

■原著論文/ORIGINAL PAPER■

過濃予混合気の高温度空気燃焼における非定常火炎挙動の数値解析

Numerical Study on Unsteady Flame Behavior in High-Temperature Air Combustion of Rich-Premixed Gas

伊藤 慎太郎・山下 博史*・林 直樹

ITO, Shintaro, YAMASHITA, Hiroshi*, and HAYASHI, Naoki

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, Aichi, 464-8603, Japan

2011年3月10日受付; 2011年8月4日受理/Received 10 March, 2011; Accepted 4 August, 2011

Abstract : Numerical simulation on the counterflow flame of methane-air rich-premixed gas with opposing high-temperature air is carried out by using rather complex chemistry. A sinusoidal fluctuation is added to the spout velocity in order to investigate unsteady flame behavior and to clarify the effects of various parameters on flame structure. First, the influences of average velocity and the fluctuation frequency of the spout velocity on flame structure are examined with Smooke's Skeletal chemical kinetics model. It is shown that both premixed and diffusion flames exist together and the phase lag increases with the increase in the fluctuation frequency of the spout velocity. Second, the effects of premixed flame and diffusion flame on unsteady behavior are examined by using "extended IYH-Skeletal chemical kinetics model" proposed in the present study. This novel model discriminates premixed-gas-originated oxygen atom X from opposing- air-originated oxygen atom Y, so that the consumption rates of oxygen molecules X_2 and Y_2 correspond to premixed and diffusion flames. It is found that the strength of diffusion flame monotonically changes corresponding to the increase of flame stretch, but the strength and location of premixed flame intricately changes corresponding to the change of spout velocity.

Key Words : Rich-premixed gas, High-temperature air, Counterflow, Unsteady behavior, Numerical simulation, Chemical kinetics model

1. 緒言

近年、エネルギー・環境問題が深刻化している。特に石油等の化石燃料の枯渇、およびその燃焼時に排出されるCO₂による地球温暖化、NO_x、SO_x、すす等による大気汚染が問題視されている。そのため、身の回りの多くの燃焼器の高効率化、低環境負荷化が求められ、広く研究・開発が行われている。

実用燃焼器内の燃焼は乱流火炎であり、さらに、乱流火炎は乱れにより火炎面が波打つことでその面積が増加することから高効率な燃焼が可能であるという特徴がある。そのため乱流火炎の火炎構造を解明することは燃焼器の高効率・低環境負荷化には必要不可欠であり、燃焼研究の主要な課題の一つとされている。

店橋らはスーパーコンピュータを用いた水素・空気予混合気の詳細素反応機構による三次元の直接数値計算(3D-DNS)や、CH-OH PLIF とステレオ PIV を組み合わせた実

験により、乱流火炎の局所構造や燃焼速度についての詳細な検討を行っている[1-4]。古川らは3つの受感部を有する静電探針とレーザ流速計を使用して局所の乱流予混合火炎のガス流速と火炎面の挙動の二次元同時計測を行っており、最近では四つの受感部を有する静電探針を用いることで三次元的な計測も可能にしている[5-8]。また、Liらは高い分解能を有するPLIFよりCH、OHおよびCH₂Oを同時に計測することで、乱流予混合火炎の局所的な火炎構造を調べている[9]。

しかし、乱流火炎は非定常かつ多次元の複雑な現象であり、その火炎構造に影響を与えるパラメータは非常に多い。このため、3D-DNSや三次元計測では、乱流火炎の火炎構造に与えるパラメータの影響を分離して一つ一つ個別に取り出して系統的に検討することは未だ非常に難しい。そこで、Laminar flamelet model [10]の考え方にに基づき、対向流火炎を用いた予混合および拡散火炎の基礎特性についての検討が行われてきた[11-14]。例えば、Dixon-Lewisら[11]は対向流予混合火炎において同じ未燃混合気を対向させ双子火炎を形成させた場合と、温度の低い既燃ガスを対向させ

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

た場合とを比較し、可燃限界に及ぼす熱損失の影響について検討している。また、非定常対向流火炎の流入速度の変動周波数に対する火炎の応答について、予混合および拡散火炎について Sung ら[12]によって、また、拡散火炎について Egolfopoulos ら[13]によって検討が行われている。これらの研究により、周波数の増加に伴う速度場と火炎の間の位相遅れの増加や、火炎の変動の振幅の減少等について明らかにされている。

しかしながら、これらの対向流火炎に対して得られた基礎特性に関する結果を実際の火炎に適用するためには、対向流火炎と実際の火炎を結合するパラメータが必要であり、著者らは Laminar flamelet model [10]に基づく組み合わせ手法を提案している[15,16]。この手法では、乱流の三次元性について検討することは困難であるが、3D-DNS に比べ計算負荷を非常に小さくできるので詳細素反応機構を考慮することが可能である。さらに火炎構造に影響を与えるパラメータを一つ一つ個別に取り出すことも可能である。林らは流入速度の流入方向成分に振動を付加した対向流の非定常火炎の数値計算により、その火炎挙動に対する振動の平均速度と周波数、対向する空気の影響を一つ一つ系統的に検討し、火炎構造が火炎面位置での酸素の質量分率で定義した反応進行度や温度で定義した反応進行度の勾配により整理できることを示した[17]。加藤らは流入速度に二次元的な振動を与えた非定常予混合火炎について検討し、火炎面の伝播方向に注目し、火炎面位置での酸素の質量分率で定義された反応進行度と、その火炎面に垂直方向の勾配により火炎の挙動を分類できることを示した[18]。さらに、野々村らは流入速度に二次元的な振動を与えた非定常予混合火炎において、局所消炎のメカニズムや乱流燃焼速度と火炎長さに相関があることを示した[19]。これらの研究はメタン-空気希薄予混合火炎を対象として行われている。

以上のように、対向流予混合火炎について、速度の変動に対する火炎の応答について、様々な側面から検討が行われている。一方で、過濃予混合気と高温空気の対向流燃焼場では予混合火炎だけではなく拡散火炎も同時に形成されていると考えられる。このような火炎は、非常に強い乱流燃焼場を作り出すのに好都合であると考えられる。本研究では、過濃予混合気と高温空気の対向流燃焼場において、流入速度を振動的に与えることで、その平均速度、周波数、振幅、空気の温度などのパラメータを変えたときの火炎挙動について調べた。次に、予混合気中の酸素と、対向する空気中の酸素がどのような割合で消費されているかを調べることは火炎構造を検討する上で興味深い。そこで、本研究では、Smooke らの Skeletal 素反応機構[20]を拡張し、予混合気中および対向する空気流中における酸素原子を区別した「拡張 IYH-Skeletal 素反応機構」を新たに考案した。この反応機構を用い、火炎全体に与える拡散火炎の影響について検討した。

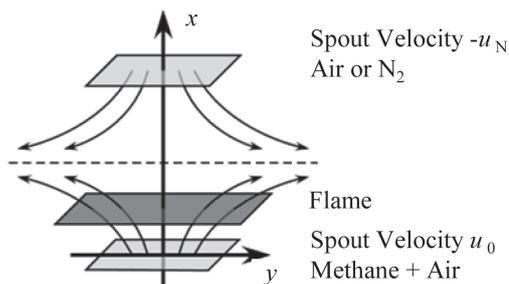


Fig.1 Schematic of analytical model

2. 解析モデルおよび計算方法

2.1. 解析モデル

本研究で用いた平面二次元対向流予混合火炎の解析モデルを図1に示す。流れ場については二次元のポテンシャル流とし、温度場および濃度場においては相似解が適用できるものとする[17,21]。予混合気温度および濃度の境界条件を設定するために、仮想的に30 mm だけ離れた二つのノズルが対向しているものとし、予混合気側ノズルの中心を原点として、ノズル軸方向の座標を x とし、速度成分を u とする。予混合気側ノズルから当量比 1.2、温度 300 K のメタン・空気予混合気を速度 u_0 で噴出させ、また対向するノズルからは温度 1500 K あるいは 1000 K に予熱した高温空気を速度 $-u_N$ 噴出させる。 u_N はよどみ点がおよそ中央断面の $x = 15$ mm の位置になるように $u_N = 3u_0$ とした。圧力は大気圧とした。

予混合気側のノズル出口平均流速を u_m とし、出口速度に正弦振動 $u_0 = u_m \{1 + A \cdot \sin(2\pi ft)\}$ を加え、十分時間が経過した後の準定常状態について検討する。ここで、振幅 $A = 0.75, 1.0$ 、振動数 $f = 1 \sim 250$ Hz の条件で数値解析を行った。また、 $u_0 = 0.5 \sim 24$ m/s の定常解についても解析を行った。ここで、速度が極めて遅い場合には逆火が起きてしまうため $u_0 \leq 0.5$ m/s の定常火炎については解析を行っていない。また、 $u_0 = 0.5 \sim 24$ m/s の定常状態の条件については対向する気体に空気ではなく窒素を用いた定常解についても解析を行った。

2.2. 化学反応機構

化学反応機構には Smooke らのメタン-空気系 Skeletal 素反応機構 (16 化学種, 25 素反応式) [20]を用いた。

さらに、予混合気中の酸素と、対向する空気中の酸素がどのような割合で消費されているかを調べ、予混合火炎と拡散火炎が共存するような燃焼場においてこれら二つの火炎を識別し、それらの強度を別々に検討するために、「拡張 IYH-Skeletal 素反応機構」を新たに考案した。すなわち、上記の Smooke らの Skeletal 素反応機構において、酸素原子 O を予混合気中の酸素に由来するものを X、および対向する空気中の酸素に由来するものを Y とし二つに分け、別の化学種として取り扱うことを考えた。例えば O_2 であ

れば, X_2, Y_2, XY の 3 種類に区別される. このように酸素原子を含む化学種は用いる酸素原子の組み合わせの数だけ派生し, 用いる化学種数は 31 個となった. ただし, 派生した化学種の熱力学定数および輸送係数はもとの化学種と同じと仮定した. 化学種の増加に伴い素反応式も増加し, 89 組となった. 酸素原子が含まれる化学種の素反応式については, その反応物と生成物の酸素原子の組み合わせの数だけ存在する. また, そもそも通常の素反応機構において酸素原子が予混合気流側あるいは高温空気流側の酸素分子のどちらに由来しているのかは考慮されていないので, 本反応機構で用いられる頻度係数, 温度係数, 温度次数, 活性化エネルギーは元の Skeletal 素反応機構と同じと仮定した. この「拡張 IYH-Skeletal 素反応機構」で考慮された化学種と素反応式を表 1 および表 2 に示す. 特に, 表 2 の最右欄には後で説明する「実現割合 P_k 」を併記した.

実現割合 P_k は, 各種の物理量が X 原子と Y 原子を区別せずにすべて O 原子と見なしたときに元の Smooke らの Skeletal 素反応機構の場合と同じ値になるように設定され, その決定方法は以下の通りである.

Table 1 Species in extended IYH-Skeletal reaction mechanism

CH ₄	X ₂	Y ₂	XY	H ₂ X	H ₂ Y	CX ₂	CY ₂
CXY	H	X	Y	XH	YH	HX ₂	HY ₂
HXY	H ₂	CX	CY	H ₂ X ₂	H ₂ Y ₂	H ₂ XY	HXC
HCY	CH ₂ X	CH ₂ Y	CH ₃	CH ₃ X	CH ₃ Y	N ₂	

Table 2 Extended IYH-Skeletal reaction mechanism

k	Reaction	B_k	a_k	E_k	P_k
1f	H+X ₂ →XH+X	2.000E+14	0.000	16800.0	1
1b	XH+X→H+X ₂	1.575E+13	0.000	690.0	1
2f	H+XY→XH+Y	2.000E+14	0.000	16800.0	1/2
2b	XH+Y→H+XY	1.575E+13	0.000	690.0	1
3f	H+XY→YH+X	2.000E+14	0.000	16800.0	1/2
3b	YH+X→H+XY	1.575E+13	0.000	690.0	1
4f	H+Y ₂ →YH+Y	2.000E+14	0.000	16800.0	1
4b	YH+Y→H+Y ₂	1.575E+13	0.000	690.0	1
5f	X+H ₂ →XH+H	1.800E+10	1.000	8826.0	1
5b	XH+H→X+H ₂	8.000E+09	1.000	6760.0	1
6f	Y+H ₂ →YH+H	1.800E+10	1.000	8826.0	1
6b	YH+H→Y+H ₂	8.000E+09	1.000	6760.0	1
7f	H ₂ +XH→H ₂ X+H	1.170E+09	1.300	3626.0	1
7b	H ₂ X+H→H ₂ +XH	5.090E+09	1.300	18588.0	1
8f	H ₂ +YH→H ₂ Y+H	1.170E+09	1.300	3626.0	1
8b	H ₂ Y+H→H ₂ +YH	5.090E+09	1.300	18588.0	1
9f	XH+XH→X+H ₂ X	6.000E+08	1.300	0.0	1
9b	X+H ₂ X→XH+XH	5.900E+09	1.300	17029.0	1
10f	XH+YH→X+H ₂ Y	6.000E+08	1.300	0.0	1
10b	X+H ₂ Y→XH+YH	5.900E+09	1.300	17029.0	1
11f	XH+YH→Y+H ₂ X	6.000E+08	1.300	0.0	1
11b	Y+H ₂ X→XH+YH	5.900E+09	1.300	17029.0	1
12f	YH+YH→Y+H ₂ Y	6.000E+08	1.300	0.0	1
12b	Y+H ₂ Y→YH+YH	5.900E+09	1.300	17029.0	1

13	H+X ₂ +M→HX ₂ +M ^a	2.300E+18	-0.800	0.0	1
14	H+XY+M→HXY+M ^a	2.300E+18	-0.800	0.0	1
15	H+Y ₂ +M→HY ₂ +M ^a	2.300E+18	-0.800	0.0	1
16	H+HX ₂ →XH+XH	1.500E+14	0.000	1004.0	1
17	H+HXY→XH+YH	1.500E+14	0.000	1004.0	1
18	H+HY ₂ →YH+YH	1.500E+14	0.000	1004.0	1
19	H+HX ₂ →H ₂ +X ₂	2.500E+13	0.000	700.0	1
20	H+HXY→H ₂ +XY	2.500E+13	0.000	700.0	1
21	H+HY ₂ →H ₂ +Y ₂	2.500E+13	0.000	700.0	1
22	XH+HX ₂ →H ₂ X+X ₂	2.000E+13	0.000	100.0	1
23	XH+HXY→H ₂ X+XY	2.000E+13	0.000	100.0	1/2
24	XH+HXY→H ₂ Y+X ₂	2.000E+13	0.000	100.0	1/2
25	XH+HY ₂ →H ₂ X+Y ₂	2.000E+13	0.000	100.0	1/2
26	XH+HY ₂ →H ₂ Y+XY	2.000E+13	0.000	100.0	1/2
27	YH+HXY→H ₂ Y+XY	2.000E+13	0.000	100.0	1/2
28	YH+HX ₂ →H ₂ X+XY	2.000E+13	0.000	100.0	1/2
29	YH+HX ₂ →H ₂ Y+X ₂	2.000E+13	0.000	100.0	1/2
30	YH+HXY→H ₂ X+Y ₂	2.000E+13	0.000	100.0	1/2
31	YH+HY ₂ →H ₂ Y+Y ₂	2.000E+13	0.000	100.0	1
32f	CX+XH→CX ₂ +H	1.510E+07	1.300	-758.0	1
32b	CX ₂ +H→CX+XH	1.570E+09	1.300	22337.0	1
33f	CX+YH→CXY+H	1.510E+07	1.300	-758.0	1
33b	CXY+H→CX+YH	1.570E+09	1.300	22337.0	1/2
34f	CY+XH→CXY+H	1.510E+07	1.300	-758.0	1
34b	CXY+H→CY+XH	1.570E+09	1.300	22337.0	1/2
35f	CY+YH→CY ₂ +H	1.510E+07	1.300	-758.0	1
35b	CY ₂ +H→CY+YH	1.570E+09	1.300	22337.0	1
36f	CH ₄ +M→CH ₃ +H+M ^b	6.300E+14	0.000	104000.0	1
36b	CH ₃ +H+M→CH ₄ +M ^b	5.200E+12	0.000	-1310.0	1
37f	CH ₄ +H→CH ₃ +H ₂	2.200E+04	3.000	8750.0	1
37b	CH ₃ +H ₂ →CH ₄ +H	9.570E+02	3.000	8750.0	1
38f	CH ₄ +XH→CH ₃ +H ₂ X	1.600E+06	2.100	2460.0	1
38b	CH ₃ +H ₂ X→CH ₄ +XH	3.020E+05	2.100	17422.0	1
39f	CH ₄ +YH→CH ₃ +H ₂ Y	1.600E+06	2.100	2460.0	1
39b	CH ₃ +H ₂ Y→CH ₄ +YH	3.020E+05	2.100	17422.0	1
40	CH ₃ +X→CH ₂ X+H	6.800E+13	0.000	0.0	1
41	CH ₃ +Y→CH ₂ Y+H	6.800E+13	0.000	0.0	1
42	CH ₂ X+H→HCX+H ₂	2.500E+13	0.000	0.0	1
43	CH ₂ Y+H→HCY+H ₂	2.500E+13	0.000	0.0	1
44	CH ₂ X+XH→HCX+H ₂ X	3.000E+13	0.000	1195.0	1
45	CH ₂ X+YH→HCX+H ₂ Y	3.000E+13	0.000	1195.0	1/2
46	CH ₂ X+YH→HCY+H ₂ X	3.000E+13	0.000	1195.0	1/2
47	CH ₂ Y+XH→HCX+H ₂ Y	3.000E+13	0.000	1195.0	1/2
48	CH ₂ Y+XH→HCY+H ₂ X	3.000E+13	0.000	1195.0	1/2
49	CH ₂ Y+YH→HCY+H ₂ Y	3.000E+13	0.000	1195.0	1
50	HXC+H→CX+H ₂	4.000E+13	0.000	0.0	1
51	HCY+H→CY+H ₂	4.000E+13	0.000	0.0	1
52	HXC+M→CX+H+M	1.600E+14	0.000	14700.0	1
53	HCY+M→CY+H+M	1.600E+14	0.000	14700.0	1
54	CH ₃ +X ₂ →CH ₃ X+X	7.000E+12	0.000	25652.0	1
55	CH ₃ +XY→CH ₃ X+Y	7.000E+12	0.000	25652.0	1/2
56	CH ₃ +XY→CH ₃ Y+X	7.000E+12	0.000	25652.0	1/2
57	CH ₃ +Y ₂ →CH ₃ Y+Y	7.000E+12	0.000	25652.0	1
58	CH ₃ X+H→CH ₂ X+H ₂	2.000E+13	0.000	0.0	1
59	CH ₃ Y+H→CH ₂ Y+H ₂	2.000E+13	0.000	0.0	1

60	CH ₃ X+M→CH ₂ X+H+M	2.400E+13	0.000	28818.0	1
61	CH ₃ Y+M→CH ₂ Y+H+M	2.400E+13	0.000	28818.0	1
62	HX ₂ +HX ₂ →H ₂ X ₂ +X ₂	2.000E+12	0.000	0.0	1
63	HX ₂ +HXY→H ₂ X ₂ +XY	2.000E+12	0.000	0.0	1
64	HX ₂ +HXY→H ₂ XY+X ₂	2.000E+12	0.000	0.0	1
65	HX ₂ +HY ₂ →H ₂ X ₂ +Y ₂	2.000E+12	0.000	0.0	2/3
66	HX ₂ +HY ₂ →H ₂ XY+XY	2.000E+12	0.000	0.0	2/3
67	HX ₂ +HY ₂ →H ₂ Y ₂ +X ₂	2.000E+12	0.000	0.0	2/3
68	HY ₂ +HXY→H ₂ XY+Y ₂	2.000E+12	0.000	0.0	1
69	HY ₂ +HXY→H ₂ Y ₂ +XY	2.000E+12	0.000	0.0	1
70	HY ₂ +HY ₂ →H ₂ Y ₂ +Y ₂	2.000E+12	0.000	0.0	1
71	HXY+HXY→H ₂ X ₂ +Y ₂	2.000E+12	0.000	0.0	1/3
72	HXY+HXY→H ₂ XY+XY	2.000E+12	0.000	0.0	1/3
73	HXY+HXY→H ₂ Y ₂ +X ₂	2.000E+12	0.000	0.0	1/3
74f	H ₂ X ₂ +M→XH+XH+M	1.300E+17	0.000	45500.0	1
74b	XH+XH+M→H ₂ X ₂ +M	9.860E+14	0.000	-5070.0	1
75f	H ₂ XY+M→XH+YH+M	1.300E+17	0.000	45500.0	1
75b	XH+YH+M→H ₂ XY+M	9.860E+14	0.000	-5070.0	2
76f	H ₂ Y ₂ +M→YH+YH+M	1.300E+17	0.000	45500.0	1
76b	YH+YH+M→H ₂ Y ₂ +M	9.860E+14	0.000	-5070.0	1
77f	H ₂ X ₂ +XH→H ₂ X+HX ₂	1.000E+13	0.000	1800.0	1
77b	H ₂ X+HX ₂ →H ₂ X ₂ +XH	2.860E+13	0.000	32790.0	1
78f	H ₂ X ₂ +YH→H ₂ X+HXY	1.000E+13	0.000	1800.0	1/2
78b	H ₂ X+HXY→H ₂ X ₂ +YH	2.860E+13	0.000	32790.0	1/2
79f	H ₂ X ₂ +YH→H ₂ Y+HX ₂	1.000E+13	0.000	1800.0	1/2
79b	H ₂ Y+HX ₂ →H ₂ X ₂ +YH	2.860E+13	0.000	32790.0	1/2
80f	H ₂ XY+XH→H ₂ X+HXY	1.000E+13	0.000	1800.0	1/2
80b	H ₂ X+HXY→H ₂ XY+XH	2.860E+13	0.000	32790.0	1/2
81f	H ₂ XY+XH→H ₂ Y+HX ₂	1.000E+13	0.000	1800.0	1/2
81b	H ₂ Y+HX ₂ →H ₂ XY+XH	2.860E+13	0.000	32790.0	1/2
82f	H ₂ XY+YH→H ₂ X+HY ₂	1.000E+13	0.000	1800.0	1/2
82b	H ₂ X+HY ₂ →H ₂ XY+YH	2.860E+13	0.000	32790.0	1/2
83f	H ₂ XY+YH→H ₂ Y+HXY	1.000E+13	0.000	1800.0	1/2
83b	H ₂ Y+HXY→H ₂ XY+YH	2.860E+13	0.000	32790.0	1/2
84f	H ₂ Y ₂ +XH→H ₂ X+HY ₂	1.000E+13	0.000	1800.0	1/2
84b	H ₂ X+HY ₂ →H ₂ Y ₂ +XH	2.860E+13	0.000	32790.0	1/2
85f	H ₂ Y ₂ +XH→H ₂ Y+HXY	1.000E+13	0.000	1800.0	1/2
85b	H ₂ Y+HXY→H ₂ Y ₂ +XH	2.860E+13	0.000	32790.0	1/2
86f	H ₂ Y ₂ +YH→H ₂ Y+HY ₂	1.000E+13	0.000	1800.0	1
86b	H ₂ Y+HY ₂ →H ₂ Y ₂ +YH	2.860E+13	0.000	32790.0	1
87	XH+H+M→H ₂ X+M ^a	2.200E+22	-2.000	0.00	1
88	YH+H+M→H ₂ Y+M ^a	2.200E+22	-2.000	0.00	1
89	H+H+M→H ₂ +M ^a	1.800E+18	-1.000	0.00	1

(1) 反応式の反応物側

- ・酸素原子をすべて同一の O と考えたとき、反応物がすべて異なる化学種である場合

全ての反応式の反応物側実現割合は 1 となる。

- ・酸素原子をすべて同一の O と考えたとき、反応物が 2 個の同じ化学種である場合

酸素原子を X と Y で区別して、反応物が 2 個の同じ化学種である反応式の反応物側実現割合は 1 となる。

酸素原子を X と Y で区別して、反応物が異なる化学種である反応式の反応物側実現割合は 2 となる。

(2) 反応式の生成物側

- ・生成物の組み合わせ数 n の場合、生成物側実現割合は便宜的に $1/n$ とする。

(3) 反応式全体

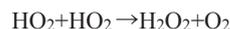
- ・反応式全体の実現割合は、反応物側実現割合と生成物側実現割合の積となる。

この実現割合 P_k を用いて、各素反応式のモル生成速度 $\hat{\omega}_k$ は次式で表される。

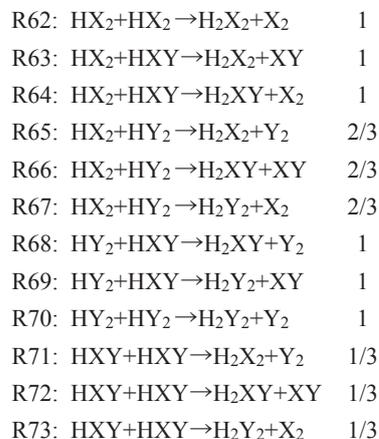
$$\hat{\omega}_k \Big|_{IYH-Skeletal} = P_k k_k \prod_i (\rho Y_i / m_i)^{v'_{i,k}} \quad (1)$$

ここで、 k_k は比反応速度定数、 ρ は密度、 $v'_{i,k}$ 、 Y_i および m_i は反応物の量論係数、質量分率およびモル質量である。

例えば、Smooke らの Skeletal 素反応機構における素反応式 {文献 [20] の素反応式番号 R21}



に対応する拡張 IYH-Skeletal 素反応機構における素反応式は下記の R62~R73 の 12 個である。実現割合を右側に付記した。



ここで、R65、R66 および R67 について考えると、これらの素反応式では、反応物は同一であるが生成物が異なるので、反応物側実現割合は決定方法 (1) の最後の場合に対応し 2 であり、生成物側実現割合は決定方法 (2) の $n=3$ の場合であり 1/3 である。したがって、これらの素反応式全体の実現割合 P_k は $2 \times (1/3) = 2/3$ となる。なお、この実現割合 P_k の決定方法の妥当性は上式 (1) の質量分率において酸素原子 O を X と Y に区別しない場合と区別した場合について展開した式を比較することによって以下のように確認できる。

Smooke らの Skeletal 素反応機構における R21 のモル生成速度は次式で表される。

$$\hat{\omega}_{21} = k_{21} \left(\frac{\rho Y_{\text{HO}_2}}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2$$

上式の Y_{HO_2} は次式で表される.

$$Y_{\text{HO}_2} = Y_{\text{HX}_2} + Y_{\text{HY}_2} + Y_{\text{HXY}}$$

この式を代入して展開すると次式が得られる.

$$\begin{aligned} \hat{\omega}_{21}|_{\text{Skeletal}} &= k_{21} \left(\frac{\rho(Y_{\text{HX}_2} + Y_{\text{HY}_2} + Y_{\text{HXY}})}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 \\ &= k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 \{Y_{\text{HX}_2} + Y_{\text{HY}_2} + Y_{\text{HXY}}\}^2 \\ &= k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 \left\{ Y_{\text{HX}_2}^2 + 2Y_{\text{HX}_2}Y_{\text{HXY}} + 2Y_{\text{HX}_2}Y_{\text{HY}_2} \right. \\ &\quad \left. + 2Y_{\text{HY}_2}Y_{\text{HXY}} + Y_{\text{HY}_2}^2 + Y_{\text{HXY}}^2 \right\} \\ &= k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 \left\{ (1 \cdot Y_{\text{HX}_2}^2) + 2(1 \cdot Y_{\text{HX}_2}Y_{\text{HXY}}) + 3\left(\frac{2}{3} \cdot Y_{\text{HX}_2}Y_{\text{HY}_2}\right) \right. \\ &\quad \left. + 2(1 \cdot Y_{\text{HY}_2}Y_{\text{HXY}}) + (1 \cdot Y_{\text{HY}_2}^2) + 3\left(\frac{1}{3} \cdot Y_{\text{HXY}}^2\right) \right\} \\ &= 1 \cdot k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 (Y_{\text{HX}_2}^2) \cdots \cdots \hat{\omega}_{62}|_{\text{IYH-Skeletal}} \\ &\quad + 1 \cdot k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 (Y_{\text{HX}_2}Y_{\text{HXY}}) \cdots \cdots \hat{\omega}_{63}|_{\text{IYH-Skeletal}} \\ &\quad + 1 \cdot k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 (Y_{\text{HX}_2}Y_{\text{HY}_2}) \cdots \cdots \hat{\omega}_{64}|_{\text{IYH-Skeletal}} \\ &\quad + \frac{2}{3} \cdot k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 (Y_{\text{HX}_2}Y_{\text{HY}_2}) \cdots \cdots \hat{\omega}_{65}|_{\text{IYH-Skeletal}} \\ &\quad + \frac{2}{3} \cdot k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 (Y_{\text{HX}_2}Y_{\text{HXY}}) \cdots \cdots \hat{\omega}_{66}|_{\text{IYH-Skeletal}} \\ &\quad + \frac{2}{3} \cdot k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 (Y_{\text{HX}_2}Y_{\text{HY}_2}) \cdots \cdots \hat{\omega}_{67}|_{\text{IYH-Skeletal}} \\ &\quad + 1 \cdot k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 (Y_{\text{HY}_2}Y_{\text{HXY}}) \cdots \cdots \hat{\omega}_{68}|_{\text{IYH-Skeletal}} \\ &\quad + 1 \cdot k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 (Y_{\text{HY}_2}Y_{\text{HXY}}) \cdots \cdots \hat{\omega}_{69}|_{\text{IYH-Skeletal}} \\ &\quad + 1 \cdot k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 (Y_{\text{HY}_2}^2) \cdots \cdots \hat{\omega}_{70}|_{\text{IYH-Skeletal}} \\ &\quad + \frac{1}{3} \cdot k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 (Y_{\text{HXY}}^2) \cdots \cdots \hat{\omega}_{71}|_{\text{IYH-Skeletal}} \\ &\quad + \frac{1}{3} \cdot k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 (Y_{\text{HXY}}^2) \cdots \cdots \hat{\omega}_{72}|_{\text{IYH-Skeletal}} \\ &\quad + \frac{1}{3} \cdot k_{21} \left(\frac{\rho}{m_{\text{HO}_2}} \right)^2 (Y_{\text{HXY}}^2) \cdots \cdots \hat{\omega}_{73}|_{\text{IYH-Skeletal}} \end{aligned}$$

このように, 前述の実現割合の決定方法に従って実現割合を決定すれば, Smooke らの Skeletal 素反応機構における R21 のモル生成速度が, 拡張 IYH-Skeletal 素反応機構における対応する素反応式 R62~R73 のモル生成速度の和で表

Table 3 Modified extended IYH-Skeletal reaction mechanism

k	Reaction	B_k	a_k	E_k	P_k
23	XH+HXY→H ₂ X+XY	2.000E+13	0.000	100.0	1
24	XH+HXY→H ₂ Y+X ₂	2.000E+13	0.000	100.0	0
25	XH+HY ₂ →H ₂ X+Y ₂	2.000E+13	0.000	100.0	1
26	XH+HY ₂ →H ₂ Y+XY	2.000E+13	0.000	100.0	0
27	YH+HXY→H ₂ Y+XY	2.000E+13	0.000	100.0	1
28	YH+HX ₂ →H ₂ X+XY	2.000E+13	0.000	100.0	0
29	YH+HX ₂ →H ₂ Y+X ₂	2.000E+13	0.000	100.0	1
30	YH+HXY→H ₂ X+Y ₂	2.000E+13	0.000	100.0	0
65	HX ₂ +HY ₂ →H ₂ X ₂ +Y ₂	2.000E+12	0.000	0.0	1
66	HX ₂ +HY ₂ →H ₂ XY+XY	2.000E+12	0.000	0.0	0
67	HX ₂ +HY ₂ →H ₂ Y ₂ +X ₂	2.000E+12	0.000	0.0	1
71	HXY+HXY→H ₂ X ₂ +Y ₂	2.000E+12	0.000	0.0	0
72	HXY+HXY→H ₂ XY+XY	2.000E+12	0.000	0.0	1
73	HXY+HXY→H ₂ Y ₂ +X ₂	2.000E+12	0.000	0.0	0

Table 4 Examination of IYH-Skeletal reaction mechanism

x (mm)	H ₂ X ₂	H ₂ XY	H ₂ Y ₂	H ₂ O ₂
17.775	0.545505E-4	0.476233E-6	0.651571E-7	0.550919E-4
(H ₂ X ₂)	0.545805E-4	0.416427E-6	0.949982E-7	0.550919E-4
18.315	0.597207E-6	0.119741E-5	0.606361E-6	0.240098E-5
(H ₂ XY)	0.597174E-6	0.119747E-5	0.606330E-6	0.240097E-5
18.735	0.402043E-7	0.516776E-6	0.169274E-5	0.224972E-5
(H ₂ Y ₂)	0.401833E-7	0.516772E-6	0.169276E-5	0.224972E-5

される. ただし, 本研究の各素反応式の実現割合の決定方法は十分条件であって, 必ずしも必要条件ではない. 特に, 決定方法 (2) では, 単純に「数学 (順列・組み合わせ) 的に」同じ確率で実現するという意味で, 近似的 (便宜的) に同一とした. しかしながら, 化学反応論的に考えると, たとえば R65, R66, R67 の実現割合を同一の 2/3 と考えることは無理があり, R66 の素反応は実現し難い. したがって, R65, R66, R67 の実現割合を「極端に」1, 0, 1 とすることも考えられる. このように, 実現割合を化学反応論的に一部「極端に」修正したものを表 3 に示す. この修正された拡張 IYH-Skeletal 素反応機構を用いて計算した H₂X₂, H₂XY, H₂Y₂ およびそれらの和 H₂O₂ の質量分率について, 各化学種のピーク位置における値を, 修正していない場合と比較して表 4 に示す. 上段が修正していない場合, 下段が修正した場合の値である. 影響が直接現れると考えられるこれらの値でもピーク値はほとんど差異がないことがわかる. もちろん化学反応論的に実現確率が合理的に推定できるならばその知見を組み込んで「より正しい拡張」を行うことを次の段階として考える予定である.

なお, この拡張 IYH-Skeletal 素反応機構は分子中の酸素原子を X, Y の 2 種類に分けていること以外に Smooke らの Skeletal 素反応機構と違いはない. 本研究で提案した方法によれば, 数学的に当然のこととして, 両者の結果は速度場, 温度場のみならず, 濃度場で酸素原子に関係ない量や, X と Y について和をとった量はすべて一致するはずであ

Table 5 Condition of calculation

Case	A	T_N [K]	u_m [m/s]	Kind of gas (right side nozzle)	Reaction mechanism
A	0 (steady flow)	1500	0.5~24	Air	Smooke's Skeletal
B	0 (steady flow)	1500	0.5~24	N ₂	Smooke's Skeletal
C	0 (steady flow)	1000	1.25~8.75	Air	Smooke's Skeletal
D-1~250	1	1500	12	Air	Smooke's Skeletal
E-1~250	0.75	1500	12	Air	Smooke's Skeletal
F-1~250	0.75	1000	5	Air	Smooke's Skeletal
G-10	1	1500	12	Air	Extended IYH-Skeletal

り、実際に一致することを確認めた。

2.3. 熱力学定数および輸送係数

熱力学定数については CHEMKIN データベース[22,23]から求めた。輸送係数については、Smooke らの Simplified Transport Model [20]を用いた。

2.4. 計算手法

対流項の差分化には一次風上差分、時間展開については Euler の完全陰解法を適用し、時間刻みは定常解および非定常解の f が 10 Hz 以下の条件については $t = 1 \mu\text{s}$, f が 10 Hz より大きい条件では $t = 0.1 \mu\text{s}$ とした。各時間ステップにおいて SOR 法による繰り返し計算を行った。格子数は 1001 点とし、格子間隔 0.03 mm の等間隔格子とした。

2.5. 計算条件

各計算条件を表 5 に示す。Case A~C は定常場の計算であり、速度 u_0 は、0.5~24 m/s の範囲でおおよそ 1 m/s 刻みでそれぞれ計算を行った。これに対して Case D~G は非定常場の計算であり、大文字のアルファベットの後の数字は振動数 f の値を表している。また、Case A~F では、反応機構には Smooke らの Skeletal 素反応機構を用いており、Case G は拡張 IYH-Skeletal 素反応機構を用いた。なお、Case G-10 は Case D-10 と素反応機構以外の計算条件は同じであり、計算結果は完全に一致していることから拡張 IYH-Skeletal 素反応機構の妥当性を確認している。

3. 計算結果および考察

3.1. 定常火炎

3.1.1. 火炎構造 (Case A)

図 2 に Case A の $u_0 = u_m = 12 \text{ m/s}$ における火炎構造図を示す。火炎構造図において熱発生速度が最大になる点の座標を $(x_{Q_{\max}}, Q_{\max})$ と定義する。また、 $x \leq x_{Q_{\max}}$ における速度 u の極小値を u_{\min} , そのときの x 方向位置を $x_{u_{\min}}$ と定義

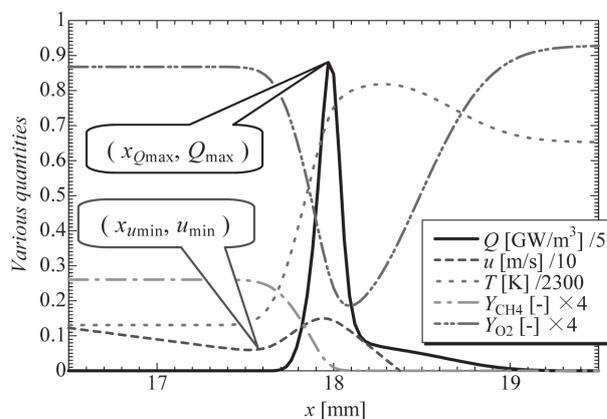


Fig.2 Flame structure (Case A ($u_0 = 12 \text{ m/s}$))

する。

図 2 において熱発生速度が高い領域の右側で酸素と燃料の質量分率の勾配方向が逆転しており、左側では予混合火炎が右側では拡散火炎が形成されていると予想される。これは、今回の計算条件では予混合気体の当量比が 1.2 の燃料過濃状態であり、そして対向する気体に高温の空気を用いているためである。特に、ノズル出口速度が大きくなると、この濃度勾配が逆転する状況が熱発生速度の高い位置で明確に現れるようになると思われる。

3.1.2. 熱発生速度最大値に対するノズル出口速度および対向する空気温度の影響 (Case A, C)

図 3 に Case A, C におけるノズル出口速度と熱発生速度最大値の関係を示す。Case A, C ともに、 u_0 が 0 m/s から増加するにしたがい、 Q_{\max} は減少、増加、減少という変化をすることがわかる。これは以下のように考えられる。 u_0 が 0 m/s から増加するにしたがいストレッチが大きくなると、予混合火炎の強度は弱まるが、しだいに火炎が対向する高温空気に近づくことで拡散火炎としての強度が増大し、さらに速度が増加するとストレッチが強くなり過ぎて拡散火炎としての強度も弱まるためであると考えられる。また、

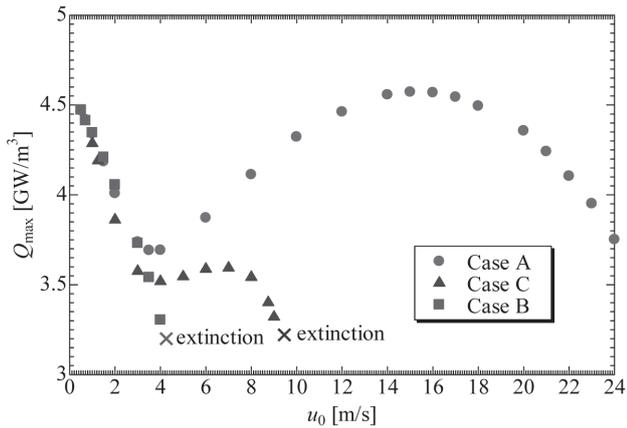


Fig.3 Relation between u_0 and Q_{max} (Case A, B and C)

速度が増加すると Case C の Q_{max} と Case A のその差が増していき, Case C は Case A で火炎が強化されている条件で消炎している. これは Case C は対向する空気の温度が 1000 K と Case A の 1500 K に比べ低いため, 形成される拡散火炎の強度が弱いためであると考えられる.

3.1.3. 対向する気体の種類の影響 (Case A, B)

対向する気体の種類が形成される火炎にどの程度の影響を及ぼしているのかを調べるために, 対向する気体の種類を空気から窒素に変えた条件 Case B と Case A の比較を行った. 図 3 に Case B におけるノズル出口速度と熱発生速度最大値の関係を示す. 図 3 から Case B は Case A, C と異なり, 速度が増加しても熱発生速度最大値が増加することなく消炎することがわかる. これは Case B は対向する気体が窒素であるために, 拡散火炎が形成されないためである. また, ノズル出口速度が 3 m/s 以下の条件で Case B と Case A はほぼ一致しており, 対向する気体の種類はほとんど影響を及ぼさないことがわかる. 以上のことから, ノズル出口速度が比較的小さなときには対向する気体の影響はほとんど無く, 予混合火炎のみが発生しており, ノズル出口速度が大きくなると対向する気体の影響を受けようになり, 対向する気体が空気の場合には拡散火炎が部分的に形成されていると考えられる. そして, この部分的に形成された拡散火炎による高温の既燃ガスが熱損失を低減する効果が火炎の保持には非常に大きな影響を与えていることがわかる.

以上に示したように, 定常対向流火炎ではノズル出口速度が大きくなると拡散火炎の影響が出てくるのがわかったが, 非定常対向流火炎においても同様な現象が生じていると考えられる.

さらに, Case C のように 1500 K より低い 1000 K でも, 対向する気体の種類が空気の場合のほうが, 1500 K の窒素の場合よりも可燃範囲が広いことから, 単に高温の対向流ということではなく拡散火炎が形成されることが重要であることがわかる.

3.2. 非定常火炎

3.2.1. 振動数の影響

以下では, 非定常火炎の各振動数における様々な物理量の位相 1 サイクルにおける変化を図示し考察を行う. これらの図では縦軸は比較する物理量により変化するが, 横軸は位相 ϕ を正規化したものであり, $\phi/2\pi = ft$ により与えられる. 計算は着火してから数サイクル分にはわたって実行し, 十分にサイクル毎の結果に変化が無くなったことを確認した上で最後の 1 サイクルを結果として用いている. ノズル出口速度 u_0 の変化も黒色の実線で示す. また, 以下の図では, 非定常火炎挙動を検討する上で基準とするために, 非定常の場合の位相 ϕ におけるノズル出口速度 u_0 に対応する定常対向流火炎の結果を●印で示した. なお, この定常対向流火炎には対向する気体の温度などの条件が同一のものを用いた.

(1) 熱発生速度最大値とその x 方向位置 (Case D-1 ~ 250)

振幅 A を 1 とした非定常条件である Case D-1 ~ 250 の熱発生速度最大値の Q_{max} およびその x 方向位置 x_{Qmax} の 1 サイクルにおける変化を図 4 および 5 にそれぞれ示す. 図 4 および 5 より $f = 1$ Hz の場合には $0.13 \leq \phi/2\pi \leq 0.38$ を除く位相において非常によく定常火炎の結果と一致しているこ

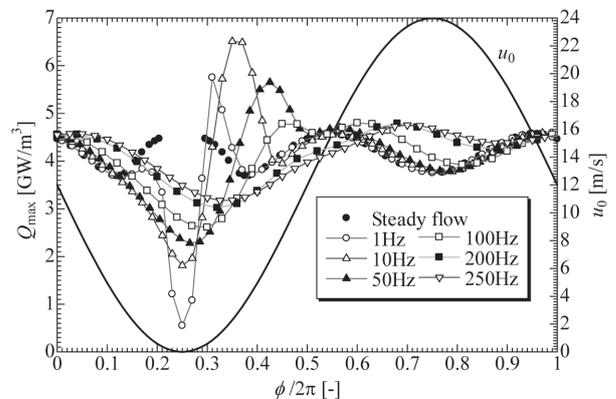


Fig.4 Cyclic change of Q_{max} (Case A, Case D-1 ~ 250)

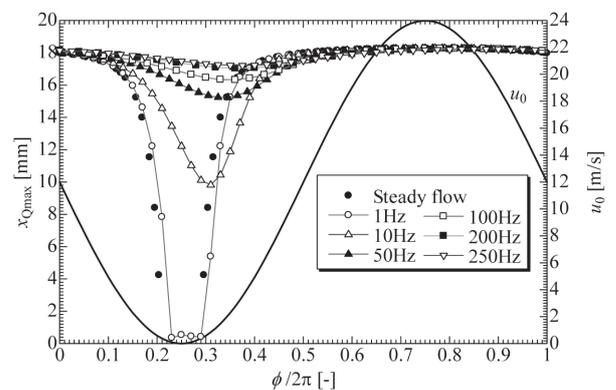
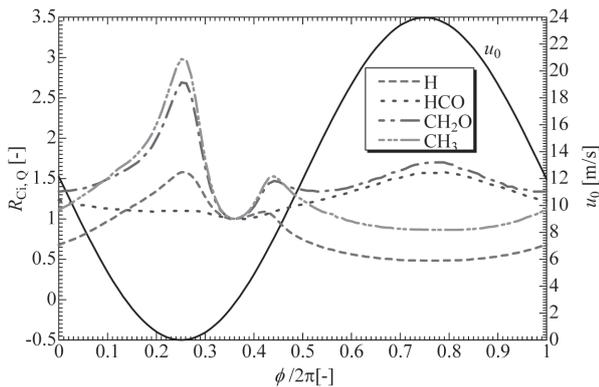
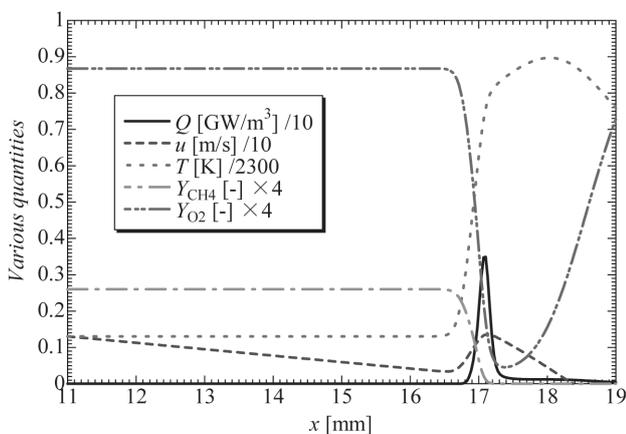
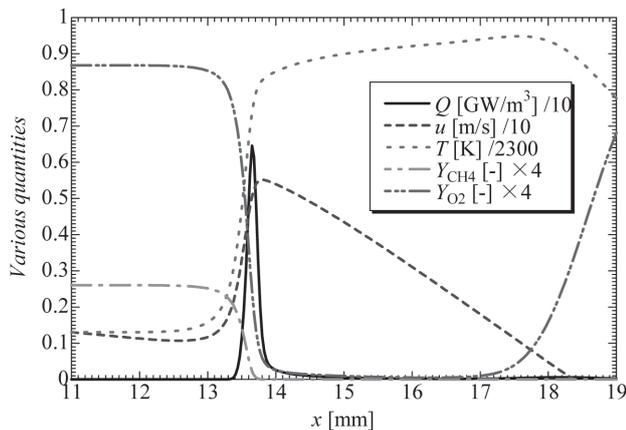


Fig.5 Cyclic change of x_{Qmax} (Case A, Case D-1 ~ 250)

Fig.6 Cyclic change of $R_{Ci,Q}$ (Case D-10)Fig.7 Flame structure (Case D-10, $\phi/2\pi = 0.14$ ($u_0 = 3$ m/s))Fig.8 Flame structure (Case D-10, $\phi/2\pi = 0.36$ ($u_0 = 3$ m/s))

とがわかる。 $0.13 \leq \phi/2\pi \leq 0.38$ での不一致の原因の一つには図5からわかるようにノズル出口速度が0 m/sに近づいたときに燃焼領域が計算の境界(ノズル出口)に近づき過ぎたことが考えられる。他の振動数では十分に境界から離れており、上述の影響は無視できることがわかる。

$f \geq 10$ Hzでは振動数の増加に伴い、 Q_{\max} および $x_{Q_{\max}}$ ともに定常火炎に対する位相遅れが増加し、一方、振幅は減

少することがわかる。これは振動数が大きくなると、速度の変化に対して、緒量の追従性が悪くなることを示している。このことは希薄予混合対向流火炎の場合に林ら[16]によっても報告されている。

図4から Q_{\max} の値は $f = 1 \sim 100$ Hz の条件では $u_0 = 0$ m/s 付近で最小になった直後に最大となることがわかる。この最大値は定常火炎と比べて非常に大きい。このことを調べるために、ある化学種 i について、そのモル濃度 C_i の空間分布図における最大値を $C_{i,\max}$ と定義し、さらに $C_{i,\max}$ の位相1サイクルでの最大値 $(C_{i,\max})_{\max}$ 、空間分布図における熱発生速度最大値 Q_{\max} の位相1サイクルでの最大値 $(Q_{\max})_{\max}$ として以下のような値 $R_{Ci,Q}$ を定義した。

$$R_{Ci,Q} = \frac{C_{i,\max}}{(C_{i,\max})_{\max}} \bigg/ \frac{Q_{\max}}{(Q_{\max})_{\max}} \quad (2)$$

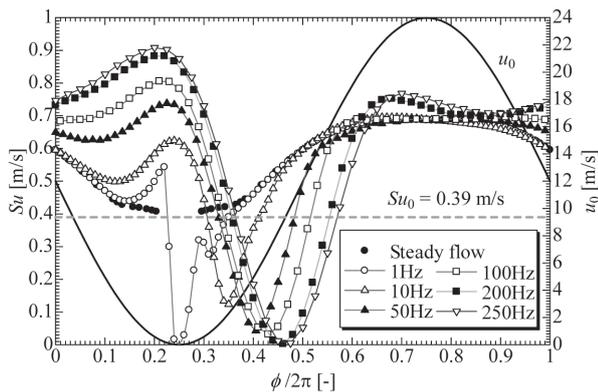
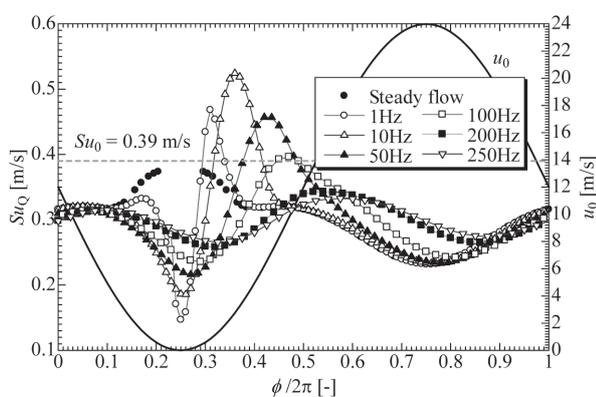
Case D の $f = 10$ Hz での H, HCO, CH₂O, CH₃ の四つのラジカルの $R_{Ci,Q}$ の1サイクルにおける変化を図6に示す。四つのラジカルの $C_{i,\max}$ と Q_{\max} はすべて $\phi/2\pi = 0.36$ で最大となるため、すべての $R_{Ci,Q}$ は $\phi/2\pi = 0.36$ で $R_{Ci,Q} = 1.0$ となる。 $\phi/2\pi = 0.26$ 付近で四つのラジカルについて $R_{Ci,Q} \geq 1.0$ となっており、 $\phi/2\pi = 0.36$ における燃焼時に比べ、多くのラジカルが使われずに残っていることがわかる。つまり、非定常火炎では $u_0 = 0$ m/s に向かう速度の減少に対して十分に火炎が追従できず、多くの燃え残りを生じ、 $u_0 = 0$ m/s から速度の増加に伴いこの燃え残りが一気に燃えたためであると考えられる。また、 $\phi/2\pi \geq 0.36$ においても複数のラジカルについて $R_{Ci,Q} \geq 1.0$ となっているが、これは予混合燃焼に拡散燃焼が混在している条件であり、予混合燃焼のみが起きている $\phi/2\pi \leq 0.36$ の条件とは火炎構造火炎構造が異なるためである。

また、Case D の $f = 10$ Hz においてノズル出口速度が同じ $u_0 = 3$ m/s であるが、0 m/s に向けて小さくなっていく $\phi/2\pi = 0.14$ と、逆に大きくなっていく $\phi/2\pi = 0.36$ の火炎構造を図7および8に示す。図7および8を比較すると $\phi/2\pi = 0.36$ の方が $\phi/2\pi = 0.14$ に比べて火炎が左側にある。これは上述のように速度場に対して火炎面が遅れているためである。さらに、 $\phi/2\pi = 0.36$ の方が $\phi/2\pi = 0.14$ に比べて火炎面直前(左側)の速度が大きいことがわかる。したがって、火炎面により多くの燃料と酸化剤が供給されており、このことも熱発生速度最大値が定常火炎にくらべて非常に大きくなった要因であると考えられる。

さらに、図5から分かるように、火炎は、ノズル出口速度の小さい位相の場合を除いて、ノズル出口速度の大きい位相となる広い時間範囲で、 $x = 17 \sim 18$ mm 付近のよどみ点位置に存在する。これは、この広い時間範囲においては、ストレッチが大きいので火炎がよどみ点位置に拘束されるためと考えられる。

(2) 「燃焼速度」(Case D-1 ~ 250)

本研究では、「便宜的な燃焼速度」 S_u を、火炎伝播速度を

Fig.9 Cyclic change of Su (Case A, Case D-1 ~ 250)Fig.10 Cyclic change of Su_Q (Case A, Case D-1 ~ 250)

表す x_{Qmax} の時間変化と, 火炎よりも x 軸方向上流 ($0 \leq x \leq x_{Qmax}$) での速度の極小値 u_{min} から以下のように定義した.

$$Su = - \left(\frac{dx_{Qmax}}{dt} - u_{min} \Big|_{0 \leq x \leq x_{Qmax}} \right) \quad (3)$$

ここで速度の定義は x 軸方向を正としているが, Su については逆向きを正とするために全体としてマイナスが付いている. この「便宜的な燃焼速度」は実験的に燃焼速度を算出する際によく用いられるものである[24].

これに対して数値計算において燃焼速度を算出する際によく用いられる「全熱発生速度による燃焼速度」 Su_Q を, 熱発生速度 Q の火炎面に垂直方向の積分値と, 予混合気入口 $x = 0$ mm での気体の密度 ρ_{in} および酸素の質量分率 $Y_{O2,in}$, 酸素のモル質量 m_{O2} , およびメタンのモル当りの低発熱量 $H_{L,CH4}$ から以下のように定義した.

$$Su_Q = \frac{1}{\frac{\rho_{in} Y_{O2,in}}{2m_{O2}} H_{L,CH4}} \int Q dx \quad (4)$$

Case D-1 ~ 250 における「便宜的な燃焼速度」および「全熱発生速度による燃焼速度」の位相 1 サイクルでの変化を図 9 および 10 にそれぞれ示す. これらの図には当量比 1.2

のメタン・空気予混合気の層流燃焼速度 $Su_0 = 0.39$ m/s を一点鎖線で示してある. u_0 が 0 に近づくと定常火炎では Su , Su_Q ともに Su_0 に近づくが, 位相に対して, すなわち u_0 に対して一定値にならないことがわかる. これは速度が遅いときには予混合火炎のみが起きていると考えられ, 拡散火炎などの影響が現れにくい, 逆に速度が比較的大きく, 拡散火炎の影響が無視できない場合には, Su と Su_Q の定常・非定常ともにその影響が現れるためである. また, 速度が大きくなったことでストレッチの影響も現れていると考えられる.

各振動数において, $\phi/2\pi = 0.25$ 付近で Su は極大となる. これは図 5 からわかるように速度の低下によりよどみ点付近に拘束されていた火炎が急激に x 軸方向の負の方向に移動し, 式 (3) において dx_{Qmax}/dt の項が負の方向に大きくなったためである. また, $\phi/2\pi = 0.3 \sim 0.5$ 付近で Su は極小となる. これは前述とは逆に速度の増大により火炎が急激に x 軸方向の正の方向に移動したためである. この極小となる位相(速度)は図 4 において, $f < 200$ Hz の場合には, Q_{max} が極大となる位相とほぼ一致する. 本研究の条件では Q の火炎面に垂直方向の積分値と Q_{max} は対応しているので, 本来であれば Q_{max} が大きいときには Su も大きくなるはずである. これに反する前述の結果の原因は, 流れ場とスカラー場に位相差があるためであると考えられる. また, ノズル出口速度が大きい場合には図 5 に示されているように, 火炎はよどみ点に拘束され, あまり大きく移動することではなく, その影響が Su に現れている.

Su_Q は各振動数において, $\phi/2\pi = 0.2 \sim 0.3$ 付近で極小となり, $\phi/2\pi = 0.3 \sim 0.5$ 付近で極大になる. これは図 4 に示したように Q_{max} が $\phi/2\pi = 0.2 \sim 0.3$ 付近で極小, $\phi/2\pi = 0.3 \sim 0.5$ 付近で極大となるためである.

3.2.2. 振幅の影響 (Case E-1 ~ 250)

前述の通り, Case D では振幅 $A = 1$ であるため瞬間的にノズル出口速度が 0 m/s になり, 振動数が小さい条件では火炎がノズル出口に近づき過ぎるので境界の影響を受けてしまう. そこで, Case E では振幅を $A = 0.75$ としてノズル出口速度が最小でも 3 m/s になるようにした.

Case E-1 ~ 250 の位相 1 サイクルにおける Q_{max} , x_{Qmax} , $f = 10$ Hz のときの $R_{Ci,Q}$, Su , および Su_Q の変化を図 11 ~ 15 に示す. 図 12 より全ての振動数において火炎はノズル出口から十分に離れた位置に存在しており境界の影響は無視できることがわかった.

図 11, 12, 14 および 15 から Case D と同様に, 振動数の増加とともに定常火炎からの位相遅れが増大することがわかる. また, Case D で確認されたような熱発生速度最大値が定常火炎に比べ著しく大きくなることはないことがわかる. 図 13 から $f = 10$ Hz における H, HCO, CH₂O, CH₃ の四つのラジカルの $R_{Ci,Q}$ は, ほぼ定常火炎と一致しており $R_{Ci,Q} = 1$ を大幅に超えることはなく, 燃え残りがあまりないことがわかる. これは, 振幅が小さくなったことでノズ

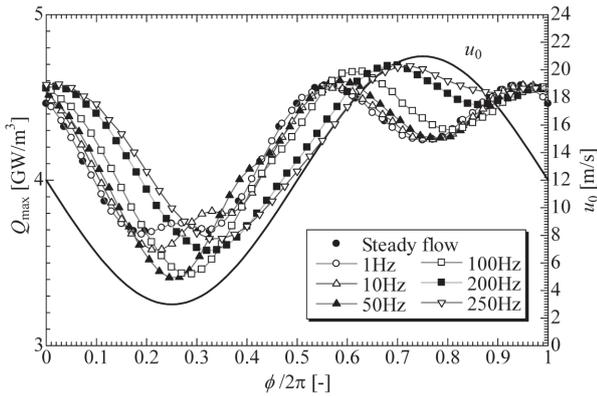


Fig. 11 Cyclic change of Q_{max} (Case A, Case E-1 ~ 250)

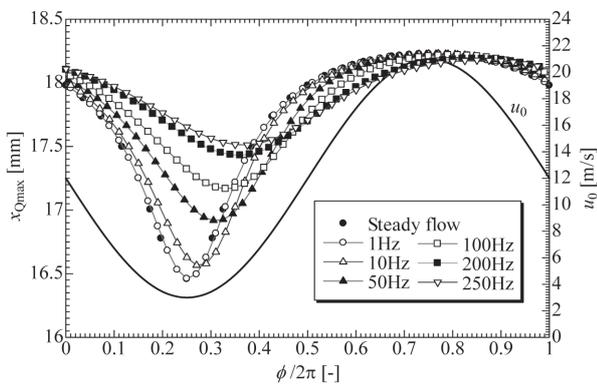


Fig. 12 Cyclic change of x_{Qmax} (Case A, Case E-1 ~ 250)

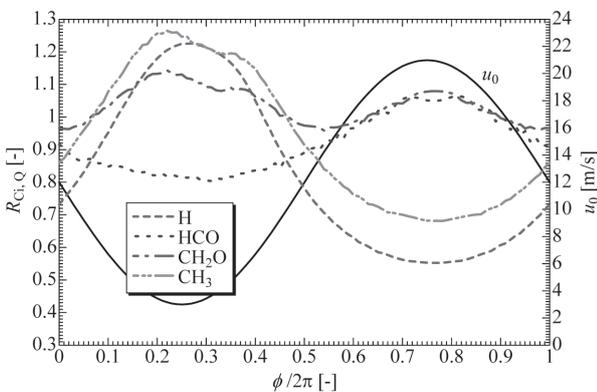


Fig. 13 Cyclic change of $R_{Ci,Q}$ (Case A, Case E-10)

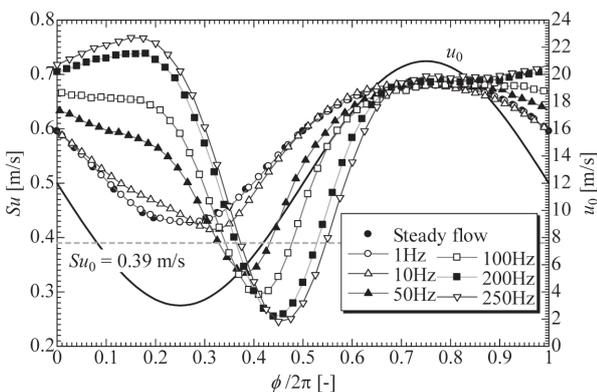


Fig. 14 Cyclic change of Su (Case A, Case E-1 ~ 250)

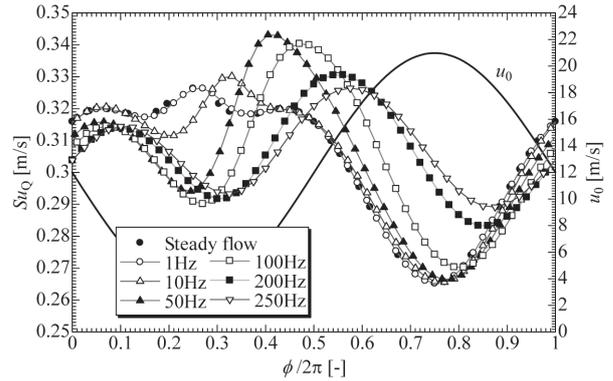


Fig. 15 Cyclic change of Su_Q (Case A, Case E-1 ~ 250)

ル出口速度の時間変化が小さくなり、流れ場に対して火炎が燃え残りを生じるほど遅れないためであると考えられる。

図 14 および 15 より Su および Su_Q は Case D と同様に対向に対して一定値にならないことがわかる。また、ノズル出口速度の最小値が 3 m/s であり、このときでも依然としてストレッチの影響が大きく、また予混合燃焼のみが起きていると考えられる速度範囲が狭いため、定常火炎において速度が小さくなくても層流燃焼速度に十分近づくことはない。

3.2.3. 対向する気体の温度の影響 (Case F-1 ~ 250)

対向する気体の温度の影響を調べるために、Case F では $T_N = 1000$ K とした。また、すべての振動数において境界の影響が無視できるように $A = 0.75$ とした。 $T_N = 1000$ K とした定常火炎 (Case C) はノズル出口速度が 8.75 m/s までは燃焼が起きているが、10 m/s 以上では消炎が起きていることを確認した。そこで、Case F では u_0 が最大でも 8.75 m/s 以下になるように $u_m = 5$ m/s とした。

Case F-1 ~ 250 の位相 1 サイクルにおける Q_{max} , x_{Qmax} , $f = 10$ Hz のときの $R_{Ci,Q}$, Su および Su_Q の変化を図 16 ~ 20 に示す。

図 16 から、Case F における熱発生速度最大値は、ノズル出口速度が大きくなったとき Case D および E に比べて小さくなっていることがわかる。これは、Case F は Case D および E に比べて対向する流れの温度が 1000 K と低く、さらに、ノズル出口速度の最大値も Case D および E に比べて遅いのでストレッチが弱いために、ノズル出口速度が大きくなったときに影響を及ぼす拡散火炎の強度が弱くなったことが原因であると考えられる。このような違いはあるものの、Case F でも Case D および E と同様に振動数の増加とともに流れ場に対する火炎の位相遅れが増大していくことがわかる。

図 17 ~ 20 から分かるように、他の諸量についても、Case D および E と同様な傾向を示した。

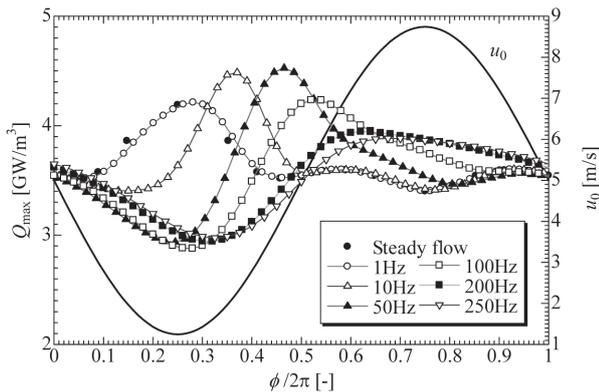


Fig.16 Cyclic change of Q_{max} (Case C, Case F-1 ~ 250)

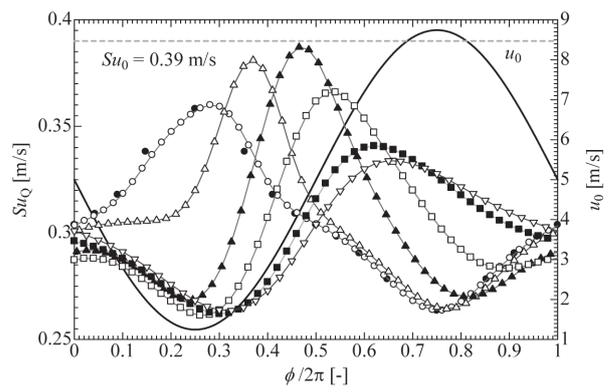


Fig.20 Cyclic change of Su_Q (Case C, Case F-1 ~ 250)

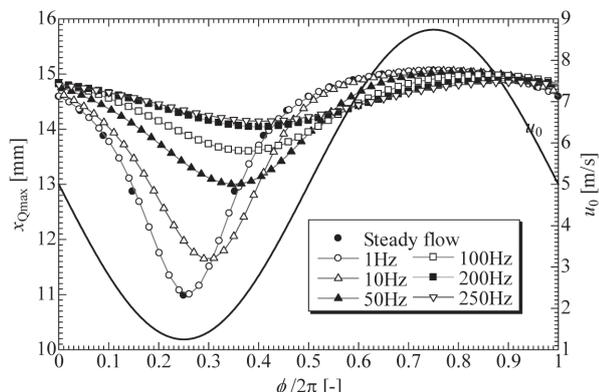


Fig.17 Cyclic change of x_{Qmax} (Case C, Case F-1 ~ 250)

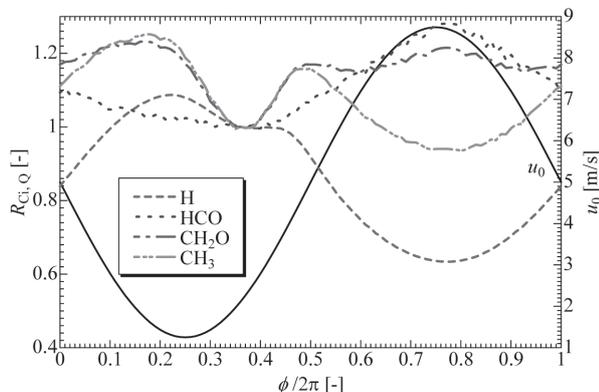


Fig.18 Cyclic change of $R_{C_i,Q}$ (Case C, Case F-10)

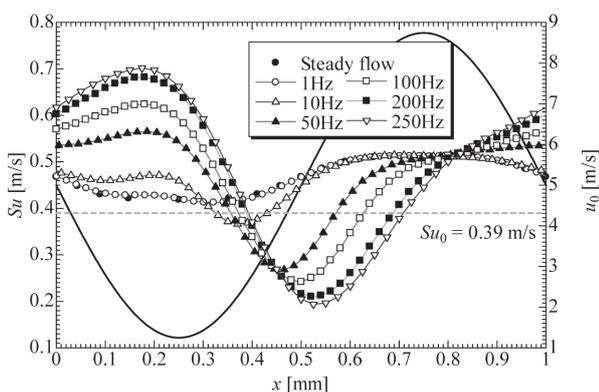


Fig.19 Cyclic change of Su (Case C, Case F-1 ~ 250)

3.3. 拡張 IYH-Skeletal 素反応機構による検討 (Case G-10)

Case G-10 において, $\phi/2\pi = 0.55$ ($u_0 = 16$ m/s) のときの酸素分子 X_2 , Y_2 , XY の質量生成速度 w_{X_2} , w_{Y_2} , w_{XY} , それらの合計および熱発生速度の空間分布を図 21 に示す. 図 21 において, w_{X_2} は予混合気中の酸素の質量生成速度であり, この値が負の方向の大きさが予混合燃焼の強度を表す. 同様に w_{Y_2} は対向空気流中の酸素の質量生成速度であり, 拡散燃焼の強度を表す.

予混合火炎と拡散火炎の判別するために Yamashita らの *Flame Index* という指標を用いることができる[25,26]. *Flame Index* は燃料の質量分率の勾配ベクトルと酸素の質量分率の勾配ベクトルの内積で以下のように定義される.

$$Flame\ Index = \nabla Y_{Fuel} \cdot \nabla Y_{O_2} \quad (Q > 0.01 \cdot Q_{max}) \quad (5)$$

質量分率の勾配ベクトルはその化学種の拡散方向を表し, 燃料と酸素の拡散方向が一致する予混合燃焼が起きている場所では *Flame Index* は正の値になり, 燃料と酸素の拡散方向が逆の拡散燃焼が起きている場所では負の値になる. この *Flame Index* が正しく予混合燃焼と拡散燃焼を判別しているかについても拡張 IYH-Skeletal 素反応機構を用いて検討を行った. 図 21 の場合における *Flame Index* を正負で ± 1 で 2 値化して図 22 に示す. この図より *Flame Index* の正負の切り替わる位置は X_2 と Y_2 の質量生成速度が切り替わる位置から左側にややずれていることがわかる. これは Y_2 が拡散火炎の位置で消費されるが, 同時にほぼ同じ位置で XY が生成されていることにより酸素分子全体の質量分率勾配が負である領域が x 方向の左側にわずかに移動するためである. このように, *Flame Index* は本研究で対象とするような予混合燃焼と拡散燃焼が混在するような場合には, 正負の値のオーダーが大きく異なり, また, 拡散燃焼の領域を広く見積もり過ぎるという 2 つの問題がある. しかし, *Flame Index* の値を正か負で見れば位置はややずれるもののおおよその判別は可能である.

w_{X_2} および w_{Y_2} の空間分布における負のピーク値をそれぞれ $w_{X_2, min}$ および $w_{Y_2, min}$, またその x 方向位置をそれぞれ

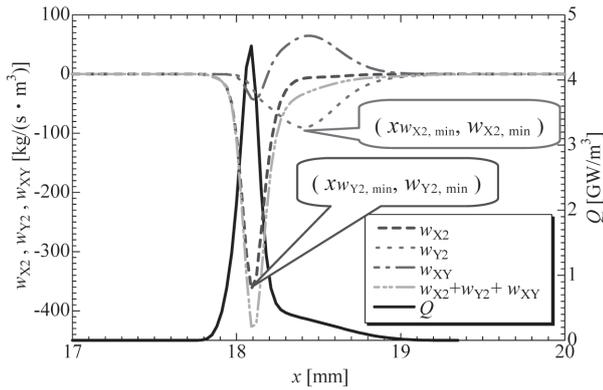


Fig.21 Mass production rate of w_{X2} , w_{Y2} and w_{XY} (Case G-10, $\phi/2\pi = 0.55$ ($u_0 = 16$ m/s))

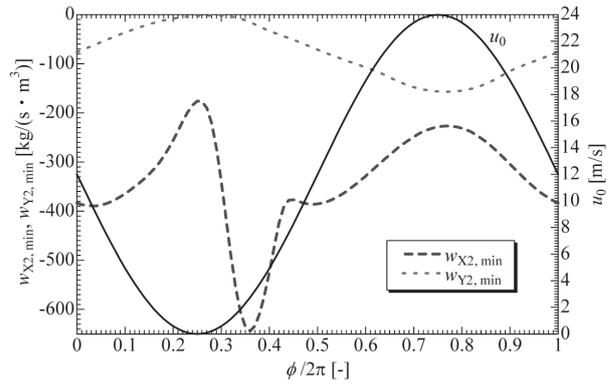


Fig.23 Cyclic change of w_{X2} , w_{Y2} (Case G-10)

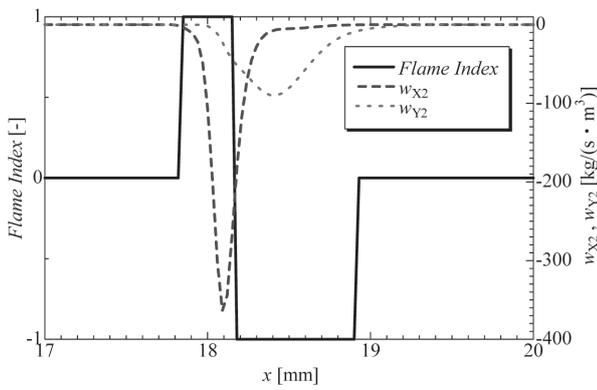


Fig.22 Flame Index (Case G-10, $\phi/2\pi = 0.55$ ($u_0 = 16$ m/s))

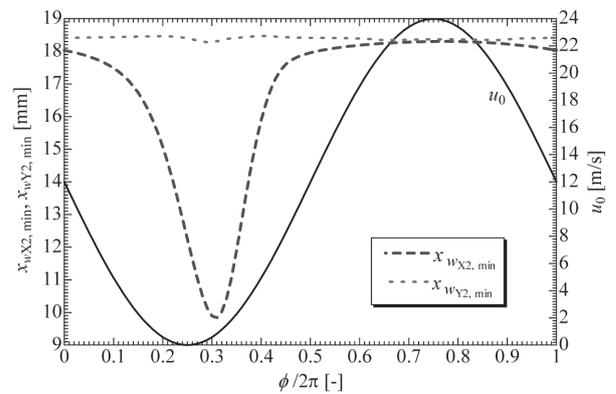


Fig.24 Cyclic change of $x_{w_{X2},min}$ and $x_{w_{Y2},min}$ (Case G-10)

れ $x_{w_{X2},min}$ および $x_{w_{Y2},min}$ と定義し、これらの諸量の位相 1 サイクルでの変化を図 23 および 24 に示す。これらの図より、 $w_{Y2,min}$ の値は u_0 の変化に対応して単調に変化し、その x 方向位置は全ての位相においてよどみ点付近に定在していることがわかる。前者は速度の増加によってストレッチが増加することで燃料および酸素の勾配が大きくなり火炎に供給される燃料および酸素の量が増加するためである。一方、後者は拡散火炎が燃料と酸素の拡散速度が量論比になるところ(ある程度ストレッチが大きい場合にはよどみ点近傍)に形成されるが、この位置はノズル出口での予混合気と対向する空気の質量流量比が一定の場合にはほとんど変化しないためである。これに対して、 $w_{X2,min}$ は図 4 の Case D-10 の熱発生速度最大値に対応して変化しており、 w_{X2} の負のピークの x 方向位置の位相に対する変化は図 5 の熱発生速度最大値の x 方向位置 x_{Qmax} の位相に対する変化にほぼ一致していることがわかる。これは、非定常予混合火炎は速度場に対して遅れが存在するものの流れ場の影響を受けやすいこと、そして当量比が 1.2 であるため強度的には拡散火炎よりも予混合火炎の方が強く予混合火炎が支配的だからである。

4. 結言

本研究では、当量比 1.2 のメタン・空気過濃予混合気と高温空気の対向流火炎において、ノズル出口速度 u_0 に周期的変動を加えることで、その平均速度、振動数、振幅、空気の温度などのパラメータが火炎挙動に与える影響について検討した。

まず、周期的変動の振幅をゼロとした定常火炎の場合について、以下のような知見を得た。

- (1) 対向する気体に温度 1500 K の高温空気を用いた場合、ノズル出口速度が $u_0 \leq 3$ m/s では予混合火炎のみが形成され、 $u_0 \geq 3$ m/s では予混合火炎と拡散火炎が共存する。そして、 $u_0 = 24$ m/s という非常に大きい速度でも火炎が形成される。
- (2) 対向する気体に高温の空気を用いた場合、ノズル出口速度の増加に対して熱発生速度の最大値は減少、増加、減少という変化をする。これは速度の増加にともなうストレッチの増加により予混合火炎の強度が低下する効果と、対向する高温空気に火炎が近づくことで拡散火炎の強度が増大する効果のバランスによって起きる。
- (3) 対向する気体が高温でかつ空気(窒素でなく)である場合に、ノズル出口速度に対して安定した火炎が形成される可燃範囲が広い。すなわち、火炎の安定性には熱

損失が低減されることが重要であり, 特に, 拡散火炎が形成され高温の既燃ガスが熱損失を低減する効果が重要である.

次に, 非定常火炎の場合については, 定常火炎と比較検討することにより, 以下のような知見を得た.

- (4) u_0 の変化に対して緒量の追従性が悪くなるため, 振動数の増加にともない位相遅れが増加する. このことは振幅および対向する空気の温度を変えても起きる.
- (5) u_0 が位相一周で大きく変化する条件で, Q_{\max} は $u_0 = 0$ m/s となる位相付近で極小になった直後に極大となる. これは, 速度場の変化に火炎が追従できないため, u_0 の減少とともに燃え残り生じ, u_0 が増加するときに火炎面直前の速度が速くなるため燃え残りが一気に燃えるからである.
- (6) 「便宜的な燃焼速度」および「全熱発生速度による燃焼速度」は, ストレッチだけでなく, 拡散火炎や燃焼場の非定常性の影響を受ける.

最後に, 酸素分子 O を予混合気中の酸素に由来する X と, 対向する空気中の酸素に由来する Y の 2 種類に分けることで, 火炎を予混合火炎と拡散火炎に判別可能な拡張 IYH-Skeletal 素反応機構を考案し, この素反応機構により非定常火炎における拡散火炎の影響を検討した.

- (7) 拡散火炎の強度は u_0 の変化によるストレッチの増減に対応して単調に変化する. また, その火炎の形成位置はよどみ点付近からほとんど変化しない.
- (8) 予混合火炎は流れ場の影響を受けやすいので, 予混合火炎の強度および形成位置は u_0 の変化に対して大きく変化する.
- (9) *Flame Index* は予混合燃焼と拡散燃焼が混在するような場合には, 正負の値のオーダーが大きく異なり, また, 拡散燃焼の領域を広く見積もり過ぎるという 2 つの問題がある. しかし, *Flame Index* の値を正か負で見れば位置はややずれるもののおおよその判別は可能である.

References

1. Tanahashi, M., Uddin, Md. A., Iwase, S., and Miyauchi, T., *JSME Trans. B.* (in Japanese), 65-638: 1-7 (1999).
2. Noda, Y., Tanahashi, M., and Miyauchi, T., *J. of Turbulence*: 1-15 (2004).
3. Tanahashi, M., Kang, S. -J., Miyamoto, T., Shiokawa, S., and Miyauchi, T., *J. of Heat Fluid Flow*, 25: 331-340 (2004).
4. Tanahashi, M., Sato, S., Shimura, M., and Miyauchi, T., *J. of Thermal Science and Technology*, 3-3: 391-409 (2008).
5. Noguchi, Y., Furukawa, J., Yoshida, M., Ikeo, S., and Hirano, T., *JSME Trans. B.* (in Japanese), 67-658: 212-219 (2001).
6. Furukawa, J., Noguchi, Y., and Williams, F. A., *JSME Trans. B.* (in Japanese), 69-680: 210-215 (2003).
7. Furukawa, J., Noguchi, Y., and Williams, F. A., *JSME Trans. B.* (in Japanese), 74-744: 169-176 (2008).
8. Hashimoto, H., Sou, A., Furukawa, J., and Williams, F. A., *JSME Trans. B.* (in Japanese), 69-680: 216-221 (2003).
9. Li, Z. S., Li, B., Sun, Z. W., Bai, X. S., and Alden, M., *Combust. Flame* 157: 1087-1096 (2010).
10. Peters, N., *Proc. Combust. Inst.* 21: 1231-1250 (1986).
11. Dixon-Lewis, G., *Proc. the Royal Society, A*, 462: 349-370 (2006).
12. Sung, C.J. and Law, C.K., *Combust. Flame*, 123: 375-388 (2000).
13. Egolfopoulos, F.N. and Campbell, C.S., *J. Fluid. Mech.*, 318: 1-29 (1996).
14. Zambon, A.C. and Chelliah, H.K., *Proc. Combust. Inst.*, 31: 1247-1255 (2007).
15. Yamashita, H., Nishioka, M., and Takeno, T., *Energy Convers. Mgmt.* 38: 1343-1352 (1997).
16. Yamashita, H., *Nensho Kenkyu* (in Japanese), 124: 47-55 (2001).
17. Hayashi, N., Yamashita, H., Nakamura, Y., and Yamamoto, K., *JSME Trans. B.* (in Japanese), 72-713: 208-215 (2006).
18. Kato, T., Hayashi, N., Yamashita, H., Nakamura, Y., and Yamamoto, K., *JSME Trans. B.* (in Japanese), 71-712: 210-217 (2005).
19. Nonomura, K., Yamashita, H., Hayashi, N., and Yamamoto, K., *JSME Trans. B.* (in Japanese), 74-747: 133-140 (2008).
20. Smooke, M. D., *Reduced Kinetics Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*, Springer-Verlag: 1-28 (1991).
21. Hayashi, N. and Yamashita, H., *J. Combust. Soc. Japan* (in Japanese), 50-154: 345-352 (2008).
22. Kee, R. J. et. al., *Sandia Report*, SAND86-8246, (1986).
23. Kee, R. J. et. al., *Sandia Report*, SAND89-8009, (1989).
24. Yu, G., Law, C. K., and Wu, C. K., *Combust. Flame* 63: 339-347 (1986).
25. Yamashita, H., Shimada, M., and Takeno, T., *Proc. Combustion Institute*, 26: 27-34 (1996).
26. Yamashita, H., Tsutsumitani, S., and Choi, N-J, *JSME Trans. B.* (in Japanese), 65-630: 775-782 (1999).