

これらの式の右辺にあるレイノルズ応力，乱流温度拡散，乱流物質拡散，平均反応速度についてモデル化を行なう。ただし，これらの式中の物性値は \tilde{T} ， \tilde{Y}_i での値を用い，またエネルギー一式の乱流温度散逸項，化学種の式の乱流物質散逸項，状態方程式の温度・濃度相関項については無視する。さらにエネルギー式の発熱項は $\sum_{i=1}^4 \overline{h_i w_i} = \sum_{i=1}^4 h_i \bar{w}_i$ のように近似する。

1. 4 乱流モデル⁽⁵⁾ ⁽⁷⁾

乱流モデルとして2方程式モデル ($k-\varepsilon$ モデル) を用いる。

$$\begin{aligned} \text{レイノルズ応力} \quad & -\overline{\rho u''_\alpha u''_\beta} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial \tilde{u}_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_\gamma}{\partial x_\gamma} \delta_{\alpha\beta} \right) \\ \text{乱流温度拡散流束} \quad & -\overline{\rho T'' u''_\alpha} = \frac{\mu_t}{\sigma_T} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_\alpha} \\ \text{乱流拡散流束} \quad & -\overline{\rho Y_i'' u''_\alpha} = \frac{\mu_t}{\sigma_Y} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_\alpha} \\ \text{乱流粘性係数} \quad & \mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{\tilde{k}^2}{\varepsilon} \end{aligned}$$

乱流エネルギーの輸送方程式は厳密に次のように書ける。

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k} u''_\alpha}{\partial x_\alpha} = -\frac{\partial \overline{k u''_\alpha}}{\partial x_\alpha} - u''_\beta \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_\beta} + u''_\beta \frac{\partial \overline{\tau_{\alpha\beta}}}{\partial x_\alpha} - \overline{\rho u''_\alpha u''_\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\beta}{\partial x_\alpha}$$

乱流拡散 圧力作用 拡散・散逸

右辺の圧力作用項は重要であるが，これに対して確立したモデルがないので，これを除いて上式をモデル化する。

乱流エネルギー輸送方程式

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k} u''_\alpha}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[\left(\frac{\mu_t}{\sigma_k} + \mu \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_\alpha} \right] - \overline{\rho u''_\alpha u''_\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\beta}{\partial x_\alpha} - \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}$$

乱流拡散・拡散

散逸

次に乱流エネルギー散逸率輸送方程式は乱流エネルギーの輸送方程式を時間で微分または $\tilde{\varepsilon}/\tilde{k}$ をかけて求める。

乱流エネルギー散逸率輸送方程式

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\varepsilon} u''_\alpha}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[\left(\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} + \mu \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_\alpha} \right] - C_1 \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \overline{\rho u''_\alpha u''_\beta} \frac{\partial \tilde{u}_\beta}{\partial x_\alpha} - C_2 \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}}$$

以上のモデルのモデル定数は以下の値がよく用いられる。

$$C_\mu = 0.09, \sigma_T = \sigma_Y = 0.7, C_1 = 1.44, C_2 = 1.92, \sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3$$

1. 5 乱流燃焼モデル

乱流燃焼モデルとして、以下のような Magnussen モデル (渦散逸モデル)^{(5), (8)} を用いる。一段不可逆反応 $H_2 + 0.5O_2 + 1.88N_2 \rightarrow H_2O + 1.88N_2$ を仮定する時、 $r = 0.5W_{O_2} / W_{H_2}$ として

$$\bar{w}_{H_2} = -A\bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{k} \min \left[\tilde{Y}_{H_2}, \frac{Y_{O_2}}{r}, B \frac{Y_{H_2O}}{r+1} \right] \quad [\text{kg} / \text{m}^3 / \text{s}]$$

$$\bar{w}_{O_2} = r\bar{w}_{H_2} \quad [\text{kg} / \text{m}^3 / \text{s}]$$

$$\bar{w}_{H_2O} = -(r+1)\bar{w}_{H_2} \quad [\text{kg} / \text{m}^3 / \text{s}]$$

ここでモデル定数は Magnussen らによれば $A = 4$, $B = 0.5$ である。ただし実際には、平均量を用いた反応速度 (強い乱流拡散によって均一となった場合)

$$\bar{w}_{H_2} = -W_{H_2} B \tilde{T}^\alpha \exp \left(-\frac{E}{R^0 \tilde{T}} \right) \bar{p}^{1.5} \left(\frac{\tilde{Y}_{H_2}}{W_{H_2}} \right) \left(\frac{\tilde{Y}_{O_2}}{W_{O_2}} \right)^{0.5}$$

と比較して小さい方を用いる。

1. 6 計算手法

以上で導出した乱流拡散および乱流燃焼の基礎方程式を解く計算手法には複雑形状への適用が容易な有限体積法を用いる。計算格子には地面近傍および水素の拡散方向へ密な不均等間隔直交格子系を用いる (図1)。

計算手法は空間二次精度、時間二次精度の陰解法を用いる。これは圧力波の影響を除外して拡散と燃焼の計算を進めるためである。

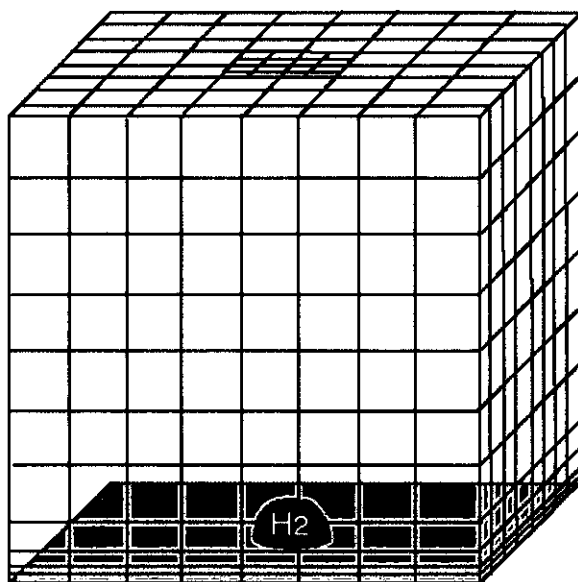


図1 計算格子

1. 7 まとめ

水素の空気中での拡散と燃焼を予測するために、浮力、乱流、燃焼を考慮した基礎方程式を導出した。今後は、格子形成、ソルバーの開発、可視化およびデータ解析プログラムの開発、モデルの検討を進めて行く。また地面に半球状の水素塊が置かれた時の水素の拡散とそ

の後任意の時間と位置で着火された時の火炎伝播を調べるなど、実験との比較、流体計算ソフト CFX-4 を用いた計算結果との比較を行ない、シミュレーションコードの信頼性を高める。また以上のシミュレーションコードが確立すれば、燃焼による発熱速度の時間、空間データが得られ、それによって発生する爆風の予測を行なうことも可能になる。

参考文献

1. Kuo, K. K., Principles of Combustion, 1986, John Wiley & Sons, pp.161-230.
2. Williams, Combustion Theory (Second edition), 1985, Benjamin/Cummings, pp. 2-3.
3. 日本機械学会, 燃焼の数値計算, 2001, pp. 33-43.
4. 日本機械学会, 燃焼の数値計算, 2001, pp. 169-207.
5. 日本機械学会, 燃焼の数値計算, 2001, pp. 143-167.
6. Kuo, K. K., Principles of Combustion, 1986, John Wiley & Sons, pp. 402-512.
7. 錦慎之助, 長谷川達也, Roland BORGHI, 姫野龍太郎, 直接数値計算による乱流予混合火炎中の乱流エネルギーと乱流スカラー流束の輸送特性の解析とモデリング, 2002, 日本燃焼学会誌, 44 巻 127 号, pp. 47-57,
8. Magnussen, B. F., On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion, Proceedings of the Combustion Institute, Vol.16, (1976), pp. 719-729.