

乱流燃焼 DNS のための高精度埋込境界法の開発

Development of a high-order immersed boundary method for turbulent combustion DNS

- 神崎 諒平, 東工大, 東京都目黒区大岡山 2-12-1, E-mail: kanzaki.r.aa@m.titech.ac.jp
- 源 勇気, 東工大, 東京都目黒区大岡山 2-12-1, E-mail: yminamot@navier.mes.titech.ac.jp
- 志村 祐康, 東工大, 東京都目黒区大岡山 2-12-1, E-mail: mshimura@navier.mes.titech.ac.jp
- 店橋 護, 東工大, 東京都目黒区大岡山 2-12-1, E-mail: mtanahas@mes.titech.ac.jp
- Ryohei Kanzaki, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo
- Yuki Minamoto, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo
- Masayasu Shimura, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo
- Mamoru Tanahashi, Tokyo Institute of Technology, 2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo

A high-order immersed boundary method for turbulent combustion DNS has been developed. By conducting DNS of premixed flame propagation in 1D and 2D space, the accuracy and the directional influence of the grid arrangement due to the developed immersed boundary method are examined. In 1D DNS, the calculation result using the immersed boundary method is directly compared with the calculation result using NSCBC to confirm the accuracy of the present immersed boundary method. In 2D DNS, the directional influence of the grid arrangement is examined by comparing the calculation results of two cases with the same calculation conditions just by rotating the calculation area. As a result, it is observed that high calculation accuracy is maintained even after the flame hits the wall and the directional influence of the grid arrangement is negligible.

1. 緒言

燃焼器内の流れの予測には数値熱流体解析が有効である。燃焼場の数値流体解析では乱流燃焼モデルが必要であるが、乱流燃焼機構には未解明な点が多く残されているため、現状の知見に基づくモデルを用いた数値解析では燃焼器内の乱流燃焼状態を真に把握することは出来ない。そのため燃焼器内の燃焼物理に関するより詳細な知見を得たり、高精度なモデル開発を行うためには詳細な化学反応機構などを考慮に入れた直接数値計算 (DNS) が有効となる。しかし、境界条件等の制約から、DNS が扱うことのできる燃焼器形状は比較的簡単な形状に制限されている。本研究では、そのような乱流燃焼の高精度 DNS に適用可能な計算手法として、組込性に優れた高精度な埋込境界法の開発を目的とする。

2. 計算手法

乱流燃焼 DNS の基礎方程式は、質量、運動量、エネルギー及び化学種の質量分率に関する完全圧縮性の保存方程式¹⁾からなり、補助方程式として理想気体の状態方程式を用いる。基礎方程式は 4 次精度中心差分法を用いてデカルト直交格子上で離散化され、3 次精度 Runge-Kutta 法を用いて時間方向に積分される。差分法により起因する非物理的な数値振動は、6 次精度陽的フィルターを用いて除去される。

本研究で開発した埋込境界法は一般的に用いられる仮想領域²⁻³⁾の手法に基づくが、組込性及び高精度化のためにこの手法を改良している。高精度化に関する重要な手法として、従来の手法では仮想領域として非流体領域及び流体領域に接するメッシュのみが用いられているが、これに加え仮想領域にある壁方向厚みを含む領域を含める。本手法では計算領域を図 1 のように流体領域 (fluid region) と非流体領域に分け、非流体領域を仮想領域 (ghost region) と固体領域 (solid region) に分ける。図 1 における直線 A-A' は図 2 の x_{wall} を通る直線を表している。DNS における埋込境界法では計算負荷や精度の低下を最小とするために、流体領域と同一の計算スキームを使用することが望ましい。そのため n_d 精度中心差分法が用いられるとき、仮想領域には n_d 個の格子点が必要となる。2 次元や 3 次元の空間を解く際には 2 変数関数の 2 階偏微分を解く必要があるため、空間の各方向に $n_d/2$ 個の格子点が仮想領域に必要

となる。また、DNS の解の非物理的な解の変動を除去するために n_f 次精度の空間フィルターを使用した場合、仮想領域には $n_f/2$ 個の格子点が必要となる。以上より、仮想領域に必要な格子点数は $\max(n_d, n_f/2)$ と計算される。ここで、 n_d と n_f は、それぞれ $n_d=4$, $n_f=6$ であるため仮想領域には 4 点の格子点が必要になる。

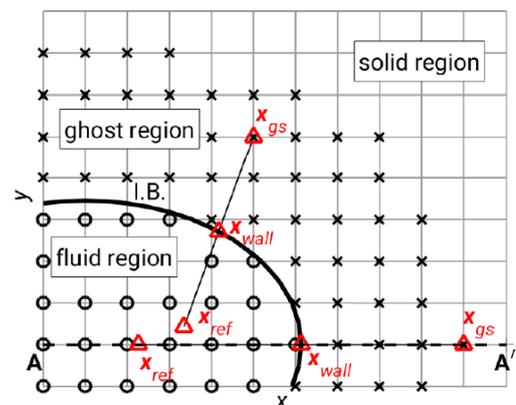


Fig. 1 Schematics of configuration and notation near the immersed boundary region in x-y plane.

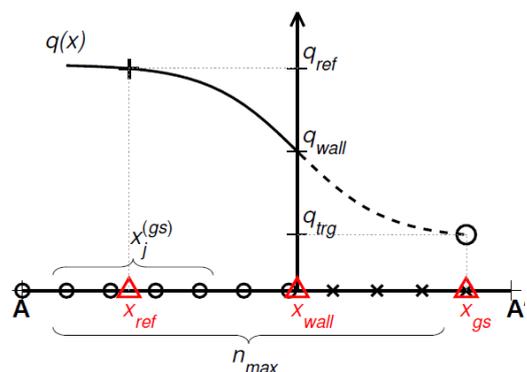


Fig. 2 Schematics of configuration and notation near the immersed boundary region in the x direction.

仮想領域を決定した後、図 2 のように仮想領域中の点 x_{gs} を通る壁面の法線と壁面との交点を x_{wall} とし、この法線上の流体領域に存在するある点を参照点 x_{ref} とする。 x_{ref} は x_{gs} と x_{wall} に対して以下の式(1)が成立するように置く。

$$x_{ref} = 2x_{wall} - x_{gs} \quad (1)$$

また物理量 q については、参照点における値を 4 次多項式のラグランジュ補間により推定し、この値と以下の式を用いて壁面境界条件に応じてそれぞれの x_{gs} における値を算出する。ここで、式(2)はディリクレ条件、式(3)はノイマン条件に対応する。

$$q_{irr}(x_{gs}) = -q(x_{ref}) + 2q(x_{wall}) \quad (2)$$

$$q_{irr}(x_{gs}) = q(x_{ref}) \quad (3)$$

本研究での計算は全て等温壁条件としており、仮想領域の値として速度及び温度には式(2)を、化学種質量分率及び圧力には式(3)を用いて計算を行う。また、質量保存を満たすために密度には式(2)と式(3)の両方を用いている。計算開始時点での流体領域中の全質量 ρ_{ref} と各時刻の全質量 ρ_{new} から式(4)のように計算される。

$$q_{irr}(x_{gs}) = \frac{\rho_{ref}}{\rho_{new}} \left(-q(x_{ref}) + 2q(x_{wall}) \right) + \left(1 - \frac{\rho_{ref}}{\rho_{new}} \right) q(x_{ref}) \quad (4)$$

$q_{irr}(x_{gs})$ の値は計算ステップごとに更新する。DNS で高精度数値計算手法を用いて物理量を求める際に仮想領域の値を使用することで格子形状に依存しない壁面を設定することができる。

また、開発した埋込境界法を用いて 1 次元 DNS を行う際には、結果を比較するために壁面での境界条件として Navier-Stokes characteristic boundary conditions (NSCBC)境界条件^(4,5)を用いた計算も同時に行う。

3. 1 次元問題による検証

1 次元 DNS の計算領域は両側に壁面を配置した 4 mm の領域とし、計算領域の中央から予混合気を着火させる。埋込境界法で計算する場合には非流体領域を含めて 4.1 mm の計算領域を設定する。燃料は水素とし、当量比を 1.0、壁面温度を 400 K、未燃予混合気温度を 800 K、初期圧力を 0.1 MPa、格子点数を $N_x=400$ として計算を行う。

図 3 と図 4 に $t=25 \mu\text{s}$, $50 \mu\text{s}$, $75 \mu\text{s}$ 及び $100 \mu\text{s}$ における温度分布と圧力分布を計算領域の片側(0.0 mm – 2.0 mm)についてのみ示した。ここで、埋込境界法による計算結果を赤、NSCBC による計算結果を黒でそれぞれ表している。また、図 3 と図 4 では $x=2.0$ mm の位置に壁面が設定されている。これより火炎が壁面に衝突する前の $t=75 \mu\text{s}$ までは NSCBC と埋込境界法の計算結果は温度、圧力ともに一致している。衝突後の $t=100 \mu\text{s}$ では誤差が現れ始めるが、誤差は温度分布では壁面付近のみに収まり、圧力分布は計算領域全体に現れる。ただし、その差は NSCBC の計算結果の 2–3 %程度に収まっていることが確認できる。

図 5 に埋込境界法の質量保存性を密度の壁面境界条件にディリクレ条件である式(2)と、式(4)を用いた 2 つの場合を比較した結果を示す。横軸は経過時間を、縦軸は初期の流体領域の全質量 ρ_{ref} に対する現在の全質量 ρ_{new} の比率を表し、式(4)による計算結果を黒で、式(2)による計算結果を赤で示している。また、図 6 には壁面の平均熱流束の推移を示した。図 5 と図 6 から、式(2)では火炎が壁面に衝突して以降、流体領域内の質量が増大し続けるが、一方、式(4)では火炎と壁面の衝突後にも質量が保存されていることが確認できる。

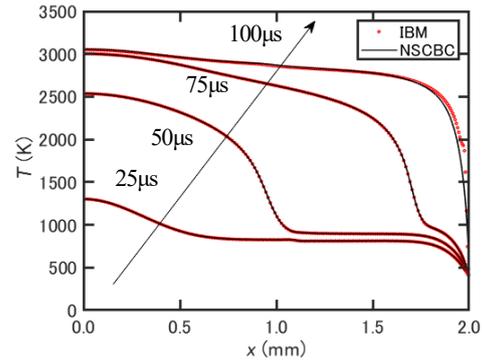


Fig. 3 Transition of temperature distribution for 1D DNS.

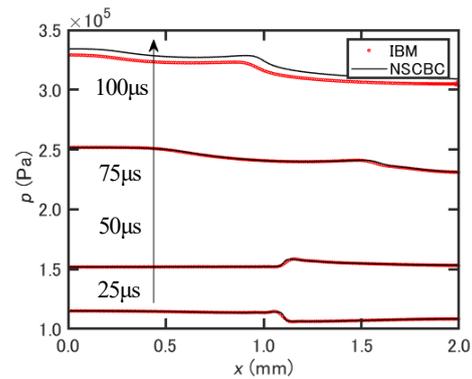


Fig. 4 Transition of pressure distribution for 1D DNS.

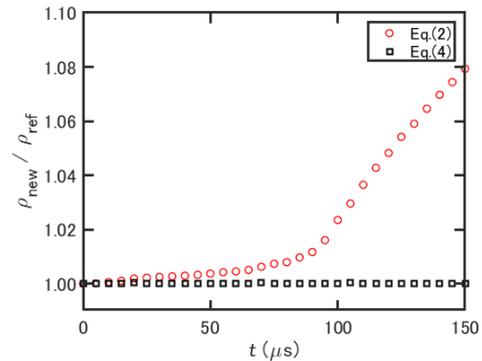


Fig. 5 Transition of total mass ratio for 1D DNS.

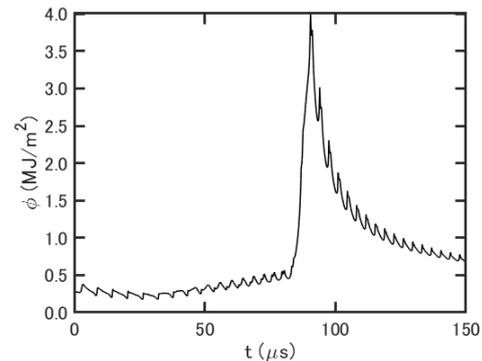


Fig. 6 Transition of mean wall heat flux for 1D DNS.

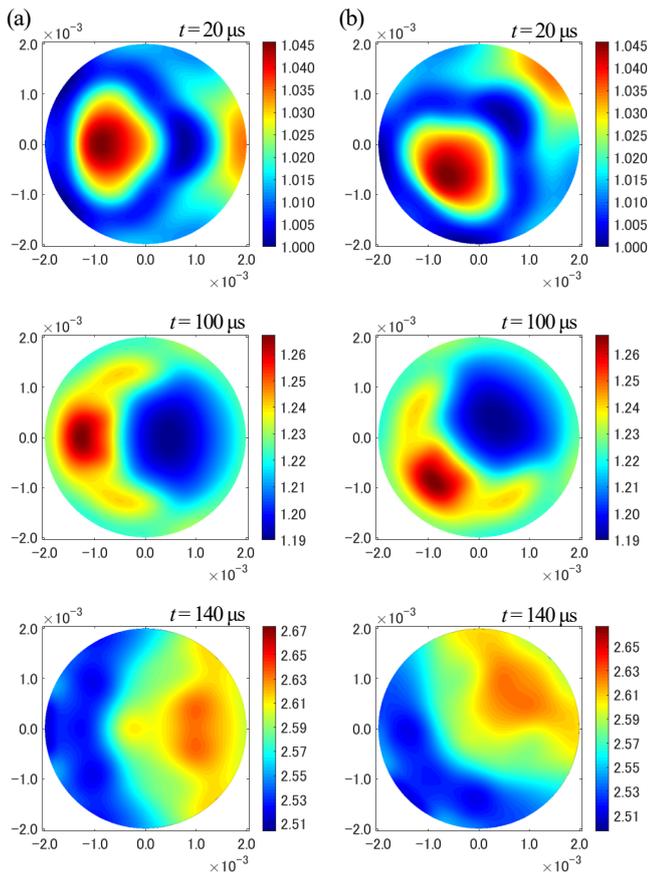


Fig. 7 Transition of pressure distribution for 2D DNS. (a) case 1, (b) case 2.

4. 2次元問題による検証

格子配置の指向性に対する埋込境界法の影響を検査するために、円形形状の燃焼器内を伝播する予混合火炎を対象に2次元DNSを行った。一辺が4.1 mmの正方領域に埋込境界法を用いることで、直径4 mmの円形の燃焼場となるように仮想領域を設定する。燃料は水素とし、当量比を1.0、壁面温度を400 K、未燃予混合気温度を800 K、初期圧力を0.1 MPa、格子点数を $N_x \times N_y = 560 \times 560$ とする。ここでは異なる2点で着火する条件について比較を行い、着火点を円の中心から x 方向に0.8 mm離れた位置で着火させたcase 1と、case 1を反時計回りに $\pi/2$ 回転させた位置で着火させたcase 2について計算を行う。

図7と図8に着火から $t = 20 \mu\text{s}$, $100 \mu\text{s}$ 及び $140 \mu\text{s}$ 後の圧力分布と HO_2 の質量分率の分布を示す。(a)列は着火点を中心から右に0.8 mmとした場合で、(b)列は(a)の着火点を 45° 回転させた場合の計算結果を表している。(a)と(b)の各分布は火炎が壁面に衝突するまでの $t = 20 \mu\text{s}$ から $100 \mu\text{s}$ ではほぼ同様の推移をたどるが、 $t = 140 \mu\text{s}$ の圧力のみわずかな差異が確認できる。このことから、開発した埋込境界法は格子配置の指向性の影響は非常に小さいと考えられる。

5. 結論

本研究では、乱流燃焼のDNSに用いる埋込境界法を開発し、1次元および2次元問題に対して予混合火炎伝播のDNSを行うことで、以下の結論を得た。

- 埋込境界法による計算結果をNSCBCによる結果と比較し計算精度を確認した。火炎と壁面の衝突前の両者の結果はほぼ一致し、衝突後においても両者の差異は非常に小さい。
- 開発した埋込境界法は優れた質量保存性を有することを確

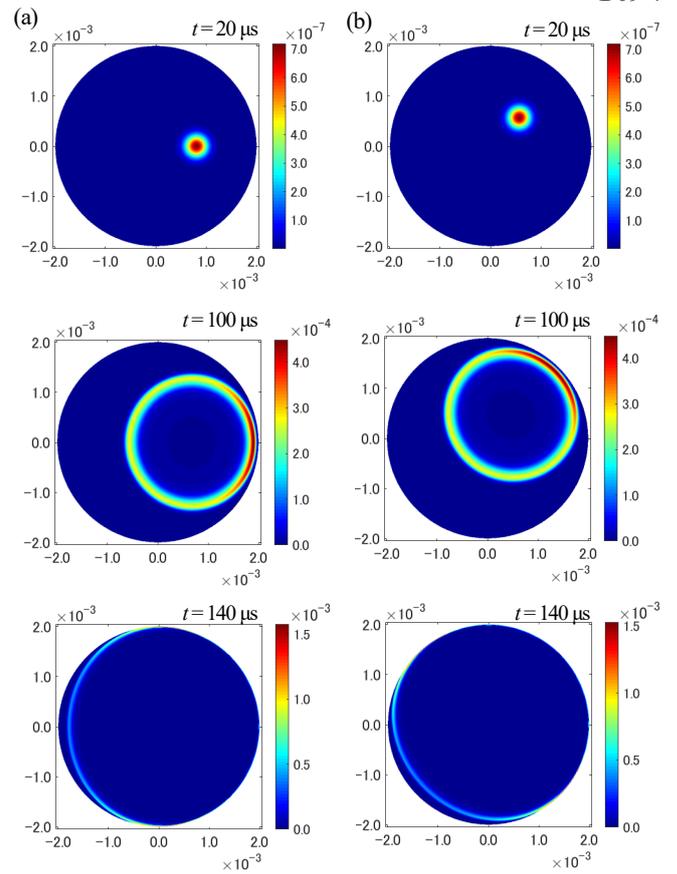


Fig. 8 Transition of distribution of HO_2 mass fraction for 2D DNS. (a) case 1, (b) case 2.

認した。

- 格子配置に起因する埋込境界法の指向性の影響は非常に小さいことが確認できた。

謝辞

本研究は、2019年度に実施した自動車用内燃機関技術研究組合との共同研究事業の成果である。関係者各位に深く感謝の意を表す。

参考文献

- Y. Minamoto, N. Fukushima, M. Tanahashi, T. Miyauchi, T. D. Dunstan, N. Swaminathan, "Effect of flow-geometry on turbulence-scalar interaction in premixed flames", *Physics of Fluids*, 23 (2011) 125107.
- P. Parnaudeau, E. Lamballais, D. Heitz, J. H. Silverstrini, "Combination of the immersed boundary method with compact schemes for DNS of flows in complex geometry", *ERCOFTAC series, Direct and Large-Eddy Simulation V*, 9 (2004), pp. 581-590.
- O Hu, N Zhao, J M Liu, A, "Ghost cell method for turbulent compressible viscous flows on adaptive Cartesian grids", *Procedia Engineering*, 67 (2013), pp.241-249.
- Poinsot, T. J. A., and Lele, S. K., "Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows", *Journal of Computational Physics*, 101 (1) (1992), pp. 104-129.
- Baum, M., Poinsot, T. J., Thevenin, D., "Accurate boundary conditions for multicomponent reactive flows", *Journal of Computational Physics*, 116 (1994), pp. 247-261.