

# 燃焼研究における数値計算の意義

竹野忠夫  
名古屋大学

## IMPACT OF THE RECENT ADVANCEMENT IN NUMERICAL CALCULATIONS ON COMBUSTION SCIENCE AND TECHNOLOGY

Tadao Takeno  
Department of Mechanical Engineering, Nagoya University

### ABSTRACT

The impact of the recent advancement in numerical calculation on combustion science and technology will be reviewed. The impact on combustion technology seems insignificant at this stage, however it has a great potential to change the engineering approach completely. The possible direction of change will be illustrated by showing an example. In combustion science, on the other hand, it has generated a new scientific approach of numerical experiment, which has been proved to be very successful in understanding the physics and chemistry of complicated combustion phenomena. The advantages of numerical experiments over real experiments will be explained with some illustrative examples. Then the problems to be overcome are discussed. Finally, future problems will be identified.

keywords; Numerical Calculation, Combustion Science and Technology

#### 1. はじめに

現在の地球環境問題の殆どが燃焼に起因する問題である。このため化石燃料に代わる新しいエネルギー源を求める努力が世界中において行われているが、その見通しは極めて暗い。少なくとも来世紀半ばまでは、エネルギーの大半を化石燃料に頼らざるを得ないのが実情である。燃焼技術に課せられた課題は極めて重いと言えよう。限られた燃料を有効に、しかも環境を汚染しないで燃焼させるには、燃焼過程の精密な制御に基づいた新しい技術の開発が必要である。ところが現状では、このような開発が容易にできる訳ではない。その主な原因は燃焼技術と燃焼科学の乖離にある。すなわち、燃焼技術の課題と最新の燃焼科学の成果を有機的に結び付けて、有効な技術を開発する

ための手法が確立されていないことにある。

最近の燃焼科学の発展には目覚ましいものがある。レーザを用いた新しい測定法の開発によって、層流火炎や乱流火炎内で進行する物理的過程や化学的過程を解明する手段が与えられるようになった。また、漸近解析に基づく新しい数学的解析手段が工夫され、火炎の持つ基本的性質が理論的に解明されつつある。さらに、最近のハードとソフト両面における数値計算技術の進歩は素晴らしい。従来は不可能であった多数の素反応を伴った流れの計算が、比較的簡単に計算できるようになった。これに伴って新たに数値実験の概念が導入され、実験や理論解析と並んで、燃焼現象を解明するための有力な研究手段が与えられることになった。燃焼過程を科学的に解明する手段、またそれ

らを用いた研究の成果による我々の現象への理解は、かなりのレベルにまで到達したとすることができる。

この燃焼科学の最新の成果を新しい燃焼技術の開発に活かすにはどうすればよいだろうか？一言で言えば、燃焼過程を正確に記述できる理論的モデルを構築することである。すなわち、このモデルに基づいて個々の燃焼過程を数値計算によって再現して、その正確な予測を可能にする手法を確立する。これによって、燃焼機器の設計に携わる多くの燃焼技術者に比較的簡単に、有効な予測手段を与えることになる。それに伴って新しい技術の開発は比較的容易に行はれるものと考えられる。

以上のように、最近の数値計算の発展は燃焼研究に対して大きなインパクトを与えているが、本稿では、特に燃焼科学への影響に的を絞って説明させて頂くことにする。燃焼理論の創設と発展、数値計算の歴史、さらには燃焼工学へのインパクトなど、全般については他で報告しているので、関心のある方は参照して頂きたい[1].

## 2. 燃焼科学へのインパクト、数値実験

数値計算は、数値実験なる新しい研究手段をもたらすことによって、燃焼科学に極めて重要なインパクトを与えた。もともと燃焼は化学反応や熱、物質移動、流れなど多数の素過程が同時に進行する極めて複雑な現象であり、その本質を科学的に解明することが非常に困難な研究対象である。現象には多数のパラメータが関与するが、これらのパラメータの全てを完全にコントロールして正確な実験を実施することが非常に困難である。一方、数値実験においては、個々のパラメータの値をコントロールすることは、極めて容易である。我々は、現段階での数値計算の精度はかなりのレベルに到達しており、幾つかの燃焼現象の本質を把握

してそれを数値計算によって再現出来るものと考えている。化学反応機構についても、正確なデータが蓄積され、かなり信頼できるレベルに到達しているものと考え[2]られ、従って、数値実験を活用して燃焼現象の物理や化学を理解することが出来るものと考えている。以下に、実際の物理実験に比べて数値実験が優れている点を例を挙げて説明したい。

### 2-1. 数値実験でのみ出来る研究

或る場合には数値実験は、物理実験では到底期待出来ないような重要な情報を与えてくれる。例えば、メタン空気の基本火炎における NO の生成機構の研究において、火炎の NO の最終的な生成量における 4 つの生成機構 (Thermal、Fenimore、NO<sub>2</sub>、N<sub>2</sub>O) のそれぞれの寄与を区別して求めることが出来た[3-5]。これにより希薄混合気では Thermal 機構が支配的であり、一方 Fenimore 機構の寄与は当量比とともに増加して、1.2 を超えると、Thermal の寄与を超えて支配的な機構になることが分かる。一方拡散火炎についても同様な図な検討を行うことによって、流れの時間が極めて遅い場合を除くと Fenimore 機構が支配的となっていることが明らかにされている。さらに、我々は NO の生成過程における個々の素反応の役割を理解する手段として定量的反応経路図を提案した[5].

以上のように、数値実験では計算データを駆使していろんな解析が可能である。上の例では、最終的な NO の生成を支配している素反応の同定や[6]、さらにこれらの素反応の各火炎におけるふるまいを調べて火炎による排出特性の違いの理由を調べることも出来る[7]。このような解析は数値実験だからこそ出来る解析であり、他の手段では到底不可能な解析である。次の例は、燃料噴流拡散火炎の遷移、消炎と乱流火炎構造に関する、簡単な一段の総括反応に基づく数値解析である[8,9].

平行な空気流中への燃料を噴出させて出来る燃料噴流拡散火炎においては、噴出速度が小さいときには、流れも火炎も層流でかつ定常である。噴出速度を増加させると、火炎の下流先端付近に遷移点が現われ、その点より下流においては流れも火炎も乱流となる。噴出速度の増加とともに、遷移点は上流に移動して、その点より上流では定常な層流火炎、その点より下流では時間変動を伴った乱流火炎という特徴的な火炎形状が観察される[10,11]。やがて遷移点が噴射管出口から直径の2、3倍下流位置に到達すると、それ以上の速度増加に対しては遷移点位置は動かなくなり、完全に発達した乱流拡散火炎が形成される。さらに速度を増加させると遷移点で火炎の発光が薄れるとともに不安定になり、或る臨界速度で小さな破裂音を発しながら局所的かつ瞬間的な消炎が生じて、火炎表面に穴があき始める。この穴は時間的に変動し、軸対象火炎の円周上を不規則に移動する。速度の増加とともにこの穴が大きくなり、次の臨界速度で遂には遷移点で火炎が完全に消炎する。火炎は噴射管出口の小さな層流火炎のみを残して、下流に流される。噴射管から噴出された燃料の大部分は、未燃の噴流となって周囲の空気を吸引しながら下流に流れ、時間的に絶えず移動する不安定な浮き上がり火炎となって燃焼する。以上の実験観察[12-14]における局所的な消炎の機構と浮き上がり火炎の燃焼機構についての数値解析を以下に簡単に紹介する[9]。

まず局所的消炎については、遷移点において火炎に垂直方向への分子拡散による熱や物質移動の速度が急激に増加して、有限の化学反応速度がそれにバランス出来なくなることによってもたらされるものと考えた[13,14]。このため、分子拡散による移動速度を代表する量としてSDR (Scalar Dissipation Rate) を導入し、この量の非定常変化と消炎との関係を調べた。その結果、局所的消炎の前の時刻において、反応帯が高いSDRの帯と接触

していることが明らかにされた。すなわち、これによって反応帯への燃料や酸素の供給速度が急激に増加し、有限の化学反応速度によってこの増加を消費出来なくなるとともに、反応帯からの熱伝道による熱損失が増加して温度が低下して消炎に至ることが分かる。さらに反応帯におけるSDRの時間変化を調べることによって、局所的消炎はSDRの値が或る臨界値を超えるときに生じていることが明らかにされている。

次に、浮き上がり火炎の瞬間的火炎構造について説明する。任意の瞬間における反応速度、温度、Mixedness、Flame Indexの空間分布を調べることによって化学反応は、噴射管出口すぐ下流の短い層流拡散火炎と下流の浮き上がり火炎内部で進行していることが分かる。このとき浮き上がり火炎内部においては、反応は一様に進行するのではなく、分散した細い帯状の反応領域内で集中して進行している。すなわち、未燃の燃料噴流への周囲空気の吸引は主として大きなスケールの渦運動で行われ、可燃混合気は渦の境界において帯状に形成されてそこで反応が進行する。このとき、個々の反応帯はその隣に分子拡散による帯状の拡散層を伴っており、火炎を形成している。この火炎の性質を調べるために、次の2つの物理量を導入した。(1) Mixednessは燃料と酸素の混合の程度を表わす量で、希薄混合気で負、過濃混合気で正になる量であり、その絶対値が大きい方が理論混合比に近くなる。次の(2) Flame Indexは燃料成分と酸素の濃度勾配のスカラー積で、拡散層におけるこの値が正であれば予混合火炎、負であれば拡散火炎を示すことになる。Flame Indexの空間分布から、浮き上がり火炎は、局所的な予混合火炎や拡散火炎さらには二重火炎の集合体であることが分かる。

以上の解析において、SDRやFlame Indexの分布は数値解析においてのみ求めることが可能であり、これによって現象についての我々の理解が容易に得られ

ることが分かる。

## 2-2. 関与する個々のパラメータの効果の分離

一般に燃焼における物理実験では、関与する多数のパラメータが複雑に相互に関係しており個々のパラメータの効果の分離して調べることが極めて難しい。例えば、全く同じ条件で燃料のみを変えた実験を行った場合、異なった結果が得られたときの解釈において、それが燃料の化学的性質の違いによるものか、或いは熱力学的性質の違いによるものか、さらには輸送係数などの物理的性質の違いによるものかを判定することは不可能である。この点においても、数値実験は極めて有利である。特定のパラメータのみを変えた実験が簡単に出来るからである。以下に燃料噴流拡散火炎の遷移機構の解明を目的とした実験の例を紹介する[8]。

## 2-3. より本質的な量のふるまい

普通の物理実験では、火炎中での温度や各成分の濃度を測定することを試みる。しかし場合によっては、もっと基本的な量、例えば個々の成分の生成速度の分布が必要になる。層流火炎の初期の研究において、火炎中で進行する化学反応についての情報を得るために、測定した温度や濃度分布から個々の成分の生成速度の分布を求めることがしばしば行われた[15]。この研究は火炎の構造解析と呼ばれたが、正確な生成速度分布を導くためには1階や2階の微係数を導く必要があり、基の濃度分布に高い精度が要求されるので、非常に困難な作業を伴うものであった。一方、数値実験では、任意の成分の生成速度の分布を知ることは極めて容易である。例として、メタン空気同軸流拡散火炎中でのNOの生成速度の分布がある[16]。この火炎の温度分布とNOの濃度分布とを比較することによって、NOの濃度はほぼ火炎位置で最大になっていることが分かる。また、NOの生成

速度の分布を調べることによって、NOはほぼ火炎面位置で生成され、しかも火炎面の空気側で正の生成帯があり、その内側の、燃料側に負の生成帯、すなわちNOを消費する領域が存在することが分かる。正の生成量は火炎面の流上流部で最大となっている。NOの生成を抑制する方法を工夫する立場からすると、濃度分布よりも生成速度の分布を知る方がより重要である。このように、数値実験では、より重要な物理量或いは化学量の分布を容易に調べることが出来る。

## 3. 数値計算の問題点

前述したように数値実験は燃焼科学にとって極めて有用な研究手段を与えてくれるものである。しかし数値実験を含めて数値計算には特に注意を払うべき幾つかの問題点があることも事実である。以下にこの問題点を指摘しておく。

### 3-1. 数値計算モデル

まず最も大事なことは、対象としている現象を再現するための数値計算モデルの作成である。仮定が少なくて詳細な計算を行うモデルが必ずしも良いという分けではない。現象の本質を捉えてそれが再現出来るモデルであれば、計算は簡単であればあるほど良いモデルとなる。このモデルの作成には、現象に対する深い洞察力が要求され、研究者としての資質が最も顕著に現われる作業となる。

### 3-2. 数値計算方法

数値計算が有用な情報を与えて暮れるためには、まず計算結果が十分な精度で正しく行われていることが前提である。ところが数値計算では、数値解法、境界条件、それに計算格子の組み合わせによっては、どんな望ましい解でも導くことが可能である。このため導いた解が本の方程式の真の解になっていることを慎重に確認する必要がある。

### 3-3. 計算結果の提示

まず計算によって得られた結果そのものはあまり意味がないことに注意しなければならない。計算で得られるのは、あくまで与えられた特別な条件の下での結果に過ぎず、他の人にとってはあまり役に立つ情報にはならない。それを何らかの普遍的な有益な情報とするには、データの解析が必要である。その意味では、物理実験も基本的には同じである。しかし多くの場合、物理実験においては、得られたデータの精度や量が十分でないために、この種の解析には絶えず困難がつきまとう。一方数値実験では、任意のデータ解析が意のままに出来る。問題は、普遍的な結論を導くためにどのような解析を行うかにあるが、これは研究者の資質に大きく依存する。

### 3-4. 研究者の資質

以上述べたように、数値実験においてはその成果が研究者の資質に大きく依存する。勿論、物理実験、或いは他のどんな科学的研究においても、研究者の資質は、その研究の成否を決める最も重要な因子である。しかし、特に数値実験においてその影響が強いように思われる。

## 4. 将来の問題

燃焼工学、燃焼科学いずれの立場から見ても、燃焼研究における数値計算にとって今後の最大の問題は乱流燃焼のモデリングである。これは、一方においては実用の燃焼器での燃焼が殆ど全て乱流燃焼によって行われていること、また他方では熱流体力学の基礎研究における乱流の重要性による。このため現時点でも、次から次へと新しいモデルが提案されており、それら全てを系統的に整理して評価することはそれほど容易ではない。また現象があまりにも複雑なことから、個々のモデルはいずれも乱流燃焼の一面のみを捉えたもので、全ての条件に対して適用出来るような普遍的なモデルは存在し

ない[17,18]。最近の傾向としては、予混合火炎と拡散火炎のいずれにおいても、化学反応が比較的狭い反応帯内部に集中して行われているとする Laminar Flamelet Model に関心が集まっている。いずれにしても正しいモデルの構築には、現象に対する深い洞察が要求されるが、このような難しい問題の解決には、何よりもまず現象の本質が理解することが必要である。そのためには、レーザ計測法を利用した物理実験、さらには新しい形の数値実験などによる総合的な研究が必要である。功名心に燃えた多くの若い人達に是非とも挑戦して貰いたいものと考えられる。

## 謝 辞

本論文の内容は、全て名古屋大学山下博史助教授と筑波大学西岡牧人助教授との共同研究の成果に基づくものである。ここに記して謝意を表したい。

## 参考文献

1. 竹野忠夫、燃焼研究における数値計算の意義、燃焼研究、印刷中。
2. GRIMECH 2.11 (Nov. 4, 1995), Internet.
3. Nishioka, M., Nakagawa, S., Ishikawa, Y. and Takeno, T., *Combust. Flame* **98**, 127-138 (1994).
4. Takeno, T., in *Transport Phenomena in Combustion* Vol. 1, (S. H. Chan, Ed.), Taylor & Francis, 1995, 101.
5. 西岡牧人、栗田 敦、近藤雪水、竹野忠夫；燃焼研究 104 (1995), 75-90.
6. 近藤雪水、西岡牧人、竹野忠夫；燃焼研究 106 (1996), 73-84.
7. Nishioka, M., Kondoh, Y. and Takeno, T.: *26th Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996, 2139.
8. Yamashita, H., Kushida, G. and Takeno,

- T., *Proc. R. Soc. London A* **431**: 301-314(1990).
9. Yamashita, H., Shimada, M. and Takeno, T.: *26th Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996, 27.
  10. Takeno, T., *25th Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1994, 1061.
  11. 竹野忠夫 ; 燃焼研究 98 (1994), 9-25.
  12. Takeno, T. and Kotani, Y.: *Combust. Sci. Tech.* **10** (1975), 45-57.
  13. Takeno, T. and Kotani, Y.: *Acta Astronautica* **2** (1975), 999-1008.
  14. 竹野忠夫、小谷良信 ; 燃焼研究 46 (1977), 15-35.
  15. Fristrom, R. M. and Westenberg, A. A., *Flame Structure*, McGraw-Hill, 1965, pp. 323-386.
  16. Nishioka, M., Y. Takemoto, H. Yamashita and Takeno, T.: *26th Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996, 1071.
  17. 竹野忠夫、乱流燃焼のモデリング、エネルギー新技術体系、日本伝熱学会編, エヌ、ティー. エス、1996, 87-90.
  18. Bray, K. N. C.: *The Challenge of Turbulent Combustion*, Plenary Lecture, *26th Symposium (International) on Combustion*, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996, 1.