

燃焼数値解析技術の高度化に関する研究



研究室紹介

黒瀬良一*

Research on Advanced Numerical Simulation of Combustion

Key Words : Combustion, Numerical Simulation, Multiphase Flow, Turbulence

はじめに

筆者は、京都大学大学院工学研究科機械理工学専攻熱物理工学分野(研究室)¹⁾に所属している。当研究室は、教授1名(筆者)、准教授1名、助教2名、特定助教2名、特定研究員1名、PhD学生(社会人含む)14名、M2学生9名、M1学生7名、B4学生8名、研究生3名、秘書2名の計50名が所属している(2024年12月現在)、一研究室としては比較的大所帯の研究室である。また、このうち、スタッフの3名、学生の13名は中国、インド、韓国に国籍をもつ外国人である。本稿では、当研究室で取り組んでいる研究の概要と、最近特に注力しているカーボンフリー燃料(特に水素)の燃焼数値解析に関する研究の進捗について紹介する。

研究室における研究

当研究室では、「熱力学、伝熱学、流体力学、分光学、電磁気学を基礎として、流体および固体の熱力学性質、熱輸送性質、熱ふく射性質、ならびにそれらの複合現象をナノ～マクロスケールで解明する。また、このような基礎研究に基づいて、「ものづくり」の工学を支える数値解析技術および計測技術の開発・高度化を進める。」ことを目標に掲げて研究を進めている。また、研究体制としては、大枠で燃焼研究グループとMD(Molecular dynamics)研究グループ

の2つのグループに分かれている。

燃焼研究グループでは、燃焼数値解析技術の確立および燃焼数値解析を用いた燃焼メカニズムの解明に関する研究を基礎から応用まで幅広く行っている。対象も産業用ガスタービン、航空機エンジン、ロケットエンジン、自動車エンジン、石炭燃焼炉およびガス化炉など、燃焼現象が見られるものはなんでも取り扱っている。最近では、カーボンフリー燃料として期待されている、水素やアンモニアの燃焼メカニズムの解明とその数値モデリングに関する研究を、スーパーコンピュータ「富岳」と最新の数値解析技術を駆使することにより取り組んでいる。この研究については、後述する。

MDグループでは、主に、マイクロ/ナノスケールの物性に関する研究やふく射に関する研究を行っている。マイクロ/ナノスケールの物性に関する研究に関して、様々な物質の物性を原子・分子スケールで解明する試みは理工学の広い分野で半世紀以上にわたって行われてるが、計算機の発達とともにその広がりが増している。本研究室では、液体の相変化や輸送現象を対象に、nmスケールのサイズをもつ微小気泡(ウルトラファインバブル)の物性評価、核沸騰の最初期過程の探究、液晶の構造発現機構などを、古典力学(ニュートン運動方程式)に基礎を置く分子シミュレーションによって調べている。また、固体中の輸送現象に関しては、格子振動(フォノン)が担うエネルギー輸送、すなわち熱伝導のミクロ機構の解明に取り組んでいる。半導体素子の微細化などにより μm スケールの熱輸送が問題になることが増えているが、そのような系ではフォノンの平均自由行程と系の代表長さが同じオーダーとなり、通常の熱伝導方程式では記述できなくなる。それに替わり、固体物理学と統計熱力学の知見に基づいてフォノンの相互作用を扱うような数値計



* Ryoichi KUROSE

1970年7月生まれ
九州大学大学院 工学研究科 化学機械
工学専攻 博士後期課程(1998年)
現在、京都大学大学院 工学研究科 機
械理工学専攻 教授 博士(工学)
専門/熱流体工学
TEL : 075-383-3654
E-mail : kurose@mech.kyoto-u.ac.jp

算手法を提案している。さらに、ナノスケールの輸送現象として電子輸送を扱おうとすると古典力学は破綻し、量子力学に基づくモデリングと数値シミュレーションが必要となる。そこで、多電子系の量子計算を、密度汎関数法と呼ばれるモデルの深化とスーパーコンピュータなどでの大規模並列計算により実現することにより、太陽電池の新規材料開発への応用のほか、摩擦帯電現象を利用したエネルギーハーベストシステム中の電子移動過程の解析など、幅広く取り組んでいる。一方、ふく射に関する研究については、熱放射の古典論計算法として、巨視的・連続的なFDTD計算法 (Finite Difference Time Domain method) や微視的・離散的な電磁力学のモデル計算法などの提案に関する研究を進めている。

燃焼数値解析に関する研究

我が国は、温室効果ガスの排出を2030年度に13年度比で46%削減、2050年までに実質ゼロとすること (すなわち、カーボンフリー社会の実現) を宣言した。温室効果ガスとして最も寄与が大きいのは二酸化炭素 (CO₂) であり、その排出量の大部分が化石燃料 (石炭、石油、天然ガス) の燃焼によるものであることから、その対策が急務とされている。そこで、風力や太陽光などの再生可能エネルギーを使って水を電気分解して製造、貯蔵、輸送が可能な水素 (H₂) やアンモニア (NH₃) を燃料として燃焼させてエネルギーを得る手法が注目されている。この技術が確立すれば、燃焼時におけるCO₂排出量がゼロとなるため、究極のカーボンフリーガスタービンが実現する。また、水素やアンモニアのガスタービンは、天然ガス (メタン (CH₄) が主原料) ガスタービンの大がかりな改修なしに流用することができるため、CO₂削減に向けた最も現実的かつ迅速な解であるとも言える。しかし、水素は燃焼速度が速い (メタンの約5倍) ことによって生じる火炎の逆流 (フラッシュバック) や、希薄燃焼条件で発生しうる火炎の不安定化と圧力変動の相互作用 (燃焼振動) がガスタービンの損傷を引き起こす危険性があること、また、アンモニアは逆に燃焼速度が遅い (メタンの約5分の1) ことによって生じる失火が起こりやすくなることから、これらの対策が不可欠であり、その解決は容易ではない。

当研究室では、カーボンフリー社会の実現に貢献

すべく、このような水素やアンモニアを燃料とするガスタービンの設計、開発を進める上で、試行錯誤試験が比較的容易で、物理現象の理解の助けになるなどの理由から、有力なツールとなりうる燃焼の数値解析技術の高度化に関する研究を進めている²⁻⁵⁾。以下に、これまでの成果を2例紹介する。

(a) 燃焼器まるとシミュレーション

数十～数百化学種の数十～数千ステップ反応から成る詳細反応機構を厳密に解く燃焼場の3次元数値シミュレーション、いわゆる燃焼の直接数値シミュレーション (Direct Numerical Simulation, DNS) は、最新のスーパーコンピュータを用いた超並列計算を行っても数月から数年、もしくはそれ以上かかることが予想され、現実的ではない。そのため、特に実機燃焼器を対象とする場合には、乱流モデルや燃焼モデルを採用するラージ・エディ・シミュレーション (Large Eddy Simulation, LES) やRANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes) シミュレーションが行われている。燃焼モデルとしてよく用いられるFlameletモデルを採用したLESの実機燃焼器への適用例の詳細については、日本ガスターブ学会誌²⁻⁵⁾の中でも紹介しているので本稿では省略する

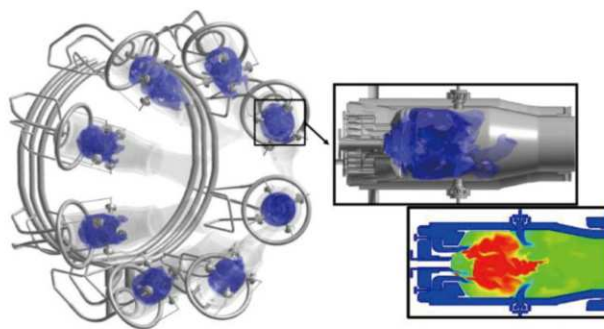


図1 KHI産業用ガスタービン燃焼器内乱流燃焼場のLES (温度分布)

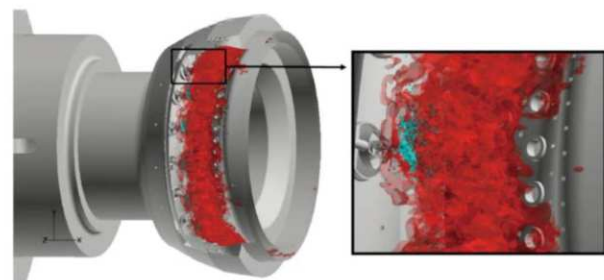


図2 JAXA航空エンジン用ガスタービン燃焼器内乱流燃焼場のLES (燃料噴霧・温度分布)

が、当時最速のスーパーコンピュータ「京」の10,000並列を用いても結果を得るのに1週間程度の計算時間がかかっている(図1, 2)。

(b) 燃焼振動の予測

燃焼の数値シミュレーションで予測が最も難しい現象の1つとして燃焼振動があげられる⁶⁾。ごく最近、筆者らは、スーパーコンピュータ「富岳」を用いて、JAXAが計測した弱旋回流燃焼器内における希薄水素の燃焼振動挙動を、LESにより再現することに成功している^{7,8)}(図3)。本計算では、燃焼モデルとして、Dynamic Thickened Flame (DTF) モデルを用いている。また、このLESコードは、複雑形状を対象とした場合に通常よく採用される非構造格子ではなく、構造格子用に開発されており、メッシュの作成、計算時間、ポスト処理等において時間の短縮が見込まれ、今後の展開が期待されるものである⁹⁾。なお、燃焼振動の評価には長時間の計算が必須となるため、本計算には、スーパーコンピュータ「富岳」の61,440コアを用いて、10日程度かかっている。

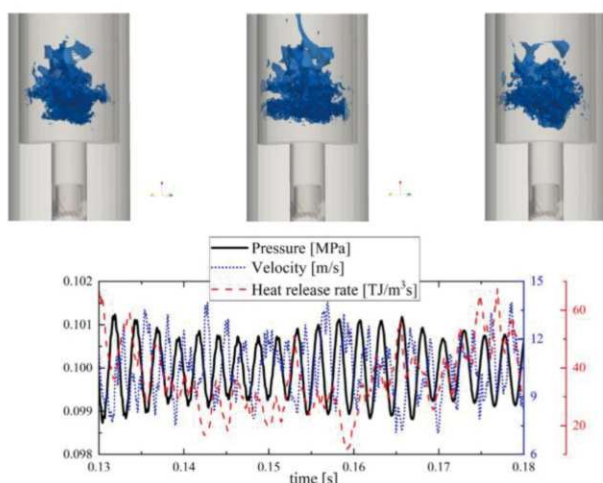


図3 JAXA弱旋回流燃焼場のLES(温度分布(上)および圧力振動特性(下))

おわりに

本稿では、京都大学 大学院 工学研究科 機械理工学専攻 熱物理工学分野(研究室)¹⁾で取り組んでいる研究の概要、および最近特に注力しているカーボンフリー燃料(特に水素)の燃焼数値解析に関する研究の進捗について紹介した。加えて、ごく最近では、アンモニア¹⁰⁾やSAF(Sustainable Aviation

Fuel)¹¹⁾等の研究も進めているが、これらの成果の紹介はまたの機会とさせていただきたい。

本研究室では、機械工学の研究には基礎研究と応用研究の明確なボーダーは存在しない、という信念に基づき、幅広い研究に興味を持って取り組むような環境づくりに努力してる。実際、本研究室では、企業との共同研究も多く、学生は企業の研究者、技術者と接し、議論する機会にも多く恵まれていると自負している。学生は共同研究者と様々な場で議論するたびに、成長し、目の輝きが変わっていくのを実感する。本研究室の研究内容はHP¹⁾にも掲載している。少しでもご興味のあるテーマが有れば、ご一報を頂ければ幸いである。

参考文献

- 1) <http://www.tse.me.kyoto-u.ac.jp/>
- 2) 黒瀬良一, ガスタービンのデジタルツインを目指して, 日本ガスタービン学会誌, Vol. 59, (2022), pp. 191-196.
- 3) 黒瀬良一, 乱流燃焼流れのLarge-eddy Simulation -噴霧燃焼への適用-, 日本ガスタービン学会誌, Vol. 35, (2007), pp. 243-252.
- 4) 黒瀬良一, 燃焼器内乱流燃焼場のCFD, 日本ガスタービン学会誌, Vol. 40 (2012), pp. 282-286.
- 5) 黒瀬良一, ガスタービン燃焼器内乱流燃焼の数値シミュレーション, 日本ガスタービン学会誌, Vol. 43 (2015), pp. 396-401.
- 6) S. Tachibana, K. Saito, T. Yamamoto, M. Makida, T. Kitano, R. Kurose, Experimental and numerical investigation of thermo-acoustic instability in a liquid-fuel aero-engine combustor at elevated pressure: validity of large-eddy simulation of spray combustion, *Combustion and Flame*, Vol. 162 (2015), pp. 2621-2637.
- 7) J. Nagao, A. L. Pillai, T. Shoji, S. Tachibana, T. Yokomori, R. Kurose, Large-eddy simulation of a lean-premixed hydrogen flame in a low-swirl combustor under combustion instability, *Physics of Fluids*, Vol. 35 (2023), p. 105124.
- 8) M. Kawai, J. Nagao, A. L. Pillai, R. Kurose, Effect of temporal increase in equivalence

- ratio on combustion instability of a lean-premixed low-swirl hydrogen jet flame: An LES study, *Physics of Fluids*, Vol. 36 (2024), p. 044119.
- 9) R. Kurose, <http://www.tse.me.kyoto-u.ac.jp/members/kurose/link.php>
- 10) Z. An, W. Zhang, M. Zhang, J. Xing, R. Kai, W. Lin, R. Wang, J. Wang, Z. Huang, R. Kurose, Experimental and numerical investigation on combustion characteristics of cracked ammonia flames, *Energy & Fuels*, Vol. 38 (2024), pp. 7412-7430.
- 11) J. Xing, Z. An, R. Kurose, Analysis and flamelet modeling of preferential evaporation in SAF/Jet A spray flames, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol. 40 (2024), pp. 105707.



コウノトリ