

[共同研究成果]

温度の変動の大きさを明らかにするための LES シミュレーション

松川 嘉也：東北大学大学院工学研究科

青木 秀之：東北大学大学院工学研究科

本研究では、化学反応を考慮した熱・物質移動を伴う流体計算(CFD)を実施し、壁からの対流伝熱に伴う温度の変動の大きさを検討した。

1. はじめに

熱分解反応は、さまざまな化学工業プロセスにおいて、目的の反応あるいは不本意な副反応として起こっている。プロセスを最適化するために、CFD と化学反応を連成させた解析が多く行われている。化学工業プロセスの多くは乱流場であり、産業界では乱流を表現するモデルとして計算コストの兼ね合いから Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS)や Large Eddy Simulation (LES)による解析が多く行われている。RANS から得られる温度場は時空間的に平均化されたものであり、LES から得られる温度場はフィルター操作が施された速度場によるものである。化学反応速度は Arrhenius の式に代表されるように、温度の上昇に伴い指数関数的に増加するため、温度に変動がある場合に平均温度を絶対反応速度の算出に用いてしまうと実際の化学反応速度とかい離する可能性がある。前報[1]では、RANS によりどの程度があるのかを検討した。また、熱分解において平均温度に対する 1%程度の変動であれば、影響が小さいことを明らかにした。本報では、壁面からの伝熱を伴う LES シミュレーションを行い、RANS より高い精度で温度の変動の大きさを見積もった。

2. シミュレーションに用いるソフトウェア構成の検討

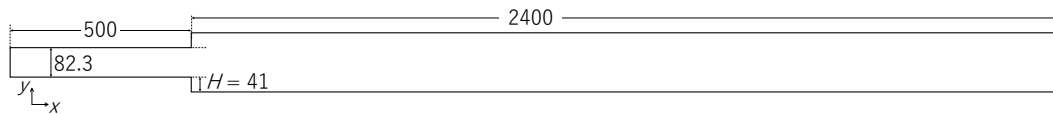
本研究では FORTRAN で記述された in-house コードにより流体計算を実施した。ライブラリとして、表 1 に示す行列計算ライブラリを用いた。Open MPI は AOBA-B にインストールされているものを用いた。AOCL、OpenBLAS および ScaLAPACK について、本研究を開始した 2020 年 11 月当初において、GCC 環境用のライブラリが提供されていなかったか、著者の力不足により使用できなかったため、GCC 環境においてはソースコードからコンパイルしたライブラリを用いた。それ以外のライブラリはソースコードからコンパイルしたものをを用いた。

表 1 シミュレーションに用いたライブラリ

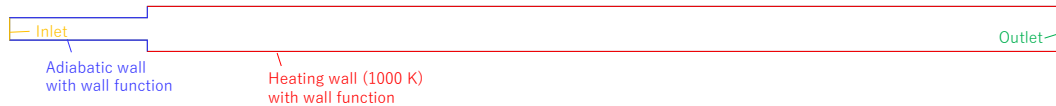
	ライブラリ名	バージョン
Message Passing Interface	Open MPI	4.0
線形代数演算	AOCL	2.2
	OpenBLAS	0.3.10
並列行列計算	ScaLAPACK	2.1.0
疎行列直接解法	MUMPS	5.3.5
メッシュ分割	ParMETIS	4.0.3
疎行列反復解法ソルバー	AMGS 並列版[2]	1.10
	AGMG [3-5]	3.3.5

3. 解析手法・解析対象

熱移動を考慮した Large Eddy Simulation (LES)によって非定常乱流場の急拡大流れを解析することで実施した。解析対象を図 1 に示す。z 軸方向には 80 mm の幅を設け、同程度の格子幅で分割し対称境界とした。解析領域を約 200 万分割した。支配方程式にはフィルター操作を施した非圧縮性 Navier-Stokes 方程式を用いた。有限体積法に基づき離散化した。運動量に関する対流項および拡散項の離散化スキームには二次中心差分法を用いた。時間項の離散化スキームには 3 次の Adams-Bashforth 法を用いた。圧力と速度のカップリングには SMAC 法[6]を適用し、圧力補正值に関する行列方程式の解法には AMG[S [2]を用いた。収束判定条件には流入質量流量で規格化した離散化した連続の式の誤差の絶対値の総和を用い、 10^{-6} 以下となった時点で収束解が得られたものとした。



(a) 解析対象の大きさ



(b) 境界条件

図 1 LES の解析対象

入口から 500 K の空気を 2 or 4 m/s の速度で流入させ、急拡大後の壁温を 1000 K とすることで大きな温度差を与えた。温度の時間変動に関するサンプリングポイントを図 2 に示す。



図 2 温度の時間変化のサンプリング位置

4. 結果と考察

初めに流入速度を 4 m/s とした場合について、急拡大位置からの x 方向距離 Δx , 壁からの y 方向距離 Δy ごとに図 3 に温度の時間変動を示す。前報[1]の RANS による予想とは反して、比較的大きな温度の変動があることが分かった。壁に近いほど変動が大きく、下流(図 3 (h) and (i))では約 100 K の振幅の振動があり、その振動数は 10 Hz に満たなかった。10–50 K の振幅で 10–20 Hz 程度の振動があった。前報[1]の検討により、この程度の大きさの温度の変動は、熱分解において無視できない大きさであることが明らかになっている。

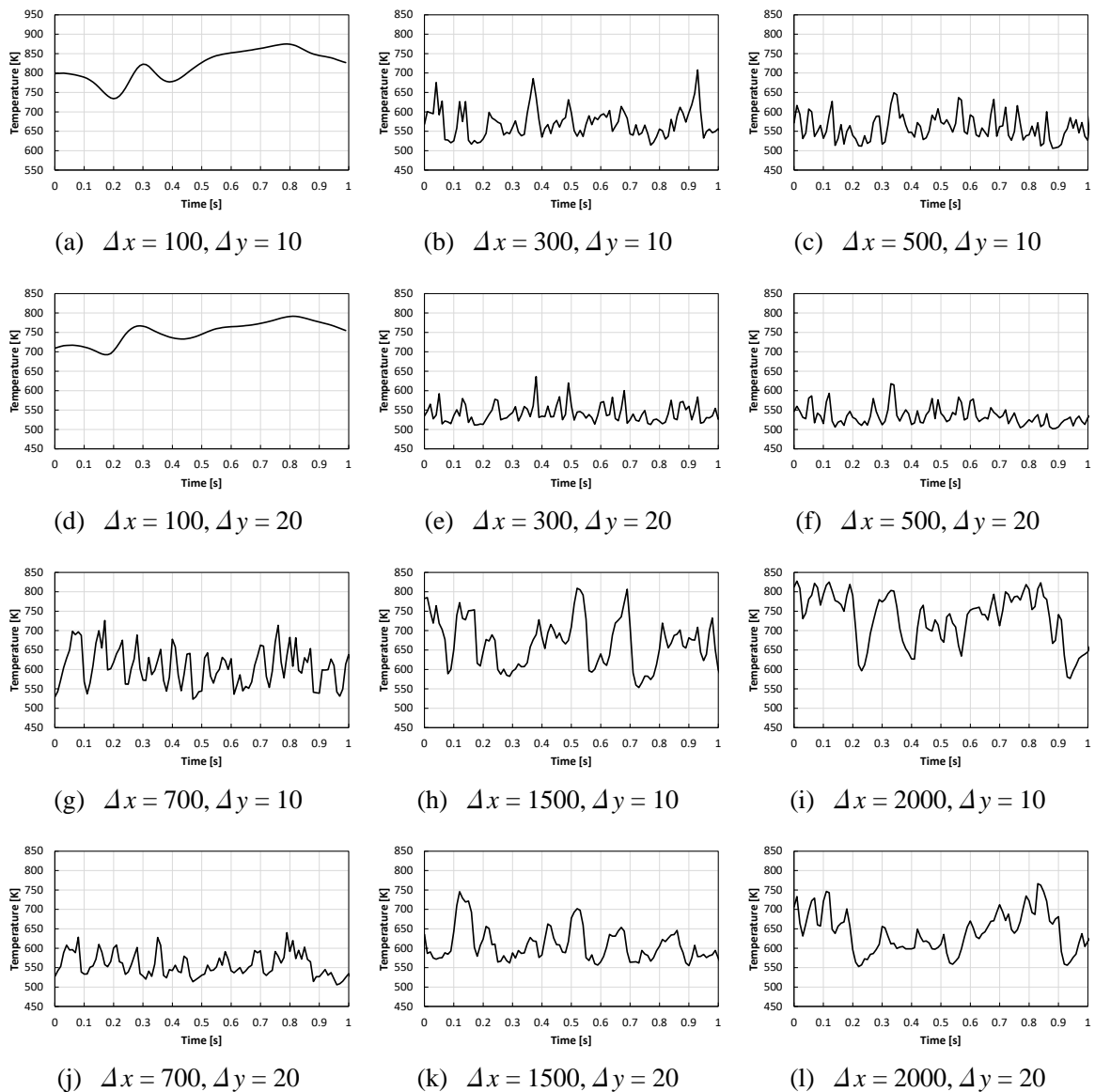


図 3 各位置における温度の時間変化(流入速度 4 m/s、壁温 1000K)

次に流入速度を 2 m/s とした場合について、図 4 に温度の時間変動を示す。流入速度が 4 m/s の場合と比較して大きな温度変動の振動数は 2–3Hz 程度でかなり小さかった。一方で振幅は上流でも壁面では 100 K 程度あり、かなり大きかった(図 4 (a) and (d))。

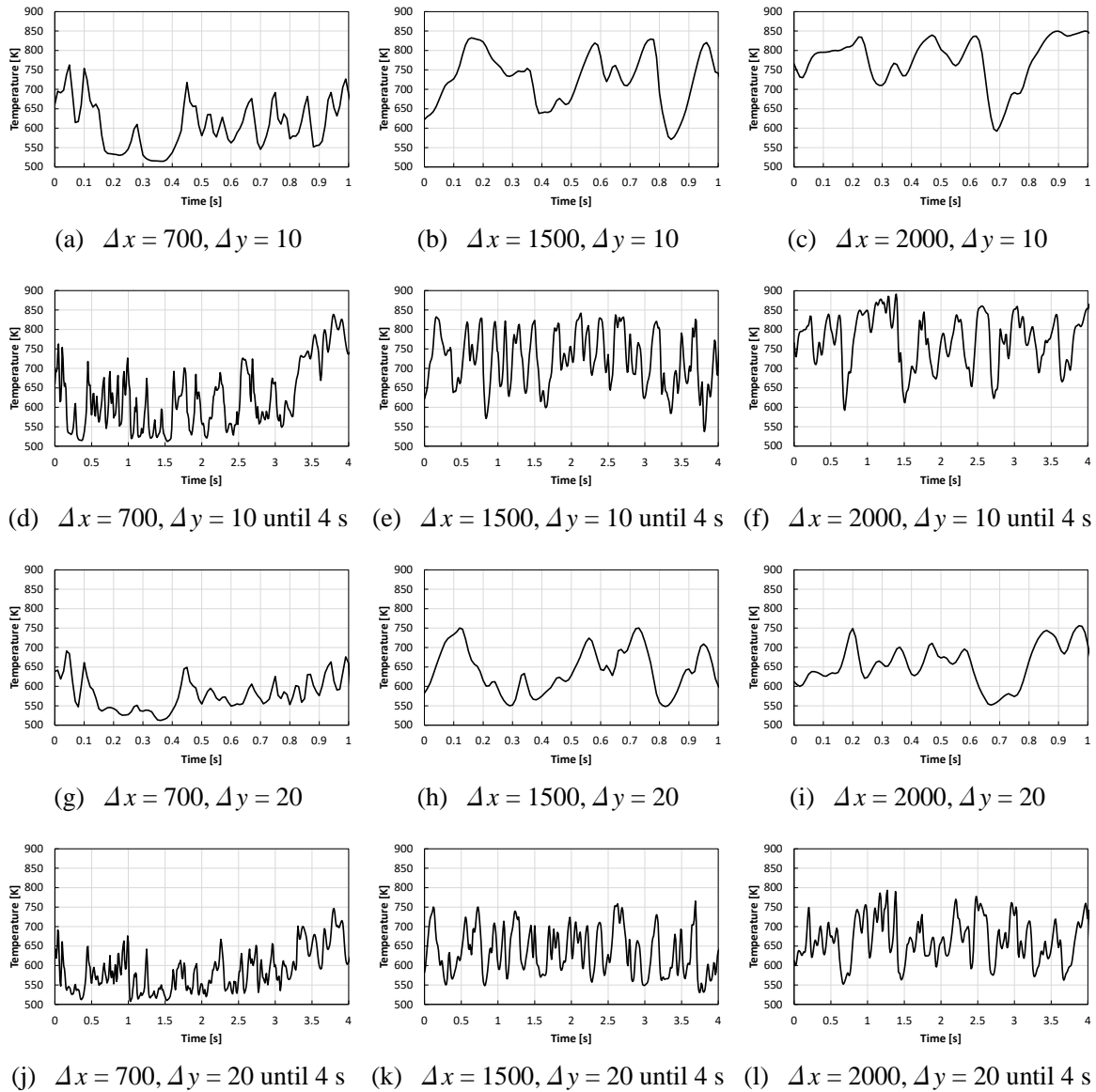


図4 各位置における温度の時間変化(流入速度 2 m/s、壁温 1000K)

4. 結論

本研究の LES シミュレーションにより、壁面からの伝熱に伴う温度の変動の大きさが大きいことが示唆された。これは熱分解速度に大きく影響する変動の大きさのため、温度の変動を考慮するためには、最低でも LES のように非定常の温度変動を考慮可能な手法を用いる必要があることが示唆された。

謝辞

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用することで実現することができた。また、研究にあたっては同センター関係各位に有益なご指導とご協力をいただいた。ここに謝意を示す。

参考文献

- [1] 松川嘉也, 松下洋介, 青木秀之, 熱分解反応シミュレーションにおける温度の変動, SENAC, 2023, 6-12.
- [2] A. Fujii, T. Tanaka, H. P. C. Laboratory, AMGS library, 2010.
- [3] Y. Notay, An aggregation-based algebraic multigrid method, *Electronic Transactions on Numerical Analysis* 37 (2010) 123-146.
- [4] A. Napov, Y. Notay, An Algebraic Multigrid Method with Guaranteed Convergence Rate, *SIAM Journal on Scientific Computing* 34 (2012) A1079-A1109.
- [5] Y. Notay, Aggregation-Based Algebraic Multigrid for Convection-Diffusion Equations, *SIAM Journal on Scientific Computing* 34 (2012) A2288-A2316.
- [6] A.A. Amsden, F.H. Harlow, A simplified MAC technique for incompressible fluid flow calculations, *J. Comput. Phys.* 6 (1970) 322-325.