噴霧燃焼流の LES における相間干渉項割付け方法のモデリング*

馬 場 雄 也^{*1}, 赤 松 史 光^{*1}Modeling of Partition Method for Phase Coupling Terms in
Large Eddy Simulation of Spray CombustionYuya BABA^{*2} and Fumiteru AKAMATSU^{*2} Department of Mechanical Engineering, Osaka University,
2-1 Yamada-Oka, Suita-shi, Osaka, 565-0871 Japan

Large eddy simulation of spray combustion was performed with Dynamic SGS model for compressible turbulence. SGS model of combustion reaction was also introduced to take account for contribution of SGS components to combustion reaction rate term. The SGS models were evaluated by comparing results of LES with DNS, which governing equations were not filtered and which had high resolution. A partition method for phase coupling terms and two types methods for partition of gaseous phase variables were applied to compare the results of simulations which have different grid resolutions. The results of LES were greatly improved with the increase of spatial resolution and the contribution of SGS stress decreased with increase of the resolution. However, LES with coarse resolution also could show good agreement with the DNS, in spite of the low resolution. On the other hand, the SGS diffusivity increased with the increase of spatial resolution. From the above results, we could conclude that the proposed partition method for phase coupling terms and partition type a were appropriate for LES of spray combustion.

Key Words: Liquid Fuel, Combustion, Multi-phase Flow, Large Eddy Simulation, Grid Resolution, SGS Contributions, Phase Coupling Term

1. 緒 言

LES (Large eddy simulation) は解像できない SGS (Subgrid-scale) 成分を付加項としてモデル化することで DNS (Direct numerical simulation) で計算できる空間スケールよりも大きな空間スケールを計算可能とする数値計算法である。燃焼分野においても LES の適用例は多く見られるようになったが、計算負荷を軽減させる目的から、混合分率とスカラー消散率を用いて火炎を記述し、非圧縮性流体解析をそのまま流用することが多い。しかしながら噴霧燃焼流は燃焼反応によって引き起こされる数多くの素過程を含む複雑な流れであるので、大幅なモデル化を行った場合、より複雑な問題に対応することができなくなる。このため、複雑な問題である噴霧燃焼流に非圧縮性流体解析を流用することは好ましくなく、本来は反応性および圧縮性流体を前提とした DNS の支配方程式を直接 LES に拡張する必要がある。

混相燃焼流の LES は未だ例が少ない。これまでの

研究には Glaze ら⁽¹⁾, Kurose ら⁽²⁾ の研究があげられるが、モデル化に伴う問題点については未検討である。一方で、DNS の支配方程式をフィルター化し、噴霧燃焼流の LES に用いた場合の SGS 成分の影響は未知である。LES では格子解像度がどのように変化しても、妥当な結果を得ることができるはずであるが、SGS 成分の影響が未知であるため、格子解像度をどのように設定すべきかは明確ではない。本稿ではまず、格子解像度および SGS 成分の影響と関係する可能性が高い相間干渉項の割付け方法を提案し、様々な格子解像度で LES を行うことで提案した割付け方法の妥当性を示すことを目的とする。また、SGS 成分の影響が割付け方法および格子解像度によってどのように変化するかについての検討を行う。

記 号

ρ	密度	c_p	定圧比熱
u_i	速度	c_v	定積比熱
T	温度	p	圧力
μ	粘性係数	λ	熱伝導率
R	一般ガス定数	v_i	液滴速度

* 原稿受付 2005 年 7 月 19 日。

^{*1} 正員, 大阪大学大学院工学研究科 (〒565-0871 吹田市山田丘 2-1)。

E-mail: babay@combu.mech.eng.osaka-u.ac.jp

T_d	液滴温度	m_d	液滴質量
X_i	液滴位置の座標	D	液滴粒径
Re	レイノルズ数	M	マッハ数
Pr	プラントル数	Sc	シュミット数
Nu	ヌッセルト数	Sh	シャウウッド数
Y_k	化学種質量分率	W_k	分子量
$V_{k,j}$	拡散速度	h_k	エンタルピー
ω_k	燃焼反応速度	γ	比熱比

2. 数 値 計 算 法

本稿では便宜上、フィルターをかけない流れを計算する場合を DNS、フィルターをかけた流れを計算する場合を LES と表記する。

2.1 気相の支配方程式 DNS では以下のフィルターをかけない質量保存式、圧縮性 Navier-Stokes 式、エネルギー保存式、化学種の質量分率保存式を解く。エネルギー保存式は物性値を直接算出するために温度表示としている⁽³⁾。また、数値解法の都合上、以下の支配方程式は非保存形 (Non-conservative form) としている。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_j \frac{\partial \rho}{\partial x_j} = -\rho \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + S_\rho, \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + S_{u_i}, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \rho c_v \frac{\partial T}{\partial t} + \rho c_v u_j \frac{\partial T}{\partial x_j} = & -p \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) \\ & + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \sum_{k=1}^N \left(c_{p,k} \frac{\partial T}{\partial x_j} + TR/W_k \frac{\partial}{\partial x_j} \right) (\rho Y_k V_{k,j}) \\ & + \sum_{k=1}^N \omega_k (TR/W_k - h_k) + S_T, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial (\rho Y_k V_{k,j})}{\partial x_j} + \omega_k + S_{Y_k}, \quad (4)$$

ここでは化学種として $C_{10}H_{22}$ (デカン), H_2O , CO_2 , O_2 および N_2 を考慮する。支配方程式中の輸送係数および熱力学物性は CHEMKIN⁽⁴⁾⁽⁵⁾ によって算出することができる。各保存式の右辺末項 S は液相との間の相間干渉項である。 σ_{ij} は粘性応力テンソルで、

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad (5)$$

である。以上の支配方程式の差分化には原則として 4 次精度中心差分法を用いる⁽⁶⁾⁽⁷⁾。保存形の支配方程式にフィルターをかけることで LES で解く支配方程式群が導かれ、SGS 項が現れる。ここではフィルター化

を施した後の方程式を非保存形に変形し、支配的な項のみを考慮した以下の式を解く。

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j} = -\bar{\rho} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} + S_\rho, \quad (6)$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \bar{\rho} \bar{u}_j \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + S_{u_i}, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \bar{c}_v \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + \bar{\rho} \bar{c}_v \bar{u}_j \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} = & -\bar{p} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\lambda} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} \right) \\ & - \bar{c}_v \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \bar{\sigma}_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \\ & - \sum_{k=1}^N \left(\bar{c}_{p,k} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j} + \bar{T} R/W_k \frac{\partial}{\partial x_j} \right) (\bar{\rho} \bar{Y}_k \bar{V}_{k,j}) \\ & + \sum_{k=1}^N \bar{\omega}_k (\bar{T} R/W_k - \bar{h}_k) + S_T, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial t} + \bar{\rho} \bar{u}_j \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{Y}_k \bar{V}_{k,j})}{\partial x_j} - \frac{\partial d_{k,j}}{\partial x_j} + \bar{\omega}_k + S_{Y_k}, \quad (9)$$

ここで $\bar{\cdot}$ は空間フィルターをかけた値を示す。 $\bar{\cdot}$ は Favre フィルターをかけた値を示しており、 $\bar{\phi} = \overline{\rho \phi} / \bar{\rho}$ で定義される。 τ_{ij} は SGS 応力、 q_j および $d_{k,j}$ はそれぞれ温度、化学種の SGS 拡散である。SGS 応力は Moin らによって提案された Dynamic SGS モデル⁽⁸⁾により評価する。圧縮性流体の Dynamic SGS モデルでは SGS 応力は次のように与えられる。

$$\tau_{ij} - 1/3 q^2 \delta_{ij} = -2 \bar{\rho} C_\Delta^2 |\tilde{S}| (\tilde{S}_{ij} - 1/3 \tilde{S}_{mm} \delta_{ij}), \quad (10)$$

ここで $\tilde{S}_{ij} = 1/2 (\partial \bar{u}_i / \partial x_j + \partial \bar{u}_j / \partial x_i)$, $|\tilde{S}| = (2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{1/2}$ であり、 Δ はフィルター幅である。SGS モデルの導出は非圧縮性流体の Dynamic モデルと同様で、Germano Identity⁽⁹⁾を導入して SGS 応力の算出できない項を消去することで導出できる。

C は Dynamic SGS モデルによって決定されるモデル定数で、Smagorinsky モデルの渦粘度の係数 C_e とは $C = C_e^2$ という関係がある。 q^2 は SGS 応力の等方性成分であり、等方性成分の渦粘度の係数 C_l から

$$q^2 = 2 C_l \bar{\rho} \Delta^2 |\tilde{S}|^2, \quad (11)$$

と計算される。渦粘度の係数 C と等方性成分の渦粘度の係数 C_l は

$$\begin{aligned} C = & \langle [\bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_i - \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{\rho} \bar{u}_i / \bar{\rho}] \tilde{S}_{ij} - 1/3 \tilde{S}_{mm} (\tilde{S}_{jj} - \hat{\tau}_{jj}) \rangle \times \\ & \langle -2 \hat{\rho} \Delta^2 |\hat{S}| (\hat{S}_{ij} \hat{S}_{ij} - 1/3 \hat{S}_{mm} \hat{S}_{jj}) \\ & + 2 \Delta^2 (\bar{\rho} |\tilde{S}| \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij} - 1/3 \bar{\rho} |\tilde{S}| \tilde{S}_{mm} \tilde{S}_{jj}) \rangle^{-1}, \\ C_l = & \frac{\langle \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{u}_i - \bar{\rho} \bar{u}_i \bar{\rho} \bar{u}_i / \bar{\rho} \rangle}{\langle 2 \hat{\rho} \Delta^2 |\hat{S}|^2 - 2 \Delta^2 \bar{\rho} |\tilde{S}|^2 \rangle}, \end{aligned} \quad (12)$$

ここで τ_{ij} および $\mathcal{T}_{ij}$ は直接計算される SGS 応力で、 $\mathcal{T}_{jj} - \hat{\tau}_{jj}$ は GS 成分から計算可能な項で構成される。 $\hat{\cdot}$ は格子幅の 2 倍の幅を持つテストフィルターでフィルター化された値であり、 $\hat{\Delta} = 2\Delta$ である。また、 $\langle \cdot \rangle$ は空間平均を示している。温度 T および化学種の質量分率 Y_k はスカラー量であるので、渦拡散によるモデル化から以下のように SGS 拡散を与えることができる⁽⁸⁾。

$$q_j = -\frac{\bar{\rho} C \Delta^2 |\bar{S}|}{Pr_t} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_j}, \quad d_{k,j} = -\frac{\bar{\rho} C \Delta^2 |\bar{S}|}{Sc_{k,t}} \frac{\partial \bar{Y}_k}{\partial x_j}, \quad (13)$$

ここで Pr_t および $Sc_{k,t}$ はスカラー量輸送の SGS モデル⁽⁸⁾から算出される乱流プラントル数、乱流シュミット数である。

燃焼反応は燃料をデカンとし、 $C_{10}H_{22} + 31/2 O_2 \rightarrow 11 H_2O + 10 CO_2$ の一段総括反応を用いる。燃焼反応速度はアレニウス型の反応速度式で以下のように与えられる。

$$\omega_F(\rho, T, Y_F, Y_O) = A(\rho Y_F / W_F)^a (\rho Y_O / W_O)^b \exp(-E/RT), \quad (14)$$

ここで ω_F は燃料の消費速度であり、酸化剤、生成物の消費および生成速度は量論比から間接的に決定される。 A は反応速度定数、 E は活性化エネルギー、 a , b は量論係数に無関係で燃料によって決まる係数である。高級炭化水素の上記係数は Westbook らによって与えられている⁽¹⁰⁾。 Y_F , Y_O は燃料と酸化剤の質量分率、 W_F , W_O は燃料と酸化剤の分子量である。LES では SGS 成分の影響を燃焼反応に考慮する必要があるため、燃焼反応の SGS モデルを導入する。SSFRM⁽¹¹⁾⁽¹²⁾ (Scale similarity filtered reaction rate model) では SGS 変動を考慮すると反応速度は以下のように与えられる。

$$\bar{\omega}_F = \overline{\omega_F(\bar{\rho}, \bar{T}, \bar{Y}_F, \bar{Y}_O)} + K_1 \overline{\omega_F(\bar{\rho}, \bar{T}, \bar{Y}_F, \bar{Y}_O) - K_1 \omega_F(\bar{\rho}, \bar{T}, \bar{Y}_F, \bar{Y}_O)}, \quad (15)$$

ここで K_1 はモデル定数であり $K_1=1.0$ が最適値とされる。 $\bar{\cdot}$ は空間フィルターを 2 回かけた値である。 $\tilde{\cdot}$ は Favre フィルターを 2 回かけた値であり、 $\tilde{\phi} = \overline{\rho \phi} / \bar{\rho}$ で定義される。

2.2 液相の支配方程式 液相の支配方程式は DNS および LES で同一とし、数多くの液滴を取り扱うために固気 2 相流を取り扱う基礎研究においては一般的な方法である Eulerian / Lagrangian 法を用いる⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾。液滴は蒸発過程で球形を保つものとし、気相に対する体積なし、回転なし、衝突なしを仮定する。以下の液滴に関する支配方程式群は Miller らの提案に基づく⁽¹⁵⁾。

$$\frac{dX_i}{dt} = v_i, \quad (16)$$

$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{F_i}{m_d} \quad F_i = m_d \left(\frac{f_1}{\tau_d} \right) (u_i - v_i), \quad (17)$$

$$\frac{dT_d}{dt} = \frac{Q + \dot{m}_d L_V}{m_d C_L},$$

$$Q = m_d \left(\frac{f_2}{\tau_d} \right) \left(\frac{Nu C_{p,G}}{3 Pr_G} \right) (T - T_d), \quad (18)$$

$$\frac{dm_d}{dt} = \dot{m}_d = -m_d \left(\frac{1}{\tau_d} \right) \left(\frac{Sh}{3 Sc_G} \right) \ln[1 + B_M], \quad (19)$$

τ_d は液滴の応答時間で、 $\tau_d = \rho_L D^2 / 18\mu$ で定義される。下付き文字 G は気相の値、 L は液相の値であることを示している。 L_V は燃料液滴の蒸発潜熱、 C_L は燃料液滴の比熱、 $C_{p,G}$ は燃料蒸気の定圧比熱である。Miller らはこれらの物性値を温度の関数として与えている⁽¹⁵⁾。

f_1 は実験式に基づいた滑り速度と噴出し速度による抗力の修正係数で、

$$f_1 = \frac{1 + 0.0545 Re_d + 0.1 Re_d^{1/2} (1 - 0.03 Re_d)}{1 + a |Re_b|^b},$$

$$a = 0.09 + 0.077 \exp(-0.4 Re_d),$$

$$b = 0.4 + 0.77 \exp(-0.04 Re_d), \quad (20)$$

$Re_d = \rho_G u_s D / \mu_G$ は滑り速度によるレイノルズ数、 $Re_b = \rho_G u_b D / \mu_G$ は噴出し速度によるレイノルズ数である。滑り速度は $u_s = |u_i - v_i|$ 、噴出し速度は $\dot{m}_d = \pi \rho_G D^2 u_b$ の関係式から与えられる。 $f_2 = \beta / (e^\beta - 1)$ は蒸発伝熱の補正係数であり、 D^2 則に液滴の蒸発が従うとすれば $\beta = -1.5 Pr_G \tau_d \dot{m}_d / m_d$ は定数となる。

ヌッセルト数とシャープウッド数はレイノルズ数の影響を考慮して Ranz-Marshall の補正から、 $Nu = 2 + 0.552 Re_d^{1/2} Pr_G^{1/3}$, $Sh = 2 + 0.552 Re_d^{1/2} Sc_G^{1/3}$ として与えられる。 B_M はトランスファ数であり、Clausius-Clapeyron の関係式から得られる液滴表面における燃料蒸気の質量分率 Y_{sf} と気相の燃料蒸気の質量分率 Y_F から、 $B_M = (Y_{sf} - Y_F) / (1 - Y_{sf})$ として与えられる。

以上の支配方程式から次の相間干渉項 S が導かれる。

$$S_\rho = S_{Y_F} = - \sum_\alpha \frac{\omega_\alpha}{\Delta V} m_d, \quad (21)$$

$$S_{u_i} = - \sum_\alpha \frac{\omega_\alpha}{\Delta V} (F_i + \dot{m}_d v_i), \quad (22)$$

$$S_T = - \sum_\alpha \frac{\omega_\alpha}{\Delta V} (v_i F_i + Q + h_{v,sf} \dot{m}_d), \quad (23)$$

ここで $h_{v,sf}$ は液滴表面における蒸発液滴のエンタルピーであり、 $h_{v,sf} = C_{p,G} T_d + h_v^0$ で、 h_v^0 は燃料蒸気の標準生成エンタルピーである。燃料の質量分率の相間干渉項は質量分率の保存式の次元が質量となっているので、液滴の蒸発した質量に等しい。 ΔV はグリッド

セルの体積であり、 ω_α は液滴が隣接する格子点に相関干渉項を割り付ける重み付け係数である。LES では気相の物理量はフィルターがかけられており、フィルターのかかっていない値を直接液相へ補間することはできない。ここでは便宜的に、フィルターをかけた気相の値を直接用いることとする。

3. 差分化および Dynamic SGS モデルの検証

先に示した LES で解かれる圧縮性流体の支配方程式は簡略化されたものであり、実際にはフィルター化を行うと多くの SGS 項が現れる。しかしながら、圧縮性乱流の Dynamic SGS モデルを考案した Moin らによれば支配的な SGS 項のみを考慮すれば付加的な SGS 項は無視できる可能性があり、高マッハ数の一様等方性乱流において提案した Dynamic SGS モデルの有効性を確認している⁽⁸⁾。まず、差分化の評価およびモデルの妥当性を示すために、単相、非燃焼場の低マッハ数および高マッハ数の等方性乱流において DNS と LES の比較を行った。

計算領域は一辺 3 cm の立方体で、DNS では格子点数を 96^3 とし、LES では格子点数を 32^3 とした。計算に用いた初期乱流場の特性値を表 1 に示す。運動エネルギーの総量を合わせるために、初期速度場にはフィルターをかけずに用いた。表 1 中、格子幅と Kolmogorov scale の比 $\Delta x/\eta$ は DNS の場合に対応しており、LES では格子幅はおおよそ Kolmogorov scale の 9 倍に相当する。

表 1 に示される計算条件のうち、マッハ数が非常に小さい条件 incomp. は CCUP 法⁽⁶⁾⁽¹⁶⁾により計算し、マッハ数が十分大きい条件 comp. では、陽的に時間積分を繰り返す直接計算法によって計算を行う。圧縮性流体のケースでは、初期乱流場の速度場を用いて、内部エネルギー $e_t = p/(\gamma - 1) + 1/2 \rho u_i u_i$ が一定となるように初期圧力場および初期温度場を与えた⁽⁸⁾。

支配方程式は非圧縮性流体および圧縮性流体の計算において、いずれも場合も質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式を採用し、化学種の質量分率保存式については解かないものとする。

3.1 非圧縮性流体、乱流の DNS および LES 図 1 は incomp. の場合の (a) $t/\tau_t=6.25$ および (b) $t/\tau_t=12.5$ における DNS と LES のエネルギースペクトルの比較である。図中、 τ_t はオイラスケールと速度の r.m.s. 値で定義される Eddy turn over time である。ここで、DNS のエネルギースペクトルは LES の結果と比較するために格子幅の 3 倍のフィルター幅を用いたフィルターを速度場にかけて算出されている。エネルギー

ペクトルは計算時間が十分長い場合でも DNS と LES でほぼ一致している。

3.2 圧縮性流体、乱流の DNS および LES 図 2 は comp. の場合の $t/\tau_t=2.99$ におけるエネルギースペクトルの比較を行ったものである。図 2 には速度の Helmholtz 分解⁽¹⁷⁾によって得られる速度の非圧縮性成分 (solenoidal) と圧縮性成分 (dilatational) を示している。圧縮性成分については低波数領域において差異が見られるが、全体的に DNS と LES でよく一致しているといえる。

以上のことから、差分化およびモデルの妥当性を示すことができた。圧縮性乱流の Dynamic SGS モデルを用いることで、幅広いマッハ数の流れを計算することができ、燃焼流のような密度変化の大きな流れに対応できると考えられる。以降の噴霧燃焼流の LES では、ここで用いたモデル化および差分化を流用するものとする。

Table 1 Characteristics of the turbulence used for validation test.

CASE	Re_λ	λ cm	η cm	$\bar{M}$	$\Delta x/\eta$
incomp.	24.5	0.11	0.011	0.001	2.92
comp.	22.9	0.11	0.012	0.229	2.82

Re_λ : Turbulent Reynolds number (Taylor scale),

λ : Taylor scale, η : Kolmogorov scale,

$\bar{M}$: Average Mach number.

Fig.1 Comparison of energy spectrum in incompressible homogeneous isotropic turbulence at (a) $t/\tau_t=6.25$, (b) $t/\tau_t=12.5$.

Fig.2 Comparison of energy spectrum in compressible homogeneous isotropic turbulence at $t/\tau_t=2.99$.

4. DNSとLESの比較

4.1 計算条件 単相, 非燃焼の流れにおいて, 差分および圧縮性乱流の Dynamics SGS モデルの有効性を示した. これらの数値解析手法を用いて噴霧燃焼流の LES を実行し, 本稿で提案する相間干渉項の妥当性を示す. 検討を行う計算条件は以下の通りである.

速度場の初期条件は 96^3 の格子点において非圧縮性乱流の DNS により発達させた発達乱流場を用いる. この初期速度場を任意の格子点数の計算格子に補間するには CIP 法⁽¹⁶⁾を用いた. CIP 法で用いる微分値は 4 次精度中心差分法で算出している. 運動エネルギーの総量を一致させるため, 初期速度場にはフィルターをかけずに初期条件として用いた. 計算領域は一辺 3 cm の立方体である. 液滴は初期条件で $D = 40\mu\text{m}$ の均一粒径とし, 乱数によって領域に一樣に分布させる. 燃焼反応は $T_0 = 1000\text{ K}$ の高温の気体中に液滴を分布させることにより, 自着火によって引き起こすものとする.

表 2 に計算条件をまとめ, 表 3 には用いた初期乱流場の特性値を示す. 表 2 中, 計算条件は一条件につき a および b の 2 種類あり, それぞれ相間干渉項の割付け方法が異なる. 相間干渉項の割付け方法の詳細については後述する.

計算時間は Itanium2 (1.6GHz) のワークステーションを用いて最も格子解像度が低い LES32 (a,b) では計算時間はおよそ 2 時間弱, 最も格子解像度が高い DNS96 (a,b) では計算時間はおよそ 50 時間弱を要した.

Table 2 Resolution and filter width setting.

CASE	N^3	filter	$\bar{\Delta}$	$\Delta x/\eta$
DNS32 (a,b)	32^3	no	-	12.36
LES32 (a,b)	32^3	yes	3.0	12.36
LES48 (a,b)	48^3	yes	2.0	8.245
LES64 (a,b)	64^3	yes	1.5	6.184
LES96 (a,b)	96^3	yes	1.0	4.122
DNS96 (a,b)	96^3	no	-	4.122

N^3 : Total number of grid points, $\bar{\Delta}$: Filter width,

$\Delta x/\eta$: Spatial interval by Kolmogorov scale.

4.2 相間干渉項の割付け方法 反応性および異相を伴う流れでは, 相間干渉項の割付け方法は解像度の問題と密接に関係する. 図 3 に相間干渉項の割付け方法の概念図を示す. 図 3(a) は従来の割付け方法, 図 3(b) は本稿で行う割付け方法を示している. 通常は液滴から気相への相間干渉項 S_p , S_{u_i} , S_T および S_{Y_k} などは, 図 3(a) 中, 液滴に隣接する黒丸で表される格子点のみの割付けられ, その他の格子点には割付けられない. 一方, 液滴の支配方程式に現れる気相の物理量,

Table 3 Characteristics of the turbulence used for the initial condition.

Re_l	Re_λ	λ cm	η cm	T_0 K	N_p
114.7	41.5	0.096	0.0076	1000	10^4

Re_l : Turbulent Reynolds number (Euler scale),

Re_λ : Turbulent Reynolds number (Taylor scale),

λ : Taylor scale, η : Kolmogorov scale,

T_0 : Initial temperature, N_p : Total number of droplets.

ρ , u_i , T および Y_k などは相間干渉項を割付けた黒丸で表される格子点から液滴位置へ割付けられる. 気相の支配方程式中に現れた重み付け係数 $\omega_{\alpha,i}$ は, 液滴と格子点間の距離 rr_i によって次のように与えられる.

$$\omega_{\alpha,i} = \frac{1/rr_i}{\sum_{i=1}^8 1/rr_i}, \quad (24)$$

ここで $\sum_{i=1}^8 \omega_{\alpha,i} = 1$ であり, 添え字 i は液滴に隣接する格子点に割り振る番号である. 一方, 液滴位置に割付けられる気相の物理量 ϕ_p は次のように与えられる.

$$\phi_p = \sum_{i=1}^8 \omega_{\alpha,i} \phi_i, \quad (25)$$

ここで ϕ_i は液滴を取り囲む格子番号 i の気相の物理量である. 以上が従来の割付け方法である.

(a) Normal partition (b) Proposed partition
Fig.3 Schematic of partition of phase coupling terms.

ここで液滴位置で得られる相間干渉項 S_ϕ を隣接点のみに割り付けると, 計算結果は解像度によって大きく変化してしまう可能性がある. 本稿ではすべての条件において, 半径 R の一定体積の球に含まれる格子点に相間干渉項を割付けることで, 割付けに関する解像度の依存性を解消し, 各計算条件が解像度を変化させても同一条件となるようにした. 本稿ではすべての条件において次の式を相間干渉項の割付けに用いる.

$$S_{\phi,i} = \frac{1}{n} S_{\phi,p}, \quad \text{for } i = 1 \dots n, \quad (26)$$

ここで $S_{\phi,i}$ は半径 R の球に含まれる格子点に割付けられる相間干渉項, n は半径 R の球に含まれる総格子点

数, $S_{\phi,p}$ は液滴位置において算出される相間干渉項である。図 3(b) では黒丸で表される格子点へ $S_{\phi,p}/n$ が等しく割付けられる。

気相の物理量を液滴位置に割付けるには次の 2 通りの方法を考慮する。従来通り式 (25) に従う場合を **Partition type a** とし、式 (25) の代わりに次の式に従って気相の物理量を液滴位置に割付ける方法を **Partition type b** とする。

$$\phi_p = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \phi_i, \quad (27)$$

ここで n は半径 R の球に含まれる総格子点数である。すなわち、Partition type b では液滴位置に割付けられる気相の物理量は、球内に含まれる気相の物理量の平均値となる。球の半径は格子点数 32^3 の場合の格子点が少なくとも 8 点含まれるように、LES32 (a,b) の格子幅 $\Delta x \approx 1$ mm から、 $R = 1.0$ mm とした。

4.3 SGS モデル係数の変化 図 4 に渦粘度の係数, C と C_l の時間変化を示す。Dynamic SGS モデルでは同じ乱流場でも渦粘度の係数は格子解像度に依存して値が変化することが分かる。特に Smagorinsky モデルでは $C_e=0.2$ が等方性乱流における最適値といわれているにも関わらず、Dynamic SGS モデルを用いた場合、値は $C=C_e^2=0.04$ から大きく変化している。ここでは $C=C_e^2=0.04$ となるのは格子点数が 32^3 となる LES32a および LES32b の条件である。

Fig.4 Time variations of eddy viscosity coefficients,

Partition type a, (a) C , (b) C_l ,

Partition type b, (c) C , (d) C_l .

図 5 に渦粘度の係数, C および C_l を用いて算出された渦粘度 μ_{SGS} および μ_{SGSl} の時間変化を示す。渦粘度はそれぞれ $\mu_{SGS} = \bar{\rho} \Delta^2 C |\bar{S}|$, および $\mu_{SGSl} = \bar{\rho} \Delta^2 C_l |\bar{S}|$ にて算出した。いずれの場合も渦粘度は解像度が上昇すると一様に減少し、SGS 応力の影響が小さくなっていることが分かる。

Fig.5 Time variations of eddy viscosities,

Partition type a, (a) μ_{SGS} , (b) μ_{SGSl} ,

Partition type b, (c) μ_{SGS} , (d) μ_{SGSl} .

図 6 に乱流プラントル数 Pr_t と乱流シュミット数 Sc_t の時間変化を、それぞれ C/Pr_t , C/Sc_t にて示す。 Sc_t については 5 種の化学種について平均値をとることで算出した。図 6 では格子解像度が高くなるにつれて、SGS 拡散が増加していることが分かる。これは格子解像度が高い場合には GS 成分の流れ場に小さな構造が存在し、液滴運動が細くなり、複雑な温度場および濃度場が形成されていることに起因している。しかしながら、Partition type b では解像度上昇による SGS 拡散の増加は緩和される。図 6(d) に示されるように、Partition type b では Partition type a の場合と異なり、格子解像度が増加しても化学種の SGS 拡散は増加しない。

Fig.6 Time variations of SGS model coefficients,

Partition type a, (a) C/Pr_t , (b) C/Sc_t ,

Partition type b, (c) C/Pr_t , (d) C/Sc_t .

図 7 に式 (13) から算出した温度と燃料蒸気の化学種質量分率についての SGS 拡散最大値の時間履歴を示す。図 7(a), (c) は $|q_{max}|$, (b), (d) は燃料蒸気について

での $|d_{max}|$ を示している。温度については線は $|q_{max}|$ 、点は $|q|$ の平均値を示している。温度については格子解像度の高さと SGS 拡散の影響の大きさは反比例しているが、燃料蒸気については、格子解像度を上げると全体的に SGS 拡散が上昇する傾向がある。これは上記の解像度により GS 成分により細かい分布が現れるようになることに起因している。また、この場合でも Partition type b の方が格子解像度が高い場合の SGS 拡散の上昇を抑えている。

Fig.7 Time variations of maximum SGS diffusivities.

Partition type a: (a) $|q_{max}|$, (b) $|d_{max}|$,

Partition type b: (c) $|q_{max}|$, (d) $|d_{max}|$.

4.4 統計量の変化 図8に最高温度の時間変化を示す。若干のばらつきが見られるものの、すべての条件で傾向はよく一致している。ただし、LES32aおよびLES32bは最高温度を低く、LES48aおよびLES48bは最高温度を過剰に予測している。この傾向は、温度場については解像度が不足しているDNS32aおよびDNS32bの条件よりもLESの予測精度が悪化していることを示し、温度場および濃度場に対するフィルタ化が予測精度を悪化させる可能性があることを示唆している。しかし、LESの予測精度は格子解像度が 64^3 以上に上昇すると向上し、最高温度の変化はDNSの傾向に近くなる。相間干渉項の割り付け方による差異を比較すると、Partition type aよりもPartition type bの方が最高温度の差異が大きく、予測精度が悪化することが分かる。この他、平均密度および平均温度の時間変化はすべての条件でよい一致を見せた。

図9に液滴平均粒径の時間変化を示す。液滴粒径の変化は液滴数が少数になる計算終了間際で差異が見られるが、すべての条件がよく一致する。この他、液滴総数の時間変化、液相総質量の時間変化はすべての条件でよく一致した。

Fig.8 Time variations of maximum temperature.

(a) Partition type a, (b) Partition type b.

Fig.9 Time variations of mean droplet diameter.

(a) Partition type a, (b) Partition type b.

4.5 エネルギースペクトル 燃焼反応を含めた場合に乱流場がSGSモデルによって正しく再現されているかを確認するために、エネルギースペクトルの比較を行った。基準とするのはDNS96aおよびDNS96bの条件であり、LESの結果と比較する際には、対応する格子幅のフィルターをかけた速度場からエネルギースペクトルを算出した。対象としたのは燃料液滴がすべて蒸発した2.0 msにおける速度場である。

図10および図11にDNSとLESのエネルギースペクトルの比較を示す。エネルギースペクトルは格子解像度が低いLES32aおよびLES32bの場合には若干の差異が見られるが、格子解像度が高くなるとフィルターをかけていないDNSの結果とLESの結果が一致するようになる。しかしながら、LES32aおよびLES32bは格子解像度が低くてもよくエネルギーカスケードを再現している。DNS32aおよびDNS32bでは格子解像度が足りず、SGS応力を考慮していないため、エネルギーカスケードが再現できず、高波数領域においてスペクトル形状が変形している。

速度場については最高温度に見られたような差異は

見られず、すべての LES が格子解像度が高い DNS の結果とよい一致を見せている。

Fig.10 Comparisons of energy spectra between DNS and LES (Partition type a), (a) LES96a, (b) LES64a, (c) LES48a, (d) LES32a

Fig.11 Comparisons of energy spectra between DNS and LES (Partition type b), (a) LES96b, (b) LES64b, (c) LES48b, (d) LES32b

5. 結 言

Dynamic SGS モデルにより、噴霧燃焼流の LES と DNS を等方性乱流において行い、相間干渉項の割付け方法および SGS 成分の影響変化の検討を行った。得られた知見は以下のとおりである。

1. 本稿で提案した相間干渉項の割付け方法によって、格子解像度を大きく変更しても LES はすべて同様の傾向を示すことができ、相間干渉項の割付け方法の妥当性を示すことができた。
2. 格子解像度が上昇すれば SGS 応力の影響は小さくなる。SGS 応力を考慮しなければ妥当な結果が得られない強い乱流場において、LES の結果は格子解像度によらず DNS とよい一致を見せた。

3. 格子解像度が向上すると、流れ場の複雑な構造が現れることで液滴運動が細かくなり、SGS 拡散の影響は SGS 応力の影響に反比例して大きくなる。
4. Partition type b によって解像度上昇に伴う SGS 拡散の影響の増加を抑えることができるが、必ずしも精度が向上するわけではない。結果として、従来と同じ方法である Partition type a の方がよい結果を示した。

文 献

- (1) Glaze, D.J. and Frankel, S.H., Effect of Dispersion Characteristics on Particle Temperature in an Idealized Non-premixed Reacting Jet, *International Journal of Multiphase Flow*, 26, (2000), pp.609–633.
- (2) Kurose, R. and Makino, M., Large Eddy Simulation of a Solid-fuel Jet Flame, *Combustion and Flame*, 135, (2003), pp.1–16.
- (3) Miyauchi, T. et al., Transport Phenomenon in Combustion 2 (Ed.S.H.Chan), *Taylor & Francis*, (1996), pp.1095.
- (4) Kee, R.J. et al., A Fortran Computer Code Package for Evaluation of Gas-phase Multi-component Transport Properties, *Sandia Report*, (1986), SAND86-8246.
- (5) Kee, R.J. et al., A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics, *Sandia Report*, (1989), SAND89-8009B.
- (6) Baba, Y. et al., CIP Characteristics in Direct Numerical Simulations, *JSME International Journal, Series B*, 47, (2004), pp.750–760.
- (7) Morinishi, Y. et al., Fully Conservative Higher Order Finite Difference Schemes for Incompressible Flow, *Journal of Computational Physics*, 143, (1998), pp.90–124.
- (8) Moin, P. et al., A Dynamic Subgrid-scale Model for Compressible Turbulence and Scalar Transport, *Physics of Fluids*, A3(11), (1991), pp.2746–2757.
- (9) Germano, M. et al., A Dynamic Subgrid-scale Eddy Viscosity Model, *Physics of Fluids*, A3(7), (1991), pp.1760–1765.
- (10) Westbrook, C.K. and Dryer, F.L., Chemical Kinetic Modeling of Hydrocarbon Combustion, *Progress in Energy and Combustion Science*, 10, (1984), pp.1–57.
- (11) DesJardin, P.E. and Frankel, S.H., Large Eddy Simulation of a Nonpremixed Reacting Jet: Application and Assessment of Subgrid-scale Combustion Models, *Physics of Fluids*, 10, (1998), pp.2298–2314.
- (12) Kurose, R. et al., Large Eddy Simulation of a Non-premixed Turbulent Reacting Mixing Layer: Effect of Heat Release and Spanwise Fluid Shear, *Combustion and Flame*, 127, (2001), pp.2157–2163.
- (13) Miller, R.S., Effects of Nonreacting Solid Particle and Liquid Droplet Loading on an Exothermic Reacting Mixing Layer, *Physics of Fluids*, 13, (2001), pp.3303–3320.
- (14) Mashayak, F., Numerical Investigation of Reacting Droplets in Homogeneous Shear Turbulence, *Journal of Fluid Mechanics*, 405, (2000), pp.1–36.
- (15) Miller, R.S. et al., Evaluation of Equilibrium and Non-equilibrium Evaporation Models for Many-droplet Gas-liquid Simulations, *International Journal of Multiphase Flow*, 24, (1998), pp.1025–1055.
- (16) Yabe, T. et al., The Constrained Interpolation Profile Method for Multiphase Analysis, *Journal of Computational Physics*, 169, (2001), pp.556–593.
- (17) Miyauchi, T. et al., Outflow Boundary Conditions for Direct Numerical Simulation of Compressible Flows, *Transaction of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B*, 65–630, (1999), pp.528–535.