

バーナ拡散火炎の数値シミュレーション

— 乱流拡散火炎 LES 解析手法の構築 —

Numerical Simulation of Turbulent Non-Premixed Flame in a Furnace

-Development of Solution Method for LES of Turbulent Non-Premixed Flame-

弘 畑 幹 鐘*・伊 藤 裕 一*・坪 倉 誠**・谷 口 伸 行*・小 林 敏 雄***

Mikikane HIROHATA, Yuichi ITOH, Makoto TSUBOKURA, Nobuyuki TANIGUCHI and Toshio KOBAYASHI

1. 緒 言

乱流拡散火炎はその現象が流れに強く依存しており、燃焼反応は燃料と酸化剤の乱流混合に律速される。乱れ成分を比較的高い波数まで再現できる Large-Eddy Simulation (LES) は時間平均型乱流モデルに比べて乱流拡散火炎のシミュレーションに適した予測手法であると考えられる。ここ数年、乱流拡散火炎の LES モデリング¹⁾や噴流火炎への LES の適用が行われており^{2), 3)}、工学的にもガスタービン燃焼器やボイラーの火炉等の燃焼場予測手法としての応用が期待される。本研究では燃焼場の対象を主に火炉内のバーナ拡散火炎を想定した同軸噴流拡散火炎とし、その LES 解析手法の確立と評価を目的とする。

本報では低マッハ数近似方程式を用いた数値解析手法を採用し、燃焼計算を実行した結果から、計算における問題点や安定性などをあわせて検討する。

2. 基礎式と SGS モデル

平均化した基礎方程式と SGS モデルを示す。ただし導出にあたって以下の仮定がなされている。

1. 保存スカラ量導入のためルイス数 1 とする。
2. 対象とする流れ場は低マッハ数近似が成立する。
3. 浮力、外力は無視する。

平均操作は圧縮性の RANS モデルと同様に密度加重平均 (favre 平均) を施す。($\bar{\phi}$: 体積平均, $\tilde{\phi}$: favre 平均)

$$\text{連続の式: } \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \dots\dots\dots (1)$$

$$\text{運動方程式: } \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = - \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \tilde{\tau}_{ij}^{s, u} \dots\dots (2)$$

$$\text{運動方程式拡散項: } \tilde{\tau}_{ij}^{s, u} = -2\mu \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \mu \tilde{S}_{kk} \right) + \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \dots (3)$$

$$\text{保存スカラ方程式: } \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\xi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{\xi} \tilde{u}_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} \tilde{\mathcal{J}}_j^{s, u} \dots\dots (4)$$

$$\text{保存スカラ式拡散項: } \tilde{\mathcal{J}}_j^{s, u} = - \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_j} + \bar{\rho} (\tilde{\xi} \tilde{u}_j - \tilde{\xi} \tilde{u}_j) \dots (5)$$

平均操作で生じた SGS 応力に Smagorinsky モデル、スカラ流束のモデルには勾配拡散型のモデルを用いる。乱流シュミット数は一定値と仮定した。(6)式中 SGS 乱流エネルギーの影響は無視した。また、粘性、拡散係数の温度依存性も今回は無視し一定値とした。SGS モデル定数については $C_s = 0.109$, $Pr_{sgs} = 0.5$ とした⁴⁾。ルイス数 1 の仮定より $Sc_{sgs} = 0.5$ となる。

$$\text{SGS 応力: } \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k_{sgs} \delta_{ij} = -2\mu_{sgs} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{kk} \right) \dots (6)$$

$$\text{SGS スカラ流束: } \bar{\rho} (\tilde{\xi} \tilde{u}_j - \tilde{\xi} \tilde{u}_j) = - \frac{\mu_{sgs}}{Sc_{sgs}} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_j} \dots\dots\dots (7)$$

3. 燃焼モデル (Flamelet PDF model)

メタンなどの一般的な燃料では拡散火炎の持つ性質は保存スカラ (燃料の混合分率) によりほぼ表現できる。また工学的な乱流火炎は一般に、火炎厚さが乱れの最小スケールより薄く、火炎面は層流火炎の集合であると考えられる (Laminar Flamelet Concept)。これらの考えに基づいて温度、密度、化学種濃度は、素反応を考慮した一次元対向拡散火炎の数値計算による値を保存スカラの関数として与える (Flamelet Database)。

乱流燃焼場の場合、これらの平均値の導出には保存スカラの乱流変動の影響を考慮するために推定確率密度関数 (Presumed Probability Density Function) の導入が必要である。Presumed PDF には beta 関数を用いる。このとき、保存スカラの変動成分はスケール相似則を用いて与えた。化学種濃度、温度の favre 平均は以下のように与えられる。

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \phi(\xi) \tilde{P}(\xi, \xi, \xi^2) d\xi \dots\dots\dots (8)$$

*東京大学生産技術研究所 第2部
**東京工業大学大学院総合理工学研究科
***東京大学国際・産学共同研究センター

研 究 速 報
 ここで、 $\phi(\xi) = \sum_{k=1}^n a_k \xi^k$, flamelet data: $\phi(\xi) = Y_a(\xi), T(\xi), \rho(\xi)$
 密度の空間平均値は以下の式で与えられる。

$$\bar{\rho} = \left[\int_0^1 \frac{1}{\rho(\xi)} \bar{P}(\xi, \xi, \xi^2) d\xi \right]^{-1} \dots\dots\dots (9)$$

4. 数 値 解 法

マッハ数が小さく等圧燃焼が仮定できる燃焼場では、低マッハ数近似を施すことにより非圧縮方程式系と同様の解析手法を用いることが出来る。低マッハ数近似方程式とその解法については加藤らの高浮力流れ計算についての論文が詳しい⁵⁾。ただし、燃焼計算では密度の変動が激しく、低マッハ数近似を陽解法に用いる際は安定性確保のため予測子修正子法やルンゲクッタ法の様な多段解法が用いられることが多い^{3) 6) 7)}。今回は安定性の確保と 1 step の時間刻みを出来る限り大きく取ることを考えて、時間進行法に 3 次精度ルンゲクッタ法を用い、これに密度変化を考慮した拡張を行った。

空間離散化手法には有限体積法による 2 次精度中心差分を用い、保存スカラの対流項のみ一次風上差分とした。圧力と速度のカップリング手法は Fractional Step 法である。時間進行法と計算アルゴリズムを以下に示す。

4.1 時間進行法 (3 次精度ルンゲクッタ法)

1 step を 3 つのステージに分ける。各ステージ $k = 1, 2, 3$ において連続の式、運動方程式、保存スカラ式は以下の様に離散化される。

$$\frac{\rho^k - \rho^{k-1}}{\Delta t} + 2\beta_k \frac{\delta}{\delta x_j} (\rho u_j)^k = 0 \dots\dots\dots (10)$$

$$(\rho u_i)^k = (\rho u_i)^{k-1} + \Delta t \left\{ \alpha_k A_i^{k-1} + \gamma_k A_i^{k-2} + \beta_k (B_i^k + B_i^{k-1}) \right\} \dots\dots\dots (11)$$

$$\xi^k = \xi^{k-1} + \frac{\Delta t}{\rho^{k-1}} \left\{ \alpha_k C^{k-1} + \gamma_k C^{k-2} + \beta_k (D^k + D^{k-1}) \right\} \dots\dots\dots (12)$$

A, C は陽的, B, D は陰的に取り扱う (本研究では $B = 0$ としている)。係数は以下のように与えた⁸⁾。

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 8/15, \alpha_2 = 5/12, \alpha_3 = 3/4 \\ \beta_1 &= 4/15, \beta_2 = 1/15, \beta_3 = 1/6 \dots\dots\dots (13) \\ \gamma_1 &= 0, \gamma_2 = -17/60, \gamma_3 = -5/12 \end{aligned}$$

密度変化の存在する流れに多段階陽解法を用いる場合、途中のステージでの密度 ρ^k をどのように与えるかが問題となる。流れ場の各ステージで保存スカラと密度を解いて与えることも可能であるが、ここでは以下のように、ルンゲクッタ法の各ステージで連続の式を満足するように値を決定する。この密度の中間値は拡散項に現れる速度 u_i^k を質量流束 $(\rho u_i)^k$ から与える際にも用いる。

$$\frac{\rho^k - \rho^{k-1}}{\Delta t} + 2\beta_k \frac{\delta}{\delta x_i} (\rho u_i)^k = 2\beta_k \left\{ \frac{\rho^{n+1} - \rho^n}{\Delta t} + \frac{\delta}{\delta x_i} (\rho u_i)^k \right\} \dots\dots\dots (14)$$

このとき、

$$\rho^0 = \rho^n, \rho^1 = \frac{1}{15}(8\rho^{n+1} + 7\rho^n), \rho^2 = \frac{1}{15}(10\rho^{n+1} + 5\rho^n), \rho^3 = \rho^{n+1} \dots\dots\dots (15)$$

となる。

4.2 計算アルゴリズム

- I. 時間 step(n) に対する $\rho^n, u_i^n, P^n, \xi^n$ は既知
- II. step(n+1) の保存スカラ量 ξ^{n+1} を(12)式より計算 ($k = 1, 2, 3$)

- III. step(n+1) の密度 ρ^{n+1} を(9)式から計算
- IV. 流れ場の計算, 時間 step(n+1) の質量流束 $(\rho u_i)^{n+1}$ を求める。

- IV-1. 質量流束の予測子 $(\rho u_i)^*^k$ を計算 ($k = 1, 2, 3$)

$$(\rho u_i)^*^k = (\rho u_i)^{k-1} + \Delta t \left\{ \alpha_k A_i^{k-1} + \gamma_k A_i^{k-2} + \beta_k (B_i^k + B_i^{k-1}) \right\} \dots\dots\dots (11)^*$$

- IV-2. 圧力 Poisson 方程式から p^k を求める。

$$\frac{\delta}{\delta x_i} \frac{\delta}{\delta x_i} p^k = \frac{1}{2\beta_k \Delta t} \left\{ \frac{1}{2\beta_k} \frac{\rho^k - \rho^{k-1}}{\Delta t} + \frac{\delta}{\delta x_i} (\rho u_i)^*^k \right\} \dots\dots\dots (16)$$

- IV-3. 修正子 $(\rho u_i)^k$ を求める。

$$(\rho u_i)^k = (\rho u_i)^*^k - 2\beta_k \Delta t \frac{\delta}{\delta x_i} p^k \dots\dots\dots (17)$$

I ~ IV を繰り返して時間進行する。

5. 検 証 計 算

5.1 計算領域と境界条件

文献 9) の pilot 火炎で保炎されたメタン空気同軸噴流拡散火炎の実験を対象とする。実験では、燃料流量平均速度 41 m/s (軸直径と燃料流量平均速度で無次元化した $Re = 16400$)、予熱のための pilot 火炎の流速は 24 m/s, coflow の空気速度 15 m/s である。pilot 火炎は予混合火炎で入口温度は 2600 K である。実験装置外寸と計算領域の関係を図 1 に示す。計算格子は不等間隔直交格子を用い、jet 流入部の形状は円形を階段近似した。格子数は X, Y, Z に対して 96 x 74 x 74, 最小格子幅は入口部で 0.07 D (D は燃料管直径) である。流入条件としては速度は実験値の時間平均分布を与える。流入乱れは今回与えていない。密度計算にはメタン-空気の Database の流入温度がともに 297 K となるものを用いている。また今回のモデルでは pilot 火炎による空気の予熱を表現できないため、pilot の部分は流入温度 297 K の空気とした。流出条件は速度保存スカラは出口ですべて対流流出境界条件を課す。対流速度には、出口の流量平均値を与えた。側面境界速度についてはスリップ条件、保存スカラは勾配 0 とした。本来自由噴流の計算においてはここには圧力一定を与え、側面からの流入を許すべきであるが、coflow の存在、また火炎の存在により、大規模なエントレイメントは抑制されると考えている。

5.2 検証計算について

今回の解析手法で燃焼流れが再現されているかどうかを

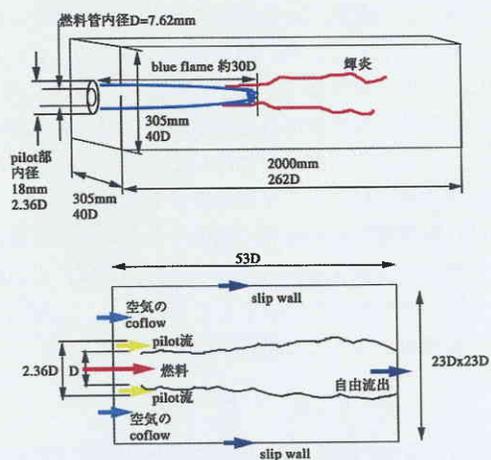


図 1 実験装置のサイズと計算領域

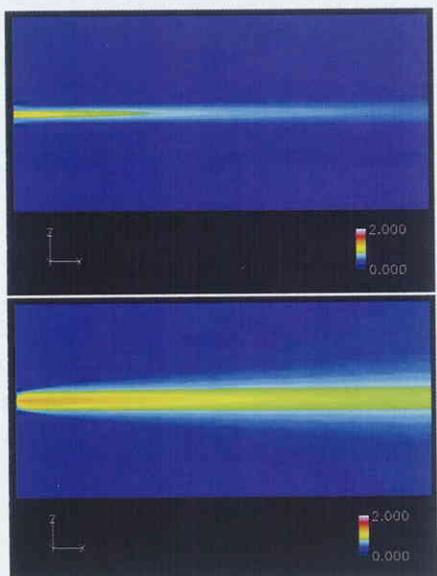


図 2 層流計算，主流方向速度分布
上図：密度一定 下図：燃焼計算

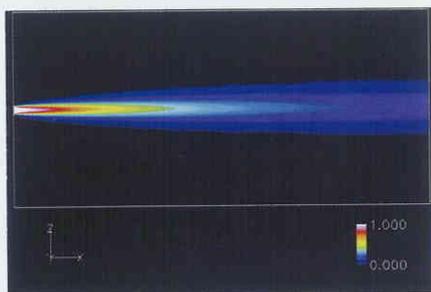


図 3 層流燃焼計算，保存スカラ分布

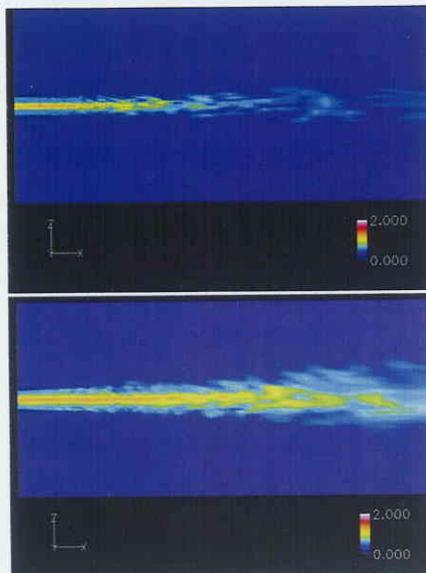


図 4 乱流計算，主流方向速度分布
上図：密度一定 下図：燃焼計算

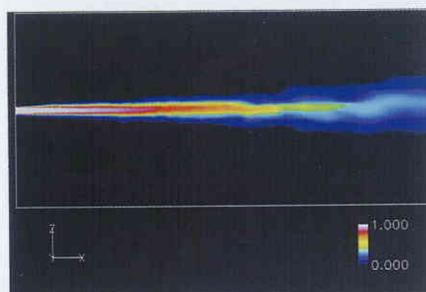


図 5 乱流燃焼計算，保存スカラ分布

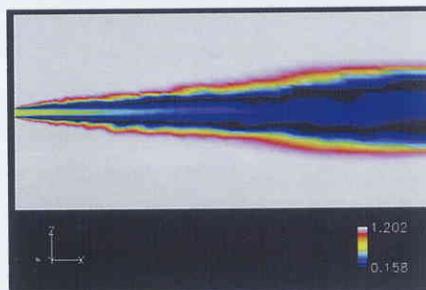


図 6 乱流燃焼計算，密度分布

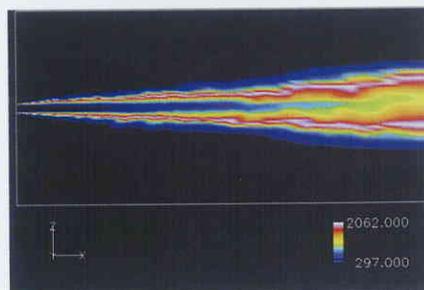


図 7 乱流燃焼計算，温度分布

研 究 速 報

以下の条件で検討する。

- (A) 層流計算 (密度一定流れと燃焼流れの比較: $Re = 200$)
 実験と同じ速度境界条件の下で Re 数を下げた層流計算により (ただし出口境界条件はすべて勾配 0) 燃焼による密度変化が生じているかどうか検討する。
- (B) 乱流計算 (密度一定流れと燃焼流れの比較: $Re = 3000$)
 LES による乱流計算を行い, 密度一定の計算では境界条件や, 格子数, 計算領域が妥当であるか検討する。燃焼計算では安定解析が可能かどうか確認する。

5.3 結果

(A) 層流計算についての結果

図 2 にそれぞれの主流方向速度, 図 3 には燃焼計算の保存スカラ分布を示す。図 2 での速度は燃料ジェット流量平均速度で無次元化されている。密度一定, 燃焼流れのいずれも定常解に収束している。燃焼計算は入口速度を共通の境界条件を与えているがメタンの密度が空気より小さいため質量流束が密度一定の計算と異なる。主流速度分布を見るにパイロット部を予熱のない常温空気と見なしたためにパイロット部の密度が減少し, 流れ方向へ膨張してその速度が燃料 jet と同程度まで増える。パイロット部が予熱空気とした場合入口付近ではこのような大きな増速は起こらないと考えられる。

(B) 乱流計算についての結果

図 4 に密度一定, 燃焼流れの速度分布, 図 5 に燃焼流れの保存スカラ分布を示す。いずれも瞬時の分布である。今回格子解像度の問題から実験と同じ Re 数では大きな数値振動が生じたため Re 数を大幅に下げて計算した。流入に不安定モードを与えていないため密度一定の計算では大規模な渦の巻き込みは起こらず, ジェットは自己相似領域を形成する前に流出する。計算領域を装置壁面まで拡張した計算も行い, 計算結果に対して側面境界の影響がない事は確認している。

燃焼計算は密度一定流れを初期値として密度変化を導入して計算を行った。図 4 では火炎が存在する領域で流れ場が膨張し, 低波数の乱れ構造が大きくなっている。渦構造が大きくなるのは, 層流計算の場合と同じくパイロット速度が急激に膨張するため, coflow との間にあるせん断層が不安定になり火炎の導入が低波数の乱れを拡大する傾向に働いていると考えられる。通常, 火炎の存在は高波数成分の乱れを抑制する効果があり, これには密度変化だけでなく分子粘性係数の温度依存性の寄与があると考えられる。本計算では粘性係数を一定としたためその効果はあまり明確でない。図 6 に乱流火炎における密度分布を示す。保存スカラの値に応じて密度が減少している様子がわかる。図 7 に燃焼流れの温度分布を示す。温度が最も高い領域がこの計算における火炎面であり, 火炎面が波打つ様子が再現できている。

計算の安定性については, 層流, 乱流計算ともにクーラン

数が 0.5 以下ならば安定計算が可能であった。ただし乱流火炎計算の問題点として, 出口対流速度に時間的に変化しない値を用いると安定解析ができなかったことを挙げておく。火炎計算の初期値を等密度流れとする場合, 火炎導入時から火炎が安定化するまでの間は, 加速による質量流束の一時的な増加と密度の減少によって主流速度は大幅に増加する。この過渡期に対流速度がその変化に追従できなければ質量流束が出口にたまって発散する。この問題は対流速度に出口断面流速の流量平均値を毎ステップごとに与えるなど, 対流速度の時間的な変化を許すことで解決できる。

6 ま と め

バーナ拡散火炎の解析手法として時間進行法に密度変化を考慮した 3 次精度ルンゲクッタ法と燃焼モデルに Flamelet PDF モデルを導入し, 拡散燃焼場 LES の解析手法を構築した。今回の解析手法で層流, 乱流火炎ともに安定解析が可能であることが検証計算において示された。ただし密度変化の導入が行われた段階であり, まだ粘性係数の温度依存性を無視しているため乱流火炎においての高波数成分の乱れの抑制などの効果は明確に表現できていない。また格子解像度の問題とパイロット部の予熱を如何に表現するかは今後の課題とする。統計量データの実験との比較は次報に述べる。

謝 辞

密度変化を考慮したルンゲクッタ法については著者の一人, 坪倉が Imperial Colledge の Jones 教授のもとで研究を行った。また, Jones 教授には燃焼モデル中の Flamelet Database も提供していただき, あわせてここに感謝申し上げる。

(1999 年 11 月 4 日受理)

参 考 文 献

- 1) Cook, A.W. and Riley, J.J., *Combustion and Flame* 112, pp. 593-596 (1998).
- 2) Branley, N. and Jones, W.P., *Turbulent Shear Flows* 11, 21-1~6 (1997).
- 3) Forkel, H. and Janicka, J., *Turbulence and Shear Flow Phenomena-1*, pp. 65-70 (1999).
- 4) Erlebacher, G., Hussaini, M.Y., Spaziale, C.G. and Zang, T.A., *Journal of Fluid Mechanics* 238, pp. 155-185 (1992).
- 5) 加藤信介, 村上周三, 義江龍一郎 日本建築学会計画系論文報告集 449 号 pp. 19-27.
- 6) Najm, H.N., Wyckoff, P.S. and Knio, O.M., *Journal of Computational Physics* 143, pp. 381-402 (1998).
- 7) Boersma, B.J., *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs* 1998, pp. 47-56.
- 8) Akselvol, K., Ph.D. Thesis, Stanford Univ. (1995).
- 9) Masri, A.R., Bilger, R.W. and Dibble, R.W., *Combustion and Flame* 71, pp. 245-266 (1988).
- 10) Libby, P. and Williams, F.A. *Turbulent Reacting Flows*, Academic Press (1994).