

■原著論文 / ORIGINAL PAPER ■

直接数値計算による乱流予混合火炎中の乱流エネルギーと
乱流スカラー流束の輸送特性の解析とモデリングAnalyzing and Modeling of Transport Properties of Turbulent Kinetic Energy and Turbulent
Scalar Flux in Turbulent Premixed Flames by DNS錦 慎之助^{1*}・長谷川 達也¹・BORGHI, Roland²・姫野 龍太郎³NISHIKI, Shinnosuke^{1*}, HASEGAWA, Tatsuya¹, BORGHI, Roland², and HIMENO, Ryutaro³¹ 名古屋工業大学大学院工学研究科都市循環システム工学専攻 〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町
Nagoya Institute of Technology, Gokiso-cho, Showa-ku, Nagoya, Aichi 466-8555, Japan² ESM2-マルセイユ第2大学/LMA-CNRS マルセイユ, フランス
ESM2-Université d'Aix-Marseille II and LMA-CNRS, Marseille, France³ 理化学研究所情報基盤研究部情報環境室 〒351-0198 和光市広沢2-1
RIKEN, 2-1 Hirosawa, Wako, Saitama 351-0198, Japan

2001年12月7日受付; 2002年1月10日受理 / Received 7 December 2001; Accepted 10 January 2002

Abstract : Turbulent premixed flames propagating in homogeneous isotropic turbulent flows were simulated with a single-step irreversible reaction. Two cases were calculated: case H, with a high-density ratio of flame $\rho_u/\rho_b = 7.53$, and case L, low-density ratio of flame $\rho_u/\rho_b = 2.50$, while u'/u_L was nearly equal to unity. We obtained databases of fully developed stationary turbulent flames. We investigated transport properties in turbulent kinetic energy and turbulent scalar flux by analyzing the transport equations, and we modeled the important terms in the transport equations. Analysis based on the Favre-averaged transport equation for turbulent kinetic energy showed that pressure related terms produced kinetic energy in the flame brush. The mean pressure gradient term, pressure dilatation term and additional dissipation components were modeled and these models well mimicked DNS. On the other hand, analysis based on the Favre-averaged transport equation for turbulent scalar flux showed that pressure concerning terms and velocity-reaction rate correlation term were positive sources to produce counter-gradient diffusion. The mean pressure gradient term, fluctuating pressure term, dissipation terms and velocity-reaction rate correlation term were modeled and these models well represented DNS.

Key Words : Turbulent premixed combustion, DNS, Modeling

1. 緒言

Karlovitz らによって火炎が乱れを増幅する作用 (Flame Generated Turbulence) が最初に提案されたのは 1953 年である[1]. また, 1980 年には Moss が乱流予混合火炎中の非勾配拡散 (Non-gradient diffusion) を実験で観察した[2]. さらに, 1981 年には Libby and Bray によって火炎が乱れを増幅する作用の理論的な考察がなされた[3]. 同時に, 逆勾配拡散 (Counter-Gradient diffusion) についての理論的な説明[3]や実験による観察 (例えば[2]) がなされた. しかしながら当時は, この重要な振舞いについての物理的な説明やモデル

化は十分にできていなかった. その後, 速度, 濃度, 温度, 反応の複雑に絡み合った乱流燃焼場を把握できる直接数値計算 (DNS) を利用した研究 (例えば Rutland and Trouvé[4]) が進められたが, 現在に至っても, 乱流予混合燃焼の理論的な説明やモデリングは十分に完成されたと言える状況には至っていない. 特に, 燃焼場でのスカラー流束の輸送方程式の中の圧力変動の関連する項と散逸項については, 十分な理解がされておらず, モデルも完成されていない.

本研究では, 近年のスーパーコンピュータの飛躍的な発達の恩恵を受け, 火炎前後の密度比 (燃焼による熱膨張) が異なる 2 つのケース, Case H: $\rho_u/\rho_b = 7.53$ および Case L: $\rho_u/\rho_b = 2.50$, についての直接数値計算を行い, 流入する一様等方性乱流中に十分に発達した定在する乱流予混合火炎データベースを構築することができた. このデータベース

* Corresponding author. E-mail: nishiki@yuki.mech.nitech.ac.jp

に基づき、乱流予混合火炎が乱流エネルギーや乱流スカラー流束に対して与える影響、すなわち火炎が乱れを増幅する作用や逆勾配拡散の発生メカニズムについて、それぞれの輸送方程式の解析によって調べた。また、輸送方程式の中の燃焼に関連する重要な項のモデル化を行った。

2. 数値計算法および計算条件

2.1. 基礎式

本研究では、圧縮性、粘性および発熱反応を考慮した三次元の流れ場を以下の仮定を用いて直接数値シミュレーションした。

- (1) 反応は一段不可逆反応とし、化学反応は Arrhenius の式に従う。
- (2) 体積粘性率、Soret 効果、Dufour 効果、圧力勾配拡散、体積力、ふく射熱損失は無視する。
- (3) 定圧比熱 C_p および比熱比 γ は一定とする。
- (4) 気体は理想気体の状態方程式に従うものとする。

これらの仮定より基礎方程式は次のように書ける。

・連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

・運動量保存の式

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (i=1,2,3) \quad (2)$$

・エネルギー保存の式

$$\frac{\partial e_i}{\partial t} + \frac{\partial\{(e_i + p)u_j\}}{\partial x_j} = \frac{\partial(u_j \tau_{kj})}{\partial x_k} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} \quad (3)$$

・化学種保存の式

$$\frac{\partial(\rho Y)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho Y u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \frac{\partial Y}{\partial x_j} \right) + W \quad (4)$$

また、各変数は次の通りである。

・せん断応力

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

・全エネルギー

$$e_i = \rho Q Y + \frac{\rho R T}{\gamma - 1} + \frac{\rho}{2} (u^2 + v^2 + w^2) \quad (6)$$

・熱流束

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} - \rho D Q \frac{\partial Y}{\partial x_i} \quad (7)$$

・反応速度

$$W = -B \rho Y T^\beta \exp\left(-\frac{\theta}{T}\right) \quad (8)$$

ここで、 μ 、 λ および D はそれぞれ粘性係数、熱伝導率および拡散係数である。また、 Q は発熱量 $[=C_p(T_a - T_0)]$ 、 R は気体定数、 B は反応の頻度因子、 β は温度依存性の次数、 θ は活性化エネルギーの特性温度である。

2.2. 数値計算法

座標系を Fig. 1 に示す。計算領域は $8 \text{ mm} \times 4 \text{ mm} \times 4 \text{ mm}$ の直方体である。長さが 8 mm の方向を流れ方向とし、一様等方性乱流の速度場を持った未燃焼ガスを計算領域に流入させ、燃焼後、流出する計算を行った。格子点数は 6 次精度中心差分法を用いる x 方向は 512 点、フーリエ級数スペクトル選点法を用いる y, z 方向は 128 点とした。時間積分は 3 段階ルンゲ・クッタ法を用いた。境界条件は x 方向には未燃焼ガスが流入し、既燃焼ガスが流出する境界条件として NSCBC (Navier-Stokes characteristic boundary conditions)[5,6] を用い、 y, z 方向には周期境界条件を用いた。

本研究では理化学研究所情報環境室に設置されている大型ベクトル並列型計算機 Fujitsu VPP700 を用いて直接数値シミュレーションを行った。計算時間は 32 PE を占有した場合で、実時間約 1 ms の計算を行うのに約 50 時間である。

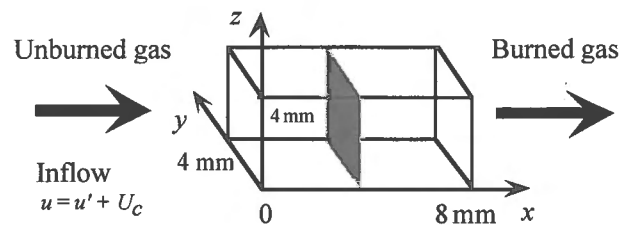


Fig. 1. Simulation domain and coordinate systems.

2.3. 予混合気体の物性

流入する予混合気体の圧力は $p_0 = 0.1 \text{ MPa}$ 、初期温度は $T_0 = 300 \text{ K}$ 、また、定圧比熱は $C_p = 1.25 \times 10^3 \text{ J/Kg}\cdot\text{K}$ 、比熱比は $\gamma = 1.4$ で一定値とした。初期温度での粘性係数は $\mu_0 = 1.77 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ とし、温度依存性は次のように与えた： $\mu = \mu_0 (T/T_0)^{0.7}$ 、 $Le = (\lambda \rho D C_p) = 1.0$ 、 $Pr = (\mu C_p / \lambda) = 0.75$ 。また、密度比が異なるケースでも、次式で定義した進行度変数 c 、

$$c = \frac{T - T_0}{T_a - T_0} = 1 - Y \quad (9)$$

と反応速度 W の関係が一致するように Case L の場合の反応速度の定義式 (式 8) を次のように修正した。

$$W = -B \rho Y T^\beta \exp\left(-\theta / \left[T + \left(\frac{T_0}{T_{2260} - T_0} - \frac{T_0}{T_a - T_0} \right) \right] \right) \quad (10)$$

ここで, T と θ は Case L の場合の断熱火炎温度と初期温度の差 ($T_a - T_0$) で無次元化された値で, T_{2260} は Case H の断熱火炎温度である. この修正により Case H と Case L で $c - W$ の関係を一致させた.

燃焼前後の密度比が異なる 2 つのケースの火炎の特性の違いは Table 1 にまとめた. なお, 層流火炎厚さは以下の式で定義した.

$$e_L = \frac{T_a - T_0}{\text{Max}|dT/dx|} \quad (11)$$

2.4. 初期条件

初期の火炎は Fig. 1 に示すように平面火炎とし, 計算領域内の初期の温度分布, 質量分率, 膨張速度および圧力分布は, 予め計算した一次元層流予混合火炎の計算データを使用した.

計算領域内の初期速度分布は, 予め計算した一様等方性乱流の速度場に平均流入速度 U_c と膨張速度を加えて与えた. 一様等方性乱流の速度場は以下のように計算した. 初めに, 次式のエネルギースペクトル[7]を与え, 一様性, 等方性および非圧縮性を満たすように初期乱流場を生成した[8].

$$E(k) = 16u_0'^2 \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{k^4}{k_0^5} \exp\left\{-2\left(\frac{k}{k_0}\right)^2\right\} \quad (12)$$

Table 1. Characteristics of flames.

	Case H	Case L
ρ_u/ρ_b	7.53	2.50
T_a	2260 K	750 K
u_L	0.6000 m/s	0.4162 m/s
e_L	0.217 mm	0.158 mm

Table 2. Characteristics of homogeneous isotropic turbulence.

	Case H	Case L
u'/u_L	0.88	1.26
l_t/e_L	15.9	21.8
l_m/e_L	9.44	13.0
l_d/e_L	0.65	0.90
Re_{lt}	95.5	95.5
Re_{lm}	56.7	56.7

ここで, $k_0 = 6$, 初期乱れ強さは $u_0' = 3.87$ m/s とした. 次に, 計算領域は一辺が 4 mm の立方体, 格子点数は各辺で 256 点とし, 空間微分にフーリエ級数スペクトル選点法, 時間積分に 5 段階ルンゲ・クッタ法を用いて, 計算開始時の乱流特性時間の約 2 倍まで計算した. 得られた一様等方性乱流の特性値を Table 2 に示す. なお, 積分スケール, テイラー・マイクロスケール, コルモゴロフ・スケールは次式から算出した[7].

・積分スケール

$$l_t = \frac{3\pi \int_0^\infty k^{-1} E(k) dk}{4 \int_0^\infty E(k) dk} \quad (13)$$

・テイラー・マイクロスケール

$$l_m = \sqrt{\frac{10\nu \int_0^\infty E(k) dk}{\varepsilon}} \quad (14)$$

・コルモゴロフ・スケール

$$l_d = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{0.25} \quad (15)$$

また, ε はエネルギー散逸率で, 次式から算出した.

$$\varepsilon = 2\nu \int_0^\infty k^2 E(k) dk \quad (16)$$

上式で, 波数 k の積分は 64 までで打ち切った. その理由は, 高波数領域でのエイリアシング・エラーの影響を排除するためと, $k = 65$ より高波数側でエイリアシング・エラーのない領域のエネルギースペクトル $E(k)$ が十分に小さい値だからである.

この得られた一様等方性乱流場 (4 mm × 4 mm × 4 mm) を乱流予混合燃焼の計算領域 (Fig. 1) の x 方向に連続して配置し, 平均流入速度 U_c と膨張速度を加えて初期の計算領域内の速度分布とした. また, 流入境界での速度分布は, 得られた一様等方性乱流場に平均流入速度 U_c を加え, テイラーの仮説を用いて位相をシフトさせながら与えた[9]. 計算開始時の平均流入速度 U_c はそれぞれのケースの層流燃焼速度 u_L とした.

3. 計算結果および考察

3.1. 火炎の形状

計算開始後, 時間経過とともにしわ状火炎が発達し, 火炎の伝播速度が増加するのに対応して, 未燃予混合気の平均流入速度を計算の途中で増加させた. Case H の場合は, 計算開始後, 4.65 ms に平均流入速度を 0.6 m/s から 1.0 m/s へ, 9.30 ms に 1.0 m/s から 1.146 m/s へ変化させた. 一方, Case L の場合は, 計算開始後, 12.4 ms に平均流入速度を 0.4162 m/s から 0.7162 m/s へ, 20.7 ms に 0.7162 m/s から 0.7862 m/s へ変化させた. これにより, 発達したしわ状火炎を計算領域内に長時間留まらせることができた. データ

ベースの解析は、火炎が十分に発達してある領域に定在している時間帯で行った。それぞれ、Case H は 9.30 ms から 20.7 ms まで (サンプリング間隔: 0.0517 ms), また Case L は 20.7 ms から 30.9 ms まで (サンプリング間隔: 0.1034 ms) である。

火炎形状の時間経過の様子を Fig. 2 に示す。ある一定領

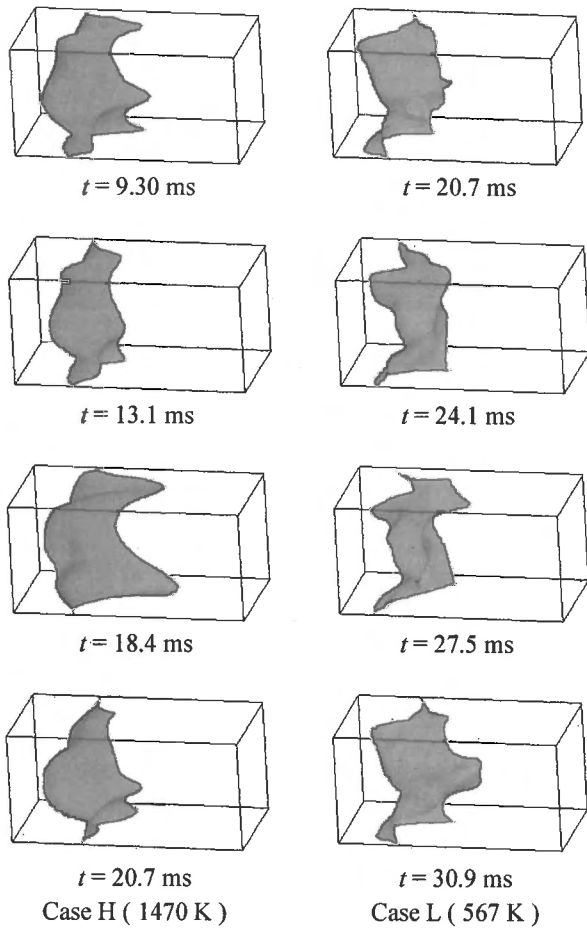


Fig.2 Temporal evolution of wrinkled flames: contour surfaces of progress variable $c = 0.6$.

域内に定在した十分に発達したしわ状火炎となっている様子が分かる。

3.2. 乱流エネルギー

流れ方向に沿った乱れの変化の様子を次の4つのPartに区分して調べた。各時刻における y - z 断面での進行度変数 c の平均値が 0.01 から 0.99 の間を火炎領域と定義し、火炎領域の手前の未燃焼部分を Part 1, 火炎領域内の未燃焼部分 ($c < 0.01$ のすべての格子点) を Part 2, 既燃焼部分 ($c > 0.99$ のすべての格子点) を Part 3, および火炎領域の下流側の既燃焼部分を Part 4 とした。それぞれの Part で各方向速度成分の乱れ強さをファール平均により算出し、時間平均した結果を Fig. 3 に示す。Case H では、すべての速度成分の乱れが火炎領域の既燃焼部分 (Part 3) で増加し、特に流れ方向の乱れ u'' が増加している。一方、Case L では、各速度とも流れ方向に沿って乱れは減少しているが、火炎領域の既燃焼部分 (Part 3) で流れ方向成分の乱れ u'' が他の方向成分の乱れよりも大きくなっている。流入してくる乱流は自由乱流で x 方向に進むにつれて乱れは減衰していくが、火炎領域の既燃焼部分 (Part 3) でわずかに流れ方向の乱れが他の方向成分に比べて大きくなっている。このことから、火炎前後の密度比が小さいケースでも火炎によって乱れが生成されていることが分かる。

火炎が生成する乱れの発生メカニズムをファール平均が施された乱流エネルギーの輸送方程式を用いて解析した。輸送方程式は運動量保存式から導出して、次のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{k}}{\partial t} + \bar{u}_k \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_k} = & \underbrace{-\frac{\overline{\partial u_i' u_k'}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_k}}_{(I)} - \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \overline{\rho u_i' u_k'}}{2 \partial x_k}}_{(II)} \\ & - \underbrace{\frac{\bar{u}_i' \partial \bar{p}}{\bar{\rho} \partial x_i}}_{(III)} - \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{u_i' \frac{\partial p'}{\partial x_i}}}_{(IV)} + \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{u_i' \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k}}}_{(V)} \end{aligned} \quad (17)$$

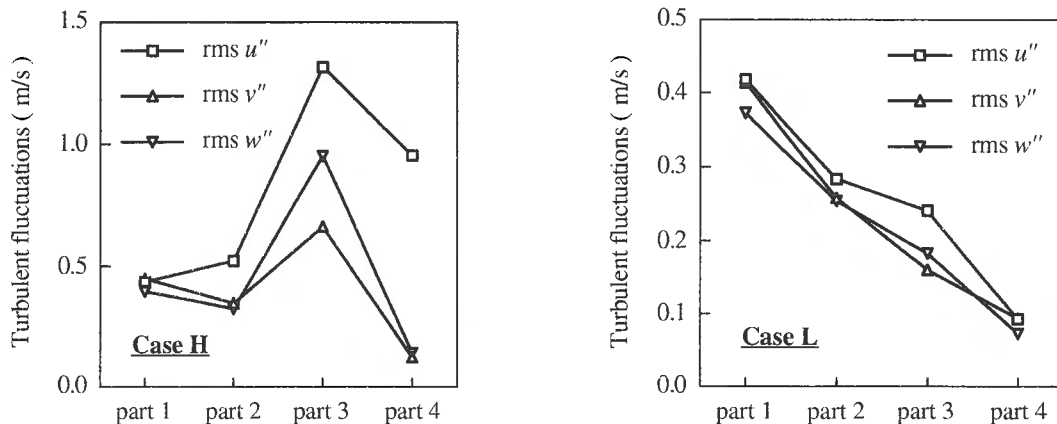


Fig.3 Evolution of turbulent fluctuations calculated conditionally: u'' is the streamwise component, v'' and w'' are transvers components. Part 1: unburnt gas area in front of the flame brush; part 2: unburnt gas area in the flame brush; part 3: burnt gas area in the flame brush; part 4: burnt gas area behind the flame brush.

ここで, (I) は平均速度勾配による生成項, (II) は乱流拡散項, (III) は平均圧力勾配による生成項, (IV) は圧力作用項, (V) は粘性による拡散および散逸項である.

各項の時間平均した分布を Fig. 4 に示す. Case H では, 火炎領域において平均圧力勾配による生成項 (III) が乱流エネルギーの増加に最も寄与し, 圧力作用項 (IV) も増加に貢献している. また, 粘性による拡散および散逸項 (V) と平均速度勾配による生成項 (I) は乱流エネルギーを減少させていることが分かる. 火炎を通過する際の乱流エネルギーの増減を見積もるためには対流項 (O1) を平均速度 \bar{u} で割った $\partial \bar{k} / \partial x$ を x 方向に積分する. Case H の場合は燃焼前後の密度比が 7.53 なので燃焼後の x 方向の平均速度は約 7.53 倍に増加する. 火炎領域内では次第に平均速度が増加していくため $\partial \bar{k} / \partial x$ の積分値は正の値となり, 火炎を通過することによって乱流エネルギーが増加することを示す. これは Fig. 3 の各成分の自乗の和が燃焼前より燃焼後の方

が大きくなっていることと一致している. 一方, Case L では, 圧力作用項 (IV) の方が平均圧力勾配による生成項 (III) より乱流エネルギーの増加に対する寄与が大きくなっていることが分かる. また, $\partial \bar{k} / \partial x$ が常に負であることから乱流エネルギーは減少し続けることを示している. しかし, 流入してくる乱流は自由乱流で, 火炎がなければ x 方向に進むにつれて次第に減衰していくが, 火炎領域では対流項 (O1) の値が小さく (0 に近づく) なり, 減衰の割合が小さくなっていることを示している. このことは火炎の影響を受けて乱れが生成されていることを指し示している.

輸送方程式の各項のうち, 圧力作用項 (IV) は圧力拡散項 (IV1) と圧力膨張項 (IV2) に変形することができる. また同様に, 粘性による拡散および散逸項 (V) は散逸の項 (V1), 燃焼に起因する項 (V2) と (V3), およびその他の微小項の和 Δ に変形することができる.

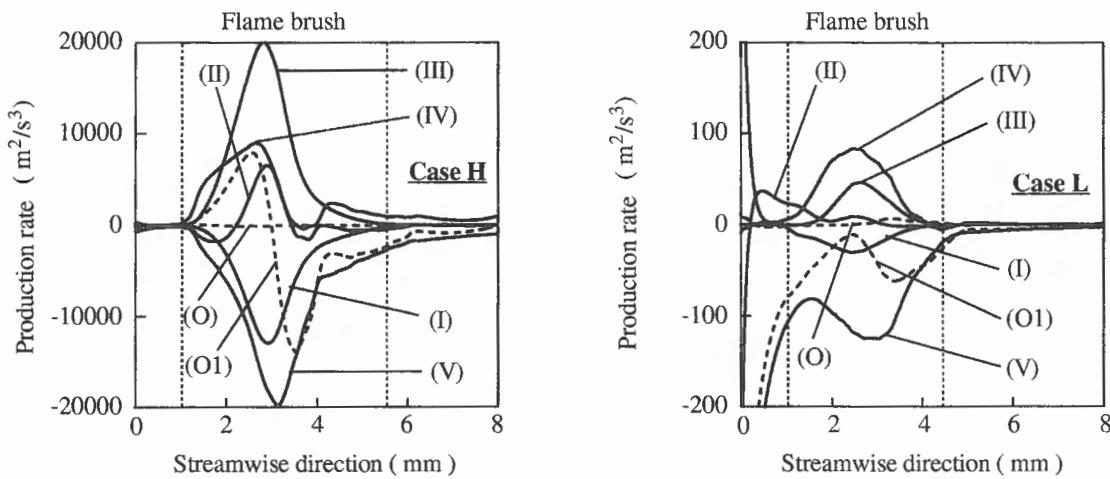


Fig.4 Streamwise balance of the production rate of turbulent kinetic energy in Eq. 17. The flame brush is defined between values of 0.005 and 0.995 for the Favre-averaged progress variable. The term (O) is calculated from the transport equation by subtracting the convection term from the right side.

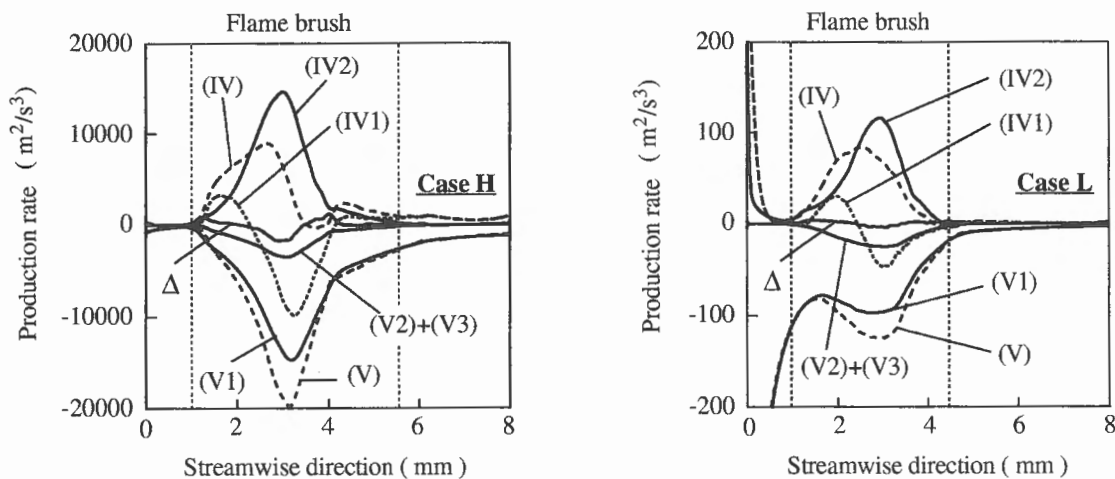


Fig.5 Streamwise evolution of the decomposed pressure work term in Eq. 18 and the decomposed diffusion and dissipation term in Eq.19.

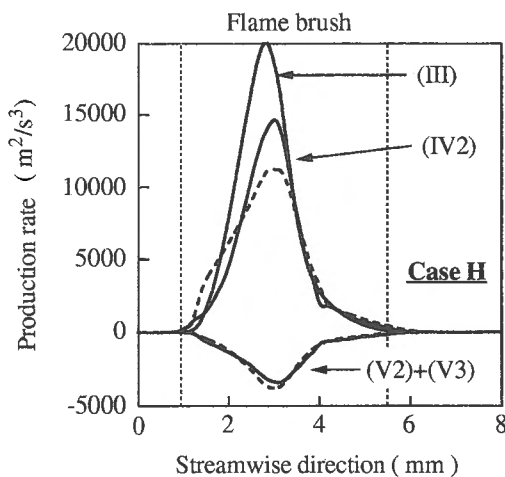
$$\underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{u_i' \frac{\partial \bar{p}'}{\partial x_i}}}_{(IV)} = - \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{\frac{\partial \rho' u_i''}{\partial x_i}}}_{(IV1)} + \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i}}}_{(IV2)} \quad (18)$$

$$\underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{u_i' \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k}}}_{(V)} = - \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{\mu \frac{\partial u_i''}{\partial x_k} \frac{\partial u_i''}{\partial x_k}}}_{(V1)} + \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{u_i' \frac{\partial (\mu \frac{\partial u_k''}{\partial x_i})}{\partial x_k}}}_{(V2)} - \underbrace{\frac{2}{3} \frac{1}{\bar{\rho}} \overline{\frac{\partial (\mu \frac{\partial u_\gamma''}{\partial x_\gamma})}{\partial x_k} u_k''}}_{(V3)} + \Delta \quad (19)$$

上の二つの式の各項の時間平均した分布を Fig. 5 に示す。Case H と Case L はグラフの縦軸のスケールが 2 桁違っているものの、良く似た分布を示している。火炎領域では圧力作用項 (IV) に関する項のうち、圧力膨張項 (IV2) は常に正の値を持ち乱流エネルギーを増加させる効果を示す。また、圧力拡散項 (IV1) の値は流れに沿って正から負に変化するが、全体として $\partial \bar{k} / \partial t$ を減少させる効果があり、乱流エネルギーを減少させる効果を持っていることが分かる。一方、粘性による拡散および散逸項 (V) に関する項では、散逸の項 (V1) が支配的であることが分かる。しかし、燃焼に起因する項 (V2)+(V3) も負の値を示しており、無視することはできない影響を持っている。また、その他の微小項の和 Δ は Case H では正負に変動する値を持つが火炎領域内のトータルの効果は無視でき、Case L でもその効果は無視できる程度に小さい。

次に、平均圧力勾配による生成項 (III)、圧力膨張項 (IV2)、燃焼に起因する項 (V2) + (V3) についてのモデル化について説明する。なお、モデル定数 C は次の式で定義した。

$$\int_{x_1; \bar{c}=0.005}^{x_2; \bar{c}=0.995} \text{DNS } dx = C \int_{x_1; \bar{c}=0.005}^{x_2; \bar{c}=0.995} \text{Model } dx \quad (20)$$



第一に、平均圧力勾配による生成項 (III) のモデル化は以下のように行った。まず、密度 ρ は進行度変数 c を用いて次式のように仮定した。

$$\frac{1}{\rho(c)} \approx \frac{c}{\rho_b} + \frac{1-c}{\rho_u} \quad (21)$$

なお、上式は $\rho(c) = \rho_u / (1 + \tau_p c)$ [10] を式変形して得られる。ここで、 $\tau_p = \rho_u / \rho_b - 1$ である。そして、 u'' の平均は確率密度関数 $P(c)$ および式 21 の関係を用いることで次のように書ける。

$$\begin{aligned} \overline{u''} &\approx \int_0^1 u'' P(c) dc = \int_0^1 \rho(c) u'' \frac{P(c)}{\rho(c)} dc \\ &\approx \int_0^1 \rho(c) \left(\frac{c u''}{\rho_b} + \frac{(1-c) u''}{\rho_u} \right) P(c) dc \end{aligned}$$

ここで、 $c = \bar{c} + c''$ を代入して、

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\rho_b} (\bar{c} \overline{\rho u''} + \overline{\rho u'' c''}) + \frac{1}{\rho_u} (\overline{\rho u''} - \bar{c} \overline{\rho u''} - \overline{\rho u'' c''}) \\ &= \left(\frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u} \right) \overline{\rho u'' c''} \end{aligned} \quad (22)$$

この結果、平均圧力勾配による生成項 (III) は次のようにモデル化できる。

$$-\frac{\overline{u_i' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}}}{\bar{\rho}} \approx - \left(\frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u} \right) \frac{\overline{\rho u_i'' c''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} \quad (23)$$

モデルと DNS のデータを比較したグラフを Fig. 6 に示す。モデル定数は Case H, L 共に 1 で、モデルと DNS データは非常に良く一致した分布を示す。

第二に、圧力膨張項 (IV2) のモデル化は次のように行っ

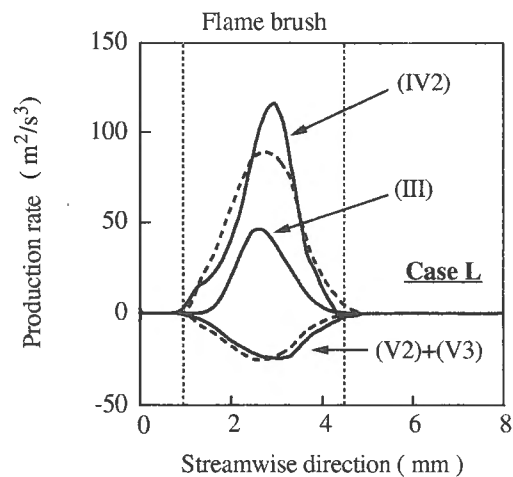


Fig.6 Comparison of (III) the mean pressure gradient term model of Eq. 23, (IV2) the pressure dilatation term model of Eq. 26 and (V2)+(V3) the additional dissipation components model of Eq. 30 with DNS data. The solid line is DNS data and the dashed line is the model. The model of the mean pressure gradient term is completely coincident with the DNS.

た. まず, p' は火炎面前後の圧力差とモデル化した.

$$p' \approx |\Delta p|_L = \rho_u u_L \Delta u = \rho_u u_L^2 (\rho_u / \rho_b - 1) \quad (24)$$

ここで, 乱流運動による圧力変動を乱流エネルギーで見積もると $p' = 1.5 \rho_u u'^2$ となる. これと式 24 を比較すると, Case H では火炎面前後の圧力差でモデル化した圧力変動は乱流運動から見積もった圧力変動の約 5 倍以上であるのに対して, Case L では両者はほぼ同じ値となる. Case H の場合は乱流運動による圧力変動を無視することができないことはないが, Case L の場合は流入してくる乱流の乱れ強さが火炎面に到達するまでに多少減衰していることを考慮しても無視することのできない効果があると考えられる. しかしながら, 火炎付近や火炎の下流側では乱流運動が火炎から影響を受けており, それを見積もることは困難であるため, 本研究では乱流運動に伴う圧力変動は考慮しないでモデル化を行った.

また, $\partial u_i'' / \partial x_i$ は火炎面前後の速度差と火炎厚さの比としてモデル化した.

$$\frac{\partial u_i''}{\partial x_i} \approx u_L \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) / e_L \quad (25)$$

この結果, 圧力膨張項 (IV2) は次のようにモデル化できる.

$$\begin{aligned} + \frac{1}{\bar{\rho}} p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i} &\approx + \frac{1}{\bar{\rho}} \rho_u u_L^2 \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) \frac{u_L}{e_L} \times \Sigma e_L \\ &\approx C_{IV2} \tilde{\omega} u_L^2 \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) \end{aligned} \quad (26)$$

ここで, Σ は単位体積当たりの火炎の表面積である. また, 次の関係 (Flame-surface density model[11]) を用いた.

$$\bar{\rho} \tilde{\omega} \approx \rho_u \mu_L \Sigma \quad (27)$$

ここで, $\rho \dot{\omega} = -W$ の関係がある. モデルと DNS のデータを比較したグラフを Fig. 6 に示す. モデル定数は Case H では $C_{IV2} = 0.35$, Case L では $C_{IV2} = 0.34$ である. 両ケースともモデルと DNS データでは最大値に差があるものの, 良く似た分布を示す.

第三に, 燃焼に起因する項 (V2) + (V3) のモデル化は以下のように行った. まず, $\partial u_i'' / \partial x_i$ は式 25 のように火炎面前後の速度差と火炎厚さの比としてモデル化した. また, u'' はファールブル平均を施した乱流エネルギーの平方根, ∂x_i は層流火炎厚さと仮定した. この結果, 燃焼に起因する項 (V2) + (V3) は次のようにモデル化できる.

$$\begin{aligned} (V2) + (V3) &\approx - \frac{1}{\bar{\rho}} C_{add} \bar{\mu} \frac{\bar{k}^{1/2}}{e_L} \frac{\Delta u}{e_L} \times \Sigma e_L \\ &= - \frac{1}{\bar{\rho}} C_{add} \frac{\bar{\mu}}{e_L \mu_L} \bar{k}^{1/2} u_L^2 \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) \times \Sigma \end{aligned} \quad (28)$$

さらに, 式 27 および次の関係を用いることで,

$$\bar{\mu} / e_L \mu_L \approx \rho_u \quad (29)$$

最終的に次のモデルが得られる.

$$(V2) + (V3) \approx - C_{add} \bar{k}^{1/2} u_L (\rho_u / \rho_b - 1) \tilde{\omega} \quad (30)$$

モデルと DNS のデータを比較したグラフを Fig. 6 に示す. モデル定数は Case H では $C_{add} = 0.29$, Case L では $C_{add} = 0.25$ である. 両ケースともモデルと DNS データは良く似た分布を示す.

3.3. 乱流スカラー流束

現在の乱流予混合燃焼のモデル方程式では, 乱流スカラー流束の評価はいまいな部分があり, 多くは次に示すような勾配拡散モデルを用いている.

$$\overline{\rho u'' c''} \approx - \frac{\mu_t}{\sigma_c} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \quad (31)$$

ここで, μ_t は乱流粘性係数, σ_c は乱流シュミット数である. これは乱流スカラー流束に対する標準的なモデルである. また, 本研究では Lewis 数を 1 と仮定しており, 式 9 の関係が成り立つ. すなわち, 進行度変数 c は生成物の濃度と同じことを意味している. 本研究の計算条件に勾配拡散モデル (式 31) を当てはめると $\partial \bar{c} / \partial x$ は火炎領域では正の値を示し, 乱流スカラー流束は負の値となる. しかしながら, DNS データから算出した乱流スカラー流束の分布は Fig. 7 に示すように正の値となり, 本研究において勾配とは逆の拡散, すなわち逆勾配拡散が発生していることが分かる. なお, Fig. 7 の値は時間平均した値である. 乱流燃焼の問題において逆勾配拡散の存在が理論的にも実験的にも指摘されている [2,3,12]. Bray-Moss-Libby model[3,12]では火炎前後の速度差に着目して乱流スカラー流束を次のようにモデル化した.

$$\overline{\rho u'' c''} \approx \bar{\rho} \bar{c} (1 - \bar{c}) (\bar{u}_b - \bar{u}_u) \quad (32)$$

この BML モデルでは乱流スカラー流束の値は常に正となり, 逆勾配拡散のモデルである. DNS データから算出した値と比較するために, BML モデルで見積もった値を Fig. 7 に示す. この図より, BML モデルは密度比の異なる両方のケースで DNS データから算出した分布と良く似た分布を示すことが分かる.

逆勾配拡散の発生のメカニズムをファールブル平均が施された乱流スカラー流束の輸送方程式を用いて解析した. 輸送方程式は運動量保存式と進行度変数 c の保存式から導出して, 次のように表される.

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\frac{\partial \overline{\rho u_j'' c''}}{\partial t}}_{(O)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho u_j'' c'' u_i})}_{(O1)} = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho u_i'' u_j'' c''})}_{(A)} \\
 - \underbrace{\overline{\rho u_j'' u_i''} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x_i}}_{(B)} - \underbrace{\overline{\rho c'' u_i''} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i}}_{(C)} - \underbrace{\bar{c}'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}}_{(D)} - \underbrace{\bar{c}'' \frac{\partial \bar{p}'}{\partial x_j}}_{(E)} \\
 + \underbrace{u_j'' \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i}})}_{(F)} + \underbrace{c'' \frac{\partial \bar{\tau}_{ji}}{\partial x_i}}_{(G)} + \underbrace{\overline{\rho u_j'' \dot{\omega}}}_{(H)} \quad (33)
 \end{aligned}$$

ここで、(A) は乱流輸送項、(B) は平均進行度変数の勾配による生成項、(C) は平均速度勾配による生成項、(D) は平均圧力勾配による生成項、(E) は圧力変動による生成項、(F) は拡散による散逸項、(G) は粘性による散逸項、(H) は速度変動と平均反応速度の関係する項である。

各項の時間平均した分布を Fig. 8 に示す。Case H では、平均圧力勾配による生成項 (D) が逆勾配拡散の発生に最も

大きな役割を果たし、速度変動と平均反応速度の関係する項 (H) と圧力変動による生成項 (E) も発生的重要因素となっている。また、平均速度勾配による生成項 (C)、平均進行度変数の勾配による生成項 (B)、散逸項 (F)、(G) は逆勾配拡散の発生を抑える効果があることが分かる。一方、Case L では、圧力変動による生成項 (E)、平均圧力勾配による生成項 (D)、速度変動と平均反応速度の関係する項 (H) が逆勾配拡散の発生に同程度の効果を持っていることが分かる。

次に、平均圧力勾配による生成項 (D)、圧力変動による生成項 (E)、散逸項 (F)+(G)、速度変動と平均反応速度の関係する項 (H) についてのモデル化について説明する。なお、モデル定数 C は式 20 で定義した。

第一に、平均圧力勾配による生成項 (D) のモデル化は以下のように行った。まず、密度 ρ を式 21 のように仮定し、また、BML limit (perfectly wrinkled flame) を仮定することによって c'' の平均は確率密度関数 $P(c)$ を用いることで次のように書ける。

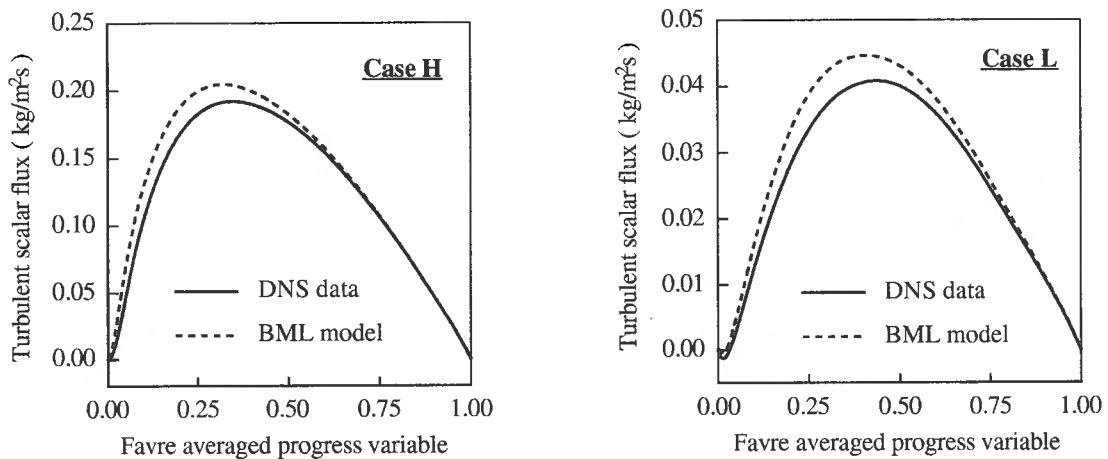


Fig.7 Evolution of turbulent scalar flux in the flame region and comparison DNS data to BML model.

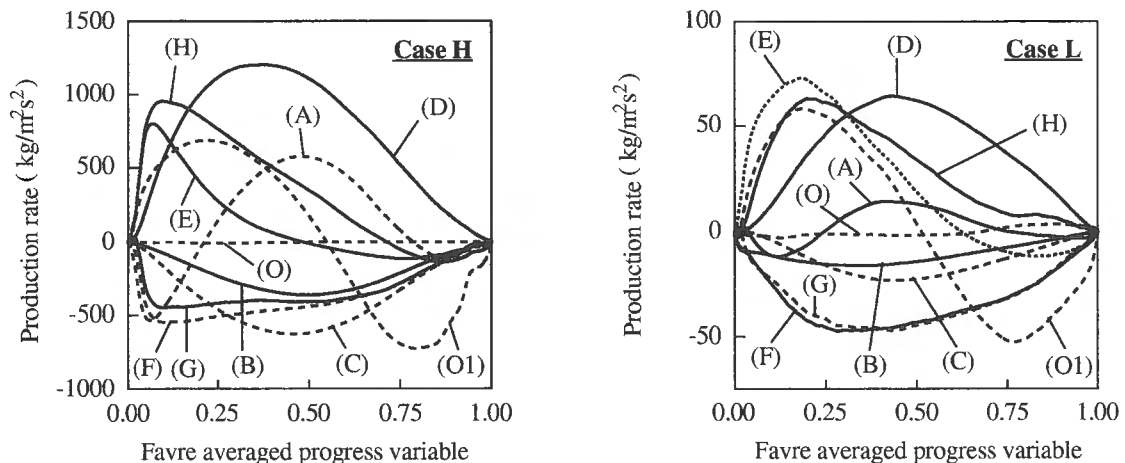


Fig.8 Streamwise balance of the production rate of turbulent scalar flux in Eq. 33. Term (O) is calculated from the transport equation by subtracting the convection term from the right hand side.

$$\begin{aligned} \overline{c''} &\approx \int_0^1 c'' P(c) dc = \int_0^1 \rho(c) c'' \frac{P(c)}{\rho(c)} dc \\ &\approx \int_0^1 \rho(c) \left(\frac{cc''}{\rho_b} + \frac{(1-c)c''}{\rho_u} \right) P(c) dc \end{aligned}$$

ここで, $c = \bar{c} + c''$ を代入して,

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\rho_b} (\bar{c} \overline{\rho c''} + \overline{\rho c''^2}) + \frac{1}{\rho_u} (\overline{\rho c''} - \bar{c} \overline{\rho c''} - \overline{\rho c''^2}) \\ &= \overline{\rho c''^2} \left(\frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u} \right) \end{aligned}$$

ここで, BML Limit の仮定 $\overline{\rho c''^2} \approx \bar{\rho} \bar{c} (1-\bar{c})$ [3] を代入して,

$$\approx \bar{\rho} \bar{c} (1-\bar{c}) \left(\frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u} \right) \quad (34)$$

この結果, 平均圧力勾配による生成項 (D) は次のようにモデル化できる.

$$-c'' \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} = -C_D \bar{\rho} \bar{c} (1-\bar{c}) \left(\frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u} \right) \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \quad (35)$$

なお, BML Limit の仮定が適合すれば, 乱流エネルギーの輸送方程式の平均圧力勾配による生成項のモデル化の場合と同様にモデル定数 C_D の値は 1 になる. モデルと DNS のデータを比較したグラフを Fig. 9 に示す. モデル定数は Case H では $C_D = 0.79$, Case L では $C_D = 0.80$ である. 両ケースとも, モデル定数は 1 よりやや小さな値となったが, モデルと DNS データは非常に良く似た分布を示した.

第二に, 圧力変動による生成項 (E) のモデル化は以下のように行った. 一般的に密度一定の流れの場合, この項はファールブル平均した $u''c''$ と逆の符号で打ち消す効果を持つ項であり, Veynante らの DNS で勾配拡散のケースでも同様の結果が示されている [13]. しかしながら, 本研究の DNS の結果では, この項は火炎領域内の未燃側の部分では同符号 (正) で生成の効果を示し, 既燃側の部分では異符号

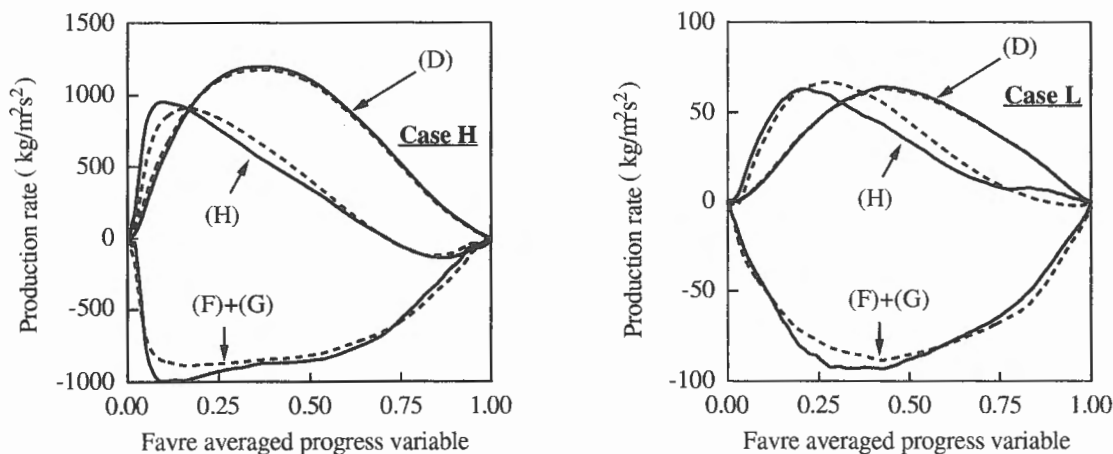


Fig.9 Comparison of (D) the mean pressure gradient term model of Eq. 35, (F)+(G) the dissipation terms model of Eq. 39 and (H) the velocity-reaction rate correlation term model of Eq. 40 with DNS data. The solid line is DNS data and the dashed line is the model.

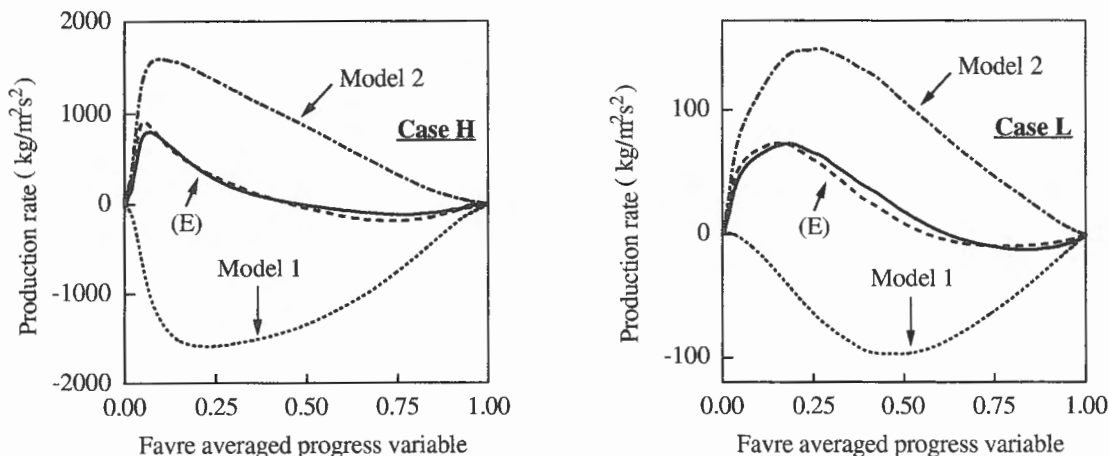


Fig.10 Comparison of (E) the fluctuating pressure term model of Eq. 38 with DNS data. The solid line of (E) is DNS data and the dashed line of (E) is sum of Model 1 and Model 2.

(負) で打ち消しの効果を示した。このため、この項は非燃焼場のモデルに火炎の影響を加えるという考え方でモデル化を行った。非燃焼場のモデルは次のように示される[14]。

$$-c'' \frac{\partial p'}{\partial x_j} \approx -C_1 \frac{\bar{\epsilon}}{k} \overline{\rho u_j'' c''} + C_2 \overline{\rho u_k'' c''} \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_k} \quad (36)$$

しかし、予混合燃焼にこのモデルを適応させるのは非常に難しく[14]、Bradley らは第2項のモデル定数を0とした[15]。そこで、非燃焼場のモデルはBradley らと同様に第1項のみをモデルとして当てはめた。一方、火炎の影響は次のようにモデル化を行った。まず、 c'' は火炎前後の変動量として1とモデル化した。また、 p' は火炎面前後の圧力差として式24のように、 ∂x_i は層流火炎厚さ e_L とそれぞれモデル化した。その結果、次のような式を得た。

$$1 \frac{\Delta p}{e_L} e_L \Sigma \approx \bar{\rho} u_L \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) \bar{\omega} \quad (37)$$

またここで、火炎領域の既燃側で火炎の影響の項の効果を小さくするために式37に $(1 - \bar{c})$ の因子を掛ける。これにより既燃側で圧力変動による生成項 (E) が負の値を示すようにした。この因子は c'' と $\partial p' / \partial x_i$ が火炎領域の未燃側で強い相互関係を持つこと意味している。以上より、最終的に以下のようなモデルになった。

$$-c'' \frac{\partial p'}{\partial x_j} \approx \underbrace{-C_{E-c} \frac{\bar{\epsilon}}{k} \overline{\rho u_j'' c''}}_{\text{Model 1}} + \underbrace{-C_{E-u} \bar{\rho} u_L \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) \bar{\omega}}_{\text{Model 2}} (1 - \bar{c}) \quad (38)$$

モデルと DNS のデータを比較したグラフを Fig. 10 に示す。モデル定数は Case H では、 $C_{E-c} = 0.67$ 、 $C_{E-u} = 1.0$ 、Case L では $C_{E-c} = 0.68$ 、 $C_{E-u} = 0.70$ である。火炎の影響を加えた項のモデル定数 C_{E-u} にやや違いがあるものの、両ケースともモデルと DNS データは非常に良く似た分布を示した。

第三に、散逸項 (F) + (G) のモデル化は二つの項をまとめて以下のように行った。まず、 ρD は一定と仮定した。また、 c および c'' は1、 ∂x_i は層流火炎厚さ e_L 、 $\partial u_j'' / \partial x_i$ は式25のようにモデル化した。この結果、散逸項 (F) + (G) は次のようにモデル化できる。

$$\begin{aligned} (F)+(G) &\approx \rho D \frac{\partial c''}{\partial x_i} \frac{\partial u_j''}{\partial x_i} \approx \rho D \frac{1}{e_L} \frac{u_L (\rho_u / \rho_b - 1)}{e_L} \Sigma e_L \\ &\approx -C_{FG} \bar{\rho} u_L \left(\frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) \bar{\omega} \end{aligned} \quad (39)$$

ここで、 $\rho D = \rho_0 e_L u_L$ の近似および式27を用いた。モデルと DNS のデータを比較したグラフを Fig. 9 に示す。モデル定数は Case H では $C_{FG} = 0.48$ 、Case L では $C_{FG} = 0.39$ である。モデル定数の値に多少の違いがあるものの、両ケースともモデルと DNS データは非常に良く似た分布を示した。

最後に、速度変動と平均反応速度の関係する項 (H) のモ

デル化は以下のように行った。この項のモデル化では、LMSE (Linear Mean Square Estimation) の仮定[16]および BML limit の仮定を用いることで次のように書ける[17]。BML limit の仮定では ϕ_m は0.75と見積もられる。

$$\begin{aligned} \overline{\rho u_i'' \bar{\omega}} &\approx \overline{\rho c''} \bar{\omega} \frac{\overline{\rho u_j'' c''}}{\bar{\rho} \bar{c} (1 - \bar{c})} \\ &\approx C_H \bar{\rho} (\phi_m - \bar{c}) \bar{\omega} \frac{\overline{\rho u_j'' c''}}{\bar{\rho} \bar{c} (1 - \bar{c})} \end{aligned} \quad (40)$$

モデルと DNS のデータを比較したグラフを Fig. 9 に示す。モデル定数は Case H では $C_H = 1.50$ 、 $\phi_m = 0.69$ 、Case L では $C_H = 1.42$ 、 $\phi_m = 0.80$ である。Case H ではモデルと DNS データは良く似た分布を示したが、Case L では、火炎領域の既燃側付近で DNS の分布が正の値を保ったままで、モデルとは逆の符号を示した。 ϕ_m の値を1にすればモデルの分布は全領域で正の値を示すようになるが、理論値とグラフの形状を考慮して Case L では、 $\phi_m = 0.80$ と決めた。

4. まとめ

本研究では、一様等方性乱流中を伝播する乱流予混合火炎の直接数値シミュレーションを、燃焼前後の密度比が、 $\rho_u / \rho_b = 7.53$ と $\rho_u / \rho_b = 2.50$ の異なる2つのケースについて行った。このシミュレーションによって、十分に発達した定在する乱流予混合火炎のデータベースを構築した。このデータベースに基づいて、乱流予混合火炎が乱流エネルギーや乱流スカラー流束に対して与える影響について、それぞれの輸送方程式の解析によって調べた。また、輸送方程式のうち燃焼に関連する重要な項のモデル化を行った。得られた結果を以下にまとめる。

1. 火炎領域内では、乱流火炎によって乱流エネルギーが増幅される。特に流れ方向の速度の乱れが増幅され、また、燃焼前後の密度比が大きい方が乱れの増幅は大きくなる。
2. ファーブル平均が施された乱流エネルギーの輸送方程式の解析結果によると、圧力に関係する項が火炎領域内で乱流エネルギーを増加させている。密度比の高いケースでは平均圧力勾配による生成項が、低いケースでは圧力作用項が最も重要な役割を果たしている。また、平均圧力勾配による生成項、圧力膨張項および燃焼に起因する項についてモデル化を行った。構築したモデルは密度比の違う場合に対しても DNS の結果を良く表現している。
3. 密度比の高いケースと低いケースの両方で逆勾配拡散が火炎領域内で支配的である。また、BML モデルは DNS のデータと良く一致している。
4. ファーブル平均が施された乱流スカラー流束の輸送方程式の解析結果によると、圧力に関係する項と速度変動と平均反応速度の関係する項が逆勾配拡散の発生の

要因となっている。また、平均圧力勾配による生成項、圧力変動による生成項、散逸項および速度変動と平均反応速度の関係する項についてのモデル化を行った。構築したモデルは DNS の結果を良く表現した。ただし、密度比が異なる場合のモデル定数の値などに多少の違いがあり、モデルの精度を向上させるためにさらに検討を加える必要があると考えられる。

謝辞

本研究は平成 12 年度および 13 年度科学研究費補助金(特別研究員奨励費 No.2054)により行われたことをここに記して謝意を表す。

References

1. Karlovitz, B., Denniston, Jr. D., W., Knapschaefer, D., H. and Wells, F., E., *Proc. Comb. Inst.* 4: 613-620 (1953).
2. Moss, J., B., *Combust. Sci. Tech.* 22: 119-129 (1980).
3. Libby, P., A. and Bray, K., N., C., *AIAA Journal* 19(2): 205-213 (1981).
4. Rutland, C., J. and Trouvé, A., *Combust. Flame* 94: 41-57 (1993).
5. Poinso, T., J. and Lele, S., K., *J. Computational Physics* 101: 104-129 (1992).
6. Baum, M., Poinso, T. and Thévenin, D., *J. Computational Physics* 116: 247-261 (1994).
7. Kraichnan, R., H., *Phys. Fluids* 7: 1030-1048 (1964).
8. Blaisdell, G., A., Mansour, N., N. and Reynolds, W., C., *Numerical Simulation of Compressible Homogeneous Turbulence*, Report No.TF-50, Stanford University, 76-79 (1991).
9. Tanahashi, M., Miyauchi, T. and Nada, Y., *Nenshyo-No-Kagaku-To-Gijyutu*, 6: 13-22 (1998).
10. Bray, K., N., C. and Libby, P., A., *Phys. Fluids* 19: 1687-1701 (1976).
11. Trouvé, A. and Poinso, T., *J. Fluid Mech.* 278: 1-31 (1994).
12. Bray, K., N., C., In Libby, P., A. and Williams, F., A., (Eds.), *Turbulent Reacting Flows*, Springer - Verlag, 115-183 (1980).
13. Veynante, D., Trouvé, A., Bray, K., N., C. and Mantel, T., *J. Fluid Mech.* 332: 263-293 (1997).
14. Bray, K., N., C., *Proc. R. Soc. Lond. A* 451: 231-256 (1995).
15. Bradley, D., Gaskell, P., H. and Gu, X., J., *Combust. Flame* 96: 221-248 (1994).
16. Borghi, R. and Dutoya, D., *Proc. Comb. Inst.* 17: 235-244 (1978).
17. Borghi, R., *Prog. Energy Combust. Sci.* 14: 245-292 (1988).