

LESによる乱流噴霧燃焼場の数値予測

Numerical prediction of turbulent spray combustion flows by using LES

伊藤 裕一

目次

第 1 章	はじめに	5
1.1	乱流噴霧燃焼解析に関する過去の研究	6
1.2	本研究の目的	7
1.3	乱流噴霧燃焼形態の分類	7
1.3.1	気相燃焼形態の分類	7
1.3.2	液体燃料の燃焼形態の分類	9
1.4	本研究の概要	10
1.5	記号	11
第 2 章	乱流燃焼流れの支配方程式とモデリング	13
2.1	乱流燃焼流れの支配方程式	14
2.1.1	化学種の輸送方程式	14
2.1.2	混合分率 Z の輸送方程式	16
2.1.3	状態方程式	18
2.1.4	拡散係数	19
2.1.5	低マッハ数近似方程式	19
2.2	乱流場のモデリング手法	20
2.2.1	気相乱流モデル	21
2.2.2	Large-Eddy Simulation	22
2.2.2.1	空間フィルタ	23
2.2.2.2	フィルタ関数	24
2.2.3	フィルタ操作を施した支配方程式と SGS モデル	26
2.2.4	その他の SGS モデル	27
2.2.4.1	スケール相似則モデル	27
2.2.4.2	ダイナミックモデル	28
2.3	燃焼モデル	28
2.3.1	化学種の輸送方程式を取り扱う燃焼モデル	29
2.3.1.1	詳細反応モデル	29
2.3.1.2	簡略化反応モデル	30
2.3.1.3	総括反応モデル	30

2.3.2	conserved scalar approach に基づく燃焼モデル	30
2.3.2.1	Flame Sheet Model	31
2.3.2.2	Chemical Equilibrium Model	31
2.3.2.3	Laminar Flamelet Model	33
2.4	乱流燃焼モデル	34
2.4.1	化学種の輸送方程式に対する乱流燃焼モデリング	35
2.4.1.1	渦消散モデル	36
2.4.1.2	Linear Eddy Model	36
2.4.1.3	Thickened Flame モデル	37
2.4.1.4	PDF モデル	38
2.4.1.5	Conditional Moment Closure モデル	39
2.4.2	conserved scalar approach における乱流燃焼モデル	40
2.4.2.1	SGS PDF モデル	40
2.4.3	Flamelet library の構築	43
2.5	まとめ	46
第 3 章	噴霧液滴の支配方程式とモデリング	47
3.1	噴霧液滴の方程式とモデリング	48
3.1.1	噴霧液滴の支配方程式	48
3.1.2	噴霧蒸発モデルの検討	49
3.1.3	粒径分布の表現	51
3.1.4	パーセル近似	52
3.1.5	噴霧燃焼形態と群燃焼理論	53
3.1.6	液滴の時間刻みの制限	55
3.2	混相乱流モデル	56
3.2.1	乱流変動の影響の考慮	56
3.3	気相と液相のカップリング	57
3.3.1	運動量および蒸発量のカップリング	59
3.4	気相と液相間におけるエネルギーのカップリング	60
3.4.1	spray flamelet model	60
3.4.2	Lagrange 型エネルギーカップリングモデルの提案	61
3.4.3	multi-parameter flamelet model の提案	62
3.5	まとめ	64
第 4 章	乱流中の蒸発噴霧の解析	66
4.1	解析対象	66

4.1.1	計測手法と計測された物理量	66
4.1.2	計測条件	68
4.1.3	粒径分布計測	69
4.2	数値解析手法と計算条件	69
4.2.1	数値解析手法	69
4.2.2	計算条件	71
4.2.3	流れの境界条件	71
4.2.4	噴霧液滴粒子の初期条件	71
4.3	解析結果と考察	72
4.3.1	可視化による検討	72
4.3.2	流れ速度の定量比較	74
4.3.3	噴霧液滴の可視化による検討	74
4.3.4	噴霧液滴挙動の定量比較	76
4.4	パーセル近似が計算結果におよぼす影響の調査	78
4.4.1	計算条件	78
4.4.2	計算結果	78
4.5	まとめ	81
第 5 章	乱流噴霧燃焼解析	82
5.1	参照実験概要	82
5.2	数値解析手法と計算条件	82
5.2.1	数値解析手法	82
5.2.2	計算条件	84
5.2.3	流入条件の決定	85
5.3	解析結果	87
5.3.1	非燃焼時流れ解析	87
5.3.2	乱流噴霧燃焼場解析	88
5.3.3	燃焼場における気相温度分布	90
5.3.4	液滴速度分布	92
5.4	まとめ	94
第 6 章	結論	96
付 録 A	気相場の数値解析手法	99
A.1	BFC 格子系における支配方程式	99
A.1.1	BFC 格子系における燃焼場解析手法	101
A.2	円筒座標系における支配方程式	102

A.3	Cyclic TDMA	104
A.3.1	TDMA	104
A.3.2	TDMA による解法	104
A.3.3	Cyclic 版 TDMA	105
付 録 B	β -PDF の積分	107
付 録 C	噴霧液滴粒子の追跡	109
C.1	粒子の追跡手法	109
C.2	補間アルゴリズム	111
参考文献		114
謝辞		125

第1章 はじめに

1997年京都で開催され、気候変動枠組条約第3回締結国会議（COP3）において採択され、2005年発効された、いわゆる「京都議定書」は、二酸化炭素をはじめとする地球温暖化に深く関与する6つの化学種の排出削減義務を法的拘束力をもった形で採択された国際条約である。このように、地球温暖化の防止は地球環境問題のひとつとして、広く世界に認知されている問題である。この地球温暖化の大きな要因が交通機関の動力源、産業・家庭用の熱源、電力の発生源として、また石油化学製品などの生産を通して行なわれる石油の利用、つまり化石燃料の燃焼であることはまちがいないであろう。

太古の祖先から受け継いできたこの環境そして資源を、我々の子孫へ如何にして残していくかを考えることは、21世紀を迎えた我々人類にとって、最重要課題といっても過言ではないだろう。そのために我々ができることとして、環境負荷低減の取り組みとしての有害排出物の低減、そしてエネルギーの有効利用としてのサイクルのエネルギー変換効率の改善、などが挙げられるだろう。

また、乱掘、浪費による化石燃料の枯渇の問題は、その有限性・可採年数から見ても非常に深刻な問題であり、エネルギーをより有効に利用することは必要不可欠な技術であると言える。

各種産業に用いられるガスタービンなどの内燃機関や工業用燃焼炉の効率向上を図るためには、燃焼により得られた熱エネルギーの機械仕事への変換効率が重要となる。また、有害排出物はまさに燃焼によって発生するものであり、燃焼と有害排出物の発生の因果関係を知ることでもある。そのためには、燃焼現象の正確な把握に基づいた、クリーンかつ高効率の適切な燃焼制御技術の確立が早急に望まれる。

本来、燃焼現象は広い学問分野を包含する複雑な現象であり、燃焼工学における多数の基礎研究の発展にも関わらず、こと燃焼技術に関しては、経験的・主観的なデータに基づいて機器設計やその改良を行なう傾向にあった。しかし、上述のような要請を受けて燃焼器設計や改良に関して、経験的でなく、合理的かつ客観的なデータに基づく指針を示す必要が出てきており、このような燃焼器の設計支援ツールとして数値シミュレーションにかかる期待は大きい。

実機や模型試験による詳細な実験は、コストの問題やその困難さから実施されることはそう多くなく、得られる知見も非常に限られたものであることは否めない。本研究でターゲットとしている乱流噴霧燃焼は、燃料の微粒化、液滴の気相への分散、蒸発、燃焼化学反応といった素過程が相互作用を及ぼしながら進行する、マルチスケール・マルチフィジックスの非常に複雑な現象であり、これらの素過程を分離して計測、理解することは難しく、今もってしてもやはりその燃料制御技術の多くは試行錯誤的な手法に基づいて行なわれている。この噴霧燃焼機構の解明を目指

すには、このような実験的研究とあわせて数値解析による研究との密接な連携が必要であり、その面からも数値解析による現象理解への期待も高まっている。

1.1 乱流噴霧燃焼解析に関する過去の研究

実用燃焼器を対象とした乱流燃焼場の数値解析においては、非燃焼乱流場解析と同様に、 $k-\varepsilon$ モデルに代表される RANS (Reynolds Averaged Numerical Simulation) モデルが乱流モデルとして適用される場合がほとんどである。LES (Large-Eddy Simulation) モデルは、歴史的に見れば RANS モデルとほぼ同時期に提案されたモデルであるが、モデルが本質的に要求する計算資源が圧倒的に違うことから、RANS モデリングでの研究が早期に発展を遂げ、今日においては多くの市販コードに標準的な乱流モデルとして採用されている。しかしながら、RANS モデルではアンサンブル平均操作に基づく方程式に基礎を置いているため、本質的に非定常な解を正確に捉えることはできない。離散式を構築する上で非定常な効果を組み込む (Unsteady RANS, URANS と呼ばれる) ことは可能で、その解析を行なうことで非定常な解を得ることはできるが、それは流れ場に存在する最大スケールの変動を捉えたに過ぎず、エネルギーカスケードなど乱流が本質的に持つ構造を捉えたことにはならない。

LES はその基礎式から、非定常現象を直接的に取り扱う手法である。その特徴の一つとして、変動強度場の予測精度が RANS モデルに比べ大幅に上回ることが挙げられるが、流れの構造のみが問題となる通常の乱流場においては、平均速度のような統計平均場の予測精度が満足されれば十分である場合がほとんどで、乱流場の特徴的なパラメータの一つである乱流変動強度の予測精度が重要となる問題はさほど多くないと言える。一方、乱流燃焼場においては、乱流変動強度によって燃焼形態や火炎性状が変化し、結果的に流れ場を大きく変化させる。つまり、乱流燃焼場においては、平均場の予測精度だけでなく変動強度場の予測精度も重要となり、LES の有用性は非常に高いと言える。当然ながらこのことは乱流噴霧燃焼場の解析においても当てはまり、この意味から乱流噴霧燃焼場の Dynamics を再現し、詳細かつ高精度な予測を行なう上で LES が必要不可欠といっても過言ではない。

近年の計算機の発達に伴い、数値解析の手法も大きく発展した。特に乱流燃焼場の解析においては、3 次元の非線形偏微分方程式である Navier-Stokes 方程式と系に存在する化学反応機構を全てを包含した形で、高精度かつ詳細に解析する DNS (Direct Numerical Simulation) ことも可能 (例えば [1]) となってきた。しかしながらこのような詳細な解析は、現在の計算機資源をもってしても、非常に限定された条件での解析がようやく行なえるようになった程度であり、産業界で利用される燃焼場と比較するとそのスケールは 3-4 桁程度の乖離があり [2, p. 9], 現状では燃焼場における物理現象を理解するという数値実験の段階であると言わざるを得ない。

また、ムーアの法則を挙げるまでもなく、今後将来にわたって計算機性能が飛躍的に向上することは間違いなさであろうが、コストパフォーマンスを考えるかぎり、なんらかの数値モデルの開発が未だ有用であることもまた間違いなさだろう。

乱流噴霧燃焼解析の過去の研究を振り返ると、RANS モデルに基づく手法での解析が数多く行なわれており [3–6], 平均速度場の予測や噴霧形状, 平均噴霧速度予測のような平均場における予測においては計算コストに見合った良い成果を挙げているが, 温度を詳細に検討した例, 特に実験値との比較という意味では松永ら [7] などに散見される程度で十分に検討されているとは言えない。

一方, 乱流噴霧燃焼問題への LES による取り組みの例としては, Sankaran and Menon [8], Caraceni ら [9], 屋我 [10], Stanford 大学の CTR* の取り組みの例 [11] があるが, 実機への適用という側面が強く, 噴霧挙動や熱発生予測を詳細に行なった例はほとんどなく, 全貌を把握するにはまだ多くの時間を要するであろう。

1.2 本研究の目的

前節で述べた背景を鑑み, 本研究では実用工学問題としての乱流噴霧燃焼問題の予測手法の確立を目指し, マルチスケールで非定常な複合現象を直接的に解析しうる LES を基礎とした乱流噴霧燃焼場の高精度な非定常解析手法を開発し, 今後ますます厳しくなるであろうエネルギー問題に対応できる合理的な設計支援ツールとしての数値予測手法を開発・構築することを目的とし, 特に噴霧挙動の予測と噴霧燃焼場の温度予測に焦点をあてた。

乱流噴霧燃焼場を LES を用いて高精度に数値解析する際に克服すべき課題として, 以下を挙げることができるであろう。

- 噴霧液滴と乱流の挙動の相互作用および噴霧蒸発の予測
- 噴霧燃焼に適した乱流燃焼モデルの構築

これらの課題に対して第 2 章以降で述べるアプローチで乱流噴霧燃焼流れのマルチスケール現象を数値解析的に扱う手法を構築することを目指す。

1.3 乱流噴霧燃焼形態の分類

乱流噴霧燃焼現象を数値解析するにあたり, その燃焼場がどのような物理現象に律則されているかを正確に知ることが解析の第一歩となる。以下に燃焼場の分類法について述べるが, 気相燃焼場による分類と噴霧などの液体燃料の燃焼形態の分類とに分けて話をすすめることにする。

1.3.1 気相燃焼形態の分類

気体燃料の燃焼形態はその様式によっていくつか分類方法がなされる (表 1.1)。まず, 連続燃焼と間欠燃焼であるが, 前者はガスタービンや工業用燃焼炉のようにバーナを使って流れの中に

*Center for Turbulence Research

静止した火炎を作るもので、できるだけ変動の少ない連続した燃焼を行なわせる．この燃焼形態では定格運転時の燃焼状態にパラメータを最適化を図る．図 1.1 は代表的なジェットエンジン [14] における燃焼状態の模式図である．一方，間欠燃焼は SI エンジンもしくはディーゼルエンジンのように密閉容器内で点火もしくは着火させることで間欠的に燃焼を行なわせる．この形態では乱流変動だけでなく，サイクル変動が場を強く支配している．図 1.2 に直噴ガソリンエンジン [15] における燃焼状態の模式図を示す．

表 1.1: 気体燃料の燃焼形態の分類 [12, p. 3]

分類法	分類 A	分類 B	分類 C
名称	連続燃焼	予混合燃焼 部分予混合燃焼	層流燃焼
	間欠燃焼	拡散燃焼	乱流燃焼

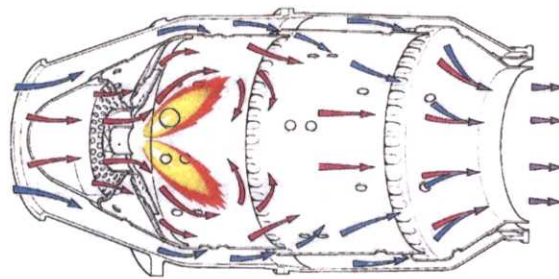


Fig. 4-3 Flame stabilizing and general airflow pattern.

図 1.1: ジェットエンジンにおける噴霧燃焼の例 [14]

連続燃焼形態の場合，燃料は十分に蒸発をするための空間・時間があるため，数値解析においては噴霧の飛行と蒸発や燃焼を考慮すれば良いということになるが，その一方で，直噴エンジンやディーゼルエンジンのような間欠燃焼形態においては，噴霧直後にピストンやシリンダ，ポート噴射型においてはポートやバルブがインジェクタのごく近傍に存在することで噴霧液滴の飛行挙動が制限され，また蒸発・燃焼過程においても非常に短時間で終了するため，これらのことを数値解析で表現するためには，その微粒化過程や，壁面への反射やぬれ，着火メカニズムや火炎伝播といった多くの要素の過渡的な時間応答をも考慮必要がある．

別の観点から燃料場を見ると，予混合燃焼，部分予混合燃焼，拡散燃焼（最近では非予混合燃焼と呼ばれる）に分けることもできる．予混合燃焼は燃料と空気を予め混合させ，その混合気を燃焼させるもので，その火炎は空間中を伝播する性質を持つ．拡散燃焼（非予混合燃焼）では，燃焼場に燃料と酸化剤が別々に供給され，それらがお互いに拡散・混合し，その量論混合面近傍で化学反応が起こり火炎が形成される．そのため火炎に伝播性は無い．拡散燃焼は，工業用や家庭用の各種バーナや燃焼機器に広く利用されており，そのほとんどが乱流を伴った，「乱流燃焼」状

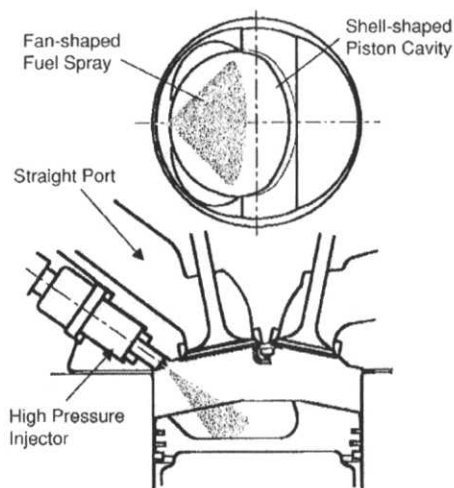


図7 直噴ガソリンエンジンの燃焼系

図 1.2: 直噴ガソリンエンジンにおける噴霧燃焼の例 [15]

態である。部分予混合燃焼は、拡散燃焼を加速するために火炎に伝播性が生じない程度の空気を燃料に混合しておくものである。浮き上がり火炎などがこの一例である。

さらに別の観点として、火炎近傍の流れの状態が層流であるか乱流であるかによって分類することもできるであろう。流れが乱流であると、火炎厚みが増すとともに、予混合燃焼にあつては火炎伝播速度が大きくなり、拡散燃焼においては単位面積あたりの燃焼率が增大する、などのように火炎の性質が大きく変化する。

上記 3 つの分類は任意の組み合わせが可能であり、「燃焼」という言葉を「火炎」に置き換えることで表 1.1 は火炎の分類表とすることができる。

1.3.2 液体燃料の燃焼形態の分類

液体燃料の燃焼形態の分類はその蒸発過程と燃焼過程から以下のように分類することが可能である。

1. 液面燃焼：火炎から燃料表面に ふく射や対流によって熱が伝えられ蒸発が起こり、発生した蒸気が液面上で燃焼する。
2. 灯心燃焼：対流やふく射によって火炎から灯心に熱が伝えられ、その熱によって発生した燃焼蒸気が拡散燃焼する。アルコールランプなどがその一例である。
3. 蒸発燃焼：燃料を予め蒸発させて気体燃料と同様に燃焼させる方法。応用例として LPP 燃料噴射弁がある。
4. 噴霧燃焼：液体燃料を噴霧器（アトマイザ、もしくはインジェクタ）によって無数の微細液

滴に微粒化し、表面積を広げるとともに空気との混合を促進させ燃焼させる方法で、応答性が良く、高負荷燃焼が可能であることから、工業目的に多用される。

このように、液体燃料の燃焼は液相のままで燃焼反応を起こすことはなく、液体燃料は一旦蒸発という過程を経て、気体となり、その燃料気体と酸化剤と反応することで燃焼する。上に挙げた燃焼法では、高負荷燃焼が可能かつ制御性に優れるという利点から噴霧燃焼は工業的には最も一般的な液体燃料の燃焼法であり、その用途は自動車や航空機、船舶、ロケットの各種エンジンや工業用燃焼炉など多岐にわたっている。本研究ではこの「噴霧燃焼」を対象とするが、噴霧燃焼を扱うためには、噴霧の挙動や蒸発といった現象とともに、気体燃焼についても考慮する必要がある。実際の噴霧燃焼はほとんどが「乱流拡散火炎」の範疇に入ることが知られている [13, p. 298] ことから、本研究は噴霧液滴の挙動の解析と乱流拡散火炎の解析の 2 点に主眼をおいて構成した。

1.4 本研究の概要

本研究では以上の観点に基づき、flamelet approach に基づく乱流噴霧燃焼 LES の手法の開発し、その有効性についての検討を行なった。

本論文は以下のように構成されている。

- 第一章では、本研究における工学的背景と研究目的、本論文の概要を述べる。
- 第二章では、乱流噴霧燃焼の LES に用いる基礎概念のうち、気相燃焼部分について、つまり乱流モデル、燃焼モデル、乱流燃焼モデルについて既往の研究を概観し、本研究で採用するモデルについて述べる。
- 第三章では、乱流噴霧燃焼の LES に用いる基礎概念のうち、液相部分、すなわち噴霧の解析に用いる基礎概念とモデリングを述べ、気相と液相の混相流における相間カップリングモデルおよび乱流モデルについて概観し、本研究で採用するモデルについて述べる。さらに本研究で開発した「Lagrange 型エネルギーカップリングモデル」について述べる。
- 第四章では、第二章、三章で概観、提案したモデルを実際の乱流蒸発噴霧実験に適用し、蒸発する噴霧の挙動解析を行ない、本研究で使用した基礎方程式やモデルの検証を実施し、その有効性について述べる。
- 第五章では、第四章で得られた知見を元に、乱流噴霧燃焼解析を行ない、実験値との詳細な比較・検討し、本研究で提案した Lagrange 型エネルギーカップリングモデルの有用性とその適用限界を検証する。併せて、本研究における予測精度や問題点を議論する。
- 第六章では、本研究の総括として、本研究で得られた結論と、将来の展望について述べる。

1.5 記号

本論文で使用する記号を以下にまとめる．これらについては本文中，断りなく使用するが，便宜上ここに挙げた記号であっても違う意味で使用することもある．その際には逐一その記号の意味を記載している．

記号一覧

C	化学種のモル濃度
D	化学種の拡散係数，液滴直径
D	物質拡散係数
E	化学反応の活性化エネルギー
F	噴霧液滴に作用する抗力
G	群燃焼数，反応進行度を表すスカラ
J	化学種の拡散流束
K	平衡定数
M	マッハ数
R	理想気体のガス定数
T	温度
V	化学種の拡散速度，計算セルの体積
W	分子量 (molecular weight)
Y	化学種の質量分率
Z	混合分率
a	音速
c_p	定圧比熱
g	重力加速度
h	熱伝達率，エンタルピー
k	反応速度定数，流体の運動エネルギー
γ	比熱比
δ	クロネッカーのデルタ，デルタ関数
ε	散逸率
λ	熱伝導率
μ	粘性係数
ν	動粘性係数，量論空燃比
ρ	流体の密度
τ	SGS 応力，特性時間
ϕ	任意の物理量
ψ	気相，液相間のカップリング項
ω	渦度

添字一覧

上付き添字

k	粒子番号
n	時間ステップ
$*$	無次元の物理量

下付き添字

F	燃料
O	酸化剤
d	液相 (dispersed phase, 液滴粒子) の物理量
g	気相 (gas phase) の物理量
i, j, k	空間方向を表す index
max	最大値
min	最小値
α, β, m	化学種の index

演算子

$\overline{(\cdot)}$	グリッドフィルタ
$\widetilde{(\cdot)}$	Favre フィルタ
$\widehat{(\cdot)}$	テストフィルタもしくは、液滴位置への補間
$\overline{(\cdot)}$	周波数空間

無次元数一覧

C_D	抗力係数
Le	ルイス数 (Lewis Number)
M	マッハ数 (Mach Number)
Nu	ヌセルト数 (Nusselt Number)
Pr	プラントル数 (Prandtl Number)
Re	レイノルズ数 (Reynolds Number)
Sc	シュミット数 (Schmidt Number)
Sh	シャーウッド数 (Sherwood Number)
St	ストローハル数 (Strouhal Number)

第2章 乱流燃焼流れの支配方程式とモデリング

本章では，本研究で扱う乱流噴霧燃焼流れの支配方程式について述べる．本研究で対象とする乱流噴霧燃焼現象を数値解析する際に考慮すべき支配方程式は，大きく分けると，

- 乱流場の支配方程式
- 燃焼場（化学反応場）の支配方程式
- 噴霧の支配方程式
- それぞれの相互干渉を考慮する方程式

となるであろう．本章では，これらのうち，乱流場と燃焼場の支配方程式について述べ，液滴の支配方程式とその取り扱い，気相燃焼とのカップリングなどについては第3章で述べることとする．

実用乱流燃焼場を詳細に直接数値解析する (Direct Numerical Simulation, DNS) ことを試みることは，現状の最高の計算機資源をもってしても未だ不十分であり，実用的な解析を実行するにあたってはいくつかの物理現象に対して何らかのモデル化が必要となる．

乱流燃焼場に対してのモデル化としては，大きく以下のようなパートに分類することができる．

- 乱流場に対するモデリング（乱流モデル）
- 燃焼現象もしくは火炎の表現に関するモデリング（燃焼モデル）
- 乱流変動が燃焼に及ぼす影響に対するモデリング（乱流燃焼モデル）

これらについて，乱流モデリングについて2.2節に，燃焼モデリングについては，2.3節に，そして乱流モデルと燃焼モデルのカップリングに相当する乱流燃焼モデルについては，2.4節でそれぞれ述べることとする．

また，本章で述べる各々の支配方程式の導出の過程については参考書が多数あるので，詳細な導出過程は割愛するが，例えば [16–18] が参考になるだろう．

2.1 乱流燃焼流れの支配方程式

乱流場を支配する方程式は、運動量保存式である Navier-Stokes 方程式と、質量保存式、そしてエネルギー（エンタルピー）の輸送方程式である。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.1.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right\} + \rho f_i \quad (2.1.2)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho h u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \frac{\mu}{\text{Pr}} \frac{\partial h}{\partial x_j} + \mu \sum_{\alpha} \left(\frac{1}{\text{Sc}_{\alpha}} - \frac{1}{\text{Pr}} \right) h_{\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_j} \right\} + \rho \sum_{\alpha} \{ Y_{\alpha} (f_j V_j)_{\alpha} \} \quad (2.1.3)$$

ここで、 f は重力などの任意の外力（体積力）項であり、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。以降、断りの無い限り、一つの項の中に同じ下付き添え字が現れるとき、その添え字 i, j, k はアインシュタインの総和規約に従うものとする。つまり、

$$a_i b_i \equiv \sum_{i=1}^3 a_i b_i \quad (2.1.4)$$

である。例として式 (2.1.1) を書き下すと、

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \rho u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \rho u_3}{\partial x_3} \quad (2.1.5)$$

となる。

2.1.1 化学種の輸送方程式

燃焼流れに代表されるような化学反応を伴う場を解析する場合には、次のような化学種に対する輸送方程式を解く必要がある。ある反応場中に存在するある化学種 α の輸送方程式は、

$$\frac{\partial \rho Y_{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_{\alpha} u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} J_{j,\alpha} + \omega_{\alpha}, \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N) \quad (2.1.6)$$

ここで、 Y_{α} は化学種 α の質量分率 (mass fraction) であり、以下のように定義される：

$$Y_{\alpha} \equiv \frac{\rho_{\alpha}}{\sum \rho_{\alpha}} = \frac{\rho_{\alpha}}{\rho} \quad (2.1.7)$$

なお、 ρ_{α} はある単位体積中に含まれる化学種 α の密度（質量濃度）である。また、この定義から、以下の式を得る。

$$\sum_{\alpha=1}^n Y_{\alpha} = 1 \quad (2.1.8)$$

以上から、質量分率 Y_{α} は密度で正規化された質量濃度と考えることができる。なお上述したとおり、下付き添え字 i, j, k については総和規約が適用されるが、化学種 index を示す α, β などには総和規約は適用しないこととする。

また、 $J_{j,\alpha}$ は化学種 α の j 方向の拡散流束であり、温度勾配による拡散（Soret 効果）、濃度勾配によって駆動される拡散（Dufour 効果）などが含まれる。拡散流束 $J_{j,\alpha}$ は以下のような関係で表すことができる。

$$J_{j,\alpha} = \rho V_{j,\alpha} Y_\alpha \quad (2.1.9)$$

ここで、 $V_{j,\alpha}$ は拡散速度であり、

$$V_{j,\alpha} \equiv u_{j,\alpha} - u_j, \quad \sum_{\alpha=1}^N Y_\alpha V_{j,\alpha} = 0. \quad (2.1.10)$$

で定義される。また、この拡散速度は以下のような構成方程式で化学種のモル分率 X_α と関係づけられる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_i} = & \sum_{\beta=1}^N \frac{X_\alpha X_\beta}{D_{\alpha\beta}} (V_{i,\beta} - V_{i,\alpha}) + (Y_\alpha - X_\alpha) \left(\frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x_i} \right) + \frac{\rho}{p} \sum_{\beta=1}^N Y_\alpha Y_\beta (f_{i,\alpha} - f_{i,\beta}) \\ & + \sum_{\beta=1}^N \left\{ \frac{X_\alpha X_\beta}{\rho D_{\alpha\beta}} \left(\frac{D_{T,\beta}}{Y_\beta} - \frac{D_{T,\alpha}}{Y_\alpha} \right) \left(\frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \right\} \quad \alpha = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

上式の右辺はそれぞれ、通常の濃度拡散、圧力差による拡散、外力の影響による拡散、温度勾配による拡散（Soret 効果）を表す。乱流燃焼流れにおいては、乱流拡散による影響が、濃度拡散を除くこれらの効果より圧倒的に大きいため [19, p. 29], 右辺第 2 項以降を無視できるとすると式 (2.1.11) は、

$$\frac{\partial X_\alpha}{\partial x_i} = \sum_{\beta=1}^N \frac{X_\alpha X_\beta}{D_{\alpha\beta}} (V_{i,\beta} - V_{i,\alpha}) \quad (2.1.12)$$

と簡単化できる。ここで、 $D_{\alpha\beta}$ は 2 成分系における化学種 α と化学種 β の相互拡散係数である*。式 (2.1.12) を実効拡散係数 D_α を用いて簡略化すると、以下のような Fick 則を得る。

$$X_\alpha V_{i,\alpha} = -D_\alpha \frac{\partial X_\alpha}{\partial x_i} \quad \text{or} \quad Y_\alpha V_{i,\alpha} = -D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_i} \quad (2.1.13)$$

ここで、実効拡散係数 D_α はそれぞれ次式で評価する。

$$D_\alpha \equiv \frac{1 - X_\alpha}{\sum_{\substack{\beta \\ \beta \neq \alpha}} \frac{X_\beta}{D_{\alpha\beta}}} \quad \text{or} \quad D_\alpha \equiv \frac{1 - Y_\alpha}{\sum_{\substack{\beta \\ \beta \neq \alpha}} \frac{Y_\beta}{D_{\alpha\beta}}} \quad (2.1.14)$$

これらの式から、拡散流束 $J_{j,\alpha}$ は以下のように表すことができる。

$$J_{j,\alpha} = -\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j}. \quad (2.1.15)$$

この関係は厳密には 2 成分間の混合に対してのみ妥当なものであるが、多くの場合、雰囲気気体成分は同一として扱うことができるため、多成分気体においても使用されている。またここで実効拡散係数 D_α をシュミット数 (Schmidt Number) Sc を用いて表記すると：

$$\rho D_\alpha \equiv \frac{\mu}{Sc_\alpha}. \quad (2.1.16)$$

*つまりわれわれが通常、拡散係数と呼んでいるものは、その気体の空気に対する相互拡散係数である。

つまり、式 (2.1.6), 式 (2.1.15), 式 (2.1.16) より、化学種の輸送方程式は以下のように記述できるととなる。

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_\alpha u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Sc_\alpha} \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) + \omega_\alpha \quad (2.1.17)$$

式 (2.1.17), もしくは 式 (2.1.6) 中の化学種 α の単位時間、単位体積あたりの生成速度 ω_α は次式のように書ける。

$$\omega_\alpha = W_\alpha \sum_{i=1}^m (\nu''_{\alpha,i} - \nu'_{\alpha,i}) k_i \prod_{\alpha} C_\alpha^{\nu'_{\alpha,i}} \quad (2.1.18)$$

ここで、 W_α は化学種 α の分子量 (molecular weight), $\nu'_{\alpha,i}, \nu''_{\alpha,i}$ は、反応 i における化学種 α の反応物もしくは生成物の量論係数、 k_i は反応 i の反応速度定数である。また、この式における「反応 i 」とは、各素反応において、正逆反応をそれぞれ別々の反応とみなして考えており、 m はその反応の数である。 C はモル濃度である。

反応 i の右向き (正方向, forward) の反応速度定数 k_{if} は次のアレニウス式 (Arrhenius equation) によって求めることができる。

$$k_{if} = AT^n \exp \left(-\frac{E}{RT} \right) \quad (2.1.19)$$

ここで、係数 A, n, E は実験的に決定される定数でさまざまな化学反応に対して整理されている。この定数については、例えば文献 [20, p. 7][†]などを参照されたい。一方、左向きの (逆方向の) 反応速度定数 k_{ib} は k_{if} とその反応の平衡定数 K_i を用いて、 $k_{ib} = k_{if}/K_i$ によって求めるが一般的である。そしてこの平衡定数 K_i は温度の関数として JANAF 表 [21] などから算出する。

2.1.2 混合分率 Z の輸送方程式

一般的な燃料における拡散火炎の持つ性質は、後に述べるいくつかの条件を満たすとき、燃料と酸化剤の質量分率、すなわち混合分率により表現できる場合がある。この場合、混合分率の輸送方程式を解くことにより、流れ場の混合状態をも知ることができる。このように、混合分率 Z とは、混合気の局所かつ瞬時的な組成を表現するために導入される変数である。このことは、図 2.1 のような噴流拡散火炎において、ノズルから噴出する燃料気体と、雰囲気から供給される酸化剤としての空気との混合の度合いとして特徴づけることができる。

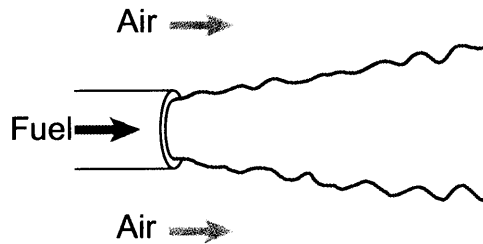


図 2.1: Schematic figure of diffusion (non-premixed) flame

[†]ここにはメタン-空気の詳細化学反応に対するデータセットが記載されている (16 化学種, 32 反応式)。

混合分率 Z の定義は複数考えられるが、一般には正規化も考慮した以下のような定義がしばしば用いられる：

$$Z \equiv \frac{1}{\phi + 1} \left(\phi \frac{Y_F}{Y_F^{\max}} - \frac{Y_{O_2}}{Y_{O_2}^{\max}} + 1 \right) \quad (2.1.20)$$

ここで Y_F^{\max} は燃料の質量分率の最大値で、通常 $Y_F^{\max} = 1$ をとる． $Y_{O_2}^{\max}$ は酸化剤である酸素の質量分率の最大値で、空気の場合おおよそ $Y_{O_2}^{\max} = 0.233$ である．また、 ϕ は当量比であり次式で与えられる：

$$\phi \equiv \frac{\nu_{O_2} Y_F^{\max}}{Y_{O_2}^{\max}} \quad (2.1.21)$$

ここで、 ν_{O_2} は量論空燃比で、燃料の組成が $C_m H_n$ と表せる場合、

$$\nu_{O_2} = \frac{32(m + n/4)}{12m + n} \quad (2.1.22)$$

と書くことができる．以上の式 (2.1.20) に代入して整理すると：

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{\frac{\nu_{O_2} Y_F^{\max}}{Y_{O_2}^{\max}} + 1} \left(\frac{\nu_{O_2} Y_F^{\max}}{Y_{O_2}^{\max}} \frac{Y_F}{Y_F^{\max}} - \frac{Y_{O_2}}{Y_{O_2}^{\max}} + 1 \right) \\ &= \frac{1}{\frac{\nu_{O_2}}{Y_{O_2}^{\max}} + 1} \left(\frac{\nu_{O_2}}{Y_{O_2}^{\max}} Y_F - \frac{Y_{O_2}}{Y_{O_2}^{\max}} + 1 \right) \\ &= \frac{1}{1 + \frac{\nu_{O_2}}{Y_{O_2}^{\max}}} \left(Y_F - \frac{Y_{O_2}}{\nu_{O_2}} + \frac{Y_{O_2}^{\max}}{\nu_{O_2}} \right) \end{aligned}$$

最終的に

$$Z = \frac{Y_f + \frac{Y_{O_2}^{\max} - Y_{O_2}}{\nu_{O_2}}}{1 + \frac{Y_{O_2}^{\max}}{\nu_{O_2}}} \quad (2.1.23)$$

が得られる．

次に混合分率 Z の輸送方程式を導く．まず、式 (2.1.17) より、燃料成分 Y_F の輸送方程式とその他の成分 Y_m の輸送方程式は：

$$\frac{\partial \rho Y_F}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_F u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_f \frac{\partial Y_F}{\partial x_j} \right) + \omega_f \quad (2.1.24)$$

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_m u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + \omega_m \quad (2.1.25)$$

ここで、式 (2.1.24)－式 (2.1.25)× ν_O を計算すると、

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho Y_F - \frac{\rho Y_m}{\nu_O} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho Y_F u_j - \frac{\rho Y_m}{\nu_O} u_j \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_f \frac{\partial Y_F}{\partial x_j} - \frac{1}{\nu_O} \rho D_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + \omega_f + \frac{\omega_m}{\nu_O} \quad (2.1.26)$$

ここで、 $m = O$ つまり化学種 m を酸化剤 O とし、両辺に $\rho Y_O^{\max}/\nu_O$ を足し、 $D_f = D_m \equiv D$ を仮定すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \left\{ Y_F - \frac{\rho Y_m}{\nu_O} + \frac{Y_O^{\max}}{\nu_O} \right\} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho \left\{ Y_F - \frac{\rho Y_m}{\nu_O} + \frac{Y_O^{\max}}{\nu_O} \right\} u_j \right) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ Y_F - \frac{\rho Y_m}{\nu_O} + \frac{Y_O^{\max}}{\nu_O} \right\} \right) \end{aligned} \quad (2.1.27)$$

両辺を $(1 + Y_O^{\max}/\nu_O)$ で除することで混合分率 Z の輸送方程式が導かれる。

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho Z u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right), \quad (2.1.28)$$

もしくは

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho Z u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right). \quad (2.1.29)$$

この式を見てわかるとおり、化学種の輸送方程式である式 (2.1.17) に存在する生成項 ω がなくなり、保存式の形になっている。つまり Z は保存スカラー (conserved scalar) である。化学種の輸送方程式である式 (2.1.17) の代わりにこの保存スカラーを用いる手法は実用燃焼場解析ではよく用いられており、この考え方は conserved scalar approach と呼ばれている。conserved scalar approach については 2.3.2 節で述べる。さらにルイス数 $Le = 1$ の仮定をおくことにより、混合分率 Z の輸送方程式は化学種だけでなく、エネルギー (エンタルピー) の輸送方程式も包含することが可能である。

ここで注意すべきことは、 Z が気相燃料のみを対象としている、ということである。例えば、燃料が燃焼炉内に投入されたとしても、もしその全てが液体、もしくは固体のままだったら、 Z の値はゼロのままである。本研究で対象としている乱流噴霧燃焼の場合、液相燃料が蒸発することで初めて混合気の Z が値を持つことになる。すなわち、 Z の輸送方程式には生成項として燃料の蒸発率が関与してくる。この場合、厳密には Z は保存スカラーでなくなるが、便宜上保存スカラーと呼ぶことにする。このことについては、第 3.3 節で詳しく述べる。

なお、予混合火炎においてはここで述べたような混合分率の考え方は適用できないが、その代わりに燃焼状態もしくは反応進行度を表すスカラーを定義し同様の計算する方法が提案されている。予混合火炎に関するモデリングについては、例えば文献 [16] などが参考になるだろう。

2.1.3 状態方程式

理想気体の状態方程式は以下のように記述される。

$$p = \rho R T \sum_{\alpha=1}^n \frac{Y_{\alpha}}{W_{\alpha}} \quad (2.1.30)$$

ここで、 R, W はそれぞれ、理想気体のガス定数、化学種 α の分子量である。また音速 a は以下のように定義される。

$$a \equiv \sqrt{\frac{dp}{d\rho}} \quad (2.1.31)$$

さらに理想気体の場合は,

$$a \equiv \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}} = \sqrt{\gamma R T} \quad (2.1.32)$$

ここで微小速度変動 u' を定義し, $p' \approx \rho u'^2$ となることを鑑みると音速の式 2.1.31 は

$$\frac{p}{p'} \approx \frac{u^2}{a^2} = M^2 \quad (2.1.33)$$

となり, マッハ数 M が小さい場合, 圧力は熱力学的に一定であると見なしてよいことになる. (低マッハ数近似) 詳細は 2.1.5 節に述べる.

2.1.4 拡散係数

燃焼を伴う乱流場においては温度変化が 1000 K のオーダーに達し, それによる拡散係数 (粘性係数) の変化が無視できない. このため, 本研究では Sutherland の式を用いて温度依存性を考慮する.

$$\mu = \mu_0 \frac{T^{0.75}}{T_0} \quad (2.1.34)$$

ここで μ_0 は 温度 T_0 における拡散係数であり, $T_0 = 300$ K, $\mu_0 = 18.67 \times 10^{-6}$ Pa s を用いた [22].

2.1.5 低マッハ数近似方程式

密度変化のある, すなわち圧縮性を持つ流体の流れ現象を数値解析する際には, 通常考えるべき速度の伝播だけでなく, 圧力波の伝播を解像し得る格子間隔や時間間隔を決める必要がある. いわゆる圧縮性流体 (高速流) の解析においては, 流れ場の速度スケールと圧力波の伝播速度つまり音速のスケールが同等であるため, この事はそれほど問題とならない. 一方, 本研究で対象とするようなガスタービンエンジンや DISI エンジン*のような実用燃焼器においては, 流れ場の速度は通常, 数 m から数十 m のオーダーであり, 音速は常温空気においても約 340 m/s であることから, 速度が同程度の非圧縮性流れ解析に比べて時間刻み Δt を大幅に小さくする必要性が生じ, このことが計算時間の増大につながってしまう. ましてや, 高温となる燃焼流れにおいては音速もそれに従いさらに大きくなるのでこの傾向はますます顕著になる. このようなマッハ数が比較的小さい流れにおいては, (状態方程式中における) 圧力の値と比較して運動方程式中の圧力の空間変化量は 10^{-4} 程度小さいと言われており [23], このような低マッハ数流れ場に対して圧力波の伝播を直接取り扱うことのできる高マッハ数圧縮性流体の解法を適用する場合, 上記の理由から運動方程式中の圧力の計算に非常に高い精度を要求される. さらに, 状態方程式中の圧力を決定する際に用いる密度や温度の計算にも同様に高い精度を要求され, 結果的に収束解を得ることが非常に困難となってしまう. そこで上記の性質を利用して, 計算負荷の低減を図りつつ, 密度変化のある流れ場を非圧縮性流体の数値解析と同様の手法で解析する方法が, 低マッハ数近似方

*Direct Injection Spark Ignition

程式に基づく手法である。この方法では、支配方程式を以下に述べるような低マッハ数近似展開を施し、これらの方程式に対して非圧縮性流体の数値解析手法を低マッハ数近似向けに拡張したスキームで解析する。以下に McMurtry *et al.* による導出 [24] と同様の方法を用いて支配方程式系を導出する。

まず全ての変数をべき級数展開する：

$$\phi = \phi^{(0)} + \gamma M^2 \phi^{(1)} + (\gamma M^2)^2 \phi^{(2)} + \dots, \quad (2.1.35)$$

ここで、 ϕ は任意の変数であり、 γ は比熱比である。マッハ数が十分小さいという仮定（これが低マッハ数近似たる所以である）においては、 γM^2 は無視小となり、この仮定を考慮し、式 (2.1.35) を式 (2.1.1) – (2.1.3) に代入すると、

$$\frac{\partial \rho^{(0)}}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{(0)} u_j^{(0)}}{\partial x_j} = 0 \quad (2.1.36)$$

$$\frac{\partial \rho^{(0)} u_i^{(0)}}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{(0)} u_i^{(0)} u_j^{(0)}}{\partial x_j} = -\frac{\partial p^{(1)}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left(\frac{\partial u_i^{(0)}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j^{(0)}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_k} \right) \right\} + \rho f_i \quad (2.1.37)$$

$$\frac{\partial \rho^{(0)} h^{(0)}}{\partial t} + \frac{\partial \rho^{(0)} h^{(0)} u_j^{(0)}}{\partial x_j} = \frac{\partial p^{(0)}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \frac{\mu}{\text{Pr}} \frac{\partial h^{(0)}}{\partial x_j} + \mu \sum_{\alpha} \left(\frac{1}{\text{Sc}_{\alpha}} - \frac{1}{\text{Pr}} \right) h_{\alpha}^{(0)} \frac{\partial Y_{\alpha}^{(0)}}{\partial x_j} \right\} \quad (2.1.38)$$

$$+ \rho^{(0)} \sum_{\alpha} \{ Y_{\alpha}^{(0)} (f_j V_j)_{\alpha} \} \quad (2.1.39)$$

$$p^{(0)} = \rho R T^{(0)} \sum_{\alpha=1}^n \frac{Y_{\alpha}^{(0)}}{W_{\alpha}} \quad (2.1.40)$$

を得る。ここで注目すべきことは、圧力を除く全ての変数は 0 次の項のみ出現していることである。1 次の近似においては、熱力学的圧力 $p^{(0)}$ は空間的には一定であるが、時間的な変化を許す。この近似においては、燃焼反応などによる熱力学的圧力の変化は流体を介して瞬時に伝わるので、音速は無限として扱う。開領域においては古典的解析 [25] から、 $p^{(0)} = p_{\infty}$ であり、燃焼は定圧現象であると仮定できる。一方、 $p^{(1)}$ は流体力学的圧力であり、熱力学的プロセス（0 次のオーダー）には直接関与しない。以降、簡単のため圧力については、 $p^{(1)}$ を p と、他の変数について $\phi^{(0)}$ を ϕ と表記することとする。

2.2 乱流場のモデリング手法

流れ場のレイノルズ数が大きくなると、流れは層流から乱流へと遷移し複雑な挙動を示す。乱流を数値計算で直接求めることは、低レイノルズ数かつ単純な流れ場だけに限られており、工学的に興味のある乱流場を直接計算することは、現在の計算機能力をもってしても未だ不可能である。

本節では乱流モデリングの分類を概観し、本研究で用いる Large-Eddy Simulation (LES) の概

念とその定式化の方法を述べる。なお、乱流場と燃焼場のカップリングは fast chemistry を仮定して行なわれるため、ここで述べる乱流モデルは燃焼モデルに直接には依存しない。

2.2.1 気相乱流モデル

乱流中に出現する全ての要素を数値解析で取り扱う計算、すなわち DNS (Direct Numerical Simulation) を実行することは、現状では計算負荷が多いため、非常に限定された条件下でのみのみしか取り扱うことができない。その近似的計算手法として開発されたのが「乱流モデル」である。過去に多くの研究者によって様々な乱流モデルが提案されているが、そのほとんどは、なんらかの「粗視化」という過程を通して表現されている。この粗視化の代表的な方法として、「アンサンブル平均操作」と「フィルタ操作」がある。前者の平均操作（より正確にはレイノルズ平均）に基づくモデルとして $k-\epsilon$ モデルに代表される RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes Simulation)*モデルがある。RANS モデルは 1970 年代に提案され、その後のモデル開発と計算機の発展に伴い、1990 年代に急速に工学設計に普及した [13, p. 181]。RANS モデルは、適切な統計平均モデルとモデル定数値が選択されている場合において、平均速度場のような統計平均値については良い近似を示すが、適切なモデルが不明な場合やモデル定数値のチューニングが不十分な場合の解は信頼性の欠けるものとなってしまう。

LES (Large-Eddy Simulation) はフィルタ操作に基づく乱流モデルであり、時間変動・空間変動を直接的に解析できる、モデル定数が少なく適用範囲が広い、という特徴がある。LES は RANS に比べて原理的に多くの格子点数と非定常計算を要求するため、計算負荷の面においては不利となるが、燃焼器内流れのような複雑乱流場が本質的に持つ流れの不均一性や非定常性を直接取り扱うことが可能であり、燃焼器性能を大きく左右する要素となり得るこれらの現象を扱う上で大きな利点を持つ。

図 2.2 に上記 3 つの手法 (DNS, LES, RANS) を単純せん断混合層に適用したときのそれぞれのモデル概念図を示す。

また、噴霧などの分散相を伴う乱流場や乱流燃焼場のようにさらに多重化された乱流問題においては、スケール分離の明確でないレイノルズ平均モデルより計算するスケールとモデル化されるスケールが分離されている LES の方が燃焼や噴霧といったサブモデルを組み込むのにも都合がよい。

ところで、乱流モデルは言い換えれば乱流場の方程式系のクロージャ問題を解決する方法と捉えることができる。以下にクロージャ問題と乱流モデルの関係 [26, pp. 137-142] について述べる。

簡単のために、非圧縮性流体を仮定した式 (2.1.2) を記号的に

$$\frac{\partial u}{\partial t} + uu = \nu u \quad (2.2.1)$$

と書くことにする。ここで、左辺第 2 項は非線形項（移流項と圧力項の和）であり、右辺項は粘性拡散項を表す。また、 $\nu = \mu/\rho$ である。平均成分 \bar{u} の輸送方程式を得るために式 (2.2.1) の平均を

*レイノルズ平均に基づく Navier-Stokes 方程式の数値解法

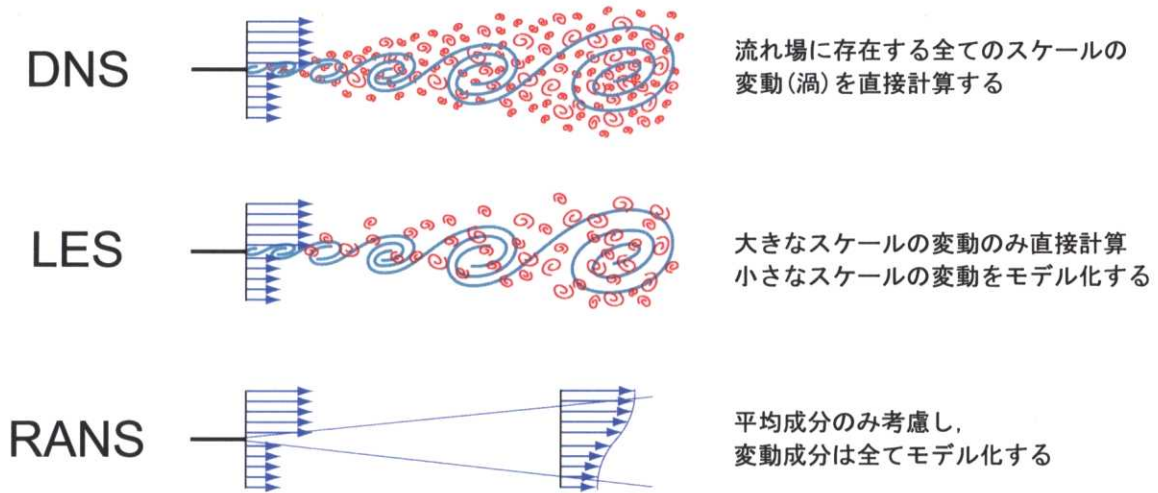


図 2.2: 流れ場から見た乱流モデルの分類 (単純せん断混合層の例)

とると,

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \overline{uu} = \nu \bar{u} \quad (2.2.2)$$

となり, 2 次のモーメント \overline{uu} を未知数として含む. この 2 次モーメントの輸送方程式は, 式 (2.2.1) に u をかけ, 平均をとることで得られる:

$$\frac{\partial \overline{uu}}{\partial t} + \overline{uuu} = \nu \overline{uu}. \quad (2.2.3)$$

このように, 非線形項に起因して, 高次のモーメントが現われ, 解を決定することができない. つまり, 未知数の数が方程式の数よりも常に多いので, 高次モーメントをなんらかの方法で低次モーメントで記述しないことには方程式系を閉じることができない. これがクロージャ問題である. そして, 「高次モーメントを低次モーメントで記述する」ことを, 乱流の性質を用いて表現するものが, すなわち乱流モデルである. この「クロージャ問題と乱流モデル」との関係は, 2.4 節で述べる化学反応と乱流とのカップリングの際にも有用な概念である.

2.2.2 Large-Eddy Simulation

図 2.3 は, 様々なレイノルズ数の様々な乱流場についてのエネルギースペクトルをプロットしたものである. この図からもわかるとおり, 一般的な乱流場において低波数の運動すなわち大きな渦の統計的性質は, 流れ場によって変化するが, 高波数の運動, すなわち小さなスケールの渦のそれは流れ場の種類によらず普遍性を持つ [27] ことがわかる. Large-Eddy Simulation (LES) はこの事実に則り, 流れ場を特徴付ける大きな渦は直接数値計算 (DNS) し, 普遍性の期待できる小さな渦についてのみモデル化を施す, という発想に基づいている. そしてこのことは, 速度などの流れ場を記述する物理量分布もしくは基礎方程式に空間フィルタを作用させ, 大きなスケールの渦と小さなスケールの渦を分離した上で, 大きなスケールの渦を直接数値計算し小さなスケール

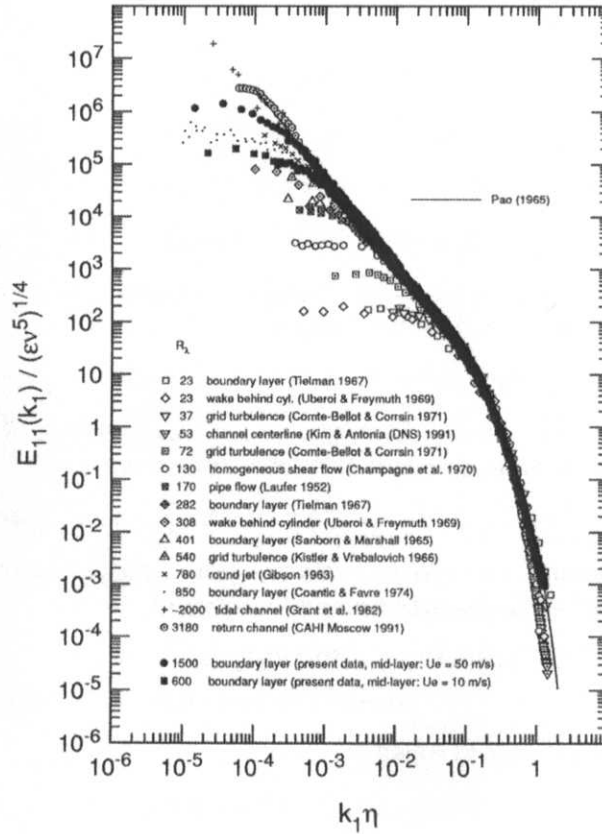


図 2.3: Energy Spectrum for various turbulent flow field [27]

ルの渦をモデル化する，というプロセスで達成される．より具体的には，計算格子より小さい成分をモデル化した方程式によって，計算格子で解像できる成分についてできるだけ精度よく直接計算を実行する，という方法をとる．

LES では一般に，直接数値計算する大きなスケールの成分を Grid scale (GS) 成分，それより小さいモデル化するスケールの成分を Sub-grid scale (SGS) 成分と呼ぶ．LES は格子サイズ付近までは直接計算を基礎としているため，DNS の近似解と捉えることも可能である．図 2.4 に LES で用いられるスケール分離の概念図を，また，図 2.5 にフィルタ操作を施した際の速度変動の模式図を示す．

2.2.2.1 空間フィルタ

前節でも述べたとおり，LES における基礎方程式は流れの基礎式である式 (2.1.1) – (2.1.3) にフィルタ操作を施したものである．このフィルタは通常，空間フィルタ，もしくはグリッドフィルタと呼ばれている．今日，SGS モデル (SGS モデルについては 2.2.3 節で述べる) として標準的に用いられている Smagorinsky モデルにおいては，次節で述べる空間フィルタ関数にどれを選択するかは問題とならず，フィルタ幅のみが重要となる．一方，スケール相似則モデルなどではフィ

ルタ関数のとり方が問題となり得る.

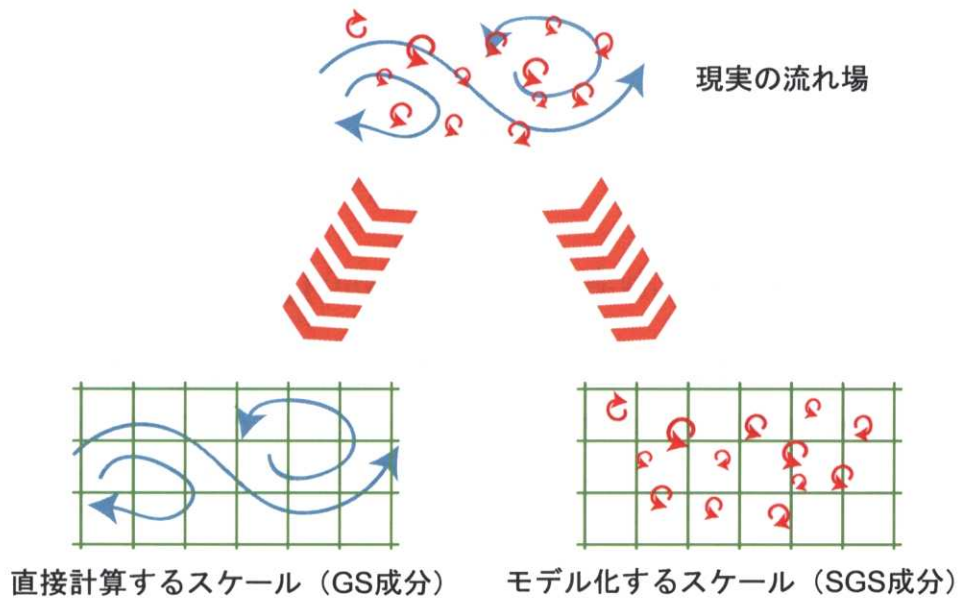


図 2.4: LES におけるスケール分離の概念

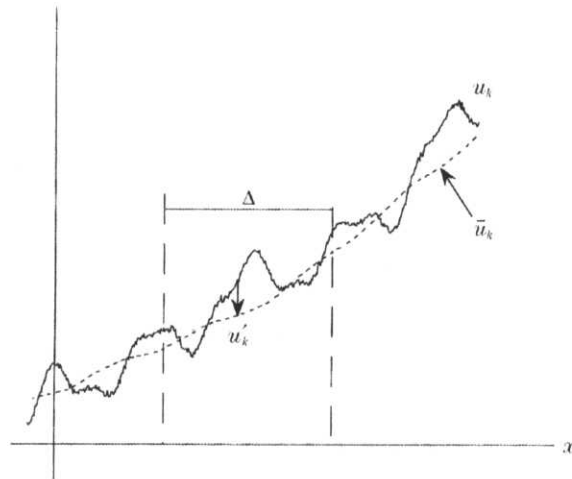


図 2.5: 真の速度分布とフィルタ操作を施した速度分布 [13, p. 170]

2.2.2.2 フィルタ関数

たたみ込み積分

$$\bar{\phi} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} G(x - x') f(x') dx' \quad (2.2.4)$$

において、 G を $x = 0$ の近くで正の値をもち、 $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} G(x) = 0$ かつ、

$$\int_{-\infty}^{\infty} G(x') dx' = 1 \quad (2.2.5)$$

を満たすようにしたとき、この G をフィルタ関数と呼ぶことができる。このフィルタ関数を 3 次元空間に展開したとき、以下のように定義される。

$$\bar{\phi} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \prod_{i=1}^3 G_i(x_i - x'_i, \Delta_i) \phi(x'_1, x'_2, x'_3, t') dx'_1 dx'_2 dx'_3 \quad (2.2.6)$$

ここで、 $G_i(x_i - x'_i, \Delta_i)$ はフィルタ関数であり、 Δ_i はフィルタ幅である。

LES に用いることのできるフィルタにはある程度の任意性があり、Gaussian フィルタ、Top-hat フィルタ、Spectral Cut-off filter などがよく利用される。

Top-hat フィルタ

$$G(x) = \begin{cases} 1/\Delta & (|x| < \Delta/2) \\ 0 & (|x| > \Delta/2) \end{cases} \quad (2.2.7)$$

このフィルタ関数をフーリエ変換し周波数空間に写像すると：

$$\bar{G}(k) = \frac{\sin(\Delta k/2)}{\Delta k/2} \quad (2.2.8)$$

となる。ここで、 k は波数であり、 \bar{G} は波数空間におけるフィルタ関数を表す。このフィルタは、物理空間における体積平均に相当し、有限差分法や有限体積法でしばしば用いられる。

Spectral Cut-off filter フィルタ

$$G(x) = 2 \frac{\sin(\pi x/\Delta)}{\pi x} \quad (2.2.9)$$

このフーリエ変換は：

$$\bar{G}(k) = \begin{cases} 1 & (|k| < \pi/\Delta) \\ 0 & (|k| > \pi/\Delta) \end{cases} \quad (2.2.10)$$

このフィルタは波数空間における Low pass filter に相当し、スペクトル法との適合性が良い。

Gaussian フィルタ

$$G(x) = \sqrt{\frac{6}{\pi \Delta^2}} \exp \frac{-6x^2}{\Delta^2} \quad (2.2.11)$$

このフーリエ変換は：

$$\bar{G}(k) = \exp \frac{-\Delta^2 k^2}{24} \quad (2.2.12)$$

ガウス関数を用いることで、フィルタのシャープさは失われるものの、物理周波数両空間で同じ式の形でフィルタを構成することが可能となる利点がある。

2.2.3 フィルタ操作を施した支配方程式と SGS モデル

乱流燃焼のような密度変化を伴う現象を数値計算で扱う場合、前述のフィルタ操作を支配方程式に施すと、そこには $\overline{\rho\phi}$ のような密度相関項が現れる。しかしこの項は直接計算することができないため、なんらかのモデル化が必要となる。このモデル化を避けるため、一般に Favre フィルタ (密度加重フィルタ) を用いて変数の分離をする、という方法がとられる。Favre filter は以下の様に定義される。

$$\tilde{\phi} \equiv \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \quad (2.2.13)$$

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (2.2.14)$$

2.2.2.1 節で述べた空間フィルタと、上記の Favre フィルタの 2 つの操作を施した質量・運動量保存方程式を以下に示す。

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2.2.15)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = & -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right\} \\ & - \frac{\partial}{\partial x_j} \{ \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i' \tilde{u}_j') \} \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

ここで、式 (2.2.16) 右辺第 3 項に現れる SGS 応力項は GS 成分で直接計算できない量なのでモデル化が必要となる。そのモデル (SGS モデルと呼ばれる) には一般によく用いられる、Smagorinsky 型モデル [28]*を採用する。

$$\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i' \tilde{u}_j') \equiv -2\mu_{SGS} \bar{S}_{ij} \quad (2.2.17)$$

$$\mu_{SGS} = \bar{\rho} (C_s \Delta)^2 |\bar{S}|. \quad (2.2.18)$$

$$\bar{S}_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.2.19)$$

$$|\bar{S}| \equiv 2 (\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{\frac{1}{2}} \quad (2.2.20)$$

ここで、 C_s は Smagorinsky 定数とも呼ばれ、唯一のモデルパラメータである。右辺第 2 項の粘性項に現われる \tilde{u} は SGS 密度変動が 0 であると仮定し、 $\tilde{u} = \tilde{u}$ として表現する [29]。(なお、Boersma ら [30] は乱流拡散火炎の DNS を実施し、*a priori* テストから $\tilde{u} \equiv \tilde{u}$ となることを報告していることも付記しておく)

次に式 (2.1.17) にフィルタ操作を施す：

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_j} - \bar{\rho} (\tilde{Y}_\alpha \tilde{u}_j - \tilde{Y}_\alpha' \tilde{u}_j') \right\} + \bar{\omega}_\alpha \quad (2.2.21)$$

*ここで Smagorinsky 型と表記しているのは、もともと Smagorinsky が提案したモデルは、非圧縮性流れにおける τ_{ij} に関するモデルであるが、低マッハ数流れにおいては SGS 密度変動の効果は大きくないものと仮定して、非圧縮乱流場の SGS モデルがそのまま流用されることが多いからである

この式でも GS 量で直接表現できない項 (SGS 乱流流束) が現れる．この項は分子粘性のアナログから，勾配拡散モデルを採用する．

$$\bar{\rho} \left(\widetilde{Y_\alpha u_j} - \widetilde{Y_\alpha} \widetilde{u_j} \right) \equiv - \frac{\mu_{SGS}}{Sc_{\alpha,SGS}} \frac{\partial \widetilde{Y_\alpha}}{\partial x_j} \quad (2.2.22)$$

ここで問題となるのが $\bar{\omega}_\alpha$ の取り扱いであるが，このことについては，第 2.4 節で詳しく述べることにする．

次にフィルタ操作を施した混合分率 Z の輸送方程式を示す．

$$\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Z u_j}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \bar{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \left(\widetilde{Z u_j} - \widetilde{Z} \widetilde{u_j} \right) \right\} \quad (2.2.23)$$

この式でも GS 量で直接表現できない項 (SGS 乱流流束) が現れるが，式 (2.2.21) と同様に取り扱う．

$$\bar{\rho} \left(\widetilde{Z u_j} - \widetilde{Z} \widetilde{u_j} \right) \equiv - \frac{\mu_{SGS}}{Sc_{SGS}} \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_j} \quad (2.2.24)$$

ここで乱流 Schmidt 数 Sc_{SGS} は，Pistch ら [73] がメタン-空気拡散火炎 (Sandia flame D) を対象に LES を実行し，Dynamic procedure によって算出された値から求めた $Sc_{SGS} = 0.4$ を採用した．

2.2.4 その他の SGS モデル

前節で渦粘性型 SGS モデルとして Smagorinsky モデルについて概観したが，以下では，もう一つの SGS モデルのアプローチとして，スケール相似に基づく SGS モデルについて述べる．このモデルは本研究では利用しない（理由は後述）が，スケール相似の概念は乱流の SGS 成分の評価だけでなく，燃焼場の SGS 成分を評価する場合にも用いることからここで紹介しておく．

スケール相似の概念に基づく燃焼場の SGS 成分の評価手法については，2.4.2.1 節で詳しく述べる．

2.2.4.1 スケール相似則モデル

SGS 応力項のモデル化手法のもうひとつの流れは，Bardina [31] モデルに代表されるスケール相似則 (scale similarity) モデルである．スケール相似則モデルでは，まず GS 成分のうちカットオフ周波数近傍の成分を以下のようにしてとりだす．

$$\bar{u} - \bar{\bar{u}} \quad (2.2.25)$$

SGS 成分の定義式

$$u' = u - \bar{u} \quad (2.2.26)$$

の両辺にフィルタ操作を施すと，

$$\overline{u'} = \bar{u} - \bar{\bar{u}} \quad (2.2.27)$$

が得られる。フィルタ操作の性質より、両辺は 0 でなく、ある値を持つ。そしてこの式は「SGS 成分のうち比較的大きい成分 ($\overline{u'}$) は GS 成分のうちの比較的小さいスケールの成分 ($\overline{u} - \overline{\overline{u}}$) と等しい」ことを示している。つまり、カットオフ周波数を軸に、近接スケールの渦は相似性を有することを示している。この考え方に基づいて SGS 応力項をモデル化したのが Bardina モデルである。Bardina モデルでは以下のように SGS 応力項をモデル化する。

$$\tau_{ij} \equiv \overline{\overline{u_i u_j}} - \overline{\overline{u_i}} \overline{\overline{u_j}} \quad (2.2.28)$$

Bardina モデルは DNS データを用いた *a priori* テストでは非常に良い結果を示すが、その一方で渦粘性モデルが持つ散逸性をこのモデルは必ずしも保障しないため、計算が不安定となりやすいことから SGS モデルとして単独で用いられることはない [32, p. 199]。

2.2.4.2 ダイナミックモデル

Smagorinsky モデルはモデルの妥当性と数値計算上の安定性から多くの LES 解析に用いられているが、唯一のモデルパラメータである C_s の値を何らかの方法で決定する必要がある。現在では、乱流統計理論からの推定値として算出された $C_s = 0.173$ という値が Smagorinsky 定数の理論値とされている [32, p. 194] が、その一方で、せん断乱流や乱流噴流の実験値との比較検証から、実際には $C_s = 0.10 \sim 0.15$ 程度の値が使われ、普遍定数となっていないのが実状である。さらに、工学的な実用性を考慮すると壁面近傍などでの C_s に対する修正も必要となり、このことも汎用性の妨げとなっている。

これらの問題を解決するためのモデルとして Germano ら [33] が提案する dynamic procedure に基づく手法が挙げられる。この手法は、Smagorinsky 定数 C_s の最適値は解析対象や局所的な流れ場によって異なるため、Smagorinsky 定数一定とする解析では普遍性に問題が生じることがある、という考えに基づき、Smagorinsky 定数を動的に求める手法 (dynamic Smagorinsky model) を提案し、多くの研究者によって様々な乱流場へ適用され成功を収めている (一例として、Akselvoll ら [34] の燃焼器内乱流場への適用例を挙げておく)。

Fureby [35] は、燃焼流れの LES において Smagorinsky モデルやスケール相似モデル、dynamic Smagorinsky モデルなどの SGS モデルの比較を行ない、速度分布やレイノルズ応力分布などでは SGS モデルによる差異は無視できる程度と報告している。一方で、化学反応を伴う流れ場においては、物質の乱流拡散係数が化学反応の有無に依存して変化する [36] ため、 C_s 一定とする Static Smagorinsky モデルでは不適当という指摘 [68] も報告されている。

本研究では、計算時間も考慮に入れ、 C_s を一定とする Static Smagorinsky モデルを採用する。

2.3 燃焼モデル

燃焼モデル、すなわち燃焼による化学反応を数値解析で取り扱う方法には大きくわけて 2 つの方法がある。ひとつめの方法は化学種の輸送方程式である式 (2.1.17) を直接解くタイプである。こ

の場合、(ラジカルや微量物質などを含めて) 化学種をどれだけ詳細に取り扱うかによってさらに分類がなされる。このタイプの燃焼モデルについては以下 2.3.1 節で概観する。また、この場合の乱流燃焼の取り扱いについては 2.4 節で述べる。

もうひとつの方法は、化学種の輸送方程式である 式 (2.1.17) を直接解く代わりに 2.1.2 節で求めた混合分率 Z の輸送方程式 (と場合によってはスカラ消散率などの補助方程式も同時に) を解き、 Z に対する熱力学的諸量を混合分率の分布関数として与えることで燃焼反応を取り扱う方法である。この方法は conserved scalar approach とも呼ばれている。この手法については、2.3.2 節で概観する。また、この場合の乱流燃焼の取り扱いについては 2.4.2 節で述べる。

2.3.1 化学種の輸送方程式を取り扱う燃焼モデル

ここではまず、化学種の輸送方程式を直接解くタイプの燃焼モデルについて概観する。この場合、ラジカルや微量物質などを含め、化学種をどれだけ詳細に取り扱うかによってさらに以下のような分類がなされる。

- 詳細反応モデル
- 簡略化反応モデル
- 総括反応モデル

以下にそれぞれのモデルの特徴を述べる。

2.3.1.1 詳細反応モデル

燃焼反応を含む多くの化学反応は複雑に進行し、化学的に見ていくつかの反応段階を経ている。このとき、それ以上分解することのできない化学反応を「素反応」と呼び、この素反応は異なる反応過程においても原則的に普遍的であると考えられる。

燃焼現象の化学反応機構は、数多くの素反応から構成され非常に複雑な系であるが、水素やメタンのような比較的簡単な燃焼反応については、ほぼ正確な化学反応機構が解明されており、これらの全てを取り扱うことで燃焼反応を表現する方法を詳細反応モデルと呼んでいる。つまり、2.1.1 節で述べた化学種の輸送方程式と化学反応式を、場に存在する全ての化学種について考慮に入れて計算する。

詳細反応モデルで、たとえば水素火炎を取り扱う際には 10 程度の化学種と 20 程度の反応式を、メタン火炎においては約 50 化学種、200 以上の反応式を考慮する必要がある [1]。また、これらの反応機構のもつ (最も小さな) 特性時間は乱流運動の特性時間よりも圧倒的に短いため、これらを全て考慮しながら数値解析するには膨大な時間を要する。このため、乱流火炎の詳細な構造解明などの物理現象の把握のための数値実験には必要不可欠な手法であるが、実用燃焼計算には計算負荷が膨大であり不向きである。

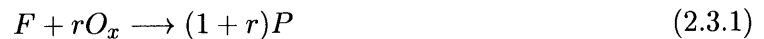
この詳細反応モデルに 2.2 節で述べた DNS を組み合わせることで、乱流燃焼 DNS が達成される。この場合、乱流燃焼場にある全ての物理量に関する詳細な情報が得られる。非常に限られた条件下ではあるが、計算例 [37] の報告も行なわれ始めている。

2.3.1.2 簡略化反応モデル

前節でも述べたとおり、燃焼現象の化学反応機構は数多くの素反応から構成され、非常に複雑な系であり、その化学反応機構の構築そのものが一つの研究分野として成立するほどである。理想的には、全ての化学反応を考慮しつつ数値解析をしたいが、実際には計算機資源などの観点からなんらかの簡略化を施す場合も多い。このような要請から来たものが「簡略化反応モデル」である。このモデルでは全ての素反応から代表的なもののみを取り扱う。簡略化の方法や簡略化した反応式に対する反応速度の設定方法などについては文献 [38, 39] を参照されたい。

2.3.1.3 総括反応モデル

総括反応モデルは、燃焼場に存在する複雑な化学反応機構を、ただ一つの反応式、つまり初期の反応物から最終的な生成物への変化のみ考慮することで化学反応を代表し、その反応に対して反応速度を設定するモデルである。



ここで、 F, O, P はそれぞれ、燃料、酸化剤、反応生成物であり、 r は量論混合比である。反応速度は 2.1.1 節で述べた反応速度のアナログを用いて、以下のようなアレニウス型反応速度式に従うと仮定する：

$$\omega_\alpha = \rho Y_F \rho Y_O A T^p \exp\left(-\frac{E}{RT}\right). \quad (2.3.2)$$

総括反応モデルの場合、モデル係数が普遍性を持たず、流れの性状、火炎形態、燃料の種類などのパラメータによって変化し得ることが問題となる。

2.3.2 conserved scalar approach に基づく燃焼モデル

一般的な燃料における拡散火炎の持つ性質は、燃料と酸化剤の質量分率、すなわち、混合分率により表現できることが多い。この場合、化学種の輸送方程式である式 (2.1.17) の代わりに混合分率 Z の輸送方程式 (2.1.29) を解くことで燃焼反応を取り扱うのが現実的、かつ有用な方法である。この考えに則って構築された手法が conserved scalar approach と呼ばれる。この手法では、混合分率の輸送方程式を解くことで火炎位置や流れ場の混合状態を知ることができるが、燃焼による熱化学的状态（化学種濃度や温度、密度）を求めるために火炎構造に関して何らかのモデル化が必要になる。

実用燃焼場における乱流火炎では、一般に化学反応における時間スケールは乱流場における最小スケールである Kolmogorov のマイクロスケールより小さいと考えることができ、燃料と酸化剤とが混ざった瞬間に反応が完了する infinite-rate fast chemistry, もしくは混合律速 (fast chemistry) であると考えてよい。混合分率を用いて熱化学状態を求める方法は以下のように分類可能である：

- 反応速度無限大を仮定し、火炎面近似を行なった Flame Sheet Model.
- 局所の化学反応は平衡状態にあると仮定する Chemical Equilibrium Model.
- 温度や濃度などの熱化学状態を対向拡散火炎の DNS や実験値から求める, Laminar Flamelet Model.

次節よりこれらのモデルについて概説する。

なお, conserved scalar approach についての総括的な解説は, Bilger [40] のレビューや, Jones ら [41] による conserved scalar approach による数値解析の詳細なレビューがあるのでそちらを参照するとよいだろう。

2.3.2.1 Flame Sheet Model

このモデルは, Burke and Schumann [42] によって最初に提案されたモデルであり, 次のような一段階不可逆反応を仮定する。



このモデルでは, 反応速度は無限大を仮定する。つまり, 反応物質が分子レベルで混合即燃焼し, 瞬時に反応生成物が生成されると考える。この仮定によって燃焼モデルは大幅に単純化される。しかし, 無限に薄い火炎面内部を除いて燃料と酸化剤は共存することはできない。さらに一段階不可逆総括反応を考えているため燃料, 酸化剤, 生成物しか表現することができず中間生成物を表現することができないことや, 実際には起こっているであろう, 火炎面近傍の逆反応を表現することができないなどの欠点を有する。しかし, 平均温度など全体的な火炎の特徴を捕らえるには容易な手法といえる。図 2.6 に Flame Sheet Model を用いて得られたメタン-空気拡散火炎における化学種濃度, 密度と温度の火炎データを示す。図中 0 の添え字は空気側での値である。この図を見てもわかるとおり, 反応速度無限大の近似に起因して, 量論混合比付近が尖っている分布となっている。

2.3.2.2 Chemical Equilibrium Model

前節の Flame Sheet Model は一段不可逆反応を仮定し, 化学反応の簡単化を図ったものであった。しかしながら現実の化学反応は, ほとんど全ての反応がある程度可逆反応を伴うため, この点で問題がある。反応の可逆性を考慮できれば, 燃料と酸化剤は共存できることになる。Chemical Equilibrium Model (化学平衡反応モデル) [44] の化学反応は Flame Sheet Approach とは異なり,

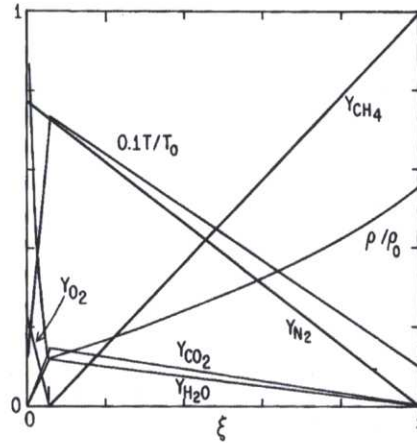


図 2.6: Thermochemical variables for methane-air diffusion flame calculated by Flame Sheet Model [43]

可逆多段階反応を考慮することができ、そして化学反応は Flame Sheet のように幾何学的に火炎面を決定しその内部のみに閉じ込められるのではなく、混合を平衡状態に保つことが必要となる場所で起こる、としている。

この手法の最も効率的かつ重要な点は化学平衡状態を仮定しているので 2.3.1 節で述べたような詳細な反応機構を必要とせず、元素の成分と混合状態を表す 2 つの状態変数（圧力とエンタルピなど）が既知であれば化学種の濃度を決定することができる点である。

図 2.7 に Chemical Equilibrium Model つまり化学平衡を仮定した際に求めることのできる火炎データ [2] を示す。この火炎データでは燃料として水素：窒素 = 1 : 1 で希釈したものを、酸化剤として空気を投入した際に得られたものである。可逆反応を考慮しているため、量論混合比付近での分布は Flame Sheet Model のものと比べて滑らかになっていることがわかる。

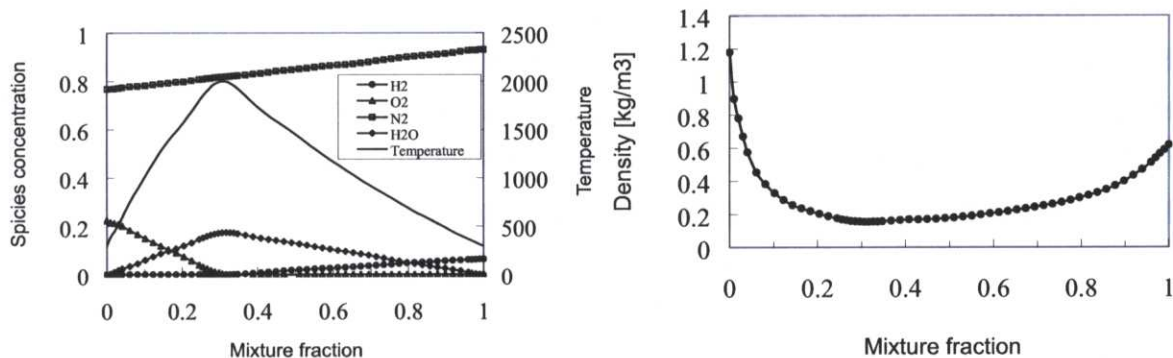


図 2.7: Thermochemical variables for Hydrogen-air diffusion flame calculated by Chemical Equilibrium Model [2]

2.3.2.3 Laminar Flamelet Model

Laminar Flamelet Model は, Peters [45,46] によって提案されたモデルで, 乱流火炎を laminar flamelet (層流火炎片) の集合体として考えるものである. 図 2.8 にその概念図を示す.

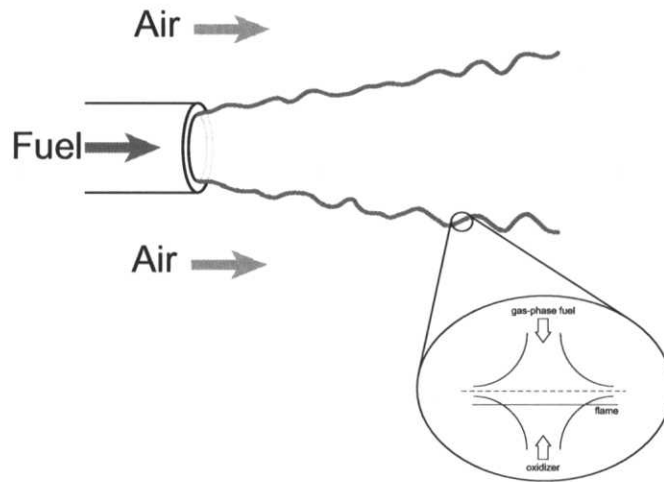


図 2.8: Conceptual image for laminar flamelet model

実機における燃焼場のほとんどは高負荷燃焼であり, そのような乱流燃焼場においては, 高速反応が期待でき, 乱流火炎の微細構造は層流状態における火炎構造を保つと考えることができる. さらに, 火炎厚さが乱れの最小スケールより薄いと仮定したときには, 火炎面は層流火炎の集合であると考えることができ, 乱流場の解析と燃焼反応の解析を分離することが可能となる. これが laminar flamelet model の基礎概念である.

Laminar flamelet model では, 火炎内の非平衡性を考慮できること, 火炎の詳細な構造を層流火炎として考え予め決定しておくことにより, 乱流火炎の計算と分離できる特徴がある. このときの層流火炎内構造は対向拡散火炎のような単純な層流拡散火炎で得たデータを用いる.

Laminar flamelet model では, 火炎構造を決めるために保存スカラ (混合分率) とスカラ消散率 (もしくは歪み速度) の 2 変数が考慮される. これは保存スカラのスカラ消散率 (scalar dissipation rate) が化学種の反応帯内部への拡散時間の逆数を与えることから, 保存スカラとスカラ消散率の 2 変数による火炎データベース (flamelet library) * を構築すれば, より高精度な乱流火炎の構造を表現することができ, 火炎の消炎現象も表現することができる. この手法にはスカラ消散率の異なる 1 次元層流拡散火炎の数値解析結果が利用できる.

噴流拡散火炎などでは保存スカラ 1 変数のみでスカラ消散率を固定した flamelet library も用いられる. この場合の laminar flamelet モデルでは火炎曲率の異なるあらゆる火炎面で反応帯への拡散速度が対向火炎と同じであると仮定している. この場合, 噴流火炎基部や後流での局所消炎

*このデータベースの呼称については flamelet data, flamelet database のようにいろいろに呼ばれているが本研究では flamelet library と呼ぶことにする.

などは表現できないことになるが、火炎温度や化学種濃度の計算は容易になる。

Flamelet library は以上の考え方に基づいて、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混合分率の関数として与える方法がよくとられる。この理由として、流れ場として非常に安定かつ、流動様式がよく知られていること、投入する気体の組成、温度や速度、ひずみ率といったパラメータを容易に変更できることが挙げられる [47]。

本研究においても、この flamelet Library を一次元層流対向拡散火炎の数値計算を行なうことで構築した。本研究で用いた flamelet library の構築の手法とその緒元については 2.4.3 節で詳しく述べる。図 2.9 にメタノール-空気火炎における flamelet library の一例を示す。

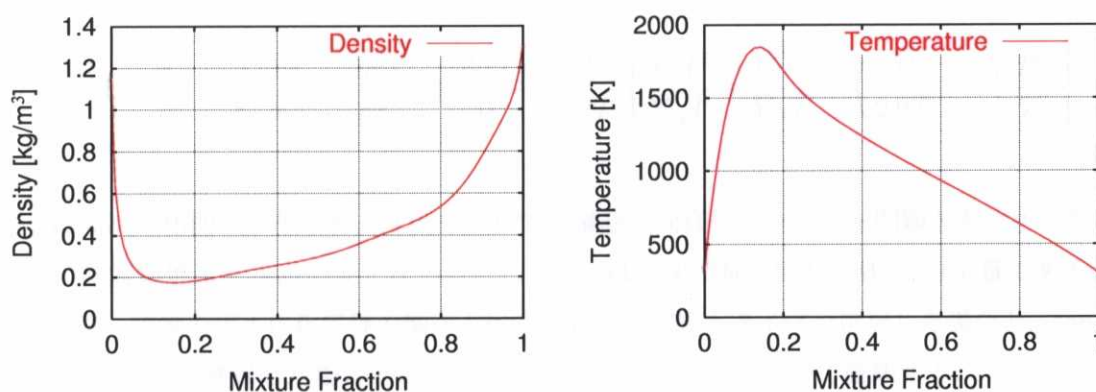


図 2.9: Flamelet library for methanol-air diffusion flame

この laminar flamelet model は、2.4.1.4 節で説明した PDF モデルのうち PDF の形状を仮定する乱流燃焼モデルとして解釈することも可能である [48]。

laminar flamelet model は、乱流拡散火炎、乱流予混合火炎、どちらの燃焼形態にも適用可能であるが、flamelet library 構築の際にはどちらの火炎形態になっているかを *a priori* に知っておくか、何らかの基準で決定する必要がある。この燃焼形態の決定方法の一例が Domingo ら [49] によって提案され、部分予混合火炎の LES での適用例を報告している。

また、ここで仮定している fast chemistry は、非平衡状態の影響が重要となる問題の場合、そもその仮定が成立しなくなり、解の精度などに影響を及ぼす [46] ことが指摘されているが、本研究で対象とする乱流噴霧燃焼場においてはこのことは問題とならない。

2.4 乱流燃焼モデル

乱流燃焼は通常、計算格子で解像できないスケールで起こっている。このことは LES にせよ RANS にせよ同様の事が言える。乱流燃焼モデリングにおいて、モデリングの性質から考えると、RANS の燃焼モデルのほとんどが LES へ直接適用もしくは拡張可能と言えるだろう。

実際、2.2.1 節でも述べたとおり、乱流モデルの発達の歴史とその工学的応用において、RANS

モデルから LES への変遷が今まに行なわれている段階で、乱流燃焼モデルにおいても、RANS モデル上で提案された乱流燃焼モデルを LES に拡張するという試みが行なわれつつある。(例えば [50, 51])

乱流燃焼モデルを構築する際にも、2.2.1 節でも述べたようなクロージャ問題が発生する [40, 48]. 反応速度 ω_α のアレニウス表現

$$\omega_\alpha = \gamma_\alpha W_\beta^{-1} \rho Y_\alpha \rho Y_\beta A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (2.4.1)$$

に対して、平均成分 \bar{Y}_α と変動成分 Y'_α に分解をすると：

$$\begin{aligned} \bar{\omega} = & \gamma_\alpha W_\beta^{-1} \bar{\rho} \bar{Y}_\alpha \bar{\rho} \bar{Y}_\beta A \exp\left(-\frac{E}{R\bar{T}}\right) \\ & \times \left[1 + \frac{\bar{\rho}^2}{\bar{\rho}^2} + \frac{\bar{Y}'_\alpha \bar{Y}'_\beta}{\bar{Y}_\alpha \bar{Y}_\beta} + \frac{2\bar{\rho}' \bar{Y}'_\alpha}{\bar{\rho} \bar{Y}_\alpha} + \frac{2\bar{\rho}' \bar{Y}'_\beta}{\bar{\rho} \bar{Y}_\beta} + \frac{E}{R\bar{T}} \left\{ \frac{\bar{Y}'_\alpha \bar{T}'}{\bar{Y}_\alpha \bar{T}} + \frac{\bar{Y}'_\beta \bar{T}'}{\bar{Y}_\beta \bar{T}} + \left(\frac{E}{2R\bar{T}} - 1\right) \frac{\bar{T}'^2}{\bar{T}^2} \right\} + \dots \right] \end{aligned} \quad (2.4.2)$$

のように高次の相関項が生まれ、乱流モデルでの議論と同様にクロージャ問題が発生するため、なんらかの乱流燃焼モデルが必要となる。ここで、 γ は正味の量論係数、 W は分子量である。

次節以降、燃焼モデルに化学種の輸送方程式を直接取り扱うタイプを選択した場合と、conserved scalar approach を選択した場合とに分けて、乱流燃焼モデルについて概観する。

2.4.1 化学種の輸送方程式に対する乱流燃焼モデリング

2.3.1 節で述べた様な、化学種の輸送方程式を直接取り扱うタイプの燃焼モデルを選択し、乱流燃焼現象を数値解析しようとする場合に問題となるのが、式 (2.2.21) の取り扱い、なかでも平均反応速度 $\bar{\omega}_\alpha$ のモデル化の方法である。

このモデルとして、近年よく用いられているモデルは、

- 平均反応速度 (LES においてはフィルタ操作を施した反応速度) $\bar{\omega}_\alpha$ を直接近似する。
- 化学種の輸送方程式を解くかわりに、化学種濃度などの確率密度関数 (Probability Density Function, PDF) の輸送方程式を解く。

が挙げられる。

なお、ここでのいう平均反応速度とは、乱流モデルとして RANS モデルを選択した場合にはおいてはアンサンブル平均としての平均反応速度となり、LES を選択した場合にはフィルタリングされた反応速度であるが、ここでは特に乱流モデルの選択の区別はせずに、単に「平均反応速度のモデル」もしくは「乱流燃焼モデル」と呼ぶことにする。

2.4.1.1 渦消散モデル

渦消散モデル (Eddy Dissipation Concept Model) [52] は Magnussen によって提案されたもので、このモデルは燃料ガス塊と酸化剤のガス塊が崩壊して分子スケール混合したときに燃焼反応が起こる、という考え方に基づく。このとき反応速度は乱流渦の消散速度に関係付けられ、以下のように算出される。

$$\bar{\omega}_{\text{eddy}} = A_e \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(Y_F, \frac{Y_O}{r} \right) \quad (2.4.3)$$

化学反応による影響を考慮するために、次に示すアレニウス型の反応速度式

$$\bar{\omega}_{\text{Arr}} = A Y_F^m Y_O^n \exp \left(-\frac{E}{RT} \right) \quad (2.4.4)$$

を用いて反応速度を見積もり、式 (2.4.3) と比較し、小さい方が反応を律速すると仮定し、

$$\bar{\omega}_f = \min(\bar{\omega}_{\text{eddy}}, \bar{\omega}_{\text{Arr}}) \quad (2.4.5)$$

を得る。このモデルの特徴は、平均の濃度を用いて乱流燃焼速度が評価されるため、変動量の輸送を解くなど、負荷の大きな計算をする必要がないことである。反応速度の式中に k や ε があることから容易に想像できるが、このモデルは RANS モデルを基礎においており、計算負荷も軽いことから市販プログラムや実用燃焼炉の乱流燃焼数値解析によく用いられている。しかしながら ε/k で定義される乱流の時間スケールは大スケール渦の特性時間であり、小スケール渦の混合によって燃焼を開始する、という仮定に合致しない欠点が指摘されている。またこのモデルは反応が極めて速い混合律速の系を対象として構築されているため、反応律速、もしくは乱流混合速度と化学反応速度が同程度であるような系における評価には不向きである。もし対象とする燃焼場（のほとんど）が混合律速であったとしても、たとえば壁面近傍では混合が抑制され、必ずしも混合律速になっているとは言えず、結果的に壁面近傍での燃焼を過大評価してしまう点なども問題である。

LES における適用例として、Fureby ら [53] のブラフボディで保炎する乱流予混合火炎の解析が挙げられる（ただしこの例では 2 次元解析）。この例では、乱流渦による消散速度 $\bar{\omega}_{\text{eddy}}$ は SGS 渦の時間スケール τ_{eddy} に反比例すると仮定し、SGS 運動エネルギーと SGS 散逸率から以下のように算出している。

$$\tau_{\text{eddy}} \propto \frac{k_{\text{SGS}}}{\varepsilon_{\text{SGS}}} \propto \frac{\lambda_{\text{SGS}}}{\sqrt{2k_{\text{SGS}}}} = \frac{C\Delta}{\sqrt{2k_{\text{SGS}}}} \quad (2.4.6)$$

ここで C は定数であり、1 とした。

なお渦消散モデルは、乱流拡散燃焼および乱流予混合燃焼どちらにも適用可能であり、その意味では万能なモデルと言える。

2.4.1.2 Linear Eddy Model

Linear Eddy Model (LEM) [54] は微小スケール混合や化学反応を十分な格子解像度を持つ局所領域を対象に解析する方法である。LEM では通常、乱流計算格子をさらに一次的に細分化し、

その中で微小混合や化学反応を解析し、移流によって計算格子をまたがって輸送させる。したがってこの局所領域で起こるプロセスについては局所一次元詳細反応計算をしていると考えることができる。単純混合層や噴流拡散場といった濃度拡散場へ適用され、乱流混合機構の解明が行なわれており [54–56]、水素-空気乱流拡散火炎の解析例 [57] も報告されている。

近年、Menon ら [58,59] は LEM を LES とカップリング (LES-LEM) させ、旋回乱流燃焼場の解析を行ない、さらに噴霧燃焼場へと拡張 [60] している。

LES-LEM の概要を以下に述べる。まず、「厳密な」すなわちフィルタ操作を施していないスカラの輸送方程式を考える：

$$\rho \frac{\partial \phi}{\partial t} + \underbrace{\rho u_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i}}_C = \underbrace{\rho \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)}_D + \underbrace{\omega_\phi}_R \quad (2.4.7)$$

ここで、C の項はトータルでのつまり GS スケールと SGS スケールとの和での移流を表し、D は分子拡散、R は化学反応による生成項である。ここで $u_i = \tilde{u} + u'$ に分解し、分子拡散項と反応生成項を SGS スケールプロセスとして扱い、以下のように fractional step 的に分解する。

$$\rho \frac{\phi^* - \phi}{\Delta t_{\text{LES}}} + \underbrace{\rho \tilde{u}_i \frac{\partial \phi}{\partial x_i}}_{L-C} = 0 \quad (2.4.8)$$

$$\rho \frac{\partial \phi^*}{\partial t} + \underbrace{\rho u'_i \frac{\partial \phi^*}{\partial x_i}}_{S-C} = \rho \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_\phi \frac{\partial \phi^*}{\partial x_i} \right) + \omega_{\phi^*}. \quad (2.4.9)$$

ここで L-C 項は GS スケールの移流を表し、S-C は SGS スケールの移流を表す。また、 Δt_{LES} は LES で用いる時間刻みで、 ϕ^* は GS スケールのみを評価した、中間的な解である。SGS スケールの輸送をあらわす式 (2.4.9) は乱流場とスカラ場、もしくは反応場を完全に解像できるスケール、すなわち、乱流場においては Kolmogorov スケールを、スカラ場においては Batchelor スケールを解像できる程度の格子数とする。LES-LEM では SGS スケールのプロセス (SGS 乱流混合、分子拡散、化学反応) を三次元の LES 格子上に埋め込んだ一次元格子で解像する。LES-LEM の手法については Sankaran らのレポート [61] が詳しい。

2.4.1.3 Thickened Flame モデル

Thickened Flame モデル [62] (肥厚火炎モデル [13, p. 285]) は Colin らによって提案された LES への適用を主眼としている乱流燃焼モデルで、Selle ら [63] によって実形状燃焼問題へ導入が報告されている。

このモデルの基礎的な概念は、乱流火炎厚さが LES の格子幅に比べて極めて薄いことを仮定し (この仮定は後の述べる laminar flamelet approach でも利用する仮定である) 変数変換により火炎厚さを擬似的に厚くして LES の格子幅で火炎面を表現する、というものである。

化学種の質量分率 Y_α の輸送方程式である 式 (2.1.17) を再掲する：

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_\alpha u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) + \omega_\alpha \quad (2.1.17)$$

この式は変数変換により、以下のように修正される：

$$\frac{\partial \rho Y_\alpha^{th}}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_\alpha^{th}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho F D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha^{th}}{\partial x_j} \right) + \frac{1}{F} \dot{\omega}_\alpha. \quad (2.4.10)$$

ここで、 F は厚み係数であり、上付き添字 th は厚み処理を施した物理量である。また、ルイス数 1 を仮定している。さらに変数変換 $X_i = x_i/F$ 、 $\Theta = t/F$ を施すと：

$$\frac{\partial \rho Y_k^{th}}{\partial \Theta} + \frac{\partial \rho u_j Y_k^{th}}{\partial X_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_\alpha \frac{\partial Y_\alpha}{\partial X_j} \right) + \omega_\alpha. \quad (2.4.11)$$

この式は、式 (2.1.17) と同じ解を持つ。従って $Y_k^{th}(x, t) = Y_k(x/F, t/F)$ は F によって厚くなった火炎をあらわす、ということになる。

Thickened Flame モデルでは、この F を十分大きくとることにより、LES の格子幅で火炎面を表現する。拡散項と反応項のバランスに起因する消炎や、着火といった乱流燃焼において重要なファクタを表現できる特徴があるが、その一方で Colin らも指摘するとおり、SGS 変動について新たなモデルが必要となる。

また、この手法では F の決定方法が重要であるが、現状では *ad hoc* な方法で決定しており、 F の決定方法についてはまだ議論の余地が残されている。

2.4.1.4 PDF モデル

PDF (確率密度関数) モデル [64] では、Lagrange 的概念に基づき平均反応速度 $\bar{\omega}_\alpha$ を PDF を用いて表現することで $\bar{\omega}_\alpha$ のモデル化をする必要がなくなる。平均反応速度 $\bar{\omega}_\alpha$ は数学的期待値として、厳密に次式で与えることができる。

$$\bar{\omega}_\alpha = \int \omega_\alpha(\phi) \mathcal{P}(\phi) d\phi. \quad (2.4.12)$$

ここで $\phi = \phi(x_i, t)$ は温度や濃度といったスカラ量であり、 $\mathcal{P}(\phi)$ は PDF を表す。

PDF モデルでは、化学種の輸送方程式を解析する代わりに、各化学種の質量分率に関する結合確率密度関数 (JPDF*) の輸送方程式を解析する。ここで、フィルタを施した質量密度関数 (filtered mass density function) あるいは Favre 平均を施した JPDF を以下のように定義する：

$$\tilde{F}(\Psi; x_i, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x', t) \zeta[\Psi, \phi(x'_i, t)] G(x'_i - x_i) dx_i \quad (2.4.13)$$

$$\zeta[\Psi, \phi(x'_i, t)] = \delta[\Psi - \phi(x'_i, t)] \equiv \prod_{\alpha=1}^{\sigma} \delta[\Psi_\alpha - \phi_\alpha(x'_i, t)] \quad (2.4.14)$$

*Joint Probability Density Function

ここで、 δ はデルタ関数であり、 Ψ は対象となるスカラ群から構成される組成空間を示す。また、 ζ は JPDPF であり、フィルタ操作を施した質量密度関数の輸送方程式は：

$$\frac{\partial \tilde{F}}{\partial t} + \frac{\partial [\overline{u_i | \Psi}] h \tilde{F}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left[\frac{1}{\rho(\phi)} \frac{\partial J_i^\alpha}{\partial x_i} \right] \tilde{F} - \frac{\partial S_\alpha(\Psi) \tilde{F}}{\partial \Psi_\alpha}, \quad (2.4.15)$$

となる。上式中、右辺第 2 項は化学種の質量分率の輸送方程式における反応生成項に対応するが、PDF 法ではこの項に関するモデル化を必要としない。一方で、左辺第 2 項には、通常非反応性乱流モデルと同様なスカラ流束モデルが必要であり、右辺第 1 項に関しては、PDF 法独特の混合モデルが必要となる。式 (2.4.15) はモンテカルロ法を用いて解く場合もある。

PDF モデルは、予混合燃焼か拡散燃焼かといった燃焼形態には依存しないが、混合モデルの精度や計算時間の面での制限を受ける欠点を有する。

2.4.1.5 Conditional Moment Closure モデル

乱流燃焼火炎のモデリングとして一般的となっているのは、laminar flamelet model と Conditional Moment Closure (CMC) である [65]。この 2 つは本質的には同じゴール、すなわち乱流燃焼火炎の正確な予測、をめざしているが、laminar flamelet model では適当な物理現象に対しての概念的なアプローチを基礎におくことに対して、CMC は厳密な数学的な導出に基礎を置いている。

CMC は Bilger [66] によって平均モデルにおいて提案されたモデルで、火炎構造を層流火炎と仮定せず、ある変数で条件付平均された化学種の質量分率に関する輸送方程式を解くことで火炎構造を表現する。拡散火炎の場合は条件変数として混合分率を選択する。このモデルもまた、他の乱流燃焼モデルと同様のアナログを利用し、Bushe ら [67] によって LES への拡張が試みられている。条件付けされたフィルタが施された物理量は以下のように混合分率の SGS PDF を用いて定義される。

$$\overline{\mathcal{P}}(\phi; x_i, t) = \int_{\Omega} \delta(\phi - Z[x'_i, t]) G(x'_i - x) dx'_i. \quad (2.4.16)$$

また、混合分率で条件付けされ、ある値 ϕ を持つようなフィルタの施された物理量 $\vartheta(x_i, t)$ は：

$$\overline{\vartheta(x_i, t) | \psi} \equiv \frac{1}{\overline{\mathcal{P}}(\phi; x_i, t)} \int_{\Omega} \vartheta(x'_i, t) | \psi \delta(\phi - Z[x'_i, t]) G(x'_i - x) dx'_i. \quad (2.4.17)$$

以上より、 ϑ の条件付フィルタは重み関数として fine grained PDF を用いたフィルタ操作、ということに相当する。一方、フィルタ操作を施した（一段不可逆反応を仮定した）化学反応速度項は

$$\overline{\omega} = \overline{\omega(Y_F, Y_O, T, \rho)}, \quad (2.4.18)$$

となり、この量に対して、first order CMC を適用すると、

$$\overline{\omega(Y_F, Y_O, T, \rho) | \phi} \approx \overline{\omega(Y_F | \phi, Y_O | \phi, T | \phi, \rho | \phi)} \quad (2.4.19)$$

また、

$$\overline{\omega}(x_i, t) = \int_0^1 \overline{\omega(x_i, t) | \psi} \overline{\mathcal{P}}(\phi; x_i, t) d\phi. \quad (2.4.20)$$

である。Bushe らは、この方法を DNS データからの *a priori* テストと単純せん断混合層の燃焼場に適用し、消炎効果などの再現に成功したが、その一方で計算時間の大幅な増大があったことも報告している。また CMC は、速度-濃度相関の項のクロージャモデル構築の困難さを回避する手法と言い替えることもできる [68]。

2.4.2 conserved scalar approach における乱流燃焼モデル

前節でも述べたとおり、conserved scalar approach を用いて実用燃焼場を表現することは、乱流中の熱化学的状态を決定するのに有用な方法である。この方法を用いて乱流燃焼場を取り扱う際には、乱流変動の影響を何らかの方法で燃焼モデルの中に組み込む必要がある。具体的には、LES で計算される混合分率は Z でなく、あくまでセル内平均成分である \tilde{Z} として算出される。安易にこの \tilde{Z} を用いて（つまり $Z = \tilde{Z}$ を仮定して）局所の密度や温度を決定することは、混合分率 Z と密度や温度といったスカラとの関係は非線形性が非常に強いことから考えても、大きな誤差を生む原因となる。

また、この非線形性は量論混合比 Z_{st} の付近では特に顕著であり、乱流燃焼の数値予測においては量論混合比付近の熱化学的状态を特に精度よく予測する必要があることから考えても SGS 成分における燃焼のモデリングは必要不可欠となる。本研究では対象としていないが、NO 生成予測のように微小な温度の違いが大きな予測誤差を生むときにはさらに重要性を増すことになる。

上記のことを踏まえて提案されている乱流燃焼モデル (LES においては SGS 燃焼モデル) として、PDF に基づく SGS モデル [69–71] などがある。

2.4.2.1 SGS PDF モデル

このモデルでは、セル内変動成分すなわち SGS 成分を考慮するために PDF を利用する。PDF の数学的性質より、一旦 PDF が決定されれば、そこからフィルタリングした値（平均値）を求めることが可能となる。しかし一般にはその PDF を厳密に与えられることはほとんどなく、何らかの近似方法で決定してやることが多い。これまでに提案されている方法として、

- PDF の輸送方程式を解く方法
- PDF を適当な方法で推定する方法（推定確率密度関数*）

が提案されている。PDF の輸送方程式を解く方法は、モンテカルロ法を利用して輸送方程式を解くが、この方法は計算負荷が膨大となるので、実用乱流燃焼場への適用は難しい。そこで本研究では、現実的な後者の推定確率密度関数を求める方法を採用する。

混合分率空間における PDF に必要とされる特性は以下のように表すことができる。

$$\begin{cases} \mathcal{P}(Z) \geq 0 & \text{if } 0 \leq Z \leq 1, \\ \mathcal{P}(Z) = 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (2.4.21)$$

*Presumed Probability Function, PPDF

$$\int_0^1 \phi(Z) \mathcal{P}(Z) dZ = 1 \quad \text{if } \phi(Z) = 1. \quad (2.4.22)$$

ここで、 $\mathcal{P}(Z)$ が PDF であり、 $\mathcal{P}(Z)dZ$ は微小区間 dZ をとる確率である。よって、あるスカラ量 $\phi(Z)$ のセル内空間平均値（ \equiv 空間フィルタ量）は次のように求めることができる。

$$\bar{\phi} = \int_0^1 \phi(Z) \mathcal{P}(Z) dZ. \quad (2.4.23)$$

同様に Favre フィルタを施されたスカラ量も

$$\tilde{\phi} \equiv \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^\infty \int_0^1 \rho \phi(Z) \mathcal{P}(\rho, Z) dZ d\rho \quad (2.4.24)$$

のように求めることができる。これらの関係は、 Z と $\phi(Z)$ との関係が、線形、非線形に関わらず一般に成立する。つまり、あるスカラ量 ϕ に対して \mathcal{P} が既知であればそのフィルタ量（平均値）も求めることができることを意味する。しかしながら結合確率密度関数 (JPDF) $\mathcal{P}(\rho, Z)$ の計算は容易ではなく、一般に以下のような近似が行なわれている [40]。

$$\tilde{P}(Z) = \frac{1}{\bar{\rho}} \int_0^\infty \rho P(\rho, Z) d\rho \quad (2.4.25)$$

これより、

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \phi(Z) \tilde{P}(Z) dZ \quad (2.4.26)$$

$$\bar{\phi} = \bar{\rho} \int_0^1 \frac{\phi(Z)}{\rho(Z)} \tilde{P}(Z) dZ \quad (2.4.27)$$

と記述することが可能となる。さらにここで、 $\bar{\phi} = 1$ とおくことで、平均密度

$$\bar{\rho} = \left[\int_0^1 \frac{1}{\rho(Z)} \tilde{P}(Z) dZ \right]^{-1} \quad (2.4.28)$$

を得る。

以上でも解るとおり、この方法では PDF の形状を予めなんらかの方法で決定しておく必要があり、その方法としてこれまでに提案されているものは、Double-delta 関数や Clipped Gaussian 分布を利用したものなど、数多く提案されている [41]。本研究では Jones ら [41] が推奨する、ベータ関数を用いる手法を採用する。この方法はしばしば「 β -PDF 法」と呼ばれている。この手法は、Cook ら [69] によって化学平衡場に適用され、有限化学反応場へと拡張された [72]。 β -PDF 法の適用例として、Branley ら [19, 29] や、Pitsch ら [73] によって、噴流拡散火炎、強旋回バーナ (TECFLAM swirl burner) に適用され、噴流拡散火炎における PDF を精度良く近似することも報告されている [29]。さらに、道岡ら [74] による燃焼反応よりも（液相反応に近い）若干ゆっくりとした反応の SGS モデリングに β -PDF を適用した例や井上 [75] による LES-RANS アプリオリテストも報告されている。

PDF の推定に ベータ関数を用いる利点として、平均値を算出する際の積分計算を簡便な代数式に置き換えることができる（詳細については、Appendix B で述べる）こと、そして式 (2.4.21)、(2.4.22) にも示した PDF に必要となる特性を備えている、ということが挙げられる。

ベータ関数で記述される PDF の形状を, LES で計算される混合分率 \tilde{Z} とその変動値 $\widetilde{Z''^2}$ を用いて以下のように定義する:

$$\tilde{p}(Z, \tilde{Z}, \widetilde{Z''^2}) = \frac{Z^{\beta_1-1}(1-Z)^{\beta_2-1}}{\int_0^1 Z^{\beta_1-1}(1-Z)^{\beta_2-1} dZ} \quad (2.4.29)$$

ここで,

$$\beta_1 = \tilde{Z} \left(\tilde{Z} \frac{1-\tilde{Z}}{\widetilde{Z''^2}} - 1 \right), \quad (2.4.30)$$

$$\beta_2 = (1-\tilde{Z}) \left(\tilde{Z} \frac{1-\tilde{Z}}{\widetilde{Z''^2}} - 1 \right), \quad (2.4.31)$$

である. この式には LES では直接計算できない混合分率の変動成分 $\widetilde{Z''^2}$ が存在し, この項を何らかの方法で評価する必要がある. この評価方法には, $\widetilde{Z''^2}$ の輸送方程式を解く方法 [76, 77] や, 局所平衡を仮定し, SGS 変動方程式中の生成と散逸とが等しいとして算出される,

$$\widetilde{Z''^2} \equiv C\Delta^2 |\nabla \tilde{Z}|^2 \quad (2.4.32)$$

より評価する方法 [29, 78], そして 2.2.4.1 節でも述べたスケール相似のアナログを利用して,

$$\widetilde{Z''^2} \equiv c_Z \left(\tilde{Z} - \widehat{\tilde{Z}} \right)^2, \quad (2.4.33)$$

のように算出する方法 [71, 72] が提案されている. ここで, $\widehat{(\cdot)}$ はテストフィルタを表し, $\hat{\phi}$ はテストフィルタを施した物理量を表す. テストフィルタは, グリッドフィルタである式 (2.2.4) もしくは式 (2.2.6) と同様に定義され, グリッドフィルタよりフィルタ幅を若干大きくとる (グリッドフィルタの 2 倍とすることが多い). また, 上式中の定数は $c_Z = 1.0$ とした [69].

以上のようなプロセスで得られた β 関数の分布 ($\tilde{Z} = 0.5$ として $\widetilde{Z''^2}$ を変化させたときの PDF の変化) を示す. 変動が小さいときにはガウス分布に似た形状となり, 変動が大きくなるにつれて, PDF は平坦になる. さらに変動が大きくなると, 両端にピークがたつ双峰型分布となる. なお, $\widetilde{Z''^2} = 0$ の場合は, $Z = \tilde{Z} = 0.5$ で delta 関数となる.

また $\widetilde{Z''^2}$ に対する密度 \bar{p} の変化についても図 2.11 に示す. 当然のことながら, $\widetilde{Z''^2} = 0$ のプロットは, flamelet library で得られた 図 2.9 と全く同じとなる. Z の SGS 変動が大きくなると局所混合, 消炎などの効果により, GS スケールでの密度変化は小さくなる. もし SGS 変動が非常に強く燃焼が起こらないような場合は, 熱化学状態は未燃混合気のもので表現される. このような状態は以下のような式であらわされる.

$$\widetilde{Z''^2} \leq \tilde{Z}(1-\tilde{Z}) \quad (2.4.34)$$

混合分率変動と重みつき平均はいつもこの不等式を満足しなければならない. 変動の算出式が, この限界を示すよりも大きな値を与えた場合は, 燃焼は起こらず, 未燃混合気の単純混合状態を示すことになる.

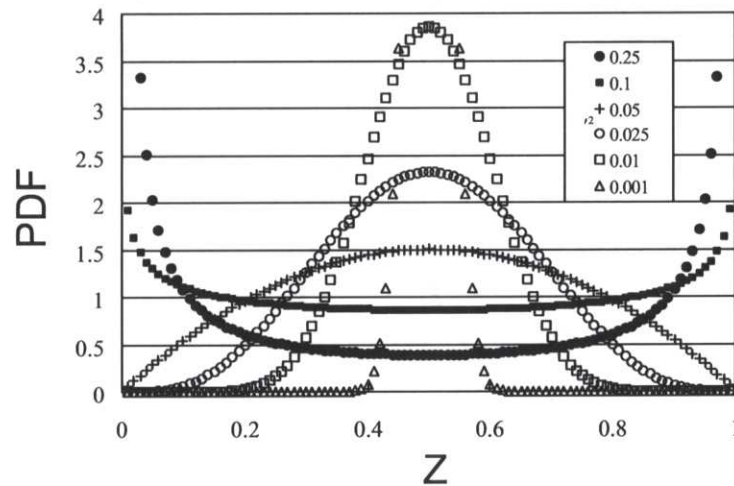


図 2.10: PDF distribution by various $\widetilde{Z''^2}$ while $\widetilde{Z} = 0.5$ [2, p. 34]

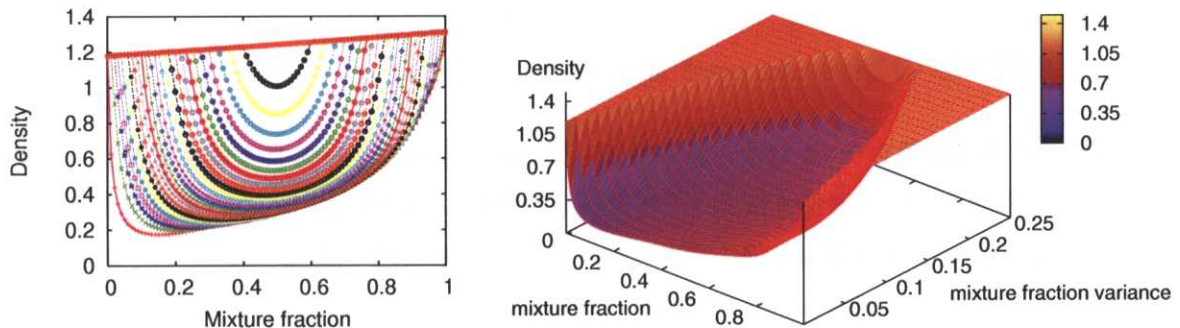


図 2.11: $\widetilde{Z''^2}$ が変化したときの密度の変化. ($0 \leq \widetilde{Z''^2} \leq 0.25$, 同じ値を違う視点から見ている)

2.4.3 Flamelet library の構築

本研究で用いる Flamelet library の構築にあたっては CHEMKIN を用いた。CHEMKIN は燃焼分野で取り扱うほとんど全ての化学種，ラジカルに関する輸送係数，素反応式や熱化学定数などのデータベースが組み込まれており，利用者が計算条件や，反応式を定義することで気相燃料の燃焼反応を計算することができる。本コードは研究者が容易に入手，使用することができる* ことも手伝って，反応動力学計算の基準ソフトウェアとなっている。

本研究では，CHEMKIN v3.7 の OPPDIF パッケージを使用した層流対向拡散火炎の計算を行ない，データテーブルとして利用する。

この際の計算条件は，ノズル間距離は 0.02m とし，一方のノズルからは燃料であるメタノール

*CHEMKIN II まではいわゆるフリーソフトウェアと配布されていたが，ver. 3 以降 GUI ベースとなり，市販される，というように配布形態が変化している。

(CH₃OH) を、他方からは酸化剤である空気を噴出させた。両ノズルの出口温度は 298.15K、出口速度は 1m/s とした。すなわち平均ひずみ率は 100 [1/s] である。計算体系の模式図を図 2.12 に示す。

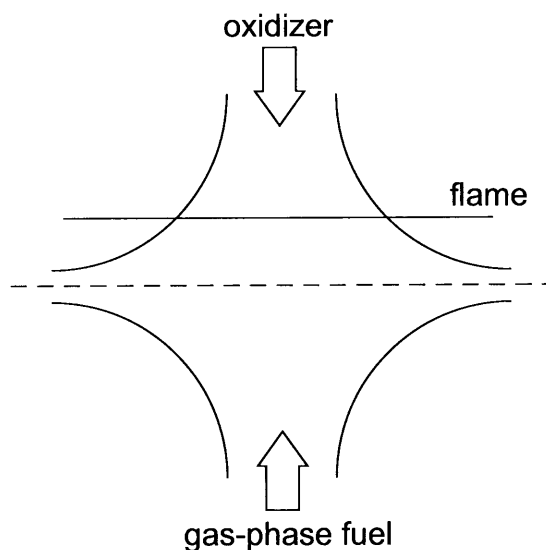


図 2.12: Schematics of the opposed diffusion flame calculated by CHEMKIN

また、燃料であるメタノールの素反応式には、16 化学種を含む 31 の可逆反応式 [38] を用いた。

以上の条件に基づき、CHEMKIN の計算によって得られた混合分率に対する温度および密度の変化を図 2.13 に示す。実際の LES 解析においてはこれらの値は関数形をとっている方が都合が良いため、適当な近似方程式を導き、この近似式に基づいて密度と温度の予測をする。なお近似方程式は、10 次の多項式を用いて最小二乗近似*をすることで求めた。

$$\phi(Z) = a_0 + a_1 Z + a_2 Z^2 + \cdots + a_{10} Z^{10}, \quad (2.4.35)$$

ここで、 a_i は多項式の係数で、 n はその次数である。

また、図 2.14 に CHEMKIN によって計算された化学種濃度のうち主要なものを図示する。必要な場合はこのデータを用いて、流れ場中の化学種濃度分布を求めることが可能となる。なお、今回の CHEMKIN の計算では Pentium IV@3.0 GHz の PC で数秒で計算可能であった。

*この多項式近似には GNUPLOT の fitting 機能を用いた。

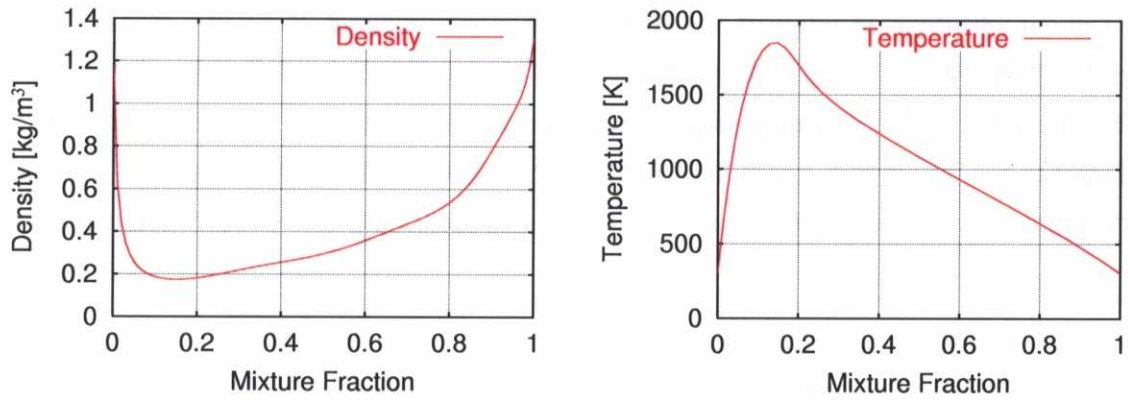


図 2.13: Flamelet library for methanol-air diffusion flame

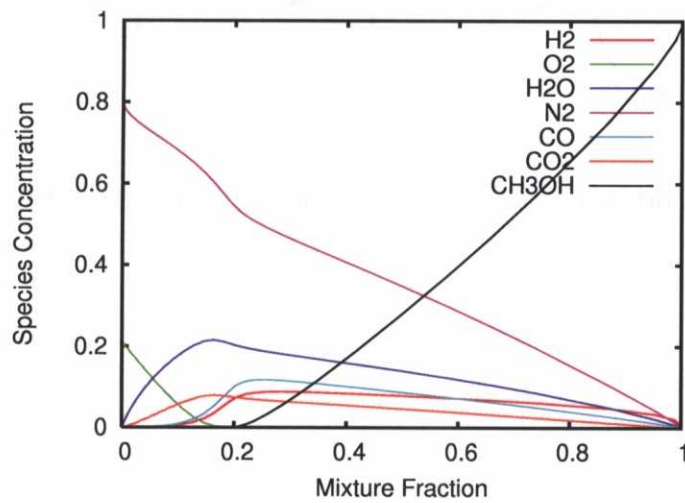


図 2.14: Thermochemical variables for methanol-air diffusion flame calculated by CHEMKIN

2.5 まとめ

本章において乱流燃焼場の解析手法を，主に LES 解析を前提としたモデリングとして概観した．ここに本研究の乱流噴霧燃焼場解析に採用したモデルをまとめる．

まず，乱流モデルとして Smagorinsky 定数 C_s を固定とした static Smagorinsky model による LES を用いる．乱流燃焼場を取り扱うために低マッハ数近似方程式を用い，非圧縮性流体と同様の手法で計算を行なう．燃焼場の表現には conserved scapar approach に基づく flamelet モデルを採用し，混合分率 Z の乱流変動を考慮するために β -PDF モデルを採用した． Z の変動成分である $\widetilde{Z''^2}$ の算出にはスケール相似 (scale similarity) のアナログを利用した．図 2.15 に解析の際の模式図を示す．

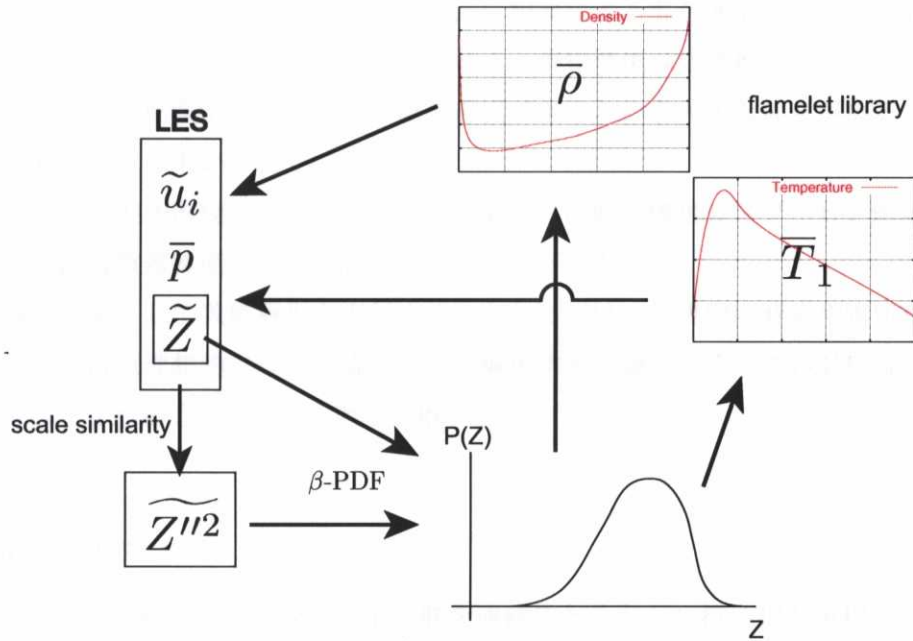


図 2.15: A sketch of computation procedure for turbulent combustion flow by using LES

第3章 噴霧液滴の支配方程式とモデリング

実用燃焼器に用いられる燃料は、都市ガスやプロパンといった気体燃料、重油やガソリンといった液体燃料、微粉炭に代表されるような固体燃料が挙げられる。気体燃料はハンドリングが容易である反面、精製にコストがかさむ欠点を持つ。一方で、液体燃料や固体燃料は、輸送や貯蔵の面で優位であるだけでなく、微粒化して（特に液体燃料の場合には噴霧として）燃焼器に投入・燃焼させる（混相燃焼と呼ぶことにする）ことで、二相流による混合促進、燃料の表面積の増加による物質交換、熱交換の促進が図られる。それゆえ、混相燃焼は応答性が良く、高負荷燃焼が可能であり、様々な混合形態すなわち燃焼形態を選択できるという大きな利点があるため、工業用燃焼場として非常によく用いられている。

本研究では、この混相燃焼の中で、特に定置型もしくは航空機用ガスタービン燃焼器や工業用燃焼炉における乱流噴霧燃焼現象の予測をターゲットとする。

実用燃焼器を対象として数値解析を実行するにあたっては、気流中に液滴や固体粒子が存在する状態である混相流（理想的には二相流）として解析する必要がある。この混相流の解析手法には、大きく分けて2つの方法が挙げられる [80]。

- Euler 的手法
- Lagrange 的手法

Euler 的手法では噴霧液滴粒子や固体粒子の群を連続体とみなし、粒子相も気相と同様に扱う手法である。この手法では質量保存式や運動量保存式を解くが、その際に考慮すべき計算格子中の粒子体積分率と粒子相速度変動との相関のモデルや粒子相乱流粘性係数モデルが確立されていない [81] こと、そもそも粒子相が希薄であるときの手法の信頼性の問題がある。

一方で、Lagrange 的手法は個々の粒子に着目し、粒子の運動方程式および液滴温度に関するエネルギー方程式を時間発展することにより、液滴の速度、位置および温度を算出する。この手法は考慮すべき粒子数が増えるに従い計算量が増大してしまうが、より直感的な手法と言え、気相との運動量や熱量の交換のモデリング手法も確立されており、Euler 的手法のように付随するモデルが多くないことからモデリングによる潜在的な誤差を少なく保つことができるという利点がある。

また、この両者を比較した例 [82] も報告されているが、どちらか一方の優位性を明確に示したものは見られず、現状ではケースバイケースである。

本研究で対象とする噴霧現象の場合、インジェクタのごく近傍を除けば噴霧液滴濃度（数密度）が低い状態であることから、上記のことを考慮し噴霧液滴の挙動の表現には Lagrange 的手法を採用する。

3.1 噴霧液滴の方程式とモデリング

液体を噴霧ノズル（インジェクタ）で微粒化して燃焼させる噴霧燃焼は、液体燃料の燃焼法として最も一般的なものである。噴霧燃焼においては、インジェクタからある適当な粒径分布*を有する燃料液滴群が噴霧され、その液滴粒子が乱流中を蒸発しながら飛行し、そこで蒸発した燃料気体が雰囲気と混合し燃焼に至るという過程を経る。したがって、乱流噴霧燃焼の数値解析においては、通常の乱流燃焼解析に加えて、噴霧液滴群の挙動やその空間分布および燃料液滴の伝熱や蒸発挙動などを考慮しなければならない。

インジェクタによる噴霧の生成（微粒化）の数値モデルとして、これまでに WAVE モデル [83] や TAB モデル [84] など多数のモデルが提案されている [85, 96, pp. 252-260] が、これらのほとんど全てが経験則に基づくモデリングであり、正確な微粒化の予測に際してはそれぞれの系によってパラメータフィッティングが必要となることがほとんどである。このため本研究においては、提案した解析手法の予測精度の議論をより正確にするため、微粒化モデルについて言及しない。つまり、議論の対象を微粒化が終わった段階以降のみとし、液滴粒径とその粒径分布、液滴速度が既知の系を対象とする。

3.1.1 噴霧液滴の支配方程式

本研究においては、乱流噴霧燃焼場中に存在する噴霧液滴は LES で用いる格子より十分小さく、また低濃度であると仮定し、個々の液滴パーセルを Lagrange 的に追跡することで表現する。その際のここの液滴（液滴パーセル）の支配方程式は以下に示すような、液滴の位置、質量、運動量および熱エネルギーに関する式である。

$$\frac{dx_{i,d}^k}{dt} = u_{i,d}^k \quad (3.1.1)$$

$$\frac{d(D_d^k)^3}{dt} = -\frac{6}{\pi\rho_d}\dot{m}^k \quad (3.1.2)$$

$$\frac{d(D_d^k)^3 u_{i,d}^k}{dt} = g\delta_{i3}(D_d^k)^3 + \frac{6}{\pi\rho_d} \left(F_i^k - \dot{m}^k u_{i,d}^k \right) \quad (3.1.3)$$

$$c_{p,d} m_d^k \frac{dT_d^k}{dt} = \pi h (D_d^k)^2 (\hat{T}_g - T_d^k) - \dot{m}^k L_v \quad (3.1.4)$$

ここで x_i^k , u_i^k , D_d^k , ρ_d , \dot{m} はそれぞれ、液滴の位置、速度、直径、液相密度、蒸発量を表わす。 g は重力加速度、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。本研究では重力の方向を“3 の方向”と定義している。また $c_{p,d}$ は液滴の定圧比熱、 m_d は液滴の質量 ($= \frac{\pi D_d^3}{6}$)、 T_d は液滴温度、 h は熱伝達率、 L_v は蒸発潜熱である。

*ある直径を持つ液滴が存在する確率を表現した確率密度分布

また、上付き添え字 k は液滴番号を表わす． F_i^k は液滴に働く抗力で以下のように見積もる．本研究においては、液滴の形状は球形を仮定し、液滴の変形や分裂、もしくは微粒化のプロセスについては考慮していない．

$$F_i^k = -\frac{\pi}{8} C_D \text{Re}_d \mu D_d^k (u_{i,d}^k - \hat{u}_{i,g}) \quad (3.1.5)$$

$$\text{Re}_d^k = \frac{D_d^k \rho_g |u_{i,d}^k - \hat{u}_{i,g}|}{\mu} \quad (3.1.6)$$

$$C_{D0} = \frac{24}{\text{Re}_d} (1 + 0.15 \text{Re}_d^{0.687}) \quad (3.1.7)$$

ここで $(\hat{\cdot})$ は、ある液滴が存在する位置における気相の物理量であり、気相の計算格子から tri-linear interpolation* を用いて算出する．式 (3.1.4) 中の熱伝達率 h の評価には、以下に示す単一球の強制対流熱伝達の実験式である Ranz & Marshall の式 [86] を用いる：

$$\text{Nu} \equiv \frac{h D_d}{\lambda} = 2.0 + 0.6 \text{Re}_d^{1/2} \text{Pr}^{1/3}, \quad (3.1.8)$$

ここで Nu は Nusselt 数であり、無次元熱伝達率を意味する．

3.1.2 噴霧蒸発モデルの検討

噴霧中に存在する蒸発する液滴では、熱や濃度の輸送現象が同時に発生する．そこでは、周囲の熱いガスから熱伝達および熱伝導により液滴内部へと熱が侵入し、それが蒸発の源となり、蒸発したガスは気相へ移流・拡散する…というように非常に複雑な現象が起こっている．そして、この蒸発現象は噴霧燃焼器内の混合気生成予測に直接的に大きな影響を及ぼす因子のひとつであり、噴霧燃焼解析にあたってはこの予測が非常に重要となることから、噴霧の蒸発を表現する数学モデルも乱流のモデリングと同様に、多くの研究者によってさまざまなモデルが提案・検証 [87, 88] されている．本節では本研究で用いる蒸発モデルについて述べる．

単一液滴の準定常蒸発を仮定すると、蒸発量は理論的に以下のように導かれる [3, 89, 90]．

$$\dot{m} = \pi D \rho_g \frac{\mu}{\text{Sc}} \text{Sh} \ln(1 + B_M) \quad (3.1.9)$$

ここで、Sh は Sherwood 数であり、以下の様に定義される．

$$\text{Sh} \equiv \frac{h_D l}{D} \quad (3.1.10)$$

Sh は無次元物質伝達率であり、「物質（濃度）伝達現象における Nusselt 数」に対応する無次元数である．従って Sherwood 数の算出には、Nusselt 数の算出のアナロジと同様に、

$$\text{Nu} = f(\text{Re}, \text{Pr}), \quad (3.1.11)$$

$$\text{Sh} = f(\text{Re}, \text{Sc}), \quad (3.1.12)$$

*この補間は 1 次の補間を 3 次元空間上に拡張したものであり、空間 1 次元の場合は、単純な線形補間となる．

と考えることで、以下の様に算出する.

$$\text{Sh} = 2 + 0.552\text{Re}^{1/2}\text{Sc}^{1/3}. \quad (3.1.13)$$

また, B_M は Mass Transfer Number*であり, 以下のように定義される.

$$B_M = \frac{Y_f^s - Y_f^\infty}{1 - Y_f^s} \quad (3.1.14)$$

ここで上付添字の s, ∞ は, それぞれ「液滴表面」と「液滴周囲雰囲気」における物理量をあらわす.

液滴の蒸発現象は, 周囲雰囲気との分圧差に起因する物質拡散が支配すると考えられ, (温度差に起因する影響も, 温度差によって生じる分圧差として表現される.) 液滴表面での燃料気体の質量分率 Y_f^s は定常蒸発を仮定することで飽和蒸気濃度に達しているとし, Clapeyron-Clausius の式などを用いて温度と圧力の関数として記述することができる. 本研究では, Clapeyron-Clausius の式の改良版である Antoine 式 [91] で飽和蒸気圧を推定し, 飽和蒸気濃度を算出した. Antoine 式は以下のように記述される:

$$\ln p_{vp} = A - \frac{B}{T + C}, \quad (3.1.15)$$

ここで A, B, C は定数でありメタノールの場合, 以下の値が用いられる [91].

$$A = 18.5875, \quad (3.1.16)$$

$$B = 3626.55, \quad (3.1.17)$$

$$C = -34.29. \quad (3.1.18)$$

また, 雰囲気における燃料気体の質量分率 Y_f^∞ は, 単純にそのセルの (気相の) 質量分率 $Y_f(x, y, z)$ とする.

ところで, 液滴表面における燃料の質量分率 Y_f^s を求めるにあたり, Clapeyron-Clausius の式や Antoine の式を使う場合, そのときの代表となる温度や圧力といったパラメータが必要となる. 温度を例にとれば, そのときの代表温度は当然ながら液滴の温度と雰囲気ガスの温度との両方が関係するはずである. 本研究では, 図 3.1 に示すように, 気相と液相 (噴霧液滴) の熱や物質交換は液滴のごく近傍の薄い層 (濃度境界層とも言える) でのみ行なわれる, とした「フィルム理論」に基づく方法を採用した. このフィルム内の物理量の算出方法は, 「1/3 ルール」 [92] に従った. 1/3 ルールは全くの経験的手法であるが, さまざまな液滴の蒸発においてよい近似を示すことが知られており, 広く用いられている手法である. 例えば, フィルム内の代表温度 T_{ref} は以下のように算出する:

$$T_{\text{ref}} = T_d + \frac{1}{3}(T_g - T_d). \quad (3.1.19)$$

また, 液滴が蒸発しながら飛行している場合, 蒸発により発生するガスの影響により抗力が減少することが知られている. この効果を表現するモデルが Eisenklam [93], Yuen and Chen [94],

*Mass Transfer Number は Spalding 数とも呼ばれることがある.

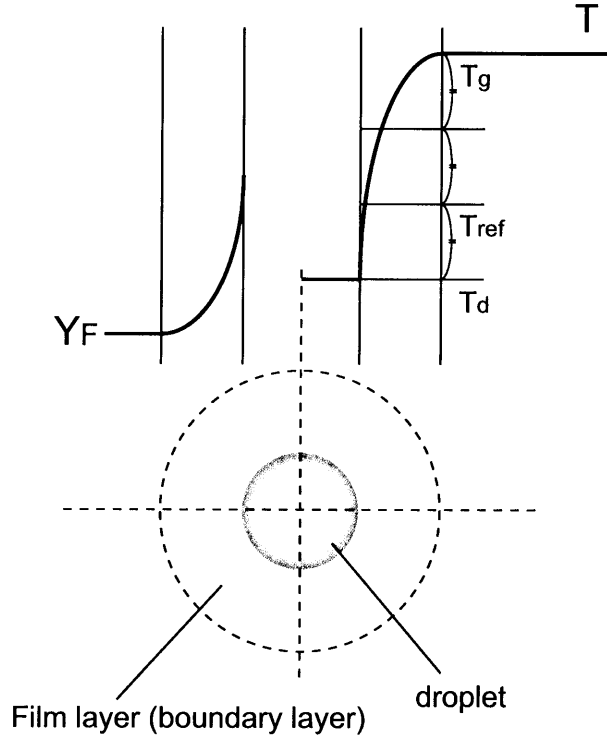


図 3.1: フィルム理論の模式図

Dukowicz [95] などにより提案されているが、本研究では、燃焼時の蒸発の予測精度と計算負荷低減の観点から Eisenklam のモデルを採用する：

$$C_D = C_{D0} \frac{1}{1 + B_M}. \quad (3.1.20)$$

ここで C_{D0} は、式 (3.1.7) で表現される剛体球を仮定した抗力係数である。

3.1.3 粒径分布の表現

一般の噴霧燃焼場において、燃焼状態や流れの状態などとならんで噴霧性状は非常に重要なパラメータである。この噴霧性状を表すパラメータのひとつとして重要なものが「平均粒径」であり、工業的に広く用いられているのが、以下に示すような算術平均粒径とザウタ平均粒径 (SMD) *の 2 種類の平均粒径である。

$$D_{10} = \frac{\sum D_m n_m}{\sum n_m} \quad (3.1.21)$$

$$D_{32} = \frac{\sum D_m^3 n_m}{\sum D_m^2 n_m} \quad (3.1.22)$$

ここで D_m は液滴の直径であり、 n_m は D_m の直径をもつ液滴の個数である。ザウタ平均粒径を噴霧の評価に用いることで、液滴と流体との間の運動量輸送や熱移動、物質輸送を関係づけること

*Sauter Mean Diameter, 体積-表面積平均粒径とも呼ばれる

が容易となる。現実のインジェクタから噴霧される燃料液滴は、様々な分裂過程を経て微粒化されるため、生成される噴霧は当然粒径はばらばらのものとなる。燃料の粒径分布が噴霧燃焼の効率に与える影響は大きく、その意味からも数値解析において粒径分布を正確に表現することは重要である。数値計算を行なう上ではこの粒径分布（確率密度）をある適当な関数で記述しておくことが都合がよく、このような用途で、対数正規分布、Rosin-Rammler の式、抜山・棚沢の式など、さまざまな式が提案されている [96]。抜山・棚沢の式 [97–100] はもともと気流噴射弁によって生成される噴霧の粒径分布を記述するものであったが、近年、一般的に見られる圧力駆動インジェクタに対しても有効であることが示されており、本研究でも粒径分布の表現には抜山・棚沢の式を用いることとする。

$$\frac{dn}{dD} = A n_T D^\alpha e^{-BD^\beta} \quad (3.1.23)$$

ここで、 D は液滴粒径、 n_T は総液滴数、 A , B , α , β は微粒化法、もしくはインジェクタによって決まる定数である。この式は、離散的には粒径が D から $D + dD$ の間にある液滴の個数 dn に相当する。なお、式 (3.1.23) に現われる定数については、例えば圧力噴射弁では $\alpha = 1, \beta = 1$ 、渦巻き噴射弁では $\alpha = -0.5, \beta = 1$ 、二流体噴射弁では $\alpha = 2, \beta = 1$ となることが知られている [96, p. 264]。

また、抜山・棚沢の式で描かれる分布関数は χ^2 分布に類似した形状をしており、式 (3.1.23) の係数を $\alpha = \beta + 4$ とおくことで Rosin-Rammler の式と同形になる。実験や経験則、もしくは解析的に粒径分布がわかっている場合には、上述の粒径分布式を用いて表現すれば良いが、もし粒径分布を予め知ることができない場合には粒径分布になんらかの仮定を置くか、「微粒化・分裂モデル」を用いて表現する必要がある。微粒化モデルはこれまでに、WAVE モデル [83] や TAB モデル [84] など多数のモデルが提案されている [85, 96, pp. 252 – 260]。

3.1.4 パーセル近似

乱流噴霧場中に噴霧液滴粒子は多数分散して存在する全ての液滴に対して Lagrange 的に運動方程式やエネルギー式を時間発展させるのは膨大な計算時間を必要とする。そこで、計算負荷低減を図る目的で流れ場中に無数に存在する全ての液滴粒子を追跡する代わりに、いくつかの液滴粒子を含んだ仮想的な代表粒子の運動方程式を解く、という近似がなされる。これがパーセル近似 (parcel approximation) である。

本研究の対象となるような粒子同士の直接の干渉が無視できる流れ場では、パーセル近似を用いて粒子を Lagrange 的に時々刻々追跡する過程において、パーセル近似に由来する特別な操作は必要としないが、あるパーセルが存在することによる影響（例えば、運動量や熱交換、蒸発による燃料ガスの発生など）を Euler 的に計算している気相へ反映する際に、そのパーセルが代表した液滴の個数 n の分だけ単純に n 倍し気相へと反映させる、という作業を行なう。このパーセル近似を実際の解析に適用した場合、計算結果になんらかの影響を及ぼすことが容易に予想がつくが、この影響について調査した研究は、中村ら [101] の報告がある程度でまだ十分とはいえない。

そこで本研究においてもこの影響を調査した．詳細については 4.4 節で述べる．

同様に計算負荷低減を目的として，液滴群の空間的な広がりをあらわす分布関数を定義する方法 [102] も提案されている．

3.1.5 噴霧燃焼形態と群燃焼理論

現実のガスタービン燃焼器や噴霧バーナの燃焼は，非常に限定された条件を除き，液滴群としての燃焼挙動が支配的 [103] と言われており，このような燃焼形態は「群燃焼状態」と呼ばれる [104, 105]．

乱流噴霧場においては，乱流と液滴との相互作用の影響などから，場所によって液滴数密度の高い領域ができる（クラスタ状態）．このような液滴の密集効果は局所的に燃料過濃の領域を作り出し，この内部では酸化剤不足から火炎が内部へ伝播できず，結果的に液滴群がひとつの大きな火炎を形成することになる．しかし，形成された液滴群すべてがこのような燃焼形態とは限らず，液滴群内に含まれる液滴の総数や，液滴間距離の違い，すなわち液滴の密集度の違いによって燃焼形態が変化する．Chiu ら [104] は，次に示す群燃焼数 G (Group Combustion Number) という液滴間の距離と個数から成るパラメータを用いて液滴の群燃焼状態を分類できることを理論的に解析した．

$$G = 1.5Le(1 + 0.276Re_d^{1/2}Sc^{1/3})n_T^{2/3}\frac{D_d}{l} \quad (3.1.24)$$

ここで， Le はルイス数， n_T はその液滴群に含まれる液滴の総数， l は平均液滴間距離である．群燃焼状態は，群燃焼数 G によって図 3.2 に示すように 4 つの燃焼形態に分類される．

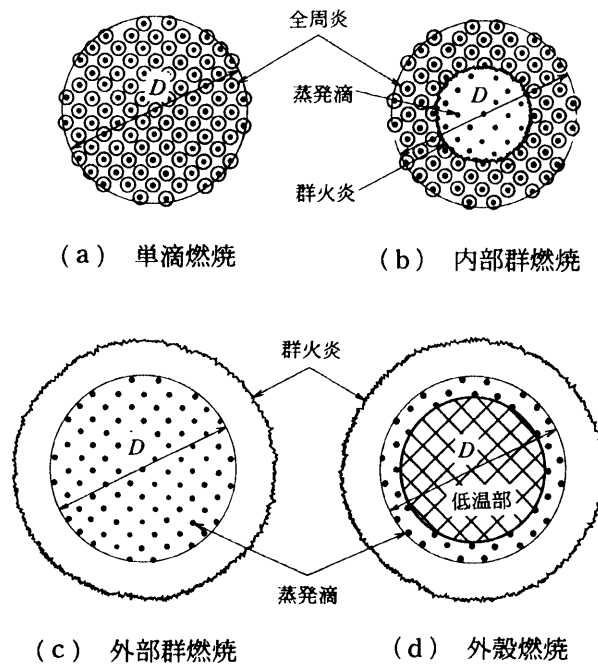


図 3.2: 群燃焼の 4 形態 [105, p. 209]

ここで、それぞれの火炎性状をまとめると、

$G < 10^{-2}$	単滴燃焼	個々の液滴に十分な酸素の供給があり、液滴 1 つ 1 つが単独で燃焼する。
$10^{-2} < G < 1$	内部群燃焼	液滴塊中心部では酸素の供給が不足し、群火炎を共有して燃焼するものの、その外周部にある液滴では単滴燃焼が生じている。
$1 < G < 10^2$	外部群燃焼	燃料蒸気に対して酸素の供給量が著しく不足し、液滴塊の外周部にのみ火炎が形成（群火炎）される。
$10^2 < G$	外殻燃焼	液滴の数密度が高すぎて液滴塊の温度が十分上昇せず、その外周部にのみ蒸発が起こる。当然ながら群火炎も液滴塊の外周部に形成される。

また、無次元液滴間距離 S を

$$S = \frac{0.05}{1 + 0.276 \text{Re}_d^{1/2} \text{Sc}^{1/3}} \frac{D_d}{l} \quad (3.1.25)$$

と定義したとき、液滴群に含まれる液滴総数 n_T と S および G との関係を図 3.3 に示す。また Chiu ら [104] はガスタービンなどの多くの工業用燃焼炉において、外部群燃焼 ($1 < G < 10^2$) が生じていると報告している。

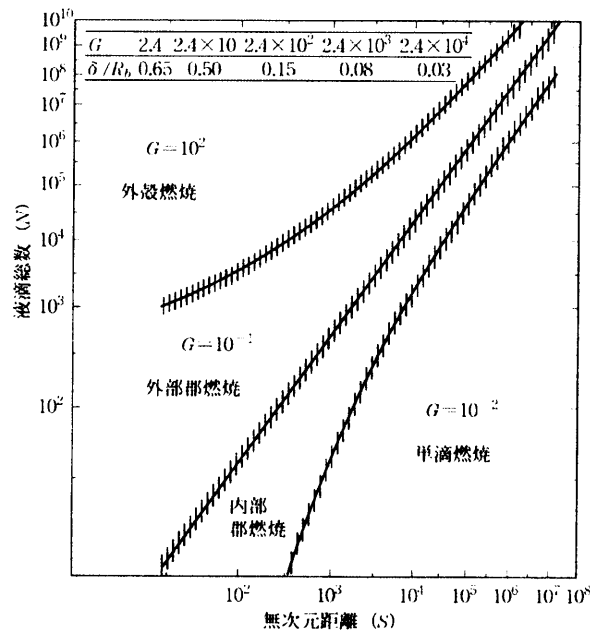


図 3.3: 液滴間の無次元距離と燃焼形態 [105, p. 208]

一般の噴霧燃焼に対する群燃焼状態の仮説は非常にリーズナブルなものであるが、その一方で、

- 液滴だけでなく液滴群も球形である
- 液滴群は均一粒径液滴で構成される
- 群火炎は非常に薄いシート状の火炎となる

という仮定をおいている。このいずれの仮定も実際の噴霧燃焼現象に即しているかという点において疑問が残る。このような背景から群燃焼状態を実験的に調査する研究も数多く行なわれている（例えば [106]）。

3.1.6 液滴の時間刻みの制限

乱流現象や噴霧挙動のように時々刻々変化する物理量を、数値解析によって求める際には、ある規則に従って時間刻み Δt を決定する。乱流のみ（気相のみ）を扱う場合には、移流問題の制限である CFL 数と分子拡散および乱流拡散に起因する条件*の 2 つを主に考慮すれば良いが、蒸発する噴霧を解析するあたっては、上記 2 つの条件以外にも以下のような現象のスケールを考慮する必要がある。

- 液滴速度緩和時間
- 液滴寿命
- 乱流渦との干渉時間
- 液滴表面加熱時間

液滴速度緩和時間 液滴速度緩和時間は、静止状態の液滴が一様な流れに置かれたときに、終端速度（の 63%）に加速されるまでの時間であり、粒子の流体運動への追従性を表すパラメータでもある。

$$\tau_{\text{relax}} = \frac{\rho_d D_d^2}{18\nu\rho_g C_D \text{Re}_d} \quad (3.1.26)$$

液滴寿命 液滴の寿命は以下のように液滴の蒸発率と関係が深い。

$$\tau_{\text{life}} = \frac{m_d}{\dot{m}} \quad (3.1.27)$$

乱流渦との干渉時間 液滴は乱流渦と干渉しながら移動するが、その際に単一渦の崩壊する時間すなわち渦寿命時間、もしくは液滴がひとつの渦を通過する時間を表すパラメータである。

$$\tau_{\text{eddy}} = \frac{\Delta}{\sqrt{2k_{SGS}/3}} \quad (3.1.28)$$

*高 Re 数の流れ解析では、拡散問題からくる条件をには特に配慮せず、CFL 数のみを考える場合も多いが、LES 解析において、壁面に格子を密にとった場合に、もしくは円筒座標系格子で解析する際の中心軸付近などで拡散条件が元で計算が破綻することがあるので注意が必要である。

液滴表面加熱時間 液相燃料の沸点が比較的低い場合、粒子の時間刻みが大きいと、1 timestep で液滴温度が急激上昇し、それにより、局所的に蒸発した燃料が増えることになる。このことは数値計算の安定性に影響を及ぼす危険性がある。液滴加熱時間はその評価を行なうパラメータである。

$$\tau_{\text{evap}} = \frac{\rho_d c_v D_d}{6 h_d}. \quad (3.1.29)$$

3.2 混相乱流モデル

2.2.1 節でも述べたように、LES 解析においては物理量をフィルタ操作によって GS 成分と SGS 成分とに分解してモデル化を行なう。これと同様に、噴霧液滴粒子についても GS 成分と SGS 成分とに分けてそれぞれの寄与を考慮する必要がある。これがすなわち混相乱流モデルとなる。

本研究においては、噴霧液滴の変形・分裂挙動は考慮しないため、個々の液滴粒子は真球状であることを仮定する。これにより、本研究における混相乱流モデルは、固気混相乱流モデルと同様の扱いが可能となる。

これまでに多くの研究者によって固気混相乱流の LES 解析が行なわれている（例えば [107, 108]）が、そのほとんどが GS 成分のみのカップリングを考慮したもので、SGS 成分の影響を考慮したものは例えば、雷ら [109, 110]、湯ら [111] などの研究があるが、まだ発展途上の段階である。なお、雷らは粒子衝突の影響も考慮 (four-way coupling) した上で、流体・粒子の SGS 成分とその相互作用についても考慮したモデル “full-way coupling model” を開発している。

一方で、実質的に粒子の質点近似が利用できる（固気）混相乱流の場合、GS 成分のみの PSI-CELL アルゴリズム [112]、すなわち two-way coupling で十分よい近似を与える [81, 113] ことから、本研究ではこれに従い、「GS 成分の two-way coupling」のみを考慮することにする。

固気混相乱流の LES と SGS モデルの総括的な解説としては、湯 [114] による解説、深淵による解説 [81] が参考になるだろう。

3.2.1 乱流変動の影響の考慮

前節でも述べたとおり、本研究においては粒子の SGS 成分による粒子の GS 成分もしくは流体成分への寄与は考慮しないが、その一方で数値計算上の観点に立つと、同一計算セルにある同じ速度を持つ粒子は全て同じ軌跡をたどることになり、乱流のランダム性が考慮されていないことになってしまう。そしてこの影響はレイノルズ数が高くなればなるほど、また計算格子が粗くなればなる程に顕著となるはずで。

そこでこのランダム性を考慮するために、本研究では気相 SGS 変動成分の液滴挙動への影響を Random walk model で表現した。ここでは、流体の SGS 成分は計算セルの中で等方的（局所等方性）と仮定し、平均 0、分散 $\frac{2}{3}k_{SGS}$ のガウス分布乱数（正規乱数）に従う [110] [85] とした。つまり、

$$\hat{u}_{i,g} = \hat{u}_{i,g} + X \sqrt{2k_{SGS}/3} \quad (3.2.1)$$

ここで k は流体 SGS 成分の運動エネルギーである.

$$k_{SGS} = \frac{C_{\nu T}}{C_\epsilon} \Delta^2 |\bar{S}|^2 \quad (3.2.2)$$

ここで, 定数 $C_{\nu T}, C_\epsilon$ は次元解析より, それぞれ 0.05, 1.0 としている.

3.3 気相と液相のカップリング

本研究のように, 噴霧液滴粒子の計算手法に Lagrange 的手法を採用した場合, 流体と液滴粒子の相互作用を扱う方法は粒子の濃度別に以下のように分類される [115] *.

1. one-way coupling. 粒子濃度が非常に薄く, 粒子の乱流への影響, 粒子同士の衝突の影響は無視できる程度に小さく, 単相流の運動量輸送方程式と, 粒子の運動方程式を別々に解くことが可能である.
2. two-way coupling. 粒子濃度がある程度高くなり, 粒子同士の衝突を無視できるが, 粒子の乱流への影響は無視できない. この領域では, 流れ場の運動が流体と粒子との双方により支配されている. 数値解析の際には, 流体・粒子間の相互干渉項を含んだ運動量輸送方程式と粒子の運動方程式を連立させて解く.
3. four-way coupling. さらに高濃度となると, 粒子の乱流への影響だけでなく, 粒子同士の相互作用の影響も無視できなくなる. 流体・粒子間の相互干渉項を含んだ運動量輸送方程式と, 粒子間相互作用を考慮した粒子の運動方程式を連立させて解く必要がある.

図 3.4 に Elghobashi [115] によって提案された, 流体-粒子の相互作用とそれによる計算手法の分類の regime を示す. 図中, Φ_p は粒子の濃度 (体積分率), S は粒子間平均距離, τ_p は粒子の緩和時間をあらわす. また, τ_K は Kolmogorov のマイクロスケール, τ_e は乱流渦の時間スケールを表す eddy turn-over time である.

以上の議論は, 固体粒子と流れの相互作用についての議論であるが, 噴霧液滴粒子が真球形をなし, 分裂や合体, 変形がないと仮定 (噴霧液滴は, 通常粒径が $\sim 100 [\mu\text{m}]$ であり, Weber 数が大きいので妥当な仮定である) すれば, 固体粒子と取り扱うことが可能であり, 同様の議論が成立する.

また, 上記の分類は体積分率による分類であるが, 質量比の分類で見た場合, 質量流量比で 0.2 以下の場合, one-way coupling でも実験結果と計算結果はほぼ一致しするが, 0.2 を超えると粒子の影響が気流にも現われ, 質量流量比が 1.0 を超える場合は粒子間相互作用は考慮しなければならない [20, p. 123], と報告している.

本研究で対象とするような乱流噴霧流れ場の場合, インジェクタノズルのごく近傍を除けば two-way coupling もしくは one-way coupling の範疇であると考えられ, 液滴粒子は質点と仮定し,

*流動層 (fluidized bed) や, 砂時計の中の砂の流れなどのように, 衝突や摩擦といった粒子間相互作用が支配的となる「粒子流」は除外している.

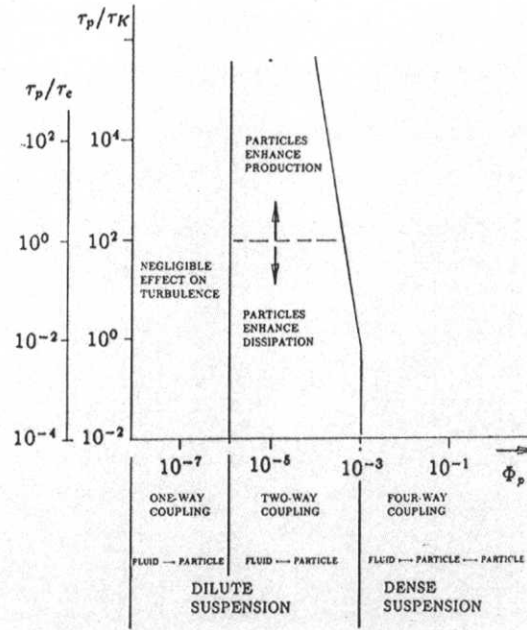


Fig. 1. Map of regimes of interaction between particles and turbulence.

図 3.4: 流体 - 粒子の相互作用と計算手法の分類 [115]

気相の LES 解析に用いられる計算セルで液滴と気相との運動量，物質，熱の交換が行なわれる，PSI-CELL アルゴリズム [112] に基づく手法で two-way coupling を行なった。

ここで仮定している質点近似は，厳密には粒子の直径が乱流の最小スケールである Kolmogorov のマイクロスケールよりも十分小さい場合にのみ適用可能である。現実の数値解析における解釈は，気相側の解析格子よりも粒子直径が小さい場合にこの仮定を適用していることが多い。なお，粒子直径が大きくなった（例えば格子と同じ～数倍程度のスケール）場合の計算手法も Kajishima ら [116] や Takagi ら [117] によって提案されており，DNS 解析のような非常に細かい格子を用いた場合，もしくは大きな液滴粒子を扱う場合においてはこれらの手法が有効であろう。

さて，気相乱流燃焼を 2.3.2 節で述べた conserved scalar approach を用いて表現する場合，LES，RANS いずれにおいても，その乱流燃焼モデルに \tilde{Z} と $\widetilde{Z''^2}$ が使われ，これらの量が燃料と空気の混合の状態を規定している。

一方，液体燃料噴霧の蒸発が起るとき， Z は保存スカラーでなくなり，結果として， \tilde{Z} と $\widetilde{Z''^2}$ の方程式中にさらなる閉じていない項，つまりモデル化すべき項が増えてしまう。 \tilde{Z} の算出については，3.1.2 節で述べた蒸発モデルを用いることで解決可能であるが，噴霧の蒸発があるときは， $\widetilde{Z''^2}$ にも影響を与えることが知られているが，本研究では蒸発現象は準定常的に起こると仮定し，この影響は無視する。一方で，噴霧蒸発時の $\widetilde{Z''^2}$ の変調を考慮するモデル [76, 118] も開発されているが詳細な検証はなされていないようである。

3.3.1 運動量および蒸発量のカップリング

本研究で採用する PSI-CELL アルゴリズム [112] では、液相と気相のカップリングの際には、液相からの相互干渉項を求め、ポイントソースとして気相の方程式に加味する。液相からの相互干渉項は以下のように求めることができる。

$$\psi_v = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^n \dot{m}^k, \quad (3.3.1)$$

$$\psi_{i,v} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^n \dot{m}^k u_{i,d}^k, \quad (3.3.2)$$

$$\psi_{i,m} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^n \psi_i^k, \quad (3.3.3)$$

ここで、 ψ_v は蒸発した燃料気体の寄与、 $\psi_{i,v}$ は蒸発した燃料気体のもつ運動量の寄与、 $\psi_{i,m}$ は液滴と流体との間の運動量の授受を表す。また V はセル体積であり、 n はそのセル内に存在する粒子数を表す。これらの相互干渉項を気相の方程式である式 (2.1.1), (2.1.2) にそれぞれ反映させると以下ようになる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = \psi_v, \quad (3.3.4)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right\} + \psi_{i,v} + \psi_{i,m}, \quad (3.3.5)$$

また、混合分率 Z に関する輸送方程式も 2.1.2 節で導出する際の 化学種 α の質量分率 Y_α の輸送方程式にソース項 ψ_v を考慮することで全く同様の過程で導くことが可能である。結果のみ書き出すと：

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho Z u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) + \left(\frac{\nu_{O_2}}{\nu_{O_2} + Y_O^{\max}} \right) \psi_v \quad (3.3.6)$$

ここで、 ν_{O_2} は量論混合比における燃料に対する酸素の質量比、すなわち量論空燃比であり、 Y_O^{\max} は空気中の酸素の質量分率の最大値、つまり未燃空気のとときの酸素の質量分率 (約 0.233) である。

以上の式 (3.3.4)–(3.3.6) にグリッドフィルタおよび Favre フィルタを施すことにより、LES における GS 成分での支配方程式が導かれる。

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \bar{\psi}_v \quad (3.3.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = & -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \right\} \\ & + \bar{\psi}_{i,v} + \bar{\psi}_{i,m} \\ & - \frac{\partial}{\partial x_j} \{ \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \} \end{aligned} \quad (3.3.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} - \bar{\rho} (\tilde{Z} u_j - \tilde{Z} \tilde{u}_j) \right\} \\ + \left(\frac{\nu_O}{\nu_O + Y_O^{\max}} \right) \bar{\psi}_v \end{aligned} \quad (3.3.9)$$

ここで、フィルタリングした相互干渉項 $\bar{\psi}_{i,v}$, $\bar{\psi}_{i,m}$, $\bar{\psi}_v$ の算出の際には、変動成分は微小であると仮定し、式 (3.3.1) – (3.3.3) をそのまま用いる。つまり：

$$\bar{\psi}_{i,v} = \psi_{i,v}, \quad (3.3.10)$$

$$\bar{\psi}_{i,m} = \psi_{i,m}, \quad (3.3.11)$$

$$\bar{\psi}_v = \psi_v. \quad (3.3.12)$$

なお、オリジナルの PSI-CELL アルゴリズムでは、熱に関するソース項も気相温度の輸送方程式に加味するが、本研究では、以下 3.4.2 節に述べる方法で熱のカップリングの影響を考慮する。詳細は次節で述べる。

3.4 気相と液相間におけるエネルギーのカップリング

3.4.1 spray flamelet model

2.3.2.3 節で気相燃焼モデルとしての laminar flamelet model について述べた。このモデルは乱流火炎を層流火炎片の集合体として考え、層流対向火炎の結果などから flamelet library を構築し、乱流火炎にあてはめる、というプロセスを経る。この考え方に基づき、図 3.5 の様に、層流対向噴霧火炎から flamelet library を構築 (spray flamelet library) し、乱流噴霧火炎に適用する例も報告されている [119]。しかしこの方法では、噴霧も含めた flamelet library の構築の際に噴霧の性

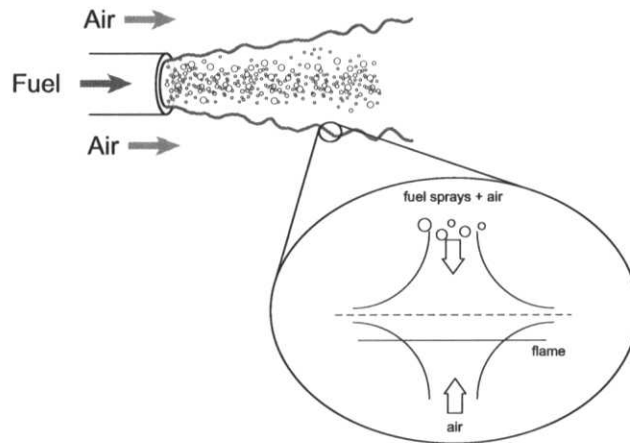


図 3.5: spray flamelet library の基礎概念

状を如何に規定するか、という問題がある。乱流噴霧火炎中には、噴霧が存在しつつ火炎を形成している部分と、(噴霧のない) 通常の拡散火炎の形態をとっている部分が存在することが容易に想像され、また火炎中に噴霧が存在する場合において、ノズル近傍部と火炎先端部では、噴霧濃度、温度、直径、群燃焼数といった様々なパラメータが異なっていることも容易に想像される。これらの現象を単一の library から火炎性状を決定してしまうには問題があると言わざるを得ない。このことから、spray flamelet library を一般の乱流噴霧燃焼解析に適用するには疑問が残るため、本研究では採用しない。

一方で flamelet library の基礎変数として、混合分率だけでなく、先に述べた噴霧濃度や群燃焼数といった他の物理パラメータを考慮した flamelet library を構築する (multi-parameter library) ことで問題解決可能な糸口となり得る。特に群燃焼状態を考慮することが spray flamelet library を構成する上で重要であろう。

また、噴霧火炎における基礎研究という意味では非常に有用な対象である対向噴霧火炎において多くの研究がなされている (例えば Mikami [120], Wakabayashi ら [121], McDonell ら [122], 数値計算の例として Gutheil ら [47], Nakamura ら [123]) ことも付記しておく。

3.4.2 Lagrange 型エネルギーカップリングモデルの提案

先に述べた PSI-CELL モデルを用いて噴霧燃焼現象を表現するためには、気相と液滴の間の熱交換についても運動量や濃度と同様にカップリングさせる必要がある。しかし、本研究では採用する flamelet モデルの場合、気相温度は flamelet library によって一意に決定され、そこには噴霧の存在による影響は加味されない。そこで火炎中の噴霧の存在による影響を考慮に入れるために、以下のような方法を提案する。

式 (3.1.4) および式 (3.1.8) より、流体セルに作用するエネルギー (熱エネルギー) に関する相互干渉項 ψ_T は以下のように算出できる。

$$\psi_T = \frac{1}{V} \sum_k \left\{ \frac{\pi \lambda D_d^k}{c_{p,d} m_d^k} \text{Nu} (\hat{T}_g - T_d^k) - \frac{\dot{m}^k L_v}{c_{p,d} m_d^k} \right\}. \quad (3.4.1)$$

そして、flamelet library から算出される気相温度 (仮の温度) を T_0 とし、噴霧の存在によって生じる熱伝達や蒸発潜熱との相互干渉を

$$T = T_0 - \frac{\psi_T \Delta t}{c_{p,g} \rho_g V}, \quad (3.4.2)$$

によって与える方法である。

このモデルは PSI-CELL モデルで熱の影響をエネルギー式のソース項として加味することと同様の手法と言え、このモデルを採用することにより、噴霧によって気相 (火炎) が局所的に冷却される影響が考慮できる。当然ながら、このモデルは噴霧が存在する領域のみ作用し、噴霧が存在しない下流領域では影響を及ぼさない。この点で 3.4.1 節に述べた spray flamelet model より優れている。

3.4.3 multi-parameter flamelet model の提案

前節で提案したモデルを用いることにより、噴霧が存在する局所的な冷却（熱輸送）を考慮できるようになるが、このモデルではその冷却されたガスが移流拡散によって下流へと輸送される効果は考慮されない。この影響を考慮するためには、エンタルピのような熱を表現する物理量の輸送方程式を解き局所温度を評価する、などの方法が必要となる。この場合、flamelet library の独立変数として混合分率だけでなく、さらに他のパラメータを考慮し構築する必要がある。この考え方は 3.4.1 節でも述べた “multi-parameter flamelet model” となる。つまり、

$$\phi = \phi(Z, \varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n), \quad (3.4.3)$$

と表現される。multi-parameter flamelet model の簡単なひとつの例として、混合分率と同時に熱を表現する物理量の輸送方程式（ここでは説明のため、エンタルピとする）を解き、「混合分率とエンタルピの 2-parameter flamelet library」を構築し、それを利用して流れ場中の温度を求める方法、を考えてみよう。この場合、式 (3.4.3) の $n = 1$ に相当する。

$$\phi = \phi(Z, \varphi_1), \quad (3.4.4)$$

$$\varphi_1 = h. \quad (3.4.5)$$

このときの flamelet library のサンプルを図 3.6 に図示する。このモデルを採用することにより、より詳細に火炎の局所状態を表現することが可能となり得るが、流れ場や混合分率の輸送だけでなく、エンタルピの輸送方程式も同時に解く必要がある。また、2-parameter library の作成のために、流れ場中でエンタルピの最大・最小値を適切に推定する必要が生じる。さらに、混合分率とエンタルピ双方の SGS 成分を考慮するためには、2.4.2.1 節で述べた SGS-PDF モデルよりさ

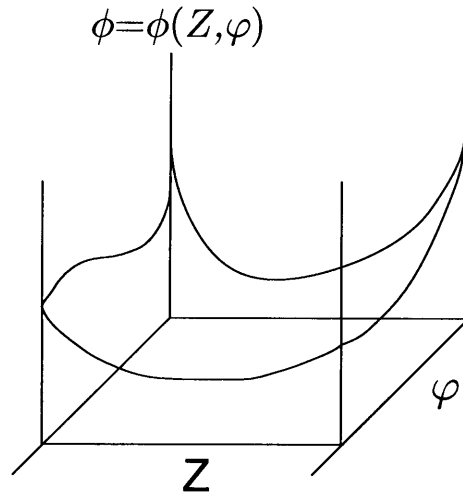


図 3.6: Example of '2-parameter flamelet library'

らに高度な PDF を推定する，つまり混合分率の変動 Z'^2 とエンタルピーの変動 h'^2 の両方を考慮しながら JPDP を積分する必要がある，この計算は容易ではない．

このように multi-parameter flamelet model は，その library への入力変数となる物理量を適切に選択する（混合分率と群燃焼数，や混合分率とエンタルピーなど）事により，詳細に火炎の局所状態を表現し得る可能性を秘めているが，JPDP の積分の問題など現状では克服しなければならない課題も多い．

一方で，上記を簡略化して乱流火炎へと適用した事例として，弘畑 [2] による部分予混合火炎問題への適用例と，Pitsch ら [124] による予混合火炎の適用例がある．弘畑は，flamelet library で算出する密度や温度を，反応進行度を表すスカラー G をスイッチングパラメータとして，局所化学種濃度を未燃混合気と既燃ガスとの線形和で表現できる，という仮定を置くことで上記の問題を回避している．

$$Y_\alpha = \{1 - f(G)\}Y_{\alpha,u}(Z) + f(G)Y_{\alpha,b}(Z) \quad (3.4.6)$$

$$T = T_0 + \frac{h - \sum Y_\alpha h_{0,\alpha}}{\sum C_{p,\alpha} Y_\alpha} \quad (3.4.7)$$

$$\rho = \frac{p_0}{RT \sum Y_\alpha / M_\alpha} \quad (3.4.8)$$

ここで，添え字 u は未燃混合状態を， b は既燃状態を表す．

Pitsch ら [124] も同様に，式 (3.4.9) のように G をスイッチングパラメータとし，非燃焼時には iso-thermal mixing での密度とし，燃焼時には密度は Z, h の関数としており，また，エンタルピー h は混合分率 Z に比例するという仮定をおいている．

$$\rho(Z, h, G) = \begin{cases} \rho_u(Z) & \text{if } G < 0 \\ \rho_b(Z, h) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.4.9)$$

以上に挙げた両者とも，flamelet library に使用する 2 つめのパラメータを混合分率 Z の線形関数として近似，つまり混合分率の従属変数として取り扱うことで，2-parameter library の構築を回避する，という意味で共通している．

$$\phi = \phi(Z, \varphi(Z)) \quad (3.4.10)$$

次にこの方法に基づいて，噴霧の存在によって周囲気相（火炎）が冷却される効果を考慮することを試みる．これは 3.4.2 節で述べた局所気相温度に噴霧冷却を考慮することに相当する．インジェクタからの燃料噴霧の投入量を与え，それが全て蒸発すると仮定すれば，噴霧の存在によって吸収されるであろう熱量が推定できる．このことを利用し，2 つめのパラメータ φ としてここでは「噴霧液滴が吸収する熱量」を選択する．この時の flamelet library は，予め吸収熱分を差し引いた混合気から library を作り，想定される範囲の吸収熱分を考慮しながら数個の library を作成した．そのプロットを図 3.7 に示す．噴霧による吸収熱分を考慮した流入温度以外は，2.4.3 節で述べたものと同じ条件である．図 3.7 を見ると，全域でグラフは流入温度分に近い分だけ上下

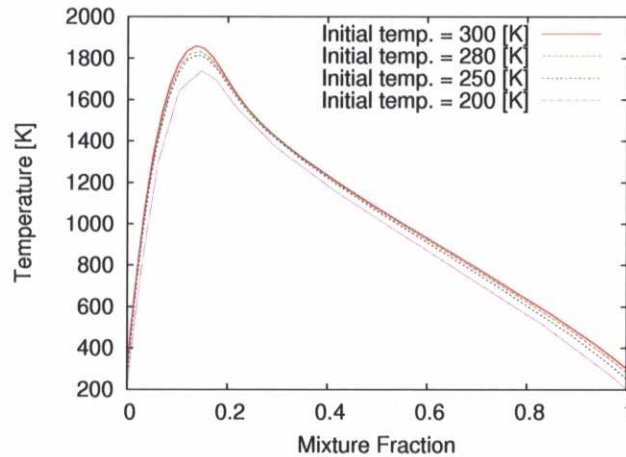


図 3.7: Temperature plot computed by flamelet library at the various initial temperature (200 – 300 [K])

にシフトしただけのプロットとなっており，流入温度によって目立った特別な変化はしていない．この事は，弘畑や Pitsch らが採用している $\varphi = \varphi(Z)$ の仮定を支持する結果と言える．

しかしこの方法を噴霧燃焼流れに適用すると，3.4.1 で述べた spray flamelet と同様に噴霧の存在しない場所においても噴霧の存在を仮定した library を利用することを意味し，この部分においては物理現象を正しくモデル化しておらず，3.4.2 節で提案した Lagrange 型エネルギーカップリングモデルが優れていると言える．

3.5 まとめ

本章において乱流噴霧燃焼場に存在する噴霧液滴の解析手法を概観した．ここに本研究の乱流噴霧燃焼場解析に採用したモデルをまとめる．

まず，乱流燃焼場は第 2 章で述べたとおり，LES と flamelet concept に基づく手法で Euler 的にモデリングされる．噴霧液滴は LES 乱流燃焼場中を Lagrange 的に移動（飛行）する粒子として表現する．この噴霧液滴粒子は DDM に基づく手法により，それぞれの液滴の運動量輸送，熱伝達や蒸発潜熱を考慮しながら時々刻々追跡される．液滴の蒸発モデルは，飽和蒸気圧も考慮した物質伝達に基づくモデルを採用し，液滴の乱流変動による影響は random walk model によって表現した．また，噴霧の存在を考慮した燃焼モデルとして，Lagrange 型エネルギーカップリングモデルとそのコンセプトを一般化した multi-parameter flamelet model を提案した．

以下図 3.8 に噴霧燃焼解析の際の模式図を示す．図中，赤線が今回提案した Lagrange 型エネルギーカップリングモデルに相当する．

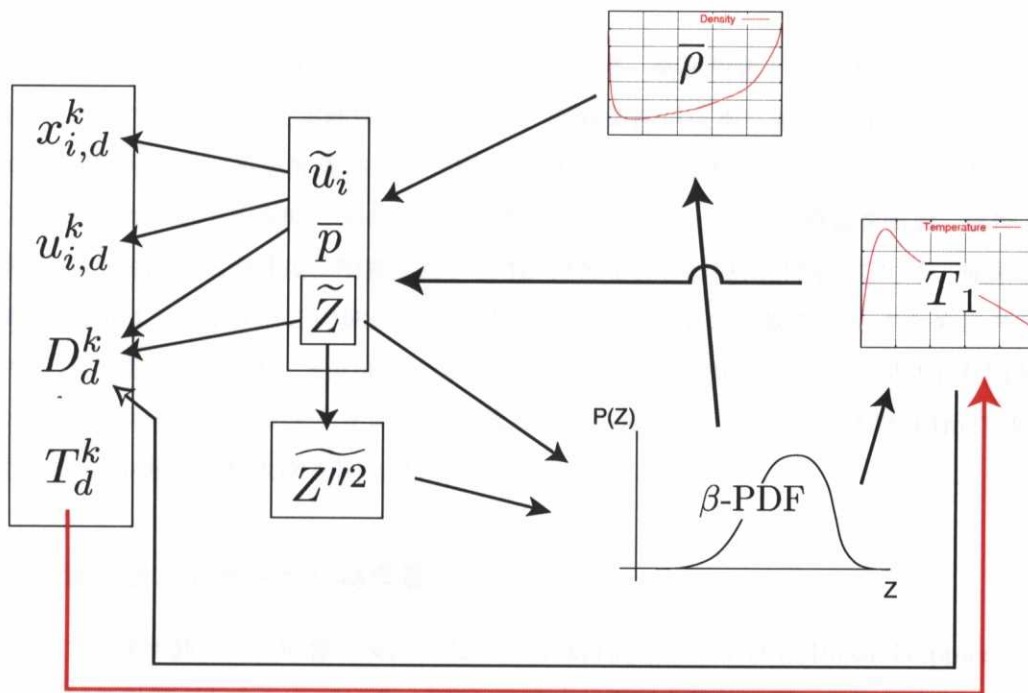


図 3.8: A sketch of computation procedure for turbulent spray combustion flows

第4章 乱流中の蒸発噴霧の解析

本章ではこれまでに述べた LES に基づく噴霧燃焼場解析手法を実際の乱流噴霧場に適用し、その評価を行なう。特に本章では、蒸発する噴霧挙動の予測精度に注目して検討を行なう。

4.1 解析対象

本節では解析対象とする実験体系の概要について述べる。解析対象として Widmann and Presser [125, 126] によって行なわれた実験体系を選んだ。実験条件が詳細に記述されており、また、検証のための数値解析で用いる境界条件になり得る物理量についても詳細な計測がなされている。

この実験系では、旋回乱流場にメタノールを燃料としたホローコーン噴霧を噴射、燃焼させ、非燃焼・燃焼場における気流速度、噴霧速度、SMD 分布などを詳細に計測している。使用された燃焼器概略図を図 4.1 に示す。この燃焼器は、火炎に与える外部の影響をなくするためにステンレス製のチャンバに覆われており、その高さは約 1.2m、直径は約 0.8m である。(図 4.1 右図参照)。旋回空気がホローコーンインジェクタの周囲の流入部から流入し、その直径は約 0.1m である。(図 4.1 左図)。ノズル近傍の拡大図を図 4.2 に示す。

4.1.1 計測手法と計測された物理量

噴霧計測は噴霧挙動に直接影響を及ぼさない非接触計測である PDA (Phase Doppler Anemometry) * を用いて計測が行なわれている。PDA は流速計測で一般的に用いられる LDV と同様の原理で稼動する計測装置で、粒子速度と粒径との両方を同時に非接触実時間計測が可能である。計測手法の詳細については、例えば [127] などを参照されたい。

計測データとして、半径方向および軸方向の平均流速成分、平均粒径、数密度、噴霧中の燃料液滴の体積フラックスを測定している。また、熱電対を使用してチャンバ壁面温度データを計測し、FTIR (Fourier transform infrared spectroscopy) を用いて、燃焼器出口における化学種濃度計測も行なっている。気相速度計測にはステレオ PIV を用い、トレーサ粒子には公称 $1.5\mu\text{m}$ のアルミナ粒子を用いている。計測機器の概略図を図 4.3 に示す。なお、計測データの測定不確かさを得るために、数ヶ月に渡り同じ条件下で実験を行なっていることも注目すべき点として挙げておく。

*PDI (phase Doppler interferometry), PDPA (phase Doppler particle anemometry) とも呼ばれることもある。

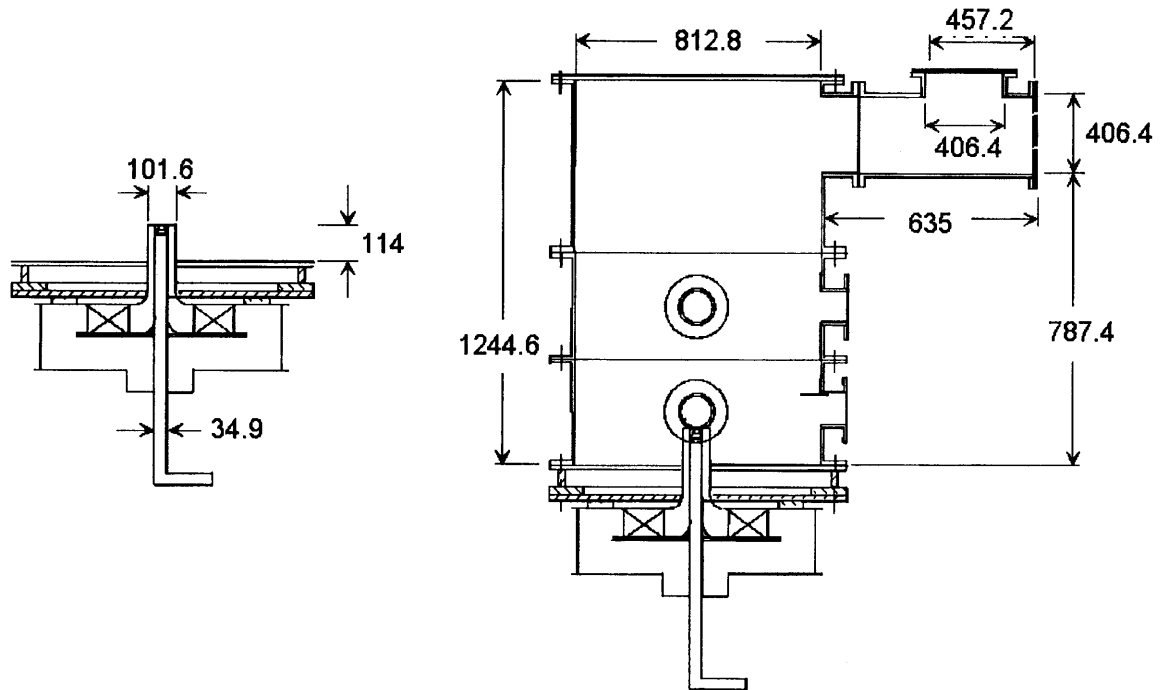


図 4.1: 実験燃焼器概略図 [125]

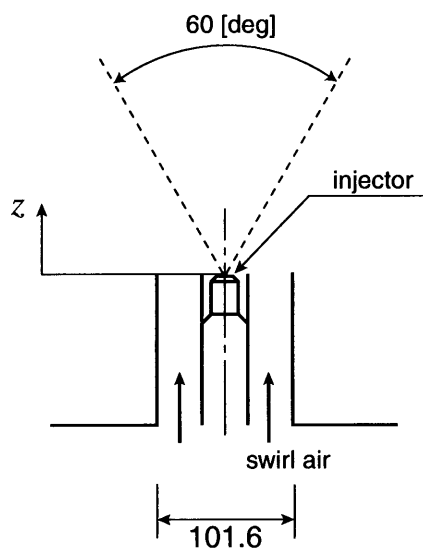


図 4.2: 流入ノズル近傍拡大図

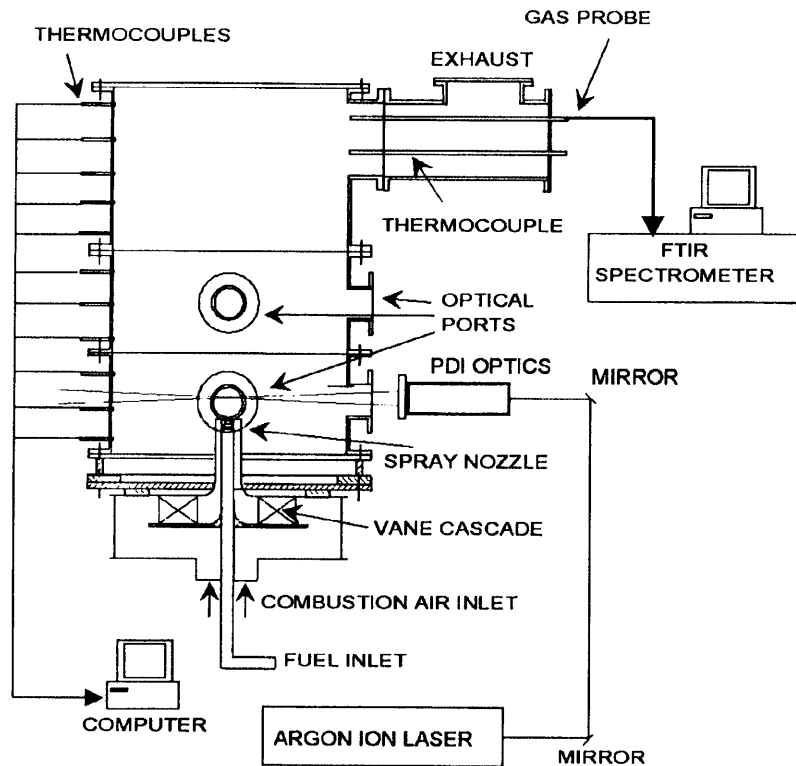


図 4.3: 実験装置 機器概略図

4.1.2 計測条件

計測条件の一覧を表 4.1 に示す。実際の計測では、非燃焼場・燃焼場、双方で計測が行なわれており、流入部直径と流入流量を代表量ととった時の Reynolds 数は約 10,000 であった。また、旋

表 4.1: Operating Conditions

Fuel Type	Methanol
Fuel flow rate	3.0 kg/h
Fuel temperature	Ambient
Equivalence ratio	0.3
Air flow rate	56.7 m ³ /h
Air temperature	Ambient
Swirl number	0.58
Chamber pressure	Ambient
Reynolds number	10,000

回強さを表す無次元数であるスワール数 S を以下のように定義される.

$$S = \frac{G_\theta}{LG_z}, \quad (4.1.1)$$

ここで L は代表長さであり, 一般にバーナ出口半径が用いられる. G_θ と G_z はそれぞれ, 角運動量の軸方向流束および軸方向運動量の軸方向流束であり,

$$G_\theta = \int_0^\infty \rho u_z u_\theta r^2 dr \quad (4.1.2)$$

$$G_z = \int_0^\infty (\rho u_z^2 + p) r dr \quad (4.1.3)$$

で与えられる. ここで, u_z と u_θ はそれぞれ軸方向および周方向の速度成分である. また, ρ はガス密度であり, p はガスの圧力である. ここで用いる 12 個のバーンによるスワールバーナの代表長さには, 環状外壁の半径 $L = 50.8 \text{ mm}$ とした. PIV データによるスワール数 S はそれぞれ, 噴霧火炎ありの場合 0.58, 火炎なしの場合, 0.60 であった.

4.1.3 粒径分布計測

この実験においては PDA を用いて, 粒径と粒子速度の同時計測を行なっている. ノズル近傍のある点 (軸方向に $z = 5 \text{ mm}$; 半径方向 $r = 2.76 \text{ mm}$) で得られた液滴直径データを図 4.4 に示す. この図では合わせて, 3.1.3 節で述べた抜山・棚沢の式にフィッティングしたグラフも載せている. なお係数については葉ら [128] の計測に用いた値 $A = 62.5, B = 5, \alpha = 2, \beta = 1$ を用いた. 実際の数値解析の際は, 粒子直径がこの分布に従うように調整している.

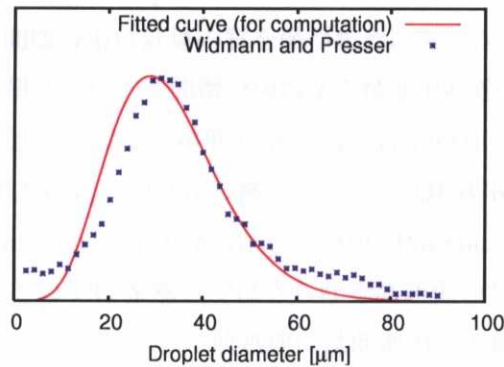


図 4.4: Droplet size distribution by hollow-cone injector (fuel: methanol)

4.2 数値解析手法と計算条件

4.2.1 数値解析手法

気相の支配方程式は, 第 2 章で述べた質量・運動量保存式である 式 (2.2.15) および 式 (2.2.16) と混合分率 Z の輸送方程式である 式 (2.2.23) であり, SGS 応力項には Smagorinsky モデル (式

(2.2.17) – (2.2.20)) と勾配拡散モデル (式 (2.2.24)) を用いた。以下に再掲する。

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (4.2.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = & -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \mu \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \bar{u}_k}{\partial x_k} \right) \right\} \\ & - \frac{\partial}{\partial x_j} \{ \bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \} \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

$$\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \equiv -2\mu_{SGS} \bar{S}_{ij} \quad (4.2.3)$$

$$\mu_{SGS} = \bar{\rho} (C_s \Delta)^2 |\bar{S}|. \quad (4.2.4)$$

$$\bar{S}_{ij} \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.2.5)$$

$$|\bar{S}| \equiv 2 (\bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij})^{\frac{1}{2}} \quad (4.2.6)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \bar{\rho} D \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} - \bar{\rho} (\widetilde{Z u_j} - \tilde{Z} \tilde{u}_j) \right\} \quad (4.2.7)$$

$$\bar{\rho} (\widetilde{Z u_j} - \tilde{Z} \tilde{u}_j) \equiv -\frac{\mu_{SGS}}{Sc_{SGS}} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \quad (4.2.8)$$

気相の方程式は複雑形状への適合性を考慮し、一般曲線座標系で離散化する。その際には方程式系の保存性を考慮したスキーム [129, 130] を用いて離散化を行なう。格子系はコロケート格子系とする。支配方程式の時間・空間微分項は計算の質を保つためにもできるだけ性質の良い、精度の高いものを使う必要がある。本研究では、空間微分項は 2 次精度中心差分で離散化している。運動方程式、混合分率方程式の時間進行には 2 次精度の Adams-Bashforth 法を用いている。ただし、計算の安定化のために混合分率方程式 (2.2.23) の移流項にのみ QUICK を用いている。また、圧力のカップリングには fractional step [131] 法を用い、圧力の Poisson 方程式の計算には BiCGStab 法を用いる。BiCGStab 法などの CG 系解法ではさらなる高速化のために ILU* や IC† といった前処理を併用することが一般的であるが、この前処理には前進消去・後退代入のプロセスが含まれ並列化で容易ではないことから、使用していない。これにより、コンパイラによる自動並列化も可能となり、ユーザ自身の手による並列化をする必要がなく、解くべき問題がそれほど大きくない場合には良いパフォーマンスが得られ非常に有用である。一方で、本格的な大規模計算をする場合には SPMD コンセプト (Single Program Multiple Data) に基づく領域分割法によって並列化をするのが効率的である。

液滴の運動方程式は 2 次精度の Adams-Bashforth 法を用いて時間進行する。また、気相・液相のカップリングの際の物理量の補間・分配には tri-linear 補間を使用した。

*Incomplete LU decomposition, 不完全 LU 分解

†Incomplete Cholesky decomposition, 不完全コレスキー分解

4.2.2 計算条件

本計算で解析する計算領域はスワラノズルからの流れを流入と見立て、流出部については簡単のため同軸とした、燃焼器形状全体である。すなわち計算領域は約 $1.2\text{m} \times 0.8\text{m}$ の円筒型である。図 4.5 に計算領域の概略図を示す。図中、赤枠で囲まれた領域が本解析の計算領域である。

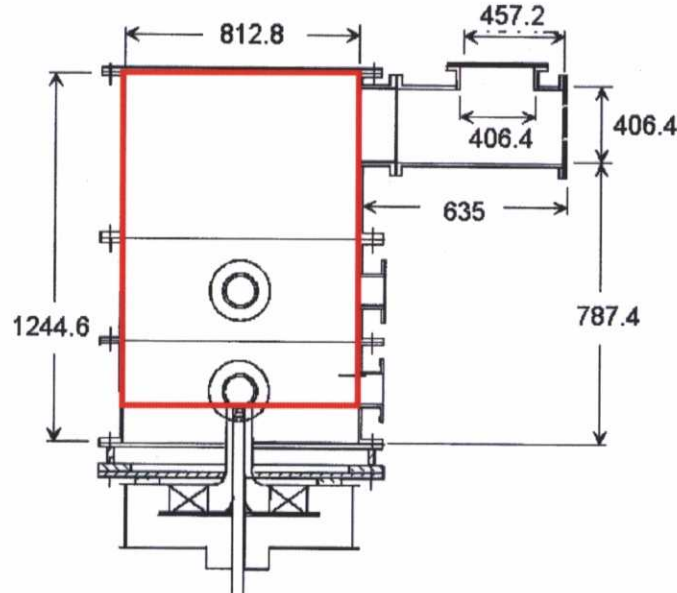


図 4.5: 計算領域概略図

格子点数は $41 \times 37 \times 101$ (半径, 周, 流れ方向) としており, そのうち流入部をカバーする点は半径方向に 20 点とした. 時間刻み $\Delta t = 25 \mu\text{s}$ とした. 流入部直径と流入空気流量でとった Reynolds 数は 10,000 (実験と同じ値) としている. また, 燃料の密度などの物性値はメタノールのものである.

燃料液滴の位置における流体の物理量の値は, tri-linear 補間を用いて計算し, 液滴から流体格子への影響の寄与の配分も同様に算出する two-way coupling とする.

4.2.3 流れの境界条件

旋回流入空気の境界条件は先に述べた実験 [125, 126] で得られたノズル最近傍 ($z = 1.4\text{mm}$) の値を用いる. この実験では流れの乱れ成分も計測されており, これも計算に考慮に入れるべきデータであるが, 今回は無視している. 側壁には no-slip 条件を与え, 流出部には対流流出条件を課した.

4.2.4 噴霧液滴粒子の初期条件

噴霧液滴粒子の初期条件は実験で得られたノズル近傍 ($z = 5\text{mm}$) の値を用い, その位置から射出させる. その際に以下のようにいくつか条件を変えて比較を行なった.

1. case A: 簡単のため、全ての液滴粒子について初期粒径 $49\ \mu\text{m}$ （これは平均粒径の値に相当する）、初期半径方向位置を 3mm とし、初期速度 22m/s を実験値より与える。周方向の位置はランダムに配置している。
2. case B: 初期粒径として図 4.4 のような確率分布を持ち、半径方向の位置は平均： 3mm 、分散 0.5mm のガウス分布に従う位置とし、速度はその位置における速度を実験値から補間して与える。（このため、それぞれの粒子に対して速度と直径は無関係に決定される）

4.3 解析結果と考察

4.3.1 可視化による検討

図 4.6 に瞬時の流れ方向速度分布を示す。この図から流れは非定常な乱流となっていることが見てとれる。また、旋回流の影響で、インジェクタが設置されている流入部中心付近の逆流域も再現されている。

ノズル近傍の瞬時渦度分布を図 4.7 に示す。渦構造はノズルリムから発生していることが見てとれ、流れ方向の渦度と周方向の渦度が連続的につながっていることから、流れ方向渦度は周方向渦度から生成されていることが予見される。周方向渦度は、旋回流れが持つ周方向せん断層から Kelvin-Helmholtz 不安定によって作られる。この渦構造は流れ方向、周方向渦度によって引き伸ばされ、結果的に渦構造を崩壊させる。

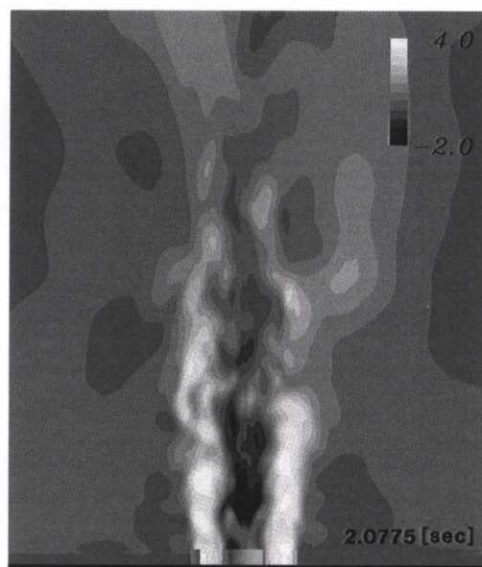


図 4.6: Typical instantaneous view of streamwise velocity distribution

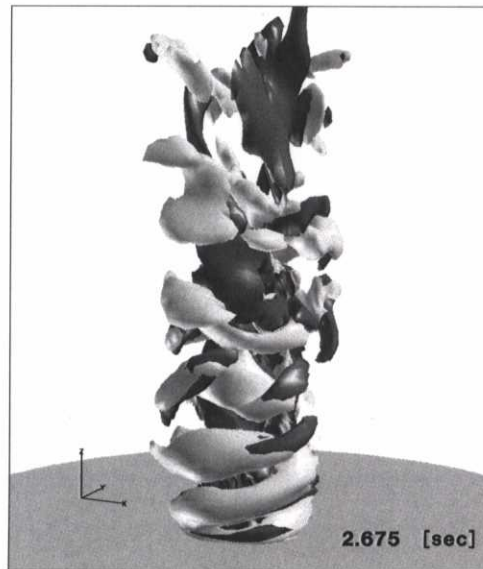


図 4.7: Instantaneous vorticity distribution (light gray: tangential vorticity, dark gray: streamwise vorticity)

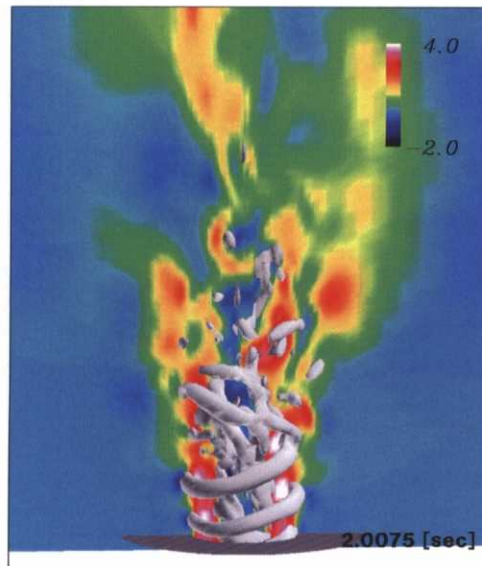


図 4.8: Vortical structures visualized using iso-surface of $\nabla^2 p$ and streamwise velocity distribution

図 4.8 に流入ノズル付近の $\nabla^2 p$ で可視化された三次元渦構造と流れ方向速度を示す。この図を見ると、流入ノズルの内側、外側のリムから出る 2 つの渦構造があることがわかる。これらの渦構造はそれぞれ時計回りと反時計回りに運動しながら下流に流れ、ここで 2 つの渦構造が干渉し合い、急速に崩壊している様子が見てとれる。

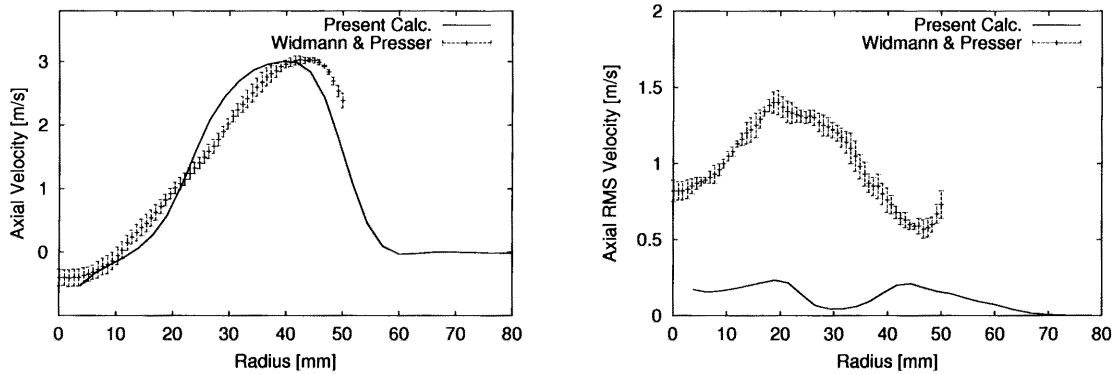


図 4.9: Radial profiles of the axial velocity component compared with experimental results (left: averaged, right: RMS)

4.3.2 流れ速度の定量比較

図 4.9 に流入部から $0.5D$ ($z=17.6\text{mm}$) 離れた場所における、流れ方向速度と乱流強度の統計量（時間方向と周方向に平均をとった）を実験値と比較したものをそれぞれ示す。この図より、平均速度の最大値や逆流域により一致が見られる。さらに旋回の影響によるプロファイルの偏りもよく捕らえられている。この偏りは旋回流れに特有かつ重要な現象であり、RANS モデルでは予測が難しいとされているものであるが、LES によって精度良く予測できることがわかる。しかしながら、図 4.9 右図を見ると乱流強度は大幅に過小評価してしまっている。本計算においては、流入の乱流変動を考慮しておらず、発生する乱流変動は自身の微小の変動から生成され、流入部の内外壁部に位置する境界層で大きくなっている。一方、実験においては、壁面せん断層における乱流変動は見られず、大きな変動が見られている。実験においては本解析における流入部に相当するノズルよりさらに上流部にあるスワールベーンが流れに対して旋回成分を与えており、このときに大きな乱流変動が生成されていることが予想される。計算においてこの影響を加味していないことに起因して図 4.9 右図の乱流強度の相違が見られたことが予想される。つまり、流入部の乱流変動を適切に付加することでこの結果は改善されることが推察される。

4.3.3 噴霧液滴の可視化による検討

図 4.10 に case A における液滴の運動と渦構造の時間履歴を示す。噴霧液滴は投入直後、自身の持つ慣性で直線的に移動するが、抗力の影響と蒸発によって自身の運動エネルギーを失い、局所流れに沿うようになる。そして流れに沿うようになった液滴が渦構造に巻きついて動くような様子が観測された。このように液滴の運動は局所渦構造に強く影響を受けることがわかる。

図 4.11 に case B における流れ方向速度（図中左側）と混合分率分布（図中右側）、および噴霧液滴粒子の様子を示す。下流へと流れた蒸発燃料ガスは、空気の流れ同様に非定常な乱れた状態になっていることが見て取れる。そうでない蒸発ガスは逆流域に滞留している。このことは、逆

流域において、噴霧より外側に燃料ガスが存在することからもわかる。実機においてはここで保炎がなされる箇所であり、本解析でも同様の保炎メカニズムが再現できたと言える。

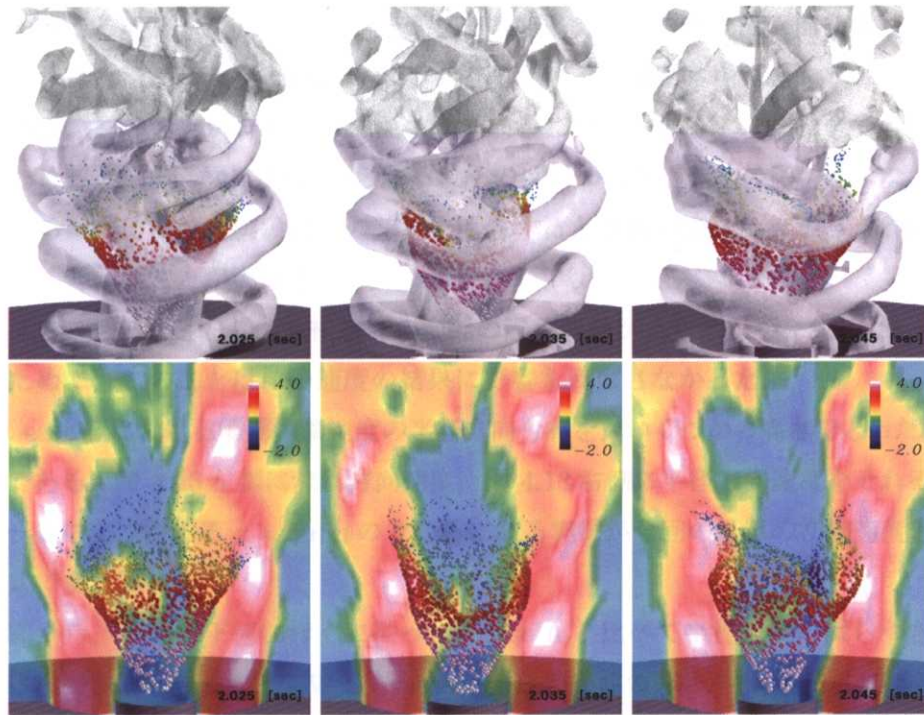


図 4.10: Time series view of typical droplet distribution

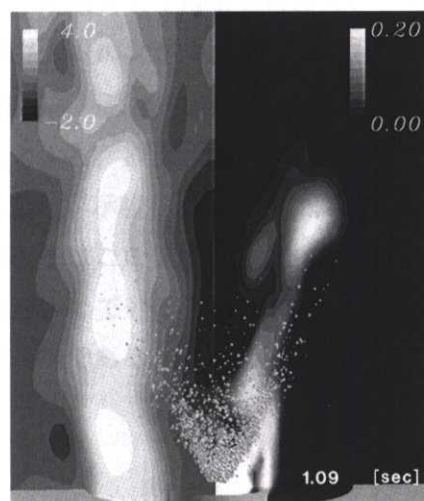


図 4.11: Typical snapshot of streamwise velocity and fuel concentration distribution and droplet motion view

4.3.4 噴霧液滴挙動の定量比較

図 4.12 に case A における、噴霧液滴速度の半径方向分布をいくつかの高さ（流れ方向距離）でとったものを示す。本計算による値はスキッタプロット、つまり計算中の粒子の値をそのままプロットしている。この結果より、実験、計算双方の結果で液滴速度は流入部を離れるほどに減少している。これは、液滴の蒸発と抗力の影響で液滴がエその運動エネルギーを失うことによって起こる現象であるが、このことが計算でも再現されていることがわかる。また、全ての液滴の初期条件が同一であることから、図 4.12 に見られる粒子のばらつきは、流れの影響、すなわち乱流が噴霧が与えている影響であり、実験値との差異を考慮すると噴霧液滴に乱流が与える影響はそれほど大きくない、ということが導ける。

また、図 4.9 にもあるとおり、気相速度の変動の過小評価が見られたが、気相/液滴の速度差が大きかったために、このことは粒子速度の結果に影響を及ぼさなかった。

図 4.13 は case B における噴霧液滴速度の半径方向分布を、いくつかの高さでとった際のスキッタプロットである。図 4.13 左側に流れ方向速度、図 4.13 右側に半径方向速度をそれぞれ示している。図中、一番左に位置する $z = 5\text{mm}$ のところにある実線が今回の計算の初期速度として用いた多項式近似式である。

これらの図から、液滴は下流に行くに従って、case A と比べて半径方向のばらつきと、液滴自身の速度のばらつきが大きくなっている。case A と B の条件の違いから、これは噴霧の初期条件、つまり初期速度や初期粒径に変化を与えたために生じていることが容易に推察される。また下流に行くに従って、多くの粒子が蒸発、消滅し、プロット点数が大幅に減少していることもわかる。

図 4.14 は図 4.13 で得られた計算値から、ある範囲の半径方向距離に位置する液滴の速度をサンプリングし平均をとって図示し直したものである。case A（図 4.12）において、全ての噴霧液滴粒子の初期液滴直径や速度を一定値として解析を行なうことで、噴霧速度の減衰の推移を予測することはできたが、噴霧の半径方向の拡がり小さく、乱流の噴霧の拡がりに及ぼす影響は小さかった。次に case B の様に初期液滴直径や速度に適切な分布を持たせたことで噴霧の拡がりの予測も可能となった。以上のことから、液滴位置の拡がり乱流の非定常性における影響よりも液滴の初期状態に強く依存することが示唆される。また、図中解析値にばらつきが見られるのは、先に述べたとおり、大半の液滴粒子はこの位置まで到達する前に蒸発してしまい、観測できる液滴粒子が圧倒的に少ないことに起因している。これはさらに長時間の計算をしサンプル数を増やした上で平均をとることで解決可能である。

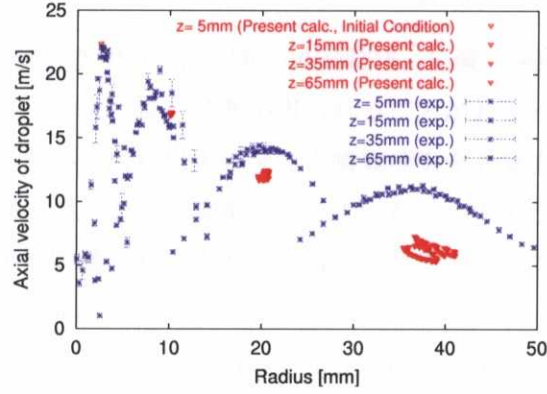


図 4.12: Radial profiles of the droplet axial velocity on case A (solid symbols: present computation, hollow symbols: experimental results [125])

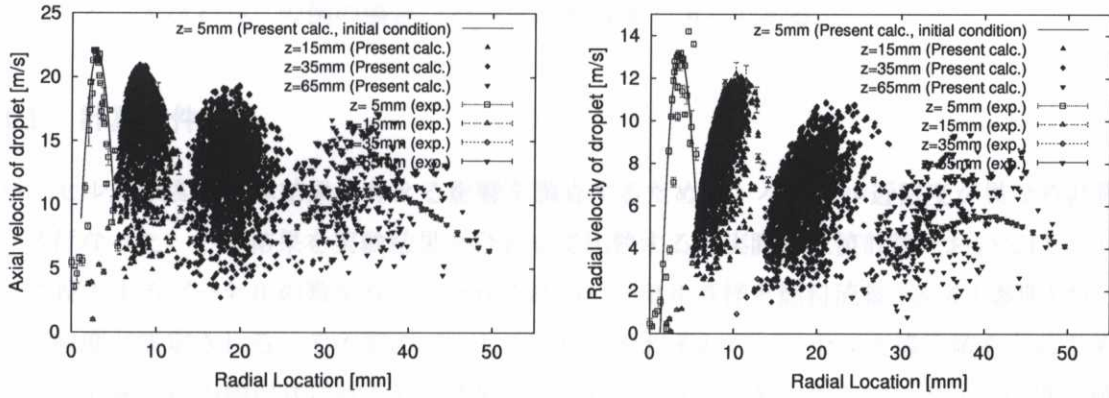


図 4.13: Scatter plots of the droplet axial (left) and radial (right) velocity on case B (solid symbols: present computation, hollow symbols: experimental results [125])

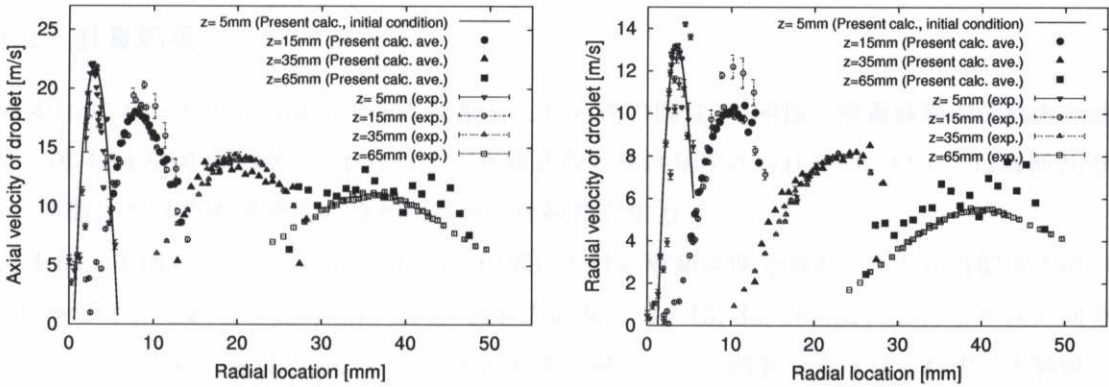


図 4.14: Radial profiles of the averaged droplet axial (left) and radial (right) velocity on case B (solid symbols: present computation, hollow symbols: experimental results [125])

4.4 パーセル近似が計算結果におよぼす影響の調査

前節の結果より、噴霧液滴の空間分布は初期の液滴粒径、位置、速度を正確に模擬した上で、適切なモデルを選択することで非常に良い予測が得られることがわかった。一方で、ここまでの計算では（明示していなかったが）流れ場中の全ての噴霧液滴を計算するのではなく、いくつかの代表粒子の計算、つまりパーセル近似計算を行っていた。このようなパーセル近似を行なった際には計算結果になんらかの影響を及ぼすことが考えられる。そこで本節ではパーセル近似が計算結果に与える影響を調査、検討する。

パーセル近似を用いてパーセル粒子を Lagrange 的に時々刻々追跡する過程では、パーセル近似に由来する特別な操作は必要としないが、あるパーセルの影響（たとえば運動量や熱交換、蒸発による燃料ガスの発生など）を Euler 的に計算している気相へ反映する際に、そのパーセルが代表した液滴の個数 n の分を、単純に n 倍し気相へと反映させる、という作業を行なう。この「一つのパーセルが n 個の液滴を代表しているときの n 」を、本研究では「パーセル近似度」と呼ぶことにする。すなわちこの例の場合、「パーセル近似度 = n 」である。

4.4.1 計算条件

パーセル近似度が計算結果に与える影響を調査するために、パーセル近似度が異なる計算を 4 ケース行なった。その結果を実験結果と合わせて比較する。実際の数値計算においては、1 time step に投入するパーセルの数を与え、それぞれのパーセル直径と燃料流量 (表 4.1 参照) からパーセル近似度が決定される。その際のパーセル直径はそれぞれのパーセルで違う値をとるため（統計的には前述の抜山棚沢式に従う）、結果的に time step 毎に異なったパーセル近似度の値となるが、計算開始から 10,000 個分のパーセルの平均値をとったものを「そのケースのパーセル近似度」としている。それぞれのケースにおけるパーセル近似度は 510.98, 111.83, 10.22, 2.03 であったが、便宜上それぞれ、パーセル近似度 500, 100, 10, 2 と表記することとする。

4.4.2 計算結果

図 4.15 にパーセル近似度を 2 として解析したときの図 4.14 同様の噴霧液滴の流れ方向速度である。図 4.14 左図と比較しても注目すべき顕著な差異は見受けられない。以下では各流れ方向 (z 方向) 位置における噴霧速度の分布を詳細に比較検討する。

図 4.16 – 4.18 に、いくつかの流れ方向位置における液滴速度分布のパーセル近似度の違いによる比較を示す。これらの図はそれぞれ、流れ方向高さ $z=15, 35, 65\text{mm}$ における半径方向分布を示している。図 4.16 を見ると、パーセル近似度の違いによる顕著な差は見られず、実験値ともよく一致している。この領域は、流れと液滴パーセルとのカップリングが比較的強く発生する箇所であるが、パーセル同士が密集して存在している、すなわちひとつの Euler セル内に存在する粒子数 (=パーセル数とパーセル近似度の積) が多いため、その差が出にくいと考えられる。

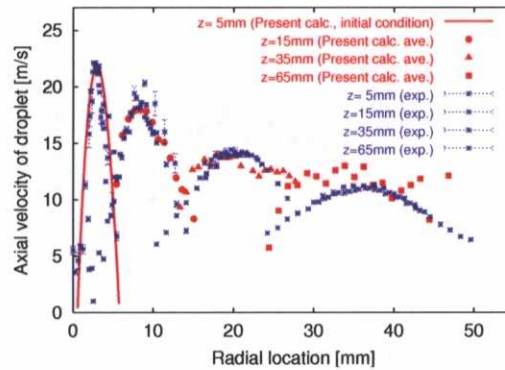


図 4.15: Radial profiles of the droplet axial velocity at various streamwise location (red symbols: present computation, blue symbols: experimental results [125])

一方、下流に位置する図 4.18 では 4.3.4 節でも述べたとおり統計平均をとるための母数が少ないことに起因するばらつきが大きい、この領域ではパーセルは分散して存在するため、パーセル近似に起因する問題が出やすい箇所と言え、それぞれのパーセルの運動量が小さくなり、流体へのカップリングが弱くなるため、それほど結果の差異として現れにくいことが推察される。

結果として、図 4.16 – 4.18 のどのグラフを見てもパーセル近似度の違いによる液滴の流れ方向速度の差異はあまり見られず、本条件下においてはパーセル表現による噴霧液滴の解析が妥当であることが伺える。ただし、液滴速度の変動強度など高次モーメントに影響を与える可能性については本解析の範疇では述べることができない。

また、図 4.16 – 4.18 全てのグラフにわたって、パーセル近似度が大きい場合、つまり計算で投入するパーセル数が少ないケースではサンプル数が少ないことに起因してプロットのばらつきが多い傾向にある。これはさらに長時間の計算をすることで解決が可能である。一方で、全てのケースにおいて、 z が大きくなる、つまりノズル下流へ行くに従ってプロットのばらつきが見られる。これは液滴が蒸発して消滅することによりサンプル数が減少することに起因しているか、それとも乱流の影響によって液滴が拡散する、つまり変動強度が大きくなっているからかは、ここでは判断できない。

計算負荷の観点から見ると、投入するパーセル数を減少させることで計算負荷を低減することが可能であるが、統計的に有意なデータを得るためには多数のパーセルを投入する必要がある、結果的に長時間の計算をしなければならない。その意味から、Euler 計算（流れ部の計算）の統計量がとれる程度の統計時間で Lagrange 計算（噴霧の計算）も十分な統計量がとれるようなパーセル数を決定する、という戦略が実用上は有効と考えられる。

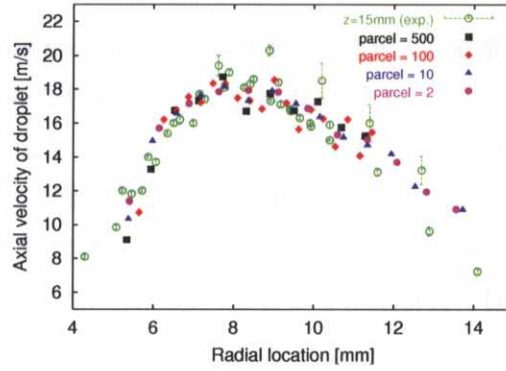


図 4.16: Radial profiles of the droplet axial velocity at $z = 15, 35\text{mm}$ (solid symbols: present computation, hollow symbol: experimental results [125])

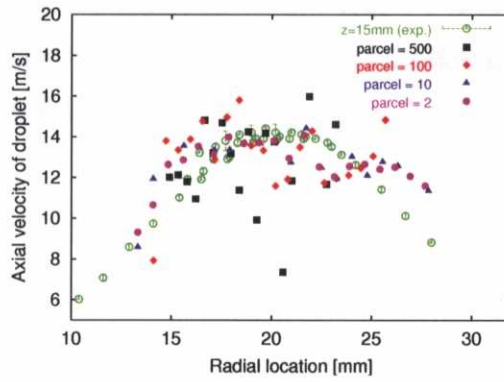


図 4.17: Radial profiles of the droplet axial velocity at $z = 35\text{mm}$ (solid symbols: present computation, hollow symbol: experimental results [125])

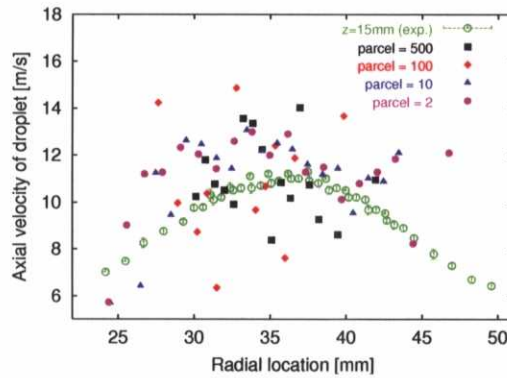


図 4.18: Radial profiles of the droplet axial velocity at $z = 65\text{mm}$ (solid symbols: present computation, hollow symbol: experimental results [125])

4.5 まとめ

乱流噴霧燃焼現象の LES 解析に向けて、乱流運動と蒸発する液滴粒子の運動についての LES 解析を行ない、旋回の影響による逆流域など従来の RANS モデルによる解析では予測の難しかった現象に対しても LES を用いることによって精度良く予測できることを示した。また、液滴粒子の運動は非定常な渦構造に強く影響を受けている様子が可視化によって観察することができた。噴霧液滴の空間分布は、初期の液滴粒径、位置、速度を正確に模擬した上で、適切なモデルを選択することで非常に良い一致を見た。これらのことから、本研究で提案したモデルや計算手法、解析プログラムの妥当性を示すことができた。

また、従来あまり検討されることのなかったパーセル近似による計算結果への影響、すなわちパーセル近似度の大きさが計算結果に与える影響を調査するために、広範にパーセル近似度を変化させて解析を行ない、解析結果同士と実験結果をあわせて比較したが、パーセル近似度の違いが計算結果に与える影響はほとんど見られず、実験値とよい一致を見た。このことから少なくとも液滴速度のような低次モーメントにおけるパーセル近似モデルの妥当性を検証できたと言える。このことから、パーセル近似度の決定については、例えば計算機資源の都合など外的な要因からパーセル近似度を調整しても差し支えない、ということも伺える。

第5章 乱流噴霧燃焼解析

本章では、前章までにおける知見を踏まえて、LESに基づく乱流噴霧燃焼場解析手法を実際の噴霧燃焼場に適用し、その評価を行なう。特に、「乱流噴霧燃焼場の温度予測とそれに関するモデルの開発」という観点から考察を行なう。

5.1 参照実験概要

本節では乱流噴霧燃焼場解析の対象とする実験体系のうち、本研究と関連が深い部分についての概要を述べる。

参照とする実験系は Karpetis & Gomez [132] による、常圧下における乱流噴霧燃焼実験である。バーナの概略図を図 5.1 に示す。噴霧は Sonotek 社製超音波インジェクタによってメタノールが噴霧され、液滴は自身の慣性と周りバーナハウジングを通過した空気によって鉛直上方へと噴出する (図 5.1)。その際の気相流量 $\dot{Q}_g (= \dot{Q}_1 + \dot{Q}_2)$ は 80L/min であり、燃料流量 \dot{m}_l は 5.1g/min である。

全空気流量のうち約 4% がインジェクタの周りを流れており (\dot{Q}_2)、これが酸化剤となってインジェクタ直後で着火される。この火炎と噴霧液滴と流入空気が縮流部を通り、直径 $D=12.7\text{mm}$ のバーナ開口部より放出される。このときのバーナ口直径 D を基準とした Reynolds 数は 21,000 であり、質量を基準とした当量比 ϕ は 0.35 である。

計測は、PDA を用いて噴霧速度を計測し、 $8\mu\text{m}$ 以下の液滴をトレーサと仮定して気相速度を算出している。また、ガス温度はラマン分光法を応用して計測している。これらの計測は軸方向に $z = 0.1D$ および $z = 0.5D \sim 6.5D$ まで $0.5D$ 間隔で、半径方向には $500\mu\text{m}$ (約 $0.04D$) 間隔で計測が実施されている。計測位置を示す模式図を図 5.2 に、実験結果を図 5.3, 5.4 に示す。

5.2 数値解析手法と計算条件

5.2.1 数値解析手法

燃焼乱流を数値解析する場合、燃焼による密度変化の寄与により、計算負荷が数倍程度に増大する。そこで、計算の高速化を図るため気相乱流部は円筒座標系で記述、離散化することにした。ただし、噴霧液滴の追跡と補間については、C 節で述べたように非構造格子だけでなく、構造格子系においても効率的に計算可能であるのでこれをそのまま適用した。

気相の支配方程式の離散化は差分法に基づく離散化を行ない、空間微分項には 2 次精度中心差

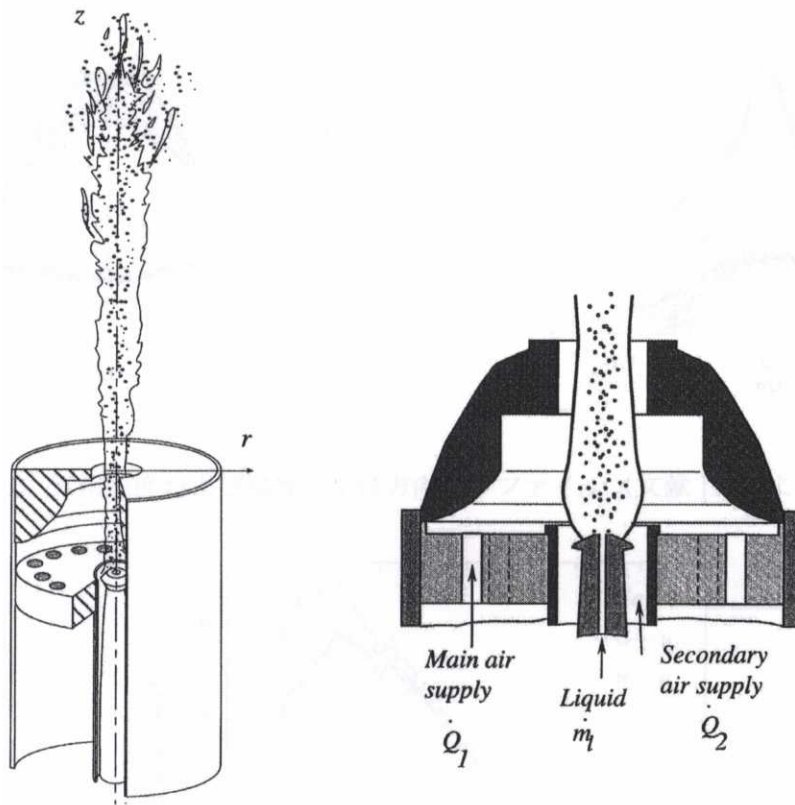


図 5.1: 参照実験における乱流噴霧燃焼場の概略図 [132]

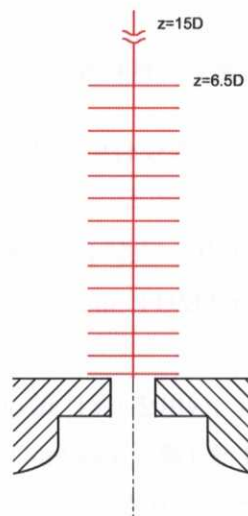


図 5.2: 計測点の模式図

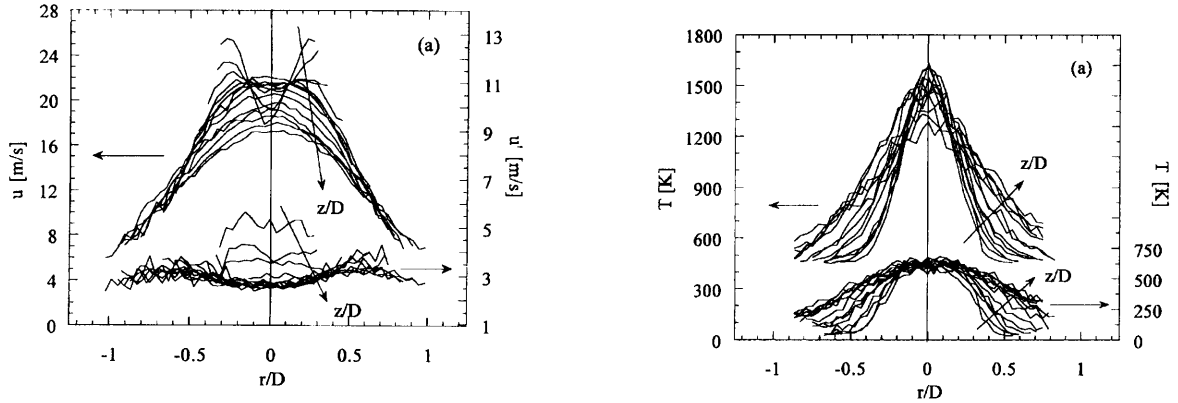


図 5.3: 気相速度および温度の半径方向プロファイル (文献 [132] より抜粋)

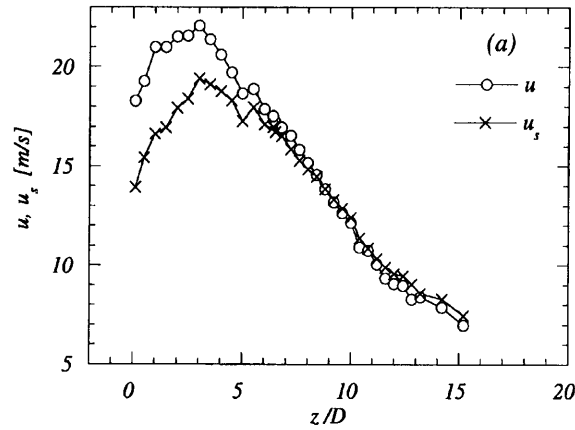


図 5.4: 中心軸上の噴霧速度 (文献 [132] より抜粋)

分で離散化する。ただし計算安定化のため、混合分率 Z の輸送方程式の移流項にのみ SMART スキーム [133] を使用した。また、時間進行スキームには、弘畑らの提案する splitted time marching method [2, 134] を用いた。また、中心軸付近において周方向格子が密となり、周方向 CFL 数の制限が厳しくなることを緩和させるために Cyclic TDMA 法 (Appendix A 参照) により陰的に取り扱うこととした。

圧力カップリングには fractional step 法 [131] を用い、圧力の Poisson 方程式は ICCG 法を用いた。ICCG 法の前処理部 (Incomplete Cholesky 分解) を Parallel Block Ordering 法 [135] によって並列計算時にも効率的に解析できるよう工夫されている。

5.2.2 計算条件

解析格子を図 5.5 に示す。計算領域は半径方向に $20D$ 、流れ方向に $30D$ とした。噴流部の速度せん断層で発生する Kelvin-Helmholts 不安定性に伴う渦構造の生成が噴流の発達に重要な役割を

果たすことから，流入部とせん断層部で良い空間分解能を得るため，格子をノズル部に密集させている．ノズル部では半径方向に 20 点とり，公比 1.05 で格子間隔を拡大させ，流れ方向にはノズル部最近傍で $0.025D$ とり，ノズルから離れるに従い，公比 1.05 で拡大させている．このときの計算点は，流れ方向に 301 点，半径方向に 65 点，周方向に 36 点となり，総格子点数はおよそ 70 万点である．

境界条件として，側面においては速度：free-slip 条件， Z ：勾配 0 を与え，流出部には対流流出条件を課した．中心軸特異点の境界条件については，Fukagata ら [136] の提案する手法を採用した．流入条件については次節で詳細に述べる．

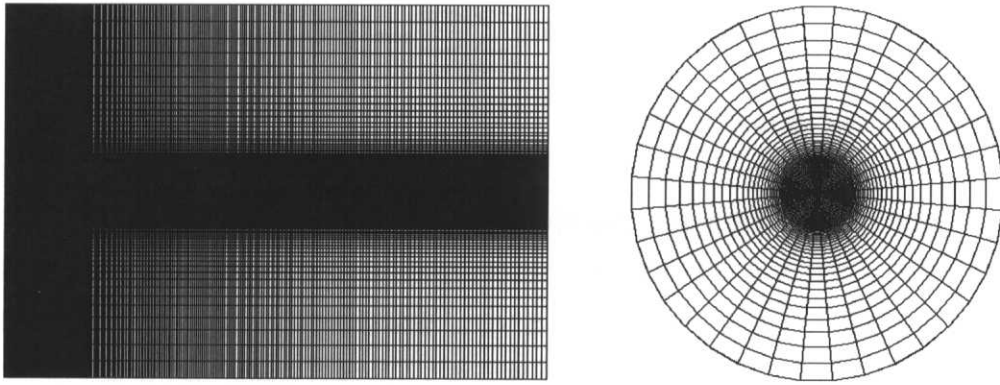


図 5.5: 解析格子

5.2.3 流入条件の決定

解析領域内への気相の流入条件は，図 5.3 で示した実験で得られたノズル最近傍である $0.1D$ の流速の値を時間平均流入速度 u_{exp} とし，さらに以下で定義される変動モード u_m を付加した．

$$u = u_{\text{exp}} + u_m \quad (5.2.1)$$

$$u_m = 0.001 u_{\text{max}} \sin(m\theta - 2\pi f t) \quad (5.2.2)$$

として与えた．ここで， u_{max} は実験における最大流入速度で， θ は周方向角度， f は変動周波数成分であり，村田 [137] が非燃焼噴流場で最適化した， $St_n = 0.25, 0.65, 1.30$ に対応する周波数成分を重畳して導入した．つまり，

$$u_m = 0.001 u_{\text{max}} \sum_{n=1}^3 \sin(m\theta - 2\pi f_n t) \quad (5.2.3)$$

ここで,

$$St_n = \frac{f_n D}{u_{\max}} \quad (5.2.4)$$

である. また m はモード番号であり, 村田 [137], Cohen ら [138] に従い, $m = 0 \sim 6$ とした. つまり,

$$u_m = 0.001 u_{\max} \sum_{n=1}^3 \sum_{m=0}^6 \sin(m\theta - 2\pi f_n t) \quad (5.2.5)$$

ただし, これだけでは近接モード成分同士の beat(うなり) 現象が発生し, 結果的に局所的に極端に速度の大きい箇所が現われ計算の破綻の原因となり得るので, 本研究ではこれに位相成分 ϕ_m を加え beat の発生を抑えるよう調整した.

$$u_m = 0.001 u_{\max} \sum_{n=1}^3 \sum_{m=0}^6 \sin(m\theta + \phi_m - 2\pi f_n t) \quad (5.2.6)$$

なお, ϕ_m はあくまで位相成分を加えるだけなので, これによって数値解の本質的, 統計的な性質が変化することはない.

混合分率 Z の流入条件についてはノズル以前での液滴の予蒸発量を見積り, 実験で得られている流入温度を用いて flamelet library にあてはめることで流入面の Z の分布を算出する. このとき, 温度の flame library は上に凸の形状をしている (2.4.3 節参照) ため, ある温度を与えたときにそれに対応する Z は, 量論混合比 Z_{st} である場合を除けば Z_A, Z_B の 2 つをとり得る. そして今回の温度条件では, $Z_A < Z_{st}(= 0.219) < Z_B$ となり, [132, p. 15] の記述より今回の噴霧火炎の全ての箇所では飽和蒸気濃度 Z_{st} に達していないことから, Z_A をもって流入面における混合分率の分布とした.

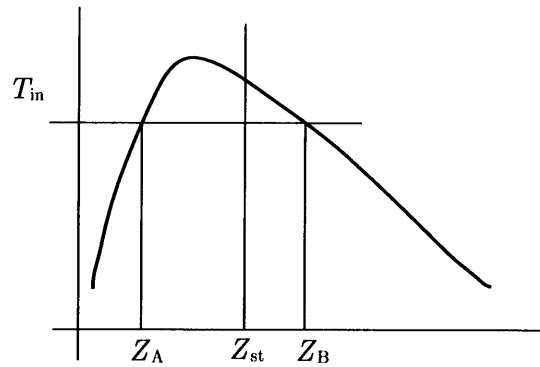


図 5.6: 流入部における混合分率 Z の決定

液滴の初期位置は, 実験値より中心軸を基準に半径方向位置は $\sigma = 0.15D$ に従う正規乱数で, 周方向位置は一様乱数で与えた. また, 初期速度については, 個々の液滴の半径方向位置を決定した後, 実験値の速度分布より算出している.

5.3 解析結果

5.3.1 非燃焼時流れ解析

乱流噴霧燃焼解析を実施する上で、まず非燃焼流れ場を解析し、十分発達した状態を生成した後、噴霧燃焼解析を開始した。燃焼解析の初期条件として用いた非燃焼流れの代表的な瞬時場を図 5.7 に示す。この図より、流入後 2-3D 下流でストローハル数に対応する速度変動が現れており、さらに下流ではポテンシャルコアの崩壊後の乱れた流れの様子が見て取れる。

図 5.8 には、図 5.7 で示した流れ方向速度に $\nabla^2 p$ で表現される 3 次元渦構造を重ね合わせたものを示す。渦輪構造が速度変動に対応する位置で見られ、それが急激に崩壊、拡散している様子が見て取れる。また、下流部に着目すると、崩壊した渦構造が再構成されている様子も見られる。

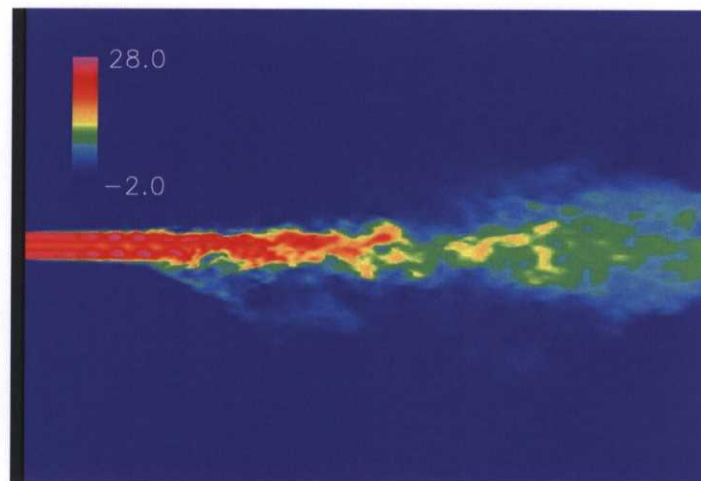


図 5.7: 非燃焼時における流れ方向速度（瞬時場）

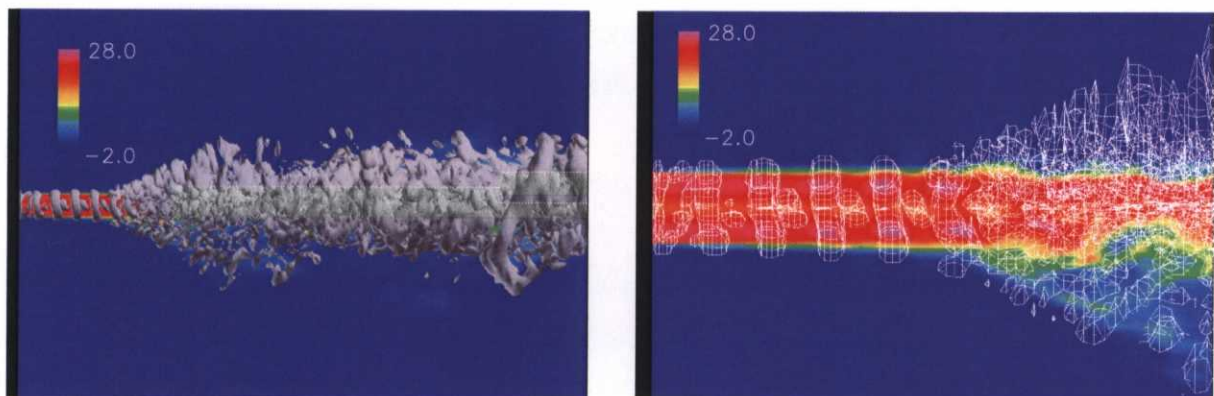


図 5.8: 噴流における渦構造 (左：全体図，右：流入部近傍拡大図)

図 5.8 右図は流入ノズル近傍の拡大図であり、 $\nabla^2 p$ の等値面をワイヤフレーム表示している。渦輪は局所的な高速領域と低速領域に分布し、噴流外側だけでなく、内側にも存在している。これは、流入速度分布が双峰状の形状をしていることに起因するせん断層が生成されるためである。

次に 図 5.8 で得られた渦構造に以下の式 (5.3.1) で定義される無次元ヘリシティ H で色づけしたものを図 5.9 に示す。

$$H = \frac{\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{u}}{|\boldsymbol{\omega}| \cdot |\boldsymbol{u}|} \quad (5.3.1)$$

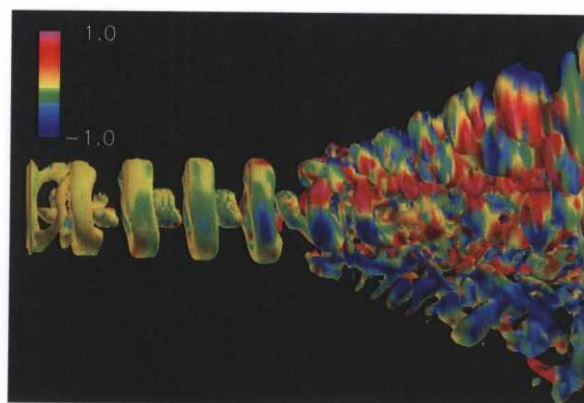


図 5.9: 噴流における渦構造 (無次元ヘリシティ H で色づけ)

この図より、渦輪上で $H \approx 0$ となっているのに対し、渦構造の崩壊と共に H が 1 もしくは -1 の値を持ち、このことより縦渦構造が生成されていることが見て取れる。渦構造の崩壊にはこのような流れ方向に軸を持つ縦渦構造が重要な役割を担うことが指摘 [139] されており、本解析においても渦構造のダイナミクスを表現し得ることがわかる。

5.3.2 乱流噴霧燃焼場解析

図 5.10 に噴霧燃焼解析で得られた代表的な流れ場の様子を示す。噴霧は (時間方向に) 均質に投入されるが、投入後 5D 程度下流では粗密な構造ができている。これは、局所渦によってできる粗密構造であると考えられる。

図 5.11 に統計平均をとったときの気相の流れ方向速度の様子を示す。双峰状に流入した流れが拡散によって下流で合流し、一つの噴流を形成していることが見て取れる。図 5.12 に流れ方向のいくつかの断面でとった気相速度分布を示す。(解析結果においては時間方向と周方向に平均をとっているため、図においては $r/D = 0$ を基準に鏡面コピーしている。)

この図より、双峰状の分布から両者が合体し、通常の噴流同様の釣鐘上の分布に遷移する様子をとらえることができたが、合流する位置については実験データとの差異が見られる。これは、本解析の燃焼解析ではその流入変動に非燃焼解析に最適化された値を用いたが、噴霧燃焼場において

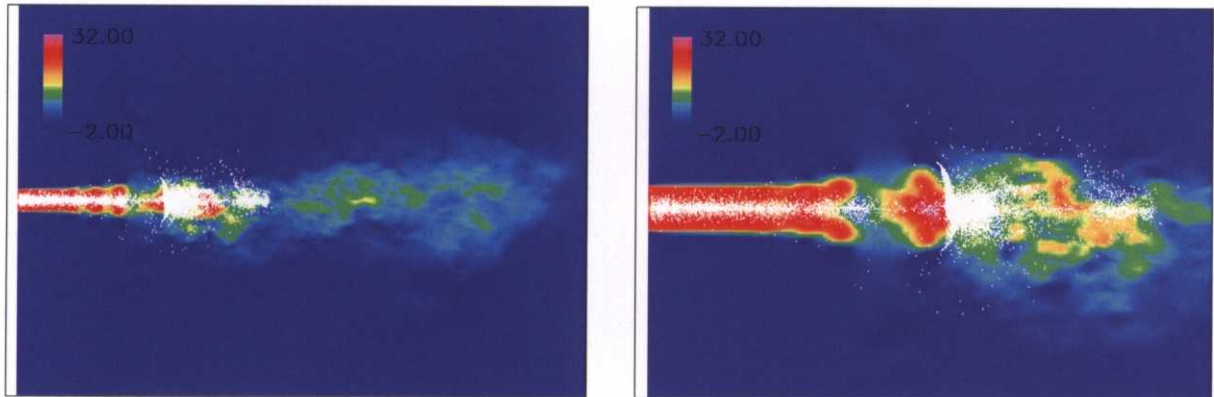


図 5.10: 噴霧燃焼場（瞬時場）

は噴霧の存在による乱流変調や燃焼のダイナミクスによる乱流変調が起こることが推察され、この影響が加味されていないことが原因して合流が遅れたことが疑われる。

図 5.13 に中心軸上における流れ方向平均速度を実験値と比較したものを示す。双峰状の高速部の拡散が小さいことに起因して、流入近傍の加速があまりなされていない。同様にポテンシャルコア領域が長く見積もられたことに起因して、 $x/D = 7$ 以上で実験値に比べ速度が大きくなっているが、その傾きはほぼ一致している。

また、解析値では局所的な凹凸が見られるが、これは統計時間が短いことに起因するものである。（通常の統計平均操作においては周方向平均も同時に行なうが、中心軸上ではこれができないため、よりたくさんの統計平均時間を必要とする）これはさらに統計時間を積み上げることで解決する問題であり、またこのことが上記の考察には影響しないため、統計時間が短いことについては問題とならない。

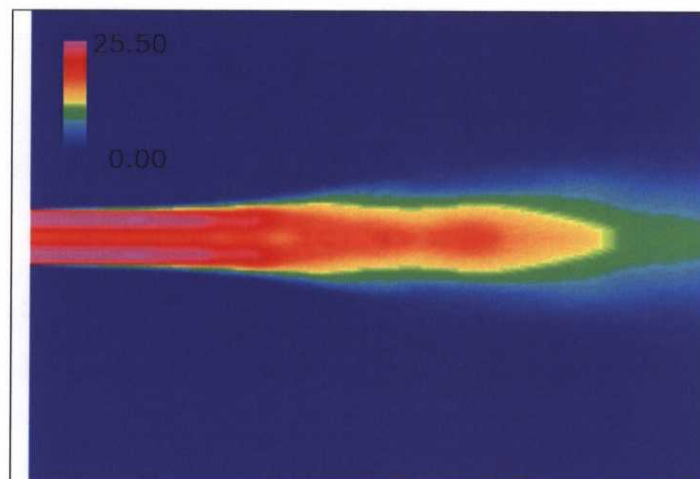


図 5.11: 流れ方向平均速度分布

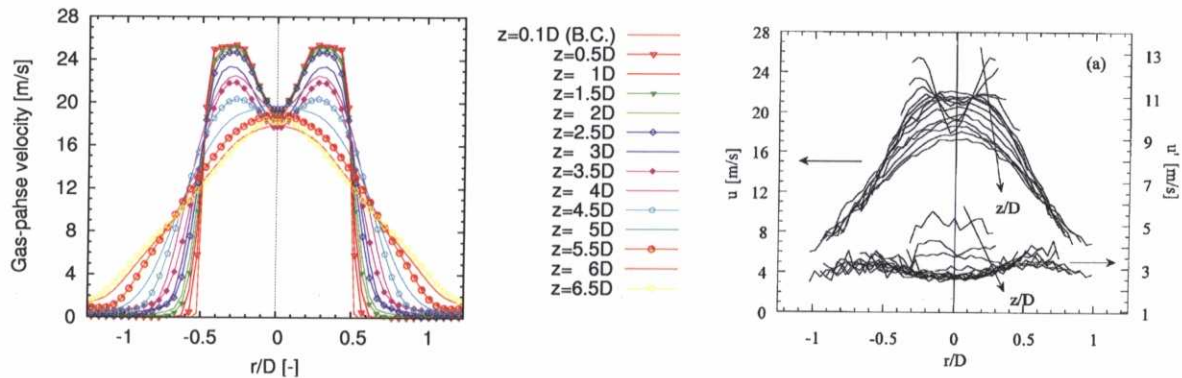


図 5.12: 平均気相速度分布の比較 (左: 解析値, 右: 実験値 (図 5.3 と同図))

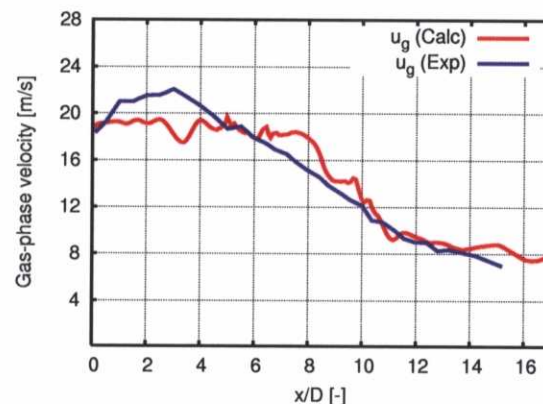


図 5.13: 中心軸上における平均気相速度分布の比較

5.3.3 燃焼場における気相温度分布

図 5.14 に平均混合分率分布の可視化結果を示す. この図より, 噴霧が多く存在する中心軸近傍において, 液滴の蒸発により燃料濃度が濃くなっていることが確認できる. 中心軸上に注目すると, 流入部近傍に比べて $z = 1 \sim 2D$ でより濃くなっている, すなわち蒸発量が増えている. これは後の図 5.18 でも示すとおり, 噴霧が加速され, 蒸発が活発に行なわれたことに起因する.

図 5.15 には平均温度分布の可視化結果を示す. 図 5.6 でも述べたとおり, 今回の条件においては, 平均混合分率は量論混合比以下であるため, 温度は混合分率の単調増加関数であり, 図 5.14 と同様のプロットとなる. 同様に, 濃度が高くなっている箇所でも温度も高くなり, このことも先に述べた液滴の蒸発促進に寄与していると推察される.

図 5.16 に気相温度の半径方向分布を示す. (解析結果においては時間方向と周方向に平均をとっているため, 図においては $r/D = 0$ を基準に鏡面コピーしている) この図より, 気相温度分布が下流に行くに従い拡散している様子が捉えられていることがわかる. また, 温度の急激な減少が

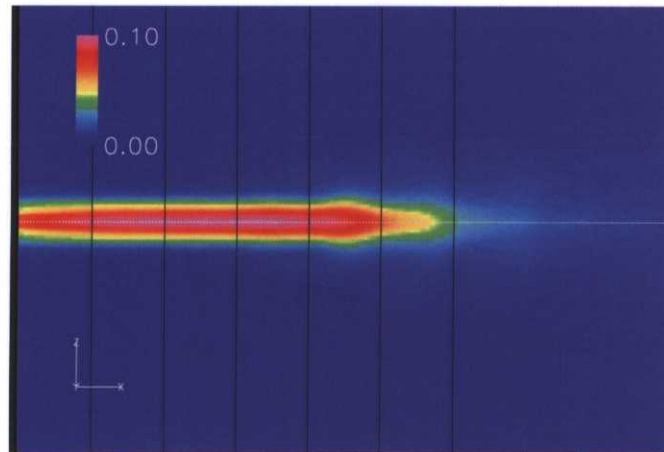


図 5.14: 平均混合分率分布

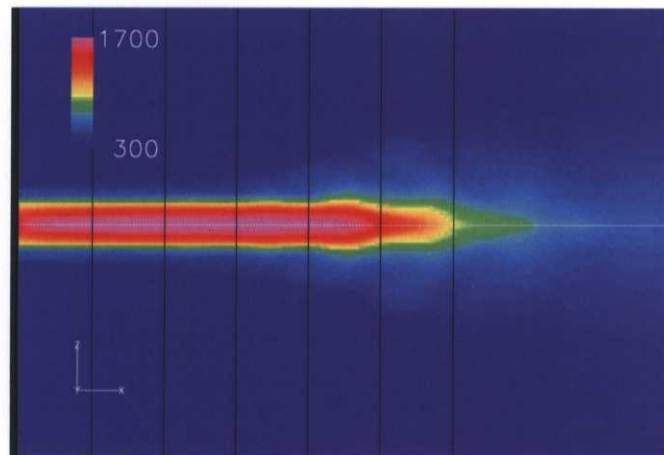


図 5.15: 平均温度分布

5~6 D で見られるが、これはポテンシャルコアの崩壊によって周囲空気との混合が活発に行なわれた結果である。定量的な予測精度としては、先の速度予測の議論で述べたとおり、せん断層の拡散が遅い（少ない）ことに起因して、温度の拡がりも同様に少なく見積もられている。

図 5.17 に 3.4.2 節で提案した Lagrange 型エネルギーカップリングモデルの使用/未使用による結果の差異をあらわす。図中、左側にはカップリングを施したもの、右側にはカップリングを施していない結果を示している。なお、右図は左図の中心軸付近を拡大したものである。この図から、本カップリングモデルにおいて、噴霧液滴への熱伝達と蒸発潜熱による火炎の冷却効果が認められ、噴霧濃度の濃い流入ノズル近傍および中心軸においてその効果が大きく見られる。このため、火炎温度がより現実に近い分布を示すようになり、本カップリングモデルの有効性を示すことができたと言える。

その一方で、本研究で提案した Lagrange 型エネルギーカップリングモデルでは、冷却された熱が移流する効果は表現することができないため、噴霧濃度の薄くなるノズルから離れた下流部において

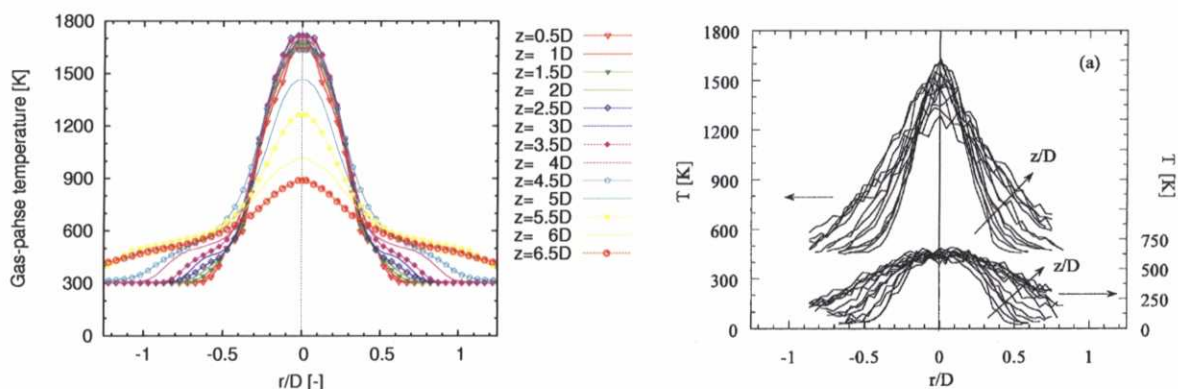


図 5.16: 平均温度分布の比較 (左: 解析値, 右: 実験値 (図 5.3 と同図))

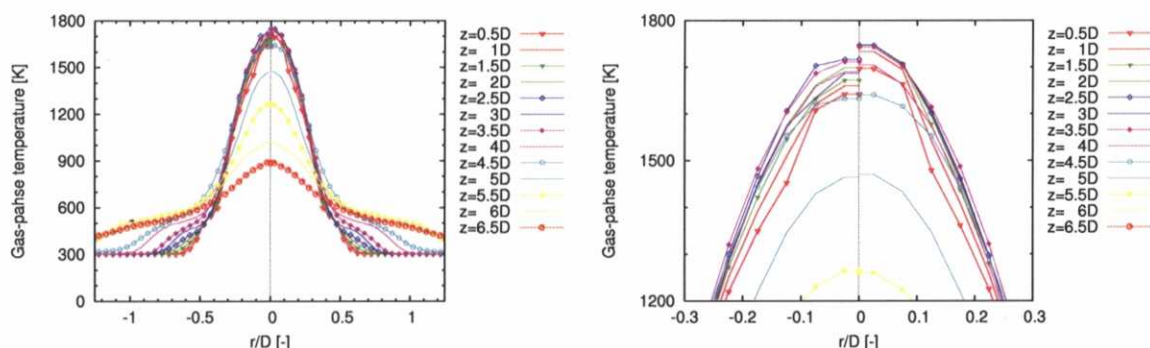


図 5.17: Lagrange 型エネルギーカップリングモデルの影響 (右図は左図の中心付近を拡大したもの)

は、冷却効果が減少し、上流部から相対的に見ると温度が上がっているように見える結果となってしまったが、この事は既に 3.4 で議論し、想定内の結果であり、この問題の解決には multi-parameter flamelet model の導入などさらなる物理的考察に基づくモデリングが必要となる。

5.3.4 液滴速度分布

中心軸上における噴霧速度 u_d を計算と実験とで比較したものを図 5.18 に示す。この図から、投入された液滴が周りの気相成分によって加速される過程を正確に予測できていることがわかる。これは、抗力モデル及び蒸発モデルが適切に表現されているからである。また、本解析においては、気相-液相間の相互干渉を GS 成分の two-way coupling で表現したが、そのモデル化が妥当であることも言える。なお、本体系における噴霧現象は 3.3 節で述べた regime diagram に照らし合わせても two-way coupling 領域であるため、その面からも本解析でも採用した two-way coupling が妥当なモデルであることを裏付けられる。

また、下流部においては実験同様に噴霧液滴は気相に追従している。この領域は one-way coupling 領域であり、この regime に対しても本解析は実験とよい一致を示すことがわかる。

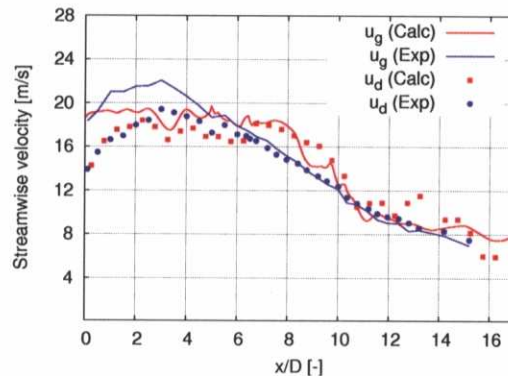


図 5.18: 中心軸上における気相速度と噴霧速度の実験値との比較

図 5.19 に実験で得られた中心軸上における液滴粒径の PDF 分布を示す。この図より、PDF 分布は x/D によって大きく変化しない、つまり平均粒径も変化しないことが見て取れる。これは群燃焼状態になっている（ただし、どの regime に相当するかの判定は難しい）ことを示唆している。一方、図 5.20 に示す計算値では、下流に行くに従い平均粒径は小さくなっていく。これはモデルの特性に由来するものであり、群燃焼状態を模擬できるとは言い難い。これらの図のような粒径分布の推移、を正確に予測するためには、この群燃焼状態を模擬できるモデルの開発の必要性があると言えるが、その一方で群燃焼状態については未知の部分も多く、そのモデル化には、実験的・理論的な広範かつ詳細な把握が避けることのできない重要な課題である。

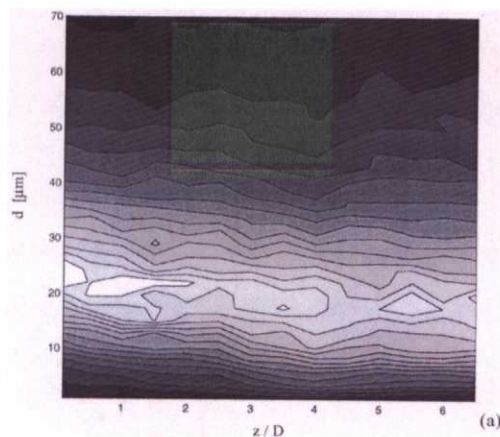


図 5.19: 中心軸上における液滴粒径の PDF 分布 [132]

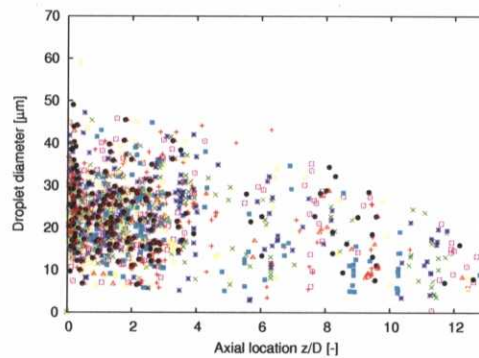


図 5.20: 中心軸近傍における液滴粒径分布

5.4 まとめ

本章では、前章までにおける知見を踏まえて LES に基づく乱流噴霧燃焼場解析手法を構築し、実際の乱流噴霧燃焼場に適用し、特に、「乱流噴霧燃焼場の温度予測とそれに関するモデルの開発」という観点からその評価を行なった。その結果、以下のような知見が得られた。

非燃焼噴流解析の結果より、縦渦構造と渦崩壊の関連性のような渦構造のダイナミクスを表現できることがわかった。この結果を元に噴霧燃焼解析を行ない、局所渦によってできる液滴粒子の粗密構造が見られた。

燃焼流れ速度分布においては、双峰状の分布から両者が干渉し、通常の噴流同様の釣鐘上の分布に遷移する様子をとらえることができたが、干渉する位置については実験データとの差異が見られた。これは、本解析の流入変動に非燃焼場で最適化された値を用いたことが原因と推察された。その際の $St=0.25$ に相当する側帯波周波数は流れ場によって変化するものであり、非燃焼場における側帯波周波数が今回の乱流噴霧燃焼場にそのまま適当可能であるかは疑問であり、また、この側帯波周波数やその強度の選択により、平均速度成分の予測は大きく変化する [137] ため、さらなる予測精度向上のためには、その乱流噴霧燃焼場における値を、詳細な実験によって見つけ出すか、もしくは数値計算的に最適値を探し出すことが必要となる。しかしながら、噴霧燃焼場においては噴霧の存在による乱流変調や燃焼のダイナミクスによる乱流変調が起こることから、側帯波周波数やその強度を実験的に知ることは困難を極めることが予想され、その点では数値解析による手法が現実的であろう。

気相温度分布においては、温度分布が下流において拡散している過程をとらえることができたが、定量予測としては、せん断層の拡散が遅い（少ない）ことに起因して、温度の拡がりも同様に少なく見積もられる結果となった。そして、本研究で提案した、Lagrange 型エネルギーカップリングモデルの導入により、噴霧の蒸発による火炎の冷却効果が導入され、本カップリングモデル導入前と比較して、実験値とより整合する結果を得た。

その一方で、3.4 節でも議論したとおり、このモデルでは冷却された熱が移流する効果は表現できないため、流入ノズルから離れた下流部における温度予測は期待されるほどのものではなかつ

た。この領域における予測精度を上げるためには、multi-parameter flamelet model の適用など、さらなる物理モデルの導入が必要となる。

噴霧速度分布においては、気相成分による加速過程を正確に予測できた、これは、抗力モデル及び蒸発モデルが適切に表現されているからである。また、本解析においては、気相－液相間の相互干渉を GS 成分の two-way coupling で表現したが、そのモデルの妥当性についても解析結果と regime diagram 両面から検証できた。

液滴粒径の空間分布の比較より、モデルの特性に由来して、実験で起こっている群燃焼状態を表現できていない。しかしながら、パーセルひとつひとつを一個の粒子群と仮定し、一個の粒子群の群燃焼状態は変化しないという仮定を置くことで、本解析が群燃焼状態を模擬している、という仮説をおくこともできるであろう。このような粒径分布の推移を正確に予測するためには、群燃焼状態を模擬できるモデルの開発の必要性があると言えるが、その一方で群燃焼状態については未知の部分も多く、そのモデル化には、実験的・理論的な広範かつ詳細な把握が避けることのできない重要な課題である。

以上より、ノズル近傍の混合過程の定量的な予測精度には検討の余地を残す結果となったが、その予測精度向上が十分可能であり、それを達成することで温度分布の予測精度も向上することが容易に推定できることから、本解析手法を用いることで乱流噴霧燃焼場中の気相速度・温度分布（乱流火炎温度分布）や噴霧液滴の挙動、蒸発の様子といった乱流噴霧燃焼の発達過程の全容とそのダイナミクスを捉えることができたと言える。

第6章 結論

本研究の目的は、実用工学問題としての乱流噴霧燃焼問題の予測手法の構築を目指し、流体力学の観点から乱流噴霧燃焼現象へのアプローチとして燃焼場における乱流火炎の流体力学的挙動と乱流中の噴霧の挙動を捉えることに主眼を置き、Euler/Lagrange 法と flamelet approach に基づく乱流噴霧燃焼 LES 解析の手法の開発と、その予測精度の検証を通して、その改良法を提案することであった。

第一章において、研究の背景と乱流噴霧燃焼解析における過去の研究を概観し、本研究の目的を述べることで、本研究の位置づけを明確にした。

第二章において、乱流拡散燃焼の数値解析手法として今日までに提案されている気相燃焼モデルを概観し、本研究で採用した、拡散火炎 flamelet-LES モデルとしての conserved scalar approach に基づく laminar flamelet model と、 β -PDF 法に基づく乱流燃焼モデルの定式化を示した。

第三章においては、乱流噴霧燃焼の数値解析手法として Euler/Lagrange 法による噴霧液滴の取扱いと、噴霧燃焼理論の中核をなす群燃焼理論について概観し、Lagrange 的手法に基づく DDM モデル、そしてそのサブモデルとしての蒸発モデル、パーセル近似、粒径分布モデル、気相解析部分とのカップリングの定式化を示した。特に、噴霧と気相の熱のカップリングについては、従来提案されていた spray flamelet model の問題点を指摘し、このことを踏まえた上で spray flamelet model の持つ問題点を解消し得る multi-parameter flamelet model を提案し、過去に提案された弘畑のモデル [2] や、Pitsch ら [124] によるモデルも multi-parameter flamelet model に包含されることを示した。しかしながら multi-parameter flamelet model は、現状では計算機資源などの観点から実用問題への適用は困難であるため、いくつかの仮定に基づく限定的状態に対応する Lagrange 型エネルギーカップリングモデルを提案した。

第四章においては、第二、三章で示した解析手法の一部を用いて、蒸発噴霧を含んだ乱流解析への適用とその予測精度の検証を行なった。その結果、旋回による逆流域生成など従来の RANS モデルによる解析では予測の難しかった現象に対しても LES を用いることによって精度良く予測できることを示した。また、液滴粒子の運動は非定常な渦構造に強く影響を受けている様子が可視化によって観察することができた。その噴霧液滴の空間分布は、初期の液滴粒径、位置、速度を正確に模擬した上で、適切なモデルを選択することで実験値と非常に良い一致を見た。これらのことから、本研究で提案したモデルや計算手法、解析プログラムの妥当性を示すことができた。また、これまであまり検討されることの少なかったパーセル近似による計算結果への影響を詳細に検討したところ、パーセル近似は計算結果に致命的な影響を及ぼすことはなく、パーセル近似

の妥当性を確認することができた。

第五章においては、上記の知見を元に実験室レベルの乱流噴霧燃焼場への LES 解析の適用を行なった。その結果、燃焼流れ速度分布においては、ダイナミクスの定性的な一致は見られたものの、定量比較では実験データとの差異が見られた。これは、流入変動成分の導入方法を再検討することでさらなる予測精度の向上が見込まれる。

気相温度分布においては、本研究で提案した、Lagrange 型エネルギーカップリングモデルの導入により、噴霧の蒸発による火炎の冷却効果が導入され、本カップリングモデル導入前と比較して、実験値とより整合する結果を得た。また、従来の RANS モデルによる予測と比較して気相温度場の予測精度が向上していることが伺えた。その一方で、3.4 節でも議論したとおり、このモデルでは冷却された熱が移流する効果は表現できないため、流入ノズルから離れた下流部における温度予測は期待されるほどのものではなかった。この領域における予測精度を上げるためには、multi-parameter flamelet model の適用など、さらなる物理モデルの導入が必要となる。

噴霧速度分布において、気相成分による加速過程を定量的にも正確に予測することができた、これは、抗力モデル及び蒸発モデルが適切に表現されているからである。また、本解析においては、気相－液相間の相互干渉を GS 成分の two-way coupling で表現したが、そのモデルの妥当性についても解析結果と regime diagram 両面から検証できた。

液滴粒径の空間分布から、モデルの特性に由来して、実験で起こっているであろう群燃焼状態を表現できなかった。しかしながら、パーセルひとつひとつを一個の粒子群と仮定し、一個の粒子群の群燃焼状態は変化しないという仮定を置くことで、本解析が群燃焼状態を模擬している、という仮説もあり得る。また、このような粒径分布の推移を正確に予測するためには、群燃焼状態を模擬できるモデルの開発の必要性があると言えるが、その一方で群燃焼状態については未知の部分も多く、そのモデル化には、実験的・理論的な広範かつ詳細な把握が避けることのできない重要な課題である。

以上より、乱流噴霧燃焼場の解析を行なった結果、ノズル近傍の混合過程の定量的な予測精度には検討の余地を残す結果となったが、本解析手法を用いることで、気相温度（乱流火炎温度）分布や乱流噴霧燃焼の発達過程の全容は定性的に捉えられることができ、個々の噴霧の挙動、運動量交換や液滴の蒸発など噴霧燃焼に関わるダイナミクスを正確に表現できることがわかった。また、本研究の目的に掲げている気相温度場の予測精度の向上、という観点においても、従来の RANS モデルによる予測 [7] と比較して予測精度は向上することが伺えた。

本研究において噴霧計算の初期条件となり得る噴霧の性状が詳細に把握できているものを対象として解析を行なった結果、本研究で採用した解析手法を用いることで、噴霧の挙動、蒸発速度などを精度良く予測できることを示した。このことから、噴霧の生成を実験的もしくは噴霧生成モデルによつて的確に表現できたとすれば、それ以降の物理現象については予測可能となるといえる。インジェクタ内部やそのごく近傍で発生している噴霧の生成・微粒化については本研究の議論の対象から外したが、インジェクタの新規開発などの理由により、その詳細性能が不明である場合などにおいては微粒化モデルや分裂モデルといった噴霧生成モデルが非常に重

要な問題となり得る。しかしこれらのモデルについては経験的かつ ad hoc なモデルが多く、現状ではまだまだ検討の余地が残っているチャレンジングな問題である。

以上の成果から、本研究で提案した乱流噴霧燃焼の LES 解析手法はガスタービン燃焼器や工業用燃焼炉といった「連続燃焼形態」に応用可能であることを示すことができた。本解析手法は基礎となる LES の特徴を考えれば、SI エンジンやディーゼルエンジンといった「間欠燃焼形態」にもほぼ変更を加えることなく適用可能であり、連続燃焼形態と比較して、より強い非定常性が見られるこのような燃焼場では強い威力を発揮することが期待される。

本研究が、より詳細な燃焼器内部現象の再現と予測、そしてそれによる迅速かつ的確な高効率・環境負荷低減燃焼器開発への一助となれば望外の喜びである。