2ZB-5

すすの物理的機構と光学特性を考慮した拡散燃焼のビジュアルシミュレーション

池田 英貴　　楽　詠灝　　西田 友是

東京大学

1 はじめに

自然現象の表現は映画やゲームなど様々なメディアにおいて需要があり, その中でも火炎現象は重要な現象の一つである. 自然界における一般的な火炎現象は拡散燃焼であり, 赤・燈色の炎とそこから生じる黒煙から成るが, これらにはすすが大きく影響している. 本研究では, 火炎現象におけるすすの影響を考慮し, 炎と煙を統一的に表現でき, かつ従来法よりも現実に忠実な描写結果が得られる, 物理則に基づいたシミュレーション法を提案する.

2 関連研究

物理の分野では, 火炎現象とすすに関する研究は, Tesner ら[1] にはじまり, 近年では Cheung ら[2] はすすを考慮した物理モデルによって大規模の炎および煙を統一的にシミュレートすることに成功している. 他方で, CG の分野の一般的な手法では, Nguen ら[3] のように炎と煙は別々の物理モデルを用いることがほとんどであり, 炎から煙が出てくるように見せるために恣意的なパラメータ操作が介入してしまい自然さが失われてしまう.また, 炎や煙をはじめとする関与媒質のレンダリングにおいて高い写実性を得るためには, 正確に光学パラメータを求めることが重要である. そのためには粒子半径の影響を考慮する必要があるが, CG 分野の従来法は, それを無視していた. そこで本研究では, これらの問題点を解決するための手法を提案する.

3 提案法

提案法による計算は, 以下で詳述する, 格子ベースおよび粒子ベースでの計算を交互に繰り返すことで進められる.

3.1 格子ベースでの計算

格子ベースの計算では, MAC グリッドを,用いて, 燃焼反応および移流の計算を行う.

3.1.1 燃焼反応

提案法で扱う発熱を伴う燃焼反応は, 簡単のため以下の反応のみとする.

$$\text{Fuel} + \text{Oxidizer} \rightarrow \text{Products} + Q_{heat} \tag{1}$$

Fuel は燃料, Oxidizer は酸化剤, Products は反応による生成物, Q_{heat} は反応によって発生する熱量である. 火炎現象の燃料としては様々なものが考えられるが, 本研究では簡単のためメタンを考えるため, 式(1) における Oxidizer は酸素, Products は二酸化炭素と水とし, Q_{heat} は 89360[J] となる. これより式(1) の反応速度 k は, アレニウスの式に従うと仮定すれば, 以下のようになる.

$$k = A\rho^2 Y_{CH4} Y_{O2} e^{-B/T} \tag{2}$$

ここで, ρ は流体の密度, Y_{CH4}, Y_{O2} はそれぞれメタン, 酸素の総質量に対する質量分率であり, また, A, B は定数である.

3.1.2 移流

移流の計算は Chenung ら[2]の提示した圧縮性流体のシミュレーション手法を用いる.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_j u_j)}{\partial x_j} = 0 \tag{3}$$

$$\frac{\partial(\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho g_j \tag{4}$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i}\{(E+p)u_i\} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\tau_{ij}u_j) + \kappa\nabla^2 T - \rho u_i g_i \tag{5}$$

ρ は流体の密度, t は時刻, u_i は速度, p は圧力, E はエネルギー, T は温度, τ_{ij} は粘性テンソルを表す. また g_i は重力加速度ベクトルの各成分に対応する. 式(3) は質量保存, 式(4) は運動量保存, 式(5) はエネルギー保存を表す.

3.2 粒子ベースでの計算

粒子ベースでの計算では, すす粒子(図 1)という概念を導入し, すす粒子の近傍におけるすすの分子の分布を代表する. すすの各分子は半径 r の球で近似し, その個数分布(粒径分布) は次の対数正規分布に従うとする.

$$n(r) = \frac{N_{all}}{\sqrt{2\pi}(\ln\sigma)r}\exp\left[-\frac{(\ln r - \ln r_{eff})^2}{2(\ln\sigma)^2}\right] \tag{6}$$

ここで, $n(r)$ は単位体積あたりの半径 r のすす分子の個数, N_{all} は単位体積あたりの全てのすす分子の数, r_{eff} は代表半径, σ は標準偏差である.

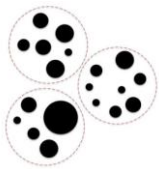

図 1. すす粒子の概念. 各すす粒子（点線）は, 近傍のすす分子（黒点）の集団を代表する.

Visual simulation of diffusion flame taking into account physical mechanism and optical property of soot
Hideki IKEDA, Yonghao YUE, Tomoyuki NISHITA
Department of Complexity Science and Engineering Graduate School of the University of Tokyo

Copyright ©2012 Information Processing Society of Japan.
All Rights Reserved.

3.2.1 すすに関する計算

Cheung[2] らの物理モデルでは, 格子ベースですすの個数密度と体積分率の時間変化を記述しているが, これと式(7) を利用すると粒子ベースにおける N_{all} と r_{eff} の時間変化を以下のように求めることができる.

$$\frac{dN_{all}}{dt} = C_\alpha A\rho^2 X_{fu}\sqrt{T}e^{-T_\alpha/T} - \frac{C_\beta}{A}\sqrt{T}N_{all}^2 - 3R_{ox}e^{-3/2(\ln\sigma)^2}\rho^{-2/3}\rho_s^{-1/3}\frac{N_{all}}{r_{eff}} \tag{7}$$

$$\frac{dr_{eff}}{dt} = \frac{36C_\alpha\rho_s}{\pi e^{9/2(\ln\sigma)^2}}X_{fu}\sqrt{T}e^{-T_\alpha/T}\frac{1}{N_{all}r_{eff}^2} - \frac{1}{3}\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3}e^{-3/2(\ln\sigma)^2}\rho^{1/3}\rho_s^{1/3}C_\gamma\sqrt{T}e^{-T_\gamma/T}X_{fu} + \frac{C_\beta}{3A}\sqrt{T}N_{all}r_{eff} - \frac{1}{3}C_\alpha A\rho^2 X_{fu}\sqrt{T}e^{-T_\alpha/T}\frac{r_{eff}}{N_{all}} \tag{8}$$

式(7) の右辺において, 第 1 項はすすの核生成, 第 2 項は凝集, 第 3 項は燃焼による効果を表す. 同様に, 式(8)の右辺のおいて, 第 1 項および第 4 項はすすの核生成, 第 2 項は表面成長, 第 3 項は凝集による効果を表す. ここで, ρ は化学種の密度の合計, X_{fu} は燃料のモル分率, R_{ox} は総括反応率, A はアボガドロ数, ρ_s はすすの物質の密度を表す. C_α, C_β, C_γ, T_α, T_γ はそれぞれ定数である. これらの物理量に関する計算は各すす粒子ごとに行われ, 式(7), (8) の右辺における ρ, T, X_{fu}, R_{ox} の値は, 各すす粒子近傍の格子から得る. またこれらの微分方程式は 3 次の Runge-Kutta 法とニュートン法を用いて解いた.

3.2.2 すす粒子の追加および削除

メモリ使用量を軽減するために, すすの存在領域のみにすす粒子を配置する. 新たなすす粒子を次の(A) または(B) を満たす格子に追加し, (C) または(D) を満たす粒子は削除する.

(A) $T > T_g$ and $C < C_g$ (B) $N_{all} > N_g$

(C) $N_{all} < N_0$ and $T < T_e$ (D) $(x_s, y_s, z_s) \notin D_s$

ここで, T_g, C_g, N_g, N_e, T_e は定数, (x_s, y_s, z_s) はすす粒子の空間座標, D_s はシミュレーション領域である.

4 結果

2 次元および 3 次元での実験を行った. 計算環境等は, 表 1 の通りである. 計算空間の初期温度は 400K であり, 300K の空気が一様に満たされている. 1 タイムステップは 3.18×10^{-6} 秒である.

また, 図 2 は火炎現象の一連の時間変化を示している. 炎(赤色の領域) から煙(灰色の領域) が生じており, また, t=1.0s では, 煙の渦の中に火の粉が見られ, 提案法によって, 火炎現象を統一的に表現できることがわかる. 図 3 は 3 次元での実験結果であり, 煤粒子の運動の様子を表している. 各タイムステップにける粒子の色の相違は, すすの個数密度の相違を示している.

表 1. 2D, 3D での計算環境等.

	計算機		計算空間	解像度	初期粒子数
	CPU	GPU			
2D	Intel Core2 Quad @2.66GHz	NVIDIA GeForce 8800	1.5m ×0.75m	256×128	5000
3D	Intel Core2 Extreme X9650 @3.00GHz	NVIDIA GeForce GTX 480	0.35m ×0.35m ×0.70m	96×96 ×192	9000

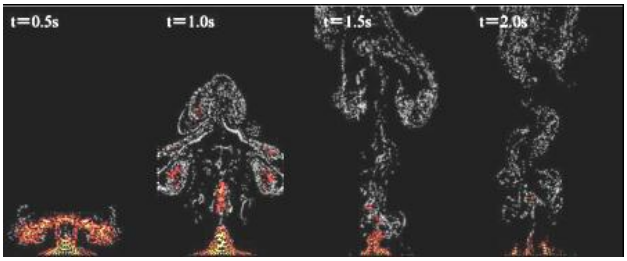

図 2. 2D での実験結果. 可視化領域は, 計算領域下部の縦 0.21m で横 0.42m の領域に限定した.

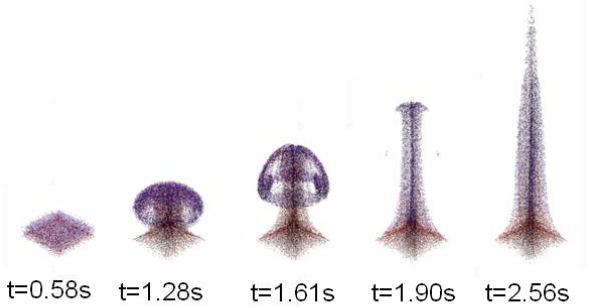

図 3. 3 次元での実験結果.

5 まとめと今後の課題

本稿では, 計算物理の方法をベースにすすの影響を考慮することにより, 炎及び煙を統一的に扱い, かつすすの個数密度および粒径を従来法よりも物理則に基づいてシミュレートできる手法を提案し, 2 次元および 3 次元空間での実験を行った.

今後は写実性の向上を従来法との比較により検証したい. また, 現在は非常に小さなタイムステップを要するが, より大きなタイムステップでシミュレーション可能かどうかも検証したい.

参考文献

[1] PA Tesner, TD Smegiriova, and VG Knorre. Kinetics of dispersed carbon formation. *Combustion and Flame*, Vol. 17, No. 2, pp. 253–260, 1971.

[2] S.C.P. Cheung and GH Yeoh. A fully-coupled simulation of vortical structures in a large-scale buoyant pool fire. *International Journal of Thermal Sciences*, Vol. 48, No. 12, pp. 2187–2202, 2009.

[3] D.Q. Nguyen, R. Fedkiw, and H.W. Jensen. Physically based modeling and animation of fire. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, Vol. 21, pp. 721–728. ACM, 2002.

Copyright ©2012 Information Processing Society of Japan.
All Rights Reserved.