

■原著論文/ORIGINAL PAPER■

爆発シミュレーションに特化した水素・空気系の総括反応モデルに関する理論的検討

Theoretical Analysis of Global Reaction Model of H₂/air System Specialized for Explosion Simulation

佐藤 実・桑名 一徳*

SATO, Minoru and KUWANA, Kazunori*

山形大学大学院理工学研究科 〒992-8510 米沢市城南4-3-16
Yamagata University, 4-3-16 Jonan, Yonezawa, Yamagata 992-8510, Japan

2013年9月25日受付; 2014年1月19日受理/Received 25 September, 2013; Accepted 19 January, 2014

Abstract : Gas explosion is a high-speed flame propagation phenomenon. The apparent flame speed during an explosion accelerates because of flame instability. Since the damage caused by an accidental explosion is significantly influenced by the flame speed, one must accurately evaluate such flame acceleration when assessing the risk level of an explosion hazard. An important risk-assessment tool of an accidental explosion will be direct numerical simulation (DNS) using a global reaction model. Then, the global reaction model must correctly reproduce flame instability behaviors. This study focuses on the Markstein number of H₂/air mixture, an important parameter that describes the instability strength, and theoretically investigates if a one-step global reaction model can reproduce the correct Markstein number that was computed by a detailed-chemistry simulation. It is first found that transport properties that depend on equivalence ratio must be considered when evaluating the Markstein number of a H₂/air mixture. It is also found that rate parameters (such as the global activation energy) that depend on equivalence ratio must be used to correctly reproduce the Markstein number using a global reaction model. It is recommended to determine the global activation energy by fitting the Markstein number of the global reaction model with that computed by a detailed-chemistry simulation.

Key Words : Explosion, Risk assessment, Direct numerical simulation, Global reaction model, Markstein number, H₂/air mixture, Global activation energy

1. 緒言

ガス爆発は高速な火炎伝播現象であり、それに伴う爆風圧は周囲に甚大な被害をもたらす。爆発事故の被害は火炎伝播挙動に大きく影響されるため、爆発リスク評価をするうえで火炎伝播挙動を詳細に理解することが不可欠である[1,2]。ガス爆発が起きている時、その火炎面には流体力学的不安定性や拡散・熱的不安定性、外力不安定性などにより乱れが生じている(これらの不安定性については文献[3,4]などに詳しい)。これらの不安定性により火炎面積が増大し、見かけの火炎伝播速度も上昇する。このような火炎伝播速度の上昇を考慮しないでガス爆発の被害を予想しようとすると、爆発被害を過小評価してしまうので注意が必要である[1]。

爆発時の火炎伝播挙動を予想するために、数値流体力学

(computational fluid dynamics または CFD) シミュレーションがしばしば実施される。これまでの爆発シミュレーションでは、乱流燃焼モデルが用いられることがほとんどであった。これは、爆発のような大規模現象を直接数値計算 (direct numerical simulation または DNS) で取り扱うのが困難だったためである。乱流燃焼モデルを用いて爆発シミュレーションを行う際は、先述のような不安定性による火炎伝播速度の上昇を考慮したモデル[5-8]を用いることが重要である(通常の乱流燃焼モデルでは、特に流体力学的不安定性の効果が考慮されていないことが多い)。

一方、コンピュータの性能向上や数値計算技術の発展に伴い、少なくとも比較的小規模な爆発現象に対しては DNS 計算が実施されるようになると予想される。しかし、多くの素反応を考慮した詳細化学反応モデルによるシミュレーションはまだ困難である。大規模詳細反応機構を流体解析に組み込む場合、化学反応方程式の強い解の硬直性と化学種移流拡散方程式の増加(そしてそれに伴う混合輸送

* Corresponding author. E-mail: kuwana@yz.yamagata-u.ac.jp

係数評価) という二つの大きな問題が存在する[9]. したがって, 総括一段反応モデルなどの簡易反応モデルを用いた DNS が現実的である.

DNS による爆発シミュレーションを実施すれば先述のような不安定性による火炎伝播速度の上昇が自然に再現されると考えるのは, 必ずしも正しくない. 詳細化学反応モデルを用いればかなり正確に火炎の不安定性を再現できるかもしれないが, 総括反応モデルを用いる場合はその限りではない. 通常用いられる総括反応モデルでは, 燃焼速度を正確に再現するように反応速度パラメータが設定されている. 例えば, Westbrook and Dryer[10]は広い当量比範囲において燃焼速度を再現できる反応速度パラメータを提案した. 彼らの総括反応モデルでは, 活性化エネルギーや前指数因子, 反応次数は当量比に依らず一定である. 活性化エネルギーをはじめとした反応速度パラメータの当量比依存性を考慮するときは, ある当量比において空気中の窒素濃度を変えることにより断熱火炎温度を変化させ, このときの燃焼速度変化が実験結果(あるいは詳細反応モデルによる計算結果)と一致するように反応速度パラメータを定めるという方法[11]がよく用いられる. しかし, このように燃焼速度のみに着目して反応速度パラメータを定めた総括反応モデルが火炎の不安定性を正確に再現できるとは考えられない. 火炎の不安定性は燃焼速度のみによるものではないためである.

以上をまとめると, 今後実施例が増加すると予想される総括反応モデルを用いた DNS による爆発シミュレーションでは, 火炎の不安定性を正確に再現できる反応速度パラメータを用いることが重要である. つまり, 従来の燃焼速度のみに着目して定められた反応速度パラメータでなく, 爆発シミュレーションに特化したものを用いなければならない.

本研究では, 予混合気の Markstein 数に着目し, 正確な Markstein 数を再現できる総括一段反応の反応速度パラメータについて理論的に検討する. Markstein 数に着目する理由は以下の二つである.

- Markstein 数は予混合気の拡散・熱的不安定性の発現やその強度を表すパラメータである
- 爆発時のように火炎が球状に伝播するとき, 火炎半径がある値を超えると流体力学的不安定性による伝播速度の上昇がはじまるが, この臨界火炎半径は Markstein 数に依存すると考えられる[12,13]

つまり, Markstein 数は爆発時における火炎の不安定性による伝播速度上昇に関する重要なパラメータである. 以下では, まず理論モデルについて簡単に説明し, 理論の妥当性を検証した後, Markstein 数を再現できる総括一段反応の反応速度パラメータについて考察する. なお, この論文では, 水素・空気の予混合気に限って検討する. これには二つ理由があり, 一つには, 水素・空気混合気はその Markstein 数が希薄条件で負(拡散・熱的に不安定), 過濃条件で正(拡散・熱的に安定)であるため, 拡散・熱的不安定性の性質

が異なる条件に対して検討できるという特徴がある. もう一つの理由は, 次節で説明する理論モデルが水素・空気の Markstein 数を正確に予測できないという問題が知られており, 更なる検討を要するということである.

2. 理論モデルとその問題点

ここでは, Markstein 数を理論的に求める方法およびその問題点について簡単に説明する. Markstein 数を求める理論モデルとして先駆的なのは Clavin and Williams[14]によるもので, このモデルをもとに予混合気の Markstein 数について検討されることも多い(例として, 橋本らによる詳細な検討[15,16]を挙げる). しかし, Clavin-Williams モデルは燃焼理論の定石である希薄成分濃度のみに依存する反応速度を仮定しており, 十分に希薄あるいは過濃な条件でしか妥当でない. このことは Clavin-Williams モデルの価値をいささかも損ねるものではないが, 爆発シミュレーションのように様々な濃度条件で火炎伝播挙動を正確に予測する必要がある場合は, Clavin-Williams モデルを基にした検討は妥当ではない. 一方, Bechtold and Matalon[17]は燃料および酸素のそれぞれに対して一次, つまり全体で二次の総括一段反応を仮定し, 活性化エネルギー漸近解析より Markstein 数 Ma を次式のように表した.

$$Ma = a_1 + \frac{\beta}{2}(Le_{\text{eff}} - 1)a_2 - \gamma a_1 \quad (1)$$

ここで, β , Le_{eff} および γ は Zel'dovich 数, 有効 Lewis 数および熱膨張の程度を表すパラメータで, それぞれ次のように定義される.

$$\beta = \frac{E(T_{\text{ad}} - T_u)}{RT_{\text{ad}}^2} \quad (2)$$

$$\gamma = \frac{\sigma - 1}{\sigma} \quad (3)$$

$$Le_{\text{eff}} = 1 + \frac{Le_E - 1 + (Le_D - 1)[1 + \beta(\Phi - 1)]}{2 + \beta(\Phi - 1)} \quad (4)$$

ただし, E は総括反応の活性化エネルギー, T_{ad} は断熱火炎温度, T_u は未燃気体温度, R は気体定数, σ は燃焼による気体の膨張比 ($\sigma = \rho_u/\rho_b$, ρ_u は未燃気体密度で ρ_b は既燃気体密度), Le_E は過剰成分の Lewis 数, Le_D は不足成分の Lewis 数である. また, 式(4)における Φ は当量比 ϕ が $\phi > 1$ なら $\Phi = \phi$, それ以外の燃料希薄条件では $\Phi = \phi^{-1}$ で定義される量である(したがって, $\Phi \geq 1$ である). なお, 本研究では未燃気体温度を 300 K とした. 式(1)中の a_1 と a_2 は次式により与えられる.

$$a_1 = \frac{\sigma}{\sigma - 1} \int_1^\sigma \frac{\lambda(x)}{x} dx \quad (5)$$

$$a_2 = \frac{1}{\sigma - 1} \int_1^\sigma \frac{\lambda(x)}{x} \ln\left(\frac{\sigma - 1}{x - 1}\right) dx \quad (6)$$

Table 1 Parameter values used in Fig.1.

Parameter	Value
Activation energy, E	20.0 kcal/mol
Thermal diffusivity, α	22.5 mm ² /s
Fuel diffusion coefficient, D_F	72.9 mm ² /s
Oxygen diffusion coefficient, D_O	18.8 mm ² /s

ただし, $\lambda(T/T_0)$ は $T = T_0$ における値で規格化された熱伝導率であり, 温度依存性しか考慮されていないが温度に対しては任意の関数である. 本研究では, $\lambda(T/T_0) = (T/T_0)^{1/2}$, つまり, $\lambda(x) = x^{1/2}$ とする.

Bechtold and Matalon [17]は実験結果との比較により彼らのモデルの妥当性を検証した. その結果, プロパン・空気混合気およびイソオクタン・空気混合気に対しては理論予測と実験結果がほぼ一致したが, 水素・空気混合気に対しては両者が大きく異なってしまった. 水素・空気混合気に対して, 式 (1) により計算された Markstein 数と実験結果 [18-20]との比較を Fig.1 に示す. なお, 式 (1) を評価するために用いたパラメータを Table 1 に示すが, これらの値は Bechtold and Matalon が用いたものと同じである. Table 1 中の拡散係数 D_i および熱拡散率 α は未燃気体における値で, Lewis 数 Le_E および Le_D を計算するために必要となる. また, 実験データは実験的に得られた Markstein 長 L を次式のように無次元化して求めた.

$$Ma = \frac{LS_u^0}{\alpha} \tag{7}$$

ただし, S_u^0 は球状火炎伝播実験[18-20]により外挿的に求められた火炎伸長がゼロのときの層流燃焼速度である. α の値には Table 1 に示したものをを用いた. Fig.1 では, 当量比の増加とともに Markstein 数が増加する傾向こそ一致すれ, Markstein 数の絶対値が一桁異なっている. 本研究

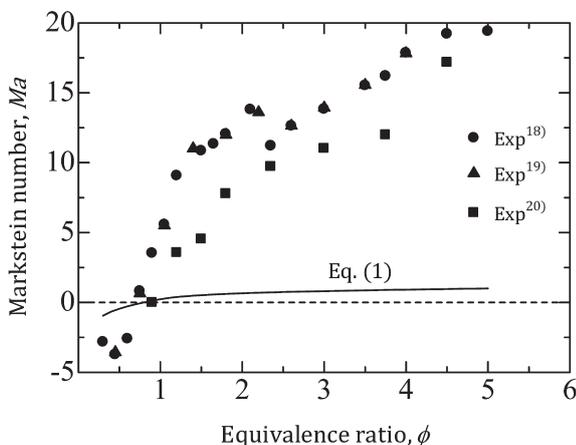


Fig.1 Comparison between experimentally-measured and theoretically-predicted Markstein numbers. For theoretical prediction, the parameters listed in Table 1 are used.

では, 爆発シミュレーションに特化した簡易反応モデルを検討する前に, Fig.1 にみられる式 (1) と実験データのずれの理由, そして式 (1) の評価方法の改善について検討する.

3. 対向流予混合火炎シミュレーション

前節の最後に述べたように, 本研究ではまず式 (1) の評価方法を再検討する. このとき, 式 (1) による理論予測結果との比較対象として Fig.1 のように実験データを用いると, 実験データそのものにばらつきがあるため, 比較がやや困難である. そこで, 詳細化学反応モデルを用いた対向流予混合火炎の数値計算を実施し, その結果得られる Markstein 数を式 (1) による理論予測結果と比較することにする. 数値計算には詳細化学反応解析ソフトウェアの CHEMKIN を用いた. 燃料気体は 1 atm, 300 K の水素・空気混合気とし, 対向流系のバーナ間距離は 2 cm とした. 詳細化学反応機構には San Diego Mechanism [21]を使用した.

Fig.2 に $\phi = 1.0$, バーナ出口流速 $U_0 = 10$ m/s の時の対向流混合火炎におけるバーナ間の流速分布を示す. このグラフより, 気体流速は温度上昇に伴う体積膨張によりおよそ 0.006 m 地点から急激に増加し, 図中の A 点を過ぎると再び減少する. A 点は火炎帯と既燃気体の境界に相当すると考えることができる. Markstein 数を求めるうえで必要なデータは火炎伸長率と燃焼速度の関係である. 火炎伸長率はバーナ出口から火炎面で急速に気体流速が上昇する地点までの傾きの絶対値の最大値 $\kappa = |dU/dZ|_{\max}$ と定義した. 一方, 燃焼速度の求め方には議論の余地がある. ここでの目的は式 (1) との比較なので, 式 (1) の導出過程と同様に, ある位置での流速および密度の積からその位置での質量燃焼速度を求め, その値を未燃気体密度で除することにより燃焼速度を求めた. どの位置を基準として燃焼速度を求めるかにより結果が異なるが, 式 (1) は火炎帯における既燃側の端での Markstein 数 (この定義が実験結果との比較に適し

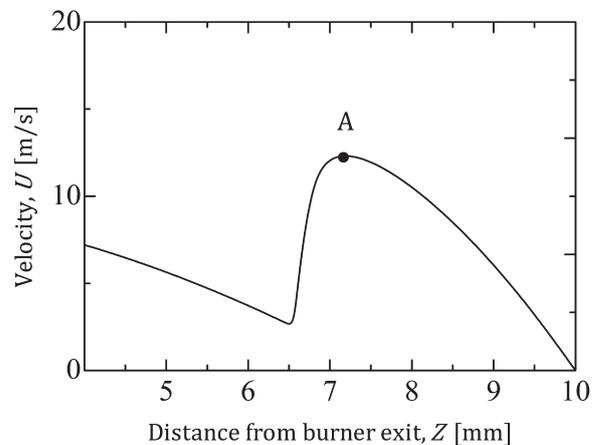


Fig.2 Velocity profile of a premixed counterflow system.

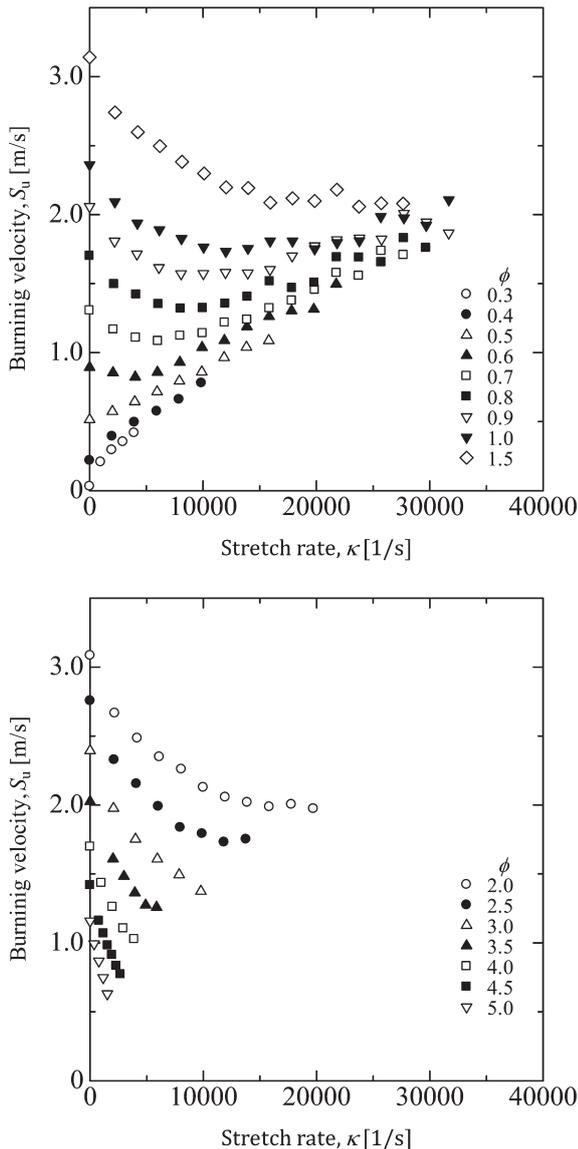


Fig.3 Computed burning velocity as a function of flame stretch rate.
Top: $\phi = 0.3-1.5$, bottom: $\phi = 2.0-5.0$.

ている[17])なので、Fig.2のA点での流速および密度から燃焼速度を評価した。この方法で求めた燃焼速度と火炎伸長率の関係を図3に示す。火炎伸長率が10000 1/s程度以下と小さい領域では燃焼速度がほぼ直線的に変化するという結果が得られ、この直線の傾きからMarkstein長が求められる。本研究では、火炎伸長率が10000 1/sまでの傾きからMarkstein長を求めた。この値までに消失する条件では消失までのデータの傾きとした。

このように求めたMarkstein長を当量比の関数としてFig.4に示す。対向流予混合火炎シミュレーションから得られたMarkstein数が球状火炎伝播実験から求められた結果とほぼ一致することが確認できた。したがって、以下では、式(1)との比較対象として、対向流予混合火炎シミュレーションから得られたMarkstein数を用いる。

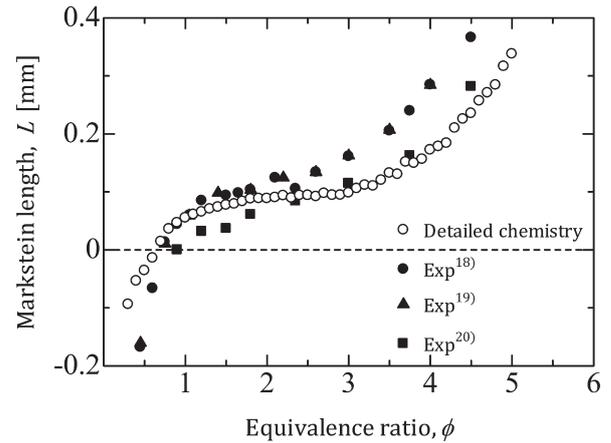


Fig.4 Comparison between experimentally-measured and numerically-computed Markstein lengths.

4. 結果および考察

4.1. 物性値の当量比依存性

Fig.1で式(1)と実験データを比較した際、元論文[17]同様、熱拡散率 α および拡散係数 D_i を一定として取り扱った。通常の炭化水素系燃料の場合、燃焼範囲における燃料濃度がそれほど大きくないためこれら物性値の当量比依存性は小さく、一定とする仮定が妥当であることが多い。しかし、水素・空気系はその限りではない。これは、水素の熱拡散率や拡散係数が一般的な炭化水素系燃料よりはるかに大きいことと、水素の燃焼範囲がはるかに広いことが理由である。例えば、当量比 $\phi = 1$ の水素・空気混合気における水素の体積分率は約30%である。また、層流燃焼速度がほぼ最大になる $\phi = 1.8$ における水素の体積分率は40%を超える。したがって、混合気の熱拡散率や拡散係数の当量比依存性を考慮した比較を試みた。熱拡散率の場合、まず各成分の熱拡散率をそれぞれのLennard-Jonesパラメータを用いて計算し、混合気における値は低圧における混合則[22]を用いて計算した。拡散係数 D_F および D_0 も同様に求めた。

Fig.5に式(1)と詳細化学反応計算結果の比較を示す。なお、Fig.5で式(1)を評価した際、活性化エネルギーはTable1と同様、20.0 kcal/molとした。Fig.1とFig.5を比べると、熱拡散率および拡散係数の当量比依存性を考慮することにより、特に燃料過濃の条件でMarkstein数の実験値が大幅に小さくなることがわかる。これは、先述のように当量比が大きくなると水素濃度が上昇し、未燃混合気の熱拡散率が増加するので、式(7)で表されるMarkstein数が小さくなるためである。

以上の検討より、物性値の当量比依存性を考慮すれば、水素・空気系に対してもBechtold-MatalonモデルのMarkstein数予測結果が詳細化学反応計算結果と大きく異なることを確認できた。そこで、以下では、Bechtold-Matalonモデルと詳細化学反応計算の比較をもとに、爆発シミュレーションに特化した総括一段反応モデルについて

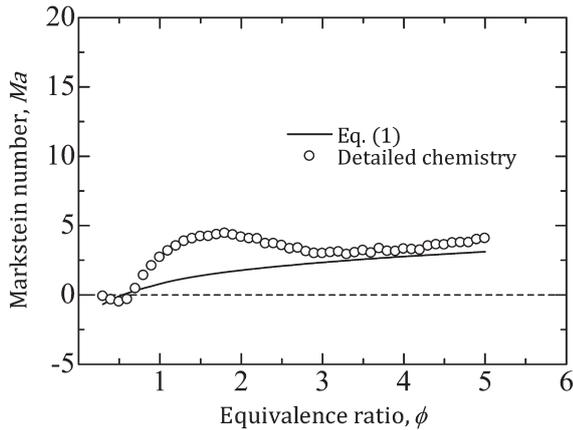


Fig.5 Markstein number predicted by Eq. (1) using thermal diffusivity and diffusion coefficient that depend on equivalence ratio.

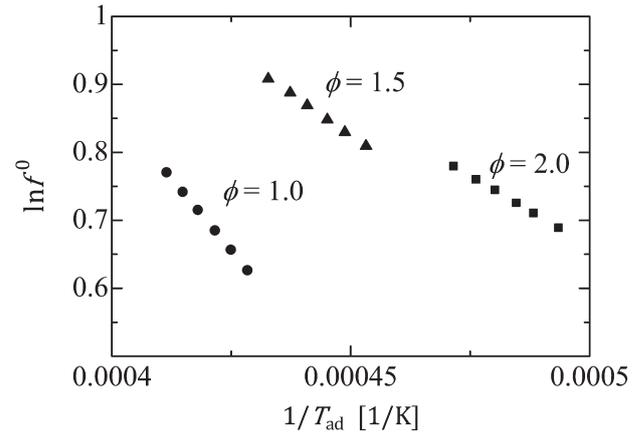


Fig.7 Response of mass burning rate to adiabatic flame temperature.

検討する.

4.2. 総括一段反応の活性化エネルギー

Fig.5 では, 総括活性化エネルギーを 20 kcal/mol に固定して式 (1) を評価した. このとき, $\phi \leq 1$ と $\phi \geq 3$ の領域では式 (1) の予測結果と詳細化学反応計算の結果がそれほど違わないが, $1 \leq \phi \leq 3$ では式 (1) が Markstein 数を過小予測している. これは, 総括活性化エネルギーを 20 kcal/mol 一定としたためである. そこで, 総括活性化エネルギーの当量比依存性を検討する. 初めに, 一定と仮定する総括活性化エネルギーの値を変化させ得られた結果を Fig.6 に示す. このグラフより, 総括活性化エネルギーを増加させると, 当量比が小さいときの Markstein 数は減少し, 当量比が大きいときは増加することがわかる. この結果より, 詳細化学反応計算により得られた Markstein 数を総括一段反応を用いて再現するためには, 総括活性化エネルギーの当量比依存性を考慮する必要があることがわかる.

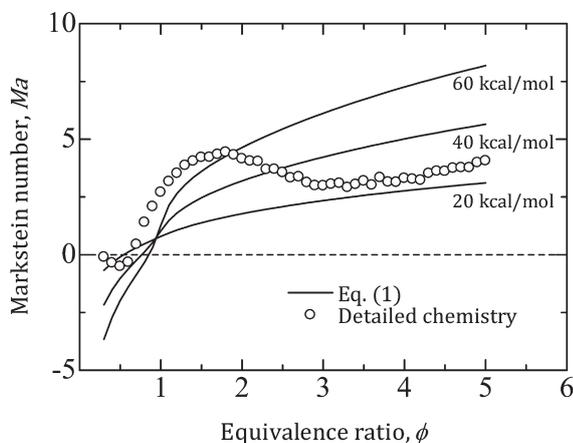


Fig.6 Activation-energy dependence of Markstein number of one-step global chemistry.

4.3. 総括活性化エネルギーの当量比依存性

ここでは, 総括活性化エネルギーの当量比依存性を検討する. まず, 1 節でも触れた, 窒素濃度変化により断熱火炎温度を変化させ, 燃焼速度の温度依存性から総括活性化エネルギーを求める方法[11]を試みた. この方法は, 活性化エネルギー漸近解析により得られる燃焼速度の解析解を基にし, 指数関数項以外の温度依存性を無視して次式により活性化エネルギーを求めるものである.

$$E = -2R \left[\frac{\partial \ln f^0}{\partial (1/T_{ad})} \right] \quad (8)$$

ここで, f^0 は質量燃焼速度であり, 層流燃焼速度 S_u^0 と未燃気体の密度 ρ_u の積で表される. 層流燃焼速度および断熱火炎温度 T_{ad} は San Diego Mechanism [21]を用いた詳細化学反応計算により求めた. Fig.7 に断熱火炎温度変化に対する f^0 の応答を示す. それぞれの計算結果の傾きから総括活性化エネルギーを求めた.

次に, 式 (1) の Markstein 数予測結果が詳細化学反応計算による結果と一致するようにパラメータフィッティングして総括活性化エネルギーを求めた. 確認のため, パラメータフィッティングして求めた総括活性化エネルギーを用いて式 (1) を再評価した結果を Fig.8 に示す. この図より, 活性化エネルギーを当量比ごとに変化させることで式 (1) による Markstein 数が詳細化学反応計算の結果とほぼ一致させられることが確認できる. ただし, $\phi = 1$ 付近では式 (1) の値が活性化エネルギーにほとんど依存しないため, 両者を完全に一致させるのは困難である. これは, $\phi = 1$ のときに式 (4) で定義される有効 Lewis 数 Le_{eff} が Zel'dovich 数 β (つまり活性化エネルギー) に依存しなくなること, そして, Le_{eff} が比較的 1 に近いことが原因である. 100 kcal/mol 以上の総括活性化エネルギーを考えれば両者の一致も可能だが, 現実的な値とも思えないため, $\phi = 1$ 付近での総括活性化エネルギーについては今後の検討課題とし, この領域における式 (1) の値は Fig.8 に含めなかった. なお, 比較のた

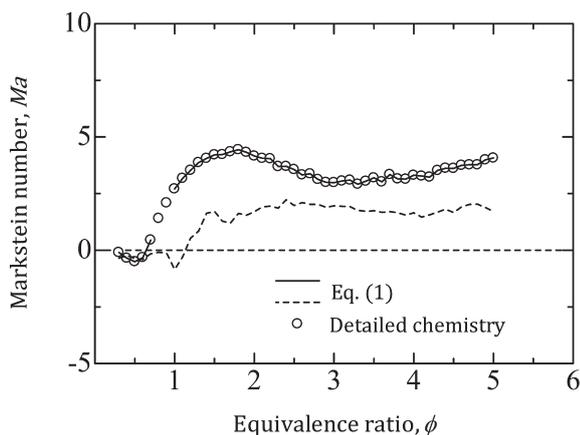


Fig.8 Markstein numbers obtained by detailed-chemistry simulation (open circle), Eq. (1) using global activation energy computed by fitting Markstein number (solid line), and Eq. (1) using global activation energy computed from the temperature dependence of mass burning rate (dashed line).

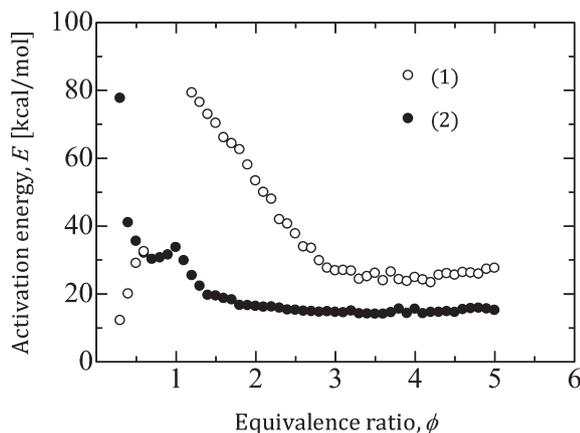


Fig.9 Dependence of global activation energy on equivalence ratio. Activation energy is derived from the Bechtold-Matalon theory, (1), and from the response of mass burning rate to adiabatic flame temperature, (2).

め、燃焼速度の温度依存性から求めた総括活性化エネルギーを用いて式(1)を評価した結果も Fig.8 に示す。燃焼速度基準で求めた総括活性化エネルギーでは詳細化学反応計算で得られた Markstein 数を再現できないことがわかる。

以上の二つの方法で求めた総括活性化エネルギーを Fig.9 に示す。まず $\phi > 1$ では、どちらの方法で求めた活性化エネルギーも当量比の増加とともに減少する。しかし、絶対値を比較すると、Markstein 数を基準に求めた総括活性化エネルギーのほうが最大で2倍程度大きい。一方 $\phi < 1$ では、Markstein 数基準の総括活性化エネルギーは当量比の増加とともに上昇するのに対し、燃焼速度の温度依存性から求めたそれは極小値を持つような分布となった。以上より、異なる方法で求めた総括活性化エネルギーは値がかなり異なることがわかった。これは当然のことであり、あらゆる燃焼挙動が詳細化学反応計算と一致するような総括反

応を構築することはもとより不可能である。したがって、総括反応モデルを用いた DNS を実施する際は、目的に応じた反応速度パラメータを選択しなければならない。混合気の Markstein 数が結果に大きな影響を及ぼすような爆発シミュレーションの場合は、今回検討したような Markstein 数を再現できる反応速度パラメータを用いることが重要である。ただし、このような反応速度パラメータを用いると、今度は雰囲気中の窒素濃度が変化したときの燃焼速度応答性を正確に予測できなくなるので注意が必要である。雰囲気中の窒素濃度が変化する可能性がある場合は、異なる窒素濃度に対して総括活性化エネルギーをあらかじめ求めておく必要がある。このように、総括反応モデルを用いた DNS による爆発シミュレーションを精度よく実施するためには、爆発現象に特化した反応速度パラメータのデータベースをあらかじめ構築しておく必要がある。

5. 結言

ガス爆発は高速な火炎伝播現象であり、火炎面の燃焼不安定性により見かけの火炎伝播速度が大きく上昇する。ガス爆発事故の被害は火炎伝播速度に大きく影響を受けるため、爆発事故のリスク評価の際には不安定性による火炎の加速を正確に評価する必要がある。特に、総括反応モデルを用いた DNS による爆発シミュレーションでリスク評価する場合、火炎の不安定性を正確に表現できる総括反応モデルを採用しなければならない。

本研究では、このような不安定性を表す重要なパラメータとして、Markstein 数に着目し、詳細化学反応計算により求めた Markstein 数を総括反応モデルが再現できるかについて理論的に検討した。まず、水素・空気系の Markstein 数を理論的に予測する際には、混合気の物性値の当量比依存性を考慮しなければならないことを明らかにした。これは、通常の炭化水素系燃料とは対照的な結果である。次に、総括反応モデルの Markstein 数を予測するとき、総括活性化エネルギーを当量比に依らず一定とすると、詳細化学反応計算の結果を再現できないことを確認した。つまり、総括反応モデルにより爆発シミュレーションを実施する場合は、総括活性化エネルギーの当量比依存性を考慮しなければならない。そのために、各当量比において空気中の窒素濃度を変化させた詳細化学反応計算を実施し、燃焼速度の断熱火炎温度依存性から総括活性化エネルギーを求めた。しかし、この方法で得られた総括活性化エネルギーを用いて Markstein 数を理論予測したところ、詳細化学反応計算の結果とは一致しなかった。そこで、理論解析値が詳細化学反応計算の結果に一致するようパラメータフィッティングを行い、総括活性化エネルギーを求めた。これら二つの方法で求めた総括活性化エネルギーにはかなりの違いがみられた。

Markstein 数を再現できる総括反応モデルを用いれば、不安定性による火炎の加速を正確に再現できる爆発シミュ

レーションが可能だと期待される。一方、このモデルでは燃焼速度の断熱火炎温度依存性を再現できないため、閉囲空間における爆発で圧力上昇に伴う温度上昇が顕著に表れる場合などは精度が低下する。例えば、不安定性による火炎伝播の加速度評価に 10 % の誤差が生じると、発生する爆風圧評価にも 10 % の誤差が生じる。このような誤差を避けるためには、各温度における反応速度パラメータをあらかじめデータベース化しておくことが重要であり、このようなデータベース構築は今後の課題である。

謝辞

本研究は経済産業省と JSPS 科研費 23241051 の助成を受けて実施したものである。ここに記して謝意を表する。

References

- Dobashi, R., Kawamura, S., Kuwana, K., and Nakayama, Y., *Proc. Combust. Inst.*, 33: 2295-2301 (2011).
- Mukaiyama, K., Shibayama, S., and Kuwana, K., *Combust. Flame* 160: 2471-2475 (2013).
- Williams, F. A., *Combustion Theory*, Addition-Wesley, (1985).
- Kadowaki, S., and Hasegawa, T., *Prog. Energy Combust. Sci.* 31: 193-241 (2005).
- Molkov, V., Makarov, D., and Schneider, H., *J. Phys. D* 39: 4366-4376 (2006).
- Makarov, D., Molkov, V., and Gostintsev, Yu., *Combust. Sci. Technol.* 179: 401-416 (2007).
- Tomizuka, T., Kuwana, K., Shimizu, K., Mogi, T., Dobashi, R., and Koshi, M., *J. Loss Prev. Process Ind.* 26: 369-373 (2013).
- Tomizuka, T., Kuwana, K., Mogi, T., Dobashi, R., and Koshi, M., *Int. J. Hydrogen Energy* 38: 5176-5180 (2013).
- 寺島洋史・越光男, 日本燃焼学会誌 55: 411-421 (2013).
- Westbrook, C. K., and Dryer, F. L., *Combust. Sci. Tech.* 27: 31-43 (1981).
- Sun, C. J., Sung, C. J., He, L., and Law, C. K., *Combust. Flame* 118: 108-128 (1999).
- Gu, X. J., Haq, M. Z., Lawes, M., and Woolley, R., *Combust. Flame* 141: 41-58 (2000).
- Bradley, D., Cresswell, T. M., and Puttock, J. S., *Combust. Flame* 124: 551-559 (2001).
- Clavin, P., and Williams, F. A., *J. Fluid Mech.* 116: 251-282 (1982).
- 早川晃弘・橋本淳, 津山工業高等専門学校紀要 48: 29-36 (2006).
- 橋本淳, 津山工業高等専門学校紀要 50: 1-6 (2008).
- Bechtold, J. K., and Matalon, M., *Combust. Flame* 127: 1906-1913 (2001).
- Aung, K. T., Hassan, M. I., and Faeth, G. M., *Combust. Flame* 109: 1-24 (1997).
- Aung, K. T., Hassan, M. I., and Faeth, G. M., *Combust. Flame* 112: 1-15 (1998).
- Kwon, O. C., and Faeth, G. M., *Combust. Flame* 124: 590-610 (2001).
- The San Diego Mechanism, Version 20120907, <http://combustion.ucsd.edu>
- Poling, B. E., Prausnitz, J. M., and O'Connell, J. P., *The Properties of Gases and Liquids*, 5th Ed., McGraw-Hill, 2000.