

実験によるパラメータチューニングを必要としない 新しい乱流噴霧ハイブリッド LES コードの開発

新城淳史¹, 梅村章²

¹島根大学総合理工学研究科

²名古屋産業科学研究所

Development of a novel hybrid LES spray code free of empirical parameter tuning

by

J. Shinjo, A. Umemura

ABSTRACT

Conventional spray simulation codes, including commercial codes, require parameter tuning using experimental data due to the fact that the models included are not closed since they are not necessarily based on a thorough understanding of related physical mechanisms such as liquid atomization. This makes the predictability of simulation low, which has been a critical issue for decades. Our previous findings on liquid atomization mechanisms through detailed spray/droplet simulations, microgravity experiments of liquid jet pinch-off, theoretical considerations, etc. have paved the way to overcome this issue, and we have proposed a hybrid spray LES (large-eddy simulation) code with a novel turbulent atomization model. The turbulent atomization model features that the main atomization modes are driven by turbulent resonance or Rayleigh-Taylor (RT) instability, and the LES-resolved liquid surface information, such as turbulent Weber number and turbulent Bond number, determines the mode and timing of atomization. Several test cases for Diesel fuel injection are conducted to examine the validity of the model, and the obtained results indicate that the present code quite accurately reproduce the global characteristics such as the initial liquid behavior, spray spreading angle and droplet distribution. In addition, more detailed information on the atomization mode, the effect of flow Reynolds number, detailed flow structures, etc. is obtained and gives insight on the spray development mechanisms. For the first time, the present code has enabled a spray simulation free of parameter tuning and expected to improve the predictability of spray simulation both in academic studies and industrial applications.

1. はじめに

乱流噴霧は自動車や航空機のエンジンをはじめとして工学的に応用範囲が広く、古くから実用上用いられている。しかしながら、スケールが数 μm の液滴から数十 cm の燃焼器まで幅広いことと、乱流状態の気液二相流であることから、現象は非常に複雑でありまだ完全に解明されているわけではない。

液体燃料エンジンで燃料噴霧のシミュレーションを行おうとすると、とたんに困難に直面する。すなわち、噴射ノズル直下の濃い噴霧（一次微粒化領域）から下流の薄い噴霧までを一貫して解こうとするとスケールと気液割合の変化幅が大きすぎてうまく解けないのである。例えば、ノズル直下では液滴の生成（微粒化）が表面近傍の物理現象によって起こるため、気液界面を追跡しようとするとき非常に解像度の高い格子が必要になる[1-3]。そのため計算機資源の制約から計算領域はごく小さい領域に限られる。一方、下流側では気相の渦スケールは液滴よりも十分に大きいので液滴を点近似する手法が使えるが、この手法では上流側境界条件において液滴の分布をどのように与えるかで苦心する。なぜなら、この方法ではノズル直下領域は解けないのであるが、解けない領域からの情報を入れこまないといけないからである。もちろん、物理的にはこれらの領域とスケールは連続しており、両者は互いに強く影響するため本来は分離できない。

従来の典型的な噴霧コードでは、ノズル直下の濃い噴霧領域をモデル化し、それより下流の薄い噴霧領域のみを解く。そのノズル直下のモデルの代表例が Blob モデルである[4]。このモデルでは、ノズルから口径と同程度の液塊 (blob) が噴射され、その液塊が次第に分裂して小液滴になっていくと仮定している。コーディングは簡便でよいが、実際の物理は正しく反映していない。その代償として、モデルの中に経験的にしか決められないパラメータがいくつか残る。そのため実際の運用では、実験結果を見ながらそれらのパラメータを調節し数値計算結果を合わせていく、

いわゆるパラメータチューニングが必須となる。しかし、これは本末転倒である。本来は予測のためにシミュレーションをやっているのであり、実験結果がなくても計算は閉じていなければならない。

上記の状態は数十年来解決していない。近年も、モデルのいくつかの改善提案がなされているが、完全には成功していない。例えば、Navarro-Martinez[5]は、微粒化はエネルギー分配側であることから表面積の増大をエネルギー変換に絡めてモデル化している。しかしながら、微粒化のメカニズムの理解が不十分であり、微粒化後の表面エネルギーはある時定数で平衡状態に落ち着くはずであるとしか考慮されておらず本質的な物理過程が正しく入っていない。このため、既存の手法と同じくケースごとにチューニングが要る経験的パラメータ（ここでは時定数）が残ったまますべての責任をここに押し込めており、本質的には問題は何も解決していない。

この解決のためには、微粒化物理の正しい理解が必要である。我々は、これまでの研究で微粒化物理の解明を詳細に行ってきた[1-3,6-9]。その結果、いくつかの重要な知見を得た。それらには、表面張力波の働き、界面不安定性、乱流化、液滴と気相の干渉などを含む。これらの知見に基づき、物理的に正しい乱流微粒化のモデルを提案した[10,11]。本研究では、その乱流微粒化モデルを実際にコーディングし、その有効性を実証することを目的とする。目指すべきコードは、産業利用にも資するべく低負荷で物理的に妥当な結果を出すように設計する。次章以降で、モデルの詳細を記述する。

2. 微粒化モデルとコード

先述の通り、乱流噴霧はマルチスケール現象であるが、本コードは噴霧全体の挙動について精度を損なわずかつ低負荷で予測することを目的とし、以下のアプローチをとる。すなわち、（１）large-eddy simulation (LES) で乱流を解く。（２）ノズル直下は液体コアの気液界面を Euler 法で

解く。ただし直接計算ほどの格子は配しない。噴霧下流部は液滴を点近似し Lagrange 法で解くハイブリッド型にする。

(3) さらに(2)で粗くした界面解像を補償するため、液滴の生成には新しく提案した乱流微粒化モデル[10,11]を組み込む。なお、乱流微粒化モデルで生成されるのはサブグリッドスケールの液滴であり、グリッドスケールで捉えられる構造に関しては直接解像する。図 1 にその模式図を示す。このアプローチにより、ノズル出口の濃い噴霧領域と下流の薄い噴霧領域が連続的に接続される。

気液界面を含む Euler 部の支配方程式はまとめて書くと[12,13]

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{f} = \mathbf{g} + \mathbf{S} \quad (1)$$

ここで、

$$\mathbf{f} = (\rho, \mathbf{u}, T, Y_i) \quad (2)$$

$$\mathbf{g} = \left(-\rho \nabla \cdot \mathbf{u}, -\frac{\nabla p}{\rho} + \mathbf{Q}_u, -\frac{P_{TH} \nabla \cdot \mathbf{u}}{\rho c_v} + Q_T, Q_{Y_i} \right) \quad (3)$$

である。また $P_{TH} = T(\partial p / \partial T)_\rho$ であり、 \mathbf{Q}_u , Q_T , Q_{Y_i} は粘性、熱伝導、拡散の項である。 \mathbf{S} は Lagrange 液滴との双方向カップリング項を表す。さらに界面で蒸発がある場合は蒸発ソース項が加わる[12,13]。これらの式をフィルタリングした後に関閉じに残るサブグリッドスケール (SGS) 項には、ここでは標準的なスマゴリンスキーモデルを用いた。

気液界面の追跡にはレベルセット法を主として用いる[1-3,12,13]。レベルセット関数 (界面からの符号付距離関数) の従う方程式は

$$\partial_t F + (\mathbf{u} \cdot \nabla) F = -|\nabla F| s_L \quad (4)$$

である。右辺の項から、微粒化による気液界面後退速度 $s_L = dN/dt$ によっても形状が変わることが分かる。蒸発のある場合にはさらに蒸発による界面後退速度を組み入れる[12,13]。

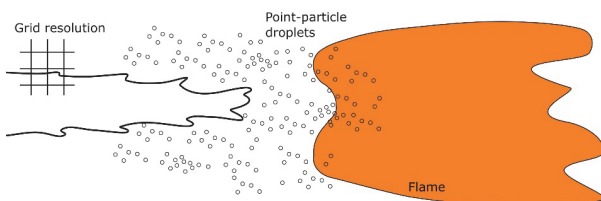


図 1 本計算での噴霧シミュレーションのアプローチ。一次微粒化領域 (左側) では液面を粗い格子で解き、液滴をモデルで与える。一方、下流側では従来のように液滴を点近似して解く。

乱流微粒化モデルは、液相内の乱流渦の運動を考慮することで構築し、液滴を Lagrange 粒子として生成する。模式図を図 2 に示す[10,11]。乱流渦と表面変形が共鳴したとき、液面の変形は振幅が増大しやがて液糸状に飛び出し、その先端から液滴を生成する (共鳴モード)。なお、界面の大変形は例えば Kelvin-Helmholtz 不安定などの機構が働くことによって起こる。大変形時には Rayleigh-Taylor (RT) 不安定 (局所加速度による変形) によって液滴が飛び出すこともあり (RT モード)、それも併せて描いてある。

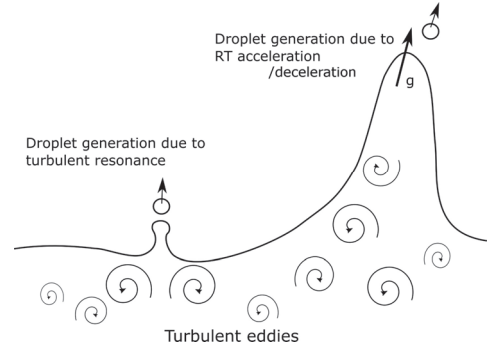


図 2 乱流微粒化のコンセプト。左側に乱流渦共鳴によるメカニズムを示す。右側のように局所的に表面加速度が大きいときは RT 不安定による液滴放出も起こる場合がある。

乱流渦の大きさはさまざまであるが、液滴が飛び出すには表面変形が乱流渦と共鳴してその振幅を増すことが条件になる[10,11]。この共鳴条件は以下のように表される。

$$\left[\left(\frac{l}{\lambda} \right)^2 - \frac{Bo}{2} \right] \left(\frac{l}{\lambda} \right) = \frac{1}{2} \left[\frac{\rho_L + \rho_G}{\rho_L} \frac{(ah)^2 We}{\sqrt{2} B} \right] \quad (5)$$

ここで、 l は参照乱流スケール (格子幅の約 3 倍)、 λ は渦波長、 B はサブグリッド乱流モデルからくる定数 ($=5.57$)、 ρ_L は液体密度、 ρ_G は気体密度である。 Bo は表面加速度 g の効果を示す乱流ボンダ数

$$Bo = \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{(\rho_L - \rho_G) g l^2}{\sigma} \quad (6)$$

であり、 We は乱流ウェーバー数

$$We = \frac{\rho_L (2k_L) l}{\sigma} \quad (7)$$

であり、ともに界面で定義される局所の量であることに注意されたい。ここで、 σ は表面張力係数、 k_L は液体乱流エネルギーである。 Bo は表面加速度 g の効果を含み、表面加速度は表面垂直方向加速度と遠心力 (曲率) 効果に分けることができる。 ah は格子内の液面位置 (α は λ の波数) に相当し、実現 (realization) ごとに異なる値をとる (図 3)。

式(5)は λ/l に関する 3 次方程式であり、各パラメータの条件によって存在する解のモード (RT 解および共鳴解) が変わる。液滴の径 d は Lang 条件により λ と関連付けられる ($d=0.34\lambda$) [8-11]。

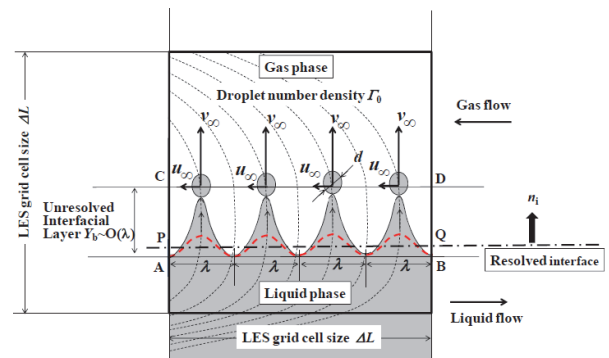


図 3 乱流微粒化の格子内のコンセプト[10]。波長 λ の波が発達し飛び出し条件を満たすと液滴が生成される。格子内の液面の高さが h である。

共鳴解の場合、実際には取りうる ah は確率的である。図 4 に例として $We=1000$ でのサブグリッド微粒化が実現する

領域を示す。上下の線は乱流渦ターンオーバー時間 (Ω_L^{-1} , Ω_L は液相内の表面せん断率) からくる。左側の斜めの境界はサブグリッド条件 (ここでは $\lambda < C\Delta L$, ΔL は格子幅、 C は格子幅に対する波長の最大値を設定する係数で図では例として 1 としてある) を表す。この 3 線に囲まれた領域が実現域である。LES 上で与える液滴情報 (乱流微粒化モデルで生成する液滴の情報) を得るには、乱流渦のターンオーバー時間の範囲内でアンサンブル平均をとる。実際のコーディングではこの結果をテーブルとしてあらかじめ持っておく。そして、気液の Euler 計算の部分により表面情報を得ることができるので、組み込んだテーブルを参照してサブグリッド液滴の情報を得る。

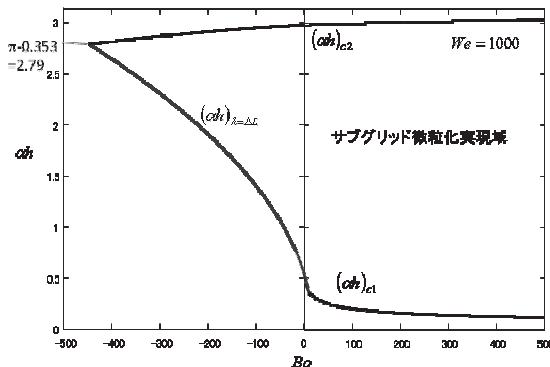


図 4 We=1000 でのサブグリッド微粒化実現域

Lagrange 粒子となった液滴の追跡には標準的な表式である

$$\frac{d\mathbf{x}_d}{dt} = \mathbf{u}_d \quad (8)$$

$$\frac{d\mathbf{u}_d}{dt} = \frac{f_1}{\tau_d} (\mathbf{u}_f - \mathbf{u}_d) \quad (9)$$

を用いる[14]。添え字 d は液滴、 f は気相を表す。式(9)の右辺は抗力を表す。なお、蒸発を考慮する場合には、液滴の温度と質量 (あるいは径) を追加して追跡する。本コードにはすでに蒸発効果は組み込んであるが、今回の計算では使用しないため説明は省略する。

3. 問題設定

コードの検証のために、自動車エンジンのディーゼル燃料噴霧を模擬して 3 つのケースを計算する[11,15]。ベースライン (ケース 1) として、実条件に近い噴霧を計算するため、口径 0.3mm の噴射孔から 200m/s での噴射を行う。また、過去の DNS[1-3]と合わせたもの、すなわち 0.1mm の口径の噴射孔から 100m/s での噴射を行ったものをケース 2 とする。最後に、Faeth ら[16]の実験データを参照するために、大きめの噴射孔 (口径 3.6mm) から 100m/s で水を噴いたものをケース 3 とする。初期の空気は静止しているものとするため、流れを駆動するのは噴射する液体の運動エネルギーのみである。本計算ではノズル出口に乱流条件 (Digital Filtering によりノズル出口を模擬した乱流成分[17]) を与える。

それぞれのケースの流れ条件を表 1 に示す。ここでのウェーバー数、レイノルズ数は液相の値と噴射孔直径をベースにしたバルクのものである。先述の局所の乱流ウェーバー数とは意味が異なるので注意されたい。ケース間で液体レイノルズ数が異なるが、その影響が微粒化や噴霧の形成にどのような影響を与えるかを調べていく。

表 1. 流れ条件。最上段は共通条件を表す。

雰囲気圧 P (MPa)	気相密度 ρ_g (kg/m ³)	液相粘性 μ_l (Pa·s)	気相粘性 μ_g (Pa·s)	気相速度 度 (m/s)
3	34.5	790×10^{-6}	18.9×10^{-6}	0

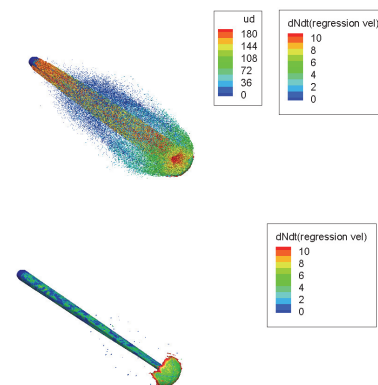
ケース	噴射孔直径 D (mm)	液相密度 ρ_l (kg/m ³)	液相速度 U (m/s)
1	0.3	848	200
2	0.1	848	100
3	3.6	1000	100

ケース	表面張力 σ (N/m)	液相 Re 数 $Re = \frac{\rho_l U D}{\mu_l}$	液相 We 数 $We = \frac{\rho_l U^2 D}{\sigma}$
1	30.0×10^{-3}	6.4×10^4	3.4×10^5
2	30.0×10^{-3}	1.1×10^4	2.8×10^4
3	70.0×10^{-3}	4.6×10^5	5.1×10^5

格子系は直交等間隔格子とした。過去の直接計算[1-3]では格子解像度はノズル直径に 260 点であったが、本計算ではいくつかの試行計算の後にノズル直径に 12 点とした。計算領域はノズル直径を D として、今回の計算ではケース 1 に $82D \times 11.5D \times 11.5D$ 、ケース 2 と 3 に約 $47D \times 10D \times 10D$ とした。計算領域はサブ領域に分割したうえで MPI で並列化した。なお、過去の直接計算[1-3]では計算領域は $14.6D \times 4.5D \times 4.5D$ 程度である。また、直接計算の総格子点数は (小さい領域に対してでも) 約 60 億点であったが、今回の計算は約 900 万~1800 万点である。液滴生成を直接解像しないため、格子解像度の要求が相当に緩和されて実スケールの解析が可能になっている。1 ケースの計算時間は計算機にもよるが、今回は最大 7 台で構成された標準的 PC クラスタで数日 (2~5 日) 程度である。

4. 結果および考察

図 5 に、ケース 1 での噴霧の発達の様子を示す。噴霧全体と内部の液柱コアに分けて描いてあり、液滴上の色は軸方向速度 u_d (m/s)、液柱コア上の色は微粒化による表面後退速度 dN/dt (m/s) である。時間はノズル直径と噴射速度を用いて無次元化してある。初期には液柱が静止空気に衝突することで先頭が巻き上がって傘状になりそのエッジから微粒化する。なお、このエッジからの微粒化は RT モードである。ここでは、大きな乱流 Bo 数が観察され (曲率を持った加速効果による)、継続的に RT 微粒化する。その後、液柱コアからの微粒化も起こり、そのために液柱コアは次第に細くなり、同時に傘も小さくなっていき最終的には傘は先頭からは消えて液柱コアはコーン状の形状になる。



(a) $\tilde{t} = 40$

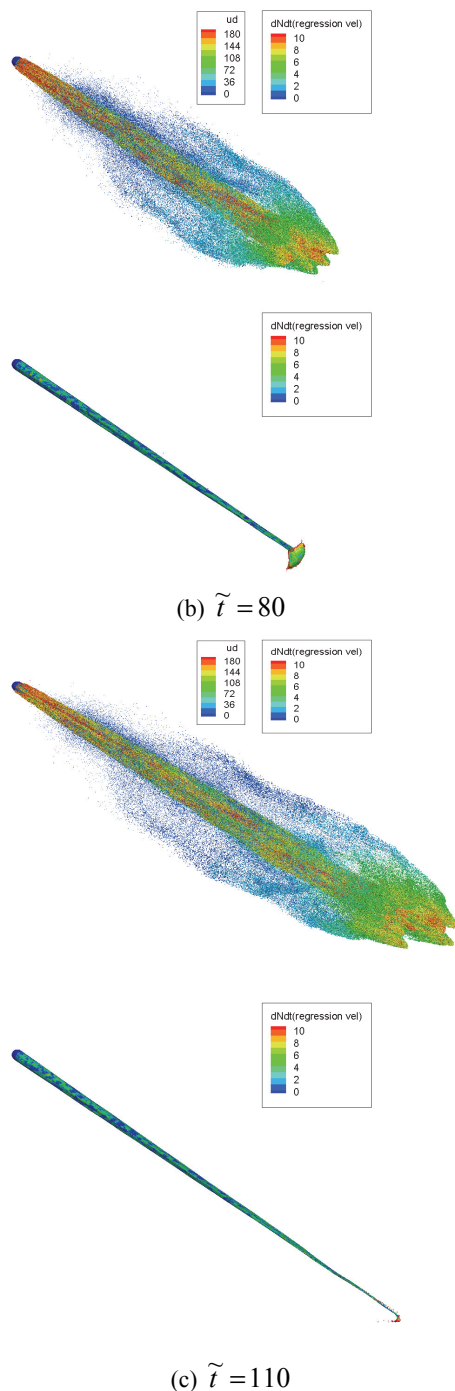


図5 ケース1の噴霧の発達の様子

ケース3の噴霧の発達の様子は、図5のケース1の発達と似ているが、ケース2の場合、図6に示すように、液柱コアの細り方が遅くなる。比較のため、先頭傘が消えた時の液柱コアの等価直径の様子を図7に示す。次に、この違いがどこから来るのかを考察する。

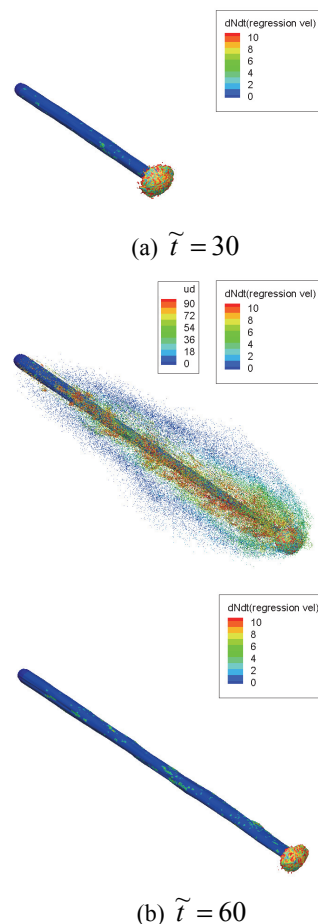
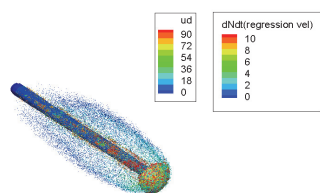


図6 ケース2の噴霧の発達の様子

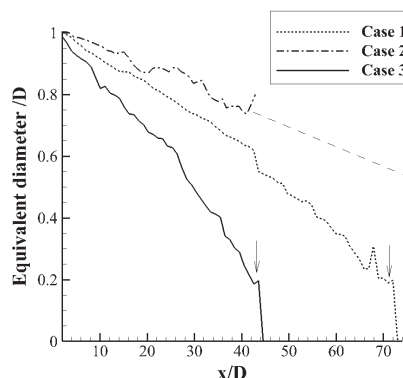


図7 液柱コアの等価直径の軸方向分布。ケース2は細り方が遅いので計算ではすべてとらえていないが傾向では点線のようなになる。矢印は先頭の傘が切れたことを示す。

微粒化の起こり方には、2つのモードがある。このうち、ノズル直下から液柱コアに起こるのは共鳴モードである。なぜなら、図8に示すように乱流 We 数が大きいからである。ケース間の違い（時間変動も含む）はあるものの、総じて共鳴モードを起こすのに十分である。この乱流 We は下流に行くほど平均的には $-2/3$ のスロープ（境界層の発達を考えれば出てくる）に沿って減少する。これは、液相内の乱流運動エネルギーを気相の運動エネルギーおよび微粒化による液滴表面エネルギーに分配していることに他ならないから、自然である。したがって、これはある程度下流に行けば共鳴モードは維持できなくなることを意味している。実際、Hoyt & Taylorの実験では、ノズル直下では表面

の細かい波打ちと小液滴の微粒化が観察されたが、液噴流が下流に行くと再層流化し、液柱コアが直径の数百倍の下流まで伸びた結果が示されている[6]。しかし、ここで仮に RT モードの励起があれば、下流で再層流化することなくさらに微粒化を継続することができる。図 9 にケース 1 と 2 の乱流 Bo 数と表面後退速度の分布を示す。表面後退速度は RT モードのほうが大きくなるため、乱流 Bo 数と合わせると RT モードが起こっているかないかが分かる。この結果から、ケース 1 では下流で RT モードが激しく起こり、コアの細りが（若干加速されながら）継続されており（図 7）、ケース 2 では RT モードが大きく起こらないためコアの細りが遅い（図 7）ことが分かる。この違いはバルクの液相 Re 数の違いによるものである。ケース 3 ではさらに大きな Re 数のため、ケース 1 に類似して RT モードが激しく起こるが、スペースの都合上ここでは示さない。以上により、液柱コアでの微粒化の振る舞いを説明することができた。

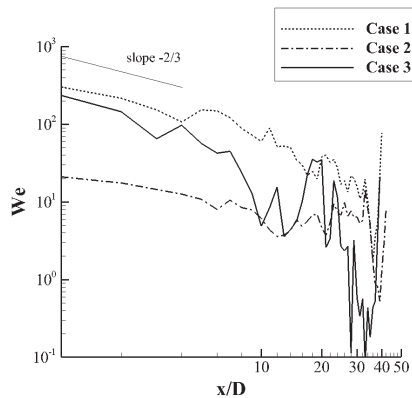
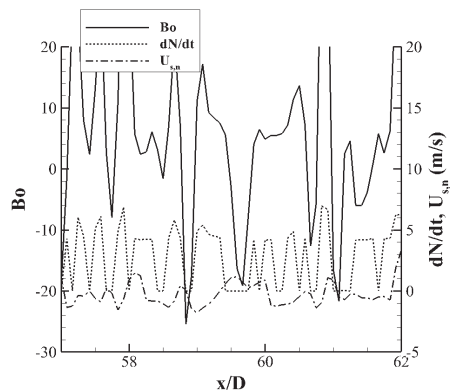
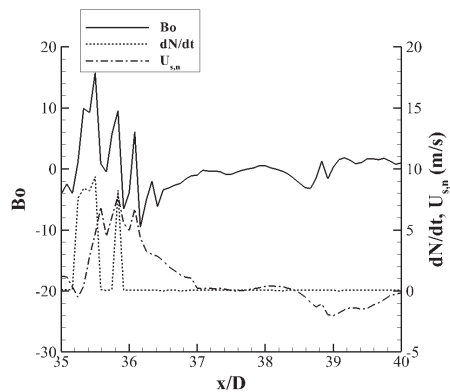


図 8 時刻 $\tilde{t} = 60$ におけるコア表面の乱流 We の分布



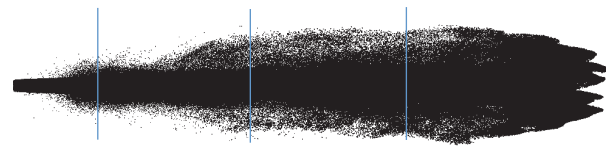
(a) ケース 1 at $\tilde{t} = 110$



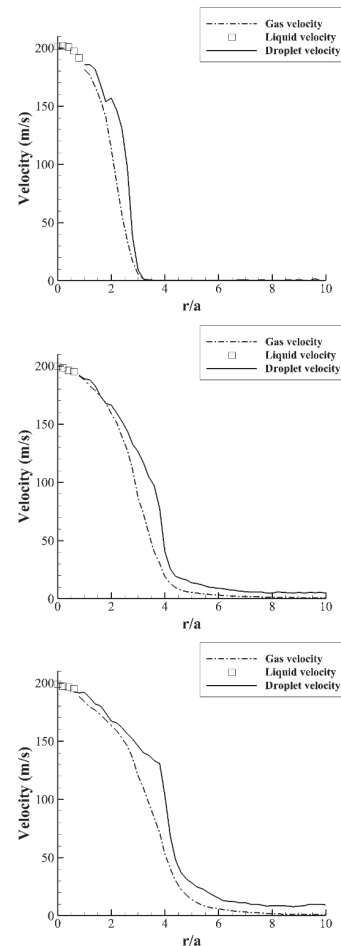
(b) ケース 2 at $\tilde{t} = 60$

図 9 液柱コア上の乱流 Bo 数の分布（実線）。点線が対応する表面後退速度。

次に液滴の動きを見る。図 10(a)にケース 1 での時刻 110 での噴霧の様子を示す。図の青い線は軸方向位置が $x/D=10, 30, 50$ の位置を示す。図 10(b)にあるように、軸方向の気相の動きは液滴が引き起こしている。ここで、速度分布は周方向に平均してある。液滴は液柱コアと同程度の軸方向速度を有し、気相を強く引きずる。また、液滴の個数が多いため、気相は液滴に追従し同程度の軸方向速度を持っている。なお、液柱コア内の速度（図 10(a)では白抜き四角）はノズル直下では乱流境界層の平均分布をしているので表面でのせん断が大きい、下流に行くにつれてせん断粘性によってフラット化されていくのにも注意されたい。これは図 8 で見たのと同じことである。半径方向には、液滴は打ち出し速度を持っているのでコアからしばらくは外向きの速度を持っている（図 10(c)）。一方、この部分の気相はコアが背後の壁面の役割を果たしているため圧力の関係で完全には液滴に追従できず、速度差が残る。一方、噴霧の外側からは軸方向の運動に対応してコアに向かった気相の流れ（図 10(c)での負の速度域）ができる。これは空気のエントレインメントである。このコア方向の気相流れと外向きの液滴がぶつくと液滴の外方向の速度は急激に減少し、噴霧の外縁が形成されていく。



(a) シャドウグラフ化した噴霧（ケース 1 at $\tilde{t} = 110$ ）



(b) 軸方向速度 at $x/D=10, 30$ and 50 (上から)

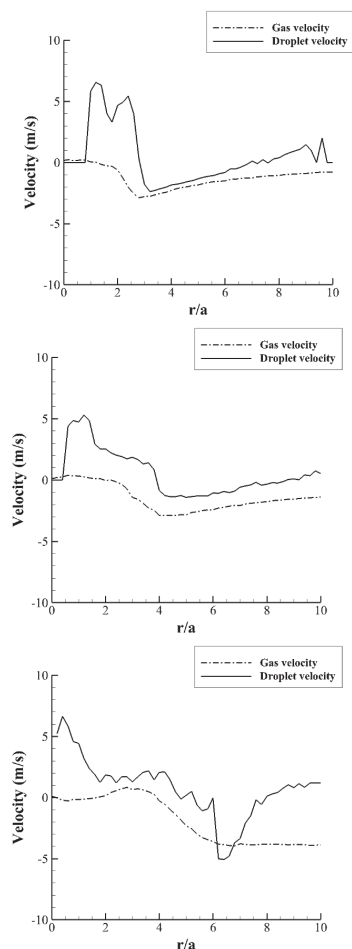
(c) 半径方向速度 at $x/D=10, 30$ and 50 (上から)

図 10 噴霧内部の速度分布

グローバルな噴霧角を図 11 に示す。実験[18-21]によりばらつきはあるが、本計算結果はよい一致を示している。最後に、ザウタ平均粒径を図 12 に示す。Faeth ら[16]の集めた実験結果と比較してある。実験ではノズル直下で小さい平均粒径であったものが下流にいくと大きくなるが示されているが、本計算結果もよい一致を示している。

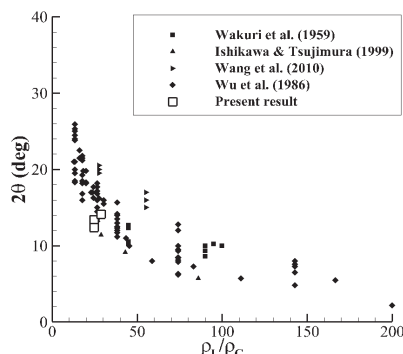


図 11 噴霧角。実験データは[18-21]による。

以上により、本研究で提案した新しい乱流微粒化モデルを組み込んだハイブリッド LES が噴霧の計算に有効であることが実証された。これまでの手法と異なり、実験結果を見ながらのパラメータチューニングは一切行っていない。むしろ、実験結果の詳細は計算後に見たため、いわゆるブラインドテストになっており、本計算手法の有効性を示し

ていると言える。本手法は計算負荷も軽く、研究や産業界での使用にも有効であると考えられる。

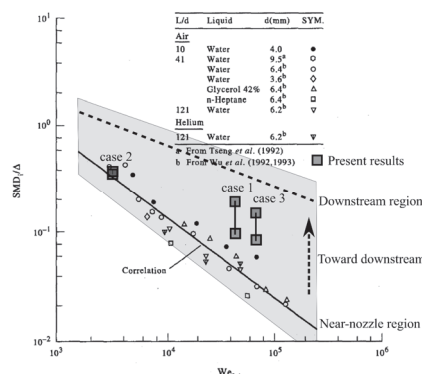


図 12 ザウタ平均粒径の比較。背景の図は Faeth ら[16]から再構成した。

5. 結論

新しい乱流微粒化モデルによる新しい噴霧コードを提案し、実証した。結果は非常に良好で、実験結果とのすり合わせ（チューニング）も一切行っていない。この結果はこれまでの噴霧シミュレーションの精度の限界を打ち破る可能性を秘めており、研究のみならず産業界での幅広い使用が期待される。

なお、アップデートを行ったため前刷りや実際の講演時の内容に比して一部異なった内容になっています。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP17H03481 およびマツダ株式会社の支援を受けました。記して謝意を表します。

参考文献

- 1) J. Shinjo, A. Umemura, *Int. J. Multiphase Flow* 36 (2010) 513-532.
- 2) J. Shinjo, A. Umemura, *Int. J. Multiphase Flow* 37 (2011) 1294-1304.
- 3) J. Shinjo, A. Umemura, *Proc. Combust. Inst.* 33 (2011) 2089-2097.
- 4) J. C. Beale, R. D. Reitz, *Atom. Sprays* 9 (1999) 623-650.
- 5) S. Navarro-Martinez, *Int. J. Multiphase Flow* 63 (2014) 11-22.
- 6) A. Umemura, *J. Fluid Mech.* 757 (2014) 665-700.
- 7) A. Umemura, *J. Fluid Mech.* 797 (2016) 146-180.
- 8) Y. Li, A. Umemura, *Int. J. Multiphase Flow* 60 (2014) 64-75.
- 9) Y. Li, A. Umemura, *J. Fluid Mech.* 759 (2014) 73-103.
- 10) A. Umemura, *Combust. Flame* 165 (2016) 154-176.
- 11) A. Umemura, J. Shinjo, submitted to *Combust. Flame*.
- 12) J. Shinjo, J. Xia, L. C. Ganippa, A. Megaritis, *Phys. Fluids* 26 (2014) 103302.
- 13) J. Shinjo, J. Xia, L. C. Ganippa, A. Megaritis, *J. Fluid Mech.* 793 (2016) 444-476.
- 14) N. Patel, S. Menon, *Combust. Flame* 153 (2008) 228-257.
- 15) J. Shinjo, A. Umemura, to be submitted.
- 16) G. M. Faeth, L.-P. Hsiang, P.-K. Wu, *Int. J. Multiphase Flow* 21 (1995) 99-127.
- 17) M. Klein, A. Sadiki, J. Janicka, *J. Comput. Phys.* 186 (2003) 652-665.
- 18) Y. Wakuri, M. Fujii, T. Amitani, R. Tsuneya, *J. Japan Soc. Mech. Eng.* 25 (1959) 820-826.
- 19) N. Ishikawa, K. Tujimura, *Atomization* 8 (1999) 51-58.
- 20) X. Wang, Z. Huang, O. A. Kutu, W. Zhang, K. Nishida, *Int. J. Heat Fluid Flow* 31 (2010) 659-666.
- 21) K.-J. Wu, R. D. Reitz, F. V. Bracco, *Phys. Fluids* 29 (1986) 941-951.