

## メタンと空気の非予混合火炎への剪断速度の影響

同志社大学エネルギー変換研究センター 加賀義人 (Yoshito Kaga)

*Energy Conversion Center, Doshisha Univ.*

レンセラー工科大学 横山直人 (Naoto Yokoyama)

*Dept. Math. Sci., Rensselaer Polytech. Inst.*

同志社大学工学部 水島二郎 (Jiro Mizushima)

*Dept. Mech. Eng., Doshisha Univ.*

### 1 はじめに

燃焼の形態を大きく2つに分類すると、燃料と酸化剤があらかじめ混ぜ合わされた混合気が燃焼する予混合燃焼と燃料と酸化剤が別々に供給されて拡散・混合をしながら燃焼する非予混合燃焼(拡散燃焼)とに大別される。予混合燃焼では、メタンなどの燃料と空気などの酸化剤が適度な混合割合(可燃範囲)で混ぜ合わされた混合気が燃焼するので、その火炎は伝播する性質がある。この伝播速度は燃焼速度とも呼ばれ、その最高燃焼速度は燃料の種類や雰囲気条件にも依存するが、数十~数百 m/s にも達する。一方、非予混合燃焼では燃料と酸化剤が別々に供給され、それらが拡散・混合しながら燃焼し、静止した安定な火炎を得ることができる。この火炎は拡散火炎と呼ばれ、安定した熱や光を得ることができる重要な燃焼形態の1つである。しかし、非予混合燃焼では、燃焼反応が燃料と酸化剤の化学反応だけでなく、それらの流れや拡散・混合などに影響されて起こるため、さまざまな現象が複雑に絡み合っており、その詳細を理解することは非常に困難であり、未解決の問題が多く残されている。

このように、非予混合燃焼は複雑な現象であるため、数値的な研究が不可欠であるが、正確に現象を調べようとすると、燃焼を数多くの素反応の組み合わせとして記述しなければならず、各素反応の反応率の評価や各化学種の流動・拡散の計算が必要となり、数値的にも困難を生じる。また、流体運動の時間スケールと化学反応の時間スケールが大きく異なり(たとえば $10^7$ 程度)、このことも燃焼の数値計算を困難にしている。そのため、これまでに数多くの燃焼モデルが提案されてきた。それらの代表的なものには、火炎面厚さが無限小であると仮定して総括一段反応機構を用いる非定常火炎面モデル[1]や、乱流場の瞬間的の局所火炎構造を定常層流火炎によって模擬する層流火炎片モデル(フレームレットモデル)[2]などが提案されてきた。しかし、これらのモデルでは、乱流混合や化学反応領域の空間的な広がりなどを正確に捉えることができず、詳細な燃焼構造を知ることはできない。そのため、これらの要素を十分に取入れた数値計算が必要である。

非予混合燃焼における流れ場の渦や渦輪の影響を評価する試みは最近になって行われるようになってきた。たとえば、木下ら(2004)[3]は窒素で希釈した水素と空気の拡散燃焼について簡略化学反応機構を用いた数値シミュレーションを行い、流れ場中の渦構造が火炎面を伸張することにより、熱発生率に大きな影響を及ぼすことを明らかにした。また、Safta *et al.* (2002)[4]は2次元拡散燃焼中の火炎面を渦輪が横切る場合について数値計算を行い、渦輪が火炎面を巻き込むことにより火炎面が伸張し、それによって熱発生率の増加や消炎が生じることを示した。流れ場の渦運動が拡散燃焼場に与える影響を調べた実験はこれらの研究よりも早くから行われており、たとえば、Everest *et al.* (1995)[5]は、平面レイリー散乱法を用いてメタンと空気の乱流拡散燃焼場における火炎の2次元温度場を測定し、流体の渦運動により火炎面の形状が複雑化する過程を明らかにした。

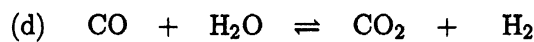
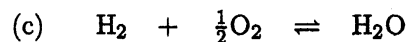
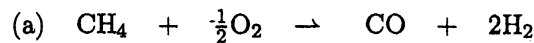
この報告では、流れ場が燃焼に与える影響を調べるために、モデルとして単純な剪断速度場中に火炎面があると仮定し、燃焼場の時間発展数値シミュレーションを行う。取り扱うのはメタン

と空気の非予混合燃焼 (拡散火炎) である。化学反応については6種4段階簡略化反応機構 [6] を用い、流れ場に関して詳細な数値計算を行って、切断速度が燃焼に与える影響と化学反応による流れ場への影響を評価する。特に注目するのは、火炎面への燃料と酸化剤の供給の機構と燃焼生成物が火炎面から排出される機構である。なぜなら、火炎面では高温・高圧場が形成されており、一般に物質の流れは高圧領域から低圧領域へと生じるため、燃料と酸化剤がいかに火炎面に到達できるのか容易には想像できないからである。本報告ではこの点に焦点を絞りそのメカニズムの解明の糸口を捜すことにする。

## 2 数値計算法

### 2.1 化学反応機構

ここでは燃焼モデルとして、メタンと空気の非予混合燃焼 (拡散火炎) を考える。空気は本来多くの物質から構成されているが、その主成分である酸素 ( $O_2$ ) と窒素 ( $N_2$ ) で構成されるものと仮定する。化学反応機構についても詳細な素過程をすべて考慮すると49種の化学物質に関わる279組の素反応を取り扱うことになり、非常に膨大な計算が必要になる。そのため、本研究では主要な反応式の組で反応を記述する次の6種4段階簡略化学反応機構 [6] を用いることにする。



反応式 (a) はメタンの燃焼反応であり、水素と一酸化炭素を生成する。反応式 (b) ではメタンと水分子が反応して、水素と一酸化炭素になる。反応式 (c) は水素の燃焼反応であり、高熱発生率の主要因となる反応で、順反応の結果水分子を生成する。反応式 (d) は一酸化炭素と水分子が反応して、水素と二酸化炭素になる可逆反応である。この6種4段階化学反応では、窒素は反応しないと仮定している。反応式 (c) および (d) の逆反応は無視する。反応式 (a)~(d) の反応率は、次のアレニウス (Arrhenius) 型の式で十分正確に近似できることがわかっている。

$$\Omega_a = A_a \exp(-E_a/R^0T)[CH_4]^{1/2}[O_2]^{5/4}, \quad (1)$$

$$\Omega_b = A_b \exp(-E_b/R^0T)[CH_4][H_2O], \quad (2)$$

$$\Omega_c = \begin{cases} A_{c,wr} \exp(-E_{c,wr}/R^0T)[H_2]^{1/2}[O_2]^{9/4}[H_2O]^{-1}T^{-1}, & ([H_2O] > 10^{-6}\text{kmol/m}^3), \\ A_{c,wl} \exp(-E_{c,wl}/R^0T)[H_2]^{1/4}[O_2]^{3/2}T^{-1}, & ([H_2O] \leq 10^{-6}\text{kmol/m}^3), \end{cases} \quad (3)$$

$$\Omega_d = A_d \exp(-E_d/R^0T)[CO][H_2O]. \quad (4)$$

ただし、記号  $[A]$  は化学種  $A$  のモル濃度を表し、 $R^0 = 8314\text{J/kmol}\cdot\text{K}$  は一般気体定数を表す。 $A_j$  および  $E_j$  ( $j = a, b, c, d$ ) は、それぞれ反応式  $j$  の頻度因子および活性化エネルギーであり、表1の値をとる。

ここで取り扱う6種の化学種 ( $CH_4$ ,  $O_2$ ,  $H_2$ ,  $H_2O$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ) と窒素 ( $N_2$ ) のそれぞれを代表して記号  $i$  で表現し、化学種  $i$  の分子量を  $W_i$ 、ルイス数 (Lewis number) を  $Le_i$  と表し、表2の値を用いる。ただし、ルイス数は物質拡散率に対する温度伝導率の割合を表す無次元数である。化学種  $i$  の反応速度  $\omega_i$  は  $\omega_i = W_i \sum_j \nu_{i,j} \Omega_j$  と定義される。ここで、 $\nu_{i,j}$  は反応式  $j$  における化学

表 1: 反応頻度因子と活性化エネルギー。

反応式	$A_j$	$E_j(\text{J/kmol})$
(a)	$4.4 \times 10^{11}$	$1.26 \times 10^8$
(b)	$3.0 \times 10^8$	$1.26 \times 10^8$
(c) Water Rich	$2.5 \times 10^{16}$	$1.67 \times 10^8$
Water Lean	$6.8 \times 10^{15}$	$1.67 \times 10^8$
(d)	$2.75 \times 10^9$	$8.38 \times 10^8$

種  $i$  の化学量論係数である。化学種  $i$  の定圧比熱  $c_{p,i}$  とエンタルピー  $h_i$  は、温度  $T$  の多項式で与えられ、その係数は CHEMKIN<sup>1</sup> のものを用いた。このとき、混合物の平均定圧比熱と平均エンタルピーはそれぞれ  $\bar{c}_p = \sum_i Y_i c_{p,i}$ 、 $\bar{h} = \sum_i Y_i h_i$  と表せる。

表 2: 分子量とルイス数。

化学種	CH <sub>4</sub>	O <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	CO	CO <sub>2</sub>	N <sub>2</sub>
$W_i$	16	32	2	18	28	44	28
$Le_i$	0.97	1.11	0.30	0.83	1.10	1.39	1.00

## 2.2 支配方程式

流れと燃焼を支配する方程式は質量保存・運動量保存・エネルギー保存・化学種保存の方程式である。ただし、重力などの外力を無視し、同様にソレ (Soret) 効果・デュフォ (Dufour) 効果・圧力勾配拡散および放射熱流速などの影響は無視する。これらの仮定のもとで、流体の密度  $\rho$ ・速度  $\mathbf{u}$ ・温度  $T$  および化学種  $i$  の質量分率  $Y_i$  の時間発展を支配する次の方程式が得られる [7]。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial (\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) - \frac{1}{c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = \frac{1}{c_p} Q, \quad (7)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_i) - \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) = \omega_i. \quad (8)$$

ここで、 $\boldsymbol{\tau} = \mu [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - (2/3)(\nabla \cdot \mathbf{u})I]$  は応力テンソルであり、 $\mu$  は粘性係数、 $I$  と上付き添字「 $T$ 」はそれぞれ単位テンソルとテンソルの転置を表す。圧力  $p$  は理想気体の状態方程式  $p = \rho R^0 T \sum_i Y_i / W_i$  に従うものとする。  $\lambda$  は熱伝導率、 $Q = -\sum_i h_i \omega_i$  は熱発生率、 $D_i$  は混合物質中での化学種  $i$  の分子拡散係数を示している。また、これらの輸送係数の評価には、Smooke *et al.* [8] による簡略化輸送係数モデル  $\lambda / c_p = A(T/T_0)^{0.7}$ 、 $\rho D_i = Le_i^{-1} \lambda / c_p$ 、 $\mu = Pr \lambda / c_p$  を用いる。ただし、基準温度を  $T_0 = 298.15 \text{K}$  とし、係数  $A$  を  $A = 2.58 \times 10^{-5} \text{kg/m} \cdot \text{sec}$  にとり、プラントル数として  $Pr = 0.75$  を用いる。

<sup>1</sup>CHEMKIN は Sandia National Laboratories で開発されたマイクロエレクトロニクス・燃焼・化学反応工業のためのソフトウェアであり、世界中でよく使われている。

### 2.3 計算方法と初期条件

一般に非予混合燃焼(拡散燃焼)においては, 図1(a)のような火炎面が形成されるとき, 火炎面を境に燃料側と酸化剤側に分けられる. 火炎形状は速度場や化学反応の不均一性によって変形し, 火炎構造が複雑に変化する. 特に, 速度場は火炎面の構造に大きな影響を与えると考えられる. 火炎面に対する速度せん断の影響を調べるために, 図1(a)中の矩形枠で示すような火炎面近傍の微小領域を切り出し, この領域をモデル化した単純な燃焼流れ場を考える. そのモデルが図1(b)である. この図で, 灰色に塗られた下半分の領域にはメタンが100%の濃度で存在し, 上半分は空気で満たされている. 初期にはそれらの境界が火炎面であり, ある程度発達した火炎面に図のように一様な剪断流が生じたときの火炎面を含む燃焼場の時間発展を調べる.

このような目的で燃焼場を調べるために, 数値シミュレーションは2つの段階に分けて実行をする. まず, ある程度発達した1次元的な燃焼場(ある1次元方向と垂直な平面内では一様な燃焼場)を得るために, ある平面を境にその両側に大気圧  $p_0 = 1\text{atm}$  ( $1.013 \times 10^5 \text{ Pa}$ ) で常温  $T_0$  の静止状態にある空気 ( $Y_{\text{O}_2,0} = 0.232, Y_{\text{N}_2,0} = 0.768$ ) とメタン ( $Y_{\text{CH}_4,0} = 1$ ) をそれぞれ充満し, 空気とメタンの境界付近を局所的に  $T_1 = 2000\text{K}$  に設定してメタンを着火する. この初期条件の下で発展方程式(5)-(8)を数値的に解き,  $5.0 \times 10^{-3}\text{sec}$  だけ時間が経過して得られる1次元的な燃焼場を第2段階の数値シミュレーションの初期条件とする. このとき, 先の数値シミュレーションで得られるほぼ1次元的な燃焼場で熱発生率が最大となる位置を火炎面として, 火炎面近傍の微小矩形領域を計算領域とする. すなわち, 図1(b)のように,  $x$  軸を火炎面上にとり, その方向の長さを  $L_x = 10^{-2}\text{m}$  とし, 火炎法線方向を  $y$  軸をとって, その方向に長さ  $L_y = 2 \times 10^{-2}\text{m}$  をとる. 流れ場は  $x$  方向に周期的であるとするが,  $y$  方向には無限に広がっているとする. このようにして得られる2次元の周期矩形燃焼場に図1(b)で矢印で描かれる一様せん断流を加えた流れ場を初期条件として第2段階の数値シミュレーションを行う. 初期条件として与える速度剪断の向きは, 図中の角  $\alpha$  を  $\alpha = 0^\circ$  から  $22.5^\circ$  おきに  $180^\circ$  までの8通りの場合について数値シミュレーションを行う. ただし,  $x$  方向に周期性を仮定しているため, 速度場がなめらかに周期条件を満たすよう, 次の速度分布を与える:

$$u_{x,s} = -F_s(x,y)A_s \sin \alpha (x \cos(-\alpha) - y \sin(-\alpha)), \quad (9)$$

$$u_{y,s} = +F_s(x,y)A_s \sin \alpha (x \sin(-\alpha) + y \cos(-\alpha)). \quad (10)$$

この式で,  $A_s$  は速度剪断一の強さを表し, ここでは  $A_s = 4000$  を用いた.  $F_s(x,y)$  は  $x$  方向の周期境界で不連続とならないようにするためのフィルター関数で, 原点からの距離を  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  として

$$F_s(x,y) = \begin{cases} 1 & (2r/L_x \leq 0.5) \\ \cos^2 \left( \pi \frac{2r/L_x - 0.5}{0.8 - 0.5} \right) & (0.5 < 2r/L_x < 0.8) \\ 0 & (2r/L_x \geq 0.80) \end{cases} \quad (11)$$

で与える. このように一部の領域のみで一様剪断速度を与えているため, 数値計算の結果得られる燃焼場のうち主として速度場が一様剪断流であるとみなせる領域内について考察を行う.

時間発展計算では, 空間微分を6次精度中心差分で近似し, 時間積分は4次精度ルンゲ・クッタ法(Runge-Kutta method)を用いた. ただし,  $x$  および  $y$  方向の格子幅は共に  $2 \times 10^{-5}\text{m}$  とし, 時間刻み幅は流れ場の最大音速がクーラン・フリードリックス・レウィー条件(CFL condition)を満たすように決定した ( $\Delta t \approx 2 \times 10^{-8}\text{sec}$ ). 音速  $c$  は  $c = \sqrt{\kappa p / \rho}$  によって求めた. ただし,  $\kappa = \bar{c}_p / (\bar{c}_p - R)$  は気体の比熱比,  $R = R^0 \sum_i Y_i / W_i$  は平均気体定数である. 前述のように,  $x$  方向

の境界には周期境界条件を課すが,  $y$  方向の境界にはナビエ・ストークス特性境界条件 (NSCBC, Navier-Stokes characteristic boundary conditions) を適用する。

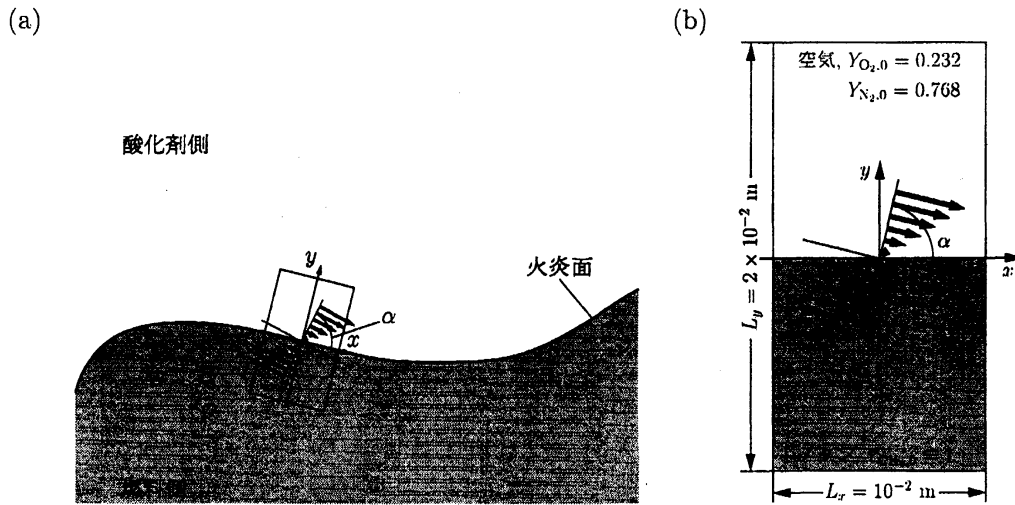


図 1: 計算領域. (a) 実際の流れ場と計算領域との関係のスケッチ, (b) 計算領域と初期条件.

### 3 計算結果

8通りの速度剪断方向について数値シミュレーションを行い, 流れ場と燃焼場について調べた. すべての計算結果を, 混合分率  $Z$  [9]:

$$Z = \frac{2Y_{\text{CH}_4}/W_{\text{CH}_4} + (Y_{\text{O}_2,0} - Y_{\text{O}_2})/W_{\text{O}_2} + (Y_{\text{CO}}/W_{\text{CO}} + Y_{\text{H}_2}/W_{\text{H}_2})/2}{2Y_{\text{CH}_4,0}/W_{\text{CH}_4} + Y_{\text{O}_2,0}/W_{\text{O}_2}} \quad (12)$$

で整理すると, 流れ・燃焼場における質量分率・温度・熱発生率・反応率のいずれの分布も速度剪断方向によらずほぼ同じ構造になることが確かめられた (図 2). ここで, 混合分率  $Z$  は空気だけの領域で 0 であり, メタンだけの領域では 1 の値をとる. 総括一段反応では, 火炎面はメタンと酸素が 1 対 2 のモル比で反応している場所で定義され, そこでの混合分率は,  $Z_{\text{st}} = (Y_{\text{O}_2,0}/W_{\text{O}_2}) / (2Y_{\text{CH}_4,0}/W_{\text{CH}_4} + Y_{\text{O}_2,0}/W_{\text{O}_2})$  となり, 本研究では  $Z_{\text{st}} \approx 0.055$  である.

まず, 今回得られた数値シミュレーション結果を, 非常に単純な火炎面モデルの解であるパーク・シューマン解 (Burke-Schumann's solution) と比較を行いながら検討する. パーク・シューマン解は反応速度が無限大の総括一段反応を仮定し, ルイス数  $Le_i$  をすべて 1 とおいて得られる単純化したモデルの解である. 図 2(a) はメタンと酸素の質量分率と温度の分布を混合分率  $Z$  で整理した図であり, 左側縦座標軸にメタンと酸素の質量分率 ( $Y_{\text{CH}_4}$ ,  $Y_{\text{O}_2}$ ) をとり, 右側に温度 ( $T - T_0$ ) をとっている. この図より, シミュレーションで得られた質量分率と温度の分布はパーク・シューマン解と概ね一致しており, 単純なモデルを仮定しているにもかかわらずパーク・シューマン解がかなり良い結果を与えることが確認できる. ただ 1 点大きく異なるのは, シミュレーション結果の温度分布が混合分率  $Z > Z_{\text{st}}$  でパーク・シューマン解よりも最大 2 割程度低くなっている点である. 温度が低く見積もられたのはおよそ  $0.1 \lesssim Z \lesssim 0.7$  の範囲であり, 火炎面を境にメタンが多い領域である. この領域でパーク・シューマン解より温度が低くなっている原因は, 本研究では 4 段階の化学反応機構を用いてより詳細な反応機構を取り扱っているために, 反応領域が広が

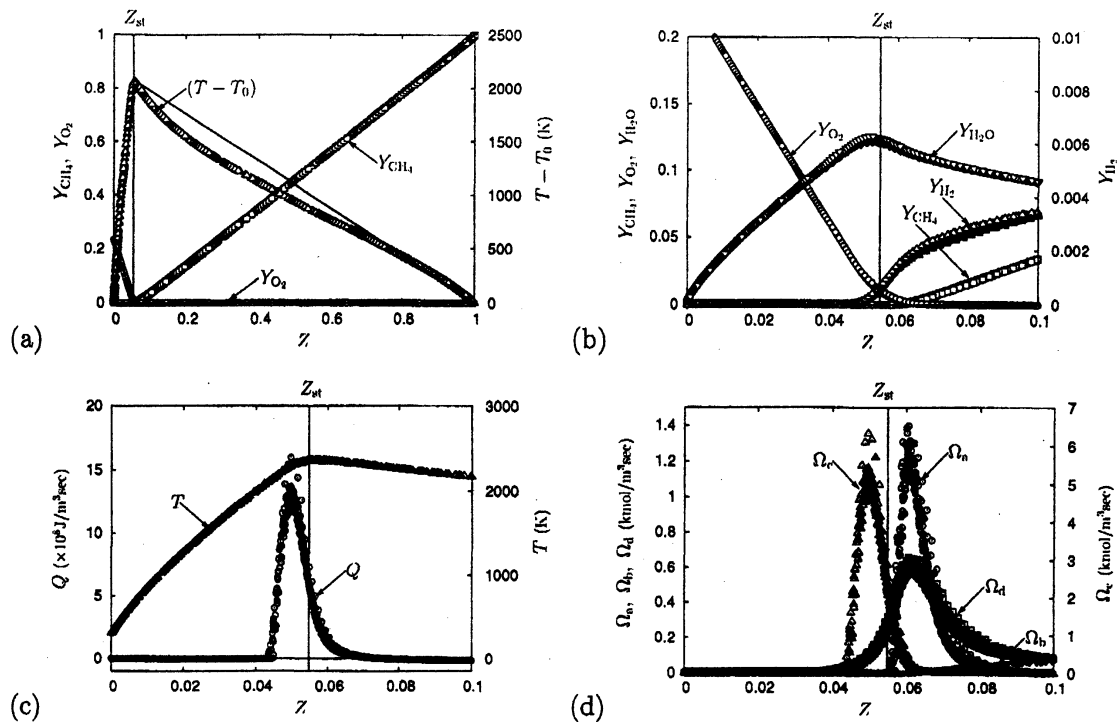


図 2: 流れ場の構造. (a) 質量分率と温度分布 (実線はパーク・シューマン解), (b) 質量分率の分布, (c) 熱発生率と温度の分布, (d) 反応率の分布.

り,  $Z > Z_{\text{st}}$  の広い領域で生じている化学反応のためである. すなわち, 熱を吸収する反応である  $\text{H}_2\text{O}$  の消費反応 (b) と (d) のために, この領域では温度の低下が生じるのである. この点は後に図 2(d) で確かめる. 当然, この効果はパーク・シューマン解では表現できない効果である. なお, この相違については既に Peters (2000)[9] でも指摘されている.

次に, メタン・酸素・水蒸気・水素の各質量分率を詳しく見てみる. 図 2(b) はこれらの質量分率の分布を描いたグラフである. 横軸は火炎面近傍の  $Z \leq 0.1$  の範囲のみをとり, 左側縦座標軸にメタン・酸素・水蒸気の質量分率 ( $Y_{\text{CH}_4}$ ,  $Y_{\text{O}_2}$ ,  $Y_{\text{H}_2\text{O}}$ ), 右側に水素の質量分率 ( $Y_{\text{H}_2}$ ) をとっている. メタンと酸素は少量ではあるが  $Z_{\text{st}}$  を挟んでお互いの領域へ入り込んでいる. 水蒸気は  $Z = 0$  近傍から増加し,  $Z_{\text{st}}$  の直前で最大値をとり,  $Z > Z_{\text{st}}$  の領域まで無視できない割合で存在している. 水素は他の化学物質に比べて軽いため 1 桁小さい質量分率をもつが, やはり  $Z > Z_{\text{st}}$  の領域で有限の値をもつ.

温度が極大値をもつ位置はほぼ火炎面 ( $Z_{\text{st}}$ ) と一致している (図 2(c)). しかし, 図 2(c) に見られるように, 熱発生率の極大値は, 火炎面 ( $Z_{\text{st}}$ ) の位置よりも, 酸素の多い領域側 ( $Z < Z_{\text{st}}$ ) にあり, 熱の発生は  $Z = 0.05$  付近に集中している. 化学反応 (a) と (b) によりメタンが消費されるのは  $Z \geq Z_{\text{st}}$  の領域であり, (a) と (b) の化学反応で生成される水素が  $Z < Z_{\text{st}}$  まで拡散しそこで酸素と反応して大きな熱を発生するのである.

ここまで述べてきたことを各反応の反応率 ( $\Omega_a$ ,  $\Omega_b$ ,  $\Omega_c$ ,  $\Omega_d$ ) の分布から確かめよう. 図 2(d) で, メタンが消費される (a) と (b) の化学反応は  $Z > Z_{\text{st}}$  の領域で行われており,  $\Omega_a$  の極大値は  $Z \sim 0.062$  にある.  $\text{H}_2\text{O}$  の消費反応である化学反応 (d) による  $\Omega_d$  もほぼ同じ点で最大値をもつ. また, 水素が酸素と反応する化学反応 (c) の  $\Omega_c$  は  $Z \sim 0.05$  付近で最大値をもち, 発熱量が最大と

なる点と一致している。すなわち、ここで取り扱っている4段階の化学反応機構モデルの範囲においてはすべての物理量の分布が混合分率  $Z$  で整理することにより整合的に記述でき、各反応の詳細まで良く理解できることがわかった。

ここまでは  $Z_{st}$  を火炎面として各化学反応について調べてきたが、熱の発生のほとんどが (c) の化学反応によるものであることが分かり、熱発生率が最大値を取る点は  $Z_{st}$  と少しずれていることが判明したので、今後は、

$$(\nabla Z \cdot \nabla Q) / |\nabla Z| |\nabla Q| = 0 \text{ for } Q \gg 1 \quad (13)$$

で表される熱発生率が最大となる点を改めて火炎面として定義し、この火炎面における熱発生率を調べることににより、燃焼場と速度剪断との非線形相互作用について考察を行う<sup>2</sup>。

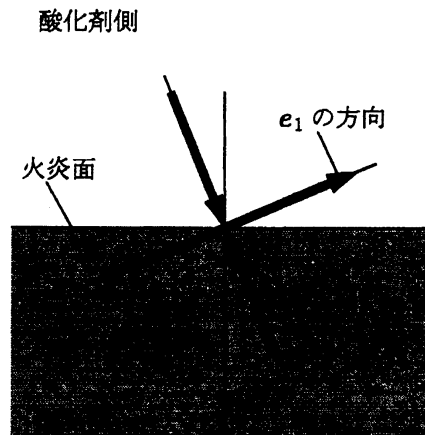


図 3: 火炎面上での速度場の収縮と伸張。

速度剪断が燃焼場に及ぼす影響を解析するため、剪断速度場を特長づける方向ベクトルを定義する。まず、流れ場の変形速度テンソル  $\{s_{ij}\} \equiv \{\partial u_i / \partial x_j\}$  を対称部分である歪み速度テンソルと渦度に対応する反対称部分に分解して次のように表す:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (14)$$

このように分解して得られた歪み速度テンソルの対角成分は流れ場の伸縮を表しており、非対角成分はずれ歪みの大きさを表す。ここでは、歪み速度テンソル  $\{s_{ij}\}$  の固有値と固有ベクトルを考える。歪み速度テンソルは対称テンソルなのでその固有ベクトルは直交する。それらの3つの直交する固有ベクトル  $e_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) と対応する固有値  $\lambda_i$  ( $i = 1, 2, 3; \lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3$ ) は、流体の伸縮運動の方向とその割合を表す。ここでは、流れの2次元性を仮定しているため、 $\lambda_1 > 0, \lambda_2 = 0, \lambda_3 < 0$  である。火炎面法線方向は局所的に  $\nabla Z$  で近似できるので、今後はこの法線方向と速度場の収縮方向 ( $e_3$ ) とのなす角  $\theta_{3, \nabla Z} = \cos^{-1}(e_3 / |e_3| \cdot \nabla Z / |\nabla Z|)$  に注目し、この角をパラメータとして燃焼場を解析し、流れ場と燃焼場との非線形相互作用を調べる (図 3)。

初期条件として与える速度剪断の方向と火炎面のなす角度  $\alpha$  (図 1(b) 参照) が  $\alpha = 0^\circ$  から  $22.5^\circ$  おきに  $157.5^\circ$  までの8通りの場合について数値シミュレーションを行った。その結果得られた8通りの燃焼場と速度場における熱発生率と  $\theta_{3, \nabla Z} = \cos^{-1}(e_3 / |e_3| \cdot \nabla Z / |\nabla Z|)$  との関係を表した

<sup>2</sup>この近似の関係式で得られる点は、実際の熱発生率最大点とほぼ一致することを数値的に確認した。

図が図4である。図4(a)から図4(h)までの各図では、新たに式(13)で定義をした火炎面上における各点での熱発生率の時間変化を表しており、各図中で記号(i)から(vi)までは、順に時間が約 $40\mu\text{sec}$ ずつ経過した状態を表している。ただし、燃焼場の解析は図1(b)の原点周辺の $2.5\text{mm}$ 四方の参照領域内に限定した。図4(a)は $\alpha = 0^\circ$ の場合であり、初期には速度剪断の方向と火炎面が平行な場合、すなわち剪断速度と火炎面が垂直な場合に対応している。同様に、図4(b)から図4(h)までは、 $\alpha = 22.5^\circ$ からそれぞれ $\alpha$ が $22.5^\circ$ ずつ大きくなっている。

各図の横軸は、歪み速度テンソルの第3固有ベクトル $e_3$ の方向(縮み速度の方向)と火炎法線方向のなす角 $\theta_{3,\nabla Z}$ であり、縦軸は単位時間あたりの発熱量 $Q$ である。これらの図中の矢印で示されるように、 $\alpha$ の値に関わらず、 $\theta_{3,\nabla Z}$ が $45^\circ$ より小さい領域では、火炎面上での熱発生率は増加する傾向があり、逆に、 $45^\circ$ より大きい箇所では、熱発生率が減少する傾向が強い。 $\theta_{3,\nabla Z}$ が小さいほど、速度場の収縮の方向が火炎面に対して垂直に近づき、一方、伸張の方向は、火炎面に平行に近づく。そのため、このような場所では、速度場による火炎面への水素と酸素の供給が円滑に行われていると考えられる。 $\theta_{3,\nabla Z}$ が $90^\circ$ に近い場合に、熱発生率が時間的に減少しているのは、火炎法線方向の速度場の伸張によって、水素と酸素の火炎面への供給が十分に行われていないからであると考えられる。

例として、初期の速度剪断と火炎面の角度 $\alpha$ が $45^\circ$ の場合である図4(c)について詳しく説明する。図4(c)で記号(vi)で表される $t = 200\mu\text{sec}$ における火炎面上での歪み速度の火炎面平行方向成分 $\lambda_p$ と火炎法線方向成分 $\lambda_n$ の $\theta_{3,\nabla Z}$ 分布を描いたのが図5(a)である。この図より、 $\theta_{3,\nabla Z}$ が $45^\circ$ より十分小さい場所では流体は火炎面に平行に伸びていること、すなわち火炎法線方向に縮んでいることがわかり、 $45^\circ$ より十分大きい場所では流体は火炎法線方向に伸び、火炎面と平行方向に縮んでいることがわかる。一方、このときの火炎面上での、速度場での移流によって運ばれる水素の質量増加率 $I_{\text{H}_2} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Y_{\text{H}_2})$ 、物質拡散による質量増加率 $J_{\text{H}_2} = \nabla \cdot (\rho D_{\text{H}_2} \nabla Y_{\text{H}_2})$ 、化学反応による質量増加率 $\omega_{\text{H}_2}$ を図5(b)および図5(c)のように描いてそれぞれを比べてみる。ただし、 $\partial \rho Y_{\text{H}_2} / \partial t = I_{\text{H}_2} + J_{\text{H}_2} + \omega_{\text{H}_2}$ である。図5(b)を見れば、3つの項を比較して移流による水素の質量増加率 $I_{\text{H}_2}$ の大きさは、他の項に比べて小さいが、図5(c)に示されるように、移流による質量増加率 $I_{\text{H}_2}$ は、速度場に直接依存しない質量増加率 $J_{\text{H}_2} + \omega_{\text{H}_2}$ に比べると、大きさは同程度であり、 $I_{\text{H}_2}$ は $J_{\text{H}_2} + \omega_{\text{H}_2}$ に比べると、 $\lambda_n$ の大きさに強く依存していることが見て取れる。 $\lambda_n$ が小さいところでは、熱発生率が時間的に増加しているが、ここでは、特に火炎面法線方向の縮み速度によって多量の水素が火炎に供給されていることがわかる。すなわち、火炎面法線方向に流れが縮み、平行な方向に流れが伸びているときには、火炎面への水素の供給が十分に行われるので、発熱量が大きいのである。また、このように火炎面上で火炎法線方向に縮み速度が現れるのは、初期状態では、速度剪断と火炎面がなす角 $\alpha$ が $0^\circ < \alpha < 90^\circ$ を満たす場合である。このことを念頭においてもう1度図4を見てみると、初期に $\alpha$ がこの条件を満たす場合には、時間と共に発熱量が増えていることが確認できる。ただし、 $\alpha = 67.5^\circ$ (図4(d))では時間と共に発熱量が減少している。また、 $\alpha = 157.5^\circ$ (図4(g))の場合は、熱発生率は減少せずに、 $\alpha = 0^\circ$ と同様に増加している。これらの原因は時間と共に火炎面の形状が変化し、火炎面に対する縮み速度の向きが $45^\circ$ に近づくためであると考えられる。

## 4 まとめ

この報告では、2次元周期領域でのメタンと空気の非予混合燃焼における化学反応に対する剪断速度の影響について、6種4段階簡略化学反応機構を用いて詳細に調べた。得られた流れ場をバーク・シューマン解と比較し、火炎面近傍の構造を見ることによって、各化学反応が生じる領域



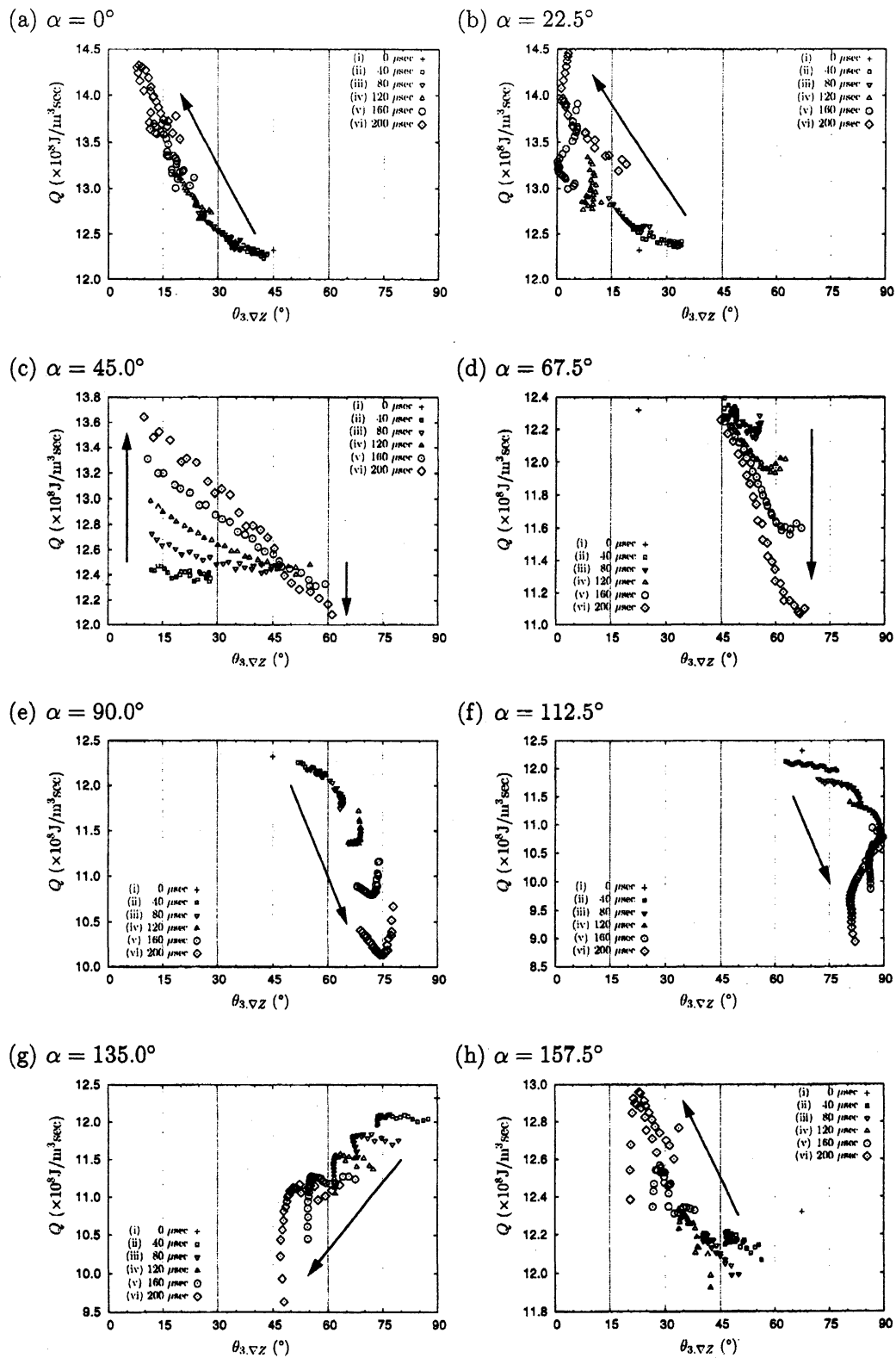


図 4: 火炎面上での火炎面と縮み速度のなす角に対する熱発生率の時間変化.

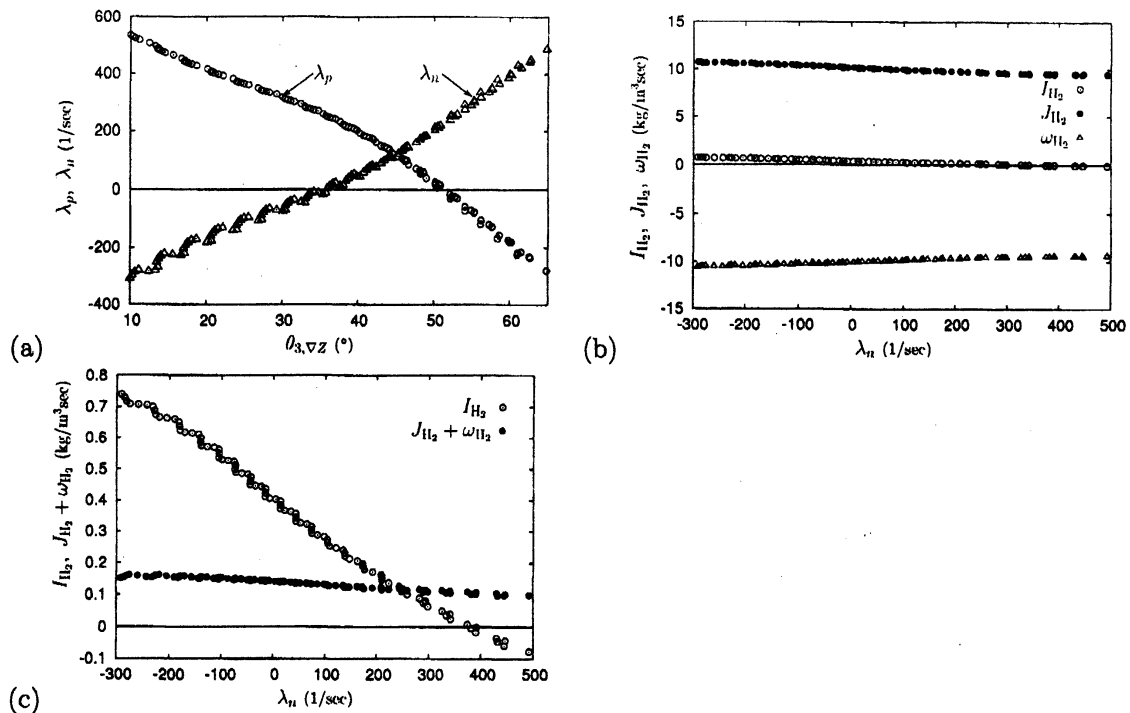


図 5: 図 4(c) の  $t = 200\mu\text{sec}[(vi)]$  の火炎面上での流れ場の伸縮と水素の質量増加率, (a) 火炎面法線方向と接線方向の伸び速度, (b)-(c) 火炎面における水素の質量増加率.

が明確に分けられ, 高熱発生率の主要因が水素の燃焼反応であり, 混合分率  $Z = 0.05$  付近に分布していることを示した. 熱発生率が極大となる面 (火炎面) への水素の供給メカニズムを調べ, 火炎面法線方向の縮み速度による水素の供給が熱発生率の増加に重要な役割を果たすことがわかった. 大きな発熱が得られるのは火炎面に垂直な方向へ流れが縮んでいる場合であり, すなわち, 縮み速度の方向と火炎面に垂直な方向のなす角が  $45^\circ$  よりも小さい場合である.

## 参考文献

- [1] T. J. Poinsot, D. C. Haworth and G. Bruneaux, "Direct Simulation and Modeling of Flame-Wall Interaction for Premixed Turbulent Combustion", *Combust. Flame*, **95**, pp. 118-132 (1993).
- [2] N. Peters, "Laminar Diffusion Models in Non-Premixed Turbulent Combustion", *Prog. Energy Combust. Sci.*, **10**, pp. 319-339 (1984).
- [3] 木下・高城・小宮山・脇田, 「大規模渦の干渉を受ける噴流拡散火炎の数値解析」, 日本機械学会論文集 (B 編), 70 巻, 691 号, pp. 773-779 (2004).
- [4] C. Safta, S. Enachescu and C. K. Madnia, "Interaction of a Vortex Ring with a Diffusion Flame", *Phys. Fluids*, **14**, pp. 668-681 (2002).

- [5] D. A. Everest, J. F. Driscoll, W. J. A. Dahm and D. A. Feikema, "Images of the Temperature Field and Temperature Gradients to Quantify Mixing Rates within a Non-Premixed Turbulent Jet Flame", *Combust. Flame*, **101**, pp. 58-68 (1995).
- [6] W. P. Jones and R. P. Lindstedt, "Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion", *Combust. Flame*, **73**, pp. 233-249 (1988).
- [7] 日本機械学会, 「燃焼の数値計算」(丸善, 東京, 2001) p. 33.
- [8] M. D. Smooke *et al.*, "Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames" (Springer-Verlag, New York, 1991) pp. 1-28.
- [9] N. Peters, "Turbulent Combustion" (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2001) pp. 170-178.