

予混合火炎の壁面近傍挙動と表面反応 Near-Wall Behavior of Premixed Flames and Surface Reaction

- 生川 功祐, 東工大院, 東京都目黒区大岡山 2-12-2, E-mail: narukawa.k.aa@m.titech.ac.jp
 源 勇気, 東工大院, 東京都目黒区大岡山 2-12-2, E-mail: yminamot@navier.mes.titech.ac.jp
 志村 祐康, 東工大院, 東京都目黒区大岡山 2-12-2, E-mail: mshimura@navier.mes.titech.ac.jp
 店橋 護, 東工大院, 東京都目黒区大岡山 2-12-2, E-mail: mtanahas@mes.titech.ac.jp
 Kosuke Narukawa, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo
 Yuki Minamoto, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo
 Masayasu Shimura, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo
 Mamoru Tanahashi, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo

To investigate the near-wall flame behavior including effect of the radical quenching by surface reaction, two-dimensional direct numerical simulations (DNS) of methane/air, hydrogen/air and n-heptane/air premixed flames propagating and impinging on the wall surface are conducted under several thermochemical conditions. From the DNS results, the flame position and flame displacement speed are calculated, and it is clarified that the near-wall flame propagation has unique characteristics and following results are obtained: (i) The flame speed has a local minimum value near the wall; (ii) Under the conditions where the wall temperature equals to the initial unburnt gas temperature, this local minimum value corresponds to the laminar flame speed of the initial thermochemical condition; (iii) These characteristics are observed regardless of the ignition position, equivalence ratio, fuels and presence/absence of surface reaction.

1. 諸言

壁面近傍に存在する火炎は、熱損失や表面反応によるラジカルの消失の影響を受け、局所的な消炎が引き起こされることが知られている⁽¹⁾。これらの現象は壁面熱損失のみでなく未燃炭化水素の発生とも密接に関係しているため、壁面近傍における火炎の挙動を解明することは実用燃焼器の高効率・低環境負荷化において重要である。特に、火炎が壁面垂直方向に伝播し、壁面に衝突することで消炎に至る head on quenching (HOQ) と呼ばれる現象は、火炎と壁面の干渉に関する基礎的な現象の一つであるため、これまでも多くの研究がなされている。Owston ら⁽²⁾は壁面に衝突する水素・空気予混合火炎の 1 次元直接数値計算 (DNS) を様々な条件で実施し、温度で定義される火炎面位置とその移動速度を算出した。その結果、断熱壁と等温壁の両条件において壁面近傍において火炎面移動速度が増大すること、さらに火炎面移動速度の増大は断熱壁において特に大きく観察されることを明らかにした。都築ら⁽³⁾は定容容器内において壁面に衝突するメタン・空気予混合火炎の CH 自発光を計測し、火炎面位置と火炎面移動速度の時間変化を算出することで、火炎が壁面に衝突し消炎に至る直前において、火炎面移動速度が同じ熱化学的条件下における層流燃焼速度に近い値をとることを明らかにした。ただし、都築らの研究においては予混合気の燃料種、着火位置、壁面温度、及び壁面の材質などの影響は検討されておらず、上記の特徴をより詳細に調査するためにはこれらの影響を考慮する必要がある。特に壁面の材質の影響は壁面温度が高温であるほど大きくなり、消炎距離にも大きな影響を与えることが Miesse ら⁽⁴⁾によって実験的に解明されており、無視できない可能性がある。

そこで本研究では、壁面に衝突する予混合火炎の直接数値計算を複数の条件において実施し、表面反応によるラジカルの消失の影響を含む、壁面近傍における予混合火炎の伝播特性を解明することを目的とする。

2. 壁面に衝突する予混合火炎の DNS

本研究では詳細反応機構と簡略化反応機構、輸送係数・熱物性

値の温度依存性を考慮に入れた、壁面に対し垂直に伝播する予混合火炎の DNS を複数の条件において実施した。基礎方程式として、質量、運動量、エネルギーおよび化学種の保存方程式を、補助方程式として理想気体の状態方程式を用い、空間離散化には 4 次精度中心差分法を用いた。また、時間積分法については 3 次精度 Runge-Kutta 法を用いた。ただし、反応項については

Table 1. Summary of the 2D DNS conditions. The equivalence ratio ϕ , wall temperature T_{wall} , distance from the ignition position to the wall D_{wall} , computational domain $L_x \times L_y$, the number of grid points $N_x \times N_y$.

Fuel	Wall	ϕ	T_{wall} [K]	D_{wall} [mm]	$N_x \times N_y$ [mm]	$N_x \times N_y$		
CH ₄	Reactive	1.0	700	2.5	30×5	2070×396		
		0.6	700					
		0.8	700					
		1.0	700					
	Inert	1.0	300	2.0	30×4	2048×320		
			500	2.5	30×5	2048×384		
		0.6	700	3.0	30×6	2048×480		
			700	1.5	18×3	1410×768		
H ₂	1.0	0.8	700	1.5	18×3	1408×768		
		300	1.5				18×3	1408×768
		500	2.0				24×4	1728×1024
	0.6	700	2.5	30×5	2160×1280			
		700	2.0	8×4	864×540			
		700	2.0	8×4	864×540			

Table 2. Summary of the 1D DNS conditions. wall temperature T_{wall} . The computational domain L_x , number of grid points N_x .

Fuel	Wall	T_{wall}	L_x	N_x
CH ₄	Inert	500	6.0	540
		700		
	Reactive	900		

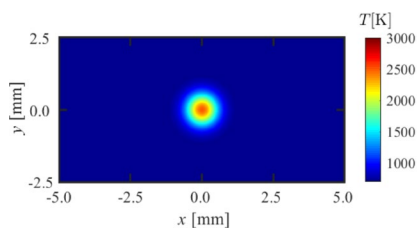


Fig. 1 Typical initial temperature distribution for 2D DNS.

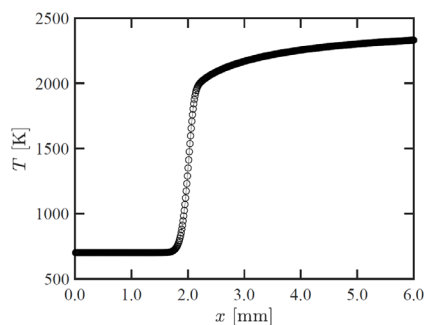


Fig. 2 Initial temperature distribution for 1D DNS.

multi-timescale (MTS) 法⁽⁵⁾ および correlated dynamic adaptive chemistry and transport (CODACT) 法⁽⁶⁾ を適用した。

2次元DNSの計算条件と初期温度分布をそれぞれ表1と図1に示す。計算対象は並行に配置された2つの壁面によって挟まれる矩形領域とし、初期条件として計算領域中心部に高温領域を設定することにより予混合気を着火させる。壁面と流出境界における境界条件はそれぞれ Navier-Stokes characteristic boundary conditions (NSCBC) による等温・すべりなし条件と非反射流出境界条件⁽⁷⁻⁸⁾ とした。各化学種の境界条件については、表面反応を考慮しない場合においては壁面上において化学的に不活性とし、化学種の拡散流速が0となるように各化学種の質量分率を与えた。また、表面反応を考慮する場合は Raimondeau ら⁽⁹⁾ によるメタン・空気予混合火炎の壁面上でのラジカルの消失に関する反応機構を用いて壁面上における各化学種の生成速度を算出することで、壁面垂直方向の各化学種の質量分率の勾配を求め、それを満たすように壁面上における値を与えた。本反応機構では、H, O, OH, CH₃ の4化学種の壁面への吸着、壁面上における安定化学種への再結合及び H₂, O₂, H₂O, CH₄, C₂H₆ の5化学種の壁面からの脱離反応を考慮しており、本研究においては衝突した化学種が壁面に吸着する確率を表す、初期吸着係数は0.1とした。2次元DNSは、水素、メタン、n-ヘプタンの3種類の燃料種に対して実施し、当量比については水素とメタンに対しては0.6, 0.8, 1.0の3通りの条件とし、n-ヘプタンに対しては1.0の1通りの条件のみとした。また、壁面温度については、水素とメタンに対しては300 K, 500 K, 700 Kの3通りの条件とし、n-ヘプタンに対しては700 Kの1通りの条件のみとした。着火位置から壁面までの距離については、水素に対しては1.5 mm, 2.0 mm, 2.5 mm, メタンに対しては2.0 mm, 2.5 mm, 3.0 mmの3通りの条件とし、n-ヘプタンに対しては2.0 mmの1通りの条件のみとした。ただし、これらすべての条件において着火位置は計算領域の中心部としているため、着火位置と壁面間の距離の差異は計算領域のサイズを変更することで決定した。全ての条件において未燃予混合気温度、初期圧力はそれぞれ700 K, 0.1 MPaとした。化学反応機構には水素に対しては9化学種19素反応⁽¹⁰⁾、メタンに対しては53化学種325素反応⁽¹¹⁾の詳細化学反応機構を用い、n-ヘプタンに対しては68化学種283素反応⁽¹²⁾の簡略化反応機構を用いた。

1次元DNSの計算条件と初期温度分布をそれぞれ表2と図2に

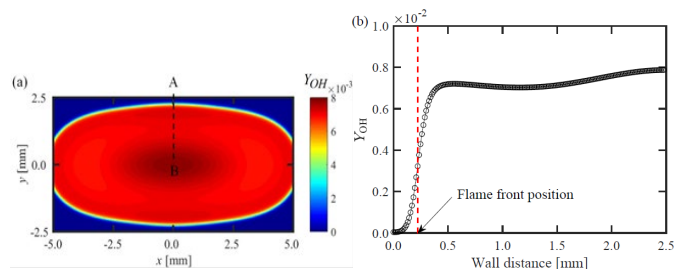


Fig. 3 Flame front position defined by Y_{OH} gradient. (a) Instantaneous field of Y_{OH} distribution (methane case), (b) Y_{OH} distribution in A-B cross section.

示す。計算対象は片側のみに壁面を配置した1次元領域とした。初期条件としては、図2に示すように同一の熱化学的条件下における1次元層流火炎の計算結果を壁面から2 mm 離れた位置に与え、火炎が壁面に衝突するまで計算を行う。壁面と流出境界における境界条件はそれぞれ2次元DNSと同様の手法を用いて与えた。1次元DNSにおいては、燃料種は Raimondeau ら⁽⁹⁾ による反応機構を用いて表面反応によるラジカルの消失の影響を考察できるメタンのみとし、壁面温度は500 K, 700 K, 900 Kの3通りの条件、また壁面の化学的境界条件は表面反応を考慮する条件とこれを考慮しない不活性壁面の2通りとした。また全条件において当量比、未燃予混合気温度、初期圧力はそれぞれ1.0, 700 K, 0.1 MPaとした。

3. 2次元DNS結果

3.1 壁面温度、着火位置、当量比及び燃料種の影響

本研究では予混合火炎の壁面近傍挙動を調査するため、都築ら⁽²⁾の実験と同様に壁面に対して垂直に伝播する火炎面の移動速度を算出した。図3に典型的な2次元DNSの結果と火炎面位置の定義を示す。図3(a)はある瞬時におけるOHラジカルの質量分率の分布を示し、図3(b)は図3(a)に示される計算領域の中央断面A-B上におけるOHラジカルの質量分率の分布を示している。本研究では、図3(b)に示されるように計算領域の中央断面A-B上においてOHラジカルの質量分率の勾配が最大値をとる位置を火炎面位置とし、火炎面移動速度はその位置の時間変化から算出した。なお、火炎面位置と火炎面移動速度については、CHラジカルや温度を用いて定義した場合についても算出したが、火炎面の壁面近傍における挙動は定性的に同じ結果となることが確認されている。

図4にメタン・空気予混合火炎と水素・空気予混合火炎における火炎面位置と火炎面移動速度の関係を壁面温度の異なる条件について示す。着火位置から壁面までの距離 D_{wall} は水素・空気予混合火炎では1.5 mm、メタン・空気予混合火炎では2.5 mmとし、当量比は全条件で1.0としている。火炎面移動速度 u_f は層流燃焼速度 S_L で正規化され、層流燃焼速度 S_L は対応する熱化学的条件下における1次元層流自由伝播火炎のDNSから算出されている。また、図中の赤の点線は $u_f/S_L = 1$ 、つまり火炎面移動速度が同じ熱化学的条件下における層流燃焼速度と一致するラインを示す。図4から、火炎面移動速度は着火した直後急激に低下し、その後はほぼ一定の加速度で減速することが分かる。さらに、Owston ら⁽¹⁾による水素・空気予混合火炎の1次元DNSにおいても確認されているように、壁面の極近傍で増大した後消炎に至る。これらの傾向はメタン・空気予混合火炎と水素・空気予混合火炎の両者において、全ての壁面温度に対して同様に観察されている。しかし、壁面近傍において火炎面移動速度がとる極小値、極大値は壁面温

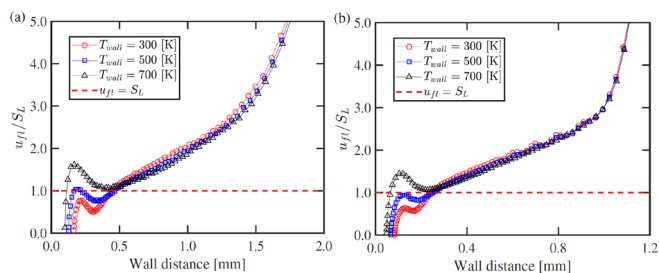


Fig. 4 Flame speed under different wall temperatures, (a) Methane cases ($D_{\text{wall}} = 1.5$ [mm], $\phi = 1.0$), (b) Hydrogen cases ($D_{\text{wall}} = 2.5$ [mm], $\phi = 1.0$).

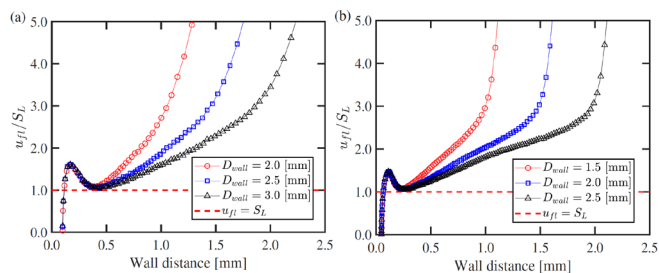


Fig. 5 Flame speed under different ignition positions ($T_{\text{wall}} = 700$ [K], $\phi = 1.0$), (a) Methane cases, (b) Hydrogen cases.

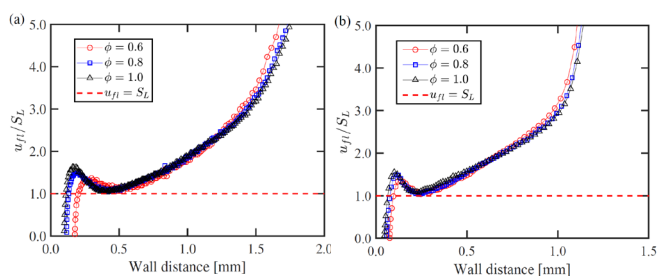


Fig. 6 Flame speed under different equivalent ratios, (a) Methane cases ($T_{\text{wall}} = 700$ [K], $D_{\text{wall}} = 2.5$ [mm]), (b) Hydrogen cases ($T_{\text{wall}} = 700$ [K], $D_{\text{wall}} = 2.0$ [mm]).

度によって異なり、壁面温度が低くなるにつれて小さな値をとる傾向にある。さらに、壁面温度が未燃予混合気温度と一致する場合には、この極小値は同一の熱化学的条件下における層流燃焼速度と非常に近い値をとっている。以下の内容では壁面温度と未燃予混合気温度が 700 K で一致する場合についてのみ説明する。

図 5 にメタン・空気予混合気炎と水素・空気予混合気炎における火炎面位置と火炎面移動速度の関係を着火位置の異なる条件について示す。ここでは、全条件において当量比は 1.0 としている。図 5 から、火炎面移動速度は着火位置によって大きく異なるが、壁面に接近するにつれてその差異は小さくなり、極小値をとる位置、大きさは着火位置によらず同一の値となることが分かる。この極小値は層流燃焼速度と近い値をとっており、図 4 において観察された火炎面移動速度と層流燃焼速度の関係性は着火位置とは無関係に成立している。さらに、火炎面移動速度が極小値をとり、消炎に至るまでの挙動についても着火位置によらず同じ挙動を示している。

図 6 にメタン・空気予混合気炎と水素・空気予混合気炎における火炎面位置と火炎面移動速度の関係を当量比の異なる条件について示す。着火位置から壁面までの距離 D_{wall} は水素・空気予混合気炎では 1.5 mm、メタン・空気予混合気炎では 2.5 mm とし、当量比は全条件で 1.0 としている。また図 6 から、当量比が 1.0 に近

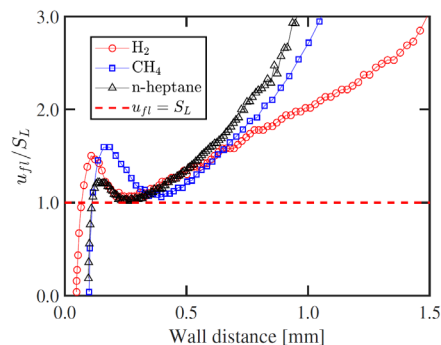


Fig. 7 Flame speed under each fuel type ($D_{\text{wall}} = 2.0$ [mm], $T_{\text{wall}} = 700$ [K], $\phi = 1.0$).

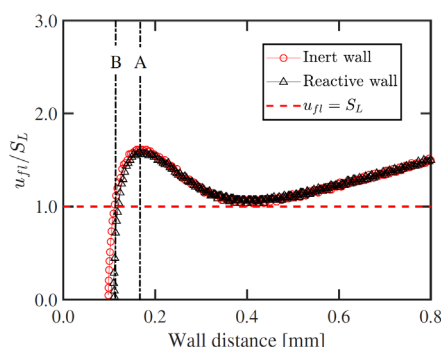


Fig. 8 Flame speed of methane/air premixed flame ($D_{\text{wall}} = 2.0$ [mm], $T_{\text{wall}} = 700$ [K], $\phi = 1.0$).

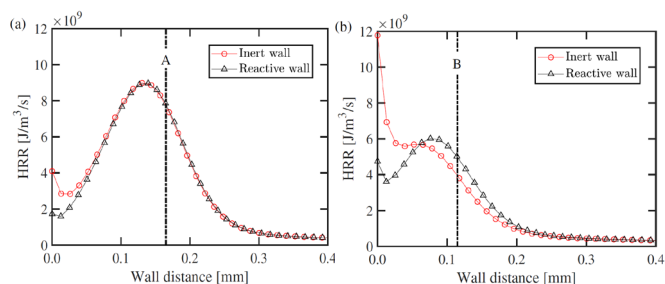


Fig. 9 Instantaneous distribution of near-wall heat release rate (HRR) of methane/air premixed flame under different wall chemical conditions ($D_{\text{wall}} = 2.5$ [mm], $T_{\text{wall}} = 700$ [K], $\phi = 1.0$) (a) when the flame front is located at approximately A where the flame speed takes a local peak value, (b) when the flame front is located at approximately B where the flame speed almost corresponds to S_L after the peak (A and B correspond to those in Fig. 8, respectively).

づくにつれて、この火炎面移動速度の増大も大きくなっていることがわかる。しかし、極小値についてはいずれの当量比においても、同一の熱化学的条件下における層流燃焼速度と近い値をとっている。

図 7 に火炎面位置と火炎面移動速度の関係を燃料種の異なる条件について示す。全条件において、着火位置から壁面までの距離 D_{wall} は 2.0 mm とし、当量比は 1.0 とした。火炎面移動速度が壁面近傍でとる極大値や、極小値をとる位置は燃料種によって異なるが、いずれの条件においても、極小値は層流燃焼速度と近い値をとっており、前述した火炎面移動速度と層流燃焼速度の関係性は燃料種に対しても無関係に成立すると考えられる。

3. 2 表面反応によるラジカルの消失の影響

図 8 にメタン・空気予混合気炎における火炎面位置と火炎面移

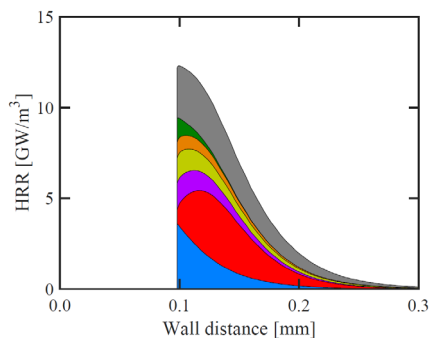


Fig. 10 Relationship between flame position and contribution of elementary reactions to heat release rate on the wall under inert wall condition (R43: $H + OH + M \rightleftharpoons H_2O + M$, R45: $H + HO_2 \rightleftharpoons O_2 + H_2$, R36: $H + O_2 + N_2 \rightleftharpoons HO_2 + N_2$, R46: $H + HO_2 \rightleftharpoons 2OH$, R52: $H + CH_3 (+ M) \rightleftharpoons CH_4 (+ M)$, R35: $H + O_2 + H_2O \rightleftharpoons HO_2 + H_2O$).

動速度の関係を、壁面での化学的境界条件の異なる場合について示す。図 8 から、表面反応による壁面でのラジカルの消失を考慮した壁面の条件ではこれを考慮しない場合と比較して消炎距離がわずかに大きくなり、壁面の極近傍においては火炎面移動速度が小さくなっていることが観察される。ただし、その差異は非常に小さく、図 4~7 において観察される火炎面移動速度と層流燃焼速度の関係性には影響を与えないことがわかる。一方で、表面反応によるラジカルの消失は壁面近傍における熱発生率や、熱発生に寄与する素反応の反応速度に大きな影響を与えることが知られている^(1,2,13)。そこで、本研究においても壁面近傍における熱発生率を算出し、火炎面位置、火炎面移動速度との対応関係を調査した。図 9 に図 3 (a) で示される A-B 断面上で、壁面近傍における熱発生率の瞬時場を示す。図 9 (a) は火炎面移動速度が極大値をとるとき、つまり火炎面がおおよそ図 8 に示す位置 A に存在するときの熱発生率の瞬時場、図 9 (b) は火炎面移動速度が極大値をとった後、減衰し層流燃焼速度とほぼ等しい値をとるとき、つまり火炎面がおおよそ図 8 に示す位置 B に存在するときの熱発生率の瞬時場を示している。

図 9 から、本研究の条件においては、表面反応を考慮しない壁面の場合にはこれを考慮する壁面の結果と比較して、壁面近傍における熱発生率が約 2 倍程度大きいことがわかる。火炎面移動速度が極大値をとる瞬時においては熱発生率の差異は壁面の極近傍においてのみ観察されるが、その後、火炎面移動速度が減衰し層流燃焼速度と等しい値をとる瞬時においては、表面反応を考慮しない場合における壁面近傍の熱発生率が火炎面位置における熱発生率を上回るほど大きくなり、表面反応を考慮する場合における熱発生率分布と大きく異なる。以上から、表面反応が火炎の伝播特性に対し強く影響するのは火炎面移動速度が極大値をとった後、減衰する過程であることがわかる。なお、壁面近傍における熱発生率の増大は低活性化エネルギーのラジカル再結合反応によるものであり、表面反応が発生する場合においてはラジカルが壁面に吸着し、再結合、脱離することで、このラジカル再結合反応を抑制するため、表面反応が発生しない場合と比較して壁面近傍の熱発生率は小さくなる⁽¹³⁾。Popp⁽¹³⁾による過去の研究から明らかになっている。図 10 に表面反応を考慮しない場合における火炎面位置と壁面上での熱発生率に対する素反応の寄与の関係を示す。火炎面が壁面に接近するとき、はじめに壁面上での熱発生率に対し大きな寄与を示すのは R52: $H + CH_3 (+ M) \rightleftharpoons CH_4 (+ M)$ であるが、火炎面が壁面に非常に近い領域に達するとその寄与は

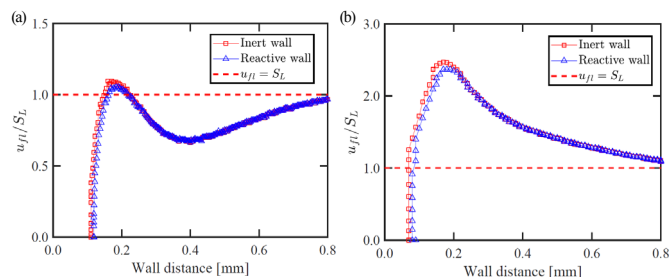


Fig. 11 Flame speed of methane/air premixed flame, (a) $T_{wall} = 500$ K, (b) $T_{wall} = 900$ K.

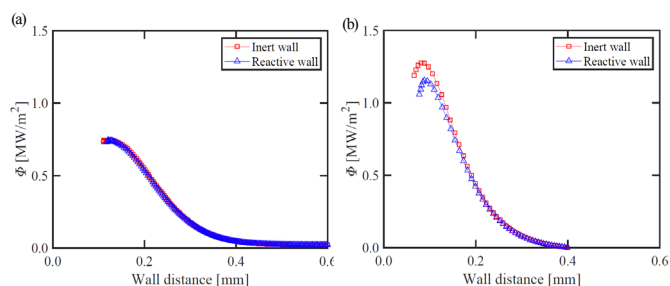


Fig. 12 Wall heat flux of methane/air premixed flame, (a) $T_{wall} = 500$ K, (b) $T_{wall} = 900$ K.

徐々に小さくなり、火炎面が壁面に最も接近するとき、つまり火炎面移動速度が 0 となると、R35: $H + O_2 + H_2O \rightleftharpoons HO_2 + H_2O$ の寄与が最大となる。また、壁面上での熱発生率に対し大きな寄与を示す素反応は図 10 に示されるように、すべて水素原子が関与する反応となっている。このことから、本研究で用いた表面反応の反応機構において、吸着化学種は H, O, OH, CH₃ の 4 化学種であるが、図 9 に示されるようなラジカルの消失を考慮した壁面の場合における壁面近傍の熱発生率の抑制は水素原子の吸着による効果が大いと考えられる。

4. 1 次元 DNS 結果

表面反応によるラジカルの消失が壁面に衝突する予混合火炎の伝播特性に与える影響をより詳細に調査するために、予熱温度と異なる温度の等温壁面に衝突するケースについて、表面反応を考慮する場合としない場合の 2 条件においてメタン・空気予混合火炎の 1 次元 DNS を実施した。1 次元 DNS における、火炎面位置と火炎面移動速度の定義は 2 次元 DNS と同様とした。

図 11 にメタン・空気予混合火炎における火炎面位置と火炎面移動速度の関係を壁面における化学的境界条件の異なる場合について示す。壁面温度は、図 11 (a) においては 500 K、図 11 (b) においては 900 K とした。図 11 を見ると、どちらの壁面温度においても火炎の伝播特性に対する表面反応の影響が観察されるのは火炎面移動速度が極大値をとった後、壁面に衝突するまでの過程であり、これは図 8 で観察された傾向と同様である。

一方、1 次元 DNS を用いた以前の研究においては表面反応によるラジカルの消失によって壁面熱流束がわずかに減少すること^(13,14)、また、この傾向は壁面温度が高いほど大きくなること⁽¹³⁾が明らかにされている。そこで本研究においては、その壁面熱流束の差異と火炎面位置及び火炎面移動速度との関係性を調査した。図 12 にメタン・空気予混合火炎における火炎面位置と壁面熱流束の関係を壁面における化学的境界条件の異なる場合について示す。図 12 をみると、壁面温度を 500 K とした場合は火炎が壁面に衝突するまでの過程では壁面熱流束の差異は観察されないが、壁面温度を 900 K とした場合は 10% 程度の壁面熱流束の差異が観察されることが分かる。壁面温度が高いほど表面反応が壁面熱流束に

与える影響が大きいという傾向は Popp ら⁽¹³⁾による過去の研究と同様である。また、壁面熱流束の差異が観察されるのは火炎面が壁面から 0.2 mm 以内の位置に存在する領域であり、これは、図 11 と比較すると火炎面移動速度の差異が観察される領域と比べて、より壁面近傍の領域であることが分かる。

5. 結論

本研究では予混合火炎と壁面の干渉に関する DNS を複数の条件で実施し、壁面近傍における予混合火炎の伝播特性を調査することで以下の結論を得た。

- 火炎面移動速度は壁面近傍で増大し、この過程で観察される極小値は、壁面温度と未燃予混合気温度が一致する場合においてのみ、同一の熱化学的条件下における層流燃焼速度と近い値をとる。
- 上記の特徴は、着火位置、燃料種、当量比、表面反応によるラジカルの消失の有無によらず観察される。
- 本研究の条件において、壁面上でラジカルの吸着反応が生じる場合、壁面に衝突するメタン・空気予混合火炎は主に水素原子の吸着によって壁面近傍の熱発生が抑制される。また壁面温度によっては壁面熱流束に対しても影響を与えるが、火炎の壁面近傍挙動に与える影響は小さい。

参考文献

- (1) Saiki, Y., Fan, Y., and Suzuki, Y., "Radical quenching of metal wall surface in a methane-air premixed flame", *Combustion and Flame*, 162 (10) (2015), pp. 4036-4045.
- (2) Owston, R., Magi, V., and Abraham, J., "Interactions of hydrogen flames with walls: Influence of wall temperature, pressure, equivalence ratio, and diluents", *International Journal of Hydrogen Energy*, 32 (12) (2007), pp. 2094-2104.
- (3) 都築, 瀬尾, 店橋, 宮内, "定容容器内におけるメタン・空気予混合火炎の伝播特性", *熱工学コンファレンス講演論文集*, 09-33 (2009), pp. 7-8.
- (4) Miesse, C. M., Masel, R. I., Jensen, C. D., Shannon, M. A., and Short, M., "Submillimeter-scale combustion", *AIChE Journal*, 50 (12), (2004), pp. 3206-3214.
- (5) Gou, X., Sun, W., Chen, Z., and Ju, Y., "A dynamic multi-timescale method for combustion modeling with detailed and reduced chemical kinetic mechanisms", *Combustion and Flame*, 157 (6) (2010), pp. 1111-1121.
- (6) Sun, W., Gou, X., El-Asrag, H. A., Chen, Z., and Ju, Y., "Multi-timescale and correlated dynamic adaptive chemistry modeling of ignition and flame propagation using a real jet fuel surrogate model", *Combustion and Flame*, 162 (4) (2015), pp. 1530-1539.
- (7) Poinso, T. J. A., and Lelef, S. K., "Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows", *Journal of computational physics*, 101 (1) (1992), pp. 104-129.
- (8) Baum, M., Poinso, T. J., Thevenin, D., "Accurate boundary conditions for multicomponent reactive flows", *Journal of Computational Physics*, 116 (1994), pp. 247-261.
- (9) Raimondeau, S., Norton, D., Vlachos, D. G., and Masel, R. I. "Modeling of high-temperature microburners", *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 (1) (2002), pp. 901-907.
- (10) Li, J., Zhao, Z., Kazakov, A., and Dryer, F. L., "An updated comprehensive kinetic model of hydrogen combustion", *International Journal of Chemical Kinetics*, 36 (10) (2004), pp. 566-575.

- (11) Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, T., Hanson, R. K., Song, S., Gardiner, Jr., W. C., Lissianski, V.V., and Qin, Z. (http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)
- (12) Lu, T., Law, C. K., Yoo, C. S., and Chen, J. H., "Dynamic Stiffness Removal for Direct Numerical Simulations", *Combustion and Flame*, 156 (8) (2009), pp. 1542-1551.
- (13) Popp, P., Smooke, M., and Baum, M., "Heterogeneous/homogeneous reaction and transport coupling during flame-wall interaction", *Symposium (International) on Combustion*, 26 (2) (1996), pp. 2693-2700.
- (14) Owston, R., Magi, V., and Abraham, J., "A numerical study of thermal and chemical effects in interactions of n-heptane flames with a single surface", *Combustion and Flame*, 148 (3) (2007), pp. 127-147.