

[共同研究成果]

熱損失を考慮した Flamelet approach に基づく

燃焼シミュレーションと NO 生成の予測

松川 嘉也：東北大学大学院工学研究科

小澤 龍磨：東北大学大学院工学研究科

赤尾津翔大：東北大学大学院工学研究科

松下 洋介：弘前大学大学院理工学研究科

青木 秀之：東北大学大学院工学研究科

Weeratunge Malalasekera : Loughborough University

本研究では、乱流拡散火炎を対象にふく射伝熱による熱損失を考慮した Flamelet approach に基づく燃焼シミュレーションを実施し、一酸化窒素 NO 生成も予測した。その結果、燃焼の Large Eddy Simulation により主要な化学種と温度の時間平均値を概ね予測することができた。また、Enthalpy defect と呼ばれる手法を導入することで、ふく射伝熱による熱損失に伴う温度低下を表現することができた。しかしながら、NO 生成の予測精度は Enthalpy defect よりもむしろ NO 生成の予測手法自体の感度の方が大きかった。

1. 緒言

前報[1]ではメタンのパイロット火炎である Sandia Flame D [2-4]を対象に Flamelet/Progress-Variable approach (FPV) [5]に基づく燃焼の Large Eddy Simulation (LES)を実施した。その結果、他の研究[6]と同様に流れと混合分率の時間平均値だけでなくその分散もほぼ完全に再現することができた。また、主要な化学種に加えてラジカル種などのマイナー化学種の濃度の時間平均値についてもほぼ完全に予測することができた。そのため、FPV に基づく LES の有用性を確認することができたとと言える。

現在、Flamelet approach として Flamelet model [7,8], Flamelet-Generated Manifolds method (FGM) [9]と FPV [5]が広く用いられている。そもそも拡散燃焼を対象としている Flamelet model では Flamelet library のパラメータは混合分率とスカラー消散率、FPV では混合分率と進行変数であり、いずれのモデルにおいてもエンタルピーは Flamelet library のパラメータではない。そのため、Flamelet model [7,8]や FPV [5]において熱損失を考慮するためには、Flamelet library のパラメータとしてエンタルピーを追加する必要がある。一方、予混合燃焼を対象としている FGM [9]では Flamelet library のパラメータは進行変数とエンタルピーであり、エンタルピーはすでに Flamelet library のパラメータである。そのため、FGM [9]は熱損失を表現可能である。しかしながら、FGM [9]を拡散燃焼に適用する場合、Flamelet library のパラメータに混合分率を追加する必要がある。以上より、いずれの Flamelet approach もそのまま用いても熱損失を考慮した拡散燃焼シミュレーションを実施することはできない。なお、FPV [5]の Flamelet library のパラメータにエンタルピーを追加したモデルと FGM [9]の Flamelet library のパラメータに混合分率を追加したモデルは FPV [5]の Flamelet library を対向流拡散火炎から、FGM [9]の Flamelet library を予混合火炎からそれぞれ構築すること以外、基礎式や Flamelet library のパラメータなどは同一となる。

本研究では、水素の噴流の乱流拡散火炎である H5 Flame [10]を対象に Flamelet approach に基づく燃焼の Large Eddy Simulation あるいは Reynolds-Averaged Navier-Stokes を実施する。Flamelet approach には Flamelet-Generated Manifolds method [9]あるいは前報と同様に Flamelet/Progress-Variable approach [5]を用いる。本研究では、さらに Enthalpy defect [11,12]と呼ばれる熱損失を考慮可能な手法を新たに追加して、ふく射伝熱による熱損失を考慮した水素の噴流の乱流拡散火炎

を対象とした燃焼シミュレーションを実施する。また、種々の手法を用いて乱流拡散火炎における環境汚染物質の1つである一酸化窒素 NO 生成の予測も試みる。

2. 解析手法

2.1 解析対象と解析条件

解析対象は水素の噴流の乱流拡散火炎である H5 Flame である。内径 $D = 8 \text{ mm}$ のパイプから 295 K の窒素で希釈した水素を 21.7 m/s で、周囲から co-flow として 295 K の空気を 0.3 m/s でそれぞれ供給する。解析領域は図 1 に示すバーナ上部の開放空間 $12.5D \times 12.5D \times 70D$ であり、燃料ジェット基準のレイノルズ数は 6,200 である。

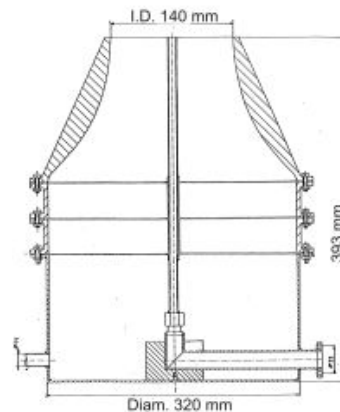


図 1 バーナの概念図 [10]

2.2 Flamelet library の構築

2.2.1 Flamelet/Progress-Variable approach (FPV)

Flamelet/Progress-Variable approach (FPV) [5] は Flamelet model の安定した燃焼の状態に加えてスカラー消散率では一意に決定できない不安定な燃焼の状態まで表現可能であることが特徴である。FPV では、Flamelet model と同様に対向流拡散火炎を対象に Flamelet library を作成するものの、燃焼を特徴づけるパラメータがスカラー消散率ではなく Progress Variable (PV) と呼ばれる進行変数とすることが Flamelet model と異なる。なお、本研究では PV を H_2O の質量分率と定義する。具体的には、Flamelet model と同様に種々のスカラー消散率に対して対向流拡散火炎を対象に燃焼シミュレーションを実施し、混合分率とスカラー消散率に対して PV の正味の生成速度を含む変数を保存した後にスカラー消散率を PV に変換することで、混合分率と PV に対して変数を Flamelet library に保存する。

2.2.2 Flamelet-Generated Manifolds (FGM)

Flamelet-Generated Manifolds Method (FGM) [9] は、一次元の対向流拡散火炎ではなく予混合火炎を対象に Flamelet library を作成する点で Flamelet model や FPV と異なる。ここでは、拡散燃焼を対象とした燃焼シミュレーションに FGM を適用することを考える。具体的には、目的の燃焼シミュレーションに先立ち、種々の等量比に対して一次元の予混合火炎の燃焼シミュレーションを実施し、距離を Controlling Variable (CV) と呼ばれる進行変数に、等量比を混合分率にそれぞれ変換し、混合分率と CV に対して CV の正味の生成速度を含む変数を Flamelet library を保存する。なお、CV は PV と名称が異なるものの、本質的には同じパラメ

一タである [11].

2.2.3 Enthalpy defect

Flamelet approach においてふく射伝熱などによる熱損失を考慮する場合、一般に Enthalpy defect と呼ばれる手法が用いられる. Enthalpy defect では、これまで説明した Flamelet library を構築する条件に加えて、あらかじめ熱損失を与えた一次元の燃焼シミュレーションを実施し、Flamelet library を構築する. 著者らの知る限り、熱損失を与える手法には、系全体に対して一様に熱損失を与える方法(scheme 1) [12], 正味の熱発生速度(Heat release rate)に 1 より小さい値を乗じて熱損失を与える方法(scheme 2) [13], 人工的なふく射伝熱を考えることで熱損失を与える方法(scheme 3) [13]がある. 系全体に対して一様に熱損失を与える方法(scheme 1)は直感的で Flamelet library も構築しやすいものの、考慮することができる熱損失量に限界があり、大きな熱損失を与えることができない. 正味の熱発生速度に 1 より小さい値を乗じて熱損失を与える方法(scheme 2), 人工的なふく射伝熱を考えることで熱損失を与える方法(scheme 3)では大きな熱損失を与えることができるものの、熱損失が不均一となるため、Flamelet library の構築が煩雑になってしまう. 本研究では、Flamelet library の構築が容易な scheme 1 を用いて熱損失を考慮した Flamelet library を構築する.

2.3 三次元の燃焼シミュレーションの解析方法

水素の噴流の拡散火炎(H5 Flame) [10]を対象とした乱流流れと Flamelet-Generated Manifolds method (FGM)と Flamelet/Progress-Variable approach (FPV)の Large Eddy Simulation の基礎式は3次元のファール平均を施した連続の式, 運動量保存式, 混合分率 \tilde{Z} と進行変数 \tilde{C} の保存式である.

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \mu_t) \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Z}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu}{Sc_z} + \frac{\mu_t}{Sc_{z,t}} \right) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right] \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{C}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{C}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu}{Sc_c} + \frac{\mu_t}{Sc_{c,t}} \right) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x_j} \right] + \bar{\omega}_c \quad (4)$$

ここで、進行変数 \tilde{C} は H₂O の質量分率としている.

本研究では、ふく射伝熱による熱損失を表現できないいわゆる Enthalpy defect を考慮するため、ファール平均を施した混合分率 \tilde{Z} と進行変数 \tilde{C} に加えてエンタルピー \tilde{h} の保存式を解く.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right] - \nabla \cdot q_r \quad (5)$$

ここで、 q_r はふく射伝熱による熱損失を表すふく射熱流束である.

$$-\nabla \cdot q_r = a(G - 4\sigma T^4) \quad (6)$$

G は入射熱流束であり、P1 approximation method に基づき求める.

$$q_r = -\frac{1}{3a} \frac{\partial G}{\partial x_j} \quad (7)$$

a はガスの吸収係数であり、Weighted-sum-of-gray-gasses model (WSGGM)を用いて推算する.

さらに、乱流拡散燃焼における NO 生成の予測を試みる. NO の濃度は他の化学種と同様 Flamelet library を参照することで求めることができる. しかしながら、NO の生成の時間スケールは燃焼に関与する化学種の中では極めて大きく、流体の運動に対して時間スケールが十分に小さく、定常状態を仮定する Flamelet approach の仮定は成り立たないことが懸念される. そこで本研究では、Flamelet library を参照することで求めるのではなく、NO の化学種の保存式を解くことで NO の質量分率を求める.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Y}_{NO}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_{NO}) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\frac{\mu}{Sc_{NO}} + \frac{\mu_t}{Sc_{NO,t}}\right)\frac{\partial\tilde{Y}_{NO}}{\partial x_j}\right] + \bar{\omega}_{NO} \quad (8)$$

ここで、 $\bar{\omega}_{NO}$ はNOの正味の生成速度であり、Flamelet libraryに保存したNOの正味の生成速度 $\bar{\omega}_{NO}$ を用いる方法(case 1)およびFlamelet libraryに保存した正味のNOの生成速度 $\bar{\omega}_{NO}$ を生成速度 $\bar{\omega}_{NO}^+$ および消費速度をNOの質量分率 \tilde{Y}_{NO}^{lib} で除した値 $\frac{\bar{\omega}_{NO}}{\tilde{Y}_{NO}^{lib}}$ に分離して評価する方法(case 2)を検討する。

$$\bar{\omega}_{NO} = \bar{\omega}_{NO}^+ + \tilde{Y}_{NO} \left(\frac{\bar{\omega}_{NO}}{\tilde{Y}_{NO}^{lib}} \right) \quad (9)$$

2.4 離散化スキームと数値解法

非構造格子の有限体積法に基づき、二次中心差分法を95%と一次風上差分法を5%混合したいわゆるブレンディング・スキームと二次中心差分法を用いて運動量保存式の対流項と拡散項をそれぞれ離散化し、3次のAdams-Bashforth法を用いて時間進展させる。また、Hybrid法を用いて混合分率 \tilde{Z} 、進行変数 \tilde{C} 、エンタルピー \tilde{h} とNOの質量分率 Y_{NO} の保存式の対流項と拡散項をそれぞれ離散化し、陰解法を用いて時間進展させる。圧力の解法にはSimplified Marker And Cell (SMAC) [14]を用いて非定常計算を実施し、時間平均値を求める。SMACの圧力補正值の連立方程式の解法にはAMGS [15]を、混合分率と進行変数の連立方程式の解法には多項式前処理付き安定化双共役勾配法[16]をそれぞれ用いた。求めた混合分率 \tilde{Z} 、進行変数 \tilde{C} とエンタルピー \tilde{h} に加えて混合分率の分散 \tilde{Z}''^2 を用いてFlamelet library $f(\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2, \tilde{C}, \tilde{h})$ を参照することで、目的の燃焼シミュレーションに必要な混合ガスの物性値である密度 $\bar{\rho}$ や粘度 μ 、反応進行変数 \tilde{C} の正味の反応速度 $\bar{\omega}_c$ に加えて化学種の濃度や温度など興味あるあらゆる変数を求める。METIS-5.1.0 [17]を用いて解析領域を分割し、Message Passing Interface (MPI)を用いて領域分割に基づく並列計算を実施した。また、通信の多い領域間から可能な限り同時に通信する独自のアルゴリズム[18]を採用し、通信に要する時間を最小化し、オーバーヘッドを最小化することで並列化効率を向上した。なお、東北大学サイバーサイエンスセンター 所有の並列コンピュータ LX 406Re-2 を用い、4 ノード 48 コアを用いた並列計算を実施した。

3. 結果と考察

3.1 RANS と LES の数値解および測定値との比較

まず、乱流流れの解析手法が乱流拡散燃焼の数値解に及ぼす影響を検討する。図2にEnthalpy defectを考慮しない場合の、Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)あるいはLarge Eddy Simulation (LES)に基づき、燃焼モデルにはFlamelet/Progress-Variable approach (FPV)を用いて求めた中心軸上における混合分率、そのRoot-mean-square (RSM)、温度および H_2 と H_2O の質量分率の時間平均値の分布を測定値とともに示す。RANSの数値解は測定値と比較して混合分率 \tilde{Z} の減衰を過大に見積もった結果、 H_2 の低下と H_2O の増加を過大に見積もり、温度の上昇を過大に見積もっている。これはRANSでは噴流の拡散を過大に評価するためであると考えられる。一方、LESの数値解は混合分率の測定値をほぼ完全に再現した結果、 H_2 の低下と H_2O の増加もほぼ完全に表現している。LESやRANSの数値解は下流において温度の測定値を若干過大に見積もっている。これは、燃焼により生成した吸収性ガスである H_2O が広範囲に分布する領域であり、ふく射伝熱による熱

損失の影響であると考える。

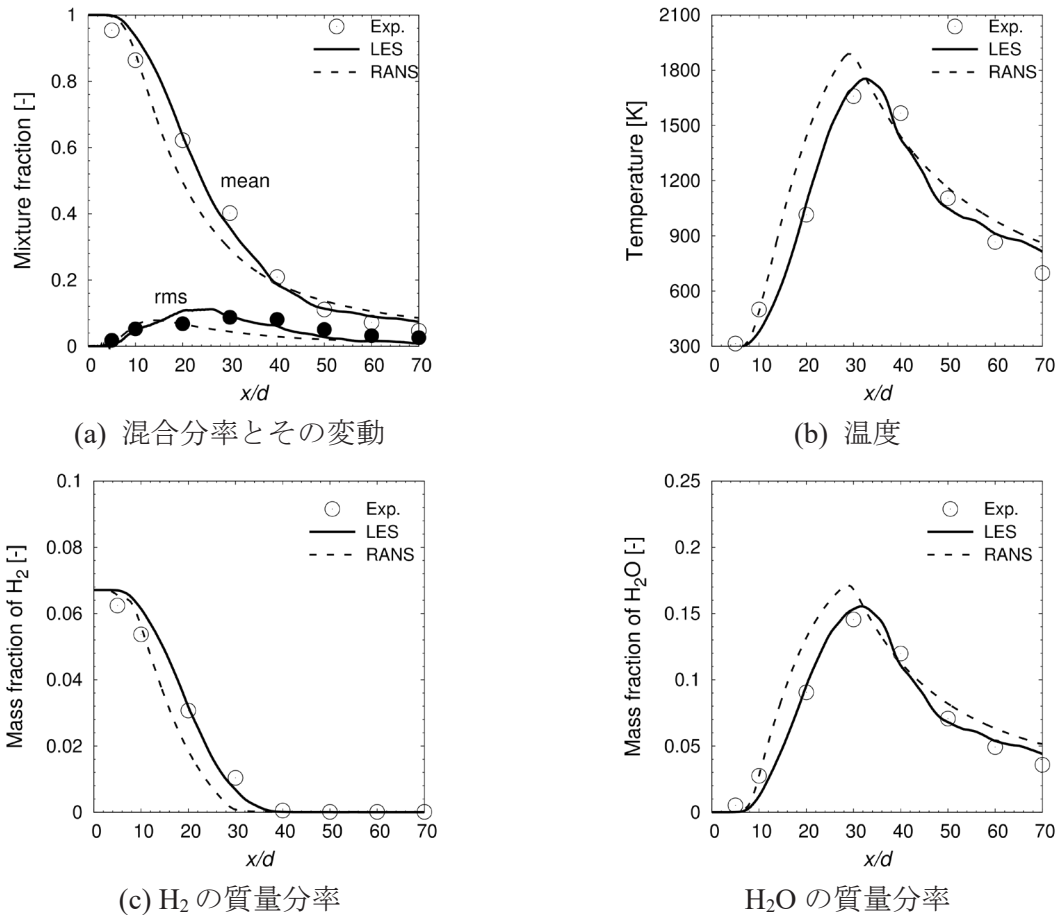


図2 中心軸上における数値解と測定値

3.2 Enthalpy defect

次に、Enthalpy defect が乱流拡散燃焼の数値解に及ぼす影響を検討する。図3に Enthalpy defect を考慮した場合としない場合の、Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) に基づき、燃焼モデルに Flamelet-Generated Manifolds method (FGM) あるいは Flamelet/Progress-Variable approach (FPV) を用いて求めた中心軸上における温度の分布を測定値とともに示す。なお、Enthalpy defect を考慮せず、燃焼モデルに FPV を用いて求めた数値解は前節と同一の結果である。用いた燃焼モデルによらず、Enthalpy defect を考慮することで、特に下流に向かって温度が低下している。これは、燃焼により生成した吸収性ガスである H₂O が生成し、半径方向に分布することでふく射伝熱による熱損失の影響が大きくなったためであると考えられる。FGM の数値解は FPV と比較して温度の低下が若干大きく、熱損失の影響が若干大きい。これは、FGM の数値解が FPV と比較して燃焼反応の進行を若干早く見積もっているためである。以上より、FGM と FPV のパラメータに混合分率、その分散と進行変数にエンタルピーを加え、Flamelet library を4次元のデータベースとすることで、熱損失を考慮することが可能であった。今後、LES に Enthalpy defect の影響を考慮することで、解析精度が向上することを示したいと考える。

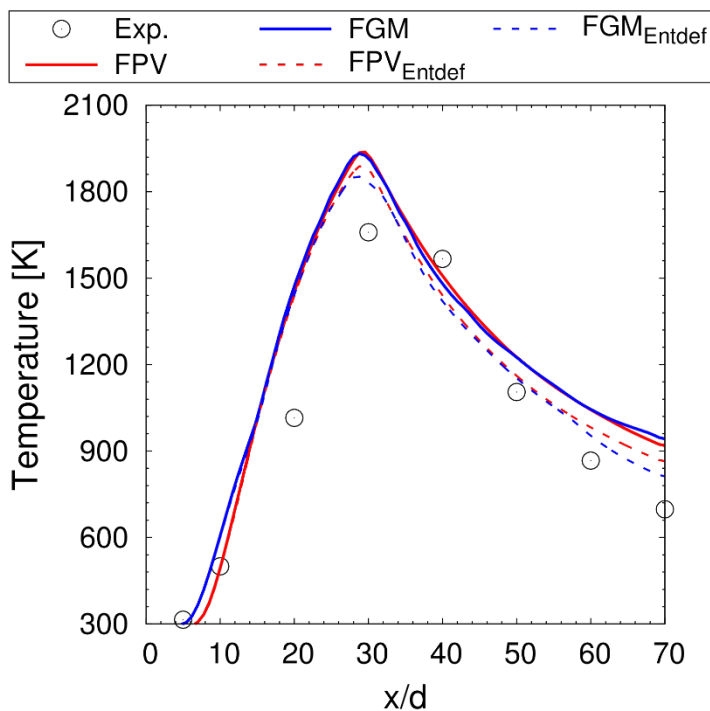


図3 中心軸上の温度分布の数値解と測定値

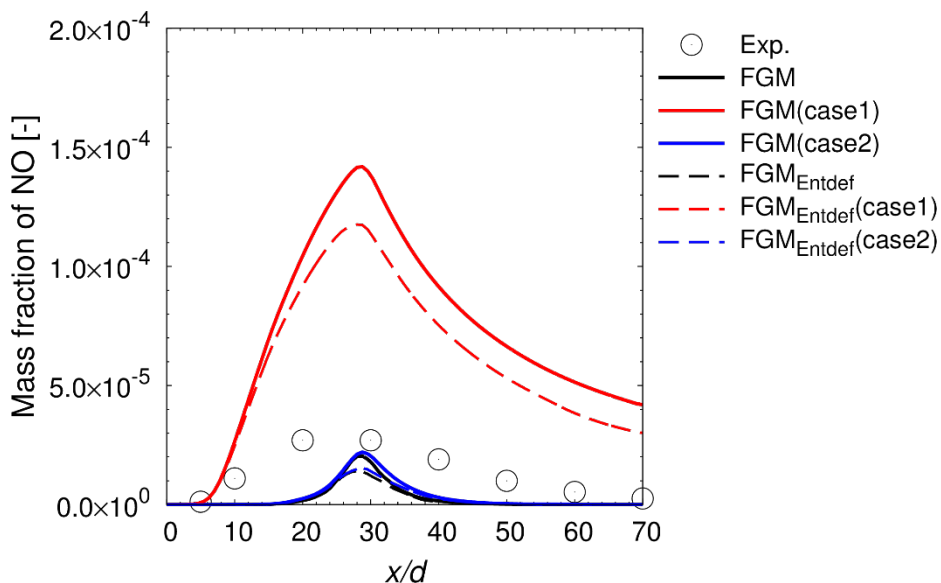


図4 中心軸上におけるNOの質量分率の数値解と測定値

3.3 NO生成の予測

最後に、Enthalpy defect と NO 生成の予測方法が NO 生成の予測精度に及ぼす影響を検討する。結果の一例として、図 4 に Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)に基づき、燃焼モデルに Flamelet-Generated Manifolds method (FGM)を用いて求めた中心軸上における NO の質量分率の分布を測定値とともに示す。Enthalpy defect の考慮および NO 生成の予測方法によらず、NO の質量

分率は測定値と同様に上流から下流に向かって増加し、その後減少した。これは温度の上昇に伴い Thermal NO が生成し、その後半径方向に拡散したためであると考えられる。Enthalpy defect の考慮によらず、NO の質量分率は Flamelet library を参照することで求める方法では測定値を過小評価し、生成項に正味に生成速度を有する NO の保存式を解く方法(case 1)では測定値を過大評価し、生成項に生成と消費に分離した NO の生成速度を有する NO の保存式を解く方法(case 2)では比較的測定値を再現した。また、いずれの方法においても Enthalpy defect を考慮することで NO の濃度が低下した。これは、H5 Flame では NO は Thermal NO により生成するが、ふく射伝熱による熱損失を考慮することで火炎の温度が低下し、Thermal NO の生成が抑制されたためである。ただし、本結果からいずれの方法が NO 生成の予測に最も適しているか結論づけるのは難しく、今後さらに検討を進める必要があると考える。

4. 結言

本研究では、乱流拡散火炎を対象に Enthalpy defect によりふく射伝熱による熱損失を考慮した Flamelet/Progress-Variable approach を用いた燃焼の Large Eddy Simulation (LES)あるいは Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS)を実施し、NO 生成の予測も試みた。その結果、燃焼の LES により主要な化学種と温度の時間平均値を概ね予測することができた。また、Enthalpy defect を導入することで、ふく射伝熱による熱損失に伴う温度低下を表現することができた。NO 生成の予測精度は Enthalpy defect よりもむしろ NO 生成の予測手法自体の感度の方が大きかった。

謝辞

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターの並列コンピュータ LX 406Re-2 を利用することで実現することができた。また、本研究の一部は特別研究員奨励費(18J11135)、JSPS 科研費(JP18K03964)および東北大学若手リーダー研究者海外派遣プログラムの助成を受けたものであり、ここに謝意を表す。

参考文献

- [1] 赤尾津翔大ら, Flamelet approach に基づくガス燃料を対象とした燃焼シミュレーション, SENAC, 52(3), 1–7 (2019)
- [2] Barlow, R. S. and Frank, J. H., Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames, Proc. Combust. Inst. 27, 1087–1095 (1998)
- [3] Barlow, R. S. et al., Piloted methane/air jet flames: Scalar structure and transport effects, Combust. Flame, 143, 433–449 (2005)
- [4] Schneider, Ch. et al., Flow field measurements of stable and locally extinguishing hydrocarbon-fuelled jet flames, Combust. Flame, 135, 185–190 (2003)
- [5] Pierce, C. and Moin, P., Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion, J. Fluid Mech., 504 73–97 (2004)
- [6] Raman, V. and Pitsch, H, A consistent LES/filtered-density function formulation for the simulation of turbulent flames with detailed chemistry, Proc. Combust. Inst., 31(2), 1711–1719 (2007)
- [7] Peters, N., Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, Prog. Energy Combust. Sci., 10(3), 319–339 (1984)
- [8] Peters, N., Laminar flamelet concepts in turbulent combustion, Symp. (Int.) on Combust., 21, 1231–1250 (1998)
- [9] van Oijen, J. A. and de Goey, L. P. H., Modelling of Premixed Laminar Flames using Flamelet-Generated Manifolds, Combustion Science and Technology. 161, 113–137 (2000)
- [10] W. Meier et al., Characterization of Turbulent hvtVAir Jet Diffusion Flames by Single-Pulse Spontaneous Raman Scattering, Combust. Sci. Technol. 118, 293–312 (1996)

- [11] 松下洋介ら, Flamelet Model に基づく乱流燃焼シミュレーション, 金属, 85(11), 915–921 (2015)
- [12] Hossain, M. et al., Modelling of a Bluff-Body Nonpremixed Flame using a Coupled Radiation/Flamelet Combustion Model, *Flow, Turbul. Combust.*, 67(3), 217–234 (2001)
- [13] Wollny, P. et al., Modelling heat loss effects in high temperature oxy-fuel flames with an efficient and robust non-premixed flamelet approach, *Fuel*, 216 44–52 (2018)
- [14] Harlow, F. H. and Welch, J. E., Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with a free surface, *Phys. Fluids*, 8 2182–2189 (1965)
- [15] 藤井昭宏ら, 領域分割による並列 AMG アルゴリズム, 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS) , 44, SIG06(ACS1), 9–17 (2003)
- [16] Van der Vorst, H. A., Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 13(2), 631–644 (1992)
- [17] Karypis, G. and Kumar, V., A Fast and Highly Quality Multilevel Scheme for Partitioning Irregular Graphs, *SIAM J. Sci. Comput.*, 20(1), 359–392, (1999)
- [18] Matsushita, Y. et al., Efficient communication strategy in parallel computation based on domain partitioning, *J. Chem. Eng. Jpn.*, 51(1), 79–82 (2018)