

仮定 PDF 法を用いた水素火炎および既燃ガス co-flow 火炎の数値計算

Numerical Simulations for Hydrogen Flame and Vitiated Co-flow Burner using Assumed PDF Method

- 檜垣 優, 徳島大学, 〒770-8506 徳島市南常三島町 2-1, E-mail:y.higaki1993@gmail.com
- 木戸口 善行, 徳島大学, 〒770-8506 徳島市南常三島町 2-1, E-mail:kidoguchi@tokushima-u.ac.jp
- 名田 譲, 徳島大学, 〒770-8506 徳島市南常三島町 2-1, E-mail:ynada@tokushima-u.ac.jp
- Yu HIGAKI, Tokushima University, 2-1 Jousanzima, Tokushima-shi, Tokushima, 770-8506, Japan
- Yoshiyuki KIDOGUCHI, Tokushima University, 2-1 Jousanzima, Tokushima-shi, Tokushima, 770-8506, Japan
- Yuzuru NADA, Tokushima University, 2-1 Jousanzima, Tokushima-shi, Tokushima, 770-8506, Japan

In this study, we focus on the assumed PDF method to construct a turbulent combustion model that can reproduce the combustion of the three fluid mixtures. This method closes the averaged reaction rate term of the transport equation of the chemical species mass fraction by assuming PDF regarding variations in chemical species concentration, temperature, and enthalpy to be a single variable and a multivariable beta function. In this model, since the reaction rate is directly solved, it can be applied to a flame mixed with three fluids. Numerical simulations for H3 Flame, Sandia Flame D and JHC burner had been performed using the proposed method to verify the accuracy of the model, and to improve the accuracy of prediction. From the results obtained from the simulations, it was found that the numerical method in this study is appropriate as a combustion model to reproduce the combustion of three fluid mixtures.

1. 緒言

近年, 既燃ガスによる希釈効果に基づく低環境負荷燃焼技術が多く用いられている[1][2]. このため, 希釈火炎の数値計算が多く行われているが, これには, いくつかの解決すべき点が残されている. 多くの場合, 燃料および酸化剤は高速噴流として炉内に供給される. 噴流が周囲の既燃ガスを巻き込むことにより反応物は既燃ガスと混合し, 希釈される. この結果, 燃料, 酸化剤および既燃ガスの三流体の混合気が形成される. このような希釈された拡散火炎を数値的に再現するには, 三流体による混合現象を考慮する必要がある. 一方で, 通常の拡散火炎の数値計算では, 多くの場合, 混合分率を用いて混合現象を表現する. 混合分率は基本的に二流体混合を表すため, 既燃ガスを含めた三流体混合には適用できない. この欠点を克服するために, 現在多くの研究者により改良モデルの構築が試みられている[3][4].

本研究では, 三流体からなる混合気の燃焼を再現できる乱流燃焼モデルとして仮定 PDF 法[5-7]に着目する. この手法は, 化学種濃度と温度の変動をベータ関数などで仮定することで, 化学種質量分率の輸送方程式の平均反応速度項を閉じる手法である. この際, 反応速度を直接解くため, 三流体が混合した火炎においても適用可能である. 本報では, この仮定 PDF 法を RANS 計算に適用し, H3Flame[8], JHC バーナー[9]及び SandiaFlameD[10][11]を対象として, その精度を検証した.

2. 解析方法

2.1 仮定 PDF 法

ファブレ平均された化学種質量分率 \bar{Y}_α の輸送方程式は以下の式で表される.

$$\frac{\partial \bar{\rho} \bar{Y}_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \bar{u} \bar{Y}_\alpha) = \nabla \cdot (D + D_t) \nabla \bar{Y}_\alpha + \bar{S}_\alpha \quad (1)$$

ここで, 上付きのバーはアンサンブル平均を示しており, チルダはファブレ平均を表す. ρ は密度, u は流速, D は分子拡散係数, D_t は乱流拡散係数である. 平均反応速度項 \bar{S}_α は, 確率密度関数 (PDF) を用いると以下のよう表される.

$$\bar{S}_\alpha = S_\alpha(\hat{T}, \hat{Y}) P(\hat{T}, \hat{Y}) d\hat{T} d\hat{Y} \quad (2)$$

ここで, \bar{S}_α は反応速度項であり, $P(\hat{T}, \hat{Y})$ は温度 T と化学種質量分

率 Y の結合確率密度関数である. また, 上付きハットは確率変数を示している. 結合確率密度関数 $P(\hat{T}, \hat{Y})$ の形状をある一つの関数で表現することは困難であるため, Gerlinger[6]は温度と化学種質量分率を独立と仮定することで, 式(1)を閉じている. 一方で, 名田ら[7]はエンタルピーと化学種濃度を独立と仮定している. 以下, Gerlinger の手法を温度・化学種仮定 PDF 法 (TY 法), 名田らの手法をエンタルピー・化学種仮定 PDF 法 (HY 法) と呼び, 次節にて詳しく述べる.

2.2 温度・化学種仮定 PDF 法 (TY 法)

温度・化学種仮定 PDF 法 (TY 法) [6]では, 温度と化学種質量分率を独立と仮定し, 結合確率密度関数を以下の式で表す.

$$P(\hat{T}, \hat{Y}) = \bar{P}_T(\hat{T}) \bar{P}_Y(\hat{Y}) \delta(\hat{\rho} - \bar{\rho}) \quad (3)$$

ここで, $\bar{P}_T(\hat{T})$ は温度の確率密度関数を, $\bar{P}_Y(\hat{Y})$ は化学種質量分率の確率密度関数を示しており, それぞれベータ関数と多変数ベータ関数により仮定される. ベータ関数の形状は平均と分散の値により決定され, 多変数ベータ関数では各変数の平均と分散の和により決定される[5]. 式(4)に多変数ベータ関数を示す.

$$\bar{P}_Y(\mathbf{Y}) = \frac{\Gamma(\sum_{i=1}^{Ns} \beta_i)}{\prod_{i=1}^{Ns} \Gamma(\beta_i)} \left[\delta \left(1 - \sum_{i=1}^{Ns} \hat{Y}_i \right) \prod_{i=1}^{Ns} \hat{Y}_i^{\beta_i - 1} \right] \quad (4)$$

$$\beta_i = \tilde{Y}_i \left[\frac{\sum_{i=1}^{Ns} \tilde{Y}_i (1 - \tilde{Y}_i)}{\sigma_Y} - 1 \right]$$

ここで, $\Gamma(\beta_i)$ はガンマ関数を示している. σ_Y は化学種質量分率の分散の和であり, 以下の式で表される.

$$\sigma_Y = \sum_{\alpha=1}^{Ns} \bar{Y}_\alpha^2 \quad (5)$$

ここで, Ns は化学種の総数である. 式(3)において, $\delta(\hat{\rho} - \bar{\rho})$ はデルタ関数であり, 平均反応速度を求める際に密度 $\bar{\rho}$ を一定として扱うことを表している.

式(3)を用いることで, 式(2)は以下のように表すことができる.

$$\bar{S}_\alpha = S_\alpha(\hat{T}, \hat{Y}) \bar{P}_T(\hat{T}) \bar{P}_Y(\hat{Y}) \delta(\hat{\rho} - \bar{\rho}) d\hat{T} d\hat{Y} \quad (6)$$

本研究における TY 法では, 式(6)を用いて反応項を解く. この手

法は、水素を燃料とした超音速燃焼場において有効であることが示されている[7].

また、TY 法において使用する平均エンタルピーの保存式は以下の式(7)である.

$$\frac{\partial(\rho)\bar{h}}{\partial t} + \frac{\partial(\rho)\bar{u}_k\bar{h}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \bar{h}}{\partial x_k} \right) \quad (7)$$

式(7)の保存式を用いる場合、エンタルピー分散と温度分散の関係は以下 (式(8)) のように表せる.

$$\begin{aligned} \sigma_h &= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (\overline{Cp_{\alpha} Cp_{\beta} Y_{\alpha} Y_{\beta}} \sigma_T) \\ &+ \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \overline{Y_{\alpha} Y_{\beta}} (\overline{Cp_{\alpha} Cp_{\beta}} \bar{T}^2 + 2h_{form,\alpha} \overline{Cp_{\beta}} \bar{T} + \\ &h_{form,\alpha} h_{form,\beta}) \\ &+ \sum_{\alpha} \sum_{\beta} T'' \overline{Y_{\beta} Cp_{\alpha}} (2h_{form,\beta} \overline{Y_{\alpha}} + 2\overline{Cp_{\beta}} \bar{T} \overline{Y_{\alpha}} - \\ &\overline{Cp_{\beta}} T'' \overline{Y_{\alpha}}) \\ &+ \sum_{\alpha} \sum_{\beta} 2\overline{Cp_{\alpha} Cp_{\beta} Y_{\alpha} Y_{\beta}} T''^2 + \\ &\sum_{\alpha} \sum_{\beta} (\overline{Cp_{\alpha} Cp_{\beta} Y_{\alpha} Y_{\beta}} T''^2) \\ &+ \sum_{\alpha} \sum_{\beta} T'' \overline{Y_{\alpha} Y_{\beta}} (2\overline{Cp_{\alpha} Cp_{\beta}} \bar{T} + 2h_{form,\alpha} \overline{Cp_{\beta}}) \end{aligned} \quad (8)$$

TY 法では、エンタルピーの分散 σ_h から温度の分散 σ_T を得るために、式(8)において、すべての相関項を無視する. この結果、以下の近似式(9)を得る.

$$\sigma_T \approx \frac{\sigma_h}{c_p} \quad (9)$$

式(9)の導出の際、多くの項を無視する操作が行われる. この操作による計算精度への悪影響を回避するために、sensible エンタルピーの保存式 (式(10)) を用いる手法を考案する.

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho)\bar{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial(\rho)\bar{u}_k\bar{h}_s}{\partial x_k} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \bar{h}_s}{\partial x_k} \right) \\ &- \sum_{\alpha=1}^{Ns} h_{form,\alpha} \bar{S}_{\alpha} \end{aligned} \quad (10)$$

h_s は sensible エンタルピー、 S_k は反応速度である. 式(10)を用いる場合、エンタルピー分散と温度分散の関係式は以下(式(11))のようになり、近似式 (式(9)) を求めるために無視する相関項の数は式(8)と比べて少ない. これにより、計算精度の向上が期待される.

$$\begin{aligned} \sigma_{hs} &= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \overline{Cp_{\alpha} Cp_{\beta}} (\overline{Y_{\alpha} Y_{\beta}} \sigma_T) \\ &+ \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \overline{Cp_{\alpha} Cp_{\beta} Y_{\alpha} Y_{\beta}} \bar{T}^2 \\ &+ \sum_{\alpha} \sum_{\beta} T'' \overline{Y_{\alpha} Cp_{\alpha} Cp_{\beta}} (2\bar{T} \overline{Y_{\beta}} - T'' \overline{Y_{\beta}}) \\ &+ \sum_{\alpha} \sum_{\beta} 2\overline{Y_{\alpha} T''^2} \overline{Cp_{\alpha} Cp_{\beta} Y_{\beta}} + \\ &\sum_{\alpha} \sum_{\beta} \overline{Cp_{\alpha} Cp_{\beta}} (\overline{Y_{\alpha} Y_{\beta}} T''^2) \\ &+ \sum_{\alpha} \sum_{\beta} T'' \overline{Y_{\alpha} Y_{\beta}} (2\overline{Cp_{\alpha} Cp_{\beta}} \bar{T}) \end{aligned} \quad (11)$$

式(7)の保存式を用いる手法を TY_ht 法、式(10)の保存式を用いる手法を TY_hs 法としてそれぞれの計算精度を検証した.

一方で、温度と化学種濃度を独立と仮定しているため、式(6)の

平均反応速度には非現実的な条件における反応速度が含まれる. たとえば、燃料と酸素の濃度が十分高く、温度が漸熱火炎温度に近い状態の反応速度である. これは、平均反応速度に大きな誤差を生む原因となる.

2.3 エンタルピー・化学種仮定 PDF 法 (HY 法)

前節で述べた温度・化学種仮定 PDF 法 (TY 法) の欠点を取り除くために、以前の研究[7]においてエンタルピー・化学種仮定 PDF 法 (HY 法) が提案されている. この手法では、平均反応速度項は以下の式で表される.

$$\bar{S}_{\alpha} = S_{\alpha}(T(\hat{h}, \hat{Y}), \hat{Y}) P(\hat{h}, \hat{Y}) d\hat{h} d\hat{Y} \quad (12)$$

ここで、 $P(\hat{h}, \hat{Y})$ はエンタルピー h と化学種質量分率 Y の結合確率密度関数である. 平均反応速度項で用いる温度は確率変数であるエンタルピーと化学種質量分率から求められる. これにより、温度と化学種質量分率の相関を模擬できる. 結合確率密度関数 $P(\hat{h}, \hat{Y})$ は、エンタルピーと質量分率を独立として、以下の式で表される.

$$P(\hat{h}, \hat{Y}) = \bar{P}_h(\hat{h}) \bar{P}_Y(\hat{Y}) \delta(\hat{\rho} - \bar{\rho}) \quad (13)$$

ここで、 $\bar{P}_h(\hat{h})$ はエンタルピーの確率密度関数であり、ベータ関数により仮定される. 化学種質量分率の確率密度関数 $\bar{P}_Y(\hat{Y})$ には、TY 法と同じく、多変数ベータ関数を用いる. また、HY 法では温度の分散 σ_T は必要ないため、近似式 (式(9)) は使用しない. この点においても、HY 法は TY 法より優位と考えられる.

2.4 基礎方程式

本研究では、低マッハ数近似とアンサンブル平均により得られる質量、運動量、化学種質量分率の保存式 (式(1)), および化学種質量分率の分散の和 σ_Y の輸送方程式を基礎方程式とする. これに加え、エンタルピー \bar{h} もしくは sensible エンタルピー \bar{h}_s の保存式およびその分散の輸送方程式が解かれる. 本研究で取り扱う各手法で使用される式を以下の表 1 に示す. これらの式は境界層近似されており、乱流モデルとして標準 $k-\varepsilon$ モデル[12]を用いる. 乱流運動エネルギーの散逸率の係数 $C_{\varepsilon 2}$ は 1.8 とした.

Table 1 Governing equations employed in each method.

	エンタルピー	温度分散
TY_ht 法	全エンタルピー	式(9)
TY_hs 法	sensible エンタルピー	式(9)
HY 法	全エンタルピー	なし

3. 計算方法および計算領域

3.1 計算方法

本研究において保存式は境界層近似を施した放物型であるため、各保存式は TDMA(Tri-Diagonal-Matrix-Algorithm)を用いて解く. 計算対象は、水素・空気乱流拡散火炎である H3Flame、メタン・既燃ガス・空気の 3 流体乱流拡散火炎である JHC バーナー、およびメタンを用いた部分予混合火炎の SandiaFlameD である.

反応機構として、H3Flame には 4 化学種 (O_2, H_2O, H_2, N_2) を考慮する 1 段不可逆総括反応[13]を用いる. また、JHC バーナーと SandiaFlameD におけるメタンと空気の燃焼反応を再現するために、以下の表 2 に示す 4 段総括反応機構[14]を用いた. ここで、 A はアレニウスの式における頻度係数を、 n は温度の乗数、 E は活性化エネルギーを示している. この反応機構では、 $CH_4, O_2, H_2, CO, CO_2, H_2O$ の 6 化学種が考慮される. 仮定 PDF 法では、6 化学種の平均質量分率の輸送方程式と分散の和の方程式を解く.

乱流拡散係数については、乱流プラントル数と乱流シュミット数を H3flame では 0.7、JHC バーナーと SandiaFlameD では 0.6 とした.

Table 2 Methane/air 4step global mechanism

[cal-mol-cm-sec-K]				
No.	Reaction	A	n	E
1	$\text{CH}_4 + 0.5\text{O}_2 \Rightarrow \text{CO} + 2\text{H}_2$	2.474×10^9	0	1.255×10^5
2	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2$	3.00×10^5	0	1.255×10^5
3	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$	2.75×10^6	0	8.368×10^4
	$\text{CO}_2 + \text{H}_2 \Rightarrow \text{CO} + \text{H}_2\text{O}$	6.71×10^7	0	1.138×10^5
4	$\text{H}_2 + 0.5\text{O}_2 \Rightarrow \text{H}_2\text{O}$	2.501×10^9	0	1.464×10^5
	$\text{H}_2\text{O} \Rightarrow \text{H}_2 + 0.5\text{O}_2$	3.48×10^{13}	0	3.983×10^5

3.2 H3Flame [8]

本計算における H3Flame の計算領域は軸対称二次元領域で、中心軸方向に 640mm、半径方向に 120mm とした (図 1)。すべての計算範囲において格子は等間隔とし、格子間隔は 0.1 mm である。H3Flame では内径 8mm の中央ノズルから H₂ と N₂ の混合気 (体積比 1/1) が流入し、その周囲からは空気が流入する。混合気と空気の間には保炎用のパイロットノズルが設置されている。混合気のノズル出口流速は 34.8 m/s であり、パイロットガスの流速は 11.4m/s、空気の流速は 0.2m/s である。流入するパイロットガスの温度は、1880K とし、燃料および空気の温度は 293K である。

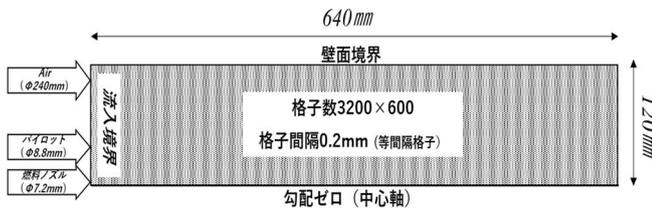


Figure 1: Numerical domain of H3Flame.

3.3 JHC バーナー [9]

JHC バーナーの計算領域は軸対称二次元領域で、計算領域の大きさは半径方向に 85 mm、流れ方向に 500 mm である (図 2)。JHC バーナーでは、中央に燃料ノズル (内径 4.25 mm)、その周囲に同軸の co-flow ノズル (内径 82 mm) が設置されている。co-flow ノズルから酸素を含む既燃ガスが供給される。また、JHC バーナーは内径 250mm の円形のダクトの中に設置されている。この結果、JHC バーナーでは、燃料、co-flow および空気の三流体が混合する。燃料はメタンと水素の混合燃料であり、体積濃度はそれぞれ 50% である。温度は 305 K、流速は 73.5 m/s としている。既燃ガスの温度は 1300 K であり、流速は 3.2 m/s である。既燃ガス中の残存酸素濃度は 9% である。またダクト内を流れる空気の温度は 305 K であり、その流速は既燃ガスと同じく 3.2m/s である。

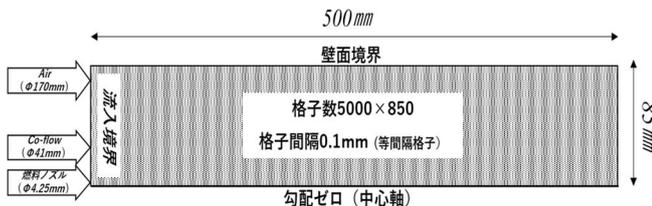


Figure 2: Numerical domain of JHC burner .

3.4 SandiaFlameD [10][11]

Sandia Flame D の計算領域も同じく軸対称二次元領域である。計算領域の大きさは半径方向に 150 mm、流れ方向に 1000 mm である (図 3)。内径 7.2 mm の中央ノズルから 300 K のメタン 25 vol.% と空気 75 vol.% の混合気が、内径 18.2 mm のノズルから温度 1880

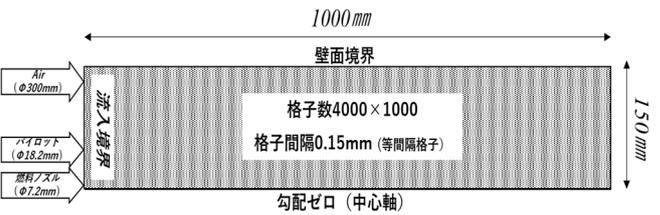


Figure 3: Numerical domain of Sandia Flame D .

4. 計算結果

4.1 H3Flame の計算結果

図 4 は HY 法による H3Flame の温度分布の計算結果を示す。図中(a)は HY 法、(b)は TY_ht 法、(c)は TY_hs 法の計算結果である。(c)の TY_hs 法では他の 2 手法に比べて最高温度が高く予測されていることがわかる。また、図 4(b)に示す TY-ht 法では、ノズル近傍の火炎幅が極端に狭くなっている。

図 5 は軸方向における温度分布を示している。プロットは実験による測定結果[8]、赤の実線は HY 法の結果、黒の実線は TY_ht 法の結果、黒の破線は TY_hs 法による計算結果を表す。図 4(c)に示したように、TY_hs 法はピーク温度を高く予測する。ただし、その差はわずかであり、HY 法、TY 法共に温度分布の計算結果は実験結果と良い一致を示す。

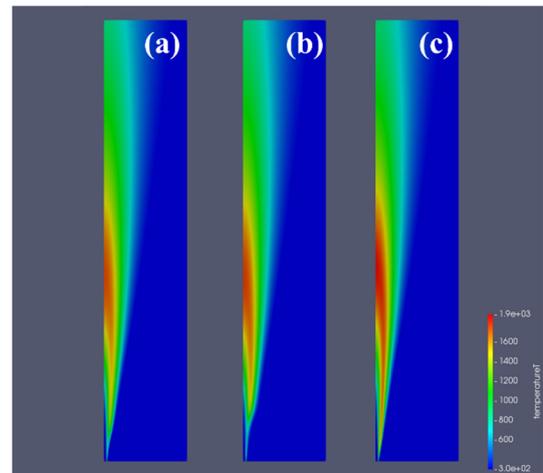


Figure 4: Temperature distributions of H3Flame ((a) HY method, (b) TY_ht method, (c) TY_hs method).

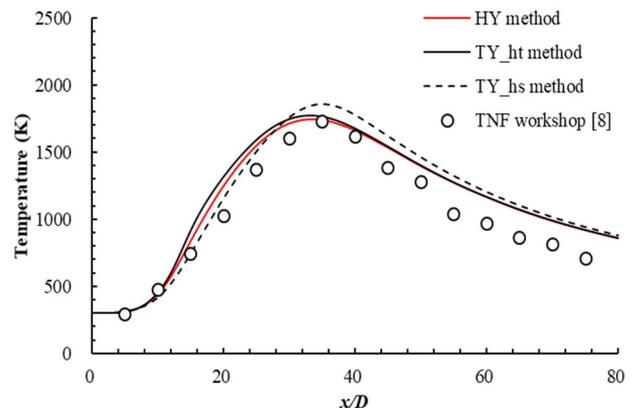


Figure 5: Axial distributions of temperature.

図 6 と図 7 は、 $x/D = 0.5$ と $x/D = 20$ での温度の半径方向分布を示している。プロットは実験による測定結果[8]、赤の実線は HY 法の結果、黒の実線は TY_{ht} 法の結果、黒の破線は TY_{hs} 法の計算結果を表す。TY_{ht} 法は、 $x/D = 0.5$ において半径方向のピーク温度を過小評価し（図 6）、 $x/D = 20$ では中心軸上の温度を過大評価している（図 7）。一方、TY_{ht} 法もしくは HY 法を用いた場合、 $x/D = 0.5$ における半径方向ピーク温度の予測に改善がみられる。また、これらの方法は $x/D = 20$ では比較的实验結果に良い一致を見せる。図 4(b)に示すように、TY_{ht} 法では、ノズル近傍の火炎幅が極端に狭くなることから、従来の TY_{ht} 法はノズル近傍の現象を再現できないことがわかる。

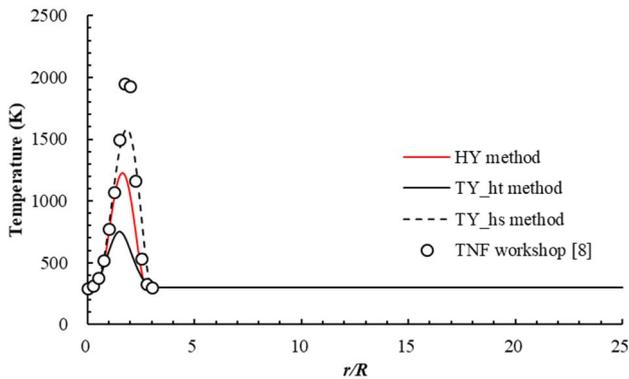


Figure 6: Radial distributions of temperature at $x/D = 0.5$.

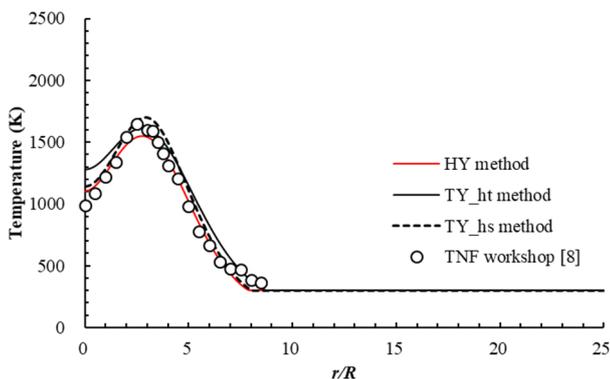


Figure 7: Radial distributions of temperature at $x/D = 20$.

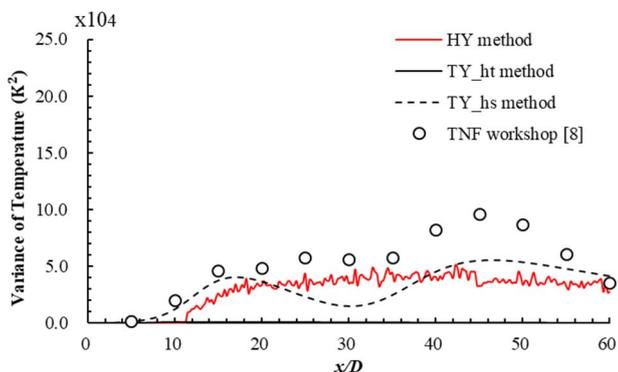


Figure 8: Axial distributions of temperature variance.

図 8 は軸方向における温度分散の分布を示している。プロットは実験による測定結果[8]、赤の実線は HY 法の結果、黒の実線は TY_{ht} 法の結果、黒の破線は TY_{hs} 法の計算結果を表す。TY_{ht} 法による計算結果は温度分散を大幅に過小評価しており、図中では、ほぼ横軸と重なって見える。一方、TY_{hs} 法と HY 法では実

験値に近い値を示すことが分かる。ここで、HY 法の値は細やかに振動しているが、これは、式(12)に示したように、温度の分散が確率変数から計算されるためである。式(11)で示したように、TY_{hs} 法の場合、温度分散を計算する式(9)において無視される相関項が少ない。このため、TY_{hs} 法の場合、TY_{ht} 法より温度分散の予測精度が向上したと考えられる。一方、HY 法では、エンタルピーの分散 σ_h から温度の分散 σ_T を得る近似式（式(11)）による影響を原理的に回避できるため、TY_{ht} 法より計算精度が向上したと考えられる。

4.2 JHC バーナーの計算結果

図 9 は HY 法による JHC バーナーの温度分布の計算結果を示す。図中(a)は HY 法、(b)は TY_{ht} 法、(c)は TY_{hs} 法の計算結果を示す。全ての手法による計算結果は類似している。

図 10 は流れ方向に 30mm 地点における半径方向温度分布を、図 11 は流れ方向に 120mm 地点における半径方向温度分布を示している。両図において赤の実線は HY 法の結果、黒の実線は TY_{ht} 法の結果、黒の破線は TY_{hs} 法の計算結果、青の実線は実験による測定結果[9]である。両図において、TY 法、HY 法による計算結果は、ともに温度ピークを 200K 程過大評価するが、比較的实验結果と良く一致する。図中、半径方向 30 mm から 50 mm の範囲において、全ての計算方法において温度は過大評価されている。これは、co-flow の乱流エネルギーの流入条件に起因する。JHC バーナーの場合、流入乱流場に関する初期条件が不明であるため、乱流エネルギーの流入条件を適切に与えることができない。今回は、co-flow の流入乱流エネルギーを調整することで、図 10 に示す解を得た。さらなる調整により、この範囲の予測精度は向上できると考えられる。

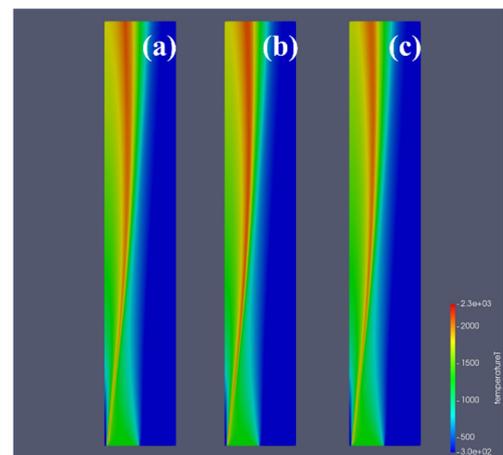


Figure 9: Temperature distributions of JHC burner ((a) HY method, (b) TY_{ht} method, (c) TY_{hs} method).

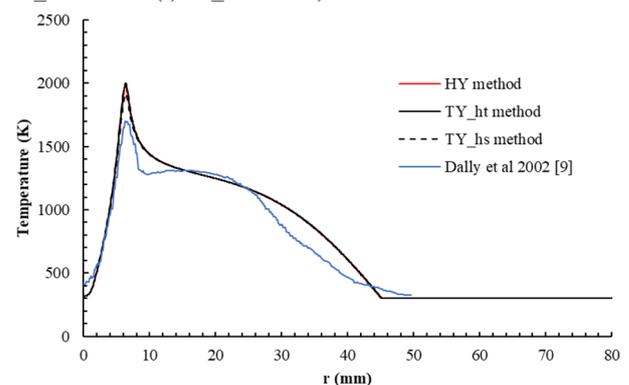


Fig. 10: Radial distributions of temperature at 30mm.

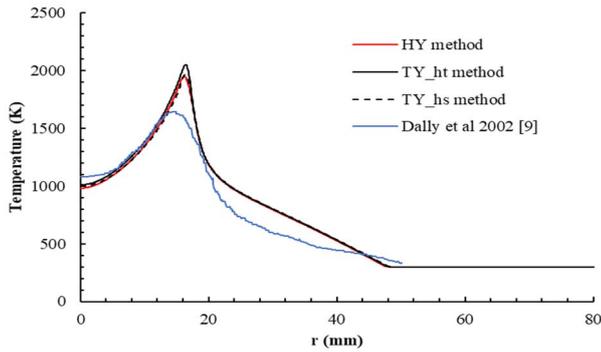


Fig. 11: Radial distributions of temperature at 120mm.

図 12 は流れ方向に 30mm 地点における半径方向の温度分散分布を、図 13 は流れ方向に 120mm 地点における半径方向の温度分散分布を示している。赤の実線は HY 法の結果、黒の実線は TY_{ht} 法の結果、黒の破線は TY_{hs} 法の計算結果、青の実線は実験による測定結果[9]である。両図において、TY_{ht} 法による計算結果は TY_{hs} 法及び HY 法の結果よりも小さい値を示す。これは図 8 に示した H3Flame の温度分散分布の傾向と一致する。このことから、TY_{ht} 法は温度分散を過小評価する傾向にあり、これは式(9)においてより多くの相関項が無視されているためと考えられる。ここで、図 12 に示すように、半径方向 8mm から 25mm の範囲で、HY 法の温度変動値がゼロになっている。これは、HY 法の数値計算手法が原因である。HY 法では、エンタルピーの分散がある程度大きい値の範囲で、エンタルピーの PDF を作成し、その PDF を基に温度分散を計算する。半径方向 8mm から 25mm の範囲ではエンタルピーの分散が小さいため、PDF 作成が省略された結果、この範囲の温度分散がゼロとなる。

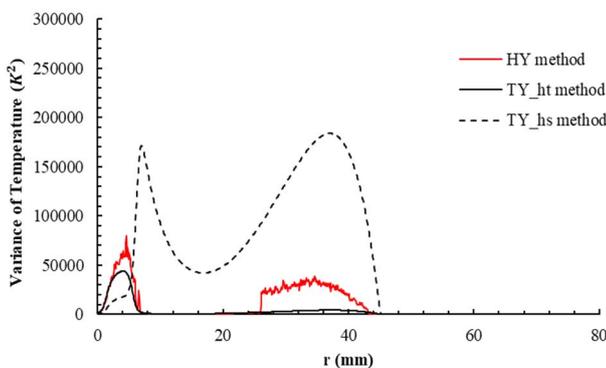


Fig. 12: Radial distributions of temperature variance at 30mm.

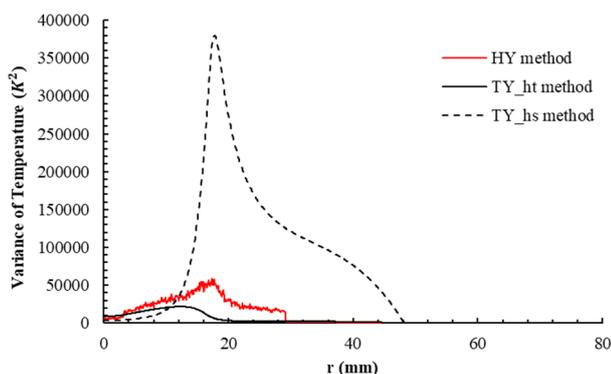


Fig. 13: Radial distributions of temperature variance at 120mm.

4. 3 SandiaFlameD の計算結果

図 14 は HY 法による SandiaFlameD の温度分布の計算結果を示す。図中(a)は HY 法、(b)は TY_{ht} 法、(c)は TY_{hs} 法の計算結果を示す。(c)の TY_{hs} 法による結果は他の 2 手法に比べて、ノズル近傍での高温領域の幅が広がっている。

図 15 は軸方向における温度分布を示している。プロットは実験による測定結果[10]、赤の実線は HY 法の結果、黒の実線は TY_{ht} 法の結果、黒の破線は TY_{hs} 法の計算結果を示す。TY_{hs} 法は、流入境界に近い部分 ($x/D=10\sim30$ 付近) で実験結果より極めて高い温度を示す。一方、TY_{ht} 法と HY 法では、TY_{hs} 法のような極端な温度上昇は無く、比較的高い精度の計算が行えている。

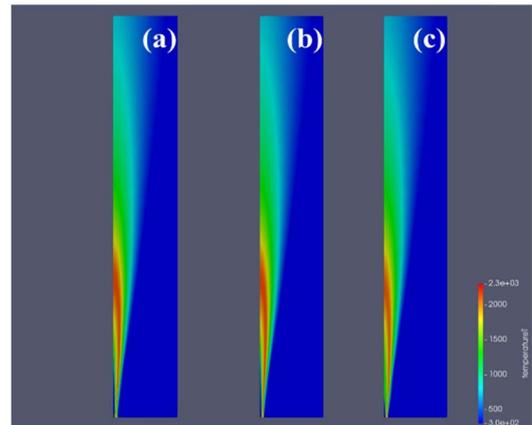


Fig. 14: Temperature distributions of SandiaFlameD ((a) HY method, (b) TY_{ht} method, (c) TY_{hs} method).

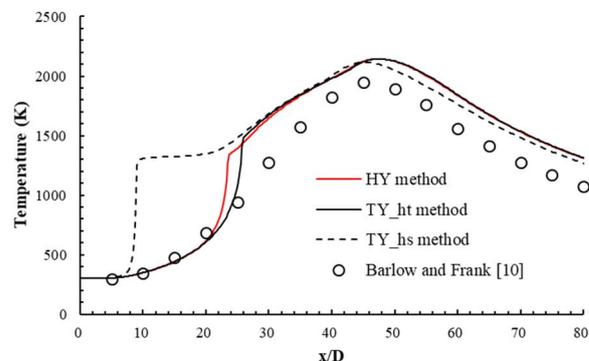


Fig. 15: Axial distributions of temperature.

図 16 は軸方向における温度分散の分布を示している。プロットは実験による測定結果[10]、赤の実線は HY 法の結果、黒の実線は TY_{ht} 法の結果、黒の破線は TY_{hs} 法の計算結果を表す。TY_{ht} 法は温度分散を大幅に過小評価する。一方、HY 法では $x/D=25$ 付近までは実験結果と良い一致を示し、その後、過小評価となる。TY_{hs} 法は $x/D=5$ 付近から急激に温度分散が上昇し、 $x/D=25$ 付近で極めて高い値を示す。

図 15 に示す TY_{hs} 法の上流部における温度の過大評価は Sandia Flame D で燃料として過濃混合気を用いたことと、TY 法の根本的な欠陥である温度と化学種質量分率の独立の仮定が招いた結果と考えられる。TY 法は独立の仮定により、高温状態における未燃混合気の状態を確率的に考慮し、反応速度を計算する。TY_{hs} 法では、図 8 に示すように比較的精度よく温度分散を予測できるため、高温状態における未燃混合気の状態確率が高く予測される。これにより、上流部での反応速度が増大し、温度は急激に上昇する。

さらに, sensible エンタルピーの保存式には反応速度項が含まれるため (式(10)), 反応速度の増大は急峻なエンタルピーの勾配を生む。これが更にエンタルピーの変動を増加させ, 温度の変動を増加させ (図 16), 反応速度を増大させる。一方, TY_ht 法では, 元々温度分散を過小評価する傾向にあるため (図 8, 図 12, および図 13), 高温状態における未燃混合気の使用率は低く, 急峻な温度上昇は生じない。また, HY 法では, 温度と化学種の相関をある程度模擬できることと, エンタルピーの保存式に反応速度項が含まれないため, 急峻な温度上昇が抑制される。この TY_hs 法の欠点は燃料に予混合気を使用した際に顕在化するものであり, 図 5 および図 9 に示すように, 純粋な乱流拡散火炎である H3Flame と JHC バーナーでは, TY_hs 法による温度の過大評価は生じない。

以上の結果から, 従来の TY_ht 法は温度分散を過小評価する傾向にあり, TY_hs 法は温度分散の予測精度を改善できるが, 予混合気が入るような燃焼場には適用できない。一方, HY 法は全てのバーナーに対して温度および温度分散分布において比較的实验値に近い値を示す。このように, 化学種濃度と温度の相関をある程度表現できる HY 法は独立を仮定した TY 法より総合的に高精度であることがわかる。

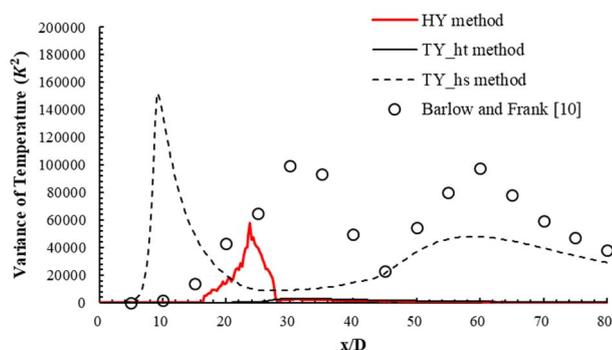


Fig. 16: Axial distributions of temperature variance.

5. まとめ

本研究では, 三流体混合を再現可能な仮定 PDF 法の精度を検証するために, H3Flame, JHC バーナーおよび SandiaFlameD に対して RANS 計算を行った。H3Flame と JHC バーナーの計算結果から, 二流体混合および三流体混合を伴う乱流拡散火炎を再現する燃焼モデルとして, sensible エンタルピーを用いた温度・化学種仮定 PDF 法とエンタルピー・化学種仮定 PDF 法は適切であることがわかった。さらに, SandiaFlameD の計算結果から, sensible エンタルピーを用いた温度・化学種仮定 PDF 法に対するエンタルピー・化学種仮定 PDF 法の優位性も確認できた。

本計算では計算負荷を考慮し 4 段の簡略化学反応機構[10]を用いており, これは計算精度悪化の原因となりえる。詳細化学反応機構を用いることで計算精度を向上できる可能性があることから, 今後, 反応機構の変更を行いさらなる計算精度の向上を目指す予定である。

参考文献

- (1) Szegő, G. et al., Combust. Flame 156: 429-438(2009).
- (2) Liu, F. et al., Combust. Flame 125: 778-787 (2001).
- (3) Ihme, M. et al., Flow, Turbulence Combust. 89: 449-464 (2012).
- (4) Gomet, L. et al., Combust. Flame 162: 668-687 (2015).
- (5) Girimaji, S., Combust. Sci. technol. 78: 177-196 (1991).
- (6) Gerlinger, P., Combust. Sci. technol. 175: 841-872 (2003).
- (7) Nada, Y. et al., JSME (B) 75: 2321-2328 (2009).
- (8) International Workshop on Measurement and Computation

of Turbulent Non premixed Flames.

<http://www.ca.sandia.gov/TNF/abstract.html>.

- (9) Dally, B. et al., Proc. Combust. Inst. 29: 1147-1154 (2002).
- (10) Barlow, R., and Frank, J., Proc. Comb. Inst. 27: 1087 (1998).
- (11) Schneider, Ch. et al., Combust. Flame 135:185-190 (2003).
- (12) Launder, E. and Spalding, B., Comput. Meth. Ap. Mech. Eng. 3: 269-289 (1974).
- (13) Terence P. Coffee, Anthony J. Kotlar, and Martin S. Miller, Combustion and Flame, 58 (1984) 59-67.
- (14) Wang, L. et al., Combust. Sci. Technol. 184: 259-276 (2012).