

jh160020-NAH

## 反応・相変化を伴う多分散系混相流の大規模シミュレーション

松尾亜紀子（慶應義塾大学）

相変化・反応によって多分散性を有する分散相と、連続相の二相からなる混相流問題について、大規模スケールでの数値解析を行うための OpenMP 並列/SIMD チューニングに取り組んだ。本課題研究では、「A：爆轟燃焼波と液滴との干渉」、「B：粉体の燃焼現象」、「C：水中高速飛翔体周りのキャビテーション現象」の 3 点を対象とした。

「A：爆轟燃焼波と液滴との干渉」では、既燃ガス逆流及び既燃ガス排出過程を明らかにし、酸化剤供給全圧に対して燃焼器平均圧が高くなる圧力ゲインな燃焼器実現のための指針を得た。「B：粉体の燃焼現象」では、層状炭塵爆発の初期過程を二次元数値解析により再現し、火炎が加速する過程を観測することでその機構を解明した。「C：水中高速飛翔体周りのキャビテーション現象」では、水中高速飛翔体の先端形状が気泡形状及び飛しょう安定性に与える影響について検討し、形状の設計指針を得た。

### 1. 共同研究に関する情報

#### (1) 共同研究を実施した拠点名

東北大学サイバーサイエンスセンター

#### (2) 共同研究分野

- 超大規模数値計算系応用分野
- 超大規模データ処理系応用分野
- 超大容量ネットワーク技術分野
- 超大規模情報システム関連研究分野

#### (3) 参加研究者の役割分担

- ・ 松尾亜紀子（慶應義塾大学理工学部）  
研究総括
- ・ 江川隆輔（東北大学サイバーサイエンスセンター）並列化処理
- ・ 小林広明（東北大学サイバーサイエンスセンター）並列化処理
- ・ 磯部洋子（東北大学サイバーサイエンスセンター）並列化処理
- ・ 奥野航平（慶應義塾大学理工学研究科）  
「C：水中高速飛翔体周りのキャビテーション現象」担当者
- ・ 浅野啓（慶應義塾大学理工学研究科）  
「B：粉体の燃焼現象解明」担当者
- ・ 渡部広吾輝（慶應義塾大学理工学研究科）  
「A：爆轟燃焼波と液滴との干渉」担当者

相変化・反応によって多分散性を有する分散相と、連続相の二相からなる混相流問題について、大規模スケールでの数値解析を行うための OpenMP 並列/SIMD チューニングを行うことを目指す。これらの現象は混相流の中でも、相反応・反応が生じたことによって分散相と連続相が同時に存在するために非常に複雑な流れとなり、現象を工学的に再現することが非常に難しい。そのため、本研究ではこのような流れ場に対する大規模スケールでの数値解析手法を構築し、現象解明につなげることを目的としている。

本課題研究では、「A：爆轟燃焼波と液滴との干渉」、「B：粉体の燃焼現象」、「C：水中高速飛翔体周りのキャビテーション現象」の 3 点について扱う。A は数  $\mu\text{m}$  の液滴が流れ場に存在し、燃焼波と液滴が干渉する気液混相反応問題であり、B は数  $\mu\text{m}$  の粉体が燃焼するとともに既燃ガスと相互干渉をする固気混相反応問題、C は蒸発によって生じた気泡が周囲液体と干渉する気液混相問題である。以下に各条件における状況及び学術的新規性について述べる。

(A) 「爆轟燃焼波と液滴との干渉」  
マイクロメートルオーダーの液滴が浮遊している状態において、伝播する燃焼波が通過する。液滴は燃焼波通過後の高温気体によっ

### 2. 研究の目的と意義

#### 1) 研究目的

て加熱され蒸発するとともに、相変化時の吸熱によって燃焼波に対して影響を与える。このような流れ場は、エンジン燃焼室内部において多く生じているが、本研究においては燃焼波がデトネーションである場合について着目し、デトネーション波と液滴の干渉現象を明らかにすることによって、デトネーションの工業利用に貢献するとともに数値解析手法の精度向上を目指す。

#### (B)「粉体の燃焼現象」

マイクロメートルオーダーの粉体が堆積しており、その上部を衝撃波が通過することによって粉体が巻き上げられ浮遊する。粉体が可燃性粒子であった場合、粉体が高温気体に晒されることによって燃焼を開始し、粉塵爆発を生ずる。炭鉱の坑道においては微粉炭の燃焼による被害が繰り返し発生しており、この抑制は炭鉱施設において常に課題として挙げられている。そのため、粉塵爆発現象の詳細を把握することは、安全防護技術を発展させる上で必要とされている。本件では、粒子群の挙動を代表粒子によって表すことで粉体の動きを精度よく再現する計算手法を確立することが目的の一部である。

#### (C)「水中高速飛翔体周りのキャビテーション現象」

水中を 100 m/s 以上で移動する物体の表面付近において生じるキャビテーション現象に焦点を当てる。水中飛翔体の周囲では、一時的な圧力の低下によってキャビテーション気泡が発生し、飛翔体はキャビテーションに包まれることとなる。この際、気泡と水における粘性の差異によって飛翔体に加わる水中抗力は大きく変化する。本件では、このような高速飛翔体に加わる流体抵抗に対して、キャビテーション現象が与える影響を調査するとともに、水中高速輸送機関の実現へ向けたキャビテーションの有効利用研究の端緒とする。

#### 2) 研究意義

多分散系の混相流は数多く存在するが、それらに対して実用的な計算コストで解析を行うモデルは存在しない。本課題研究によって工学的スケールにおけるこれらの現象を定量的に再現することのできる手法が開発できれば、混相流現象を解明する一端とすることが出来る。

本課題研究では特に 3 テーマに絞って解析を行う事から、波及効果として以下の 3 点が期待できる。

- ① デトネーションエンジンの実用化に向けた知見を収集し、推進機関の効率向上に貢献する。
- ② 粉塵爆発現象の一端を解明し爆発現象に対する安全・予防技術の発展に貢献する。
- ③ キャビテーションの有効利用に向けた提言を行い、輸送機関の高速化に貢献する。

### 3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

本課題研究における研究対象は、産業・自然界において広く散見される現象であり、小規模スケールでの解析のみでは現象解明につながらない。数値解析によって得られた知見を反映することによって混相流現象に対する研究の進展に貢献するためには、工学的スケールにおける現象解析が必要である。

本課題研究において用いる混相流解析コードの構築は既に着手しており、それぞれの問題に対して二次元での解析能力があることは小規模計算において確認している。しかし、工学的スケールにおける大規模計算を効率的かつスピーディーに行うためには、ベクトル型コンピューターによる高並列計算を行う必要がある。そこで、ベクトル型コンピューターの並列化性能を発揮させるため、自主開発コードの OpenMP 並列/SIMD チューニングを行うものである。

### 4. 前年度までに得られた研究成果の概要

新規課題のため該当なし

5. 今年度の研究成果の詳細

(A) 「爆轟燃焼波と液滴との干渉」

デトネーションを利用したエンジンに PDE(Pulse Detonation Engine)がある。PDE は、デトネーションを繰り返し燃料器内で発生させ、推力を得る内燃機関である。PDE の燃料供給法に燃料・酸化剤以外の物質を用いない燃料液滴パージ法が提案されている (図 1)。過程 1 において未燃混合気を点火位置近くまで充填した後に点火を行う。過程 2 では、DDT 過程を経て管内にデトネーション波が伝播する。過程 3 では、既燃ガスは管外に排出され、管内の圧力が減少したことで酸化剤の供給が再開される。酸化剤により既燃ガスが排出されたところで燃料液滴がインジェクターより管内に噴霧される。過程 4 において、燃料と酸化剤が混合し未燃混合気形成され

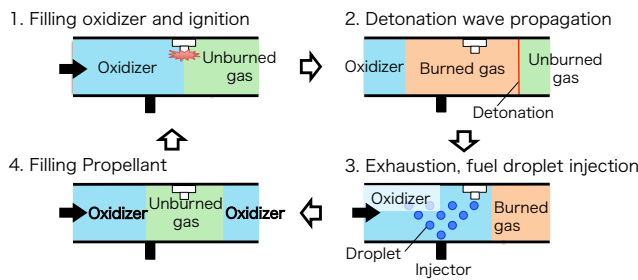


図 1 燃料液滴パージ作動概要図

る。しかし、過程 2 においてデトネーションによって生じた既燃ガスが酸化剤供給側に逆流を起こすことから、過程 3 において逆流した既燃ガスを排出する必要がある。そこで、本研究では既燃ガス逆流及び既燃ガス排出過程について数値解析による検討を行った。

図 2 に既燃ガス排出過程の流れ場を示す。点火後デトネーションによって生じた既燃ガスは酸化剤供給側へと逆流するが、デトネーションが開管端に到達した後に管内へ伝播する膨張波によって逆流を止め排出されることが分かった。

また、図 3 に点火位置におけるある時刻までの平均圧力を酸素供給全圧で除した値の履歴を示す。燃焼器長さ  $L$  が大きい場合ほど点火位置におけるある時刻までの平均圧力を酸素供給全圧で除した値は大きくなって

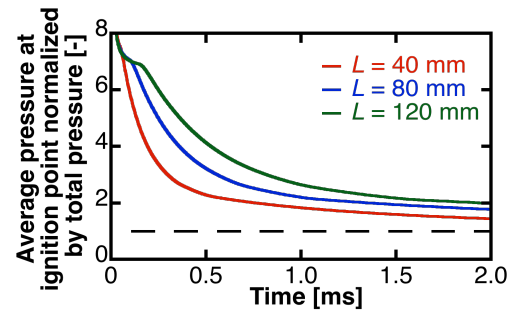
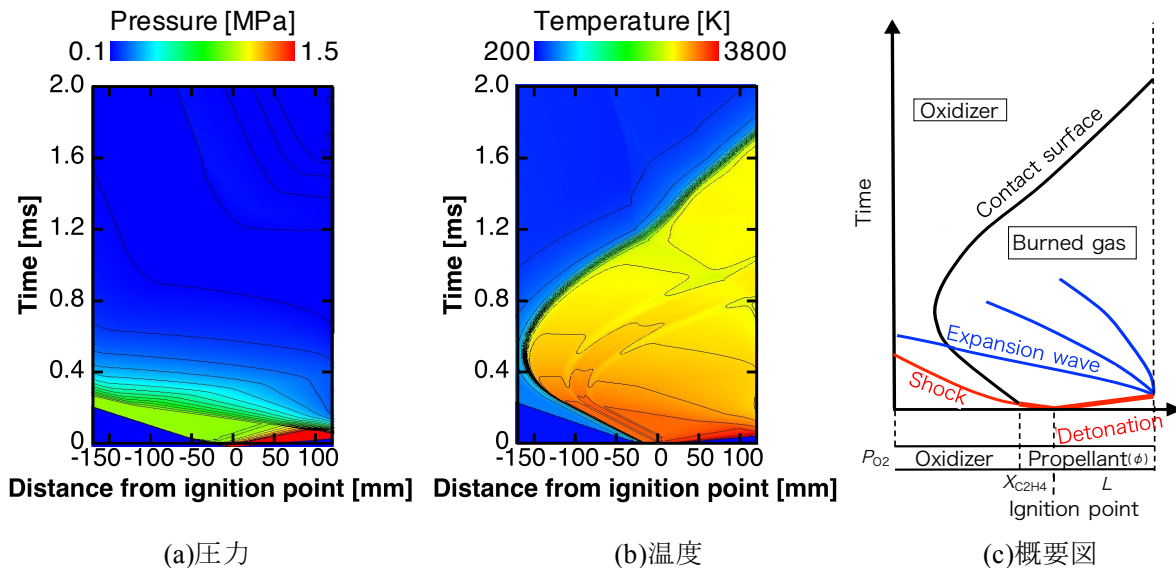


図 3 点火位置における平均圧を酸化剤供給全圧で除した値の時間履歴 ( $\phi = 0.84, P_{O_2} = 0.151\text{MPa}, X_{C_2H_4} = 0\text{ mm}$ )



(a)圧力

(b)温度

(c)概要図

図 2 管内の x-t 線図 ( $L = 120\text{ mm}, \phi = 0.84, P_{O_2} = 0.151\text{ MPa}, X_{C_2H_4} = 0\text{ mm}$ )

いる。これらの結果より、酸化剤供給全圧に対して燃焼器平均圧が高くなる圧力ゲインな燃焼器実現のためには、燃焼器を短く、酸化剤供給全圧を低く、点火位置から酸化剤供給側に燃料・酸化剤混合気が配置されている距離を大きく、当量比を高くすることが有効であることが分かった。

図 4 に作動周波数と点火位置における平均圧力を酸化剤全圧で除した値の関係を示す。作動周波数が増加するほど点火位置における平均圧力を酸化剤全圧で除した値は増加し、作動周波数が 714 Hz 以上では 1 以上の値となり圧力ゲインが得られる結果となった。より高い圧力ゲインを得るためには高周波数作動が必要となり、酸化剤全圧を増加させるか背圧を低くすることで酸素流れをチョークさせることが有効である。

(B) 「粉体の燃焼現象」

炭塵爆発では炭塵は重力沈降によって堆積していることが多いため、最初に燃焼波との干渉により堆積した炭塵が巻き上がり、その後分散し炭塵が燃焼するという層状炭塵爆発の過程をとる。本研究では、層状炭塵爆発の初期過程を二次元数値解析により再現し、火炎が加速する過程を観測することでその機構解明を試みた。

解析対象を図 5 に示す。計算領域左側には CH<sub>4</sub>-O<sub>2</sub> 予混合気が配置されており、点起爆によって気相デトネーションを発生させる。このデトネーションによる衝撃波と高温の既燃ガスのみが炭塵配置領域に侵入する。この後、衝撃波および既燃ガスとの干渉によって炭塵から CH<sub>4</sub> が揮発し、周囲の空気と反応を始めることで層状炭塵燃焼が開始される。

図 6 に衝撃波伝播速度、火炎伝播速度及び気相反応によるエネルギー放出量の時間履歴を示す。15 ms 以降の燃焼波伝播速度は超音速であるだけでなく衝撃波伝播速度を上回っており、この後に燃焼波は衝撃波と一体

となってデトネーションへと遷移する可能性が示唆される

図 7 に各物理量の断面平均値に関する x-t 線図を示す。13 ms 以降、x=2-6 m 地点において圧力、密度が急激に上昇している。一方で、温度には大きな変化が見られない。したがって、これは炭塵粒子から CH<sub>4</sub> が揮発する際に生ずる固相から気相への相変化に伴う圧力上昇であるといえる。

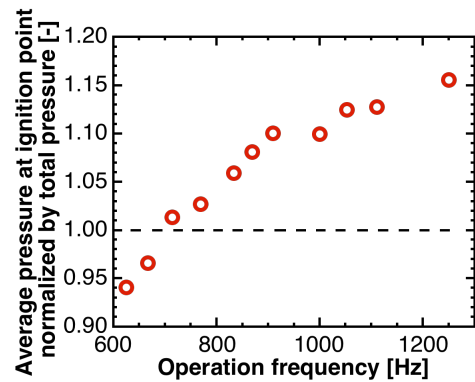


図 4 作動周波数と点火位置における平均圧力を酸化剤全圧で除した値 (L<sub>c</sub>= 120 mm, φ = 0.582, P<sub>b</sub> = 0.1 MPa, P<sub>O<sub>2</sub></sub> = 0.248 MPa, Δt<sub>inj</sub>= 400 μs, Δt<sub>wait</sub>= 0 s)

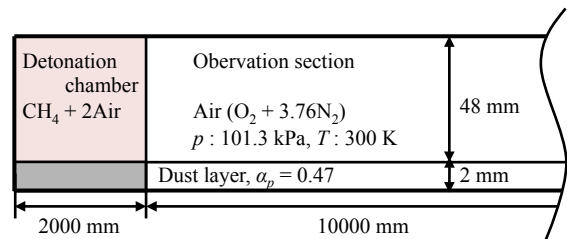


図 5 層状炭塵燃焼問題の模式図

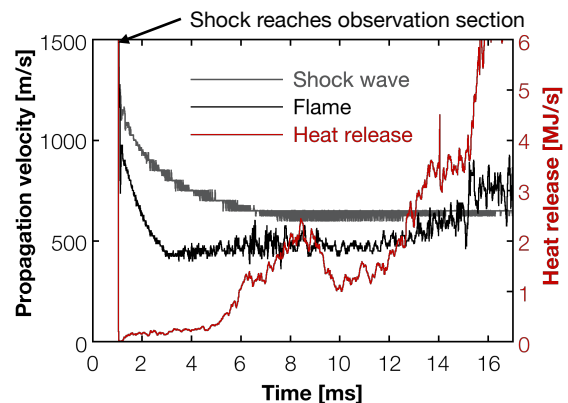


図 6 衝撃波と反応面の伝播速度履歴及び気相化学反応の放出エネルギー速度履歴

図 8 に 15.5 ms における反応面付近の流れ場を示す。形成されている火炎 ( $x = 9.5 \text{ m}$ ) は、予め流れ場に存在する空気と炭塵の揮発によって放出された  $\text{CH}_4$  が接する領域で生じていることから、拡散火炎であるといえる。火炎後方上部の領域 ( $x = 7.7 - 9.4 \text{ m}$ ) では  $\text{CH}_4$  移流速度は  $1000 \text{ m/s}$  と火炎移流速度 ( $600 \text{ m/s}$ ) を上回る速度で移流しており、 $\text{CH}_4$  移流が拡散火炎の超音速での移流を支持していることが分かった。

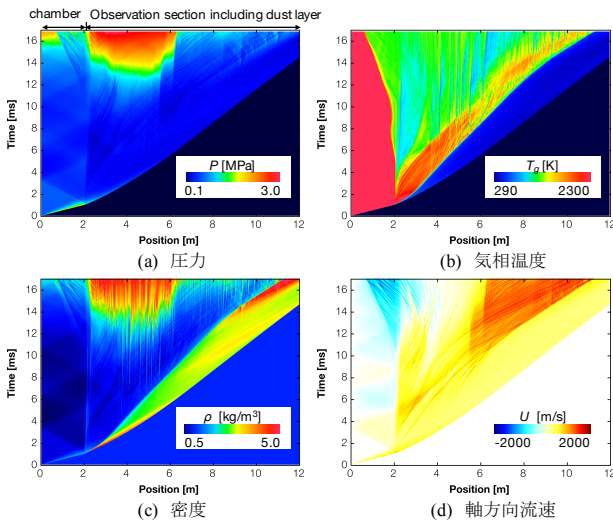


図 7 断面平均値の各物理量 x-t 線図

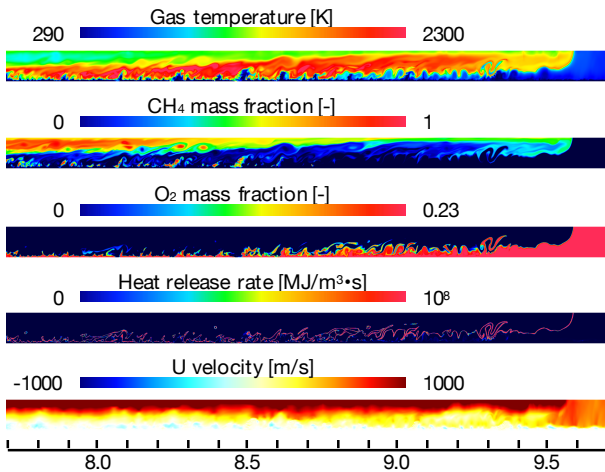


図 8 15.5 ms における反応面付近の各物理量分布

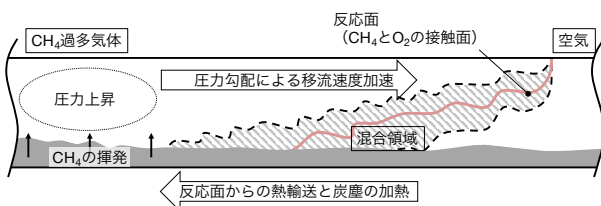


図 9 層状炭塵燃焼機構

これらの結果より、層状炭塵燃焼は図 9 に示すように以下の機構であることが分かった。(1) $\text{CH}_4$  が反応面に追いつくことにより、 $\text{CH}_4$  と  $\text{O}_2$  が接触し気相燃焼が起こる。(2) 反応面からの熱輸送により、炭塵粒子が加熱され  $\text{CH}_4$  が放出される。(3) $\text{CH}_4$  が固体から気体へと相変化することにより、反応面後方において密度・圧力が上昇する。(4) 圧力勾配によって反応面後方の気体が加速され、揮発した  $\text{CH}_4$  が反応面に追いつく。

(C) 「水中高速飛翔体周りのキャビテーション現象」

水中高速飛翔体周りにスーパーキャビテーションが現れる場合、気泡は先端部分から発生し、先端形状により気泡形状や飛しょう安定性が異なることが先行実験により明らかになっている。本研究では水中高速飛翔体について数値解析を行い、先端形状が飛しょう安定性に及ぼす影響について検討した。

先端形状として図 10 に示す Ogival nose、Spike nose 及び Flat nose を用いた。Flat nose は Ogival nose の先端部を平らに切ったものである。Spike nose は Ogival nose の肩部の外周を直角に切り欠いた形状をしている。

各形状の気相体積分率を図 11 に示す。気相体積分率が高い場所は、水が水蒸気に変化しキャビテーションが発生している所であり、水中高速飛翔体周りから発生したキャビテーションが水中高速飛翔体全体を包み込む一つの気泡を形成していることが分かる。水中高速飛翔体底

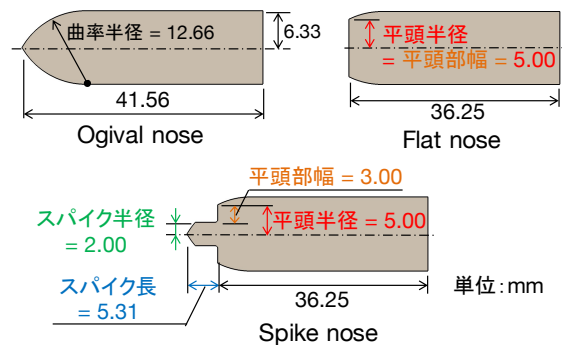


図 10 水中高速飛翔体形状



部での気泡直径は、Ogival nose、Spike nose、Flat nose の順に大きくなった。気泡は流体の流れに沿って広がっており、Ogival nose よりも Spike nose 及び Flat nose の方が先端部での流体が外側に流れているために気泡直径が大きくなったと考えられる。Spike nose の平頭部幅は Ogival nose の平頭直径よりも小さいため、流れの転向も少なく、気泡直径が小さくなったと考えられる。

また、飛しょう安定性として静安定性について検討し、指標として静安定性余裕  $X_{CP} = (l_{CG} - l_{CP})/l_{TO}$  を用いた。ここで、 $l_{CG}$ : 先端から重心までの距離、 $l_{CG}$ : 先端から重心までの距離、 $l_{CP}$ : 先端から圧力中心までの距離、 $l_{TO}$ : 飛しょう体全長である。 $X_{CP}$  が正の場合は静不安定、負の場合は静安定となる。

図 12 に迎角  $5^\circ$  での Ogival nose の圧力分布及び重心周りに加わるモーメントを示す。水中高速飛翔体上側よりも下側に加わるモーメントが大きくなっており、迎角をさらに大きくする方向に作用している。その結果、 $X_{CP}$  は正の値で静不安定となった。

図 13 に迎角  $5^\circ$  での Flat nose の圧力分布及び重心周りに加わるモーメントを示す。Flat nose の場合、先端の平頭部分の圧力は水平方向に加わるため、迎角を小さくする方向のモーメントが生じる。そのため、 $X_{CP}$  は負の値で静安定となった。

図 14 に迎角  $5^\circ$  での Spike nose の圧力分布及び重心周りに加わるモーメントを示す。Spike nose の場合、平頭部で水平方向に高い圧力を受け安定側の力を受けるものの、スパイク側面で垂直方向に圧力を受け不安定側の力を受けるため、両者の力が相殺され、結果的に  $X_{CP}$  は正の値で静不安定となった。Spike nose では平頭部幅とスパイク長のバランスによって静安定性が決まるため、スパイク部形状を変更することで静安定性の向上は可能であると考えられる。

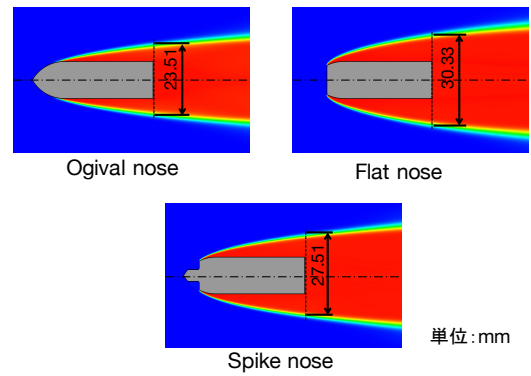


図 11 各形状の気相体積分率及び底部での気泡直径

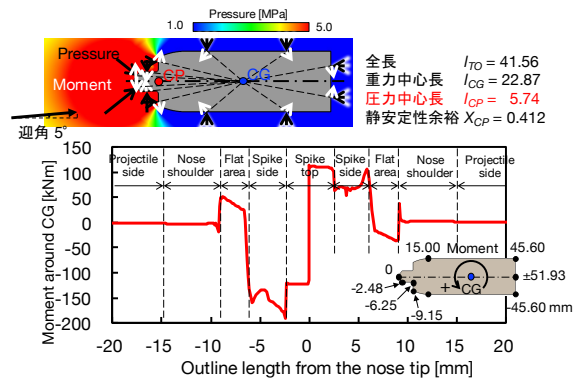


図 12 圧力分布及び重心周りに加わるモーメント (Ogival nose、迎角  $5^\circ$ )

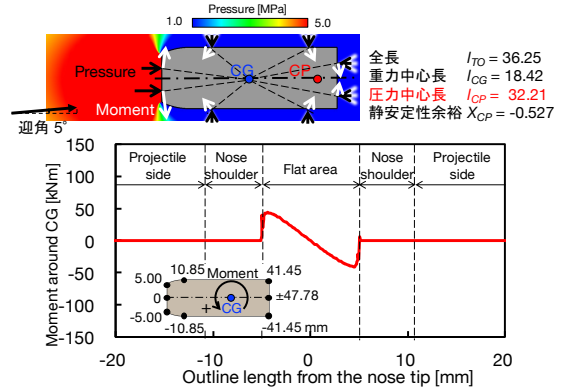


図 13 圧力分布及び重心周りに加わるモーメント (Flat nose、迎角  $5^\circ$ )

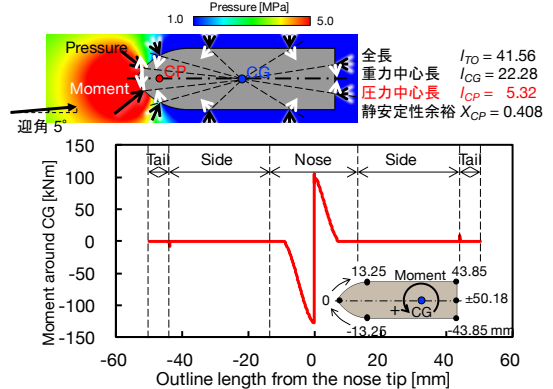


図 14 圧力分布及び重心周りに加わるモーメント (Spike nose、迎角  $5^\circ$ )

## 6. 今年度の進捗状況と今後の展望

新規採択である今年度は、それまでに作成していたプログラムを東北大学スーパーコンピュータSX-ACE へ移植し、OpenMP 及び MPI による高速化を実施した。

SX-ACE はベクトルコンピュータであるため、高速化にあたってはベクトル化効率向上を目指した。燃焼を伴う計算では、化学反応計算の時間刻み幅が流体計算のものよりも小さく、流体計算 1 ステップに対し、化学反応計算は複数回繰り返し計算を行なっている。化学反応計算の繰り返し数が流体計算の 1 ステップに相当すると繰り返し計算を終了するが、この処置においてループ内に exit 文による飛び出しが存在し、ベクトル化を阻害していた。そこで、化学反応計算のループをブロッキングし、収束した要素をマスクしてブロック内の全要素が収束するまで収束計算を行うように修正し、ベクトル化を行なった。しかし、ブロックサイズを大きくするとベクトル長は伸びるが冗長な演算が発生するため、ブロックサイズの最適化も実施した。また、当初プログラムでは繰り返し計算において、最内ループの繰り返し数が少なくベクトル化の効率が悪かったため、長い繰り返し計算が最内ループに来るように変更した。その結果、図 15 に示すようにシングルスレッドでの計算時間は約 48,669 秒から約 1,072 秒に短縮され、約 45 倍の高速化が実現できた。

課題申請時には、解析に使用するプログラムの並列化が OpenMP のみであり、大規模解析を実施することが困難であった。そこで、はじめに (A)「爆轟燃焼波と液滴との干渉」のプログラムについて、MPI 化を行なった。MPI 化においては、データの分割や空間分割の並列数の指定等、一般的な MPI 化対策を行なった。その結果、SX-ACE の複数並列による実行時間は図 16 のように得られた。さらにプログラムのサブルーチンごとの並列化状況を図 17 に示す。図から 'imrhs' 及

び 'mod\_thermo.ibthm' のサブルーチンにおいて並列化が低くなっていることが分かる。'imrhs' は流体計算を行うサブルーチンであり、'mod\_thermo.ibthm' は境界部分における状態方程式を解くサブルーチンである。両者の並列化が低いのは、ベクトル化効率が悪

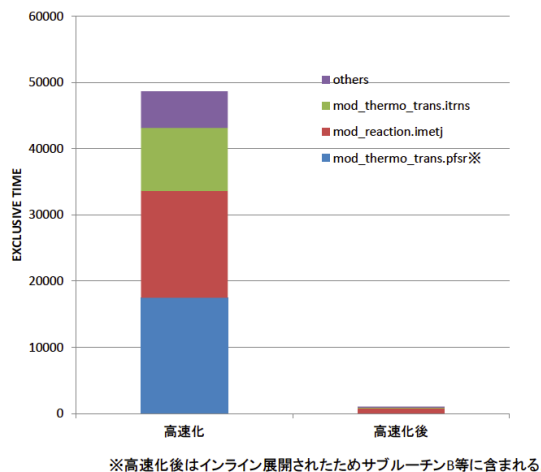


図 15 高速化前後のシングルスレッドでの計算時間比較

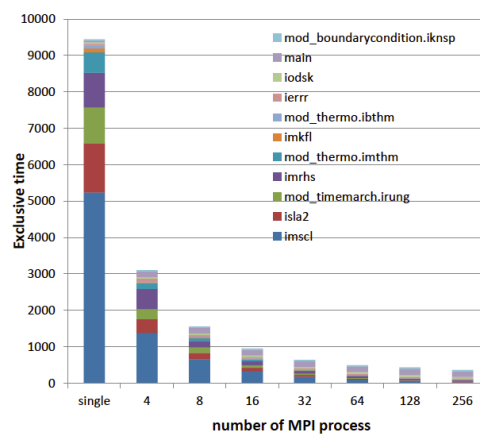


図 16 SX-ACE の複数並列による実行時間

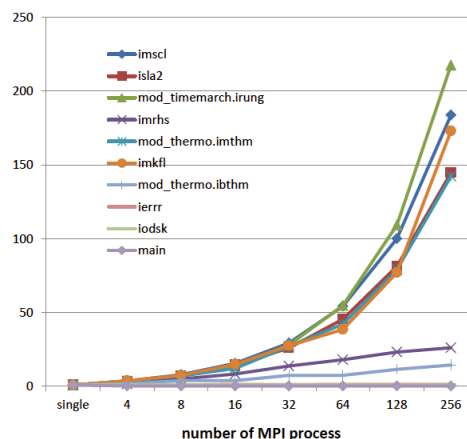


図 17 サブルーチンごとの並列化状況

いためたと考えられ、改善の余地があると思われる。以上の MPI 化によって(A)「爆轟燃焼波と液滴との干渉」については、大規模解析を行える状態になった。

(A)「爆轟燃焼波と液滴との干渉」の MPI 化を元に「B: 粉体の燃焼現象」及び「C: 水中高速飛翔体周りのキャビテーション現象」の二つのプログラムの MPI 化を実施中である。特に、「B: 粉体の燃焼現象」については、固体粒子と流体とのカップリングが生じ、粒子情報と流体情報の相関や粒子同士の衝突を計算する必要がある。そのため、粒子処理及び流体処理の分散メモリ並列化が困難であり、さらなる検討を行なっていく予定である。

今後は、3 テーマのプログラムの MPI 化を完了させ、大規模解析を行うことで、工学的スケールにおける現象解析を行ないたい。

## 7. 研究成果リスト

### (1) 学術論文

該当なし

### (2) 国際会議プロシーディングス

該当なし

### (3) 国際会議発表

- Okuno, K., and Matsuo, A., “The Effects of Nose Shapes and Viscosity on the Cavity Evolution Around the Underwater Projectile”, The 9th International Conference on Multiphase Flow (ICMF2016), Firenze, Italy, May. 22 – 27, 2016
- A. Matsuo, H. Watanabe, K. Matsuoka, J. Kasahara, ‘Numerical Investigation on the Effective Parameters for the Purge Process in Liquid Fuel Purge Method’, International Workshop on Detonation for Propulsion 2016, Singapore, July 12–15, 2016
- K. Matsuoka, K. Muto, S. Takagi, J. Kasahara, H. Watanabe, A. Matsuo, and T. Endo, ‘Experimental Study on Control Technique of Pulsed Detonation’, International Workshop on

Detonation for Propulsion 2016, Singapore, July 12–15, 2016

- H. Watanabe., A. Matsuo., K. Muto, K. Matsuoka, J. Kasahara, and T. Endo., “One-Dimensional Investigation of Purging Process in Liquid Fuel Purge Method”, 36th International Symposium on Combustion, Seoul, Korea, July 31 – Aug. 5, 2016
  - K. Matsuoka, K. Muto, J. Kasahara, H. Watanabe, A. Matsuo, and T. Endo, “Investigation of Fluid Motion in Valveless Pulse Detonation Combustor with High-Frequency Operation”, 36th International Symposium on Combustion, Seoul, Korea, July 31 – Aug. 5, 2016
  - Hiroaki Watanabe, Akiko Matsuo, Ken Matsuoka, Jiro Kasahara, Numerical Investigation on Burned Gas Backflow in Liquid Fuel Purge Method, AIAA Scitech 2017, Texas, USA, Jan 9–13, 2017
- ### (4) 国内会議発表
- 渡部広吾輝、松尾亜紀子、武藤浩平、松岡健、笠原次郎、遠藤琢磨、燃料液滴パーシ法における既燃ガス排出過程に関する数値解析、第 48 回流体力学講演会／第 34 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム、金沢、2016 年 7 月
  - 志村啓、松尾亜紀子、炭塵燃焼における乱流の影響に関する数値解析、日本混相流学会混相流シンポジウム 2016、京都、2016 年 8 月
  - 奥野航平、松尾亜紀子、水中高速飛翔体周りに発生するキャビテーションへ乱流が及ぼす影響に関する数値解析、日本混相流学会混相流シンポジウム 2016、京都、2016 年 8 月
  - 松岡健、高尾和幸、瀧春菜、廣田成俊、笠原次郎、渡部広吾輝、松尾亜紀子、遠藤琢磨、パルス detonation 燃焼器のキロヘルツ作動に向けた実験的研究、第 60 回宇宙科学技術連合講演会、函館、2016 年 9 月



- ・ 渡部広吾輝、松尾亜紀子、高尾和幸、松岡健、笠原次郎、低背圧環境下で作動するパルスデトネーションスラスタに関する数値解析、第 54 回燃焼シンポジウム、仙台、2016 年 11 月
- ・ 志村啓、松尾亜紀子、層状炭粉塵爆発の火炎伝播機構に対する数値解析、平成 28 年度火薬学会秋季大会、長崎、2016 年 11 月
- ・ 志村啓、松尾亜紀子、炭塵燃焼の数値解析における反応モデルの影響、第 54 回燃焼シンポジウム、仙台、2016 年 11 月
- ・ 奥野航平、松尾亜紀子、スーパーキャビテーションによる抗力低減効果に関する数値解析、キャビテーションに関するシンポジウム(第 18 回)、福岡、2016 年 12 月
- ・ 渡部広吾輝、松尾亜紀子、瀧春菜、松岡健、笠原次郎、パルスデトネーション燃焼器の高周波数連続作動に関する数値解析、平成 28 年度衝撃波シンポジウム、横須賀、2017 年 3 月
- ・ 志村啓、松尾亜紀子、堆積粉塵上を伝播する衝撃波に対する数値解析、平成 28 年度衝撃波シンポジウム、横須賀、2017 年 3 月
- ・ 奥野航平、松尾亜紀子、水中移動体の先端形状が飛しょう安定性に及ぼす影響に関する数値解析、平成 28 年度衝撃波シンポジウム、横須賀、2017 年 3 月

(5) その他（特許、プレス発表、著書等）

該当なし