



令和3年1月 19 日

報道機関 各位

東北大学流体科学研究所

熱効率向上の弊害、ノッキングの定量予測に 世界で初めて成功 ～スパコンによる直接数値計算で実験との定量的な一致を実現～

【発表のポイント】

- ガソリンエンジンの熱効率向上の障害となっているのが、ノッキング^{注1}と呼ばれる異常燃焼である。
- 現在のスーパーコンピュータでは定量的な予測が不可能と考えられていたノッキングを、超高速な数値計算手法を開発することで可能とした。
- ノッキング発生前後の流体・化学反応を定量的に予測する手法を確立したことで、今後の熱効率向上に向けたノッキング抑制の知見を拡大することが可能となった。

【概要】

ガソリン・エンジンの熱効率向上の最大阻害要因であるノッキングは、流体と化学反応の複雑な連成の結果として発生する現象であるため、長年の研究にも関わらず、十分な知見が得られていません。スーパーコンピュータの進歩に伴い、詳細なデータを得ることができる数値計算を用いたノッキングの解明が注目されていますが、化学反応に起因する膨大な計算負荷により、仮想的な条件における基礎研究しか実施されてきませんでした。東北大学流体科学研究所の森井助教ら(丸田・森井／中村研究グループ)は、超高効率かつ堅牢な数値計算手法を開発し、化学反応に起因する計算負荷を大幅に低減することで、ノッキングに関する実験との定量比較を実現しました。

本成果は燃焼分野で最も権威のある学術誌 *Combustion and Flame* の 2021 年 1 月号に掲載され、2021/1/18 現在、Most Downloaded *Combustion and Flame Articles* となっています。

※画像、映像の有(2枚)

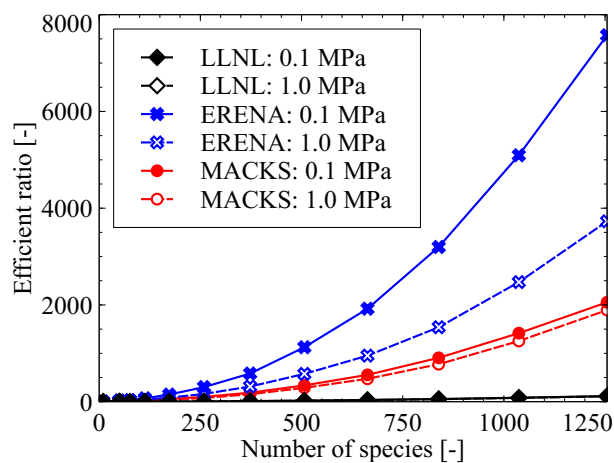


図 1 . LLNL, ERENA, MACKS の CVMODE に対する計算加速倍率.

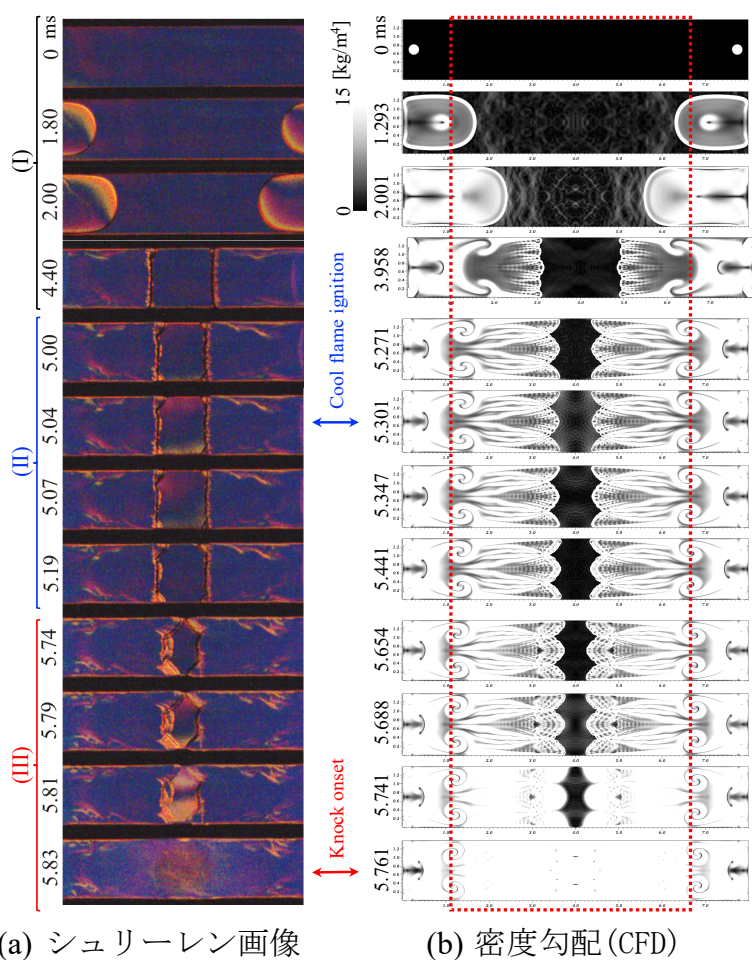


図2. 実験で観測された領域を赤い点線で示しています. 画像の左側の値は時間をミリ秒単位で表しています. 3つの異なる特徴的なタイミングである冷炎着火前(I), 冷炎着火(II), ノック発生(III)を示している.

【詳細な説明】

◆ 背景

2050年までに脱炭素社会を実現するためには、内燃機関の効率をできるだけ早く改善することが重要です。ガソリン・エンジンの高効率化の最大の障害はノッキングと呼ばれる異常燃焼です。

ノッキングは化学反応と流れが関与する複雑な現象であり、実験によって詳細把握をすることが困難であるため、長年の研究にも関わらず詳細は分かっていません。そこで、詳細な情報を得ることができる数値計算の適用がノッキングの解明に対して期待されています。しかし、ガソリン燃料を用いた燃焼の数値計算負荷は非常に大きいことが知られており、基礎研究は実施されているものの、実験や実機との定量比較は未だに実現されていません。この膨大な計算負荷は流れではなく、化学反応によるものです。よって、ノッキングを解明するためには、化学反応の計算の高速化が必要であり、その高速化された計算方法を用いた数値計算を用いることで、実験や実機の定量比較が求められています。

◆ 研究の詳細

ノッキングを直接数値計算^{注2}で再現することを目的に、主な計算負荷である化学反応の計算負荷を大幅に低減させる数値計算アルゴリズムを開発しました。数十年前から高速であることが広く認知されている従来の計算方法はヤコビ行列と呼ばれる行列式を必要とし、ヤコビ行列の生成による計算負荷は化学種の数の二乗に比例します。この問題を解決するために、まず化学反応に最適な計算アルゴリズムを開発し、ヤコビ行列を使わずに安定的に計算できる手法を開発しました。その結果、化学種の数の一乗まで負荷を下げることに成功しました。例えば、化学種の数が1000であれば、1000倍の高速化が可能です。

さらに計算負荷を軽減するために、開発した高速数値計算手法を、米国ローレンスバークレー国立研究所でエクサスケールコンピュータ用に開発中のソフトウェアに組み込み、全体で約100倍の高速化を実現しました。この高速化されたソフトウェアを用いて、九州大学で行われた実機条件に近い基礎実験に対して直接数値計算を行いました。その結果、実験で得られたノッキングのタイミングと圧力履歴がよく一致していることが分かり、ノッキング抑制の知見を拡大することが可能となりました。

謝辞

本研究の一部は SIP 革新燃焼技術・AICE の支援を受けて実施されたものです。ここに記して謝意を表します。

[論文情報]

1.

タイトル: Optimization of one-parameter family of integration formulae for solving stiff chemical-kinetic ODEs

著者: Youhi Morii and Eiji Shima

雑誌: Scientific Reports, 10, 21330 (2020)

DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-020-78301-6>

2.

タイトル: Two-dimensional laboratory-scale DNS for knocking experiment using n-heptane at engine-like condition

著者: Youhi Morii, Ajit K. Dubey, Hisashi Nakamura and Kaoru Maruta

雑誌: Combustion and Flame, 223, 330-336 (2021)

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.10.018>

[用語説明]

注1: ノッキング

火炎が到達していない未燃ガスにおいて発生する自着火現象. エンジンを破損する恐れもある. 熱効率向上に向けた高圧縮比条件で発生しやすい.

注2: 直接数値計算

モデル化なしで, 基礎方程式をそのまま数値計算する方法.

【問い合わせ先】

東北大学流体科学研究所

担当 森井雄飛

電話 022-217-5296

E-mail

morii@edyn.ifs.tohoku.ac.jp