

燃焼の数値シミュレーション

宮内 敏雄*

Numerical Simulation of Combustion

Toshio MIYAUCHI

Key words : computer ; simulation ; modelling ; combustion ; chemical reaction ; direct numerical simulation ; large eddy simulation.

1. はじめに

近年の計算機関連技術の進展はめざましく、特にワークステーションのコストパフォーマンスの向上には、目を見張るものがある。このような状況の基に、燃焼の数値シミュレーションにも新しい展開が開けつつあり、燃焼の直接数値計算が可能となりつつある。

燃焼の数値シミュレーションを行う場合、層流火炎と乱流火炎では幾分異なった取り扱いが必要である。層流火炎の数値シミュレーションに関しては“CHEMKIN”¹⁾に代表される汎用プログラムがあり、圧力一定の様な混合気の反応、一次元火炎²⁾、衝撃波管内の反応³⁾、超攪拌燃焼器内の反応⁴⁾などについては“CHEMKIN”に含まれているプログラムを用いて素反応を考慮に入れた数値計算をワークステーションを用いて行うことができる。詳細な素反応を考慮に入れた二次元層流火炎の数値シミュレーションは現時点ではスーパーコンピュータを必要とするが、近い将来にはワークステーションにより計算が可能になると思われる。また、詳細な素反応を考慮に入れた三次元層流火炎の計算は現時点ではスーパーコンピュータを用いても困難であるが、近年盛んに研究が行われつつあるReduced Kinetic Mechanism⁵⁾を用いることにより、近い将来には数値計算が可能になるものと思われる。以上のように層流火炎の数値シミュレーションに関しては、基本的な問題はほぼ解決されており、その適用範囲の拡大は、ひとえに計算速度の増加と記憶容量の拡大など計算機能力の向上にかかっている。

一方、乱流火炎に関しては未解明な点が多く残されている。その一つは乱流モデルに関するものであり、他の一つは発熱と流体運動の強い相互作用に関するものである。通常の乱流の数値シミュレーションには、 $k-\epsilon$ モデルや応力方程式モデルなどのいわゆるレイノルズ平均に基づく乱流モデルが用いられている。燃焼の数値シミュレーションの場

合に、ファール平均を取ることにより非燃焼流と同様な乱流モデルを適用することが可能であり、ある程度の成功を収めているが、発熱に伴う密度変化と動粘性係数の低下が非燃焼流とは異なった現象を引き起こす可能性があり、また化学反応により散逸項が影響を受ける可能性があるため⁶⁾、非燃焼流と同様の乱流モデルを燃焼流に適用できる保証はない。また、旋回を伴う火炎の場合には、いわゆる勾配拡散モデルが成立しなくなり、乱流モデルとして応力方程式モデルを用いる必要があることが知られている。さらに化学反応項はいわゆるレイノルズ平均の考え方に基づいては閉じることは困難であり、確率密度関数に基づいたモデルが提唱されている⁷⁾。一方、発熱と流体運動の相互作用に関しては、十分な解明は行われておらず、今後の研究が期待されている。

層流火炎の数値シミュレーションや $k-\epsilon$ モデル・応力方程式モデルなどの従来の乱流モデルに基づいた乱流火炎の数値シミュレーションについてはすでに解説⁸⁾がまとめられているので、ここでは乱流火炎の直接数値計算とラージ・エディター・シミュレーションについて解説することにする。乱流燃焼の直接数値計算は渦と火炎の相互作用など乱流燃焼の機構解明に重要な役割を果たすのみならず、 $k-\epsilon$ モデルや応力方程式モデルなど時間平均を施した方程式に現れる高次相関項をモデル化する際にも重要な役割を果たしている。

乱流燃焼の直接数値計算が可能となった背景には、演算速度が数十GFLOPSに達するスーパーコンピュータが実用に供せられるようになってきたことに加え、数値計算手法として、従来の差分法に加えてスペクトル法、高次精度差分法などの新手法が開発されたことがある。乱流燃焼の直接数値計算は現状では比較的レイノルズ数の低い流れに限られており、また反応機構としても単段階不可逆反応などに限られているが、西暦2000年頃に実用化が予定されて

平成6年1月19日受付 平成6年4月8日受理 (Received on Jan. 19, 1994; Accepted on Apr. 8, 1994) (依頼解説)

* 東京工業大学工学部 (Faculty of Engineering, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama Meguro-ku Tokyo 152)

いる1TFLOPSクラスのスーパーコンピュータを用いれば、比較的高レイノルズ数を対象とした素反応を考慮に入れた乱流燃焼の直接数値計算が可能になるものと思われ、乱流燃焼機構の解明、実用燃焼装置における乱流燃焼の予測等に大きな寄与をなすものと思われる。

現時点における乱流燃焼の直接数値計算はスペクトル法と高次精度差分法を用いて行われており、周期境界条件や固体壁を伴う場合にはスペクトル法が、流入・流出境界条件を伴う場合には高次精度差分法が適用されている。以下、数値計算法、スペクトル法を用いた計算例、高次精度差分法を用いた計算例等について説明を行う。

2. 数値計算法

2.1 スペクトル法

スペクトル法は空間的に直交関数展開を行うことにより、空間微分を解析的に行い、ナビエ・ストークス方程式などの偏微分方程式を時間に関する常微分方程式に換えて時間積分を行う方法である。この方法は通常の差分法に比べて、少ない格子点数で高い精度が得られ、位相誤差を伴わないなどの利点を持っている。時間積分には通常、時間分割法、ルンゲ・クッタ法などが用いられている。直交関数としては周期境界条件が適用可能な場合にはフーリエ級数が、固体壁を扱う場合にはチェビシエフ級数が用いられる場合が多い。

対流項などの非線形項は波数空間ではなく、物理空間で計算する場合が多く、この場合に生じるaliasing誤差を取り除くために、padding法やphase shift法が用いられている⁹⁾。

2.2 高次精度差分法

流入・流出境界条件を伴う場合、スペクトル法の適用は困難であるため、差分法を用いる必要がある。その場合、2次精度中心差分法や3次精度風上差分法では差分誤差が大き過ぎるために、高次精度差分法を用いる必要がある。高次精度差分法は中心差分と風上差分に分けられるが、レイノルズ数が比較的低く、数値的な不安定性を生じにくい場合には、中心差分が、レイノルズ数が比較的高く、数値的な不安定性を生じ易い場合には風上差分が用いられる。

高次精度中心差分には4次精度中心差分、6次精度中心差分など次数が高くなるにつれて考慮すべき格子点数が増える通常中心差分法の外にPade法のように次数に比して考慮すべき格子点数が少ないコンパクト差分法がある。また、全波数領域においてスペクトル法に匹敵する精度を有するspectral likeなコンパクト差分法もある¹⁰⁾。

2.3 M²展開

非圧縮性流れの数値計算を行う場合、時間差分間隔 Δt はCourant条件によって次式により決定される。

$$u\Delta t/\Delta x \leq 1 \dots\dots\dots(1)$$

圧縮性流体の場合に、Courant条件は、

$$(u+a)\Delta t/\Delta x \leq 1 \dots\dots\dots(2)$$

となり、代表速度が流速と音速の和となるため、同じ空間差分間隔でも時間差分間隔に対する制約はより厳しいものとなる。また通常の燃焼問題では流れのマッハ数Mは十分小さく、密度変化は主として温度変化に伴って生じるものであるから、基礎方程式をM²で展開するM²展開法が適用可能である。この方法において熱力学的圧力は流れの場合全で一様となり、M²の1次の項から非圧縮性流体に対するものと同様な運動量保存式が得られる。このような近似により数値計算上の困難は大幅に解消される¹¹⁾。

3. スペクトル法による乱流燃焼の直接数値計算

スペクトル法による乱流燃焼の直接数値計算は予混合気自発着火現象¹²⁾、2次元乱流中の予混合火炎伝播¹⁴⁾を対象として行われている。化学反応としては単段階不可逆反応を対象としており、境界条件としては周期境界条件を用いている。数値計算法としてはフーリエ級数展開を用い、時間前進法は記憶容量節約型の5次精度ルンゲ・クッタ法を用いている。

3.1 予混合気自発着火

一辺が4mmの正方形領域を計算領域とし、窒素で希釈された水素・酸素混合気自発着火を対象とした直接数値計算が新井ら¹²⁾によって行われている。格子数は128×128である。彼らの計算結果から、乱流によって乱れ強さに比例する温度変動が生じること、温度のゆらぎが存在することにより非一様な着火が生じること、初期温度が低い場合には非一様な着火から爆轟波が発生し、着火遅れ時間が短くなること、乱流中の着火遅れ時間はTsugeとSagaraの理論値¹³⁾とほぼ一致することなどが明らかにされている。

3.2 乱流中の予混合火炎伝播

一辺が4mmの正方形領域を計算領域とし、窒素で希釈された水素・酸素混合気中の予混合火炎伝播を対象とした直接数値計算が口田ら¹⁴⁾によって行われている。格子数は128×128である。この場合、反応速度の頻度因子は層流燃焼速度と一次元予混合火炎の漸近解析解から決定されている。乱流のスケールを固定し、乱れ強さとルイス数を変化させた計算結果から、二次元かつ発達中の乱流火炎という制約下ではあるが、しわ状層流火炎から群島状の火炎まで観察されること、ルイス数が1より小さくなると火炎面が不安定化し複雑になり、乱流燃焼速度が大きくなること、ルイス数が1より大きくなると未燃気体側に凹の部分では反応速度が大きくなって火炎面が安定化し、乱流燃焼速度が低下することなどが明らかにされている。

4. 高精度差分法による乱流燃焼の直接数値計算

スペクトル法による乱流燃焼の直接数値計算の適用が周期境界条件または固体壁境界条件を有する問題に限定されているのに対して、高精度差分法による乱流燃焼の直接数値計算は流入・流出境界条件を有する問題にも適用可能である。

高精度差分法による乱流燃焼の直接数値計算は消炎、歪速度の影響、ルイス数効果などの解明を対象として行われている。化学反応としては単段階不可逆反応を仮定しており、境界条件としてはNSCBC (Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition) 法¹⁵⁾を用いている。NSCBC法は反応性ナビエ・ストークス方程式に対する適切な数の境界条件を用いており、非反射境界条件の適切な取扱いができるため、渦と火炎の相互作用によって生じる音波は境界で反射されず、領域内の計算に影響を与えることはない。数値計算手法としては空間微分は6次精度のコンパクト差分法を用いて行っており、時間前進は記憶容量節約型の3次精度ルンゲ・クッタ法を用いて行っている。現時点では計算は2次元に限られており、格子数としては 158×158 を用いているが、3次元計算が試みられており、また、化学反応として多段階可逆反応を考慮に入れる試みも行われている。

4・1 乱流予混合火炎におけるルイス数効果

乱流予混合火炎におけるルイス数効果の解明を目的とした直接数値計算がHaworthら¹⁶⁾によって行われている。発熱、変物性、単段階アレニウス型化学反応を考慮に入れた直接数値計算が行われ、反応物ルイス数の効果が調べられ

た。Fig. 1に示すような局所的な瞬時の乱流火炎構造から、局所的な反応物の消費速度や乱流燃焼速度などが求められている。また、火炎面の歪速度と曲率が計算により求められ、火炎面積、火炎面単位面積当りの平均反応物消費速度、乱流燃焼速度などとの関連が明らかにされた。その結果、火炎面曲率の確率密度関数は零平均の周りにほぼ対称であること、歪速度の確率密度関数は正の値のピークを持つ非対称な分布であり、火炎面は大きな歪速度の方向に傾く傾向があること、ルイス数が1と異なる火炎面の構造は局所的な火炎の曲率よりも接線方向の歪速度と強い相関を示すこと、単位面積当りの平均反応物消費速度は曲率には余り依存せず、平均接線歪速度によって支配されていること、 $Le > 1$ よりも $Le < 1$ の方が広い火炎面が形成されることが明らかにされている。

5. M^2 展開法による乱流燃焼の直接数値計算

超音速燃焼を除き通常の燃焼はマッハ数が十分に小さい流れの中で生じており、また振動燃焼、燃焼騒音などを対象とする場合を除き圧力波の伝播を考慮に入れる必要はない。このような場合、密度変化として温度変化に伴うもののみを考慮に入れればよく、 M^2 展開法として知られている低マッハ数近似を用いることができる。この近似は音速を無限大と仮定することに等価であり、熱力学的圧力は空間内で一定となる。速度場、濃度場、温度場などの変数はフーリエ級数を用いて展開し、スペクトル法を用いた直接数値計算が行われている。

5・1 二次元混合層の発達に対する発熱と主流密度差の影響

乱流せん断層中に成長する大規模渦構造がせん断層の発達に大きな役割を果たしていることが知られているが、乱流拡散火炎のような化学反応を伴う流れでは、化学反応に伴う発熱による密度変化も重要な影響を与えている。さらに、混合する二流体の密度差によっても混合層の発達は影響を受けることが実験的に示されている。このようなことから低マッハ数近似を用いた二次元混合層の直接数値計算が店橋ら¹⁷⁾によって行われており、化学反応に伴う発熱による密度変化および主流の密度差が混合層の発達に与える影響が明らかにされている。境界条件としては周期境界条件と自由滑り境界条件が用いられており、 128×129 の格子点が用いられている。初期速度分布、濃度分布、密度分布としてはハイパボリック・タンジェント型を仮定し、速度の初期じょう乱としてRayleigh方程式から得られた基本波、第1低調波、第2低調波を与えている。無次元発熱量 $Ce = 5$ 、主流密度比 $r = \rho_2 / \rho_1 = 1$ の計算結果から、Fig. 2に示すように化学反応に伴う発熱による密度変化により、大規模渦外側でbaloclinic torqueが発生し、Fig. 3に示すように大規模渦とは逆回転の渦度領域を生じること、これによりFig.

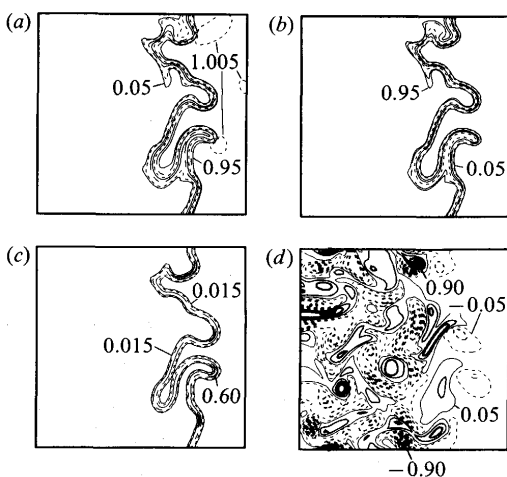


Fig. 1. Direct numerical simulation of turbulent premixed flame ($Le=1.2$).

- (a) Nondimensional temperature distribution
- (b) Mass fraction of reactant
- (c) Nondimensional reaction rate distribution
- (d) Nondimensional vorticity distribution

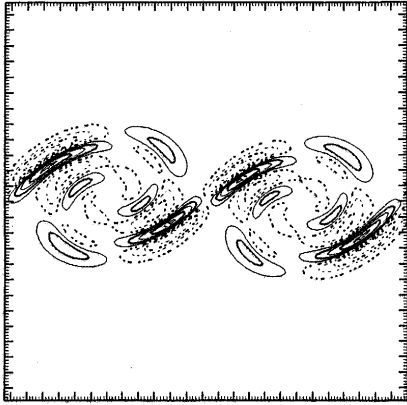


Fig. 2. Baloclinic torque term ($Ce=5, r=1.0$).

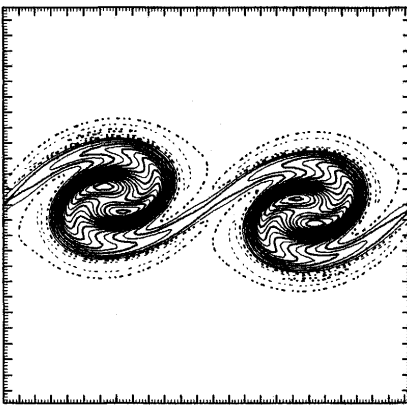


Fig. 3. Equivorticity lines ($Ce=5, r=1.0$).

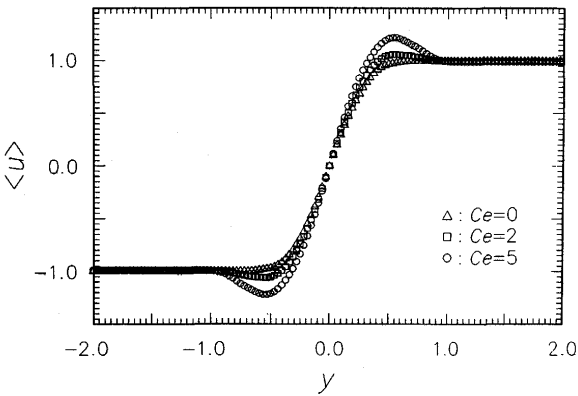


Fig. 4. Mean velocity profile ($r=1.0$).

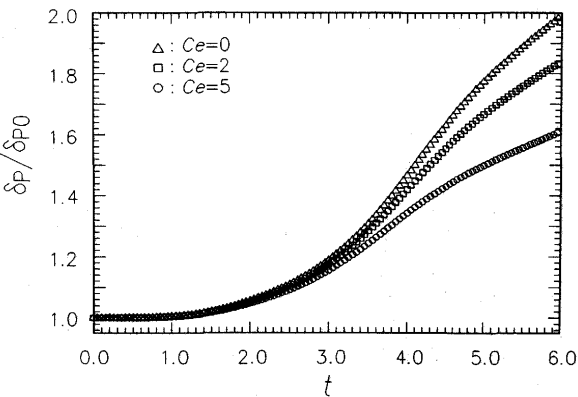


Fig. 5. Product thickness ($r=1.0$).

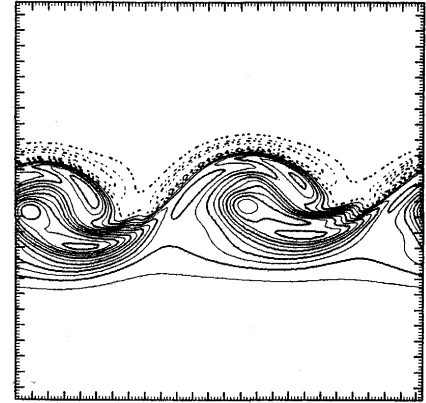


Fig. 6. Equivorticity lines ($Ce=0, r=0.2$).

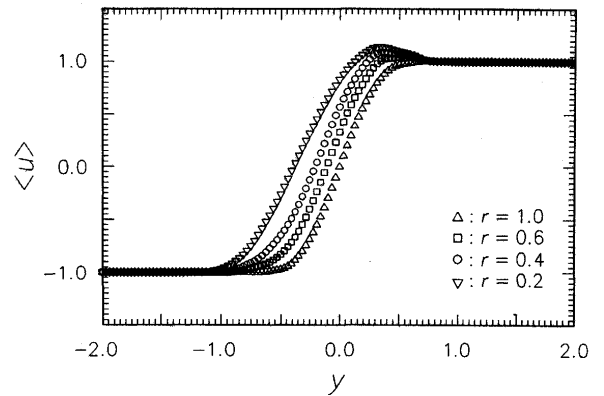


Fig. 7. Mean velocity profile ($Ce=0$).

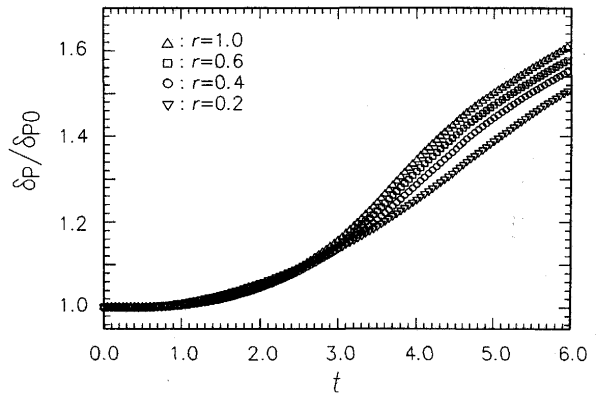


Fig. 8. Product thickness ($Ce=5$).

4に示すように平均速度分布にオーバーシュートとアンダーシュートが現れ、運動量厚さの増加は抑制されることがわかる。Fig. 5は生成物厚さの時間変化を示しているが、この図から負の過度領域の発達により化学反応による生成量は減少することがわかる。また主流に密度差が存在する場合、baloclinic torqueとexpansionにより非対称な大規模渦が形成され、Fig. 6に示すように高密度流体側に大規模渦とは逆回転の過度が形成されること、この高密度側の逆回転領域により、Fig. 7に示すように高密度側だけに速度のオーバーシュートが生じ、密度差の増加とともに化学反応による生成量は抑制されることが示されている。さらに発熱・主流

密度差がともに存在する場合には, Fig. 8に示す生成物厚さの時間変化から明らかなように化学反応による生成量は一層抑制される。

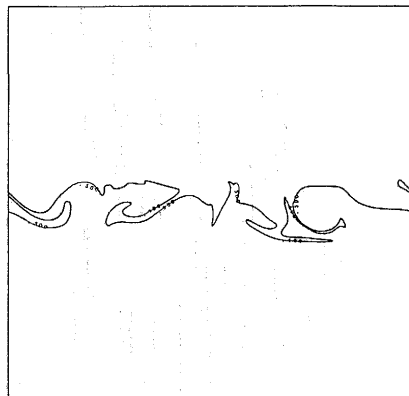
6. フラクタル・ダイナミック・サブグリッドスケール・モデル

乱流燃焼の実用計算を考えた場合, コルモゴロフ・スケールまでの分解能を得ることは一般に困難であるため, ラージ・エディ・シミュレーション (LES) などのモデル化が必要となる。非反応性流れのLESは十分に研究されており, 多くのモデルが提唱されているが, 反応性流れのLESについては反応項の非線形性に伴うclosure問題の困難さのために, そのモデル化に関する研究は余り行われていない。ここでは宮内ら¹⁰⁾によって行われた乱流拡散火炎のフラクタル特性とそれに基づくモデル化に関する研究について述べる。

二次元一様等方性乱流中に形成される乱流拡散火炎を対象とし, 簡単化のために化学反応による発熱を無視すると, 反応物, 生成物はpassive scalarとなる。また, 高速化学反応を仮定し, 火炎面モデルを導入すると, 化学種生成項は



(a)



(b)

Fig. 9. Equivorticity lines and flame front.
(a) Equivorticity lines
(b) Flame front

消去され, 火炎面はmixture fraction一定の面となる。数値計算はスペクトル法を用いて行われており, 格子数としては576×576が用いられている。境界条件としては速度場に関しては周期境界条件を, 濃度場に関しては一定勾配分布からの変動に関して周期的境界条件が課されている。Fig. 9に直接数値計算により得られた等渦度線と火炎面を示す。

Fig. 10は複雑な火炎面を長さLの直線定規でおおった場合

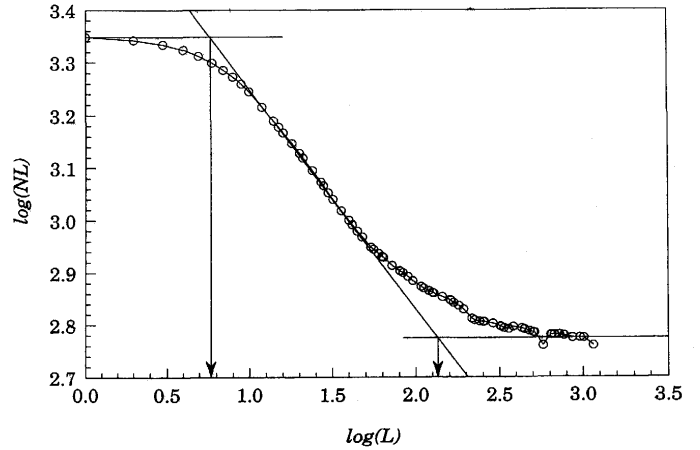


Fig. 10. Fractal characteristic of flame front.

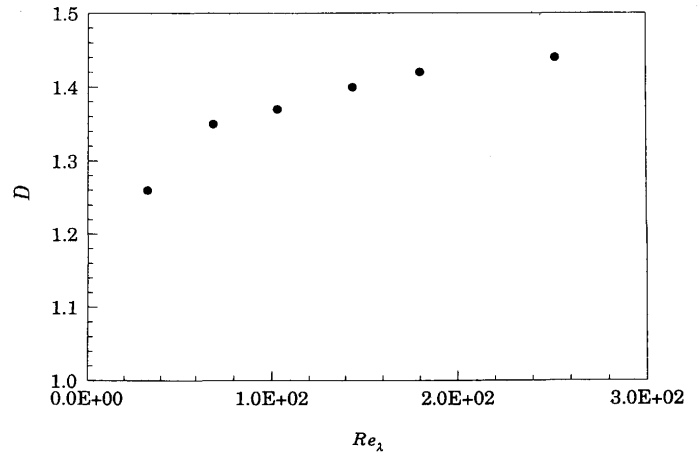


Fig. 11. Relation between fractal dimension and Reynolds number.

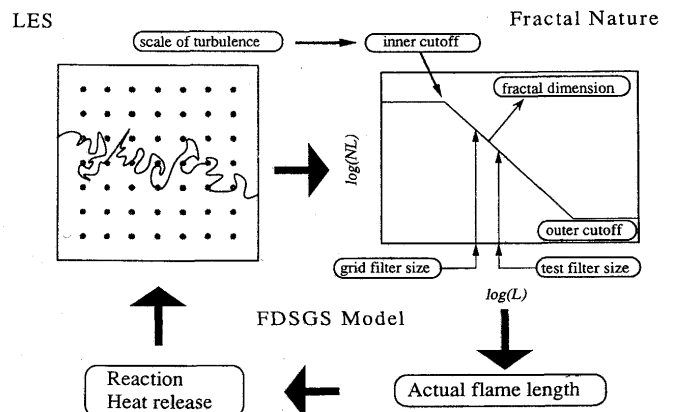


Fig. 12. Fractal dynamic subgrid scale model.

の、定規の数NとLの積の対数とLの対数の関係を示している。この図から火炎面はフラクタル特性を示すことがわかり、フラクタル次元DはFig. 11に示すようにレイノルズ数とともに増加する。inner cutoffはenstrophy based microscaleの2~3倍であり、enstrophy散逸が最大となるスケールに非常に近い。また、平均scalar gradientのcutoff scaleはinner cutoffの約2倍となる。Fig. 12に示すように低解像度のLESデータからinner cutoffを仮定することにより火炎面の実際の長さや平均scalar gradientの実際の値を求めることができ、subgrid scaleにおける反応量、発熱量などを求めることができる。

7. 変動濃度相関項の直接数値計算

k-εモデルのような時間平均された方程式を対象とする場合、化学種生成項は次のように表される。

$$-R(\overline{c_A c_B} + \overline{c_A' c_B'}) = -\overline{R c_A c_B} (1 + \alpha) \dots\dots\dots (3)$$

左辺第1項は平均濃度相関項を、左辺第2項は変動濃度相関項を表しており、変動濃度相関項をモデル化する必要があるが、このモデル化については十分な検討が行われていない。ここでは反応性一様等方性乱流および反応性混合層の直接数値計算結果を用いて変動濃度相関項の評価を行った店橋ら¹⁹⁾の研究について説明を行う。簡単化のために化学反応による発熱を無視すると、反応物、生成物はpassive scalarとして取り扱うことができる。数値計算はスペクトル法を用いて行われており、反応性一様等方性乱流の計算の場合、格子数は64×64×64とし、境界条件としては周期的境界条件が用いられている。また、反応性混合層の計算の場合、格子数は64×65×64とし、境界条件としては周期境界条件と自由滑り境界条件が用いられている。

反応性一様等方性乱流の直接数値計算結果から平均濃度相関項はFig. 13に示すように平均反応速度に対して正の寄与をなし、変動濃度相関項は負の寄与をなすことが明らか

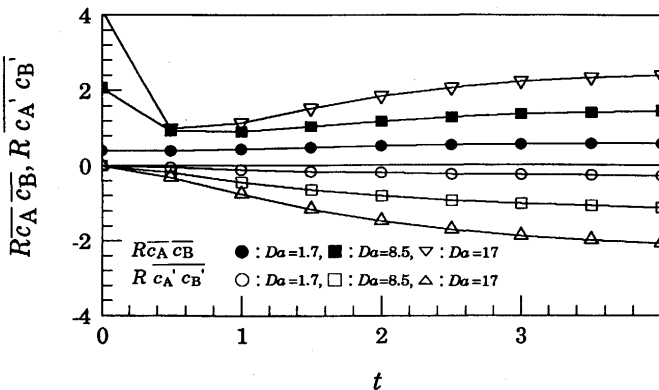


Fig. 13. Mean concentration correlation and fluctuating concentration correlation (homogeneous isotropic turbulence).

となった。その結果、平均反応速度はFig. 14に示すようにほぼ一定に保たれるが、(3)式の右辺で定義される混合度αはFig. 15に示すように負を示し、時間の経過とともに絶対値が大きくなること、混合度αは流れの代表時間と化学反応の代表時間の比であるDa数が大きい程絶対値が大きくなることが明らかとなった。

反応性混合層の直接数値計算結果から平均濃度相関項はFig. 16に示すように平均反応速度に対して正の寄与をなし、変動濃度相関項は負の寄与をなすこと、大規模渦の合体に対応して平均濃度相関項、変動濃度相関項とも2つの極値

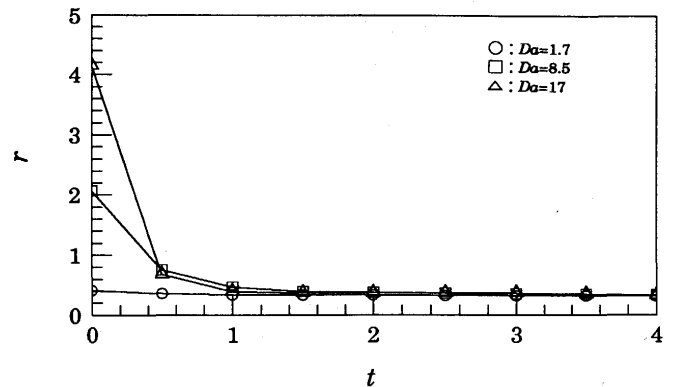


Fig. 14. Mean reaction rate (homogeneous isotropic turbulence).

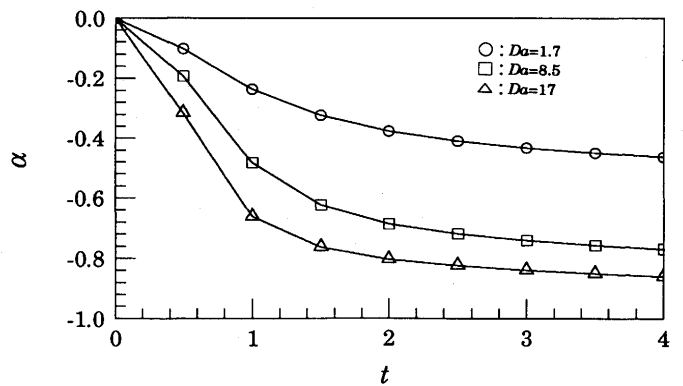


Fig. 15. Degree of mixedness (homogeneous isotropic turbulence).

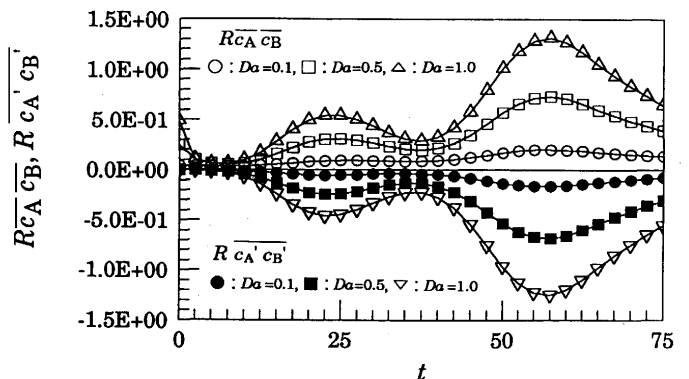


Fig. 16. Mean concentration correlation and fluctuating concentration correlation (mixing layer).

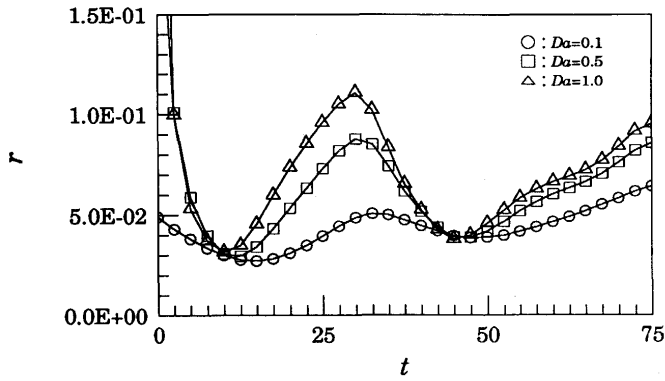


Fig. 17. Mean reaction rate (mixing layer).

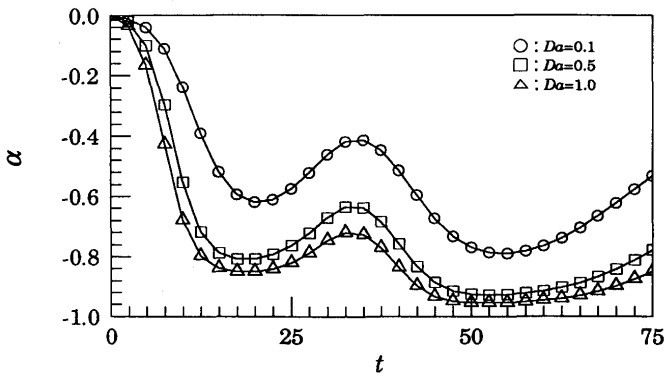


Fig. 18. Degree of mixedness (mixing layer).

を示すことが明らかとなった。平均反応速度はFig. 17に示すように大規模渦の合体に対応して極値を示し、その最大値はDa数の増加にともない大きくなる。また、混合度 α はFig. 18に示すように大規模渦の合体に対応して極値を示し、さらにDa数の増加にともない絶対値が大きくなることが明らかとなった。

8. まとめ

以上、乱流燃焼の直接数値計算に関し、計算例を中心に現状を説明した。現段階では、計算対象は2次元の場合が多く、また反応機構も単段階不可逆反応を対象としたものが多いが、西暦2000年頃に実用化が予定されている1TFLO-PSクラスのスーパーコンピュータを用いれば、比較的高レイノルズ数を対象とした素反応を考慮に入れた乱流燃焼

の直接数値計算が可能になるものと思われ、乱流燃焼機構の解明、実用燃焼装置における乱流燃焼の予測等に大きな寄与をなすものと思われる。この際、問題になることは格子生成と反応機構の簡素化である。現状でも最小格子間隔は火炎帯厚さで規定されており、火炎帯内に10~20の格子点を配置する必要がある、乱流燃焼の直接数値計算に適した格子生成に関する研究の更なる進展が望まれる。また、全ての素反応を考慮に入れた乱流燃焼の3次元直接数値計算は近い将来も困難と思われるため、reduced mechanism等反応機構の簡素化は不可欠なものと考えられる。

文 献

- 1) R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller: Sandia Report, SAND89-8009B (1991)
- 2) R. J. Kee, J. F. Grcar, M. D. Smooke and J. A. Miller: Sandia Report, SAND85-8240 (1985)
- 3) R. E. Mitchell and R. J. Kee: Sandia Report, SAND82-8205 (1982)
- 4) P. Glarborg, R. J. Kee, J. F. Grcar and J. A. Miller: Sandia Report, SAND86-8209 (1986)
- 5) N. Peters and B. Rogg (Ed.): Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems, (1993), p.1 [Springer-Verlag]
- 6) P. A. Libby and F. A. Williams: Turbulent Reacting Flows, (1980), p.29 [Springer-Verlag]
- 7) P. A. Libby and F. A. Williams: Turbulent Reacting Flows, (1980), p.185 [Springer-Verlag]
- 8) 宮内敏雄: 熱と流れのコンピュータアナリシス (日本機械学会編), (1986), p.128 [コロナ社]
- 9) C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarteroni and T. A. Zang: Spectral Methods in Fluid Dynamics, (1988), p.82 [Springer-Verlag]
- 10) S. K. Lele: J. Comput. Phys., **108** (1992), p.16
- 11) P. A. McMurtry, J. J. Riley and R. W. Metcalfe: J. Fluid Mech., **199** (1989), p.297
- 12) 新井且浩, 長谷川達也, 門脇 敏, 王 健平, 城之内忠正, 山口 啓起: 第4回数値流体力学シンポジウム講演論文集, (1990), p.657
- 13) S. Tsuge and K. Sagara: Combust. Science and Technol., **18** (1978), p.179
- 14) 口田征人, 長谷川達也, 山口啓起: 第30回燃焼シンポジウム前刷集, (1992), p.214
- 15) T. Poinsot and S. Lele: CTR Manuscript, **102** (1989), p.1
- 16) D. C. Haworth and T. Poinsot: J. Fluid Mech., **244** (1992), p.405
- 17) 店橋 護, 宮内敏雄: 日本機械学会論文集, 59-560B (1993), p.336
- 18) 宮内敏雄, 店橋 護: 燃焼の科学と技術, **1** (1992), p.29
- 19) 店橋 護, 宮内敏雄: 第30回燃焼シンポジウム前刷集, (1992), p.445