

3.7 1次元拡散の計算結果および考察

1次元層流拡散の計算結果を以下に示す。

3.7.1 水素の質量分率分布の時間変化

水素の質量分率分布の時間変化を Fig. 3.7 に示す。

水素は時間とともに大気中に左右対称に拡散している。1次元計算では、流れ方向が1方向しかないので、浮力流れ、対流等の流れ場は存在せず、速度場は常に0で拡散移動のみに支配される。時刻0.9sでは濃度差はほぼなくなり、ほぼ同一濃度に達している。

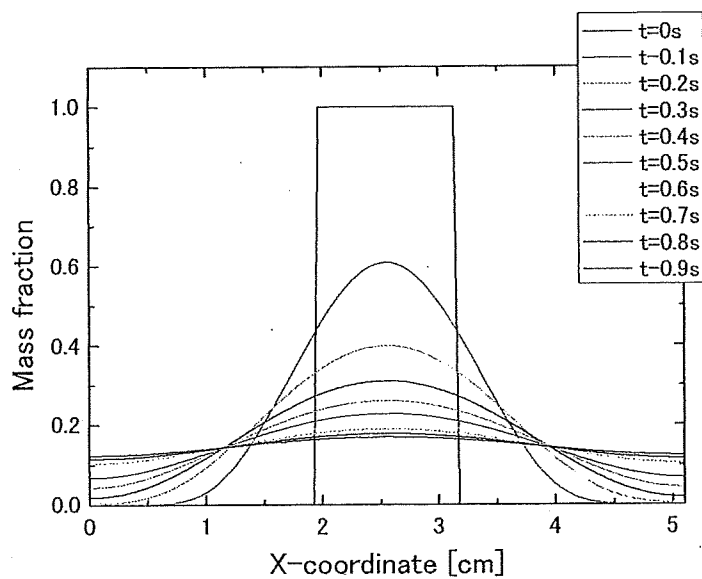


Fig. 3.7 Time history of H₂ mass fraction distribution

3.8 1次元拡散・燃焼の計算結果および考察

1次元層流拡散・燃焼の計算結果を以下に示す。

3.8.1 水素の質量分率分布の時間変化

水素の質量分率分布の時間変化を Fig. 3.8 に示す。拡散中に外部熱源により着火、燃焼に至る様子が水素質量分率の減少によりわかる。また、水素の質量分率の減少領域が徐々に広がっていることから火炎が伝播していることもわかる。水素が全て消費されず残っているのは、過濃燃料域で酸化剤である酸素がすべて消費されたからである。

3.8.2 温度分布の時間変化

温度分布の時間変化を Fig. 3.9 に示す。温度は時刻 1.0001s のときに 2.55cm 付近で最大温度をとった後、徐々に減少しながら左右対称に伝播している。これは、外部熱源により大きく温度が上昇して着火し、左右へ火炎が伝播したことを示している。また、火炎伝播速度は最大で約 25m/s である。

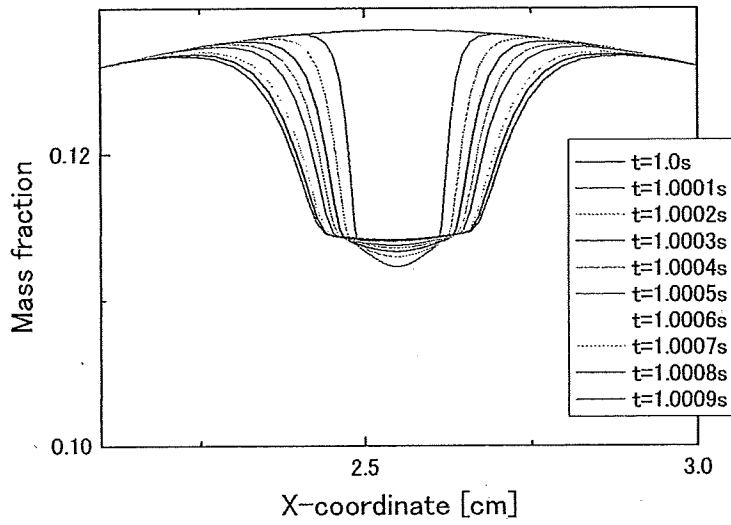


Fig. 3.8 Time history of H₂ mass fraction distribution

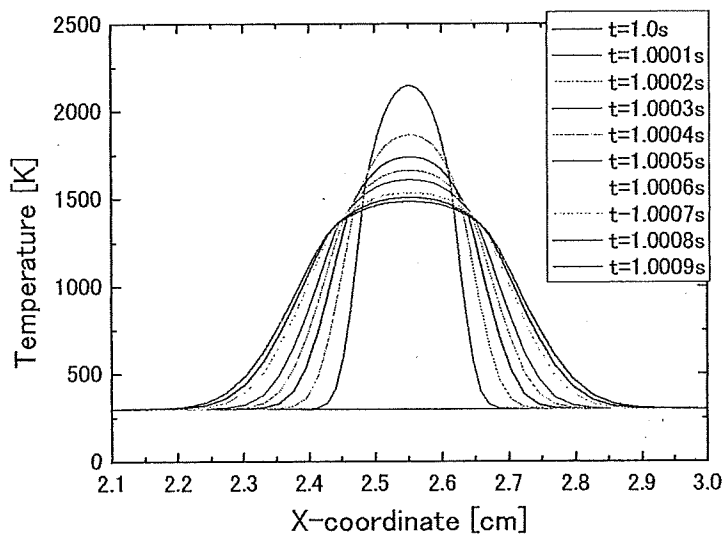


Fig. 3.9 Time history of temperature distribution

3.9 3次元拡散の計算結果および考察

3次元層流拡散の計算結果を以下に示す。計算結果は初期状態の水素塊の中心を通る X-Z 断面の値を示している。Fig. 3.10 に断面の配置を示す。

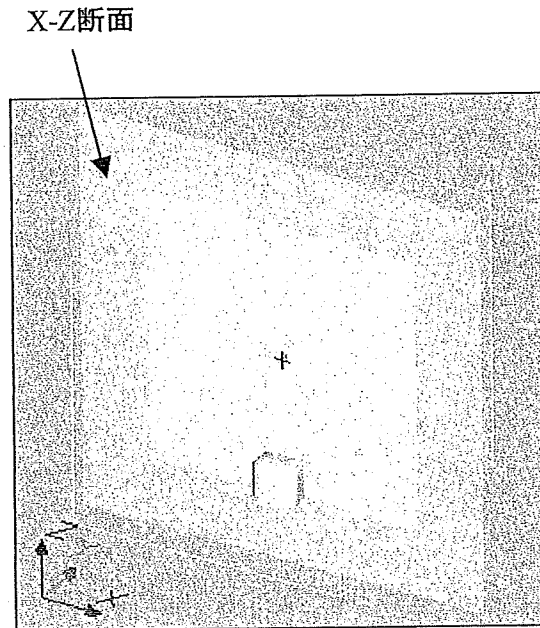


Fig. 3.10 Image of X-Z cross section of calculation region

3.9.1 水素の質量分率の時間変化

水素の質量分率分布の時間変化を Fig. 3.11 に示す。水素が時間経過とともに拡散している様子がわかる。水素は密度が小さいため浮力が働くが、鉛直上方向への拡散はそれほど顕著ではなく、ほぼ同心円状に広がっている。これは水素貯蔵量が少なく、浮力の影響が大きくなる前に水平方向へ拡散が進み、水素の濃度が薄くなったためであると考えられる。水素は、最も軽い気体であると同時に非常に拡散係数の大きい気体で、空気と比べても約4倍の拡散係数をもっているため、水平方向への拡散が速い。

3.9.2 速度場の時間変化

速度場の時間変化を Fig. 3.12 に示す。水素の浮力により流体は鉛直上方へ加速されている。しかし、水素の水平方向への速い拡散により浮力項があまり効かないため、鉛直上方向への速度は最大速度で 1.05cm/s と非常に小さい。しかし、周りの空気は水素が上方の上昇流れにより粘性効果で引っ張られ、対流を起こしている。

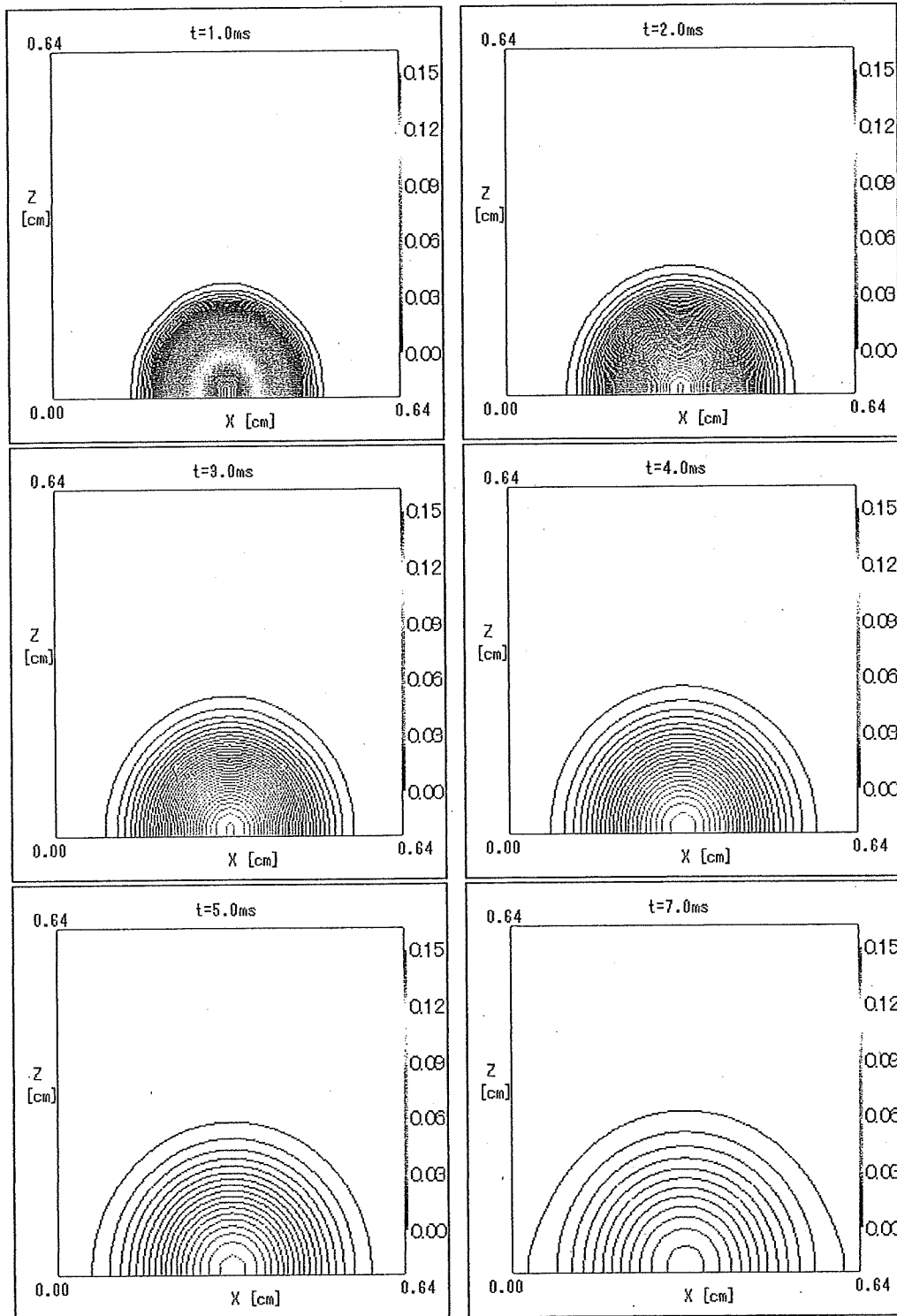


Fig. 3.11 Time history of H_2 mass fraction distribution

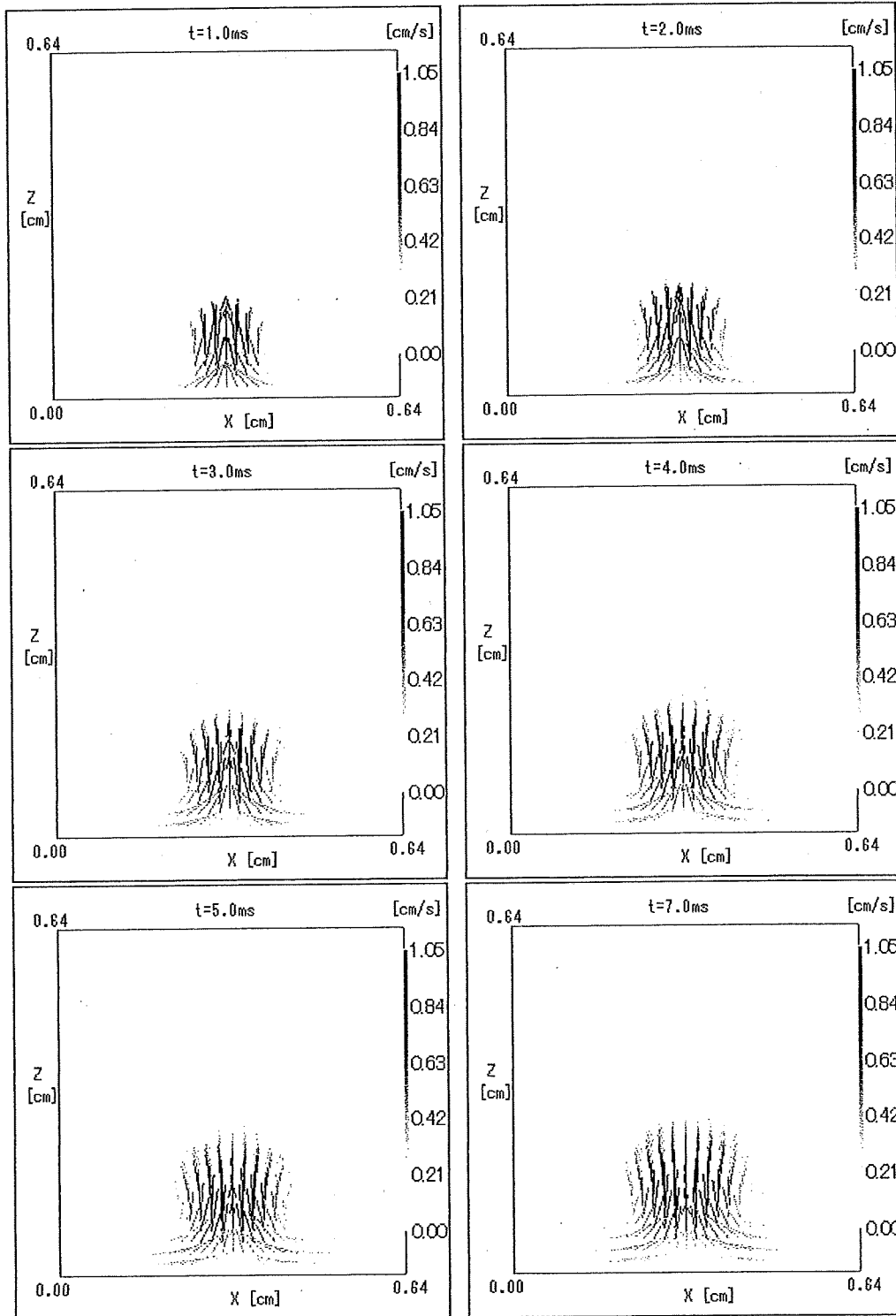


Fig. 3.12 Time history of velocity distribution

3.10 3次元拡散・燃焼の計算結果および考察

3次元層流拡散・燃焼の計算結果を以下に示す。

3.10.1 水素の質量分率の時間変化

水素の質量分率分布の時間変化を Fig. 3.13 に示す。水素が拡散を開始してから 0.4ms 後に着火を開始した。着火は一定時間、一定のエネルギーを与えて着火させた。外部熱源を配置した部分から徐々に水素の濃度が減少し始め、時間とともにその範囲は半球状に広がっている。燃焼の特性時間はおおよそ 1~10ns で拡散の特性時間に比べ非常に短いため、浮力の効果はほとんどなく、水素の拡散が大きく進む前に燃焼が終了している。時刻 0.49ms 時では下限可燃限界以下になり燃え残った水素が残っている。

3.10.2 速度場の時間変化

速度場の分布の時間変化を Fig. 3.14 に示す。熱源配置直後は急激な温度上昇により混合気体が上方へ加速され、その後、着火し、火炎伝播とともに速度の大きい領域が広がっているのがわかる。これは燃焼した混合気体が膨張したためである。燃焼後も気体が加速されているのは、燃料過濃により燃焼後も残った水素に浮力が働いているためと温度上昇にともなう浮力の効果のためである。

3.10.3 温度分布の時間変化

温度分布の時間変化を Fig. 3.15, Fig. 3.16 に示す。Fig. 3.16 は着火点を通る $Y=Z=0.16\text{cm}$ の X 軸に沿った温度分布の時間変化である。着火開始直後は外部熱源を配置した部分が著しく温度上昇をはじめ、時間とともに水平方向、鉛直方向の違いはほとんどなくほぼ同心円状に高温域が拡大している。これは着火により混合気体は燃焼をはじめ伝播していることを示している。可燃範囲にある混合気体をすべて燃焼し尽くした後は熱伝導により徐々に温度が減少している。

Fig. 3.16 から火炎伝播速度は最大で約 20m/s となっていることがわかる。

また、時刻 0.42ms までは燃焼ガスの温度はほぼ一定であるが、時刻 0.43ms 以降火炎を通り過ぎた燃焼ガスの温度が高くなっていることがわかる。これは水素塊中心から離れていくに従って当量比に近い混合気体が形成されているためであり、濃度差のある燃料の燃焼をうまく表現できている。

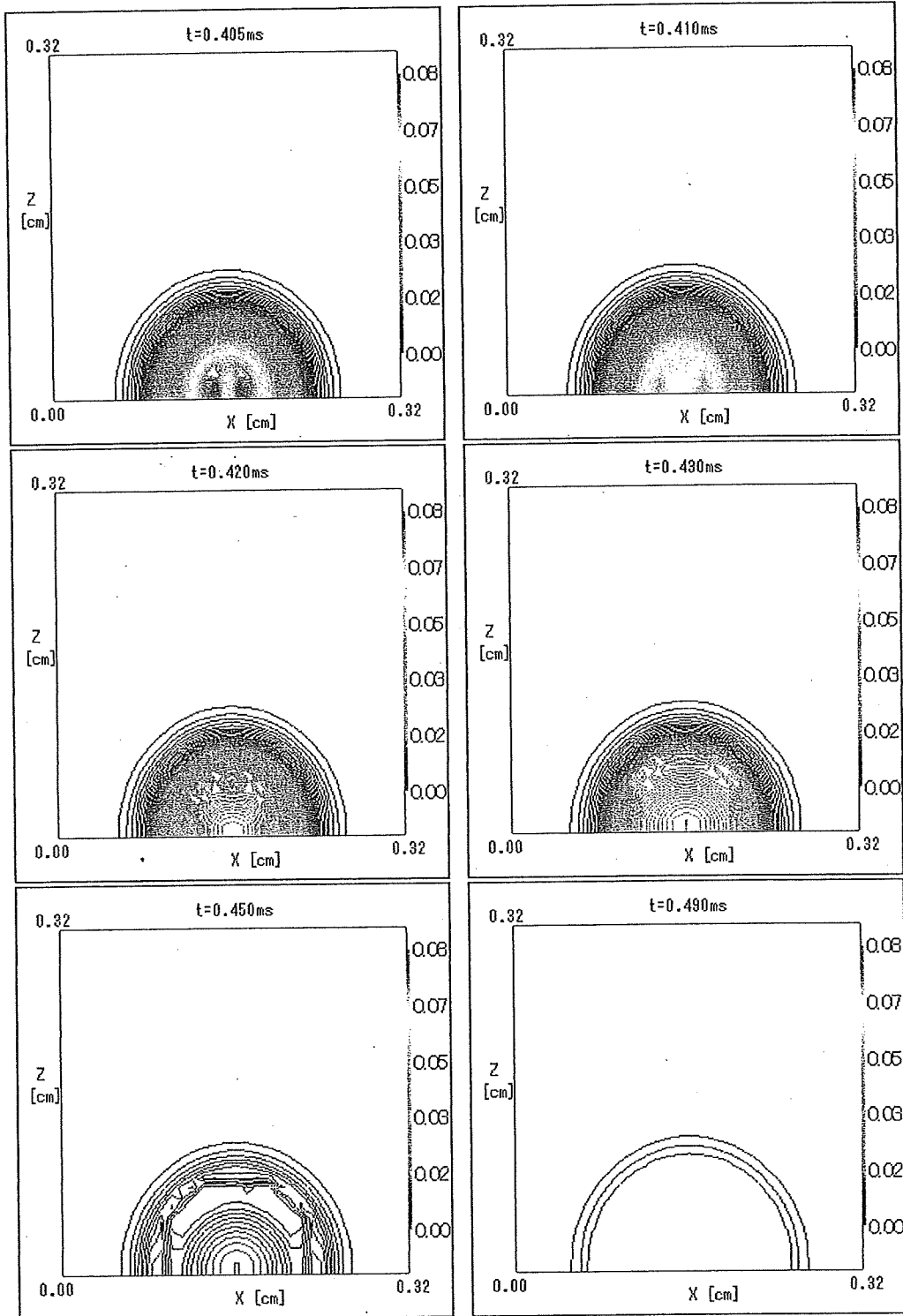


Fig. 3.13 Time history of H₂ mass fraction distribution

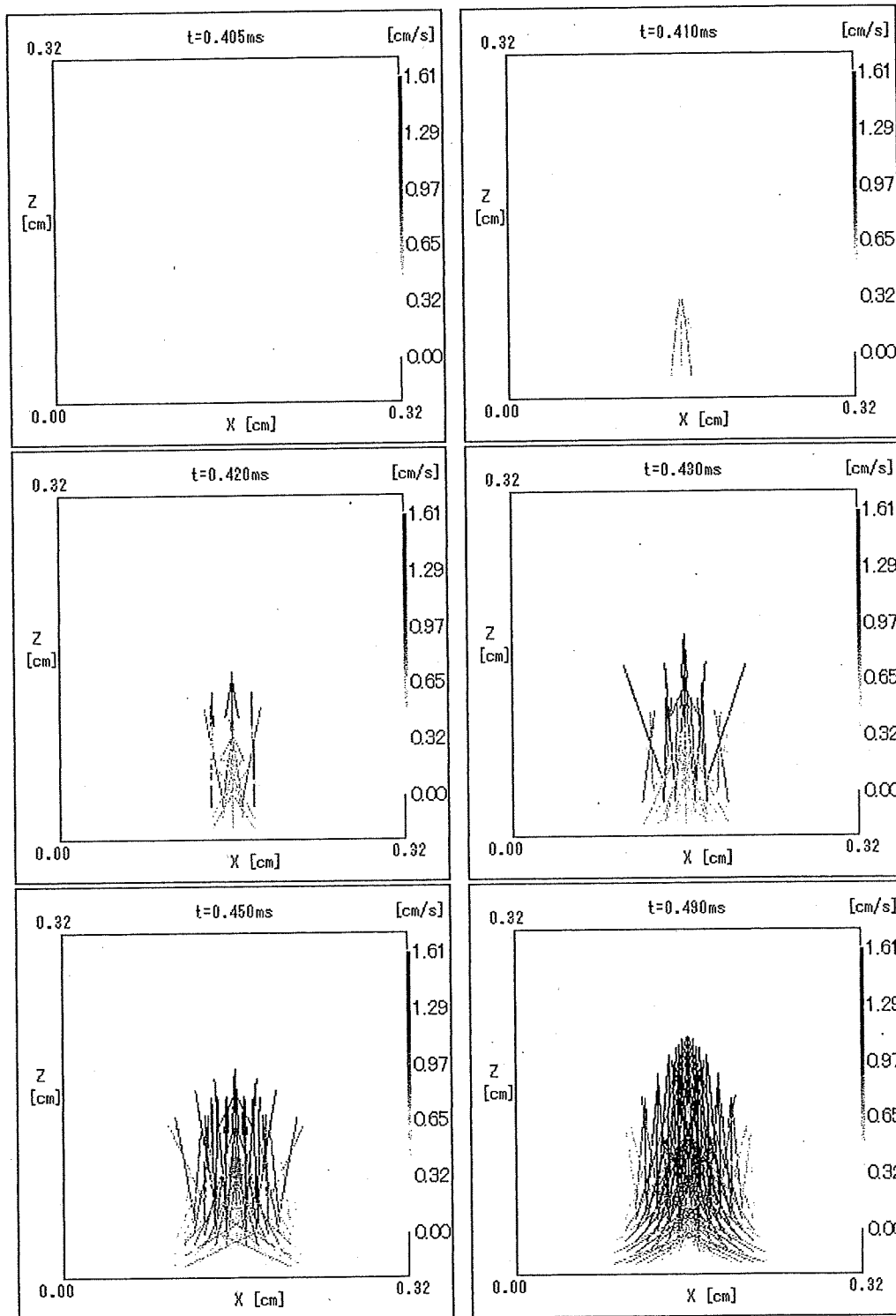


Fig. 3.14 Time history of velocity distribution

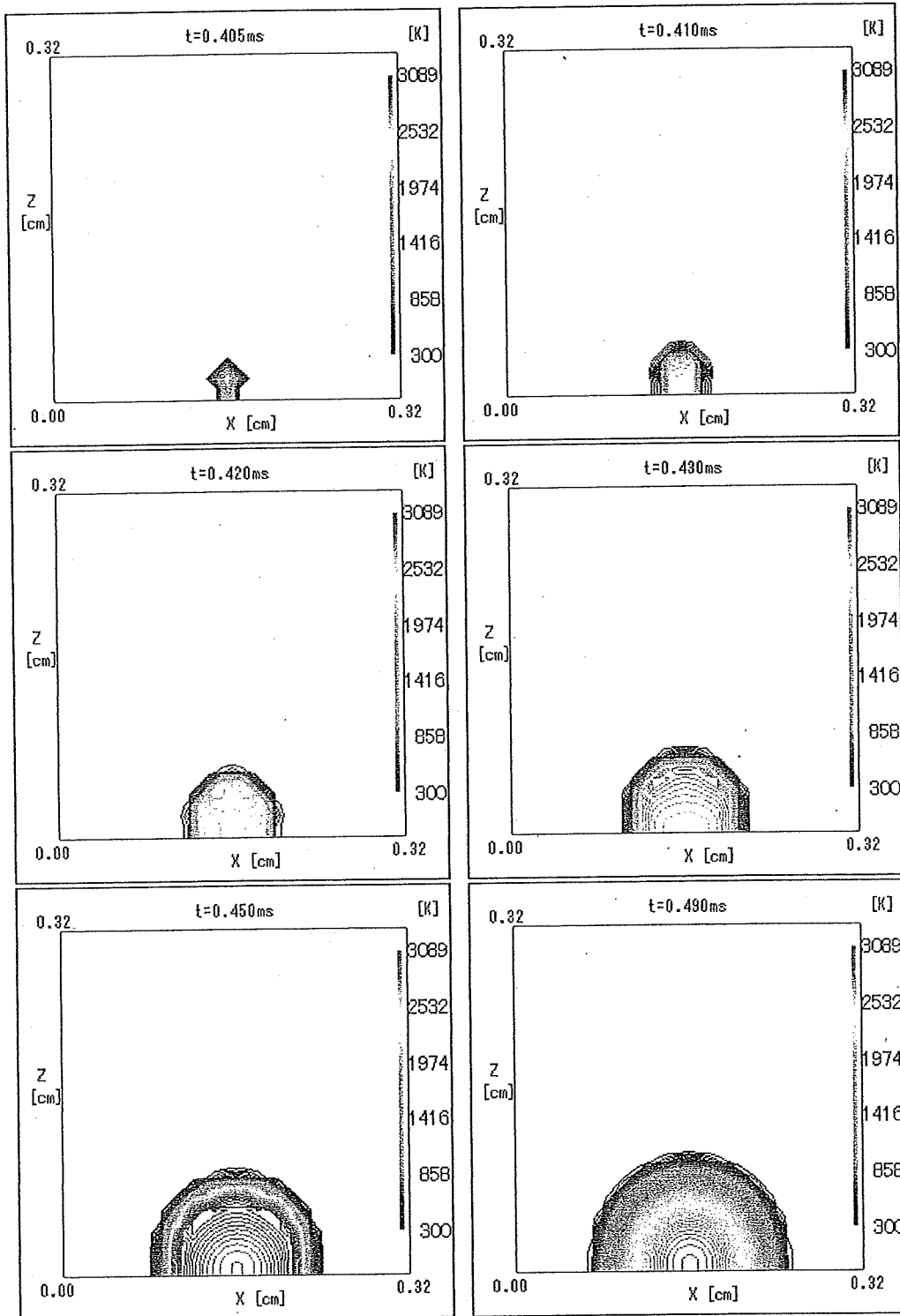


Fig. 3.15 Time history of temperature distribution

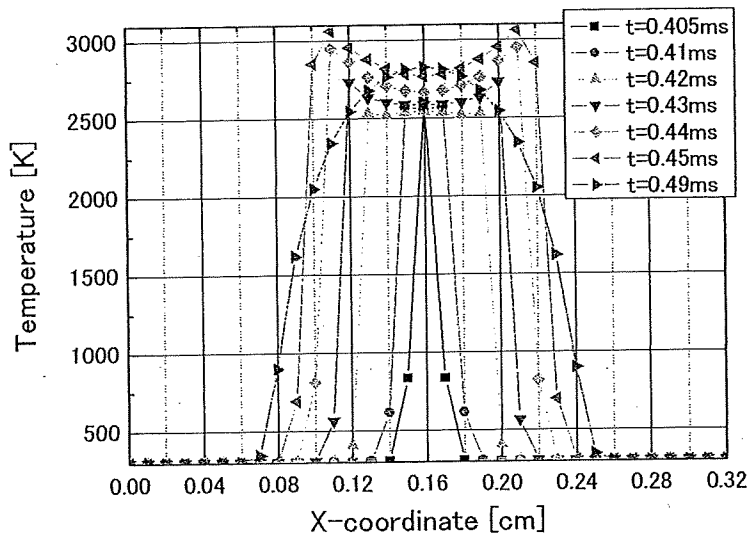


Fig. 3.16 Time history of temperature distribution along X-coordinate

3.11 まとめ

以下に層流拡散および拡散・燃焼計算のまとめを示す。

1 次元層流拡散・燃焼計算

- ・ 1次元の層流拡散・燃焼の計算コードを開発した。
- ・ 水素塊が大気中に拡散し、その後外部熱源により着火させ燃焼する現象をシミュレーションすることができた。

3 次元層流拡散・燃焼計算

- ・ 3次元の層流拡散・燃焼の計算コードを開発した。
- ・ Δ 型陰解法を導入することで高い精度で非定常問題を解くことができた。
- ・ 水素の浮力を考慮した拡散計算を行うことができた。
- ・ 外部熱源により着火から燃焼までの過程をシミュレーションすることができた。
- ・ 爆発現象を含む燃焼現象においてほとんどの現象は乱流現象であるため、乱流の効果を入れた計算を行う必要がある。
- ・ 層流では計算領域が微小であるため、大規模スケールの計算を行うためには莫大な時間と計算負荷がかかり、高速解法を導入する必要がある。

4. 乱流拡散・燃焼計算コードの開発

本研究で行った乱流拡散・燃焼計算コードは以下のような条件のもとで構築された。

4.1 乱流について

4.1.1 乱流とは

層流の運動量，熱，物質の輸送拡散は一般に分子運動に基づく流れである。しかし，自然界，産業界を通じて多くの現象は乱流に関わる現象である。本研究で対象としている大気中での水素の拡散，燃焼現象もまた乱流に関わる現象であり，乱流の性質を考慮することは数値解析による予測には不可欠なものである。

また，層流解析で扱える計算領域は分子運動の挙動を正しく捉えることができるごく微小な領域に限られ，大規模なスケールの計算を行うには非常に計算負荷がかかる。そこで乱流の効果を考慮することで層流の場合に比べて比較的大きな計算領域を扱うことができる。

一般に乱流は流体が不規則に乱れて運動する状態をいう。これは，流体運動において，粘性による減速効果よりも慣性力が上回り，流体の塊がいわば自由勝手に動き，それが乱れて見えることによる。

4.1.2 Reynolds 分解と Favre 平均

乱流中の速度や温度を測ると，時間的に変動する分布が得られる。乱流現象において多くの場合，あらゆる位置と時間での物理量に関する情報は必要とされず，またそのような情報は得にくい。乱流の性質を考えると，統計的な性質を知ることにより有用性があり，多くの工学的な問題では，平均値を求めることで目的が達せられるため，平均値と変動成分に分けて乱流を記述することが便利である。このような分解を Reynolds 分解という^[3]。

そこで，平均値を定義する必要がある。本研究では，流れ場は時間において非定常であり，空間において非一様であるため，以下のように定義する。

$$\bar{f}(\mathbf{x}, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^N f(\mathbf{x}, t) \quad (4.1)$$

(4.1) より Reynolds 分解を用いて，ある物理量 f を平均値 \bar{f} と乱れ f' として以下のように表す。

$$f = \bar{f} + f' \quad (4.2)$$

(4.2) の操作を支配方程式に施すと、変動量の相関項、特に密度変動に関する相関項が多く現れる。しかし、密度変動に関する相関項は定量的なモデル化が厄介であり、保存式中の項の数が増加してしまう。そこで、密度加重 (Favre) 平均を用いる。

Favre 平均は次のようになる。

$$\rho = \bar{\rho} + \rho'$$

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} \quad (4.3)$$

ここで、密度加重平均値を \tilde{f} 、それからの変動量を f'' とする。

この操作により密度変動に関する相関項はなくなる。

4.2 乱流拡散・燃焼場の支配方程式

仮定として以下の条件を用いた^[3]。

- 3章の層流拡散・燃焼の支配方程式と同様の仮定を用いる。
- エネルギーの保存式において乱流温度散逸項 $\frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\lambda \frac{\partial T''}{\partial x_\beta} \right)$ を無視する。
- 化学種の保存式において乱流物質散逸項 $\frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k''}{\partial x_\beta} \right)$ を無視する。
- 状態方程式において温度・濃度相関項 $R_0 \sum_{k=1}^4 \left(\frac{\rho T'' Y_k''}{W_k} \right)$ を無視する。

以上の仮定より、支配方程式は次のようになる。

ただし、式は Favre 平均を用いた。

- 連続の式

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_\alpha)}{\partial x_\alpha} = 0 \quad (4.4)$$

- ・ 運動量の保存式

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_\beta \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\overline{\tau_{\alpha\beta}} - \overline{\rho u_\alpha^n u_\beta^n} \right) + \bar{F}_\alpha \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (4.5)$$

- ・ エネルギー保存式

$$\bar{\rho} c_p \frac{\partial \tilde{T}}{\partial t} + \bar{\rho} c_p \tilde{u}_\beta \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_\beta} = \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_\beta} - \overline{\rho u_\beta^n T^n} \right) - \sum_{k=1}^4 h_k \bar{w}_k + \bar{Q} \quad (4.6)$$

- ・ 化学種の保存式

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_\beta \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_\beta} = \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\bar{\rho} D_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_\beta} - \overline{\rho u_\beta^n Y_k^n} \right) + \bar{w}_k \quad (k = 1, 2, 3, 4) \quad (4.7)$$

- ・ 状態方程式

$$\bar{p} = \bar{\rho} R^0 \tilde{T} \sum_{k=1}^4 \frac{\tilde{Y}_k}{W_k} \quad (4.8)$$

- ・ せん断応力

$$\overline{\tau_{\alpha\beta}} = \mu \left(\frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \tilde{u}_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\gamma}{\partial x_\gamma} \right) \quad (4.9)$$

- ・ 体積力

$$\bar{F}_\alpha = \left\{ \bar{\rho}_{air} - \left(\bar{\rho}_0 + \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \tilde{T}} (\tilde{T} - \tilde{T}_0) \right) \right\} g_\alpha \quad (4.10)$$

4.3 乱流モデル

4.2 節により導出された乱流の支配方程式には層流の支配方程式に対して新たな項が付加される。Reynolds 応力 $-\overline{\rho u_\alpha'' u_\beta''}$ ，乱流温度拡散流束 $-\overline{\rho u_\beta'' T''}$ ，乱流濃度拡散流束 $-\overline{\rho u_\beta'' Y_k''}$ である。

これらの項は未知数であり，これらを何らかの形で解き，方程式を閉じさせる必要がある。これまでの研究の成果によって多くのモデルが提案されているが，それらはおおよそ3つのグループに分類することができる。第一は付加項を渦粘性を用いた構成方程式から求める方法，第二は Reynolds 応力を始めとする新たな未知数自身の輸送方程式を解いて直接求める方法，第三は Reynolds 分解の代わりに波数によって乱れ成分を分別し，乱れの高波数成分をモデル化して低波数成分については忠実に数値解を得るラージ・エディ・シミュレーション (LES) である。第一，二のモデルは RANS モデル (Reynolds-averaged Navier-Stokes equation model) と呼ばれる。

本研究では，未知数の数が少なく計算負荷の小さい第一のモデルに分類される $k-\varepsilon$ 2 方程式モデルを用いて計算を行った。

次に $k-\varepsilon$ 2 方程式モデルについて述べる。 $k-\varepsilon$ 2 方程式モデルは，乱流エネルギー k ，乱流エネルギー散逸率 ε の2つの輸送方程式を導入することによって，乱れの運動エネルギーと代表長にもとづく渦粘性を求めるものである。 k と ε の輸送方程式は以下のものである。なお，導出にあたって次の仮定を用いた。

- 圧力作用項 $-\overline{u_\beta'' \frac{\partial p}{\partial x_\beta}}$ は確立されたモデルがないため，無視する。

- 乱流粘性係数

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\varepsilon} \quad (4.10)$$

- Reynolds 応力

$$-\overline{\rho u_\alpha'' u_\beta''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \tilde{u}_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\gamma}{\partial x_\gamma} \right) - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \bar{\rho} \tilde{k} \quad (4.11)$$

- ・ 乱流温度勾配流束

$$-\overline{\rho u_\beta'' T''} = \frac{\mu_t}{\sigma_T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_\beta} \quad (4.12)$$

- ・ 乱流濃度勾配流束

$$-\overline{\rho u_\beta'' Y_k''} = \frac{\mu_t}{\sigma_Y} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_\beta} \quad (4.13)$$

- ・ 乱流エネルギー k の輸送方程式

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial t} + \overline{\rho u_\beta} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_\beta} = \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_\beta} - \overline{\rho u_\alpha'' u_\beta''} \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta} - \bar{\rho} \varepsilon \quad (4.14)$$

- ・ 乱流エネルギー散逸率 ε の輸送方程式

$$\bar{\rho} \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \overline{\rho u_\beta} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_\beta} = \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_\beta} - \frac{\varepsilon}{\tilde{k}} \left(C_1 \overline{\rho u_\alpha'' u_\beta''} \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta} + C_2 \bar{\rho} \varepsilon \right) \quad (4.15)$$

$$C_\mu = 0.09, C_1 = 1.44, C_2 = 1.92, \sigma_T = 0.7, \sigma_Y = 0.7, \sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3 \quad (4.16)$$

4.4 低 Reynolds 数補正

4.3 節で示した乱流モデルは標準 $k-\varepsilon$ 2 方程式モデルである。このモデルは十分発達した等方性乱流を前提としており壁近傍や低 Reynolds 数乱流に対して必ずしも正しい解を与えることができるとはいえない。そこで、本研究では方程式の各項にモデル関数を導入し、低 Reynolds 数効果を正しく考慮した低 Reynolds 数補正を行った。この補正には様々なモデルが存在するが、本研究では Jones-Launder のモデルを用いた。以下にモデルを示す。なお、 ε の代わりに $\tilde{\varepsilon}$ を用いて数値的安定性を向上させた。

・ 乱流粘性係数

$$\mu_t = C_\mu f_\mu \bar{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \quad (4.17)$$

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon - 2\nu \left(\frac{\partial \sqrt{\tilde{k}}}{\partial z} \right)^2 \quad (4.18)$$

$$C_\mu = 0.09, f_\mu = \exp \left(-\frac{2.5}{1 + \frac{R_t}{50}} \right), R_t = \frac{\tilde{k}^2}{\nu \tilde{\varepsilon}}, \nu = \frac{\mu}{\rho} \quad (4.19)$$

f_μ は減衰関数で、壁近傍での乱流粘性係数の過大評価をおさえ、分子粘性の直接的効果を擬似するために導入される。 R_t , ν はそれぞれ乱流 Reynolds 数, 動粘性係数である。また、乱流エネルギー散逸率 ε に付加された $-2\nu \left(\frac{\partial \sqrt{\tilde{k}}}{\partial z} \right)^2$ は、 ε の境界条件における数値安定性を向上させるための項で、 $\tilde{\varepsilon}$ を用いることで壁面境界条件を $\tilde{\varepsilon} = 0$ とすることができる。

・ 乱流エネルギー k の輸送方程式

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{k}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_\beta \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_\beta} = \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_\beta} - \overline{\rho u_\alpha'' u_\beta''} \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta} - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} - 2\bar{\rho} \nu \left(\frac{\partial \sqrt{\tilde{k}}}{\partial z} \right)^2 \quad (4.20)$$

$$\sigma_k = 1.0 \quad (4.21)$$

右辺第 4 項に付加項 $-2\bar{\rho} \nu \left(\frac{\partial \sqrt{\tilde{k}}}{\partial z} \right)^2$ が新たに加えられる。

この項は $\tilde{\varepsilon}$ を用いたことにより現れる項である。

・ 乱流エネルギー散逸率 ε の輸送方程式

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \overline{\rho u}_\beta \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_\beta} &= \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_\beta} \\ &- \frac{\tilde{\varepsilon}}{\bar{k}} \left(C_1 f_1 \overline{\rho u''_\alpha u''_\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta} + C_2 f_2 \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} \right) + 2 \bar{\rho} \nu \nu_t \left(\frac{\partial^2 \tilde{u}_\alpha}{\partial z^2} \right)^2 \end{aligned} \quad (4.22)$$

$$C_1 = 1.45, C_2 = 2.0, \sigma_\varepsilon = 1.3, f_1 = 1.0, f_2 = -0.3 \exp(-R_t^2), \nu_t = \frac{\mu_t}{\rho} \quad (4.23)$$

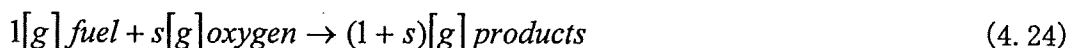
付加項 $2\bar{\rho}\nu\nu_t\left(\frac{\partial^2\tilde{u}_\alpha}{\partial z^2}\right)^2$ は壁近傍の予測性能を上げるために導入される。一般に付加項は粘性

低層では消えてなくなり、対数領域では z^{-4} で減少することが示されている。物理的な意味をもつものではないが、壁近傍における ε の挙動を精度よく再現するために必要な項である。 f_1 は一般に 1.0 が広く用いられ、 f_2 は低 Reynolds 数効果を取り入れるために導入される関数である。 ν_t は乱流動粘性係数である。

4.5 乱流燃焼モデル

本研究は、乱れの小さい流れ場であるため、着火の際、層流燃焼も扱うことのできるモデルが必要である。従って、乱流域でも、層流域でも扱うことのできる渦崩壊モデル^[13]を用いた。渦崩壊モデルを以下に示す。

水素の燃焼は層流と同様、総括一段不可逆反応とする。



乱流反応速度は燃料、酸化剤、燃焼ガスの渦塊が崩壊してゆく過程でもっとも少ない量に支配されるとして、以下のようなになる。

$$\begin{aligned}
\overline{\dot{w}_{H_2}} &= -\omega, \overline{\dot{w}_{O_2}} = -s\omega, \overline{\dot{w}_{H_2O}} = (1+s)\omega, \omega = \max(\omega_T, \omega_L) \\
\omega_T &= 23.6 \left(\frac{\mu \tilde{\varepsilon}}{\rho \tilde{k}^2} \right)^{\frac{1}{4}} \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \min \left(Y_{fuel}, \frac{Y_{O_2}}{s}, \frac{Y_{product}}{1+s} \right) \\
\omega_L &= \frac{\bar{\rho} W_{fuel} \left(S_L + 0.88 FK^{-0.3} (2\tilde{k})^{0.5} \right)}{d} \min \left(Y_{fuel}, \frac{Y_{O_2}}{s} \right) \\
K &= 0.157 \frac{2\tilde{k}}{S_L^2} \left(\frac{\mu}{\mu_t} \right)^{0.5} \\
W_{fuel} &= 2.0, F = 1.0, d = 0.125
\end{aligned} \tag{4.25}$$

S_L は層流燃焼速度, W_{fuel} は火炎厚さを表すパラメータ, F は速度補正に関するパラメータ,

K は Karlovitz の伸張度である. ω_T は乱流による燃焼速度, ω_L は層流による燃焼速度で値の大きい方を用いる.

S_L は当量比 ϕ により決定され, 最大層流燃焼速度を与える ϕ_m , 希薄燃焼限界 ϕ_l , 過濃燃焼限界 ϕ_r から以下の式で計算する.

$$\begin{aligned}
S_L &= \frac{(\chi - \chi_r)(\chi - \chi_l)}{(1 - \chi_r)(1 - \chi_l)} S_{L,max} \\
\chi &= \frac{\phi}{\phi_m}, \chi_r = \frac{\phi_r}{\phi_m}, \chi_l = \frac{\phi_l}{\phi_m}
\end{aligned} \tag{4.26}$$

4.6 数値計算法

数値計算法は 3.3 節の層流の数値計算法と同様である.

ただし, 対流項に関しては Roache の 1 次精度の風上差分法を, 化学反応項は陽的差分を用いた.

4.6.1 Roache の風上差分

Roache の風上差分は次のようである.

Roache の風上差分

$$\rho u \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_i = \rho_i u_i \frac{f_{i+1/2} - f_{i-1/2}}{\Delta x_i} + \frac{1}{2} \text{abs}(u_i) \Delta x_i \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \Big|_i \tag{4.27}$$