

液体燃料微粒化初期過程の数値解析

新城淳史、松山新吾、溝淵泰寛、小川哲
宇宙航空研究開発機構研究開発本部
梅村章
名古屋大学大学院工学研究科

Numerical Simulation of Liquid Fuel Primary Breakup

by
Junji Shinjo, Shingo Matsuyama, Yasuhiro Mizobuchi, Satoru Ogawa
Aerospace Research and Development Directorate, Japan Aerospace Exploration Agency
Akira Umemura
Department of Aerospace Engineering, Nagoya University

ABSTRACT

Large-scale numerical simulations of liquid fuel jet have been conducted to elucidate the physical mechanism of primary atomization near the injection nozzle. The grid resolution is made fine enough to resolve the smallest physical scale that is determined by the Weber number, i.e. surface tension effect. Such calculations have not been performed before, and this paper reports the world's first results on primary atomization in a turbulent spray. Physical processes are well captured such as surface instability development, ligament formation and droplet generation. While the aerodynamic force plays a role in developing surface instability, surface tension becomes more dominant in ligament and droplet formation. The droplet pinch-off is mostly dominated by the short-wave pinch-off mode, as the ligaments have tips. This is consistent with our previous research on droplet pinch-off from slow laminar liquid jets and provides insights into modeling. By these results, our understanding is made deeper on what is actually occurring inside a turbulent spray. The computational performance of JAXA's new supercomputer JSS is also described. Combined with the VisIMPACT parallelization method, this kind of large-scale computation can be easily implemented. With the reduction in I/O time, large unsteady simulations like this have been becoming possible.

1. はじめに

液体微粒化は工学の幅広い分野において応用されている。航空・宇宙・自動車・船舶等の液体燃料エンジンでは燃料の微粒化性能がエンジン燃焼性能や排気ガス特性に重大な影響を与える。また、化学加工、印刷、食品加工、医薬品製造などの諸分野でも液体微粒化は広く用いられている。しかし、特にエンジンでは乱流状態で用いられることが多いことも相まってその物理機構はまだ完全には理解されていない。したがって、よく分からないままに経験的に利用しているのが現状である[1]。そのため機器の設計は試行錯誤的要素が強くなっている。

噴霧の数値シミュレーションにおいても、特に一次微粒化領域（噴射ノズルに近く液体比率が大きい領域、後述図1のA領域）においては現象がよく分かっていないことから精度の低いモデルしか存在しない。しかし、この領域は噴霧数値シミュレーションの入射境界条件を与えるところであり、実行してみればすぐに分かることであるが液滴をLagrange的に追跡するような噴霧シミュレーションでは入口条件を少し変えると流れ場が大きく変わる。したがって、モデルの精度向上は重要でありそのために噴霧の物理をより理解する必要がある。まだ理解の足りない現時点では、現実には噴霧モデルのパラメータについて実験データを見ながらチューニングし数値解析結果を合わせ込んでいく操作を行うことが多い。しかし、これは本末転倒であり実験データを得るのが困難なエンジン内部の流れではいよいよ数値解析による予測の信頼性は低いものにならざるを得ない。

我々は、このような液体微粒化を取り巻く状況を打破すべく、噴霧の研究を行ってきた。これまで、ウェーバー数（慣性力と表面張力の比）が1のオーダーになる条件で一本の液糸（糸状の液体構造）を模擬した低速層流噴射液から液滴が生成される過程を理論・実験・数値計算の観点から考察してきた[2-7]。この形態での研究は過去の例も多いが[1]、我々はこれまで看過されてきた伝播性の表面張力波が重要な役割を果たしていることを明らかにした。そこで、本研究では、実際の液体噴流からどのように液糸が

できるかを解明し、一本の液糸の結果と接続できるようにすることを目的に数値解析を行う。

図1に乱流噴霧の模式図を示す。上述のこれまでの研究はBの領域に当たり、本研究はAの領域（一次微粒化領域）に当たる。一次微粒化領域では液体の比率が高いため、気液ともEuler的に扱う、つまり液体の形状を追跡する数値解析が必要になる。また、気液干渉、表面張力の作用により液噴流コア表面から次第に小さい構造が分離していくのでそれらを正しく解像できる格子系を用いなければならない。条件によっては必然的に大規模な計算機リソースを必要とするため計算が困難になる場合もある。これまで、噴流コアの分裂過程を見るための同様の計算はいくつか行われてきているが[8-10]、液噴流形態で格子解像度を十分に持った計算例はこれまでのところほとんどない。実のところ、格子解像度が足りない計算をしても噴霧の大局的な構造としてはもっともらしい結果が出る。しかし、そこでは表面張力によって最終的に液滴が分断されている物理的に正しい機構ではなく、単に格子解像度未満になった液体構造が数値的に切れるという偽の現象が起きているだけである。このような結果からは正しい物理的知見は得られない。

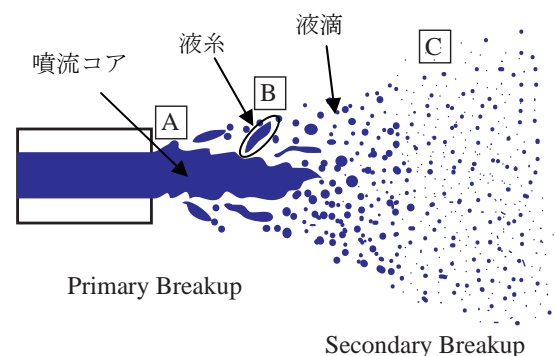


図1 液体噴霧の模式図

本計算では、これまででない細かい解像度で計算を行い、液糸および液滴生成過程を正しく捉えることを目的とする。これにより乱流噴霧で起こっている物理過程を把握し、実機器への応用を目的とした噴霧 LES へのモデル化の知見を得ることにする。また、JAXA に 2009 年 4 月に導入したスパコン JSS で実現可能になった最初の大規模計算ということで、計算環境についても若干の記述をしたい。

2. 計算条件および計算環境

数値計算の基礎方程式は非圧縮の 3 次元ナビエ・ストークス方程式とし気液界面には表面張力を入れた。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

$$\rho \left[\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}_{SV} \quad (1)$$

\mathbf{F}_{SV} は表面張力の項であり、CSF 法によって評価した。すなわち

$$\mathbf{F}_{SV} = \sigma \kappa \frac{\nabla \phi}{(\phi_{\max} - \phi_{\min})} \quad (2)$$

である。ここで σ は表面張力係数、 κ は局所曲率である。 ϕ は密度関数でありここでは液体を 1、気体を 0 と定義し、密度と粘性係数は密度関数を用いて気液それぞれのものを線形結合して与えた。界面の捕獲にはレベルセット法を用い、体積保存性の悪いところを VOF 法の発展版である MARS 法で補うことにした。レベルセット関数は界面からの距離で定義し以下の移流方程式に従う。

$$\frac{\partial F}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) F = 0 \quad (3)$$

F と ϕ はヘビサイド関数を用いて変換した。移流の計算には CIP 法を用いた。なお、計算法の詳細は文献[6,7]を参照されたい。

表 1 計算条件

ケース	噴孔直径 $D=2a$	霧 囲 気圧	液体 密度	液体 粘性	表面 張力
1-3	0.1mm	3MPa	848kg/m ³	2870e-6 Pa·s	30.0e-3 N/m

ケース	液体速度 U_{inj}	気体速度	液体レイノ ルズ数 $Re = \rho U a / \mu$	噴射ウエー バー数 $We_{bulk} = \rho U^2 a / \sigma$
1	30m/s	0m/s	440	1260
2	50m/s		740	3600
3	100m/s		1470	14400

計算には、JAXA に新規に設置された JSS システムを使用した。JSS はいくつかのサブシステムから成るが、その中核は富士通 FX1 ベースのスケラブルクラスタである。FX1 クラスタは、クロック周波数 2.5GHz クアッドコアの SPARC64TM VII チップ 1 個を搭載したノードが、Infiniband を使ったフルバンドの Fat tree トポロジーで 3,008 個結合された形態のものである。ノードは、40GFLOPS の理論ピーク性能と 32GB のメモリ空間を有する。CPU は、コア間ハードバリア、6MB 共有 L2 キャッシュ、高メモリバンド幅及び先進コンパイラ技術を核とする Virtual Single Processor by Integrated Multi-core Parallel Architecture (これ以降、

VisIMPACT と呼ぶ) と呼ばれるメカニズムを実装し、OpenMP 指示行追加などのユーザへのプログラミング負担を最小にしつつ CPU 内での高速自動スレッド並列実行を可能とする。FX1 クラスタでは、ノード間通信は、基本はフルバンドの Fat tree ネットワークにより行なわれるが、集合通信の高速化、ノード間バリア、計算ノード間の OS ジッタ低減のために高機能スイッチを使った高速バリアネットワークを別に持っている。VisIMPACT 及び高速バリアネットワークを利用することにより、マルチコア CPU 利用時におけるプログラミングモデル変更や MPI 大規模並列における並列化効率低下をあまり気にすることなく大規模問題にアタックすることができる。また、FX1 クラスタは、1PB の RAID ディスク装置と 10PB のテープ装置から成る大規模ストレージを擁し、25GB/秒の実行転送性能による入出力が可能である。

オリジナルコードは Fortran77 で書かれている。並列化は、XPFortran を用いて行なった。XPFortran は、富士通が開発したデータ並列タイプの並列化 Fortran 言語の一種である。ループレベル並列性に基いているため、並列プログラミングが比較的容易であり、インクリメンタルな開発が可能 (逐次に戻れる) である。XPFortran にはグローバルメモリ空間という概念があり、並列計算機システムの各ノードが持つ物理メモリを論理的に 1 つのメモリ空間に見せる機能がある。これにより変数が連続した一つの空間内に割り付けられているように見えるために、ノード間のデータ転送を意識することなくプログラミングができる。XPFortran では、プロセス間でのバリア同期を多用するため、高速バリアネットワークが有効に機能している。VisIMPACT 並列は、コンパイル時に -Kimpact オプションを指定すればよい。XPFortran と VisIMPACT 並列を利用することにより、ユーザは大規模並列を容易に実行することができる。

今回、最も大きいケース 3 の場合では、1440CPU (5760 コア) を用い計算時間は 450 時間である。非定常流のため、時系列のデータ量が合計で 150TB ほど出てくるが、入出力速度がボトルネックにならないように工夫をした (3 章を参照)。

3. 結果および考察

3.1 流れ場

図 2 にケース 3 の噴霧形状の概要を示す。各ケースとも定性的には同じ流れ場になる。色は軸方向速度である。液柱先頭では、傘形状が形成されその背後の巻き込み渦と縦渦の作用により乱れた流れ場が形成される。液糸の生成は先頭の傘のエッジと液柱コア表面の両方から確認できる。液糸の先端からは液滴が生成している。計算格子の解像度が足りているかを知る簡便な方法には、生成される液糸が滑らかで表面には波打ちが見られること、生成した液滴が球形状になること、などがあるが、図 2 では実際にそのようになっている (次ページ)。

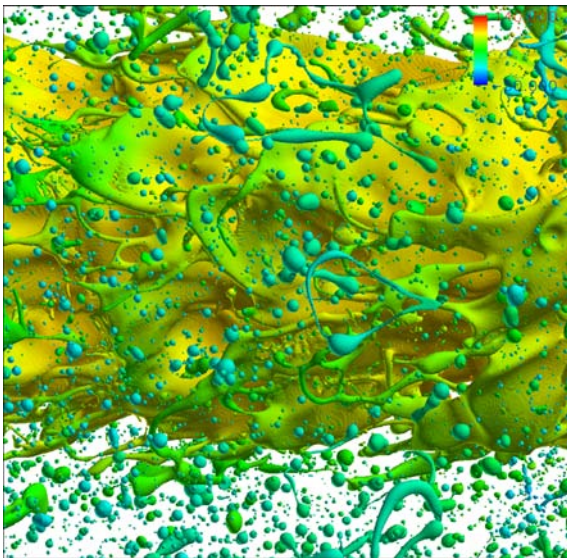
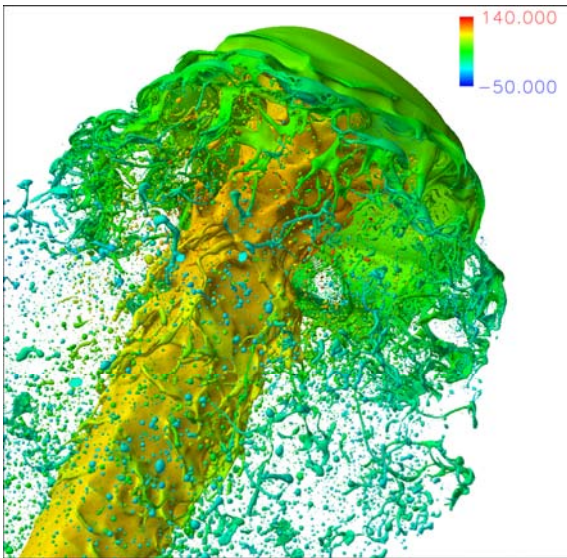


図 2 ケース 3 の全体図 (上) および液噴流コア付近の拡大図 (下)。表面色は軸速度(m/s)。

バルクのウェーバー数 (ここでは噴射速度と等価) が上がると、生成される構造が小さくなる。図 3 に噴流コア表面上に形成される波打ちの波長を記す。発達の仕方は完全な軸対称ではないためばらつきはあるが、噴射速度 (すなわち噴射ウェーバー数) が大きくなると形成される構造のスケールが小さくなること分かる。

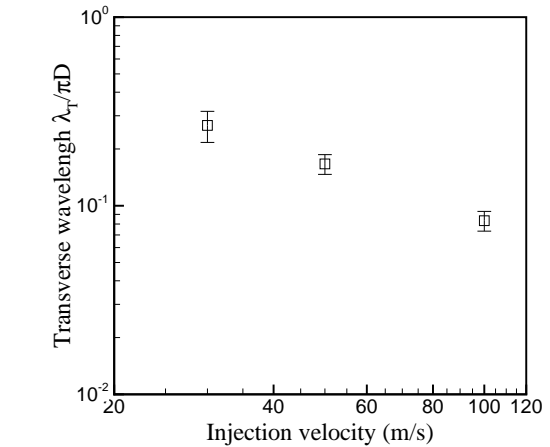
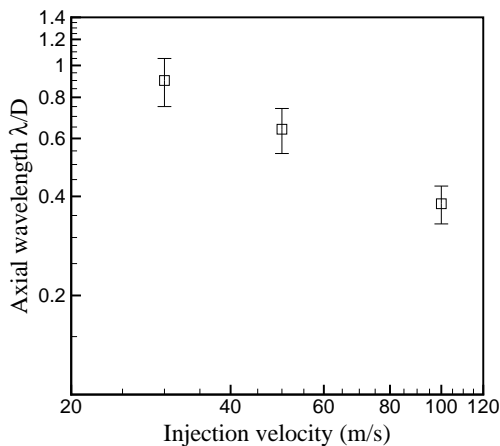


図 3 噴射ウェーバー数による生成構造のスケールの違い

液糸が形成されるのは、噴流先頭の傘からと噴流コア表面からである。傘では軸対称渦と縦渦が複雑に存在しており、渦の動きによって局所の液構造が形状を変え、最終的に分裂して液糸になる。噴流コア表面でも、同様に局所の気体の動きで表面の形状が変形し最終的に液糸になる。この様子は定性的にはどのケースでも確認されている。図 4 にケース 1、図 5 にケース 3 での表面液糸の形成の例を示す。ここで、時刻は噴射速度と液柱直径で無次元化した時刻を用いている。初期の時点で図の中央にうろこ状構造ができていく (図 4 : $t=18.27$ 、図 5 : $t=15.76$)。うろこの縁は表面張力によって丸まっているので真ん中は相対的に厚みが薄い。やがて、この真ん中の薄くなったところに穴が開く (図 4 : $t=18.97$ 、図 5 : $t=16.04$)。穴が開くと表面張力で急速に縁が丸まるため、糸状の輪のような形状になり (図 4 : $t=19.67$ 、図 5 : $t=16.91$)、その後複数の液糸に分かれていく (図 4 : $t=21.07$ 、図 5 : $t=17.20$)。このような動きが繰り返されている。

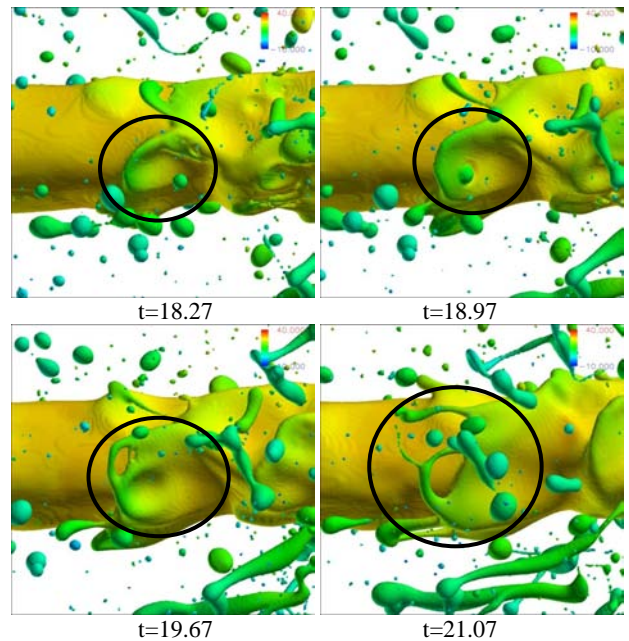


図 4 噴流コア上での液糸の形成 (ケース 1)

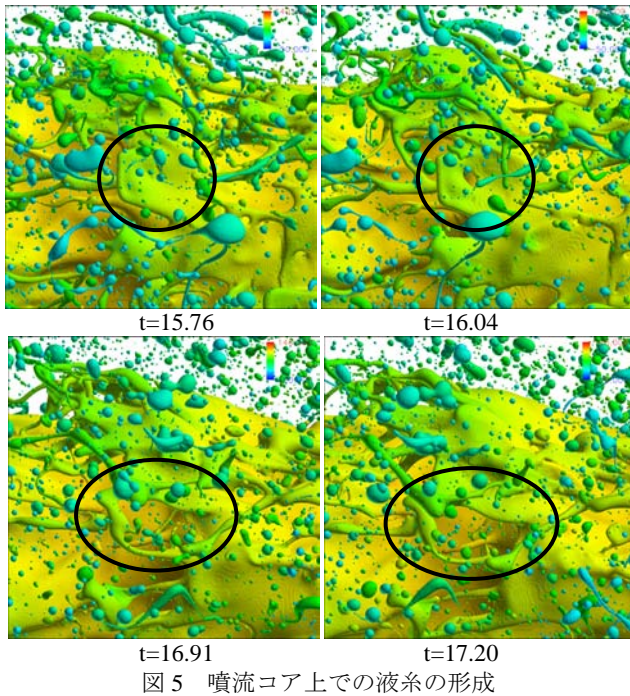


図5 噴流コア上での液糸の形成

液糸が形成される時点の局所の気体ウェーバー数を、

$$We_g = \rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_l|^2 a_L / \sigma \quad (4)$$

で定義した。ここで添え字 g は気体、 l は液体、 L は液糸を表す。図 6 に 3 ケースの結果をプロットする。ばらつきはあるが、いずれも気体ウェーバー数が 1 のオーダーの付近に分布していることが分かる。このとき、空気力と表面張力が同程度の大きさになっており、その時に液糸の形成が起こる。噴射速度（噴射ウェーバー数）を上げると、この 1 のオーダーになるように液体構造が小さくなるため、結果として液糸や液滴のスケールは小さくなる。

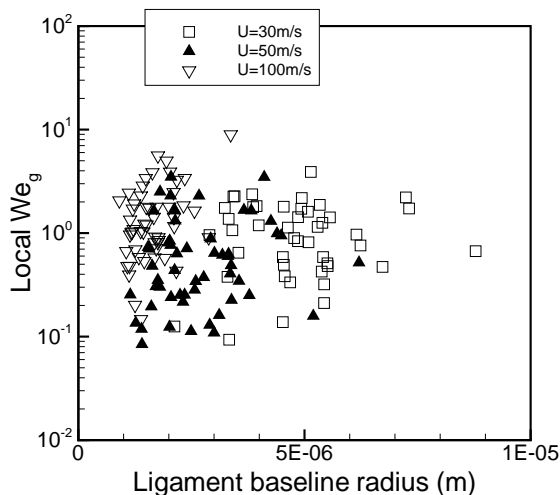


図6 液糸形成時の局所気体ウェーバー数

液糸からの液滴生成も直接追跡することができる。液糸からの液滴生成を模擬した実験室実験は層流低速噴射液を用いるが、この際、分断モードには 2 つあること（短波長モード：端面が収縮し液柱を押しこむことで表面張力波を発生させ端面の影響で不安定化して切れるモードであり切れる波長（間隔）は液柱半径の約 3.6 倍。長波長モード：いわゆる Rayleigh モードで、軸対称液柱上の長い変形は円周方

向と母線方向の表面張力の大小関係から不安定化しやすいというもの。分断波長（間隔）は液柱半径の約 9 倍で端面の存在は不安定化には必ずしも必要ない。実験室実験ではノズル出口で擾乱を与えその発達を見る形態が多いが、端面が擾乱源になっていることは最近梅村が指摘している[2-7]。）、噴射ノズルの影響があること、地上実験では重力加速の影響があることが分かっている[2-7]。この形態が、乱流噴霧中に置かれた液糸にどこまで対応しているかはまだ確認されていない。乱流噴霧中の実際の液糸は当然有限長であり端面を持っているので、短波長モードが主体であると予想される。

図 7 にケース 1 での液糸からの液滴生成過程を示す。ここで、図の圧力は断面内の

$$\Delta p = [p - (p_g + \sigma/a_L)] / (\sigma/a_L) \quad (5)$$

を示している。 p_g は気体圧力である。液糸が少し曲がっているため若干中心軸からずれた断面もあるが全体の特徴はよく見える。t=18.97 においては、既に液糸全体にわたって表面張力波の発達が見える。この波長は液糸半径の約 3-4 倍になっており、短波長モードであることが分かる。実際、液糸の先端液塊（図の右下）の部分は液柱を押しこめているので圧力が上がっている。この押しこめ動作が続くと先端液塊がさらに大きくなるのでそこでの圧力が下がり（t=19.67）、すぐ隣のくびれ部から液を吸い込むように発達する。さらに先端液塊の圧力が下がると（t=20.37）いよいよくびれ部は発達しその圧力が急上昇する。そのためそこに先端液塊に向かう液ジェットが形成され、t=21.07 で分断に至る。これは、我々が層流噴射液の模擬試験で見た短波長モードそのものである[2-7]。

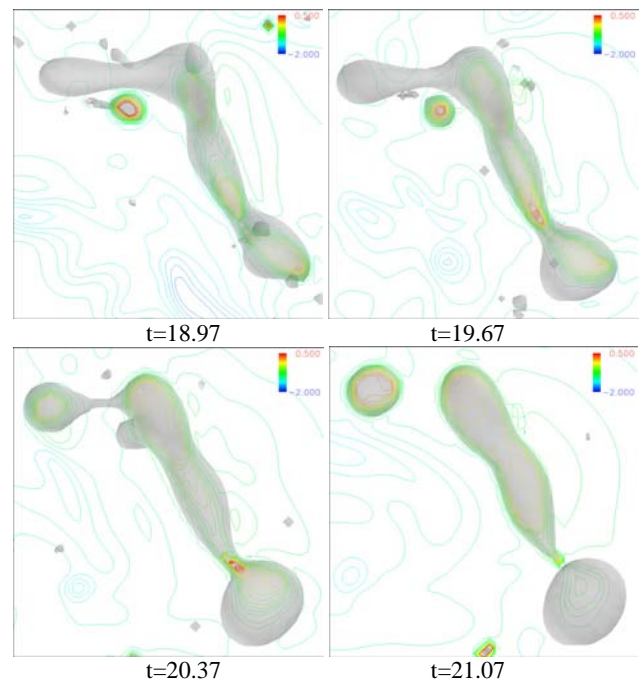


図7 液糸からの液滴生成（ケース 1）

同様の現象はどのケースでも確認でき、短波長モードが支配的であると考えられることができる。ただし、特に高速噴射であるケース 3 では、空力の作用により若干興味深い現象が起こるのでここで取り上げる。図 8 にケース 3 での液滴生成過程を示す。この場合、時刻が早い時間には液糸表面上の波長は短く見えるが、時間が経つにつれて長くなっていくように見える。しかし、このような両端を持つ短い

液系上に長波長モードが現れるのは液系が何も外から作用を受けていないなら考えにくい。

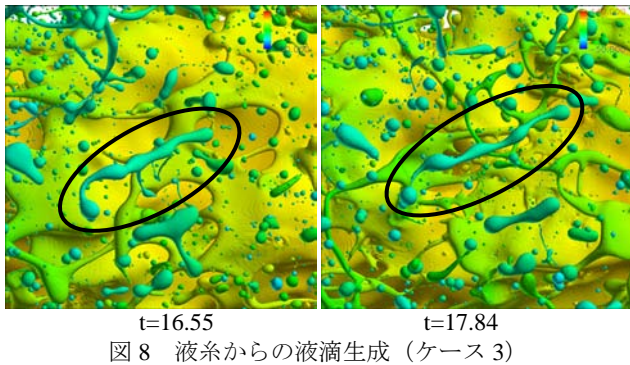


図 8 液系からの液滴生成 (ケース 3)

そこで、この液系について時間履歴を追ってみた。すると液系が伸長していることが分かった。図 9 に、この液系の伸長の様子を示す。横軸の時刻は、液系の分断の時間スケールでスケールリングし直した

$$t_L = t_{real} \frac{U_c}{a_L} = t_{real} \frac{1}{a_L} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l a_L}} \quad (6)$$

としてある。点線は、流れのない空間にこの長さの液系が置かれたときに両端からの収縮によって予想される長さの履歴である。実線は実際の液系長さであり、明らかに長くなってきている。これは、周囲気体の運動により液系が次第に伸長されていっていることを示している。それに伴い、液系上に一旦形成された波長が（波の数は変わらないので）短波長モードの波長 $3.62a_L$ から長波長モードの波長 $9.02a_L$ に近づいて伸びて行っていることがわかる（一点鎖線）。長波長モードは本質的には、液系上の長い波長の変形は不安定であると言っているのみであるので、ここで起きた現象（端面収縮とそれに伴う表面の波形の成長）はあくまで短波長モード支配であり、外的要因によって最後は見掛け上長波長になったと考えるべきである。

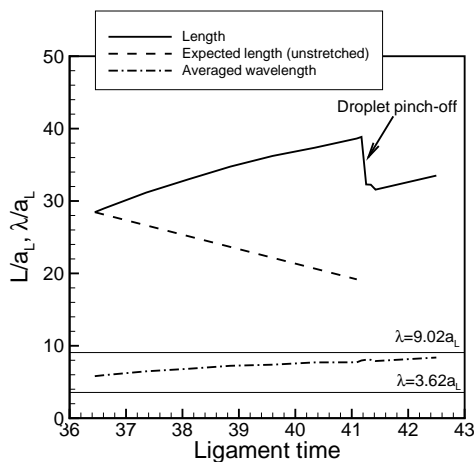


図 9 液系の伸長 (ケース 3)。図 7 に対応する。

このように、表面張力を入れた詳細計算により、これまで見ることができなかった噴霧内の細かい構造、運動が次第に明らかになってきた。もちろん、毎回のようにこのような大規模計算を行う訳にはいかないの、今後はモデル化の情報を抽出することが重要になる。

3. 2 計算機性能

このシミュレーションでは大量のデータを処理する必要があり、データ出力時間の短縮が大きな課題であった。今

回の計算では、1 回の出力データ量が 306GB、全体で 153TB のデータを出力する必要があり、データ出力時間が 3000 時間以上に及ぶことが明らかであった。この値は演算時間の 10 倍にあたる。この問題は 1440 ノード毎に計算されたデータを 1 台のマスターノードが集約してデータ出力するために発生している。更に、ファイルサーバを複数利用者が共有しているため、今回のような大規模シミュレーションでは専用サーバが必要と判断した。

そこで、各ノードで計算されたデータをそれぞれのノードからファイルサーバにデータ出力することによりデータ出力時間の短縮を図った。次に JSS が所有するファイルサーバを占有利用し、更に効率よくデータ出力する設定を行った。ファイルサーバは Infiniband ネットワークで接続されておりファイルシステムとして富士通製のネットワーク型ファイルシステム (SRFS) を採用している。各ノードからデータを出力する際には Fortran の I/O バッファキャッシュを経由する。1440 ノードから一斉に書き込みが行われた場合ファイルシステムに効率よくデータを書き込みが行われるようにシステム環境を変更した。Fortran の I/O バッファキャッシュサイズを SRFS の I/O ブロック長 (32MB) の整数倍になるように 512MB に設定した。更に、1440 ノード分のデータ量がファイルサーバのサーバキャッシュに収まるように SRFS のサーバキャッシュサイズを 1 回のデータ出力量以上の値に設定した。以上のような設定を行い 153TB のデータを 12.5 時間で行うことができた。これは演算時間の約 3% にあたる。これにより、入出力が計算のボトルネックになることはなくなった。

次に、XPFortran と VisIMPACT を融合させたマルチプロセスおよびマルチスレッドによる階層並列での実行性能結果についてのべる。マルチコア CPU の時代となり、マルチコアに適したプログラミングスタイルでは、高効率なスレッド並列化との階層化で、プロセス並列のプロセス数を少なくすることで、プロセス間通信に伴う性能低下を削減することが重要となる。

VisIMPACT を融合させることによる性能改善の効果を図 10 に示す。これは、使用する資源量に比例して計算処理量をスケールアップさせた場合の、単位時間あたりの処理量をプロットしている。図からわかるように「XPFortran+VisIMPACT」は「XPFortran」に対して同じプロセス数で 3 倍程度スピードアップしており、自動並列による効果が出ている。

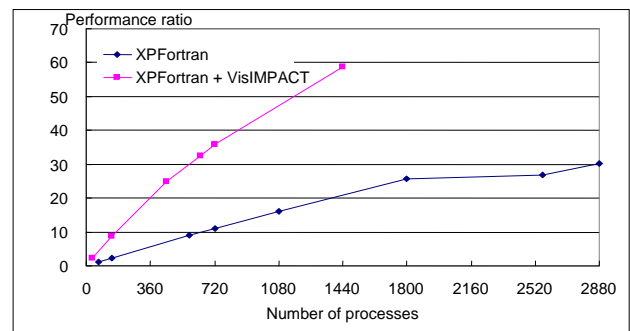


図 10 VisIMPACT による性能改善

次に、図 10 を使用する資源量(ノード数)で揃えて表示したグラフを図 11 に示す。「XPFortran+VisIMPACT」では、プロセスあたり「XPFortran」の 4 倍の資源量を必要とするが、同じ資源量の「XPFortran」と比較した場合、高並列では「XPFortran+VisIMPACT」の処理性能が上回っており、VisIMPACT を使用することで、1440 ノードの大規模並列でも性能が十分にスケールすることを示している。

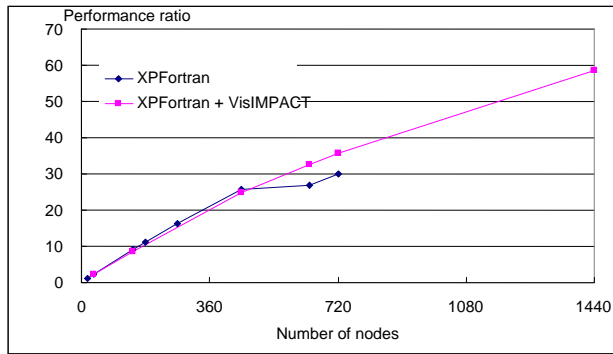


図 11 性能のスケールビリティ

and atomization: DNS and modelling study, *Intl. J. Multiphase Flow*, 35, pp.247–260 (2009)

4. 結論

このように、詳細な計算によって乱流噴霧内の液柱コア不安定性、液糸・液滴の生成過程の追跡が可能になった。個々の過程の詳細な解析は、まだ完全には終わっていないが、空力干渉や表面張力が果たす役割についての理解が深まった。液糸から液滴が生成される過程は、我々のこれまで低速層流噴射液からの知見と一致する結果である。今後は、さらにデータの解析を進め、さまざまな乱流統計量や液糸・液滴との相関を探っていく予定である。

本計算を実施した JSS システムについておよびその性能についても簡単に述べた。ユーザに過大な負担を強いることなく、このような大規模計算でも問題なく動作させることができた。

謝辞

本計算遂行や原稿作成にあたり、富士通スパコン運用チームおよび JAXA 情報・計算工学センターのご支援を受けました。ここに記して感謝いたします。

参考文献

- 1) Lin, S. P., *Breakup of Liquid Sheets and Jets*, Cambridge University Press (2003)
- 2) Umemura, A., Wakashima, Y., Atomization Regimes of a Round Liquid Jet with Near-Critical Mixing Surface at High Pressure, *Proc. Combust. Inst.*, 29, pp.633-640 (2002)
- 3) 梅村, 噴射液の自己不安定化機構の理論的研究 (第 1 報: 噴射液の不安定化に関連する表面張力波), 日本航空宇宙学会論文集, 55-640 (2007) 216-223
- 4) 梅村, 噴射液の自己不安定化機構の理論的研究 (第 2 報: 分断フィードバックループ), 日本航空宇宙学会論文集, 55-640 (2007) 224-231
- 5) 梅村, 噴射液の自己不安定化機構の理論的研究 (第 3 報: 短距離分断過程の一次元計算), 日本航空宇宙学会論文集, 55-643 (2007) 359-366
- 6) 新城, 小川, 梅村, 液膜端の収縮により発生する表面張力波の特性, 日本航空宇宙学会論文集, 55-641 (2007) 273-281
- 7) 新城, 松山, 溝渕, 小川, 梅村, 伝播性表面張力波による液糸からの液滴分断機構に関する数値解析, 微粒化 18-61 (2009) 36-43
- 8) Gorokhovski, M., Herrmann, M., Modeling primary atomization, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 40, pp.343-366 (2008)
- 9) Menard, T., Tanguy, S., Berlemont, A., Coupling level set/VOF/ghost fluid methods: Validation and application to 3D simulation of the primary break-up of a liquid jet, *Intl. J. Multiphase Flow*, 33, pp.510–524 (2007)
- 10) Lebas, R., Menard, T., Beau, P.A., Berlemont, A., Demoulin, F.X., Numerical simulation of primary break-up