

乱流燃焼の PDF モデリング

Modeling on Probability Density Function for Turbulent Combustion

野田 進*

*豊橋技術科学大学工学部

Susumu Noda

*Toyohashi University of Technology

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

1 はじめに

乱流解析で開発されたモデリング手法が乱流燃焼においても用いられる。最も基本的なモデリング手法は RANS モデリングと同様に特性量を平均量と変動量に分け、両者を解析するモーメント法である。しかし、乱流燃焼解析では乱流燃焼特有の完結問題が発生する。式(1)で示す反応項に関連して生じる高次相関項は通常の乱流燃焼場では収束しない [1]。このため、何らかの対策が必要となる。

$$\begin{aligned} \bar{\dot{\omega}}_i = & \gamma_i W_j^{-1} \bar{\rho}^2 \bar{Y}_i \bar{Y}_j A \exp(E/R_0 \bar{T}) \\ & \times \left\{ 1 + \frac{\bar{\rho}'^2}{\bar{\rho}^2} + \frac{\bar{Y}_i \bar{Y}_j'}{\bar{Y}_i \bar{Y}_j} + \frac{2\bar{\rho}' \bar{Y}_i'}{\bar{\rho} \bar{Y}_i} + \frac{2\bar{\rho}' \bar{Y}_j'}{\bar{\rho} \bar{Y}_j} + \frac{E}{R_0 \bar{T}} \left[\frac{\bar{Y}_i \bar{T}'}{\bar{Y}_i \bar{T}} + \frac{\bar{Y}_j \bar{T}'}{\bar{Y}_j \bar{T}} + \left(\frac{E}{2R_0 \bar{T}} - 1 \right) \frac{\bar{T}'^2}{\bar{T}^2} \right] + \dots \right\} \quad (1) \end{aligned}$$

ここで、 $\dot{\omega}$ は反応速度、 γ は正味量論係数、 W は分子量、 ρ は密度、 Y は質量分率、 A は頻度因子、 E は活性化エネルギー、 R_0 は一般ガス定数、 T は温度である。また、添字 i, j は化学種を示し、上付きバーとプライム記号は平均値と変動値を示す。

一方、平均反応速度 $\bar{\dot{\omega}}_i$ は数学的期待値として、厳密に次式で与えられる。

$$\bar{\dot{\omega}}_i = \int \dot{\omega}_i(\phi) P(\phi) d\phi \quad (2)$$

ここで、 ϕ はスカラー量（濃度と温度）、 $P(\phi)$ は確率密度関数（PDF）である。下付きバーは独立変数（空間変数）を示す。したがって、何らかの手法で $P(\phi)$ を求めることが出来れば、反応項を閉じることができる。

また、高速反応およびルイス数 $Le=1$ の仮定が使用できる場合には、火炎構造は反応進行変数（予混合火炎の場合）もしくは混合分率（拡散火炎の場合）の関数として一意的に決定される。したがって、乱流燃焼場においてこれら変数の PDF が求めれば、スカラー場を決定できる（層流火炎片モデル）。このように乱流燃焼解析に現れるスカラー量の PDF を解析的に求めるために開発されたのが PDF モデリングである。

2 PDF モデリング

乱流燃焼の PDF モデリングには PDF の形状を仮定する手法と PDF を直接解析する手法がある。前者の代表的なものとして層流火炎片 (Laminar flamelet) モデル[2, 3, 4]があり、後者には PDF 法[5]がある。

2.1 層流火炎片 (Laminar flamelet) モデル

層流火炎片モデルでは低マッハ数流れの乱流燃焼に対し、高速反応およびルイス数 1 を仮定し、乱流燃焼を層流火炎片の集合として表現する。これは一般の乱流燃焼では反応特性時間が流れの特性時間に比べ極めて短く、また各化学種の拡散係数の差は小さく、さらに物質拡散係数と熱拡散係数が同程度と考えられる場合が多いためである。この仮定の下で、火炎片の構造は拡散火炎の場合は混合分率また予混合火炎の場合は反応進行変数の関数として一意的に与えられる。

2.1.1 レイノルズ平均と密度加重平均

層流火炎片モデルはモーメント法を基本としている。このため、特性量は平均値と変動値に分解される。ただし、乱流燃焼場では密度変動に起因する相関項を避けるために、密度加重平均 (ファール平均) が用いられる。以下にレイノルズ平均と密度加重平均の関係を述べる。

等温乱流場の RANS モデリングでは特性量 Ψ に対し、以下のレイノルズ分解が適用される。

$$\Psi = \bar{\Psi} + \Psi' \quad (3)$$

ここで、上付きバーはアンサンブル平均 (レイノルズ平均) を示し、プライム記号は変動値を表す。アンサンブル平均は実現値に対する算術平均もしくは数学的期待値として、次式で与えられる。

$$\bar{\Psi}(\mathbf{x}, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Psi^{(n)}(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi P(\Psi) d\Psi \quad (4)$$

ここで、 \mathbf{x} は位置ベクトル、 t は時間、 N はサンプル総数、 $P(\Psi)$ は確率密度関数を示す。

一方、乱流燃焼場においてレイノルズ分解を使用すると、密度変動に基づく相関項が現れ、解析が極めて複雑となる。このため、以下の密度加重平均 (ファール平均) が使用される。

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{x}, t) = \overline{\rho\Psi} / \bar{\rho} \quad (5)$$

したがって、特性量は密度加重平均とその変動量に分解される。

$$\Psi = \tilde{\Psi} + \Psi'' \quad (6)$$

密度変動を伴う乱流燃焼の基礎式に密度加重平均を適用すると、等温乱流場のモーメント式とほぼ同等な式が得られ、RANS モデリングで開発された解析手法が利用できる[6]。

2.1.2 流れ場の基礎方程式

乱流燃焼場は強い非等方性乱流場であり、 $k-\varepsilon 2$ 方程式モデルは不適と考えられるが、解析上の簡便さから乱流燃焼解析において今なお広く使用されている。本稿においても、 $k-\varepsilon 2$ 方程式モデルを基礎にした解析手法について説明する。 $k-\varepsilon 2$ 方程式モデルに基づく流れ場の基礎方程式は以下となる。

$$\text{連続の式: } \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (7)$$

$$\text{運動量保存式: } \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j + \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j'') = -\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j}\bar{\tau}_{ij} + \bar{\rho}g_i \quad (8)$$

ここで、 u は速度、 p は圧力、 τ_{ij} は粘性応力、 g は重力加速度である。また、レイノルズ応力 $\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j''$ は以下の渦粘性モデルが使用される。

$$\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j'' = -\mu_t \left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{2}{3} \left(\bar{\rho}\tilde{k} + \mu_t \frac{\partial\tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (9)$$

ここで、 μ_t は乱流粘性係数、 $\tilde{k} (\equiv \tilde{u}_i\tilde{u}_i''/2)$ は乱れ運動エネルギー、 δ_{ij} はデルタ関数である。

乱流粘性係数は乱流場の状態を表す特性量であり、次式で与えられる。

$$\mu_t = C_\mu \frac{\bar{\rho}\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (10)$$

ここで、乱れ運動エネルギー \tilde{k} とその消散率 $\tilde{\varepsilon}$ は以下の式で与えられる。

$$\frac{\partial\bar{\rho}\tilde{k}}{\partial t} + \frac{\partial\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{k}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} \frac{\partial\tilde{k}}{\partial x_j} \right) - \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j'' \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} - \bar{\rho}\tilde{\varepsilon} \quad (11)$$

$$\frac{\partial\bar{\rho}\tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \frac{\partial\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial\tilde{\varepsilon}}{\partial x_j} \right) - C_{\varepsilon 1} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{u}_i\tilde{u}_j'' \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} \quad (12)$$

以上の式に現れる経験定数 C_μ 、 $C_{\varepsilon 1}$ 、 $C_{\varepsilon 2}$ 、 σ_k 、 σ_ε は 0.09、1.44、1.92、1.0、1.3 が広く用いられている。流れ場は以下に示すスカラー場の解析と連立して解かれる。

2.1.3 乱流予混合燃焼の層流火炎片モデル [7, 8]

層流火炎片モデルの仮定（高速反応、ルイス数 1）の下で、層流予混合火炎片の構造は反応進行変数 c の関数 $Q(c)$ によって表すことができる。反応進行変数 c は次式で定義される。

$$c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u} \quad \text{もしくは} \quad c = \frac{Y_F - Y_F^u}{Y_F^b - Y_F^u} \quad (13)$$

ここで、 T と Y_F はそれぞれ温度と燃料質量分率である。また、添字 u と b はそれぞれ未燃気体および既燃気体を表す。反応進行変数の $c=0$ と $c=1$ は未燃状態および既燃状態を示す。したがって、乱流予混合燃焼場の反応進行変数の PDF、 $P(c; x, t)$ が求まれば、各スカラー統計量を次式より求めることができる。

$$\tilde{Q} = \frac{1}{\bar{\rho}(x, t)} \int_0^1 \rho(c) Q(c) P(c; x, t) dc \quad (14)$$

層流火炎片モデルでは PDF を仮定する。もっとも基本的なモデルは火炎片が非常に薄いとは仮定する Bray-Moss-Libby モデル (BML モデル) である。以下に、BML モデルを説明する。

BML モデルでは反応進行変数の PDF を二つのデルタ関数 δ で表現する。

$$P(c; x, t) = \alpha(x, t) \delta(c) + \beta(x, t) \delta(1 - c) \quad (15)$$

ここで、 α と β は未燃気体と既燃気体の存在確率を示す。また、確率の基本条件（確率密度関数の全空間における積分値は 1 となる）より、以下の関係が存在する。

$$\alpha(x, t) + \beta(x, t) = 1 \quad (16)$$

また、予混合火炎構造と PDF 式(15)から、以下の関係を導くことができる。

$$\beta(x, t) = \frac{\tilde{c}}{1 - \gamma(1 - \tilde{c})} \quad (17)$$

ここで、 γ は気体膨張因子であり、以下で与えられる。

$$\gamma = (\rho_u - \rho_b) / \rho_u \quad (18)$$

したがって、 \tilde{c} を解析で求めることによって、上式の関係から PDF を決定することができる。

乱流予混合燃焼場の反応進行変数 \tilde{c} の輸送方程式は次式で表される。

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{c}}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{c}}{\partial x_j} = - \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{c}''}{\partial x_j} + \tilde{\omega}_c \quad (19)$$

ここで、乱流流束 $\tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{c}''$ は以下の式で与えられる。

$$\tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{c}'' = \tilde{\rho} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) (\tilde{u}_j^b - \tilde{u}_j^u) \quad (20)$$

このモデル式は実験で確認されている逆勾配拡散を表現しており、この点で BML モデルは優れたモデルと言える。また、反応項 $\tilde{\omega}_c$ は次式で与えられる [9]。

$$\tilde{\omega}_c = \rho_u S_L I_0 g \tilde{c} (1 - \tilde{c}) / L_y \quad (21)$$

ここで、 S_L は層流燃焼速度、 I_0 は火炎伸長率、 g はモデル定数、 L_y は積分長さスケールである。

BML モデルに関連して、多くの研究がある。参考文献 [7, 9, 10] を参照されたい。

2.1.4 乱流拡散燃焼の層流火炎片モデル [3]

乱流拡散燃焼の層流火炎片モデルにおいて、層流拡散火炎片の火炎構造は混合分率 Z と量論スカラー散逸速度 χ_{st} の関数 $Q(Z, \chi_{st})$ として与えられる。したがって、乱流拡散燃焼の Z と χ_{st} の密度加重結合確率密度関数 (JPDF) $\tilde{P}(Z, \chi_{st})$ が求まれば、火炎中の各スカラー統計量 \tilde{Q} が求まる。ただし、一般に Z と χ_{st} は統計的独立性が仮定され、次式が使用される。

$$\tilde{Q} = \int_0^1 Q(Z, \chi_{st}) \tilde{P}(Z) \tilde{P}(\chi_{st}) dZ d\chi_{st} \quad (22)$$

なお、特性量 Ψ の密度加重 PDF は以下の式で定義される。

$$\tilde{P}(\Psi) = \frac{\rho(\Psi) P(\Psi)}{\bar{\rho}(\Psi)} \quad (23)$$

また、混合分率は以下の式で定義される。

$$Z = (f - f_o) / (f_F - f_o) \quad (24)$$

ここで、 f は元素の質量分率、結合関数などで示される保存スカラー量であり、添字 F と 0 は混合前の燃料と酸化剤を示す [1]。また、量論スカラー散逸速度 χ_{st} は火炎伸長効果を表す特性量であり、次式で定義される。

$$\chi_{st} = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial x_k} \right)_{st}^2 \quad (25)$$

ここで、 D は拡散係数である。

Z の確率密度関数 $\tilde{P}(Z)$ はスカラー量の乱流混合における間欠特性に基づき、クリップド・ガウス分布もしくは β 関数分布が仮定される [11, 12]。また、解析から求まる平均値 \tilde{Z} と分散値 $\tilde{g} (= \tilde{Z}^{\prime 2})$ によって、その形状は決定される。平均混合分率 \tilde{Z} と混合分率の分散 \tilde{g} の保存式は次式で与えられる。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Z}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}u_i\tilde{Z}) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_Z}\frac{\partial\tilde{Z}}{\partial x_i}\right) \quad (26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{g}) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}u_i\tilde{g}) = -\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_g}\frac{\partial\tilde{g}}{\partial x_i}\right) + C_{g1}\mu_t\left(\frac{\partial\tilde{Z}}{\partial x_i}\right)^2 - C_{g2}\bar{\rho}\tilde{g}/\tilde{k} \quad (27)$$

ここで、 σ_Z 、 σ_g は Z と g に対するシュミット数であり、ともに 0.7 が使用される。また、 C_{g1} 、 C_{g2} は経験定数であり、それぞれ 2.8、1.92 が広く用いられている。

また、クリップド・ガウス分布は以下の式で与えられる。

$$\tilde{P}(\underline{Z}) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\underline{Z}-\mu}{\sigma}\right)^2\right] [H(\underline{Z}) - H(\underline{Z}-1)] + A\delta(0) + B\delta(1) \quad (28)$$

ここで、 μ と σ はクリップド・ガウス分布の平均値と分散値であり、 $H(\underline{Z})$ はヘビサイド関数である。また、 A と B は次式で与えられる。

$$A = \int_{-\infty}^0 \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\underline{Z}-\mu}{\sigma}\right)^2\right] d\underline{Z}, \quad B = \int_1^{\infty} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\underline{Z}-\mu}{\sigma}\right)^2\right] d\underline{Z} \quad (29)$$

クリップド・ガウス分布の μ と σ は式(26)と式(27)の解析から得られた \tilde{Z} と \tilde{g} によって、次の関係を用いて決定される。

$$\tilde{Z} = \int_0^1 \underline{Z}\tilde{P}(\underline{Z})d\underline{Z}, \quad \tilde{g} = \int_0^1 (\underline{Z}-\tilde{Z})^2 \tilde{P}(\underline{Z})d\underline{Z} \quad (30)$$

また、 β 関数分布は次式で与えられる。

$$\tilde{P}(\underline{Z}) = \frac{\underline{Z}^{\alpha-1}(1-\underline{Z})^{\beta-1}}{\int_0^1 \underline{Z}^{\alpha-1}(1-\underline{Z})^{\beta-1} d\underline{Z}} \quad (31)$$

ここで、 α と β は次式で与えられる。

$$\alpha = \tilde{Z} \left[\frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{\tilde{g}} - 1 \right], \quad \beta = \alpha \frac{(1-\tilde{Z})}{\tilde{Z}} \quad (32)$$

量論スカラー散逸速度 χ_{st} の確率密度関数 $\tilde{P}(\chi_{st})$ は以下の対数正規分布が仮定される。

$$\tilde{P}(\chi_{st}) = \frac{1}{\chi_{st}\sigma_\chi\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma_\chi^2}(\ln\chi_{st} - \mu_\chi)^2\right\} \quad (33)$$

この分布の平均値 μ_χ は次式によって決定される。

$$\tilde{\chi}_{st} = \exp\left(\mu_\chi + \frac{1}{2}\sigma_\chi^2\right) = C_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{g} \quad (34)$$

ここで、分散値 σ_χ^2 と C_χ は経験値として、ともに 2.0 が使用される。また、簡略化のため、 χ_{st} の分布の広がりを見捨てる場合には、 $\tilde{P}(\chi_{st}) = \delta(\chi_{st} - \tilde{\chi}_{st})$ が使用される。また、燃焼が活発な場合には、しばしば χ_{st} の効果は無視される。

2.2 確率密度関数 (PDF) 法 [5, 13, 14]

乱流現象を支配する特性量の多点多時刻結合確率密度関数が得られれば、乱流現象を厳密に表現できる。しかし、無限に広がる時間と空間の結合確率密度関数(JPDF)を得ることは不可能である。このため、確率密度関数(PDF)法では一般に 1 点 1 時刻の JPDF の輸送を解析する。ただし、式(2)の反応速度 $\bar{\omega}_i$ は 1 点 1 時刻のスカラー量の JPDF が得られれば、厳密に解析できる。このため PDF 法は火炎構造に依存することなく解析できるため、乱流燃焼解析にとって極めて有望な解析法と言える。ただし、1 点 1 時刻の JPDF は物理空間と時間空間の情報(スペクトルと解釈できる)を含まないため、空間情報を必要とする拡散項にはモデルを必要とする。以下に、PDF 法の基本的な考えを述べる。

PDF 法はラグランジ的概念に基づいている。連続の式、運動量保存式、成分保存式、エネルギー保存式をラグランジ表記すると、以下となる。

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \quad (35)$$

$$\rho \frac{Du_i}{Dt} = \rho A_i \quad (36)$$

$$\rho \frac{DY_\alpha}{Dt} = \rho B_\alpha \quad (37)$$

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \rho C_h \quad (38)$$

ここで、 ρ は密度、 u は速度、 Y_α は化学種 α の質量分率、 h はエンタルピーである。また、 D/Dt は以下の物質微分を表し、流体粒子の移動を示す。

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u_k \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (39)$$

また、式(36)～(38)の右辺は以下である。

$$\rho A_i = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_k} + \rho g_i \quad (40)$$

$$\rho B_\alpha = -\frac{\partial J_{\alpha k}}{\partial x_k} + \dot{\omega}_\alpha \quad (41)$$

$$\rho C_h = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial J_{hk}}{\partial x_k} \quad (42)$$

ここで、 p は圧力、 τ_{ij} は粘性応力、 g は重力加速度、 $J_{\alpha k}$ は化学種 α の k 方向拡散流束、 $\dot{\omega}_\alpha$ は化学種 α の生成速度、 J_{hk} はエンタルピーの k 方向拡散流束である。

式(35)～(38)から以下の仮想流体粒子の輸送式を得る。

$$dx_i^* = u_i^* dt \quad (43)$$

$$du_i^* = A_i^* dt \quad (44)$$

$$dY_\alpha^* = B_\alpha^* dt \quad (45)$$

$$dh^* = C_h^* dt \quad (46)$$

ここで、星記号は仮想粒子の特性量を示す。したがって、式(43)～(46)は物理空間、速度空間、成分空間、エンタルピー空間における仮想粒子の移動を表す。個々の粒子は点密度関数 (fine grained PDF) $p^*(\underline{u}, \underline{Y}, h, \underline{x}; t)$ によって表される。

$$p^*(\underline{u}, \underline{Y}, h, \underline{x}; t) = \delta(\underline{u} - \underline{u}^*(t)) \delta(\underline{Y} - \underline{Y}^*(t)) \delta(h - h^*(t)) \delta(\underline{x} - \underline{x}^*(t)) \quad (47)$$

ここで、 δ はデルタ関数である。物理空間の各位置の JPDF は以下の条件付アンサンブル平均によって求めることができる。

$$P^*(\underline{u}, \underline{Y}, h; \underline{x}, t) = \frac{\overline{\delta(\underline{u} - \underline{u}^*(t)) \delta(\underline{Y} - \underline{Y}^*(t)) \delta(h - h^*(t)) \delta(\underline{x} - \underline{x}^*(t))}}{\overline{\delta(\underline{x} - \underline{x}^*(t))}} \quad (48)$$

式(48)は解析領域の位置 \underline{x} (解析では各格子) に存在する粒子の集合が JPDF を表現することを示している。

PDF 法には種々の特性量の JPDF を解析する方法が考案されているが、ここではスカラー PDF 法について説明する。離散表示の 1 点 1 時刻スカラー JPDF は点密度関数のアンサンブル平均として以下のように表現される。

$$P_N(\underline{\phi}; \underline{x}, t) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \prod_{i=1}^k \delta(\underline{\phi}_i - \underline{\phi}_i^{(n)}) \quad (49)$$

ここで、 δ はデルタ関数であり、 ϕ_i は化学種の質量分率とエンタルピーである。 k はスカラー量の総数である。 N は粒子の総数である。JPDF が求めれば、 $\underline{\phi}$ の任意の関数 $\tilde{Q}(\underline{\phi})$ の統計量をアンサンブル平均として求めることができる。

スカラー量 ϕ の密度加重 JPDF, $\tilde{P}(\underline{\phi}; \underline{x}, t)$ の輸送方程式は以下となる [5]。

$$\frac{\partial \tilde{P}(\underline{\phi})}{\partial t} + \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{P}(\underline{\phi})}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial \phi_\alpha} [S_\alpha(\underline{\phi}) \tilde{P}(\underline{\phi})] = -\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} \langle u_i^n | \underline{\phi} \rangle \tilde{P}(\underline{\phi})] + \frac{\partial}{\partial \phi_\alpha} \left[\left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_i^\alpha}{\partial x_i} \middle| \underline{\phi} \right\rangle \tilde{P}(\underline{\phi}) \right] \quad (50)$$

ここで、 S_α は化学種 α の生成速度 ($\dot{\omega}_\alpha = \rho S_\alpha$)、 J_i^α は化学種 α の i 方向への分子拡散による質量流束である。 $\langle A | B \rangle$ は B で条件づけられた A のアンサンブル平均を示す。式(50)の左辺第 1 項は非定常項、第 2 項は対流輸送項、第 3 項は反応項である。右辺第 1 項は乱流速度変動 (乱流拡散) 項であり、第 2 項は分子混合項である。左辺は厳密に扱うことができるが、右辺はモデルを必要とする。乱流拡散項は一般に以下の勾配拡散モデルが使用される。

$$\langle \rho \rangle \langle u_i^n | \underline{\phi} \rangle \tilde{P}(\underline{\phi}) = -\Gamma_T \frac{\partial \tilde{P}(\underline{\phi})}{\partial x_i} \quad (51)$$

ここで、 Γ_T は乱流拡散係数である。なお、速度とスカラー量の JPDF の輸送を考慮する場合には、乱流拡散項は厳密に扱える。

分子混合項については多くのモデルが提案されている。たとえば、カールモデルは異なる特性 (ϕ_a と ϕ_b) をもつ二つの粒子が衝突すると、瞬時に均質に混合され、両特性の平均値 ($\phi^* = [\phi_a + \phi_b]/2$) をもつ二つの粒子に分裂するというモデルである [15]。修正カールモデルはカールモデルにおいて衝突後の特性が両特性の中間に一様確率でランダムに割り当てられるものである [16]。また、平均値との交換干渉 (interaction by exchange with mean, IEM) モデル

は次式によって粒子の特性を平均値に向かって緩和させるモデルである [17].

$$\frac{d\phi^*}{dt} = -\frac{1}{2} C_\phi \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} (\phi^* - \bar{\phi}) \quad (52)$$

ここで, $C_\phi = 2$ である. この他にも写像完結モデル(mapping closure model) [18], ユークリッド最短系譜モデル(Euclidean minimum spanning trees model) [19]などが提案されている.

モデル化されたスカラーPDF 輸送方程式は流れ場の方程式と連立させることにより, モンテカルロ法で解析される [20, 21].

3 解析例

同軸噴流拡散火炎を対象とした層流火炎片モデルとスカラーPDF 法による解析例について説明する [22]. 燃料として体積比 1:2 の水素・窒素混合燃料 ($Z_{st}=0.46$) を使用し, 酸化剤として空気をを用いている. 内径 $D=6\text{mm}$ ($R=D/2$) の燃料管から 30m/s の燃料流を, その周囲の内径 14mm の環状管から 30m/s の高速空気流を, さらにその周囲に 3m/s の低速空気流を流した.

解析では軸対称, 定常, 境界層流れを考慮した. 流れ場は $k-\varepsilon 2$ 方程式モデルに基づいている. 層流火炎片モデル解析 (F.M.) では PDF の形状にクリップド・ガウス分布を使用し, また反応速度無限大, 一段不可逆反応を考慮した火炎構造を用いた. 一方, PDF 法の解析では二通りの解析を行った. 一つは層流火炎片モデルと同等な PDF 解析(I-PDF)であり, Z の PDF の輸送を解析している. もう一つの解析は有限反応速度を考慮した PDF 解析(F-PDF)である. 採用した反応機構は 9 化学種, 20 段反応からなる酸水素反応である. 分子混合モデルとして修正カールモデルを使用した. 解析では有限差分/モンテカルロ法を使用し, 各格子にはモンテカルロ粒子を 1000 個配置した. また, F-PDF 法による解析ではノズル境界にパイロット火炎を設置した. 一方, F.M. 法と I-PDF 法では混合の進行とともに反応速度無限大, 一段不可逆反応の火炎構造が適用されるため, 着火の操作は不要となる.

図 1 は半径方向温度分布であり, 図中の白丸記号は熱電対による実験値である. また図 2 は F-PDF 法の解析で得られた温度と OH 質量分率のスキッタープロットである. 図中に示された実線は反応速度無限大, 一段不可逆反応に基づく温度分布である.

図 1 の温度分布より, いずれの解析とも実験値をよく予測している. ただし, 上流の $x/D = 4, 6$ では解析結果は火炎の存在する高温領域で温度を過大評価する傾向にある. これは実験値が熱電対による測定であることから, ふく射および熱伝導による熱損失のために温度が低く測定されていることに起因すると思われる. また $x/D=40$ で PDF 法の温度が F.M.法に比べ, 過大評価されている. これはモンテカルロ法の解析精度が粒子数に依存するために, 下流で混合が過小評価されることに起因する.

図 2 の温度のスキッタープロットより, F-PDF 法が有限反応速度の効果を適切に表現していることが分る. すなわち, 温度スキッタープロットが $x/D=4$ で反応速度無限大, 一段不可逆反応の火炎構造に対応する温度分布付近に散乱点が集中しており, 火炎基部において反応が活発であることが分る. ただし, これはパイロット火炎による保炎に起因する. また, 過濃領域 ($Z > 0.4$) で, 散乱点が反応速度無限大の火炎構造における温度分布からわずかに低い温度領域に集中している. これは Barlow ら [23]によって実験的に確認された火炎基部での

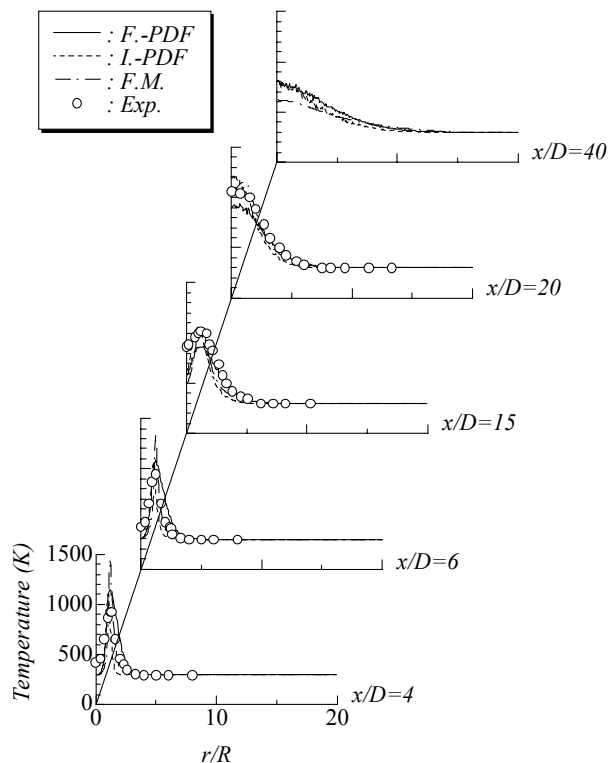


Fig. 1 Radial temperature profiles

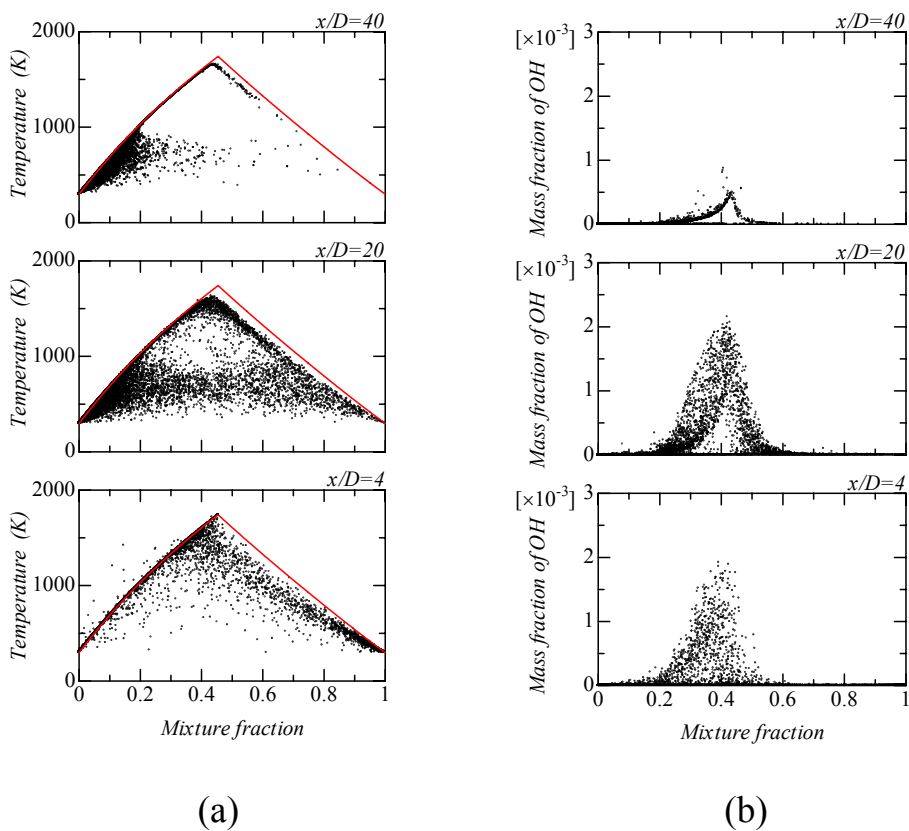


Fig.2 Scatter plots of temperature (a) and OH mass fraction (b). Solid lines in (a) correspond to the flame structure of one-step, irreversible reaction.

火炎伸長効果に伴う温度低下を再現しているものと考えられる。また、 $x/D=20$ では散乱点は二つの領域に集中する傾向にある。一つは反応速度無限大、一段不可逆反応に基づく燃焼領域であり、もう一つは非燃焼領域である。これは噴流の遷移領域における火炎伸長効果の増大に伴い、反応の活発な火炎から消炎までの火炎片がこの領域に混在していることを示している。この現象は Masri ら[24]によって実験的に確認されており、混合分率空間での双峰状 PDF として理解されている。 $x/D=40$ では非燃焼領域の散乱点は減少し、再び燃焼領域に集中する傾向にある。これは上流の消炎に続く再着火現象を再現しているものと考えられる。また、OH 質量分率のスキャッタープロットから、中間生成物である OH が火炎伸長効果に伴い、多く生成されることが分る。

4 まとめ

乱流燃焼のモデル解析は実用規模の燃焼を考慮すると不可欠である。モーメント法の一つである層流火炎片モデルは低次のモーメントでスカラー場の PDF を近似するが、深い物理的、化学的洞察の下に考案されたモデルであり、また解析負荷が極めて低いことから実用的なモデルと言える。ただし、近年レーザ計測、直接数値シミュレーションから層流火炎片モデルの仮定に対し、問題点が指摘され、改良が求められている。一方、PDF 法は PDF の輸送を直接解析によって求める。この手法は反応項を厳密に扱うことができるため、火炎構造に関係なく解析が可能となる。このため、乱流燃焼のモデル解析において有望な手法と考えられる。ただし、PDF 法ではモンテカルロ法による解析が行われるために、解析負荷が大きくなる問題がある。

本稿では PDF モデリングの最も基本的な内容についてのみ解説した。層流火炎片モデルに関連して、有限反応速度を考慮する 2 変数法[25]、反応進行変数と混合分率の組み合わせ法[26]、条件付モーメント・クロージャー (CMC)法[27]など上述の問題に対応して検討されている。PDF 法については、本稿でも取り上げたが層流火炎片モデルとの組み合わせ法[10,21]などが検討されている。興味のある読者は参考文献を参照されたい。

参考文献

- [1] Bilger, R.W., "Turbulent Jet Diffusion Flames", Prog. Energy Comb. Sci., Vol.1, (1976), 87-109.
- [2] Lockwood, F.C. and Naguib, A.S., "The Prediction of the Fluctuations in the Properties of Free, Round-Jet, Turbulent, Diffusion Flames", Comb. Flame, Vol.24, (1975), 109-124.
- [3] Peters, N., "Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion", Prog. Energy Comb. Sci., Vol.10, (1984), 319-339.
- [4] Bray, K.N.C. and Moss, J.B., "A Unified Statistical Model of the Premixed Turbulent Flame", Acta Astronaut., Vol.4, (1977), 291-319.
- [5] Pope, S.B., "PDF Methods for Turbulent Reactive Flows", Prog. Energy Comb. Sci., Vol.11, (1985), 119-192.
- [6] Jones, W.P. and Whitelaw, J.H., "Calculation Methods for Reacting Turbulent Flows: A review", Comb. Flame, Vol.48, (1982), 1-26.

- [7] Bray, K.N.C., "Turbulent Flows with Premixed Reactant", in *Turbulent Reacting Flows* (eds. Libby, P.A. and Williams, F.A.), Springer-Verlag, (1980), 115-183.
- [8] Peters, N., "Turbulent Combustion", Cambridge University Press, (2000), 87-91.
- [9] Bray, K.N.C. and Libby, P.A., "Recent Developments in the BML Model of Premixed Turbulent Combustion", in *Turbulent Reacting Flows* (eds. Libby, P.A. and Williams, F.A.), Academic Press, (1994), 115-151.
- [10] Veynante, D. and Vervisch, L., "Turbulent Combustion Modeling", *Prog. Energy Comb. Sci.*, Vol.28, (2002), 193-266.
- [11] Jones, W.P., "Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion", in *Prediction Methods for Turbulent flows* (ed. Kollmann, W.), Hemisphere Publishing Corporation, (1980), 379-421.
- [12] Libby, P.A. and Williams, F.A., "Fundamental Aspects", in *Turbulent Reacting Flows* (eds. Libby, P.A. and Williams, F.A.), Springer-Verlag, (1980), 1-43.
- [13] O'Brien, E.E., "The Probability Density Function (pdf) Approach to Reacting Turbulent Flows", in *Turbulent Reacting Flows* (eds. Libby, P.A. and Williams, F.A.), Springer-Verlag, (1980), 185-218.
- [14] Dopazo, C., "Recent Developments in pdf Methods", in *Turbulent Reacting Flows* (eds. Libby, P.A. and Williams, F.A.), Academic Press, (1994), 375-474.
- [15] Curl, R.L., "Dispersed Phase Mixing: I. Theory and Effects in Simple Reactors", *AIChE J.*, Vol.9-2, (1963), 175-181.
- [16] Dopazo, C., "Relaxation of Initial Probability Density Functions in the Turbulent Convection of Scalar Fields", *Phys. Fluids*, Vol.22-1, (1979), 20-30.
- [17] Dopazo, C., "Probability Density Function Approach for a Turbulent Axisymmetric Heated Jet. Centerline Evolution", *Phys. Fluids*, Vol.18-4, (1975), 397-404.
- [18] Pope, S.B., "Mapping Closures for Turbulent Mixing and Reaction", *Theoret. Comput. Fluid Dynamics*, Vol.2, (1991), 255-270.
- [19] Subramaniam, S. and Pope, S.B., "A Mixing Model for Turbulent Reactive Flows based on Euclidean Minimum Spanning Trees", *Comb. Flame*, Vol.115, (1998), 487-514.
- [20] 野田進, 井之上隆之, 小沼義昭, "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", *日本機械学会論文集 B*, Vol.67-653, (2001), 226-233.
- [21] 野田進, 西岡誠, "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", *日本燃焼学会誌*, Vol.129, (2002), 171-180.
- [22] 野田進, 堀谷良樹, "詳細反応機構を考慮したスカラー確率密度関数法による希積水素乱流噴流拡散火炎の解析", *日本機械学会論文集 B*, Vol.69-688, (2003).
- [23] Barlow, R.S., Dibble, R.W., Starner, S.H. and Bilger, R.W., "Piloted Diffusion Flames of Nitrogen-Diluted Methane near Extinction: OH Measurements", *Proc. Comb. Inst.*, Vol.23, (1990), 583-589.
- [24] Masri, A.R., Dibble, R.W. and Barlow, R.S., "The Structure of Turbulent Nonpremixed Flames

- Revealed by Raman-Rayleigh-LIF Measurements”, Proc. Energy Comb. Sci., Vol.22, (1996), 307-362.
- [25] Janika,J. and Kollmann,W., “A Two-Variables Formalism for the Treatment of Chemical Reactions in Turbulent H₂-Air Diffusion Flames”, Proc. Comb. Inst., Vol.17, (1979), 421-430.
- [26] Zhang,Y., Rogg,B. and Bray,K.N.C., “2-D Simulation of Turbulent Autoignition with Transient Laminar Flamelet Source Term Closure”, Comb. Sci. Tech., Vol.105, (1995), 211-227.
- [27] Klimenko,A.Y. and Bilger,R.W., “Conditional Moment Closure for Turbulent Combustion”, Prog. Energy Comb. Sci., Vol.25, (1999), 595-687.