

■原著論文/ORIGINAL PAPER■

予混合～拡散燃焼場に適用可能な統一的燃焼モデルの提案とその評価
(第二報 層流対向流拡散火炎への適用による検証)A Proposal of United Combustion Model for Premixed and Diffusion Flames and Its
Evaluation (2nd Report: Verification by the Laminar Counterflow Diffusion Flame)

稲毛 真一*

INAGE, Shin-ichi*

日立製作所 電力・電機開発研究所 ターボ機械研究開発センター 〒312-0034 茨城県ひたちなか市堀口 832-2
Hitachi, Ltd. Power & Industrial Systems R & D Laboratory, 832-2 Horiguchi, hitachinaka-shi Ibaraki-ken, 312-0034 Japan

2007年7月11日受付; 2007年10月10日受理/Received 11 July, 2007; Accepted 10 October, 2007

Abstract : To verify the accuracy, the numerical simulation of the one dimensional counterflow diffusion flame was performed using of the united combustion model, which is proposed on the 1st report. The model is applicable to the premixed and diffusion flame. To compare the results, the two scalar Flamelet model was also applied to one dimensional counterflow diffusion flame. The main results are follows, 1) The distributions of the temperature and the mole fraction of each gas composition through the diffusion flame were in good agreement with experimental data, which was measured by Tsuji and Yamaoka[6]. 2) On the results of the two scalar model, some discrepancies on the distribution of the temperature and the mole fraction were found with experimental data. It depends on the estimation method of the temperature and the mass fraction using of G and the mixture fraction.

Key Words : United combustion model, Premixed flame, Diffusion flame, Numerical simulation, 2-scalar Flamelet

1. 緒言

第一報[1]において、著者らが提案してきた予混合燃焼モデル[2-5]をベースに、拡散燃焼に対しても適用可能なように拡張した燃焼モデルを構築した。モデルには燃焼速度及び燃料の質量分率である混合分率の勾配が含まれており、混合分率の勾配がゼロとなる予混合燃焼の場合は、従来の予混合燃焼モデルに漸近することが特徴である。また、燃焼速度を通じて、燃焼器内圧力、空気予熱温度及び火炎伸張による消炎効果を考慮できることも、大きな特徴の一つである。燃焼モデルとしては、予混合～拡散燃焼に適用できるだけでなく、層流～乱流にも適用でき、また特に乱流の場合には、併用する乱流モデルにも依存せずに、全ての乱流モデルにそのまま適用できることを目標としている。本報は、第一報の提案モデルを辻及び山岡が行った層流対向流拡散火炎の実験[6]に適用し、層流拡散火炎に対する解析精度を検証したものである。既存の論文[2-5]にて、予混合の層流～乱流燃焼場に関しては検証がなされているの

で、統一的な燃焼モデルとしての検証の第一段階である。同時に、富永及び大島による大規模燃焼器内の燃焼流動解析[7]で適用された 2-scalar Flamelet モデルに関しても、上記の層流対向流拡散火炎に対して適用し、比較した。

2. 統一燃焼モデルの特徴

火炎内の各種成分の質量分率は、混合分率(燃料の質量分率) f と反応進行度 c を導入する事により評価できる。

先ず著者が以前導出した、反応進行度による層流及び乱流予混合燃焼モデルを以下に示す。反応は総括反応を仮定している。まず、層流燃焼モデルとして、

$$\omega = \frac{8\rho_u Su}{\delta} c^2(1-c) \quad (1)$$

を得ている。ここに、 Su : 層流燃焼速度、 δ : 層流火炎の厚みであり、次の関係が成立する。

$$Su = \frac{4\lambda_i}{\rho_u C p_i \delta} \quad (2)$$

* Corresponding author. E-mail: shinichi.inage.wk@hitachi.com

ここに、 λ_i : 熱伝導率、 C_{p_i} : 定圧比熱であり、 i は未燃焼ガス温度と断熱火炎温度の平均温度での物理量である事を示す。また、乱流予混合燃焼モデルとしては、

$$\omega_i = \frac{8\rho_u S_i}{\delta_i} C^2 (1-C) \quad (3)$$

を得ている。ここに、 S_i : 乱流燃焼速度、 δ_i : 乱流火炎帯の厚み、 C : 時間或いは空間平均の c である。 S_i と δ_i の間にも、(2) と類似の以下の関係が成立する。

$$S_i = \frac{4(\lambda_i + \lambda_l)}{\rho_u C_{p_i} \delta_i} \quad (4)$$

ここに、 λ_l : 乱流熱伝導率である。*Wrinkled laminar flame* のように乱れが比較的小さい場合には、(3) において、 $(S_i/\delta_i) \approx (Su/\delta)$ が成立し、(1) の反応速度にて層流～乱流の予混合燃焼に適用可能となる。その場合、陽に乱流の効果は含まれないが、乱流の効果は、反応進行度 C の輸送式中の乱流拡散係数により考慮される。これから、(1) は *Wrinkled laminar flame* においては、乱流モデルに依存せず、乱流拡散係数を $k-\varepsilon$ モデルのような時間平均、LES のような空間平均、更に直接シミュレーションに対しても適用可能である。(1) で層流燃焼速度 Su を評価する必要があるが、 Su は理論式で与えても、実験値を用いても良い。なお、燃焼場の圧力及び未燃焼ガスの温度及び予混合気の燃料の質量分率が決めれば、 Su は一義的に決定され、それらの影響は全て包含したモデルである。

第一報[1]では、(1) 及び (3) をベースに拡散燃焼に適用可能なようにモデルを拡張した。拡張するための概念を説明する。火炎と直交する座標を x とする。先ず、予混合燃焼の場合は火炎中のある位置における反応は、その位置の反応進行度のみで決定される。混合分率 f は一定値であり、 f により決定される厚み δ を経て燃焼が完了する。それに対して、拡散火炎帯中では、混合分率 f が変化、すなわち勾配を持つため、燃焼が完了するのに必要な火炎厚み δ の距離の間に、概略 $(df/dx) \cdot \delta$ だけ f が変化する。変化率を $[\Delta f]$ とし、 f の分布関数から $[\Delta f]$ だけ変化する微小距離 Δx を逆算する。その微小距離 Δx 内の平均の反応速度をその位置での f における反応速度と考える。すなわち、

$$\omega_{mean} \cdot \Delta x = \int_x^{x+\Delta x} \omega dx \quad (5)$$

$$\therefore \omega_{mean} = \frac{1}{\Delta x} \int_x^{x+\Delta x} \omega dx \quad (5')$$

予混合燃焼の場合は、 $[\Delta f] = 0$ なので、 $\Delta x = 0$ と解釈する。(5') の ω に (1) を用いると、

$$\omega_{mean}(x) = 4 \frac{\rho_u Su}{\Delta x} c^2 (1-c) \frac{\hat{\alpha}(1+\hat{\alpha}c)}{(1+\hat{\alpha}(2c-1))^2} \quad (6)$$

ここに、

$$\hat{\alpha} = \tanh\left(\frac{2\Delta x}{\delta}\right) \quad (7)$$

である。 $\Delta x \rightarrow 0$ の時、 $\hat{\alpha} \rightarrow 2\Delta x/\delta \rightarrow 0$ であり、 ω_{mean} が (1) へ漸近することは、容易に確認できる。すなわち、 $[\Delta f] \rightarrow 0$ で、予混合燃焼へ戻る。 Δx を適切に評価することにより、 ω_{mean} を改めて ω と書けば、最終的なモデルとして、以下を得ている。

$$\omega(x) = \frac{4\rho_u Su}{\delta} c^2 (1-c) \frac{\hat{\alpha}(1+\hat{\alpha}c)}{(1+\hat{\alpha}(2c-1))^2} \times \left(\frac{df}{dx} + \frac{\delta}{2} \frac{d^2 f}{dx^2}\right) \left(\frac{df}{dx}\right)^{-1} \quad (8)$$

ここで、

$$\hat{\alpha} = \tanh\left(\frac{2 \frac{df}{dx}}{\frac{df}{dx} + \frac{\delta}{2} \frac{d^2 f}{dx^2}}\right) \quad (9)$$

$(df/dx) \rightarrow 0$ の極限では、(8)、(9) で表されるモデルは予混合燃焼モデル (1) へと漸近する。(8)、(9) を新たな層流場の統一的な燃焼モデルと考える。これは、 Su 及び δ を通じて、燃焼場の圧力、未燃焼ガスの温度の効果を含み、拡散～予混合燃焼に統一的に適用できるモデルとなっている。乱流拡散燃焼の場合には、(8)、(9) において、 $Su \rightarrow S_p$ 、 $\delta \rightarrow \delta_i$ と置き換えれば良い。

更に、火炎伸張による消炎効果を考慮した場合には、以下のようなになる。

$$\omega = \frac{4\rho_u Su}{\delta} I_0^2 c^2 (1-c) \frac{\hat{\alpha}(1+\hat{\alpha}c)}{(1+\hat{\alpha}(2c-1))^2} \times \left(\frac{df}{dx} + \frac{\delta}{2} \frac{d^2 f}{dx^2}\right) \left(\frac{df}{dx}\right)^{-1} \quad (I_0 > 0.7153) \quad (10)$$

$$\omega = 0 \quad (I_0 < 0.7153)$$

ここに、

$$\hat{\alpha} = \tanh\left(\frac{2 \frac{df}{dx}}{\frac{df}{dx} + \frac{\delta}{2} \frac{d^2 f}{dx^2}}\right) \quad (11)$$

また、 I_0 : 火炎伸張度で、 $0 \sim 1$ の値を取り、火炎伸張の度合いを示し、 $I_0 = 1$ が火炎伸張無しの状態を示す。火炎伸張度 I_0 は、次の補助方程式により評価される。

$$\frac{1}{Ka} = -\frac{\rho_0}{\rho_u} \frac{1}{4I_0^2} \ln(1-I_0) \quad (12)$$

ここに, Ka : Karlovitz 数であり, $Ka = g\delta/Su$ で定義される.
 ρ_0 : 常温・常圧における未燃焼気体の密度 ($\approx 1.17 \text{ kg/m}^3$),
 ρ_u : 解析条件での未燃焼気体の密度である.

上記 (10) ~ (12) を用いて, 反応進行度の輸送式を解けば, 乱流～拡散燃焼場を统一的に解析可能である. しかし, 予混合燃焼場において定義された反応進行度を拡散燃焼場に適用すると, 反応進行度の輸送式は f の勾配を含み, c 単独の方程式としては閉じない. そこで, 拡散燃焼場にも適用できるように, 以下の様に反応進行度を再定義した.

$$\hat{c} = \frac{f}{f_{T_{\max}}} c \quad (f < f_{st} : \text{燃料希薄側}) \quad (13)$$

$$\hat{c} = \frac{1-f}{1-f_{T_{\max}}} c \quad (f > f_{st} : \text{燃料過濃側}) \quad (14)$$

上で, $f_{T_{\max}}$ は f が分布する中で, 最大断熱火炎温度となる混合分率を意味する. 通常, 空気・メタン系の拡散燃焼であれば, $f_{T_{\max}} = f_{st}$ である. 本研究では, 例えば, 空気と予混合気体の拡散燃焼のような場合も想定しているので, 一般には $f_{T_{\max}} = f_{st}$ とは限らないために, $f_{T_{\max}}$ を定義している. この定義を用いると, \hat{c} の輸送方程式は以下のように, \hat{c} に対して閉じた式となる.

燃料希薄側 ($f < f_{st}$):

$$\frac{\partial \rho \hat{c}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \hat{c}}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 \rho \hat{c}}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{f}{f_{T_{\max}}} \omega \quad (15)$$

燃料過濃側 ($f > f_{st}$):

$$\frac{\partial \rho \hat{c}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \hat{c}}{\partial x_i} = D \frac{\partial^2 \rho \hat{c}}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{1-f}{1-f_{T_{\max}}} \omega \quad (15')$$

この定義によれば, 予混合～拡散燃焼の範囲で同一の混合分率及び反応進行度の輸送式を用いる事ができる. 以下では, (15) を統一モデルにおける反応進行度の輸送式とする. この表現を用いると, 火炎帯中の各ガス成分の質量分率は, 次式で評価できる.

燃料希薄側 ($f < f_{st}$):

$$Y_{CH_4} = f - f_{T_{\max}} \hat{c} \quad (16)$$

$$Y_{O_2} = A_{O_2} \left\{ (1-f) + f_{T_{\max}} \left(1 - \frac{1}{f_{st}} \right) \hat{c} \right\} \quad (17)$$

$$Y_{CO_2} = \frac{M_{CO_2}}{M_{CH_4}} f_{T_{\max}} \hat{c} \quad (18)$$

$$Y_{H_2O} = \frac{2M_{H_2O}}{M_{CH_4}} f_{T_{\max}} \hat{c} \quad (19)$$

$$Y_{N_2} = 1 - Y_{Fu} - Y_{O_2} - Y_{CO_2} - Y_{H_2O} \quad (20)$$

燃料過濃側 ($f > f_{st}$):

$$Y_{CH_4} = f - \frac{f_{st}(1-f_{T_{\max}})}{1-f_{st}} \hat{c} \quad (21)$$

$$Y_{O_2} = A_{O_2} \left\{ (1-f) - (1-f_{T_{\max}}) \hat{c} \right\} \quad (22)$$

$$Y_{CO_2} = \frac{A_{O_2} M_{CO_2}}{2M_{O_2}} (1-f_{T_{\max}}) \hat{c} \quad (23)$$

$$Y_{H_2O} = \frac{A_{O_2} M_{H_2O}}{M_{O_2}} (1-f_{T_{\max}}) \hat{c} \quad (24)$$

$$Y_{N_2} = 1 - Y_{Fu} - Y_{O_2} - Y_{CO_2} - Y_{H_2O} \quad (25)$$

ここに, A_{O_2} : 空気中の酸素の質量分率, 添え字 st : 理論当量比の値, M は各添え字成分の分子量である.

3. 一次元層流対向流拡散燃焼場によるモデル検証

前章で検討した拡散燃焼モデルを検証する為に, 先ず, 以下にメタン燃焼に関係する諸物理量を評価する.

3.1. 混合分率 f と断熱火炎温度 T_b の関係の評価

先ず, CHEMKIN の解析結果を元に, メタンの混合分率 f と断熱火炎温度 T_b の関係を $f = 0 \sim 1$ の領域を 4 分割し, f の代数方程式として以下の近似式を作成した.

($0 < f < 0.05516$) 領域:

$$\begin{aligned} T_b = & -113228845.69165 f^4 + 11737034.1713959 f^3 \\ & - 616615.906818825 f^2 + 52308.3287006443 f \\ & + 296.6634525089 \end{aligned} \quad (26)$$

($0.05516 \leq f < 0.07$) 領域:

$$\begin{aligned} T_b = & 64348500.0250244 f^3 - 12758168.2519039 f^2 \\ & + 826409.165742415 f - 15341.02363235089 \end{aligned} \quad (27)$$

($0.07 \leq f < 0.15$) 領域:

$$\begin{aligned} T_b = & 61545773.015625 f^5 - 29596833.1329268 f^4 \\ & + 5536351.77958977 f^3 - 472417.517758189 f^2 \\ & + 2335.20220224502 f + 2924.93703012966 \end{aligned} \quad (28)$$

($0.15 \leq f < 1$) 領域:

$$\begin{aligned} T_b = & 55291.0434846878 f^6 - 194986.976939949 f^5 \\ & + 275914.588665896 f^4 - 200609.410276632 f^3 \\ & + 78512.1065533559 f^2 - 16019.0473793767 f \\ & + 2210.93647211575 \end{aligned} \quad (29)$$

なお, T_b は絶対温度である. 上式を用いた混合分率 f と断熱火炎温度 T_b の関係を図 1 に示す.

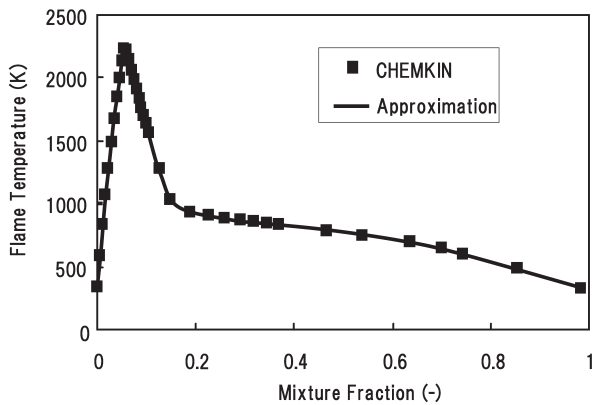


Fig.1 Relationship of mixture fraction and flame temperature

3.2. 未燃焼気体温度と断熱火炎温度の平均温度 T_i と熱伝導度及び定圧比熱の関係の評価

熱伝導度及び定圧比熱は空気の値を用い、300 ~ 1500 (K) の範囲で以下の近似式を作成した[8].

$$C_{p_i} = -1.35581 \times 10^{-10} T_i^3 + 3.33473 \times 10^{-7} T_i^2 - 4.95831 \times 10^{-5} T_i + 0.992480 \quad (30)$$

$$\lambda_i = 7.41483 \times 10^{-11} T_i^3 - 1.58959 \times 10^{-5} T_i^2 + 0.0790704 T_i + 3.88731 \quad (31)$$

なお、 C_{p_i} 及び λ_i の単位は、それぞれ kJ/(kg · K) 及び 10^{-3} W/(m · K) である。

3.3. 混合分率と Su/δ 及び Su の関係の評価

導出した拡散燃焼モデル中に Su/δ が含まれているため、混合分率 f との関係式が必要となる。著者らは、先に予混合燃焼モデルを提唱した際に、 Su/δ と混合分率 f との関係式を以下で与えた[2].

1) 燃料希薄側 ($f < f_{st}$)

$$\frac{\rho_u Su}{\delta} = \frac{\alpha A_{O_2} \rho_u^2}{4 M_{O_2}} \left\{ \frac{1-f}{\tau^2} \left(\frac{RT_b}{E} \right)^2 + \left(1 - \frac{f}{f_{st}} \right) \frac{1}{\tau} \left(\frac{RT_u}{E} \right) \right\} \exp \left(- \frac{E}{RT_b} \right) \quad (32)$$

2) 燃料過濃側 ($f > f_{st}$)

$$\frac{\rho_u Su}{\delta} = \frac{\alpha A_{O_2} \rho_u^2}{4 M_{O_2}} \frac{1-f_{st}}{f_{st}} \left\{ \frac{f}{\tau^2} \left(\frac{RT_b}{E} \right)^2 + \left(1 - \frac{1-f}{1-f_{st}} \right) \frac{1}{\tau} \left(\frac{RT_u}{E} \right) \right\} \exp \left(- \frac{E}{RT_b} \right) \quad (32')$$

ここに、 α 、 E ：メタン・酸素の反応式に以下の Arrhenius 型モデルを適用した場合の頻度因子及び活性化エネルギー

である。

$$\omega = \alpha \left(\frac{\rho Y_{CH_4}}{M_{CH_4}} \right) \left(\frac{\rho Y_{O_2}}{M_{O_2}} \right) \exp \left(- \frac{E}{RT} \right) \quad (33)$$

また、 M_{O_2} 、 M_{CH_4} ：酸素及びメタンの分子量、 $R = 8.314472$ ($m^2 \text{ kg s}^{-2} \text{ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$) で気体定数である。

本論文では、直接 (32)、(32') を用いる代わりに、(2) を用いた次式にて、層流燃焼速度を元に Su/δ を評価した。

$$\frac{Su}{\delta} = \frac{\rho_u Su^2}{4} \frac{C_{p_i}}{\lambda_i} \quad (34)$$

層流燃焼速度として、既存の実験値や CHEMKIN の計算結果を参照にし、 $f = 0 \sim 1$ の範囲を 6 領域に分割して、以下の近似式を作成した。

($f < 0.02$) 領域：

$$Su/\delta = 5.0 f$$

($0.02 \leq f < 0.03$) 領域：

$$Su/\delta = 1052040168546300 f^6 - 154627951999508 f^5 + 9437528654941.02 f^4 - 306105107984.657 f^3 + 5564458613.27831 f^2 - 53751266.0146892 f + 215558.3882318$$

($0.03 \leq f < 0.06$) 領域：

$$Su/\delta = 851202875808 f^6 - 204368897261.44 f^5 + 17726682777.808 f^4 - 652872257.330477 f^3 + 7124126.6342832 f^2 + 151678.5643925 f - 3280.8633077$$

($0.06 \leq f < 0.1$) 領域：

$$Su/\delta = 43050861570.293 f^5 - 18554720653.0273 f^4 + 3168903663.64079 f^3 - 267305221.54482 f^2 + 11083688.8993161 f - 179218.655354832$$

($0.1 \leq f < 0.15$) 領域：

$$Su/\delta = 779650666.014959 f^6 - 762042943.361681 f^5 + 309233828.872044 f^4 - 66702786.5206976 f^3 + 8068813.3801095 f^2 - 519183.90262304 f + 13888.5350887117$$

($0.15 \leq f < 1.0$) 領域：

$$Su/\delta = -0.0471 f + 0.0471 \quad (35)$$

(35) により与えられる平均反応速度 ($\rho_u Su/\delta$) と混合分率 f との関係を図 2 に示す。図中に、CHEMKIN による Su/δ も示したが、(35) による評価式との対応は良いと考える。解析条件は、予混合気温度：300 K、大気圧とした。(35) に Su と δ の関係式 (2) を用いて、 Su 及び δ はそれぞれ独立に計算できる。未燃焼気体の密度を 1.17 (kg/m^3) とした場合

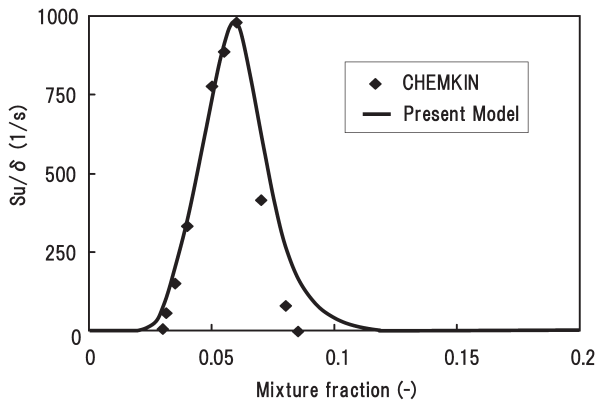


Fig.2 Relationship of mean chemical reaction rate and mixture fraction

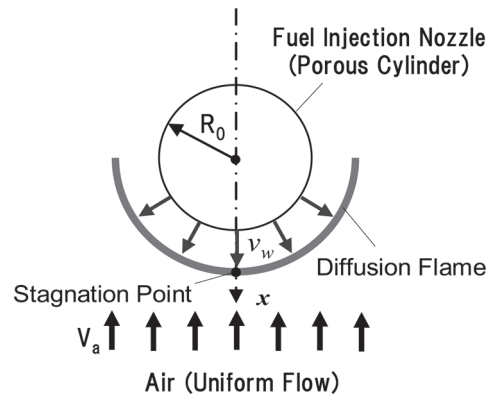


Fig.5 Calculation domain

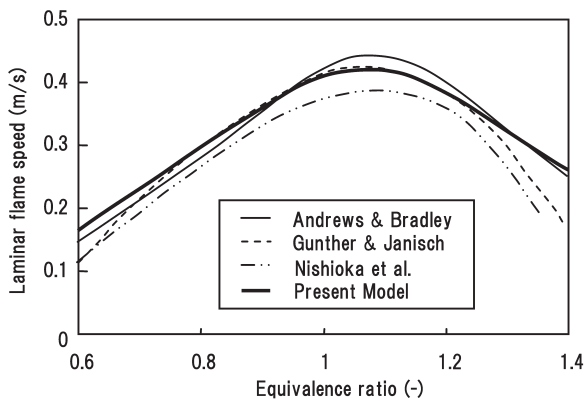


Fig.3 Relationship of flame speed and equivalence ratio

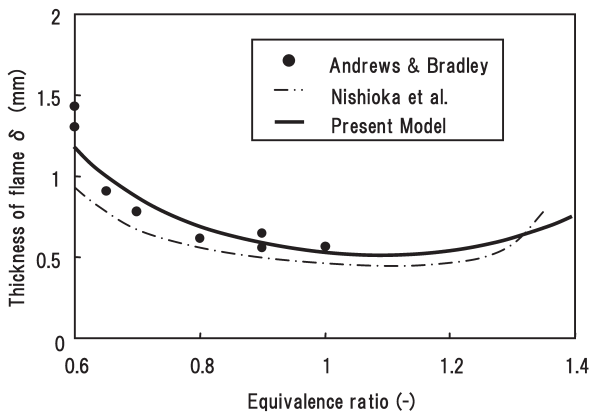


Fig.4 Relationship of the flame thickness and equivalence ratio

の, Su 及び δ と当量比の関係をそれぞれ, 図3及び図4に示す. なお, オリジナルの *Andrews & Bradley* のデータ[10]は, 火炎厚みを $c = 0.01 \sim 0.99$ で変化する厚み L と定義して求めているので, 本研究における δ に換算してプロットしている. 換算式は, $L \approx 2.3\delta$ である. 図より, (35) から求めた Su 及び δ の予測値は, 既存データ[9]を良く再現することが判る. これから, 近似式としての (35) の妥当性が

Table 1 Numerical conditions

Parameters	Conditions
Pressure : P	0.1M(Pa)
Temperature of unburned gas : T_u	300(K)
Air velocity : V_a	1.5(m/s)
Fuel velocity : u_f	0.06(m/s)
Fuel	Methane

示されたものとする.

また, 火炎伸張の効果の評価には, (12) を補助方程式として用い, *Newton* 法にて解を求める. (12) で *Karlovitz* 数の逆数 $1/Ka$ が 0.6138 よりも小さい場合には, I_0 には数学的な解が無いので $I_0 = 0$ とする. 一方, $1/Ka$ が 5 を越えると *Newton* 法でも解を得る事が難しくなる. $1/Ka = 3$ において, $I_0 = 0.999994$ なので, $1/Ka > 3$ では実質 $I_0 = 1$ において良い. そのため, $0.6138 < 1/Ka < 3$ の範囲で, *Newton* 法にて I_0 を求める事になる.

3.4. 層流対向流拡散火炎への適用及び検証

検証として, 辻及び山岡による層流対向流拡散火炎[6]に燃焼モデル (10), (11) を適用する. 対向流拡散火炎では, 速度勾配による火炎伸張の効果が大きいので, 火炎伸張を考慮したモデルが必須となる. 解析体系を図5に示す. 図に示すように, 多孔体で構成された半径 $R_0 = 0.03$ (m) の円柱上の燃料ノズルが一様流を成す空気流中に設置されたものであり, 淀み点を基点に拡散火炎が形成される. 辻及び山岡の実験条件を表1に示す.

図5中に示す様に x 軸方向を取り, その原点を燃料ノズル位置とする. ノズルを原点として, 解析体系として $x = 0.0126$ mとした. 混合分率及び先に提案した反応進行度 \hat{c} の定常次元輸送方程式は, 次のようになる.

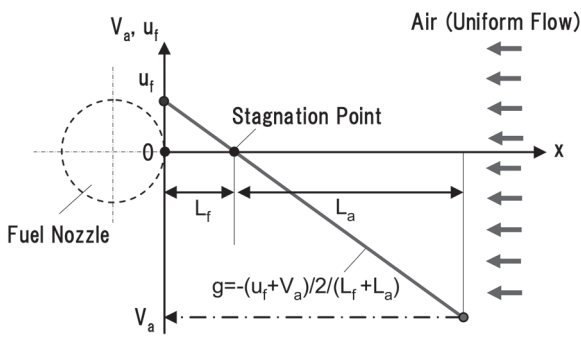


Fig.6 Velocity distribution

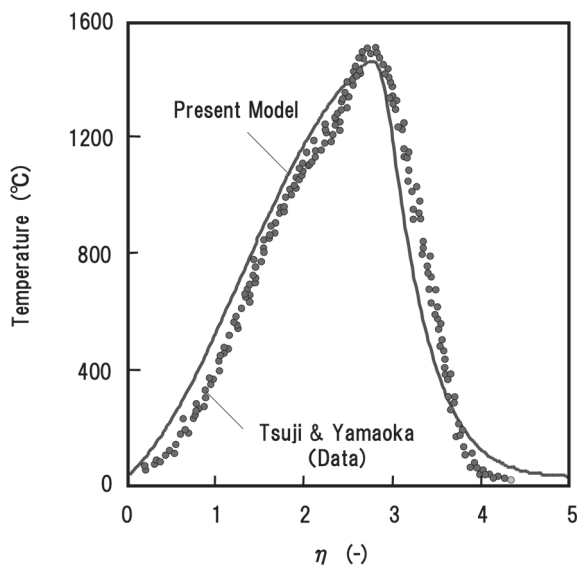


Fig.7 Comparison of temperature distributions

1) 混合分率輸送式:

$$-2\rho g x \frac{df}{dx} = D \frac{d^2 f}{dx^2} \quad (36)$$

2) 反応進行度輸送式:

$$-2\rho g x \frac{d\hat{c}}{dx} = D \frac{d^2 \hat{c}}{dx^2} + \omega \quad (37)$$

ここに、 g : 速度勾配、 D : 拡散係数である。温度に関しても、Lewis 数を 1 の下で、温度の輸送式を解いた。(37)の燃焼反応項 ω に (10), (11) を適用する。なお、(10), (11) 中の c は \hat{c} に変換して適用した。また、火炎伸張の効果は、本ケースでは速度勾配が小さいことから、無視したケースとした。

図 5 中の x 軸に沿った、燃料及び空気の流速の入力分布を図 6 に示す。ポテンシャル流れを仮定すると、勾配 g は次式で与えられる。但し、下記では原点を淀み点として表している。

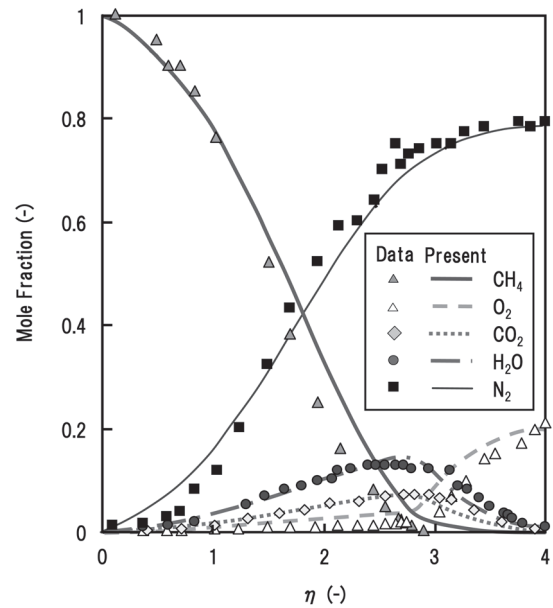


Fig.8 Comparison of mole fraction distributions

$$g = -\frac{(u_f + V_a)}{2(L_f + L_a)} \quad (38)$$

ここに、 L_f : 淀み点と原点した場合のノズル～淀み点の距離、 L_a : 淀み点と原点した場合の空気側の解析体系の長さ、 u_f : 燃料噴出し速さ、 V_a : 空気の一様速さである。また、拡散係数 D は、未燃焼ガスの拡散係数と最大燃焼温度での拡散係数の平均値を与えるものとし、 $D = 3 \times 10^{-5} \text{ (m}^2/\text{s)}$ とした。計算には淀み点の位置を評価する必要がある。淀み点の位置は、実験での淀み点位置を参考にして、燃料ノズル位置から 0.52 (mm) とした。すなわち、 $L_f = -0.52 \text{ (mm)}$ である。

辻及び山岡の実験及び解析の無次元化された x 軸方向に沿った温度分布を図 7 に示す。無次元化距離 η は以下の式で定義される。図の原点は、燃料ノズル位置とした。

$$\eta = \frac{x}{R_0} \sqrt{2Re} \quad (39)$$

ここに、 Re : 未燃焼気体で定義されたレイノルズ数であり、 $Re = V_a R_0 / \nu$ である。文献[6]より、 $\nu = 1.6 \times 10^{-5} \text{ (m}^2/\text{s)}$ とした。図 7 より、解析結果は、全体的な温度分布を良く再現しているものと考えられる。実験では、無次元距離 $\eta = 2 \sim 3$ 近傍の温度分布に凹みが認められる。これは、辻及び山岡の論文[6]によれば、燃料過濃側において負の発熱速度の反応域が存在するためと報告されている。その要因の一つとして、燃料過濃側での熱分解についても言及している。負の発熱速度の要因が、熱分解であれば、本モデルは一段総括反応を前提にしているため、実験で観察される凹み部分は再現できない。しかし、実用上、十分足りえる予測精度を有するものと考えられる。

次に, 実験及び解析の x 軸方向に沿った各成分のモル分率の分布を図 8 に示す. 図より, 酸素及びメタンの分布が全体に過大評価傾向にある. 実験では CO , C_2H_2 他の成分が生成されている. 本解析では, 一段総括反応を考慮するために, 酸素及びメタンを過大評価しているものとする. また, 全成分において概して過濃側で差異が大きくなるが, 単位 η の実空間での距離は 0.4 (mm) であり, 実用の範囲としては温度分布同様に全体的な分布を良く再現できていると考える.

以上の比較により, 層流拡散燃焼場に, 拡散燃焼モデル (10), (11) を適用した結果, 実験を再現する結果を得た. これにより, 提案したモデルは, 十分な精度にて層流火炎中の物理量を評価可能と考える.

4. 既存燃焼モデルとの比較

予混合燃焼～拡散燃焼の複合燃焼場を解析する試みとして, 2-scalar Flamelet モデルがある. 以下では, その基本概念を述べ, 提案モデルとの比較を行う.

2-scalar Flamelet モデルは, その名が示す通り, 混合分率 f 及び火炎面位置の情報を与える G の二つの輸送方程式を用いる. 各々, 以下で与えられる.

1) 混合分率 f の輸送式:

$$\frac{\partial \rho f}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j f}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \quad (40)$$

ここに, u_j : j 方向の流速, Sc : Schmit 数, Sc_t : 乱流 Schmit 数でそれぞれ定数, μ : 粘性係数, μ_t : 渦粘性係数である.

2) G -方程式:

$$\frac{\partial \rho G}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j G}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_G} \frac{\partial G}{\partial x_j} \right) + \rho S_i |\nabla G| \quad (41)$$

ここに, σ_G : 定数, S_i : 乱流燃焼速度であり, 富永らは評価に次式を用いている.

$$S_i = Su \cdot \exp \left(\frac{u'^2}{S_i^2} \right) \quad (42)$$

ここに, u' : 乱れ速度, Su : 層流燃焼速度である. 2-scalar Flamelet モデルは, (40) により火炎帯中の混合分率 f の分布を求め, 各位置の f に対して G -方程式を適用している. G は $0 \sim 1$ の値を取るが, ある基準値 G_0 (通常, 0.5 とされる) が火炎面位置を表し, $G < G_0$ は未燃焼状態を, $G > G_0$ は既燃焼を表すものである. 火炎面を薄いものと仮定すれば, 火炎面の平均反応割合は, 層流の場合は層流燃焼速度, 乱流の場合は乱流燃焼速度となるために, (41) のような G -方程式となる. 前述のように, G は閾値 G_0 のみが本来の意味を持つが, 富永らは G に対してより積極的な意味を持たせ, 未燃焼の両状態のスイッチングパラメータとし

て用いて, 各成分の質量分率と温度を以下のように定義している.

$$Y_i = (1-G)Y_{i,u} + GY_{i,b} \quad (43)$$

$$T = (1-G)T_u + GT_b \quad (44)$$

ここに, Y_i : 成分 i の質量分率, 添え字は b : 既燃焼の値, u : 未燃焼の値を示す. これは, G に反応進行度と類似な意味を持たせたものと解釈できる. (42) 中の層流燃焼速度に関しては, 富永らは CHEMKIN コードを用いて各混合分率に関して Su を計算し, f に関する多項式として与えている. 2-scalar Flamelet モデルの本質は, 各 f に対してその f により決定される燃焼速度を導入しているのであるから, 各 f の各位置において予混合燃焼の過程が完了すると仮定したものと考える. 本研究とは, 予混合火炎には有限の厚みがあるために, 各 f において完全に予混合燃焼の過程が完了せずに, 反応完了には有限の距離が必要であり, その反応速度は左記距離内での平均の反応速度で与えられると言う点で異なる. 以下, 本研究で提案した燃焼モデルと比較し, 2-scalar Flamelet モデルを考察する. 2-scalar Flamelet モデルでは「局所に完全な予混合燃焼」を適用しているので, 本モデルにその概念を適用すると, 基礎式は,

1) 混合分率 f の輸送式:

$$\frac{\partial \rho f}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j f}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left((D + D_t) \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \quad (45)$$

2) C -方程式:

$$\frac{\partial \rho C}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j C}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left((D + D_t) \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + \omega \quad (46)$$

の二つの方程式を導入する点では, C と G の違いであり, 本質的な差異はない. ここで, D , D_t は拡散及び乱流拡散係数であり, (40) の μ/Sc , μ_t/Sc_t と等価である. 反応項 ω は, 「局所に完全な予混合燃焼」を仮定するので, 予混合燃焼モデルを適用することになる. すなわち, (3) のように,

$$\omega = \frac{8\rho_u S_i}{\delta_i} C^2 (1-C) \quad (47)$$

で与えられる. なお, 火炎伸張の効果は無視している. 以下, (45) ~ (47) の組合せの下で, 2-scalar Flamelet モデルとの関係性を評価する. 一見, 2-scalar Flamelet モデルと提案モデルは, 形式が大きく異なるように見えるが, 実は完全に等価であることを以下に示す. 層流場の反応進行度 c の輸送式を考える.

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j c}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + \omega \quad (48)$$

$$\omega = \frac{8\rho_u Su}{\delta} c^2 (1-c) \quad (49)$$

この c において, c を \tanh 型の関数で近似した下では,

$$\frac{dc}{dx} = \frac{4}{\delta} c(1-c) \quad (50)$$

であるから, (49) は,

$$\omega = 2\rho_u Su \cdot c \frac{dc}{dx} \quad (51)$$

となり, 以下のように書き直せる.

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j c}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) + 2c\rho_u Su \nabla c \quad (52)$$

これは, $c \rightarrow G$ と文字のみ書き換えれば,

$$\frac{\partial \rho G}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j G}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D \frac{\partial G}{\partial x_j} \right) + 2G\rho_u Su \nabla G \quad (53)$$

今, 一次元の場合を考えると, (53) は以下となる.

$$\frac{\partial \rho G}{\partial t} + \frac{d\rho u G}{dx} = \frac{d}{dx} \left(D \frac{dG}{dx} \right) + 2G\rho_u Su \frac{dG}{dx} \quad (54)$$

G を \tanh 関数で近似した下では, \tanh 関数の性質から,

$$\frac{d^2 G}{dx^2} = \frac{4}{\delta} (1-2G) \frac{dG}{dx} = \frac{4}{\delta} \frac{dG}{dx} - \frac{8}{\delta} G \frac{dG}{dx} \quad (55)$$

$$\begin{aligned} \therefore \rho_u Su \frac{d^2 G}{dx^2} &= \frac{4\rho_u Su}{\delta} (1-2G) \frac{dG}{dx} \\ &= \frac{4\rho_u Su}{\delta} \frac{dG}{dx} - \frac{4}{\delta} 2\rho_u Su \cdot G \frac{dG}{dx} \end{aligned} \quad (56)$$

$$\begin{aligned} 2\rho_u Su G \frac{dG}{dx} &= \frac{\delta}{4} \left(\frac{4\rho_u Su}{\delta} \frac{dG}{dx} - \rho_u Su \frac{d^2 G}{dx^2} \right) \\ &= \rho_u Su \frac{dG}{dx} - \frac{\rho_u Su \delta}{4} \frac{d^2 G}{dx^2} \end{aligned} \quad (57)$$

ここで, 以下の層流燃焼速度 Su と層流火炎の厚み δ との関係式を用いる.

$$Su = \frac{4\lambda}{\rho_u Cp \delta} = \frac{4D}{\delta} \quad (58)$$

なお, (58) で Lewis 数を 1 と仮定した. (57) は,

$$2\rho_u Su G \frac{dG}{dx} = \rho_u Su \frac{dG}{dx} - D \frac{d^2 G}{dx^2} \quad (59)$$

(59) を (54) に代入し, D の座標依存性を無視すると, 以下を得る.

$$\frac{\partial \rho G}{\partial t} + \frac{d\rho u G}{dx} = \rho_u Su \frac{dG}{dx} \quad (60)$$

これは, Williams による G -方程式そのものである. 各 (x, y, z) 方向に対して, (55) ~ (59) が独立に成り立つ仮定の下で

は, 上の議論は三次元下でも一般性を失わない. 乱流場に対して, 三次元化した (60) を Favre 平均すれば,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \langle G \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \langle u_i \rangle \langle G \rangle}{\partial x_i} \\ = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \left(\langle u_j G \rangle - \langle u_j \rangle \langle G \rangle \right) \right) + \langle \rho_u Su \nabla G \rangle \end{aligned} \quad (61)$$

ここに, $\langle \rangle$ は, Favre 平均を表す. 乱流場において, 右辺第二項を Williams に従い,

$$\langle \rho_u Su \nabla G \rangle = \rho_u S_i \nabla \langle G \rangle \quad (62)$$

と表現すれば[11], 乱流場における G -方程式となる. すなわち, 各 f に対して「局所での完全な予混合燃焼」を仮定した下では, 反応進行度をベースとした本モデルと G -方程式をベースとした 2-scalar Flamelet モデルとは完全に等価であり, Favre 平均反応進行度 C と G を同一視できることを強調しておく. C は反応進行度であるから, $0 \sim 1$ で変化する C の各値は物理的な意味を持つ. それ故, \tanh の近似の下では, 富永らが行った G をスイッチングパラメータとして機能させる方法は妥当と考える. なお, 唯一の違いは, (62) の右辺に掛かる密度である. オリジナルの G -方程式では ρ であり, 燃焼に伴い変化するが, (62) では未燃焼気体の密度である. 右辺で, 密度と S_i がセットで用いられることを考えると, 未燃焼気体の密度 ρ_u の方が自然には感じられる. なお, 密度 ρ_u に変更した G -方程式は, 既に富永らにより採用されており, 2-scalar Flamelet モデルと共に用いられている[12]. 上述の議論は, その妥当性を補足するものとする. 一方, 完全に等価となるのは, 層流の c 方程式から出発し, Favre 平均方程式において, (62) を適用した場合である. 実は, 直接, 乱流場の Favre 平均反応進行度 C の輸送式 (46) と, 乱流燃焼速度 S_i と乱流火炎の厚み δ_i の関係式 (47) を用いると, 直接乱流場の G (C を置き換えたものとする) の輸送式を導出できる. すると,

$$\frac{\partial \bar{\rho} \langle G \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \langle u_i \rangle \langle G \rangle}{\partial x_i} = \rho_u S_i \nabla \langle G \rangle \quad (63)$$

を得る. これは, (41) と比較して, 乱流拡散項を含まない形式となっている. すなわち, (61) と比較して解釈すれば, Williams と異なり,

$$\begin{aligned} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \left(\langle u_j G \rangle - \langle u_j \rangle \langle G \rangle \right) \right) + \langle \rho_u Su \nabla G \rangle \\ = \rho_u S_i \nabla \langle G \rangle \end{aligned} \quad (64)$$

とモデル化した形である. 但し, (63) は直接導出されたものであり, (64) のような仮定は設けていない事を強調しておく. (63) は, 層流における G 方程式, すなわち拡散項を含まない表現と完全に合致するものである. いずれの表現が実際解析に適用性が高いかは, 解析等により精査する必要がある.

各 f の分布に対して, 「局所での完全な予混合燃焼を適用する」というコンセプトの下では, 本研究のモデルと *2-scalar Flamelet* は等価であることが示されたので, そのコンセプトの妥当性を検証するために, 乱流の効果を無視して, 前述の辻及び山岡の対向流拡散火炎に対して, f 輸送式とオリジナルの G -方程式 (62) を適用し, 解析した. 但し, 対象が層流場なので, 乱流燃焼速度 S_t の代わりに, 著者らが導いた理論式 (2), (35) を元に算出した層流燃焼速度 S_u を用いた. 温度の評価には, 前述の富永らの (44) を用いた. T_b として, *CHEMKIN* を用いた平衡計算による断熱火炎温度をライブラリーとして与えた. *2-scalar Flamelet* モデルは, 局所の f に厚みゼロの予混合火炎を対応させ, その火炎面情報を G で表す. 層流拡散火炎の構造を評価できる程度にメッシュを細分化しても, そのメッシュ内に厚みゼロの予混合火炎が存在すると考えれば, 層流拡散火炎に G -方程式及び *2-scalar Flamelet* モデルを適用することは問題無い. 火炎帯中の G の分布を図 9 に示す. 図より, $\eta = 1.2 \sim 3.2$ 程度の範囲で $G = 1$ となり, それ以外の領域では急速にゼロになる. これは, $\eta = 1.2 \sim 3.2$ の領域で, 各 f において予混合火炎が存在することを意味している. この G 分布を元に, 解析した温度分布の比較を図 10 に示す. 図より, 火炎帯中の最大火炎温度を過大評価している. これは, 各 f における火炎温度のライブラリーとして平衡計算による断熱火炎温度を適用したこと, また瞬時に予混合燃焼が完了する, すなわち局所の予混合火炎の厚みをゼロと仮定したためと考える. 本来の G 方程式は, $G = 0.5$ の値が火炎面を表す指標であり, $G > 0.5$ は既燃焼, $G < 0.5$ は未燃焼を表す. その本来の定義を用いたならば, 完全に断熱火炎温度が f 分布に沿って計算されたものとする. 富永らは, G の $0 \sim 1$ の値そのものに意味を持たせることにより, 火炎温度が断熱火炎温度になることを制御したものを見ることができる. すなわち, G により局所の予混合火炎が完全燃焼しない状況を便宜的に模擬したものとする. しかし, その抑制効果が G のみの効果では不十分であることを示唆するものとする. 本研究で提案したように, 予混合火炎は反応完了に一定の厚みが必要なため, f の分布による予混合燃焼の燃焼抑制効果の導入が拡散燃焼モデルには不可欠なものとする. 実際, 図 10 で, 無次元距離 $\eta = 0 \sim 4$ (-) は, 実際の座標において, 高々 2 mm 程度である. 先に示した図 4 のように, メタン系の予混合火炎の厚みは, 理論当量比近傍で 0.5 mm 程度, 当量比 0.6 付近で 1.5 mm 程度に達する. このような条件下では, 局所に予混合燃焼が完了する仮定は, 困難が伴うものとする. 水素・空気燃焼や高温空気での燃焼場のように, 燃焼速度が比較的速く, 且つ火炎の厚みも小さい場合には, 完全な予混合燃焼を仮定することは近似的には成立し得るものとする. 但し, 炭化水素系で特に f の分布が急激な勾配を持つ場合には, f の輸送式と G -方程式を燃焼速度にて直接結びつけるのは困難と考える. また, (44) の温度表現では, 最大温度の差異を除いても全体的な温度分布が一致

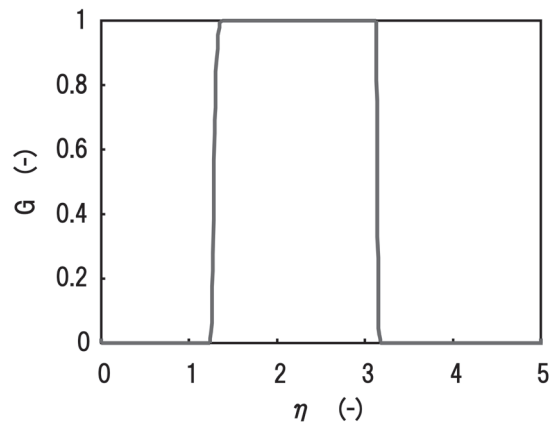


Fig.9 Distribution of G through the flame

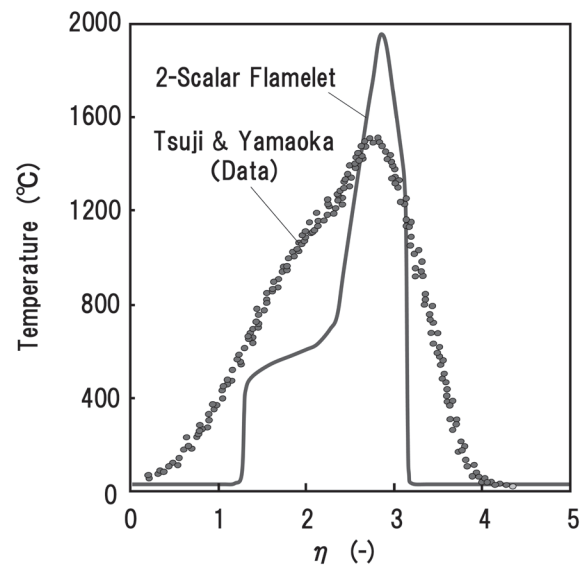


Fig.10 Comparison of temperature distributions

しなかった. 各位置の火炎温度の絶対値は G を乗ずることにより抑制されているが, 温度の全体分布は断熱火炎温度が f 分布に沿って分布している形になっている. その理由として, 予混合燃焼と異なり, 温度拡散が現象を支配する拡散燃焼において, 温度拡散効果を無視し, 局所の G と断熱火炎温度により温度が決定されると仮定したために差異が生じたものとする. この点は, 温度に関する輸送式を同時に解けば, 改善されるものとする.

次に, x 軸方向に沿った各成分のモル分率分布との比較を図 11 に示す. 図 9 の $G = 1$ の領域の燃料過濃領域では酸素が, また燃料希薄領域ではメタンが, 完全に反応しており, ゼロとなっている. これは, *2-scalar Flamelet* モデルの概念が忠実に再現されていると言える. 反面, 図 9 の $G = 0$ の領域では, 反応生成物である CO_2 及び水がゼロになっている. 全体的な分布においては, $\eta > 3.2$ 領域でメタンの, 更に $\eta < 1.3$ 領域で酸素の不自然な分布が認められる.

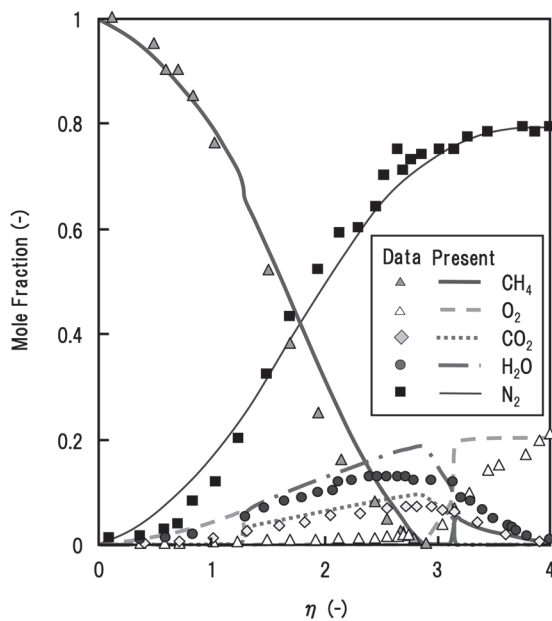


Fig.11 Comparison of mole fraction distributions

これは、各成分のモル分率を (43) を元に評価したためと考える。すなわち、(43) の形式では、各 f に対する未燃焼と既燃焼の各ガス成分の質量分布を G の線形和で求めているため、 $G=0$ の領域では、そのまま未燃焼の f の値が残ることになる。同時に、一般化した反応進行度の輸送式 (15) の導出において説明したが、反応進行度には、 f に分布がある場合、 f の勾配による拡散項が含まなければならないのに対して、 G -方程式にはそのような効果が含まれていない。そのため、残った f が拡散により、輸送される効果が生じない。そのため、 f が分布する効果を考慮しなければ、各成分を (43) の形式で評価するのは難しいものとする。これは、上記の温度分布と同じ事情と考える。本モデルの場合、反応進行度の定義を変更する事により、 f の勾配による反応進行度の拡散を陽には含まないが、各成分の質量分率の表現を (16) ~ (25) のように変更することで、正しい解が得られるようになっている。以上のことから考えると、少なくとも常温で炭化水素系の層流拡散場への 2-scalar Flamelet の適用は難しいものとする。この状況は、おそらく乱流拡散燃焼場においても同様と推測する。但し、 Su が十分に大きい場合、例えば水素や予熱空気下での燃焼場では、各 f での「瞬時的予混合燃焼」が近似的に成立し、2-scalar Flamelet モデルも十分な精度を持つと期待できる。これは、前報[1]で導入した状態指標 ϑ によっても説明できる。状態指標 ϑ は、本論文 2 章で説明した $[\Delta f] \equiv (df/dx) \cdot \delta$ と同じで量であり、 $[\Delta f]$ を改めて ϑ と書いたものである。(2) を用いると、

$$\vartheta = \delta \frac{df}{dx} = \frac{4\lambda_i}{\rho_u Su C_p} \frac{df}{dx} \quad (65)$$

となる。これは、上述のように、ある f での予混合燃焼が完了するのに必要な火炎厚み δ の距離の間に変化する混合分率の変化分を示すと同時に、燃焼状態が予混合～拡散燃焼のいずれの形態であるかを示す、新たな無次元数である。無次元数としては、 Pe 数の逆数と類似の形式である。燃焼を、 Su という指標で示される反応が支配するか、 df/dx という指標で示される拡散が支配するかを示す。すなわち、 $\vartheta=0$ は予混合燃焼を示し、 ϑ が大きいほど拡散燃焼としての傾向が強くなることを示す。状態指標 ϑ より、 Su が十分に大きい場合、 df/dx の効果が小さくなる。そのため、水素や予熱空気下での燃焼場では、各 f での「瞬時的予混合燃焼」が近似的に成立し、2-scalar Flamelet モデルも十分な精度を持つと考える。

5. 結言

第一報にて提案した統一燃焼モデルを一次元対抗流拡散火炎に適用し、火炎帯中の温度分布及び各成分のモル分率の実験値と比較した。その結果、以下の知見を得た。

①解析値は、温度及び各ガス成分のモル分率の実験の分布を良く再現できた。これにより、層流においては一定範囲の精度で検証できたものとする。

②既存の 2-scalar Flamelet モデルと比較した。「各 f に対して、局所で完全予混合燃焼が完了する」という仮定の下では、本提案モデルは 2-scalar Flamelet モデルと完全に等価である。但し、2-scalar Flamelet モデルで辻及び山岡の対向流拡散火炎を解析すると、火炎温度分布及び各成分のモル分率分布が実験値に比して、大きくずれる結果となった。これは、炭化水素系の場合、火炎厚みが比較的厚いため、少なくとも、層流の炭化水素系の燃焼場への局所完全予混合燃焼の仮定を適用するのは困難と考える。

今後、種々の乱流モデルと併用した、複数の燃焼場へ適用し、統一的な燃焼モデルとしての精度を検証していく予定である。

謝辞

本研究を進めるにあたり、北海道大学、大島 伸行教授より有益なご討論を頂いた。ここに記して謝意を表す。

References

1. 稲毛真一, 予混合～拡散燃焼場に適用可能な統一的燃焼モデルの提案とその評価 (第一報, 基本モデルの構築), 日本燃焼学会誌, 150: 267-276 (2007)
2. 稲毛, 大塚, 機論 B 編 61 巻 586 号, 2290, (1995)
3. 稲毛, 大塚, 機論 B 編 63 巻 609 号, 1806, (1997)
4. 稲毛他, 機論 B 編 63 巻 612 号, 2351, (1997)
5. 稲毛他, 機論 B 編 63 巻 615 号, 263, (1997)
6. H. Tsuji and I. Yamaoka, 13th Symp. (Int.) on Comb., The

Comb. Inst. (1971),723

7. 富永他, 第 18 回数值流体力学シンポジウム B7-4(2004)
8. 伝熱工学資料 (改訂題 4 版), 日本機械学会 (1986), 329
9. 燃焼工学ハンドブック, 日本機械学会 (1995), 27
10. Andrews, G. E., and Bradly, D., *Combustion & Flame*. 19 (1972),133.
11. Williams, F. A., *Combustion Theory (2nd ed.)*, Addison-Wesley, 1985.
12. 富永他, 第 44 回燃焼シンポジウム C132 (2006)