

## 格子ガスオートマトン法による燃焼場の数値計算\*

山本和弘<sup>\*1</sup>, 小沼義昭<sup>\*1</sup>

## Simulation of Combustion Field by Lattice Gas Automata

Kazuhiro YAMAMOTO<sup>\*2</sup> and Yoshiaki ONUMA<sup>\*2</sup> Department of Mechanical Engineering, Toyohashi University of Technology,  
1-1 Tempaku cho, Toyohashi shi, Aichi, 441 8580 Japan

Lattice Gas Automata (LGA) is an alternative approach for simulating fluids. The scheme of this discrete model is simple and easy for parallel computing. In this work, we simulate combustion field by this LGA model. Two particles of reactant and product are used, which have properties of the unburned and burned gases. The model includes convection, diffusion, and reaction. The degree of reaction is expressed with reaction probability depending on the local temperature. We focus on the counter flow premixed flames. The flow, temperature, and concentration fields are determined by collective behavior of particles. It is concluded that combustion field can be simulated by this two component LGA model.

**Key Words**: Combustion, Premixed Combustion, Computational Fluid Dynamics, Chemical Reaction, Lattice Gas Automata

## 1. 緒 論

燃焼現象を数値的に解析する場合, いわゆる数値流体力学(Computational Fluid Dynamics)と同様, 流体の連続性を仮定した Navier-Stokes 方程式やエネルギー・成分の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, 計算の精度や安定性に大きく影響する. 乱流燃焼では流れや反応の微小なスケールが重要であり, その場合には計算の格子間隔を小さくとる必要がある.

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. 一般に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運動方程式を用いて決定論的に追跡する方法に, 分子動力学法(Molecular Dynamics)がある. この場合, 物理系を構成する分子の運動を直接調べるため, 現在取扱うことができる系の大きさは非常に小

さく数十 nm 程度が限界なため<sup>(1)</sup>, この方法で燃焼を含む反応流れを直接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<sup>(2)~(4)</sup>. 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, 離散化された格子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た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, その際生じる打ち切り誤差がない. また, 粒子の有無を整数形の変数である 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. また, 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<sup>(5)</sup>.

これまでの研究では, LGA はおも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<sup>(6)</sup>, 平行平板の流れ<sup>(7)</sup>, 自然対流の解析<sup>(8)</sup>, 二相流<sup>(9)~(12)</sup>などについて研究が行われているが, 反応性流体の解析例はほとんどない. LGA 法は計算方法が非常に単純で

\* 原稿受付 2000年12月13日.

<sup>\*1</sup> 正員, 豊橋技術科学大学機械システム工学系(☎441 8580 豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1).

E-mail: yamamoto@mech.tut.ac.jp

あり、混相流をそれぞれの相を別々に解くことなく直接模擬できることから、乱流燃焼や気液相が混在する噴霧燃焼を模擬する場合には、従来の支配方程式を解く計算方法より本手法が向いている可能性がある。ただし、燃焼を模擬するには、まず反応を計算に組み込む必要がある。これまでに著者らは、反応物と生成物の2種類の粒子を考慮した2成分LGA法<sup>(13)(14)</sup>を提案した。本研究では、粒子に温度と濃度の特性を与えることで温度場および濃度場を決定し、燃焼場の計算を試みた。解析対象は、代表的な火災である層流の対向流予混合火炎とした。

2. 計算モデル

図1にLGAモデルの概略を示す。本研究のモデルは、1986年にFrisch, Hasslacher, Pomeauらによって提案された非圧縮性の流体解析モデルであるFHPモデルである<sup>(2)</sup>。空間は六角形格子で離散化される。今回は静止粒子を考慮しないFHP Iモデルを採用した。粒子は単位質量をもち、単位速度(方向は*i*=1, 2, ..., 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、各格子には速度の方向に対応して6個のセルが存在する。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。格子点上の六つの速度ベクトルは、

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

と定義され、時刻  $t(0, 1, 2, \dots)$  における格子点  $\mathbf{r}$  の状態  $n(t, \mathbf{r})$  は、それぞれ六つの速度  $c_i$  の粒子が存在するか否かによって決定される。一般に粒子の存在の有無は、零または1のBool変数で表される。以下で、燃焼場において重要となる対流・拡散・反応の記述と

境界条件について説明する。

**2・1 対流** まず、流れを記述する粒子の並進過程と衝突過程について説明する。1 time step で、隣接格子から移動してきた粒子が格子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)。密度や速度などの巨視量は、疎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、その中に存在する粒子の分布をもとに決定される。具体的に説明すると、時刻  $t$ 、場所  $\mathbf{r}$  において粒子の分布が決定され、領域内のセル  $i$  の粒子数の平均値を

$$N_i(t, \mathbf{r}) = \langle n_i(t, \mathbf{r}) \rangle \quad \dots\dots\dots (2)$$

と定義すると、平均粒子密度  $\rho$  および平均運動量  $\rho u$  は、それぞれ、

$$\rho = \sum_i N_i(t, \mathbf{r}) \quad \dots\dots\dots (3)$$

$$\rho u = \sum_i c_i N_i(t, \mathbf{r}) \quad \dots\dots\dots (4)$$

と表される。 $N_i$  は密度の単位を、 $c_i$  は速度の単位をもつ。式(3)、(4)より、流体の平均速度は、

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

となる。今回のFHPIのモデルにおいて、音速  $c_s$ 、動粘性係数  $\nu$  およびレイノルズ数  $Re$  は次式で与えられる。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。

$$c_s = 1/\sqrt{2}, \quad \dots\dots\dots (6)$$

$$\nu = \frac{1}{12d(1-d)^3} - \frac{1}{8} \quad \dots\dots\dots (7)$$

$$Re = \frac{UD}{\nu} \quad \dots\dots\dots (8)$$

**2・2 拡散** LGA法で反応流れを扱うためには、2成分以上の粒子と反応モデルが必要である。反応は考慮されていないものの上記のFHPモデルを拡張し、2成分流れを扱うようにしたものにILGモデルがある<sup>(9)</sup>。このモデルでは、2種類の粒子(例えば赤粒子と青粒子)を用いることで、それぞれの相を区別する。衝突過程の後、青(赤)粒子は隣接する六つの格子のうちでもっとも多く青(赤)粒子を含んでいる格子へ移動する。これにより2成分間には表面張力に相当する力が働き、例えば水と油などの成分がそれぞれ凝集する動きが模擬できる。今回想定する燃焼場は、表面張力が働く相の分離を対象としたものとは異なり、それぞれの粒子がお互いの相に進入(拡散)するため、ILGモデルのような相の分離を模擬する衝突則を採用することはできない。

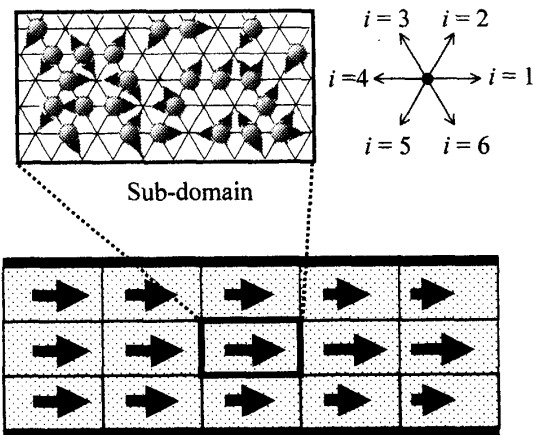


Fig. 1 LGA model and FHP lattice

すでに著者らは、反応物 R と生成物 P の 2 種類の粒子を用いた LGA モデルで反応流れの計算を試みた<sup>(13)(14)</sup>。反応物と生成物のそれぞれの粒子の状態は、6 方向の速度をもつ粒子が存在するかどうかを記述する 6 個の Bool 変数で表す。

$$n_{Ri}(t, \mathbf{r}) = \{0, 1\}, \quad n_{P,i}(t, \mathbf{r}) = \{0, 1\} \dots\dots\dots (9)$$

例えば、ある時刻ある格子上に 1 方向と 4 方向に反応物 R の粒子が存在した場合、 $n_R(t, \mathbf{r}) = \{1, 0, 0, 1, 0, 0\}$  のように表される。前回のモデルでは、衝突則を簡略化するため、2 粒子間に正・逆反応を考慮し、並進過程後、格子線上に存在する反応物と生成物の粒子をすべてどちらかの粒子に置き換えていた。その結果、反応流れを模擬できたものの、このモデルをすぐに燃焼場に拡張することはできない。なぜなら、燃焼場においては、反応により安定な化学種が生成されるという不可逆反応が主であり、また、粒子間の相互拡散を以前のモデルは含んでいないからである。そこで今回は、反応物が生成物になる反応のみを考慮した。また、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、反応物と生成物がお互いの相に進入して混じり合う拡散が表現される。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した。

**2.3 反応** 実際の燃焼場では、反応量がアレニウス式で記述されるように、一般に温度が高いほど反応速度は大きい。そこで、R、P 各粒子に温度の特性を与え、R が P に変化する反応を、以下のような局所の温度に依存する反応確率により表現した。

$$\left. \begin{array}{ll} T_R < T < 1300 \text{ K} & p=0 \\ 1300 \text{ K} < T < 1800 \text{ K} & p=p(\text{可変}) \\ 1800 \text{ K} < T < T_P & p=1 \end{array} \right\} \dots\dots\dots (10)$$

このように 3 段階ではあるが、温度が高いほど反応確率を高くしている。これにより、局所の温度に基づき反応物が生成物となる反応が起こる。同様に濃度の特性を与えることで濃度場の計算も可能となる。今回、反応物 R は温度 300 K ( $T_R$ )、当量比 0.85 のメタン・空気の希薄混合気とし、生成物 P は断熱火炎温度 2100 K ( $T_P$ )、一段反応を考えた場合の残存酸素、二酸化炭素、水蒸気からなる組成とした(図 2)。これにより疎視化領域において、温度や濃度などの局所の特性値は、各粒子の分布をもとに以下のように計算される(一例として温度)。

$$\begin{aligned} T &= \frac{\sum T_R N_R + \sum T_P N_P}{\sum N_R + \sum N_P} \\ &= T_R \frac{\sum N_R}{\sum N_R + \sum N_P} + T_P \frac{\sum N_P}{\sum N_R + \sum N_P} \\ &= T_R X_R + T_P X_P \dots\dots\dots (11) \end{aligned}$$

ここで  $\sum$  は疎視化領域での積算を表し、 $X_R, X_P$  は領域内の各粒子の平均割合である。

**2.4 解析対象および境界条件** 本解析では、対向流中に形成される予混合火炎を対象とした。図 3 に計算領域と座標系を示す。上下の多孔質壁から吹出された反応物は、高温領域で生成物となり、軸方向に排出される。実際の計算では、上壁から  $i=5, 6$  方向の速度をもつ反応物粒子を、下壁から  $i=2, 3$  方向の速度をもつ反応物粒子を均一に流入させ、対向する流れ場を与えた。このときの流入速度は 0.09 とした。格子数は、 $x$  方向に 801、 $y$  方向に 321 であり、 $16 \times 8$  の格子点を用いて疎視化を行った。これにより疎視化領域の数は  $x$  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  $L$  ( $L$  は壁面間距離の半分)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  $180^\circ$  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零になり、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。ま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 流れ場と統計ノイズ** まず、系がほぼ定常になるまでの程度計算する必要があるかを確かめた結果、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、この離散モデルにおいては、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

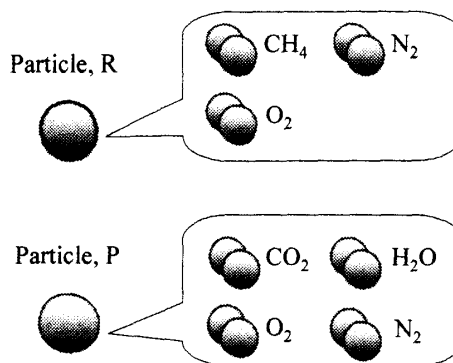


Fig. 2 Two particles of reactant and product

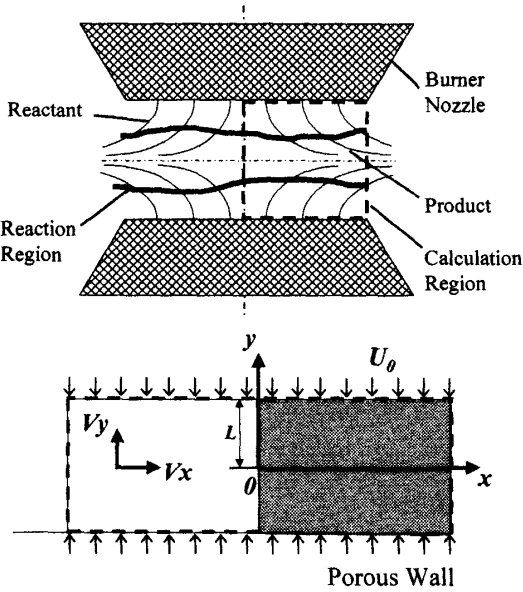


Fig. 3 Counter flow and coordinate

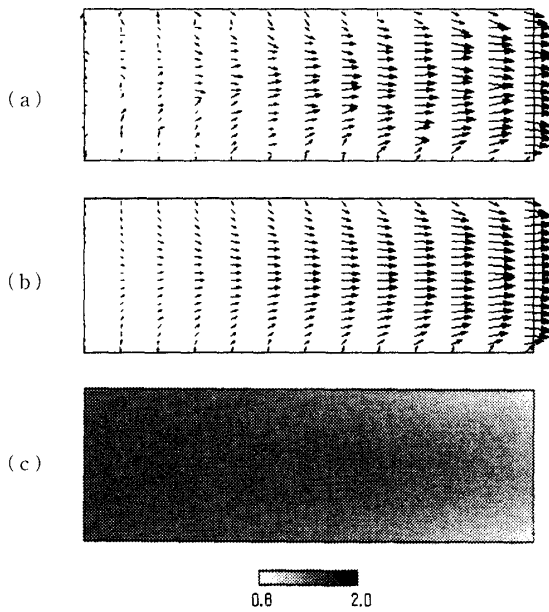


Fig. 4 Distributions of (a) Instantaneous velocity vector, (b) averaged velocity vector, (c) averaged density

イズが存在する。図4(a)に  $t=10\,000$  における瞬時の速度ベクトルを、図4(b)に  $t=10\,000$  から  $11\,000$  まで  $1\,000$  回平均した速度ベクトルを示す。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形成されていることがわかる。時間平均後は速度分布がなめらかになり、対向する流れ場ははっきりとわかる。また、図4(c)に平均密度分布を示すが、これによると出口付近は自由流出条件によりやや低下するものの、

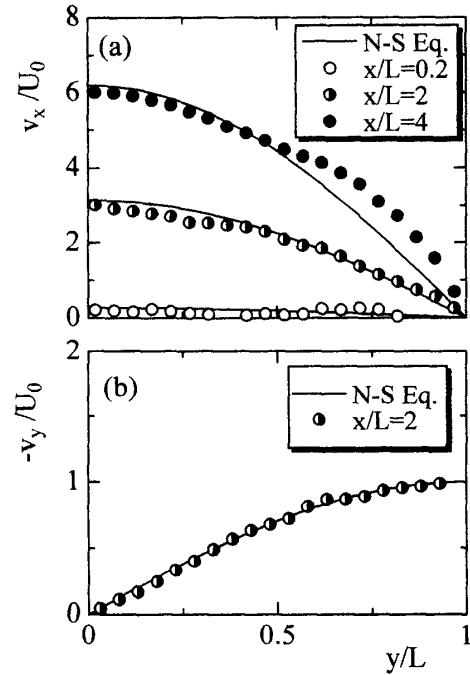


Fig. 5 Distribution of non-dimensional velocities in  $x$ ,  $y$  direction,  $p=0.05$

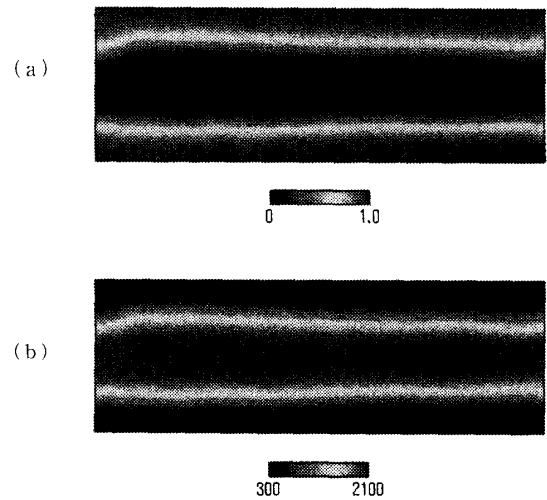


Fig. 6 Distributions of (a) mass fraction of reactant, and (b) temperature;  $p=0.05$

全体では密度がほぼ一定であることがわかった。以後  $t=10\,000$  から  $11\,000$  の時間平均分布をもとに結果の検討を行う。

次に、今回のモデルで得られた対向流れ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解き比較した。速度分布を定量的に比較した結果を図5に示す。このときの LGA モデルの反応確率  $p$  は  $0.05$  である。比較はよどみ点付近、出口付近、それらの中間に対応する、 $x/L=0.2, 2, 4$  の3箇所で行った。図5では、 $x$  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。ただし出口付近では、壁面 ( $y/L=1$ ) 近くの流速がやや大きくなることがわかった。今回は出口で自由流出境界を採用しているため、出口から系の外にいったん出た粒子は戻ることなく、このため壁付近の粒子密度が低下する [図 4(c)]。その結果、 $x$  方向速度を減少させる  $i=3, 4, 5$  の速度成分をもつ粒子が少なくなり、速度がやや大きくなったものと思われる。

**3・2 温度場と濃度場** 次に火炎構造について検討した。図 6 に反応物 R の割合分布と温度分布を示す。このときの反応確率  $p$  は 0.05 である。これによると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、上下の壁から吹出された反応物粒子は、高温領域に入ると生成物粒子となり、その後軸方向に排出されていることがわかる。火炎は  $y=0$  の境界に対して完全には対称となっていない。これはおそらく  $x$  が正の領域しか計算しておらず、 $x=0$  における単純な Reflection 則の影響があると思われる。今後、反応モデルも含めて検討が必要である。図 7 に  $x/L=0.2$  において得られた  $y$  方向の温度分布と各化学種の濃度分布を示す。壁面 ( $y/L=1$ ) よりメタンや酸素を含む反応物粒子が流入し、反応により生成物粒子へと変化

するにつれて温度は上昇する。その後、二酸化炭素や水蒸気からなる既燃ガスへと組成が変化する構造が観察された。したがって、いわゆる対向流火炎の構造が模擬されていることがわかった。

**3・3 反応確率と火炎特性** 次に、反応確率を変化させて反応領域(火炎面)の挙動を調べた。反応確率  $p=0.10, 0.05, 0.02$  のときの温度分布を図 8 に示す。反応確率がある値以上では、火炎がある位置に定在するが、反応確率を小さくすると火炎はよどみ面に近づき高温領域は減少する。さらに  $p$  を減少させ 0.02 より小さくすると消炎した。

これらの変化を定量的に調べるため、全計算領域に占める生成物 P の割合を  $F_p$  とし、反応確率を変化させてその値を求めた。その結果を図 9 に示す。これによると、反応確率を 0.4 から減少させると、 $F_p$  はゆるやかに減少し、反応確率が 0.1 以下となると急激に減少した。また反応確率が 0.02 より小さい場合は、初期に高温の生成物領域を与えても反応が次第に減少し、火炎は消炎することがわかった。

ここで、反応確率を変化させた場合の反応領域(火炎面)と粒子の輸送量について考察する。反応物が生成物となる反応領域では、反応確率を減少させると反応により消費される反応物の量が減少するので、対流により流入する反応物のほうが反応により消費される量よりも多くなる。その結果、反応領域はよどみ面に向かって押し流されることになる。対向流のよどみ流

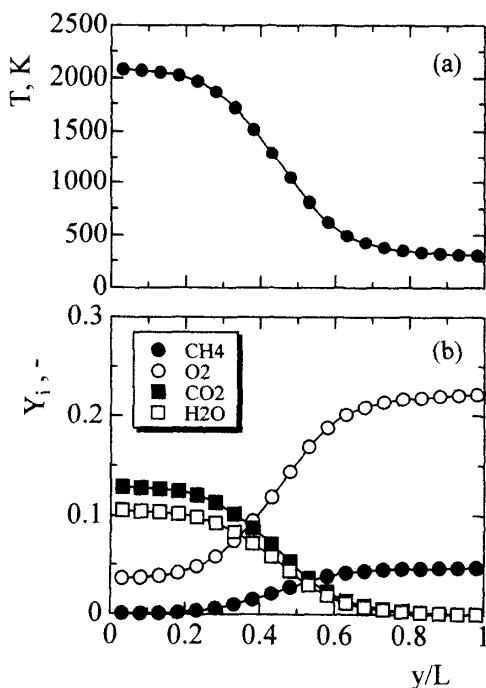


Fig. 7 Distributions of (a) temperature and (b) mass fraction of species,  $i$ ;  $p=0.05$ ,  $x/L=0.2$

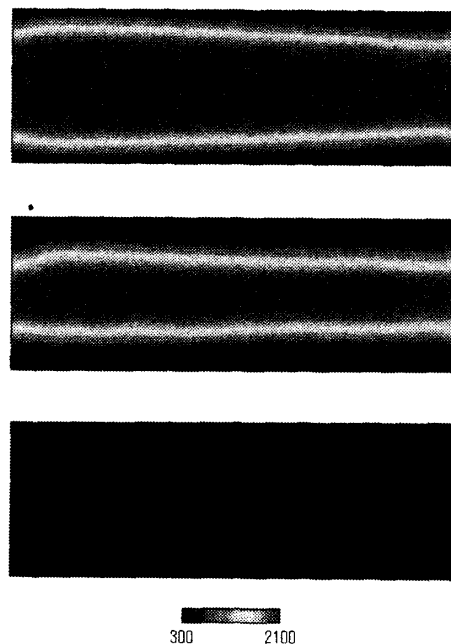


Fig. 8 Temperature distribution, (a)  $p=0.10$ , (b)  $p=0.05$ , and (c)  $p=0.02$

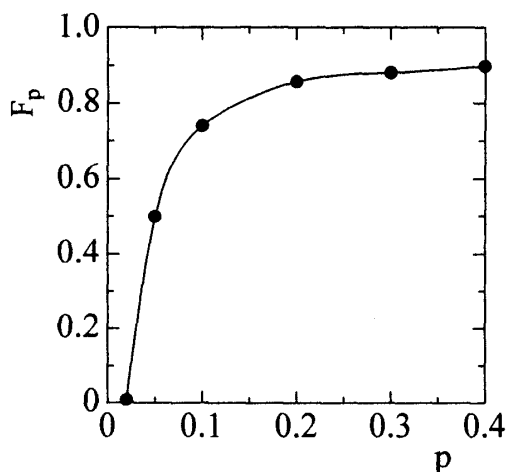


Fig.9 Variations of total fraction of product with reaction probability

れにおいては、よどみ面に近づくに従い中心に向かう  $y$  方向速度は減少する [図 5(b)]。したがって、流入する反応物の量が減少して流入量と反応量がバランスする位置まで反応領域(火炎面)は移動し、ある位置で定在することになったものと思われる。

今回の計算では、反応物と生成物の 2 種類の粒子を考慮し、各粒子の温度と組成を仮定することで、温度場と濃度場を決定した。また、反応確率を用いて混合気の変えることができた。ただし実際は火炎中にラジカルが存在することや、通常反応は温度と濃度の両方に依存することを考えると、消炎も含めた火炎の挙動を完全に模擬できていない。加えて、温度や濃度の特性を粒子に与えているため、それぞれの拡散を区別することはできず、温度と濃度の拡散速度が等しいとするルイス数(熱拡散率と不足成分の拡散係数の比)が 1 の計算をしていることになる。乱流輸送が支配的である乱流燃焼においては、このモデルでも燃焼場が模擬できるものと思われるが、今後

検討が必要である。

#### 4. ま と め

本研究では、燃焼場を模擬する 2 成分 LGA モデルを提案し、対向流火炎の数値計算を行った。各粒子に温度や濃度の特性を与えることで、これまで計算できなかった温度場や濃度場を決定することができる。反応量を反応確率により表現したところ、反応確率がある程度小さい場合には、初期に高温領域を与えても火炎がよどみ領域に近づき消炎した。反応確率がある値以上では、系がほぼ定常となり、反応領域に流入する反応物の量と反応物が生成物に変化する量がバランスする位置に火炎が定在した。これらの挙動は、実際の対向流火炎のものと似ており、今回提案したモデルにより燃焼場の計算が可能であることが示唆された。

#### 文 献

- (1) 日本機械学会編, 原子・分子モデルを用いる数値シミュレーション, (1996), コロナ社.
- (2) Frisch, U., Hasslacher, B. and Pomeau, Y., *Phys. Rev. Lett.*, **56**, (1986), 1505-1508.
- (3) Frisch, U., D'huilières, D., Hasslacher, B., Lallemand, P., Pomeau Y. and Rivert, J.P., *Complex Syst.*, **1** (1987), 649-707.
- (4) Doolen, G.D., *Lattice Gas Methods for Partial Differential Equations*, (1987), Addison Wesley.
- (5) 渡辺悟・高橋亮一, 機論, **63** 609, B (1997), 1605-1611.
- (6) D'huilières, D. and allemand, *Complex Syst.*, **1** (1987), 599-632.
- (7) 吉沢克己・高橋亮一, 機論, **57** 540, B (1991), 2663-2670.
- (8) 小林正興・高橋亮一, 機論, **57**-540, B (1991), 2671-2677.
- (9) Rothmann, H. and Keller, J.M., *J. Stat. Phys.*, **52** (1989), 1119-1127.
- (10) 松隈洋介・高橋亮一, 機論, **61**-589, B (1995), 3145-3152.
- (11) 渡辺悟・高橋亮一, 機論, **63** 605, B (1997), 194-200.
- (12) 松隈洋介・高橋亮一・阿部豊・安達公道, 機論, **64**-622, B (1998), 1617-1622.
- (13) 山本和弘, 燃焼の科学と技術, 8-2 (2000), 73-85.
- (14) 山本和弘・松永陽一・小沼義昭, 燃焼の科学と技術, 8-2 (2000), 87-95.