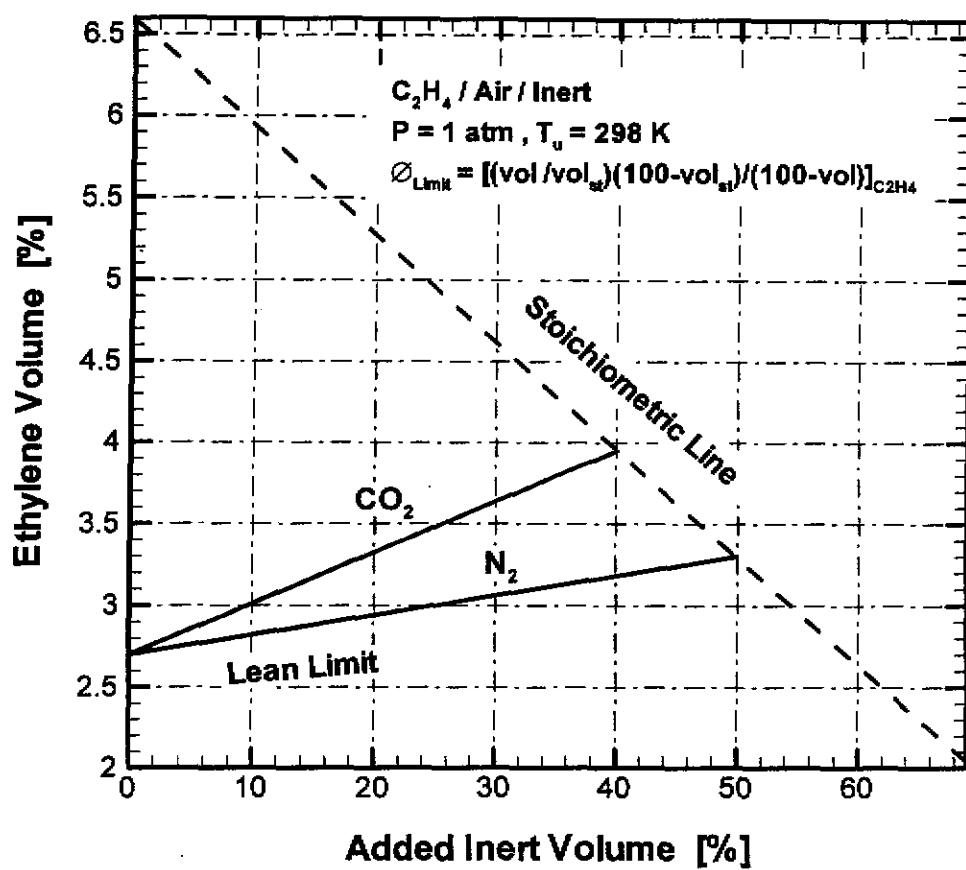


圖 C-4 乙烯-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

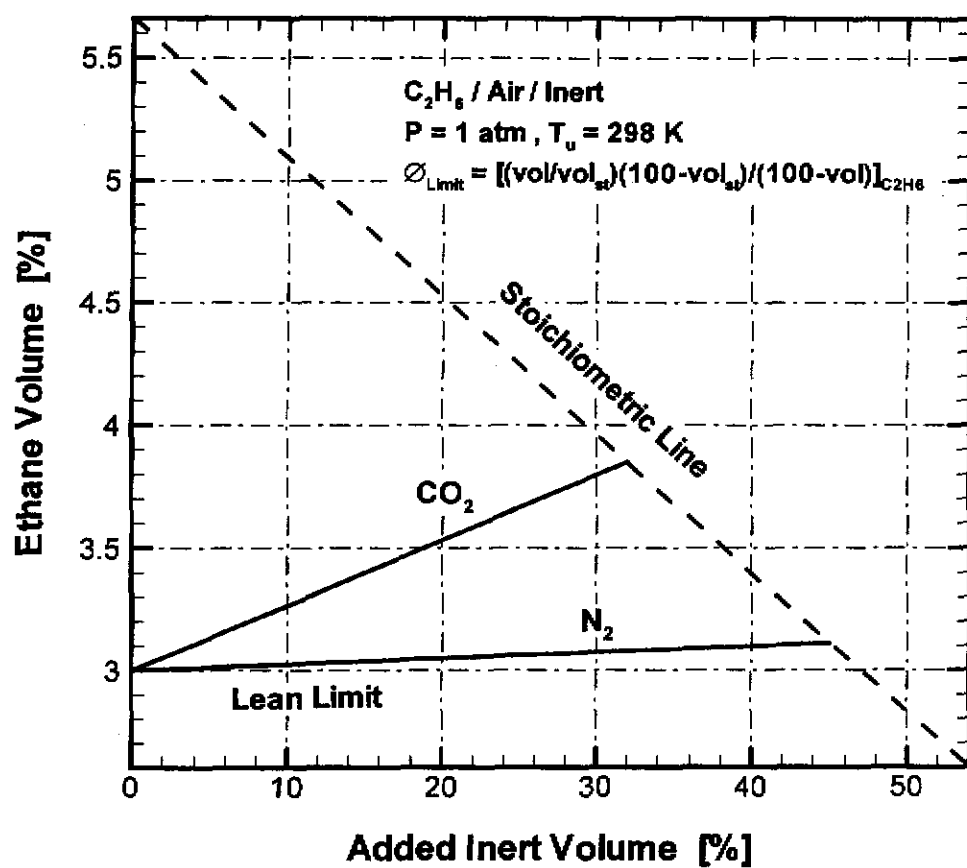


圖 C-5 乙烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

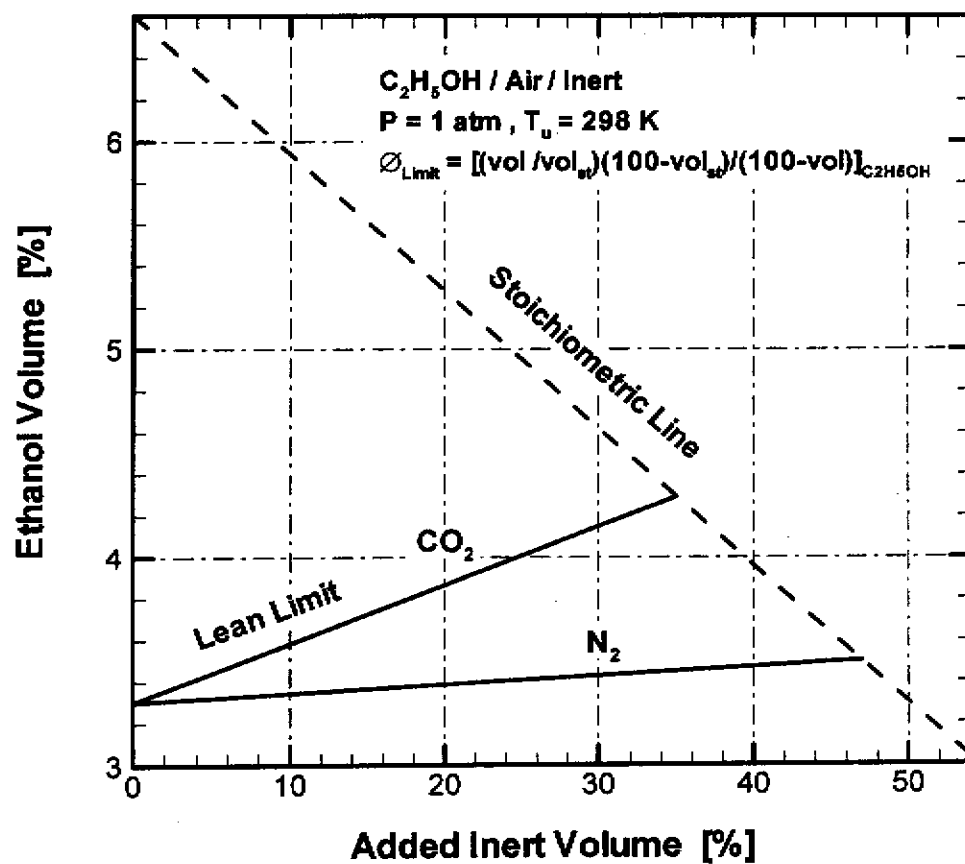


圖 C-6 乙醇-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

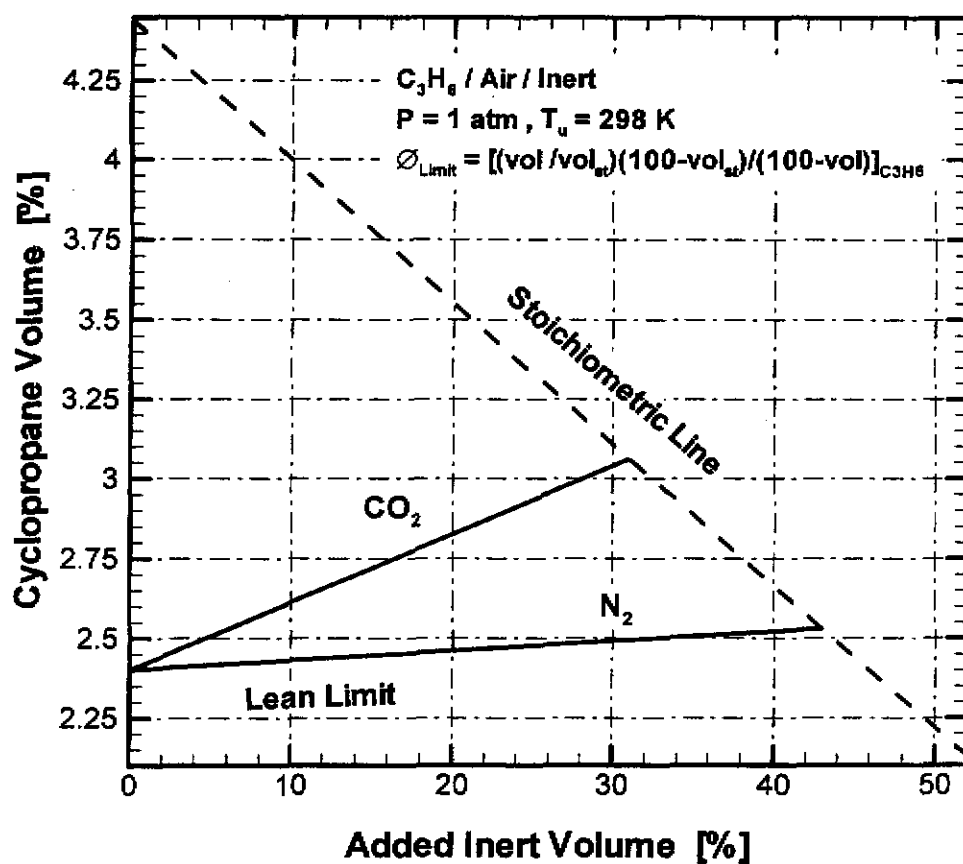


圖 C-7 環丙烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

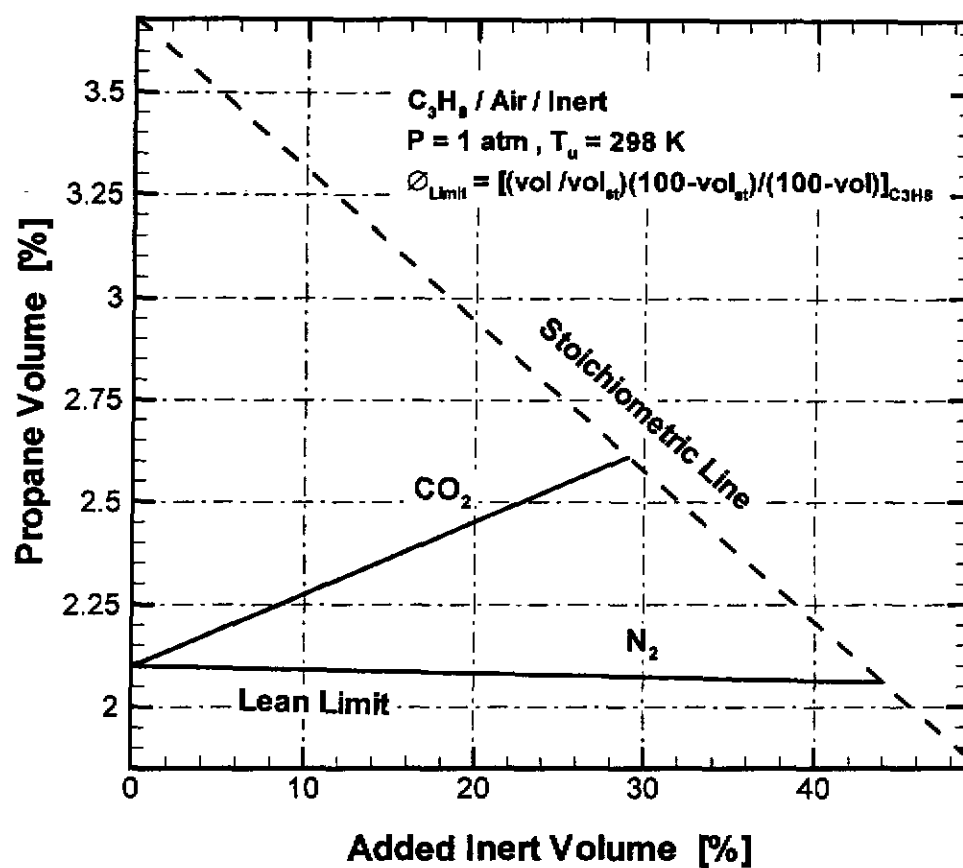


圖 C-8 丙烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

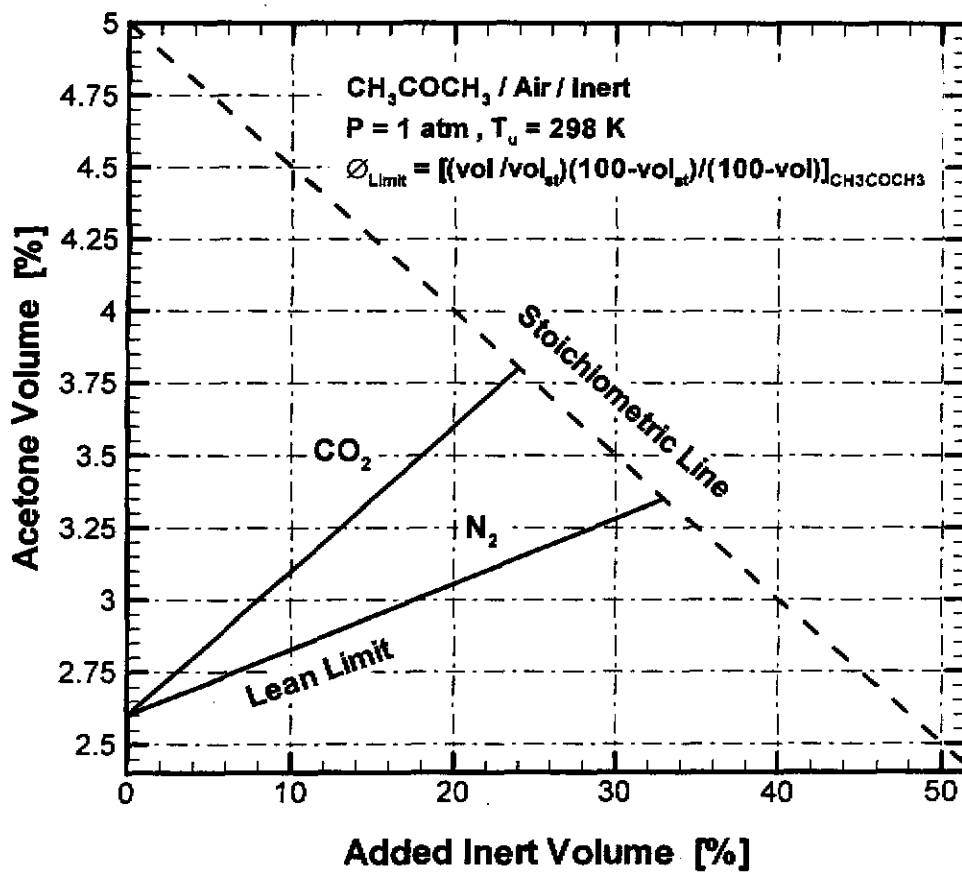


圖 C-9 丙酮-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

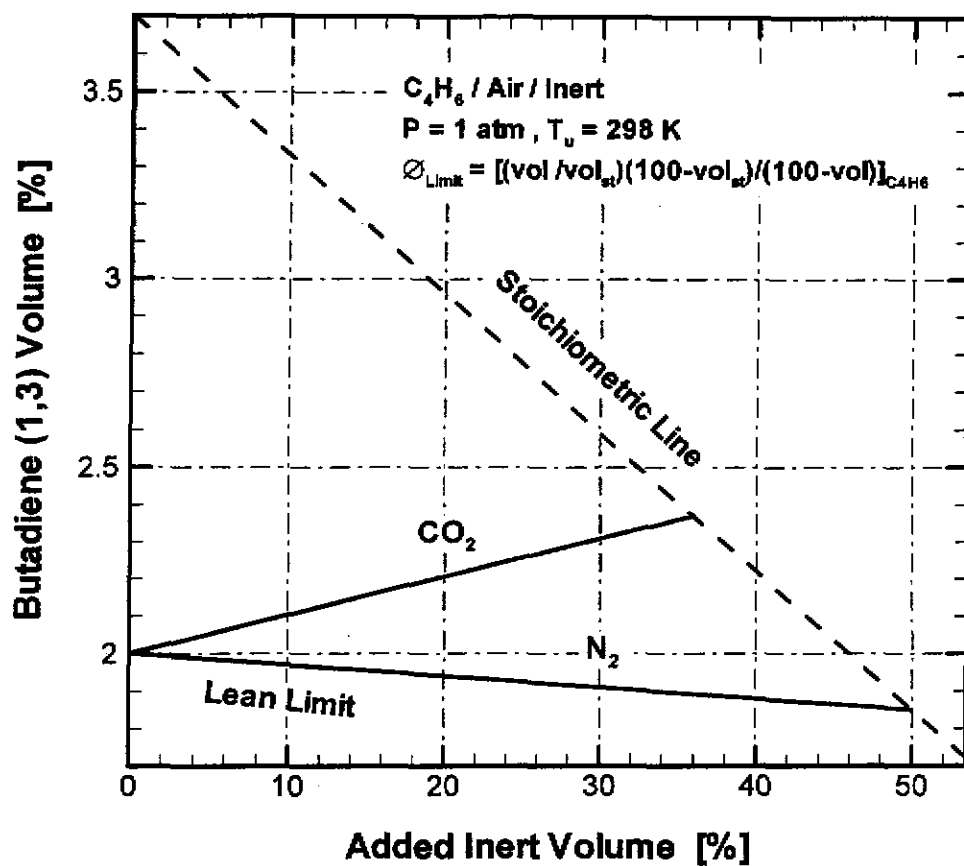


圖 C-10 丁二烯-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

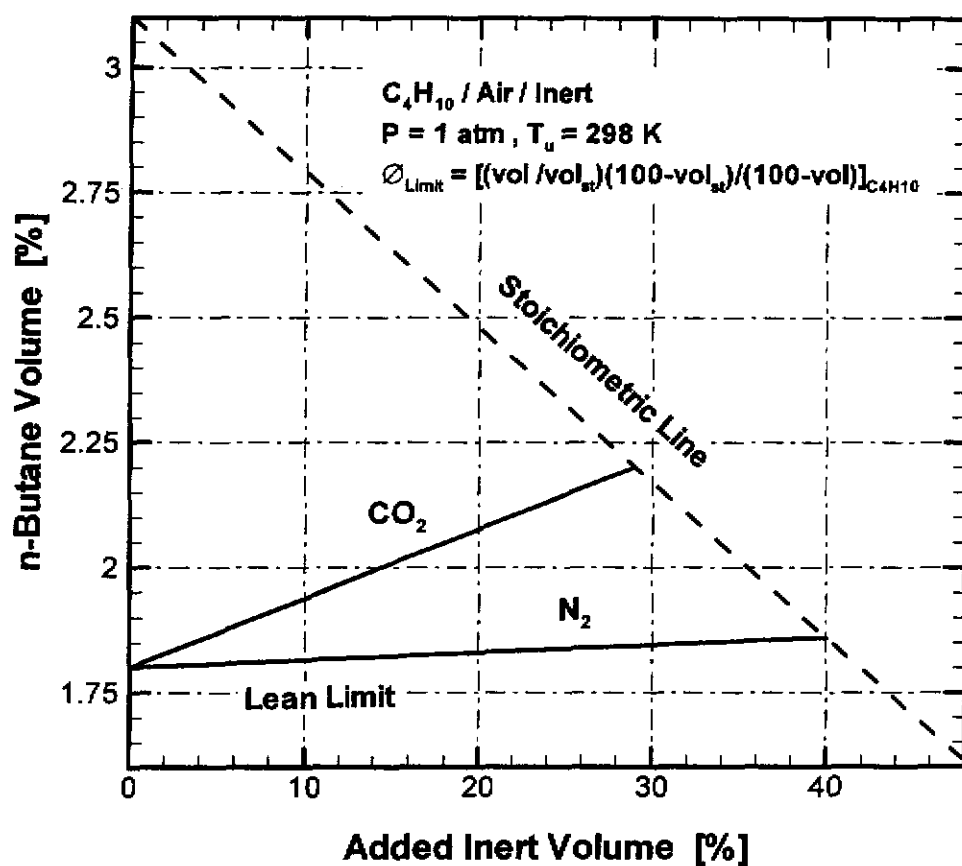


圖 C-11 丁烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

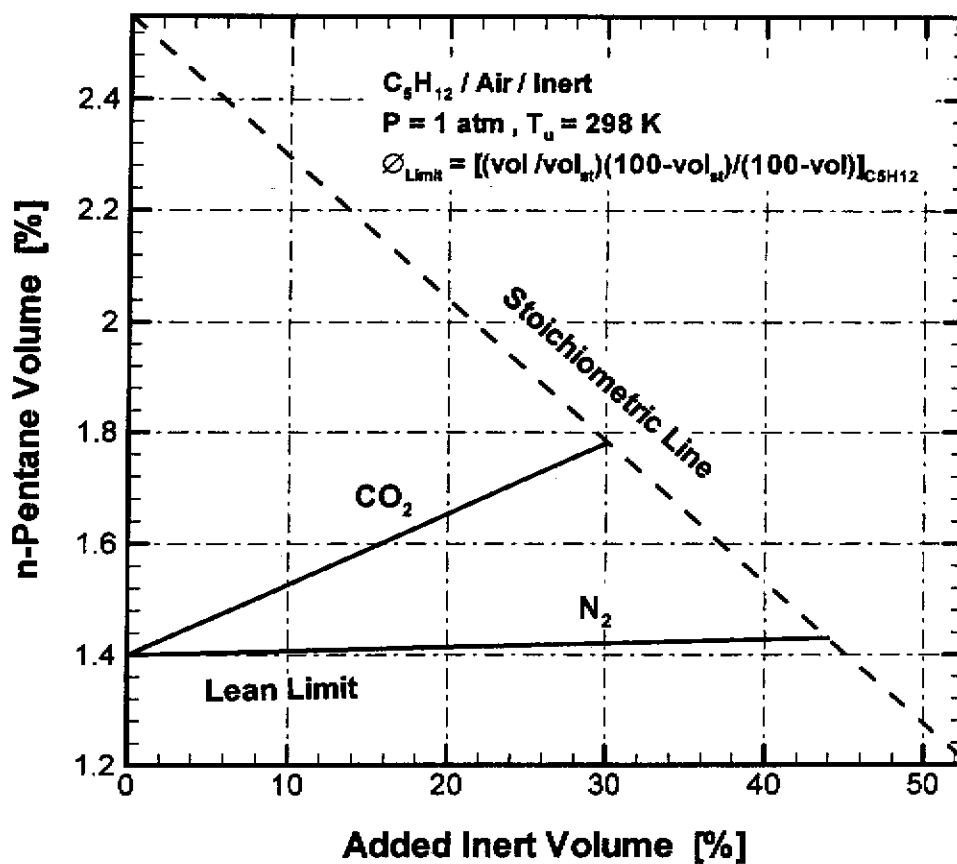


圖 C-12 戊烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

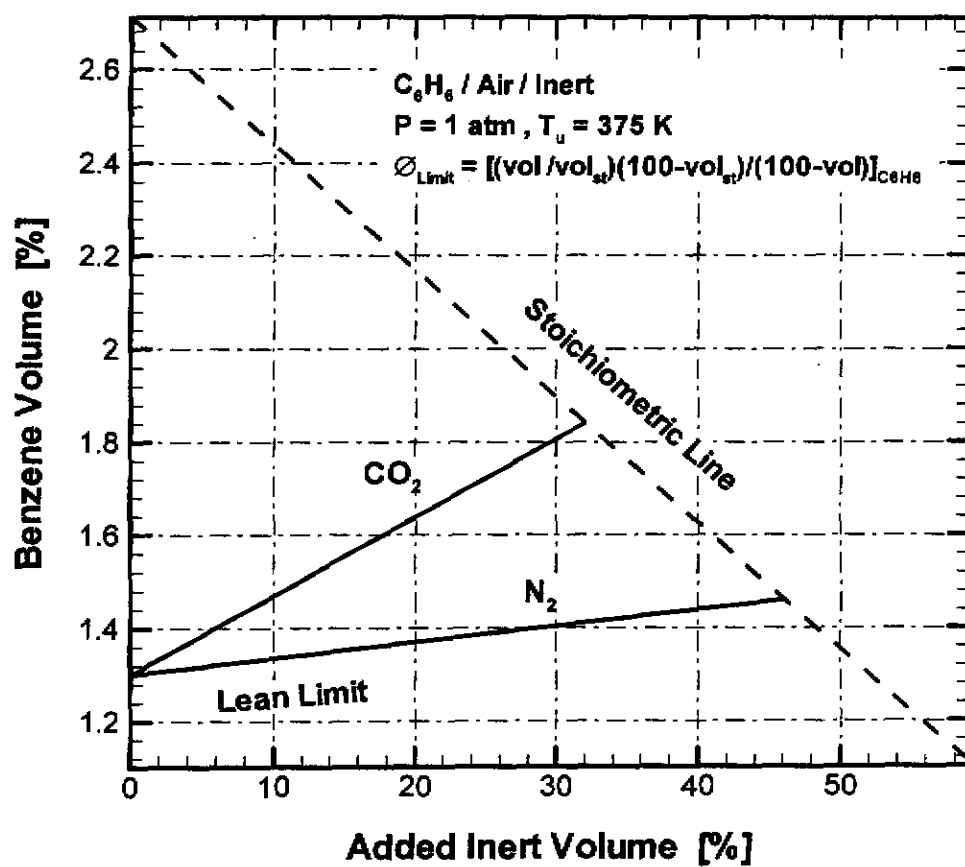


圖 C-13 苯-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

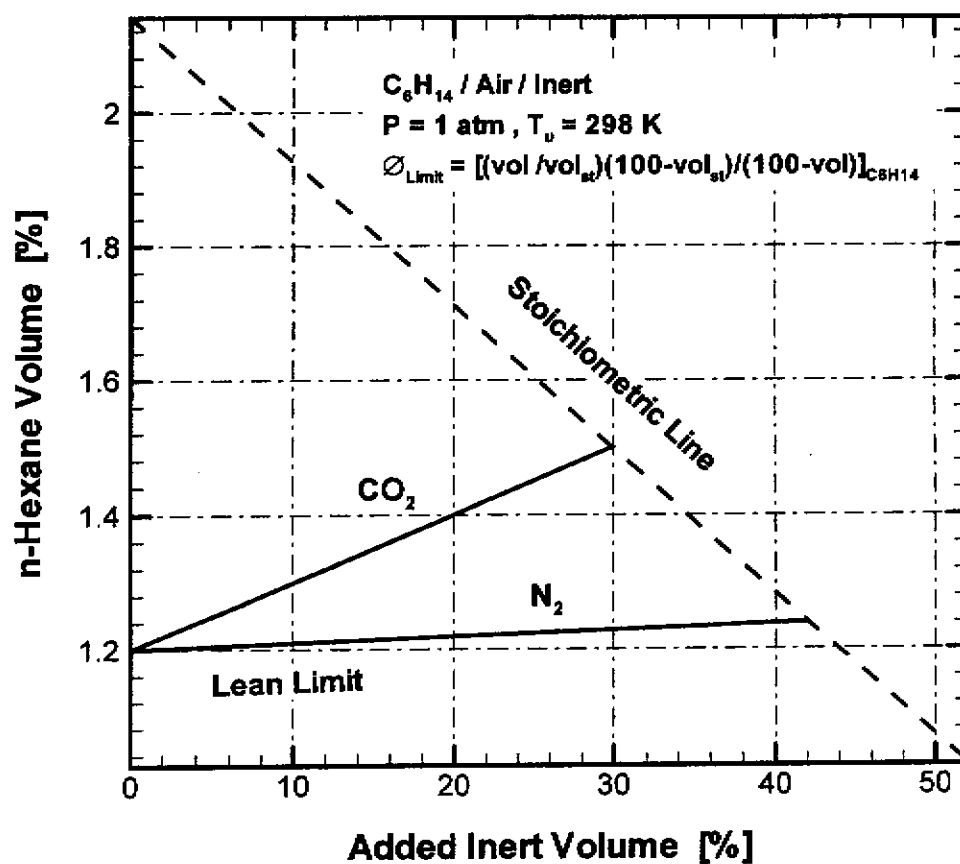


圖 C-14 己烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

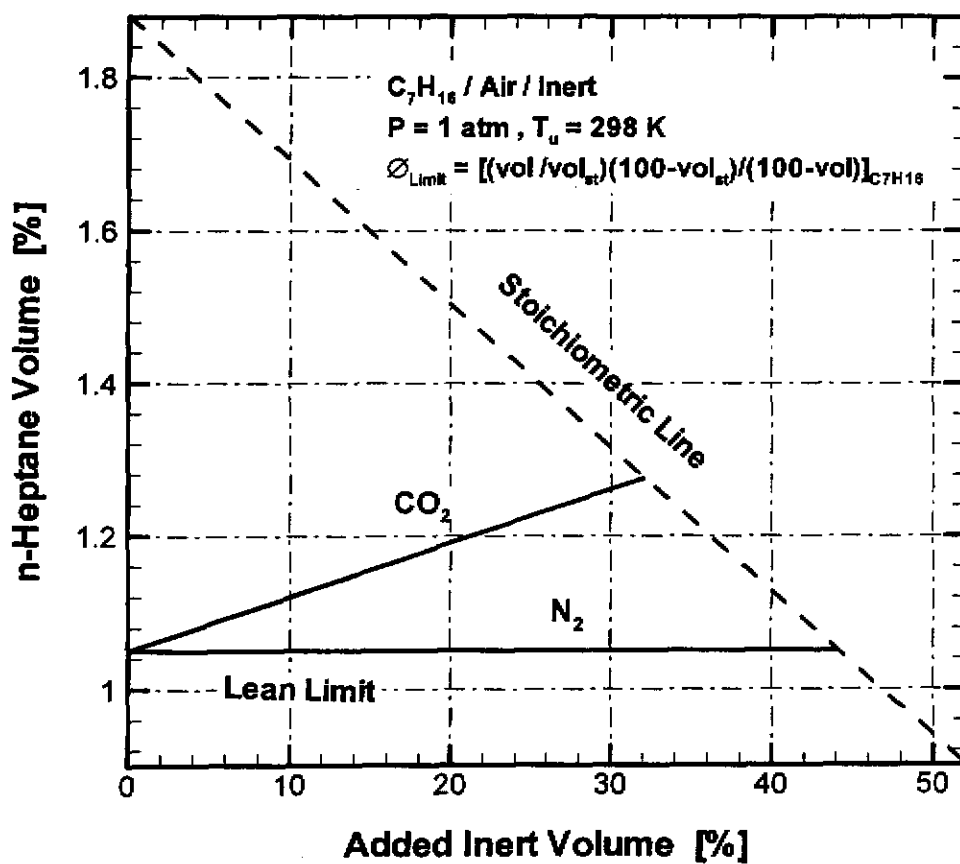


圖 C-15 庚烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響

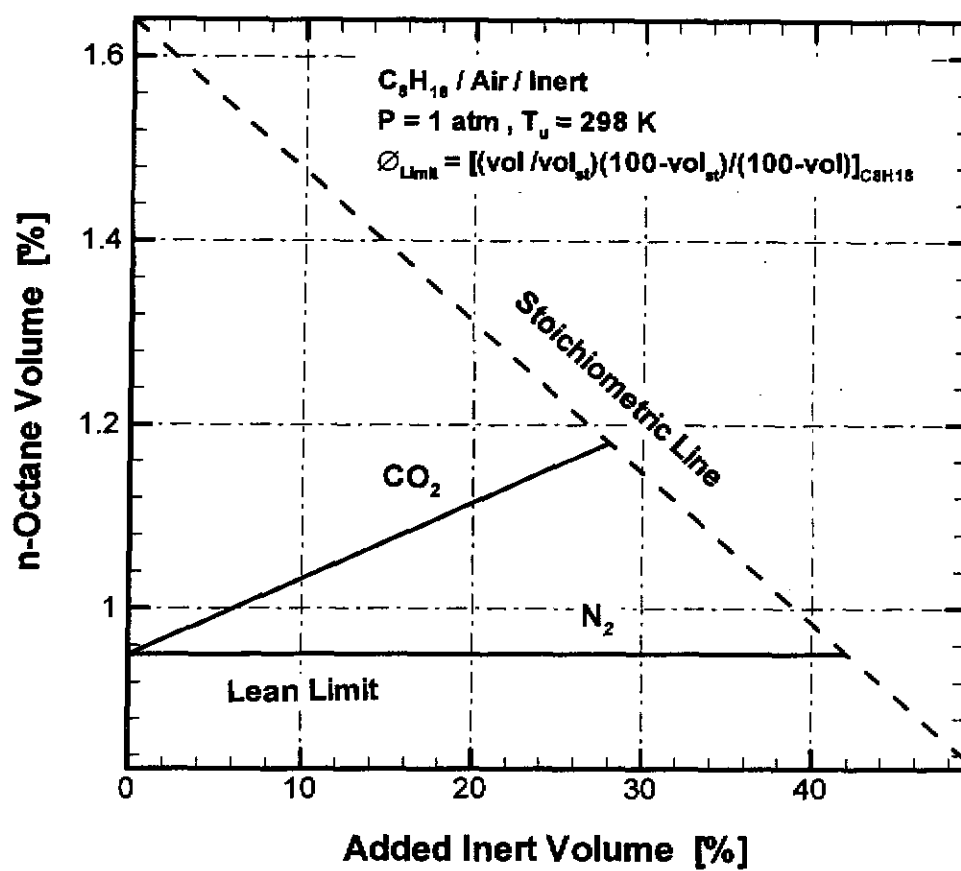


圖 C-16 辛烷-空氣混合氣觀察添加惰性氣體對貧極限的影響