

## 格子ボルツマン法による燃焼場の数値計算\*

山 本 和 弘\*<sup>1</sup>

## Simulation of Combustion Field by Lattice Boltzmann Method

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

For modeling turbulent combustion, numerous studies have been made. Even chemically non-reacting turbulent flows are complex phenomena, and chemical reactions make the problem more complicated. Due to the limitation of computational costs, conventional numerical methods are impractical in carrying out 3D numerical simulations at high Reynolds numbers with detailed chemistry. The lattice Boltzmann method (LBM) has emerged as an efficient alternative for numerical simulation of complex flows. In our recent study, we have proposed a numerical scheme to simulate combustion field by LBM. Here, for benchmark study, we focus on a flame in simple flow geometry. The numerical model and LB equations for flow, temperature, and concentration are explained in detail. Using methane/air and propane/air mixtures, we obtain laminar burning velocities, which are compared with experimental values.

**Key Words:** Computational Fluid Dynamics, Lattice Boltzmann Method, Premixed Combustion, Flame, Burning Velocity, Chemical Reaction

## 1. 緒 論

乱流火炎のモデリングを行うため、実験と計算によりさまざまな研究が行われている<sup>(1)~(3)</sup>。その際、火炎構造位相図(Combustion Diagram)により火炎構造の分類を行うことが多い。最近、乱流火炎の実験結果をもとに新しい位相図が提案されており<sup>(4)~(6)</sup>、この検証が不可欠である。近年のレーザ計測技術の発展から、瞬時の二次元火炎断面像を実験により得ることが可能となり、乱流火炎の構造について詳細な検討が行われている。しかしながら、乱流燃焼は三次元の現象であり、三次元構造をもとに火炎の特性を議論することが不可欠である。一方、DNSなどの数値計算により、火炎の特性を三次元で解析することが可能となってきた(例えば、店橋らの研究<sup>(7)</sup>)。しかしながら非常に強い乱れをもつ場合、計算精度の観点からより小さな時間・空間スケールを考慮する必要がある、細かいタイムステップと膨大な格子点が必要となる。これにより計算時間が増大するため、フィルタリングにより小さ

なスケールの特性をモデル化し、大きなスケールで計算を行うLES(Large Eddy Simulation)がいまのところ現実的であるが、この場合にも特徴的な乱れの構造が正確に計算できる程度の精度が要求される。

一方、よりミクロな視点から流れを模擬する方法に分子動力学(MD法)があるが<sup>(8)</sup>、計算負荷が飛躍的に増加する。そこで近年、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が提案された。その一つに格子ガスオートマトン法(LGA)があり、その手法の利点として、(1)支配方程式が存在せず数値誤差がない、(2)ミクロな視点から現象を記述するため境界条件の設定が容易である、(3)局所性が高く並列計算に適している、などが挙げられる<sup>(9)~(11)</sup>。著者らは反応物と生成物の2種類の粒子を用いてLGAにより燃焼場の解析を試みた<sup>(12)~(14)</sup>。しかし、粒子の存在の有無を整数形のBool変数を用いて記述するため、直接実数を扱うことができない。また2種類の粒子間の反応を確率により表したが、その物理的な解釈が問題となっている。

これに対し、粒子の分布関数を用いて格子の状態を記述し、分布関数に対する発展方程式をもとに流れを模擬する格子ボルツマン法(LBM)が提案された<sup>(15)</sup>。これにより実数を直接扱うことが可能になり、アレニ

\* 原稿受付 2002年1月5日。

\*<sup>1</sup> 正員、豊橋技術科学大学工学部(〒441-8580 豊橋市天伯町雲雀ヶ丘1-1)。

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

ウス型の反応を用いて燃焼場を解析することができる。著者らはこれまでの研究において、LBMにより燃焼場を計算する方法を提案し、対向流火炎の数値計算を試みた<sup>(16)</sup>。そこで本研究では、その手法の妥当性についてさらに検討するため、一様流中に形成される火炎の数値計算を行い、燃焼速度を求めて実験結果と比較した。なお、メタンとプロパンの2種類の予混合気を用いた。

2. 計算モデル

2.1 格子ボルツマン法(LBM) 格子ボルツマン法はLGAから発展した手法であり、粒子の並進と衝突の過程により流れを模擬するが、粒子の動きを追うのではなく、粒子のアンサンブル平均としての分布関数に着目する。したがって、LGAで必要だった粗視化の手続きは必要ない。並進の過程ではLGAと同様、1タイムステップでその速度ベクトルの方向に分布関数が1格子分移動する(図1)。衝突については、分布関数が衝突により平衡分布へ緩和すると考え、単一緩和時間近似を用いて衝突項を局所平衡分布とのずれにより簡略化している(BGK近似)。

図1に示すような二次元のモデル(d2q9)では、空間は正方形の格子で離散化される。この場合、粒子の速度ベクトルはそれぞれ以下ようになる。

$$e_a = \begin{cases} = (0, 0) & a=0, \\ = (\cos[(a-1)\pi/2], \sin[(a-1)\pi/2]) \cdot c & a=1-4, \\ = (\cos[(a-5)\pi/2 + \pi/4], \sin[(a-5)\pi/2 + \pi/4]) \sqrt{2} \cdot c & a=5-8, \end{cases}$$

ここで、 $c = \delta_x / \delta_t (=1)$ であり、 $\delta_x$ と $\delta_t$ は格子間距離と時間間隔である。今回は非圧縮のモデルであるので、以下のような圧力 $p$ に対する分布関数の発展方程式を用いて速度場を求める<sup>(17)</sup>。

$$p_a(x + e_a \delta_t, t + \delta_t) - p_a(x, t) = -\frac{1}{\tau} [p_a(x, t) - p_a^{eq}(x, t)] \dots\dots\dots (1)$$

$$p_a^{eq} = w_a \left\{ p + p_0 \left[ 3 \frac{(e_a \cdot u)}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(e_a \cdot u)^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{c^2} \right] \right\} \dots\dots\dots (2)$$

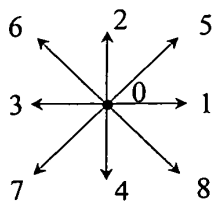


Fig. 1 Square lattice in d2q9 model

圧力 $p$ と速度ベクトル $u$ は以下の式から求められる。

$$p = \sum_a p_a \dots\dots\dots (3)$$

$$u = \sum_a e_a p_a / \rho_0 \dots\dots\dots (4)$$

ここで、 $p_0 = \rho_0 c_s^2$ であり、 $\rho_0$ は非圧縮性を仮定した際一定となる密度、 $c_s (=c/\sqrt{3})$ は音速である。動粘性係数 $\nu$ は緩和時間 $\tau$ を用いて以下のように表される。

$$\nu = \frac{2\tau - 1}{6} \frac{\delta_x^2}{\delta_t} \dots\dots\dots (5)$$

格子ボルツマン法の分布関数の発展方程式は、連続なBoltzmann方程式から導出されることが示されており、したがって格子ボルツマン方程式はBoltzmann方程式の特殊な離散形である。またこの式からNavier-Stokes方程式が導出されることも証明されている<sup>(17)</sup>。これまでに円柱周りの流れ<sup>(18)</sup>を含むさまざまな流れを対象にベンチマーク計算が行われ、計算精度、計算効率、安定性について検討が行われている。また、Martinezらは $Re$ が10000程度の二次元せん断乱流の計算を行い、乱流場を正確に模擬できることを明らかにした<sup>(19)</sup>。

しかしながら反応性流れ、特に燃焼場のLBMによる解析例はほとんどない。わずかにFilippovaらにより燃焼場の計算が試みられている<sup>(20)</sup>。ただし、彼らは流れ場をLBMで求め、エネルギーと化学種の保存式を差分法で別に解く手法を用いている。通常燃焼場の数値解析には非常に多くの計算時間が必要なことから、新しい計算手法であるLBMにより燃焼場を模擬することは有意義であると思われる。著者らはこれまでにボルツマン方程式だけで燃焼場を模擬する方法を新たに提案した<sup>(16)</sup>。流れ場に対するボルツマン方程式に加えて、温度・濃度に対しても分布関数を与えることにより、温度場と濃度場を決定した。具体的には流れ場を式(1)(2)により求め、得られた速度をもとに温度場と濃度場を計算する。今回の非圧縮のモデルでは、温度と濃度の変化は流れ場に影響を及ぼさないが、密度の分布関数を用いて流れ場を求める圧縮性のモデル<sup>(21)(22)</sup>も報告されており、今後圧縮性を考慮した検討を行う予定である。温度と化学種の質量分率に対する発展方程式と平衡分布関数を以下に示す。

$$F_{s,a}(x + e_a \delta_t, t + \delta_t) - F_{s,a}(x, t) = -\frac{1}{\tau_s} [F_{s,a}(x, t) - F_{s,a}^{eq}(x, t)] + w_a Q_s \dots\dots\dots (6)$$

$$F_{s,a}^{eq} = w_a s \left\{ 1 + 3 \frac{(e_a \cdot u)}{c^2} + \frac{9}{2} \frac{(e_a \cdot u)^2}{c^4} - \frac{3}{2} \frac{u^2}{c^2} \right\}$$

$$s = T, Y_i (i = CH_4, C_3H_8, O_2, CO_2, H_2O) \dots\dots\dots (7)$$

これらの分布関数を積算することにより温度と化学種の濃度が求められる。

$$T = \sum_{\alpha} F_{T,\alpha} \dots\dots\dots (8)$$

$$Y_i = \sum_{\alpha} F_{Y_i,\alpha} \dots\dots\dots (9)$$

式(6)における温度と濃度のそれぞれの緩和時間は、式(5)と同様熱拡散率と各化学種の拡散係数により決定される。反応に関連する項  $Q_s$  は計算と実際の現象との相似性から与えられる。例えばLBMにおける化学種  $i$  の質量分率に対する反応項  $Q_{Y_i}$  [kg/(m<sup>3</sup>·s)] は、実際の反応速度  $\omega_i$  [kg/(m<sup>3</sup>·s)] を用いて以下のように与えられる。

$$Q_{Y_i} = (\omega_i)_{LBM} = \omega_i \{ \rho_0 U_0 / L \}^{-1} \{ \rho_0 U_0 / L \}_{LBM} \dots\dots\dots (10)$$

ここで  $U_0$  と  $L_0$  は、それぞれの座標系における代表速度と代表長さであり、LBMの添字をつけた場合は、LBMの座標系におけるそれぞれの値を示す。また、化学種の反応速度は、Westbrookらにより提案されたメタンとプロパンに対する一段不可逆反応速度式をもとに以下の式で与えられた<sup>(23)</sup>。

$$\omega_i = \lambda_i \cdot M_i \cdot \omega_{ov} \dots\dots\dots (11)$$

$$\omega_{ov} = k_{ov} C_f^a C_o^b \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \dots\dots\dots (12)$$

$\omega_{ov}$  はモル総括反応速度、 $\lambda_i$  は一段反応の両論係数、 $M_i$  は化学種の分子量、 $k_{ov}$  は総括反応定数、 $a$  と  $b$  は定数、 $E$  は総括活性化エネルギーである。

2.2 座標系と境界条件

ここでは、計算に用いた座標系と境界条件について説明する。図2に座標系と境界条件を示す。左側から一様に流入した混合気は、火炎帯で反応して既燃ガスとなり右側から排出される。計算に用いた格子数であるが、火炎構造を正確に記述するのに必要な格子数について検討するため、流路長さ10 cm に対し流れ方向( $x$ 方向)とそれに直角方向( $y$ 方向)の格子数をそれぞれ変化させた。境界条件は、入口で流入境界<sup>(21)(22)</sup>、上下の壁は周期境界とし、出口では自由流出境界とした。計算は変数をすべて流入時の未燃ガスの特性値で無次元化して行い、LBMにより得られた結果を実際の値に変換して温度や速度を算出した。未燃ガスの流入速度は1 m/s

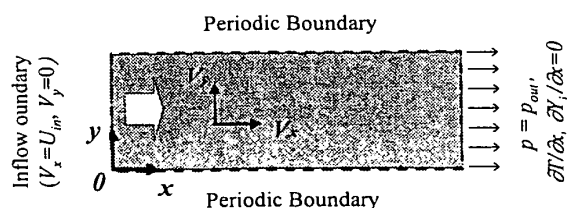


Fig. 2 Coordinate and boundary conditions

(LBMでは0.02)とし、計算初期に下流に高温領域を与えて、火炎の移動速度が定常になるまで計算を行った。

3. 計算結果および考察

3.1 火炎構造

まず火炎構造について検討した。プロパン・空気の混合気で当量比  $\phi$  が1.0のときの温度・濃度の  $x$  方向分布を図3に示す。これは流れに垂直な高さの中心位置で得られた火炎面付近の分布である。このときの格子数は  $x$  方向に3001、 $y$  方向に41であり、分布がほぼ定常となるタイムステップが10000の結果である。これによると、未燃ガスの温度が上昇するにしたがい反応物であるプロパンと酸素の濃度が減少し、二酸化炭素と水蒸気が生成されている。温度や濃度は  $y$  方向に一様であったことから、一次元火炎のような構造が観察された。

そこで、火炎構造に及ぼす格子数の影響について検討する。はじめに  $x$  方向の格子数  $N_x$  を変化させて火炎構造を調べた。図4に、 $x$  方向の格子数を変化させたときの反応速度分布を示す。反応帯中に存在する格子点の数を明確にするため、白丸で格子上の総括反応速度を示した。このときの当量比は1.0であり、燃料はプロパンである。 $x$  方向の格子数は、601から3001まで変化させた。実際の長さに変換すると、格子間隔はそれぞれ約0.17 mmと0.03 mmに相当する。これによると、反応帯の厚みはいずれの場合も約0.3 mm程度であること、また格子点を変化させると反応帯内の格子数も変化することがわかる。例えば、図4(b)の  $N_x=2401$  の場合で反応帯中に約10点ほど

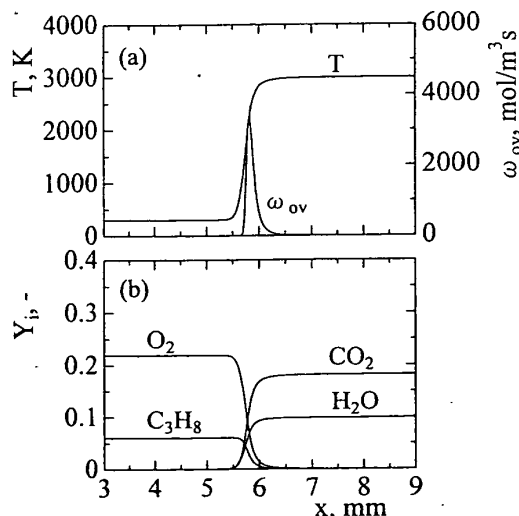


Fig. 3 Distributions of (a) temperature and over-all reaction rate, (b) mass fraction of species;  $\phi = 1.0$

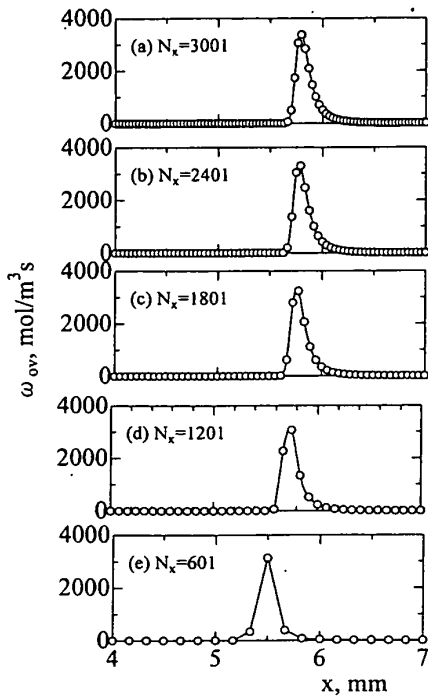


Fig. 4 Distributions of over-all reaction rate for propane/air mixtures;  $\phi=1.0$

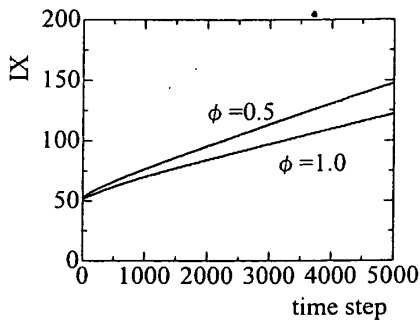


Fig. 5 Flame position in Lattice Boltzmann coordinate for propane/air mixtures

であるが、図 4(e)では極端に少なく反応帯の構造を正確に記述できていない。

次に、格子数を変化させたときに、燃焼速度がどのように変化するかについて検討した。燃焼速度  $S_L$  は、反応速度が最大となる位置を火炎面位置とし、その時間変化を調べるにより求めた。

$$S_L = \left( \frac{S_L}{U_{in}} \right)_{LBM} \times U_{in} = \left( \frac{U_{in} - V_f}{U_{in}} \right)_{LBM} \times U_{in} \quad \dots\dots\dots (13)$$

ここで、 $U_{in}$  は流入速度、 $V_f$  は火炎の移動速度である。図 5 にプロパン・空気の混合気で当量比が 0.5 と 1.0 に対し、格子数は  $x$  方向に 3001、 $y$  方向に 41 のときに得られた火炎面位置の時間変化を示す。計算初期では格子番号で  $IX=51$  以降に高温の領域を与えて

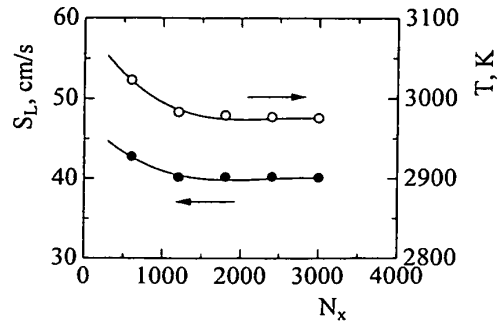


Fig. 6 Convergence study on burning velocity and flame temperature for propane/air mixtures;  $\phi=1.0$

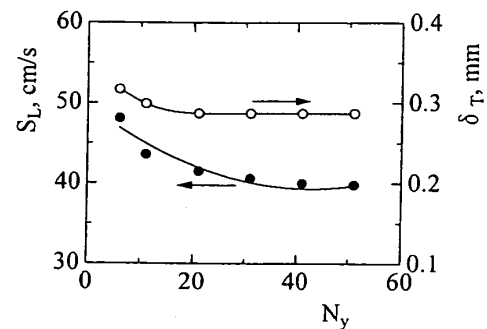


Fig. 7 Convergence study on burning velocity and flame thickness for propane/air mixtures;  $\phi=1.0$

いる。今回の計算では流入速度が 1 m/s と大きいことから、燃焼速度が流入速度より小さいため火炎面は下流方向に流されることになる。希薄混合気の場合は、当量比が小さいほうが燃焼速度は小さいため、当量比が 0.5 の場合は火炎がより下流に移動しているようすが観察された。また、タイムステップが 2000 程度で火炎の移動がほぼ定常になることがわかった。火炎の移動速度から燃焼速度を求めた結果を図 6 に示す。また、系内の最高温度を火炎温度とし、その結果も同時に示した。これによると、 $x$  方向の格子数が 1200 程度で燃焼速度と火炎温度がほぼ一定値に収束することがわかった。図 4(d)によれば、このときの反応帯内の格子数は 5 点程度、格子間隔は約 0.08 mm であり、この程度の精度で燃焼速度などの火炎特性値が計算できることがわかった。

次に、 $y$  方向の格子数  $N_y$  を変化させ、火炎帯厚さと燃焼速度の変化について検討した。火炎帯厚さは流れ方向の温度こう配の最大値を用いて以下のような式から求めた。

$$\delta_r = \frac{T_{max} - T_0}{\left( \frac{\partial T}{\partial x} \right)_{max}} \quad \dots\dots\dots (14)$$

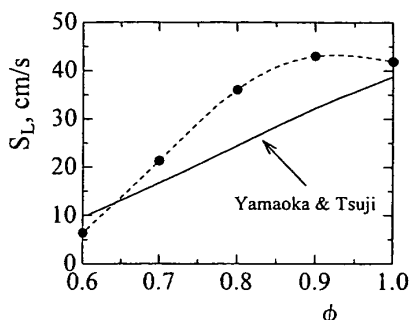


Fig. 8 Variation of burning velocity with equivalence ratio for methane/air mixtures

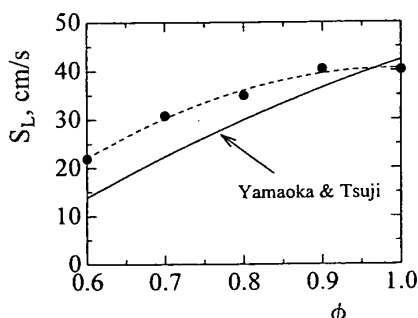


Fig. 9 Variation of burning velocity with equivalence ratio for propane/air mixtures

燃焼速度と火炎帯厚さを求めた結果を図7に示す。このときのプロパン・空気混合気の当量比は1.0であり、 $x$ 方向の格子数は3001、 $y$ 方向の格子数は6から51まで変化させた。また、火炎帯厚さを求めた結果も同時に示した。これによると、計算する際の格子数が増加すると、燃焼速度は減少するものの、格子数が40程度ではほぼ一定値に収束することがわかった。また、温度こう配の最大値から求めた火炎帯厚さは、図3の反応帯の幅と同程度であり、格子数を増加させると一定値に収束することがわかった。

以上の結果から、 $N_x=3001$ 、 $N_y=41$ として燃焼速度を求め、すでに実験により得られた結果と比較した。

**3.2 燃焼速度** 式(12)のWestbrookらが提案した一段反応モデルは、燃焼速度が実験結果と対応するように活性化エネルギーや反応定数を決定している。したがって、燃焼速度について調べることで、非圧縮性を仮定した今回の計算モデルの妥当性を検討することができるものと思われる。メタンとプロパンの予混合気に対し、燃焼速度を求めた結果をそれぞれ図8と図9に示す。比較のため、Yamaokaら<sup>(24)</sup>の実験結果も示した。これによるといずれの燃料の場合も、計算で得られた燃焼速度は、実験により求められた値

より大きいことがわかった。しかし、当量比を増加させると燃焼速度が増加する傾向は見られており、また当量比が1付近は実験値に近い燃焼速度が得られた。したがって、今回示した格子ボルツマン法により燃焼場が模擬できることを示すことができた。

#### 4. 結 論

本研究では、格子ボルツマン法(LBM)により燃焼場を模擬する方法を説明した。また、メタン・空気およびプロパン・空気混合気の一様流中に形成される火炎を対象に数値計算を行った。その結果、以下のことが明らかとなった。

(1) 火炎構造を記述するのに必要な格子数について検討した結果、反応帯中に存在する格子数が5点程度(格子間隔は約0.08 mm)であれば、火炎温度や燃焼速度などの特性値を計算できる。

(2) 計算により得られた燃焼速度をすでに得られた実験結果と比較することで結果の妥当性を検討した。その結果、一次元火炎の構造が模擬でき、一段総括反応でも比較的実験値に近い燃焼速度が得られた。

今後、圧縮性を考慮するなどモデルを改善していく必要があるが、LBMにより燃焼場の数値計算が可能であることが確認できた。

本研究は、アメリカ国立ロスアラモス研究所の Drs. Doolen & He と行った共同研究を発展させたものである。ここに感謝の意を表す。

#### 文 献

- (1) Bray, K. N. C., *Turbulent Reacting Flows, Topics in Applied Physics*, 44 (1980), 115-183, Springer-Verlag.
- (2) Borghi, R., *Recent Advances in Aeronautics Science*, (1985), 117-134.
- (3) Peters, N., *Proc. Combust. Inst.*, 21 (1986), 1231-1250.
- (4) Mansour, M. S., Peters, N. and Chen, Y. C., *Proc. Combust. Inst.* 27 (1998), 767-773.
- (5) Peters, N., *J. Fluid Mech.*, 384 (1999), 107-132.
- (6) Plessing, T., Kortschik, C., Peters, N., Mansour, M. S. and Cheng, R. K., *Proc. Combust. Inst.*, 28 (2000), 359-366.
- (7) Tanahashi, M., Fujimura, M. and Miyauchi, T., *Proc. Combust. Inst.*, 28 (2000), 529-535.
- (8) 原子・分子モデルを用いる数値シミュレーション, 日本機械学会編, (1996), 194-213, コロナ社.
- (9) Frisch, U., Hasslacher, B. and Pomeau, Y., *Phys. Rev. Lett.*, 56 (1986), 1505-1508.
- (10) Frisch, U., D'huimières, D., Hasslacher, B., Lallemand, P., Pomeau, Y. and River, J. P., *Complex Syst.*, 1 (1987), 649-707.
- (11) Doolen, G. D., *Lattice Gas Methods for Partial Differential Equations*, (1987), 3-9, Addison Wesley.
- (12) 山本和弘, 燃焼の科学と技術, 8-2 (2000), 73-85.
- (13) 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.

- (14) 山本和弘・小沼義昭, 機論, 67-663, B (2001), 2871-2876.
- (15) Chen, S. and Doolen, G. D., *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 30 (1998), 329-364.
- (16) Yamamoto, K., He, X. and Doolen, G. D., *J. Statist. Phys.*, 107 (2002), 367-383.
- (17) He, X. and Luo, L-Shi, *J. Statist. Phys.*, 88, Nos. 3/4 (1997), 927-944.
- (18) He, X. and Doolen, G. D., *Phys. Rev. E*, 56-1 (1997), 434-440.
- (19) Martinez, D. D., ほか 3 名, *Phys. Fluids*, 6 (1994), 1285-1298.
- (20) Filippova, O. and Hanel, D., *J. Comput. Phys.*, 158 (2000), 139-160.
- (21) Zou, Q. and He, X., *Phys. Fluids*, 9-6 (1997), 1591-1598.
- (22) He, X., Chen, S. and Doolen G. D., *J. Statist. Phys.*, 146, (1998), 282-300.
- (23) Westbrook, C. K. and Dryer, F. L., *Combust. Sci. Technol.*, 27 (1981), 31-43.
- (24) Yamaoka, I. and Tsuji, H., *Proc. 20th Symp. (Int.) Combust.*, (1982), 1883-1892.