

定容容器内乱流燃焼場を対象とした SGS モデル

SGS models for turbulent premixed combustion in a constant volume vessel

- 普世 梓, 東工大院, 東京都目黒区大岡山 2-12-2, E-mail: fuse.a.aa@m.titech.ac.jp
- 源 勇気, 東工大院, 東京都目黒区大岡山 2-12-2, E-mail: yminamot@navier.mes.titech.ac.jp
- 志村 祐康, 東工大院, 東京都目黒区大岡山 2-12-2, E-mail: mshimura@navier.mes.titech.ac.jp
- 店橋 護, 東工大院, 東京都目黒区大岡山 2-12-2, E-mail: mtanahas@navier.mes.titech.ac.jp
- Azusa Fuse, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo
- Yuki Minamoto, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo
- Masayasu Shimura, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo
- Mamoru Tanahashi, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo

Large eddy simulations (LES) of the turbulent premixed combustion in a constant volume vessel are conducted by using fractal dynamic SGS (FDSGS) combustion model and compared with several SGS combustion models. Flame fronts obtained from LES with the FDSGS combustion model show good agreement with these of filtered direct numerical simulation (DNS). However, all models could not predict the maximum of mean pressure. To investigate this discrepancy, conditional averages of filtered energy conservation equation budget are studied. To consider pressure rising condition, instantaneous DNS data with different mean pressure is used. It is revealed that a pressure-dilatation correlation term (T_5') which has not been modeled is one of leading terms. A *a priori* test of T_5' model shows good agreement when the pressure slowly rises but the model over-predicts when the pressure starts to rise suddenly. However, correlation coefficients suggest that the proposed model has strong correlation with filtered DNS result.

1. 緒論

環境保全などの観点から、数値計算手法を用いた高効率・低環境負荷型の燃焼器の設計・開発が注目されている。特に振動燃焼といった非定常現象の予測のために、ラージ・エディ・シミュレーション (LES) の利用が有望視されている。LES では、グリッド・スケール (GS) の現象を、フィルタ操作の施された支配方程式により解くが、サブグリッド・スケール (SGS) の現象による寄与を SGS モデルによって予測する必要がある。特に SGS 燃焼モデルは乱流燃焼場の LES 結果に大きな影響を及ぼすため、高精度なモデル開発が重要である。

著者らの以前の研究^(1,2,3)では、 G 方程式や反応進行変数を用いる LES に必要な火炎面積を予測するフラクタル・ダイナミック SGS (FDSGS) 燃焼モデルを提案し、直接数値計算 (DNS) データを用いた静的・動的テストによってその有効性を明らかにした。

特に山田ら⁽³⁾は、自動車用エンジンのように平均圧力上昇を伴う定容容器内乱流燃焼場を対象として、FDSGS 燃焼モデルの静的テストを行い、FDSGS 燃焼モデルが従来モデルと比べて火炎面積を精度良く予測可能であることを示した。

本研究では、定容容器内乱流燃焼場の動的テストを行い、実際の LES 実行時の FDSGS 燃焼モデルの予測精度の検証及び LES 手法の改良等を行い、乱流予混合火炎の高精度 LES の確立を目的とする。

2. FDSGS 燃焼モデル

FDSGS 燃焼モデル⁽¹⁾は、火炎片モデルを仮定して以下の式で与えられる。

$$\frac{S_T}{S_L} = \left(\frac{\alpha^4 \nu^3}{2\sqrt{2} C_s^2 \Delta^6} \right)^{\frac{2-D_3}{4}} \left\{ \tilde{S}_y \tilde{S}_y - \text{div}(\tilde{\mathbf{u}})^2 \right\}^{-\frac{(2-D_3)}{8}} + \frac{\delta_A}{\delta_L} \frac{\text{div}(\tilde{\mathbf{u}})}{\delta_L (\text{div}(\mathbf{u}_L))|_{G=G_0}} \quad (1)$$

右辺の第 1 項は、火炎面のフラクタル特性と高レイノルズ数乱流のスケール分離の仮定に基づいてモデル化されており、乱流運動による火炎面積の増大の効果を表す。第 2 項は、火炎片モデルと層流火炎の解析に基づいた修正項であり、膨張の効果を表す。

ν , C_s , Δ , δ_A 及び δ_L はそれぞれ動粘性係数, Smagorinsky 定数, LES のフィルタ幅, 式(2)で表されるフィルタを施した層流火炎の擬似火炎厚さ及び温度勾配に基づく層流火炎厚さである。

$$\delta_A = \int_{-d/2}^{d/2} \text{div}(\tilde{\mathbf{u}})_L dx / (\text{div}(\tilde{\mathbf{u}})_L)|_{G=G_0} \quad (2)$$

\tilde{f} は物理量 f の空間 Favre 平均, G は Level-set アプローチで用いるスカラー量, G_0 は火炎面を表す。 α は式(3)に示す Inner cutoff (α) とコヒーレント微細渦の最頻直径 ($D \approx 8\eta$) の相関式によって与えられる。

$$\alpha = \frac{\varepsilon_L}{\eta} = 8 \exp\left(C \frac{\delta_F}{D}\right) \quad (3)$$

ここで, C はモデル定数 ($C=6.0$), δ_F は Zel'dovich 厚さを表す。フラクタル次元 (D_3) は、フラクタル・ダイナミック SGS モデル⁽⁴⁾を用いて動的に予測される。

3. 定容容器内乱流燃焼場の DNS

本研究では以前の研究⁽⁵⁾で報告した定容容器内の水素・空気乱流予混合火炎伝播に関する DNS データを用いる。支配方程式として

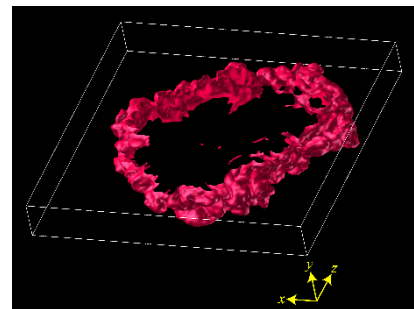


Fig.1 A schematic of the computational domain and flame surface defined by the temperature iso-surface of 1289 K.

Table 1 Numerical condition of DNS.

Re_λ	Re_l	u'_{rms} [m/s]	l [mm]	η [mm]	S_L [m/s]	δ_L [mm]
97.1	516.2	18.98	2.465	0.0243	10.34	0.470

は、質量、運動量、化学種及びエネルギーの保存方程式が用いられている。ここで、化学反応機構、輸送係数・熱物性値の温度依存性及び圧力を考慮する際に温度が陽的に必要となるが、エンタルピの保存方程式を用いた場合、エンタルピから温度を求める際の反復計算を必要とするため、エネルギー保存方程式として以下に示すような ρT の保存方程式が用いられている。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho T}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u T) &= \frac{1}{c_v} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \frac{1}{c_v} \sum_{i=1}^N (\rho Y_i V_i c_{p,i} \nabla T) \\ &\quad - \frac{T}{c_v} \sum_{i=1}^N [R_i \nabla \cdot (\rho Y_i V_i)] - \frac{1}{c_v} P : (\nabla u) \\ &\quad - \frac{1}{c_v} \sum_{i=1}^N (h_i \omega_i) + \frac{T}{c_v} \sum_{i=1}^N (R_i \omega_i), \end{aligned} \quad (4)$$

ここで、

$$P = \left[p + \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot u) \right] I - \mu [(\nabla u) + (\nabla u)^T], \quad (5)$$

である。空間離散化には 4 次精度中心差分法が、時間積分には 3 次精度 Runge-Kutta 法が適用されている。

図 1 に計算領域及び $t=312 \mu s$ における温度等値面を示す。予混合気は計算領域の中心で着火され、火炎は中心から外縁部に向かって伝播する。初期高温領域は 2000 K、コア半径は 0.25 mm である。計算領域は $L_x \times L_y \times L_z = 40 \text{ mm} \times 5 \text{ mm} \times 40 \text{ mm}$ であり、格子点数は $2049 \times 257 \times 2049$ である。境界条件は Navier-Stokes characteristic boundary condition に基づく等温壁条件 ($T_{wall} = 450 \text{ K}$) とした。初期未燃予混合気の温度、当量比及び圧力は $T_{ini} = 700 \text{ K}$, $\phi = 1.0$ および $P_{ini} = 0.1 \text{ MPa}$ である。計算条件を表 1 に示す。ここで、 Re_λ と Re_l は、テイラー・マイクロスケール λ と積分長 l に基づくレイノルズ数、 η はコルモゴロフ・スケール、 u'_{rms} は乱流強度である。

4. 定容容器内乱流燃焼場を対象とした動的テスト

定容容器内予混合気火炎を対象として、FDSGS 燃焼モデルを用いた動的テストを行った。計算領域は DNS と同一であり、格子点数は $257 \times 33 \times 257$ である。支配方程式として、フィルタ操作の施された質量、運動量、質量分率に基づく反応進行変数及びエネルギーの保存方程式を用いた。SGS 応力モデルには、Smagorinsky モデルを適用した。SGS スカラー流束項及び SGS 熱流束項には勾配拡散型モデルを適用した。ここで SGS モデル中に必要な定数はそれぞれ、Smagorinsky 定数 $C_s = 0.16$ 、乱流シュミット数 $Sc_\alpha = 1.0$ 、乱流プラントル数 $Pr_t = 0.7$ である。SGS 燃焼モデルには FDSGS 燃焼モデルと従来のモデル^(6,7,8,9)を用いた。フィルタ操作を施したエネルギー方程式の生成項 (式(1)の右辺第 5 項と第 6 項) は以下のように wrinkling factor Ξ を用いてモデル化した。

$$-\frac{1}{c_v} \sum_{i=1}^N (h_i \omega_i) + \frac{T}{c_v} \sum_{i=1}^N (R_i \omega_i) \approx (T_b - T_u) \rho_u \Xi |\nabla \tilde{c}|, \quad (6)$$

ここで、FDSGS 燃焼モデル中の δ_c 、 $\text{div}(u)_L$ 及び δ_i/δ_c 、式(6)中の T_b は、山田ら⁽⁶⁾が提案した多項式近似を用いた層流火炎特性の推定法を用いて与えた。また T_u は反応進行変数 $c \leq 0.01$ で定義された未燃領域の平均温度を用いた。空間離散化には 4 次精度中心差分法を、時間積分には 3 次精度 Runge-Kutta 法を適用した。境界条件は Navier-Stokes characteristic boundary condition に基づく等温壁条件 ($T_{wall} = 450 \text{ K}$) とした。初期条件として、 $t = 100 \mu s$ での DNS

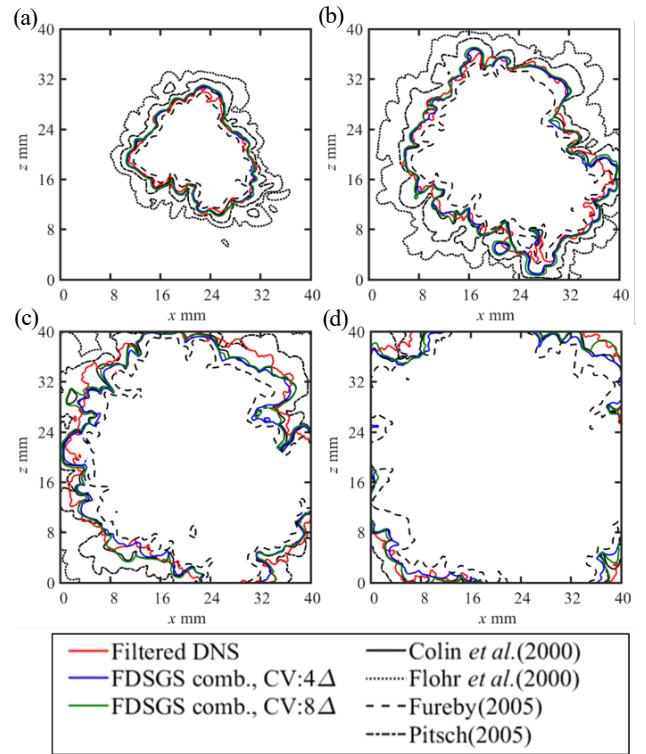


Fig.2 Temporal development of the flame surface with different models at $t = 216 \mu s$ (a), $312 \mu s$ (b), $408 \mu s$ (c) and $504 \mu s$ (d).

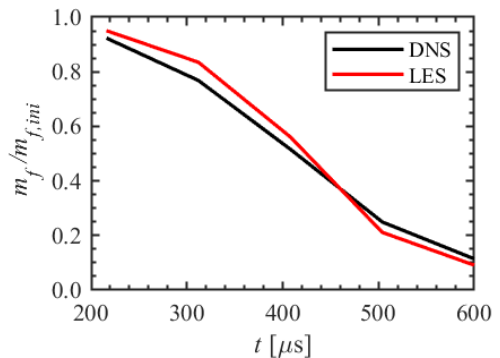


Fig.3 Temporal evolution of total mass of fuel normalized by initial value. The black line is DNS result and the red line is LES result with FDSGS combustion model (CV: 4Δ).

データにガウシアンフィルタ及びカットオフフィルタを施した場を用いた。これは DNS の初期場は計算領域全体が未燃予混合気で満たされているため、質量分率に基づいた反応進行変数の輸送方程式を解く場合、火炎の伝播を再現できないためである。

5. SGS 燃焼モデルの予測精度

図 2 に、定容容器中心断面における火炎面の比較を示す。ここで本研究では火炎面を、1 次元層流予混合気火炎 (予熱温度 700K、圧力 0.1MPa) において最大熱発生率位置における反応進行変数の値 ($c = 0.562$) から定義した。FDSGS 燃焼モデルは検査体積の大きさによらず、他のモデルと比較して火炎面の伝播を高い精度で予測している。また、図 3 に無次元化された燃料質量の時間変化の比較を示す。FDSGS 燃焼モデルを用いた LES 結果は DNS 結果と比較して燃料の消費量を高い精度で予測している。

ここでは、このような場合に LES で採用されるエネルギー保存方

程式の収支について検討する。

6. エネルギー方程式のSGS特性とモデリング

本研究で対象としたような外的要因により温度場が影響を受ける場合、燃焼状態を表現する反応進行変数の輸送方程式に加えて、式(4)で表現される温度場に対する方程式も同時に解析する必要がある。式(4)で表されるエネルギー方程式にフィルタ操作を施し分解すると、以下のように表せる。

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{T}}{\partial t} = T_1 + T_1' + T_2 + T_2' + T_3 + T_3' + T_4 + T_4' + T_5 + T_5' + T_6 + T_6' + T_7, \quad (7)$$

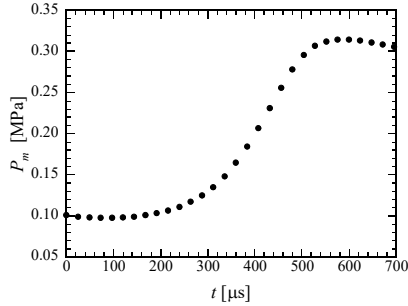


Fig.4 Temporal development of the mean pressure.

ここで、各項は以下の通りである。

$$T_1 = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{T}),$$

$$T_1' = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{u} \tilde{T}) - T_1,$$

$$T_2 = \frac{1}{c_v} \nabla \cdot (\bar{\lambda} \nabla \tilde{T}),$$

$$T_2' = \frac{1}{c_v} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - T_2,$$

$$T_3 = -\frac{1}{c_v} \sum_{i=1}^N (\bar{\rho} \tilde{Y}_i \tilde{V}_i c_{p,i} \nabla \tilde{T}),$$

$$T_3' = -\frac{1}{c_v} \sum_{i=1}^N (\rho Y_i V_i c_{p,i} \nabla T) - T_3,$$

$$T_4 = -\frac{\tilde{T}}{c_v} \sum_{i=1}^N [\bar{R}_i \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{Y}_i \tilde{V}_i)],$$

$$T_4' = -\frac{T}{c_v} \sum_{i=1}^N [R_i \nabla \cdot (\rho Y_i V_i)] - T_4,$$

$$T_5 = -\frac{1}{c_v} \bar{p} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}),$$

$$T_5' = -\frac{1}{c_v} p (\nabla \cdot \mathbf{u}) - T_5,$$

$$T_6 = -\frac{1}{c_v} \nabla \cdot \left[-\frac{2}{3} \bar{\mu} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \mathbf{I} + \bar{\mu} \{ (\nabla \tilde{\mathbf{u}}) + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T \} \right] (\nabla \tilde{\mathbf{u}}),$$

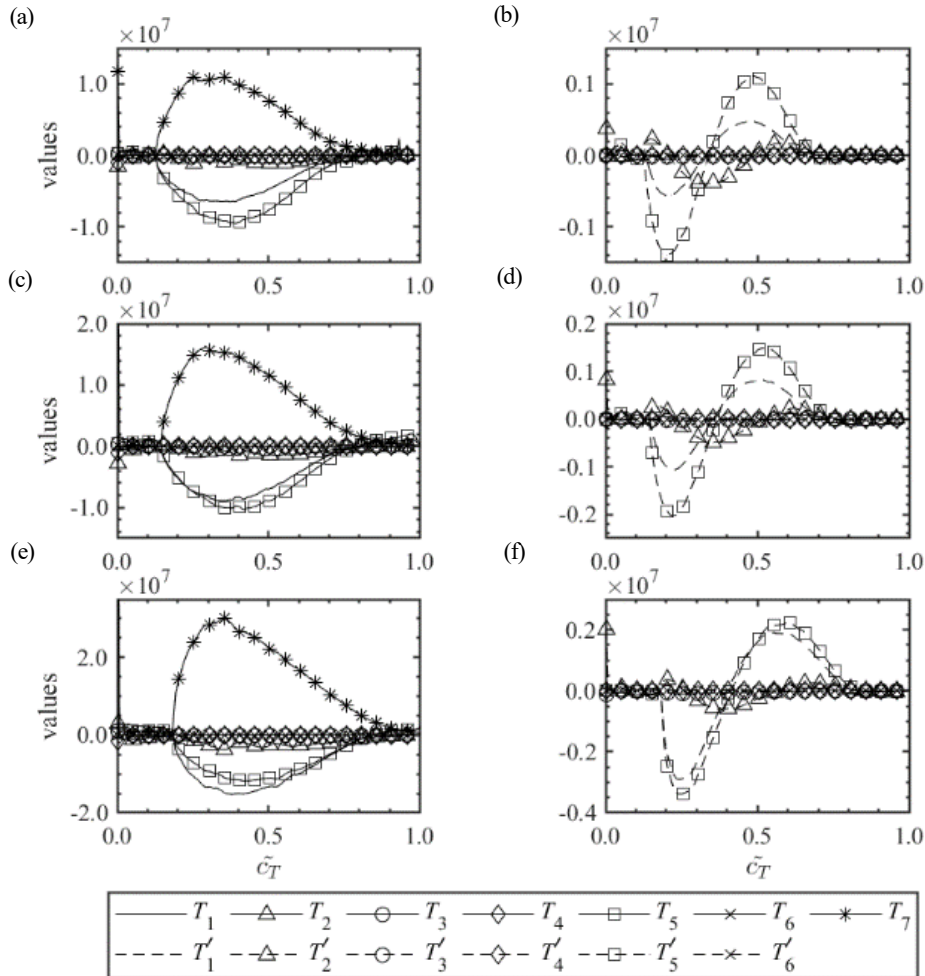


Fig.5 Conditional averages of the filtered energy equation budget with reaction progress variable c_T with $\Delta = 25.7\eta$ at $t = 216 \mu\text{s}$ (a,b), $312 \mu\text{s}$ (c,d) and $408 \mu\text{s}$ (e,f).

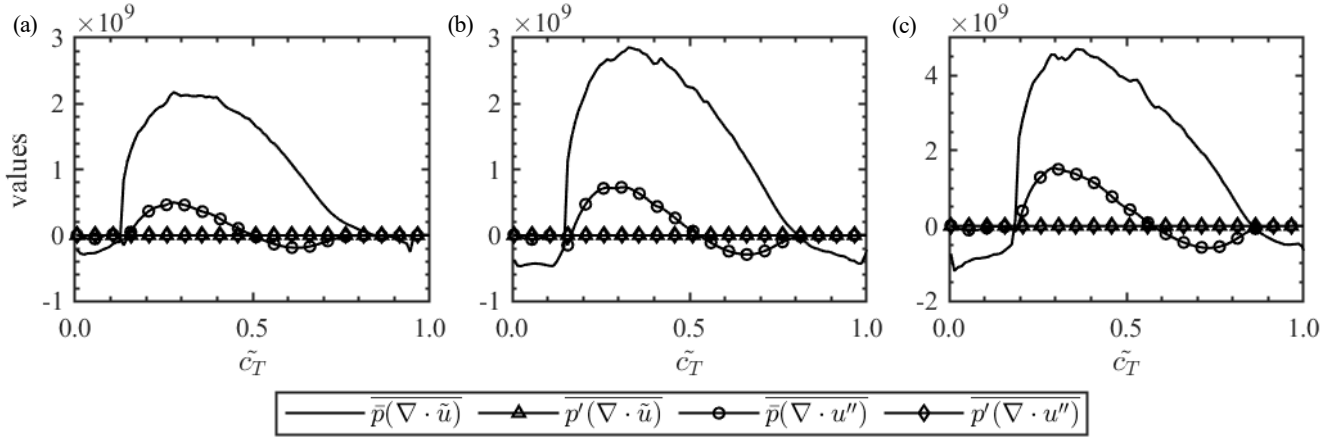


Fig.6 Conditional averages of the terms of Eq. (9) with reaction progress variable cr with $\Delta = 25.7\eta$ at $t = 216 \mu\text{s}$ (a), $312 \mu\text{s}$ (b) and $408 \mu\text{s}$ (c).

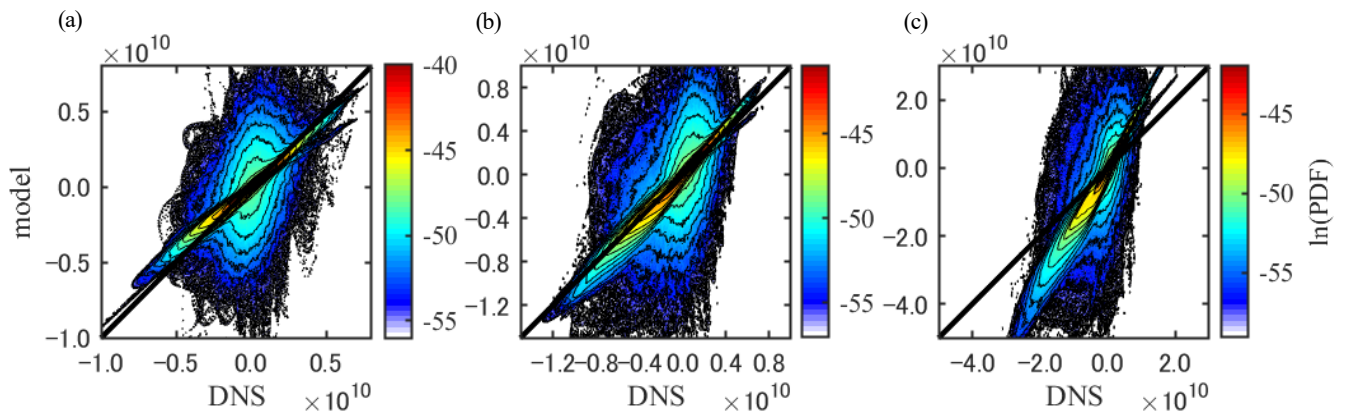


Fig.7 Joint probability density functions of $\overline{p(\nabla \cdot \mathbf{u})}$ of the DNS values and the values predicted by Eq.(11) with $\Delta = 25.7\eta$ at $t = 216 \mu\text{s}$ (a), $312 \mu\text{s}$ (b) and $408 \mu\text{s}$ (c). The black thick lines show complete agreement.

$$T_6' = -\frac{1}{c_v} \nabla \cdot \left[-\frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} + \mu \{ (\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T \} \right] (\nabla \mathbf{u}) - T_6,$$

$$T_7 = -\frac{1}{c_v} \sum_{i=1}^N (h_i \omega_i) + \frac{T}{c_v} \sum_{i=1}^N (R_i \omega_i).$$

これらの項のうち、 $T_1 \sim T_6$ は LES から得られる GS の物理量から直接計算され、 $T_1' \sim T_6'$ には SGS モデルが適用されるべきである。 T_7 は、強い非線形性を持つ化学種の反応速度を項の一部に持つため、式(7)のような特別なモデリングが必要となる。これらの項の収支を検討する。本研究で対象とした場合は、図4に示すように平均圧力が時間とともに上昇する。そこで異なる平均圧力となる時刻において検討を行うため、 $t = 216 \mu\text{s}$, $312 \mu\text{s}$ 及び $408 \mu\text{s}$ における DNS データを用いて解析を行った。また、フィルタ幅としては $\Delta = 25.7\eta$ のガウシアンフィルタを用いた。

図5に、温度に基づく反応進行変数 $cr = (T - T_u)/(T_b - T_u)$ で条件づけられた式(7)の各項の平均値を示す。ここで T_u として壁温度 $T_{\text{wall}} = 450 \text{K}$ を用いた。これらより、平均圧力の異なるいずれの時刻においても、 T_2 , T_5 , T_7 , T_2' 及び T_7' が支配的であることがわかる。そこで以下では、圧力と膨張の相関項である T_7' のモデリング及びその静的テストを行う。

T_7' を以下のように近似する。

$$T_7' \approx -\frac{1}{c_v} \left\{ \overline{p(\nabla \cdot \mathbf{u})} - \overline{p(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}})} \right\}, \quad (8)$$

ここで、 $\overline{p(\nabla \cdot \mathbf{u})}$ の p と \mathbf{u} を空間平均成分と変動成分に分解する

と、以下のように表せる。

$$\begin{aligned} \overline{p(\nabla \cdot \mathbf{u})} &= \overline{(\bar{p} + p') \{ \nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} + \mathbf{u}'') \}} \\ &= \overline{\bar{p}(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}})} + \overline{p'(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}})} + \overline{\bar{p}(\nabla \cdot \mathbf{u}'')} + \overline{p'(\nabla \cdot \mathbf{u}'')}. \end{aligned} \quad (9)$$

これらの項の大小関係を比較する。図6に温度に基づく反応進行変数で条件つけた式(9)右辺の各項の平均値を示す。これより圧力の平均成分を持つ右辺第1項及び第3項が支配的であることがわかる。従って以下のように圧力の平均成分のみを扱う。

$$\overline{p(\nabla \cdot \mathbf{u})} \approx \overline{\bar{p}(\nabla \cdot \mathbf{u})}, \quad (10)$$

ここで、 $(\nabla \cdot \mathbf{u})$ は全スケール (GS+SGS) の膨張を表しているため、これを予測するモデルが必要となる。ここで FDSGS 燃焼モデルと同様に火炎片モデルを仮定すると乱流火炎においても、 $(\nabla \cdot \mathbf{u}_L)$ を持つ層流火炎が火炎面面積に応じて分布していると考えられる。FDSGS 燃焼モデルの膨張の効果を表す式(1)の第2項は、LES における一つの格子点が代表する一辺 Δ の検査体積内における膨張の面積分及び体積積分より導出された項であり、これを用いて $(\nabla \cdot \mathbf{u})$ を表すことで式(10)は以下のように表せる。

$$\begin{aligned} \overline{p(\nabla \cdot \mathbf{u})} &\approx \overline{\bar{p}(\nabla \cdot \mathbf{u})} \\ &\approx \overline{\bar{p}(\nabla \cdot \mathbf{u})}_L \frac{\delta_a}{\delta_b} \frac{(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}})}{(\nabla \cdot \mathbf{u}_L)} \Big|_{p=p_a}. \end{aligned} \quad (11)$$

この項について DNS 結果との比較を行った。図7に $\overline{p(\nabla \cdot \mathbf{u})}$ の

Table 2 Pearson correlation coefficients of $\overline{p(\nabla \cdot \mathbf{u})}$ with $\Delta = 25.7\eta$.

t [μs]	Pearson correlation coefficient
216	0.965
312	0.974
408	0.976

DNS 結果とモデル予測値の結合確率密度関数を示す。右斜めの黒太線は DNS 結果とモデル結果の完全な一致を示している。 $t=216 \mu\text{s}$ と $312 \mu\text{s}$ は、確率密度の高い領域は DNS 結果とモデル予測値は良い一致を示す。平均圧力が急激に上昇する $t=408 \mu\text{s}$ では、モデルは DNS 結果と比較して大きな値を予測している。ここで表 2 に $\overline{p(\nabla \cdot \mathbf{u})}$ の DNS 結果とモデル予測値の相関係数を示す。図 7(c) で $t=408 \mu\text{s}$ のモデル予測値は DNS 結果より大きかったが、表 2 では $t=408 \mu\text{s}$ の相関係数はそれ以前と同等に高い値を示しており、式(11)で表されるモデルは DNS 結果と強い相関を示していると言える。

7. 結論

本研究では、フラクタル・ダイナミック SGS 燃焼モデルを用いた定容容器内乱流燃焼場を対象とした動的テストを行った。また動的テストの結果を受けて、DNS データを用いてエネルギー保存方程式中の圧力・膨張の相関項に対するモデル開発を行い、以下の結論を得た。

- ・フラクタル・ダイナミック SGS 燃焼モデルは平均圧力が時間とともに変化する燃焼場においても火炎面の伝播を高い精度で予測可能である。
- ・エネルギー保存方程式中の圧力・膨張の相関項に対して提案したモデルは、DNS 結果と強い相関を示す。

謝辞

本研究は、2019 年度に実施した自動車用内燃機関技術研究組合との共同研究事業の成果である。関係者各位に深く感謝の意を表す。

参考文献

- (1) Yoshikawa, I., Shim, Y., Nada, Y., Tanahashi, M. and Miyauchi, T., “A dynamic SGS combustion model based on fractal characteristics of turbulent premixed flames”, Proc. Combust. Inst., 34 (2013), pp. 1373-1381.
- (2) Hiraoka, K., Katada, Y., Yoshikawa, I., Fukushima, N., Tanahashi, M. and Miyauchi, T., “SGS combustion characteristics in a turbulent jet premixed flame: DNS and the fractal dynamic model.” In Proc. 9th ASPACC (2014), pp. 216-219.
- (3) 山田, 名田, 平岡, Yenerdag, 源, 志村, 店橋, “定容容器内乱流予混合火炎のためのフラクタル・ダイナミック SGS 燃焼モデルの構築”, 第 30 回数値流体力学シンポジウム, 第 30 回数値流体力学シンポジウム予稿集, 1-4 (2016)
- (4) Miyauchi, T., Tanahashi, M. and Gao, F., “Fractal characteristics of turbulent diffusion flames”, Combust. Sci. Tech., 96 (1994), pp.135-154.
- (5) Yenerdag, B., Fukushima, N., Shimura, M., Tanahashi, M. and Miyauchi, T., “Turbulence-flame interaction and fractal characteristics of H_2 - air premixed flame under pressure rising condition”, Proc. Combust. Inst., 35 (2015), pp. 1277-1285.
- (6) Colin, O., Ducros, F., Veynante, D. and Poinso, T., “A thickened flame model for large eddy simulation of turbulent premixed combustion”, Phys. Fluids, 12 (2000), pp. 1843-1863.

- (7) Flohr, P. and Pitsch, H., “A turbulent flame speed closure model for LES of industrial burner flows”, Proc. Center for Turbulence Research Summer Program, (2000), pp. 169-179.
- (8) Fureby, C., “A fractal flame-wrinkling large eddy simulation model for premixed turbulent combustion”, Proc. Combust. Inst., 30 (2005), pp. 593-601.
- (9) Pitsch, H., “A consistent level set formulation for large-eddy simulation of premixed turbulent combustion”, Combust. Flame, 143 (2005), pp. 587-598.