

- (a) 無次元ピーク圧力と無次元距離の関係  
 (b) 無次元正圧インパルスと無次元距離の関係

図 5-1 実験結果と Sachs のスケール則

### 3. 低温における水素ガスの爆発特性評価

独立行政法人産業安全研究所 水谷高彰  
独立行政法人産業安全研究所 松井英憲

## 1. はじめに

水素燃料自動車の開発では、液体水素の利用も考えられている。液体水素は、 $-253^{\circ}\text{C}$  (20K) の極低温であるため、漏洩した場合の水素ガスはかなり低温であることが予測される。このような状態で漏洩後空気と混合し、閉空間で爆発が生じた場合の爆発圧力やその威力を予め把握しておく必要がある。密閉容器内でのガス爆発時の最大爆発圧力 ( $P_m$ ) は、近似的に次式によって示される。

$$P_m = P_1 \times (n_2 \cdot T_2) / (n_1 \cdot T_1) \cdots \cdots (1)$$

ここで、 $P_1$  はガスの初圧、 $n_1$ ,  $n_2$  は爆発前後のガスのモル数、 $T_1$ ,  $T_2$  は爆発前後のガスの温度である。最大爆発圧力は、(1)式による計算で予測し得るが、昇圧速度などの動的な特性は実測でしか得られず、高温下での測定値は得られているが、低温下でのデータは見当たらない。そこで、小型爆発円筒容器 (容積 1L) を用いて、室温から約  $-60^{\circ}\text{C}$  までの低温域での化学量論組成の水素/空気混合ガスの爆発圧力特性の測定を行った結果について示す。

## 2. 実験装置及び方法

実験装置の概略を図 1 に示す。爆発容器は低温での温度制御を容易にするため、内径 106mm、高さ 111mm のステンレス製円筒容器を用いた。中央部に間隙 4mm の電極を有しており、市販の電子ライタの放電回路を用いたスパークで着火した。片側のフランジは強化ガラスになっており、放電の状態及び火炎の伝播が目視できるようになっている。爆発容器には、ガス導管、弁、デジタルマノメータ、圧力変換器、シース K 型熱電対が取り付けられている。爆発容器は、 $-60^{\circ}\text{C}$  まで冷却可能な低温恒温エタノール槽に浸漬して温度制御を行った。

試験方法は、予め別のタンクに調整した 30% 水素/空気混合ガスを爆発容器内に加圧導入して、容器と一緒に低温槽内で所定の温度まで冷却し、容器内ガス温度が一定になったところで、余分のガス圧を大気圧迄放出して初圧を大気圧とした。着火、爆発時の圧力波形はデジタルオシロスコープで記録・解析した。

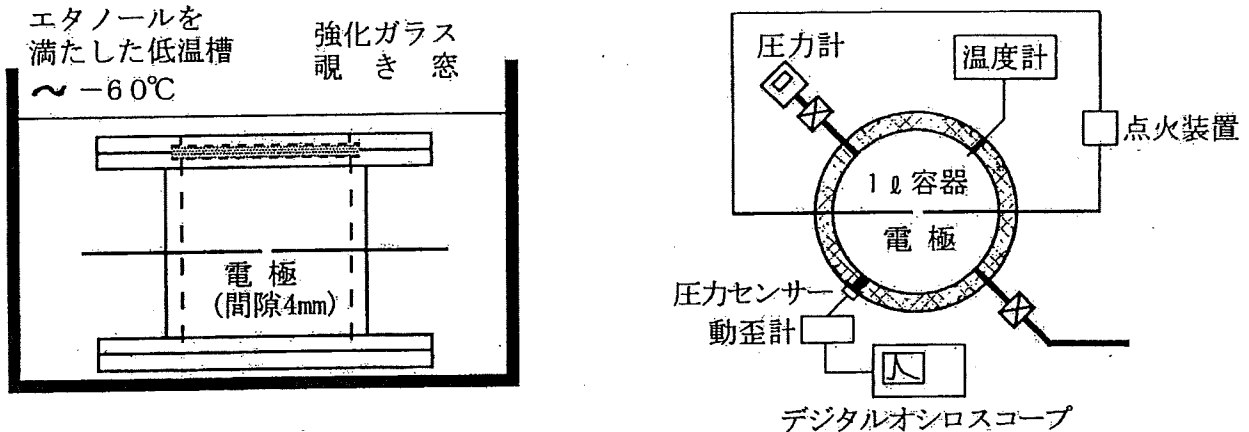


図 1 低温水素ガス爆発特性試験装置の概略

## 3. 実験結果と考察

種々初期温度 ( $T_1$ ) における爆発圧力波形の測定結果を図 2 に示す。初期圧力は何れも大気圧であり、(1)式から予測されるように最大爆発圧力 ( $P_m$ ) は、初期温度 ( $T_1$ ) が低いほど当然ながらかなり高くなる。測定値は何れも断熱定容燃焼の計算値より 4~8% 低い値であった (図 3 参照)。これは、爆発容器が 1L と小型であるため、容積に対する表面積の割合が大きくなり、熱損失が増大したためと考えられる。ここで注目すべき点は、初期温度が低くなると反応速度が遅くなるため燃焼速度が低下して昇圧速度が低下することが予測されるが、爆発威

力の指標となる実際の最大昇圧速度  $(dP_m/dt)_m$  及び平均昇圧速度  $(\Delta P_m/\tau)$  は、測定の温度範囲ではほぼ一定の値が得られたことである。このことは、低温下での昇圧速度は、最大爆発圧力の増大と、最大爆発圧力到達時間  $(\tau)$  の増大で相殺され、初期温度によってあまり変わらないということができる。

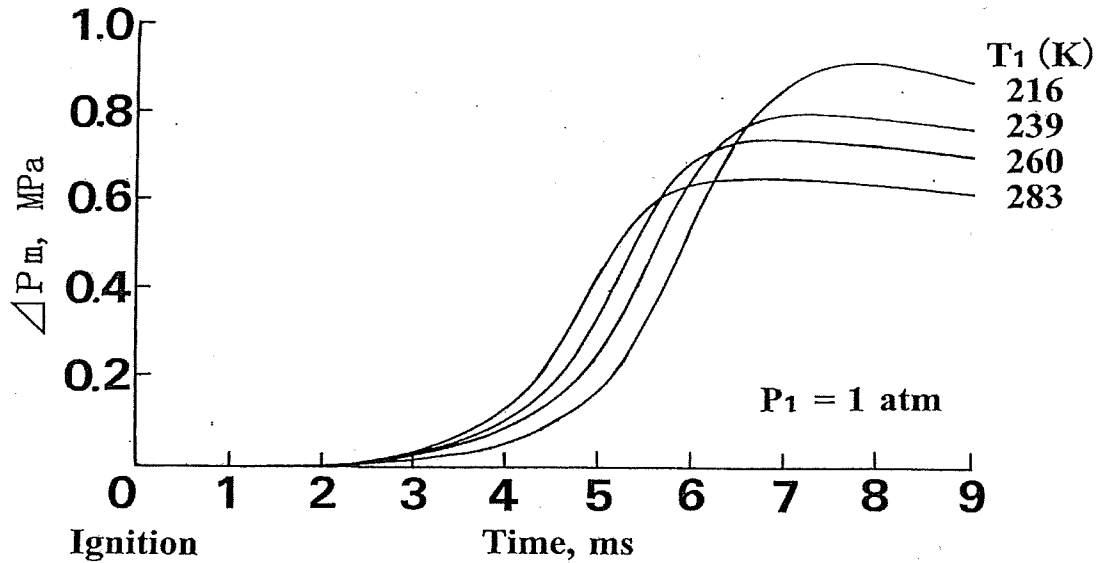


図2 低温下における水素 30%/空気混合ガスの爆発圧力波形 (1L 円筒容器, 初圧: 大気圧)

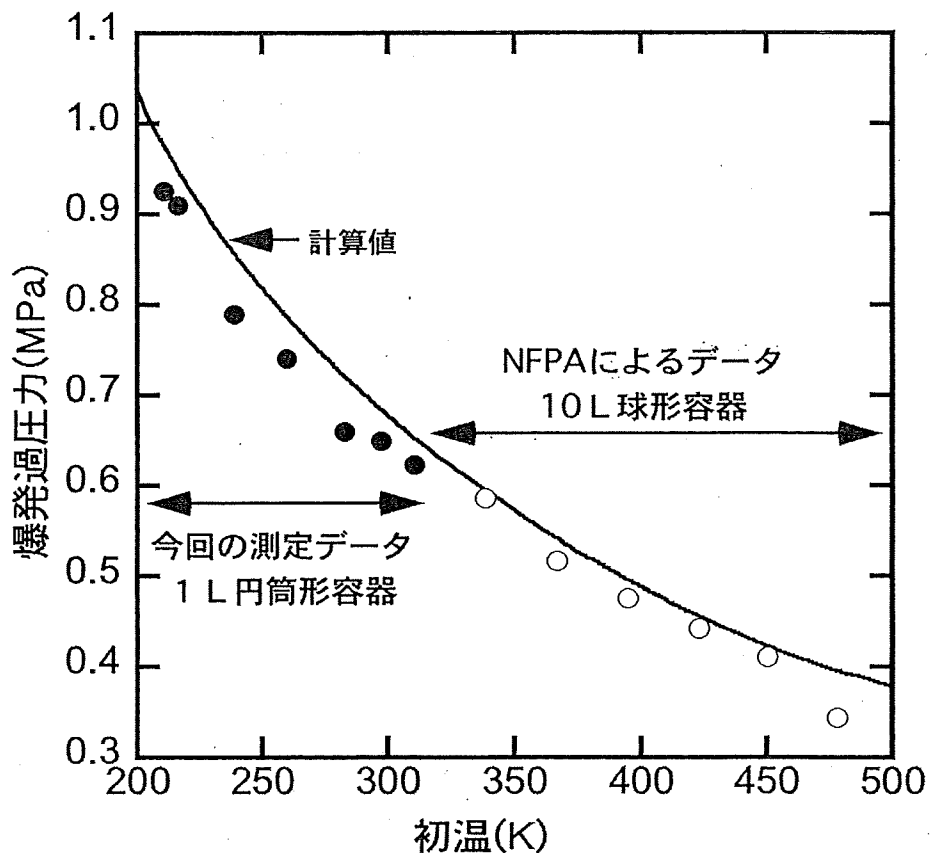


図3 初期温度と水素委の爆発圧力の関係 (水素 30%-空気混合ガス)

引用文献

- 1) NFPA, National Fire Code (1964), 翻訳：可燃性ガス，蒸気—空気混合物の爆発圧力に関するデータ表，安全工学，Vol.5, No.3, p.233 (1966)

## 4. 開放空間における爆発危険性評価指数の導入

独立行政法人産業安全研究所 大塚輝人

## 1. はじめに

近年の流体計算コードの発展により、ガス流体の拡散過程については、比較的容易に、かつ正確に求められるようになってきている。一方、実規模の実験を多数回繰り返すことは非常に困難であり、燃焼を含んだ計算は、正確な反応機構を用いた DNS と呼ばれる直接計算法や、反応速度を近似した方法等多くのモデルがあり、計算量は拡散に比して未だ膨大なものとなっている。したがって、簡便な拡散計算をもちいて危険性を評価するための何らかの指標を導入することは、非常に有用である。そこで、具体的な評価指数として、1)可燃領域の時間積分値、2)可燃領域における燃焼熱の時間積分値の二つを挙げ、検討を行った。この二つの評価指数は、漏洩条件が同じ場合に、可燃領域の時間積分値は、着火の発生確率が時間的、空間的に一様である場合に災害の発生頻度を提供でき、可燃領域の燃焼熱の積分値は、災害に寄与する燃焼熱の期待値を提供できる。

## 2. 計算条件

計算領域として円筒対称で、中央にある最小格子間隔 1mm から始まる公差 1mm の一方向偏向格子を用い、上方および側方に大気圧で一定の圧力境界、下方にすべりなしの床を設定し、温度 25°C 一定の層流モデルを仮定した。その上で、表 3.1 に示した諸定数を用いて、水素、メタンの各々について計算を行った。表 3.1 では水素の爆発下限界として、上方伝ぱしが行えない燃焼限界の 4%ではなく、通常伝ぱし、かつ、有意な爆発圧力を与える 8%を用いている。

ガスの初期条件は、直径 1m の球状の水素、あるいはメタンの塊が地表面に接してあるものとし、0 秒から、時間の経過によりどのように拡散して行くかを計算した。

表 3.1 計算に用いた諸定数

気体	水素	メタン
拡散定数( $\text{kgm}^{-1}\text{s}^{-1}$ )	$5.75 \times 10^{-6}$	$1.06 \times 10^{-5}$
分子量	2.00	16.0
燃焼熱( $\text{kJ/mol}$ )	241.82	890.7
爆発上限界(質量分率)	0.006	0.0324
爆発下限界(質量分率)	0.172	0.0892

## 3. 水素とメタンの比較

図 3.1 に可燃領域の時間推移を示した。可燃領域は、水素で 4 秒、メタンで 9 秒の時点で大きく減少後、中心軸付近の非常に小さな空間がしばらく残った状態が続いていた。残った領域が推移全体に占める割合はそれほど大きくなく、可燃領域はかなり上方に移動しているため、実際には着火にほとんど寄与しないと考えられるため、可燃領域の存続時間はこの大きな減少の時点までと考えてよい。可燃領域の最大値は水素で  $2.68 \text{ m}^3$ 、メタンで  $3.87 \text{ m}^3$  であった。したがって単純な漏洩であれば、メタンの方が広い領域の空間で着火可能であるといえる。可燃領域の時間積分値は、メタンで  $18.9 \text{ m}^3\text{s}$  であり、これは水素の  $8.59 \text{ m}^3\text{s}$  の二倍以上に相当する。

次に、図 3.2 に燃焼熱の時間推移を示した。燃焼熱については、過濃部分の混合気の燃焼熱を空気濃度を用いて計算した。表 3.1 に見られるとおり、メタンの燃焼熱は水素の燃焼熱の 3.68 倍と大きいため、図 3.2 では顕著な違いが出てきている。可燃領域における燃焼熱の積分値は、水素で  $11.5 \text{ MJ}$ s、メタンで  $52.4 \text{ MJ}$ s であった。水素とメタンの単位量あたりの燃焼熱

の比を勘案しても、この指標からは一度災害が起きた場合、メタンの方が、大きな被害を与えられられる。

以上主に天然ガスなどを対象とした従来の考え方を、将来水素に適用するような場合に用いることのできる簡便な指標について述べた。二つの指標から、同量の水素とメタンが漏洩した場合、着火の頻度、爆発の規模の両者の面で水素の方が安全側であるといえる。

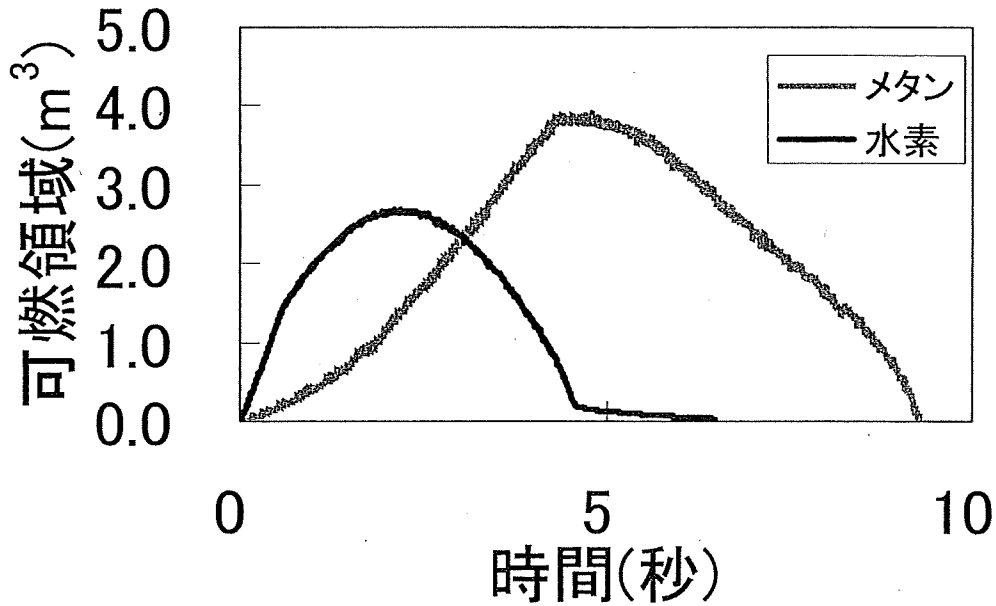


図 3.1 可燃領域の推移

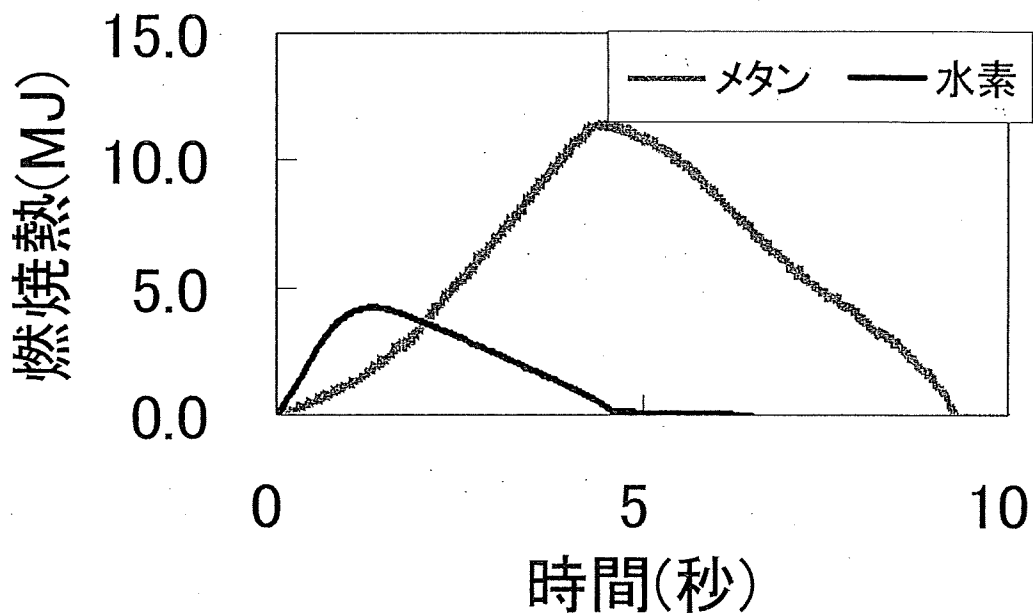


図 3.2 可燃領域内の混合気の燃烧熱量の推移



上記の従来の評価方法では、混合気の反応性に関するファクターは全く考慮されていない。ここで、混合気の反応性を表す代表的なファクターとして、火炎の層流燃焼速度を考慮する。火炎伝播速度は火炎燃焼速度に依存し、火炎伝播速度が増せば、形成される圧力波の強度も増加する。図 3.1 で示した可燃領域体積に局所の火炎燃焼速度を掛けた量 ( $m^4/s$ ) を計算した。結果を図 3.3 に示す。水素の最大燃焼速度 (当量比 1.8, 約  $3m/s$ ) は、メタンの最大燃焼速度 (当量比 1, 約  $0.4m/s$ ) に比べて、8 倍程度である。その影響が大きく効き、新しい指標は、水素がメタンに比べて、危険性が高い事を示す。

この様に、ガス濃度の時間変化計算から、開放空間における爆燃の危険指数が推算できることになり、貯蔵ガスの放出過程をシミュレーションできれば、相対的な危険度を評価することが可能になる。

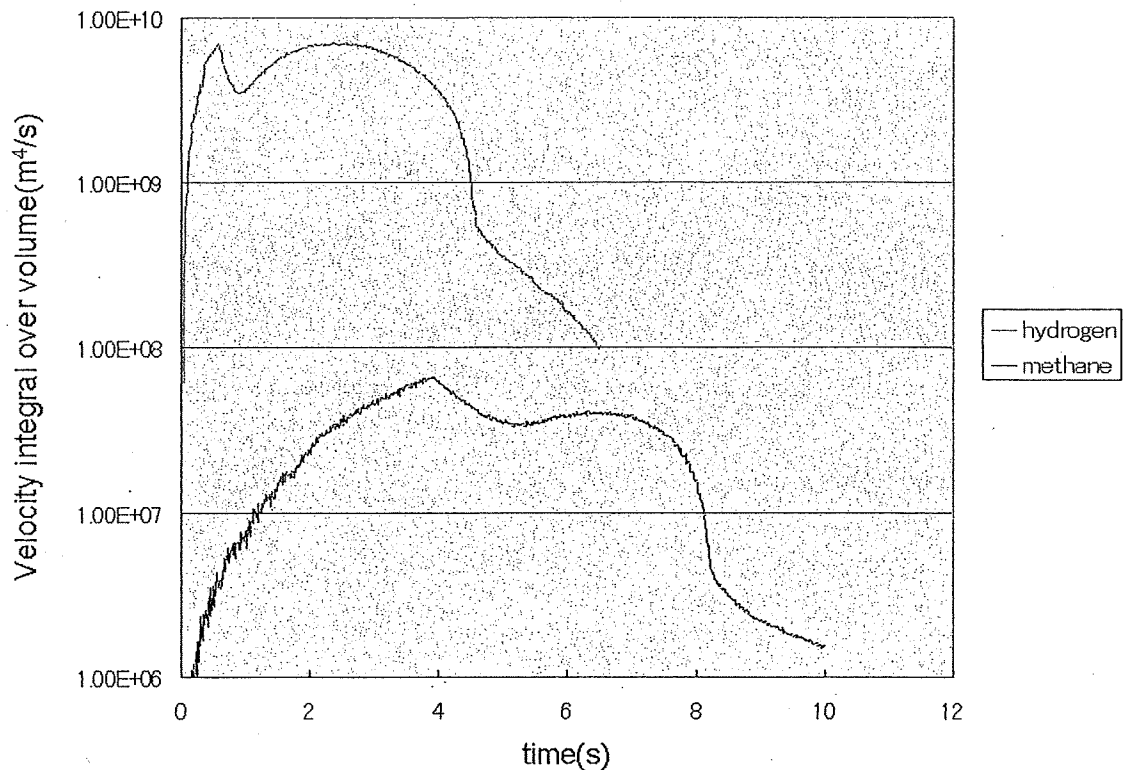


図 3.3 燃焼速度を考慮した爆発危険指数の時間変化

#### 引用文献

- 1) CFX4.4 マニュアル(2001)

## 5. 水素ガス漏洩爆発現象の計算的検証

独立行政法人産業安全研究所	大塚輝人
独立行政法人産業安全研究所	水谷高彰
名古屋大学大学院工学研究科博士前期課程2年	上坂直人
名古屋大学大学院工学研究科	斎藤寛泰
名古屋大学大学院工学研究科	吉川典彦

## 1. はじめに

次世代エネルギーとして期待される水素について、爆発挙動の研究が近年盛んに行われている[1]. 我々は以前より、実験室規模の小型爆発試験装置や野外における大規模な実験装置を用いて水素-空気混合気の爆発現象の観測を行ってきた[2,3]. 特に、一定量の混合気が爆燃する場合に注目し、周囲環境に開放される圧力波の伝ば状態を調べた[4,5]. 開放空間における燃焼に対する測定は、非常に擾乱が多く、困難であるため再現性が低く多数の実験を必要とする. 本研究では昨年度得られた実験の結果を計算によって再現することで現象の理解と、計算による外挿の可能性を調べた.

## 2. 計算手法

計算には、ANSYS 社の CFX4.4[6]を用いて行った. 乱流モデルとして、以下の式で表される  $k-\varepsilon$  モデルを用いた. ここで  $\rho$  は密度,  $U$  は流れの速度,  $g$  は重力をあらわすベクトル,  $\mu$  は粘性,  $k$  は渦のエネルギー,  $\varepsilon$  はその消散率,  $\sigma$  はプラントル数を表し,  $C$  はモデルの定数を意味する. 以上の式に加えて実際には、状態方程式とエネルギー保存の式を連立させて解いている.

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) &= 0 \\ \frac{\partial \rho U}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \otimes U) - \nabla \cdot (\mu_{eff} \nabla U) \\ &= -\nabla(p + \frac{2}{3}\mu - \zeta)\nabla \cdot U + \nabla \cdot (\mu_{eff} (\nabla U)^T) + \rho g \\ \mu_{eff} &= \mu + \mu_T = \mu + C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \\ \frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U k) - \nabla \cdot ((\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k}) \nabla k) &= P + G - \rho \varepsilon \\ \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U \varepsilon) - \nabla \cdot ((\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon}) \nabla \varepsilon) \\ &= C_1 \frac{\varepsilon}{k} (P + C_3 \max(G, 0)) - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \\ P &= \mu_{eff} \nabla U \cdot (\nabla U + (\nabla U)^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot U (\mu_{eff} \nabla \cdot U + \rho k) \\ G &= \frac{\mu_T}{\rho \sigma_\rho} g \cdot \nabla \rho\end{aligned}$$

燃焼には、渦による混合が燃焼の律速であるとの考えから導かれた、以下の式で表される Eddy-Break-up モデルを用いた.  $m$  は燃料, 酸化剤, 燃焼生成物各々の質量分率を表し,  $i$  は燃料 1kg が燃焼するのに必要な酸化剤の質量である.  $R$  は反応速度を示し, 添え字の  $T, L$  は乱流, 層流を示す.

$$\frac{\partial \rho m_F}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U m_F) - \nabla \cdot \left( \left( \frac{\mu_T}{\sigma_T} + \frac{\mu}{\sigma_L} \right) \nabla m_F \right)$$

$$= \max(R_L, R_T)$$

$$R_T = -23.6 \left( \frac{\mu \varepsilon}{\rho k^2} \right)^{\frac{1}{4}} \rho \frac{\varepsilon}{k} \min\left( m_F, \frac{m_O}{i}, \frac{m_P}{i+1} \right)$$

$$R_L = \frac{\rho W_F (S_L + 0.88 FK^{-0.3} (2k)^{0.5})}{d_B} \min\left( m_F, \frac{m_O}{i} \right)$$

層流燃焼速度  $S_L$  は当量比  $\phi$  によって、最大層流燃焼速度を与える  $\phi_m$ 、希薄燃焼限界  $\phi_l$ 、過濃燃焼限界から  $\phi_r$  から次式で計算する。

$$\frac{S_L}{S_{L\max}} = \frac{(\chi - \chi_l)(\chi - \chi_r)}{(1 - \chi_l)(1 - \chi_r)}$$

$$\chi = \frac{\phi}{\phi_m}, \chi_r = \frac{\phi_r}{\phi_m}, \chi_l = \frac{\phi_l}{\phi_m}$$

$K$  は Karlovitz の伸張度(stretch factor)であり、次式で定義される。 $W_F$  は火炎厚さを表すパラメータで、 $F$  は速度補正に関するパラメータである。

$$K = 0.157 \frac{2k}{S_L^2} \left( \frac{\mu}{\mu_T} \right)^{0.5}$$

着火は適当な領域に層流燃焼による火炎球が広がることを仮定して、その領域内に着火時間  $t_i$  にいたるまでの間、以下の反応項を Eddy-Break-up モデルに付け加えた。

$$-\frac{\rho m_F}{t_i} \left( \frac{t}{t_i} \right)^2$$

以上のモデルで用いた定数を Table 1 に示す。

Table 1 Model Constants

$C_\mu$	0.09	$\sigma_\rho$	1.0
$C_l$	1.44	$\sigma_T$	0.9
$C_2$	1.92	$\sigma_L$	1.0
$C_3$	1.0	$W_F$	2.0
$\sigma_k$	1.0	$F$	1.0
$\sigma_\varepsilon$	1.217	$d_B$	0.125

### 3. 計算対象

計算の比較対象となる室内実験に用いた実験装置の概略図を Fig.1 に示す[3]. 実験装置はラテックス膜をリングで押さえた板に、試料混合気の導入と、着火用スパークプラグの設置のための穴を穿ったものである. 混合気の充填はラテックス膜が直径 275mm の半球を形成するまで行った. したがって, 内部に導入される混合気は約 5.4L である.

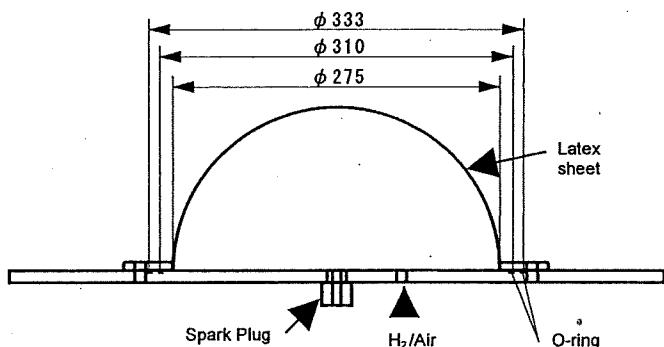


Fig. 1 Experimental Set-up

実験では, 上部に設けたカッターナイフでラテックス膜を破り, 破膜をレーザーで検知することで速やかに着火し, 高速度ビデオカメラと音圧計を用いて, 火炎伝ばの様子と発生する音波による圧力を記録した.

計算は円筒対称を仮定して, 高さ方向と半径方向の 2 軸を用いた二次元系を火炎が届く可能性のある部分(半径  $r$ , 高さ  $h < 500\text{mm}$ )を 5mm のメッシュでとった. 壁面から反射する音波の影響を避けるために,  $r, h < 1000\text{mm}$  で 10mm,  $r, h < 2000\text{mm}$  で 20mm,  $r, h < 4000\text{mm}$  で 40mm のメッシュをとり高さ, 半径方向ともに 4m の領域を計算した. 初期温度は 293K を仮定しており, 火炎部分は約 20ms 程度, 反射波の影響を受けずにすむ.

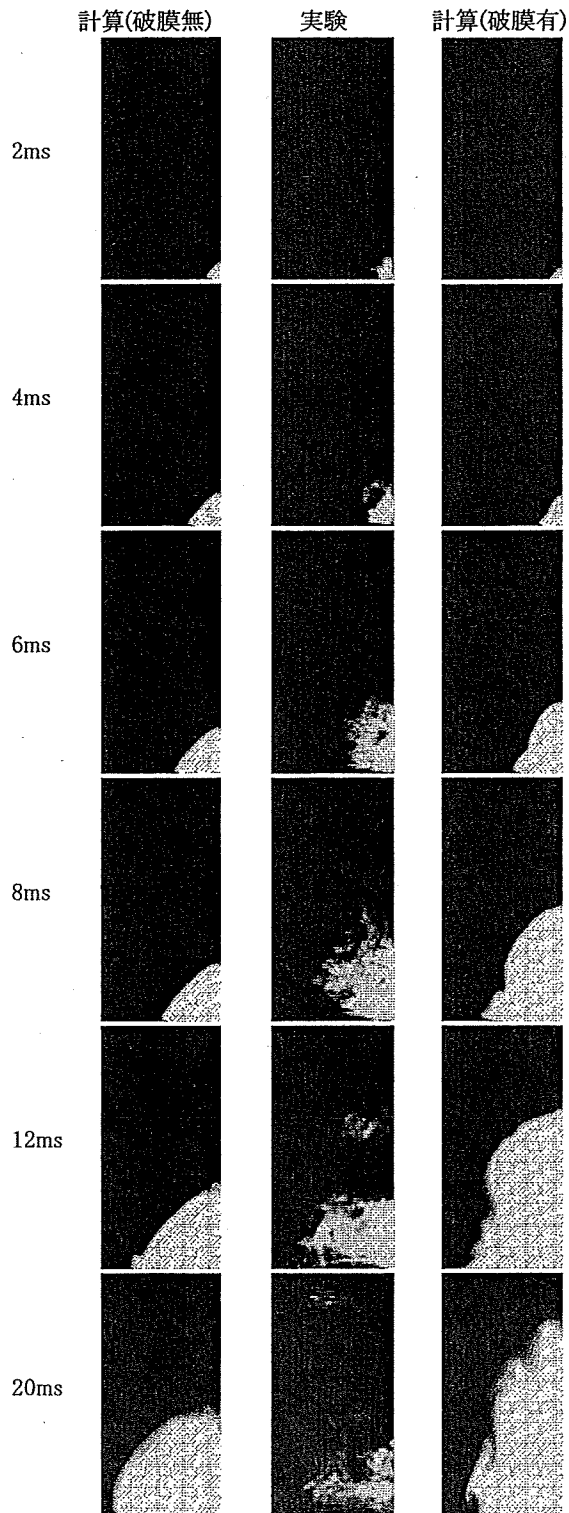


Fig.2  
Comparison between Computational and Experimental results.

#### 4. 結果と考察

Fig.2 に当量比 1.0 の計算結果と高速度カメラの写真の比較を示す。図は右側を中心軸として円筒方向を左に 250mm, 垂直方向を縦に 500mm の範囲を切り取ったものである。中央の列が実際の実験時の映像であり, 可視光として記録されているのは水分子の高振動励起状態からの遷移に伴う発光[7]である。

計算は, ゴム膜内の実測値である大気圧+6kPa の混合気を初期条件とし, 左列はゴム膜の破膜が一瞬で起き, 無視できることを仮定しており, 右列は 1ms の有限時間で中央上部からゴム膜端が等速円運動を描きながら割れて行くのを模擬して初期条件を作成した後, 着火したものである。1ms は, 別途高速度カメラで撮影した破膜の様子から決定したものである。計算結果において輝度で示しているのは, 発光が水分子であるということから, 水分濃度を示したものであり, 火炎面は濃度勾配のある部分に存在すると考えられる。計算のどちらも, 実験に比べて乱れが小さく評価されており, ムラが少ない。横方向の火炎伝ばは 8ms 程度で充填時の半径分まで広がっている。特徴的なのは上方への伝ば速度と伝ば範囲である。着火時の初期条件で破膜を考慮した場合において, 始めの開口面積が小さいため, 初期の内圧が+6kPa でも, 30m/s 程度の速い流れが誘起されるので, その結果火炎が混合気の上端まで到達する間に, 混合気を充填半径の数倍程度まで上昇させる。このため, 破膜を考慮した場合の方が, 伝ば速度, 伝ば距離ともに破膜を考慮しない場合に比して大きく, 実験に近いと考えられる。実験の写真では 20ms で 500mm まで火炎が上昇しているが, 実際のゴム膜の割れ方が等速ではなく, 加速度的であり, 開口面積の小さい時間が長いため, 誘起される上方への流れがより速いものと考えられる。

Fig. 3 に中心から 250mm の位置での破膜を考慮した場合の圧力プロファイルを示した。ちょうど火炎が側面に達した時間帯で最大圧力を迎え, 直後にほぼ等しい絶対値の負圧を示している。

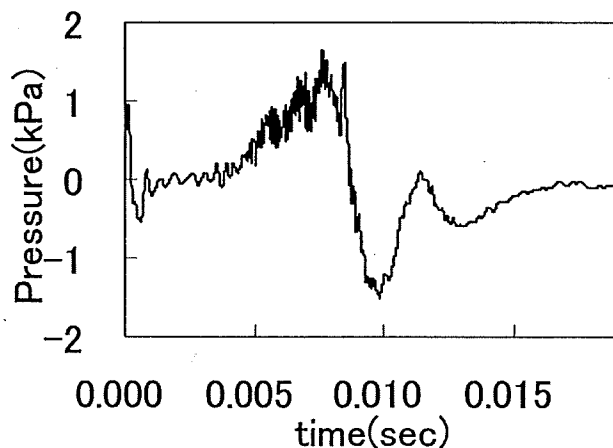


Fig.3 Pressure Profile at  $r=250\text{mm}$ ,  $h=0\text{mm}$

## 参考文献

1. 水素国際利用クリーンエネルギーシステム技術 (WE-NET) 第Ⅱ期研究開発, タスク 2, 安全対策に関する調査・研究, NEDO-WE-NET 0202, 財団法人エネルギー総合工学研究所(2003)
2. 上坂・斎藤・吉川, 第 41 回燃焼シンポジウム講演論文集, pp.113-114(2003)
3. 斎藤他, 水素-空気爆燃の野外実験, 火薬学会誌第 65 巻, pp.140-146(2004)
4. 上坂他, 第 42 回燃焼シンポジウム講演論文集, (2004)
5. 斎藤他, 第 42 回燃焼シンポジウム講演論文集, (2004)
6. CFX4.4 マニュアル(2001)
7. たとえば Gaydon A.G., Spectroscopy and Combustion Theory, p31 (1948)



## 6. 水素爆発シミュレーションコードの開発

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  
名古屋大学エコトピア科学研究所 長谷川達也

## 記号

$B_i$	:	反応速度の頻度因子	
$c_{pm}$	:	化学種 $m$ の定圧比熱	[erg/g · K]
$\bar{c}_p$	:	混合気平均の定圧比熱	[erg/g · K]
$D_m$	:	化学種 $m$ の混合気体に対する拡散係数	[cm <sup>2</sup> /s]
$D_{T,j}$	:	化学種 $j$ の熱拡散係数	[cm <sup>2</sup> /s]
$D_{ij}$	:	化学種 $i$ の化学種 $j$ に対する拡散係数	[cm <sup>2</sup> /s]
$E_a$	:	活性化エネルギー	[erg/mol]
$F$	:	速度補正に関するパラメータ	
$\mathbf{F}$	:	外力項ベクトル	[dyne]
$g$	:	重力	[cm/s <sup>2</sup> ]
$h_m$	:	化学種 $m$ のエンタルピー	[erg/g]
$h_m^0$	:	基準温度での化学種 $m$ のエンタルピー	[erg/g]
$k$	:	体積粘性係数	[(dyne/cm <sup>2</sup> ) · s]
$K$	:	Karlovitz の伸張度	[1/s]
$\tilde{k}$	:	乱流エネルギー	[cm <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
$p$	:	圧力	[dyne/cm <sup>2</sup> ]
$\mathbf{P}$	:	応力テンソル	[dyne/cm <sup>2</sup> ]
$\dot{Q}$	:	外部熱源	[erg/cm <sup>3</sup> · s]
$\mathbf{q}_R$	:	輻射熱流束	[erg/cm <sup>2</sup> · s]
$R^0$	:	普遍気体定数	[erg/mol · K]
$S_L$	:	層流燃焼速度	[cm/s]
$S_\beta$	:	検査体積の $\beta$ 方向の面積	[cm <sup>2</sup> ]
$t$	:	時間	[s]
$T$	:	温度	[K]
$T_0$	:	初期温度	[K]
$u$	:	x 方向の速度	[cm/s]
$\mathbf{u}$	:	速度ベクトル	[cm/s]
$\mathbf{U}$	:	単位テンソル	
$v$	:	y 方向の速度	[cm/s]
$\mathbf{V}_m$	:	化学種 $m$ の拡散速度	[cm/s]
$w$	:	z 方向の速度	[cm/s]
$W_m$	:	化学種 $m$ の分子量	[g/mol]
$W_{fuel}$	:	火炎厚さを表すパラメータ	
$\dot{w}_m$	:	化学種 $m$ の反応速度	[g/cm <sup>3</sup> · s]

$x, y, z$	:	座標軸 [cm]
$X_m$	:	化学種 $m$ のモル分率
$Y_m$	:	化学種 $m$ の質量分率
$\lambda$	:	熱伝導係数 [erg/cm · K · s]
$\mu$	:	粘性係数 [(dyne/cm <sup>2</sup> ) · s]
$\mu_T$	:	乱流粘性係数 [(dyne/cm <sup>2</sup> ) · s]
$\nu$	:	動粘度 [cm <sup>2</sup> /s]
$\rho$	:	密度 [g/cm <sup>3</sup> ]
$\rho_0$	:	標準状態における流体の密度 [g/cm <sup>3</sup> ]
$\rho_{air}$	:	標準状態における空気の密度 [g/cm <sup>3</sup> ]
$\bar{\tau}$	:	応力テンソル [dyne/cm <sup>2</sup> ]
$\varepsilon$	:	乱流エネルギー散逸率 [cm <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]
$\tilde{\varepsilon}$	:	付加項を加えた乱流エネルギー散逸率 [cm <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]
$\delta_{\alpha\beta}$	:	クロネッカー記号
$\Delta t$	:	時間刻み幅 [s]
$\Delta u_{\alpha_c}$	:	連続の式が寄与する速度変化分 [cm/s]
$\Delta u_{\alpha_M}$	:	運動量の保存式が寄与する速度変化分 [cm/s]
$\phi$	:	scalar potential
$\bar{f}$	:	Reynolds 平均を用いた時の平均値
$f'$	:	Reynolds 平均を用いた時の変動量
$\tilde{f}$	:	密度加重 (Favre) 平均を用いた時の平均値
$f''$	:	密度加重平均を用いた時の変動量

## 1. 緒言

現在、化石燃料の枯渇問題をはじめとして、環境問題など多くの将来を危惧する問題が深刻化しており、特にエネルギー問題の早急な解決は非常に望まれている。その解決策のひとつとして水素燃料が注目されており、すでに水素エンジンや水素燃料電池自動車の開発が進み、水素燃料を用いた技術が実用段階まであと一步というところまできている。しかし、その一方でまだ安全性の面やインフラの整備といった点で実用化するに足る準備が整っていないのが現状である。水素燃料が注目されている大きな特徴として挙げられるのが、燃焼しても水しか生成しないクリーンな燃焼を行うことができるという点である。その反面、水素燃料は拡散係数が他の燃料に比べ大きく、着火しやすい（最小点火エネルギー0.02mJ）、さらには可燃限界濃度範囲が空気に対して4~75vol%と非常に広く、燃焼速度も速い（最大層流燃焼速度3.2m/sec）という危険な特徴も有している。もっとも水素は空気に比べ非常に軽い気体で急速に上方へ拡散するため、空気と可燃性混合気を形成する時間は短く、閉じ込めや着火さえ起こらなければ爆発の危険性は少ないと考えられるが、一旦着火するならばその威力は大きい。水素利用の普及に際して、上記の相反する2つの特性を考慮してその事故災害の危険性を総合的にどの様に評価するかは重要な課題である。しかし、大規模な実験を行うにはあまりにも費用と危険性が伴い、現在においても実験およびシミュレーションによるデータの蓄積は不十分であり、結論に導ける段階ではない<sup>[1]</sup>。

水素の爆発事故の危険性評価についてその評価方法はまだ確立されていないが、一般的な爆発の危険性評価には様々な要素があり、代表的なものは可燃範囲、火炎伝播速度、圧力波の伝播、最大圧力、最大昇圧速度等が評価のパラメータとなる。

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プログラムコードを開発し、様々な条件下での水素の拡散特性、燃焼状態、圧力波の伝播状態を予測し、危険性評価を行うためのデータを取得することが目的である。

ただし、火炎伝播と圧力波の伝播を同時に解くことは困難であるので、圧力波を無視する低Mach数近似を用いて火炎伝播を解いた結果から、火炎面をピストンとして見た場合の衝撃波の形成過程を計算することになる。本研究においては、前半の水素の拡散と火炎伝播のシミュレーションコードの開発のみを行う。

また、現在大規模スケールの計算を行うことのできる市販プログラムコードが数多く利用されているが、用いられている支配方程式およびモデル、解の収束のさせ方などそのアルゴリズムは不透明である。本研究では計算手法を明確に把握することも目的としている。