速度・成分結合 PDF 法による乱流非予混合燃焼の数値解析

A numerical analysis of non-premixed combustion by a velocity-composition joint PDF approach

中嶋圭司 (豊橋技科大院), 名田譲 (豊橋技科大), 野田進 (豊橋技科大)

Keiji NAKASHIMA, Yuzuru NADA and Susumu NODA

Department of Mechanical Engineering, Toyohashi University of Technology, Tempaku-cho, Toyohashi 441-8580, JAPAN

Key Words: PDF method, Monte Carlo solution, Turbulent modeling, Non-premixed combustion, Mixing layer

1. 緒論

乱流非予混合燃焼のモデル解析手法にモーメント法と確率密度関数(PDF)法がある。モーメント法は、速度や成分に対してそれぞれ平均化した保存式を解く方法であり、現在、実用規模の燃焼解析に最も広く用いられている。この場合、レイノルズ応力や乱流スカラー流束の乱れ変動に起因する相関項をモデル化する必要がある。

一方、PDF 法は PDF 輸送方程式を解き、平均量を期待値として求める方法である。PDF 法は一点一時刻 PDF を扱うため、スケール情報を持たず、拡散項をモデル化する必要がある。しかしながら、速度と成分をまとめて扱える上、化学反応項や対流輸送項を厳密に扱うことができるため⁽¹⁾、速度と成分が不規則に変動する乱流燃焼解析に有効であると言える。

そこで本研究は、反応性混合層に対する速度・成分結合 PDF 法の応用を目的とし、PDF とともに乱流スケール情報を計算の中で得る手法を提案する。本手法を非燃焼場および燃焼場に適用し、混合層への燃焼反応による影響を調べた。

2. 解析方法

2-1 密度加重平均

密度の急激な変化を伴う乱流燃焼場においては、一般に密度加重平均 $\bar{Q} = \langle \rho Q \rangle / \langle \rho \rangle$ が用いられる。ここで $\langle \rangle$ はアンサンブル平均である。PDF 法では、密度加重速度・成分結合 PDF $\tilde{f}$ から期待値として、密度加重平均値 $\bar{Q}$ を求める。

$$\bar{Q}(x, t) = \iint Q(\mathbf{v}, \Psi) \tilde{f}(\mathbf{v}, \Psi) d\mathbf{v} d\Psi \quad (1)$$

密度加重 PDF の定義、 $\tilde{f} = \rho f / \langle \rho \rangle$ より平均密度は

$$\langle \rho(x, t) \rangle = \left[\iint \frac{1}{\rho(\Psi)} \tilde{f}(\mathbf{v}, \Psi) \rho d\mathbf{v} d\Psi \right]^{-1} \quad (2)$$

となる。以下、密度加重速度・成分結合 PDF を単に PDF と呼ぶ。

2-2 速度・成分結合 PDF 法

PDF 輸送方程式は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{f}}{\partial t} + V_i \frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{f}}{\partial x_i} \\ = - \frac{\partial}{\partial V_i} \left[\left\langle \frac{DU_i}{Dt} \right|_{\mathbf{v}=\mathbf{V}} \right] \langle \rho \rangle \tilde{f} - \frac{\partial}{\partial \Psi} \left[\left\langle \frac{D\Psi}{Dt} \right|_{\Psi=\Psi} \right] \langle \rho \rangle \tilde{f} \end{aligned} \quad (3)$$

左辺第一項は非定常項、第二項は対流項である。右辺第一項は速度空間における輸送、第二項は成分空間における輸送を表す。ここで $\langle A|B \rangle$ は条件付き期待値である。

PDF は点密度関数の期待値として求められるため、計算には、確率粒子を用いて点密度関数を表現するモンテカルロ法が使用される⁽²⁾。モンテカルロ法は計算領域に配置した確率粒子に特性量を与え、その挙動を解析する手法であり、粒子の集合から各格子の PDF が求められる。確率粒子の輸送方

程式は点密度関数輸送方程式と等価である次のラグランジュ方程式で表される。

$$\begin{aligned} dx_i^* &= U_i^* dt, \\ dU_i^* &= \left(\frac{DU_i}{Dt} \right)_{\mathbf{v}=\mathbf{V}} dt, \quad d\Psi^* = \left(\frac{D\Psi}{Dt} \right)_{\Psi=\Psi} dt \end{aligned} \quad (4)$$

上式のうち速度、成分の輸送は位相空間において拡散過程として表され、確率モデルが適用される。以下に本解析で利用したモデルを示す。

2-3 速度モデル

速度モデルは単純化 Langevin モデル⁽²⁾を用いた。

$$\begin{aligned} dU_i^* &= - \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_i} dt - \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} C_0 \right) \frac{\varepsilon}{k} (U_i^* - \tilde{U}_i) dt \\ &\quad + \sqrt{C_0 \varepsilon} dW_i \end{aligned} \quad (5)$$

ここで右辺第一項は平均圧力勾配項である。第二項は変動圧力勾配項であり、レイノルズ応力モデル式における圧力-歪相関テンソルに対する Rotta モデルを再現する⁽³⁾。第三項は粘性に基づく拡散項であり、 dW_i は等方的 Wiener 過程である。 C_0 は 2.1 を使用した。本解析では、スケール情報である乱流運動エネルギーの消散率 ε をモーメント式から与えた。

2-4 分子混合モデル

本研究では高速反応を仮定できる酸水素反応を扱うため、反応モデルにはコンサーブド・スカラー・アプローチを適用した。そのため成分空間における輸送は、混合分率 ζ の分子混合過程により行われる。ここで、混合分率 ζ は確率変数であり、本研究では窒素質量分率 Y_{N_2} に基づき、以下のように定義した。

$$\zeta = (Y_{N_2} - Y_{N_2, O}) / (Y_{N_2, F} - Y_{N_2, O}) \quad (6)$$

本計算では消散速度が粒子の値と平均値との差に比例する、IEM モデル⁽⁴⁾を用いた。

$$d\zeta^* = - \frac{1}{2} C_\psi \frac{\varepsilon}{k} (\zeta^* - \tilde{\zeta}) dt \quad (7)$$

ここで、 $C_\psi = 2.0$ である。

以上の輸送方程式により輸送された粒子の特性に基づき、格子のアンサンブル平均から平均量を求めた。また、得られた平均値に対し、三次スプライン関数による平滑化⁽¹⁾を行った。

なお、乱流スケール情報である乱流運動エネルギーの消散率 ε は次式から与えた。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \rho \rangle \tilde{U}_k \varepsilon}{\partial x_k} &= - C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \langle \rho \rangle \tilde{u}_i^* \tilde{u}_k^* \frac{\partial \tilde{U}_i}{\partial x_k} - C_{\varepsilon 2} \langle \rho \rangle \frac{\varepsilon^2}{k} \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \mu_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_k} + C_\varepsilon \frac{k}{\varepsilon} \langle \rho \rangle \tilde{u}_i^* \tilde{u}_j^* \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right\} \end{aligned} \quad (8)$$

ここで、モデル定数はそれぞれ $C_{\varepsilon 1} = 1.44$, $C_{\varepsilon 2} = 1.92$, $C_\varepsilon = 0.15$ とした。

3. 解析対象および解析条件

解析対象は二次元反応性混合層とする。燃料と酸化剤を非予混合の状態で流し、非燃焼場および燃焼場の解析を行った。計算領域は $X \times Y = 500[\text{mm}] \times 100[\text{mm}]$ とする。計算は定常問題として扱い、marching step 法⁽¹⁾により解析した。

Fig.1 Two-dimensional mixing layer

速度場は、文献⁽⁵⁾を参考に初期条件を誤差関数により与えた。燃料側の流速を $U_f = 20.0[\text{m/s}]$ 、酸化剤側の流速を $U_a = 10.0[\text{m/s}]$ とした。混合層厚さ δ を最大速度差 $\Delta U = U_f - U_a$ から、 $\delta(x) = y_{0.9}(x) - y_{0.1}(x)$ と定義した。ここで、 $y_{0.9}(x)$ 、 $y_{0.1}(x)$ はそれぞれ $U_{0.1} = U_a + 0.1 \Delta U$ 、 $U_{0.9} = U_a + 0.9 \Delta U$ となる位置である。初期混合層厚さは $\delta_0 = 2.5[\text{mm}]$ とした。

確率粒子は各格子の中心に 100 個ずつ配置した。燃料として体積比 1 : 1 の水素・窒素混合燃料を使用し、酸化剤として空気を用いた。量論混合分率 ζ_{st} は 0.303 である。コンサーブド・スカラー・アプローチに基づく解析では、反応速度無限大、一段不可逆反応を仮定したときに形成される火炎構造図を用いた。

4. 結果・考察

本手法を用いて二次元混合層の非燃焼場および燃焼場の解析を行い、次の結果を得た。

Fig.2 Lateral profiles of the mean mixture fraction; a) Cold, b) Combustion

Fig.3 Growth of the mixing layer thickness

図2より平均混合分率分布は非燃焼場および燃焼場ともに下流に行くほど勾配が緩やかになり、混合層厚さ δ が増加し

ていくことがわかる (図3)。また、燃焼場では非燃焼場に比べ、混合層の拡大が抑えられていることがわかる。

図4から燃焼場では、燃料と酸化剤の混合が最も進む混合層の中心付近で反応が起こり、温度上昇に伴う膨張によって密度が小さくなっている。PDF 法では、平均圧力を Poisson 方程式から与えることで連続の式を満足し⁽¹⁾、密度変化を考慮している。

一方、各断面における乱流スカラー流束 (図5) について非燃焼場に比べ、燃焼場では値が明らかに小さくなっていることがわかる。これは燃焼反応によって乱れの生成が抑制されたことを示す。本解析では、Poisson 方程式から求められる平均圧力勾配が反応に伴う密度の減少により、非燃焼場に比べ緩やかになる。Langevin モデルにおいて、反応の効果は平均圧力勾配項に現れるため、平均圧力勾配の減少によって確率粒子の速度変化が小さくなり、乱れの生成が抑えられたと考えられる。

以上のことから、燃焼反応による密度変化は乱れの生成を抑制し、混合層の拡大を抑える効果を持つと言える。

Fig.4 Lateral profiles of mean density (left) and mean temperature (right) in the reactive mixing layer

Fig.5 Lateral profiles of scaled scalar flux, $u_y^* = u / 7 \Delta U$; a) Cold, b) Combustion.

文献

1. S.B.Pope (1985). PDF methods for turbulent reactive flows, *Prog. Energy Combust. Sci.* 11, 119-192.
2. Haworth, D.C. and S.B.Pope (1987). Monte Carlo Solutions of a Joint PDF Equation for Turbulent Flows in General Orthogonal Coordinates, *J. Comput. Phys.* 72, 311-346.
3. S.B.Pope (2000). *Turbulent Flows*. Cambridge University Press.
4. C. Dopazo (1979). Relaxation of initial probability density functions in the turbulent convection of scalar fields, *Phys. Fluids* 22, 20-30.
5. Rogers, M.M. and R.D.Moser (1994). Direct simulation of a self-similar turbulent mixing layer, *Phys. Fluids* 6, 903-923.
6. Champagne, F.H., Y.H.Pao, and I.J.Wygnanski (1976). On the two-dimensional mixing region, *J. Fluid Mech.* 74, 209-250.