

複数化学種の合流解析

Advanced Algorithm & Systems

平成 21 年 6 月

1	はじめに	1
2	解析条件	1
2.1	系の形状(メッシュ)	1
2.2	初期条件	3
2.3	境界条件	3
2.3.1	流入口、流出口	3
2.3.2	壁面	3
2.4	物性値	3
2.4.1	粘性係数、熱伝導	3
2.4.2	定圧比熱	4
2.4.3	拡散係数	4
3	解析結果	4
3.1	系全体(0.50 秒後)	4
3.1.1	温度	4
3.1.2	密度	5
3.1.3	速さと流線	5
3.2	管路内での酸素の質量分率	6
3.3	合流部での酸素の質量分率	8
3.4	流入口 A から入れた水素の質量分率	10
4	補足	14
4.1	平板ポアズイユ流れ	14
4.2	有効拡散係数の求め方	15

1 はじめに

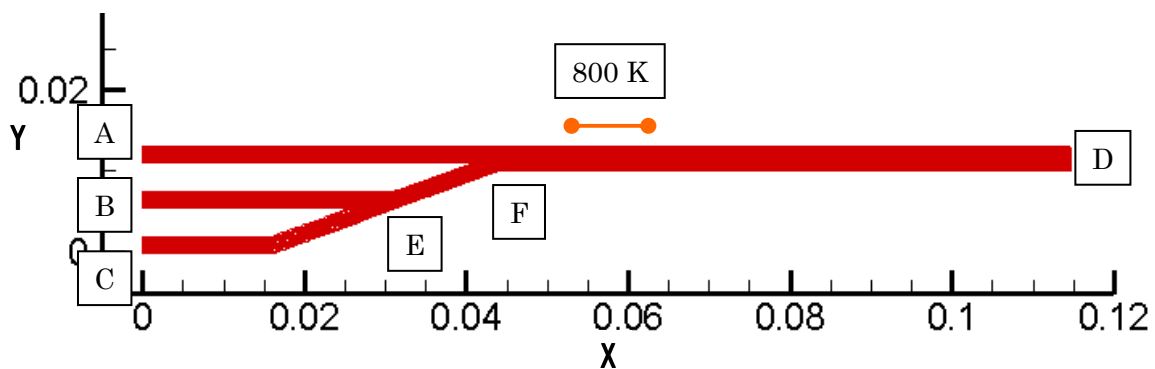
複数の化学種の気体混合流れを、弊社開発の流体ソルバーで解析した例。非圧縮的な流れのケースであるが、圧縮性流体解析コードで計算している例でもある。

2 解析条件

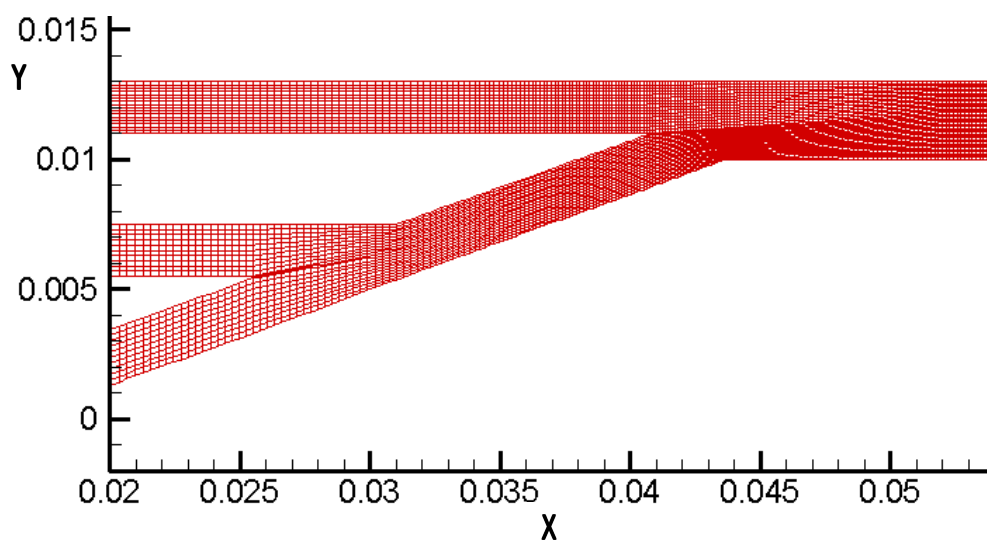
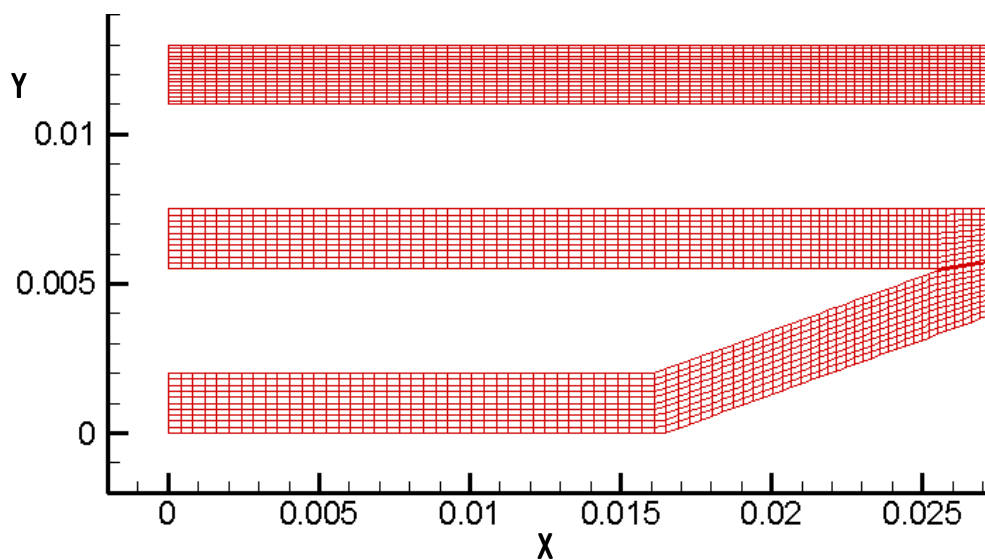
2.1 系の形状(メッシュ)

以下のような形状の系(メッシュ)で計算した。後々の説明のために、図中にあるような具合で、流入口、流出口に A, B, C, D と名前を付ける。また 2 箇所の合流部にも E, F

と名前を付ける。



拡大図



2.2 初期条件

メッシュの内点について、計算開始時での物理量(圧力、密度、温度、速度、ガスの成分)は以下のとおり。

	値
圧力 [Pa]	2.66644d4
温度 [K]	300.2
密度 [kg/m ³]	0.02153d0
速度(vx) [m/s]	0.256
速度(vy) [m/s]	0.0
成分	100% H2

2.3 境界条件

2.3.1 流入口、流出口

	流入口 A	流入口 B	流入口 C	流出口 D
圧力 [Pa]	2.66644d4	2.6664396d4	2.6664399d4	2.6664387d4
温度 [K]	300.2	300.2	300.2	(free)
密度 [kg/m ³]	0.02153d0 (H2)	0.3417d0 (O2)	0.02153d0 (H2)	(free)
速度 (vx) [m/s]	0.256	0.0032	0.192	(free)
速度 (vy) [m/s]	0.0	0.0	0.0	(free)
成分	100% H2	100% O2	100% H2	(free)

- (free)は値を固定していないことを示す。

2.3.2 壁面

粘性流体なので、壁面での速度は vx, vy とともにゼロ。圧力、密度、成分比は、それらの勾配ベクトルがそれぞれ壁面に垂直となるような条件。(いわゆるノイマン条件)。温度も基本的には同じ条件だが、最も上部にある壁面の、x=0.055 付近(一枚目の図のオレンジ色の線分辺り)のみ、800 K で固定。

2.4 物性値

2.4.1 粘性係数、熱伝導度

水素については、<http://properties.nist.gov/fluidsci/semiprop/gases/H2.html>にあるデータを、酸素については、<http://properties.nist.gov/fluidsci/semiprop/gases/O2.html>にあるデータを温度の3次関数で近似して用いた。

水素と酸素が混合しているグリッドでは、質量分率の重みをつけた平均値を用いた。(これには物理的な根拠はないが、一般に市販されている流体ソルバーなどでも採用されている簡便法である。)

2.4.2 定圧比熱

水素については、http://www.engineeringtoolbox.com/hydrogen-d_976.htmlにあるデータを、酸素については、<http://properties.nist.gov/fluidsci/semiprop/gases/O2.html>にあるデータを温度の4次関数で近似して用いた。

水素と酸素が混合しているグリッドでは、質量分率の重みをつけた平均値を用いた。(こちらは、エネルギーの加法性から物理的に正しい。)

2.4.3 拡散係数

拡散係数は、理論的に導かれる推算式(Bird, Stewart, and Lightfoot (2002); Transport Phenomena, John Wiley & Sons, 2nd. Ed.の式(17.3-12))を用いた。この式から得られる値は、(水素についてだけであるが、)http://www.nedo.go.jp/informations/other/200716_1/02.pdfのp. 13やp. 30にある値とはほぼ一致している。(上記文献の記述を信用するならば、無極性ガスに対しては5%程の精度で推定値が得られるそうである。)

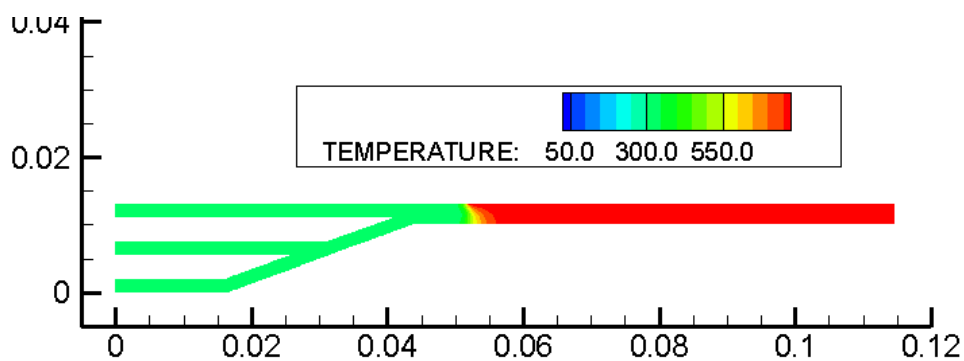
この式から求まる自己拡散係数、相互拡散係数の値を用いて、各成分に対する有効拡散係数を求める。その具体的な方法は§ 4.2を参照。

3 解析結果

3.1 系全体(0.50 秒後)

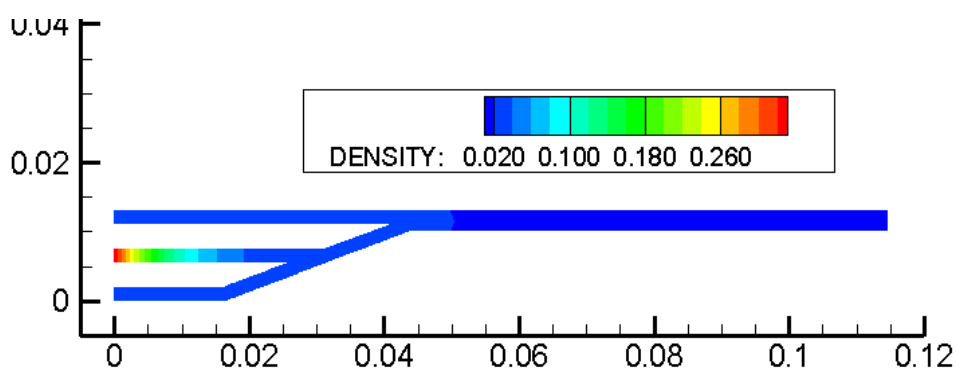
3.1.1 温度

高温壁からの熱伝導と移流によって、下流部全体が高温になる。なお、この温度分布は0.24秒後からほとんど変わらない。



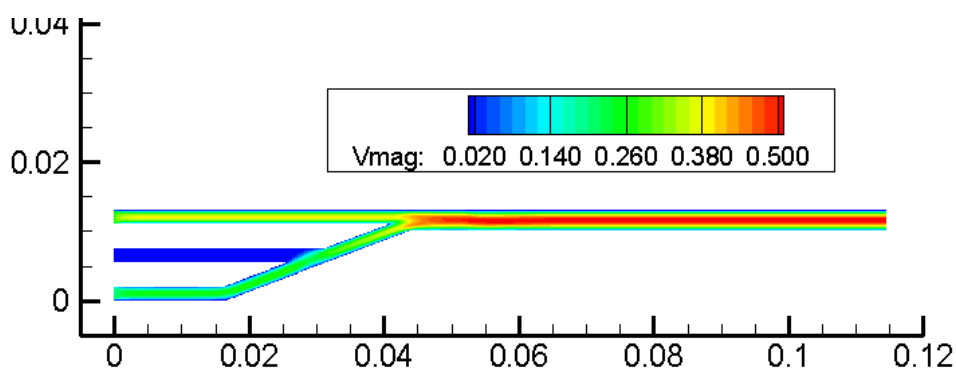
3.1.2 密度

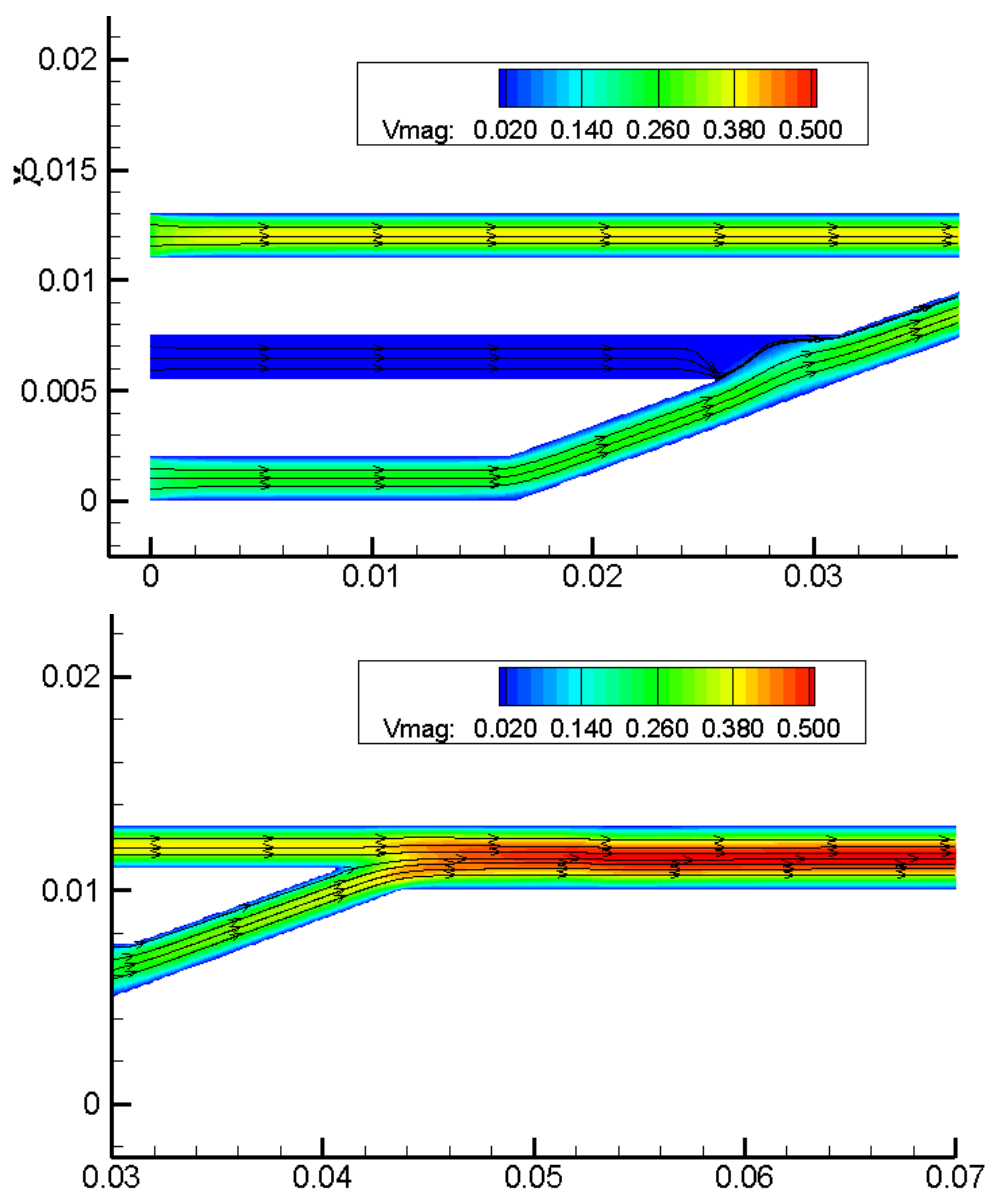
酸素が存在する所は密度が高くなっている。また、この図からは見づらいが、温度の高い所は密度が下がっている。



3.1.3 速さと流線

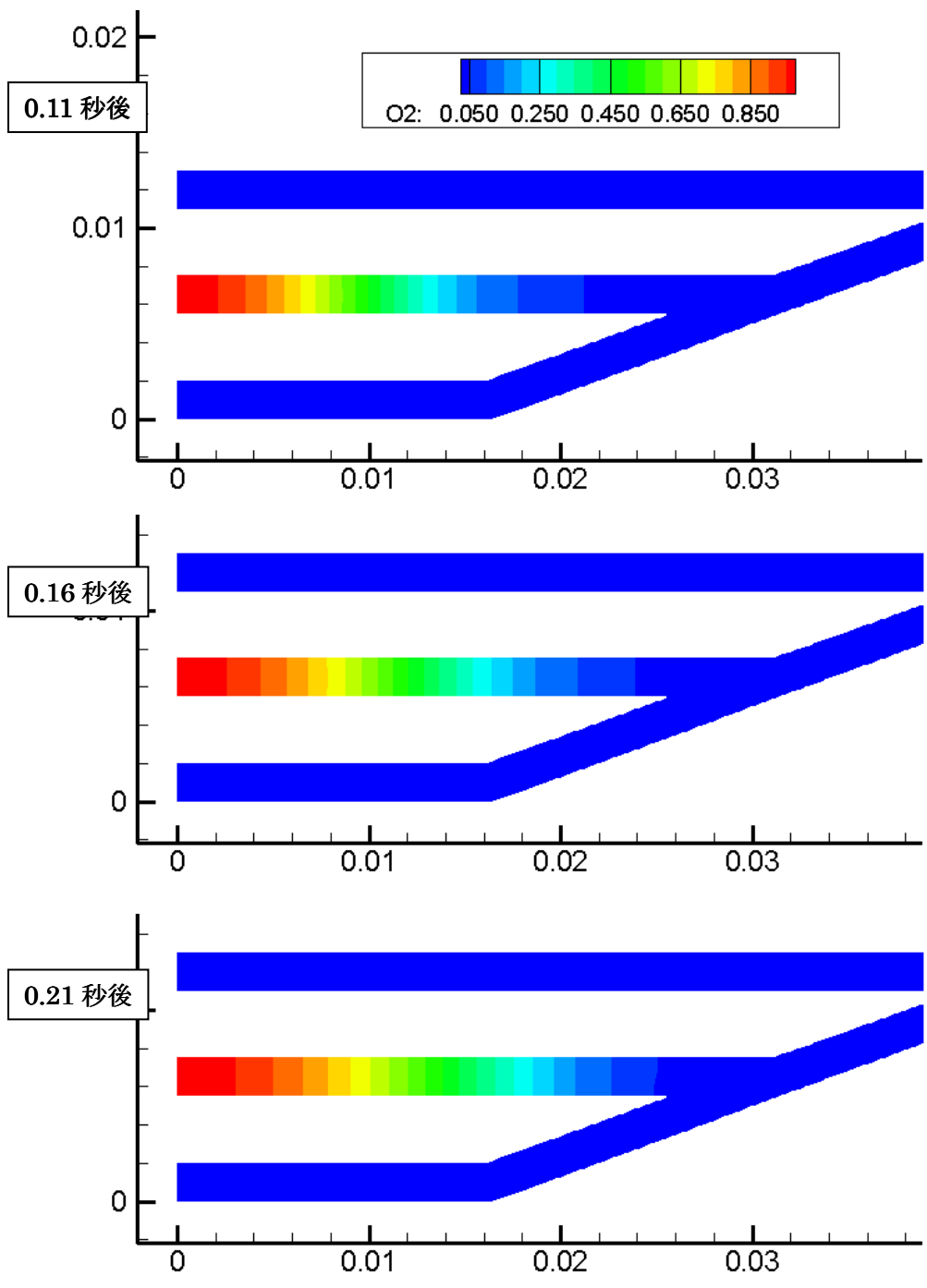
0.50 秒後における、流入口 A, B, C から 0.005 m の所の、管の中央での v_x の値はそれぞれ、0.389 m/s, 0.0048 m/s, 0.264 m/s である。

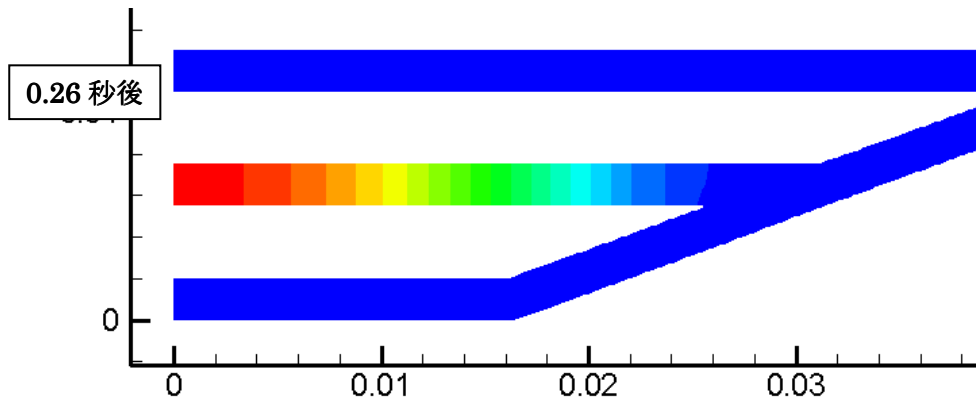




3.2 管路内での酸素の質量分率

管路での酸素の質量分率を示す。拡散が十分に効くので、等高線は速度の方向(壁面)に垂直になる。流量が小さいので、わずかずつではあるが、流れ込んでいる様子が分かる。

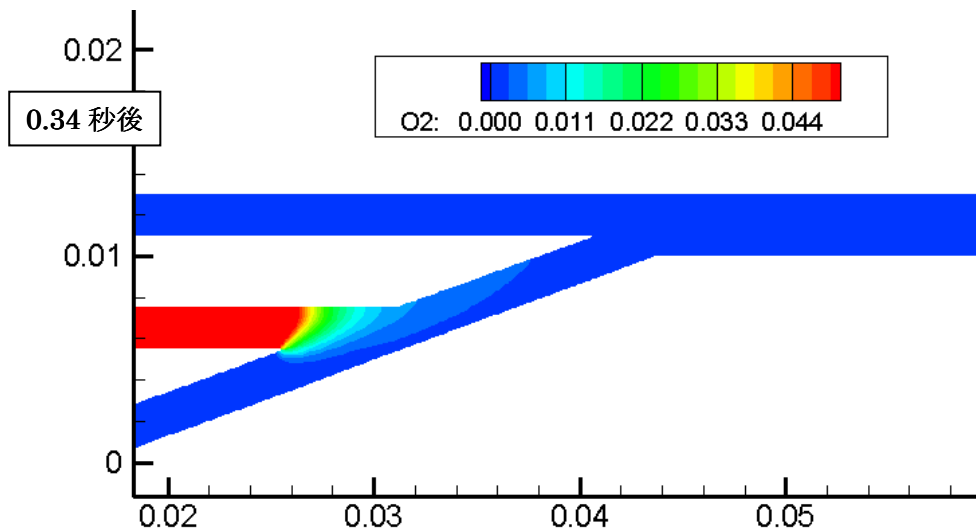


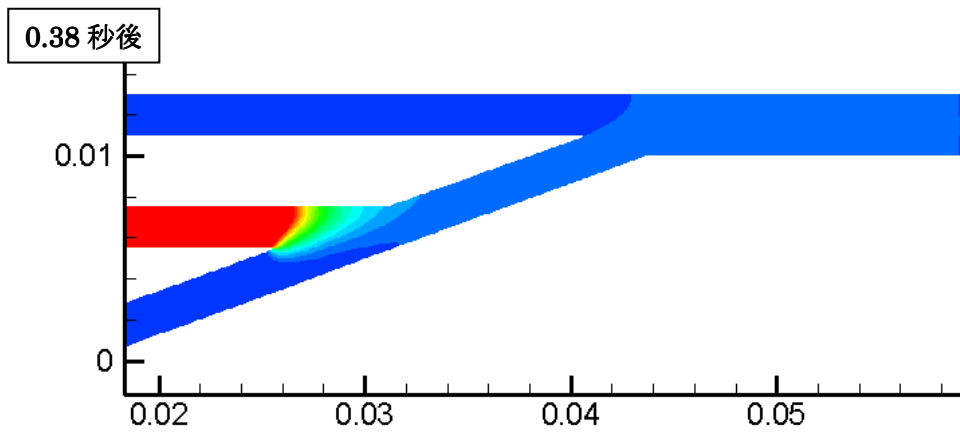
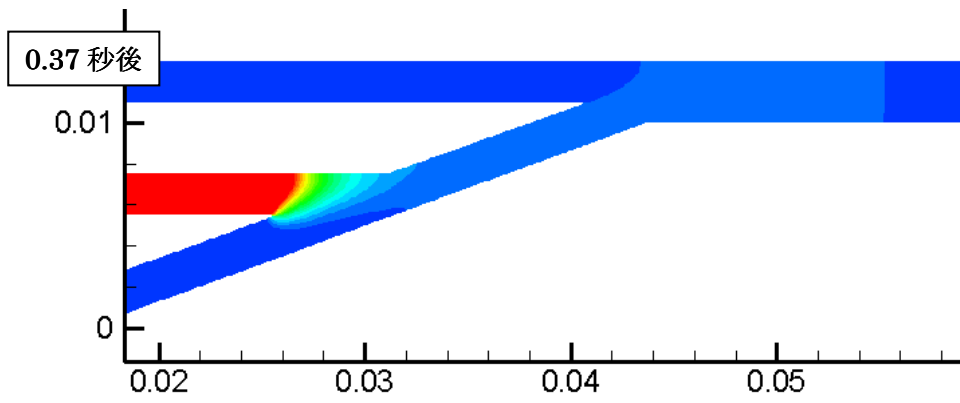
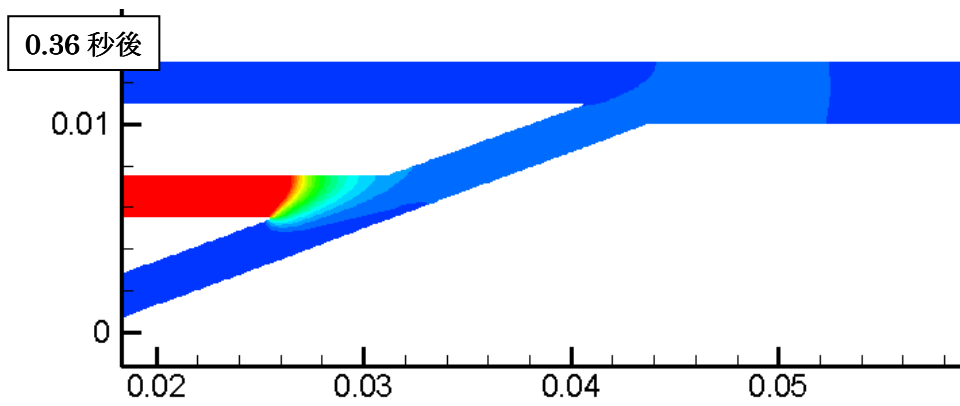
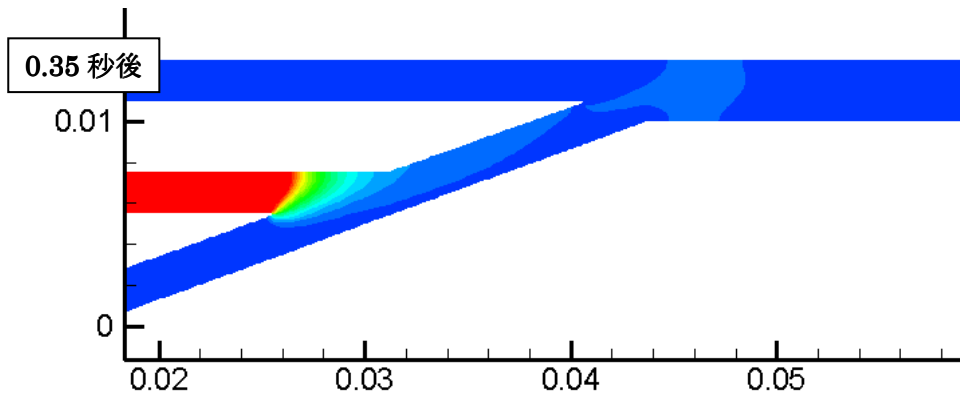


3.3 合流部での酸素の質量分率

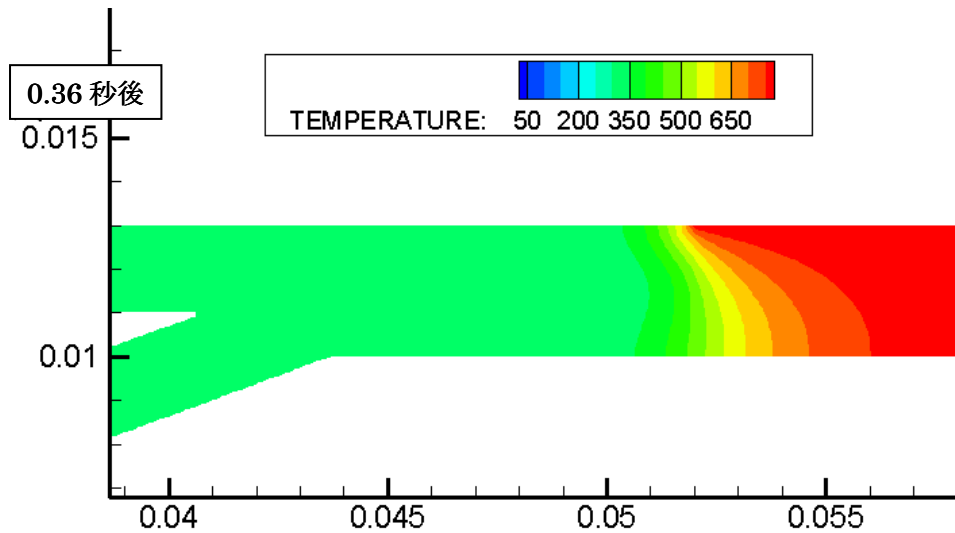
合流部での酸素の質量分率を示す。(カラーバーの範囲が、前節とは変更されていることに注意。) 値が 0.01 以下程度の所に注目し、領域の広がり方を見ると、これは中央の管路から染み出した酸素が、下側の管路からの流れに乗りつつ拡散していると解釈できる。

合流後の管路では、0.36 秒後辺りから、等高線が壁面に垂直になりながら進行しており、管路に渡って十分に拡散していると考えられる。これは高温となる領域のやや手前である。(この付近の温度分布を、この節の最後に載せた。)





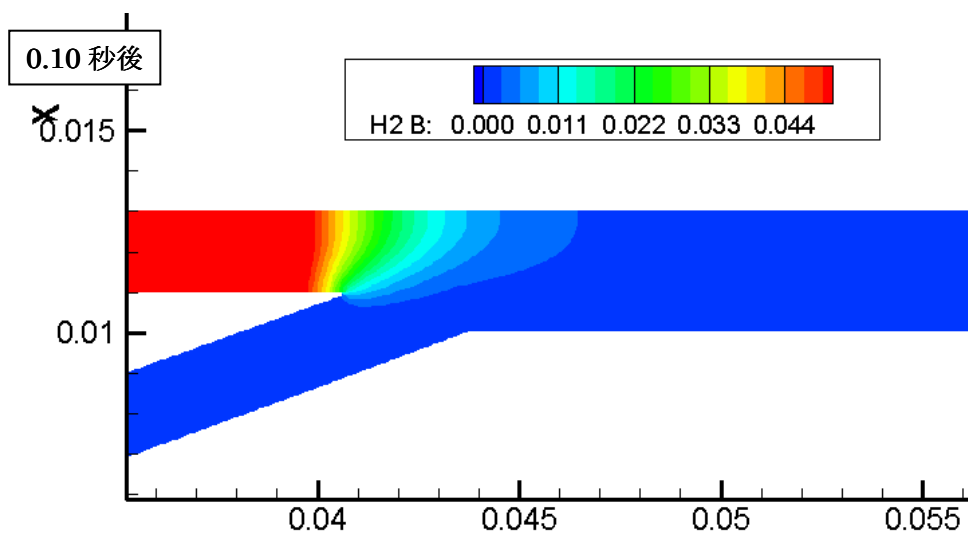
参考までに、0.36 秒後の、この領域付近での温度分布を以下に載せる。この付近の、この温度分布は 0.10 秒後辺りからほとんど変化していない。

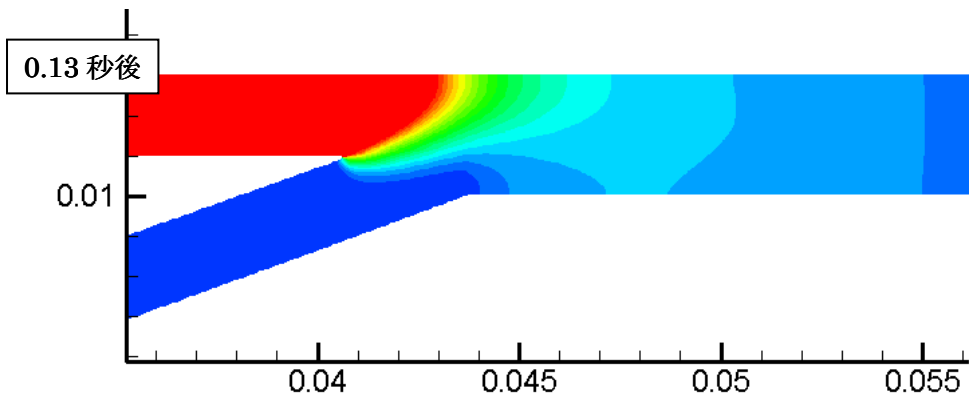
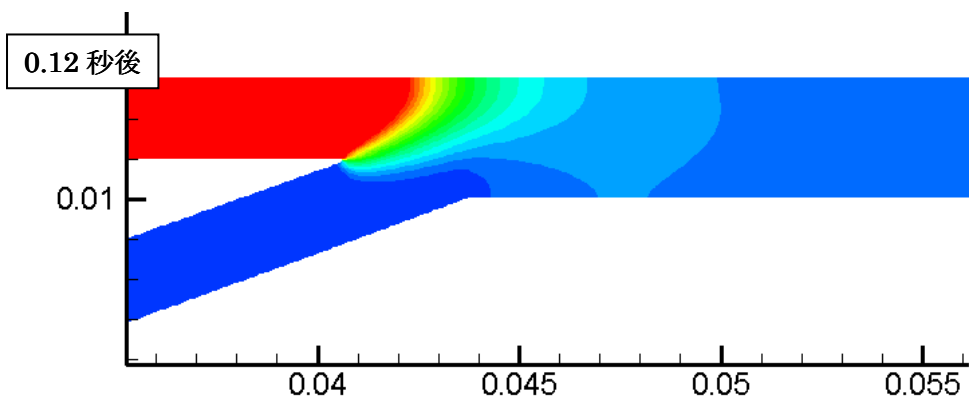
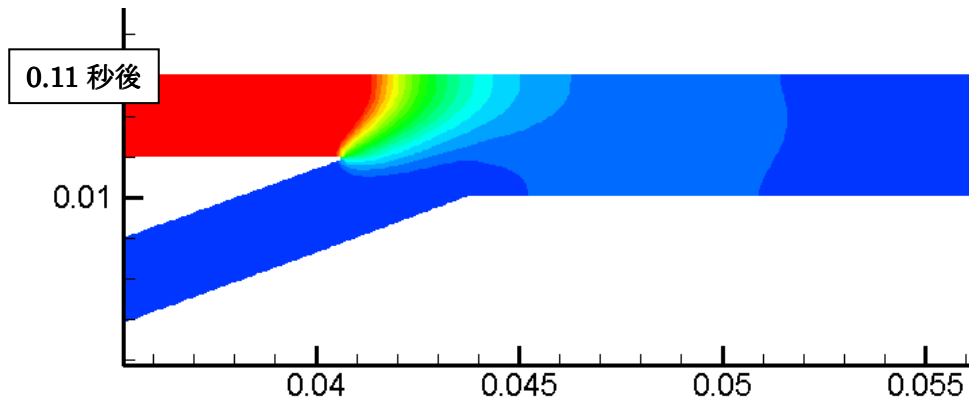


3.4 流入口 A から入れた水素の質量分率

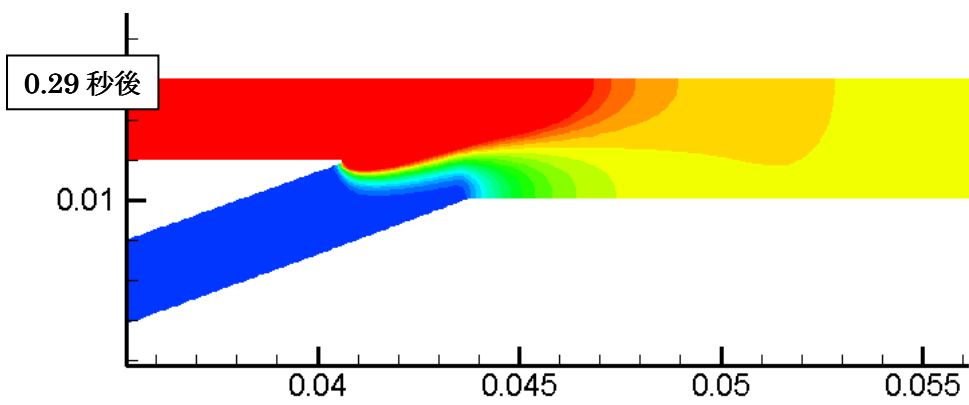
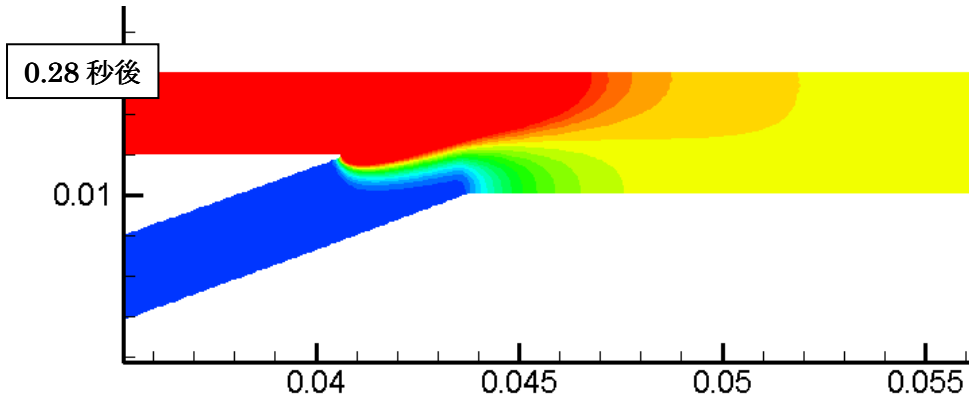
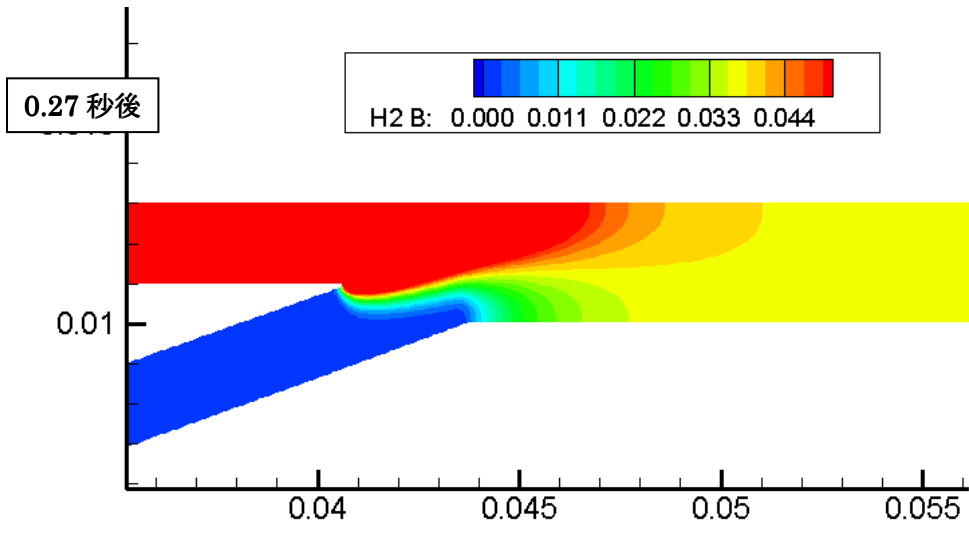
染み出し方のパターンを 0.10 秒から 0.13 秒までと、0.27 秒から 0.31 秒までの二つの区間で見ると、その後、0.40 秒後辺りで、値がほぼ収束することを図示する。

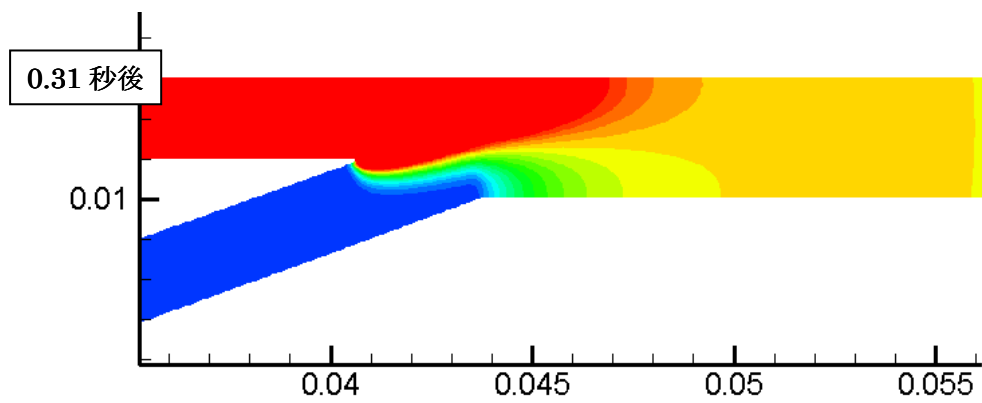
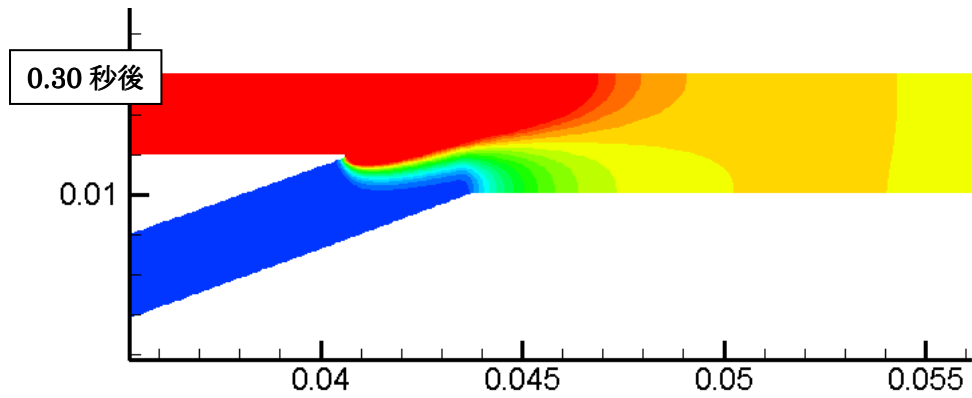
管路の壁面に垂直だった等高線が、下側の管路からの流れがあるために先細りになりながらも、合流部へ流れ込んでいく。拡散も若干見られる。



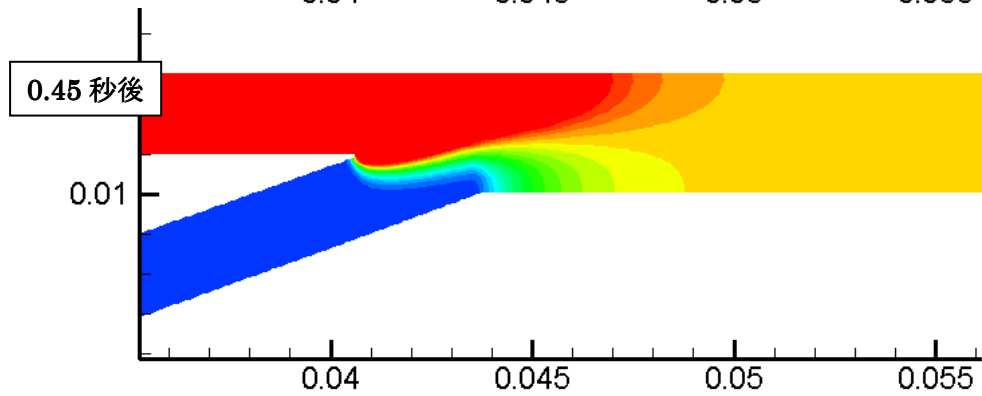
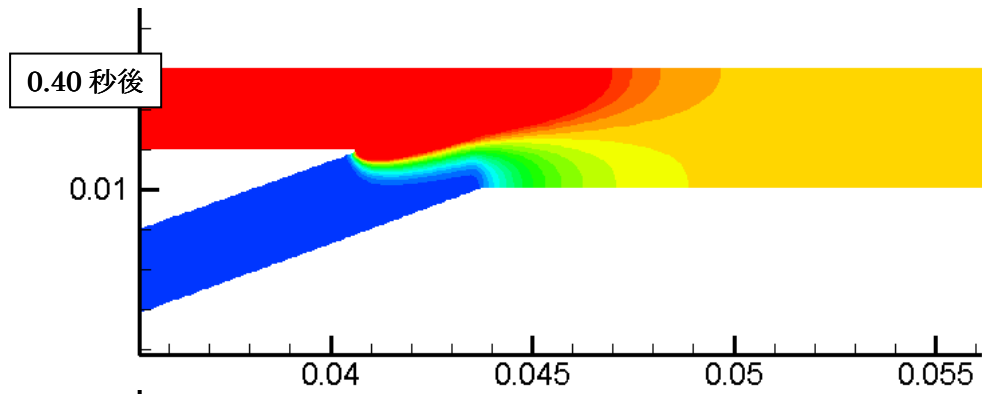


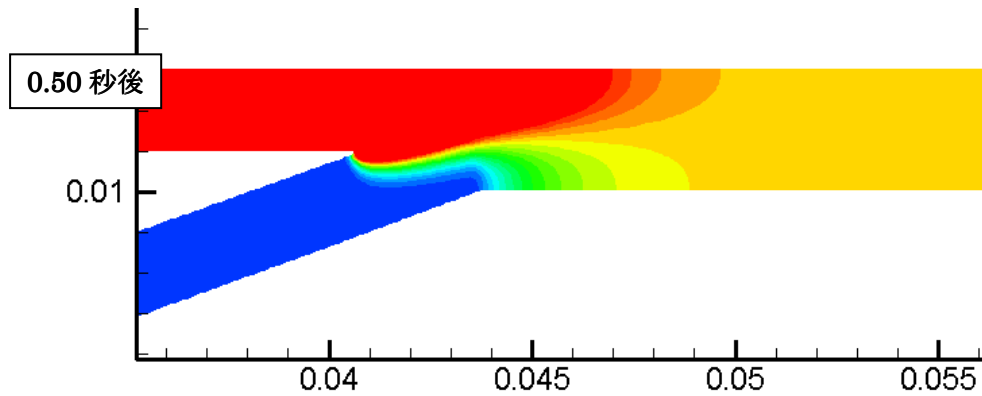
もう少し時間が経過すると以下のようなになる。ここからはオレンジと黄色の境の変化に注目。壁面に沿って流れ込んでいたものが徐々に拡散し、管路いっぱいに広がっていく。





以降は、0.40 秒以後、時間変化がほぼ起らないことを示す。

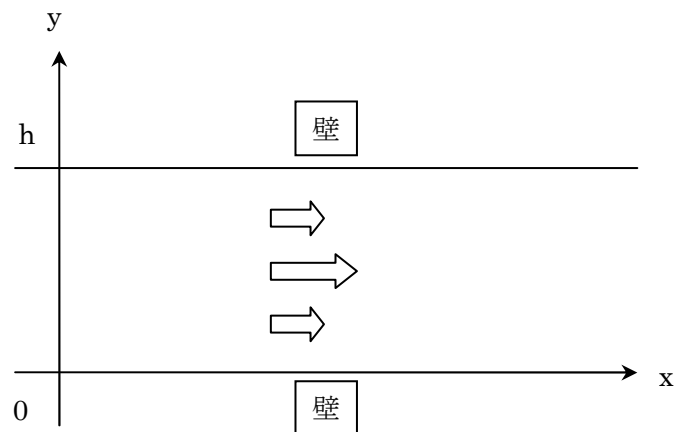




4 補足

4.1 平板ポアズイユ流れ

本解析における各流入口から各合流部までの流れは、流体力学の教科書に例示される平板ポアズイユ流れ(圧力差で駆動される非圧縮性粘性流体の流れ)とほぼ等しいと考えられる。



平板ポアズイユ流れでの速度プロファイルは、管路の中央で最大、壁面でゼロとなる2次関数

$$v_x(y) = v_{x,\max} \left[1 - \left(\frac{y}{h/2} - 1 \right)^2 \right]$$

である。このとき管路を流れる流体の流量 Q は、

$$Q = \int \rho v_x dy dz = \frac{2}{3} \rho L_z v_{x,\max} h$$

である。ただし密度は一定、紙面垂直方向の幅を L_z とした。体積流量は

$$Q_v = 8.0 \times 10 \text{cm}^3 / \min \left(\frac{L_z}{10 \text{mm}} \right) \left(\frac{v_{x, \max}}{0.1 \text{m/s}} \right) \left(\frac{h}{2 \text{mm}} \right)$$

となる。

4.2 有効拡散係数の求め方

§ 2.4.3 に述べた拡散係数の推算式は、ある化学種が同一の化学種へと拡散する際の係数である自己拡散係数、および、ある化学種が別の化学種へと拡散する際の係数である相互拡散係数を求めるものである。

3 種以上の化学種が拡散しあう系において、例えば、Maxwell-Stefan の拡散方程式のように、ある化学種が各々の化学種へそれぞれ拡散するというイメージでの発展方程式が存在する。この場合、方程式系には自己拡散係数および相互拡散係数が直接現れる。しかし、取り扱う化学種が増えるにつれて、考慮すべき項が増え、方程式が複雑化するため解きにくくなる。

一方で、方程式は Fick の法則の形のまま、ある化学種に対する有効的な拡散係数というものを導入して、3 種以上の化学種の拡散を近似的に解くという方法も考えられる。この方法ならば、取り扱う化学種が増加しても、方程式自体が複雑化することはない。弊社のソルバーは、この方法で拡散を解いている。

化学種 i に対する有効拡散係数 D_{im} は「数値流体力学シリーズ 5：燃焼・希薄流・混相流・電磁流体の解析」（東京大学出版会）の式(1.19)、

$$D_{im} = \frac{1 - x_i}{\sum_{j \neq i} (x_j / D_{ij})}$$

を用いて求めている。ただし、 x_i は化学種 i のモル分率、 D_{ij} は化学種 i と j の間の相互拡散係数である。また、この式は、 $x_i = 1$ のときに不定形となるため、その場合に限り（計算コード上は $x_i > 0.99$ のときに）、 $D_{im} = D_{ii}$ とした。 D_{ii} は化学種 i の自己拡散係数である。