

反応性流体の流体/粒子連結シミュレーション

河野 明男, 草野 完也

独立行政法人海洋研究開発機構 地球シミュレータセンター

kawanoa@jamstec.go.jp

概要： 気体の燃焼現象のための連結階層シミュレーションの手法を提案する。この手法は連続流体モデルと気体分子運動論モデルを連結することによって実行される。シミュレーションの対象となる系は空間的に二つの領域（連続体領域と粒子領域）に分割される。前者はほとんど局所熱平衡状態にある領域であり、連続流体モデルによって解かれる。後者は熱的に非平衡にある領域であり、気体運動論モデルによって解かれる。この手法を気体デトネーション伝播現象に対して適用した。

1 はじめに

燃焼は、化学反応と流れ場が強くカップルした典型的なマルチフィジクス現象である。一方、燃焼における支配的な素反応は極めて短い時間的・空間的スケールを持つラジカル反応であるため、燃焼はマルチスケール現象の一つでもある。現在、人類の消費するエネルギーの大部分は燃焼によって生じる熱エネルギーから得ている。しかし燃焼によって窒素酸化物などの大気汚染物質や地球温暖化ガスである二酸化炭素が排出され、その影響が懸念されている。また予期せぬ燃焼は火災や爆発などの大きな災害をもたらす。有害物質の排出を抑制しつつ燃焼のエネルギーを効率的に利用し、また爆発などの災害の予防や被害の軽減のためには燃焼現象の解明と予測が不可欠である。近年の計算機技術の進展に伴い、燃焼のシミュレーション研究はますますその重要性を増している。

通常、燃焼現象のシミュレーションは連続流体モデルによって実行される。このモデルでは化学反応は Arrhenius の式を用いた化学反応速度論モデルによって記述されている。しかしこの燃焼モデルは連続体近似および局所熱平衡近似に基づいたものであることに注意する必要がある。激しい燃焼においては化学反応に伴う発熱によって強い非平衡が実現しうるため、そのような場所では化学反応の記述に Arrhenius 式のように反応速度係数を単に温度の関数として表現した式を用いることができない。また物理量の急峻な勾配を伴う流れ場では連続体としての流体の取り扱いが困難となる。特にデトネーションや超音速燃焼では流れ場内に衝撃波が存在し、その波面の厚さはしばしば平均自由行程の数倍程度となる。したがって波面の内部を取り扱う場合には連続体近似が適用

できず、衝撃波と燃焼場との干渉や波面の微細な構造を精密に取り扱うためには分子レベルの運動論を考慮する必要がある。全ての領域を分子モデルによって扱うことができれば理想的であるが、それは連続流体モデルに基づくシミュレーションと比較して莫大なコストが掛かり現実的ではない。ところが燃焼場においては連続体近似や局所熱平衡近似が強く破たんしている空間領域は燃焼場全体から見れば小さく、連続流体モデルによって効率的に取り扱うことができる空間領域が系の大部分を占める場合が多い。そのような特性に着目し、我々は気体の燃焼を効率的にシミュレートするための連結階層シミュレーションの手法を提案する [1]。この手法を気体デトネーション伝播に対して適用し、我々の連結階層シミュレーションが分子モデルに基づいたシミュレーションの結果を正しく再現できることを確認した。

2 アルゴリズム

系は空間的に二つの領域に分割される。一つはほぼ局所熱平衡状態にある領域で、系の大部分を占める。この領域を「連続体領域」とよび、Navier-Stokes 方程式に基づいた連続流体モデルによってシミュレートする。もう一つは衝撃波面などの物理量の急峻な勾配が存在する場所を囲むようにとられた空間的に局在した領域である。この領域を「粒子領域」とよび、Boltzmann 方程式に基づいた気体運動論モデルによってシミュレートする。

図 1 に示すように、粒子領域と連続体領域は空間的に重複した hand-shaking 領域を持つ。Hand-shaking 領域は連続体領域から粒子領域へ情報を受け渡す C→P 結合と、粒子領域から連続

体領域へ情報を伝える P→C 結合からなる。これらの結合領域では、各化学種密度、運動量、温度のような連続体としての物理量が送受信される。C→P 結合では連続体領域から受け渡された物理量に対応する熱平衡分布に従って粒子領域上にシミュレーション分子が生成される。P→C 結合ではその場所における連続体としての物理量を粒子領域中の分子の統計平均から求め、連続体領域の対応する部分に与える。

3 テスト計算

この手法を 2 次元気体デトネーション伝播に適用した例を図 2 に示す。点線で囲まれた領域が分子領域である。このモデルでは伝播するデトネーション波面が常に分子領域内部にあるように自動的に連結位置が調節されている。デトネーションに特徴的な三重衝撃波構造が明確に再現されており、流れが hand-shaking 領域を通じて適切に下流へ伝播していることがわかる。

2 次元デトネーション波は複数の三重点が互いに衝突を繰り返して伝播し、その軌跡は鱗状のセル構造となることが知られている。図 3 に示されたデトネーション波の最大圧力履歴より、流体モデルと粒子モデルの結果に違いがあることがわかる。連結階層モデルでは空間的にほとんどの領域が流体モデルで計算されているにも関わらず、その結果は分子モデルのみによる計算と良く一致している。このことは連結階層シミュレーションの有効性を端的に示している。

4 まとめ

燃焼現象の連結階層シミュレーションの手法を提案し、それを 2 次元気体デトネーション伝播に対して適用した。我々の手法は、空間的にほとんどの領域が計算コストの面で有利な流体モデルで計算されているにも関わらず、その結果は分子モデルのみによる計算と良く一致する。

参考文献

- [1] A. Kawano and K. Kusano,
 “Continuum/Particle Interlocked
 Simulation of Gas Detonation,”
 Proceedings of the 26th International
 Symposium on Shock Waves, 2007.

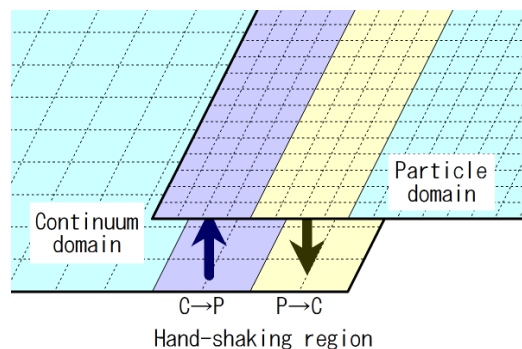


図 1: 連続体領域と分子領域との間でそれぞれの境界のマクロな物理量の情報を交換することにより連結階層シミュレーションを実現する。

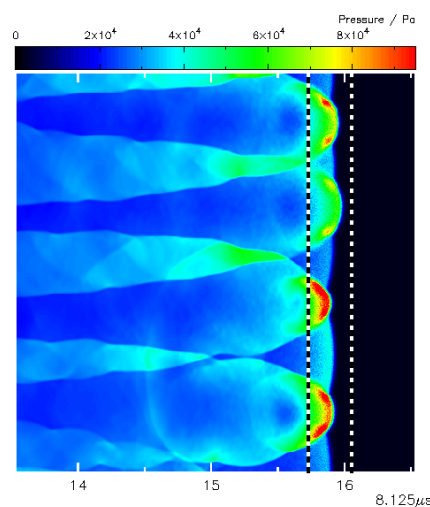


図 2: デトネーション伝播の連結階層シミュレーションの例。点線で囲まれたデトネーション波面近傍領域のみを分子モデルで扱い、それ以外の領域は連続流体として計算する。色は圧力を示す。

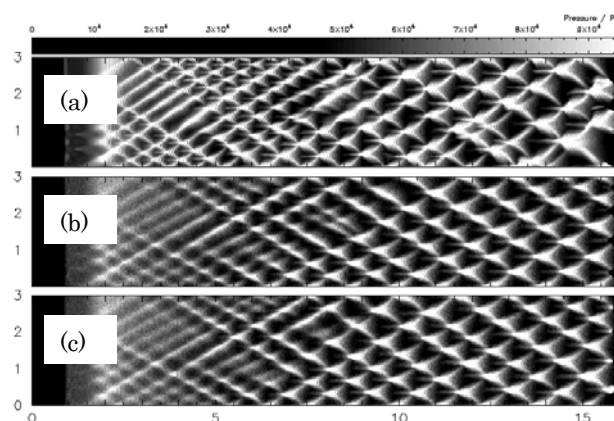


図 3: 最大圧力履歴の比較。(a)、(b)、(c)はそれぞれ連続流体モデルのみ、気体分子モデルのみ、及び連結階層モデルによって得られた結果をそれぞれ示す。