

甲第 4482 号

外部放射熱により加熱される固体燃料の自発着火  
に与える重力の影響に関する数値解析

中 村 祐 二



①

学位論文

外部放射熱により加熱される固体燃料の自発着火  
に与える重力の影響に関する数値解析

平成 11 年 12 月

名古屋大学大学院工学研究科  
機械情報システム工学専攻

中村祐二

# 目次

第1章	はじめに	2
1.1	本研究の目的	2
1.2	自発着火とは	2
1.3	気体燃料と固体燃料の自発着火の相違点と特徴	3
1.4	これまでの固体燃料の自発着火に関する研究	4
1.4.1	実験的研究	4
1.4.2	解析的研究	4
1.5	自発着火機構に与える重力の影響	5
1.5.1	最近の実験で明らかになったこと	5
1.5.2	着火機構に重力が及ぼす影響の重要性	5
1.6	数値解析による手法を選んだ理由	6
1.7	本論文の構成	6
第2章	解析モデルと定式化	9
2.1	気相の解析モデル	11
2.1.1	基礎方程式	11
2.1.2	気相の解析に用いた仮定	12
2.1.3	各保存式の簡略化	13
2.1.4	気相の化学反応モデル	16
2.1.5	解くべき気相の基礎方程式	19
2.2	固相の解析モデル	20
2.2.1	固体燃料の着火解析の複雑さ	20
2.2.2	固相の定式化に関する留意点	21
2.2.3	固相の解析に用いた仮定	21
2.2.4	固相の化学反応モデル	23
2.2.5	簡略化された基礎方程式	24
2.2.6	解くべき固相の基礎方程式	32
第3章	数値解析法	35
3.1	離散化方程式	35
3.1.1	有限体積法による離散化	35



3.1.2	速度成分に関する離散化方程式	37
3.2	圧力補正法	38
3.3	離散化方程式の計算	41
3.4	計算精度について	41
3.4.1	計算領域の影響	42
3.4.2	格子間隔の影響	42
3.4.3	時間刻みの影響	42
第4章	境界条件および初期条件	47
4.1	境界条件	47
4.2	初期条件	50
第5章	着火に至る非定常過程に与える重力の影響	52
5.1	緒言	52
5.2	無重力状態における非定常挙動： $g = 0.0G$	52
5.2.1	気相における非定常変化 ( $g = 0.0G$ )	52
5.2.2	固相における非定常変化 ( $g = 0.0G$ )	55
5.3	弱重力状態における非定常挙動： $g = 0.25G$	56
5.3.1	気相における非定常変化 ( $g = 0.25G$ )	56
5.3.2	固相における非定常変化 ( $g = 0.25G$ )	58
5.4	通常重力状態における非定常挙動： $g = 1.0G$	60
5.4.1	気相における非定常変化 ( $g = 1.0G$ )	60
5.4.2	固相における非定常変化 ( $g = 1.0G$ )	62
5.5	各重力場での着火に至るまでの非定常挙動の比較	63
5.5.1	重力が気相の非定常変化にもたらす影響	63
5.5.2	重力が固相の非定常変化にもたらす影響	64
5.6	結言	65
第6章	自発着火の定義に関する検討	83
6.1	緒言	83
6.2	数値解析における着火の判定の困難さ	83
6.3	検出されるべき着火の特徴	84
6.3.1	一般的な着火	84
6.3.2	本研究における着火	84
6.4	考慮した着火の定義	86
6.5	結果および検討	87
6.5.1	各物理条件における重力の変化に対する着火特性	87
6.5.2	結果の検討 (1) -不適切な着火条件-	88
6.5.3	結果の検討 (2) -適切な定義-	89
6.5.4	結果の検討 (3) -普遍性-	90



6.6	結言	91
第7章	重力が着火に及ぼす影響	101
7.1	緒言	101
7.2	重力による着火特性の変化	101
7.2.1	着火時間と着火位置	101
7.3	先端着火領域での着火	102
7.4	内部着火領域での着火	104
7.5	先端着火から内部着火への遷移	104
7.5.1	重力に依存した熱移動 (1) -plume 形状が及ぼす影響-	104
7.5.2	重力に依存した熱移動 (2) -軸上の温度分布の変化-	105
7.6	内部着火が達成できる条件	106
7.6.1	内部着火と表面温度との関係	106
7.6.2	重力に依存した変化	107
7.7	結言	108
第8章	重力と周囲酸素の変化が着火に及ぼす影響	120
8.1	緒言	120
8.2	周囲酸素による着火特性の変化	121
8.2.1	重力および周囲酸素濃度を变化させた場合の着火形態	121
8.2.2	周囲酸素濃度が着火特性に与える影響	121
8.3	高酸素濃度場での着火	122
8.4	無重力着火	122
8.5	重力と周囲酸素濃度とが着火に与える影響の比較	123
8.6	着火実験への提案	124
8.7	結言	125
第9章	総括	133
	参考文献	136
	謝辞	145



# 記号一覧

$A$ (または $A'$ )	頻度係数	[cgs unit]
$b$	離散化後の生成項	
$c_{p,i}$	$i$ 成分の定圧比熱	[J/(g K)]
$\bar{c}_p$	平均の定圧比熱	[J/(g K)]
$D_{ij}$	$ij$ 間の二成分拡散係数	[cm <sup>2</sup> /s]
$D_{T,i}$	$i$ 成分の温度拡散係数	[cm <sup>2</sup> /s]
$E$	活性化エネルギー	[J/mol]
$f$	単位質量当りの外力ベクトル	[dyn/g]
$G$	標準重力加速度 ( $1G = 980.665$ )	[cm/s <sup>2</sup> ]
$g$	重力加速度ベクトル	[cm/s <sup>2</sup> ]
$g$	重力加速度	[cm/s <sup>2</sup> ]
$\Delta H$	局所エンタルピーの変化量	[J/(cm <sup>3</sup> s)]
$h$	比エンタルピー	[J/g]
$h^0$	生成エンタルピー	[J/g]
$h^T$	温度エンタルピー	[J/g]
$I$	固体加熱のための外部熱放射流束	
$I$	外部熱放射流束の強度	[J/(cm <sup>2</sup> s)]
$k$	比反応速度	[1/s]
$M$	考慮した反応の数	
$\dot{m}$	分解生成ガスの質量流束	[g/(cm <sup>2</sup> s)]
$N$	考慮した成分の数	
$n$	垂直単位ベクトル	
$n$	反応次数	
$P$	応力テンソル	[dyn/cm <sup>2</sup> ]
$p$	圧力 (動圧)	[dyn/cm <sup>2</sup> ]
$Q_{dr}$ (または $Q_{dz}$ )	半径 (軸) 方向への熱伝導変化量	[J/(cm <sup>3</sup> s)]
$q$	熱流束ベクトル	[J/(cm <sup>2</sup> s)]
$q_R$	熱ふく射ベクトル (=熱ふく射流束)	[J/(cm <sup>2</sup> s)]
$q$	反応生成熱	[J/g]
$R^0$ (または $R$ )	普遍気体定数 (=8.314)	[J/(K mol)]
$r$	半径方向	[cm]
$S$	面積	[cm <sup>2</sup> ]
$S^\phi$	従属変数 $\phi$ に関する生成項	
$T$	温度	[K]
$t$	時間	[s]



$t_{ig}$	着火時間	[s]
$\mathbf{U}$	単位テンソル	
$V$	コントロールボリュームの体積	[cm <sup>3</sup> ]
$\mathbf{V}_i$	$i$ 成分の拡散速度ベクトル	[cm/s]
$\mathbf{v}$	速度ベクトル	[cm/s]
$v$	速度成分	[cm/s]
$W_i$	$i$ 成分の分子量	[g/mol]
$X_i$	$i$ 成分のモル分率	
$Y_i$	$i$ 成分の質量分率	
$y$	厚さ方向	[cm]
$z$	軸方向	[cm]
$z_{ig}$	着火位置	[cm]
$z_{tip}$	plume (= 燃料塊) 先端の位置	[cm]

### ギリシャ文字

$\Delta$	微小量	
$\delta$	固体燃料の半分の厚さ または ディラックのデルタ関数	[cm]
$\varepsilon$	放射率	
$\Gamma_\phi$	従属変数 $\phi$ に関する拡散係数	[cm <sup>2</sup> /s]
$\kappa$	体積粘性係数	[g/(cm s)]
$\lambda$	熱伝導率	[J/(cm s K)]
$\mu$	せん断粘性係数	[g/(cm s)]
$\nu'$ (または $\nu''$ )	反応物 (または生成物) の量論係数	
$\nu$	質量を基準にした量論係数	
$\Phi$	エネルギー散逸	[dyn/(cm <sup>2</sup> s)]
$\phi$	一般従属変数	
$\rho$	密度	[g/cm <sup>3</sup> ]
$\sigma$	ステファン・ボルツマン定数 (= $5.67 \times 10^{-12}$ )	[J/(cm <sup>2</sup> K <sup>4</sup> s)]
$\dot{\omega}_i$	$i$ 成分の生成速度	[g/(cm <sup>3</sup> s)]

### 添字, 上付文字

$A$	Ash (灰分)
$b$	逆反応
$C$	Char (チャー: 炭状の燃え残り)



<i>cg</i>	可燃ガス成分（下記の <i>f</i> と等価）
<i>E</i>	右隣のコントロールボリュームの中心
<i>e</i>	コントロールボリュームの右面
( <i>else</i> )	圧力勾配以外の項
<i>F</i>	固体燃料（＝セルロース）
<i>f</i>	可燃ガス成分（上記の <i>cg</i> と等価） 正反応（第2章に限る）
<i>g</i>	気相
<i>I</i>	中心面
<i>i</i>	気相および固相における成分
<i>init</i>	初期状態
<i>m</i>	素反応番号
<i>max</i>	最大値
<i>N</i>	1つ上のコントロールボリュームの中心
<i>n</i>	コントロールボリュームの上面
<i>nb</i>	隣接部
<i>ox</i>	酸素成分
<i>P</i>	コントロールボリュームの中心
<i>p</i>	反応生成物
<i>r</i>	半径方向
<i>rad</i>	表面からのふく射
<i>S</i>	固相 1つ下のコントロールボリュームの中心（第3章に限る）
<i>s</i>	コントロールボリュームの下面
<i>W</i>	左隣のコントロールボリュームの中心
<i>w</i>	コントロールボリュームの左面
<i>z</i>	軸方向
$\infty$	周囲の標準状態
0	基準状態
1	固体燃料の熱分解反応
2	固体燃料の酸化反応
3	Char の酸化反応
1~7	着火判定条件（第6章に限る）
+	外側向き（または上向き）
-	内側向き（または下向き）
'	補正量
*	推定値



## 第1章 はじめに



# 第1章 はじめに

## 1.1 本研究の目的

加熱による固体燃料の自発着火は、気相および固相の変化が密接に関連した非常に複雑な現象である [1, 2]。その一方で、固体燃料の燃焼をもたらす最初の段階であるため、その詳細を理解することは重要である。着火の物理が理解できれば、固体ロケットの推進剤の着火の制御、または火災予防対策を発展させることができるため、実用的な面における貢献度も高い。

着火現象は、流れ場および化学反応特性に大きく左右されるが、特に流れ場の変動は、自発着火に至るまでの非定常過程を複雑に変化させて、着火現象そのものを複雑にする [3, 4]。そのため、これまでの着火研究は、主に一次元場 [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17] あるいは微小重力場 [18, 19, 20, 21, 22, 23] といった、簡単で安定した流れ場を用いて行われ、流れ場の変動を考慮しない場合の着火の物理が調べられてきた。

一方、流れ場が着火に与える影響を調べた研究は極めて少ない。そのため、例えば、上記の簡単な流れ場で得られる着火特性が、自然対流の作用する地上場での着火現象に対して合致しないことは示されているものの [24, 25]、その物理的原因は十分に理解されていない。実際の着火現象は、特別な場合を除いて常に自然対流の下で起こるため、自然対流が自発着火に与える影響またはその物理を理解することは、火災予防対策等の実用的な面においても重要な役割を果たす。そのため、1) 自然対流がどのようなプロセスを経て着火に影響を与えるのか、また 2) その程度がどれほどか等の基本的な部分を系統的に調べることが望まれる。

本研究では、これまでの着火研究により発展したモデルに改良を加え、積極的に重力の効果を考慮できる解析手法を確立し、自発着火に至る非定常過程に与える重力の影響を数値解析により詳細に調べ、着火のメカニズムを明らかにすることを目的とする。

## 1.2 自発着火とは

自発着火とは、可燃ガスと酸化剤ガスとの予混合気が加熱された結果、発熱を伴う化学反応が促進されて、それによる局所的な温度上昇がさらに発熱反応を加速して自発的に熱暴走 (thermal explosion) [1, 26, 27, 28, 29] に至る現象であ



る。化学反応論に基づけば、発熱を伴う化学反応速度は、反応物の化学種の濃度  $C$  にべき乗で、温度  $T$  に対してはアレニウス型で与えられる（化学反応速度  $\propto C^n \cdot \exp(-a/T)$ ;  $a, n = \text{const.}$ ）ため、温度の上昇に伴って爆発的に反応が加速される。この加速開始の瞬間が着火の瞬間であり、着火は化学反応速度と密接な関係がある。ところで、反応速度を決定する温度および成分濃度は通常は空間的に分布を持つ。従って反応速度も空間分布を持ち、局所で評価できる量である。また、流れ場の変化は、熱および物質輸送を通じて着火に影響を及ぼし得る。このように、自発着火は、化学反応と流れ場に強く影響を受ける局所における瞬時の現象である。

### 1.3 気体燃料と固体燃料の自発着火の相違点と特徴

気体燃料の着火の研究は、そのほとんどが既知の混合気を対象にして行われている。具体的な研究例としては、既知の混合気が熱源（高温壁、高温流等）から熱を得て着火に至る場合の着火限界 [28, 30, 31]、着火時間 [32] もしくは化学反応定数の算出 [33] を研究対象にするものが多い。これらに共通して言える特徴は、ある混合気に対してある特定のデータを得ることが可能であるという点であり、これはすなわち現象が制御可能であることを示唆している。また、最近の数値解析では、炭化水素系の燃料に関する詳細な反応機構が解明されつつあり [34, 35, 36]、特定の燃料においては実験と非常に良く合う結果を予測することができるため、いわゆる数値実験で得られる結果の信頼性も高い。このように、気体燃料の着火現象は、制御パラメータを人為的に変化させてその影響を調べることにより、現象の詳細を理解することができるという特色を有する。

一方、固体燃料の自発着火とは、可燃性固体物質が加熱されて熱分解を起こし、そこで発生する分解ガスが自発的に着火に至る現象であるので、着火特性は固体燃料および分解生成ガスの両方に依存する。特に前者に関して、固体燃料の分解過程は非常に複雑であり、現在でも未知な部分が多い。例えば、一連の固体の反応過程では分解生成ガスを放出あるいは液体を生じ、多相が混在した中で複雑に化学反応が進行する [37, 38, 39, 40]。また、この分解反応で生じる分解生成ガス等の組成は、固体燃料の均質性 [41] や加熱条件等により様々に変化することが知られており [41, 42, 43, 44, 45]。一般に実験の再現性は乏しい。このように、固体燃料の自発着火は、その過程すら十分に理解されていないために、人為的に制御ができない。ここが気体燃料の着火と大きく異なる点であり、固体燃料の着火の物理に対する理解を困難にしている原因である。

なお、ここで示した固体燃料の着火とは、強制的に固体を加熱するからとはいえず「強制着火」ではない。その理由は、固体への加熱状況だけでは着火の有無が決まらず、気相へ放出された分解生成ガスが流れ場等の影響を受けて「自発的に」



着火の有無が決定されるためである。

## 1.4 これまでの固体燃料の自発着火に関する研究

### 1.4.1 実験的研究

最初に発展したのは1920年代頃から始まった固体ロケット燃料の着火研究であり[46]、主に可燃性物質に沿って高速高温の酸化剤を流した場合の着火が調べられた。解析対象は、流れ場が境界層流れ[11, 47, 48]または淀み点流れ[5, 8, 9, 10, 17]等の単純なものであり、着火領域は表面付近に限られているものが殆どであった。よって、着火現象に対する流れ場の依存性は小さく、着火特性は表面温度や固体の分解速度といった固体燃料の性質が支配するという説が有力であった。ところが、固体の性質だけでは説明できない着火の存在が確認されると、境界層内部の気相の変化が重要であるという新たな指摘がなされた(例えば[11])。こうして着火には、固体の表面反応で起こるもの(solid-phase ignition)と、境界層内部の気相で起こるもの(gas-phase ignition)があることが示された。

その後、火災の基礎研究が発達し、可燃性物質を加熱することで自発的に誘発される自発着火が調べられた。固体ロケット燃料の場合と大きく異なる点は、流れ場が全体的に弱いために境界層が厚くなることと、固体燃料に酸化剤を含まないことである。これにより、固体表面への酸素供給等も含め、境界層内部での熱および物質輸送の非定常変化が、着火に対してますます重要になることが示唆される。事実、このことは多くの文献で示されている(例えば[17, 49, 50])。また最近では、前述の微小重力環境を利用する等、積極的に流れ場を制御することによって、自発着火に与える各種パラメータの影響が詳細に調べられてきている。

また、加熱方法に関しては、高熱線等の接触型[51]からふく射加熱等の非接触型[52, 53]へと発展し、両者の違いやその有効性が議論された[37, 49]。ふく射加熱は実際の火災における加熱源であるので、最も現実的かつ実用的なモデルとされているが、その一方で、発生した分解ガスがそのふく射熱を吸収して着火特性に影響を与えるという、ふく射加熱着火に特有の問題点があることも指摘された[24, 25, 37, 54, 55, 56, 57, 58, 59]。

### 1.4.2 解析的研究

着火の解析的研究として最初に発展したのは、熱発火理論である[1, 26, 27, 28, 29]。これは、定常でしかも0次元の理論解析であり、発熱と放熱のバランスが取れなくなるところを着火と考え、数学的に定常解の存在の有無で着火を定義するものである。続いて、解析対象が非定常一次元場へと拡張され(例えば、前述の淀み点流れにおける着火等)、理論解析[12, 14, 15]だけでなくコンピュータを用



いた着火解析が行われてきた。これらは、それに対応した実験と比較することにより、着火モデルの発展に貢献した。ところが、それらで得られたモデルはあくまで一次元場に対するものであり、実際の現象を正確に予測できないことはすでに指摘されている。例えば、自然対流の影響が存在する多次元場における結果とはよい一致をしない（例えば [24, 25]）。

一方、多次元場の解析の例として、米国研究機関の一つである NIST (National Institute of Standards and Technology) が行っている、外部放射加熱による微小重力場における固体燃料の着火および燃焼の研究がある [21, 22]。彼等の解析結果は、落下塔、スペースシャトルで行われた微小重力実験の結果と非常に良い一致を示しており、多次元場の解析の成功例としてだけでなく、複雑とされている固体燃料の分解反応モデルの妥当性を保証する重要なデータとなっている。

## 1.5 自発着火機構に与える重力の影響

### 1.5.1 最近の実験で明らかになったこと

重力が着火機構に与える影響については、微小重力実験で得られた結果と、通常重力場の同一実験による結果を比較することで端的に知ることができる。最近では、NIST だけでなく多くの研究グループが微小重力場での着火研究を行っており、通常重力場との着火データを比較したものが幾つか存在する [18, 19, 20, 59]。それらによれば、無重力場における着火は通常重力場における着火よりも早い時間で起きることが報告されている。これは、着火のメカニズムに何らかの形で自然対流の影響が存在することを意味しており、これを本研究にて詳細に調べる。

### 1.5.2 着火機構に重力が及ぼす影響の重要性

微小重力実験では、自然対流がもたらす実験データの乱れ（例えば [49]）を抑制できるため、着火に与えるパラメータの影響を正確に調べることが可能である。ところが、そこで得た知見を重力場において利用するためには、重力が引き起こす自然対流が、どのように熱および物質輸送を変化させ、その結果、どのようにして自発着火のメカニズムに影響を及ぼすのかを知る必要がある。以上が着火に与える重力の影響を調べる意義である。

これまでに、自発着火に与える自然対流の影響を指摘している研究は幾つか存在するが、その詳細を調べた例は意外に少ない。また、そのほとんどが微小重力場と通常重力場の結果を比較するのみであり [18, 20]、それだけではデータが少ないために、重力が着火のメカニズムに対してどのように影響するのか追求できない。重力をパラメータとして着火を調べた例として Park らの研究論文が唯一存在するが [59]、解析対象が準一次元流れ場であるため、多次元場における重力がも



たらず現象を説明するには不十分である。

実際の多次元場における重力の影響を理解するためには、後述するように重力の項を含むナビエ・ストークスの式を導入して、重力の大きさを段階的に変化させて調べることが望ましい。結果として得られる、着火に至るまでの非定常過程、着火時における各物理量の空間分布および着火特性等を詳細に検討することにより、本研究の目的が達成できるものと考ええる。

## 1.6 数値解析による手法を選んだ理由

着火現象を研究対象とした場合のアプローチには、多くの研究と同様に実験的手法および数値解析的手法という二つがある。実験的手法は、視覚的に現象を捕えることができるため、得られた結果そのものを理解しやすい一方、瞬時に起こる現象を正確にデータとして得るのは非常に困難であるという難点がある。その例として、前述の「自然対流による実験データの攪乱」および「固体燃料の分解反応の再現性の乏しさ」がある。また、測定方法には、着火現象が流れ場に強く依存するものであるので非接触の光学系による計測が望まれ、それにより生じる装置の大規模化や精度などの問題が存在する。

それに対して数値解析的手法は、現象の物理を損なわないモデルが確立すれば、上記の問題点を取り除くことができる。しかも、パラメータの制御を人為的に行うことができるため、その影響を調べるという目的に向いている。加えて、最近では計算機が飛躍的な進歩を遂げ、莫大なメモリを必要とする非定常計算を高い時間および空間分解能で精度良く解けるようになってきた。以上の理由により、本研究では数値解析による手法が有効であると判断した。

本研究で用いたモデルは、反応モデルを含めて、基本的には前述の NIST で開発されたものに準ずる [21, 60]。ただし、流れ場の算出に関しては、元来 NIST の解析で使われたポテンシャル流れ近似を用いずに、新たにナビエ・ストークスの式を導入した。この改善は、重力の存在により表面に沿う流れが起こるため [61, 62]、もはやポテンシャル流れではないことによる。前述の通り、NIST の解析手法では、多次元無重力場の着火を適切に表現できることが証明されており、流れ場の算出に関わる改良が適切に行われたのであれば、本研究の結果も十分な妥当性を有するものと考えることができる。

## 1.7 本論文の構成

まず、本研究で用いた仮定の下で解くべき各保存方程式を単純化した過程（第2章）および用いた計算方法の詳細（第3～4章）を述べる。第5章以降では、それらに基づいて行われた計算結果および検討を述べる。

第5章では、重力がもたらす現象変化の理解を目的として、幾つかの重力にお



いて着火に至る非定常過程に着目し、各物理量の二次元分布を比較検討することによって重力の影響が非定常過程にどのように現れるのかを把握し、重力による非定常現象の違いを指摘する。

第6章では、着火特性の定量評価に不可欠な「自発着火の定義」に関する検討を行い、最も適切に着火特性の変化を表現し得る着火条件を提案する。同時に、その普遍性および物理的意味に関する考察も行う。

第7章では、前章で得られた最適な着火の定義を導入して、自発着火特性に与える重力の影響を定量的に調べる。また、着火の瞬間付近に注目し、重力による自発着火のメカニズムの違いについての考察も行う。

第8章では、重力だけでなく、着火に大きな影響を与えるとされている周囲酸素濃度も変化させて、各設定条件における着火特性に着目して、周囲酸素濃度が着火に与える影響および重力が着火に与える影響の程度を調べる。また、検討を通じて無重力着火の物理的意味等、その性質に関する考察も行う。

最終章（第9章）では、本研究で得られた知見の総括を行う。



## 第2章 解析モデルと定式化



## 第2章 解析モデルと定式化

本研究では、外部放射熱により加熱される固体燃料から放出される分解生成ガスが、気相において自発着火に至る非定常過程を様々な重力場で調べ、自然対流がどのようにして自発着火機構に影響を与えるのかを詳細に検討する。本章では、この現象を解析するためのモデルおよび解くべき簡略化された基礎方程式の導出方法を説明する。

図 2.1 に解析モデルの概略図を示す。常温の静止大気中に水平に配置された固体燃料に、鉛直上方からガウス分布を持つ放射熱を連続的に照射し、固体燃料を加熱して温度上昇を促す。固体が十分な温度にまで熱せられると分解および酸化反応が起こり、それらの反応により生じた分解生成ガス塊（これを plume と呼ぶ）が分解温度で大気中に放出される。その後、plume 中の可燃ガス成分と大気中の酸素とが混合して、表面上に可燃性予混合気を形成する。その予混合気が固体表面からの熱伝導等で加熱されると、気相において発熱反応が加速して、局所の温度上昇を引き起こし、自発的に着火に至る。重力が存在する場では、気相に放出された高温の plume は、周囲大気との密度差により浮力を受け、物理量の分布形状は重力と逆方向の上方へ引き伸ばされる。その時誘発される自然対流が、熱および物質輸送を変化させ、着火特性を変化させる。この自発着火に至るまでの非定常過程を詳細に調べることにより、重力が自発着火機構に与える効果を理解することが本研究の主旨である。

まず、本解析において最も基本となる仮定を示す。

仮定 1 現象は照射軸において対称に進行する（軸対称）。

この仮定を施しても、重力による効果を調べることは可能であるので、本研究の目的は十分に達成できる。なお、本研究を通じて解析は円柱座標を用い、半径方向および軸方向をそれぞれ  $r$  および  $z$  とする（図 2.1 参照）。



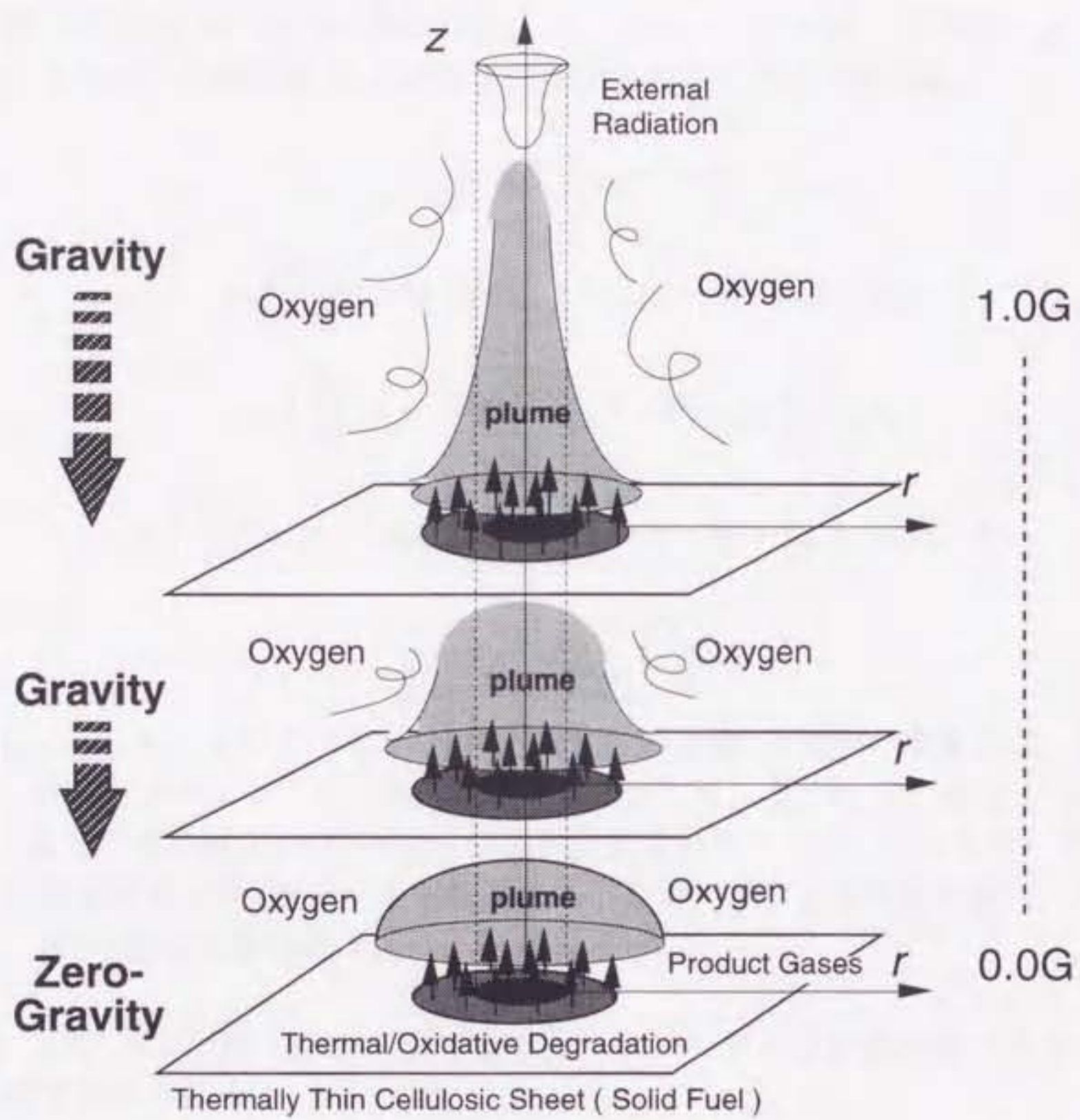


Figure 2.1: Schematic illustration of numerical model



## 2.1 気相の解析モデル

### 2.1.1 基礎方程式

反応性ガス力学における基礎方程式は、以下に示す質量、化学種の成分、運動量、エネルギーの保存式および気体の状態方程式である [63, 64].

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v}) = 0 \quad (2.1)$$

$$\rho_g \left( \frac{\partial Y_{g,i}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla Y_{g,i} \right) = \dot{\omega}_{g,i} - \nabla \cdot (\rho_g Y_{g,i} \mathbf{V}_i) \quad (2.2)$$

$$\rho_g \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla \cdot \mathbf{P} + \rho_g \sum_{i=1}^N Y_{g,i} \mathbf{f}_i \quad (2.3)$$

$$\rho_g \left( \frac{\partial h_g}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla h_g \right) = \frac{Dp}{Dt} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \Phi + \rho_g \sum_{i=1}^N Y_{g,i} \mathbf{f}_i \cdot \mathbf{V}_i \quad (2.4)$$

$$p = \rho_g R^0 T_g \sum_{i=1}^N \left( \frac{Y_{g,i}}{W_i} \right) \quad (2.5)$$

$\rho_g$ ,  $Y_{g,i}$ ,  $\mathbf{v}$ ,  $h_g$ ,  $p$  および  $T_g$  はそれぞれ気体の密度,  $i$  成分の質量分率, 速度ベクトル, 比エンタルピー, 圧力および温度を表す.  $\mathbf{V}_i$ ,  $\mathbf{f}_i$ ,  $\Phi$ ,  $\dot{\omega}_{g,i}$  および  $W_i$  はそれぞれ  $i$  成分の拡散速度,  $i$  成分にかかる単位質量当りの外力, エネルギー散逸,  $i$  成分の生成速度および  $i$  成分の分子量である. なお, 添字  $g$  は気体を表し,  $N$  は成分の数,  $R^0$  は普遍気体定数である.

式 (2.3) および式 (2.4) における応力テンソル  $\mathbf{P}$  および熱流束ベクトル  $\mathbf{q}$  は以下の形で与えられる.

$$\mathbf{P} = \left[ p + \left( \frac{2}{3} \mu - \kappa \right) \nabla \cdot \mathbf{v} \right] \mathbf{U} - \mu [(\nabla \mathbf{v}) + (\nabla \mathbf{v})^T] \quad (2.6)$$

$$\mathbf{q} = -\lambda_g \nabla T_g + \rho_g \sum_{i=1}^N Y_{g,i} \mathbf{V}_i h_{g,i} + \mathbf{q}_R + RT_g \sum_i \sum_j \left( \frac{X_j D_{T,i}}{W_i D_{ij}} \right) (\mathbf{V}_i - \mathbf{V}_j) \quad (2.7)$$

$\mu$ ,  $\kappa$  および  $\mathbf{U}$  は気体のせん断粘性係数, 体積粘性係数および単位テンソルを表す.  $\lambda_g$ ,  $\mathbf{q}_R$ ,  $X_j$ ,  $D_{T,i}$  および  $D_{ij}$  はそれぞれ気体の熱伝導率, 熱ふく射ベクトル,  $j$  成分のモル分率,  $i$  成分の温度拡散係数および  $ij$  間の二成分分子拡散係数である. 式 (2.7) の右辺最終項は, 分子拡散に起因するエネルギー輸送を表しており, 一般に Dufour 効果として知られている.



式 (2.2), (2.4) および (2.7) で見られる  $i$  成分の拡散速度  $V_i$  は, 特に二分子の混合気 ( $i = 1, 2$ ) では次のように表される.

$$Y_{g,1} V_1 = -D_{12} \nabla Y_{g,1} + D_{12} \frac{Y_{g,1} Y_{g,2}}{X_{g,1} X_{g,2}} (Y_{g,1} - X_{g,1}) \frac{\nabla p}{p} - \frac{D_{T,1}}{\rho_g} \frac{\nabla T_g}{T_g} + D_{12} \frac{(Y_{g,1} Y_{g,2})^2}{X_{g,1} X_{g,2}} \frac{\rho_g}{p} (f_1 - f_2) \quad (2.8)$$

右辺第一項から第四項までは, それぞれ濃度勾配, 圧力勾配, 温度勾配, 外力に起因する拡散速度である. 第二項および第三項は特に圧力拡散および Soret 効果として知られている. 通常の分子拡散では, 第二項~第四項は極めて小さく, 第一項が支配的である.

理想気体の比エンタルピー  $h$  は,  $i$  成分の比エンタルピー  $h_i$  と次の関係がある. なお, この関係は気体, 固体に関わらず成立するため, 相を区別する添字は付けない.

$$h = \sum_{i=1}^N h_i Y_i \quad (2.9)$$

$i$  成分の比エンタルピー  $h_i$  は, 基準温度  $T^0$  における生成エンタルピー  $h_i^0$  を用いて次のように表される.

$$h_i = h_i^0 + \int_{T^0}^T c_{p,i} dT \quad (2.10)$$

$c_{p,i}$  は  $i$  成分の定圧比熱である. 式 (2.10) の右辺第一および第二項は, いわゆる潜熱および顕熱分を表し, それぞれ「chemical enthalpy」および「thermal enthalpy」とも呼ばれる. なお, 混合気全体の定圧比熱  $c_p$  は,  $i$  成分の定圧比熱  $c_{p,i}$  を用いて次のように定義される.

$$c_p \equiv \sum_{i=1}^N c_{p,i} Y_i \quad \text{or} \quad \int_{T^0}^T c_p dT \equiv Y_i \int_{T^0}^T c_{p,i} dT \quad (2.11)$$

### 2.1.2 気相の解析に用いた仮定

以下に, 混合気に関して設けた仮定を列挙する.

仮定 2 固体燃料の分解生成ガスは, 可燃ガスおよび不燃ガスの二種類に大別できるとする.

仮定 3 大気は酸素と窒素との混合気とする.

仮定 4 すべての気体は理想気体として振る舞い, 各物性値は分子量をはじめとし, 気体の種類に依らず空気の値に等しいと考える. また, 特に気体の熱化学定数および輸送係数は温度のみの関数として与える.

仮定 5 体積粘性係数は無視できると考える.



仮定6 エネルギー式において圧力仕事、粘性による散逸、Dufour効果は無視できると考える。

仮定7 拡散を表す式において、Soret効果は無視できると考える。

仮定8 低マッハ数流れ近似が適用できるとする。

仮定9 ガスによるふく射熱の吸収はないと考える。

これらの仮定のうち、特に仮定5～8については、通常の層流燃焼問題では広く一般的に用いられるものであり、その妥当性は過去の多くの研究により証明されている [63]。本研究で考慮する現象は、基本的に層流燃焼の一部であるため、これらの仮定は有効であると考えた。その他の仮定については、以下の考えに基づいて妥当と判断した。

#### 仮定2, 3

これらは、NISTで開発された固体の分解反応モデルに依存した仮定である。固体反応モデルの妥当性は後の節で述べるのでここでは割愛する。

#### 仮定3, 4

本研究で扱う着火現象には、分子の熱力学定数および輸送係数の違いに起因した変化よりも流れによる変化の方が断然影響が大きい。従って、これらの仮定を用いても本質的な物理は変化しないものと考ええる。

#### 仮定9

これまでの着火に関する研究のうちの幾つかで、「ガスによる外部ふく射熱の吸収の影響」は無視できないと指摘されている [37, 57, 58, 24]。ところが、この吸収の影響は「ガスの吸収係数が高い」または「加熱放射強度が高い」場合に顕著に現れるとも指摘されている [37, 49, 55]。本研究での加熱強度は、それらの研究で用いられている値に比べて相対的に小さいことを考慮すると、ガスによるふく射熱吸収の効果は相対的に無視できると考える。

### 2.1.3 各保存式の簡略化

本節では、前節の仮定を用いて、順に化学種の成分、運動量およびエネルギー保存式と気体の状態方程式を簡略化する。



## 化学種の成分保存式の簡略化

ここでは、式 (2.2) の右辺第二項の拡散速度に注目する。拡散速度  $\mathbf{V}_i$  は式 (2.8) で与えられるが、仮定4により、各成分のモル分率と質量分率は同じになるため、式 (2.8) の右辺第二項はゼロになる。また、仮定7により式 (2.8) の右辺第三項は無視できる。右辺第四項も、ここでは重力が各成分に対して同等にかかるため（すなわち  $\mathbf{f}_i - \mathbf{f}_j = 0$ ）にゼロとなる。従って、拡散速度は式 (2.8) の右辺第一項、すなわち濃度勾配による速度として表記することができる（すなわち  $Y_{g,i} \mathbf{V}_i = -D_{12} \nabla Y_{g,i}$ ）。さらに、全ての成分に対する相互拡散係数が等しい（すなわち  $D_{ij} \cong D$ ）とすれば、以下の関係が導かれる。

$$Y_{g,i} \mathbf{V}_i = -D \nabla Y_{g,i} \quad (2.12)$$

これは Fick の法則として知られている。この簡略化された拡散速度を用いれば、成分保存式 (2.2) は次のようになる。

$$\rho_g \left( \frac{\partial Y_{g,i}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla Y_{g,i} \right) = \dot{\omega}_{g,i} + \nabla \cdot (\rho_g D \nabla Y_{g,i}) \quad (2.13)$$

## 運動量方程式の簡単化

式 (2.3) の右辺第一項における  $\mathbf{P}$  は式 (2.6) で与えられ、仮定5より体積粘性係数 ( $\kappa$ ) を省略できる。 $\kappa$  は単一原子ではゼロ、多原子分子ではゼロまたは正の値をもつが、正確な値がわからないため通常はゼロとして解析を行う。

次に、式 (2.3) の右辺第二項 ( $= \rho_g \sum_{i=1}^N Y_{g,i} \mathbf{f}_i$ ) は、仮定4より各気体成分にかかる外力が等しくなるため  $\rho \mathbf{F}$  となる。ここで、 $\mathbf{F}$  は気体全体にかかる単位質量当りの力を表し、本研究では重力加速度ベクトル  $\mathbf{g}$  に相当する。なお、この重力加速度ベクトルは、 $z$  軸方向成分のみに大きさ  $-g$  を持つもので、本計算での計算パラメータの一つである（変化範囲は  $g = 0.0G \sim 1.0G$  (ただし  $1G = 980.665 \text{ cm/s}^2$ )）。

今、圧力  $p$  を動圧  $\bar{p}$  と静圧  $p_\infty$  に分けて考えたとすると ( $p = \bar{p} + p_\infty$ )、静止状態におけるつり合いの式より次式を得る。

$$-\nabla \cdot p_\infty + \rho_{g,\infty} \mathbf{g} = 0 \quad (2.14)$$

添字  $\infty$  は周囲の標準状態 (300K, 1atm) を表す。以上を考慮すると、運動量保存式 (2.3) は次のようになる。

$$\rho_g \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla \cdot \left[ \left( \bar{p} + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \mathbf{U} - \mu \{ (\nabla \mathbf{v}) + (\nabla \mathbf{v})^T \} \right] + (\rho_g - \rho_{g,\infty}) \mathbf{g} \quad (2.15)$$

なお、これ以降では、上記の動圧  $\bar{p}$  をただの  $p$  と表記する。



### エネルギー保存式の簡略化

式 (2.4) は, 式 (2.9) ~ (2.11) の関係を使って次のようにも表記できる.

$$\begin{aligned} \rho_g \frac{D}{Dt} \left( \int_{T^0}^{T_g} c_{pg} dT \right) &= \frac{Dp}{Dt} \\ &+ \nabla \cdot \left[ \lambda_g \nabla T_g - \rho_g \sum_{i=1}^N Y_{g,i} \mathbf{V}_i \int_{T^0}^{T_g} c_{pg,i} dT - \mathbf{q}_R + (D.E.) \right] \\ &+ \Phi + \rho_g \sum_{i=1}^N Y_{g,i} \mathbf{f}_i \cdot \mathbf{V}_i - \sum_{i=1}^N h_{g,i}^0 \dot{\omega}_{g,i} \end{aligned} \quad (2.16)$$

右辺第二項の (D.E.) は, 前述の Dufour 効果による項を表す. このようにエンタルピーを潜熱および顕熱分に分けて表記すれば, 右辺最終項に反応による発熱を表す項が現れる.

まず, 上式の左辺の簡略化を行う. 顕熱分の物質微分は, 式 (2.11) の関係を考慮に入れば次のようになる.

$$\frac{D}{Dt} \left( \int_{T^0}^{T_g} c_{pg} dT \right) = c_{pg} \frac{DT_g}{Dt} + \sum_{i=1}^N \left[ \left( \frac{DY_{g,i}}{Dt} \right) \int_{T^0}^{T_g} c_{pg,i} dT \right] \quad (2.17)$$

今, 仮定 4 により気体種別で定圧比熱を区別せず, 同じものとして扱うため,  $c_{pg,i} = \bar{c}_{pg}$  と考えてよい. すなわち, 上式の右辺第二項は,  $\sum_{i=1}^N \left[ \left( \frac{DY_{g,i}}{Dt} \right) \int_{T^0}^{T_g} c_{pg,i} dT \right] = \left( \int_{T^0}^{T_g} \bar{c}_{pg} dT \right) \sum_{i=1}^N \left( \frac{DY_{g,i}}{Dt} \right) \propto \frac{D}{Dt} \sum_{i=1}^N Y_i$  となりゼロとなる. 従って式 (2.16) の左辺は次のようになる.

$$\rho_g \frac{D}{Dt} \left( \int_{T^0}^{T_g} c_{pg} dT \right) = \rho_g c_{pg} \frac{DT_g}{Dt} \quad (2.18)$$

続いて, 式 (2.16) の右辺の簡略化を行う. 式 (2.16) の右辺第一項は仮定 6 により消去することができる. 圧力仕事は, もともと運動エネルギーと同じオーダーであり, それらは熱エネルギーと比べて極めて小さい. そのためマッハ数が小さい層流燃焼場では, 通常これを無視して考える. すなわち

$$\frac{Dp}{Dt} = 0. \quad (2.19)$$

次に式 (2.16) の右辺第二項を考える. 大括弧の中の第二項は, 各成分のエンタルピーの顕熱分が拡散によって運ばれる量の変化を表す. ここで再び仮定 4 により  $c_{pg,i} = \bar{c}_{pg}$  なることを利用すると,

$$\rho_g \sum_{i=1}^N Y_{g,i} \mathbf{V}_i \int_{T^0}^{T_g} c_{pg,i} dT = \int_{T^0}^{T_g} \bar{c}_{pg} dT \rho_g \sum_{i=1}^N Y_{g,i} \mathbf{V}_i \quad (2.20)$$



となる。ここで  $\sum_{i=1}^N Y_{g,i} \mathbf{V}_i$  は、拡散速度の定義によってゼロになるため、この項は消去される。続いて、同大括弧内の第三項は、**仮定 9** により消去することができる。また、同大括弧内の最終項は**仮定 6** により消去することができる。以上により、式 (2.16) 右辺の大括弧で表される第二項は、そのうちの第一番目の項、すなわち温度勾配によるエネルギー輸送変化のみが残る。

式 (2.16) の右辺第三項は、**仮定 6** により消去することができる。粘性散逸とは、粘性力によって消失するエネルギーのことであり、熱エネルギーに比べると無視できる程小さい。

式 (2.16) の右辺第四項は、外力に逆らって分子拡散する時に消費するエネルギーの総和を表す。今、**仮定 4** より  $\mathbf{f}_i = -g\mathbf{n}_z$  とすることができるので、式 (2.16) の右辺第四項は以下のように変形できる。

$$\rho_g \sum_{i=1}^N Y_{g,i} \mathbf{f}_i \cdot \mathbf{V}_i = \rho_g \sum_{i=1}^N Y_{g,i} (-g\mathbf{n}_z) \cdot \mathbf{V}_i \propto \mathbf{n}_z \cdot \sum_{i=1}^N Y_{g,i} \mathbf{V}_i \quad (2.21)$$

$\mathbf{n}_z$  は軸方向の単位ベクトルを表す。上式の最終形において、被微分部は拡散速度の定義によりゼロとなるため、式 (2.16) 右辺第四項は消去できる。

以上をまとめると、エネルギー式 (2.4) は次のようになる。

$$\rho_g c_{pg} \left( \frac{\partial T_g}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T_g \right) = \nabla \cdot (\lambda_g \nabla T_g) - \sum_{i=1}^N h_{g,i}^0 \dot{\omega}_{g,i} \quad (2.22)$$

なお、反応を含む上式の右辺最終項については次節でさらに簡単になる。

### 気体の状態方程式の簡略化

**仮定 4** により、式 (2.5) の右辺における総和の部分は以下のように簡単化される。

$$\sum_{i=1}^N \left( \frac{Y_{g,i}}{\bar{W}_i} \right) = \frac{1}{\bar{W}} \quad (2.23)$$

$\bar{W}$  は空気の平均分子量である。従って、気体の状態方程式 (2.5) は次のようになる。

$$p = \rho_g R^0 T_g \frac{1}{\bar{W}} \quad (2.24)$$

### 2.1.4 気相の化学反応モデル

本節では、成分保存式 (2.13) およびエネルギー保存式 (2.22) に現れる  $i$  成分の生成速度  $\dot{\omega}_i$  に関するモデル化について述べる。一般に、化学反応による  $i$  成分



の生成速度  $\dot{\omega}_i$  は以下のように与えられる,

$$\dot{\omega}_i = W_i \sum_{m=1}^M (\nu_{i,m}'' - \nu_{i,m}') \left\{ k_{f,m} \prod_{j=1}^N \left( \frac{\rho Y_j}{W_j} \right)^{\nu_{j,m}'} - k_{b,m} \prod_{j=1}^N \left( \frac{\rho Y_j}{W_j} \right)^{\nu_{j,m}''} \right\} \quad (2.25)$$

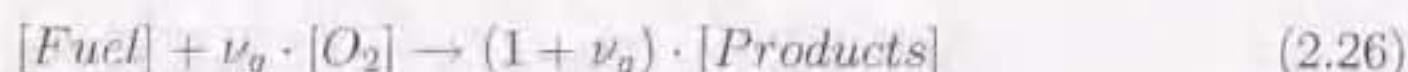
$M$  は成分  $i$  の生成および消滅に関係する反応の数を表す,  $\nu_{i,m}'$  および  $\nu_{i,m}''$  は, それぞれ  $m$  番目の反応における反応物および生成物としての  $i$  成分の量論係数を表す,  $k_{f,m}$  および  $k_{b,m}$  は, それぞれ  $m$  番目の反応における正反応および逆反応の比反応速度である,

化学反応に関して以下の仮定を付け加える,

**仮定 10** 混合気の反応は総括一段の不可逆反応とする,

**仮定 11** 総括反応速度は, 反応物である可燃ガスおよび酸素の濃度に比例し (二次反応), アレニウス型の温度依存性を有すると考える,

着火には, 実際多くの素反応が関わっているので (例えば [34, 36]), 総括反応を仮定することはあまりにも大胆である. しかし, 分解ガス中に含まれる可燃ガス成分すら十分に特定できない現状では, 数値計算による素反応レベルでの検証は不可能である. 加えて, 熱発火理論によれば, 定性的には「温度が発熱速度を急激に上昇させること」だけが着火が実現されるのに必要かつ十分な条件である. 逆に言えば, それが満たされるのであれば反応の数は幾つでもよく, 現象の基本的な性質は保つと考えられる. 以上二点より, 本研究では総括反応機構を用いて解析を行うことにした. なお, 重要となる反応定数等に関しては, NIST の文献 [21] からそのまま引用した. 本研究で考慮した化学反応は, 以下で表される総括一段の不可逆反応である,



$[Fuel]$ ,  $[O_2]$  および  $[Products]$  は, それぞれ固体から放出された分解生成ガス中の可燃成分, 周囲大気中の酸素および不活性の既燃ガスである. また,  $\nu_g$  は質量に基づく量論係数であり, 燃料 1 グラム当りの酸素消費量を表す. この量論係数値は本解析を通じて  $\nu_g = 3.57$  であり (文献 [21] 参照), 分解生成ガス成分が CO (5%) と C<sub>2</sub>H<sub>6</sub> (95%) の混合気 [65] とした場合の完全燃焼に要する酸素量 (質量) にほぼ等しい. セルロースの熱分解では, 主に CO と C の小さな炭化水素 (C<sub>1</sub>~C<sub>3</sub> 系) が発生することが知られているので [45, 65], この値は十分妥当であると考えられる.

これ以降では, 反応式の簡単化の手順を述べる. 仮定 4 より, ガスの分子量を区別することなく  $W_i = \bar{W}$  とできる. 反応数は一つのみであるので  $M = 1$  となり, 逆反応を考えなくともよいから  $k_{b,m} = 0$ . さらに仮定 10 および仮定 11 より, 気相の総括反応の頻度係数を  $A_g'$ , 活性化エネルギーを  $E_g$  とすると,  $k_{f,m}$  は



$k_{f,m} = A'_g \exp\left(-\frac{E_g}{RT_g}\right)$  と表記でき、濃度のべき乗数  $\nu'_{j,m}$  を  $j$  に関わらず 1 とすることができる。以上の関係を式 (2.25) に適用すれば、成分別の生成速度  $\dot{\omega}_{g,i}$  は以下のようなになる。

$$i = f \quad \dot{\omega}_{g,f} = -\bar{W} A'_g \left(\frac{\rho_g Y_f}{\bar{W}}\right) \left(\frac{\rho_g Y_{ox}}{\bar{W}}\right) \exp\left(-\frac{E_g}{RT_g}\right) \quad (2.27)$$

$$i = ox \quad \dot{\omega}_{g,ox} = -\nu_g \bar{W} A'_g \left(\frac{\rho_g Y_f}{\bar{W}}\right) \left(\frac{\rho_g Y_{ox}}{\bar{W}}\right) \exp\left(-\frac{E_g}{RT_g}\right) \quad (2.28)$$

$$i = p \quad \dot{\omega}_{g,p} = (1 + \nu_g) \bar{W} A'_g \left(\frac{\rho_g Y_f}{\bar{W}}\right) \left(\frac{\rho_g Y_{ox}}{\bar{W}}\right) \exp\left(-\frac{E_g}{RT_g}\right) \quad (2.29)$$

添字の  $f$ ,  $ox$  および  $p$  は、それぞれ固体から放出された分解ガス中の可燃成分、周囲大気中の酸素および不活性の既燃ガスを表す。上記において、頻度係数  $A'_g$  および分子量  $\bar{W}$  は定数であるため、それらをまとめて新たに頻度係数  $A_g$  とおく。ここで、上記の生成速度の共通部を取り出して、それを  $\dot{\omega}_g$  とする。すなわち

$$\dot{\omega}_g = A_g (\rho_g Y_f) (\rho_g Y_{ox}) \exp\left(-\frac{E_g}{RT_g}\right). \quad (2.30)$$

これは式 (2.26) で与えられる反応の反応速度に相当する。これを用いると、式 (2.13) における各成分の生成速度は、 $\dot{\omega}_g$  を使って次のように書ける。

$$\dot{\omega}_{g,f} = -\dot{\omega}_g, \quad \dot{\omega}_{g,ox} = -\nu_g \dot{\omega}_g, \quad \dot{\omega}_{g,p} = (1 + \nu_g) \dot{\omega}_g \quad (2.31)$$

また、本研究における気相反応の反応定数（頻度係数  $A'_g$  および活性化エネルギー  $E_g$ ）は文献 [21] の値を用い、それぞれ  $8.0 \times 10^8 \text{ g}/(\text{cm}^3 \text{ s})$  および  $67 \text{ kJ/mol}$  である。

ここで、式 (2.22) の右辺最終項を考える。それは上記の関係式を用いると次のように表記できる。

$$-\sum_{i=1}^N h_{g,i}^0 \dot{\omega}_{g,i} = \left\{ h_{g,f}^0 + \nu_g h_{g,ox}^0 - (1 + \nu_g) h_{g,p}^0 \right\} \dot{\omega}_g \quad (2.32)$$

右辺の反応速度にかかる係数は、生成物と反応物の生成エンタルピーの差を表しており、式 (2.26) の反応における反応熱  $q_g$  に相当する。すなわち

$$-\sum_{i=1}^N h_{g,i}^0 \dot{\omega}_{g,i} = q_g \dot{\omega}_g. \quad (2.33)$$

本計算では  $q_g = 30.0 \text{ kJ/g}$  とした [21]。



### 2.1.5 解くべき気相の基礎方程式

以上で解くべき気相の基礎方程式が仮定1~11のもとで全て数学的に簡略化された。以下に簡略化された解くべき気相の基礎式をまとめて表記する。

#### 質量保存式

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \mathbf{v}) = 0 \quad (2.34)$$

#### 成分保存式

$$i = f \quad \rho_g \left( \frac{\partial Y_{g,f}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla Y_{g,f} \right) = -\dot{\omega}_g + \nabla \cdot (\rho_g D \nabla Y_{g,f}) \quad (2.35)$$

$$i = ox \quad \rho_g \left( \frac{\partial Y_{g,ox}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla Y_{g,ox} \right) = -\nu_g \dot{\omega}_g + \nabla \cdot (\rho_g D \nabla Y_{g,ox}) \quad (2.36)$$

#### 運動量保存式

$$\rho_g \left( \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla \cdot \left[ \left( p + \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \mathbf{v} \right) \mathbf{U} - \mu \{ (\nabla \mathbf{v}) + (\nabla \mathbf{v})^T \} \right] + (\rho_g - \rho_{g,\infty}) \mathbf{g} \quad (2.37)$$

#### エネルギー保存式

$$\rho_g c_{pg} \left( \frac{\partial T_g}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T_g \right) = \nabla \cdot (\lambda_g \nabla T_g) + q_g \dot{\omega}_g \quad (2.38)$$

#### 反応速度式

$$\dot{\omega}_g = A_g (\rho_g Y_f) (\rho_g Y_{ox}) \exp \left( -\frac{E_g}{RT_g} \right) \quad (2.39)$$

#### 気体の状態方程式

$$p = \rho_g R^0 T_g \frac{1}{\bar{W}} \quad (2.40)$$



## 2.2 固相の解析モデル

### 2.2.1 固体燃料の着火解析の複雑さ

固体燃料の自発着火過程は、固相において相変化を伴う複雑な分解反応が起こるだけでなく、それにより生成されるガス成分および液膜が気相で起こる着火特性に影響を与えるため、非常に複雑かつ再現性に乏しい。その主な要因は次の三つに大別できる。

- 固体燃料の性質の不均一性
- 多様な分解形態
- 分解生成物の不確定性

以下にこれらの理由を記載する。

#### 固体燃料の性質の不均一性

一般に、固体燃料内部にはすき間（空隙）がランダムに存在し、不均一な構造となっている。しかも、固体には気体のように分子拡散により無限時間後には自然と均一に広がる性質がないため、初期の不均一性は緩和されることがない。そのため、着火以前の固体燃料の分解反応は一様に起こらず、現象の再現性を著しく低下させる。

#### 多様な分解形態

加熱により固体燃料が分解する際、固体表面には液膜および気泡が生じる場合もあればひび割れを起こす場合もある [37, 38, 39, 40]。ロケットの推進薬では金属物が放出されて、それが燃焼促進に大きく作用する例もある [66, 67]。このような様々な分解形態もまた、前述の「不均一性」と同様に特に再現性を乏しくする原因になる。

#### 分解生成物の不確定性

分解反応により生じるガスおよび液相の種類は、最も単純なポリマーの場合ですら一つには決まらない [68, 69]。ある文献によれば、分解生成物の種類は加熱方法および加熱速度にも依存することも指摘されている [40, 70]。分解生成物の確定が困難であるということは、すなわち、どのような組成のガスが着火に至るのかわからない。このことが着火の解析を難しくする。

以上のように、固体燃料が自発的な着火に至るまでの過程には様々な不確定要素が混在して、それが着火特性に影響を与え得る。これが「固体燃料の着火は複雑である」と言われる由縁であり、固体燃料の着火機構を理解することを困難にしている。



### 2.2.2 固相の定式化に関する留意点

加熱により固体燃料が分解して着火に至る場合、前述の通り、固体の分解反応において相変化を伴う反応が存在するのが普通である。一方、気相における化学反応は、そのほとんどが相変化を起こさず、反応物および生成物ともに気体である。このように、単相および多相が関わるという点が、気相および固相の定式化の際にも留意すべき点になる。

例として反応前後における質量保存則を考える。考慮した反応は、下記に示すようなA（またはA'）がB,C（またはB',C'）となる反応である。

気体反応： 「気体(A)」→「気体(B)」+「気体(C)」

固体反応： 「固体(A')」→「固体(B')」+「ガス or 液体(C')」

相変化のない通常の気体反応では、反応前後でのガスの質量は等しい ( $A=B+C$ )。ところが、固体反応では系全体での質量は保存されるものの ( $A'=B'+C'$ )、相変化があるため、固相にのみ注目すれば  $A' \rightarrow B'$  となり、変化した分の質量（すなわち  $C'$ ）だけ減少する。このように、反応前後での単相内における質量は保存されない。同様の違いがエネルギー式に関しても現れ、固相の場合は相変化に伴うエンタルピー変化量を考慮しなくてはならない。

このように、多相にわたる変化を一斉に考える場合、その影響が保存方程式に組み込まれなくてはならない。その分だけ気相の保存式の定式化より複雑になる。

### 2.2.3 固相の解析に用いた仮定

以下に、着火に至るまでの過程における固相の解析に関して設けた仮定を列挙する。

仮定 12 固体はセルロースが主成分であるとする。

仮定 13 固体の反応には三つの総括反応を考える。また、固体を構成する物質は燃料、Char および灰分の三成分のみとする。

仮定 14 固体の構成分子は均一に分布するものとする。

仮定 15 固体は物理的に薄いと考え、厚さ方向には物理量の分布がないとする。

仮定 16 固体表面は黒体と考える。

仮定 17 分解反応による変化は体積変化には現れず、密度変化を通じてのみ現れるとする。

仮定 18 固体の熱物性値は常に一定であり、構成物質の割合に依存しないと考える。

これらの仮定は、後述の反応モデルを含めてNISTの解析 [21, 60] で使われたものと同じである。その固体解析モデルは、彼等独自の実験結果に基づいて開発され



たもので、十分に信頼できる。この一連の固体の解析に関するモデル化は重力とは無関係と考えられるので、本研究でも NIST の固体反応モデルをそのまま利用した。以下に、これらの仮定の汎用性および妥当性を、他の解析および実験を例に挙げて説明する。

#### 仮定 12, 13, 14

固体燃料の分解モデルにおいては、できるだけ「単純」かつ「一般に良く使われている」材質を解析対象にすることが望ましい。これまでの火災研究において、可燃性固体燃料として用いられてきたものは、主に 1:木材, 2:PMMA (Polymethylmethacrylate), 3:セルロースという三種類で代表される。木材は、均質性および構成物質の複雑さから、その熱分解は非常に複雑となり、再現性が乏しいため解析モデルの対象には適さない。PMMA は高い再現性を示すが、通常の火災における可燃性固体ではない。以上より、本研究ではセルロースを解析対象にした。

セルロースは木や紙等の可燃性物質の主成分として知られており [38]。その熱分解を調べた研究は多く [42, 71, 72]、反応モデルも幾つか提唱されている [42, 43, 60, 72, 73]。本研究では、主旨が同じである NIST で開発された反応モデル [60] を用いて計算を行った。上記の仮定はそれに準じたものである。なお、NIST の実験は均質性の高いセルロースを選んで行われており、現象の再現性は高く、材質のばらつきはないものと考えてよい。

#### 仮定 15

固体の熱伝導率は気体のそれに比べて大きいため、ある空間距離にわたって温度変化の影響は素早く伝わる。固体燃料の厚さが非常に薄い場合、この概念により厚さ方向への温度変化はないと考えることができる。また、この概念は温度に関係する他の物理量にも適用できる。なおこの仮定は、材質にも依存するが、PMMA では 2.0mm 以下 [74]、セルロースではおよそ 0.15mm 以下 [75] の厚さでは十分に適用可能である。本研究で設定した固体燃料の厚さは 0.1mm であるので、この仮定は十分妥当であると考ええる。

#### 仮定 16

放射率および吸収率は固体燃料の性質に強く依存し、必ずしも黒体とはいえない。しかし、そこまで考慮するとパラメータが多くなりすぎて現象の本質が捕らえにくくなる恐れがある。この仮定は、NIST の解析モデルに準じているのであるが、NIST 以外の研究グループでも採用されており (例えば [76])、それぞれが有用な成果を挙げていることから、このモデル化が現象の物理を変える程の深刻な問題にはならないと考える。

#### 仮定 17, 18

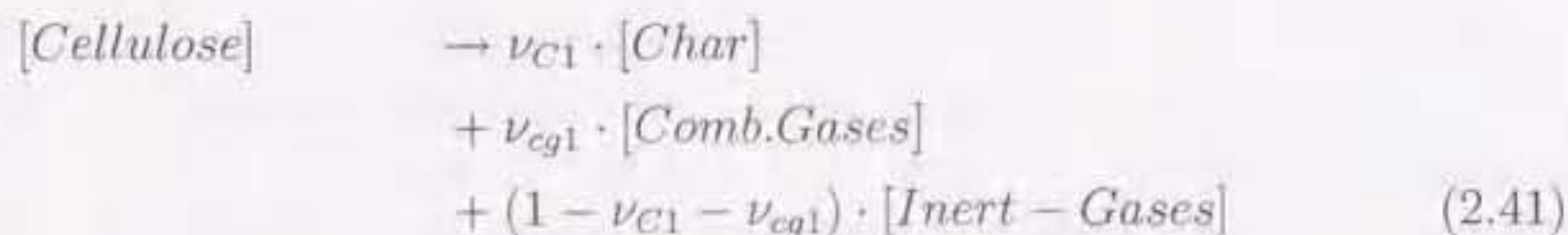


一旦固体の反応が起こると、固体の一部が相変化を起こし固相内部の空隙を増加させる。そのため、固体の体積は徐々に減少する。しかし、このような表面およびその極内部で起こるミクロな構造変化は非常に複雑であり、現時点では正確にモデル化できる段階ではない。そのため、何かマクロな性質が変化するとして、その変化を表すことを考えた。上記の仮定はその一部である。なお、固定された熱物性値には固体の比熱 ( $c_{pS}$ ) および熱伝導率 ( $\lambda_S$ ) があり、それぞれ  $c_{pS} = 1.255 J/(g K)$  および  $\lambda_S = 6.0 \times 10^{-4} J/(cm K s)$  とした [21]。

## 2.2.4 固相の化学反応モデル

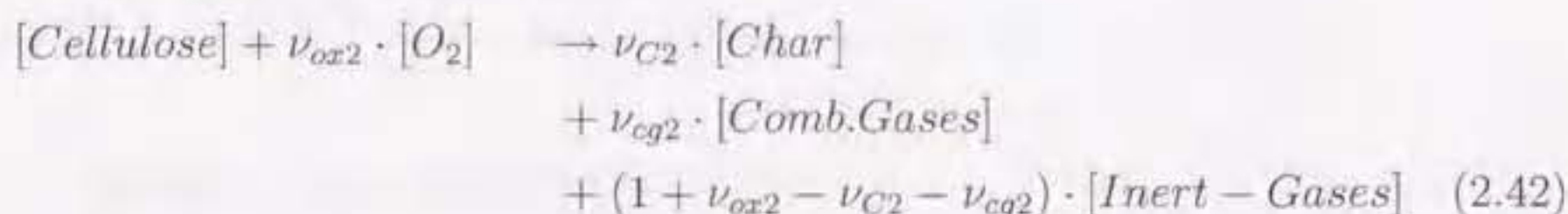
考慮した化学反応は次で表される三つの総括不可逆反応である [60]。

### 1: 固体燃料の熱分解反応 (吸熱)



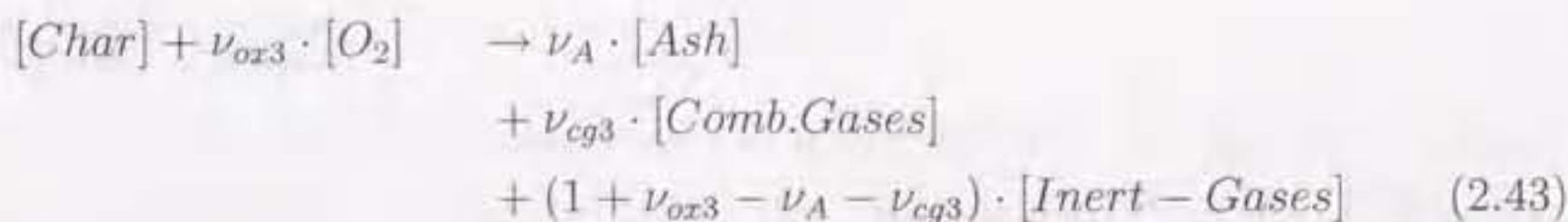
(ただし,  $\nu_{C1} = 0.24$ ,  $\nu_{cg1} = 0.23$ )

### 2: 固体燃料の酸化反応 (発熱)



(ただし,  $\nu_{ox2} = 0.41$ ,  $\nu_{C2} = 0.21$ ,  $\nu_{cg2} = 0.06$ )

### 3: Char の酸化反応 (発熱)



(ただし,  $\nu_{ox3} = 1.65$ ,  $\nu_A = 0.03$ ,  $\nu_{cg3} = 0.52$ )

$[Cellulose]$ ,  $[Char]$  および  $[Ash]$  は、それぞれ固体燃料, Char および灰分を表す。また,  $[O_2]$ ,  $[Comb.Gases]$  および  $[Inert - Gases]$  は、それぞれ反応に使われる酸素, 固体から放出される可燃ガス成分および不活性ガス成分である (仮定 2 参照)。添字  $C$ ,  $A$  および  $cg$  は、それぞれ Char, 灰分および可燃ガス成分を表す。なお、添字の番号 1~3 は各反応番号に対応する。これらの反応の物理的意味は、1 グラ



ムの反応物（ここでは [Cellulose] および [Char]）が熱分解あるいは酸化反応により消費された場合、 $\nu_i$  ( $i = C, A, cg$ ) グラムの固体の反応生成物（ここでは [Char] および [Ash]）になることを示す。

上記のようにモデル化された各反応における反応速度を、それぞれ以下のように与える [60]。

$$\dot{\omega}_{S1} = A_{S1} \left( \frac{\rho_S Y_{S,F}}{\rho_{S0}} \right)^{n_{S1}} \exp \left( -\frac{E_{S1}}{RT_S} \right) \quad (2.44)$$

$$\dot{\omega}_{S2} = A_{S2} \left( \frac{\rho_S Y_{S,F}}{\rho_{S0}} \right)^{n_{S2}} \left( \frac{\rho_g Y_{g,ox}}{\rho_{g2}} \right)^{n_{g2}} \exp \left( -\frac{E_{S2}}{RT_S} \right) \quad (2.45)$$

$$\dot{\omega}_{S3} = A_{S3} \left( \frac{\rho_S Y_{S,C}}{\rho_{S0}} \right)^{n_{S3}} \left( \frac{\rho_g Y_{g,ox}}{\rho_{g3}} \right)^{n_{g3}} \exp \left( -\frac{E_{S3}}{RT_S} \right) \quad (2.46)$$

ここで  $\rho_S$ ,  $T_S$  および  $Y_{S,i}$  はそれぞれ固体の密度、温度および  $i$  成分の質量分率である。  $A_S$ ,  $E_S$  および  $n$  はそれぞれ各反応の頻度係数、活性化エネルギーおよび反応次数である。この反応次数は実験値に合うように制御された値である [60]。添字  $S$  は固相を、 $F$  は特に固体燃料（＝セルロース）を表す。これらの反応速度とは、すなわち、単位体積当りの反応物の質量が消費される速度を意味する。なお、上記の反応速度に関する反応定数は以下の通りである。

$$\begin{aligned} A_{S1} &= 2.0 \times 10^{17} 1/s, & E_{S1} &= 220.0 kJ/mol, & n_{S1} &= 1.80, & \text{---} \\ A_{S2} &= 2.5 \times 10^{12} 1/s, & E_{S2} &= 160.0 kJ/mol, & n_{S2} &= 1.30, & n_{g2} = 0.50, \\ A_{S3} &= 5.7 \times 10^9 1/s, & E_{S3} &= 160.0 kJ/mol, & n_{S3} &= 1.00, & n_{g2} = 0.78. \end{aligned}$$

## 2.2.5 簡略化された基礎方程式

上記の仮定およびモデル化された化学反応を考慮に入れて、解くべき基礎方程式を簡略化する。

### 質量保存に関する定式化

前述のように、固体の質量は反応の進行とともに減少する。これは固体の反応により生じた分解生成ガスが気相へ放出されるためである。すなわち、固体質量の減少速度は、分解生成ガスの放出速度と等しい。この概念に基づいて固体に関する質量保存則の定式化を行う。

ある時刻における固体の質量を  $\rho_S V$ （ただし  $V$  は固体中のコントロールボリュームの体積）とした場合、その時間変化は、仮定 17 から  $\frac{\partial(\rho_S)}{\partial t} V$  と表記できる。一方、固体の質量消滅に関わる反応は 1～3 全てであり、各反応による質量消滅量は各反応の反応後の固体の質量から反応前のそれを引いたものに等しい。今、仮定 18 よ



り、固体燃料、Char および灰分の密度は等しいと考えるので、各反応 1~3 が起きた場合の質量の変化分は、反応物 1 グラム当りそれぞれ  $(\nu_{C1} - 1)V$ ,  $(\nu_{C2} - 1)V$  および  $(\nu_A - 1)V$  である。以上より、固体の質量保存式は以下のようになる。

$$\frac{\partial \rho_S}{\partial t} = (\nu_{C1} - 1)\dot{\omega}_{S1} + (\nu_{C2} - 1)\dot{\omega}_{S2} + (\nu_A - 1)\dot{\omega}_{S3} \quad (2.47)$$

また、分解生成ガスは固体の表裏の二表面から同等に発生するので、片側の表面から放出される質量流束  $\dot{m}$  は、固体の厚さを  $2\delta$  とした場合、次のように書ける。

$$\dot{m} = -\frac{\partial \rho_S}{\partial t} \cdot \delta \quad (2.48)$$

なお、本研究では前述の通り  $2\delta = 0.1\text{mm}$  である。

### 成分保存に関する定式化

成分保存式に関しては、気体のそれと同様の概念により導き出すことが可能である。ただし、固体中には対流および拡散による物質の移動がないため、成分の時間変化は反応による成分の増減で決定される。今、反応 1~3 の反応速度がそれぞれ式 (2.44) ~ 式 (2.46) で与えられ、それぞれの反応が各成分（固体燃料、Char、灰分）の変化に関わる程度が式 (2.41) ~ 式 (2.43) で与えられることを考慮すると、各成分の保存式は以下のようにならされる。なお、仮定 13 により、固体を構成する成分は三つのみであるので、二つの成分保存式のみが独立である。

$$\text{Virgin Solid Fuel} : \frac{\partial (\rho_S Y_F)}{\partial t} = -\dot{\omega}_{S1} - \dot{\omega}_{S2} \quad (2.49)$$

$$\text{Char} : \frac{\partial (\rho_S Y_C)}{\partial t} = \nu_{C1}\dot{\omega}_{S1} + \nu_{C2}\dot{\omega}_{S2} - \dot{\omega}_{S3} \quad (2.50)$$

$$\text{Ash} : \frac{\partial (\rho_S Y_A)}{\partial t} = \nu_A\dot{\omega}_{S3} \quad (2.51)$$

### エネルギー保存に関する定式化

エネルギー保存則の基本概念より、加熱による物質変化に伴う局所のエンタルピー変化量  $\Delta H$  と外部との熱移動量  $\mathbf{q}$  は等しい（または式 (2.4) 参照）。すなわち、

$$\Delta H = -\nabla \cdot \mathbf{q} \quad (2.52)$$

この等式は、体積  $V$  のコントロールボリュームで積分しても成り立つ。すなわち、

$$\int_V (\Delta H) dV = - \int_V (\nabla \cdot \mathbf{q}) dV \quad (2.53)$$



(1) エネルギー保存式左辺 まず、式 (2.53) の左辺に当る部分、すなわち体積  $V$  の固体が加熱によって受ける内部でのエンタルピー変化を考える (図 2.2 参照)。加熱により固体の化学反応が起こると、反応前の固体は反応後には残留固体と放出気体に変化し、エンタルピーの形態は固体と気体との二つの形に変換される。つまり、固体の反応前後におけるエンタルピー変化  $\Delta H$  は、次の二つの和である。

- 固体が別の固体に変化したことによる固相のエンタルピー変化 (= 単相内での変化)
- 固体の反応によって発生する (= 変換された) 気体が有するエンタルピー分

これらを式で表せば、固体の体積変化がない場合 (仮定 17) は次のようになる。

エンタルピー変化量

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s h_s V) + \left\{ -\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s V) \cdot h_g \right\} = V \cdot \frac{\partial(\rho_s h_s)}{\partial t} - V \cdot \frac{\partial \rho_s}{\partial t} h_g \quad (2.54)$$

ここで、 $h_s$  は固体の比エンタルピーである。式 (2.54) において、右辺第二項は固相の質量保存式 (式 (2.47)) より直ちに知ることができる。以下では、右辺第一項 (すなわち固体内における比エンタルピー変化) を簡略化する手順を述べる。

まず、式 (2.54) の右辺第一項の微分部分は次のようになる。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_s h_s) = \frac{\partial \rho_s}{\partial t} h_s + \rho_s \frac{\partial h_s}{\partial t} \quad (2.55)$$

$$= \frac{\partial \rho_s}{\partial t} h_s + \rho_s \frac{\partial}{\partial t} \left( \sum_{i=1}^N Y_{s,i} h_{s,i} \right) \quad (2.56)$$

$$\left( \text{since } h_s = \sum_{i=1}^N Y_{s,i} h_{s,i} \right)$$

$$= \frac{\partial \rho_s}{\partial t} h_s + \rho_s \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial t} (Y_{s,i} h_{s,i}) \quad (2.57)$$

$$= \frac{\partial \rho_s}{\partial t} h_s + \rho_s \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial Y_{s,i}}{\partial t} h_{s,i} + Y_{s,i} \frac{\partial h_{s,i}}{\partial t} \right) \quad (2.58)$$

$Y_{s,i}$ ,  $h_{s,i}$  および  $N$  はそれぞれ固相における各化学種  $i$  の質量分率、比エンタルピーおよび反応に関わる成分の数を表す。ここで、上式 (2.58) の右辺最終項の括弧内部を考える。括弧内部第一項は、比エンタルピーの定義 (式 (2.10)) により潜熱および顕熱に分けて表記すると、以下のようになる。

$$\frac{\partial Y_{s,i}}{\partial t} h_{s,i} = \frac{\partial Y_{s,i}}{\partial t} h_{s,i}^0 + \frac{\partial Y_{s,i}}{\partial t} \int_{T^0}^{T_s} c_{p,s,i} dT \quad (2.59)$$

$c_{p,s,i}$  は成分  $i$  の比熱である。成分  $i$  の生成速度を  $\dot{\omega}_{s,i}$  ( $\equiv \partial(\rho_s Y_{s,i})/\partial t$ ) と表記すると、 $\dot{\omega}_{s,i} = \rho_s \frac{\partial Y_{s,i}}{\partial t} + Y_{s,i} \frac{\partial \rho_s}{\partial t}$  なる関係があるので、これを使うと上式 (2.59) の



右辺第一項は

$$\frac{\partial Y_{S,i}}{\partial t} h_{S,i}^0 = \left( \frac{\dot{\omega}_{S,i}}{\rho_S} - \frac{Y_{S,i}}{\rho_S} \frac{\partial \rho_S}{\partial t} \right) h_{S,i}^0 \quad (2.60)$$

となる。よって、式 (2.58) の右辺第二項の括弧内部は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y_{S,i}}{\partial t} h_{S,i} + Y_{S,i} \frac{\partial h_{S,i}}{\partial t} \\ = \frac{\dot{\omega}_{S,i}}{\rho_S} h_{S,i}^0 - \frac{Y_{S,i}}{\rho_S} \frac{\partial \rho_S}{\partial t} h_{S,i}^0 + \frac{\partial}{\partial t} \left( Y_{S,i} \int_{T^0}^{T_S} c_{pS,i} dT \right) \end{aligned} \quad (2.61)$$

ここで、上式の右辺最終項に  $\rho_S$  をかけて  $i = 1 \rightarrow N$  まで足し合わせる場合、式 (2.11) で与えられる全体の比熱を用いれば次のように表記できる。

$$\rho_S \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial t} \left( Y_{S,i} \int_{T^0}^{T_S} c_{pS,i} dT \right) = \rho_S \frac{\partial}{\partial t} \left( \int_{T^0}^{T_S} c_{pS} dT \right) \quad (2.62)$$

一般に  $g(y) = \int_{a(y)}^{b(y)} f(x, y) dx$  に対して、 $\frac{dg(y)}{dy} = \int_a^b \frac{\partial f}{\partial y} dx + f(b(y), y) \frac{db(y)}{dy} - f(a(y), y) \frac{da(y)}{dy}$  が成立することを考えれば、上式は以下のようなになる ( $g = \int_{T^0}^{T_S} c_{pS} dT$ ,  $f = c_{pS}$ ,  $x = T$ ,  $y = t$ )。

$$\rho_S \frac{\partial}{\partial t} \left( \int_{T^0}^{T_S} c_{pS} dT \right) = \rho_S \int_{T^0}^{T_S} \frac{\partial}{\partial t} (c_{pS}) dT + \rho_S c_{pS}(T_S) \frac{\partial T_S}{\partial t} \quad (2.63)$$

上式右辺第一項は、仮定 18 を考慮すればゼロになるので、次式が成立する。

$$\rho_S \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial t} \left( Y_{S,i} \int_{T^0}^{T_S} c_{pS,i} dT \right) = \rho_S c_{pS} \frac{\partial T_S}{\partial t} \quad (2.64)$$

以上より、式 (2.58) 全体は次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_S h_S) &= \frac{\partial \rho_S}{\partial t} h_S + \sum_{i=1}^N (h_{S,i}^0 \dot{\omega}_{S,i}) \\ &\quad - \sum_{i=1}^N \left( Y_{S,i} \frac{\partial \rho_S}{\partial t} h_{S,i}^0 \right) + \rho_S c_{pS} \frac{\partial T_S}{\partial t} \end{aligned} \quad (2.65)$$

$$= \frac{\partial \rho_S}{\partial t} \left( h_S - \sum_{i=1}^N h_{S,i}^0 Y_{S,i} \right) + \sum_{i=1}^N (h_{S,i}^0 \dot{\omega}_{S,i}) + \rho_S c_{pS} \frac{\partial T_S}{\partial t} \quad (2.66)$$

$$= \frac{\partial \rho_S}{\partial t} h_S^T + \sum_{i=1}^N (h_{S,i}^0 \dot{\omega}_{S,i}) + \rho_S c_{pS} \frac{\partial T_S}{\partial t} \quad (2.67)$$

最終項右辺第一項の  $h_S^T$  は、固体の顕熱分を表す。これらを式 (2.54) の右辺第二項に代入すれば、コントロールボリューム内部におけるエンタルピーの変化量が導かれる。すなわち、

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_S h_S V) + \left\{ -\frac{\partial}{\partial t} (\rho_S V) \cdot h_g \right\}$$



$$= V \cdot \frac{\partial(\rho_S h_S)}{\partial t} - V \cdot \frac{\partial \rho_S}{\partial t} h_g \quad (2.68)$$

$$= V \cdot \left[ \frac{\partial \rho_S}{\partial t} h_S^T + \sum_{i=1}^N (h_{S,i}^0 \dot{\omega}_{S,i}) + \rho_S c_{pS} \frac{\partial T_S}{\partial t} \right] - V \cdot \frac{\partial \rho_S}{\partial t} h_g \quad (2.69)$$

続いて、式(2.69)の化学反応に関する項である右辺第一項の括弧内部の第二項(すなわち  $\sum_{i=1}^N (h_{S,i}^0 \dot{\omega}_{S,i})$ )を考える。成分*i*の生成速度 $\dot{\omega}_i$ は、成分保存式(2.49)～(2.51)を用いればそれぞれ次のように与えられる。

$$i = F(\text{Cellulose}) : \quad \dot{\omega}_{S,F} = -\dot{\omega}_{S1} - \dot{\omega}_{S2} \quad (2.70)$$

$$i = C(\text{Char}) : \quad \dot{\omega}_{S,C} = \nu_{C1} \dot{\omega}_{S1} + \nu_{C2} \dot{\omega}_{S2} - \dot{\omega}_{S3} \quad (2.71)$$

$$i = A(\text{Ash}) : \quad \dot{\omega}_{S,A} = \nu_A \dot{\omega}_{S3} \quad (2.72)$$

よって、考慮している項は次のようになる。

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N (h_{S,i}^0 \dot{\omega}_i) &= h_{S,F}^0 (-\dot{\omega}_{S1} - \dot{\omega}_{S2}) + h_{S,C}^0 (\nu_{C1} \dot{\omega}_{S1} + \nu_{C2} \dot{\omega}_{S2} - \dot{\omega}_{S3}) \\ &\quad + h_{S,A}^0 (\nu_A \dot{\omega}_{S3}) \end{aligned} \quad (2.73)$$

$$\begin{aligned} &= (-h_{S,F}^0 + h_{S,C}^0 \nu_{C1}) \dot{\omega}_{S1} + (-h_{S,F}^0 + h_{S,C}^0 \nu_{C2}) \dot{\omega}_{S2} \\ &\quad + (-h_{S,C}^0 + h_{S,A}^0 \nu_A) \dot{\omega}_{S3} \end{aligned} \quad (2.74)$$

ここで、1～3の各反応における発熱量 $q_{S1} \sim q_{S3}$ を導入し、ヘスの定理(= Hess' law)を適用する。すなわち、反応物の生成エンタルピーから生成物のそれを引いた差分が反応による放熱量であると考えると以下の関係を得る。ただし、気体の生成エンタルピーは気体の種類に関わらず同一の $h_G^0$ とした(仮定4)。

$$\text{reaction1:} \quad h_{S,F}^0 = \nu_{C1} h_{S,C}^0 + (1 - \nu_{C1}) h_G^0 + q_{S1} \quad (2.75)$$

$$\text{reaction2:} \quad h_{S,F}^0 = \nu_{C2} h_{S,C}^0 + (1 - \nu_{C2}) h_G^0 + q_{S2} \quad (2.76)$$

$$\text{reaction3:} \quad h_{S,C}^0 = \nu_A h_{S,A}^0 + (1 - \nu_A) h_G^0 + q_{S3} \quad (2.77)$$

この関係を用いると、式(2.74)は次のように書き換えることができる。

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N (h_{S,i}^0 \dot{\omega}_i) &= \sum_{k=1}^3 (-q_{Sk} \dot{\omega}_{Sk}) \\ &\quad - \{(1 - \nu_{C1}) \dot{\omega}_{S1} + (1 - \nu_{C2}) \dot{\omega}_{S2} + (1 - \nu_A) \dot{\omega}_{S3}\} h_G^0 \end{aligned} \quad (2.78)$$

$$= \sum_{k=1}^3 (-q_{Sk} \dot{\omega}_{Sk}) + h_G^0 \frac{\partial \rho_S}{\partial t} \quad (2.79)$$

この関係式により、各成分の和をとっていた部分が各反応の和に変換された。これらを式(2.69)に代入すると、コントロールボリューム内部のエンタルピー変化



量を別方法で表記することができる.

$$\begin{aligned} V \cdot \left[ \frac{\partial \rho_S}{\partial t} h_S^T + \sum_{i=1}^N (h_{S,i}^0 \dot{\omega}_{S,i}) + \rho_S c_{pS} \frac{\partial T_S}{\partial t} \right] - V \cdot \frac{\partial \rho_S}{\partial t} h_g \\ = \rho_S c_{pS} \frac{\partial T_S}{\partial t} V + \sum_{k=1}^3 (-q_{Sk} \dot{\omega}_{Sk}) V \\ + \frac{\partial \rho_S}{\partial t} h_S^T V - \frac{\partial \rho_S}{\partial t} (h_g - h_G^0) V \end{aligned} \quad (2.80)$$

$$= \rho_S c_{pS} \frac{\partial T_S}{\partial t} V + \sum_{k=1}^3 (-q_{Sk} \dot{\omega}_{Sk}) V + \frac{\partial \rho_S}{\partial t} (h_S^T - h_g^T) V \quad (2.81)$$

ただし,  $h_g^T$  は気体の顕熱分のエンタルピーを表す. もしも気体および固体の定圧比熱が温度に関わらず一定であるとする, 上式は次のようにも書ける.

$$\rho_S c_{pS} \frac{\partial T_S}{\partial t} V + \sum_{k=1}^3 (-q_{Sk} \dot{\omega}_{Sk}) V + \frac{\partial \rho_S}{\partial t} [c_{pS} (T_S - T_0) - c_{pg} (T_S - T_0)] V \quad (2.82)$$

以上により, 加熱による体積  $V$  のコントロールボリューム内部のエンタルピー変化が得られた. なお, 上記の各反応における生成熱  $q_{S1} \sim q_{S3}$  は, それぞれ次のように与える [60].

$$q_{S1} = -0.57 \text{ kJ/g}, \quad q_{S2} = 5.7 \text{ kJ/g}, \quad q_{S3} = 25.0 \text{ kJ/g}$$

(2) エネルギー保存式右辺 ここでは, 式 (2.53) の右辺であるコントロールボリューム全体が受ける熱流束  $\mathbf{q}$  の収支を考える. 式 (2.53) の左辺は, 上記により式 (2.81) となる, これを式 (2.53) に代入すると, 次の関係を得る.

$$\rho_S c_{pS} \frac{\partial T}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 (-q_{Sk} \dot{\omega}_{Sk}) + \frac{\partial \rho_S}{\partial t} (h_S^T - h_g^T) = -\frac{1}{V} \int_V (\nabla \cdot \mathbf{q}) dV \quad (2.83)$$

基本的に熱流束  $\mathbf{q}$  は, 式 (2.7) で示したものと同一であるが, 固体内では物質拡散は存在しないため, 次式にまで簡単化される.

固体に関わる熱流束

$$\mathbf{q} = -(\lambda \nabla T)_{\text{bound}} + \mathbf{q}_R \quad (2.84)$$

上式右辺第一項は表面での熱伝導による熱輸送を表し, 右辺第二項はふく射熱流束を表す. 本研究におけるふく射熱流束  $\mathbf{q}_R$  は「外部放射熱流束:  $\mathbf{I}$  (強度  $I$ )」と「表面からの黒体放射熱流束:  $\mathbf{q}_{\text{rad}}$ 」である. すなわち,

$$\mathbf{q}_R = \mathbf{I} + \mathbf{q}_{\text{rad}} \quad (2.85)$$

$$= \left\{ -I + \varepsilon \sigma (T_S^4 - T_\infty^4) \right\} \mathbf{n}_+ \quad (2.86)$$



$\mathbf{n}_+$  は表面から垂直外向きの単位ベクトルを表す。また、 $\varepsilon$  および  $\sigma$  は、放射率 (= 1 (仮定 16 より)) およびステファン・ボルツマン定数である。この関係を式 (2.84) に代入すると次式を得る、

$$\mathbf{q} = -(\lambda \nabla T)_{\text{bound}} - \{I - \varepsilon \sigma (T_S^4 - T_\infty^4)\} \mathbf{n}_+ \quad (2.87)$$

ここで、式 (2.83) の右辺の積分部は、ガウスの定理を用いると以下のように表記できる、

$$\int_V (\nabla \cdot \mathbf{q}) dV = \int_S (\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}) dS \quad (2.88)$$

$$= \{(\mathbf{q}_{z+} S_{z+} + \mathbf{q}_{z-} S_{z-}) \cdot \mathbf{n}_z + (\mathbf{q}_{r+} S_{r+} + \mathbf{q}_{r-} S_{r-}) \cdot \mathbf{n}_r\} \quad (2.89)$$

$\mathbf{n}$  および  $S$  はそれぞれの固体側面から垂直外向きの単位ベクトルおよび面積を表す。添字 + および - はそれぞれコントロールボリュームから見た放出および流入方向を表す。本解析では、考慮した固体面のうち上部半面だけに注目しているので、下面は断熱条件 (すなわち  $\mathbf{q}_{z-} = 0$ ) である。なお、気相との熱のやり取り (加熱のための外部放射および表面からの黒体放射) するのは上方片面の垂直方向に限られ、両側面は固体内の熱伝導しかない。以上を考慮すれば、コントロールボリュームの半径方向の幅を  $\Delta r$  とした時、各方向への熱流束は以下のように表記できる、

$$\mathbf{q}_{z+} \cdot \mathbf{n}_z = - \left( \lambda_g \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{z=0} - I + \varepsilon \sigma (T_S^4 - T_\infty^4) \quad (2.90)$$

$$\mathbf{q}_{z-} \cdot \mathbf{n}_z = 0 \quad (2.91)$$

$$\mathbf{q}_{r+} \cdot \mathbf{n}_r = - \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_{r+\Delta r} = - \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_r - \Delta \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_r \quad (2.92)$$

$$\mathbf{q}_{r-} \cdot \mathbf{n}_r = + \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_r \quad (2.93)$$

円柱座標系における厚さ  $\delta$  の微小要素を考えた場合、体積  $V$ 、各面の面積  $S_{z+}$ 、 $S_{r+}$  および  $S_{r-}$  はそれぞれ  $V = \delta \cdot r \Delta r \Delta \theta$ 、 $S_{z+} = r \Delta r \Delta \theta$ 、 $S_{r+} = \delta \cdot (r + \Delta r) \Delta \theta$  および  $S_{r-} = \delta \cdot r \Delta \theta$  となる。よって式 (2.89) に  $-\frac{1}{V}$  をかけたもの (すなわち式 (2.83) の右辺) は次のようになる、

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{V} \{(\mathbf{q}_{z+} S_{z+} + \mathbf{q}_{z-} S_{z-}) \cdot \mathbf{n}_z + (\mathbf{q}_{r+} S_{r+} + \mathbf{q}_{r-} S_{r-}) \cdot \mathbf{n}_r\} \\ & = -(\mathbf{q}_{z+} \cdot \mathbf{n}_z) \frac{r \Delta r \Delta \theta}{\delta \cdot r \Delta r \Delta \theta} + \left\{ \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_r + \Delta \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_r \right\} \frac{\delta \cdot (r + \Delta r) \Delta \theta}{\delta \cdot r \Delta r \Delta \theta} \\ & \quad - \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_r \frac{\delta \cdot r \Delta \theta}{\delta \cdot r \Delta r \Delta \theta} \end{aligned} \quad (2.94)$$

$$= -(\mathbf{q}_{z+} \cdot \mathbf{n}_z) \delta^{-1} + \frac{1}{r} \left\{ \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_r + \Delta \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_r \right\} + \frac{\Delta}{\Delta r} \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_r \quad (2.95)$$



ここで、上式 (2.95) の右辺に対して  $\Delta \rightarrow 0$  の極限を考えると以下ようになる。

$$\begin{aligned} \lim_{\Delta \rightarrow 0} & \left[ -(\mathbf{q}_{z+} \cdot \mathbf{n}_z) \delta^{-1} + \frac{1}{r} \left\{ \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_r + \Delta \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_r \right\} + \frac{\Delta}{\Delta r} \left( \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right)_r \right] \\ & = \left[ \left( \lambda_g \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{z=0} I - \varepsilon \sigma (T_s^4 - T_\infty^4) \right] \delta^{-1} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) \end{aligned} \quad (2.96)$$

これで式 (2.83) の右辺、すなわち式 (2.53) の右辺部の最終形が得られた。

以上で各要素の具体的な定式化が全てなされた。式 (2.48) を考慮に入れると、式 (2.81) および式 (2.96) より、固相におけるエネルギー保存式は次のようになる。

$$\begin{aligned} \rho_s c_{ps} \frac{\partial T_s}{\partial t} & = \sum_{k=1}^3 (q_{sk} \dot{\omega}_{sk}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) \\ & + \left[ \dot{m} (h_s^T - h_g^T) + \left( \lambda_g \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{z=0} + I - \varepsilon \sigma (T_s^4 - T_\infty^4) \right] \delta^{-1} \end{aligned} \quad (2.97)$$

なお、本研究における加熱源である外部放射熱流束  $I$  は、ガウス分布で次式のように与える。

$$I_{init} = 10.0 \exp(-r^2) \quad (2.98)$$

$$I = I_{init} \cdot \rho_s / \rho_{s,init} \quad (2.99)$$

添字 *init* は初期の状態を示す。加熱分布の半値幅は  $r = 0.83 \text{ cm}$  程度であり、主な加熱範囲は  $r < 1.7 \text{ cm}$  に限られる。なお、初期における中心軸上での加熱強度は  $10 \text{ J}/(\text{cm}^2 \text{ s})$  である。本研究において、固体表面に到達する熱流束  $I$  は NIST の解析に準じて式 (2.99) のようにモデル化されたものを使用する [21]。このモデル化により、加熱強度は固体の密度の減少と共に減衰する。しかし、それが着火現象に対して定性的に影響を及ぼさないことはすでに報告されている [21]。



## 2.2.6 解くべき固相の基礎方程式

以上で解くべき固相の基礎方程式が仮定12~18のもとで全て数学的に簡略化された。以下に簡略化された固相の解くべき基礎式をまとめて表記する。

### 質量保存式

$$\frac{\partial \rho_S}{\partial t} = (\nu_{C1} - 1)\dot{\omega}_{S1} + (\nu_{C2} - 1)\dot{\omega}_{S2} + (\nu_A - 1)\dot{\omega}_{S3} \quad (2.100)$$

### 成分保存式

$$\text{Virgin Solid Fuel} \quad \frac{\partial (\rho_S Y_F)}{\partial t} = -\dot{\omega}_{S1} - \dot{\omega}_{S2} \quad (2.101)$$

$$\text{Char} \quad \frac{\partial (\rho_S Y_C)}{\partial t} = \nu_{C1}\dot{\omega}_{S1} + \nu_{C2}\dot{\omega}_{S2} - \dot{\omega}_{S3} \quad (2.102)$$

$$\text{Ash} \quad \frac{\partial (\rho_S Y_A)}{\partial t} = \nu_A \dot{\omega}_{S3} \quad (2.103)$$

### エネルギー保存式

$$\begin{aligned} \rho_S c_{pS} \frac{\partial T_S}{\partial t} = & \sum_{k=1}^3 (q_{Sk} \dot{\omega}_{Sk}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \lambda_S \frac{\partial T_S}{\partial r} \right) \\ & + \left[ \dot{m} (h_S^T - h_g^T) + \left( \lambda_g \frac{\partial T}{\partial z} \right)_{z=0} + I - \varepsilon \sigma (T_S^4 - T_\infty^4) \right] \delta^{-1} \end{aligned} \quad (2.104)$$

ただし,  $I = \rho_S / \rho_{S,init} \cdot 10.0 \exp(-r^2)$ .

### 反応速度式

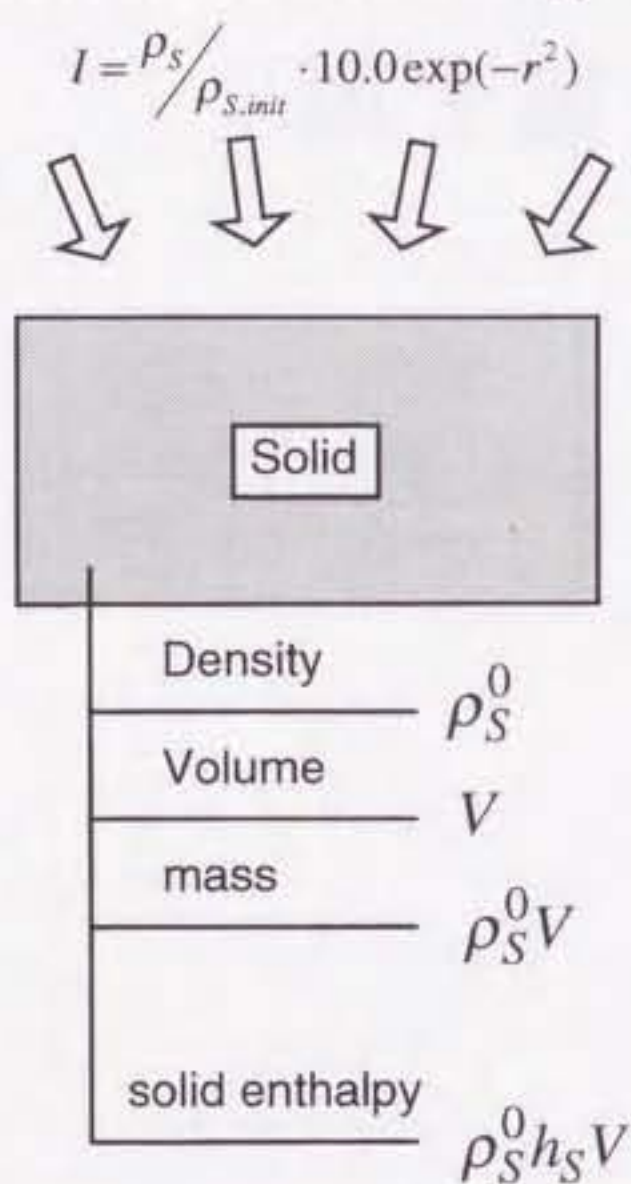
$$\dot{\omega}_{S1} = A_{S1} \left( \frac{\rho_S Y_{S,F}}{\rho_{S0}} \right)^{n_{S1}} \exp \left( -\frac{E_{S1}}{RT_S} \right) \quad (2.105)$$

$$\dot{\omega}_{S2} = A_{S2} \left( \frac{\rho_S Y_{S,F}}{\rho_{S0}} \right)^{n_{S2}} \left( \frac{\rho_g Y_{g,ox}}{\rho_{g2}} \right)^{n_{g2}} \exp \left( -\frac{E_{S2}}{RT_S} \right) \quad (2.106)$$

$$\dot{\omega}_{S3} = A_{S3} \left( \frac{\rho_S Y_{S,C}}{\rho_{S0}} \right)^{n_{S3}} \left( \frac{\rho_g Y_{g,ox}}{\rho_{g3}} \right)^{n_{g3}} \exp \left( -\frac{E_{S3}}{RT_S} \right) \quad (2.107)$$



## Thermal Heating: I



degradative reactions

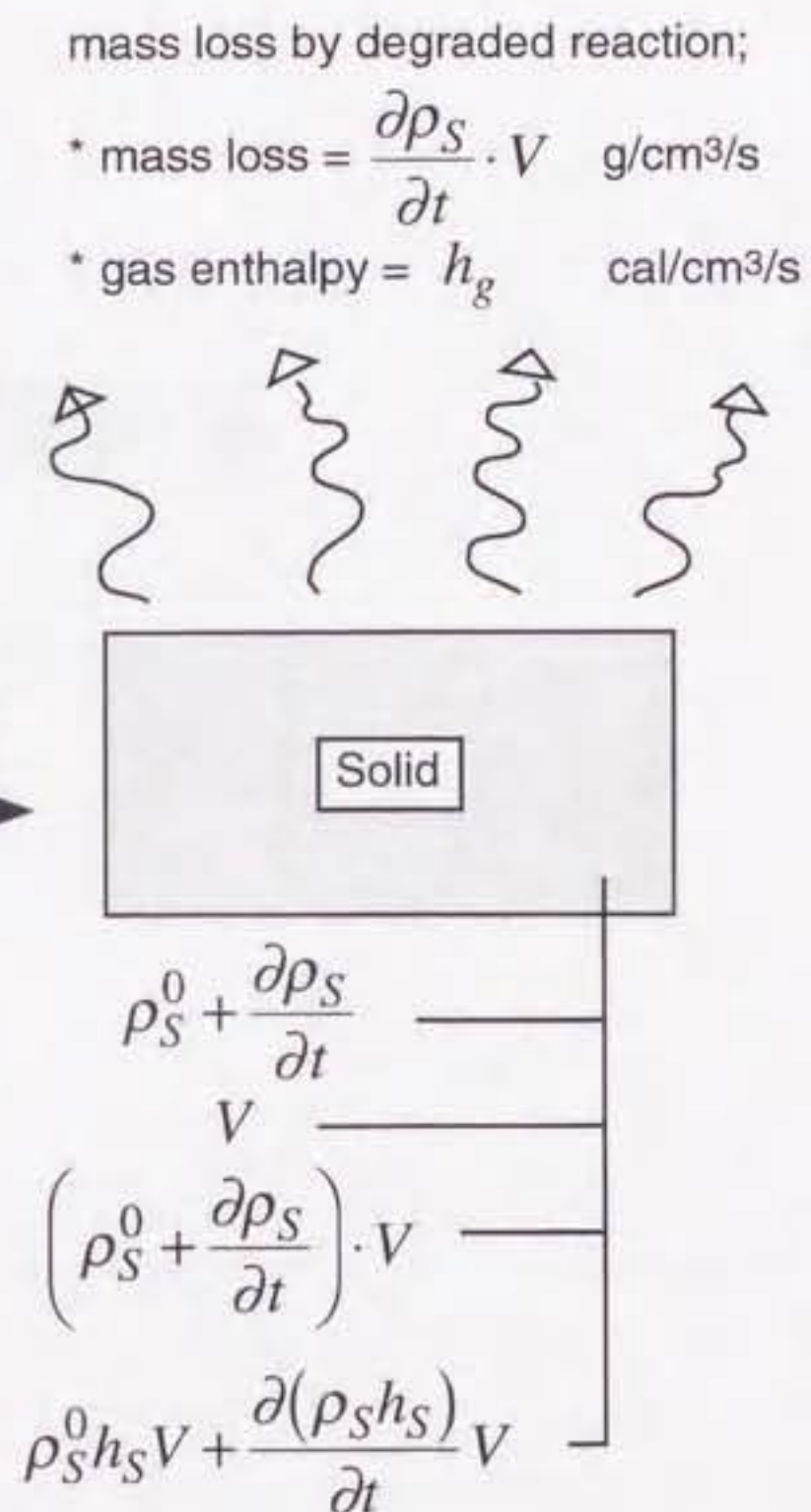


Figure 2.2: Schematic illustration of solid-phase decomposition



### 第 3 章 数值解析法



## 第3章 数値解析法

ここでは、第2章で得られた簡略化された各保存方程式の具体的な解き方を示す。本計算は有限体積法（例えば [77]）を用いるため、まず、微分方程式の形を代数方程式に変形（＝離散化）する手順を述べ、続いて各保存式の各項の評価方法について述べる。

### 3.1 離散化方程式

#### 3.1.1 有限体積法による離散化

保存方程式の一般形は、従属変数を  $\phi$  とすれば次式で与えられる。

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \phi - \Gamma^\phi \nabla \phi) = S^\phi \quad (3.1)$$

または、

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi_i} \left( \rho v_i \phi - \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi_i} \right) = S^\phi \quad (3.2)$$

$\Gamma^\phi$  および  $S^\phi$  はそれぞれ従属変数  $\phi$  に関する拡散係数および生成項を表し、 $i$  は位置に関する方向成分（ $r$ ：半径方向、 $z$ ：軸方向）を表す。式 (3.2) の左辺は順に非定常項、対流項、拡散項であり、右辺は生成項である。有限体積法の最初の段階として、上式の体積積分を取り、有限体積  $\Delta V$  における保存則に変形する。

$$\left( \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} \right)_P (\Delta V)_P + J_e - J_w + J_n - J_s = (S^\phi)_P (\Delta V)_P \quad (3.3)$$

ここで、添字  $P$  はコントロールボリューム（以下 C.V. と表記）の中心点を表し、 $e, w, n$  および  $s$  は、図 3.1 のように C.V. 表面上に定義された点である。上式における  $J$  は、ある界面を通過する全流束を表し、例えば界面  $e$  での  $J_e$  は、

$$J_e = \left( \rho v_r \phi - \Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi_r} \right)_e (\Delta \xi_z)_P \quad (3.4)$$

である。なお、 $J_w \sim J_s$  についても同様の形で表記できる。

式 (3.3) の状態から各項を順に離散化する。以下に具体的な形を示す。



### 非定常項

$$\left( \frac{\partial (\rho \phi)}{\partial t} \right)_P = \frac{\rho_P \phi_P - \rho_P^0 \phi_P^0}{\Delta t} \quad (3.5)$$

ここで、上付き添字0は時間  $\Delta t$  だけ前の時刻を表す。この時間に関する差分は、一般に Euler の完全陰解法と呼ばれる。

### 流束項

今、対流、拡散成分およびその比を、それぞれ  $F_e$ ,  $D_e$  および  $P_e$  とする。すなわち、

$$F_e \equiv (\rho v_r)_e, \quad D_e \equiv \frac{(\Gamma \phi)_e}{(\partial \xi_r)_e}, \quad P_e \equiv \frac{F_e}{D_e} \quad (3.6)$$

このとき、拡散項は  $(\Gamma \phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi_r})_e = D_e (\phi_E - \phi_P)$  と表すことができる。添字の  $E$  は  $P$  を中心とする C.V. の右隣に位置する C.V. の中心点であり、図 3.1 で定義される。以下の議論における  $W$ ,  $N$ ,  $S$  も  $E$  と同様の方法で定義される。ここで、 $F_e$  および  $D_e$ 、すなわち界面における対流および拡散強さの評価には、いかなる方法を用いても良い。 $\Gamma \phi$  は従属変数（例えば温度）の関数で与えられるため、通常は界面の隣接点の値（ここでは  $E$  と  $P$ ）を用いて評価される。物理量の変化が急激でない場合、例えば  $D_e$  は次式のように算術平均で十分評価できる [77]。

$$D_e = \frac{(\Gamma \phi)_e}{(\partial \xi_r)_e} = \frac{(\delta \xi_r)_{e+} \Gamma_P^\phi + (\delta \xi_r)_{e-} \Gamma_E^\phi}{(\partial \xi_r)_e^2} \quad (3.7)$$

ここで、添字  $e_+$  および  $e_-$  は図 3.1 で定義される。一方、界面における物理量  $\phi_e$  は本解析では次のように与えた。

$$\phi_e = \begin{cases} \frac{1}{2} (\phi_E + \phi_P) & |P_e| \leq 2 \\ \phi_P & P_e > 2 \\ \phi_E & P_e < -2 \end{cases} \quad (3.8)$$

このような  $\phi_e$  の与え方は、一般に「ハイブリッド法」として知られており [77]、拡散に対する対流強さ（すなわち  $P_e$ ）がある値（ここでは2）を境に、中心差分法あるいは風上差分法で評価する方法である。前者は精度が良いという長所があるが、小さなペクレ数領域でのみに使用に限られるという短所を持つ。一方、後者は格子の並びによって数値粘性を生じる、あるいは精度が悪いという短所はあるものの、大きなペクレ数領域でも有効であり、高い計算安定性を有する。このため、両者の特性を併せ持つハイブリッド法を用いれば、広い範囲の対流強さを精度よく安定に解くことが可能となる。本研究では、重力を変えた場合の非定常変化において、局所での自然対流が様々な値を取り、しかも広範囲で変化する。その変化を正確に評価するためには、この方法が最も適しているものと考えた。なお、 $e$  以外の界面における流束も同様の方法で評価される。



### 生成項

生成項に関しては、特別な離散化をほどこす必要はなく、C.V. 中心における値を用いればよい。なお、非定常項および流束項に属さない項はすべて生成項に含まれるとして計算を行う。

以上により、保存方程式の各項は C.V. の中心  $P$  およびその隣接点  $E, W, N, S$  を用いて表現された。それらをまとめると、式 (3.3) は最終的に次式で与えられるような離散化された方程式になる。

$$a_P^\phi \phi_P = a_E^\phi \phi_E + a_W^\phi \phi_W + a_N^\phi \phi_N + a_S^\phi \phi_S + b^\phi \quad (3.9)$$

これを一般に、従属変数  $\phi$  に関する離散化方程式と呼ぶ。

### 3.1.2 速度成分に関する離散化方程式

従属変数  $\phi$  が速度成分である場合には、特別な注意が必要である。その理由は、生成項の一部として、他の物理量の場合には見られない圧力項が存在するためである。本節では速度成分を解く際に必要かつ特別なルールについて述べる。

式 (3.9) の離散化方程式を速度成分  $v_i$  について書き下すと以下のようなになる。

$$a_P^{v_i} (v_i)_P = a_E^{v_i} (v_i)_E + a_W^{v_i} (v_i)_W + a_N^{v_i} (v_i)_N + a_S^{v_i} (v_i)_S + b^{v_i} \quad (3.10)$$

このとき、生成項  $b^{v_i}$  には運動量保存式 (2.37) より  $-\frac{\partial p}{\partial \xi_i} (\Delta V)_P$  という項が存在する。半径方向 ( $i=r$ ) に対するこの項は、具体的には次のように表される。

$$-\left(\frac{\partial p}{\partial \xi_i}\right)_P (\Delta V)_P = -(\Delta V)_P \frac{p_E - p_W}{(\delta \xi_r)_e + (\delta \xi_r)_w} \quad (3.11)$$

上記のように、評価したい位置  $P$  から見て両隣の位置（すなわち  $E$  と  $W$ ）の値のみで位置  $P$  における圧力勾配を算出した場合、極端に言えば、格子点一つ置きに波打つ圧力分布が存在したとしても、各位置における圧力勾配は一様に 0 になり得る。これは受け入れられない事実であり、圧力勾配を計算するのに上記の評価方法は適切でないことを示している。この問題を回避するために、速度成分を評価する点のみを半グリッドずらす手法（そのように配置された格子を「スタaggerド格子」と呼ぶ）が有効である [77]。具体的な評価点の配置は図 3.2 および図 3.3 に示す通りであり、温度、濃度等の物理量は、通常通り C.V. 内部の格子点で評価される一方で、矢印で示される速度成分  $v_r$  および  $v_z$  は C.V. の界面上で評価される。このようにずらして配置された速度成分に対する離散化方程式は、半径およ



び軸方向にそれぞれ次のように書ける,

$$a_e^{v_r}(v_r)_e = a_{ee}^{v_r}(v_r)_{ee} + a_{ew}^{v_r}(v_r)_w + a_{Ne}^{v_r}(v_r)_{Ne} + a_{Se}^{v_r}(v_r)_{Se} - \frac{p_E - p_P}{(\delta\xi_r)_e} (\delta V)_e + b_{(else)}^{v_r} \quad (3.12)$$

$$a_n^{v_z}(v_z)_n = a_{En}^{v_z}(v_z)_{En} + a_{Wn}^{v_z}(v_z)_{Wn} + a_{nn}^{v_z}(v_z)_{nn} + a_{sn}^{v_z}(v_z)_s - \frac{p_N - p_P}{(\delta\xi_z)_n} (\delta V)_n + b_{(else)}^{v_z} \quad (3.13)$$

上式において,  $b_{(else)}^{v_i}$  は圧力勾配以外の生成項を表す, このようにスタッガード格子の概念を導入すると, 式 (3.6) における界面での対流成分はそのまま導かれるという利点もあり, 多くの場合で利点をもたらす.

## 3.2 圧力補正法

気相における従属変数は密度  $\rho_g$ , 速度  $\mathbf{v}$ , 圧力  $p$ , 温度  $T_g$ , 成分の質量分率  $Y_{g,i}$ , 反応速度  $\dot{\omega}_g$  の六種類が存在し, 気相の基礎式は第2章で示した通り六種類存在するため, 全ての従属変数は各基礎式を連立して解けば数学的に一つに決まる. ところで, 解の算出において何よりも重要なのは, どのような手法を用いるかということよりも, 最終的に各基礎式を万遍なく満たす解が得られるかどうかにある.

本研究では, 特に圧力  $p$  に関して SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) [77] として知られる解法を用い, 面倒な圧力の計算をすることなく全ての基礎式が矛盾なく成立するような圧力分布を推定した. 以下に, 具体的な圧力分布の推定およびその補正方法を述べる.

今, 圧力分布が未知であるとして, 仮になんらかの分布と仮定したとする. それを  $p^*$  で表す. すると, その圧力分布に応じて, 仮の速度分布が式 (3.12) および (3.13) により直ちに導かれる. これを  $(v_r^*)_e$  および  $(v_z^*)_n$  と表す. すなわち,

$$a_e^{v_r}(v_r^*)_e = \sum_{nb} a_{nb}^{v_r}(v_r^*)_{nb} - \frac{p_E^* - p_P^*}{(\delta\xi_r)_e} (\delta V)_e + b_{(else)}^{v_r} \quad (3.14)$$

$$a_n^{v_z}(v_z^*)_n = \sum_{nb} a_{nb}^{v_z}(v_z^*)_{nb} - \frac{p_N^* - p_P^*}{(\delta\xi_z)_n} (\delta V)_n + b_{(else)}^{v_z} \quad (3.15)$$

上式での添字  $nb$  は隣接部を表す (図 3.1 参照). ここで, 星印のついた推定値と真の値との差は, 推定値からの補正すべき量を示す. それらを圧力および速度成分について  $p'$  および  $v'_i$  で表すと, 次のような関係となる.

$$p = p^* + p' \quad (3.16)$$

$$v_i = v_i^* + v'_i \quad (3.17)$$



この関係を式 (3.12) および (3.13) に代入し、それから式 (3.14) および (3.15) の差を取ることで、 $p'$  と  $v'_i$  が満たすべき関形式を得る。

$$a_e^{v_r}(v'_r)_e = \sum_{nb} a_{nb}^{v_r}(v'_r)_{nb} - \frac{p'_E - p'_P}{(\delta\xi_r)_e} (\delta V)_e \quad (3.18)$$

$$a_n^{v_z}(v'_z)_n = \sum_{nb} a_{nb}^{v_z}(v'_z)_{nb} - \frac{p'_N - p'_P}{(\delta\xi_z)_n} (\delta V)_n \quad (3.19)$$

ここで、上式 (3.18) および (3.19) において、大胆にも右辺第一項を無視できると考える。すると、速度補正量  $v'_i$  は圧力補正量  $p'$  によってのみ決定されることになる。すなわち、

$$(v'_r)_e = d_e (p'_P - p'_E), \quad \text{at} \quad d_e = \frac{(\delta V)_e}{a_e^{v_r} (\delta\xi_r)_e} \quad (3.20)$$

$$(v'_z)_n = d_n (p'_P - p'_N), \quad \text{at} \quad d_n = \frac{(\delta V)_n}{a_n^{v_z} (\delta\xi_z)_n} \quad (3.21)$$

以上から、真の速度成分は、次のように推定速度  $v_i^*$  と補正圧力  $p'$  によって表すことができる。

$$(v_r)_e = (v_r^*)_e + (v'_r)_e = (v_r^*)_e + d_e (p'_P - p'_E) \quad (3.22)$$

$$(v_z)_n = (v_z^*)_n + (v'_z)_n = (v_z^*)_n + d_n (p'_P - p'_N) \quad (3.23)$$

ところで、基礎式の一つである質量保存式を離散化すると次のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\rho_P - \rho_P^0}{\Delta t} (\Delta V)_P + [(\rho v_r)_e - (\rho v_r)_w] (\Delta\xi_z)_P \\ + [(\rho v_z)_n - (\rho v_z)_s] (\Delta\xi_r)_P = 0 \end{aligned} \quad (3.24)$$

上式に式 (3.22) および (3.23) を代入する。これにより、質量保存式を満たすことができるように定めるべき補正量の関係を知ることができる。すなわち、

$$a_P^{p'} p'_P = a_E^{p'} p'_E + a_W^{p'} p'_W + a_N^{p'} p'_N + a_S^{p'} p'_S + b^{p'} \quad (3.25)$$

ここで、

$$a_E^{p'} = \rho_e d_e (\Delta\xi_z)_P \quad (3.26)$$

$$a_W^{p'} = \rho_w d_w (\Delta\xi_z)_P \quad (3.27)$$

$$a_N^{p'} = \rho_n d_n (\Delta\xi_r)_P \quad (3.28)$$

$$a_S^{p'} = \rho_s d_s (\Delta\xi_r)_P \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} b^{p'} = \frac{\rho_P - \rho_P^0}{\Delta t} (\Delta V)_P + [(\rho v_r^*)_e - (\rho v_r^*)_w] (\Delta\xi_z)_P \\ + [(\rho v_z^*)_n - (\rho v_z^*)_s] (\Delta\xi_r)_P \end{aligned} \quad (3.30)$$



上式 (3.25) は、質量保存式を正確に満たすような推定圧力からの補正量  $p'$  を求めることができる離散化方程式である。これは、推定速度  $v_i^*$  のみを用いて求めることができる。

補正を含めた具体的な計算手順は次の通りである。

ステップ1 まず推定した圧力場の下で式 (3.14) および (3.15) を用いて推定速度成分を求める。

ステップ2 推定速度成分を用いて式 (3.25) により圧力補正量を求める。

ステップ3 得られた圧力補正値を用いて、式 (3.16) により、真の圧力値を求めると同時に、得られた圧力補正値を用いて、式 (3.20) および (3.21) から速度補正値を、式 (3.22) および (3.23) から補正された速度成分を求める。

ステップ4 ステップ3で補正された速度成分を用いて、温度および成分の保存式を解き、改訂された密度分布を得る。

ステップ5 十分に解が収束していなければステップ1に戻る。

以上の手順で繰り返し計算を単位時間ステップ内において何度も行ふことにより、最終的には全ての従属変数に関して収束解が得られる。なお、繰り返した直後に入るべき推定圧力値には、一つ前の繰り返しにおける「真の圧力 (ステップ3)」を用いると都合が良い。

上記において留意すべき点は、ステップ3における「真の圧力」の意味である。これは、最終解としての圧力ではなく、単に「最終解に近いであろう」真の圧力を指す。その理由は、式 (3.20) および (3.21) において、幾つかの項を無視して速度補正を行ったことによる。しかし、上記のように補正された圧力値を次の繰り返しにおける推定圧力値とすれば、次第に真の圧力値 (すなわち真の速度成分) を得ることができる。この方が、項を無視せずに解く場合に比べて収束は遅いが、それに伴う計算の複雑さを考慮すれば便利である。また、本節の最初に述べたように、数学的に存在し得る最終解は一つであるため、計算が収束しさえすれば、どのようなやり方を用いても同じ解が得られる筈である。

計算が収束した時を考えると、補正すべき量である圧力補正値  $p'$  および速度補正値  $v_i'$  はゼロになり、式 (3.30) で与えられる生成項  $b^p$  はゼロになる。よって、反復計算を行う過程において、 $b^p$ 、 $p'$  ないし  $v_i'$  に着目すれば、計算解の収束性を判断することができる。本計算では  $b^p$  の相対量を「ステップ5」における収束判定基準として利用した。



### 3.3 離散化方程式の計算

速度成分および他の物理量の離散化方程式は一般に式(3.9)で与えられる。すなわち、求めるべき $P$ における物理量は、その周りの値 $E, W, N, S$ により算出される。最も単純に解くには、点順法(=ガウスザイデル法)を用いればよいが、境界の影響が他端に伝わるのに時間がかかり、結局多くの計算時間を要する。そこで本解析では、その発展した解法である線順法を用いて計算を行った[77]。点順法では、 $P$ を取り巻く周りの値が全て既知であるとして毎回更新しながら順に解くため、一度の計算において、ある点の情報はその隣接点にしか伝わらない。一方で線順法は、ある一方向以外の点を既知と考えて(例えば $N$ と $S$ )、未知の点(すなわち $W, P, E$ )をある線上に配置させてTDMA法等で一気に解く解法である。この場合、ある端の影響は一度のTDMAの走査によって瞬時に他端に伝わるので、最終解への早い収束が期待できる。

本計算では、単位時間ステップ内で、上記の線順法に基づく操作を軸および半径方向へと交互に行い、SORによる繰り返し計算を行うことにより収束解を得た。ここで、発散を防いで安定に計算を遂行するために、不足緩和によるSOR法を採用した。その理由は、反応項等の非線形性の強い項が含まれたものを計算する場合、解の発散が起きやすくなることによる。

上記の手法は、主に気相の各基礎式を解く場合に利用された。固体の保存式を解く場合は、一部異なるアルゴリズムを用いた。特に固体の質量保存式(2.100)、成分保存式(2.101)～(2.103)に関しては、変数は時間のみの関数であることに注意すると、わざわざ空間の情報を得る必要がないので上記の操作は不要である。これらは、時間に対する常微分方程式として解いた。ただし、固体のエネルギー保存式(2.104)だけは半径方向への温度分布を考慮しているため、上記の差分法に基づく解法を利用して解いた。

### 3.4 計算精度について

数値計算を行う上で、その解が格子間隔および時間刻み等の人為的な要素に依存してはいけない。すなわち、研究を遂行する準備段階にて、これらの依存性の程度を確認する必要がある。本研究でシミュレートする現象は、加熱された固体燃料による自発的な着火である。特に着目するのは、着火特性、すなわち着火時間と着火位置であるため、それらに与える数値計算上での人為的な要素の影響を評価した。以下にその結果を示す。



### 3.4.1 計算領域の影響

重力が大きい場合、浮力による自然対流の影響は、ある時間かかって計算領域の上端まで到達する。ほとんどの場合、着火はそれ以前の時間で起こるので、領域もしくは境界の影響は考える必要はないが、着火時間が遅い場合には、着火前に境界まで変動が伝わることもある。その場合でも安定に計算を行うためには、計算領域を広く取り、上記の影響を最小限に抑えることが望ましい。よって、本解析では不等間隔格子を採用して計算を行った。具体的には、着火が起こる領域においては等間隔で最小格子を配置し、その外側では徐々に格子間隔を広くすることで計算領域を増加した。本計算の物理領域は、計算条件によって異なるが  $4.8 \times 9.2 \sim 24.8 \times 40.1 \text{ cm}^2$  の範囲である。

なお、境界付近まで自然対流の影響が到達しても、適切な境界条件を適用すれば計算を安定に行うことができる。この問題に関しては、次章の「境界条件」において述べる。境界条件、格子間隔および時間刻みを固定し、領域を軸方向に2倍に拡張した場合と半径方向に2倍に拡張した場合の検証を行った結果、境界まで自然対流の影響が到達するしないに関わらず、着火時間および着火位置に変化はなかったことを確認した。これは、本計算で用いたパラメータの全範囲で成り立つ。以上より、計算領域に伴う影響はないものと考えてよい。

### 3.4.2 格子間隔の影響

同じ計算領域において、格子間隔を半分にして計算を行った結果、着火位置の計算パラメータによる変化は定性的には同一である一方、定量的なずれが僅かながら確認された。しかし、そのずれ量は分解能の違いによる誤差範囲内の大きさであった。よって、用いた格子間隔では十分正確に着火を記述できるものと考えてよい。ただし、計算条件によって最適な格子間隔は異なるため、各計算パラメータでの適切な格子間隔を逐次求めて、常に最適な環境での計算を行った。本計算で用いられた最小格子幅は、 $\Delta x = 0.1 \sim 0.5 \text{ mm}$  の範囲である。

### 3.4.3 時間刻みの影響

急激な化学反応に対する追従性を良くするため、できるだけ小さな時間刻みで計算することが望ましい。本計算で用いた時間刻みは、 $\Delta t = 0.001 \text{ s}$  であり、全条件において着火までの非定常変化を表現できることを確認した。なお、この半分の時間刻みで計算した結果との比較した結果、着火時間 ( $0.2 \sim 1.0 \text{ s}$  程度) に対して約 0.5% 程度のずれに止まった。従って、使用した時間刻みでは十分正確に着火を表現できると考える。



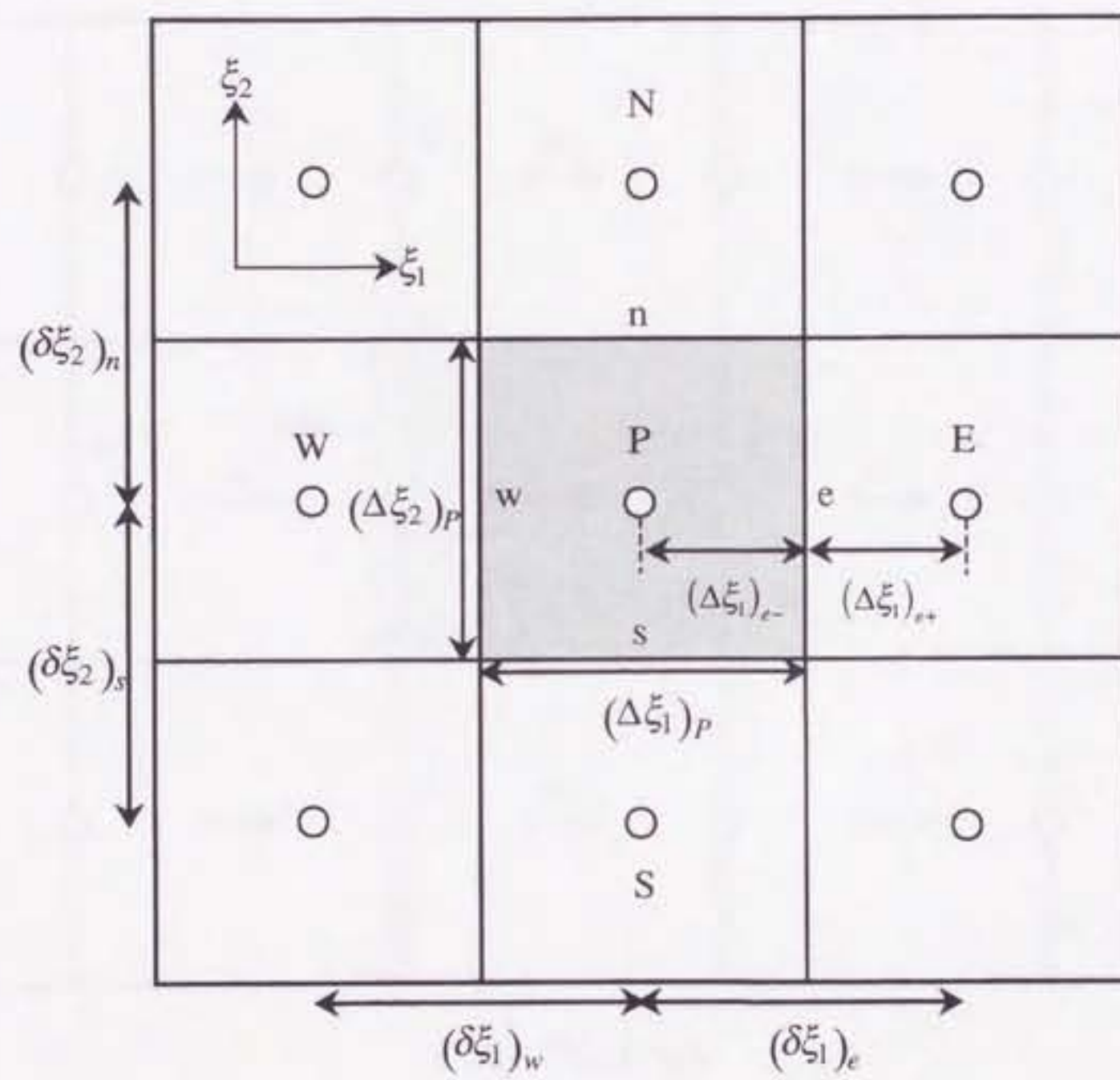


Figure 3.1: Control volumes



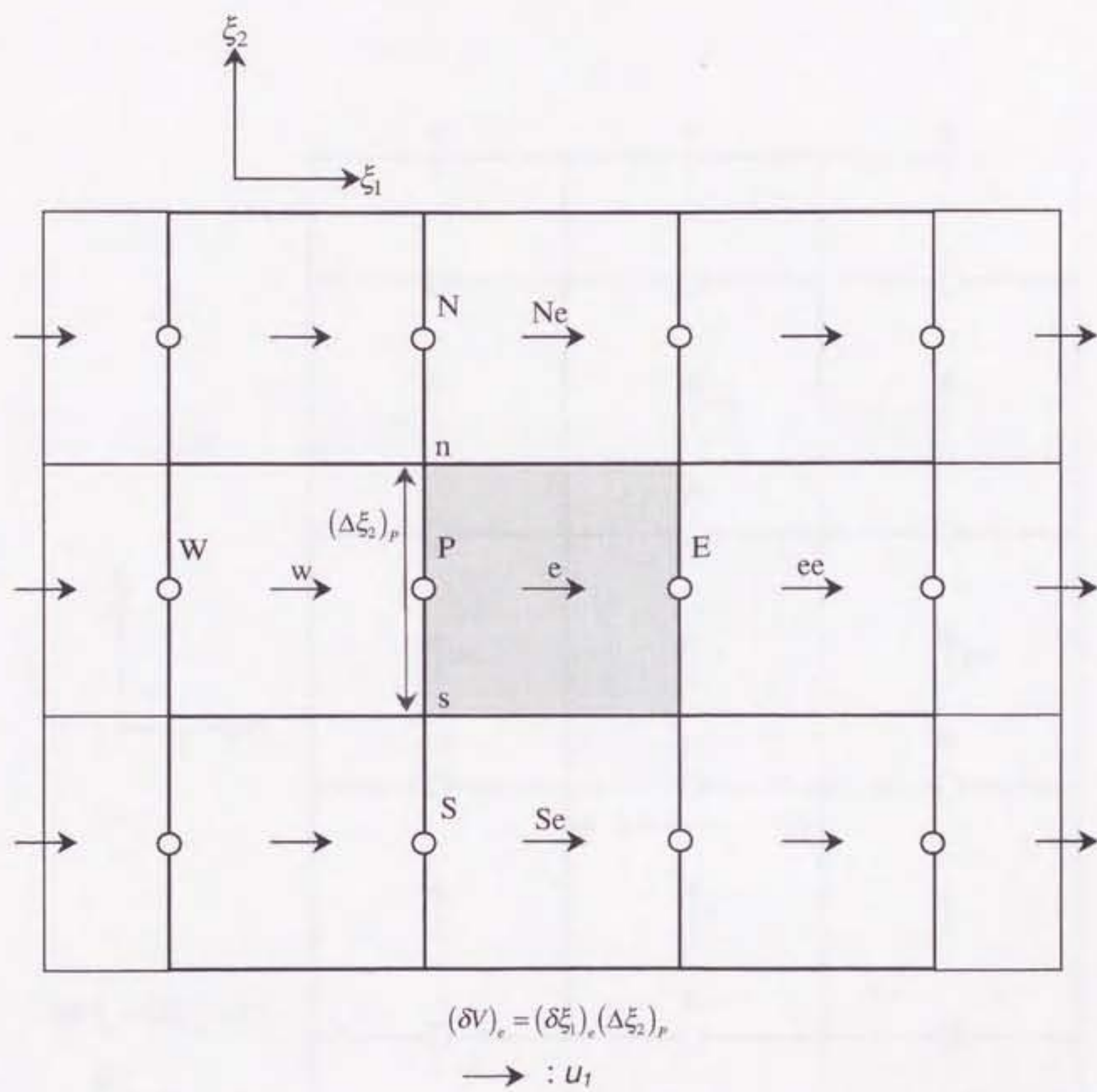


Figure 3.2: Staggered grid generation for  $u_1$



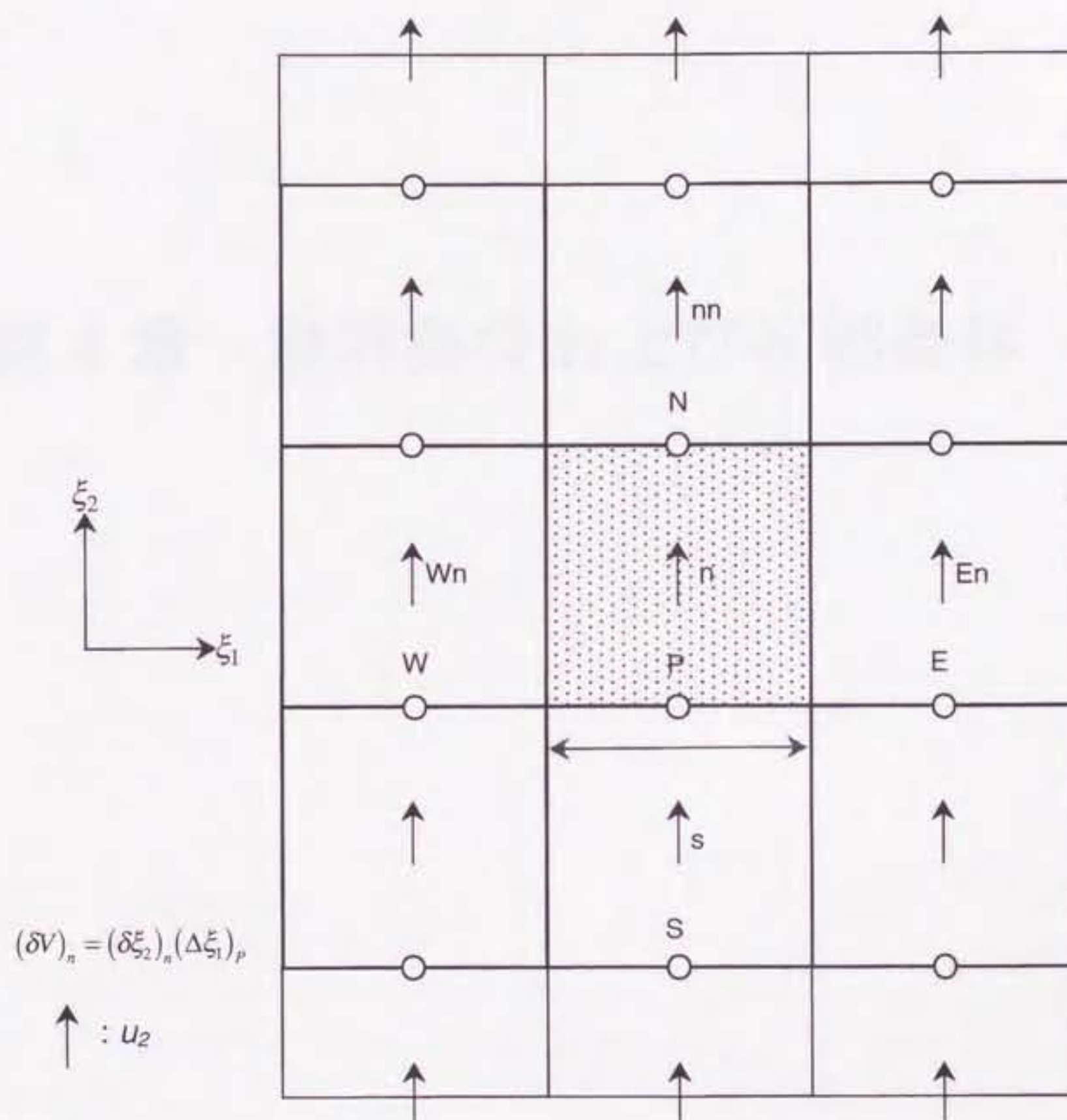


Figure 3.3: Staggard grid generation for  $u_2$



## 第 4 章 境界条件および初期条件



## 第4章 境界条件および初期条件

### 4.1 境界条件

本計算を通じて、使用した境界条件は同一である。軸対称二次元計算においては、1：中心軸上 ( $r=0$ )、2：半径方向の外側境界 ( $r=r_{max}$ )、3：軸方向の外側境界 ( $z=z_{max}$ )、4：固体表面上 ( $z=0$ ) の四つの境界面が存在する。以下に各面における境界条件を示す。

#### 1：中心軸上 ( $r=0$ )

軸対称の仮定の下では、中心軸上では物理量の半径方向への勾配はない。また、半径方向の速度成分はそこではゼロになる。以上を式で表すと次のようになる。

$$v_r|_{r=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \phi}{\partial r} \right|_{r=0} = 0 \quad (\phi = v_z, T_g, Y_{g,i}, T_S) \quad (4.1)$$

#### 2：半径方向の外側境界 ( $r=r_{max}$ )

本計算では、中心軸から最も離れた位置における境界条件に「物理量の勾配なし」を考えた。本研究で扱う現象では、自然対流により上方へと運動量が流出するため、それを補うように半径方向からの中心軸へ向う流れが生じる。しかし、半径方向への境界も不等間隔格子を用いて十分に離れた位置に設けたため、その流れの影響は直ちに境界へは伝わらず、そこでの流れ場の変動は非常に小さい。このように変動が小さい場合、勾配なしという境界条件で十分対応できる。具体的に式で表すと次のようになる。

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial r} \right|_{r=r_{max}} = 0 \quad (\phi = v_r, v_z, T_g, Y_{g,i}, T_S) \quad (4.2)$$

#### 3：軸方向の外側境界 ( $z=z_{max}$ )



本計算では、固体表面から最も離れた位置における境界条件として対流流出条件を考えた。この境界条件の優れている点は、今までにいくつかの文献で挙げられている [78]。その中で、本研究で利用した理由に最もふさわしいものは「渦が生じて矛盾なく流出を模擬できる」ことである。本研究では、重力により誘起される自然対流により渦が発生し、それが流されて計算領域の上面から流出する。ここで対流流出型の境界条件の利点を利用する。具体的な形を式で表すと次のようになる。

$$\left. \frac{\partial v_r}{\partial z} \right|_{z=z_{\max}} = 0, \quad \left. \frac{\partial v_z}{\partial z} \right|_{z=z_{\max}} = 0, \quad \left. \frac{D\phi}{Dz} \right|_{z=z_{\max}} = 0 \quad (\phi = T_g, Y_{g,i}) \quad (4.3)$$

#### 4：固体表面上 ( $z=0$ )

表面上における半径方向の速度成分は、壁面 non-slip 条件によりゼロとなる ( $v_r|_{z=0} = 0$ )。軸方向の速度成分は、固体反応により発生する気体成分の質量流束から算出できる ( $v_z|_{z=0} = (\dot{m}/\rho_g)|_{z=0}$ )。固体のエネルギー式は、表面の熱バランス条件が考慮されている形であるため、表面における温度の境界条件は、固体温度そのものに等しい ( $T|_{z=0} = T_s$ )。

混合気の成分濃度に関しては特別な考慮が必要である。表面付近の濃度分布は、1：表面からの噴出速度（対流）、2：固体の反応による消費または生成、3：分子拡散の三要素で決定される。従って、表面での成分濃度は、そこでのバランスを考慮しなくてはならない。以下に求め方を示す [64]。

まず、非常に薄い、空間に静止したコントロールボリューム（体積  $V$ ）を考える。成分の保存方程式の一般形（式 (2.2)）をこのコントロールボリュームで積分すると次のようになる（静止していることに注意）。

$$\frac{d}{dt} \left[ \int_V \rho Y_i dV \right] + \int_A \rho Y_i [\mathbf{v} + \mathbf{V}_i] \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \dot{\omega}_i dV \quad (4.4)$$

$A$  は、非常に薄いコントロールボリュームの厚さ方向に垂直な面における面積を表し、 $\mathbf{n}$  は各面に垂直方向の単位方向ベクトルを表す。ここで、このコントロールボリュームの厚さを無限小に近付けた場合を考える。上式 (4.4) 左辺第二項の面積積分においては、厚さ方向の積分だけを考慮すればよいことになる。今、コントロールボリュームの厚さ方向の中心を通り、厚さを二分する面（中心面：それを  $I$  で表す）を考え、その面から上部を添字 +、下部を添字 - で表すことにすれば、式 (4.4) は次のようになる。

$$\begin{aligned} & \int_{A_I} \{ \rho_+ Y_{i+} [(\mathbf{v}_+ + \mathbf{V}_{i+})] - \rho_- Y_{i-} [(\mathbf{v}_- + \mathbf{V}_{i-})] \} \cdot \mathbf{n}_+ dA \\ & = \lim_{V \rightarrow 0} \left( \int_V \dot{\omega}_i dV - \frac{d}{dt} \left[ \int_V \rho Y_i dV \right] \right) \end{aligned} \quad (4.5)$$



ここで、上式 (4.5) 右辺の体積積分内部の  $V \rightarrow 0$  極限は、デルタ関数を用いて次のように表すことができる。

$$\dot{\omega}_i \rightarrow \dot{\omega}_i^I \delta(y_z - y_{z,I}) \quad (4.6)$$

$$\rho Y_i \rightarrow \rho_i^I \delta(y_z - y_{z,I}) \quad (4.7)$$

$y$  は厚さ方向を表し、 $\dot{\omega}_i^I$  および  $\rho_i^I$  はそれぞれ中心面上での反応速度および密度を表す。つまり式 (4.5) は次のように書ける。

$$\begin{aligned} \int_{A_I} \{ \rho_+ Y_{i+} [(\mathbf{v}_+ + \mathbf{V}_{i+})] - \rho_- Y_{i-} [(\mathbf{v}_- + \mathbf{V}_{i-})] \} \cdot \mathbf{n}_+ dA \\ = \int_{A_I} \dot{\omega}_i^I dA - \frac{d}{dt} \int_{A_I} \rho_i^I dA \end{aligned} \quad (4.8)$$

上式の左辺の物理的意味は、中心面に流入する成分  $i$  と流出するその差を表し、右辺は中心面で成分  $i$  が生成（または消費）される量とそれが時間的に蓄積する量を表す。

ここで、中心面  $I$  を固体表面、 $+$  が気相側、 $-$  が固相側として目的である境界条件を導く。固体内では対流・拡散速度は存在しないので式 (4.8) において  $\mathbf{v}_- = 0$ ,  $\mathbf{V}_{i-} = 0$ 。また表面上での成分  $i$  の蓄積はなく、気相から運ばれた成分は反応による消費のみに使われるため右辺の  $d\rho_i^I/dt$  はゼロとなる。さらに、気相における拡散速度は第2章で述べたように濃度拡散のみで表現され、Fick の法則が適用されるとする。以上より式 (4.8) は次のようになる。

$$(\rho_{g,i} Y_{g,i} v_z)_{z=0} - \left( \rho_g D \frac{dY_{g,i}}{dz} \right)_{z=0} = \dot{\omega}_i^I \Big|_{z=0} \quad (4.9)$$

ここで、左辺第一項における  $(\rho_{g,i} v_z)_{z=0}$  は表面から放出される質量流束を示し、式 (2.48) における  $\dot{m}$  ( $= -\frac{\partial \rho_s}{\partial t} \delta$ ) に等しい。また、固体の反応が式 (2.41) ~ (2.43) で表される場合、上式右辺はそれぞれの成分  $i = ox, f$  について次のようになる。

$$i = ox: \quad \dot{\omega}_{ox}^I \Big|_{z=0} = -(\nu_{ox2} \dot{\omega}_{S2} + \nu_{ox3} \dot{\omega}_{S3}) \delta = (\dot{m}_{ox}) \quad (4.10)$$

$$i = f: \quad \dot{\omega}_f^I \Big|_{z=0} = (\nu_{cg1} \dot{\omega}_{S1} + \nu_{cg2} \dot{\omega}_{S2} + \nu_{cg3} \dot{\omega}_{S3}) \delta = (\dot{m}_f) \quad (4.11)$$

よって成分  $i$  に関する境界条件は次のようになる。

$$(\dot{m} Y_{g,i})_{z=0} - \left( \rho_g D \frac{dY_{g,i}}{dz} \right)_{z=0} = (\dot{m}_i)_{z=0} \quad (4.12)$$

以上により、表面上における境界条件は次のようにまとめられる。

$$\begin{aligned} v_r|_{z=0} = 0, \quad v_z|_{z=0} = (\dot{m}/\rho_g)_{z=0}, \quad T|_{z=0} = T_S \\ (\dot{m} Y_{g,i})_{z=0} - \left( \rho_g D \frac{dY_{g,i}}{dz} \right)_{z=0} = (\dot{m}_i)_{z=0} \\ \text{where } \dot{m}_{ox} = -(\nu_{ox2} \dot{\omega}_{S2} + \nu_{ox3} \dot{\omega}_{S3}) \delta \\ \dot{m}_f = (\nu_{cg1} \dot{\omega}_{S1} + \nu_{cg2} \dot{\omega}_{S2} + \nu_{cg3} \dot{\omega}_{S3}) \delta \end{aligned} \quad (4.13)$$



## 4.2 初期条件

本計算における初期条件は以下に述べる通りである。初期雰囲気は完全に静止状態にある酸素と不活性ガスとの混合気であり、温度は計算領域全体に室温で同様であると考え、また、初期の固体は純固体燃料であるとする。ここで、初期である時刻ゼロ ( $t=0$ ) とは、固体燃料へ外部放射熱の照射を開始した時間、つまり自発着火等の非定常変化を起こす最初のきっかけを与えた瞬間と定義する。以上を式で表現すると次の通りである。

### 気相の初期条件

$$\begin{aligned}v_r|_{t=0} &= v_z|_{t=0} = 0 \\T_g|_{t=0} &= T_\infty \\Y_{g,ox}|_{t=0} &= Y_{ox,\infty}, \quad Y_{g,f}|_{t=0} = 0\end{aligned}\tag{4.14}$$

### 固相の初期条件

$$\begin{aligned}T_s|_{t=0} &= T_\infty \\Y_{S,F}|_{t=0} &= 1, \quad Y_{S,C}|_{t=0} = Y_{S,A}|_{t=0} = 0\end{aligned}\tag{4.15}$$

本計算における計算パラメータは、初期の酸素濃度  $Y_{ox,\infty}$  および重力加速度  $g$  の二つであり、それぞれ 0~1 および 0.0G~1.0G (ただし  $G$  は通常重力加速度; 2.1 節参照) の範囲で変化させた。



## 第5章 着火に至る非定常過程 に与える重力の影響



## 第5章 着火に至る非定常過程に与える重力の影響

### 5.1 緒言

第1章でも述べたように、固体燃料の自発着火には気相における輸送現象と化学反応が重要である。これまでの実験によれば、重力の存在が着火時間等の着火特性に大きな影響を与えることは確認されているものの、その具体的な機構、すなわち重力が輸送過程をどのように変化させて着火特性の変化を引き起こすのかについては十分に理解されていない（例えば [79]）。

本章では、異なる重力場における着火に至るまでの非定常過程に着目し、その結果を観察および吟味することで、重力の作用について大まかに理解することを目的とする。重力が輸送過程に与える影響を大まかに理解することは、本研究の主目的を達成することに強く関係しており、後の章で展開される議論に必要な情報を提供できる。

以下では、まず無重力状態における着火に至るまでの主な非定常過程を観察し、続いて重力を加えた場合のそれを観察することで、無重力場との相違を指摘する。着火特性を用いての詳細な議論は第7章で行うことにして、ここではあくまで重力に依存した現象の相違を把握することを主旨とする。なお、本章を通じて周囲酸素濃度  $Y_{ox,\infty}$  は 0.4 と固定した。このように比較的高い周囲酸素濃度を環境条件としたのは、単に短い計算時間でよいことや、着火から燃焼への移行がはっきりと確認できるという便宜的な理由による。勿論、どの周囲酸素濃度を用いても重力が非定常過程に影響する物理は変わらない。

### 5.2 無重力状態における非定常挙動： $g = 0.0G$

#### 5.2.1 気相における非定常変化（ $g = 0.0G$ ）

##### 二次元分布による非定常挙動の観察（ $g = 0.0G$ ）

図 5.1 に、無重力における気相の二次元物理量分布（(a) 温度  $T_g$ 、(b) 可燃ガスおよび酸素の質量分率（それぞれ  $Y_{g,f}$ 、 $Y_{g,ox}$ ）、(c) 反応速度  $\dot{\omega}_g$  および速度ベク



トル) および固相の物理量 (温度  $T_s$ , 密度  $\rho_s$ , 成分の質量分率  $Y_{s,i}$ ) の半径方向分布 ((d)) の時間変化を示す。(a) 気相の温度および (b) 酸素濃度の二次元分布は等温線および等濃度線で表示されており, 線間隔はそれぞれ  $\Delta T_g = 100K$  および  $\Delta Y_{g,ox} = 0.05$  である。一方, (b) 気相の燃料成分濃度および (c) 反応速度の二次元分布はグレースケールでその大きさが表示されており, 濃い方が大きな値を持つ。それぞれの表示範囲は  $0 \leq Y_{g,f} \leq 0.4$  および  $0 \leq \dot{\omega}_g \leq 5.0 \times 10^{-4} g/(cm^3 s)$  である。反応速度は燃焼の程度を表す一つの指標であり, これが大きいと局所的な発熱速度も大きい。(c) の速度ベクトルにおいて, 矢印の長短は速度の大小を表しており, 図中の  $1cm$  のベクトル長さは速度  $v = 50cm/s$  に相当する。図示された時間範囲は  $t = 0.1s \sim 1.0s$  であり, この時間範囲内において, 加熱された固体燃料の上方での自発着火および火炎形成に至る様子が観察できる。

固体燃料が加熱されると固体の温度が上昇し,  $t = 0.2s$  になると固相の分解反応が起きて気相へガス成分を放出する様子が見られる。この放出ガス成分は, 2.1 節で述べたように可燃性ガスと不燃性ガスから成る混合気であり, 一般に plume と呼ばれる。plume の温度は, 分解時の固体表面温度 (約  $700K$  程度) に等しく, その放出速度は概ね  $15cm/s$  程度である ( $t = 0.2s$ , (c) 参照)。この plume の放出は, 以下の二つの「燃焼に重要な効果」をもたらす。

一つは気相に高温領域を形成することである。plume 自体が速度を持つ高温燃料塊であるので, plume が移動した付近の混合気は高温となる。無重力場では, 存在する弱い噴き出し対流以外に流れを起こす要因がないために, plume 形状, すなわち高温領域は半球よりやや軸方向に伸びた形を保ちつつ広がる様子が見られる ( $t = 0.2s \sim 0.45s$ )。

plume 放出がもたらすもう一つの効果は, 気相内に可燃性予混合気を形成することである。(b) より, plume の放出に伴って, 表面付近に滞在していた酸素成分は外側へ押しやられる様子が確認でき, もはや表面の加熱面付近への酸素供給はなくなる。その一方で, 表面から押しやられた酸素は, 徐々に plume 内部へと分子拡散により浸透し, plume 界面付近において plume 中の可燃ガスとの可燃性予混合気が形成される ( $t = 0.2s \sim 0.45s$ )。

また, (c) によれば, plume 界面付近に形成された予混合気が高温の plume により加熱されて, そこで気相の化学反応を徐々に促進する様子が観察できる ( $t = 0.2s \sim 0.45s$ )。化学反応がもたらす発熱効果は局所の温度を上昇させ, 反応速度自身のアレニウス型の温度依存性により, この温度上昇はさらなる反応の加速をもたらす。このルーチンにより, 最終的には  $t = 0.45s \sim 0.5s$  で見られるような局所的な温度上昇 (熱暴走), いわゆる着火が起こる。なお, この急激な温度上昇は中心軸上の plume の先端付近から開始することがわかる。

反応が盛んになると同時に, plume 界面付近に存在していた予混合気は, 燃焼過程を経てすぐさま消滅し, そこに温度が  $2000K$  を超える領域が現れて, 火炎が



生じたことが示唆される ( $t = 0.6\text{s} \sim 1.0\text{s}$ )。ここで生じた火炎は、内側には燃料ガスのみが、外側には酸素しか存在しないため、拡散火炎である。なお、着火に至るまで、もしくはその後の plume 形状および火炎形状は、NIST による微小重力実験 [21] または解析 [80] で報告されているものと同じと判断できるため、本計算は重力が小さい場合での実際の現象をよく模擬していると考えてよい。

#### 中心軸上における非定常挙動の観察 ( $g = 0.0G$ )

ここでは、中心軸方向の分布だけに着目し、着火に至る非定常変化過程をより詳しく観察する。図 5.2～図 5.3 に、気相における中心軸上の物理量分布（温度  $T_g$ 、主要成分の質量分率  $Y_{g,i}$ 、反応速度  $\dot{\omega}_g$ ）の時間変化を示す。

着火前 ( $t = 0.2\text{s} \sim 0.4\text{s}$ ) では、前述の通り plume 放出に応じた高温領域の拡張と plume 先端部における可燃性予混合気の形成が確認できる。また、plume 内部の温度は、ほぼ表面温度と等しい高温状態を保っており、そこでの酸素は最初に比べて 90% 以上が希釈されていることがわかる。

さらに時間が経過すると ( $t = 0.4\text{s} \sim 0.5\text{s}$ )、plume 先端付近で着火することが確認でき、そこで温度と反応速度が最大となることがわかる。また、 $t = 0.5\text{s}$  においては反応速度は急激に増大し、同時に plume 内部に若干存在していた予混合気に向かって予混合火炎伝播する様子が観察される。

着火後 ( $t = 0.6\text{s}$  以降) では、温度が  $2000\text{K}$  を超える典型的な拡散火炎領域が見られる。なお、そこでの燃料および酸素は消費されて微量しか存在しないために反応速度は小さい。すなわち、そこには燃焼によって生成された高温の既燃ガスが停滞していることを示唆している。

以上が無重力における非定常燃焼過程の一連の気相の変化である。特に着火に至るまでの過程において重要な点をまとめると以下のようなになる。

- 流れ場は分解生成ガスの噴き出し流れのみで形成される。
- 高温の分解生成ガスで満たされた plume は、気相においてやや伸びた半球状となり、その界面付近の球殻領域において可燃性予混合気が形成される。
- 着火以前の plume 内部の温度は、ほぼ表面温度と同じである。
- 自発着火は、plume 先端付近の中心軸上から発生する。
- 着火時間はおよそ  $0.45\text{s}$  付近と判断できる。



### 5.2.2 固相における非定常変化 ( $g = 0.0G$ )

本節では、気相で見られた着火から燃焼までの一連の非定常過程における固体の変化に着目する。図5.4に、固相の (a) 表面温度  $T_s$ 、(b) 密度  $\rho_s$ 、(c) 固体燃料および (d) Char の質量分率 (それぞれ  $Y_{S,F}$ 、 $Y_{S,C}$ ) の半径方向分布の時間変化を示す。

加熱の初期においては、(a) より固体表面の温度は加熱分布 (ガウス分布形状) に従って上昇することがわかる。  $t = 0.2s$  以降、すなわち表面温度が約  $700K$  という固体燃料の分解温度に達すると、固体表面の中心軸付近の温度上昇が急に緩やかになり ((a) 参照)、そこで固体燃料が消費され ((c) 参照)、同時に Char が生成されることがわかる ((d) 参照)。これは、この時刻から固体燃料の分解反応が開始して、気相への plume 放出が生じたことを示唆する。

ここで、上記の「plume 放出」がどの分解反応により支配されているのかを調べる。図5.5に、固体燃料の分解に関わる反応 (2.2節参照) の反応速度 ((a)  $\dot{\omega}_{S,1}$ 、(b)  $\dot{\omega}_{S,2}$ ) の半径方向分布の時間変化を示す。この図より、(a) 熱分解反応速度は (b) 燃料酸化反応速度に比べてオーダーが一つ大きいことが確認できる。すなわち、この段階での固体燃料の分解は「1: 吸熱の熱分解反応」が支配していることがわかる。これは Lee ら [42] もしくは Blackshear ら [81] の結論をはじめとし、多くのセルロース熱分解に関する研究結果と同じである。従って、本研究で採用したモデルに基づく計算は実際の現象を忠実に再現していると考えてよい。

一旦、固体燃料の分解反応が始まると、前述のように吸熱反応が支配的になるため、中心軸付近は外部から常に加熱されているにも関わらず、温度上昇が緩やかになる (図5.4(a) 参照)。また、気相への plume 放出により表面近くの酸素は希釈されるので、表面の中心軸付近での酸化反応 (すなわち「2: 燃料酸化反応」) はさらに起こりにくくなり、もはや重要でなくなる。この様子は、固体燃料のほとんどが消費されるまで (図5.4(c) によれば約  $t = 0.65s$  付近で90%以上消費される) 持続される。なお、その後、吸熱反応は停止するため、図5.4(a) より表面の温度上昇は再び大きくなることが確認できる。また、気相での自発着火の瞬間 ( $t = 0.45s$  付近) においては、固相では吸熱の熱分解反応が行われている最中であり、その時の表面温度は分解温度にほぼ等しい。

最後に固相の反応に関しての補足を加える。前述の通り、plume 放出は熱分解反応によるものがほとんどであることが確認されたが、その反応速度分布は、図5.5(a) によれば加熱領域の端の方が大きい形となる。これは、この反応が一次反応であることに関係している。熱分解反応領域では、表面温度はほとんど等しいため、反応速度分布は固体燃料濃度の分布に影響され得る。

一方で、固体燃料の酸化反応も、図5.5(b) より加熱領域の端付近に集中して起こることがわかる。これは、固体燃料の酸化反応は二次反応であるため、酸素濃度にも影響されることによる。加熱領域の端付近では、分解生成ガスの放出が弱



くなる，すなわち表面での酸素が希釈されにくいために，固体燃料の酸化反応はその領域に集中して現れる。

最後に Char の酸化反応の寄与を考える。図 5.4(d) によれば本計算時間内では Char が全く消費されていないことを考慮すると，この反応は全く起こっておらず，本計算時間内で見られる固体の非定常変化（＝燃焼過程）に対して無関係であるといえる。

以上が無重力での非定常燃焼過程における一連の固相の変化である。特に着火に関連する事項において重要な点をまとめると以下のようなになる。

- 分解生成ガスの発生は，そのほとんどが熱分解反応によるものである。
- 無重力では吸熱反応の進行中において気相での着火が起こり得る。
- 着火時における固相の表面温度は熱分解温度にほぼ等しく，時間的な変動はほとんどない。

## 5.3 弱重力状態における非定常挙動： $g = 0.25G$

### 5.3.1 気相における非定常変化（ $g = 0.25G$ ）

#### 二次元分布による非定常挙動の観察（ $g = 0.25G$ ）

図 5.6 に，重力を通常重力の  $1/4$  だけ考慮した場合，すなわち  $g = 0.25G$  における気相の二次元物理量分布（(a)～(c)）および固相の物理量の半径方向分布（(d)）の時間変化を示す。なお，図の説明は図 5.1 と同じである。

加熱の初期である plume 放出時（すなわち  $t = 0.2s$ ）付近までの各物理量の分布は無重力のそれと目立った違いがない。ところが，一旦 plume が放出されてある程度の時間が経過した  $t = 0.4s$  以降になるとその違いが顕著に現れる。

plume は，前述のように約  $700K$  の熱分解温度を持っているため，重力が存在すると，高温 plume は浮力により上向きの力を受け，その結果として自然対流が誘起される。plume 形状は，この対流の影響を強く受け， $t = 0.4s \sim 0.6s$  で見られるように徐々に軸方向に伸ばされると同時に中間付近からくびれ始め，茸状へと変形する（例えば [82, 83]）。

この流れの効果により，plume 移動がもたらす高温領域は無重力の場合に比べて広くなる。また，plume 放出による表面付近の酸素の希釈，および plume 内部の可燃ガスと周囲酸素との可燃性予混合気の形成に関しては，無重力の場合と同様に起こるが，その混合状態およびその範囲は無重力のそれとは異なる。例えば，plume 形状が細くなることにより，周囲酸素は半径方向から拡散により plume 内部まで深く浸透することができるため，plume 界面および内部での混合状態は良



好になる ( $t = 0.4s$  以降の (b) 参照)。すなわち、可燃性予混合気の存在範囲は無重力のそれと比べて広がる。

また、上記の可燃性予混合気領域内においては、無重力の場合と同様に加熱により徐々に反応が開始されてゆくが ((c) 参照)、この重力値 ( $g = 0.25G$ ) においては、無重力において着火した時間付近 ( $t = 0.45s \sim 0.50s$ ) では急激な温度上昇 (または反応の加速) が見られないことがわかる。しかも、(c) において plume 先端付近に着目すれば、 $t = 0.45s$  までは反応速度が徐々に増加していたものの、その後は逆に減少する傾向を示し、ここでの着火は不成功に終わったことを示唆している [84]。このように、混合が促進されたからといって、それが直ちに着火が起きやすくなることにはならない。その代わり、可燃性予混合気が存在する plume 内部において緩やかに反応が進行し続け、最終的には  $t = 0.7s$  付近において plume 先端ではなく内部で自発着火に至ることが確認できる。着火に関して、中心軸上で起こっていることは無重力の場合と同じであるが、その発生位置は重力によって大きく異なり、重力が大きくなると plume の先端ではなく内部の表面からやや離れた位置になることが特徴的である。このように、着火現象は、重力に依存して変化することが確認できる。

着火後、表面から離れた位置で拡散火炎を形成する ( $t = 0.7s$  以降) ことは、無重力の場合と同じである。ただし、火炎の形成過程において温度の急上昇に伴う浮力の増大により、火炎形状はその影響を受けて変化することが確認できる。

#### 中心軸上における非定常挙動の観察 ( $g = 0.25G$ )

図 5.7～図 5.8 に、 $g = 0.25G$  の場合の気相における中心軸上の物理量分布の時間変化を示し、前節の無重力の場合と同様に一次元的に現象を観察する。なお、図の説明は先の図 5.2～図 5.3 と同じである。

着火前では、無重力の場合と同様に、plume の放出に応じて表面付近の酸素が押し退けられ、まずはその先端部において可燃ガスと周囲酸素との可燃性予混合気の形成が確認される ( $t = 0.2s \sim 0.3s$ )。ところが、時間の経過と共に、前述の通り重力の影響により plume が細くなることで plume 内部への酸素供給が促進されるので、plume 内部における中心軸上の酸素分布は無重力の場合とは異なることが確認できる ( $t = 0.4s \sim 0.6s$ )。無重力の場合、plume 内部は 90% 以上の酸素の希釈が起こっていたものの、 $g = 0.25G$  においては、上記の理由で周囲酸素が内部に供給されて、plume 内部における混合状態は良好となることがわかる。一方で、plume 内部の温度は、表面温度よりも低くなることが確認できる。これは、plume 形状が細くなり plume 内部から外部への拡散 (伝導) による熱放出が大きくなるためであると考えられる。

反応速度分布に関しては、着火前においては低い値を保ちつつ変化していることがわかる ( $t = 0.2s \sim 0.6s$ )。 $t = 0.4s$  では、反応領域は plume 内部に広く分布し、その最大値は最初は plume 先端付近にあり、それまで徐々に増加していたも



の、時間の経過と共に減少に転ずる様子が明確に確認できる。同時に、表面に近い位置でもう一つの反応速度の最大値が見られる。このように、一度目の着火が plume 先端付近で起こる兆しがあるものの、そこでの着火は不成功に終わり、その後、内部から二度目の着火が発生する、という現象が起きていることを再確認できる。

着火時付近 ( $t = 0.6\text{s} \sim 0.75\text{s}$ ) においては、それまで徐々に増加してきた反応速度の最大値が急激に増加し、そこでの温度上昇をもたらすことが確認できる。 $t = 0.7\text{s}$  において現れる反応速度が最大となる位置は、局所の温度が最大となる位置にはほぼ等しく、無重力の場合に着火に至った瞬間と同じ状態と考えることができる。また、一旦激しい反応速度の上昇が認められると、広範囲にわたって形成されている予混合気に向かって上方あるいは下方に予混合火炎伝播する様子が確認できる ( $t = 0.75\text{s}$ )。その後は、無重力の場合と同様に気相において拡散火炎を形成することがわかる ( $t = 0.80\text{s}$  以降)。

以上が  $g = 0.25G$  における非定常燃焼過程の一連の気相の変化である。特に着火に至るまでの過程において重要な点をまとめると以下のようになる。

- 流れ場は分解生成ガスの噴き出し流れと浮力が作る流れの合成である。
- 高温の分解生成ガスで満たされた plume が気相に現れると、重力の存在により plume 形状はくびれを持った茸状となり、半径方向に細く絞られると同時に軸方向に伸ばされる。
- plume に含まれる可燃ガスと入り込む周囲酸素との可燃性予混合気は plume 界面および内部という広範囲にわたって形成される。
- 着火以前の plume 内部の温度は表面温度よりも低くなる。
- plume 先端付近では、一旦着火が起こる兆しがあるが、結局は不成功に終わる。
- 自発着火は、plume 先端ではなく plume 内部の中心軸上から発生する。
- 着火時間はおおよそ  $0.7\text{s}$  付近と判断できる。
- 着火位置は加熱表面ではなく、そこから離れた位置の気相内の局所である。

### 5.3.2 固相における非定常変化 ( $g = 0.25G$ )

図 5.9 に、気相で見られた着火から燃焼までの  $g = 0.25G$  での一連の非定常過程における固体の物理量分布の時間変化を示す。なお、図の説明は図 5.4 と同じである。



着火前に関する各物理量の分布は、温度変化の端付近における成分の分布等に若干の違いが見られる。例えば、加熱領域の端付近においては、温度分布が若干ではあるが角ばっており、そこでの温度上昇が存在することを示している。しかし、起こっている基本的な現象そのものに関して言えば、無重力のそれと同じである。固体の温度変化については、(a)～(d)より、無重力の場合と同様に、吸熱の熱分解反応は $t = 0.65\text{s}$ 付近まで持続され、そこでの温度上昇が抑えられる様子が確認できる。その後は、外部からの加熱を受けているため、徐々に温度が上昇をすることがわかる。この傾向は、例えば Vovelle ら [85] の結果と同じである。また、この重力値においては、気相での自発着火の瞬間 ( $t = 0.7\text{s} \sim 0.75\text{s}$  付近) においては、固相では中心軸付近における熱分解反応がほぼ完了したことを示唆しており、その時の表面温度は分解温度よりも高い値となる。

図 5.10 に、 $g = 0.25G$  における固体燃料の分解に関する反応の反応速度分布の時間変化を示す。図の説明は図 5.5 と同じである。これによれば、無重力の場合と同様に「1: 吸熱の熱分解反応」が支配的であることがわかる。また、その反応速度の分布形状に関して、加熱領域の端付近に最大値をもつことは無重力の場合と同様であるが、その最大値の時間変化は異なり、無重力の場合のように時間の経過と共に減衰しない。これは、後述するが加熱領域の端付近で見られた固体の温度上昇による影響である。この温度上昇による反応速度の上昇により、そこでの固体燃料濃度の減少による分解反応速度の減衰分が補填されたためと考えればよい [85]。

図 5.9(b) において見られる加熱領域の端付近における最大値の時間的増加は、気相の流れ場による影響である。重力が誘起する自然対流により、表面に沿って中心軸に集まる流れが生じるため (図 5.6 参照)、加熱領域の端付近には常に周囲酸素が供給される。そのため、発熱反応である固体燃料の酸化反応がそこで促進され、反応速度を若干ではあるが上昇させ、そこでの温度上昇を促したと考えられる。

最後に Char の酸化反応の寄与を考える。図 5.9(d) によれば本計算時間内では Char が消費されてないことを考慮すると、この反応は無重力の場合と同様に全く起きていないと言える。自然対流によって端付近に酸素が供給されるとはいえ、結局 Char の酸化反応を引き起こすには十分ではないことがわかる。

以上が  $g = 0.25G$  における非定常燃焼過程の一連の固相の変化である。特に着火に関連する事項において重要な点をまとめると以下ようになる。

- 分解ガスの発生は、そのほとんどが熱分解反応によるものである。
- $g = 0.25G$  においては中心軸付近の吸熱反応が終わってから気相での着火が確認できる。
- 着火時における固相の表面温度は熱分解温度よりも高くなる。



## 5.4 通常重力状態における非定常挙動： $g = 1.0G$

### 5.4.1 気相における非定常変化 ( $g = 1.0G$ )

#### 二次元分布による非定常挙動の観察 ( $g = 1.0G$ )

図5.11に、通常重力  $g = 1.0G$  における気相の二次元物理量分布 ((a)~(c)) および固相の物理量の半径方向分布 ((d)) の時間変化を示す。なお、図の説明は図5.1と同じである。

加熱の初期の非定常変化である plume 放出時 (すなわち  $t = 0.2s$ ) 付近までの各物理量の分布は  $g = 0.0G$  または  $g = 0.25G$  の場合のそれと目立った違いがない。ところが、一旦 plume が放出されてある程度の時間が経過すると、前節で述べたように重力がもたらす自然対流の影響 (混合状態、plume 内部の温度が変化) が現れ始めるが、重力値が大きくなるとそれはさらに顕著になる。

(a) および (b) によれば、 $t = 0.2s$  を超えるとすぐさま plume 形状が自然対流の影響を受けて茸状へと変形する様子が確認できる。これは、前節の  $g = 0.25G$  の場合の変化と本質的には変わりがないものの、その程度はより激しくなることがわかる。なお、流れ場は、そのほとんどは自然対流に支配されており、もはや噴き出しによる対流は相対的に非常に小さい。

また、先の「気相における加熱領域の拡大」および「可燃性予混合気の形成」等は、重力の大きさに関わらず同様に起こることが確認できる ( $t = 0.2s$  以降の (a) および (b) 参照)。その後の可燃性混合気の形成に関する変化については、plume 内部の混合状態はさらに良くなる等、基本的には  $g = 0.25G$  の場合と同じ現象ではあるが、その程度は重力が大きい場合の方が大きくなることが確認できる。

化学反応に関しては、重力の大きさに関わらず、最初は plume 界面付近で起こり始めることが認められる ((c),  $t = 0.2s \sim 0.3s$ )。ところが、通常重力の場合も  $g = 0.25G$  の場合と同様に、plume 先端における反応速度は急速に減少し、以後、そこから着火することはない。このように、重力の増加は、着火を促進する働きではないことが再度確認され、plume 先端での着火を妨げることがわかる。

上記のような挙動が一旦落ち付くと、暫くは各物理量はほとんど変化のない状態が持続する ( $t = 0.5s \sim 0.7s$ )。次第に反応速度の上昇が表面付近から徐々に見られるようになり ((c),  $t = 0.7s$  以降参照)、 $t = 0.9s$  付近で著しい反応速度の増大を示し、自発着火に至ったことを確認できる。着火に関して、この重力の場合も、他の重力の場合と同様に「着火は中心軸上で起こる」ことが確認でき、着火位置は  $g = 0.25G$  の場合と同様に、plume 先端ではなく plume 内部であることがわかる。

着火後の変化に関しては、議論するには参考データが不足していることもあるだけでなく、本研究では対象外であるのでここでは記述しない。ただ、着火後 ( $t = 1.0s$  以降) において、温度が  $2000K$  を超える火炎が発生していることが確認できた。なお、着火に至るまで、もしくはその後の plume 形状および火炎形状は、



Mutoh ら [50] もしくは Yoshizawa ら [65] による実験で報告されているものと同じであるため、本計算は重力が存在する場合でも実際の現象をよく模擬していると考えてよい。

#### 中心軸上における非定常挙動の観察 ( $g = 1.0G$ )

図 5.12～図 5.13 に、通常重力における気相の中心軸上の物理量分布の時間変化を示し、前節と同様に一次元的に現象を観察する。なお、図の説明は図 5.2～図 5.3 と同じである。

plume 放出直後では、 $g = 0.0G$  または  $g = 0.25G$  の場合と同様に表面付近の酸素の希釈、plume 先端での可燃性予混合気の形成に加え、重力が大きいと、前述の自然対流の効果が強くなるため、plume 内部への酸素の浸透が多くなり、plume 内部における混合状態はさらに良好になることがわかる。その一方で、plume 内部の温度は、 $g = 0.25G$  の場合と同様に表面から離れるにつれて低下しており、しかも、その低下量は  $g = 0.25G$  の場合に比べて大きくなることがわかる。このことは、重力の存在がもたらす plume 内部からの熱放出効果は重力の増加と共に大きくなることを示している。

着火前の反応速度分布は、 $g = 0.25G$  の場合と比べるとさらに低い値を保ちつつ変化していることがわかる ( $t = 0.2s \sim 0.6s$ )。また、 $g = 0.25G$  の場合に見られたような、表面付近と plume 先端付近の二つの反応速度の最大値はこの重力では確認できず、重力が大きくなると plume 先端での反応はほとんど促進されないことがわかる。一方で、時間の経過と共に、 $t = 0.6s$  付近から表面近くで反応速度の最大値が現れる。

着火時付近 ( $t = 0.94s$  付近) においては、それまで徐々に増加してきた表面付近に存在する反応速度の最大値が急激に増加し、そこでの温度上昇を引き起こすことがわかる。着火以前の時刻に相当する  $t = 0.9s$  において、反応速度の最大を示す位置は温度のそれとは違うものの、反応がさらに激しくなる  $t = 0.94s$  においては両者はほぼ一致するようになることがわかる。従って、 $g = 1.0G$  での着火時間はこの時間付近であることが言える。また、着火後に相当する  $t = 1.0s$  では、気相に広範囲で形成された予混合領域に向う予混合火炎伝播が確認でき、表面から離れた位置 ( $z = 4.0cm$  付近) において温度が  $2000K$  を超える拡散火炎の形成が認められる。

以上が通常重力における非定常燃焼過程の一連の気相の変化である。特に着火に至るまでの過程において重要な点をまとめると以下のようなになる。

- 流れ場は分解生成ガスの噴き出し流れと浮力が作る流れの合成であり、後者が支配的である。



- 高温の分解生成ガスで満たされた plume が気相に現れると、重力の存在により、plume 形状はくびれを持った茸状となり、半径方向に細く絞られる一方で、軸方向に広く伸ばされる。この効果は重力が大きい程大きい。
- plume に含まれる可燃ガスと入り込む周囲酸素との可燃性予混合気は plume 界面および内部という広範囲にわたって形成される。なお、この程度は重力が大きい程大きい。
- 着火以前の plume 内部の温度は表面温度よりも低くなる。なお、この現象は重力が大きい程顕著に現れる。
- 自発着火は、plume 先端ではなく、 $g = 0.25G$  の場合と同様に plume 内部の中心軸上から発生する。
- 着火時間はおおよそ 0.94s 付近と判断できる。
- 着火位置は表面に極近い位置である。

#### 5.4.2 固相における非定常変化 ( $g = 1.0G$ )

図 5.14 に、気相で見られた着火から燃焼までの  $g = 1.0G$  での一連の非定常過程における固体の物理量の時間変化に着目する。なお、図の説明は図 5.4 と同じである。

着火前に関する各物理量の分布は、 $g = 0.25G$  の場合にも見られたような温度変化の端付近における成分の分布等に若干のゆらぎが見られるが、起こっている基本的な現象は重力に依存せず同じであることが確認できる。また、通常重力においては、 $g = 0.25G$  の場合と同様に気相で見られた自発着火 ( $t = 0.9s$  付近) は、固相の中心部における熱分解反応がほとんど停止した後に起こることがわかる。図 5.15 に、固体燃料の分解に関する反応の反応速度分布の時間変化を示す。なお、図の説明は図 5.5 と同じである。この図で見られる変化は、本質的に  $g = 0.25G$  の場合と同じであり、重力が大きい場合の特徴的な現象は特に見られない。

以上が通常重力における非定常燃焼過程の一連の固相の変化である。特に着火に関わる関連事項において重要な点をまとめると以下のようなになる。

- 分解ガスの発生は、そのほとんどが熱分解反応によるものである。
- 通常重力場においては中心軸付近の吸熱反応が終わってから気相での着火が確認できる。
- 着火時における固相の表面温度は熱分解温度よりもさらに高くなる。



## 5.5 各重力場での着火に至るまでの非定常挙動の比較

本節では、これまでに本章で得られた各重力 ( $g = 0.0G, 0.25G, 1.0G$ ) における気相および固相の物理量の着火に至るまでの非定常変化を比較および検討することにより、重力が与える影響に関する指摘を行う。

### 5.5.1 重力が気相の非定常変化にもたらす影響

図 5.1, 図 5.6 および図 5.11 からわかるように,  $t = 0.2s$  までの plume 放出直後までに相当する加熱の初期段階においては, 重力の影響はほとんど見られない。重力による違いが大きく現れるのは plume 放出後に限られ ( $t = 0.3s$  以降), それは自然対流による plume 形状の変化を通じて現れる。

#### plume 形状

無重力 (図 5.1) の場合, 前述の通り対流は弱い噴き出し流れのみであるため, plume 形状はやや縦に伸びた半球状となる。一方, 重力が存在すると (図 5.6 および図 5.11), 表面を沿って中心軸に集まるように形成される自然対流により, plume 形状は茸状となり, 半径方向に細く絞られ, 軸方向にさらに伸ばされる。なお, その程度は重力の増加に伴って大きくなる。

#### 可燃性予混合気の存在範囲

plume 放出以降における成分濃度および反応速度分布に着目すると, 無重力 (図 5.1) の場合, plume 界面付近, すなわちやや伸びた半球殻領域に可燃性予混合気が存在し, そこに限り反応が促進されることがわかる。一方, 重力が存在すると (図 5.6 および図 5.11), その混合領域は plume 界面だけではなく, plume 内部にまで形成される。これは, 自然対流により plume が細くなることで, plume 内部へ酸素が拡散によって浸透することによる。なお, この混合の程度は重力の増加に伴って良好となる。また, 混合領域の増加するため, 広範囲で反応が可能となる。

#### plume 内部の温度

各重力における中心軸上の温度分布の時間変化 (図 5.2~5.3, 図 5.7~5.8, 図 5.12~5.13) に着目すれば, plume 内部の温度は, 重力が増加するのに伴って, 徐々に表面温度と比較して低くなる。なお, この温度低下の程度は重力の増加に伴って大きくなる。これは, 前述の酸素濃度の流入度合と逆の傾向を示しており, plume が細くなることによる外への放熱効果の増大によるものである。



## 着火の瞬間

無重力の場合、着火は plume の先端付近から起こり、その時刻は比較的早い（図 5.1,  $t = 0.45\text{s}$  付近）。その一方で、重力が存在すると、着火は中心軸から発生するものの着火位置は plume 先端ではなく内部に移り、着火時間は重力の増加に伴って長くなる（図 5.6,  $t = 0.7\text{s}$  および図 5.11,  $t = 0.94\text{s}$  付近）。また、着火位置は重力によって異なり、重力が大きい場合には徐々に表面へと近付くことが確認できる（図 5.6 および図 5.11 参照）。なお、 $g = 0.25G$  の場合では、 $t = 0.4\text{s} \sim 0.5\text{s}$  にかけて、一旦 plume の先端付近で活発となった反応が時間と共に減衰するという、興味深い特徴的な現象が存在することを示した。

以上をまとめると次のようになる。

- 重力の増加に伴って、流れ場は噴き出し流れから自然対流が主なものになる。
- 重力の増加に伴って、plume 形状は半径方向に細く、軸方向に長くなる。
- 着火前の可燃性予混合領域は重力が大きい程広く、その混合状態は良好になる。
- 着火前の plume 内部の温度は、重力が増加するに従って低下する。
- 着火時間は重力の増加に伴って長くなる。
- 着火は、いずれの重力でも中心軸上で起こるが、その位置は重力によって様々に変化する。特に大きい重力では着火位置は表面付近に限られる。
- 重力が大きくなると、一旦 plume 先端で着火しそうになるが、それが不成功となる状況が存在する。
- 重力に依存して二種類の着火形態（plume 先端もしくは内部で着火）が存在する（なお、以降ではそれぞれ「先端着火」および「内部着火」と呼ぶ）。

### 5.5.2 重力が固相の非定常変化にもたらす影響

まず、図 5.5, 図 5.10 および図 5.15 によれば、重力の大きさに無関係に、固体燃料の分解には吸熱の熱分解反応が支配的であることがわかる。この分解過程においては、図 5.4, 図 5.9 および図 5.14 により、吸熱効果がもたらす変化等、固相の変化の基本的なところも重力に無関係であることがわかる。ただし、中心軸付近に着目すれば、熱分解反応が終了した以降の表面温度の上昇率に若干の変化がみられる。図 5.16 に、中心軸上の表面温度の時間変化を各重力別に示す。この図によれば、温度の上昇率は重力が大きい程、若干ではあるが大きくなることがわ



かる。なお、図中にはそれぞれの重力におけるおおよその着火時間を白丸で示しており、着火時における表面温度は一定ではないことが明らかである。

また、固相の反応速度に関しては、微かではあるが加熱領域の端付近において重力による違いが確認された（図 5.5, 図 5.10 および図 5.15 参照）。その理由は、主に気相における自然対流による加熱領域の端（すなわち分解領域の端）付近への酸素供給に起因するものである。しかし、それらの変化は非常に小さく、しかも気相の着火位置から離れているため、この現象による着火への影響は無視できる程小さいと考えられる。

以上をまとめると次のようになる。

- 分解生成ガスの発生は、重力値に依らずそのほとんどが熱分解反応によるものである。
- 各重力における着火時の固体の表面温度は一定ではない。

## 5.6 結言

本節では、異なる重力値 ( $g = 0.0G, 0.25G, 1.0G$ ) における加熱される固体燃料の着火から火炎形成までの非定常変化を調べ、それらを観察および比較検討することによって、特に重力が着火に至るまでの非定常過程に与える影響を調べた。その結果、重力の影響は、それが引き起こす自然対流を介して行われ、その自然対流が気相内での熱および物質の移動を変化させることにより着火そのものに影響を与えることが明らかにされた。なお、着火に至る非定常挙動に与える具体的な影響は前節にまとめた通りであり、同時に重力に依存した現象を指摘することができた。

ただし、着火の詳細等は、その物理定義が導入されていないため、ここで論じることとはできない。正確に着火の影響を求めるためには、適切な着火の定義を導入して定量的な評価を行うことが必要である。



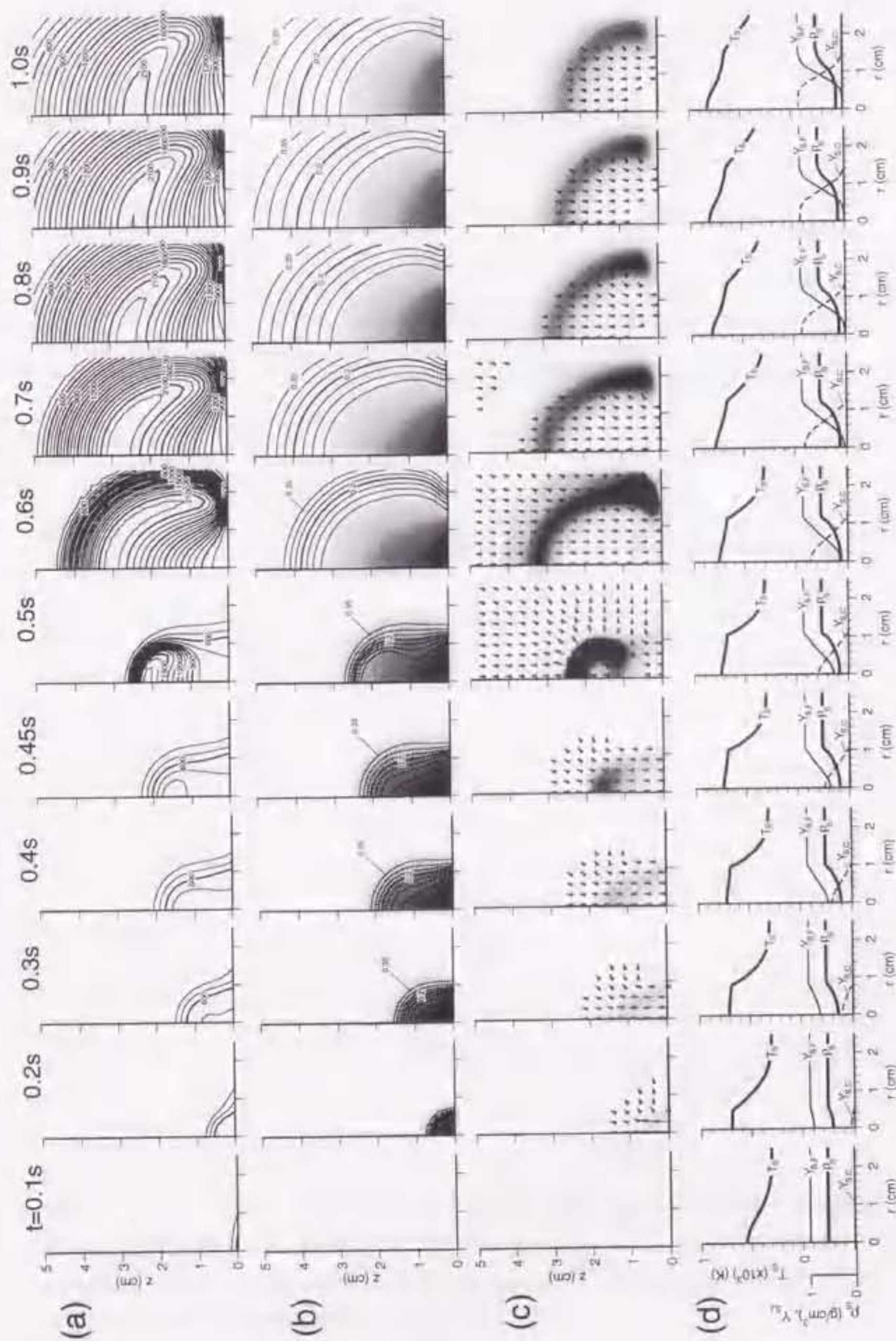


Figure 5.1: Time-sequence of 2-D variables distributions in gas-phase (a)-(c), and (d) radial distributions of solid-phase variables for  $g=0.0G$ ; (a) temperature contours ( $T_g$  [K],  $\Delta T_g=100K$ ), (b) species mass fraction ( $Y_{g,ox}$ ,  $\Delta Y_{g,ox}=0.05$ ), patterns: gasified fuel ( $\omega_g$ ,  $0.0\sim 0.4$ ), (c) reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [g/cm<sup>3</sup>s],  $0.0\sim 5.0\times 10^{-4}$ ), (d) radial distributions of solid surface temperature ( $T_s$  [K]), density ( $\rho_s$  [g/cm<sup>3</sup>]), species ( $Y_{s,i}$  ( $i=F$ ; virgin solid fuel,  $i=C$ ; Char)). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



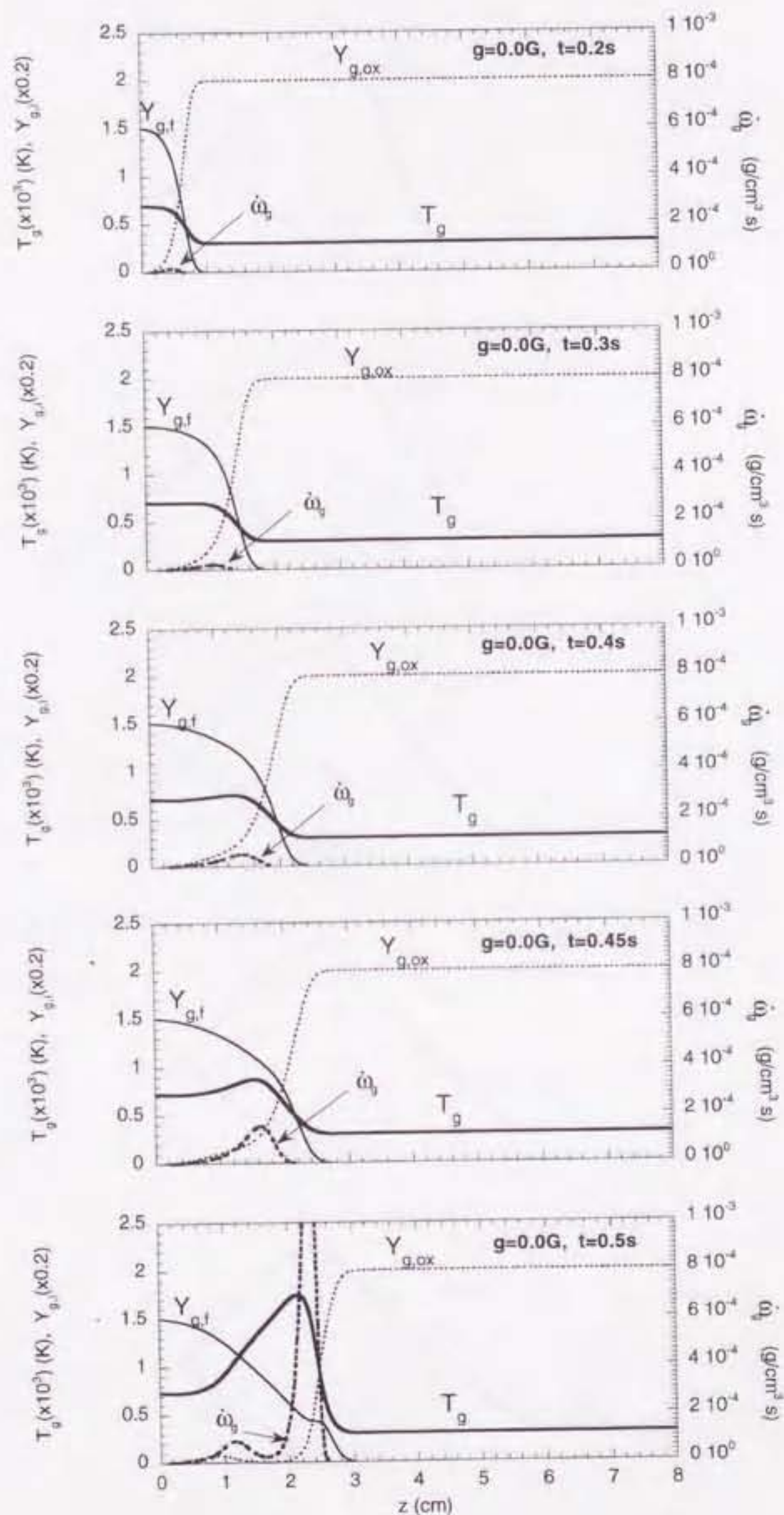


Figure 5.2: Time-variation of variables distributions in gas-phase on center axis for  $g = 0.0G$ ; temperature ( $T_g$  [K]), species (oxygen:  $Y_{g,ox}$  and gasified fuel:  $Y_{g,f}$ ), reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [ $g/(cm^3s)$ ]);  $t = 0.2s \sim 0.5s$ . Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



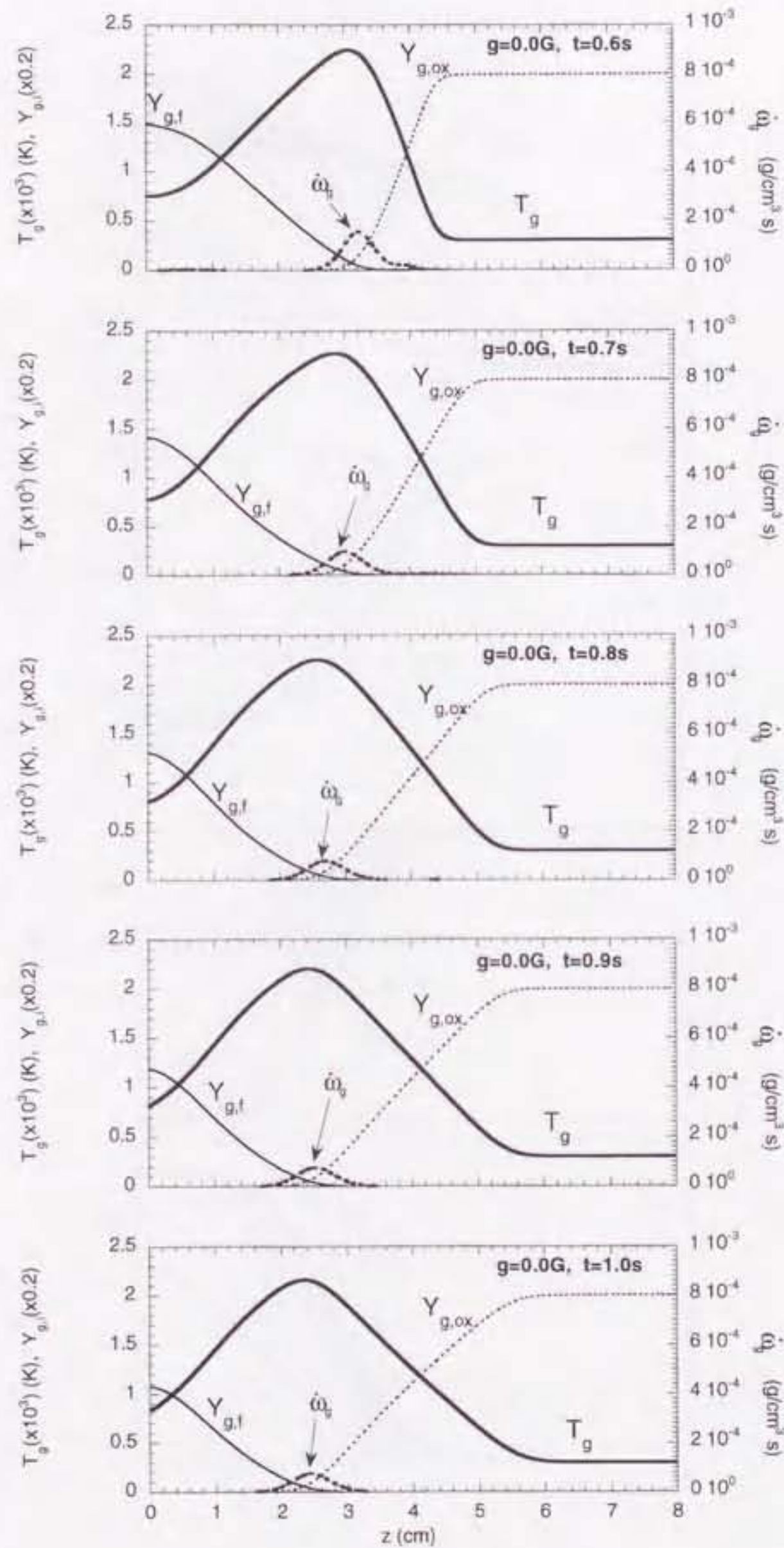


Figure 5.3: Time-variation of variables distributions in gas-phase on center axis for  $g = 0.0G$ ; temperature ( $T_g$  [K]), species (oxygen:  $Y_{g,ox}$  and gasified fuel:  $Y_{g,f}$ ), reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [ $g/(cm^3 s)$ ]);  $t = 0.6s \sim 1.0s$ . Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



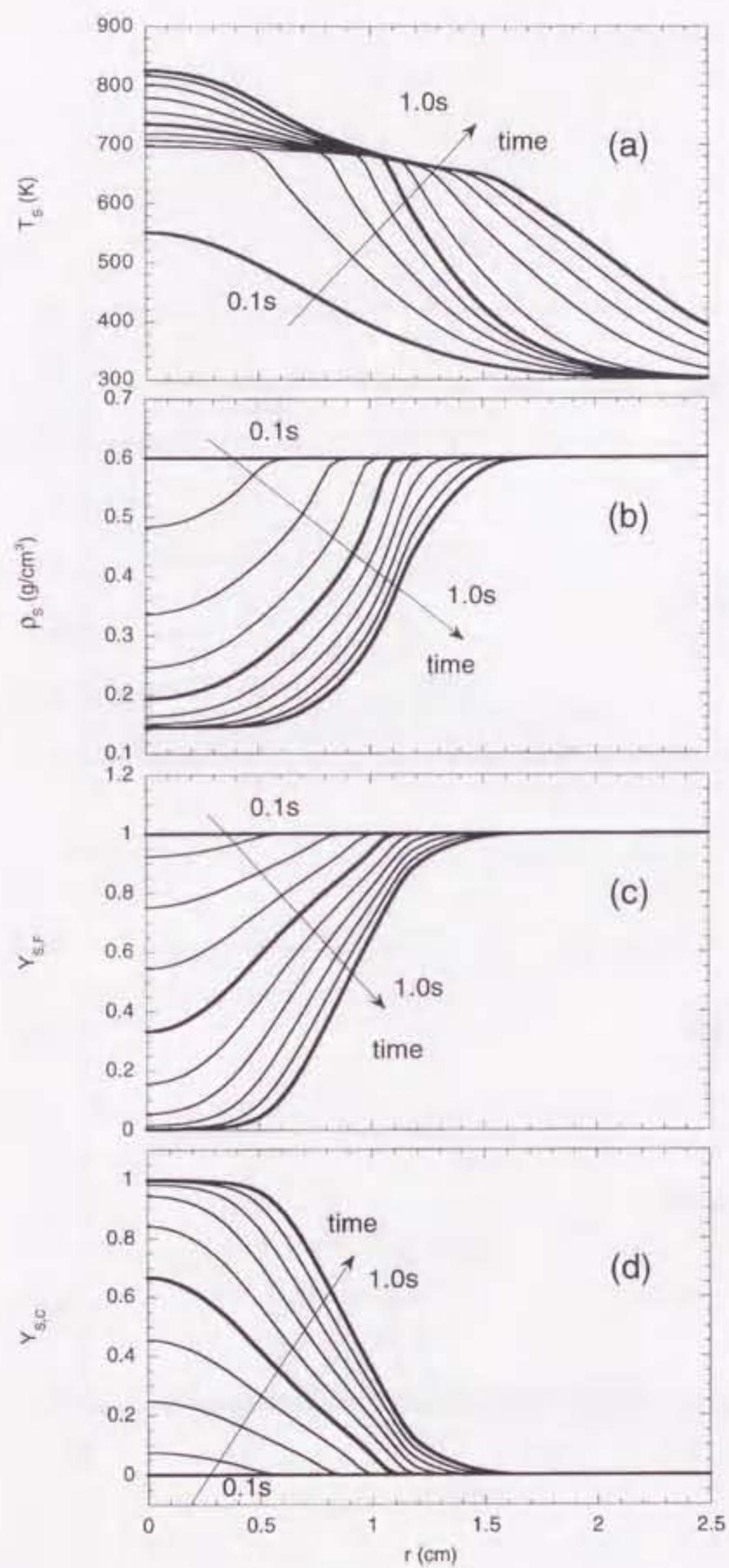


Figure 5.4: Time-histories of the variable distributions in solid-phase for  $g = 0.0G$ ; (a) surface temperature ( $T_s$  [K]), (b) solid density ( $\rho_s$  [g/cm<sup>3</sup>]), (c) mass fraction of virgin solid fuel ( $Y_{s,F}$ ), (d) mass fraction of char ( $Y_{s,C}$ ). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



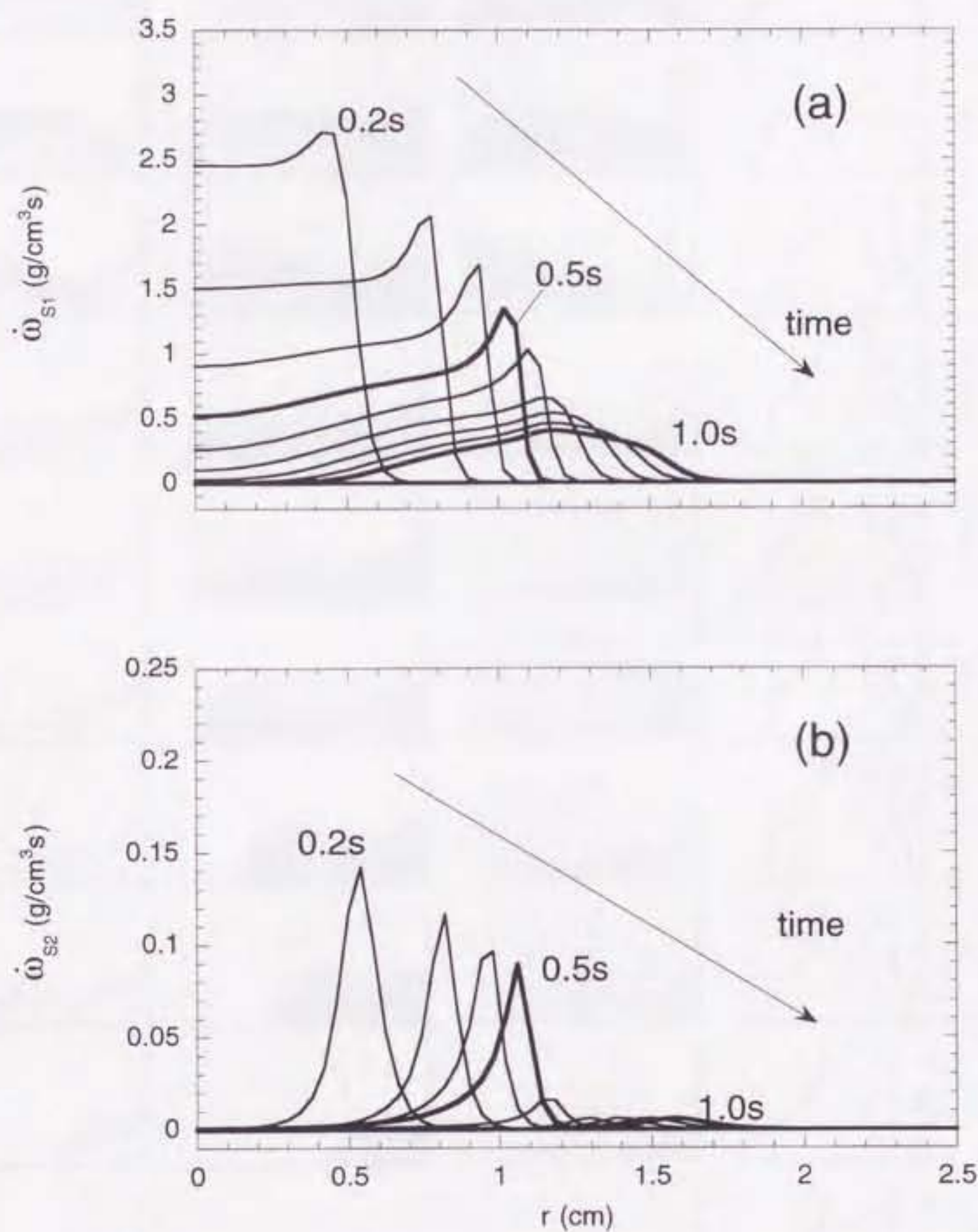


Figure 5.5: Time-histories of the decomposed reactions of virgin solid fuel in solid-phase for  $g = 0.0G$ ; (a) rate of pyrolysis reaction of virgin solid fuel ( $\dot{\omega}_{s1}$  [g/(cm³s)]), (b) rate of oxidative reaction of virgin solid fuel ( $\dot{\omega}_{s1}$  [g/(cm³s)]). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



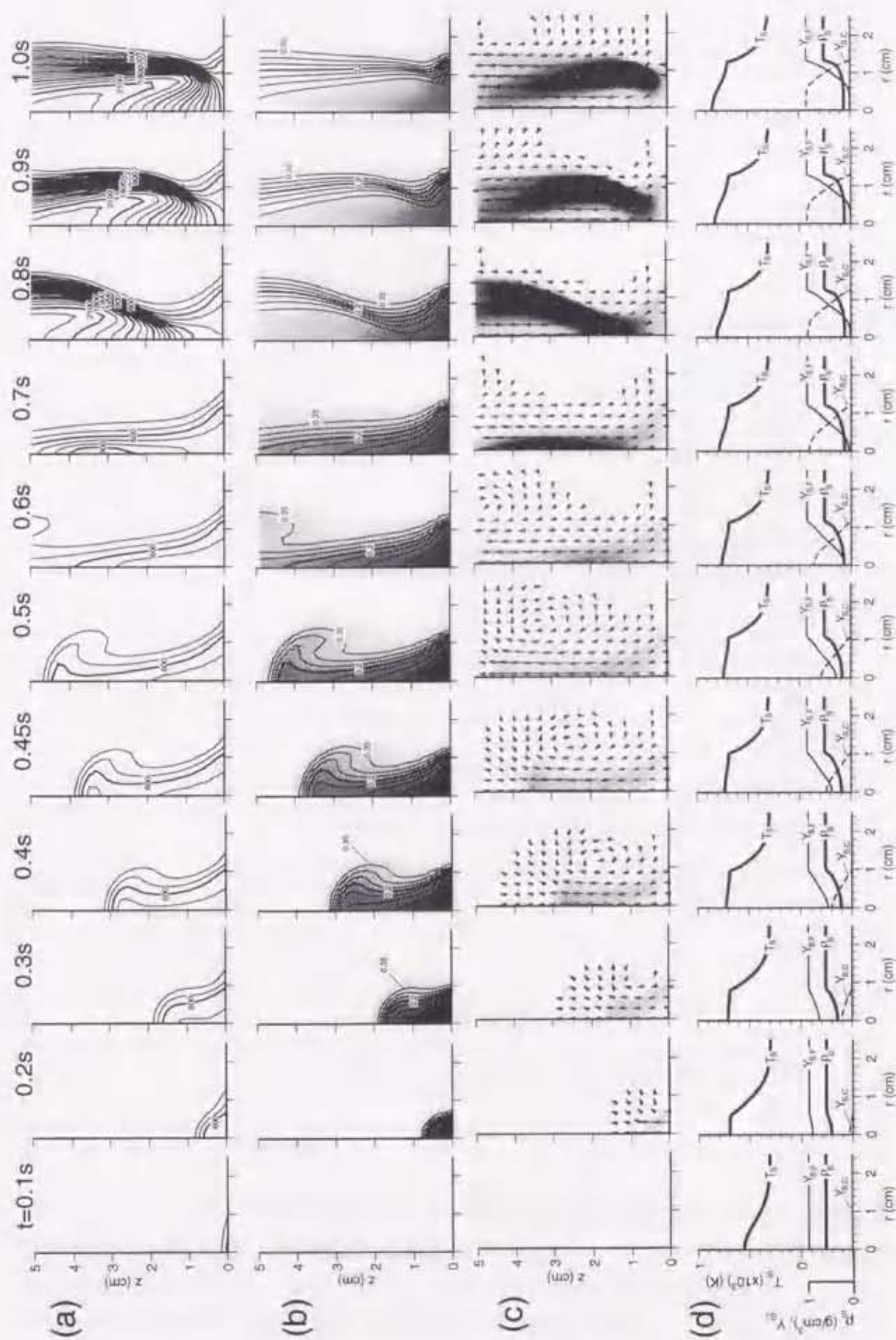


Figure 5.6: Time-sequence of 2-D variables distributions in gas-phase ((a)-(c)), and (d) radial distributions of solid-phase variables for  $g=0.25G$ ; (a) temperature contours ( $T_g$  [K],  $\Delta T_g=100K$ ), (b) species mass fraction (contours: oxygen ( $Y_{g,ox}$ ,  $\Delta Y_{g,ox}=0.05$ ), patterns: gasified fuel ( $Y_{g,f}$ ,  $0.0-0.4$ )), (c) reaction rate ( $\dot{w}_g$  [g/cm<sup>3</sup>s],  $0.0-5.0 \times 10^{-4}$ ), (d) radial distributions of solid surface temperature ( $T_s$  [K]), density ( $\rho_s$  [g/cm<sup>3</sup>]), species ( $Y_{s,i}$  ( $i=F$ ; virgin solid fuel,  $i=C$ ; Char)). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



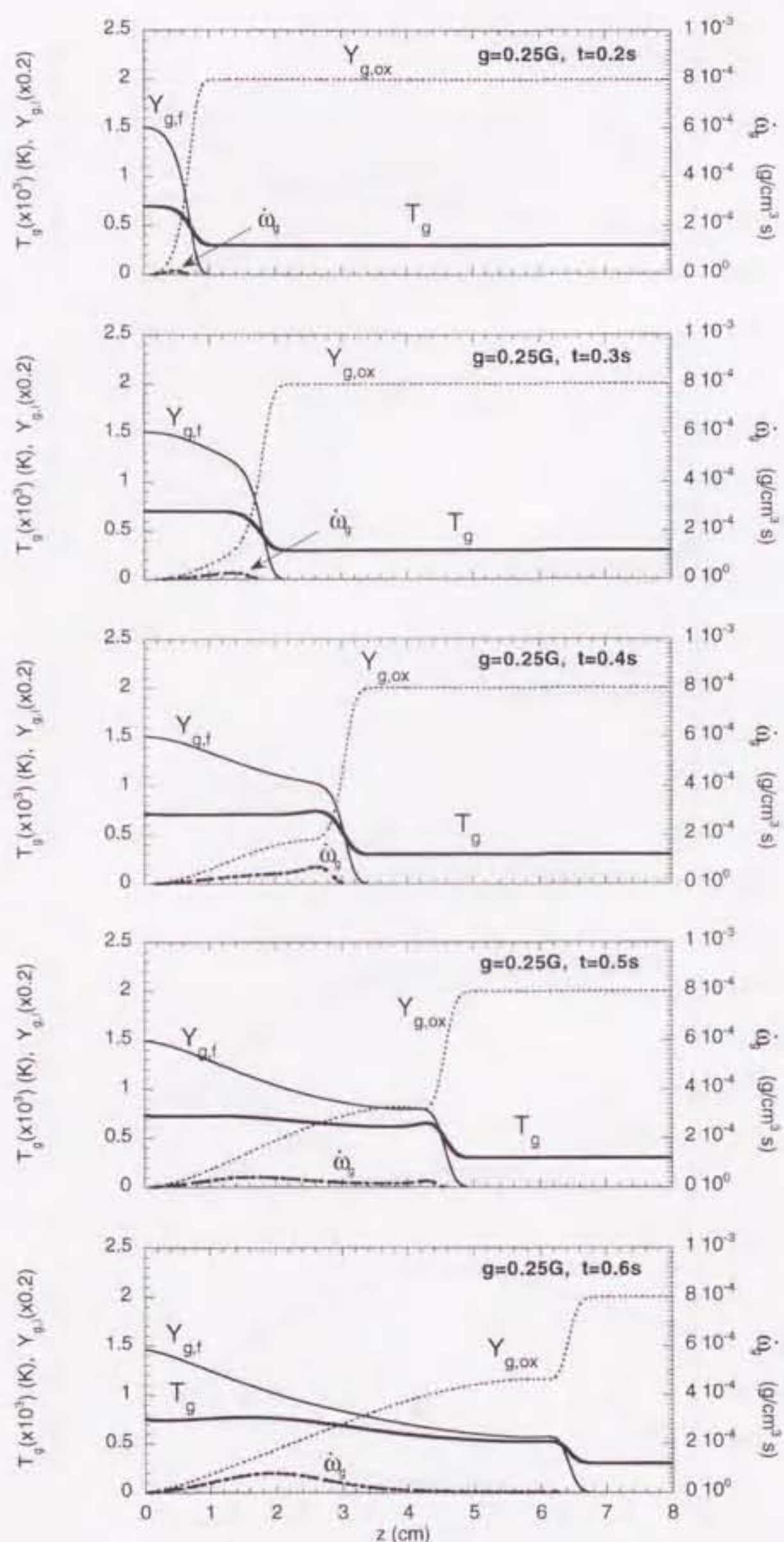


Figure 5.7: Time-variation of variables distributions in gas-phase on center axis for  $g = 0.25G$ ; temperature ( $T_g$  [K]), species (oxygen:  $Y_{g,ox}$  and gasified fuel:  $Y_{g,f}$ ), reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [ $g/(cm^3s)$ ]) ;  $t = 0.2s \sim 0.6s$ . Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



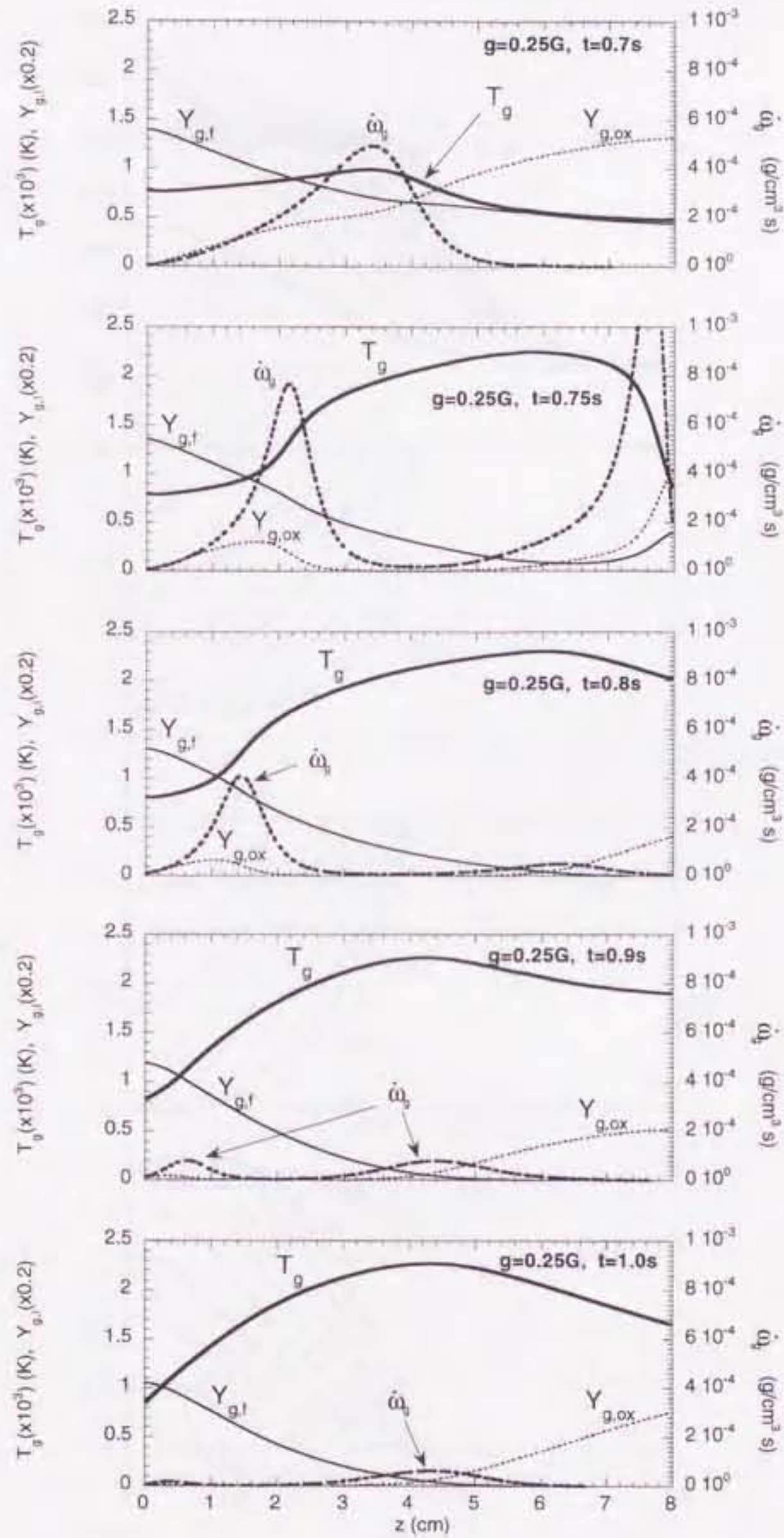


Figure 5.8: Time-variation of variables distributions in gas-phase on center axis for  $g = 0.25G$ ; temperature ( $T_g$  [K]), species (oxygen:  $Y_{g,ox}$  and gasified fuel:  $Y_{g,f}$ ), reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [ $g/(cm^3 s)$ ]);  $t = 0.7s \sim 1.0s$ . Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



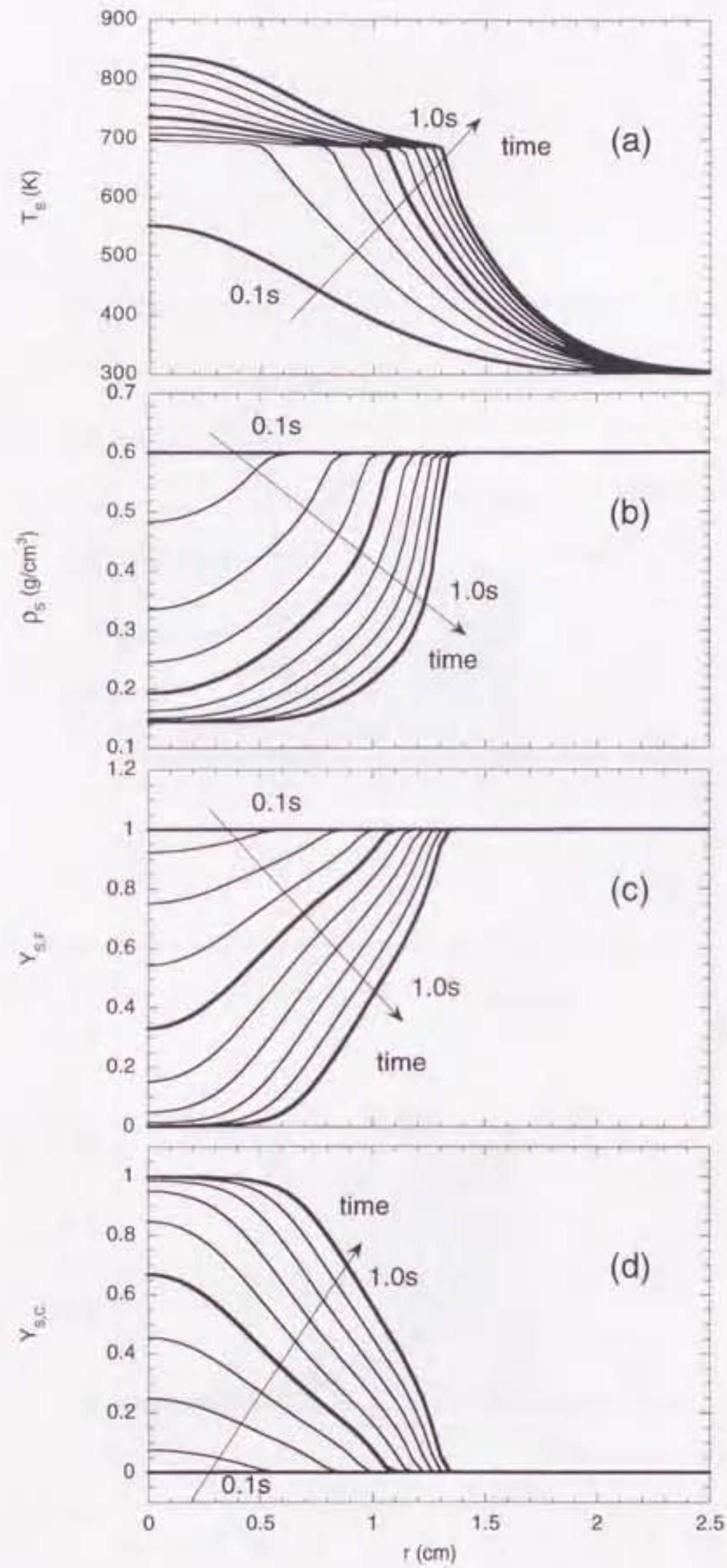


Figure 5.9: Time-histories of the variable distributions in solid-phase for  $g = 0.25G$ ; (a) surface temperature ( $T_s$  [K]), (b) solid density ( $\rho_s$  [g/cm<sup>3</sup>]), (c) mass fraction of virgin solid fuel ( $Y_{s,F}$ ), (d) mass fraction of char ( $Y_{s,C}$ ). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



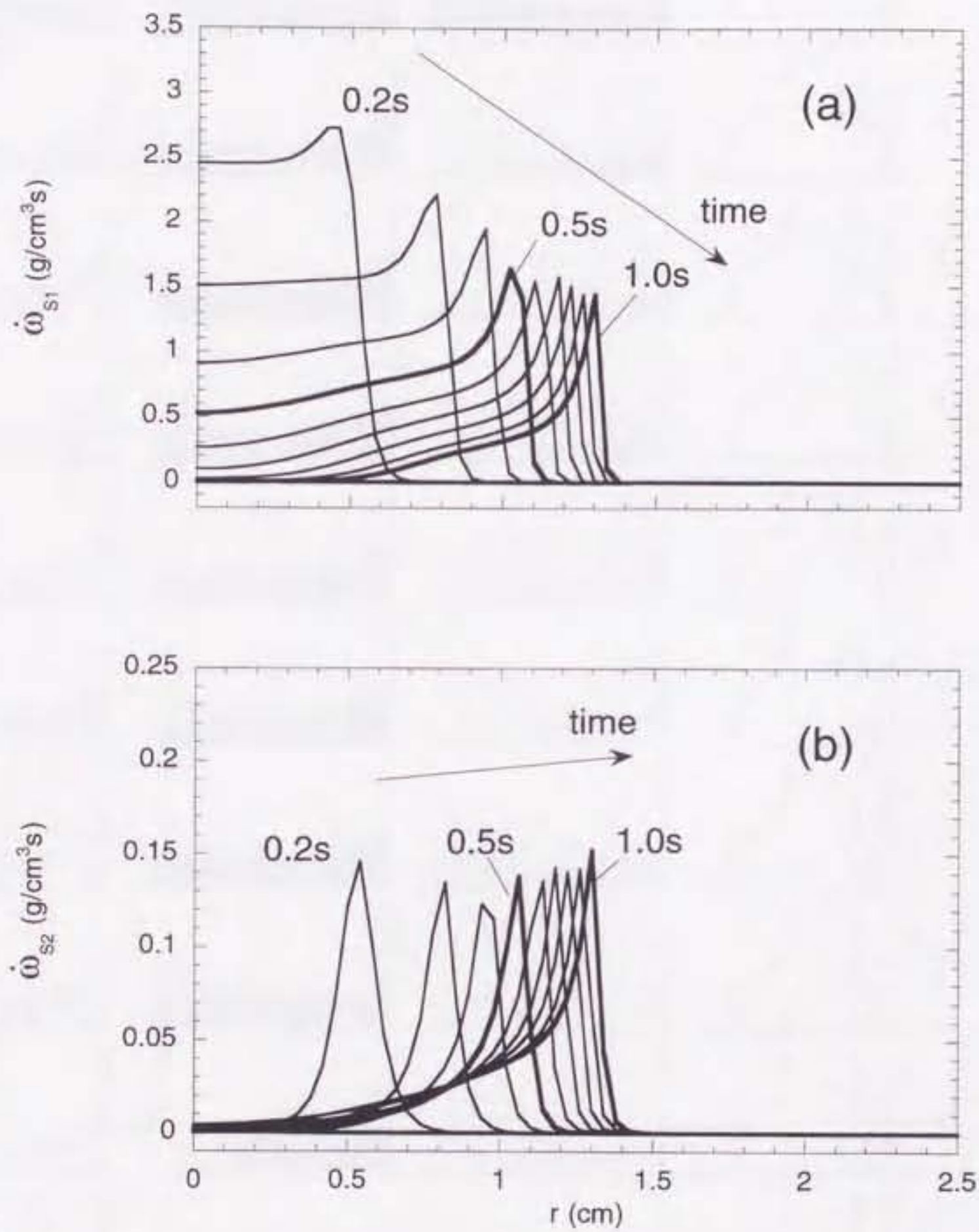


Figure 5.10: Time-histories of the decomposed reactions of virgin solid fuel in solid-phase for  $g = 0.25G$ ; (a) rate of pyrolysis reaction of virgin solid fuel ( $\dot{\omega}_{S1}$  [g/(cm³s)] ), (b) rate of oxidative reaction of virgin solid fuel ( $\dot{\omega}_{S1}$  [g/(cm³s)] ). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



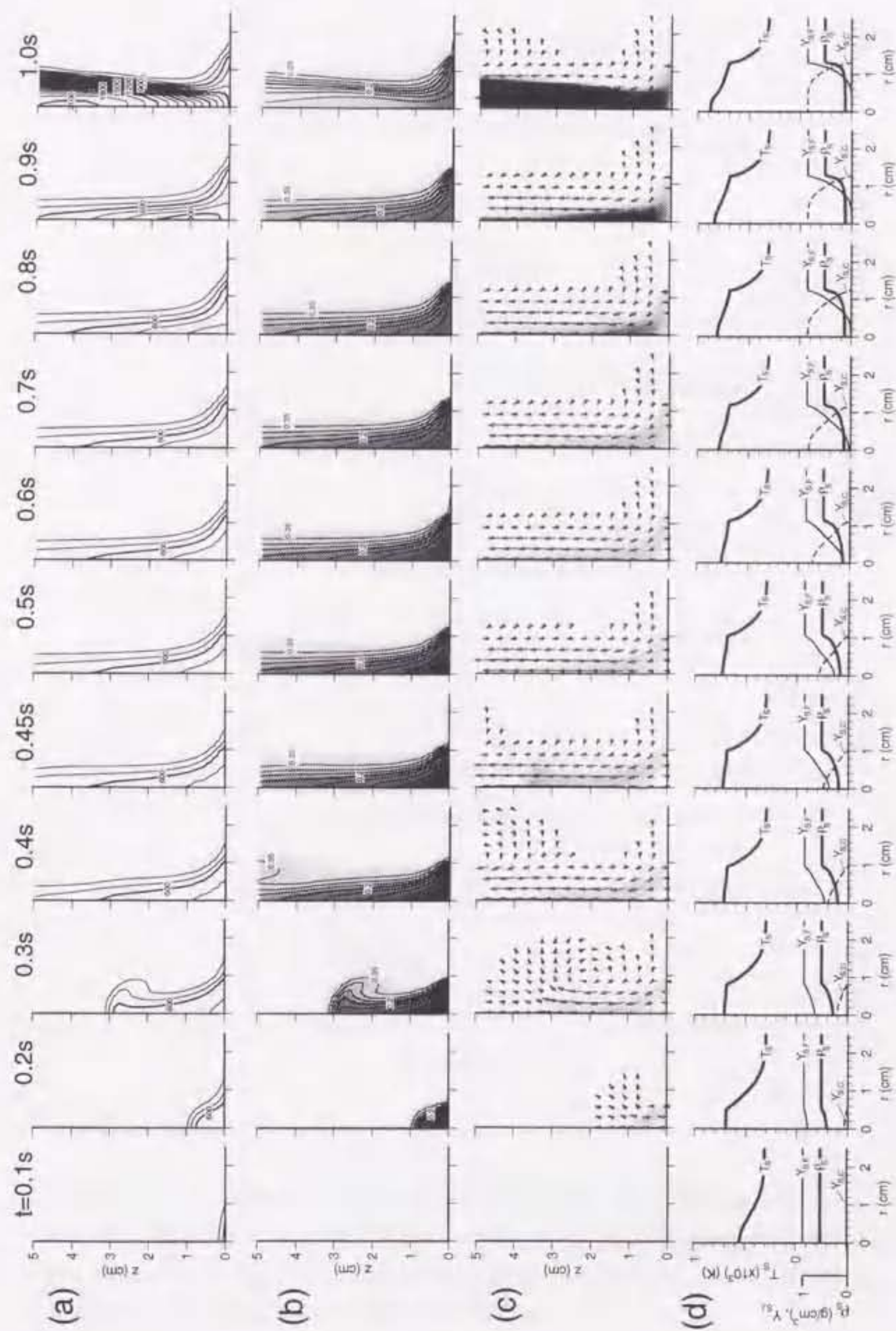


Figure 5.11: Time-sequence of 2-D variables distributions in gas-phase (a)-(c), and (d) radial distributions of solid-phase variables for  $g=1.0G$ ; (a) temperature contours ( $T_g$  [K],  $\Delta T_g=100K$ ), (b) species mass fraction (oxygen ( $Y_{g,ox}$ ,  $\Delta Y_{g,ox}=0.05$ ), patterns: gasified fuel ( $Y_{g,f}$ ,  $0.0\sim 0.4$ )), (c) reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [g/cm<sup>3</sup>s],  $0.0\sim 5.0\times 10^{-4}$ ), (d) radial distributions of solid surface temperature ( $T_s$  [K]), density ( $\rho_s$  [g/cm<sup>3</sup>]), species ( $Y_{s,i}$  ( $i=F$ ; virgin solid fuel,  $i=C$ ; Char)). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



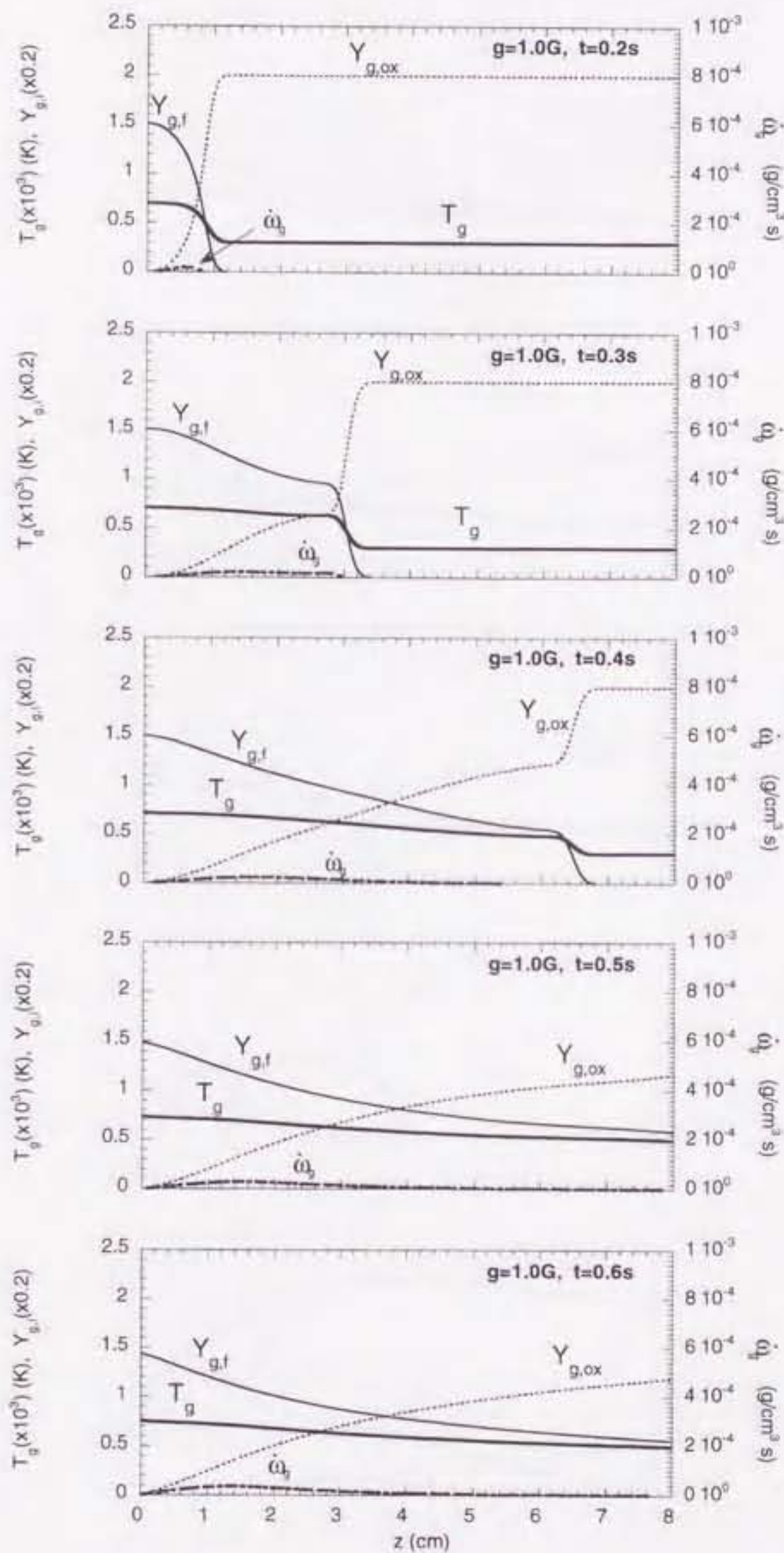


Figure 5.12: Time-variation of variables distributions in gas-phase on center axis for  $g = 1.0G$ ; temperature ( $T_g$  [K]), species (oxygen:  $Y_{g,ox}$  and gasified fuel:  $Y_{g,f}$ ), reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [ $g/(cm^3s)$ ]) ;  $t = 0.2s \sim 0.6s$ . Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



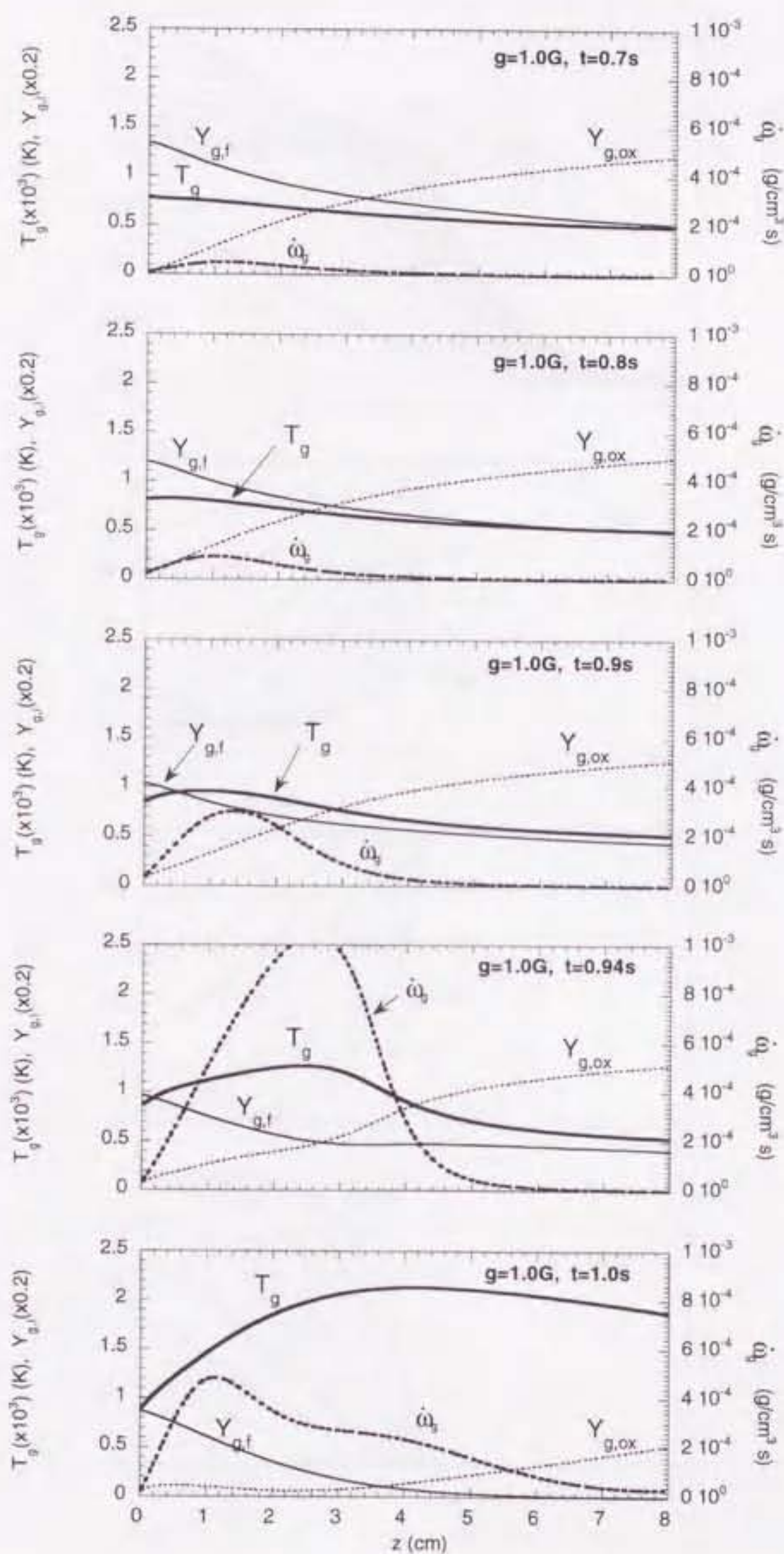


Figure 5.13: Time-variation of variables distributions in gas-phase on center axis for  $g = 1.0G$ ; temperature ( $T_g [K]$ ), species (oxygen:  $Y_{g,ox}$  and gasified fuel:  $Y_{g,f}$ ), reaction rate ( $\dot{\omega}_g [g/(cm^3s)]$ );  $t = 0.7s \sim 1.0s$ . Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



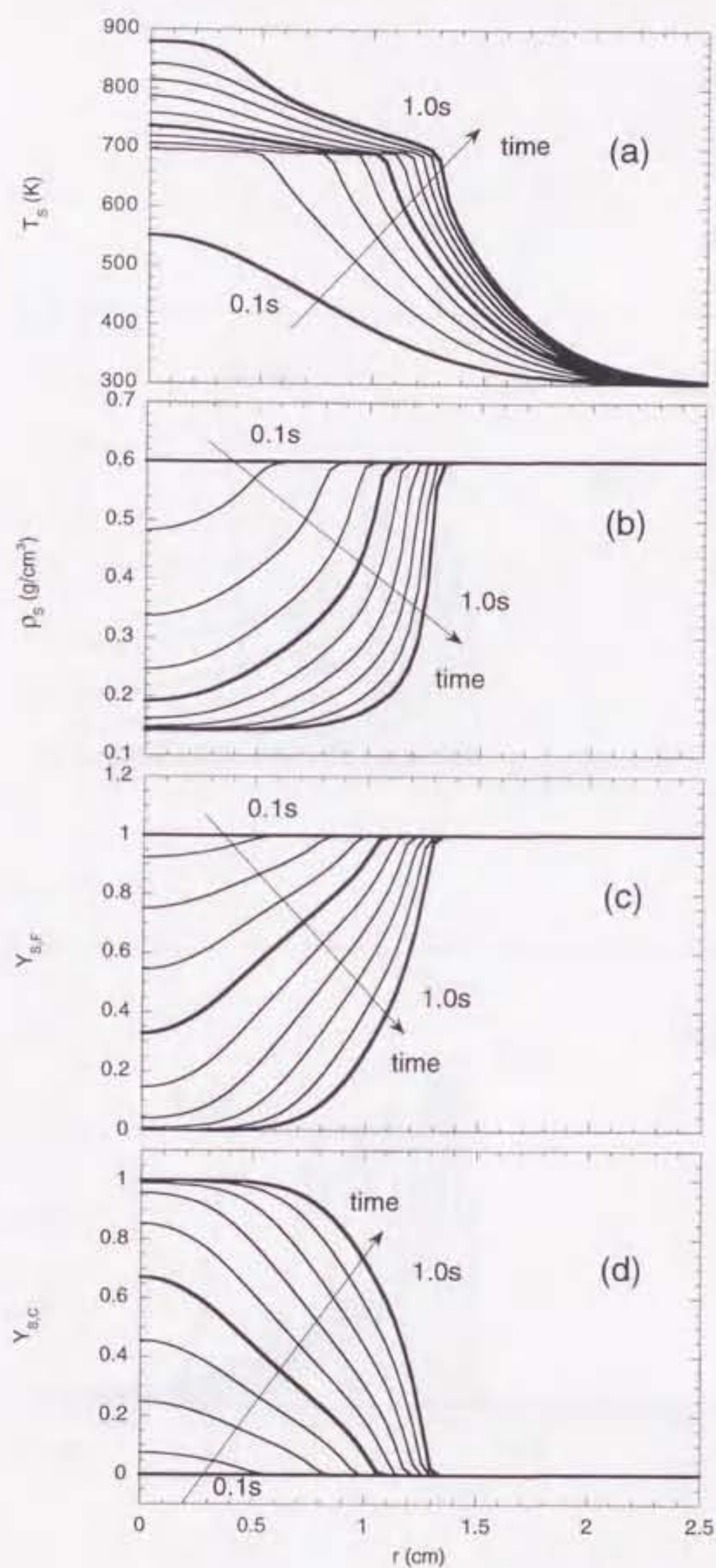


Figure 5.14: Time-histories of the variable distributions in solid-phase for  $g = 1.0G$ ; (a) surface temperature ( $T_s$  [K]), (b) solid density ( $\rho_s$  [g/cm<sup>3</sup>]), (c) mass fraction of virgin solid fuel ( $Y_{s,F}$ ), (d) mass fraction of char ( $Y_{s,C}$ ). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



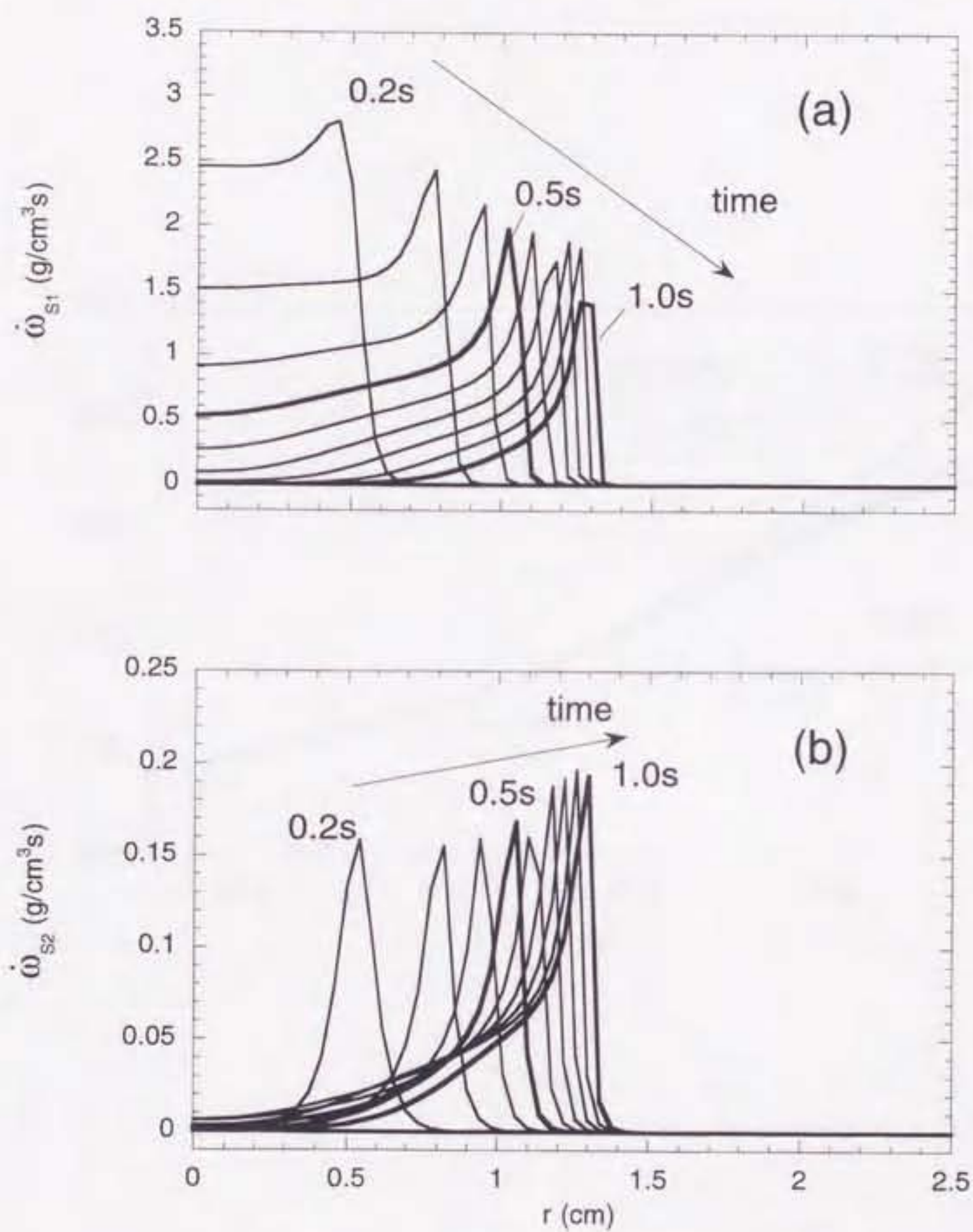


Figure 5.15: Time-histories of the decomposed reactions of virgin solid fuel in solid-phase for  $g = 1.0G$ ; (a) rate of pyrolysis reaction of virgin solid fuel ( $\dot{\omega}_{s1}$  [g/(cm<sup>3</sup>s)] ), (b) rate of oxidative reaction of virgin solid fuel ( $\dot{\omega}_{s1}$  [g/(cm<sup>3</sup>s)] ). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



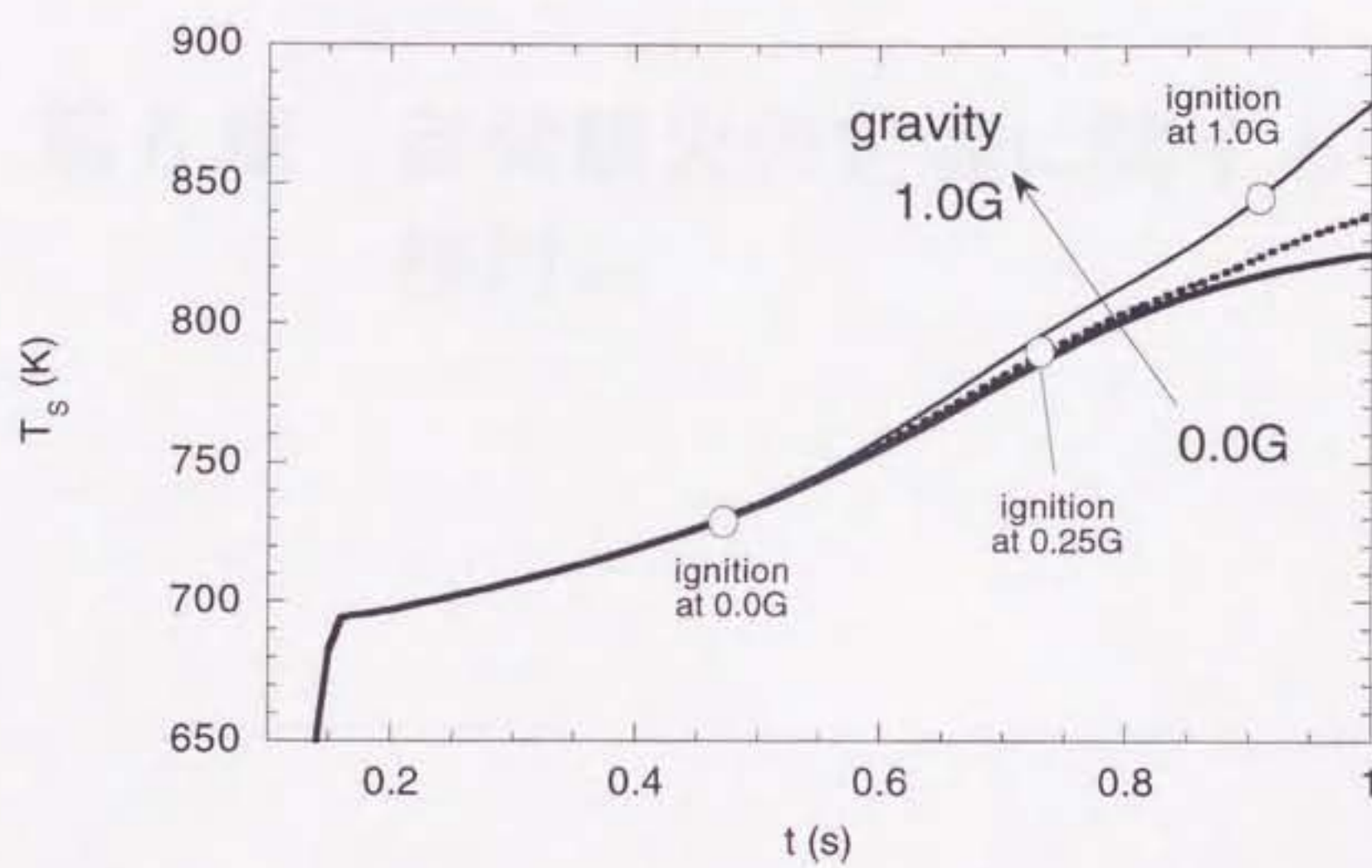


Figure 5.16: Time-change of solid surface temperature at center axis for the various gravities ( $g = 0.0G, 0.25G, 1.0G$ ). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



## 第6章 自発着火の定義に関する 検討<sup>[87]</sup>



## 第6章 自発着火の定義に関する検討

### 6.1 緒言

本研究のように自発着火に与えるあるパラメータの影響を詳細に解明しようとする場合、まずは着火特性、すなわち着火時間および着火位置という着火を記述できる量が、パラメータによりどのように変化するかを調べることになる。このとき、どのような状態（瞬間）が自発着火であるかという、いわゆる「着火の定義」が不可欠となる。着火の定義に関して言えば、今まで行われてきた着火研究においては必ずしも統一されているものではない（例えば [12, 24, 86]）。これは、個々の問題によって適切な定義があることを示唆しており、本研究における適切な着火の定義がどのようなものなのか、あらかじめ検討しなくてはならない。

着火の定義に関する研究には、ふく射加熱による固体燃料の一次元着火モデルに基づいた解析で、最適な物理条件を検討したものが幾つか存在する [12, 48, 86]。それらによれば、いずれの定義であっても得られる着火特性、またはパラメータに対する応答は定性的には同じ、と報告されている。ところが、第5章で確認されたように、本研究においては特定の重力値において一旦 plume 先端で着火しそうになるが結局失火するといった、特徴的な現象が存在する。このような振る舞いは、先に挙げた一次元解析では報告されていないため、今まで用いられてきた物理条件でこれを正確に表現できるかどうか調べることは重要である。

本章では、重力により現象が複雑に変化する場で起こる自発着火において、数値解析を行う上で、今までの一次元解析において良いとされた幾つかの着火の定義を用いて着火特性を調べ、その中で現象を最も忠実に表現し得る最適な物理条件を提言し、その物理的理由を明らかにすることを目的とする。なお、その物理条件が、本解析のもう一つのパラメータである周囲酸素濃度の変化にも対応し得るかどうか検討した。また、本章の最後では、現象に依存しない普遍的と言える着火条件の存在に関する検討も行った [87]。

### 6.2 数値解析における着火の判定の困難さ

着火の瞬間は、一般的に実験においては「火炎からの第一次発光」としてフォトマルチプライヤーを用いて検出される [15, 51, 88]。すなわち、火炎発生時においてあるレベル以上の光量が検出される瞬間である。従って、理論あるいは数値



解析において着火を扱うためには、上記の現象論的な瞬間と対応する状態を、数学的あるいは物理的な条件で記述しなければならない。具体的な例として、簡単な0次元の理論解析においては定常解の有無（例えば [26, 27]）、一方で直接数値解析においては特定の物理条件を満たすかどうかにより熱暴走の開始を判断する（例えば [12, 24, 86]）。ここで、前者は数学的に一つに決まるため、着火の定義は明確である。ところが後者の場合、人為的に様々な物理条件を導入できる一方、どれが上記の現象論的な瞬間と最も妥当な対応を示すのかは直ちに決められない。これが数値解析において着火を正確に扱うことを難しくしている理由である。

## 6.3 検出されるべき着火の特徴

### 6.3.1 一般的な着火

熱発火理論における着火とは、局所的に発熱が熱損失を上回り、それによって生じる温度上昇が反応による発熱を加速して熱暴走に至る現象である。まず、一般的に着火とみなせる必要最小限の特徴を挙げる。

特徴1 着火は空間的、時間的に局所の現象である。

特徴2 着火後、(予混合火炎伝播を経て) 安定な燃焼に移行する。

着火はある時刻において一点の局所から始まるものであるため、その位置と瞬間が決定されるべきである。また、局所熱暴走を経て安定な燃焼が開始する最初の段階を着火とみなすべきである（例えば [16]）。従って、一時的に局所での発熱がある程度存在する場合でも、それが加速されて安定な燃焼に至らなければ着火とはみなせない。

### 6.3.2 本研究における着火

本研究で取り扱う軸対称二次元場における様々な重力下での着火現象において特徴的な点は、5.5節で指摘した通りである。ここで、改めて着火に関する重要な部分を示し、その詳細について説明する。

まず、本解析において着火が開始される位置は、重力の値に関わらず常に中心軸上となることである。これは、固体を加熱する熱流束の形状（ガウス分布：2.2節参照）が軸上で中心最大になることによる。固体表面における温度分布は加熱分布に強く依存する。本研究の場合、中心軸上で最も加熱量が大きいため、そこが最も分解温度に達する時間が短く、そこから固体燃料の分解が始まる。すなわち、気相においては、中心軸上が最も早く可燃性予混合気の形成がなされる位置になる。また、その混合気の自発着火は、分解ガスの持つ熱（分解温度）により



促進されることを考慮すると、着火が中心軸上からもたらされるのは十分に納得できる。

次に、各重力場における着火過程に注目する。図6.1～図6.3に、 $g = 0.0G, 0.25G, 1.0G$ における着火の瞬間付近の気相の温度、成分濃度、反応速度および速度成分の二次元分布の非定常変化を示す。なお、図の説明は前章の図5.1と同じである。ただし、反応速度の表示範囲は、この一連の図に限り  $0 < \dot{\omega}_g < 1.0 \times 10^{-3} \text{ g/(cm}^3\text{s)}$  である。また、前章と同様に周囲酸素濃度  $Y_{O_2,\infty}$  は0.4で固定した。

無重力の場合（図6.1）、急激な温度上昇および反応の加速が中心軸上の plume 先端付近で起こり、その影響が直ちに可燃性予混合気の存在領域である半球殻領域に沿って進行する様子がわかる。その一方、重力が存在する場合（図6.2および図6.3）、前述のように、表面を沿って中心軸に向って集まる自然対流によって plume は細くなり、予混合領域は plume 内部からその境界付近にわたって広く形成される。しかし、その予混合領域内（ここでは plume 内部）の局所で着火して、その影響が直ちに予混合気内を伝わるという一連の過程は無重力の場合と変わらない。

このように、前述の「特徴1, 2」という着火に関連した必要事項は、いずれの重力に対してもこのモデルによる解析で確認できる。また、重力に依存して異なる二つの着火形態、すなわち先端着火と内部着火が存在することも別の特徴として考慮されるべき情報である。さらに詳しく観察すれば、反応が顕著になる位置は重力に依存して変化し、重力が大きい場合はより表面に近付くことももう一つの特徴である（図6.2および図6.3、または前章参照）。

続いて、 $g = 0.25G$ における  $t = 0.45\text{s}$  付近での興味深い挙動に注目する。図6.4に、その場合の気相の温度および反応速度の二次元分布の非定常変化を示す。図の説明は、前章の図5.1における温度および反応速度分布の部分と同じである。ただし、反応速度の表示範囲は、この図に限り  $0 < \dot{\omega}_g < 5.0 \times 10^{-5} \text{ g/(cm}^3\text{s)}$  である。この条件下では、最初は軸上の plume 先端にて局所的に温度および反応速度が最大となり、徐々に増加して一旦着火しそうになるが、その後、それは直ちに安定な燃焼に移行しないことがわかる。これは、この図の表示時間内における plume 先端付近（図6.4中の丸で囲った部分）に表れる温度  $T_g$  および反応速度  $\dot{\omega}_g$  の極大値の時間変化を表した図6.5からも明らかである。すなわち、plume 先端付近での局所的な反応の加速が何らかの原因で抑えられ、そこでの熱暴走が妨げられたことを示している。この場合、最終的に plume 先端ではなく、遅れて plume 内部から再び反応の加速が生じて着火に至る（図6.2,  $t = 0.7\text{s}$  付近）。上記のような plume 先端付近の不安定な振る舞いを「偽着火」が現れたと考え、これを避けるべく着火の定義を選ぶ必要がある。

最後に、着火条件は制御パラメータの値に依存するものであってはいけない。本研究を通じて変化させたパラメータは、重力と周囲酸素濃度の二種類であるが、使用した変化範囲内では、唯一の物理条件で着火が評価されるべきである。

以上の本研究で見られる着火の特徴をまとめると、着火の定義の選出に関して



注意を払うべき追加項目は以下のようになる。

特徴3 着火は中心軸上から開始する。

特徴4 先端着火と内部着火の二種類の着火形態が存在する。

特徴5 伝播しない偽着火が存在する。

特徴6 重力の増加に伴って着火時間は遅くなり、一方、着火位置は様々である。

特徴7 着火を表す物理条件が重力および周囲酸素濃度に依存しない。

これら七つの本解析で見られる着火に関する特徴は、これから検討する各着火の定義において常に現象として現れなければならない。逆に言えば、これらの特徴は本研究での着火の定義として適、不適を判断する基準となるものである。

## 6.4 考慮した着火の定義

本研究では以下の七つの着火条件の妥当性を検討した。これらはすでに一次元解析等で一般的に用いられているものである。なお、それぞれ各着火条件における物理的意味も添付した。

・定義1: 
$$\frac{\partial T_g}{\partial z} = 0$$

中心軸上の一点において温度の空間分布に極大値が生じ、その点から周りの気体に熱を与え始める瞬間 [89]。

・定義2: 
$$T_g \geq T_s$$

中心軸上の一点において加熱される固体表面温度よりも気相の温度が高くなり、発熱効果を保証する瞬間 [90]。

・定義3: 
$$\left. \frac{\partial T_g}{\partial z} \right|_{\text{on surface}} = 0$$

固体表面での温度勾配が0となり、気相から固相へ反応熱が伝わり始める瞬間 [86]。

・定義4: 
$$\dot{\omega}_g \geq C_{ig,4}$$

気相の一点における局所反応速度 (= 発熱速度) が必要最小限のレベルを超える瞬間 [12, 48, 91]。

・定義5: 
$$\int_V \dot{\omega}_g dV \geq C_{ig,5}$$



系全体の反応速度（＝発熱速度）が必要最小限のレベルを超える瞬間 [37, 58].

$$\cdot \text{定義6: } \frac{\partial T_g}{\partial t} \geq C_{ig,6}$$

気相の一点における局所温度の時間変化があるレベルを超え、急激な温度上昇を開始する瞬間 [8, 24].

$$\cdot \text{定義7: } \frac{\partial \omega_g}{\partial t} \geq C_{ig,7}$$

気相の一点における局所反応速度の時間変化があるレベルを超え、加速度的に反応が開始する瞬間 [12].

定義4～定義7における  $C_{ig,n}$  は任意定数である。また、取り扱う着火は常に中心軸上で起こるため（前節「特徴3」参照）、定義5以外において、各物理量は中心軸での値を考える（定義5は全空間が対象）。

本研究では、着火の振る舞いを記述する量として、「着火時間： $t_{ig}$ 」および「着火位置： $z_{ig}$ 」に注目する。ここで、着火時間とは、固体燃料を加熱し始めた瞬間から着火の定義を満たした瞬間までに要した時間である。同様に着火位置とは、固体表面から、着火の瞬間において定義を満たした位置までの距離を指す。ここで、定義3の着火は、着火位置は常に表面上である。これは、前節「特徴6：着火位置変化」に反する。また、定義5では、前節「特徴1：局所性」の情報が欠けているため、着火位置を明確に決められない。よって、定義3および定義5はこの時点で不適切なものといえる。ただし、便宜的にそれぞれ「最高温度」および「最高反応速度」を示す位置を仮の着火位置として、参考までに結果を示す。

## 6.5 結果および検討

### 6.5.1 各物理条件における重力の変化に対する着火特性

図6.6に、周囲酸素濃度  $Y_{O_2,\infty} = 0.4$  における各物理定義により検出された着火時間および着火位置の重力に対する変化を示す。図より、全ての定義において  $g \approx 0.2 \sim 0.3G$  付近では着火時間および着火位置の急激な変化（以後これを「遷移」と呼ぶ）が見られることがわかる。このようにして二分された重力域において、遷移後の定性的な応答に着目すると、定義2および定義4～7では重力の増加に伴い着火時間は大きくなるのに対し、定義1および定義3では逆に小さくなり、定義に依存した定性的な違いがあることがわかる。特に定義1では、遷移後の着火位置の変化も他とは大きく異なる。また、注意深く観察すると、定義2では、遷移が生じる重力値が他の定義に比べてやや大きくなる。

以上の結果から、前章の「特徴4：二種類の着火形態の存在」は全着火条件で満たされるのに対し、「特徴6：着火時間の変化」は定義1および定義3では定性的



に合致せず、それらは適切な着火条件と言えないことがわかる。以下にこれが生じる物理的な理由を考察する。

### 6.5.2 結果の検討 (1) -不適切な着火条件-

まず、重力の大きな場合において、重力に対する着火時間の応答が定性的に合致しない定義1および定義3に着目し、その原因を考察する。次に、遷移がずれて現れた定義2についての考察も行う。

#### 定義1による着火

これまで行われてきたような自発着火過程の一次元解析では、局所の温度勾配がゼロになるのは、発熱反応により局所で温度の隆起が生じる場合に限られる。ところが、本解析系においては、別の原因でそれが起き得る [91, 92]。詳しくは第7章 (7.5節参照) で述べるが、重力が大きくなると、plume 中間部において、plume から外部への半径方向の熱損失が促進されて、発熱とは無関係に図 7.9(a-2) で見られるような plume 先端付近での温度の極大値が現れる。このようにして現れた極大値は、発熱というよりむしろ放熱により生じたものなので、時間の経過に伴い消滅することも同図により確認できる。上記のような一連の現象は、後述するが特に重力が大きい場合に見られるものであり、この状態は「特徴2: 着火後の安定燃焼性」を持たず、着火と判断すべきではない。

このように、定義1による着火の判断は、特に重力の大きい場合では不適となるため、着火検出に関して望ましい物理条件とはいえない。

#### 定義3による着火

次に、定義3による着火がどのような状態で起こるのか調べるため、この定義による着火時間が同程度 (ほぼ  $t_{ig} = 0.78s$ ) である  $g = 0.25G$  および  $1.0G$  の場合における着火過程に注目する。

図 6.7 に、それぞれの重力値 ( $g = 0.25G$  および  $1.0G$ ) における中心軸上の温度分布の時間変化を示す。なお、図中においてこの定義における着火の瞬間における温度分布に相当するものを太線で表示してある。この図より、定義3で判断された着火時の最高温度は、(a)  $g = 0.25G$  においては  $2000K$  を超えているのに対し、(b)  $g = 1.0G$  においては  $800K$  程度であることがわかる。また、その位置は、前者では表面から離れているのに対し、後者では表面近くである。これらより、定義3による着火の瞬間は、両者で現象的に同じ瞬間を指しているとはいえない。この両者の違いは、図 5.6 および図 5.11 で示されるように、火炎核といえる高温部の形成される位置が重力によって異なるために生じる。

$g = 0.25G$  のように、火炎核が表面から離れた位置で発生すると ((a)  $t = 0.7s$ ,



$z = 3.5\text{cm}$  付近), 表面付近が相対的に低温になるため, 下向き (表面へ) の熱伝導が促進される. その一方で, plume にかかる浮力により, 周囲大気が軸に向かって入り込み, 上向きの対流が増加する. すなわち, 対流と熱伝導の両者は互いに向き合う形となり, 気相内の発熱の影響が直ちに表面へ及ぶのが妨げられる. よって, 着火時間は, 発熱を開始してから暫く経った状態を表すことになる. ところが,  $g = 1.0G$  のように, 火炎核が表面近くで発生すると ( $(b)t = 0.8s, z = 0.5\text{cm}$ ), 上記のような巻き込み対流には影響を受けず, 直ちに気相内の発熱の影響が表面に伝わる. よって, 着火時間は発熱を開始した直後の状態を表すことになる.

このように, 火炎核の発生位置に応じて定義 3 に基づく着火時間が左右されることが, 着火としての判断に不適切となる原因であることがわかる.

以上の議論により, 浮力の増加に伴う「巻き込み対流の増大」や, それと同時に起こる「多方向への熱損失の促進」といった多次元に特有の現象によって, 定義 1 および定義 3 では正しい着火を記述しない理由が確認された. 従って, 本研究においては, これらの物理条件は着火判定には不適である.

#### 定義 2 における遷移重力のずれ

表面温度が気相着火に密接に関わる場合, 例えば着火位置が常に表面付近にあればこの定義でも問題ない. ところが, 本研究でのように表面から離れたところで着火する場合には, この定義では疑問点が残る. 例えば, 図 6.4 で示したような, plume 先端で一旦着火しそうになるが結局は失火する場合, plume 先端部の温度が一時的に表面温度を越すことが有り得る. これは, 表面から離れた位置においては, 表面に関連したもの以外の要素 (すなわち局所の対流および拡散による熱移動等) がそこでの熱的状态を支配し得るために起こる.

なお, これまでの固体燃料の着火研究において, 気相着火が重要な場合には, 実験および理論的に表面温度のみが現象を支配しきれないこと [15] や, 気相内部での変化の影響が着火そのものを左右すること (例えば [17]) が指摘されている. 以上を考慮すると, この物理条件は本研究における着火の判断に最適であるとはいえない.

#### 6.5.3 結果の検討 (2) -適切な定義-

これまでの議論より, 定義 1~3 は本研究では不適切であることが確認され, 着火位置を定義できない定義 5 もふさわしくないとされた. 本節では, 残り三つの定義 4, 6, 7 に関して, どれがふさわしい定義であるかを検討する.

ここで, 上に挙げた残りの定義は全て「物理量 > ある臨界値」という形であることに注目する. これらの定義は 6.3 節の「特徴 1~6」をすでに満たしているため, この「ある臨界値」は残された「特徴 7: 制御パラメータへの非依存性」を満た



たすように設定される必要がある。以下では、この臨界値の決め方に着目して議論を展開する。

図6.8に、先端着火および内部着火という二種類の着火形態において、中心軸上における各物理量  $((a) \dot{\omega}_g, (b) \partial T_g / \partial t, (c) \partial \dot{\omega}_g / \partial t)$  の最大値の代表的な時間変化を示す。これらの図から、全ての物理量の変化に対してピークは前者で二つ、後者で三つ存在することがわかる。それらは、

- 固体燃料からの噴き出し直後 ( $\sim 0.15s$ ) : **P**,
- plume 先端での着火に失敗した直後 : **Q**,
- 最終的な着火 : **R**.

という状態に相当し、順に **P**, **Q**, **R** と名前を付ける。この時、着火形態に依らずに着火判別定数である臨界値  $C_{ig}$  が満たすべき必要十分条件は、

$$\max(\mathbf{P} \text{ or } \mathbf{Q}) < C_{ig} < \min(\mathbf{R})$$

である。ここで  $\max(\mathbf{P} \text{ or } \mathbf{Q})$  とは、様々な重力と周囲酸素濃度を考慮した条件で得られる **P** もしくは **Q** の最大値を表し、 $\min(\mathbf{R})$  はその時の **R** の最小値を表す。なお、十分に周囲酸素濃度が低い場合 ( $Y_{O_2,\infty} < 0.25$ ) では **R** は存在しなくなるため、この場合の  $C_{ig}$  が満たすべき条件は  $\max(\mathbf{P} \text{ or } \mathbf{Q}) < C_{ig}$  である。

上記を満たす  $C_{ig}$  の存在を確認するために、ある固定された周囲酸素濃度において重力を変化させた場合に得られる  $((a) \dot{\omega}_g, (b) \partial T_g / \partial t, (c) \partial \dot{\omega}_g / \partial t)$  の  $\max(\mathbf{P} \text{ or } \mathbf{Q})$  および  $\min(\mathbf{R})$  を、考慮した周囲酸素濃度の範囲で調べた結果を図6.9に示す。

この図より、 $(b) \partial T_g / \partial t$  においては、希薄酸素状態で  $\max(\mathbf{P} \text{ or } \mathbf{Q}) < \min(\mathbf{R})$  とならないため、 $C_{ig}$  は存在しない。これは、希薄酸素状態における着火は、酸素不足のため比較的緩やかに進行する（すなわち **R** は小さい）ため、相対的に初期に見られる表面付近の温度上昇率（すなわち **P**）が無視できなくなることによる。この定義が有効なのは、高酸素濃度場のような急激な熱暴走が起き得る場合に限り、「特徴7」を満たさない。

$(c) \partial \dot{\omega}_g / \partial t$  においては、 $(b)$  とは異なり、考慮した周囲酸素濃度の範囲において常に  $\max(\mathbf{P} \text{ or } \mathbf{Q}) < \min(\mathbf{R})$  となるが、全ての周囲酸素濃度において共通に使用できる臨界値  $C_{ig}$  は存在しない。従って、これも「特徴7」を満たさない。

結局、全ての周囲酸素濃度および重力で同一の臨界値で評価できるのは定義4、すなわち  $\dot{\omega}_g > C_{ig,4}$  において  $C_{ig,4}$  が図の  $(a)$  にハッチングを施した範囲にある時のみであり、これだけが最後の「特徴7: 制御パラメータへの非依存性」を満たすことができる。



#### 6.5.4 結果の検討 (3) -普遍性-

本節では、これまでの議論で「着火を適切に表現できる物理条件である」とされた定義4の普遍性について考察を行う。まず定義4の物理的意味を考える。6.4節で示したように、この物理条件は局所の発熱速度がある値を超えることを意味している。これは、着火発生位置において「局所的な発熱速度が局所的な熱損失速度を上回ってエネルギーバランスが保てなくなる (=熱暴走に至る)」ことに対応し、まさしく熱発火理論における着火の条件を局所的に適用したことと同じである。よって、本章を通じて得た結論を言い換えると、本研究において観察されるような複雑な現象内で起こる着火であっても、それが表面から離れた位置での局所の現象である限り、熱発火理論はそのまま適用できる、ということになる。ほとんど表面上で起こる着火のような、固体の状態が完全に着火を支配する場合や、反応連鎖による発熱とは無関係に起こり得る着火（この場合は成分の濃度で決まる）では、この定義4は最適とは言えない。しかし、実際の着火においては、表面で起こるのは非常に限られた場合であるし、成分よりも熱が重要となる場合が圧倒的に多い。以上を考慮すると、定義4は、複雑な現象を含み、普遍的に利用できる物理条件であると考えられる。

ただし、この「ある値（すなわち  $C_{ig}$ ）」は局所的な熱損失速度に相当するため、解析系によって異なる値となり、値自体の普遍性はない。しかし、ここで重要なのは「熱発火理論の概念が複雑系の着火にも適用できること」であって、 $C_{ig}$ の値自体の大きさを議論することは本研究の主旨とは異なる。

### 6.6 結言

軸対称二次元場における重力等により現象が複雑に変化する場合の自発着火に対して、着火特性を指標として、現象を正確に表現し得る適切な物理条件を調べた結果、以下の知見を得た。

1. 一次元的な現象に対して良いとされていた着火の定義では、多次元性がもたらす複雑な現象、例えば巻き込み対流および plume 先端部における温度場の変動等が存在する中で起こる着火を正確に記述できない場合がある。
2. 多次元効果により熱および運動量等の輸送が盛んになるため、それらによって偶発的に満たされ得る物理条件は着火判定には適さない。
3. 熱発火理論は複雑な現象内で起こる着火でも有効であり、それに基づく物理条件である「局所反応速度 > ある物理量」は、気相における局所の着火現象を適切に表現し得る普遍的な物理条件と考えることができる。



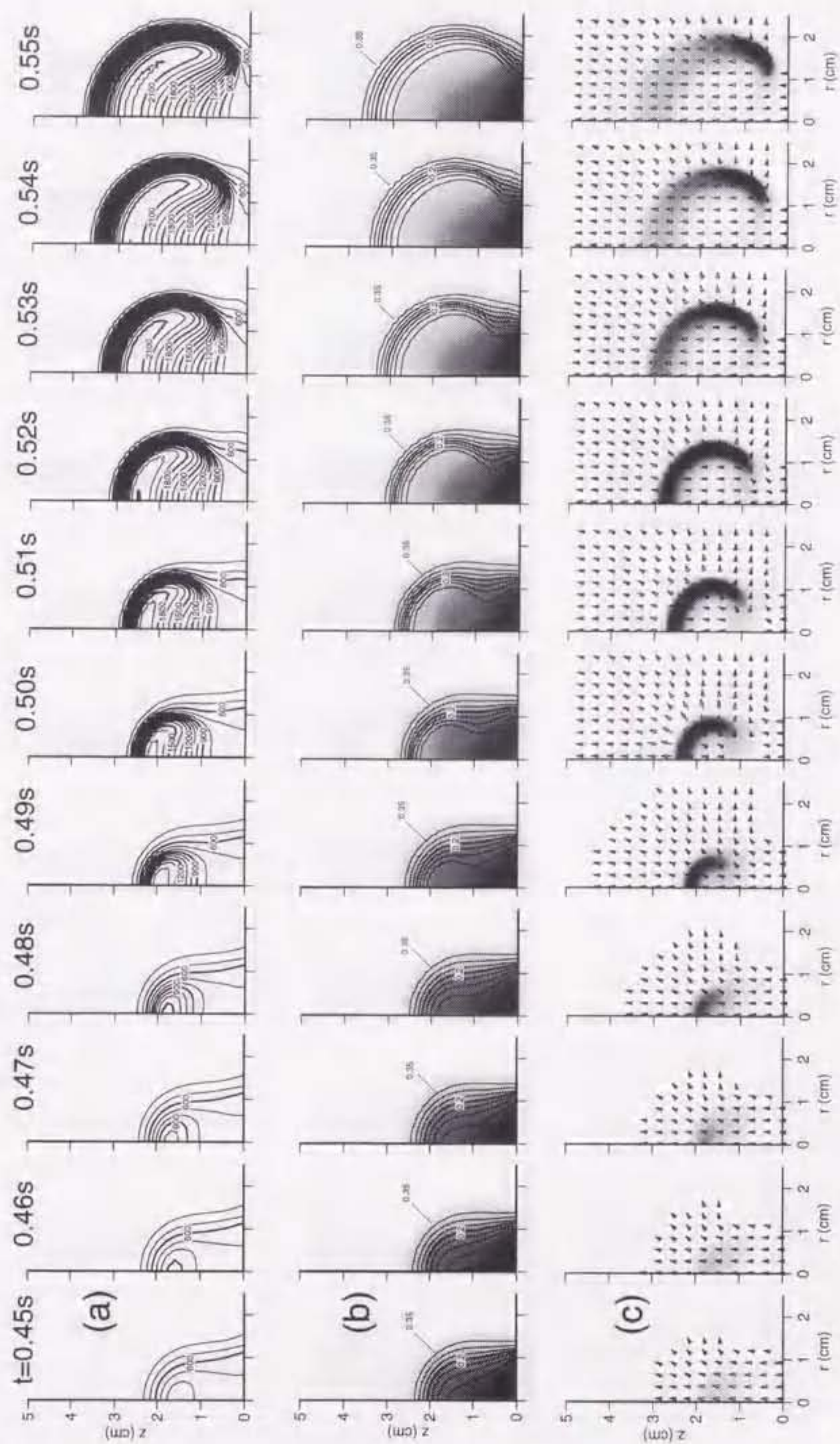


Figure 6.1: Time-sequence of 2-D variables distributions in gas-phase for  $g=0.0G$  around the spontaneous ignition ( $t_{ig} = 0.457s$ ); (a) temperature contours ( $T_g$  [K],  $\Delta T_g=100K$ ), (b) species mass fraction contours (oxygen ( $Y_{g,ox}$ ,  $\Delta Y_{g,ox}=0.05$ ), patterns: gasified fuel ( $Y_{g,f}$ ,  $0.0-0.4$ )), (c) reaction rate ( $\omega_g$  [g/cm<sup>3</sup>s],  $0.0-1.0 \times 10^{-3}$ ). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



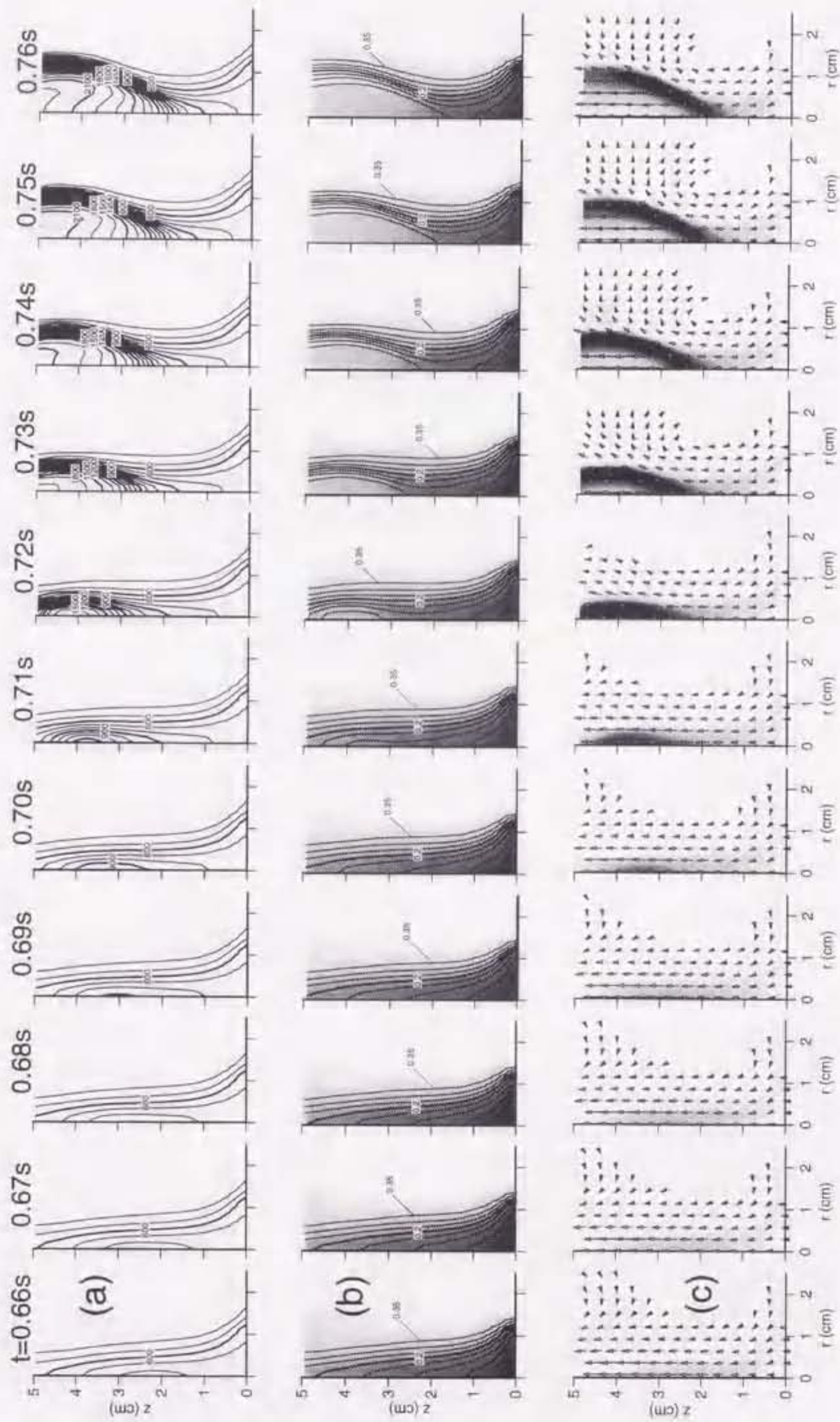


Figure 6.2: Time-sequence of 2-D variables distributions in gas-phase for  $g=0.25G$  around the spontaneous ignition ( $t_{ig} = 0.672s$ ); (a) temperature contours ( $T_g$  [K],  $\Delta T_g=100K$ ), (b) species mass fraction contours (oxygen ( $Y_{g,ox}=0.05$ ), patterns: gasified fuel ( $Y_{g,f}$  0.0-0.4)), (c) reaction rate ( $\omega_g$  [g/cm<sup>3</sup>s], 0.0-1.0x10<sup>-3</sup>). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



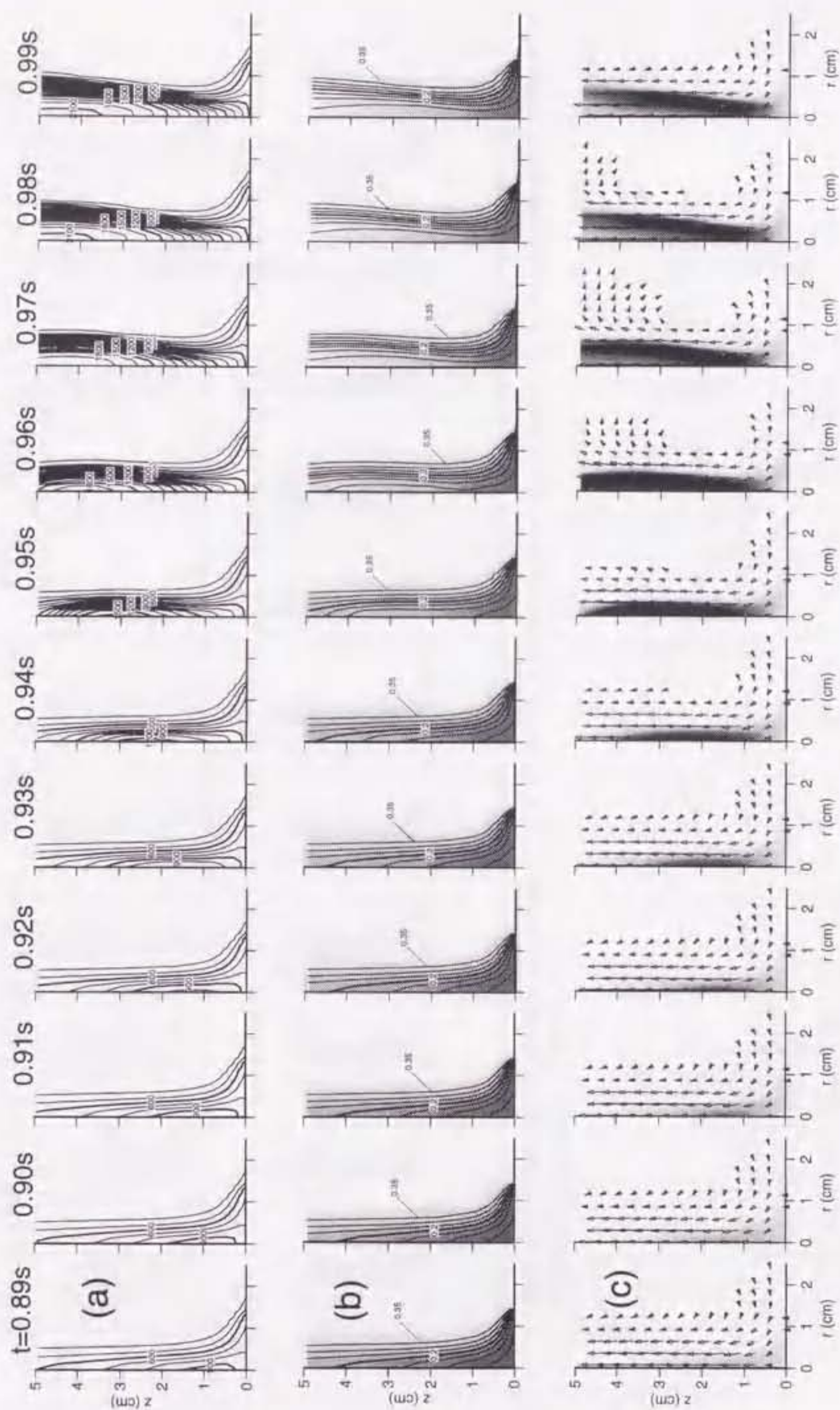


Figure 6.3: Time-sequence of 2-D variables distributions in gas-phase for  $g=1.0G$  around the spontaneous ignition ( $t_{ig} = 0.874s$ ); (a) temperature contours ( $T_g$  [K],  $\Delta T_g=100K$ ), (b) species mass fraction (contours: oxygen ( $Y_{g,ox}, \Delta Y_{g,ox}=0.05$ ), patterns: gasified fuel ( $Y_{g,f}, 0.0-0.4$ )), (c) reaction rate ( $\omega_g$  [g/cm<sup>3</sup>s], 0.0-1.0x10<sup>-3</sup>). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



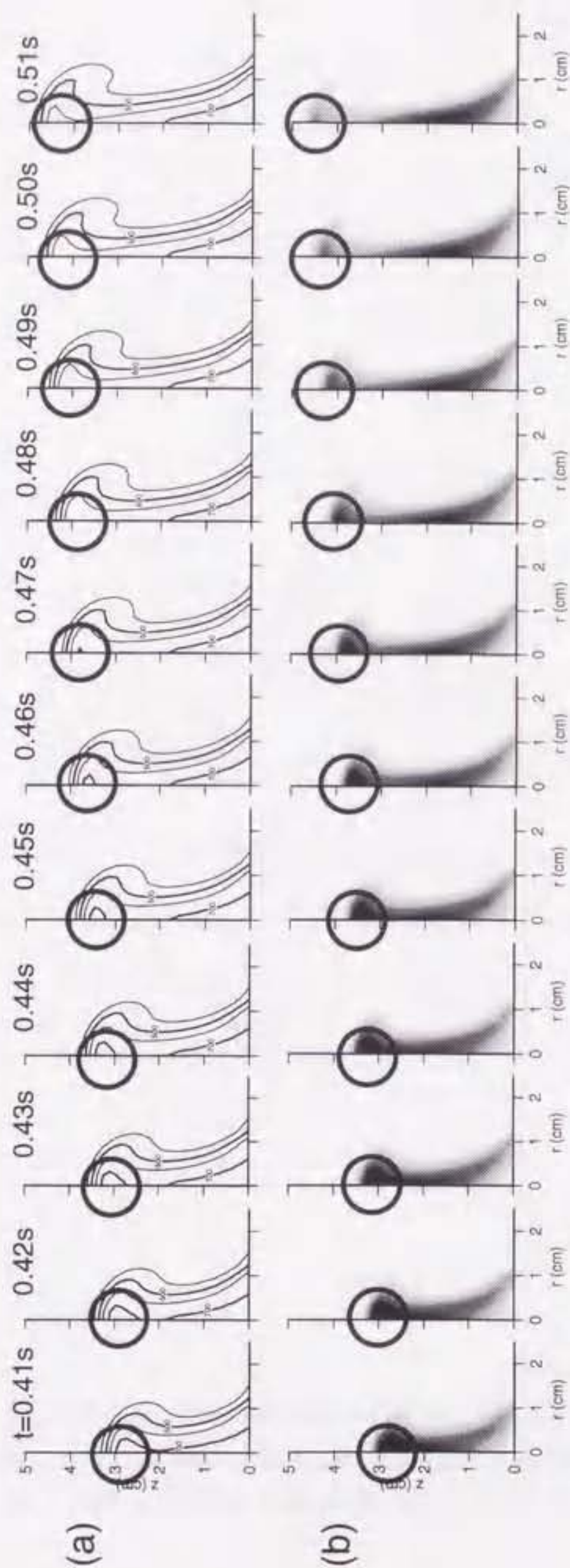


Figure 6.4: Time-sequence of 2-D variables distributions in gas-phase for  $g=0.25G$  around the false ignition (in the early stage of ignition); (a) temperature contours ( $T_g$  [K],  $\Delta T_g = 100K$ ), (b) reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [g/cm³s], 0.0~5.0x10⁻⁵). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.

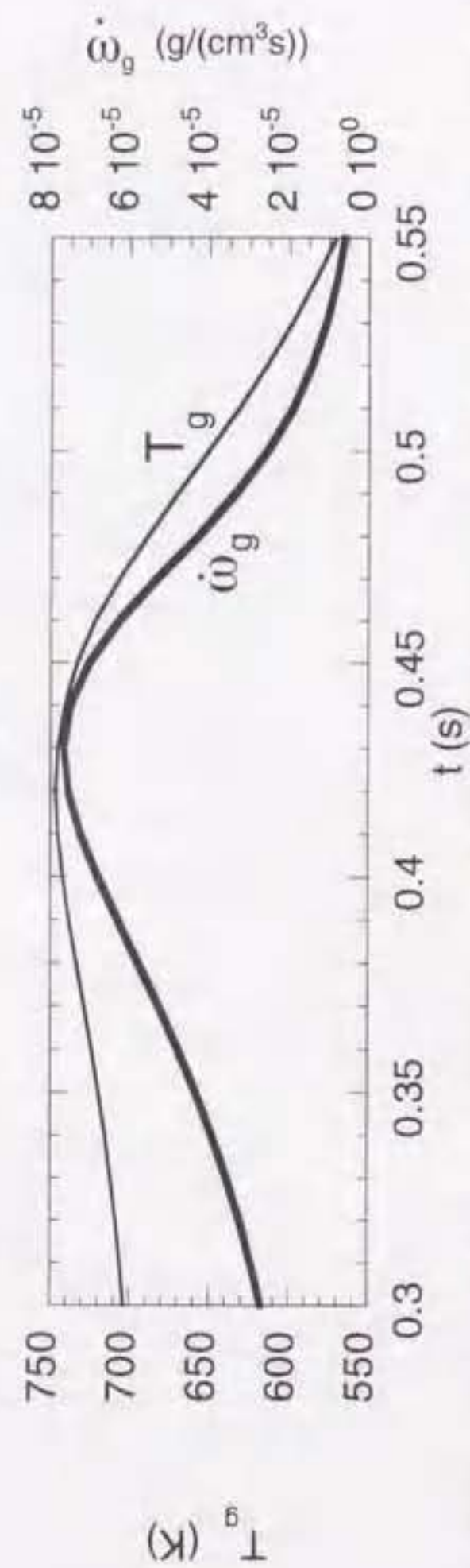


Figure 6.5: Time-change of the first peak value of temperature ( $T_g$  [K]) and reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [g/cm³s]) at the vicinity of the tip of the plume on center axis for  $g=0.25G$ . Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



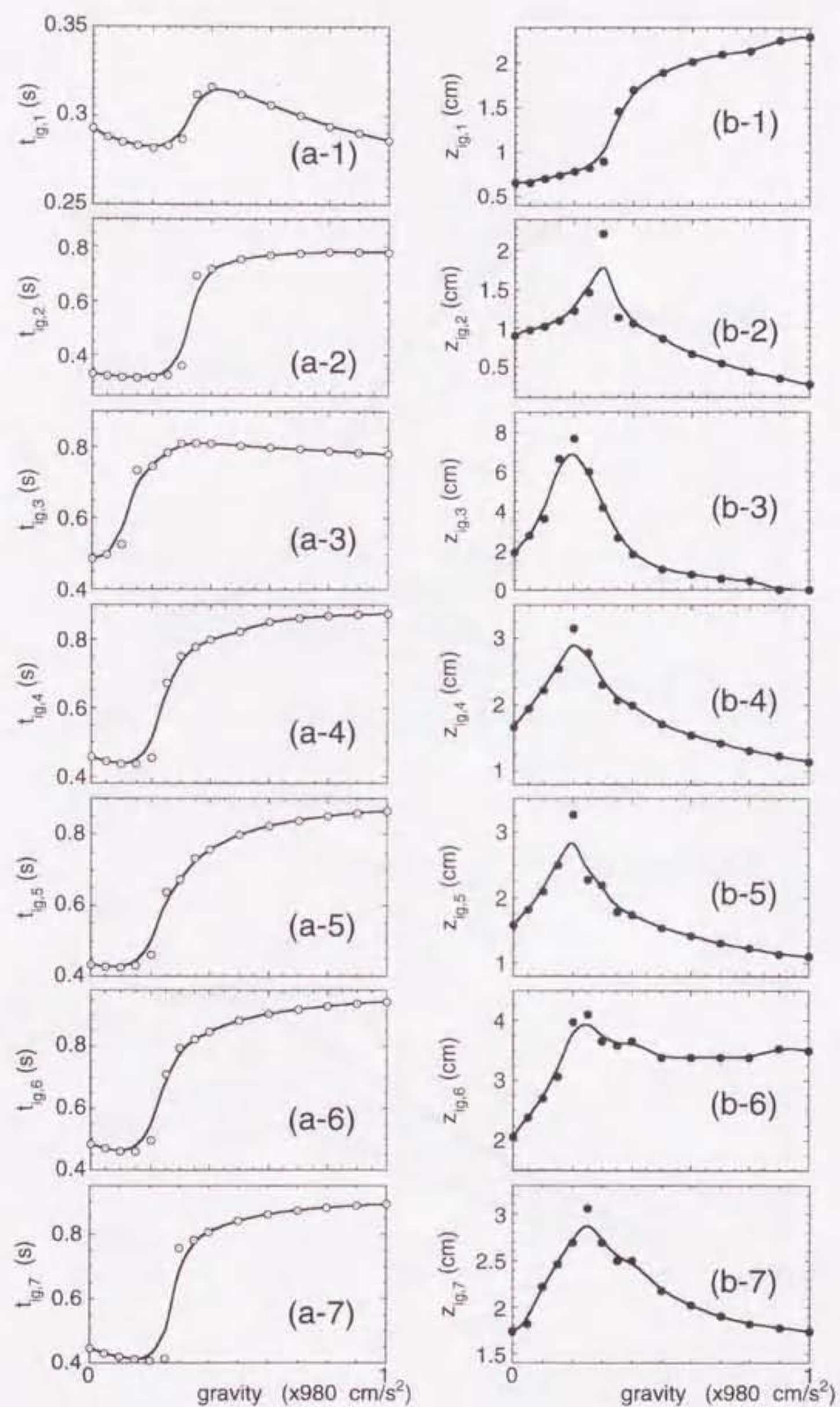


Figure 6.6: The variation of (a) ignition delay time and (b) ignition position in various gravities for each ignition criterion (Def. 1-7). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



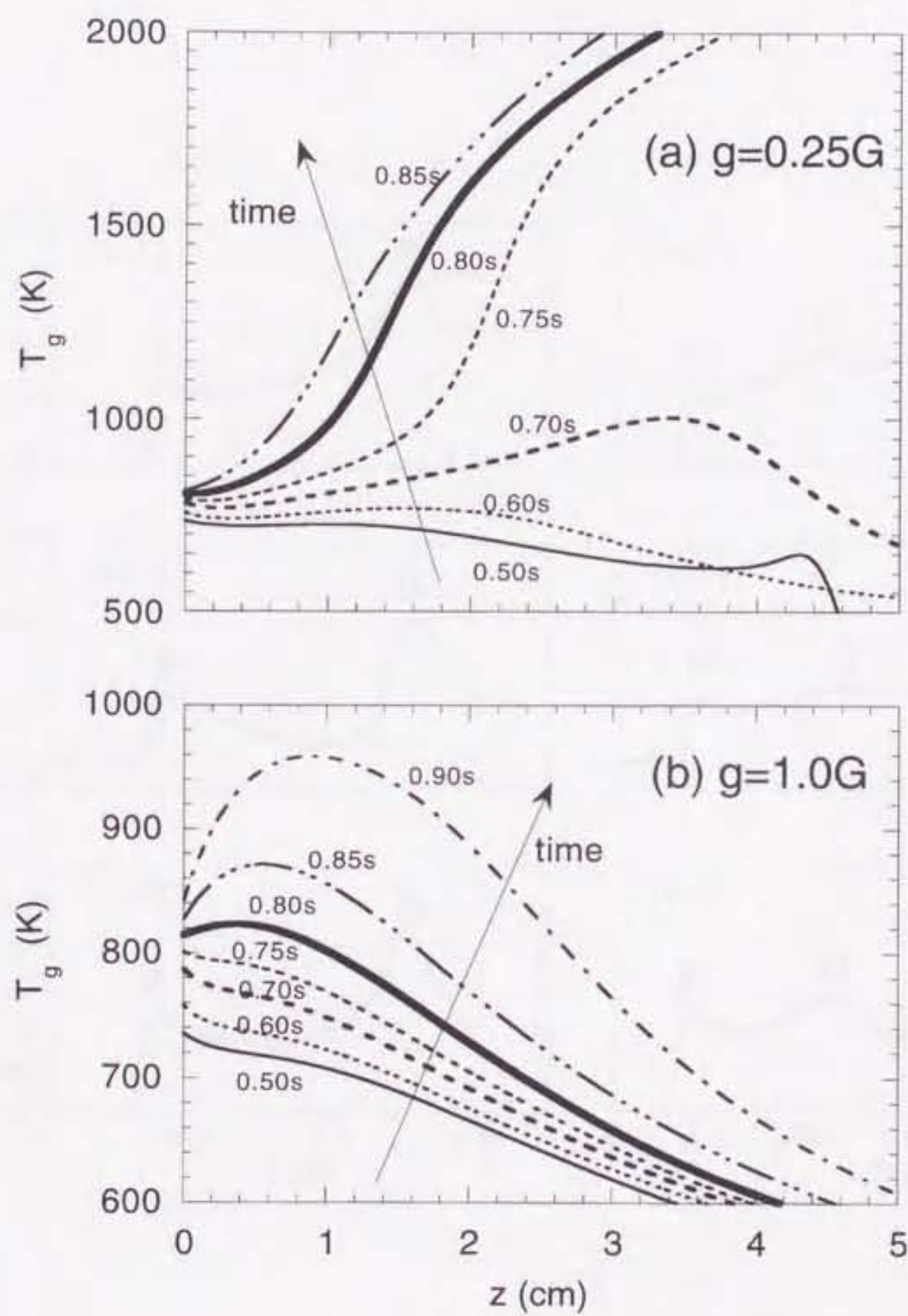


Figure 6.7: Time-histories of temperature distributions at center axis for (a)  $g = 0.25G$  and (b)  $g = 1.0G$ ,  $t = 0.5s \sim 0.9s$ . Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



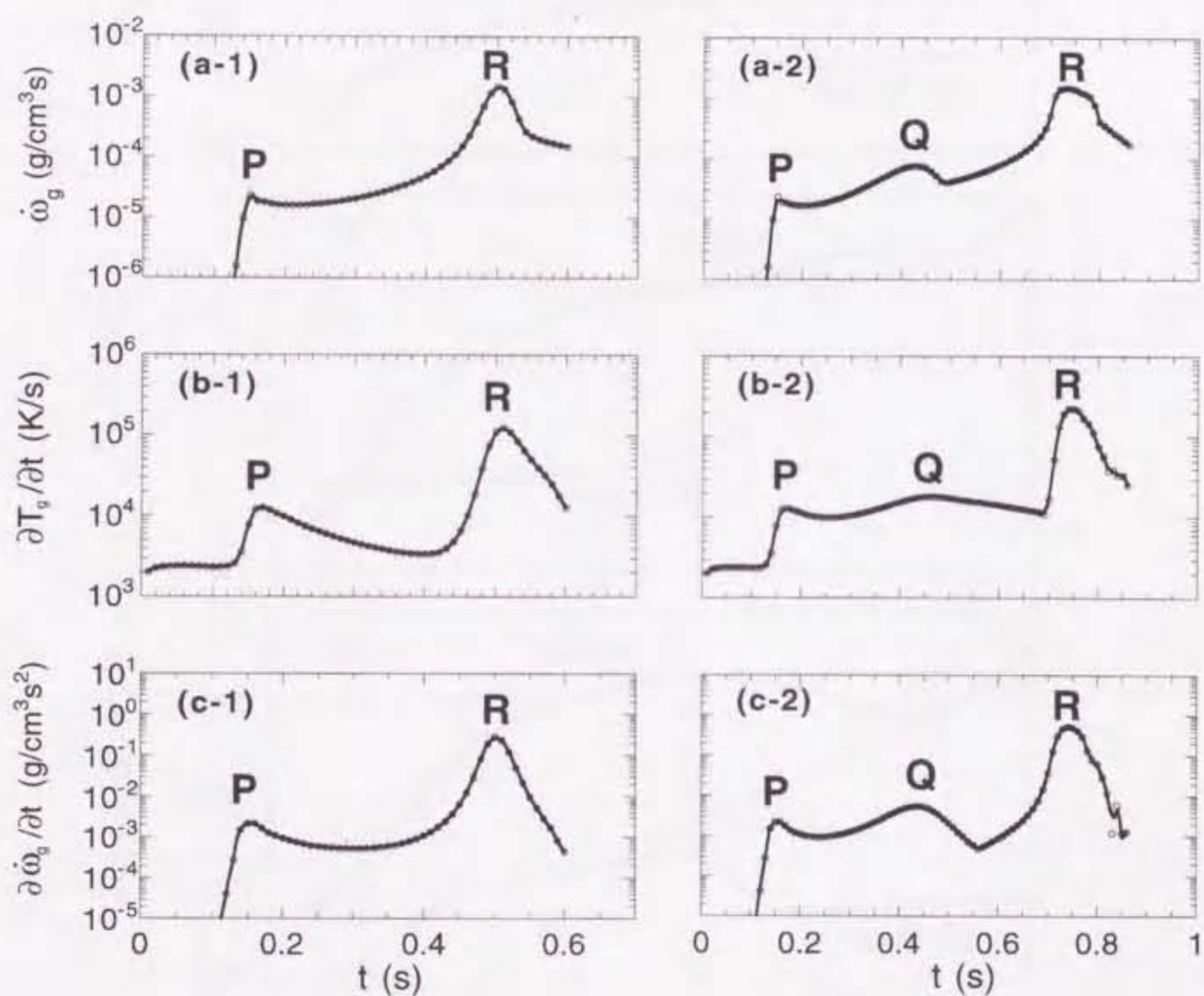


Figure 6.8: The comparisons of time-change of (a) maximum reaction rate, (b) maximum time-change of temperature and (c) maximum time-change of reaction rate for each distinct type of ignition; (left: tip-ignition, right: inside-ignition). Corresponding conditions for tip- and inside-ignition are  $g = 0.0G$  and  $g = 0.25G$ . Adopted ambient oxygen concentration for both is 0.4.



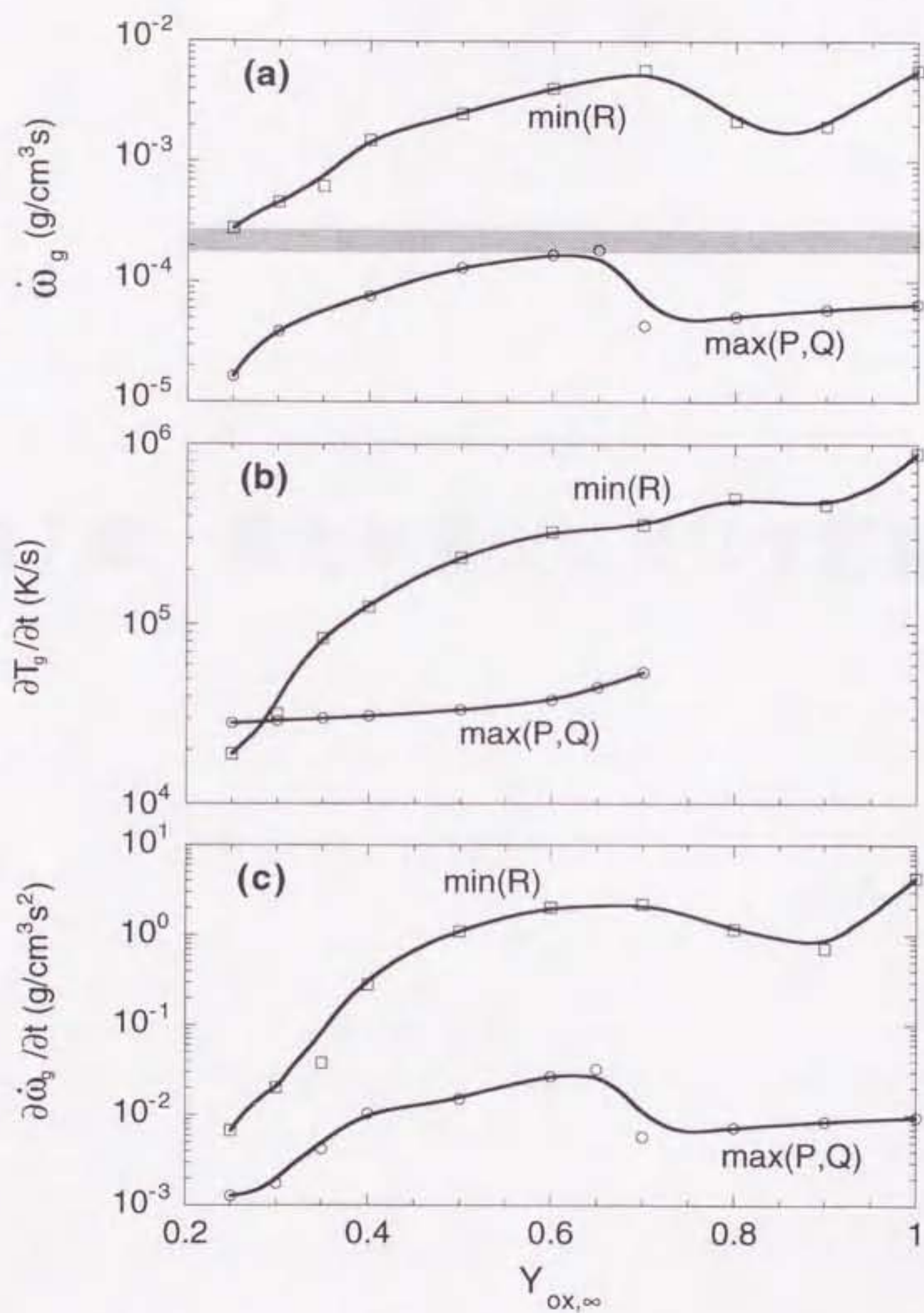


Figure 6.9: The comparisons of available range of ignition criterion constant,  $C_{ig}$ , in various ambient oxygen conditions; (a) maximum reaction rate, (b) maximum time-change of temperature and (c) maximum time-change of reaction rate.



## 第7章 重力が着火に及ぼす影響<sup>[92]</sup>



## 第7章 重力が着火に及ぼす影響

### 7.1 緒言

第5章の議論により、重力の存在によって plume 形状が変化して、その結果、混合状態の促進だけでなく場の温度分布の著しい変化が引き起されることがわかった。また、重力の大きさに依存して、二種類の着火形態、すなわち plume 先端での着火と plume 内部での着火のいずれかが見られることも確認された。しかし、着火がどの瞬間であるのか定義していない段階では定性的な議論しかできない。これでは着火のメカニズムまたは物理を理解するのには不十分である。ところが、本解析に適切である着火の定義が前章において確立されたため、着火時間および着火位置といった着火特性を定量的に扱えるようになった。これにより着火の物理に対する考察がさらに詳しくできる筈である。

本章では、「着火時間： $t_{ig}$ 」および「着火位置： $z_{ig}$ 」といった着火特性が、重力によってどのように変化するかを調べ、その原因となる物理現象を詳細に調べることにより、着火のメカニズムに与える重力の影響を理解することを目的とする。これにより、第5章で指摘された「重力に依存した二種類の着火形態（先端着火および内部着火）」の出現に関する物理も理解できる。

なお、本章を通じて変化させたパラメータは重力のみであり、周囲酸素濃度  $Y_{ox,\infty}$  は、第5章の場合と同じく 0.4 で固定した。

### 7.2 重力による着火特性の変化

#### 7.2.1 着火時間と着火位置

まず、重力を増加させた場合の着火特性、すなわち着火時間と着火位置の振る舞いを調べる。着火特性を定量的に評価するため、本章では前章の結果に基づいて、着火の瞬間を「気相の反応速度 ( $\dot{\omega}_g > 2.0 \times 10^{-4} \text{ g/(cm}^3\text{s)}$ )」を計算領域内のどこかで満たした瞬間と定義した [87]。なお、着火時間は「外部放射熱の照射開始から上記の着火条件を満たすのに要した時間」、着火位置は「固体表面からその条件を満たした位置までの距離」と定義する。

図 7.1 に、重力による着火時間および着火位置の変化を示す。この図から、小さ



な重力値においては着火時間はほぼ一定であるが、ある重力値において急激な遅れが認められ、大きな重力値では徐々に着火時間が大きくなる傾向を示すことがわかる。着火位置に関しては、小さな重力においては重力の増加に伴い着火位置は表面から離れるが、ある特定重力値を境にして重力の増加に伴い着火位置は表面へと近づくといい、着火位置の重力に対する変化が、ある重力値において逆転することが確認できる。

注目すべき点は、この「着火時間の急激な遅れ」および「着火位置の重力に対する変化の逆転」が起こる重力値は等しいことである（以下、この重力値を「遷移重力」と呼ぶ）。これはすなわち、その特定の重力値において、重力が着火に与える作用のうちの何かが変わったことを示唆しており、それを理解することは「自発着火に与える重力の影響」を理解することに対して極めて重要な意味を持つ。

まず、遷移重力付近では何が起こっているのかを調べる。図7.2に、着火時間および着火の瞬間の plume 形状と着火位置の重力による変化を示す。図中の白丸は着火位置を表す。plume 形状は図中のグレーの部分で記述され、固体からの分解生成ガス中の可燃ガス濃度を用いて表している。なお、グレースケールは、濃い方が多くの可燃ガスが存在することを意味する。図中には、可燃ガス濃度の最大値の10%に相当する等濃度線を同時に示し、これを plume 界面のおおよその位置と考えることにする。

この図によれば、前述の遷移重力よりも小さい重力の場合では着火位置は常に plume 先端付近であるのに対し、それよりも大きな重力の場合では着火位置は常に plume 内部であることがわかる。つまり、遷移重力とは、重力に依存して現れる二種類の着火形態の境界条件に相当することがわかる。以下、本章を通じて、遷移重力よりも小さな重力領域を「先端着火領域」、それよりも大きな重力領域を「内部着火領域」と呼ぶことにする（図7.2中でそれぞれ tip-ignition および inside-ignition に相当）。

次節以降では、この各領域に対する着火の瞬間の物理量の空間分布を調べることにし、各々の着火形態の特色を理解する。

### 7.3 先端着火領域での着火

図7.3および図7.4に、典型的な先端着火領域における着火の瞬間の (a) 気相の温度  $T_g$ 、(b) 成分の質量分率（可燃ガス  $Y_{g,f}$  および酸素  $Y_{g,ox}$ ）、(c) 反応速度  $\dot{\omega}_g$  の二次元分布を示す。図中の (a) と (c) には速度ベクトルを併せて表記した。条件は、それぞれ無重力 ( $g = 0.0G$ ) および若干重力のある  $g = 0.1G$  の場合である。(a) 温度場、(b) 可燃ガス濃度 ( $Y_{g,f}$ ) および (c) 反応速度の大きさはグレースケールで表されており、その表示範囲は図中下部に示した通りである。(b) 酸素濃度分布 ( $Y_{g,ox}$ ) に関しては等濃度線で表記してあり、その線間隔は  $\Delta Y_{g,ox} = 0.05$  である。



また、速度ベクトルの大きさは、図中に示した通りである。これらの図からわかるように、着火の瞬間における全体の速度場は両図 ( $g = 0.0G$  および  $g = 0.1G$  の場合) を通じて弱く、流れ場は分解生成ガスの噴き出し流れが支配的であることがわかる。これは場の重力が小さいために自然対流が顕著に現れないためである。このときの plume 形状は、噴き出し流れによってやや縦長の半球状となる。なお、(b) より、plume 内部はほぼ均質で可燃ガス成分が詰まっている状態にあり、周囲酸素との混合がなされる領域は plume の界面付近に限られていることがわかる。(c) より、化学反応はその予混合領域においてのみ促進されている様子が確認でき、その中でも 6.3 節で述べた理由により着火は中心軸上で起こっている。

図 7.1 によれば、先端着火領域においては着火時間は重力とは無関係にほぼ一定であることが示されている。すなわち、固体表面から放出される高温の可燃ガスが、周囲酸素と接触してから着火に至るまでの時間が等しい。ここでこの理由を考える。

一般に、自発着火に至るまでには、熱および物質輸送により放熱および混合が促進する過程（これを「物理過程」と呼ぶ）、および形成された可燃性混合気の化学反応が進行する過程（これを「化学過程」と呼ぶ）が同時に行われている（例えば [3]）。重力の作用は、熱および物質輸送にかかるため「物理過程」を変化させ得るが [93]、「化学過程」はむしろ、混合気の状態により決まるため、重力には直接関係しない。

固体表面から可燃ガスが生じると、直ちに plume 界面に予混合気形成される。この形成された予混合気は、高温の可燃ガスにより加熱されて「化学過程」を開始する。今、常に着火が軸上の plume 先端で起こるということは、すなわち、ガウス分布の加熱により最初に分解生成ガスが気相に放出され「最初に形成された予混合気が着火した（＝予混合気としての滞在時間が一番長いガスが着火した）」ことを意味する。plume 先端に形成されている予混合気の熱および混合状態は、対流および拡散に代表される「物理過程」により刻々と変化するが、それにも関わらずそこで着火したということは、物理過程により温度または濃度場を変化させ得る間に、化学過程である化学反応が加速したと考えてよい。よって、着火に至るまでの時間は、その予混合気が反応を開始して熱暴走に至るまでの時間（これを「化学おくれ」と呼ぶ）に強く依存していると考えることができる。

つまり、先端着火領域に属する重力範囲においては、重力は plume 先端に形成された予混合領域を上方に移動させるのみであり、そこでの熱移動および混合状態（すなわち物理過程）に与える影響は少なく、着火時間は化学おくれのみで決まるため、例えば周囲酸素濃度が固定された場では一定に保たれる。後述するが、周囲酸素濃度を変化させると、最初に形成され得る予混合気の混合状態が変化するため「化学おくれ」が変化し、周囲酸素濃度による着火時間の影響が確認できる（8.3 節あるいは 8.4 節参照）。



## 7.4 内部着火領域での着火

図7.5および図7.6に、典型的な内部着火領域における着火の瞬間の(a)気相の温度、(b)成分濃度、(c)反応速度の二次元分布を示し、(a)と(c)には速度ベクトルを併せて表記した。条件は $g = 0.5G$ および通常重力(すなわち $g = 1.0G$ )の場合である。なお、図の見方は前述の図7.3と同じである。これらの図からわかるように、着火の瞬間における速度場は、先の先端着火領域のものとは異なり、噴き出し流れはほとんど確認できず、重力による自然対流が支配的となる。この自然対流は、表面に沿って中心軸へ集まるように形成され、その影響により plume 形状は半径方向に細くなり、同時に軸方向に著しく伸ばされる。この時、plume 内部へは分子拡散等が促進されて酸素成分が多く浸透しており、前述の先端着火領域の場合と異なり、plume 界面から内部まで可燃性混合気が分布していることがわかる。なお、内部着火領域では、高温を保つ表面付近において、その中心軸上にて着火が実現される。この理由は後の節で述べる。

## 7.5 先端着火から内部着火への遷移

これまでの観察において、先端着火の特色と内部着火との違いについて検討され、二種類の着火形態がそれぞれどのような状況において発生するのかを調べた。ここで疑問となるのは、先端着火から内部着火への遷移は何故起こるのか、ということである。図7.1によれば、先端着火領域での着火は内部着火領域のそれに比べて随分と早い時刻に実現されるので、その時刻において、内部着火領域での plume 先端における着火が何らかの形で妨げられたと考えればよい。本節ではこの点に着目して議論を進める。

まず、plume 先端付近における熱移動に着目する。その理由は、着火に不可欠な化学反応速度には、温度が指数関数的に影響するためである。なお、化学反応速度は反応物の濃度にも依存するが、化学反応速度を表す式(2.39)によれば一次関数的に影響するため、ある程度予混合気が存在する位置では、相対的に言えば局所温度が化学反応速度を支配すると考えてよい。

### 7.5.1 重力に依存した熱移動(1) -plume形状が及ぼす影響-

第5章でも示したが、重力増加に伴う変化において最も顕著なのが「plume形状の変化」である。本節ではこれが熱移動に与える影響を調べた。図7.7に、先端着火の瞬間以前の過程における plume の変化(左)および中心軸上での半径方向への熱伝導による熱移動量の分布(右)の時間変化を、重力が小さい場合と大きい場合と比較して示す。図の左側には plume 形状を可燃ガス濃度を基準にして表記したものと速度ベクトルを併せて示した。plume 形状の表記方法は前節(7.2節)



で示した方法に準ずる。図中の白丸は、各時間における plume 先端部に現れる反応速度が極大を示す位置である。なお、向かって左の列の重力が小さい場合、すなわち「先端着火領域」の代表例には  $g = 0.1G$  の場合を、向かって右の重力が大きい場合、すなわち「内部着火領域」の代表例には  $g = 0.4G$  の場合を考えた。ここで、半径方向の熱伝導による熱移動量  $Q_{dr}$  とは、エネルギー式に現れる熱伝導項に等しく、単位は  $J/(cm^3s)$  である。なお、この値が負であれば plume 内部からの放熱を表し、その絶対値が大きければそこでの放熱効果が大きいことを示す。

この図によれば、(a) の重力が小さい場合では、浮力による自然対流が顕著に現れず、plume 形状はやや縦長を保ち、半径方向の熱伝導のピーク位置は常に plume 先端に存在することがわかる。また、その位置は局所反応速度が最大となる位置にほぼ等しく、plume からの熱伝導による熱移動量の増大は、そこでの反応による発熱とのバランスを保とうとした結果であることがいえる。一方、(b) の重力が大きい場合では、 $t = 0.25s$  では重力の小さい場合との違いが見られないものの、時間の経過に伴って、自然対流により plume 形状は先端より下方で絞られるようになる。その時、plume 内側から外へ向かう熱伝導による熱移動が促進され、plume 先端付近での発熱位置におけるピーク以外に、絞られることによる熱伝導による熱移動のピークが発生することがわかる ( $t = 0.3s$ )。また、それによる放熱効果は、時間の経過に伴って徐々に顕著になることがわかる ( $t = 0.35s \sim 0.4s$ )。

### 7.5.2 重力に依存した熱移動 (2) -軸上の温度分布の変化-

上記のような plume 形状の変化に伴う熱移動により、中心軸上の温度分布は著しくその影響を受ける。図 7.8 に、図 7.7 と同じ条件における (a) 中心軸上の温度、半径および軸方向への熱伝導による熱移動量の分布 (それぞれ (b), (c)) を重力が小さい場合 (左:  $g = 0.1G$ ) と大きい場合 (右:  $g = 0.4G$ ) を比較して示す ( $t = 0.3s \sim 0.4s$ )。なお、横軸は plume 先端付近の反応速度の極大位置からの相対距離である。また、熱伝導による熱移動量の負の値が大きくなるということは、そこからの放熱効果が大きいことを表す。

先の観察と同様に、(2) 重力が大きい場合、plume 先端より下方で plume が細くなるために、そこでの半径方向への放熱効果が大きくなる ((b-2) 参照)。この時、その位置での局所温度は低下し、温度分布に窪みが生じることがわかる ((a-2),  $t = 0.35s$  参照)。一旦 plume 先端付近に軸方向の温度勾配が生じると、直ちに軸方向への放熱効果が大きくなる ((c-2) 参照)。このようにして、plume 先端はより多くの放熱効果を受けることになり、その結果、時間の経過と共にその温度は低下する ((a-2),  $t = 0.4s$  参照)。これが plume 先端における着火が妨げられる理由である。

一方、(1) 重力が小さい場合、plume 先端付近における半径方向および軸方向への熱伝導による熱移動量の時間的变化は非常に小さく、ほぼ準定常的であることがわかる ((b, c-1) 参照)。このように、重力が小さい場合には、重力が大きい場



合と異なり、放熱を促進する効果が存在しない。そのため、そこで起こる発熱反応がもたらす局所温度の上昇は減速されず ( $a-1$  参照)、その位置で着火に至ることができる。

以上により、重力が大きくなると何故先端着火が不可能となるのか、またそれに対して自然対流の影響がどのように作用したのかが明らかになった。

なお、重力の大きい場合に関する plume 先端での変化は、次のように言い換えることもできる。重力が大きい場合、plume 先端の予混合気において熱移動という「物理過程」が、そこに存在していた混合気が化学反応という「化学過程」に比べて早く起こった。すなわち反応が加速する前に放熱が加速されたため、そこでは着火できなくなった。前節で述べたように、重力が小さい場合、plume 先端での化学過程が着火時間を決定したことを含めて考えれば、plume 先端に形成される可燃性予混合気に対する物理および化学過程の重要性が逆転したところが、遷移重力に相当するということもできる。

## 7.6 内部着火が達成できる条件

内部着火領域では、plume 内部の表面近くにおいて着火することが 7.2 節で確認されているが、plume 内部では半径方向への放熱効果が大きくなることも 7.5 節で確認された。これらは一見して矛盾しているように思われるが、両者共に真の現象である。本節では、この矛盾点を解消するために、内部着火に至る以前の物理量の分布を詳細に検討し、内部着火に至るメカニズムを解明する。同時に、内部着火領域内において、着火位置が重力の増加に伴って表面へ移動する理由も考える。

### 7.6.1 内部着火と表面温度との関係

図 7.9 に、内部着火の瞬間以前における中心軸上の物理量の分布 ((a) 酸素の質量分率  $Y_{g,ox}$ , (b) 温度  $T_g$ ) および (c) 半径方向の熱伝導による熱移動量  $Q_{dr}$  の時間変化を示す。前述と同様に、熱伝導量が大きな負の値であれば、そこでの放熱効果が大きいことを表す。

まず (a) に注目すると、一旦 plume が放出された後、酸素濃度分布は準定常状態を保つことがわかる。すなわち、局所反応速度の時間変化は局所温度の時間変化により支配されることになり、ここでも熱移動が反応速度を支配する要素となる。熱移動量に関して補足すれば、 $t = 0.5s$  における plume 内部の軸方向の温度分布は、その先端付近 (図 7.8(a) 参照) に比べて比較的なだらかであるため、軸方向への熱伝導による熱移動はほとんどなく、その大部分が半径方向へのものである。

(c) によれば、 $t = 0.5s$  では表面より離れた位置 (およそ  $z = 2.0cm$ ) から上方にて顕著に現れており、そこでの温度は低下していることがわかる ((b) 参照)。と



ところが、同図によれば、表面付近では、半径方向への放熱効果が少ないために温度分布はほとんど変化しない。これは、例えば図 5.11 からわかるように、表面付近の自然対流が弱いいため plume 形状が顕著に細くならず、そこでの放熱効果が小さいことが考えられる。また、加熱により表面が常に高温に保たれているために、表面近くの混合気は表面から常に加熱されることになる。このように、固体表面の状態は、表面近くでの着火に対して影響をもたらす得る要素となる。

ここで、着火に至るまでの固体の変化について考える。図 7.10 に同条件における固体表面（中心軸上）の各物理量（温度  $T_s$ 、密度  $\rho_s$ 、固体燃料および Char の質量分率（ $Y_{s,F}$  および  $Y_{s,C}$ ））の時間変化を示す。第 5 章で指摘されたように、分解反応のほとんどは  $t = 0.65s$  付近で完了し、それ以降では表面温度は徐々に上昇する。すると、その上方に存在する混合気は徐々に加熱されて、そこでの反応が加速される。この様子は図 7.9(b) における、 $t = 0.6s$  以降の変化に対応している。この状態は緩やかに進行し、plume 内部での発熱が徐々に顕著となり、最終的には内部着火が実現される。

このように、内部着火は表面温度が上昇することにより、放熱効果の少ない表面付近から引き起こされるものであることがわかった。なお、上記のような表面に依存した着火現象はすでに確認されており（例えば [52]）、この説明には矛盾がないものと考えることができる。

## 7.6.2 重力に依存した変化

図 7.1 および図 7.2 によれば、内部着火領域においては重力の増加に伴って着火位置が表面へと近づく。これは、前節での考察を応用して容易に説明することができる。

図 5.6 ( $g = 0.25G$ ) と図 5.11 ( $g = 1.0G$ ) とを比較すればわかるように、重力が大きくなると plume 形状は細くなるため、plume 内部からの放熱効果が顕著になる。また、その効果を受ける領域は重力の増加に伴って広がる。すなわち、高温を保つことができる範囲は、重力が大きいほど表面近くに限られる。着火位置も同様の作用を受けると考えればよい。

以上によって、内部着火の重力依存性だけでなく、それが起こり得るための必要条件を導き出すことができた。



## 7.7 結言

本章では、加熱される固体燃料の気相内における自発着火に与える重力の効果をより詳細に調べ、着火に至るメカニズムが重力によってどのように変化するかを解明した。具体的には、第6章で求められた着火の定義で得られる着火特性を導入し、その重力による変化が、どのような物理現象により引き起されているのかを詳細に調べた。本章で得られた結論を以下に示す。

1. 重力に依存して現れた二種類の着火形態、すなわち先端着火（小さな重力）と内部着火（大きな重力）では、その着火特性が大きく異なる。前者は重力の増加に伴って着火位置は上昇するが、後者はその逆である。
2. ある特定の重力値において、着火形態が急激に遷移する。
3. 先端着火が起こる小さな重力においては、plume 先端での熱移動に与える重力の効果は小さいが、内部着火が起こる大きな重力においては、その効果が顕著に現れ、特に plume 内部から半径方向への熱伝導による放熱効果を促進して、そこでの着火を妨げる。
4. 内部着火を起こす大きな重力においては、plume 内部からの放熱効果は存在するものの、その影響を受けにくい表面付近において着火可能な領域が存在する。
5. 内部着火の可能性は表面温度の上昇により支配される。



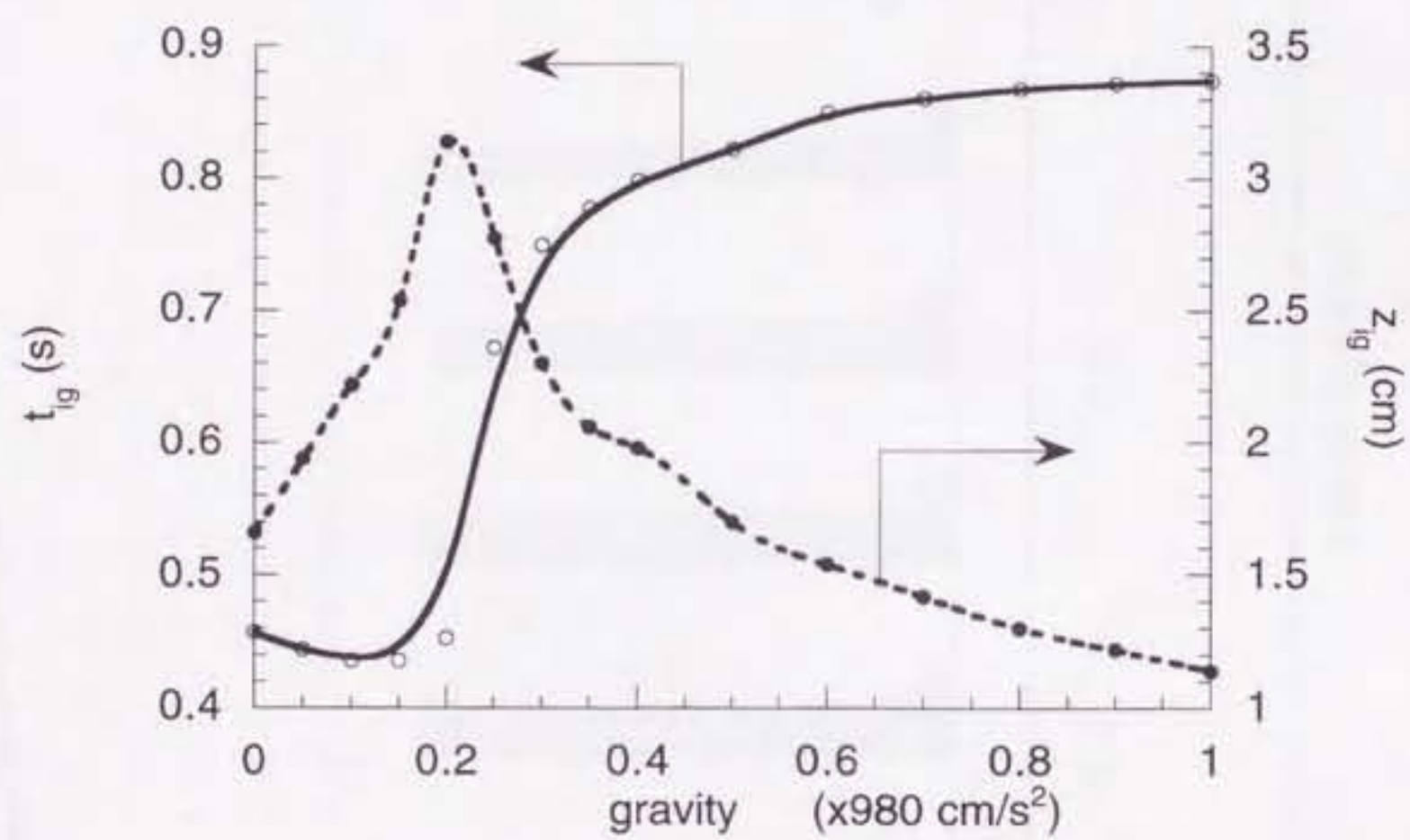


Figure 7.1: The variation of ignition delay time ( $t_{ig}$ ) and ignition position ( $z_{ig}$ ) in various gravities. Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



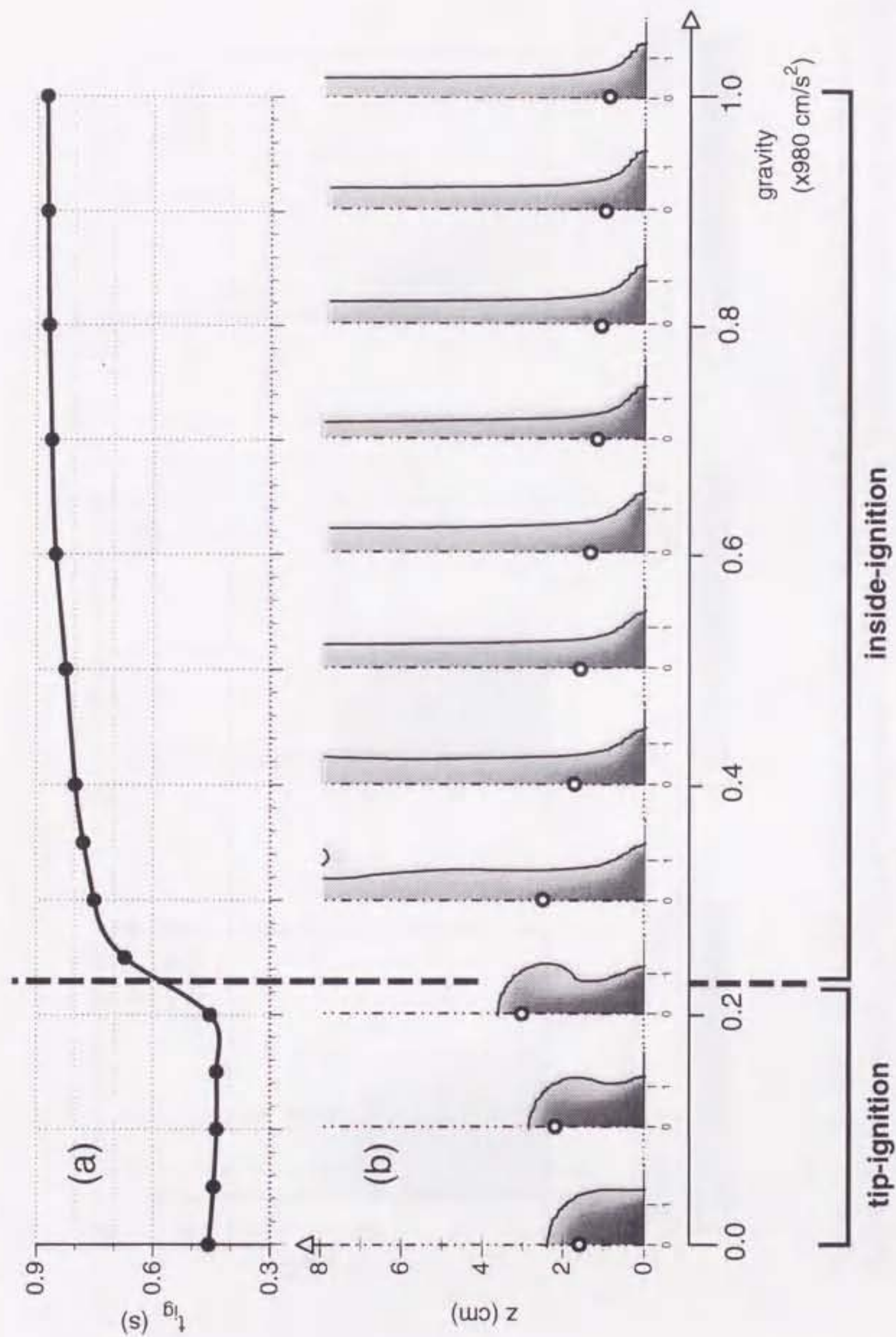


Figure 7.2: The variation of ignition delay time ( $t_{ig}$ ) and ignition position ( $z_{ig}$ ) with instantaneous plume shape at ignition in various gravities. Open circle shows the ignition position. Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



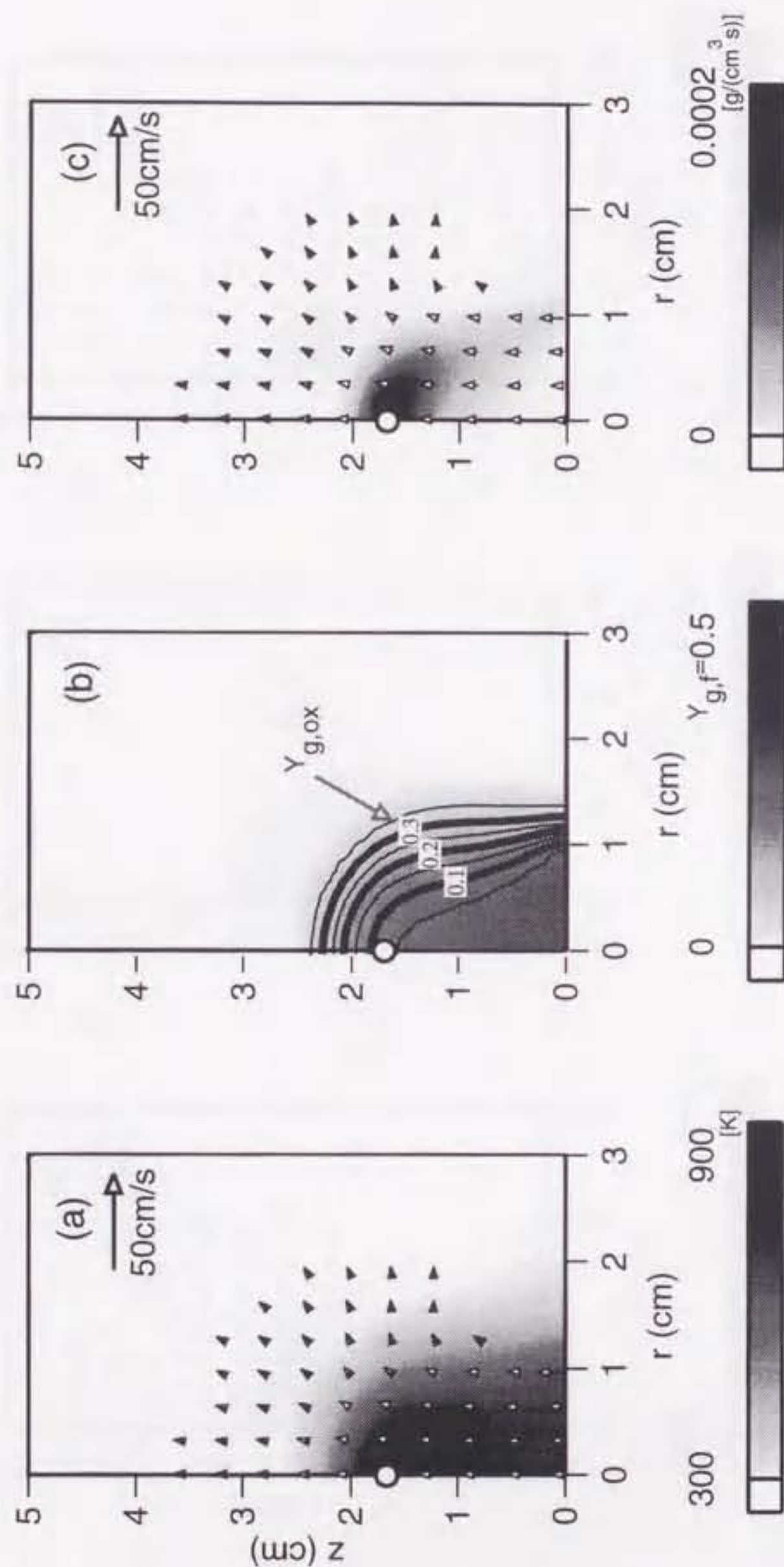


Figure 7.3: Instantaneous 2-D variables distributions in gas-phase for  $g=0.0G$  around the spontaneous ignition ( $t_{ig} = 0.457s$ ); (a) velocity vector and temperature ( $T_g$  [K], 300~900K), (b) species mass fraction (contours: oxygen ( $Y_{g,ox}$ ,  $\Delta Y_{g,ox} = 0.05$ ), patterns: gasified fuel ( $Y_{g,f}$ , 0.0~0.5)), (c) velocity vector and reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [g/cm³s], 0.0~2.0x10<sup>-4</sup>). Open circle shows the ignition position. Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



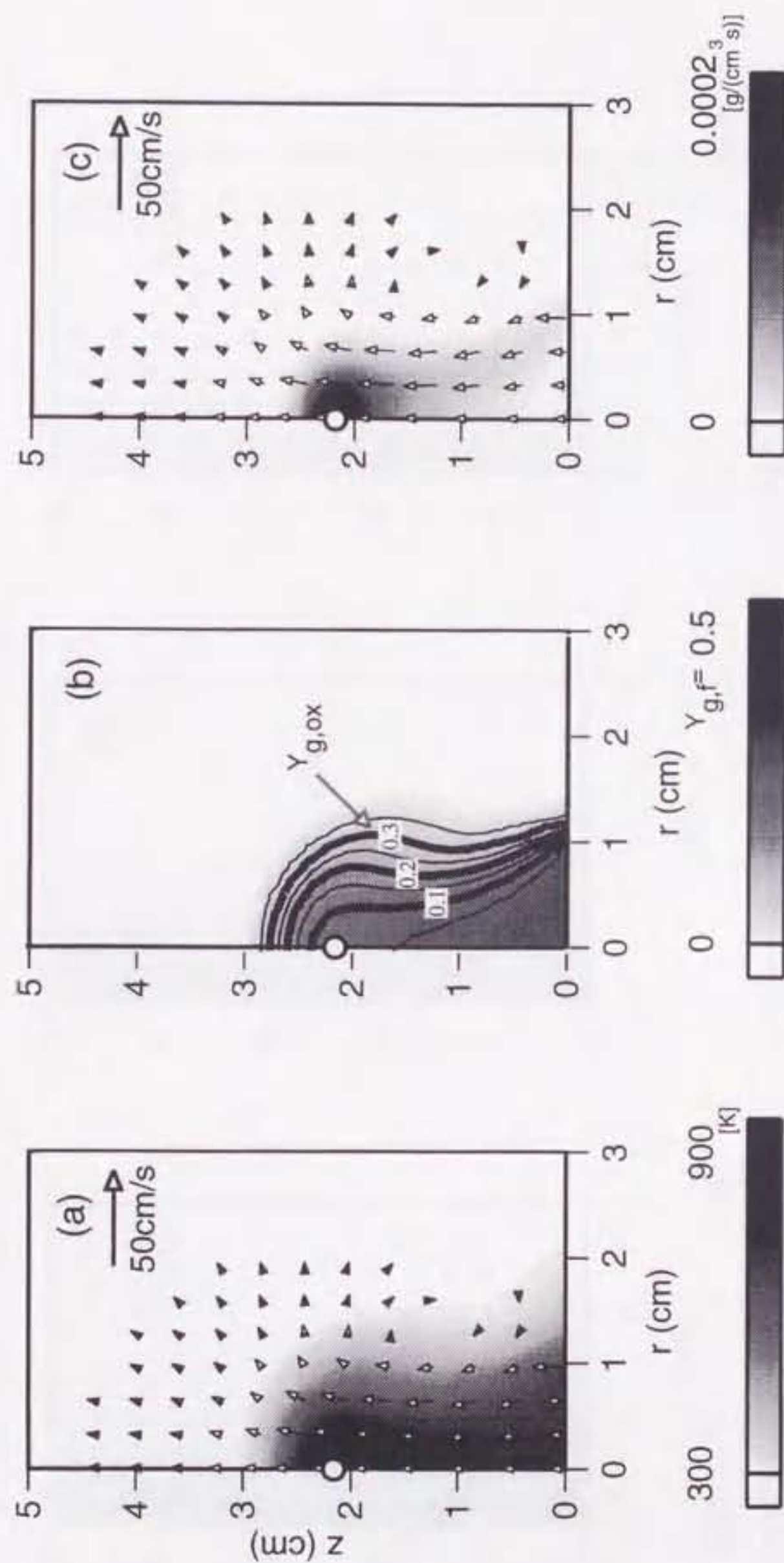


Figure 7.4: Instantaneous 2-D variables distributions in gas-phase for  $g=0.1G$  around the spontaneous ignition ( $t_{ig} = 0.436s$ ); (a) velocity vector and temperature ( $T_g$  [K], 300~900K), (b) species mass fraction (contours: oxygen ( $Y_{g,ox}$ ,  $\Delta Y_{g,ox} = 0.05$ ), patterns: gasified fuel ( $Y_{g,f}$ , 0.0~0.5)), (c) velocity vector and reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [g/cm<sup>3</sup>s], 0.0~2.0x10<sup>-4</sup>). Open circle shows the ignition position. Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



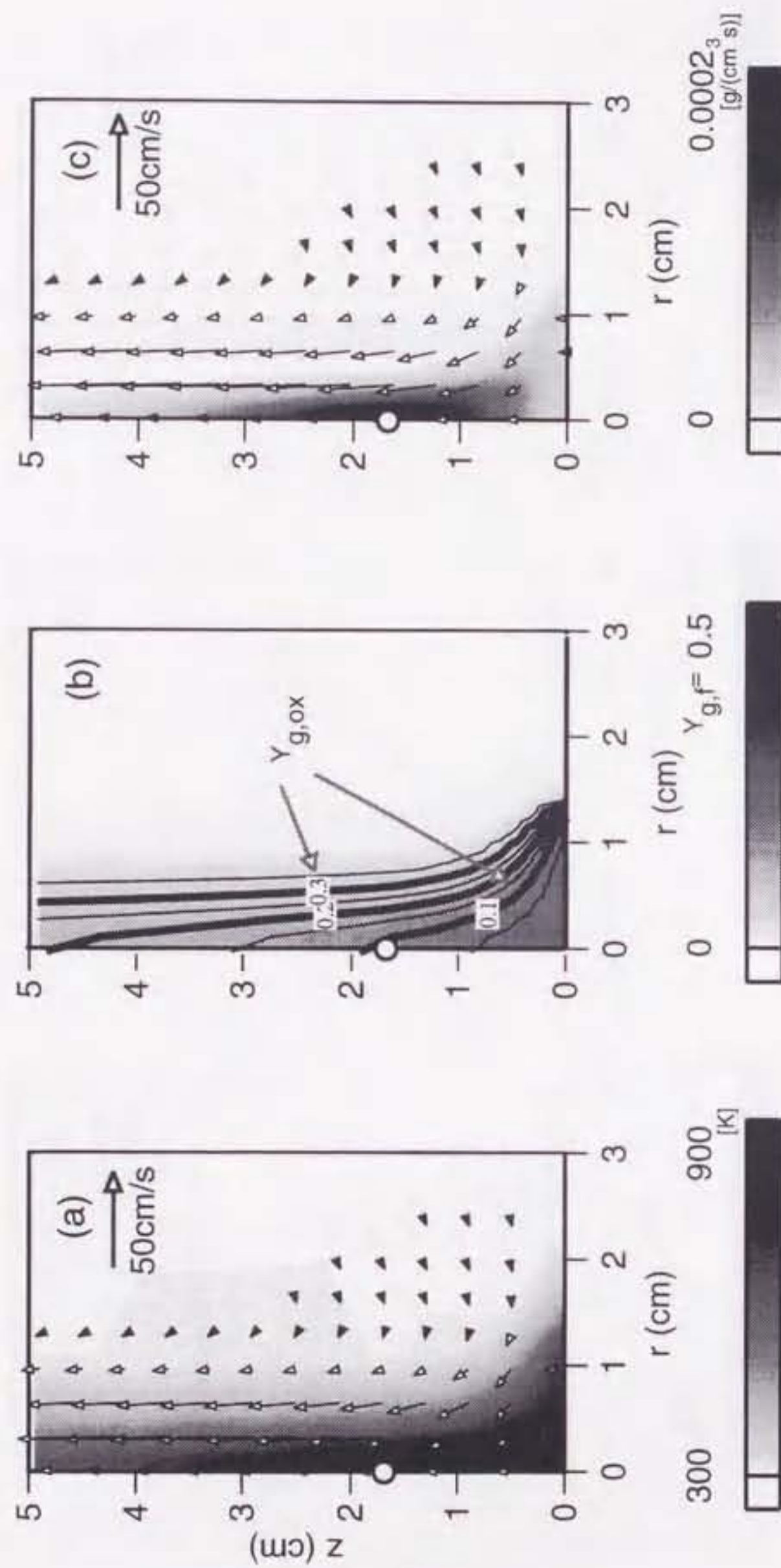


Figure 7.5: Instantaneous 2-D variables distributions in gas-phase for  $g=0.5G$  around the spontaneous ignition ( $t_{ig} = 0.832s$ ); (a) velocity vector and temperature ( $T_g$  [K], 300~900K), (b) species mass fraction (contours: oxygen ( $Y_{g,ox}$ ,  $\Delta Y_{g,ox}=0.05$ ), patterns: gasified fuel ( $Y_{g,f}$ , 0.0~0.5)), (c) velocity vector and reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [g/cm³s], 0.0~2.0x10⁻⁴). Open circle shows the ignition position. Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



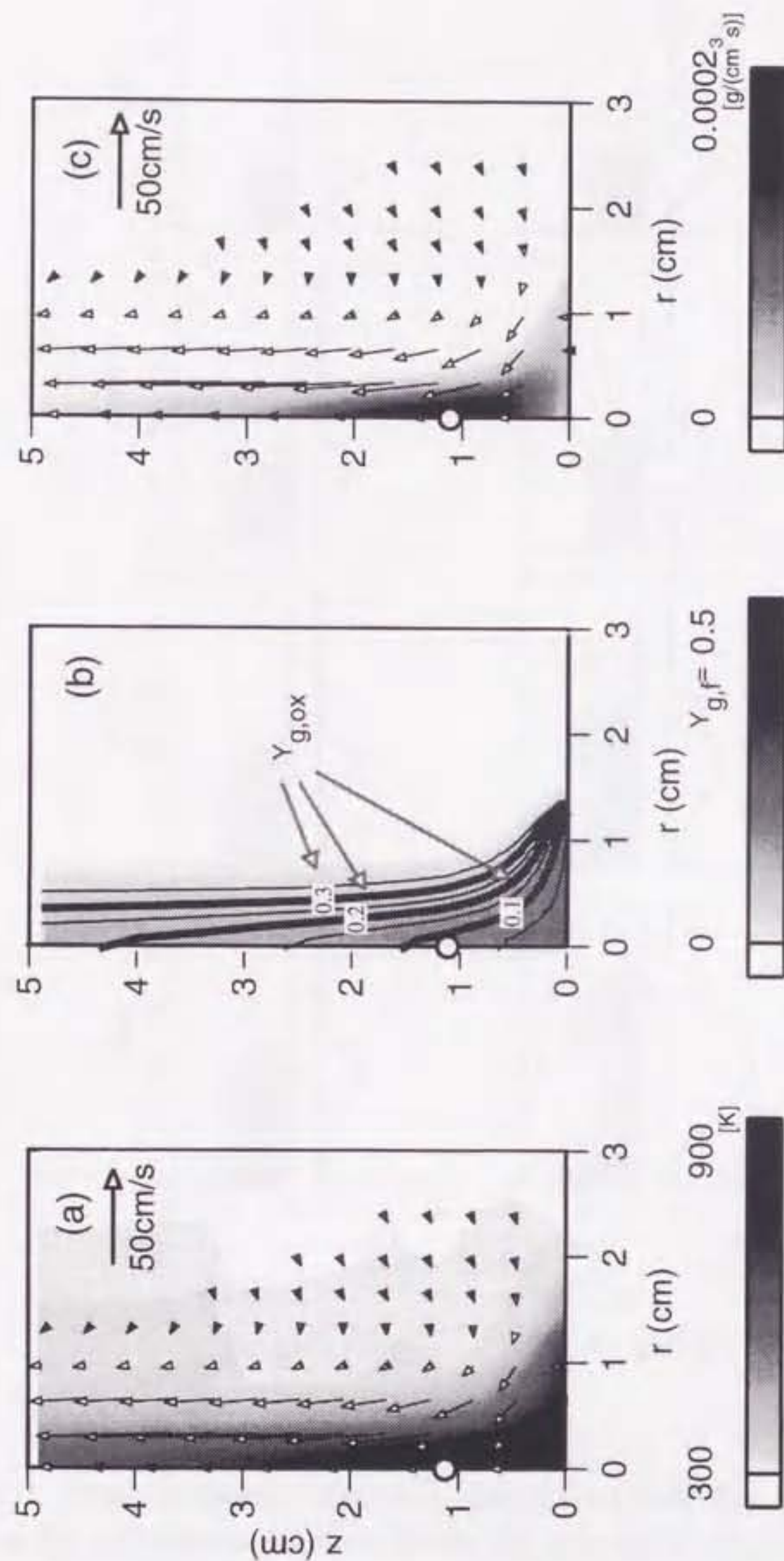


Figure 7.6: Instantaneous 2-D variables distributions in gas-phase for  $g=1.0G$  around the spontaneous ignition ( $t_{ig} = 0.874s$ ); (a) velocity vector and temperature ( $T_g$  [K], 300~900K), (b) species mass fraction (contours: oxygen ( $Y_{g,ox}$ ,  $\Delta Y_{g,ox} = 0.05$ ), patterns: gasified fuel ( $Y_{g,f}$ , 0.0~0.5)), (c) velocity vector and reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [g/cm<sup>3</sup>s], 0.0~2.0x10<sup>-4</sup>). Open circle shows the ignition position. Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



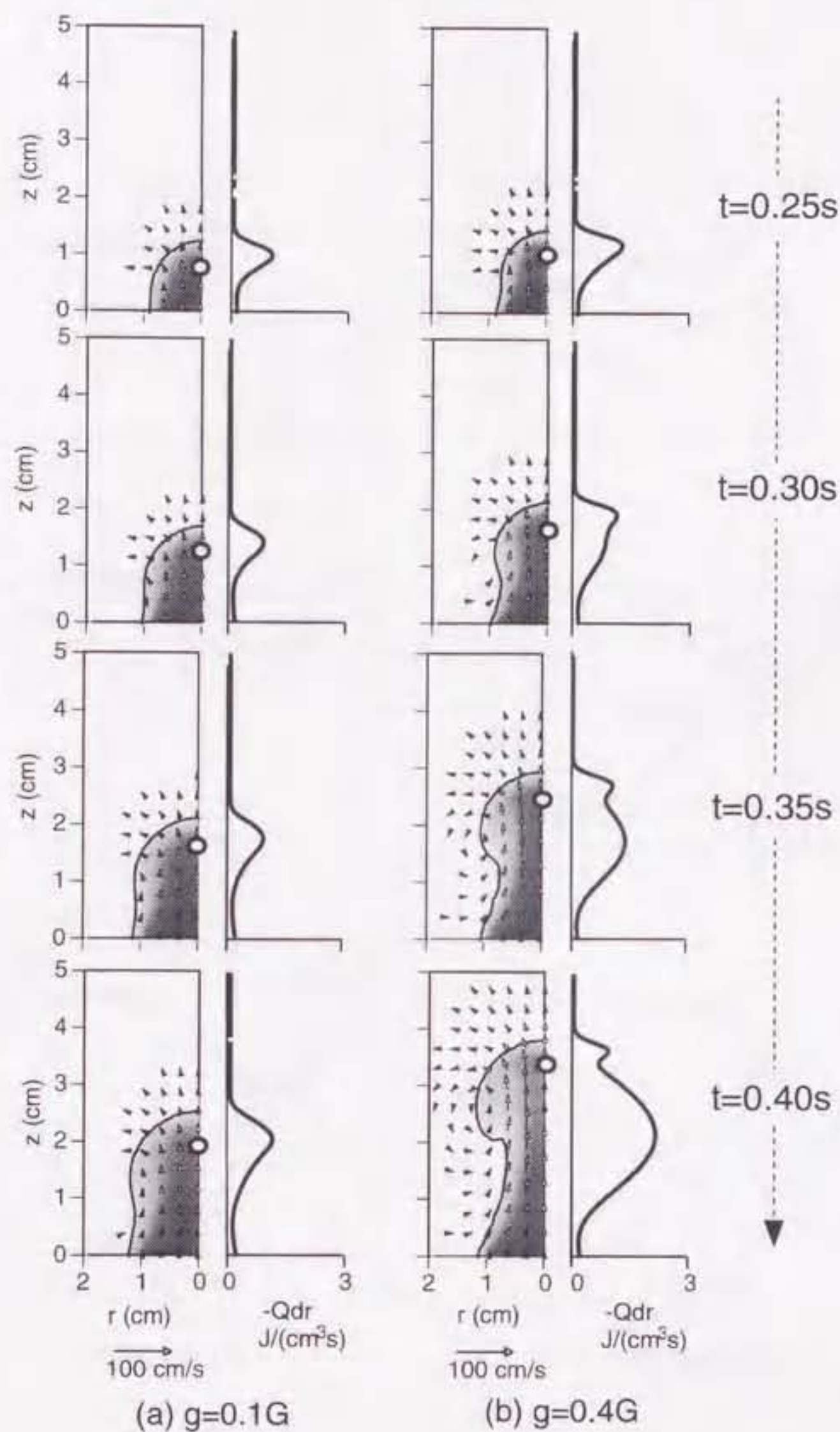


Figure 7.7: Time-sequence of plume shape and velocity field (on left), and heat loss by radial conduction from the plume ( $-Q_{dr}$ ,  $[J/(cm^3s)]$ ) on the center axis (on right) for (a)  $g = 0.1G$  (=typical case of tip-ignition) and (b)  $g = 0.4G$  (=typical case of inside-ignition),  $t = 0.25s \sim 0.4s$ . On left, patterns represent typical plume shape by gasified fuel concentration ( $Y_{g,f}$ ,  $0.0 \sim 0.5$ ) and lines show 1/10 contours of maximum gasified fuel concentration ( $= 0.05$ ). Circles show that local maximum reaction rate at the vicinity of plume tip. Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



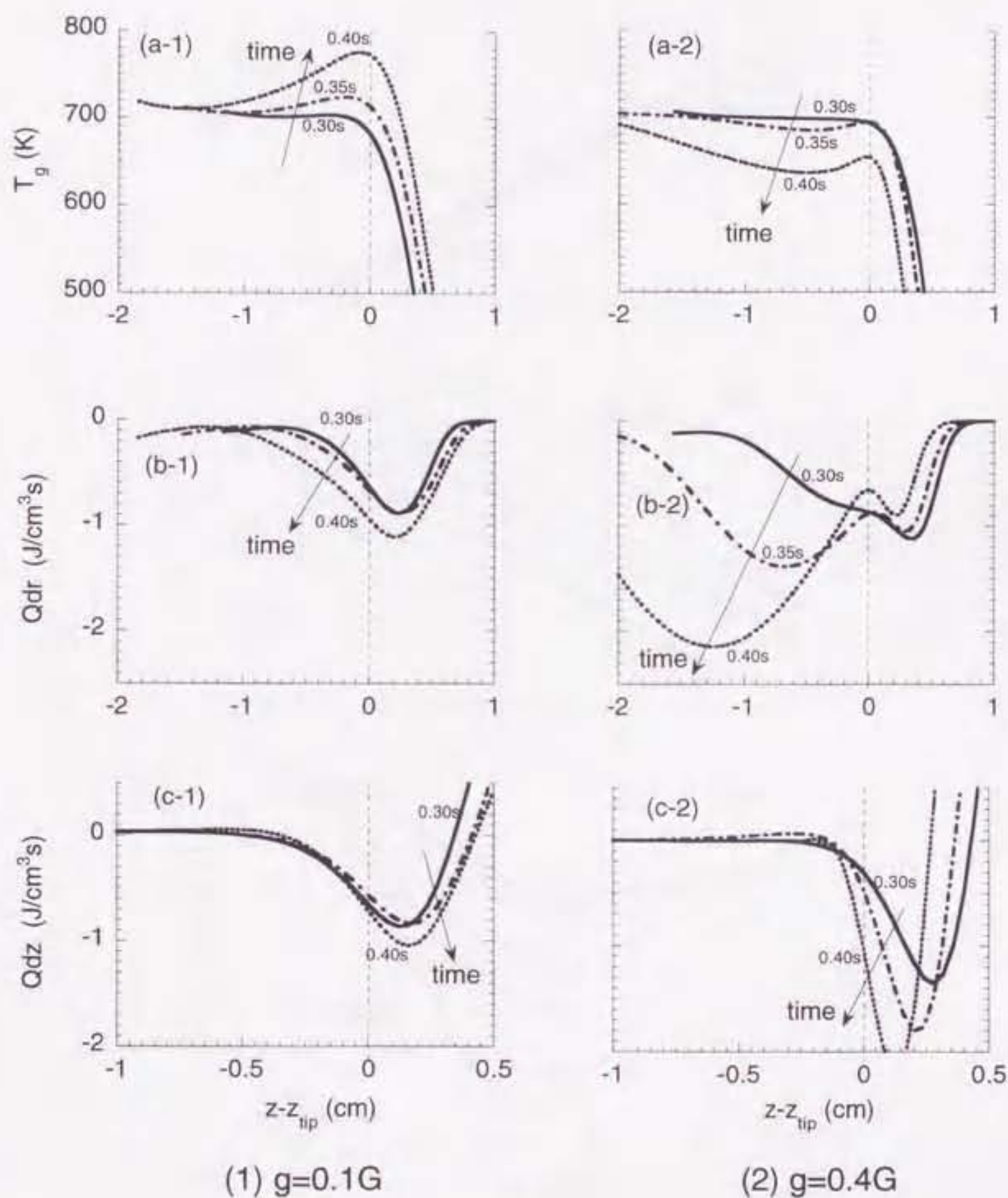


Figure 7.8: Time-variation of the relative distributions of (a) temperature ( $T_g$  [K]), (b) radial and (c) axial heat conduction ( $-Q_{dr}$ , [ $J/(cm^3 s)$ ], ( $-Q_{dz}$ , [ $J/(cm^3 s)$ ]) on the center axis from the plume tip for (1)  $g = 0.1G$  (=typical case of tip-ignition) and (2)  $g = 0.4G$  (=typical case of inside-ignition),  $t = 0.3s \sim 0.4s$ .  $z_{tip}$  represents the location of plume tip and is defined the position of local maximum reaction rate at the vicinity of the plume tip. Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



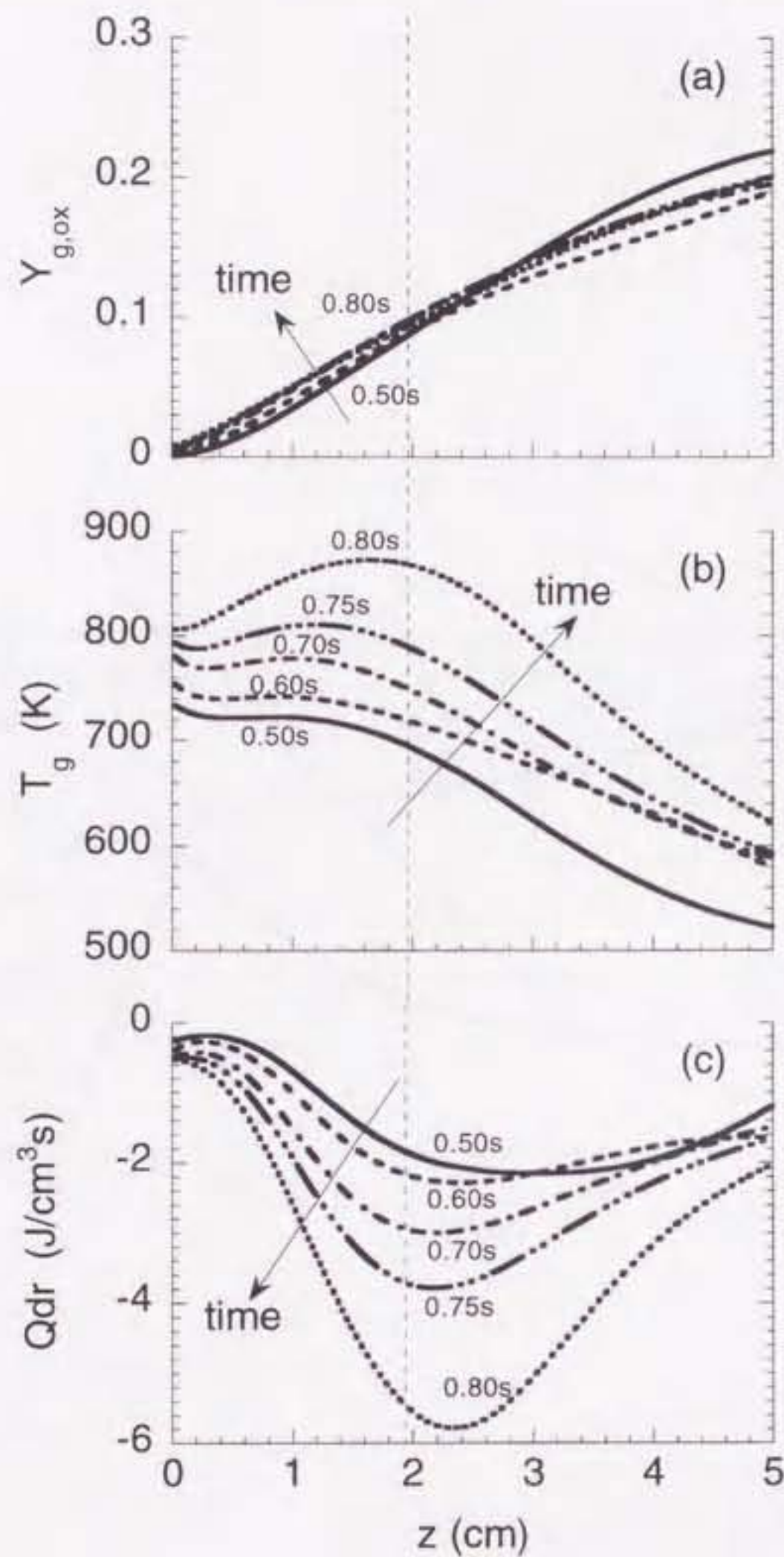


Figure 7.9: Time-variation of the distributions of (a) oxygen concentration ( $Y_{g,ox}$ ), (b) temperature ( $T_g$  [K]) and (c) radial heat loss by conduction ( $-Q_{dr}$ , [ $J/(cm^3s)$ ]) on the center axis for typical case of inside-ignition ( $g = 0.4G$ ),  $t = 0.5s \sim 0.8s$ . Vertical dashed line shows the ignition position under the given condition. Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



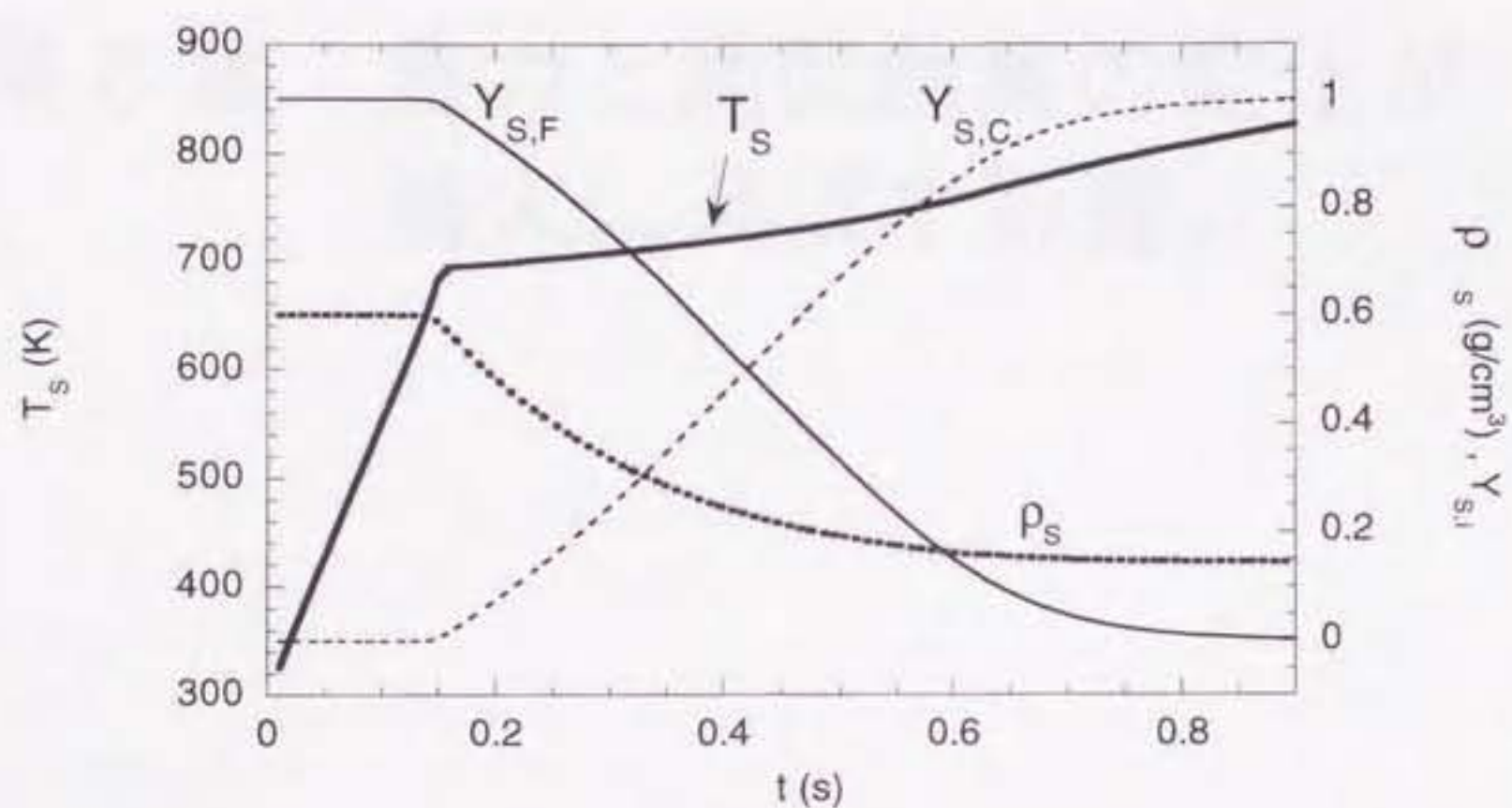


Figure 7.10: Time-change of solid surface temperature ( $T_s$  [K]), solid density ( $\rho_s$  [g/cm<sup>3</sup>]), mass fractions of solid species (virgin fuel:  $Y_F$ , char:  $Y_C$ ) on the center axis for typical case of inside-ignition ( $g = 0.4G$ ). Adopted ambient oxygen concentration is 0.4.



## 第 8 章 重力と周囲酸素の変化が 着火に及ぼす影響<sup>[91]</sup>



## 第8章 重力と周囲酸素の変化が着火に及ぼす影響

### 8.1 緒言

前章までの検討により、着火のメカニズムに与える重力の影響を知ることができた。しかし、この結果を実用的に生かすためには、その影響の程度がどれくらいであるのかを提示する必要がある。そこで本章では、重力に加えて周囲酸素濃度も様々に変化させた場合の自発着火を調べ、重力が自発着火に与える影響の程度が周囲酸素濃度のそれに比べて相対的にどのくらいであるのかを検討した。本研究において、周囲酸素濃度をパラメータの一つとして用いた理由は、これまで多くの着火研究において重要であると結論されており、かつ比較的そのデータが多く存在することによる（例えば [8, 12, 19, 53, 94]）。

また、本章における検討は、最近盛んに行われている微小重力環境での着火実験にも、以下の理由により役立てることができる。実際の微小重力実験は、安定した現象を得るために高酸素濃度環境で行われるものが多い。また、現在において微小重力環境を得るのには、主に落下塔あるいは放物飛行（またはスペースシャトル）が利用されている。ところが、これらの手法では完全な無重力環境を得ることができず、一般に  $g = 10^{-5}G \sim 10^{-2}G$  程度の重力が除去できずに残る（以下「残留重力」と呼ぶ）と言われている [3]。そこで「この程度の残留重力は人為的に設定された周囲酸素濃度場において無視できる程度であるのか？」という疑問が生じる。これは、得られる実験データの信頼性に関わる重要な課題であるが、今までの研究において報告された例はない。本章における議論は、この疑問を解決することができることに於いて実用的であり、着火のメカニズムをより詳しく検討することにもなるので科学的にも有用である。後者に関しては、周囲酸素濃度を変化させることにより得られた知見の一つとして、無重力着火の物理的特徴に関する考察を本章中で行った。

本章を通じて用いられたパラメータは、重力および周囲酸素濃度の二つであり、その変化範囲は、重力は無重力から通常重力まで ( $g = 0.0G \sim 1.0G$ )、周囲酸素濃度に関しては、周囲が完全不活性ガスから純酸素まで ( $Y_{O_2,\infty} = 0.0 \sim 1.0$ ) の範囲である。



## 8.2 周囲酸素による着火特性の変化

### 8.2.1 重力および周囲酸素濃度を变化させた場合の着火形態

図8.1に、重力および周囲酸素濃度の可変範囲内における着火形態の分布を調べた。この図からわかるように、明らかに三種類の着火形態として分類可能である。すなわち、小さな重力および高酸素濃度場においては「先端着火 (= tip-ignition)」が、大きな重力および中酸素濃度場においては「内部着火 (= inside-ignition)」が実現され、それ以下の酸素濃度場では、重力に無関係に「着火不能 (= non-ignition)」となる。ただし、本解析の対象とした物理時間はせいぜい  $t < 2.0\text{s}$  であるので、これ以上の加熱時間で起こり得る着火に関しては、本研究では議論の対象とはしない。

### 8.2.2 周囲酸素濃度が着火特性に与える影響

次に、周囲酸素濃度の増減により、どのような着火が実現されるのかを調べた。図8.2に、通常重力下 ( $g = 1.0G$ ) における着火時間および着火の瞬間の plume 形状と着火位置の周囲酸素濃度による変化を示す。なお、図の説明は前述の図7.2と同じである。この図は、図8.1内に点線で表示した部分の変化に対応し、周囲酸素濃度を増加させると、「着火不能」→「内部着火」→「先端着火」の順に実現される。

この図によれば、たとえ通常重力下であっても、周囲酸素濃度が高い条件では plume 先端において着火することが示されている。その着火時間は非常に早く、ほぼ固体表面から分解生成ガスが噴き出した直後 (約  $t = 0.2\text{s}$  程度) に対応している。高酸素濃度領域 (すなわち先端着火領域) では、着火時間の周囲酸素濃度に対する依存性は非常に小さいことが言える。また、同じく高酸素濃度領域における着火位置の周囲酸素濃度に対する変化に着目すると、若干ではあるが周囲酸素濃度の増加に伴って着火位置が表面へと近付くことがわかる。これは Kashiwagi らの実験と同じ傾向である [55]。

注目すべきことは、この図で見られる周囲酸素による着火特性の変化は、図7.2での重力によるそれとはほぼ逆の傾向を示していることである。これは、それぞれのパラメータによる着火時間と着火位置の挙動を一度に表した図8.3によっても理解できる。すなわち、重力の増加は着火時間を遅らせて着火を妨げる働きを持つが、周囲酸素濃度の増加は着火時間を常に早めて着火を促進する働きをもつ。また、二種類の着火形態の領域、すなわち先端着火領域および内部着火領域での着火位置の応答は、重力を変化させても周囲酸素を変化させても常に逆になり、両者の着火の性質の違いは、パラメータに依存したものでないことがわかる。



### 8.3 高酸素濃度場での着火

図8.1あるいは図8.2によれば、通常重力場であっても高酸素濃度場であれば先端着火することが示されている。これは、「重力により誘起された自然対流がそこでの着火を妨げる」という前述した結論と反するように思われる。本節では、この条件における着火の瞬間について詳しく調べ、その理解を深める。

図8.4に、通常重力および周囲純酸素状態における着火の瞬間の (a) 気相の温度  $T_g$ , (b) 成分の質量分率 (可燃ガス  $Y_{g,f}$ , 酸素  $Y_{g,ox}$ ), (c) 反応速度の二次元分布を示す。(a) と (c) には速度ベクトルを併せて表記した。なお、図の見方は前述のもの (例えば図7.3) と同じである。この図によれば、着火の瞬間の流れ場は、通常重力であるとはいえ非常に弱いことがわかる。前述の「重力が小さい場合の先端着火の瞬間図 (図7.3等)」を比較すれば、流れ場に関しては、それらはほぼ同じであると判断できる。すなわち、両者の着火は本質的には同じ物理であるといえる。意外とも思えるのは、通常重力での流れ場の弱さであるが、これは着火に至るまでの時間が非常に早いために、その時間内に浮力により流れが加速されずに淀んでいるためと考えられる (図8.4(a) または (c) 参照)。ちなみに、この条件における着火時間は、固体表面からの分解生成ガスの噴き出し (約  $t = 0.15s$  付近) が始まった  $0.06s$  後である。

また、周囲酸素濃度が非常に高いため、高温の可燃性予混合気がすぐさま plume 界面上に形成されるだけでなく、それは非常に反応性の高い予混合気となる。すなわち、7.3節で述べた「(着火に必要な) 化学おくれ」時間が短くなり、瞬時の着火が実現されたことになる。

以上をまとめると、高酸素濃度であるために着火時間が早まり、着火は流れの影響を受けない「先端着火」として実現されたことになる。すなわち、図8.1において図中「tip-ignition」で示される領域での着火は、上記の理由により、通常重力下であっても、自然対流による熱および物質移動が促進されないうちに着火に至るため、結果として無重力における着火と同質であると言える。

### 8.4 無重力着火

前節において、先端着火は無重力着火と同質であることが示唆された。すなわち図8.1における「tip-ignition」の領域では、どの条件においても無重力と同じ着火現象が見られることになる。本節では、この領域における着火特性の振る舞いに注目し、無重力着火の性質を理解する。

図8.5に、(a) 無重力 ( $g = 0.0G$ ) および (b) 通常重力 ( $g = 1.0G$ ) における着火時間の周囲酸素濃度に対する変化を示し、(c) にそれらの合成図を示す。(a) によれば、無重力の場合、着火時間は周囲酸素濃度の増加に対して指数関数的に減少することがわかる。また、同様の変化が (b) または (c) の通常重力の場合における高酸素濃度領域、すなわち「tip-ignition」の領域でも見られることがわかる。以上



より、その領域では重力に無関係に、周囲酸素濃度のみで着火時間が決定されることが示唆される。また、この着火時間の周囲酸素濃度依存性は、図 8.6 で示されるような一次元解析および液滴の着火と定性的に合致する [12, 19]。液滴を使った実験では一次元的な現象を模擬していることと同じであることを考慮すれば、無重力着火は一次元的な着火と同質であると考えることができる。

実際の微小重力における着火過程では、図 7.8 に見られるように半径および軸方向への熱（および物質）移動が存在するため、多次元の現象である。しかし、同図で見られるように、半径方向への熱（および物質）移動による plume 内部の時間的变化は小さく、これは先端着火を起こす物理には影響しない。そのため、結果は一次元の現象と同じものが得られる。

一方、(b) より、酸素濃度が低くなることで着火の遷移が起こると、高酸素濃度場では見られなかった重力による差が生じ、周囲酸素濃度による変化度合も、高酸素濃度場のそれとは明らかに異なることがわかる。これは、低酸素濃度領域での着火は、前章で述べたように重力による影響を受け、周囲酸素濃度だけが着火を支配する要因ではなくなることに由来する。この時、重力の影響は半径方向への熱損失を通じて着火に現れるため、現象変化方向（すなわち軸方向）のみを考慮するという一次元的な解釈はできなくなる。このように「重力着火」とは多次元的な熱および物質移動が促進され、それが着火に影響することを指し、これが「無重力着火」との相違点である。

## 8.5 重力と周囲酸素濃度とが着火に与える影響の比較

本節では、重力が着火に与える影響が周囲酸素濃度のそれに比べてどの程度なのかを検討する。前節の議論により、図 8.1 における「tip-ignition」の領域では、着火時間に対して周囲酸素濃度が現象を支配しており、重力の影響は無視できる程小さいことが示された。また、「non-ignition」の領域では、周囲酸素が希薄すぎるために熱損失が最も少ない無重力の場合でも反応を加速することができない（つまり前述の「化学おくれ」時間が無限大）ことが示唆される。この領域における現象は、当然ながら重力に無関係で、先端着火領域と同様に、周囲酸素濃度のみで決まる。一方、図 8.1 における「inside-ignition」の領域では、着火時間に与える重力による影響が大きくなる、すなわち重力により「物理おくれ」が影響されることにより、現象は重力と周囲酸素の両方のバランスで決定されることも示された。以上から、支配領域の大きさを本解析の変化範囲で比較すれば、周囲酸素濃度の方が重力に比べて着火現象を支配する程度が大きいと言える。

以上の考察より、実用例として 8.1 節で挙げた「（微小重力環境をもたらす装置では除去しきれない）残留重力下での着火データに関して払うべき注意事項」が確定できる。図 8.1 により、残留重力がせいぜい 0.1G 程度であれば、周囲酸素濃度を少々高めに設定しておけば無重力着火が実現できる。逆に、小さな周囲酸素を



用いる場合には、微かな残留重力であっても「inside-ignition」の領域に入る、すなわち無重力着火とはならない場合が生じる恐れがある。そのため、実験環境において設定する周囲酸素濃度が低い場合、残留重力を極力小さくすることが実験データの信頼性を高めるのに必要不可欠であることが示唆される。

## 8.6 着火実験への提案

今までの議論により、本研究の数値計算結果から着火のメカニズムに関する多くの知見を得た。それらの結果を応用し、着火計測に対する有用な提案を行うことで本論文の最後とする。

周囲酸素濃度が比較的低い場合、観測される着火には「先端着火」と「内部着火」の両者の形態が存在し得る。本研究の結果によれば、その二種類の着火現象においては、現象を支配しているパラメータが異なるので、実験中に観測している着火がそのいずれに相当するのかは判別しておきたい情報の一つである。観測において、シュリーレン像等を用いれば、着火の瞬間の plume 形状を見ることによりその判断は瞬時にできるが、装置が高価かつ複雑となるので、それに取って替わる判断材料があれば都合がよい。

ところで、現在における着火計測においては、採取されているデータとして挙げられるのは「着火時間」に限られているといっても過言ではない。しかし、残念ながら、着火時間の計測だけでは上記の二種類の着火形態を判断するのは困難である。なぜなら、例えば、図 8.5(b) 等で見られるように、周囲酸素濃度を増加すると着火時間は着火形態に関わらずに減少する等、両着火形態共に制御パラメータによる定性的な応答が同一であるからである。

そこで、着火形態の簡単な判断材料として「着火位置の変化を測定」することを提案したい。前述の議論であるように、先端着火および内部着火の範囲では、制御パラメータによる応答が常に逆方向にある。従って、例えば周囲酸素濃度を高くあるいは低くする等の制御を行った場合の、着火位置の応答に着目すれば、容易に着火形態を判別することが可能である。また、着火位置の測定は、例えば熱電対、静電探針 [95] 等を空間的に配置してやり局所の温度履歴を測定することで代用できるため、それほど困難ではなく、実験装置における面倒が増えるわけでもない。

以上のように、本研究で得た知見は学術的にも有用であるだけでなく、実用面にも生かすことのできることを示された。



## 8.7 結言

本章では、様々な重力および周囲酸素濃度において加熱される固体燃料の気相内における自発着火を調べ、それぞれが着火現象に与える影響を比較し、検討を行った。また、それを通じて、無重力着火という現象の理解を深め、固体燃料の自発着火に関して系統的な展開を行った。以下に本章で得られた結論を示す。

1. 周囲酸素濃度を変化させた場合、重力を変化させた場合とほとんど逆の着火特性を得る。
2. 先端着火と内部着火とでは、現象を支配するパラメータが異なり、前者は周囲酸素濃度、後者は重力と周囲酸素濃度の両方である。
3. 先端着火は一次元的な着火過程であるのに対し、内部着火は多次元的な着火過程である。
4. 重力が着火に影響を与える程度は周囲酸素のそれに比べて小さく、ある範囲の周囲酸素濃度に限って両者は同程度になる。
5. 着火位置は、二種類の着火形態を容易に判断する情報を提供してくれるので、実験で測定されるべき有用なデータである。



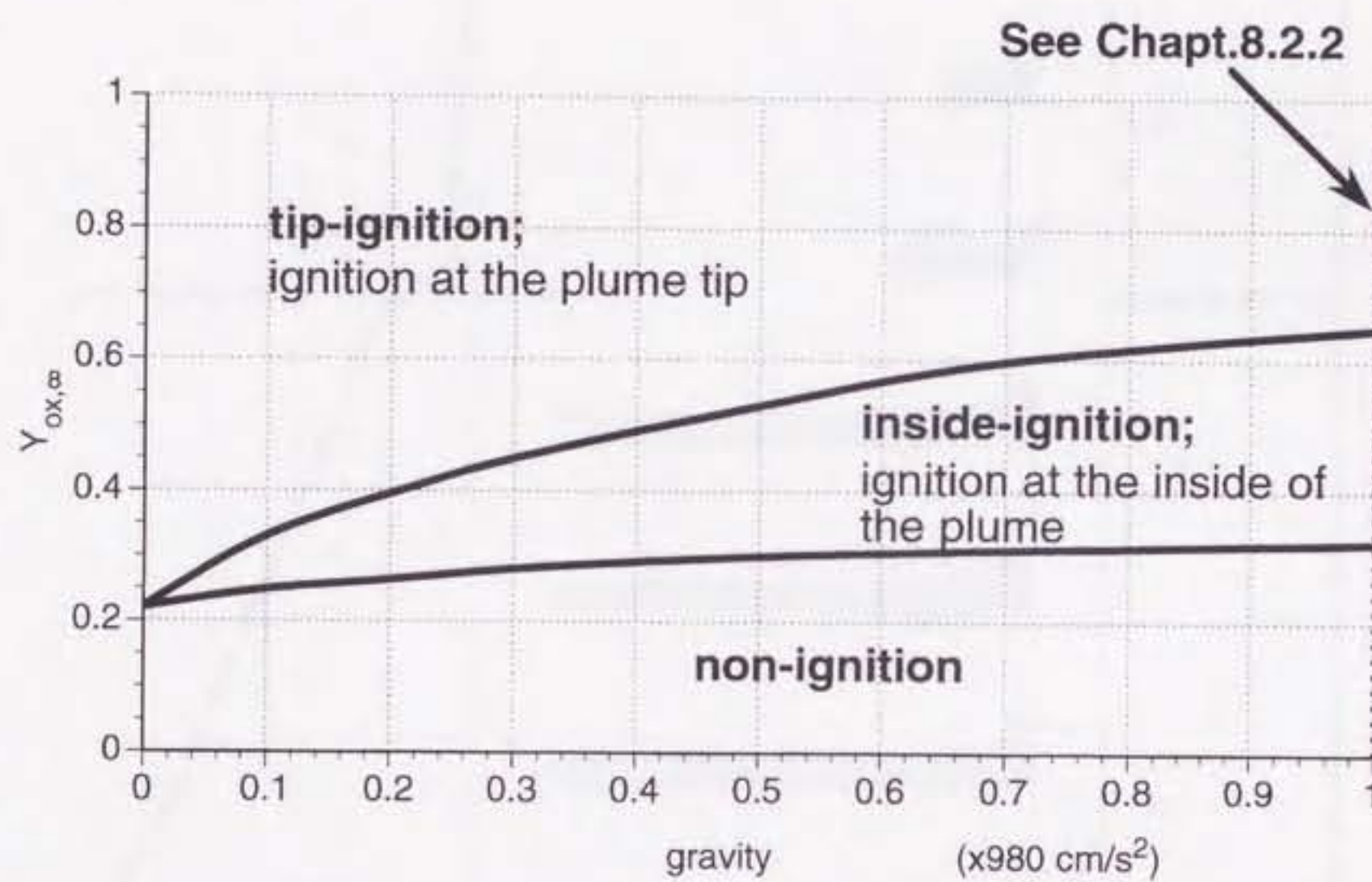


Figure 8.1: Distinct ignition behaviors in gravity vs. ambient oxygen concentration plot.



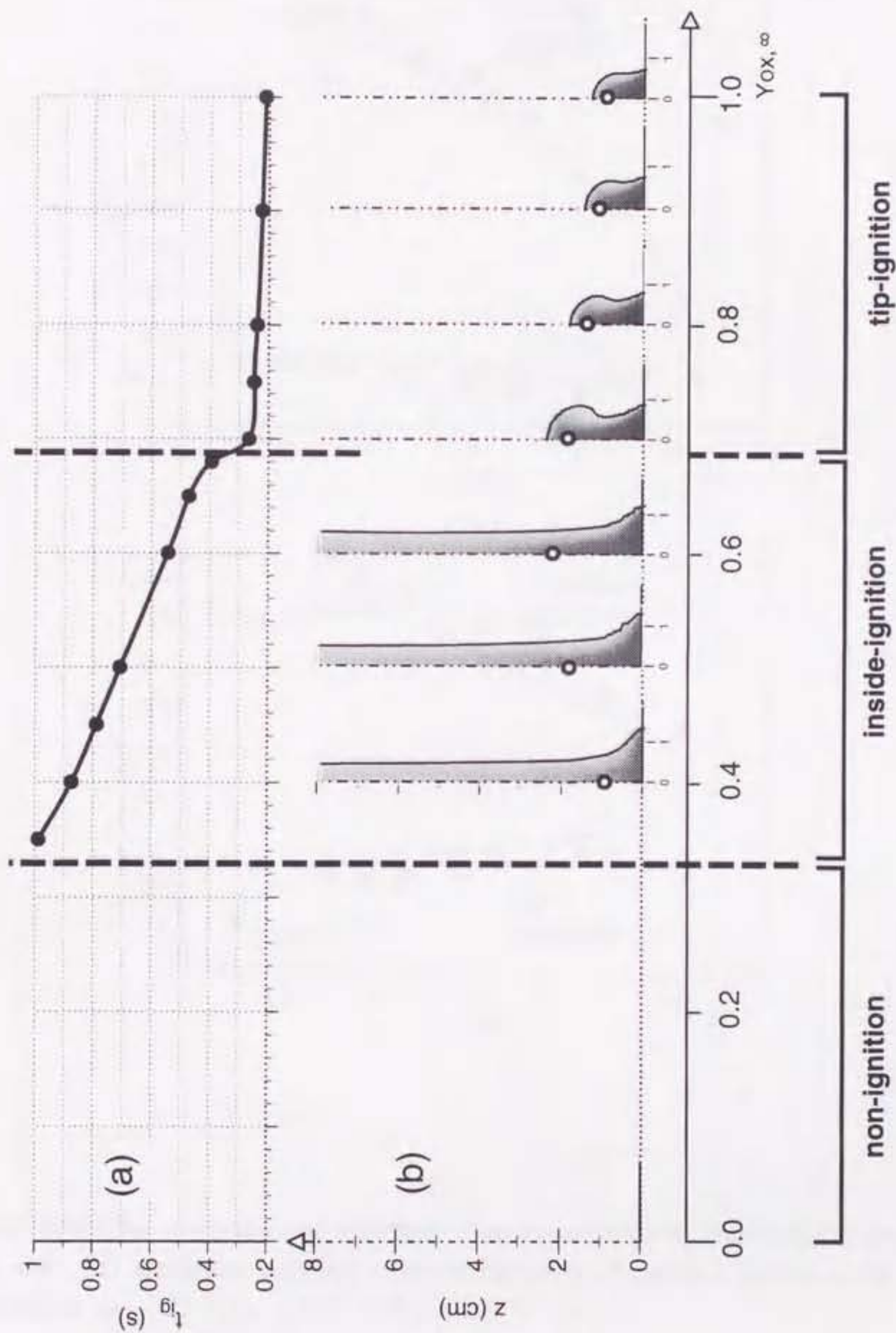


Figure 8.2: The variation of ignition delay time ( $t_{ig}$ ) and ignition position ( $z_{ig}$ ) with instantaneous plume shape at ignition in various ambient oxygen concentrations. Open circle shows the ignition position. Adopted gravity is 1.0G.



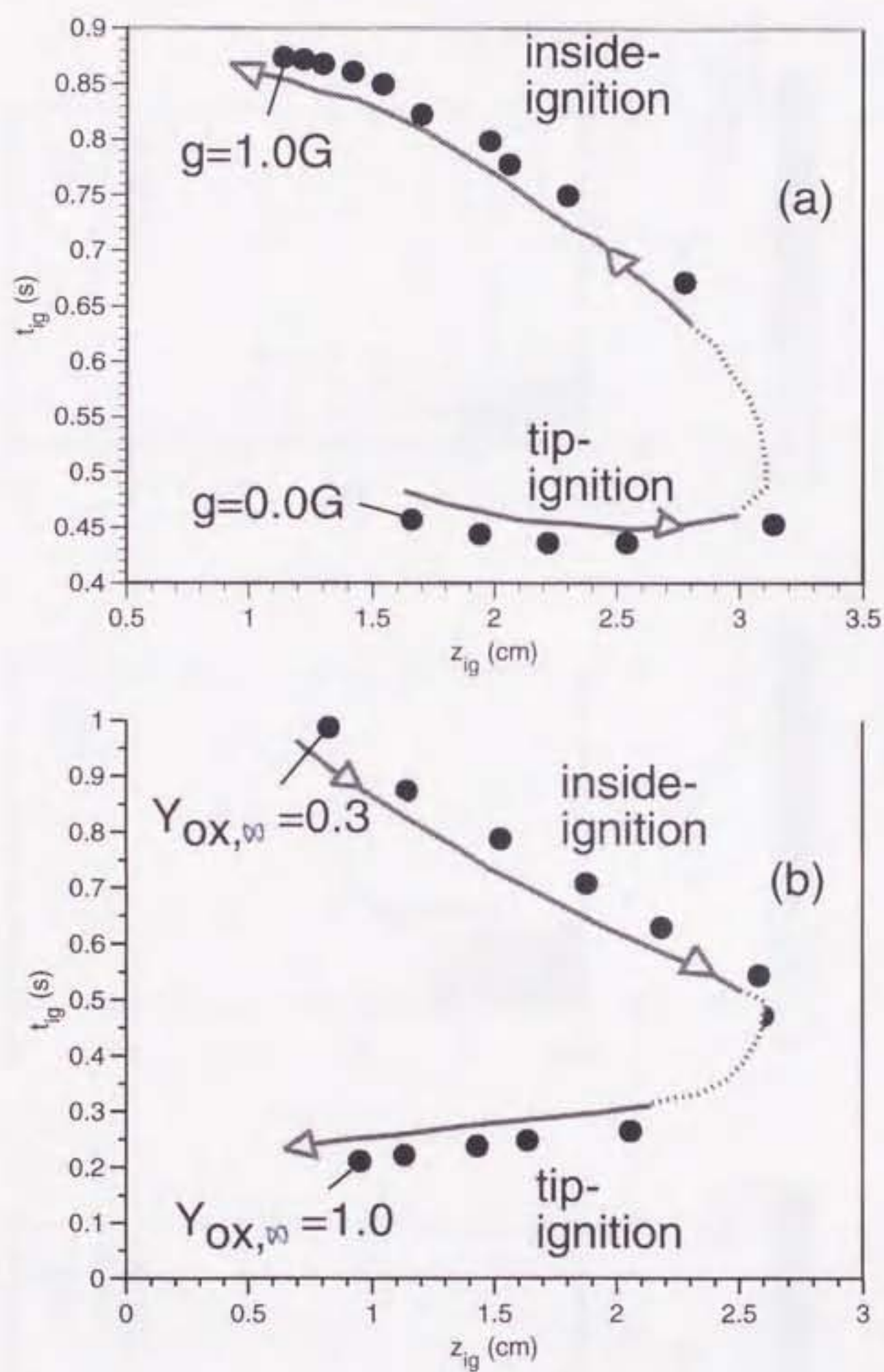


Figure 8.3: The variation of ignition characteristics in various (a) gravities and (b) ambient oxygen concentrations; Adopted environmental conditions are (a)  $Y_{ox,\infty} = 0.4$ , (b)  $g = 1.0G$ .



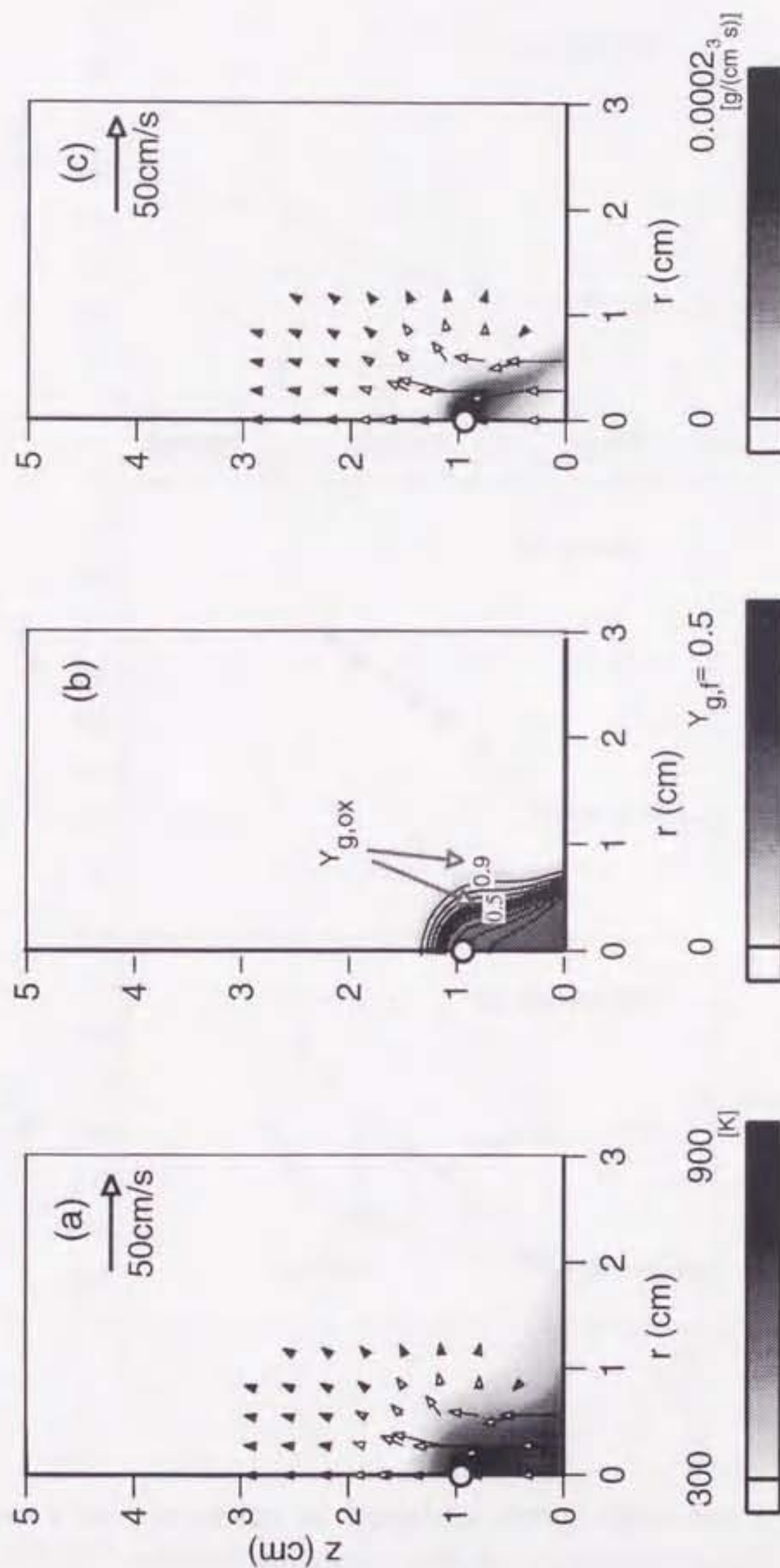


Figure 8.4: Instantaneous 2-D variables distributions in gas-phase for  $g=1.0G$  around the spontaneous ignition ( $t_{ig} = 0.211s$ ); (a) velocity vector and temperature ( $T_g$  [K],  $300 \sim 900K$ ), (b) species mass fraction (contours: oxygen ( $Y_{g,ox}$ ,  $\Delta Y_{g,ox} = 0.05$ ), patterns: gasified fuel ( $Y_{g,f}$ ,  $0.0 \sim 0.5$ )), (c) velocity vector and reaction rate ( $\dot{\omega}_g$  [g/cm³s],  $0.0 \sim 2.0 \times 10^{-4}$ ). Open circle shows the ignition position. Adopted ambient oxygen concentration is 1.0.



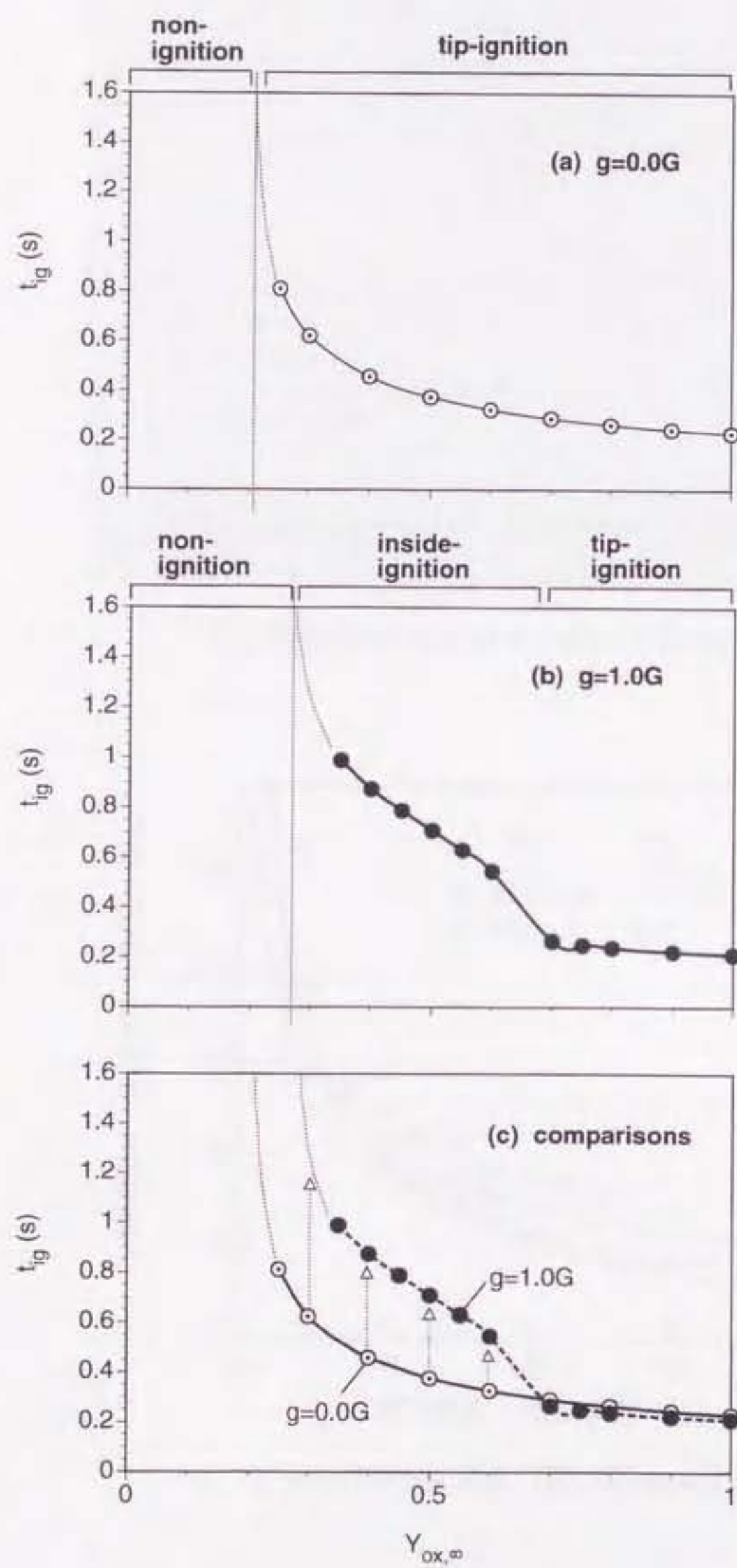
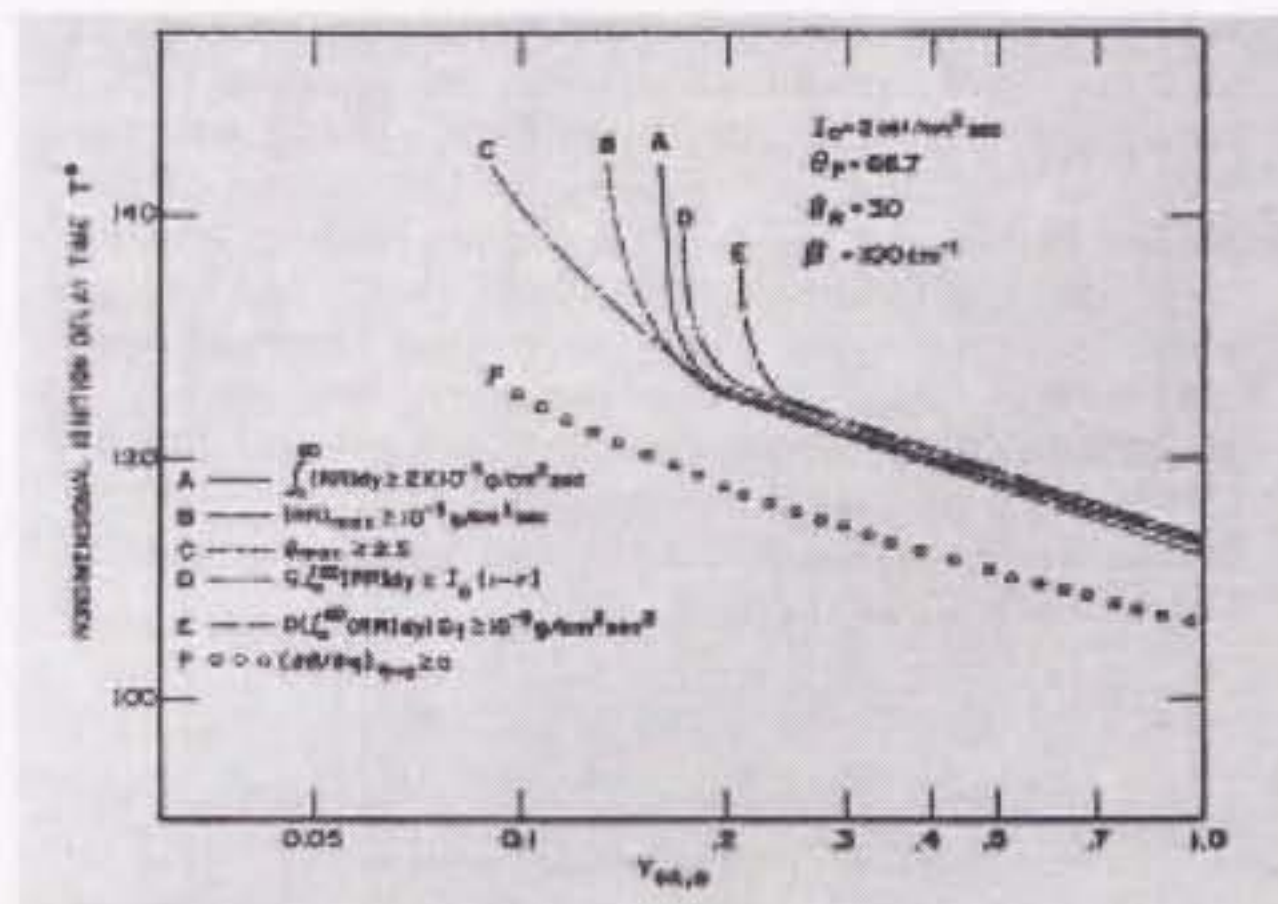
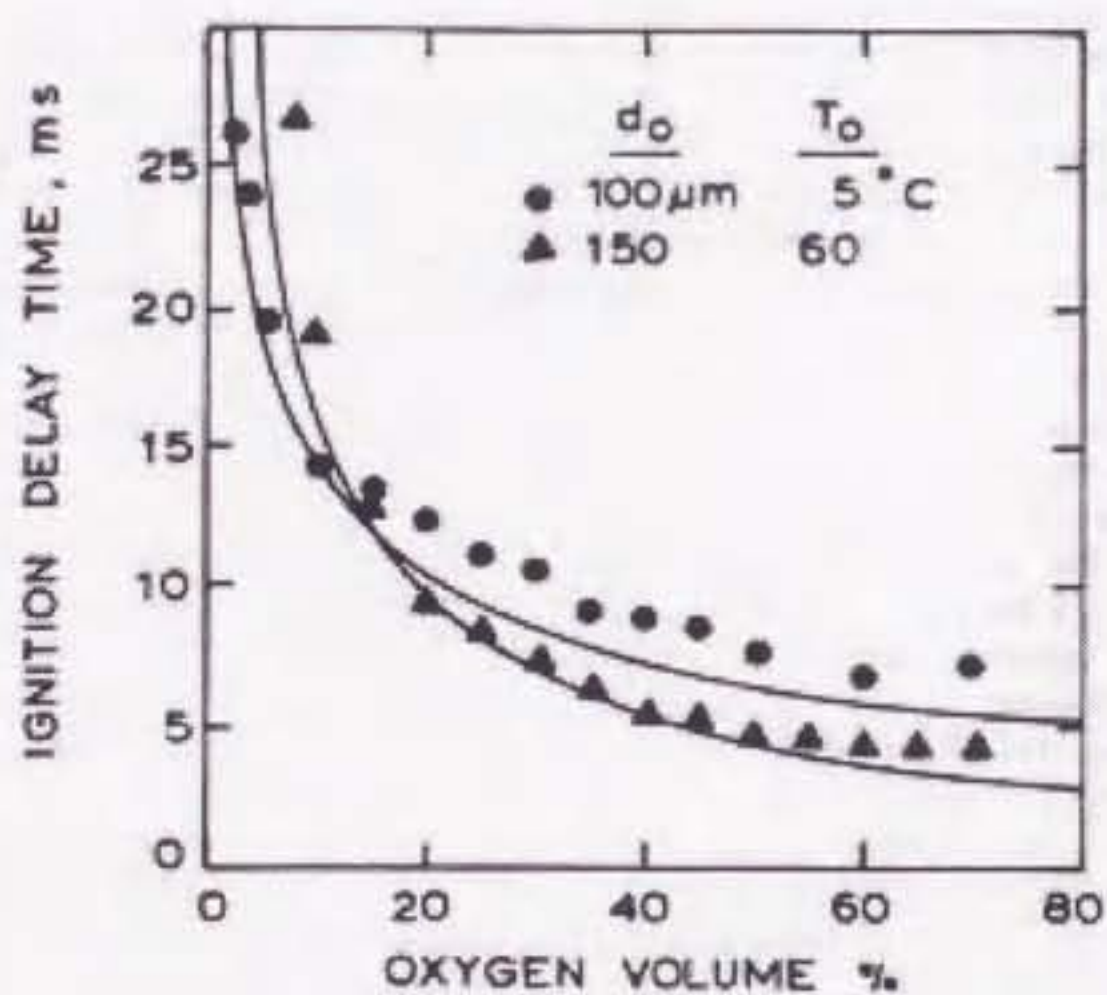


Figure 8.5: The variation of ignition delay time for (a)  $g = 0.0G$  and (b)  $g = 1.0G$  in various ambient oxygen concentrations. (c) shows the combination of (a) and (b) for easy comparison.





(a) referred from Ref.[12], (1-D ignition)



(b) referred from Ref.[19], (Droplet ignition)

Figure 8.6: The variation of ignition delay time in various ambient oxygen concentrations by previous 1-D analysis. Referred from (a) 1-D ignition analysis of solid-fuel by T. Kashiwagi (in Combust. Sci. Tech. Vol.8 1974), (b) Droplet ignition by S. C. Rah et al. (in Combust. Sci. Tech. Vol.49 1986).



## 第9章 総括



## 第9章 総括

本論文では、数値計算によって、加熱される固体燃料の自発着火に至る非定常過程を詳細に調べ、それに重力が影響するメカニズムを明らかにした。以下に、得られた結論を総括する。

第1章では、固体燃料の自発着火に関する研究の変遷と、何故重力の影響を知る必要があるのか、という本研究を遂行するのに必要とされる情報を述べた。同時に、本論文の研究目的を述べ、その位置付けを行った。

第2章では、本論文で用いた理論モデルの説明を行うと共に、本研究で使われた気相および固相の各保存式の定式化を行った。

第3章では、本論文で用いた数値計算手法に関する説明を行うと共に、その有効性についての解説を行った。また、第4章では、本計算で用いられた境界条件等の説明を行い、その妥当性の検討を行った。

第5章では、まず着火に至るまでの非定常現象が各重力場においてどのように異なるのかを理解するために、周囲酸素濃度一定の条件下において無重力 ( $g = 0.0G$ )、 $g = 0.25G$  および通常重力 ( $g = 1.0G$ ) の三条件についての気相および固相の非定常変化を調べた。

その結果、固体燃料からの高温の可燃ガス塊 (= plume) 放出までの変化は重力に依存しないが、一旦 plume が放出されると各重力場で違いが生じることがわかった。plume 形状は、重力の増加に伴って自然対流により半球状から細長い茸状へと変化して、plume 内部からの拡散による熱放出と plume 内部への周囲酸素の浸透を促進させる。それにより、plume 内部の温度は低下するが、その一方で plume 界面にのみ形成されていた可燃性予混合気は plume 内部にまで形成され、混合状態は良好になることが確認された。

なお、着火時間は重力の増加と共に遅くなり、着火位置は各重力で異なることもわかった。確認された着火に関して最も大きな違いは、無重力では plume 先端において着火していたが、重力が大きい場合には plume 内部に移行することである。このように、重力に依存した二種類の着火形態の存在を明らかにした。

固体の変化に関しては、重力の違いによる重要な変化はほとんど見られないことがわかった。また、着火に至る際の表面温度は各重力において異なり、重力の



増加に伴って表面温度は上昇することがわかった。

第6章では、第5章で見られた重力に依存した着火を、数値解析にて検出するのに最適な物理条件を調べた。

6.2節では、数値解析における着火判定の困難さを解説した。6.3節では、本研究で検出すべき着火の特徴をまとめ、着火の満たすべき項目を七つ挙げ、着火判定に関する必要事項を明らかにした。

6.4節では、今までの行われた一次元的な現象における着火の研究で使われた物理条件の代表的なものを挙げ、その物理的な意味を把握した。続いて6.5節において、上節で挙げた着火の定義を本研究にも適用した結果を示した。着火特性を調べた結果、幾つかの着火の定義では定性的に不適切な結果となることを指摘し、その理由を確定した。重力および周囲酸素濃度を変化させた場合に適切となる着火条件は、反応速度、すなわち気相での発熱速度に関する定義が最適であることを導き出し、その理由を考察することにより、複雑な現象内で起こる着火についても熱発火理論が有効であることを示した。

第7章では、第5章で見られた重力に依存した着火現象の詳細について調べ、着火に至るメカニズムに与える重力の影響を解明した。

7.2節では、前章で求められた適切な着火の定義に基づいて、着火特性に与える重力の影響を調べた。その結果、小さな重力においては着火は常に plume の先端で起こり、ある特定重力値以上になると、着火は常に plume 内部で起こることを示した。また、重力による着火特性、特に着火位置の応答は、先端着火領域と内部着火領域では逆になることが示され、重力の変化に応じて全く異なる二種類の着火が存在することを明らかにした。

7.3節および7.4節では、それら二種類の着火の瞬間に着目し、それぞれの着火の特徴を調べた。また、7.5節では、内部着火から先端着火へ移行するメカニズムに関する検討を行い、重力が大きくなると plume からの熱損失を増加させることが二種類の着火形態が生じる要因であることを明らかにした。

また、7.6節では、内部着火が熱損失が大きい plume 内部で起こり得る理由を調べた。その結果、表面の極近くに限っては、自然対流による熱損失の程度は少なく、しかもその付近の混合気は常に固体表面から加熱されているので、着火しやすい領域として存在することが明らかになった。このように、内部着火は固体表面の状態に強く依存し、それにより重力が大きい場合における着火特性の定性的な重力依存性を説明できることが示された。

第8章では、重力が着火に与える影響の程度を調べるために、自発着火に大きな影響を及ぼすことが知られている周囲酸素濃度も重力と同時に変化させた時の着火を調べた。同時に、本章を通じて、無重力着火とはどのようなものかという考察も行った。



8.2節では、重力と周囲酸素濃度を同時に変化させた場合、どの条件でどの着火が見られるのかを調べた。その結果、大きな周囲酸素濃度では、重力に依存せずに plume の先端で着火に至り、plum 内部で着火するのはある周囲酸素濃度の範囲に限られることを明らかにした。また、周囲酸素濃度による着火特性の変化は、重力によるそれと全く逆の傾向を示すことを確認した。

8.3節では、通常重力のような重力が大きい場合で、かつ高酸素濃度場における先端着火の瞬間を調べた。その結果、基本的に微小重力における着火の瞬間とはほぼ同じであることが確認でき、着火に至るまでの物理は同じであることを明らかにした。

8.4節では、無重力着火の特色およびその物理的な意味を調べた。その結果、無重力着火の変化は、一次元的な解析結果と定性的に良く一致することが確認された。逆に言えば、重力が大きくなりその影響が着火に対して無視できなくなる場合、半径方向への熱伝導等の多次元効果が顕著に現れることに相当し、第7章での議論との一貫性を示した。

8.5節では、着火に与える重力と周囲酸素濃度との影響の程度を比較することにより、重力が着火に与える影響の強さを相対的に評価した。その結果、着火に与える影響は周囲酸素濃度の方が随分と大きいことがわかった。ただし、中間の酸素濃度場においては、重力の影響は無視できなくなるので、注意が必要となることが示された。

最後に、8.6節では、これまでの本研究で得た知見をもとに、着火実験における提案を行った。実験中に、測定対象が前述の二種類の着火形態のいずれであるのかを判断する際には、着火位置を測定すればよいことを指摘し、本研究結果は実用的に有効な情報であることを示した。



## 参考文献

- [1] D. Drysdale. : *An Introduction to Fire Dynamics*. John Wiley and Sons, 1985. Chapt. 6.
- [2] T. J. Ohlemiller. : Modeling of smoldering combustion propagation. *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 14, pp. 227-310, 1985.
- [3] 熊谷清一郎. : 燃烧. 岩波全書 291, 岩波書店, 1976. 第1章.
- [4] T. Kashiwagi. : Effects of sample orientation on radiative ignition. *Combustion and Flame*, Vol. 44, pp. 223-245, 1982.
- [5] O. P. Sharma and W. A. Sirignano. : Ignition of stagnation point flow by a hot body. *Combustion Science and Technology*, Vol. 1, pp. 95-104, 1969.
- [6] A. Liñán and F. A. Williams. : Theory of ignition of a radiative solid by constant energy flux. *Combustion Science and Technology*, Vol. 3, pp. 91-98, 1971.
- [7] T. Niioka and F. A. Williams. : Relationship between theory and experiment for radiant ignition of solids. In *Seventeenth International Symposium on Combustion*. The Combustion Institute.
- [8] S. A. Beckel and R. D. Matthews. : Ignition of Polyoxymethylene. *Combustion and Flame*, Vol. 57, pp. 71-86, 1984.
- [9] 大塚芳郎, 北野三千雄. : 層流燃料噴流の自着火の研究 (第1報, 実験). 日本機械学会論文集 (第2部), Vol. 42, No. 363, pp. 3582-3589, 1976.
- [10] 北野三千雄, 大塚芳郎. : 対向流における自着火の研究. 日本機械学会論文集 (B編), Vol. 45, No. 400, pp. 1902-1911, 1984.
- [11] T. Kashiwagi, B. W. MacDonald, H. Isoda, and M. Summerfield. : Ignition of a solid polymeric fuel in a hot oxidizing gas stream. In *Thirteenth International Symposium on Combustion*, pp. 1073-1086. The Combustion Institute, 1971.



- [12] T. Kashiwagi. : A radiative ignition model of a solid fuel. *Combustion Science and Technology*, Vol. 8, pp. 225-236, 1974.
- [13] M. Kindelan and F. A. Williams. : Theory for endothermic gasification of a solid by a constant energy flux. *Combustion Science and Technology*, Vol. 10, pp. 1-19, 1975.
- [14] M. Kindelan and F. A. Williams. : Radiant ignition of a combustible solid with gas-phase exothermicity. *Acta Astronautica*, Vol. 2, pp. 955-979, 1975.
- [15] M. Kindelan and F. A. Williams. : Gas-phase ignition of a solid with in-depth absorption of radiation. *Combustion Science and Technology*, Vol. 16, pp. 47-58, 1977.
- [16] B. Amos and A. C. Fernandez-Pello. : Model of the ignition and flame development on a vaporizing combustible surface in a stagnation point flow: Ignition by vapor fuel radiation absorption. *Combustion Science and Technology*, Vol. 62, pp. 331-343, 1988.
- [17] T. Niioka, M. Takahashi, and M. Izumikawa. : Gas-phase ignition of a solid fuel in a hot stagnation-point flow. In *Eighteenth International Symposium on Combustion*. The Combustion Institute.
- [18] M. Tanabe, M. Kono, J. Sato, J. Koenig, C. Eigenbrod, and H. J. Rath. : Effects of natural convection on two stage ignition of an n-Dodecane droplet. In *Twenty-Fifth International Symposium on Combustion*, pp. 455-461. The Combustion Institute, 1994.
- [19] S. C. Rah, A. F. Sarofim, and J. M. Beér. : Ignition and combustion of liquid fuel droplets (Part II: Ignition studies). *Combustion Science and Technology*, Vol. 49, pp. 169-184, 1986.
- [20] H. Nagata, H. M. Kim, J. Sato, and M. Kono. : An experimental and numerical investigation on the hot surface ignition of premixed gases under microgravity conditions. In *Twenty-Fifth International Symposium on Combustion*, pp. 1719-1725. The Combustion Institute, 1994.
- [21] K. Nakabe, H. R. Baum, H. Yamashita, G. Kushida, and T. Kashiwagi. : Ignition and transition to flame spread over a thermally thin cellulosic sheet in a microgravity environment. *Combustion and Flame*, Vol. 98, pp. 361-374, 1994.



- [22] T. Kashiwagi, K. B. McGrattan, S. L. Olson, O. Fujita, M. Kikuchi, and K. Ito. : Effects of slow wind on localized radiative ignition and transition to flame spread in microgravity. In *Twenty-Sixth International Symposium on Combustion*, pp. 1345-1352. The Combustion Institute, 1996.
- [23] 藤田修, 菊池政雄, 伊藤猷一, S. L. Olson, T. Kashiwagi, 桜谷隆. : 微小重力環境を用いた低速空気流中の紙の着火および火炎伝播現象の観察. 日本マイクログラビティ応用学会誌, Vol. 14, pp. 25-33, 1997.
- [24] C. Di Blasi, S. Crescitelli, G. Russo, and G. Cinque. : Numerical model of ignition processes of polymeric materials including gas-phase absorption of radiation. *Combustion and Flame*, Vol. 83, pp. 333-344, 1991.
- [25] C. Di Blasi. : Ignition and flame spread across solid fuels. In E. S. Oran and J. P. Boris, editors, *Progress in Astronautics and Aeronautics/ Numerical Approaches to Combustion*, Vol. 135, pp. 643-671. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1991.
- [26] R. A. Strehlow. : *Combustion Fundamentals*. McGraw-Hill, 1984. Chapt. 6.
- [27] 秋田一雄. : 熱発火理論の方程式展望. 燃焼研究, Vol. 9, pp. 2-40, 1965.
- [28] 水谷幸夫. : 燃焼工学. 森北出版, 第2版, 1989. 第4章.
- [29] M. H. Lefebvre. : Combustion aerothermodynamics. Lecture Note at Dept. of Aero. Eng., Nagoya University, 1993.
- [30] R. A. Strehlow. : *Combustion Fundamentals*. In [26], 1984. Chapt. 12.
- [31] F. A. Williams. : *Combustion Theory*. Addison-Wesley, second edition, 1985. Chapt. 8.
- [32] H. Curran, J. M. Simmie, P. Dagaut, D. Voisin, and M. Cathonnet. : The ignition and oxidation of allene and propyne: Experiments and kinetic modeling. In *Twenty-Sixth International Symposium on Combustion*, pp. 613-620. The Combustion Institute, 1996.
- [33] G. Freeman and A. H. Lefebvre. : Spontaneous ignition characteristics of gaseous hydrocarbon-air mixtures. *Combustion and Flame*, Vol. 58, pp. 153-162, 1984.
- [34] R. S. Brokaw. : Ignition kinetics of the carbon monoxide-oxygen reaction. In *Eleventh International Symposium on Combustion*, pp. 1063-1073. The Combustion Institute, 1967.



- [35] A. E. Lutz, R. J. Kee, J. A. Miller, H. A. Dwyer, and A. K. Oppenheim. : Dynamic effects of autoignition centers for hydrogen and  $C_{1,2}$ -hydrocarbon fuels. In *Twenty-Second International Symposium on Combustion*, pp. 1683–1693. The Combustion Institute, 1988.
- [36] J. Warnatz. : Invited lecture; Resolution of gas phase and surface combustion chemistry into elementary reactions. In *Twenty-Fourth International Symposium on Combustion*, pp. 553–579. The Combustion Institute, 1992.
- [37] T. Kashiwagi. : Radiative ignition mechanism of solid fuels. *Fire Safety Journal*, Vol. 3, pp. 185–200, 1981.
- [38] A. W. Goos. : *Wood Chemistry/ The Thermal Decomposition of Wood*, Vol. 2. Reinhold, 1952. Chapt. 20.
- [39] E. J. Kansa, H. E. Perlee, and R. F. Chaiken. : Mathematical model of wood pyrolysis including internal forced convection. *Combustion and Flame*, Vol. 29, pp. 311–324, 1977.
- [40] T. Kashiwagi T. J. Ohlemiller. : A study of oxygen effects on nonflaming transient gasification of PMMA and PE during thermal irradiation. In *Nineteenth International Symposium on Combustion*, pp. 815–823. The Combustion Institute, 1982.
- [41] T. J. Ohlemiller and F. E. Rogers. : Cellulosic insulation material; II. Effect of additives on some smolder characteristics. *Combustion Science and Technology*, Vol. 24, pp. 139–152, 1980.
- [42] C. K. Lee, R. F. Chaiken, and J. M. Singer. : Charring pyrolysis of wood in fires by laser simulation. In *Sixteenth International Symposium on Combustion*, pp. 1459–1470. The Combustion Institute, 1977.
- [43] A. A. Farooq, D. Price, G. J. Milnes, and A. R. Horrocks. : Use of gas chromatographic analysis of volatile products to investigate the mechanisms underlying the influence of flame retardants on the pyrolysis of cellulose in air. *Polymer Degradation and Stability*, Vol. 33, pp. 155–170, 1991.
- [44] B. K. Kandola, M. Akalin, A. R. Horrocks, H. L. Bhatnagar, and D. Price. : Studies on evolved gases and smoke generated by flame-retarded phosphorylated cellulose. *Fire Safety Journal*, Vol. 20, pp. 189–202, 1993.
- [45] S. Caubet, P. Corte, C. Fahim, and J. P. Traverse. : Thermochemical conversion of biomass: Gasification by flash pyrolysis. *Solar Energy*, Vol. 29, pp. 565–572, 1982.



- [46] F. A. Williams, M. Barrère, and N. C. Huang. : *Fundamental Aspects of Solid Propellant Rockets*. Technivision Services Slough, 1969. Chapt. 8.
- [47] T. Kashiwagi and M. Summerfield. : Ignition and flame spreading over a solid fuel: Non-similar theory for a hot oxidizing boundary layer. In *Fourteenth International Symposium on Combustion*, pp. 1235-1247. The Combustion Institute, 1973.
- [48] R. K. Kumar. : Gas phase ignition of a composite solid propellant subjected to radiant heating. *Combustion Science and Technology*, Vol. 30, pp. 273-288, 1983.
- [49] T. Kashiwagi. : Experimental observation of radiative ignition mechanism. *Combustion and Flame*, Vol. 34, pp. 231-244, 1979.
- [50] Y. Mutoh, T. Hirano, and K. Akita. : Experimental study on radiative ignition of Polymethylmethacrylate. In *Seventeenth International Symposium on Combustion*, pp. 1183-1190. The Combustion Institute, 1979.
- [51] G. Adomeit. : Ignition of gases at hot surfaces under nonsteady-state conditions. In *Tenth International Symposium on Combustion*. The Combustion Institute.
- [52] S. Martin. : Diffusion-controlled ignition of cellulosic materials by intense radiant energy. In *Tenth International Symposium on Combustion*, pp. 877-896. The Combustion Institute, 1965.
- [53] N. J. Alvares and S. B. Martin. : Mechanism of ignition of thermally irradiated cellulose. In *Thirteenth International Symposium on Combustion*, pp. 905-914. The Combustion Institute, 1971.
- [54] T. Kashiwagi. : Effects of attenuation of radiation on surface temperature for radiative ignition. *Combustion Science and Technology*, Vol. 20, pp. 225-234, 1979.
- [55] T. Kashiwagi and T. Kashiwagi. : A study of the radiative ignition mechanism of a liquid fuel using high speed holographic interferometry. In *Nineteenth International Symposium on Combustion*, pp. 1511-1521. The Combustion Institute, 1982.
- [56] T. Kashiwagi, T. J. Ohlemiller, and T. Kashiwagi. : Observation of vapor generation preceding the ignition of liquid n-Decane and i-Decene by CO<sub>2</sub> laser radiation. *Combustion Science and Technology*, Vol. 29, pp. 15-35, 1982.



- [57] T. J. Ohlemiller and M. Summerfield. : Radiative ignition of polymeric materials in oxygen/nitrogen mixtures. In *Thirteenth International Symposium on Combustion*, pp. 1087-1094. The Combustion Institute, 1971.
- [58] S. H. Park and C. L. Tien. : Radiation induced ignition of solid fuels. *Int. J. Heat Mass Transfer.*, Vol. 33, pp. 1511-1520, 1990.
- [59] S. H. Park and C. L. Tien. : Radiation induced ignition of porous solid fuels. *Combustion Science and Technology*, Vol. 95, pp. 173-192, 1994.
- [60] T. Kashiwagi and H. Nambu. : Global kinetics constants for thermal oxidative degradation of a cellulosic paper. *Combustion and Flame*, Vol. 88, pp. 345-368, 1992.
- [61] 阿部俊夫, 石黒亮二. : 過熱された水平上向き面上の自然対流 (第1報, 数値解析). 日本機械学会論文集 (第2部), Vol. 41, No. 352, pp. 3577-3587, 1975.
- [62] R. J. Goldstein and K. S. Lau. : Laminar natural convection from a horizontal plate and the influence of plate-edge extensions. *J. Fluid Mech.*, Vol. 129, pp. 55-75, 1983.
- [63] R. A. Strehlow. : *Combustion Fundamentals*. In [26], 1984. Chapt. 5.
- [64] F. A. Williams. : *Combustion Theory*. In [31], second edition, 1985. Chapt. 1.
- [65] Y. Yoshizawa and H. Kubota. : Experimental study on gas-phase ignition of cellulose under thermal radiation. In *Nineteenth International Symposium on Combustion*, pp. 787-795. The Combustion Institute, 1982.
- [66] 久保田浪之助. : ロケット燃焼工学. 日刊工業新聞社, 1995. 第10章.
- [67] C. M. Drew, A. S. Gordon, and R. H. Knipe. : Study of quenched aluminum particle combustion. In M. Summerfield, editor, *Progress in Astronautics and Aeronautics/ Heterogeneous Combustion*, pp. 17-39. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1964.
- [68] K. Seshadri and F. A. Williams. : Structure and extinction of counterflow diffusion flames above condensed fuels: Comparison between Poly(methyl methacrylate) and its liquid monomer, both burning in nitrogen-air mixture. *Journal of Polymer Science*, Vol. 16, pp. 1755-1778, 1978.
- [69] S. H. Park, A. J. Stretton, and C. L. Tien. : Infrared radiation properties of Methyl Methacrylate vapor. *Combustion Science and Technology*, Vol. 62, pp. 257-271, 1988.



- [70] H. Arisawa and T. B. Brill. : Kinetics and mechanism of flash pyrolysis of Poly(methyl methacrylate) (PMMA). *Combustion and Flame*, Vol. 109, pp. 415-426, 1997.
- [71] N. A. Moussa, T. Y. Toong, and C. A. Garris. : Mechanism of smoldering of cellulosic materials. In *Sixteenth International Symposium on Combustion*, pp. 1447-1457. The Combustion Institute, 1977.
- [72] R. S. Miller and J. Bellan. : Analysis of reaction products and conversion time in the pyrolysis of cellulose and wood particles. *Combustion Science and Technology*, Vol. 119, pp. 331-373, 1996.
- [73] P. C. Lewellen, W. A. Peters, and J. B. Howard. : Cellulose pyrolysis kinetics and char formation mechanism. In *Sixteenth International Symposium on Combustion*, pp. 1471-1480. The Combustion Institute, 1977.
- [74] A. Ito and T. Kashiwagi. : Characteristics of flame spread over PMMA using holographic interferometry sample orientation effects. *Combustion and Flame*, Vol. 71, pp. 189-204, 1988.
- [75] T. Hirano, S. E. Noreikis, and T. E. Waterman. : Postulations of flame spread mechanism. *Combustion and Flame*, Vol. 22, pp. 353-363, 1974.
- [76] C. Di Blasi. : Modeling and simulation of combustion processes of charring and non-charring solid fuels. *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 19, pp. 71-104, 1993.
- [77] S. V. Patankar. : *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. McGraw-Hill, 1980.
- [78] 吉田尚史. : 非定常流れの差分解法と境界条件に関する数値的研究. PhD thesis, 名古屋大学, 1996.
- [79] 熊谷清一郎. : 燃焼. 岩波全書 291, [3], 1976. 第4章.
- [80] G. Kushida, H. R. Baum, T. Kashiwagi, and C. Di Blasi. : Heat and mass transport from thermally degrading thin cellulosic materials in a microgravity environment. *Journal of Heat Transfer*, Vol. 114, pp. 494-502, 1992.
- [81] Jr. P. L. Bkackshear and K. A. Murty. : Heat and mass transfer to, from, and within cellulosic solids burning in air. In *Tenth International Symposium on Combustion*, pp. 911-923. The Combustion Institute, 1965.



- [82] J. L. Ellzey, K. J. Laskey, and E. S. Oran. : A study of confined diffusion flames. *Combustion and Flame*, Vol. 84, pp. 249-264, 1991.
- [83] 大波多浩司, 伊藤昭彦. : 液面燃焼における火炎面への空気流入機構. 第32回燃焼シンポジウム講演論文集, pp. 603-605, 1994.
- [84] 中村祐二, 櫛田玄一郎, 山下博史, 竹野忠夫. : 固体燃料の着火過程における初期火炎のふるまい (着火過程に与える自然対流の影響). 第33回燃焼シンポジウム講演論文集, pp. 608-610, 1995.
- [85] C. Vovelle, H. Mellottée, and R. Delbourgo. : Kinetics of the thermal degradation of cellulose and wood in inert and oxidative atmospheres. In *Nineteenth International Symposium on Combustion*, pp. 797-805. The Combustion Institute, 1982.
- [86] P. D. Gandhi and A. M. Kamary. : Criterion for spontaneous ignition of radiantly heated organic solids. *Combustion Science and Technology*, Vol. 50, pp. 233-254, 1986.
- [87] 中村祐二, 竹野忠夫. : 数値解析におけるふく射熱による固体燃料の自発着火の定義に関する検討. 日本機械学会論文集 (B編), 1999. (印刷中).
- [88] T. J. Ohlemiller, L. H. Caveny, L. DeLuca, and M. Summerfield. : Dynamic effects on ignitability limits of solid propellants subjected to radiative heating. In *Fourteenth International Symposium on Combustion*, pp. 1297-1307. The Combustion Institute, 1973.
- [89] 中村祐二, 櫛田玄一郎, 山下博史, 竹野忠夫. : 外部放射により加熱される固体燃料の自発着火に与える自然対流の影響. 日本機械学会論文集 (B編), Vol. 62, No. 599, pp. 2758-2766, 1996.
- [90] D. K. Zhang, P. C. Hills, C. Zheng, T. F. Wall, and P. Samson. : Fibre optic ignition of combustible gas mixtures by the radiative heating of small particle. In *Twenty-Fourth International Symposium on Combustion*, pp. 1761-1767. The Combustion Institute, 1992.
- [91] Y. Nakamura, G. Kushida, H. Yamashita, and T. Takeno. : Effects of gravity and ambient oxygen on a gas-phase ignition over a heated solid fuel. *Combustion and Flame*, 1999. (in printing).
- [92] Y. Nakamura, M. Kobayashi, G. Kushida, H. Yamashita, and T. Takeno. : A numerical study of effects of buoyancy driven flow on spontaneous ignition of a heated solid fuel. In *1999 ASME/JSME Fluid Engineering Division Summer Meeting*, 1999. FEDSM99-7769.



- [93] 上島光浩, 小沼義昭. : 燃料ガス噴流の着火に関する研究 (第2報, 諸因子の影響). 日本機械学会論文集 (B編), Vol. 58, No. 556, pp. 3773-3778, 1992.
- [94] C. J. Chang, L. Thompson, and R. D. Winship. : Ignition delay of propane in air between 725-880°C under isothermal conditions. In *Seventh International Symposium on Combustion*, pp. 431-435. The Combustion Institute, 1959.
- [95] 上島光浩, 小沼義昭. : 燃料ガス噴流の着火に関する研究 (第1報, 静電探針による着火位置の測定). 日本機械学会論文集 (B編), Vol. 55, No. 516, pp. 2526-2532, 1989.



## 謝辞

本研究論文は、名古屋大学大学院工学研究科機械情報システム工学専攻環境情報システム講座において、平成7年4月より平成11年12月までの期間、竹野忠夫教授の御指導の下で研究を行い、その成果を機械学会論文集および *Combustion and Flame* 等で公表した論文をまとめたものであります。本研究を行うにあたり、御支援ならびに御指導を賜りました竹野忠夫教授に対し、慎んで感謝の意を表します。

本論文の内容に関し、名古屋大学大学院工学研究科 藤田秀臣教授ならびに山下博史教授からは、貴重な時間を割いていただき、なおも多くの有益な御教示を賜りました。特に山下博史教授には、同講座の頃より長年に渡り、変わらず数値計算を始めとした多くの御指導を賜りました。心から感謝致します。

名古屋大学大学院工学研究科 榎田玄一郎元講師（現：愛知工業大学工学部助教授）には本研究に関する計算コードの開発を支援して下さっただけでなく、愛知工業大学に移られてからも何かと面倒を見ていただき、討論を通じて有意義な御助言、御指導を賜りました。深く感謝致します。また、名古屋大学工学部 西岡牧人元助手（現：筑波大学工学部助教授）には研究活動だけでなく日常を通じて数々の御支援ならびに御助言をいただき、何度もそのお言葉に救われました。有難うございました。名古屋大学難人工物処理研究センター 朱学雷元講師（現：米国Purdue 大学研究員）ならびに名古屋大学大学院工学研究科 早川正人技官には、日常においても大変お世話になりました。厚く御礼申し上げます。

また、私が博士課程在籍中（平成8年～9年）において Visiting Research Scholar として重複在籍し、外国にて貴重な研究活動の場を与えて下さいました米国ケンタッキー大学工学部 Prof. Kozo Saito ならびに Center for Applied Energy Research のディレクター Dr. John Stencel に感謝の意を表明します。特に、Prof. Saito からは研究と人生についての討論を通じて、多くの知見ならびに影響を受けただけでなく、第二の故郷ケンタッキーにて数えきれない程の素晴らしい経験をさせていただきました。心から感謝致します。また、ケンタッキー大学での経験を通じて知り合い、物理的、精神的に私を支えてくれた多くの仲間-Ban, Cheng, Zhou, Abu, Ghassan, Yuguo, Lee, Victor etc.-に感謝します。日産自動車株式会社 岩井信弘博士ならびに弘前大学工学部 伊藤昭彦教授、大分高等専門学校 小西忠司助教授、神奈川工業大学 鳴海明教授およびその生徒の皆様には、ケンタッキーおよび各地にて大変お世話になりました。中でも小西先生においては、論文の執筆において多大なる御支援をして下さいました。慎んで謝意を表します。



さらに、本研究の内容に関して、幾つかの討論を通じて多大なる御助言ならびに専門的な情報を惜しみなく御教示下さいました米国 National Institute of Standards and Technology(NIST) の Dr. Takashi Kashiwagi に対し感謝致します。

また、本研究を進めるにあたり、数々の御支援を戴いただけでなく、時には心のオアシスであった本研究室の大学院諸氏、計算を支えてくれたコンピュータ(DEC3000, VT-Alpha533: mercury, Apples) に感謝致します。

私生活においては、長期に渡る大学院生活にも関わらず、変わらぬ惜しみなく支援していただき、そして暖かく見守ってくれた両親 中村清一、すみ子氏に感謝致します。

そして最後に、多忙な論文執筆時期においてもたゆまぬ愛情で私を支えてくれた最愛なる市川啓子氏に対し、心より感謝致します。

平成 11 年 12 月  
名古屋大学大学院工学研究科  
中村祐二







