

■原著論文/ORIGINAL PAPER■

スカラー確率密度関数法による乱流噴流拡散火炎のモデリングに関する検討

Modeling of Turbulent Jet Diffusion Flames Using a Scalar Probability Density Function Approach

野田 進^{1*}・西岡 誠²NODA, Susumu^{1*} and NISHIOKA, Makoto²¹ 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
Toyohashi University of Technology, 1-1 Hibarigaoka, Tempaku, Toyohashi 441-8580, Japan² 豊橋技術科学大学大学院 〒441-8580 豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1
Toyohashi University of Technology, 1-1 Hibarigaoka, Tempaku, Toyohashi 441-8580, Japan

2002年4月9日受付, 2002年6月24日受理 / Received 9 April 2002; Accepted 24 June 2002

Abstract : The prediction performance of a scalar probability density function (PDF) method is assessed in turbulent jet diffusion flames to seek an improvement of the method. The present PDF method is based on the conserved scalar approach, dealing with the mixture fraction as a scalar. This discards the most advantageous property of PDF modeling, which is capable of treating a reaction exactly, but allows evaluation of the prediction performance of PDFs in a simple manner. The effects of the number of Monte Carlo particles, molecular mixing model and fuel are especially discussed. The modified Curl model and the interaction by exchange with mean (IEM) model are evaluated as molecular mixing models. Two methane/hydrogen and hydrogen/nitrogen flames are dealt to assess the effect of fuel on the performance of the PDF method, together with of the conventional flamelet model calculations. It is found that every physical process like the convection, molecular mixing and turbulent diffusion requires sure participation of particles in each numerical process to get a calculation accuracy. Both the molecular mixing models guarantee to the second moment of scalar fluctuation, but more improved models are required for higher moments. The present PDF method can predict at higher accuracy regardless of fuel than the flamelet model calculations. However, downstream from the maximum temperature position on the centerline of jet flame the performance of PDF method is weakened.

Key Words : Turbulent diffusion combustion, Jet, Probability density function method, Conserved scalar approach, Modeling

1. 緒言

乱流燃焼の数値シミュレーションにおいて、近年の計算機性能の向上とともに、より複雑でまた広い範囲の解析が行われている。例えば、直接シミュレーション (Direct numerical simulation, DNS) の解析では、Tanahashi ら[1]は乱流予混合火炎の解析を行い、コヒーレント微細スケール渦と火炎との相互作用について検討した。また Sreedhara ら[2]は非予混合気中での自着火現象について解析を行い、その解析データをもとに従来のモデルの検討を行った。このように DNS 解析は乱流燃焼の物理および化学現象の詳細を解明する上で強力な手法であるが、その計算負荷は今

なお大きく、解析領域は小さな領域に限定される。このため、実用的な乱流燃焼の解析にはモデリング手法が必要となる。モデリング手法として、層流火炎片モデル (Laminar flamelet model, LFM) 法 [3]、確率密度関数 (Probability density function, PDF) 法 [4]、条件付モーメントクロージャ (Conditional moment closure, CMC) 法 [5]、Large eddy simulation (LES) 法 [6,7,8] などがある。これらの手法は実用規模の解析に幅広く適用されているが、解析精度の改善あるいは乱流浮上がり火炎や多相燃焼等の複雑な燃焼場での適用を考えると、更なるモデリングの改良が求められている。

モデリング手法の一つである PDF 法は他のモデリング手法に比べ、反応が厳密に扱えるという優れた特徴がある [4]。これは PDF が反応に必要な情報をすべて含むことができるためである。しかしながら、PDF 法では PDF を表

* Corresponding author. E-mail: noda@mech.tut.ac.jp

現するために、多数の仮想的な粒子 (モンテカルロ粒子) を扱うため解析負荷が高くなるという問題が存在する。また一般に扱われる PDF 法では 1 点 1 時刻の PDF を扱うため、その PDF は物理空間および時間空間の多点情報 (スペクトルと解釈できる) を含まない。このため空間的な情報を必要とする拡散項 (スカラー PDF 法では乱流拡散項と分子混合項) はモデリングを必要とする。

著者らは PDF 法の解析精度がこれら拡散項のモデリングに強く依存するとの認識から、反応を直接扱わずにコンサーブドスカラーアプローチに基づくスカラー PDF 法の解析精度について検討してきた[9]。この手法はスカラー量として混合分率のみを扱うために、乱流拡散火炎を層流拡散火炎片の集合と考える層流火炎片モデル (LFM) と同じレベルの解析手法と言える。両者の基本的な解析上の差はスカラー PDF 法が PDF を直接解析によって求めるのに対し (2 節)、モーメント法に基づく LFM 法では PDF を仮定することである (3 節)。前述のように PDF 法の最大の特徴は反応が厳密に扱えると言う点であるが、コンサーブドスカラーアプローチに基づく本手法と LFM 法の解析を比較することで、PDF 法のモデリングの問題点を明確に議論できると考えている。

またこれまでの著者らの研究において、スカラー PDF 法が乱流噴流拡散火炎の下流で混合を過小評価する傾向のあることを確認した[9]。この現象は本手法で用いられるモンテカルロ法および上述の拡散項のモデリングに関連するものと考えられる。

そこでこれらの点を明らかにするために、本研究では混合分率のみを扱う単一スカラー PDF 法の解析精度について、モンテカルロ粒子数、分子混合モデル、燃料の種類の影響について検討した。また LFM 法による解析結果および実験値との比較検討を行った。

2. 確率密度関数 (PDF) 法

乱流現象を支配する速度あるいはスカラー量 (濃度など) を実験によって同じ場所、同じ時刻で測定すると 1 点 1 時刻の結合確率密度関数 (JPDF) が得られる。ここで時刻とは実験を無限回繰り返すときの初期時刻からの経過時間のことである。多点多時刻で測定すると多点多時刻 JPDF が得られる。このように考えると乱流現象のすべての情報を JPDF で表現することが可能である。しかし、現実には高次元の確率密度関数を扱うことは解析負荷を考慮すると不可能である。したがって一般の PDF 法では 1 点 1 時刻 JPDF が扱われる。離散表示の 1 点 1 時刻 JPDF (以下、1 点 1 時刻は省略する) は以下のように表現される。

$$P_N(\underline{V}, \underline{\psi}; \underline{x}, t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \delta(\underline{V} - \underline{U}^{(n)}) \delta(\underline{\psi} - \underline{\phi}^{(n)}) \quad (1)$$

ここで、式 (1) に現れる δ 関数は個々の標本の度数を表すため点密度関数 (fine grained PDF) と呼ばれる。またこの離

散 JPDF と連続 JPDF, $P(\underline{V}, \underline{\psi}; \underline{x}, t)$ との関係は $P(\underline{V}, \underline{\psi}; \underline{x}, t) = \langle P_N(\underline{V}, \underline{\psi}; \underline{x}, t) \rangle$ となる。ここで、 $\langle \rangle$ はアンサンブル平均を示す。JPDF が求まると、 V と ψ の任意の関数 $Q(\underline{V}, \underline{\psi})$ の統計量が以下のように求まる。

$$\begin{aligned} \langle Q(\underline{U}, \underline{\phi}) \rangle_N &= \iint Q(\underline{V}, \underline{\psi}) P_N(\underline{V}, \underline{\psi}) d\underline{V} d\underline{\psi} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N Q(\underline{U}^{(n)}, \underline{\phi}^{(n)}) \end{aligned} \quad (2)$$

JPDF, $P(\underline{V}, \underline{\psi}; \underline{x}, t)$ の輸送方程式を通して、乱流場の JPDF が求まれば、統計量を式 (2) より求めることができる。JPDF 輸送方程式は点密度関数の時間変化をもとに導出する方法[10]もしくは $Q(\underline{V}, \underline{\psi})$ の物質微分の期待値をもとに導出する方法[4]があり、以下となる。

$$\begin{aligned} \rho(\underline{\psi}) \frac{\partial P}{\partial t} + \rho(\underline{\psi}) V_j \frac{\partial P}{\partial x_j} + \left(\rho(\underline{\psi}) g_j - \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_j} \right) \frac{\partial P}{\partial V_j} \\ + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\rho(\underline{\psi}) S_\alpha(\underline{\psi}) P \right] = \frac{\partial}{\partial V_j} \left[\left\langle -\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial p'}{\partial x_j} \middle| \underline{V}, \underline{\psi} \right\rangle P \right] \\ + \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left[\left\langle \frac{\partial J_\alpha}{\partial x_j} \middle| \underline{V}, \underline{\psi} \right\rangle P \right] \end{aligned} \quad (3)$$

この式において、左辺は厳密に扱える。一方、右辺に含まれる条件付期待値は前述のように 1 点 1 時刻 JPDF が空間情報を持たないためにモデルを必要とする。左辺第 1 項は非定常項であり、第 2 項は物理空間での対流輸送、第 3 項は重力と平均圧力勾配による速度空間での輸送、第 4 項は化学反応による成分空間での輸送を表す。また、右辺第 1 項は粘性応力と変動圧力勾配による速度空間での輸送、第 2 項は分子混合による成分空間での輸送を表す。式 (3) とモーメント式との関係は、例えば式 (3) に左から V_i を掛け、全空間で積分すると、平均速度 $\langle U_i \rangle$ の支配方程式が得られる。同様にして、乱れエネルギー k 、平均スカラー量 $\langle \phi \rangle$ 、スカラー変動の分散 $\langle \phi'^2 \rangle$ の支配方程式を求めることができる。

緒言で述べたように、本研究で使用する PDF 法は混合分率のみを扱う単一スカラー PDF 法であり、LFM の考えに基づく解析 (コンサーブドスカラーアプローチ) である。ここで、用語コンサーブドスカラーアプローチは LFM と同意義で使用される。ただし、用語 LFM を用いる場合には 3 節で述べる解析手法を指すことが多く、ここでは解析手法と区別して概念をコンサーブドスカラーアプローチによって示す。すなわち、高速反応とルイス数 $Le=1$ の仮定の下で、乱流拡散火炎を層流拡散火炎片の集合と考える。この仮定の下ですべてのスカラー量は混合分率の関数となり、混合分率の輸送のみを考えればよい。本解析において、流れ場は $k-\epsilon$ 2 方程式モデルにより解析した。流れ場の支配方程式については文献 [9] を参照して頂きたい。混合分率 Z の PDF 輸送方程式は式 (3) を速度空間で積分し、反応項

を無視すると求まる。本研究の解析対象である統計的に定常な同軸流噴流拡散火炎を考慮すると密度加重 PDF, $\tilde{P}(Z)$, の輸送方程式は円筒座標系で以下のように表現される。

$$\tilde{u} \frac{\partial \tilde{P}(Z)}{\partial x} + \tilde{v} \frac{\partial \tilde{P}(Z)}{\partial r} = \frac{1}{\langle \rho \rangle r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_z} \frac{\partial \tilde{P}(Z)}{\partial r} \right) + E(Z; \underline{x}) \quad (4)$$

ここで、密度加重 PDF は次のように定義される。

$$\tilde{P}(Z; \underline{x}) \equiv \rho(Z) \tilde{P}(Z; \underline{x}) / \langle \rho \rangle \quad (5)$$

また Z は混合分率独立変数である。本研究では混合分率確率変数 ζ を窒素質量分率 Y_{N_2} に基づき、以下のように定義した。

$$\zeta = \frac{Y_{N_2} - Y_{N_2,0}}{Y_{N_2,F} - Y_{N_2,0}} \quad (6)$$

式 (4) の左辺の 2 項は対流輸送項である。右辺第 1 項は乱流拡散項であり、勾配拡散モデルが適用されている。ここで、 $\sigma_z = 0.7$ である。また、実効粘性係数 μ_{eff} は $\mu_{eff} = \mu_l + \mu_t$ である。 μ_l は層流粘性係数であり、 μ_t は乱流粘性係数である。乱流粘性係数 μ_t は次式で与えられる。

$$\mu_t = C_\mu f_\mu \frac{\langle \rho \rangle k^2}{\varepsilon} \quad (7)$$

ここで、 k は乱れエネルギーであり、 ε はその消散速度である。また、 f_μ は火炎による層流化現象に基づく μ_t の低下を補正するための修正係数である [11,12]。また、 $C_\mu = 0.09$ とした。

式 (4) の右辺第 2 項は分子混合項であり、本研究では二通りのモデルを使用した。一つは修正 Curl モデル [13,14] であり、もう一つは平均値との交換干渉 (Interaction by exchange with mean, IEM) モデル [15] である。

本研究ではオイラー的な手法に基づき、モデル PDF 輸送方程式 (4) をモンテカルロ法によって解析する [9,16]。なお、PDF 輸送方程式の解析法にはラグランジアン的手法も提案されている [17]。以下にモンテカルロ法について簡単に説明する。詳細については文献 [9] を参照して頂きたい。まず、以下のような演算子を定義する。

$$\left. \begin{aligned} \hat{C}_r &\equiv \tilde{v} \frac{\partial}{\partial r} \\ \hat{D} &\equiv \frac{1}{\langle \rho \rangle r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_z} \frac{\partial}{\partial r} \right) \\ \hat{E} \tilde{P}(Z) &\equiv E \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

さらに、式 (4) を差分化すると x 方向の PDF の進展は以下の式で表される。

$$\tilde{P}(x_{i+1}) = (1 + \Delta t \hat{D})(1 + \Delta t \hat{E})(1 + \Delta t \hat{C}_r) \tilde{P}(x_i) + O(\Delta t^2, \Delta x^2) \quad (9)$$

この式の右辺は PDF の輸送に対して、乱流拡散、分子混合、半径方向対流の効果が独立して扱えることを示してい

る。ここで、 $\Delta t = \Delta x / \tilde{u}$ である。

乱流拡散効果は以下に示すフーリエ数 γ で表現される。

$$\gamma_{\pm} = \left(\frac{\Delta t}{\langle \rho \rangle \Delta r^2} \frac{\mu_{eff}}{\sigma_z} \right)_{j\pm} \quad (10)$$

すなわち、格子 j と隣り合う格子 $(j-1)$ と格子 $(j+1)$ の間で、それぞれ γ_N 個と γ_{-N} 個のモンテカルロ粒子がランダムに交換される。ただし、片側の格子間での交換粒子の総数は $N/2$ 以下であることが要求される ($\gamma < 1/2$)。

分子混合は前述のように、修正 Curl モデルと IEM モデルを用いた。分子混合は格子内の粒子間で進行する。まず修正 Curl モデルでは計算時間間隔 Δt と衝突周波数 $\omega (= C_z \varepsilon / k)$ で決定される衝突確率 $\Delta t \omega$ に基づき混合を進行させる。すなわち、ランダムに抽出されたモンテカルロ粒子対の特性を総粒子数が $\Delta t \omega N$ 個となるまで以下の式に従って組成を変化させる。

$$\left. \begin{aligned} Z_a^* &= (1 - \xi) Z_a + \frac{1}{2} \xi (Z_a + Z_b) \\ Z_b^* &= (1 - \xi) Z_b + \frac{1}{2} \xi (Z_a + Z_b) \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

ここで、 a, b はランダムに抽出された一対の粒子を示す。また、 ξ は混合を制御する確率変数であり、一様確率密度関数

$$A(\xi) = 1, \quad 0 < \xi < 1 \quad (12)$$

をもつ。このモデルは式 (4) の中で、以下のように表現される。

$$E(Z; \underline{x}) = 2\beta\omega \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{P}(Z_a) \tilde{P}(Z_b) K(Z, Z_a, Z_b) dZ_a dZ_b - 2\beta\omega \tilde{P}(Z) \quad (13)$$

$$K(Z, Z_a, Z_b) = \int_0^1 A(\xi) \delta(Z - (1 - \xi) Z_a - \frac{1}{2} \xi (Z_a + Z_b)) d\xi \quad (14)$$

ここで、衝突周波数 ω に含まれる C_z は 2 を使用した。また、 β は 3 をとる。

IEM モデル [15] では、モンテカルロ粒子を以下の式に従って組成を変化させる。

$$\frac{dZ^*}{dt} = -\frac{1}{2} C_z \frac{\varepsilon}{k} (Z - \langle \zeta \rangle) \quad (15)$$

このモデルは式 (4) の中で以下のように表現される。

$$E(Z; \underline{x}) = \frac{\partial}{\partial Z} \left[\tilde{P}(Z) \frac{1}{2} C_z \frac{\varepsilon}{k} (Z - \langle \zeta \rangle) \right] \quad (16)$$

このモデルは粒子の特性を式 (15) に従って変化させるために、決定論的モデル (Deterministic model) とも呼ばれる [4]。

半径方向対流は以下に示すクーラン数 c で表現される。

$$c_j = \frac{\Delta t}{\Delta r} \tilde{v}_j \quad (17)$$

格子 $j-1$ からランダムに $c_j N$ 個抽出された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 $c_j N$ 個のモンテカルロ粒子と置き換える。ただし、 $c_j < 1$ の条件が要求される。

軸方向の対流については、式 (9) より、格子内のモンテカルロ粒子の対流時間を $\Delta t_j = \Delta x / \bar{u}_j$ 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格子に移動させればよい。

3. 層流火炎片モデル (LFM) 法

緒言で述べたように、本解析では PDF 法の解析精度を評価するためにモーメント法に基づく LFM 解析も行った。流れ場の解析は $k-\varepsilon$ 2 方程式モデルに基づき解析した [9]。ここでは、2 節と対応づけて、混合分率の PDF の算出法についてのみ述べる。

LFM 法では平均混合分率 $\bar{\zeta}$ と混合分率の分散 $\widetilde{\zeta'^2}$ の支配方程式を解析し、両者から PDF を求める。このとき、PDF の分布形状は仮定される。まず、本解析で使用した円筒座標表示の統計的に定常な $\bar{\zeta}$ と $\widetilde{\zeta'^2}$ の境界層型支配方程式を示す。

平均混合分率 $\bar{\zeta}$ の支配方程式；

$$\bar{\rho} u \frac{\partial \bar{\zeta}}{\partial x} + \bar{\rho} v \frac{\partial \bar{\zeta}}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_z} \frac{\partial \bar{\zeta}}{\partial r} \right), \quad (18)$$

混合分率の分散 $\widetilde{\zeta'^2}$ の支配方程式；

$$\begin{aligned} \bar{\rho} u \frac{\partial \widetilde{\zeta'^2}}{\partial x} + \bar{\rho} v \frac{\partial \widetilde{\zeta'^2}}{\partial r} = & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_{eff}}{\sigma_g} \frac{\partial \widetilde{\zeta'^2}}{\partial r} \right) \\ & + C_{g1} \mu_t \left(\frac{\partial \bar{\zeta}}{\partial r} \right)^2 - C_{g2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon \widetilde{\zeta'^2}}{k} \end{aligned} \quad (19)$$

また、式 (18) と式 (19) に含まれる係数は以下の値を使用した。

$$\sigma_z = \sigma_g = 0.7, \quad C_{g1} = 2.8, \quad C_{g2} = 1.92 \quad (20)$$

実効粘性係数 μ_{eff} は前節で述べたとおりである。なお、式 (4) から導かれる $\widetilde{\zeta'^2}$ の支配方程式は $C_{g1} = 2.85$, $C_{g2} = 2$ を与える。

本研究では PDF の形状として、クリップド・ガウス分布とベータ関数分布の二種類を使用した。いずれも、LFM 解析において広く使用される分布である [たとえば、18]。クリップド・ガウス分布は以下のように与えられる。

$$\tilde{P}(Z) = \gamma_1 \delta(Z) + (1 - \gamma_1 - \gamma_2) P_m + \gamma_2 \delta(1 - Z) \quad (21)$$

$$P_m = G(Z) / I_G \quad (22)$$

ここで、

$$G(Z) \equiv \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(Z - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (23)$$

$$I_G = \int_0^1 G(Z) dZ \quad (24)$$

$$\gamma_1 = \int_{-\infty}^0 G(Z) dZ \quad (25)$$

$$\gamma_2 = \int_1^{\infty} G(Z) dZ \quad (26)$$

ガウス分布式 (23) に含まれる平均値 μ と分散値 σ^2 は解析で求まる混合分率の平均値 $\bar{\zeta}$ と分散値 $\widetilde{\zeta'^2}$ から、以下の式をもとに繰り返し計算によって求められる。

$$\bar{\zeta} = \int_0^1 Z \cdot \tilde{P}(Z) dZ \quad (27)$$

$$\widetilde{\zeta'^2} = \int_0^1 (Z - \bar{\zeta})^2 \cdot \tilde{P}(Z) dZ \quad (28)$$

一方、ベータ関数分布式は以下で与えられる。

$$\tilde{P}(Z) = \frac{Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1}}{\int_0^1 Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1} dZ}; \quad 0 \leq Z \leq 1 \quad (29)$$

ここで、 α と β は次式で与えられる。

$$\alpha = \bar{\zeta} \left[\frac{\bar{\zeta}(1-\bar{\zeta})}{\widetilde{\zeta'^2}} - 1 \right], \quad \beta = \alpha \frac{(1-\bar{\zeta})}{\bar{\zeta}}. \quad (30)$$

4. 解析対象および解析条件

同軸流噴流拡散火炎を対象に解析を行った。内径 $D=6$ mm の燃料管から燃料を噴出させた。また、燃料管の周囲に設置された内径 14 mm の同軸管から高速空気流を流し、その周囲には低速空気流を流した。燃料はメタン/水素混合燃料 (体積比 2 : 3) と水素/窒素混合燃料 (体積比 1 : 2) の二種類である。量論混合分率 Z_{st} はそれぞれ 0.048 と 0.46 である。出口流速条件を表 1 に示す。

解析では軸対称を考慮した。また、定常、境界層流れを考慮し、marching integration の解析を行った。解析領域の大きさは半径方向に 60 mm である。軸方向の解析領域は火炎長さに応じて決定した。計算格子については、半径方向格子間隔を 0.2 mm 一定とした。軸方向の格子間隔 Δx はフーリエ数の制限 ($\gamma < 1/2$) とクーラン数の制限 ($c < 1$) を共に満たすように決定した。またこの格子は PDF 法と LFM 法の両方で使用した。

また、計算領域入口における流れ場の初期条件は実験値 [19, 20] を用いた。混合分率については、PDF 法では燃料ノズル内の格子の粒子すべてに $\zeta=1$ を与え、その外側では

Table 1 Calculation conditions

Fuel	U_0	U_h	U_l
Methane/Hydrogen	25	12	3
Hydrogen/Nitrogen	30	30	3

U_0 : Fuel velocity, U_h : Higher air velocity, U_l : Lower air velocity. Unit is m/s.

$\zeta=0$ を与えた. LFM法では $\bar{\zeta}$ と $\overline{\zeta'^2}$ の初期条件が必要となるが, $\bar{\zeta}$ については燃料ノズル内で1とし, その外側で0とした. また, $\overline{\zeta'^2}$ については計算領域入口すべてに 1×10^{-8} を与えた[21]. また, 境界条件については, 中心軸で対称境界条件を与えた. 外側境界ではすべての物理量の勾配をゼロとした.

なお, 本解析で使用した火炎構造は反応速度無限大の一段不可逆反応に基づくものである.

5. 結果および考察

5.1. モンテカルロ粒子数の影響

PDF法の解析手法であるモンテカルロ法の粒子数の影響は2節で述べたフーリエ数 γ , 分子衝突確率 $\Delta t \omega$, クーラン数 c に含まれる $\Delta t (= \Delta x / \bar{u})$ と Δr に関する. Δr は γ と c に含まれ, Δr の減少はこれらの無次元数(輸送確率)を増加させ解析精度の向上に寄与する. 一方, γ , $\Delta t \omega$, c に含まれる Δt の減少(Δx の減少あるいは \bar{u} の増加)は輸送確率を低下させ, 解析精度を下げる. この点は一般の解析手法において解析時間間隔を細かくすると解析精度が向上することと異なる点である. ただし, モンテカルロ法の精度は Δt のみを考えるのではなく各物理過程に寄与する粒子数が解析精度を決定する. したがって, 各格子の粒子数 N を増加させることで確率の解析精度を上げることができる. そこで, メタン/水素火炎について, 半径方向格子間隔 Δr を0.2 mmと固定した条件で, 各格子の粒子数を1000, 2000, 3000と変化させた解析を行い, 粒子数の影響を検討した. 分子混合モデルは修正カルモデルを用いた.

まず, 流れ場に関する解析結果は三つの粒子数の場合に

おいて差は認められなかった(図示せず). このためフーリエ数とクーラン数に関する拘束条件($\gamma < 1/2, c < 1$)で決定される Δx は同程度となり, 三つの場合の空間分解能は同程度となる. 一方, スカラー場の精度評価は本解析がコンサーブドスカラーアプローチに基づいているため, 混合分率の解析結果を比較することで可能となる. PDFから求まる平均混合分率 $\bar{\zeta}$ とその乱れ強さ ζ'' を図1に示す. この結果より, $\bar{\zeta}$ の予測には本解析で使用した粒子数の影響はないことが分かる. このことは $\bar{\zeta}$ に寄与する乱流拡散と対流の効果が粒子数1000個以上で十分解析可能であることを示している. 一方, ζ'' については粒子数1000個の場合と粒子数2000, 3000個の場合で差が見られる. 粒子数2000, 3000個の場合と比べ, 1000個の場合上流の中心部で低い値を取り, また下流で大きな値をとる. これらの差はPDFの2次以上のモーメントに影響する分子混合過程の解析精度に原因づけられる. 分子混合は平均値を変えずに, 乱れ強さを減少させる効果を持つことを考慮すると, 粒子数1000個の場合, 粒子数不足のために, 上流の乱れ強さの過小評価は分子混合が過大に評価されたためであり, また下流の乱れ強さの過大評価は衝突周波数 ω の減少に伴い, 分子混合効果が正確に評価されなくなったと思われる. 本解析条件下では粒子2000個以上で十分な解析精度が得られていると考えられるが, 前述のようにPDF法の解析精度はフーリエ数, 分子衝突確率, クーラン数を通して空間および時間分解能に関連しているために, この値は普遍的なものではない. 粒子数に関連する一般的な解析精度の必要条件はすべての輸送過程の評価に必ず粒子が関与し($\gamma N > 1, cN > 1, \Delta t \omega N > 2$), しかも解の収束性が得られていることと言える.

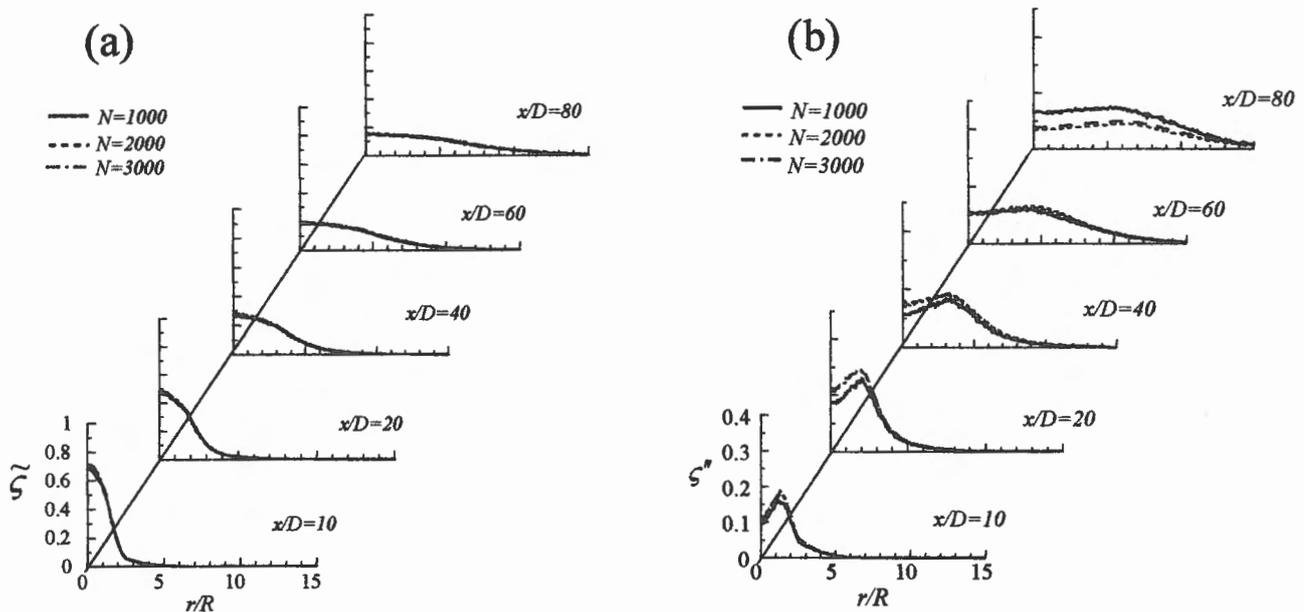


Fig.1 Effect of the number of Monte Carlo particle on the prediction performance of the PDF method (CH_4/H_2 flame). (a): mean value of mixture fraction, (b): rms value of mixture fraction.

5.2. 分子混合モデルの影響 (修正カールモデルと IEM モデルの場合)

PDF 法において、分子混合項のモデリングはもっとも難しい。これは式 (3) の分子混合項に含まれる条件付き平均値 $\langle \frac{\partial J_i^c}{\partial x_j} | \psi \rangle$ が前以て分かる場合がほとんどないためである。ここで取り上げる二つのモデル (修正カールモデルと IEM モデル) は一様等方性乱流場のスカラー量の分散の時間的挙動を従来のモデルと一致させるようにモデル化したものである。

解析条件はメタン/水素火炎、半径方向格子間隔 $\Delta r = 0.2 \text{ mm}$ 、粒子数 $N = 2000$ である。また、計算領域を半径方向に 90 mm としたデータを使用した。両モデルを使用した解析結果において、流れ場および平均混合分率分布に大きな差は認められなかった (図示せず)。このため、ここでは混合分率の乱れ強さ ζ'' の結果のみを図 2 に示す。図の結果より、 ζ'' においても差は極めて小さく、修正カールモデルと IEM モデルは分子混合過程のスカラー量の 2 次モーメント以下において同程度のモデルであることが分かる。

ただし、これらのモデルの使用には次の注意が必要である。IEM モデルの扱いは極めて簡単であるが、式 (15) に従

い粒子の特性を変化させるために、初期の PDF 形状が維持されるという欠点がある。PDF 法が PDF を直接求める手法であることを考慮すると、IEM モデルのこの欠点は大きい。一方、修正カールモデルは高次モーメントの変化を予測できるが、一様等方性乱流場の分子混合に要求される正規分布への漸近を予測できない [14]。このため分子混合モデルについてさらに高精度なモデルが必要と思われる。なお、近年一様等方性乱流場のガウス場と関連付ける写像完結モデル (Mapping closure model) [22-26]、ユークリッド最短系譜モデル (Euclidean minimum spanning trees model) [27] が提案されている。

5.3. 燃料の影響

コンサーブドスカラーアプローチに基づく乱流拡散火炎の予測において、従来の PDF 形状を仮定する LFM 法は解析精度がその分布形状に依存する。現在幅広く用いられているクリップドガウス分布とベータ関数分布は混合分率空間の両端 ($Z = 0, 1$) で差を生じる可能性がある。ここではメタン/水素火炎 ($Z_{st} = 0.048$) と水素/窒素火炎 ($Z_{st} = 0.46$) について、PDF 法と従来の LFM 法との解析結果を比較することで、PDF 法の解析精度の評価を行う。なお、PDF 法の分子混合モデルは修正カールモデルであり、モンテカルロ粒子は 2000 個である。以下、LFM 法において PDF 形状としてクリップドガウス分布を使用する解析を FCG、またベータ関数分布を使用する解析を FBF とする。なお、いずれの火炎においても PDF 法と LFM 法の解析結果において、流れ場には大きな差は見られなかった。このため、以下の議論は温度分布と混合分率の PDF に限定する。

図 3 にメタン/水素火炎の温度分布を示す。ただし、解

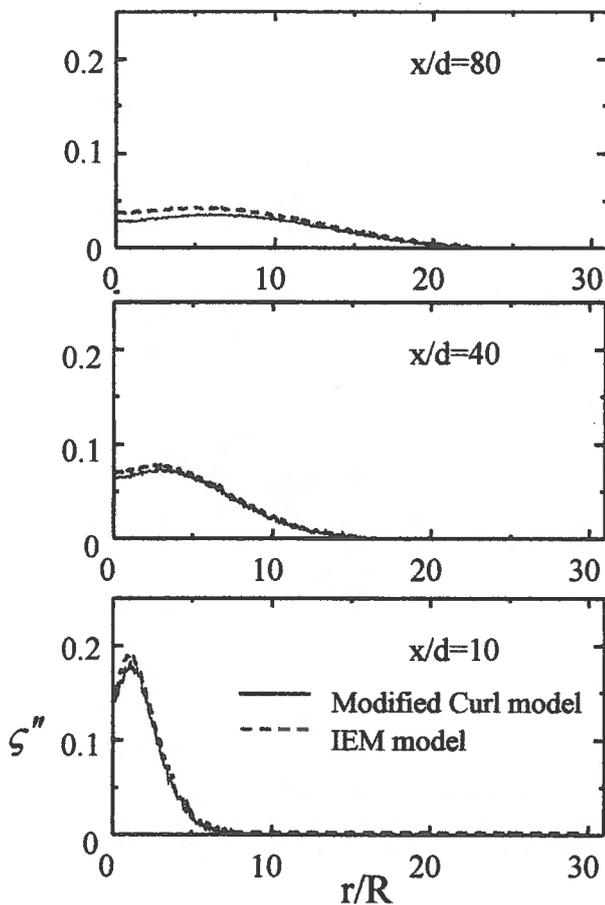


Fig.2 Effect of molecular mixing model on the prediction performance of the PDF method (CH_4/H_2 flame).

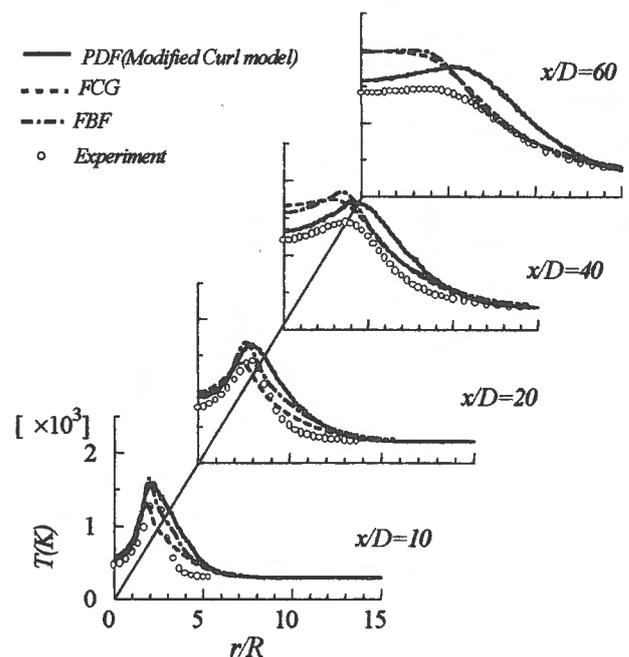


Fig.3 Radial profiles of temperature (CH_4/H_2 flame).

析によって得られた温度は密度加重値である。また、図には被覆なしの Pt/Rh 熱電対によって測定された実験値も示してある。熱電対によって測定される温度は非密度加重値に近いと解釈されるので比較の際には注意を要する。一般に密度加重平均温度はわずかに非密度加重平均温度に比べ低く見積られる傾向にある。x/D=10, 20の上流では、下流の x/D=40, 60 に比べ、比較的实验値とよく一致している。ただし、PDF 法と FBF 法は最高火炎温度位置より外側でわずかに過大評価し、FCG 法は最大温度をわずかに過小評価する傾向にある。一方下流においては、PDF 法と LFM 法の予測結果に大きな差が見られた。PDF 法は高温領域の中心軸方向への移動が遅く、火炎長を長く見積もる傾向にあり、LFM 法はその逆となった。ただし、PDF 法で得られた温度分布は中心軸上温度分布において最大温度となる位置 (x/D=70) までは分布形状が実験値とよく一致した。一方、LFM 法は火炎中心部で高い温度を予測した。これらの点について、つぎに混合分率 PDF 分布から検討する。

図 4 と図 5 に PDF 法、FCG 法、FBF 法によって予測された x/D=10 と 60 における混合分率の PDF を示す。混合分率の平均値と分散は x/D=20 までいずれの解析手法とも同程度の値を予測した。一方、x/D=40 以降では、PDF 法は平均値と分散値とも LFM 法よりも大きな値を予測した(図示せず)。まず、前述の x/D=20 までの各手法による温度予測値の差(図 3)は、混合分率の 2 次モーメントまでがほぼ等しいことより、それ以上の高次モーメントに起因する。

図 4 から分かるように、PDF 法と FBF 法は滑らかな PDF を予測するのに対し、FCG 法は Z=0 と 1 の近傍で不連続となる。特に FCG 法の結果において、Z=0 での値が大きくなっている。言い換えると、混合分率の中間値の確率が低くなっていることを意味し、このことが FCG 法において温度を低く見積もる原因となっている。一方、PDF 法と FBF 法の火炎外側での温度の過大評価については、火炎構造および火炎伸長効果が考えられる。本解析で用いた火炎構造は反応速度無限大の一段不可逆反応に基づくものであり、火炎温度は実際の有限反応速度に基づく火炎温度よりも高く見積もられる。また、本解析では火炎構造への火炎伸長効果が考慮されていない。本火炎の量論混合分率は 0.048 であり、火炎構造の観点からこれらの影響は希薄側で強く出る。このことが PDF 法と FBF 法における希薄側での温度の過大評価の原因であると考えられる。

x/D=60 では、PDF 法は他の手法に比べ、幅広い PDF を予測した。このことは量論混合分率付近の確率が低いことを意味し、前述の火炎中心部での低い温度の原因となっている。本 PDF 法は混合を低く見積もる傾向にあり、このため中心軸上の最大温度以降において、温度の低下が弱まる傾向にある。この解析上の問題は現在の PDF 法が各格子に等しい数のモンテカルロ粒子を配置する手法であるためと思われる。この問題については粒子のラグランジ的移动を考慮するランジュバンモデル[4]手法が有効になると思われる。

つぎに、水素/窒素火炎の解析結果について検討する。こ

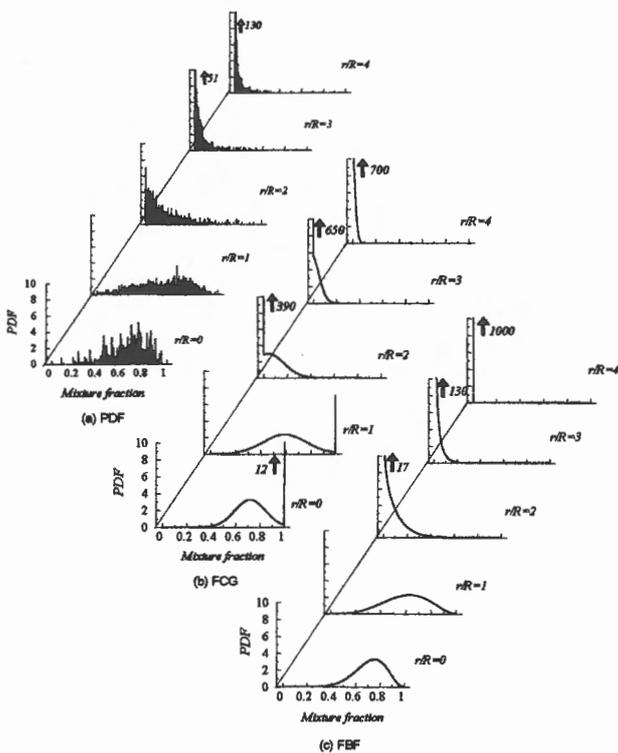


Fig.4 Predicted PDFs at x/D=10 (CH₄/H₂ flame).

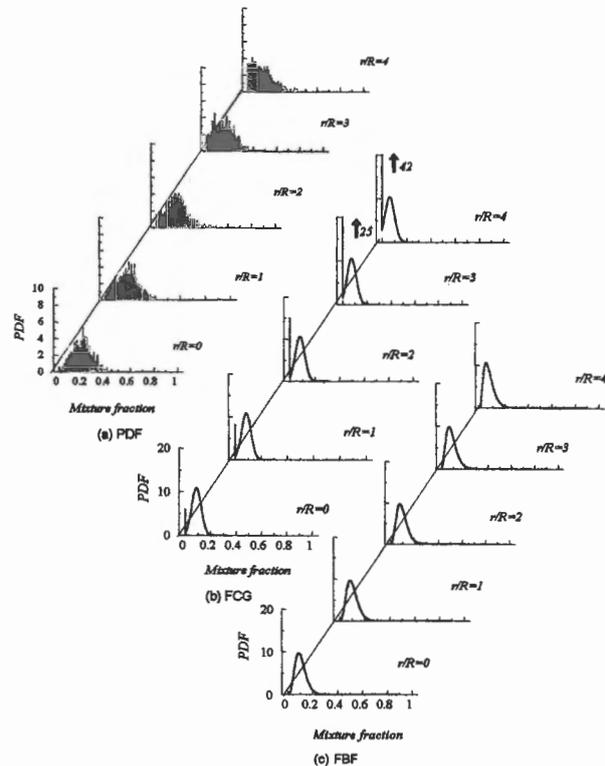


Fig.5 Predicted PDFs at x/D=60 (CH₄/H₂ flame).

の火炎の量論混合分率は 0.46 である。メタン/水素火炎の予測と同様に、流れ場は PDF 法, LFM 法の両手法において同等の予測値が得られた。このため、この場合においても温度分布と混合分率の PDF の予測結果についてのみ検討する。

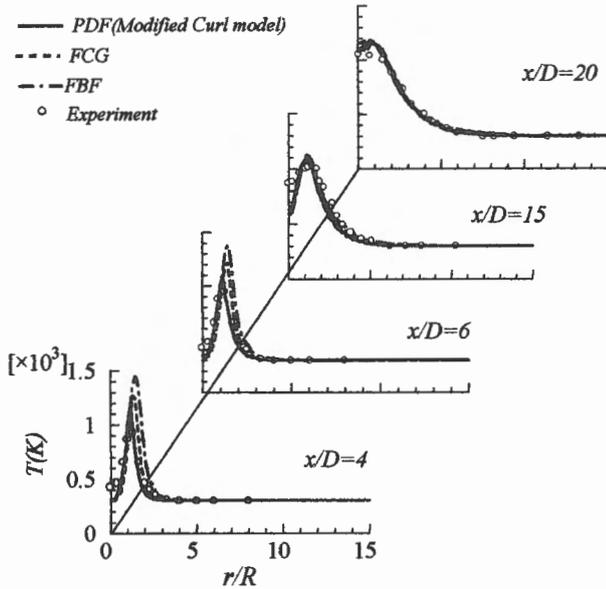


Fig.6 Radial profiles of temperature (H_2/N_2 flame).

図 6 に各手法によって得られた温度分布を示す。また実験値は Pt/Rh 熱電対による温度測定値である。図示した範囲において、PDF 法はよく実験値を予測している。ただし、メタン/水素火炎同様中心軸上の最大温度位置 ($x/D=20$) 以降において、温度が高く見積もられた。この点は今後解決すべき問題であると考えている。一方、LFM 法は上流の $x/D=4, 6$ において、わずかに温度を過大評価するが、その下流では実験値とよく一致した。いずれの手法とも図示した範囲においてよく実験値を予測していると判断できる。これは解析対象とした水素/窒素火炎が高速反応の仮定に適した火炎であることに基づくと考えられる[28, 29]。一方、燃料に水素が含まれることから選択拡散の効果が大きくなり、コンサーブドスカラーアプローチの仮定の一つである $Le=1$ が不適切となることが考えられるが、本火炎のように火炎長が短い場合には燃料の滞留時間が短く、選択拡散の影響が大きく出ないものと考えられる。

図 7 と図 8 は $x/D=4$ と 20 の PDF の予測結果を示している。 $x/D=4, r/R=1$ の混合初期において、PDF 法は平坦な PDF を予測している。これは分子混合モデルとして使用した修正カールモデルの特性に基づいている。すなわち、分子混合過程の演算において、ランダムに抽出された一対の粒子の混合分率が式 (11) に基づき一様確率でその中間のいずれかの値に割り当てられるためである。一方、LFM 法は中間値にガウス分布状の PDF を示している。すなわち、本火炎の量論混合分率 ($Z_{st} = 0.46$) 付近の確率が高い。この

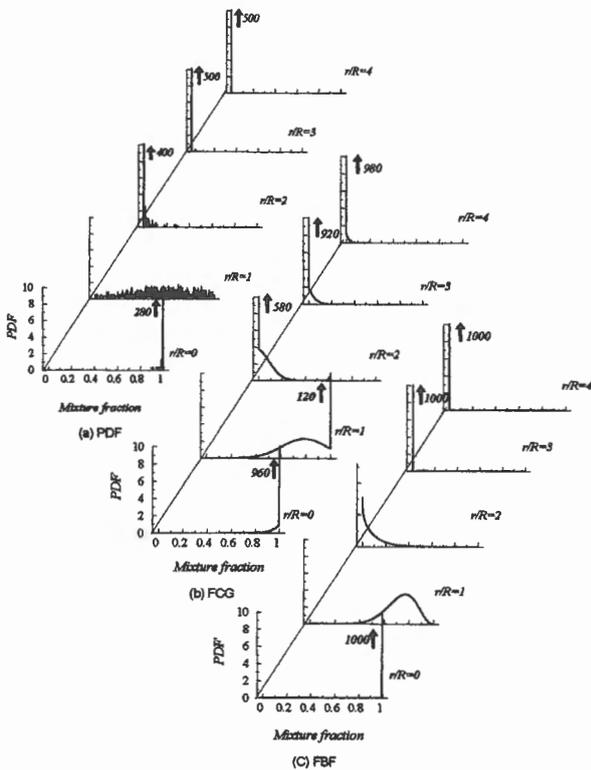


Fig.7 Predicted PDFs at $x/D=4$ (H_2/N_2 flame).

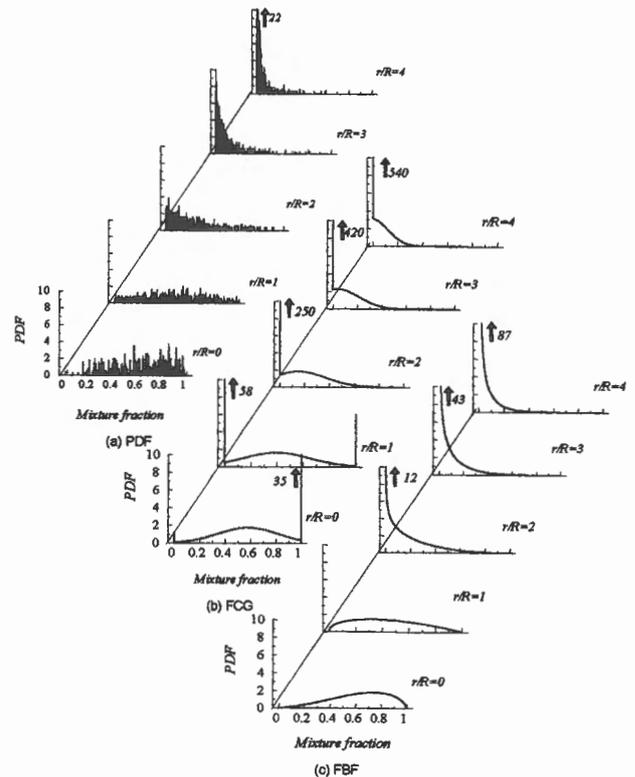


Fig.8 Predicted PDFs at $x/D=20$ (H_2/N_2 flame).

ことが、温度分布において、LFM法が温度をわずかに高く見積もる原因となっている。 $x/D=20$ ではいずれの解析結果とも混合分率の中間領域でPDFがよく一致している。このことが解析手法によらず中間領域に量論混合分率を持つ本火炎の火炎温度を精度よく予測した原因である。

最後に、以上の議論において、本PDF法を評価するためにLFM法によるスカラー場の解析結果(混合分率と温度)および温度の実験値との比較を行った。しかしながら、これらの手法によって解析されるスカラー場は流れ場の解析精度に強く影響を受ける。本研究では乱流燃焼場の解析に広く用いられている $k-\varepsilon$ 2方程式モデルに基づく流れ場の解析を行ったが、 $k-\varepsilon$ 2方程式モデルは燃焼の影響が少なくなる火炎長の短い乱流火炎で流れ場の解析精度が向上する傾向にある。メタン/水素火炎と水素/窒素火炎を比較すると、水素/窒素火炎は反応速度が速く火炎長が短くなるため、流れ場の解析精度が向上する。このことがスカラー場の予測に影響しているものと考えられる。流れ場の解析精度の改善法として、高次相関項のモデリングを必要としない速度-成分JPDF法がある。速度-成分JPDF法に基づく解析が更なる解析精度の向上に有効と思われる。

6. 結言

スカラー確率密度関数(PDF)法の解析精度を評価するために、乱流噴流拡散火炎を対象にコンサーブドスカラーアプローチに基づくPDF解析を行った。本研究ではPDF法の解析手法であるモンテカルロ法の粒子数の影響、分子混合モデルの影響(修正カルモデルとIEMモデル)、燃料の影響について検討した。その結果つぎの結論が得られた。

1. PDF法の解析手法であるモンテカルロ法は仮想粒子(モンテカルロ粒子)を使用する。このため粒子の使用個数が解析精度に影響する。ただし、粒子数の影響はフーリエ数、分子衝突確率、クーラン数を通して空間分解能と関連する。そこで空間分解能がほぼ同じ条件下で、粒子数の影響を検討した。この結果、PDF法において十分な解析精度を得るためには、必ず各輸送過程に寄与する粒子が存在することが必要であり、また総粒子数は分子混合項に支配されることが分かった。
2. PDF法において、分子混合項はモデリングを必要とする。そこで、本研究では修正カルモデルとIEMモデルの解析精度について検討した。両モデルはスカラー量の2次モーメント以下において同等のモデルである。ただし、IEMモデルは初期のPDF形状が保存される欠点がある。一方、修正カルモデルは高次モーメントの変化を予測できるが、一様等方性乱流場の分子混合に要求される正規分布への漸近を予測できない欠点がある。分子混合項の高度なモデリングが要求される。
3. 本研究で使用したPDF法はコンサーブドスカラーアプローチに基づくスカラーPDF法である。したがって、従来のフレームレットモデル(LFM)法と同レベルの解

析手法と言える。PDF法が直接PDFを求めるのに対し、LFM法はPDF分布形状を仮定する。そこで、量論混合分率が大きく異なる二つの火炎について、両手法による解析を行い、両結果を比較することでPDF法の解析精度について検討した。この結果、LFM法は燃料の種類(量論混合分率の差)により、解析精度に影響を受けるのに対し、PDF法は火炎中心軸上の最高温度が得られる位置の上流において、燃料の種類に因らず、精度よく予測できることが分かった。ただし、中心軸上の最高火炎温度以降において、混合が過小評価される問題が存在するため、解析手法の改良が必要である。

おもな記号

g	: 重力加速度
i	: 軸方向格子点
J	: 分子拡散流束
j	: 半径方向格子点
N	: 各格子におけるモンテカルロ粒子の総数
p	: 圧力
p'	: 変動圧力
P	: 確率密度関数
r	: 半径方向座標
st	: 量論条件
S	: 反応生成速度
t	: 時間
T	: 温度
u	: 軸方向速度
U	: 速度確率変数
v	: 半径方向速度
V	: 速度独立変数
x	: 軸方向座標
Z	: 混合分率独立変数
ζ	: 混合分率確率変数
ϕ	: 成分確率変数
ψ	: 成分独立変数
ρ	: 密度
τ	: 粘性応力
Δt	: 時間間隔
Δx	: 軸方向格子間隔
Δr	: 半径方向格子間隔
$\langle \rangle$: 数学的期待値またはアンサンブル平均
$\langle A B \rangle$: B で条件付けられた A の期待値
$\vec{\quad}$: ベクトル
$\bar{\quad}$: 密度加重平均
A''	: 密度加重平均からの変動量

謝辞

本研究に対し、貴重なご助言を賜った、豊橋技術科学大

工学学部小沼義昭教授に感謝の意を表します。

References

1. Tanahashi, M., Fujimura, M., and Miyauchi, T., *Proc. Combust. Inst.* 28: 529-535 (2000).
2. Sreedhara, S. and Lakshminisha, K. N., *Proc. Combust. Inst.* 28: 25-34 (2000).
3. Peters, N., *Prog. Energy Combust. Sci.* 10: 319-339 (1984).
4. Pope, S. B., *Prog. Energy Combust. Sci.* 11: 119-192 (1985).
5. Klimenko, A. Y. and Bilger, R. W., *Prog. Energy Combust. Sci.* 25: 595-687 (1999).
6. Thibaut, D. and Candel, S., *Combust. Flame* 113: 53-65 (1998).
7. Menon, S. and Jou W.-H., *Combust. Sci. Technol.* 75: 53-72 (1991).
8. Fureby, C. and Moller, S.-I., *AIAA J.* 33(12): 2339-2347 (1995).
9. Noda, S., Inoue, T., and Onuma, Y., *Trans. JSME* (in Japanese) B67-653: 226-233 (2001).
10. Lundgren, T. S., *Phys. Fluids* 10: 969-975 (1967).
11. Jones, W. P. and Launder, B. E., *Int. J. Heat Mass Transf.* 15: 301-314 (1972).
12. Jones, W. P. and Launder, B. E., *Int. J. Heat Mass Transf.* 16: 1119-1130 (1973).
13. Dopazo, C., *Phys. Fluids* 22: 20-30 (1979).
14. Pope, S. B., *Combust. Sci. Technol.* 28: 131-135 (1982).
15. Dopazo, C., *Phys. Fluids* 18: 397-404 (1975).
16. Pope, S. B., *Combust. Sci. Technol.* 25: 159-174 (1981).
17. Pope, S. B., *Annu. Rev. Fluid Mech.* 26: 23-63 (1994).
18. Jones, W. P., in *Prediction Methods for Turbulent Flows* (ed. Kollmann, W.), Hemisphere Publishing Corporation, (1980), pp.279-421.
19. Komiya, T., Master degree dissertation of Toyohashi University of Technology (in Japanese), (1990).
20. Taniyama, K., Master degree dissertation of Toyohashi University of Technology (in Japanese), (1996).
21. Chen, J.-Y., *Combust. Flame* 69:1-36 (1987).
22. Chen, H., Chen, S. and Kraichnan, R. H., *Phys. Rev. Let.* 63-24: 2657-2660 (1989).
23. Gao, F. *Phys. Fluids* A3(10): 2438-2444 (1991).
24. Girimaji, S. S., *Phys. Fluids* A4(12): 2875-2886 (1992).
25. Pope, S. B., *Theoret. Comput. Fluid Dynamics* 2: 255-270 (1991).
26. Gotoh, T. and Kraichnan, R. H., *Phys. Fluids* A5(2): 445-457 (1993).
27. Subramaniam, S. and Pope, S. B., *Combust. Flame* 115: 487-514 (1998).
28. Janicka, J. and Kollmann, W., *Proc. Combust. Inst.* 17: 421-430 (1979).
29. Bilger, R. W., in *Turbulent Reacting Flows* (eds. Libby, P. A. and Williams, F. A.), Springer-Verlag, Berlin, 65-113 (1980), pp.65-113.