

- 連続の式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial x_\alpha} = 0 \quad (3.1)$$

- 運動量の保存式

$$\rho \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} + \rho u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} = -\frac{\partial p}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial \tau_{\alpha\beta}}{\partial x_\beta} + F_\alpha \quad (\alpha = 1, 2, 3) \quad (3.2)$$

- エネルギー保存式

$$\rho \bar{c}_p \frac{\partial T}{\partial t} + \rho \bar{c}_p u_\beta \frac{\partial T}{\partial x_\beta} = \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_\beta} \right) - \sum_{k=1}^4 h_k \dot{w}_k + \dot{Q} \quad (3.3)$$

- 化学種の保存式

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho u_\beta \frac{\partial Y_k}{\partial x_\beta} = \frac{\partial}{\partial x_\beta} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_\beta} \right) + \dot{w}_k \quad (k = 1, 2, 3, 4) \quad (3.4)$$

- 状態方程式

$$p = \rho R^0 T \sum_{k=1}^4 \frac{Y_k}{W_k} \quad (3.5)$$

ここで、各変数は次のようである。

- せん断応力

$$\tau_{\alpha\beta} = \mu \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{2}{3} \delta_{\alpha\beta} \frac{\partial u_\gamma}{\partial x_\gamma} \right) \quad (3.6)$$

・ 体積力

本研究で取り扱う水素は空気に対し非常に軽い気体であるため、浮力の影響が大きくなる。従って空気に対する浮力の効果を考慮する。

$$\begin{aligned} F_\alpha &= (\rho_{air} - \rho)g_\alpha \\ g_1 &= 0, g_2 = 0, g_3 = g \end{aligned} \quad (3.7)$$

さらに温度による密度変化を考慮するため、ブシネスク近似を用いた。

$$F_\alpha = \left\{ \rho_{air} - \left(\rho_0 + \frac{\partial \rho}{\partial T} (T - T_0) \right) \right\} g_\alpha \quad (3.8)$$

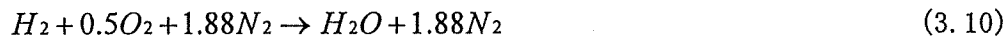
・ 外部熱源

水素—酸素混合気体を着火させるためには、何らかの方法でエネルギーを加える必要がある。本研究では混合気体内のある領域に一定時間、外部熱源を置き、温度を上昇させた。aは定数で、着火時間中は一定のエネルギーを与えている。

$$\dot{Q} = a \quad (3.9)$$

・ 反応速度

本研究で用いた化学反応は総括一段不可逆反応である。反応式は次のようになる。



反応速度には以下の Arrhenius 型の式^[4]を用いた。

$$\begin{aligned} \dot{w}_{H_2} &= -W_{H_2}\omega, \dot{w}_{O_2} = -0.5W_{O_2}\omega, \dot{w}_{H_2O} = W_{H_2O}\omega \\ \omega &= B_1 \exp\left(-\frac{E_a}{R_0T}\right) \rho^{1.5} \left(\frac{Y_{H_2}}{W_{H_2}}\right) \left(\frac{Y_{O_2}}{W_{O_2}}\right)^{0.5} \end{aligned} \quad (3.11)$$

ここで頻度因子、活性化エネルギーは参考文献[5]を参照して定めた。

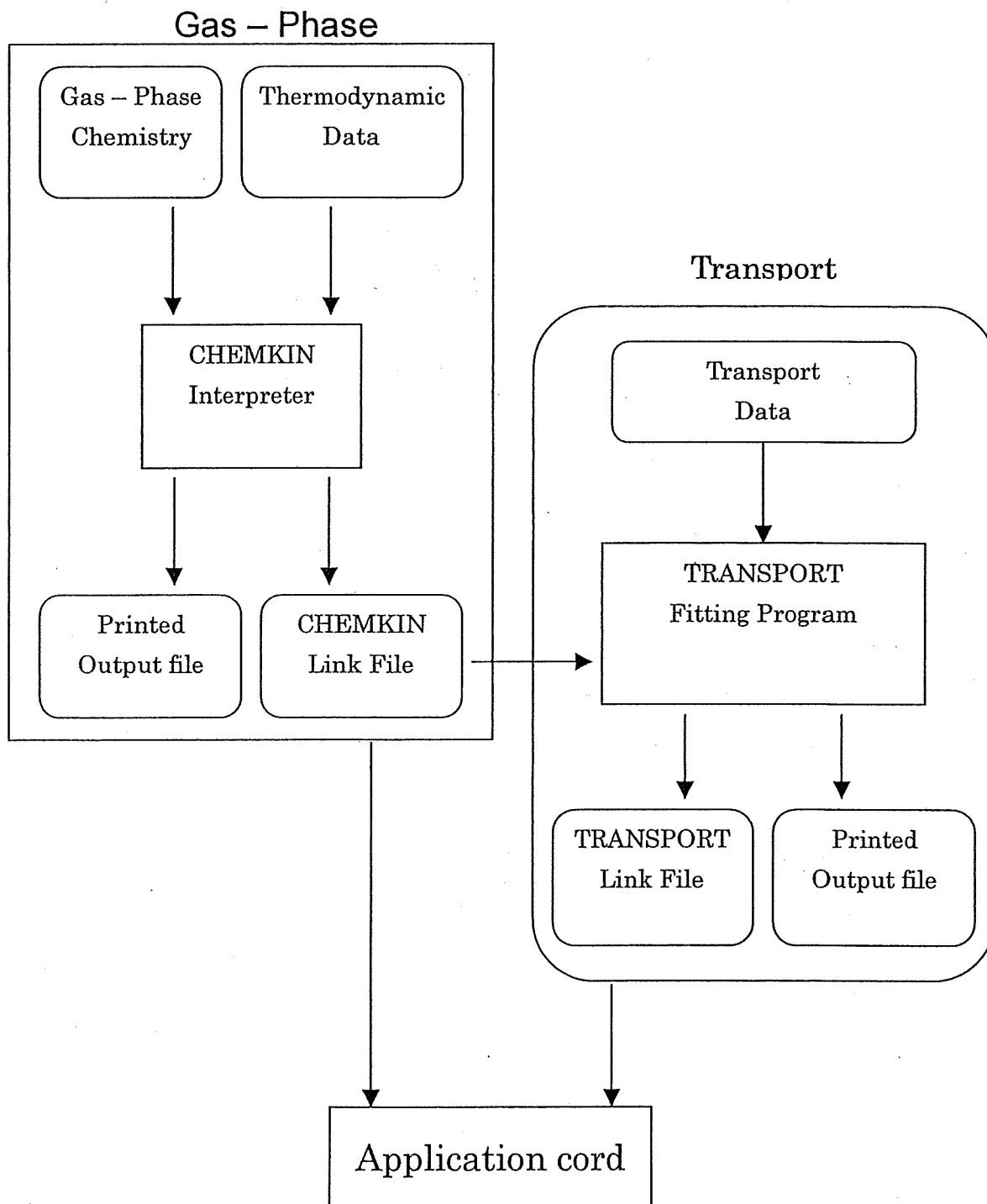
$$\begin{aligned} \text{頻度因子}^{[5]} &: B_1 = 1.6 \times 10^{12} \\ \text{活性化エネルギー}^{[5]} &: E_a = 15 \text{ [kcal/mol]} \end{aligned}$$

3.2 物性値の導出

本研究では化学反応機構をもとに任意の温度に対する各化学種の物性値を CHEMKIN^[6]を用いて導出する。そこで、CHEMKIN の基本的な構造を示し、本研究での適用方法を述べる。

計算を行う過程で、CHEMKIN Interpreter (以下 CHEM-Int) と TRANSPORT Fitting Program (以下 TRANS-FP) から得られるデータを使用する。CHEM-Int は、はじめに入力として化学反応式と各化学反応式における係数 (反応速度の頻度因子, 温度依存性の次数, 活性化エネルギー) を必要とする。CHEM-Int によって作られるリンクファイルには入力された化学反応式や化学種, 化学反応の係数の他に化学種の分子量や熱力学の多項式係数を出力する。TRANS-FP は CHEM-Int によって作られたリンクファイルをもとに各化学種に対する輸送係数 (粘性係数, 熱伝導率, 拡散係数) を出力する。 (Table 1)

Table 1 Abstract of CHEMKIN



3.3 数値計算法

本研究では層流計算にあたり、次のような数値計算法^{[7], [8]}を用いた。

3.3.1 時間の離散化

本研究は非定常問題であるため、時間の精度は非常に重要である。しかし、精度の高い解を得ることより大きなスケールでの計算を目的としているため、時間の離散化には時間刻み幅を比較的大きくとることができる1次精度の陰解法を用いた。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} \quad (3.12)$$

3.3.2 空間の離散化

本研究では、空間微分には有限体積法による2次精度の中心差分法を用いた。化学反応項に関しては非線形項であるため、Newtonの線形化を用いて線形化した。

以下にNewtonの線形化を示す。

化学反応項は温度と化学種の質量分率の非線形項である。これらの項はベクトル表記すると次のようになる。

$$\mathbf{f}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} -\sum_{k=1}^4 h_k \dot{w}_k \\ \dot{w}_{H_2} \\ \dot{w}_{O_2} \\ \dot{w}_{H_2O} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

$$\mathbf{U} = (T^{n+1}, Y_{H_2}^{n+1}, Y_{O_2}^{n+1}, Y_{H_2O}^{n+1})$$

時間の離散化には陰解法を用いているため、上述の反応項は次のようになる。

$$\mathbf{f}^{n+1}(\mathbf{U}^{n+1}) = \begin{pmatrix} -\sum_{k=1}^4 h_k \dot{w}_k^{n+1} \\ \dot{w}_{H_2}^{n+1} \\ \dot{w}_{O_2}^{n+1} \\ \dot{w}_{H_2O}^{n+1} \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

これを線形化すると次のようになる。

$$\mathbf{f}^{n+1}(\mathbf{U}^{n+1}) = \mathbf{f}^n(\mathbf{U}^n) + \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{U}} \right|^n (\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n) \quad (3.15)$$

3.3.3 時間進行法

本研究では時間進行法に ADI (Alternative Direction Implicit) 法^[9]を用いた。ADI 法については付録 A に記す。

3.3.4 速度と圧力のカップリング計算

速度と圧力のカップリング計算には H. A. Dwyer による圧力補正法^[7] (low Mach number scheme) を用いた。この scheme は MAC 型解法の系統に入り、圧力方程式の調整によって連続の条件を完全に満たす解を得ることができる解法である。さらに音波を除去できるという利点も持ち合わせている。MAC 型解法のほとんどは非圧縮性流体を対象とした陽解法であるが、陽解法では時間刻み幅に厳しい条件が課せられるため、時間刻み幅を比較的自由にとれ燃焼計算等の可変密度流れを扱うことのできる本手法を用いた。

以下にアルゴリズムを示す。

まず、次の仮定を行う。

- ・ 空間的にあるいは時間的に熱力学的な圧力が一定である。
- ・ Navier-Stokes 方程式に現れる圧力つまり動圧は熱力学的圧力に比べて小さい。

支配方程式の有限体積法による表記を以下に示す。

- ・ 連続の式

$$\iiint \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega + \iint \rho u_\beta dS_\beta = 0 \quad (3.16)$$

- ・ 運動量の保存式

$$\iiint \rho \frac{\partial u_\alpha}{\partial t} d\Omega + \iiint \rho u_\beta \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} d\Omega = -\iint p dS_\alpha + \iint \tau_{\alpha\beta} dS_\beta \quad (3.17)$$

本解法では、2段階解法を用い、速度場と圧力場をカップリングして計算する。
 速度変化は運動量の保存式が寄与する速度変化 $\Delta u_{\alpha M}$ と連続の式が寄与する速度変化 $\Delta u_{\alpha C}$
 の2つの部分に分けられ、次のようになる。

$$u_{\alpha}^{n+1} = u_{\alpha}^n + \Delta u_{\alpha M} + \Delta u_{\alpha C} \quad (3.18)$$

流体を非圧縮性であると仮定すると $\nabla \times \Delta u_{\alpha C} = 0$ となり、渦なしとみなすことができる。
 つまり、 $\Delta u_{\alpha C}$ にはScalar Potentialが存在することに等しい。Scalar Potentialより連続
 の式が寄与する速度変化分は次のようになる。

$$\Delta u_{\alpha C} = \frac{\partial \phi}{\partial x_{\alpha}} \quad (3.19)$$

以上より式 (3.16), (3.17) は次のようになる。

$$\iiint \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega + \iint \rho (u_{\beta}^n + \Delta u_{\beta M} + \frac{\partial \phi}{\partial x_{\beta}}) dS_{\beta} = 0 \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \iiint \rho \frac{\Delta u_{\alpha M} + \frac{\partial \phi}{\partial x_{\alpha}}}{\Delta t} d\Omega + \iiint \rho u_{\beta}^n \frac{\partial u_{\alpha}^{n+1}}{\partial x_{\beta}} d\Omega = \\ - \iint p^{n+1} dS_{\alpha} + \iint \tau_{\alpha\beta}^{n+1} dS_{\beta} \end{aligned} \quad (3.21)$$

次に圧力変化について述べる。圧力変化 ϕ は速度変化と直接関係があり、次のように書ける。

$$\begin{aligned} p^{n+1} &= p^n + \phi \\ \phi &= -\rho \frac{\phi}{\Delta t} \end{aligned} \quad (3.22)$$

これを式 (3.22) に代入してやると

$$\begin{aligned} \iiint \rho \frac{\Delta u_{\alpha M} + \frac{\partial \phi}{\partial x_{\alpha}}}{\Delta t} d\Omega + \iiint \rho u_{\beta}^n \frac{\partial u_{\alpha}^{n+1}}{\partial x_{\beta}} d\Omega = \\ - \iint (p^n - \rho \frac{\phi}{\Delta t}) dS_{\alpha} + \iint \tau_{\alpha\beta}^{n+1} dS_{\beta} \end{aligned} \quad (3.23)$$

以上を2段階に分けると次のようになる。

STEP I

$$\iiint \rho \frac{u_\alpha^*}{\Delta t} d\Omega + \iiint \rho u_\beta^n \frac{\partial u_\alpha^*}{\partial x_\beta} d\Omega = -\iint p^n dS_\alpha + \iint \tau_{\alpha\beta}^* dS_\beta \quad (3.24)$$

$$u_\alpha^* = u_\alpha^n + \Delta u_{\alpha M}$$

式 (3.24) を u_α^* について解く。

STEP II

$$\iint \frac{\partial \phi}{\partial x_\beta} dS_\beta = -\iint \rho u_\beta^* dS_\beta - \iiint \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega \quad (3.25)$$

式 (3.25) より ϕ について解く。

流体要素の加速は通常一定密度過程によって進められるため、式 (3.25) の右辺第2項は無視する。

与えられた ϕ より次の式を解く。

$$\iiint \rho \frac{\Delta u_{\alpha C}}{\Delta t} d\Omega = \iint \rho \frac{\phi}{\Delta t} dS_\alpha \quad (3.26)$$

以上より

$$u_\alpha^{n+1} = u_\alpha^n + \Delta u_{\alpha M} + \Delta u_{\alpha C} \quad (3.27)$$

$$p^{n+1} = p^n + \varphi \quad (3.28)$$

$$\varphi = -\rho \frac{\phi}{\Delta t}$$

が求められる。

3.3.5 Poisson 方程式の解法

3.3.4 項で述べた解法では 2 段階 step で ϕ に関する式を解かなければならない。この式を離散化すると一般的な楕円型偏微分方程式 Poisson 方程式になる。本研究では、等間隔格子の計算においては 4 段階 V 型多重格子法^{[10], [11]}、不等間隔格子の計算においては SOR 法^[3]を用いた。SOR 法および多重格子法については付録 B, C に記す。

3.3.6 Δ 型陰解法

本研究が対象としている現象は非定常な現象であるため、1 時間 Step ごとに流れ場が大きく変化する。非定常現象、乱流現象等においては、その変化が著しく、直接解法では、十分に収束した解を得ることは難しい。そこで、本研究 scheme への Δ 型陰解法^[12]の導入をはかり、十分に収束した解を得て、次の時間 Step に進める反復解法を試みた。

Δ 型陰解法は次のようになる。

従来の本研究 scheme を時間に関して離散化した式は以下のようになる。

STEP I

$$\left[1 + \Delta t \left(u_{\beta}^n \cdot \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} - \nu \frac{\partial^2}{\partial x_{\beta}^2} \right) \right] u_{\alpha}^* = u_{\alpha}^n - \frac{\Delta t}{\rho} \frac{\partial p^n}{\partial x_{\alpha}} + \Delta t g_{\alpha} \quad (3.29)$$

STEP II

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_{\beta}^2} &= - \frac{\partial}{\partial x_{\beta}} (\rho u_{\beta}^*) \\ u_{\alpha}^{n+1} &= u_{\alpha}^n + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \phi}{\partial x_{\alpha}} \\ p^{n+1} &= p^n - \frac{\phi}{\Delta t} \end{aligned} \quad (3.30)$$

式 (3.29), (3.30) に△型陰解法を導入すると次のようになる。

STEP I

$$\left[1 + \Delta t \left(u_\beta^n \frac{\partial}{\partial x_\beta} - \nu \frac{\partial^2}{\partial x_\beta^2} \right) \right] \Delta u_\alpha^{*(m)} = - (u_\alpha^{(m-1)} - u_\alpha^n) + \frac{1}{2} (rhs^{(m-1)} + rhs^n), \quad (3.31)$$

$$rhs = -\Delta t \left(u_\beta^n \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} - \nu \frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial x_\beta^2} + \frac{\partial p}{\partial x_\alpha} - g_\alpha \right), u_\alpha^{*(m)} = u_\alpha^{(m-1)} + \Delta u_\alpha^{*(m)}$$

STEP II

$$\frac{\partial^2 \phi^{(m)}}{\partial x_\beta^2} = - \frac{\partial}{\partial x_\beta} (\rho u_\beta^{*(m)})$$

$$u_\alpha^{(m)} = u_\alpha^{*(m)} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \phi^{(m)}}{\partial x_\alpha} \quad (3.32)$$

$$p^{(m)} = p^{(m-1)} - \frac{2\phi^{(m)}}{\Delta t}$$

さらに, $\Delta u_\alpha^{*(m)} = u_\alpha^{*(m)} - u_\alpha^{(m-1)}$, $rhs = -\Delta t \left(u_\beta^n \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} - \nu \frac{\partial^2 u_\alpha}{\partial x_\beta^2} + \frac{\partial p}{\partial x_\alpha} - g_\alpha \right)$ を再度代入する。

STEP I

$$\left[1 + \Delta t \left(u_\beta^n \frac{\partial}{\partial x_\beta} - \nu \frac{\partial^2}{\partial x_\beta^2} \right) \right] u_\alpha^{*(m)} = u_\alpha^n - \Delta t \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{p^{(m-1)} + p^n}{2} \right) + \Delta t g_\alpha + \Delta t \left(u_\beta^n \frac{\partial}{\partial x_\beta} - \nu \frac{\partial^2}{\partial x_\beta^2} \right) \left(\frac{u_\alpha^{(m-1)} + u_\alpha^n}{2} \right) \quad (3.33)$$

STEP II

$$\frac{\partial^2 \phi^{(m)}}{\partial x_\beta^2} = -\frac{\partial}{\partial x_\beta} (\rho u_\beta^{*(m)})$$

$$u_\alpha^{(m)} = u_\alpha^{*(m)} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \phi^{(m)}}{\partial x_\alpha} \quad (3.34)$$

$$p^{(m)} = p^{(m-1)} - \frac{2\phi^{(m)}}{\Delta t}$$

となる。

これを $\phi^{(m)} \rightarrow 0$ まで繰り返し計算を行う。

3.4 境界条件

境界条件について以下に示す.

- 地面の境界条件

地面の境界条件は壁面境界条件を用いた.

$$\begin{aligned} \mathbf{u}|_{wall} &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial n}|_{wall} &= 0 \\ \frac{\partial Y_i}{\partial n}|_{wall} &= 0 \end{aligned} \tag{3.35}$$

- 開放空間の境界条件

開放空間の境界条件には Neumann 境界条件を用いた.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n}|_{bound} &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial n}|_{bound} &= 0 \\ \frac{\partial Y_k}{\partial n}|_{bound} &= 0 \end{aligned} \tag{3.36}$$

3.5 計算条件

層流拡散および拡散・燃焼計算の計算条件を Table 3.1,

Table 3.2 に示す.

1 次元の計算においては水平方向を座標軸にとり, 浮力の効果のない水平方向への拡散・燃焼の計算を行った. 計算格子に関しては 1 次元拡散には不等間隔格子, 3 次元拡散・燃焼には等間隔格子を用いた.

Table 3.1 Calculation conditions for 1D H₂ diffusion

	拡散	拡散・燃焼
格子点数	201 点	201 点
計算領域	5.1cm	5.1cm
水素貯蔵領域	1.16cm	1.16cm
水素貯蔵量	94.5 μg	94.5 μg
格子間隔	0.01~0.5mm	0.01~0.5mm
時間刻み幅	0.1ms	0.1ms (燃焼時は 10.0nsec)
着火開始時刻		1.0s (着火位置は x=2.55cm,)
熱源エネルギー		6×10 ¹² erg/cm ³ ・s
着火時間		1.0 μs

Table 3.2 Calculation conditions for 3D H₂ diffusion

	拡散	拡散・燃焼
格子点数	33 点×33 点×33 点	33 点×33 点×33 点
計算領域	6.4mm×6.4mm×6.4mm	3.2mm×3.2mm×3.2mm
水素貯蔵領域	1.0mm×1.0mm×1.0mm	0.5mm×0.5mm×0.5mm
水素貯蔵量	81.896ng	10.237ng
格子間隔	0.2mm	0.1mm
時間刻み幅	1.0 μs	1.0 μs (燃焼時は 10.0nsec)
着火開始時刻		40.0 μs (着火位置は x=y=1.6mm, z=0.2mm)
熱源エネルギー		6×10 ¹⁴ erg/cm ³ ・s
着火時間		1.0 μs

3.6 Δ 型陰解法の効果

本研究 scheme への Δ 型陰解法を導入した時の Δ 型陰解法の効果を調べた。計算結果は時刻 2.001ms の結果である。水素塊中心を通る Z 軸に沿った値をプロットした。以下に計算結果を示す。

Fig. 3.1 は Z 方向の速度分布, Fig. 3.2 は反復計算による速度の変化量, Fig. 3.3 は Z 方向の圧力分布, Fig. 3.4 は反復計算による圧力の変化量, Fig. 3.5 は求められた速度を連続の式に代入したときの残差, Fig. 3.6 は反復計算による連続の式の残差の変化量である。速度分布 (Fig. 3.1), 圧力分布 (Fig. 3.3) を見ると反復計算により 3 回目以降徐々に収束していることがわかる。また, 反復計算を行ったことによる速度の変化量 (Fig. 3.2), 圧力の変化量 (Fig. 3.4), 連続の式の残差 (Fig. 3.5) および残差の変化量 (Fig. 3.6) はいずれも 0 に漸近し, 3 回繰り返せばほぼ値が収束していることを示している。反復解法を用いた場合と反復解法を用いず直接解法で求めた場合と分布が著しく異なっているため, 本研究のような非定常問題を扱う場合, Δ 型陰解法を導入し, 各時間 step ごとに値を収束させることが必要である。これ以降の計算では Δ 型陰解法を採用し, 最大繰り返し回数を 10 回として圧力の変化量が 1%以下を収束判定とする。

また, 速度, 圧力以外の変数に関しても求めた値を修正値として繰り返し計算を行う。

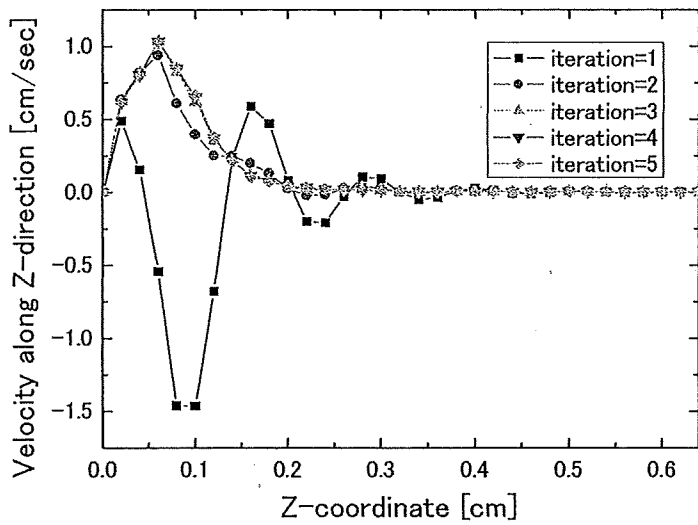


Fig. 3.1 Velocity along Z-direction

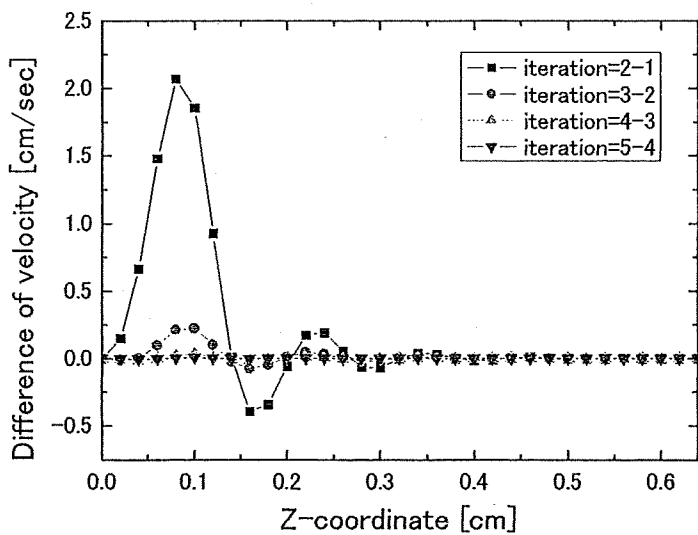


Fig. 3.2 Difference of velocity

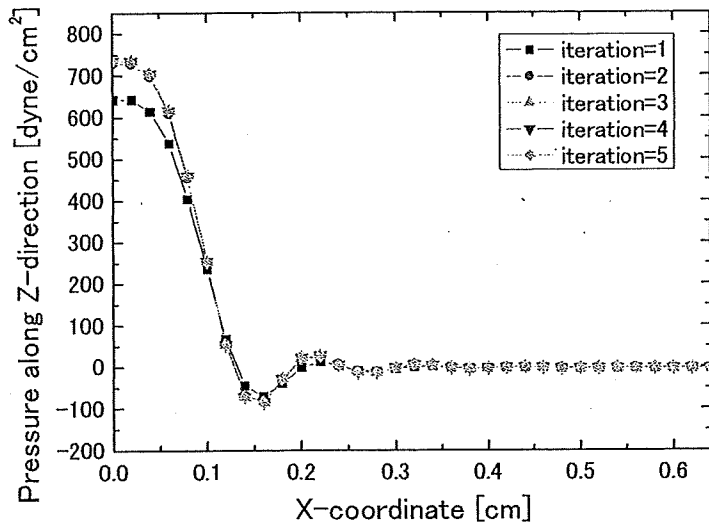


Fig. 3.3 Pressure along Z-direction

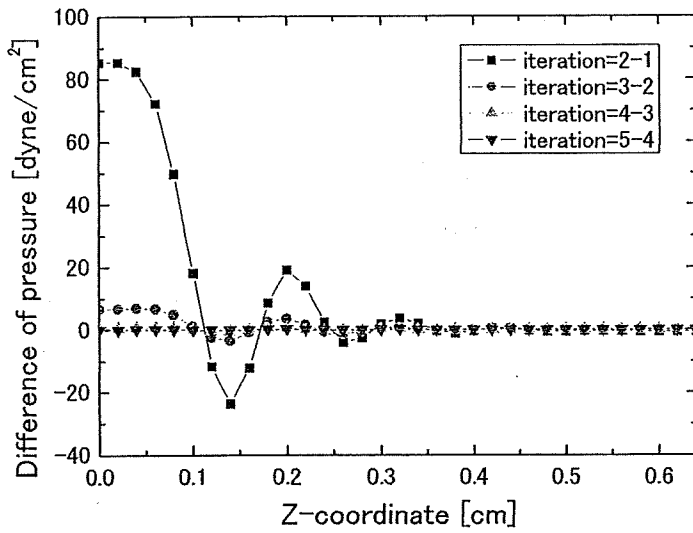


Fig. 3.4 Difference of pressure

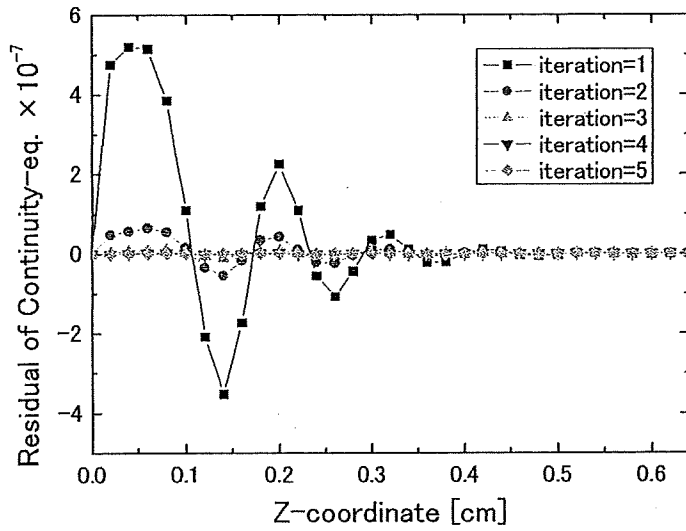


Fig. 3.5 Residual of Continuity-eq. along Z-direction

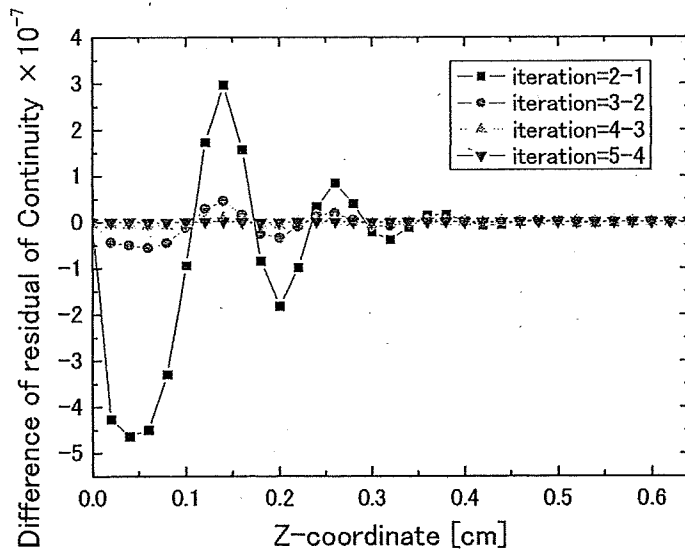


Fig. 3.6 Difference of residual of Continuity-eq.

3.7 1次元拡散の計算結果および考察

1次元層流拡散の計算結果を以下に示す。

3.7.1 水素の質量分率分布の時間変化

水素の質量分率分布の時間変化を Fig. 3.7 に示す。

水素は時間とともに大気中に左右対称に拡散している。1次元計算では、流れ方向が1方向しかないため、浮力流れ、対流等の流れ場は存在せず、速度場は常に0で拡散移動のみに支配される。時刻0.9sでは濃度差はほぼなくなり、ほぼ同一濃度に達している。

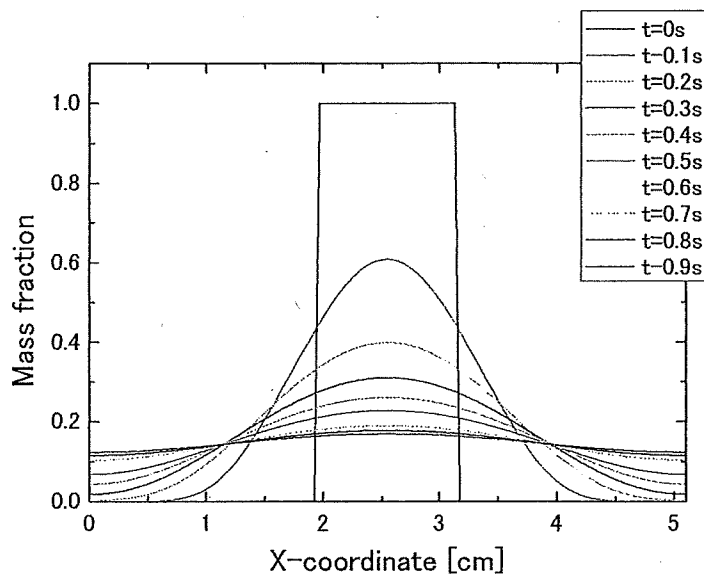


Fig. 3.7 Time history of H₂ mass fraction distribution

3.8 1次元拡散・燃焼の計算結果および考察

1次元層流拡散・燃焼の計算結果を以下に示す。

3.8.1 水素の質量分率分布の時間変化

水素の質量分率分布の時間変化を Fig. 3.8 に示す。拡散中に外部熱源により着火、燃焼に至る様子が水素質量分率の減少によりわかる。また、水素の質量分率の減少領域が徐々に広がっていることから火炎が伝播していることもわかる。水素が全て消費されず残っているのは、過濃燃料域で酸化剤である酸素がすべて消費されたからである。

3.8.2 温度分布の時間変化

温度分布の時間変化を Fig. 3.9 に示す。温度は時刻 1.0001s のときに 2.55cm 付近で最大温度をとった後、徐々に減少しながら左右対称に伝播している。これは、外部熱源により大きく温度が上昇して着火し、左右へ火炎が伝播したことを示している。また、火炎伝播速度は最大で約 25m/s である。

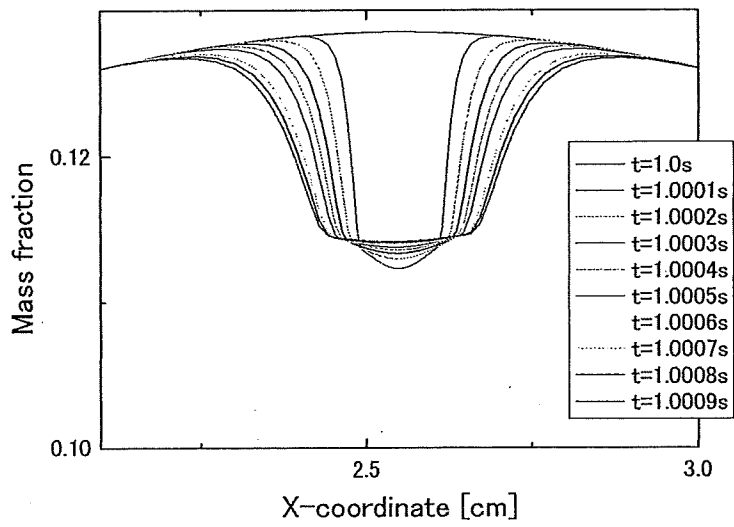


Fig. 3.8 Time history of H₂ mass fraction distribution

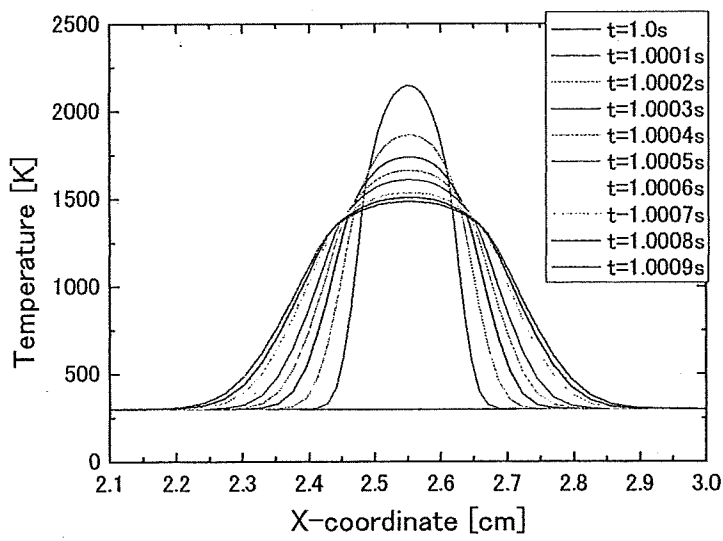


Fig. 3.9 Time history of temperature distribution