

■原著論文/ORIGINAL PAPER■

Flamelet モデルを適用した燃焼場の格子ガスシミュレーション Lattice Gas Simulation on Combustion with Flamelet Model

山本 和弘*¹

YAMAMOTO, Kazuhiro*¹

*¹ 豊橋技術科学大学 〒441-8580 愛知県豊橋市雲雀ヶ丘天伯町1-1
Toyohashi University of Technology, 1-1 Tempaku-cho, Hibiyaoka, Toyohashi, Aichi 441-8580, Japan
E-mail : yamamoto@mech.tut.ac.jp.

Abstract : Since computer performance has drastically increased, numerical simulation is a powerful means for simulation of fluid flow. However, combustion simulation is still challenging and it is difficult to simulate combustion field with both turbulence and detailed chemistry, because it takes much time to solve 2D or 3D governing equations such as conservation equations of mass and momentum. Recently, Lattice Gas Automata (LGA) has been proposed as an alternative approach for simulating fluids. It describes the fluid at more microscopic level by assuming that it is composed by mesoscopic particles. The space and time are all discrete, and the physical quantities take only a finite set of values. Macroscopic quantities such as density and velocity are determined by the collective behavior of particles. The scheme of this discrete model is simple and easy for parallel computing. In this work, we simulate combustion field by LGA, coupled with a Laminar Flamelet model to determine the temperature and concentration of the mixture by fast-chemistry assumption. Two particles of fuel and oxidizer are used for simulating diffusion combustion. We focus on the so-called counter flow diffusion flame. Some results including flow, temperature, and concentration fields are shown.

Key words : Lattice Gas Automata, Flamelet Model, Diffusion Combustion, Computational Fluid Dynamics

1. 緒言

一般に燃焼場を含む反応流れを数値的に解析する場合、流体の連続性を仮定した Navier-Stokes 方程式やエネルギー・成分保存式などの巨視的方程式を解く。実際の解析では、これらの式を差分方程式に変換して数値的に解くことが多いが、その際発生する打ち切り誤差や丸め誤差は、計算精度や安定性に大きく影響する。燃焼現象では、反応領域の厚さは 1 mm 以下であることが多く、急激な温度・濃度変化を伴う。特に乱流燃焼においては、流体の乱れも考慮する必要がある。より小さな格子間隔と時間ステップを用いなければならない。このため、詳細な反応を考慮した 2 次元・3 次元の計算を行うには、非常に多くの計算時間が必要となる。

実際の流れを微視的に見た場合、非常に多くの分子または原子がランダムに運動している。温度や速度といった巨視的物理量は、これら分子の挙動を統計的に平均化することで得られる。実在するすべての分子運動を解析する方法に分子動力学法 (Molecular Dynamics) がある。

物理系を構成する分子の運動を直接調べるため、系全体の支配方程式は必要ないが、現在のところ取り扱う系の大きさは非常に小さく数 10nm 程度が限界なため[1]、この方法で燃焼を含む反応流れを模擬することは現実的ではない。

近年、新しい流れの解析手法として注目された格子ガスオートマトン法 (Lattice Gas Automata, LGA) は、巨視的な支配方程式を必要とせず、分子や原子の集合に相当する仮想的な粒子を用いて流れを模擬する方法である[2-4]。密度や速度などの巨視量は、その挙動を統計的に処理することで得られる。粒子は、空間を離散化した格子点 (厳密には格子間の交差点を結ぶ边上) を単純な規則により時間発展していくが、各過程で質量と運動量が保存されるため、このモデルが連続の式と Navier-Stokes 方程式を先天的に満足していることが理論的に証明されている。この手法では、数学モデルを計算モデルに変換する必要がないため、打ち切り誤差がない。また、粒子の有無を整数型の変数である Bool 変数を用いて記述するため丸め誤差がなく、数値安定性に優

れている。加えて境界条件の記述が容易で、データの局所性も高く、並列計算に適している[5]。この手法の欠点としては、粒子の有無を Bool 変数で計算するため直接実数を扱えないことが挙げられる。また、Navier-Stokes 方程式を満足するためには粒子密度がほぼ一定であることが前提になっている [3]。これらの解決法として期待されているのが格子ボルツマン法[6]であるが、本論の対象外であるので代表的な参考文献を挙げるに留める。

これまでの研究では、LGA は主に流れの解析に用いられ、静止平板まわりのカルマン渦の発達[7]、平行平板間の流れ[8]、自然対流の解析[9]、二相流[10-13]などについて研究が行われている。しかし、反応性流れの解析例はほとんどない。通常燃焼を含む反応流れの解析には、非常に多くの計算時間が必要なことから、計算方法が単純な LGA の手法を用いてこれらの問題を検討することは有意義であると思われる。特に、噴霧燃焼など混相流れを対象とする場合は、それぞれの相に対して支配方程式をたてる必要のない本手法の方が、従来の数値解析法よりも向いている可能性がある。ただし、反応流れを含む多成分系の流れを扱う場合、多数の種類の粒子を考慮すると衝突過程の計算が非常に複雑になる。我々はこれまでの研究において、2種類の粒子を用いた格子ガスオートマトン法により燃焼場を模擬する方法を提案した[14-16]。しかし、反応物粒子が生成物粒子に変化する量を確率により表現しており、その物理的解釈が難しい。そこで本研究では、格子ガスオートマトン法に Laminar Flamelet モデル[17]を適用することを試みた。燃料と酸化剤に相当する2種類の粒子を用い、それぞれの粒子分布から混合分率を求め、温度や濃度などはあらかじめ求めておいた混合分率と各スカラー量の対応関係をもとに決定した。解析対象は、代表的な拡散火炎である対向流拡散火炎とした。

2. 計算方法

2.1 格子ガスオートマトン (LGA)

今回は静止粒子を考慮しない FHP I のモデルを採用した[2,3]。文献 15 で詳しく説明しているが、FHP はこのモデルの3人の開発者である Frisch, Hasslacher, Pomeau の頭文字である。FHP モデルには、用いる粒子と衝突のパターンにより FHP I から FHP IV まで4つのモデルが存在し、その違いは粘性などの物性値に反映される。空間は6角形格子で離散化される(図1)。粒子は単位質量を持ち、単位速度(方向は $i = 1, 2, \dots, 6$)で移動する(速度と質量の大きさはそれぞれ1)。粒子を格納する単位をセルと呼び、各格子点(辺の交差点)には速度の方向に対応して6個のセルが存在することになる。

粒子は一つのセルに一つしか入ることができない排他則に従う。粒子の存在の有無は0と1の Bool 変数で表される。格子点上の6つの各速度ベクトルは、

$$c_i = \left(\cos \frac{(i-1)\pi}{3}, \sin \frac{(i-1)\pi}{3} \right) \quad (i = 1, \dots, 6) \quad (1)$$

と定義される。時刻 $t (0, 1, 2, \dots)$ における格子点 \mathbf{r} の状態 $n(t, \mathbf{r})$ は、それぞれ6つの速度 \mathbf{c}_i の粒子が存在するか否かによって決定される。したがって $n(t, \mathbf{r})$ は1または0の値をとる6個の Bool 変数 $n_i(t, \mathbf{r})$ の集合として

$$n(t, \mathbf{r}) = \{n_i(t, \mathbf{r}) \mid n_i \in \{0, 1\}\} \quad (i = 1, \dots, 6) \quad (2)$$

と記述される。例えば、ある点で1方向と4方向の粒子が存在した場合、 $n(t, \mathbf{r}) = (1, 0, 0, 1, 0, 0)$ のように表される。流れの状態は(2)を要素とする集合で定義され、

$$n(t) = \{n_i(t, \mathbf{r}) \mid \forall \mathbf{r}\} \quad (3)$$

と記述される。

粒子の動きを簡単に説明すると、1 time step で、隣接格子から移動してきた粒子が格子点(各辺の交差点)上で他の粒子と衝突し(衝突過程)、進行方向を変化させて隣接する格子に移動する(並進過程)。衝突過程について説明するため、表1に FHP I モデルにおいて考慮する衝突則を示す。ここで、 n は格子点に存在する粒子数、 j_x は粒子の x 方向運動量の合計、 j_y は y 方向運動量の合計である。4列目に衝突の状態を示すが、衝突後はこのカラムに属する他の衝突の状態へ等確率で遷移する。最後の folds は、衝突の回転対称性から得られる同じグループに属する状態の数を示す。ただし、表には j_x と j_y がともに正の場合だけを示している。FHP I では4体衝突まで考慮する。このように衝突過程では、質量と運動量が保存されるいくつかの状態の中から一つが等しい確率で選択されることから、このモデルが統計的な性質を含む複雑系の研究に適しているとされている[2-5]。密度や速度などの巨視量は、粗視化領域と呼ばれるいくつかの格子で構成された空間(Sub-domain)において、粒子の分布を平均化することで決定される。ただし、図1でも示したように、各粗視化領域は互いに交わり部を持たない。

以下で密度や速度などの巨視量を求める方法を説明す

る。時刻 t ，場所 \mathbf{r} において粒子の分布が決定され，各粗視化領域内のセル i の粒子数の平均値を

$$N_i(t, \mathbf{r}) = \langle n_i(t, \mathbf{r}) \rangle \quad (4)$$

と定義する。具体的には， N_i は粗視化領域内に存在する i 方向の全粒子数をその領域内の交差点の数で割ることにより得られる。各辺の長さは 1 であるので， N_i は密度の単位を， c_i は速度の単位を持つことになる。したがって，平均粒子密度 ρ および平均運動量 $\rho \mathbf{u}$ はそれぞれ，

$$\rho = \sum_i N_i(t, \mathbf{r}) \quad (5)$$

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i c_i N_i(t, \mathbf{r}) \quad (6)$$

と表される。(5)，(6)より流体の平均速度は，

$$\mathbf{u}(t, \mathbf{r}) = \frac{\sum_i c_i N_i(t, \mathbf{r})}{\sum_i N_i(t, \mathbf{r})} = \frac{\sum_i c_i N_i(t, \mathbf{r})}{\rho} \quad (7)$$

となる。今回の FHP I のモデルにおいて，音速 c_s ，動粘性係数 ν およびレイノルズ数 Re は以下の式で与えられる。ここで， U は代表速度， D は代表長さ（セルの単位長さが 1 であるので代表的な格子数に等しい）である。動粘性係数を求める際に必要な一方向あたりの粒子平均密度 d は， $d = \rho/6$ で与えられる。

$$\begin{aligned} c_s &= 1/\sqrt{2}, \\ \nu &= \frac{1}{12d(1-d)^3} - \frac{1}{8} \\ \text{Re} &= \frac{UD}{\nu} \end{aligned} \quad (8)-(10)$$

今回の拡散火炎の計算では，燃料と酸化剤の 2 種類の粒子を用いている。したがって，全体の速度と密度を求める際は，合計の粒子数を用いて計算する。粒子間の衝突については，粒子数と運動量が保存されるすべての衝突則を考慮した。これにより，2 種類の粒子がお互いの

相に進入する拡散が表現される。

2.2 Flamelet モデルと混合分率

次に温度場と濃度場を決定する方法について説明する。今回は，流れと比較して反応が十分に速く，局所の状態が平衡にあると仮定する Laminar Flamelet モデルを適用する。この場合，温度や濃度などの各スカラー量は，燃料と酸化剤がどの程度混合しているかにより決定される。窒素や元素数など反応に依存しないスカラー量（これらを完全保存スカラー量と呼ぶ）に着目すると，この完全保存スカラー量により燃料と酸化剤の混合の度合いが特定でき，その結果，局所の温度や濃度などの値が決定される。すべてのスカラー量に対する保存式を解く必要がないため，計算負荷を著しく低減することができるので，この手法は乱流火炎の計算において有効であると考えられている[17].

今回は窒素の質量分率をもとに混合分率を求めた（式(11)）。ここで， $Y_{N_2, f}$ と $Y_{N_2, o}$ はそれぞれ燃料と酸化剤の窒素の質量分率である。また，混合分率に対する温度と濃度の対応関係を図 2 に示す。この図は，局所の燃料と酸化剤の組成から反応後の組成を計算したものであり，これにより粒子の特性が未燃ガスから既燃ガスへと変化する過程が考慮される。計算には，反応前の燃料の組成がメタンと窒素の体積比で 1:4，酸化剤は酸素と窒素が 2:3 の混合気とした。

$$f = \frac{Y_{N_2} - Y_{N_2, o}}{Y_{N_2, f} - Y_{N_2, o}} \quad (11)$$

2.3 解析対象と境界条件

本解析では，対向流中に形成される拡散火炎（対向流拡散火炎）を対象とした。図 3 に計算領域と座標系を示す。上下の多孔質壁から燃料と酸化剤の粒子が吹き出され，反応後二酸化炭素と水蒸気の組成を持つ高温の生成物粒子が軸方向に排出される。計算では，上壁から $i=5, 6$ 方向の速度を持つ燃料粒子を，下壁から $i=2, 3$ 方向の速度を持つ酸化剤粒子を，設定した流速となるよう適当な間隔で均一に流入させた。今回の流入速度 U_0 は 0.09 とした。また，壁面以外の領域内には初期に全ての速度成分の粒子をランダムに配置した。格子数は， x 方向に 801， y 方向に 321 であり， 16×8 の格子点を用いて粗視化を行った。これにより粗視化領域の数は x 方向に 50， y 方向に 40 である。壁面間距離を特性長さとした場合，レイノルズ数は約 40 となる。

座標系はいわゆるよどみ点を原点とし、 x 方向に流れが加速する。計算領域は $x > 0$ の部分とした。また境界条件であるが、 $y = -L$ および L (壁面間距離の半分) の壁面は粘性壁として Bounce-back 則を適用した。これは、粒子が壁に到達すると、その方向が 180 度反転する境界条件である。これにより、衝突の前後で壁に対する法線方向成分と接線方向成分の合成ベクトルがともに 0 になり、粘性壁を表現することになる。また $x = 0$ のよどみ面は滑り壁とし、入射粒子の境界に対する速度の法線方向速度成分が反転し、接線方向成分が保存される Reflection 則を適用した。流出部は自由流出境界とした。

3. 計算結果および考察

3.1 流速分布

まず流れ場について検討した。系がほぼ定常になるまで計算を行ったところ、計算回数が 10000 回でほぼ定常になることがわかった。ただし、格子ガスオートマトン法では、粒子の振る舞いが確率により与えられるため、系内に統計ノイズが存在する[2-4]。図 4 に $t=10000$ における瞬時の速度ベクトルと $t=10000$ から 11000 まで 1000 回平均した速度ベクトルを示す。図 4(a) の瞬間の速度分布には速度変動が存在するものの、 $y=0$ 付近によどみ面が存在し、系内には対向する流れ場が生じていることがわかる。平均後は図 4(b) のように分布がなめらかになり、対向する流れ場がはっきり観察される。また図 4(c) に燃料と酸化剤の合計の粒子数から求められる平均密度分布を示す。密度の等高線は 0.1 ごとに示しているが、中心のよどみ領域で密度が高く、出口に向かうほど密度が低下した。したがって、出口付近の特に壁面付近では自由流出条件により密度が低下するの、領域全体で密度はほぼ一定であることがわかった。以後 1000 回の時間平均値をもとに検討を行う。

次に、今回のモデルで得られた対向流れの速度分布の妥当性を調べるため、非圧縮性の N-S 方程式を差分法により求め比較した。無次元化した質量と運動量の保存式を以下に示す。

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (12)$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) \quad (13)$$

$$u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) \quad (14)$$

ここで、 u, v, p はそれぞれ無次元化した x 方向速度、 y 方向速度、圧力であり、 Re はレイノルズ数である。計算は Re を等しくして行い、LGA により得られた速度分布と比較した。その結果を図 5 に示す。比較はよどみ点付近、出口、そしてその間に対応する、 $x/L = 0.2, 2, 4$ の 3 箇所で行った。今回の計算では、燃料と酸化剤の流入速度は同じにしており、また各粒子の質量は等しいので、速度分布はよどみ面を挟んで上下対称となる。したがって、ここでは y が正の領域のみをプロットした。図において、 x 方向と y 方向の速度 v_x, v_y はいずれも壁での流速 U_0 で無次元化している。これによると、LGA の速度分布は N-S 方程式を解くことにより得られる分布にほぼ一致した。ただし、 $x/L = 4$ において、壁面 ($y/L = 1$) 付近の流速が大きくなっていることがわかる。

今回は出口で自由流出境界を採用しており、出口から系の外にいったん出た粒子は戻ることではない。通常、出口では十分発達した流れを仮定して、出口での各スカラー量の x 方向(流れ方向)の勾配をゼロとする境界条件を用いる。本計算でも N-S 方程式を解いた場合の境界条件は、 v_x の流れ方向の勾配をゼロとしている。ただし格子ガス法では、この境界条件を直接当てはめることは困難である。例えば他の論文では、平行平板間流れにおいて流入・流出部で周期境界を仮定し、出口から流出した粒子を入口から補充するような方法を用いている[9,11]。ただし、今回のような対向流れでは入口と出口が完全に異なるため、周期境界条件を用いることはできない。したがって、単純に粒子が出口で流出する条件としたが、これにより図 4(c) において壁付近の密度が低下し、式(7)で得られる流れ方向速度が出口付近で大きくなったものと思われる。

3.2 温度分布と濃度分布

温度や濃度などの各スカラー量を決定するには、燃料と酸化剤の粒子分布から窒素の質量分率を求め、式 11 により混合分率を求める必要がある。図 6 に今回得られた窒素の質量分率を示す。下壁から吹き出される酸化剤の窒素質量分率は 0.568、上壁から吹き出される燃料の窒素質量分率は 0.875 であり、等高線は質量分率が 0.6, 0.7, 0.8 となる位置を示している。燃料に含まれる窒素は酸化剤よりも多く、中央のよどみ領域付近で窒素濃度が大きく変化していることがわかる。したがって、この領域では両粒子が混在しており、燃料と酸化剤の混合層が形成されていることがわかる。この窒素の質量分率をもとに混合分率を計算し、各スカラー量を図 2 より求めた。 $x/L = 2$ において得られた結果を図 7 に示す。

これによると、両壁付近は温度が低く、中央に高温の領域が存在する。図 4(b) のベクトル分布と比較すること

により、上下の壁から吹き出された燃料と酸化剤の各粒子は、反応により二酸化炭素や水蒸気からなる粒子となり、その後軸方向に排出されていることがわかる。したがって、いわゆる対向流拡散火炎の構造が模擬されていることがわかった。

4. 結言

本研究では、格子ガスオートマトン法に Flamelet モデルを適用し、燃焼場の数値計算を行った。燃料と酸化剤の2種類の粒子を用い、各粒子の分布から混合分率を求め、混合分率と各スカラー量の関係から、温度や濃度などを決定した。対象は対向流拡散火炎とした。その結果、流れ場はN-S方程式を解くことにより得られる解析解にほぼ一致し、対向流れが模擬できた。また、2種類の粒子の混合の程度から温度場と濃度場を決定でき、火炎構造を求めることができた。今後、境界条件の検討や別の流れ場に形成される火炎を対象に研究を行う予定であり、格子ガスオートマトン法が燃焼場の新しい解析手法となることが期待される。

文献

1. Numerical Simulation by Molecular Dynamics in Japanese, Ed. by Japanese Section of Mechanical Engineering, Corona Co., 1996.
2. Frisch, U., Hasslacher, B., and Pomeau, Y., *Phys. Rev. Lett.*, **56**, 1505-1508 (1986).
3. Frisch, U., D'humières, D., Hasslacher, B., Lallemand, P., Pomeau Y., and Rivent, J. P., *Complex Systems*, **1**, 649-707 (1987).
4. Doolen, G. D., *Lattice Gas Methods for Partial Differential Equations*, Addison Wesley (1987).
5. Watanabe, S. and Takahashi, R., *Trans. Japan Society for Mechanical Engineers*, B63, 1605-1611 (1997) (in Japanese).
6. Chen, S., and Doolen, G. D., *Annual Reviews of Fluid Mech.*, **30**:329-364 (1998).
7. d'Humières, D., and Lallemand, P., *Complex Systems*, **1**, 599-632 (1987).
8. Yoshizawa K. and Takahashi, R., *Trans. Japan Society for Mechanical Engineers*, B57, 2663-2670 (1991) (in Japanese).
9. Kobayashi, M. and Takahashi, R., *Trans. Japan Society for Mechanical Engineers*, B57, 2671-2677 (1991) (in Japanese).
10. Rothmann, H., and Keller, J. M., *J. Stat. Phys.*, **52**, 1119-1127 (1989).
11. Matsukuma, Y. and Takahashi, R., *Trans. Japan Society for Mechanical Engineers*, B61, 3145-3152 (1995) (in Japanese).
12. Watanabe, S. and Takahashi, R., *Trans. Japan Society for Mechanical Engineers*, B63, 194-200 (1997) (in Japanese).
13. Matsukuma, Y., Takahashi, R., Abe, Y., and Adachi, K., *Trans. Japan Society for Mechanical Engineers*, B64, 1617-1622 (1998) (in Japanese).
14. Yamamoto, K., Onuma, Y., *Trans. Japan Society for Mechanical Engineers*, B67, 2871-2876 (2001) (in Japanese).
15. Yamamoto, K., *Combustion Science and Tech. in Japanese* Vol. 8, 73-85 (2000).
16. Yamamoto, K., Matsunaga, Y., and Onuma Y., *Combustion Science and Tech. in Japanese* Vol. 8, 87-95 (2000).
17. Peters, N., *Prog. Energy Comb. Sci.*, **10**:319-339 (1984).