

图1 格子例 最小格子間隔 1mm, 水素 0.5sec

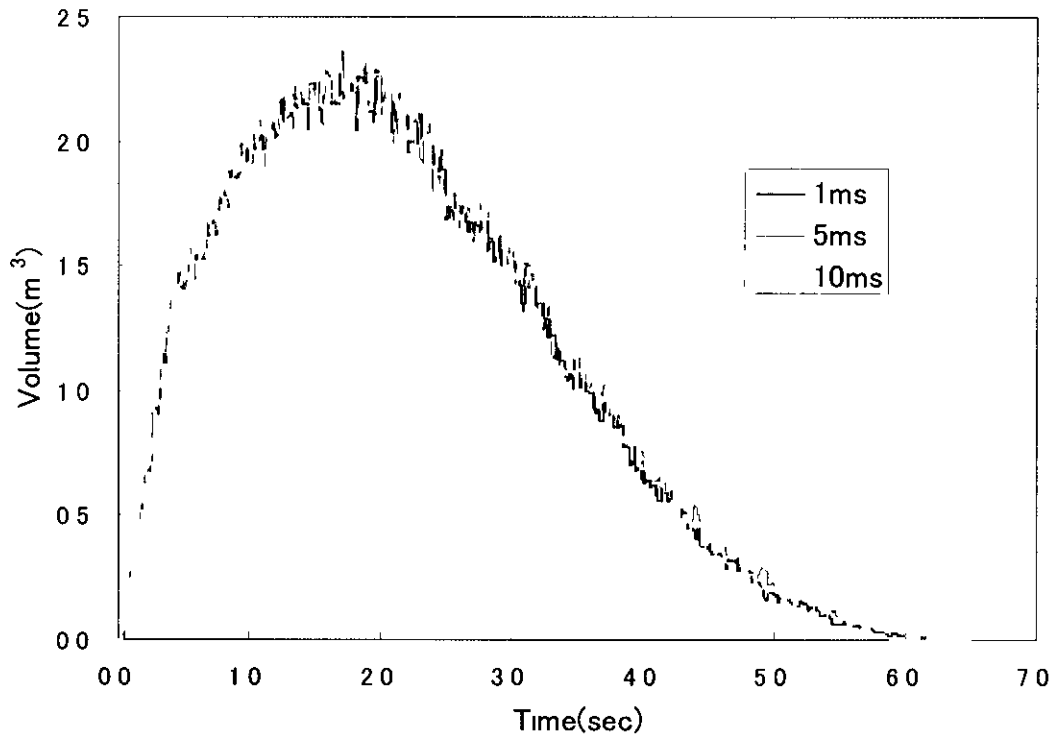


図 2 時間間隔の影響

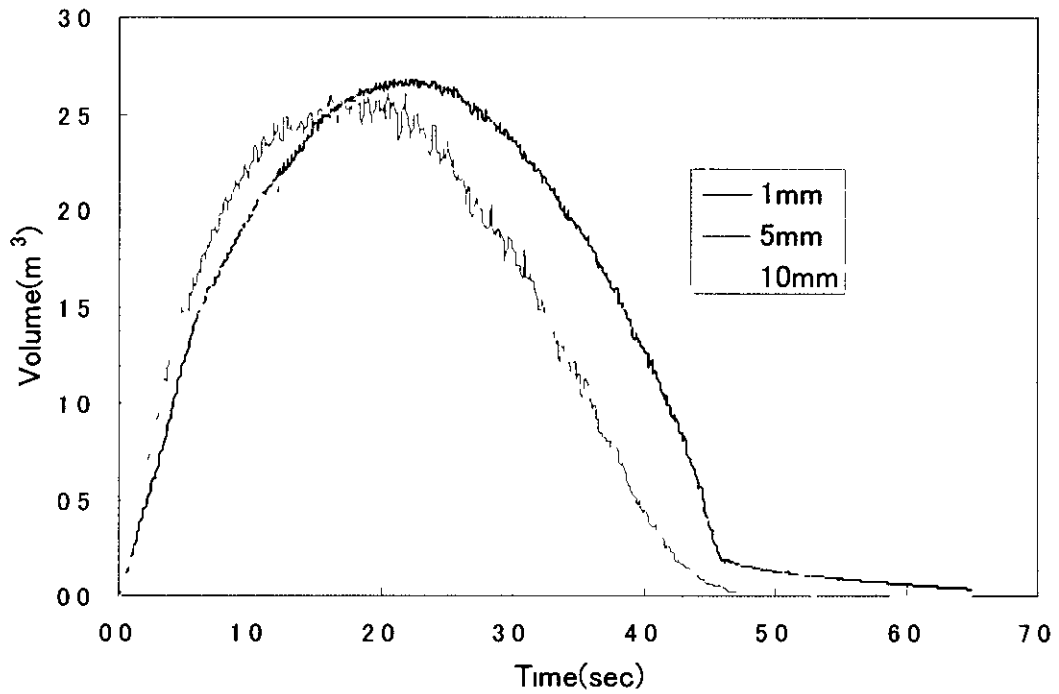


図 3 格子間隔の影響

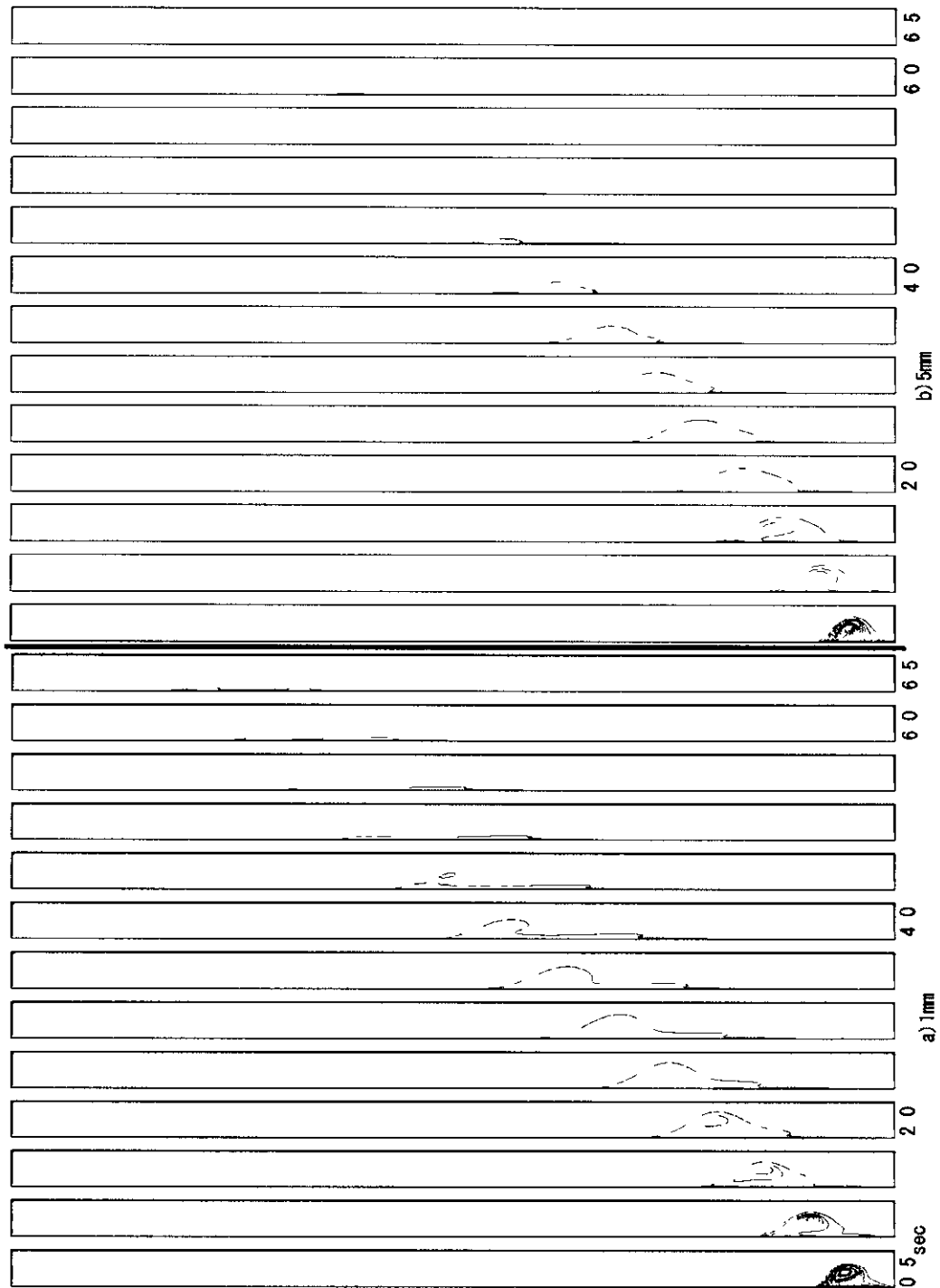


図4 最小格子間隔 a)1mm と b)5mm の場合の等濃度線による爆発領域の推移(等濃度線は図1に同じ)

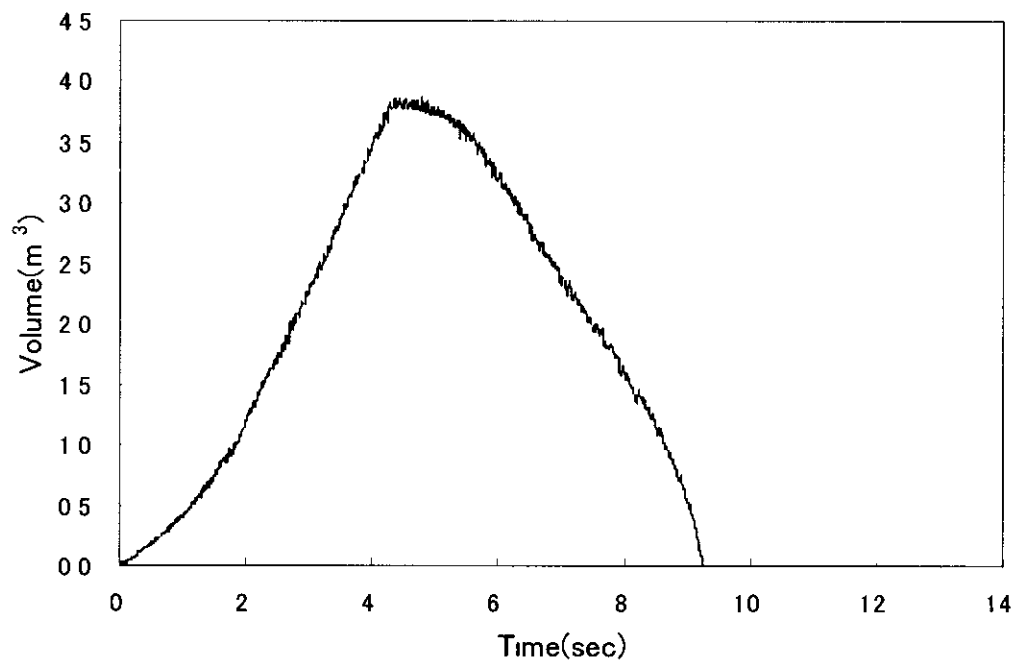


図5 メタンの爆発領域の推移

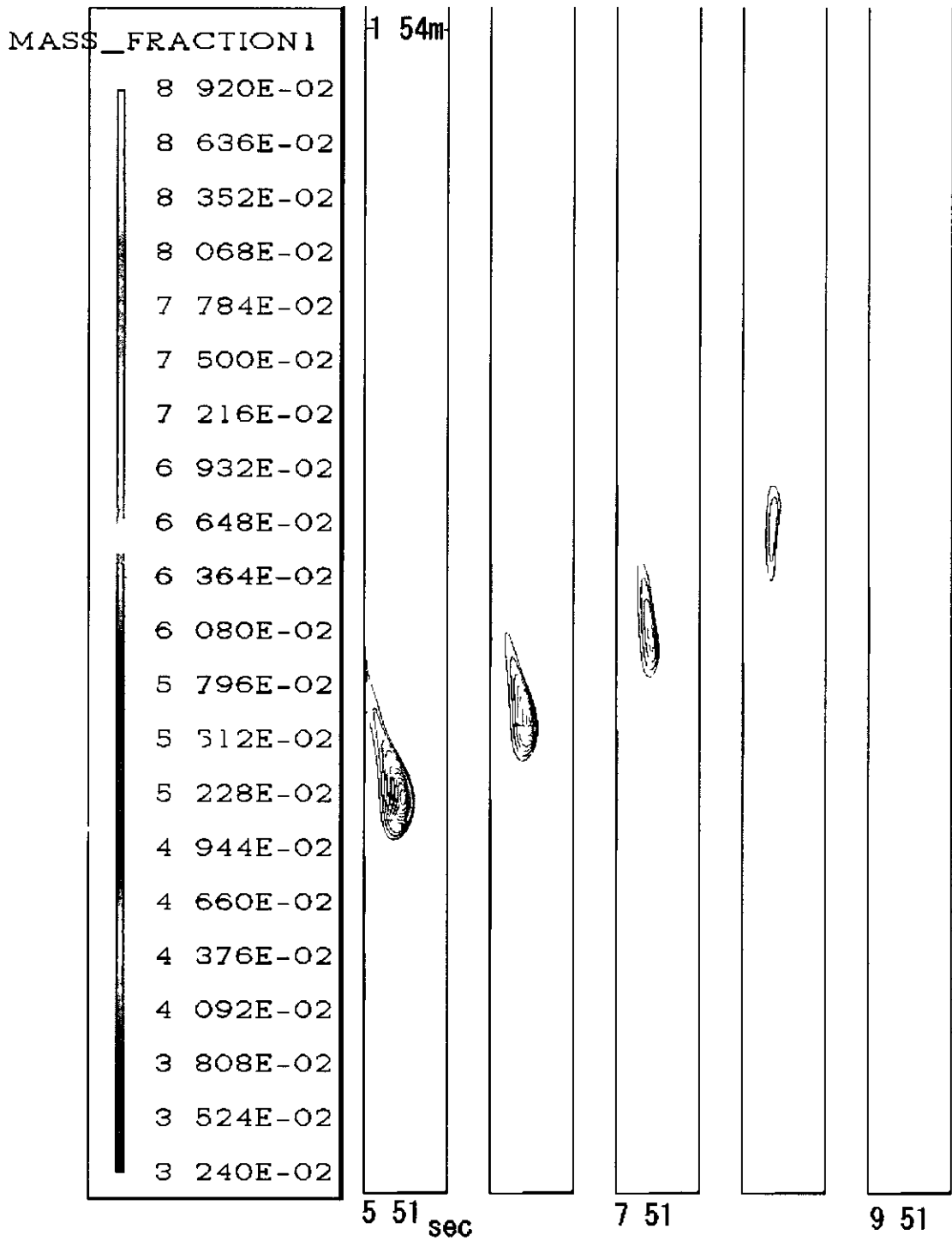


図6 メタンの等濃度線による爆発領域の推移

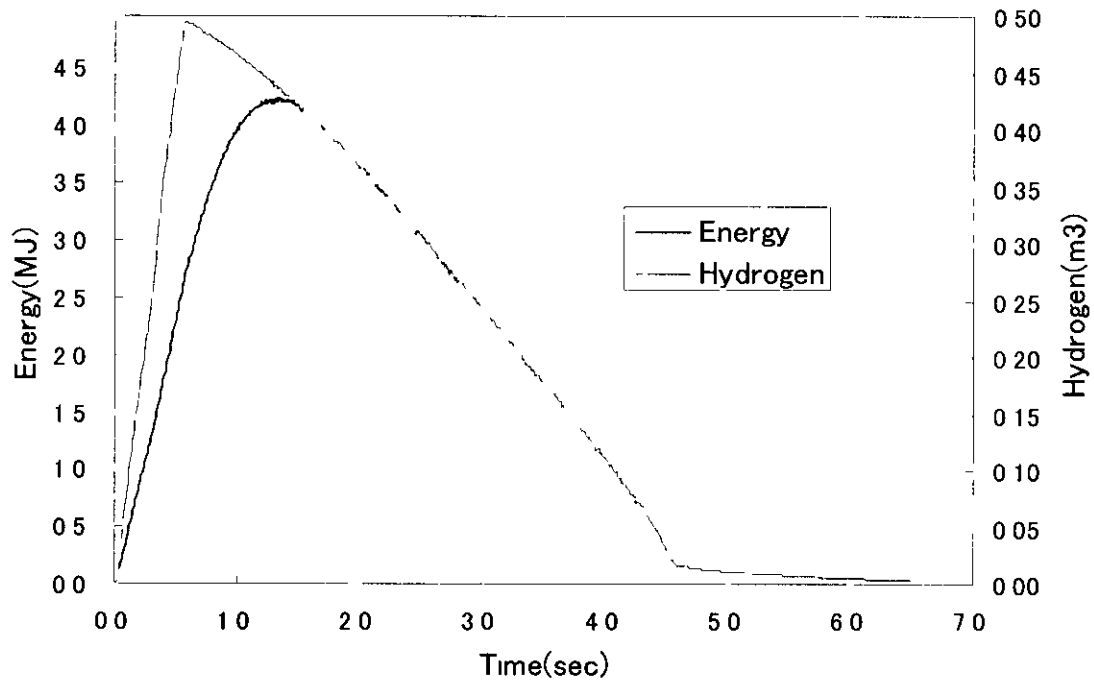


図7 爆発領域内の燃焼熱と水素量

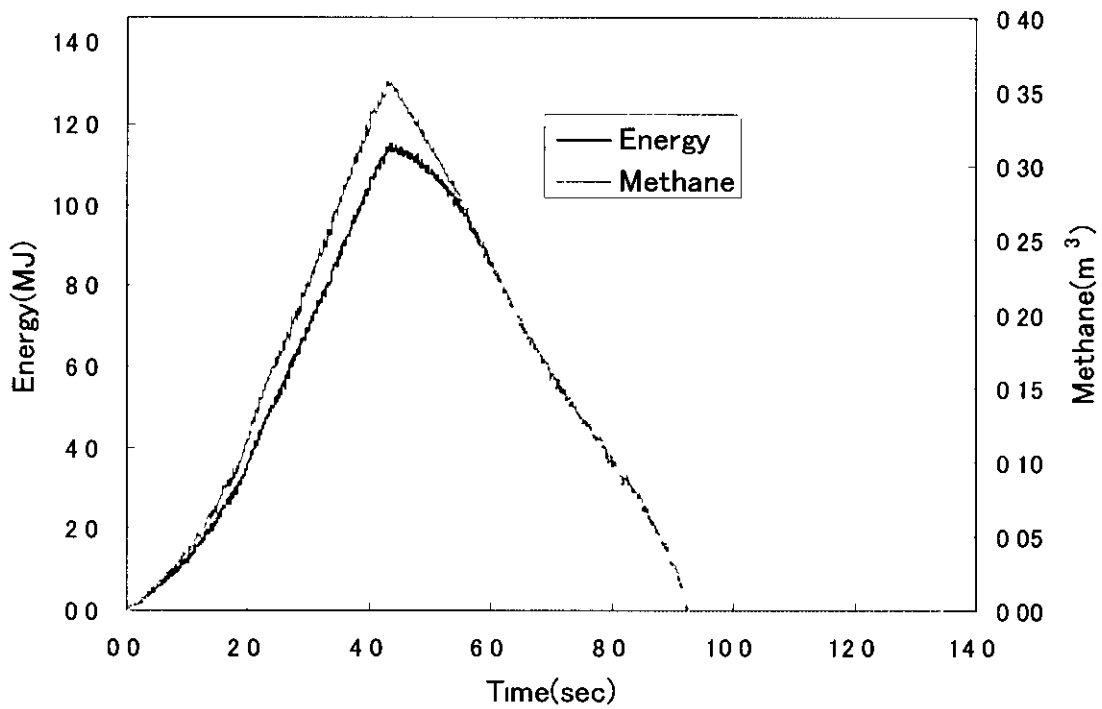


図8 爆発領域内の燃焼熱とメタン量

## 4 水素の大気中拡散と燃焼の数値シミュレーション

名古屋大学エコトピア科学研究機構 長谷川達也

名古屋大学大学院工学研究科博士前期課程 2年 森崎雄貴

### 1 緒言

本研究は、大気雰囲気での水素の拡散および燃焼の 3 次元数値シミュレーションにより水素の拡散の特性、燃焼状態を予測し、危険性評価するのが目的である。実規模での解析が望ましいか、今回は中間報告としてますスカラー計算機による 3 次元プログラムの構築と微小領域での水素の拡散の解析を行った。

### 2 支配方程式

本研究では拡散・燃焼の数値シミュレーションを行う。本研究で用いた支配方程式について以下に述べる。

#### 2.1 拡散・燃焼の支配方程式<sup>1) 2)</sup>

本研究で用いた拡散・燃焼の支配方程式は、三次元圧縮性 Navier-Stokes 方程式とエネルギー保存式、各化学種の質量保存式、状態方程式であり、以下のような仮定および簡略化を行った。

- 1) 低 Mach 数流である
- 2) 考慮する化学種は、反応種として  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ , 不活性種として  $N_2$  の計 4 種である
- 3) Soret 効果, Dufour 効果, 圧力勾配拡散, 体積粘性, 輻射熱流束, 粘性散逸, 粘性仕事, 圧力の時間変化を無視する
- 4) 運動エネルギーはエンタルピに比べ小さいとし, 無視する
- 5) 拡散は Fick の法則に従う

以上より導出された支配方程式は以下のようになる。

連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 \quad (2.1)$$

運動量保存式

$$\rho \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot (\nabla \mathbf{V}) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho \mathbf{f} \quad (2.2)$$

エネルギー保存式

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot (\nabla T) = \frac{1}{c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \frac{1}{c_p} \sum_{i=1}^N h_i w_i \quad (2.3)$$

化学種の保存式

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \mathbf{V} \cdot (\nabla Y_i) = \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) + w_i \quad (2.4)$$

状態方程式

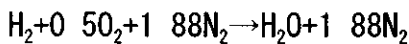
$$p = \rho R_0 T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{W_i} \quad (2.5)$$

応力テンソル

$$\bar{\tau} = -\nabla \times [\mu(\nabla \times \mathbf{V})] + \nabla[(\lambda + 2\mu)\nabla \cdot \mathbf{V}] \quad (2.6)$$

## 2.2 化学反応機構<sup>1) 3)</sup>

本研究では、化学反応に以下の総括一段不可逆反応を用いた



反応速度には以下の Arrhenius 型の式を用いた

$$\omega = B_1 \exp\left(-\frac{E}{R_0 T}\right) \rho^{1.5} \left(\frac{Y_{\text{H}_2}}{W_{\text{H}_2}}\right)^{1.0} \left(\frac{Y_{\text{O}_2}}{W_{\text{O}_2}}\right)^{0.5} \quad (2.7)$$

$$w_{\text{H}} = -W_{\text{H}_2}\omega, \quad w_{\text{O}_2} = -0.5W_{\text{O}_2}\omega, \quad w_{\text{H}_2\text{O}} = W_{\text{H}_2\text{O}}\omega \quad (2.8)$$

$B_1$ ,  $E$  はそれぞれ反応の頻度因子、活性化エネルギーで、頻度因子には現段階では  $1.6 \times 10^{12}$ , 活性化エネルギーには  $15 \text{ kcal}/(\text{mol} \cdot \text{K})$  を用いた<sup>3)</sup>

## 3 計算手法

本研究では速度と圧力の計算に California 大学の Harry A Dwyer 教授による圧力補正法 low Mach number scheme を用い、時間進行法に 1 次精度の A D I 法を、空間の離散化には有限体積法による 2 次精度の中心差分法を用いた。補正式に現れる Poisson 方程式の解法には 4 段階多重格子法を用い、化学反応項に関しては非線形になるため、Newton の線形化を用い、熱力学定数および輸送係数の算出には汎用アプリケーション / CHEMKIN を用いた

### 3.1 low Mach number scheme<sup>2)</sup>

Low Mach number の仮定を用いた解法は、非圧縮性流体解析でよく用いられる SMAC 法に非常に似ているが、密度変化を考慮している点において大きな特徴がある。また、Navier-Stokes 方程式を解くことによって発生する音波を取り除くことかできる。以下に low Mach number scheme について述べる。

Low Mach number scheme はまず、空間的にあるいは時間的に熱力学的な圧力が一定である、Navier-Stokes 方程式 (2.2) に現れる圧力つまり動圧は熱力学的圧力に比べて小さいという仮定のもとで解かれる。また、空間の離散化には有限体積法を用いる。有限体積法による表記を以下に示す。状態方程式に関しては、密度を求める際にのみ使うため、積分型表記はしていない。

連続の式

$$\iint \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega + \iint \rho \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (3.1.1)$$



運動量保存式

$$\iiint \frac{\partial \rho \mathbf{V}}{\partial t} d\Omega + \iint \rho \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot d\mathbf{S} = - \iint p d\mathbf{S} + \iint \bar{\tau} \cdot d\mathbf{S} + \iiint \rho \mathbf{f} d\Omega \quad (3.12)$$

エネルギー保存式

$$\iiint \frac{\partial \rho T}{\partial t} d\Omega + \iint (\rho \mathbf{V} T) \cdot d\mathbf{S} = \iint \frac{1}{c_p} (\lambda \nabla T) \cdot d\mathbf{S} - \iiint \frac{1}{c_p} \sum_{i=1}^N h_i w_i d\Omega \quad (3.13)$$

化学種保存式

$$\iiint \frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} d\Omega + \iint (\rho \mathbf{V} Y_i) \cdot d\mathbf{S} = \iint (\rho D_i \nabla Y_i) \cdot d\mathbf{S} + \iiint w_i d\Omega \quad (3.14)$$

状態方程式

$$p_i = \rho R_0 T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{W_i} \quad (3.15)$$

計算の最も難しい問題の一つは連続の式からの圧力場の決定である。この解法では、2段階解法を用い、速度場と圧力場を計算する。温度、化学種の質量分率に関しては陰解法により、1段階で独立に新しい時間の値を求める。

今時刻  $n$  での各変数は既知であるとする。

この解法では速度変化は運動量保存式 (3.12) が寄与する速度変化  $\Delta \mathbf{V}_M$  と連続の式 (3.11) が寄与する速度変化  $\Delta \mathbf{V}_C$  の2つの部分に分けられる。

つまり

$$\mathbf{V}^{n+1} - \mathbf{V}^n = \Delta \mathbf{V}_M + \Delta \mathbf{V}_C \quad (3.16)$$

と書ける。

流体を非圧縮とみなすと  $\text{rot } \Delta \mathbf{V}_C = 0$  となり、渦なしとみなすことかてきるので、 $\Delta \mathbf{V}_C$  にはスカラーポテンシャルが存在することになる。即ち、

$$\Delta \mathbf{V}_C = \nabla \phi \quad (3.17)$$

と書くことかてきる。

式(3.17)より式 (3.11)、(3.12) は次のようになる。

連続の式

$$\iiint \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega + \iint \rho (\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M + \nabla \phi) \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (3.18)$$

運動量保存式

$$\begin{aligned} & \iiint \frac{\rho (\Delta \mathbf{V}_M + \nabla \phi)}{\Delta t} d\Omega + \iint \rho (\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M + \nabla \phi) (\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M + \nabla \phi) \cdot d\mathbf{S} \\ & = - \iint p^{n+1} d\mathbf{S} + \iint \bar{\tau}^{n+1} \cdot d\mathbf{S} + \iiint \rho \mathbf{f} d\Omega \end{aligned} \quad (3.19)$$

次に圧力変化について述べる。圧力変化は速度変化と関係があり、次のように書ける（圧力を陰的に差分した式から圧力を陽的に差分した式を引くことにより求められる）

$$p^{n+1} = p^n + \alpha \quad (3.1.10)$$

$$\rho \frac{\phi}{\Delta t} = -\alpha$$

(3.1.10)を式(3.1.9)に代入すると

$$\begin{aligned} & \iiint \frac{\rho(\Delta \mathbf{V}_M + \nabla \phi)}{\Delta t} d\Omega + \iint \rho(\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M + \nabla \phi)(\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M + \nabla \phi) d\mathbf{S} \\ &= -\iint (p^n - \rho \frac{\phi}{\Delta t}) d\mathbf{S} + \iint \bar{\tau}^{n+1} d\mathbf{S} + \iiint \rho f d\Omega \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

次に Navier-Stokes 方程式の右辺にある粘性項の簡略化を行う。一般に粘性項は次のように書ける

$$\nabla \cdot \bar{\tau} = -\nabla \times [\mu(\nabla \times \mathbf{V})] + \nabla[(\lambda + 2\mu)\nabla \cdot \mathbf{V}] \quad (3.1.12)$$

右辺の第2項の速度の発散の勾配は低マノハ流れにおいて無視しても精度は落ちないため省略する。すると以下ようになる

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \bar{\tau} &= -\nabla \times [\mu(\nabla \times \mathbf{V})] \\ \nabla \cdot \bar{\tau}^{n+1} &= -\nabla \times [\mu\{\nabla \times (\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M + \nabla \phi)\}] \end{aligned} \quad (3.1.13)$$

また勾配の curl は0になるため、 $\nabla \phi$ の項は省略できる

$$\nabla \cdot \bar{\tau}^{n+1} = -\nabla \times [\mu\{\nabla \times (\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M)\}] \quad (3.1.14)$$

以上より、粘性項を有限体積法型で表記すると

$$\iiint \nabla \cdot \bar{\tau}^{n+1} d\Omega = \iint \bar{\tau}^{n+1} d\mathbf{S} = \iint [\mu \nabla(\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M) - \mu \nabla(\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M)] d\mathbf{S} \quad (3.1.15)$$

低マノハ流れでは通常、速度の発散は非常に小さいため右辺の第2項も無視できる

$$\iiint \nabla \cdot \bar{\tau}^{n+1} d\Omega = \iint \bar{\tau}^{n+1} d\mathbf{S} = \iint \mu \nabla(\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M) d\mathbf{S} \quad (3.1.16)$$

以上より連続の式と運動量保存式は次のようになる

$$\iiint \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega + \iint \rho(\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M + \nabla \phi) d\mathbf{S} = 0 \quad (3.1.17)$$

$$\begin{aligned} & \iiint \frac{\rho(\Delta \mathbf{V}_M + \Delta \mathbf{V}_C)}{\Delta t} d\Omega + \iint \rho(\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M + \nabla \phi)(\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M + \nabla \phi) d\mathbf{S} \\ &= -\iint (p^n - \rho \frac{\phi}{\Delta t}) d\mathbf{S} + \iint \mu \nabla(\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M) d\mathbf{S} + \iiint \rho f d\Omega \end{aligned} \quad (3.1.18)$$

(3 1 17), (3 1 18)を low Mach model 解法では式を 2 段階に分解する

第 1 段 STEP

$$\begin{aligned} & \iiint \frac{\rho \Delta \mathbf{V}_M}{\Delta t} d\Omega + \iint \rho (\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M) (\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M) dS \\ & = -\iint p^n dS + \iint \mu \nabla (\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M) dS + \iiint \rho f d\Omega \end{aligned} \quad (3 1 19)$$

第一段階として式 (3 1 19) を  $\Delta \mathbf{V}_M$  について解く

第 2 段 STEP

$$\iint \rho \nabla \phi dS = -\iint \rho (\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M) dS - \iiint \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega \quad (3 1 20)$$

連続の式 (3 1 20) より  $\phi$  について解く 流体要素の加速は通常一定密度過程によって進められるため式 (3 1 20) の右辺の第 2 項は無視する

与えられた  $\phi$  より

$$\iiint \frac{\rho \Delta \mathbf{V}_c}{\Delta t} d\Omega + \iint \rho \nabla \phi [2(\mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M) + \nabla \phi] dS = \iint \rho \frac{\phi}{\Delta t} dS \quad (3 1 21)$$

この解法では、左辺の第 2 項は無視する

$$\iiint \frac{\rho \Delta \mathbf{V}_c}{\Delta t} d\Omega = \iint \rho \frac{\phi}{\Delta t} dS \quad (3 1 22)$$

式 (3 22) を  $\Delta \mathbf{V}_c$  について解く

以上より

$$\mathbf{V}^{n+1} = \mathbf{V}^n + \Delta \mathbf{V}_M + \Delta \mathbf{V}_c \quad (3 1 23)$$

$$p^{n+1} = p^n + \alpha \quad (3 1 24)$$

$$\rho \frac{\phi}{\Delta t} = -\alpha$$

が求められる

### 3 2 A D I 法<sup>4)</sup>

3 次元の支配方程式の数値計算において、陽解法は非常に簡単であるが、CFL 条件など極端に時間刻み幅を小さくしなければならず計算に手間がかかる A D I 法は本研究のような多次元問題において非常に有効な解法である

以下に A D I 法について述べる

ここでは方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \quad (3 2 1)$$

を扱う たたし格子点数は  $M \times M \times M$  とする

今時刻  $n$  での解が既知であるとする

この解法では 2 階の導関数のうちまず  $z$  方向だけを第  $(n+1/3)$  時点の未知の  $u$  の格子点値

て表した陰差分近似で置き換え、他の2階導関数を陽差分近似で置き換える

$$\frac{u_{ijk}^{n+1/3} - u_{ijk}^n}{(1/3)\Delta t} = \frac{u_{i+1jk}^n - 2u_{ijk}^n + u_{i-1jk}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{ij+1k}^n - 2u_{ijk}^n + u_{ij-1k}^n}{(\Delta y)^2} + \frac{u_{ijk+1}^{n+1/3} - 2u_{ijk}^{n+1/3} + u_{ijk-1}^{n+1/3}}{(\Delta z)^2} \quad (3.2.2)$$

Ozに平行な1行にのっているM-1個の格子点のそれぞれに適用すると時刻(n+1/3)dtのこれらの格子点における連立方程式が得られる。つまり未知数の数がM-1個を持つM-1個の独立な連立方程式となり、これを解く。この作業を各zの格子点において行う。

次に第(n+2/3)時点に解を進める。これはy方向の2階導関数を陰差分近似で、その他を陽差分近似し、Oyに平行な列上の各格子点に対応して差分方程式を書き下ろすことで達成される。

$$\frac{u_{ijk}^{n+2/3} - u_{ijk}^{n+1/3}}{(1/3)\Delta t} = \frac{u_{i+1jk}^{n+1/3} - 2u_{ijk}^{n+1/3} + u_{i-1jk}^{n+1/3}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{ij+1k}^{n+2/3} - 2u_{ijk}^{n+2/3} + u_{ij-1k}^{n+2/3}}{(\Delta y)^2} + \frac{u_{ijk+1}^{n+1/3} - 2u_{ijk}^{n+1/3} + u_{ijk-1}^{n+1/3}}{(\Delta z)^2} \quad (3.2.3)$$

さらに第(n+1)時点に解を前進させる。これはx方向の2階導関数を陰差分近似し、その他を陽差分近似する。

$$\frac{u_{ijk}^{n+1} - u_{ijk}^{n+2/3}}{(1/3)\Delta t} = \frac{u_{i+1jk}^{n+1/3} - 2u_{ijk}^{n+1/3} + u_{i-1jk}^{n+1/3}}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{ij+1k}^{n+2/3} - 2u_{ijk}^{n+2/3} + u_{ij-1k}^{n+2/3}}{(\Delta y)^2} + \frac{u_{ijk+1}^{n+2/3} - 2u_{ijk}^{n+2/3} + u_{ijk-1}^{n+2/3}}{(\Delta z)^2} \quad (3.2.4)$$

以上のように新しい時刻の値を求めることができる。

ここで、時間刻み幅はどの段階でも同一にしなければならないという点に注意する。

### 3.3 Newtonの線形化<sup>5)</sup>

本研究で用いる方程式の中に化学反応項が含まれる。この項は非定常項で陰解法としてシステムを解くためには線形化する必要がある。

式(2.7)より

$$\omega = B_1 \exp\left(-\frac{E}{R_0 T}\right) \rho^{1.5} \left(\frac{Y_{H_2}}{W_{H_2}}\right)^{1.0} \left(\frac{Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{0.5} \quad (3.3.1)$$

$$\text{ここで、 } w_{H_2} = -W_{H_2}\omega, \quad w_{O_2} = -0.5W_{O_2}\omega, \quad w_{H_2O} = W_{H_2O}\omega \quad (3.3.2)$$

反応項が支配方程式に現れるのはエネルギーの保存式と化学種の保存式であり、それぞれ

$$\iiint_V \sum_{i=1}^K w_i h_i dV, \quad \iiint_V w_i dV \quad \text{である}$$

本研究では、Newton法を用いて線形化を施します、離散化では1次の陰解法を用いているので、(3.3.2)の反応項はそれぞれ、

$$\iiint_V \sum_{i=1}^K w_i^{n+1} h_i dV, \iiint_V w_i^{n+1} dV \quad (3.3.3)$$

となる。上の式を行列で表すと

$$\iiint_V \hat{F}^{n+1} dV = \iiint_V w^{n+1} \begin{pmatrix} \sum_{k=1}^K -h_k W_k V_k \\ -W_{H_2} V_{H_2} \\ -W_{O_2} V_{O_2} \\ W_{H_2O} V_{H_2O} \end{pmatrix} dV \quad (3.3.4)$$

となる

そうするとエネルギー式と化学種の式は行列で以下のように書ける

$$\iiint_V \rho \frac{\hat{U}^{n+1} - \hat{U}^n}{\Delta t} dV + \iiint_V \rho u \frac{\partial \hat{U}}{\partial x} \Big|^{n+1} dV = \iint_S \hat{\alpha} \frac{\partial \hat{U}}{\partial x} \Big|^{n+1} dS + \iiint_V \hat{F}^{n+1} dV \quad (3.3.5)$$

ここで

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \bar{c}_p T \\ Y_{H_2} \\ Y_{O_2} \\ Y_{H_2O} \end{pmatrix}, \hat{\alpha} = \begin{pmatrix} \frac{\lambda}{c_p} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho D_{H_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho D_{O_2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho D_{H_2O} \end{pmatrix} \quad (3.3.6)$$

Newtonの線形化により上の式が次のようになる

$$\hat{F}^{n+1} = \hat{F}^n + \left[ \frac{\partial \hat{F}}{\partial \hat{U}} \right]^n (\hat{U}^{n+1} - \hat{U}^n) \quad (3.3.7)$$

$$\left[ \frac{\partial \hat{F}}{\partial \hat{U}} \right]^n = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial U_1} & \frac{\partial F_1}{\partial U_2} & \frac{\partial F_1}{\partial U_3} & \frac{\partial F_1}{\partial U_4} \\ \frac{\partial F_2}{\partial U_1} & \frac{\partial F_2}{\partial U_2} & \frac{\partial F_2}{\partial U_3} & \frac{\partial F_2}{\partial U_4} \\ \frac{\partial F_3}{\partial U_1} & \frac{\partial F_3}{\partial U_2} & \frac{\partial F_3}{\partial U_3} & \frac{\partial F_3}{\partial U_4} \\ \frac{\partial F_4}{\partial U_1} & \frac{\partial F_4}{\partial U_2} & \frac{\partial F_4}{\partial U_3} & \frac{\partial F_4}{\partial U_4} \end{bmatrix} \quad (3.3.8)$$

さらに空間において離散化するとセル1での離散方程式は

$$\hat{A}_i \hat{U}_{i-1}^{n+1} + \hat{B}_i \hat{U}_i^{n+1} + \hat{C}_i \hat{U}_{i+1}^{n+1} = \hat{D}_i \quad (3.3.9)$$

となる。各セルに対して離散化すると、ブロック三重対角行列になり、これを解く

### 3.4 多重格子法<sup>6) 7) 8)</sup>

多次元の数値計算において格子点数が増えると計算機にとって非常に負荷の大きいものになり、可能な限りの高速化の手法を取り込む必要がある。本研究では高速解法の一つである

多重格子法を用い、以下に多重格子法について述べる

ポアソン方程式をはじめとする楕円型の偏微分方程式は、その行列式を直接解くよりも、適当な緩和法を利用することによって効率よくその近似解を求めることかてきる。緩和法にはヤコビ法、カウスーサイテル法やSOR法などかあるか、これらの緩和法は格子幅と同程度の波長の誤差に対しては非常に効率よく減衰させることかてきるか、長波長の誤差に対しては効率か非常に悪いという性質かある。一方、多重格子法はこれを改善させるために誤差の様々な周波数成分をおのおのに対応した粗い計算格子を用いて効率よく減衰させる緩和法である

### 3 4 1 計算手法

ここでは、多重格子法の簡単な計算手法を述べる。計算対象として楕円型偏微分方程式を考える。基礎方程式は以下のようになる

$$LW = F \quad (3.4.1)$$

$L$  演算子,  $W$  厳密解,  $F$  定数項

多重格子法では階層的な格子  $G^k$  を用いる。添え字  $k$  は格子の細かさを示し、この値か小さくなるにつれて格子か粗くなる。(3.4.1)を細かい格子  $G^k$  上で離散化し、次の線形方程式を得る

$$L^k W^k = F^k \quad (3.4.2)$$

$L^k$  細かい格子  $k$  上での演算子,  $W^k$  厳密解,  $F^k$  定数項

SORなどの緩和法で近似解  $w_1^k$  を得る。ここで各格子での残差  $R^k$  を次のように定義する

$$R^k = F^k - L^k w_1^k \quad (3.4.3)$$

さらに近似解の修正量  $v^k$  を以下のように定義する

$$v^k = W^k - w_1^k \quad (3.4.4)$$

(3.4.3)と(3.4.4)を(3.4.2)に代入すると

$$L^k v^k = R^k \quad (3.4.5)$$

という細かい格子上での修正方程式を得る。この修正方程式を粗い格子に制限補間して、粗い格子上で低周波成分の誤差を減衰させる

$$R^{k-1} = I_{k-1}^k R^k \quad (3.4.6)$$

$I_{k-1}^k$  細かい格子から粗い格子への制限補間演算子

$$L^{k-1} v^{k-1} = R^{k-1} \quad (3.4.7)$$

(3.4.7)により厳密に解いて得られた修正値  $v^{k-1}$  を細かい格子へ延長補間して  $v^k$  を求める

$$v^k = I_{k-1}^k v^{k-1} \quad (3.4.8)$$

$A_{k-1}$  粗い格子から細かい格子への延長補間演算子

これにより得られた修正値を次のようにもとの近似解に加えてやり，さらに緩和計算を行う

$$w_2^k = w_1^k + v^k \quad (3.4.9)$$

この過程を何サイクルか繰り返し収束させる方法が多重格子法である。ここでは2つの種類の格子を用いたが，修正方程式(3.4.7)を解くためにさらに粗い格子を用いて再帰的に上述のサイクルを適用することでさらに効率よく解を近似することかてきる

### 3.4.2 制限補間演算子と延長補間演算子

3次元問題では制限補間演算子にはいくつかの種類がある。もし上述に示す解法が各方向に使われるならば結果は27点のスキームである

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_{j,k} = \frac{1}{64} & (8\rho_{j,k} + 4(\rho_{+1,j,k} + \rho_{-1,j,k} + \rho_{j,+1,k} + \rho_{j,-1,k} + \rho_{j,k,+1} + \rho_{j,k,-1}) \\ & + 2(\rho_{+1,j+1,k} + \rho_{-1,j+1,k} + \rho_{+1,j-1,k} + \rho_{-1,j-1,k} \\ & + \rho_{+1,j,k+1} + \rho_{-1,j,k+1} + \rho_{j,+1,k+1} + \rho_{j,-1,k+1} + \rho_{+1,j,k-1} \\ & + \rho_{-1,j,k-1} + \rho_{j,+1,k-1} + \rho_{j,-1,k-1}) \\ & + \rho_{+1,j+1,k+1} + \rho_{-1,j+1,k+1} + \rho_{+1,j-1,k+1} + \rho_{-1,j-1,k+1} \\ & + \rho_{+1,j+1,k-1} + \rho_{-1,j+1,k-1} + \rho_{+1,j-1,k-1} + \rho_{-1,j-1,k-1}) \end{aligned} \quad (3.4.10)$$

文献7)によれば効果的な展開補間演算子は双一次展開であり，これは線形補間を行うことに等しい

### 3.5 CHEMKINによる物性値の導出<sup>9)</sup>

本研究では反応機構を元に任意の温度に対する各化学種の反応速度や物性値をCHEMKINを用いて導出する。ここではCHEMKINの基本的な構造を示し，本研究での適用方法を述べる

計算を行う過程で，CHEMKIN InterpreterとTRANSPORT Fitting Programから得られるデータを使用する。CHEMKIN Interpreterは，はじめに入力として化学反応式と各化学反応式における係数（反応速度の頻度因子，温度依存性の次数，活性化エネルギー）を必要とする。CHEMKIN Interpreterによって作られるリンクファイルには，入力された化学反応式や化学種，化学反応の係数のほかに化学種の分子量や熱力学の多項式係数を出力する。TRANSPORT Fitting ProgramはCHEMKIN Interpreterによって作られたリンクファイルを元に各化学種に対する輸送係数（粘性係数，熱伝導率，拡散係数）を出力する。（図3.5）

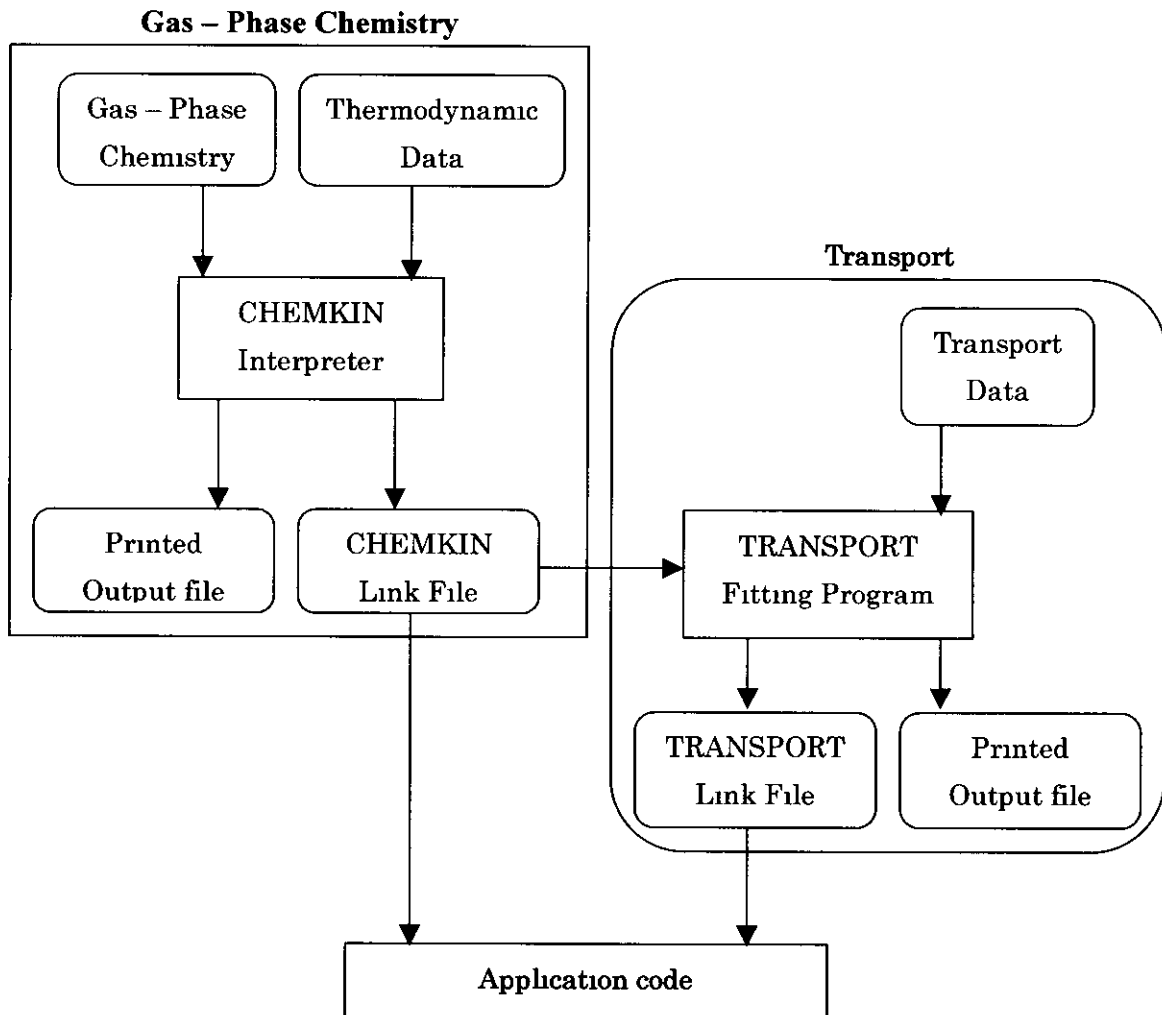


図 3 5 CHEM-KIN の概要

本研究では、この二つのファイルを入力データとして計算を行う。さらに CHEM-KIN Library および TRANSPORT Library の中から必要なサブルーチンを抜き出し、各係数を導出した。

#### 4 初期条件および境界条件

計算するにあたって初期条件および境界条件が必要である。初期値問題および境界値問題において初期条件および境界条件の設定が大きく結果に影響するため、うまく与えられなければならない。以下に本研究で用いた初期条件および境界条件を示す。

まず、拡散の計算には、計算領域として格子数 33 点×33 点×33 点、16mm×16mm×16mm で、中央に 4.5mm×4.5mm×4.5mm の水素の塊を置いた。雰囲気は大気とする。Fig 1 に水素の配置場所を示す。初期温度場として 300K、速度はなく、圧力は大気圧とする。



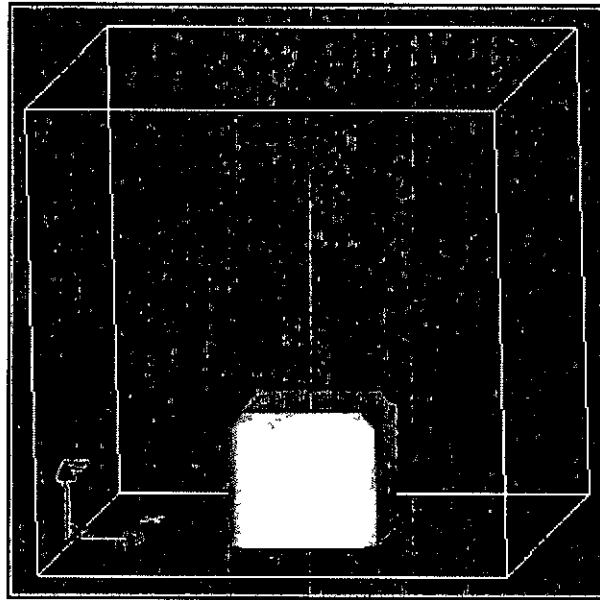


Fig 1 0sec 時の水素の配置

境界条件は  $z=0$  面を壁面とし、その他の境界は自由境界とする。このため、壁面境界では、速度成分を 0、質量分率、温度をノイマン境界条件とし、自由空間においてはすべて自由流出境界条件とした。修正方程式であるポアソン方程式に関しては壁面上で速度が 0 になるようにノイマン境界条件で、その他の境界では圧力が大気圧に固定されるようにディリクレ境界条件で 0 を与えた。

また、燃焼の計算には、計算領域として格子数 33 点  $\times$  33 点  $\times$  33 点、1.6mm  $\times$  1.6mm  $\times$  1.6mm で、中央に 0.45mm  $\times$  0.45mm  $\times$  0.45mm の水素の塊を置いた。0.002sec 後に水素の塊の中心に熱源を置き、着火させた。境界条件は拡散の計算と同じ境界条件を用いている。

## 5 計算結果と考察

以下に本研究の計算結果を示す。

水素の可燃限界は 4~75vol% で、Fig 2~3 はそれぞれ時刻 0.02sec、0.04sec での水素の下限可燃限界分布である。水素は非常に拡散係数が大きいため、急速に拡散しているのがわかる。また、水素は最も軽い気体であるため、上方への拡散が時間と共に顕著に表れている。

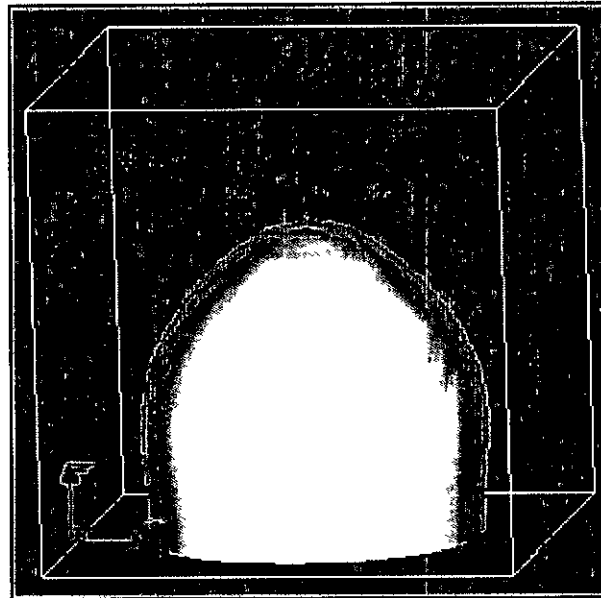


Fig 2 t=0.02sec での水素の可燃限界分布

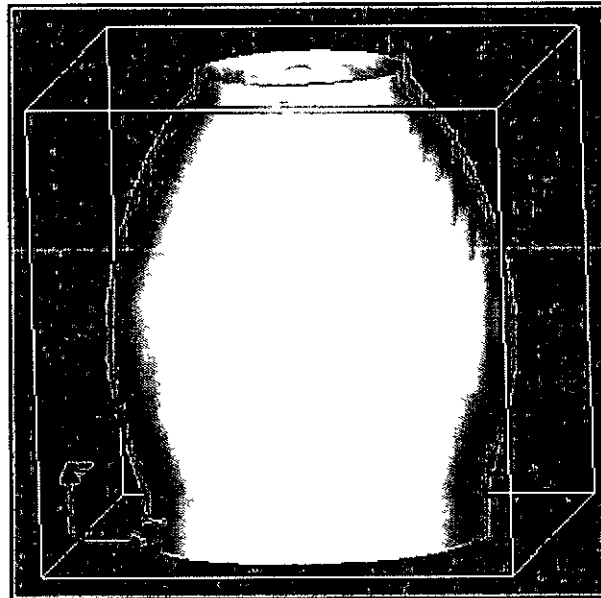


Fig 3 0.04sec での水素の可燃限界

次に Fig 4, 5 に  $y=8.0\text{mm}$  での  $x-z$  断面における流れ場と水素の質量分率分布を示す。流れ場を見ると、どちらの時刻においても水素の塊が上方へ移動しており、最大で約  $1\text{m/sec}$  に加速されている。一方、周囲空気は水素が上昇していくにつれて下方から中央に流れ込んでいる。

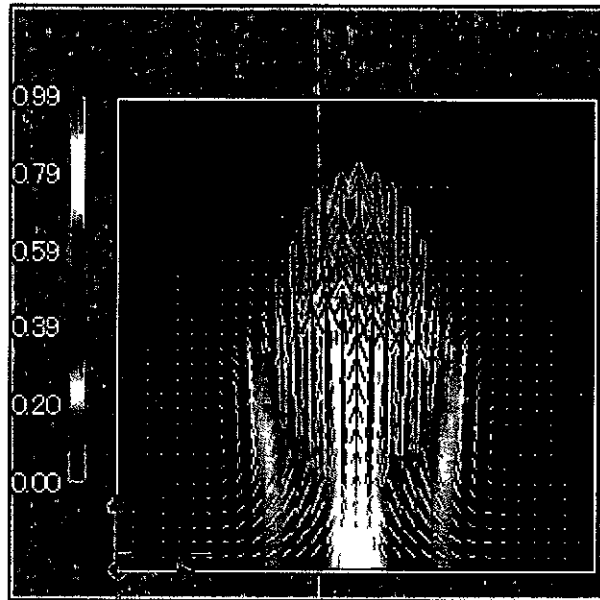


Fig 4 0.02sec での流れ場と水素の質量分率分布 (y=8.0mm)

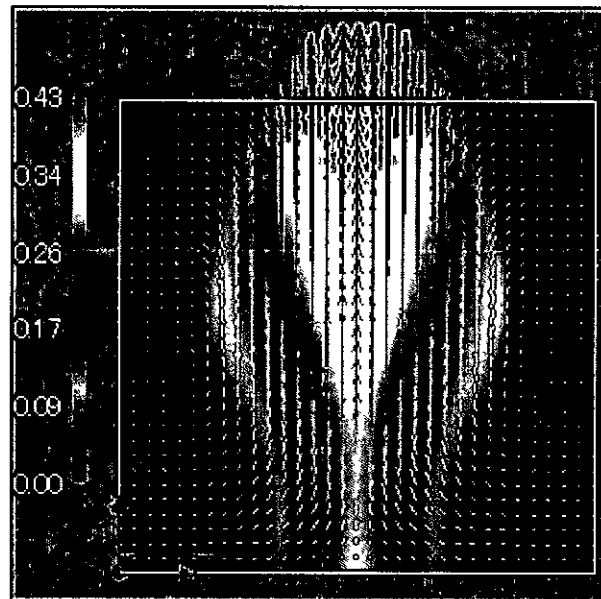


Fig 5 0.04sec での流れ場と水素の質量分率分布 (8.0mm)

以上より水素の塊が同心円状に拡散しながら上昇する現象をシミュレーションすることか  
てきた

Fig 6~10 は熱源を置いてからの温度分布の時間変化を示す 図を見ると熱源により着火  
し、同心円状に温度上昇が起こり、火炎が伝播していることがわかる Fig 11~15 に  $H_2O$  質  
量分率等値面の時間変化を示す 等値面の値は質量分率 0.12 である  $H_2O$  が火炎伝播に伴っ  
て生成され広がっていることがわかる

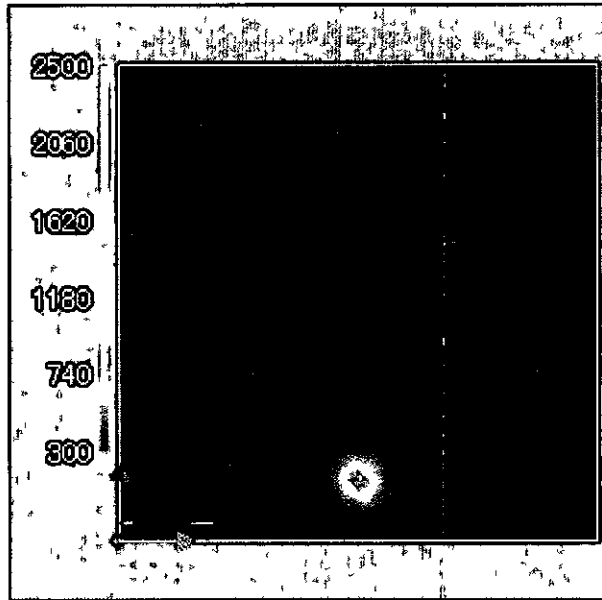


Fig 6 0 002005sec 後の温度分布 (y=0 8mm)

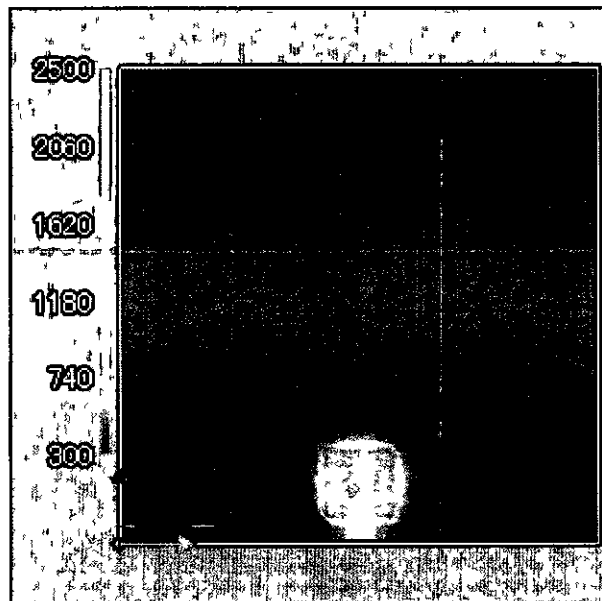


Fig 7 0 002008sec 後の温度分布 (y=0 8mm)