

高速流解析ソフトウェア Advence/FrontFlow/FOCUSによる 可燃性ガス爆発解析

富塚 孝之* 中森 一郎*

Numerical analysis of gas explosion using Advence/FrontFlow/FOCUS

Takayuki Tomizuka* and Ichiro Nakamori*

Advence/FrontFlow/FOCUS は高速流れの圧縮性流体に適した流体解析ソルバーであり、さらに構造解析との連成機能も有している。一方、安全工学分野における可燃性ガスによる爆発解析は、衝撃波や爆轟波だけでなく、火炎の伝播挙動を再現しつつ構造物への影響もシミュレーションする必要がある。ここでは Advence/FrontFlow/FOCUS の可燃性ガスによる爆発解析に対する適用性を解説し、解析事例を紹介する。

1. はじめに

近年、計算機能力と数値解析技術の飛躍的な向上により、複雑かつ過渡的な物理現象のシミュレーションにおいても非常に大きな成果を出している。

爆発現象の解析についてもその中の1つで、爆轟波のように衝撃波と燃焼波の複雑な相互作用も数値解析によりその物理的機構をミクロスケールで解明できるようになった。この現象は化学反応と流体力学の非定常で複雑な変化がもたらすもので、高速かつ大規模な計算能力はもちろんの事、適切な詳細化学反応モデルと数値モデル（空間スキーム、時間スキーム）がなければ数値シミュレーションすることは不可能である。

しかし、それでも今日の計算機資源で実用的な情報を得るには不十分であり、何かしら人工的な物理モデルを利用しなければ、産業技術や安全対策技術には活用できない。

Advence/FrontFlow/FOCUS はそのような観点から、高精度な数値モデルを取り入れつつ、マクロスケールを対象に数値シミュレーションができるソルバーである。計算格子には計算精度と

計算効率のよい直交格子を採用し、そこに複雑形状の構造物を容易に取り込むことができる Immersed Boundary 法（境界埋め込み法）を導入している。Immersed Boundary 法のさらなるメリットは、流体の計算格子が構造物形状に依存しないため、構造解析との連成計算により構造物の変形、移動も流体計算に容易に取り込むことが可能である。

安全工学分野におけるガス爆発シミュレーションの特徴は以下の通りである。

- ・対象スケールが大きい（数 m 以上）
- ・対象領域に建物や複雑な構造物がある
- ・ガスの濃度解析も必要
- ・構造物の変形、場合によっては破壊度合いも評価対象
- ・燃焼による熱的影響も評価対象

以上の項目すべてに対して、Advence/FrontFlow/FOCUS は適応しているといえる。

2. 可燃性ガス爆発の特徴

産業現場では、可燃性のガス、液体、固体がしばしば取り扱われているが、その扱いを誤ったり、管理に不備があったりすると、燃焼が起こり、さらに燃焼が制御できなくなると、火災・爆発災害

*アドバンスソフト株式会社 第2事業部

2nd Computational Science and Engineering
Group, AdvanceSoft Corporation

となり大きな被害が発生する。可燃性ガスの取扱施設においてガス爆発事故が発生する過程としては、施設における配管やタンクの亀裂や破損もしくは人為的な作業ミス（バルブの閉め忘れなど）などにより可燃性ガスが排気、漏洩し、その後気流や自重により空気と混合しながら、移流、拡散および滞留し、可燃性の空間が生成される。そこに電気設備や静電気による火花や他の火気が着火源となり予混合燃焼が起こる。初期の火炎伝播速度は層流燃焼速度で比較的ゆっくり燃え広がるが、徐々に燃焼速度が大きくなることにより火炎伝播は加速され、圧力が上昇する。この現象により発生した高い圧力波が構造物等を破壊に至らしめ、高速に広がる火炎は周囲の機器や人に燃焼、火傷を負わせることとなる。

一般に火災は、可燃性物質（例えば木材（固体）や石油（液体）など）の燃焼によって起こり、爆発は、可燃性ガス、噴霧、粉じん（例えばメタンガスや石炭粉じんなど）の燃焼によって起こる。爆発は、燃焼のみならず水蒸気爆発（急激な相変化）や高圧容器の破壊などによっても起こるが、本稿ではガスの燃焼によって起こる爆発についてのみ記す。

燃焼とは、可燃性物質と酸化剤（通常は空気中の酸素）が、反応（酸化還元反応）を起こし急速なエネルギー放出を起こすものである。エネルギー放出は、熱放出や体積膨張等として現れ、火災における焼損や爆発における圧力上昇を引き起こす。どのような要素がそろった時に燃焼が起こるかについて考えてみると、燃焼が起こるために必要な要素として、(1)可燃性物質、(2)酸化剤（酸素など）が挙げられるが、これらを混合しただけでは通常は燃焼が起こらず、(3)着火源（熱エネルギー）によりエネルギーを加えることで燃焼が開始する。以上の3つが1つでも欠けると燃焼が起こらないわけであり、これらは燃焼の三要素と呼ばれることもある。火災・爆発災害の対策を考える上で重要な概念である。さらに、燃焼では活性種（ラジカル）による連鎖反応が急速な反応進行を支えているため、連鎖反応も要素に加えることもある（ある種の消火剤は、火炎中の活性種を失

活されることによって連鎖反応を抑え燃焼を停止させている）。

3. 爆発シミュレーションに係る数値モデル

本誌の別稿で Advence/FrontFlow/FOCUS の詳細については解説されているので、本章では爆発現象に特有な数値モデルについて記す。

3.1. 火炎伝播モデル

予混合燃焼における火炎伝播速度は火炎面の構造に依存するため、これを運動方程式と反応速度式で予測するためには火炎面の構造を詳細に表現しうだけの格子解像度が必要となる。すると計算格子幅は μm のオーダーとなり、爆発危険評価対象のスケールが数 m ～数 10m もしくはそれ以上と考えると、計算領域の一辺だけでも 10^6 以上の計算格子数が必要になる。これを3次元でシミュレーションすると考えれば計算格子数は $(10^6)^3$ 以上のオーダーとなり、実用的な計算は不可能である。

逆に爆発危険評価ツールとして実用上耐えうる程度の計算負荷でシミュレーションが行えるためには、全体の計算格子数は1000万未満が望ましい。すると爆発危険評価対象のスケールが数 m ～数 10m と考えると、1つの計算格子幅は 1cm 以上となる。

従って、火炎面モデルは火炎面を不連続なデフラグレーション面として取り扱い、その面の輸送式を解くことにより火炎伝播を表現する[1]ことで、計算格子幅の制約が緩和される。火炎面の輸送は燃焼速度により算出されるため、乱流予混合燃焼の場合は乱流燃焼速度の予測が必要となるが、火炎面の詳細構造を考慮する必要がないことから格子解像度の影響は小さく、大規模な爆発解析に適用しうるモデルになる[2]。

本モデルでは、火炎面の輸送を解くため、以下の既燃ガスに対する保存式を用い、生成・消滅量を燃焼速度によってモデル化する。

$$\frac{\partial(\rho c)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho c u_j)}{\partial x_j} = \dot{\rho}_B \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_B &= \rho u_f |\nabla c| & 0 \leq c < 1 \\ \dot{\rho}_B &= 0 & c \geq 1 \end{aligned} \quad (2)$$

ここで、 u_f は乱流燃焼速度であり、既燃気体の質量分率 c および上流側の未燃気体の物理量の関数である[1]。

3.2. 乱流燃焼速度モデル

前節における乱流燃焼速度は層流燃焼速度 S_l の関数などとしてモデル化される。その例としては次式[3]が挙げられる。

$$S_t = S_l \{1 + k_1 (u'/S_l)^n\} \quad (3)$$

ここで、 u' は乱流強度、 k_1, n は一定値で 4.3, 1 である。また、次式[4]のように乱流の長さスケール ℓ_t [m]を用いるものもあるが、乱流強度 u' をパラメータとしているものが多い。

$$S_t = A(u')^{3/4} S_l^{1/2} \kappa^{-1/4} \ell_t^{1/4} \quad (4)$$

これらのモデルは乱流強度に依存するため流れの計算の中で乱れが発生しないと効果が表れない。実際に火炎は伝播が進むにつれて自発的な乱れによる皺状火炎が発生する。この現象を再現するためにフラクタル火炎伝播モデル[5]がある。

3.3. 解析事例

上記の火炎伝播モデルを組み込んだ解析事例を以下に記す。解析モデルは矩形管内における点爆発である。図 1 に反応進行度による既燃ガス分布で、図 2 には圧力分布を示す。

左下から点爆発が起きた後に火炎が伝播し、右方向へ進行していく様子が再現されており、圧力波は管壁に衝突後反射しながら干渉していく様子が分かる。

4. 構造解析

破壊のシミュレーションは、微細破壊機構のシミュレーションを行う場合と、連続体のモデルとしてマクロなシミュレートする場合がある。前者については、空間のスケールが大きくても数 mm 単位のスケールのシミュレーションとなるので、

爆発解析の対象にはならない。後者のマクロなシミュレーションを利用した方法では、有限要素法プログラムにおいて動的陽解法の代表的な例として、DYNA3D2000 がある。DYNA3D2000 の本解析に関連する機能を表 1 に示す。

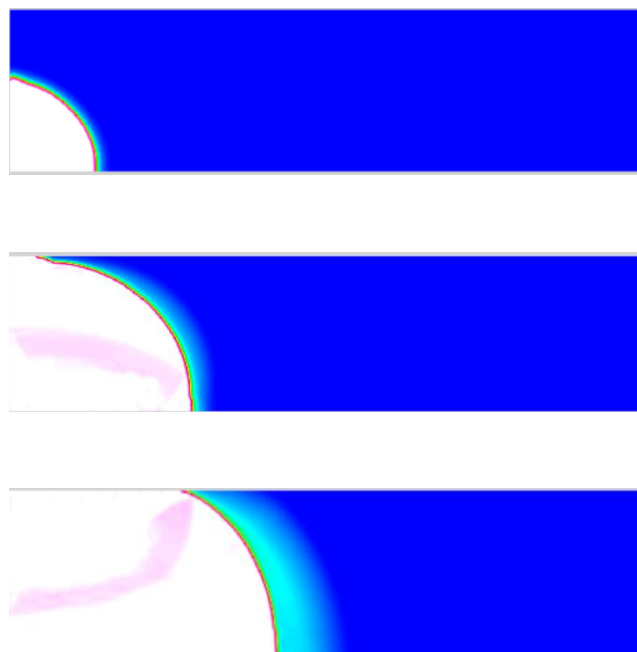


図 1 既燃ガス分布

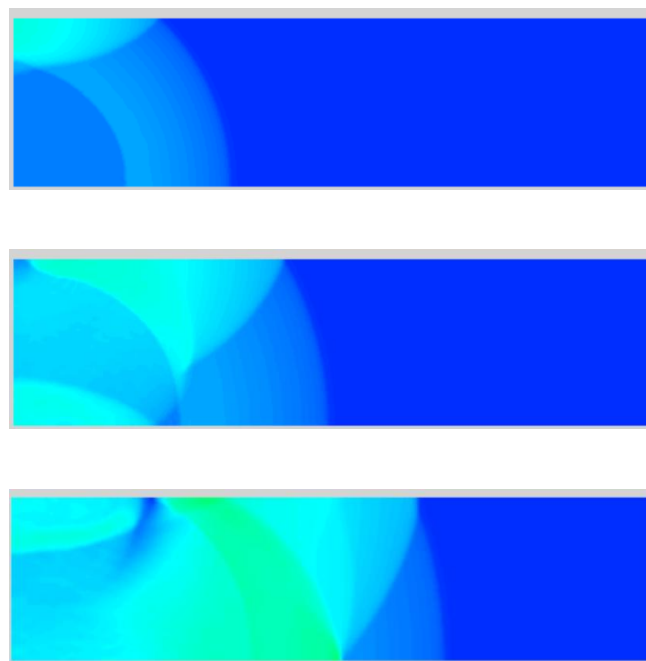


図 2 圧力分布

DYNA3D は、3 次元のソリッドおよび梁・シェル構造に対して、時系列の動的応答を解析することを目的とした、陽解法を利用した非線形有限要

素法のプログラムである。DYNA3D はここ 25 年の間に、米国では LLNL と産業界で利用され、主として、非弾性と接触を含む解析に利用されてきた。要素の定式化は、1 次元トラスと梁、2 次元の 3 節点三角形シェルおよび 4 節点四角形シェル要素、および 3 次元の連続要素から構成される。弾性、塑性、熱の効果等を含む多くの材料モデルが利用可能である。

表 1 DYNA3D2000 の主な機能

項目	機能
手法	接触を含む陽解法による有限要素法
要素	2 節点トラス, 2 節点梁 3 節点三角形シェル, 4 節点四角形シェル要素 8 節点四角形厚肉シェル要素, 8 節点六面体要素
材料モデル	非線形材料, 破壊モデル等 26 種類

また、接触解析が可能である。接触解析に関して、DYNA3D 2000 のスライディング面と接触面の考え方は、節点と面の概念で定式化されている。スレーブ節点がマスター面に貫通しないような定式化であるが、マスターとスレーブの対称性は保たれるようなアルゴリズムとなっている。

また、DYNA3D-2000 は破壊のモデルについては、各種のモデルがあり、次のような機能を有する。まず、要素剛性を小さくすること、または、ある基準に達したら要素の応力を 0 にする方法がある。次に、破壊基準に基づき、ソリッド、またはシェル要素を削除する方法がある。第 3 の方法として、シェルスライドラインあらかじめ定義された線上を split する方法がある。最後に、節点のペアを指定して、ある破壊基準に基づきすべての要素境界が離す方法がある。また、境界条件は、亀裂のある対称面やスライディング境界も設定できる。

破壊モデルのある弾塑性材料は、具体的には表 2 のようなデータで定義されている。このモデルは、通常の変形型の弾塑性モデルに、2 つの破壊基準を導入したものである。このモデルで破壊基準に達する前は、通常の変形型モデルと同じ動きをし、ここでは、有効塑性歪による破壊基準がモデルに用意されており、有効塑性歪が与えられた基準を超えると要素が削除される。このモデルは、

弾塑性材料の脆性破壊（応力基準）または延性破壊（歪基準）の概略を表現する場合に有効である。

表 2 破壊モデルの指定できる材料モデル
(例 1)

Columns	Quantity
1-10	Card 3 Shear modulus, G
11-20	Yield stress, σ_0 (see Figure 5)
21-30	Tangent modulus, E_T
31-40	Effective plastic strain at failure, $\bar{\epsilon}_f^p$
41-50	Failure pressure, p_f (positive in compression)

また、その他のモデルにも、破壊のモデルが表現できるものがある。例えば、コンクリートについては、降伏圧力と応力の関係を入力するタイプであり、張力に依存する簡単な破壊モデル、張力の破壊と塑性歪を関係付けるモデル、張力による破壊と損傷係数を求めるモデル等がある。

表 3 破壊モデルの指定できる材料モデル
(例 2)

Columns	Quantity
1-10	Card 3 First elastic constant Poisson's ratio, ν , for constant ν model Negative of shear modulus, $-G$, for constant G model
11-20	Maximum principal stress at failure, σ_{cur}
21-30	Cohesion, a_0
31-40	Pressure hardening coefficient, a_1
41-50	Pressure hardening coefficient, a_2
51-60	Damage scaling factor, h

5. 流体-構造の連成手法

流体-構造連成解析では、流体解析からは構造物表面の圧力分布、構造解析からは変形後の座標と境界面の移動速度の情報が必要となる(図 3 参照)。

Advence/FrontFlow/FOCUS では、専用の連成ソフトウェアにより流体-構造解析ソフトウェア間でデータの受け渡しを行う。流体解析と構造解析は同じ時間刻みで解析を行い、毎ステップ情報の受け渡しを行う。また、構造解析において破壊が発生した場合には破壊箇所の要素を削除し、それに伴い、発生・消失のあった境界面の情報を作成し(図 4 参照)、流体計算に反映する。

解析事例である図 5 では、衝撃波が構造物である突起物に衝突し、突起物に変形していく過程が再現されている。

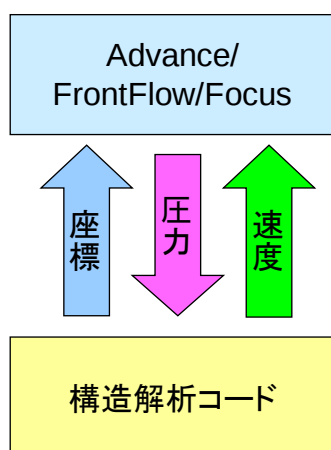


図 3 流体-構造連成解析のデータ受け渡し

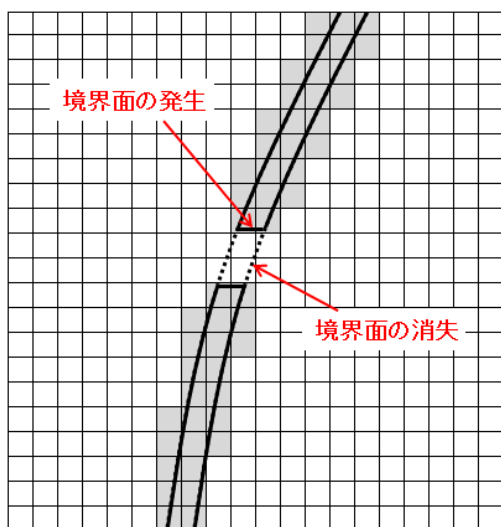
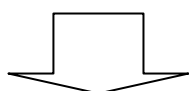
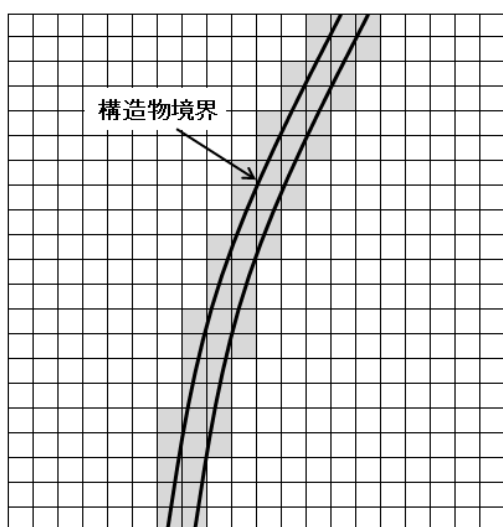


図 4 構造物破壊時の境界面の発生と消失

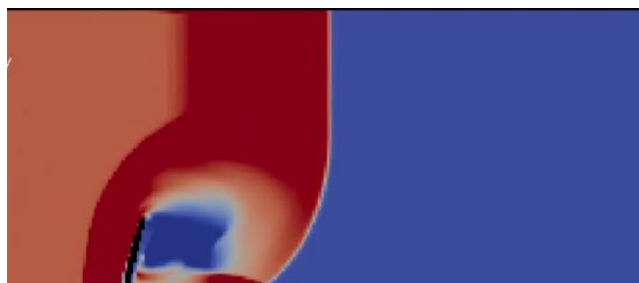


図 5 衝撃波と構造物の衝突

6. おわりに

本稿では、Advance/FrontFlow/FOCUS による可燃性ガスの爆発解析について記した。

Advance/FrontFlow/FOCUS が爆発現象を解析に適したソルバーであり、複雑な構造物との連成解析も容易に行えることを解説し、いくつかの解析事例を紹介した。

参考文献

- [1] 高野泰斉, “火炎を伴う気流の差分計算モデル”, 日本航空宇宙学会誌, 第 36 巻, 第 411 号, pp.186-191, (1988)
- [2] 高橋邦彦ほか, “実規模 LP ガス漏洩・爆発評価システムの開発”, Sci. Tech. Energetic Materials, Vol. 65, No. 4, pp.116-124, (2004)
- [3] U.Bielert, M.Klug, and G.Adomeit, “Application of Front Tracking Techniques to the Turbulent Combustion Processes in a Single Stroke Device”,

COMBUSTION AND FLAME 106,pp.11-28
(1996).

- [4] Zimont, V. L., Polifke, W., Bettelini, M. and Weisenstein, W., An Efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion at High Reynolds Numbers Based on a Turbulent Flame Speed Closure. J. of Gas Turbines Power, 120:526-532, (1998)
- [5] 富塚, “数値シミュレーションによる可燃性ガスの爆発危険性解析”, 博士論文, 東京大学