

■原著論文/ORIGINAL PAPER■

予混合燃焼場及び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
(第七報 H₂/N₂ 浮上り火炎による検証)A Proposal of United Combustion Model for Premixed and Diffusion Flames and Its Evaluation (7th report: Verification of the Combustion Model by A H₂/N₂ Lifted Flame in a Vitiated Coflow)阿部 一幾^{1*}・稲毛 真一²ABE, Kazuki^{1*} and INAGE, Shin-ichi²¹ (株)日立製作所 エネルギー・環境システム研究所 火力研究開発センタ 〒312-0034 茨城県ひたちなか市堀口 832-2
Hitachi, Ltd. Energy & Environmental Systems Laboratory, 832-2 Horiguchi, hitachinaka-shi, Ibaraki, 312-0034, Japan² (株)日立製作所 電力システム社 新エネルギー推進本部 〒101-8608 東京都千代田区外神田一丁目 18 番 13 号
Hitachi, Ltd. Power Systems Company, 1-18-13 Sotokanda, Chiyoda-ku, Tokyo, 101-8608, Japan

2010年3月29日受付; 2010年6月9日受理/Received 29 March, 2010; Accepted 9 June, 2010

Abstract : This paper evaluates the accuracy of author's combustion model that can be applied to the premixed and diffusion flames. The proposed united combustion model is based on the author's premixed combustion model and the effect of preferential diffusion is considered through the author's algebra model that evaluates fuel concentration variation on the flame with curvature. In this paper, a H₂/N₂ lifted flame in vitiated coflow conducted by *Cabra* was numerically simulated. Two simulations were performed, the one is with the proposed preferential diffusion model and the other is without that model. Both of them, calculated mixture fraction profiles were in good agreement with experimental data within $x/D \leq 11$ and were not within $x/D \geq 14$ because of overestimation of fuel diffusion. Comparing each result, it is indicated that the preferential diffusion model enhanced reaction speed, especially around the jet nozzle exit. However, the influence of overestimation of fuel diffusion is not negligible so that it is difficult to evaluate the superiority of the calculation with the author's preferential diffusion model. As a future works, more suitable analysis object should be simulated for evaluate the preferential diffusion effect quantitatively.

Key Words : United combustion model, Preferential diffusion, Numerical simulation, Lifted flame

1. 緒言

著者らが提案してきた予混合燃焼モデル[1-2]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既報[3-4]において構築した。提案モデルには燃焼速度及び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。

著者らは、提案モデルを検証する目的で、辻及び山岡の層流対向流拡散火炎の実験及び Barlow, Frank のパイロツ

ト火炎にサポートされた乱流拡散火炎、更に対向流拡散火炎へ適用した[6-7]。実験値との比較により、実用的な数値解析として、層流及び乱流拡散火炎に対する精度を検証できた。一方、石炭ガス化ガス、コークス炉ガス等の水素を含む混合燃料では、水素の拡散係数が空気やメタンに比して3~4倍大きいため、乱流燃焼場では、水素の選択拡散効果が燃焼場に影響する。著者らは、既報[8]において水素の選択拡散効果を評価するための濃度の変化式を導出し、乱流燃焼時の局所燃焼速度の平均値を計測した城戸、中原らの実験結果[9]を定量的に再現することを確認した。本研究は、選択拡散効果が局所燃焼速度に及ぼす影響を、既報で提案した予混合燃焼場及び拡散燃焼場に適用可能な統一的燃焼モデルに取り入れて、燃料に水素を含む乱流燃焼場の解析精度を検証したものである。評価対象は、*Cabra* ら

* Corresponding author. E-mail: kazuki.abe.nd@hitachi.com

の水素と窒素の混合ガスを燃料とし、その周囲に酸素を含む水素既燃ガスを流した浮上り火炎[10]とした。実験値との比較により、浮上り火炎に対する精度を検討した。

2. 統一的燃焼モデルの特徴

本章では、既報[3-4]において構築した予混合燃焼と拡散燃焼に統一的に適用可能な燃焼モデルについて、概要を述べる。

火炎内の各種成分の質量分率は、混合分率 f と反応進行度 c を導入する事により評価できる。著者らが以前導出した、反応進行度 c による層流及び乱流予混合燃焼モデル[1-2]を以下に示す。反応は総括反応を仮定している。反応進行度 c 式の反応項を ω とすると、層流燃焼モデルとして、式(1)を得る[1]。

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

ここに、 ρ_u は未燃焼ガスの密度、 Su は層流燃焼速度、 δ は層流火炎の厚みであり、次の関係が成立する。

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

ここに、 λ_i は熱伝導率、 C_{p_i} は定圧比熱であり、 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ことを示す。*Wrinkled laminar flame* のように乱れが比較的小さい場合には、 $(S_i/\delta)_i = (Su/\delta)$ が成立し、式(1)の反応速度にて層流及び乱流の予混合燃焼に適用可能となる。その場合、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。式(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、未燃焼ガスの温度及び予混合気の燃料質量分率が決まれば、 Su は一義的に決定され、燃焼に対する圧力、温度、燃空比の影響を包含したモデルである。また、式(2)で $\lambda_i \rightarrow (\lambda_i + \lambda_l)$ 、 $Su \rightarrow S_p$ 、 $\delta \rightarrow \delta_l$ と置き換えれば、乱流燃焼場に対する式(2)と類似の関係が成立する。ここで、 λ_l は乱流熱伝導率、 S_l は乱流燃焼速度、 δ_l は乱流火炎帯の厚みである。

さらに、著者らは、予混合燃焼モデル式(1)に火炎伸張の効果を検討して、最終的に以下のモデルを提案した[2]。

$$\omega = \begin{cases} \frac{8\rho_u Su}{\delta} I_0^2 c^2 (1-c) & (I_0 > 0.7153) \\ 0 & (I_0 \leq 0.7153) \end{cases} \quad (3)$$

ここに、 I_0 は火炎伸張度で、 $0 \sim 1$ の値を取り、火炎伸張の度合いを示す。 $I_0 = 1$ は火炎伸張が全く無い状態を表し、 $I_0 = 0.7153$ が火炎伸張による消炎限界点を表す。 $I_0 \leq 0.7153$

で燃焼モデルはゼロ値となるが、これは火炎伸張による消炎を表現している。

次いで著者らは、式(1)をベースに層流拡散燃焼に適用可能なように拡張した[3-4]。その概念を以下説明する。火炎に直交する座標を x とする。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 は一定値であると仮定すれば、 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 $(df/dx) \cdot \delta$ だけ f が変化する。変化量を Δf とし、 f の分布関数から Δf 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 における燃焼反応速度と考える。すなわち、

$$\omega_{mean} \cdot \Delta x = \int_x^{x+\Delta x} \omega dx \quad (4)$$

予混合燃焼の場合は、 $\Delta f = 0$ なので、 $\Delta x = 0$ と解釈する。式(4)の ω に式(1)を用いて変形すると、

$$\omega_{mean}(x) = 4 \frac{\rho_u Su}{\Delta x} c^2 (1-c) \frac{\hat{\alpha}(1+\hat{\alpha}c)}{(1+\hat{\alpha}(2c-1))^2} \quad (5)$$

ここに、 $\hat{\alpha} = \tanh(2\Delta x/\delta)$ である。 $\Delta x \rightarrow 0$ の時、 $\hat{\alpha} \rightarrow 2\Delta x/\delta \rightarrow 0$ であり、 ω_{mean} が式(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、最終モデルは以下となる[3]。

$$\omega = \frac{4\rho_u Su}{\delta} I_0^2 c^2 (1-c) \frac{\hat{\alpha}(1+\hat{\alpha}c)}{(1+\hat{\alpha}(2c-1))^2} \times \left(\frac{df}{dx} + \frac{\delta}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} \right) \left(\frac{df}{dx} \right)^{-1} \quad (I_0 > 0.7153) \quad (6)$$

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

ここで、

$$\hat{\alpha} = \tanh \left(\frac{2 \frac{df}{dx}}{\frac{df}{dx} + \frac{\delta}{2} \frac{d^2 f}{dx^2}} \right) \quad (7)$$

$df/dx \rightarrow 0$ の極限では、式(6)は予混合燃焼モデル式(1)へと漸近する。式(6)を新たな層流場の統一的な燃焼モデルと考える。このモデルは、モデル定数を必要とせず、 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、予混合燃焼、拡散燃焼に統一的に適用できる。乱流拡散燃焼の場合には、式(6)において、 $Su \rightarrow S_p$ 、 $\delta \rightarrow \delta_l$ と置き換えれば良い。また、*Wrinkled laminar flame* でのように乱れが比較的小さい場合には、 $(S_l/\delta)_l = (Su/\delta)$ として良い。

上記式 (6) を用いて、反応進行度の輸送式を解けば、予混合燃焼場、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。

$$\hat{c} = c \frac{f}{f_{Tmax}} \quad (\text{燃料希薄側: } f \leq f_{st}) \quad (8)$$

$$\hat{c} = c \frac{1-f}{1-f_{Tmax}} \quad (\text{燃料過濃側: } f > f_{st}) \quad (9)$$

式 (8),(9) で、 f_{st} は量論混合分率を、 f_{Tmax} 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、メタンと空気の拡散燃焼であれば、 $f_{Tmax} = f_{st}$ 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ため、一般には $f_{Tmax} \neq f_{st}$ とは限らないために、 f_{Tmax} 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 ($f \leq f_{st}$) は

$$\frac{\partial \rho \hat{c}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \hat{c}}{\partial x_j} = D \frac{\partial^2 \rho \hat{c}}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{f}{f_{Tmax}} \omega \quad (10)$$

燃料過濃側 ($f > f_{st}$) は

$$\frac{\partial \rho \hat{c}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j \hat{c}}{\partial x_j} = D \frac{\partial^2 \rho \hat{c}}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{1-f}{1-f_{Tmax}} \omega \quad (11)$$

この定義によれば、予混合燃焼、拡散燃焼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、式 (10),(11) を統一燃焼モデルにおける反応進行度の輸送式とする。

3. 各ガス成分の質量分率輸送式でのモデルの表現

本解析では、反応進行度の輸送式を解く代わりに、各ガス成分の質量分率の輸送式を解いた。その場合の各質量分率輸送式におけるモデル式 (6) の表現を考察する。燃焼場を解析する場合には、以下の輸送式を解く必要がある。

1) 混合分率 f の輸送式：

$$\frac{\partial \rho f}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j f}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \rho f}{\partial x_j} \right) \quad (12)$$

ここに、 u_j : j 方向の流速、 Sc : Schmidt 数、 Sc_t : 乱流 Schmidt 数で、それぞれ定数、 μ : 粘性係数、 μ_t : 渦粘性係数である。

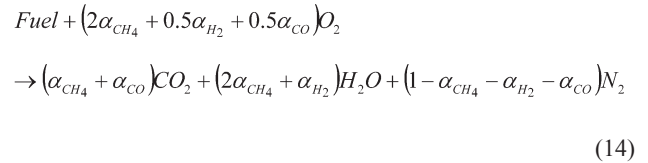
2) 各ガス成分の質量分率輸送式：

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \rho Y_k}{\partial x_j} \right) + \omega_k \quad (13)$$

上式中の x_j は三次元デカルト座標系である。一般化反応進

行度の輸送式 (10),(11) を元に、各成分の質量分率輸送式 (13) に対する反応項 ω_k の表現を検討した。

ここで、燃料がメタン、水素、一酸化炭素、窒素からなる混成ガスである場合を考える。この混成ガス 1 モルあたりに含まれるメタン、水素、一酸化炭素のモル分率をそれぞれ α_{CH_4} , α_{H_2} , α_{CO} とする。このとき、混成ガス 1 モルあたりに含まれる窒素のモル分率は $(1 - \alpha_{CH_4} - \alpha_{H_2} - \alpha_{CO})$ で与えることができる。反応は総括反応とすると、反応式は以下となる。



ここで、 $Fuel = \alpha_{CH_4} CH_4 + \alpha_{H_2} H_2 + \alpha_{CO} CO + (1 - \alpha_{CH_4} - \alpha_{H_2} - \alpha_{CO}) N_2$ である。各 ω の導出方法は既報[5]に拠った。燃料希薄側 ($f \leq f_{st}$) では、

$$\omega_{Fuel} = -f\omega \quad (15)$$

$$\omega_{O_2} = A_{O_2} f \left(1 - \frac{1}{f_{st}} \right) \omega \quad (16)$$

$$\omega_{CO_2} = \frac{(\alpha_{CH_4} + \alpha_{CO}) M_{CO_2}}{M_{Fuel}} f \omega \quad (17)$$

$$\omega_{H_2O} = \frac{(2\alpha_{CH_4} + \alpha_{H_2}) M_{H_2O}}{M_{Fuel}} f \omega \quad (18)$$

$I_0 > 0.7153$ のとき

$$\omega = G \cdot \frac{Y_{Fuel}}{f} \left(1 - \frac{Y_{Fuel}}{f} \right)^2 \frac{\hat{\alpha} \left(1 + \hat{\alpha} \left(1 - \frac{Y_{Fuel}}{f} \right) \right)}{\left(1 + \hat{\alpha} \left(1 - 2 \frac{Y_{Fuel}}{f} \right) \right)^2} \quad (19)$$

燃料過濃側 ($f > f_{st}$) では、

$$\omega_{Fuel} = -\frac{f_{st}(1-f)}{1-f_{st}} \omega \quad (20)$$

$$\omega_{O_2} = -A_{O_2} (1-f) \omega \quad (21)$$

$$\omega_{CO_2} = \frac{A_{O_2} (\alpha_{CH_4} + \alpha_{CO}) M_{CO_2}}{(2\alpha_{CH_4} + 0.5\alpha_{H_2} + 0.5\alpha_{CO}) M_{O_2}} (1-f) \omega \quad (22)$$

$$\omega_{H_2O} = \frac{A_{O_2} (2\alpha_{CH_4} + \alpha_{H_2}) M_{H_2O}}{(2\alpha_{CH_4} + 0.5\alpha_{H_2} + 0.5\alpha_{CO}) M_{O_2}} (1-f) \omega \quad (23)$$

$I_0 > 0.7153$ のとき

$$\omega = G \cdot \left(\frac{1-f_{st}}{f_{st}} \frac{f-Y_{Fuel}}{1-f} \right)^2 \left(1 - \frac{1-f_{st}}{f_{st}} \frac{f-Y_{Fuel}}{1-f} \right) \times \frac{\hat{\alpha} \left(1 + \hat{\alpha} \frac{1-f_{st}}{f_{st}} \frac{f-Y_{Fuel}}{1-f} \right)}{\left(1 + \hat{\alpha} \left(2 \frac{1-f_{st}}{f_{st}} \frac{f-Y_{Fuel}}{1-f} - 1 \right) \right)^2} \quad (24)$$

式(19),(24)において,

$$G = \frac{4\rho_u Su}{\delta} I_0^2 \left(\frac{df}{dx} + \frac{\delta}{2} \frac{d^2f}{dx^2} \right) \left(\frac{df}{dx} \right)^{-1} \quad (25)$$

$$\hat{\alpha} = \tanh \left(\frac{2 \frac{df}{dx}}{\frac{df}{dx} + \frac{\delta}{2} \frac{d^2f}{dx^2}} \right) \quad (26)$$

このとき、混成ガスは窒素を含むので、混合分率 f は空気中に含まれる窒素の輸送方程式の解から、以下のように代数的に計算できる。

$$f = 1 - \frac{Y_{N_2, Air}}{1 - A_{O_2}} \quad (27)$$

ここで、 $Y_{N_2, Air}$ は空気中に含まれる窒素の質量分率である。つまり、ある位置における窒素の質量分率 Y_{N_2} は、 $Y_{N_2, Air}$ と燃料中に含まれる窒素の質量分率 $Y_{N_2, Fuel}$ の和として表される。

混成ガスのように多成分燃料である場合は、 α_{CH_4} 、 α_{H_2} 、 α_{CO} が空間で分布を持つため、 f_{st} の値は局所的に変化する。メタン、水素、一酸化炭素のモル分率 α_{CH_4} 、 α_{H_2} 、 α_{CO} は、次式で計算できる。

$$\alpha_k = \frac{f_k}{M_k} \left/ \left(\sum_l \frac{f_l}{M_l} \right) \right. \quad (28)$$

$k, l = CH_4, H_2, CO, N_2, Fuel$ である。したがって、メタン、水素、一酸化炭素、混成ガス中に含まれる窒素の混合分率 f_{CH_4} 、 f_{H_2} 、 f_{CO} 、 $f_{N_2, Fuel}$ から混成ガスに含まれる各成分のモル分率が計算できて、 f_{st} は次式となる。

$$f_{st} = \frac{A_{O_2}}{A_{O_2} + (2\alpha_{CH_4} + 0.5\alpha_{H_2} + 0.5\alpha_{CO}) \frac{M_{O_2}}{M_{Fuel}}} \quad (29)$$

著者らは、上記モデルをベースに、水素含有燃料での水素の選択拡散効果による濃度の変化を評価した。以下にその概要を述べる。

4. 選択拡散効果のモデル化

本章では、既報[8]において提案した、選択拡散効果が乱流燃焼場の燃焼特性に与える影響を評価するモデルについて、概要を述べる。

上記の統一的燃焼モデルでは、各混合分率における Su/δ を平均反応速度として与える必要がある。メタンのように拡散係数が比較的空氣に近い場合には、 Su/δ は予混合気の初期燃空比により一義的に決定される。一方、本研究で対象としている水素含有燃料の場合、水素の拡散係数は空氣の3~4倍であり、選択拡散と呼ばれる独特の現象が起こる。特に乱流燃焼場においては、乱流火炎のうち未燃混合気側に凸な形状を有する部分の先端付近に水素が集中し、火炎から十分離れた未燃混合気中の水素濃度に比して、水素濃度が増大する。そのため、例えば水素含有燃料では、各位置において Su/δ が変化する。水素含有燃料の燃焼場を解くためには、この効果を正しく評価し、燃焼モデルに考慮する必要がある。

まず、燃料の拡散係数が、燃料、空氣の混合特性に与える影響を未燃燃焼場について検討する。 y 方向に一定速度で流れる空氣中に、燃料を点源として供給する状況を考える。空氣の流速を Su とすると、輸送される空氣中のある点 A における燃料の輸送式は、以下のように書ける。

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{D_f}{Su} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \hat{D}_f \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad \text{但し、} \quad \hat{D}_f = \frac{D_f}{Su} \quad (30)$$

Su は、層流燃焼速度である。上式の解は、 f_0 を拡散する燃料の質量として、式(31)で表せる。

$$f = \frac{f_0}{\sqrt{4\pi\hat{D}_f y}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\hat{D}_f y}\right) \quad (31)$$

次いで、乱流燃焼場のように、渦による凹凸のある火炎に対して検討する。本研究では、図1のように凹凸がペアになった火炎を考える。選択拡散の効果として、凹面形状の火炎上の点 A 上流では、空氣よりも小さい拡散係数を持つ燃料成分が集中し、反対に凸面形状の火炎上の点 B 上流では、空氣よりも大きい拡散係数を持つ燃料成分が集中する。各点 A、B の燃料質量分率をそれぞれ $Y_{(A)}$ 、 $Y_{(B)}$ とする。そして、本研究では、燃料の質量バランスとして、火炎から十分離れた上流位置の未燃混合気の燃料質量分率を f_0 とし、 $Y_{(A)} + Y_{(B)} = 2f_0$ を仮定する。

次に、図1に示す予混合気に対して半径 r の凹面を持つ火炎について考える。凹面火炎が形成する予混合気内では、

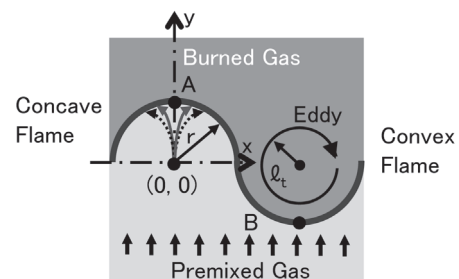


Fig.1 Concept of turbulent premixed flame

拡散による燃料の交換は, $x = -r \sim r$ の範囲でのみ行われる. そのため, $y = r$ の位置を点 A とすると, 点 A における燃料の質量は, 式 (32) となる.

$$\begin{aligned} f_{(A)} &= \frac{2f_0}{\sqrt{4\pi\hat{D}_f y}} \int \exp\left(-\frac{x^2}{4\hat{D}_f y}\right) dx \\ &= f_0 \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{r}{\sqrt{4\hat{D}_f y}}} \exp(-t^2) dt \quad (\because t = x/\sqrt{4\hat{D}_f y}) \\ &\approx f_0 \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{r}{4\pi\hat{D}_f y}\right)\right)^{0.5} \end{aligned} \quad (32)$$

ここで, 誤差関数の近似に Williams の近似式[11]を適用した. 近似式の相対誤差は最大 1% 程度である.

また, 空気に関しても同様の取り扱いを適用できて, 点 A における燃料質量分率は, 式 (33) となる.

$$\begin{aligned} Y_{(A)} &= \frac{f_{(A)}}{f_{(A)} + f_{air(A)}} = \frac{f_0}{f_0 + (1-f_0) \cdot \frac{1 - \exp\left(-\frac{r}{4\pi\hat{D}_{air}}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{r}{4\pi\hat{D}_f}\right)}} \\ &\rightarrow \frac{f_0}{f_0 + (1-f_0)\left(\frac{D_f}{D_{air}}\right)^{0.5}} \quad (r \rightarrow 0) \end{aligned} \quad (33)$$

乱流の極限として, 渦のスケールが平面火炎 ($r = \infty$) に比して十分に小さい, すなわち $r \rightarrow 0$ の極限を考え, 式 (33) のように簡略化した. この結果は, 十分に大きい曲率を持つ場においては, 初期濃度と燃料, 空気の拡散係数比により, 燃料濃度が変化する事を意味する.

式 (33) は, 火炎面が予混合気に対して凹面の場合である. 凸面の場合, 燃料の質量バランスから $Y_{(A)} + Y_{(B)} = 2f_0$ を仮定すると式 (34) となる.

$$Y_{(B)} = 2f_0 - \frac{f_0}{f_0 + (1-f_0)\left(\frac{D_f}{D_{air}}\right)^{0.5}} \quad (34)$$

なお, 拡散係数 D_f と D_{air} の比が 1 である場合は, 式 (33), (34) から $Y_{(A)} = Y_{(B)} = f_0$ となる. 既報[8]では, 式 (34) で求めた凸火炎における燃料の質量分率から計算した燃焼速度が, 城戸, 中原らが実験計測した乱流予混合火炎の局所燃焼速度の平均値[9]を精度良く評価することを確認した. したがって, 式 (34) によって選択拡散効果による燃料濃度変化を評価すれば, 選択拡散効果の燃焼場への影響が考慮できると考える.

これを燃料がメタン, 水素, 一酸化炭素, 窒素の混成ガスである場合について検討する. 図 1 に示した凹火炎の点 A における, メタン, 水素, 一酸化炭素, 窒素の各質量は, 上記と同様の考え方によれば, 以下の様に展開できる.

Table 1 Binary Diffusion Coefficient for gases

	CH ₄	H ₂	CO	Air
$D \times 10^4$ (m ² /s)	0.216	0.778	0.214	0.208

$$f_{k(A)} = f_{k(0)} \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{r}{4\pi\hat{D}_k}\right)\right)^{0.5} \quad (35)$$

$$f_{air(A)} = \left(1 - \sum_k f_{k(0)}\right) \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{r}{4\pi\hat{D}_{air}}\right)\right)^{0.5} \quad (36)$$

f_k は成分 k ($k = CH_4, H_2, CO, N_{2,Fuel}$) の質量, $f_{k(0)}$ は成分 k の初期の質量分率, D_k は成分 k の拡散係数を燃焼速度で除した値である. これより, 点 A での成分 k の質量分率は, 以下となる.

$$Y_{k(A)} = \frac{f_{k(A)}}{\sum_l f_{l(A)} + f_{air(A)}} \quad (37)$$

前節同様に, 乱流の極限として, 渦のスケールが平面火炎 ($r = \infty$) に比して十分に小さい場合 ($r \rightarrow 0$) には,

$$Y_{k(A)} = \frac{f_{k(A)}}{\sum_l f_{l(A)} \left(\frac{D_k}{D_l}\right)^{0.5} + \left(1 - \sum_l f_{l(A)}\right) \left(\frac{D_k}{D_{air}}\right)^{0.5}} \quad (38)$$

となる. 特に燃料が混成ガスの様に複数成分から成る場合について, 選択拡散効果を評価する理論的な方法は, 本研究の取扱いの他は困難と考える.

前述した既報[8]の検証結果から, 乱流燃焼場では, 凸火炎において選択拡散によって燃料が集中し, 局所的な燃焼速度が増加することが支配的と考える. 凸火炎の点 B における各質量分率は, 各成分 k についても以下で表現できる.

$$Y_{k(B)} = 2f_{k(0)} - Y_{k(A)} \quad (39)$$

したがって, 式 (39) で求まる凸火炎における各質量分率に対する Su/δ を, 式 (6) の燃焼モデルに代入すれば, 乱流燃焼場での選択拡散効果が考慮できる. 式 (39) の拡散係数は表 1 の値 (298 K, 0.1013 MPa) [11]を使用した. ここで, 空気の拡散係数 D_{air} は, 酸素と窒素の相互拡散係数を採用した.

5. H₂/N₂ 浮上り火炎による検証

本研究では Cabra らによる実験結果[10]を解析した. 体系を図 2 に, 解析条件を表 2 に示す. 中央に配置された内径 $D = 4.57$ mm の燃料ノズルから燃料が供給され, その周囲から酸素を含む $T_{in} = 1045$ K の既燃ガスが供給される. 燃料ノズルの周囲に供給する既燃ガスは, 水素を燃焼させて生成しているため水蒸気を含む. 燃料は窒素で希釈され

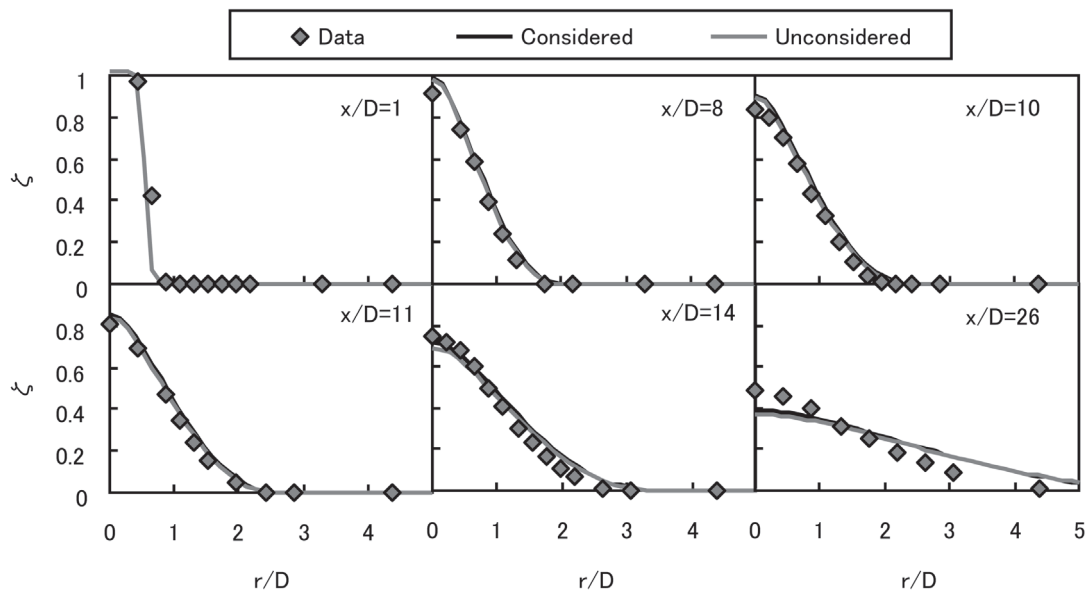


Fig.4 Mean mixture fraction along radial direction

す。解析においても、実験と同様の浮上り火炎が再現できている。以下、各分布について解析結果と実験結果を比較して考察する。

図4は $x/D = 1, 8, 10, 11, 14, 26$ における半径方向の混合分率分布を示す。 x/D は軸方向座標 x を燃料ノズル直径 D で無次元化した無次元距離である。半径方向座標 r についても、燃料ノズル直径で無次元化した r/D で示す。混合分率 ζ は、以下の Bilger の定義[14]によって算出した。

$$\zeta = \frac{\frac{(Z_H - Z_{H,O})}{2M_H} - \frac{(Z_O - Z_{O,O})}{M_O}}{\frac{(Z_{H,F} - Z_{H,O})}{2M_H} - \frac{(Z_{O,F} - Z_{O,O})}{M_O}} \quad (46)$$

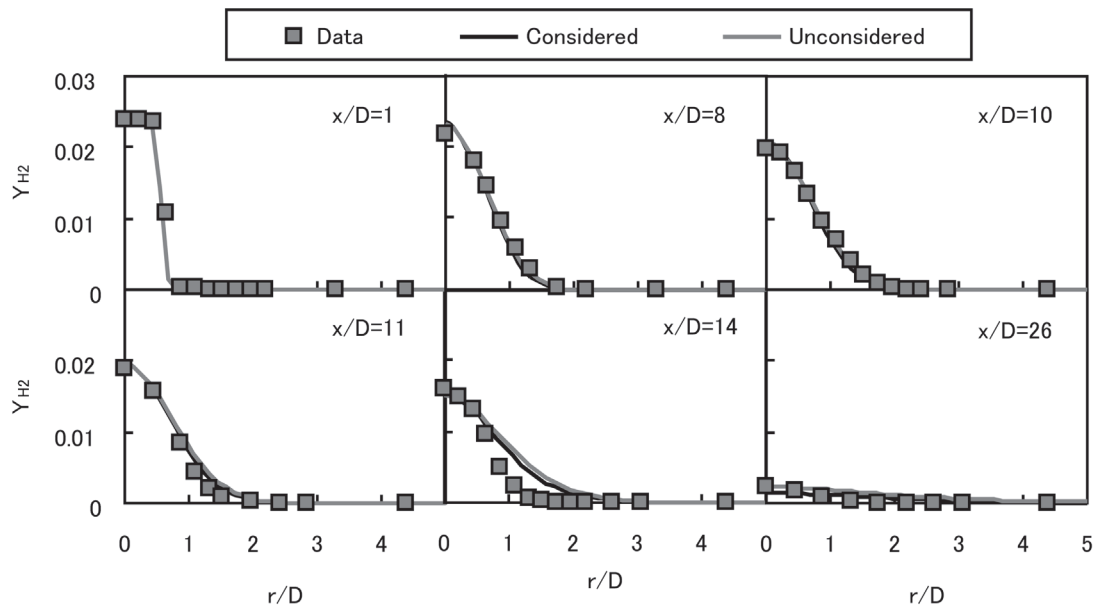
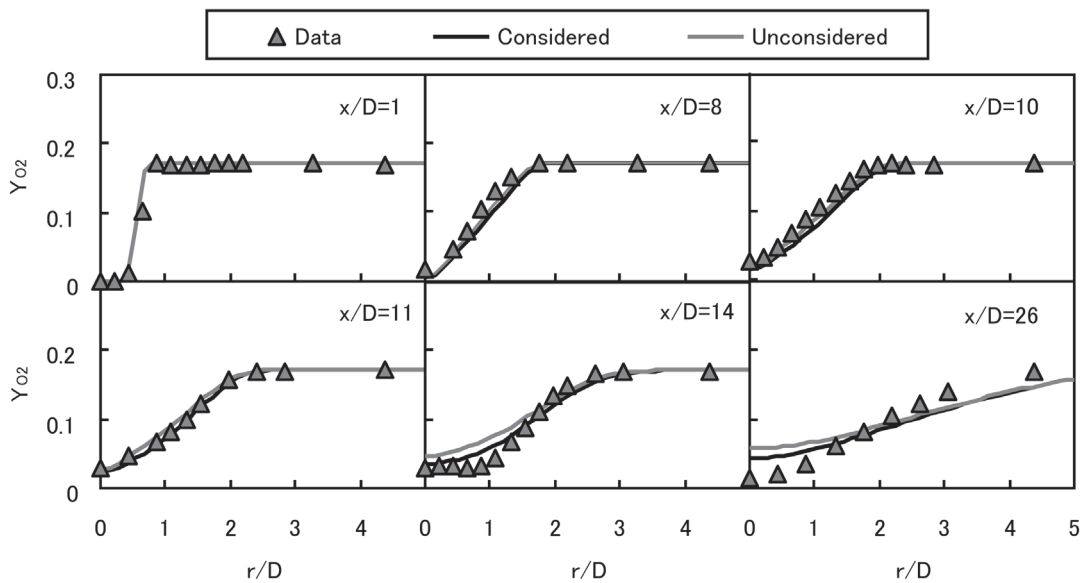
Z_i は i 原子の質量分率であり、 $Z_{i,j}$ は流体 j (O : 酸化剤, F : 燃料) の中に含まれる i 原子の質量分率、 M_i は i 原子の原子量である。ここで、混合分率 ζ は3章中の混合分率 f とは定義が異なることに注意されたい。図で Data が実験値、Considered が選択拡散効果を考慮した場合の解析値、Unconsidered が選択拡散効果を考慮しない場合の解析値である。

$x/D \leq 11$ では、選択拡散効果の考慮の有無によらず解析結果は実験結果を再現し、燃料ノズルから噴出する燃料の拡散を、精度良く評価できている。しかし、 $x/D = 14$ では、解析結果は実験結果からずれ始め、 $x/D = 26$ では、解析結果は実験結果に比べて大きく鈍った分布となった。これは、乱流モデルが燃料の拡散を実際に比べて大きく評価したためと考える。乱流モデルに標準 $k-\epsilon$ モデルを用いた場合に、噴流場での物質拡散を過大に評価することは、広く知られている。Masri [15]らは、本研究と同じ体系を標準 $k-\epsilon$ モデルを用いて解析し、噴流の下流で燃料の拡散を過大に評価

することを示した。本研究では、物質拡散の解析精度を上げるために、 $k-\epsilon$ モデルの中でも噴流場の解析に適していると言われる RNG $k-\epsilon$ モデルを採用したが、 $x/D \geq 14$ では燃料の拡散を過大に評価した。燃料ノズルからある程度下流の燃料拡散を正しく評価するには、他の乱流モデルや LES による混合解析が必要と考える。以降では、燃料の拡散が再現できている $x/D \leq 11$ の領域を中心に考察する。

図5は半径方向の H_2 質量分率分布、図6は半径方向の O_2 質量分率分布を示す。断面の x/D は図4と同じである。混合分率分布と同じく、 $x/D \leq 11$ では、解析結果は実験結果を再現しており、物質拡散が正しく評価できていると考える。図5、図6で選択拡散効果を考慮した解析結果は、考慮しない解析結果に比してわずかに値が小さい。これは、選択拡散効果を考慮しない解析結果に比して、考慮した解析結果は、選択拡散効果によって反応速度が増加し、 H_2, O_2 の消費が大きくなったためである。 $x/D \geq 14$ では、物質拡散の過大評価によって、解析結果は実験結果に比して鈍った分布となった。選択拡散を考慮した解析結果は、考慮しない解析結果に比べて値が小さくなっており、 $x/D \leq 11$ だけでなく $x/D \geq 14$ においても選択拡散効果によって反応速度が増加することを示している。

図7は半径方向の H_2O 質量分率分布を示す。 $x/D = 1$ では、解析結果は実験結果を再現し、選択拡散効果の考慮の有無で差はない。 $x/D = 8$ では、選択拡散効果を考慮した解析結果の分布が、 $r/D = 1$ 付近で上に凸となっており、反応が開始している。さらに、 $x/D = 10$ では、選択拡散を考慮しない解析結果の分布が、 $r/D = 1$ 付近で上に凸となっており、反応が開始する。しかし、 $x/D = 8, 10$ では、実験結果の分布には、凸な分布が無く、反応は開始しない。実験結果の分布は、 $x/D = 11$ において、反応が開始して上に凸と

Fig.5 Mean H₂ mass fraction along radial directionFig.6 Mean O₂ mass fraction along radial direction

なっている。つまり、解析結果は実験結果に比べて反応の開始する x/D が小さく、解析の反応速度が過大に評価された。反応速度の過大評価は、燃焼モデル中の Su/δ の計算のために、素反応計算で使用した反応メカニズムの影響と考える。また、 $x/D=8, 10$ では、選択拡散効果を考慮しない解析結果は、実験結果に値が近いが、選択拡散効果を考慮した場合は、選択拡散効果によってさらに反応速度が増加し、実験結果との差が大きくなった。一方、 $x/D=11$ では、選択拡散効果を考慮した解析結果は実験結果を良く再現するが、選択拡散効果を考慮しない解析結果は、実験結果に比して値が小さい。この x/D による選択拡散効果の影響の

違いについて考察すると、本研究では、局所的な火炎構造は考慮せず、解析領域全体について、選択拡散効果による濃度変化を考慮している。実際の選択拡散効果は、局所的な火炎構造に対し、その影響が強く作用するため、実験結果と解析結果との間にこのような差が生じたと考える。したがって、 $x/D=11$ で選択拡散効果を考慮した解析結果が実験結果を良く再現したが、この結果だけでは式(39)で選択拡散効果を考慮することの優位性が示せたとは言えない。 $x/D \leq 11$ についても、高精度に解析するには、 Su/δ の計算に用いた反応メカニズムの見直しと選択拡散モデルに火炎構造を考慮することが必要である。しかし、反応開始

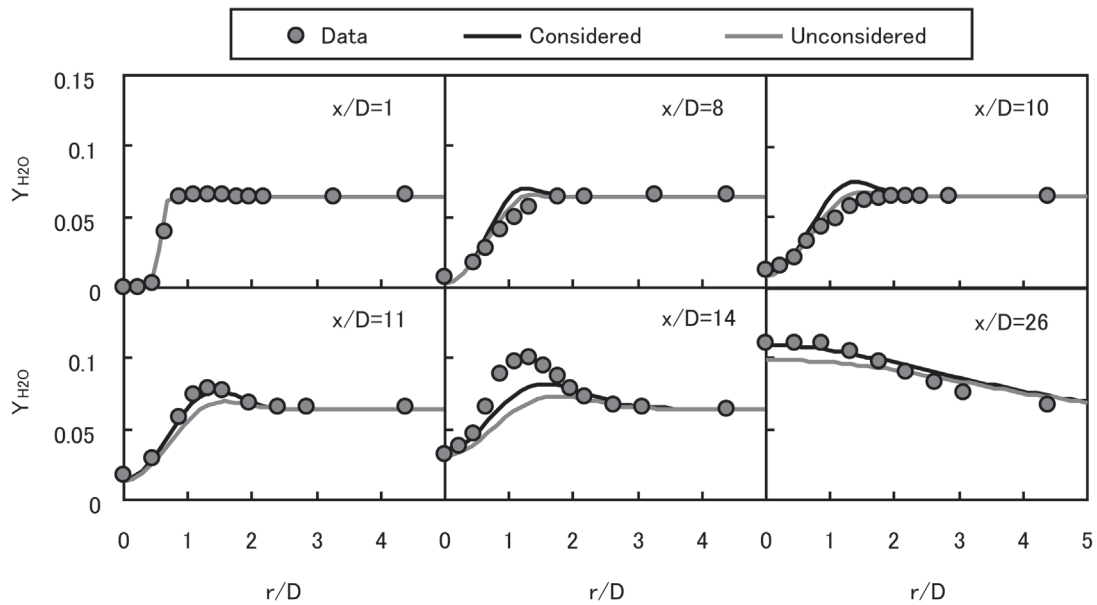
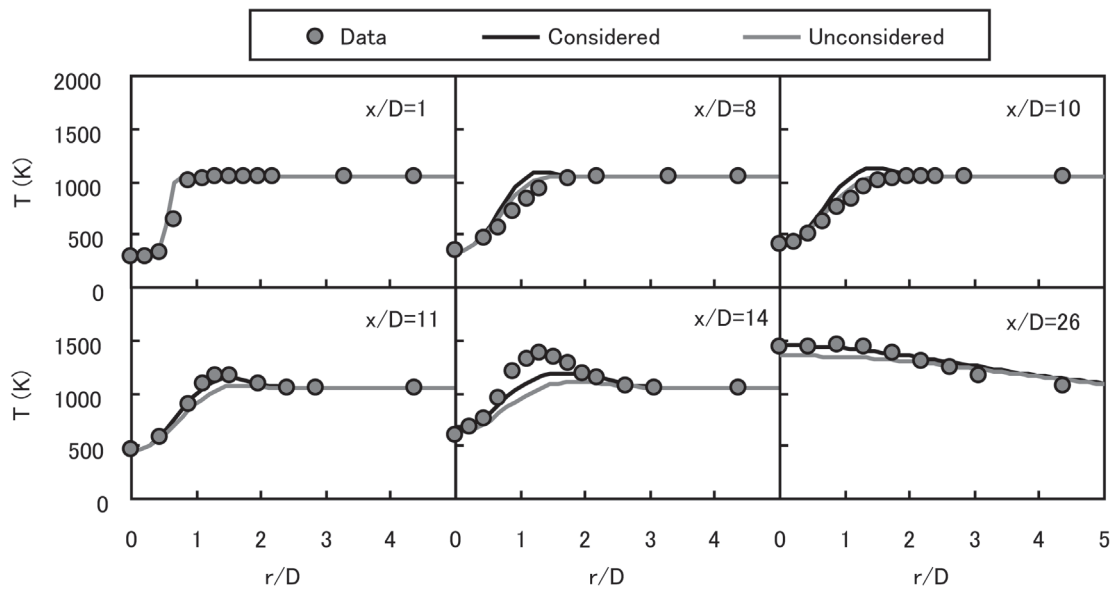
Fig.7 Mean H₂O mass fraction along radial direction

Fig.8 Mean Temperature along radial direction

位置での反応速度を過大評価することに注意すれば, 選択拡散効果を考慮した解析結果の解析精度は, 現状でも十分と考える。また, $x/D \geq 14$ では, 物質拡散が正しく評価できていないが, $x/D \geq 14$ の断面の $r/D \leq 3$ の領域では, $x/D \leq 11$ の結果と同じく選択拡散効果による反応速度の増加によって, 選択拡散効果を考慮した解析結果は, 値が大きくなった。

図 8 は半径方向の温度分布を示す。本研究では, 燃焼モデルが総括反応であるので, 解析結果は実験結果に対して図 7 の H₂O 質量分率分布と同様の傾向である。選択拡散効果を考慮した解析結果は, H₂O 質量分率分布と同じく,

$x/D = 11$ の分布で実験結果を良く再現した。

図 9~13 は, 中心軸上の混合分率分布, H₂ 質量分率分布, O₂ 質量分率分布, H₂O 質量分率分布, 温度分布を示す。物質拡散が正しく評価できている $x/D \leq 11$ で考察すると, 各分布について中心軸上では選択拡散効果の考慮の有無で差は小さく, 解析結果は実験結果を良く再現した。分布全体では, 選択拡散効果の考慮の有無によって, 解析結果が実験結果に近いものとかい離するものがある。しかし, 繰り返すように本研究の乱流モデルでは $x/D \geq 14$ で物質拡散が正しく評価できていない。定性的には, 図 10 の H₂ 質量分率分布と図 11 の O₂ 質量分率では値が小さく, 図 12 の H₂O

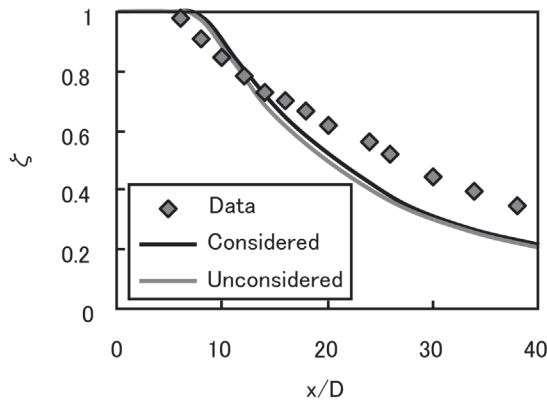


Fig.9 Mean mixture fraction along centerline

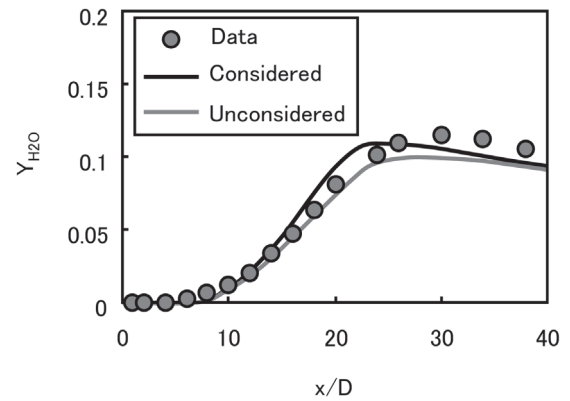
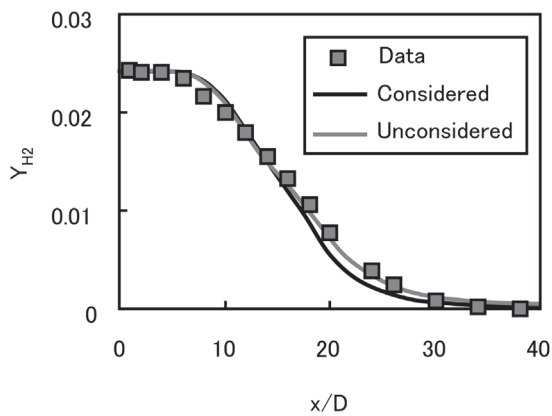
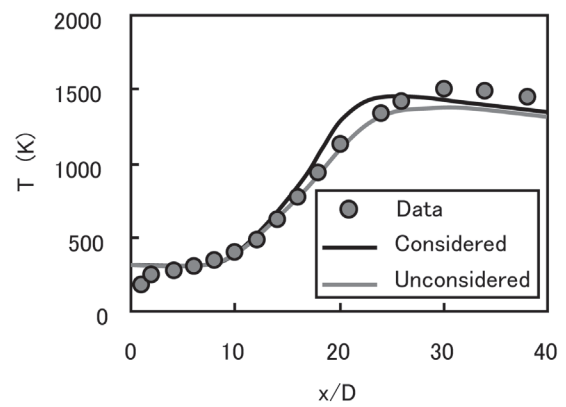
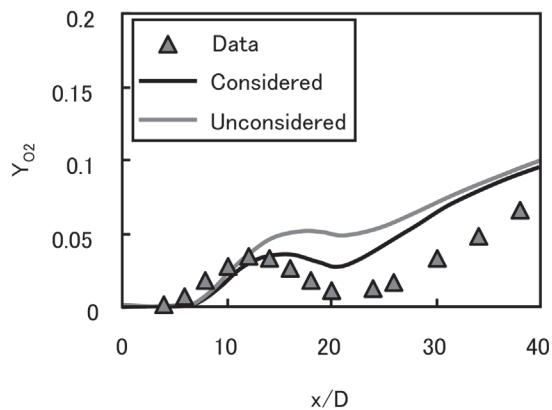
Fig.12 Mean H₂O mass fraction along centerlineFig.10 Mean H₂ mass fraction along centerline

Fig.13 Mean temperature along centerline

Fig.11 Mean O₂ mass fraction along centerline

質量分率は値が大きくなっており、中心軸上でも、選択拡散効果を考慮した解析では反応速度が増加する。中心軸上の $x/D \geq 14$ について、選択拡散効果の考慮の影響を詳細に検討するためには、物質拡散を下流まで正しく評価できる乱流モデルや *LES* で解析する必要があると考える。

以上、選択拡散効果を考慮の有無が解析精度に与える影響について考察した。適用した乱流モデルである *RNG k-ε*

モデルの物質拡散の評価精度が $x/D \geq 14$ の下流では不十分であったため、選択拡散効果を考慮することの優位性は明確ではない。選択拡散効果が顕著に出やすい体系の解析によって、式 (39) のモデルで選択拡散効果を考慮する優位性の更なる検証が必要と考える。ただし、反応速度をやや過大評価することに注意すれば、本研究の選択拡散モデルを組み込んで解析することに本質的な問題は無いと考える。

6. 結言

予混合燃焼場及び拡散燃焼場に適用可能な統一的燃焼モデルを、メタン、水素、一酸化炭素、窒素から成る混成ガスを燃料とする場合に対して拡張した。そして、拡張した燃焼モデルに火炎構造を仮定して選択拡散効果による濃度変化を考慮する選択拡散モデルを組み込み、 N_2 希釈した H_2 を燃料とする噴流火炎を解析した。

乱流モデルに噴流場の解析に適するとされる *RNG k-ε* モデルを用いて解析し、解析結果は実験結果を一定精度で再現した。しかし、乱流モデルは $x/D \geq 14$ で燃料の拡散を過大に評価した。燃料の拡散を下流まで正しく評価するには、他の乱流モデルや *LES* による解析が必要である。

今後, 物質拡散を下流まで正しく評価できる乱流モデルや *LES* との組合せによる再解析や, 選択拡散効果が顕著に出やすい体系の解析によって, 本研究の燃焼モデルと選択拡散モデルについて検証を進めていく.

References

1. 稲毛, 大塚, 機論 B 編 61 巻 586 号, 2290, (1995).
2. 稲毛, 大塚, 機論 B 編 63 巻 609 号, 1806, (1997).
3. 稲毛真一, 日本燃焼学会誌, 49 巻 150 号, 47, (2007).
4. 稲毛真一, 日本燃焼学会誌, 49 巻 150 号, 57, (2007).
5. Ebret 他, 日本燃焼学会誌, 50 巻 152 号, 126, (2008).
6. 稲毛真一, 日本燃焼学会誌, 50 巻 154 号, 353, (2008).
7. 稲毛真一, 日本燃焼学会誌, 51 巻 155 号, 63, (2009).
8. 稲毛他, 日本燃焼学会誌, 54 巻 159 号, 60, (2010).
9. 城戸, 中原, 機論 B 編 63 巻 614 号, 277, (1997).
10. Lifted H_2/N_2 Jet Flame in a Vitiated Coflow: <http://www.me.berkeley.edu/cal/vcb/data/VCHNData.html>
11. 日本規格協会, 数値統計表, (1972).
12. 日本機械学会, 技術資料 流体の熱物性値集, (1983).
13. Yakhot, V., et. al., *Phys. Fluids* A4 (1992), 1510.
14. Bilger, R. W., *Combust. Flame* 80 (1990), 135.
15. Masri, A. R. et. al., *Combust. Theory Modeling* 8 (2004), 1.