

右辺第 2 項の 2 階微分項は 2 次精度の中心差分を用いる。  
全体としての空間に関する精度は 1 次精度になる。

#### 4.7 境界条件

境界条件は 3.4 節の層流の境界条件と同様である。  
さらに乱流エネルギーおよび乱流エネルギー散逸率の境界条件は次のようになる。

- 地面の境界条件

$$\begin{aligned}\tilde{k}\Big|_{wall} &= 0 \\ \tilde{\varepsilon}\Big|_{wall} &= 0\end{aligned}\tag{4.28}$$

- 開放空間の境界条件

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{k}}{\partial n}\Big|_{bound} &= 0 \\ \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial n}\Big|_{bound} &= 0\end{aligned}\tag{4.29}$$

#### 4.8 計算条件

3 次元乱流拡散，拡散・燃焼計算の計算条件を Table 4.1 に示す。計算格子に関しては不等間隔格子を用い，地面近傍で十分に細かい格子を用いて地面近傍の大きな速度勾配を捉えられるようにした。計算格子を Fig. 4.1 に示す。

Table 4.1 Calculation conditions

	拡散	拡散・燃焼
格子点数	33点×33点×33点	33点×33点×33点
計算領域	3.2cm×3.2cm×2.895cm	3.2cm×3.2cm×2.895cm
水素貯蔵領域	0.5cm×0.5cm×0.5cm	0.5cm×0.5cm×0.5cm
水素貯蔵量	10.237 $\mu$ g	10.237 $\mu$ g
格子幅	0.01~0.1cm	0.01~0.1cm
時間刻み幅	0.5~1.0 $\mu$ s	10.0~50.0ns
着火時刻		0.035s (着火位置は x=y=1.6cm, z=0.195cm)
着火エネルギー		$3.0 \times 10^{11}$ erg/cm <sup>3</sup> ·s
着火時間		20.0 $\mu$ s

乱流エネルギー，乱流エネルギー散逸率の初期条件は壁面上で  $\tilde{k} = 0$  [cm<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>]，

$\tilde{\varepsilon} = 0$  [cm<sup>2</sup>/s<sup>3</sup>]とした。

開放空間では乱れは一様で小さいものと考え， $\tilde{k} = 20$  [cm<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>]， $\tilde{\varepsilon} = \frac{\tilde{k}^{1.5}}{l}$  [cm<sup>2</sup>/s<sup>3</sup>]，

$l = 3.2$  [cm]とした。

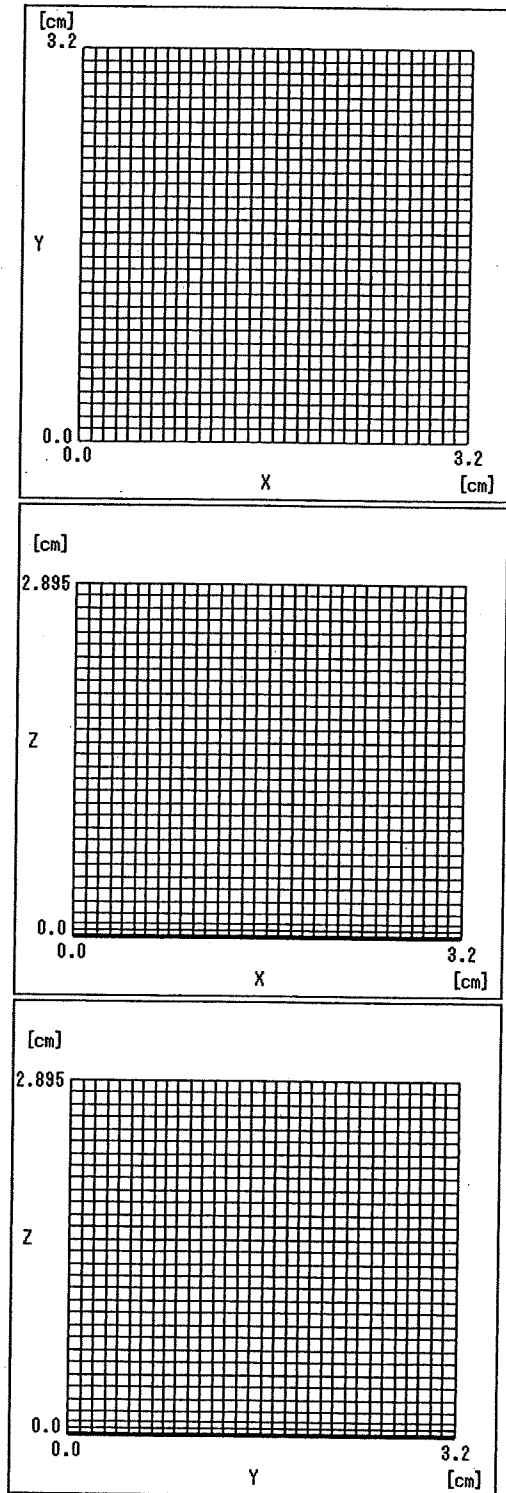


Fig. 4.1 Calculation grid

## 4.9 拡散の計算結果および考察

3次元乱流拡散計算の結果を以下に示す。

### 4.9.1 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. 4.2 に示す。水素は時間経過とともに上下左右軸対称に拡散している。層流拡散の計算 (Fig. 3.11) に比べて鉛直上方向への拡散が顕著で浮力の効果が表れている。水素は水平方向への拡散も非常に速いため、上方へ移動しながらも徐々に水平方向に可燃範囲を広げている。

### 4.9.2 速度分布の時間変化

速度分布の時間変化を Fig. 4.3 に示す。速度場は時間とともに浮力の影響で急速に鉛直上方向へ加速している。拡散開始まもなくは水素塊の濃度は濃く、塊中心付近から急激に加速が進み、加速域は徐々に塊全体に広がる。ある程度時間が経過すると拡散により濃度は薄くなり、速度変化は小さくなって全体的に鉛直上方向へ移流拡散する。周囲の空気はその流れに引っ張られるように対流を起こしている。

### 4.9.3 乱流エネルギー分布の時間変化

乱流エネルギー分布の時間変化を Fig. 4.4 に示す。乱流エネルギーは水素塊と空気の鉛直上方向の上部境付近で大きく増加している。増加の主な要因は、浮力により加速した水素塊と空気との境で大きな速度勾配が表れたからである。時間とともに乱流エネルギーは水素塊に押されるようにおわん型に拡散し、徐々に広がっている。地面境界付近では、地面に近づくにつれ乱れが弱くなっており、薄い層のようにになっている。特に水素塊内部の地面境界は時間とともに層が厚くなっている。

### 4.9.4 乱流エネルギー散逸率分布の時間変化

乱流エネルギー散逸率分布の時間変化を Fig. 4.5 に示す。散逸率も乱流エネルギーと同様に水素塊と空気の境界の速度勾配が大きい部分で増加している。しかし、乱流エネルギーは水素塊上部付近で増加、拡散しているのに比べ、散逸率はやや下部で最大値をとり拡散もほぼ球状に拡散し、水素塊内部全体的に散逸率が増加している。その後、時刻 25ms あたりから水素内部では徐々に厚くなっている乱流エネルギーの層に押し上げられるように乱流エネルギー散逸率の大きな領域がおわん型の分布に変化している。

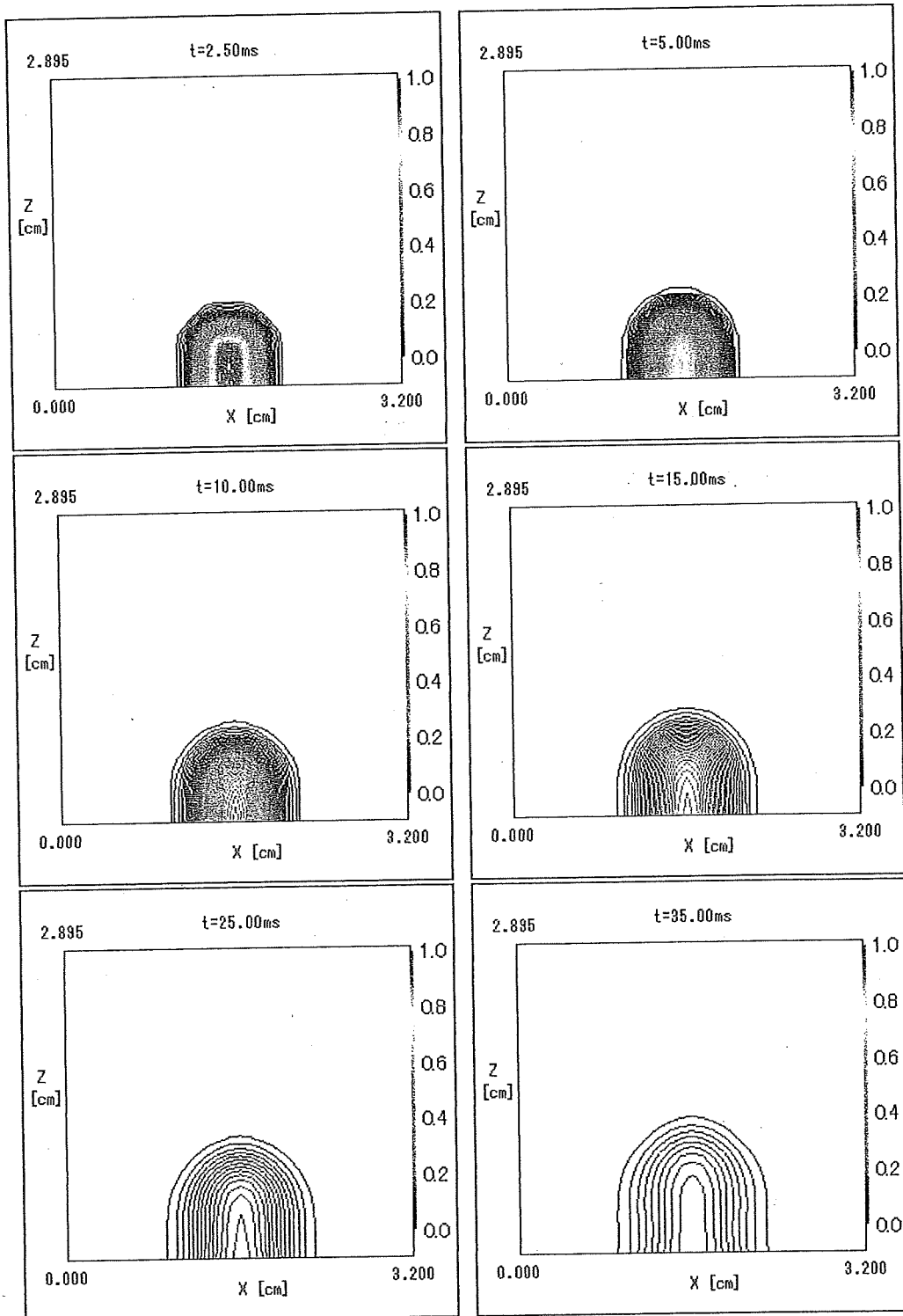


Fig. 4.2 Time history of H<sub>2</sub> mass fraction distribution

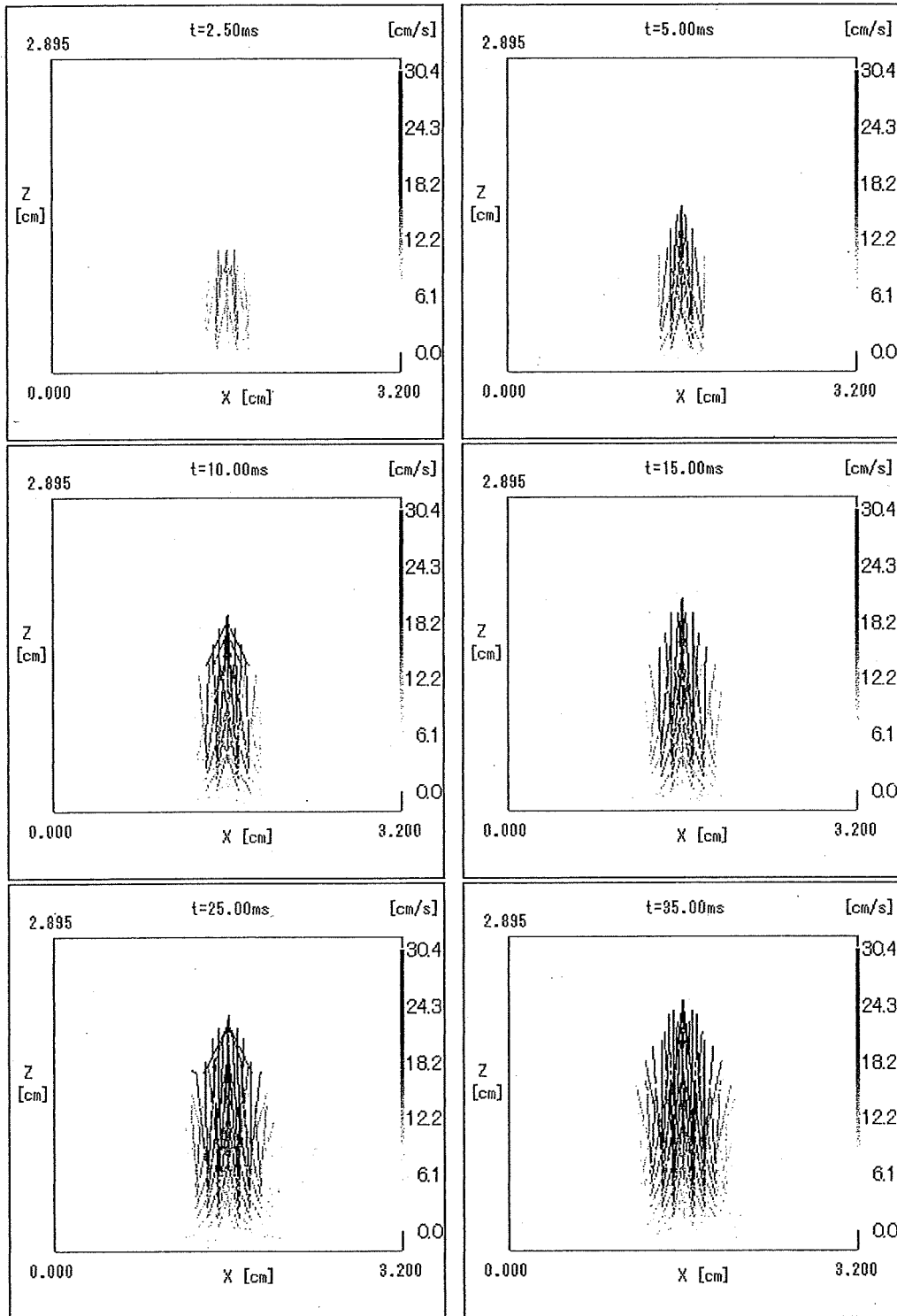


Fig. 4.3 Time history of velocity distribution

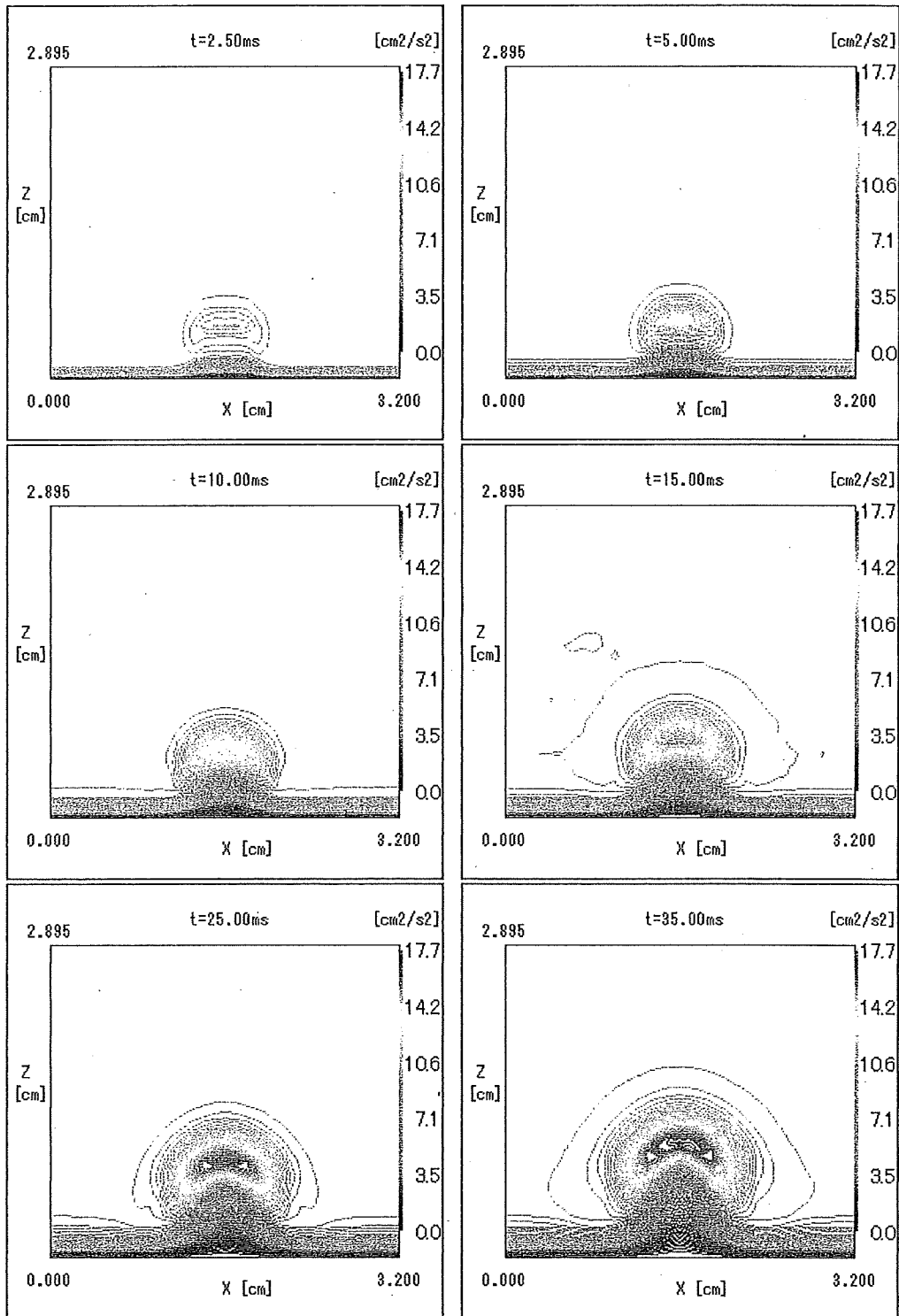


Fig. 4.4 Time history of turbulent energy distribution

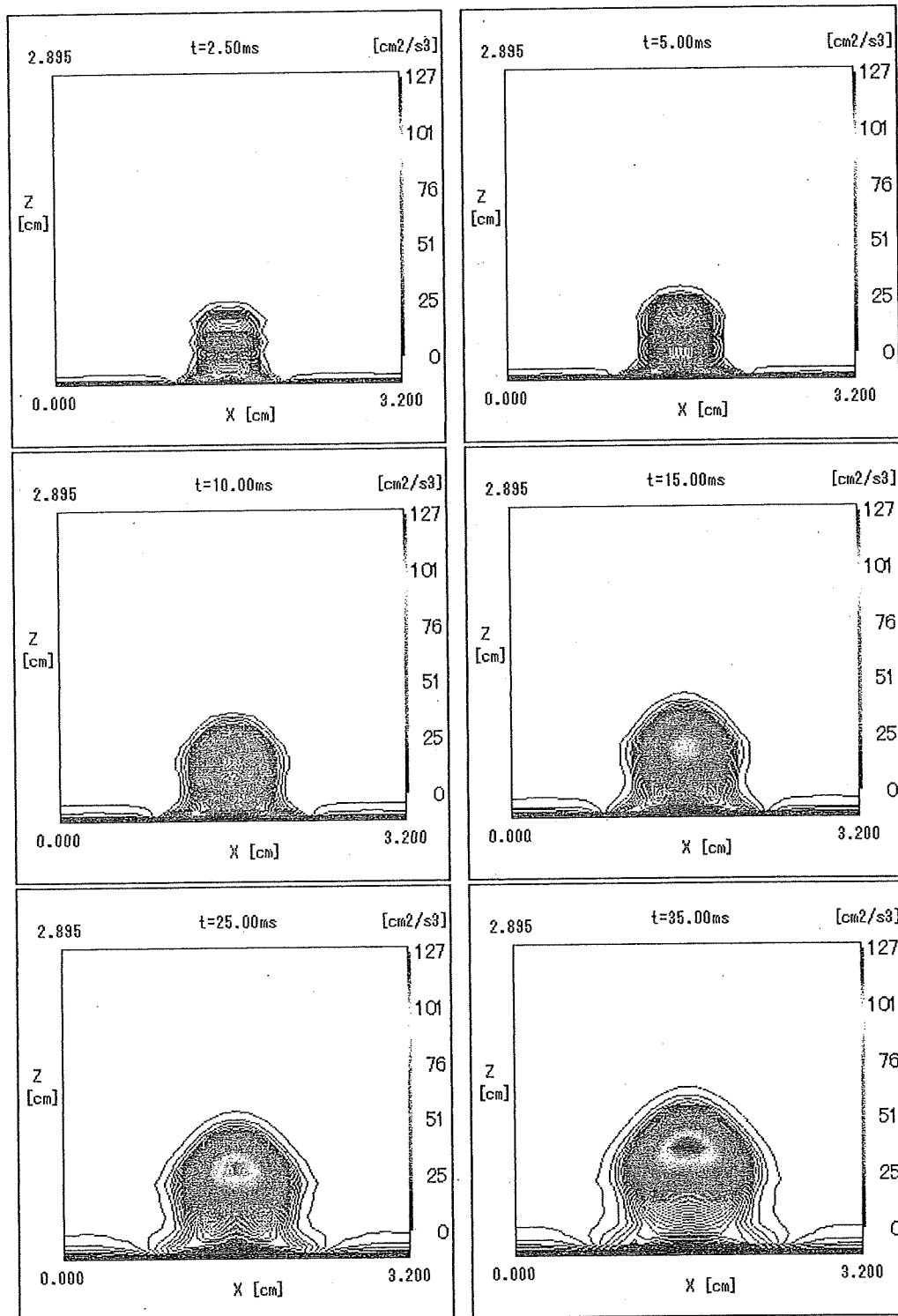


Fig. 4.5 Time history of turbulent energy dissipation rate distribution



#### 4.10 拡散・燃焼の計算結果および考察

3次元乱流拡散・燃焼計算の結果を以下に示す。

##### 4.10.1 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. 4.6 に示す。時間とともに水素塊の中心付近から水素が減少しているのがわかる。また、水素の減少している領域が徐々に広がっていることから着火により火炎が伝播していることがわかる。水素の質量分率が減少しているものの減少量が少ないのは水素塊が過濃であり、燃焼後も水素が残っているためである。水素塊は時間とともに大気中へ拡散しているが拡散と燃焼の特性時間の違いから見ている時間範囲では拡散がほとんど進んでいない。

##### 4.10.2 速度分布の時間変化

速度分布の時間変化を Fig. 4.7 に示す。外部熱源を配置した部分が加速されている。これは燃焼による加速であると考えられる。また、水素塊全体に浮力の効果による上昇速度が生まれているが、可燃範囲内の濃度をもつ水素塊ではそれほど密度差による浮力は働かず、鉛直方向への加速は小さい。

##### 4.10.3 温度分布の時間変化

温度分布の時間変化を Fig. 4.8 に示す。水素塊中心付近から急激に温度上昇が始まり、徐々に高温域が拡大しており、火炎伝播の仕方はほぼ層流燃焼の場合と類似している。本研究のような乱れの小さい流れ場における計算では、乱れの生成は浮力による速度の加速のみに支配され、従来よく用いられている乱流燃焼モデルではうまく着火しないが、本研究で用いた層流燃焼も扱えるモデルにより小さな乱れからでも着火・燃焼過程を計算することができた。Fig. 4.9 は外部熱源配置位置を通る X 軸に沿った温度分布の時間変化であるが、このグラフからも外部熱源によりある領域が高温になり着火、燃焼に至る過程がよくわかる。火炎伝播速度は約 40m/sec で、層流の燃焼計算による結果よりやや速い結果である。

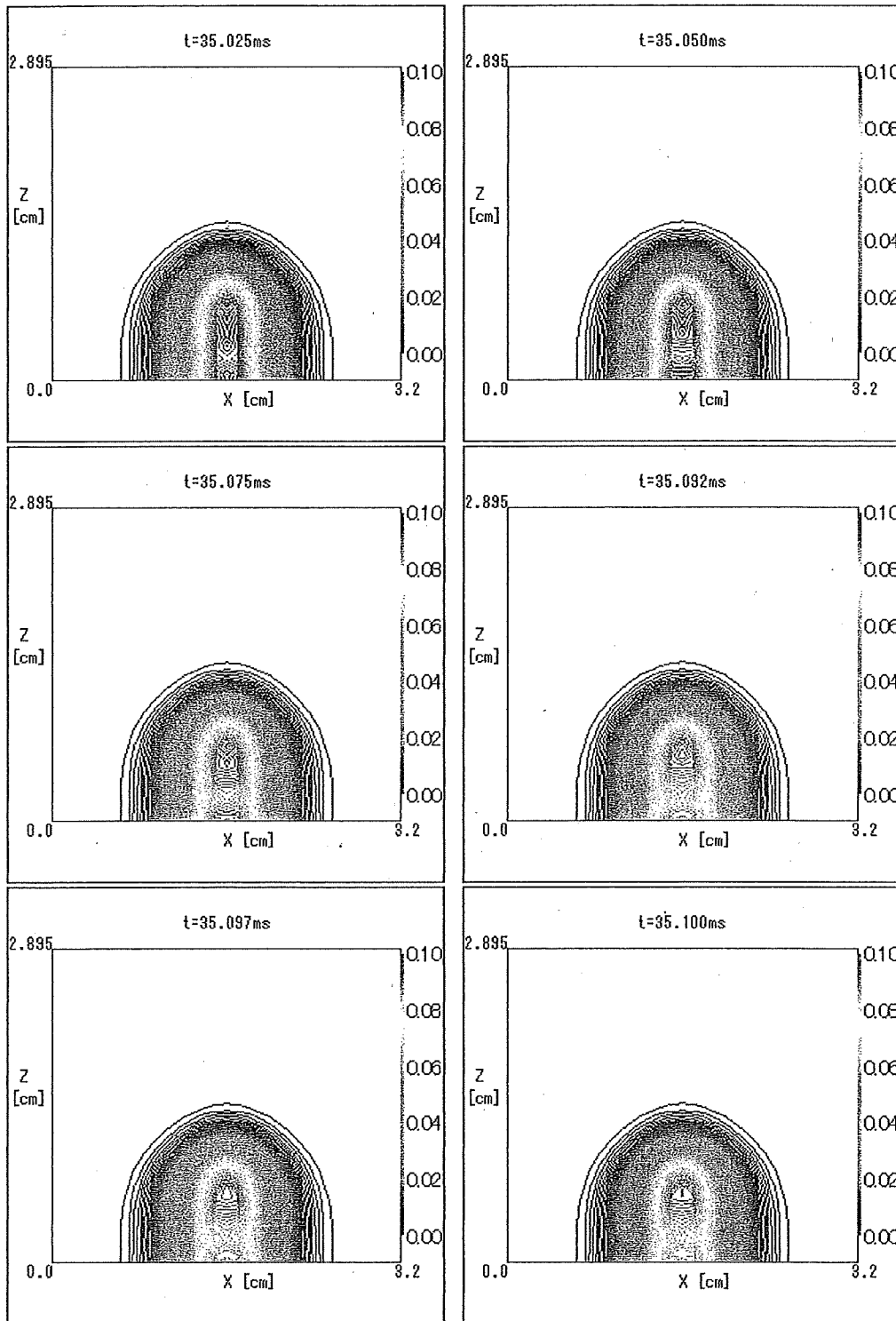


Fig. 4.6 Time history of H<sub>2</sub> mass fraction distribution

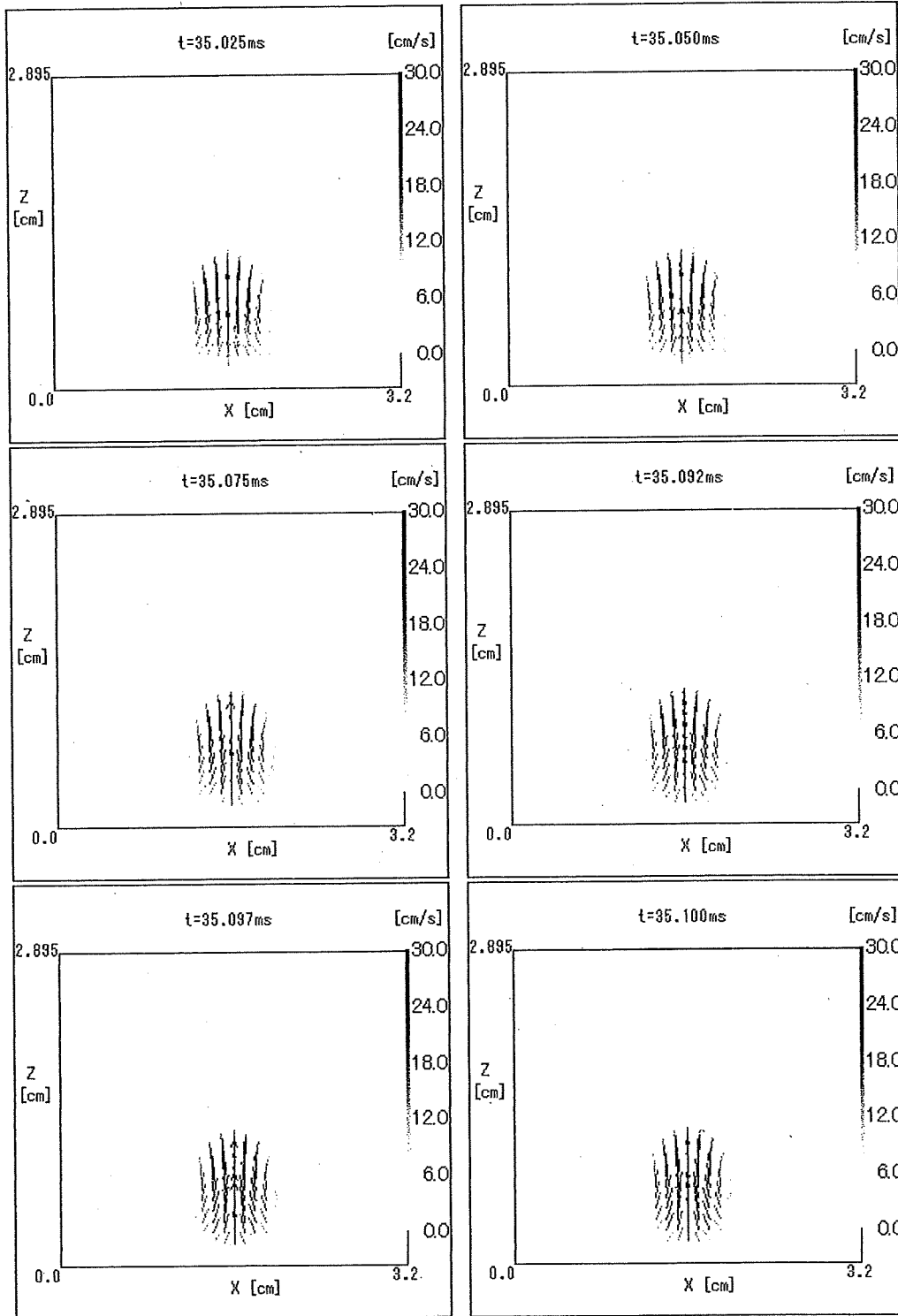


Fig. 4.7 Time history of velocity distribution

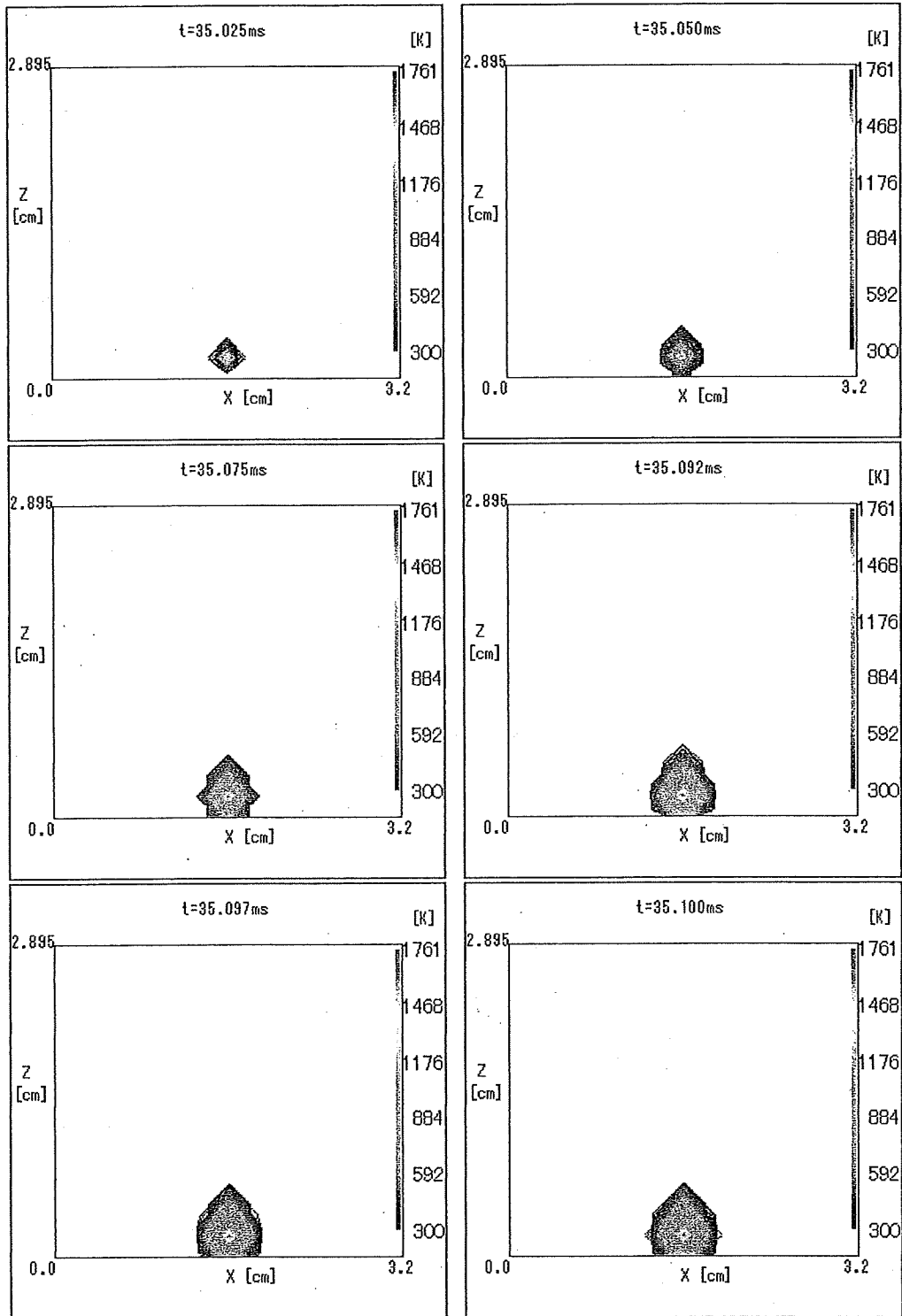


Fig. 4.8 Time history of temperature distribution

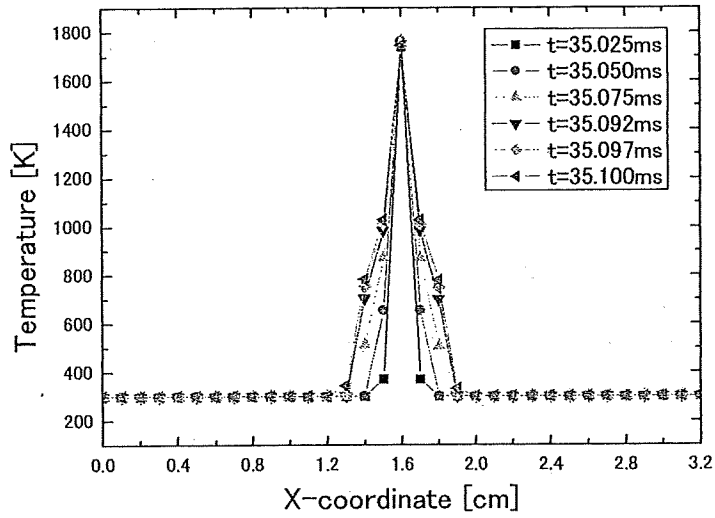


Fig. 4.9 Time history of temperature distribution along X-coordinate

#### 4.11 まとめ

3次元乱流拡散・燃焼計算のまとめを以下に示す.

##### 3次元乱流拡散・燃焼計算

- ・ 3次元乱流拡散・燃焼計算コードの開発を行った.
- ・ 乱流の効果を考慮することで, 層流計算に比べて大きな計算領域での計算が可能になった.
- ・ 水素は浮力に駆動され上昇しながら周囲の空気を対流させる現象をシミュレーションすることができた.
- ・ 乱れは水素塊の鉛直方向上部先端あたりで顕著に生成され, 徐々に周りの空気との境付近まで乱れが広がった.
- ・ 外部熱源により水素 - 空気混合気体は加熱され, 着火, 燃焼に至る現象をシミュレーションすることができた.
- ・ 火炎伝播速度が約 40m/sec で, ほぼ層流燃焼計算による火炎伝播速度よりやや大きい値となった.
- ・ 大規模スケール計算のために格子間隔を広くとり, また, 格子点数を多くとった計算を行う必要がある.

## 5. 高速解法

### 5.1 Message Passing Interface (MPI)

Fig. 2.2 の野外実験をはじめとする水素 - 空気爆燃および爆発の数値解析を行うためには非常に広い計算領域が必要である。大規模スケールの計算を行うためには、格子間隔を大きくすることも必要であるが、格子点数を増やすことも必要になってくる。しかし、格子点数を増やすと、1時間 step の計算負荷が大きくなり、莫大な時間が費やされるために高速解法を用いてできるだけ計算負荷を軽減することが求められる。本研究では、Message Passing Interface (MPI) <sup>[14]-[17]</sup>を用いて並列計算機による計算の高速化をはかった。

### 5.2 MPI による並列計算の効果

2CPU の PC クラスタを用いて並列計算を行った際の 1CPU 計算との計算時間の比較を行った。計算条件を Table 5.1 に示す。また、計算格子は地面付近と水素塊のある中央付近が密な不等間隔格子を用いた。計算格子を Fig. 5.1 に示す。

Table 5.1 Calculation condition

格子点数	61 点×61 点×61 点
計算領域	48.5cm×48.5cm×40.0cm
水素貯蔵領域	10cm×10cm×10cm
水素貯蔵量	81.896mg
Poisson 方程式の解法	SOR 法
SOR 法の反復回数	2000 回
時間刻み幅	1.0 $\mu$ s
計算回数	10 回

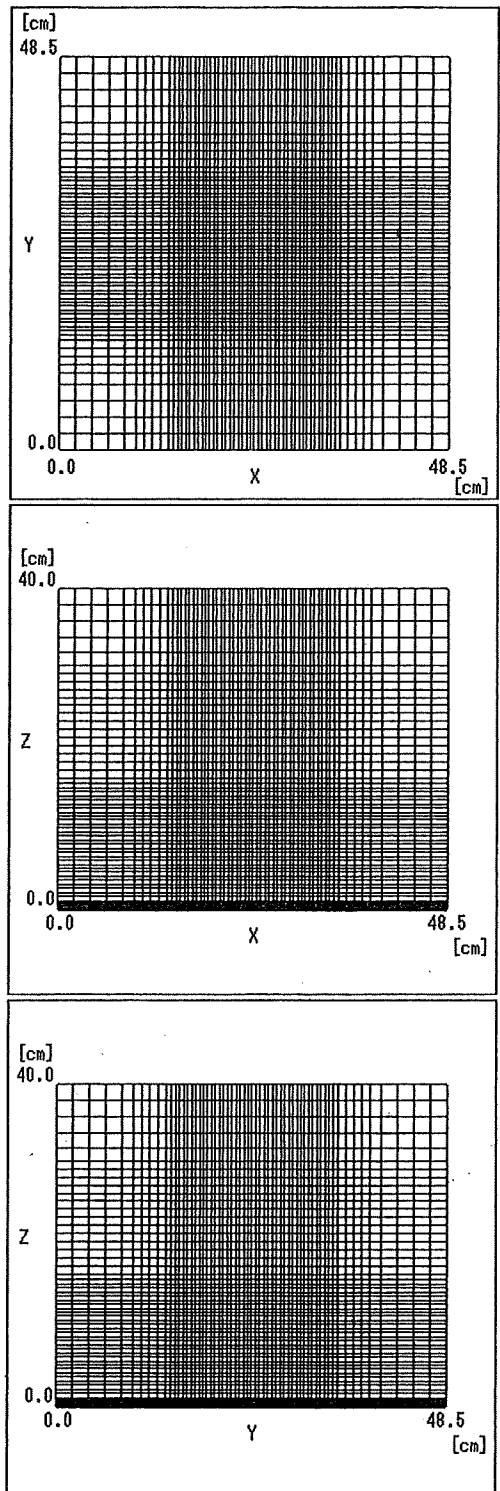


Fig. 5.1. Calculation grid



計算結果を以下に示す。全体の計算時間 (Fig. 5.2) が 1CPU 計算に比べ短縮されていることがわかる。計算時間の差分 (Fig. 5.3) をみると毎時間 step あたり約 8s 短縮されている。また、並列化部のみの計算時間を比較すると毎時間 step あたり約 14s の短縮を行うことができた。全体の計算時間の差と並列化部のみの計算時間の差が異なるのは 2 つの CPU の計算時間のばらつきと並列化操作を行ったための無駄なコマンド (同期をとる箇所や通信の仕方等) が原因であると考えられる。計算時間のばらつきはハードウェアによる部分が大きく、改善することは難しい。しかし、無駄なコマンドによる時間の浪費は改善する必要がある、さらなる MPI の最適化が必要である。

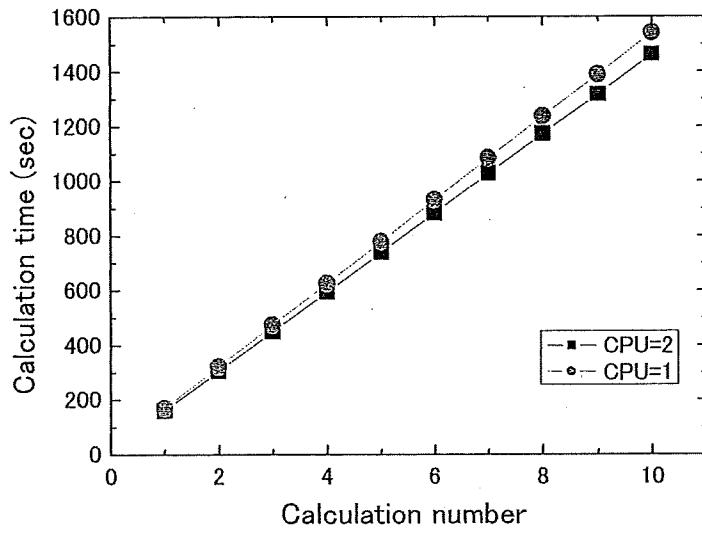


Fig. 5.2 Comparison of calculation time

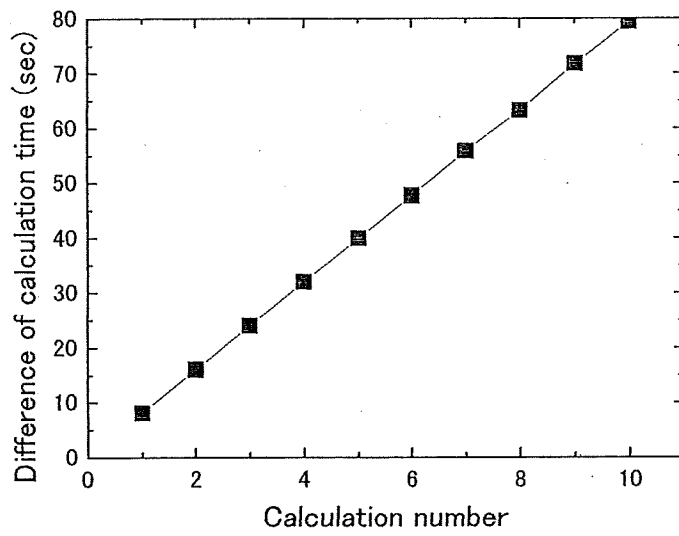


Fig. 5.3 Difference of calculation time

### 5.3 小規模実験スケールの計算領域での計算

MPI を用いて次のような小規模実験スケールの乱流拡散計算を行った。

#### 5.3.1 計算条件

計算条件を Table 5.1 示す。計算格子は Fig. 5.1 に示すものを用いた。

Table 5.2 Calculation conditions

	拡散
格子点数	61 点×61 点×61 点
計算領域	48.5cm×48.5cm×40.0cm
水素貯蔵領域	10cm×10cm×10cm
水素貯蔵量	81.896mg
格子幅	0.01~2.0cm
時間刻み幅	0.1~0.5 $\mu$ sec
プロセッサ数	2 個

乱流エネルギー  $\tilde{k}$ ，乱流エネルギー散逸率  $\tilde{\varepsilon}$  の初期条件は，地面上で  $\tilde{k} = 0$  [ $\text{cm}^2/\text{s}^2$ ]， $\tilde{\varepsilon} = 0$  [ $\text{cm}^2/\text{s}^3$ ]とした。

開放空間で  $\tilde{k} = 1.0$  [ $\text{cm}^2/\text{s}^2$ ]， $\tilde{\varepsilon} = \frac{\tilde{k}^{1.5}}{l}$  [ $\text{cm}^2/\text{s}^3$ ]， $l = 10.0$  [cm]とした。

#### 5.3.2 計算結果及び考察

水素の質量分率分布の時間変化を Fig. 5.4 に，速度分布の時間変化を Fig. 5.5 に示す。時間とともにごく微量ではあるが，水素が拡散しているのがわかる。また，速度分布は時間とともに水素塊内部の領域が急速に加速されているのがわかる。しかし，地面境界近傍で非常に小さな格子間隔を用いたため，時間刻み幅を小さくとらざるをえず，計算負荷が大きい。大きな格子で大規模なスケールを計算するためには壁近傍の格子間隔を大きくとる方法を用いなければ困難である。

また，MPI により計算時間の短縮を行うことができたが，全体の計算時間の大部分が並列化を行った部分ではなく，Poisson 方程式の計算部分である。本研究では，等間隔格子には多重格子法を，不等間隔格子にはSOR法を用いているが，不等間隔格子を用いた場合SOR法では非常に計算時間がかかり，不等間隔格子におけるPoisson方程式の高速解法がさらなる計算時間の短縮に不可欠である。

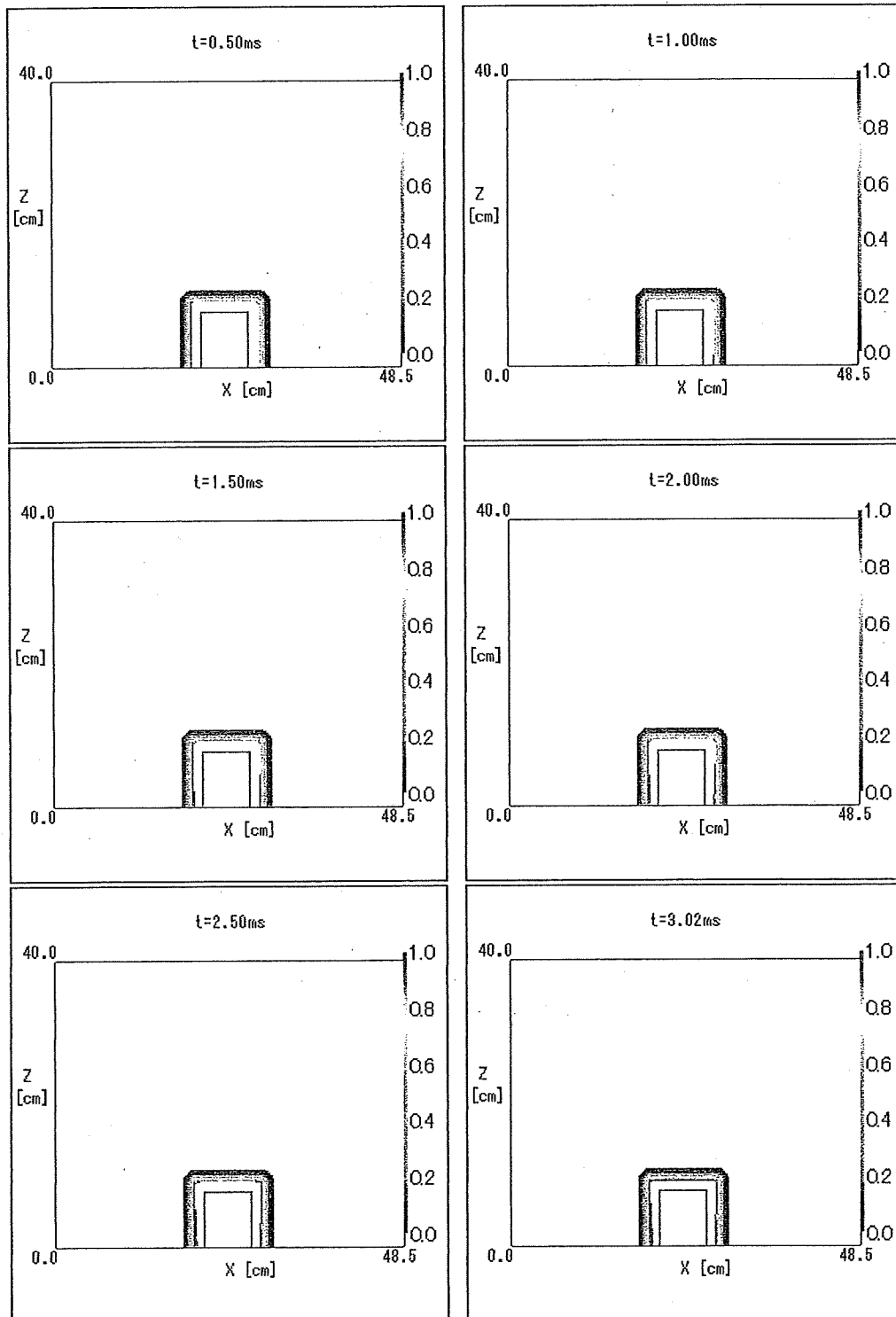


Fig. 5.4 Time history of H<sub>2</sub> mass fraction distribution