

■原著論文/ORIGINAL PAPER■

超小型燃焼器における壁面でのラジカルクエンチングを考慮した数値解析

Numerical Study on Ultra-micro Combustor with Considering Radical Quenching on the Wall

今井 俊幾¹・山下 博史^{1*}・林 直樹¹・趙 黛青²IMAI, Toshiki¹, YAMASHITA, Hiroshi^{1*}, HAYASHI, Naoki¹, and ZHAO, Daiqing²¹ 名古屋大学大学院工学研究科 〒464-8603 名古屋市千種区不老町
Nagoya University, Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya-city, 464-8603, Japan² 中国科学院広州能源研究所
Guangzhou Institute of Energy Conversion of CAS, Guangzhou 510640, China

2010年5月13日受付; 2010年8月12日受理 / Received 13 May, 2010; Accepted 12 August, 2010

Abstract : In recent years, electrical devices like cell phone and laptop PC have been downsized. So, there is high demand to develop smaller and lighter electrical generator than it is, and many researchers have studied ultra-micro generators. Ultra-micro gas turbine, that is one of ultra-micro generators, is expected to have the energy density of several ten times higher than lithium ion battery. But, the smaller combustor is, the stronger the effect of the wall is. Therefore, thermal quenching and radical quenching through the wall cause combustion more unstable in ultra-micro combustor. Most of researches consider thermal quenching effect, while they ignore radical quenching effect. Moreover, a combustor is too small to measure combustion condition experimentally. This paper describes the result obtained by the numerical simulation for H₂-Air premixed gas combustion considering radical quenching in a simple parallel plate channel and a practical ultra-micro combustor. The numerical model has elementary reaction kinetics considering adsorption and desorption reaction on wall. The details of combustion characteristics, such as temperature, mole fractions, surface coverage, reaction rate and etc, are obtained. The effects of radical quenching are especially examined by comparing with combustor considering surface reactions and one not considering surface reactions. Through these examinations, the effects of radical and heat quenching and radical quenching mechanisms are made clear.

Key Words : Radical Quenching, Ultra-micro Combustor, Numerical Analysis, Hydrogen, Surface Reaction

1. 緒言

1.1. 超小型エネルギー源の需要

近年、携帯電話やノートパソコンなど携帯型電子機器の小型化・高機能化が進んでいる。これらの携帯型電子機器を携帯して、いつでもどこでも使用するためには、軽量で長時間使用できることが必要である。また、独立型のヒューマノイドロボットや災害救助用のロボットの研究開発も盛んに行われている[1-2]。これらの独立型ロボットは電源をケーブルで供給すると不便であったり、常に電源が得られるとは限らないような場所で使用しなければならなかったりすることが考えられる。そのため、小型で軽量な高エネルギー密度を有するエネルギー源が求められている。超小型燃焼器を搭載したウルトラマイクロガスタービンは、現

在多くの電子機器で用いられているリチウムイオン電池に比べ、単位重さ当りの取り出せるエネルギーが数十倍大きい[3]、その実用化が期待されている。現在、超小型ガスタービン[4-5]や熱電素子を用いた小型発電機[6]の研究などが盛んに行われている。また、著者らは名古屋大学と中国科学院広州エネルギー研究所 (GIEC) の共同プロジェクトとして、Fig.1 (a) に示す超小型燃焼器を用いたガスタービン型の発電機や Fig.1 (b) に示す同燃焼器を用いた熱電素子型の発電機の研究開発も行っている。

1.2. 超小型燃焼器の問題点

超小型燃焼器にはその小ささのために解決しなければならない多くの問題がある。まず、燃焼器が小型になるにつれて、比表面積 (燃焼器の体積に対する壁面積の比) が大きくなり、表面の影響が顕著に現れると考えられる。そのため、燃焼器壁面におけるラジカル失活や熱損失の影響が

* Corresponding author. E-mail: yamashita@mech.nagoya-u.ac.jp

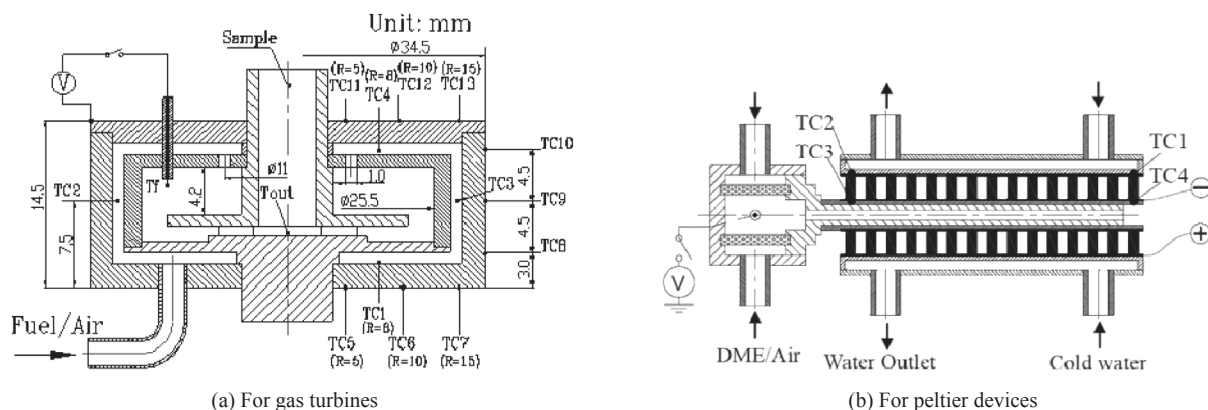


Fig.1 Combustor models proposed by GIEC

顕著になり、安定な火炎を維持することが困難になると考えられる。また、拡散の特性時間が非常に短く、濃度が一樣になる傾向が強いため、火炎帯が厚くなり火炎が不安定になると考えられる[7]。さらに、粘性の影響も大きくなり、圧力損失も大きくなる。

超小型燃焼器では非常に小さい空間を対象にするため、実験による計測は非常に困難であり、数値解析による研究が必要となる。これまでの大きな燃焼器の数値解析では、壁面におけるラジカルクエンチングの影響が小さいために無視されてきた。しかし、今回対象としているような超小型燃焼器では表面におけるラジカルクエンチングの影響は大きくなると考えられるため、考慮する必要がある。

1.3. 本研究の目的

本研究では、「単純な平行平板間流路モデル」および「実用的な超小型燃焼器モデル」に対して、気相の反応モデルに水素・空気予混合気の詳細素反応機構モデル、壁面にラジカルクエンチングのモデルを用い、その影響とメカニズムを考察することを目的としている。燃焼器壁面でラジカルクエンチングが起こる場合と起きない場合とを比較することで、ラジカルクエンチングが燃焼現象にどのような影響があるのか調べ、そのメカニズムについて検討する。表面反応の機構は各物質によって異なると考えられるが、今回はラジカルクエンチングの影響に焦点を当てるため、表面反応にはラジカルクエンチングの影響が顕著に表れる Aghalayam らの提案した Fig.2 の反応機構を用いた[8]。

超小型燃焼器におけるラジカルクエンチングに関連した研究として、Raimondeau ら[9]は直円管マイクロチャンネル内のメタン・空気量論予混合火炎を扱い、流路入口部における熱損失とラジカルクエンチングが火炎伝播に大きな影響を与えることを指摘している。また、Hua ら[10]は一連の研究で、入口部で直径が倍に拡大される直円管マイクロチャンネル内の水素・空気量論予混合火炎を扱い、基本的な燃焼特性について検討を行うとともに、三次元の超小型燃焼器についても数値解析を行っている。しかしながら、これらの研究では、表面反応の状態や関連する気相のラジ

カルとの関係が示されておらず、ラジカルクエンチングの機構について十分には解明されていない。また、本研究の結果と定量的に直接比較できる結果は見当たらない。

2. 解析モデルおよび計算方法

2.1. 燃焼器モデル

2.1.1. 平行平板間流路モデル

まず、超小型燃焼器における壁面でのラジカルクエンチングが燃焼特性に与える影響の基本的な評価を行うため、単純な平行平板間流路を用いた。Fig.3 (a) に用いた境界条件を示す。平板間距離 d は 0.8 mm とし、流路長 l は 3.6 mm とした。座標系はデカルト座標系を用い、計算格子は x 方向に 180 格子、 y 方向に 40 格子の等間隔格子を用いた。現象は平行平板中央で対称となっていると考えられるため、 $y = 0.4 \text{ mm}$ を対称境界条件とし、下半分のみを計算対象とした。左端を流入口、右端を流出口とした。

流入口からは、水素・空気予混合気を十分に速度境界層が発達したものとして、次式に従ってポワズイユ流れを流入させた。

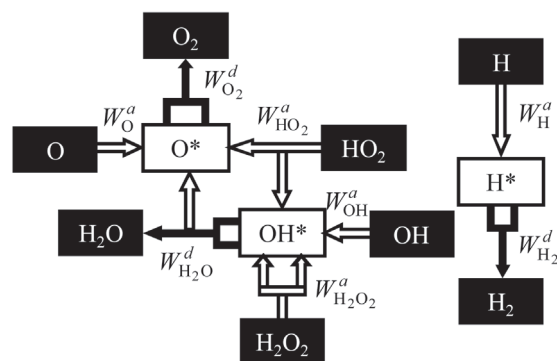


Fig.2 Reaction paths of radical quenching



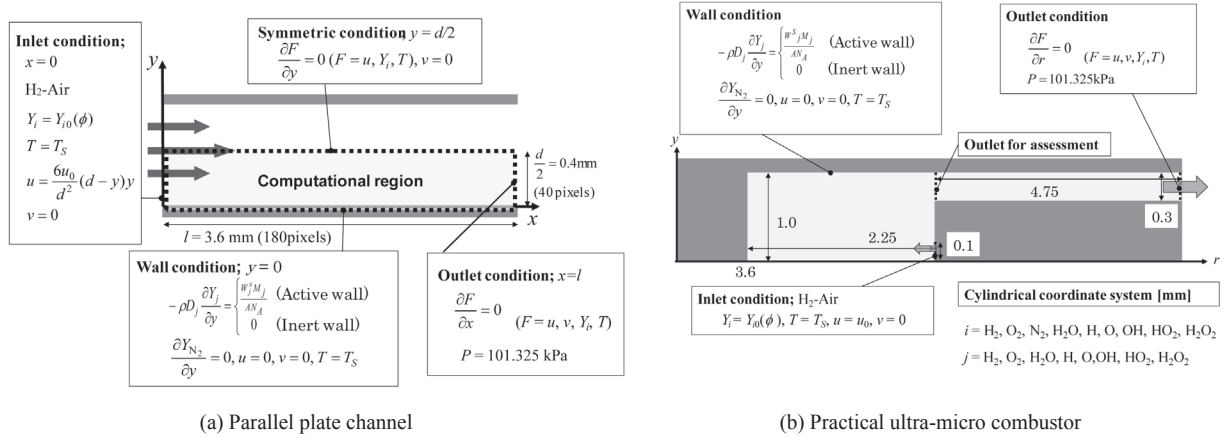


Fig.3 Schematic of analytical models

$$u = \frac{6u_0}{d^2}(d-y)y$$

ここで, 燃焼領域の大部分が流路内に定在するように平均流入速度 u_0 を計算領域内における H_2O の質量分率の中間値をとる位置が $x = 1.2$ mm となるように, u_0 を調整した. また, 流入温度は T_s とした.

流出口は自由流出境界とした. すなわち, 各物理量の流れ方向の勾配をゼロとした. ただし, 圧力振動を抑えるために出口圧力は大気圧 ($P = 101.325$ kPa) に固定した.

壁面は滑りなし壁面とし, 壁面上の流速はゼロとした. 各化学種の質量分率については, ラジカルクエンチングを考慮しない不活性壁面の場合と考慮した活性壁面の場合で異なる. 不活性壁面の場合には, 質量分率の壁面垂直方向の勾配をゼロとし, 湧き出しや吸い込みは無いものとした. 活性壁面の場合での境界条件および計算手法については 2.3 節で述べる.

壁の熱伝導率は十分大きいとし, 壁のエネルギー方程式は解かず, 壁面温度を一定とする. ここで, 流入予混合気は燃焼領域に達するまでに十分に温度境界層が発達し, 壁と平衡状態になることを想定して, 壁面温度は流入温度と同じ T_s とした. これにより, 流入口から燃焼領域に達するまでの助走区間の長さに依存しない解を得ることができる. 実際の燃焼器では, 壁の厚みや材質, 燃焼器外壁の形状によって壁の温度は異なるが, 温度 T_s の条件を変えて計算することで, それらの影響について検討した.

対称境界では, 境界上で y 方向速度 v をゼロとし, その他の物理量は境界面に垂直方向の勾配をゼロとした.

2.1.2. 実用的な超小型燃焼器モデル

次に, 上記の平行平板間流路では考慮することのできない, 流れ場の影響や流入速度のみを変化させた場合の燃焼状態の変化を調べるために, より実用器に近いモデルを用いた. Fig.3 (b) にその境界条件を示す. ここで, $r = 0.0$ について軸対称の円柱座標系を用いている. 燃焼室となる部

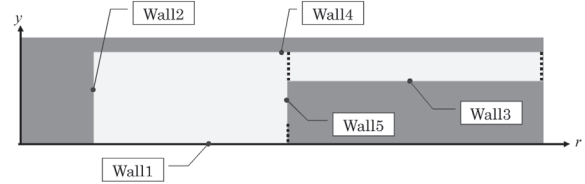


Fig.4 Numbers of walls of practical combustor

分の高さを 1.0 mm, 流出流路となる部分の高さを 0.3 mm とした. また, 幅は半径方向に 2.25 mm とした. 計算格子は, r 方向に 350 格子, y 方向に 50 格子の等間隔格子を用いた.

流入口は, 燃焼器の外側の壁面に設け, 最下端の幅 0.1 mm のスリットから水素・空気予混合気が一様流として流入するとした. 流入速度の調整が必要であった平行平板間モデルとは異なり, このモデルでは, 燃焼器の構造により流入速度を自由に決めることができる.

流出口として上部に長さ 4.75 mm の流路を設けたが, これは出口の境界条件の影響を小さくすることが目的であるため, 出口温度の評価は $r = 5.85$ mm で行った. 流出口および壁面の境界条件は上記の平行平板間流路の場合と同じとした. また, 各壁面を識別するために, Fig.4 のように壁に番号を与えた.

2.2. 気相の支配方程式

本解析では, 連続方程式, 運動方程式, エネルギー方程式, 各化学種における連続方程式, 状態方程式を用いた. 混合気は理想気体とする. ここで, 外力の影響は考慮していない. また, 温度勾配による熱拡散, 濃度勾配による物質拡散に比べ非常に小さいため Soret 効果および Dufour 効果, 圧力拡散の効果は無視する. エネルギー方程式において粘性散逸項は燃焼による発熱に比べ非常に小さく, 圧力仕事項もエックハート数が小さいため無視した.

熱力学定数に関して, 定圧比熱は一定圧力下で温度のみの関数と仮定し, JANAF table [11]の値に対し, 適当な温度範囲で最小二乗近似を施した温度の多項式で与える. 輸送

Table 1 Adsorption reaction on wall

i	Reaction	i^*	σ_{0i}	n
H	$H+* \rightarrow H^*$	H^*	1.0	1
O	$O+* \rightarrow O^*$	O^*	1.0	1
OH	$OH+* \rightarrow OH^*$	OH^*	1.0	1
HO ₂	$HO_2+2* \rightarrow OH^*+O^*$	OH^* O^*	1.0	2
H ₂ O ₂	$H_2O_2+2* \rightarrow 2OH^*$	OH^*	1.0	2

Table 2 Desorption reaction on wall

i^*	Reaction	i	ν_i	E_i^d	n
H^*	$2H^* \rightarrow H_2+2*$	H_2	1.0×10^{10}	0.0	2
O^*	$2O^* \rightarrow O_2+2*$	O_2	1.0×10^{10}	0.0	2
OH^*	$2OH^* \rightarrow H_2O+O+2*$	H_2O	1.0×10^{10}	0.0	2

係数は Smooke らの Simplified Transport Model [12]を適用する。支配方程式の離散化には有限体積法を用い、圧力と速度の連成には SIMPLE 法[13]を用いた。対流項には一次風上差分法、時間展開にはオイラーの陰解法を適用した。時間刻みは 10^{-6} s において SOR 法による繰り返し計算を行った。

気相の化学反応機構には、水素・空気系詳細素反応機構 [14]を用い、9 個の化学種と 21 個の素反応で構成される。熱力学定数は CHEMKIN データベース[15-16]を用いる。

2.3. 壁面の表面反応

固体表面には多くの吸着サイトが存在し、各サイトにつき 1 つの化学種が化学的結合により吸着する。この吸着サイト 1 つが固体表面を占める面積 A は、今回は Si の共有結合半径が約 100 pm であることを勘案し、 1.0×10^{-20} m² とした。吸着サイトがある化学種 i で占有される割合を θ_i で表す。本モデルでは、吸着化学種として、H, O, OH の 3 種を考慮し、* を付して表示する。

2.3.1. 吸着反応

Table 1 に吸着反応を示す。ここで * は空サイトを表す。固体表面に吸着する場合には、化学的吸着によるため、表面に 1 層しか吸着しないととして、Langmuir の吸着モデルを用いる。このとき反応速度 W_i^a は吸着確率 σ_i と衝突頻度 Z_i の積で表せ、それぞれ以下ようになる。

$$W_i^a = \sigma_i Z_i$$

$$\sigma_i = \sigma_{0i} \left(1 - \sum_l \theta_l \right)^n$$

$$Z_i = \frac{P_i}{\sqrt{2\pi M_i R^0 T}} N_A A$$

ここで、 σ_{0i} は初期吸着確率、 P_i は分圧、 M_i は分子量、 R^0 は普遍気体定数、 A は吸着サイト 1 つ当たりの面積、 N_A はアボガドロ数である。

2.3.2. 脱離反応

Table 2 に脱離反応を示す。表面上に吸着した化学種同士が反応することで、固体表面から脱離する。このとき吸着反応の反応速度 W_i^d はアレニウス型の温度依存性を示し、次式で与えられる。

$$W_i^d = \nu_i \exp \left(-\frac{E_i^d}{R^0 T_s} \right) \theta_i^n$$

ここで、 ν_i は脱離の頻度因子、 E_i^d は脱離の活性化エネルギーを示す。

2.3.3. 各吸着化学種における連続方程式

各吸着化学種の被覆率の時間変化は固体表面の吸着サイトにおける各化学種の吸着・脱離反応の反応速度によって、それぞれ次式で表される。

$$\frac{\partial \theta_{H^*}}{\partial t} = W_H^a - 2W_{H_2}^d$$

$$\frac{\partial \theta_{O^*}}{\partial t} = W_O^a + W_{H_2O}^d + W_{HO_2}^a - 2W_{O_2}^d$$

$$\frac{\partial \theta_{OH^*}}{\partial t} = -2W_{H_2O}^d + 2W_{H_2O_2}^a + W_{OH}^a + 2W_{HO_2}^a$$

2.3.4. 気相と固体壁面の反応の連成

表面反応による各物質の 1 サイト当たりの個数生成速度 W_i^s を用いて次式で定義した。

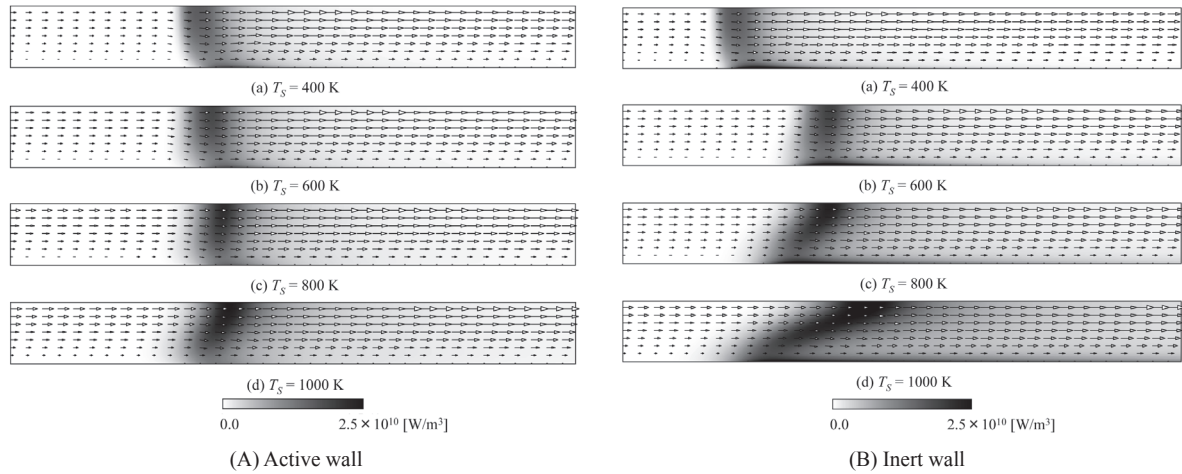
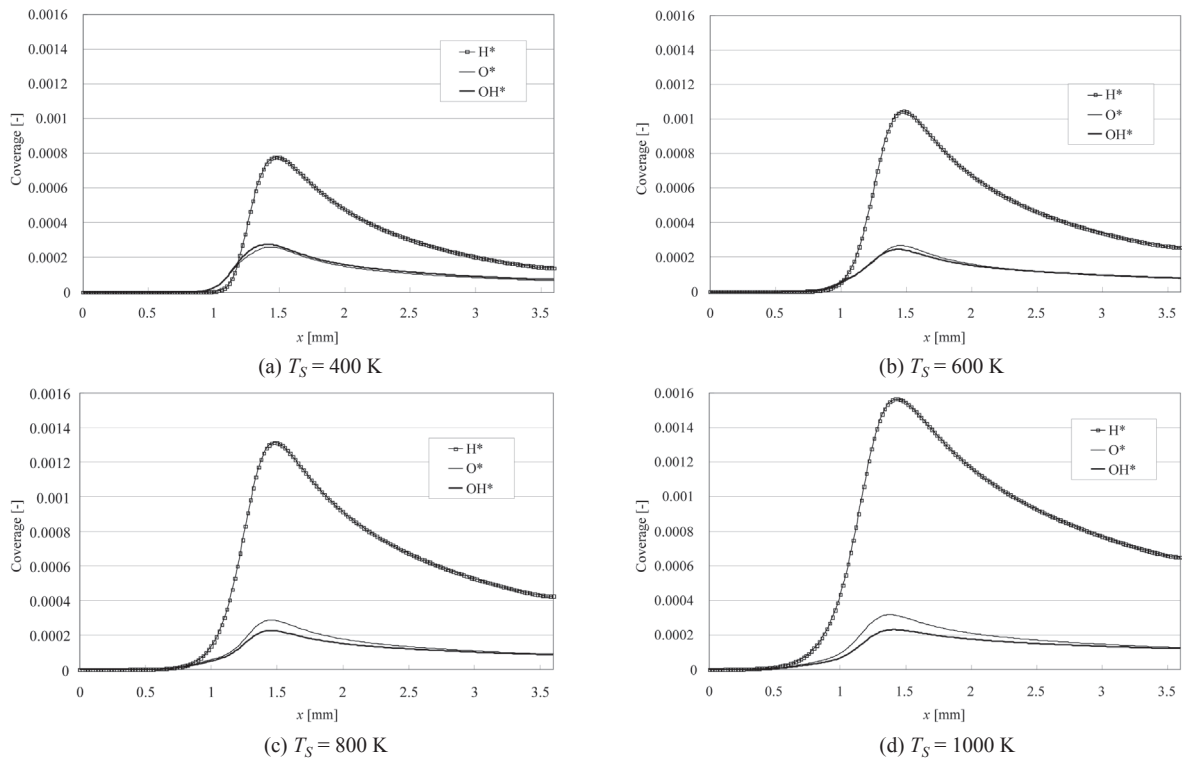
$$-\rho D_i \left(\frac{\partial Y_i}{\partial y} \right)_{\text{surface}} = \frac{W_i^s M_i}{AN_A}$$

ここで、 ρ は密度、 M_i は化学種の分子量もしくは原子量、また、上付きの s は吸着 a または脱離 d を表す。これによって、壁面でのラジカルクエンチングを湧き出し、吸い込みとして表現した。また、N₂ に関しては壁面に垂直方向の勾配をゼロとした。

2.4. 各物理量の評価方法

平行平板間流路モデルにおいて各物理量の評価に計算領域内の積分値を用いる。しかし、条件によって火炎の形状や位置が異なり、一律な評価ができない。そこで、壁面上の温度勾配が最大になる点から上流側へ 0.4 mm、下流側へ 2.0 mm を評価領域と定めた。

総発熱速度 Q は評価領域内における発熱速度の積分値とした。また、平行平板間流路における流入温度、流入速度の違いにより、燃料が初期に持っているエンタルピーや燃料の量が異なる。そこで、流入条件と同一の温度、流入量の混合気が化学平衡状態になるまでに放出するエンタル


 Fig.5 Distributions of heat release rate and velocity vectors ($\phi = 1.0$)

 Fig.6 Distributions of coverage ($\phi = 1.0$, Active wall)

$P_0 - Q_0$ を求め, その値で Q を除して燃焼効率 ε_q とした.

$$\varepsilon_q = \frac{Q}{Q_0}$$

$$Q_0 = \int_0^{d/2} H_0 C u dy$$

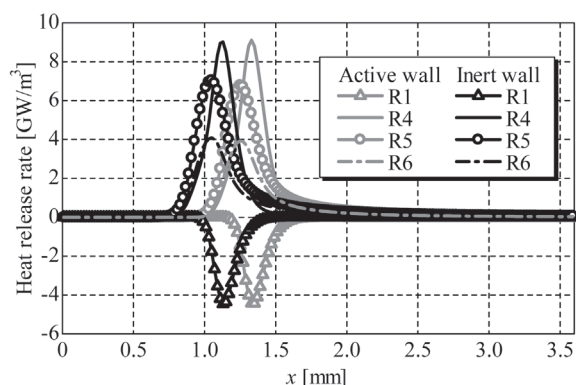
ここで, H_0 は流入混合気が化学平衡になるまでに放出する単位モル当りのエンタルピー, C は流入混合気のモル濃度である.

3. 計算結果および考察

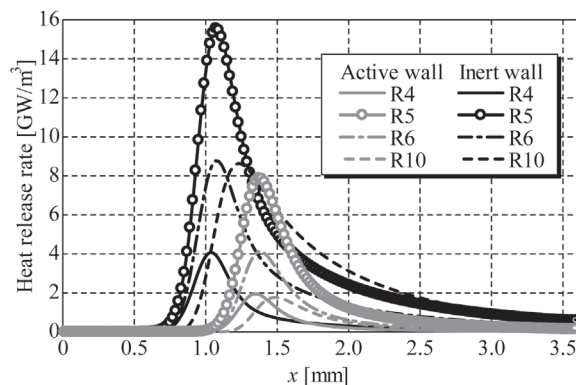
3.1. 平行平板間流路モデル

活性壁面および不活性壁面が火炎に及ぼす影響の違いを調べるために以下のような条件で計算した. 当量比 ϕ は 0.8, 1.0 および 1.2, 壁面温度 T_s は 400 K, 600 K, 800 K および 1000 K とした.

当量比 $\phi = 1.0$ における発熱速度分布および速度ベクトル分布を, 活性, 不活性壁面について Fig.5 (A),(B) に示す. また, 活性壁面における被覆率分布を, 各 T_s についてそれぞれ Fig.6 (a)-(d) に示す.



(a) In center of channel



(b) On wall

Fig.7 Contributions of elementary reactions to total heat release rate ($T_s = 600$ K, $\phi = 1.0$)

(a) Active wall



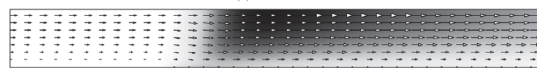
(b) Inert wall

0.0 0.00223 [-]

(a) H radical



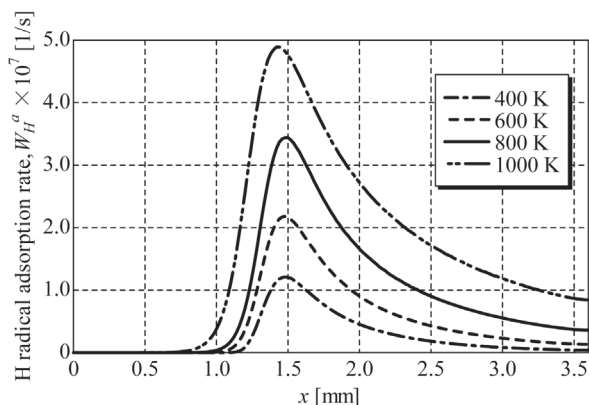
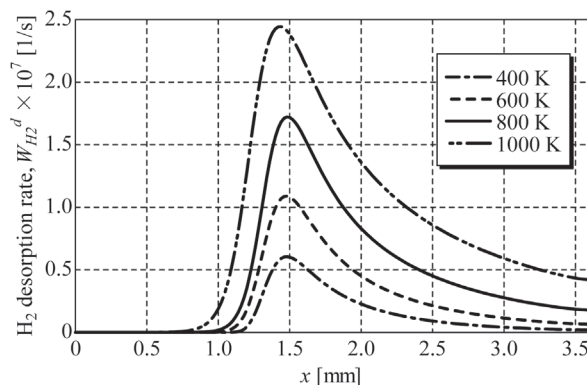
(a) Active wall



(b) Inert wall

0.0 0.011 [-]

(b) OH radical

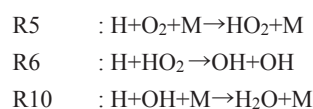
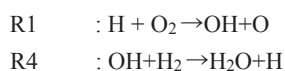
Fig.8 Distributions of H and OH radical mass fraction and velocity vector ($T_s = 600$ K, $\phi = 1.0$)Fig.9 H radical adsorption rate ($\phi = 1.0$, Active wall)Fig.10 H₂ desorption rate ($\phi = 1.0$, Active wall)

壁面温度が高い場合、流入速度が大きくなるので、火炎が傾き、発熱速度も大きくなっている。また、不活性壁面の場合には、活性壁面にはない壁面近傍における強い発熱速度が確認できる。

3.1.1. 壁面近傍の表面反応についての検討

同じ壁面温度において、活性壁面の場合と不活性壁面の場合を比べると、活性壁面の場合では、不活性壁面の場合に比べ、壁面近傍の発熱が抑制されていることが分かる。

Fig.7 に $\phi = 1.0$, $T_s = 600$ K の場合の流路中央付近と壁面近傍の主な素反応の発熱速度への寄与を示す。図中の素反応を以下に示す。



(1) 流路中央付近の発熱速度

Fig.7 (a) に示す流路中央付近について、活性壁面と不活性壁面で各素反応による発熱速度はほとんど同じであることが分かる。つまり、壁面のラジカルエンチングの影響は、流路幅 0.8 mm という狭い流路でも流路中央付近では、素反応への影響はほとんどないことが分かる。これは、流路中央付近では温度が高く、分岐連鎖反応が支配的となる。そのため、多くのラジカルが生成され、壁面のラジカルエンチングの影響がほとんど現れないと考えられる。

(2) 壁面近傍の発熱速度

Fig.7 (b) から、壁面近傍では、流路中央付近の場合と発

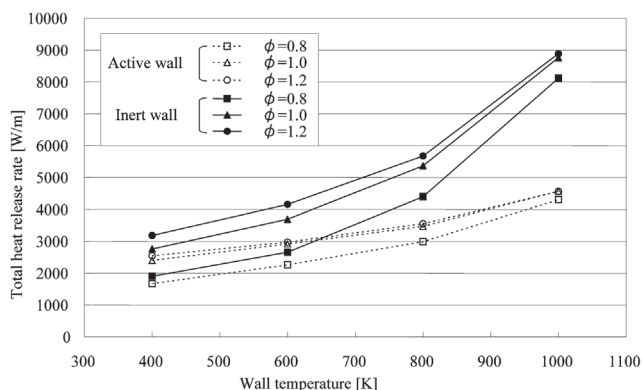


Fig.11 Total heat release rate

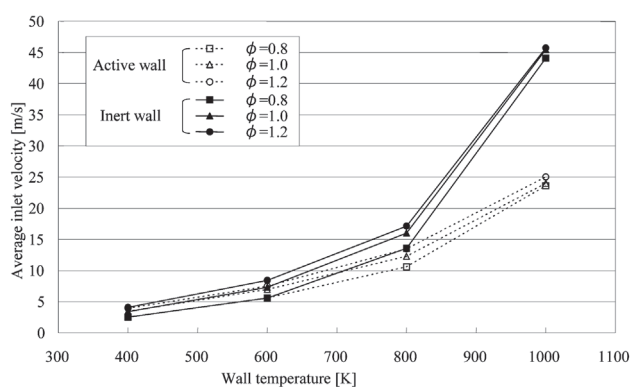


Fig.12 Average inlet velocity

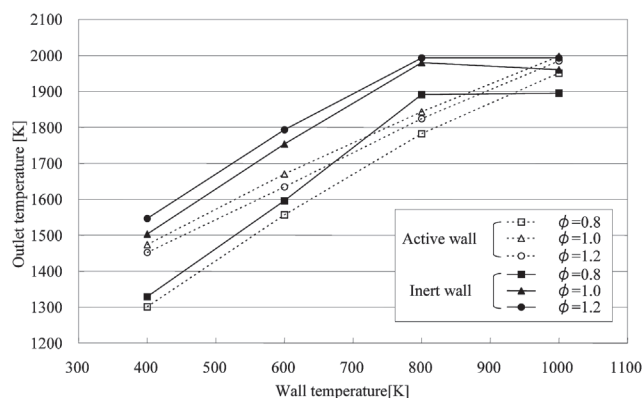


Fig.13 Maximum temperature at outlet

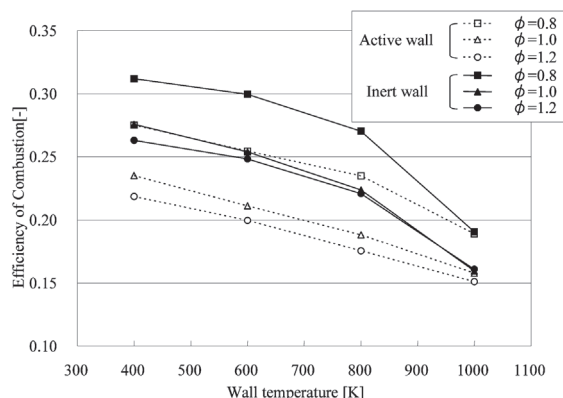


Fig.14 Efficiency of combustion

熱速度に大きく寄与する素反応の種類が異なっていることが分かる。ここでは、壁面が低温であるため、気体は冷やされている。そのため、分岐連鎖反応ではなく、標準生成エンタルピーの小さい H_2O や HO_2 を生成する停止反応が支配的となり、局所的に発熱が大きくなっている。また、停止反応では、連鎖分岐反応に比べ H ラジカルや OH ラジカルの生成が少なく、壁面でのラジカルクエンチングの影響が大きく現れていると考えられる。よって、活性壁面の場合では、主な発熱速度を示す素反応による発熱速度が半分、もしくはそれ以上に抑制されている。ここで、Fig.8 に $\phi = 1.0$, $T_s = 600 \text{ K}$ における H , OH ラジカルの質量分率分布を示す。図より、不活性壁面の場合にはこれらのラジカルが壁面上でも多く分布していることが分かる。それに比べ、活性壁面の場合には、流路中央付近のラジカルの分布は不活性壁面の場合と変わらないが、壁面近傍のラジカルは大きく減少していることが分かる。つまり、 H , OH ラジカルの減少が活性壁面近傍の発熱速度の抑制に大きく影響していることがわかる。

3.1.2. 壁面温度の影響

壁面温度が異なる場合について、ラジカルクエンチングが火炎に及ぼす影響を調べる。Fig.6 (a) と Fig.6 (d) を比べると分かるように、高温の場合には気相中で多くのラジカ

ルが生成するため、壁面への吸着量も大きいことが分かる。Fig.9 および Fig.10 に活性壁面における表面への H ラジカルの吸着速度分布および H_2 の脱離速度分布を各 T_s について示す。図より、高温の場合には、壁面近傍に多くの H ラジカルが存在し、吸着速度および H_2 の脱離速度がともに大きくなっている。つまり、多くの H ラジカルが不活性な化学種に転換されていることが分かる。一方、不活性壁面ではこの転換がないため、壁面温度が高いほど、 H_2O や HO_2 を生成する停止反応による発熱速度が大きくなる。

Fig.11 に各壁面温度における総発熱速度を示す。図より、活性、不活性壁面ともに壁面温度が上昇するに従って、総発熱速度が増加している。また、壁面温度が高い場合、活性壁面と不活性壁面の場合における総発熱速度の差が大きくなっている。ここで、Fig.12 に各温度における平均流入速度を示す。単純な平行平板を用いているために、火炎伝播速度と流入速度がつりあうように流入速度を設定しなければならない。そのため、流速に自由度がなく、Fig.12 のように壁面温度が高温になるほど火炎伝播速度が大きくなる。これにより、流入速度も大きくなってしまっている。よって、Fig.11 における総発熱速度の増加は流入質量流量の増加のために起こっていると考えられる。

また、Fig.13 に流出口における最高温度を示す。発熱速度は壁面温度が高い方が大きくなっているが、流出口の最

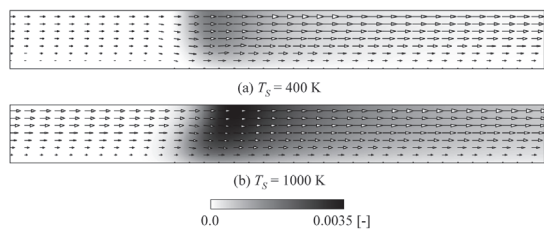


Fig.15 Distributions of H mass fraction and velocity vector ($\phi = 1.0$, Active wall)

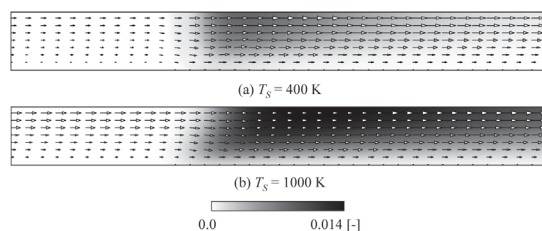


Fig.16 Distributions of OH mass fraction and velocity vector ($\phi = 1.0$, Active wall)

Table 3 Relations between inlet velocity and inlet mass flow rate at $T_s = 400$ K

Inlet velocity [m/s]	10	15	25	40	50	75	100	125
Inlet mass flow rate [g/s]	0.0024	0.0035	0.0059	0.0095	0.0118	0.0178	0.0236	0.0296

Table 4 Relations between inlet velocity and inlet mass flow rate at $T_s = 600$ K

Inlet velocity [m/s]	10	15	25	40	50	75	100	125	150	170
Inlet mass flow rate [g/s]	0.0016	0.0024	0.0039	0.0063	0.0079	0.0119	0.0158	0.0199	0.0239	0.0270

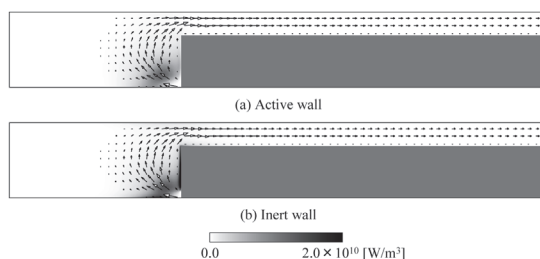


Fig.17 Distributions of heat release rate and velocity vectors ($T_s = 600$ K, $\phi = 1.0$, $u_0 = 15$ m/s)

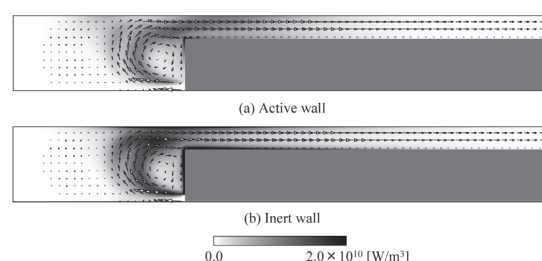


Fig.18 Distributions of heat release rate and velocity vectors ($T_s = 600$ K, $\phi = 1.0$, $u_0 = 100$ m/s)

高温度に関しては壁面温度が高い場合でもあまり高くなっていないことが分かる。よって、燃焼器が超小型である場合には、壁面温度が高い、または、燃料を多く供給し、多くの発熱速度を得た場合でも、流出口において高い温度を得難くなる場合がある。

そこで、超小型燃焼器によって燃料から取り出せたエネルギー量を燃焼効率により評価する。Fig.14 に各壁面温度における燃焼効率を示す。ここから、活性壁面の場合には不活性壁面の場合に比べ、燃焼効率が低くなっていることが確認できる。これは、上で述べたラジカルクエンチングの影響によるものである。また、壁面温度が高い場合には、燃焼効率が低下し、壁面の活性、不活性による差異が小さくなっていることが分かる。ここで、Fig.15, Fig.16 に活性壁面における 400 K と 1000 K の場合の H, OH ラジカルの質量分率分布を示す。これらから、壁面温度が高い方が多くのラジカルが生成していることが分かる。しかし、下流を見ると、生成した多くのラジカルが流出している。つまり、壁面温度が高い場合には、多くのラジカルが生成するが、そのエネルギーは熱として放出される前に燃焼器から出てしまうため、燃焼効率が低くなってしまっている。また、壁面近傍でのラジカルクエンチングは壁面温度が高い

場合で大きい。気相中で多くのラジカルが生成するため、ラジカルクエンチングによるラジカルの減少の影響が相対的に小さくなっていると考えられる。なお、活性壁面と不活性壁面とでは流入速度が異なるので、その影響も考えられる。

3.1.3. 当量比の影響

今回、当量比 0.8, 1.0 および 1.2 の場合について計算した。しかし、Fig.13 の流出口の最高温度や Fig.14 の燃焼効率から分かるように、当量比によって流出口の最高温度の差、燃焼効率の差はあったが、当量比の違いが原因と考えられるラジカルクエンチングの影響の違いはなかった。当量比の違いに注目するためには、より幅広い当量比に関して検討を行う必要があると考えられる。

3.2. 実用的な超小型燃焼器モデル

活性壁面および不活性壁面が火炎に及ぼす影響を調べるために、以下のような条件で計算した。当量比 1.0, 壁面温度は 400 K, 600 K, 流入速度は、10 m/s から 170 m/s の間で変化させた。ここで、Table 3 および Table 4 に流入速度と流入質量流量の関係を示す。

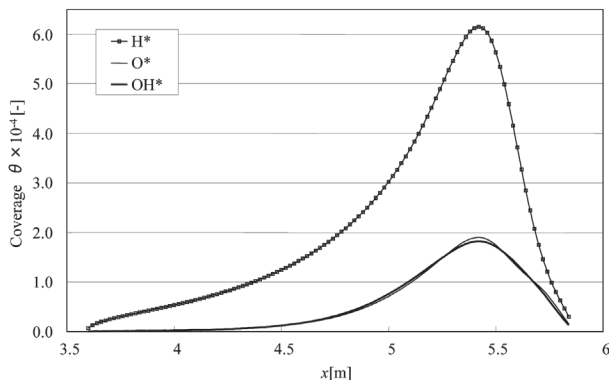


Fig.19 Distributions of coverage
(Wall 1, $T_s = 600$ K, $u_0 = 15$ m/s)

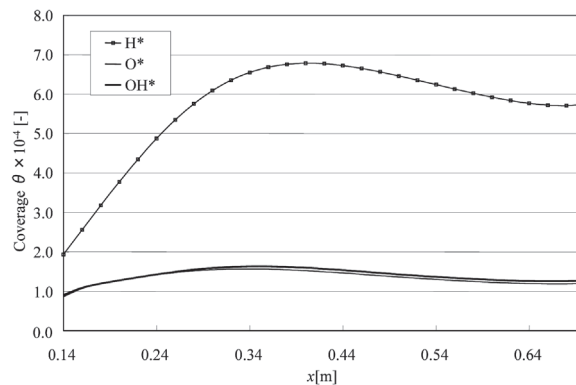


Fig.20 Distributions of coverage
(Wall 5, $T_s = 600$ K, $u_0 = 15$ m/s)

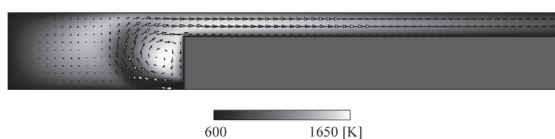


Fig.21 Distributions of temperature and velocity vectors
($T_s = 600$ K, $u_0 = 100$ m/s, Inert wall)

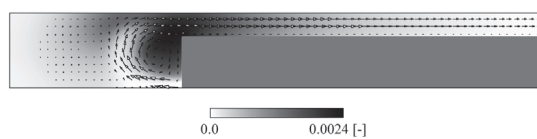


Fig.22 Distributions of H radical mass fraction and velocity vectors
($T_s = 600$ K, $u_0 = 100$ m/s, Inert wall)

3.2.1. 流速による壁面の影響の違い

Fig. 17, 18 に流入速度 15 m/s および 100 m/s の場合における発熱速度分布を壁面温度 600 K の活性壁面, 不活性壁面についてそれぞれ示す。

(1) 流入速度が小さい場合 (15 m/s)

Fig.17 に示すように, 流入速度が小さい場合には, 火炎は流入口近くに形成された。また, 火炎の形状も閉じた火炎が形成され安定して燃焼していた。

活性壁面と不活性壁面を比べると, 平行平板間流路でも見られたように, 不活性壁面の場合には, Wall 1 や Wall 5 の壁面上で停止反応による強い発熱が見られ, 逆に活性壁面では, 壁面近傍の発熱は抑制されていることが分かる。Fig.19 および Fig.20 に壁面温度 600 K における活性壁面の場合の Wall 1 および Wall 5 の各化学種の被覆率分布を示す。これらの図と平行平板間流路の結果である Fig.6 (b) とを比較すると, 両者はよく似た傾向を示している。つまり, 火炎近傍の壁面に化学種が吸着しラジカルクエンチングを起こしていると考えられる。

壁面から離れた火炎の中央は, 平行平板間流路の場合と同じように, 活性壁面でも不活性壁面でもほぼ同じであることが分かる。これは, 流入速度が比較的小さいため, 流れ場も流入口から流出口までスムーズに流れており, 火炎と壁面の接触場所も平行平板間流路の場合と比べあまり変化していないためであると考えられる。

(2) 流入速度が大きい場合 (100 m/s)

Fig.18 に示す流入速度が大きい場合には, 流速 15 m/s の場合と火炎の形状が大きく異なり, 流れ場によって火炎が強く曲げられている。燃焼器の中心側の火炎は消炎しか

ているが, 外側の火炎は強く発熱している。これは, 燃焼器中心側は流速が大きいため火炎が伸張され消炎するが, 燃焼器外側は流れ場によって燃焼器壁面との間に渦ができるため, Fig.21 および Fig.22 に示した温度や H ラジカルの分布からわかるように, 高温既燃ガスや H ラジカルが循環し, 火炎を維持していると考えられる。また, 先ほどよりも水素予混合気の流入量が多いため, 発熱速度も大きくなっている。

活性壁面の場合には, 不活性壁面の場合に比べ, 発熱速度が小さいことがわかる。Fig.23 および Fig.24 に壁面温度 600 K における活性壁面の場合の Wall 4 と Wall 5 の化学種の被覆率分布を示す。Fig.23 から分かるように, 燃焼器上部壁面の Wall 4 では, 多くのラジカルが吸着, ラジカルクエンチングを起こし, 壁面近傍の火炎が弱められている。また, Fig.25 および Fig.26 に示すように高温既燃ガスや H ラジカルが渦により循環しているが, Fig.24 から分かるように, 渦により循環してきたラジカルは Wall 5 に吸着する。そのため, ラジカルクエンチングを起こし, H ラジカルの減少により活性壁面では火炎が弱められていると考えられる。このように, 燃焼器壁面と火炎との位置関係により, 壁面におけるラジカルクエンチングが火炎に及ぼす影響が異なることが分かる。また, 流速が大きくなり, 循環流が生じる場合には, 壁面とラジカルが接触する面積が増えるため, 壁面におけるラジカルクエンチングの影響が顕著に現れる。

3.2.2. 流出口の最高温度

Fig.27 に流入質量流量を変化させた場合の流出口にお

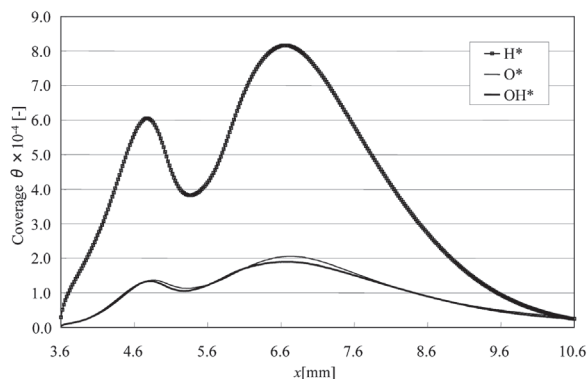


Fig.23 Distributions of coverage
(Wall 4, $T_s = 600$ K, $u_0 = 100$ m/s)

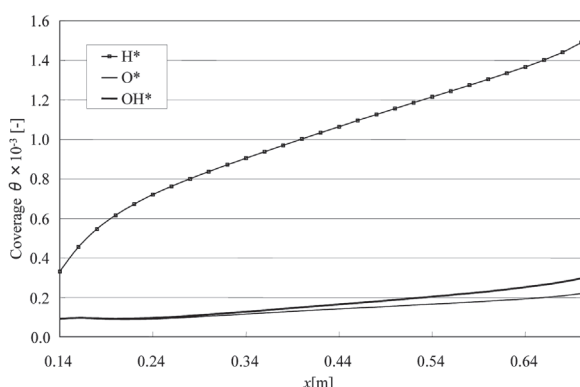


Fig.24 Distributions of coverage
(Wall 5, $T_s = 600$ K, $u_0 = 100$ m/s)

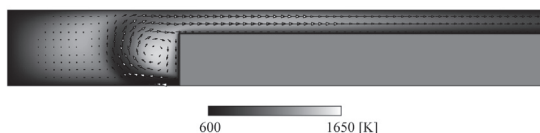


Fig.25 Distributions of temperature and velocity vectors
($T_s = 600$ K, $u_0 = 100$ m/s, Active wall)

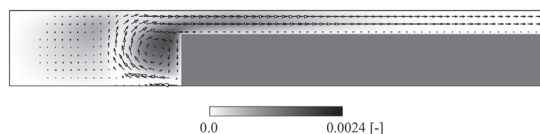


Fig.26 Distributions of H radical mass fraction and velocity vectors
($T_s = 600$ K, $u_0 = 100$ m/s, Active wall)

る最高温度を示す。以下の議論において、質量流量の大きさで3つに区分する。まず、流入質量流量が0.007 g/s付近までは、質量流量の増加に伴って最高温度が高くなっている。この領域を低流入領域とする。次に、流入質量流量0.018 g/s付近までは、流出口の最高温度は低下する。この領域を中流入領域とする。そして、0.018 g/s付近以上では、温度の減少割合が低下している。この領域を高流入領域とする。

(1) 低流入領域

この領域では、壁面温度による最高温度の違いはあるが、活性壁面と不活性壁面の差はほとんど現れていないことが

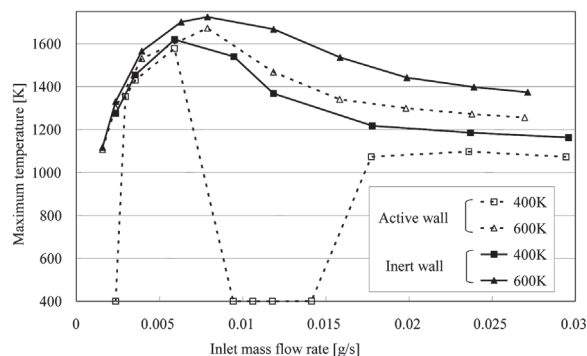


Fig.27 Maximum temperature at outlet

分かる。これは、Fig.17, Fig.18 で示したように、形成される火炎が小さく、流れ方向にある壁面が少ないためにラジカルクエンチングの影響も小さい。また、壁面温度 $T_s = 400$ K、活性壁面の場合においては、流入質量流量を小さくすると不活性壁面では消炎しない条件で消炎した。これは、活性壁面では、熱損失にラジカルクエンチングによるエネルギー損失が加わるため、弱い火炎では維持できず、消炎したと考えられる。

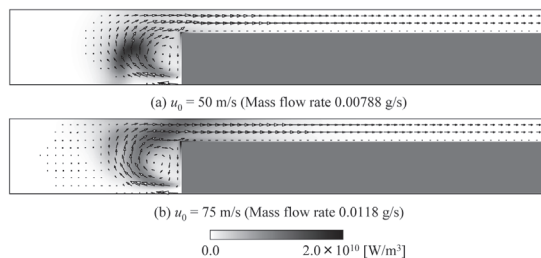
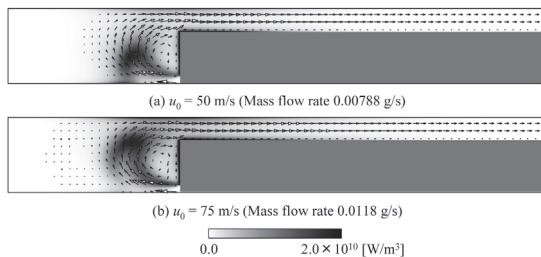
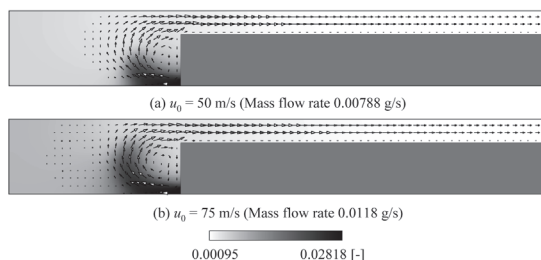
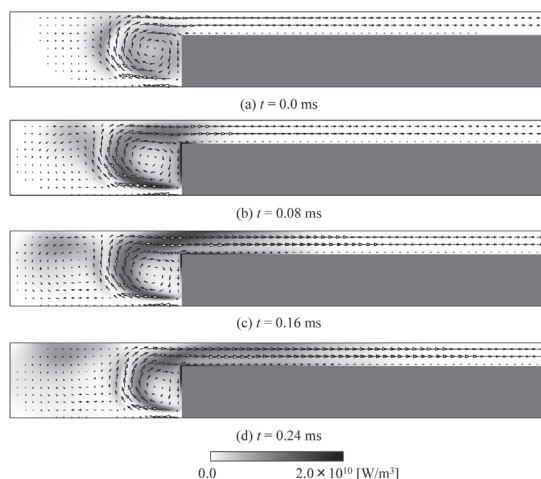
(2) 中流入領域

流出口の最高温度は0.007 g/s から0.009 g/s 付近でどの条件でも最大となり、その後、徐々に低下している。また、活性壁面、不活性壁面の場合で燃焼状態の違いが見られる。特に、壁面温度400 K、活性壁面の場合には、流入質量流量が約0.009 g/s ($u_0 = 40$ m/s) から0.016 g/s ($u_0 = 75$ m/s) になると火炎が不安定になり、消炎、または火炎が振動する現象がみられた。

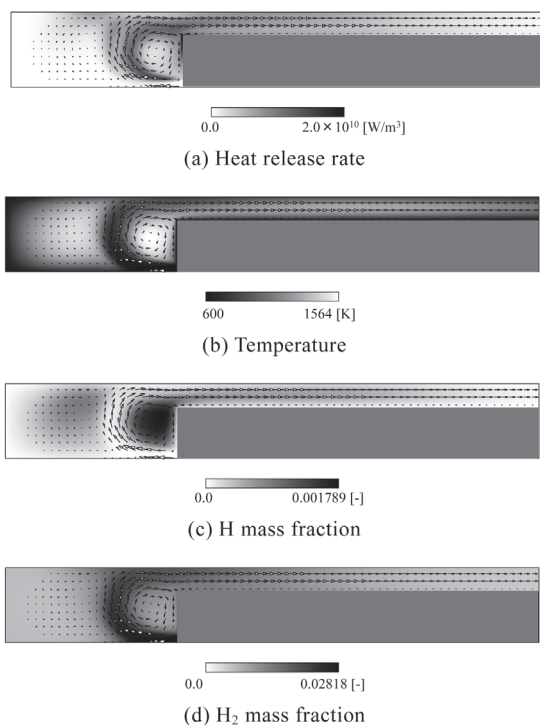
流出口の最高温度がピークを迎えるまでは、壁面温度600 K の場合、Fig.28 および Fig.29 に示す発熱速度分布から分かるように、活性、不活性壁面ともに、 $u_0 = 50$ m/s では、閉じた火炎帯ができるが、 $u_0 = 75$ m/s では、燃焼器中心側の火炎が消炎する。また、活性壁面の場合には燃焼器上壁面に火炎が衝突していることが分かる。

Fig.30 に不活性壁面の場合の水素の質量分率分布を示す。流入速度が50 m/s の場合には、水素はよく消費されているが、流入速度が75 m/s の場合には、局所消炎に伴い燃焼器内側に水素が漏れている。そのため、流出口における最高温度も低くなっていると考えられる。これは、燃焼器中心側は火炎が伸張されるために、消炎し、未燃ガスとして流出してしまうためと考えられる。一方、閉じた火炎ができている場合には、予混合気はよく燃焼し、流出口に到達する前に高温に達することができると考えられる。

また、活性壁面で壁面温度400 K の場合には、流入速度が40~60 m/s では消炎が起き、流入速度が75 m/s では振動した火炎となった。Fig.31 に壁面温度400 K で流入速度70 m/s の振動の1周期分の発熱速度分布を示す。一枚ごとの時間間隔は0.08 ms とした。図より、火炎が振動する場合は、以下のプロセスを経ていることが分かる。


 Fig.28 Distributions of hear release rate and temperature and velocity vectors ($T_S = 600$ K, Active wall)

 Fig.29 Distributions of hear release rate and velocity vectors ($T_S = 600$ K, Inert wall)

 Fig.30 Distributions of H_2 and velocity vectors ($T_S = 600$ K, Inert wall)

 Fig.31 Periodic variation of distributions of hear release rate and velocity vectors ($T_S = 400$ K, $u_0 = 75$ m/s, Active wall)

- (a) 燃焼器外側の渦に循環してきたラジカルや熱により, 着火し, 渦が膨張する.
 (b) 着火後, 膨張し燃焼器中心側に向かって火炎が押される.


 Fig.32 Distributions of various quantities ($T_S = 600$ K, $u_0 = 150$ m/s, Active wall)

- (c) 燃焼器中心側の火炎は壁面の上部をたどって中心側へ, 燃焼器外側の火炎は, 壁面の上部にそって, 流出口流路に流れ込む.
 (d) 火炎が上部壁面にぶつかり, 左右に分かれて火炎が広く壁面と接するためにラジカルクエンチングや熱損失の影響で火炎が弱められる. また, 燃焼器外側の渦においても, ラジカルクエンチングや熱損失により循環するラジカルや熱が少なくなるためにさらに火炎が弱められる. 以上の要因により, 火炎の消炎が始まり, 火炎が縮小する.

流速 75 m/s の場合には, 燃焼器外側の渦によるラジカルや熱の循環によって再び火炎が強められるため, 振動火炎となる. しかし, より遅い流速の場合には, 燃焼器外側の壁面でのラジカルクエンチングや熱損失の影響がより強まり, 再着火せず, 消炎していると考えられる.

(3) 高流入領域

高流入領域では, 流出口の最高温度はある程度低下したところではほぼ一定になっている. ここで, Fig.32 に活性壁面, 壁面温度 600 K, 流入速度 150 m/s の場合の発熱速度, 温度, H および H_2 の質量分率分布を示す. 高流入領域では流速が変化しても, ほぼ同じ発熱速度分布となる. 大きな流速により伸張が大きくなり, 燃焼器中心側の火炎は消炎する. 一方, 燃焼器外側では, Fig.32 (b), (c) に示す温度と H ラジカル質量分率の分布から分かるように, 多くの熱と H ラジカルが燃焼器外側の渦によって循環しているため火炎は渦の外周に沿って保持されている. しかし, 先端

が燃焼器の外側壁面の角に触れるほど曲がっているため、燃焼器の壁面の高さから流出流路の高さを引いた部分 (Wall 5 の高さ) に火炎形状が依存し、Fig.32 (d) に示す水素質量分率分布から分かるように壁面外側の火炎で燃焼できなかった多くの未燃混合気が外部に流出してしまっていることが分かる。高流入領域の場合には、このような原因により、水素予混合気が流出してしまうので、一定量以上は水素・空気予混合気は燃焼できなくなり、温度が一定値以上上昇できなくなっていると考えられる。

4. 結論

壁面上でのラジカルクエンチングをモデル化した表面反応機構を組み込み、数値解析を行った。活性壁面と不活性壁面とを比較することで以下の知見を得た。

平行平板間流路モデルについて、

- (1) 活性壁面では、ラジカルクエンチングによって H や OH などの活性化学種が H_2 や O_2 などの不活性化学種に転換されてしまうために、熱発生速度に大きく寄与する反応が抑制される。
- (2) 比較的高温な流入温度の場合、非常に多くのラジカルが生じているため、壁面におけるラジカルクエンチングの影響が相対的に抑制される。
- (3) 壁面温度が高温の場合、H や OH が再結合して熱を放出する前に流路から出てしまうために、大きい発熱速度を得ることができても、高温を達成できるとは限らない。また、このとき、燃焼効率は低下する。

なお、このモデルでは、活性壁と不活性壁、および壁面温度の違いによって、流入速度が異なることに注意が必要である。

実用的燃焼器モデルについて、

- (4) 流入速度が小さい場合には、平行平板間流路の場合と似た燃焼場となるが、火炎が小さくなるため、壁面との接触面積も少なく、ラジカルクエンチングの影響は小さい。しかし、活性壁面の場合の方がラジカルクエンチングによる損失の分、消炎しやすい。
- (5) 流入速度が大きい場合には、壁面上部に火炎が触れ、壁面上の火炎が抑制される。さらに、燃焼器形状に依存した循環流が燃焼器外側の壁面に生じ、これによって燃焼器外側火炎のみ保持することができる。また、火炎と壁面の接触箇所が多くなりラジカルクエンチングの影響は大きくなる。
- (6) 流入速度が小さい場合には、閉じた火炎ができるため、水素燃料は十分消費され、流出口までの距離もあるために、高温に達することができる。流入速度が大きくなると、燃焼器中心側の火炎が伸張により消炎するため、未燃ガスがそのまま流出してしまい、流入速度が小さい場合に比べ温度が上昇しない。

- (7) 活性壁面の場合、流入速度が大きくなると火炎と壁面の接触面積が増加するため、ラジカルクエンチングの影響が大きくなり、条件によって火炎の振動や消炎など、不安定となる。

謝辞

本研究の一部は独立行政法人科学技術振興機構 (JST) の戦略的国際科学技術協力推進事業の委託研究として実施した。なお、この事業は中国国家自然科学基金委員会 (NSFC) との共同支援による日中共同研究プロジェクトである。

References

1. Ohno, K., *Journal of the Japan Society of Mechanical Engineers* (in Japanese) 110: 882 (2007).
2. Tadokoro, S., *Prevention Times* (in Japanese) 214: 8-13 (2003).
3. Epstein, A.H., *J. Eng. Gas Turbines Power* 126: 205-226 (2004).
4. Epstein, A.H., Senturia, S.D., Al-Midani, O., et al., *AIAA*: 97-1773(1997).
5. Suzuki, S., Yamashita, H., and Yamamoto, K., *JSME Trans. B.* (in Japanese) 74: 1641-1648 (2008).
6. Kwon, S., *Proc. 46th Symp. (Jpn.) Combust.* (in Japanese): S10-S14 (2008).
7. Yuasa, S. and Oshimi, K., *J. Inst. Eng.* 84: 213-220 (2005).
8. Aghalayam, P., Bui, P.-A., and Vlachos, D.G., *Combust. Theory and Modeling* 2: 515-530(1998).
9. Raimondeau, S., Norton, D., Vlachos, D.G., and Masel, R.I., *Proc. Combust. Inst.*, Vol.29, pp. 901-907 (2002).
10. Hua, J., Wu, M., and Kumar, K., *Chem. Eng. Sci.*, 60: 3497-3506 and 3507-3515 (2005).
11. NIST, *JANAF Thermochemical Tables*, Third Edition, (1985).
12. Smooke, M.D., *Reduced Kinetics Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*, Springer-Verlag: 1-28 (1991).
13. Patankar, S.V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw-Hill: 126-130 (1980).
14. Gutheil, E., et al., *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems*, Springer-Verlag: 177-195 (1993).
15. Kee, R.J., et al., *Sandia Report*, SAND86-8246, (1986).
16. Kee, R.J., et al., *Sandia Report*, SAND89-8009, (1989).