

## DNS データベースを用いた乱流燃焼モデルの開発

Development of Turbulent Combustion Models based on DNS Databases

錦 慎之助\*, 長谷川 達也\*\*

\*長岡技術科学大学機械系 \*\*名古屋大学理工科学総合研究センター

Shinnosuke Nishiki\* and Tatsuya Hasegawa\*\*

\*Nagaoka University of Technology \*\*Nagoya University

E-mail: nishiki@mech.nagaokaut.ac.jp

## 1 はじめに

流体や熱移動, 乱流, 燃焼の現象を数値シミュレーションによって再現し, 実用的な設計に用いられる商用の解析ソフトでは多くの場合, 乱流モデルなどの「モデル」を用いた計算を行っている. これは実際の開発や設計では, 完全な現象の解析が必要なのではなく, 設計に必要な情報の抽出と時間平均したデータなどが求められているからである. また, 計算コスト削減と開発期間短縮の目的を達成するためにもモデルを利用した計算が行われている. 熱伝導解析や乱流解析の分野では精度の良いモデルの研究開発が進んでおり, 実用的な設計や開発に商用の解析ソフトが利用されている. ところが, 燃焼を含んだ現象は非常に複雑であるため, 実際の燃焼器の設計や開発に用いることのできる実用的な精度の良い乱流燃焼モデルは現在に至っても完成していない. 乱流予混合燃焼中の乱流場を解くモデルとして, 燃焼のない場合の乱流モデルを代用して計算することは不可能ではないが, 火炎付近で発生する熱膨張と急激な温度上昇が流れ場に与える強い影響が考慮されていないため, 計算結果の妥当性に疑問が生じてしまう. ところで, 燃焼現象の根本である化学反応のプロセスは非常に複雑であり, また燃料によって化学反応機構は大幅に異なっている. 詳細な化学反応を考慮した数値シミュレーションは,  $\text{CO}_2$  や  $\text{NO}_x$  の削減の研究や化学反応機構そのものの研究などには極めて重要であるが, 詳細化学反応を考慮した 3 次元の乱流予混合燃焼の直接数値計算を実行するためには膨大な計算時間とコストが必要になってしまうことが問題点である. また一方で, 燃焼条件の変化に対応可能な精度の良い乱流燃焼モデルを開発するためには複数の条件の直接数値計算(DNS)データベースを構築する必要がある. そのため, 本研究では単純化した化学反応機構を採用し, 乱流予混合燃焼を急激な熱発生とそれに伴う熱膨張が発生する乱流と仮定して複数の条件下のデータベースを構築した. そして, 急激な熱発生が乱流に与える影響を重点に調べ, 乱流燃焼モデルを開発することを目標としている. このような DNS データを用いたモデル構築は, 乱流モデルの研究開発において現在盛んに行われている手法である[1]. このような DNS の研究が盛んに行われている背景としては, 急速に発達を続けている計算機の性能向上が挙げられる.

本研究では, まず初めに燃焼前後のガスの密度比(膨張比)が異なる 3 ケースの条件下で

乱流予混合燃焼の DNS を行い、十分に火炎が発達した状態のデータベースを構築した。次に、乱流エネルギーと乱流スカラー流束の輸送方程式の解析からその特性を調べた。そして、これらの輸送方程式の各項の内、燃焼に関連する項のモデル化を行った。具体的な内容は次セッション以降に示す。

## 2 乱流予混合燃焼の直接数値計算

詳細な計算手法等は既報[2-4]を参照して頂くことにして、ここでは簡単に計算手法を紹介する。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計算した。(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  $\gamma$  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。

計算領域は図 1 に示すように  $8\text{mm} \times 4\text{mm} \times 4\text{mm}$  の直方体で、長さ  $8\text{mm}$  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、計算領域内で燃焼した後、下流側に向かって燃焼ガスが流出する。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。時間積分には 3 段階ルンゲ・クッタ法を使用した。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[5,6]を用い、 $y, z$  方向には周期境界条件を用いた。

計算領域および周囲の圧力は  $0.1 \text{ MPa}$  とした。また、流入する未燃焼ガスの温度は  $300 \text{ K}$  とし、定圧比熱は  $1.25 \times 10^3 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$ 、比熱比は  $1.4$  で一定値とした。初期温度  $T_0 = 300 \text{ K}$  での粘性係数は  $\mu_0 = 1.77 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$  とし、粘性係数および輸送係数の温度依存性は次式のようにルイス数を  $1.0$ 、プラントル数を  $0.75$  とすることで与えた。

$$\mu = \mu_0 \left( \frac{T}{T_0} \right)^{0.7}, \quad Le = \frac{\lambda}{\rho D C_p} = 1.0, \quad Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda} = 0.75 \quad (1)$$

本研究では、燃焼前後の密度比が異なる 3 ケースの火炎の特性の違いを表 1 にまとめた。なお、Case H, M および L はそれぞれ、密度比が、High, Middle および Low の場合を意味している。

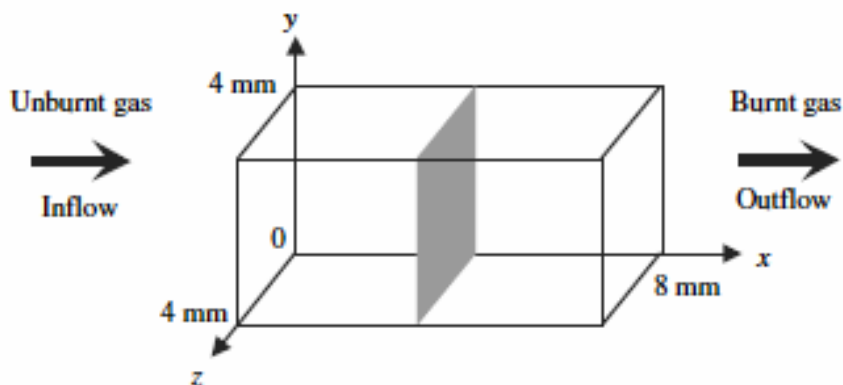


Fig. 1. Simulation domain and coordinate system.

Table 1. Characteristics of flames.

	Case H	Case M	Case L
$\rho_u/\rho_b$	7.53	5.00	2.50
$T_a$	2260 K	1500 K	750 K
$u_L$	0.600 m/s	0.523 m/s	0.416 m/s
$e_L$	0.217 mm	0.191 mm	0.158 mm

$\rho_u$ : density of unburnt gas,  $\rho_b$ : density of burnt gas,  
 $T_a$ : adiabatic temperature,  $u_L$ : laminar burning  
 velocity,  $e_L$ : flame thickness.

Table 2. Characteristics of turbulence.

	Case H	Case M	Case L
$u'/u_L$	0.88	1.01	1.26
$l_i/e_L$	15.9	18.0	21.8
$l_m/e_L$	9.44	10.7	13.0
$l_d/e_L$	0.65	0.74	0.90
$Re_{lt}$	95.5	95.5	95.5
$Re_{lm}$	56.7	56.7	56.7

$u'$ : turbulent intensity,  $l_i$ : integral length scale,  
 $l_m$ : Taylor micro scale,  $l_d$ : Kolmogorov scale,  
 $Re_{lt}$ : Reynolds number based on integral length scale,  
 $Re_{lm}$ : Reynolds number based on Taylor micro scale.

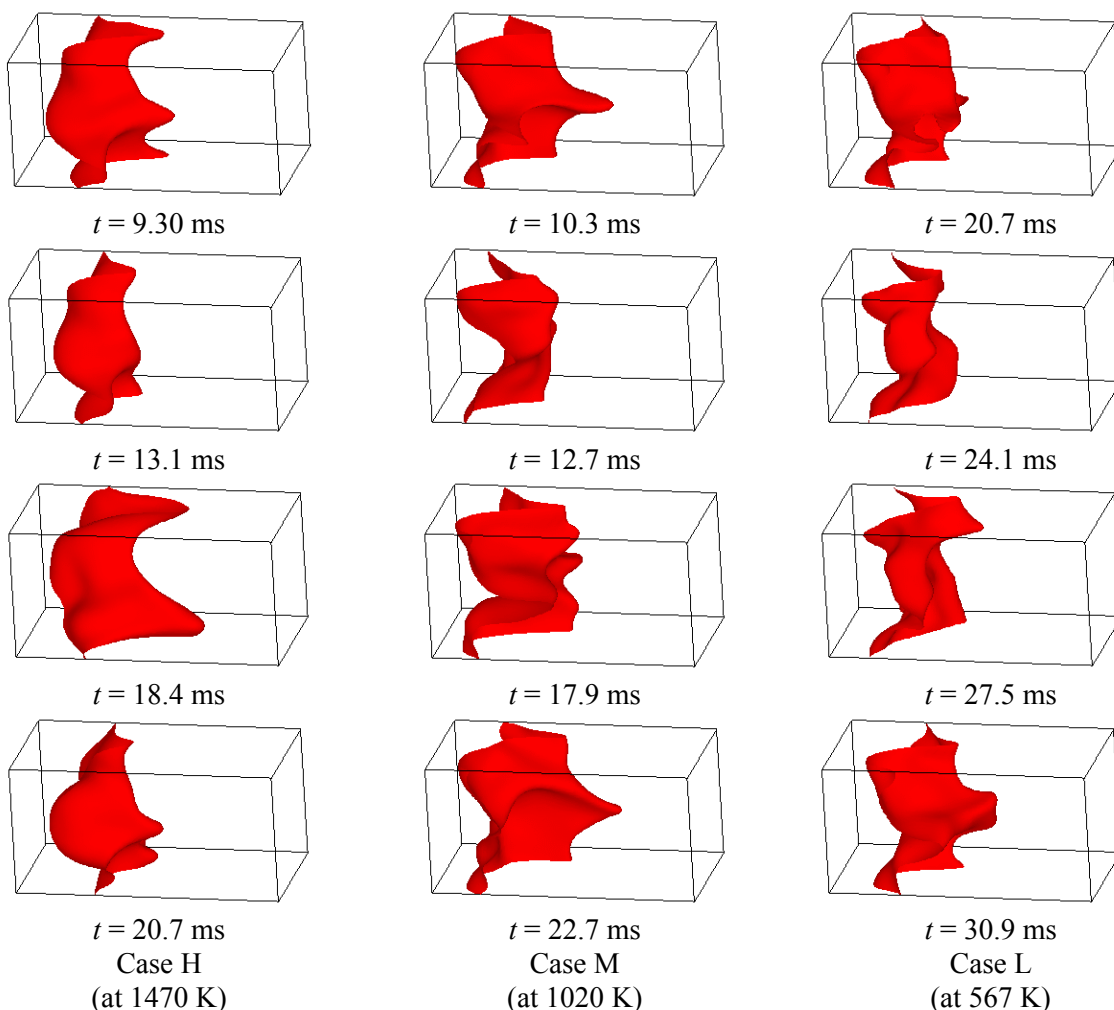


Fig. 2. Temporal evolution of wrinkled flames:  
 Contour surfaces of the progress variable at about  $c = 0.6$ .

計算開始時の火炎の初期条件は図 1 に示すような平面火炎とし、予め計算した一次元層流予混合火炎の計算データを初期温度分布、質量分率、膨張速度および圧力分布に使用した。また、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と膨張速度を加えて与えた。流入する一様等方性乱流および初期の乱流場の特性は表 2 にまと

めた。

計算開始後、火炎は平面火炎からしわ状火炎に発達する。初期条件の平面火炎は層流燃焼速度で伝播するが、しわ状火炎の発達につれて火炎伝播速度が増加して乱流燃焼速度に達する。計算初期の未燃焼ガスの平均流入速度は層流燃焼速度と同じであるが、火炎伝播速度の増加に対応して平均流入速度を計算の途中で増加させた。この操作により、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。火炎形状の時間経過の様子を図 2 に示す。十分に発達したしわ状火炎が、ある一定領域内に定在している様子が分かる。データベースの解析は、火炎が十分に発達して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、Case M は 10.3 ms から 22.7 ms、また Case L は 20.7 ms から 31.0 ms までである。なお、サンプリング間隔は 0.0517 ms である。

数値計算は理化学研究所に設置されている VPP700E を使用し、32PE で並列計算を行った。一回のジョブ投入当たり、約 0.1 ミリ秒の計算を進めることができ、計算時間は約 5 時間（計算開始から終了までの時間）である。

### 3 乱流輸送特性の解析とモデリング[2, 3]

#### 3.1 乱流エネルギーの輸送方程式[7]

乱流エネルギーの輸送方程式の解析により、乱流エネルギーの乱流輸送特性を調べた。ファールブル平均が施された乱流エネルギーの輸送方程式は次のように表される。

$$\underbrace{\frac{\partial \tilde{k}}{\partial t}}_{(O)} + \underbrace{\tilde{u}_k \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_k}}_{(O1)} = - \underbrace{\frac{\overline{u''_i u''_k}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k}}_{(I)} - \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \overline{\rho u''_i u''_i u''_k}}{2 \partial x_k}}_{(II)} - \underbrace{\frac{\overline{u''_i}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}}_{(III)} - \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{u''_i \frac{\partial p'}{\partial x_i}}}_{(IV)} + \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{u''_i \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k}}}_{(V)} \quad (2)$$

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。

各項を時間平均した分布を図 3 に示す。各ケースとも火炎領域において平均圧力勾配による生成項 (III) と圧力作用項 (IV) が乱流エネルギーの増加に対して寄与していることが分かる。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る効果を示している。

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。同じように、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  $\Delta$  に変形することができる。

$$\underbrace{-\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{u''_i \frac{\partial p'}{\partial x_i}}}_{(IV)} = - \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{\frac{\partial p'}{\partial x_i} u''_i}}_{(IV1)} + \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{p' \frac{\partial u''_i}{\partial x_i}}}_{(IV2)} \quad (3)$$

$$\underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{u''_i \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k}}}_{(V)} = - \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{\mu \frac{\partial u''_i}{\partial x_k} \frac{\partial u''_i}{\partial x_k}}}_{(V1)} + \underbrace{\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{u''_i \frac{\partial (\mu \frac{\partial u''_i}{\partial x_k})}{\partial x_k}}}_{(V2)} - \underbrace{\frac{2}{3} \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial (\mu \frac{\partial u''_i}{\partial x_k})}{\partial x_k} u''_k}_{(V3)} + \Delta \quad (4)$$

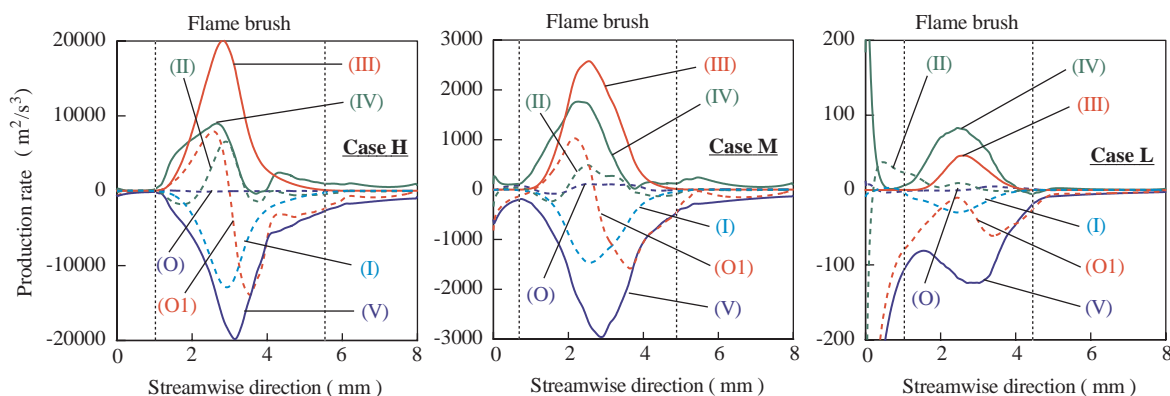


Fig. 3. Streamwise balance of the production rate of the turbulent kinetic energy.

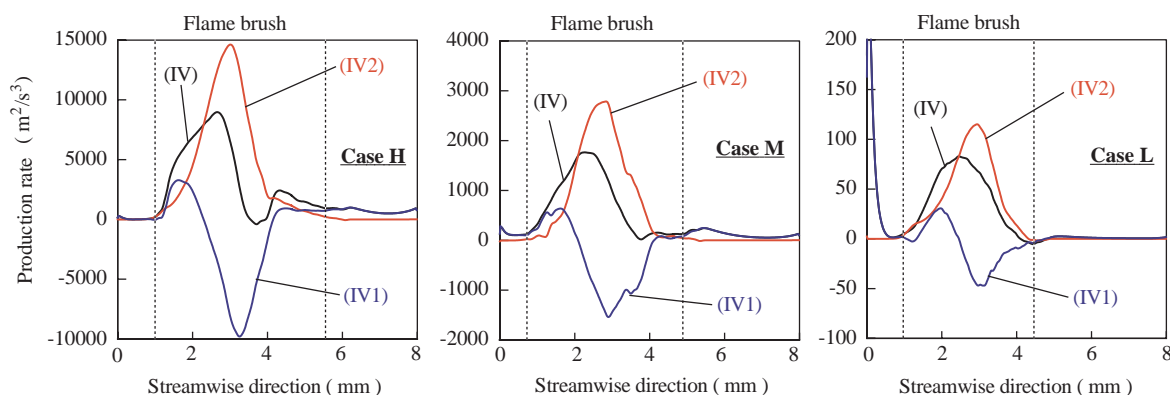


Fig. 4. Streamwise balance of the pressure work term (IV), the pressure diffusion term (IV1) and the pressure dilatation term (IV2)

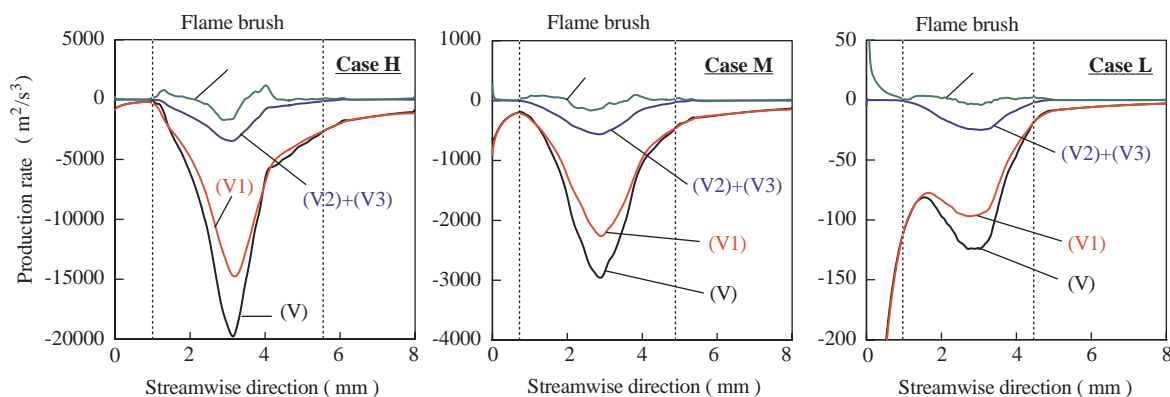


Fig. 5. Streamwise balance of the diffusion and dissipation term (V), the classical dissipation term (V1), the additional dissipation components (V2) and (V3), and other small terms  $\Delta$ .

式(3), (4)の各項の時間平均した分布をそれぞれ図4, 5に示す. Case H, M と L では各項の値(グラフの縦軸)に大きな差があるものの, 火炎領域内では良く似た形状の分布を示している. 図4は, 火炎領域で圧力作用項(IV)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. 一方, 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乱流エネルギーを減少させる効果を持っていることを示している. 図5は, 粘

性による拡散および散逸項(V)で散逸の項(V1)が支配的であるが, 燃烧に起因する項(V2)+(V3)も負の値を持っており, 無視することはできない影響があることを示している. その他の微小項の和  $\Delta$  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る程度に小さいことが分かる.

乱流エネルギーの輸送方程式のうち, 燃烧の影響を受ける平均圧力勾配による生成項 (III), 圧力膨張項 (IV2), 燃烧に起因する項 (V2)+(V3) についてそれぞれモデル化を行った. なお, ここで進行度変数  $c$  は次式のように定義した.

$$c = \frac{T - T_0}{T_a - T_0} \tag{5}$$

### 3.1.1 平均圧力勾配による生成項 (III) のモデル化

密度  $\rho$  を進行度変数  $c$  を用いて次式のように仮定した.

$$\frac{1}{\rho(c)} \approx \frac{c}{\rho_b} + \frac{1-c}{\rho_u} \tag{6}$$

また,  $u''$  の平均は確率密度関数  $P(c, u)$  および式 6 の関係を用いることで次のように書ける.

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

ここで,  $c = \tilde{c} + c''$  を代入して,

$$= \left( \frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u} \right) \overline{\rho u'' c''} \tag{7}$$

となる. 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.

$$-\frac{\overline{u_i''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} \approx -C_{III} \left( \frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u} \right) \frac{\overline{\rho u_i'' c''}}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} \tag{8}$$

モデルと DNS のデータを比較したグラフを図 6 に示す. モデル定数は Case H, M, L 共に 1.0 で, モデルと DNS のデータは非常に良く一致した分布を示した.

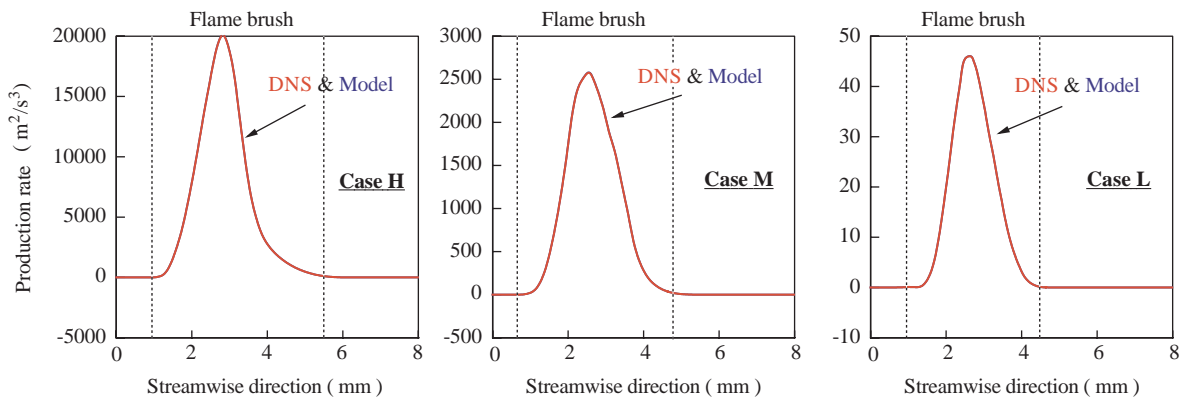


Fig. 6. Comparison of the model for the mean pressure gradient term (III) with DNS.

## 3.1.2 圧力膨張項 (IV2) のモデル化

まず、圧力変動  $p'$  は火炎面前後の圧力差として次式のようにモデル化した。

$$p' \approx |\Delta p|_L = \rho_u u_L \Delta u = \rho_u u_L^2 (\rho_u / \rho_b - 1) \quad (9)$$

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次式のようにモデル化した。

$$\frac{\partial u_i''}{\partial x_i} \approx u_L \left( \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) / e_L \quad (10)$$

この結果、圧力膨張項(IV2)は次のようにモデル化できる。

$$\begin{aligned} +\frac{1}{\bar{\rho}} \overline{p' \frac{\partial u_i''}{\partial x_i}} &\approx +\frac{1}{\bar{\rho}} \rho_u u_L^2 \left( \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) \frac{u_L}{e_L} \times \Sigma e_L \\ &\approx C_{IV2} \tilde{\omega} u_L^2 \left( \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right)^2 \end{aligned} \quad (11)$$

ここで、 $\Sigma$  は単位体積当たりの火炎の表面積である。また、次の関係式 (Flame-surface density model[8]) を用いた。

$$\bar{\rho} \tilde{\omega} \approx \rho_u u_L \Sigma \quad (12)$$

モデルと DNS のデータを比較したグラフを図 7 に示す。モデル定数  $C_{IV2}$  は Case H では 0.35, Case M では 0.36, Case L では 0.34 である。各ケースともモデルと DNS データの最大値の値にやや差があるが、モデルと DNS データの分布は良く似た分布を示した。

## 3.1.3 燃焼に起因する項(V2)+(V3)のモデル化

まず、 $\partial u_i'' / \partial x_i$  は式(10)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、 $\partial x_i$  は層流火炎厚さとモデル化した。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。

$$\begin{aligned} (V2)+(V3) &\approx -\frac{1}{\bar{\rho}} C_{\text{add}} \bar{\mu} \frac{\tilde{k}^{1/2}}{e_L} \frac{\Delta u}{e_L} \times \Sigma e_L \\ &= -\frac{1}{\bar{\rho}} C_{\text{add}} \frac{\bar{\mu}}{e_L u_L} \tilde{k}^{1/2} u_L^2 \left( \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) \times \Sigma \end{aligned} \quad (13)$$

さらに、式(12)および次の関係を用いることで、

$$\bar{\mu} / e_L u_L \approx \rho_u \quad (14)$$

最終的に次式のようなモデルが得られる。

$$(V2)+(V3) \approx -C_{\text{add}} \tilde{k}^{1/2} u_L (\rho_u / \rho_b - 1) \tilde{\omega} \quad (15)$$

モデルと DNS のデータを比較したグラフを図 8 に示す。モデル定数  $C_{\text{add}}$  は Case H では 0.29, Case M では 0.28, Case L では 0.25 である。各ケースともモデルと DNS データは良く似た分布を示した。

乱流エネルギーの輸送方程式のうち、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) のモデル化を行った。それぞれモデルと DNS データとの比較

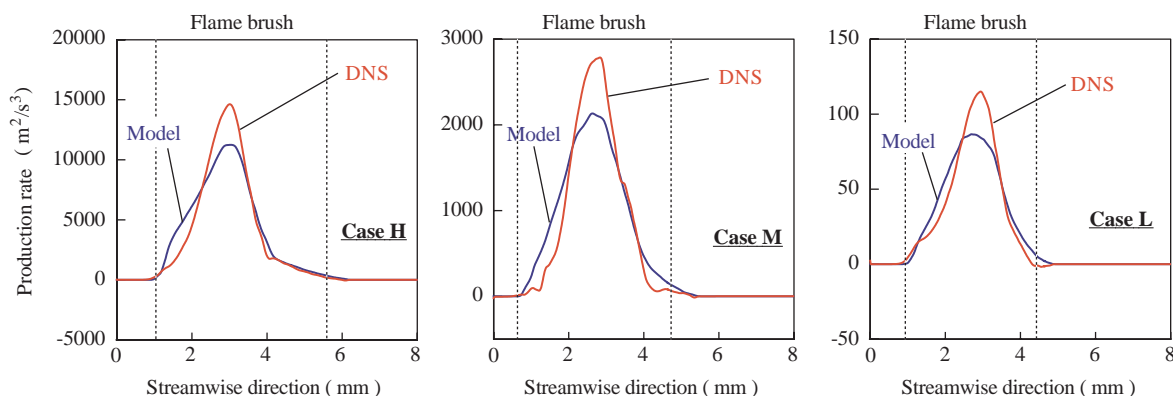


Fig. 7. Comparison of the model for the pressure dilatation term (IV2) with DNS.

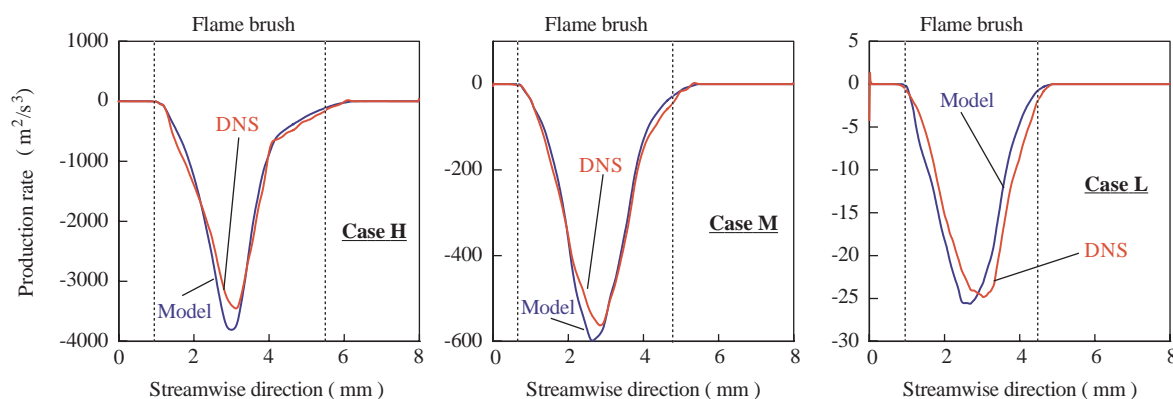


Fig. 8. Comparison of the model for the additional dissipation components (V2)+(V3) with DNS.

を行った結果、モデルは DNS の結果を良く再現していることが確認できた。また、それぞれのモデルのモデル定数は密度比の異なる条件でも非常に近い値を示しており、これらの乱流エネルギーの輸送方程式の燃焼モデルは精度良く構築することができたと考えられる。

### 3.2 乱流スカラー流束の輸送方程式

乱流予混合燃焼のモデル方程式では、多くの場合、勾配拡散モデルが用いられている。しかしながら、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おり [9-11]、本研究の条件下での計算結果は逆勾配拡散が支配的となった。逆勾配拡散の発生のメカニズムをファー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。ファール平均が施された乱流エネルギーの輸送方程式は次のように表される。

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{\frac{\partial \overline{\rho u_j' c''}}{\partial t}}_{(O)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho u_j'' c'' \tilde{u}_i})}_{(O1)} = - \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho u_i' u_j' c''})}_{(A)} - \underbrace{\overline{\rho u_j'' u_i'} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i}}_{(B)} \\
 & \underbrace{-\overline{\rho c'' u_i'} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}}_{(C)} - \underbrace{\overline{c''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j}}_{(D)} - \underbrace{\overline{c''} \frac{\partial p'}{\partial x_j}}_{(E)} + \underbrace{u_j'' \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{\rho D \frac{\partial c}{\partial x_i}} \right)}_{(F)} + \underbrace{\overline{c''} \frac{\partial \tau_{ji}}{\partial x_i}}_{(G)} + \underbrace{\overline{\rho u_j'' \tilde{\alpha}}}_{(H)} \quad (16)
 \end{aligned}$$

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



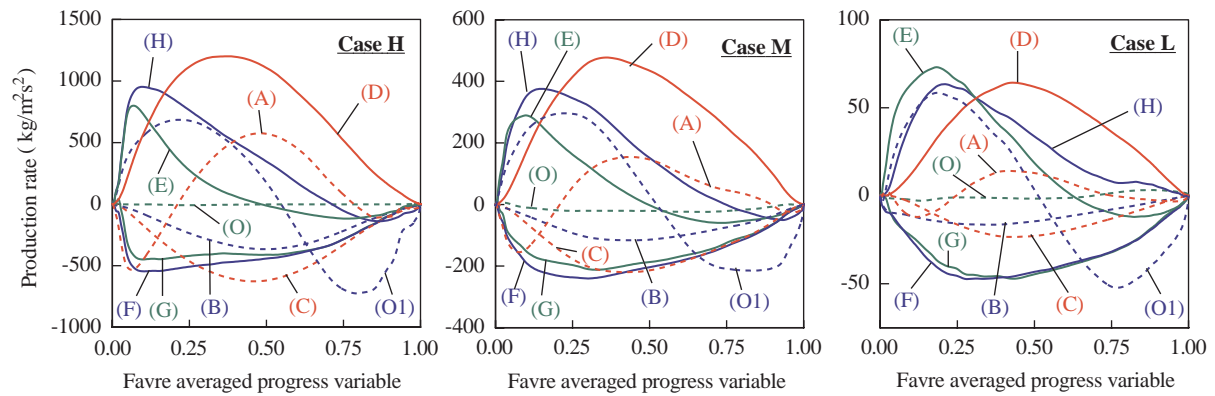


Fig. 9. Streamwise balance of the production rate of turbulent scalar flux.

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. 各項を時間平均した分布を図 9 に示す. これらの図より, 平均圧力勾配による生成項 (D) と圧力変動による生成項 (E), 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の要因となっていることが分かる.

乱流スカラー流束の輸送方程式のうち, 燃焼の影響を受ける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) についてそれぞれモデル化を行った.

### 3.2.1 平均圧力勾配による生成項 (D) のモデル化

まず,  $c''$  の平均は確率密度関数  $P(c,u)$  を用いることで次のように書ける. ここで, 密度  $\rho$  は式(6)のように仮定した.

$$\begin{aligned} \overline{c''} &\approx \int_u \int_c c'' P(c,u) dc du = \int_u \int_c \rho(c) c'' \frac{P(c,u)}{\rho(c)} dc du \\ &\approx \int_u \int_c \rho(c) \left( \frac{cc''}{\rho_b} + \frac{(1-c)c''}{\rho_u} \right) P(c,u) dc du \end{aligned}$$

ここで,  $c = \tilde{c} + c''$  を代入して,

$$\approx \overline{\rho c''^2} \left( \frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u} \right)$$

また, BML Limit の仮定  $\overline{\rho c''^2} = \bar{\rho} \tilde{c}(1-\tilde{c})$  [10] を代入して,

$$\approx \bar{\rho} \tilde{c}(1-\tilde{c}) \left( \frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u} \right) \tag{17}$$

となる. これより, 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.

$$-\overline{c''} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \approx -C_D \bar{\rho} \tilde{c}(1-\tilde{c}) \left( \frac{1}{\rho_b} - \frac{1}{\rho_u} \right) \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} \tag{18}$$

モデルと DNS のデータを比較したグラフを図 10 に示す. モデル定数  $C_D$  は Case H では 0.79,

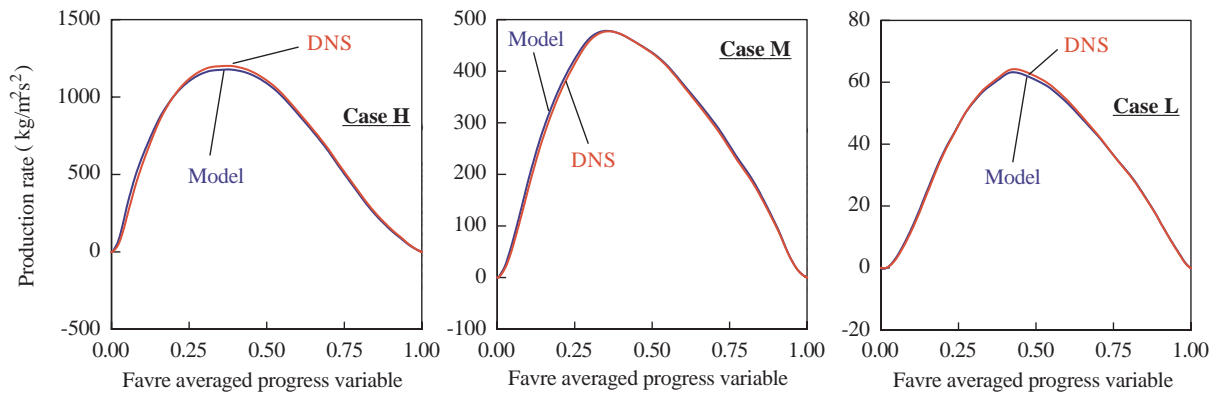


Fig. 10. Comparison of the model for the mean pressure gradient term (D) with DNS.

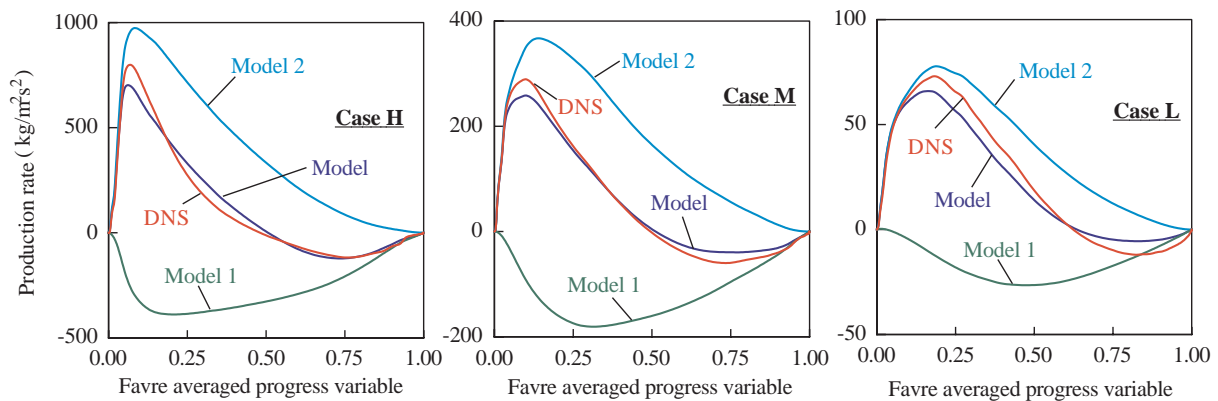


Fig. 11. Comparison of the model for the fluctuating pressure term (E) with DNS data.

Case M では 0.80, Case L では 0.80 である. モデルと DNS データは非常に良く似た分布を示した.

### 3. 2. 2 圧力変動による生成項 (E) のモデル化

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式のように書ける[12,13].

$$-c'' \frac{\partial p'}{\partial x_j} \approx -C_1 \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \overline{\rho u_j'' c''} + C_2 \overline{\rho u_k'' c''} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_k} \approx -C_1 \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \overline{\rho u_j'' c''} \quad (19)$$

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(9) のように,  $\partial x_i$  は層流火炎厚さ  $e_L$  とそれぞれモデル化した. また, 火炎領域の既燃側で火炎の影響の効果を小さくするために  $(1-\tilde{c})^{1.8}$  の因子を掛ける. 最終的に以下のモデルが得られる.

$$-c'' \frac{\partial p'}{\partial x_j} \approx \underbrace{-C_{E-c} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \overline{\rho u_j'' c''}}_{\text{Model 1}} + \underbrace{C_{E-a} \bar{\rho} u_L \left( \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) \tilde{\Delta} (1-\tilde{c})^{1.8}}_{\text{Model 2}} \quad (20)$$

モデルと DNS のデータを比較したグラフを図 11 に示す. モデル定数  $C_{E-c}$  は Case H では, 0.31, Case M では 0.33, Case L では 0.33 である. また, モデル定数  $C_{E-a}$  は Case H では, 0.66, Case M では 0.64, Case L では 0.64 である. モデル定数は密度比が変化してもほぼ同じ値で, 各ケー

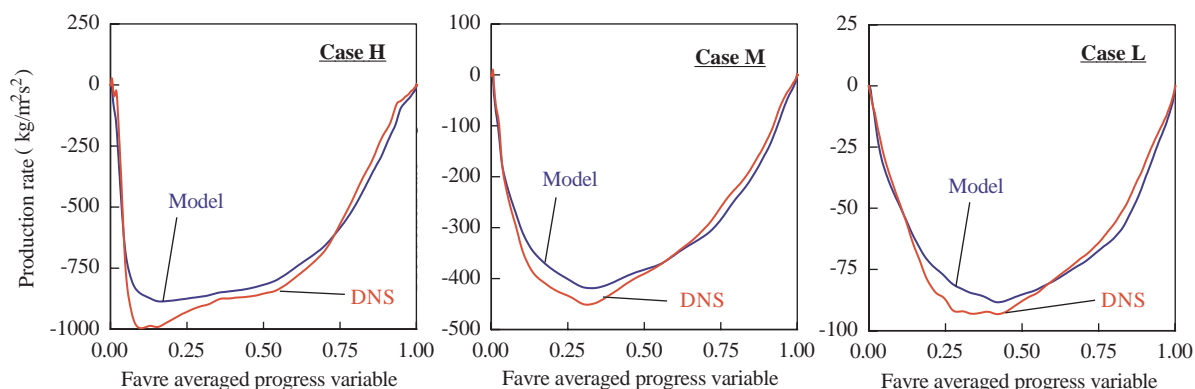


Fig. 12. Comparison of the model for dissipation terms (F)+(G) with DNS.

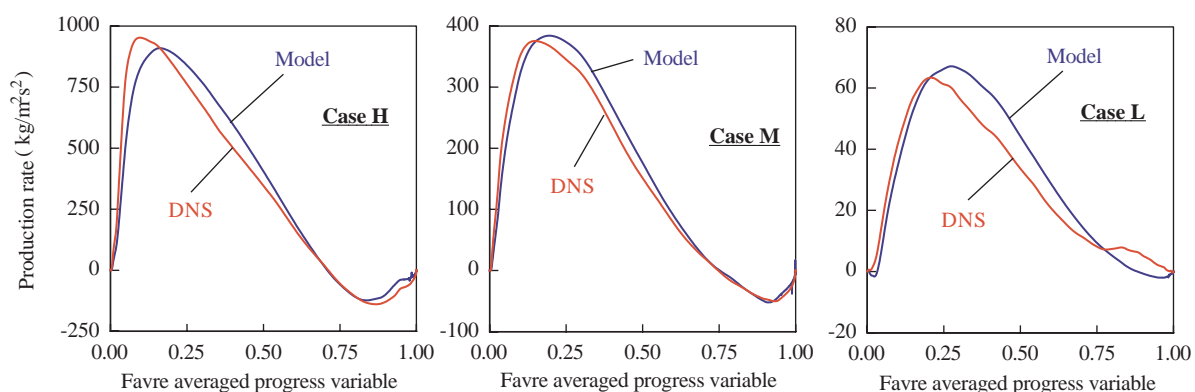


Fig. 13. Comparison of the model for velocity-reaction rate correlation term (H) with DNS.

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。

### 3.2.3 散逸項 (F) と (G) のモデル化

これらの項は二つの項をまとめてモデル化した。まず、 $\rho D$  は一定と仮定した。また、 $c$  および  $c''$  は 1,  $\partial x_i$  は層流火炎厚さ  $e_L$ ,  $\partial u_i''/\partial x_i$  は式(10)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。

$$(F)+(G) \approx -C_{FG} \bar{\rho} u_L \left( \frac{\rho_u}{\rho_b} - 1 \right) \tilde{\omega} \tag{21}$$

モデルと DNS のデータを比較したグラフを図 12 に示す。モデル定数  $C_{FG}$  は Case H では 0.48, Case M では 0.45, Case L では 0.39 である。各ケースともモデルと DNS データは良く似た分布を示したが、モデル定数の値に多少の違いがある点がモデルの修正課題である。

### 3.2.4 速度変動と平均反応速度の関係する項(H)のモデル化

この項のモデル化は、LMSE (Linear Mean Square Estimation) の仮定[14]および BML limit の仮定を用いることで次のように書ける[15]。

$$\overline{\rho u_j'' \tilde{\omega}} \approx C_H \bar{\rho} (\phi_m - \tilde{c}) \tilde{\omega} \frac{\overline{\rho u_j'' c''}}{\bar{\rho} \tilde{c} (1 - \tilde{c})} \tag{22}$$

モデルと DNS のデータを比較したグラフを図 13 に示す。モデル定数  $C_H$  は Case H では 1.50, Case M では 1.58, Case L では 1.42, また、モデル定数  $\phi_m$  は Case H では 0.69, Case M では

0.68, Case L では 0.80 である. Case H と M 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 とモデルとは逆の符号を示した. なお, Case L のモデル定数  $\phi_m$  の値は理論値とグラフの形状を考慮して 0.80 と決めた.

乱流スカラー流束の輸送方程式のうち, 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) についてモデル化を行った結果, 平均圧力勾配による生成項 (D), 圧力変動による生成項 (E) のモデルは DNS の結果を良く再現していることが確認できた. しかし, 残りの散逸項 (F)+(G), 速度変動と平均反応速度の関係する項 (H) のモデルでは, 密度比が変化した場合のモデル定数の差がやや大きいため, モデルの修正を行う必要があると考えられる.

#### 4 おわりに

乱流予混合燃焼の直接数値計算(DNS)のデータベースから乱流燃焼モデルを構築した方法について示した. これまでに本研究で構築した乱流予混合燃焼のデータベースは, 乱流の強さが比較的弱い条件下で計算を行った結果である. 実用的な燃焼器ではより強い乱流状態での燃焼が起きており, 構築した乱流燃焼モデルが適用できる範囲は限られている. 乱流や燃焼の条件が異なっても対応可能な汎用性のある燃焼モデルを開発するためには, さらに多くの条件下でのデータベースを構築してモデルの検証・開発を行う必要がある. 今後さらに計算機の性能が向上していけば, データベースの構築が容易になり, 精度の良い燃焼モデルの開発が可能になると期待される.

#### 謝辞

本研究は, 燃焼モデルの構築はフランス LMA-CNRS の Roland Borghi 教授からの多大な助言を受けて行った. また, 数値計算は理化学研究所情報基盤センターの姫野龍太郎センター長との共同研究により行った. ここに本研究の遂行に必要な研究協力であったことを記し, 謝意を表する.

#### 参考文献

- [1] 長野靖尚, 服部博文, “DNS データベースによる RANS モデルの構築”, 日本流体力学会数値流体力学部門 Web 会誌, 11 巻 2 号, (2003), pp. 59-72.
- [2] S. Nishiki, “DNS and Modeling of Turbulent Premixed Combustion”, Doctoral thesis, Nagoya Institute of Technology, (2003).
- [3] 錦慎之助, 長谷川達也, ロラン ボルギ, 姫野龍太郎, “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”, 日本燃焼学会誌, 44 巻 127 号, (2002), pp. 47-57.
- [4] 錦慎之助, 長谷川達也, ロラン ボルギ, 姫野龍太郎, “DNS に基づく乱流予混合燃焼の輸送特性とモデリング”, 第 15 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, (2001), C10-1.
- [5] T. J. Poinsot and S. K. Lele, “Boundary Conditions for Direct Simulations of Compressible Viscous Flows”, J. Computational Physics, Vol. 101, (1992), pp. 104-129.

- [6] M. Baum, T. Poinso and D. Thévenin, “Accurate Boundary Conditions for Multicomponent Reactive Flows”, *J. Computational Physics*, Vol. 116, (1994), pp. 247-261.
- [7] S. Nishiki, T. Hasegawa, R. Borghi and R. Himeno, “Modeling of Flame-Generated Turbulence Based on Direct Numerical Simulation Databases”, *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 29, (2002), pp. 2017-2022.
- [8] A. Trouvé, and T. Poinso, “The Evolution Equation for the Flame Surface Density in Turbulent Premixed Combustion”, *J. Fluid Mech.*, Vol. 278, (1994), pp. 1-31.
- [9] J. B. Moss, “Simultaneous Measurements of Concentration and Velocity in an Open Premixed Turbulent Flame”, *Combust. Sci. Tech.*, Vol. 22, (1980), pp. 119-129.
- [10] P. A. Libby and K. N. C. Bray, “Countergradient Diffusion in Premixed Turbulent Flames”, *AIAA J.* Vol. 19, (1981), pp. 205-213.
- [11] K. N. C. Bray, “Turbulent Flows with Premixed Reactants”, In *Turbulent Reacting Flows* (ed. Libby P. A. and Williams F. A.), *Topics in Applied Physics* 44, Springer-Verlag, (1980), pp. 115-183.
- [12] K. N. C. Bray, “Turbulent Transport in Flames”, *Proc. R. Soc. Lond., A* 451, (1995), pp. 231-256.
- [13] D. Bradley, P. H. Gaskell and X. J. Gu, “Application of a Reynolds Stress, Stretched Flamelet, Mathematical Model to Computations of Turbulent Burning Velocities and Comparison with Experiments”, *Combust. Flame*, Vol. 96, (1994), pp. 221-248.
- [14] R. Borghi and D. Dutoya, “On the Scales of the Fluctuations in Turbulent Combustion”, *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 17, (1978), pp. 235-244.
- [15] R. Borghi, “Turbulent combustion modelling”, *Proc. Energy Combust. Sci.*, Vol. 14, (1988), pp. 245-292.