ハイブリッド PDF 法による乱流噴流拡散火炎の 数値シミュレーション*

野田 進^{*1}, 井之上 隆之^{*2}, 小沼 義昭^{*1}

Numerical Simulation of a Turbulent Jet Diffusion Flame by a Hybrid PDF Method

Susumu NODA^{*3}, Takayuki INOUE and Yoshiaki ONUMA

^{*3} Toyohashi University of Technology, Dept. of Mechanical Engineering,
Tempaku, Toyohashi, Aichi, 441-8580 Japan

A hybrid probability density function (PDF) method has been developed so as to analyze turbulent diffusion flames, devoting to only PDF's of the mixture fraction, based on the conserved scalar approach. To evaluate the potentiality of the method, a turbulent jet diffusion flame has been calculated by this method and also the presumed PDF method called the flamelet model to compare those results with experimental results. The hybrid PDF method is able to evaluate the process of inhomogeneous turbulent mixing, while the flamelet model overestimates the scalar turbulent mixing, as the presumed PDF assumption ignoring the inhomogeneous mixing. The accuracy of the estimation of the flow field is crucial for the hybrid PDF method, whereas the underestimation of the turbulent kinetic energy by the $k-\epsilon$ 2 equation model used in the present study leads to the underestimation of the scalar turbulent mixing.

Key Words: Turbulent Diffusion Combustion, Modeling, Probability Density Function Method, Conserved Scalar Approach, Flamelet Model, Simulation

1. 緒 論

燃焼の数値シミュレーションにおいて、計算機性能の向上とともに、複雑な燃焼場の解析が行われるようになってきた。層流火炎の解析では流れ場と素反応機構を同時に考慮した解析が可能となってきた⁽¹⁾⁽²⁾。一方、乱流火炎の解析では、近年直接数値シミュレーション(DNS)によって、素反応機構を考慮した解析が行われるようになってきているが⁽³⁾、解析対象が極めて限定されており、実用規模の乱流燃焼をNDSで解析できるまでには達していない。このため、乱流燃焼の解析は今後とも、モデルに基づく解析が必要であると考えられる。

乱流火炎のモデルに基づく数値シミュレーションには二つの方法がある。一つは平均化された特性量の支配方程式を解く方法である。もう一つは確率密度関数(PDF)の輸送方程式を解き、各特性量をPDFの期待値として求める方法である。現在一般的に使用されている手法は前者であるが、支配方程式の中に乱れ変動

に起因するレイノルズ応力項、速度・スカラー量相関項が現れる。したがって、これらをモデル化し、方程式を閉じる必要がある。特に、反応生成項に関連して生ずる相関項は一般の乱流燃焼場では高次の相関項が収束しないという問題があり、この項の扱いが相当難しくなる⁽⁴⁾⁽⁵⁾。

一方、最近注目されてきた後者のPDF法⁽⁶⁾⁽⁷⁾では確率密度関数の輸送方程式を直接解析し、各特性量をPDFの期待値として求めるために、上述の高次相関項のモデル化を必要としない。また反応生成項についても、直接取扱うことができるためにモデル化の必要がなく、多くの利点をもっている。ただし、一般に用いられるPDF法では1点確率密度関数の輸送を考える場合が多く、この手法では空間的な情報(スケールに関する情報)がPDFに含まれないために、例えば分子混合項にはモデルが必要となる。また、PDF法では解析次元が高くなり、計算値が膨大となるという欠点がある。したがって、一般には流れ場については前者の方法で求め、スカラー量についてのみPDF法で求める手法が多く用いられている。しかし、PDF法では各特性を仮想的な粒子にもたせ、モンテカルロ法による確率的な解析が行われるために、従来の有限差分法に基づく手法と比べ、いまだ一般化された手法には

* 原稿受付 2000年2月15日。

^{*1} 正員、豊橋技術科学大学工学部(〒441-8580 豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1)。

^{*2} 豊橋技術科学大学大学院。

E-mail: noda@mech.tut.ac.jp

至っていないと思われる。

そこで、本研究では解析対象を三重噴流拡散火炎とし、流れ場については k - ε 2 方程式モデルを用いて解析し、またスカラ量の輸送については PDF 法で解析することを試みた。本解析では、コンサーブドスカラアプローチの考えを利用し、化学種の質量分率、温度等のスカラ量を混合分率 Z の関数として表し、混合分率 Z の PDF のみを PDF 法で解析するハイブリッド PDF 法を用いた。また $\tilde{Z}$ と $\tilde{Z}''^2$ について解析を行い、混合分率 Z の PDF を仮定するフレームレットモデル⁽⁸⁾ によって得られる解析結果および実験結果との比較を行い、PDF 法の有効性についても検討した。

おもな記号

- D : ノズル直径
 h_j : 半径方向の格子間隔 $= r_{j+1} - r_j$
 i, j : 軸方向および半径方向の格子番号
 k : 乱れエネルギー
 $p(Z; \mathbf{x})$: 混合分率の確率密度関数
 R : ノズル半径
 u, v : 軸方向および半径方向速度
 x, r : 軸方向および半径方向座標
 X : モル分率
 Y : 質量分率
 Z : 混合分率
 $Z'' = Z - \tilde{Z}$
 ε : 乱れエネルギー消散率
 μ_l : 分子粘性係数
 μ_t : 乱流粘性係数
 μ_{eff} : 実効粘性係数 $= \mu_l + \mu_t$
 $\bar{\cdot}$: ファブプレ平均
 $\overline{\cdot}$: 期待値またはアンサンブル平均

2. 解析モデルおよび解析手法

本解析では図 1 に示す三重噴流拡散火炎を対象に解析を行った⁽⁹⁾。中心の燃料管から燃料を噴出させ、その周囲の同軸管から高速空気流を、さらにその周囲の同軸管から低速空気流を噴出させた。解析はコンサーブドスカラアプローチに基づく 2 種類の解析を行った。一つは混合分率 Z の確率密度関数(PDF)を直接解くハイブリッド PDF 法であり、もう一つは Z の PDF を仮定するフレームレットモデル⁽⁸⁾ の解析である。本解析では k - ε 2 方程式モデルを基準にした解析を行った。以下に、本解析で用いた定常、軸対称、境界層形支配方程式を示す。

Fig. 1 Coaxial burner and calculation domain

連続の式；

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho \bar{u}) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho \bar{v}) = 0 \quad (1)$$

主流方向の運動量保存式；

$$\rho \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \rho \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_{eff} \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right) \quad (2)$$

乱れエネルギー k の輸送方程式；

$$\begin{aligned} \rho \bar{u} \frac{\partial k}{\partial x} + \rho \bar{v} \frac{\partial k}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \left(\mu_l + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial r} \right] \\ + \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right)^2 - \rho \varepsilon \quad (3) \end{aligned}$$

乱れエネルギー消散率 ε の輸送方程式；

$$\begin{aligned} \rho \bar{u} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} + \rho \bar{v} \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \left(\mu_l + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} \right] \\ + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \right)^2 - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (4) \end{aligned}$$

さらに、フレームレットモデルの解析では、以下に示す混合分率 $\tilde{Z}$ とその変動強さ $\tilde{Z}''^2$ の輸送方程式を用いた。

混合分率 $\tilde{Z}$ の輸送方程式；

$$\rho \bar{u} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x} + \rho \bar{v} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_Z} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial r} \right) \quad (5)$$

変動強さ $\tilde{Z}''^2$ の輸送方程式；

$$\begin{aligned} \rho \bar{u} \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x} + \rho \bar{v} \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_g} \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial r} \right) \\ + C_{g1} \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial r} \right)^2 - C_{g2} \rho \frac{\varepsilon \tilde{Z}''^2}{k} \quad (6) \end{aligned}$$

混合分率 Z は窒素質量分率 Y_{N2} を基準に以下のよう定義した。

$$Z = \frac{Y_{N2} - Y_{N2,0}}{Y_{N2,F} - Y_{N2,0}} \quad (7)$$

ここで、添字 F と O は混合する前の燃料と酸化剤を示す。

また、ハイブリッド PDF 法で用いた Z の PDF 輸送方程式は次式である。

$$\bar{u} \frac{\partial \tilde{p}(Z; \mathbf{x})}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \tilde{p}(Z; \mathbf{x})}{\partial r} = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial r}$$

$$\times \left[r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_z} \frac{\partial \tilde{p}(Z; \mathbf{x})}{\partial r} \right] + E(Z; \mathbf{x}) \quad \dots\dots (8)$$

ここで、左辺は対流項、右辺第1項は乱流拡散項、右辺第2項は分子混合項である。PDF 輸送方程式の導出については、Pope の論文⁽⁶⁾ に詳しく説明されているので、参照されたい。

本解析では分子混合項のモデル化を Curl モデル⁽¹⁰⁾ および修正 Curl モデル⁽¹¹⁾⁽¹²⁾ に基づき行った。分子混合項 $E(Z; \mathbf{x})$ は以下のように表すことができる。

$$E(Z; \mathbf{x}) = 2\beta\omega \int \tilde{p}(Z+Z') \tilde{p}(Z-Z') dZ' - 2\beta\omega \tilde{p}(Z) \quad \dots\dots (9)$$

ここで、衝突頻度 ω と乱流粘性係数 μ_t は次式で与えられる。

$$\omega = 2C_z \frac{\varepsilon}{k} \quad \dots\dots (10)$$

$$\mu_t = C_\mu f_\mu \frac{\rho k^2}{\varepsilon} \quad \dots\dots (11)$$

また、 β は Curl モデルの場合、2 であり、修正 Curl モデルの場合は 3 となる。また、式(11)中に現れる f_μ は、火炎による層流化現象に基づく乱流粘性係数 μ_t の低下を補正するための修正係数である⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾。

以上の式中に現れた係数の値は以下のとおりである。

$$\left. \begin{aligned} C_\mu &= 0.09, C_{\varepsilon 1} = 1.44, C_{\varepsilon 2} = 2.8, \\ C_{\varepsilon 2} &= C_{g2} = 1.92, C_z = 2.0, \\ \sigma_k &= 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3, \sigma_z = \sigma_g = 0.7 \end{aligned} \right\} \quad \dots\dots (12)$$

また、反応の取扱いについては、両解析ともコンサーブドスカラーアプローチの手法に基づき、メタン・水素混合燃料(体積比 2:3)と空気の反応を反応速度無限大、一段不可逆反応と仮定した際に形成される火炎構造を適用した(図2)。この場合の量論混合分率 Z_{st} は 0.0477 である。火炎構造における各スカラー量を $Q(Z)$ とすると、火炎内のファブレ平均スカラー量 $\bar{Q}(\mathbf{x})$ は次式で与えられる。

$$\bar{Q}(\mathbf{x}) = \int_0^1 Q(Z) \tilde{p}(Z; \mathbf{x}) dZ \quad \dots\dots (13)$$

ここで、フレームレットモデルによる解析では、確率密度関数 $\tilde{p}(Z; \mathbf{x})$ を式(5)、(6)の解析から求まる $\tilde{Z}$ と $\tilde{Z}^2$ からクリップド・ガウシアン分布を仮定し⁽⁸⁾、求めた。

一方、ハイブリッド PDF 法では式(8)をモンテカルロ法で解析し、PDF を直接求めた。以下にその方法について簡単に説明する。式(8)において、次のような演算子を定義する。

$$C_r \equiv \bar{v} \frac{\partial}{\partial r} \quad \dots\dots (14)$$

Fig.2 Flame structure under the fast chemistry assumption

$$D \equiv \frac{1}{\bar{\rho} r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_z} \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad \dots\dots (15)$$

さらに、分子混合項 E について、演算子 E を以下のように定義する。

$$E = E \tilde{p}(Z; \mathbf{x}) \quad \dots\dots (16)$$

x 方向対流項について、前進差分を行うと、式(8)は式(14)~(16)を用いると、次のように書くことができる。

$$\begin{aligned} \tilde{p}(x_{i+1}) &= (1 + \Delta t D + \Delta t E - \Delta t C_r) \tilde{p}(x_i) + O(\Delta x^2) \\ &= (1 + \Delta t D)(1 + \Delta t E)(1 - \Delta t C_r) \tilde{p}(x_i) \\ &\quad + O(\Delta t^2, \Delta x^2) \quad \dots\dots (17) \end{aligned}$$

ここで、 $\Delta t = \Delta x / \bar{u}_j$ である。また、最後の式は PDF の輸送方程式の演算において、乱流拡散、分子混合、対流を独立して処理することのできることを示している。この演算に基づく誤差は Δt^2 もしくは Δx^2 で決まるオーダとなる。この誤差は Δt^2 に基づき低速領域で拡大し、特に解析場において速度が零となる場合は解析が不可能となる。

流入条件として、ノズル出口すぐ下流の各格子に $N = 1000$ 個のモンテカルロ粒子を割り当て、次のような特性を与えた。

$$\begin{aligned} Z^{(m)} &= 1.0 \quad : r < R \\ Z^{(m)} &= 0.0 \quad : r \geq R \quad (m = 1, 2, \dots, N) \quad \dots\dots (18) \end{aligned}$$

また、式(17)に従い、乱流拡散、分子混合、対流の順に、連続的な操作を行い⁽¹⁵⁾、PDF の変化を求めた。乱流拡散項の解析では、以下の演算を行った。

$$\begin{aligned} \tilde{p}(r_j, t_d) &= (1 + \Delta t D) \tilde{p}(r_j) \\ &= (1 - \gamma_{j+} - \gamma_{j-}) \tilde{p}(r_j) + \gamma_{j+} \tilde{p}(r_{j+1}) + \gamma_{j-} \tilde{p}(r_{j-1}) \quad \dots\dots (19) \end{aligned}$$

ここで、 t_d は乱流拡散の演算後の PDF を表すための仮想時間である。また、 γ_{j+} 、 γ_{j-} はフーリエ数である。 γ_{j+} 、 γ_{j-} は本解析で用いた不等間隔格子に対応させると、それぞれ以下の式となる。

$$\gamma_{j+} = \frac{2\Delta t}{\bar{\rho} r_j} \left[\frac{h_{j-1}}{h_j^2(h_j + h_{j-1})} r_{j+1/2} \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_z} \right)_{j+1/2} \right]$$

$$+ \frac{h_j - h_{j-1}}{h_j^2(h_j + h_{j-1})} r_j \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_z} \right)_j \Bigg] \dots\dots\dots (20)$$

$$\gamma_{j-} = \frac{2\Delta t}{\rho r_j} \left[\frac{h_j}{h_{j-1}^2(h_j + h_{j-1})} r_{j-1/2} \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_z} \right)_{j-1/2} - \frac{h_j - h_{j-1}}{h_{j-1}^2(h_j + h_{j-1})} r_j \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{\sigma_z} \right)_j \right] \dots\dots\dots (21)$$

ただし、計算では γ_{j+} と $\gamma_{(j+1)-}$ 、もしくは $\gamma_{(j-1)+}$ と γ_{j-} は等しくなければならない。そこで、各格子間のフーリエ数は両者の平均値とした。また、式(19)に基づき、 $N\gamma_{j+}$ 個(整数)のモンテカルロ粒子をランダムに格子 j と格子 $j+1$ から抽出し、交換した。また格子 j と格子 $j-1$ についても同様に、 $N\gamma_{j-}$ 個(整数)の粒子の交換を行った。

分子混合については、各格子内のモンテカルロ粒子 N 個からランダムに抽出した $N\omega\Delta t$ 個(整数)の粒子について、次の操作を行い、混合させた。

$$Z^{(p)}(t+\Delta t) = (1-\alpha)Z^{(p)}(t) + \frac{1}{2}\alpha[Z^{(p)}(t) + Z^{(q)}(t)] \dots\dots\dots (22)$$

$$Z^{(q)}(t+\Delta t) = (1-\alpha)Z^{(q)}(t) + \frac{1}{2}\alpha[Z^{(p)}(t) + Z^{(q)}(t)] \dots\dots\dots (23)$$

ここで、Curl モデルの場合には、 $\alpha=1$ となり、抽出された粒子の特性の算術平均値が粒子に戻される。一方、修正 Curl モデルの場合には α を $0 \leq \alpha \leq 1$ の範囲で一様乱数として与える。モンテカルロ粒子の個数を無限とする極限において、Curl モデルの場合は PDF が必ず離散的となるのに対して、修正 Curl モデルでは連続的な PDF が得られる特徴がある⁽¹⁶⁾。

半径方向の対流については、以下の式に基づき演算を行うことができる。

$$\tilde{p}(r_j, t_{cr}) = (1 - \Delta t C_r) \tilde{p}(r_j, t_m) = (1 - c_j) \tilde{p}(r_j, t_m) + c_j \tilde{p}(r_{j-1}, t_m) \dots\dots\dots (24)$$

ここで、 t_m と t_{cr} はそれぞれ分子混合と半径方向の対流を演算した後の仮想時間である。また、 c_j は以下の式で表される格子 j のクーラン数である。

$$c_j = \frac{\Delta t}{h_{j-1}} v \dots\dots\dots (25)$$

式(24)は格子 $j-1$ からランダムに抽出された Nc_j 個(整数)のモンテカルロ粒子を格子 j においてランダムに抽出された Nc_j 個のモンテカルロ粒子と交換することを示している。ただし、本解析では Spalding の手法⁽¹⁷⁾に従い、von Mises 座標系で解析しているので、半径方向の対流の解析は陽に現れない。

軸方向の対流については、式(17)より、格子内のモンテカルロ粒子の滞留時間を $\Delta t = \Delta x / \bar{u}_j$ で与えていることと等価である。したがって、 N 個の粒子すべて

を下流方向格子に移動させればよい。

3. 計算条件

解析対象は体積比 2:3 のメタン・水素混合燃料を用いた三重噴流拡散火炎である⁽⁹⁾ (図 1)。内径 $D=6$ mm の燃料管から 25 m/s で燃料流を、さらにその周囲の内径 7 mm の環状管から 12 m/s で高速空気流を、さらにその周囲の内径 140 mm の周囲管から 3 m/s で低速流を流した。前述のように、本解析では定常、軸対称、境界層流れ場を仮定し、marching integration による解析を行った⁽¹⁷⁾。計算領域の大きさは $x \times r = 720 \times 60$ mm² である。格子数は半径方向に 105 である。格子間隔はノズル近傍で細くなる不等間隔格子である。また、軸方向の格子間隔は 0.6 mm である。流れ場の解析ではノズル出口条件として、 $x/D=0.11$ における実験データを使用した。また、フレームレットモデルによる計算では $\tilde{Z}$ と $\tilde{Z}^2$ の初期値が必要となるが、 $\tilde{Z}$ については燃料ノズル内において 1 とし、その外側では零とした。また、 $\tilde{Z}^2$ については計算領域入口すべてにおいて、 1×10^{-8} を与えた。また、ハイブリッド PDF 法では各格子にモンテカルロ粒子を 1000 個割り当て、燃料ノズル内ではすべての粒子に $Z=1$ の特性をもたせ、その外側では $Z=0$ の特性をもたせた。モンテカルロ粒子の個数の決定については、200 個以上で解析結果に大きな差がでないことを確認したうえで、比較的連続的な PDF 分布が得られるとして、本解析では 1000 個の場合の結果を扱っている。

4. 結果および考察

4.1. Curl モデルと修正 Curl モデルの比較

PDF 法において、分子混合項のモデル化は最も困難な課題である。分子混合項のモデル化は一樣、等方性乱流において濃度変動の減衰過程を精度よく模擬するようにモデル化がなされる。本研究では Curl モデルと修正 Curl モデルについて検討した。前述のように、Curl モデルは離散的な PDF を作り出す欠点があるが、修正 Curl モデルはその点が改良されている。しかし、両モデルとも混合の基本原理である局所混合が満足されていない。分子混合は特性の類似した分子間で混合が進行すると考えられるが、Curl モデルでは各格子におけるモンテカルロ粒子のアンサンブルからランダムにモンテカルロ粒子を抽出し、混合させるために、特性の大きく異なる粒子の混合が発生する可能性がある。このため、分子混合が過大に評価される欠点が指摘されている⁽¹⁸⁾。

Fig. 3 Temperature distributions due to two molecular diffusion models

Fig. 5 Temperature distributions calculated by the hybrid PDF method and the flamelet model

(a) Modified Curl model

(b) Curl's model

Fig. 4 Probability density functions due to two molecular diffusion models ($x/D=20$)

図3と図4にCurlモデルと修正Curlモデルを用いた場合の温度分布および混合分率のPDF ($x/D=20$)の解析結果を示す。ただし、図3の温度分布には実験結果も示してある。また、PDF図の縦軸の数値は混合分率 Z の間隔 0.001 に存在する粒子数である。まず、図3におけるハイブリッドPDF法による解析結果と実験値の比較では、ハイブリッドPDF法による結果が実験値に比べ、火炎中心部の $x/D \geq 40$ におい

て、過小評価され、また逆に火炎外側では全領域で過大評価されている。この現象については4.2節で議論するが、本解析の流れ場の計算において、乱れが過小評価されたためであり、計算領域全体にわたり乱流混合が低く見積もられたことに起因している。

Curlモデルと修正Curlモデルの比較では、火炎の外側でCurlモデルに基づく温度が修正Curlモデルに基づく温度よりもわずかに大きく評価され、また分布も広がっている。両モデルとも分子混合に伴う濃度変動の減衰過程における変動の分散値は保証されるが、高次のモーメントは保証されていない。特に、Curlモデルは混合する粒子特性の算術平均値を各粒子に戻すために、中間の特性が強くなる傾向にある。この傾向は燃料と周囲空気が接する噴流境界で強く現れる。図4の混合分率のPDFにおいて、火炎外側で $Z=0$ の確率がCurlモデルで低く現れるのはこのためと考えられる。このため、図2の混合分率 Z に対する火炎構造から明らかなように、Curlモデルを用いた解析では燃料と酸化剤との中間の特性が増加するために、反応に基づくスカラー量の特性を過大評価する傾向があるものと考えられる⁽¹⁹⁾。

4.2 ハイブリッドPDF法とフレイムレットモデルによる解析結果の比較

図5と図6にハイブリッドPDF法およびフレイムレットモデルによる解析結果の比較を示す。また、実験値も示してある。ここで、モル分率の実験値はガスクロマトグラフィーによるデータであり、密度に依存するデータが得られるため、密度加重平均値として示してある。ハイブリッドPDF法の分子混合モデルは修正Curlモデルを使用した。まず、図5の温度分布において、ハイブリッドPDF法は $x/D \leq 20$ では火炎中心で実験値とよく一致しているが、その下流では低い温度分布を示した。ま

Fig. 6 Mole fraction distributions calculated by the hybrid PDF method and the flamelet model

た火炎の周辺では、火炎全域について逆に温度は高くなる。一方、フレームレットモデルでは、 $x/D \leq 20$ で実験値とよく一致するが、 $x/D \geq 40$ では火炎中心の温度は高く見積もられた。しかし、火炎の周辺では実験値とよく一致した。

また、図 6(a) の H_2 と CH_4 のモル分率分布では、ハイブリッド PDF 法は $x/D=20$ 断面の火炎中心で $\bar{X}_{H_2}$ を大きく見積もるが、 $\bar{X}_{CH_4}$ は実験値とよく一致した。一方、フレームレットモデルは火炎中心で $\bar{X}_{H_2}$ を大きく見積もるが、逆に火炎周辺で低く見積もる傾向にある。また、 $\bar{X}_{CH_4}$ は全体的に実験値よりも低く見積もられた。下流の $x/D=60$ 断面では、ハイブリッド PDF 法は実験値と比べ、火炎中心において $\bar{X}_{H_2}$ と $\bar{X}_{CH_4}$ とも過大評価し、フレームレットモデルはわずかに過小評価した。また、 $\bar{X}_{O_2}$ と $\bar{X}_{N_2}$ については [図 6(b)], $x/D=20$ 断面において両手法ともに比較的实验値をよく予測した。ただし、ハイブリッド PDF 法はフレームレットモデルの結果に比べ、低く見積もる傾向にある。この傾向は $\bar{X}_{N_2}$ に関して、 $x/D=60$ でさらに拡大し、その予測は大きく下回った。図 6(c) の $\bar{X}_{H_2O}$ と $\bar{X}_{CO_2}$ のピーク位置は反応帯の位置を示すがハイブリッド PDF 法の結果はフレームレットモデルに比べ、外側に位置する。また、下流に行くに従って、その傾向が拡大している。

以上の温度分布および化学種濃度の結果は、実験結果に比べ、ハイブリッド PDF 法は燃焼反応の進行を過小評価し、逆にフレームレットモデルの解析は過大評価する傾向にあるといえる。また、コンサーブドスカラーアプローチに基づく本解析では反応は量論条件位置で進行することを前提としたモデルであるので、ハイブリッド PDF 法による解析は混合を過小評価し、

Fig. 7 Radial profiles of calculated mean axial velocity and rms value compared against experimental data

Fig. 8 Axial profiles of calculated mean axial velocity and rms value compared against experimental data

フレームレットモデルの解析は過大評価する傾向にあるといえる。

以上の問題点をさらに明確にするために、次に流れ場の解析結果と実験結果の比較を行う。図 7 と図 8 に平均速度 $\bar{u}$ と乱れ強さ u'' の $x/D=20$ の断面分布および中心軸上分布を示す。ただし、実験値については LDV による測定結果であるために、モル分率同様、密度加重平均値として扱っている。これらの結果より、平均速度については本解析で用いた $k-\epsilon$ 2 方程式モデルにより比較的良好に予測されている。一方、乱れ強さについては、 $x/D=10$ 以降の火炎中心で低く見積もら

れた。特に、噴流混合領域 ($x/D=20$, $r/R=2\sim4$) で、予測値は実験値に比べ相当低く、最大で実験値の約 50% となった。

この乱れ強さが低く見積もられた問題点はハイブリッド PDF 法の解析精度に大きく影響する。乱れ強さの値は乱流混合と分子混合の両方に影響する。ただし、分子混合は平均値に対して影響は少ないと考えられるので、本解析結果においては主として乱流混合の問題が重要となる。乱流混合を評価するフーリエ数 γ への乱れの影響は式 (20), (21) の μ_{eff} を通じて生ずる。乱れの増加は γ の増加となり、乱流混合を促進する。したがって、乱れ強さの過小評価(図 7, 8)は乱流混合の過小評価をもたらす。ハイブリッド PDF 法による温度分布が火炎中心において、実験値よりも低く見積もられ、また反応帯が噴流の外側に位置し、火炎中心の燃料が実験値よりも高く見積もられた問題は乱流混合の過小評価によってもたらされている。一方、乱れ強さが過小評価されたにもかかわらず、フレームレットモデルによる解析結果は火炎中心において温度あるいは燃料の消費を過大に評価した。本解析で行ったハイブリッド PDF 法とフレームレットモデルとの

解析上の差は PDF の求め方にのみ存在する。そこで、この問題を検討するために、次にフレームレットモデルで使用されるクリップド・ガウシアン分布について検討した。

図 9 と図 10 に $x/D=20$ と $x/D=60$ のハイブリッド PDF 法およびフレームレットモデルの解析によって得られた PDF を示す。 $x/D=20$ の断面では、両者の結果において、混合の進行がほぼ同程度に予測されている。また、両者の PDF はよく類似しているといえる。しかし、詳細に見ると、 $r/R=3, 6$ の位置においてハイブリッド PDF 法による結果はフレームレットモデルによって仮定されるクリップド・ガウシアン分布とは少し異なり、分布のすそ野が広がる傾向にある。この傾向は下流の $x/D=60$ 断面に移動すると、さらに強まり、正規分布からずれる。図 7, 8 で示される流れ場の解析結果には両者間にほとんど差は認められない。したがって、解析上実効粘性係数 μ_{eff} を通して生ずる混合分率の乱流混合への効果については、両者に大きな差はないものと考えられる。しかし、実際の乱流噴流拡散火炎において、一様等方性の乱流場が形成される可能性はほとんどなく、スカラ場において

(a) H. PDF

(a) H. PDF

(b) Flamelet

(b) Flamelet

Fig. 9 PDF's calculated by the hybrid PDF method and the flamelet model ($x/D=20$)

Fig. 10 PDF's calculated by the hybrid PDF method and the flamelet model ($x/D=60$)

も同様と考えられる。このことは、フレームレットモデルにおけるクリップド・ガウシアン分布の仮定は、様な乱流混合を仮定するものであり、保存スカラ量である混合分率の不均質な乱流混合過程を無視することになり、スカラ量の乱流混合を過大に評価することになる。このことがフレームレットモデルによる解析において、火炎中心の混合および反応を過大に評価する原因となったと考えられる。一方、ハイブリッド PDF 法による混合および反応の過小評価は、流れ場の予測において、乱れ場が過小評価されたためである。ハイブリッド PDF 法の解析精度向上のためには、流れ場の解析精度が極めて重要であるといえる。

本解析手法の問題点として、流れ場の解析の問題以外に、分子混合項のモデル化、反応の扱い、メタン・水素燃料を使用したことによる選択拡散の扱いが重要となる。これらの問題については今後検討する予定である。

5. 結 論

確率密度関数(PDF)法に基づく乱流拡散燃焼のモデリングについて検討した。本研究ではコンサーブドスカラアプローチの考えを利用し、混合分率のみをPDF法で解析するハイブリッドPDF法の開発を試みた。また、PDFを仮定するフレームレットモデル解析および実験結果と比較し、ハイブリッドPDF法の有効性について検討した。以下に結論を示す。

(1) ハイブリッドPDF法により、乱流拡散燃焼場のスカラ量の混合過程を予測できる。本解析で用いたPDF輸送方程式の定常解析法は乱流拡散項、分子混合項、対流項を独立に演算する。この手法の解析精度は $O(\Delta t^2, \Delta x^2)$ となる。ここで、 $\Delta t = \Delta x / \bar{u}_j$ である。したがって、低速域で解析精度が低下し、特に解析領域に速度が零となる領域が含まれる場合には解析できない欠点がある。

(2) ハイブリッドPDF法の解析精度において、流れ場の解析精度が極めて重要となる。解析対象とした噴流拡散火炎の予測において、 $k-\varepsilon 2$ 方程式モデル

は乱れエネルギーを過小評価した。このことが、スカラ量の乱流混合の低下をもたらし、反応が過小評価された。このため、流れ場の解析において、さらに高精度な解析が必要と考えられる。

(3) フレームレットモデルによる解析はスカラ量の混合を過大に評価する。これは本解析において、PDFをクリップドガウシアン分布と仮定したためである。

文 献

- (1) Takagi, T. and Xu, Z., *Combust. Flame*, **96**, (1994), 50-59.
- (2) Takahashi, F. and Katta, V. R., *Proc. 26th Symp. (Int.) Combust.*, The Combust. Institute, (1996), 1151-1160.
- (3) 店橋護・斎藤敏彦・宮内敏雄, 第37回燃焼シンポジウム講演論文集, (1999), 167-168.
- (4) Bilger, R. W. (Libby, P. A. and Williams, F. A., eds.), *Turbulent Shear Flows*, (1980), 65-113.
- (5) Smith, N. S. A., Bilger, R. W. and Chen, J.-Y., *Proc. 24th Symp. (Int.) Combust.*, The Combust. Institute, (1992), 263-269.
- (6) Pope, S. B., *Prog. Energy Combust. Sci.*, **11**(1985), 119-192.
- (7) Borghi, R., *Prog. Energy Combust. Sci.*, **14**(1988), 245-292.
- (8) Lockwood, F. C. and Naguib, A. S., *Combust. Flame*, **24** (1975), 109-124.
- (9) 谷山公勇, 豊橋技術科学大学修士論文, (1996).
- (10) Curl, R. L., *AIChE J.*, **9**-2(1963), 175-181.
- (11) Dopazo, C., *Phys. Fluids*, **22**(1979), 20-30.
- (12) Janicka, J., Kolbe, W. and Kollmann, W., *J. Nonequil. Thermodyn.*, **4**(1979), 47-66.
- (13) Jones, W. P. and Launder, B. E., *Int. J. Heat Mass Transf.*, **15**(1972), 301-314.
- (14) Jones, W. P. and Launder, B. E., *Int. J. Heat Mass Transf.*, **16**(1973), 1119-1130.
- (15) Pope, S. B., *Combust. Sci. Technol.*, **25**(1981), 159-174.
- (16) Pope, S. B., *Combust. Sci. Technol.*, **28**(1982), 131-145.
- (17) Spalding, D. B., *GENMIX-A General Computer Program for Two-Dimensional Parabolic Phenomena*, (1977), Pergamon Press.
- (18) Masri, A. R., Subramaniam, S. and Pope, S. B., *Proc. 26th symp. Combust.*, The Combust. Institute, (1996), 49-57.
- (19) 酒井康彦・久保貴・中村育雄, 機論, **65**-636, B(1999), 2681-2688.