

## ■解説論文／REVIEW PAPER■

Flamelet approach において用いるデータベースの作成方法に関するレビュー  
A Brief Review on How to Make a Database for Flamelet Approach横井 智記<sup>1\*</sup>・齋藤 泰洋<sup>1</sup>・松下 洋介<sup>1</sup>・青木 秀之<sup>1</sup>・MALALASEKERA, Weeratunge<sup>2</sup>YOKOI, Satoki<sup>1\*</sup>, SAITO, Yasuhiro<sup>1</sup>, MATSUSHITA, Yohsuke<sup>1</sup>, AOKI, Hideyuki<sup>1</sup>, and MALALASEKERA, Weeratunge<sup>2</sup><sup>1</sup> 東北大学 大学院工学研究科 化学工学専攻 〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-07

Graduate School of Engineering, Tohoku University, 6-6-07 Aoba, Aramaki, Aoba-ku, Sendai, Miyagi 980-8579, Japan

<sup>2</sup> Wolfson School of Mechanical, Electrical and Manufacturing Engineering, Loughborough University, Loughborough, Leicester LE11 3TU, United Kingdom

2018年5月13日受付; 2018年9月26日受理/Received 13 May, 2018; Accepted 26 September, 2018

**Abstract:** The simulation of turbulent combustion has been of more importance to develop practical combustors. The flamelet (or tabulated chemistry) approach is one of the techniques to estimate combustion reaction rate and to describe turbulent combustion field. This approach can reduce computational cost in comparison with the reduced reaction schemes because the combustion reaction rate is just looked up from the pre-calculated database. The difficulty of the flamelet approach comes from the variety of how to make this pre-calculated database. In the present study, we reviewed previous researches in terms of the flamelet approach and summarized the ideas to make the database for the flamelet approach. First, the fundamental combustion reaction models such as the detailed reaction model and skeletal model were introduced. And then, how to generate the dataset for the database in flamelet, flamelet progress variable, and flamelet generated manifolds models were mentioned. Moreover, how to process the dataset into the database for the turbulent combustion simulation was pointed out. Finally, apart from making the database, the treatment of the database in the computational fluid dynamics was described briefly.

**Key Words:** Flamelet approach, Tabulated chemistry, Combustion simulation

## 1. 緒言

数値シミュレーションによる燃焼場の予測は、ガスタービンやエンジン、ボイラといった製品の開発において、近年ますます重要になってきている。燃焼反応を定量化するための燃焼モデルには、詳細反応モデル[1]、Skeletal 反応モデル[1]、簡略化反応モデル[2]、Eddy dissipation concept (EDC) [3]、Thickened flame model [4]、G-equation 法[5]、CMC 法[6]、Flamelet approach [5, 7]など様々なモデルが存在する。これらのなかで、全化学種の分布を考慮して生成速度を与える詳細反応モデルは最も解析精度の高い燃焼モデルであるものの、使用メモリ量が非常に大きいことおよび計算負荷が高いことから Large eddy simulation (LES) と併用することは難しい。そこで、近年 Flamelet approach が注目されている。Flamelet approach では、実際に解析する燃

焼場よりも単純な系において詳細反応モデルによる解析を行い、その結果をデータベース化し、燃焼に関する二次元あるいは三次元流体計算(以後、Computational fluid dynamics (CFD) 計算と称する)においてデータベースを参照することで燃焼反応の計算負荷を低減しつつ詳細な化学種の分布を得ることが可能である。本稿では、このデータベースを作成するうえで必要な燃焼モデルである詳細反応モデルおよび Skeletal 反応モデルを解説するとともに、Flamelet approach におけるデータベースの作成方法を解説する。

## 2. 詳細反応モデルおよび Skeletal 反応モデル

詳細反応モデルでは、流れの解析とともに解析領域において以下の(1)–(5)を繰り返すことで、燃焼解析を行う。

- (1) 解析領域内の各化学種のモル濃度を計算する。
- (2) 詳細化学反応機構に基づき、温度、圧力および各化学

\* Corresponding author. E-mail: satoki.yokoi@gmail.com

- 種のモル濃度を用いて各素反応の反応速度を計算する.
- (3) 各素反応の反応速度から各化学種の正味の生成速度を計算する.
  - (4) 各化学種の質量分率の保存式を解き, 各化学種の質量分率分布を計算する.
  - (5) エネルギーもしくはエンタルピーの支配方程式を解き, 解析領域内の温度分布を計算する.

Skeletal 反応モデルでは, (2) の詳細化学反応機構の代わりに Skeletal 反応機構を用いる. 詳細反応モデルとの違いは, 反応機構において注目している特性 (例えば着火遅れ) を表現するために不要な素反応および化学種が簡略化 (lumping) もしくは無視されている点である.

各素反応の反応速度を計算する際には, 連立常微分方程式を解く必要がある. Flamelet approach におけるデータベースを作成する場合には Variable coefficient ordinary differential equations solver (VODE) [8]を使用している例[9]や Double-precision VODE (DVODE) を使用している例[10, 11]が散見される.

### 詳細化学反応機構と Skeletal 反応機構

化学反応に関わる化学種と素反応をまとめた反応機構は詳細化学反応機構もしくは Skeletal 反応機構として多数報告されている. ここで, 素反応は異なる系における反応においても普遍である反応である. 燃焼反応を対象とした詳細化学反応機構として最も化学種の少ない詳細化学反応機構は Miller and Bowman [12]の提案した 8 種の化学種および 20 本の素反応からなる水素の燃焼反応であろう. 近年, メタン噴流の燃焼において使用例が多いのは Gas research institute が提供している GRI-Mech [13]であるものの, メタンといった Natural gas の詳細反応機構は他にも散見される [14, 15]. 液体燃料の詳細化学反応機構としては, エタノール[16-18]や n-dodecane までの詳細化学反応機構[19, 20]が知られている. なお, n-dodecane までの詳細化学反応機構は 2885 化学種, 11754 素反応で構成されるため, 燃焼解析に用いるのは難しい. そこで, Flamelet approach のデータベースを作成するときには, 数百化学種, 2000 素反応程度の Skeletal 反応機構が用いられている. 例えば, 158 化学種かつ 1804 素反応の n-heptane [21]および 130-257 化学種かつ 1521-2395 素反応の n-dodecane [22-24]の Skeletal 反応機構がある.

### 3. Flamelet approach

Flamelet approach は Flamelet モデル[5, 25]に端を発するモデル群である. このアプローチでは実際に解析する燃焼場よりも単純な系において詳細反応モデルによる解析を行った結果をデータベース化し, CFD から計算した火炎構造を特徴づけるパラメータを用いて, データベースを参照することで密度, 粘度, 温度, 各化学種の質量分率といった物理量を推定する. そのため, Tabulated chemistry とも

呼ばれる. このアプローチに属するモデルには, Laminar flamelet [5, 25], Flamelet progress variable (FPV) [26], Flamelet generated manifolds (FGM) [7], Flame prolongation of ILDM (FPI) [27], Unsteady flamelet [28, 29]などがある.

Peters [5, 25]は Flamelet モデルを提案した. Flamelet モデルでは, 拡散燃焼において火炎面の近傍に現れる現象が対向流拡散火炎の相似形であると仮定する. ここで, 対向流拡散火炎は燃料と酸化剤の流れが対向する燃焼場である. Bilger et al. [30]にならない Eq. (1) のように炭素, 水素および酸素の元素分率の和を規格化すると, 対向流拡散火炎において  $Z$  は燃料側が 1 で, 酸化剤側が 0 となるとともに, 燃料側から酸化剤側にかけて単調に減少する.

$$Z = \frac{2(Y_C - Y_{C,2})/M_C + (Y_H - Y_{H,2})/2M_H - 2(Y_O - Y_{O,2})/M_O}{2(Y_{C,1} - Y_{C,2})/M_C + (Y_{H,1} - Y_{H,2})/2M_H - 2(Y_{O,1} - Y_{O,2})/M_O} \quad (1)$$

ここで,  $Z$  は Mixture fraction (混合分率) であり, 燃焼構造を特徴づけるパラメータの一つである. その他の重要な対向流拡散火炎の特性は, 流入速度を変えることで, 火炎における化学種および熱の対流流出の影響を考慮することが可能である点である. これにより, 乱流燃焼における火炎の伸長の効果を表現することができる. Peters は Eq. (2) のようにスカラ消散率  $\chi$  を定義することにより, 流入速度が火炎の伸長に及ぼす影響を評価することを提案した.

$$\chi = 2D \left[ \left( \frac{\partial Z}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial Z}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial Z}{\partial z} \right)^2 \right] \quad (2)$$

スカラ消散率は混合分率の勾配の大きさと拡散速度で表されるため, 各流入速度の条件に対して燃焼領域内で分布を持つ. しかしながら, 燃料および酸化剤の化学種の組成, 圧力, 温度を変えなければ, 量論当量比におけるスカラ消散率の値は各流入速度に対して一意に定まる. そこで, 対向流拡散火炎を様々な流入速度の条件で詳細反応モデルを用いて解析し, 混合分率と量論当量比におけるスカラ消散率を用いて整理することで, Flamelet table と呼ばれるデータベースを作成する. ここで, 対向流拡散火炎は軸対称性より, 一次元の火炎片方程式と呼ばれる式により計算することが可能である. Flamelet table の作成後, CFD 計算では混合分率の保存式を解くことで, 解析領域内の混合分率の分布を取得することが可能である. また, 層流および Direct numerical simulation の CFD 計算においても, Eq. (2) を用いてスカラー消散率を計算することが可能であり, LES においては  $Z$  のファール平均である  $\bar{Z}$  を用いて同様の形でモデル化される. したがって, CFD 計算において取得した混合分率とスカラ消散率を用いて Flamelet table から物理量を参照することが可能である. なお, CFD 計算において混合分率を解く場合, 各分子の拡散速度の違いを考慮することができないため, Flamelet table を作成する際には拡散係数を全化学種で一定として計算するべきであると考えられる. そのため, 近年, 各化学種の拡散係数を考慮したデータベースを構築し, 混合分率を用いて参照する例[31]

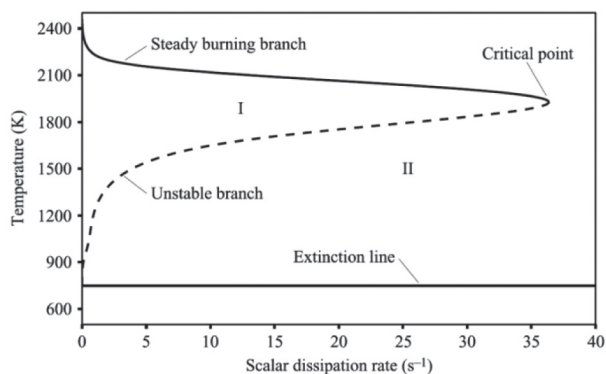


Figure 1 Locus of maximum temperature in the steady-flamelet [26].

があるものの、この方法を採用するべきではないだろう。拡散係数を一定とする場合、物質拡散の速度と熱拡散の速度が等しいと仮定し、ルイス数を 1 として計算する例が多い[32-36]。なお、メタンではルイス数がほぼ 1 であることが確かめられている[37]。

#### Flamelet progress variable (FPV) モデル

FPV モデル[26]は、Flamelet モデル[25]における問題点を改善したモデルである。FPV モデルでは、Flamelet モデルと同様に一次元の火炎片方程式を解き、対向流拡散火炎の計算結果をデータベース化する[26, 38, 39]。Flamelet モデルとの違いは、データベースの参照に用いるパラメータにスカラ消散率ではなく Progress variable (反応進行変数) を用いる点である。反応進行変数を用いる理由は、スカラ消散率では一意に表すことのできない火炎構造が存在するためである。Figure 1 に、一次元の対向流拡散火炎の解析結果について最大温度を量論当量比におけるスカラ消散率により整理した結果を示す。火炎構造は三種類 (steady burning (stable), unstable および extinction) に分けられ、スカラ消散率 ( $\chi_{st} < 35$ ) に着目すると、取り得る火炎構造が三種類あることがわかる。そこで、Pierce and Moin [26]はデータベースの参照に用いるパラメータとして反応進行変数を利用することを提案した。反応進行変数を利用することにより三種類の火炎構造を表すことが可能であり、消炎や再着火といった不安定な火炎の現象を表現することが可能になる。

#### Flamelet generated manifolds (FGM) モデル

FGM モデル[7, 40, 41]は intrinsic low-dimensional manifold (ILDM) 法[42]を拡張したモデルである。また、FPI モデル[27]も FGM モデルと同様に ILDM 法に基づくモデルであり、現在は FPI モデルと FGM モデルは同じモデルとみなされている[43]。ILDM 法は反応機構をベクトル場として捉え、部分平衡と擬定常状態を仮定することで、反応に関わるパラメータの次元を数学的に削減する手法であり、FGM モデルに理論的背景を与えている。2000 年代初期に

おける FGM モデルでは、一次元の火炎片方程式を解き、予混合伝播火炎の計算結果[7, 40, 41]もしくは対向流予混合火炎の結果[40, 44]をデータベース化していた。2010 年以降、FGM モデルにおいても対向流拡散火炎の結果をデータベース化する研究[31, 45]が現れた。現在は、FGM モデルの適用範囲内の一部を FPV モデルと呼んでいる状況になっている。したがって、FPV モデルと FGM モデルは CFD 計算におけるモデルの利用において全く同じように取り扱うことが可能である。FGM モデルでは、CFD 計算においてデータベースを参照するためのパラメータを Control variable と定義している。FGM モデルを開発しているグループは、FGM モデルでは火炎構造を特定するための次元を拡張すること、つまり Control variable の数を増やすことを許容しており、その点で FPV モデルより汎用性が高いと主張している[46]。

#### 火炎の非定常性の表現

着火現象のような火炎の非定常性をデータベースに取りこむ検討は 2000 年代初期に Pitsch et al. [28, 29, 47]が精力的に行っている。Pitsch et al. は、各スカラ消散率における着火による非定常性を時間もしくは反応進行変数により表現することを提案しており、それぞれ Unsteady flamelet モデルもしくは Unsteady FPV モデルと呼んでいる。Figure 2 (a) に Unsteady FPV における最高温度とスカラ消散率の関係を示す。丸印が非定常解析の初期状態を表し、安定燃焼状態まで非定常解析を行う。Figure 2 (a) に示すような Pitsch et al. の提案したモデルでは、複数のスカラ消散率におけるデータを使用している。したがって、データ参照にはスカラ消散率が必要である。一方で、Sadasivuni et al. [48]は、ある一つのスカラ消散率における着火から安定燃焼までのデータをデータベース化した解析手法を Unsteady FPV モデルと呼び、このモデルを用いて解析を行った。Sadasivuni et al. はこの Unsteady FPV による結果が unstable branch をデータベース化した FPV モデルと比較して浮き上がり火炎の実験結果を良好に表現することを示した。FGM モデルの研究では、このようにあるスカラ消散率における着火から安定燃焼までのデータをデータベース化する取り組みを Igniting flamelet と呼んでおり、近年、噴霧燃焼における着火遅れを表現するための取り組みが進んでいる[45, 49-53]。Igniting flamelet では、Figure 2 (b) に示すように、あるスカラ消散率における対向流拡散火炎の着火過程と stable branch を用いて、自着火する火炎を解析する。Ma and Dirk [52]は、着火から安定燃焼までのデータと安定燃焼から消炎に至るまでのデータのデータベースを CFD 計算に使用した場合の結果を比較し、着火から安定燃焼までのデータをデータベース化した場合のほうが、実験値を良好に表現することを示した。これらの結果から、Igniting flamelet を利用する場合、対数軸とした S カーブの Stable branch の直線領域とその端のスカラ消散率における着火過程をデータベース化すればよいと考えられる。



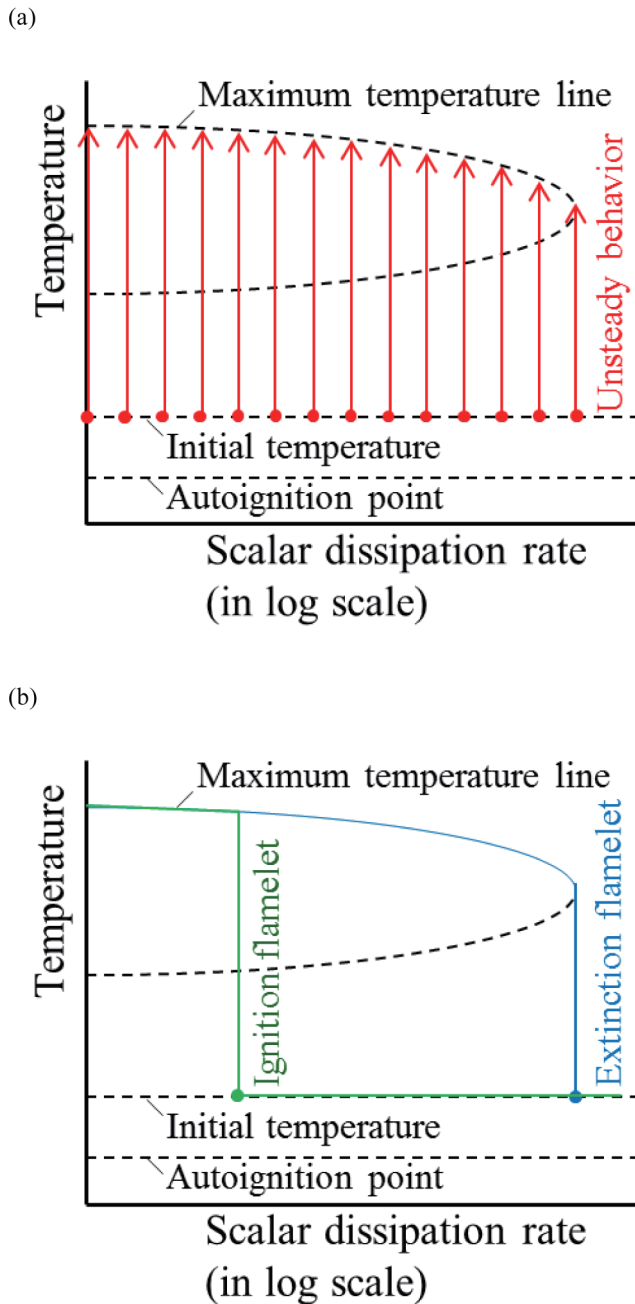


Figure 2 Locus of maximum temperature in (a) the unsteady-FPV and (b) the ignition/extinction flamelet.

### データベース参照に用いるパラメータ

#### Control variable

第一の Control variable は反応によって変わらないパラメータと定義され, 初期はエンタルピーが使われていた[7]. これは, 断熱状態にない当量比一定 (混合分率一定と同義) の予混合火炎の解析に適用されていたためである[7]. 近年は, 混合分率を使用している例[53-55]が多い. 第二の Control variable は反応進行変数である. 反応進行変数については後述する. 近年, Control variable として混合分率, 混合分率の分散, 反応進行変数, 反応進行変数の分散およびエンタルピーを考慮した 5D-FGM モデル[36]が現れている.

Control variable として, エンタルピーを用いる場合, 各エンタルピーにおける火炎片方程式の解析結果が必要になる. 火炎片方程式においてエンタルピーを考慮する方法は二つある.

- (1) 流入境界における温度を変える方法[56, 57],
- (2) 計算領域内部において加熱および冷却される効果を生成項に加える方法[33, 36, 58]である.

熱損失によるエンタルピーの低下はエンタルピーディフェクトと表現される[33, 57]. 冷却壁による熱損失が燃焼反応に及ぼす影響を計算する場合, (1) の方法によりエンタルピーディフェクトを考慮すると, 流入境界における温度が非現実的に低下することが報告されている[36, 57]. なお, エンタルピーを Control variable とせず, 保存式を解くことにより推定したエンタルピーと Flamelet table から参照された化学種の質量分率を用いて, 温度および密度を予測する方法[53, 59]もある. しかしながら, この場合, 領域内におけるエンタルピーの変化が化学反応速度に及ぼす影響は無視される.

#### Progress variable (反応進行変数)

反応進行変数は反応の進行の程度を表すパラメータで, 1960 年頃にすでに提案されている[60]. 反応進行変数の定め方は任意であるものの, Flamelet approach における反応進行変数は各混合分率に対して単調に増加あるいは減少することが求められる. これは, 反応進行変数を Flamelet table の参照用のパラメータとするために必要な条件である. この条件を達成するためにデータ点の削除を行っている例が存在する[61]. また, Maas and Pope [42]が示しているように燃焼反応の反応速度は  $10^9$  から  $10^2$  まで存在するため, 反応進行変数が燃焼反応における代表性を持つためには, 燃焼反応の初期から生成が開始され, 温度に対する感度が高く, 平衡に達するまでの時間が長いことが必要である.

反応進行変数として温度が使用されている文献[25, 62]も存在するが, Flamelet approach において反応進行変数は Table 1 に示すように基本的に安定化学種の質量分率が用いられている. FPV モデルを提唱した Pierce and Moin [26]は  $\text{CO}_2$  および  $\text{H}_2\text{O}$  の質量分率の和を反応進行変数として与え, FGM モデルを提唱した Oijen and Goey [7]は酸素の質量分率を与えている. また, Ihme and Pitsch [39]および Lamouroux et al. [63]は  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2$  および  $\text{H}_2\text{O}$  の質量分率の和を, Fiorina et al. [1, 43, 64]は  $\text{CO}$  および  $\text{CO}_2$  の質量分率の和を与えている. このように, 安定な燃焼生成物を反応進行変数とする研究例は多いが, 近年これらの生成物を反応進行変数とした場合に着火を良好に表現できない可能性が示唆されている. そこで, 燃料の自着火を表現する必要のある研究[53]では,  $\text{CH}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$  および  $\text{CO}_2$  の質量分率を分子量で除した値の和を反応進行変数に採用している. また,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$  および  $\text{HO}_2$  の質量分率を分子量で除した値の和を用いた研究例[50]もある. なお,  $\text{CH}_2\text{O}$  や  $\text{HO}_2$  といったラジカルを反応進行変数に含めるのは, 着火

Table 1 Definition of progress variable.

$Y_p$	Ref.
$Y_{CO_2} + Y_{H_2O}$	[26]
$Y_{O_2}$	[7]
$Y_{CO} + Y_{CO_2} + Y_{H_2} + Y_{H_2O}$	[39, 63]
$Y_{CO} + Y_{CO_2}$	[1, 43, 64]
$Y_{CO_2}/Mw_{CO_2} + Y_{H_2O}/Mw_{H_2O} + Y_{H_2}/Mw_{H_2}$	[65]
$Y_{CH_2O}/Mw_{CH_2O} + Y_{CO}/Mw_{CO} + Y_{CO_2}/Mw_{CO_2}$	[53]
$Y_{CO}/Mw_{CO} + Y_{CO_2}/Mw_{CO_2} + Y_{H_2O}/Mw_{H_2O}$	[50]

プロセスにおいてこれらのラジカルが非常に重要な中間体であるためである。着火が再循環領域において生じる場合、反応進行変数は安定な生成物と  $HO_2$  を区別できない。そこで、 $H_2O$  の質量分率を反応進行変数とするデータベースと  $HO_2$  の質量分率を反応進行変数とするデータベースを用意し、 $H_2O$  の質量分率に応じてデータベースを使い分ける手法が提案されている[55]。

#### presumed provability density function (presumed PDF) or filtered density function (FDF)

乱流燃焼を計算する場合、計算セル内部に解像できていない物理量の分布が存在することが知られており、流れの計算にレイノルズ平均方程式 (RANS) を用いる方法では PDF を、LES を用いる方法では FDF を用いてその分布を考慮する。Flamelet approach では、この PDF もしくは FDF の形状を仮定することで、セル内部の物理量の分布の影響を考慮したデータベースをあらかじめ構築する。このとき、セル内部の分布を特徴づける量には物理量の分散が使用されており、この物理量の分散をデータベース参照用のパラメータとするため、データベースの次元が増える。物理量の分散は CFD 計算によって推定することができるため、CFD 計算ではデータベースを参照することで乱流燃焼場における温度および化学種の空間分布を推定することが可能になる。仮定した PDF は presumed PDF と呼ばれる。

FDF を用いることでセル内部の物理量の分布を表現可能になることを示すため、Figure 3 に Directnumerical simulation (DNS) による解析結果と DNS の結果にフィルタ操作を施し LES による解析を模擬した結果の比較を示す。図より、FDF を使用した場合は使用していない場合と比較して、DNS による解析が物理量の分布をより良く表現していることがわかる。上述したように Flamelet approach において、温度や密度といった物理量は混合分率のような Control variable と関係づけられているが、この関係は非線形的である。したがって、Figure 3 のように FDF を用いずに平滑化処理された Control variable を用いて温度や密度を予測した場合、解析精度が低下する可能性が高い。そこで、ファールブル平均された物理量を Eq. (3) のようにある Control variable とその値の存在する確率密度から積分値として算出する。

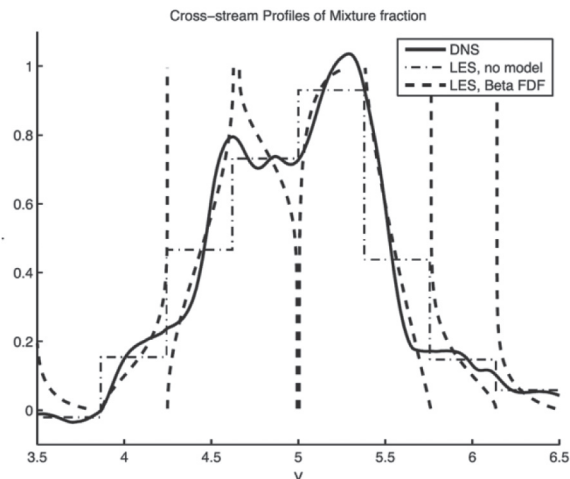


Figure 3 Mixture fraction calculated via DNS, filtered DNS results which mimics LES mean values, and sub-grid profiles mapped from  $\beta$ -PDFs [70].

$$\bar{\phi}(\bar{Z}) = \int_0^1 \phi(Z) \bar{P}(Z) dZ \quad (3)$$

ここで、Control variable の代表として混合分率  $Z$  を用いているが、反応進行変数  $C$  においても同様である。なお、フィルタ操作を施された密度は Eq. (4) により求める。

$$\bar{\rho}(\bar{Z}) = \left[ \int_0^1 \frac{\bar{P}(Z)}{\rho(Z)} dZ \right]^{-1} \quad (4)$$

燃焼解析において使用する FDF には、 $\beta$  関数が用いられることが多い[1, 34, 38, 39, 41, 66-69]ものの、近年 top-hat 関数を用いる研究例もある[70-72]。本項では、 $\delta$  関数、 $\beta$  関数および top-hat 関数に関して説明する。

#### $\delta$ 関数

$\delta$  関数は Eq. (5) により表される[68, 72-74]。

$$\bar{P}(Z) = \delta(Z - \bar{Z}) \quad (5)$$

この関数を用いた場合、ファールブル平均された値は  $\bar{\phi}(\bar{Z}) = \phi(\bar{Z})$  となる。したがって、ファールブル平均された Control variable から得られた値と瞬時の Control variable から算出された値は等しいと仮定されている。

#### $\beta$ 関数

$\beta$  関数は Eq. (6) により表される[72-74]。

$$\bar{P}(Z) = Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1} \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \quad (6)$$

where  $\alpha = \bar{Z} \left[ \frac{\bar{Z}(1-\bar{Z})}{\bar{Z}^2} - 1 \right]$ ,  $\beta = (1-\bar{Z}) \frac{\alpha}{\bar{Z}}$

ここで、 $\bar{Z}^2$  は混合分率の分散を表している。この関数を各  $\alpha$  および  $\beta$  について計算した結果を Figure 4 に示す。

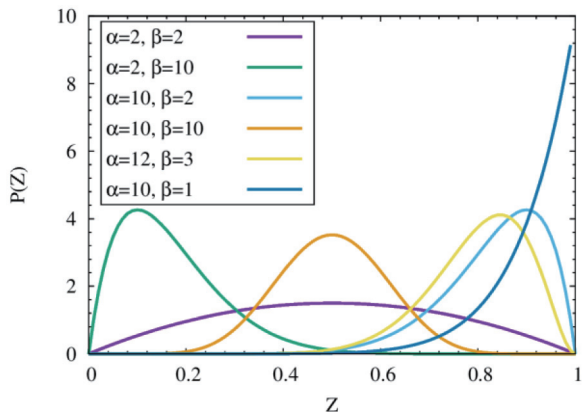


Figure 4 Beta function.

$\Gamma$  関数内の  $\alpha$  および  $\beta$  は関数の定義よりともに正である。そのため、 $\bar{Z}^{1/2}$  は 0.25 未満であるという条件が課される。また、 $\alpha$  および  $\beta$  が大きい場合、 $\Gamma$  関数の計算値が無限大に発散する。そこで、数値解析上は  $\alpha$  および  $\beta$  が 500 以上の場合、 $\tilde{P}(Z)$  を  $\delta$  関数で近似する。さらに、数値解析上、積分区間の最後の点の特異点となるため、積分することができない。そこで、これを回避するため、Eq. (7) のように処理する[75]。

$$\tilde{\phi}(\bar{Z}) = \int_0^1 \phi(Z) \tilde{P}(Z) dZ \cong \frac{\eta^\alpha}{\alpha} \phi(0) + \int_\eta^{1-\eta} \phi(Z) \tilde{P}(Z) dZ + \frac{\eta^\beta}{\beta} \phi(1) \tag{7}$$

なお、データベース作成の際は、 $\bar{Z}^{1/2}$  の値を 0-0.25 において何点か定め、その  $\bar{Z}^{1/2}$  における Eq. (7) の計算結果をデータベースとする。

top-hat 関数

top-hat 関数は Eq. (8) により表される[70]。

$$\tilde{P}(Z) = \begin{cases} t_0 & (f_a \leq Z \leq f_b) \\ 0 & \text{(for all other } Z) \end{cases} \tag{8}$$

where  $t_0 = \frac{1}{f_b - f_a}$ ;  $f_a = \bar{Z} - \frac{l}{2}$ ;  $f_b = \bar{Z} + \frac{l}{2}$ ;  $l = \sqrt{12\bar{Z}^{1/2}}$

この関数を用いた場合、 $f_a \leq Z \leq f_b$  の範囲の値を取り得る確率は  $t_0$  で一定として計算される。ただし、この関数が適用可能なのは、分散が  $0 < \bar{Z}^{1/2} \leq 1/3 \min[\bar{Z}^2, (1-\bar{Z})^2]$  の場合のみである。分散が 0 の場合は、 $\delta$  関数を用いる。また、分散が大きく、積分区間の上端もしくは下端を含む場合は、特別な取り扱いが必要になる。各分散に対する適用範囲と用いる値は異なる[70]。この関数を使用する場合、各分散における値をデータベースに保存する必要はない代わりに、各刻みまでの積分値を保存する。

規格化

Flamelet approach においてデータベース  $F(Z, C)$  は、Figure 5 [46]のようにそれぞれの次元を 0 から 1 として表現し、等間隔な格子状に構築される。これは、前述の PDF (or FDF) を計算するとき積分区間が明確になることおよびデータベースの探索においてハッシュ探索を用いることが可能になることによると考えられる。混合分率は定義から 0-1 であるものの、反応進行変数やエンタルピーは規格化しなければ 0-1 とはならない。そのため、Eq. (9) を用いて、次元を構成する変数を規格化する研究例が多い[10, 46, 54, 71, 72]。

$$C = \frac{Y_p - Y_p^{min}(Z)}{Y_p^{max}(Z) - Y_p^{min}(Z)} \tag{9}$$

また、分散は Eq. (10) のように規格化することができる[63]。

$$\bar{Z}_{norm}^{1/2} = \frac{\bar{Z}^{1/2}}{\bar{Z}(1-\bar{Z})} \tag{10}$$

なお、Figure 5 では刻みの間隔が一定であるが、不等間隔にしたほうが良いとする研究例も存在する[45]。また、

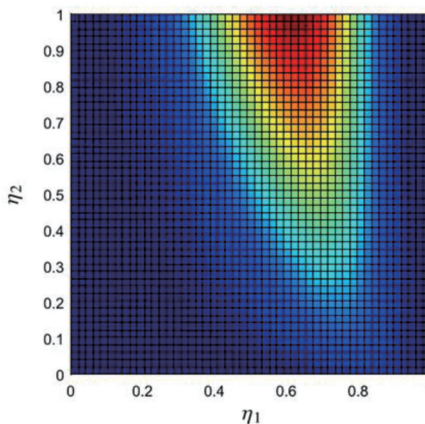
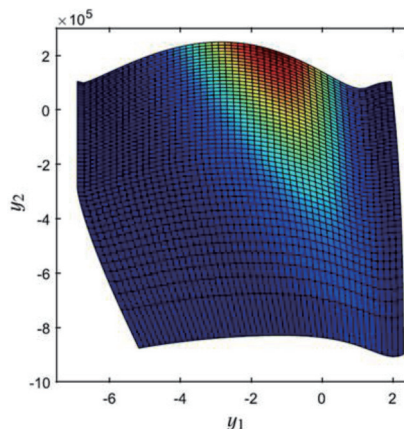


Figure 5 Chemical source term of the progress variable as a function of the control variables  $y_1 = Y$  and  $y_2 = h$  (top) and as a function of  $\eta_1$  and  $\eta_2$  after transformation to the unit square (bottom) [46].



Table 2 Resolution of flamelet table.

Model	$\tilde{Z}/Z$	$\tilde{\chi}$	$\tilde{C}/C$	$\tilde{Z}^{n^2}$	$\tilde{C}^{n^2}$	$\tilde{h}$	Ref.
FPI (laminar)	80	-	100	-	-	-	[43]
Flamelet	201	7	201	-	-	-	[76]
FGM (toop-hat)	201	-	201	-	-	-	[72]
FGM	141	-	161	21	-	-	[53]
FGM	201	-	201	15	-	-	[63]
FGM	101	-	101	21	21	-	[41]
FPV	100	-	100	15	15	-	[39]
Flamelet	not found	100	-	not found	-	10	[33]
FGM	40	-	120	10	10	30	[36]

Figure 5 の  $y_1$  は  $22.7Y_{CO_2}-31.3Y_{O_2}$  であり,  $y_2$  はエンタルピーを表し,  $\eta_1$  と  $\eta_2$  はそれぞれ  $y_1$  および  $y_2$  を最大値および最小値を用いて規格化した変数である.

#### 各次元の離散点の数

データベースからデータを参照する場合, 離散点間の値は線形補間により算出する. したがって, 各次元の離散点の数は滑らかな曲線を表示するために十分なデータ量が必要である. Table 2 に既往の報告で示されているデータベース上の各次元の離散点の数を示す. 表より混合分率および反応進行変数は 100–200, 分散は 10–20 あれば十分であると考えられる.

#### CFD 計算

データベースを CFD 計算において使用する場合, CFD 計算においてデータベース参照用のパラメータの分布を取得する必要がある. 一例として LES の場合, パラメータの一つである混合分率の保存式は次のように表現される.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Z}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{Z}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_{sgs}}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right] + \bar{S}_Z \quad (11)$$

なお, 生成項  $\bar{S}_Z$  は混相燃焼の計算において燃料の湧き出しを考慮する場合に用いる. 反応進行変数の保存式は次のように表現される.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{C}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{C}\tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_{sgs}}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_j} \right] + \bar{\omega}_C \quad (12)$$

ここで, 反応進行変数の生成項はデータベースから参照することで与える. LES における Control variable の分散の計算方法は, 下記のようにいくつか種類がある.

(1) フィルタ操作を施された Control variable の勾配の大きさから算出する.

$$\tilde{Z}^{r2} = C_A \Delta^2 \left( \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \right)^2 \quad (13)$$

$C_A$  はモデル定数であり, 0.09 [77], 0.1 [70], 0.15 [72], 1 [41], や LES における Smagorinsky 定数[69]が使用される.

(2) セル界面の値の最大値および最小値から算出する[70, 72].

$$\tilde{Z}^{r2} = \frac{1}{12} (\tilde{Z}_{f,max} - \tilde{Z}_{f,min})^2 \quad (14)$$

(3) 分散の保存式により計算する[67, 72].

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Z}^{r2}) + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{Z}^{r2}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{\rho}D_s \frac{\partial \tilde{Z}^{r2}}{\partial x_j} \right) + 2\bar{\rho}D_t \left( \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 - 2\bar{\rho}D_t \frac{\tilde{Z}^{r2}}{\Delta^2} \quad (15)$$

Pera et al. [78]は液滴の蒸発を考慮する場合に分散の保存式に生成項を加える手法を提案している.

(4) スケール相似則に基づき算出する[79].

$$\tilde{Z}^{r2} = C_A (\bar{Z}^2 - \bar{Z}^2) \quad (16)$$

なお, 各項は次式によって LES の結果からフィルタリング操作によって近似的に求める.

$$\bar{Z}^2 = \tilde{Z}^2 + \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Z}^2}{\partial x_i}, \quad \bar{Z} = \tilde{Z} + \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_i} \quad (17)$$

Pierce and Moin [38]は LES におけるレナード項からスケール相似則を定式化しており, Eq. (16) のそれぞれの項にフィルタ操作を施された密度の影響を加えている.

#### 4. 結言

本研究では, Flamelet approach において用いるデータベースの作成方法をまとめた. Flamelet モデルから始まり, Flamelet generated manifolds モデルの最前線までの歴史と, Control variable の取り扱いを解説した. 本研究が Flamelet approach を用いた燃焼解析を行う研究者の研究の一助となれば幸いである.

#### 謝辞

本研究は, JSPS 科研費 15J04680, 18K03964 の助成を受けたものである. また, 成果の一部は東北大学の平成 26 年度前期研究大学強化実現構想, 若手リーダ研究者海外派遣事業および (公財) 東燃ゼネラル石油研究奨励・奨学財団第 36 回 (平成 28 年度) 研究奨励助成によるものである. ここに謝意を表す.

## References

1. B. Fiorina, D. Veynante, S. Candel, Modeling Combustion Chemistry in Large Eddy Simulation of Turbulent Flames, *Flow Turbulence Combust* 94 (2015) 3-42.
2. W.P. Jones, S. Lyra, S. Navarro-Martinez, Numerical investigation of swirling kerosene spray flames using Large Eddy Simulation, *Combustion and Flame* 159 (2012) 1539-1561.
3. B.F. Magnussen, B.H. Hjertager, On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion, *Symposium (International) on Combustion* 16 (1977) 719-729.
4. O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, T. Poinsot, A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion, *Physics of Fluids* 12 (2000) 1843-1863.
5. N. Peters, *Turbulent Combustion*, Cambridge University Press 2001.
6. A.Y. Klimenko, R.W. Bilger, Conditional moment closure for turbulent combustion, *Progress in Energy and Combustion Science* 25 (1999) 595-687.
7. J.A.V. Oijen, L.P.H.D. Goey, Modelling of Premixed Laminar Flames using Flamelet-Generated Manifolds, *Combustion Science and Technology* 161 (2000) 113-137.
8. P.N. Brown, Byrne, G.D., Hindmarsh, A.C, VODE: A Variable Coefficient ODE Solver, *Journal of Scientific and Statistical Computing* 10 (1989) 1038.
9. T. Kitano, J. Nishio, R. Kurose, S. Komori, Evaporation and combustion of multicomponent fuel droplets, *Fuel* 136 (2014) 219-225.
10. V. Mittal, D.J. Cook, H. Pitsch, An extended multi-regime flamelet model for IC engines, *Combustion and Flame* 159 (2012) 2767-2776.
11. B.T. Zoller, J.M. Allegrini, U. Maas, P. Jenny, PDF model for NO calculations with radiation and consistent NO-NO<sub>2</sub> chemistry in non-premixed turbulent flames, *Combustion and Flame* 158 (2011) 1591-1601.
12. J.A. Miller, C.T. Bowman, Mechanism and modeling of nitrogen chemistry in combustion, *Progress in Energy and Combustion Science* 15 (1989) 287-338.
13. G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, J. William C. Gardiner, V.V. Lissianski, Z. Qin, GRI<sub>3.0</sub> mechanism, (1999) Berkeley. Available from: <[http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)>.
14. P. Glarborg, M.U. Alzueta, K. Dam-Johansen, J.A. Miller, Kinetic Modeling of Hydrocarbon/Nitric Oxide Interactions in a Flow Reactor, *Combustion and Flame* 115 (1998) 1-27.
15. A.A. Konnov, Implementation of the NCN pathway of prompt-NO formation in the detailed reaction mechanism, *Combustion and Flame* 156 (2009) 2093-2105.
16. N.M. Marinov, A detailed chemical kinetic model for high temperature ethanol oxidation, *International Journal of Chemical Kinetics* 31 (1999) 183-220.
17. M.U. Alzueta, J.M. Hernández, Ethanol Oxidation and Its Interaction with Nitric Oxide, *Energy & Fuels* 16 (2002) 166-171.
18. G. Mittal, S.M. Burke, V.A. Davies, B. Parajuli, W.K. Metcalfe, H.J. Curran, Autoignition of ethanol in a rapid compression machine, *Combustion and Flame* 161 (2014) 1164-1171.
19. C.K. Westbrook, M. Mehl, W.J. Pitz, Lawrence Livermore National Laboratory. <https://combustion.llnl.gov/mechanisms> (accessed Dec 18 2017).
20. Y. Pei, M. Mehl, W. Liu, T. Lu, W.J. Pitz, S. Som, A Multicomponent Blend as a Diesel Fuel Surrogate for Compression Ignition Engine Applications, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 137 (2015) 111502.
21. K. Narayanaswamy, G. Blanquart, H. Pitsch, A consistent chemical mechanism for oxidation of substituted aromatic species, *Combustion and Flame* 157 (2010) 1879-1898.
22. E. Ranzi, T. Faravelli, The CRECK Modeling Group. <http://creckmodeling.chem.polimi.it/menu-kinetics> (accessed Dec 18 2017).
23. E. Ranzi, A. Frassoldati, A. Stagni, M. Pelucchi, A. Cuoci, T. Faravelli, Reduced Kinetic Schemes of Complex Reaction Systems: Fossil and Biomass-Derived Transportation Fuels, *International Journal of Chemical Kinetics* 46 (2014) 512-542.
24. K. Narayanaswamy, P. Pepiot, H. Pitsch, A chemical mechanism for low to high temperature oxidation of n-dodecane as a component of transportation fuel surrogates, *Combustion and Flame* 161 (2014) 866-884.
25. N. Peters, Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, *Progress in Energy and Combustion Science* 10 (1984) 319-339.
26. C.D. Pierce, P. Moin, Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion, *Journal of Fluid Mechanics* 504 (2004) 73-97.
27. O. Gicquel, N. Darabiha, D. Thévenin, Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion, *Proceedings of the Combustion Institute* 28 (2000) 1901-1908.
28. H. Pitsch, Unsteady flamelet modeling of differential diffusion in turbulent jet diffusion flames, *Combustion and Flame* 123 (2000) 358-374.
29. H. Pitsch, M. Ihme, An Unsteady/Flamelet Progress Variable Method for LES of Nonpremixed Turbulent Combustion, doi:10.2514/6.2005-557(2005).



30. R.W. Bilger, S.H. Stårner, R.J. Kee, On reduced mechanisms for methane • air combustion in nonpremixed flames, *Combustion and Flame* 80 (1990) 135-149.
31. L.M. Verhoeven, W.J.S. Ramaekers, J.A. van Oijen, L.P.H. de Goey, Modeling non-premixed laminar co-flow flames using flamelet-generated manifolds, *Combustion and Flame* 159 (2012) 230-241.
32. J.A. Van Oijen, R.J.M. Bastiaans, L.P.H. De Goey, Low-dimensional manifolds in direct numerical simulations of premixed turbulent flames, *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (2007) 1377-1384.
33. M. Ravikanti, W. Malalasekera, M. Hossain, T. Mahmud, Flamelet Based NO<sub>x</sub>-Radiation Integrated Modelling of Turbulent Non-premixed Flame using Reynolds-stress Closure, *Flow Turbulence Combust* 81 (2008) 301-319.
34. M. Ihme, H. Pitsch, Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model: 1. A priori study and presumed PDF closure, *Combustion and Flame* 155 (2008) 70-89.
35. T.Y. Shingo Nishida, Kazuhiro Tsukamoto and Nobuyuki Oshima Numerical Simulation of NO Production in Gas-Turbine Combustor With Large-Eddy Simulation Using 2-Scalar Flamelet Approach, *Proceedings of the ASME 2009 International Design Engineering Technical Conferences & Computers and Information in Engineering Conference* 2 (2009) 9.
36. A. Donini, R.J. M. Bastiaans, J.A. van Oijen, L.P. H. de Goey, A 5-D Implementation of FGM for the Large Eddy Simulation of a Stratified Swirled Flame with Heat Loss in a Gas Turbine Combustor, *Flow Turbulence Combust* 98 (2017) 887-922.
37. J.A.M. de Swart, G.R.A. Groot, J.A. van Oijen, J.H.M. ten Thije Boonkkamp, L.P.H. de Goey, Detailed analysis of the mass burning rate of stretched flames including preferential diffusion effects, *Combustion and Flame* 145 (2006) 245-258.
38. C.D. Pierce, P. Moin, A dynamic model for subgrid-scale variance and dissipation rate of a conserved scalar, *Physics of Fluids* (1994-present) 10 (1998) 3041-3044.
39. M. Ihme, H. Pitsch, Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model: 2. Application in LES of Sandia flames D and E, *Combustion and Flame* 155 (2008) 90-107.
40. J.A. van Oijen, L.P.H. de Goey, Modelling of premixed counterflow flames using the flamelet-generated manifold method, *Combustion Theory and Modelling* 6 (2002) 463-478.
41. A.W. Vreman, B.A. Albrecht, J.A. van Oijen, L.P.H. de Goey, R.J.M. Bastiaans, Premixed and nonpremixed generated manifolds in large-eddy simulation of Sandia flame D and F, *Combustion and Flame* 153 (2008) 394-416.
42. U. Maas, S.B. Pope, Simplifying chemical kinetics: Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space, *Combustion and Flame* 88 (1992) 239-264.
43. B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, N. Darabiha, Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using FPI flamelet tabulation, *Combustion and Flame* 140 (2005) 147-160.
44. H. Bongers, J.A. Van Oijen, L.M.T. Somers, L.P.H. De Goey, THE FLAMELET GENERATED MANIFOLD METHOD APPLIED TO STEADY PLANAR PARTIALLY PREMIXED COUNTERFLOW FLAMES, *Combustion Science and Technology* 177 (2005) 2373-2393.
45. U. Egüz, S. Ayyapureddi, C. Bekdemir, B. Somers, P. de Goey, Manifold resolution study of the FGM method for an igniting diesel spray, *Fuel* 113 (2013) 228-238.
46. J.A. van Oijen, A. Donini, R.J.M. Bastiaans, J.H.M. ten Thije Boonkkamp, L.P.H. de Goey, State-of-the-art in premixed combustion modeling using flamelet generated manifolds, *Progress in Energy and Combustion Science* 57 (2016) 30-74.
47. H. Pitsch, M. Chen, N. Peters, Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames, *Symposium (International) on Combustion* 27 (1998) 1057-1064.
48. S.K. Sadasivuni, W. Malalasekera, S.S. Ibrahim, Unsteady flamelet/progress variable approach for non-premixed turbulent lifted flames, *Russian Journal of Physical Chemistry B* 4 (2010) 465-474.
49. C. Bekdemir, L.M.T. Somers, L.P.H. de Goey, J. Tillou, C. Angelberger, Predicting diesel combustion characteristics with Large-Eddy Simulations including tabulated chemical kinetics, *Proceedings of the Combustion Institute* 34 (2013) 3067-3074.
50. C. Bekdemir, B. Somers, P. de Goey, DNS with detailed and tabulated chemistry of engine relevant igniting systems, *Combustion and Flame* 161 (2014) 210-221.
51. L. Ma, B. Naud, D. Roekaerts, Transported PDF Modeling of Ethanol Spray in Hot-Diluted Coflow Flame, *Flow Turbulence Combust*, doi:10.1007/s10494-015-9623-3(2015) 1-34.
52. L. Ma, D. Roekaerts, Modeling of spray jet flame under MILD condition with non-adiabatic FGM and a new conditional droplet injection model, *Combustion and Flame* 165 (2016) 402-423.
53. A. Wehrfritz, O. Kaario, V. Vuorinen, B. Somers, Large Eddy Simulation of n-dodecane spray flames using Flamelet Generated Manifolds, *Combustion and Flame* 167 (2016) 113-131.
54. F. Proch, A.M. Kempf, Numerical analysis of the Cambridge

- stratified flame series using artificial thickened flame LES with tabulated premixed flame chemistry, *Combustion and Flame* 161 (2014) 2627-2646.
55. M.U. Göktolga, J.A. van Oijen, L.P.H. de Goey, Modeling MILD combustion using a novel multistage FGM method, *Proceedings of the Combustion Institute* 36 (2017) 4269-4277.
56. J.A. van Oijen, F.A. Lammers, L.P.H. de Goey, Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds, *Combustion and Flame* 127 (2001) 2124-2134.
57. M. Hossain, J.C. Jones, W. Malalasekera, Modelling of a Bluff-Body Nonpremixed Flame using a Coupled Radiation/Flamelet Combustion Model, *Flow Turbulence Combust* 67 (2001) 217-234.
58. A. Kishimoto, H. Moriai, K. Takenaka, T. Nishiie, M. Adachi, A. Ogawara, R. Kurose, Application of a Nonadiabatic Flamelet/Progress-Variable Approach to Large-Eddy Simulation of H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> Combustion Under a Pressurized Condition, *Journal of Heat Transfer* 139 (2017) 124501.
59. Y. BABA, R. KUROSE, Analysis and flamelet modelling for spray combustion, *Journal of Fluid Mechanics* 612 (2008) 45-79.
60. W.W. Wood, J.G. Kirkwood, Hydrodynamics of a Reacting and Relaxing Fluid, *Journal of Applied Physics* 28 (1957) 395-398.
61. S. Yokoi, S. Mikami, Y. Matsukawa, Y. Saito, Y. Matsushita, H. Aoki, W. Malalasekera, Improvement of the prediction accuracy of NO emissions in counter-flow diffusion flames on using NO mass fraction as a progress variable, the 8th European Combustion Meeting, Dubrovnik, Croatia, 2017.
62. D. Bradley, P.H. Gaskell, X.J. Gu, M. Lawes, M.J. Scott, Premixed turbulent flame instability and NO formation in a lean-burn swirl burner, *Combustion and Flame* 115 (1998) 515-538.
63. J. Lamouroux, M. Ihme, B. Fiorina, O. Gicquel, Tabulated chemistry approach for diluted combustion regimes with internal recirculation and heat losses, *Combustion and Flame* 161 (2014) 2120-2136.
64. B. Franzelli, B. Fiorina, N. Darabiha, A tabulated chemistry method for spray combustion, *Proceedings of the Combustion Institute* 34 (2013) 1659-1666.
65. L. Ma, D. Roekaerts, Numerical study of the multi-flame structure in spray combustion, *Proceedings of the Combustion Institute* 36 (2017) 2603-2613.
66. A. Kempf, LES Validation from Experiments, *Flow Turbulence Combust* 80 (2008) 351-373.
67. B. Fiorina, R. Mercier, G. Kuenne, A. Ketelheun, A. Avdić, J. Janicka, D. Geyer, A. Dreizler, E. Alenius, C. Duwig, P. Trisjono, K. Kleinheinz, S. Kang, H. Pitsch, F. Proch, F. Cavallo Marincola, A. Kempf, Challenging modeling strategies for LES of non-adiabatic turbulent stratified combustion, *Combustion and Flame* 162 (2015) 4264-4282.
68. M. Ihme, H. Pitsch, Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flames using a flamelet/progress variable formulation, *Physics of Fluids* 20 (2008) 055110.
69. H. Pitsch, H. Steiner, Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia flame D), *Physics of Fluids* (1994-present) 12 (2000) 2541-2554.
70. J. Floyd, A.M. Kempf, A. Kronenburg, R.H. Ram, A simple model for the filtered density function for passive scalar combustion LES, *Combustion Theory and Modelling* 13 (2009) 559-588.
71. F. Proch, A.M. Kempf, Modeling heat loss effects in the large eddy simulation of a model gas turbine combustor with premixed flamelet generated manifolds, *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (2015) 3337-3345.
72. A. Rittler, F. Proch, A.M. Kempf, LES of the Sydney piloted spray flame series with the PFGM/ATF approach and different sub-filter models, *Combustion and Flame* 162 (2015) 1575-1598.
73. H. Versteeg, W. Malalasekera, An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method, Prentice Hall 2007.
74. T. Poinso, D. Veynante, Theoretical and numerical combustion second edition, Edwards 2005.
75. C.-S. Chen, K.-C. Chang, J.-Y. Chen, Application of a robust  $\beta$ -pdf treatment to analysis of thermal NO formation in nonpremixed hydrogen-air flame, *Combustion and Flame* 98 (1994) 375-390.
76. A. Kempf, R.P. Lindstedt, J. Janicka, Large-eddy simulation of a bluff-body stabilized nonpremixed flame, *Combustion and Flame* 144 (2006) 170-189.
77. D.J. Clayton, W.P. Jones, Large Eddy Simulation of a Methane-Air Diffusion Flame, *Flow Turbulence Combust* 81 (2008) 497-521.
78. C. Pera, J. Réveillon, L. Vervisch, P. Domingo, Modeling subgrid scale mixture fraction variance in LES of evaporating spray, *Combustion and Flame* 146 (2006) 635-648.
79. A.W. Cook, J.J. Riley, A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flows, *Physics of Fluids* 6 (1994) 2868-2870.