

# 乱流燃焼流れのラージ・エディ・シミュレーション

## Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion Flow

谷口 伸行

東京大学生産技術研究所

Nobuyuki Taniguchi

Institute of Industrial Science, University of Tokyo

E-mail: ntani@iis. u-tokyo. ac. jp

### 1 はじめに

エネルギーや環境資源の有限性を前提とすることが 21 世紀を迎えて必須の条件となりつつある。工学のパラダイムにも大きな転換が求められており、新しい評価基準の下で、新しいタイプの技術開発が進むであろう。そこで起こりうる様々な事象に対しては、従来にもまして、的確で、総合的、かつ、迅速な予測と対策が重要になると考えられる。特に、CO<sub>2</sub> 対策などにおいて既に見られるように、エネルギーと環境の関わる課題ではシミュレーションのもつ役割がますます高いと考える。乱流の予測としては膨大な演算量を必要とする原理方程式に基づく乱流の直接数値シミュレーション (DNS: Direct Navier-Stokes Simulation) が実際に実行され、数値実験として DNS の有用性が広く認識されている。また、その近似解析モデルといえるラージ・エディ・シミュレーション (LES: Large Eddy Simulation) を本格的に工学問題に適用していくことも可能となってきた。しかし、燃焼反応流れにおいては化学反応の素過程は極めて小さな時間スケール、空間スケールをもつことが一般的であるため、これらを乱流の特徴的な現象と一括して直接扱うことは実用的とはいえない。そこで、流れの中の燃焼の影響を薄い火炎片でのみ生じるものとして簡略化して扱う flamelet アプローチが用いられる。

本稿では flamelet アプローチによる乱流燃焼の LES モデリングについて、拡散火炎と予混合火炎が複合した現象である浮き上がり噴流火炎への適用を対象に紹介する。

### 2 Flamelet アプローチによる乱流火炎モデル

#### 2.1 拡散火炎 LES モデル

噴流拡散火炎や対向拡散火炎の火炎形状は混合分率の量論混合比における等値面で表現できる。この時、混合即燃焼などの仮定を与えれば、拡散火炎の温度、密度、化学種濃度などの熱力学的諸量は混合分率に対する分布関数として与えることができる。拡散火炎に対するこのようなモデル化手法は **conserved scalar approach** と呼ばれる。火炎面を表現するスカラ量を含む流れ場のシミュレーションと火炎モデルあるいは化学反応計算を分離できることがこの手法の利点で、流れのスケールと反応のスケールが大きく離れている実用燃焼場の解

析において計算負荷や精度の観点から有用性がある．また，非定常火炎と渦の干渉など乱流火炎の Dynamics を再現するのに適している．

一般的に工学的な乱流火炎では火炎厚さが乱れの最小スケールより薄く，火炎面は層流火炎の集合 (**laminar flamelet**) であると考えられる<sup>1)</sup>．このとき，乱流変動による火炎伸長が反応に及ぼす影響を無視すれば，混合分率に対する層流拡散火炎の温度，化学種濃度分布は一次元対向火炎に対し火炎面近似，平衡反応近似あるいは素反応計算などを用いて与えられる．

図 1 に一例として平衡反応計算によって得られた拡散火炎データを示す．燃料は窒素で希釈された水素で体積比は水素：窒素 1:1，酸化剤は空気である．

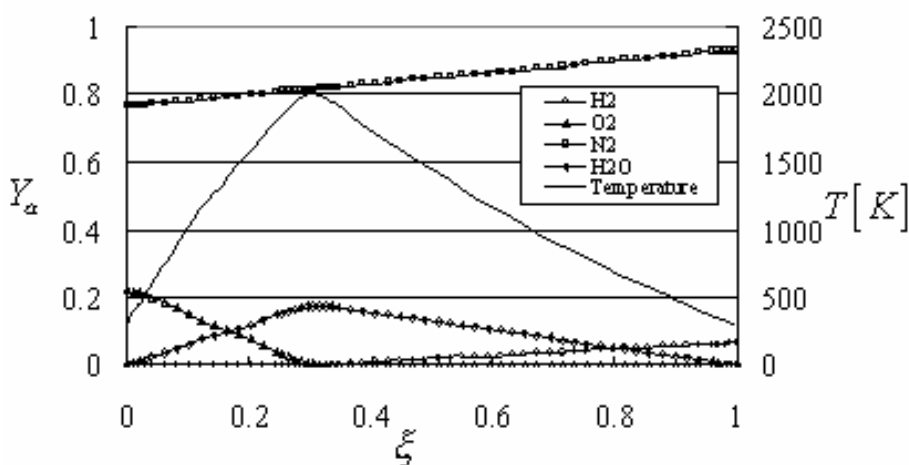


Fig.1 Dependence of mass fraction of species and temperature on mixture fraction

乱流拡散火炎LESの基礎式である混合分率の輸送方程式を以下に示す．

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \tilde{\xi} + \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{\xi} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k} - \bar{\rho} (\widetilde{u_k \xi} - \tilde{u}_k \tilde{\xi}) \right) \tag{1}$$

ここで， $\bar{\phi}$  は体積平均， $\tilde{\phi}$  は Favre 平均をあらわす．(1) 式から求まるは混合分率の Grid-Scale 成分であり，LES ではこの値から温度や化学種濃度の GS 成分を求める必要がある．混合分率とスカラ変数の関係は一般に非線形性が強いいため混合分率の GS 成分  $\tilde{\xi}$  のみからは決定できず，Sub-Grid Scale 変動成分  $\widetilde{\xi'^2}$  の影響を考慮する必要がある．このため，噴流拡散火炎 LES では RANS と同様に推定確率密度関数 (**Presumed PDF**) モデルが導入され，この Presumed PDF には Beta PDF が主に用いられる<sup>2),3),4)</sup>．Density weighed presumed PDF を  $\tilde{P}(\xi, \tilde{\xi}, \widetilde{\xi'^2})$  とすると拡散火炎における化学種  $\alpha$  の質量分率，温度の Favre 平均は次式から求めることができる．

$$\tilde{\phi} = \int_0^1 \phi(\zeta) \tilde{P}(\zeta, \tilde{\xi}, \widetilde{\xi'^2}) d\eta, \phi(\xi) = Y_\alpha(\xi), T(\xi) \tag{2}$$

### 2.2 Triple flame のモデル化

拡散火炎 LES モデルを拡張し、火炎面方程式を用いた浮き上がり火炎 LES モデルを構築するには未燃混合領域と拡散火炎領域の境界をどう扱うかが問題である。この浮き上がり火炎基部には **edge flame** または **triple flame** と呼ばれる火炎が形成されていると考えられる<sup>5),6)</sup>。Triple flame の概略図を図 2 に示す。

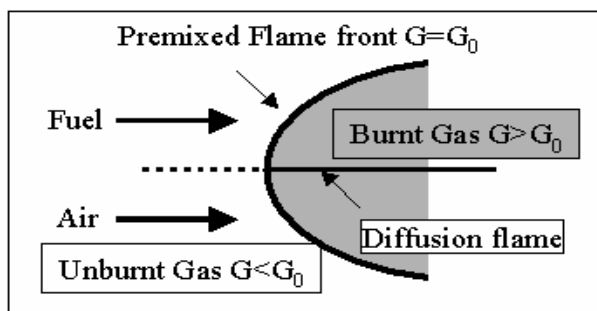


Fig.2 Schematic view of a triple flame

本研究では浮き上がり火炎基部の伝播性を考慮し、triple flame に対し以下のモデリングを行った。

- ①濃度混合は混合分率  $\xi$  で表現する。
- ②部分予混合火炎の伝播性を  $G$  方程式で表現する。
- ③ $G$  をスイッチングパラメータとして  $G = G_0$  を火炎面とし、既燃ガス領域を  $G > G_0$ 、未燃ガス混合領域を  $G < G_0$  で表現する。予混合火炎面以後の既燃ガス領域における化学種濃度は混合分率のみの関数として式 (2) の拡散火炎濃度で近似する。
- ④火炎の浮き上がりは気流速度と火炎伝播速度が釣り合うところで起こる<sup>7)</sup>と仮定した。ただし火炎の浮き上がりに関する仮説として他に、火炎伸長による局所消炎効果<sup>8)</sup>が提案されているため  $G$  方程式の火炎伝播速度モデルに消炎項を導入する。

この方針に沿って浮き上がり火炎 LES モデルを構築するのに部分予混合火炎における  $G$  方程式モデルと火炎近傍における濃度分布モデルが必要になる。

### 2.3 予混合火炎モデル

層流予混合火炎の特性を表す物理量は火炎伝播速度であり、既燃ガスを着火源として未燃ガスへ火炎が伝播する。予混合火炎面の移動方程式は次式で表される<sup>9)</sup>。

$$\rho \frac{\partial G}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla G = \rho S_L |\nabla G| \tag{3}$$

乱流予混合火炎において、laminar flamelet とみなせる場合、乱流火炎面の挙動は以下の LES-G 方程式で表現できる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \tilde{G} + \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{G} = - \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{G} - \tilde{u}_k \tilde{G} \right) + S_T \left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_k} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{4}$$

$$\frac{S_T}{S_L} = 1 + C_{pg} \left( \frac{u_{sgs}}{S_L} \right)^n \quad (5)$$

$S_T$ は乱流火炎伝播速度,  $u_{sgs}$ は subgrid 速度スケールである. triple flame において火炎伝播速度は混合による等量比の変化と火炎伸張の影響を強く受けると考えられる. 火炎伸張効果を評価するパラメータにはスカラ消散率  $\chi$  が用いられる. Müller(1994) ら<sup>4)</sup>はスカラ消散率が  $\chi = \chi_q$  で消炎が起こるとして消炎効果を式 (7) の様にとモデル化した.  $S_L^0$ は火炎伸張を受けない層流火炎伝播速度である.

$$S_L = S_L^0 \left( 1 - C_q \frac{\chi}{\chi_q} \right) \quad (6)$$

本研究では強い剪断のあるところで消炎が起こると考え, 歪み速度を消炎パラメータに組み込み triple flame の乱流火炎伝播速度を以下のようにモデル化した<sup>10)</sup>. ここでは  $S_L^0$  は混合分率のみの関数とみなした.  $S_{Lmax}^0$  は  $S_L^0$  の最大値である.

$$\frac{S_T}{S_L^0(\xi)} = \left( 1 + C_{pg} \left( \frac{\sqrt{(\tilde{u}_i - \tilde{u}_i)^2}}{S_{Lmax}^0} \right) \right) f_q \quad (7)$$

$$f_q = \left( 1 - C_q \frac{\tilde{a}}{a_q} \right), \quad \tilde{a} = \left( \frac{\sqrt{(\tilde{u}_i - \tilde{u}_i)^2}}{\Delta} \sqrt{2\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij}} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (8)$$

本研究で用いる部分予混合火炎に対する LES-G 方程式は式(4)(7)(8)により構成される.

## 2.4 化学種濃度モデル

$G$  方程式を用いた火炎解析手法は Levelset approach と呼ばれ, スカラ  $G$  は火炎面においてのみ意味を持つが, 火炎面を  $G = G_0 = 0.5$  とし,  $G = 1$  を既燃ガス (burnt gas)  $G = 0$  を未燃ガス (unburnt gas) と定義すれば等量比一定の予混合火炎において  $G$  は反応進行度  $c$  に一致し,  $G$  を質量分率と結びつけることができる. 反応進行度は以下の式で定義される.

$$c = \frac{Y_\alpha - Y_{\alpha,u}}{Y_{\alpha,b} - Y_{\alpha,u}} \quad (9)$$

化学種濃度  $Y_\alpha$  が火炎面から離れた領域ではそれぞれ混合分率のみの関数とし, 温度条件の影響を受けないと仮定する. 既燃ガスと未燃ガスのスイッチングパラメータ  $f$  を式 (9) の反応進行度  $c$  に相当するパラメータとみなして triple flame 近傍における濃度については以下の形式でモデル化する.

$$Y_\alpha = \{1 - f(G)\} Y_{\alpha,u}(\xi) + f(G) Y_{\alpha,b}(\xi) \quad (10)$$

本研究ではモデルの単純化のため  $f = G$  とする. また, LES 空間平均操作において混合分率と  $G$  はお互いに独立であると仮定し,  $G$  の変動を無視した. これより化学種濃度の GS 成分を以下の式で与える.

$$\tilde{Y}_\alpha = \{1 - \tilde{G}\} \tilde{Y}_{\alpha,u}(\tilde{\xi}) + \tilde{G} \tilde{Y}_{\alpha,b}(\tilde{\xi}, \tilde{\xi}^2) \quad (11)$$

既燃ガス領域における拡散火炎濃度  $\tilde{Y}_{\alpha,b}(\tilde{\xi}, \tilde{\xi}^2)$  の導出には式 (2) より Presumed PDF を用いた。PDF 中の混合分率の SGS 変動成分  $\tilde{\xi}^2$  はスケール相似則で与えた。

$$\tilde{\xi}^2 = (\tilde{\xi} - \tilde{\xi})^2 \quad (12)$$

式(2)(11)(12)から化学種濃度 GS 成分のモデルが構築される<sup>11)</sup>。

### 3. 浮き上がり噴流拡散火炎の LES 解析

#### 3.1 解析対象と基礎式

計算対象として Múniz ら<sup>6)</sup>によるメタン空気浮き上がり噴流拡散火炎の実験より、噴流軸直径  $D=4.8\text{mm}$ ,  $\text{Re}=4100$ , 燃料流量平均速度  $U_{\text{jet}}=15[\text{m/s}]$ , 周囲流速  $U_{\text{co}}=0.74[\text{m/s}]$  とした。燃料はメタン (99% vol.) で周囲流は空気である。この条件のとき時間平均における浮き上がり距離は実験では時間平均で燃料管先端からおよそ  $30D(150[\text{mm}])$  付近である。

浮き上がり噴流拡散火炎を記述するために用いた LES 基礎方程式は低マッハ数近似を施した連続の式、運動方程式、混合分率方程式と  $G$  方程式である。式 (11) の化学種濃度モデルから温度と密度を求めるためと補助式としてエンタルピ方程式と状態方程式を導入した。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho} \tilde{u}_i) &= 0 && \text{連続の式} \\ \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) &= -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \tau_{ij} \right) && \text{運動方程式} \\ \frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \tilde{\xi} + \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{\xi} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \tilde{\xi}}{\partial x_k} - \eta_j^\xi \right) && \text{混合分率方程式} \\ \frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \tilde{G} + \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{G} &= \frac{\partial}{\partial x_k} (\eta_j^G) S_T \left( \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_k} \frac{\partial \tilde{G}}{\partial x_k} \right)^{\frac{1}{2}} && G \text{ 方程式} \\ \frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \tilde{h} + \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{h} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\mu}{Pr} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_k} - \eta_j^h \right) && \text{エンタルピ方程式} \\ \tilde{h} - \sum_{\alpha=1}^n \tilde{Y}_\alpha h_{0,\alpha} &&& \text{温度} \\ \tilde{T} &= \frac{\sum_{\alpha=1}^n C_{p_\alpha} \tilde{Y}_\alpha}{P_0} + T_0 && \text{温度} \\ \bar{\rho} &= \frac{P_0}{R \tilde{T} \sum_{\alpha=1}^n \tilde{Y}_\alpha / M_\alpha} && \text{密度} \end{aligned} \quad (13)$$

乱流伝播速度は式 (7), (8) より、化学種質量分率は式 (11) を用いる。ここで、 $C_{p_\alpha}$  : 化学種  $\alpha$  の定圧比熱、 $h_{0,\alpha}$  : 化学種  $\alpha$  の標準生成エンタルピ、 $M_\alpha$  : 化学種  $\alpha$  の分子量  $R$  : 理想気体のガス定数である。SGS 応力  $\tau_{ij}$  には Smagorinsky モデル、各スカラ流束の SGS モデル  $\eta_j^\phi$  には勾配拡散モデルを用いる。粘性係数はサザランドの式を用いて温度依存性を考慮した。

モデルパラメータについてはすべて定数を仮定し  $C_S = 0.11$ , 乱流プラントル数とシュミット数は  $Pr_{sgs} = Sc_{sgs} = 0.5$  とした。式 (12) の部分予混合火炎伝播速度  $S_L^0$  はメタン空気予混

合火炎の層流伝播速度の実験値を混合分率の関数として与えた<sup>12)</sup>. 式 (7)(8) のモデル定数  $C_{pg}$ ,  $C_q$  については固定定数とした. 対象となる実験<sup>7)</sup>において乱流火炎伝播速度がおおよそ  $S_T = 0 \sim 3S_L$  になるとの知見をもとに,  $C_{pg} = 1.0$ ,  $C_q = 0.3$  と最適化した. 式 (8) の歪み速度パラメータ  $a_q$  についてはメタン空気火炎対向火炎における値  $a_q = 550$  [1/s] を用いた.

### 3.2 計算対象と計算手法

本計算では低マッハ数近似解法を用い時間進行法には 3 次精度ルンゲクッタ法を用いた. 空間離散化手法には有限体積法による 2 次精度中心差分を用い, 混合分率方程式の対流項のみ SMART scheme とした. 圧力と速度のカップリング手法は Fractional Step 法である. 計算格子は不等間隔円筒座標格子を用い計算領域は  $X, R, \theta$  に対して  $60D \times 20D \times 2\pi$  ( $D$  は燃料管直径) で格子数は  $200 \times 82 \times 32$  である. 計算初期値として非燃焼噴流の量論混合比のラインに沿って  $G = 0.5$  を与えた.

### 3.3 計算結果

計算結果として瞬時の混合分率,  $G$  (既燃ガス), 温度分布を図 3, 4, 5 に示す. それぞれに火炎面  $G = 0.5$  を図示した. 火炎形状は浮き上がり火炎としては適切な形状である. 今回の計算では helical な大規模渦運動が存在するため, それに伴い火炎面が大きく湾曲しているのがわかる. 計算における火炎基部は瞬時において  $X/D = 28 \sim 30$  付近に存在し, 実験値の浮き上がり距離をほぼ再現している.

図 4 と図 5 において温度分布は  $G$  の分布にほぼ相似である. これは式 (11) が火炎後流において  $G$  が未燃ガスと既燃ガスの混合パラメータとして機能していることを示している. 今回のモデリングでは火炎面が薄いことを仮定して式 (11) を用いているが火炎基部で  $G$  の分布が拡散的な場合, 火炎面前縁  $G < 0.5$  に温度上昇を与えてしまう可能性があり, 火炎先端近傍における式 (11) は  $G < 0.5$  の領域で  $\tilde{Y}_\alpha = \tilde{Y}_{\alpha,u}$  となるような修正が必要である.

図 6 に  $S_{Lmax}^0 = 0.37$  [cm] で無次元化した乱流火炎伝播速度分布を示す. 図 4 の混合分率の両論混合比における等値面 (メタン空気の場合  $\xi_{st} = 0.55$ ) に沿って火炎が伝播性を持つ領域が存在するが, 特に火炎基部前後で伝播速度の値に大きな変化はみられない. 本計算では主流方向速度と乱流火炎伝播速度が釣り合うところで火炎が保炎されていると考えられる. Müller らは RANS による浮き上がり火炎の解析において, 乱流伝播速度モデルにおける消炎項が浮き上がり距離の予測ならびに火炎の安定化に寄与することを指摘しているが, 本研究においても, 式 (7) において  $f_q = 1$  として消炎効果を無視した場合は最終的に  $X/D = 6 \sim 14$  付近まで火炎が逆火することを確認している.

## 4 結論

混合分率方程式と  $G$  方程式を用いた浮き上がり火炎解析モデルを LES に定式化し, メタン空気浮き上がり噴流拡散火炎の非定常シミュレーションを行った. 今回用いた手法で非定常な浮き上がり火炎の解析が安定して実行可能であること, 浮き上がり距離, 火炎形状の予測が可能であることが確認できた. ただし, 浮き上がり距離の予測に対して普遍性がある乱流

火炎伝播速度モデルの提案は今後の課題とする。火炎基部における triple flame の火炎伝播速度に対して適切なモデルを与えることができれば、火炎形状の制御など実用問題への展開も期待できる。

### 参考文献

- 1) Peters, N.: 21th Symp. of Combustion (1986) 1231.
- 2) Cook, A. W. and Riley, J. J.: Combustion and Flame 112 (1998) 593.
- 3) Branley, N. and Jones, W. P., 11th Symp. of Turbulent Shear Flows,(1997), pp.21-1
- 4) Forkel, H and Janicka, J.: Turbulence and Shear Flow Phenomena 1 (1999) 65
- 5) Müller, C. M., Breibach, H., and Peters, N. : 25th Symp. of Combustion (1994) 1099.
- 6) Múniz, L. and Mungal, M. G: Combustion and Flame 111 (1997) 16.
- 7) Vanquickenbone, L. and van Tiggelen, A.: Combustion and Flame 10 (1966) 59.
- 8) Peters, N. and Williams, A.: AIAA J. 21-3 (1983) 423.
- 9) Menon, S. 6th Int. Conf. on Numerical Combustion (1996).
- 10) 朴, 谷口, 小林, 生産研究51-1 (1999) 45.
- 11) Hirohata, M., Kobayashi, T., Taniguchi, N., 3rd Int. Symp. on Turbulence and Shear Flow Phenomena (2003).
- 12) 燃焼工学ハンドブック, 機械学会編, 丸善 (1995) 27.

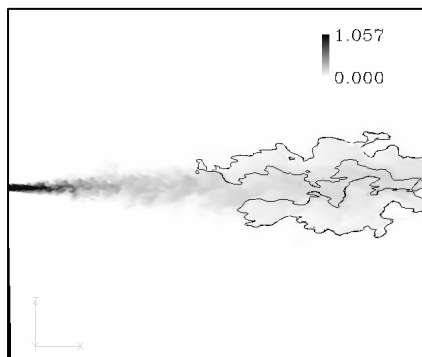


Fig.3 The instantaneous distribution of mixture fraction and wrinkling flame surface  $G=0.5$

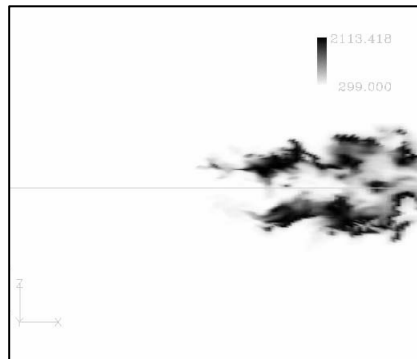


Fig.5 The instantaneous distribution of Temperature [K]

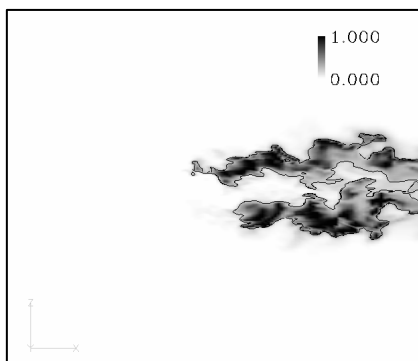


Fig.4 The instantaneous distribution of  $G$  (burnt gas) and wrinkling flame surface  $G=0.5$

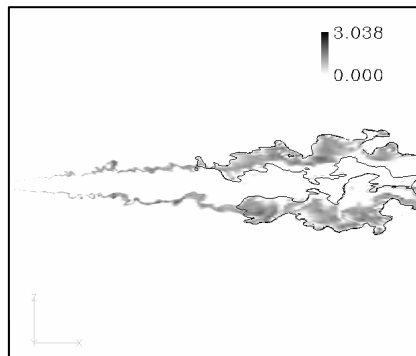


Fig.6 The instantaneous distribution of turbulent burning velocity  $ST/SL^0_{max}$  and wrinkling flame surface  $G=0.5$