研 究 速 報

質量荷重平均乱流理論と乱流燃焼における逆勾配拡散機構

Statistical Turbulence Theory Based on Mass-Weighted Averaging, with Emphasis on Counter-Gradient Diffusion in Turbulent Combustion

吉　澤　　　徵*
Akira YOSHIZAWA

1. は じ め に

電気伝導性の有無に関わらず，乱れた運動を行う媒質中では，運動量，温度，物質濃度等はその値の大きい領域から小さい領域に輸送されることが多い．この性質を端的に表現するものとして，勾配拡散の概念があり，乱流ないし渦拡散率で拡散強度を表す．勾配拡散近似が破綻する代表的事例として，乱流燃焼，特に余混合火炎における既燃ガス濃度（進行度変数で表わす）の逆勾配拡散，すなわち低濃度領域から高濃度領域への拡散を上げることができる．[1] 近年，流体および化学反応方程式の直接数値計算（DNS）によって，その物理的機構が理解されつつある．[2,3]

乱流燃焼を工学的目的で解析する方法として，レイノルズ平均にもとづく乱流モデル（RANSモデル）とラージ・エディ・シミュレーション（LES）があり，DNSは幾何学的形状が簡単な特殊な場合に限られている．LESの適用範囲は計算機能力，サブグリッド・スケール（SGS）モデリングの向上によって著しく拡大しているが，レイノルズ数が大きく，固体壁を有する流れでは多大の計算時間を必要とするため，RANSモデルはいぜん有用な解析手段といえる．

乱流燃焼の解析における基本的RANSモデルとして乱流拡散近似にもとづくモデルがしばしば用いられるが，逆勾配拡散を本質とする現象に対しては適当ではない．そのため，これに代わって逆勾配拡散を簡潔に表現するモデルとしてBray-Moss-Lilby（BML）モデルがあり，[4]乱流拡散モデルと組み併せることによって勾配拡散，逆勾配拡散双方の状況に対応しようとする試みもある．BMLモデルは進行度変数に関する確率分布関数にもとづいて構成されたものであり，RANSモデルにおける乱流拡散表現とは基本的概念を異にするものである．

乱流燃焼や超音速流のように密度変化が本質となる現象を扱う際の平均法は，質量荷重（ファブル）平均である．非圧縮乱流のRANSモデリングは，テンソルおよび次元解析にもとづく発見的方法と乱流理論による統計理論的方法があり，それぞれ乱流モデリングの進展に異なる角度から寄与がなされてきた．これに対し，質量荷重平均におけるRANSモデリングでは，非圧縮乱流モデルを発見的方法で密度変化効果を補う段階に留まっている．この原因の一つとして，質量荷重平均にもとづく乱流理論が整備されていないことが上げられる．

本小論においては密度変化を伴う非一様乱流を質量荷重平均をもとに統計理論的に考察する．これをもとに，進行度変数の逆勾配拡散の発生機構を議論し，RANSモデリングへの発展性に触れる．

2. 基 礎 方 程 式

一段不可逆化学反応に従う乱流燃焼を考察の対象とすると，基礎方程式は以下のように与えられる：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho u_i = 0, \qquad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho u_i + \frac{\partial}{\partial x_j}\rho u_i u_j = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\mu s_{ij}, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho e + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho e u_i = -p\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\kappa\frac{\partial \theta}{\partial x_i}\right) + Q, \qquad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho c + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho c u_i = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho D\frac{\partial c}{\partial x_i}\right) - W. \qquad (4)$$

ここで，ρは密度，$\mathbf{u}$は速度，pは圧力，eは内部エネルギー，θは温度，cは進行度変数，μは粘性率，κは熱伝導率，Dは化学種の拡散率である．式（3）において，s_{ij}は速度歪みテンソル

*東京大学生産技術研究所　情報・システム部門

$$s_{ij}=\frac{\partial u_j}{\partial x_i}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}-\frac{2}{3}\frac{\partial u_l}{\partial x_l}\delta_{ij} \quad \cdots\cdots(5)$$

である．式（3）と（4）において，Wは未燃ガスの反応率，Qは反応による熱発生率である．進行度変数cは未燃領域で$c=0$，既燃領域で$c=1$と規格化されている．

完全気体を仮定し，

$$e=C_V\theta,\ p=(\gamma-1)\rho e \quad \cdots\cdots(6)$$

を用いると，式（3）は

$$\frac{\partial p}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_i}pu_i=-(\gamma-1)p\frac{\partial u_i}{\partial x_i}+\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\kappa}{C_V}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{p}{\rho}\right)+(\gamma-1)Q \quad (7)$$

となり，圧力pに対する方程式に書き換えられる（C_Vは定積比熱，γは比熱比である）．

3. 質量荷重平均方程式

物理量fの質量荷重平均とそのまわりの揺らぎを

$$\hat{f}=\{f\}_M\equiv\frac{\langle\rho f\rangle}{\bar{\rho}},\ f''=f-\hat{f} \quad \cdots\cdots(8)$$

で定義する．ここで〈●〉はアンサンブル平均であり，

$$\bar{\rho}=\langle\rho\rangle \quad \cdots\cdots(9)$$

と書く．速度$\mathbf{u}$と進行度変数cに対して質量荷重平均を用いて

$$\mathbf{u}=\hat{\mathbf{u}}+\mathbf{u}'',\ c=\hat{c}+c'' \quad \cdots\cdots(10)$$

と分解し，密度ρと圧力pは通常のアンサンブル平均を適用し，

$$p=\bar{p}+p',\ \rho=\bar{\rho}+\rho' \quad \cdots\cdots(11)$$

と書く．

この結果，平均量は以下の方程式に従う：

$$\frac{\partial\bar{\rho}}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_i}\bar{\rho}\hat{u}_i=0, \quad \cdots\cdots(12)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\bar{\rho}\hat{u}_i+\frac{\partial}{\partial x_j}\bar{\rho}\hat{u}_i\hat{u}_j+\frac{\partial}{\partial x_j}\bar{\rho}R_{ij}=-\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i}+\frac{\partial}{\partial x_j}\langle\mu s_{ij}\rangle, \quad \cdots(13)$$

$$\frac{\partial\bar{p}}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_i}\bar{p}\hat{u}_i+\frac{\partial P_i}{\partial x_i}$$
$$=-(\gamma-1)\left\langle p\frac{\partial u_i}{\partial x_i}\right\rangle+\frac{\partial}{\partial x_i}\left\langle\frac{\kappa}{C_V}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{p}{\rho}\right\rangle+(\gamma-1)\bar{Q}, \quad \cdots\cdots(14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\bar{\rho}\hat{c}+\frac{\partial}{\partial x_i}\bar{\rho}\hat{Y}\hat{u}_i+\frac{\partial}{\partial x_i}\bar{\rho}\Gamma_i=\frac{\partial}{\partial x_i}\left\langle\rho D\frac{\partial c}{\partial x_i}\right\rangle-\bar{W}. \quad \cdots\cdots(15)$$

ここで，R_{ij}，$\mathbf{P}$，$\mathbf{\Gamma}$は

$$R_{ij}=\frac{\langle\rho u_i u_j\rangle-\bar{\rho}\hat{u}_i\hat{u}_j}{\bar{\rho}}=\{u_i''u_j''\}_M, \quad \cdots\cdots(16)$$

$$\mathbf{P}=\langle p\mathbf{u}\rangle-\bar{p}\hat{\mathbf{u}}, \quad \cdots\cdots(17)$$

$$\mathbf{\Gamma}=\frac{\langle\rho c\mathbf{u}\rangle-\bar{\rho}\hat{c}\hat{\mathbf{u}}}{\bar{\rho}}=\{c''\mathbf{u}''\}_M \quad \cdots\cdots(18)$$

で定義される．式（16），（18）はそれぞれ質量加重平均下でのレイノルズ応力，進行度変数の乱流フラックスである．式（16）～（18）の性質を明らかにすることが，RANSモデリングによる乱流燃焼解析の第一歩となる．

4. 新変数の導入と質量加重平均理論の構成

式（16），（18）に見るように，質量加重平均下では主要な統計量が3体相関量となる．これに加え，$\overline{u''}\neq 0$および$\overline{c''}\neq 0$となることから，非圧縮乱流の研究で開発された手法をそのまま適用することが困難である．この状況が質量加重平均による乱流理論が手つかずに残されている主たる理由である．

本小論では，新変数

$$\mathbf{v}=\rho\mathbf{u}''/\bar{\rho},\ \eta=\rho c''/\bar{\rho} \quad \cdots\cdots(19)$$

導入する．その結果，$\bar{\mathbf{v}}=0$および$\bar{\eta}=0$となり，新変数は非圧縮乱流における揺らぎと同様の条件に従う．本来の$\mathbf{u}''$とc''は

$$\mathbf{u}''=(1-(\rho'/\bar{\rho})+\cdots)\mathbf{v},\ c''=(1-(\rho'/\bar{\rho})+\cdots)\eta \quad \cdots\cdots(20)$$

と近似することによって，式（16）～（18）を新変数で書くことができる．式（19）にもとづき，平均量および揺らぎを

$$S=(\bar{\rho},\hat{\mathbf{u}},\bar{p},\hat{c}),\ s(\rho',\mathbf{v},p',\eta) \quad \cdots\cdots(21)$$

と選ぶ．この選択によって揺らぎに関する方程式は著しく簡潔となる．

式（21）のもとでは，非圧縮の非一様乱流理論，TSDIA（two-scale DIA）[5,6]を容易に密度変動を受ける流れに適用できる．以下のその筋道のみを示す．[7]

（A）スケールパラメターδを用いて，時空間に関し2スケールを導入する：

$$\xi(=\mathbf{x}),\ \tau(=t);\ \mathbf{X}(=\delta\mathbf{x}),\ T(=\delta t). \quad \cdots\cdots(22)$$

遅い変数$(\mathbf{X},T)$は平均量の変化を，速い変数(ξ,τ)は揺らぎの変化を表わすことに適しており，

$$S=F(\mathbf{X};T),\ s=s(\xi,\mathbf{X};\tau,T) \quad \cdots\cdots(23)$$

と書く．揺らぎの$(\mathbf{X}, T)$依存性は，揺らぎ方程式のS依存性から明らかである．

(B) 速い変数に関し，平均速度$\hat{\mathbf{u}}$で動く座標系でのフーリエ表現

$$s(\xi, \mathbf{X}; \tau, T) = \int s(\mathbf{k}, \mathbf{X}; \tau, T) \exp\left(-i\mathbf{k} \cdot (\xi - \hat{\mathbf{u}}\tau)\right) d\mathbf{k} \quad (24)$$

を導入する．特に必要のないときは，$s(\mathbf{k}, \mathbf{X}; \tau, T)$における$(\mathbf{X}, T)$依存性を書かないことにする．

(C) 揺らぎのフーリエ成分を

$$(\rho', \mathbf{v}, p', \eta) = \sum_{n=0}^{\infty} \delta^n (\rho_n, \mathbf{v}_n, p_n, \eta_n) \quad \cdots\cdots (25)$$

と展開する．この結果，$(\rho_n, \mathbf{v}_n, p_n, \eta_n)$ $(n \geq 2)$は最低次の成分$(\rho_0, \mathbf{v}_0, p_0, \eta_0)$によって表わすことができる．

(D) 式（25）の解を用いて，式（16）～（18）を計算する．この際，最低次の成分に関する統計量が必要となるので，$w = (\rho_0, p_0, \eta_0)$と書いて，

$$\left\langle v_{0i}(\mathbf{k}, \mathbf{X}, \tau, T) v_{0j}(k', \mathbf{X}, \tau', T) \right\rangle = Q_{vij}(\mathbf{k}, \mathbf{X}, \tau, \tau', T)\delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}'), \quad (26)$$

$$\left\langle w(\mathbf{k}, \mathbf{X}, \tau, T) w(\mathbf{k}', \mathbf{X}, \tau', T) \right\rangle = Q_w(\mathbf{k}, \mathbf{X}, \tau, \tau', T)\delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \quad (27)$$

と指定する．最低次の成分の方程式は平均場を直接含まないため，等方性を仮定して

$$Q_{vij}(\mathbf{k}, \tau, \tau') = D_{ij}(\mathbf{k}) Q_{vS}(k, \tau, \tau') + \Pi_{ij}(\mathbf{k}) Q_{vC}(k, \tau, \tau'), \quad (28)$$

$$Q_w(\mathbf{k}, \tau, \tau') = Q_w(k, \tau, \tau') \quad \cdots\cdots (29)$$

と書く（下付き添字SおよびCは非圧縮，圧縮成分をそれぞれ表わす）．ここで，

$$D_{ij}(\mathbf{k}) = \delta_{ij} - (k_i k_j / k^2), \quad \Pi_{ij}(\mathbf{k}) = k_i k_j / k^2. \quad \cdots\cdots (30)$$

密度揺らぎスペクトルは速度スペクトルの圧縮成分と

$$Q_\rho(k, \tau, \tau') = \bar{\rho}^2 k^2 \int_{-\infty}^{\tau} d\tau_1 \int_{-\infty}^{\tau'} Q_{vC}(k, \tau_1, \tau_2) d\tau_2 \quad \cdots\cdots (31)$$

の関係にある．

5. 結果のまとめ

新変数によるTSDIAの結果をまとめると，主な統計量に対して以下を得る：[6)]

$$R_{ij} = \frac{1}{3}\langle \mathbf{v}^2 \rangle \delta_{ij} - C_{vv1}\hat{s}_{ij} + C_{vv2}\frac{1}{\bar{\rho}^2}\left(\frac{D\hat{u}_i}{Dt}\frac{D\hat{u}_j}{Dt} - \frac{1}{3}\left(\frac{D\hat{u}_l}{Dt}\right)^2 \delta_{ij}\right), \quad (32)$$

$$P_i = -C_{pv1}\bar{\rho}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\bar{p}}{\bar{\rho}}\right) + C_{pv2}\frac{\bar{p}}{\bar{\rho}^2}\frac{D\hat{u}_i}{Dt}, \quad \cdots\cdots (33)$$

$$\Gamma_i = -C_{\eta v1}\bar{\rho}\frac{\partial \hat{c}}{\partial x_i} + C_{\eta v2}\frac{1}{\bar{\rho}^2}\frac{D\hat{u}_i}{Dt}\frac{D\hat{c}}{Dt}, \quad \cdots\cdots (34)$$

$$\overline{c''} = C_{\rho\eta}\frac{1}{\bar{\rho}^2}\frac{D\hat{c}}{Dt}. \quad \cdots\cdots (35)$$

ここで，C_{vv1}，C_{vv2}等は式（28）および（29）のスペクトルに関係づけられ，その対応関係は

$$C_{vv1}, C_{pv1}, C_{\eta v1} \Rightarrow Q_{vS} + \frac{1}{2}Q_{vC}, \quad \cdots\cdots (36)$$

$$C_{vv2}, C_{pv2}, C_{\eta v2}, C_{\rho\eta} \Rightarrow Q_\rho \quad \cdots\cdots (37)$$

となる．

式（32）～（35）の結果で重要なことは，以下の2点である．

(a) 有次元係数C_{vv1}，C_{vv2}等はすべて正の量である．この結果，これらの係数の詳細を知ることなしに，重要な性質を議論することが可能となる．

(b) 密度スペクトルQ_ρで表わされる膨張ないし収縮効果は，ラグランジュ微分と結合して現れる．

6. 余混合火炎の観点からの議論

一様等方性乱流中を伝播する余混合火炎のDNSによって，逆勾配拡散に関する興味深い知見が得られている．特に，以下の2点を上げることができる．[2,3)]

(a) 化学反応による熱膨張効果が火炎近傍で著しいとき，逆勾配拡散が発生する．これに対して，勾配拡散は乱流運動が優勢のとき生じる．

(b) 順圧力，逆圧力勾配は，それぞれ逆勾配拡散，勾配拡散を引き起こす傾向にある．

上記の流れにガリレイ変換を適用し，火炎が定在する状況を考える．平均量を

$$\hat{\mathbf{u}} = (\hat{u}(x), 0, 0), \bar{\rho} = \bar{\rho}(x), \bar{p} = \bar{p}(x), \hat{c} = \hat{c}(x) \quad \cdots\cdots (38)$$

と書き，未燃ガスがxの負方向から流れ込むとする．DNSより，逆勾配拡散が発生している状況では

$$\frac{d\hat{u}}{dx} > 0, \frac{d\bar{p}}{dx} < 0, \frac{d\bar{\rho}}{dx} < 0, \frac{d\hat{c}}{dx} > 0 \quad \cdots\cdots (39)$$

となっている．式（34）より，

$$\Gamma_x = -C_{\eta v1}\frac{d\hat{c}}{dx} + C_{\eta v2}\frac{1}{\bar{\rho}^2}\frac{D\hat{u}}{Dt}\frac{D\hat{c}}{Dt} \quad \cdots\cdots(40)$$

を得る．第1項は負で，通常の勾配拡散項である．第2項は式（39）のもとでは正となり，この項が第1項を凌駕するとき，逆勾配拡散が起こりうる．とくに，式（37）より密度揺らぎと逆勾配拡散が密接することになるが，この知見は上述の（a）と符合している．

進行度変数に関する乱流フラックス$\mathbf{\Gamma}$は輸送方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\bar{\rho}\Gamma_i = -\frac{\partial}{\partial x_j}\bar{\rho}\Gamma_i\hat{u}_j - \bar{\rho}R_{ij}\frac{\partial\hat{c}}{\partial x_j} - \bar{\rho}\Gamma_j\frac{\partial\hat{u}_i}{\partial x_j}$$
$$-\overline{c''}\frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} - \left\langle c''\frac{\partial p'}{\partial x_i}\right\rangle - \frac{\partial}{\partial x_j}\bar{\rho}\left\{u_i''u_j''c''\right\}_M + \cdots \quad \cdots\cdots(41)$$

に従う．DNSより，通常生産項の役目を果たす右辺第2，3項は負となり，第4，5項が生産項の役目をもつ．特に，第4項は質量加重平均に固有の量であることから，その重要性が理解できる．上述の（b）より逆勾配拡散は順圧力勾配（$d\bar{p}/dx<0$）において発生しやすいことが指摘されているが，このためには$\overline{c''}>0$である必要がある．理論結果すなわち式（35）は，式（39）よりこの要件を満たしており，DNS結果と整合している．この場合も，式（37）より逆勾配拡散と密度揺らぎが密接していることが確認できる．

乱流フラックス$\mathbf{\Gamma}$の逆勾配拡散においては圧力勾配効果が重要な役割を演じていることが式（41）からわかるが，式（34）あるいは（40）には圧力勾配自体は現れていない．これは一見矛盾しているように見えるが，圧力勾配効果は$D\mathbf{U}/Dt$を通して生じるためであり，密度揺動効果がラグランジュ微分と結合して発生するという本理論結果と矛盾しない．

6. RANSモデリングに向けて

乱流燃焼の工学解析と本研究結びつけるためには，理論結果を用いてRANSモデルを導く必要がある．乱流燃焼の解析で用いられるもっとも基本的モデルは乱流粘性にもとづくK–εモデルであるが，本研究より密度揺動を考慮することが逆勾配拡散の予測に重要であることがわかる．そこで，乱流量として

$$K, \varepsilon, K_\rho\left(=\left\langle\rho'^2\right\rangle\right) \quad \cdots\cdots(42)$$

を採用する．

式（42）を用いると，

$$R_{ij} = \frac{2}{3}K\delta_{ij} - \nu_T\hat{s}_{ij} + c_R\frac{K^2}{\varepsilon^2}\frac{K_\rho}{\bar{\rho}^2}\left(\frac{D\hat{u}_i}{Dt}\frac{D\hat{u}_j}{Dt} - \frac{1}{3}\left(\frac{D\hat{u}_l}{Dt}\right)^2\delta_{ij}\right), \quad (43)$$

$$P_i = -\frac{\nu_T}{\sigma_P}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\bar{p}}{\bar{\rho}}\right) + c_P\frac{K_\rho}{\bar{\rho}^2}\frac{K}{\varepsilon}\bar{p}\frac{D\hat{u}_i}{Dt}, \quad \cdots\cdots(44)$$

$$\Gamma_i = -\frac{\nu_T}{\sigma_\Gamma}\frac{\partial\hat{c}}{\partial x_i} + c_\Gamma\frac{K^2}{\varepsilon^2}\frac{K_\rho}{\bar{\rho}^2}\frac{D\hat{u}_i}{Dt}\frac{D\hat{c}}{Dt} \quad \cdots\cdots(45)$$

のようにモデル化される．ここで，ν_Tは通常の乱流粘性率

$$\nu_T = C_\nu\frac{K^2}{\varepsilon} \quad \cdots\cdots(46)$$

であり，c_R等は正のモデル定数である．K_ρの導入により，本量に対する輸送方程式が必要となるが，ここでは省略する．

（2002年11月5日受理）

参 考 文 献

1） N. Peters, *Turbulent Combustion*（Cambridge University Press, Cambridge, 2000）.
2） D. Veynante, A. Trouve, K. N. C. Bray, and T. Mantel, J. Fluid Mech. 332, 26（1997）.
3） S. Nishiki, T. Hasegawa, R. Borghi, and R. Himeno, J. Combust. Soc. Jpn. 44, 47（2002）.
4） P. A. Libby and K. C. N. Bray, AIAA J. 19, 205（1981）.
5） A. Yoshizawa, *Hydrodynamic and Magnetohydrodynamic Turbulent Flows: Modelling and Statistical Theory*（Kluwer, Dordrecht, 1998）.
6） A. Yoshizawa, S-I. Itoh, and K. Itoh, *Plasma and Fluid Turbulence*（Institute of Physics, Bristol, 2002）.
7） A. Yoshizawa, Phys. Fluids 15, No. 3（2003）.