

実験条件としては、主流ヘリウム-空気混合気の濃度を 100 % (ヘリウムのみ), 75, 50, 25, および, 0 % (空気のみ) と変化させて行った。また、周囲流にはポンベからの乾燥空気を流した。主流混合気の断面平均流速は 28 m/s (体積流量 5.4 L/min), 周囲流の断面平均流速は 0.07 m/s (体積流量 20 L/min) で一定とし、座標系として下流方向に z 軸, 半径方向に r 軸をとった。

3. 実験結果および考察

ヘリウム濃度が 100 % の条件において得られたヘリウム噴流のレーリ散乱断面画像の一例を図 3-2 に示す。画像は 20 パルス分を積算した時間平均画像であり、暗電流補正を行っているが、z 軸方向 (レーザーシートの高さ方向) のレーザーシート光内強度分布の補正は行っていない。

ヘリウムのレーリ散乱断面積は空気のそれに比べてかなり小さく、空気に対するヘリウムのレーリ散乱断面積比 $\sigma_{Rhe} / \sigma_{Rair}$ は, 0.0165 である^(3,4)。レーリ散乱画像から判断できるように、中心付近の彩度の高い領域はその周囲の領域に比べて散乱光強度が低くなっている。したがって、この領域がヘリウム噴流を示していることになる。

次に、各ヘリウム濃度条件におけるレーリ散乱画像を図 3-3 (a)~(e) に示す。画像化されているのは、 $r = -6 \sim 6 \text{ mm}$, $z = 16 \sim 22 \text{ mm}$ の領域である。ヘリウム濃度の減少とともに、

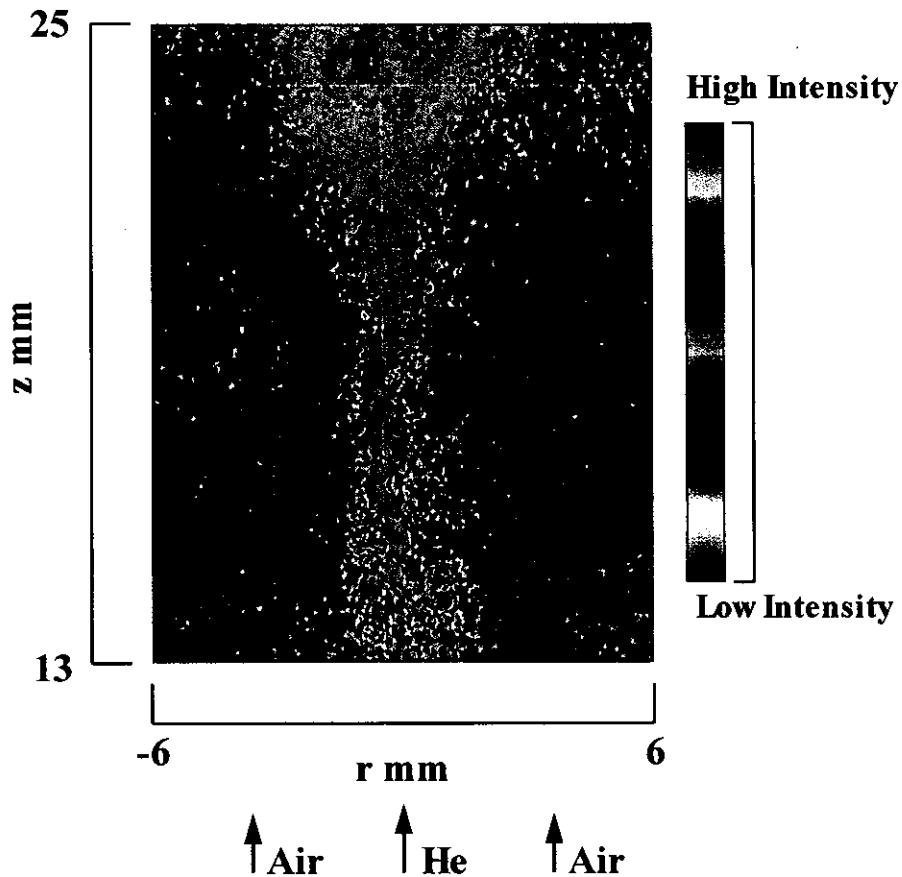


図 3-2 ヘリウム噴流のレーリ散乱断面画像 (ヘリウム濃度 100%)

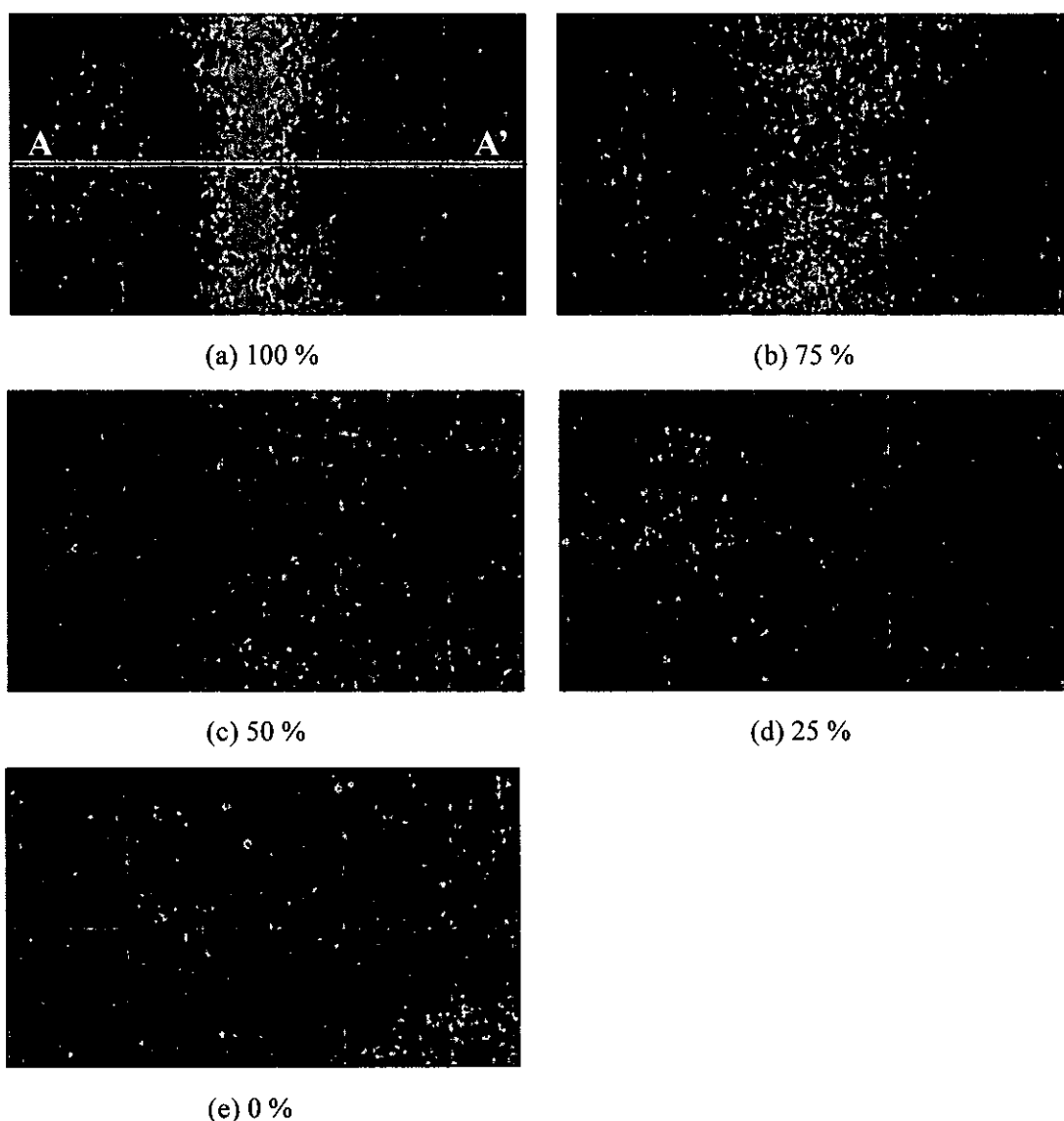


図 3-3 各ヘリウム濃度条件におけるレーリ散乱断面画像

画像中央付近のレーリ散乱光強度が次第に強くなり、25%ではほぼ周囲の空気流と見分けがつかなくなっている様子がみてとれる。

次に、図 3-3 中の A-A'断面 ($z = 19 \text{ mm}$) におけるレーリ散乱光強度 (画像輝度) 分布の変化を、ヘリウム濃度 100%, 50%, 25%について図 3-4 (a)~(c)にそれぞれ示す。画像上の輝度分布であるため、多少のばらつきはあるが、 $r = 0 \text{ mm}$ 付近における強度分布は、主流混合気の濃度変化に伴って明らかに変化していることがわかる。これは、主流中の空気の割合が大きくなり、レーリ散乱断面積の増加にともなって散乱光強度が増大したためである。すなわち、レーリ散乱光強度には濃度依存性があり、逆に、散乱光強度から濃度を求められることを示している。ただし、レーリ散乱法の適用には、空気中の塵や埃からのミー散乱の干渉による信号クオリティの低下、分子を捉える感度を向上させるためには大出力のレーザーが必要であることなど、S/N 比向上のためにクリアすべき課題があるため、今後検討していきたい。

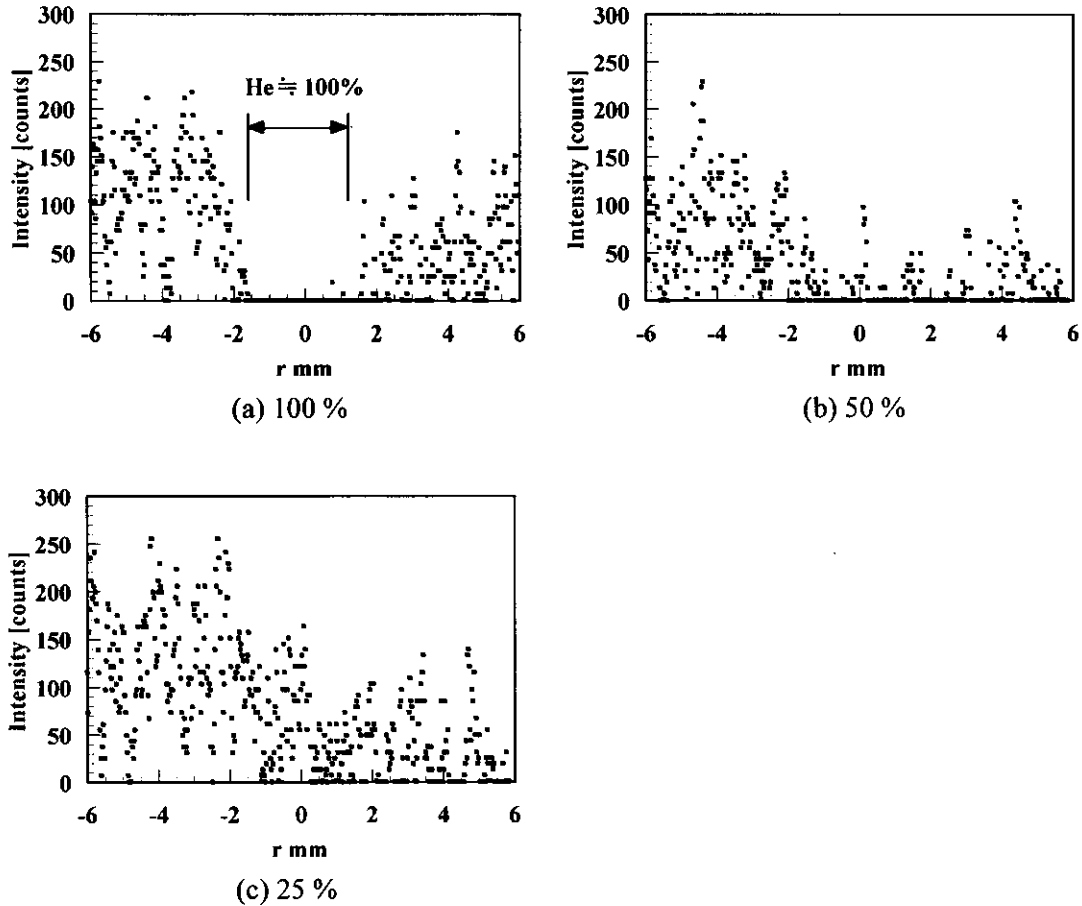


図 3-4 A-A'上におけるレーリ散乱光強度分布 ($z = 19 \text{ mm}$)

4. まとめ

漏洩事故時における水素の拡散過程を十分に把握できることが必要であるとの観点から、開空間中に拡散する水素の濃度分布測定法の確立を目指すことを目的に、YAG レーザのシート光とゲート機能付き ICCD カメラを用いたレーザレーリ散乱法による、ヘリウム-空気混合気噴流の可視化、および、レーリ散乱光強度の濃度依存性を検討した。その結果、S/N 比の向上に若干の課題を残しているが、混合気流の二次元濃度分布をレーリ散乱光強度分布により把握可能であることを示した。

5. 今後の展望

本実験におけるヘリウム-空気混合気噴流のレーリ散乱計測から、噴流の可視化、および、レーリ散乱光強度のヘリウム濃度に対する依存性を確認できた。今後は、S/N 比の向上、実際に水素を用いた場での実験を行い、同時並行で行っている数値計算結果へのフィードバックを試みたい。

6. 参考文献

- (1) Moyeda, D.K., "Laser Rayleigh Scattering Measurements in Swirl-Stabilized Natural Gas Flames", Master's Thesis, UC Irvine, (1995).

- (2) 大竹一友, “燃焼場の温度と濃度のレーザ計測”, 高温学会誌, Vol.15, No.1, (1989), pp.7-14.
- (3) 吉川典彦, 丹羽智明, 大竹一友, “レーザ散乱による火炎温度変動の計測”, 日本機械学会論文集, 50-452B, (1984), pp.1088-1094.
- (4) 宮藤章, “レーザ応用計測に基づく乱流拡散火炎の構造解析”, 大阪大学博士論文, (1998).
- (5) Meiler, W., Barlow, R.S., Chen, Y.-L. and Chen, J.-Y., “Raman/Rayleigh/LIF Measurements in a Turbulent CH₄/H₂/N₂ Jet Diffusion Flame: Experimental Techniques and Turbulence-Chemistry Interaction”, Combustion and Flame, Vol.123, (2000), pp.326-343.

6. CFX-4 ソフトウェアを用いた水素濃度分布時間変化の計算

名古屋大学大学院工学研究科 村上桂一
独立行政法人産業安全研究所 大塚輝人

1. 目的

産業安全研究所が所有する流体計算ソフト CFX-4 を用いて、空気中の漏洩水素濃度分布を調べる。得られた結果は、野外・屋内実験に於いて、センサーの設置場所の決定などに役立つ。また、周囲に障害物のある場所で漏洩した水素ガスの濃度分布をシミュレートすることで、安全な障害物配置の指標が得られる。更に、可燃混合気濃度の時間変化から、漏洩してからの危険な距離や時間が予測できる。

2. CFX-4 ソフトウェアの特徴

CFX-4 ソフトウェアはプロセスや化学工業における複雑な流れを予測できる最も人気のあるコードの一つです。ダイレクト CAD アクセスや自動化された形状作成ツール、スライディング・メッシュ、そして乱流、燃焼、輻射、多相流に対する優れたモデルを提供します。(CFX-4 ホームページ <http://www.cfx-ap.com/products/cfx-4/index.html> より抜粋)

CFX-4 による CFD のステップ

- ① 解析領域の形状と格子を作成する。
Build ソフトによる geometry file の作成
- ② 注目する現象に応じて基礎式を選択する。
必要に応じて、質量分率保存式やユーザスカラー保存式を追加
- ③ 適切物理モデルを選択し、物性値を与える。
Setup ソフトによる command file の作成 (図1 参照)
- ④ 適切な境界条件を設定する。
Setup ソフトによる command file の作成 (図1 参照)
- ⑤ 解析を実行する。
- ⑥ 収束判定を行い、結果を評価する。

3. 計算実行立ち上げまでの経過

平成 14 年度中に、3 回にわたって産業安全研究所へ出張し、CFX-4 を使用して計算を行った。

○第1回：平成14年11月15日、16日

- ・練習問題として分岐管内の流れを解く。
- ・一辺 10m の立方体中に、水平水素ジェットを吹きこむ問題を仮定し、格子を作成。
最小格子間隔を 1cm から 10cm まで変化させて格子点数を削減したが、総格子点数が 1,000 万を超え、ワークステーションの記憶容量の制限から計算困難。
- ・一辺 1 m の立方体ならば容量オーバーしない事を確認。
- ・計算領域の格子の作成方法を把握した。

○第2回：平成15年2月26日，27日

・空気中にダクトから水素を流入させる問題を解く。

① 計算領域形状：

- ・1200mm×1200mm×1200mmの領域に，100mm×200mm×100mmのダクトが取り付けられている。
- ・格子間隔を全領域均一で20mmとした場合，総格子点数は，216,250となる。

② 水素の質量分率式を追加

③ 物理モデル：

- ・乱流 (k-εモデル)，圧縮性，質量分率，熱伝導，浮力 (密度変化による) を考慮。
- ・物性値のデータベース：水素の比熱，拡散係数，分子量を入力。空気はデータベースから自動入力 (利用可能なデータベースに水素のデータが無いため)。

④ 境界条件：

- ・速度指定流入境界
- ・圧力境界
- ・壁面境界

⑤ 計算実行：200回の繰り返し計算で，約48分

- ・空気-水素混合気流れ場の計算条件の入力方法を把握し，計算実行可能にした。
- ・計算結果の表示方法を把握した。

○第3回：平成15年3月17日，18日

- ・実験室サイズの非定常問題を解いて，データを保存する。
- ・USER FORTRAN オプションを用いて，燃料ガス分布の初期条件を与える (図2参照)。
- ・物理モデルは前回の③と同様に設定し，下記のジオメトリで計算した。

G-I：空気で満たされた幅1.1m，高さ1.5m，奥行き1.1mのボックスの底部に，1辺10cmの水素貯気室を設けた (図3参照)。初期条件は，ボックス，水素貯気室とも293K，1atmとした。時間0秒で貯気室上面を開放し，その後0.5秒ごと4秒までの水素濃度分布を得た (図4～11)。比較のため，メタンの場合も同様の条件で計算した (図12～19)。

G-II：上記ボックスの側面に，底面から30cmの高さに同じ大きさの貯気室を設け (図20参照)，貯気室の初期圧を2atmとした。時間0秒で貯気室を開放し，その後0.05秒ごと0.4秒までの水素濃度分布を得た。図21に0.4秒後の水素濃度分布を示す。

G-III：上記ボックス内部の底部コーナーに1辺30cmの水素塊を設定し，1秒後に壁に沿ってどの位の高さまで上昇するかを計算した (図22参照)。上昇高さの比較のためメタンの場合も計算した (図23参照)。また，水素塊を底部中央に設定した場合を計算し比較した (図24参照)。

- ・非定常問題のデータ保存方法及び表示方法を把握した。

4. 計算結果及び考察

可燃限界濃度を表1に示す。表中の質量分率の上限と下限の範囲を，質量分率分布図のカラーバー右側に赤線で示す。

底面中央に設けた貯気室 (G-I) から水素ガスが拡散する場合の質量分率分布の時間変化を、0.5sec 毎に図 4～1 1 に示す。図中の格子間隔は 5cm である。可燃限界範囲の空間分布を図から見ると、可燃限界下限が 2 秒後には垂直方向 15cm まで達するものの、4 秒後には 5cm の高さとなり、貯気室内の濃度も 0.5 秒後の 1/50 と低くなる。メタンガスの場合 (図 1 2～1 9) は、時間の経過とともに可燃領域が空間的に広がり、4 秒後には垂直方向 10cm まで達し、貯気室内の濃度は 0.5 秒後の 1/7 となる。これらの結果から、水素ガスのほうが早く拡散し、漏洩水素が可燃混合気として漂う時間が短いと予測される。

底面からの高さ 30cm の側壁に設けられた貯気室 (G-II) から、初期圧 2atm の水素が噴出すシミュレーションの結果を図 2 1 に示す。この図から、可燃限界下限の広がり、最大で、水平方向に 15cm、垂直方向には壁面にそって上方 15cm となる。ちょうど、貯気室上端を中心とした半径 15cm のドーム状に可燃領域が分布する。壁面の方向への拡散が妨げられ濃度の比較的濃い領域が壁面上に存在していると考えられる。即ち、漏洩場所の上方の壁面に着火源があると危険であることが予測される。しかし、これは 0.4 秒後の結果であり、1 秒後にはほとんど拡散してしまい、可燃領域は存在しない。

断熱壁で囲まれた空間 (G-III) の底部のコーナーに存在する 1 辺 30cm の水素塊拡散の様子をシミュレートした結果を図 2 2 に示す。この図から、可燃領域の中心は壁面上にあることが分る。また、1 秒後には 120cm の高さに達する。メタンの場合を図 2 3 に示す。定性的には水素の場合と同じだが、2 秒後の可燃限界下限の到達高さは水素の場合に比べて 2/3 である。さらに、水素については、底面上中央に同様の水素塊がある場合について計算した。図 2 4 から、垂直方向に僅かに多く拡散しているが、水平方向と比べて殆ど差が無い事が分る。これは、水素塊と壁の距離が短く、周囲から回り込む空気が少ないためと思われる。

これらの結果から、CFX-4 による計算で水素ガス漏洩場所からの安全距離の時間変化が得られることが分った。ただし、実験との比較が必要不可欠である。

5. 次年度の課題

今年度は、商用流体解析ソフト CFX-4 を用いて、簡単な状況下での漏洩水素ガス濃度分布の予測を行った。現段階では、ソフトの使用法に慣れたところである。次年度は、屋内実験を模擬したシミュレーションを高精度で行い、実験結果と比較・検討する必要がある。今年度の計算結果は、粗い格子を用いた場合の結果であり、格子間隔を小さくし、より精度の高いシミュレーション結果を実験と比較する。また、貯気室のサイズ・形状や周囲の障害物の配置などを可能な限り実験と同じにして計算を行う。その際、浮力や乱流などの物理モデルの検討も必要になる可能性もある。

屋内実験との比較から得られた結果を基に、野外実験規模の水素濃度分布を予測し、センサや着火装置の配置場所決定の参考となるシミュレーションを行う。屋内実験との大きな違いは、地熱による地面と大気との温度差や、横風の存在である。これらの条件を初期条件や境界条件として考慮してシミュレーションを行わなければならないであろう。幸い CFX-4 はこれら条件の入力は容易である。また、粗い格子であれば、野外規模の大きさの計算も可能であると思われる。

表 1 各燃料の可燃限界濃度

燃料	可燃限界	容積比 (モル比)	燃料の質量分率
水素	下限	0.04	2.89E-3
	上限	0.75	1.72E-1
メタン	下限	0.05	2.84E-2
	上限	0.15	8.92E-2


```

>>CFX4
  >>OPTIONS
    THREE DIMENSIONS
    RECTANGULAR GRID
    CARTESIAN COORDINATES
    TURBULENT FLOW
    HEAT TRANSFER
    COMPRESSIBLE FLOW
    BUOYANT FLOW
    TRANSIENT FLOW
    USE DATABASE
    MASS FRACTION EQUATIONS 1
  >>USER FORTRAN
    USRINT
>>MODEL DATA
  >>MATERIALS DATABASE
    >>SOURCE OF DATA
      PCP
    >>FLUID DATA
      FLUID 'AIR'
      MATERIAL TEMPERATURE 2.9300E+02
      MATERIAL PHASE 'GAS'
    >>SPECIES DATA
      MATERIAL TEMPERATURE 2.9300E+02
      MATERIAL PHASE 'GAS'
      MASS FRACTION1 'HYDROGEN'
  >>PHYSICAL PROPERTIES
    >>BUOYANCY PARAMETERS
      GRAVITY VECTOR 0.000000E+00 -9.800000E+00 0.000000E+00
      BUOYANCY REFERENCE DENSITY 1.2000E+00
    >>COMPRESSIBILITY PARAMETERS
      WEAKLY COMPRESSIBLE
      UNIVERSAL GAS CONSTANT 8.3140E+03
      FLUID MOLECULAR WEIGHT 2.8950E+01
      REFERENCE PRESSURE 1.0130E+05
    >>MASS TRANSFER PARAMETERS
      >>DIFFUSIVITIES
        MASS FRACTION1 7.1000E-06
      >>MOLECULAR WEIGHTS
        MASS FRACTION1 2.0000E+00
      >>SPECIFIC HEATS
        MASS FRACTION1 1* 2.930000E+02
    >>TRANSIENT PARAMETERS
      >>FIXED TIME STEPPING
        TIME STEPS 80* 5.000000E-02
        INITIAL TIME 0.0000E+00
        BACKWARD DIFFERENCE
        LINEAR TIME DIFFERENCING
  >>SOLVER DATA
    >>PROGRAM CONTROL
      MAXIMUM NUMBER OF ITERATIONS 40
      MASS SOURCE TOLERANCE 1.0000E-06
  >>MODEL BOUNDARY CONDITIONS
  >>OUTPUT OPTIONS
    >>DUMP FILE OPTIONS
      TIME INTERVAL 5.0000E-01
      ALL VARIABLES
      GEOMETRY DATA
  >>STOP

```

図1 コマンドファイルの例 (ジオメトリ : G-II, 貯気室 : 水素, 2atm)

```

SUBROUTINE USRINT(U,V,W,P,VFRAC,DEN,VIS,TE,ED,RS,T,H,RF,SCAL
+           ,CONV,XC,YC,ZC,XP,YP,ZP
+           ,VOL,AREA,VPOR,ARPOR,WFACT,DISWAL,IPT
+           ,IBLK,IPVERT,IPNODN,IPFACN,IPNODEF,IPNOBDB,IPFACB
+           ,WORK,IWORK,CWORK)
C
C+++++ USER AREA 4 ++++++
C---- TO USE THIS USER ROUTINE FIRST SET IUSED=1
C
      IUSED=1
C
C+++++ END OF USER AREA 4 ++++++
C
C+++++ USER AREA 5 ++++++
C
C---- AREA FOR INITIALISING VARIABLES U,V,W,P,VFRAC,TE,ED,RS,T,SCAL
C      ONLY.
C
C---- EXAMPLE 1 (SET TEMPERATURE TO 300.0 EVERYWHERE)
C
      IF(.NOT.LRDISK) THEN
C      USE IPALL TO FIND 1D ADDRESSES OF ALL CELL CENTRES
      CALL IPALL('SOLID 2','*', 'BLOCK', 'CENTRES', IPT,NPT,CWORK,IWORK)
C
      DO 100 IPHASE = 1, NPHASE
C      LOOP OVER ALL INTERIOR CELLS
      DO 110 I=1,NPT
C      USE ARRAY IPT TO GET ADDRESS
      INODE=IPT(I)
      SCAL(INODE,IPHASE,1)=1.0
      P(INODE,IPHASE)=2.0260E+05
110    CONTINUE
100    CONTINUE
C
      END IF
C---- END OF EXAMPLE 1
C
C---- EXAMPLE 2 (SET FIRST SCALAR TO 0.5 EVERYWHERE IF STARTING RUN
C      FROM SCRATCH, BUT NOT ON A RESTART).
C
      IF(.NOT.LRDISK) THEN
C
C      USE IPALL TO FIND 1D ADDRESSES OF ALL CELL CENTRES
      CALL IPALL('*', '*', 'BLOCK', 'CENTRES', IPT,NPT,CWORK,IWORK)
C
      DO 100 IPHASE = 1, NPHASE
C      LOOP OVER ALL INTERIOR CELLS
      DO 110 I=1,NPT
C      USE ARRAY IPT TO GET ADDRESS
      INODE=IPT(I)
      SCAL(INODE,IPHASE,1)=0.5
C 110    CONTINUE
C 100    CONTINUE
C
      END IF
C
C---- END OF EXAMPLE 2
C
C+++++ END OF USER AREA 5 ++++++

```

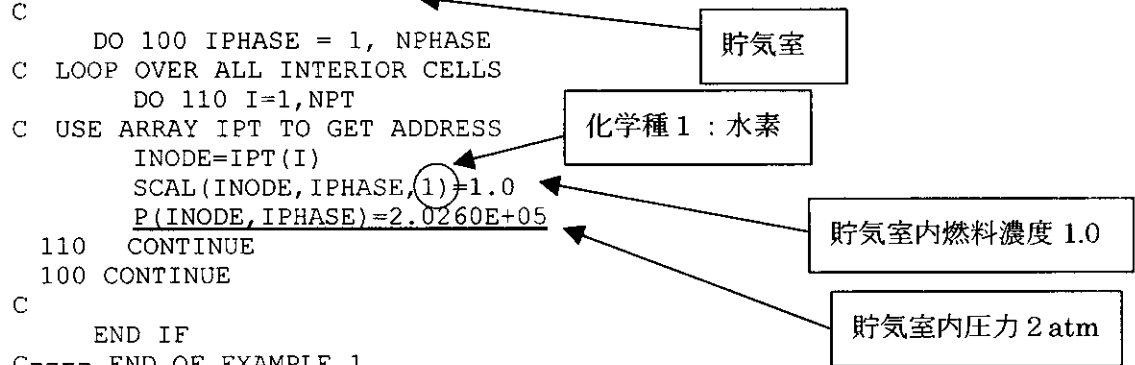


図2 USER FORTRAN の例 (USRINT による初期値の設定)

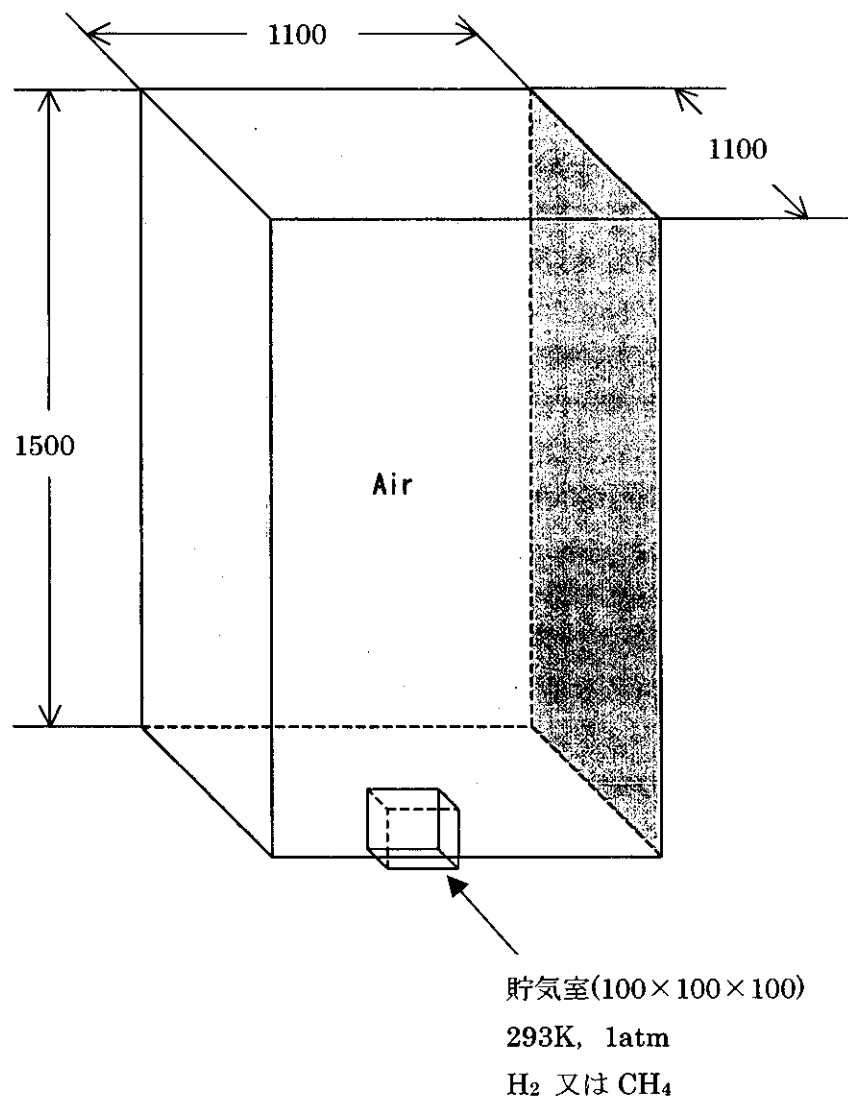


図4 G-Iのジオメトリ(単位: mm)

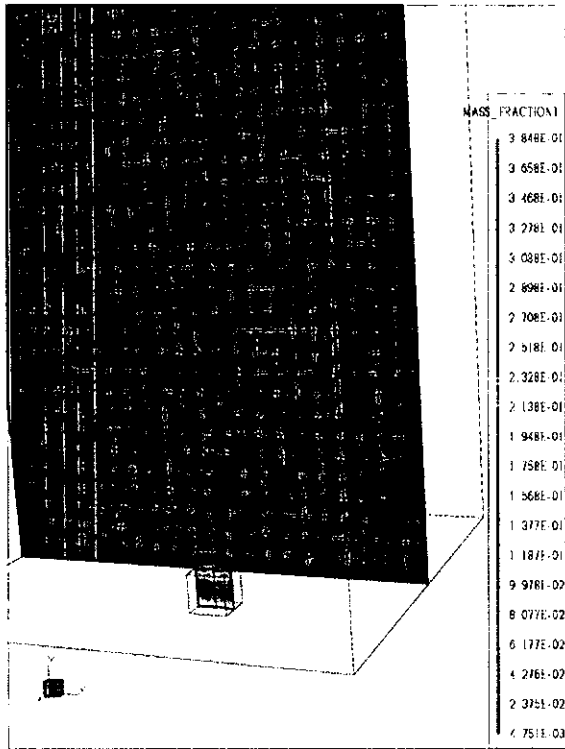


图5 贮气室：水素，0.5sec

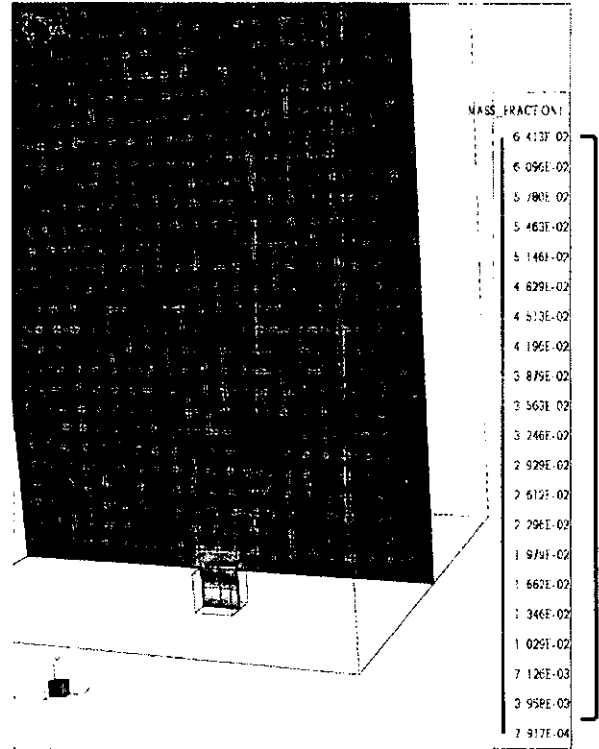


图6 贮气室：水素，1.0sec

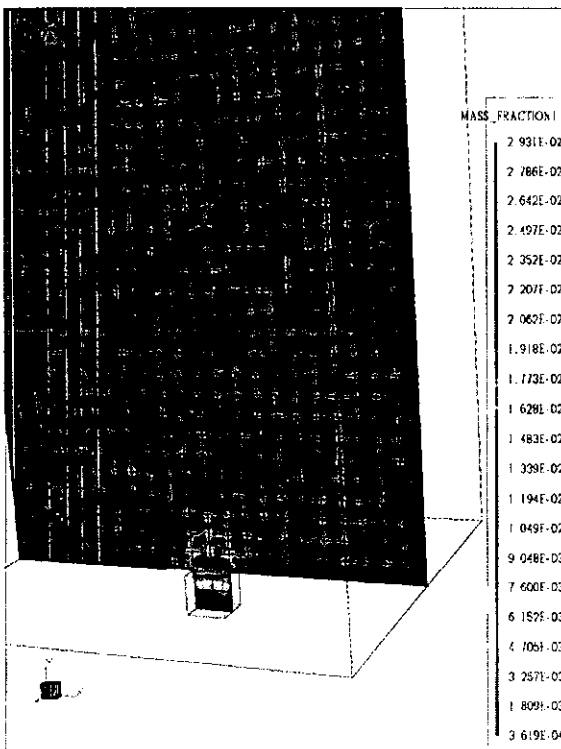


图7 贮气室：水素，1.5sec

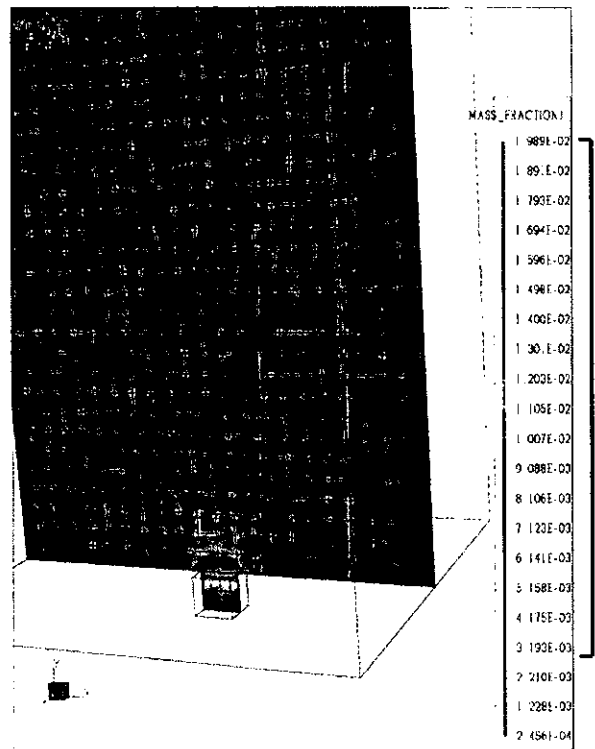


图8 贮气室：水素，2.0sec

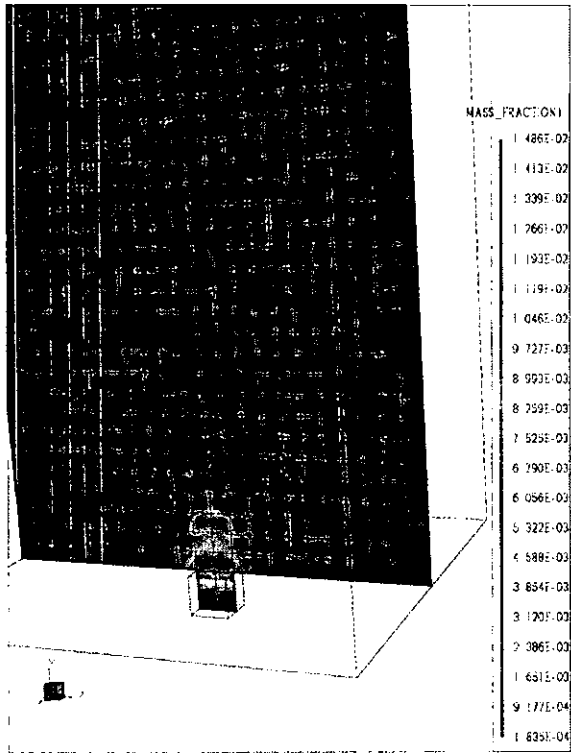


图9 贮气室：水素，2.5sec

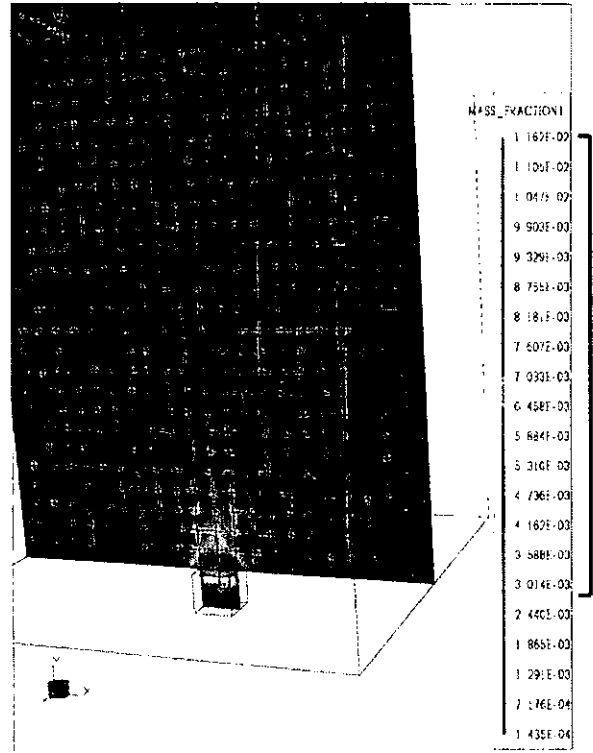


图10 贮气室：水素，3.0sec

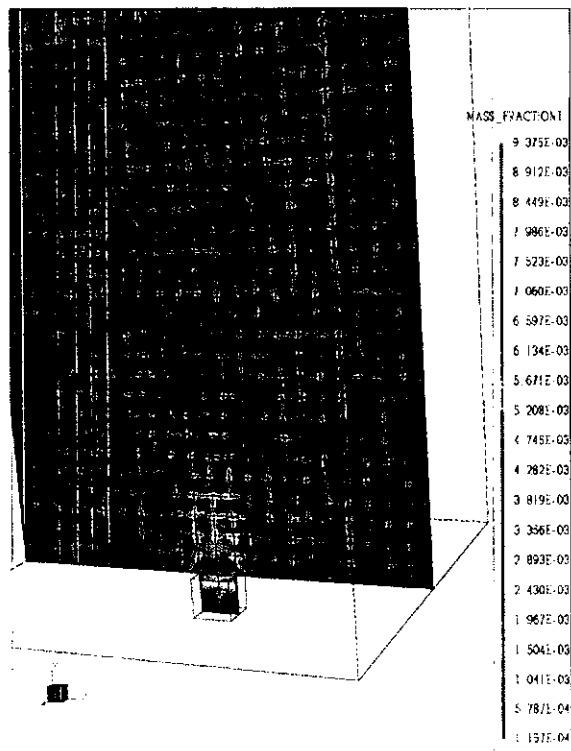


图11 贮气室：水素，3.5sec

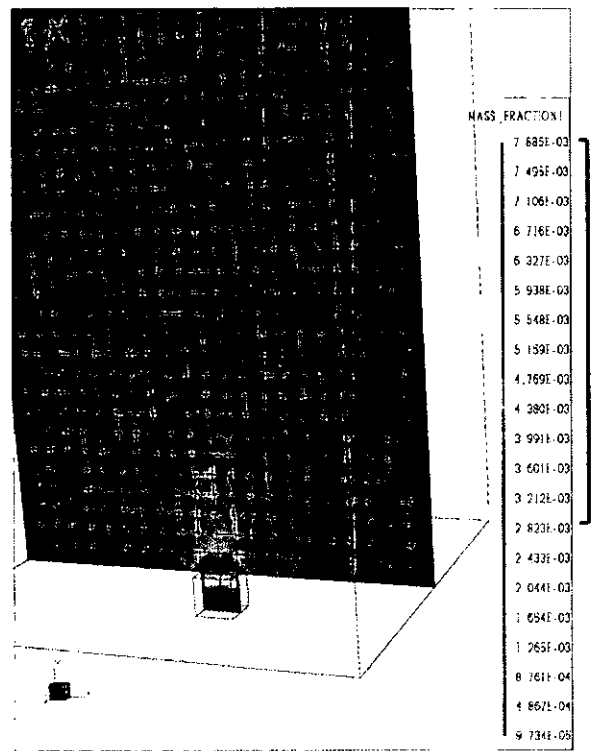


图12 贮气室：水素，4.0sec

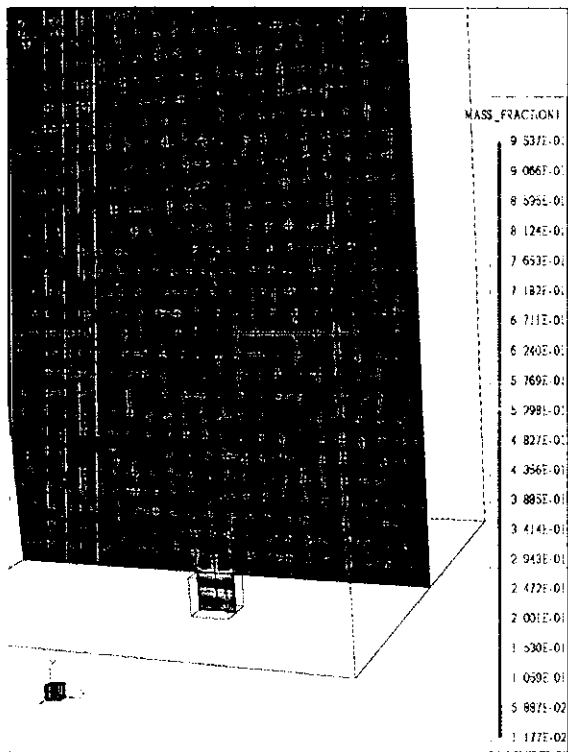


図 1 3 貯気室：メタン，0.5sec

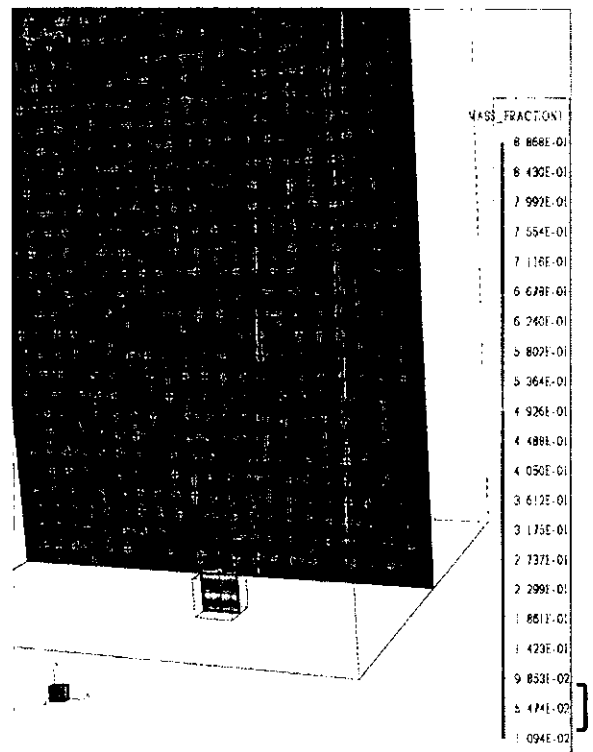


図 1 4 貯気室：メタン，1.0sec

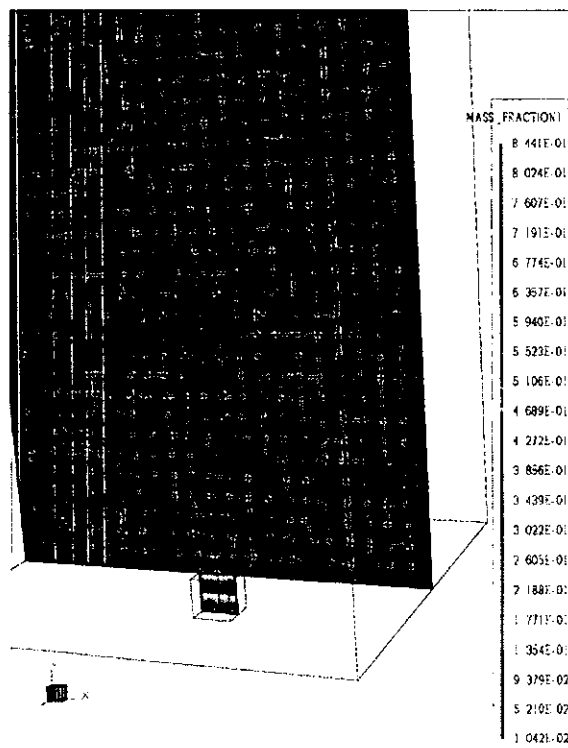


図 1 5 貯気室：メタン，1.5sec

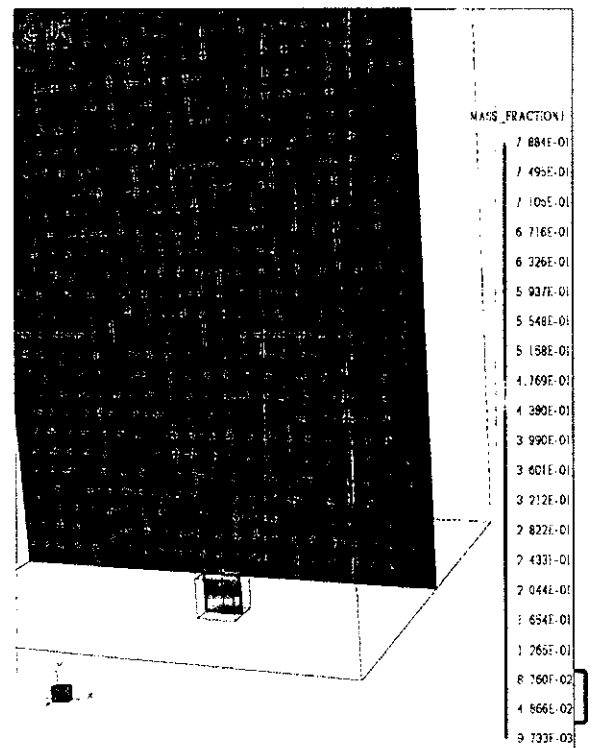


図 1 6 貯気室：メタン，2.0sec

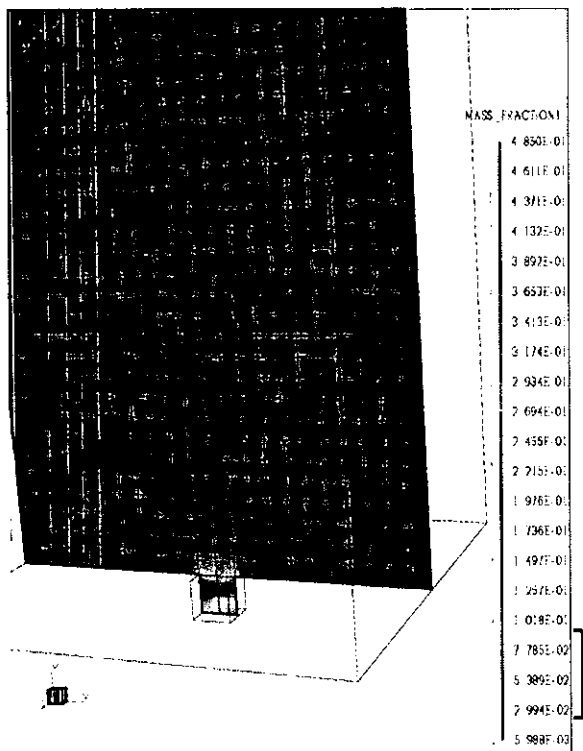


図 17 貯気室：メタン，2.5sec

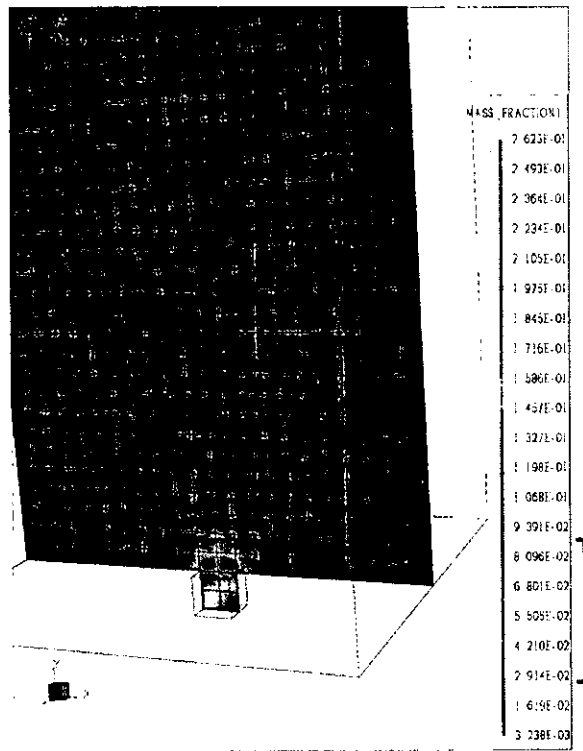


図 18 貯気室：メタン，3.0sec

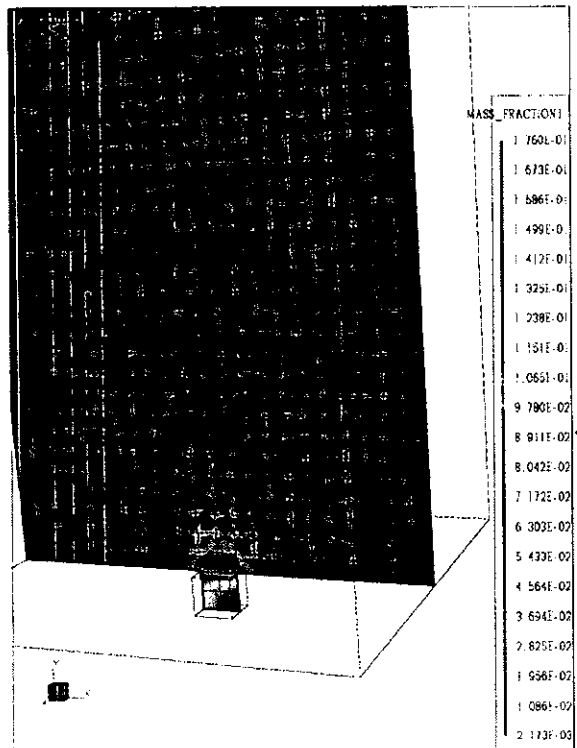


図 19 貯気室：メタン，3.5sec

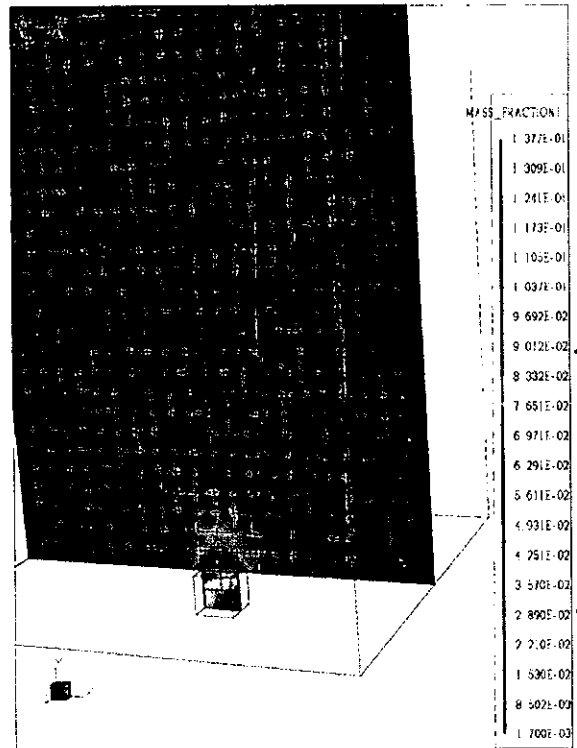


図 20 貯気室：メタン，4.0sec

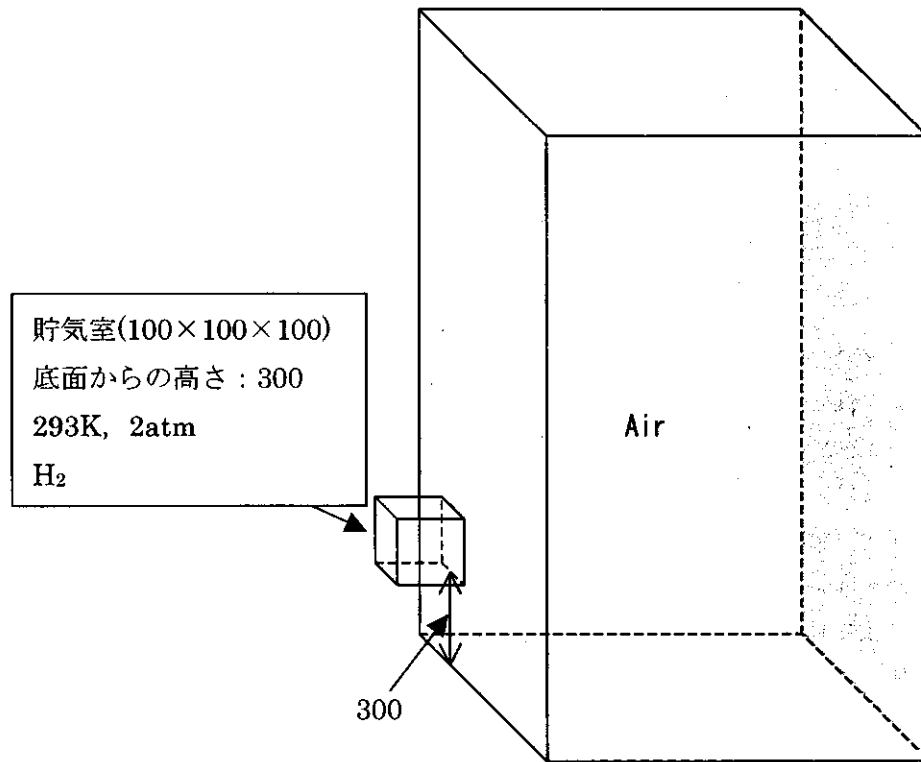


図 21 G-IIのジオメトリ(単位: mm)

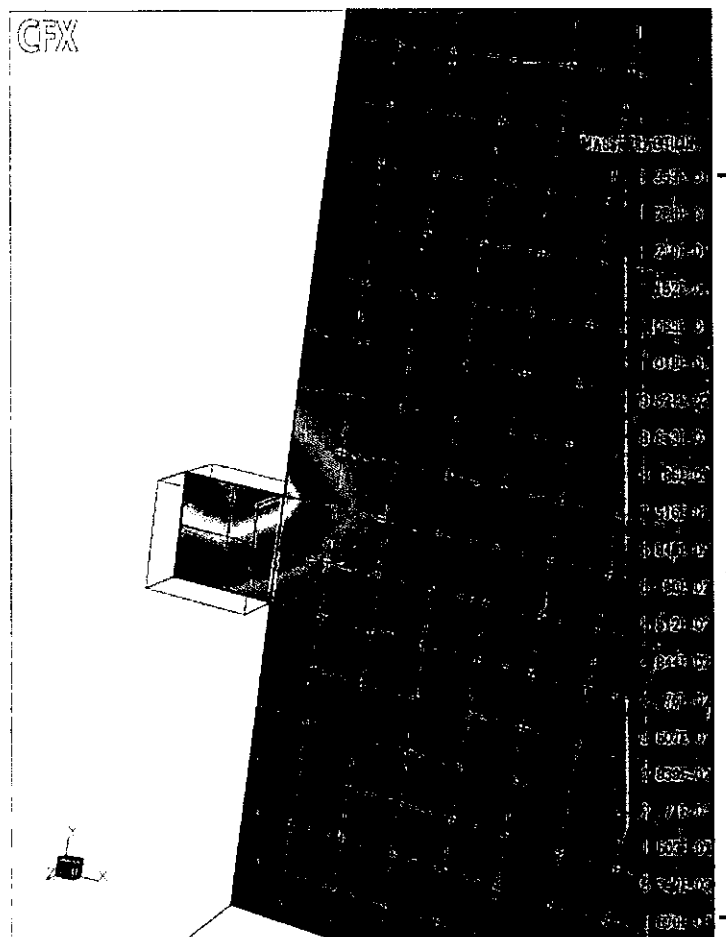


図 22 水素質量分率分布 (0.4sec)

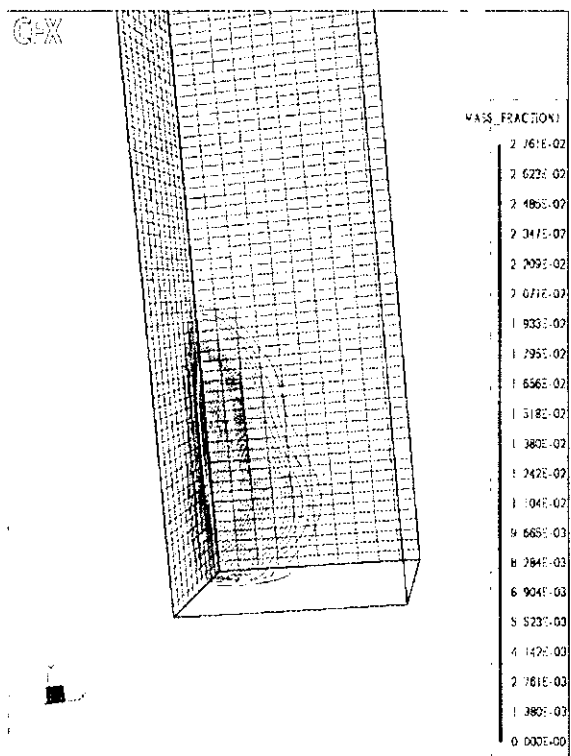
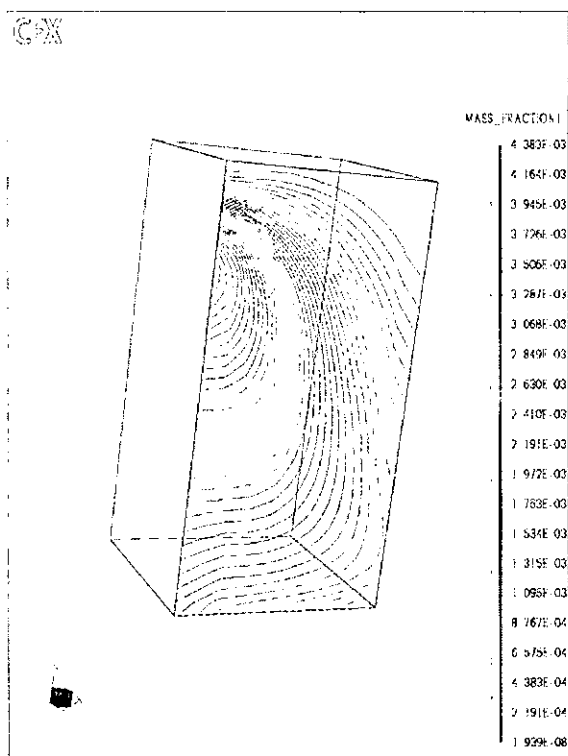


図 23 水素質量分率分布 (コーナー, 左: 2sec 後, 右: 1sec 後)

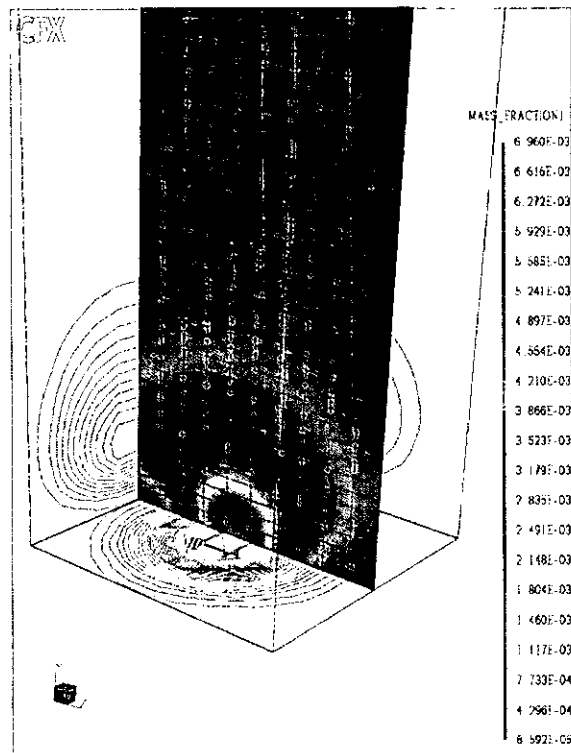
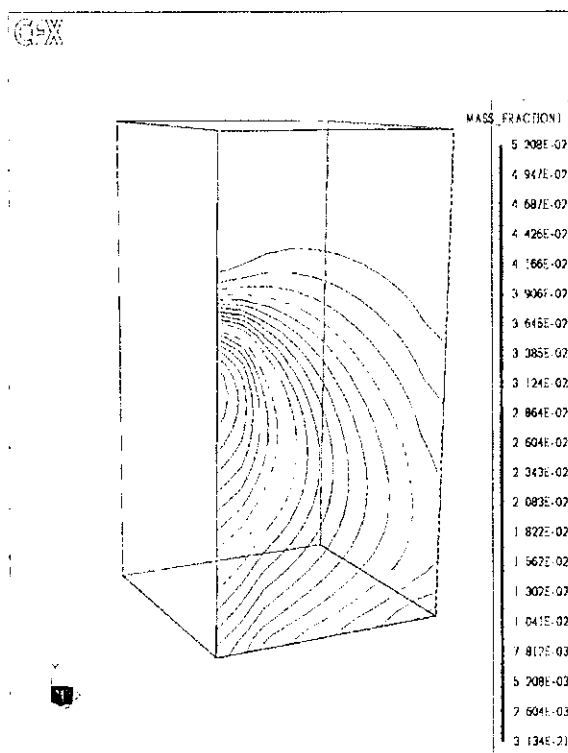


図 24 メタン質量分率分布 (コーナー, 2sec)

図 25 水素質量分率分布 (中央, 1sec)

7. 水素の大気中拡散と燃焼の数値シミュレーション

名古屋大学 理工科学総合研究センター 長谷川達也

1. 1 はじめに

水素ステーションにおいて大気中に水素ガスが漏洩し爆発した場合の安全性を評価するために、独自の数値シミュレーションコードを開発し、予測を行なうことが本研究の目的である。数値シミュレーションの流れは以下のである。(1) 水素の大気中での拡散の予測、(2) 着火に至った場合の燃焼の予測、(3) 燃焼によって発生する爆風の予測。ここでは(1)と(2)の数値シミュレーションに関わる基礎式の導出とモデルについて検討した結果を報告する。

1. 2 拡散と燃焼の基礎方程式

以下の仮定を行なう。

- (1) H_2, O_2, H_2O, N_2 の4種類の化学種を考慮する。
- (2) 化学反応は1段不可逆反応 $H_2 + 0.5O_2 + 1.88N_2 \rightarrow H_2O + 1.88N_2$ である。
- (3) Soret 効果, Dufour 効果, 温度勾配拡散, 体積粘性を無視する。
- (4) 外力として重力のみを考慮する。
- (5) 拡散は Fick 則に従う。

仮定に基づく多成分系の燃焼の基礎方程式は以下のように書くことができる^{(1) (3)}。

$$\text{連続の式} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0$$

$$\text{運動量の式} \quad \rho \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + \rho u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} = -\frac{\partial p}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \tau_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + \rho f_\alpha \quad (f_1 = f_2 = 0, f_3 = -g)$$

$$\text{エネルギー式} \quad \rho \frac{\partial h_t}{\partial t} + \rho u_\alpha \frac{\partial h_t}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \tau_{\alpha\beta} u_\beta}{\partial x_\alpha} + \rho f_\alpha u_\alpha$$

$$\text{化学種の式} \quad \rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho u_\alpha \frac{\partial Y_i}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial \rho Y_i V_{i\alpha}}{\partial x_\alpha} + w_i \quad \text{for } H_2, O_2, H_2O$$

$$\text{状態方程式} \quad p = \rho R^0 T \sum_{i=1}^4 \left(\frac{Y_i}{W_i} \right)$$

ここで

$$\tau_{\alpha\beta} = \mu \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right)$$

$$h_t = \sum_{i=1}^4 Y_i h_i + \frac{1}{2} u_\alpha u_\alpha$$

$$h_i = h_i^0 + \int_{T_0}^T C_{p,i} dT$$

$$q_\alpha = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} + \rho \sum_{i=1}^4 h_i Y_i V_{i\alpha} + q_{r\alpha}$$

$$V_{i\alpha} = -D_i \frac{1}{Y_i} \frac{\partial Y_i}{\partial x_\alpha}$$

$$w_{H_2} = W_{H_2} \omega, \quad w_{O_2} = 0.5 W_{O_2} \omega, \quad w_{H_2O} = -W_{H_2O} \omega$$

$$\omega = -BT^\alpha \exp\left(-\frac{E}{R^0 T}\right) p^{1.5} \left(\frac{Y_{H_2}}{W_{H_2}}\right) \left(\frac{Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{0.5}$$

次にエネルギー式を変形する⁽⁴⁾。まず次の仮定を行なう。

(6) 運動エネルギーはエンタルピーに比べて小さく無視できる。

このときエネルギー式は

$$\rho \frac{\partial h}{\partial t} + \rho u_\alpha \frac{\partial h}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial q_\alpha}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \tau_{\alpha\beta} u_\beta}{\partial x_\alpha} + \rho f_\alpha u_\alpha$$

$$h = \sum_{i=1}^4 h_i Y_i \text{ より } dh = \sum_{i=1}^4 C_{p,i} Y_i dT + \sum_{i=1}^4 h_i dY_i = C_p dT + \sum_{i=1}^4 h_i dY_i,$$

また $q_\alpha = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} + \rho \sum_{i=1}^4 h_i Y_i V_{i\alpha} + q_{r\alpha}$ を代入して

$$\begin{aligned} \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u_\alpha C_p \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} + \rho \sum_{i=1}^4 h_i \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho u_\alpha \sum_{i=1}^4 h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_\alpha} \\ = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho \sum_{i=1}^4 h_i Y_i V_{i\alpha} \right) - \frac{\partial q_{r\alpha}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \tau_{\alpha\beta} u_\beta}{\partial x_\alpha} + \rho f_\alpha u_\alpha \end{aligned}$$

化学種の式に h_i をかけて和をとると、

$$\rho \sum_{i=1}^4 h_i \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho u_\alpha \sum_{i=1}^4 h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_\alpha} = - \sum_{i=1}^4 h_i \frac{\partial \rho Y_i V_{i\alpha}}{\partial x_\alpha} + \sum_{i=1}^4 h_i w_i$$

辺々差し引くとエネルギー式は次のようになる。

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u_\alpha C_p \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \right) - \sum_{i=1}^4 h_i \frac{\partial \rho Y_i V_{i\alpha}}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial q_{r\alpha}}{\partial x_\alpha} - \sum_{i=1}^4 h_i w_i + \frac{\partial \tau_{\alpha\beta} u_\beta}{\partial x_\alpha} + \rho f_\alpha u_\alpha$$

ここでさらに以下の仮定を行なう。

(7) 圧力の時間変化を無視する。

(8) $\sum_{i=1}^4 h_i \frac{\partial \rho Y_i V_{i\alpha}}{\partial x_\alpha}$ を無視する。

(9) 輻射熱流束を無視する。

(10) 粘性散逸，粘性仕事を無視する。

(11) 体積力による仕事（位置エネルギー変化）を無視する。

これよりエネルギー式は

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho u_\alpha C_p \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \right) - \sum_{i=1}^4 h_i w_i$$

保存系表示では多成分系の燃焼の基礎方程式は以下のように書くことができる。

$$\text{連続の式} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0$$

運動量の式
$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha u_\beta}{\partial x_\beta} = -\frac{\partial p}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \tau_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + \rho f_\alpha \quad (f_1 = f_2 = 0, f_3 = -g)$$

エネルギー式
$$\frac{\partial \rho T}{\partial t} + \frac{\partial \rho T u_\alpha}{\partial x_\alpha} = \frac{1}{C_p} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{1}{C_p} \sum_i h_i w_i$$

化学種の式
$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_i u_\alpha}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D_i \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \right) + w_i \quad \text{for } H_2, O_2, H_2O$$

状態方程式
$$p = \rho R^0 T \sum_{i=1}^4 \left(\frac{Y_i}{W_i} \right)$$

ここで

$$\tau_{\alpha\beta} = \mu \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right)$$

$$h_i = h_i^0 + \int_{T_0}^T C_{p,i} dT$$

$$w_{H_2} = W_{H_2} \omega, \quad w_{O_2} = 0.5 W_{O_2} \omega, \quad w_{H_2O} = -W_{H_2O} \omega$$

$$\omega = -BT^a \exp\left(-\frac{E}{R^0 T}\right) p^{1.5} \left(\frac{Y_{H_2}}{W_{H_2}}\right) \left(\frac{Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{0.5}$$

μ, λ, D_i, C_p : 混合気の物性値

1. 3 乱流拡散と乱流燃焼の基礎方程式^{(5), (6)}

質量加重平均に基づく基礎方程式を導出する。質量加重平均は変数を ϕ とすると次のように書ける。

$$\tilde{\phi} = \overline{\rho\phi} / \bar{\rho}, \quad \phi = \tilde{\phi} + \phi'', \quad \overline{\rho\phi''} = 0$$

平均量についての基礎方程式は以下のようなになる

連続の式
$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0$$

運動量の式
$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_\alpha \tilde{u}_\beta}{\partial x_\beta} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\bar{\tau}_{\alpha\beta} - \overline{\rho u_\alpha'' u_\beta''} \right) + \bar{\rho} f_\alpha$$

レイノルズ応力

エネルギーの式

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{T}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{T} \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\alpha} = \frac{1}{C_p} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_\alpha} - \overline{\rho T'' u_\alpha''} \right) + \frac{1}{C_p} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\lambda \frac{\partial T''}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{1}{C_p} \sum_i \overline{h_i w_i}$$

乱流温度拡散 乱流温度散逸 発熱

化学種の式
$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\rho D_i \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_\alpha} - \overline{\rho Y_i'' u_\alpha''} \right) + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\overline{\rho D_i \frac{\partial Y_i''}{\partial x_\alpha}} \right) + \bar{w}$$

乱流物質拡散 乱流物質散逸 平均反応速度

状態方程式
$$\bar{p} = \bar{\rho} R^0 \tilde{T} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\tilde{Y}_i}{W_i} \right) + R^0 \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\overline{\rho T'' Y_i''}}{W_i} \right)$$

温度・濃度相関