

■原著論文/ORIGINAL PAPER■

硬直性の強い化学反応方程式に対する高速時間積分法の評価
Comparison of Time Integration Methods for Stiff Reaction Equations森井 雄飛^{1*}・寺島 洋史²・越 光男³・清水 太郎¹MORII, Youhi^{1*}, TERASHIMA, Hiroshi², KOSHI, Mitsuo³, and SHIMIZU, Taro¹¹ 宇宙航空研究開発機構 情報・計算工学センター 〒252-5210 相模原市中央区由野台 3-1-1
JAXA's Engineering Digital Innovation Center, 3-1-1 Yoshinodai, Chuuou, Sagamihara, Kanagawa, 252-5210, Japan² 東京大学大学院工学系研究科 〒113-0032 東京都文京区弥生 2-11-16
University of Tokyo, 2-11-16 Yayoi, Bunkyo, Tokyo 113-0032, Japan³ 横浜国立大学大学院環境情報研究院 〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-7
Yokohama National University, 79-7 Tokiwadai, Hodogaya-ku, Yokohama, Kanagawa 240-8501 Japan

2013年8月2日受付; 2013年12月15日受理/Received 2 August, 2013; Accepted 15 December, 2013

Abstract : Performance and accuracy of several time integration methods for chemical reaction equations are comprehensively investigated, aiming at an efficient reacting flow simulation with large detailed chemical kinetics. In this study, a modified CHEMEQ2, dynamic multi-timescale method (MTS), and two Runge-Kutta-based methods (R-K-Chebyshev and R-K-Fehlberg) are considered as currently available and possible explicit time integration methods, while VODE is used as a reference implicit time integration method. Ignition problems for three hydrocarbon systems (CH₄, n-C₇H₁₆, and n-C₁₀H₂₂) and an internal combustion engine model with n-C₇H₁₆ are simulated. The results for both problems show that the modified CHEMEQ2 shows the best performance for all the conditions in not only the accuracy, but also the robustness, while MTS gives less performance and the two Runge-Kutta-based methods cannot work even for the ignition problems with hydrocarbon systems. It is also found that the two explicit time integration methods (CHEMEQ2 and MTS) reduce nearly 20-100 times computational time compared to the reference implicit time integration method.

Key Words : Detailed chemical kinetics, Reactive flow, Computational fluid dynamics

1. 諸言

複雑な燃焼反応系に対する詳細化学反応機構の自動生成[1,2]が可能になってきた現在, 新たな燃料設計や高効率・低公害燃焼器開発において着火特性や消炎現象の予測を行う上で, 大規模詳細反応機構を考慮可能な数値流体解析(Computational Fluid Dynamics: CFD)手法を確立することが強く要望されている。しかし, 大規模詳細化学反応機構をCFD解析に組み込む場合, 考慮する化学種数に応じた移流拡散方程式数の増加や化学反応方程式の強い硬直性が大きな問題となり, その導入は容易ではない。

こうした問題を背景に, 我々は, 大規模詳細反応機構を反応性CFD解析に組み込むための方法論の開発を行ってきた[3]。これまでに, 大規模詳細反応機構を用いた反応性CFD解析において, 流体, 反応計算のどの部分が律速とな

るのかを明らかにし, 高速・高効率な時間積分法を用いることや多成分輸送係数に対して簡易な混合則を採用することにより, 大規模詳細反応機構を考慮した反応性CFD解析が効率的に実施できることを示してきた。この中でも特に, 化学反応方程式に対する時間積分法の更なる高速・高効率化が, 反応性CFD解析を効率的に実施する上での最大の鍵であることが分かっている。

我々のこれまでの研究では, 時間積分法として, 効率的な陽解法である multi-timescale (MTS) 法[4]を採用してきたが, MTS法以外にも方程式の強い硬直性を解決することを目的とした陽解法の開発は古くから行われている。古典的な Runge-Kutta 法[5]に始まり, Young and Boris の漸近法[6], Runge-Kutta 法を改良した積分法[7,8], 準定常法 (quasi steady state: QSS) [9]を改良した Mott らによる CHEMEQ2 として知られる α -QSS 法[10,11]が開発されている。近年では, Qureshi らによる CHEMEQ2 の改良[12]や Eriksson らの方法[13] (MTS 法と考え方が似ている) が挙げられる。こ

* Corresponding author. E-mail: morii.yuuhi@jaxa.jp

の中でも, CHEMEQ2 や MTS は, 燃焼反応解析の効率化を強く意識して開発されたものと考えられる.

このように, 硬直性が強い方程式に対する陽解法が開発されているが, 化学反応方程式のように非常に強い硬直性を持つ方程式を解く場合, 現状, 陰解法 (VODE [14] や DASPK [15]) を用いることが一般的な理解であり[5,16,17], 陽解法の使用はあまり検討されていない. そのため, 大規模詳細反応機構を用いた反応性 CFD 解析において, 前述したような各種陽解法の適用性を詳細に調べた研究例はほとんど存在していないといえる.

そこで, 本研究では, 大規模な詳細化学反応機構を考慮した反応性 CFD 解析を高速・高効率に実現することを目指し, 化学反応方程式に対する各種陽解法の適応可能性を詳細に調べることを目的とした. 着火解析と CFD 解析との連成を想定した内燃エンジンモデル解析を実施した. 従来, 硬直性が強い問題には陽解法の適用は困難とされているが[16,17], 特に内燃エンジンモデル解析において, 物理量変化が非常に激しい反応硬直性の強い条件を含めることで, 陽解法の適用性を広範囲の条件で調べる. 陰解法の結果を含め, 各種陽解法の安定性, 精度, そして計算時間の評価を詳細に行うことで, 大規模詳細反応機構を用いた反応性 CFD 解析に適した反応方程式の時間積分法を探求する.

2. 化学反応の数値計算法

本研究では体積と内部エネルギーが一定の条件で化学反応方程式 (1)(2) を解く.

$$\frac{dY_i}{dt} = \frac{\omega_i}{\rho} \quad (1)$$

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{\sum_{i=1}^{N_s} e_i \omega_i}{\rho c_v} \quad (2)$$

ここで, ρ は質量, Y_i は化学種 i の質量分率, ω_i は質量当たりの反応生成速度, T は温度, N_s は化学種の数, e_i は化学種 i の内部エネルギー, c_v は質量あたりの定積比熱である. また, ω_i は生成速度 P_i , 減少速度 D_i を用いると, $\omega_i = P_i - D_i$ の関係がある. 式 (1)(2) を積分する際に問題となるのが, 化学種間の特性時間の違いによる硬直性である.

本研究では, 各種時間積分法を比較するために, 表 1 に示すように, 陰解法として VODE を選択し, CFD 解析との連成において, 適用可能性の有る 4 つの陽解法を使用した. しかし, 予備的な 0 次元着火解析において, RKC 法と RKF 法は, 水素燃料を用いた場合は計算が可能であったが, より硬い化学反応方程式を解く必要がある炭化水素燃料を用いた解析 (CH₄/Air の 0.1 MPa/1300 K での着火計算) では計算が発散した. そのため, 本研究では, 陽解法として改良版 CHEMEQ2 と MTS を選択し, その性能評価を実施した. 各手法については, 原論文[4,10,12,14]に詳しいが, 以降,

Table 1 Time Integration methods.

Implicit	VODE[14]
Explicit	CHEMEQ2[10, 12]
	MTS[4]
	Runge-Kutta-Chebyshev (RKC)[7]
	Runge-Kutta-Fehlberg (RKF)[8]

用いた時間積分法の概要を簡単に述べる.

2.1 CHEMEQ2 と改良版 CHEMEQ2 [12]

式 (1)(2) に $\omega_i = P_i - D_i$ の関係を代入し, 変形すると,

$$\frac{dY_i}{dt} = q_i - p_i Y_i \quad (1')$$

$$\frac{dT}{dt} = q_T - p_T T \quad (2')$$

が得られる. ここで,

$$q_i = \frac{P_i}{\rho}, \quad q_T = -\frac{\sum_{i=1}^{N_s} e_i P_i}{\rho c_v}, \quad (3)$$

$$p_i = \frac{D_i}{\rho Y_i}, \quad p_T = -\frac{\sum_{i=1}^{N_s} e_i D_i}{\rho c_v T}$$

の関係がある. CHEMEQ2 では, 式 (1')(2') を解く. q_i, q_T 及び p_i, p_T が一定であると仮定すると, 式 (1')(2') から式 (4) (5) が得られる.

$$Y_i(t) = Y_i^0 e^{-p_i t} + \frac{q_i}{p_i} (1 - e^{-p_i t}) \quad (4)$$

$$T(t) = T^0 e^{-p_T t} + \frac{q_T}{p_T} (1 - e^{-p_T t}) \quad (5)$$

添え字 0 は $t=0$ での値を示す. 式 (1')(2') を 0 から Δt まで積分する際に, q 及び p が大きく変化しないと仮定できれば, 式 (4)(5) に $t=0$ での q 及び p を用いて $Y_i(\Delta t)$ 及び $T(\Delta t)$ を求めることができる. 式 (4)(5) に上記仮定を使うと $t=\Delta t$ では,

$$Y_i(\Delta t) = Y_i^0 + \frac{\Delta t(q_i - p_i Y_i^0)}{1 + \alpha_i p_i \Delta t} \quad (6)$$

$$T(\Delta t) = T^0 + \frac{\Delta t(q_T - p_T T^0)}{1 + \alpha_T p_T \Delta t} \quad (7)$$

と書ける. α_i, α_T は,

$$\alpha_i(p_i \Delta t) = \frac{1 - (1 - e^{-p_i \Delta t})/(p_i \Delta t)}{1 - e^{-p_i \Delta t}} \quad (8)$$

$$\alpha_T(p_T \Delta t) = \frac{1 - (1 - e^{-p_T \Delta t})/(p_T \Delta t)}{1 - e^{-p_T \Delta t}} \quad (9)$$

であり, それぞれ $p_i \Delta t$, $p_T \Delta t$ の関数であり, $p_i \Delta t \rightarrow -\infty$ のとき $\alpha \rightarrow 0$, $p_i \Delta t \rightarrow 0$ のとき $\alpha \rightarrow 1/2$, $p_i \Delta t \rightarrow \infty$ のとき $\alpha \rightarrow 1$ の関係がある. 以上を用いて, 予測子・修正子法によって, 式(1') (2') を解く. CHEMEQ2 で使う予測子及び修正子は式(10)-(13) のように設定する. 添え字 P, C はそれぞれ予測子 (Predictor), 修正子 (Corrector) を表す.

$$Y_i^P = Y_i^0 + \frac{\Delta t(q_i^0 - p_i^0 Y_i^0)}{1 + \alpha_i^0 p_i^0 \Delta t} \quad \text{Predictor} \quad (10)$$

$$T^P = T^0 + \frac{\Delta t(q_T^0 - p_T^0 T^0)}{1 + \alpha_T^0 p_T^0 \Delta t} \quad \text{Predictor} \quad (11)$$

$$Y_i^C = Y_i^0 + \frac{\Delta t(q_i^* - p_i^* Y_i^0)}{1 + \alpha_i^* p_i^* \Delta t} \quad \text{Corrector} \quad (12)$$

$$T^C = T^0 + \frac{\Delta t(q_T^* - p_T^* T^0)}{1 + \alpha_T^* p_T^* \Delta t} \quad \text{Corrector} \quad (13)$$

ここで, q_i^* , q_T^* , p_i^* , p_T^* , α_i^* , α_T^* は,

$$q_i^* = \alpha q_i^P + (1 - \alpha) q_i^0 \quad (14)$$

$$q_T^* = \alpha q_T^P + (1 - \alpha) q_T^0 \quad (15)$$

$$p_i^* = \frac{1}{2} (p_i^P + p_i^0) \quad (16)$$

$$p_T^* = \frac{1}{2} (p_T^P + p_T^0) \quad (17)$$

$$\alpha_i^* (p_i^* \Delta t) = \frac{1 - (1 - e^{-p_i^* \Delta t}) / (p_i^* \Delta t)}{1 - e^{-p_i^* \Delta t}} \quad (18)$$

$$\alpha_T^* (p_T^* \Delta t) = \frac{1 - (1 - e^{-p_T^* \Delta t}) / (p_T^* \Delta t)}{1 - e^{-p_T^* \Delta t}} \quad (19)$$

である.

ここで, 予測子・修正子法の許容誤差 ε による判定は, Qureshi ら[12]が提案した

$$\|Y_i^C - Y_i^P\| \leq \varepsilon (Y_i^C + \delta) \quad (20)$$

を用いている. $\delta = 0$ とすれば CHEMEQ2, $\delta = 10^{-12}$ とすれば改良版 CHEMEQ2 である. この Qureshi らが提案した収束判定基準によって, 改良版 CHEMEQ2 の堅牢性が向上している. また, 本研究では $\varepsilon = 10^{-1}$ として解析を実施している. この値はオリジナルの CHEMEQ2 で使用されている値である. 式(20)が全ての化学種で満たされれば, 次の時間刻み幅に進み, 満たさない場合は, Δt を小さくして, 再度計算する. また, 最初の時間刻み幅は, 式(21)を用いてすべての化学種から最も小さい値を用いた.

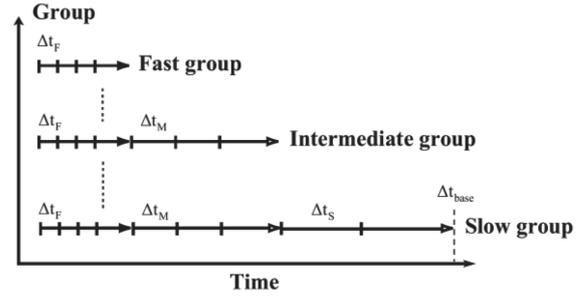


Fig.1 Schematic of MTS method: time integration process.

$$\Delta t = \varepsilon \min \left(\frac{Y_i}{|q_i - p_i Y_i|}, \quad \text{or} \quad \frac{1}{p_i} \text{ (if } q_i \gg p_i Y_i) \right) \quad (21)$$

2.2 Multi-timescale (MTS) 法[4]

MTS では, 化学種の特性時間を減少速度 D_i で評価し, その特性時間に応じて化学種をグループ分けし, グループごとに適切な時間刻み幅を設定して時間積分する手法である. 概念図を図1に示す.

例えば, fast mode と判断されたグループは小さな時間刻み幅で積分され, 収束した時点で計算を終了する (収束したグループの化学種質量分率 Y_i は凍結する, また fast mode ほど速い収束が期待できる). 収束判定は後述の式(28)(29)により行う. 順に, intermediate mode へと移り, 最終的に, slow mode が, 設定された Δt_{base} まで時間積分される. それぞれのグループの時間刻み幅を Δt_g とすると, 式(1)と(2)は単純な Euler 陽解法を用いて,

$$Y_i^{m+1} = Y_i^m + \frac{\Delta t_g \omega_i^m}{\rho} \quad (22)$$

$$T^{m+1} = T^m + \Delta t_g \frac{-\sum_{i=1}^{N_s} e_i \omega_i^m}{\rho c_v} \quad (23)$$

と積分される. m は化学反応式の時間積分の内部反復ステップを意味し, 収束, もしくは Δt_{base} に到達した時点で Y_i や T が CFD 解析に受け渡される. 各グループに対する適切な時間刻み幅 Δt_g をどのように決めるかが重要となる. まず, 化学種の特性時間 τ_i は,

$$\tau_i = \frac{Y_i}{D_i} \quad (24)$$

と計算することができ, これを基に, 生成される全グループ数 N_T とどの化学種がどのグループに所属するかを示すインデックス N_i を以下のように定義する (グループは $O(10)$ 範囲で分けられる):

$$N_T = \log_{10} \left(\frac{\Delta t_{\text{base}}}{\tau_{\text{min}}} \right) \quad (25)$$

$$N_i = \log_{10} \left(\frac{\Delta t_{\text{base}}}{\tau_i} \right) \quad (26)$$

ここで, τ_{\min} は最も小さな特性時間であり, 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 10^{-14} で制限している. 最終的に, 各グループの時間刻み幅は, 式 (26) に対応して,

$$\Delta t_g = \xi \frac{\Delta t_{\text{base}}}{10^{N_g-1}} \quad (27)$$

と定義する. N_g はグループ番号である (例えば, $N_g = 1$ のとき, $\Delta t_g = \xi \Delta t_{\text{base}}$). 係数 ξ は, これも原論文では述べられていないが, $\xi \leq 1.0$ の任意の定数であり, 本研究では計算安定のため $\xi = 0.25$ を用いている. ここで, 計算の手順をまとめる.

1. 式 (24) により, 化学種の特性時間 τ_i を評価する
2. 式 (26) により, 化学種をグループに分ける
3. 式 (27) で定義される時間刻み幅で式 (22)(23) に従い, 各グループを時間積分する
4. 収束判定は, グループごとに行い, 収束したグループはその時点で化学種質量分率 Y_i を凍結する

時間積分は, それぞれのグループが, 収束, もしくは Δt_{base} に到達するまで行う. すなわち, 条件によっては, 上位 (特性時間が短い) グループが収束せずに, Δt_{base} に到達することもあり得る. その場合, 下位 (特性時間が長い) グループを積分する必要はなくなる. 収束判定は, 以下の式 (28)(29) を用いて行った.

$$\sum_{i=1}^{N_{s,g}} \frac{dY_i/dt}{\text{ATOL} + \text{RTOL}|Y_i|} < 1.0 \quad (28)$$

$$\frac{dT/dt}{\text{ATOL} + \text{RTOL}|T|} < 1.0 \quad (29)$$

ここで, 絶対誤差 $\text{ATOL} = 10^{-13}$, 相対誤差 $\text{RTOL} = 10^{-5}$ と設定した.

2.3 VODE 法[14]

陰解法として VODE を選択し, 数値解析を実施した. 本解析では, 5 次精度陰的後退差分, 全ヤコビ行列を計算, 毎反復において初期化を実施している. また, 内部反復の最大数を 500 とした. ATOL , RTOL は MTS と同じ値を用いているため, 精度は MTS と同等である. しかし, 改良版 CHEMEQ2 は ϵ によって精度を決めているので, MTS と VODE で用いられている精度の決定方法が異なることに注意して頂きたい.

3. 解析結果および考察

本研究で用いた 3 種類の炭化水素燃料 (CH_4 , nC_7H_{16} , $\text{nC}_{10}\text{H}_{22}$) の詳細反応機構は, 詳細反応機構自動生成ソフトウェアである KUCRS [2] を用いて作成した. 表 2 に, それぞれの化学種数・素反応数をまとめる.

Table 2 Number of species and elementary reactions in chemical kinetics.

	No. of Species	No. of Reactions
CH_4	68	334
nC_7H_{16}	373	1071
$\text{nC}_{10}\text{H}_{22}$	839	2126

着火解析, CFD 解析との連成を想定した内燃エンジンモデル解析を実施し, 時間積分法の比較を行った. 安定性を調べるため, 時間刻み幅 $\Delta t = 1.0 \times 10^{-7}, 1.0 \times 10^{-8}$ s を用いた解析を実施した.

3.1 CHEMEQ2 と改良版 CHEMEQ2 の比較

まず初めに, CHEMEQ2 と改良版 CHEMEQ2 の比較を実施した. 計算条件は, 内部エネルギー・体積一定, 初期圧力 $P_0 = 0.1, 1$ MPa, 初期温度 $T_0 = 1300$ K の条件で, 当量比 $\phi = 1$ の $\text{nC}_7\text{H}_{16}/\text{Air}$ の着火解析を実施した.

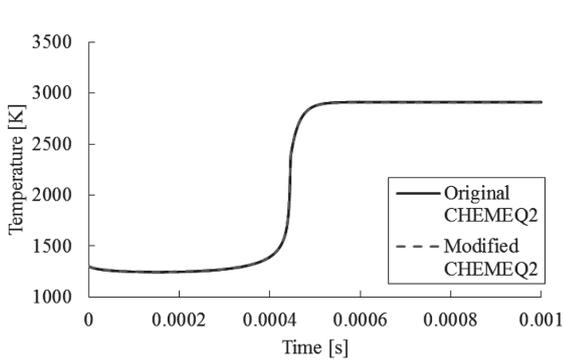
ここで, CHEMEQ2 では, 今回設定した時間刻み幅 ($\Delta t = 1.0 \times 10^{-7}, 1.0 \times 10^{-8}$ s) において, 内部ループで使われる時間刻み幅が小さくなりすぎてエラーが生じることに注意したい. これは, 無限ループを避けるためのサブルーチンに依るものであり, これをコメントアウトすることで対処することができた. この事実は一般的ではないため, CHEMEQ2 があまり採用されない理由の一つと考えられる. 一方で, 改良版 CHEMEQ2 では, この様な問題は発生していない. すなわち, 改良版 CHEMEQ2 は収束判定部に多少の変更を行なうだけで, 過度に小さな時間刻み幅になることを避け, 高い堅牢性を得ている.

初期圧力 $P_0 = 0.1, 1$ MPa, 時間刻み幅 $\Delta t = 1.0 \times 10^{-8}$ s の条件における着火解析の温度履歴と nC_7H_{16} , CO_2 , OH のモル分率結果を図 2 に示す.

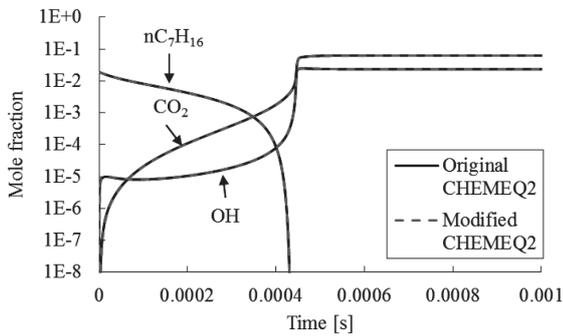
いずれのプロファイルにおいても, 改良版 CHEMEQ2 は CHEMEQ2 と一致する結果が得られている. また, 図 3 に計算時間の比較を示している. 棒グラフ横の数字は計算時間[s]を表示している. 改良版 CHEMEQ2 は CHEMEQ2 に比べて 20 % 程度の高速化が見込まれる. 以上のことから, 本論文では改良版 CHEMEQ2 を利用することとした.

3.2 着火解析

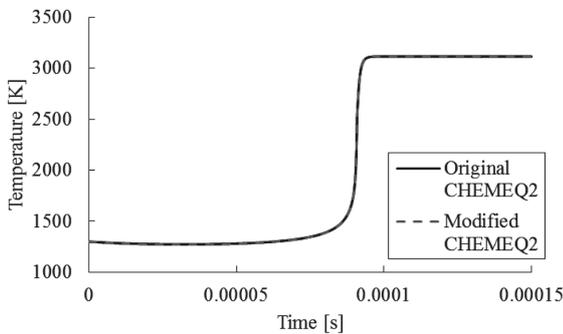
内部エネルギー・体積一定, 初期圧力 $P_0 = 0.1, 1$ MPa, 初期温度 $T_0 = 1300$ K の条件で, 当量比 $\phi = 1$ の CH_4/Air , $\text{nC}_7\text{H}_{16}/\text{Air}$, $\text{nC}_{10}\text{H}_{22}/\text{Air}$ の着火解析を実施した. 本研究では, 大規模詳細反応機構を CFD 解析に組み込むことを目的としている. 通常, 反応性 CFD 解析は化学反応の硬直性を避けるため, 流体と化学反応を分離して解くのが一般的であり, その際には陰解法のヤコビ行列は毎時間ステップで計算する必要がある. したがって, 通常 CHEMFIN 等を使った着火解析と異なり, VODE を用いた解析では, 毎ステップで初期化を行なっていることに注意いただきたい. 本条



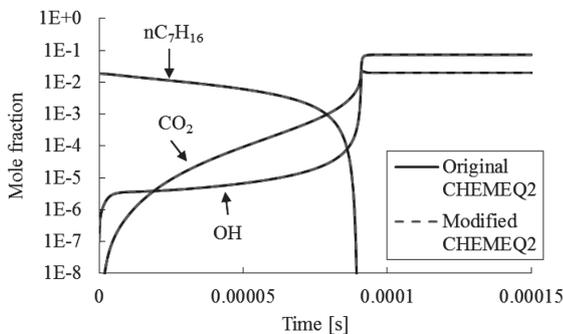
(a) Temperature at 0.1 MPa



(b) Mole fraction of nC₇H₁₆, CO₂, OH at 0.1 MPa



(c) Temperature at 1 MPa



(d) Mole fraction of nC₇H₁₆, CO₂, OH at 1 MPa

Fig.2 Comparison of two CHEMEQ2s for nC₇H₁₆/Air.

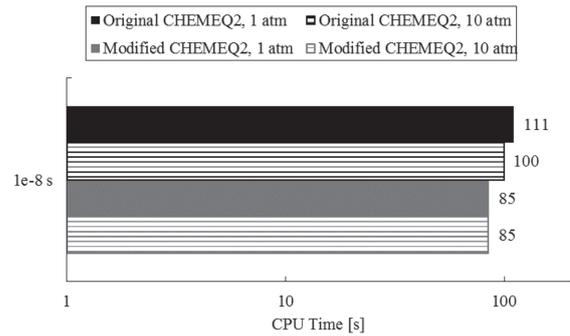


Fig.3 Computational time comparison on intel Xeon E3-1225: single core.

件下で陽解法を用いた計算が最も困難であると考えられるのは、初期圧力 $P_0 = 1$ MPa, 時間刻み幅 $\Delta t = 1.0 \times 10^{-7}$ s の条件である。初期圧力 $P_0 = 1$ MPa, 時間刻み幅 $\Delta t = 1.0 \times 10^{-7}$ s の条件における着火解析を行った温度履歴とそれぞれの燃料分子, CO₂, OH のモル分率, 及び解析を実施したすべての条件での着火遅れ時間と平衡温度の結果を図 4 - 6 に示す。全ての $\Delta t, P_0$ の条件で、改良版 CHEMEQ2 及び MTS を用いた結果は、VODE の結果とよく一致している。以上の結果から、MTS 及び改良版 CHEMEQ2 は、陽解法での解析が困難であると考えられる条件においても、十分な精度を保ちつつ堅牢に解析できることが分かった。

着火解析にかかった計算時間を図 7 に示す。棒グラフ横の数字は計算時間[s]を表示している。改良版 CHEMEQ2 及び MTS を用いた計算時間は、VODE の結果と比べると非常に短い。特に、800 化学種を超える nC₁₀H₂₂/Air の解析では、VODE を用いた場合、非現実的な時間が必要となるが、陽解法である改良版 CHEMEQ2 を用いれば、2 桁計算時間を減少させることが可能であり、CFD 解析との連成の観点で有効である。

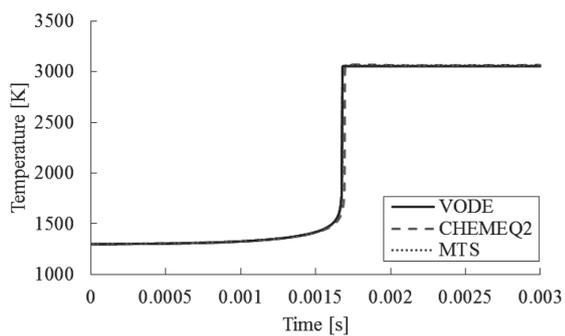
3.3 内燃エンジンモデルを用いた解析

反応方程式と流体解析とを連成することを想定し、本研究では、よく知られる内燃エンジンモデル[18]を用いて、各時間積分法の評価を行った。このエンジンモデルにおける流体は、多次元オイラー / ナビエ・ストークス方程式のように、空間的な運動は無いが、反応による影響が流体物理量に影響し、エンジンシリンダーの動きによる流体物理量の変化が反応に影響を与えるという点で、簡易的な流体と反応の連成問題と考えられる。

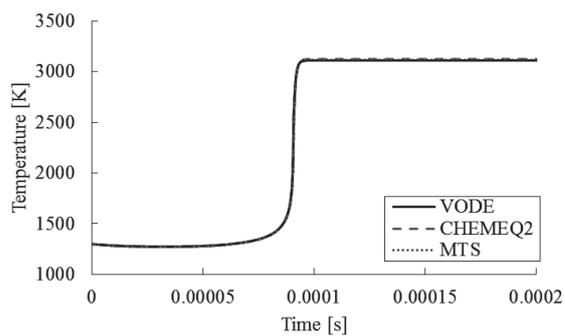
図 8 にエンジンモデルの概略図を示す。文献[18]にならない、シリンダー内の体積の時間変化 $V(t)$ は、以下の式に従うようにした：

$$\frac{V(t)}{V_c} = 1 + \frac{C-1}{2} \left(R + 1 - \cos \theta - \sqrt{R^2 - \sin^2 \theta} \right) \quad (30)$$

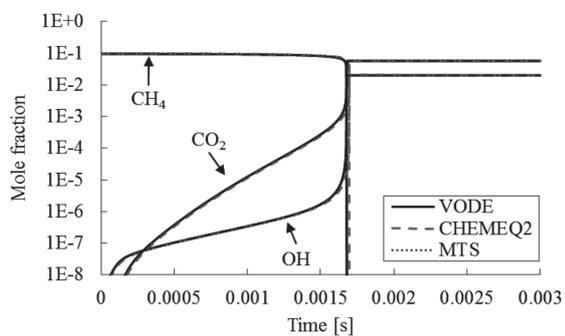
ここで、クリアランス体積 V_c は、



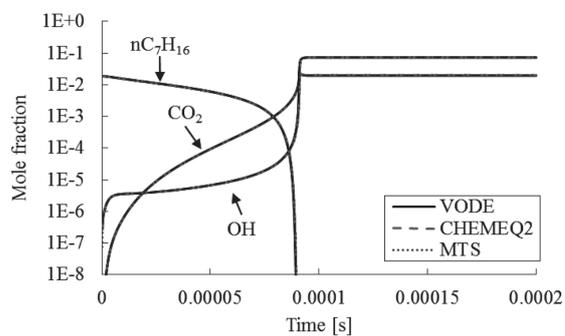
(a) Temperature



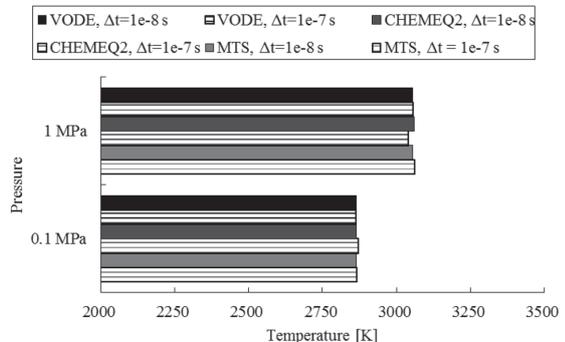
(a) Temperature



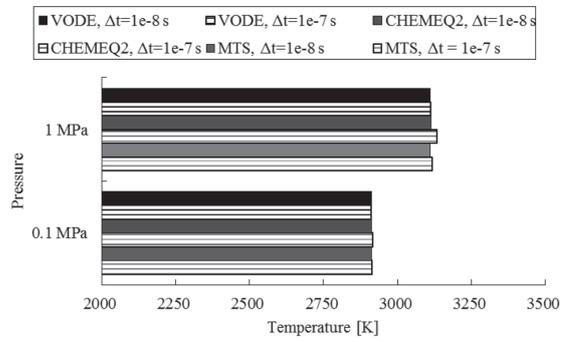
(b) Mole fraction of CH₄, CO₂, OH



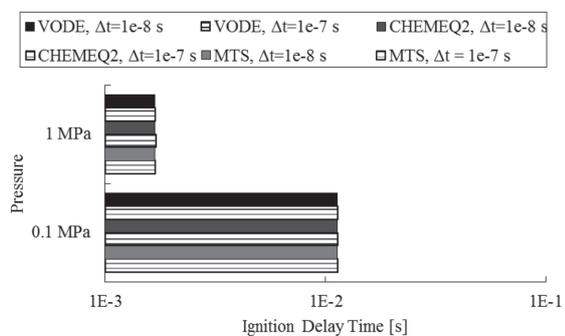
(b) Mole fraction of nC₇H₁₆, CO₂, OH



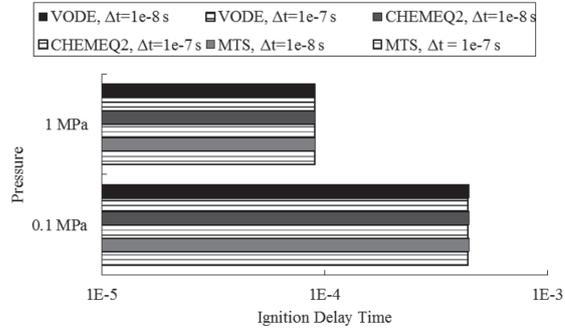
(c) Ignition Delay Time



(c) Ignition Delay Time



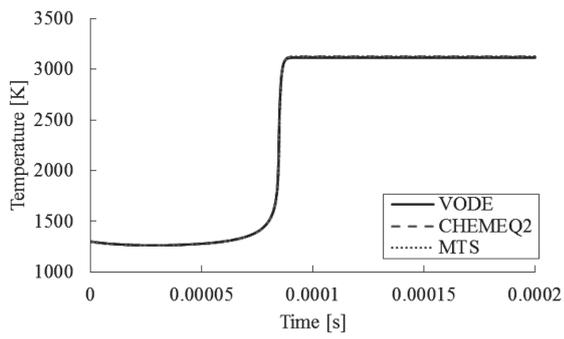
(d) Equilibrium Temperature



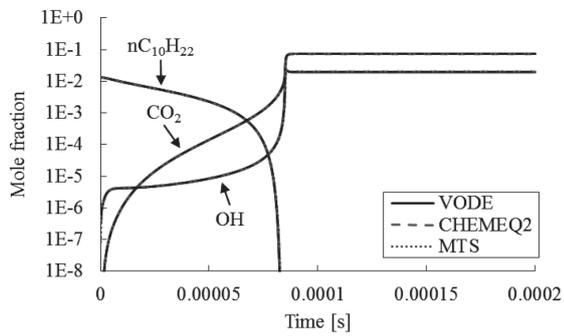
(d) Equilibrium Temperature

Fig.4 Comparison of three integration methods for CH₄/Air.

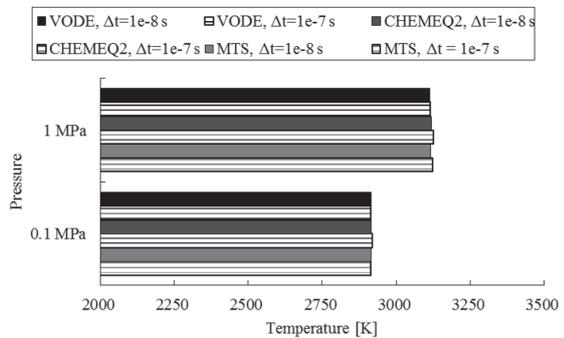
Fig.5 Comparison of three integration methods for nC₇H₁₆/Air.



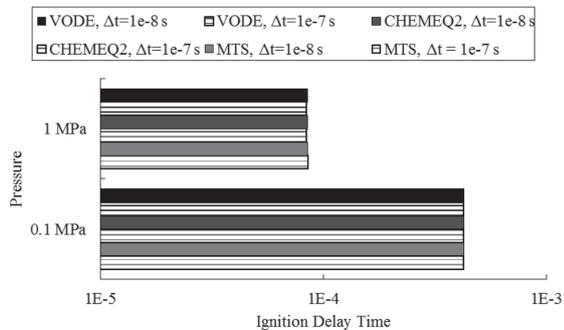
(a) Temperature



(b) Mole fraction of nC₁₀H₂₂, CO₂, OH

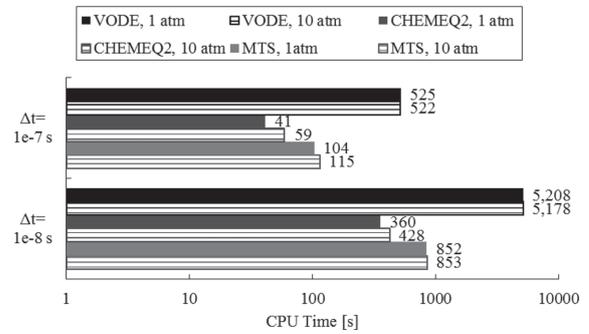


(c) Ignition Delay Time

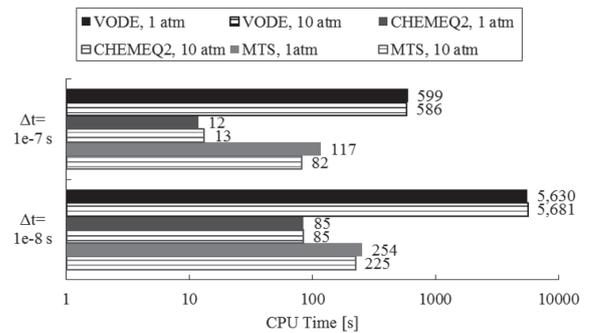


(d) Equilibrium Temperature

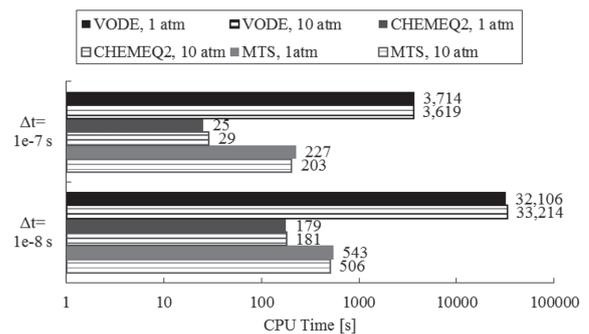
Fig.6 Comparison of three integration methods for nC₁₀H₂₂/Air.



(a) CH₄/Air



(b) nC₇H₁₆/Air



(c) nC₁₀H₂₂/Air

Fig.7 Computational time comparison on intel Xeon E3-1225: single core.

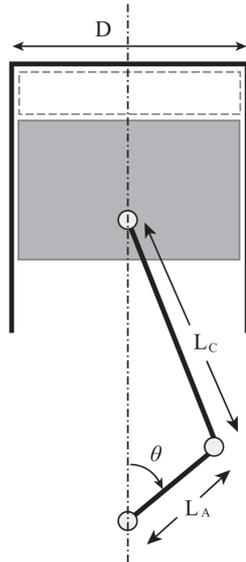


Fig.8 Schematic of an engine cylinder.

Table 3 Computational parameters.

C	No. of revs./rpm	L _C /mm	D/mm	L _A /mm
18.0	1500	145.0	86.0	86.0

$$V_c = \frac{0.25\pi D^2 L_A}{C - 1} \quad (31)$$

と表される. 式 (30) と (31) 中において, D はボア内径, C は圧縮比, L_A はクランクアーム半径, そして θ はクランクアームの角度である. R は, コネクティングロッド L_C と L_A の比で,

$$R = \frac{L_C}{L_A} \quad (32)$$

と定義される.

断熱過程であること, 化学種の質量分率が時間刻み幅 Δt の間で一定であることをそれぞれ仮定すると, 温度変化と圧力変化は, 以下のように求めることができる.

$$T(t + \Delta t) = T(t) \left(\frac{V(t)}{V(t + \Delta t)} \right)^{\gamma(t) - 1} \quad (33)$$

$$p(t + \Delta t) = p(t) \left(\frac{V(t)}{V(t + \Delta t)} \right)^{\gamma(t)} \quad (34)$$

ここで, T は温度, p は圧力, そして γ は比熱比である.

使用したエンジンモデルの諸元は, 表 3 にまとめられる. 本研究では, 上死点近傍において自着火するようにパラメータを設定した. 最終的に, 計算の手順をまとめると以下の通りとなる.

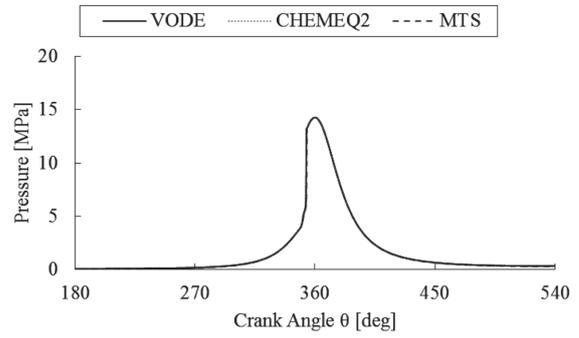
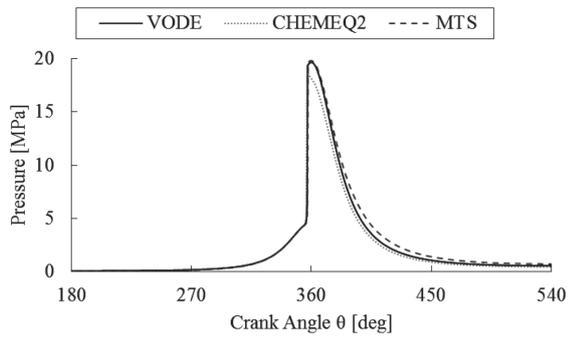
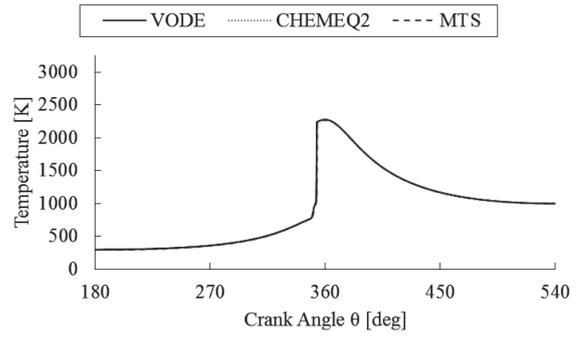
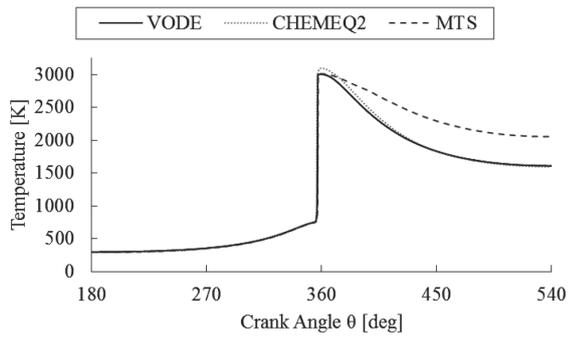
1. 体積と内部エネルギーを一定とした化学反応方程式 (1) (2) により温度と圧力を求める
2. 式 (30) において, 表 1 に示した回転数で θ を変化させ, 新しい体積 $V(t + \Delta t)$ を求める
3. 式 (33)(34) により新しい温度 $T(t + \Delta t)$ と圧力 $p(t + \Delta t)$ を求める
4. 1. に戻る

作動流体として, 当量比 $\phi = 1.0, 0.5$ の nC_7H_{16}/Air 混合気体を用いた. 反応機構は, 着火問題と同様で, KUCRS により生成された 373 化学種, 1071 素反応のメカニズムである. 初期温度と圧力は, 300 K と 0.1 MPa とした. 時間刻み幅として, $\Delta t = 1.0 \times 10^{-7}, 1.0 \times 10^{-8}$ s の 2 つの値を用い, 改良版 CHEMEQ2, MTS, そして VODE の比較により, 各時間積分法の評価を行った. 内燃エンジンモデルを用いた解析でも, 着火遅れの解析と同様に, VODE を用いた解析では, 毎ステップで初期化を行なっていることに注意いただきたい. CHEMKIN Pro によるエンジンモデル解析は, 本評価よりも高速に計算可能と考えられるが, 本研究では流体と反応は交互に解くことを想定しており, 例えば CHEMKIN CFD を用いた多次元解析では, 本結果と同等になることが予想される.

図 9 により, 内燃エンジンモデルを用いた解析では, ピストン運動が加わることによって, 着火問題よりも急激な物理量変化 (圧力が 20 MPa 程度まで上昇) が発生していることがわかる (クランクアングルが 360 度近くに相当). このため, 解法間の違いが顕著に現れ, MTS は, 参照解として考えられる VODE の結果と, 着火タイミングは合っている一方で, その後の温度プロファイルが大きく異なる. これは, MTS において, 図で見られるような急激な物理変化を伴う場合, グループ分けが十分でないまま計算が開始されるため, 安定性を確保できないためと考えられる. 時間刻み幅を小さくすることで改善は見られるが ($\Delta t = 1.0 \times 10^{-9}$ でほぼ同じプロファイルになる), この問題のような激しい変化 (高圧状態になることを含め) に対しては, MTS はまだ改善の余地があることがわかる. 一方で, 改良版 CHEMEQ2 は, $\Delta t = 1.0 \times 10^{-7}$ s では VODE との若干の差異が見られるが, $\Delta t = 1.0 \times 10^{-8}$ s では VODE と良く一致しており, MTS に比べるとその精度と堅牢性の高さが確認できる. 図 10 に示す $\phi = 0.5$ の条件では, 圧力が 15 MPa 程度まで上昇しているものの, $\phi = 1$ の条件に比べると物理量の変化が比較的緩やかになるため, MTS, 改良版 CHEMEQ2, そして VODE とほぼ同じプロファイルとなる.

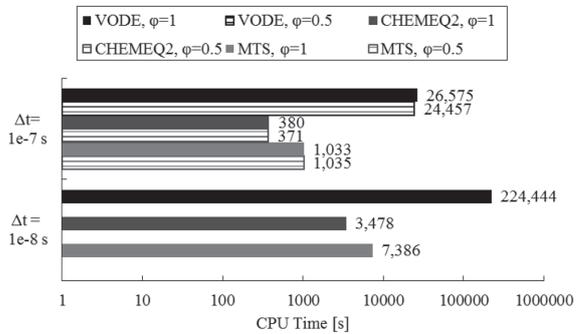
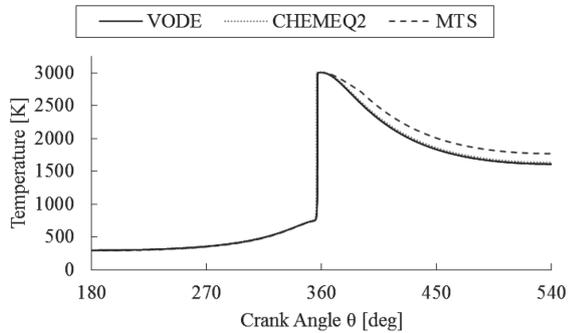
以上, 内燃エンジンモデル解析の結果から, 陽解法である改良版 CHEMEQ2 は, MTS を用いた場合よりも安定して計算が可能であり, VODE と比較しても十分な精度・安定性を保って計算可能であることがわかった. これは, 選択した時間刻み幅 (CFD 解析によって決定) が, 改良版 CHEMEQ2 で使われている QSS 仮定が十分成り立つ程度に小さいことに起因していると考えられる.

最後に, 内燃エンジンモデルを用いた解析に必要なとなっ



A) $\Delta t = 1.0 \times 10^{-7}$ s

Fig.10 Comparison on internal combustion model simulations for $\phi = 0.5, \Delta t = 1.0 \times 10^{-7}$ s.



B) $\Delta t = 1.0 \times 10^{-8}$ s

Fig.11 Computational time comparison on intel core i7-3960X: single core.

Fig.9 Comparison on internal combustion model simulations for $\phi = 1.0$.

た計算時間を図 11 に示す。棒グラフ横の数字は計算時間[s]を表示している。陽解法を用いた解析は、VODE を用いた解析に比べて、計算時間のオーダーが異なる結果が得られた。特に、改良版 CHEMEQ2 では、着火問題と同様に、2桁程度高速化できる結果が得られており、安定性及び計算速度で優れた解法であることがわかった。また、MTS との比較により、陽解法の中でも改良版 CHEMEQ2 は安定性・計算時間ともに優れた性能を持っているといえる。

4. 結言

大規模詳細反応機構と CFD 解析との連成を目的として、

化学反応方程式に対する時間積分法の性能評価を詳細に行った。着火問題と CFD 解析との連成を想定した内燃エンジンモデルを対象に、陰解法の VODE, 陽解法の MTS, 改良版 CHEMEQ2 を使用し, 安定性, 精度, そして計算時の性能比較を行った。大規模詳細化学反応機構を組み込んだ CFD 解析の実施においては, VODE 等の陰解法を用いた解析は, 安定性には優れているものの, 毎時間刻みに行われる初期化のため, 非現実的な計算時間が必要である。一方, 陽解法である MTS や改良版 CHEMEQ2 を用いた解析は, 陰解法に比べて計算速度が桁違いに速く, また, 本研究で対象とした問題に対して十分な精度で計算できることが示された。特に, 改良版 CHEMEQ2 は, 安定性・計算速度共に優れており, 大規模詳細化学反応機構を用いた CFD 解析を可能にする時間積分法の 1 つとして有用といえる。

謝辞

本研究で使用したエンジンモデルについては, マツダ株式会社の藤本英史, 佐藤圭峰, 両博士に貴重なアドバイスをいただいた。また, 本研究は JSPS 科研費 23360095 の助成を受けたものです。ここに記して, 感謝の意を表す。

References

- Côme, G.: Gas-Phase Thermal Reactions: Chemical Engineering Kinetics. Springer (2001).
- Miyoshi, A.: Development of an Auto-generation System for Detailed Kinetic Model of Combustion. *Trans. Soc. Automot. Eng. Japan.* 36, 35-40 (2005).
- Terashima, H., Koshi, M.: Development and assessment of an efficient method for simulating compressible reacting flows with large detailed chemical kinetics. *J. Combust. Soc. Japan.* 53, 411-421 (2013).
- Gou, X., Sun, W., Chen, Z., Ju, Y.: A dynamic multi-timescale method for combustion modeling with detailed and reduced chemical kinetic mechanisms. *Combust. Flame.* 157, 1111-1121 (2010).
- Press, W., Teukolsky, S., Vetterling, W., Flannery, B.: Numerical recipes in C. (1992).
- Young, T., Boris, J.: A numerical technique for solving stiff ordinary differential equations associated with the chemical kinetics of reactive-flow problems. *J. Phys. Chem.* 81, 2424-2427 (1977).
- Sommeijer, B., Shampine, L., Verwer, J.: RKC: an explicit solver for parabolic PDEs. *J. Comput. Appl. Math.* 88, 315-326 (1998).
- Fehlberg, E.: Low-order classical Runge-Kutta formulas with stepsize control and their application to some heat transfer problems. *Computing.* 4, 93-106 (1969).
- Poinsot, T., Veynante, D.: Theoretical and numerical combustion. RT Edwards Incorporated (2005).
- Mott, D.R., Oran, E.S., van Leer, B.: New quasi-steady-state and partial-equilibrium methods for integrating chemically reacting systems. *Journal Comput. Phys.* 164, 407-428 (2000).
- Mott, D., Oran, E.: CHEMEQ2: A solver for the stiff ordinary differential equations of chemical kinetics. (2001).
- Shi, Y., Green, W., Wong, H., Oluwole, O.: Accelerating multi-dimensional combustion simulations using GPU and hybrid explicit/implicit ODE integration. *Combust. Flame.* (2012).
- Eriksson, K., Johnson, C., Logg, A.: Explicit time-stepping for stiff ODEs. *SIAM J. Sci. Comput.* (2004).
- Brown, P., Byrne, G., Hindmarsh, A.: VODE: A variable-coefficient ODE solver. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* (1989).
- Keken, P. Van, Yuen, D., Petzold, L.: DASPK: a new high order and adaptive time-integration technique with applications to mantle convection with strongly temperature- and pressure-dependent rheology. *Geophys. Astrophys. Fluid Dyn.* 80, 57-74 (1995).
- Najm, H., Wyckoff, P., Knio, O.: A semi-implicit numerical scheme for reacting flow: I. stiff chemistry. *J. Comput. Phys.* 143, 381-402 (1998).
- Yu, R., Yu, J., Bai, X.-S.: An improved high-order scheme for DNS of low Mach number turbulent reacting flows based on stiff chemistry solver. *J. Comput. Phys.* 231, 5504-5521 (2012).
- CHEMKIN Theory Manual. The Reaction Design company.