噴霧燃焼時のすす生成に及ぼす液滴径の影響

Effect of Droplet Size on Soot Formation in Spray Combustion

渡邊 裕章^a, 黒瀬 良一^b, 牧野 尚夫^a, 小森 悟^b

Hiroaki Watanabe, Ryoichi Kurose, Hisao Makino, Satoru Komori

Received 15 January 2009; Accepted 27 February 2009

A two-dimensional numerical simulation is applied to spray flames formed in a laminar counterflow, and the effect of droplet size on soot formation behavior is investigated in detail. N-decane ($C_{10}H_{22}$) is used as a liquid fuel, and the droplet motion is calculated by the Lagrangian method. A one-step global reaction is employed for the combustion heat release. A kinetically based soot formation model with flamelet model is employed to predict the soot formation. Radiation is taken into account using the discrete ordinate method. The results showed that the diffusion and premixed combustion co-exist in the spray flame and the soot is mainly formed in the spray diffusion flame region. The soot formation behavior is strongly affected by the droplet size. The soot volume fraction increases with the droplet size.

Keywords: Numerical simulation, Spray combustion, Soot formation, Droplet size, Counterflow

1. 緒 言

液体燃料は、搬送性や流量制御性等に優れるため、産業機器や電力用ボイラ等の小規模から大規模の機器において、幅広く利用されている。液体燃料の利用方法としては、噴霧燃焼方式が一般的であるが、そのクリーン利用にあたっては、燃焼時に生成される環境影響物質の窒素酸化物 (NO_x) とすすの抑制が大きな課題である。特に、すすは、PM2.5等の微小粒子状物質として、近年注目が集まっており、その生成挙動の把握は重要である。しかしながら、噴霧燃焼火炎中では、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等について詳細な検討を行ってきた¹⁻⁵⁾。

他方、すすの生成挙動についても、近年、著者らを含め、多くの研究者が精力的な研究を進めてきている⁵⁻¹¹⁾。これは、計算機性能の飛躍的な向上にともない、ガス燃焼場において、LES (Large-eddy simulation) が研究用ツールとして一般的になり、流れ場の詳細を把握することができるようになったこと¹²⁻¹⁴⁾や、上記物質の生成メカニズムにかかわる多種のガス成分と化学反応を取り扱うことが可能な火炎片 (flamelet) モデル^{15,16)}等の燃焼モデルが提案されたことによる。Flamelet モデルとは、素反応式による詳細な反応計算の結果 (ガス温度や化学種濃度) を、燃料ガスと酸化剤の混合分率等をパラメータとしてデータベース (chemtable) 化しておき、流れ場の計算時における局所のガス温度や化学種濃度を chemtable から抽出することで決定する方法である。Wen *et al.*⁹⁾ は、ケロシンの噴流拡散火炎に対して141化学種と1015反応式を考慮した chemtable を用いる flamelet モデルにより、

a 財団法人 電力中央研究所 エネルギー技術研究所
(〒240-0196 神奈川県横須賀市長坂2-6-1)
TEL 046-856-2121
Energy Engineering Research Laboratory, Central Research
Institute of Electric Power Industry
(2-6-1 Nagasaka, Yokosuka, Kanagawa 240-0196, Japan)
b 京都大学大学院 工学研究科
(〒606-8501 京都市左京区吉田本町) TEL 075-753-9218
Department of Mechanical Engineering and Science, Kyoto
University
(Yoshida-honmachi, Sakyo-ku, Kyoto 606-8501, Japan)

Grid size : 200 (axial) × 400 (spanwise)

Fig. 1 Schematic of computational setup

すす生成挙動に対する前駆体化学種の影響を調べた。Watanabe *et al.*¹¹⁾ は、燃料油滴の当量比と輻射の影響の観点から、すすの生成挙動を、112化学種と883反応式を考慮した n- デカンの chemtable を用いる flamelet モデルにより検討し、本手法によって予測された噴霧火炎内のすす生成挙動が実験と定性的に一致すること、および、すす生成が燃料油滴の当量比や輻射伝熱に大きな影響を受けること等を明らかにした。しかしながら、噴霧の液滴径については、液体燃料用バーナの霧化特性や燃焼特性を評価する上で重要な因子であるにもかかわらず、Nakamura *et al.*²⁾ や Watanabe *et al.*³⁾ によって、液滴径が噴霧火炎の群燃焼挙動や火炎片特性に大きな影響を及ぼすことを明らかにされているものの、すすの生成挙動に及ぼす影響については、ほとんど議論されていない。

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、噴霧の液滴径がすす生成に及ぼす影響について明らかにすることを目的とする。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。

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¹⁷⁾ に従う (Fig. 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¹⁸⁾。

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、Eq. (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。

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

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

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

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

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

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、五つの化学種 (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, 化学種, および混合分率の生成項を表す。また, $S_{\text{combu}, k}$ は n-デカン蒸気の燃焼にともなう生成項である。 ρ は, 理想気体の状態方程式から導く。

燃料液滴の挙動は, ラグランジュ的に解くことにより求める。液滴密度は気相よりも十分に大きいと仮定し, 液滴の挙動に対して, 抗力と重力の影響のみを考慮し, 流れのせん断力に起因する揚力は無視する¹⁹⁾。さらに, 液滴の衝突, 分裂および合体は考慮しない²⁰⁾。液滴の蒸発モデルには, 非平衡 Langmuir-Knudsen モデルを用いる²¹⁾。液滴の位置 ($x_{d,i}$), 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。

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

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

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

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

ここで, f_1 と f_2 はそれぞれ液滴の蒸発による抗力と熱伝達に関する修正係数²²⁾, 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, 炭化水素液滴の放射率 ($=0.4$)²³⁾ 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, すずの挙動を, 次に示す, すずの数密度 (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 ($6.02 \times 10^{26} \text{ k mol}^{-1}$) 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 はすずのモル質量 ($1,200 \text{ kg/k mol}$) である²⁴⁾。本研究では, すずの生成は, 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。

すずの前駆体として C_2H_2 を仮定し, すずの核生成速度には, 次式で表される Leung *et al.*²⁴⁾ 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⁷⁾。

すずの凝集は, すず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, すず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²⁵⁾。

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

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

すずの表面成長は, 核生成と同様に, C_2H_2 が寄与するものと仮定する^{26,27)}。このとき, 表面成長速度は,

$$\begin{aligned} \left(\frac{dM}{dt} \right)_{\text{Gro.}} = & c_4 \left(\rho \frac{Y_{\text{C}_2\text{H}_2}}{W_{\text{C}_2\text{H}_2}} \right) e^{-\frac{12100}{T}} \left[(\pi N)^{1/3} \left(\frac{6M}{\rho_{\text{soot}}} \right)^{2/3} \right] \end{aligned} \quad (17)$$

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

OH ラジカルと酸素をすずの酸化反応の酸化剤として考慮する^{28,29)}。このとき, すずの酸化反応速度は, 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⁹⁾。

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

$$-c_6\rho\frac{Y_{O_2}}{W_{O_2}}e^{-\frac{19778}{T}}T^{1/2}(\pi N)^{1/3} \\ \times\left(\frac{6M}{\rho_{soot}}\right)^{2/3} \quad (18)$$

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、Eqs. (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の計算には、112の化学種と883の素反応過程を考慮した³⁰⁾。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、Eq. (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³¹⁾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 , $C_{10}H_{22}$ およびすすの濃度から決まる吸収係数³²⁾ と粒子数密度から決まる散乱係数³³⁾ 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。Eq. (4) のエネルギー保存式の生成項 S_h における輻射の影響は、次式によって考慮する。

$$S_h=-\frac{1}{\Delta V}\sum_N\left(Q_d+\frac{dm_d}{dt}h_{v,sf}+\frac{1}{2}\frac{dm_d}{dt}u_{d,i}u_{d,i}+Q_{rad}\right) \quad (21)$$

$$-Q_{rad}=\alpha\left(\int_{4\pi}Id\Omega-4\sigma T^4\right) \quad (22)$$

ここで、 Q_d および Q_{rad} は対流および輻射による寄与項、 $h_{v,sf}$ は粒子表面における燃料蒸気のエンタルピである。

2. 5 計算条件

縦 20 mm $\times$ 横 40 mm の計算領域を 200×400 の等間隔格子 (コントロールボリュームの実寸法 $100\text{ }\mu\text{m}\times 100\text{ }\mu\text{m}$) 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} , および噴霧液滴の当量比 (ϕ_i) を1.26 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、 ϕ_i 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。噴霧の粒径分布の影響を調べるため、Sauter 平均径 (SMD) を30.0, 74.2, 106.7, および $137.6\text{ }\mu\text{m}$ (それぞれ, S1, S2, S3, および S4) と変化させた。噴霧の粒径分布は、対応する PDA (Phase Doppler Anemometry) 計測により得たものを用いた¹⁷⁾ (Fig. 2)。本研究で検討する条件を Table 1 にまとめる。油滴の初期位置は一樣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	Droplet size (Sauter mean) SMD (μm)	Strain rate a (s^{-1})	Equivalence ratio ϕ_i (—)
S1	30.0	40	1.26
S2	74.2	40	1.26
S3	106.7	40	1.26
S4	137.6	40	1.26

Fig. 2 Droplet size distributions, for cases S1, S2, S3 and S4

3. 結果と考察

Fig. 3 に、各液滴径条件 (S1, S2, S3, および S4 の SMD はそれぞれ, 30.0, 74.2, 106.7, および 137.6 μm) のガス温度 (T) の瞬間分布の比較を示す。ただし、図中の白点は、各液滴粒子の位置を表す。図より、各条件において、上側ポートから投入された液滴の数が、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、液滴は主にこの領域で蒸発し、燃焼していることが分かる。また、液滴径が大きくなるほど、よどみ平面付近にのみ高温の領域が形成されることが分かる。これは、液滴径が大きくなるほど、蒸発速度が遅くなるためである。液滴径の大きい S3 と S4 の条件では、蒸発が完了せずに、よどみ平面の高温の領域を通過する粒子が見られる。

Fig. 4 に、各液滴径条件における混合分率 (Z) の瞬間分布の比較を示す。ただし、図中の黒線は、量論混合分率 ($Z_{\text{st}}=0.062$) を表す。 Z の生成は、液滴の蒸発によって進行するため、 Z の分布は、Fig. 3 における T の分布と似た形状をもち、液滴径が大きくなるほど、よどみ平面付近にのみ高 Z 領域が形成される。また、液滴径の最も小さい S1 では、上側ポート近傍から蒸発にともなう Z の生成が起こり、燃料ガスが

外側に移流してしまうため、 Z_{st} よりも高い値を示す領域は現れない。

次に、各液滴径条件における 火炎構造を調べるため、噴霧火炎の flame index (FI) を計算した。Fig. 5 に、各条件における FI の瞬間分布の比較を示す。ただし、 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³⁴⁾。

$$FI = \nabla Y_{\text{C}_{10}\text{H}_{22}} \cdot \nabla Y_{\text{O}_2} \quad (23)$$

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。各条件における FI の分布から、一見して、噴霧火炎は拡散火炎と予混合火炎が混在する複雑な構造にあることが分かる。著者らの既往研究²⁾によれば、この特徴は以下のように説明されている。まず、液滴は、上側ポートから流入した後、蒸発を開始するが、この蒸発により着火前には見かけ上、流れ方向に対する気相デカンの濃度勾配 (正) と酸素の濃度勾配 (負) が逆転するので、まず拡散的な特徴が現れる。その後、着火とともに双方の質量分率の勾配は負に転じ、予混合的な火炎構造を示す。さらに、よどみ平面付近には、環状の拡散火炎帯が形成されており、帯の中には予混合火炎が点在する。これに対して、着火前の蒸発量が多い S1 では、上述の特徴がより顕著に現

Fig. 3 Comparison of instantaneous distributions of gaseous temperature, for cases S1, S2, S3, and S4

れていることが分かる。また、S1では、高温領域内部にはほとんど強い拡散火炎は存在しない。一方、液滴径が大きくなるに従い、液滴の蒸発は主によみ平面付近の高温の領域において起こるため、予混合的な火炎構造は弱まり、高温の領域には大きく環状の拡散火炎帯が形成されることが分かる。

Fig. 6 に、各液滴径条件における、すす体積分率 (V_s) の瞬間分布の比較を示す。図より、各々の条件において、**Fig. 5** で観察された計算領域中心部に形成される拡散火炎帯付近において、 V_s の濃度が高い領域が見られることが分かる。このことから、すすは、主として拡散火炎中に生成されることが確認できる。液滴径が比較的大きい S3 と S4 では、拡散火炎帯付近に V_s の高濃度領域が観察される。一方、S3 よりも液滴径の小さい S2 では、 V_s の値は低くなり、最も液滴径の小さい S1 では、ほとんど V_s の高い値を示す領

Fig. 4 Comparison of instantaneous distributions of mixture fraction, for cases S1, S2, S3, and S4

域を見ることができない。これは、**Fig. 5** で観察されたように、S1 は、液滴の蒸発速度が速く、高温領域内部まで到達する液滴がほとんどないために、この領域に他の条件のような強い拡散火炎帯が形成されないことによるものと思われる。

より定量的な比較をするため、**Fig. 7** に、液滴径を変化させた際の中心 (x) 軸上のガス温度 ($\bar{T}$) の時間平均値分布の比較を示す。一般的に、液滴径が小さいほど蒸発速度が速いことから、液滴径の最も小さい S1 が最も早く着火し、液滴径が大きくなるに従い、着火が遅れることが分かる。S1 では、ガス温度のピーク値が S2 に比較して低いですが、これは蒸発が早く完了し、気相デカンが外側に流れるため、中心軸上の総発熱量が低くなることによる。その他の条件では、液滴径が小さいほど高いガス温度のピーク値をもつ。これは、前述のように、液滴径が小さいほど蒸発速度が速いことから、予混合的な火炎構造が発達しやすいこと

Fig. 5 Comparison of instantaneous distributions of flame index, for cases S1, S2, S3, and S4

によるものと思われる。

Fig. 8 に、液滴径を変化させた際の中心軸上の混合分率 ($\bar{Z}$)、および液滴蒸発速度 ($\bar{S}_m$) の時間平均値分布の比較を示す。 $\bar{Z}$ 分布に注目すると、 $\bar{Z}$ のピーク

Fig. 7 Comparison of axial distributions of time-averaged gaseous temperature, for cases S1, S2, S3, and S4

Fig. 6 Comparison of instantaneous distributions of soot volume fraction, for cases S1, S2, S3, and S4

値は、液滴径が大きくなるほど大きな値を示し、また、高い $\bar{Z}$ を示す領域が小さくなる傾向にあることが分かる。これは、大きな液滴径ほど蒸発速度が遅い

Fig. 8 Comparison of axial distributions of time-averaged mixture fraction and evaporation rate of droplets, for cases S1, S2, S3, and S4

Fig. 9 Comparison of axial distributions of time-averaged soot volume fraction and mass fraction of acetylene, for cases S1, S2, S3, and S4

ために、よどみ平面付近の高温領域において一気に蒸発が進むためであると考えられる。なお、S1の $\bar{Z}$ のピーク値が極端に小さいのは、前述のとおり、気相デカンが外側に流れるためである。他方、 $\bar{S}_m$ の分布では、 $\bar{S}_m$ のピーク値は、液滴径が大きくなるほど小さな値を示し、ピーク値の現れる位置は、 x/L_p の大きい下流側に移動していくことが分かる。また、 $\bar{S}_m$ のピーク値と $\bar{Z}$ の分布との位置関係に注目すると、S1では、 $\bar{S}_m$ のピーク値は、 $\bar{Z}$ が増加する位置とほぼ等しい $x/L_p=0.15$ 付近に位置するのに対して、液滴径が大きくなるほど、 $\bar{Z}$ のピーク値が現れる位置に近づいていることが分かる。これらの挙動は、前述のとおり、液滴径が小さいほど蒸発速度が速く、より上流側から蒸発が始まる傾向にあることに起因する。

Fig. 9に、液滴径を変化させた際の中心軸上のすす体積分率($\bar{V}_s$)、および C_2H_2 の質量分率($\bar{Y}_{C_2H_2}$)の時間平均値分布の比較を示す。図より、 $\bar{V}_s$ 、および $\bar{Y}_{C_2H_2}$ は、ともに液滴径が大きくなるほど、高いピーク値を示すことが分かる。また、 $\bar{V}_s$ 、および $\bar{Y}_{C_2H_2}$ のそれぞれ

のピーク値が現れる位置は、ほぼ一致する。Eqs. (15)～(18)に従うと、一見、より温度が高い小さい液滴径のほうが高い $\bar{V}_s$ を示すように見える。しかし実際は、**Fig. 8**に見られたように、液滴径が大きな条件ほど、液滴の蒸発が遅いため、 $\bar{Z}$ の高いピーク値がよどみ平面近傍に現れる。そのため、拡散的な火炎構造が強まり、前駆体であるアセチレン濃度が上昇することで、すすの生成が促進されるものと考えられる。

4. 結 言

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、すす生成挙動に及ぼす液滴径の影響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) 噴霧火炎は、拡散火炎と予混合火炎の混在する複雑な火炎構造をもつ。また、すすの濃度は、主としてよどみ平面近傍に存在する拡散火炎領域において高い値を示す。これは、拡散火炎内は、燃料液滴の蒸発により、すすの前駆体であるアセチレン濃度が高くなり、すすの生成反応が促進されるためである。
- 2) すすの濃度は、液滴径に大きく依存し、液滴径が大きいほど高い値を示す。これは、液滴径が大きいほど蒸発速度が遅くなるため、液滴の蒸発が主としてよどみ平面近傍に集中することで拡散火炎が顕著になり、すすの前駆体であるアセチレン濃度の上昇を促進するためである。

[謝辞] 本研究を遂行するにあたり、大阪大学 赤松史光教授に実験データの提供と貴重な助言を戴いた。また、本研究の一部は文部科学省科学研究費補助金(課題番号20686015)の援助を受けて行われた。ここに記して、謝意を表する。

Nomenclature

A_d : projection area of droplet	(m^2)	N_A : Avogadro's number	($kmol^{-1}$)
B_M : mass transfer number	($-$)	Nu : Nusselt number	($-$)
c_p : specific heat of mixture gas	($J/(kgK)$)	P : Pressure	(Pa)
$c_{p,d}$: specific heat of liquid fuel	($J/(kgK)$)	Pr : Prandtl number	($-$)
D_k : diffusion coefficient	(m^2/s)	Sc : Schmidt number	($-$)
g_i : gravitational acceleration	(m/s^2)	Sh : Sherwood number	($-$)
h : specific enthalpy	(J/kg)	T : gaseous temperature	(K)
I : radiant intensity	($W/(m^2sr)$)	T_d : droplet temperature	(K)
L_v : latent heat of liquid fuel	(J/kg)	u_i : gaseous velocity	(m/s)
M_p : mass of soot nucleus	($kg/kmol$)	$u_{d,i}$: droplet velocity	(m/s)
m_d : mass of droplet	(kg)	Y_k : mass fraction of k -th species	($-$)

Z : mixture fraction	(—)	σ_{ij} : stress tensor	(Pa)
α : absorption coefficient	(m^{-1})	τ_d : particle relaxation time	(s)
κ : scattering coefficient	(m^{-1})	χ : scalar dissipation rate	(s^{-1})
λ : thermal diffusivity	(m^2/s)	Ω : outgoing direction of radiation	(—)
ρ : density	(kg/m^3)		

References

- 1) Kurose, R., O. Desjardins, M. Nakamura, F. Akamatsu and H. Pitsch : “Numerical simulation of spray flames”, CTR Annual Research Briefs-2004, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stonford Univ., pp. 269-280 (2004)
- 2) Nakamura, M., F. Akamatsu, R. Kurose and M. Katsuki : “Combustion mechanism of liquid fuel spray entering gaseous flame front”, *Phys. Fluids*, **17**, 123301 (2005)
- 3) Watanabe, H., R. Kurose, S. -M. Hwang and F. Akamatsu : “Characteristics of flamelet in spray flames formed in a laminar counterflow”, *Combust. Flame*, **148**, 234-248 (2007)
- 4) Baba, Y. and R. Kurose : “Analysis and flamelet modelling for spray combustion”, *J. Fluid Mech.*, **612**, 45-79 (2008)
- 5) Kurose, R. and F. Akamatsu : “Experiments and numerical simulations of spray combustion”, *J. Combust. Soc. Japan*, **50**, 206-214 (2008)
- 6) Frenklach, M. and S. J. Harris : “Aerosol dynamics modeling using the method of moments”, *J. Coll. Interf. Sci.*, **118**, 252-261 (1987)
- 7) Brookes, S. J. and J. B. Moss : “Prediction of soot and thermal radiation properties in confined turbulent jet diffusion flames”, *Combust. Flame*, **116**, 486-503 (1999)
- 8) Pitsch, H., E. Riesmeier and N. Peters : “Unsteady flamelet modeling of soot formation in turbulent diffusion flame”, *Combust. Sci. Technol.*, **158**, 389-406 (2000)
- 9) Wen, Z., S. Yun, M. J. Thomson and M. F. Lightstone : “Modeling soot formation in turbulent kerosene/air jet diffusion flame”, *Combust. Flame*, **135**, 323-340 (2003)
- 10) El-Asrag, H., T. Lu, C. K. Law and S. Menon : “Simulation of soot formation in turbulent premixed flames”, *Combust. Flame*, **150**, 108-126 (2007)
- 11) Watanabe, H., R. Kurose, S. Komori and H. Pitsch : “Effects of radiation on spray flame characteristics and soot formation”, *Combust. Flame*, **152**, 2-13 (2008)
- 12) Pitsch, H. and H. Steiner : “Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia flame D)”, *Phys. Fluids*, **12**, 2541-2554 (2000)
- 13) Pierce, C. D. and P. Moin : “Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion”, *J. Fluid Mech.*, **504**, 73-97 (2004)
- 14) Selle, L., G. Lartigue, T. Poinso, R. Koch, K. -U. Schildmacher, W. Krebs, P. Kaufmann and D. Veynante : “Compressible large eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes”, *Combust. Flame*, **137**, 489-505 (2004)
- 15) Peters, N. : “Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion”, *Prog. Energy Combust. Sci.*, **10**, 319-339 (1989)
- 16) Peters, N. : “Turbulent combustion”, Cambridge University Press (1990)
- 17) Hwang, S. -M., H. Saito, S. Takada, F. Akamatsu and M. Katsuki : “Observation of spray flame stabilized in a laminar counterflow field”, Proc. thirty-eighth Japanese Combust. Symp., pp. 201-202 (2000)
- 18) Westbrook, C. K. and F. L. Dryer : “Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion”, *Prog. Energy Combust. Sci.*, **10**, 1-57 (1984)
- 19) Kurose, R. and S. Komori : “Drag and lift forces on a rotating sphere in a linear shear flow”, *J. Fluid Mech.*, **384**, 183-206 (1999)
- 20) Ham, F., S. V. Apte, G. Iaccarino, X. Wu, M. Herrmann, G. Constantinescu, K. Mahesh and P. Moin : “Unstructured LES of reacting multiphase flows in realistic gas turbine combustors”, CTR Annual Research Briefs-2003, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stonford Univ., pp. 139-159 (2003)
- 21) Miller, R. S. and J. Bellan : “Direct numerical simulation of a confined threedimensional gas mixing layer with one evaporating hydrocarbon-droplet-laden stream”, *J. Fluid Mech.*, **384**, 293-338 (1999)
- 22) Kurose, R., H. Makino, S. Komori, M. Nakamura, F. Akamatsu and M. Katsuki : “Effects of outflow from the surface of a sphere on drag, shear lift, and scalar diffusion”, *Phys. Fluids*, **15**, 2338-2351 (2003)
- 23) Tseng, C. C. and R. Viskanta : “Effect of radiation absorption on fuel droplet evaporation”, *Combust. Sci. Tech.*, **177**, 1511-1542 (2005)
- 24) Leung, K. M., R. P. Lindstedt and W. P. Jones : “Simplified reaction mechanism for soot formation in non-premixed flames”, *Combust. Flame*, **87**, 289-305 (1991)
- 25) Puri, R., T. F. Richardson, R. J. Santoro and R. A. Dobbins : “Aerosol dynamic processes of soot aggregates in a laminar ethene diffusion flame”, *Combust. Flame*, **92**, 320-333 (1993)
- 26) Frenklach, M., D. W. Clary, J. Gardiner and S. E. Stein : “Detailed kinetic modeling of soot formation in shock-tube pyrolysis of acetylene”, *Proc. Combust. Inst.*, **20**, 887-901 (1984)
- 27) Harris, S. J., A. M. Weiner and R. J. Blint : “Formation of small aromatic molecules in a sooting ethylene flame”,

- Combust. Flame*, **72**, 91-109 (1988)
- 28) Neoh, K. G., J. B. Howard and A. F. Sarofim : "Particulate carbon formation during combustion", *Plenum*, 261 (1981)
 - 29) Lee, K. B., M. W. Thring and J. M. Beer : "On the rate of combustion of soot in a laminar soot flame", *Combust. Flame*, **6**, 137-145 (1962)
 - 30) Bikas, G. and N. Peters : "Kinetic modelling of *n*-decane combustion and autoignition", *Combust. Flame*, **126**, 1456-1475 (2001)
 - 31) Fiveland, W. A. : "Three-dimensional radiative heat transfer solutions by discrete-ordinates method", *J. Thermophys.*, **2**, 309-316 (1988)
 - 32) Grosshandler, W. L. : "A narrow-band model for radiation calculation in a combustion environment", NIST Technical Note, **1402** (1993)
 - 33) Modest, M. F. : "Radiative heat transfer", Mc Graw-Hill, Inc., (1993)
 - 34) Yamashita, H., M. Shimada and T. Takeno : "A numerical study on flame stability at transition point of jet diffusion flames", *Proc. Combust. Inst.*, **25**, 27-34 (1996)