噴霧火炎内すす生成の数値シミュレーション*

渡 邊 裕 章^{*1,*2}, 黒 瀬 良 一^{*2}
小 森 悟^{*2}, Heinz PITTSCH^{*3}

A Numerical Simulation of Soot Formation in Spray Flames

Hiroaki WATANABE^{*4}, Ryoichi KUROSE,
Satoru KOMORI and Heinz PITTSCH^{*4} Energy Engineering Research Laboratory, Central Research Institute of Electric Power Industry (CRIEPI),
2-6-1 Nagasaka, Yokosuka-shi, Kanagawa, 240-0196 Japan

A two-dimensional numerical simulation is applied to spray flames formed in a laminar counterflow, and soot formation behavior is studied in terms of equivalence ratio and radiation in detail. N-decane ($C_{10}H_{22}$) is used as a liquid spray fuel, and the droplet motion is calculated by the Lagrangian method. A one-step global reaction is employed for the combustion reaction model. A kinetically based soot model with flamelet model is employed to predict soot formation. Radiation is taken into account using the discrete ordinate method. The results show that the soot is formed in the spray diffusion flame region and its radiation emission increases with increasing the equivalence ratio of the droplet fuel. This trend is in good agreement with that of the luminous flame behavior observed in the experiment. The radiation is found to strongly affect the soot formation behavior. Without the radiation model, the soot volume fraction is fatally overpredicted.

Key Words: Numerical Simulation, Spray Combustion, Soot, Thermal Radiation, Counterflow

1. 緒 言

噴霧火炎中では、液体燃料の微粒化、油滴の気相への分散、蒸発、燃料蒸気の空気との混合反応といった多くの過程が同時に進行しながら起こるため、その火炎構造は極めて複雑であり、依然不明な点が多い。これまで著者らは、層流対向流中に形成される噴霧火炎の直接数値計算 (direct numerical simulation, DNS) を実施し、油滴の群燃焼や火炎片の挙動について詳細な検討を行ってきた⁽¹⁾⁽²⁾⁽³⁾。中村ら⁽²⁾は、噴霧火炎中に形成される拡散火炎の挙動が、実験⁽⁴⁾で観察されるすすの生成を示す輝炎の挙動と良く一致することを指摘した。しかし、実際にすすの生成計算を行っていないため、その詳細なメカニズムは議論していない。

近年、すすの生成量を予測するための手法として、速度論に基づく生成モデルと火炎片 (flamelet) モデルを組み合わせた方法が提案されている。ここで flamelet モデルは、主要なガス成分に比べてかなり低濃度で算出に多くの化学種と化学反応を要する、すすの前駆体

濃度を得るために用いられる。すすの前駆体としては、アセチレン (C_2H_2) や芳香族炭化水素 (PAH) 等が用いられる。Pitsch ら⁽⁵⁾は、エチレンの噴流拡散火炎におけるすすの生成を、PAH を前駆体とした核生成モデルにより検討した。一方、Wen ら⁽⁶⁾は、ケロシンの噴流火炎を対象に、すす生成に及ぼす C_2H_2 や PAH を前駆体とした核生成モデルの影響を調べた。これらの研究は、ガス拡散火炎中のすす生成予測に対して flamelet モデルが有効であることを示している。

本研究では、層流対向流場に形成される噴霧火炎に 2 次元 DNS を実施することにより、燃料油滴の当量比と輻射の影響の観点から、噴霧燃焼場におけるすすの生成挙動を明らかにすることを目的とした。すすの生成には、 C_2H_2 を前駆体とした核生成、凝集、表面成長、および酸化反応の各過程を考慮する。また、前駆体 (C_2H_2) と酸化剤 (OH ラジカル) それぞれの濃度は、flamelet モデルにより決定する。輻射の効果は、discrete ordinate 法⁽⁷⁾により考慮する。

* 原稿受付 2006 年 9 月 29 日。

^{*1} 正員, (財)電力中央研究所エネルギー技術研究所(〒240-0196 横須賀市長坂 2-6-1)。^{*2} 正員, 京都大学大学院工学研究科(〒606-8501 京都市左京区吉田本町)。^{*3} Department of Mechanical Engineering, Stanford University (Stanford, CA 94305-3035)。

E-mail: whiroaki@criepi.denken.or.jp

記 号

u_i	速度	h	比エンタルピ
P	圧力	λ	熱拡散率
ρ	密度	Z	混合分率
σ_{ij}	応力テンソル	χ	スカラー消散率

g_i	重力加速度	D_k	拡散係数
T	ガス温度	c_p	混合ガスの比熱
L_V	油滴の蒸発潜熱	$c_{p,d}$	油滴の比熱
τ_d	油滴の緩和時間	B_M	質量トランスファー数
A_d	油滴の投影面積	I	輻射強度

Fig. 1 Schematic drawing of computational setup.

2. 計 算 方 法

2.1 対象系 層流対向流場の噴霧火炎に対する計算領域の設定は、黄らの実験⁽⁴⁾に従う(図1)。計算領域は、上下に位置するバーナポート径 L_p によって無次元化し、x-y座標の原点は上側ポート中心に置く。また、液体燃料はn-デカン($C_{10}H_{22}$)とする。上側ポートからは、常温常圧空気(300 K, 0.1013 MPa, および酸素質量分率 = 0.2357)が $-0.5 \leq y^* \leq 0.5$ より、また、n-デカンの噴霧油滴が $-0.15 \leq y^* \leq 0.15$ より投入される。下側ポートからは、噴霧の安定的な着火のため、常温常圧空気とn-デカン蒸気の予混合ガスが、 $-0.5 \leq y^* \leq 0.5$ より投入される。上下ポートから流入する流体の速度は等しい。

本研究の燃焼反応には、次のn-デカンの一段総括反応を用いる⁽⁸⁾。

2.2 支配方程式 本研究では、速度論に基づくすす生成モデルを採用する。すすの前駆体に C_2H_2 を、酸化剤には OH ラジカルと酸素を考慮する。主要なガス組成は式(1)により決定するが、低濃度で算出に多くの化学種と反応式を要する C_2H_2 と OH ラジカルの濃度は、後述するflameletモデルにより決定する。ただし、flameletモデルでは輻射強度輸送式を直接考慮することができないため、輻射項を含むエネルギー方程式を解き、温度場を決定する。考慮する気相の支配方程式は、質量、運動量、エネルギー、および混合分

率の保存式である。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \rho u_j = S_m \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j + P \delta_{ij} - \sigma_{ij}) - \rho g_i = S_{u_i} \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j h - \rho \lambda \frac{\partial h}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^n h_k (\rho \lambda - \rho D_k) \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right] = S_h \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho u_j Y_k - \rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) = S_{comb,k} + S_{Y_k} \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho u_j Z - \rho D_Z \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) = S_Z \quad (6)$$

ここで、 h_k 、 Y_k および D_k はそれぞれ k 番目の化学種に対する比熱、質量分率および拡散係数である。 δ_{ij} はクロネッカーのデルタ関数、 Z はflameletモデルのために導入された混合分率である。 Z の拡散係数 D_Z には、混合ガスの拡散係数を与える。 Y_k には、5つの化学種(O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O および $C_{10}H_{22}$)を考慮する。 S_m , S_{u_i} , S_h , S_{Y_k} および S_Z は、それぞれ油滴と気相の相互作用(粒子運動、または蒸発)による質量、運動量、エンタルピー、化学種、および混合分率の生成項を表す。また、 $S_{comb,k}$ はn-デカン蒸気の燃焼に伴う生成項である。 ρ は、理想気体の状態方程式から導く。

燃料油滴の挙動は、ラグランジェ的に解くことにより求める。油滴密度は気相よりも十分に大きいと仮定し、油滴の挙動に対して、抗力と重力の影響のみを考慮し、流れの剪断力に起因する揚力は無視する⁽⁹⁾。さらに、油滴の衝突、分裂および合体は考慮しない⁽¹⁰⁾。油滴の蒸発モデルには、非平衡Langmuir-Knudsenモデルを用いる⁽¹¹⁾。油滴の位置($x_{d,i}$)、速度($u_{d,i}$)、温度(T_d)、および質量(m_d)に関する保存式は、次式で表される。

$$\frac{dx_{d,i}}{dt} = u_{d,i} \quad (7)$$

$$\frac{du_{d,i}}{dt} = \frac{f_1}{\tau_d} (u_i - u_{d,i}) + g_i \quad (8)$$

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{Nu}{3Pr} \left(\frac{c_p}{c_{p,d}} \right) \left(\frac{f_2}{\tau_d} \right) (T - T_d) + \frac{1}{m_d} \left(\frac{dm_d}{dt} \right) \frac{L_V}{c_{p,d}} + \frac{1}{m_d c_{p,d}} [A_d \varepsilon_d (\pi I - \sigma T_d^4)] \quad (9)$$

$$\frac{dm_d}{dt} = -\frac{Sh}{3Sc} \frac{m_d}{\tau_d} \ln(1 + B_M) \quad (10)$$

ここで、 f_1 と f_2 はそれぞれ油滴の蒸発による抗力と熱伝達に関する修正係数⁽¹²⁾、 σ はステファン・ボルツマ

ン定数 ($5.67 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K}^4)$) である。 ϵ_d の粒子放射係数には、炭化水素油滴の放射率 ($= 0.4$)⁽¹³⁾ を与える。

以上の支配方程式および計算手法の詳細については、文献⁽²⁾⁽³⁾を参照されたい。

2.3 すず生成モデル 本研究では、すすの挙動を、次に示すすの数密度 (N) と質量密度 (M) の各保存式を解くことによって求める。

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho u_j \phi - \rho D_s \frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) = S_\phi \quad (11)$$

ここで、 D_s は拡散係数、 ϕ は N または M を表す。ただし、 N と M は次式で与えられる。

$$N = N_A \rho \phi_N, \quad M = \rho \phi_M \quad (12)$$

ここで、 N_A はアボガドロ数 ($6.02 \times 10^{26} \text{ kmol}^{-1}$) である。また、それぞれの保存式の生成項は、次式で表すことができる。

$$S_N = \frac{1}{N_A} \left[\left(\frac{dN}{dt} \right)_{\text{Inc.}} + \left(\frac{dN}{dt} \right)_{\text{Coa.}} \right] \quad (13)$$

$$S_M =$$

$$\frac{M_P}{N_A} \left(\frac{dN}{dt} \right)_{\text{Inc.}} + \left(\frac{dM}{dt} \right)_{\text{Gro.}} + \left(\frac{dM}{dt} \right)_{\text{Oxi.}} \quad (14)$$

ここで、 M_P はすすのモル質量 ($1,200 \text{ kg/kmol}$) である⁽¹⁴⁾。本研究では、すすの生成は、核生成 (inception)、凝集 (coagulation)、表面成長 (growth) および酸化反応 (oxidation) の各過程から構成されるものと仮定する。

すすの前駆体として C_2H_2 を仮定し、すすの核生成速度には、次式で表される Leung ら⁽¹⁴⁾の単純化モデルを用いる。

$$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{\text{Inc.}} = c_1 N_A \left(\rho \frac{Y_{\text{C}_2\text{H}_2}}{W_{\text{C}_2\text{H}_2}} \right) e^{-\frac{21100}{T}} \quad (15)$$

ここで、 $c_1 = 54 \text{ s}^{-1}$ である⁽¹⁵⁾。

すすの凝集は、すす粒子同士の衝突頻度に比例すると考えられる。衝突頻度は、すすの粒径と雰囲気ガスの平均自由行程から決めることができ、凝集速度は次式で与えられる⁽¹⁶⁾。

$$\left(\frac{dN}{dt} \right)_{\text{Coa.}} = - \left(\frac{24R}{\rho_{\text{soot}} N_A} \right)^{1/2} \left(\frac{6}{\pi \rho_{\text{soot}}} \right)^{1/6} T^{1/2} M^{1/6} N^{11/6} \quad (16)$$

ここで、 R は一般ガス定数、 ρ_{soot} はすすの密度 ($2,000 \text{ kg/m}^3$) である。

すすの表面成長は、核生成と同様に、 C_2H_2 が寄与するものと仮定する⁽¹⁷⁾⁽¹⁸⁾。このとき、表面成長速度は、

$$\left(\frac{dM}{dt} \right)_{\text{Gro.}} =$$

$$c_4 \left(\rho \frac{Y_{\text{C}_2\text{H}_2}}{W_{\text{C}_2\text{H}_2}} \right) e^{-\frac{12100}{T}} \left[(\pi N)^{1/3} \left(\frac{6M}{\rho_{\text{soot}}} \right)^{2/3} \right] \quad (17)$$

ここで、 $c_4 = 9000.6 \text{ kg} \cdot \text{m}/(\text{kmol} \cdot \text{s})$ である。

OH ラジカルと酸素をすすの酸化反応の酸化剤として考慮する⁽¹⁹⁾⁽²⁰⁾。このとき、すすの酸化反応速度は、 OH ラジカルによる反応速度と酸素による反応速度との加算の形で表される⁽⁶⁾。

$$\left(\frac{dM}{dt} \right)_{\text{Oxi.}} = -c_5 \eta \rho \frac{Y_{\text{OH}}}{W_{\text{OH}}} T^{1/2} (\pi N)^{1/3} \left(\frac{6M}{\rho_{\text{soot}}} \right)^{2/3} - c_6 \rho \frac{Y_{\text{O}_2}}{W_{\text{O}_2}} e^{-\frac{19778}{T}} T^{1/2} (\pi N)^{1/3} \left(\frac{6M}{\rho_{\text{soot}}} \right)^{2/3} \quad (18)$$

ここで、 $\eta = 0.13$ 、 $c_5 = 105.81 \text{ kg} \cdot \text{m}/(\text{kmol} \cdot \text{K}^{1/2} \cdot \text{s})$ 、および $c_6 = 8903.51 \text{ kg} \cdot \text{m}/(\text{kmol} \cdot \text{K}^{1/2} \cdot \text{s})$ である。

T と O_2 の濃度は、式 (1)、(4) および (5) から決定し、 C_2H_2 と OH ラジカルの濃度は、steady flamelet モデルにより決定する。Steady flamelet モデルでは、物理空間の各位置における C_2H_2 と OH ラジカルの濃度を、flamelet ライブラリと呼ばれるデータベースを用いて決める。Flamelet ライブラリは、 Z 空間において、1 次元火炎片方程式を解くことで得られる。本研究では、 Z 空間における n -デカン / 空気の 1 次元層流対向流拡散火炎方程式を、CFX-RIF⁽²¹⁾を用いて計算した。この計算には、112 の化学種と 883 の素反応過程を考慮した。物理空間と Z 空間をやりとりするパラメータには、 Z と次式で定義される χ を用いる。

$$\chi = 2D_Z |\nabla Z|^2 \quad (19)$$

なお、本研究では、式 (6) の Z 保存式を解く際に、下側ポートから流入する予混合ガスに由来する Z の輸送は無視した。

2.4 輻射モデル 本研究では、輻射計算に discrete ordinate 法⁽⁷⁾を採用する。ある方向 Ω に対する輻射強度 I の輸送式は、次式で表される。

$$\Omega \cdot \nabla I(r, \Omega) = -(\alpha + \kappa) I(r, \Omega) + \alpha I_b(r) \quad (20)$$

ここで、 I_b は各位置における黒体輻射強度、 α と κ はそれぞれ、 CO_2 、 H_2O 、 $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ およびすすの濃度から決まるガス吸収係数⁽²²⁾と粒子数密度から決まる散乱係数⁽²³⁾である。各セルからの輻射強度の輸送方向は、 S_8 近似によって決める。式 (4) のエネルギー保存式における輻射による生成項は、次式で与えられる。

$$-\dot{Q}_{\text{rad}} = \alpha \left(\int_{4\pi} I d\Omega - \sigma T^4 \right) \quad (21)$$

Fig. 2 Droplet size distribution.

2.5 計算条件 縦 20 mm × 横 40 mm の計算領域を 200 × 400 の等間格子 (コントロールボリュームの実寸法 100 μm × 100 μm) に分割した。支配方程式の解法には、有限体積法に基づく SIMPLE 法を採用した。空間差分には 4 次精度中心差分を、時間差分には完全陰解法を用いた。また、油滴に関する時間差分は、2 次精度 Adams-Bashforth 法を用いて解いた。

本研究における計算では、伸張率 (a) を 40 s^{-1} 、および噴霧の平均粒径 (SMD) を 106.7 μm とした。ただし、 a は入口ガス流速 (u_0) と上下ポート間距離 (L_p) で定義した ($a \equiv 2u_0/L_p$)。また、噴霧の粒径分布は、対応する PDA (Phase Doppler Anemometry) 計測により得た (図 (2))。噴霧の供給当量比 (ϕ_l) の影響を調べるため、 ϕ_l を 1.26, 0.84, および 0.63 (それぞれ, RE1, RE2, および RE3) と変化させた。これらの条件に対しては、輻射を考慮した。ただし、 ϕ_l は、上側ポートの $-0.15 \leq y^* \leq 0.15$ から供給される空気量と噴霧供給量によって定義した。加えて、輻射の影響を調べるため、 $\phi_l = 1.26$ に対して、輻射を考慮しない条件 (E1) を計算した。本研究で検討する条件を表 1 にまとめる。油滴の初期位置は一様乱数を用いて決定し、その速度は気相の流入速度に等しいとした。ポート径 $L_p (= 0.02 \text{ m})$ と入口流速 $u_0 (= 0.4 \text{ m/s})$ 、および常温空気性状から求まるレイノルズ数は 500 である。下側ポートからの予混合ガス火炎に対して、上側ポートから燃料油滴を投入した後、550 ms ($0.1 \text{ ms} \times 5,500$ タイムステップ) 後まで計算を行い、最後の 500 ステップ分を用いて統計量を算出した。

Table 1 Cases presented.

Cases	Equivalence ratio, ϕ_l , [-]	Radiation
RE1	1.26	Yes
RE2	0.84	Yes
RE3	0.63	Yes
E1	1.26	No

Fig. 3 Instantaneous distributions of (a) gaseous temperature, (b) soot volume fraction, and (c) flame index, for case RE1.

3. 結果および考察

3.1 すす生成の一般的特性 図 3(a)~(c) に、RE1 (噴霧の供給当量比 $\phi_l = 1.26$, 伸張率 $a = 40 \text{ s}^{-1}$, および噴霧粒径 $SMD = 106.7 \text{ μm}$) における、(a) ガス温度 (T), (b) すすの体積分率 (V_s), および (c) flame index (FI) の瞬間分布をそれぞれ示す。ただし、図中の白い点は、各油滴粒子の位置を表す。また、 FI は予混合火炎と拡散火炎を判別するパラメータであり、次式で定義される⁽²⁴⁾。

$$FI = \nabla Y_{C_{10}H_{22}} \cdot \nabla Y_{O_2} \quad (22)$$

FI は、正であれば予混合火炎を、負であれば拡散火炎を表す。上側ポートから投入された油滴の数が、図 3(a) 中央付近に見られる高温の領域において急速に減少することから、油滴は主にこの領域で蒸発し、燃焼していることがわかる。また、 V_s は、この高温域の上流側 (x/L_p が小さくなる方向) 部分において高い値を示し、その領域は、中央付近に大きく広がる拡散火炎の位置と一致する (図 3(b), (c))。このことから、すすは拡散火炎中に生成されることが確認できる。なお、

このような拡散火炎の発達は、油滴の群燃焼に起因することが著者らによって確認されている⁽²⁾。

図4(a)～(c)に、RE1における、(a)ガス温度($\bar{T}$)、混合分率($\bar{Z}$)、すす体積分率($\bar{V}_s$)、および油滴蒸発速度($\bar{S}_m$)、(b)すすの前駆体と酸化剤の質量分率($\bar{Y}_k$)、および、(c)すすの質量密度方程式の生成項($\bar{S}_m$)の中心軸上の時間平均値分布をそれぞれ示す。図4(a)から、 $x/L_p = 0.3$ 付近において、燃料蒸気は着火し、 $\bar{T}$ が急速に上昇することがわかる。 $\bar{T}$ の上昇とともに、 $\bar{S}_m$ は上昇し、 $x/L_p = 0.35$ 付近でピーク値をもつ。これに対して、油滴の蒸発により生成される $\bar{Z}$ とすすの体積分率($\bar{V}_s$)は、 $\bar{S}_m$ よりも下流側のほぼ同じ位置にピーク値をもち、その分布形状も良く似た傾向を示している。図4(b)において、すすの前駆体であるアセチレン(C_2H_2)の質量分率($\bar{Y}_{C_2H_2}$)は、すすの酸化剤であるOHラジカルと酸素の質量分率($\bar{Y}_{OH}$ および $\bar{Y}_{O_2}$)がそれぞれその最低値とゼロ値をとる $x/L_p = 0.4$ 付近でピーク値をもつ。これらに起因するすす生成速度の挙動が、図4(c)において見られる。すすのトータルの生成速度は、酸化速度がピーク値をもつ $x/L_p = 0.3 \sim 0.4$ を除き、ほとんどが核生成速度に一致しており、表面成長の影響はほとんど見られない。すすの酸化速度は、そのピーク値を $\bar{Y}_{C_2H_2}$ のピーク値の上流側で $\bar{Y}_{OH}$ のピーク値付近にもち、 $\bar{Y}_{OH}$ の急激な減少とともにゼロに向かう。一方、下流側の酸化速度は、ほぼゼロである。これは、油滴の群燃焼により既に酸素が消費されていることに起因する。

3.2 噴霧の供給当量比の影響 噴霧の供給当量比(ϕ_l)の影響を調べるため、 $\phi_l = 1.26, 0.84$, および 0.63 の3条件(それぞれ、RE1, RE2, および RE3)について検討する。図5(a)～(d)は、RE1～RE3における、(a)ガス温度(T)、(b)flame index(FI)、および、(c)すすからの輻射エネルギー(E_s)の瞬間分布と、(d)対応する実験において観察される輝炎の写真⁽⁴⁾の比較である。ただし、 E_s は、すす体積分率(V_s)とガス温度(T)から次式で定義する。

$$E_s = V_s \sigma T^4 \quad (23)$$

写真に現れる輝炎の明るさは、すすの燃焼に伴う輻射エネルギーの放出に比例すると考えられるため、 E_s の分布は、輝炎の写真と比較することが可能である。図5(a)から、 ϕ_l が増加すると、図の中央部に現れる高温の領域が拡大することがわかる。これは、噴霧燃焼による拡散火炎が発達することに対応している(図5(b))。また、図5(c)より、すすからの輻射エネルギー(E_s)は、 ϕ_l の増加に従って、増加することがわかる。この傾向は、図5(b)に見た拡散火炎領域の拡大と対応してお

Fig. 4 Time-mean profiles of (a) gaseous temperature, mixture fraction, soot volume fraction and evaporation rate of droplets, (b) mass fractions of soot precursor and oxidizers, and (c) source terms of soot mass density, for case RE1.

り、実験において観察される輝炎の傾向とも定性的に一致する(図5(d))。実際、実験において、輝炎の発生が、RE1では定常的に見られるのに対して、RE3では間欠的であるなど、 ϕ_l に対して敏感な様子が観察されている。

図6(a), (b)に、RE1～RE3における、(a)ガス温度($\bar{T}$)、および油滴蒸発速度($\bar{S}_m$)、(b)すす体積分率($\bar{V}_s$)、および C_2H_2 の質量分率($\bar{Y}_{C_2H_2}$)の中心軸上の時間平均値分布をそれぞれ示す。図6(a)から、RE1～RE3において、それぞれの $\bar{T}$ のピーク値の差は、100 K 以内にあり、それほど大きな違いは見られないことがわかる。しかしながら、 $\bar{V}_s$ は、 ϕ_l の増加に従い、劇的に増加する(図6(b))。これは、 $\bar{Y}_{C_2H_2}$ の増加、すなわち、すすの前駆体の生成が $\bar{S}_m$ の増加と共に顕著になるためである。

Fig. 5 Instantaneous distributions of (a)gaseous temperature, (b)flame index, (c)soot radiation emission, and (d)experiment's photographs, for $\phi_f = 1.26, 0.84$ and 0.63 (case RE1, RE2 and RE3, respectively).

3.3 輻射の影響 すすの生成挙動に及ぼす輻射の影響を調べるため、輻射を考慮しない条件 (E1, $\phi_f = 1.26$) を計算し、輻射を考慮した条件 (RE1) と比較する。図 7(a)~(c) に、E1 における、(a) ガス温度 (T)、(b) すすの体積分率 (V_s)、および (c) flame index (FI) の瞬間分布をそれぞれ示す。RE1(図 3(a)) と比較すると、E1 における T の分布(図 7(a)) では、中央部に現れる高温の領域が大きく広がっていることがわかる。また、図 3(b) と図 7(b) の V_s の分布を比較すると、すすの生成量は、E1 の方が RE1 よりも多いことがわかる。さらに、E1 における火炎構造を見てみると、拡散火炎領域が、RE1 におけるそれよりもわずかに上下方向に拡大している様子が観察できる(図 3(c), 図 7(c))。

定量的な比較を行うため、図 8(a), (b) に、RE1 と E1 における、(a) ガス温度 ($\bar{T}$)、および油滴蒸発速度 ($\bar{S}_m$)、(b) すす体積分率 ($\bar{V}_s$)、および C_2H_2 の質量分率 ($\bar{Y}_{C_2H_2}$) の中心軸上の時間平均値分布の比較をそれぞれ示す。図 8(a) から、輻射を考慮しない E1 では、輻射を考慮した RE1 よりも、 $\bar{T}$ のピーク値が 300K 程度高くなり、燃料油滴の着火はより上流側で起こることが

Fig. 6 Comparison of time-mean profiles of (a)gaseous temperature and evaporation rate of droplets, (b)soot volume fraction and mass fraction of C_2H_2 , for $\phi_f = 1.26, 0.84$ and 0.63 (case RE1, RE2 and RE3, respectively).

Fig. 7 Instantaneous distributions of (a) gaseous temperature, (b) soot volume fraction, and (c) flame index, for case E1.

Fig. 8 Comparison of time-mean profiles of (a) gaseous temperature and evaporation rate of droplets, (b) soot volume fraction and mass fraction of C_2H_2 , between the cases of with and without radiation (case RE1 and E1, respectively).

わかる。また、これに伴い、E1 では RE1 よりも、 $\bar{S}_m$ の上昇が上流側で起こる。さらに、E1 における $\bar{V}_s$ は、RE1 のそれよりも大幅に高い値を示す (図 8(b))。これらの原因としては、E1 において、未燃ガスや燃料油滴の温度が火炎温度よりも大幅に低いことに起因する輻射熱損失が考慮されていないことが考えられる。式 (15)~(18) に従うと、一見、すすの酸化は、その速度が核生成や表面成長の速度と同様に、温度が上昇するに従って大きくなるため、すすの生成を抑制するように見える。しかし、拡散火炎内では、油滴の群燃焼により酸化剤となる酸素が既に消費されているため、すすの酸化反応は進まない。その結果、輻射を考慮しない場合のすすの生成が促進されるものと考えられる。

4. 結 論

本研究では、層流の 2 次元対向流場に形成される n-デカンの噴霧火炎に対して DNS を実施することにより、すすの生成挙動について検討を行った。得られた主な知見は、以下の通りであった。

1. すすは、主に拡散火炎領域において形成される。また、すすの燃焼に伴う輻射のエネルギーは、供給当量比の増加に伴ってすすの前駆体濃度が増加するため、劇的に大きくなる。この傾向は、実験において観察される輝炎の挙動と定性的に良く一致する。
2. 輻射を考慮した場合に比較して、考慮しない場合におけるすすの生成量は大幅に増加する。これは、低温の未燃ガスや液滴からの輻射熱損失がないことによる火炎温度の上昇により、すすの核生成や表面成長が促進されるためである。この結果は、すすの生成量を正確に予測するためには、輻射を考慮することが不可欠であることを示している。

謝 辞

本研究を遂行するにあたり、大阪大学 赤松史光助教授に実験データの提供と貴重な助言を頂いた。また、電力中央研究所 馬場雄也氏、黄承敏氏、大高円氏、大阪大学 中村摩理子氏、および株式会社フルーエント・アジアパシフィック 福地健氏には、コード開発においてご協力頂いた。さらに、スタンフォード大学 Matthias Ihme 氏、および Olivier Desjardins 氏には、貴重な助言を頂いた。本研究の一部は文部科学省科学研究費補助金 (課題番号 17560186) およびゼネラル石油研究奨励財団の援助を受けて行われた。ここに記して、謝意

を表する。

文 献

- (1) Kurose, R., Desjardins, O., Nakamura, M., Akamatsu, F. and Pitsch, H., Numerical simulation of spray flames, *CTR Annual Research Briefs-2004, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.* (2004), 269-280.
- (2) Nakamura, M., Akamatsu, F., Kurose, R. and Katsuki, M., Combustion mechanism of liquid fuel spray entering gaseous flame front, *Phys. Fluids*, 17 (2005), 123301.
- (3) Watanabe, H., Kurose, R., Hwang, S.-M. and Akamatsu, F., Characteristics of flamelet in spray flames formed in a laminar counterflow, *Combust. Flame*, 148 (2007), 234-248.
- (4) Hwang, S.-M., Saito, H., Takada, S., Akamatsu, F. and Katsuki, M., Observation of spray flame stabilized in a laminar counterflow field, *Proc. thirty-eighth Japanese Combust. Symp.* (2000), 201-202.
- (5) Pitsch, H., Riesmeier, E. and Peters, N., Unsteady flamelet modeling of soot formation in turbulent diffusion flames, *Combust. Sci. and Tech.*, 158 (2000), 389-406.
- (6) Wen, Z., Yun, S., Thomson, M. J. and Lightstone, M. F., Modeling soot formation in turbulent kerosene/air jet diffusion flame, *Combust. Flame*, 135 (2003), 323-340.
- (7) Fiveland, W. A., Three-dimensional radiative heat-transfer solutions by the discrete-ordinates method, *J. Thermophysics*, 2 (1988), 309-316.
- (8) Westbrook, C. K. and Dryer, F. L., Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion, *Prog. Energy, Combust. Sci.*, 10 (1984), 1-57.
- (9) Kurose, R. and Komori, S., Drag and lift forces on a rotating sphere in a linear shear flow, *J. Fluid Mech.*, 384 (1999), 183-206.
- (10) Ham, F., Apte, S. V., Iaccarino, G., Wu, X., Herrmann, M., Constantinescu, G., Mahesh, K. and Moin, P., Unstructured LES of reacting multiphase flows in realistic gas turbine combustors, *CTR Annual Research Brief-2003, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.* (2003), 139-159.
- (11) Miller, R. S. and Bellan, J., Direct numerical simulation of a confined three-dimensional gas mixing layer with one evaporating hydrocarbon-droplet-laden stream, *J. Fluid Mech.*, 384 (1999), 293-338.
- (12) Kurose, R., Makino, H., Komori, S., Nakamura, M., Akamatsu, F. and Katsuki, M., Effects of outflow from the surface of a sphere on drag, shear lift, and scalar diffusion, *Phys. Fluids*, 15 (2003), 2338-2351.
- (13) Tseng, C. C. and Viskanta, R., Effect of radiation absorption on fuel droplet evaporation, *Combust. Sci. and Tech.*, 177 (2005), 1511-1542.
- (14) Leung, K. M., Lindstedt, R. P. and Jones, W. P., Simplified reaction mechanism for soot formation in nonpremixed flames, *Combust. Flame*, 87 (1991), 289-305.
- (15) Brookes, S. J. and Moss, J. B., Predictions of soot and thermal radiation properties in confined turbulent jet diffusion flames, *Combust. Flame*, 116 (1999), 486-503.
- (16) Puri, R., Richardson, T. F., Santoro, R. J. and Dobbins, R. A., Aerosol dynamic processes of soot aggregates in a laminar ethene diffusion flame, *Combust. Flame*, 92 (1993), 320-333.
- (17) Frenklach, M., Clary, D. W., Gardiner, J. and Stein, S. E., Detailed kinetic modeling of soot formation in shock-tube pyrolysis of acetylene, *Proc. Twentieth Symp. (Int.) on Combust.*, The Combustion Institute, (1984), 887-901.
- (18) Harris, S. J., Weiner, A. M. and Blint, R. J., Formation of small aromatic molecules in a sooting ethylene flame, *Combust. Flame*, 72 (1988), 91-109.
- (19) Neoh, K. G., Howard, J. B. and Sarofim, A. F., Particulate carbon formation during combustion, Plenum, (1981), 261.
- (20) Lee, K. B., Thring, M. W. and Beer, J. M., On the rate of combustion of soot in a laminar soot flame, *Combust. Flame*, 6 (1962), 137-145.
- (21) CFX-RIF Manual, Ansys, Inc. (2005).
- (22) Grosshandler, W. L., A narrow-band model for radiation calculation in a combustion environment, *NIST Technical Note*, 1402 (1993).
- (23) Modest, M. F., Radiative heat transfer, McGraw-Hill, Inc., (1993).
- (24) Yamashita, H., Shimada, M. and Takeno, T., A numerical study on flame stability at transition point of jet diffusion flames, *Proc. Twenty-fifth Symp. (Int.) on Combust.*, The Combustion Institute, (1996), 27-34.