

高速流解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/FOCUSによる 爆轟シミュレーションの計算例

中森 一郎*

Simulation of detonation by using Advance/FrontFlow/FOCUS

Ichiro Nakamori*

本稿では、高速流解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/FOCUS で用いている解析手法について概説するとともに、建屋内の長さスケールにおいて層流火炎から乱流火炎を経て爆轟波へ遷移し伝播する様子を再現する計算結果を数例ご紹介する。

Key word: 流体解析、燃焼、乱流、爆轟、DDT、燃焼速度、フラクタルモデル

1. はじめに

層流火炎から火炎面の自発的な乱れと乱流に起因する乱れにより火炎の見かけの速度が加速し爆轟波へ遷移 (Deflagration to Detonation Transion, DDT) する現象の数値計算はこれまでに多くの研究があるが、近年特に建屋内の長さスケールにおける DDT 解析のためのモデル手法に関する研究が盛んに行なわれている。中でも、Ettner[1]らによって示された数値モデルと適用例では数メートル規模の長さスケールにおける DDT を数十万要素の計算格子とともに簡易な計算機環境下で予測可能な手法として認知されつつある。乱流燃焼速度に関わる加速領域や、爆轟に遷移後の爆轟波の挙動について議論されるべきことは多々残されているが、大規模スケールでの DDT をシミュレーションで再現する上での一つの指標となるのかも知れない。本稿では、こうした動向を踏まえて、DDT 解析の最近の取り組みを示すとともに、より大きな長さスケールでの DDT 解析について若干の計算例を示す。

2. 支配方程式

2.1. 基礎方程式

基礎方程式として、圧縮性 Navier-Stokes 方程式

*アドバンスソフト株式会社 第2事業部

を用い、積分型で次式のように表せる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V Q dv + \int_s (E n_x + F n_y + G n_z) ds = \int_s (E_v n_x + F_v n_y + G_v n_z) ds + \int_V S dv \quad (1)$$

ここで Q は解ベクトル $Q = (\rho, \rho u, \rho v, \rho w, e, e_v, \rho_i)^t$ であり、 ρ は密度、 u, v , ならびに w は速度成分を表す。 e は単位体積当たりの全エネルギーを表す。また、 ρ_i と e_v は 化学種の質量と振動エネルギーを表し、化学反応流を扱う際に考慮される。さらに、添字の v は粘性項であることを表し、 $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)^t$ は検査面の単位法線ベクトルである。なお、 S は化学反応生成項とエネルギー緩和項を表す。Advance/FrontFlow/FOCUS では、与えられた支配方程式を有限体積法により離散化し、種々の数値解法を適用する。

2.2. 離散化

本節では(1)式により与えられた支配方程式の離散化について説明する。記述をコンパクトにするために非粘性流束と粘性流束について

$E(Q) = E n_x + F n_y + G n_z$ ならびに

$E_v(Q) = E_v n_x + F_v n_y + G_v n_z$ とあらためて定義

する。これを用いて(1)式の左辺第2項は有限体積法において以下のように半離散的に記述できる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V Q dV + \sum_k [E(Q) - E_v(Q)] S_k = \int_V S dV \quad (2)$$

ここで V は検査体積であり、 S_k は i 番目の検査体積 V_i を囲む k 番目の検査面である。さらに、

$$\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)^t, \quad \mathbf{l} = (l_x, l_y, l_z)^t, \quad \text{および}$$

$$\mathbf{m} = (m_x, m_y, m_z)^t \quad \text{の正規直交規定で構成される}$$

行列 T を用いれば、非粘性流束 $\mathbf{E}(Q)$ は以下のよう書き換えられる。

$$\mathbf{E}(Q) = T^{-1} T \mathbf{E}(Q) = T^{-1} \mathbf{H}(Q) \quad (3)$$

上式の $\mathbf{H}(Q)$ は検査面の法線方向に再構築された流束表現であり、具体的には以下のように表せる。

$$\mathbf{H}(Q) = (\rho u_n, \rho u_n^2 + p, \rho u_n u_l, \rho u_n u_m, \rho u_n h, \rho_1 u_n, \dots, \rho_j u_n)^t \quad (4)$$

ここで、速度成分 u_n 、 u_l 、および u_m はそれぞれ $u_n = u n_x + v n_y + w n_z$ 、 $u_l = u l_x + v l_y + w l_z$ 、 $u_m = u m_x + v m_y + w m_z$ である。また、行列 T は下記の通りであり、

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & n_x & n_y & n_z & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & l_x & l_y & l_z & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & m_x & m_y & m_z & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (5)$$

行列 T^{-1} は行列 T の転置行列である。

2.3. 対流項の構成方法

本節では法線方向に再構築された流束表現 $\mathbf{H}(Q)$ に対する数値スキームについて記述する。

2.3.1. 風上化について

圧縮性流れでは、不連続面などの流れの急峻な分布に対応するために風上法などの数値的な安定化手法が必要である。風上化の一つは、セル境界に衝撃波管の初期値問題を計算ステップ毎に設定し直す Godunov 型の解法があり、これをベースとして反復を伴わない近似的な流束の構成方法として近似リーマン解法が存在する。近似リーマン解法として Roe[3] の FDS 法が挙げられるが強い衝撃波に関連したカーバンクルに対して脆

弱であるために使用できない。衝撃波を安定に扱うという意味で FVS 法[例えば文献 4]が挙げられるが数値粘性が過大なために粘性計算には使用できない。また、HLL 系の解法では、まず HLLE[5] は FVS と同様、数値粘性が強すぎるために粘性流の計算に使用できない。HLLC[6] は HLL 系のスキームの中でも接触面の情報を回復することで境界層の精度も良いがカーバンクルに対してやはり脆弱であり[例えば文献 7]、爆轟解析への使用は避けた。選択肢として AUSM 型のスキームを使用する可能性が残されることになる。AUSM 型の数値スキームは広義の意味で Godunov 法の一つであり $\mathbf{H}_k$ は以下のような移流項と圧力項に分けて表され、ヤコビアン行列を伴わない形であるために化学種の変更や気液二相流への拡張が容易であるという利点を持つ。

$$\mathbf{H}_k = \mathbf{H}_k^{(c)} + \mathbf{p}_k \quad (6)$$

ここで、

$$\mathbf{H}_k^{(c)} = m_k \Psi_k \quad (7)$$

$$\mathbf{p}_k = (0, p_k, 0, \dots, 0) \quad (8)$$

であり、 Ψ_k は $\Psi_k = (1, u_n, u_l, u_m, h, f_i, \dots)^t$ である。

h はエンタルピーであり、 f_i は i 種の化学種の質量分率である。また、 m_k と p_k については、それぞれ計算格子 i と計算格子 j のセル境界を過ぎる質量流量 $(\rho u_n)_k$ と圧力であり、それぞれの計算格子の音速と速度成分 u_n で計算されるマッハ数の情報から構築する。この方法には AUSM⁺[8] や AUSMDV[9] など幾つかのバージョンが存在するが、残念なことにカーバンクル不安定に対していづれも充分ではない。本解析では、速度の遅い接触不連続面をシャープに追跡することと、非常に強い衝撃波や爆轟波の背後でカーバンクル不安定を回避することを両立させることを目的として、AUSMDV をさらに改良したバージョンを使用している。

2.3.2. 対流項の高精度化の方法

対流項の高精度化は、セル境界 k 上に内挿した値を使用することで達成する。例として、TVD 制限関数 ϕ を用いてセル境界値は以下のように内挿する。

$$Q_{i,k} = Q_i + \phi \nabla Q_i \cdot r_i \quad (9)$$

ここで添字の i, k はセル中心 i からセル境界 k へ内挿していることを表す。また、 r_i はセル中心からセル境界までのベクトルである。

2.3.3. 粘性項、または高精度化(MUSCL 法)で使用する諸量の勾配の計算法

(2)式の第2項に含まれる粘性流束 $E_v(Q)$ では、セル境界上の速度と温度のそれぞれの1階微係数が必要になる。そこでセル境界を囲む検査面 s_k と検査体積 V を取り直し、ガウスの発散定理を用いることにより検査体積における体積平均的な勾配を算出する。例えば速度成分 u の勾配を計算するには、ガウスの発散定理は

$$\int_V \nabla u dv = \int_s u ds \quad (10)$$

であるので

$$V \nabla u \equiv \int_V \nabla u dv \quad (11)$$

という検査体積における平均的な勾配を定義すれば

$$\nabla u \equiv \frac{1}{V} \int_s u ds = \frac{1}{V} \sum_l (u_l s_l) \quad (12)$$

で求めることができる。ここで l は新たに作成された検査体積を構成する検査面の番号である。

2.4. 時間積分法

本節では、時間積分法（陽解法）について説明する。まず(2)式は以下のように書き換えられる。

$$V_i \frac{\partial Q}{\partial t} = -R_i^n \quad (13)$$

ここで添字の i は計算格子の番号を意味し、 n は時刻レベルを表す。また、右辺は残差ベクトル R としてまとめており、 V は計算格子の体積である。例えば、Rung-Kutta 陽解法の場合は、

$$\begin{aligned} Q_i^0 &= Q_i^n \\ Q_i^k &= Q_i^0 - \alpha_k \frac{\Delta t}{V_i} R_i(Q^{k-1}) \\ Q_i^{n+1} &= Q_i^m \\ k &= 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (14)$$

などとする。

2.5. 平衡気体の温度計算法

各々の化学種の定圧比熱は温度 T に関する以下の多項式近似で与えられるものとする。

$$C_p / R = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4$$

ここで用いられる係数 $a_1 \sim a_5$ は、例えば GRI-Mech 3.0 を使用して得られる。

また、定圧比熱に関連して、温度は以下のようにして求めることができる。まず解ベクトル $Q = (\rho, \rho u, \rho v, \rho w, e, \rho_1, \rho_1, \dots, \rho_s)^T$ が更新されたとして、全エネルギー e と運動エネルギー $\frac{1}{2} \rho \bar{u}^2$ が決定される。次に、種々のガス密度 ρ_s と全エネルギー e と運動エネルギー $\frac{1}{2} \rho \bar{u}^2$ との間には、以下のエネルギー式が成り立つ。

$$\sum_s \rho_s h_s = e - \frac{1}{2} \rho \bar{u}^2 + p \quad (15)$$

ここで圧力 p は、ドルトンの分圧の法則から温度と結び付けられ、次式のように書ける。

$$p = \sum_s \rho_s R_s T \quad (16)$$

また、エンタルピー h_s も GRI-Mech 3.0 で与えられる数値テーブルを利用することにより、NASA で用いられている多項式型で係数 a とともに次式のように与えられる。

$$\begin{aligned} h / RT &= a_1 + a_2 T / 2 + a_3 T^2 / 3 \\ &+ a_4 T^3 / 4 + a_5 T^4 / 5 + a_6 / T \end{aligned} \quad (17)$$

したがって、種々のガス密度 ρ_s と全エネルギー e と運動エネルギー $\frac{1}{2} \rho \bar{u}^2$ との間に成り立つ以下のエネルギー式を計算セル毎に温度について解くことになる。

$$\sum_s \rho_s h_s - e + \frac{1}{2} \rho \bar{u}^2 - \sum_s \rho_s R_s T = 0 \quad (18)$$

上式の左辺を f とおけば、温度 T について5次方程式となり、 f の温度微分は以下のように表される。

$$\begin{aligned} f' &= \frac{\partial f}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \left(\sum_s \rho_s h_s \right) - \frac{\partial}{\partial T} \left(\sum_s \rho_s R_s T \right) \\ &= \sum_s \left[(a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4) \rho_s R_s \right. \\ &\quad \left. - \rho_s R_s \right] \end{aligned} \quad (20)$$

温度 T についての5次方程式を解くため、ニュートン法を適用する。 N 回のニュートン反復計算後の温度 T_{N+1} は $T_{N+1} = T_N - f / f'$ で求めることがで

きる。温度が求まれば、圧力は(16)式により計算できる。

2.6. 乱流モデル

本解析での乱流の扱いはRANSモデルを使用し、以下の $k-\varepsilon$ モデルを用いている。モデル定数は標準的な値を用いることとする。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho k u_i}{\partial x_i} &= P - \rho \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\mu + \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] \\ \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \rho \varepsilon u_i}{\partial x_i} &= C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] \end{aligned} \quad (21)$$

$$P = -\rho u_i u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad \mu_t = C_\mu \rho \frac{\varepsilon^2}{k}$$

2.6.1. 燃焼モデルと DDT モデル

以下の形式で表される G 方程式を使用する。

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial t} + \frac{\partial G u_i}{\partial x_i} &= S_T |\nabla G| + \bar{\omega}_{\text{ign}} \\ S_T &= S_L + u' \end{aligned} \quad (22)$$

u' は乱流エネルギー k から算出する。また、 $G=1$ で既燃、 $G=0$ が未燃状態を表す。解法の詳細は略すが、レベルセット法を併用する場合は、毎時間ステップにおいて $G=1/2$ の位置を $\tilde{G}=0$ とする距離関数 $\tilde{G}$ を移流方程式で解き、適宜距離関数の再初期化を実施し、さらに距離関数 $\tilde{G}$ を次式により疑似的な Heaviside 関数に変換して未燃と既燃状態を識別する。

$$H = \begin{cases} 1 & \text{if } \tilde{G} > \Delta \\ 0 & \text{if } \tilde{G} < -\Delta \\ \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\tilde{G}}{\Delta} + \frac{1}{\pi} \sin \left(\frac{\pi \tilde{G}}{\Delta} \right) \right] & \text{otherwise} \end{cases} \quad (23)$$

Δ は格子サイズの数倍を採ることとされており、その地点での計算格子サイズの 2 倍を採用した。これにより、火炎面は常に格子サイズの 4 倍程度の厚みを保持する。 $G=1/2$ の位置の移動の追跡後に生成項による G の変化を加算する。燃焼による生成項と爆轟燃焼による生成項はそれぞれ独立

して計算しておく。 S_L は層流火炎速度であり空気中の水素火炎は次式の経験式で与えられる。

$$S_L = S_{L0} \left(\frac{T}{T_{\text{ref}}} \right)^{1.75} \left(\frac{p}{p_{\text{ref}}} \right)^{-0.2} \quad (24)$$

ここで $S_{L0}[\text{m/s}]$ は水素分子のモル濃度の関数として次式[参考文献 13]で与えた(図 1)。

$$S_{L0} = \begin{cases} -488.9x_{H_2}^4 + 285.0x_{H_2}^3 \\ -21.92x_{H_2}^2 + 1.351x_{H_2} - 0.040, & x_{H_2} \leq 0.35 \\ -160.2x_{H_2}^4 + 377.7x_{H_2}^3 \\ -348.7x_{H_2}^2 + 140.0x_{H_2} - 17.45, & x_{H_2} \geq 0.35 \end{cases} \quad (25)$$

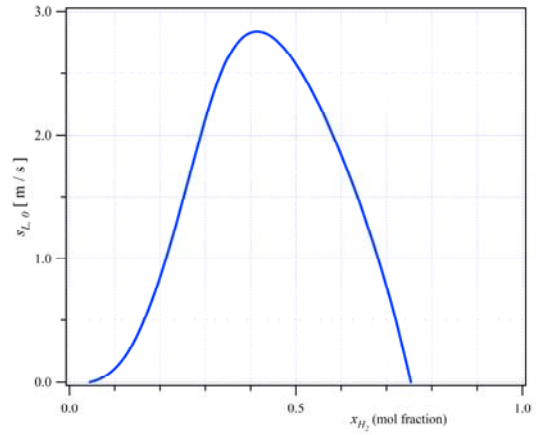


図 1 $T_{\text{ref}} = 298\text{K}$, $p_{\text{ref}} = 1.013\text{bar}$ における水素-空気層流火炎速度 S_{L0}

また、 $\bar{\omega}_{\text{ign}}$ は爆轟による G の生成項を表し、Ettner[1]の方法に倣って、Heaviside 関数で爆轟燃焼のスイッチが入る以下の形式を使用する。

$$\bar{\omega}_{\text{ign}} = \alpha \frac{1-G}{\Delta t} H(\tilde{\tau}_{\text{high}} - 1) + (1-\alpha) \frac{1-G}{\Delta t} H(\tilde{\tau}_{\text{low}} - 1) \quad (26)$$

$\tilde{\tau}$ は着火遅れ時間に達しているかどうかの指標であり、 $\tilde{\tau}=1$ が着火遅れ時間に到達した状態を表す。また、 $\tilde{\tau}$ については以下の微分方程式を解く。

$$\frac{\partial \rho \tau}{\partial t} + \frac{\partial \rho \tau u_i}{\partial x_i} = \frac{\rho}{t_{\text{ign}}} \quad (27)$$

ここで、 t_{ign} は着火遅れ時間として与える時間スケールである。これに対する精緻なモデリングはこれからである。本シミュレーションでは Ettner[2]の着火遅れ時間分布の例を参考にして温

度と圧力の多項式近似で与えている。

3. 障害物付き管路内の DDT シミュレーション

ここでは水素濃度 15% で均質に管内を満たした場合と鉛直方向に水素濃度分布が存在する場合の 2通りの解析を実施した。

3.1. 水素の平均濃度 15% (鉛直方向に水素濃度分布あり)

まず、水素濃度分布が鉛直方向に存在する場合の計算例について述べる。管路は全長 5.4m、高さ $H=60\text{mm}$ 、障害物の間隔 $S=300\text{mm}$ 、障害物の高さ $h=12\text{mm}$ 、障害物の厚み $t=12\text{mm}$ とし、これらは参考文献[1]に全て倣った。計算格子は要素サイズが $4\text{mm} \times 4\text{mm}$ 2次元格子とした。ただし、奥行きに 4mm の 1セルのみの配置であり 2次元的な流れ場の計算である。要素数は $1350 \times 15 \times 1=20,250$ セルを用いた。障害物の高さと厚みをそれぞれ 3セルで解像するサイズであり、各々の方向で Ettner[1, 2]の使用した格子解像度 $2\text{mm} \times 2\text{mm}$ よりも敢えて 2倍粗い解像度とした。

初期値は空気に水素を 15% 混入させ 1atm とし、全密度を 1kg/m^3 と設定し、Newton 反復法を使用して得られた温度が約 290K の状態から計算を開始した。本計算に先だち、予め鉛直方向に 1次元の水素拡散の計算を解いておきこれを初期濃度分布として使用した。図 2 にその濃度分布の結果を示す。解析結果について、各地点での火炎速度を実験値と比較した例を図 3 に示す。また、

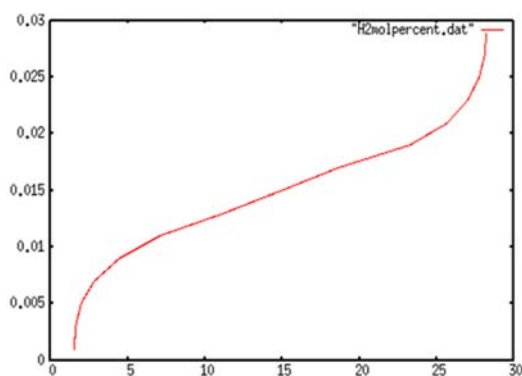


図 2 鉛直方向の水素モル濃度分布

ンター図から $x=1.8\text{m}$ 前後で火炎速度が加速している様子が見て取れ、図 3 のグラフとも対応する。これにより、乱流強度から乱流速度を与える旧来の燃焼速度モデルと Ettner の起爆モデルの組み合わせでも数メートル規模の DDT 解析を実施することは十分に可能であると考えられる。

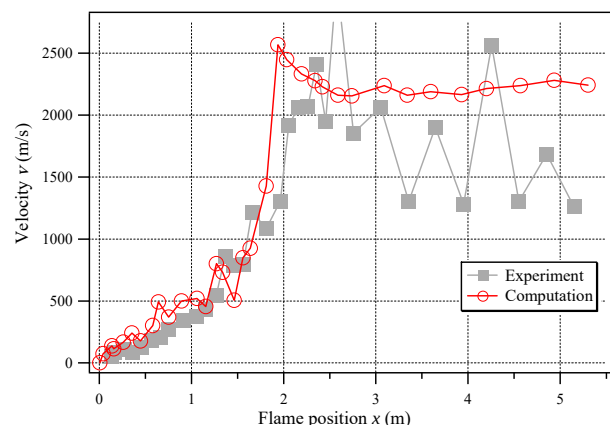


図 3 各地点における火炎伝播速度の実験値との比較 (平均値 25% 水素濃度、鉛直方向に初期濃度分布ありの場合)

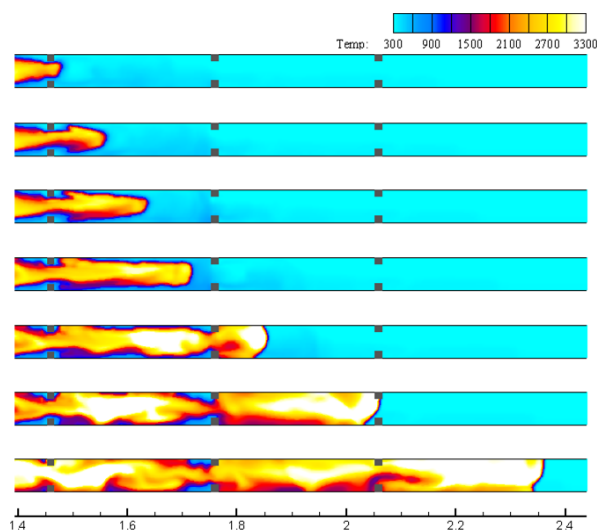


図 4 温度コンターの時系列

3.2. 水素濃度が均質的に 15% で充填された場合

前節と同様の設定にて水素濃度が均質に 15% に充填された初期値からシミュレーションを実施した。図 5 に各地点での火炎速度の変化を示す。この場合は水素濃度が一定でありそれほど高い濃度ではないため、火炎による温度も前節に比べると低く、着火遅れ時間がそれほど小さくならないこともあって、使用したモデルでは DDT に至

関連する温度コンターの時系列を図 4 に示す。コ

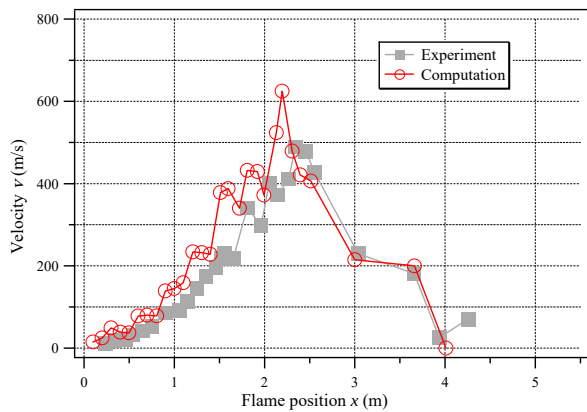


図 5 各地点における火炎伝播速度の実験値との比較 (均質な 15%濃度分布を初期値とした場合)

らず、Ettner[1]らのシミュレーション結果とほぼ同等の結果が得られることが確かめられた。

4. 大規模な長さスケールを有する容器内 DDT

ここでは最近の取り組みとして、上記の例よりも大きな長さスケールの下での実験 (通称 RUT, 参考文献 4) を対象とした計算例を示す。RUT 試験は水素-空気系で実施された常温常圧下の DDT 試験である。ここでは、(22)式で表される乱流火炎速度の代りに、フラクタルモデルにより火炎速度を決定している。この理由は、全長 30 数メートル以上に及ぶ計算対象を、格子解像度が数十センチで扱える可能性があるためである。オリジナルのフラクタルモデル[11]は乱流強度の影響や(24)式で表されるような圧力と温度の影響を考慮していないため、改良を施した上でチューニングを施したフラクタルモデルを用いている。

最初に、膨張する球状火炎の実験値と比較検証の結果を示す。図 6 は横軸が時刻、縦軸が火炎面の位置であり、実験値は文献[11]から引用した。格子幅は 20 センチとし、球を 1/8 モデルで扱っており、計算要素数は 15,625 である。粗い格子で解像しているものの実験値と良く合っているのが見て取れる。なお、乱流強度をフラクタルモデルに組み込むことにより、障害物等で流れが乱される際に火炎がさらに加速される挙動を良く再現するところにフラクタルモデルの改良の余地が残されている。ここでは参考文献[12]に見られる

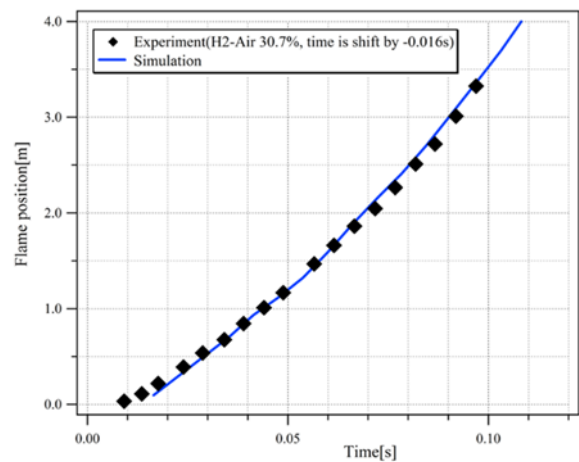


図 6 球状に膨張する火炎速度の比較図

ような試みを用いているが詳細は略す。

次に、RUT 試験[例えば、文献 4]で得られた DDT 試験結果との比較例を示す。常温、常圧下の空気に対して水素 14%濃度で一様な濃度分布を初期値としている。また、実際に配置された障害物は、奥行き方向に一部が欠けていたりするなど 3 次元的な形状をしているが、ここでは単純化して奥行き方向には隙間のない配置としている。格子スケールは、長手方向に 0.2m、鉛直方向に 0.1m、奥行き方向に 0.25m とし、結果として用いた計算要素数は 92,000 個に抑えられている。

図 7 は RUT22 と呼ばれる実験を対象とした解析例であり、図の下方の目盛は長さ[m]を表す。4 つ目の障害物を過ぎるときに爆轟波へ遷移しているのが見て取れる。この解析に関連して、実験値[10]との比較を図 8 に示す。横軸が時刻、縦軸が燃焼波面位置である。シミュレーションの値は、

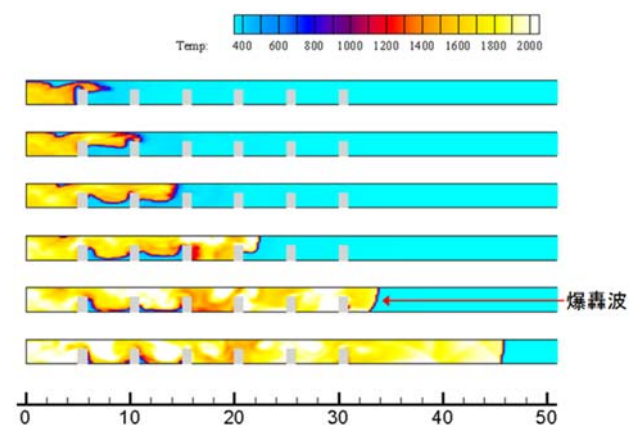


図 7 温度コンターの時系列(RUT22)

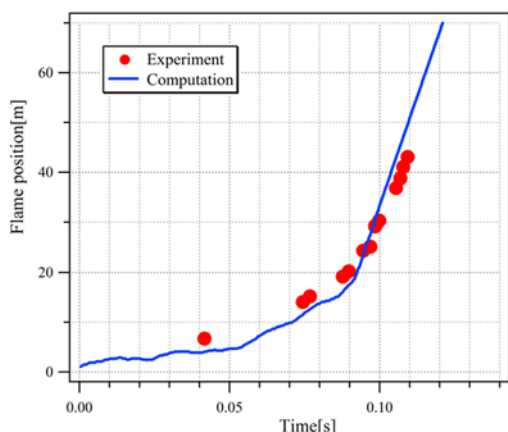


図 8 燃焼波の位置に関する実験との比較 (RUT22)

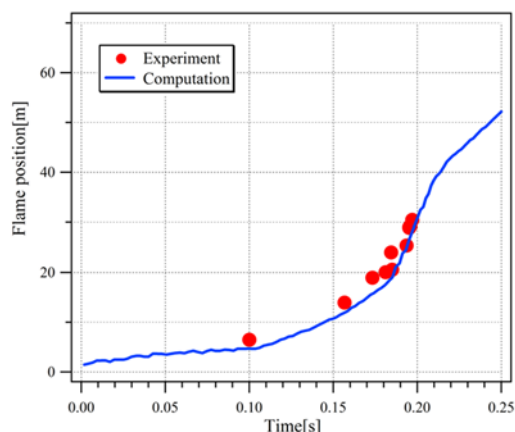


図 10 燃焼波の位置に関する実験との比較 (RUT16)

途中から勾配が急激に変化し、その後に一定となることが分かる。また、実験値から読み取れる勾配と良く一致している。このことから、DDT 現象のみならず、爆轟速度も良く再現できていると考えられる。

次に RUT16 の試験結果との比較を示す。常温、常圧下の空気に対して水素 12.5% 濃度で様な濃度分布を初期値としている。図 9 からは判別しにくい、最後の障害物を燃焼波面が過ぎた後の時刻において、燃焼波に先行して圧縮波が伝播しているのが見て取れ、その後、燃焼波は圧縮波に追いつくことなく燃え尽きる結果となっている。このことは、図 10 の実験値との比較図が示唆しているように、燃焼波面は爆轟波に至らず燃え尽きることと矛盾しない。また、実験値から乱流火炎速度は約 500m/s 前後まで加速しているのが見て取れる。これは図 6 のところで述べた球状火炎で見られる火炎速度に比べ 1 桁大きい、改良したフラクタルモデルは火炎速度を比較的良く再現できているものと考えられる。

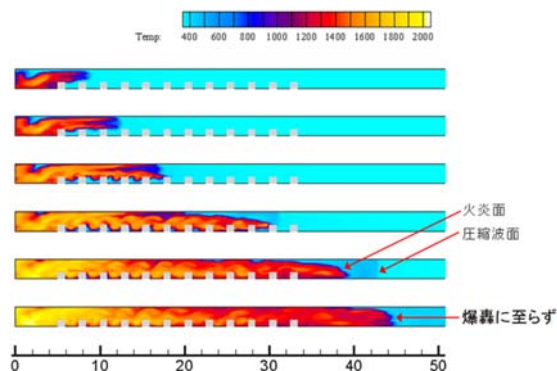


図 9 温度コンターの時系列(RUT16)

5. おわりに

本稿では、層流燃焼から乱流燃焼を経て爆轟へと遷移する燃焼流れを模擬する計算例を紹介した。Ettner[1]により示された爆轟モデルを乱流燃焼速度モデルと併用することにより、高い計算不可を回避しつつ数十メートルの長さスケールにおける DDT をシミュレーションで模擬できる可能性があることが確認できた。文献[1]に述べられている通り、爆轟波面形状に関わる微小な物理現象や境界層との干渉から生じる DDT を扱うことが困難であるものの、実際の建造物の空間スケールで生じる DDT を再現できる意義は大きいと考えられる。しかしながら、この爆轟モデルは着火遅れ時間に達した計算セルで起爆させるメカニズムのため、爆轟の消炎がうまく表現できないことや、起爆モデルにおいて着火遅れ時間のデータベースを用いなければならないことなど、使いづらい点が幾つかある。そう考えていくと、乱流燃焼速度から爆轟波へと一つのモデルで自然に繋がる何らかの数値モデルが待望される。その意味で、例えばフラクタルモデルは、DDT を生じる手前の段階における乱流燃焼速度モデルとしてばかりでなく、火炎面の自発的な乱れに乱流強度の効果を加味するような改良を施していくと、爆轟波に至るまでの燃焼波面速度を与える数値モデルに発展させ得ると考えられる。

参考文献

[1] Ettner, F, Vollmer, K. G., and Sattelmayer, T., “I

- Numerical Simulation of the Deflagration-to-Detonation Transition in Inhomogeneous Mixtures,” J. Combustion, Vol. 2014,(2014).
- [2] Ettner, F, Effiziente, Numerische Simulation des Deflagrations-Detonations Übergangs [Ph.D. thesis], TU München, 2013.
- [3] Roe, P. L., "Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors and Difference Schemes", J. Comput. Phys., Vol. 43 (2), 1981, pp. 357–372.
- [4] Van leer, B., “Flux-Vector Splitting for the Euler Equation,” Eighth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics: Proc. the Conference, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, Germany, 1982.
- [5] Einfeldt, B., "On Godunov-type Methods for Gas Dynamics,” SIAM J. Numer. Anal., Vol. 25 (2), 1988, pp. 294–318.
- [6] Toro, E. F., Spruce, M., Speares, W., "Restoration of the Contact Surface in the HLL-Riemann Solver,” Shock Waves, Vol. 4, 1994, pp. 25–34.
- [7] Pandolfi, M, and D'Ambrosio, D., “Numerical Instabilities in Upwind Methods: Analysis and Cures for the “Carbuncle” Phenomenon,” J. Comput. Phys., Vol. 166, 2001, pp. 271-301.
- [8] Liou, M. S., “A Sequel to AUSM: AUSM⁺,” J. Comput. Phys., Vol. 129, 1996, pp. 364- 382.
- [9] Wada, Y. and Liou, M. S., “A Flux Splitting Scheme With High-Resolution and Robustness for Discontinuities,” NASA TM 106452; ICOMP-93-50; AIIAA-94-0083(1994).
- [10] Hasslberger, J., Lorenz, R. B., and Sattelmayer, T., “Numerical Simulation of Deflagration-to-Detonation Transition in Large Confined Volumes,” J. Loss Prevention in the Process Industries, Vol. 36, 2015, pp. 371-379.
- [11] Tomizuka, T., Kuwana, K., Mogi, T., and Dobashi, R., “A Study of Numerical Hazard Prediction Method of Gas Explosion,” Int. J. Hydrogen Energy(2013), pp. 1-5.
- [12] Zimont, V., 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,” Trans. ASME, Vol. 120, 1998, pp. 526-532..
- [13] S. R. Turns, *An Introduction to Combustion*, McGraw-Hill, 1995.
- ※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイルがダウンロードできます。(ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。)