

平成 29 年 6 月 9 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2016

課題番号：15K14258

研究課題名(和文) 支配方程式レベルで工夫する乱流混合・燃焼の高解像度モデリング

研究課題名(英文) An approach of modifying the governing equations in a physically-consistent manner for modeling of turbulent mixing and combustion

研究代表者

河合 宗司 (Kawai, Soshi)

東北大学・工学研究科・准教授

研究者番号：40608816

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,000,000円

研究成果の概要(和文)：詳細反応機構に基づく実燃焼流問題のシミュレーションを可能とする高精度かつ堅牢な数値計算法の確立を目的とし研究を行った。人工的に火炎面を厚くすることで粗い計算格子でも火炎を解像できるようにするArtificially Thickened Flame(ATF)モデルのアイデアを基にし、独自の視点に基づく物理的に矛盾無く支配方程式レベルで工夫する理論を詳細反応機構に基づく燃焼流れに発展させた。また今後の本手法の高次精度計算手法への展開を考慮し、化学種の保存則を丸め誤差レベルで常に満足する高次精度陰的フィルタースキームの開発を行った。

研究成果の概要(英文)：In this study, an accurate and robust numerical modeling for simulating realistic chemically reacting flow problems using detailed chemical kinetics was studied. Our approach is to couple our idea of modifying the governing equations in a physically-consistent manner and the concept of artificially thickened flame modeling that maintains physical laminar flame speed while artificially thickening flames. Also, by considering the extension of our approach to applying a high-order accurate numerical method, we proposed flux-based high-order accurate Pade-type filters that can satisfy the conservation law of each specie at the order of the machine zero level, something that existing Pade-type filters fail to do.

研究分野：航空宇宙工学、圧縮性流体力学、数値流体力学

キーワード：航空宇宙流体力学 数値流体力学 反応流 燃焼 詳細反応機構 熱工学 圧縮性流体

1. 研究開始当初の背景

燃焼現象は、エネルギー・環境の根幹に関わる発電ガスタービンや航空機エンジン等の高効率化・低工ミッション化に大きく関わる重要な熱流体現象である。しかし、現状の燃焼流解析では、化学反応に関して簡易なモデルを適用するとその予測精度は限定的であったり、また詳細反応機構のような高度なモデルを使用できたとしても、それらの適用は、非常に小スケールの DNS 解析に限定され、実機スケール解析とのギャップが大きいことが多いのが現状である。

一方で、研究代表者等は従来の応用数学的な計算法の開発とは一線を画す、物理的な視点から支配方程式レベルで矛盾無く工夫する数値計算法の理論を提案してきている。また本理論が、界面流体や圧縮性流体、磁気流体まで幅広い流体解析に対して、高精度かつ堅牢な数値計算法となると同時に、その理論の大元となる概念から Subgrid-scale(SGS)モデルとしての作用も有する可能性があることを示してきた [例: Kawai 等, *J. Comput. Phys.*, 2013, 2010 など]。

本研究は、研究代表者等が確立してきた物理的な視点から支配方程式レベルで矛盾無く工夫する数値計算法の本理論を、詳細反応機構に基づく反応性流体方程式に拡張できないかと考えたものである。

2. 研究の目的

本研究では、詳細反応機構に基づく実機スケールの乱流燃焼解析を可能とする数値計算手法の確立を目的とする。研究の中核となるのは、独自の物理的な視点に基づき支配方程式レベルで工夫する数値計算法のアイデアを燃焼流れに発展させることである。具体的には、化学種輸送方程式に LES 空間フィルターを施し、燃焼面に起因する格子で解像できていないスケールのモデル化を物理的に矛盾無く構築することを試みる。

3. 研究の方法

本研究では、実装が容易であり、かつ人工的に火炎面を厚くすることで粗い計算格子で火炎を解像できるようにする

Artificially Thickened Flame(ATF)モデルのアイデアを基にし、独自の視点に基づく物理的に矛盾無く支配方程式レベルで工夫する理論を燃焼流れへの発展を試みる。ATFモデルでは質量保存式中の拡散係数を F 倍し、かつ反応率は $1/F$ 倍することで火炎構造を厚くしつつ、層流火炎速度は本来の速度となるようにするモデルである。まず、1次元層流伝播火炎速度問題に対して本モデルの妥当性を確認し、多次元問題として、2次元伝播火炎-渦干渉問題に適用する。また、物理的に矛盾なくモデルを構築するという視点か

ら ATF モデルの再考を行う。更には、本手法の高次精度計算手法への展開を考慮し、化学種の保存則を丸め誤差レベルで常に満足する高次精度陰的フィルタースキームの開発を試みる。

4. 研究成果

(1) ATF モデルの検証

近年、詳細反応機構/反応性流体解析を効率的に行う試みが盛んに行われている。しかし、詳細反応機構を用い、反応率をアレニウスの式によってモデル化する場合、その時間・空間フィルター化が困難となる。これが、詳細反応機構/流体解析を様々な問題へ適用する際の大きな問題点として存在する。これまで、確率密度関数(PDF)や Liner Eddy Model (LEM) などが開発・適用されているが、ここでは、実装容易性や本研究での拡張性を考慮し、ATF モデルに着目した。

高压条件では、分子拡散が小さくなることから、火炎厚みが薄くなり、高い格子解像度が必要となる。図1に示すのは、水素空気予混合気(当量比 1.0)の層流燃焼速度に対する格子幅の影響である。格子幅の増加(横軸左方向)によって、層流燃焼速度が収束値に対して大きくずれていくことがわかる。また、より高压となる 5 気圧条件では、1 気圧条件に比べ、より高い格子解像度が必要であることもわかる。この結果により、燃焼圧力や解析サイズの増加とともに、直接的に火炎を解像することの困難さが認識される。

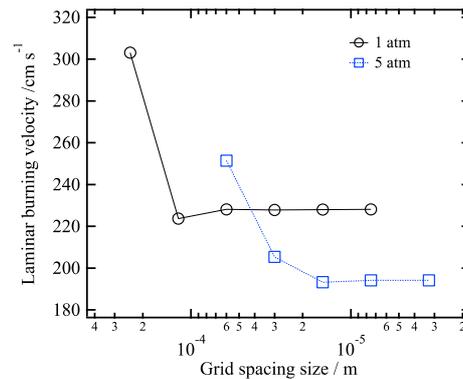


図1 層流燃焼速度に対する格子幅の影響

そこで、ATF モデルでは、拡散 D と反応率 W とした場合に、層流燃焼速度が $(DW)^{0.5}$ 、火炎厚さが $(D/W)^{0.5}$ に比例することを利用する。ここで、格子解像度を緩和することを目的に、拡散 D を F 倍することを考える。上記した拡散と反応率の関係により、層流燃焼速度を維持するためには、反応率を $1/F$ 倍すれば良い。一方、火炎厚さは F 倍されることになり、最初の狙いであった格子解像度の緩和が実現される。

ATF モデルでは、拡散を人工的に F 倍したため、Navier-Stokes 方程式に含まれる無次

元数に影響を与える。本研究では、プラントル数、シュミット数、そしてルイス数を維持するため、熱伝導率、粘性係数を同様にF倍した。一方、レイノルズ数は、1/F倍されることになり。元々の方程式が修正されていることに注意したい。以降、Fを厚さ率と呼ぶ。

図2に、圧力5気圧、水素空気予混合火炎の層流燃焼速度に現れるエラーと厚さ率Fとの関係を示す。横軸が厚さ率Fであり、F=1.0はATFモデルを用いない場合を意味する。ATFモデル無しでは、図1でも示されていたように、非常に大きなエラーが発生するが、ATFモデルを用いることにより、エラーが急激に減少する様子が示されている。例えば、厚さ率F=4.0で、エラーは1.0%以下となる。当量比1.0以外の条件でも同じ傾向であり、実験値の再現も良い。

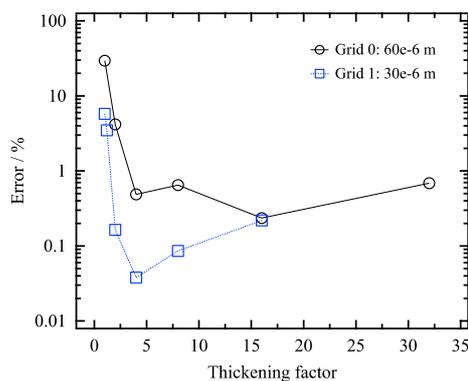


図2 層流燃焼速度エラーに対する厚さ率 F の影響

図3に、ATFモデルで得られた温度の空間分布と参照解との比較を示す。ATFモデルの計算は、参照解に対して、1/8倍の格子幅を用いたことに注意いただきたい。厚さ率F=2.0(図ではn=3:n=厚さ率×格子幅÷層流火炎厚さで定義される)では、やや燃焼速度が大きく、参照解とのずれを見せるが、厚さ率Fを大きくすることで、参照解の火炎位置と良く一致することがわかる。単純な層流火炎を考えた場合、厚さ率F=4.0により、3次元解析では $8^3 = 512$ 倍の格子解像度の削減が期待できることを意味する。ただし、図3にも示されているように、厚さ率の増加と共に、火炎幅も増加する。これは、化学種分布にも連動し、火炎近傍の物理や火炎と音波の干渉などを調べる際には注意が必要である。しかし、簡単な方程式の修正により、燃焼現象において重要な層流火炎速度を、少ない格子点でとらえられることの意義は大きい。

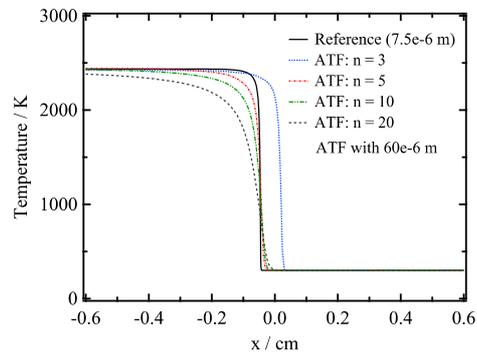


図3 火炎近傍の温度分布

図4に、多次元問題への適用として、伝播火炎と渦干渉の問題設定を示す。2次元定容容器内で、計算領域下方から火炎を伝播させ、渦と干渉した後の火炎挙動を調べる問題である。上境界は断熱壁、左右は周期境界条件である。当量比1.0の水素空気予混合気で、圧力5気圧の条件とした。

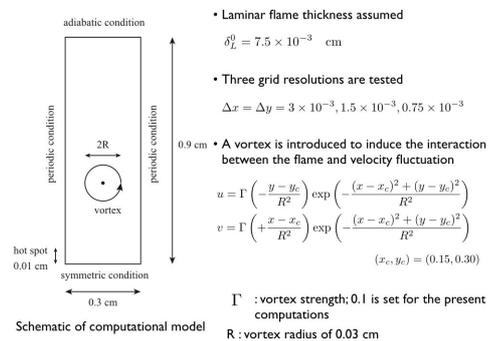


図4 伝播火炎と渦干渉問題の設定

まず、図5にATFモデル無しの結果を用いて、火炎形状における格子解像度の影響を示す。空間熱発生率で火炎形状を可視化した。最も細かい格子Grid3(参照解)に対し、最も荒い格子Grid1では、火炎伝播速度が遅くなり、最終的な火炎形状の再現に失敗している。不十分な格子で詳細反応流体解析を行うことの危険性を示す。

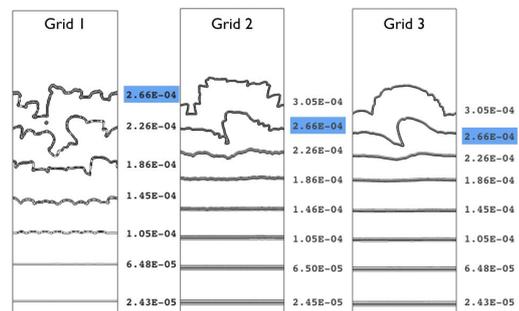


図5 ATFモデル無し結果における格子解像度の影響

図6に、最も荒い格子Grid1を用いたATFモデルによる結果を示す。厚さ率 $F = 4$ により、火炎移動や形状など、参照解 (No model with Grid 3) を良く再現できることがわかる。更に厚さ率を大きくした場合 ($F = 12$) には、火炎厚さの増加とともに、参照解との差が現れるが、大まかな挙動はとらえられていると言える。厚さ率 F というパラメータの導入によって、大きな効果が得られることが示された。

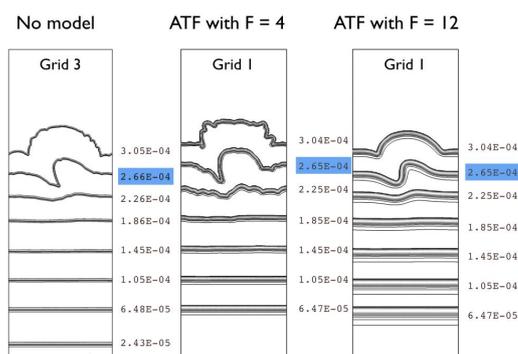


図6 ATFモデルによる結果

本解析では、初期条件の与え方に注意点がある。火炎伝播させる場合に、計算領域下に高温源を配置し、自着火を利用することで、火炎伝播を誘導した。ATFモデルを用いた場合、反応率が $1/F$ 倍されるため、モデル無しに対して、自着火タイミングが異なることになる (そのため、モデル無しの条件を初期条件として用いた)。場合によっては、自着火しない場合も考えられる。これは、例えば、自動車ノック問題における末端ガスの自着火タイミングをATFモデルでは正確に解析できないことを意味しており、非定常問題での大きな問題点となる。

詳細反応機構/反応流体解析における反応率のサブグリッドモデルとして、ATFモデルに着目し、その妥当性を検証した。1次元層流燃焼速度の問題では、ATFモデルにより、非常に少ない格子点で層流燃焼速度を再現できることを示した。2次元伝播火炎と渦干渉問題では、火炎伝播速度や渦干渉後の火炎形状の再現が可能であることを示した。しかし、ATFモデルでは、大きく2点の問題がある。1点目は、厚さ率 F の導入により、方程式が影響を受けることである。本研究の場合、レイノルズ数が人工的に $1/F$ 倍された流体場を解析することになる。2点目は、反応率が $1/F$ 倍されることにより、詳細反応を使用した場合のキーとなる自着火速度が影響されることである。本研究では、これらの問題を解決するため、ATFモデルをベースにその定式化を再考した。

(2) ATFモデルの再考: 物理的に矛盾しないモデリング

ATFモデルは、次式で示すように拡散係数を F 倍し、かつ反応率は $1/F$ 倍することで火炎構造を厚くすることで火炎構造を格子で解像しやすくしつつ、かつ層流火炎速度は本来の速度となるようにするモデルである。しかし上記でも示したように反応率は $1/F$ 倍してしまうため、着火時間に問題が生じる。これは、詳細反応機構を用いる一つの大きな利点である着火時間の正確な予測を失っていることを意味している。

$$\frac{\partial (\rho Y_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho Y_s \mathbf{u} - \rho F D_s \nabla Y_s) = \frac{\dot{\omega}_s}{F}$$

そこで本研究では、ATFモデリングのアイデアをベースとし、研究代表者等が確立してきた物理的な視点から支配方程式レベルで矛盾無く工夫する数値計算法の理論を反応性流体方程式へと拡張を試みた。すなわち、火炎構造を厚くすることで火炎構造を格子で解像しやすくしつつ、かつ層流火炎速度は本来の速度となるようにするまでは従来のATFモデルと同様だが、それに加えて着火時間の正確な予測を可能とするようモデリングを再考した。モデリングの詳細については割愛するが、物理的に矛盾無くこれらの拡散係数と反応率を自動的に制御することで、火炎面は人工的に厚くすることで粗い格子で火炎面を解像し、かつ正確に着火現象や火炎速度を扱える手法を考案した。本提案手法は、乱流燃焼現象に対しての検証が十分では無いため、今後は更なる乱流燃焼流解析での検証が必要である。

(3) 保存型高次精度陰的フィルタスキームの開発

燃焼流解析では、微量の化学種が反応に重要な役割を果たすことが知られているため、微量であってもその化学種の保存則は非常に重要となる。本研究では、本手法の高次精度計算手法への展開を考慮し、高次精度陰的フィルタスキームの物理量保存性について解析し、化学種の保存則を丸め誤差レベルで常に満足する高次精度陰的フィルタスキームの開発を行った。

LESなどの高忠実な数値計算では、高精度かつ高解像度なコンパクト差分法に高次精度陰的フィルタスキームがしばしば用いられる。Lele [Lele, *J. Comput. Phys.*, 1992] が提案している代表的な3重対角高次精度陰的フィルタスキームは次式のように表され、数多くのLES解析で使用されている。

$$\alpha_f \hat{q}_{i-1} + \hat{q}_i + \alpha_f \hat{q}_{i+1} = \sum_{k=0}^n \frac{a_k}{2} (q_{i+k} + q_{i-k})$$

ここで、 q はフィルターをかける前の物理量で、ハットがついた q はフィルターかけた物理量、 α_f および a_k は係数である (詳細は [Lele, *J. Comput. Phys.*, 1992] を参照)。

計算領域全体でのこの物理量 q の保存性を議論するため、この式の右辺と左辺を周期境界条件の下で計算領域全体 (N) に渡って総和を取ると次式が導かれる。

$$\sum_{i=1}^N \hat{q}_i = \sum_{i=1}^N q_i$$

これより、フィルターかけた物理量 q ハットは計算領域全体で保存すると議論されてきている。しかし、この広く使われている標準的な高次精度陰的フィルタースキームは、その定式化からも明らかのように、何度もフィルター操作を繰り返すことで丸め誤差が蓄積する形式となっており、global な保存特性がマシンゼロレベルで保証されないことが分かる（実際に保証されないことは、数値実験でも示している）。

そこで本研究では、フィルターをかけた後も global な保存特性を丸め誤差レベルで保証する高次精度陰的フィルタースキームを提案した。提案手法は、次式で表されるようにフィルター操作をフラックス形式で行う手法である。

$$\hat{q}_i \equiv q_i - (\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i-\frac{1}{2}})$$

ここで、 f ハットはフィルターフラックスと呼ぶことにする。本提案手法の概念は、図 7 に示すように、有限体積法的なフラックスの出入りの概念をベースとしており、ある物理量 q は、フィルターフラックス f ハットの出入りによりフィルターをかけた q ハットなると考えることである。本フィルタースキームにより f ハットの計算自体には丸め誤差が入るが、何度もフィルター操作を繰り返すことでその丸め誤差が蓄積しないフィルターとなる。ここでフィルターフラックス f ハットは、高次精度かつ陰的な定式化となっており、詳細な定式化については現在投稿済み・査読中の学術雑誌論文を参照して頂きたい [Shirotto, Kawai, & Ohnishi, 投稿済み・査読中]。

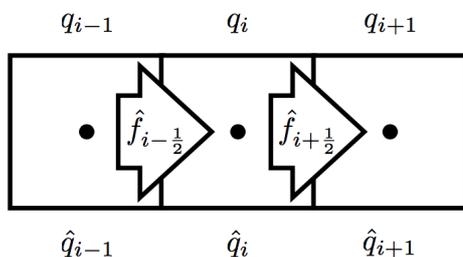


図 7 提案するフラックスベース高次精度陰的フィルターの概念図

図 8 は、本提案フィルター手法と Lele [Lele, *J. Compt. Phys.*, 1992] が提案しているフィルター手法との、周期境界条件下での計算領域全体での保存量の保存特性の時間発展を示した数値実験結果である。従来の高次精度陰的フィルタースキームでは保存

エラーが時間発展とともに増加してしまうことが示されており、また本提案手法が保存則を丸め誤差レベルで常に満足することを示した。本成果は、現在、国際学術雑誌に投稿済み・査読中である [Shirotto, Kawai, & Ohnishi, 投稿済み・査読中]。掲載決定し次第、研究代表者のホームページに論文情報を掲載する。

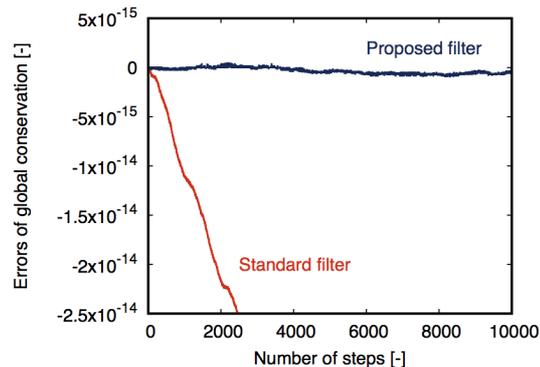


図 8 Global な保存特性の検証

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 1 件)

1. 森井雄飛, 寺島洋史, 詳細化学反応機構を用いた反応性流体解析における高効率解析手法, ガスタービン学会誌, 査読無, 特集: 燃焼現象, 44(2), 96-101, (2016) .

[学会発表](計 2 件)

1. 寺島洋史, 大門優, 高圧メタン酸素ロケット噴射器近傍の非定常燃焼流れ場構造: 詳細反応機構を用いた CFD 解析, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2016, 2016 年 10 月 22 日, 愛媛大学城北キャンパス (愛媛県松山市)
2. 森井雄飛, 寺島洋史, 清水太郎, 青野淳也, 爆燃・爆轟伝播現象に対する ATF/詳細反応機構を用いたモデリング, 第 53 回燃焼シンポジウム, つくば国際会議場 (茨城県つくば市), 2015 年 11 月 18 日 .

6. 研究組織

(1) 研究代表者

河合 宗司 (KAWAI, Soshi)
 東北大学・大学院工学研究科・准教授
 研究者番号: 40608816

(2) 研究分担者

寺島 洋史 (TERASHIMA, Hiroshi)
 北海道大学・大学院工学研究院・准教授
 研究者番号: 20415235