

数值解析による燃料希薄メタン-空気予混合火炎の
火炎構造と支配パラメータの解明

林 直樹

目次

第 1 章 緒論	1
1.1 はじめに	1
1.2 従来の研究	2
1.2.1 燃焼速度および火炎伸長に関する研究	2
(1) 層流燃焼速度の算出および層流燃焼速度に与える 種々の物理量の影響	2
(2) 火炎伸長に関する研究	3
1.2.2 乱流燃焼場における化学反応モデルに関する研究	6
1.3 研究目的	7
1.4 本論文の概要	8
参考文献	9
第 2 章 支配方程式および数値計算方法	17
2.1 支配方程式	17
2.2 各保存方程式の簡略化	18
2.2.1 運動方程式	18
2.2.2 各化学種の連続方程式	18
2.2.3 エネルギー方程式	19
2.3 数値計算方法	20
参考文献	20
第 3 章 熱力学定数・輸送係数および化学反応機構	21
3.1 熱力学定数	21
3.2 輸送係数	21
3.3 化学反応機構	22
3.3.1 メタン-空気系総括一段不可逆反応	22
3.3.2 メタン-空気系素反応機構	23
3.3.3 化学反応機構の比較	23
(1) 層流燃焼速度と当量比の関係への反応機構の影響	24
(2) 火炎伸長と諸特性の関係への反応機構の影響	25
参考文献	27
第 4 章 予混合火炎の火炎構造に対する輸送係数の影響	29

4.1	はじめに	29
4.2	解析モデル	29
4.2.1	火炎伸長のない平面一次元予混合火炎	29
4.2.2	火炎伸長のある対向流予混合双子火炎	30
4.3	結果および考察	31
4.3.1	総括反応を用いた場合	31
(1)	層流燃焼速度に与える輸送係数の影響	31
(2)	温度, 反応物濃度および熱発生速度に与える輸送係数の影響	33
4.3.2	素反応機構を用いた場合	39
(1)	火炎伸長のない平面一次元予混合火炎	40
(2)	火炎伸長のある対向流予混合双子火炎	42
4.4	まとめ	48
	参考文献	48
第5章 反応物の消費速度に基づいて定義された”燃焼速度”		
	と層流燃焼速度および火炎伸長率との関係	51
5.1	はじめに	51
5.2	燃料・酸素の質量生成速度および熱発生速度に基づく ”燃焼速度”の定義	52
5.3	平面一次元予混合火炎を用いた検討	53
5.4	対向流予混合火炎を用いた検討	57
5.5	まとめ	62
	参考文献	62
第6章 非定常予混合火炎における諸量の反応進行度による整理		
6.1	はじめに	65
6.2	解析モデル	66
6.2.1	非定常対向流予混合双子火炎	66
6.2.2	非定常二次元予混合火炎	67
6.3	非定常対向流予混合双子火炎を用いた検討	68
6.3.1	非定常火炎における諸量の挙動	68
6.3.2	反応進行度の定義	70
6.3.3	燃焼強度と反応進行度およびその勾配との関係	73
6.3.4	熱発生速度の最大値に対する検討	79
6.3.5	火炎面における中間生成物のモル濃度	83
6.3.6	火炎面における最終生成物のモル濃度	83
6.4	非定常二次元予混合火炎を用いた検討	85

6.4.1 火炎の時間変化.....	85
6.4.2 火炎構造を支配する物理量の検討.....	89
6.5 まとめ.....	92
参考文献.....	92
第7章 曲率を持つ予混合火炎の過渡応答および定常的な火炎構造.....	95
7.1 はじめに.....	95
7.2 解析モデル.....	95
7.3 計算結果および考察.....	97
7.4 まとめ.....	100
参考文献.....	100
第8章 空間および時間変動する予混合火炎の火炎構造と乱流燃焼速度.....	101
8.1 はじめに.....	101
8.2 解析モデル.....	102
8.3 火炎長さと乱流燃焼速度の算出.....	103
8.4 計算結果および考察.....	105
8.4.1 火炎面形状の時間変化.....	105
(1) 局所的な消炎（予混合気-空気対向流火炎：Case A）.....	105
(2) 未燃ガスの島の発生・消滅 （予混合気-既燃ガス対向流火炎：Case B）.....	112
(3) 超希薄燃焼（予混合気-既燃ガス対向流火炎：Case C）.....	114
8.4.2 非定常場における燃焼速度と火炎面積の関係.....	116
8.5 まとめ.....	119
参考文献.....	119
第9章 結論.....	121
謝辞.....	124

第 1 章

緒論

1.1 はじめに

近年，地球温暖化や大気汚染が大きな問題となっている．地球温暖化の主要な原因とされている温室効果ガスの代表例として挙げられるのが二酸化炭素である．1997 年に採択された京都議定書 [1]において我が国は，京都議定書第一約束期間の 2008 年から 2012 年の 5 ヶ年平均で 1990 年と比較して温室効果ガスを 6 %削減することが義務付けられていた．最終年度の 2012 年度において温室効果ガス排出量はこれまでの 5 ヶ年を平均して基準年比 1.4 %増となったが，これには原子力発電事故に伴う火力発電による化石燃料の消費量の増加が一因となっている [2]．京都議定書に対しては，京都メカニズムクレジットや算入可能な森林等吸収源による吸収量を加味した結果，基準年比 8.4 %減となり，京都議定書第一約束期間の目標は達成されている．その後，国連気候変動枠組条約第 19 回締約国会議(COP19)において，我が国の次の削減目標が 2020 年度において 2005 年から 3.8 %減少させることが表明されており，さらなる二酸化炭素低減が求められている．

二酸化炭素の排出要因において，自動車などの内燃機関や工場，発電所などにおける燃焼機器が占める割合は大きい．そのため，これらの燃焼機器の効率の向上を行うことで，燃料の消費を抑え，二酸化炭素の低減を行うことは非常に重要である．燃焼は大きく分けて予混合燃焼と非予混合燃焼(拡散燃焼)に分けられる．このうち予混合燃焼は，燃料と酸化剤の混合比を変えることで NO_x やすすなどの大気汚染物質を低減可能である．特に燃料希薄予混合火炎は，大気汚染物質の低減に加え，燃焼を利用した熱機関の燃費の向上にも役立つ．

近年，計算機の能力の向上などにより燃焼器の設計，開発，研究において三次元の数値シミュレーションが用いられることが多くなっている．しかし，三次元の直接数値計算(3D-DNS) [3-5]は，いまだその計算コストの大きさから，限定された条件でのみ使用が可能であり，ほとんどの数値シミュレーションにおいて何らかのモデル化手法が用いられている．このうち乱流の流れ場においては一般に RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes Simulation)や LES (Large Eddy Simulation)が用いられる．一方，反応場においては後述のように多くのモデルが提案されている．これらのモデル化手法の開発や改良において，より正確な火炎構造や燃焼に関する基礎特性の把握は非常に重要である．

また、実際の燃焼器では、非定常三次元流れ場となり、火炎伸長や火炎曲率を有する燃焼場となっている。そこで、本研究では特に燃料希薄予混合火炎に着目し、その基礎的な火炎特性や火炎の反応場のモデリング手法の検討を行う。以下に、従来の研究として、まず、予混合火炎において基本的な火炎伸長のない燃焼場における燃焼速度、すなわち層流燃焼速度に関する熱理論を紹介し、その上で、火炎伸長のある実際的な燃焼場における火炎伸長率の定式化と、その燃焼速度に与える影響に関する研究について説明する。さらに、予混合火炎の化学反応モデルについても解説する。

1.2 従来の研究

1.2.1 燃焼速度および火炎伸長に関する研究

(1) 層流燃焼速度の算出および層流燃焼速度に与える種々の物理量の影響

層流燃焼速度 S_L は、予混合気の一様流中に形成される平面状火炎において、未燃混合気に対する火炎伝ばの相対速度として定義され、未燃混合気の組成と熱力学的状態（温度、圧力）が与えられれば一義的に規定される特性量である [6]。このため、反応機構のモデリングにおけるフィッティングパラメータとして活用されてきた [7]。しかし、実験においてその正確な算出は非常に困難であり、角度法や面積法、バーナへの熱損失を利用した平面火炎を用いた方法、球状伝ば火炎を用いた手法 [8]、対向流火炎を用いた算出法 [9-12] など多くの手法が提案されているが、その手法毎に値が異なる。そのため、近年においても新しい手法や各手法の改善手法も多く提案されている [13, 14]。近年では、球状伝ば火炎を用いた手法や対向流火炎を用いた手法が多く用いられている。

この層流燃焼速度に対して予混合気の圧力や温度等のパラメータがどのように影響するかについて、数多くの研究がなされてきている。特に、エンジンなどの燃焼器は高圧下で燃焼させることから圧力に対する燃焼速度の応答が調べられている。また、未燃混合気の温度の影響についても実験や数値シミュレーションより整理されている。さらに、層流燃焼速度に対して、混合気の有効熱伝導率や有効拡散係数も影響することも知られている。熱理論によれば層流燃焼速度は次式のように評価されている [15, 16]。

$$S_L = \frac{1}{\rho_0} \sqrt{\frac{\lambda \omega T_b - T_i}{c_p T_i - T_u}}$$

$$\omega = Ap^n \exp\left(-\frac{E}{R^0 T_b}\right) \quad (1.1)$$

ここで、 ρ_0 は未燃予混合気の密度、 λ は有効熱伝導率、 ω は一段の総括反応を考慮した場合の反応速度、 c_p は平均の定圧比熱、 T_u, T_b, T_i はそれぞれ、未燃ガス、既燃ガス、反応帯入口での温度である。また、 A, p, n, E, R^0 は比例定数、系の圧力、反応次数、活性化エネルギー、一般気体定数である。しかしながら、この式では反応帯における反応物の濃

度の効果が考慮されていない。本来、 ω には反応物の濃度が必要であり、この式では比例定数 A の中に含まれている。Law らの考察 [17]によると、層流燃焼流束 $f^0 (= \rho_0 S_L)$ と有効熱伝導率および有効拡散係数 D の間には以下の関係が成り立つことが示されている。

$$f^0 \propto \frac{\lambda / c_p}{\sqrt{\rho_0 D}} \quad (1.2)$$

上式より、層流燃焼流束は有効熱伝導率 λ に比例し、有効拡散係数 D の 1/2 乗に反比例することがわかる。

有効熱伝導率や有効拡散係数は同じ混合気を使用している場合には変化しないが、予混合気の組成を変化させた場合には異なる値となる。この最も顕著な例が予混合気中の不活性ガスを変化させた場合である。予混合燃焼において、酸化剤として通常の空気(酸素+窒素)から不活性ガスの種類や混合割合を変化させることで、環境負荷低減に向けての対策等が行われることがある。例えば排ガス再循環燃焼では燃焼後の排気ガスの一部を未燃混合気と混合して使用することにより NO_x の低減、燃費の向上を図ることが可能である。また近年では Oxy-fuel 燃焼として二酸化炭素を窒素の代わりに用いることで CCS(Carbon Capture and Storage)への適用を目指している研究もある [18]。よって、不活性ガスあるいは希釈ガスの種類やその割合を変化させた際における火炎の燃焼特性を把握することは非常に重要であり、このような種々の不活性ガス種を用いた場における層流燃焼速度の計測も行われてきた。例えば Qiao ら [19]はメタン予混合火炎の消炎限界および層流燃焼速度について、不活性ガス種を変化させた微小重力下での実験および数値計算に基づき検討している。また、Shy ら [20]は、メタン予混合火炎において乱流燃焼速度に与える流速や圧力上昇、放射熱損失の影響を、窒素希釈および二酸化炭素希釈の場合について比較し検討している。このような一連の研究において、燃焼速度に与える因子として、不活性ガスの熱伝導率、密度、また二酸化炭素のように厳密には不活性ではないガスの反応性などが指摘されているが、これらの影響は分離できないため、どの因子が燃焼速度の変化に影響を与えるか議論することは困難である。

(2) 火炎伸長に関する研究

実用的な火炎は多くの場合、伸長のある流れ場中に形成される。この伸長の度合いを示すために広く用いられているのが、火炎伸長率 κ である。火炎伸長率 κ は火炎面積を A 、時間を t として次式のように定義される。

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \quad (1.3)$$

この定義からの任意の流れ場における任意の形状の火炎に対する火炎伸長率の導出は Matalon らによって行われた [21]. これによると火炎伸長率 κ は流体速度の火炎面に對して接線方向の速度 $\mathbf{v}_{fluid,t}$ と火炎伝ば速度 $v_{flame,n}$ を用いて、次式で与えられる.

$$\kappa = \nabla_t \cdot \mathbf{v}_{fluid,t} + v_{flame,n} (\nabla_t \cdot \mathbf{n}) \quad (1.4)$$

ここで、右辺第1項は火炎面に沿う方向の速度成分の変化率を、第2項は伝播火炎における火炎面曲率の効果を表す. 火炎面が静止している場合には $v_{flame,n} = 0$ となり火炎面曲率の項はなくなるが、この場合、接線方向速度の変化により第1項にその効果が含まれる [22]. この式はさらに燃焼速度を使って表すと次式のようにになる.

$$\kappa = -\{\nabla \times (\mathbf{v}_{fluid} \times \mathbf{n})\} \cdot \mathbf{n} + (S_L + \mathbf{v}_{fluid}|_u \cdot \mathbf{n}) (\nabla \cdot \mathbf{n}) \quad (1.5)$$

火炎が伸長を受ける場合、燃焼速度は層流燃焼速度の値とは異なるとされている. ここで、文献によっては伸長を受けた火炎における燃焼速度に対しても（伸長の影響を受けた）層流燃焼速度 (laminar burning velocity) としている場合もある (例えば [8, 23]) が、本研究では火炎伸長を受けない平面一次元予混合火炎において、本来の定義 (未燃予混合気に対する相対的な火炎伝ば速度) に基づく燃焼速度のみ “層流燃焼速度, S_L ” とし、伸長を受けた場合や他の手法で定義した燃焼速度を S_u として区別する. 火炎伸長率が小さい場合、 S_L からのずれは火炎伸長率と比例関係にあり、この比例定数を Markstein 長さ L [24] として次式のように表される [25-27].

$$S_u = S_L - L\kappa \quad (1.6)$$

Markstein 長さを火炎帯厚さで無次元化した無次元数が Markstein 数となる. Markstein 長さを求める研究やその特性についてこれまでも多くの研究がなされている [28-30]. 特に, Tseng ら [31] は, Markstein 長さの計測により L の正負が入れ替わる当量比が1ではないことを指摘している. 例えば本研究において対象とするメタンを燃料として用いた場合、当量比 0.7 近傍において火炎伸長率と燃焼速度の関係の勾配の正負が逆転することが指摘されている.

従来、燃焼速度に与える火炎伸長率の影響については Lewis 数効果や選択拡散効果等によって説明されてきた. ここで、Lewis 数は混合気の有効熱拡散率 a と物質拡散係数 D の比として下記のように定義される.

$$Le = \frac{a}{D} = \frac{\lambda}{\rho c_p D} \quad (1.7)$$

これらの効果が火炎に対してどのような影響を与えるかに関する研究は非常に多く研究されている [32-34]. このうち Lewis 数効果については, $Le < 1$ ($Le > 1$) の火炎に対しては燃焼速度と火炎伸長率は正(負)の相関を持つとされている. Lewis 数効果において Lewis 数は不足成分の値を用いることから, 例えば, 水素-空気予混合火炎のように軽い水素燃料とやや重い酸化剤の場合には, 当量比が 1 より小さい燃料が希薄な条件では $Le < 1$ の火炎として, 当量比が 1 より大きくなるとその効果が入れ替わり, $Le > 1$ の火炎とされていた. これに対して, プロパン-空気火炎は燃料が希薄な条件では $Le > 1$ の火炎として扱われてきた. なお, 燃料希薄のメタン-空気予混合火炎はその値が 0.97 と 1 に非常に近いことから, Lewis 数が 1 として扱われることもあるが, 一方で, 1 よりも小さい火炎として扱われることもあり [35], その扱いにあいまいさが残る. また, Lewis 数効果を検討する際に, 燃料を変える他に, 不活性ガスの種類を変えて行う手法もある. 燃料がメタンの場合, 不活性ガスとして, ヘリウムを用いたとき, $Le > 1$ の火炎, アルゴンを用いた場合 $Le \sim 1$, 二酸化炭素を用いた場合 $Le < 1$ の火炎として扱うことができる [19, 35]. しかし, この場合, Lewis 数以外にも密度や定圧比熱など他のパラメータも同時に変化してしまうことから, 純粋な Lewis 数効果の検討が困難となることがある. 実験では Lewis 数のみを変化させることは困難であるが, 数値解析では人為的に輸送係数を変化させることが可能である. そこで, Ju ら [36]は, 総括一段不可逆反応において, 燃料の Lewis 数を変化させ, その他の化学種の Lewis 数を 1 とした対向流火炎を用いることで, Lewis 数効果が消炎に及ぼす影響について検討を行っている.

さらに, 曲率を有する火炎においては, Lewis 数効果のみではなく, 分子の輸送現象 [37]や予熱の効果があることが指摘されている. その他にも, 既燃側において燃え残りが存在する場合, その影響があることも指摘されている [38, 39].

伸長流中の火炎としてよく用いられるのが上述のよどみ流または対向流火炎 [40]や球状伝ば火炎 [28]である. 対向流火炎はポテンシャル流を仮定した場合, ノズル半径方向速度を除いて, 温度, 濃度, ノズル軸方向速度などは火炎の半径方向に均一であると仮定することができる. また, 相似解を使うことによりノズル軸方向の擬一次元火炎として扱うことができる. このとき, 火炎伸長率 κ はポテンシャル流を仮定した対向流火炎では次式のように火炎面法線方向の速度勾配 a のみで表すことができる.

$$\kappa = a \tag{1.8}$$

したがって, ノズルからの噴出速度を大きくすることで, 伸長を大きくできることができる. この特性により, 火炎伸長率に対する火炎の応答について対向流火炎を用いて検討が行われてきた. 初期には Law ら [9], Tsuji, Yamaoka [40, 41]および Ishizuka ら [42]によって, その火炎形態や消炎時の火炎伸長率が実験や計算により求められている. 予混合気同士が対向した場合と, 空気と予混合気を対向させた場合については, Dixon-

Lewis が検討している [43]. 対向するノズルから異なる当量比の予混合気を噴出させ、その場合の局所消炎や 2 つの火炎の干渉などの火炎挙動に対する研究もなされている [44]. また、対向流火炎は、ノズルからの噴出速度、圧力、当量比などに対して時間変動を与えることにより、火炎の非定常性について検討する研究 [45-50]においてもよく用いられる.

このような対向流火炎は伸長の影響を明確にすることができるが、対向流火炎では火炎面の法線方向に質量流束が一定には保たれないため、火炎から十分離れた未燃混合気の流速も変化し、火炎から十分離れた未燃混合気の流速として燃焼速度を算出することが困難である. そのため、火炎前縁の速度極小値を燃焼速度とする研究もあるが、便宜的な定義でしかありえない. また、未燃側の速度勾配を反応帯へ外挿し、熱発生速度最大位置での速度を燃焼速度とするものもある [30]. Davis らはこの燃焼速度から対向流予混合火炎を用いて Markstein 長さを算出している [29].

一方、燃焼速度の熱理論に立ち戻って、数値計算によって得られた”反応物の消費速度”に基づいて燃焼速度を定義する方法がある [51-53]. この定義による燃焼速度は、伸長を受けない平面一次元火炎では、当然、未燃混合気の流速で定義した層流燃焼速度と一致し、伸長のある火炎の場合にも計算結果に基づいて算出することができるので、火炎伸長の効果を検討するのに非常に有効と思われる. 従来の研究により、伸長のない火炎では反応物消費速度に基づく”燃焼速度”はいわゆる層流燃焼速度と一致し、伸長火炎では異なる値を持ち、Markstein 長さは消費速度に基づく燃焼速度の方が大きくなる傾向となることが知られている [54].

1.2.2 乱流燃焼場における化学反応モデルに関する研究

化学反応モデルとして素反応に基づく詳細反応機構を使用すれば、正確な結果が得られる. 最も単純な水素-空気予混合火炎の場合、9 つの化学種と 21 の素反応 [55]を用いれば、ほぼ正確に火炎を表現できる. このため、詳細素反応機構を用いた三次元の直接数値計算 [3]も多く行われている. また、炭化水素系で最も単純なメタン-空気予混合火炎において最も定評があり、広く用いられている GRI-Mech 3.0 [56]では、NO_x生成を含めて正確な結果を得るためには 53 の化学種、325 の素反応が必要とされている. 炭化水素に必要な詳細素反応機構は燃料分子が大きくなるに従い増大し、例えば炭素数が 8 程度の炭化水素では、数千の素反応と数百の化学種が必要とされる [57]. したがって、このような素反応機構を用いて、そのまま実用的なスケールの三次元の数値解析を行うことは、計算機の記憶容量、計算速度また計算費用の観点から現在のところ不可能である.

そのため、計算負荷を低減させるためにいくつかの手法が試みられてきた. まずは総括反応を用いる方法が挙げられるが、火炎構造を正確に表すことは困難である. また、

当然のことながら中間生成物や NO_x , すずなどの燃焼排出物を予測することができない。したがって、素反応機構に基づいて作成された **Reduced mechanism** や **Skeletal** 機構を用いる方法 [58-61]が提案されている。また、高級炭化水素においてはサロゲート燃料の反応機構を用いることで計算負荷を低減させることも試みられている [62, 63]。また、**Transported PDF model** も提案されている [64]。

これらのモデルとは異なる観点からの乱流燃焼のモデル化の手法の一つとして、**Laminar flamelet model** [65] に基づく組み合わせ手法がある。この手法は **Laminar flamelet model** による「乱流火炎の瞬間の局所的な構造は層流火炎によって模擬できる」という考え方に基づき、多次元の複雑な流れ場は単純な反応機構を用いて計算し、単純な反応機構では考慮されていない化学種の分布や生成速度等はそれに対応する単純な流れ場に対して詳細な反応機構を用いて計算を行い、両者を再結合パラメータにより結びつけることにより計算を行うというものである。これに分類される手法として **FPI(flame propagation of ILDM)** [66]や **FGM(Flamelet generated manifolds)** [67, 68]などがある。これらのモデルは火炎特性や反応項が一つのスカラー上で整理される手法である。このような手法において、再結合パラメータとして用いるのに最適な物理量を見出すことが重要となる。拡散火炎では、清水ら [69]、山下 [70]は、混合分率の火炎面位置における勾配と関連する **Scalar dissipation rate** を用いることで、拡散火炎の火炎構造を整理することができることを示している。また、荒井ら [71]は水素-空気予混合火炎における再結合パラメータを検討している。

1.3 研究目的

前節に述べたように、予混合火炎に関する研究は広く行われている。メタン-空気予混合火炎は最も基礎的な炭化水素燃料として広く基礎研究および実用研究に用いられてきた。その一方で、燃料希薄メタン-空気予混合火炎の **Lewis** 数が 1 に非常に近いことから、様々な研究において $Le=1$ の火炎として扱うのか、 $Le<1$ の火炎として扱うのかあいまいな場合がある。そこで、本研究では、燃料希薄メタン-空気予混合火炎の火炎構造に与える種々の物理量の影響を明らかにすることを第一の目的としている。特に、混合気の輸送係数、火炎伸長、火炎の非定常性に着目する。また、前節の従来の研究において述べたように対向流火炎は火炎伸長を受ける火炎の代表例である。しかし、この対向流予混合火炎では流れ場を基に“燃焼速度”を明確に定義することが困難である。一方、数値シミュレーションで算出可能な反応物消費速度であれば対向流火炎においても算出可能である。そこで、本研究では燃料や酸化剤の質量生成速度の積算値を基にした燃焼速度を算出し、それらの火炎伸長率に対する応答について明らかにする。

さらに、1.2.2 項で述べた組み合わせ手法における再結合パラメータとして最も適切な物理量を把握することを第二の目的としている。特に現在のモデリングにおいて火炎

の非定常性があまり考慮に入れられておらず、火炎がその瞬間において準定常であるという条件が必要となる場合が多い。そこで、非定常火炎を対象にその瞬間の火炎構造を支配するパラメータを明らかにする。最後に、実際の乱流燃焼場を火炎面に凹凸を持つ非定常火炎として模擬し、局所の火炎構造を反映する局所燃焼速度と乱流燃焼場全体の燃焼強度を反映する乱流燃焼速度について考察する。

1.4 本論文の概要

本論文は9章からなる。以下に各章の構成を述べる。

まず、第1章では、本研究の背景、目的、既往の研究について述べる。

第2章では、本研究で用いる基礎方程式について述べ、数値解析手法についてまとめる。

第3章では、本研究で用いた熱力学定数と輸送係数、さらに、3種の化学反応機構について述べ、それらの比較を行う。

第4章、第5章では主に、第一の目的である燃料希薄メタン-空気予混合火炎の火炎構造に与える種々の物理量の影響について明らかにする。第4章では、熱拡散係数や物質拡散係数を操作した場を用いてメタン-空気予混合火炎の燃焼速度や熱発生速度などに与える輸送係数や Lewis 数効果の影響について検討を行う。

第5章では、燃料と酸素の質量生成速度および熱発生速度の積算値を基にした複数の手法で“燃焼速度”の算出を試み、さらに、層流燃焼速度および火炎伸長率との関係について検討する。なお、第4章および第5章では燃料希薄から燃料過濃条件まで扱って検討を行う。

第6章では、第二の目的である組み合わせ手法に用いる再結合パラメータの候補となる物理量を明らかにするために、非定常平面对向流予混合火炎、および火炎曲率を伴う非定常予混合火炎を用いて火炎構造を支配するパラメータについて検討を行う。

第7章では、第6章までの基礎的な流れ場の知見を基に、曲率を持つ予混合火炎における過渡応答および定常的な火炎構造の検討を行う。

第8章では、第7章と同様に第6章までの基本的な流れ場の知見を基に、空間および時間変動する二次元予混合火炎の火炎構造について特徴的な火炎挙動を取り上げて検討を行う。また、所燃焼速度と空間平均した乱流燃焼速度について考察する。

第9章において本研究で得られた知見をまとめる。

参考文献

- [1] S. オーバーテュアー, H. E. オット, *21 世紀の国際気候政策, 京都議定書*, シュプリンガー・フェアラーク東京, 2001.
- [2] 環境省, 26年版 環境白書 循環型社会白書/生物多様性白書, 日経出版, 2014.
- [3] Y. Nada, M. Tanahashi and T. Miyauchi, "Effect of turbulence characteristics on local flame structure of H₂-air premixed flames," *Journal of Turbulence*, vol. 5, N16, 2004.
- [4] M. Tanahashi, Y. Nada, Y. Ito and T. Miyauchi, "Local flame structure in the well-stirred reactor regime," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, pp. 2041-2049, 2002.
- [5] J. B. Bell, M. S. Day and J. F. Grcar, "Numerical simulation of premixed turbulent methane combustion," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, pp. 1987-1993, 2002.
- [6] 水谷幸夫, *燃焼工学入門*, 森北出版, 2003, p. 62.
- [7] C. K. Law, C. J. Sung, H. Wang and T. F. Lu, "Development of comprehensive detailed and reduced reaction mechanisms for combustion modeling," *AIAA Journal*, vol. 41, pp. 1629-1646, 2003.
- [8] D. Bradley, R. A. Hicks, M. Lawes, C. G. Sheppard and R. Woolley, "The measurement of laminar burning velocities and Markstein numbers for iso-octane-air and iso-octane-n-heptane-air mixtures at elevated temperatures and pressures in an explosion bomb," *Combustion and Flame*, vol. 115, pp. 126-144, 1998.
- [9] C. K. Wu and C. K. Law, "On the determination of laminar flame speeds from stretched flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 20, pp. 1941-1949, 1985.
- [10] F. N. Egolfopoulos, P. Cho and C. K. Law, "Laminar flame speeds of methane-air mixtures under reduced and elevated pressures," *Combustion and Flame*, vol. 76, pp. 375-391, 1989.
- [11] F. N. Egolfopoulos, D. L. Zhu and C. K. Law, "Experimental and numerical determination of laminar flame speeds: Mixtures of C₂-hydrocarbons with oxygen and

- nitrogen," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 23, pp. 471-478, 1991.
- [12] G. E. Andrew and D. Bradley, "Determination of burning velocities: A critical review," *Combustion and Flame*, vol. 18, pp. 133-153, 1972.
- [13] V. Mittal, H. Pitsch and E. Egolfopoulos, "Assessment of counterflow to measure laminar burning velocities using direct numerical simulations," *Combustion Theory and Modelling*, vol. 16, pp. 419-433, 2012.
- [14] Z. Liu, M. J. Lee and N. I. Kim, "Direct prediction of laminar burning velocity using an adapted annular stepwise diverging tube," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 34, pp. 755-762, 2013.
- [15] 水谷幸夫, *燃焼工学*, 第 3 編, 森北出版, 1977, p. 84-85.
- [16] 新岡嵩, 河野通方, 佐藤順一, *燃焼現象の基礎*, オーム社, 2001, pp. 27-29.
- [17] C. K. Law, *Combustion Physics*, Cambridge University Press, 2006, p. 253.
- [18] J. Oh and D. Noh, "Laminar burning velocity of oxy-methane flames in atmospheric condition," *Energy*, vol. 45, pp. 669-675, 2012.
- [19] L. Qiao, Y. Gan, T. Nishiie, W. J. Dahm and E. S. Oran, "Extinction of premixed methane/air flames in microgravity by diluents: Effects of radiation and Lewis number," *Combustion and Flame*, vol. 157, pp. 1446-1455, 2010.
- [20] S. S. Shy, S. I. Yang, W. J. Lin and R. C. Su, "Turbulent burning velocities of premixed CH₄/diluent/air flames in intense isotropic turbulence with consideration of radiation losses," *Combustion and Flame*, vol. 143, p. 106-118, 2005.
- [21] M. Matalon, "On flame stretch," *Combustion Science and Technology*, vol. 31, pp. 169-181, 1983.
- [22] S. H. Chung and C. K. Law, "An invariant of flame stretch," *Combustion and Flame*, vol. 55, pp. 123-125, 1984.
- [23] M. Weiß, N. Zarzalis and R. Suntz, "Experimental study of Markstein number effects on laminar flamelet velocity in turbulent premixed flames," *Combustion and Flame*, vol. 154, pp. 671-691, 2008.

- [24] G. H. Markstein, "Experimental and theoretical studies of flame-front stability," *Journal of the Aeronautical Sciences*, vol. 18, pp. 199-209, 1951.
- [25] C. K. Law, D. L. Zhu and G. Yu, "Propagation and extinction of stretched premixed flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 21, pp. 1419-1426, 1986.
- [26] S. Kwon, L. -K. Tseng and G. M. Faeth, "Laminar burning velocities and transition to unstable flames in $H_2/O_2/N_2$ and $C_3H_8/O_2/N_2$ mixtures," *Combustion and Flame*, vol. 90, pp. 230-246, 1992.
- [27] M. Matalon and B. J. Matkowsky, "Flames as discontinuities," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 124, pp. 239-259, 1982.
- [28] D. R. Dowdy, D. B. Smith and S. C. Taylor, "The use of expanding spherical flames to determine burning velocities and stretch effects in hydrogen/air mixtures," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 23, pp. 325-332, 1990.
- [29] S. G. Davis, J. Quinard and G. Searby, "Markstein numbers in counterflow, methane- and propane- air flames: a computational study," *Combustion and Flame*, vol. 130, pp. 123-136, 2002.
- [30] S. G. Davis, J. Quinard and G. Searby, "Determination of Marstein numbers in counterflow premixed flames," *Combustion and Flame*, vol. 130, pp. 112-122, 2002.
- [31] L. -K. Tseng, M. A. Ismail and G. M. Faeth, "Laminar burning velocities and Markstein numbers of hydrocarbon/air flames," *Combustion and Flame*, vol. 95, pp. 410-426, 1993.
- [32] J. Buckmaster, "The quenching of a deflagration wave held in front of a bluff body," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 17, pp. 835-842, 1979.
- [33] 伊藤慎太郎, 山下博史, 林直樹, "過濃予混合気の高温度空気燃焼における非定常火炎挙動の数値解析," *日本燃焼学会誌*, 第53巻, pp. 271-283, 2011.
- [34] P. Libby, A. Liñán and F. Williams, "Strained premixed laminar flames with non-unity Lewis number," *Combustion Science and Technology*, vol. 34, pp. 257-293, 1983.
- [35] D. Shimokuri, Y. Karatsu and S. Ishizuka, "Effects of inert gases on the vortex bursting in small diameter tubes," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 34, pp. 3403-

- 3410, 2013.
- [36] Y. Ju, H. Guo, K. Maruta and T. Niioka, "Flame bifurcations and flammable regions of radiative counterflow premixed flames with general Lewis numbers," *Combustion and Flame*, vol. 113, pp. 603-614, 1998.
- [37] 溝渕泰寛, 竹野忠夫, 松山新吾, 新城淳史, 小川哲, “水素空気過濃予混合火炎の曲率が火炎構造に与える影響,” *燃焼学会誌*, 第 54 卷, pp. 41-48, 2012.
- [38] K. Yamamoto, S. Ishizuka and T. Hirano, "Effects of rotation of the stability and structure of tubular flame," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 25, pp. 1399-1406, 1994.
- [39] B. Rogg, "Response and flamelet structure of stretched premixed methane-air flames," *Combustion and Flame*, vol. 73, pp. 45-64, 1988.
- [40] H. Tsuji and I. Yamaoka, "Structure and extinction of near-limit flames in a stagnation flow," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 19, pp. 1533-1540, 1982.
- [41] I. Yamaoka and H. Tsuji, "Determination of burning velocity using counterflow flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 20, pp. 1883-1892, 1984.
- [42] S. Ishizuka, K. Miyasaka and C. K. Law, "Effects of heat loss, preferential diffusion, and flame stretch on flame-front instability and extinction of propane/air mixtures," *Combustion and Flame*, vol. 45, pp. 293-308, 1982.
- [43] G. Dixon-Lewis, "Laminar premixed flame extinction limits. II Combined effects of stretch and radiative loss in the single flame unburnt-to-burnt and the twin-flame unburnt-to-unburnt opposed flow configurations," *Proceedings of the Royal Society A*, vol. 462, pp. 349-370, 2006.
- [44] 矢作裕司, 仁平広宣, “対向流中に形成される超希薄乱流予混合火炎の消炎と火炎挙動,” *日本機械学会論文集(B 編)*, 第 68 卷, pp. 1287-1294, 2002.
- [45] D. M. Valiev, M. Zhu, G. Bansal, H. Kolla and C. K. Law, "Pulsating instability of externally forced premixed counterflow flame," *Combustion and Flame*, vol. 160, pp. 285-294, 2013.
- [46] W. Christiansen, C. K. Law and C. J. Sung, "The role of pulsating instability and global Lewis number on the flammability limit of heptane/air flames," *Proceedings of the*

- Combustion Institute*, vol. 28, pp. 801-814, 2000.
- [47] H. G. Im, J. K. Bechtold and C. K. Law, "Response of counterflow premixed flames to oscillating strain rates," *Combustion and Flame*, vol. 105, pp. 358-372, 1996.
- [48] J. Tien and M. Matalon, "On the burning velocity of stretched flames," *Combustion and Flame*, vol. 84, pp. 238-248, 1991.
- [49] F. N. Egolfopoulos, "Dynamics and structure of unsteady, strained, laminar premixed flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 25, pp. 1365-1373, 1994.
- [50] C. J. Sung and C. K. Law, "Structural sensitivity, response, and extinction of diffusion and premixed flames in oscillating counterflow," *Combustion and Flame*, vol. 123, pp. 375-388, 2000.
- [51] D. Poinso, D. Veynante and S. Candel, "Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 228, pp. 561-606, 1991.
- [52] A. Trouvé and T. Poinso, "The evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 278, pp. 1-31, 1994.
- [53] 山本和弘, 伊佐山勉, 林直樹, 山下博史, "対向流予混合火炎中の OH 濃度と燃焼速度," *日本燃焼学会誌*, 第 49 卷, pp. 181-186, 2007.
- [54] J. K. Bechtold and M. Matalon, "The dependence of the Markstein length on stoichiometry," *Combustion and Flame*, vol. 127, pp. 1906-1913, 2001.
- [55] E. Gutheil, G. Balakrishnan and F. A. Williams, *Reduced kinetic mechanisms for applications in combustion systems*, N. Peters and B. Rogg, Eds., 1993, pp. 177-195.
- [56] G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, M. Eiteneer, C. T. Goldenberg, R. K. Bowman, S. Hanson, W. Song, V. V. Lissianski and Z. Qin, "GRI-Mech 3.0," Available: http://combustion.berkeley.edu/Combustion_Laboratory/gri-mech/.
- [57] 三好明, "燃焼化学反応モデリングへの誘い," *燃焼学会誌*, 第 50 卷, pp. 325-330, 2008.
- [58] M. D. Smooke and V. Giovangigli, *Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames*, M. D. Smooke, Ed., 1991, pp. 1-28.

- [59] Z. Luo, C. S. Yoo, E. S. Richardson, J. H. Chen, C. K. Law and T. Lu, "Chemical explosive mode analysis for a turbulent lifted ethylene jet flame in highly-heated coflow," *Combustion and Flame*, vol. 159, pp. 265-274, 2012.
- [60] T. Lu and C. K. Law, "A criterion based on computational singular perturbation for the identification of quasi steady state species: A reduced mechanism for methane oxidation with NO chemistry," *Combustion and Flame*, vol. 154, pp. 761-774, 2008.
- [61] Y. Xin, D. A. Sheen, H. Wang and C. K. Law, "Skeletal reaction model generation, uncertainty quantification and minimization: Combustion of butane," *Combustion and Flame*, vol. 161, pp. 3031-3039, 2014.
- [62] S. Som, D. E. Longman, Z. Luo, M. Plomer, T. Lu, P. K. Senecal and E. Pmrning, "Simulating flame lift-off characteristics of diesel and biodiesel fuels using detailed chemical-kinetic mechanisms and large eddy simulation turbulence model," *Journal of Energy Resoources Technology*, vol. 134, pp. 871-882, 2012.
- [63] J. T. Farrell, N. P. Cerbabsky, F. L. Dryer, D. G. Friend, C. A. Hergart, C. K. Law, R. M. McDavid, C. J. Mueller, A. K. Patel and H. Pitsch, "Development of an experimental database and kinetic models," *SAE*, 2007-01-0201, 2007.
- [64] D. C. Haworth and S. B. Pope, Turbulent combustion modeling, T. Echekki and E. Mastorakos, Eds., Springer, 2011, pp. 119-142.
- [65] N. Peters, "Laminar flamelet concepts in turbulent combustion," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 21, pp. 1231-1250, 1986.
- [66] O. Gicquel, N. Darabiha and D. Thevenin, "Liminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 28, pp. 1901-1908, 2000.
- [67] J. A. van Oijen, F. A. Lammers, L. de Goey and R. S. Cant, "Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds," *Combustion and Flame*, vol. 127, pp. 2124-2134, 2001.
- [68] J. A. Oijen and L. de Goey, "Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds," *Combustion Science and Technology*, vol. 161, pp. 113-137, 2000.

- [69] 清水昭博, 山下博史, 高石良伸, 趙黛青, “拡散火炎における NO_x の非定常生成特性の解明と組合せ予測手法の検証,” *日本機械学会論文集(B 編)*, 第 69 卷, pp. 453-460, 2008.
- [70] 山下博史, “乱流拡散火炎に対する Laminar Flamelet Model に基づく組合せ予測手法の提案,” *燃焼研究*, 第 124 卷, pp. 47-55, 2001.
- [71] 荒井康, 林直樹, 山下博史, “曲率を持つ水素-空気予混合火炎の火炎構造に対する支配パラメータの解明,” *日本機械学会論文集(B 編)*, 第 79 卷, pp. 158-168, 2013.

第 2 章

支配方程式および数値計算方法

2.1 支配方程式

化学反応を伴う流れを表記する支配方程式は非定常三次元空間における質量, 運動量, エネルギーおよび各化学種の保存方程式および理想気体の状態方程式であり, 以下のようになる [1-4].

まず, 連続の式は密度 ρ , 速度ベクトル \mathbf{v} とすると,

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

となる.

次に, 運動方程式(ナビエ・ストークスの式) は

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla \cdot \mathbf{P} + \rho \sum_i (Y_i \mathbf{f}_i) \quad (2.2)$$

ここで, Y_i は化学種 i の質量分率, \mathbf{P} は応力テンソル, \mathbf{f}_i は化学種 i に作用する体積力である.

エネルギー方程式は内部エネルギー u を用いると次式となる.

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} \left(u + \frac{v^2}{2} \right) + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \left(u + \frac{v^2}{2} \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \mathbf{P}) + \rho \sum_i (Y_i \mathbf{f}_i \cdot (\mathbf{v} + \mathbf{V}_i)) \quad (2.3)$$

\mathbf{q} は熱流束ベクトル, \mathbf{V}_i は化学種 i の拡散速度である.

各化学種の連続方程式は

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla Y_i = w_i - \nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{V}_i) \quad (2.4)$$

となり, w_i は化学種 i の質量生成速度である.

状態方程式は、混合気は理想気体と仮定すると(次節の仮定(1)),

$$p = \rho R^0 T \sum_i \frac{Y_i}{m_i} \quad (2.5)$$

となり、 p 、 T および R^0 は気体の圧力、温度および一般気体定数、 m_i は化学種 i のモル質量である。

2.2 各保存方程式の簡略化

本研究では下記の仮定を用いて各方程式を簡略化する。

- (1) 混合気は理想気体とする。
- (2) 運動方程式において体積粘性係数 ζ を無視する。
- (3) エネルギー方程式において粘性散逸、輻射、Dufour効果、圧力仕事を無視する。
- (4) 圧力勾配拡散、Soret効果を無視する。
- (5) 重力などの体積力は働かないとする。

2.2.1 運動方程式

式(2.2)における応力テンソル \mathbf{P} はニュートンの粘性流体では以下の式で与えられる。

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

ここで、仮定(2)より体積粘性係数 $\zeta = 0$ とする。 μ は混合気の有効粘度である。

本研究では重力等の外力は無視しているため、式(2.2)における右辺第2項は0となる。応力テンソルを式(2.6)に代入すると、デカルト座標系において k 方向の運動方程式は以下ようになる。ここで、実効圧力 $P \equiv p - (\mu/3)\nabla \cdot \mathbf{v}$ を用いている。

$$\rho \frac{\partial u_k}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla u_k - \nabla \cdot (\mu \nabla u_k) = - \frac{\partial P}{\partial x_k} + \left(- \frac{\partial \mu}{\partial x_k} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \mu}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \quad (2.7)$$

2.2.2 各化学種の連続方程式

仮定(4)を用いることにより、次式で表されるFickの法則を適用する。

$$\mathbf{V}_i = -D_i \nabla (\ln Y_i) \quad (2.8)$$

$$Y_i \mathbf{V}_i = -D_i \nabla Y_i \quad (2.9)$$

ここで、Fick の法則はモル基準または質量基準の二つの定式化があるが、本研究では質量基準を用いる。Fick の法則を用いると、各化学種の連続方程式は下記のようになる。

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla Y_i - \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) = w_i \quad (2.10)$$

なお、通常混合気において最も多く存在する N_2 については 式(2.10)を解かず、以下のようにして求める。

$$Y_{N_2} = 1 - \sum_{i \neq N_2} Y_i \quad (2.11)$$

2.2.3 エネルギー方程式

内部エネルギー u をエンタルピ h に変換すると、式(2.3)は以下のようになる。

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \frac{Dp}{Dt} + \rho \sum_i (Y_i \mathbf{f}_i \cdot \nabla V_i) + \Phi \quad (2.12)$$

ここで、 Φ は粘性散逸項である。熱流束ベクトル \mathbf{q} は、下記のように与えられる。

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \rho \sum_i h_i Y_i \mathbf{V}_i + q_D + q_R \quad (2.13)$$

ここで、 λ は有効熱伝導率、 h_i は化学種 i のエンタルピである。仮定(3)より、Dufour 効果および熱輻射を表す右辺第3項、第4項を無視する。式(2.13)の \mathbf{q} を式(2.12)に代入すると、

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla h = -\nabla \cdot \left[-\lambda \nabla T + \rho \sum_i h_i Y_i \mathbf{V}_i \right] + \frac{Dp}{Dt} + \rho \sum_i (Y_i \mathbf{f}_i \cdot \mathbf{V}_i) + \Phi \quad (2.14)$$

次に、エネルギー方程式を温度のみを従属変数とした方程式に変換する。エンタルピは次式を用いて温度 T に変換される。

$$h = \sum_i (h_i Y_i) = \int_{T^0}^T c_p dT + \sum_i (h_i^0 Y_i) \quad (2.15)$$

T^0 は基準とする温度である。式(2.15)を式(2.14)に代入し、整理すると以下の式が得られる。

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \mathbf{v} \cdot \nabla T = -\sum_i h_i w_i + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \rho \sum_i c_{p,i} Y_i V_i \cdot \nabla T + \frac{Dp}{Dt} + \rho \sum_i (Y_i f_i \cdot V_i) + \Phi \quad (2.16)$$

ここで、右辺第3,5,6項は他の項よりも小さく無視できるため、エネルギー方程式は以下の式となる。

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_p \mathbf{v} \cdot \nabla T = -\sum_i h_i w_i + \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \frac{Dp}{Dt} \quad (2.17)$$

2.3 数値計算方法

本研究では伸長のない平面一次元予混合火炎，対向流予混合火炎，二次元の非定常予混合火炎を対象に数値シミュレーションを行った。本節ではそれらに共通の数値解析手法について説明を行う。

2.1節で示した各支配方程式を離散化するために、有限体積法を用いた。圧力と速度の連成には SIMPLE 法(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations)を用いた [3, 5]。SIMPLE 法は圧力補正量という量を導入し、粘性項および対流項の双方を陰的に時間進行してさらに大きな時間刻み幅の設定を可能とし収束性を高める解法である。

時間積分には一次精度陰解法を用い、各時間ステップにおいて SOR 法(Successive Over-Relaxation)による繰り返し計算を行った。

参考文献

- [1] F. A. Williams, *Combustion Theory*, Addison-wesley Publishing Company, 1965, pp. 2-4.
- [2] K. K. Kuo, *Principles of Combustion*, John Wiley & Sons, 2005, pp. 15-38.
- [3] 山下博史, *燃焼の数値計算*, 日本機械学会, 2001, pp. 177-182.
- [4] C. K. Law, *Combustion Physics*, Cambridge University Press, 2006, p. 253.
- [5] S. V. Patankar, *Numerical Transfer and Fluid flow*, McGraw-Hill, 1980, pp. 126-130.

第3章

熱力学定数・輸送係数および化学反応機構

3.1 熱力学定数

熱力学定数には CHEMKIN データベース [1, 2]を用いる。各化学種の定圧比熱 $c_{p,i}$ は一定圧力下で温度のみの関数とし, JANAF table の値 [3]に対し, 適当な温度範囲で最小二乗法による近似を行った以下の温度 T の多項式で与える。

$$\frac{c_{p,i}m_i}{R^0} = a_{1i} + a_{2i}T + a_{3i}T^2 + a_{4i}T^3 + a_{5i}T^4 \quad (3.1)$$

また, 各化学種のエンタルピ h_i , エントロピ s_i は以下の定圧比熱より算出される。

$$h_i = h_i^0 + \int_{T^0}^T c_{p,i} dT \quad (3.2)$$

$$s_i = \int_{T^0}^T \frac{c_{p,i}}{T} dT \quad (3.3)$$

ここで h_i^0 は各化学種の比生成エンタルピである。混合気の有効定圧比熱は各化学種の質量分率 Y_i より下記より算出する。

$$c_p = \sum_i Y_i c_{p,i} \quad (3.4)$$

3.2 輸送係数

輸送係数については Smooke らの Simplified Transport Model [4]を用いる。すなわち, 混合気体の有効熱伝導率 λ に対しては燃焼場で最も多く存在する窒素分子に対する次の近似式を用いる。

$$\frac{\lambda}{c_p} = A \left(\frac{T}{T_0} \right)^r \quad A = 2.58 \times 10^{-4} \text{ g}/(\text{cm} \cdot \text{s}) \quad (3.5)$$

各化学種の有効拡散係数 D_i に対しては次の近似式を用いる。

$$\rho D_i = \frac{1}{Le_i} \left(\frac{\lambda}{c_p} \right) \quad (3.6)$$

ここで、ルイス数 Le_i は各化学種毎に一定とした。第4章ではこれらの有効熱伝導率 λ および有効拡散係数 D_i の値を操作している。

混合気体における有効粘度はプラントル数を全ての化学種に対して同一と仮定して次式で与える。

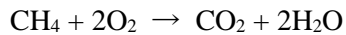
$$\mu = Pr \left(\frac{\lambda}{c_p} \right), Pr = 0.75 \quad (3.7)$$

3.3 化学反応機構

本研究では、多くの条件を効率的に計算するためにメタン-空気系総括一段不可逆反応 [5]、Smooke らの Skeletal 素反応機構(16 個の化学種, 25 組の素反応) [4]、GRI-Mech 3.0(53 個の化学種, 325 組の素反応) [6]を適宜用いる。

3.3.1 メタン-空気系総括一段不可逆反応

メタン-空気系の反応式は以下のように表される。



このとき、比反応速度定数 k は以下のように表される。

$$k = A \exp\left(-\frac{E}{R^0 T}\right) \left(\frac{\rho Y_F}{m_F}\right)^a \left(\frac{\rho Y_O}{m_O}\right)^b, A = BT^\alpha \quad (3.8)$$

ここで、 A, B, α, E, a, b はそれぞれ頻度係数、温度係数、温度次数、活性化エネルギー、燃料、酸化剤の濃度次数である。Westbrook ら [5]のメタン-空気系総括一段不可逆反応におけるこれらの値を表 3.1 にまとめる。

Table 3.1 Reaction rate parameters (Unit: mol, cm³, s, K, cal/mol) [5]

B	α	E	a	b
6.7×10^{12}	0.0	4186.8×10^3	0.2	1.3

3.3.2 メタン-空気系素反応機構

本研究で用いた GRI-Mech 3.0 や Skeletal 反応機構で用いた素反応機構モデルについて説明する。まず，素反応式は以下で表される。

$$\sum_{i=1}^N \nu'_{i,k} \mathbf{M}_i \rightarrow \sum_{i=1}^N \nu''_{i,k} \mathbf{M}_i, \quad k=1, \dots, M \quad (3.9)$$

ここで， \mathbf{M}_i は i 番目の化学種を表し， $\nu'_{i,k}$ ， $\nu''_{i,k}$ は量論係数である。

化学種 i の正味の質量生成速度 w_i は， k 番目の素反応のモル反応速度 $\hat{\omega}_k$ および比反応速度定数 k_k によって次式のように表される。

$$w_i = m_i \sum_k (\nu''_{i,k} - \nu'_{i,k}) \hat{\omega}_k \quad (3.10)$$

$$\hat{\omega}_k = k_k \prod_j (\rho Y_j / m_j)^{\nu'_{j,k}} \quad (3.11)$$

$$k_k = A_k \exp\left(-\frac{E_k}{R^0 T}\right), \quad A_k = B_k T^{\alpha_k} \quad (3.12)$$

ここで， A_k, B_k, α_k, E_k は k 番目の素反応の頻度係数，温度係数，温度次数，活性化エネルギーである。 k 番目の素反応における発熱量 q_k により，熱発生速度は次式のように表される。

$$Q = \sum_k q_k \hat{\omega}_k \quad (3.13)$$

$$q_k = \sum_i \left\{ -h_i m_i (\nu''_{i,k} - \nu'_{i,k}) \right\} \quad (3.14)$$

3.3.3 化学反応機構の比較

各素反応機構の違いについて述べる。本項で用いる伸長のない平面一次元予混合火炎および相似解を用いた対向流予混合双子火炎の解析モデルの詳細については第4章で説明する。

(1) 層流燃焼速度と当量比の関係への反応機構の影響

まず、各化学反応機構を用いた場合の層流燃焼速度を比較する。図 3.1 に伸長のない平面一次元予混合火炎を用いて算出した層流燃焼速度 S_L と当量比 ϕ の関係を各化学反応機構に対して示す。本研究で主な検討対象としている燃料希薄条件では Skeletal 反応機構と GRI-mech 3.0 はよい一致をしていることがわかる。燃料過濃条件では Skeletal 反応機構の方が大きい。これは C_2 以上の化学種が Skeletal 反応機構では含まれていないためであると考えられる。

総括反応機構は当量比 1 近傍では GRI-Mech 3.0 と近い燃焼速度を持つ。燃料希薄条件では常に他 2 つの反応機構に比べて大きな値をもつが、当量比に対する傾きはほぼ同じである。燃料過濃条件では当量比依存性は定性的にも正しくない。

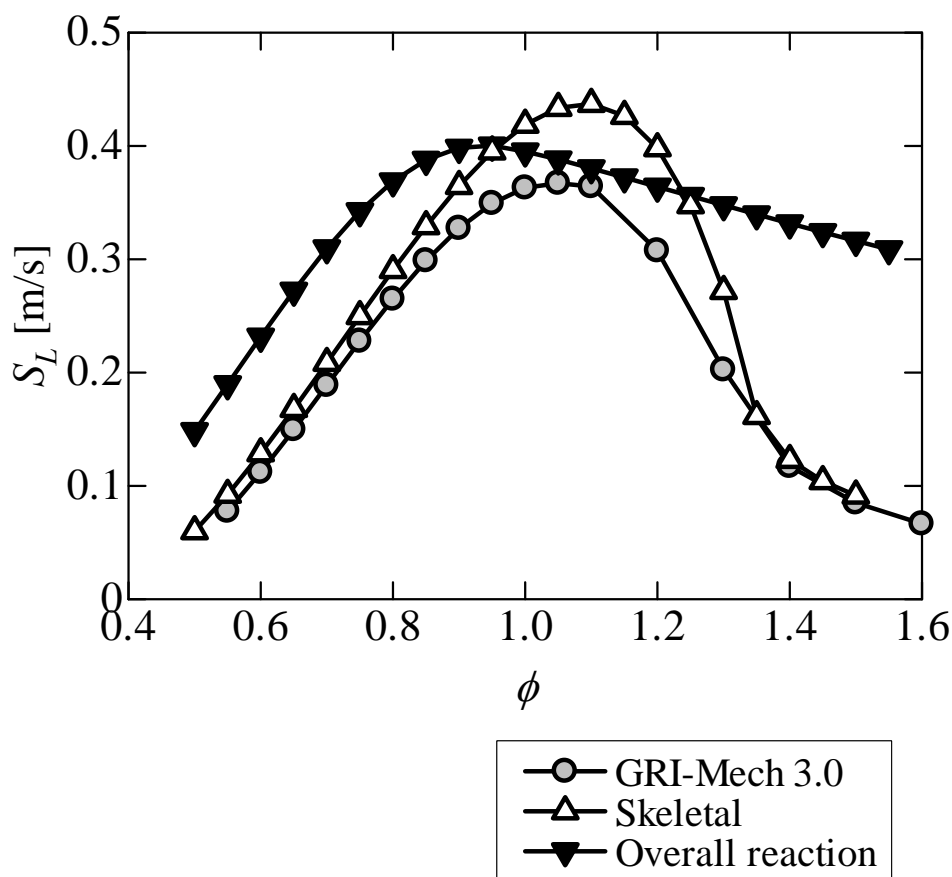


Fig. 3.1 Comparison of chemical kinetics models for laminar burning velocity

(2) 火炎伸長と諸特性の関係への反応機構の影響

図 3.2 に $\phi = 0.75$ における最高温度 T_{\max} すなわちよどみ面での温度および H ラジカル, OH ラジカルのモル濃度最大値, $c_{\text{H,max}}$, $c_{\text{OH,max}}$ と火炎伸長率 κ の関係を示す. まず, 可燃限界は Skeletal 素反応機構と GRI-Mech 3.0 ではほぼ同じ $\kappa = 600 \text{ s}^{-1}$ 程度であったが, 総括反応では図には示されていない 1680 s^{-1} まで火炎は保持されており非常に大きい. Skeletal 素反応機構および GRI-Mech 3.0 では κ が大きくなるとともに T_{\max} は小さくなる. これは, κ が大きくなると反応帯がよどみ面に近づき, 燃焼反応過程が中断され, 温度が十分上がる前に燃焼ガスがよどみ面に達してしまうためである. 一方, 総括反応では, T_{\max} の値はほとんど変わらない. これは総括反応では CO などの中間生成物の反応が考慮されておらず, 火炎帯より下流での反応がなく, メタンと酸素の反応が終わるとすぐに最高温度に達すること, また, 流入速度を変化させた場合においても火炎構造がほとんど変わらないことによる.

図 3.2(b), (c) に示すように, 火炎中の H ラジカルや OH ラジカル等各化学種の濃度分布についても Skeletal 素反応機構と GRI-Mech 3.0 は定性的に良い一致を示している.

以上の結果より, 総括反応では火炎伸長と火炎構造の関係を正確に表すことは不可能であることが分かる. 一方, Skeletal 反応機構は, 化学種の濃度について定量的な値に違いはあるものの定性的には GRI-Mech 3.0 とほぼ同様の傾向をもっており, 火炎構造の検討を行うには十分に正確な結果を得られていることがわかった.

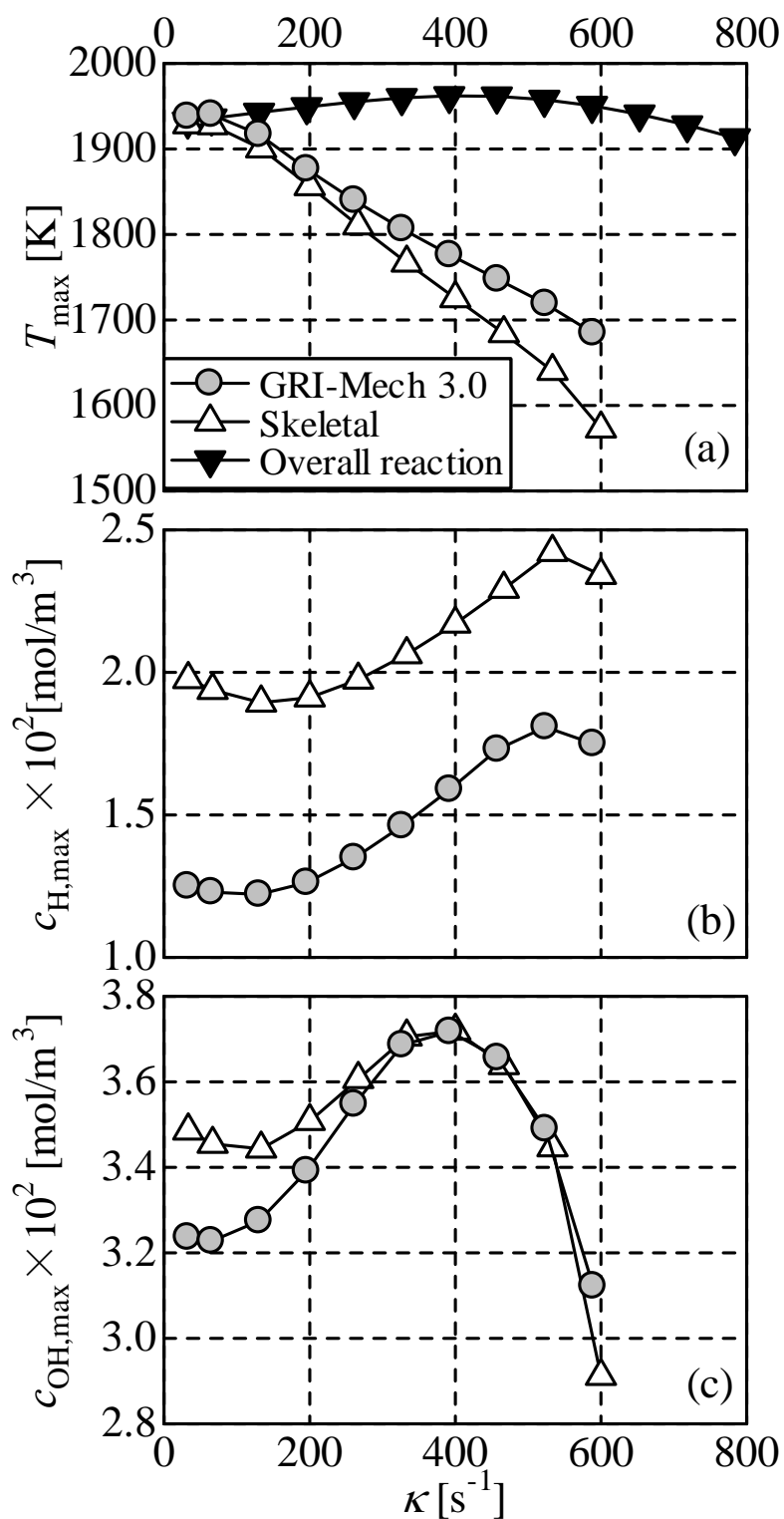


Fig. 3.2 Comparison of chemical kinetics models for the effect of flame stretch rate on T_{\max} , $c_{\text{H,max}}$ and $c_{\text{OH,max}}$

参考文献

- [1] R. J. Kee, *Sandia report*, 1986, SAND86-8246.
- [2] R. J. Kee, *Sandia report*, 1989, SAND89-8009.
- [3] NIST, *JANAF Thermochemical Tables*, third edition, 1985.
- [4] M. D. Smooke and V. Giovangigli, *Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames*, M. D. Smooke, Ed., 1991, pp. 1-28.
- [5] C. K. Westbrook and F. L. Dryer, "Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames," *Combustion Science and Technology*, vol. 27, pp. 31-43, 1981.
- [6] G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, M. Eiteneer, C. T. Goldenberg, R. K. Bowman, S. Hanson, W. Song, V. V. Lissianski and Z. Qin, "GRI-Mech 3.0," Available at: http://combustion.berkeley.edu/Combustion_Laboratory/gri-mech/.

第 4 章

予混合火炎の火炎構造に対する輸送係数の影響

4.1 はじめに

伸長のある予混合火炎の火炎構造を決める重要な要因として挙げられるのが Lewis 数効果である。一般的に、Lewis 数が 1 よりも大きいか、小さいかによりその影響は逆転するとされている。空気(酸素+窒素)を酸化剤として用いる場合には、 Le が 1 よりも小さな混合気としては燃料希薄の水素、ほぼ 1 の混合気として燃料希薄のメタン、1 より大きな混合気として燃料希薄のプロパンが代表例として挙げられる。近年では、燃料を変えずに不活性ガスをヘリウム、アルゴン、二酸化炭素等に変更することにより、Lewis 数の効果の検討を行う実験や数値解析が見られる [1, 2]。しかし、不活性ガスの種類を変更した場合、Lewis 数のみならず比熱や密度等の他の物理量も変化することから純粋な Lewis 数効果の検討は難しい。

一方、数値解析では物性値を任意に操作することが可能であることから、燃料や反応機構は変えずに、各化学種の Lewis 数のみを変更することにより、Lewis 数効果のみの検討を行うことが可能である。これまでも Ju ら [3]は、総括一段不可逆反応において、燃料の Lewis 数を変化させ、その他の化学種の Lewis 数を 1 とした対向流火炎を用いることで、輻射や Lewis 数効果が消炎に及ぼす影響について検討を行っている。

これらの研究を踏まえ、本章では、基礎的な燃焼場である火炎伸長のない平面一次元予混合火炎、および火炎伸長率を任意に設定することが可能な燃焼場としての平面二次元対向流予混合双子火炎を用いて Lewis 数と火炎構造の関係について検討を行う。

4.2 解析モデル

4.2.1 火炎伸長のない平面一次元予混合火炎

図 4.1 に示す伸長のない予混合火炎では、流れ場は質量流束 ρu が一定であると仮定し、温度場および濃度場についてのみ保存方程式を解く。-5 mm ~ 15 mm までを計算領域とした。格子数を 350 点とし、原点近傍(-2 mm < x < 3mm)では 0.02 mm の等間隔格子を、それ以外の領域では不等間隔格子を用いた。 $x = -5$ mm から大気圧、300 K のメタン - 空気予混合気を流入させる。このとき火炎が計算領域内に定在するように流入速度

を調整した. $x = 0$ の位置における温度 $T = 1300 \text{ K}$ になるようにしている. 火炎が計算領域内に定在するとき流入速度は層流燃焼速度 S_L と等しくなる.

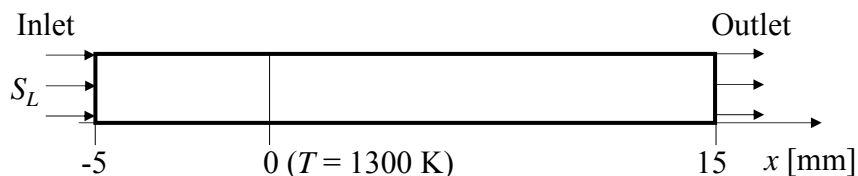


Fig. 4.1 Schematics of unstretched laminar premixed flame

4.2.2 火炎伸長のある対向流予混合双子火炎

図 4.2 に示す平面二次元対向流予混合火炎では, 流れ場は平面二次元のポテンシャル流とし, 温度場および濃度場には相似解が適用できるものとする. 対向する二つのノズルからメタン-空気の予混合気を速度 u_0 で噴出させ, 双子火炎を形成させる. この場合, 流れ場はよどみ面を挟んで対称となるため, 一方のノズルからよどみ面までを計算領域とした. 一方のノズルの中心を原点として, ノズル軸方向および軸に垂直方向の座標を (x, y) とする. 圧力は大気圧, ノズル位置での温度は 300 K とする. ノズル間の距離 L は 30 mm , 格子間隔は 0.01875 mm であり, 格子数は 800 点の等間隔格子とした. なお, このような対向流では, 火炎伸長率 κ はノズル間の速度勾配と等しくなる.

$$\kappa = \frac{2u_0}{L} \quad (4.1)$$

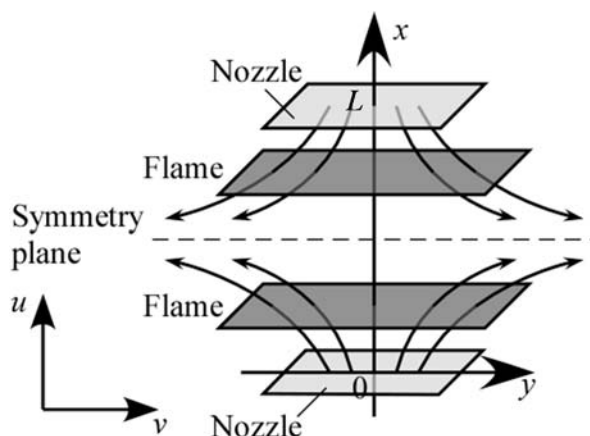


Fig. 4.2 Schematics of the twin premixed counterflow flame

4.3 結果および考察

4.3.1 総括反応を用いた場合

(1) 層流燃焼速度に与える輸送係数の影響

本項では、火炎構造に与える輸送係数の効果について検討を行うために、有効熱伝導率 λ および各化学種の有効拡散係数 D_i を操作した計算を行った。反応機構については輸送係数の影響がより明確に表れるように総括一段不可逆反応を用いた。また、混合気の当量比は1.0とする。まず、本解析において λ には窒素の値を用いているが、この値を実際の値の0.5倍、1倍、2.0倍と操作した。また、 D_i についても同様に実際の値の0.5倍、1倍、2.0倍とした。この実際の値からの変化率を r_c とし、 λ および D_i の r_c の値がともに1であるとき実際の予混合火炎となる。計算条件として、Case A: D_i に実際の値を用い、 λ のみを変化させた場合；Case B: λ に実際の値を用い、 D_i のみを変化させた場合；Case C: λ と D_i を同時に変化させた場合、の3条件について検討を行う。Case Cにおいて各化学種のLewis数 Le_i は実際の値($Le_{CH_4} = 0.97$, $Le_{O_2} = 1.11$, $Le_{CO_2} = 1.39$, $Le_{H_2O} = 0.83$)で一定となる。

図4.3にCase AからCにおける輸送係数の変化率 r_c と層流燃焼速度 S_L の関係を示す。熱理論による層流燃焼速度の評価 [4, 5]は次式のように表されている。

$$S_L = \frac{1}{\rho_0} \sqrt{\frac{\lambda \omega T_b - T_i}{c_p T_i - T_u}}$$

$$\omega = Ap^n \exp\left(-\frac{E}{R^0 T_b}\right) \quad (4.2)$$

ここで ρ_0 は未燃予混合気の密度、 ω は一段の総括反応を考慮した場合の反応速度、 c_p は平均の定圧比熱、 T_u, T_b, T_i はそれぞれ、未燃ガス、既燃ガス、反応帯入口での温度である。また、 A, p, n, E, R^0 は比例定数、系の圧力、反応次数、活性化エネルギー、一般気体定数である。この式では反応帯における反応物の濃度の効果が考慮されていない。反応帯における反応物の濃度は拡散係数が大きいと低下し、反応速度は小さくなる。Lawらの考察 [6]によると、実際の予混合火炎における層流燃焼速度を $S_{L,0}$ とすると、

$$\frac{S_L}{S_{L,0}} = \frac{\lambda}{\sqrt{D_i}} = r_c^n \quad (4.3)$$

となる。本解析の結果は、どの条件においても式(4.3)とおおよそ合致する結果となる。ここで、Case Aのとき $n = 1$ 、Case Bのとき $n = -0.5$ およびCase Cのとき $n = 0.5$ である。すなわち、Case Aでは λ のみを変えているために、 S_L と r_c は比例関係にあり、同様にCase B, Cではそれぞれ r_c の $-1/2$ 乗、 $1/2$ 乗に比例することを示している。実際に図

4.3においてCase AからCの n はそれぞれ, 0.93, -0.436, 0.498となり, おおよそ一致する. このような傾向が得られる理由を確認するために, 次項において火炎構造について調べる.

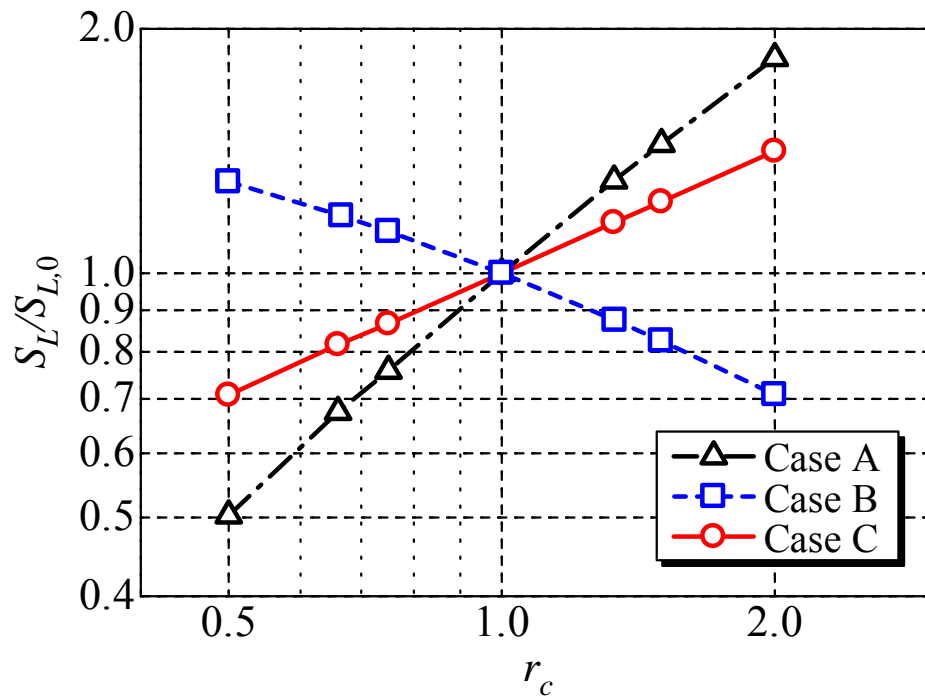
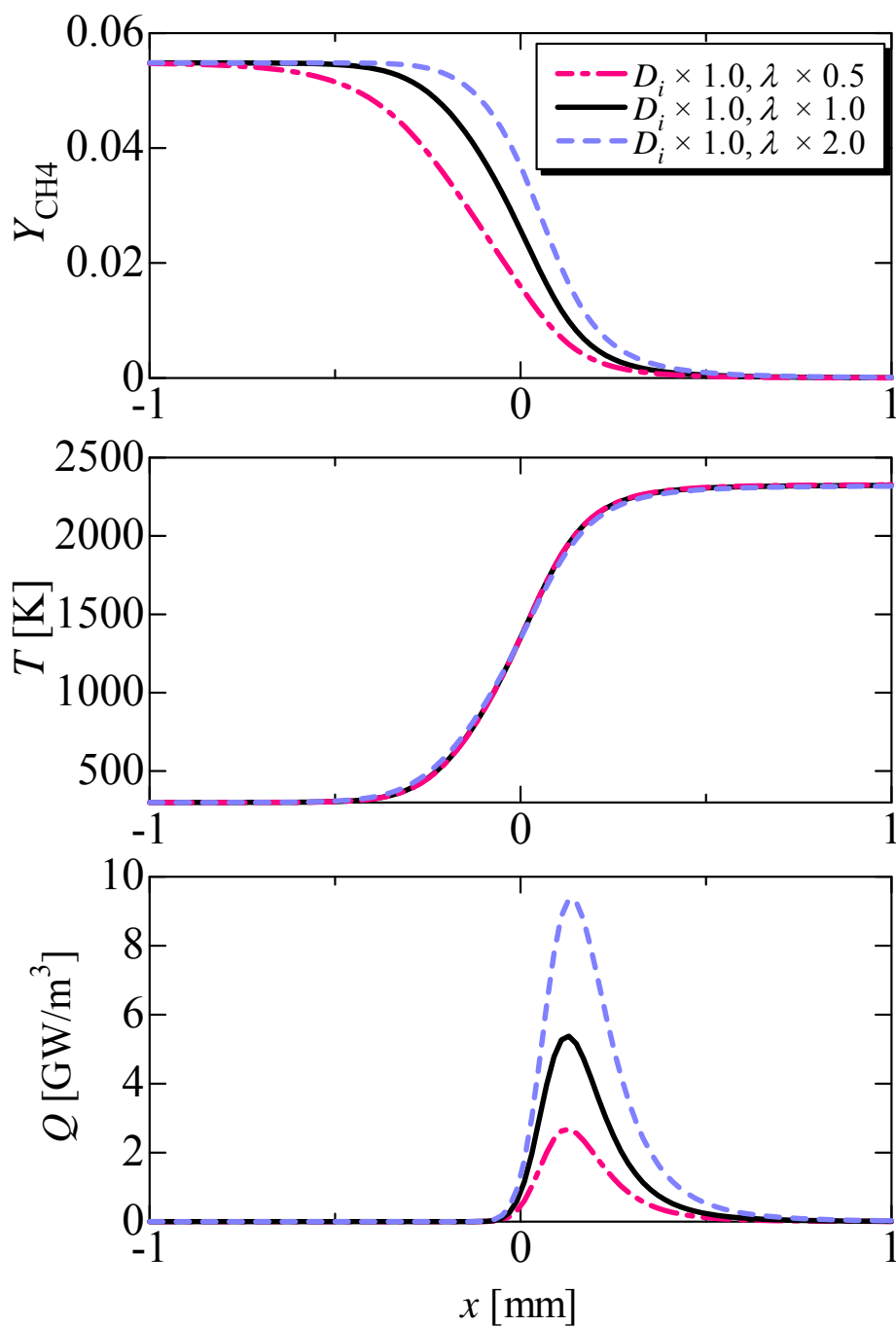


Fig. 4.3 Effect of changing rate of transport coefficients on S_L

(2) 温度、反応物濃度および熱発生速度に与える輸送係数の影響

まず、輸送係数が火炎構造に与える影響について検討する。図4.4~4.6にCase A~Cにおける温度、反応物であるメタンのモル濃度および熱発生速度の分布を示す。なお、層流燃焼速度の変化により対流の効果が各条件で異なっていることに注意が必要である。

各条件において、最終的な到達温度は断熱火炎温度にほぼ対応する。このとき、比熱等は操作していないため、全ての条件において到達温度はほぼ同じとなる。火炎帯付近での温度勾配は、Case Aの場合には熱伝導率を変化させても変化しない。これは、熱伝導率の増加は温度勾配を小さくするはずであるが、燃焼速度が大きくなることによる対流の効果の増加とちょうど相殺されたためと考えられる。逆に、反応物濃度分布は物質拡散係数が同じであるが、燃焼速度が大きくなることによる対流の効果の増加により、熱伝導率が大きくなると、勾配が大きくなることがわかる。これに対し、Case Bの場合には物質の拡散係数を大きくすると、温度勾配も緩やかになるが、反応物がかなり上流へ拡散することにより反応帯における濃度が非常に低下している。また、Case Cの場合には拡散係数が大きくなると勾配が緩やかとなるが、Lewis数が一定であることにより反応物濃度と温度の分布が相似的に広がることがわかる。

Fig. 4.4 Distributions of Y_{CH_4} , T and Q (Case A)

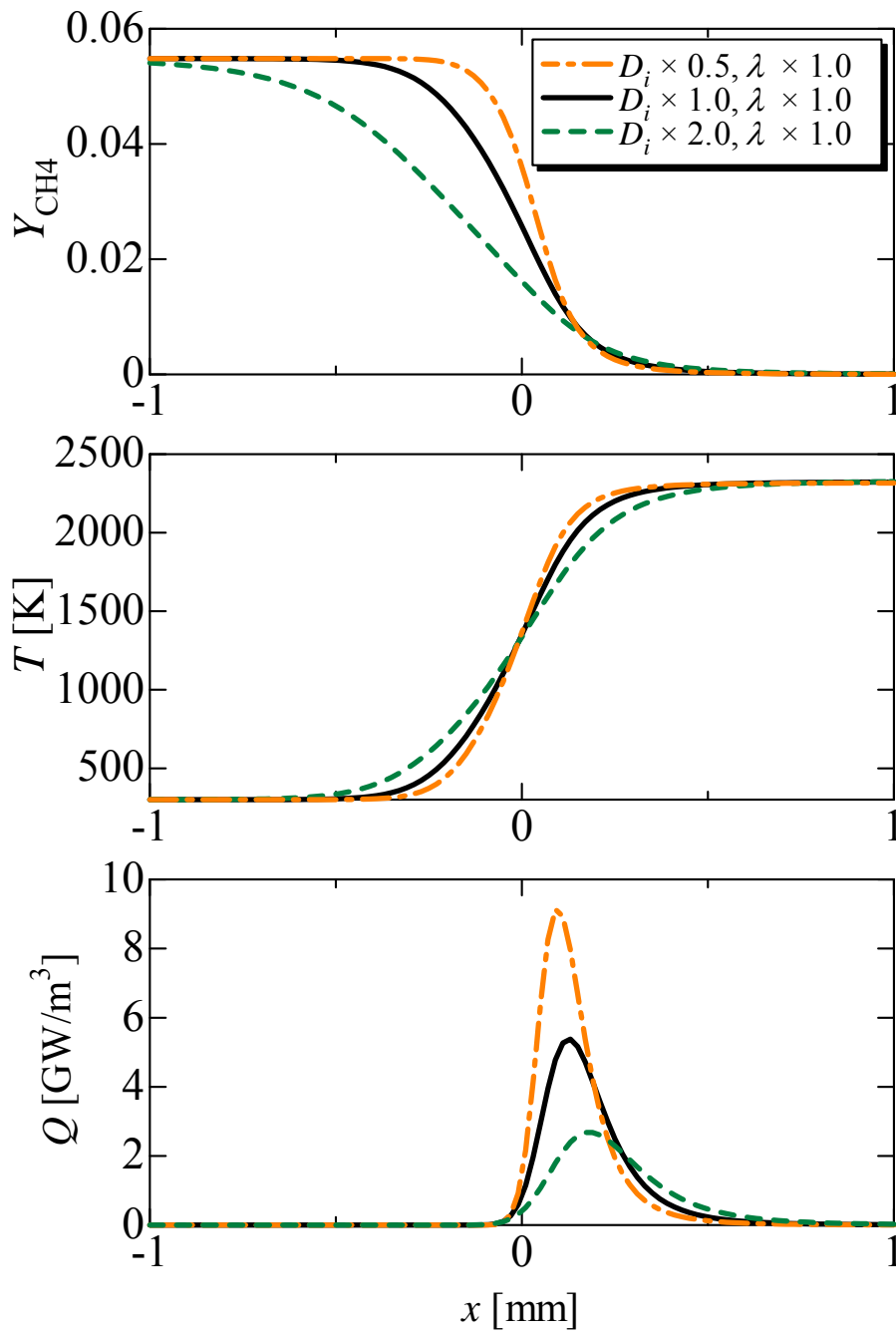
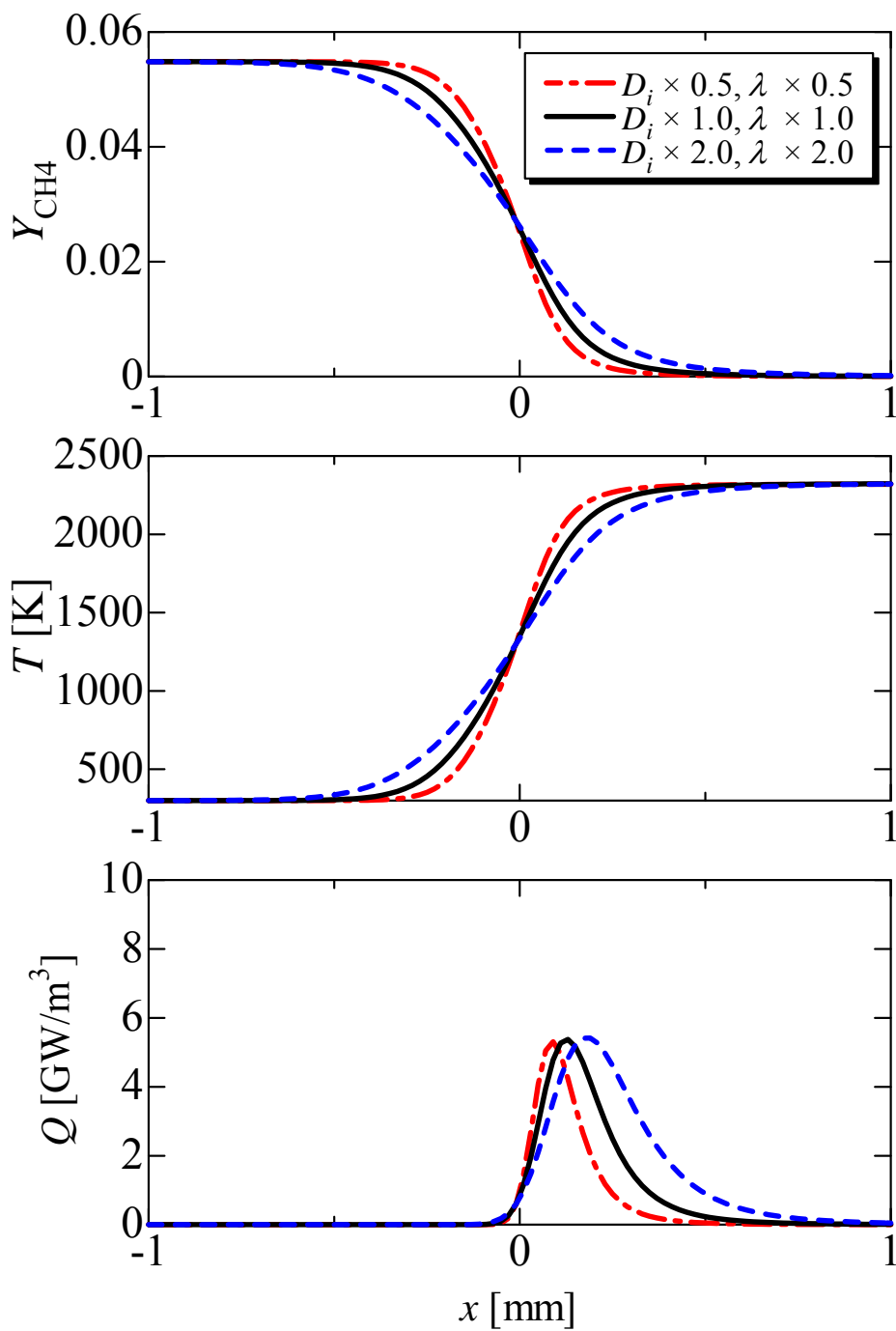


Fig. 4.5 Distributions of Y_{CH_4} , T and Q (Case B)

Fig. 4.6 Distributions of Y_{CH_4} , T and Q (Case C)

次に輸送係数の変化が、熱発生速度分布に与える影響について検討する。まず、熱発生速度の最大値 Q_{\max} と層流燃焼速度との関係を図 4.7 に示す。図より Q_{\max} と S_L の間には相関がみられないことがわかる。特に、Case C で熱発生速度は特徴的な挙動を示し、変化率 r_c に対して S_L は変化している場合でも Q_{\max} は一定である。Case A, B を含めた場合でも Lewis 数が同じ条件であれば Q_{\max} は常に一定である。図 4.6 で示したように、Lewis 数が同じ条件では温度と反応物の濃度の分布の間に相似性が保たれることから、分布の幅は伸縮しても、局所の温度と濃度の値が同一となる。このため、Lewis 数が一定の場合に Q_{\max} も一定となるものと考えられる。

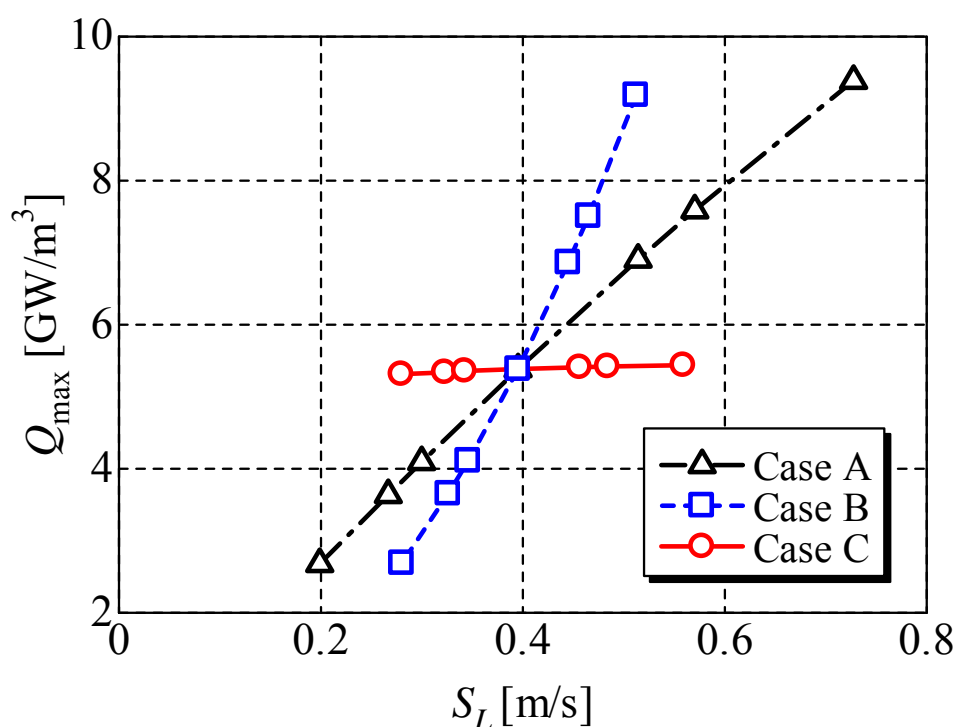


Fig. 4.7 Effects of changing rate of transport coefficients on the relation between maximum heat release rate, Q_{\max} and laminar burning velocity, S_L

熱発生速度の積算値 Q_{sum} と層流燃焼速度との関係を図 4.8 に示す. ここで, Q_{sum} は次式から算出する.

$$Q_{\text{sum}} = \int Q dx \quad (4.4)$$

熱理論からも明らかであるが, Q_{sum} は層流燃焼速度の変化と Case A~C の全ての条件においてよく一致している. Q_{sum} は熱伝導率が大きくなると相似的に熱発生速度の分布の幅が広がるために大きくなったと考えられる. 言い換えれば, 熱伝導率が大きくなると燃焼反応できる領域が広がり, 大量の予混合気を受け入れることが可能となる. これにより, 層流燃焼速度が大きくなることができると考えられる. 一般に火炎帯厚さが薄い場合に層流燃焼速度が大きくなるとされているが, これは同じ混合気を用いた場合, すなわち, 同じ輸送係数の条件において比較した場合の結果であると考えられる.

以上より, 物質の拡散係数の増加は燃焼速度を小さくし, 熱伝導率の増加は燃焼速度を大きくする効果があり, 熱理論を修正した式(4.3)の Law の式とも一致することがわかった. また, 熱発生速度や諸量の分布にも影響があることがわかった.

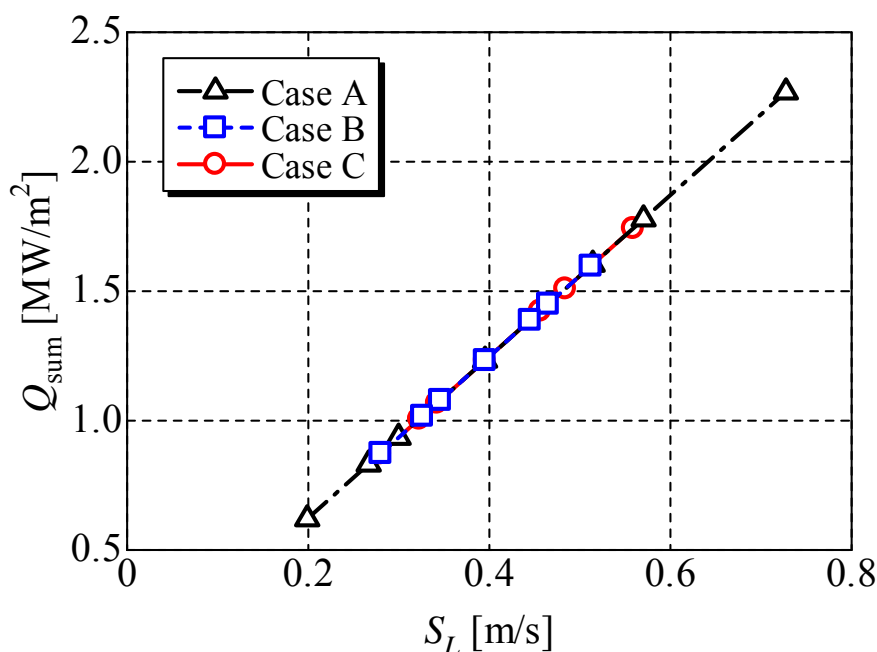


Fig. 4.8 Effects of changing rate of transport coefficients on the relation between summation of heat release rate, Q_{sum} and laminar burning velocity, S_L

4.3.2 素反応機構を用いた場合

次に、素反応を考慮した場合について検討を行う。反応機構には Smooke らの Skeletal 素反応機構を用いた [7]。特に Lewis 数に着目するために、以下のように、Lewis 数を基準として輸送係数の操作を行う。化学種 i の Lewis 数 Le_i は、混合気の有効熱拡散係数 a と有効拡散係数 D_i を用いて次式で表される。

$$Le_i = \frac{a}{D_i} \quad (4.5)$$

ここで、 a には窒素の値を用いている。また、選択拡散の影響をなくし、Lewis 数の影響について評価するために、各化学種の D_i を同一となるように操作し、 $Le_i = 0.5, 0.9, 1.0, 1.1, 1.5$ となるように D_i の値を決めた。この操作により、 $Le_i = 1.0$ では各化学種の拡散および熱と物質の拡散が等しい場となり、 $Le_i \neq 1.0$ では、各化学種の拡散は等しいが、熱と物質の拡散は異なる場となる。この操作は前項における Case B に相当する。このとき混合気の当量比は 0.75 とする。なお、当量比 $\phi = 0.55, 0.95$ の場合についても計算を行ったが、定性的な傾向は $\phi = 0.75$ の場合と同じであったため、以下では $\phi = 0.75$ の場合の結果についてのみ示す。また、比較のために、伸長のない平面一次元予混合火炎では Lewis 数に実際の値を用いた当量比 $\phi = 0.75$ の条件の結果と比較する。表 4.1 に Skeletal 素反応機構における各化学種の Lewis 数を示す。

また、当量比を変化させた場合における火炎伸長の影響とも比較するために、対向流予混合双子火炎の場合にも Lewis 数に実際の値を用いた場合の計算を行う。このとき、混合気の当量比 ϕ は $0.55, 0.75$ および 0.95 の 3 条件とし、流入速度は $u_0 = 0.5 \text{ m/s}$ から消炎までとする。

Table 4.1 Lewis numbers for various species [7]

Species	CH ₄	O ₂	H ₂ O	CO ₂	H	O
Le_i	0.97	1.11	0.83	1.39	0.18	0.70
Species	OH	HO ₂	H ₂	CO	H ₂ O ₂	HCO
Le_i	0.73	1.10	0.30	1.10	1.12	1.10
Species	CH ₂ O	CH ₃	CH ₃ O	N ₂		
Le_i	1.12	1.00	1.30	1.00		

(1) 火炎伸長のない平面一次元予混合火炎

まず、火炎伸長のない平面一次元予混合火炎について、当量比 $\phi=0.75$ において Le_i を操作し、 $Le_i=0.5, 1.0, 1.5$ とした場合およびLewis数を操作しない実際の場合について、温度 T 、熱発生速度 Q の分布を図4.9に示す。ここで、 $x=0$ は $T=1300\text{ K}$ となる位置である。まず、温度分布を比較すると Le_i が異なる条件で勾配は多少異なるが大きな変化はない。総括反応を用いた場合におけるCase Bとほぼ同じ傾向であるが、勾配の差異は総括反応の場合に比べて小さい。また、熱発生速度分布についてもLewis数が大きくなるとともに最大値は大きくなり、総括反応の場合におけるLewis数を変化させた場合と同様の結果となった。

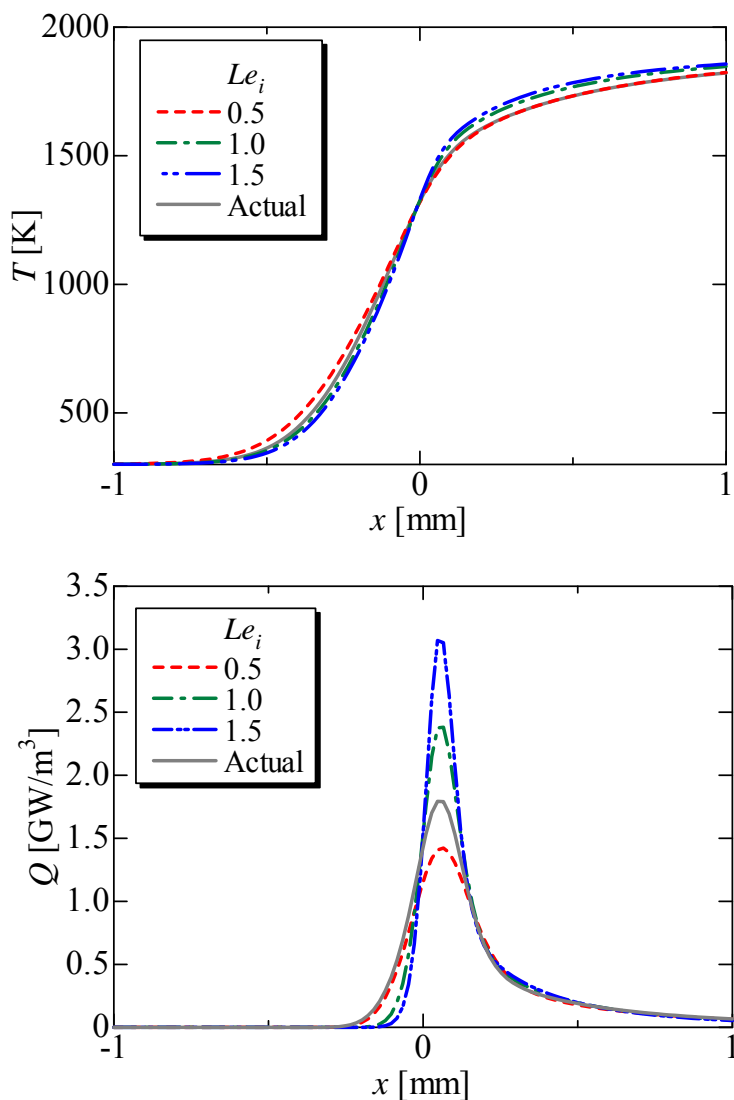


Fig. 4.9 Distributions of T and Q in unstretched planar premixed flame of $\phi=0.75$

各化学種の分布についても、反応物については前項において検討した結果と同様の傾向が得られたため、代表的な中間生成物として図 4.10 に示す CH_2O および OH ラジカルについて検討する。まず、 Le_i が小さい条件ほど、質量生成速度 $w_{\text{CH}_2\text{O}}$ および w_{OH} の最大および最小値の絶対値は小さくなる。また、その分布形状はほぼ同じである。質量分率 $Y_{\text{CH}_2\text{O}}$ および Y_{OH} の分布について主に予熱帯から反応帯に存在する CH_2O は反応物濃度の場合と同様に Le_i が小さい条件ほど上流へ拡散している。一方、反応帯から既燃領域に存在する OH ラジカルについてはその最大値は小さくなるが、既燃側での平衡濃度はほぼ同じとなっている。また、実際の Le_i と近い Le_i の値とした条件と似た分布を持つ。したがって、これらの化学種の濃度分布は、化学種間で Le_i の値が異なることは無関係であることがわかる。

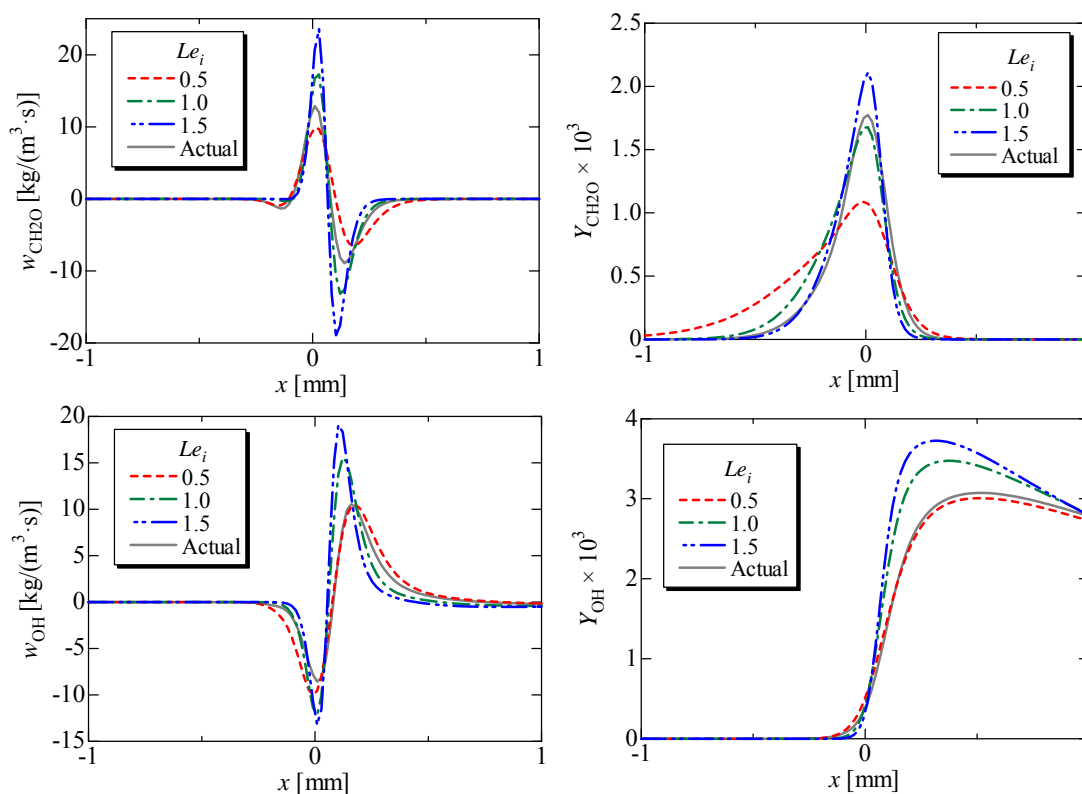


Fig. 4.10 Distributions of $w_{\text{CH}_2\text{O}}$, $Y_{\text{CH}_2\text{O}}$, w_{OH} , Y_{OH} in unstretched planar premixed flame of $\phi = 0.75$

(2) 火炎伸長のある対向流予混合双子火炎

図 4.11 に当量比 0.75 において、全化学種の Le_i を同一で 0.5~1.5 とした場合の火炎伸長率 κ と Q_{\max} , Q_{sum} との関係を示す. 図中には実際の Le_i を用いた $\phi = 0.75$ の結果についても併せて示す. まず, 前項までに示した伸長のない予混合火炎における Lewis 数の影響は図 4.11 において κ を 0 へ外挿した場合に相当する. 伸長がない場合の Q_{\max} や Q_{sum} の変化は輸送係数の値そのものによる影響であるが, 火炎伸長率 κ を大きくした場合における Lewis 数の影響はいわゆる Lewis 数効果により表れる. $Le_i = 0.5, 0.9$ では, 熱と物質の拡散の不均衡により, κ が大きくなるにつれ, 火炎が強化されることから Q_{\max} は大きくなり, 小さくなるのは消炎直前のみである. 熱と物質の拡散が等しい $Le_i = 1.0$ の場合では, Q_{\max} の変化は小さい. また, $Le_i > 1$ の条件では逆に κ が大きくなるにつれ火炎が弱められることにより Q_{\max} は小さくなり, 消炎する κ も小さくなる.

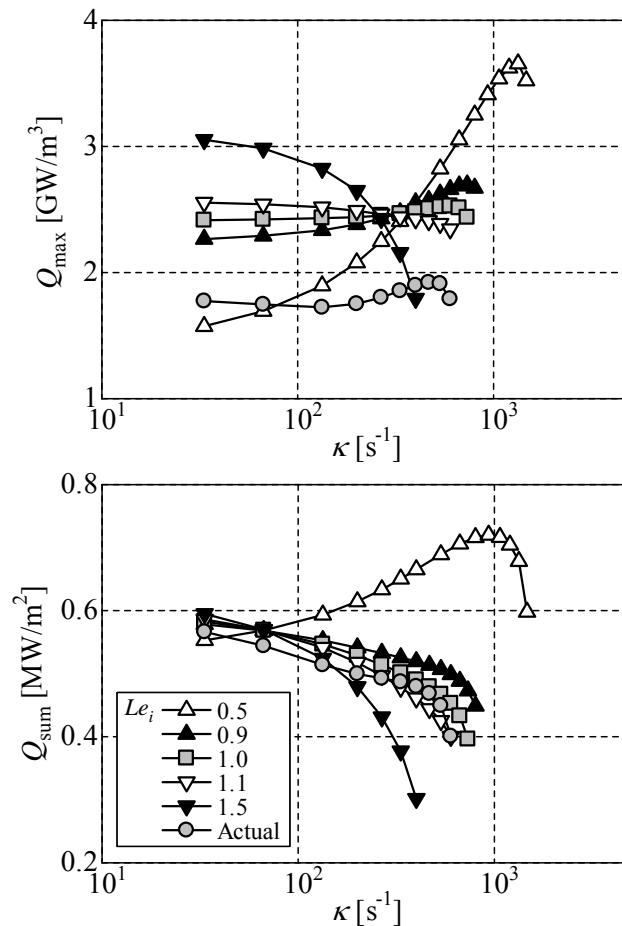


Fig. 4.11 Influence of κ on Q_{\max} and Q_{sum} for various Lewis numbers in counterflow premixed flame of $\phi = 0.75$

一方, Q_{sum} は Q_{max} とは異なる挙動をとることがわかる. まず, $Le_i = 0.5$ の場合には, κ が大きくなると, Q_{sum} は κ が小さい範囲では, Q_{max} と同じように大きくなる. しかし, $\kappa > 600 \text{ s}^{-1}$ では, 一定となり, さらに大きくなると減少する. 一方, $Le_i \geq 0.9$ 以上の場合には, κ が大きくなると Q_{sum} は小さくなる. これは, Q_{sum} に影響を与える要因として, Lewis 数だけではなく, よどみ面においても反応が完結せず, Q の値が 0 とはならない, 「燃え残りの効果」が働いているからである. このような現象は Yamamoto らによって計測された管状火炎における OH ラジカルや温度の分布などからも確認できる [8, 9]. そのため, Le_i が 1 よりも小さく, 火炎が強められるはずの $Le_i = 0.9$ の条件において, Lewis 数の効果により火炎が強化される効果よりも燃え残りの効果が上回り, Q_{sum} が減少する結果となったと考える.

燃え残りの効果について確認するために, 図 4.12 に OH ラジカルのもル濃度最大値 $c_{\text{OH,max}}$ および火炎面での値 $c_{\text{OH},q}$ と κ の関係を, Le_i を同一で 0.5~1.5 とした場合および実際の場合について示す. まず, $Le_i = 0.5, 1.5$ の場合, Le_i が 1 より大きく離れているため, 熱発生速度の場合と同様に熱と物質の拡散の不均衡により κ が大きくなると, $c_{\text{OH,max}}$ は $Le_i = 0.5$ では増加し, $Le_i = 1.5$ では減少する. 一方, Le_i が 1 に近い $Le_i = 0.9, 1.0, 1.1$ では, κ が小さい範囲では, κ の増加とともにそれぞれの Lewis 数に合致した傾向を示すが, κ が大きくなると, どの条件でも大きくなる傾向となる. 図 4.13 に実際の Le_i を用いた場合の OH ラジカル質量生成速度 w_{OH} の分布を火炎がよどみ面から十分に離れている条件 ($\kappa = 66.7 \text{ s}^{-1}$) と, 消炎直前のよどみ面近傍に火炎が形成されている条件 ($\kappa = 533 \text{ s}^{-1}$) について示す. ここで横軸は火炎面位置 x_q からの距離とし, 既燃側を正とする. 実際の Le_i の場合, Lewis 数効果による火炎の強化は小さく, 質量生成速度の分布は κ が変わっても変化は小さい. しかし, κ が大きくなると, 火炎面がよどみ面に近づき, 下流の OH ラジカル生成がよどみ面によって中断される. なお, このとき $c_{\text{OH,max}}$ はよどみ面での値となる. また, Le_i が 1 に近い各条件においても Lewis 数による増減の効果よりも「燃え残りの効果」が上回ったため κ が大きくなると $c_{\text{OH,max}}$ も大きくなったと考える. 一方, $c_{\text{OH},q}$ は $Le_i < 1.0$ では, $c_{\text{OH,max}}$ と同じ傾向がある. しかし, $Le_i = 1.1$ の場合には, $c_{\text{OH},q}$ とは異なり, 火炎面がよどみ面に近づくと小さくなるのに対し, 実際の Le_i を用いた場合には大きくなっている.

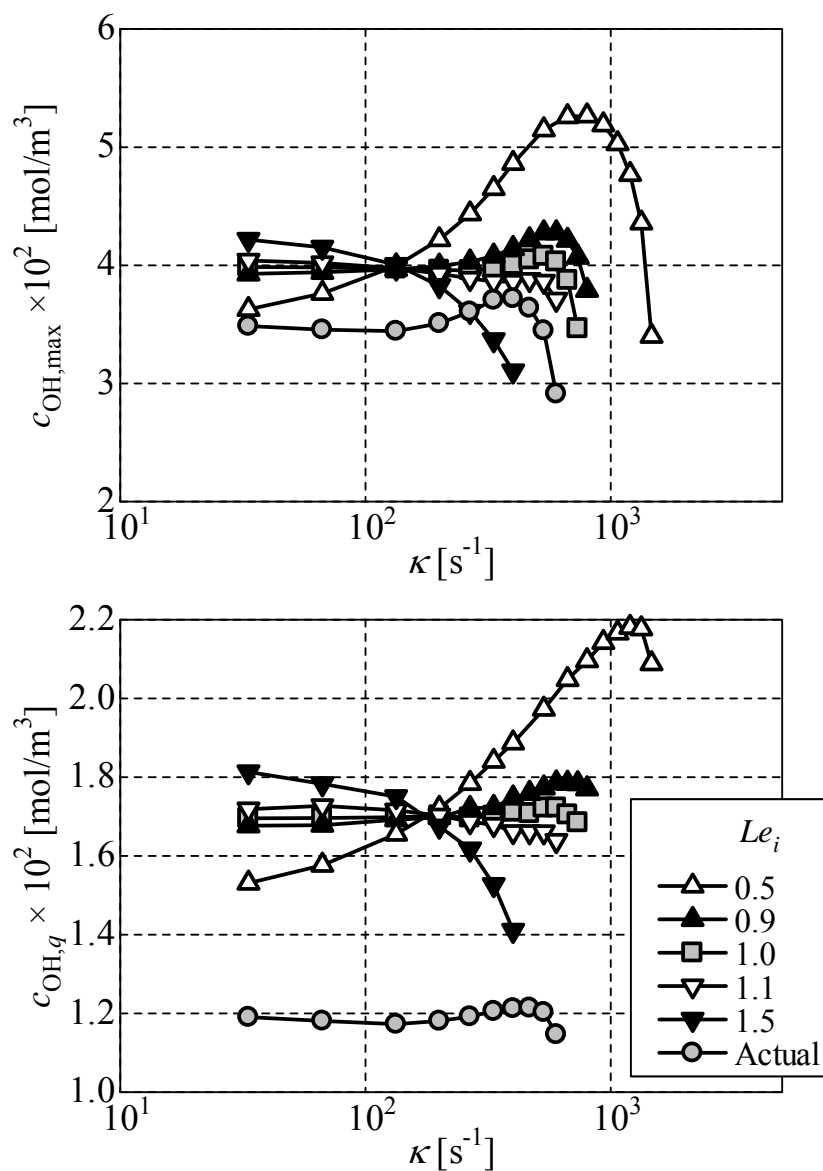


Fig. 4.12 Influence of κ on (a) $c_{\text{OH,max}}$ and (b) $c_{\text{OH,q}}$ for various Lewis numbers in counterflow premixed flame of $\phi = 0.75$

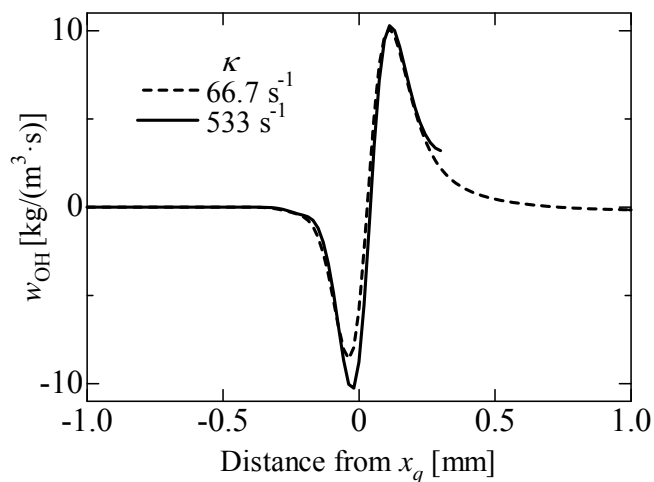


Fig. 4.13 Distributions of w_{OH} in counterflow premixed flame of $\phi = 0.75$

この Le_i を操作した結果と実際のメタン-空気対向流予混合双子火炎における種々の当量比で得られる結果との比較を行う。図 4.14 に各当量比における Q_{max} , Q_{sum} および火炎面位置 x_q と κ との関係を実際の場合について示し、図 4.11 の結果と比較する。ここで、 Q_{max} , Q_{sum} は伸長を受けない層流一次元予混合火炎での値 $Q_{\text{max},0}$, $Q_{\text{sum},0}$ との比として表示する。

$\phi = 0.55$ では、 κ が大きくなるとともに Q_{max} は増加し、消炎直前の条件でのみ減少する。また、 Q_{sum} は κ が大きくなると共に小さくなる。この結果は Le_i を操作した場合における $Le_i = 0.90$ の場合の挙動とほぼ同じであり、燃料希薄メタン-空気予混合火炎の Lewis 数が 0.97 であることと対応した結果である。それに対し、 $\phi = 0.75$ では、 Q_{max} の変化は小さいが、伸長率の大小により傾向が変化する。まず、 $\kappa < 160 \text{ s}^{-1}$ の場合、 κ が大きくなると Q_{max} は小さくなるが、 $\kappa > 160 \text{ s}^{-1}$ では、 $\phi = 0.55$ の場合と同様に Q_{max} は κ が大きくなるとともに大きくなる。 $\phi = 0.95$ では、 Q_{max} は $\kappa < 250 \text{ s}^{-1}$ では κ が大きくなると減少し、 $\kappa > 250 \text{ s}^{-1}$ ではほぼ一定となる。

火炎伸長が小さい範囲における当量比の違いによる Q_{max} の傾向の変化は火炎伸長と燃焼速度の関係がメタン火炎において $\phi = 0.70$ 近傍で変化するという球状伝ば火炎を用いた実験 [10] と同様の結果となった。したがって、火炎の伝ば挙動と Q_{max} の関係が強いということが示唆される。

火炎伸長が大きい条件では、どの当量比においても、消炎直前を除き、 κ が大きくなると Q_{max} も大きくなる。このように Q_{max} と κ の関係が変化する κ の値は、火炎面の位置 x_q と関係していると推察する。図 4.14(c) に示すように、どの当量比でも、 κ が大きくな

るとともに火炎面はよどみ面($x=15\text{ mm}$)に近づき、一定の κ 以上ではその位置はほとんど変わらなくなる。この x_q がほとんど変わらなくなる κ の値は ϕ が大きいほど大きく、 $\phi=0.55$ の場合には非常に小さい。この x_q が変わらなくなる κ の値は、 $\phi=0.75, 0.95$ では、 Q_{\max} と κ の関係において、 κ の増加とともに Q_{\max} が減少していたものが増加あるいは一定へと転じる値である。すなわち、火炎面の位置が κ の増加とともに大きく変化することができる範囲では、 Q_{\max} は減少し、火炎面の位置がほとんど変わらなくなると、 Q_{\max} が増加する傾向が生じる。これは、 Le_i を同一とした場合にはない傾向であるので、選択拡散の効果であると考えられる。図4.12および13で示したOHラジカルのように、Lewis数が1に近い条件では、燃焼反応の中断により、よどみ面における濃度が大きくなる。また、各化学種の拡散はその化学種の D_i の大きさにより決まる。表4.1に示すようにラジカルのLewis数は小さいものが多いため、生成物である CO_2 や H_2O よりも火炎面に拡散しやすい。このため、火炎面位置でのラジカルの濃度が大きくなることで、燃焼反応を促進して火炎を強化、 Q_{\max} を大きくすることに寄与したものと考えられる。一方、 Le_i を同一で1に近い値とした場合は、反応の中断により、よどみ面でのラジカルの濃度は大きくなる。特に、 $Le_i=0.9, 1.0$ の場合は、実際の Le_i の値を用いたときと、同じように火炎面でのラジカルの濃度は大きくなる。しかし、 Le_i を同一としたため、生成物もラジカルも同じように拡散し、火炎を強化する効果は働かない。

図4.14(b)に示すように、 Q_{sum} は ϕ によってその勾配は異なるが、 κ が大きくなるとともに減少する。ここで、火炎構造に与える当量比の影響について各化学種のLewis数を操作した場合の結果である図4.11と合わせて考察する。実際のLewis数の場合、 κ が小さい範囲では、 Q_{\max} の傾向は ϕ によって異なり、 $\phi=0.55$ では、 κ が大きくなると $Le_i < 1$ の傾向と一致し、 κ による Q_{\max} の変化量は、実際の燃料希薄メタン-空気予混合火炎のLewis数の値に近い $Le_i=0.9$ の場合の変化割合に近い。一方、 $\phi=0.75, 0.95$ では、 Q_{sum} は、 $Le_i > 1$ の傾向と同じように κ が大きくなるとともに小さくなる。

以上の結果より、球状火炎における伝ば速度に対する実験結果 [10]との対応より、火炎伝ばとは Q_{\max} が対応していることが示唆された。Lewis数が1よりも十分離れている条件では Q_{sum} も κ に対して Q_{\max} とほぼ同じ挙動を取るが、 $Le=0.9$ 程度とあまり1から離れていない条件では Q_{sum} と Q_{\max} は異なる挙動を示すことがわかった。

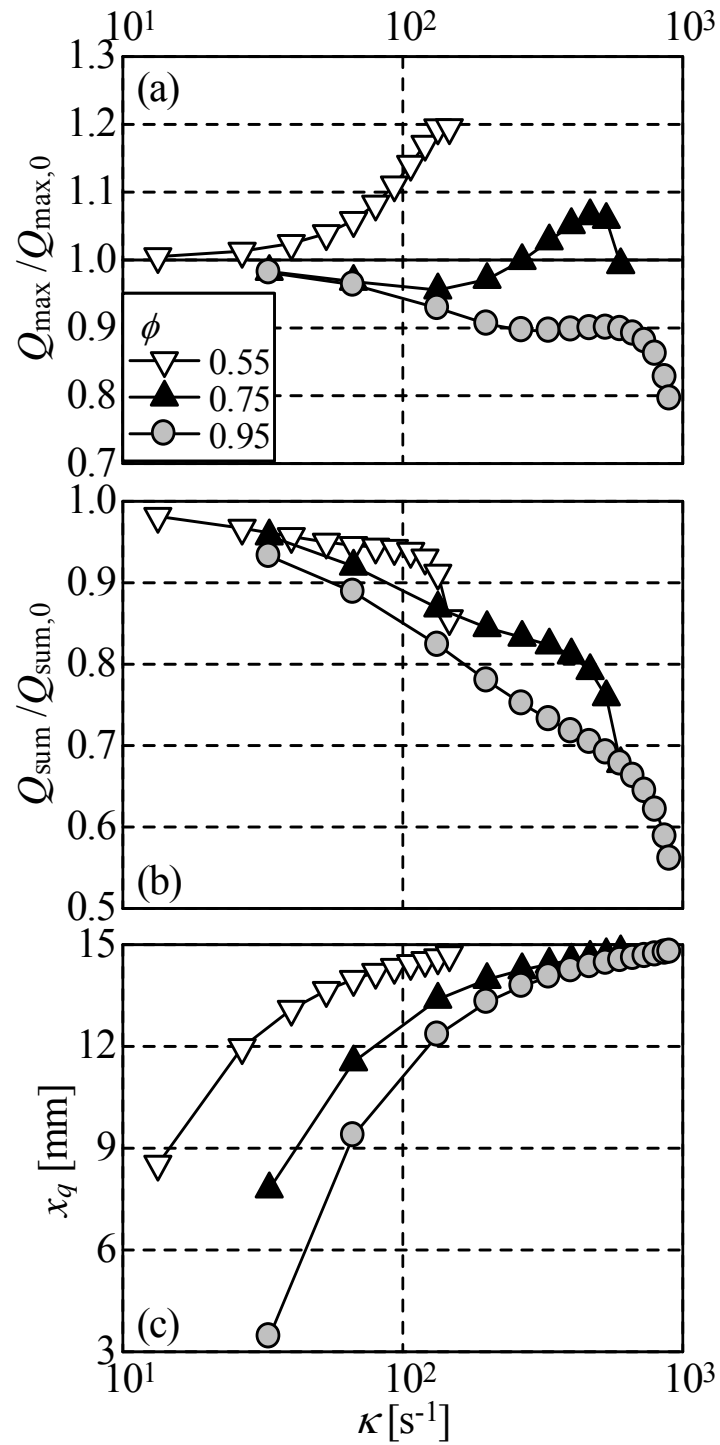


Fig. 4.14 Influence of κ on (a) Q_{max} , (b) Q_{sum} and (c) x_q for various ϕ in counterflow premixed flame with actual Lewis number

4.4 まとめ

本章では、基礎的な流れ場である火炎伸長のない予混合火炎、および火炎伸長率を任意に設定することが可能な場としての平面二次元対向流予混合双子火炎を用いて混合気の有効熱伝導率や各化学種の有効拡散係数、または Lewis 数と火炎構造の関係について検討を行った。その結果、以下の知見が得られた。

- (1) 層流燃焼速度は、有効熱伝導率が大きくなると大きくなり、一方、各化学種の有効拡散係数が大きくなると小さくなる。また、Lewis 数一定の条件下で有効熱伝導率および各化学種の有効拡散係数を同時に大きくすると、層流燃焼速度は大きくなる。その比例定数は熱理論から推測される結果とほぼ一致する。
- (2) 輸送係数を変化させた場合の火炎構造への影響について、断熱火炎温度は変化しないが、火炎帯における温度勾配は変化する。
- (3) 熱発生速度の積算値は層流燃焼速度の変化とよく対応するが、最大値の傾向は積算値の場合と異なり、反応帯における反応物濃度の濃度が大きいほど、最大値は大きくなる。
- (4) Lewis 数の違いが伸長を受ける火炎の火炎構造に与える影響を調べるために、素反応機構を用いて、Lewis 数を操作した数値解析を行った。このとき、Lewis 数が 1 から大きく離れる場合には Lewis 数の効果が支配的となるが、メタン-空気予混合火炎のように 1 からあまり離れていない場合、Lewis 数効果の影響は小さくなり、燃え残りの影響が大きくなる。
- (5) 火炎伸長率が小さい範囲では、熱発生速度の最大値は当量比 $\phi = 0.55$ では Lewis 数 $Le_i < 1$ の場合と、 $\phi = 0.75$ および 0.95 では $Le_i > 1$ の場合と同様な傾向をもつ。一方、 κ が大きい範囲では、火炎面がよどみ面に近づき、火炎面の位置が変化しなくなった場合、燃え残りの効果により最大値は大きくなる。

参考文献

- [1] L. Qiao, Y. Gan, T. Nishiie, W. J. Dahm and E. S. Oran, "Extinction of premixed methane/air flames in microgravity by diluents: the effects of radiation and Lewis number," *Combustion and Flame*, vol. 157, pp. 1446-1455, 2010.

- [2] D. Shimokuri, Y. Karatsu and S. Ishizuka, "Effects of inert gases on the vortex bursting in small diameter tubes," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 34, pp. 3403-3410, 2013.
- [3] Y. Ju, H. Guo, K. Maruta and T. Niioka, "Flame bifurcations and flammable regions of radiative counterflow premixed flames with general Lewis numbers," *Combustion and Flame*, vol. 113, pp. 603-614, 1998.
- [4] 水谷幸夫, *燃焼工学*, 第3編, 森北出版, 1977, p. 84-85.
- [5] 新岡嵩, 河野通方, 佐藤順一, *燃焼現象の基礎*, オーム社, 2001, pp. 27-29.
- [6] C. K. Law, *Combustion Physics*, Cambridge university press, 2006, p. 253.
- [7] M. D. Smooke and V. Giovangigli, *Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames*, M. D. Smooke, Ed., 1991, pp. 1-28.
- [8] K. Yamamoto, S. Ishizuka and T. Hirano, "Effects of rotation of the stability and structure of tubular flame," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 25, pp. 1399-1406, 1994.
- [9] B. Rogg, "Response and flamelet structure of stretched premixed methane-air flames," *Combustion and Flame*, vol. 73, pp. 45-64, 1988.
- [10] S. G. Davis, J. Quinard and G. Searby, "Determination of Marstein numbers in counterflow premixed flames," *Combustion and Flame*, vol. 130, pp. 112-122, 2002.

第 5 章

反応物の消費速度に基づいて定義された”燃焼速度” と層流燃焼速度および火炎伸長率との関係

5.1 はじめに

火炎面前方の未燃混合気に相対的な伝ば速度の火炎面法線方向の分速度は燃焼速度と呼ばれる。このうち、層流予混合火炎の燃焼速度は燃料の種類と混合気の組成、温度、圧力に対応した固有の値を持ち、層流燃焼速度と呼ばれている [1]。前章で用いたような伸長のない平面一次元予混合火炎において層流燃焼速度は火炎が定在するときの無限上流の予混合気の流入速度に対応する。一方、火炎伸長のある流れ場では、無限上流の予混合気の流入速度は定義できない。そのため、第 1 章で述べたように Markstein 数の計測の際などには球状伝ば火炎を用いて燃焼速度を算出する手法がよく用いられている。しかしながら、火炎伸長のある流れ場の代表例である対向流予混合火炎では球状伝ば火炎のように、火炎面の伝ば速度に基づく燃焼速度の決定法を用いることができない。そのため、火炎面の前縁における速度の極小値や火炎端における極大値などについてその特性が調べられてきたが、その結果は様々な挙動を示すことが知られている [2]。

伝ば速度や速度場以外の燃焼速度の決定法として用いられるのが反応物の消費速度 (Consumption rate) に基づく”燃焼速度”である [3, 4]。一般に、火炎伸長のない平面一次元火炎でのみこれら二つの”燃焼速度”は一致し、伸長火炎では異なる値を持つ。このとき、Markstein 長さは消費速度に基づく燃焼速度の方が大きくなる傾向にある [5]。

反応物消費速度に基づく”燃焼速度”について Touvé ら [3] は燃料の消費速度に基づいて定義し、検討を行っている。しかしながら、素反応を考慮した場合、反応物である酸化剤と燃料とではその挙動が異なることが考えられる。そこで、本章では燃料と酸素の質量生成速度(消費速度)や、熱発生速度の積算値に基づく複数の手法で”燃焼速度”の算出を試み、まず、伸長のない平面一次元予混合火炎を対象に、第 3 章で示した 3 つの素反応機構について検討を行う。次に、対向流予混合火炎について、これらの燃焼速度が伸長を大きくした場合に示す挙動について検討を行う。

5.2 燃料・酸素の質量生成速度および熱発生速度に基づく”燃焼速度”の定義

まず、各種の”燃焼速度”の定義について説明する。予混合気が火炎面法線方向 n に速さ u で流入し、その燃料が全て火炎帯で消費されると仮定した場合、下記の釣り合いの式が成り立つ。

$$\rho_0 Y_{F0} u = - \int w_F dn \quad (5.1)$$

ρ_0 , Y_{F0} は未燃混合気における密度、燃料の質量分率、 w_F は燃料の質量生成速度である。この関係から求められる燃焼速度を $S_{u,F1}$ とすると、次式で与えられる。

$$S_{u,F1} = - \frac{1}{\rho_0 Y_{F0}} \int w_F dn \quad (5.2)$$

次に、総括反応的な化学量論を考え、燃料にメタンを用いた場合、流入した酸素とメタンの消費速度が釣り合うと仮定すると未燃混合気の酸素の質量分率 Y_{O0} を用いて次式が成り立つ。

$$\frac{1}{4} \rho_0 Y_{O0} u = - \int w_F dn \quad (5.3)$$

この関係から求められる燃焼速度を $S_{u,F2}$ とすると、次式で与えられる。

$$S_{u,F2} = - \frac{4}{\rho_0 Y_{O0}} \int w_F dn \quad (5.4)$$

同様の手法で酸素の質量生成速度 w_O および熱発生速度 Q の積算値を用いることにより、各定義に基づく”燃焼速度” $S_{u,O1}$, $S_{u,O2}$, $S_{u,Q1}$, $S_{u,Q2}$ は式(5.5)~(5.8)で与えられる。

$$S_{u,O1} = - \frac{1}{\rho_0 Y_{O0}} \int w_O dn \quad (5.5)$$

$$S_{u,O2} = - \frac{1}{4\rho_0 Y_{F0}} \int w_O dn \quad (5.6)$$

$$S_{u,Q1} = \frac{1}{\rho_0 Y_{F0} H} \int Q dn \quad (5.7)$$

$$S_{u,Q2} = \frac{4}{\rho_0 Y_{O0} H} \int Q dn \quad (5.8)$$

ここで、 H は 300 K におけるメタンの低発熱量であり $H = 50.15 \text{ kJ/g}$ である。

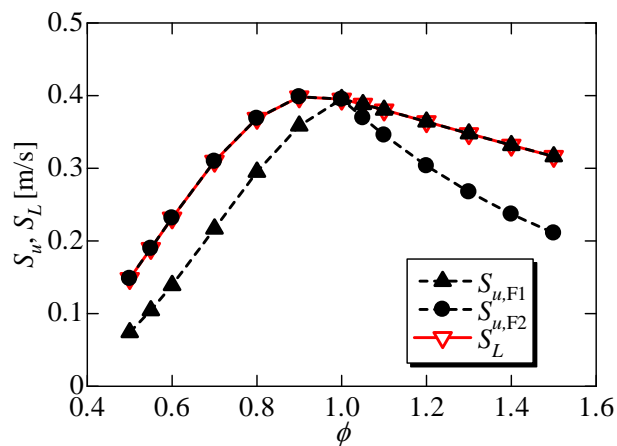
5.3 平面一次元予混合火炎を用いた検討

4章と同様の平面一次元予混合火炎において、当量比を $\phi = 0.50 \sim 1.6$ まで変化させた場合の $S_{u,F1}$, $S_{u,F2}$ と層流燃焼速度 S_L の関係を総括一段不可逆反応を用いた場合について図5.1(a)に示す。 $S_{u,F1}$ は燃料希薄条件で、 $S_{u,F2}$ は燃料過濃条件で層流燃焼速度 S_L と一致することがわかる。この結果は火炎帯における燃料の消費量と不足物質の流入量がバランスしているためである。一方、過剰物質を用いて定義した場合、一部反応せずに残るため S_L と差が出たと考えられる。

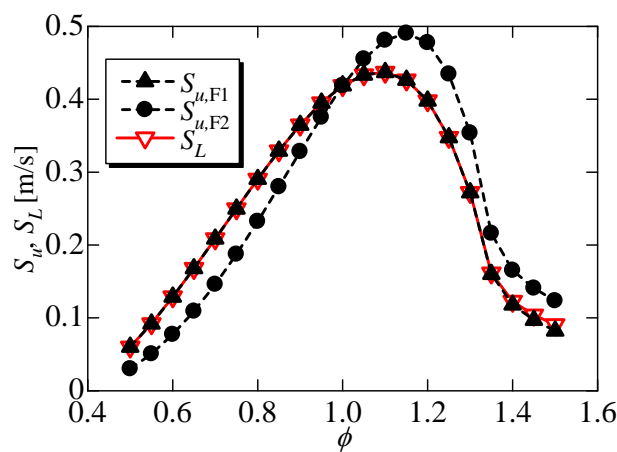
次に、Skeletal素反応機構およびGRI-Mech 3.0を用いた場合について図5.1(b),(c)に示す。Skeletal反応機構を用いた場合とGRI-Mech 3.0を用いた場合は定性的に同じ結果となった。また、後述する $S_{u,O1}$ 等についてもSkeletal反応機構とGRI-Mech 3.0で同様の結果となる。総括反応を使用した場合と異なり、 $S_{u,F1}$ は希薄、過濃に関係なく層流燃焼速度と一致することがわかる。これは、燃料であるメタンの特性に由来し、流入したメタンは最終生成物となるかどうかに関わらず、たとえ燃料過濃条件であっても熱分解により全てラジカル等の中間生成物となるためである。この特性により、式(5.1)が常に成り立っていると考えられる。一方、総括反応を用いた場合には過濃側で S_L と一致していた $S_{u,F2}$ は層流燃焼速度が大きい条件ほど大きいという傾向は持っているが、過濃側、希薄側ともに層流燃焼速度とは一致しない。

図5.2に $S_{u,O1}$, $S_{u,O2}$ と層流燃焼速度の関係を示す。酸素で定義した場合の傾向は反応機構によらない。燃料希薄条件では $S_{u,O2}$ と S_L が一致する。燃料過濃条件では $S_{u,O1}$ と S_L が一致する。すなわち、酸素で定義した場合は不足物質の流入量と酸素の質量生成速度の積算値が釣り合うということがわかる。すなわち、燃料であるメタンは酸素と反応したかどうかに関係なくほぼ全て熱分解により消費されるのに対し、消費された酸素は必ず燃焼反応に寄与していることがわかる。

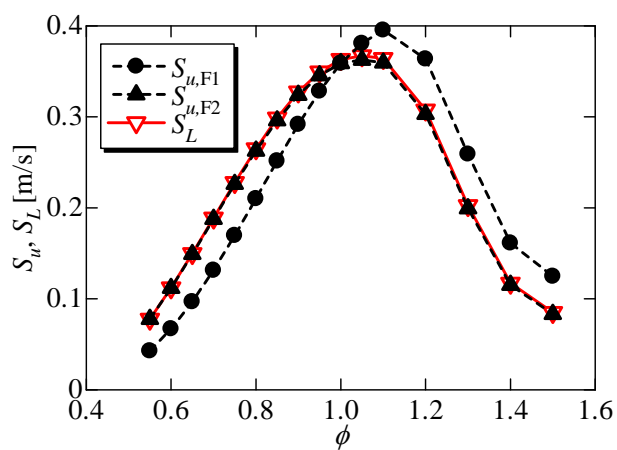
図5.3に $S_{u,Q1}$, $S_{u,Q2}$ と層流燃焼速度の関係を示す。燃料希薄条件ではどの反応機構を用いた場合でも、 $S_{u,Q1}$ と S_L が一致する。すなわち、投入した燃料に対して実際の発熱速度が対応していることがわかる。一方、過濃条件では不足物質である酸素が総括反応では全て消費されるため、 $S_{u,Q2}$ は S_L と一致する。しかし、素反応機構を考慮した場合、 $S_{u,Q2}$ と S_L は正の相関をもつものの、一致しない。すなわち、燃料過濃条件では消費された燃料、酸素の全てが発熱反応に寄与するわけではないことがわかる。



(a) Overall reaction

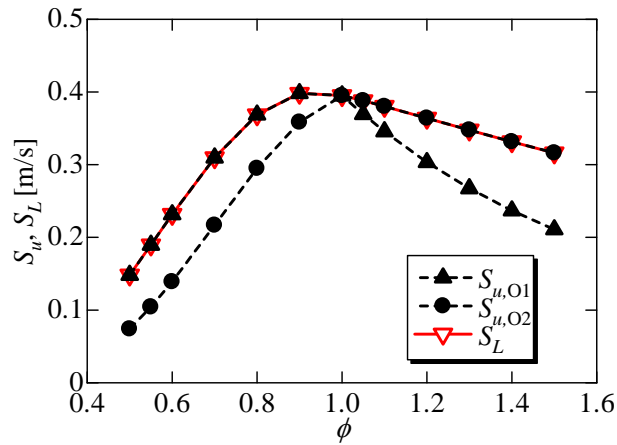


(b) Skeletal mechanism

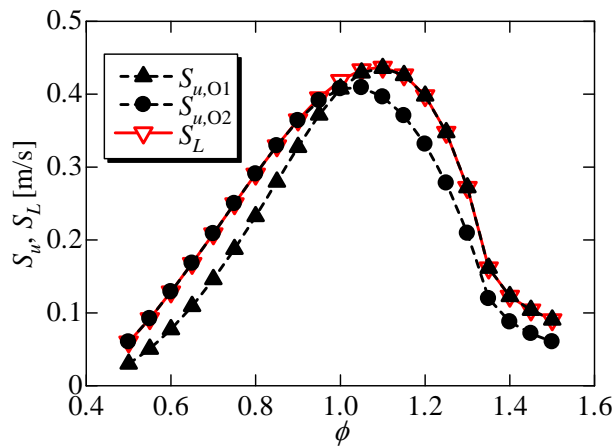


(c) GRI-Mech3.0

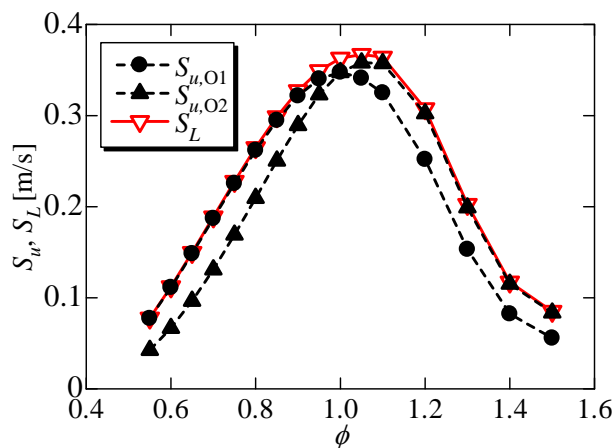
Fig. 5.1 Various definitions of burning velocity ($S_{u,F1}$ and $S_{u,F2}$)



(a) Overall reaction

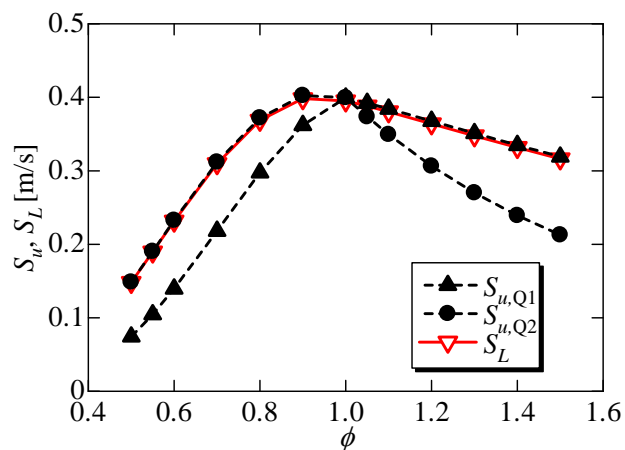


(b) Skeletal mechanism

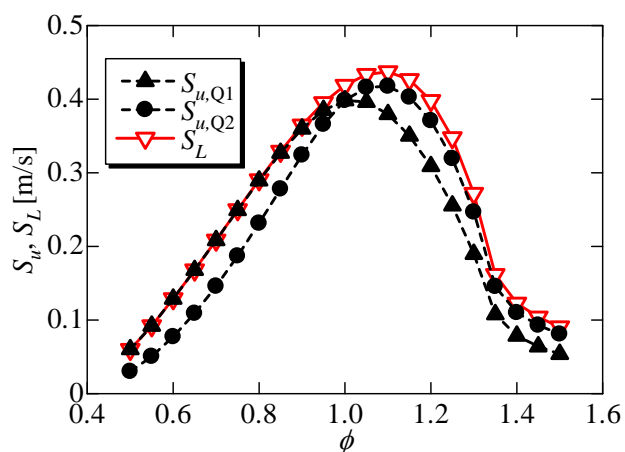


(c) GRI-Mech3.0

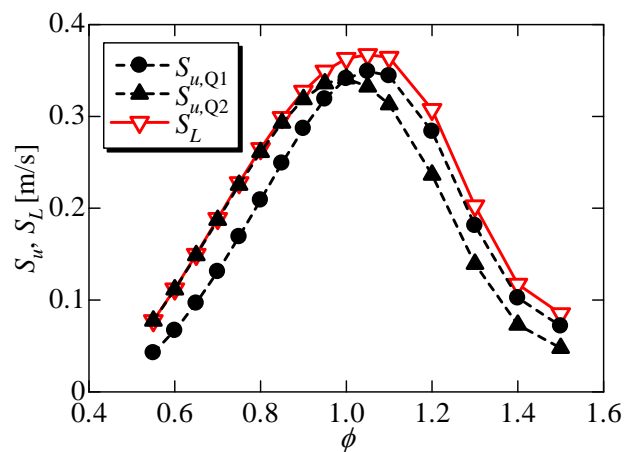
Fig. 5.2 Various definitions of burning velocity ($S_{u,O1}$ and $S_{u,O2}$)



(a) Overall reaction



(b) Skeletal mechanism



(c) GRI-Mech3.0

Fig. 5.3 Various definitions of burning velocity ($S_{u,Q1}$ and $S_{u,Q2}$)

以上より、層流燃焼速度と一致する各算出方法による“燃焼速度”をまとめると表 5.1 のようになる。この結果に基づき、以下の Skeletal 素反応機構を用いた検討における燃料および酸素の質量生成速度、また熱発生速度の積算値に基づく燃焼速度をそれぞれ $S_{u,F}$, $S_{u,O}$, $S_{u,Q}$ と表す。以下の研究では燃料希薄条件を主に扱うため、それぞれ $S_{u,F1}$, $S_{u,O2}$, $S_{u,Q1}$ の値を用いる。

Table 5.1 “Burning velocities, S_u ” which correspond to laminar burning velocity, S_L

Fuel condition	Overall reaction	Elementary reaction
Lean	$S_{u,F1}, S_{u,O2}, S_{u,Q1}$	$S_{u,F1}, S_{u,O2}, S_{u,Q1}$
Rich	$S_{u,F2}, S_{u,O1}, S_{u,Q2}$	$S_{u,F1}, S_{u,O1}$

5.4 対向流予混合火炎を用いた検討

図 5.4 に $\phi = 0.75$, $\kappa = 133 \text{ s}^{-1}$ の場合におけるノズル軸方向の速度分布を示す。まず、対向流予混合火炎における燃焼速度の定義として、速度の極小値(図中の A 点)を用いる方法が採用されることがある [6]。そこで、図 5.5 に各当量比における κ とこの定義に基づく燃焼速度 $S_{u,vmin}$ との関係を示す。ここで、 $S_{u,vmin}$ は層流燃焼速度 S_L との比によって表示している。まず、これまでも多くの論文で述べられているように、各当量比において、 κ が 0 に近づくと、1 に近くなることから、対向流火炎を用いて層流燃焼速度を外挿することによって求める方法(例えば [7, 8])は妥当性を持っていることが確認できる。また、どの当量比においても $S_{u,vmin}$ は κ が大きくなると大きくなる傾向を持つ。Law ら [6] は種々の燃料に対して $S_{u,vmin}$ と κ の関係を調べ、 Le が 1 より非常に大きい場合を除いて $S_{u,vmin}$ は κ が大きくなると大きくなる傾向にある結果を示しており、本研究における傾向と一致している。しかし、図 4.14 で示したように各当量比条件において、 κ が増加した場合の Q_{max} や Q_{sum} の挙動は単調増加ではない。したがって、 $S_{u,vmin}$ が大きいことと、燃焼強度が強いことは必ずしも対応していないことがわかる。このため、ノズル軸方向の速度の極小値を燃焼速度とすることは適切ではないと考えられる。このことは Egolfopoulos らによっても示されている [9]。

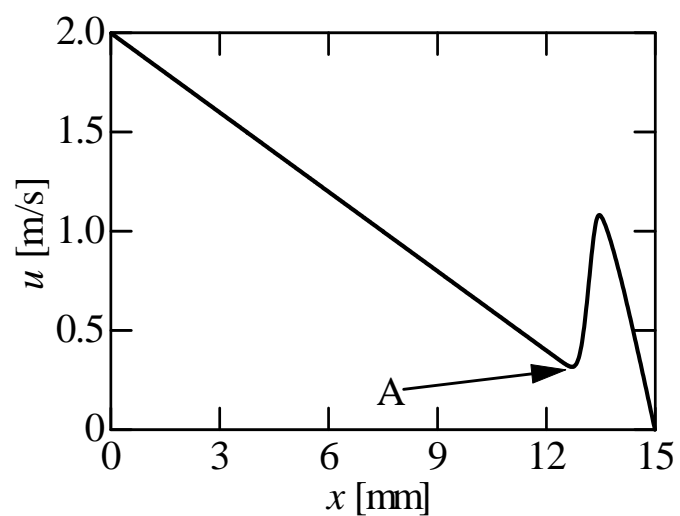


Fig. 5.4 Distributions of u for $\phi = 0.75$ and $\kappa = 133 \text{ s}^{-1}$

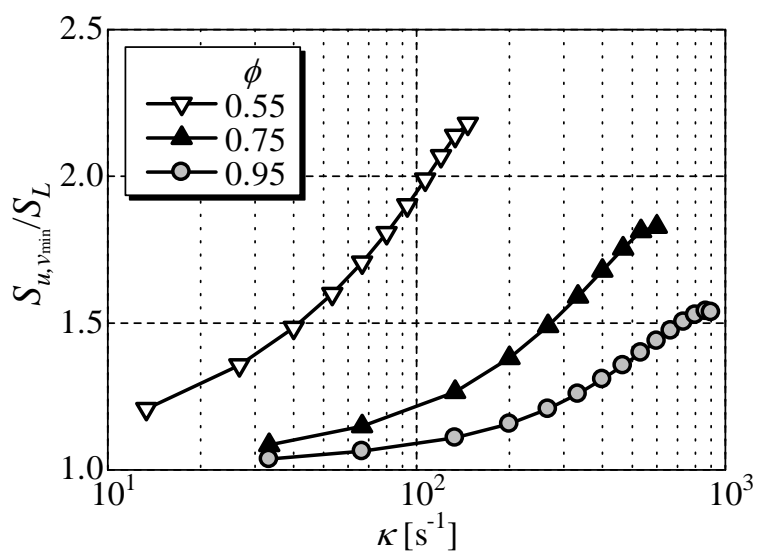
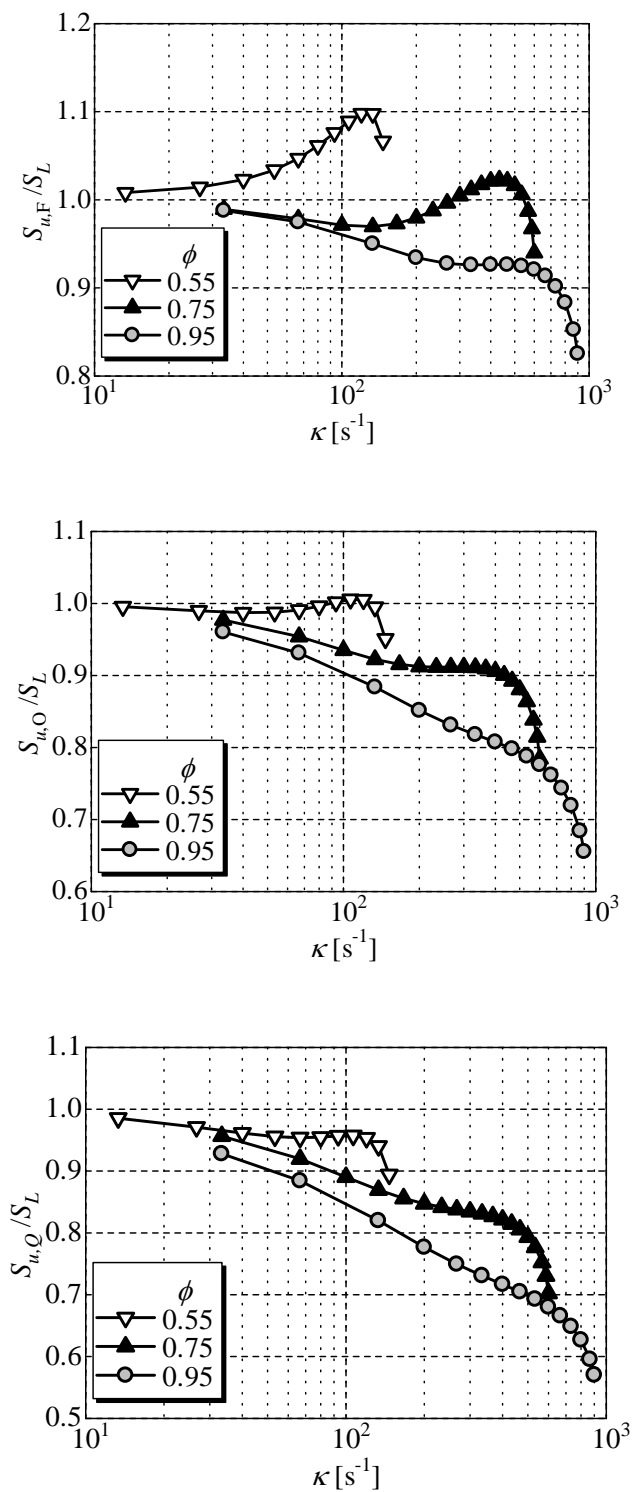


Fig. 5.5 Correlation between $S_{u, y_{min}}$ and κ

そこで、流速からではなく、前節で示した反応物の消費速度や熱発生速度の積算値に基づいた燃焼速度が、対向流火炎において伸長を変化させた場合にどのような挙動を示すか検討する。図 5.6 に火炎伸長率 κ と $S_{u,F}$, $S_{u,O}$, $S_{u,Q}$ の関係を示す。まず、 $S_{u,F}$ は当量比 $\phi = 0.55$ の場合、消炎近傍を除いて $S_{u,F}$ は伸長率が大きくなると大きくなる傾向がある一方、 $\phi = 0.95$ の場合は κ に対して単調に減少する。また、 $\phi = 0.75$ では κ が小さい条件では $\phi = 0.95$ と同じように κ とともに小さくなり、その後、増加に転じ、消炎近傍で値は小さくなる。これらの結果は図 4.14 で示した Q_{\max} と同様の傾向である。そこで、 Q_{\max} と $S_{u,F}$ の関係を図 5.7 に示す。ここで、 $S_{u,F}$ と Q_{\max} は S_L および伸長のない層流一次元予混合火炎での値 Q_{\max}^0 との比として示す。消炎近傍の条件を除き、当量比の値が異なる場合でもほぼ同じ直線上に乗っており、 $S_{u,F}$ と Q_{\max} はよい相関があることがわかる。

次に、 $S_{u,O}$ と $S_{u,Q}$ の傾向は $S_{u,F}$ とは大きく異なり、4章で示した「燃え残りの効果」によりほぼ単調に減少する結果が得られた。 $S_{u,O}$ と $S_{u,Q}$ の関係を図 5.8 に示す。図よりこの2つの”燃焼速度”は消炎近傍も含めて強い正の相関をもつことがわかる。

したがって、燃焼強度を熱発生速度の最大値と考えるならば $S_{u,F}$ が対応し、熱発生速度の積算値と考えるならば $S_{u,O}$ または $S_{u,Q}$ として熱発生速度の積算値そのものから直接求める必要がある。実際に実験で酸素や燃料の質量生成速度を評価することは困難であるが、燃料希薄の対向流火炎などにおける数値解析を行う際には、この手法は正確な燃焼診断に役立つと考えられる。また、近年では熱発生速度を PLIF 法により CH_2O と OH の積により算出する手法 [10] も用いられるようになってきていることから、 $S_{u,Q}$ は実験的に計測可能になりつつある。

Fig. 5.6 Correlation between “burning velocity” and κ

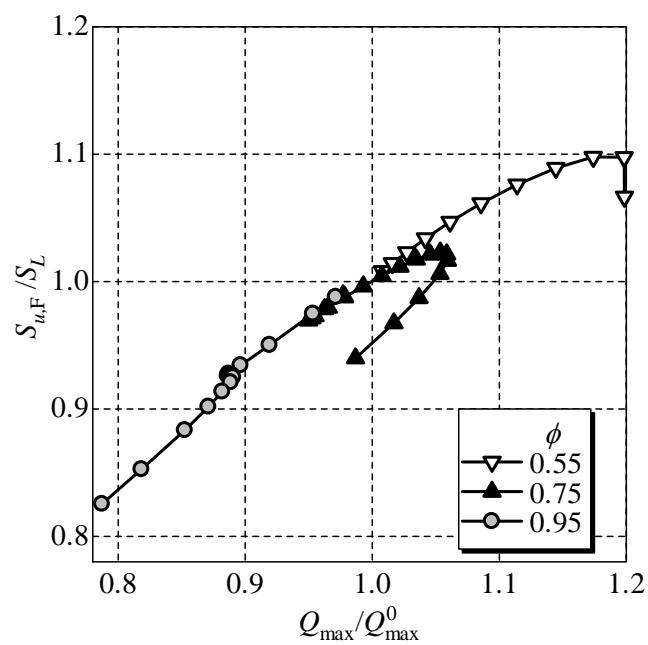


Fig. 5.7 Correlation between $S_{u,F}$ and Q_{\max}

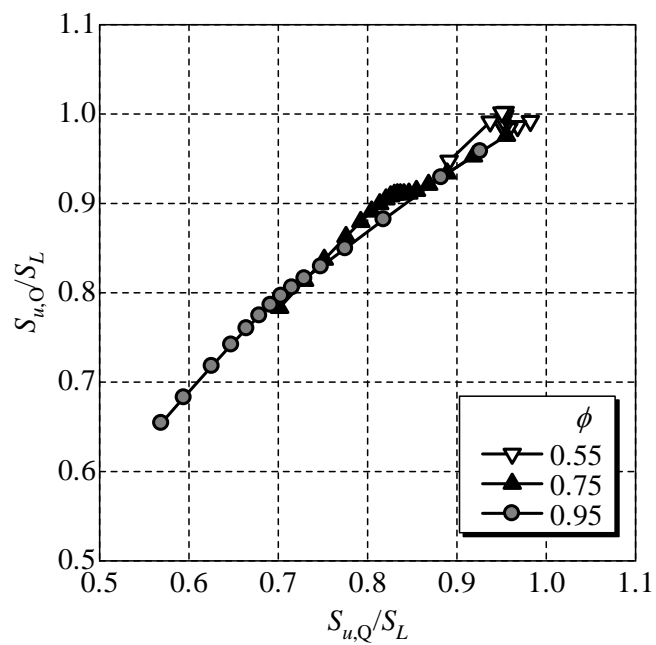


Fig. 5.8 Correlation between $S_{u,O}$ and $S_{u,Q}$

5.5 まとめ

反応物の質量生成速度および熱発生速度の積算値に基づいた“燃焼速度”について、その特性について明らかにした。

- (1) 燃料希薄条件では、燃料の質量生成速度、酸素の質量生成速度、熱発生速度の積算値を用いた(5.2)式, (5.6)式, (5.7)式より算出した“燃焼速度” $S_{u,F1}$, $S_{u,O2}$, $S_{u,Q1}$ と伸長を受けない平面一次元予混合火炎を用いて定義した層流燃焼速度 S_L が一致する。燃料過濃条件では、総括反応を用いた場合には(5.4)式, (5.5)式, (5.8)式より算出した“燃焼速度” $S_{u,F2}$, $S_{u,O1}$, $S_{u,Q2}$ と、素反応機構を用いた場合には(5.2)式, (5.5)式より算出した“燃焼速度” $S_{u,F1}$, $S_{u,O1}$ と S_L が一致する。
- (2) 対向流予混合双子火炎において燃料の質量生成速度に基づいて定義した“燃焼速度”は熱発生速度の最大値と正の相関を持ち、酸素の質量生成速度に基づいて定義した“燃焼速度”は熱発生速度の積算値に基づいた燃焼速度と対応関係を示す。

参考文献

- [1] 水谷幸夫, *燃焼工学入門*, 森北出版, 2003, p. 62.
- [2] Y. Ju and Y. Xue, "Extinction and flame bifurcations of stretched dimethyl ether premixed flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 30, pp. 295-301, 2005.
- [3] A. Trouvé and T. Poinso, "The evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 278, pp. 1-31, 1994.
- [4] T. Poinso, "Comments on "flame stretch interactions of laminar premixed hydrogen air flames at normal temperature and pressure" by K. T. Aung, M. J. Hassan, and G. M. Faeth," *Combustion and Flame*, vol. 113, pp. 279-281, 1998.
- [5] J. K. Bechtold and M. Matalon, "The dependence of Markstein length on stoichiometry," *Combustion and Flame*, vol. 127, pp. 1906-1913, 2001.
- [6] C. K. Law, D. L. Zhu and G. Yu, "Propagation and extinction of stretched premixed flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 21, pp. 1419-1426, 1986.

- [7] I. Yamaoka and H. Tsuji, "Determination of burning velocity using counterflow flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 20, pp. 1883-1892, 1984.
- [8] F. N. Egolfopoulos, P. Cho and C. K. Law, "Laminar flame speeds of methane-air mixtures under reduced and elevated pressures," *Combustion and Flame*, vol. 76, pp. 375-391, 1989.
- [9] F. N. Egolfopoulos, N. Hansen, Y. Ju, K. Kohse-Holnhaas, C. K. Law and F. Qi, "Advances and challenges in laminar flame experiments and implications for combustion chemistry," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 43, pp. 36-67, 2014.
- [10] H. N. Najm, P. H. Paul, J. Mueller and S. Wyckoff, "On the adequacy of certain experimental observables as measurements of flame burning rate," *Combustion and Flame*, Vol. 113, pp. 312-332, 1998.

第 6 章

非定常予混合火炎における諸量の反応進行度による整理

6.1 はじめに

近年、計算機の性能の向上、種々のモデル化により実用燃焼器の開発においても研究用としては 3D-DNS が行われることも多くなってきた。しかし、依然として計算領域は大きく取れず、また、時間的、費用的にも多大なコストが必要となり、実用燃焼器の設計や開発には不向きであり、乱流燃焼のモデル化が重要である。乱流流れ場に対しては LES や RANS が多く用いられているが、反応場に対してもモデル化の手法の開発は大きな課題である。このため、まずは総括反応が多く用いられているが、総括反応では火炎構造を正確に表すことが困難であり、FGM (Flamelet Generated Manifolds) [1]や ILDM (Intrinsic Low-Dimensional Manifolds) [2]など多くの手法が提案されている。このうち、総括反応では考慮できない中間生成物や燃焼排出物を予測するための手法として、Laminar flamelet model [3]に基づく組み合わせ手法がある。これは「乱流場の瞬間の局所的な火炎構造は層流火炎で模擬できる」という考え方に基づいている。すなわち、まず、乱流火炎で実現されそうな種々の流れ場・燃焼場の条件に亘って詳細化学反応機構を用いた層流火炎の計算を行い火炎構造に対するデータベースを作成し、適切に燃焼場を反映し、火炎構造を支配するパラメータを探求する。次に、簡単な総括反応機構を用いた乱流火炎の計算によりこの支配パラメータについて統計処理を行い、支配パラメータを媒介として両方の計算結果を再結合する手法である [4]。この支配パラメータは再結合パラメータと呼ばれ、詳細化学反応機構および総括反応を用いた両方の計算で共通に定義できる必要がある。この火炎構造に対する支配パラメータを明らかにすることは、組み合わせ手法だけでなく火炎のモデリングなどにおいて非常に有益であると考えられる。

本章ではまず、非定常の対向流予混合火炎を取り上げ、非定常火炎の挙動と併せて、再結合パラメータの候補について検討を行う。このとき、特に酸素の質量分率等で定義した反応進行度およびその勾配を再結合パラメータの候補として検討を行う。また、この結果を非定常の二次元火炎に対しても適用し、その妥当性について明らかにする。

6.2 解析モデル

6.2.1 非定常対向流予混合双子火炎

本章では 4.2.2 項で説明した対向流予混合双子火炎に対して流入速度を一定とした定常火炎および流入速度に変動を与えた非定常火炎の数値シミュレーションを行う。当量比 $\phi = 0.55, 0.75, 0.95$ の 3 条件を用い、全ての条件において圧力は大気圧、ノズル流出口での温度は 300 K とする。広範囲の条件を効率よく計算するため、ノズル間の距離 L は 15 mm と 30 mm の 2 種類を用いる。格子間隔は 0.01875 mm であり、格子数は 400 点 ($L = 15$ mm) または 800 点 ($L = 30$ mm) の等間隔格子とする。

定常計算におけるノズル間の距離 L は 30 mm であり、流入速度の条件は、層流燃焼速度近傍から消炎直前までとする。一方、非定常火炎の計算では、ノズル出口流速を平均流速 u_m で一定とした場合の Skeletal 素反応機構による定常火炎を初期条件とし、噴出速度 u_0 に以下の式で与える正弦振動を加え十分時間が経過した後の準定常状態について検討する。

$$u_0 = u_m \{ 1 + A \cdot \sin(2\pi ft) \} \quad (6.1)$$

ここで、 A および f はそれぞれ、変動の振幅および振動数であり、 $A = 0.75$ と固定し、 $f = 50 \sim 1000$ Hz とする。ただし、火炎の非定常挙動について検討する際には、一部の ϕ , u_m の条件に対して $f = 1, 10$ Hz についても計算する。非定常火炎の平均流速 u_m およびその流速に対応する (4.1) 式の定義に基づき算出した火炎伸長率の平均値 κ_m の計算条件を表 6.1 に示す。なお、 κ_m と f が同じ条件では、 L が異なっても火炎の挙動は同じであることを確認している。

ポテンシャル流の仮定を非定常火炎について用いることで、実験で得られる火炎挙動とは同じ火炎挙動を得られるわけではないが、本研究では流れ場がはっきりした場に対して、後述する流れ場とスカラー場との時間的な遅れについて明示することを狙っている。

Table 6.1 Numerical conditions of average spout velocity and flame stretch rate
(Unsteady flame)

L [mm]	ϕ	0.55	0.75	0.95
30	u_m [m/s]	0.4 - 1.8	0.5 - 2.0	0.5 - 2.0
	κ_m [s^{-1}]	26.7 - 120	33.3 - 133.3	33.3 - 133.3
15	u_m [m/s]		1.5 - 30	2.0 - 5.0
	κ_m [s^{-1}]		200 - 400	266.7 - 667

6.2.2 非定常二次元予混合火炎

二次元非定常予混合火炎の解析モデルおよび境界条件を図 6.1 に示す. 加熱源 O の位置を原点とした二次元のデカルト座標系を考え, 流れ方向およびそれに垂直方向の座標を (x, y) とし, それに対応する速度成分を (u, v) とする. メタンと空気からなる一様な予混合気を左端全域から流入させ, 加熱源 O で強制的に温度を上昇させ着火させる. 予混合気は当量比 0.75 で, 温度は 300 K とし, 流入速度 u_0 に以下のような時間的変動および空間的変動を加える.

$$u_0 = u_m \{ 1 + A \cdot \sin(2\pi k y) \cdot \sin(2\pi f t) \} \quad (6.2)$$

ここで, k は波数である. この計算モデルでは, A を 1.0 に固定し, 平均流入速度 u_m を 1.25 ~ 2.0 m/s, 波数 k を 0.1 ~ 0.4 mm⁻¹, 振動数 f を 100, 250, 500 Hz と変化させた. また, x 軸を対称境界, 右端および上端を自由流出境界とした. 計算領域の大きさは, $x = -2 \sim 18$ mm, $y = 0 \sim 20$ mm であり, 差分格子数は x 方向 201, y 方向 201 とした. また, 格子間隔は x, y 方向ともに 0.1 mm の等間隔格子とした. 化学反応機構には, Smooke らのメタン-空気系 Skeletal 素反応機構を用いた.

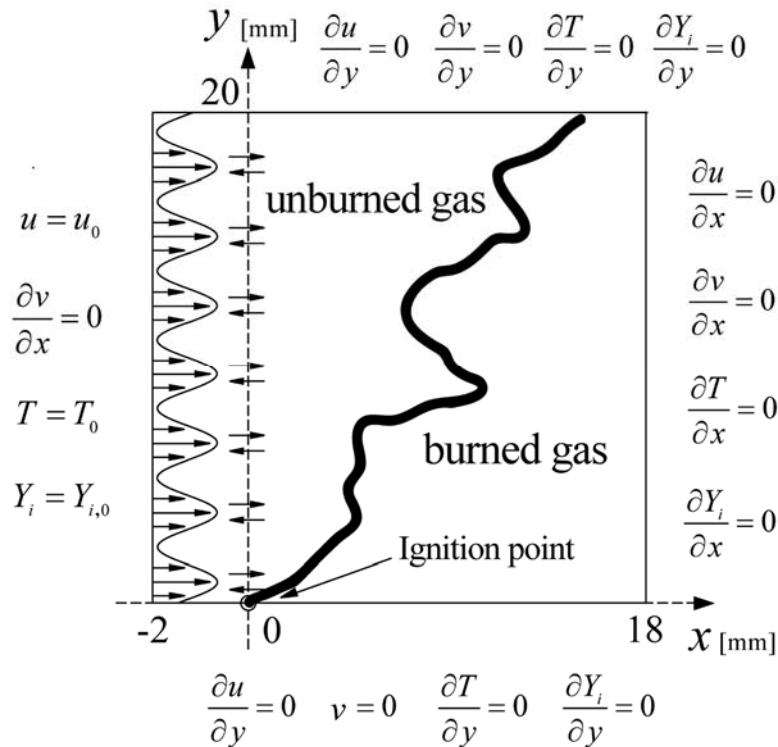


Fig. 6.1 Analytical model and boundary conditions

6.3 非定常対向流予混合双子火炎を用いた検討

6.3.1 非定常火炎における諸量の挙動

図 6.2 に $\phi = 0.75$, $\kappa_m = 333 \text{ s}^{-1}$ における火炎伸長率 κ , 火炎面の位置 x_q および熱発生速度最大値 Q_{\max} の 1 周期分の時間変化を $f = 1 \sim 1000 \text{ Hz}$ の各条件について示す. 図中の緑色の実線は定常条件のデータを用い, 各瞬間における火炎伸長率から算出した x_q および Q_{\max} である. 図 6.2(b) における x_q について, 振動数が小さい場合, 定常火炎から算出した結果とほぼ一致する. 振動数が大きくなると, 定常火炎の結果との違いが大きくなり変化が正弦関数のようになるとともに, κ の変化に対する位相の遅れも大きくなる. また, 変動の振幅も小さくなる. 振動数を大きくすると, 速度の変動に対し, 火炎の変動が追従できなくなることを示している.

一方, Q_{\max} も f が小さい場合では, 定常火炎から算出した結果とほぼ一致する. すなわちこのような条件では, 火炎伸長率とその瞬間の火炎構造はよく対応しており, 火炎伸長率を使うことでその瞬間の現象を表現できると考えられる. しかし, 振動数が大きくなると, x_q の場合と同様に, 定常火炎から算出される結果との違いが大きくなり, 変化が正弦関数のようになる. ここで, $f = 10 \sim 100 \text{ Hz}$ の比較的小さい振動数において, 定常火炎の結果に近い時刻と, 異なる挙動を示す時刻とが存在する. 定常火炎の結果と近い時刻 ($f \cdot t = 0.25$ 近傍) は, 図 6.2(c) に示すように κ が大きく, 火炎がよどみ面 ($x = 7.5 \text{ mm}$) に近づき火炎がほとんど動かない時刻と一致する. 一方, κ が小さく, 火炎がよどみ面から離れ, 火炎が大きく動く時刻 ($f \cdot t = 0.75$ 近傍) は定常火炎の結果とは大きく異なる挙動を示す. よって火炎が大きくその位置を変動させる場合, 火炎伸長の影響よりも非定常性の影響が大きくなることが示唆される. よってこのような条件では流れ場で定義する火炎伸長と温度や濃度場のようなスカラー場との間には時間遅れが存在し, その瞬間の火炎構造を表す際に, その瞬間の火炎伸長率のみでは不十分であり, 現象を正確に表すことができないことが示された.

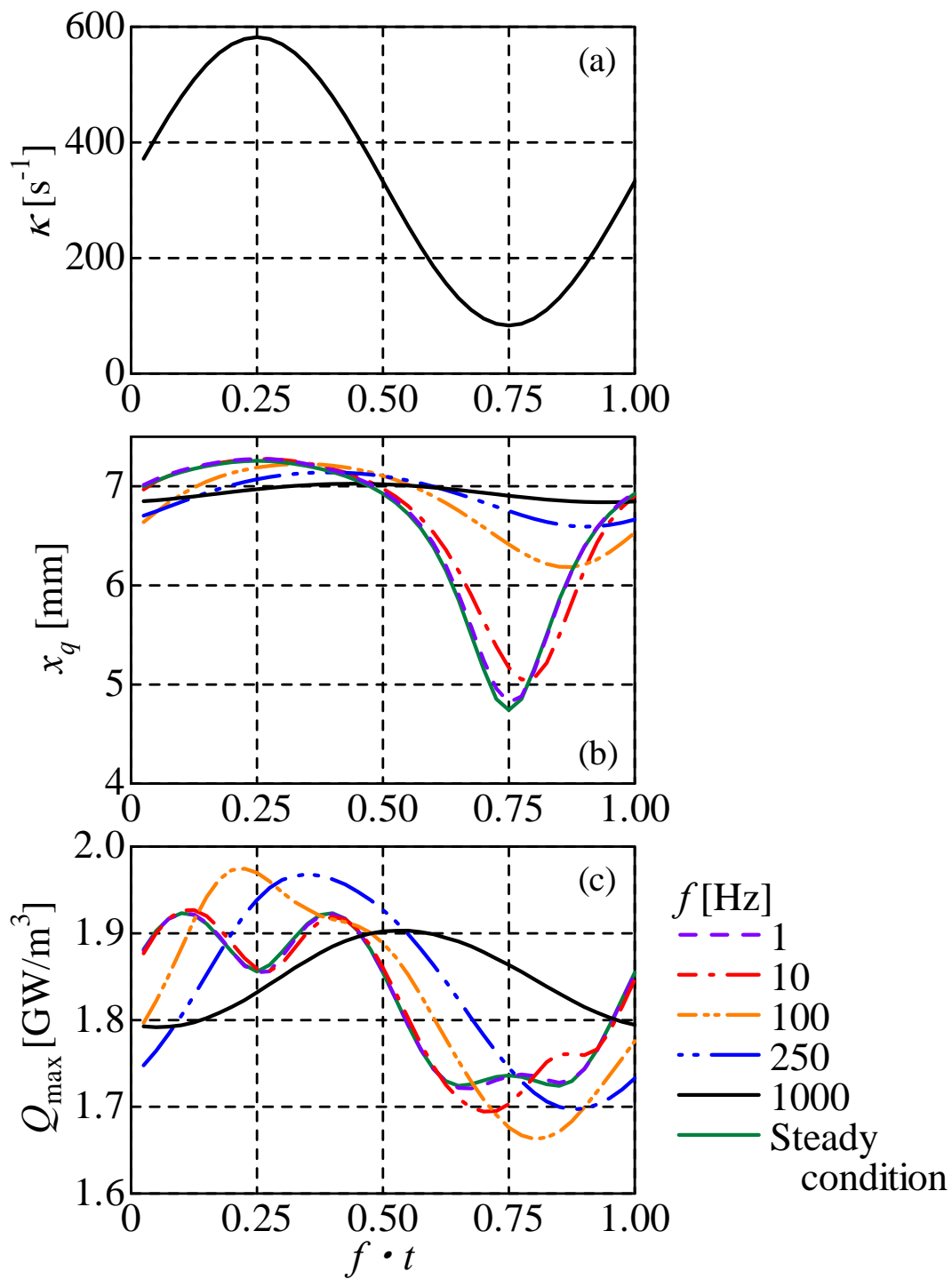


Fig. 6.2 Periodic variations of (a) κ , (b) x_q and (c) Q_{\max} for $\phi = 0.75$ and $\kappa_{\text{in}} = 333 \text{ s}^{-1}$

6.3.2 反応進行度の定義

前項で示したとおり，非定常火炎の火炎構造を決定するには， κ のみでは不十分である．そこで，再結合パラメータとして κ を用いるのではなく，以下で定義する反応進行度を用いることを考えた．組み合わせ手法における再結合パラメータとしての物理量には，簡単な反応機構を用いた場合でも算出可能なことが必要であり，火炎伸長率，酸化剤や燃料，生成物の濃度，温度などが考えられる．本研究ではこれらの物理量と火炎構造との関係について調べることにより，再結合パラメータとして最も適当な物理量について検討する．

まず，反応進行度 C は以下のように定義する．

$$C = \frac{F - F_u}{F_b - F_u} \quad (6.3)$$

ここで， F は各種の物理量，下付きの u は未燃混合気での値，また b は各当量比における化学平衡状態での値であり，例えば平衡組成または断熱火炎温度である．拡散火炎について，清水ら [4] は，混合分率の火炎面位置における勾配と関連する **Scalar Dissipation Rate (SDR)** を用いることで，拡散火炎の火炎構造を整理することができることを示している．予混合火炎においても，**SDR** と同様に，スカラー量である反応進行度の勾配を用いて火炎構造を整理することが可能であると考えられる．そこで， F として酸素の質量分率および温度をとった場合の反応進行度の火炎面における値を $C_{O,q}$ および $C_{T,q}$ とし，またそれらの x 軸方向勾配を $\nabla C_{O,q}$ および $\nabla C_{T,q}$ として，これらの量を用いて火炎構造を整理することを試みる．ただし，火炎面の位置は熱発生速度が最大となる位置とする．ここで，燃料であるメタンについては，予熱帯においてその濃度が大きく減少し，火炎面ではほぼ 0 となることから，燃料希薄メタン予混合火炎の反応進行度としては不適切であると考え除外している．

図 6.3 に一例として，酸素の質量分率により定義した反応進行度， C_o ，そのノズル軸方向の勾配 ∇C_o および熱発生速度 Q の x 軸方向分布を示す．図は $\phi = 0.75$ ， $u_0 = 2.0$ m/s の定常対向流双子火炎の結果である． C_o および ∇C_o は未燃混合気では 0 であり，予熱帯近傍において大きくなり， ∇C_o は熱発生速度最大値で定義する火炎面の直前で最大値を取る．また， C_o はよどみ面においてほぼ 1 となる．ただし， κ が大きくなり，よどみ面においても反応が完結しない条件では，酸素濃度も平衡状態にはならないため C_o は 1 にならない．この傾向は C_T ， ∇C_T についてもほぼ同様である．本研究では，火炎面での値を用いて火炎面近傍の火炎構造を表すことを検討する．そこで，まず各反応進行度とその勾配の定常火炎における基礎的な特性について示す．

図 6.4 に定常対向流予混合火炎における κ と $C_{O,q}$ ， $\nabla C_{O,q}$ の関係を示す．ここで， $C_{O,q}$

および $\nabla C_{O,q}$ はそれぞれ、平面一次元予混合火炎での値 $C_{O,q}^0$ および $\nabla C_{O,q}^0$ との比として示している。図 6.4(a)に示すように、 $C_{O,q}$ はどの ϕ においても κ に対して単調に増加する。 $C_{O,q}$ は反応帯における反応物である酸素濃度と対応しているため、 κ が大きくなると反応帯における反応物濃度が大きくなっている。

$\nabla C_{O,q}$ の大小は反応帯におけるスカラー量の勾配と対応している。図 6.4(b)に示す $\nabla C_{O,q}$ では、 κ が大きい場合、当量比および κ が大きくなると、 $\nabla C_{O,q}$ も大きくなり、消炎直前においてのみ小さくなる。 κ が小さい場合、 ϕ によってその特徴は異なる。まず、 $\phi=0.55$ の場合、 κ の大きさに関わらず、単調に増加する。一方、 $\phi=0.75$ の場合、 κ が小さい条件では、 κ に対する $\nabla C_{O,q}$ の変化は小さいが、 κ が 100 を超えたあたりから急激にその変化の勾配は大きくなる。また、 $\phi=0.95$ の場合には κ が小さい条件では、 κ が大きくなると $\nabla C_{O,q}$ は小さくなる。当量比によって κ と $\nabla C_{O,q}$ の関係が異なる κ の範囲は、 Q_{\max} の場合と同様に火炎面の位置が κ の増加とともに大きく変化することができる範囲とほぼ一致することがわかる。

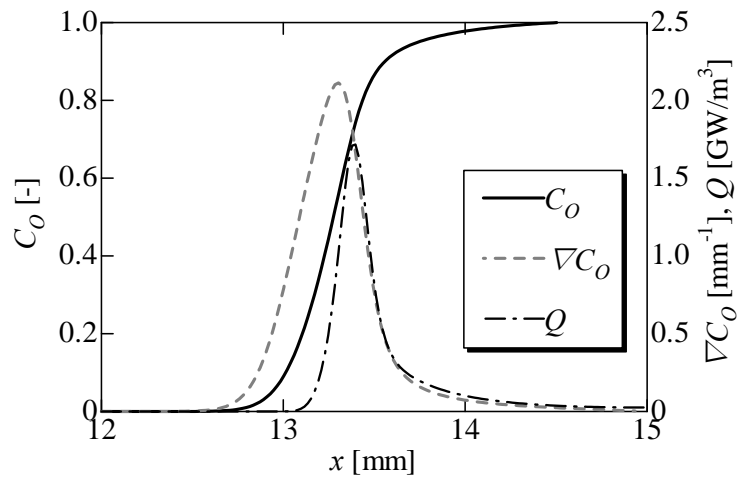


Fig. 6.3 Distributions of reaction progress variable, its gradient and heat release rate for $\phi = 0.75$, $u_0 = 2.0$ m/s in steady flame

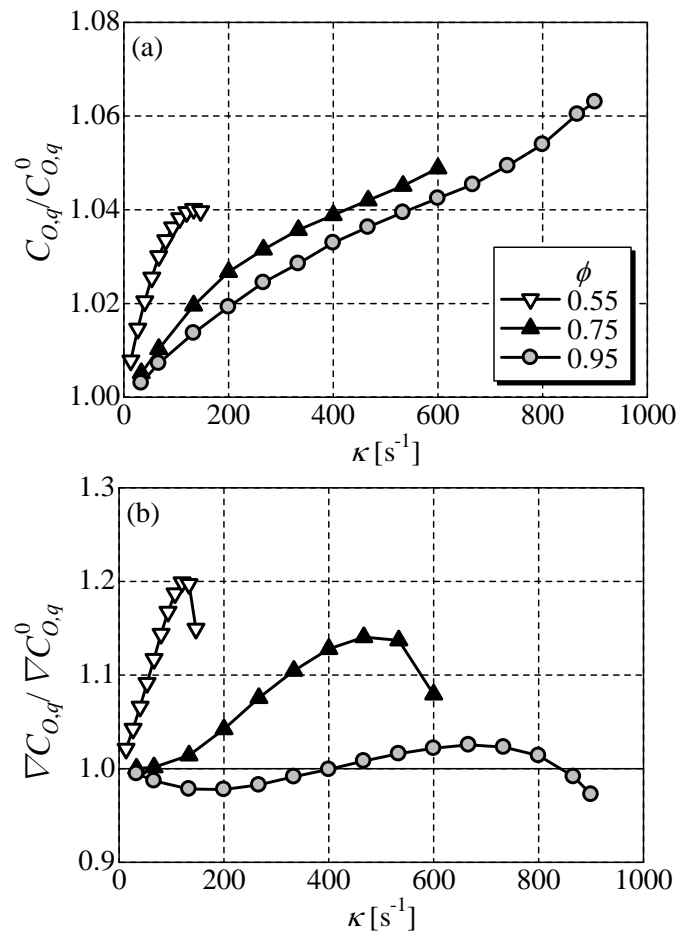


Fig. 6.4 Influence of flame stretch on $C_{O,q}$ and $\nabla C_{O,q}$ in steady flame

6.3.3 燃焼強度と反応進行度およびその勾配との関係

まず、非定常火炎において前項で定義した反応進行度およびその勾配が燃焼強度とどのような関係にあるかを示す。本項では燃焼強度の指標として Q_{\max} および $S_{u,0}$ を取り上げる。図 6.5 および図 6.6 に $\phi = 0.95$ における Q_{\max} および $S_{u,0}$ と酸素の質量分率および温度で定義した反応進行度およびその勾配との関係を示す。図中のプロットは、非定常条件における 1 周期中からの 40 点および定常条件の全条件についてプロットしたものである。左上図からわかるように、全条件において、 $S_{u,0}$ および Q_{\max} のどちらも酸素で定義した反応進行度と非常によく相関があり、反応進行度が小さいほど $S_{u,0}$ や Q_{\max} は大きくなる。すなわち、反応物濃度が反応帯で大きいときに燃焼速度が大きくなる。一方、燃焼強度はその他のパラメータとの相関はほとんどなく、これらのパラメータだけでは一義的に決まらない。また、 $C_{T,q}$ は $C_{O,q}$ に比べて値の変化範囲が非常に小さいことがわかる。

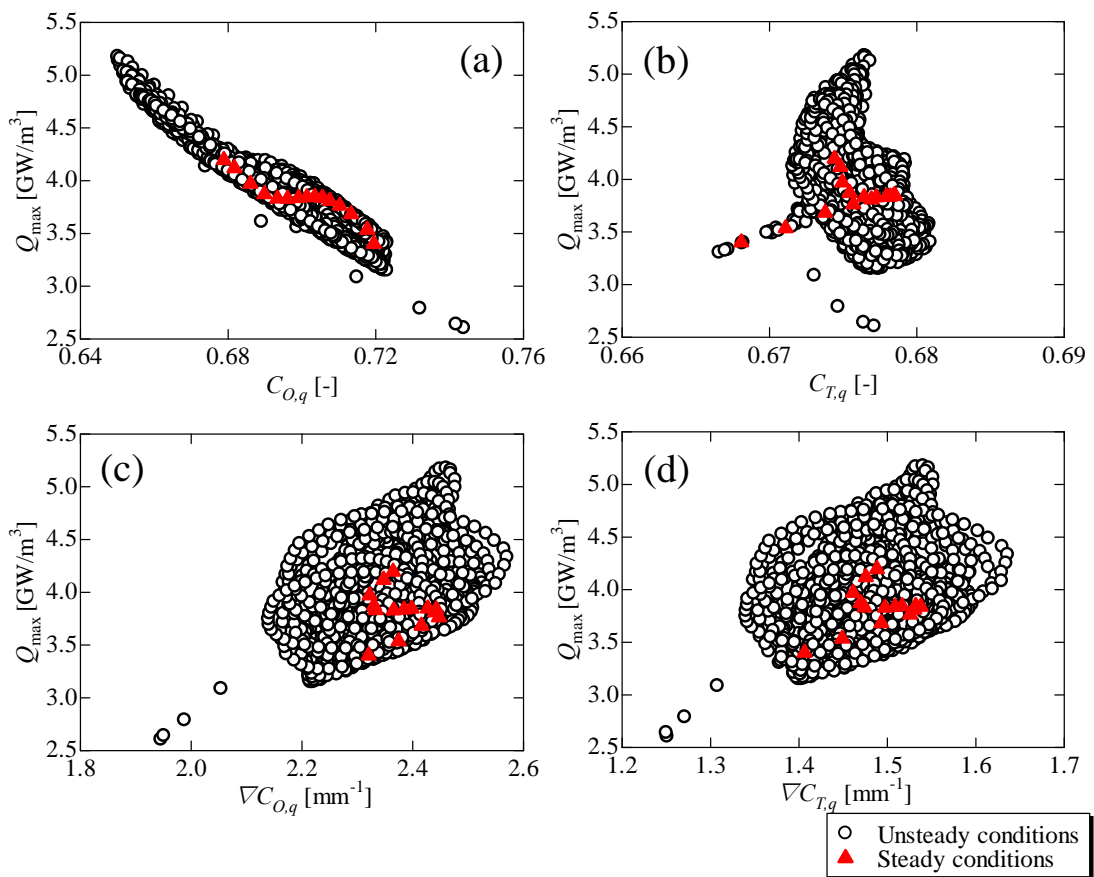


Fig. 6.5 Relation between Q_{\max} and various progress variables or their gradients for $\phi = 0.95$

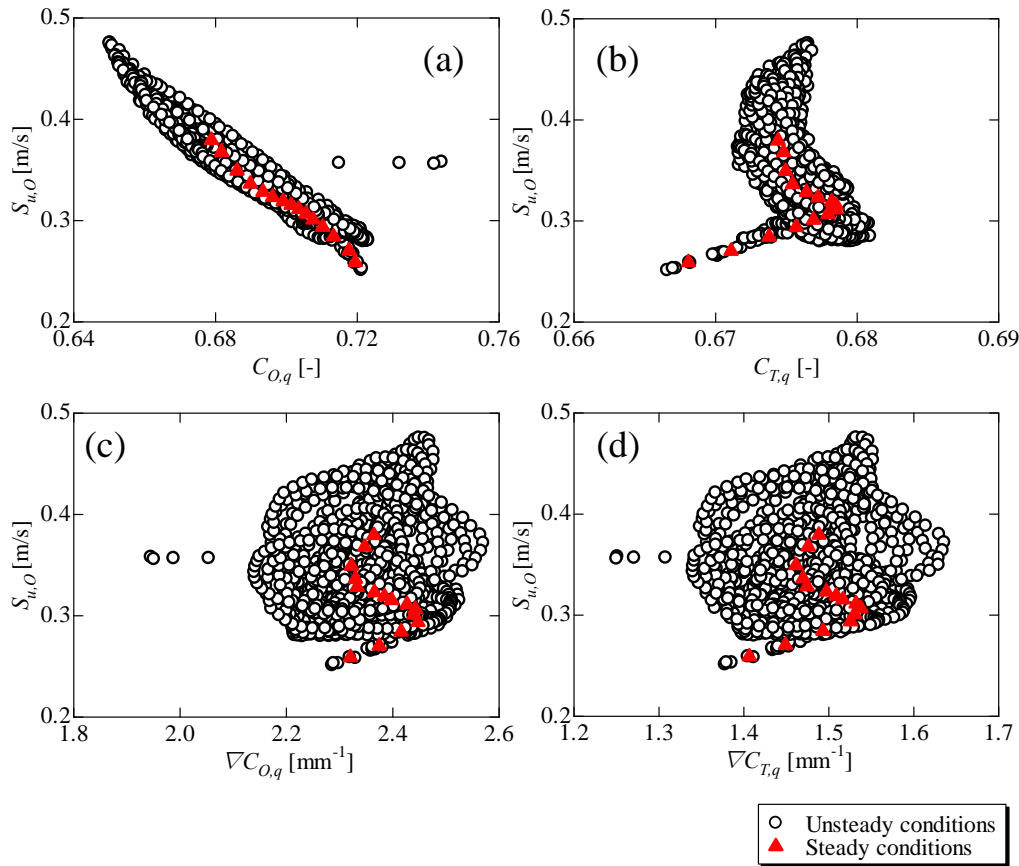


Fig. 6.6 Relation between $S_{u,O}$ and various progress variables or their gradients for $\phi = 0.95$

次に、 $\phi = 0.75$ の場合について図 6.7 および図 6.8 に示す。 $S_{u,O}$ は 0.95 の場合と同様に $C_{O,q}$ との相関が強いことがわかる。一方で、 Q_{\max} との関係は $C_{O,q}$ が 0.71 より小さい条件ではよい相関があるものの、 $C_{O,q}$ が大きい条件では値が大きく変動することがわかる。また、 $\nabla C_{O,q}$ との関係を調べると、変動は大きいものの 1.83 近傍を境に負の相関から、正の相関へと変化することがわかる。

さらに、 $\phi = 0.55$ の場合について図 6.9 および図 6.10 に示す。 $S_{u,O}$ はどの反応進行度や勾配とも明確な相関は見られない。一方、 Q_{\max} は $\nabla C_{O,q}$ と比較的よい相関をもち、 $\nabla C_{O,q}$ が大きいほど、 Q_{\max} の値は大きくなる。Lewis 数が 1 よりかなり小さい水素-空気予混合火炎では Q_{\max} は $\nabla C_{O,q}$ と強い相関を持つ傾向が見られる [5] ことから、 $\phi = 0.55$ の火炎は比較的 Lewis 数が 1 より小さい火炎の傾向を強く持っていることが推測される。

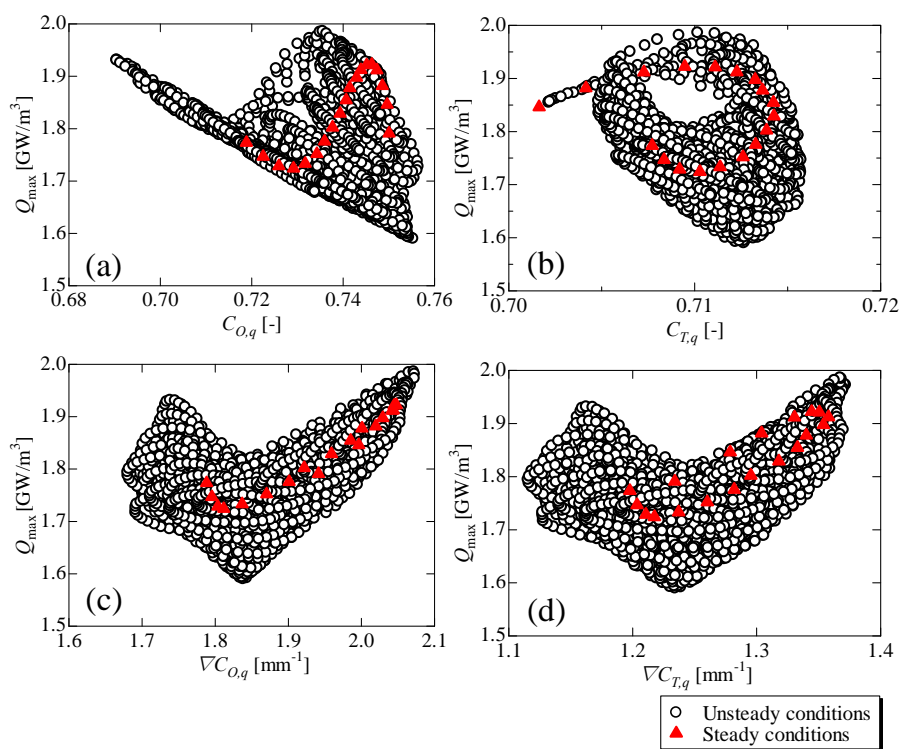


Fig. 6.7 Relation between Q_{\max} and various progress variables or their gradients for $\phi = 0.75$

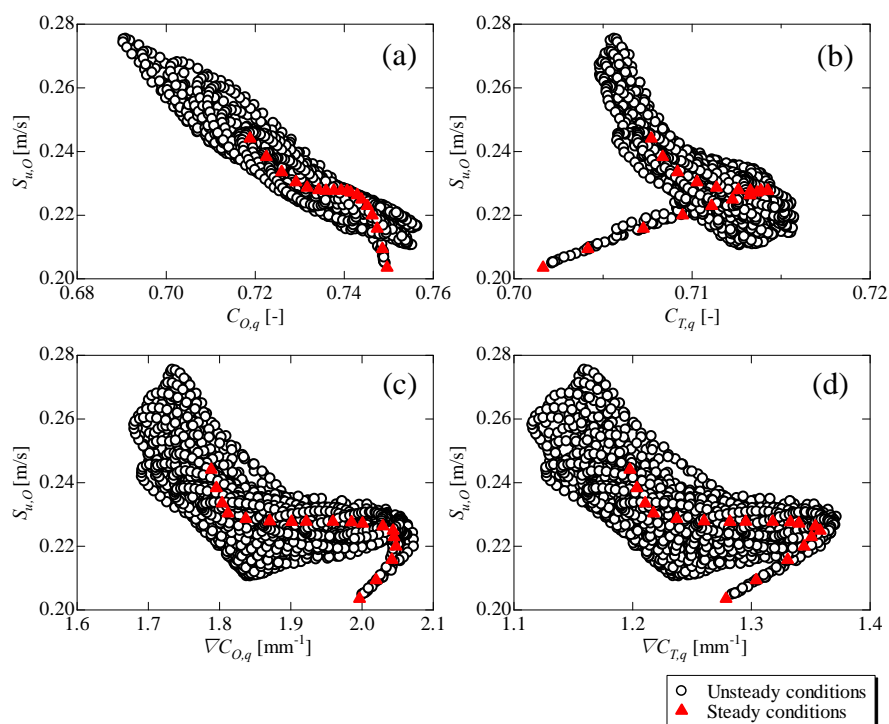
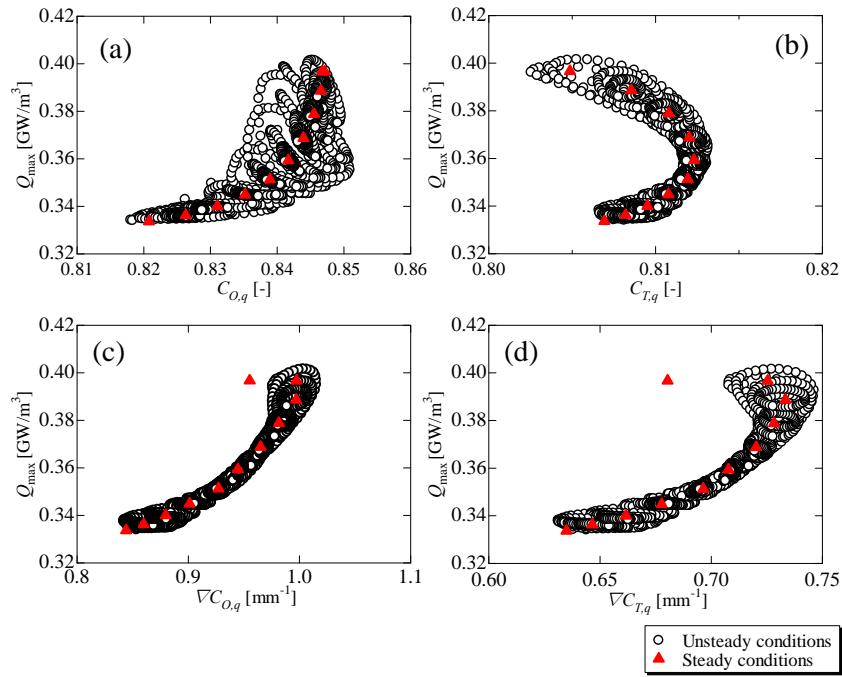
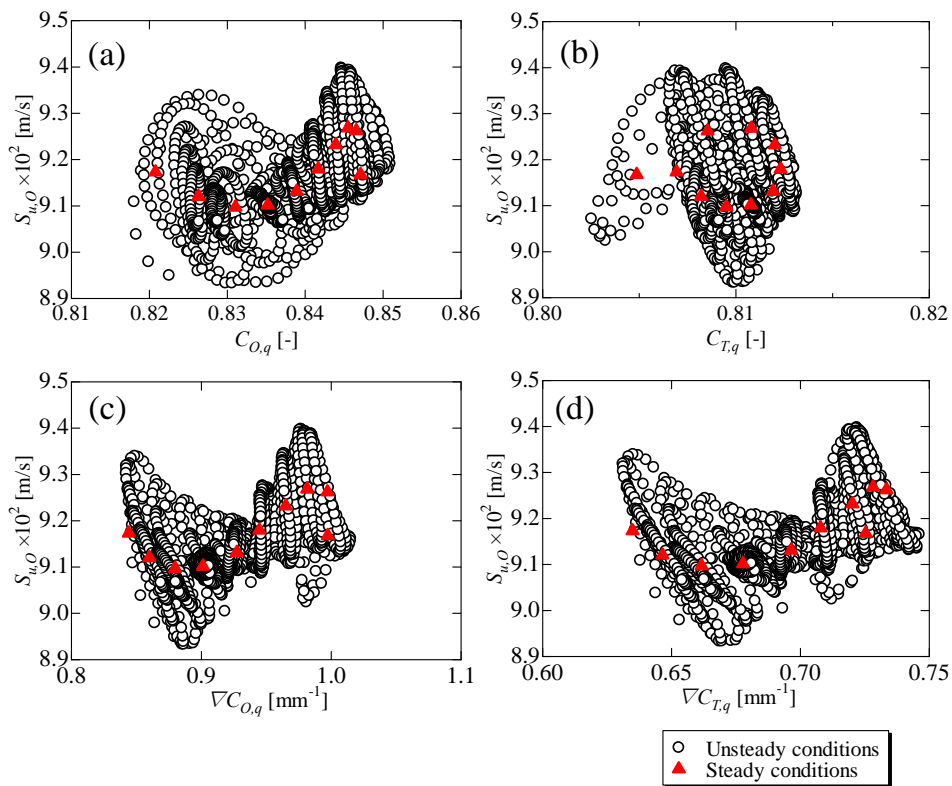


Fig. 6.8 Relation between $S_{u,O}$ and various progress variables or their gradients for $\phi = 0.75$

Fig. 6.9 Relation between Q_{\max} and various progress variables or their gradients for $\phi = 0.55$ Fig. 6.10 Relation between $S_{u,O}$ and various progress variables or their gradients for $\phi = 0.55$

以上の結果より、酸素で定義した反応進行度およびその勾配が燃料希薄メタン-空気予混合火炎における再結合パラメータとして有力な候補であることが示唆された。しかし、 Q_{\max} に見られたように、一つのパラメータのみでは十分に整理しきれていないことから、酸素で定義した反応進行度およびその勾配の両方を用いて整理することを試みる。

まず、非定常火炎における $C_{O,q}$ と $\nabla C_{O,q}$ がなす平面上で、非定常過程がどのような軌跡を示すか検討する。図 6.11 に一例として、 $\phi = 0.75$ の条件で κ_m を固定し、 f を変化させた場合における $C_{O,q}$ と $\nabla C_{O,q}$ がなす平面上での非定常過程の軌跡を一周期分について示す。図 6.11 (a) と (b) は、それぞれ κ_m が小さい場合 ($\kappa_m = 33.3 \text{ s}^{-1}$) と大きい場合 ($\kappa_m = 333 \text{ s}^{-1}$) である。図中には定常火炎において u_0 を変化させた場合の結果についても太い実線で示す。まず、図に示されるように流速を変動させると非定常過程は一周期の間に一つのループを描く。6.3.1 項で示したような非定常性が小さいと考えられる周波数が小さい条件では、定常火炎の変化に沿って変化するが、この図では 50 Hz 以上の結果を示しているため、非定常性が存在し、それによりループを描く。図 6.11(a) に示す $\kappa_m = 33.3 \text{ s}^{-1}$ の場合、 κ_m が小さく火炎が κ の変化により大きく位置を動かすことができる。この場合、 f が小さいとき $C_{O,q}$ の変化は大きく、 f が大きくなるにつれてその変化は小さくなる。これは、 κ の変動に対して、 f が大きくなるにつれて火炎の追従性が悪くなるためである。図 6.11(b) に示す $\kappa_m = 333 \text{ s}^{-1}$ の場合、 f が小さいときには定常火炎の火炎伸長率の変化の傾向と同様に变化するが、大きなループとなっており偏差も大きい。一方、 f が大きいときには、非定常性の影響が強く現われることにより、定常火炎の変化とは全く異なる挙動を示すが、応答性が悪くなりループは小さくなる。

次項において火炎面近傍の物理量に着目し、火炎の熱発生速度の最大値および各化学種のモル濃度の火炎面における値について、反応進行度による整理が可能かについて検討する。

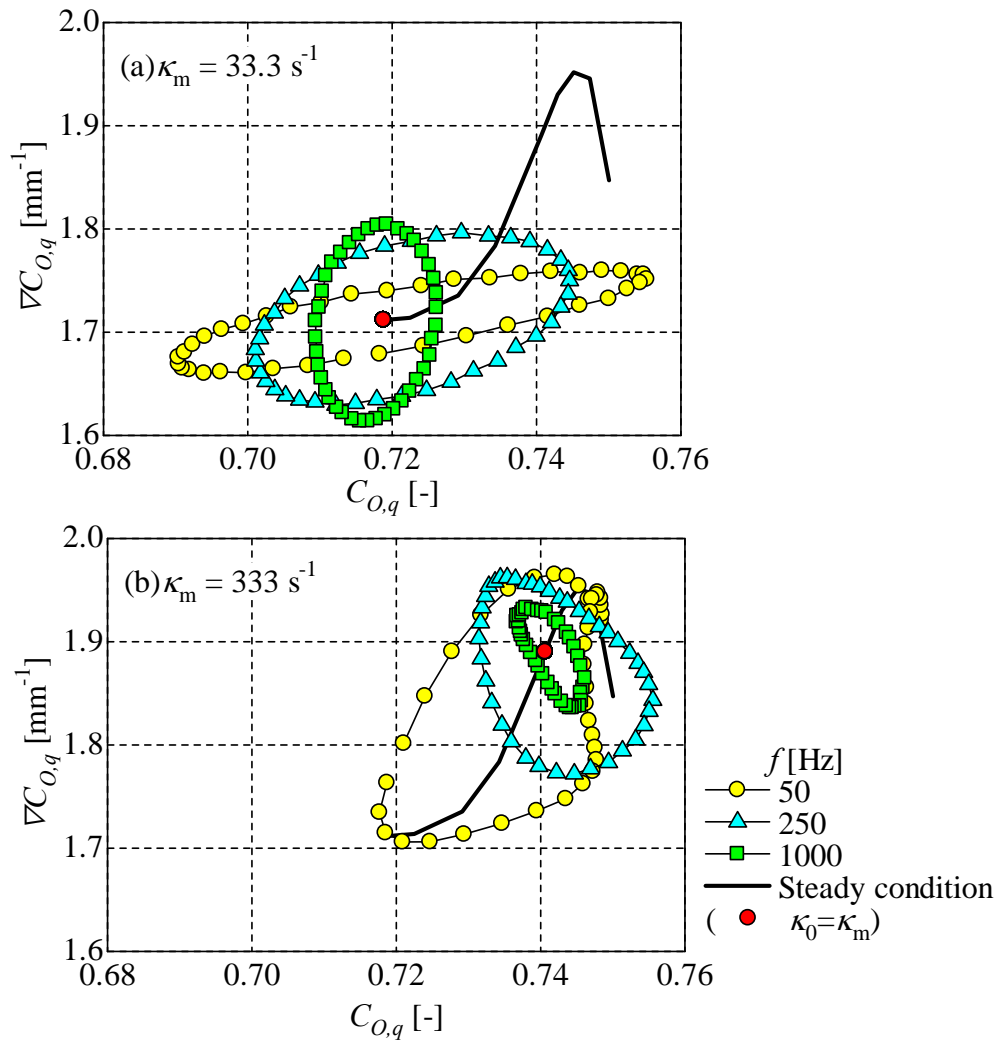


Fig. 6.11 Trajectory of unsteady behavior on the $C_{O,q}$ - $\nabla C_{O,q}$ plane for $\phi = 0.75$ in the case of fixed κ_m

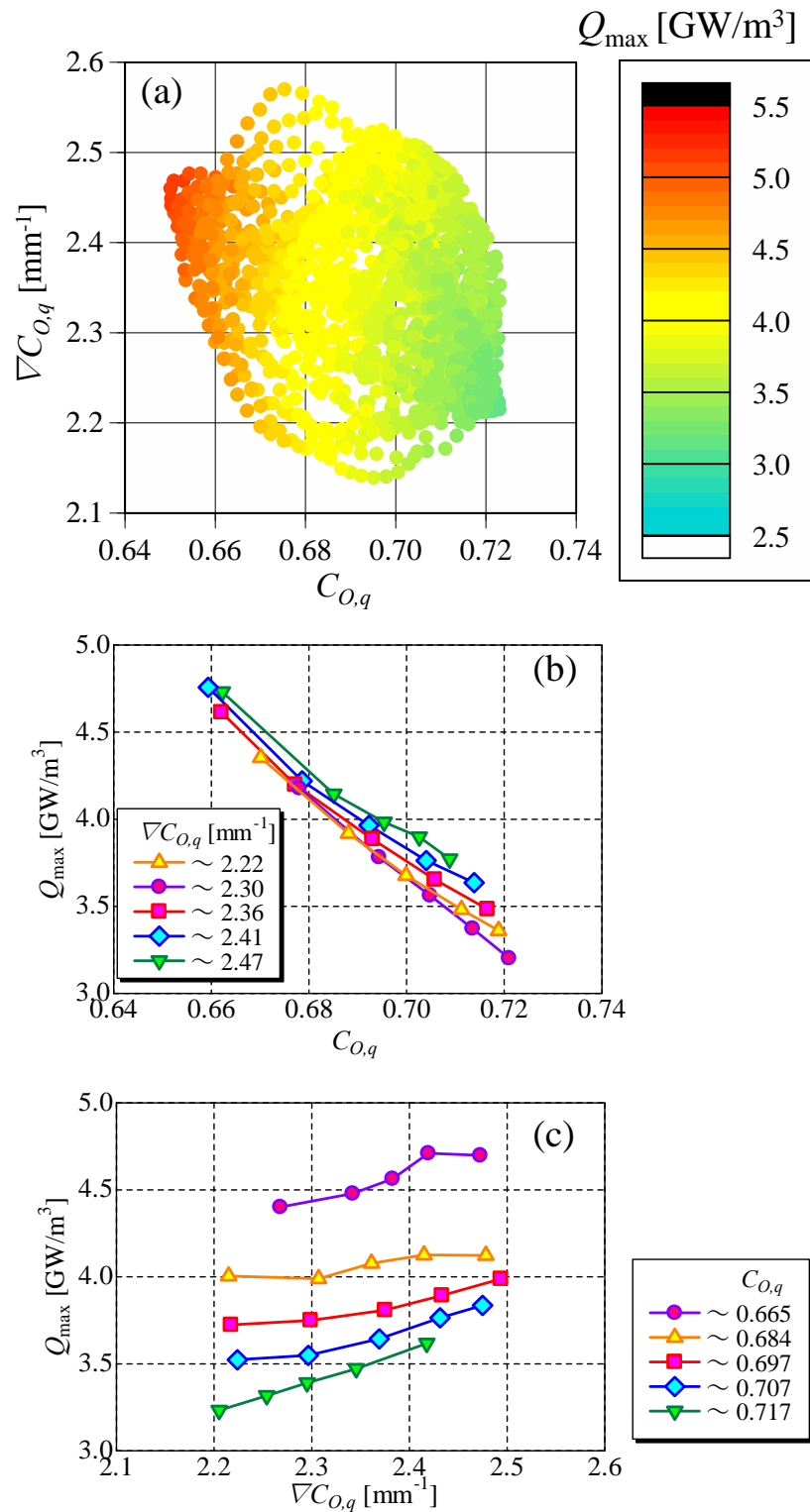
6.3.4 熱発生速度の最大値に対する検討

図 6.12~6.14 に当量比毎に熱発生速度最大値 Q_{\max} を $C_{O,q}$ および $\nabla C_{O,q}$ で整理した結果を示す. 各図における(a)中のプロットは, 非定常条件における1周期中からの40点および定常条件の全条件についてプロットしたものである. 図に示されるように, $C_{O,q}$ と $\nabla C_{O,q}$ の値が近いプロット点では, Q_{\max} の値もほぼ同じとなることがわかり, この2つのパラメータが決まると Q_{\max} の値も一意に決まることがわかる. その特性をさらに定量的に明示するために, 他方のパラメータを固定した上で, 図(b),(c)に $C_{O,q}$ および $\nabla C_{O,q}$ の Q_{\max} に与える影響を示す. すなわち, 図(b)は, 図(a)中の全プロットにおいて, データ数が等しくなるように $\nabla C_{O,q}$ の大きさによって5つのデータ群に分け, さらにそれぞれのデータ群において, $C_{O,q}$ の大きさで5つに分類した結果を横軸に $C_{O,q}$, また $\nabla C_{O,q}$ の大きさをプロット種類の違いで示したものである. 図(c)は図(b)とは逆にまず, $C_{O,q}$ で5つに分類した後に, $\nabla C_{O,q}$ で分類し, 横軸に $\nabla C_{O,q}$ を, また $C_{O,q}$ の大きさをプロット種類の違いで示す.

まず, $\phi=0.95$ において図 6.12(a)に示されるように, $C_{O,q}-\nabla C_{O,q}$ 平面上において近くにプロットされた点の色がほぼ同じであることから, Q_{\max} は $C_{O,q}$ と $\nabla C_{O,q}$ の2つのパラメータにより整理できていることがわかる. この当量比では, 図 6.12(b)に示されるように $C_{O,q}$ との相関が強く, $\nabla C_{O,q}$ との相関は小さいことが示される. ただし, $C_{O,q}$ の大きい条件では, $C_{O,q}$ の値が同じ場合, $\nabla C_{O,q}$ の値が大きいデータ群ほど, Q_{\max} の値も大きくなっていることから, $\phi=0.75$ の場合と同様に, 伸長が大きい条件, この場合は $C_{O,q}$ が大きい条件ではわずかながら, $\nabla C_{O,q}$ の影響も表れる.

次に, $\phi=0.75$ では, 図 6.13(b)中における $\nabla C_{O,q} < 1.79 \text{ mm}^{-1}$ に分類される火炎伸長が小さい条件では, Q_{\max} は $C_{O,q}$ との相関が強い. 逆に, $\nabla C_{O,q} > 1.79 \text{ mm}^{-1}$ では, 図 6.13(c)に示されるように, $\nabla C_{O,q}$ との相関が強い. ただし, その場合でも, 同じ $\nabla C_{O,q}$ の値ならば, $C_{O,q}$ の値が大きいデータ群でさらに Q_{\max} の値は大きくなっている. この傾向は, 第4章で示した火炎の位置との関係が強い. すなわち, 火炎の位置が火炎伸長の変化に伴って自由に動ける場合は $C_{O,q}$ の, 火炎がよどみ面近傍に固定されている場合は $\nabla C_{O,q}$ の影響が強くなることが示唆される.

図6.14に示す $\phi=0.55$ では, 図 6.9 の結果からも明らかなように, 図 6.14(b)において, $\nabla C_{O,q}$ の各データ群は, $C_{O,q}$ の軸に平行にプロットされており, 逆に図 6.14(c)では, $C_{O,q}$ のデータ群の大きさに関わらず, 同一の曲線上にプロットされていることから, $C_{O,q}$ との相関は小さく, $\nabla C_{O,q}$ との相関が強いことがわかる. $\phi=0.55$ は燃焼速度が非常に小さく, 小さい火炎伸長率においてもよどみ面での燃え残りの効果が発生する. このために, $\nabla C_{O,q}$ との相関が強くなったと考えられる.

Fig. 6.12 Relationships of Q_{\max} to $C_{O,q}$ and $\nabla C_{O,q}$ for $\phi = 0.95$

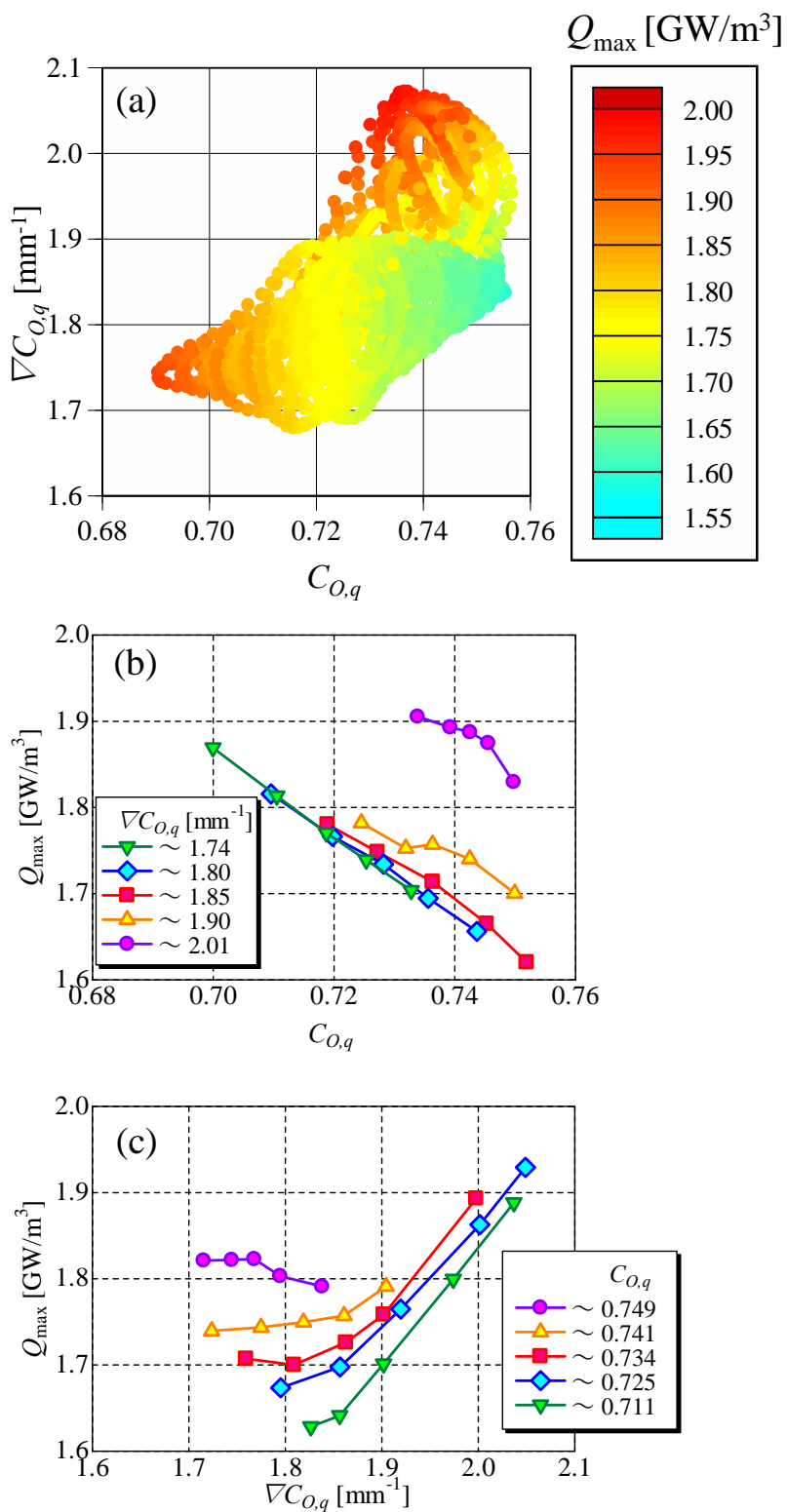
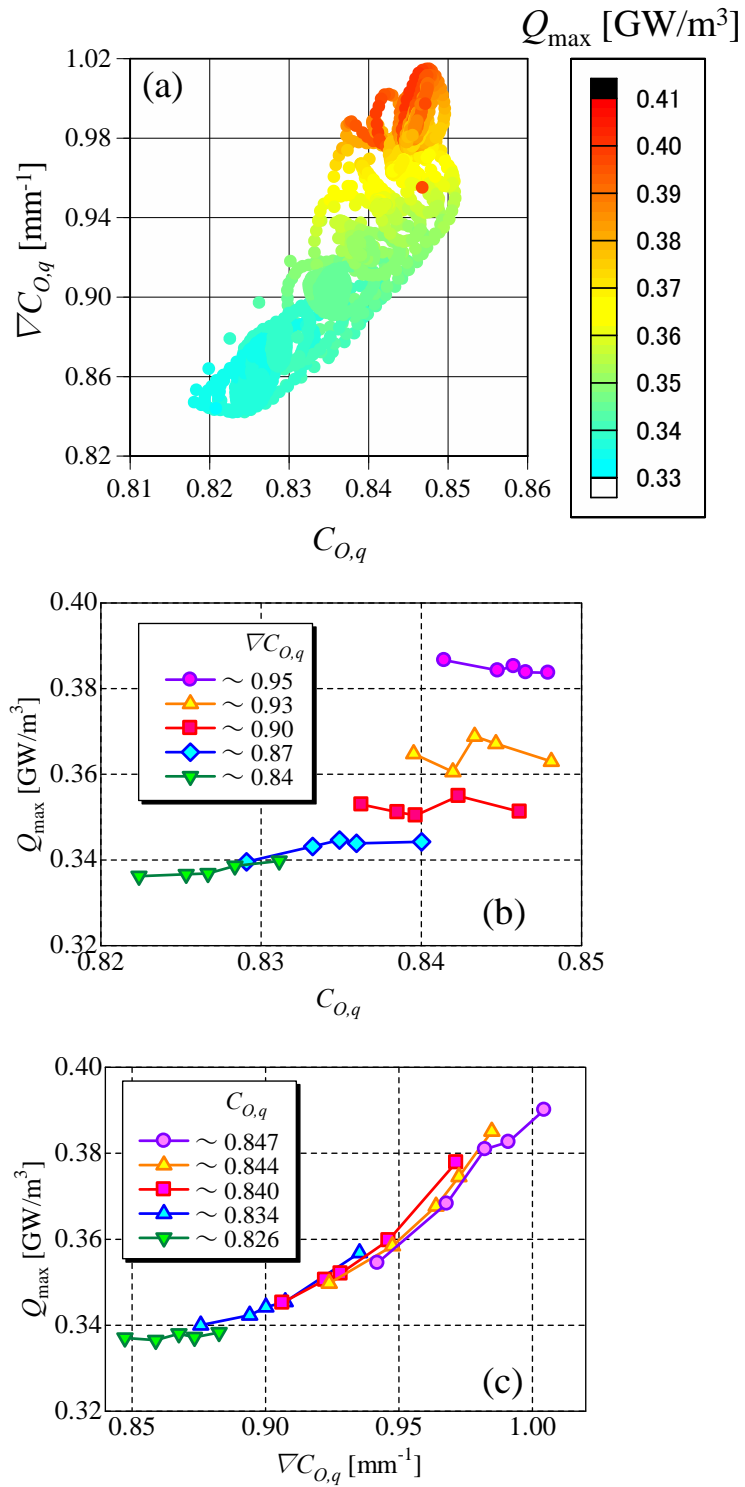


Fig. 6.13 Relationships of Q_{\max} to $C_{O,q}$ and $\nabla C_{O,q}$ for $\phi = 0.75$

Fig. 6.14 Relationships of Q_{\max} to $C_{O,q}$ and $\nabla C_{O,q}$ for $\phi = 0.55$

6.3.5 火炎面における中間生成物のモル濃度

図 6.15 に中間生成物の一例として、 $\phi=0.75$ の場合における OH ラジカルのモル濃度 $c_{\text{OH},q}$ を $C_{\text{O},q}$ および $\nabla C_{\text{O},q}$ で整理した結果を示す。OH モル濃度の傾向は図 6.13(a) に示した Q_{max} の傾向とほぼ同じであり、 $\nabla C_{\text{O},q}$ が小さい条件では、 $C_{\text{O},q}$ との相関が強く、 $\nabla C_{\text{O},q}$ が大きい領域では、 $\nabla C_{\text{O},q}$ との相関が強い。他の当量比の条件においても Q_{max} と同様の傾向を示した。また、火炎面における CHO や CH_2O といった他の中間生成物である化学種でも同様の傾向が見られる。

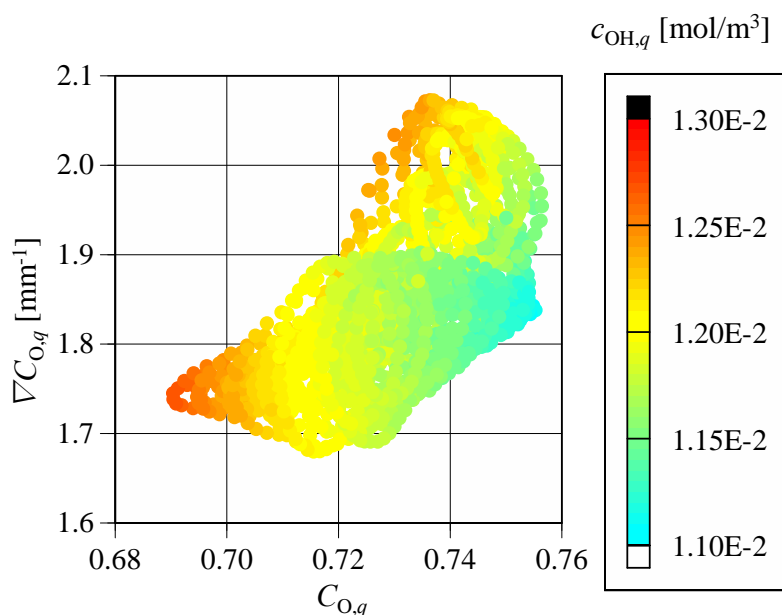


Fig. 6.15 Relationship of OH mole concentration at flame front to $C_{\text{O},q}$ and $\nabla C_{\text{O},q}$ for $\phi = 0.75$

6.3.6 火炎面における最終生成物のモル濃度

図 6.16, 図 6.17 に $\phi=0.75$ における二酸化炭素のモル濃度 $c_{\text{CO}_2,q}$ と水のモル濃度 $c_{\text{H}_2\text{O},q}$ を $C_{\text{O},q}$ および $\nabla C_{\text{O},q}$ で整理した結果をそれぞれ示す。二酸化炭素のモル濃度は、 $C_{\text{O},q}$ と正の強い相関があり、 $\nabla C_{\text{O},q}$ との相関は非常に小さい。この傾向は当量比によらず表れ、前述の熱発生速度、中間生成物濃度の場合とは異なる。

図 6.17 に示される火炎面における H_2O のモル濃度についても、 CO_2 とは逆に $C_{\text{O},q}$ が小さい場合に大きな値となるが、 $C_{\text{O},q}$ との相関が強い傾向となる。このように、最終生成物となる両化学種は各当量比毎にほぼ $C_{\text{O},q}$ のみで整理を行うことが可能である。

以上より、メタン-空気火炎では、最終生成物の濃度は $C_{O,q}$ にのみ依存する。また、熱発生速度最大値およびラジカル・中間成生物の濃度は、 ϕ が 1 に近い条件では、 $C_{O,q}$ が支配的である一方、 $\phi \ll 1$ または $\phi = 0.75$ 付近で $\nabla C_{O,q}$ が大きい条件において $\nabla C_{O,q}$ が大きく火炎構造に作用することがわかった。このように、当量比が異なると燃焼特性はかなり変化する。したがって、反応進行度の定義を当量比の効果を考慮して修正することによりある程度整理することは可能と思われるが、各物理量の当量比依存性と、各当量比の火炎伸長率や非定常性に対する依存性を統一して整理することはかなり困難であると思われる。

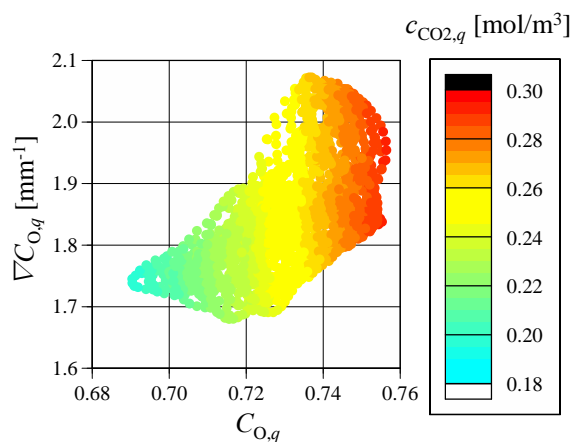


Fig. 6.16 Relationship of CO_2 mole concentration at flame front to $C_{O,q}$ and $\nabla C_{O,q}$ for $\phi = 0.75$

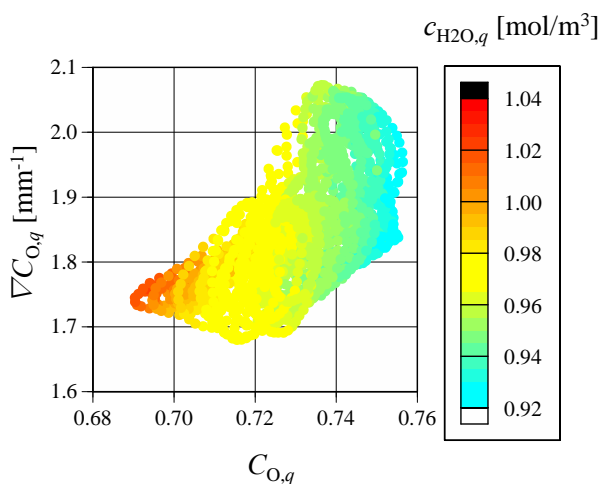


Fig. 6.17 Relationship of H_2O mole concentration at flame front to $C_{O,q}$ and $\nabla C_{O,q}$ for $\phi = 0.75$

6.4 非定常二次元予混合火炎を用いた検討

6.4.1 火炎の時間変化

この解析モデルでは、流入速度に時間的および空間的変動を加えているため、時間経過とともに火炎形状が変化する。そこで、 $u_m = 1.75 \text{ m/s}$, $k = 0.4 \text{ mm}^{-1}$, $f = 250 \text{ Hz}$ および $u_m = 2.0 \text{ m/s}$, $k = 0.3 \text{ mm}^{-1}$, $f = 500 \text{ Hz}$ の場合の OH モル濃度の時間変化を図 6.18 および図 6.19 に示す。なお、これらの図の時間間隔は $35 \mu\text{s}$ である。図中の白黒の境界が火炎面に対応する。これらの図より、火炎面形状は時間とともに変化することがわかる。今回示していない他の条件でも同様の変化が見られる。

図 6.19 では、図 6.18 の条件に比べ波数が大きいいため、火炎面の凹凸の数が多くなる。また、振動数が大きいことにより、流入速度の変動に対する火炎の追従性が悪くなることから、火炎面の凹凸のスケールも小さくなっている。このような火炎面形状の変化の原因として、流入速度に加えている時間的および空間的変動に加え、火炎面自体が持つ流体力学的不安定性 [6] が挙げられる。火炎面には流入速度に加えている時間的・空間的変動に対応して凹凸が繰り返し現れ、変形しながら下流側に移動している。また、流体力学的不安定性により、その変形はやや不規則なものとなっている。

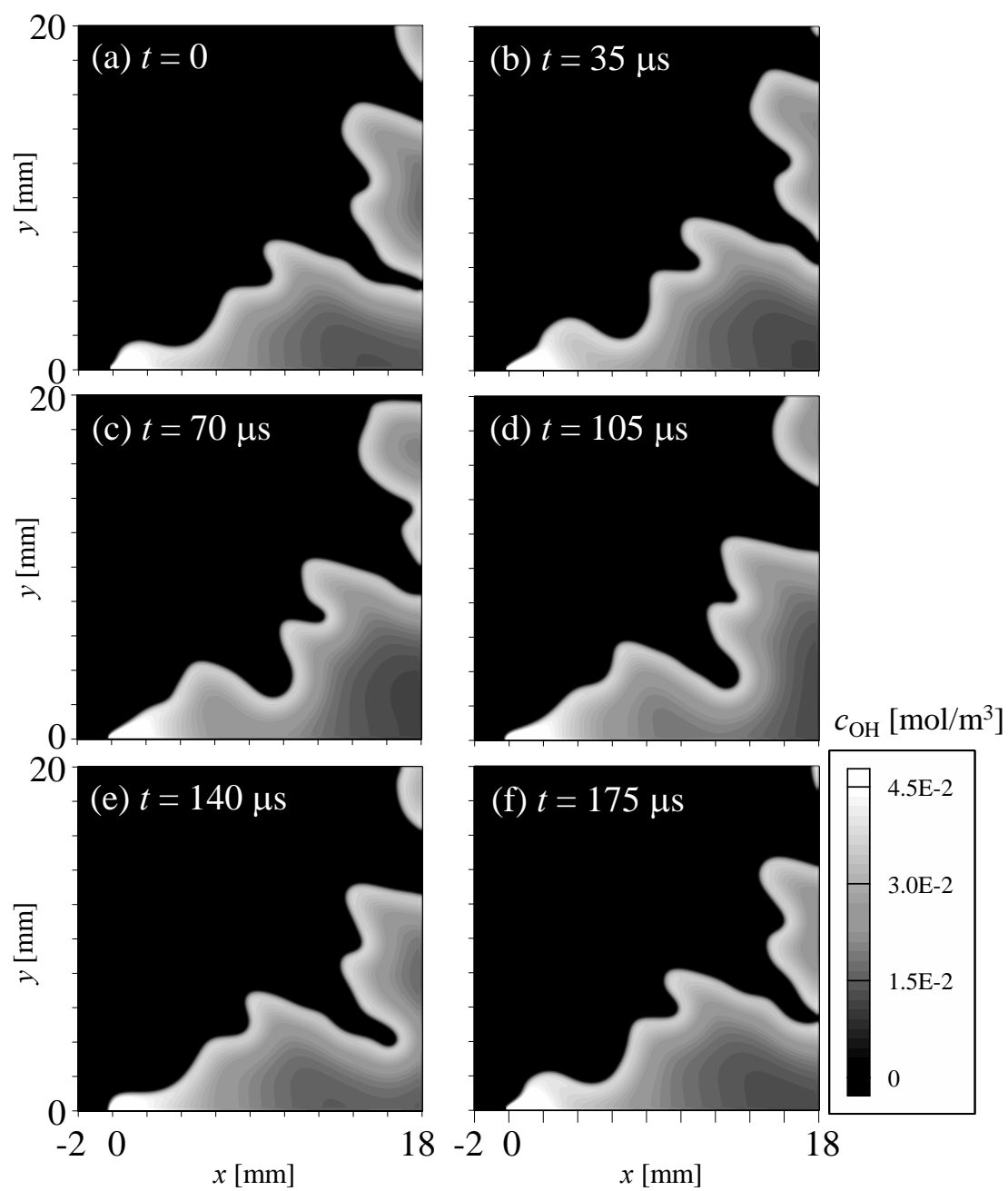


Fig. 6.18 Time evolution of OH mole concentration

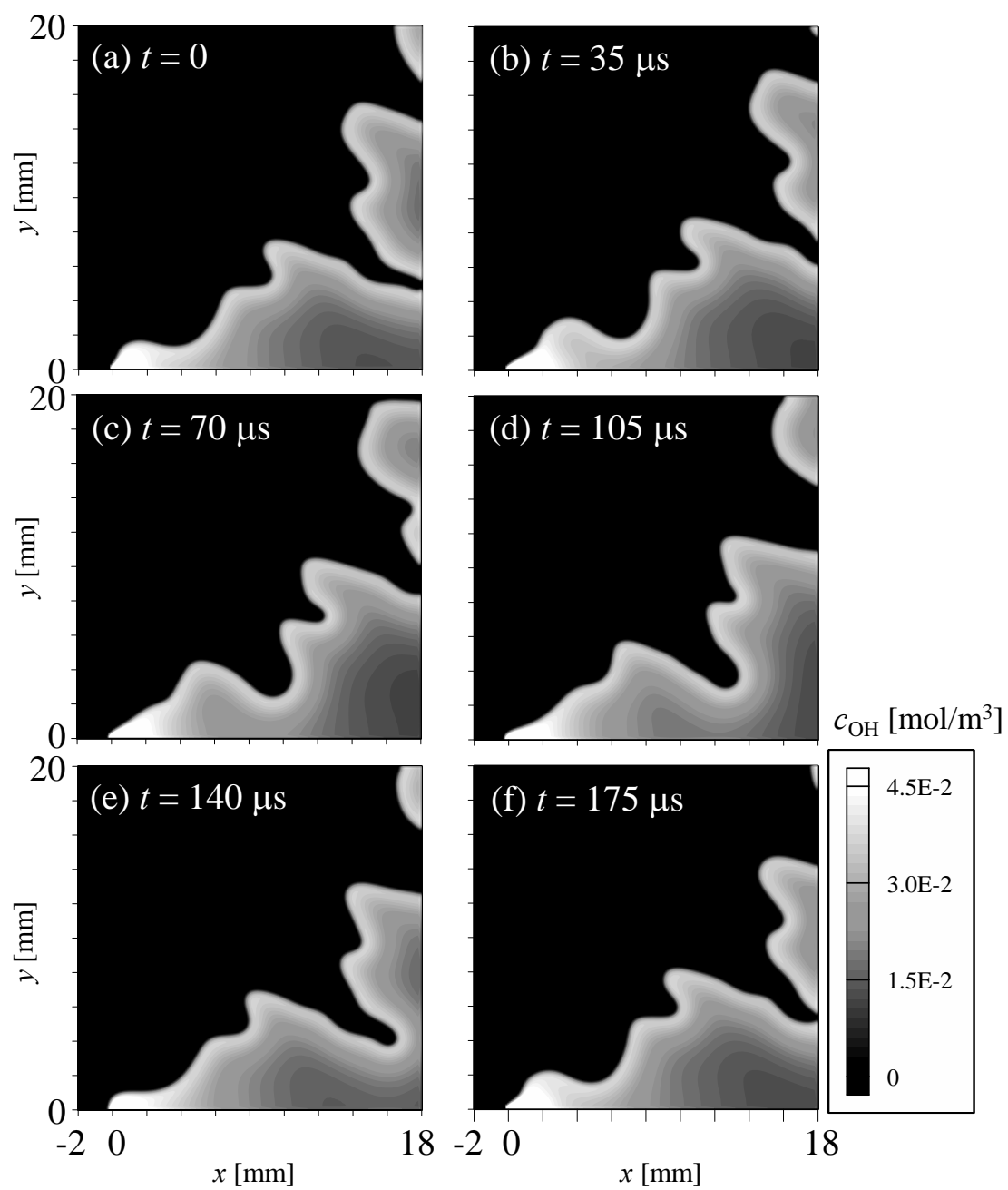


Fig. 6.19 Time evolution of OH mole concentration

火炎構造の考察を行うにあたり、火炎面に垂直方向の諸量の分布を求める必要がある。例として、 $u_m = 1.75 \text{ m/s}$, $k = 0.2 \text{ mm}^{-1}$, $f = 250 \text{ Hz}$ の場合におけるある瞬間の二次元の OH モル濃度分布を図 6.20(a) に示す。図中に示した A-A' 断面の温度 T , 熱発生速度 Q , OH モル濃度 c_{OH} , CO_2 モル濃度 c_{CO_2} の分布は図 6.20 (b) のようになる。ここで図中の n 軸は火炎面を原点とし、既燃側方向を正としたものである。流入速度に変動を加えない場合、定常な斜め予混合火炎が形成され、着火点から離れた領域では、火炎面垂直方向の諸量の分布はどの位置でも同じとなる。これに対し、速度変動を加えた場合、前節で述べたように、火炎面形状の変化等の影響により、局所的な火炎構造は変化し、定常火炎とは異なるものとなる。

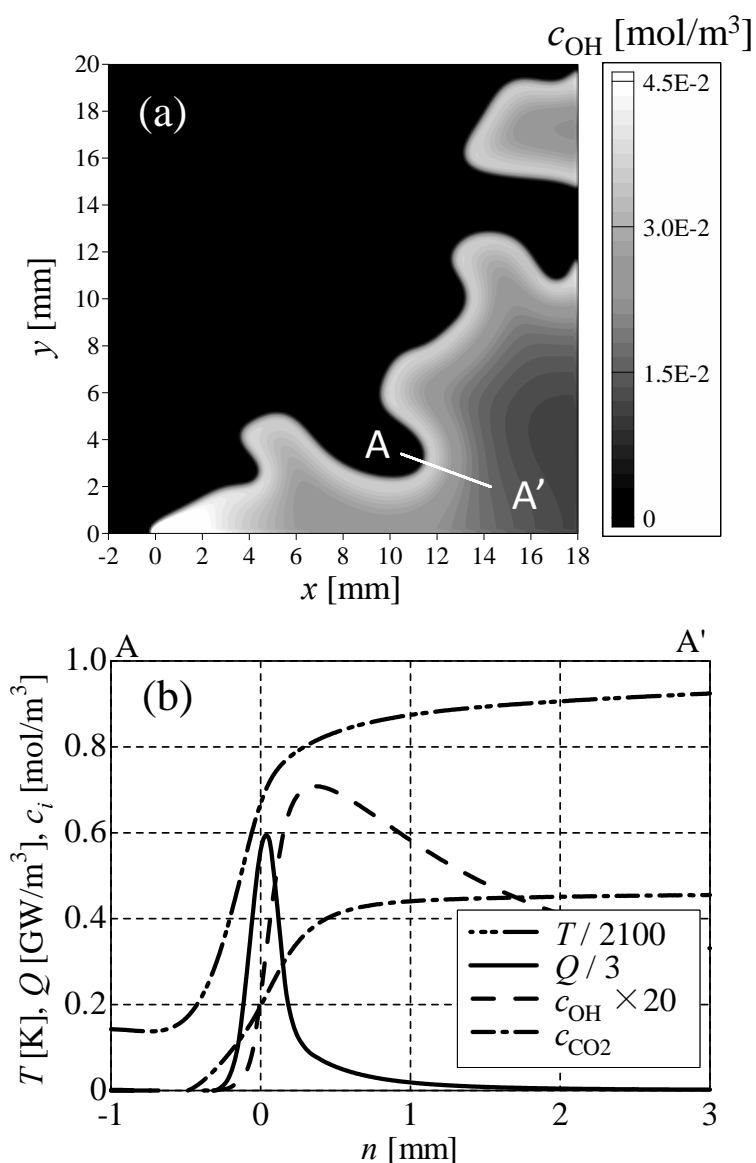


Fig. 6.20 OH mole concentration and flame structure along A-A'

6.4.2 火炎構造を支配する物理量の検討

6.3.2 項において示した酸素の質量分率によって定義した反応進行度を用いることにより、非定常の二次元火炎においても6.3節と同様の結果を得られるか検討する。火炎構造を表す特性量である熱発生速度の最大値 Q_{\max} 、OH モル濃度の最大値 $c_{\text{OH,max}}$ との関係調べる。反応進行度の火炎面位置における値 $C_{O,q}$ を横軸にとり、図 6.21(a) に熱発生速度の最大値 Q_{\max} との関係を示す。また、(b)に OH モル濃度の最大値 $c_{\text{OH,max}}$ との関係を示す。まず、 $C_{O,q}$ の値の範囲は非定常対向流予混合火炎の場合には見られなかった $C_{O,q} < 0.68$ の小さい値を取る火炎片が見られる。これは、火炎が曲率を持つことによる効果であると考えられる。

図 6.21 (a) より、 $C_{O,q} > 0.53$ の場合、 $C_{O,q}$ と Q_{\max} との間には相関があることが分かる。多少の差異があるものの、 $C_{O,q}$ が決まれば一意に Q_{\max} が決まる。非定常対向流予混合双子火炎の場合と比較すると、図 6.13(b)に示す $\nabla C_{O,q}$ が小さい場合の傾向と一致している。次に、(b)に示す OH ラジカルの場合、傾向は Q_{\max} の場合とほぼ同じであるが、差異が大きく、 $C_{O,q}$ のみを用いて火炎構造を表すことが難しいということを示している。

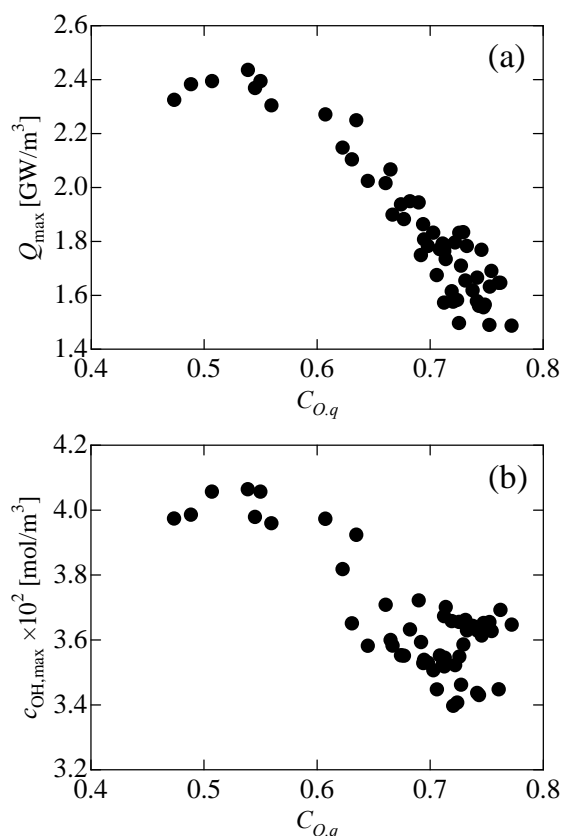


Fig. 6.21 Relation between Q_{\max} and $C_{O,q}$, and between $c_{\text{OH,max}}$ and $C_{O,q}$

図 6.22(a) に諸量を $C_{O,q}$ および $(\partial C_O/\partial n)_q$ で整理した結果を示す。ここで、 $(\partial C_O/\partial n)_q$ は火炎面位置における反応進行度の火炎面に垂直方向の勾配である。また、熱発生速度の積算値 Q_{sum} は火炎面垂直方向に熱発生速度を積算した値である。まず、 $C_{O,q} < 0.65$ 、 $(\partial C_O/\partial n)_q < 1.7\text{mm}^{-1}$ と非定常対向流予混合火炎で見られたものより小さい値を持つ火炎片が存在していることがわかる。この火炎片は既燃側に凸の大きな曲率を持つ火炎片に対応する。

次に、 Q_{sum} の値は、 $C_{O,q}$ および $(\partial C_O/\partial n)_q$ で表した平面上のごく近くに配置された場合、ほぼ同じ値となる。したがって、これらの値は、 $C_{O,q}$ と $(\partial C_O/\partial n)_q$ が決まれば一意に定まることになる。 Q_{sum} は $C_{O,q}$ が大きくかつ $(\partial C_O/\partial n)_q$ が大きい場合、小さな値となっている。これは、火炎面位置で酸素の質量分率が小さく、酸素の質量分率の勾配が大きい場合には、反応が活発ではないことを示している。

同様に、各化学種の特性量を $C_{O,q} - (\partial C_O/\partial n)_q$ 平面上で整理した結果の例として、OH モル濃度の最大値 $c_{\text{OH,max}}$ 、最大 CO_2 質量生成速度 $w_{\text{CO}_2,\text{max}}$ および CO_2 全質量生成速度 $w_{\text{CO}_2,\text{sum}}$ を図 6.22(b) ~ (d) に示す。これらの特性量もまた $C_{O,q} - (\partial C_O/\partial n)_q$ 平面上で一義的に決定することができるとともに、 $C_{O,q}$ が大きくかつ $(\partial C_O/\partial n)_q$ が大きい場合、小さな値となるものが多い。

以上より、非定常二次元予混合火炎における火炎構造を表す様々な特性量は、非定常対向流予混合火炎の場合と同様に、反応進行度の火炎面位置における値 $C_{O,q}$ と反応進行度の火炎面に垂直方向の勾配の火炎面位置における値 $(\partial C_O/\partial n)_q$ の平面上で一義的に決定できることが分かる。また、非定常対向流予混合火炎において見られなかった $C_{O,q}$ や $(\partial C_O/\partial n)_q$ の値の組み合わせの領域に属する火炎片も存在し、より広範囲の反応進行度およびその勾配の値を持つ火炎片を実現できるデータベースも必要であることがわかった。

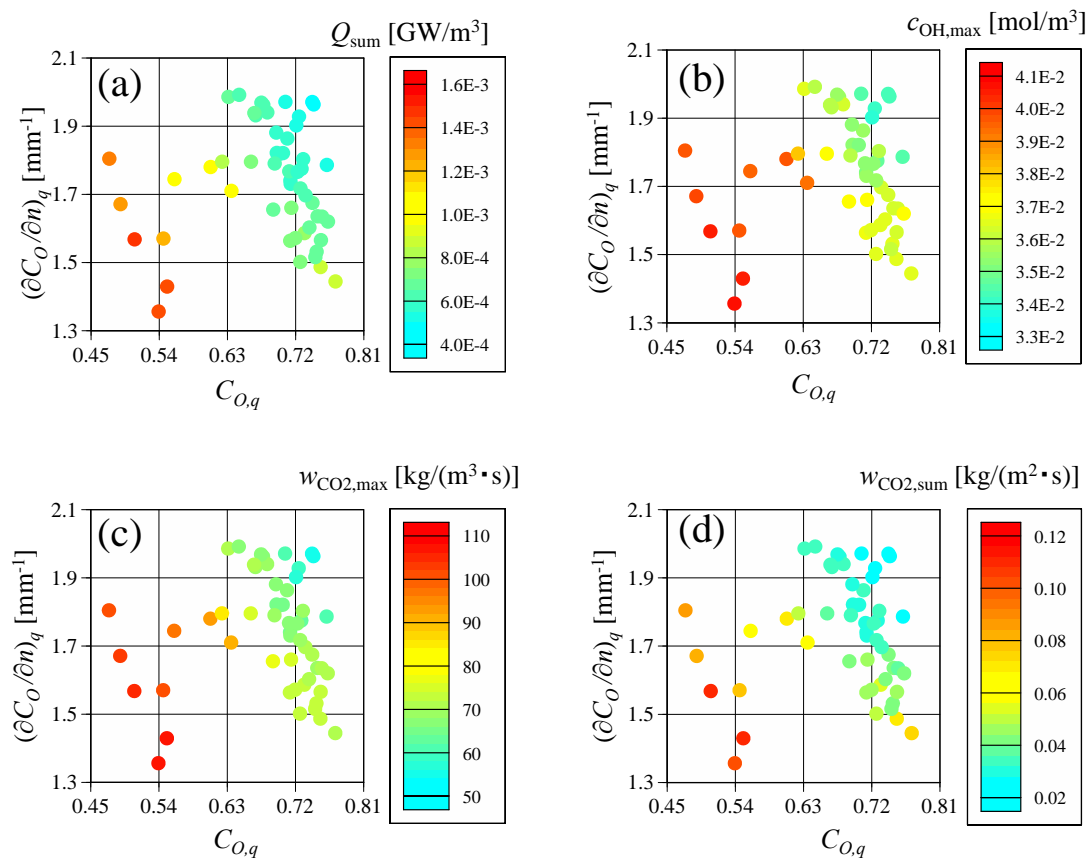


Fig. 6.22 Relationship of various quantities to $C_{O,q}$ and $(\partial C_O / \partial n)_q$

6.5 まとめ

まず、素反応機構を用いたメタン-空気定常および非定常対向流予混合火炎の数値解析を行い、その非定常挙動および火炎構造を支配するパラメータについて検討を行った。また、非定常二次元予混合火炎に対しても同様に支配パラメータの検討を行った。その結果以下のような知見が得られた。

- (1) 非定常対向流予混合双子火炎において、 f が小さい場合は、定常火炎の傾向とほぼ一致した挙動となり、非定常性の影響は見られないが、 f が大きくなるにしたがい、非定常性の影響が支配的となる。
- (2) 酸素の濃度で定義した火炎面での反応進行度は、火炎伸長率に対して消炎近傍を除き、単調に増加する。また、火炎面における反応進行度の勾配と火炎伸長率の関係は、火炎面がよどみ面から離れている場合、その傾向は当量比によって異なる。一方、火炎面がよどみ面に近づき火炎伸長率を変えてもその位置がほとんど変わらない状態になった場合、全ての当量比において、火炎伸長率が大きくなるとともに勾配も大きくなり、消炎近傍においてのみ小さくなる。
- (3) 各当量比で $C_{O,q}$ と $\nabla C_{O,q}$ を用いることにより火炎面近傍の火炎構造を表す多くのパラメータを整理することができる。最終生成物の濃度はほぼ $C_{O,q}$ にのみ依存する。また、中間成生物の火炎面における濃度および熱発生速度最大値は、 ϕ が 1 に近いが、 $\phi = 0.75$ 付近で $\nabla C_{O,q}$ が小さい条件では $C_{O,q}$ が支配的である。一方、 $\phi \ll 1$ または、 $\phi = 0.75$ 付近で $\nabla C_{O,q}$ が大きい条件では、 $\nabla C_{O,q}$ の影響が支配的であることがわかった。
- (4) 非定常二次元予混合火炎においても $C_{O,q}$ と $(\partial C_O / \partial n)_q$ を用いることにより諸量を整理することができることがわかった。ただし、非定常対向流予混合火炎において見られなかった $C_{O,q}$ や $(\partial C_O / \partial n)_q$ の値の組み合わせの領域に属する火炎片も存在し、より対向流予混合火炎だけではなく、より広範囲の反応進行度およびその勾配の値を持つ火炎片を実現できるデータベースも必要であることがわかった。

参考文献

- [1] J. A. Oijen and L. de Goey, "Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds," *Combustion Science and Technology*, vol. 161, pp. 113-137, 2000.
- [2] O. Gicquel, N. Darabiha and D. Thevenin, "Liminar premixed hydrogen/air

counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 28, pp. 1901-1908, 2000.

- [3] N. Peters, "Laminar flamelet concepts in turbulent combustion," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 21, pp. 1231-1250, 1986.
- [4] 清水昭博, 山下博史, 高石良伸, 趙黛青, “拡散火炎における NO_x の非定常生成特性の解明と組合せ予測手法の検証,” *日本機械学会論文集(B 編)*, 第 69 卷, pp. 453-460, 2008.
- [5] 荒井康, 林直樹, 山下博史, “曲率を持つ水素-空気予混合火炎の火炎構造に対する支配パラメータの解明,” *日本機械学会論文集(B 編)*, 第 79 卷, pp. 158-168, 2013.
- [6] F. A. Williams, *Combustion Theory*, 2nd ed., The Benjamin/Cumming Publishing, 1985.

第7章

曲率を持つ予混合火炎の過渡応答 および定常的な火炎構造

7.1 はじめに

燃料希薄燃焼は NO_x やすすなどを低減でき、また、燃費の向上も図れることから多くの用途で用いられる。一方、その不安定性や不完全燃焼、局所消炎により、未燃炭化水素を多く排出する場合がある。このため、希薄燃焼における火炎の構造や挙動を正確に把握することは非常に重要である。火炎面曲率は火炎面の接線方向の速度勾配とともに火炎伸長の重要なファクターである。このため、火炎面曲率や接線方向の速度勾配に関して、実験や数値解析を通して多くの研究が行われてきた。

また、火炎の消炎は未燃ガスや CO 等の有害ガスが発生することから、その現象を明らかにするために多くの数値解析、実験が行われている [1-4]。例えば、矢作ら[1]は対向流燃焼器を用い、乱流予混合火炎における層状燃焼の消炎特性について検討を行っている。

本研究では、平面对向流予混合火炎の入口流速の一部に大きな流速を与え、曲率を持つ予混合火炎が形成されるまでの過渡応答に主に着目し、その際の火炎の局所的な消炎や速度場について検討を行う。特に本章では熱発生速度の分布に着目する。

7.2 解析モデル

曲率を持つ対向流予混合火炎の解析モデルを図 7.1 に示す。図のように、点 O を原点とした二次元のデカルト座標系を用い、流れ方向およびそれに垂直方向の座標を (x, y) 、その速度成分を (u, v) とする。両ノズル間の距離 L は 15 mm とし、それぞれ大気圧、温度 300 K の空気および当量比 0.55 のメタン・空気予混合気を噴出させる。このとき、上下で対称となるため、 x 軸で対称条件、上部境界に自由流出条件を用いる。

図のように、火炎面に x 軸近傍で曲率を持たせるために、速度 u は、左側境界では、以下のように x 軸近傍で周囲とは異なる大きさとし y 方向に分布を与える。

$$\begin{aligned} u = u_0 = 0.2 \text{ m/s}: y > 0.129 \text{ mm} \\ u = u_1: y = 0 \sim 0.129 \text{ mm} \end{aligned} \quad (7.1)$$

また右側境界では, $u = -u_0 = 0.2 \text{ m/s}$ で一定とする. v の境界条件は, u_1 の値に関わらず, 以下のように曲率を持たない平面火炎におけるポテンシャル流の場合と同じとした.

$$v = (2u_0/L)y \quad (7.2)$$

本研究では, まず $u_0 = u_1 = 0.2 \text{ m/s}$ とし, 曲率を持たない平面火炎を形成させ, これを初期状態として用いた. 計算開始後に u_1 を大きくし, 火炎が定常状態に達するまでの非定常挙動を調べた. ここで, $u_1 = 1.2 \sim 1.8 \text{ m/s}$ である. 計算領域の大きさは x 方向に $x = 0 \sim 15 \text{ mm}$, y 方向に $y = 0 \sim 6 \text{ mm}$ とした. 格子数は x 方向 400 点, y 方向 100 点であり, その間隔は, x 方向に $0 \sim 7.5 \text{ mm}$ は $x = 0.025 \text{ mm}$ の等間隔格子, $x = 7.5 \sim 15 \text{ mm}$ および y 方向については不等間隔格子とした.

化学反応機構には, Smooke らのメタン-空気系 Skeletal 素反応機構を用いた. その他の計算手法については 2 章および 3 章で説明したとおりである.

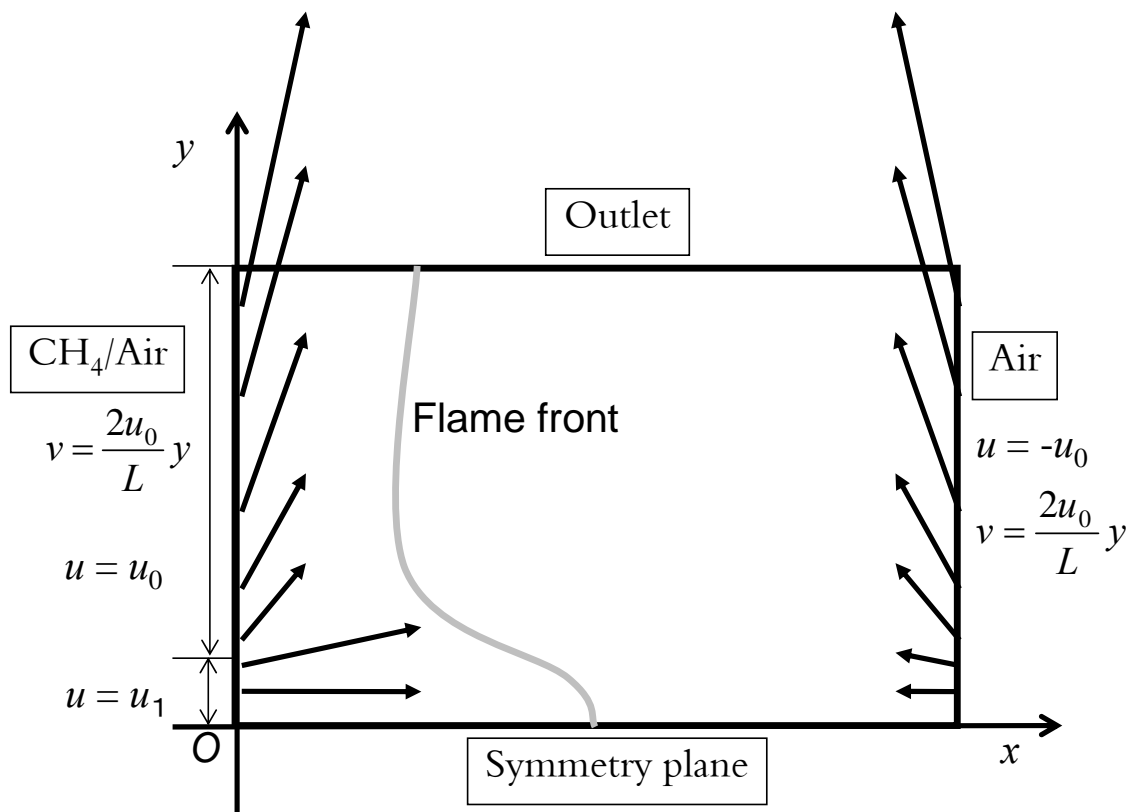


Fig. 7.1 Schematics of the curved counterflow premixed flame

7.3 計算結果および考察

図 7.2 に、初期時刻から定常状態に達するまでの過渡現象について、熱発生速度 Q の空間分布の時間変化を示す。まず、図 7.2(a)では、速い流速の影響がまだ火炎面に到達していないため、火炎はほぼ平面の状態を保っている。しかしながら u_1 を u_0 よりも大きくしたことにより、火炎面は空気ノズル側に凸の形状となる。メタンはルイス数が 1 よりもわずかに小さいため、曲率の効果により Q は小さくなる。それ以上に、火炎面が冷たい空気流側に突き出ることによって火炎は弱くなる。これらに加えて、速度場の変動による非定常性の影響もあり、図 7.2(b)と(c)の間で x 軸近傍において局所的に消炎する。この消炎の間に空気流側に未燃ガスが抜け出して、図 2(d)のように、消炎により生じた火炎の端は跳ね上がるような動きをする。さらに、図 2(e)のように、火炎の最もくびれた部分が未燃側に伝播し対称面である x 軸上で 2 つの部分に分かれる。このうち、空気流側の火炎片は空気流側へ抜け出た未燃ガスが燃え尽きることにより消失し、最終的には図 7.2 (f)のような定常的な火炎となる。

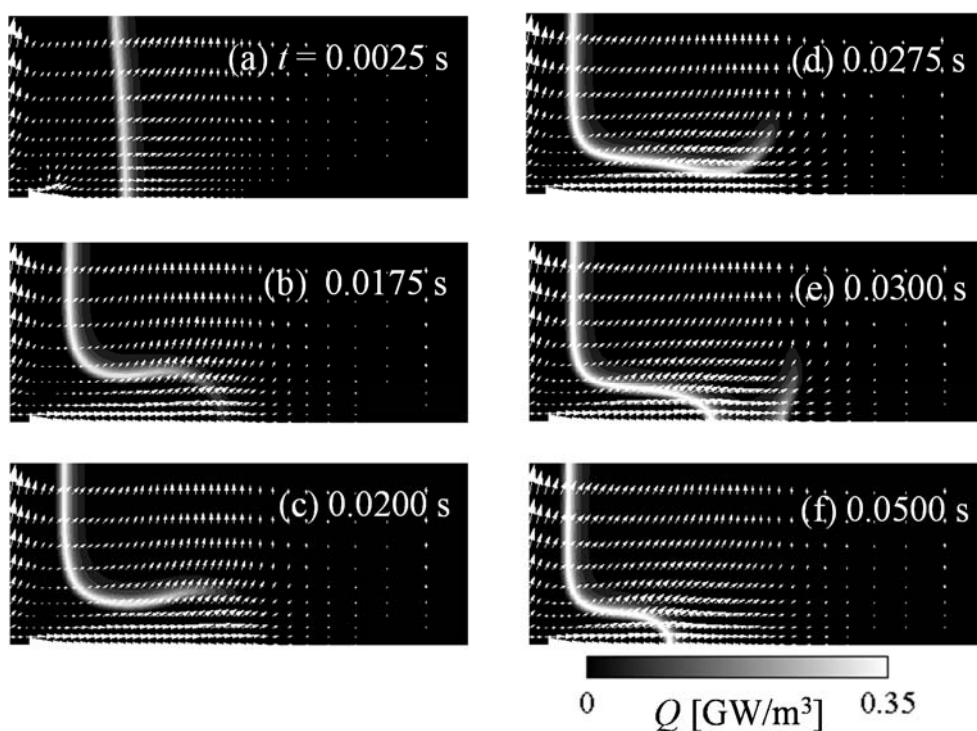


Fig. 7.2 Time history of the heat release rate and velocity vector distributions leading to local extinction with $u_1 = 1.8$ m/s

図 7.3 に熱発生速度分布および各 x 断面における熱発生速度の最大値 Q_{\max} を y の関数として示す。 Q_{\max} が最大となるのは $y=1$ mm 近傍であり、このとき火炎面曲率はほぼ 0 となる。一方、火炎面が正および負の曲率をもつ領域において Q_{\max} は比較的小さな値となる。上述のように、燃料希薄メタン-空気予混合火炎のレイス数が 1 よりも小さいならば、レイス数効果により既燃側に凸の場合のみ火炎は弱められ、未燃側に凸の場合火炎は強められるはずである。しかし、未燃側に凸の場合でも Q_{\max} が弱いという結果となった。火炎伸長では曲率の項と火炎面に沿う方向のひずみ速度成分の項が存在する [5] ことから、火炎面に沿う方向のひずみ速度成分による火炎伸長の影響の可能性が考えられる。しかし、ひずみ速度の算出の際にどこで速度を定義するか定義があいまいとなる。そこで、本項では x 方向の速度勾配 $\partial u/\partial x$ および y 方向の速度勾配 $\partial v/\partial y$ を計算領域全域にわたって算出した。その結果を図 7.4 に示す。図中、緑の領域では勾配が小さく、青や赤で示されている領域が速度勾配の絶対値が大きい領域に対応する。図より未燃側に凸の領域における速度勾配はその周囲よりも小さい。これは噴流が衝突している影響である。このため、もともとレイス数が 1 に非常に近いことにより弱いレイス数効果の影響に加え、速度勾配の影響も加わることで Q_{\max} は比較的小さくなったと考えられる。

次に、図 7.5 に、 $y=0$ 断面における Q_{\max} の時間変化を様々な u_1 の条件に対して示す。 u_1 が小さい条件に対して火炎は局所消炎を起こさずに定常火炎へと至ることがわかる。ただし、この条件でも Q_{\max} は小さくなる。一方、 $u_1 > 1.6$ m/s の条件では火炎は局所消炎をいったん起こした後に定常火炎が形成される。

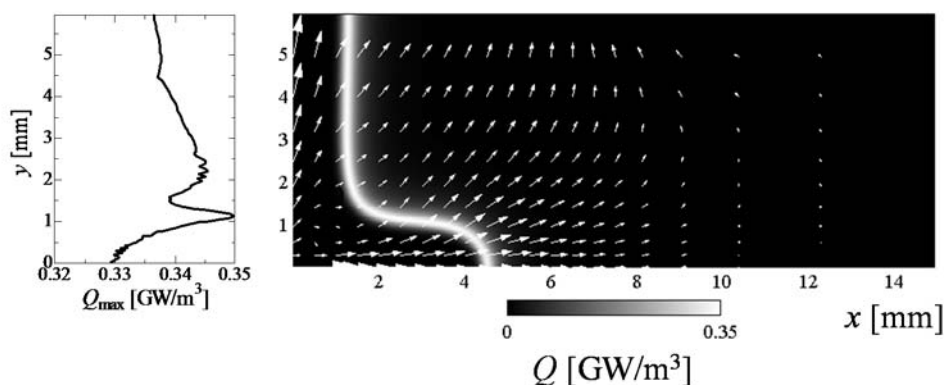


Fig. 7.3 Heat release rate distributions and maximum heat release rate as functions of y at steady state ($u_1 = 1.8$ m/s, $t = 0.05$ s)

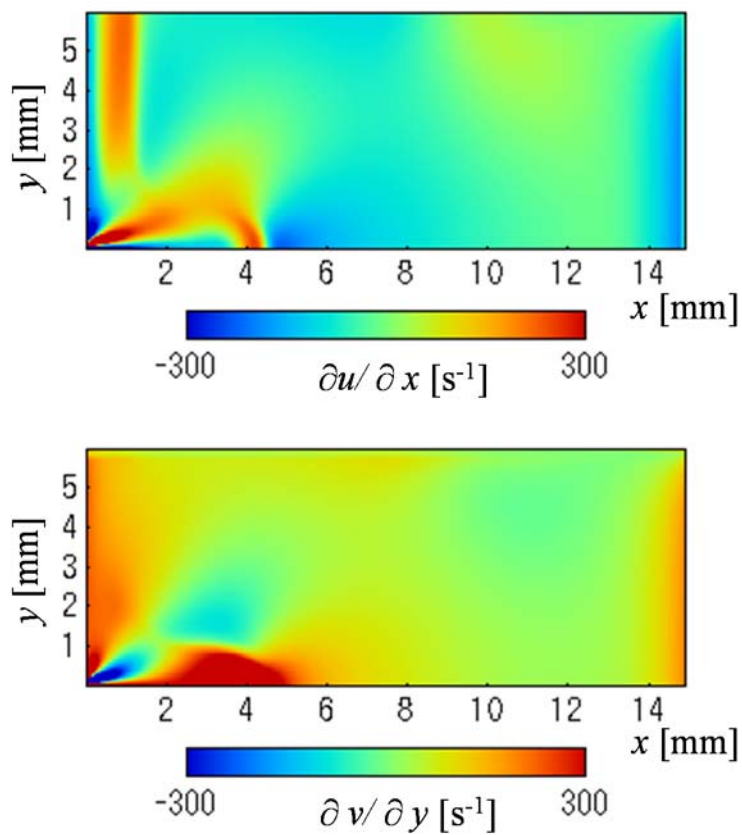


Fig. 7.4 $\partial u / \partial x$ and $\partial v / \partial y$ distributions ($u_1 = 1.8 \text{ m/s}$, $t = 0.05 \text{ s}$)

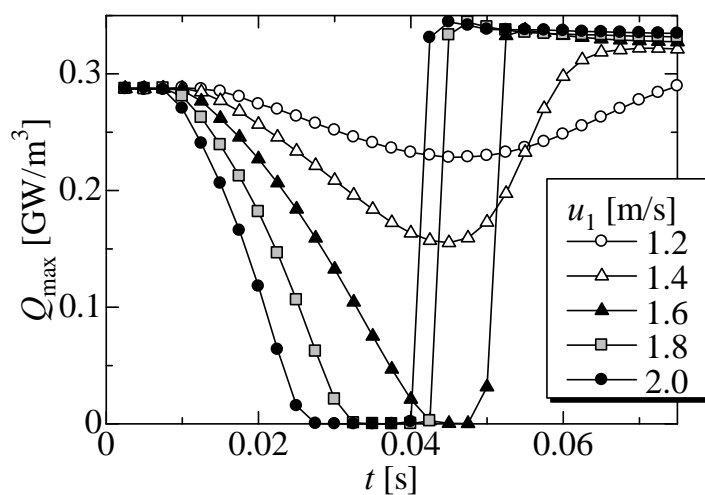


Fig. 7.5 Time variation of Q_{\max} along $y = 0$ under various u_1 conditions

7.4 まとめ

火炎面曲率を持つ予混合火炎の数値シミュレーションを行い、以下のような結論を得た。

- (1) 熱発生速度は初期の流入速度から変化させるとすぐに減少を始め、局所消炎を起こした。その後、周囲からの伝ばにより最終的には曲率を持つ定常の予混合火炎を形成した。局所消炎は $u_1 > 1.6 \text{ m/s}$ の条件でのみ観測された。
- (2) 局所消炎を引き起こした場合の速度勾配を算出した結果、速度勾配の絶対値が大きい領域において火炎は弱められた領域が存在した。

参考文献

- [1] 矢作裕司, 仁平広宣, “対向流中に形成される超希薄乱流予混合火炎の消炎と火炎挙動,” *日本機械学会論文集(B編)*, 第68巻, 第668, pp. 1287-1294, 2002.
- [2] J. B. Bell, R. K. Cheng, M. S. Day and I. G. Shepherd, "Numerical simulation of Lewis number effects on lean premixed turbulent flames," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 31, pp. 1309-1317, 2007.
- [3] N. I. Kim, U. D. Lee and H. D. Shin, "Extinction of a premixed flame by a large variation in axial velocity," *Combustion and Flame*, vol. 136, pp. 467-480, 2004.
- [4] T. Poinso, D. Veynante and S. Candel, "Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 228, pp. 561-606, 1991.

第 8 章

空間および時間変動する 予混合火炎の火炎構造と乱流燃焼速度

8.1 はじめに

前章までに、主に伸長のある層流予混合火炎を対象に検討を行ってきた。しかし、実用燃焼器においては時間的のみではなく、空間的にも変動する乱流燃焼となる。乱流燃焼では、前章における過渡現象においても見られた局所消炎や未燃予混合気塊などの特徴的な挙動を示すことが知られている。局所消炎時の火炎の挙動については Poinsot ら [1] が調査している。また、未燃混合気塊の発生と消滅について、店橋ら [2] は噴流乱流予混合火炎の先端部におけるその挙動を調べている。

実験的に局所消炎を調べる際に指標となる最適な物理量についての調査はこれまでも多く行われている。まず、計測可能な化学種として CH が挙げられる。CH の分布は火炎面の位置とよく一致するとして計測に用いられてきた。しかし、CH 濃度が小さいことにより計測には高エネルギーのレーザが必要なこと、また、消炎時には熱発生速度の挙動と異なる場合があることなどが指摘されている。また、OH と CH₂O の濃度の積が熱発生速度と良い相関がある [2] ということから、OH-CH₂O 同時 PLIF 法により両者の濃度場を計測し、熱発生速度分布の可視化が行われている [3, 4]。山本らは、OH-CH₂O 同時 PLIF 計測を用いて、旋回噴流燃焼器を用いた乱流予混合火炎の火炎構造の検討を行ってきた [5]。この実験において、CH₂O は存在するものの OH が消失している領域が存在することが指摘されている。この現象が局所消炎に対応すると考えられる。

さらに、乱流燃焼の評価を行う際の指標として、乱流燃焼速度が用いられる。乱流燃焼速度の定義には層流燃焼からの面積の増加率に基づくものと、フラクタル次元を基に算出するもの等が提案されている。

本章では、対向流予混合火炎の流入速度に時間的、空間的に強い変動を与え、乱流火炎を凹凸のある火炎面を持つ非定常火炎として模擬する。このとき、予混合気と対向する気体として、低温の空気、高温の既燃ガスの 2 種類を用いる。まず、本解析モデルにおいて見られた局所消炎や未燃混合気塊の挙動について明らかにする。次に、局所消炎を伴う場においても CH₂O と OH ラジカルの挙動を調べ、CH₂O と OH の濃度の積と熱発生速度との関係について示す。最後に、火炎面の面積および局所燃焼速度から算出した乱流燃焼速度の挙動についても検討を行う。

8.2 解析モデル

本章で用いた非定常二次元対向流予混合火炎の解析モデルおよび境界条件を図8.1に示す。二次元のデカルト座標系を考え、流れ方向およびそれに垂直方向の座標を (x, y) とし、対応する速度成分を (u, v) とする。計算領域は流れ方向の長さを15 mm、垂直方向の幅 $L_{in}=10$ mmとし、座標は $x = -7.5 \sim 7.5$ mm, $y = 0 \sim 10$ mmとした。差分格子数は x 方向301, y 方向101とした。また、格子間隔は x 方向に0.05 mm, y 方向に0.1 mmの等間隔格子とする。

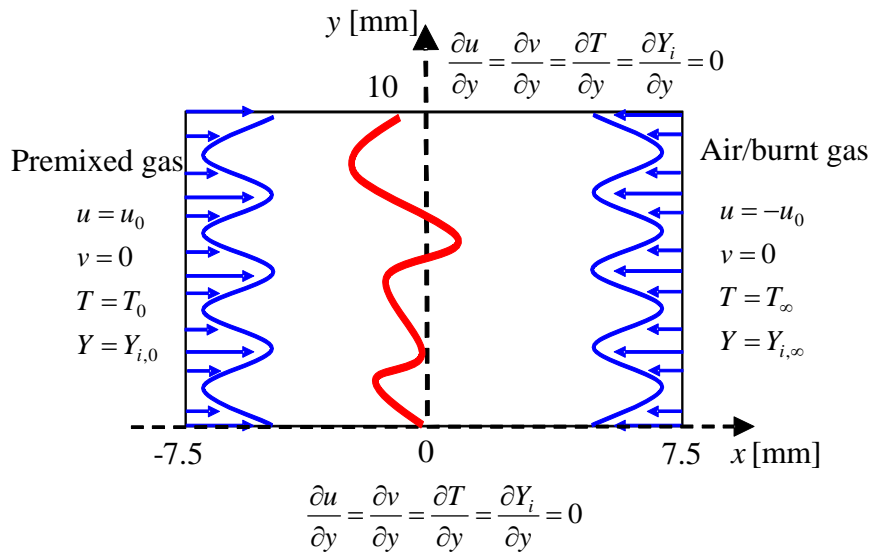


Fig. 8.1 Analytical model and boundary conditions

作動流体として、左端からはメタン-空気予混合気を、右端からはそれに対向して空気(Case A)または既燃ガス(Case B)を流入させる。メタン-空気予混合気の温度 T_0 は300 K, 当量比 $\phi = 0.75$ とする。また、Case Cとして超希薄燃焼であり可燃限界近傍である $\phi = 0.55$ についても既燃ガスを対向させた計算を行う。Case Aにおいて対向させる空気の温度は $T_\infty = 300$ Kとする。また、Case BおよびCase Cにおける既燃ガスの温度および組成 $Y_{i,\infty}$ は、左端から流入させる予混合気の一次元層流火炎を別途数値計算し、その十分下流での値を用いる。表8.1に主な化学種の $Y_{i,\infty}$ を示す。また、 $T_\infty = 1923.8$ Kである。左右両端の流入速度 u_0 には、次式で時間的および空間的変動を加える。

$$u_0 = u_m \{1 + A \cos(2\pi ky) \sin(2\pi ft)\} \quad (8.1)$$

ここで、 u_m は平均流入速度、 A は変動の振幅、 k は波数、 f は振動数を表す。Case A～Case Cにおける各パラメータを表8.2にまとめる。また、計算領域の上下の境界条件は自由流出境界とした。初期条件として適当な分布を初期時刻に与え、十分時間が経過した後の状態について検討する。化学反応機構にはSmookeらのメタン-空気系Skeletal素反応機構を用いる。

Table 8.1 Inlet burned gas composition for Case B

Species	CO ₂	H ₂ O	O ₂	CH ₄	N ₂	OH	CO
Mass fraction	0.114	0.093	0.554	0.0	0.736	5.84 × 10 ⁻⁴	1.27 × 10 ⁻⁴

Table 8.2 Inlet velocity condition

Case	Opposing Fluid	u_m [m/s]	A	k [mm ⁻¹]	f [Hz]
A	Air	1.0	5	1	50
B	Burned gas	1.0	5	1	50
C	Burned gas	1.0	3	0.5	50

8.3 火炎長さと乱流燃焼速度の算出

本章における計算条件では比較的強い変動を火炎に与えている。この速度変動により、非定常過程の各瞬間において、火炎形状と局所燃焼速度が空間分布を持ち、時間経過とともに変化する。そこで、各瞬間における燃焼特性を把握するために、各瞬間の火炎長さと燃焼速度の空間平均量を以下のように算出する。

まず、火炎長さ L_f (二次元場なので火炎面積に対応) を算出するために、各時間における火炎面の位置を熱発生速度 Q が局所的に極大となる位置と定義し、それらの点を結ぶことで火炎面形状を求める。ここで、注目している格子点位置での Q の値が、 x 軸と y 軸に沿う方向の最も近傍の上下左右の 4 つの格子点での値よりも大きい場合、あるいは x 軸と y 軸を 45 度回転した方向の最も近傍の対角 2 方向の 4 つの格子点での値よりも大きくなる場合に、その格子点位置は Q が局所的に極大となる位置とみなす。そして、この条件を満たす極大位置について、その上下左右あるいは対角 2 方向のいずれかを含む 3 点において 2 次関数補間をすることで、正確な極大位置を内挿により求める。さらに、定常状態における熱発生速度の最大値のほぼ 50 % である 0.8 GW/m³ を閾値として、 Q の極大値がこの値以上である場合にのみ火炎面として判定する。このようにして求めた極大点位置の最近接点同士を結ぶことにより連続した火炎面を構成する。この際、極大点の間隔が幅方向の格子点間隔の 5 倍以下となっている場合だけを結ぶこととする。これは、火炎面に「端」が存在する場合に、その点とある程度離れた位置にある火炎面を連結してしまうことを防ぐためである。このようにして探索した火炎面における隣接した極大点間距離をピタゴラスの定理により求め、計算領域全体で積算する

ことにより火炎長さ L_f を算出する.

図 8.2 に上記の方法で決定された火炎面の位置(a)と実際の熱発生速度分布(b), また両者を重ねて表示し, 比較したもの(c)の一例をそれぞれ示す. 図より, 決定された火炎面の位置が, 熱発生速度の分布形状と非常によく一致していることがわかる. また, 火炎面と定義する熱発生速度の極大値に閾値を設けたことで, 局所的な消炎が起こっている箇所においても火炎面の端が精度よく検出できていることがわかる.

次に, 乱流燃焼速度 S_T および単位火炎長さ当たりの平均燃焼速度 S_a は, 流れ方向に垂直方向の幅 L_m および火炎長さ L_f を用いて次式で定義する.

$$S_T = -\frac{4}{\rho_0 L_m Y_{F0}} \iint w_o dx dy \quad (8.2)$$

$$S_a = \frac{L_m}{L_f} S_T \quad (8.3)$$

ここで, w_o は酸素の質量生成速度, ρ_0 は未燃予混合気の密度, Y_{F0} は未燃予混合気中の燃料 CH_4 の質量分率である.

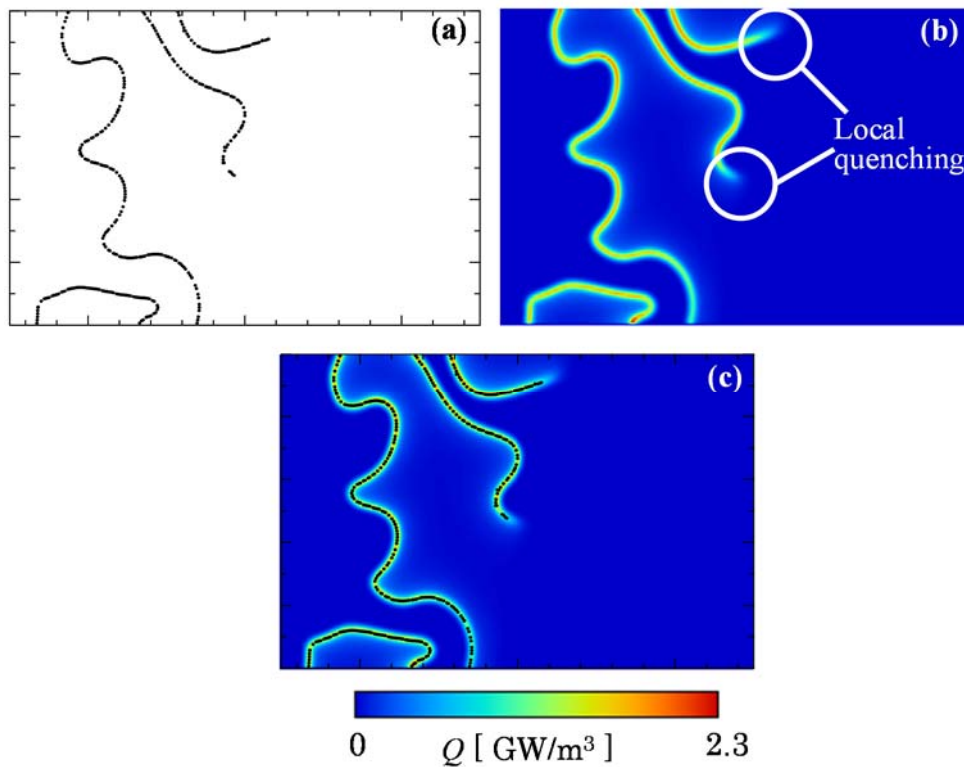


Fig. 8.2 Searching for flame front

8.4 計算結果および考察

8.4.1 火炎面形状の時間変化

Case A から C の場合について、流入速度の変動による火炎面の時間的・空間的な変化について検討する。本項では特に Case A で見られた局所消炎時の挙動、Case B で見られた未燃予混合気塊の挙動、Case C における既燃ガス塊について検討を行う。

(1) 局所的な消炎（予混合気-空気対向流火炎：Case A）

図 8.3 および 8.4 に Case A における熱発生速度および温度の二次元分布の時間変化を示す。図中の時刻 t は図(a)を $t=0$ としている。まず、図 8.3(a)では計算領域の上部から下部へ途中途切れることなく、一枚の火炎面が形成されている。温度分布において火炎面から空気ノズル側で温度が高くなっており、既燃ガスが存在することがわかる。このとき、火炎面は計算領域中央部の火炎面が空気側に張り出した形状となる。(b)の $y = 5\text{mm}$ における火炎片のようにさらに空気側へ張り出すと、局所的に熱発生速度が小さくなる。その後(c)において、 $y = 5\text{mm}$ において局所的に消炎する。このような消炎が起こる原因として、対向流の最大流速が 6.0 m/s に達することで、定常場では火炎が存在できないような強い火炎伸長の効果、および火炎面が常温の空気流側に凸となることによる火炎の冷却の効果が考えられる。しかし、後述する高温の既燃ガスを対向させた Case B の場合、このような局所消炎は確認されない。これより、後者の効果が局所消炎に大きく影響していることが示唆される。

その後、(d) ~ (f)のように前章の曲率を持つ予混合火炎と同様の機構により、局所消炎をしていた領域へ火炎は復帰する。この(f)以降も火炎面は局所消炎を伴い複雑に変動を続ける。ここで、式(8.1)で流入速度に与えた正弦関数と余弦関数の時間的また空間的な周期的変化と、火炎面形状の変化がほとんど対応していないことがわかる。これは、変動の振幅 A が 5 という非常に強い乱れを与えていることや、対向流の流れ場に起因する不安定性が現れていることが大きく影響していると考えられる。

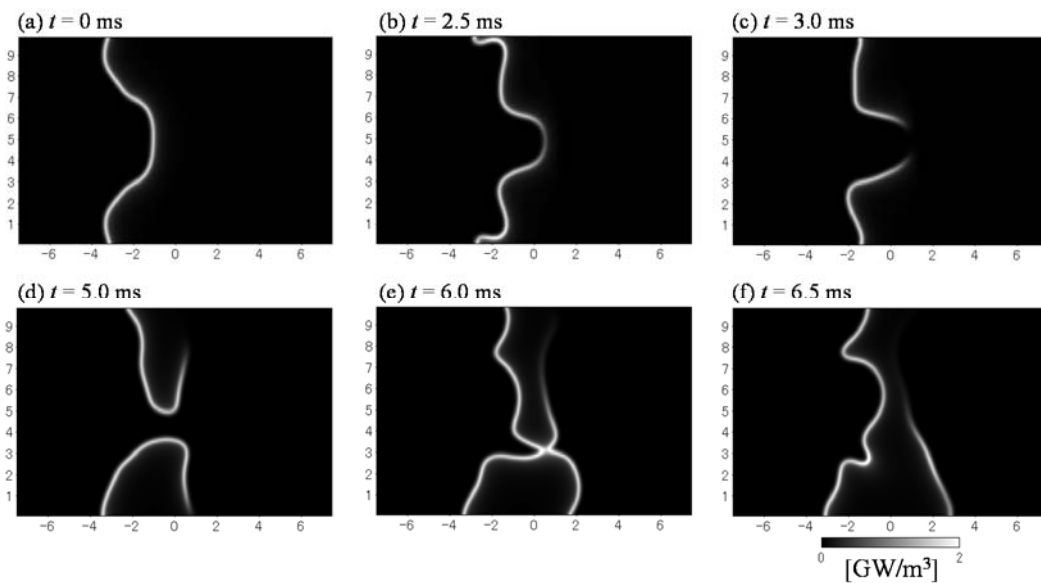
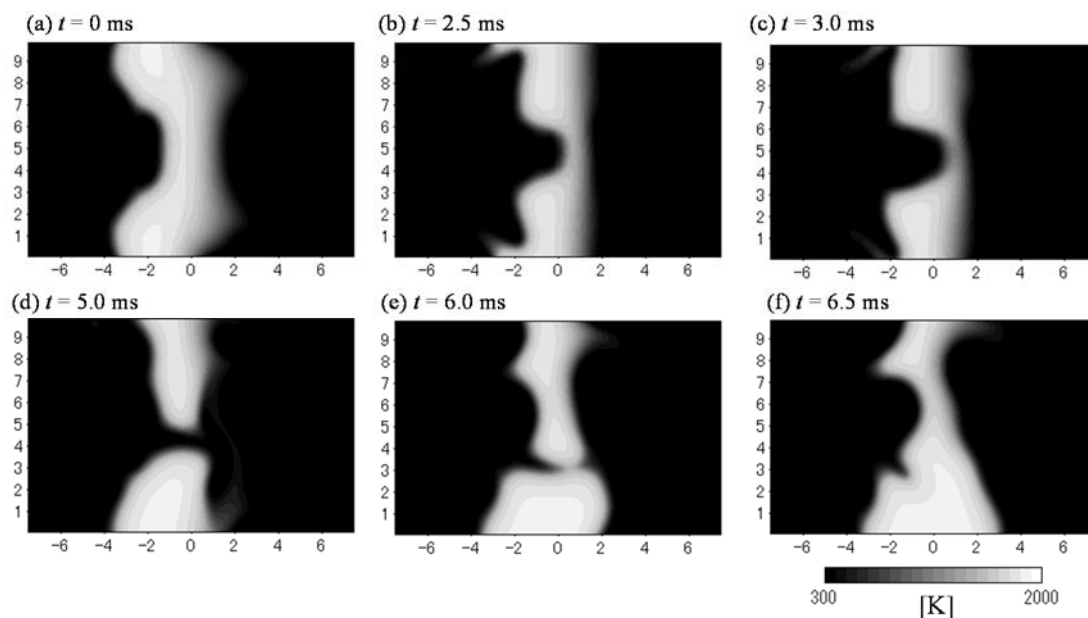


Fig. 8.3 Time history of heat release rate (Case A)



8.4 Time history of temperature (Case A)

局所消炎時の火炎の挙動を詳しく検証するために、 $y = 5 \text{ mm}$ の断面における Q の最大値 Q_{\max} および CH_3 の最大値 $c_{\text{CH}_3, \max}$ の時間変化を図 8.5 に示す. まず、 $t = 3 \sim 5 \text{ ms}$ の間で Q_{\max} の値が基準値である 0.8 GW/m^3 未満となっているため、本研究の定義では火炎面は存在しないことになる. このとき、局所消炎を起こしている領域の近傍の温度は $t = 3.0 \text{ ms}$ (図 8.4(c)) のとき 1200 K 程度であるが、 $t = 5.0 \text{ ms}$ (図 8.4(d)) のときにはほぼ常温となる. また、予熱帯で発生する CH_3 は時間とともに減少しているが、 Q がほとんど零となっている $t = 3.5 \text{ ms} \sim 5 \text{ ms}$ においても CH_3 は $y = 5 \text{ mm}$ の断面にある程度存在している. 図 8.6 に CH_3 の二次元濃度分布の時間変化を示す. 図 8.6(c) に示す $t = 3.0 \text{ ms}$ のとき Q が非常に小さい領域でも CH_3 はある程度の濃度を保っており、このときにはメタンの消費は多少起こっているが発熱反応が起こっていない状態であると考えられる. 次に、図 8.6(d) に示す $t = 5.0 \text{ ms}$ の時、 $y = 5 \text{ mm}$ 断面では CH_3 の生成および消費反応はほとんどないが、上下に存在する火炎面で生成された CH_3 の拡散により $c_{\text{CH}_3, \max}$ が零ではないと考えられる.

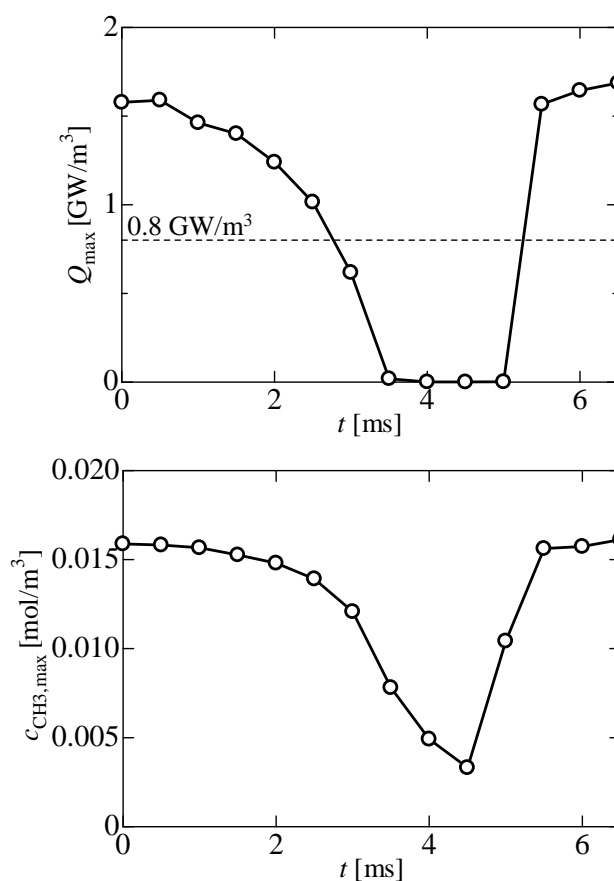
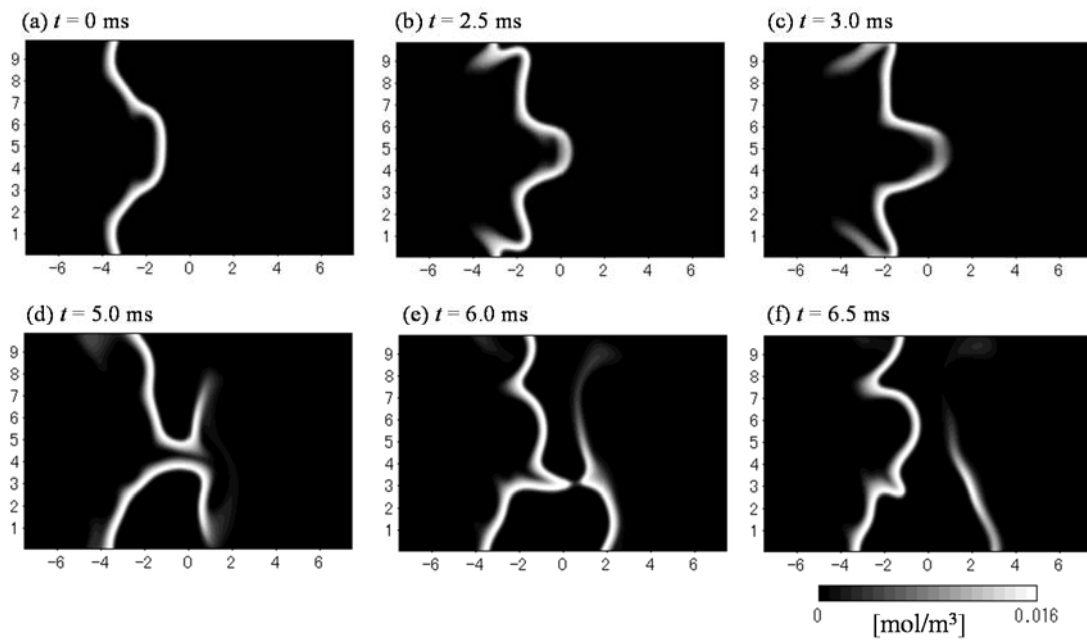


Fig. 8.5 Time history of maximum heat release rate and CH_3 mole concentration at $y = 5 \text{ mm}$ (Case A)

Fig. 8.6 Time history of CH_3 mole concentration (Case A)

近年, OH と CH_2O の濃度の積が熱発生速度と良い相関がある [2]ということから, OH- CH_2O 同時 PLIF 法により両者の濃度場を計測し, 熱発生速度分布の可視化が行われている [3, 4]. また, その妥当性を検証する研究も多く行われている. 山本らは, OH- CH_2O 同時 PLIF 計測を用いて, 旋回噴流燃焼器を用いた乱流予混合火炎の火炎構造の検討を行ってきた [5]. このような実験において, CH_2O は存在するものの OH がほぼ消失している領域が存在することが指摘されている. この現象が局所消炎に対応すると考えられる. そこで, 局所消炎においてこれらの化学種およびその積の挙動について検討する. 図 8.7 に OH および CH_2O の $y = 5 \text{ mm}$ における最大値 $c_{\text{OH,max}}$ および $c_{\text{CH}_2\text{O,max}}$ の時間変化を示す. まず, $c_{\text{OH,max}}$ は Q_{max} とほぼ同じ挙動を示し, Q_{max} がほぼ零となった $t = 3.5 \text{ ms}$ において $c_{\text{OH,max}}$ もほぼ零となる. 一方, 火炎が $y = 5 \text{ mm}$ に復帰する際には多少の時間差がある. OH とは異なり, CH_2O の濃度は零とはならず, CH_3 とほぼ同様の挙動を示す. これは, CH_2O の生成消費の挙動が CH_3 と同じく主に予熱帯で生成され, 温度が一定以上であれば燃料が分解されて生成されるのに対し, OH は反応帯下流側で主に生成されるため, 燃焼反応が進まなければ生成されないためである.

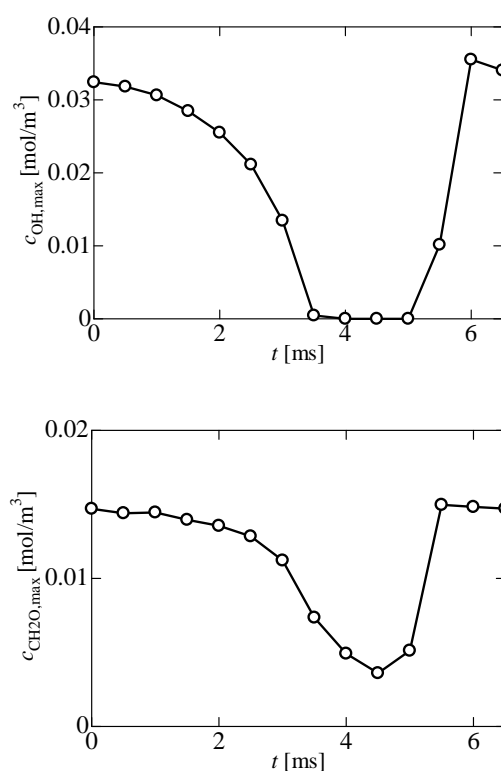


Fig. 8.7 Time history of maximum OH and CH_2O mole concentration at $y = 5 \text{ mm}$ (Case A)

図 8.8 に OH と CH₂O の濃度の積の二次元分布の時間変化を示す．図 8.9 に $y = 5 \text{ mm}$ における OH と CH₂O モル濃度の積の最大値 $(c_{\text{OH}} \times c_{\text{CH}_2\text{O}})_{\text{max}}$ を示す．ただし，これらの図において平面一次元予混合火炎での値 $(c_{\text{OH}} \times c_{\text{CH}_2\text{O}})_{\text{max}}^0 = 0.000142 \text{ (mol/m}^3\text{)}^2$ との比として示している．図 8.3 に示した Q の分布と比較すると，火炎帯付近において $c_{\text{OH}} \times c_{\text{CH}_2\text{O}}$ と Q の分布は非常によい一致を示していることがわかる．これより，局所消炎を伴う非定常場においても，温度が高い既燃ガス中に存在する OH と予熱領域および反応領域に存在する CH₂O の濃度の積が，火炎面の位置に対応する熱発生速度の分布とよく対応することが本計算によって確認できる．

OH の計測のみでもある程度の局所消炎の測定は可能であると考えられる．しかし，周囲雰囲気や反応が起こっていない未燃側との間にも OH 濃度が低下するところが出てしまうことから，CH₂O との積により火炎面が特定できることは局所消炎の診断において OH-CH₂O 同時 PLIF 法は非常に有効であることが示唆される．

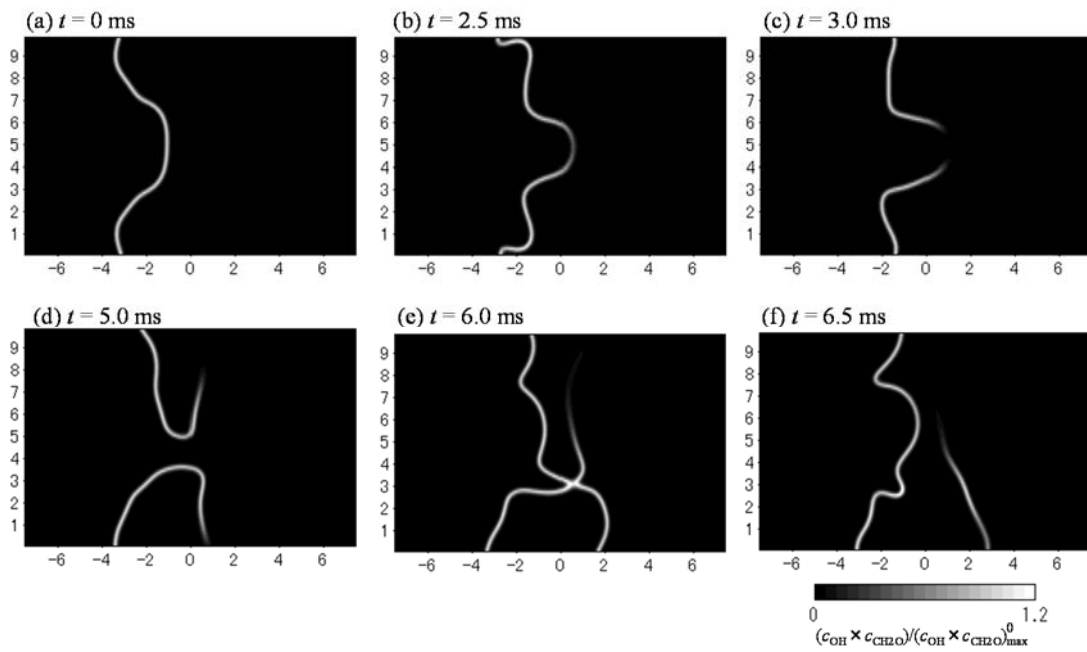


Fig. 8.8 Time history of $(c_{OH} \times c_{CH_2O})$ (Case A)

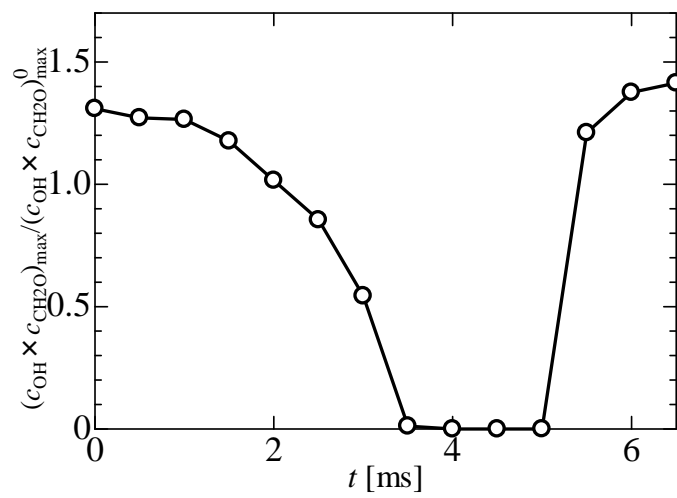


Fig. 8.9 Time history of $(c_{OH} \times c_{CH_2O})_{\max}$ at $y = 5$ mm (Case A)

(2) 未燃ガスの島の発生・消滅（予混合気－既燃ガス対向流火炎：Case B）

図 8.10 および 8.11 に Case B における熱発生速度および温度の二次元分布の時間変化を示す。図 8.11 には速度ベクトルを併せて示す。Case A と同様に火炎は速度変動により凹凸を持つが、(b)と(c)の間で、一部の火炎面が左側の火炎面からちぎれ、独立している。このように、高温の既燃領域中で未燃ガスの島が形成されることが模擬されている。この現象は実験による Johchi, Tanahashi らの研究 [7]や Nakamura らの研究 [7], また総括一段反応を適用した数値解析による Poinsot ら [1]による研究においても観測されている。この条件では、(b)と(c)の間で図 8.10(b)中に破線で囲った領域において主に上側の火炎面がその火炎面近傍の大きな流れとともに下方へ伝ばし、下側の火炎面と融合することで、未燃ガスの島が形成される。このときの OH ラジカル濃度の二次元分布を図 8.12 に示す。未燃ガスの島の周囲が既燃ガスに囲まれていることから、燃焼反応が進行することで島内部の未燃ガスが消費され、島が小さくなっている。そして、図 8.10(e)において未燃ガスの島が消失した直後には、破線で囲まれている OH スポットが確認できる。

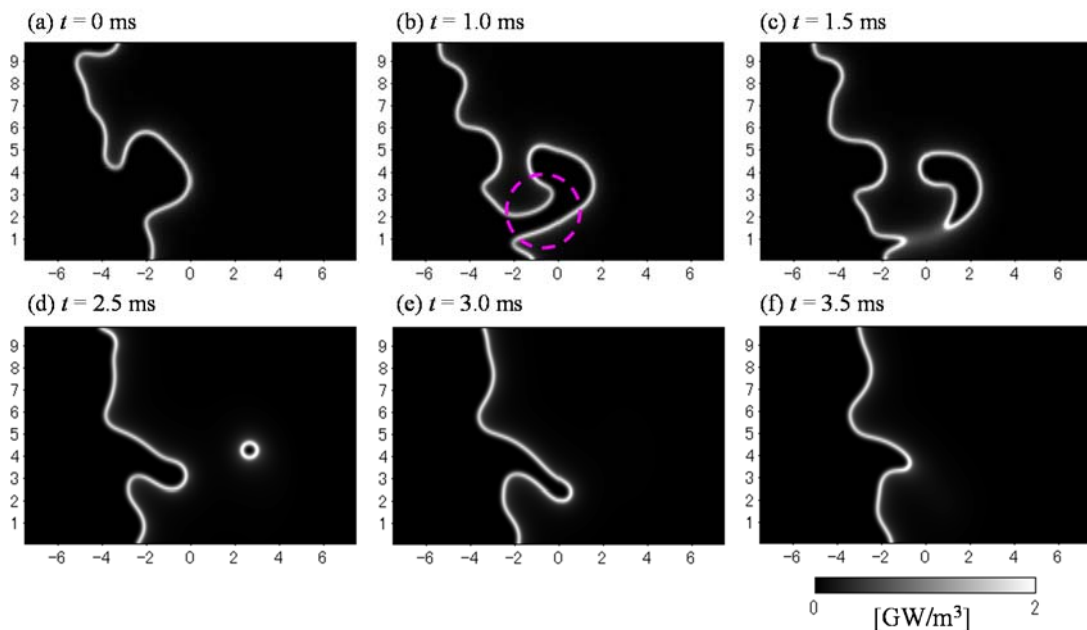


Fig. 8.10 Time history of heat release rate (Case B)

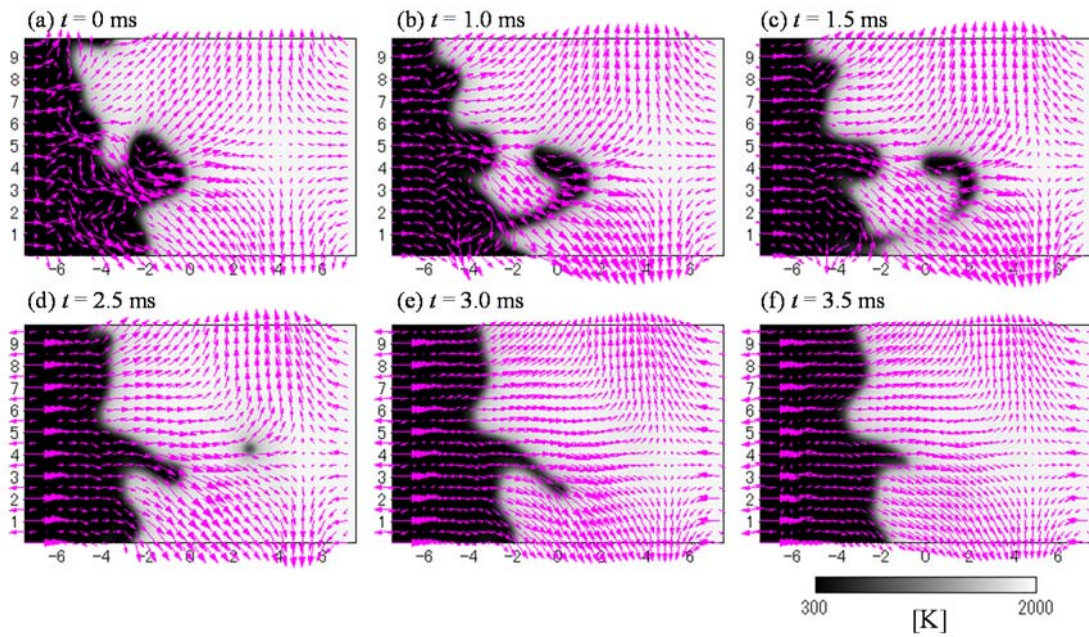


Fig. 8.11 Time history of temperature with velocity vector (Case B)

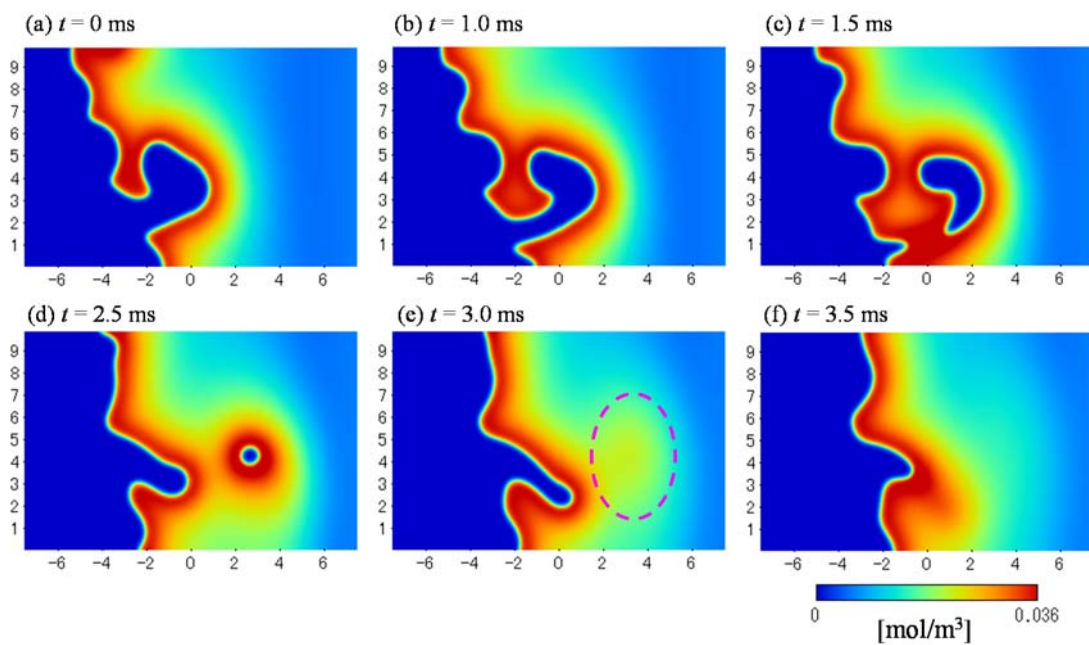


Fig. 8.12 Time history of OH mole concentration (Case B)

(3) 超希薄燃焼（予混合気-既燃ガス対向流火炎：Case C）

予混合気の当量比を可燃限界付近の 0.55 における燃焼特性を検討する。まず、予混合気に対向させる気体が既燃ガスの場合は平均流入速度 $u_m = 1.0 \text{ m/s}$ においても、火炎が消炎せずに定在する。ただし、可燃限界付近であるので、変動のない定常火炎において式(8.2)で求められる燃焼速度は 0.062 m/s となり、メタン-空気平面一次元予混合火炎における最大燃焼速度である 0.34 m/s よりも非常に小さな値を示す。それでも、平均流速 1.0 m/s の対向流場で消炎せずに存在し続けるのは、高温の既燃ガスによる保炎効果が大きく影響しているからである。実際、対向させる気体を空気にしたところ、火炎を保持するためには対向流の平均流速が 0.15 m/s 以下である必要がある。

このような超希薄火炎である Case C において、8.4.1(2)項とは逆に、未燃ガス中に既燃ガスの島が発生する現象が表れる。このことを明示するために熱発生速度および OH モル濃度の二次元分布を図 8.13 および図 8.14 に示す。熱発生速度分布には速度ベクトルも併せて示す。既燃ガスの島は、図 8.14 の白丸で囲まれた部分において 2 つの火炎面が接近し消炎するという対向流予混合双子火炎と同様の消炎機構により火炎面が消失し、図 8.13(c)において孤立した既燃ガスの島が形成されている。また、未燃ガスの島とは異なり、周囲を未燃ガスに囲まれているため、島が小さくならず存在し続け、最終的には近くの火炎本体と融合していることがわかる。このような未燃ガスの島については、Nakamura ら [7]の実験結果でも観測されている。

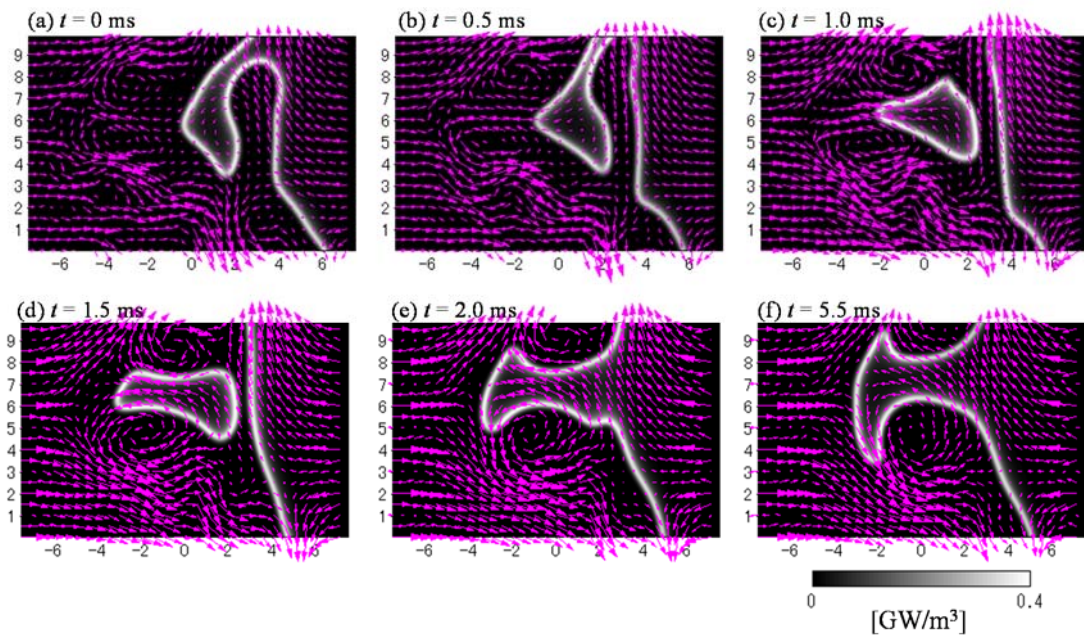


Fig. 8.13 Time history of heat release rate with velocity vector (Case C)

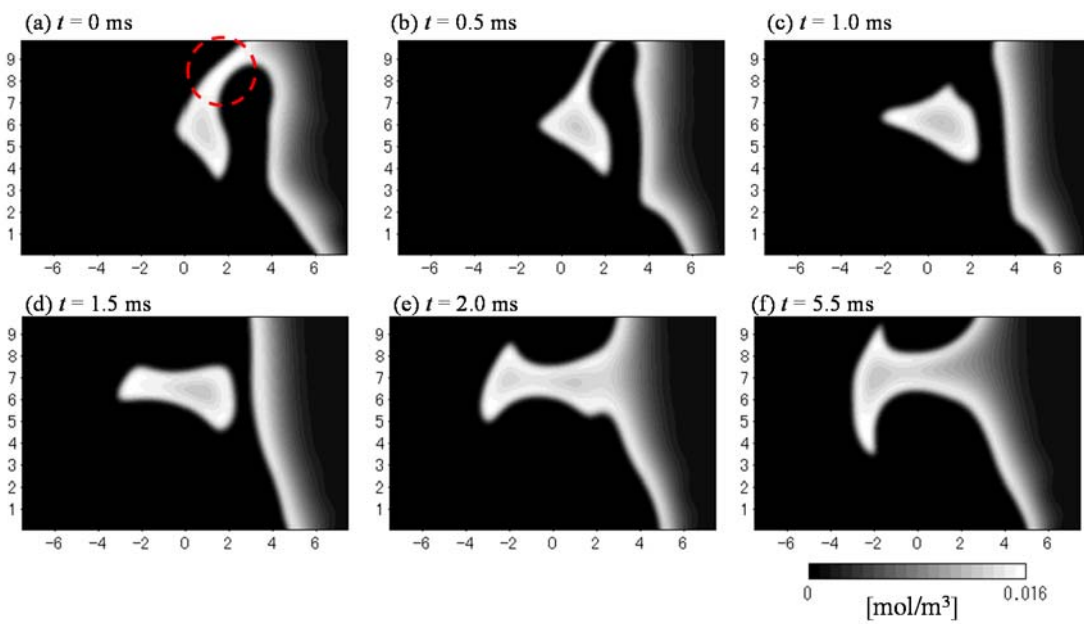


Fig. 8.14 Time history of OH mole concentration (Case C)

8.4.2 非定常場における燃焼速度と火炎面積の関係

これまでに示したように火炎面形状は時間とともに変化する. この火炎面の非定常性によって, 場全体の燃焼の強さを表す乱流燃焼速度も時間とともに変化し, 火炎面積(本研究では火炎長さ)に大きく影響を受ける. 本研究では, 乱流燃焼速度と火炎面積の相関について, 与えた変動が大きい場合について詳しく検討を行う. また, 式(8.3)で定義される平均燃焼速度についても, 火炎面積や乱流燃焼速度と比較し検討を行う.

対向させる気体の種類以外の条件が同じである Case A と Case B において, 火炎長さ L_f と単位火炎長さ当たりの平均燃焼速度 S_a の計算開始から 50 ms までの時間変化について図 8.15 と図 8.16 にそれぞれ示す. これらの図では, 初期時刻には対向流の流入速度を平均流速 u_m で一定とした場合の定常火炎を用い, それ以降の流入速度変動による非定常変化を示す. なお, 縦軸の S_a および L_f は, 予混合気に対向させる空気または既燃ガスそれぞれの場合における変動を与えない定常火炎での値 $S_{a,A}^0, L_{f,A}^0, S_{a,B}^0, L_{f,B}^0$ で無次元化している. Case A および B のどちらの場合も, L_f は初期値の 2 倍以上まで変化しているが, S_a は初期値の約 0.9~1.3 倍程度しか変化していない. このように, 流れ場の変動により, 火炎面には火炎伸長や変形の効果により凹凸が生じ, 火炎長さ (火炎面積) は大きく変化する. これに対し, ある瞬間の局所燃焼速度の計算領域全体での平均値である単位火炎長さ当たりの平均燃焼速度 S_a の値はあまり変化しない. しかしながら, 局所的な燃焼速度は火炎伸長や火炎面曲率により大きく変化していると考えられる [8]. つまり, 局所的な燃焼速度は局所の火炎面の形状や火炎伸長に応じて大小様々な値に変化しているが, 計算領域全体で平均するとそれほど大きな変化にはならないといえる. このように局所の燃焼速度, したがって局所の火炎構造には火炎伸長や火炎面曲率の影響が表れると考えられるが, 乱流場全体としてはそれらの影響はあまり表れない.

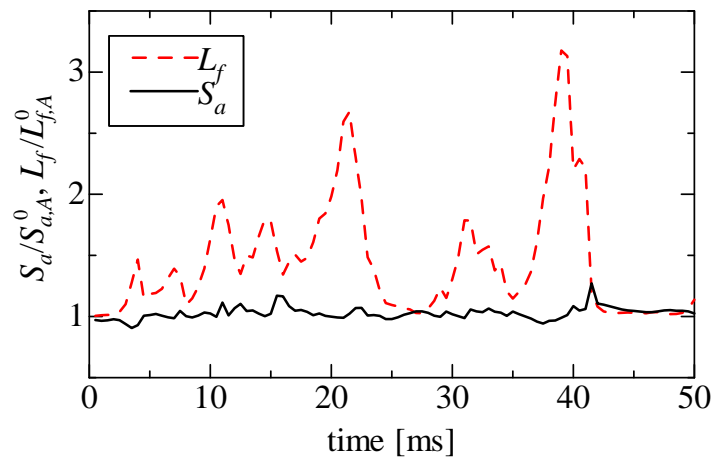


Fig. 8.15 Time evolution of S_a and L_f (Case A)

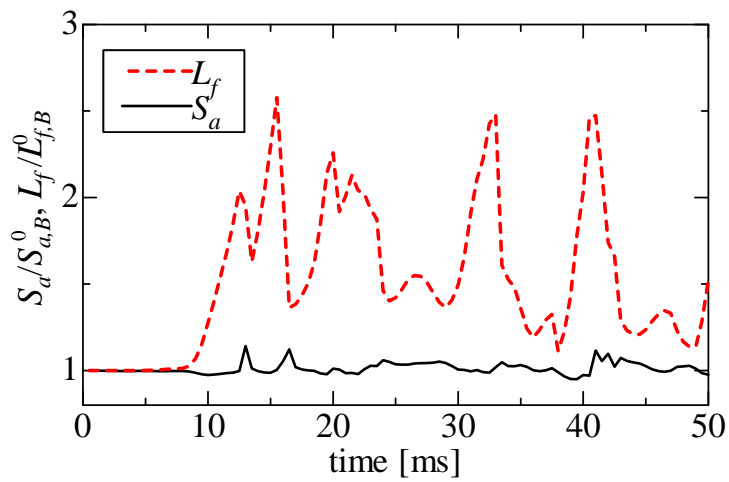


Fig. 8.16 Time evolution of S_a and L_f (Case B)

Case A と Case B において、各瞬間の乱流燃焼速度 S_T と L_f の関係について図 8.17 に示す。ただし、 S_a および L_f は図 8.15 および図 8.16 と同様に比で示している。図より、予混合気と対向させている流体がどちらの場合にも、 S_T と L_f の間には非常によい相関があり、乱流燃焼速度の大きさは火炎長さすなわち火炎面積によってほぼ決まるといえる。さらに、予混合気に対向させる気体が、常温の空気か高温の既燃ガスかによる差はあまりないといえる。なお、 S_T と L_f の関係が直線上からわずかにばらつく原因としては、局所的な消炎の効果、熱発生速度が 0.8 GW/m^3 以上の場合を火炎面として火炎長さを算出したことによる影響、さらに、局所の燃焼速度の平均値である S_a 自体の変化が挙げられる。

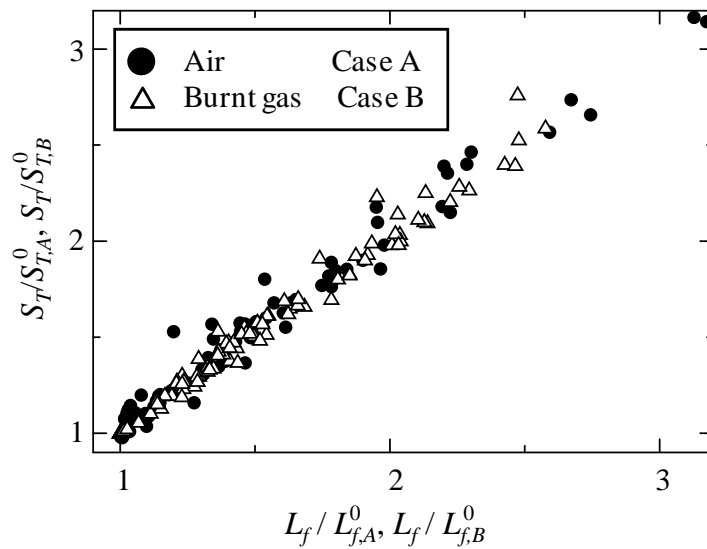


Fig. 8.17 Relation between S_T and L_f (Case A and Case B)

8.5 まとめ

速度場はかなり強い変動を与えた二次元非定常変動場での対向流予混合火炎に対して、素反応機構による数値解析を行い、火炎構造の変化や火炎長さ（火炎面積）と燃焼速度の関係について以下のような知見を得た。

- (1) 非定常変動場において、火炎面の形状は時間とともに様々な形に変化する。まず、予混合気と空気を対向させた場合、局所的な消炎が発生した。消炎の原因としては、火炎面が常温の空気流側に凸となることによる火炎の冷却の効果が考えられる。
- (2) 高温の既燃ガスと対向させた場合、未燃ガスの島が発生した。また、可燃限界に近い当量比 0.55 の場合、既燃ガスの島が発生した。これらは実験において観測されている現象を再現している。
- (3) 非定常変動場においても、 OH と CH_2O のモル濃度の積と熱発生速度の分布は非常によい一致を示す。
- (4) 乱流燃焼速度と火炎長さは、局所的な消炎が発生するか否かに関わらず強い相関を持ち、ほぼ比例関係にある。なお、比例関係からわずかにずれる場合もあるが、この原因としては局所的な消炎が発生することや、火炎面の曲率による局所的な燃焼速度の増大などが挙げられる。また、単位火炎長さ当たりの平均燃焼速度は火炎長さとは比べ変化が小さい。

参考文献

- [1] D. Poinso, D. Veynante and S. Candel, "Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams," *Journal of Fluid Mechanics*, vol. 228, pp. 561-606, 1991.
- [2] H. N. Najm, P. H. Paul, J. Mueller and S. Wyckoff, "On the adequacy of certain experimental observables as measurements of flame burning rate," *Combustion and Flame*, Vol. 113, pp. 312-332, 1998.
- [3] P. H. Paul and H. N. Najm, "Planar laser-induced fluorescence imaging of flame heat release rate," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 27, pp. 43-50, 1998.
- [4] B. O. Ayoola, R. Balachandran, J. H. Frank, E. Mastorakos and C. F. Kaminski, "Spatially resolved heat release rate measurements in turbulent premixed flames," *Combustion and Flames*, vol. 144, 2006.

- [5] K. Yamamoto, S. Ishii and M. Ohnishi, "Local flame structure and turbulent burning velocity by joint PLIF imaging," *Proceedings of the Combustion institute*, vol. 33, pp. 1285-1292, 2011.
- [6] A. Johchi, Y. Naka, M. Shimura, M. Tanahashi and T. Miyauchi, "Investigation on rapid consumption of fine scale unburned mixture islands in turbulent flame via 10 kHz simultaneous CH-OH PLIF and SPIV," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 35, pp. 3663-3671, 2015.
- [7] Y. Nakamura, S. Manome and H. Yamashita, "Imaging of reactive zone in turbulent premixed flames by acetone-OH simultaneous PLIF," *Journal of Visualization*, vol. 11, pp. 71-78, 2008.
- [8] M. Tanahashi, Y. Nada, Y. Ito and M. Miyauchi, "Local flame structure in the well-stirred reactor regime," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, pp. 2041-2049, 2002.

第9章

結論

本研究では、燃料希薄メタン-空気予混合火炎に着目し、数値解析により、その火炎構造に与える種々の物理量の影響について検討することを第一の目的とし、その結果として火炎構造を支配するパラメータを解明することで、Laminar flamelet model に基づく組み合わせ手法における再結合パラメータとして最も適切な物理量を見出すことを第二の目的とした。

まず、第4章において基礎的な流れ場である火炎伸長のない平面一次元予混合火炎を用い、混合気の有効熱伝導率や各化学種の有効拡散係数と火炎構造の関係について検討を行った。層流燃焼速度は、熱伝導率が大きくなると大きくなり、拡散係数が大きくなると小さくなる。また、Lewis 数一定の条件下で熱と物質の拡散係数を大きくすると、層流燃焼速度は大きくなるという結果が得られ、その依存性は定量的に Law らによって改良された熱理論から推測される結果とほぼ一致することが数値解析により確認できた。さらに、これらの輸送係数を変化させた場合における火炎構造の変化については、断熱火炎温度は変化しないが、火炎帯における温度勾配は変化すること、また、熱発生速度の積算値は層流燃焼速度の変化とよく対応するが、その最大値の傾向は異なることがわかった。

次に、メタン-空気予混合火炎において、火炎伸長率の変化に対する火炎構造の応答に与える Lewis 数効果の影響を明らかにするために、火炎伸長率を任意に設定することが可能な場である平面对向流予混合双子火炎について、素反応機構を用いた数値解析を行った。これにより、各化学種の Lewis 数を任意に変化させた場合について、Lewis 数効果の影響を明らかにした。この結果、燃料希薄メタン-空気予混合火炎における不足物質の Lewis 数は1よりもわずかに小さいだけであるため、Lewis 数効果だけではなく、燃え残りの効果などの影響を受けることにより火炎伸長率の大きさ、また、熱発生速度の最大値や積算値といった指標ごとにその挙動は異なることがわかった。その火炎構造の火炎伸長率に対する応答は当量比によって異なることもわかった。

第5章では、燃料と酸素の質量生成速度および熱発生速度の積算値に基づいた複数の手法で“燃焼速度”の定義を試みた。まず、火炎伸長を受けない平面一次元予混合火炎において、本研究で定義された複数の“燃焼速度”のいくつかは、燃料希薄および過濃条件、また総括反応および素反応機構によって、層流燃焼速度と一致することがわかった。

また、火炎伸長率との関係について検討することにより、熱発生速度の最大値は、燃料の質量生成速度に基づく”燃焼速度”と正の相関を持つことがわかった。一方、熱発生速度の積算値は、酸素の質量生成速度および熱発生速度の積算値に基づく”燃焼速度”と正の相関を持つことがわかった。

第6章において、素反応機構を用いた定常および非定常対向流予混合火炎の数値解析を行い、非定常挙動および火炎構造を支配するパラメータについて明らかにし、Laminar flamelet model に基づく組み合わせ手法における再結合パラメータとして適切であると考えられる物理量として酸素の質量分率に基づく反応進行度およびその勾配の火炎面における値が最も適切であることがわかった。また、空間的および時間的に変動する非定常二次元予混合火炎においても、酸素の質量分率に基づく反応進行度およびその勾配の火炎面における値を用いることにより火炎構造の整理が可能であることを明らかにした。

第7章において、火炎面曲率を持つ予混合火炎の数値シミュレーションを行い、初期条件である平面火炎に対して、流入境界の一部に局所的に大きな流速を与え、その際の定常的な曲率を持つまでの過渡応答において現れる局所消炎に対して、その熱発生速度の挙動を明らかにした。

第8章では、第6章までの基本的な流れ場の知見を基に、速度場にかなり強い変動を空間および時間的に与えた二次元予混合火炎の火炎構造について検討を行い、条件によって現れる局所消炎や、未燃および既燃ガスの島について、その火炎構造を明らかにした。さらに、酸素の質量生成速度の積分値と火炎長さ(火炎面積)から算出した乱流燃焼速度と火炎長さ(火炎面積)は、局所的な消炎が発生するか否かに関わらず強い相関を持ち、ほぼ比例関係にあることがわかった。また、単位火炎長さ当たりの平均燃焼速度は火炎長さとは比べ変化が小さいことがわかった。

また、レーザ計測により比較的容易に計測可能な OH ラジカルと CH_2O の濃度の積が熱発生速度分布と対応するという従来知見について、局所消炎を伴う非定常火炎においても濃度の積と熱発生速度の分布はよい一致を示すことを示した。

最後に、本研究の目的に対して得られた知見は以下のようにまとめることができる。

まず、第一の目的である燃料希薄メタン-空気予混合火炎の火炎構造に与える種々の物理量の影響については、混合気の有効熱伝導率と各化学種の有効拡散係数およびそれらの比である Lewis 数に着目して検討した。その結果、火炎伸長のない平面一次元予混合火炎では輸送係数の大小により、反応帯における反応物の濃度や温度勾配が変化することにより層流燃焼速度や燃焼強度が変化する。一方、火炎伸長を受ける火炎の場合、燃料希薄メタン-空気予混合火炎では Lewis 数が 1 に近い場合、Lewis 数の効果は小さ

く、火炎伸長の影響は燃え残りの効果など Lewis 数効果以外のメカニズムが支配的になることがわかった。

次に、第二の目的である燃料希薄メタン-空気予混合火炎の火炎構造を支配するパラメータについては、定常および非定常対向流予混合火炎に着目して検討した。その結果、酸素の質量分率に基づく反応進行度およびその勾配の火炎面位置における値が最も適切であり、組み合わせ手法における再結合パラメータとして用いることができると考えられることがわかった。また、火炎面曲率を有する火炎や局所消炎が生じるような火炎についても検討し、本研究で提案した再結合パラメータの適用の可能性があることがわかった。

謝辞

本研究は、著者が名古屋大学大学院工学研究科機械理工学専攻環境・エネルギー工学講座伝熱・燃焼工学研究グループにおいて行った研究をまとめたものである。

本論文を結ぶにあたり、学生時代より長年にわたるご指導、ご鞭撻いただきました山下博史教授には謹んで感謝の意を表します。燃焼分野のみならず、様々な分野から考察のヒントを導く研究スタイルには多くのことを学ばせていただきました。

本論文をまとめるにあたり、ご指導、ご助言を賜りました名古屋大学大学院山本和弘准教授に深く感謝申し上げます。同研究グループにおける議論において日頃から貴重なご意見をいただくことができました。

また、本論文をまとめるにあたり、貴重なご意見、ご助言をいただきました名古屋大学大学院成瀬一郎教授並びに吉川典彦教授には厚く御礼申し上げます。

計算機およびサーバの管理および運営をお願い、またご助言いただきました早川正人技術職員に感謝申し上げます。同研究グループにおいて、ともに研究を行い、議論した卒業生および大学院生諸氏に感謝いたします。特に、加藤敏宏君、野々村一樹君、宮田智生君には特に本論文の研究において協力いただきました。

最後に、研究を遂行するにあたりご助言いただきました多くの方々に御礼申し上げます。