

燃焼に関する定式化

質量保存則

運動量保存則

エネルギー保存則

化学成分保存則

状態方程式

解離反応モデル

エネルギー保存式

$$\rho C_p \frac{dT}{dt} = \frac{dp}{dt} + \left(\frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right) + \Phi_v + \dot{Q}$$

C_p : 多成分混合気体の定圧比熱、 λ : 多成分混合気体の熱伝導度
 右辺第3項、第4項は散逸加熱およびエネルギー生成項

化学成分保存式

$$\rho \frac{dY_k}{dt} = - \frac{\partial}{\partial z} (\rho Y_k V_{kz}) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \rho Y_k V_{kr}) + \omega_k$$

$$V_{kz} = - \frac{D}{Y_k} \frac{\partial Y_k}{\partial z}, \quad V_{kr} = - \frac{D}{Y_k} \frac{\partial Y_k}{\partial r}$$

$$\sum_{k=1}^K Y_k \equiv 1$$

Y_k : 第 k 化学種の質量分率

D : 多成分混合気体の拡散係数

ω_k : 反応による生成項

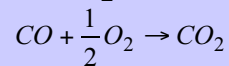
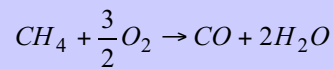
状態方程式

$$p = \rho RT \sum_{k=1}^K \frac{Y_k}{w_k} \quad Y_k : \text{化学種 k の質量分率}$$

w_k : 化学種 k の分子量

解離反応モデル

COを含む2段階反応式を採用した場合を考える。



$$- \frac{d[CH_4]}{dt} = 0.5 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{16389}{T}\right) [CH_4][O_2]$$

$$- \frac{d[CO_2]}{dt} = 0.5 \times 10^{12} \exp\left(-\frac{13832}{T}\right) [CO][O_2]$$

解離反応モデル

気流中で起こる化学反応としては以下の7種成分気体の反応が考えられる。



例として化学種を、酸素分子、窒素分子および窒素原子の3種類とすると、考慮すべき反応式はつぎの1種類のみとなる。

$$-\frac{d[\text{N}_2]}{dt} = k_f [\text{N}_2][\text{M}] - k_b [\text{N}][\text{N}][\text{M}] - 225.19 \text{ kcal/mol}$$

但し、 k_f, k_b は反応速度係数

AA&S 流体ソルバーAEOLUS の計算フロー

[I] Diffusion & Reaction Phase (拡散項&反応項積分)

- ・質量 : $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$
- ・運動量 : $\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$
- ・エネルギー : $\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \dot{Q}_{reaction}$
- ・化学組成 : $\rho \frac{dY_k}{dt} = \nabla \cdot (\rho D \nabla Y_k) + \omega_k^{reaction}$

・数値解 : $\mathbf{Q}^n \Rightarrow \mathbf{Q}^*$

[II] Acoustic Phase (音響項積分) : GCUP 法

- ・質量 : $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u}$
 - ・運動量 : $\frac{\partial \nabla \cdot \mathbf{u}}{\partial t} = \nabla \cdot \frac{\nabla p}{\rho}$
 - ・エネルギー : $\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{dp}{dt}$
 - ・状態方程式 : $p = f(\rho, T, Y_k)$ (解の拘束条件)
- 4つの連立によって圧力のみ方程式が導出される。

・数値解 : $\mathbf{Q}^* \Rightarrow \mathbf{Q}^{**}$

[III] Advection Phase (移流項積分) : CIP 法

- ・質量 : $\frac{D\rho}{Dt} = 0$
- ・運動量 : $\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = 0$
- ・エネルギー : $\rho C_p \frac{DT}{Dt} = 0$
- ・化学組成 : $\rho \frac{DY_k}{Dt} = 0$

・数値解 : $\mathbf{Q}^{**} \Rightarrow \mathbf{Q}^{n+1}$

AEOLUS が採用する数値積分の方法

- ① 方程式を部分段階法で数値積分します。これは、方程式に寄与する項を一つずつに考慮して積分する方法です。nステップ目の解から n+1 ステップ目の解が求まるまで、中間解を経由します： $Q^n \Rightarrow Q^* \Rightarrow Q^{**} \Rightarrow Q^{n+1}$
- ② 方程式は、非移流項・移流項に分解されます。AEOLUS では、非移流項として、拡散項・反応項・音響項を含みます。
- ③ 拡散項・反応項は、寄与する項ごとに適切な解法を採用します。
- ④ 特に、音響項積分には **GCUP 法** を用います。そこでは、圧力の非線形方程式を解き、解が物質の状態方程式を満たします。一方、従来の **CUP 法** は圧力の線形方程式を解いています。
- ⑤ 移流項積分には **CIP 法** を採用します。