

並列計算機による時間変動成分を考慮した乱流燃焼解析ソフトウェアの開発
～ 2次元予混合火炎バーナーの解析～

牧田 光正⁽¹⁾、林 茂⁽¹⁾、川名 輝子⁽²⁾、笈雅行⁽²⁾、小池秀耀⁽²⁾、小林 敏雄⁽³⁾、谷口伸行⁽³⁾

Development of a Turbulent Combustion Analysis Code Treating
Dynamical Turbulent Flow for Parallel Computing

Mitsumasa MAKIDA⁽¹⁾, Shigeru HAYASHI⁽¹⁾,
Teruko KAWANA⁽²⁾, Masayuki KAKEI⁽²⁾, Hideaki KOIKE⁽²⁾,
Toshio KOBAYASHI⁽³⁾, Nobuyuki TANIGUCHI⁽³⁾

We are developing a turbulent combustion analysis code for large scale numerical simulation of combustion phenomena using parallel computing machines. In this study we calculated as follows. Firstly, zero Mach number approximation is applied to the analysis of subsonic compressible flow, and BFC coordinate is taken for considering the real complicated shape of the burner. Secondly, the stabilization of the simulation including various time scales is realized by coupling equation of continuity with equation of energy conservation via equation of state. The result of LES simulation shows that it is qualitatively valid for the real combustion phenomena.

Key Words : LES, Zero Mach Number Approximation, Coupling Equation of Continuity with Equation of Energy Conservation, BFC

1. 序論

近年、航空機エンジンをはじめとする燃焼器の性能向上、NO_x等の環境汚染物質の削減は省エネルギー、環境問題の観点から非常に重要な課題となっており、それに伴い燃焼解析技術の重要性は高まっている。燃焼流れ数値解析において問題となるのは次の点である。

- ・実際の燃焼は乱流であり火炎面のガスが乱流時間変動成分により混合され伝播することを考慮する必要がある。
- ・燃焼解析に要する時間、メモリが莫大である。
- ・燃焼流れには様々な時間スケールが混在するが如何に安定に効率的に解くか。
- ・複雑な燃焼器の形状を如何にして模擬するか。

こうした点を解決できれば、乱流燃焼解析ソフトウェアは実用的に役立つものと期待できる。

2. ソフトウェアの概要

次の特徴をもつ乱流燃焼解析ソフトウェアを開発した。

乱流の時間変動成分を考慮するために乱流の大規模成分はそのまま解き、小規模成分はモデル化するLES(Large Eddy Simulation)を採用した。

並列計算法として、計算負荷が高いルーチンをMPIで並列化した。

高速計算法として、亜音速燃焼流れを効率良く解くためにゼロ Mach 数近似を用いた。様々な時間スケールが混在する燃焼流れを安定かつ効率的に解くため、化学反応による生成消滅項を他の項とは別に時間積分した。これにより流れ場の時間スケールの0.1倍のタイムステップで燃焼解析が可能になった。

燃焼解析のための効率的な解適合格子の方法として、温度勾配が急な場所にメッシュを寄せる方法を採用した。複雑形状を近似するためBFC格子を用いた。

3. 基礎式と数値解法

基礎式は、連続の式、運動量保存式、エネルギー保存式、状態方程式、化学種の質量保存式とする。

- ・連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) \quad (1)$$

- ・運動量保存式

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) - \nabla p + \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2)$$

- ・エネルギー保存式

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho h \mathbf{v}) + \frac{dP}{dt} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \frac{dQ}{dt} \quad (3)$$

- ・状態方程式

$$P = \rho \sum_i \left(\frac{Y_i}{W_i} \right) RT \quad (4)$$

- ・化学種の質量保存式

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{v}) - \nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{V}_i) + w_i \quad (5)$$

ゼロ Mach 数近似^[1]を施したことにより、音波は除去され、非圧縮性流体解析と基本的に同じ数値解法を採用することができる。速度場の時間発展はSMAC法による。

⁽¹⁾ 航空宇宙技術研究所、⁽²⁾ 富士総合研究所、⁽³⁾ 東京大学

急激な発熱を伴う燃焼化学反応に対して安定かつ効率的に解くため化学反応による生成消滅項だけ他の項とは別に陰的に時間積分する。エネルギー保存式と状態方程式をカップリングさせて解く数値解法を採用する。具体的には状態方程式を時間微分した式、

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} = -\frac{\bar{p}}{\bar{T}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} - \bar{p} W \sum_l \frac{1}{W_l} \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial t} + \frac{\bar{p}}{P} \frac{\partial P}{\partial t} \quad (6)$$

とエネルギー保存式、および化学種の質量分率の式から密度の時間微分の式 $\frac{\partial \bar{p}}{\partial t}$ を作る。この式と化学種の質量分率の式 $\frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial t}$ を連立させる。この連立常微分方程式を解くにあたり、対流項は Adams-Bashforth 法により、拡散項(通常拡散、多成分化学種による拡散、乱流拡散)は Crank-Nicolson 法により離散化する。化学反応による生成・消滅の項は陰的に離散化する。また、圧力の時間変化項は無視する。

化学種の質量保存式を足し合わせると混合気体の質量保存式に等しくなることを保証するために、N 種の化学種に対して、N-1 種の化学種の質量保存式と混合気体の質量保存式の計 N 本の次の連立方程式を解くことになる。

$$\begin{cases} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} &= C_\rho^{n,n-1} + D_\rho^{n,n+1} + W_\rho^{n+1} \\ \frac{\partial \tilde{Y}_1}{\partial t} &= C_{\tilde{Y}_1}^{n,n-1} + D_{\tilde{Y}_1}^{n,n+1} + W_{\tilde{Y}_1}^{n+1} \\ &\dots \\ \frac{\partial \tilde{Y}_{N-1}}{\partial t} &= C_{\tilde{Y}_{N-1}}^{n,n-1} + D_{\tilde{Y}_{N-1}}^{n,n+1} + W_{\tilde{Y}_{N-1}}^{n+1} \end{cases}$$

ただし、 $C_\rho, C_{\tilde{Y}_i}$ は対流項、 $D_\rho, D_{\tilde{Y}_i}$ は拡散項、 $W_\rho, W_{\tilde{Y}_i}$ は生成消滅項である。

4. 結果と考察

2次元火炎バーナーの実験を行い、計算と比較した。

4.1. 実験

(1) 非燃焼実験

入口付近中央部に保炎器をもつバーナーに温度 386[K] の空気 (N_2, O_2 混合気体) を流速 2[m/s] で流入させると、流れは保炎器前方で循環流を生じ出口から流出する。(図 1)。これを PIV 法で測定した。主流方向流速時間平均値、主流方向流速時間瞬時値、乱流エネルギーの平方根の実験結果をそれぞれ図 2、図 3、図 4 に示す。

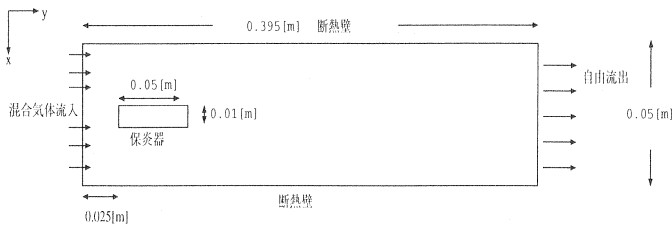


図 1: 計算体系 (2次元予混合火炎バーナー、非燃焼実験)

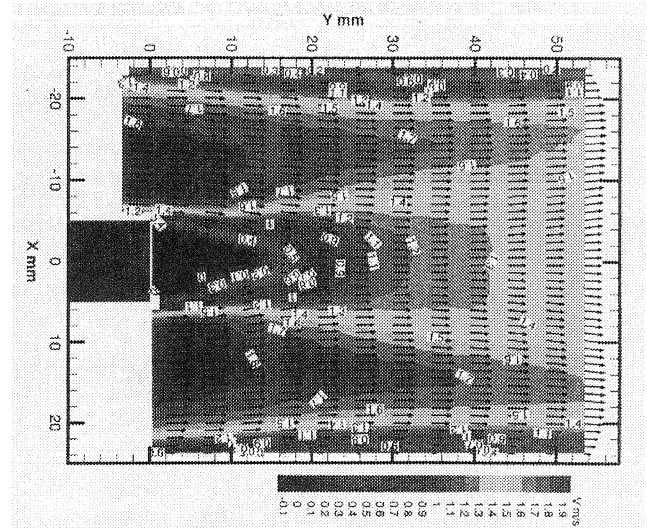


図 2: 主流方向流速時間平均値の等高線図、非燃焼実験

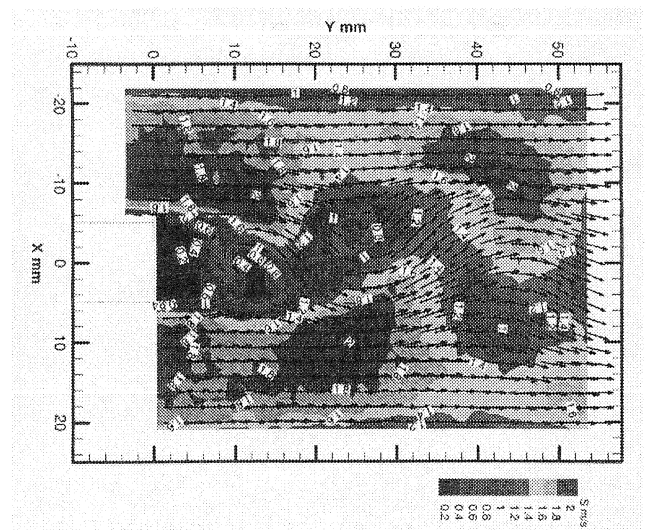


図 3: 主流方向流速瞬時値の等高線図、非燃焼実験

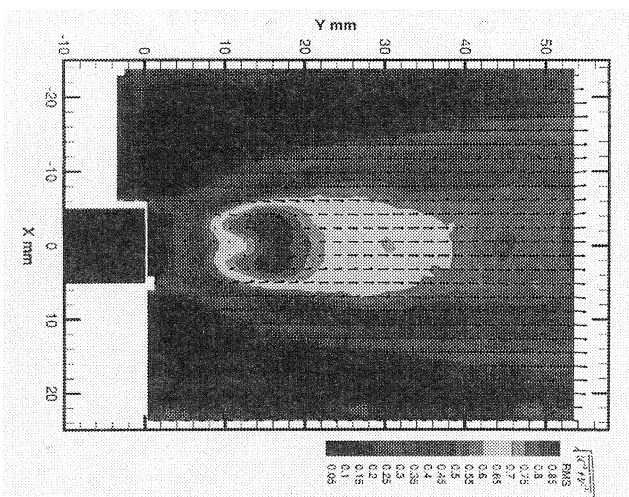


図 4: 乱流エネルギーの平方根の等高線図、非燃焼実験

(2) 燃焼実験

入口中央部に保炎器をもつバーナーに空気と燃料(メタン)を当量比0.6で混合させた気体を流入させる。これに着火すると、燃焼流を生じて火炎がバーナー壁に沿って拡がり出口から流出する(図5)。これをPIV法で測定した。主流方向流速時間平均値、乱流エネルギーの平方根、流れに垂直な断面の温度分布の実験結果をそれぞれ、図6、図7、図8に示す。

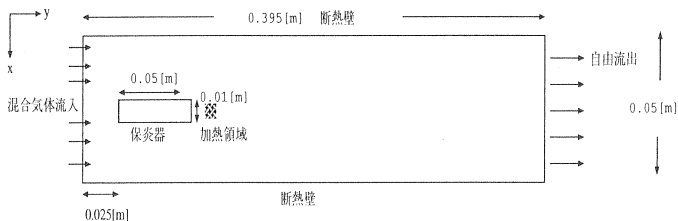


図 5: 計算体系(2次元予混合火炎バーナー、燃焼実験)

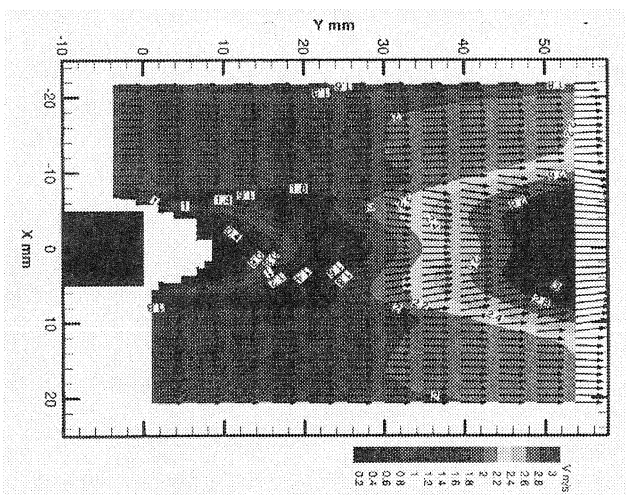


図 6: 主流方向流速時間平均値の等値面図、燃焼実験

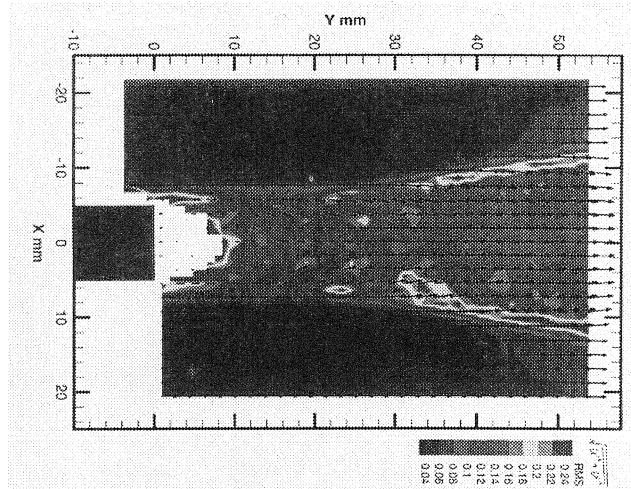


図 7: 乱流エネルギーの平方根の等値面図、燃焼実験

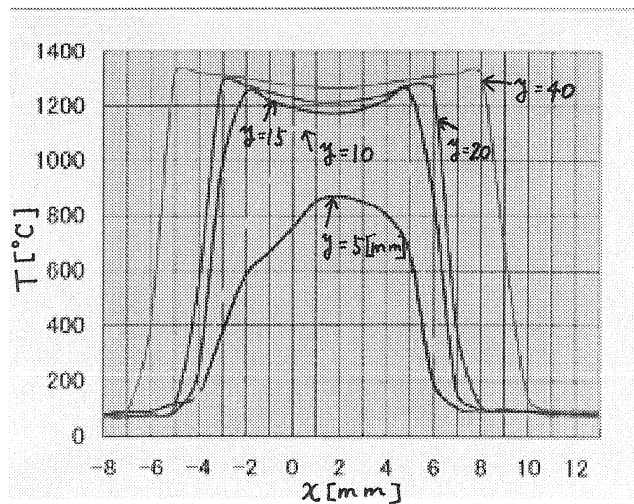


図 8: 流れに垂直な断面の温度分布、燃焼実験

4.2. 計算

(1) 非燃焼計算

非燃焼実験についての2次元数値解析を行った。

計算格子は36x60x3とし、保炎器近傍で特に細くなるようにした。スパン方向長さは50[mm]とした。時間ステップはCFL条件の時間ステップの0.4倍とした。初期条件として静止流速に乱れを入れた流速、温度386[K](一様)、大気圧の空気を考えた。乱流モデルはLES(Smagorinskiモデル)とした。流速の対流項差分はQUICKとした。流速時間平均値、主流方向流速時間平均値、流速瞬時値、主流方向流速瞬時値、乱流エネルギーの平方根の計算結果をそれぞれ、図9、図10、図11、図12、図13に示す。

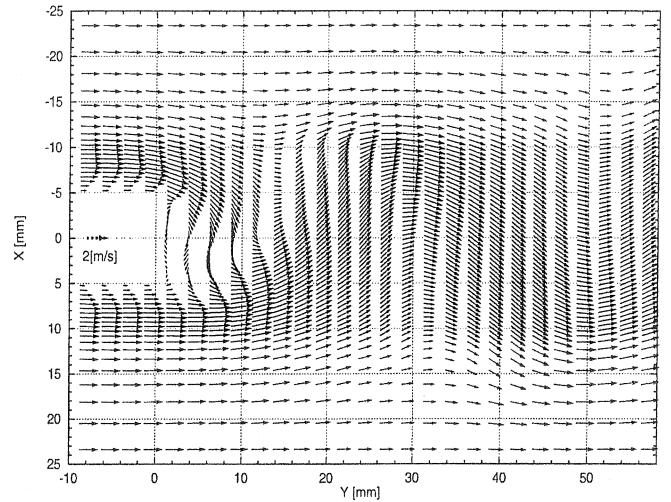


図 11: 流速瞬時値、非燃焼計算

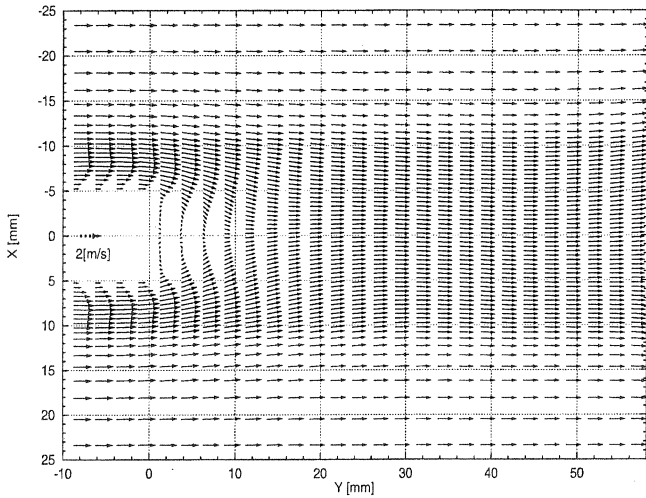


図 9: 流速時間平均値、非燃焼計算

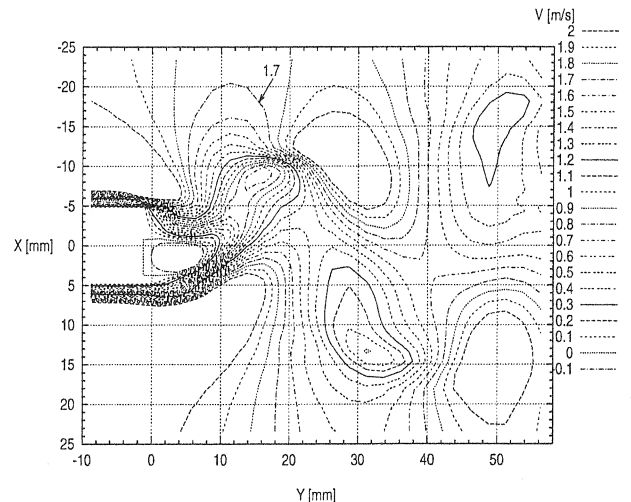


図 12: 主流方向流速瞬時値の等高線図、非燃焼計算

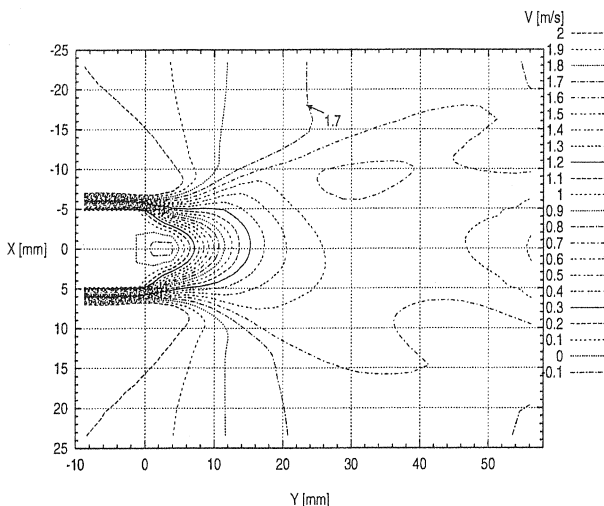


図 10: 主流方向流速時間平均値の等高線図、非燃焼計算

実験、計算ともに保炎器前方への流れの巻き込みが見られるが、巻き込みがおこる位置はLES計算では実験よりも保炎器により近くなっている。本計算結果は他のソフトウェア(α -FLOW)による結果と一致している。計算と実

験で差異が生じたのはスパン方向のメッシュ数が少ないため2次元性が強く現われた結果と考えられる。3次元性を考慮したLES計算を行えば実験に近い結果が得られると期待できる。

(2) 燃焼計算

この実験について数値解析を行った。

計算格子は36x60x3とし、保炎器近傍で特に細くなるようにした。スパン方向長さは50[mm]とした。時間ステップはCFL条件の時間ステップの0.1倍とした。比熱、エントロピーの温度依存性は多項式近似した。輸送係数は全て温度によらず一定とした。LES計算では初期流速に乱れを入れるのが通常であるが、実験によると流速の時間的な乱れは少ないため、一様流速を初期値とした。加熱領域は保炎器後方で点状にした。対流項差分は流速についてはQUICK、温度、化学種濃度については1次風上とした。乱流モデルはLES(Smagorinskiモデル)とした。燃焼化学反応は次の総括一段反応でモデル化した。

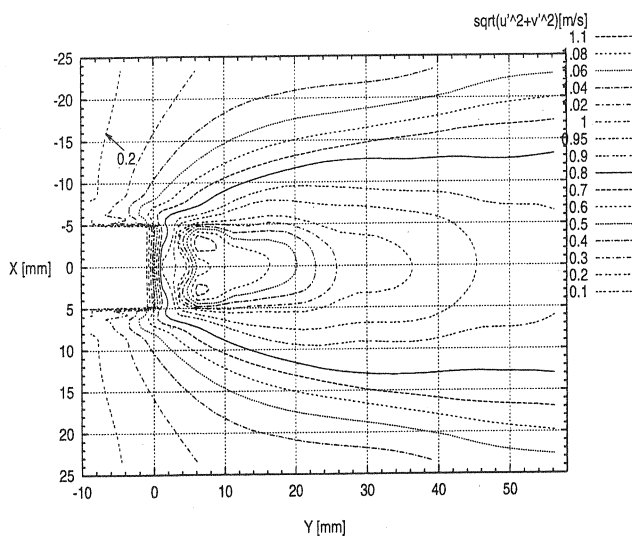
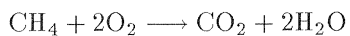


図 13: 乱流エネルギーの平方根の等高線図、非燃焼計算



反応速度はアレニウスの式で表した。

時間平均流速、主流方向流速時間平均値、乱流エネルギーの平方根、主流方向に垂直な断面の温度分布の計算結果をそれぞれ図 14、図 15、図 16、図 17 に示す。

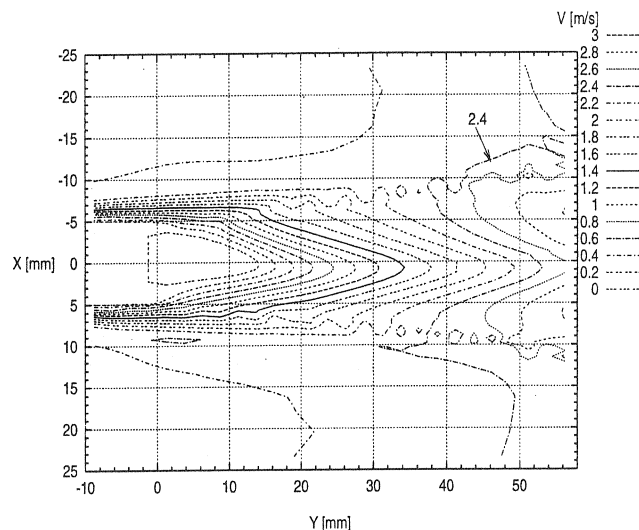


図 15: 主流方向流速時間平均値の等高線図、燃焼計算

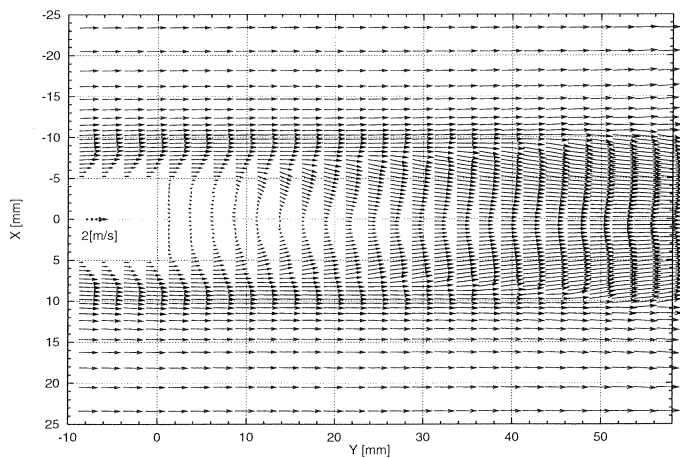


図 14: 時間平均流速、燃焼計算

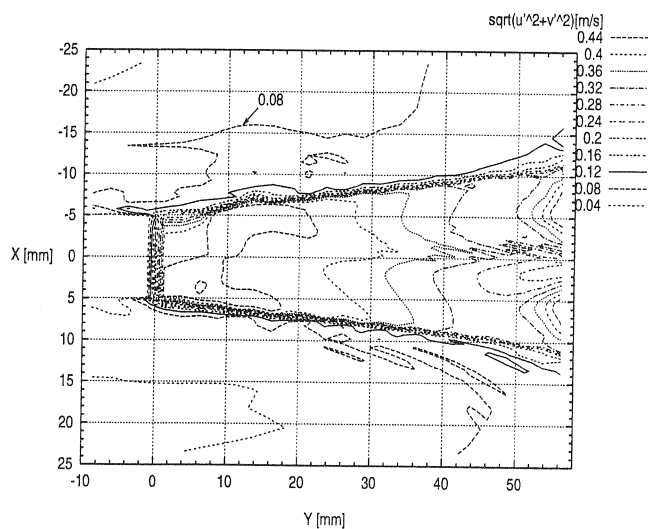


図 16: 乱流エネルギーの平方根の等高線図、燃焼計算

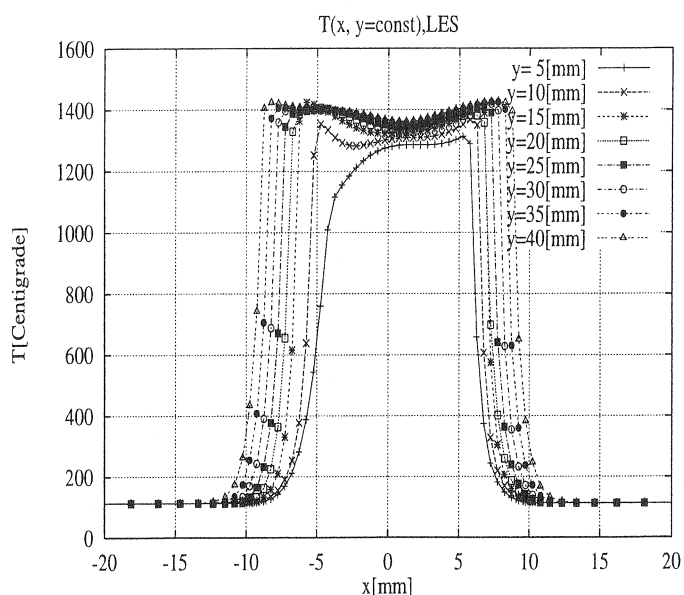


図 17: 主流方向に垂直な断面の温度分布、燃焼計算

既燃領域の温度は、LES 計算では $1400 \sim 1500[^\circ\text{C}]$ であり、実験値 $1300 \sim 1400[^\circ\text{C}]$ より $100[^\circ\text{C}]$ 程高い。これは実験では輻射による熱の損失があるためと考えられる。

流速分布、既燃領域の x 方向拡がり幅、燃焼温度の分布などについて LES 計算は、代数乱流モデルに比べて実験結果を定性的に正しく再現している。

5. 結論

乱流燃焼解析に適した数値計算法として、LES、並列化、ゼロ Mach 数近似、化学反応項だけ別に時間積分する方法、燃焼火炎面にメッシュを寄せる方法、BFC を用いた乱流燃焼解析ソフトウェアを開発した。バーナーの非燃焼実験、燃焼実験を行い、それに対して LES による非燃焼計算、及び燃焼計算を行った。その結果、実験による流速、乱流エネルギー、火炎面温度などを代数乱流モデルに比べて定性的に正しく再現していることが確認された。ソフトウェアは実用燃焼器の流れに対しても有効であることが検証された。

謝辞：本研究は文部科学省計算科学技術共同研究推進制度における「並列計算機による時間変動成分を考慮した乱流燃焼解析に関する研究」の一環として実施したものである。

参考文献

[1]Rehm,R.G.and Baum.H.R “The Equations of Motion for Thermally Driven Buoyant Flows”, Journal of Research of the National Bureau of Standards **83** (3),297(1978).