



JAXA

宇宙航空研究開発機構研究開発資料

宇宙航空研究開発機構研究開発資料

JAXA Research and Development Memorandum

詳細シミュレーションによる水素噴流浮き上がり火炎の構造解析

溝渕 泰寛, 新城 淳史, 松山 新吾, 小川 哲, 竹野 忠夫



JAXA-RM-07-018

2008年2月

宇宙航空研究開発機構
Japan Aerospace Exploration Agency

詳細シミュレーションによる水素噴流浮き上がり火炎の構造解析*

溝渕 泰寛^{*1}, 新城 淳史^{*1}, 松山 新吾^{*1}, 小川 哲^{*1}, 竹野 忠夫^{*1}

Numerical study of the flame structure of a hydrogen jet lifted flame by detailed simulation

Yasuhiro MIZOBUCHI^{*1}, Junji SHINJO^{*1}, Shingo MATSUYAMA^{*1}
Satoru OGAWA^{*1} and Tadao TAKENO^{*1}

ABSTRACT

A real-size hydrogen jet lifted flame is successfully reproduced by a highly resolved time-dependent 3-D numerical simulation with detailed chemistry and rigorous transport properties. The analysis based on Flame Index clearly shows that the lifted flame is not a single flame but consists of three flame elements; 1) a stable leading edge flame, 2) diffusion flame islands floating on the outer side of the lifted flame, 3) inner vigorously turbulent rich premixed flames. The stable laminar leading edge flame of ring shape has a triple flame like structure and is stabilized outside the turbulent jet where the incoming flow almost balances with the burning velocity. The combustion in diffusion flame islands can be explained by the conventional laminar flamelet concept, although they take island-like shapes. The island-like shapes are produced by the unsteady turbulent behavior of inner rich premixed flame. In the inner vigorously turbulent rich premixed flames, flame structures that are largely deviated from the laminar flamelet concept are observed. The turbulence scales and the flame structure scales are in the same order and turbulent eddies can easily penetrate into the flame internal structures.

概 要

詳細な化学反応過程および流体の輸送特性を組み込んだ十分な解像度を有するシミュレーションにより、実スケールの水素噴流浮き上がり火炎を数値的にとらえることに成功した。Flame Index を用いた解析により、浮き上がり火炎は単なる一つの火炎ではなく3つの火炎要素を含んでいることが分かった。すなわち、1)三重火炎的な構造をもつリング状の安定な先端火炎、2)浮き上がり火炎外側に島状に形成される島状拡散火炎、3)浮き上がり火炎内側で噴流の乱れの影響を強く受けている内側過濃乱流予混合火炎、である。先端火炎についてはリング状の先端火炎中に、火炎の伝播速度と火炎に流入する混合気の流れ速度が釣り合う部位が存在することにより火炎が安定化されていることが推定された。島状拡散火炎については、特異な形状をもつものの、その中での燃焼は従来の火炎の概念で説明できること、その生成は内側にある乱流過濃予混合火炎の非定常の挙動によるものであることが示された。内側乱流過濃予混合火炎では、従来の火炎の概念から大きく外れた火炎構造が観察され、そこでは乱流渦のスケールと火炎構造のスケールが同程度であり流体の乱れが火炎内部構造に影響を与えやすい状態にあるということが分かった。

* 平成 19 年 12 月 3 日 受付 (Received 3 December, 2007)

*1 総合技術本部 計算科学研究グループ (Computational Science Research Group, Institute of Aerospace Technology)

記号

D	: ノズル直径(m)
D_s	: 化学種 s の拡散係数 (m^2/s)
e	: 混合気単位体積あたりの内部エネルギー (J/m^3)
E	: 混合気単位体積あたりの全内部エネルギー (J/m^3)
F.I.	: Flame Index ($1/\text{m}^2$)
H_s	: 化学種 s の 1 モルあたりのエンタルピ (J/mol)
ΔH_{fs}	: 化学種 s の 1 モルあたりの生成エンタルピ (J/mol)
k	: ボルツマン定数 (J/K)
m_s	: 化学種 s の分子 1 個あたりの質量 (kg)
M_s	: 化学種 s の分子量 (kg/mol)
N.F.I.	: Normalized Flame Index
P	: 圧力 (N/m^2)
R_u	: 普遍気体定数 ($\text{J}/\text{K}/\text{mol}$)
T	: 温度 (K)
u_i	: i 方向の速度 (m/s)
X_s	: 化学種 s のモル分率
Y_s	: 化学種 s の質量分率
z_s	: 混合気単位質量あたりの化学種 s のモル数 (mol/kg)
ε_s	: 化学種 s のポテンシャル井戸深さ (J)
κ	: 熱伝導率 ($\text{W}/\text{m}/\text{K}$)
μ	: 粘性係数 ($\text{N}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$)
ρ	: 密度 (kg/m^3)
σ_s	: 化学種 s の衝突直径 (m)
τ	: せん断応力 (N/m^2)
$\dot{\omega}_s$: 化学種 s の単位体積あたりのモル生成速度 ($\text{mol}/\text{m}^3/\text{s}$)

1. はじめに

噴流は基本的な流れの一つであり、層流から乱流への遷移の問題あるいは乱流噴流での乱流混合の問題が古くから研究されてきている。同様に、空気中に噴流として噴出された燃料の燃焼によって形成される燃料噴流拡散火炎も基本的な火炎の一つであり、工業的にも広く利用されている火炎である。この火炎においては、噴流速度を徐々に上げていくと、層流から乱流への遷移が起こり、さらに速度を上げるとノズルに付着していた拡散火炎がノズルから離脱し、ノズルから離れた位置で燃焼が始まることが知られている。この火炎形態を浮き上がり火炎と呼ぶ。

ノズルから離脱する前の拡散火炎とは異なる性質を持つ浮き上がり火炎は、基礎的な研究という面から見てもまた実用的な研究の面から見ても興味深い研究対象である。浮き上がり火炎の研究における主たる研究課題は、その火炎構造の解明およびノズルから離脱した火炎が下流に吹き飛ばされずに定在的な火炎として保持されるた

めの安定化機構の解明である。現在まで主に拡散火炎の消炎[1]、三重火炎構造[2,3,4,5]という視点から多くの研究がなされている。しかしながら従来の研究は定常あるいは二次元解析が中心であり、三次元性・非定常性が強い浮き上がり火炎の構造の解明は未だ十分には行われておらず、また安定化機構についても結論が出ていない。それは、噴流の強い乱れの影響を受ける三次元的で非定常な内部構造を計測することは極めて困難であり、最近発達してきた光学計測手法を用いても容易なことではないからである。

このような複雑な燃焼現象の解明には数値シミュレーションが有効である。火炎の詳細シミュレーションを行うためには、乱流に代表される流体のスケールに加えて燃料を消費し熱を発生する反応帯を解像する必要がある。一般に高温の燃焼流れにおいては反応帯の厚さは乱流の最小スケールよりも小さい場合が多く、火炎の詳細なシミュレーションには極めて細かい格子解像度が要求され、膨大な計算機資源が必要となる。従来そのようなシミュレーションの実施は困難であったが、近年の計算機能力および計算手法の向上により火炎内部の薄い反応帯内をも解像する数値シミュレーションが可能となってきた。本報ではスーパーコンピュータを用いた詳細なシミュレーションにより、水素噴流浮き上がり火炎の構造および、その中に含まれる火炎要素の特徴について調べた結果について報告する。

2. 解析対象とする火炎

計算対象の火炎は静止空気中に噴き出された超音速水素噴流の燃焼によって得られる浮き上がり火炎である(図 1)。計算条件は Cheng らの実験[6]に従う。噴き出し口径 D は 2mm、噴き出し速度は 680m/s、噴出し口径にもとづくレイノルズ数は 13600 である。静止空気、噴出し水素とも圧力 $1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$ (1atm)、温度 280K とする。計算条件を表 1 に示す。実験では浮き上がり高さ約 7D の浮き上がり火炎が観察されている。

表 1 計算条件

	温度	圧力	速度
水素噴流	280K	1.01325Pa	680m/s
静止空気	280K	1.01325Pa	0m/s

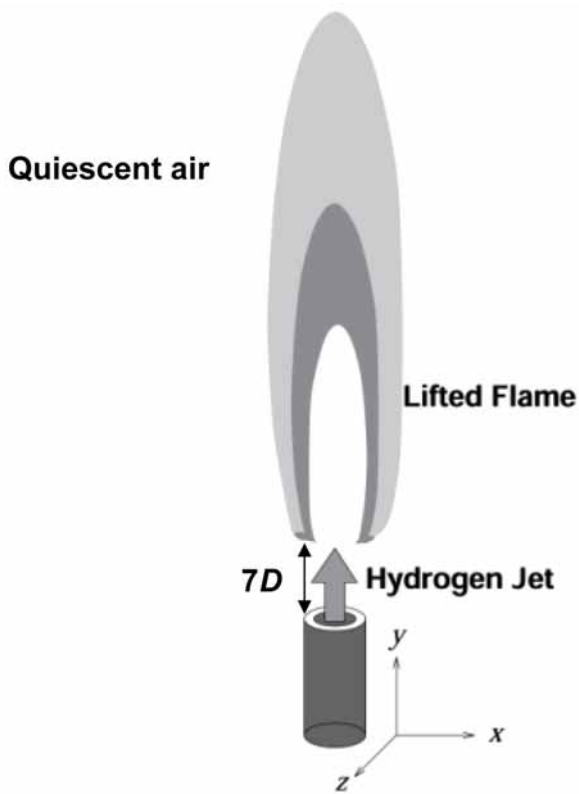


図1 計算対象の概観

3. 数値シミュレーション

3.1 物理モデル

気体は熱的に平衡とする。化学反応モデルとしては 9 化学種 ($H_2, O_2, OH, H_2O, H, O, H_2O_2, HO_2, N_2$) 17 反応 (表 2) モデル[7]を用いる。十分な数の化学種を考慮しており既燃ガスの温度を精度よく予測できること、その反面比較的少ない素反応数すなわち小さな計算負荷で妥当な予混合火炎伝播速度を与えるということ、また着火の問題に対しても実績があることから、このモデルを選択した。分子拡散については、濃度勾配拡散を仮定し Fick の法則で評価する。空気の組成は体積分率で O_2 22%, N_2 78%とした。

表 2 化学反応モデル (Westbrook[7])

$$k_{f,b} = AT^n \exp(-E_a/R_uT)$$

	Reaction	Forward rate			Reverse rate		
		log A	n	E_a	log A	n	E_a
1	$H + O_2 \rightleftharpoons O + OH$	14.27	0	16.79	13.17	0	0.68
2	$H_2 + O \rightleftharpoons H + OH$	10.26	1	8.90	9.92	1	6.95
3	$H_2O + O \rightleftharpoons OH + OH$	13.53	0	18.35	12.50	0	1.10
4	$H_2O + H \rightleftharpoons H_2 + OH$	13.98	0	20.30	13.34	0	5.15
5	$H_2O_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + HO_2$	13.00	0	1.80	13.45	0	32.79
6	$H_2O + M \rightleftharpoons H + OH + M$	16.34	0	105.00	23.15	-2	0.00
7	$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$	15.22	0	-1.00	15.36	0	45.90
8	$HO_2 + O \rightleftharpoons OH + O_2$	13.70	0	1.00	13.81	0	56.61
9	$HO_2 + H \rightleftharpoons OH + OH$	14.40	0	1.90	13.08	0	40.10
10	$HO_2 + H \rightleftharpoons H_2 + O_2$	13.40	0	0.70	13.74	0	57.80
11	$HO_2 + OH \rightleftharpoons H_2O + O_2$	13.70	0	1.00	14.80	0	73.86
12	$H_2O_2 + O_2 \rightleftharpoons HO_2 + HO_2$	13.60	0	42.64	13.00	0	1.00
13	$H_2O_2 + M \rightleftharpoons OH + OH + M$	17.08	0	45.50	14.96	0	-5.07
14	$H_2O_2 + H \rightleftharpoons HO_2 + H_2$	12.23	0	3.75	11.86	0	18.70
15	$O + H + M \rightleftharpoons OH + M$	16.00	0	0.00	19.90	-1	103.72
16	$O_2 + M \rightleftharpoons O + O + M$	15.71	0	115.00	15.67	-0.28	0.00
17	$H_2 + M \rightleftharpoons H + H + M$	14.34	0	96.00	15.48	0	0.00

3.2 支配方程式

支配方程式は三次元ナビエーストクス方程式と9化学種の保存式および状態方程式である。化学種の保存式を組み込んだナビエーストクス方程式は、

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\frac{\partial F_i}{\partial x_i} + \frac{\partial F_i^v}{\partial x_i} + S \quad (1)$$

と書ける。ここに、

$$q = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_1 \\ \rho u_2 \\ \rho u_3 \\ E \\ \rho z_1 \\ \vdots \\ \rho z_9 \end{pmatrix}, \quad F_i = \begin{pmatrix} \rho u_i \\ \rho u_1 u_i + \delta_{1i} p \\ \rho u_2 u_i + \delta_{2i} p \\ \rho u_3 u_i + \delta_{3i} p \\ (E+p)u_i \\ \rho z_1 u_i \\ \vdots \\ \rho z_9 u_i \end{pmatrix}, \quad F_i^v = \begin{pmatrix} 0 \\ \tau_{1i} \\ \tau_{2i} \\ \tau_{3i} \\ \tau_{jk} u_k + q_j \\ \rho D_1 z_{1,j} \\ \vdots \\ \rho D_9 z_{9,j} \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega}_1 \\ \vdots \\ \dot{\omega}_9 \end{pmatrix},$$

$$E = e + \frac{1}{2} \rho (u_1^2 + u_2^2 + u_3^2), \quad e = \sum_s \rho z_s (H_s + \Delta H_{fs}) - p,$$

$$\tau_{ij} = \mu (u_{i,j} + u_{j,i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} u_{k,k}), \quad q_j = \kappa T_{,j} + \sum_s \rho D_s h_s z_{s,j},$$

であり、 $h_s \equiv H_s + \Delta H_{fs}$ 、 $(\)_{,j} \equiv \partial(\) / \partial x_j$ である。 z_s は化学種 s の混合気単位質量あたりのモル数、 H_s 、 ΔH_{fs} はそれぞれ化学種 s の1モル当たりのエンタルピー、生成熱であり、 D_s は拡散係数である。各化学種のエンタルピーは JANAF[8] テーブルから引用し、温度の4次多項式で近似した。多項式の係数を各化学種について表3に示す。 $\dot{\omega}_s$ は化学種 s の単体積あたりの生成速度 (mol/m³/s) であり表2より求める。

状態方式は下記となる。

$$p = R_u T \sum_s \rho z_s \quad (2)$$

ここに、 R_u は普遍気体定数 (=8.31447 JK⁻¹mol⁻¹) である。

各化学種の輸送係数は Lennard-Jones の分子間ポテンシャル[9]を用いて評価し、Wilke の法則[10]によって混合気体の輸送係数を求める。具体的には、粘性係数 μ および熱伝導率 κ は下記の通り求める。

$$\mu = \sum_s \frac{X_s \mu_s}{\varphi_s} \quad (3)$$

$$\kappa = \sum_s \frac{X_s \kappa_s}{\varphi_s}$$

$$\varphi_s = \sum_r X_r \left[1 + \sqrt{\frac{\mu_s}{\mu_r}} \left(\frac{M_r}{M_s} \right)^{1/4} \right]^2 / \sqrt{8 \left(1 + \frac{M_s}{M_r} \right)} \quad (4)$$

ここに X_s 、 M_s はそれぞれ化学種 s のモル分率、分子量である。 μ_s および κ_s はそれぞれ化学種 s の粘性係数および熱伝導率であり下記により求める。

$$\mu_s = \frac{5}{8 \sigma_s^2} \sqrt{\frac{k m_s T}{\pi}} / w_1 \quad (5)$$

$$\kappa_s = \frac{\mu_s}{M_s} \left(\frac{\partial H_s}{\partial T} + \frac{5}{4} R_u \right) \quad (6)$$

ここに、 k はボルツマン定数 (=1.38065 × 10⁻²³ JK⁻¹) であり、 m_s 、 σ_s はそれぞれ化学種 s の分子1個の質量、衝突直径である。

化学種 s の拡散係数は、2対拡散係数 D_{sr} を用いて下記の通り与える。

$$D_s = \frac{1 - X_r}{\sum_{r \neq s} \frac{X_r}{D_{sr}}} \quad (7)$$

ただし、化学種 s と r の間の2対拡散係数 D_{sr} は下記により求める。

$$D_{sr} = \frac{3}{8 \sigma_{sr}^2 N_{sr}} \sqrt{\frac{k(m_s + m_r)T}{2\pi m_s m_r}} / w_2 \quad (8)$$

ここに $N_{sr} = N_s + N_r$ 、 $\sigma_{sr} = (\sigma_s + \sigma_r) / 2$ であり、 N_s は化学種 s の数密度である。

式(5)、(8)中の w_1 および w_2 は分子間ポテンシャルモデルから決まる無次元関数であり $T / (\varepsilon_s / k)$ の関数である。 ε_s は化学種 s の分子ポテンシャルモデルの井戸の深さであり、 ε_s / k は温度の次元を持つ。本研究では w_1 、 w_2 とも $(\varepsilon_s / k) / T$ の3次多項式で近似した。なお w_2 を求める際には井戸の深さとして2化学種の井戸の深さの相乗平均を用いる。化学種ごとの衝突直径 σ_s および ε_s / k を表4 [11]に、 w_1 および w_2 の kT / ε_s に対する値[9]を表5に、その多項式近似係数を表6に示す。

なお、特記のない記号は一般の使用に従うものとする。

表 3 : エンタルピー多項式係数および生成エンタルピー

$$H_s = a_0 + a_1T + a_2T^2 + a_3T^3 + a_4T^4$$

$H_s, H_{fs} : [\text{J/mol}], T : [\text{K}]$

	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	ΔH_{sf}
H ₂	-8.1326E+03	2.6663E+01	2.1287E-03	-8.7153E-08	-1.2495E-12	0.0000E+00
O ₂	-8.7981E+03	2.8524E+01	3.4874E-03	-4.4822E-07	2.5177E-11	0.0000E+00
OH	-8.2317E+03	2.6919E+01	2.4185E-03	-1.9602E-07	4.4040E-12	3.9426E+04
H ₂ O	-8.8587E+03	2.7196E+01	8.8307E-03	-1.1411E-06	5.8445E-11	-2.4160E+05
H	-6.1868E+03	2.0760E+01	3.1743E-06	-6.3343E-10	4.5081E-14	2.1778E+05
O	-6.4485E+03	2.1805E+01	-5.9607E-04	1.2975E-07	-7.5884E-12	2.4896E+05
H ₂ O ₂	-1.0680E+04	2.6514E+01	3.5581E-02	-1.5200E-05	2.6737E-09	-1.3305E+05
HO ₂	-1.0338E+04	3.1957E+01	9.6625E-03	-1.6663E-06	1.0667E-10	1.7556E+04
N ₂	-8.2271E+03	2.6494E+01	3.9239E-03	-6.3248E-07	3.8992E-11	0.0000E+00

表 4 : 衝突半径 (σ_s) および ε_s/k

	$\sigma_s [10^{-10} \text{m}]$	$\varepsilon_s/k [\text{K}]$
H ₂	2.920	38.0
O ₂	3.548	107.4
OH	2.750	80.0
H ₂ O	2.605	572.4
H	2.050	145.0
O	3.500	80.0
H ₂ O ₂	3.458	107.4
HO ₂	3.458	107.4
N ₂	3.621	97.53

表 5 : kT/ε_s に対する w_1, w_2 の値[9]

kT/ε_s	w_1	w_2
0.3	2.648	2.841
0.5	2.066	2.284
0.7	1.729	1.922
1.0	1.440	1.593
1.3	1.274	1.401
1.6	1.168	1.280
2.0	1.075	1.176
2.5	1.0002	1.093
3.0	0.9500	1.0388
4.0	0.8845	0.9699
5.0	0.8428	0.9268
7.0	0.7898	0.8728
10.0	0.7422	0.8244
20.0	0.6640	0.7436
50.0	0.5761	0.6504
100.0	0.5177	0.5869

表 6 : w_1, w_2 の多項式近似

$$w = a_0 + a_1R + a_2R^2 + a_3R^3, \quad R = (\varepsilon_s / k) / T$$

	a_0	a_1	a_2	a_3
w_1	5.977E-01	1.0752E+00	-2.3769E-01	3.0005E-02
w_2	1.3401E+00	2.3472E+00	-3.9074E-01	3.2369E-02

3.3 離散化手法

前述の支配方程式を一般座標系に変換した後、有限体積法によって離散化する。式(1)は一般座標系において

$$\frac{\partial \hat{q}}{\partial t} = -\frac{\partial \hat{F}_i}{\partial \xi_i} + \frac{\partial \hat{F}_i^v}{\partial \xi_i} + \hat{S} \quad (9)$$

と書ける。ここに、

$$\begin{aligned} \hat{q} &= Vq, \\ \hat{F}_i &= n_{1,i}F_1 + n_{2,i}F_2 + n_{3,i}F_3, \\ \hat{F}_i^v &= n_{1,i}F_1^v + n_{2,i}F_2^v + n_{3,i}F_3^v, \\ \hat{S} &= VS \end{aligned}$$

であり、 V は計算セル体積、 $\mathbf{n}_i \equiv (n_{1,i}, n_{2,i}, n_{3,i})$ はセル境界法線方向の面積ベクトルである。本研究では計算格子の変形移動はないものとする。

対流項については風上三次精度の TVD(Total Variation Diminishing) 数値流束[12,13]で評価し、その際、特性量を外挿することによって高精度の数値流束を構築する。セル境界 $j+1/2$ における数値流束 $\hat{F}_{i,j+1/2}$ は式(10)で表される。ただし、 $T^{-1}AT=A$ 、 $A=\partial \hat{F}_i / \partial q$ 、 A は A の固有値行列である。実際の計算に必要な行列 T^{-1} 、 T 、 A の具体的な形については参考文献[13,14]を参照されたい。

多くの高精度 TVD 数値流束では外挿する変数の勾配の符号が変化する位置で流束制限関数が働き精度が1次精度に落ちてしまうという問題がある。ここでは特性量の勾配の符号が変化する場所でも2次精度を維持するように設計された流束制限関数[14]を用いる。式(11)および(12)の右辺第2項が数値流束を2次精度とする付加項、第3項が3次精度とするための付加項である。図2は変数勾配変化率 R に対する第2項の値である。 $\Psi=1$ の時、数値流束は2次精度を確保する。図3は変数勾配変化率に対する第3項の値であり、 $\bar{\Psi}=1$ の時、数値流束は3次精度となる。 $R<0$ すなわち変数勾配の符号が変化する場合にも2次精度を確保できる条件があることが分かる。式(13)、(14)中の定数 α_1 、 β_1 、 β_2 は流束制限関数の特性を制御する正値であり、 ε は0割を防ぐための小さな正値である。本計算では2次精度以上となる条件を広く確保するために $\alpha_1=1.5$ 、 $\beta_1=1.0$ 、 $\beta_2=1.5$ とした。

$$\hat{F}_{i,j+1/2} = \frac{1}{2} \left[\hat{F}_{i,j} + \hat{F}_{i,j+1} - T_{j+1/2} \left(A_{j+1/2}^+ \sigma_{j+1/2}^+ - A_{j+1/2}^- \sigma_{j+1/2}^- \right) \right] \quad (10)$$

$$\sigma_{j+1/2}^+ = \sigma_{j+1/2} - \Psi(R_p) \sigma_{j-1/2} - \frac{2}{3} \bar{\Psi}(R_p) (\sigma_{j+1/2} - \sigma_{j-1/2}) \quad (11)$$

$$\sigma_{j+1/2}^- = \sigma_{j+1/2} - \Psi(R_m) \sigma_{j+3/2} - \frac{2}{3} \bar{\Psi}(R_m) (\sigma_{j+1/2} - \sigma_{j+3/2}) \quad (12)$$

$$\Psi(R) = \min \left\{ -\frac{2\beta_2}{\min(R, -\varepsilon)}, 1, \frac{6\beta_1}{\max(R+2, \varepsilon)} \right\} \quad (13)$$

$$\bar{\Psi}(R) = \min \left\{ -\frac{3 \cdot \max(0, R)}{\max(1-R, \varepsilon)} (\alpha_1 - 0.5), 1, \frac{6\beta_1}{\max(R+2, \varepsilon)} \right\} \quad (14)$$

$$\sigma = T^{-1} \Delta q, \quad R_p = \sigma_{j-1/2} / \sigma_{j+1/2}, \quad R_m = \sigma_{j+3/2} / \sigma_{j+1/2}$$

粘性項および拡散項については通常の2次精度中心差分を用いる。ただし、化学種の拡散については、Fick 則による勾配拡散を用いているため、化学種が3種以上となると、全体の質量保存との整合性が取れなくなる。すなわち化学種の質量の総和が、全質量と一致なくなる。それは、このモデルによって評価した各化学種の拡散流束が、質量流束の総和が0になることを保証しないためである。そこで、以下の手法で全質量保存との整合性を確保するように拡散流束を修正した。セル境界における拡散流束を一度計算し、境界を正と負の方向に通過する質量流束を求める。本来、正方向に通過する質量流束と負の方向に通過する質量流束の大きさは等しくなければならないが、勾配拡散を用いる場合には両者は一致しない。そこで、両者の平均値を真の質量流束の値と仮定し、両者がその平均値となるように各化学種の拡散流束に重みをかけ調整する。すなわち下記手続きにより質量保存を満足する化学種 s の修正拡散流束 \tilde{f}_s^d を求める。

$$\tilde{f}_s^d = \tilde{f}_s^{d+} + \tilde{f}_s^{d-} \quad (15)$$

ただし、

$$\tilde{f}_s^{d\pm} = \frac{S}{S^\pm} f_s^{d\pm}, \quad S = \frac{1}{2} (S^+ + |S^-|), \quad S^\pm = \sum_s f_s^{d\pm}$$

であり、 f_s^d は勾配拡散から直接計算された化学種 s の拡散流束である。

時間方向の積分には2次精度の Runge-Kutta 法による陽的積分を用いた。通常、化学反応を伴う支配方程式を

時間発展的に解く際には、化学反応生成項の stiffness による時間積分幅の制限を取り除くために、様々な緩和法が用いられることが多いが、本研究では特別な措置は施していない。後に示すとおり計算格子が非常に細かく、流体の方程式からの要請で決まる時間積分幅が反応の時間スケールに比べ十分に小さいためである。

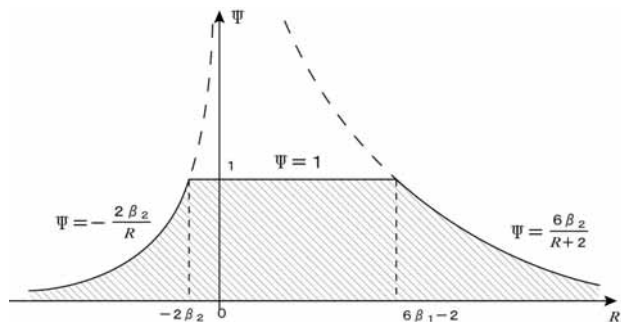


図2 数値流束2次精度付加項の流束制限関数 $\Psi(R)$

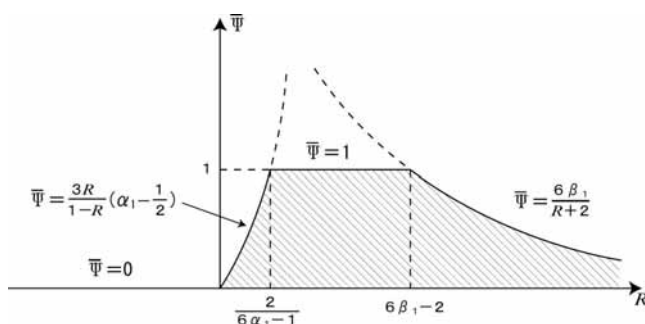


図3 数値流束3次精度付加項の流束制限関数 $\bar{\Psi}(R)$

3.4 境界条件

計算領域外部境界には無反射条件[15,16]を与え、ノズル外壁は滑り壁とする。ノズル出口においては完全乱流管内流れの平均速度分布に対応する全温全圧分布を与える。具体的には、表1に示された条件の静止空気の水素を噴出した時に所定の速度を与える全温全圧に固定する。噴出速度を計算領域から外挿し、与えられた全温全圧から断熱条件の関係を用いて噴出温度、密度を求める。従って、計算領域内の圧力変動に応じて噴出し速度は変動する。噴出し条件として陽的には乱れを付加していない。

3.5 計算格子および並列計算

計算領域はノズル出口中心を原点、噴流軸方向を y 軸、それに垂直な方向を x, z 軸として、おおよそ $-3D < y < 21D$, $-12D < x, z < 12D$ である。計算格子系は計算領域全体を覆う矩形格子系と噴射ノズル周りの円筒格子系からなる重合格子系となっている。円筒格子系の領域は $-3D < y < 2D$, $0.375D < (x^2+z^2)^{1/2} < 0.75D$ である。図4左側は計算領域の分

割を示しており、全体を覆う矩形格子系は72のサブドメインから、噴射ノズル周りに赤く記された円筒格子系は3つのサブドメインから構成されている。円筒格子系と矩形格子系は y 座標が一致しており、 $x-z$ 平面において以下のように保存量の受け渡しを行う。円筒格子系内側および外側境界それぞれ2点の保存量を矩形格子系から線形内挿補間することにより得、逆に円筒格子系内部（外側境界以外）にある矩形格子系の格子点上の保存量は円筒格子系の物理量から内挿補間することにより与える。この作業をイタレーション毎に行う。

火炎および噴流周辺における矩形格子系の格子幅は0.05mmとした。円筒格子系における格子幅は半径方向に変化するが矩形格子系の格子幅と同オーダーでそれを超えないように設定されている。本研究で用いたモデルを一次元層流予混合火炎解析コード PREMIX[17]に組み込み、当量比1の水素/空気一次元予混合火炎を計算すると、その燃料消費層、発熱層とも約0.5mmの厚みとなる。予混合火炎の反応帯厚さは当量比1付近で最も狭くなるので、本研究で用いた計算格子は予混合火炎の内部構造を10点程度以上で解像できる格子幅となっている。一方で、この格子幅は実験で測定された火炎最上流端あたりでのコルモゴロフスケール[6]の2~3倍となっており、乱流の最小スケールまで解像することは期待できない。しかしながら、実質的な乱流のエネルギースケールを担っているのは最小スケールの5倍以上の渦であり、乱流構造解像に必要な解像度はコルモゴロフスケールの5~8倍ということが報告されており[18,19]、乱流構造の大部分は解像することが可能な格子幅と考えられる。格子間隔は不等間隔で中心軸から離れたところ、また下流域においては粗くなっている。総計算格子点数は約2億点である。

計算は宇宙航空研究開発機構の CeNSS(Central Numerical Simulation System)を用いて行われた。図4右に示すように、各サブドメインに1プロセスを割り当て、プロセス間通信を MPI(Message Passing Interface)によって行い、プロセス内では OpenMP による並列化を行った。この手法により、大量の CPU を用いたにもかかわらずプロセス間のデータ通信量を低く抑えた効率的な並列計算を実施した。計算は75プロセス291CPUを用いて倍精度で行ったが、実行時の使用メモリは約230GB、計算速度は約0.13TFlopsであった。計算における時間刻みは約6nsであり、1ステップあたりの実計算時間は約30秒である。今回、用いたデータは火炎が準定常状態になってから約0.5msの間のデータであるが、データ取得のために約90000ステップ、750時間/CPUの計算時間を要した。また、データの保存は単精度で100ステップ毎に行った。1瞬間あたりのデータサイズは約10GBであり、総データ量は約9TBとなった。

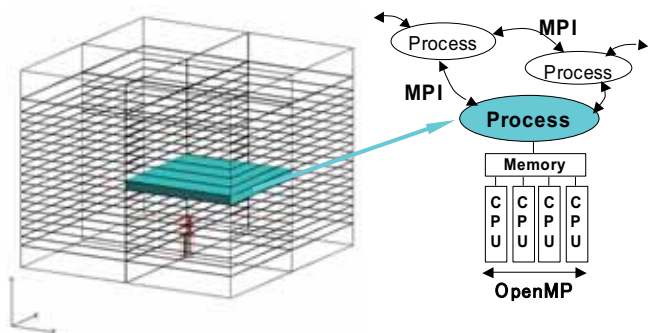


図4 領域分割と並列計算

4. 流れ場の概要

4.1 水素噴流

図5はある瞬間の水素噴流の様子である。水素体積分率70%の等値面であり、表面の色は等値面上の温度を示している。水素噴流の強い Kelvin-Helmholtz 不安定性により極めて三次元性が強く乱れが大きな噴流が形成されていることが分かる。また噴流上流未燃部においては非常に小さな乱れの構造が観察されるが、既燃部においては小さな構造は観察されない。これは既燃部においては高温ガスの大きな粘性および拡散速度により小さな構造が抑圧されるためである。

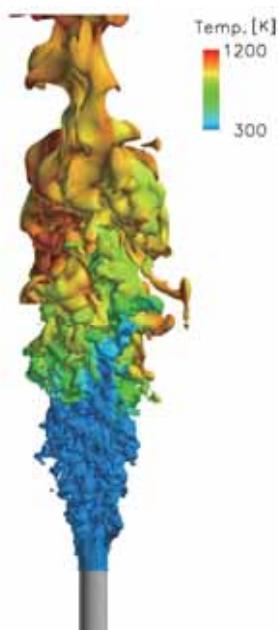
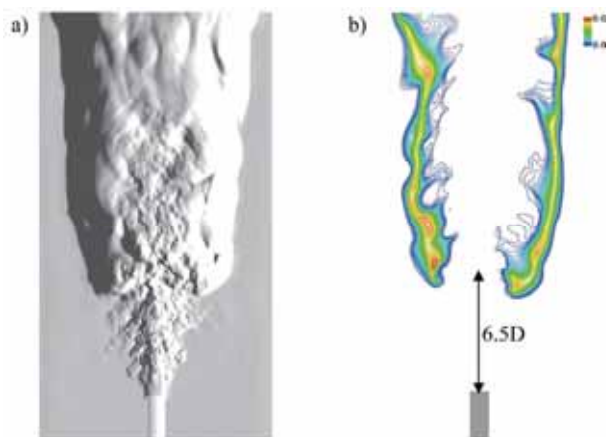


図5 水素噴流。水素体積分率70%等値面、表面の色は温度を表す。

4.2 浮き上がり高さ

実験においてはシュリーレン写真や火炎の自発光を観察することにより浮き上がり高さを推定している。図6aは数値データから擬似的に作ったシュリーレン写真であり、図6bは火炎の自発光源であるOHの対称面内の質量分率分布である。火炎の最上流部の位置は周方向に分布があり時間的にも変動するが、その高さはおよそ6-6.5Dである。浮き上がり高さに0.5-1D程度の差が観察との間にあるものの、かつてシミュレーションによって再現された例がない火炎形態の全体的な姿を詳細なシミュレーションにより再現することに成功している。



a : 数値データから作成したシュリーレン写真

b : 対称面内 OH 質量分率分布

図6 火炎浮き上がり高さ

4.3 半径方向の分布

参照した実験においては、時間平均的かつ周方向に平均的な温度分布および組成分布の計測が試みられている。化学種についてはラマン散乱により、温度についてはラマン分光法によって計測されている。計測の困難さから、かなりの測定誤差があることは避けられないが、大まかな傾向については比較検証の対象となると考える。数値シミュレーションにおいても収集した時系列データの時間平均をとり、周方向に平均をとることにより半径方向の分布を計測データと比較した。浮き上がり高さが計測よりも0.5-1D程度短いことを考慮して、計算結果は試験での計測点にあわせて0.5D上流位置、1D上流位置での分布を示している。

図7はノズルから7D下流（火炎最上流端付近）における、a:温度、b:水素モル分率、c:酸素モル分率、d:OHモル分率、e:H₂Oモル分率の半径方向分布である。シミュレーションにおいては、上下位置の僅かな違いで分布が大きく変化するが、計測値はおおよそシミュレーションにおけるy=6Dとy=6.5Dの間に分布している。実験と

の対応という観点からも、本シミュレーションにおける浮き上がり高さは6-6.5Dというべきであろう。また、噴流中心 ($r=0$) での酸素モル分率が計測とほぼ一致していることは、火炎上流における噴流への雰囲気空気への取り込みをシミュレーションがよく再現していることを示している。しかしながら OH が発生し温度が上昇する領域でシミュレーションが酸素モル分率を大幅に低く見積もる傾向にあり、この点は他の諸量と異なる傾向を示している。

図8はノズルから9.5D下流での半径方向分布である。それぞれの分布は観察結果と似通った形となっている。ここでも軸中心での酸素モル分率は計測とよい一致を示しているが、7D下流と同様に反応が起こっていると思われる領域において差異が見られる。シミュレーションにおいては $r=5\text{mm}$ 付近の反応が始まり OH が発生し温度が上昇する領域で酸素が消費されつくされた領域が見られるのに対し、計測においては軸中心とほぼ同一の値を示している。上述の通り火炎上流での酸素の噴流への取り込みがよく再現されているとすると、反応過程の差が計測とシミュレーションとの差ということになるが、反応の生成物である H_2O のモル分率分布は計測とシミュレーションでよい一致を見せている。また9.5D下流においては内側水素過濃既燃ガスと外側空気中の酸素の間に拡散火炎が形成されているため理論混合比の位置付近では酸素がほぼ消費しつくされ、酸素濃度が非常に小さな領域が形成されてしかるべきとも考えられる。酸素モル分率の分布の差異について理解するためには反応モデルおよび計測誤差の両面から検討する必要があると考えるが、ここでは今後の課題とする。

酸素モル分率分布については検討課題があるものの、それを除く諸量の半径分布においてシミュレーションは観察結果に近い分布を再現している。

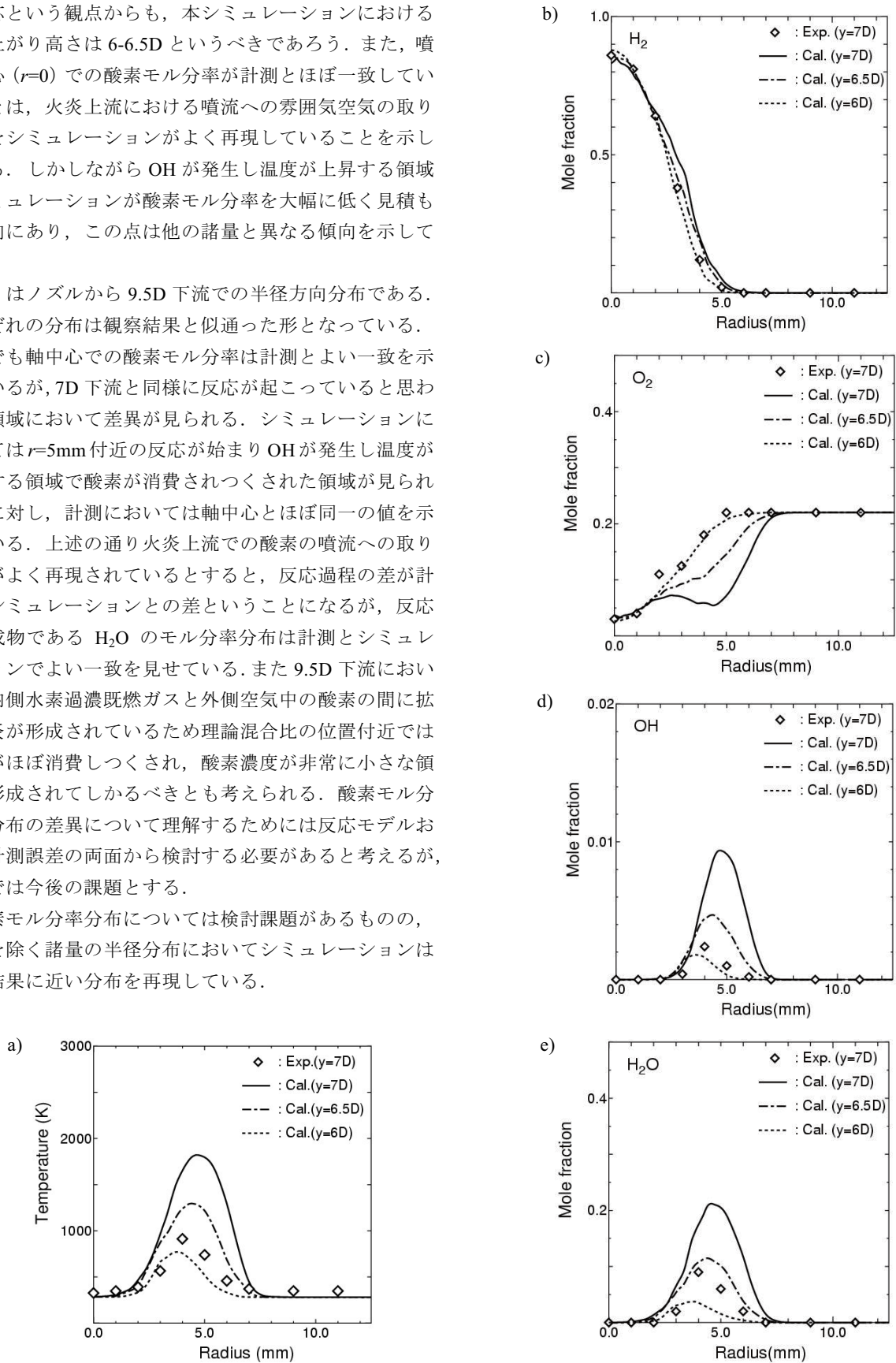


図7 温度および化学種質量分率の半径方向分布 (ノズルより7D下流).
 a: 温度, b: 水素モル分率, c: 酸素モル分率, d: OH モル分率, e: H₂O モル分率.

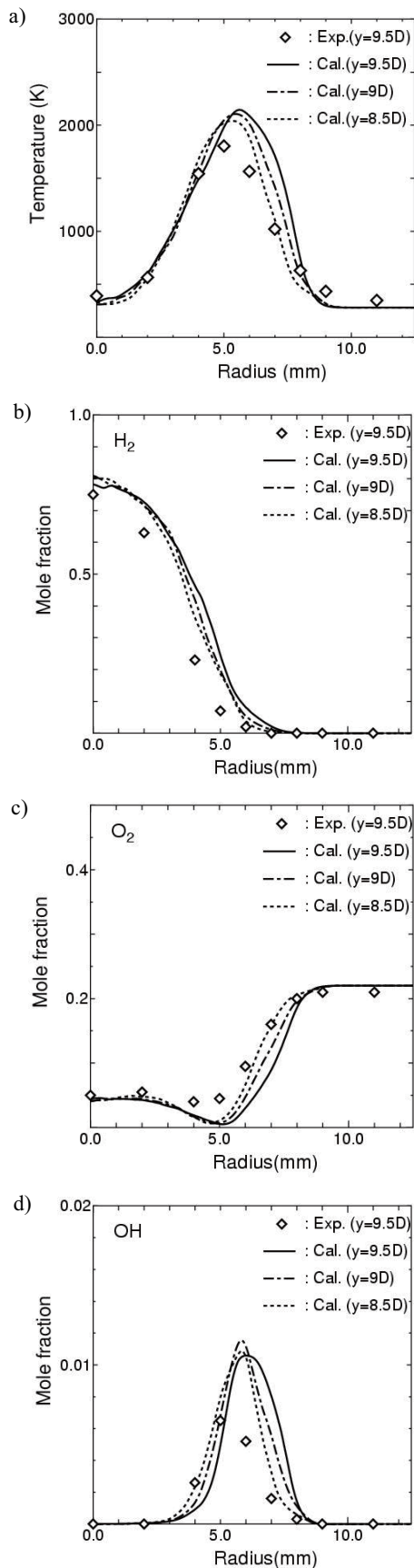


図 8：温度および化学種質量分率の半径方向分布（ノズルより 9D 下流）。

a：温度，b：水素モル分率，c：酸素モル分率，d：OH モル分率，e：H₂O モル分率。

5. 火炎全体構造

図 9 a, b はそれぞれ，ある瞬間の対称面内での水素消費速度と発熱率の分布である．ノズルから伸びている実線は理論混合比の位置を示している．燃料消費，発熱とも複雑な分布となっているが，大部分は火炎先端付近で起こっていることが分かる．また火炎下流においては，理論混合比の線に沿って燃料消費および発熱がスポット状に現れている．以下において，この複雑な火炎構造の理解を試みる．

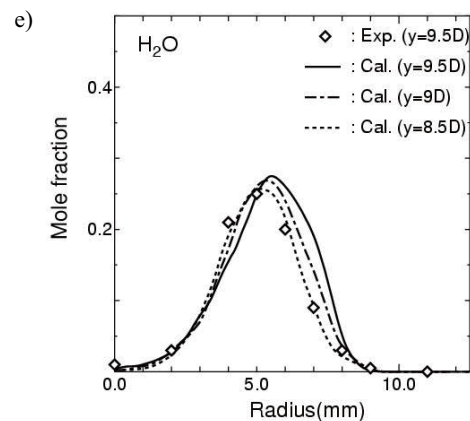
5.1 Flame Index

火炎の全体的な構造解析のために，竹野らによって提案された Flame Index [20]を用いた．Flame Index (以下.F.I.) は下記のとおり定義される．

$$F.I. = \nabla Y_F \cdot \nabla Y_O \quad (16)$$

ここに， Y_F および Y_O は燃料および酸化剤の質量分率であり，本シミュレーションの場合，F が水素，O が酸素となる．

火炎の燃焼形態としては大きく分けて，予混合火炎と拡散火炎がある．予混合火炎とは燃料と酸化剤が反応する前から十分混合した火炎であり，波のような伝播性を持つ．この火炎の内部では，図 10a に示すように，燃料と酸化剤は同じ方向から反応帯に供給される．一方，拡散火炎は燃料と酸化剤が別々に供給され分子拡散により混ざりながら反応する火炎であり，理論混合比となる位置付近で燃焼反応が起こる．この火炎では，図 10b に示すように燃料と酸化剤が互いに向き合う形で反応帯に供給される．従って F.I. が正の時すなわち，燃料濃度勾配と酸化剤濃度勾配の向きが同じ場合は火炎の燃焼形態は予混合火炎，逆に負の場合は拡散火炎と判断することができる．



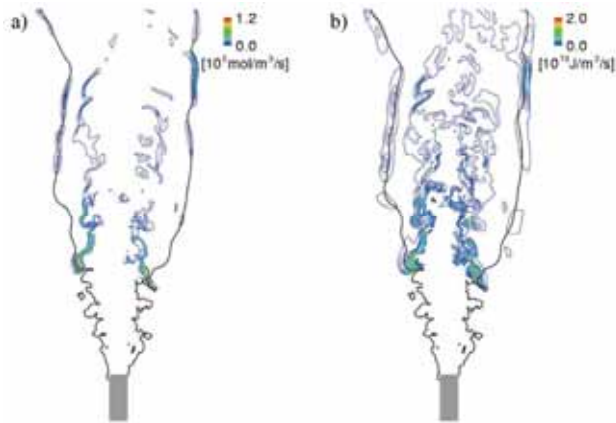


図9 2次元断面内の a: 燃料消費速度分布, b: 発熱分布. ノズルからの実線は理論混合比の位置を表す.

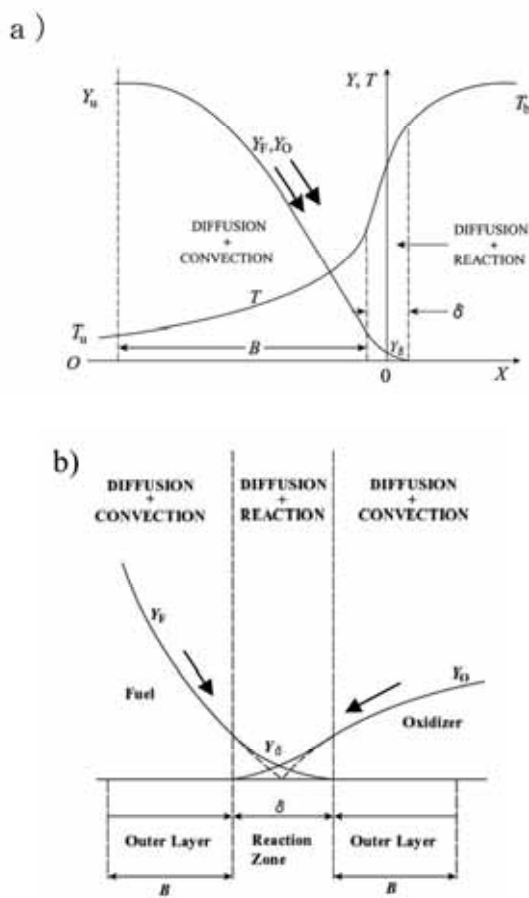


図10 代表的な火炎形態, a: 予混合火炎, b: 拡散火炎.

5.2 Normalized Flame Index

F.I.は予混合火炎と拡散火炎の判別を可能とする. このF.I.を無次元化することにより新しい意味を付け加えることができる. 正のF.I.については, 同じ当量比の一次元層流予混合火炎のF.I.で無次元化し, 負のF.I.については対向流一次元拡散火炎において歪み速度を大きくしていった時に消炎する際のF.I.で無次元化する. この無次元化されたF.I.すなわち Normalized Flame Index (N.F.I.)は,

予混合火炎に対しては局所の火炎速度の指標となり, 局所の火炎速度が一次元層流火炎の火炎速度のおおよそ(N.F.I.)^{1/2}と推定することができる. 拡散火炎に対しては消炎までの余裕を示すことになる.

5.3 火炎構成要素

図11は水素消費速度 $10^4 \text{ mol/m}^3/\text{s}$ の等値面である. 等値面上の色はF.I.および局所の気体組成を用いて判定した燃焼モードを示している. 赤: 過濃予混合火炎, 青: 希薄予混合火炎, 緑: 拡散火炎に分類できる. 過濃とは理論混合比よりも燃料の割合が多い場合で, 希薄とはその逆である.

この図から, 対象の浮き上がり火炎は単なる一つの火炎ではなく, 3つの火炎要素を含んでいることを示している. すなわち,

- ・ 過濃/希薄予混合火炎と拡散火炎が混在した三重火炎的な構造をもつ火炎先端部
- ・ 火炎外側に島状に分布する拡散火炎
- ・ 火炎内側の複雑な形状の過濃予混合火炎

である. さらに火炎の非定常な動きを観察すると, 火炎先端部は三次元性が強い構造を持ち緩やかに動いているが非常に安定で浮き上がり火炎全体の安定性をコントロールしていること, 外側の拡散火炎は理論混合比の面に沿ってゆっくりと下流に流れていくこと, 内側の過濃予混合火炎は噴流の乱れの影響を強く受ける乱流火炎であることが明らかとなった.

次章において, 各火炎要素について明らかとなったこと, 今後解明していくべきことについて述べる.

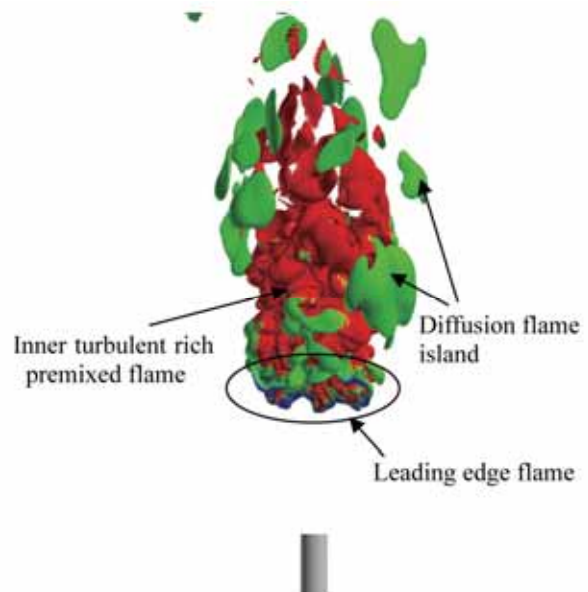


図11 火炎全体構造. 水素消費速度 10^4 mol/s/m^3 の等値面. 表面の色は燃焼モードを表す, 赤: 過濃予混合燃焼, 青: 希薄予混合燃焼, 緑: 拡散燃焼.

6. 火炎構成要素の特徴と研究課題

6.1 先端火炎

先端火炎は、過濃／希薄予混合火炎および拡散火炎が混在した三重火炎的な構造を持っている。浮き上がり火炎上流端に位置するこの火炎要素が火炎全体の安定性を支配している。この先端部の非定常な動きを観察すると、噴流からもっとも離れた位置にある希薄予混合火炎が最も安定で位置の変動が小さい部位となっている。ただし、常にある位置の希薄予混合火炎が安定であるわけではなく、安定な位置は時々刻々移動している。図 12 a はある瞬間における安定な希薄予混合火炎における N.F.I.を示している。ただし図を見やすくするために、温度が 400K 未満の領域では N.F.I.=0 としている。正の N.F.I.は実線で 0.4 から 0.4 刻みで、負の N.F.I.は破線で 0.001 刻みで等値線を描いている。黒い実線は理論混合比の位置を示している。図中の希薄予混合火炎部において N.F.I.は 0.8-1.6 の値となっている。火炎が安定な間は、N.F.I.の値は時間的に変動するものの図 12a に代表されるように 1 前後から 2 前後の値を示す。すなわち予混合火炎の伝播速度は一次元層流予混合火炎と同程度から 1.5 倍程度であることが推定される。理論混合比近くの当量比の予混合火炎の伝播速度が 2m/s であることから(図 12 b)、局所の火炎の伝播速度は 2-3m/s と推定される。一方、軸方向の平均速度は約 2.9m/s であった。すなわち、安定な希薄予混合火炎においては、火炎の伝播速度と流入する未燃混合気のおおよそつりあっていると見える。

上記のような点がリング状の先端火炎に常に存在することにより、火炎位置が安定化されているものと推測されるが、解析は先端火炎全体としての安定性の理解までは至っていない。今後、複雑な三次元構造を持つ先端火炎が全体としてどの様に安定化されているか、三次元構造の非定常な動きを観察して明らかにしていく必要がある。

また、火炎伝播速度と未燃混合気流入速度のバランスによって先端火炎位置が決まっているとすると、今回のシミュレーションにおいて浮き上がり高さが観察よりも 0.5-1D 低い原因として、水素噴流と空気の運動量の混合および予混合火炎の伝播速度の評価誤差が考えられる。今後この二つの評価方法の精度検討および高精度化を図っていく必要がある。

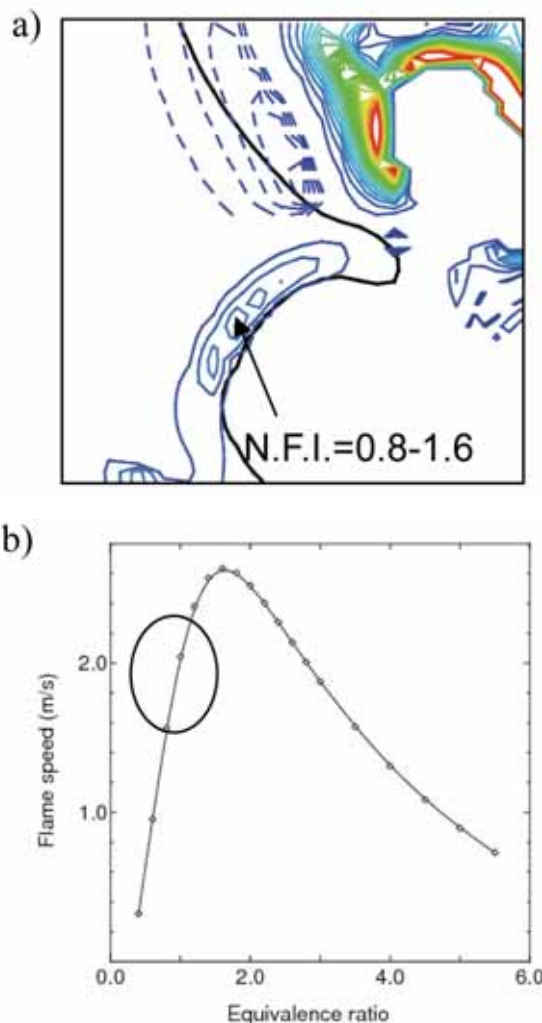


図 12 a)先端付近の N.F.I.分布と b)水素空気予混合火炎の伝播速度. a)中の黒実線は理論混合比の位置を示す

6.2 島状拡散火炎

外側の拡散火炎については、まず通常の火炎とは異なる島状の形態の中でどのような燃焼が起こっているかが興味深い。図 13 は二つの島状拡散火炎に対して、その幅とその火炎における最大燃料消費速度の関係をプロットしたものである。火炎の輪郭を消費速度が $10^4 \text{mol/m}^3/\text{s}$ の等値面と定義し、その幅を火炎幅として計測した。火炎の幅はおおよそ分子拡散の時間スケールを表すので、拡散の時間スケールと化学反応の時間スケールの比較となる。どちらの火炎においても、分子拡散の時間スケールと化学反応の時間スケールはほぼ線形な関係にあり、化学反応が分子拡散に支配されていることを示唆している。すなわち、島状の特異な形状をとるものの、その中で燃焼は、薄い反応帯で起きる燃料消費がその周りの分子拡散による燃料供給に支配されているという通常の層流火炎片の概念[21]で説明できる性質を持っていることが分かる。

加えて、島状の形態がどのように形成されているのかも興味深い。すなわち、周辺よりも強い拡散燃焼が起こっている領域が局所的に存在するのはなぜかということである。以下に火炎の挙動を観察することによって明らかになった形成過程を示す。

浮き上がり火炎外側には理論混合比等値面外側あたりに酸素分子拡散層が形成されている。これは先端火炎に流入する過濃混合気中の酸素の大部分が先端火炎で消費されてしまうためにできる先端火炎後流の酸素が殆ど無い領域と外側の空気の間に来る酸素分子拡散層である。その内側にある過濃予混合火炎は極めて乱れの強い火炎であり、時により外側に大きく張り出す場合がある。この内側予混合火炎が外側にある酸素分子拡散層に接触する時に島状拡散火炎が形成され、また既存の島状拡散火炎に接触する場合はその燃焼を活性化させる。

図 14 は生成過程の一例である。外側に描かれている等値線はある平面内の酸素質量分率分布であり、酸素分子拡散層を表している。時刻 a において○で囲まれた部分が非定常な動きにより時刻 b において外側酸素拡散層に接する。その時に予混合火炎に接して拡散火炎が形成される。その後時刻 c に見られるように予混合火炎と拡散火炎の接合部が燃料の消費によって収縮してゆき、ついには時刻 d において接合部で消滅が起こり拡散燃焼部は内側過濃予混合火炎から分離され、島状の拡散火炎となる。

6.3 内側乱流過濃予混合火炎

内側過濃予混合火炎は水素噴流の乱れの影響を最も強く受ける火炎要素である。その影響が顕著に現れた結果として、図 15 の上半分に見られるような発熱層が燃料消費層から大きく乖離している領域の存在があげられる。これは、現在多くの火炎モデルの基礎となっている層流

火炎片の概念[21]からは大きく外れた特徴である。

そのような特徴が顕著な部分における乱れのスケールをシミュレーションの時系列データを統計処理することにより推算した。計測した点はノズルから 16mm、噴流中心から 2.8mm の位置であり、平均速度および速度変動は 71.7m/s および 43.4m/s、局所的な当量比は約 4 である。具体的には x, y, z 方向それぞれにおける速度変動の 2 点相関から得られる各方向の積分長の平均を積分長とし、散逸率等を用いてコルモゴロフスケールを推算した。その結果、積分長およびコルモゴロフスケールはそれぞれ 2.8mm および 0.03mm と得られた。参考までに、実験で計測・推算された、ほぼ同位置における平均速度は 70m/s、積分長は 1.3mm、コルモゴロフスケールは 0.03mm である[6]。統計処理ではコルモゴロフスケールが 0.03mm と

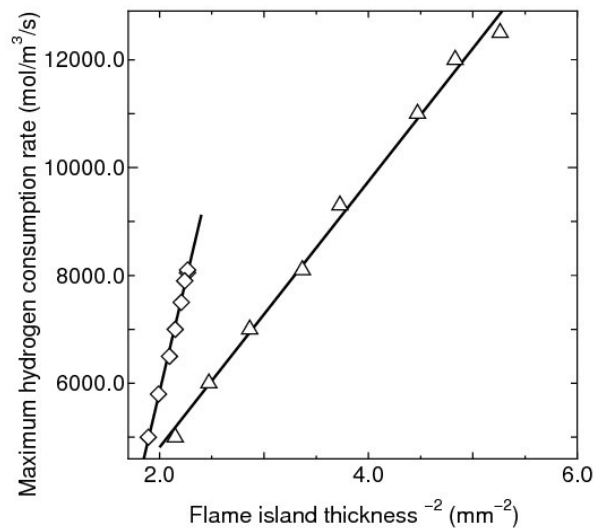


図 13 島状拡散火炎の幅と燃料消費速度

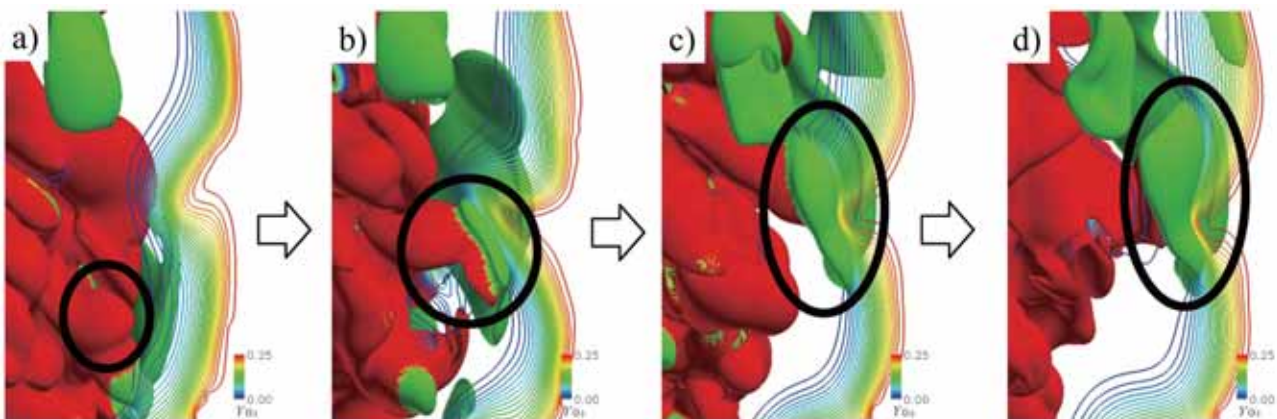


図 14 内側過濃予混合火炎の非定常挙動による島状拡散火炎の生成。内側過濃予混合火炎が火炎外側にある酸素分子拡散層に接触した際に島状拡散火炎が生成される。等値線は酸素分子拡散層を示す。

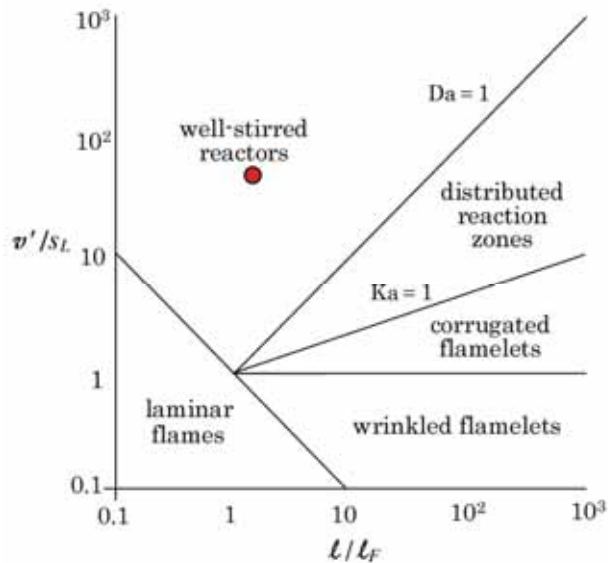


図 16 内側過濃乱流予混合火炎の Borghi Diagram 上での分類. 赤い点が計測点.

推算されたが、計算格子幅が 0.05mm であることを考慮するとシミュレーションで再現されている渦のスケールは 0.2mm 程度から 2.8mm の間に分布していると考えられる。一方で当量比 4.0 の層流水素予混合火炎は非常に厚く、燃料消費層が約 1mm、発熱層は更にそれよりも少し厚い。すなわち、この内側過濃予混合火炎においては火炎厚さと同オーダーで、それよりも小さい渦が存在するため、渦が火炎内部に侵入し火炎構造に影響を与えやすい状態が形成されている。その結果、発熱層が燃料消費層から大きく乖離するに至っていると考えられる。乱流予混合火炎の特性を、火炎厚さ l_F と積分長 l の比および層流火炎伝播速度 S_L と乱れ velocity v' の比をパラメータとして整理する図の一つに Borghi ダイアグラム[22]がある(図 16)。図 16 中 $Ka \equiv l_F^2 / \eta^2$ は火炎厚さとコルモゴロフスケール η の比 (の自乗) を表すカルピッツ数であり、 $Da \equiv S_L l / v' l_F$ は乱流と燃焼の時間スケールの比を表す乱流ダムケラー数である。火炎および乱れのスケールを直接 Borghi ダイアグラム上にプロットすると、乱れが非常に強い場合、 $Da < 1$ すなわち乱れの時間スケールが燃焼の時間スケールよりも小さい well-stirred reactors に分類され、非常に特異な燃焼状態が形成されていることが分かる。

今後はこのような通常の火炎の概念を適用できない燃焼の構造を解明し、その燃焼がいかに維持されているかを理解し、その知見を燃焼モデル構築へと活かしていくことが必要である。

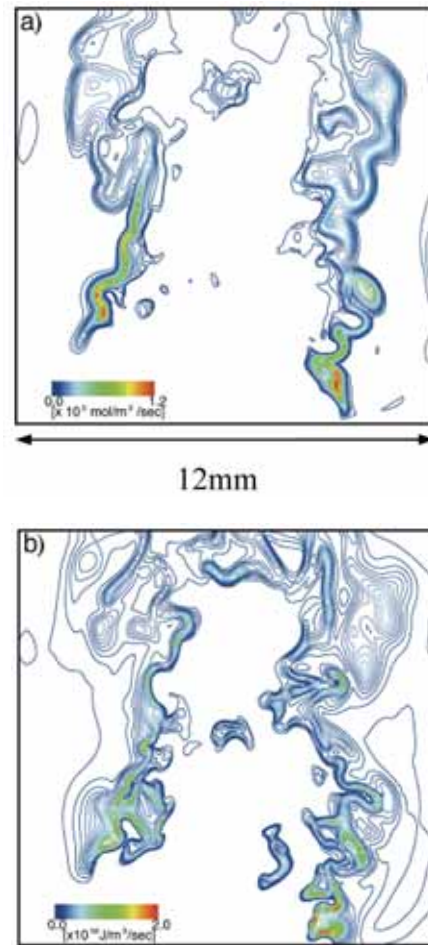


図 15 発熱層の燃料消費層からの乖離, a: 二次元断面内燃料消費速度分布, b: 発熱分布.

7. まとめ

詳細な化学反応過程および流体の輸送特性を組み込んだ、火炎反応帯構造および乱れの主要構造をとらえることができる解像度を有する数値シミュレーションにより、水素噴流浮き上がり火炎をとらえることに成功した。

取得されたデータを解析することにより、浮き上がり火炎は単なる一つの火炎ではなく、3つの火炎要素を含んでいることが分かった。すなわち、

- ・三重火炎的な構造をもつ安定な先端火炎
- ・浮き上がり火炎外側に島状に形成される島状拡散火炎
- ・浮き上がり火炎内側で噴流の乱れの影響を強く受けている内側過濃乱流予混合火炎

である。

先端火炎については、リング状の先端火炎中に、火炎の伝播速度と流入混合気速度がつりあう部位の存在により火炎位置が安定化されていることが推定された。

島状拡散火炎については、特異な形状をもつものの、その中の燃焼は従来の火炎の概念で説明できることが示された。また、その生成は内側にある乱流過濃予混合火

炎の非定常な挙動によるものであることが示された。

内側乱流過濃予混合火炎については、従来の火炎の概念から大きく外れた火炎構造が観察された。そこでは乱流渦のスケールと火炎構造のスケールが同程度であり、流体の乱れが火炎内部構造に影響を与えやすい状態にあるということが分かった。

以上の通り、浮き上がり火炎の全体構造および火炎構成要素について、その特徴がある程度明らかとなった。しかしながら残された課題も多い。特に、複雑な三次元構造を持つ先端火炎が全体としてどの様に安定化されているか、従来の火炎理論を適用できない内側乱流予混合火炎の構造をいかに理解し、その知見を乱流火炎理論へ発展させていくか、ということが今後の重要な課題と考える。また、シミュレーションによって再現された浮き上がり高さが観察よりも0.5-1D低いという問題もある。その原因としては、水素噴流と空気の運動量混合と予混合火炎伝播速度の評価精度が考えられ、今後これらの評価精度の検討および精度を向上させる計算手法を追求していく必要がある。

8. 謝辞

本研究は文部科学省開放的融合研究制度「乱流制御による新機能熱流体システムの創出」の一環として行われた

9. 参考文献

- [1] Peters, N and Williams, F. A., AIAA J. 21(3):423-429 (1983).
- [2] Kioni, P. N., Rogg, B., Bray, K.N.C., and Liñán, A., Combust. Flame 95:276-290 (1993).
- [3] Ruetsch, G. R. and Vervisch, L., Phys. Fluids, 7(6) : 1447-1454 (1995).
- [4] Favier, V. and Vervisch, L., Proc. Combust. Inst. 27: 1239-1245 (1998).
- [5] Vervisch, L. and Poinso, T, Annu. Rev. Fluid Mech. 30:655-691, 1998.
- [6] Cheng, T. S., Wehrmeyer, J. A. and Pitz, R. W., Combust. Flame, 91:323-345 (1992).
- [7] Westbrook, C. K., Combust. Sci. Tech., 29:67-81 (1982).
- [8] JANAF Thermochemical Tables (1965).
- [9] Chapman, S. and Cowling, T. G., The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases, Cambridge Univ. Press (1970).
- [10] Wilke, C. R., J. Chem. Phys., 18(4):517-519 (1950).
- [11] Frenklach, M., Wang, H., Goldenberg, M., Smith, G. P., Golden, D. M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Gardiner, W. C., and Lissianski, V., GRI Topical Report No. GRI-95/0058 (1995).
- [12] Roe., P. L., J. Comp. Phys., 43:357-372 (1981).
- [13] Wada, Y., Ogawa, S. and Ishiguro, T., AIAA paper 89-0202 (1989).
- [14] Wada, Y., PhD thesis, the University of Tokyo (1995).
- [15] Thompson, K. W., J. Comp. Phys., 68:1-24 (1987).
- [16] Poinso, T., Lele, S., J. Comp. Phys., 101:104-129(1992).
- [17] Kee, R. J., Grcar, J. F., Smooke, M. D. and Miller, J. A., Sandia Report SAND85-8240 (1985).
- [18] Moin, P. and Mahesh, K., Annu. Rev. Fluid Mech., 30:539-578(1998).
- [19] Tanahashi, Kang, S.J., Miyamoto, T., Shiokawa, S. and Miyauchi, T., Int. J. Heat and Fluid Flow, 25: 331-34(2004).
- [20] Yamashita, H., Shimada, M. and Takeno, T., Proc. Combust. Inst. 26: 27-34 (1996).
- [21] Williams, F. A., Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows, 189-208, Plenum Press(1975).
- [22] Borghi, R., Recent Advances in the Aerospace Science, 117-138, Plenum, New York (1985).