

令和 4 年 6 月 13 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2019～2021

課題番号：19K21927

研究課題名（和文）時空間操作を用いた詳細反応機構に基づく革新的乱流燃焼シミュレーションへの挑戦

研究課題名（英文）Challenges for high-fidelity turbulent combustion simulation based on detailed reaction mechanisms

研究代表者

河合 宗司（Kawai, Soshi）

東北大学・工学研究科・教授

研究者番号：40608816

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000 円

研究成果の概要（和文）：本研究では、火炎帯厚さを格子で解像しない粗い格子を用いても乱流燃焼現象を高忠実に再現可能な詳細反応機構に基づく乱流燃焼LES手法の確立を目指し研究を進めた。本研究ではまず火炎帯内部の化学種分布は変えずに空間方向に引き伸ばすことで（火炎帯を人工的に引き伸ばすことで）、粗い格子でも層流伝播火炎の燃焼速度や自着火を正しく再現する火炎帯拡大モデル、Localized thickened flame (LTF) モデルを提案した。また本提案LTFモデルを基盤とした詳細反応機構に基づく乱流燃焼LESモデルについて、火炎面曲率効果のモデリングを提案し、その有効性を検証した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

乱流燃焼現象は、エネルギー・環境の根幹を成す燃焼器の高効率化・低エミッション化に関わる重要な熱流体現象であり、詳細は化学反応を記述する詳細反応機構に基づく高忠実な乱流燃焼シミュレーション手法の確立は、燃焼器設計におけるトライ＆エラーを減らし、設計上流段階からのシミュレーションによる信頼できる燃焼器を設計する上で重要な役割を果たすと考えられる。また本研究がターゲットしている詳細反応機構に基づく反応速度のLESモデル（SGSモデル）は、学術的にも未だ確立されていない部分が多く、本研究は学術および工学応用、その両面から貢献することを目指して実施した。

研究成果の概要（英文）：This study investigated a high-fidelity turbulent combustion LES method based on detailed reaction mechanisms that reproduce turbulent combustion phenomena using coarse grids. To establish the high-fidelity LES method, we first proposed the localized thickened flame (LTF) model that spatially expands the flame thickness while maintaining the accurate laminar burning velocity and auto-ignition without changing the chemical species distributions inside the flame. Then, based on the LTF model, the turbulent combustion LES method that models the fame curvature effects was proposed and validated through the turbulence and flame interaction problem.

研究分野：圧縮性流体力学、数値流体力学、航空宇宙工学

キーワード：数値流体力学 詳細反応機構 燃焼 乱流 熱流体工学 LES

1. 研究開始当初の背景

乱流燃焼現象は、エネルギー・環境の根幹を成す燃焼器の高効率化・低エミッション化に関わる重要な熱流体現象であり、学術研究および工学応用その両面から現象の理解および事前の予測精度向上が求められている。加えて燃焼器のさらなる高効率化・低エミッション化のため、燃焼器の高圧化・希薄燃焼化への要求も大きく、今後より一層、着火・消炎現象に対する予測精度の重要性も高まると予測される。

燃焼器開発などの工学的問題における乱流燃焼現象の数値予測では、実燃焼器スケールの解析が必要となるため、反応速度無限大の仮定を課した簡易な乱流燃焼モデルが適用されることが多い。詳細反応機構を解かないこれらの簡易モデルは、実燃焼器スケール解析が可能という利点がある一方、乱流現象と連成する化学反応現象、特に着火・消炎などの予測精度は限定的となる場合が多い。そこで化学反応現象を高度に再現しうる詳細反応機構に基づく乱流燃焼解析が期待されるが、実燃焼器スケールに適用するにはまだまだ解決すべき課題が多いのが現状である。特に高圧環境下では火炎厚みが薄くなり、その薄い火炎帯で起こる化学反応現象を解像するには非常に多くの格子点が必要となる。よって、詳細反応機構に基づき、実燃焼器スケールの燃焼解析を行うことは、最新スパコンを用いても困難といえる。

本研究では、詳細反応機構に基づく乱流燃焼解析において、ネックとなっている空間的に薄い火炎帯の新たなモデル化に取り組んだ。ここでは、化学反応や乱流との干渉に対して支配物理に矛盾なく火炎を空間的に引き伸ばすことができれば、実燃焼器スケール解析で用いるような比較的粗い格子を用いても高忠実な乱流燃焼解析が実現できるのではと考えた。詳細反応機構に基づく本乱流燃焼解析手法により、火炎面挙動やその乱流干渉現象、さらには着火・消炎現象を高精度に予測評価可能とすることを目指している。

2. 研究の目的

本研究では、火炎帯厚さを格子で解像しない粗い格子を用いても、乱流燃焼現象を高忠実に再現可能な詳細反応機構に基づく乱流燃焼 Large-eddy simulation (LES) 手法の確立を目的とする。

3. 研究の方法

本研究では、粗い格子を用いた場合に支配方程式中の化学種生成率項や移流項などから派生するサブグリッドスケール (SGS) 項に対し、物理的に満たすべき条件を陽的に課すことで適切に物理を満足するモデル化を試みる。研究手順としては、まず層流火炎現象に対するモデルを構築し、そのモデルを基盤として、乱流火炎現象へとモデルを発展させる。

具体的には、まず層流火炎現象を対象とし LES で用いるような火炎内部構造を直接格子で解像しない粗い格子を用いたとしても、層流伝播火炎の燃焼速度および火炎内部構造を正しく再現できる LES モデル (SGS モデル) の開発を試みる。またここでは着火現象への適用も考え、自着火現象を阻害しないモデリングを念頭に置く。加えて本 LES モデルを定容容器簡易エンジン内のノッキング解析に適用し、工学的実問題での有効性を確認する。次に上記で得られたモデルを基盤とし、火炎面と乱流との干渉を考える乱流火炎現象に対する乱流燃焼 LES モデリングへの発展に着手する。更に本研究では、乱流燃焼解析に関して上記 LES 燃焼モデルの構築に加え、数値計算スキームとしても多化学種解析で問題となる圧力・速度平衡問題を解決する数値計算スキームの開発を試みる。

4. 研究成果

(1) 層流伝播火炎現象を対象とした火炎帯拡大モデリング

詳細反応機構を用いた燃焼解析では、薄い火炎帯における各化学種の分布を直接格子で解像することが必要なため、解析に必要な格子点数が膨大となり、世界最先端のスパコンを用いたとしても実燃焼器スケールの解析は困難である。また仮に火炎内部構造を解像できない粗い格子を詳細反応機構に基づく燃焼解析で用いた場合、火炎内部の化学種分布が正しく再現できず、単純な層流伝播火炎の燃焼速度さえも正しく予測できない。

そこで本研究ではまず、層流伝播火炎現象を対象とし、火炎帯内部の化学種分布は変えずに空間方向に引き伸ばすことで (火炎帯を人工的に引き伸ばすことで)、粗い格子でも層流伝播火炎の燃焼速度を正しく再現する火炎帯拡大モデル、Localized thickened flame (LTF) モデルを提案した。本研究で新規開発した LTF モデルの詳細は我々の学術論文 [H. Terashima, Y. Hanada and S. Kawai, Proceedings of the Combustion Institute, 38, 2119-2126, (2021) (引用文献[1])] を参照して頂

きたく、ここではその概要のみを述べる。本 LTF モデルでは、格子で解像しない火炎面の効果は SGS 項として支配方程式に現れると考え、その SGS 項を適切な物理的拘束条件の下でモデル化するアプローチを取っている。具体的には、各化学種の輸送方程式に現れる格子で解像しない火炎面に起因する SGS 拡散係数 ($D_{s,flame}$) および SGS 化学種生成率項 ($\dot{\omega}_{s,flame}$) を物理的拘束条件を満たすようにモデル化する。ここで重要となるのは、モデルを決定する物理的拘束条件である。 $D_{s,flame}$ および $\dot{\omega}_{s,flame}$ を決定するために、本研究で課している条件は以下の 3 つである。① 火炎帯内部の化学種分布を空間的に拡大する。② 正しい層流燃焼速度を維持する。③ SGS 項は解像できていない火炎帯のみで値を持つ。本提案 LTF モデルでは、①を満足するため SGS 拡散係数を物理拡散係数の χ 倍に大きくする (すなわち $D_{s,flame} = \chi D_s$)。さらに燃焼速度は理論的に化学種生成率と拡散係数の掛け算の平方根に比例するので、②の正しい燃焼速度を維持するという条件により SGS 化学種生成率項が χ の関数として $\dot{\omega}_{s,flame} = -\chi/(1+\chi)\dot{\omega}_s$ として一意に定まる。以上により、本 LTF モデルは一つのパラメータ χ のみで制御される。またこれらのモデリングにより火炎帯厚さは $(1+\chi)$ 倍に空間的に拡大されることも理論的に示され、さらには火炎帯内部の化学種分布は変えずに火炎帯を空間方向に引き伸ばすことが可能となる。③の条件は自着火現象を正しく予測するために重要となる条件で、本研究では χ を火炎面を特徴付ける物理量 (本研究では温度) の高階微分でモデル化している。加えて χ のモデリングでは、格子幅によらず火炎帯内部構造を同程度の格子点数で解像するという条件も加味してモデル化した。

本提案 LTF モデルの検証のため、10 気圧、メタン空気予混合気における 1 次元層流伝播火炎現象の詳細反応機構に基づく LTF モデル燃焼解析を実施した。図 1 は解析から得られた燃焼速度の結果であり、横軸にはモデル χ にかかる無次元モデル定数 C_χ を、縦軸に燃焼速度を示している。またここでは、DNS で得られた参照値を点線で、LTF モデルは 3 つの異なる粗い格子幅 (それぞれ DNS の 16 倍、32 倍、64 倍粗い格子幅) で計算した結果を示している。横軸の無次元モデル定数 C_χ が大きくなると χ が十分に大きい値を持ち、LTF モデルが火炎帯を十分に拡大し、粗い格子でも火炎帯が十分解像できていることを意味する。一方、無次元モデル定数 C_χ が小さい領域 (概ね 10 以下) は、LTF モデルの働きをわざと不十分にした状態であり、火炎帯が十分に拡大されておらず、粗い格子では火炎帯が解像できていないことを意味する。図 1 より、 χ を十分に大きくすることで、粗い格子を用いた詳細反応機構に基づく燃焼解析でも理論通り燃焼速度を正しく予測評価できることが示された。また無次元モデル定数をおおよそ $C_\chi = 100$ とすることで、どのような格子幅を用いても高精度な解析が可能となることが分かった。加えて本研究では、圧力条件や化学種が異なる、1 気圧メタン空気予混合気、1 気圧および 10 気圧の水素空気予混合気でも同様の結果が得られており、本提案 LTF モデルのロバスト性も確認している。

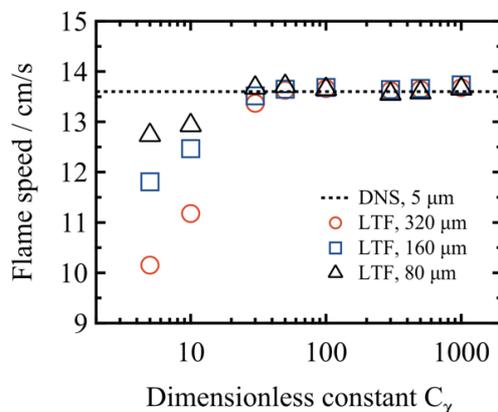


図 1 Flame propagation speed under 10 atm in terms of the dimensionless constant of χ for three different grid sizes.

次に自着火および着火後の層流伝播火炎を伴う条件での本提案 LTF モデルの有効性を検証した。ここでは特に詳細反応機構を用いることでその予測精度の向上が期待される自着火のタイミングに着目する。図 2 は 10 気圧のメタン空気予混合気における自着火・層流伝播火炎問題に関する各時刻における火炎面位置を示したものである。自着火は 1500 K の高温ガス領域を初期に設置することで起こしている。また本提案 LTF モデルを用いた結果は、DNS の参照解および ATF モデル (詳細は割愛するが Colin 等[2]による詳細反応機構に基づく燃焼モデル、[2]では TF モデルと記載) を用いた結果と比較している。本提案 LTF モデルは粗い格子を用いても詳細反応機構を用いる一つの利点である自着火のタイミングを正確に予測し、その後の層流伝播火炎を含めて DNS と良い一致を示すことを確認した。これは LTF モデル構築の際に課した③の条件をモデルが適切に考慮できていることを示す。

加えて本研究では、本 LTF モデルを定容容器内火炎伝播および末端ガス自着火現象問題にも適用しており、火炎伝播とともに容器内圧力が上昇し、火炎帯が時々刻々と薄くなる定容容器内の火炎伝播および末端ガス自着火現象の予測にも本 LTF モデルが有効であることを示している。

結果の詳細については引用文献[1]を参照いただきたいが、LTF モデル適用によって、効率的な多次元ノッキング解析の実施が期待できる。以上より本研究で新規開発した LTF モデルを用いることによって、物理的な火炎厚さを解像しない粗い格子を用いても詳細反応機構に基づく着火を含む層流燃焼解析が高精度に実施できることが示された。なおより詳細な LTF モデルの導出や検証結果については、引用文献[1]を参照いただきたい。

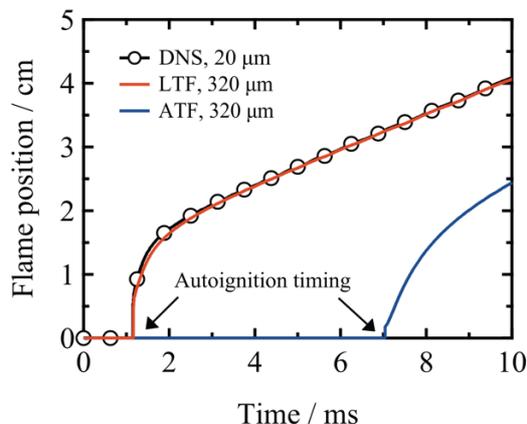


図 2 Comparisons of flame propagation behaviors caused by autoignition.

(2) LTF モデルを用いた乱流燃焼解析における火炎面曲率効果のモデリング

(1)に記載したように本研究で新規開発した LTF モデルは、火炎帯内部構造を物理的に矛盾なく空間的に拡大することで、粗い格子を用いた詳細反応機構に基づく燃焼解析に対して有効なモデルであることが示された。本章では、LTF モデルを基盤とした詳細反応機構に基づく燃焼解析手法の乱流燃焼 LES モデリングについての研究成果を報告する。

ここではまず乱流燃焼 LES モデルでは、どのような物理現象を適切にモデル化すべきか理解することを目的とし、乱流火炎現象を単純化した 1 気圧の水素空気予混合気 2 次元平面火炎に単独渦を干渉させる系を考える。LTF モデルを用いた粗い格子での解析、および比較参照用の十分に細かい格子での DNS 解析を実施し、比較検証した。図 3 はその結果である。2 次元平面火炎の中央付近に単独渦が左から移流し、火炎面と干渉することで火炎面を巻き上げる様子が見て取れる。図 3 右図に示すように LTF モデルを用いた粗い格子での解析では、渦・火炎面干渉時に火炎面の伝播に遅れが生じることが明らかとなった。またその原因は、LTF モデルにより空間的に拡大された火炎帯厚さにより、曲率を持った火炎面に起因する火炎面平滑化効果（曲率を持った火炎面を元に戻そうとする効果）が強くなったためであることを明らかにした。

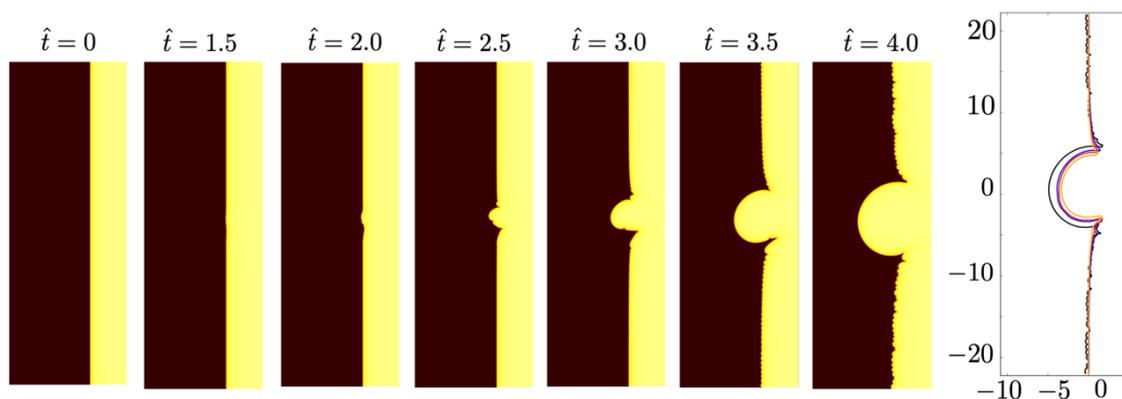


図 3 Temporal development of flame structures in flame and vortex interaction. Left, temperature distributions obtained by DNS; right, comparisons of flame structures at $t = 4.0$ (black lines, DNS grid resolution of $10 \mu\text{m}$; blue line, LTF model with $100 \mu\text{m}$ and $C\chi = 100$; red line, LTF model with $200 \mu\text{m}$ and $C\chi = 100$; orange line, LTF model with $200 \mu\text{m}$ and $C\chi = 1000$).

次にこれらの結果を受け、LTF モデルによる火炎面拡大によって課題となった火炎面の平滑化効果を弱め、正常化させる乱流燃焼 LES モデルの開発に着手した。ここでは、格子で解像しない火炎面に起因する SGS モデルである(1)で議論した LTF モデルに加え、格子で解像できていな

い乱流と火炎面干渉に起因する SGS 拡散係数 ($D_{s,turb}$) および SGS 化学種生成率項 ($\dot{\omega}_{s,turb}$) に関して条件を与えモデル化を試みた。本研究では乱流燃焼 LES モデルとして、まず①SGS 化学種生成率項 ($\dot{\omega}_{s,turb}$) を変化させ燃焼速度を制御する。ここでは SGS 化学種生成率項を物理的な化学種生成率項の $\beta/(1+\chi)$ 倍とモデル化し (すなわち $\dot{\omega}_{s,turb} = \beta/(1+\chi)\dot{\omega}_s$)、モデルパラメータ β をコントロールすることで LTF モデルの火炎帯拡大効果により過剰となった火炎面平滑化効果を正常化させる方向に作用させる。このモデリングは、図 3 右図に示したように LTF モデルで生じている火炎面伝播の遅れを補正する効果がある。次に①のモデリングにより LTF モデルで拡大した火炎帯厚さは変えないよう②SGS 拡散係数を $D_{s,turb} = \beta(1+\chi)D_s$ とモデル化する。火炎帯厚さは、理論的に拡散係数を化学種生成率で割った値の平方根に比例するため、本乱流燃焼 LES モデリングにより、火炎帯厚さは LTF モデルで拡大した厚さから変えず、燃焼速度のみをコントロールすることが可能となる。なお本乱流燃焼 LES モデルは一つのモデルパラメータ β のみで制御される。ここでパラメータ β のモデリングでは、火炎伝播速度の式を応用し、Markstein 長さ と火炎伸長率の関数としてモデル化した。

図 4 は図 3 と同条件の渦・火炎面干渉問題に提案 β モデルを付加した LTF モデルの結果を示したものである。提案 β モデルを付加することで、LTF モデルで過剰となった火炎面の平滑化効果を正常化する (弱める) 効果が確認でき、燃焼速度を促進させることが可能となった。これにより LTF モデルのみでは後退していた火炎面位置が、 β モデルを付加することで参照解である DNS に近付いている。また図 4 右図を見ると、火炎面が未燃焼気側に凸の領域では β が正の値を、逆に凹領域では負の値を持っていることから、意図した通り、LTF モデルで過剰となっている火炎面の平滑化効果を正常に戻す役割を果たしていることが分かる。また本研究では、一様等方性乱流と火炎面干渉問題にも本乱流燃焼 LES モデル (LTF 火炎面拡大モデルに加え、曲率を持った火炎面で平滑化効果を正常に戻す β モデルを加味したモデル) を適用し、乱流火炎速度を促進させることが可能となることを確認できている。本提案 β モデルには、モデリングに再考すべき点やパラメータ調整の課題は残るが、提案乱流燃焼 LES モデルにより DNS 解に近い乱流火炎速度を再現できることを示した。

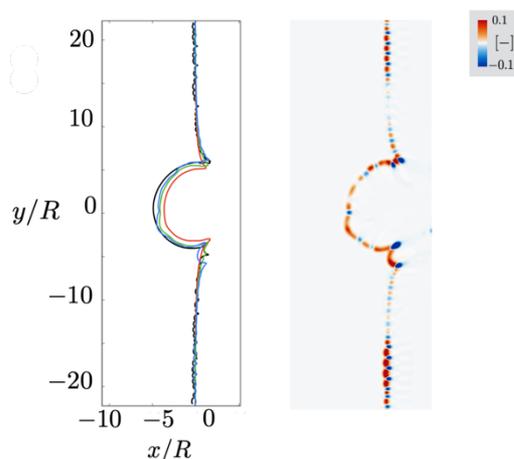


図 4 Effects of β model in LTF simulation in flame and vortex interaction at $t = 4.0$. Left, comparisons of flame structures (black line, DNS grid resolution of $10 \mu\text{m}$; blue and green lines, LTF model with β model; red line, LTF model without β model (same as the red line in Fig. 3)); right, β distributions for the case of LTF model with β model.

加えて本研究では、高忠実な乱流燃焼 LES 解析を実現するためのもう一つの基盤となる数値計算スキームに関する研究についても実施した。燃焼流解析への適用までは踏み込めていないが、圧縮性多成分流体の数値計算スキームにおいて長年の課題となっていた圧力平衡と保存を両立する新しい空間離散化スキームの構築に成功している。本研究成果は、現在、国際学術論文誌に投稿準備中である。

引用文献

- [1] H. Terashima, Y. Hanada, S. Kawai, A localized thickened flame model for simulations of flame propagation and autoignition under elevated pressure conditions, Proceedings of the Combustion Institute, 38, 2119-2126, (2021).
- [2] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, T. Poinso, A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion, Physics of Fluids, 12, 1843-1863, (2000).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 1件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Terashima Hiroshi, Hanada Yutaka, Kawai Soshi	4. 巻 38
2. 論文標題 A localized thickened flame model for simulations of flame propagation and autoignition under elevated pressure conditions	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings of the Combustion Institute	6. 最初と最後の頁 2119-2126
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.proci.2020.06.063	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 寺島洋史, 河合宗司	4. 巻 38
2. 論文標題 A localized thickened flame model: 定容容器内火炎伝播及び末端ガス自着火現象への適用	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ながれ	6. 最初と最後の頁 435-438
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 藤原悠嗣, 玉置義治, 河合宗司	4. 巻 41
2. 論文標題 圧縮性多成分流体における圧力平衡と保存を両立する新しい空間離散化スキームの提案	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ながれ	6. 最初と最後の頁 61-64
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 0件/うち国際学会 2件）

1. 発表者名 Hiroshi Terashima, Yutaka Hanada, Soshi Kawai
2. 発表標題 A localized thickened flame model for simulations of flame propagation and autoignition under elevated pressure conditions
3. 学会等名 The 38th International Symposium on Combustion (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 花田豊, 河合宗司, 寺島洋史
2. 発表標題 詳細反応機構を用いたLES燃焼解析に向けたSGS火炎面シワモデルの検討
3. 学会等名 第34回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 寺島洋史, 河合宗司
2. 発表標題 A localized thickened flame model: 定容容器内火炎伝播及び末端ガス自着火現象への適用
3. 学会等名 日本流体力学学会年会2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 花田豊, 河合宗司, 寺島洋史
2. 発表標題 詳細反応機構を用いた格子依存性の少ない火炎面捕獲モデリング
3. 学会等名 第33回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 河合宗司, 花田豊, 寺島洋史
2. 発表標題 火炎面シミュレーションの時空間操作とモデリング
3. 学会等名 航空宇宙空力シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuji Fujiwara, Yoshiharu Tamaki, Soshi Kawai
2. 発表標題 Fully conservative scheme for multi-component flows satisfying pressure equilibrium
3. 学会等名 AIAA SCITECH 2022 Forum (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 藤原悠嗣, 玉置義治, 河合宗司
2. 発表標題 圧縮性多成分流体における圧力平衡と保存を両立する新しい空間離散化スキームの提案
3. 学会等名 第35回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	寺島 洋史 (石原洋史)	北海道大学・工学研究院・准教授	
	(Terashima Hiroshi)		
	(20415235)	(10101)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------