Flamelet 法を用いた液相反応乱流場の Large-Eddy Simulation*

河野直紀^{*1}, 黒瀬良一^{*2}
小森 悟^{*2}, 馬場雄也^{*3}Large-Eddy Simulation of a Turbulent Reacting Liquid Flow
Using Flamelet ModelNaoki KOHNO, Ryoichi KUROSE^{*4},
Satoru KOMORI and Yuya BABA^{*4} Department of Mechanical Engineering and Science, and Advanced Institute of Fluid Science and Engineering,
Kyoto University, Yoshida-honmachi, Sakyo-ku, Kyoto-shi, Kyoto, 606-8501 Japan

Large-eddy simulations (LES) employing flamelet models are applied to turbulent reacting liquid flows and validated by comparing with the experiments. The LES is performed for a reacting mixing-layer liquid flow with rapid or moderately fast reaction downstream of a turbulence-generating grid. As the flamelet model, the steady and unsteady Lagrangian flamelet models are tested. A second-order, irreversible, and isothermal reaction ($A+B \rightarrow 2P$) is considered. The results show that the flamelet models inherently developed for turbulent combustion are applicable to turbulent reacting liquid flows provided that the model coefficient in evaluating the SGS variance of mixture fraction in the scale-similarity model (Cook and Riley, Phys. Fluids, 1994), C_z , is set to 5.0. The rapid reaction can be adequately predicted both by the steady and unsteady Lagrangian flamelet models, whereas the moderately fast reaction can be predicted only by the unsteady Lagrangian flamelet model which is capable to take slow chemical processes into account.

Key Words: Turbulent Reacting Liquid Flow, Large-Eddy Simulation, Flamelet Model

1. 緒 言

化学反応を伴う乱流場は、工業反応装置内や環境中の流れに多く見られる。したがって、工業反応装置の最適設計や、大気・海洋中における反応性汚染物質の拡散予測を行ううえで、反応乱流場に対する高精度の数値計算手法を開発することは極めて有益である。

このような反応乱流場の数値計算手法としては、時間平均化した流れ場を解く Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) シミュレーションが従来から広く用いられているが、近年では、コンピュータ性能の向上に伴い、乱流挙動をより正確に捉えることが可能な Large-Eddy Simulation (LES) が用いられるようになってきた。しかし、これまで実行されてきた LES は燃焼を主とする気相の反応場に対するものがほとんどであり、液相の反応場に対するものは極めて数少ない。この理由としては、液相では濃度変動の最小スケールであるバチエラスケールが速度変動の最小スケールであるコルモゴロフスケールよりも非常に小さい(約 25 分の

1) ため濃度の乱流拡散挙動自体が未だ十分に理解されていないことや、液相では遅い反応速度を伴う場合が多いため乱流反応過程のモデル化を容易にする瞬間反応の仮定ができないことが挙げられる。したがって、バチエラスケールがコルモゴロフスケール程度と大きく、瞬間反応を主に取り扱う気相の燃焼反応場に対して考案、検証された乱流反応モデルが液相の反応場に対してそのまま適用可能か否かはわかっていない。

近年、Michioka & Komori⁽¹⁾は、二次の不可逆反応を伴う液相等方性乱流場の Direct Numerical Simulation (DNS) を実施することにより、瞬間反応に適用可能な Conserved scalar モデルと適度に速い反応に適用可能な反応クロージャモデルを提案した。また、実際に格子乱流場⁽¹⁾や混合層⁽²⁾の LES を実行し、実験値と比較、検討することによって、提案したモデルの妥当性についても検証を行っている。しかし、これらを統一した任意の反応速度に適用可能なモデルは確立されていない。また、適度に速い反応系に対する反応クロージャモデル中には、二次の不可逆反応のみを対象にした DNS から得られた条件付き期待値についての経験的相関式が含まれるという問題点もある。

そこで本研究では、Michioka & Komori⁽¹⁾とは異なる乱流反応モデルとして、燃焼分野で用いられている

* 原稿受付 2009 年 3 月 16 日。

^{*1} 学生員, 京都大学大学院工学研究科(☎ 606-8501 京都市左京区吉田本町)。^{*2} 正員, 京都大学大学院工学研究科。^{*3} 正員, (独)海洋研究開発機構地球シミュレーションセンター(☎ 236-0001 横浜市金沢区昭和町 3173-25)。

E-mail: kurose@mech.kyoto-u.ac.jp

Flamelet モデル^{(3)~(6)}に注目し、その液相反応乱流場への適用性について検討を行った。

2. おもな記号

q_{Zj}	: SGS 乱流物質流束 [-]
U_i	: i 方向の速度 [-]
Γ_i	: 物質 i のモル分率 [-]
ν	: 動粘性係数 [-]
τ_{ij}	: SGS 応力 [-]

添え字

A	: 物質 A の
B	: 物質 B の
P	: 物質 P の
st	: 化学量論値

3. 数値計算法

3.1 Flamelet モデルの概要 本来、燃焼反応場に対して考案された Flamelet モデル^{(3)~(6)}は、「火炎面の厚さがコルモゴロフスケールよりも十分に小さい (燃焼反応速度が速度変動の最小時間スケールよりも十分に速い) との仮定のもとで、乱流火炎を微視的な層流火炎面の集合とみなす」ものである。これを液相反応に置き換えれば、Flamelet モデルは、「反応面の厚さがコルモゴロフスケールよりも十分に小さい (反応速度が速度変動の最小時間スケールよりも十分に速い) との仮定のもとで、乱流反応面を微視的な層流反応面面の集合とみなす」ものと言える。したがって、変動流れ場の各反応面を微視的に見た場合、物質 A, B は図 1 のような一次元層流対向流をなしており、その拡散と反応との間には平衡状態が成り立つと仮定することができる。Flamelet モデルでは、この仮定を用いて反応の計算と流れの計算を分離して行う。そのため、さまざまな流動場に対応した反応の結果をあらかじめデータベース化することによって、実際の計算での負荷を抑えることができる。このデータベースを Chemtable (もしくは、Flamelet ライブラリ) と呼ぶ。Flamelet モデルを採用した反応乱流場の LES の計算手法の概略を図 2 に示す。本 LES では、実際の物理空間 (変動流れ場) で連続の式、Navier-Stokes (N-S) 方程式、および混合分率 (一方の反応物質を基準としたモル分率混合割合) $\bar{Z}$ の輸送方程式のみを解く。なお、今回対象とする二次の不可逆反応 ($A + B \rightarrow 2P$) では、物質 A を基準にとると、物質 A 側で $\bar{Z} = 1$ 、物質 B 側で $\bar{Z} = 0$ の値をとる。ここで、上付き $—$ は LES フィルタをかけた値であることを示す。各位置における

Fig. 1: Schematic of laminar counter flow and profiles of Γ_i against Z .

Fig. 2: Concept of flamelet model.

諸化学濃度などの値は、Chemtable から $\bar{Z}$, $\bar{Z}$ の Sub-grid scale (SGS) 変動強度 $\overline{Z''^2}$, および $\bar{Z}$ の勾配を表すスカラー消散率

$$\bar{\chi} = 2(D_Z + D_t) \frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_j}, \dots \quad (1)$$

を介して抽出する。

ここで、 D_Z は $\bar{Z}$ の拡散係数、 D_t は乱流拡散係数である^{(7) (8)}。なお、 Z'' は Z の空間変動値 ($Z = \bar{Z} + Z''$) である。Chemtable を用いることにより、各化学種の質量もしくはモル分率保存方程式を本来解くべき物理空間で解く必要がなくなるため、特に多化学種の多段反応を対象とした系の計算には非常に有効である。詳細は後述するが、Chemtable の作成時には、様々なひずみをもつ層流反応面片に対して全化学種の質量もしくはモル分率保存方程式が解かれる。このとき、反応面での支配方程式は Z に関する一次元方程式で与えられるため、Chemtable の作成に要する計算負荷は極めて小さい。

以下に、本 LES の計算手法および Chemtable の作成方法を詳しく述べる。

3.2 Large-Eddy Simulation 法

3.2.1 支配方程式 Flamelet モデルを採用した

物理空 (変動流れ場) の支配方程式は以下に示す連続の式, N-S 方程式, および Z の輸送方程式である。

$$\frac{\partial \bar{U}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \bar{U}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{U}_j \bar{U}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} + \frac{1}{Re} \frac{\partial^2 \bar{U}_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (3)$$

$$\frac{\partial \bar{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{U}_j \bar{Z}}{\partial x_j} = \frac{1}{Re Sc} \frac{\partial^2 \bar{Z}}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{\partial q_{Zj}}{\partial x_j} \quad (4)$$

ここで, Re , Sc は代表長さ L_0 および代表速度 U_0 基準のレイノルズ数, シュミット数である。また, τ_{ij} および q_{Zj} はそれぞれ SGS 応力および SGS 乱流物質流束である。本研究では, τ_{ij} を Lagrangian dynamic モデル⁽⁹⁾により, q_{Zj} を渦拡散モデル⁽¹⁰⁾によりモデル化する。

3.2.2 数値解法と計算条件

図 3 に計算領域の概略を示す。以下に示す計算条件は, 既往実験^{(11) (12)}と同様になるように設定した。計算領域は主流 (x) 方向に 520mm, 鉛直 (y) 方向に 80mm, スパン (z) 方向に 80mm とした。一様な流入速度 $U_{ave}=0.25\text{m/s}$ で物質 A および B を予混合のない状態で上下層から投入し, 流入口から下流方向に 20mm の位置に設定した乱流格子によって等方的に拡散させ, 反応を起こさせた。乱流格子は一辺 2mm の正方角柱とした。反応は二次の不可逆反応 ($A+B \rightarrow 2P$) とし, 瞬間反応として酢酸 (物質 A) と水酸化アンモニウム (物質 B) の反応

を, 適度に速い反応として水酸化ナトリウム (物質 A) とギ酸メチル (物質 B) の反応

を想定した。この時の反応速度 k_r はそれぞれ $1.0 \times 10^8 \text{m}^3/(\text{mol s})$, $0.02 \text{m}^3/(\text{mol s})$ とし, 初期モル濃度 Γ_0 はそれぞれ 10mol/m^3 , 100mol/m^3 とした。

乱流格子を設定した y - z 平面の中心を原点とし, x , y , z は格子間隔 $M=20\text{mm}$ で無次元化した ($0 \leq x/M \leq 25$, $-2 \leq y/M \leq 2$, $-2 \leq z/M \leq 2$)。計算格子には乱流格子付近で間隔が密となる不等間隔スタガード格子を用い, グリッド数は x , y , z 方向に対してそれぞれ 520, 80, 80 とした。境界条件として, x 方向の出口には対流流出境界条件を, y , z 方向の壁面にはスリップ境界条件を与えた。式 (3) の移流項は 2 次精度完全保存スキーム⁽¹³⁾によって計算し, その他の項については 2 次精度中心差分法を用いた。解法にはフラクショナルステップ法を用い, 時間積分

Fig. 3: Computational domain.

は 2 次精度のクランク・ニコルソン法により行った。

代表長さおよび代表速度は, それぞれ $L_0 = M$ および $U_0 = U_{ave}$ とした。レイノルズ数 $Re (= U_0 L_0 / \nu)$ は 5000 とし, シュミット数 $Sc (= D_Z / \nu)$ は対象系が液相であることを考慮して 600 に設定した。したがって, 速度変動の最小スケールであるコルモゴロフスケール η_k に比べて, 濃度変動の最小スケールであるパチェラスケール $\eta_B (= \eta_k / Sc^{1/2})$ は約 25 分の 1 となる。

3.3 Chemtable の作成方法

3.3.1 支配方程式 本研究で扱う液相反応では反応に伴う密度変化や温度変化がないため, 反応面の支配方程式は次式の物質濃度に対する Z 空間の一次方程式で与えられる^{(4) (14)}。

$$\frac{\partial \Gamma_i}{\partial t} = \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 \Gamma_i}{\partial Z^2} + \omega_i \quad (5)$$

ここで, $\omega_A = \omega_B = -Da \Gamma_A \Gamma_B$, $\omega_P = +2Da \Gamma_A \Gamma_B$ である。 Da は数値実験上のダムケラ数であり, k_r および Γ_0 を用いて次式で与えられる。

$$Da = \frac{L_0 k_r \Gamma_0}{U_0} \quad (6)$$

また, χ はスカラー消散率であり, Z 空間では次のように与えられる^{(4) (15)}。

$$\chi(Z, \chi_{st}) = \chi_{st} \frac{\exp \left\{ -2 [\text{erfc}^{-1}(2Z)]^2 \right\}}{\exp \left\{ -2 [\text{erfc}^{-1}(2Z_{st})]^2 \right\}} \quad (7)$$

ここで, Z_{st} は, Γ_i の Z 空間分布において $\Gamma_A = \Gamma_B$ となる Z の値であり, 図 1 に示すように $Z_{st} = 0.5$ となる。また χ_{st} は $Z = Z_{st}$ における χ の値, erfc^{-1} は余誤差関数の逆関数である。

3.3.2 Large-Eddy Simulation との結合

図 4 に, Chemtable と LES との結合法の概略を示す。 χ_{st} をパラメータとして反応面の支配方程式 (5) を解くことにより, Γ_i を Z と χ_{st} の関数 $\Gamma_i(Z, \chi_{st})$ としてデータベース化することが可能となる。しかし, $\Gamma_i(Z, \chi_{st})$ は計算格子内の完全混合を想定しているため, LES の変動流れ場における $\bar{\Gamma}_i$ とは異なる。そこで, $\bar{\Gamma}_i(Z, \chi_{st})$ を, LES によって得られるパラメータ $\bar{Z}$, $\bar{Z}''^2$, $\bar{\chi}$ を用いて, それらの関数 $\bar{\Gamma}_i(\bar{Z}, \bar{Z}''^2, \bar{\chi})$ となるように整理し直す。具体的な方法は以下の通りである。

拡散燃焼では、物理量の変動は Z の変動に依存し、変動による確率密度はベータ関数分布に従う傾向があることが知られている⁽¹⁶⁾。本研究でも拡散燃焼と同様に、ベータ関数分布を PDF(確率密度関数)として用いることで、乱流変動による物理量の変動を考慮し、フィルタ化した物理量を次のように求める。

$$\bar{\Gamma}_i = \int \int \Gamma_i(Z, \chi_{st}) \bar{P}(Z, \chi_{st}) dZ d\chi_{st} \dots \dots (8)$$

ここで、 $\bar{P}(Z, \chi_{st})$ は SGS での変動に対する PDF を表す。 $\bar{P}(Z, \chi_{st})$ は通常、 $\bar{P}(Z, \chi_{st}) = \bar{P}(Z) \bar{P}(\chi_{st})$ として分離される。 χ_{st} による変動を表す $\bar{P}(\chi_{st})$ には lognormal 関数を使用することができるが⁽¹⁷⁾、この変動による影響は無視されることが多い⁽¹⁸⁾。この場合、 $\bar{P}(\chi_{st})$ には χ_{st} に関するデルタ関数を採用することができ、本研究でもデルタ関数を用いる。したがって、上式はより簡潔に、

$$\bar{\Gamma}_i = \int \Gamma_i(Z, \chi_{st}) \bar{P}(Z) dZ \dots \dots \dots (9)$$

と表せる。 $\bar{P}(Z)$ はベータ関数分布であり、次式で与えられる。

$$\bar{P}(Z) = \frac{Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1}}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)} \Gamma(\alpha + \beta), \dots \dots (10)$$

$$\alpha = \bar{Z} \gamma, \quad \beta = (1 - \bar{Z}) \gamma, \dots \dots \dots (11)$$

$$\gamma = \frac{\bar{Z}(1-\bar{Z})}{\bar{Z}''^2} - 1, \dots \dots \dots (12)$$

ここで、 $\Gamma(\alpha)$ 、 $\Gamma(\beta)$ 、 $\Gamma(\alpha + \beta)$ はガンマ関数である。式中に示されるように、ベータ関数分布は $\bar{Z}$ および $\bar{Z}''^2$ により関数形が変化する。したがって、変動流れ場から得られた $\bar{Z}$ および $\bar{Z}''^2$ により関数形を決定し、Chemtable 中の Z 空間で積分を行うことで、 $\bar{\Gamma}_i$ を次のように $\bar{Z}$ 、 $\bar{Z}''^2$ および χ_{st} の関数として求めることができる。

$$\bar{\Gamma}_i = \bar{\Gamma}_i(\bar{Z}, \bar{Z}''^2, \chi_{st}) \dots \dots \dots (13)$$

また、 $\bar{\chi}$ も同様の PDF を用いて式 (7) の $\chi(Z, \chi_{st})$ を Z 空間で積分することにより、

$$\bar{\chi} = \int \chi(Z, \chi_{st}) \bar{P}(Z) dZ \dots \dots \dots (14)$$

で求められる。この式によって $\bar{\chi}$ と χ_{st} を関連付け、 $\bar{\Gamma}_i$ を次のように $\bar{Z}$ 、 $\bar{Z}''^2$ および $\bar{\chi}$ の関数として求めることができる。

$$\bar{\Gamma}_i = \bar{\Gamma}_i(\bar{Z}, \bar{Z}''^2, \bar{\chi}) \dots \dots \dots (15)$$

したがって、本研究では χ_{st} を取りうる値の範囲の中で変動させて $\Gamma_i(Z, \chi_{st})$ を作成し、さらに $\bar{Z}$ 、 $\bar{Z}''^2$ を変動させた PDF を $\Gamma_i(Z, \chi_{st})$ および $\chi(Z, \chi_{st})$ に予め施すことにより、LES に対応した $\bar{\Gamma}_i(\bar{Z}, \bar{Z}''^2, \bar{\chi})$ の Chemtable を作成した。

Fig. 4: Chemtable for LES.

3.3.3 数値解法と計算条件 反応面の支配方程式 (5) の空間微分項には 2 次精度中心差分法を用いた。時間積分にはオイラー陰解法を用い、収束計算には SOR 法を用いた。その際、 Z 軸上のグリッド数は 3000 とし、 Z の領域 $0 \leq Z \leq 1$ を等間隔に分割した。境界条件としては、物質 A 側 ($Z = 1$) で $(\Gamma_A, \Gamma_B, \Gamma_P) = (1, 0, 0)$ を、物質 B 側 ($Z = 0$) で $(\Gamma_A, \Gamma_B, \Gamma_P) = (0, 1, 0)$ を与えた。

$\bar{Z}''^2$ には 0~0.25 の範囲を 50 等分して与えた。また、変動流れ場の $\bar{\chi}$ の上限値が 0.006 であったため、式 (7) の χ_{st} には 0~0.006 の範囲を 100 等分して与えた。

反応速度を表すダムケラ数 Da (式 (6)) は k_r および Γ_0 から、瞬間反応に対して 8.0×10^7 、適度に速い反応に対して 0.16 とした。

また上述のとおり、LES から Chemtable を参照するためには $\bar{Z}$ 、 $\bar{Z}''^2$ 、 $\bar{\chi}$ を求める必要があるが、LES から容易に算出できる $\bar{Z}$ および $\bar{\chi}$ とは異なり、 $\bar{Z}''^2$ は直接求めることができない。そこで本研究では、 $\bar{Z}''^2$ を Cook & Riley⁽¹⁶⁾ の Scale similarity モデルに従って、以下の式で与えた。

$$\bar{Z}''^2 \approx C_Z \widetilde{Z}''^2 = C_Z (\widetilde{Z}^2 - \bar{Z}^2) \dots \dots \dots (16)$$

ここで、上付き $\sim$ はテストフィルタ操作を表す。テストフィルタ幅は計算格子幅の 2 倍に設定した。Scale similarity モデルは Grid scale (GS) 内の乱流構造がテストフィルタ内の乱流構造と相似であるとの仮定に基づいたモデルである。式中の C_Z は $\bar{Z}''^2$ と $\widetilde{Z}''^2$ の相関係数であり、燃焼乱流場に対しては $C_Z = 1.0$ と

なることが知られている⁽¹⁶⁾が、液相反応乱流場に対しては、近年 Michioka & Komori⁽¹⁾により $C_Z = 5.0$ が適切であることが報告されている。そこで本研究では、計算結果に及ぼす C_Z の影響を検討するため、 $C_Z = 0, 1.0, 5.0$ と変化させた。

なお本研究では、式 (5) の定常解を Chemtable として用いる Steady flamelet モデル^{(3)~(6)}と、非定常解を Chemtable として用いる Unsteady Lagrangian flamelet モデル⁽⁷⁾の 2 つを用いて計算を行った。Steady flamelet モデルは燃焼反応の計算で良く用いられる手法であり、その Chemtable は対象系に依存しないという利点を有する。一方、Unsteady Lagrangian flamelet モデルは、Chemtable が対象系によって異なるという欠点を伴うものの、反応の経過時間を考慮できるという利点を有する。これは Unsteady Lagrangian flamelet モデルが、LES の計算結果をもとに、流れ場特有の物質滞留時間を加味すること起因する。

4. 結果および考察

4.1 Chemtable の特性 図 5 に Steady flamelet モデルの Chemtable の一例を示す。図 5(a) および (b) はそれぞれ瞬間反応および適度に速い反応に対応する Chemtable であり、各モル分率 $\bar{\Gamma}_i$ に及ぼす $\bar{Z}^{1/2}$ および $\bar{\chi}$ の影響を示す。両図から、生成物質のモル分率 $\bar{\Gamma}_P$ は、 $\bar{Z} = 0.5$ で最大値をとること、また、 $\bar{Z}^{1/2}$ の増大に伴い $\bar{\Gamma}_P$ は減少することがわかる。なお後者は、 $\bar{Z}^{1/2}$ の増大に伴い GS 内が完全混合状態から離れることに起因する。また、図 5(a) と図 5(b) を比較すると、 $\bar{\Gamma}_P$ は反応速度の増加に伴い増大することがわかる。さらに、瞬間反応を伴う場合には $\bar{\Gamma}_P$ が $\bar{\chi}$ に依存しないのに対して、適度に速い反応を伴う場合の $\bar{\Gamma}_P$ は $\bar{\chi}$ の増加に伴い減少することもわかる。

図 6 および図 7 に瞬間反応および適度に速い反応に対応する Unsteady Lagrangian flamelet モデルの Chemtable の一例を示す ($x/M = 5, 25$)。なお、本計算は断面流速が一様になる等方性乱流場を対象にしているため、経過時間 t は主流方向位置 x/M の関数に置き換えることができる。

図 6 から、瞬間反応を伴う場合の $\bar{\Gamma}_P$ は x/M によらず Steady flamelet モデルと同じ分布を示すことがわかる。これは、瞬間反応に対しては Chemtable が系に依存しないことを示している。また、図 7 から、適度に速い反応を伴う場合の $\bar{\Gamma}_P$ は下流に行くに従い増加することがわかる。したがって、Unsteady Lagrangian flamelet モデルは適度に速い反応の時間発展を考慮することが可能であると考えられ

Fig. 5: Examples of relation between $\bar{Z}$ and $\bar{\Gamma}_i$ for steady flamelet model.

Fig. 6: Examples of relation between $\bar{Z}$ and $\bar{\Gamma}_i$ for unsteady Lagrangian flamelet model in rapid reaction case.

る。なお、Unsteady Lagrangian flamelet モデルでは、式 (5) の χ として LES より得られる $\bar{\chi}$ の時間履歴を逆変換した値を用いるため、 $\bar{\chi}$ の取り得る値を予め指定する必要がない。したがって、LES からの参照パラメータとして $\bar{Z}$ 、 $\bar{Z}^{1/2}$ および反応の経過時間 t を用いる。

Fig. 7: Examples of relation between $\bar{Z}$ and $\bar{\Gamma}_i$ for unsteady Lagrangian flamelet model in moderately fast reaction case.

4.2 流動場および濃度場特性 図 8 に速度勾配テンソルに対する第二不変量の等値面を表す。図から、乱流格子によって生成された渦が下流に行くに従って減少することが確認できる。

図 9 に主流方向 (x) 及び鉛直方向 (y) の速度変動強度 $\langle U'^2 \rangle$, $\langle V'^2 \rangle$ の中心軸 (x 軸) 上主流方向分布を、実験値⁽¹¹⁾と比較して示す。ここで、 $\langle \rangle$ は時間平均値を表し、 U' , V' はそれぞれ主流方向及び鉛直方向速度 U , V の時間変動値 ($U = \langle U \rangle + U'$, $V = \langle V \rangle + V'$) である。図から、 $\langle U'^2 \rangle$, $\langle V'^2 \rangle$ の分布は実験値に近い値を示しながら、下流領域において減衰傾向を示すことがわかる。したがって、本計算では実験と同等の等方性減衰乱流場が形成されていると言える。

図 10 に x - y 断面における混合分率 $\bar{Z}$ の瞬間分布を示す。混合分率は反応の有無に関わらず不変な保存量であるため、反応速度によらず同じ分布となる。図から、混合層の境界である中心軸付近において混合が活発に起こり、下流に行くに従い混合領域が広がることをわかる。

図 11 に混合分率の変動強度 $\langle Z'^2 \rangle$ の主流 (x) 方向分布を示す。ここで、混合分率は反応を伴わない場合の物質 A のモル分率と一致するため、実験⁽¹¹⁾により得られた反応を伴わない場合の物質 A の濃度変動強度 $\langle \Gamma_A'^2 \rangle|_{\text{no reac}}$ を併せてプロットする。なお Z' , Γ_A' はそれぞれ Z , Γ_A の時間変動値 ($Z = \langle Z \rangle + Z'$,

Fig. 8: Distributions of second invariant in a grid-generated turbulence.

Fig. 9: Streamwise distributions of turbulence intensities of longitudinal and vertical velocity fluctuations $\langle U'^2 \rangle$ and $\langle V'^2 \rangle$.

$\Gamma_A = \langle \Gamma_A \rangle + \Gamma_A'$ である。本研究で用いた Scale similarity モデル⁽¹⁶⁾では、 $\langle Z'^2 \rangle$ を Sub-grid scale (SGS) 成分を考慮して以下のように与える。

$$\begin{aligned} \langle Z'^2 \rangle &= \langle \bar{Z}^2 \rangle - \langle \bar{Z} \rangle^2 + \langle \bar{Z}''^2 \rangle \\ &= \langle \bar{Z}^2 \rangle - \langle \bar{Z} \rangle^2 + C_Z \langle \bar{Z}''^2 \rangle \\ &= \langle \bar{Z}^2 \rangle - \langle \bar{Z} \rangle^2 \\ &\quad + C_Z \langle \bar{Z}^2 - \bar{Z}^2 \rangle \dots (17) \end{aligned}$$

ここで、右辺第 1 項および第 2 項の和は GS から算出される変動強度であり、右辺第 3 項は SGS における変動強度である。図から、燃焼乱流場に対して提案されている $C_Z=1.0$ ⁽¹⁶⁾よりも、Michioka & Komori⁽¹⁾により液相反応乱流場に対して提案された $C_Z=5.0$ の方が実験値⁽¹¹⁾に近い値をとることがわかる。

Fig. 10: Distribution of instantaneous mixture fraction $\bar{Z}$ on the x - y plane.

Fig. 11: Streamwise distributions of mean-squared mixture fraction fluctuation $\langle Z'^2 \rangle$.

4.3 Steady flamelet モデルの適用性

図 12 に瞬間反応および適度に速い反応を伴う場合の x - y 断面における生成物質のモル分率 $\bar{\Gamma}_P$ の瞬間分布の一例を示す。また、図 13 に Steady flamelet モデルを適用した場合の時間平均した生成物質のモル分率 $\langle \Gamma_P \rangle (= \langle \bar{\Gamma}_P \rangle)$ の主流 (x) 方向分布を実験値⁽¹²⁾と比較して示す。図 12 から、どちらの場合も混合が活発な中心軸付近で生成物質が生じるが、瞬間反応と適度に速い反応の間で生成物質濃度の分布には大きな差が見られないことがわかる。また、図 13 から、瞬間反応の $\langle \Gamma_P \rangle$ は $C_Z=5.0$ を用いることで実験値と良好に一致するが、適度に速い反応の $\langle \Gamma_P \rangle$ は実験値よりもかなり高い値をとることがわかる。これらは Steady flamelet モデルが反応の定常解のみを与え、比較的ゆるやかに進む反応の時間発展を考慮できないことに起因する。なお、 $x/M < 8$ の領域において計算値が実験値より高い値をとるのは、計算格子が粗いため初期の小さな乱流変動が捉えられていないためであると考えられる。

4.4 Unsteady Lagrangian flamelet モデルの適用性 図 14 に瞬間反応および適度に速い反応を伴う場合の x - y 断面における生成物質のモル分率 $\bar{\Gamma}_P$ の瞬間分布の一例を示す。また、図 15 に Unsteady Lagrangian flamelet モデルを適用した場合の時間平均した生成物質のモル分率 $\langle \Gamma_P \rangle$ の主流 (x) 方向分

Fig. 12: Distributions of instantaneous product mole fraction $\bar{\Gamma}_P$ on the x - y plane for steady flamelet model.

Fig. 13: Streamwise distributions of time-averaged product mole fraction $\langle \Gamma_P \rangle$ for steady flamelet model.

Fig. 14: Distributions of instantaneous product mole fraction $\bar{\Gamma}_P$ on the x - y plane for unsteady Lagrangian flamelet model.

布を実験値⁽¹²⁾と比較して示す。図 14 から、瞬間反応に比べて、適度に速い反応の生成物質濃度が低く示されることがわかる。また、図 15 から、適度に速い反応の $\langle \Gamma_P \rangle$ は実験値と良好に一致すること、および瞬間反応の $\langle \Gamma_P \rangle$ は前節で述べた Steady flamelet モデルを用いた値とほぼ同じ値をとることがわかる。

Fig. 15: Streamwise distributions of time-averaged product mole fraction $\langle \Gamma_P \rangle$ for unsteady Lagrangian flamelet model.

5. 結 言

本研究では、Flamelet モデルを組み込んだ LES を二次の不可逆反応を伴う液相格子乱流場に適用し、既往実験との比較を行うことによって、Flamelet モデルの液相反応乱流場への適用性を検討した。その結果、以下の知見を得た。

(1) 気相の燃焼乱流場に対して考案された Flamelet モデルは、スケール相似則のもとで C_Z の値を適切に与えることで、液相反応乱流場の LES に対しても適用可能である。

(2) 瞬間反応は Steady flamelet モデルによっても Unsteady Lagrangian flamelet モデルによっても予測可能であるが、適度に速い反応は遅い化学反応過程を考慮できる Unsteady Lagrangian flamelet モデルによってのみ予測可能である。

謝 辞

本研究を遂行するにあたり、(財) 電力中央研究所 道岡武信氏には貴重な助言をいただいた。また、計算の実行には、京都大学 中谷友昭氏に協力いただいた。ここに記して、謝意を表する。本計算の一部は、国立環境研究所地球環境センターのスーパーコンピュータを用いて行われた。

文 献

- (1) Michioka, T. & Komori, S., Large-eddy simulation of a turbulent reacting liquid flow, *AIChE J.*, 50, 2705-2720 (2004).
- (2) Onishi, R. & Komori, S., Thermally-Stratified Liquid Turbulence with a Chemical Reaction, *AIChE J.*, 52, 456-468 (2006).
- (3) Peters, N., Turbulent combustion, *Cambridge University Press* (2000).

- (4) Peters, N., Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, *Prog. Energy Combust. Sci.*, 10, 319-339 (1984).
- (5) Baba, Y. & Kurose, R., Analysis and flamelet modelling for spray combustion, *J. Fluid Mech.*, 612, 45-79 (2008).
- (6) Kurose, R., Large-eddy simulation of turbulent combustion - Application to spray combustion, *Journal of the Gas Turbine Society of Japan*, 35, 243-252 (2007).
- (7) Pitsch, H. & Steiner, H., Scalar mixing and dissipation rate in large-eddy simulations of non-premixed turbulent combustion, *Proc. Combust. Inst.*, 28, 41-49 (2000).
- (8) Pierce, C. D. & Moin, P., A dynamic model for subgrid-scale variance and dissipation rate of a conserved scalar, *Phys. Fluids*, 10, 3041-3044 (1998).
- (9) Meneveau, C., Lund, T. S. & Cabot, W. H., A Lagrangian dynamic subgrid-scale model of turbulence, *J. Fluid Mech.*, 319, 353-385 (1996).
- (10) Moin, P., Squire, K., Cabot, W. & Lee, S., A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport, *Phys. Fluids*, A3(11), 2746-2757 (1991).
- (11) Komori, S., T. Kanzaki, Y. Murakami, and H. Ueda, Simultaneous Measurements of Instantaneous Concentrations of Two Species Being Mixed in a Turbulent Flow by Using a Combined Laser-Induced Fluorescence and Laser-Scattering Technique, *Phys. Fluids A*, 1(2), 349 (1993).
- (12) Komori, S., T. Kanzaki, and Y. Murakami, Concentration Correlation in a Turbulent Mixing layer with Chemical Reactions, *J. Chem. Eng. Jpn.*, 27(6), 742 (1994).
- (13) Morinishi, Y., Lund, T. S., Vasilyev, O. V. & Moin, P., Fully conservative higher order finite difference schemes for incompressible flow, *J. Comput. Phys.*, 143, 90-124 (1998).
- (14) Baba, Y., Kurose, R., & Akamatsu, F., A study on numerical method and solution behavior of laminar diffusion flamelet equation, *JSME Ser. B*, 72, 2033-2040 (2006).
- (15) Pitsch, H. & Peters, N., A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects, *Combust. Flame*, 114, 26-40 (1998).
- (16) Cook, A. W. & Riley, J. J., A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flows, *Phys. Fluids*, 6, 2868-2870 (1994).
- (17) Pierce, C. D. & Moin, P., Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion, *J. Fluid Mech.*, 504, 73-94 (2004).
- (18) Pitsch, H., Creating flamelet library for the steady flamelet model or the flamelet/progress variable approach, *A c++ computer program for 0-D and 1-D laminar flame calculations* (2006).