乱流混合層中の粒子挙動に及ぼす代表粒子モデルの影響

Effects of Parcel Model on the Particle Motion in a Turbulent Mixing Layer

渡邊 裕章^{a*,**}, 上杉 太亮^b, 武藤 昌也^c

Hiroaki Watanabe, Daisuke Uesugi, Masaya Muto

Received 11 September 2014; Accepted 30 October 2014

Three-dimensional direct numerical simulation is performed in a particle-laden turbulent mixing layer to investigate the effects of a parcel modeling on the characteristics of particle dispersion, scalar diffusion and velocity fluctuation. The effects of the parcel model are carefully investigated and discussed in comparison with the case in which the parcel model is not used as a reference, RC, in terms of the number of particles represented by a parcel, N_p , and Stokes number defined by the particle relaxation time and Kolmogorov time scale, St . Results show that the parcel model can capture almost behavior of particle dispersion while the discrepancy between the model and RC becomes larger with increasing N_p . The evaporation rate is suppressed by employing the parcel model, because the vapor pressure in a cell is rapidly saturated by the parcel which represents a number of particles and subsequently the mass transfer number is underestimated. The trend of turbulence modulation is qualitatively captured by the cases employing the parcel model with the small N_p while the case with the larger N_p and St cannot capture the trend. It is therefore essential that N_p and St are carefully determined to avoid capturing the nonphysical behavior in a numerical simulation with the parcel model.

Keywords: Numerical simulation, Two-phase turbulent flow, Mixing layer, Particle dispersion, Parcel model

1. 緒 言

近年、計算機性能の飛躍的な向上により、複雑な物理現象を対象とする数値解析が可能となってきた。微粉炭燃焼ボイラや石炭ガス化炉等のエネルギー機器、輸送用エンジン等の推進機器などにおいて多く見られる混相燃焼流もまた複雑な物理現象を含む系の一つで

あるが、このような分散粒子を含む流れ場の解析手法には、大別すると粒子群の挙動を連続相と仮定して Euler 的に解く手法^{1,2)}と、個々の粒子の挙動を分散相と仮定して Basset-Boussinesq-Oseen (BBO) 方程式により Lagrange 的に解く手法^{3~6)}がある。Lagrange 法は、前者と比較して個々の粒子挙動を精度よく解析できる利点があるが、一方で、計算コストの観点から、系内の全ての分散粒子を時々刻々追跡するのは、極めて困難である場合が多い。そこで、分散粒子数が膨大となる実用規模の数値解析では、一般的に代表粒子モデルが用いられることが多い。代表粒子モデルとは、複数個の粒子を含んだ仮想粒子（パーセル）を追跡し、1つのパーセルの熱・物質・運動量、それぞれの相間交換量を複数倍して、複数個の粒子が滞留する効果を考慮するモデルである。この代表粒子モデルが数値解析の予測精度に及ぼす影響について、系統的に検討を行った研究例は極めて少ない。Nakamura *et al.* は、噴霧火炎の二次元直接数値計算を行い、代表粒子モデルはパーセルの分布が局所的になることが原因で、蒸発

a 一般財団法人電力中央研究所 エネルギー技術研究所
(〒240-0196 神奈川県横須賀市長坂 2-6-1)
Energy Engineering Research Laboratory, CRIEPI
(2-6-1 Nagasaka, Yokosuka, Kanagawa 240-0196, Japan)
b 東京大学大学院 新領域創成科学研究科
(〒277-8563 千葉県柏市柏の葉 5-1-5)
Department of Human and Engineered Environmental Studies,
The University of Tokyo
(5-1-5 Kashiwanoha, Kashiwa, Chiba 277-8563, Japan)
c 京都大学大学院 工学研究科 機械理工学専攻
(〒615-8540 京都府京都市西京区京都大学桂)
Department of Mechanical Engineering and Science, Kyoto
University
(Kyoto daigaku-Katsura, Nishikyo-ku, 615-8540, Japan)
*責任者連絡先 whiroaki@mech.kyushu-u.ac.jp
**現職 九州大学大学院 工学研究院 機械工学部門
(〒819-0395 福岡県福岡市西区元岡744)

量の予測が正確に行えないこと、またガス温度や火炎の位置の予測にも影響を及ぼすことを示唆した⁷⁾。また、武藤らは、代表粒子モデルのうち体積一定モデルと個数一定モデルに着目し、二次元直接数値計算によりパーセルの空間分散挙動を解析し、パーセルが代表する粒子数が大きくなるほど、誤差が大きくなることを指摘している⁸⁾。これらの研究は、いずれも代表粒子モデルが混相流による乱流変調やスカラ輸送、燃焼特性等の予測精度に大きな影響を及ぼすことを指摘しているものの、いずれも二次元流による検討であるため、本質的に三次元的な非定常現象である乱流との相互作用について正確に議論するに至っていない。

そこで本研究では、三次元乱流混合層を対象に分散粒子-流体二相流の直接数値計算を実施し、代表粒子モデルが粒子分散やスカラ輸送、乱流変調等の相間輸送現象に及ぼす影響を調べた。特に、粒子運動と乱流との相互作用を調べるため、乱流に関するコルモゴロフの時間スケールと粒子の緩和時間により定義される Stokes 数により、その特性を整理した。なお、本研究では、微小液滴を no-slip 界面を有する粒子と仮定し、液滴からの蒸発を相間のスカラ輸送として取り扱うが、これらの仮定が成立する微粉炭粒子等の微小固体粒子についても本研究と同様の議論が成り立つものと考えられる。

2. 計算方法

2.1 支配方程式

本研究では、分散粒子-流体の二相流の気相側について、低マッハ数近似を施した支配方程式を直接数値計算により解く。解くべき方程式は、次に示す連続の式、Navier-Stokes 方程式、エネルギー保存式、および化学種保存式である。

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

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

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j h}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho a \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + S_h \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \right) + S_{Yk} \quad (4)$$

ここで、 ρ は気相密度、 u_i は気相の i 方向の速度、 p は圧力、 h は気相の比エンタルピー、 a は気相の熱拡散率、 Y_k は k 化学種の質量分率、および D_k は k 化学種の気相に対する物質拡散係数である。また、 σ_{ij} は

粘性応力テンソルであり、次式で与えられる。

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

ここで、 μ は粘性係数である。 S_m 、 S_{ui} 、 S_h 、および S_{Yk} は、気相と粒子の相互作用（粒子運動、または蒸発）による質量、運動量、エンタルピー、および化学種の生成項を表し、次式により計算する。

$$S_m = -\frac{1}{\Delta V} \sum_N \frac{dm_p}{dt} \quad (6)$$

$$S_{ui} = -\frac{1}{\Delta V} \sum_N \frac{d}{dt} (m_p u_{p,i}) \quad (7)$$

$$S_h = -\frac{1}{\Delta V} \sum_N \left[\frac{1}{2} \frac{d}{dt} (m_p u_{p,i} u_{p,i}) + Q_p + \frac{d}{dt} (c_{p,p} m_p T_p) \right] \quad (8)$$

$$S_{Yk} = -\frac{1}{\Delta V} \sum_N \frac{dm_p}{dt} \quad (9)$$

ここで、 ΔV は検査体積、 N は各検査体積に存在する粒子個数、 $c_{p,p}$ は粒子比熱、 Q_p は対流熱流束である。

本研究では、n-デカン ($C_{10}H_{22}$) の液滴粒子を解析対象とし、その挙動は Lagrange 的に解くことにより求める。このとき、粒子相と気相との熱、物質、および運動量の交換を考える際には、PSI-Cell モデル¹⁰⁾を適用する。粒子密度は気相よりも十分に大きいと仮定し、粒子の挙動に対して抗力と重力の影響のみを考慮し、流れのせん断力に起因する揚力は無視する¹¹⁾。また、流れ場における粒子相の体積分率は十分小さいと考えられることから、粒子の衝突、および合体は考慮しない。さらに、液滴粒子の Weber 数は、最大でもおよそ 10^{-1} オーダと見積もられることから、分裂についても考慮しない。液滴の蒸発モデルには、非平衡 Langmuir-Knudsen モデルを用いる^{12,13)}。粒子の位置 ($x_{p,i}$)、速度 ($u_{p,i}$)、温度 (T_p)、および質量 (m_p) に関する保存式は、次式で表される。

$$\frac{dx_{p,i}}{dt} = u_{p,i} \quad (10)$$

$$\frac{du_{p,i}}{dt} = \frac{f_1}{\tau_p} (u_i - u_{p,i}) \quad (11)$$

$$\frac{dT_p}{dt} = \frac{Nu}{3Pr} \left(\frac{c_p}{c_{p,p}} \right) \left(\frac{f_2}{\tau_p} \right) (T - T_p) + \frac{1}{m_p} \left(\frac{dm_p}{dt} \right) \frac{L_v}{c_{p,p}} \quad (12)$$

$$\frac{dm_p}{dt} = -\frac{Sh}{3Sc} \frac{m_p}{\tau_p} \ln(1 + B_M) \quad (13)$$

Fig. 1 Schematics of computational domain.

ここで、 L_v は潜熱である。また、粒子緩和時間 τ_p は次式で定義される。

$$\tau_p = \frac{(\rho_p/\rho)d_p^2}{18\nu} \quad (14)$$

d_p は粒子径、 ρ_p は粒子の密度、 ν は混合気の動粘性係数である。Prandtl 数 Pr と Schmidt 数 Sc は、以下の式で計算される。

$$Pr = \frac{\mu}{\rho a} \quad (15)$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D_k} \quad (16)$$

Nusselt 数 Nu と Sherwood 数 Sh は、次の式で表される。

$$Nu = 2 + 0.552 Re_{sl}^{1/2} Pr^{1/3} \quad (17)$$

$$Sh = 2 + 0.552 Re_{sl}^{1/2} Sc^{1/3} \quad (18)$$

ここで、スリップ速度 $u_{sl} = |u_i - u_{p,i}|$ に基づく粒子 Reynolds 数 Re_{sl} を次のように定義する。

$$Re_{sl} = \frac{u_{sl} d_p}{\nu} \quad (19)$$

B_M は物質トランスファ数であり、次式で定義される。

$$B_M = \frac{Y_{V,s} - Y_V}{1 - Y_{V,s}} \quad (20)$$

ここで、 Y_V は粒子からの蒸発成分の質量分率である。 $Y_{V,s}$ は粒子表面付近での蒸発成分の質量分率であり、次式で計算される。

$$Y_{V,s} = \frac{\chi_s}{\chi_s + (1 - \chi_s) W_M / W_V} \quad (21)$$

$$\chi_s = \frac{p_{atm}}{p} \exp \left[\frac{L_v}{R/W_V} \left(\frac{1}{T_{B,L}} - \frac{1}{T_p} \right) \right] - \left(\frac{2L_k}{d_p} \right) \beta \quad (22)$$

$$L_k = \frac{\mu [2\pi T_p (R/W_V)]^{1/2}}{Scp} \quad (23)$$

ここで、 χ_s は粒子表面での蒸気のみ率であり、蒸気圧に対して非平衡状態を仮定している。 W_M と W_V はそれぞれ混合気と蒸気の分子量、 p_{atm} は大気圧、 R は一般ガス定数、 $T_{B,L}$ は液滴成分の沸点、 L_k は Knudsen 厚さ、 β は次式で表される無次元蒸発パラメータである。

$$\beta = - \left(\frac{\rho_p Pr}{8\mu} \right) \frac{dp_p^2}{dt} \quad (24)$$

Stokes 抗力と蒸発による熱移動の補正を表す関数 f_1 と f_2 は次のように表される¹⁴⁾。

$$f_1 = \frac{1 + 0.0545 Re_{sl} + 0.1 Re_{sl}^{1/2} (1 - 0.03 Re_{sl})}{1 + b |Re_b|^c} \quad (25)$$

$$b = 0.06 + 0.077 \exp(-0.4 Re_{sl}) \quad (26)$$

$$c = 0.4 + 0.77 \exp(-0.04 Re_{sl}) \quad (27)$$

$$f_2 = \frac{\beta}{e^\beta - 1} \quad (28)$$

ここで、粒子表面からの蒸気の吹出し速度 u_b に基づく Reynolds 数 Re_b は次のように定義する。

$$Re_b = \frac{u_b d_p}{\nu} \quad (29)$$

以上の支配方程式および計算手法の詳細については、文献^{5~8)}を参照されたい。

2.2 計算条件

本研究の対象系は、分散粒子-流体二相の三次元乱流混合層とし、分散粒子には、前述の通り気液界面に no-slip 条件を仮定する n-デカン液滴を用いる。なお、こうした分散 n-デカンの微小液滴粒子を含む二相乱流場の実プロセスとしては、灯油焚きボイラや航空用ジェットエンジン燃焼器内の噴霧燃焼場等が挙げられるが、本研究は乱流混合層を対象とする基礎的検討であり、界面が no-slip 条件であり水分蒸発や揮発分放出といった物理的・化学的な相間熱物質輸送現象を伴う微粉炭粒子などの固体粒子へも応用が可能と考えられる。Fig. 1 に計算領域を示す。計算領域は三次元の

Table 1 Cases presented.

Cases	Particles/Parcel N_p [-]	Particle size d_p [μm]	Stokes number St [-]	Mass flow rate Q_t [kg/s]	Equivalence ratio ϕ [-]
Case RC1	1				
Case N051	51	21.7	42	7.7×10^{-4}	1.1
Case N501	50				
Case RC2	1				
Case N052	5	34.5	100	7.7×10^{-4}	1.1
Case N502	50				
Case RC3	1				
Case N053	5	49.7	208	7.7×10^{-4}	1.1
Case N503	50				

$0.0 \leq x^* \leq 16.0$, $-1.0 \leq y^* \leq 1.0$, および $-1.0 \leq z^* \leq 1.0$ の直方体領域であり, 計算格子には, $600 \times 100 \times 100$ 点を等間隔に配置した。ただし, $x^* \equiv x/L_0$, $y^* \equiv y/L_0$, および $z^* \equiv z/L_0$ であり, 基準長さ (L_0) を 5×10^{-3} m とした。入口境界には, 300 K の空気を高速側流速 $u^{\text{high}} = 90$ m/s, および低速側流速 $u^{\text{low}} = 45$ m/s で流入させた。このとき, これらの速度差を基準とする Reynolds 数は15,000となる。高速流と低速流の境界には, 混合層の splitter plate 上に発達する乱流境界層を模擬するため, Spalart による境界層厚さに基づく流速分布¹⁵⁾を与えた。また, y^* 方向にはすべり境界条件, z^* 方向には周期境界条件, 出口境界には自由流出条件を与えた。

本研究では, 粒子運動と乱流との相互作用を調べるため, 乱流に関するコルモゴロフの時間スケール τ_K と粒子の緩和時間 τ_p により定義される Stokes 数 St により, その特性を整理する。

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_K} \quad (30)$$

$$\tau_K = \sqrt{\frac{\epsilon}{\nu}} \quad (31)$$

ここで, ϵ はエネルギー消散率である。Elghobashi による粒子-流体間の相間干渉に関するダイアグラム¹⁶⁾によると, $St \geq 100$ では粒子は乱れを増進させ, $St < 100$ では粒子は乱れを抑制する。本研究では, 投入する粒子の初期粒径として, $21.7 \mu\text{m}$, $34.5 \mu\text{m}$, および $49.7 \mu\text{m}$ の3条件を与えた。このとき, 中心軸上の $x^* = 8$ における τ_K を基準とすると, 対応する St は, それぞれ42, 100, および208となる。なお, これらの St は1よりも十分大きいので, 粒子の乱流渦への追

Fig. 2 Vertical distribution of time-averaged stream wise velocity.

従性は高くないと考えられる。粒子の投入流量は, $7.7 \times 10^{-4} \text{ kg/s}$ である。代表粒子モデルの条件としては, 1パーセルが代表する粒子数を5, および50個とし, 代表粒子モデルを用いない条件 (RC) と比較することにより, その特性を調べた。**Table 1** に, 本研究において検討する計算条件をまとめる。

各保存式の移流項には2次精度中心差分を用い, 5%の一次風上差分を加味した。時間進行は, Euler 陰解法を用いた。時間ステップは $1.5 \times 10^{-6} \text{ s}$ とし, このときの Courant 数は約0.8であった。**Fig. 2** に, 粒子投入前の单相流時の軸方向時間平均速度の y^* 方向分布を示す。ただし, 速度 u は流速差 $\Delta U = u^{\text{high}} - u^{\text{low}}$ で, 位置 y は $u = \Delta U = 1$ となる位置 $y_{0.5}$ と運動量厚さ θ で無次元化されている。サンプルした $x^* \geq 6.0$ の3断面において無次元速度が1本の曲線上に分布していることから, この領域で流れが自己保存の状態であり, 十分に発達した混合層であることがわかる。また,

Fig. 4 Comparison of particle dispersion in vertical direction.
(a) RC (b) $N_p=5$ (c) $N_p=50$

それよりもわずかに過小評価することがわかる。一方、 $N_p=50$ では y^* のほぼ全域に渡り、 $Y_{C_{10}H_{22}}$ の値は RC のそれを大きく下回ることがわかる。こうした傾向は St が大きくなっても同様に観察されるが、 $N_p=50$ の場合を比較すると、 St が大きくなるほど RC の値を過小に見積もる傾向が顕著になる。

次に、上述の現象をさらに理解するために、粒子の蒸発速度（各セルへの相間質量移動速度）に着目する。**Fig. 6** に、 $x^*=14$ における粒子の蒸発速度の y^* 方向分布の St ごとの比較を示す。RC の結果を St ごとに比較すると、 St が大きくなるにしたがい蒸発速度が遅くなることがわかる。これは、 St が小さい粒子に比べて比表面積が相対的に小さくなるためである。蒸発速度に対する代表粒子モデルの影響に注目すると、**Fig. 5** に見られたように、代表粒子モデルが各 St ごとに $Y_{C_{10}H_{22}}$ 分布に与える影響と同様の傾向をもつことがわかる。

このことから、代表粒子モデルを用いると相間の質量輸送に影響を及ぼし、それがさらに流れ場のスカラ輸送に影響を及ぼしていると理解することができる。代表粒子モデルを用いることで蒸発速度が抑制されるのは、パーセル数が少なくなるとともに N_p が大きくなることで、パーセルが存在するセルにおいて Eq. (20) 中の Y_V が RC よりも過大に見積もられ、結果として物質トランスファ数 B_M が過小に見積もられることによると考えられる。さらに、この傾向は、 St が大きくなるほどパーセル数が少なくなるため、顕著になるものと考えられる。

3. 3 乱流変動および相間の運動量輸送に対する代表粒子モデルの影響

Fig. 7 に、 $x^*=14$ における主流方向の流れの速度変動 u' の y^* 方向分布の St ごとの比較を示す。まず最初に、各 St 条件における RC と単相流の u' を比較する。 St が 40 の場合、RC の u' は単相流の u' よりも小さい値を示しているため、粒子によって乱れが抑制されること、すなわち、運動量は流体から粒子へ輸送されていることがわかる。この条件から St が大きくなるにしたがい、RC の u' は単相流のそれに近づいていくことから、流体から粒子への運動量輸送が減少することがわかる。次に u' に対する代表粒子モデルの影響に注目すると、いずれの St 条件においても y^* の負側では、RC の u' をよく再現できている。これは、**Fig. 3** に見られたように、 y^* の負側に分散している粒子は少なく、代表粒子モデルの影響は限定的であるためだと考えられる。一方、 y^* の正側や混合層境界付近の粒子濃度の高い領域では、RC の u' に比べ大きな値を示す。 $N_p=50$ では、単相流の u' と同等、もしくはそれ以上の値を示す。これらの挙動は、代表粒子モデルの使用によるパーセル数の減少に伴い、パーセルの空間分布に偏りが生じ、粒子のもつ乱れの抑制効果が小さく見積もられるためだと考えられる。特に、 St が 208 の場合では、パーセル数が極端に少なくなるため、 y^* のほぼ全域で、単相の u' にほぼ一致する結果となった。

上述の挙動をさらに詳細に調べるため、相間の運動量輸送について検討を行った。**Fig. 8** に、 $x^*=14$ に

(a) $St=40$

(b) $St=100$

(c) $St=208$

Fig. 5 Vertical distribution of time-averaged mass fraction of n-decane, Y_{C10H22} .

(a) $St=40$ (b) $St=100$ (c) $St=208$

における Eq. (2) の生成項 S_{ux} の y^* 方向分布の St ごとの比較を示す。ただし、 S_{ux} は、値が正のとき粒子から流体への運動量輸送を、値が負のとき流体から粒子への運動量輸送を表す。まず、各 St 条件の RC について着目する。 St が40の場合、 y^* の正側では S_{ux} の値が負であるため、流体から粒子へ運動量が輸送されていることがわかる。一方、 y^* の負側では S_u の値は

(a) $St=40$

(b) $St=100$

(c) $St=208$

Fig. 6 Vertical distribution of time-averaged evaporation rate, dm_p/dt .

(a) $St=40$ (b) $St=100$ (c) $St=208$

正となっており、粒子から流体へ運動量が輸送されている。これは、入口境界の高速側から流入した粒子が低速側へ分散したため、粒子の速度が流体の速度よりも速いためである。 St が40から大きくなるにしたがい、 y^* の負側における S_{ux} が正の値を取ることはな

Fig. 7 Vertical distribution of rms of axial velocity, u' .
(a) $St=40$ (b) $St=100$ (c) $St=208$

くなることがわかる。これは、前節で観察されたとおり、 St が大きくなると粒子が y^* の負側へ分散しにくくなるためである。他方、 y^* の正側では、 St が大きくなるにしたがい、運動量輸送量が大きくなる。次に S_{ux} に対する代表モデルの影響に注目すると、 $N_p=5$ の場合には、 St が40の場合に y^* の負側で S_{ux} が正の

Fig. 8 Vertical distribution of time-averaged axial momentum transfer, S_{ux} .
(a) $St=40$ (b) $St=100$ (c) $St=208$

値を示すことや、 St が大きくなるにしたがい y^* の正側で S_{ux} の絶対値が大きくなることなど、定性的な一致を見ていることがわかる。一方、 $N_p=50$ の場合は、いずれの St 条件においても S_{ux} が y^* 方向に大きく変動しているに加えて、 St が大きくなるにしたがい y^* の正側の S_{ux} の絶対値はむしろ小さくなる傾向にある。これは、 St が大きくなるにしたがって極端にパーセル数が少なくなり、流体・粒子間の相互作用

Fig. 9 Comparison of slip velocity, u_{sl} , and particle Reynolds number, Re_{sl} .
(a) Slip velocity (b) Particle Reynolds number

をもはや捉えることができないことを示している。

Fig. 9 に、 $y^*=0.5$ における各条件の u_{sl} および Re_{sl} 数の比較を示す。いずれの St 条件においても、RC に比べて代表粒子モデルは u_{sl} をより大きく見積もり、結果として Re_{sl} 数を過大に評価する傾向にある。 $N_p=5$ の場合は相対値で30%程度の過大に評価されるが、 $N_p=50$ ではそれが100%を超えることがわかる。特に、 St が208の場合は、 $N_p=50$ の条件で Re_{sl} 数が100を超えるが、これは液滴粒子の蒸発による湧き出し効果の補正係数 f_1 の適用範囲外であることが知られている¹⁴⁾。

4. 結 言

本研究では、分散粒子-流体二相の三次元乱流混合層の直接数値計算を実施し、代表粒子モデルが粒子分

散や相間の輸送現象に及ぼす影響について検討を行った。得られた主な知見は、以下の通りであった。

1. 混合層に発達する乱流によって分散される粒子の空間分布について、代表粒子モデルを使った計算は、代表粒子モデルを使わない計算 (RC) を概ね再現するが、1パーセルが代表する粒子数 N_p が多くなるほど、粒子の分散が抑制され、RC との差異が拡大する。これは、 N_p の増加に伴い計算領域内のパーセル数が少なくなるとともに、個々のパーセルが代表する粒子の総質量が大きくなるためである。
2. 代表粒子モデルを用いることで、蒸発（相間質量輸送）速度は抑制され、それがさらに流れ場のスカラー輸送量の減少に繋がる。これは、代表粒子モデルによりパーセル数が少なくなるとともに N_p が大きくなることで、パーセルが存在するセルにおいて液滴蒸気が RC よりも過大に見積もられ、結果として物質トランスファ数 B_M が過小に見積もられることによる。さらにこの傾向は、 St が大きくなるほど顕著になる。
3. 粒子による乱流変調について、 N_p が少ない場合、代表粒子モデルを使った計算は RC を概ね再現するが、 N_p が大きくなると、特に St が大きい条件において、流体・粒子間の相互作用が捉えられなくなる。また、 N_p の増加に伴い、 Re_{sl} 数は RC に比べて過大に評価される傾向にあるため、特に St が大きい条件では、Stokes 抵抗則の範囲を逸脱し、非物理的な挙動を示す可能性がある。
4. RC と代表粒子モデルを用いた場合の種々物理量の予測値の差異は、 N_p が 10^1 オーダになると急激に増大する。特に St が 10^2 を超える粒子に対して代表粒子モデルを用いる際には、相間の熱物質移動量や BBO 方程式に使用される数値モデルの適用範囲に注意し、 N_p を適切な値に設定する必要がある。

[謝辞] 本研究の一部は、JSPS 科研費25420173の助成を受けて実施された。ここに記して、謝意を表する。

Nomenclature

a : diffusion coefficient of enthalpy	[m ² /s]	D : diffusion coefficient	[m ² /s]
B_M : mass transfer number	[-]	d_p : particle diameter	[m]
c_p : specific heat	[J/(kg·K)]	f_p : particle volume fraction	[-]

h : total enthalpy	[J]	T : gaseous temperature	[K]
L_k : Knudsen thickness	[m]	t : time	[s]
L_V : latent heat of liquid fuel	[J/kg]	u : velocity	[m/s]
L_0 : characteristic length	[m]	V : control volume	[m ³]
m_p : particle mass	[kg]	x : x coordinate	[m]
N_p : particles/parcel	[—]	Y : species mass fraction	[—]
Nu : Nusselt number	[—]	y : y coordinate	[m]
Pr : Prandtl number	[—]	δ : Kronecker's delta	[—]
p : pressure	[Pa]	ϵ : dissipation rate	[m ² /s ³]
Q_f : mass flow rate	[kg/s]	ϕ : equivalence ratio	[—]
Q_p : convection heat flux	[W/m ²]	θ : momentum thickness	[m]
Re : Reynolds number	[—]	λ : thermal conductivity	[W/(m•K)]
S : source terms of interphase transfer	[kg/(m ³ •s)], [kg/(m ² •s ²)], [kgJ/(m ³ •s)]	μ : viscosity	[Pa•s]
Sc : Schmidt number	[—]	ν : kinematic viscosity	[m ² /s]
Sh : Sherwood number	[—]	ρ : density	[kg/m ³]
St : Stokes number	[—]	σ_{ij} : stress tensor	[Pa]
		τ : characteristic time	[s]
Subscript			
B : boiling point		S : surface	
b : blowing out		sl : slip	
h : enthalpy		p : particle	
i, j, k : direction		u : momentum	
K : Kolmogorov scale		V : vapor	
k : k-th species		Y : species	
m : mass			

References

- Boileau, M., Pascaud, S., Riber, E., Cuenot, B., Gicquel, L. Y. M., Poinot, T. J. and Cazalens, M. : “Investigation of two-fluid methods for large eddy simulation of spray combustion in gas turbines”, *Flow, Turbu. Combust.*, **80**, 291-321 (2007)
- Pedel, J., Thornock, J. N., Smith, P. J. : “Ignition of co-axial turbulent diffusion oxy-coal jet ames: Experiments and simulations collaboration”, *Combust. Flame*, **160**, 1112-1128 (2013)
- Watanabe, H. and Otaka, M. : “Numerical simulation of coal gasification in entrained flow coal gasifier”, *Fuel*, **85**, 1935-1943 (2006)
- Kurose, R., Watanabe, H. and Makino, H. : “Numerical simulations of pulverized coal combustion”, *KONA Powder Particle J.*, **27**, 144-156 (2009)
- Moriai, H., Kurose, R., Watanabe, H., Yano, H., Akamatsu, F. and Komori, S. : “Large-eddy simulation of turbulent spray combustion in a sub scale aircraft jet engine combustor - Predictions of NO and soot concentrations”, *J. Eng. Gas Turbines Power*, **135**, 091503 (2013)
- Watanabe, H., Kurose, R., Hayashi, M., Kitano, M., Komori, S. : “Effects of ambient pressure and precursors on soot formation in spray flames”, *Adv. Powder Technol.*, **25**, 1376-1387 (2014)
- Nakamura, M., Akamatsu, F., Kurose, R. and Katsuki, M. : “Combustion mechanism of liquid fuel spray entering gaseous flame front”, *Phys. Fluids*, **17**, 123301 (2005)
- Muto, M., Uesugi, D., Watanabe, H. and Makino, H. : “Effect of parcel models on turbulent property and scalar diffusion yield from dispersed liquid particles in a particle-laden turbulent mixing layer”, *J. Soc. Powder Technol., Japan*, **50**, 646-655 (2013)
- Elghobashi, S. : “Particle-laden turbulent flows: direct simulation and closure models”, *Appl. Sci. Res.*, **48**, 301-314 (1991)
- Crowe, C. T., Sharma, M. P. and Stock, D. E. : “The Particle-Source-in-Cell (PSI-CELL) model for gas-droplet flows”, *J. Fluids Eng.*, **99**, 325-332 (1977)
- Kurose, R. and Komori, S. : “Drag and lift forces on a rotating sphere in a linear shear flow”, *J. Fluid Mech.*, **384**, 183-206 (1999)
- Miller, R. S., Harstak, K., Bellan, J. : “Evaluation of equilibrium and nonequilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations”, *J. Multiphase Flow*, **24**, 1025-1055 (1998)
- Miller, R. S. and Bellan, J. : “Direct numerical simulation of a confined three-dimensional gas mixing layer with one evaporating hydrocarbon-droplet-laden stream”, *J. Fluid Mech.*, **384**, 293-338 (1999)
- Kurose, R., Makino, H., Komori, S., Nakamura, M., Akamatsu, F. and Katsuki, M. : “Effects of outflow from the surface of a sphere on drag, shear lift, and scalar diffusion”, *Phys. Fluids*, **15**, 2338-2351 (2003)
- Spalart, P. R. : “Direct simulation of a turbulent boundary layer up to $Re_\theta=1410$ ”, *J. Fluid Mech.*, **187**, 61-98 (1988)
- Elghobashi, S. : “On predicting particle-laden turbulent flows”, *J. Appl. Sci. Res.*, **52**, 309-329 (1994)