

堅牢かつ高速な化学反応積分法の提案

嶋英志, 森井雄飛

国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構

Proposal of a Robust and Fast Integration Method for Chemical Kinetics

by

Eiji SHIMA and Yuuhi MORII

ABSTRACT

Analysis of detailed chemical reactions of combustion sometimes requires the handling of hundreds to thousands of chemical species, and often involves very fast reactions. In the calculation combining CFD and such a chemical reaction, most of the total calculation time is occupied by chemical reaction calculation. In this paper, we propose a new method using a simple implicit method and time step decision method. Although this method requires inner iteration, it fulfills high speed and conservation law completely. We will show the formulation of the new scheme, then its effectiveness and accuracy will be shown using 0-D premixed ignition and 1-D laminar flame.

1. はじめに

高効率・低公害燃焼器の開発や新燃料の設計において、燃焼現象を正確に予測するために、詳細な化学反応メカニズムを用いた数値シミュレーションの要求が高まっている。現在、詳細な化学反応メカニズムのための化学反応自動生成ツールが用意^{1,2)}されており、0次元(0-D)予混合着火や一次元(1-D)層流火炎の数値シミュレーションを容易に行うことができる。しかしながら、このような数値シミュレーションによって得られる情報には限界があり、詳細な反応メカニズムを用いた多次元CFD解析は、燃焼現象における化学反応と流体力学の相互作用を理解するための研究^{3,7)}や産業界での利用が広がりつつある。しかし、最新の計算資源でも計算コストは非常に高い。計算コストの大部分は、大規模詳細反応の常微分方程式(ODE)を解く際に発生する。

このような問題を解決するために、VODE⁸⁾などの陰解法が広く用いられている。これらの方法は、特に硬直系を扱うために開発され、大きな時間刻みでも堅牢で高速である。しかし、圧縮性CFD解析では、音速によるCFL条件のため、時間刻みは一般に小さい値(例えば、 1×10^{-8} s以下)に制限される。このような場合、陰解法では、主な計算コストはJacobian行列生成とLU分解にある。これは、化学種が増加すると顕著になる。

一方、Jacobian-free積分法、すなわち行列演算のない方法は、計算コスト削減のため大きな注目を集めている。前に述べたように、圧縮性CFD解析の時間刻みは非常に小さい値に制限されている。したがって、この場合には硬直性は緩やかになる。それでも、最小化学特性時間は、圧縮性CFDから要求される時間刻みよりもか

なり小さくなることがあるので、ルンゲクッタ法などの従来の陽解法の適用は困難である。

この問題を克服するために、化学反応のODEを解くための堅牢なJacobian-free積分法が提案されている。よく知られているCHEMEQ2⁹⁾は、予測子-修正子法と準定常近似(QSSA)を組み合わせて堅牢な手法を構築し、いくつかの反応性CFD解析で成功を収めている。Gouら¹⁴⁾は収束速度を向上させるためにCHEMEQ2にダイナミックマルチタイムスケール(MTS)法とハイブリッドMTS(HMTS)法の両方を採用した陽的積分法を開発した。MTSやHMTSをVODEと比較すると、結果は正確で、計算コストを削減できることが示された。しかし、CHEMEQ2やMTSは硬直な条件では、あまり堅牢ではないことが報告されている¹¹⁾。更に、MTSは各時間ステップで化学種のグループ分けのための計算コストを要する。

最近Moriiらは迅速かつ堅牢なJacobian-free積分法ERENA¹²⁾を提案し、多くの化学種と硬直な化学反応速度を持つ系でより高速で、より堅牢であることを示した。一方、ERENAでは全質量は保存されるが、各原子の質量は保存しない。修正は可能だが、この変更は計算コストを増加させ、ERENAの利点を失う可能性がある。各原子質量非保存は、既存の陽解法の弱点の1つである。

本論では、原子質量保存を満足、また内部反復中に質量分率の正值性も保証される、Jacobian-free陰解法を示す。本法は内部反復を必要とするが、計算コストが小さく、大きな時間ステップで堅牢である。定式化を示したのち、予混合着火問題や層流燃焼問題により精度・計算コストを既存の時間積分法と比較することで、その特徴を示す。

2. 化学反応の常微分方程式

N 化学種の化学反応方程式は、質量分率 y_i について、次のように書ける。

$$\frac{dy_i}{dt} = \omega_i = c_i - \frac{y_i}{T_i}, i=[1, N] \quad (1)$$

$c_i, T_i > 0$ は、生成率と（消滅）特性時間にあたり、各化学種の質量分率と温度の非線形関数である。また、次の制約条件がある。

$$\sum_{i=1}^N y_i = 1 \quad (2)$$

$$0 \leq y_i \leq 1 \quad (3)$$

また、 ω_i は常に下記を満たす。

$$\sum_{i=1}^N \omega_i = 0 \quad (4)$$

3. 陰解法に対する疑似時間法の導入

$c, T > 0$ が定数の次の線型方程式を考える。

$$\frac{dz}{dt} = c - \frac{z}{T} = \omega \quad (5)$$

次の陽解法では安定性条件は式(7)で与えられる。

$$z^{n+1} = z^n + \left(c - \frac{z^n}{T} \right) \Delta t \quad (6)$$

$$0 < \Delta t \leq 2T \quad (7)$$

したがって、陽解法では、時間刻みを特性時間程度に抑える必要があり、全素反応の最小の特性時間に制限されるので、時間刻みが極めて小さく制限される。そこで、安定性限界に左右されない陰解法として、次のようなワンパラメータファミリを考える。

$$\frac{z^{n+1} - z^n}{\Delta t} - \left\{ \theta \omega^{n+1} + (1-\theta) \omega^n \right\} = 0 \quad (8)$$

これの解法として、1ステップ分の時間発展を人工時間 τ の時間発展の収束解として求める疑似時間法（PTS：Pseudo Time Step Method）を考える。

$$\frac{z^{k+1} - z^k}{\tau} + \left[\frac{z^k - z^n}{\Delta t} - \left\{ \theta \omega^k + (1-\theta) \omega^n \right\} \right] = 0 \quad (9)$$

$$\Leftrightarrow z^{k+1} = z^k - \tau \left[\frac{z^k - z^n}{\Delta t} - \left\{ \theta \omega^k + (1-\theta) \omega^n \right\} \right]$$

式(9)は、次のように整理できる。

$$z^{k+1} = \alpha z^k + \beta \quad (10)$$

$$\alpha = \left\{ 1 - \tau \left(\frac{\theta}{T} + \frac{1}{\Delta t} \right) \right\} \quad (11)$$

$$\beta = \tau \left\{ c + \left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{1-\theta}{T} \right) z^n \right\} \quad (12)$$

係数が定数の場合には、次の解析解が得られる。

$$z^k = \alpha^k \left(z^0 - \frac{\beta}{1-\alpha} \right) + \frac{\beta}{1-\alpha} \quad (13)$$

ここで右辺第一項の上付きはべき乗を示す。収束条件は下記のように書ける。

$$|\alpha| = \left| 1 - \tau \left(\frac{\theta}{T} + \frac{1}{\Delta t} \right) \right| < 1 \Leftrightarrow \tau < \frac{2T\Delta t}{\theta\Delta t + T} \quad (14)$$

したがって、 Δt の選択に関わらず、 τ が式(14)を満たせば収束し、収束解として陰解法が実現される。システムの場合、化学種ごとに異なる τ を用いることが可能である。

4. PTSでの正值性を維持できる時間積分法

Newton反復の途中に質量分率が負になると生成率等が異常な値となり計算の破綻を招く。そこで、任意の $T, c, z^n > 0$ についての z^{k+1} の正值性維持を考える。式(10-12)より十分条件は下記で表せる。

$$1 - \tau \left(\frac{\theta}{T} + \frac{1}{\Delta t} \right) \geq 0 \quad (15)$$

$$\frac{1}{\Delta t} - \frac{1-\theta}{T} \geq 0 \quad (16)$$

$\theta \neq 1$ の時、式(16)は次と等価である、

$$\Delta t \leq \frac{T}{1-\theta} \quad (17)$$

したがって、 $\theta \neq 1$ の時、任意の $c, z^n > 0$ について正值性の保証には、陽解法の安定性条件と同様に化学特性時間と同程度に Δt を制限する必要がある。そこで、 Δt によらず正值性維持できる $\theta=1$ のEuler陰解法を選択する。

この場合、式(9)は次のように書ける。

$$z^{k+1} = \left\{ 1 - \tau \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{\Delta t} \right) \right\} z^k + \tau \left\{ c + \frac{z^n}{\Delta t} \right\} \quad (18)$$

式(18)より、正值性を維持する τ の条件は次で与えられる。

$$1 - \tau \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{\Delta t} \right) \geq 0 \Leftrightarrow \tau \leq \frac{T\Delta t}{T + \Delta t} \quad (19)$$

式(14)との比較により、正值性維持の場合には安定性も保証される。正值性を維持する最大の τ を用いた場合、式(18)は次のように整理できる。

$$z^{k+1} = \frac{T\Delta t}{T + \Delta t} \left\{ c + \frac{z^n}{\Delta t} \right\} \quad (20)$$

線形の場合、式(20)は1ステップで収束解を与える。

化学反応方程式の各化学種について書く。

$$y_i^{k+1} = \frac{T_i^k \Delta t}{T_i^k + \Delta t} \left\{ c_i^k + \frac{y_i^n}{\Delta t} \right\} \quad (21)$$

なお非線形性を考慮しても正值性維持は明らかである。

非線形の場合の安定性のため、 τ を制限する、

$$\tau_i^k = \frac{\lambda T_i^k \Delta t}{T_i^k + \Delta t} \quad (22)$$

$$0 < \lambda \leq 1$$

この λ を導入すると、漸化式は次のように表わせる。

$$y_i^{k+1} = (1-\lambda)y_i^k + \lambda \frac{T_i^k \Delta t}{T_i^k + \Delta t} \left(c_i^k + \frac{y_i^n}{\Delta t} \right) \quad (23)$$

数値実験の結果 $\lambda = 0.5$ であれば幅広い条件で安定である。収束すると下記の関係が成立する。

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t \omega_i^{n+1} \quad (24)$$

したがって、下記のように保存則も成立する。

$$\sum_{i=1}^N y_i^{n+1} = \sum_{i=1}^N y_i^n + \Delta t \sum_{i=1}^N \omega_i^{n+1} = \sum_{i=1}^N y_i^n = 1 \quad (25)$$

5. 時間刻みの決定法

効率的な計算実施には特性時間を大きく超える Δt の利用が必須である。線形の場合には Euler 陰解法は無条件安定であるが化学反応などの非線形方程式の場合には、精度・安定性の観点から Δt を制限する必要がある。そこで本節では、安定性と効率を両立する時間刻み決定法を考察する。

5.1 ERENA 法での時間刻み選択法

ERENA法の場合には、時間刻みを下記の手順で決定する。式(1)のEuler陽解法は次のように書ける。

$$\begin{aligned} y_i^{n+1} \text{ Explicit} &= y_i^n + \left(c_i^n - \frac{y_i^n}{T_i^n} \right) \Delta t \\ &= y_i^n + \omega_i^n \Delta t \equiv y_i^n + \beta_{\text{Explicit}} \omega_i^n \end{aligned} \quad (26)$$

一方、QSSA¹⁾は次で書ける。

$$\begin{aligned} y_i^{n+1} \text{ QSS} &= (y_i^n - c_i T_i) \exp\left(-\frac{\Delta t}{T_i}\right) + c_i T_i \\ &= y_i^n + T_i \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{T_i}\right) \right) \omega_i^n \equiv y_i^n + \beta_{\text{QSS}} \omega_i^n \end{aligned} \quad (27)$$

式(26)と式(27)の差は、下記であらわされる。

$$\text{Error}_{E-Q} \equiv (\beta_{\text{Explicit}} - \beta_{\text{QSS}}) \omega_i^n \quad (28)$$

係数が定数であれば、QSSAは厳密解を表すので、式(28)はEuler陽解法の誤差を示す。

一方、質量保存を考えると、Euler陽解法は質量保存を満たす。

$$\sum_{i=1}^N y_i^{n+1} \text{ Explicit} = 1 \quad (29)$$

一方、QSSAでは、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N y_i^{n+1} \text{ QSS} &= \sum_{i=1}^N (y_i^{n+1} \text{ Explicit} - \text{Error}_{E-Q}) \\ &= 1 - \sum_{i=1}^N \text{Error}_{E-Q} \neq 1 \end{aligned} \quad (30)$$

つまり、Euler陽解法の誤差と見えたものが、逆にQSSAの保存則の誤差となっている。この矛盾は、方程式の非線形性に起因し、 $\sum_{i=1}^N \text{Error}_{E-Q}$ は非線形性の指標とみなせる。そこで、ERENAでは下記を満たすように試行錯誤的な反復計算で Δt を決定する。

$$\left| \sum_{i=1}^N \text{Error}_{E-Q} \right| < 10^{-8} \quad (31)$$

5.2 新しい時間刻みの決定法

Euler陰解法においても、ERENAと同じ方法を使うこともできるが、式(31)を満たす Δt を求めるのに、試行錯誤的な方法しかないという問題がある。この原因の大きなものは、QSSAにおける指数関数の利用である。そこで、QSSAに変えて、Euler陰解法の利用を考える。Euler陰解法は式(26,27)と同様の形式で次のように書ける。

$$\begin{aligned} y_i^{n+1} \text{ Implicit} &= y_i^n + \frac{T_i \Delta t}{T_i + \Delta t} \omega_i^n \\ &\equiv y_i^n + \beta_{\text{Implicit}} \omega_i^n \end{aligned} \quad (32)$$

式(26)と式(32)の差を次であらわす。

$$\text{Error}_{E-I} \equiv (\beta_{\text{Explicit}} - \beta_{\text{Implicit}}) \omega_i^n = \frac{\Delta t^2}{T_i + \Delta t} \omega_i^n \quad (33)$$

したがって、保存則のエラーは次のようにあらわされる。

$$\begin{aligned} \left| \sum_{i=1}^N y_i^{n+1} \text{ Implicit} - 1 \right| &= \left| \sum_{i=1}^N \text{Error}_{E-I} \right| \\ &\leq \sum_{i=1}^N |\text{Error}_{E-I}| \leq N \max_{i=1}^N (|\text{Error}_{E-I}|) \end{aligned} \quad (34)$$

そこで、次の制約で Δt を決定する。

$$\max_{i=1}^N (|\text{Error}_{E-I}|) \leq \varepsilon \quad (35)$$

化学種 i について、式(35)を書くと；

$$\frac{\Delta t^2}{T_i + \Delta t} \left| c_i - \frac{y_i^n}{T_i} \right| = \frac{\Delta t^2}{T_i + \Delta t} |\omega_i^n| \leq \varepsilon \quad (36)$$

したがって、 Δt に関する条件は次のように書ける。

$$0 < \Delta t \leq \frac{\varepsilon}{2|\omega_i^n|} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4|\omega_i^n| T_i}{\varepsilon}} \right) \quad (37)$$

ここで、 $b=1/T$ を用いて式(36,37)を書き直すと、

$$\frac{b_i \Delta t^2}{1 + b_i \Delta t} |\omega_i^n| \leq \varepsilon \quad (38)$$

$$0 < \Delta t \leq \frac{\varepsilon}{2|\omega_i^n|} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4|\omega_i^n|}{b_i \varepsilon}} \right) \quad (39)$$

したがって、零割回避を含めて、実際の計算手順は次のように書ける。

$$\Delta t = \Delta t_{initial}$$

DO i=1,N

$$\text{IF} \left(\frac{b_i \Delta t^2}{1 + b_i \Delta t} \left| \omega_i^n \right| > \varepsilon \right) \text{THEN}$$

$$\Delta t = \frac{\varepsilon}{2 \left| \omega_i^n \right|} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4 \left| \omega_i^n \right|}{b_i \varepsilon}} \right) \quad (40)$$

ENDIF

ENDDO

数値実験の結果、 $\varepsilon=10^{-3}$ で、幅広い条件で安定に計算可能である。式(23)に、この時間刻み決定法を組み合わせた手法を、P3CO(Positivity Preserving Pseudo Time Step Method for Chemical Reaction's Ordinary Differential Equation)と呼ぶ。

6. 計算例

本節では、硬直性の強い条件下における予混合着火解析及び一次元数値流体解析に各々の積分法を組み込んだ一次元層流燃焼解析を実施し、P3COの精度及び解析速度をVODE及びERENAと比較することで検証した。また、本節で利用する詳細化学反応モデルは水素燃料にUT-JAXA¹³⁾モデルを用い、炭化水素燃料にKUCRS¹⁾を用いて作成したモデルを使用した。表1にそれぞれの化学種数・素反応数を示す。

	No. of Species	No. of reactions
H ₂ /O ₂	11	34
CH ₄ /O ₂	68	334
nC ₇ H ₁₆ /O ₂	373	1071

6.1 予混合着火解析

P3COがERENAよりも高効率となると予測される硬直性の強い条件である高圧かつ酸化剤をO₂とした0次元予混合着火解析を実施し、結果をVODE及びERENAと比較する。解析条件は内部エネルギー・体積一定、初期圧力1MPa、初期温度1300Kで、当量比1のH₂/O₂、CH₄/O₂の予混合着火解析を実施した。時間積分法として、VODEとERENA及び本研究で開発したP3COを選択し、時間刻み幅は10⁻⁷sとした。

図1, 2にH₂/O₂、CH₄/O₂を用いた着火解析の結果を、図3, 4に1ステップあたりの解析時間比の履歴をそれぞれ示している。ここで、解析時間比は、それぞれの1ステップあたりの解析時間をVODEの1ステップあたりの最大解析時間で除したものである。

図1のH₂/O₂の結果から、ERENAは着火が遅れ、P3COは

着火が早いことが分かる。ERENAは設定した閾値(式(37))において、着火遅れ時間が大幅に遅れている。これは、閾値を小さくすれば回避可能な問題ではあるが、閾値を小さくすると、解析コストが大幅に増大するため、CFD解析での利用を考えると現実的ではない。さらに、図3から水素燃料の場合にはVODEがP3COやERENAに比べて高速であることが分かる。これは化学種数が少なく、VODEに必要なJacobian生成に関連する負荷が小さく、一方、強い硬直性のためERENAやP3COで必要な反復計算負荷が大きいためである。よって、P3CO及びERENAは水素燃料を用いた硬直性の強い条件ではVODEに比べて利得がなく、高圧酸水素の条件ではVODEが有利なことが分かる。

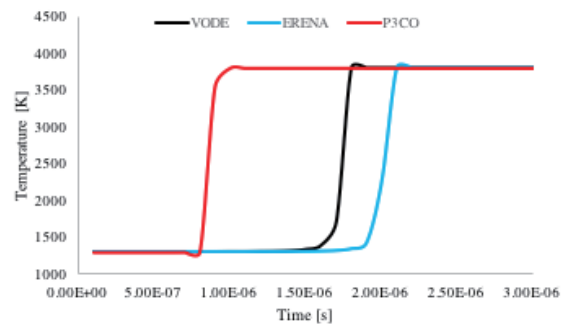


Fig. 1. Temperature history of H₂/O₂ case.

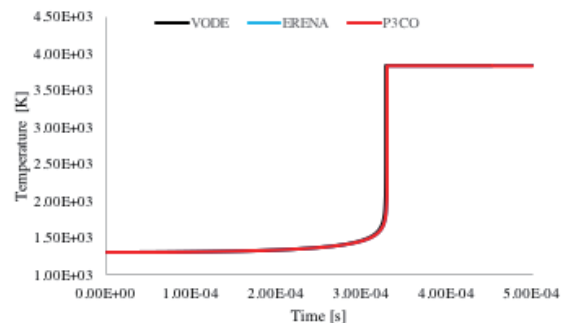


Fig. 2. Temperature history of CH₄/O₂ case.

次にCH₄/O₂の結果を検証する。図2から、P3CO及びERENAはVODEと良く一致することが分かる。また、図4から、P3COとERENAはVODEに比べて着火領域近傍の最も硬直性が強い時間を除き、大幅に解析負荷を低減させることができることが分かる。

最後にERENAとP3COのVODEに対する高速化率を表2に示す。高速化率の定義は、VODEの解析負荷をERENAおよびP3COの解析負荷でそれぞれ除したものとした。つまり、1より大きければVODEより高速である。硬直性の強い条件下で水素燃料を用いた解析を実施する場合、ERENA及びP3COはVODEよりも解析負荷が大きい。しかし、大きな化学種数を持つメタン燃料のケースではERENAとP3COは硬直性の強い条件下でもVODEよりも高速であることが分かる。また、燃料に関係なく

P3COはERENAよりも高速である。

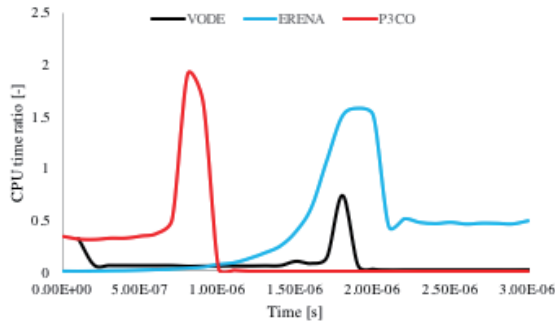


Fig. 3. CPU time ratio history of H₂/O₂ case.

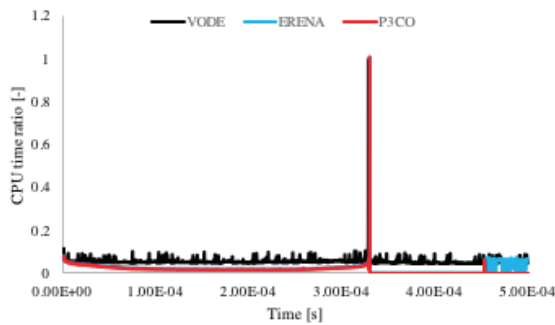


Fig. 4. Temperature history of CH₄/O₂ case.

	ERENA	P3CO
H ₂ /O ₂	0.37	0.48
CH ₄ /O ₂	2.44	3.30

6.2 一次元層流燃焼速度

次に、P3COをCFD解析へ組み込んだ性能・精度を調査する。ただし、本解析はP3COをCFDコードに組み込んで問題がないことの確認するための簡易解析であり、硬直性の強い条件ではない。

支配方程式として一次元圧縮性Navier-Stokes方程式を用いた。数値解析手法として、化学反応による解の硬直性を避けるために、流体と化学反応方程式を分離してそれぞれを時間進行させる分離型解法を用いている。数値流束をHLLC¹⁴⁾により評価し、minmod limiterを用いたMUSCL¹⁵⁾で高次精度化を実施した。時間発展は3次精度TVD Runge-Kutta¹⁶⁾を用いた。また、化学反応方程式の時間積分方には比較のためVODE, ERENA, P3CO法を用いた。解析は初めにNASA-CEAプログラム¹⁷⁾で既燃状態を計算領域右側に、計算領域左側に未燃ガスを配置した条件で解析をはじめ、左の境界から一定速度の未燃ガスが流入する条件で実施した。解析条件は、0.1 MPa、300 Kの条件で、当量比1のH₂/AirとnC₇H₁₆/Airの予混合気を用いた。

H₂/Airの層流燃焼速度の履歴を図5に、nC₇H₁₆/Airの履歴を図6に示す。P3COの結果はVODE, ERENAの結果によく一致していることが分かる。したがって、P3COをCFD解析に組み込んでも問題なく計算可能であることが分かる。

図5から、P3COの結果はERENAよりもVODEとの誤差が大きくなっている。この理由は水素燃料を用いた0次元着火問題におけるP3COの結果で精度がERENAよりも下がっている原因と同じであると考えられる。

また、nC₇H₁₆/Airの結果では、P3COはERENAよりもVODEと良く一致している。ERENAが一致しない理由は保存性や誤差の蓄積に起因するものであると考えられる。

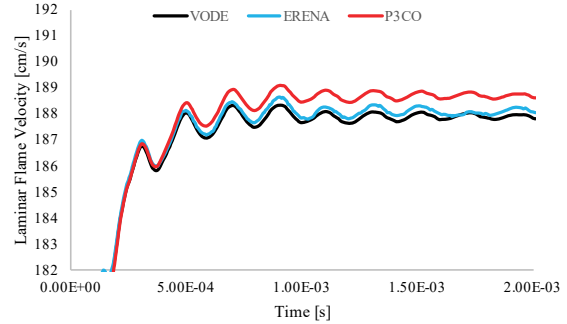


Fig. 5. Laminar flame velocity history of H₂/O₂ case.

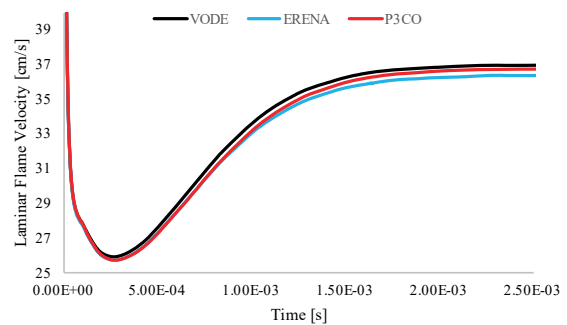


Fig. 6. Laminar flame velocity history of CH₄/O₂ case.

	ERENA	P3CO
H ₂ /Air	1.15	1.19
nC ₇ H ₁₆ /Air	125	44

最後にERENAとP3COのVODEに対する高速化率を表3に示す。硬直性の強い条件では無いため水素燃料の条件でもERENA及びP3COはVODEよりも高速であることが分かる。また、化学種数の大きな条件ではERENA及びP3COを利用すればVODEに比べて大幅に解析負荷を下げる事が可能となる。また、水素燃料の条件ではERENAよりもP3COが高速である。以上の結果より、化学種が少ないケースや硬直性の強い条件下ではP3COはERENAに比べて優位であることが示すことができた。

7. P3COの誤差要因分析

図1に示されるように、H₂/O₂反応においてP3COの着火遅れはVODEと一致しない。また図5に示されるように、H₂/O₂反応において層流燃焼速度がP3COとVODE/ERENAに不一致が見られる。この原因を調べる

ために H_2/O_2 反応の0次元計算を用いて時間精度を確認する。

図7に(外側)時間刻みを 10^{-9} sから 10^{-7} sまで変化させたときのP3COの結果をVODEと比較する。この場合、着火遅れ時間は 10^{-6} s程度であるが、P3COでVODEと同様の着火遅れ時間を再現するには 10^{-8} s以下の時間刻みを要することが分かる。一方、計算コストに関して $dt=10^{-7}$ のVODEの計算時間を基準として両者の比較を表4に示す。時間刻みが 10^{-8} s以下であれば、P3COはVODEよりも高速で精度とコストを両立させることができる。

P3COは安定性のためにEuler陰解法を用いているため時間一次精度であり、着火などの現象に比べ1/10より十分小さい時間刻みが時間精度維持のために必要ということが、6節で示したいくつかの不一致の原因と考えられる。5.2に示した時間刻みの決定法は安定に計算できる上限を示すには有効であるが、時間精度の観点では更なる改良が必要である。またEuler陰解法の利用は正值性維持の必要条件ではなく、改良の余地がある。

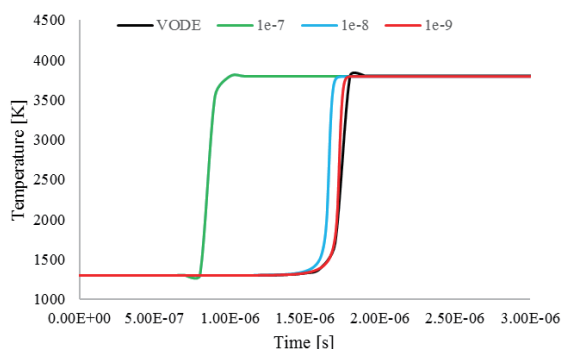


Fig. 7 Temperature history of H_2/O_2 case.

	$dt=10^{-7}$	$dt=10^{-8}$	$dt=10^{-9}$
VODE	1.00	4.47	33.5
P3CO	2.07	3.73	13.1

8. まとめと結論

簡単な陰解法と新しい時間刻み設定法を組み合わせたJacobian-free積分法P3CO(Positivity Preserving Pseudo Time Step Method for Chemical Reaction's Ordinary Differential Equation)の定式化と基本的な計算例を用いた検証と評価を示した。P3COは正值性を維持する内部反復を用いることで保存則を完全に満足し、硬直な系でも堅牢であることが期待される。

既存の積分法VODE及びERENAとの比較では、硬直性の高い予混合着火においては、P3COはERENAよりも高速であるが、化学種の少ない H_2/O_2 のケースではVODEが最も高速であった。ERENAやP3COなどJacobian-free積分法は化学種が多い場合に有利であることが改めて示された。

一方、硬直性の高くない一次元層流燃焼においては、いずれのケースでもVODEよりは高速であったが、ERENAとの比較では、 H_2/Air でほぼ同等、 nC_7H_{16}/Air では1/3程度の速度にとどまった。

また、いずれのケースでもの H_2 の燃焼のケースではVODE、ERENAの計算結果と一致しなかった。

硬直な多化学種系での高速性・安定性というP3COの当初の目的は実現されている。一方、新しい時間刻み決定法は、安定な時間刻みの上限を示す点では成功しているが、十分な時間精度を得るには、更なる改良が必要である。

参考文献

- 1) A. Miyoshi, Proc. Soc. Automot. Eng. Jpn. 36(5) (2005) 1–6.
- 2) C.W. Gao, J.W. Allen, W.H. Green, R.H. West, Comput. Phys. Commun. 203 (2016) 212–225.
- 3) Y. Mizobuchi, S. Tachibana, J. Shinio, S. Ogawa, T. Takeno, Proc. Combust. Inst. 29(2) (2002) 2009–2015.
- 4) S. Kong, R. Reitz, Proc. Combust. Inst. 29(1) (2002) 663–669.
- 5) C. Yoo, E. Richardson, R. Sankaran, Proc. Combust. Inst. 33(1) (2011) 1619–1627.
- 6) N. Tsuboi, Y. Morii, A. Koichi Hayashi, Proc. Combust. Inst. 34(2) (2013) 1999–2007.
- 7) S. Paolucci, Z.J. Zikoski, T. Grenga, J. Comput. Phys. 272 (2014) 842–864.
- 8) P.N. Brown, G.D. Byrne, A.C. Hindmarsh, VODE: a variable-coefficient ODE solver, SIAM J. Sci. Stat. Comput. 10(5) (1989) 1038–1051.
- 9) D.R. Mott, E.S. Oran, B. van Leer, J. Comput. Phys. 164(2) (2000) 407–428.
- 10) X. Gou, W. Sun, Z. Chen, Y. Ju, Combust. Flame 157(6) (2010) 1111–1121.
- 11) H. Terashima, Y. Morii, M. Koshi, Int. J. Energ. Mater. Chem. Propuls. 14(3) (2015) 177–196.
- 12) Y. Morii, H. Terashima, M. Koshi, T. Shimizu, & E. Shima. (2016). ERENA: Journal of Computational Physics, 322, 547–558.
- 13) K. Shimizu et al, J. Prop. Power, vol. 27, no. 2, pp.383–395.
- 14) Toro, E.F. et al., Shock Waves, 4: pp. 25–34 (1994)
- 15) van Leer, V. et al, Int. Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, pp. 507–512 (1982)
- 16) Gottlieb, S. et al, Math. Comput., 67: pp. 73–85 (1998).
- 17) Gordon, S. et al., NASA Ref. Publication 1311 (1996).