

■原著論文/ORIGINAL PAPER■

大規模詳細反応機構を考慮した圧縮性燃焼流シミュレーションを可能とする高速・高効率な数値解析手法の開発とその評価

Development and Assessment of an Efficient Method for Simulating Compressible Reacting Flows with Large Detailed Chemical Kinetics

寺島 洋史*・越 光男

TERASHIMA, Hiroshi* and KOSHI, Mitsuo

東京大学大学院工学系研究科総合研究機構 〒113-8656 東京都文京区弥生 2-11-16
University of Tokyo, 2-11-16 Yayoi, Bunkyo, Tokyo 113-8656, Japan

2013年3月12日受付; 2013年7月14日受理/Received 12 March, 2013; Accepted 14 July, 2013

Abstract : Assessment of a reacting flow solver with large detailed chemical kinetics is extensively performed in terms of its efficiency and capability. The present method solves the compressible Navier-Stokes equations with the chemical reaction source terms in the operator-splitting form, i.e., the chemical reaction and fluid parts are solved separately during one time step. For the chemical reaction, a dynamic multi-times scale (MTS) method is introduced for alleviating the stiffness. Several zero- to two-dimensional combustion problems with methane, n-butane, and n-heptane reaction mechanisms are used for the assessment of the present method. The ignition problems with the three reaction mechanisms demonstrate that the present method provides the higher efficiency with smaller time step size and larger number of chemical species, compared to a conventional implicit time integration method (VODE). The present method with MTS is 2~30 times faster than the method with VODE for the ignition problems. The one-dimensional end-gas auto ignition problems with methane and n-butane reaction mechanisms also demonstrate the higher efficiency and the capability of the present method for capturing the interaction between combustion and compressibility, e.g., engine knocking-like behaviors. Further, the present assessment indicates that, if efficient time integration methods such as MTS were applied, the fluid part becomes the limiting factor for simulating reacting flows, because of the time-consuming calculation of the transport properties. The present problems show that the fluid part turns out to be more time-consuming than the chemical reaction part with more than 50 chemical species on the time step size of $1.e-8$ s. As a result, the present method with MTS is 2~5 times faster than the method with VODE for the one-dimensional problem. A detailed estimation of computational time for the transport properties is provided. Finally, the present method is successfully applied to the two-dimensional end-gas auto ignition phenomena of n-butane with available and reasonable computational resources.

Key Words : Large detailed chemical kinetics, Compressible reacting flow, Stiffness

1. 緒言

現在、内燃機関における超希薄燃焼や着火タイミング制御、また多様化する燃料に対応して新たな燃料設計などを行うにあたり、詳細化学反応機構を非定常流体解析に組み込むことが強く要望されている。これまでに実施されてきた混合促進など流体力学に基づく燃焼制御(スワールやタンブル制御など)には限界が見られており、今後、より高効率・クリーンな燃焼を実現するためには、流体と化学反応機構の理解を組み合わせた新しい燃焼制御手法が必要であろう。

しかしながら、大規模詳細反応機構を流体解析に組み込む場合、大きく2つの問題が存在する。化学反応方程式の強い解の硬直性と化学種移流拡散方程式の増加(それに伴う混合輸送係数評価)である。このため、数百数千の化学種、数千数万の素反応から構成される大規模詳細反応機構を流体解析へ導入することは容易でなく、大型計算機が発達してきた現在においても非常に挑戦的な課題となっている。実際、大学や研究所で開発されたコードをはじめ、商用汎用コードにおいても、大規模詳細反応機構を適用できる反応性流体解析コードは未だ少なく、開発途上といえる。

1つ目の問題である化学反応方程式における解の硬直性に関しては、通常、硬直性を避けるため、陰解法[1]や速い反応過程の除去(例えば Intrinsic low-dimensional manifold:

* Corresponding author. E-mail: htera@rocketlab.t.u-tokyo.ac.jp

ILDM [2]など)の適用が考えられる。例えば、陰解法に関しては、後退微分公式法による直接積分法 (Variable coefficient ODE solver: VODE [1]) などが開発されており、流体解析と連成しない0次元問題においては、非常に強力かつ高速な手法である。例えば、VODEを含め様々な陰解法の性能比較が、Nejad [3]により行われており参照いただきたい。一方で、流体解析との併用を考えると、化学種の増加に伴い、陰解法における行列演算や初期化プロセスの必要性から、その効率性が大きく損なわれることが知られている[4,5]。そのため、疎行列を解く反復法の改良などがDASPK [6]などに取り入れられており、現在においても行列演算の大幅な速度向上の取り組みが図られている。しかしながら、陰解法を流体解析へ組み込む場合の本質的問題は、行列反転のための反復法というよりは、計算格子点毎に行わなければいけない初期化プロセスにあることに注意したい。このことを考慮すると、流体と反応を別々に扱う分離解法において、陰解法の適用は難しい。

一方、陽解法は、古典的な多段 Runge-Kutta 法に始まり、その後、硬直性の強い方程式を対象とした幾つかの方法が提案されてきている。主なものとしては、CHEMEQ に実装されている Young and Boris の漸近法[7]、準定常法 (quasi steady state: QSS) [8]を改良した Mott らによる CHEMEQ2 として知られる α -QSS 法[9]、そして Eriksson らの方法[10]などが挙げられる。陽解法は、初期化や行列演算を必要とせず、一般的には陰解法に比べ効率的であるが、解の硬直性が強い場合、時間積分の時間刻み幅の制限や安定性が常に問題となる。

以上を背景として、近年、大規模詳細反応機構を流体解析へ効率的に組み込むための取り組みが盛んに行われつつある。例えば、Shi ら[5]は、陽解法である CHEMEQ2 と陰解法 VODE をハイブリッド化し、かつ CPU と GPU を併用する手法を提案している。また、Hiremath ら[11]は、並列計算機における計算ロードバランス (反応が活発な領域とそうではない領域のバランス) の観点から、乱流燃焼解析における化学反応計算の効率性とスケラビリティを高める試みを行なっている。しかしながら、いずれにおいても、その実装の複雑さにより、導入が容易とはいえない。

本研究では、計算負荷、多次元流体解析との親和性、そして実装の容易性を踏まえ、近年提案された陽解法である dynamic multi-timescale (MTS) 法[4]を導入し、多次元圧縮性流体解析と連成させることで、その適用性と効率性の評価を行う。MTS 法は、陽解法でありながら、上記した陽解法に比べ、解の硬直性を避けることが可能とされている。本研究では、更に、2つ目の問題 (化学種数の増加による移流方程式と輸送係数評価) を考慮し、流体計算 (移流項、粘性項、輸送係数評価など)、化学反応計算時間の評価を行い、どの要素が、大規模詳細反応機構を用いた反応性流体解析の律速となっているかを調べ、明確化する。

化学反応計算に対する MTS 法の性能や適用性は、その提案論文[4]により示されているが、本研究では、実際に、1、

2次元非定常流体解析と連成させることで、流体解析部分を含めた性能評価、適用性、そして問題点を明確化する。また、本論文では MTS 法を使用するが、行われる議論や得られる結論は、より効率的な陽解法を使用した場合にも一貫して適用可能である。

本研究では、圧縮性流体解析手法を採用し、Large-eddy simulation (LES) や Direct numerical simulation (DNS) を想定し、議論を行なっている。これは、Reynolds averaged Navier-Stokes (RANS) に基づく解析が、定常燃焼現象に対しては有効であるが、前述したような我々が目指している燃焼不安定性、着火や保炎機構といった非定常燃焼現象の解明には限界があるからである。また、未だ適切な解析手法が無い燃焼騒音や燃焼共振においては、圧縮性と燃焼との連成が重要となる。一方で、本研究で得られる圧縮性流体 LES や DNS を想定した結論と RANS や非圧縮性流体解析のような圧力分離解法との関連性も重要なため、最後にその関連性の議論を行う。

2. 数値解析手法

2.1. 支配方程式

本研究では、各化学種の移流拡散方程式を加えた圧縮性 Navier-Stokes 方程式を支配方程式とする。熱的完全気体を仮定する。

$$\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot \rho \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\partial \rho \mathbf{u} / \partial t + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + p \boldsymbol{\delta} - \boldsymbol{\tau}) = 0 \quad (2)$$

$$\partial E / \partial t + \nabla \cdot ((E + p) \mathbf{u} - \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{q}) = 0 \quad (3)$$

$$\partial \rho Y_s / \partial t + \nabla \cdot (\rho Y_s \mathbf{u}) - \nabla \cdot (\rho D_s \nabla Y_s) = \dot{\omega}_s \quad (4)$$

ここで、 ρ は密度、 \mathbf{u} は速度ベクトル、 p は圧力、 E は全エネルギーである。 $\boldsymbol{\tau}$ は粘性応力テンソル、 \mathbf{q} は熱流束ベクトル、 $\boldsymbol{\delta}$ は単位テンソルを表す。 Y_s は各化学種の質量分率、 D_s は拡散係数、そして $\dot{\omega}_s$ は反応速度である。下添字 s は化学種を表し、 $s = 1 \sim N$ で、 N は全化学種数である。 t は時間である。本研究では全密度と全ての化学種密度を変数としており、条件多価となっているが、本論文中の議論には影響が無いと考えている。計算に密度が必要な場合には、全密度式 (1) の密度を使用した。物質拡散における圧力、体積力、そして熱拡散の影響は無視する。

本研究では、流体と反応の時間スケールの違いを考慮し、それぞれの支配方程式を別々に解く分離解法を適用する[12]。すなわち、流体を解く場合、反応に関わる項である式 (4) の反応速度項 $\dot{\omega}_s$ をゼロとする。一方、化学反応方程式は、式 (1)~(4) において、体積と内部エネルギーが一定、全ての物理量の空間微分を無視と仮定することで、次のような常微分連立方程式として得られる。

$$dY_s/dt = \dot{\omega}_s/\rho \tag{5}$$

$$dT/dt = -\sum_{s=1}^N e_s \dot{\omega}_s / (\rho c_v) \tag{6}$$

ここで, T は温度, e_s は各化学種の内部エネルギー, そして c_v は混合物の定積比熱である.

2.2. 流体方程式の数値解法

反応速度項を無視した流体方程式 (1)~(4) に対して, 数値流束を HLLC [13]で評価し, MUSCL [14]で高精度化した. 制限関数として minmod 関数を用いた. 時間積分には 3 段 TVD Runge-Kutta 法[15]を使用した. これら手法は, 圧縮性 Navier-Stokes 方程式を解く上で標準的な方法といえる.

各化学種の粘性係数と 2 成分拡散係数は, 分子運動論に基づく Hirschfelder の式[16]を, 熱伝導率は, Warnatz の式 [17]を用いた. 混合物に対しては, 粘性係数は Wilke により提案され Bird らにより修正された式[18], 熱伝導率は Mathur らの式[19]を用いた. 混合拡散係数は Bird らの式を用いた[18] (混合気平均拡散係数, すなわち mixture-averaged model). 輸送係数の実装は, [20]を参照いただきたい.

2.3. 化学反応方程式の数値解法

化学反応方程式 (5) と (6) を時間積分する際に問題となるのが, 各化学種の特性時間の違いによる解の硬直性である. 本研究では, 解の硬直性による時間刻み幅の制限を避けること, 流体解析との効率的な連成を考慮し, MTS 法[4]を導入した. MTS 法では, まず, 化学種の特性時間を評価し, その特性時間に応じて化学種を動的にグループ分けし, グループ毎に適切な時間刻み幅を設定して時間積分する. 詳細は原論文にあるが, 重要な要素や本研究で新たに導入した部分を説明する.

MTS 法の概要を図 1 に示す. 化学種を特性時間によりグループ分けした後, まず, fast group に対して設定された時間刻み幅で全ての化学種を積分し, fast group に属する化学種質量分率変化が収束した時点で, それに属する化学種を凍結する. 続いて, intermediate group に対して設定されたより大きな時間刻み幅によって残りの化学種が積分される. これを繰り返し, 最終的に, 最も長い特性時間を持つグループである slow group が, 設定された時間 (Δt_{base}) まで時間積分される. このように各化学種に適切な時間刻み幅を動的に設定することにより, 陽解法でありながら解の硬直性を避けることが可能となる. 時間積分は Euler 陽解法で行われる (多段積分法も考えられるが, その分計算時間を要することになる). 図中では 3 つのグループのみを書いているように見えるが, 実際にはより多くのグループ数が生成されることに注意いただきたい.

グループと各グループの時間刻み幅 Δt_g は次のように決

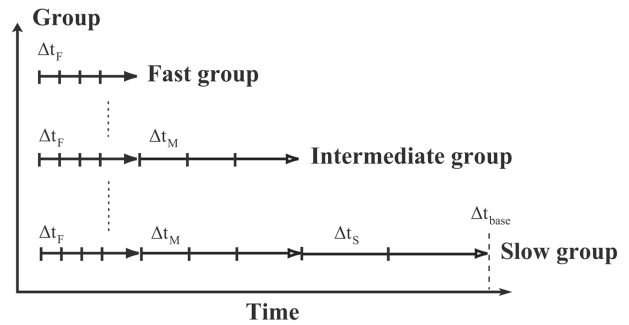


Fig. 1 A procedure of MTS: concept of time integration and grouping (note that, while the figure presents only three groups, in most cases several groups more than three are generated).

定される. まず, 化学種特性時間が減少速度 D_s を用いて以下の式 (7) により評価される[4,21] (ある化学種の反応速度は, $\dot{\omega}_s = P_s - D_s$ と書くことができ, P_s は生成速度である).

$$\tau_s = Y_s/D_s \tag{7}$$

この特性時間に基づき, 生成される全グループ数 N_T とどの化学種 s がどのグループに属するかを示すインデックス N_s を以下のように定義する.

$$N_T = \log_{10}(\Delta t_{base}/\tau_{min}) + 1 \tag{8}$$

$$N_s = \log_{10}(\Delta t_{base}/\tau_s) + 1 \tag{9}$$

ここで, τ_{min} は最小特性時間である. 原論文では言及されていないが, 本研究では, ゼロ割を避けるため, 適当な小さな値 (例えば, 10^{-14}) で制限している. 最終的に, あるグループ N_g の時間刻み幅 Δt_g は, 式 (9) より,

$$\Delta t_g = \alpha \Delta t_{base}/10^{N_g-1} \tag{10}$$

と決定される. 式 (10) の係数 α は, 本研究で導入した $0 < \alpha \leq 1$ を満たす任意の定数であり, 計算安定化のため $\alpha = 0.25$ と設定した.

陰解法 VODE の使用においては, 主要な設定パラメータとして, ヤコビ行列の内部生成 (MF = 22), 絶対誤差 ATOL が 10^{-13} , そして相対誤差 RTOL が 10^{-5} と設定した. いずれも標準的な値と考えられる. 但し, Nejad [3]の評価にもあるように, これらの与え方で計算時間が変化することには注意いただきたい. また, 0 次元計算においても, 流体解析との連成を考慮して, 毎回初期化を行なっている.

2.4. 計算手順

計算手順をまとめる. 時間方向の連成には, Strang-type の進行法[12]などが考えられるが, 本研究では, 流体と反応方程式を順々に解き進める手順を採用した. そのため,

Table 1 Comparison of computational time between MTS and VODE.

	初期圧力 初期温度 経過時間	1×10^{-7}		1×10^{-8}	
		Save / %, VODE (上) と MTS (下) の計算時間 (s)			
CH ₄	1 atm 1500 K 3 ms	67.2	102	83.2	1009
			33		169
	10 atm 1300 K 3 ms	54.4	103	82.9	1021
			47		174
n-C ₄ H ₁₀	1 atm 1300 K 1.2 ms	52.0	98	89.4	1146
			47		121
	10 atm 1100 K 1.4 ms	50.8	122	88.6	1154
			60		132
n-C ₇ H ₁₆	1 atm 1300 K 1 ms	83.0	893	96.0	8128
			152		326
	10 atm 1100 K 1.1 ms	86.2	1064	96.6	9507
			146		322

系としては時間1次精度に制限されるが、使用している時間刻み幅が小さいため、その影響は無視できる(1次元解析で確認している)。計算手順は次のようになる。

1. 流体計算から、化学種質量分率 Y_s , 温度 T を得る
2. 式(7)から、各化学種特性時間 τ_s を評価する
3. 式(9)により、化学種をグループに分ける
4. 式(10)の時間刻み幅 Δt_g で、反応方程式を積分する
5. 収束判定を行い、収束したグループの化学種質量分率を凍結する
6. 指定した Δt_{base} まで積分後、化学種質量分率、温度を流体計算へ渡す
7. 1へ戻る

ここで、条件によっては、特性時間が小さい中間帯のグループが収束せず、指定した Δt_{base} まで積分される場合もある。この場合は、演算時間が長くなる。これは、反応場が、中間帯グループに所属する化学種の特性時間に支配されている場合に起こり得る。収束判定は、VODE同様、各化学種

質量分率と温度に対して、絶対誤差 ATOL が 10^{-13} , 相対誤差 RTOL が 10^{-5} と設定した。

3. 結果および考察

3.1. 0次元問題

まず、流体解析とは連成しない0次元着火問題(式(5)と(6)のみが解かれる)において、MTSと陰解法VODEとの比較を行った。3つの反応系、CH₄/Air(68化学種, 334反応), n-C₄H₁₀/Air(113化学種, 426反応), そしてn-C₇H₁₆/Air(373化学種, 1071反応)を考え、いずれも当量比1.0とした。反応機構は、KUCRS[22]により作成された。表1に計算時間の比較を示す。CPUには、Intel core i7(2.93 GHz)で1 coreのみ用いた(自動並列は使用しない)。初期圧力と温度は表1に示すように設定し、2つのベース時間刻み幅 $\Delta t_{base} = 1 \times 10^{-7}$, 1×10^{-8} を用いた結果を示す。これらの時間刻み幅は、圧縮性流れにおいて陽解法を使用した場合(音速基準のCourant-Friedrichs-Lewy: CFL条件に依存する)の典型的な値と考えられる。表1中のsaveは、以下の定義で計算した。

$$\text{save} = 100 \times (t_{\text{VODE}} - t_{\text{MTS}}) / t_{\text{VODE}} \quad (11)$$

ここで、 t_{VODE} , t_{MTS} は、それぞれVODE, MTSによる必要とした計算時間を表す。

基本的な傾向として、化学種数が増加する、もしくは時間刻み幅 Δt_{base} が小さくなると、VODEに比べて、MTSの効率性が高くなるのがわかる(図2に、高圧10 atmの場合の結果をグラフ化しており、参照いただきたい)。高圧になると、解がより硬直になることが予想されるが、効率性はほとんど変わらない結果となった。化学種数の増加に関する効率性向上の理由については、陰解法であるVODEが行列演算の必要性から少なくとも $O(N_s^2)$ で演算量が増えるのに対し、MTSは $O(N_s)$ で済むためである。

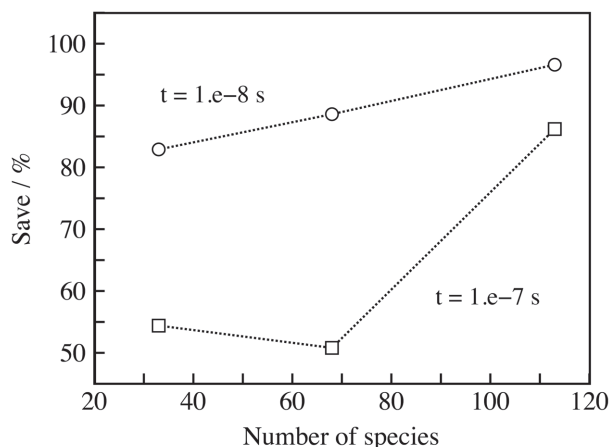


Fig. 2 Computational save rate by MTS against VODE for ignition problems in the case of initial pressure of 10 atm.

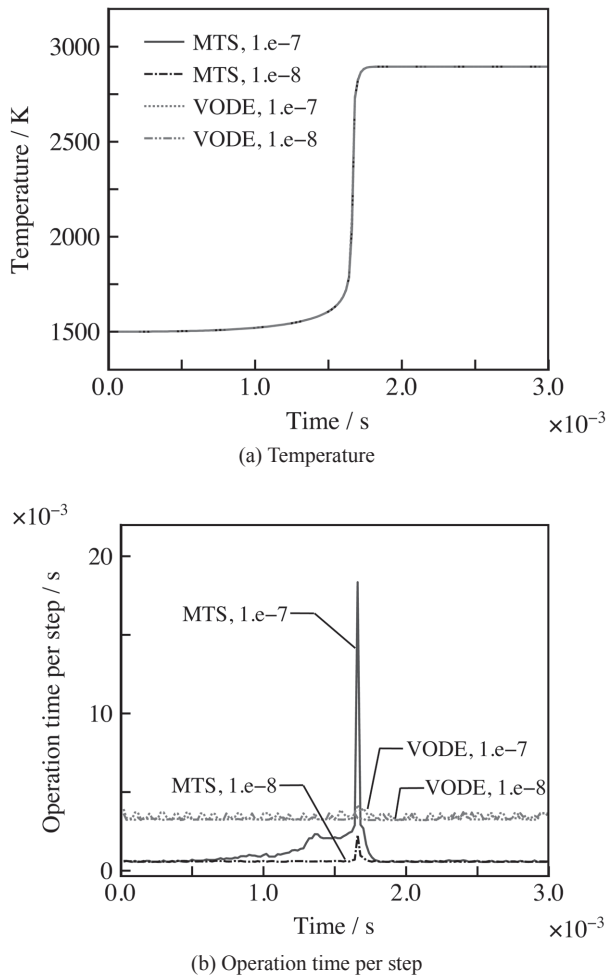


Fig. 3 Temperature profiles and operation times of MTS and VODE on CH₄/Air ignition problem under constant volume and adiabatic conditions.

一方で、時間刻み幅の大きさによる効率向上の理由を調べるため、一例として、CH₄/Air 着火問題 (1 atm, 1500 K) の結果と各方法の演算時間変化を図 3 に示す。図 3 (b) の縦軸の演算時間は、計算 1 step にかかった時間であり、横軸は物理経過時間である。VODE は、ベース時間刻み幅 Δt_{base} に関わらず、計算 1 step にかかる時間は、計算中ほぼ一定で推移することがわかる (そのため、時間刻み幅を 1/10 とし、反復回数を 10 倍にすると、ほぼ 10 倍の計算時間が必要となる)。一方で、MTS は、着火が生じる時間帯においてのみ、計算時間が急激に増加し (これは中間帯のグループで指定した Δt_{base} まで積分されたことを意味する)、それ以外の時間帯では、VODE に対して、少ない演算時間で推移していることがわかる。この結果から、MTS の計算時間は、VODE と異なり、時間刻み幅の大きさに単純には比例しない特徴を持つ。そのため、ベース時間刻み幅 Δt_{base} を小さくした場合に、MTS の効率性がより向上することになる。また、着火が生じていない時間帯において、MTS の計算負荷が少ないことも、多次元流体解析との連成を考えた場合に大きな利点となる。

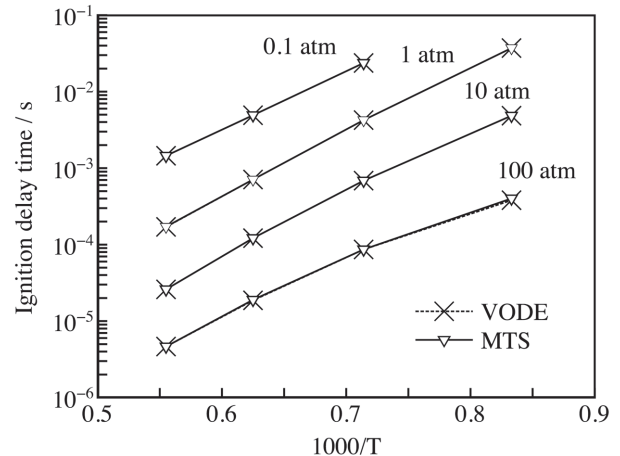


Fig. 4 Comparison of ignition delay time between MTS and VODE on CH₄/Air ignition problems under constant volume and adiabatic conditions. $\Delta t_{base} = 1 \times 10^{-8}$ s.

計算の妥当性については、図 3 (a) や図 4 に示すように、幅広い初期温度・圧力に対して (原論文には無い高圧 100 atm 条件を含めた)、着火遅れ時間や平衡温度値 (ここでは示していない) に関して、参照解となる VODE と良い一致が得られている。

3.2. 流体と連成した場合の評価 (1, 2 次元解析)

流体解析と連成した場合、計算効率性の評価に移流、粘性、熱伝導、拡散項、そして輸送係数の計算時間が新たに加わる。過去の研究[23]では、化学種数が 20 を超えると、混合物に対する輸送係数の評価が計算時間の律速になるという概算的な報告がある。しかしながら、実際、Navier-Stokes 方程式を用いる燃焼流シミュレーションにおいて、計算時間の評価を明確にしている研究例はほとんど見られない。

3.2.1 問題設定

本研究では、予混合エンドガス自着火問題[24]を取り上げた。高温着火源における自己着火、火炎伝搬、エンドガスの着火、そして圧力波伝搬と圧縮性燃焼流シミュレーションにおいて重要な要素を複数含んでおり、評価として適当な問題と考えた。2つの予混合気体、CH₄/O₂/Ar (68 化学種, 334 反応), n-C₄H₁₀/O₂/Ar (113 化学種, 426 反応) に対して評価を行った。概要を図 5 に示す。領域長さ L が 5 cm, 左境界を対称境界, 右境界を断熱壁とする。左境界において、0.25 cm の領域を高温着火源とした。経過時間 4 ms まで計算を行った。それぞれの計算条件を表 2 にまとめる。当量比は 1.0 である。本条件は、計算時間評価を主目的としたため、火花点火機関を想定した計算としては、やや非現実的である。計算格子は一様間隔とし、51 点 (格子幅 $\Delta x = 0.1$ cm) とした。0次元問題と同様に、2つの計算時間刻み幅 ($\Delta t = 1 \times 10^{-7}$, 1×10^{-8}) を用いた。計算 CPU は、Intel core i7-3960X (3.3 GHz) である (自動並列は使用しない)。

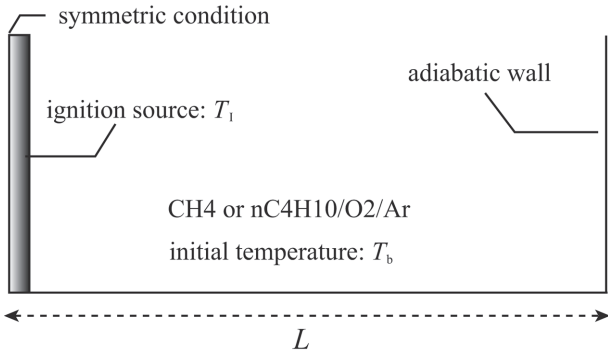


Fig. 5 Schematic of one-dimensional end-gas auto ignition problem.

Table 2 Computational conditions for end-gas auto ignition problem.

/O ₂ /Ar	初期圧力	初期温度 T_b	着火源 T_1
CH ₄	1 atm	1300 K	1600 K
n-C ₄ H ₁₀		1000 K	1400 K

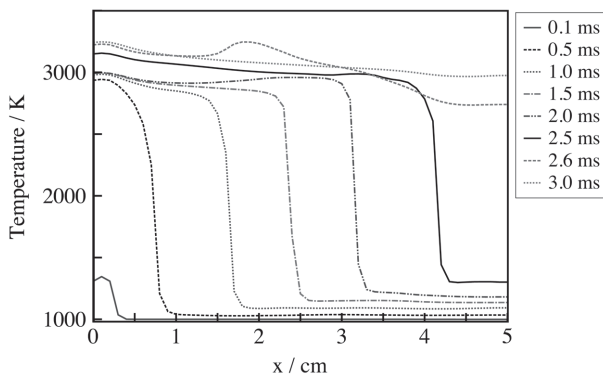


Fig. 6 Time histories of temperature profiles on 1-D end-gas auto ignition of n-C₄H₁₀/O₂/Ar.

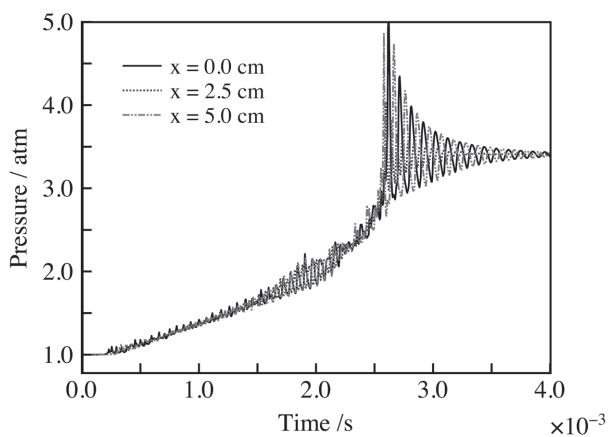


Fig. 7 Time histories of pressure at three different locations.

3.2.2 1次元エンドガス自着火現象

図6に n-C₄H₁₀/O₂/Ar における幾つかの時間の温度分布を示す。時間刻み幅 $\Delta t = 1 \times 10^{-7}$ の結果である。まず、左端の高温源で自着火し、予混合気体中を火炎が伝搬する。火炎前方のエンドガスの温度も徐々に高くなり、時刻 $t = 2.5 \sim 2.6$ ms において、エンドガス全体が着火し、最終的に領域内がほぼ一定の温度になる。

図7に、左端 ($x = 0.0$ cm)、中間 ($x = 2.5$ cm)、そして右端 ($x = 5.0$ cm) における圧力時間履歴を示す。火炎の伝搬と共に計算領域内の圧力は徐々に増加し、エンドガスの自着火と共に大きな圧力波を発生し振動している。左端と右端では、ちょうど180度位相がずれた圧力波伝搬となっている。このようなエンドガス着火による圧力振動(ノッキング)の様子は過去の実験論文[24]にも見られており、本研究で行った圧縮性燃焼流シミュレーションによって大まかな傾向が捉えられたといえる。ここには示していないが、VODEによる計算結果はほぼ同じになり、時間刻み幅の影響もほとんど見られない(splittingの影響は小さい)。また、音速を用いた流体 CFL 条件で決定される時間刻み幅は、比較的荒い格子幅のため、今回設定した $\Delta t = 1 \times 10^{-7}$ よりもやや大きい。本研究では計算効率性の評価を主目的としているため、火炎帯など、燃焼流れ場を適切に解像しておらず、火炎速度を含め詳細な流れ場の議論には更なる計算が必要と考えている。

3.2.3 計算時間の比較

表3と図8に計算時間の比較を示す。時間刻み幅が大きい $\Delta t = 1 \times 10^{-7}$ の場合、表1に示した0次元の結果とほぼ同じになっている一方で、 $\Delta t = 1 \times 10^{-8}$ の場合、MTSの効率性が0次元計算結果に比べやや低下していることがわかる。これは、1次元燃焼流解析においても、化学反応計算に対するMTSの高効率性は維持されるが、全体計算時間に対する流体計算の割合が増えているためである。

Table 3 Comparison of computational time between MTS and VODE on 1-D end-gas auto ignition problem.

/O ₂ /Ar	1×10^{-7}		1×10^{-8}	
	Save / %	VODE (上) と MTS (下) の計算時間 (s)	VODE (上) と MTS (下) の計算時間 (s)	Save / %
CH ₄	60.5	7791	70.0	67837
		3077		20412
n-C ₄ H ₁₀	59.3	18762	71.5	163137
		7626		46566

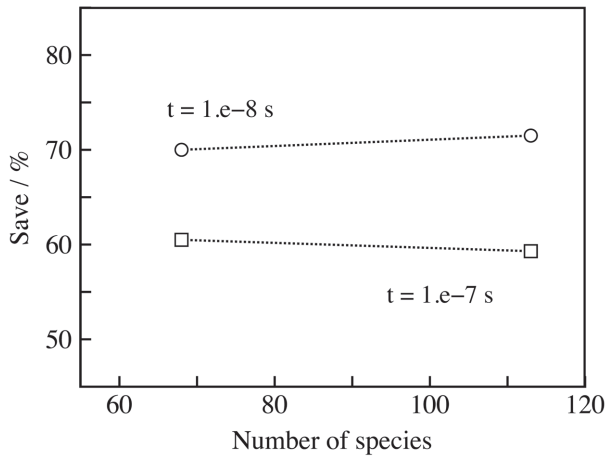
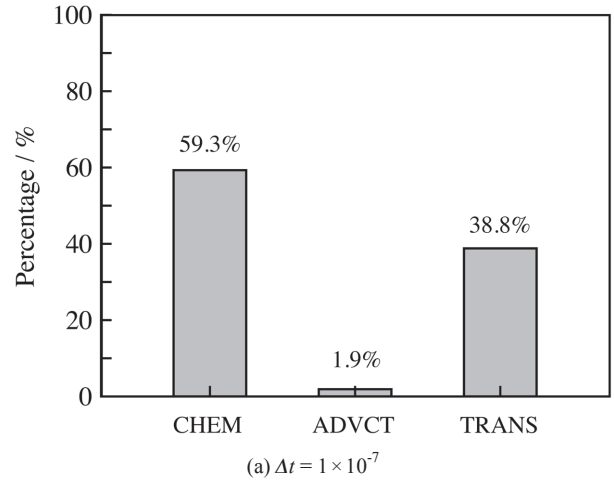


Fig. 8 Computational save rate by MTS against VODE for 1-D end-gas auto ignition problems.

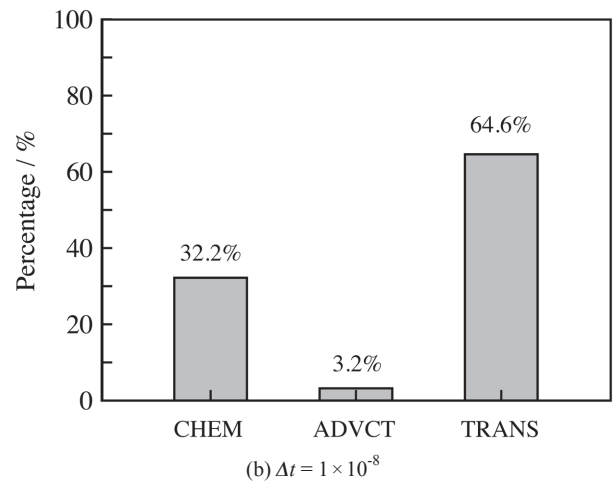
この振る舞いを詳細に説明するため, n-C₄H₁₀/O₂/Ar に対し, MTS を用いた場合の, 全体時間に対する各要素の計算時間割合を図9に示す. 時間刻み幅が大きい $\Delta t = 1 \times 10^{-7}$ の場合 (図9(a)), 化学反応計算の割合が流体計算を上回るが, $\Delta t = 1 \times 10^{-8}$ の場合 (図9(b)) には, この傾向が逆転し, 流体計算の割合が大幅に増加する. 更に, 流体計算を移流項 (時間積分も含む) とそれ以外の非移流項 (粘性項や輸送係数評価など) に分けて見ると, ほとんどの演算時間が非移流項部分に占められていることがわかる. 著者らの経験上, 通常の反応を考慮しない圧縮性流体解析 (陽解法) では, 非移流項の演算は, 移流項の2~3倍程度となる. 一方で, 今回の計算では, 20倍程度の違いとなっており, 流体計算時間のほとんどが, 多成分輸送係数の評価に費やされているといえる.

図10に化学種数に対する各要素の計算時間割合の傾向を示す. ここで, 小さな反応機構として, DRG法[25]により簡略化された CH₄/O₂/Ar (33化学種, 150反応)の結果を追加した. 時間刻み幅 $\Delta t = 1 \times 10^{-8}$ の場合では, 化学種数が約50以上になると, 流体計算の割合が化学反応計算よりも高くなり, 化学種数の増加と共にその差が更大きくなる. 一方, 時間刻み幅 $\Delta t = 1 \times 10^{-7}$ の場合, ここで対象とした反応機構では, 常に化学反応計算の割合が流体より高いが, 化学種数の増加に従い, 流体計算時間との差は縮まっていくことがわかる.

以上の結果から, 時間積分法として陽解法を用いた圧縮性反応性流体解析では, 時間刻み幅と化学種数の大きさに従い (本研究では, $\Delta t = 1 \times 10^{-8}$ 程度以下, 50化学種以上), 化学反応計算は律速ではなくなり, 流体計算, 特に多成分輸送係数の評価が律速となることが示された. すなわち, 化学種数の増加や格子解像度の増加に伴い (例えば, LESやDNSの実施を想定すると), 反応計算よりもむしろ, 流体計算 (多成分輸送係数評価) の効率性を高めていかなければならない. ちなみに, 陰解法 VODE を用いた場合, 0次



(a) $\Delta t = 1 \times 10^{-7}$



(b) $\Delta t = 1 \times 10^{-8}$

Fig. 9 Comparison of computational times. CHEM denotes the chemical reaction. In fluid, ADVCT is for the advection with the time integration, and TRANS means the rest part, including the estimation of transport properties.

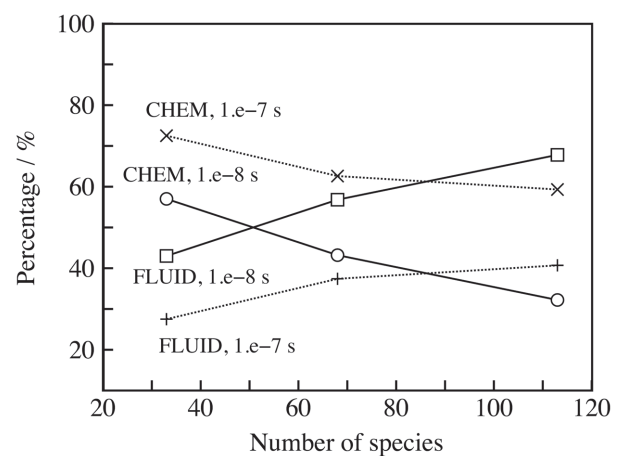


Fig. 10 Scaling of each computational part in terms of the number of chemical species, where CHEM denotes the chemical reaction part and FLUID denotes the fluid part.

元問題でも示されたように、時間刻み幅の大きさに従い化学反応計算時間も同じ割合で増加するため、化学反応計算と流体計算割合の逆転は生じない。すなわち、常に化学反応計算が反応性流体解析の律速となることに注意された。

3.2.4 多成分輸送係数の評価について

ここで、多成分輸送係数の評価が律速となる理由を粘性係数によって具体的に調べてみる。一般的に、多成分粘性係数モデルとして、Wilkeの式がよく用いられる[18,26]。

$$\mu = \sum_i^N \frac{\mu_i}{1 + \sum_{k \neq i} \frac{X_k}{X_i} \Phi_{ik}} \quad (12)$$

ここで、 μ_i は化学種 i の粘性係数、 X_i はモル分率、そして Φ_{ik} は相互作用係数である。 N は総化学種数である。一方で、精度はやや落ちるが、次のような経験式も提案されている[27]。

$$\mu = \frac{1}{2} \left[\sum_i^N X_i \mu_i + \left(\sum_i^N \frac{X_i}{\mu_i} \right)^{-1} \right] \quad (13)$$

これら式(12)と(13)のオペレーションカウント(四則演算の総数)を概算し、その比をとったものを図11に示す。オペレーションカウントは、近似的に、式(12)は $3N^2 + 2N - 1$ で、式(13)は $4N$ で評価できるとした。この概算において、式(12)における相互作用係数 Φ_{ik} のオペレーションカウントは考慮に入れていない(つまり式(12)のカウントはやや少なく見積もられている)。それぞれの式から予想されるように、Wilkeの式は、ほぼ N^2 で比例するのに対し、経験式は、 N で比例するため、化学種数の増加と共に2式のオペレーションカウント比は線形的に変化する。例えば、今回用いた $n\text{-C}_4\text{H}_{10}$ (113化学種)を考えると、経験式により約86倍程度以上の速度向上が期待できる。これは、熱伝導率についても同様のことがいえる(今回用いたMathurらの式は、式(13)と同じ形であるため、熱伝導率に対してWilkeの式のような評価を行った場合[27]、今回の評価以上に輸送係数評価が律速となる)。

分子拡散係数については、混合気平均拡散モデルの場合、指数関数部の計算時間が問題となるため、評価する化学種数を少なくすることや、Lu and Lawにより提案されているspecies bundle [23]で計算時間の削減が可能と期待できる。また、今回用いた混合気平均拡散モデルと多成分拡散を考慮した multicomponent model (多成分拡散モデル) [28]との計算時間の比較を図12に示す。図縦軸は、多成分拡散モデルと混合気平均拡散モデルとの計算時間の比である。例えば、 CH_4 で約27倍、 $n\text{-C}_7\text{H}_{16}$ で約127倍と、化学種数の増加と共に多成分拡散モデルの計算時間は急激に増加する。従来から、高精度であるものの多成分拡散モデルが使われることはほとんどないが、このような具体的な評価によって、各モデル間の差を認識しておくことは重要である。それでは、多成分輸送係数の中で最も時間がかかるもの

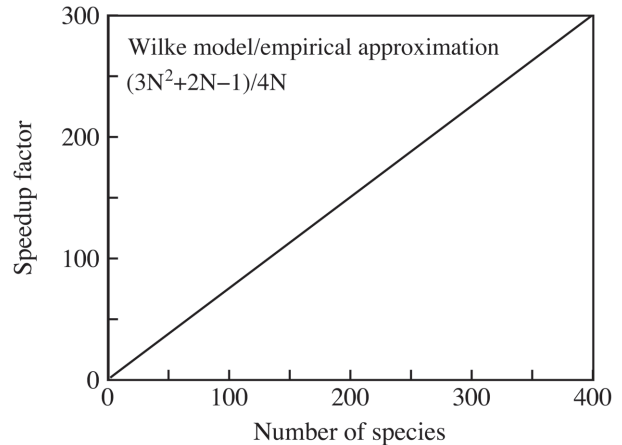


Fig. 11 Comparison of operational counts between Wilke model and an empirical approximation.

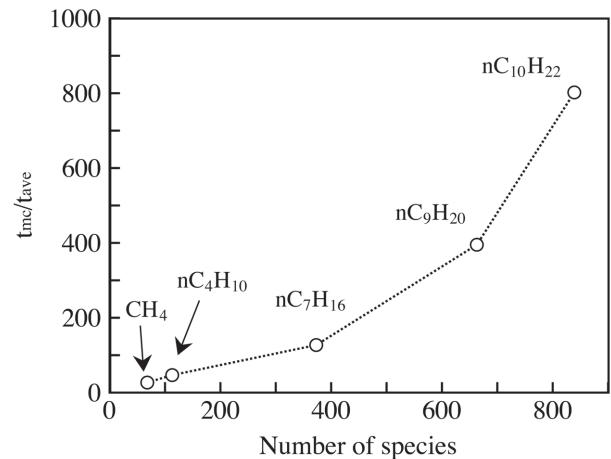


Fig. 12 Comparison between multicomponent and mixture-averaged diffusion coefficients, where t_{mc} denotes the computational time for multicomponent model and t_{ave} for mixture-averaged model.

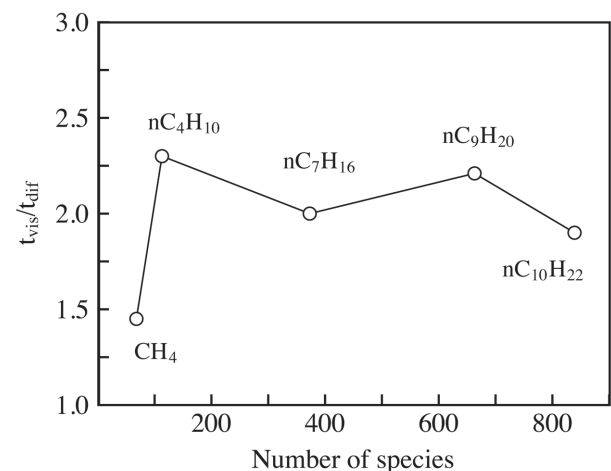


Fig. 13 Comparison of computational time between viscosity (Wilke model) and diffusion coefficients (mixture averaged model), where t_{vis} denotes the computational time for viscosity and t_{dif} for diffusion coefficients.

は何か, それを評価した結果を図 13 に示す. 粘性係数と熱伝導率はほぼ同じ式で書けるため, 粘性係数 (Wilke model) と拡散係数 (混合気平均拡散モデル) との比較を行った. 図縦軸は, 粘性係数の計算時間を拡散係数の計算時間で割ったものである. この図より, 今回評価したどの化学種数においても, 粘性係数が最も律速部であること, そして拡散係数に対して約 2 倍の計算時間を要することがわかる. すなわち, 式 (12) のような混合気評価式を用いた場合 (N^2 のオペレーション), 多成分輸送係数において粘性係数もしくは熱伝導率が律速部となる. 一方, 前述した通り, 式 (13) のような評価 (N のオペレーション) により混合気輸送係数の計算時間は劇的に短縮する. この場合, 拡散係数が律速部となる.

3.2.5 2次元エンドガス自着火現象

最後に, エンドガス自着火問題の 2次元解析結果を図 14 (温度の時系列可視化) と図 15 (圧力の時間履歴) に示す. $n\text{-C}_4\text{H}_{10}/\text{O}_2/\text{Ar}$ (113 化学種, 426 反応) の予混合気体を対象とした. 1次元解析とは, 初期高温源を半径 0.25 cm の円 (図 14 (a) を参照) としたこと以外は同様の条件である. 計算領域 5 cm \times 2.5 cm に対して, 計算格子点数 201 \times 101 (一樣格子幅で, $\Delta x = \Delta y = 0.025$ cm) で解像し, 東京大学情報基盤センターの FX10 システム (5 nodes, 78 cores) を用いて計算を行った. 時間刻み幅は $\Delta t = 1 \times 10^{-7}$ とした. 約 4 ms の計算に対して, 50 時間程度の計算時間を必要とした (1次元結果からの単純な見積りでは, 陰解法 VODE の使用では, その 3 倍程度の計算時間増加が予想される). 高温源での自着火, 2次元空間における火炎伝播の様子, そして最終的にエンドガスが自着火し, 強い圧力波を発生させていることが確認できる (図 14 のキャプションのアルファベットが, 図 15 中の記号と対応する). 一方で, 1次元解析同様, 本格解像度により, 火炎伝搬を適切に解像しているとはいえ, 現象の詳細な議論には今後の更なる計算が必要である. 但し, 計算格子点数 101 \times 51 においてもほぼ同様のエンドガス着火タイミングが得られている. 以上の結果により, 効率的な時間積分法の導入を行うことで, 大規模詳細反応機構を用いた 2次元反応性流体計算が, 現実的な計算時間・規模で可能となるといえる.

3.3. RANS 解析との関連性について

本研究では, LES や DNS の使用を想定して議論を行ってきた. 一方で, RANS 計算では, 乱流モデルによる輸送係数が支配的となるため, 今回のような多成分輸送係数の評価 (粘性係数や熱伝導率の層流成分や分子拡散係数) は必要とされないことが想定される. しかしながら, RANS 計算においても, 重要ではないと認識しながらも層流輸送係数の多成分評価を行なってしまい, 律速部となる可能性は十分に考えられる. 重要なことは, RANS, すなわち乱流輸送係数が支配的となる場合には, 粘性係数や熱伝導率の層流成分や分子拡散係数の多成分評価は無視するか出来る

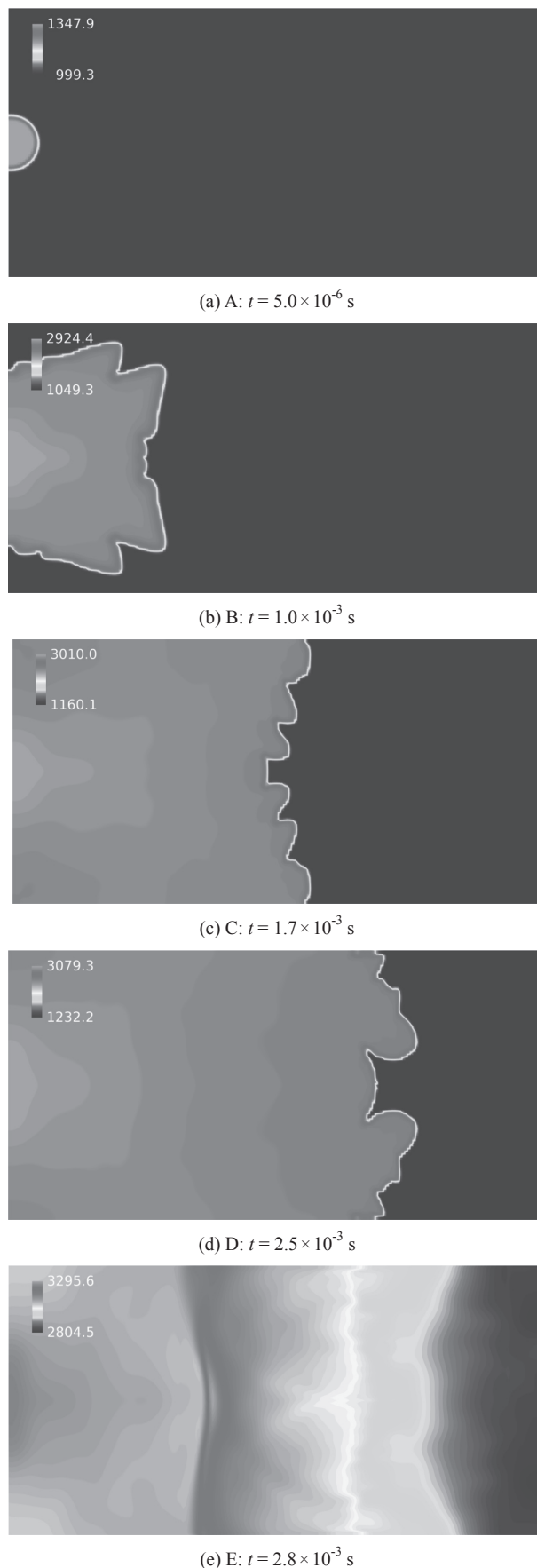


Fig. 14 Sequential views of temperature distributions on two-dimensional end-gas auto ignition problem.

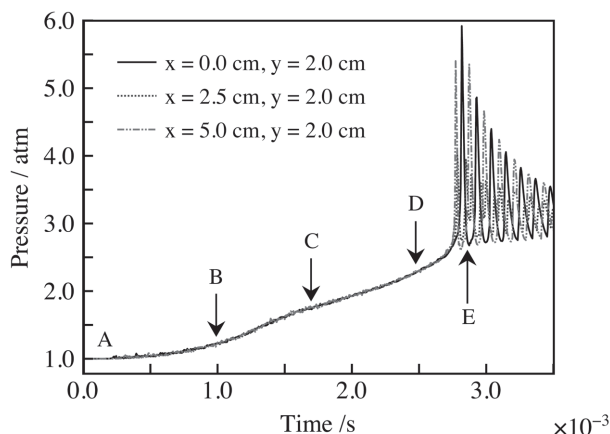


Fig. 15 Time histories of pressure at three different locations for two-dimensional problem.

限り簡素に行うべきということである。

3.4. 圧力分離法との関連性について

燃焼現象は低速を対象とするものが多く、音速伝搬を無視して非圧縮性流体解析で見られるような圧力分離法を使う場合も多い。この場合、時間刻み幅は音速による CFL 条件に制限されないため、本論文で使用した大きさから 1 桁から 2 桁大きい時間刻み幅を使用することが想定される。この場合、本研究結果の表 1 からデータを外挿すると、陰解法と陽解法との時間差は徐々に小さくなっていくことが予想され、多成分輸送係数の問題も図 9 をベースに考えると、その評価は相対的に小さくなる可能性がある。より大きな時間刻み幅を使用できる場合については今後の課題である。

4. 結言

大規模詳細反応機構を考慮した圧縮性燃焼流シミュレーションを可能とする高速・高効率な数値解析法の開発を目的として、本研究では、化学反応方程式の解の硬直性軽減のため MTS を導入し、流体解析部分を含めた手法の効率性と適用性の評価を行った。0 次元、1 次元解析いずれにおいても、従来用いられる陰解法 VODE に対して、化学種数の増加に加えて、時間刻み幅が小さくなると、解の精度を維持しつつも MTS の効率性が劇的に高まることを示した。これは、MTS では、1 step あたりの演算時間が動的に変化するためである。

1 次元解析 (エンドガス自着火問題) 結果により、時間刻み幅が $\Delta t = 1 \times 10^{-8}$ s の場合、化学種数が約 50 以上で流体計算が律速部になること、また、化学種数の増加と共に流体計算の割合が大幅に増加していくことを示した。流体計算が律速となる原因は、多成分輸送係数の評価である。2 次元解析結果から、効率的な時間積分法の導入により、大規模詳細反応機構を用いた 2 次元反応性流体計算が、現実

的な計算時間・規模で可能であることが示された。

本研究で行った評価により、化学反応方程式に対して高速・高効率な陽解法を適用することで、大規模詳細反応機構を考慮した圧縮性燃焼流シミュレーションが効率的に実施できることが示唆された。一方で、流体計算、すなわち多成分輸送係数の評価が大きな問題になることも明らかになった。超大規模反応機構かつ LES や DNS 解析を可能とするためには、より高速な陽解法の探求を含め、多成分輸送係数部分の簡略化や簡略化による燃焼流れ場への影響を明らかにすることが必要である。

謝辞

本研究は、科研費基盤研究 (B) 23360095 の助成を受けた。本論文で示した一部計算は、東京大学情報基盤センターの FX10 システムを利用した。時間積分法に関しては、森井雄飛招聘研究員 (JEDI/JAXA) に有意義な意見をいただいた。HLLC プログラムは、野々村拓助教 (ISAS/JAXA) より提供されたものである。ここに感謝の意を表す。

References

1. Brown, P. N., Byrne, G. D. and Hindmarsh, A. C., *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 10(5): 1038-1051 (1989).
2. Maas, U. and Pope, S. B., *Combustion and Flame*, 88(3): 239-264 (1992).
3. Nejad, L. A., *Astrophysics and Space Science*, 299(1): 1-29 (2005).
4. Gou, X., Sun, W., Chen, Z. and Ju, Y., *Combustion and Flame*, 157(6): 1111-1121 (2010).
5. Shi, Y., Green, W. H., Wong, H. W. and Oluwole, O. O., *Combustion and Flame*, 159(7): 2388-2397 (2012).
6. Li, S. and Petzold, L., *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 125(1): 131-145 (2000).
7. Young, T. R. and Boris, J. P., *The Journal of Physical Chemistry*, 81(25): 2424-2427 (1977).
8. Jay, L. O., Sandu, A., Potra, F. A. and Carmichael, G. R., *SIAM Journal on Scientific Computing*, 18(1): 182-202 (1997).
9. Mott, D. R., Oran, E. S. and van Leer, B., *Journal of Computational Physics*, 164(2): 407-428 (2000).
10. Eriksson, K., Johnson, C. and Logg, A., *SIAM Journal on Scientific Computing*, 25(4): 1142-1157 (2004).
11. Hiremath, V., Lantz, S. R., Wang, H. and Pope, S. B., *Combustion and Flame*, 159: 3096-3109 (2012).
12. Strang, G., *SIAM J. on Numerical Analysis*, 5(3): 506-517 (1968).
13. Toro, E. F., Spruce, M. and Speares, W., *Shock Waves*, 4(1): 25-34 (1994).

14. Van Leer, B., International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics: 507-512 (1982).
15. Gottlieb, S. and Shu, C. W., *Mathematics of Computation of the American Mathematical Society*, 67(221): 73-85 (1998).
16. Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F. and Bird, R. B., *Molecular theory of gases and liquids*, John Wiley and Sons, Inc., New York (1954).
17. Warnatz, J., *Numerical Methods in Flame Propagation*, Eds. N. Peters and J. Warnatz, Friedr. Vieweg and Sohn, Wiesbaden (1982).
18. Bird, R. B., Stewart, W. E. and Lightfoot, E. N., *Transport Phenomena*, John Wiley and Sons, New York (1960).
19. Mathur, S., Tondon, P. K. and Saxena, S. C., *Molecular Physics*, 12(6): 569-579 (1967).
20. Kee, R. J., Dixon-Lewis, G., Warnatz, J., Coltrin, M. E. and Miller, J. A., SAND-86-8246, Sandia National Laboratory, Livermore, CA (USA) (1986).
21. Kee, R. J., Rupley, F. M. and Miller, J. A., SAND89-8009B, Sandia National Laboratory, Livermore, CA (USA) (1989).
22. Miyoshi, A., *Transactions of Society of Automotive Engineers of Japan* 36: 35-40 (2005).
23. Lu, T. and Law, C. K., *Combustion and Flame*, 148(3), 117-126 (2007).
24. Gabano, J. D., Kageyama, T., Fisson, F. and Leyer, J. C., *Symposium (International) on Combustion*, 22(1): 447-454 (1988).
25. Lu, T., & Law, C. K., *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1): 1333-1341 (2005).
26. Wilke, C. R., *The Journal of Chemical Physics*, 18: 517 (1950).
27. Warnatz, J., Maas, U. and Dibble, R. W., *Combustion: physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation*, 4th edition, Springer: 57-66 (2006).
28. Dixon-Lewis, G., *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 307(1488): 111-135 (1968).