濃度・温度揺らぎの確率評価による乱流燃焼反応解析技術

Turbulent Combustion-Reactive Flow Simulation Using the PDF (Probability Density Function) Method

技	術	本	部	鵜	飼		修*1	湯	淺	厚	志*2
				遠	藤	浩	之*3				

燃焼機器の信頼性向上や微量物質抑制等を実現するために,実験計測技術に加えて計算機による乱流燃焼現象の高精 度予測技術の果たす役割が重要である。化学反応と大小の様々な渦を伴う乱流とが相互に作用し合う乱流燃焼流は,流 れ,温度,濃度等の変動を特徴とする。従来の解析手法は,平均濃度・温度を基本に計算を行っているため,変動の効 果を的確に取り込むことができなかった。そこで,濃度や温度の変動を確率表現を用いて高精度に評価できる確率密度 関数法を基本とする実用的な高精度解析技術を開発し,内燃機噴霧燃焼問題等の実際問題へ適用した。

To improve the reliability of combustion devices and reduce pollutants, numerical simulation accurately predicting turbulent combustion phenomena plays an important role in addition to experimental techniques. Turbulent combustion flows are extremely complicated and chemical reactions and turbulence with many vortices of different sizes mutually interact. They feature fluctuations in velocity, temperature, species concentrations, etc. Conventional numerical methods cannot appropriately include such effects of fluctuations because they solve governing equations based only on averaged quantities. We develop practical simulation techniques based on the probability density function (PDF) method enabling us to treat fluctuations of concentrations and temperature with high accuracy by probabilistic expressions. We apply this PDF method to such practical problems as spray combustion in internal engines.

1.はじめに

燃焼機器の開発において,信頼性向上や微量物質抑制等を 実現するために,実験計測技術に加えて計算機による乱流燃 焼現象の高精度予測技術の果たす役割が重要になっている.

化学反応と大小様々な渦を伴う乱流とが相互作用する乱流 燃焼では、燃焼に伴う発熱やNO_x等の有害微量物質の生成は 温度、濃度等の場所、時間の変動に大きく依存する。従来の 解析手法は、平均濃度・温度を基本に計算を行っているため、 変動の効果を的確に取り込むことができなかった。

そこで、乱流中の濃度や温度の変動を確率表現を用いて評価できる PDF (Probability Density Function:確率密度関数)法⁽¹⁾と、燃焼反応を高速、高精度に計算するための参照表法⁽²⁾とを基に、実問題へ適用可能な高精度解析技術を開発した。本手法をメタン拡散燃焼問題で確認し、応用問題として内燃機噴霧燃焼問題に適用し、実用性を検証した⁽³⁾⁽⁴⁾.

2. 手法の概要

図1に示すように乱流燃焼解析を乱流解析部分と燃焼反応 解析部分とから構成し、乱流解析部分には当社内及び商用シ ステムで蓄積されてきた実績ある技術を用いる.一方、燃焼 反応解析部分には PDF 法を採用し、図1に斜体で示した本手 法の主要項目について以下に記述する.

2.1 基礎方程式(5)(6)

図1の燃焼反応解析部分では、乱流中での燃焼反応に伴う ガス成分の生成(消費)・発熱(吸熱)を表現する乱流燃焼モ デルが重要である。

```
*1 基盤技術研究所物理工学研究室主席研究員
```

*2 高砂研究所流体研究室





図1 濃度・温度揺らぎの確率的評価による乱流燃焼解析 手法の構成 従来法による乱流解析部分と PDF 輸 送方程式を解く燃焼反応解析部分とを連成させる乱流燃 焼解析手法の構成を示す. Diagram of turbulent combustion simulation based on the probabilistic estimation of fluctuations of species concentrations and temperature

例として、2種のガス成分 A、B の間の A+B \rightarrow C(生成物) なる前進反応を考える. 燃焼反応による成分 A の単位体 積当たりの生成速度(消費速度の逆符号) S_A は式(1)のように 温度,濃度の関数として表される.

$$\overline{S}_{A} = -\overline{k_{c}Y_{A}Y_{B}},\tag{1}$$

三菱重工技報 Vol. 38 No. 5 (2001-9)



図2 乱流噴流における位置で変化する燃料濃度 Y_fの PDF f (Y_f)の模式図⁽⁵⁾⁽⁶⁾ 燃料の乱流噴流での単純な混 合拡散において,位置毎に異なる形状をとる燃料濃度 Y_fと空気濃度 Y_oの PDF を示す. Schematic shapes of the PDFs of the fuel concentration changing at different positions in a turbulent jet

ここで,

 Y_{α} :成分 α (=A, B) の濃度

kc:反応速度定数(温度の指数関数)

計算上全ての現象の時間スケールに合わせることは非現実的なため、時間平均化操作を施すことにより、乱流燃焼モデルが得られる。実際の濃度 Y_a は時間平均 $\overline{Y_a}$ と平均からの変動成分 Y'_a を用いて式(2)で表される。

$$Y_a = \overline{Y_a} + Y'_a \tag{2}$$

式(2)から式(1)の時間平均項を変形すると式(3)が得られる。 $\overline{S}_A = -\overline{k_c Y_A Y_B} = -\overline{k_c} \overline{Y_A} \overline{Y_B} - \overline{k_c} \overline{Y'_A Y'_B}$

$$-\overline{Y_A} \ \overline{k'_c Y'_B} - \overline{Y_B} \ \overline{k'_c Y'_A} \tag{3}$$

上式の右辺第2~4項に現れる変動成分の積の平均値は2 次モーメント(分散)であり、3次以上の高次項は無視している.

実現象を模式的に確率表現で示したのが図2で、燃料の乱 流噴流での単純な混合拡散における燃料濃度 Yと空気濃度 Y。 の確率密度関数 (PDF) を表している. PDF f(Y)とは,成 分濃度 y ($0 \le y \le 1$) が $Y_1 \le y < Y_2$ の範囲にある確率がその 積分 $_{Y_1} f(Y) dY$ で与えられる関数である。 $Y_o = 1 - Y_f$ によ り、 Yoは Yoの左右が反転した分布をとる。図2の位置 a は周 囲の空気を連行する領域で、Yfではゼロ、Yoでは1である確 率が最も高く、他も同様に、b~dの各位置で Yo, Yfがある 濃度をとる確率を示している.従来法では、図2中に▲、△ で示した平均値 (期待値),例えばbの位置では, Y_{f} = 0.34, Y_o=0.66 を用いて式(3)が右辺第1項のみで規定され る.しかし、実際には、燃料濃度 Y_f が 0 $\leq Y_f \leq 0.7$ の範囲に わたって図に示す確率で存在し得るため、式(3)中の高次モー メントの影響により、平均値のみによる場合と比べて大きな 差が生じる。PDF 法は、PDF を正確に算出することで、平均 や任意の高次モーメントを簡単に求めることができるため、 式(3)を正確に計算できる点が優位な手法である。ここで、あ る時間 t,場所 x における濃度,温度を確率変数(T, Y_{a})と する PDF を $f(T, Y_A, T_B; x, t)$ と表記する。各保存式から導



出されるこの $f(T, Y_A, T_B; \mathbf{x}, t)$ を未知変数とした濃度-温度 結合 PDF 輸送方程式が、PDF を直接正確に算出するために 解くべき基礎方程式となる⁽¹⁾⁽³⁾⁽⁴⁾.

2.2 温度-濃度結合 PDF 輸送方程式の計算法

図1に示すように $k-\varepsilon$ 乱流モデルを用いた乱流解析と PDF 輸送方程式を解く燃焼反応解析とを密度を媒介として連成さ せる. PDF 輸送方程式の数値解析法として、質量及びスカラ ー (T, Y_a) を属性として持ち、流れに乗って移動する多数個 の確率粒子の統計量として PDF を近似するモンテカルロ法に 基づく解法⁽¹⁾を用いている.また、図3に示すように、各計算 セルの確率粒子数を一定値に保つ制御により計算精度の安定 化と計算負荷の均一化を図り、かつ成分数 α の大きな実機の 多次元問題も合理的な計算時間で計算可能とした.

2.3 参照表法

PDF 法では統計的に有意な多数個の確率粒子毎にそのスカ ラー (T, Y_a) に基づく化学反応計算を行うが、粒子単位の直 接計算には莫大な時間を要する.従って、実用問題に PDF 法 を適用するには化学反応計算の高速化が不可欠であり、効率 的な参照表法 (Look-up Table Method)⁽²⁾を採用した.

参照表法では、対象とする化学反応系において実現可能な すべての初期温度・ガス成分 (T, Y_{α})の化学反応による変化 量 ($\Delta T, \Delta Y_{\alpha}$)を予め計算し、データとして保持しておく.

特

集

ここでは、Chenらのオリジナルの手法⁽²⁾を改良し、3種以上 の流入境界を持つ系にも適用可能な参照表法を開発した.

メタンの燃焼反応系を対象とする参照表を用いて、5000 個 の異なる初期ガス成分に対する化学反応計算を行った.その 結果,従来からの直接積分法(Direct Integration Method) の計算時間 25.6 秒に対して参照表法は 0.124 秒となり、200 倍以上の高速化が得られた.また,直接積分法による計算値 を基準解とする各ガス成分の相対誤差の平均値は 10⁻⁶以下と なり、本手法が良好な計算精度を持つことを確認できた.

3. 乱流燃烧解析事例

3.1 二次元軸対称メタン一空気乱流拡散火炎の検証解析

図4(a)に示すメタンー空気乱流拡散火炎(⁷⁾の二次元軸対称 解析で,実測データとの比較で PDF 法の精度を検証した.

本解析ではセル分割数4000で、セル当たり50個の計 200000個の確率粒子を使用し、粒子単位の燃焼計算には参照 表法を用いた.計算の時間ステップは10⁻⁵sに固定した.

バーナ中心軸上の z/D = 40, 45 の位置で直接求めた温度の PDF を図 4 (b)に示す. これら中心軸上の各位置での PDF を 基に計算した期待値が図 4 (c)に示す流れ(z)方向の平均温度 分布であり, (b)の各 PDF のピーク位置の温度はそれぞれ(c) のz/D = 40, 45 での平均温度にほぼ対応している. 本解析結 果は,ほぼ定常とみなせる状態からの1000時間ステップにわ たる時間平均である. 前述のように PDF からは任意の高次モ ーメントを計算でき,図には示していないが,本解析で得ら れた PDF から求めた温度の分散値が平均温度分布と同様に実 測データを精度良く再現できたことにより, PDF 法の解析精 度が優れていることを確認できた.



図4 メタンー空気乱流拡散火炎の解析
同心円状の2重管で構成されるメタンー空気乱流拡散火炎のバーナ形状及び温度の
PDF,バーナ中心軸上の流れ方向温度分布を示す.
Calculation of the methane-air turbulent diffusion flame

3.2 ディーゼル噴霧燃焼三次元解析

PDF 法と米国 Los Alamos 国立研究所開発の代表的なエンジン燃焼解析コード KIVA3 とを連成させて,表1に示す2種の計算条件でのディーゼル噴霧燃焼の三次元解析を実施した。

定容空間内噴霧燃焼観察試験を対象とした計算モデルを図 5(a)に,噴射開始後1.75 msec における KIVA3 単体及び PDF 法による計算結果の比較を図5(b)に示す.図5(b)(1) のガス温度分布は高温部分の存在領域は両者で一致している が,KIVA3 単体では噴霧中心まで高温になっているのに対し て,PDF 法では高温域が噴霧周辺に分布しておりより実現象 に近い.図5(b)(2)の NO 濃度分布では,KIVA3 単体では高 温域全体で NO が生成されるため NO の高濃度域が広いが, PDF 法では周辺の高温域の一部で NO 濃度が高く,他は全体 的に低くなっている.KIVA3 単体では NO 生成を2章の式(3) 右辺第1項のみで評価するため,平均温度が高くなると kcの

cylinder diesel engine experiment									
	定容空間	単筒エンジン試験							
燃料	n-ドデカン	DI (軽油相当)							
燃料噴射量 (mm ³)	40	480							
初期圧力 (ata)	30	3.25							
初期温度 (K)	850	309							
乱流モデル	標準 k-ε モデル								
化学反応式	アレニウ	アレニウス型総括反応式							

表1 噴霧燃焼解析の計算条件

200mm

図 5

Computational conditions of spray combustion in the constant volume and in the single cylinder diesel engine experiment



(1) 温度分布

(k) 2400 🏢

メッシュ(三次元, 14 400 セル)及び噴射開始後 1.75 ms にお けるガス温度・NO 濃度分布の計算結果の比較を示す. Three-dimensional calculation of spray combustion in the constant volume



図6 単筒エンジンの噴霧燃焼三次元解析 計算メッシュ (三次元,9024 セル) 及び KIVA3 単体と PDF 法により計算された NO 濃度の時間変化の比較を示す. Three-dimensional calculation of spray combustion in the single cylinder diesel engine

急激な増大の効果が直接現れるが, PDF 法では式(3)右辺の高 次項を含めて評価するため, 高温域と NO 濃度が完全には対応しない.

この特徴により,従来法では不十分であった乱流燃焼にお ける微量有害物質生成予測精度の向上が図れる.

単筒エンジン試験噴霧燃焼解析の計算モデルを図6(a)に、 両手法によるエンジン内NO濃度の時間変化の比較を図6(b) に示す.最終のNO濃度値として、実測値約1000ppmに対 して、KIVA3単体の63ppmの3倍以上の201ppmが得られ た.これはガス成分の燃焼反応のみによる改善効果としては 非常に大きいが、噴霧燃焼のキーとなる液滴の運動・蒸発等 のモデルや反応系の改良により定量性の更なる改善の目途を 得ている.

以上, KIVA3 単体の解析結果及び観察結果との比較で, PDF 法を用いて定性的・定量的により実現象に近い解析結果 が得られ,実用問題に対する PDF 法の有効性が示された.

4.おわりに

濃度や温度の変動を直接取り扱える PDF 法を用いた実用的 な高精度乱流燃焼解析技術を開発し,基本的な解析精度及び 実用問題への適用可能性を検証した.

さらに,計算精度を維持しつつ化学反応計算時間を大幅に 短縮できる参照表法の開発により,実規模の問題への本手法 の適用が可能となった. 詳細な燃焼反応系と変動の効果を考慮できる PDF 法の特徴 とにより, NOx 等の微量反応生成物の予測精度の大幅な向上 が期待できるため, 今後, ディーゼルエンジン, ガスタービ ン燃焼器, ボイラ等の実規模の解析に適用する予定である. また, 任意の乱流モデルや燃焼反応系との連成が容易であり, 幅広い実用問題への適用と更なる高精度化を進める.

参考文献

- Pope, S. B., Pdf Methods for Turbulent Reactive Flows, Prog. Energy Combust. Sci., Vol.11 (1985) pp. 119
- (2) Chen, J.-Y. et al., Pdf Modeling of Turbulent Nonpremixed Methane Jet Flames, Combust. Sci. and Tech., Vol.64 (1989) pp.315
- (3) Yuasa, A. et al., Numerical Simulation of Spray Combustion in Diesel Engines Using the PDF Method, Abstracts of Work-in-Progress Posters 28th International Symposium on Combustion 5-B07 (2000-7) pp. 443
- (4) 湯淺厚志ほか,確率密度関数法を用いた乱流拡散火炎の 解析,日本機械学会流体工学部門講演会講演論文集 No.99-19 (1999-10) p.231
- (5) Libby, P. A. et al., Turbulent Reacting Flows, Academic Press, (1994) pp.1-62, 375-474
- (6) Warantz, J. et al., Combustion, Springer, (1996) pp.157 -204
- (7) http://www.ca.sandia.gov/tdf/3rdWorkshop/ M3APilot97

特

隼