

ナトリウム液滴燃焼解析コード (COMET) の開発

1998年8月

動力炉・核燃料開発事業団
大洗工学センター

複製又はこの資料の入手については、下記にお問い合わせ下さい。

〒311-1393 茨城県東茨城郡大洗町成田町4002

動力炉・核燃料開発事業団

大洗工学センター

システム開発推進部・技術管理室

Inquiries about copyright and reproduction should be addressed to : Technology Management Section O-arai Engineering Center, Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation 4002 Narita-chō, O-arai-machi, Higashi-Ibaraki, Ibaraki-ken, 311-1393, Japan

©動力炉・核燃料開発事業団

(Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation) 1998

ナトリウム液滴燃焼解析コード (COMET) の開発

岡野 靖*、大平 博昭**

要旨

ナトリウム漏えい事象において発生するスプレイ燃焼では、液滴状のナトリウムが化学反応を生じながら雰囲気中を落下する。ナトリウム液滴燃焼挙動の解明には、圧縮性強制対流場、化学反応種の拡散移行、ナトリウム液滴の挙動、ナトリウムの化学反応、化学反応種の物性挙動に対し、統合的に同時に取り扱う必要がある。

本研究では、直接シミュレーションを用いた強制対流場におけるナトリウム液滴の燃焼解析コード COMET (Sodium Droplet Combustion Analysis Methodology using Direct Numerical Simulation in 3-Dimensional Coordinate) を開発した。強制対流場の計算に拡張 MAC 法を用いる点、化学反応種の相互拡散を取り扱う点、液滴と雰囲気大気間での物質およびエネルギー輸送を取り扱う点、圧力平衡定数法を用いてナトリウムに関する化学反応計算を行う点、気体分子運動論により混合気体の物性値を推算する点に、本コードの特長がある。

単一球形ナトリウム液滴が、流速一定の一様な流れ場に置かれた場合の燃焼シミュレーションを、COMET を用いて実施した。液滴の燃焼に伴う直径の時間変化が、燃焼工学上知られた d^2 乗法則とよい一致を示すとともに、燃焼・発熱の状況およびナトリウム化合物の生成・消滅・移行挙動に関する知見が得られた。

本解析コードを用いたナトリウム液滴の燃焼シミュレーションを通じて、ナトリウム漏えい事象時の多様なスプレイ燃焼条件に対し、発熱および化学反応生成物の定量的な評価が可能となる。

* 大洗工学センター 基盤技術開発部 熱流体技術開発室

** 本社 広報室

Development of Sodium Droplet Combustion Analysis Methodology using Direct Numerical Simulation in 3-Dimensional Coordinate (COMET)

Yasushi Okano*, Hiroaki Ohira**

Abstract

In the early stage of sodium leak event of liquid metal fast breeder reactor, LMFBR, liquid sodium flows out from a piping, and ignition and combustion of liquid sodium droplet might occur under certain environmental condition. Compressible forced air flow, diffusion of chemical species, liquid sodium droplet behavior, chemical reactions and thermodynamic properties should be evaluated with considering physical dependence and numerical connection among them for analyzing combustion of sodium liquid droplet.

A direct numerical simulation code was developed for numerical analysis of sodium liquid droplet in forced convection air flow. The numerical code was named COMET, 'Sodium Droplet **CO**mbustion Analysis **ME**thodology using Direct Numerical Simulation in 3-Dimensional Coordinate'. The extended MAC method was used to calculate compressible forced air flow. Counter diffusion among chemical species is also calculated. Transport models of mass and energy between droplet and surrounding atmospheric air were developed. Equation-solving methods were used for computing multiphase equilibrium between sodium and air. Thermodynamic properties of chemical species were evaluated using dynamic theory of gases.

Combustion of single sphere liquid sodium droplet in forced convection, constant velocity, uniform air flow was numerically simulated using COMET. Change of droplet diameter with time was closely agree with d^2 -law of droplet combustion theory. Spatial distributions of combustion rate and heat generation and formation, decomposition and movement of chemical species were analyzed.

Quantitative calculations of heat generation and chemical species formation in spray combustion are enabled for various kinds of environmental condition by simulating liquid sodium droplet combustion using COMET.

* Thermal Hydraulic Research Section, Advanced Technology Division, O-arai Engineering Center

** Public Relation Office, Head Office

目次

要旨	I
Abstract	II
目次	III
図表リスト	V
記号表	VII
第1章 緒言	1
1-1 研究の背景	1
1-2 研究の目的	2
第2章 解析手法	3
2-1 対流場の基礎方程式	3
2-1-1 拡張MAC法	4
2-1-2 圧力ポアソン方程式	11
2-1-3 拡張MAC法適用条件	18
2-2 化学反応種の拡散	20
2-2-1 拡散現象	20
2-2-2 拡散方程式	21
2-3 燃焼化学反応	23
2-3-1 化学反応平衡論	23
2-3-2 化学ポテンシャル	25
2-3-3 圧力平衡定数法	27
2-4 ナトリウム液滴	29
2-4-1 物質輸送	29
2-4-2 エネルギー輸送	31
2-5 基礎物性	34
2-5-1 ナトリウム特性	34
2-5-2 化学熱力学データ	36
2-5-3 輸送特性	38

第3章	数値計算手法	4 0
3-1	離散化手法	4 0
3-1-1	時間差分法	4 0
3-1-2	空間差分法	4 1
3-2	境界条件	4 2
3-2-1	側面境界	4 2
3-2-2	流入境界	4 3
3-2-3	流出境界	4 3
3-3	行列解法	4 4
3-4	数値解法	4 5
3-4-1	差分略記法	4 5
3-4-2	差分方程式	4 7
3-4-3	計算アルゴリズム	4 9
第4章	液滴燃焼解析	5 1
4-1	概要	5 1
4-2	解析条件	5 1
4-3	解析結果	5 2
4-4	今後の課題	5 4
第5章	結言	5 6
	謝辞	5 7
	参考文献	5 8

図表リスト

Tables

- Table.1 : Thermochemical Properties of Liquid of Sodium
- Table.2 : Thermochemical Properties of Ideal Gas of Sodium
- Table.3 : Phase of chemical species
- Table.4 : Functions for Prediction of Transport Properties of Gases at Low Densities
- Table.5 : Analytical conditions of droplet combustion simulation
- Table.6 : Calculation conditions of droplet combustion simulation
- Table.7 : Input parameters for droplet combustion simulation

Figures

- Fig. 1 : Chemical potentials of gas phase species
- Fig. 2 : Chemical potentials of condensed phase species
- Fig.3 : Calculation algorithm
- Fig.4 : Calculation model for simulation of liquid sodium droplet combustion
in forced convection air flow
- Fig.5 : Grid system for simulation of liquid sodium droplet combustion
in forced convection air flow
- Fig.6 : Space-averaged ambient temperature change with time
- Fig.7 : Space-averaged ambient pressure change with time

- Fig.8 : Heat generation rate change with time of liquid sodium droplet
- Fig.9 : Temperature change with time of liquid sodium droplet
- Fig.10 : Diameter change with time of liquid sodium droplet
- Fig.11 : Square of diameter change with time of liquid sodium droplet
- Fig.12 : Velocity vectors in x-z plane
- Fig.13 : Contour lines of temperatures in x-z plane (Unit in K)
- Fig.14 : Contour lines of spatial pressure variation in x-z plane (Unit in Pa)
- Fig.15 : Z-direction component of vorticity vector in x-y planes (Unit in sec^{-1})
- Fig.16 : Contour lines of heat release rate of chemical reaction in x-z plane (Unit in W)
- Fig.17 : Contour lines of mass fraction ratio of sodium (Na) in x-z plane
- Fig.18 : Contour lines of mass fraction ratio of oxygen (O_2) in x-z plane
- Fig.19 : Contour lines of mass fraction ratio of water (H_2O) in x-z plane
- Fig.20 : Contour lines of mass fraction ratio of hydrogen (H_2) in x-z plane
- Fig.21 : Contour lines of mass fraction ratio of sodium hydroxide (NaOH) in x-z plane
- Fig.22 : Contour lines of mass fraction ratio of sodium oxide (Na_2O) in x-z plane
- Fig.23 : Contour lines of mass fraction ratio of disodium peroxide (Na_2O_2) in x-z plane
- Fig.24 : Contour lines of mass fraction ratio of nitrogen (N_2) in x-z plane

記号表

$^{\circ}C$:	摂氏温度	X	:	モル分率
C_p	:	定圧比熱	x	:	空間座標 (x 座標)
C_v	:	定積比熱	Y	:	質量分率
D	:	拡散係数	Y'	:	質量分率変化率
D_T	:	温度拡散係数	y	:	空間座標 (y 座標)
D	:	速度ダイバージェンス項	z	:	空間座標 (z 座標)
d	:	拡散数			
E	:	エネルギー			
$^{\circ}F$:	華氏温度			
f	:	体積力	[Greek]		
G	:	ギブス自由エネルギー	α	:	活量
H, h	:	エンタルピー	γ	:	比熱比、 活量係数
K	:	圧力平衡定数、 蒸発速度	Δ	:	時間・空間刻み幅
k	:	ボルツマン定数	ε	:	内部エネルギー、 全輻射率
M	:	拡散係数行列、 マッハ数	κ	:	質量吸収係数
m	:	分子量	λ	:	熱伝導率、 波長
P	:	圧力			
Q'	:	発生熱	μ	:	粘性係数
q	:	熱流束	ν	:	化学量論数
R	:	気体定数	ρ	:	密度
$^{\circ}R$:	ランキン温度	σ	:	衝突直径、 応力テンソル成分、 ステファン・ボルツマン定数
S	:	エントロピー			
T	:	温度	τ	:	応力テンソル項
t	:	時間	ϕ	:	液滴直径
U	:	内部エネルギー	χ	:	体積粘性係数
u	:	速度			
u	:	速度ベクトル			
V	:	拡散速度、 体積			

[Subscript]		[Superscript]	
*	: 予測量	0	: 標準圧力
+	: 右からの極限	n	: タイムステップ
-	: 左からの極限	'	: 原系
0	: 基準温度(297.15K)、 一様流	"	: 反応系
1	: 体積平均量		
2	: 局所変分量		
ab	: 絶対		
drop	: 液滴		
evap	: 蒸発		
f	: 反応系 1 モル当り		
fus	: 溶解		
g	: ガス相		
i, j	: 化学反応種		
mask	: マスク関数		
R	: ランキン温度		
sat	: 飽和蒸気		
sl	: 凝縮相、 エアロゾル		
surf	: 表面、 界面		
x	: 空間座標(x方向)		
y	: 空間座標(y方向)		
z	: 空間座標(z方向)		

第1章 緒言

1-1 研究の背景

高速増殖原型炉「もんじゅ」における2次主冷却系のナトリウム漏えい事故では、事故発生後の現場調査により、漏えいの直接の原因が2次冷却系の配管に挿入された温度計さやの折損であることが判明した。その後、破損メカニズムが各種試験および解析により解明されるとともに、ナトリウム漏えい事故発生後の事象推移を考察し、現象のメカニズムを総合的に理解するため、もんじゅでの漏えい現場を模擬した体系での漏えい燃焼実験が実施された^[1]。同時に、ナトリウム漏えい事故におけるナトリウムの漏えい挙動、スプレイ燃焼・コラム燃焼・プール燃焼に伴う反応熱や化学反応生成物の発生および移行挙動、空気・エアロゾルの移行挙動、鋼製材料・コンクリート材料からなる構造材の温度などの評価を目的に開発された各種ナトリウム燃焼解析コードにより、漏えい現象の解析および評価、検討が実施された^[1]。

ナトリウム燃焼解析の高度化を目的として、機構論的解析体系の開発が行なわれている^[2]。そこではナトリウム漏えい現象に伴う最新の知見および解析評価手法を解析コードに反映させるのみならず、ナトリウム漏えい飛散挙動、スプレイ燃焼における液滴燃焼、ナトリウムプールの形成とプール燃焼挙動、漏えい室内および連結室間の空気・エアロゾル移行挙動およびナトリウムに関する化学反応などの個々の現象を、機構論的な物理モデルを構築し数値シミュレーションを行なう手法により、ナトリウム漏えい現象を総合的に検討する。従来の実験関係式構築により現象をモデル化する方法では、漏えいナトリウムの量や温度、雰囲気大気の成分構成や濃度、強制対流の有無などの異なる条件毎に基礎的な実験を蓄積する必要がある。機構論的な手法を用いることにより、物理モデルの適用範囲内であれば、多くの異なる条件によらず現象のシミュレーションが可能となる。

スプレイ燃焼でナトリウム液滴が空中を落下する間、雰囲気中の酸素および水蒸気と化学反応を起こし燃焼する。化学反応により燃焼熱が発生するとともに、ナトリウム、ナトリウム酸化物および水酸化ナトリウムなどのエアロゾルが生成される。これまで、燃焼熱の評価には単一液滴の燃焼量に関する実験関係式^{[3],[4]}を用いて評価している^[5]。また化学反応に対しては発生し得る幾つかの化学反応式を決定した上で反応順序を設定することにより、一括して評価する手法^[6]が取られている。しかし、漏えいナトリウムが比較的少なく、個々の液滴における雰囲気中の酸素や水蒸気濃度分布による燃焼量の相違が大きい場合などでは、一括して評価すること難しくなる。また、漏えい時に鋼製床ライナー上に形成されるナトリウム溶融体による構造材腐食機構としては、NaFe 複合酸化型腐食機構および溶融塩型腐食機構が知られているが、スプレイ燃焼に伴い溶融体に降り注ぐナトリウム液滴の組成および液滴燃焼により生成された化合物はナトリウム溶融体の組成に影響を及ぼすと考えられる。以上の理由により、ナトリウム液滴個々の燃焼挙動について、化学反応を含めた定量的な解明が必要とされている。

1-2 研究の目的

スプレイ燃焼におけるナトリウム液滴の燃焼発熱量および化学反応生成物の生成量を評価するため、液滴個々の燃焼挙動に対し化学反応を含めて定量的に解析する手法の開発を研究の目的とする。ナトリウム液滴の燃焼解析では、局所的に大きな発熱を伴う流れ場を扱う必要から圧縮性強制対流場を解析する必要がある。また化学反応に伴い多種の化学反応種が生成されるため、化学反応種の相互拡散の解析が必要である。また液滴に関して界面からのナトリウム蒸発などの物質輸送、熱伝導・輻射・蒸発に伴うエネルギー輸送およびそれらに伴う液滴の温度・密度・質量変化を評価する必要がある。またナトリウムと雰囲気酸素・水蒸気との化学反応に伴う反応熱および反応生成量の評価、さらに化学反応種およびそれらの混合物に対する物性評価を行なう必要がある。

これらの解析を統合して液滴燃焼の数値シミュレーションを行なうため、本研究ではナトリウム液滴燃焼解析コード (COMET : Sodium Droplet Combustion Analysis Methodology using Direct Numerical Simulation in 3-Dimensional Coordinate) を開発した。強制対流場および化学反応種拡散に対する計算手法として拡張MAC法を用いた。拡張MAC法は、対流項に3次精度風上差分を適用することにより直接シミュレーション (以下DNS) を行う数値解析手法であり、レシプロエンジン内燃焼解析や予混合気火炎伝播解析などの実績がある[7],[8]。液滴に関する物質・エネルギー輸送については、質量・エネルギー保存則および状態方程式などの関係式に基づく物理モデルを開発した。ナトリウムに関する化学反応については、化学反応平衡論に基づく機構論的な解析モデルを導入した。さらに化学反応種およびそれらの混合物に対する物性は、気体分子運動論に基づき評価する。

本報告書では、ナトリウム液滴燃焼解析コード (COMET) の概要と燃焼シミュレーション結果について報告する。第1章で研究の背景および目的を述べた後、第2章にてCOMETで用いる各種解析手法とその基礎方程式・構成方程式の導出過程を詳細に述べる。次に第3章にて、各方程式から導かれる有限差分法と具体的な数値計算法について述べる。第4章ではCOMETによる一様流場中のナトリウム液滴燃焼シミュレーション結果および今後の課題を述べる。最後に第5章にて結言を述べる。

第2章 解析手法

第2章では、COMET で用いられる拡張 MAC 法における基礎方程式および構成方程式、化学反応種の拡散方程式、燃焼化学反応の構成方程式、ナトリウム液滴に関する基礎式、化学反応種の基礎物性値について述べる。

2-1 対流場の基礎方程式

ナトリウム液滴が燃焼しながら、雰囲気大気中を落下する場合を考える。この時、液滴にとって、大気の流れは強制対流場となる。落下高さを 10m 程度とすれば、直径数 mm の液滴の終端速度は 10m/s 程度であり、流れ場の乱れの程度を示すレイノルズ数は 1,000 程度となる。液滴表面近傍に局所的に着目した場合、液滴表面より蒸発したナトリウム蒸気は、大気中の酸素あるいは水蒸気と化学反応を生じている。特に火炎を生じるような燃焼反応が生じている場合、それに伴う発熱により、液滴近傍における対流場温度の空間的な変化は大きいと考えられる。このため、場の密度変化を正確に取り扱うことが重要になると考えられるため、強制対流場に対し、非圧縮性近似を用いず、圧縮性流体として扱う必要があると判断した。

圧縮性流体に対して解析を行うために、様々な計算スキームが開発されている。これらは、高速流の解析や衝撃波の解析に対して多くの実績がある。しかしながら、流速が比較的小さい低マッハ数流れの解析に対しては収束率が悪く、事実上計算が不可能になることが知られている。一方、レシプロエンジン内での乱流と渦燃焼の相互作用を伴う圧縮性流体の大渦および直接シミュレーション手法として、桑原らにより提案された拡張 MAC 法^④が知られている。この手法は、圧力場の動力的成分の変化によって生じる密度変化の成分を圧縮性流体の構成方程式から取り除くことにより、熱対流に無関係な音波成分を除いていることに特徴がある。これにより圧縮性流体の数値解析上の困難さを回避している。本節では拡張 MAC 法について、その概要を説明する。

2-1-1 拡張MAC法

圧縮性流体の基礎方程式を以下に示す^{[10],[11]}。

・連続の式：

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho(\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (1)$$

・運動量保存式：

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla P + [\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}] + \mathbf{f} \quad (2)$$

・エネルギー保存式：

$$\rho \frac{Dh}{Dt} = \frac{DP}{Dt} + (\boldsymbol{\tau} : \nabla \mathbf{u}) - \nabla \cdot \mathbf{q} + Q' \quad (3)$$

・化学反応種質量保存式：

$$\rho \frac{DY_i}{Dt} = \rho Y_i' - \nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{V}_i) \quad (i=1, \dots, l) \quad (4)$$

流体を理想気体とした場合の状態方程式を以下に示す。

・状態方程式：

$$P = (\gamma - 1) \cdot \rho \cdot \varepsilon = \left(\frac{C_p}{C_v} - 1 \right) \cdot \rho \cdot \varepsilon = (\gamma - 1) \cdot \rho \cdot C_v \cdot T \quad (5)$$

なおエンタルピー、内部エネルギー、比熱比は以下で表される。

$$h = C_p \cdot T, \quad \varepsilon = C_v \cdot T, \quad \gamma = \frac{C_p}{C_v} \quad (6)$$

さらに式(1)～(4)を3次元デカルト座標系の表記にするため、式(7)～(10)に具体的に書き下す。エネルギー方程式(3)中の散逸関数は、超音速流の場合を除いて、無視することができる。また状態方程式(5)に対しては、その全微分を式(12)に書き下す。

・連続の式：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u_x \frac{\partial \rho}{\partial x} + u_y \frac{\partial \rho}{\partial y} + u_z \frac{\partial \rho}{\partial z} = -\rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \quad (7)$$

・運動量保存式：

$$\rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial x} + \left(\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} \right) \quad (8-1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial y} + \left(\frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z} \right) \quad (8-2)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P}{\partial z} + \left(\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \right) \quad (8-3)$$

・応力テンソル項成分：

$$\sigma_{ij} = \left(\chi - \frac{2}{3} \mu \right) \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (9)$$

・エネルギー保存式：

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u_x \frac{\partial T}{\partial x} + u_y \frac{\partial T}{\partial y} + u_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \left(\frac{\partial P}{\partial t} + u_x \frac{\partial P}{\partial x} + u_y \frac{\partial P}{\partial y} + u_z \frac{\partial P}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q' \quad (10)$$

・化学反応種質量保存式：

$$\rho \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + u_x \frac{\partial Y_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial Y_i}{\partial y} + u_z \frac{\partial Y_i}{\partial z} \right) = \rho Y_i' - \left(\frac{\partial \rho Y_i V_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho Y_i V_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho Y_i V_z}{\partial z} \right) \quad (i=1, \dots, l) \quad (11)$$

・状態方程式：

$$\frac{1}{P} \frac{DP}{Dt} = \frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} + \frac{1}{T} \frac{DT}{Dt} \quad (12)$$

次に物理量をスケール別に分離し、再定式化を行う。具体的には圧力・温度・密度を式(13-1)～(13-3)に従い、体積平均量と局所変分量に分解する。その上で、各時間において局所変分量の積分値が0となるよう、式(14-1)～(14-3)に従い平均値補正を課す。

・スケール分離式：

$$\text{圧力： } P = P_1(t) + P_2(t, x, y, z) \quad (13-1)$$

$$\text{温度： } T = T_1(t) + T_2(t, x, y, z) \quad (13-2)$$

$$\text{密度： } \rho = \rho_1(t) + \rho_2(t, x, y, z) \quad (13-3)$$

・ 平均値補正式：

$$\text{圧力： } \iiint_V P_2(t, x, y, z) dx dy dz = 0 \quad (14-1)$$

$$\text{温度： } \iiint_V T_2(t, x, y, z) dx dy dz = 0 \quad (14-2)$$

$$\text{密度： } \iiint_V \rho_2(t, x, y, z) dx dy dz = 0 \quad (14-3)$$

スケール分離の後、平均値補正式が満足されれば、物理量 ϕ の体積平均量に対し、以下の式が成立する。

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial x} = \frac{\partial \phi_1}{\partial y} = \frac{\partial \phi_1}{\partial z} = 0 \quad (15-1)$$

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} = \frac{d \phi_1}{dt} \quad (15-2)$$

また式(15-1)、式(15-2)から、以下の式が成立する。

$$\frac{D \phi_1}{Dt} = \frac{d \phi_1}{dt} \quad (15-3)$$

スケール分離および平均値補正を式(7),(8), (10),(12)に施す。

・ 連続の式：

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial \rho_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial \rho_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial \rho_2}{\partial z} = -(\rho_1 + \rho_2) \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \quad (16)$$

・ 運動量保存式：

$$(\rho_1 + \rho_2) \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P_2}{\partial x} + \left(\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} \right) \quad (17-1)$$

$$(\rho_1 + \rho_2) \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P_2}{\partial y} + \left(\frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z} \right) \quad (17-2)$$

$$(\rho_1 + \rho_2) \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P_2}{\partial z} + \left(\frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \right) \quad (17-3)$$

・エネルギー保存式：

$$\begin{aligned}
 (\rho_1 + \rho_2)C_p \left(\frac{dT_1}{dt} + \frac{\partial T_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial T_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial T_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) \\
 = \frac{dP_1}{dt} + \left(\frac{\partial P_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial P_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial P_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial P_2}{\partial z} \right) \\
 + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) + Q'
 \end{aligned} \tag{18}$$

・状態方程式：

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)} \left(\frac{d\rho_1}{dt} + \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial \rho_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial \rho_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial \rho_2}{\partial z} \right) = \\
 \frac{1}{(P_1 + P_2)} \left(\frac{dP_1}{dt} + \frac{\partial P_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial P_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial P_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial P_2}{\partial z} \right) \\
 - \frac{1}{(T_1 + T_2)} \left(\frac{dT_1}{dt} + \frac{\partial T_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial T_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial T_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial T_2}{\partial z} \right)
 \end{aligned} \tag{19}$$

式(9)の応力テンソル成分は、体積粘性率 $\chi=0$ なるストークスの仮定を用いて簡略化する。

・応力テンソル成分：

$$\begin{aligned}
 \sigma_{ij} &= \mu \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right] \\
 &= \mu \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \mathbf{D} \right]
 \end{aligned} \tag{20-1}$$

ただし \mathbf{D} は、速度ダイバージェンス項である。

また、粘性率が場所によらない定数とみなせる場合、式(17-1)、式(17-2)および式(17-3)中の右辺第2項が表す応力テンソル項に式(20-1)を代入し、アインシュタインの略記法を用いて、簡略化する。

・応力テンソル項：

$$\begin{aligned}
 \tau_x &\equiv \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} \\
 &= \mu \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{D} + \left(\frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \right] \\
 &= \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{D} \right] \\
 &= \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{D} \right]
 \end{aligned} \tag{20-2}$$

$$\begin{aligned}
 \tau_y &\equiv \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z} \\
 &= \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right] \\
 &= \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{D} \right]
 \end{aligned} \tag{20-3}$$

$$\begin{aligned}
 \tau_z &\equiv \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \\
 &= \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right] \\
 &= \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{D} \right]
 \end{aligned} \tag{20-4}$$

$$\therefore \tau_i \equiv \frac{\partial \sigma_{ix}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{iy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{iz}}{\partial z} = \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial i} \mathbf{D} \right] \tag{20-5}$$

次に拡張 MAC 法では、圧力の動力的成分の変化によって生じる密度変化を無視するため、エネルギー保存式(18)と状態方程式(19)から圧力の局所変分量を消去する。物理的には、熱対流に無関係な音波を流体の方程式から締め出すことに相当する^[12]。

・エネルギー保存式：

$$\begin{aligned}
 (\rho_1 + \rho_2) C_p \left(\frac{dT_1}{dt} + \frac{\partial T_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial T_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial T_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) = \\
 \frac{dP_1}{dt} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) + Q'
 \end{aligned} \tag{21}$$

・状態方程式：

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)} \left(\frac{d\rho_1}{dt} + \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial \rho_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial \rho_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial \rho_2}{\partial z} \right) = \frac{1}{P_1} \frac{dP_1}{dt} \\
 - \frac{1}{(T_1 + T_2)} \left(\frac{dT_1}{dt} + \frac{\partial T_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial T_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial T_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial T_2}{\partial z} \right)
 \end{aligned} \tag{22}$$

さらに、連続の式(16)に式(22)を代入し、以下の式を得る。

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{(T_1 + T_2)} \left(\frac{\partial T_1}{\partial t} + \frac{\partial T_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial T_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial T_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) = \\
 \frac{1}{P_1} \frac{dP_1}{dt} + \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right)
 \end{aligned} \tag{23}$$

また式(22)より、状態方程式は以下のように整理できる。

・状態方程式：

$$P_1 = C_v \cdot (\gamma - 1) \cdot \rho \cdot T = (C_p - C_v) \cdot \rho \cdot T \quad (24)$$

温度ラグランジェ微分項は、式(21)と式(23)を用いて、次式で表される。

・温度ラグランジェ微分項：

$$\begin{aligned} \frac{DT_1}{Dt} &\equiv \frac{dT_1}{dt} + \frac{\partial T_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial T_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial T_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial T_2}{\partial z} \\ &= \frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)C_p} \left[\frac{dP_1}{dt} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) + Q' \right] \\ &= (T_1 + T_2) \left[\frac{1}{P_1} \frac{dP_1}{dt} + \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right] \end{aligned} \quad (25)$$

また式(23)より、速度ダイバージェンス項として、次式が得られる。

・速度ダイバージェンス項：

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &\equiv \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = \\ &= -\frac{1}{P_1} \frac{dP_1}{dt} + \frac{1}{(T_1 + T_2)} \left(\frac{\partial T_1}{\partial t} + \frac{\partial T_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial T_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial T_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (26-1)$$

この式から、式(25-2)を用いて温度ラグランジェ微分項を消去する。

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= -\frac{1}{P_1} \frac{dP_1}{dt} + \frac{1}{(T_1 + T_2)} \times \\ &= \left\{ \frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)C_p} \left[\frac{dP_1}{dt} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) + Q' \right] \right\} \end{aligned} \quad (26-2)$$

さらに式(6)を用いて、整理する。

$$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \left[-\frac{1}{P_1} + \frac{(C_p - C_v)}{P_1} \frac{1}{C_p} \right] \frac{dP_1}{dt} + \\ &= \frac{1}{(T_1 + T_2)} \frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)C_p} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) + Q' \right] \end{aligned} \quad (26-3)$$

$$\begin{aligned} \therefore \mathbf{D} &= -\left(\frac{C_p - R}{C_p} \right) \frac{1}{P_1} \frac{dP_1}{dt} + \frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)C_p} \frac{1}{(T_1 + T_2)} \times \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) + Q' \right] \end{aligned} \quad (26-4)$$

以上の手順により、拡張 MAC 法における基礎方程式として、以下の式が得られた。

・連続の式：

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial \rho_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial \rho_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial \rho_2}{\partial z} = -(\rho_1 + \rho_2) \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \quad (16)$$

・運動量保存式：

$$(\rho_1 + \rho_2) \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P_2}{\partial x} + \tau_x \quad (17-1)$$

$$(\rho_1 + \rho_2) \left(\frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P_2}{\partial y} + \tau_y \quad (17-2)$$

$$(\rho_1 + \rho_2) \left(\frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = -\frac{\partial P_2}{\partial z} + \tau_z \quad (17-3)$$

・エネルギー保存式：

$$\begin{aligned} (\rho_1 + \rho_2) C_p \left(\frac{dT_1}{dt} + \frac{\partial T_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial T_2}{\partial x} + u_y \frac{\partial T_2}{\partial y} + u_z \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) = \\ \frac{dP_1}{dt} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) + Q' \end{aligned} \quad (21)$$

・化学反応種質量保存式：

$$\rho \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + u_x \frac{\partial Y_i}{\partial x} + u_y \frac{\partial Y_i}{\partial y} + u_z \frac{\partial Y_i}{\partial z} \right) = \rho Y_i' - \left(\frac{\partial \rho Y_i V_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho Y_i V_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho Y_i V_z}{\partial z} \right) \quad (11)$$

($i=1, \dots, n$)

また状態方程式、速度ダイバージェンス項、応力テンソルとして、次の式が得られた。

・状態方程式：

$$P_1 = C_v \cdot (\gamma - 1) \cdot \rho \cdot T = (C_p - C_v) \cdot \rho \cdot T \quad (24)$$

・速度ダイバージェンス項：

$$\begin{aligned} \mathbf{D} = - \left(\frac{C_p - R}{C_p} \right) \frac{1}{P_1} \frac{dP_1}{dt} + \frac{1}{(\rho_1 + \rho_2) C_p} \frac{1}{(T_1 + T_2)} \times \\ \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) + Q' \right] \end{aligned} \quad (26-4)$$

・応力テンソル項：

$$\tau_i \equiv \frac{\partial \sigma_{ix}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{iy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{iz}}{\partial z} = \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_i}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial i} \mathbf{D} \right] \quad (20-5)$$

2-1-2 圧力ポアソン方程式

拡張 MAC 法では、非圧縮性流体解析で用いられる MAC 法と同様に、流体の基礎方程式から圧力ポアソン方程式を導き出し、数値的な繰り返し収束計算を行っていく。しかしながら、大きな発熱を伴う圧縮性流体であるため、これを考慮した圧力方程式の導出が行われている。本節では、まず非圧縮性流体を対称とした従来の MAC 法における圧力方程式^[13]の導出過程を述べる。その後、拡張 MAC 法の特徴の一つである圧縮性流体を対称とした圧力方程式^[7]について、その導出過程を詳細に記述する。

・非圧縮性流体の圧力方程式)

連続の式(1)を、非圧縮性流体に対し具体的に書き下し、次式を得る。

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = \rho \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) = \rho \mathbf{D} = 0 \quad (27)$$

$$\mathbf{D} \equiv \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right), \quad \rho = \text{Const} \quad (28)$$

運動量保存式は式(8-1)~(8-3)に示されている。連続の式(27)を用いれば、応力テンソル項の式(20-2)中の速度ダイバージェンス項は0となり、以下のように簡略化される。

$$\begin{aligned} \tau_x &\equiv \frac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial\sigma_{xz}}{\partial z} \\ &= \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{D} \right] \\ &= \mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (29-1)$$

同様に式(20-3),(20-4)における応力テンソル項は、次式のように簡略化される。

$$\tau_y \equiv \frac{\partial\sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial\sigma_{yz}}{\partial z} = \mu \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) \quad (29-2)$$

$$\tau_z \equiv \frac{\partial\sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial\sigma_{zz}}{\partial z} = \mu \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) \quad (29-3)$$

式(8-1)を x で偏微分し、式(29-1)を用いて次式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} &= -\rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial u_x}{\partial x} + \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + u_x \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_y \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial z} + u_z \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} \right] \\ &\quad + \mu \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (30-1)$$

同様に式(8-2),(8-3)をそれぞれ y, z で偏微分し、式(29-2),(29-3)を用いて次式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} = & -\rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_x \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 + u_y \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial z} + u_z \frac{\partial^2 u_y}{\partial y \partial z} \right] \\ & + \mu \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (30-2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = & -\rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_x \frac{\partial^2 u_z}{\partial z \partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_y \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 + u_z \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right] \\ & + \mu \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) \end{aligned} \quad (30-3)$$

式(30-1)~(30-3)の和をとり、整理して次式を得る。

$$\begin{aligned} \Delta P = & \left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} \right) = \\ & -\rho \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) + \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 \right. \\ & + 2 \left\{ \frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial x} \right\} \\ & + u_x \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z \partial x} \right) + u_y \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} \right) + u_z \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial z \partial x} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) \\ & + \mu \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z \partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} \right) \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial z \partial x} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (31)$$

また速度ダイバージェンスに関し、式(28)より、以下の式が得られる。

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \quad (32-1)$$

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial x} = \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z \partial x} \right) \quad (32-2)$$

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial y} = \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y \partial z} \right) \quad (32-3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial z} = \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial z \partial x} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) \quad (32-4)$$

式(32-1)~(32-4)を用いて、式(31)を整理し、以下の圧力ポアソン方程式を得る。

$$\begin{aligned}
 \Delta P \equiv & \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) P = \\
 & -\rho \left[\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \left(u_x \frac{\partial}{\partial x} + u_y \frac{\partial}{\partial y} + u_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \mathbf{D} \right. \\
 & \left. + \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \right] \\
 & + \mu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \mathbf{D}
 \end{aligned} \tag{33}$$

速度ダイバージェンス項は本来0であり、その時間変化以外の項を0とする。

$$\begin{aligned}
 \Delta P \equiv & \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) P = \\
 & -\rho \left[\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{34}$$

すなわち非圧縮性流体に対する圧力ポアソン方程式が得られた。

$$\Delta P = -\rho \left[\left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right] \tag{35}$$

・ 拡張 MAC 法における圧力ポアソン方程式)

非圧縮性流体における圧力ポアソン方程式と同様の操作を、圧縮性流体に対する基礎方程式に施すことにより、拡張 MAC 法における圧力ポアソン方程式を導出する。

運動量保存式(8-1)における応力テンソル項は、式(20-5)より、次式で表される。

$$\begin{aligned} \tau_x &\equiv \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} \\ &= \mu \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \mu \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{D} \end{aligned} \quad (36-1)$$

圧縮性流体のため、速度ダイバージェンス=0とは置けず、右辺第2項は0とはならない。式(8-2),(8-3)における応力テンソル項も、同様に、次式で表される。

$$\begin{aligned} \tau_y &\equiv \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z} \\ &= \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{D} \right] \end{aligned} \quad (36-2)$$

$$\begin{aligned} \tau_z &\equiv \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \\ &= \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{D} \right] \end{aligned} \quad (36-3)$$

また式(17-1)に対して x の偏微分をとり、次式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 P_2}{\partial x^2} &= \\ &- (\rho_1 + \rho_2) \left(\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial u_x}{\partial x} + \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + u_x \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_y \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial z} + u_z \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) \\ &- \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) \frac{\partial \rho_2}{\partial x} + \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{D} \right] \end{aligned} \quad (37-1)$$

非圧縮性での式(39)との相違は、右辺に密度変化に伴う項

$$- \left(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) \frac{\partial \rho_2}{\partial x} \quad (38)$$

が加わったことにある。

ここで式(17-1)と式(36-1)から、速度ラグランジェ微分項を求める。

$$\begin{aligned} \frac{Du_x}{Dt} &\equiv \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \\ &= -\frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)} \frac{\partial P_2}{\partial x} + \frac{\mu}{(\rho_1 + \rho_2)} \left[\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{D} \right] \end{aligned} \quad (39)$$

式(39-1)を式(37-1)へ代入し整理して、次式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 P_2}{\partial x^2} &= -(\rho_1 + \rho_2) \left[\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial u_x}{\partial x} + \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + u_x \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} \right. \\ &\quad \left. + u_y \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial z} + u_z \frac{\partial^2 u_x}{\partial x \partial z} \right] - \frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)} \frac{\partial \rho_2}{\partial x} \frac{\partial P_2}{\partial x} \\ &\quad + \left(\frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)} \frac{\partial \rho_2}{\partial x} + 1 \right) \mu \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mathbf{D} \right] \end{aligned} \quad (40-1)$$

同様に式(17-2),(17-3)をそれぞれ y, z で偏微分し、整理して次式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 P_2}{\partial y^2} &= -(\rho_1 + \rho_2) \left[\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_x \frac{\partial^2 u_y}{\partial x \partial y} + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + u_y \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial z} + u_z \frac{\partial^2 u_y}{\partial y \partial z} \right] - \frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)} \frac{\partial \rho_2}{\partial y} \frac{\partial P_2}{\partial y} \\ &\quad + \left(\frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)} \frac{\partial \rho_2}{\partial y} + 1 \right) \mu \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \mathbf{D} \right] \end{aligned} \quad (40-2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 P_2}{\partial z^2} &= -(\rho_1 + \rho_2) \left[\frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial u_z}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_x \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} + \frac{\partial u_y}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial y} \right. \\ &\quad \left. + u_y \frac{\partial^2 u_z}{\partial y \partial z} + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 + u_z \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right] - \frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)} \frac{\partial \rho_2}{\partial z} \frac{\partial P_2}{\partial z} \\ &\quad + \left(\frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)} \frac{\partial \rho_2}{\partial z} + 1 \right) \mu \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \mathbf{D} \right] \end{aligned} \quad (40-3)$$

式(40-1)~(40-3)を加えて、次の圧力ポアソン方程式を得る。

$$\begin{aligned}
\Delta P \equiv & \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) P_2 = \\
& -(\rho_1 + \rho_2) \left[\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \left(u_x \frac{\partial}{\partial x} + u_y \frac{\partial}{\partial y} + u_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \mathbf{D} \right. \\
& + \left. \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \right] \\
& + \frac{1}{(\rho_1 + \rho_2)} \left(\frac{\partial \rho_2}{\partial x} \frac{\partial P_2}{\partial x} + \frac{\partial \rho_2}{\partial y} \frac{\partial P_2}{\partial y} + \frac{\partial \rho_2}{\partial z} \frac{\partial P_2}{\partial z} \right) + \frac{4}{3} \mu \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \mathbf{D} \\
& + \frac{\mu}{\rho_1 + \rho_2} \left\{ \left(\frac{\partial \rho_2}{\partial x} \right) \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) \right] \right. \\
& + \left(\frac{\partial \rho_2}{\partial y} \right) \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2} \right) \right] \\
& + \left. \left(\frac{\partial \rho_2}{\partial z} \right) \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) \right] \right\} \quad (41)
\end{aligned}$$

すなわち圧縮性流体に対する圧力ポアソン方程式が得られた。

$$\begin{aligned}
\Delta P_2 = & -\rho \left[\left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \right] \\
& - \rho \left[\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + u_x \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial x} + u_y \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial y} + u_z \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial z} \right] + \frac{1}{\rho} \nabla \rho_2 \cdot \nabla P_2 + \frac{4}{3} \mu \Delta \mathbf{D} + \frac{\mu}{\rho} \nabla \rho_2 \cdot \Delta \mathbf{u} \quad (42)
\end{aligned}$$

さらに速度ダイバージェンスに対し、その時間変化以外の項を0と近似することにより、次の拡張MAC法における圧力ポアソン方程式を得る。

$$\begin{aligned}
\Delta P_2 = & -\rho \left[\left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \right] \\
& - \rho \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \frac{1}{\rho} \nabla \rho_2 \cdot \nabla P_2 + \frac{\mu}{\rho} \nabla \rho_2 \cdot \nabla (\Delta \mathbf{u}) \quad (43)
\end{aligned}$$

式(43)において、右辺第2項は圧力場の傾きを表わす。

$$\frac{1}{\rho} \nabla \rho_2 \cdot \nabla P_2 \quad (44)$$

また右辺第3項は粘性に起因する応力テンソルを表わしている。

$$\frac{\mu}{\rho} \nabla \rho_2 \cdot \nabla (\Delta \mathbf{u}) \quad (45)$$

拡張MAC法^[3]の原論文では、式(43)に相当する圧力方程式から、応力テンソルを除く操作を行なっている。同様の操作を式(43)に対して行なうことにより、最終的に次式の圧力ポアソン方程式が導かれる。

$$\Delta P_2 = -\rho \left[\left(\frac{\partial u_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_y}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial u_z}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \right] \quad (46)$$

$$-\rho \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \frac{1}{\rho} \nabla \rho_2 \cdot \nabla P_2$$

本研究で扱う作動流体は、その成分としてナトリウムおよびナトリウム化合物を気体あるいはエアロゾルとして含むものの、窒素および酸素を主成分とする大気である。従って、式(43)に含まれる粘性による応力テンソルは、圧力場の傾きに比して小さいと考えてよい。ゆえに原論文^[3]で行われているのと同様に、本研究において応力テンソルの除外操作を行うことは妥当であると考えられ、式(46)で記述される圧力ポアソン方程式を用いることとした。

2-1-3 拡張 MAC 法適用条件

拡張 MAC 法では、圧縮性流体の基礎方程式から圧力の動力的成分を除くことにより、基礎方程式を導いている。この操作が物理的に妥当となる条件が、堀端^[12]により示されている。運動量保存式(17-1)~(17-3)は、圧力の局所変分量 P_2 により、流体が駆動されることを示している。すなわち、 P_2 は圧力の動力的成分と考えることができる。よって P_2 による密度の変化は以下で示される。

$$\Delta\rho \approx \left(\frac{\partial\rho}{\partial P} \right)_T \Delta P_2 = \frac{\rho_1}{P_1} \Delta P_2 \quad (47)$$

非定常流において、流体の速度が大きく変化する時間と距離を、それぞれ τ と l とした場合、以下の式が成り立つ^[7]。

$$\Delta P_2 \approx \left(\frac{l\rho_1 u_1}{\tau} \right) \quad (48)$$

よって式(47)、(48)より、以下の式が成立する。

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_1} \approx \frac{\Delta P_2}{P_1} \approx \left(\frac{l\rho_1 u_1}{\tau} \right) / \rho_1 = \frac{l u_1}{\tau} = \frac{l}{\tau c} M \quad (49)$$

$$\text{ただし、マッハ数：} M = u_1 / c \quad (50)$$

一方、流れ場の代表的な温度差を ΔT とした場合、温度による密度変化は、理想気体の状態方程式(4)を用いて、以下で表される。

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_1} \approx (\Delta \ln \rho) \Big|_{P_1} = \left[\Delta \ln \left(\frac{P}{C_v (\gamma - 1) T} \right) \right] \Big|_{P_1} = - \frac{\Delta T}{T_1} \quad (51)$$

よって式(49)、式(51)より、

$$\left| \frac{l}{\tau c} M \right| \ll \left| \frac{\Delta T}{T_1} \right| \quad (52)$$

が満たされる流れでは、圧力の動力的成分による密度変化は、温度によるものに比べ、無視できることになる。流体の速度と比較し、音波の速度が卓越した非定常流では、

$$\frac{l}{c} \ll \tau, \quad M \ll 1 \quad (53)$$

が成り立つため、拡張 MAC 法が適用できる。

具体的に、例えば、標準状態の空気の流れ場中に置かれたナトリウム液滴を考え、その条件が以下で与えられるとする。

$$\text{代表長さ： } l = 1.0 \times 10^{-2} \text{ (m)} \quad (54-1)$$

$$\text{速度： } u_1 = 1.0 \text{ (m/s)} \quad (54-2)$$

$$\text{音速： } c = 331 \text{ (m/s)} \quad (54-3)$$

$$\text{代表時間： } \tau \approx l/u_1 = 10^{-2} \text{ (s)} \quad (54-4)$$

$$\text{代表温度： } T_1 = 1,000 \text{ (K)} \quad (54-5)$$

この時、式(53)より、以下の条件が満足されれば、拡張 MAC 法が適用できる。

$$|\theta| \gg |T_1| \cdot \left| \frac{l}{\tau c} M \right| = |T_1| \cdot \left| \frac{lu}{\tau c^2} \right| \approx T_1 \cdot \left(\frac{u}{c} \right)^2 \approx 1.0 \times 10^{-2} \text{ (K)} \quad (55)$$

燃焼を伴う流れでは、式(70)の条件は容易に満足される。

また空間平均圧力 P_1 は、系の境界条件から定まることも示されている^[12]。温度ラグランジェ微分項を表す式(25-1)を、エネルギー保存式(21)へ代入し、次式を得る。

$$\begin{aligned} (\rho_1 + \rho_2) C_p \left[(T_1 + T_2) \cdot \left(\frac{1}{P_1} \frac{dP_1}{dt} + \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right] \\ = \frac{dP_1}{dt} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) + Q' \end{aligned} \quad (56)$$

状態方程式(24)を用いて整理し、次式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{dP_1}{dt} = -\gamma P_1 \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \\ + (\gamma - 1) \cdot \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) + Q' \right] \end{aligned} \quad (57)$$

これを系内で体積積分し、次式を得る。ただし \mathbf{n} は外向き単位ベクトル。

$$V \cdot \frac{dP_1}{dt} + \left(\gamma \int_s \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} ds \right) = (\gamma - 1) \cdot \left[\int_s \left(\lambda \frac{\partial T_2}{\partial x}, \lambda \frac{\partial T_2}{\partial y}, \lambda \frac{\partial T_2}{\partial z} \right) \cdot \mathbf{n} ds + \int_v Q' dv \right] \quad (58)$$

よって空間平均圧力 P_1 は、系の空間形状、系境界における流速と熱流束密度の法線成分、および系内での総発熱量より定まることがわかる。

燃焼反応を伴う低流速の圧縮性流体解析に、従来の圧縮性流体向けの計算手法を適用することは、その低収束性から事実上困難と考えられる。本節で述べた拡張 MAC 法^[10]は、この困難さを克服できる有力な数値計算手法である。

2-2 化学反応種の拡散

2-2-1 拡散現象

多種の化学反応種の混合体内部では、各化学反応種が相互拡散を行っている。化学反応種の質量拡散流束 J は、一般には次式のように、化学種の濃度勾配によって駆動される濃度拡散 $J(\rho)$ 、温度勾配により駆動される温度拡散 $J(T)$ 、圧力の勾配により駆動される圧力拡散 $J(P)$ 、および各化学種に対する外力の差異により駆動される拡散 $J(f)$ の和となる^[14]。

$$J = J(\rho) + J(T) + J(P) + J(f) \quad (59)$$

これらの拡散の中で、通常、支配的な拡散は濃度拡散であり、多成分系における有効拡散係数 D_m を用いて、次式で表わされる。

$$J^{(\rho)} = -\rho D_m \left(\frac{\partial Y_j}{\partial x} + \frac{\partial Y_j}{\partial y} + \frac{\partial Y_j}{\partial z} \right) \quad (60)$$

温度拡散により、重い分子は低温側へ、軽い分子は高温側へ駆動される。温度勾配が大きい場合、水素原子や水素分子の拡散に影響を持つ可能性があるが、通常の燃焼場ではあまり大きい影響はないと考えられている^[14]。圧力拡散は、圧力場の勾配による分子の駆動で、強い遠心力場などでは影響を生じる可能性があるが、通常の燃焼場ではあまり大きな影響はなく、無視することが可能である。外力の差異により駆動される拡散については、イオン状態の分子が電磁場中に存在するなどの場合を除き、地上における通常の燃焼では各分子にかかる重力は同一と考えられるため、無視することが可能である。

2-2-2 拡散方程式

上記の多成分系における拡散を記述する方程式の導出を行う。化学種の分子の衝突による単位体積あたりの運動量の交換量 Γ は、単位体積単位時間あたりの化学種 i と j の総衝突数 V_{ij} を用いて、次の式で表わされる^[10]。

$$\Gamma_i = \sum_{j=1}^N \mu_{ij} v_{ij} (\bar{\mathbf{v}}_j - \bar{\mathbf{v}}_i) + \rho Y_i \mathbf{f}_i, \quad i=1, \dots, N. \quad (61)$$

この運動量の交換を、マクロ的に見た場合、圧力の位置変化および運動量の時間変化として表わされる^[15]。

$$\Gamma_i = \nabla P_i + \rho Y_i \frac{D\mathbf{v}_0}{Dt}, \quad i=1, \dots, N. \quad (62)$$

ここで分子の並進運動により定義される温度が、全ての気体分子で同一であると仮定すれば、気体の分圧は、各気体分子のモル分率を用いて、

$$P_i = X_i \cdot P \quad (63)$$

と表わせるので、式(63)の全微分をとることにより、次の式が成り立つ。

$$\nabla P_i = P \nabla X_i + X_i \nabla P \quad (i=1, \dots, N). \quad (64)$$

また流体における運動量保存式は次の式で表わされる。

$$\rho \frac{D\mathbf{v}_0}{Dt} = -\nabla P + \rho \sum_{j=1}^N Y_j \mathbf{f}_j \quad (65)$$

式(61)、式(62)、式(65)を式(64)へ代入し、次式を得る。

$$\sum_{j=1}^N \mu_{ij} v_{ij} (\bar{\mathbf{v}}_j - \bar{\mathbf{v}}_i) + \rho Y_i \mathbf{f}_i = Y_i \left(-\nabla P + \rho \sum_{j=1}^N Y_j \mathbf{f}_j \right) + P \nabla X_i + X_i \nabla P \quad (66)$$

式(66)を圧力 P で除し、整理することにより、次の方程式を得る。

$$\nabla X_i = \sum_{j=1}^N \frac{\mu_{ij} v_{ij}}{P} (\bar{\mathbf{v}}_j - \bar{\mathbf{v}}_i) + (Y_i - X_i) \frac{\nabla P}{P} + \frac{\rho}{P} \left[\sum_{j=1}^N Y_i Y_j (\mathbf{f}_i - \mathbf{f}_j) \right] \quad (i=1, \dots, N) \quad (67)$$

さらに、拡散係数とモル分率、圧力、粘性、衝突頻度を結び付ける^[18]

$$D_{ij} = X_i X_j \frac{P}{\mu_{12} v_{12}} \quad (68)$$

を用いることにより、最終的に次の拡散方程式を得る。

$$\nabla X_i = \sum_{j=1}^N \left(\frac{X_i X_j}{D_{ij}} \right) (\bar{\mathbf{v}}_j - \bar{\mathbf{v}}_i) + (Y_i - X_i) \frac{\nabla P}{P} + \frac{\rho}{P} \left[\sum_{j=1}^N Y_i Y_j (\mathbf{f}_i - \mathbf{f}_j) \right] \quad (i=1, \dots, N) \quad (69)$$

より厳密に、温度の位置変化による拡散の効果 (Soret 効果) を含むよう熱拡散係数 D_T を用いた拡散方程式は次式で表される^[15]。

$$\begin{aligned} \nabla X_i = & \sum_{j=1}^N \left(\frac{X_i X_j}{D_{ij}} \right) (\bar{\mathbf{v}}_j - \bar{\mathbf{v}}_i) + (Y_i - X_i) \frac{\nabla P}{P} \\ & + \frac{\rho}{P} \left[\sum_{j=1}^N Y_i Y_j (\mathbf{f}_i - \mathbf{f}_j) \right] + \sum_{j=1}^N \left(\frac{X_i X_j}{\rho D_{ij}} \right) \left(\frac{D_{T,j}}{Y_j} - \frac{D_{T,i}}{Y_i} \right) \left(\frac{\nabla T}{T} \right) \quad (i=1, \dots, N) \end{aligned} \quad (70)$$

ここで、熱拡散係数 D_T は、圧力、温度、化学種の濃度の関数である。圧力勾配が十分小さいか、分子質量が同一であれば、式(86)の第2項は無視できる。また通常、気体化学種に作用する体積力は同一であり、第3項も無視出来る。さらに熱拡散効果が小さい、か、温度勾配が十分小さければ、第4項も無視することが可能である。

実際、温度拡散の効果と通常の濃度勾配による拡散の効果の比を表わす無次元数

$$\frac{D_{T,i}}{(\rho D_{ij})} \quad (71)$$

は、気体化学種のほぼ全ての2種間で 1/10 以下^[10]であり、無視して差し支えない。

以上の簡略化により、式(86)から、次の Stefan-Maxwell 方程式が得られる。

$$\nabla X_i = \sum_{j=1}^N \left(\frac{X_i X_j}{D_{ij}} \right) (\bar{\mathbf{v}}_j - \bar{\mathbf{v}}_i), \quad i=1, \dots, N. \quad (72)$$

この式を、次のように書き下す。

$$-\sum_{k \neq i}^N \left(\frac{X_i X_k}{D_{ik}} \right) \bar{\mathbf{v}}_i + \sum_{j \neq i}^N \left(\frac{X_i X_j}{D_{ij}} \right) \bar{\mathbf{v}}_j = \nabla X_i, \quad i=1, \dots, N. \quad (73)$$

さらに、2化学種間の相互拡散係数の関係

$$D_{ij} = D_{ji} \quad (74)$$

を用いることにより、式(89)は次の対角行列に書き換えられる。

$$M_{ij} \bar{\mathbf{v}}_j = \nabla X_i, \quad i=1, \dots, N \quad (75)$$

$$M_{ij} = M_{ji} = \frac{X_i X_j}{D_{ij}} \quad (i \neq j), \quad -\sum_{k \neq i}^N \frac{X_i X_k}{D_{ik}} \quad (i = j) \quad (76)$$

すなわち、次の行列式を得る。

$$\begin{pmatrix} -\sum_{k \neq 1}^N \left(\frac{X_1 X_k}{D_{1k}} \right) & \dots & \left(\frac{X_1 X_N}{D_{1j}} \right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \left(\frac{X_N X_1}{D_{N1}} \right) & \dots & -\sum_{k \neq N}^N \left(\frac{X_N X_k}{D_{Nk}} \right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{v}}_1 \\ \vdots \\ \bar{\mathbf{v}}_N \end{pmatrix} = \nabla \begin{pmatrix} X_1 \\ \vdots \\ X_N \end{pmatrix} \quad (77)$$

2-3 燃焼化学反応

本節ではナトリウム液滴燃焼解析コードで用いられる化学反応モデルについて説明する。始めに化学熱力学で使用される各種定義を、続いて化学反応平衡について、最後に圧力平衡定数法に基づく化学反応解析手法について述べる。

2-3-1 化学反応平衡論

化学熱力学によって取り扱う対象は、平衡状態にある系である。Gibbs 自由エネルギー (G) は、系の変化の方向や反応の平衡組成を知るのに有用な系固有の関数である。これはエンタルピー (H)、温度 (T) およびエントロピー (S) を用いて、次のように表される。

$$G \equiv H - TS \quad (78)$$

さらにエンタルピーは、内部エネルギー (U)、圧力 (P) および体積 (V) を用いて、次式で示される。

$$H = U - PS \quad (79)$$

式(78),(79)の全微分をとることにより、系の微小変化に対する Gibbs 自由エネルギーの変化が得られる。

$$\begin{aligned} dG &= dH - TdS - SdT \\ &= dU + PdV + VdP - TdS - SdT \end{aligned} \quad (80)$$

温度および圧力が一定の条件の下では、式(80)は次式のように変形できる。

$$dG = dU + PdV - TdS \quad (81)$$

系に加えられた熱エネルギー (Q) を用いれば、可逆変化は次式で記述できる。

$$dQ = TdS \quad (82)$$

熱力学第一法則 (エネルギー保存則) は、次式で表せる。

$$dQ = dU + dW \quad (83)$$

式(81)~(83)を用いることにより、次式を得る。

$$-dG = dW - PdV \quad (84)$$

これは、温度・圧力一定の条件下で、系が可逆変化した場合、Gibbs 自由エネルギーの減少分は、外界への仕事から容積仕事を差し引いた最大有効仕事に等しいことを意味する。

さらに温度・圧力一定の条件下で、外界への仕事が容積仕事のみである条件を考える。熱力学第二法則を表す不可逆変化に対する Clausius の不等式は次式である。

$$TdS > dQ \quad (85)$$

熱力学第一法則を用いれば、式(85)は次のように書きかえられる。

$$TdS > dU + PdV \quad (86)$$

ゆえに、式(80),(86)から、次式が得られる。

$$dG < 0 \quad (87)$$

すなわち不可逆変化は、Gibbs 自由エネルギーが減少する方向への変化である。よって、最終的な平衡状態では、Gibbs 自由エネルギーは極小値をとることになる。これが系の Gibbs 自由エネルギー変化から、化学反応の変化の方向や平衡状態での化学組成が得られる理由である。

Gibbs 自由エネルギーの変化は、標準生成自由エネルギー(ΔG^ρ) で表される。これは、標準圧力条件下 (0.1MPa) の生成反応における、エンタルピー変化を表す標準生成エンタルピー(ΔH^ρ) および絶対エントロピー (S^ρ) の変化を表す標準エントロピー変化 (ΔS^ρ) から求まる。

例えば、標準圧力状態のある温度条件下における、水の生成反応を考える。水素および酸素から水蒸気が生成する反応は、次式で表される。



この生成反応における標準生成エンタルピーは、水素の標準状態 (圧力 0.1MPa、温度 298.15K) におけるエンタルピーを基準とした (見かけ上の) 絶対エントロピーを用いて、次式で表される。

$$\Delta H_{f,H_2O}^0(T) = H_{H_2O}^0(T) - \left[H_{H_2}^0(T) + \frac{1}{2} H_{O_2}^0(T) \right] \quad (89-1)$$

また標準エントロピー変化は、熱力学第 3 法則から完全な結晶の絶対零度でのエントロピーを零とした絶対エントロピーを用いて、次式で表される。

$$\Delta S_{f,H_2O}^0(T) = S_{H_2O}^0(T) - \left[S_{H_2}^0(T) + \frac{1}{2} S_{O_2}^0(T) \right] \quad (89-2)$$

これらを用いて、生成反応における標準生成自由エネルギー変化は、以下で記述できる。

$$\begin{aligned} \Delta G_{f,H_2O}^0(T) &= \left[G_{H_2O}^0(T) - \left\{ G_{H_2}^0(T) + \frac{1}{2} G_{O_2}^0(T) \right\} \right] \\ &= \left[H_{H_2O}^0(T) - T \cdot S_{H_2O}^0(T) \right] \\ &\quad - \left\{ \left[H_{H_2}^0(T) - T \cdot S_{H_2}^0(T) \right] + \left[H_{O_2}^0(T) - T \cdot S_{O_2}^0(T) \right] \right\} \\ &= \Delta H_{f,H_2O}^0(T) - T \cdot \Delta S_{f,H_2O}^0(T) \end{aligned} \quad (89-3)$$

2-3-2 化学ポテンシャル

可逆変化で容積仕事の場合、熱力学第一法則から以下の式が成り立つ。

$$TdS = dU + dW = dU + PdV \quad (90)$$

式(80)に式(90)を代入し、さらに温度一定条件を課せば、次式が成り立つ。

$$\begin{aligned} dG &= VdP - SdT + dU + PdV - TdS \\ &= VdP - SdT + \underbrace{(dU + PdV - TdS)}_{=0} \\ &= VdP - \underbrace{SdT}_{=0} \\ &= VdP \end{aligned} \quad (91)$$

また理想気体 1mol に対する式は、次式である。

$$V = RT/P \quad (92)$$

式(91)に式(92)を代入し、標準状態からある圧力まで積分をとる。

$$\int_{G_f^0}^{G_f} dG = \int_{P^0}^P \left(\frac{RT}{P} \right) dP \quad (93-1)$$

$$\therefore G_f - G_f^0 = RT(\ln P - \ln P^0) = RT \ln \left(\frac{P}{P^0} \right) \quad (93-2)$$

化学ポテンシャルは、気体化学種 1mol 当りの標準生成自由エネルギーで定義される^[6]。

$$\mu_f(P, T) \equiv G_f(P, T), \quad \mu_f^0(P^0, T) \equiv G_f^0(P^0, T) \quad (94)$$

標準状態での圧力=1bar なので、式(93-2),(94)から、次の式を得る。

$$\mu_f(P, T) = \mu_f^0(P^0, T) + RT \ln \frac{P}{P^0} = \mu_f^0(P^0, T) + RT \ln P \quad (95)$$

理想気体の混合を考えた場合、その Gibbs 自由エネルギーは、気相化学種のモル数(n_i)、分圧(P_i)を用いることにより、式(95)から次式となる。

$$G_f(P, T) = \sum_i n_i \mu_{f,i}(P_i, T) = \sum_i n_i \left[\mu_{f,i}^0(P^0, T) + RT \ln P_i \right] \quad (96)$$

さらに分圧を、モル分率(X_i)と全圧(P)を用いて表せば、次のように変形される。

$$G_f(P, T) = \sum_i n_i \left[\mu_{f,i}^0(P^0, T) + RT(\ln X_i + \ln P) \right] \quad (97)$$

化学反応式に含まれる化学反応種(C_i)に対する、原系での量論係数(v_i')および生成系での量論係数(v_i'')を用いれば、一般に化学反応式は次式で表される。

$$\underbrace{\sum_i (v_i' \cdot C_i)}_{\text{Original}} = \underbrace{\sum_i (v_i'' \cdot C_i)}_{\text{Formation}} \quad (98)$$

この時の Gibbs 自由エネルギー変化は、式(96)より次式で表される。

$$\begin{aligned}
 \Delta G_f(P,T) &= \underbrace{\sum_i G_f(P,T)}_{\text{Original}} - \underbrace{\sum_i G_f(P,T)}_{\text{Formation}} \\
 &= \left[\sum_i (v_i' \cdot \mu_{f,i}^o) - \sum_i (v_i'' \cdot \mu_{f,i}^o) \right] + RT \left[\sum_i (v_i' \cdot \ln P_i) - \sum_i (v_i'' \cdot \ln P_i) \right] \quad (99) \\
 &= \sum_i [(v_i' - v_i'') \cdot \mu_{f,i}^o] + RT \sum_i (\ln P_i^{v_i'} - \ln P_i^{v_i''}) \\
 &= \sum_i [(v_i' - v_i'') \cdot \mu_{f,i}^o] + RT \ln \prod_i P_i^{v_i' - v_i''}
 \end{aligned}$$

標準生成自由エネルギー変化および圧力平衡定数は、以下のように定義される[11]。

$$\Delta G_f^0(P,T) \equiv \sum_i [(v_i' - v_i'') \cdot \mu_{f,i}^o] \quad (100)$$

$$K_p \equiv \prod_i P_i^{v_i' - v_i''} \quad (101)$$

定圧・定温条件下の平衡状態では、Gibbs 自由エネルギーは変化しない($\Delta G_f=0$)ことから、式(99)~(101)を用いて、圧力平衡定数は次式のように表される。

$$K_p(T) = \exp\left(\frac{-\Delta G_f^0}{RT}\right) \quad \text{or} \quad \ln K_p(T) = \frac{-\Delta G_f^0}{RT} \quad (102)$$

圧力平衡定数は、化学反応式(98)を設定し、各化学反応種に対する標準自由エネルギーが与えられれば、温度のみの関数として定義される。

液体化学種の化学ポテンシャルは、圧力にかわり活量(α)、活量係数(γ) および液相におけるモル分率(y)を用いて定義される[16],[17]。

$$\mu_f(P,T) = \mu_f^0(P^0,T) + RT \ln \alpha = \mu_f^0(P^0,T) + RT \ln(\gamma \cdot y) \quad (\text{for liquid}) \quad (103)$$

活量係数=1 の理想溶液を仮定し、さらに液体では圧力変化に対する化学ポテンシャルの変化が小さいことから、次式を得る。

$$\mu_f(P,T) \approx \mu_f(T) = \mu_f^0(P^0,T) + RT \ln y \quad (\text{for liquid}) \quad (104)$$

固体化学種の場合、式(103)で活量=1 とおくことにより、次式となる。

$$\mu_f(P,T) \approx \mu_f(T) = \mu_f^0(T) + RT \ln 1 = \mu_f^0(T) \quad (\text{for solid}) \quad (105)$$

圧力平衡定数の評価では、式(101)において気相化学種の分圧(P_i)の代わりに、液体化学種では液相でのモル分率(y_i)を、固体化学種では 1 を用いればよい。

2-3-3 圧力平衡定数法

圧力平衡定数法は、圧力平衡定数と原子数保存式および気体の状態方程式より、与えられた元素組成をもつ、ある圧力・温度条件下での平衡状態での化学反応種の組成を求める手法である^[17]。

以下に例として、ナトリウム (Na) と酸素 (O₂)、酸化ナトリウム (Na₂O) および過酸化ナトリウム (Na₂O₂) からなる系 (以後 Na-O 系) を考え、具体的な解析手順について述べる。系を構成する元素および化学反応種は以下の通りとする。なお、化学反応種の相状態としては、全て気体 (添字(g)) であると想定する。

$$\text{元素 } (E_j, j=1,2) \quad : \quad \text{Na, O} \quad (106)$$

$$\text{化学反応種 } (C_i, i=1\sim4) \quad : \quad \text{Na(g), O}_2\text{(g), Na}_2\text{O(g), Na}_2\text{O}_2\text{(g)} \quad (107)$$

系内に存在する各元素(E_j)のモル数を N_j とする。また、各化学反応種 (C_i) のモル数およびモル分率を n_i 、 X_i とおく。Na および O に対する原子数保存から、以下の2つの保存式が成立する。

$$\text{Na 原子数保存} \quad : \quad 1 \times n_1 + 0 \times n_2 + 2 \times n_3 + 2 \times n_4 = N_1 \quad (108-1)$$

$$\text{O 原子数保存} \quad : \quad 0 \times n_1 + 2 \times n_2 + 1 \times n_3 + 2 \times n_4 = N_2 \quad (108-2)$$

また状態方程式は以下で示される。

$$PV = RT \sum_{i=1}^4 n_i \quad (109)$$

各化学種の分圧は、全圧 P を用いれば、下式で表される。

$$P_i = PX_i = P \frac{n_i}{\sum_{k=1}^4 n_k} \quad (i=1\sim4) \quad (110)$$

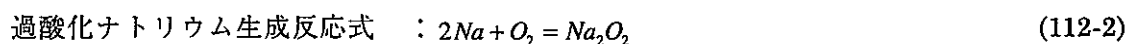
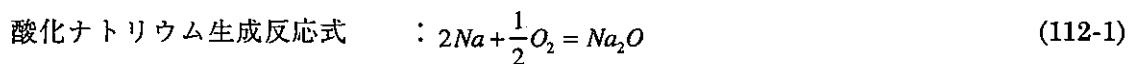
圧力・温度一定条件下の平衡状態を扱っているため、系の圧力、温度は一定である。

$$P = P_0 = \text{const.} \quad (111-1)$$

$$T = T_0 = \text{const.} \quad (111-2)$$

式(108-1)~(111-2)には変数として、各化学種に対するモル数4変数および分圧4変数、系全体に対する圧力、体積、温度の3変数、の合計11変数が含まれている。一方、独立な方程式は9個存在している。

ここで、化学反応種生成量の関係を示す圧力平衡定数式として、次式に示される酸化ナトリウムおよび過酸化ナトリウムの生成を想定すれば、反応独立な2式が構築できる。



式(112-1),(112-2)より、次の2つの圧力平衡定数が得られる。

$$K_1 = \frac{P_{Na_2O}}{P_{Na}^2 P_{O_2}^{0.5}} \quad (113-1)$$

$$K_2 = \frac{P_{Na_2O_2}}{P_{Na}^2 P_{O_2}} \quad (113-2)$$

式(100),(102)から、圧力平衡定数は次式で与えられる。各化学反応種の化学ポテンシャルを含む化学熱力学データは温度の関数として与えられる。

$$RT \ln K_1(T) = \mu_{f,Na_2O}^0 - \left(2\mu_{f,Na}^0 + \frac{1}{2}\mu_{f,O_2}^0 \right) \quad (114-1)$$

$$RT \ln K_2(T) = \mu_{f,Na_2O_2}^0 - \left(2\mu_{f,Na}^0 + \mu_{f,O_2}^0 \right) \quad (114-2)$$

以上の式(124)~(130)により、各成分のモル数と分圧、系の圧力、体積、温度を定めることができる。

具体的な計算例を次に示す。まず式(130)の圧力平衡定数より、次の式を得る。

$$\ln K_1 = \ln P_{Na_2O} - \left(2 \ln P_{Na} + \frac{1}{2} \ln P_{O_2} \right) \quad (115-1)$$

$$\ln K_2 = \ln P_{Na_2O_2} - \left(2 \ln P_{Na} + \ln P_{O_2} \right) \quad (115-2)$$

式(111-1)を用いて、式(110)から全圧力を消去し、次式を得る。

$$\ln P_i = \ln n_i + \ln P^0 - \ln \sum_{k=1}^4 n_k \quad (i=1 \sim 4) \quad (116)$$

式(115-1),(115-2),(116)から、モル数に関し、次式を得る。

$$\ln K_1 = \ln n_{Na_2O} - \left(2 \ln n_{Na} + \frac{1}{2} \ln n_{O_2} \right) - \frac{3}{2} \ln P^0 + \frac{3}{2} \ln \sum_{k=1}^4 n_k \quad (117-1)$$

$$\ln K_2 = \ln n_{Na_2O_2} - \left(2 \ln n_{Na} + \ln n_{O_2} \right) - 2 \ln P^0 + 2 \ln \sum_{k=1}^4 n_k \quad (117-2)$$

式(108-1),(108-2),(117-1),(117-2)から、4種 (Na, O₂, Na₂O, Na₂O₂) の化学反応種のモル数に関して、独立な4つの方程式が得られた。これらの方程式は、非線型連立方程式を構成する。これは、適切な初期値から、Newton-Raphson法などを用いて繰り返し計算を行うことにより、収束解を得ることができる。

2-4 ナトリウム液滴

ナトリウム液滴は、その周囲の大気雰囲気との間で物質移動や熱移動を行いながら、落下していく。この時液滴には、抗力や揚力による界面移動を伴う形状変化や、蒸発などの物質輸送を通じた質量減少が生じている。また、温度境界層を通じた熱伝導、高温気体・エアロゾルからの輻射熱伝達、蒸発に伴う気化潜熱などのエネルギー輸送を通じた温度変化も生じている。本章では、これらの諸現象に対する定式化、およびナトリウム液滴燃焼解析コード COMET におけるモデル化について述べる。

2-4-1 物質輸送

ナトリウム液滴の形状・質量変化および内部物性に関する定式化・モデル化について、記述する。

・液滴形状)

ナトリウム液滴は、雰囲気流体との間で抗力や揚力といった力学的な相互作用を受けながら、空気中を落下中する。これらの相互作用により、液滴は変形、さらには振動する場合も想定される。本研究においては、液滴の形状としては球形を仮定することとし、変形の効果は除外することとした。これは、本手法による蒸発量あるいは燃焼量の解析値を、強制対流場における球形液滴の蒸発量や燃焼量に関する既存の実験関係式と、定量的に比較・検討を行うことにより、本研究で用いた解析手法の液滴燃焼への適用性および精度について、評価する必要があると考えたからである。また、球形以外の形状への変形を、強制対流場、化学反応種拡散、燃焼化学反応など多くの数値解析モデルを含む液滴燃焼解析と同時に扱うことは、本研究におけるナトリウム液滴燃焼解析コードにおいては数値解析上難しく、今後の課題である。

本解析コードでモデル化される液滴の変形は、球形液滴の質量変化に伴う半径および界面の変化である。本研究ではマスク関数を用いることにより、液滴界面の内部および外部の区別を行う。またマスク関数値の変化により、液滴径の現象に伴う界面変化はモデル化される。マスク関数は、次式で定義される。

$$f_{mask} = \begin{cases} 1.0 & (\text{inside of droplet surface}) \\ 0.0 & (\text{outside of droplet surface}) \end{cases} \quad (118)$$

・内部物性)

液滴が落下中に高温の燃焼化学反応が発生する状況では、液滴には周囲から熱エネルギーの流入が生じていると考えられる。また、酸欠環境を落下するために化学反応量が少なく、高温の燃焼反応がほとんど生じていない状況では、逆に、液滴が冷却される場合も考えられる。液滴周囲における温度や化学反応種濃度の空間分布は、対流の影響により、球対称をとるとは限らない。そのため液滴界面上の位置により、熱エネルギーの流出あるいは流入状況が異なり、液滴内部に温度分布や流動が生じることも考えられる。

一方、ナトリウム漏えい事象において液滴燃焼の影響が大きくなるのは、スプレー燃焼量が多く、発生する熱エネルギーや化学反応種の量が多い場合、すなわち液滴が激しい燃焼を生ずるような状況である。液滴周囲に形成される高温のガスあるいは反応生成物により、液滴温度は燃焼開始後ただちに上昇し内部に温度勾配を生じるが、温度が沸点に達した後の液滴内部の温度分布は平坦となる^[18]。

本研究では、液滴内部でのナトリウムの温度分布は平坦であると仮定した。および流動を無視することとした。これは次のように定式化される。

$$T(t,r) = T(t) \quad (r \leq r_{surf}) \quad (119-1)$$

$$\rho(t,r) = \rho(t) \quad (r \leq r_{surf}) \quad (119-2)$$

$$\mathbf{v} = 0 \quad (r \leq r_{surf}) \quad (119-3)$$

液滴内部の流動や伝熱の詳細な取り扱いと、それらの蒸発量あるいは燃焼量への影響評価は、今後の課題である。

・蒸発)

液滴界面に接した雰囲気大気内部には、速度分布と温度分布を持った薄い境界層が存在すると想定され、速度境界層は流体抵抗の、温度境界層は熱抵抗の原因となる^[19]。速度境界層内では、界面に接した部分で速度は0、本流側で本流速度をとる。温度境界層内では、界面に接する部分での大気温度は液滴表面温度と等しく、本流側では流体温度と等しくなる。よって、液滴界面のごく近傍においては、気体側のナトリウム蒸気と液滴側の液体ナトリウムは、化学的に平衡状態にあると想定した。この時、ナトリウム蒸気は、液滴界面近傍の大気において、界面温度に対応するナトリウムの飽和蒸気圧で分布していることとなる。これは、ナトリウム分圧および飽和蒸気圧を用いることにより、次式のように定式化できる。

$$P_{Na}|_{surf+} = P_{Na,sat}(T|_{surf}) \quad (120)$$

この場合のナトリウム液滴からの総蒸発量は、以下の式で定式化できる。

$$\left(\dot{m}_{evap} = \right) \frac{d}{dt} \left(\int_{V_{droplet}} \rho dv \right) = \int_{V_{surf+}} \left(\frac{P_{Na,sat}}{T|_{surf}} - \frac{P_{Na}}{T|_{surf+}} \right) \frac{dv}{R} \quad (121)$$

2-4-2 エネルギー輸送

・熱伝導)

液滴の界面に接した流体内の温度境界層は、液滴から気体への熱抵抗の原因となる。気体と液滴との間の熱伝導は、液滴の温度を変化させるため、ナトリウム液滴の蒸発量あるいは燃焼量に影響を与えると考えられる。そこで本研究では、ナトリウム液滴と雰囲気大気間の熱伝導について、液滴周囲での温度場に関する3次元極座標系のエネルギー方程式を用いて、詳細に解析することとした。

・3次元極座標系エネルギー方程式：

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + u_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + \frac{u_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial T}{\partial \phi} = \frac{1}{\rho C_p r^2 \sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial r} \lambda \left(r^2 \sin \theta \frac{\partial T}{\partial r} \right) \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial \theta} \lambda \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial \phi} \lambda \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial T}{\partial \phi} \right) \right] + \frac{1}{\rho C_p} \left[u_r \frac{\partial P}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial P}{\partial \theta} + \frac{u_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial P}{\partial \phi} \right] \end{aligned} \quad (122)$$

式(122)中の温度および圧力を、強制対流場の基礎方程式に対する操作と同様に、体積平均量と局所変分量へのスケール分離を施すことにより、次式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_2}{\partial t} + u_r \frac{\partial T_2}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial T_2}{\partial \theta} + \frac{u_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial T_2}{\partial \phi} = - \frac{\partial T_1}{\partial t} \\ + \frac{1}{\rho C_p r^2 \sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial r} \lambda \left(r^2 \sin \theta \frac{\partial T_2}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \lambda \left(\sin \theta \frac{\partial T_2}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial \phi} \lambda \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial T_2}{\partial \phi} \right) \right] \\ + \frac{1}{\rho C_p} \left[u_r \frac{\partial P_2}{\partial r} + \frac{u_\theta}{r} \frac{\partial P_2}{\partial \theta} + \frac{u_\phi}{r \sin \theta} \frac{\partial P_2}{\partial \phi} \right] \end{aligned} \quad (123)$$

式(123)を用いることにより、液滴からの表面熱流束は、次式で表すことができる。

$$q_{cond} = \int_{surf} (\lambda \nabla T_2) ds \quad (124)$$

・輻射熱伝達)

本研究では、液滴周囲の高温領域から液滴界面への輻射熱伝達を考慮する。理想的な黒体からの単色輻射エネルギーは Planck の法則^[19]に従い、次式で示される。

$$E_\lambda = \frac{C_1}{\lambda^5 (\exp(C_2/\lambda T) - 1)} \quad (125)$$

絶対温度 T の黒体表面から放出される単位面積当たりの全輻射エネルギーは、式(125)を波長で積分した次の Stefan-Boltzmann の法則^[19]で与えられる。

$$E = \int_0^\infty E_\lambda d\lambda = C_1 \int_0^\infty \left[\frac{\lambda^{-5}}{\exp(C_2/\lambda T) - 1} \right] d\lambda = \sigma T^4 \quad (126)$$

ただし Stefan-Boltzmann 定数 $\sigma = 5.67032 \times 10^{-8} [W/(m^2 K^4)]$ である。

実在物質からの輻射のエネルギーは、同温度の理想物体、すなわち黒体からの輻射のエネルギーより小さい。そのエネルギーの比は、全輻射率 ϵ を用いて次式で表される。

$$Q = \epsilon E = \epsilon \sigma T^4 \quad (127)$$

全輻射率は物質によって異なり、また圧力や温度、有効厚さにより変化する。CO₂やH₂Oの全輻射率については、近似的に次の Schack の式を用いて求めることが出来る^[19]。

$$\epsilon_{CO_2} = 0.7 \frac{(P_{CO_2} \cdot L)^{0.5}}{(T_g/100)^{0.5}} \quad (128-1)$$

$$\epsilon_{H_2O} = 7.0 \frac{(P_{H_2O} \cdot L)^{0.8}}{(T_g/100)} \quad (128-2)$$

物体の表面に熱輻射が入射すると、その一部は吸収されて熱に変わるが、その残りは反射する。全入射エネルギーに対する吸収エネルギーの割合は全吸収率 α で表される。さらに、輻射による熱移動が平衡に達しており、物体の温度が同一の場合には、Kirchhoffの法則^[14]から、単色吸収率と単色輻射率は等しくなる。この時、黒体あるいは灰色体では、全吸収率と全輻射率は等しくなる($\alpha = \epsilon$)。この関係は非金属に対して近似的に適用され、高温 T_b からの輻射が、常温 T_s の物体に吸収される場合の全吸収率は、物体温度が T_b (可燃性物体の場合は着火温度) に達したときの全輻射率に等しいとして取り扱う。またナトリウムなどの金属の全吸収率は、電磁波理論から両物体の相乗平均温度 $T_m = \sqrt{T_b \cdot T_s}$ での全輻射率と等しいとして取り扱う^[14]。液体ナトリウムの全輻射率に関しては、その温度依存性は必ずしも明確になっていない。よって本研究では、ナトリウム全輻射率は温度によらず一定値として扱う。

気体の場合は内部からの輻射が外部にまで達することから、固体の場合とは異なる扱いが必要となる。輻射を行う分子としては、CO、NO などの非対称二原子分子、および CO₂、H₂O のような三原子分子^[14]などを考慮する必要がある。He、Ar などの単原子分子、および N₂、O₂ などの対称 2 原子分子は輻射不活性であるため、これらの分子による輻射エネルギーの吸収や放出は事実上無視できる^[19]。

ナトリウム液滴の燃焼により生成されるナトリウム化合物の状態としては、ガス状あるいは凝縮のためエアロゾルとして存在すると想定される。炭化水素が不完全燃焼を起こす場合にも、高温固体粒子が生成し、これが大きな輻射熱伝達を生じさせることが知られ輝炎輻射と呼ばれるが、その取り扱いはガス輻射の場合と同様でよい^[19]。本研究では、ナトリウム化合物は全成分ガス状であると仮定することとした。しかしながら、ナトリウム化合物がすべてガス状であるとした場合でも、輻射率、吸収率などの基礎的データの蓄積は十分成されていない。ゆえに本研究では、輻射率、吸収率に関しては、CO₂のデータを使用することとした。ナトリウム化合物に関する基礎的データの蓄積および液滴燃焼解析への反映は、今後の課題である。

気体に対する全輻射率を表すガス輻射率は、半径 L の半球状のガス塊（温度 T_g ）から放出され、半球の中心部にある微少な黒体の平面（面積 dA ）へ吸収されるエネルギー（ dQ ）から、次式により定義される。

$$dQ_g = \varepsilon_g E_g dA, E_g = \alpha T_g^4 \quad (129)$$

また、ガス吸収係数は、厚さ L のガス層を通過する平行光束の強度の変化を表すガス吸収率を用いて、次式で関連付けられる。

$$a_g = 1 - \exp(-\kappa PL) \quad (130)$$

ガスと同温度の黒体からの輻射に対するガス吸収率は、Kirchhoff の法則から（ $a_g = \varepsilon_g$ ）となるが、温度が異なる場合は（ $a_g \neq \varepsilon_g$ ）である。ナトリウム液滴燃焼では、ナトリウム液滴と周囲のガス温度は、通常異なった値をとる。CO₂、H₂O に対しては次の近似式が知られており、これらから吸収係数を求めることができる。

$$a_{CO_2} = \left(\frac{T_g}{T_b} \right)^{0.65} \cdot \varepsilon_{CO_2} \quad (131-1)$$

$$a_{H_2O} = \left(\frac{T_g}{T_b} \right)^{0.45} \cdot \varepsilon_{H_2O} \quad (131-2)$$

また温度 T の微少体積 dV を占める高温気体から、液滴界面の微少面積 dA_i に入射する輻射エネルギー流束^[20]は、 dV から dA_i を望む立体角を考えることにより、以下の式で定式化される。質量吸収係数は物質の吸収バンド毎に大きく異なっている^[20]。

$$q_{rad} = \left[\int_V \rho \kappa \left(\frac{\sigma T^4}{\pi} \right) dV \right] \cdot \left(\frac{\cos \theta_l}{r_m^2} \right) dA_i \quad (132)$$

・ 蒸発熱)

蒸発熱は、質量(m)変化率と蒸発潜熱 L を用いて次式で表される。

$$q_{evap} = \dot{m}_{evap} \cdot L \quad (133)$$

・ 液滴温度変化)

液滴の温度変化は、熱伝導、輻射熱伝達、蒸発熱を用いて、次式で与えられる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\int_{V_{drop}} (\rho C_p T) dv \right] = q_{cond} + q_{rad} - q_{evap} \quad (134)$$

ただし、ナトリウム液滴温度は沸点以上とはならない条件を課す。

$$T_{drop} \leq T_{boiling} \quad (135)$$

2-5 基礎物性

液滴燃焼解析で用いられる液体ナトリウムの物性、および混合気体の物性、さらに化学反応平衡計算で使用されるギブス自由エネルギーについて記述する。

2-5-1 ナトリウム特性

液体ナトリウムの特性および物性値^[21]は、以下の通りである。なお単位系としては、可能な限り MKSA 単位系で記述している。

密度^[22]

Equation of J. P. Stone *et al.* :

$$\rho(\text{kg/m}^3) = 950.1 + T[-0.22976 + T(-1.460 \times 10^{-5} + 5.638 \times 10^{-9} T)] \quad (98 \leq T < 1,370^\circ\text{C}) \quad (136-1)$$

定圧比熱^[22]

$$C_p(\text{J/kgK}) = 1.4366 \times 10^3 + T(-0.58045 + 4.6225 \times 10^{-4} T) \quad (97.81 \leq T < 900^\circ\text{C}) \quad (136-2)$$

粘性係数^[22]

$$\eta(\text{Pa}\cdot\text{s}) = \begin{cases} 1.235 \times 10^{-3} \rho^{\frac{1}{3}} \cdot \exp\left(\frac{6.97 \times 10^5 \rho}{T}\right) & (100 \leq T < 500^\circ\text{C}) \\ 8.51 \times 10^{-4} \rho^{\frac{1}{3}} \cdot \exp\left(\frac{1.040 \times 10^6 \rho}{T}\right) & (500 \leq T < 1,200^\circ\text{C}) \end{cases} \quad (136-3)$$

熱伝導率^[22]

Equation of G. H. Golden and J. V. Tokar :

$$\lambda(\text{J/msK}) = 93.0 + T(-0.581 \times 10^{-2} + 1.173 \times 10^{-5} T) \quad (97.81 < T < 1400^\circ\text{C}) \quad (136-4)$$

表面張力^[23]

Equation of G. H. Golden and J. V. Tokar :

$$\sigma(\text{kg/m}) = 1.01972 \times 10^{-4} (206.7 - 0.1T) \quad (97.81 < T < 1,371^\circ\text{C}) \quad (136-5)$$

エンタルピー^[23]

$$h(\text{J/kg}) = -6.748 \times 10^4 + T_R [9.05352 \times 10^2 + T_R(-0.128587 + 2.64445 \times 10^{-5} T_R)] \quad (136-6)$$

エントロピー⁽²³⁾

$$S(J/kg \cdot K) = 3.75229 \times 10^3 \log_{10} T_R - 7.500525 \times 10^3 + T_R(-0.462736 + 7.13243 \times 10^{-5} T_R) \quad (136-7)$$

沸点⁽²²⁾

$$T(^{\circ}C) = 881.4 \quad (P = 1.01325 \times 10^5 Pa) \quad (136-8)$$

融点⁽²²⁾

$$T(^{\circ}C) = 97.82 \quad (P = 1.01325 \times 10^5 Pa) \quad (136-9)$$

垂直全輻射率⁽²²⁾

$$\epsilon_0 = 0.046 \sim 0.057 \quad (175 \leq T \leq 520^{\circ}C) \quad (136-10)$$

また、ナトリウム蒸気に関する物性値は以下で与えられる。

飽和蒸気圧⁽²³⁾

Equation of R. W. Dichburn and J. C. Gilmour :

$$P_{Na,sat}(Pa) = \begin{cases} 3.346420 \times 10^{11} T_R^{-0.5} \cdot \exp\left(\frac{-2.30733 \times 10^4}{T_R}\right) & (T_R < 2,049.7^{\circ}R) \\ 6.9729435 \times 10^{11} T_R^{-0.61344} \cdot \exp\left(\frac{-2.298196 \times 10^4}{T_R}\right) & (T_R > 2,049.7^{\circ}R) \end{cases} \quad (137-1)$$

飽和蒸気圧⁽²³⁾Equation of G. H. Golden *et al.* :

$$\lambda(J/msK) = 0.2439707 + T_F(5.919900 \times 10^{-3} - 1.443432 \times 10^{-6} T_F) \quad (210 < T_F < 2,552^{\circ}F) \quad (137-2)$$

2-5-2 化学熱力学データ

ギブス自由エネルギー、エンタルピー、エントロピー、比熱などの化学熱力学データは、各種データ集^{[24],[25]}に記されている。例えば、液体 Na および Na 蒸気の化学熱力学データとして、JANAF では表形式で与えられている (表 1、2 参照)。表には左から順に、比熱 [C_P 、絶対標準エントロピー [S^0]、標準状態でのエンタルピーを基準とした自由エネルギー関数 [$(G^0 - H^0)/T$]、標準状態の H_2 ガスのエンタルピーを基準とした標準エンタルピー [H^0]、標準生成エンタルピー [$\Delta_f H^0$]、標準生成自由エネルギー [$\Delta_f G^0$]、圧力平衡定数の常用対数 [$\log_{10}(K_f)$] が記載されている。また、融点 [T_{fus}] や融解熱 [$\Delta_{fus} H^0$] などのデータも記載されている。

本研究の対象であるナトリウム液滴の燃焼解析において取り扱う化学反応種は、これまでのナトリウムに関する燃焼実験^[20]および燃焼解析^[1]を参考に、Na (ナトリウム、Sodium)、 O_2 (酸素、Oxygen)、 H_2O (水蒸気、Water)、 H_2 (水素、Hydrogen)、窒素 (N_2 、Nitrogen)、NaOH (水酸化ナトリウム、Sodium Hydroxide)、 Na_2O (酸化ナトリウム、Sodium Oxide) および Na_2O_2 (過酸化ナトリウム、Disodium Peroxide) とした。NaH (水素化ナトリウム、Sodium Hydride) は、比較的低温において生ずるナトリウムによる水素のコールド・トラップにより生ずる^[21]ため、燃焼解析においては考慮しないこととした。また、NaO (一酸化ナトリウム、Sodium Monoxide) および NaO_2 (超酸化ナトリウム、Sodium Superoxide) については、これまでの燃焼実験において特に観測されていないため、本研究では考慮しないこととした。

ナトリウムが液滴から蒸発した後に、周囲の酸素や水蒸気と反応する状況をモデル化するため、ナトリウムおよび水の化学状態は気相 (*gas*、以後 (g) と略記) とした。ナトリウムの酸化物や水酸化物などは、気体としてだけでなく、エアロゾルとしても存在すると考えられる。よってこれらのナトリウム化合物は、液相または固相の凝縮相 (*solid* or *liquid*、以後 (sl) と略記) としても扱えるよう、モデル化することとした。考慮する化学反応種とその状態について、表 3 にまとめる。

化学熱力学データは、ナトリウム、酸素、酸化ナトリウムおよび過酸化ナトリウムについては参考文献^[26]を、それ以外の化学反応種については JANAF Thermochemical Tables^[24]または Thermochemical Data of Pure Substances^[25]のデータを用いた。

・比熱)

化学反応種のもル定圧比熱は、温度に対し多項式で与える。比熱データが、文献において表形式で与えられている化学種については、6 次之多項式近似により評価する。

$$C_P = \sum_{i=1}^N a_i T^{i-1} \quad (138-1)$$

なお気相化学種を理想気体として扱うことにより、もルエンタルピーともルエントロピーは、定圧比熱を用いて表わせる。

$$H^0(T) = H^0(T_0) + \int_{T_0}^T C_P dT = H^0(T_0) - \sum_{i=1}^N \frac{a_i}{i} (T_0)^i + \sum_{i=1}^N \frac{a_i}{i} (T)^i \quad (138-2)$$

$$\begin{aligned}
 S^0(T) &= S^0(T_0) + \int_{T_0}^T \frac{C_p}{T} dT \\
 &= S^0(T_0) - a_1 \ln(T_0) - \sum_{i=2}^N \frac{a_i}{i-1} (T_0)^{i-1} + a_1 \ln T + \sum_{i=1}^N \frac{a_i}{i-1} (T)^{i-1}
 \end{aligned}
 \tag{138-3}$$

・ギブス自由エネルギー

化学平衡を扱うためには、全ての化学反応種の標準ギブス自由エネルギーに対し、ある基準となるエンタルピーを基準としたものに変換する必要がある。基準としては、通常、標準状態（圧力 0.1MPa）における H₂ ガスのエンタルピー [$H^0_{H_2}$] を用いる。具体的には、以下の式に従って、“見かけ上の” 絶対標準ギブス自由エネルギー [G^0_{ab}] を求めた。

$$G^0_{ab} = - \left\{ \frac{-[G^0 - H^0(T_0)]}{T} \right\} + [\Delta_f H^0(T_0)]
 \tag{139}$$

各化学反応種に対して求められた絶対標準ギブス自由エネルギーを図 1 に示す。なお、本報告書で本節以外の部分では、絶対標準ギブス自由エネルギーを表す ab の添字は省略している。

2-5-3 輸送特性

純粋気体に対する粘性係数、熱伝導度、拡散係数などの輸送特性値は、分子運動論に基づき求める。本節では輸送特性計算式について概説する。

Maxwell 分布に従う理想気体中の分子の平均速度と平均自由行程は次式となる^[27]。

$$\text{平均速度: } \bar{v} = \sqrt{\frac{8 RT}{\pi M}} \quad (140)$$

$$\text{平均自由行程: } l = \frac{1}{\sqrt{2}\pi\sigma_0^2 N} \quad (141)$$

これを用いて Maxwell は Newton の法則から、ガスの粘性係数式を導いた。

$$\mu = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{mkT}{\pi^3}} \frac{1}{\sigma_0^2} \quad (142)$$

また同様の考察から単原子分子の熱伝導度として以下の式が導かれている。

$$k = \sqrt{\frac{k^3 T}{\pi^3 m}} \frac{1}{\sigma_0^2} = \frac{3}{2} \frac{k}{m} \mu \quad (143)$$

さらに単成分および2成分間の拡散係数としては以下の式が得られている。

$$\text{単成分系: } D = \frac{2}{3} \left(\frac{k}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\sqrt{T^3/m}}{P\sigma_0^2} \quad (144)$$

$$\text{2成分系: } D_{ij} = \frac{4\sqrt{2}}{3} \left(\frac{k}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\sqrt{T^3(1/m_i + 1/m_j)}}{P(\sigma_i + \sigma_j)^2} \quad (145)$$

実在気体の輸送係数を十分な精度で計算できる Chapman-Enskog 理論では、分子間の衝突に対し干渉ポテンシャルを用いる^[27]。干渉ポテンシャルとしては、遠距離で働く引力と近接時の反発力から構成される Lennard-Jones ポテンシャルが知られている。

$$\phi(\sigma) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma_0}{\sigma}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_0}{\sigma}\right)^6 \right] \quad (146)$$

Chapman-Enskog 理論では、干渉ポテンシャルを用いて輸送係数の補正を行う。補正係数は衝突積分と呼ばれ、物性係数に対する平均化操作の相違から、粘性係数および熱伝導率に対する衝突積分、と、拡散拡散に対する衝突積分、の2種類がある。Lennard-Jones パラメータである衝突直径 $[\sigma]$ および温度 $[k/\epsilon]$ は化学種により異なり^{[27],[28]}、その代表的なものは数表で与えられている。衝突積分 $[\Omega]$ は無次元温度 $[kT/\epsilon]$ の関数として、数表で与えられている(表5参照)。

衝突積分を含む係数評価式^[27]を以下に示す。

$$\text{粘性係数: } \mu = 2.6693 \times 10^{-6} \frac{\sqrt{mT}}{\sigma_0^2 \Omega^{(2,2)}} \quad (147-1)$$

$$\text{熱伝導率: } \lambda = 8.3264 \times 10^{-2} \frac{\sqrt{T/m}}{\sigma_0^2 \Omega^{(2,2)}} \quad (147-2)$$

$$\text{自己拡散係数: } D = 6.5701 \times 10^{-8} \frac{\sqrt{T^3/m}}{P \sigma_0^2 \Omega^{(1,1)}} \quad (147-3)$$

多成分系の輸送係数は、組成とともに線形に変化せず、特に各成分の輸送係数が大きく異なる場合には、その相違が大きい。多成分系の粘性係数の評価には、次式で示される Wilke による近似式^[29]を用いた。

$$\mu = \sum_i \frac{\mu_i}{1 + \frac{1}{X_i} \sum_{j \neq i} \Phi_{ij} X_j} \quad (148-1)$$

ただし Φ は次式で与えられる。

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{m_i}{m_j}\right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2} \left(\frac{m_j}{m_i}\right)^{1/4}\right]^2 \quad (148-2)$$

ここで、2成分系に対する Lennard-Jones ポテンシャルおよび無次元温度は、各成分の値から、以下の近似式を用いて計算される。

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad (149-1)$$

$$\left(\frac{\varepsilon}{k}\right)_{ij} = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon}{k}\right)_i \cdot \left(\frac{\varepsilon}{k}\right)_j} \quad \therefore \left(\frac{kT}{\varepsilon}\right)_{ij} = T \sqrt{\left(\frac{k}{\varepsilon}\right)_i \cdot \left(\frac{k}{\varepsilon}\right)_j} \quad (149-2)$$

熱伝導率の評価には、Manson and Saxena による近似式^[30]を用いた。

$$\lambda = \sum_i \frac{\mu_i}{1 + \frac{1.065}{X_i} \sum_{j \neq i} \Phi_{ij} X_j} \quad (150)$$

拡散係数の評価には、Hirschfelder らの式^[27]を用いた。

$$D_{ij} = 1.8583 \times 10^{-7} \frac{\sqrt{T^3(1/m_i + 1/m_j)}}{P \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{(1,1)}} \quad (151)$$

第3章 数値計算手法

第2章にて示した拡張MAC法の基礎方程式・構成方程式や化学反応種の拡散方程式に対し、有限差分法を用いて時間および空間を離散化し数値シミュレーションを行う。本章では差分方程式と計算アルゴリズムについて具体的に示す。

3-1 離散化手法

ナトリウム液滴燃焼解析では、各種保存式や圧力ポアソン方程式、および拡散方程式などに対し、有限差分法を用いて直接数値シミュレーションを行う。

3-1-1 時間差分法

時間差分の計算スキームとしては、陰解法、陽解法、および半陰解法がある。陰解法は、時間微分に関わる項以外の項に、その時点での値をとる方法であり、オイラー陰解法、クランク・ニコルソン法、が挙げられる。陽解法は、時間微分に関わる項以外のすべての項に、1ステップ前の値をとる方法であり、オイラー陽解法、アダムス・バッシュフォース法、ルンゲ・クッタ法、有理ルンゲクッタ法、などが知られている。半陰解法は、方程式中の項により陰解法と陽解法を使い分ける方法である。数値安定性の悪い項だけを陰として効率的に計算を行うための各種の計算アルゴリズムが提案されている。例えば、非圧縮性流れに対して用いられるSMAC法では、圧力項のみを陰的に扱い、それ以外の項は陽的に扱われる。

安定に数値解が求められる時間刻み幅は、陽的に取り扱われる部分の固有の時定数で制限されるため、時間差分スキームに関しては、陰的であるほど数値安定性に優れている。燃焼を伴った流れの場合には、反応の時定数が流れの時定数とくらべ非常に短い状況回が想定される。非常に短い時間スケールで解析を行い、工学的に意味のある時間オーダーまで計算を行うには多大な時間を必要とし、実用上困難である。よって、燃焼を伴う流れの計算の多くは、すべてを陰に解く完全陰解法が使用され^[11]、大きな時間刻みとする工夫が成されている。

液滴燃焼解析においても、時間差分法としては陰解法を用いる。具体的にはオイラー陰解法およびクランク・ニコルソン法を採用した。以下に2つの手法に関して、物理量 ϕ に対する非定常問題を想定し、差分精度を含めて説明する。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = f(\phi) \quad (152)$$

・オイラー陰解法)

本スキームは、時間微分以外の項のすべてに、その時点(時刻 $n+1$)での値を使用する完全陰解法であり、時間に対し1次精度を持つ。離散化の表記は次式で示される。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = f(\phi^{n+1}) + O(\Delta t) \quad (153)$$

・クランク・ニコルソン法)

時間微分以外の項を、その時点(時刻 $n+1$) と前の時点(時刻 n) との平均値を使用するスキームで、時刻 $n+1$ での未知量を用いる陰解法である。具体的な表記は次式の通りであり、時間に対し 2 次精度を持つ。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\Delta t} = f \left[\left(\frac{\phi^{n+1} + \phi^n}{2} \right) \right] + O(\Delta t^2) \quad (154)$$

3-1-2 空間差分法

強制対流場のような流体の流れでは、拡散より、対流あるいは移流の方が卓越している。移流方程式は双曲型方程式であるため、一階微分項である対流項に対する空間差分が重要である。一方、非定常拡散方程式は放物型方程式であるため、二階微分項である拡散項は、通常、次式で示される 2 次精度あるいは 4 次精度の中心差分が用いられる。

・ 2 次精度中心差分法)

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (155)$$

・ 4 次精度中心差分法)

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{-\phi_{i+2} + 8\phi_{i+1} - 8\phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{12\Delta x} + O(\Delta x^4) \quad (156)$$

本研究では対流項以外の空間微分項に対し 2 次精度中心差分法を用いた。

対流項の差分スキームには、計算精度の向上や数値安定性を目的として多くの差分スキームが提案され^[30]、例えば、1 次精度風上差分、2 次精度中心差分、QUICK、KK(Kawamura and Kuwahara)スキーム、などがある。KK スキームを用いることにより、比較的粗い格子で乱流モデルを用いずに乱流の直接シミュレーションが行えたとの報告が有る^[7]。本研究では対流項に対する空間差分スキームとして KK スキームを採用した。KK スキームについて差分精度を含めて説明する。

KK スキームは、次式に示されるように 3 次精度の風上差分である。これは、4 次精度の中心差分に、3 次精度 4 階微分の数値拡散項が付加された形である。

・ KK スキーム)

$$u \frac{\partial \phi}{\partial x} = u \frac{-\phi_{i+2} + 8\phi_{i+1} - 8\phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{12\Delta x} + |u| \frac{\phi_{i+2} - 4\phi_{i+1} + 6\phi_i - 4\phi_{i-1} + \phi_{i-2}}{4\Delta x} + O(\Delta x^3) \quad (157)$$

打ち切り誤差項は、4 階微分の数値拡散であるため、流体固有の物理的な 2 次の拡散効果とは異なっている。すなわち、4 階微分の数値拡散による平滑化により小さな乱れ成分は排除され、かつ、大きな流れについては扱うことができると考えられている^[22]。一方、計算結果がメッシュ分割に強く依存する、あるいは、平均流はある程度再現することができるが乱流統計量は正しく再現することができない、などの報告もされている^[9]。

3-2 境界条件

圧力や速度に対する境界条件の差分方程式への与え方について説明する。

3-2-1 側面境界

・流速境界条件)

側面境界での流速に対しては、側壁に対するフリースリップおよびノンスリップ条件、一様流に対する条件の3種類の境界条件を指定できる。側面近傍セルにおける、側面に平行な流れの方向を x 、それと垂直で側面から内部に向かう方向を y とする。側面近傍セルでの流速 u とし、側面外部での仮想的な分割セルにおける流速を u' とおく。

フリースリップ条件：

フリースリップ条件は、対象境界条件とも呼ばれ、次式で与えられる。

$$\left. \frac{\partial u_x}{\partial y} \right|_w = 0, u_y \Big|_w = 0 \quad (158-1)$$

差分表示では次式で与えればよい。

$$\left. \frac{\partial u_x}{\partial y} \right|_w \Rightarrow \frac{u_x - u'_x}{\Delta y} = 0 : u'_x = u_x \quad (158-2)$$

ノンスリップ条件：

ノンスリップ条件は、壁面境界条件とも呼ばれ、次式で与えられる。

$$u_x \Big|_w = 0, u_y \Big|_w = 0 \quad (159-1)$$

差分表示では次式で与えればよい。

$$u'_x = -u_x \quad (159-2)$$

一様流境界条件：

側面外部に一様流が存在する場合の境界条件であり、フリースリップ条件において、仮想セルでの流速に対し一様流の流速を与えればよい。

$$u'_x = u_0 \quad (160)$$

・温度境界条件)

側壁での温度境界条件は、フリースリップ、ノンスリップ、一様流境界のそれぞれに対し、流速と同様の条件を与える。すなわち、側面近傍セルでの温度を T 、仮想セルにおける温度を T' として、次式で与えられる。

$$\text{フリースリップ条件： } T' = T \quad (161)$$

$$\text{ノンスリップ条件： } T' = T \quad (162)$$

$$\text{一様流境界条件： } T' = T_0 \quad (163)$$

・圧力境界条件)

一方側面での圧力境界条件には、フリースリップ、ノンスリップ、一様流境界のいずれの場合に対しても、境界における法線方向への流速に変化を与えないよう、内点より 0 次外挿のノイマン条件を与える。

$$\left. \frac{\partial P}{\partial y} \right|_w = 0 \quad (164-1)$$

側面近傍セルでの圧力を P 、仮想セルにおける圧力を P' とすれば、差分表示では次式で与えることとなる。

$$\left. \frac{\partial P}{\partial y} \right|_w \Rightarrow \frac{P - P'}{\Delta y} = 0 \quad \therefore P' = P \quad (164-2)$$

3-2-2 流入境界

境界が流入口である場合（流入条件）を考える。境界近傍セルにおける、側面に垂直な流れの方向を x 、側面に平行な方向を y とする。流速境界条件としては一様流流速を、温度境界条件としては一様流温度を、圧力境界条件としては内点より 0 次外挿のノイマン条件を与える。

$$\text{速度境界条件) } u'_x = u_0 \quad (165)$$

$$\text{温度境界条件) } T' = T_0 \quad (166)$$

$$\text{圧力境界条件) } P' = P \quad (167)$$

3-2-3 流出境界

境界が流出口である場合（流出条件）を考える。境界近傍セルにおける、側面に垂直な流れの方向を x 、側面に平行な方向を y とする。流速境界条件としては、流れの主流方向への内点からの一次外挿条件（ノイマン条件）を与える。これは境界近傍セルのさらに上流セルを添字 $x-1$ で表すことにより、次の差分式で与えられる。

速度境界条件)

$$u'_x = 2u_x - u_{x,x-1} \quad (168)$$

温度境界条件に対しても、速度境界条件と同じ条件を与える。

温度境界条件)

$$T' = 2T - T_{x-1} \quad (169)$$

圧力境界条件としては、内点より 0 次外挿のノイマン条件を与える。

圧力境界条件)

$$P' = P \quad (170)$$

3-3 行列解法

本手法では、エネルギー方程式、圧力ポアソン方程式、運動量保存式、化学反応種質量保存式、化学反応種拡散方程式を陰的に解く。このため、エネルギー方程式、圧力ポアソン方程式、運動量保存式および化学反応種質量保存式の各方程式に対し、逆行列を解く必要がある。

逆行列の数値計算では、3次元デカルト座標系を対象とする場合、7点階差式を扱う必要が有る。液滴燃焼解析では、行列式に対し過大緩和法（SOR法；Successive Over Relaxation method）を用いて、繰り返し計算により収束計算を行い解を求める^[31]。また、化学反応種拡散方程式に対しては、LU分解法により、行列式の解を求める^[32]。

液滴燃焼解析では、この行列式の求解にほとんどの時間を要している。SOR法による行列解法を、そのベクトル化版であるRed-Black法に変更する、あるいは、ベクトル化や並列化が有効なCG法（Conjugate Gradients method）、Bi-CG法、CGS法（Conjugate Gradients Squared method）、Bi-CGSTAB法（Bi-Conjugate Gradients-Stable method）などのCG系解法とすることにより、大幅な高速化が可能と考えられる。高速化の実現により、複雑で大規模な体系でのシミュレーションが可能となる。これにより、単一液滴のみの燃焼シミュレーションでは現象の解明が困難な、複数の液滴が近接して存在する場合の液滴間の相互作用などの解明も可能になると考えられる。

3-4 数値解法

本節では、まず、拡張 MAC 法における基礎方程式に対する差分方程式を示し、その計算方法について説明を行う。続いて、拡張 MAC 法での基礎方程式、化学反応種の拡散方程式、燃焼化学反応計算および液滴計算から構成される計算アルゴリズムについて、その概要を説明する。

3-4-1 差分略記法

まず、差分方程式を簡潔に記述するため、以下に物理量 ϕ に対する差分表記の略記法を定義しておく。

・ KK スキーム)

$$u_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \Rightarrow \alpha_x(u, \phi) \quad (170-1)$$

$$\equiv u_x \frac{-\phi_{x+2} + 8\phi_{x+1} - 8\phi_{x-1} + \phi_{x-2}}{12\Delta x} + |u_x| \frac{\phi_{x+2} - 4\phi_{x+1} + 6\phi_x - 4\phi_{x-1} + \phi_{x-2}}{4\Delta x}$$

$$u_y \frac{\partial \phi}{\partial y} \Rightarrow \alpha_y(u, \phi) \quad (170-2)$$

$$\equiv u_y \frac{-\phi_{y+2} + 8\phi_{y+1} - 8\phi_{y-1} + \phi_{y-2}}{12\Delta y} + |u_y| \frac{\phi_{y+2} - 4\phi_{y+1} + 6\phi_y - 4\phi_{y-1} + \phi_{y-2}}{4\Delta y}$$

$$u_z \frac{\partial \phi}{\partial z} \Rightarrow \alpha_z(u, \phi) \quad (170-3)$$

$$\equiv u_z \frac{-\phi_{z+2} + 8\phi_{z+1} - 8\phi_{z-1} + \phi_{z-2}}{12\Delta z} + |u_z| \frac{\phi_{z+2} - 4\phi_{z+1} + 6\phi_z - 4\phi_{z-1} + \phi_{z-2}}{4\Delta z}$$

$$\sum_{i=x,y,z} \left(u_i \frac{\partial \phi}{\partial i} \right) \Rightarrow \alpha(u, \phi) \quad (170-4)$$

$$\equiv \alpha_x(u, \phi) + \alpha_y(u, \phi) + \alpha_z(u, \phi)$$

・ 2次精度一階中心差分)

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} \Rightarrow \beta_x(\phi) \equiv \frac{\phi_{x+1} - \phi_{x-1}}{2\Delta x} \quad (171-1)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} \Rightarrow \beta_y(\phi) \equiv \frac{\phi_{y+1} - \phi_{y-1}}{2\Delta y} \quad (171-2)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} \Rightarrow \beta_z(\phi) \equiv \frac{\phi_{z+1} - \phi_{z-1}}{2\Delta z} \quad (171-3)$$

・ 2次精度二階中心差分)

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Rightarrow \gamma_{xx}(\phi) \equiv \frac{\phi_{x+1} - 2\phi_x + \phi_{x-1}}{\Delta x^2} \quad (172-1)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \Rightarrow \gamma_{yy}(\phi) \equiv \frac{\phi_{y+1} - 2\phi_y + \phi_{y-1}}{\Delta y^2} \quad (172-2)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \Rightarrow \gamma_{zz}(\phi) \equiv \frac{\phi_{z+1} - 2\phi_z + \phi_{z-1}}{\Delta z^2} \quad (172-3)$$

$$\Delta \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \Rightarrow \gamma(\phi) \equiv \gamma_{xx}(\phi) + \gamma_{yy}(\phi) + \gamma_{zz}(\phi) \quad (172-4)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \Rightarrow \gamma_{xy}(\phi) \equiv \frac{\phi_{x+1,y+1} + \phi_{x-1,y-1} - \phi_{x-1,y+1} - \phi_{x+1,y-1}}{4\Delta x \Delta y} \quad (173-1)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial y \partial z} \Rightarrow \gamma_{yz}(\phi) \equiv \frac{\phi_{y+1,z+1} + \phi_{y-1,z-1} - \phi_{y-1,z+1} - \phi_{y+1,z-1}}{4\Delta y \Delta z} \quad (173-2)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial z \partial x} \Rightarrow \gamma_{zx}(\phi) \equiv \frac{\phi_{z+1,x+1} + \phi_{z-1,x-1} - \phi_{z-1,x+1} - \phi_{z+1,x-1}}{4\Delta z \Delta x} \quad (173-3)$$

・ 応力テンソル成分)

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \mu \left[\left(\frac{\partial u_i}{\partial u_j} + \frac{\partial u_j}{\partial u_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right] \\ &\Rightarrow \varepsilon_{ij} \equiv \mu \left\{ [\beta_j(u_i) + \beta_i(u_j)] - \frac{2}{3} \delta_{ij} [\beta_x(u_x) + \beta_y(u_y) + \beta_z(u_z)] \right\} \\ &= \begin{cases} \mu \left\{ [\beta_j(u_i) + \beta_i(u_j)] - \frac{2}{3} [\beta_x(u_x) + \beta_y(u_y) + \beta_z(u_z)] \right\} (i=j) \\ \mu [\beta_j(u_i) + \beta_i(u_j)] (i \neq j) \end{cases} \end{aligned} \quad (174)$$

・ 応力テンソル項)

$$\begin{aligned} \tau_x &\equiv \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_x}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right] \\ &\Rightarrow \zeta_x(u) \equiv \mu \left\{ [\gamma_{xx}(u_x) + \gamma_{yy}(u_x) + \gamma_{zz}(u_x)] + \frac{1}{3} [\gamma_{xx}(u_x) + \gamma_{xy}(u_y) + \gamma_{zx}(u_z)] \right\} \end{aligned} \quad (175-1)$$

$$\tau_y \equiv \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right] \quad (175-2)$$

$$\Rightarrow \zeta_y(u) \equiv \mu \left\{ [\gamma_{xx}(u_x) + \gamma_{yy}(u_y) + \gamma_{zz}(u_z)] + \frac{1}{3} [\gamma_{xy}(u_x) + \gamma_{yx}(u_y) + \gamma_{yz}(u_z)] \right\}$$

$$\tau_z \equiv \mu \left[\left(\frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z} \right) \right] \quad (175-3)$$

$$\Rightarrow \zeta_z(u) \equiv \mu \left\{ [\gamma_{xx}(u_x) + \gamma_{yy}(u_y) + \gamma_{zz}(u_z)] + \frac{1}{3} [\gamma_{zx}(u_x) + \gamma_{yz}(u_y) + \gamma_{zz}(u_z)] \right\}$$

3-4-2 差分方程式

運動量保存式、エネルギー保存式、圧力ポアソン方程式と速度ダイバージェンス項、状態方程式に対する、差分方程式を具体的に書き下す。ただし前時点でのタイムステップ n 、現時でのタイムステップ $n+1$ 、予測値*とする。

・運動量保存式)

$$(\rho_1^n + \rho_2^n) \left[\frac{u_x^{n+1} - u_x^n}{\Delta t} + \alpha(u^n, u_x^{n+1}) \right] = -\beta_x(P_2^{n+1}) + \zeta_x(u^{n+1}) \quad (176-1)$$

$$(\rho_1^n + \rho_2^n) \left[\frac{u_y^{n+1} - u_y^n}{\Delta t} + \alpha(u^n, u_y^{n+1}) \right] = -\beta_y(P_2^{n+1}) + \zeta_y(u^{n+1}) \quad (176-2)$$

$$(\rho_1^n + \rho_2^n) \left[\frac{u_z^{n+1} - u_z^n}{\Delta t} + \alpha(u^n, u_z^{n+1}) \right] = -\beta_z(P_2^{n+1}) + \zeta_z(u^{n+1}) \quad (176-3)$$

・エネルギー保存式)

$$\begin{aligned} (\rho_1^n + \rho_2^n) C_p \left[\frac{T_1^{n+1} - T_1^*}{\Delta t} + \frac{T_2^{n+1} - T_2^n}{\Delta t} + \alpha(u^n, T_2^{n+1}) \right] \\ = \frac{P_1^* - P_1^n}{\Delta t} + \lambda [\gamma(T_2^{n+1})] + Q'^{n+1} \end{aligned} \quad (177)$$

・化学反応種質量保存式：

$$\begin{aligned} \rho^{n+1} \left[\frac{Y_i^{n+1} - Y_i^*}{\Delta t} + \alpha(u^{n+1}, Y_i^{n+1}) \right] \\ = \rho^{n+1} Y_i' - \left(\beta_x(\rho^{n+1} Y^{n+1} V_{i,x}^{n+1}) + \beta_y(\rho^{n+1} Y^{n+1} V_{i,y}^{n+1}) + \beta_z(\rho^{n+1} Y^{n+1} V_{i,z}^{n+1}) \right) \quad (i=1, \dots, l) \end{aligned} \quad (178)$$

・圧力ポアソン方程式)

$$\begin{aligned} \Delta P_2 = \gamma(P_2^{n+1}) = & -(\rho_1^n + \rho_2^n) \left\{ [\beta_x(u_x^n)]^2 + [\beta_y(u_y^n)]^2 + [\beta_z(u_z^n)]^2 \right. \\ & \left. + 2[\beta_x(u_y^n)\beta_y(u_x^n) + \beta_y(u_z^n)\beta_x(u_y^n) + \beta_z(u_x^n)\beta_x(u_z^n)] + \frac{D^{n+1} - D^n}{\Delta t} \right\} \\ & + [\beta_x(\rho_2^n)\beta_x(P_2^{n+1}) + \beta_y(\rho_2^n)\beta_y(P_2^{n+1}) + \beta_z(\rho_2^n)\beta_z(P_2^{n+1})] / (\rho_1^n + \rho_2^n) \end{aligned} \quad (179)$$

・速度ダイバージェンス項)

$$D^{n+1} = -\left(\frac{C_p - R}{C_p}\right) \frac{1}{P_1^n} \frac{P_1^{n+1} - P_1^n}{\Delta t} + \frac{1}{(\rho_1^n + \rho_2^n)} \frac{1}{C_p} \frac{1}{(T_1^n + T_2^n)} \left\{ \lambda[\gamma(T_2^{n+1})] + Q'^{n+1} \right\} \quad (180)$$

・状態方程式)

$$P_1^* = \rho_1^n R T_1^* \quad (181-1)$$

$$(P_1^* + P_2^n) = (\rho_1^{n+1} + \rho_2^{n+1}) R (T_1^{n+1} + T_2^{n+1}) \quad (181-2)$$

・化学反応種拡散方程式)

$$\begin{pmatrix} -\sum_{k=1}^N (X_1^n X_k^{n+1} / D_{1k}^n) & \cdots & (X_1^n X_N^n / D_{1N}^n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (X_N^n X_1^n / D_{N1}^n) & \cdots & -\sum_{k=N}^N (X_N^n X_k^n / D_{Nk}^n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{1,x}^{n+1} \\ \vdots \\ V_{N,x}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_x(X_1) \\ \vdots \\ \beta_x(X_N) \end{pmatrix} \quad (i=1, \dots, n) \quad (182-1)$$

$$\begin{pmatrix} -\sum_{k=1}^N (X_1^n X_k^{n+1} / D_{1k}^n) & \cdots & (X_1^n X_N^n / D_{1N}^n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (X_N^n X_1^n / D_{N1}^n) & \cdots & -\sum_{k=N}^N (X_N^n X_k^n / D_{Nk}^n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{1,y}^{n+1} \\ \vdots \\ V_{N,y}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_y(X_1) \\ \vdots \\ \beta_y(X_N) \end{pmatrix} \quad (i=1, \dots, n) \quad (182-2)$$

$$\begin{pmatrix} -\sum_{k=1}^N (X_1^n X_k^{n+1} / D_{1k}^n) & \cdots & (X_1^n X_N^n / D_{1N}^n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (X_N^n X_1^n / D_{N1}^n) & \cdots & -\sum_{k=N}^N (X_N^n X_k^n / D_{Nk}^n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{1,z}^{n+1} \\ \vdots \\ V_{N,z}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_z(X_1) \\ \vdots \\ \beta_z(X_N) \end{pmatrix} \quad (i=1, \dots, n) \quad (182-3)$$

・体積平均圧力計算式)

$$\begin{aligned} \sum_V dx dy dz (P_1^* - P_1^n / \Delta t) + \gamma \sum_S ((u_x^n, u_y^n, u_z^n) \cdot \mathbf{n}) ds \\ = (\gamma - 1) \lambda \sum_S [(\beta_x(T_2^n), \beta_y(T_2^n), \beta_z(T_2^n)) \cdot \mathbf{n}] ds + \sum_V Q'^n dx dy dz \end{aligned} \quad (183)$$

・出力密度計算式)

$$Q'^{n+1} = \sum_{i=1}^n [\rho^n Y_i^* C_{P,i}^* (T_1^* + T_2^n)] - \sum_{i=1}^n [\rho^n Y_i^n C_{P,i}^n (T_1^n + T_2^n)] \quad (184)$$

3-4-3 計算アルゴリズム

Fig.3 に示すアルゴリズムに従い、前述の差分方程式の数値計算を行う。具体的な手順と各手順毎の概要を説明する。

(1) 体積平均圧力計算

式(183)から、タイムステップ n での発熱密度、および気体化学反応種の流入・流出量から、タイムステップ $n+1$ での体系平均圧力 P_1^* を計算する。同時に、状態方程式(178-1)から体系平均温度 T_1^* も求める。なお、右辺第1項の熱伝導により体系から奪われる熱エネルギーは、右辺第2項の燃焼発熱量による熱エネルギーと比較し、大幅に小さいため考慮しないこととする。

(2) 化学反応計算

化学反応による成分変化を求め、質量分率 Y_i^* 、モル分率 X_i^* を求める。化学反応平衡を用いているため、化学反応速度は混合律速となり、対流および拡散速度に支配される。

(3) 出力密度計算

化学反応種の質量分率の変化に伴うエンタルピー変化から、出力密度計算式(184)を用いて、出力密度 Q^{n+1} が求められる。

(4) 粘性・熱伝導率計算

体系温度 T_1^* 、 T_2^n およびモル分率 X_i^* から、全ての計算点毎に、式(148-1)を用いて粘性係数 μ^{n+1} を、また式(150)を用いて熱伝導率 λ^{n+1} を計算する。

(5) 熱伝導・輻射熱伝達計算

液滴への熱伝導によるエネルギー輸送量 q_{cond} を式(124)から、また、輻射熱伝達によるエネルギー輸送量 q_{rad} を式(132)から計算する。

(6) 温度場計算

エネルギー保存式(177)をSOR法を用いて収束計算することにより、体系温度 T_1^{n+1} 、 T_2^{n+1} を求める。この時、収束計算での繰り返し計算毎に、温度平均値補正式(13-2)を用いて、体系平均温度 T_1^{n+1} と局所変分量 T_2^{n+1} の整合性を保つ。

(7) 密度計算

体系温度 T_1^{n+1} 、 T_2^{n+1} および体系圧力 P_1^* 、 P_2^{n+1} に伴う体系平均密度 ρ_1^{n+1} および局所変分量 ρ_2^{n+1} の変化を、状態方程式(181-2)から計算する。

(8) 液滴温度計算

タイムステップ $n+1$ での熱伝導 q_{cond} および輻射 q_{rad} によるエネルギー輸送量、およびタイムステップ n での液滴温度 T_{drop}^n および蒸発 q_{evap} によるエネルギー輸送量から、式(134)を用いて、タイムステップ $n+1$ での液滴温度 T_{drop}^{n+1} を求める。

(9) 圧力場計算

圧力ポアソン方程式(178)をSOR法を用いて収束計算することにより、体系圧力 P_1^{n+1} , P_2^{n+1} を求める。この時、収束計算での繰り返し計算毎に、圧力平均値補正式(13-1)を用いて、体系平均圧力 P_1^{n+1} と局所変動圧力 P_2^{n+1} の整合性を保つ。

(10) 速度場計算

運動量保存式(176-1)~(176-3)を用いて、速度 u を x, y, z 各方向ごとに、SOR法を用いて収束計算を行う。

(11) 蒸発量計算

液滴温度 T_{drop}^{n+1} および飽和蒸気圧の式(137-1)から、液滴近傍でのナトリウム飽和蒸気圧 $P_{Na, sat}$ を求める。さらに蒸発量計算式(121)から総蒸発量 $m'_{evap}{}^{n+1}$ を、蒸発熱計算式(133)から蒸発によるエネルギー輸送量 q_{evap} を計算する。

(12) 拡散係数計算

体系温度 T_1^{n+1} , T_2^{n+1} および体系圧力 P_1^{n+1} , P_2^{n+1} から、全ての計算点毎に、式(151)を用いて拡散係数 $D_{ij}{}^{n+1}$ を計算する。

(13) 拡散速度計算

化学反応種拡散方程式(182-1)~(182-3)を用いて、各化学反応種に対する拡散速度 V_i を x, y, z 方向ごとに、SOR法を用いて収束計算を行なう。

(14) 化学反応種成分濃度計算

化学反応種質量保存式(179)を用いて、化学反応種毎の質量分率 Y_i^{n+1} を、SOR法を用いて計算する。ここで化学反応は混合律速であり、化学反応量は(2)で既に計算を行なっている。よって式(179)中の反応速度としては0を与えればよい。また質量分率 Y_i^{n+1} から、モル分率 X_i^{n+1} を計算する。

(15) 液滴界面計算

液滴温度 $T_{drop}{}^{n+1}$ の変化およびナトリウム蒸発に伴う液滴質量 $m'_{evap}{}^{n+1}$ の変化から、液滴径の変化と界面移動量を評価し、式(118)を用いて液滴内部あるいは外部の設定を変更する。

(16) 計算結果出力

タイムステップ $n+1$ における計算結果を出力する。その後に、タイムステップを進行させ、(1)から再計算を行なう。

第4章 液滴燃焼解析

本章では、ナトリウム液滴燃焼解析コード (COMET) による強制対流場における単一液滴燃焼の数値シミュレーション結果を示す。

4-1 概要

ナトリウム漏えい事象におけるスプレイ燃焼では、液滴状のナトリウムが雰囲気中を自由落下する。ナトリウム液滴燃焼解析では、単一の液滴に着目し、燃焼を伴う化学反応と各種化学反応生成物の生成・消滅と移行挙動および反応熱の発生・分布について、数値シミュレーションを行うことにより、定量的な解明を行う。

落下するナトリウム液滴が、雰囲気大気中の酸素との化学反応により燃焼し、燃え尽きる現象のシミュレーションを行う。ナトリウム液滴が自由落下しながら燃焼する状況を模擬するよう、単一ナトリウム液滴が一様な強制対流場に存在する状況を設定した。液滴温度は始めから沸点に達していたとし、燃焼により消滅するまでを数値シミュレーションした。

4-2 解析条件

計算体系：

単一液滴が一様な強制対流場中に存在する状況をモデル化するため、Fig. 4 に示す解析体系で数値シミュレーションを実施した。幅 x 奥行き x 高さが1対1対2である縦長の直方体中に、単一の球形ナトリウム液滴が存在している。液滴の直径は 2.0mm から 6.0mm とし、直方体の大きさは幅 x 奥行き x 高さで 6.4mm x 6.4mm x 12.8mm から 20.0mm x 20.0mm x 40.0mm とした。高さ方向を z 軸とした場合、z=0 の面に空気が一様に流入するとした。解析メッシュを Fig. 5 に示す。3次元正方格子によりメッシュ分割され、幅 x 奥行き x 高さを 20x20x40 分割する場合、メッシュ数は 16,000 で、格子1辺長さは 0.32mm~1.00mm となる。64x64x128 分割の場合、メッシュ数は 524,288 で、格子1辺の長さは 0.010mm から 0.031mm となる。

計算条件：

計算条件を表 5 に記す。落下速度は燃焼中一定であるとした。雰囲気大気の圧力は大気圧 1.01325×10^5 MPa で温度は 300℃とした。大気成分組成としては、酸素が約 25wt% と過剰に含まれ、また水蒸気が 1.3wt% と約 20℃の大気条件下で湿度 100% に相当する条件を与えた。燃焼開始時点における液滴の直径は 6.09mm とし、温度は沸点 881℃とした。また計算条件を表 6 に示す。体系は 2x2x4cm の直方体形状で、中心軸上の 1/3 の高さにナトリウム液滴を配置した。空間分割幅を 1mm とし、時間刻み幅は 0.1ms とした。

計算パラメータ：

COMET では混合気体の物性値を、分子運動論に基づき各時間ステップ、各計算点毎に求めている。混合気体の粘性係数、熱伝導度の計算に用いる Lennard-Jones ポテンシャルパラメータに関し、本シミュレーションで用いた値を表 7 に示す。酸素、水蒸気、水素、窒素に関するパラメータは、化学便覧^[33]中の値を用いた。一方、ナトリウムおよびナト

リウム化合物に関するパラメータには、物性値推算手法および分子直径データを参考に導出した値を用いた^[28]。また拡張 MAC 法における圧力ポアソン方程式および状態方程式中で用いられる比熱比および気体定数をパラメータとして与える必要がある。空気雰囲気中でのナトリウム液滴の落下現象であることから、比熱比は空気での値を、気体定数は一般気体定数を用いた^[34]。なお輻射熱伝達量に影響を与える質量吸収係数には、CO₂の吸収領域の中心波長 $\lambda=4.3 \times 10^{-6}$ (m)に対する値^[20]を用いており、これはナトリウム液滴周囲の高温領域からの輻射が単色であると近似したことに相当する。この場合の質量吸収係数は、CO₂に対するプランク吸収係数と比較し、約3桁大きな値となる。このためナトリウム液滴は実際の現象より、過度に激しく燃焼することとなる。

4-3 解析結果

解析は、時刻 0 秒で液滴が強制対流場中に置かれた状態から、ほとんど全てのナトリウムが蒸発して液滴が燃え尽きる 0.2455sec まで解析を実施した。

解析体系全体での空間平均温度の時間変化を Fig. 6 に示す。初期温度 300℃から、燃焼開始直後には 480℃まで急激な温度上昇を示し、その後は液滴径の減少に伴い、ほとんど単調に減少する傾向を示した。燃焼終了時点で空間平均温度は 350℃である。

空間平均圧力の時間変化を Fig. 7 に示す。初期圧力 1.10325×10^5 Pa から、燃焼開始直後には 1.14×10^5 Pa と約 13%もの上昇を示した。その後は時間経過とともにほぼ単調に減少し、燃焼終了時点では 1.32×10^5 Pa まで低下する。

解析体系全体での総発熱量の時間変化を Fig. 8 に示す。時刻 0 の事象開始時で総発熱量 0 の状態から、燃焼開始直後の 0.01sec で 10.8kW と急激な発熱が起こっていることが分かる。その後 0.04sec まで発熱量は減少した後、0.05sec に一時的に小規模な増加を示す。これは、液滴後部の流れの主流方向下流に形成される高温の燃焼領域が、燃焼開始直後には拡大および縮小するためである。0.06sec 後は再び単調な減少傾向を示し、燃焼終了時点においても約 3.6kW の総発熱量がある。これは液滴消滅時においても、流れの主流方向下流には、ナトリウムおよびナトリウム化合物が存在し、それらが酸素および水蒸気と化学反応をしているためである。

液滴温度の時間変化を Fig. 9 に示す。温度初期条件として、ナトリウムの沸点 881℃に達しているとしたが、燃焼終了時点までその温度のまま一定であることが分かる。これは、液滴に流入する輻射および熱伝導によるエネルギーは、すべてナトリウムの蒸発に用いられていることを示している。

液滴の直径の時間変化を Fig. 10 に、また直径の 2 乗の時間変化を Fig. 11 に示す。燃焼噴霧に対する理論的・実験的研究によれば、微小な油滴の速度は粘性抵抗のために終端速度に急速に近づくため、燃焼油滴は球対象な拡散火炎に完全に囲まれている^[33]と考えられる。この単純なモデルに基づいた理論によれば、油滴表面への熱伝達が蒸発率を支配するために、油滴の直径は次式で示される d^2 法則に従い時間とともに減少する。

$$d^2 = d_0^2 - Kt \quad (185)$$

本シミュレーションにおいても Fig. 11 によれば、燃焼開始後約 0.1sec まではほぼ d^2 法則と同一の挙動を示すが、液滴径が初期値の半分以下となる 0.15sec 以降では明らかに d^2

法則とは異なる傾向を示した。この原因の一つとして、ナトリウム蒸発への対流の影響が、液滴径に対して異なっていることに起因していることが考えられる。しかしながら液滴の解像度の影響、すなわち直行座標系で球形液滴を表現するために、小さい液滴が適切に扱われていない可能性もあり、今後より解像度の高いシミュレーションを行うことにより、 d^2 法則とは異なる傾向を示した原因について考察する必要がある。

燃料の蒸発速度定数 K は、燃料と酸化剤の広範な組み合わせに対して以下の範囲にある¹³⁾ことが知られている。

$$K = 3.6 \times 10^{-7} \sim 3.56 \times 10^{-6} \quad (\text{m}^2/\text{s}) \quad (186)$$

特に炭化水素の空気中での燃焼では、ほぼ全ての場合に対し以下の範囲[]にある。

$$K = 10 \pm 2 \times 10^{-7} \quad (\text{m}^2/\text{s}) \quad (187)$$

本シミュレーションによる蒸発速度定数は約 $2.5 \times 10^{-5} \sim 2.6 \times 10^{-4} (\text{m}^2/\text{s})$ であり、式(186)の値より大きい。これは質量吸収係数を大きく採ったため輻射伝熱量が過大に評価されたためである。

速度場の時間変化を Fig. 12 に示す。液滴に主方向の流れが妨げられ迂回している様子、流れが剥離している様子が観察される。温度場の時間変化を Fig. 13 に示す。流れの下流側に高温領域が形成されているのが観察できる。また液滴周囲に着目すると、流れが剥離する位置近傍より下流側で高温となっていることが分かる。最高温度は燃焼開始後約 0.15sec までは約 1,680K で一定であるが、0.20sec 以後は約 1,670K と若干低下している。圧力の空間変分量の時間変化を Fig. 14 に示す。液滴の上流側で圧力が高く、後方で低い様子は、各時間ステップを通じてほぼ同じである。また解析空間内部での圧力の差は高々 15Pa であり、Fig. 7 で示された解析空間全体での平均圧力の変化に比べて小さい。速度場から求めた渦度ベクトルの z 方向（主流方向）成分の変化を Fig. 15 に示す。液滴径が比較的大きな 0.10sec までは、液滴周辺および下流側に乱れた流れが観察される。しかし液滴径の小くなる 0.20sec 以降では、渦度ベクトルの z 方向成分に 90° 毎の対称性が見られる。これは液滴径が小さくなった場合、空間解像度が低いため、球形ではなくむしろ立方体として表現されるためと考えられる。

化学反応による発熱分布を Fig. 16 に示す。液滴に対し主流流れ上流側に高発熱領域が形成されている。一方、液滴の流れ下流側は、上流側と比較し、化学反応による発熱量は少ない。また高発熱領域から主流の流れに沿い、化学反応による発熱領域が形成されている。ナトリウム、酸素、水、水素、水酸化ナトリウム、酸化ナトリウム、過酸化ナトリウムおよび窒素のモル濃度分布を、それぞれ Fig. 17~24 に示す。ナトリウムは液滴の全面から蒸発するが、Fig. 17 によれば液滴の流れ下流直後に高濃度領域が見られ、最高濃度は約 70mol% に達している。酸素濃度分布は Fig. 18 によれば、液滴周囲および主流流れが剥離した下流の領域で低濃度となっている。液滴最後部の近傍で最も低濃度となっており、その濃度は約 3mol% である。水蒸気濃度は Fig. 19 によれば、酸素と同様に液滴周囲および液滴の流れ下流側で低濃度となっているが、特に流れ下流側での濃度はほぼ 0mol% である。水素は Fig. 20 によれば、ほとんど発生していない。水酸化ナトリウムは Fig. 21 によれば、主流流れに沿った液滴の下流側ではあるが、液滴直後ではなく流れに沿った少

し後方に高濃度領域が形成されている。その最高濃度は約 7mol%に達している。酸化ナトリウムは Fig. 22 によれば、液滴最後部の近傍で、かつ、主流流れが剥離した位置の後方の領域で高濃度となっている。0.01sec 後で液滴が大きい時点では、その最高濃度は約 20mol%に達している。時間が経過し液滴径が減少するのに伴い、その最高濃度は低下していき、0.15sec での最高濃度は約 16mol%、0.24sec での最高濃度は約 14mol%となっている。過酸化ナトリウムは Fig. 23 によれば、酸化ナトリウムと比較しその発生量は少ないものの、酸化ナトリウム濃度の高い液滴後部の領域と主流流れとの境界領域で最高 4×10^{-3} mol%程度の濃度を生じている。

以上の発熱量分布および化学反応種分布から、ナトリウム液滴の燃焼では、次の化学反応が生じていると考えられる。まず液滴の流れ上流側では、液滴から蒸発したナトリウムは対流および拡散により移行してきた酸素と化学反応し、酸化ナトリウムに変化すると同時に激しい発熱を生じている。一方液滴の流れ下流側では、液滴から蒸発したナトリウムの多くは高温のために酸素と直ちに化合はしない。対流により下流や拡散により主流流れ近傍などの比較的低温な領域に移行した時点で、ナトリウムは酸素と反応し酸化ナトリウムさらには過酸化ナトリウムを生じる。さらに酸化ナトリウムは対流により下流に移行するが、同時に主流流れの水蒸気との拡散による混合のために化学反応をおこし、水酸化ナトリウムを生じる。

4-4 今後の課題

単一のナトリウム液滴の一様な強制対流中における燃焼シミュレーションを実施し、液滴の周囲での流れの状況や温度場・圧力場の時間変化のみならず、ナトリウムや酸素などの化学種の移行挙動、さらには化学反応の状況について、詳細な情報が得られた。

燃焼シミュレーションにより、化学反応種の生成や発熱について定量的に評価することが可能である。今後より詳細な解析を行い、それらの精度を向上させるためには、下記の事柄が課題として挙げられる。

基礎物性データの蓄積：

ナトリウム液滴燃焼で生じる化学反応としては、ナトリウムなどの燃料と酸素による酸化反応やナトリウムおよびナトリウム酸化物の水蒸気との反応が挙げられる。これらの化学反応は、各化学反応種の移流や拡散による混合が原因となっている。よって作動流体の粘性や化学反応種の拡散などの基礎的物性値が本質的に重要である。本研究では、ある時間のある空間点での粘性係数、熱伝導係数および相互拡散係数を求めるため、分子運動論に基づく評価を行っている。分子運動論に基づく評価は物性値評価手法としてよく用いられる手法^[28]であるが、その評価には、例えば、各化学反応種毎の Lennard-Jones ポテンシャル・パラメータが必要となる。酸素、窒素などの大気成分および炭化水素系化合物の燃焼で発生する二酸化炭素や一酸化窒素、二酸化硫黄などに対する Lennard-Jones ポテンシャル・パラメータは、多くの文献^{[28],[33]}に収められているものの、ナトリウムおよびナトリウム化合物に対するパラメータは記載されておらず、何らかの手法により推定する必要がある。本来これらのパラメータは、各化学反応種の粘性係数の実験値などから決定されるものであり、ナトリウムおよびナトリウム化合物についても、粘性係数データを

実験的により求めた上で Lennard-Jones パラメータを決定する必要がある。また、液滴からのナトリウム蒸発量は、液滴への輻射熱伝達および熱伝導に拠っている。輻射熱伝達量の決定には、液滴周囲に存在するナトリウムおよびその化合物の質量吸収係数あるいは吸収率が重要となる。二酸化炭素および水蒸気に対するデータは、温度、圧力およびそれらの混合比の関数^[19]として与えられており、比較的容易に算出することが可能である。しかしナトリウムおよびナトリウム化合物に関するデータはこれまで知られておらず、今後これらの基礎的データの蓄積が望まれる。

化学反応モデルの改良：

本研究ではナトリウムの燃焼反応を対象として、平衡化学反応論に基づく圧力平衡定数法により化学反応モデルを使用した。その化学熱力学的な状態としては、気相のみ、あるいは、気-固相系を考慮することが可能である。気-固相系モデルでは、各化学反応種に対し特定の相を設定する、すなわちその化学反応種の相平衡を考慮しないこととした。特にナトリウムについては、“液体燃料は燃料蒸気が酸素と反応し燃焼する^[34]”ことから、化学熱力学的には気相状態にあると考えた。液滴周囲の高温領域に蒸発したナトリウムが、対流および拡散により低温領域に移行しながら凝縮し、エアロゾルの一部となることも想定される。本研究で用いた化学反応モデルではこの状況は表現されていない。ナトリウムの相平衡モデルを導入する、あるいは、ナトリウム飽和蒸気圧を考慮してナトリウムの相状態を切り替えるモデルを導入することにより、この問題は解決可能と考えられる。

解析精度の向上：

ナトリウム液滴が燃焼により径が減少した場合、本解析コードで用いる直行座標系による空間分割では球面に対する形状模擬性が問題となる。実際、本シミュレーションにおいてナトリウム液滴の蒸発が進行し液滴が1～数メッシュで表された場合、液滴周囲の大気の流れに明確な影響が生じている。これはナトリウム蒸気の対流および拡散による移行に影響を及ぼす。さらに液滴周囲の温度場も影響を受けるため、液滴への輻射熱伝達が変化し、ひいてはナトリウム蒸発量も影響を受けていると考えられる。

径が減少した場合でも適切な形状模擬性を確保し、解析精度を向上させる必要がある。そのために空間解像度を向上させる方法として、空間分割幅を各空間方向毎に任意に設定できるよう改良する方法が考えられる。これにより液滴が小さくなった時にも、十分なメッシュ数で分割されるようにすることが可能である。さらに本コードで用いた直行座標系で正方格子を用いた空間分割から、境界適合座標法を用いることにより、球形液滴に沿った曲線座標で物理空間を分割し、座標変換を施すことにより計算空間では正方格子を用いる方法も考えられる。

第5章 結言

ナトリウム液滴の燃焼挙動の機構論的解明には、圧縮性強制対流場、化学反応種の拡散、ナトリウム燃焼化学反応、ナトリウム液滴挙動、化学反応種および混合物の物性挙動など、多くの物理現象を統合して同時に扱う必要が有る。本研究では、直接シミュレーションを用いた強制対流場におけるナトリウム液滴の燃焼解析コード COMET (Sodium Droplet Combustion Analysis Methodology using Direct Numerical Simulation in 3-Dimensional Coordinate) を開発した。本解析コードは以下の特長を有する。

- 1：拡張 MAC 法による圧縮性強制対流場および化学反応種拡散の数値解析手法の導入
- 2：液滴と雰囲気大気間の物質輸送モデルおよびエネルギー輸送モデルの導入
- 3：圧力平衡定数法によるナトリウム化学反応の解析手法の導入
- 4：気体分子運動論に基づく混合物の物性値推算手法の導入

本コードを用いて単一球形ナトリウム液滴の一様強制対流場中での燃焼シミュレーションを行った。ナトリウム液滴の燃焼に伴う直径の時間変化は、燃焼工学上知られた d^2 乗法則とよい一致を示した。また液滴周囲での燃焼の状況および発熱分布、さらにはナトリウムの酸化物や水酸化物など化学反応種の生成・消滅状況や移行挙動についての知見が得られた。

本解析コードによるナトリウム液滴の燃焼シミュレーションを通じて、ナトリウム漏えい事象時の多様なスプレイ燃焼条件における発熱および化学反応生成物の定量的な評価が可能となる。

謝辞

ナトリウム液滴燃焼解析コード (COMET) の開発において助言を頂いた動力炉・核燃料開発事業団 大洗工学センター 基盤技術開発部 熱流体技術開発室 室長代理の山口 彰主任研究員に感謝の意を表します。日本原子力学会 原子炉熱流動の微視的シミュレーション研究専門委員会において、専門的な立場から発展的な議論を通じて有益な助言を頂いた東京工業大学 原子炉工学研究所の二ノ方 壽教授および委員の方々に感謝の意を表します。コード開発にあたり、技術的な協力を頂いた(株)計算流体力学研究所の葛生 和人氏に感謝の意を表します。

参考文献

- [1] 伊藤 和元 他 10 名、“[もんじゅ] ナトリウム漏えい事故に関する技術報告”、日本原子力学会誌、**39**、9、pp. 704-732 (1997)
- [2] 山口 彰 他 3 名、“ナトリウム漏えい・燃焼挙動の機構論的解析手法の開発”、PNC TN9410 97-040 (1997)
- [3] J. C. Birchley and N. Riley, ‘Transient Evaporation and Combustion of a Composite Water-Oil Droplet’, *Combustion and Flame*, **29**, pp.145-165 (1977)
- [4] “燃焼工学ハンドブック”、日本機学会(1995)
- [5] S. S. Tsai, “The NACOM code for analysis of postulated sodium spray fires in LMFBRs”, NUREG/CR-1405 (1980)
- [6] P. R. Shire, “SPRAY code user’s report”, HEDL-TME 76-94 (1977)
- [7] K. Naitoh and K. Kuwahara, ‘Large eddy simulation and direct simulation of compressible turbulence and combusting flows in engines based on the BI-SCALES method’, *Fluid Dynamics Research*, **10**, pp.299-325 (1992)
- [8] K. Kuzuu, K. Ishii and K. Kuwahara, ‘Numerical simulation of premixed flame propagation in a closed tube’, *Fluid Dynamics Research*, **18**, pp.165-182 (1996)
- [9] K. Kuwahara, “Computation of thermal convection with a large temperature difference”, Proc. of 4th Int. Conf. on Applied Numerical Modeling (1984)
- [10] 廣瀬 直喜 他 4 名著、“数値流体力学シリーズ 2 圧縮性流体解析”、東京大学出版会 (1995)
- [11] 小林 敏雄 他 6 名著、“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(1995)
- [12] 堀端 康善、“低マッハ数流れの数値シミュレーション -温度変化の大きい場合について-”、ながれ、**9**、pp.170-183 (1990)
- [13] 河村 哲也 他 4 名著、“数値流体力学シリーズ 非圧縮性流体解析”、東京大学出版会 (1995)
- [14] 標 宣男 他 3 名著、“数値流体力学 -複雑流れのモデルと数値解析-”、朝倉書店 (1994)
- [15] Forman A. Williams, “Combustion Theory” Second Edition, Addison-Wesley Publishing Company (1985)
- [16] 伊香保 恒男、新山 浩雄著、“プログラム学習 化学熱力学”、講談社サイエンティフィック (1991)
- [17] Michael M. Abbott and Hendrick C. Van Ness 共著 大島 広行訳、“マグローヒル大学演習 化学熱力学”、オーム社 (1996)
- [18] J. C. Birchley and N. Riley, “Transient Evaporation and Combustion of a Composite Water-Oil Droplet”, *Combustion and Flame*, **29**, pp.145-165 (1977)
- [19] “伝熱工学資料 改訂第 3 版”、日本機械学会 (1975)
- [20] 近藤 次郎著、“高速空気力学”、コロナ社 (1977)

- [21] 高須 宏雄 他 4 名、“ナトリウム技術実用物性表 (Na, Ar, 304SS, 2 1/4 Cr-1Mo 鋼)”、PNC TN941 81-73 (1981)
- [22] O. J. Foust, “Liquid Metals Handbook sodium NaK Supplement”, LMEC (1967)
- [23] C. H. Golden and J. V. Tokar, “Thermophysical Properties of Sodium”, ANL-7323 (1967)
- [24] M. W. Chase, Jr. *et al.*, “JANAF Thermochemical Tables Third Edition”, Journal of Physical and Chemical Reference Data, **14**, 1 (1985)
- [25] Ihsan Barin, “Thermochemical Data of Pure Substances Third Edition”, VCH (1995)
- [26] R. H. Lamoreaux and D. L. Hildenbrand, “High Temperature Vaporization Behavior of Oxides. I. Alkali Metal Binary Oxides”, Journal of Physical and Chemical Reference Data, **13**, 1 (1984)
- [27] R. Byron Bird *et al.*, “Transport Phenomena”, John Wiley & Sons, Inc. (1960)
- [28] R. C. Reid, J. M. Prausnitz and T. K. Sherwood 著、平田 光穂 監訳、“気体、液体の物性値推算ハンドブック 第3版”、マグロウヒル (1985)
- [29] Wilke, C. R., “A Viscosity equation for gas mixtures”, J. Chem. Phys., **18**, 4, pp.517-519 (1950)
- [30] Mason, E. A. and S. C. Saxena, “Approximation Formula for the Thermal Conductivity of Gas Mixtures”, Phys. Fluids, **1**, pp.361-319 (1958)
- [31] 越塚 誠一著、インテリジェント・エンジニアリング・シリーズ “数値流体力学”、培風館 (1997)
- [32] 森口 繁一、伊里 正夫編、“算法通論 第2版”、東京大学出版会 (1985)
- [33] 日本化学会 編、“化学便覧基礎編 改訂2版”、丸善 (1975)
- [34] R. A. Strehlow 著、水谷 幸夫 訳、“基礎燃焼学”、森北出版 (1972)

Table.1 Thermochemical properties of liquid of sodium^[24]

Enthalpy Reference Temperature = $T_f = 298.15$ K				Standard State Pressure = $p^\circ = 0.1$ MPa			
T/K	J K ⁻¹ mol ⁻¹			kJ mol ⁻¹			Log K_f
	C_p°	S°	$-[G^\circ - H^\circ(T_f)]/T$	$H^\circ - H^\circ(T_f)$	$\Delta_f H^\circ$	$\Delta_f G^\circ$	
0						00	INFINITE
100							
200							
250							
288.15	32.708	57.862	57.862	0.	2.406	0.495	-0.087
300	32.685	58.064	57.863	0.090	2.414	0.483	-0.084
350	32.068	63.056	58.258	1.879	2.580	0.147	-0.022
370.980	31.627	64.915	58.583	2.349			
400	31.510	67.301	59.130	3.288	0.	0.	0.
450	31.004	70.882	60.247	4.831	0.	0.	0.
500	30.592	74.225	61.486	6.370	0.	0.	0.
600	29.807	79.720	64.083	9.386	0.	0.	0.
700	29.271	84.278	66.952	12.338	0.	0.	0.
800	28.945	88.163	69.104	15.247	0.	0.	0.
900	28.838	91.584	71.415	18.134	0.	0.	0.
1000	28.945	94.808	73.584	21.021	0.	0.	0.
1100	29.259	97.377	75.623	23.930	0.	0.	0.
1170.825	29.613	99.206	76.989	26.005			
1200	29.790	99.945	77.544	28.881	-95.780	2.440	-0.106
1300	30.514	102.357	79.361	29.895	-95.824	10.689	-0.429
1400	31.351	104.649	81.086	32.988	-94.809	18.823	-0.702
1500	32.188	106.840	82.730	36.166	-93.711	26.902	-0.937
1600	33.024	108.944	84.303	39.426	-92.529	34.908	-1.140

CRYSTAL (←) LIQUID

FUGACITY = 1 bar

$\Delta_f H^\circ(298.15 \text{ K}) = [2.406] \text{ kJ mol}^{-1}$
 $\Delta_{fus} H^\circ = 2.602 \text{ kJ mol}^{-1}$

$S^\circ(298.15 \text{ K}) = [57.862] \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$
 $T_{fus} = 370.98 \pm 0.02 \text{ K}$

PREVIOUS: CURRENT: June 1962

Table.2 Thermochemical properties of ideal gas of sodium^[24]

Enthalpy Reference Temperature = $T_f = 298.15$ K				Standard State Pressure = $p^\circ = 0.1$ MPa			
T/K	J K ⁻¹ mol ⁻¹			kJ mol ⁻¹			Log K_f
	C_p°	S°	$-[G^\circ - H^\circ(T_f)]/T$	$H^\circ - H^\circ(T_f)$	$\Delta_f H^\circ$	$\Delta_f G^\circ$	
0	0.						
100	20.788	130.960	172.147	-8.197	107.549	107.549	INFINITE
200	20.788	145.397	155.568	-2.040	107.911	86.877	-22.718
250	20.788	150.008	154.009	-1.001	107.920	81.778	-17.088
298.15	20.788	153.687	153.687	0.	107.300	76.825	-13.460
300	20.788	153.785	153.687	0.038	107.288	76.836	-13.344
350	20.788	157.000	153.920	1.078	106.873	71.560	-10.660
400	20.788	159.775	154.482	2.117	103.743	66.753	-8.717
450	20.788	162.223	155.209	3.156	103.220	62.161	-7.216
500	20.788	164.413	156.022	4.196	102.721	57.828	-6.020
600	20.788	168.203	157.746	6.274	101.783	48.697	-4.239
700	20.788	171.407	159.476	8.353	100.909	39.919	-2.979
800	20.788	174.183	161.144	10.431	100.079	31.263	-2.041
900	20.788	176.631	162.731	12.510	99.270	22.710	-1.318
1000	20.788	178.821	164.232	14.589	98.482	14.246	-0.744
1100	20.788	180.802	165.680	16.667	97.832	6.885	-0.278
1170.825	20.788	182.094	166.902	18.133			
1200	20.788	182.011	168.989	18.746			
1300	20.788	184.270	169.205	20.824			
1400	20.788	186.810	169.466	22.603			
1500	20.787	187.249	170.006	24.682			
1600	20.787	188.591	171.678	27.060			
1700	20.788	189.851	173.710	29.139			
1800	20.792	191.030	175.600	31.218			
1900	20.797	192.164	177.630	33.298			
2000	20.806	193.231	178.642	35.378			
2100	20.816	194.246	178.408	37.459			
2200	20.833	195.215	177.241	39.541			
2300	20.866	196.141	178.043	41.620			
2400	20.886	197.029	178.816	43.713			
2500	20.924	197.883	179.562	45.803			
2600	20.973	198.704	180.282	47.898			
2700	21.032	199.497	180.979	49.999			
2800	21.104	200.263	181.654	52.105			
2900	21.188	201.005	182.309	54.219			
3000	21.389	201.725	182.944	56.343			
3100	21.403	202.425	183.561	58.477			
3200	21.535	203.108	184.161	60.624			
3300	21.680	203.771	184.746	62.784			
3400	21.845	204.421	185.315	64.960			
3500	22.030	205.057	185.870	67.154			
3600	22.234	205.680	186.411	69.367			
3700	22.460	206.292	186.941	71.601			
3800	22.709	206.894	187.458	73.856			
3900	22.981	207.488	187.964	76.144			
4000	23.278	208.073	188.459	78.457			
4100	23.602	208.652	188.945	80.800			
4200	23.845	209.224	189.421	83.175			
4300	24.324	209.792	189.888	85.589			
4400	24.611	210.345	190.346	87.998			
4500	24.992	210.901	190.796	90.469			
4600	25.421	211.454	191.239	92.990			
4700	25.876	212.008	191.675	95.584			
4800	26.359	212.556	192.105	98.166			
4900	26.888	213.104	192.528	100.827			
5000	27.388	213.651	192.944	103.533			
5100	27.949	214.199	193.356	106.299			
5200	28.537	214.747	193.762	109.123			
5300	29.150	215.297	194.163	112.007			
5400	29.789	215.847	194.560	114.954			
5500	30.453	216.400	194.952	117.966			
5600	31.141	216.955	195.340	121.046			
5700	31.851	217.512	195.724	124.195			

FUGACITY = 1 bar

$\Delta_f H^\circ(0 \text{ K}) = 107.5 \pm 0.7 \text{ kJ mol}^{-1}$
 $\Delta_f H^\circ(298.15 \text{ K}) = 107.3 \pm 0.7 \text{ kJ mol}^{-1}$

$IP(\text{Na}, g) = 41449.44 \pm 0.03 \text{ cm}^{-1}$
 $S^\circ(298.15 \text{ K}) = 153.687 \pm 0.025 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

PREVIOUS: June 1962 (1 atm) CURRENT: December 1983 (1 bar)

Table. 3 Phase of chemical species

#	Model	N ₂	O ₂	H ₂ O	H ₂	Na	NaOH	Na ₂ O	Na ₂ O ₂	NaH
1	Gas reaction model	G	G	G	G	G	G	G	G	G
2	Aerosol and gas reaction model	G	G	G	G	G	<u>C</u>	<u>C</u>	<u>C</u>	<u>C</u>

G : Gas species, C : Condensation species

Table. 4 Functions for prediction of transport properties of gases at low densities^[27]

$\kappa T/\epsilon$ or $\kappa T/\epsilon_{AB}$	$\Omega_{\mu} = \Omega_{\kappa}$ (For viscosity and thermal conductivity)	$\Omega_{\varphi, AB}$ (For mass diffusivity)	$\kappa T/\epsilon$ or $\kappa T/\epsilon_{AB}$	$\Omega_{\mu} = \Omega_{\kappa}$ (For viscosity and thermal conductivity)	$\Omega_{\varphi, AB}$ (For mass diffusivity)
0.30	2.785	2.662	2.50	1.093	0.9996
0.35	2.628	2.476	2.60	1.081	0.9878
0.40	2.492	2.318	2.70	1.069	0.9770
0.45	2.368	2.184	2.80	1.058	0.9672
0.50	2.257	2.066	2.90	1.048	0.9576
0.55	2.156	1.966	3.00	1.039	0.9490
0.60	2.065	1.877	3.10	1.030	0.9406
0.65	1.982	1.798	3.20	1.022	0.9328
0.70	1.908	1.729	3.30	1.014	0.9256
0.75	1.841	1.667	3.40	1.007	0.9186
0.80	1.780	1.612	3.50	0.9999	0.9120
0.85	1.725	1.562	3.60	0.9932	0.9058
0.90	1.675	1.517	3.70	0.9870	0.8998
0.95	1.629	1.476	3.80	0.9811	0.8942
1.00	1.587	1.439	3.90	0.9755	0.8888
1.05	1.549	1.406	4.00	0.9700	0.8836
1.10	1.514	1.375	4.10	0.9649	0.8788
1.15	1.482	1.346	4.20	0.9600	0.8740
1.20	1.452	1.320	4.30	0.9553	0.8694
1.25	1.424	1.296	4.40	0.9507	0.8652
1.30	1.399	1.273	4.50	0.9464	0.8610
1.35	1.375	1.253	4.60	0.9422	0.8568
1.40	1.353	1.233	4.70	0.9382	0.8530
1.45	1.333	1.215	4.80	0.9343	0.8492
1.50	1.314	1.198	4.90	0.9305	0.8456
1.55	1.296	1.182	5.0	0.9269	0.8422
1.60	1.279	1.167	6.0	0.8963	0.8124
1.65	1.264	1.153	7.0	0.8727	0.7896
1.70	1.248	1.140	8.0	0.8538	0.7712
1.75	1.234	1.128	9.0	0.8379	0.7556
1.80	1.221	1.116	10.0	0.8242	0.7424
1.85	1.209	1.105	20.0	0.7432	0.6640
1.90	1.197	1.094	30.0	0.7005	0.6232
1.95	1.186	1.084	40.0	0.6718	0.5960
2.00	1.175	1.075	50.0	0.6504	0.5756
2.10	1.156	1.057	60.0	0.6335	0.5596
2.20	1.138	1.041	70.0	0.6194	0.5464
2.30	1.122	1.026	80.0	0.6076	0.5352
2.40	1.107	1.012	90.0	0.5973	0.5256
			100.0	0.5882	0.5170

Table.5 Analytical conditions of droplet combustion simulation

Sodium liquid droplet		Ambient condition		
Initial diameter (m)	6.09x10 ⁻³	Pressure (Pa)	1.01325x10 ⁵	
Initial Temperature (°C)	881	Temperature (°C)	300	
Fall Velocity (m/s)	5.764(const.)	Density (kg/m ³)	0.5925	
		Composition		
		Species	wt%	vol%
		N ₂	26.06	23.59
		O ₂	1.31	2.10
		H ₂ O	71.83	74.31

Table.6 Calculation conditions of droplet combustion simulation

Measurement		Space lattice	
Width (x)(m)	2.00x10 ⁻²	x (m)	1.00x10 ⁻³
Depth (y)(m)	2.00x10 ⁻²	y(m)	1.00x10 ⁻³
Height (z)(m)	4.00x10 ⁻²	z (m)	1.00x10 ⁻³
Droplet location		Time-sharing	
x (m)	1.00x10 ⁻²	Δt (s)	1.00x10 ⁻⁴
y (m)	1.00x10 ⁻²		
z (m)	1.33x10 ⁻²		

Table.7 Input parameters for droplet combustion simulation

Lennard-Jones potential parameters					
Species	ε (K)	σ (x10 ⁻¹⁰ m)	Species	ε (K)	σ (x10 ⁻¹⁰ m)
O ₂	106.7 ^[28]	3.467 ^[28]	Na	712.28*	1.192*
H ₂ O	775 ^[28]	2.52 ^[28]	NaOH	1144.32*	1.572*
H ₂	59.7 ^[28]	2.827 ^[28]	Na ₂ O	2697.98*	1.606*
N ₂	71.4 ^[28]	3.798 ^[28]	Na ₂ O ₂	1820.16*	1.682*
Gas parameters					
Universal gas constant			Ratio of specific heat		
R (kg m ² / s ² kg-mole K)		8.314x10 ³	γ		1.40

* Estimated properties

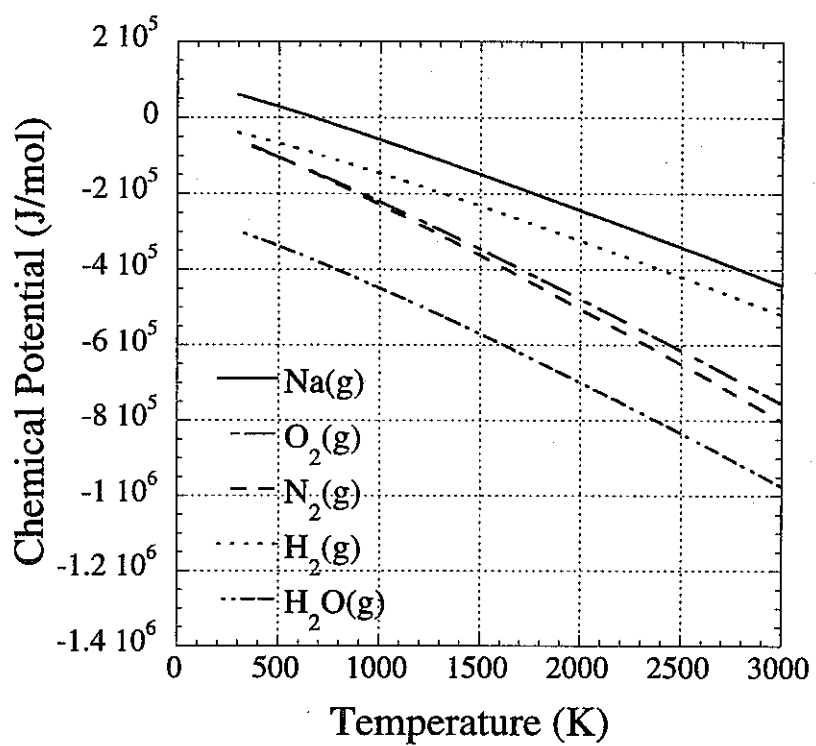


Fig. 1 Chemical potentials of gas phase species

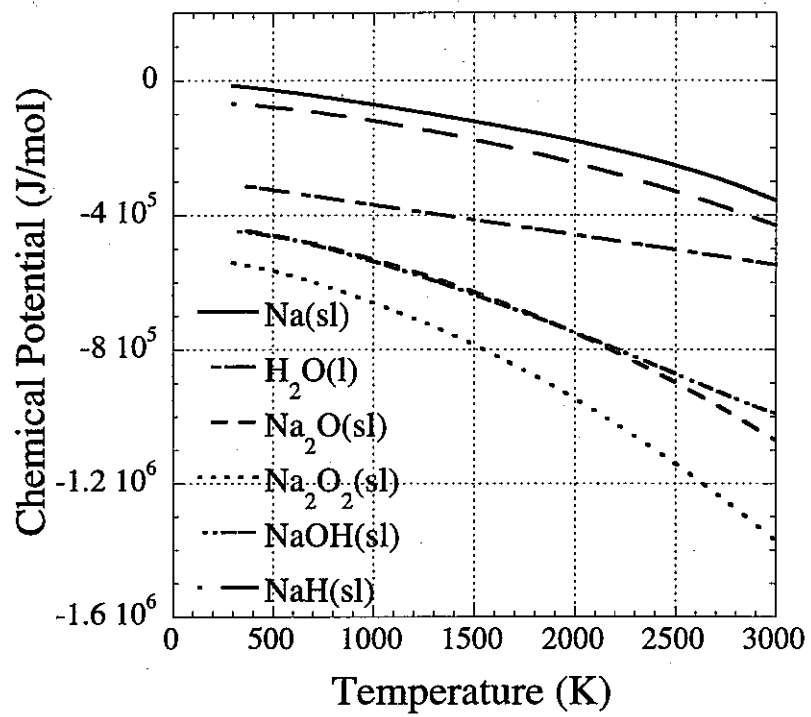


Fig. 2 Chemical potentials of condensed phase species

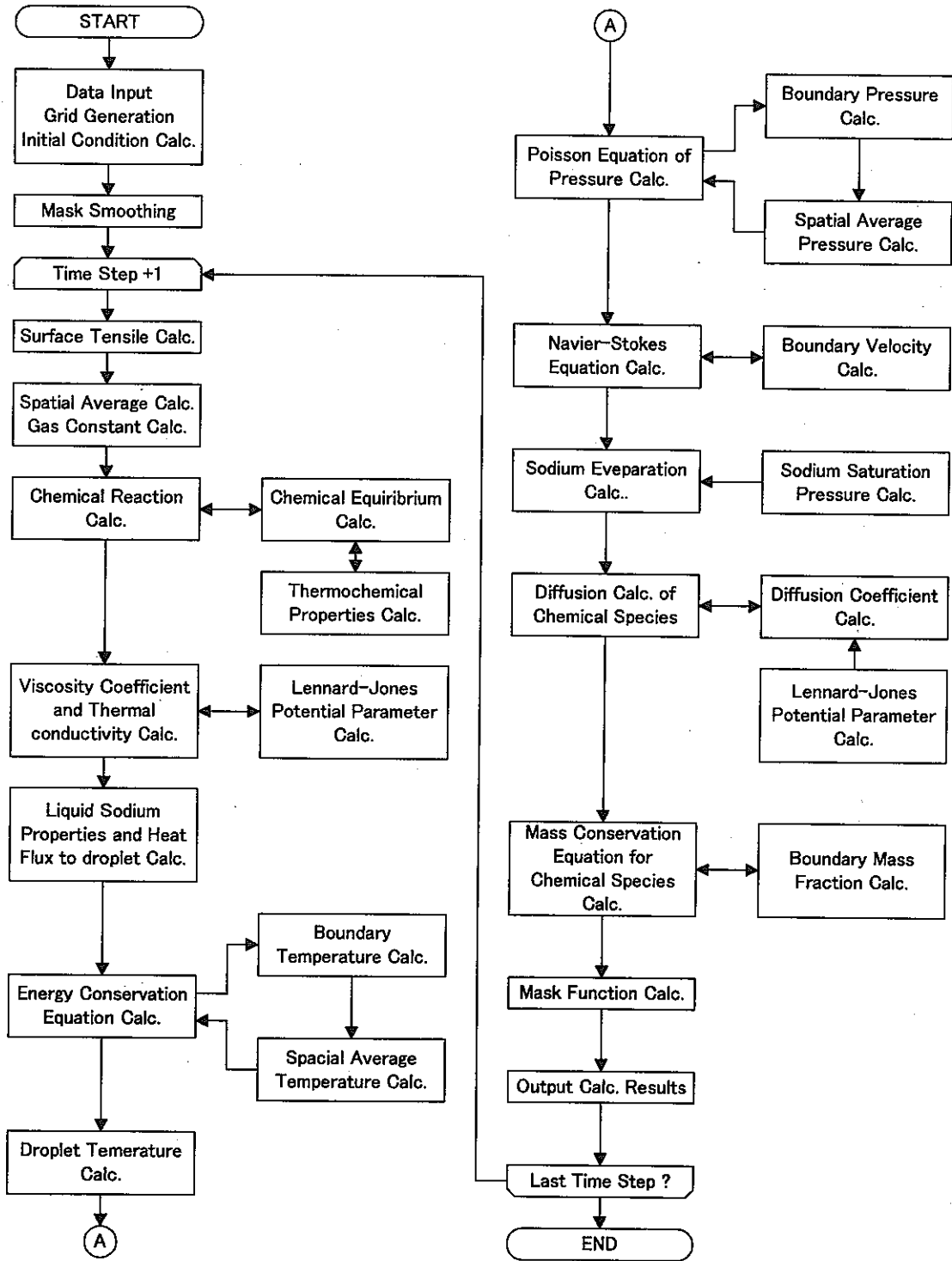


Fig. 3 Calculation algorithm

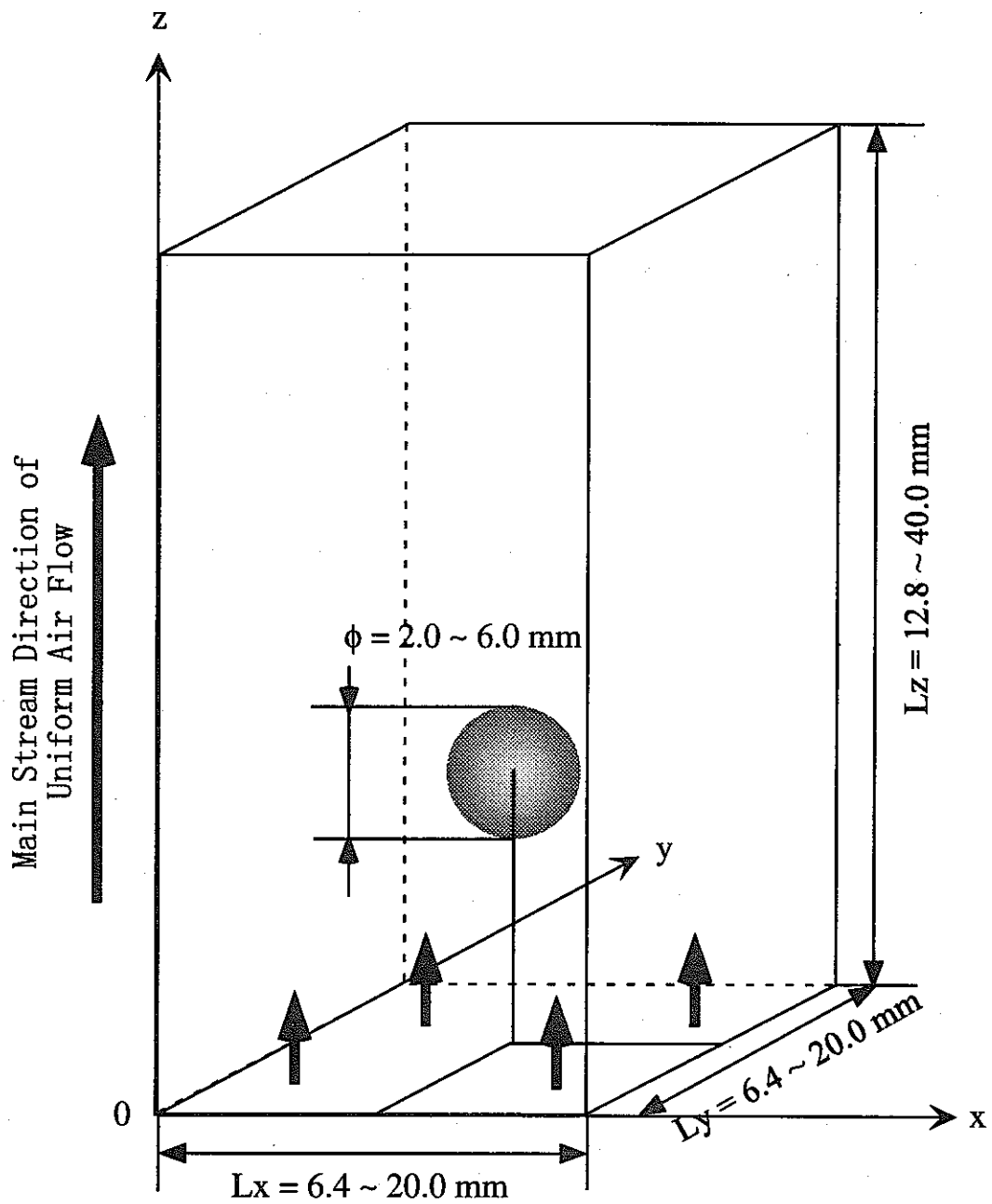


Fig.4 Calculation model for simulation of liquid sodium droplet combustion in forced convection air flow

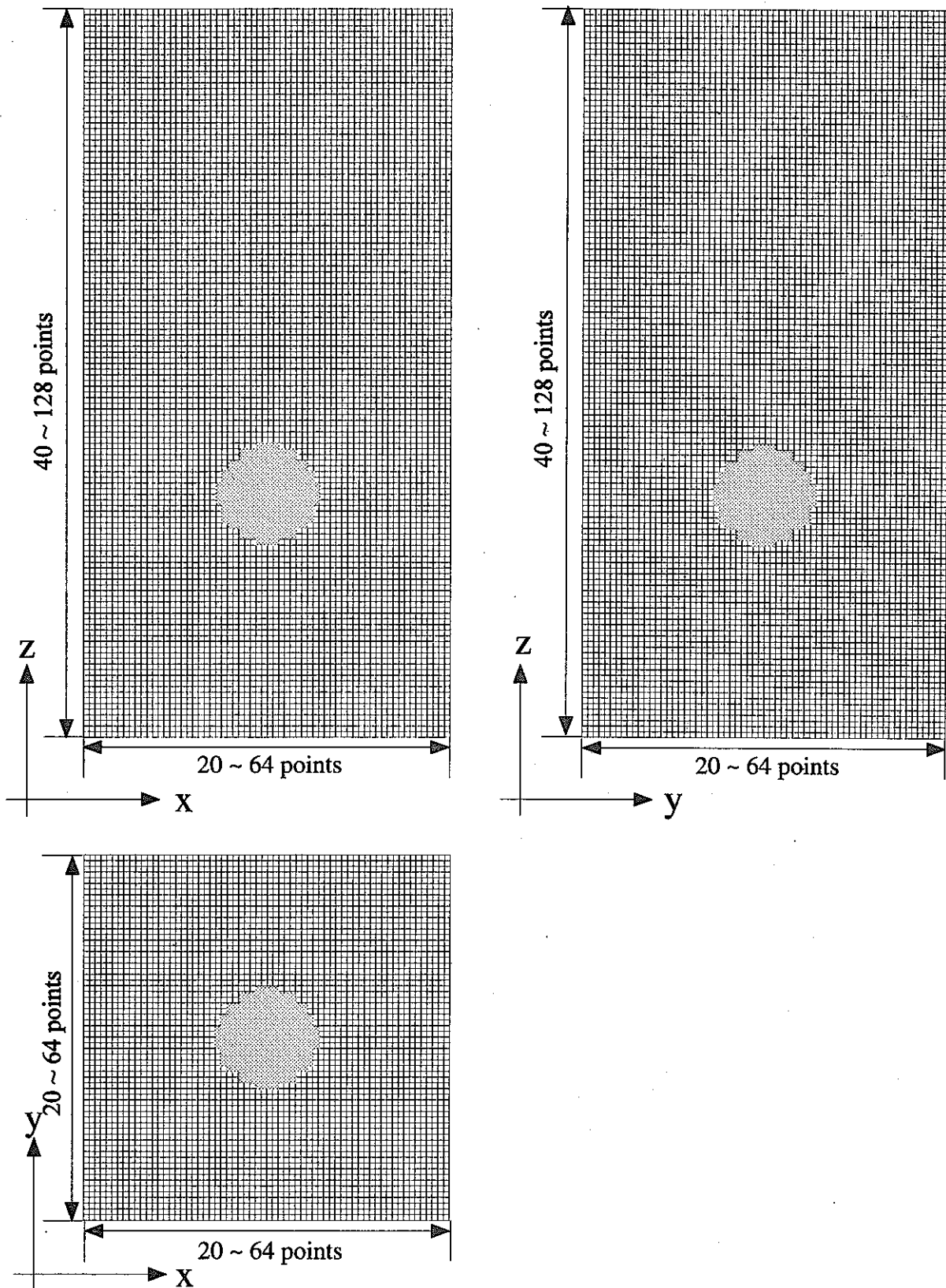


Fig.5 Grid system for simulation of liquid sodium droplet combustion in forced convection air flow

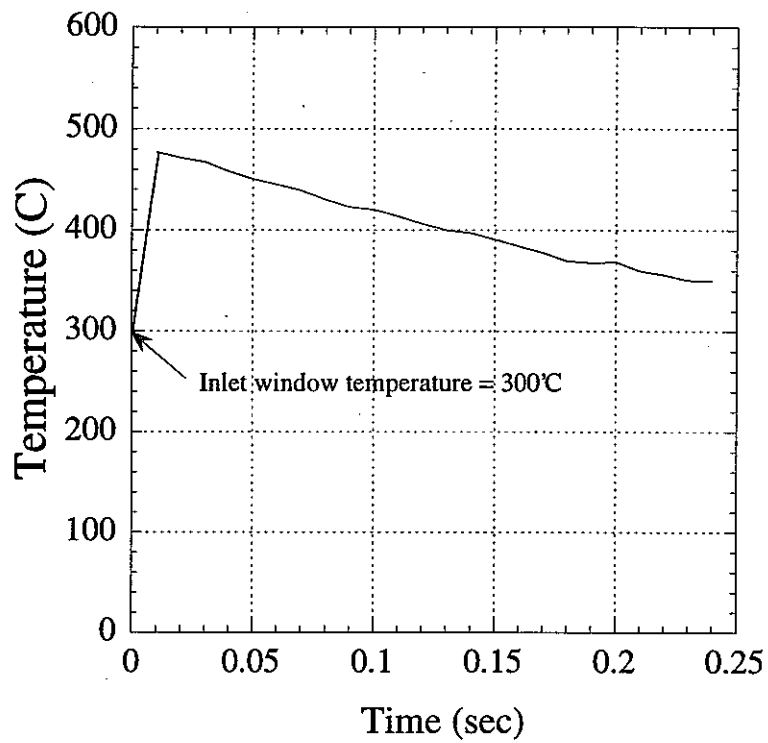


Fig. 6 Space-averaged ambient temperature change with time

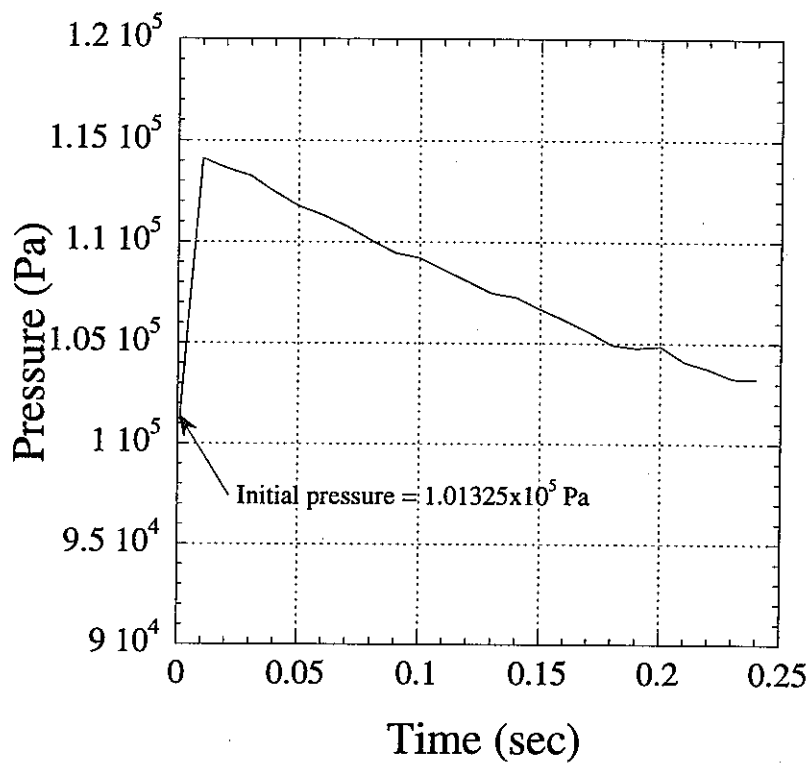


Fig. 7 Space-averaged ambient pressure change with time

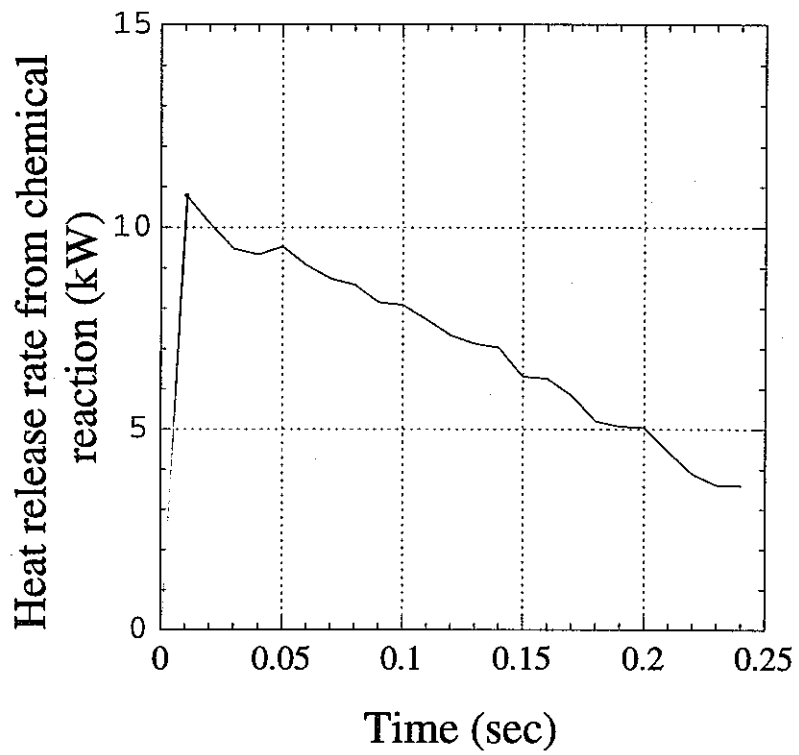


Fig. 8 Heat generation rate change with time of liquid sodium droplet

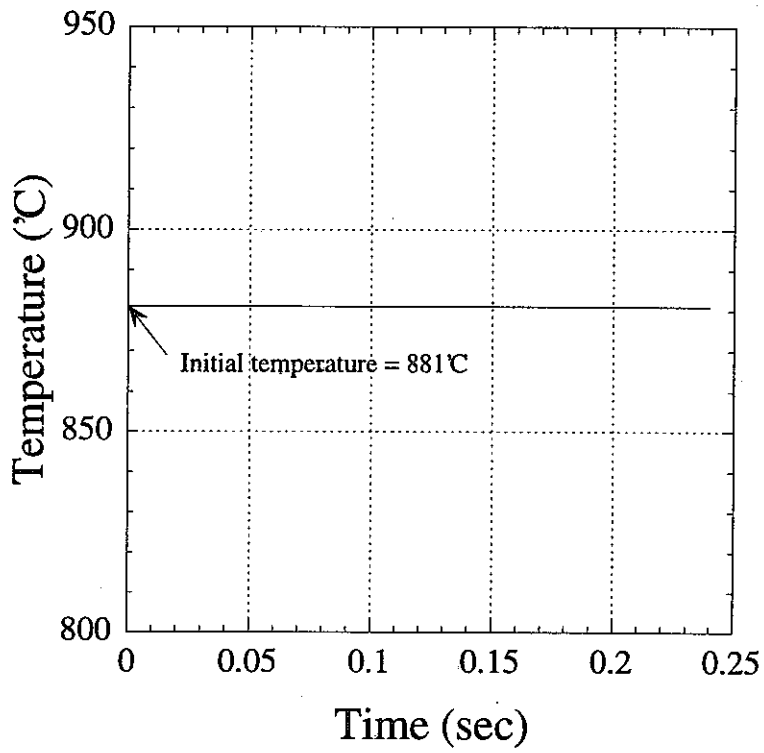


Fig. 9 Temperature change with time of liquid sodium Droplet

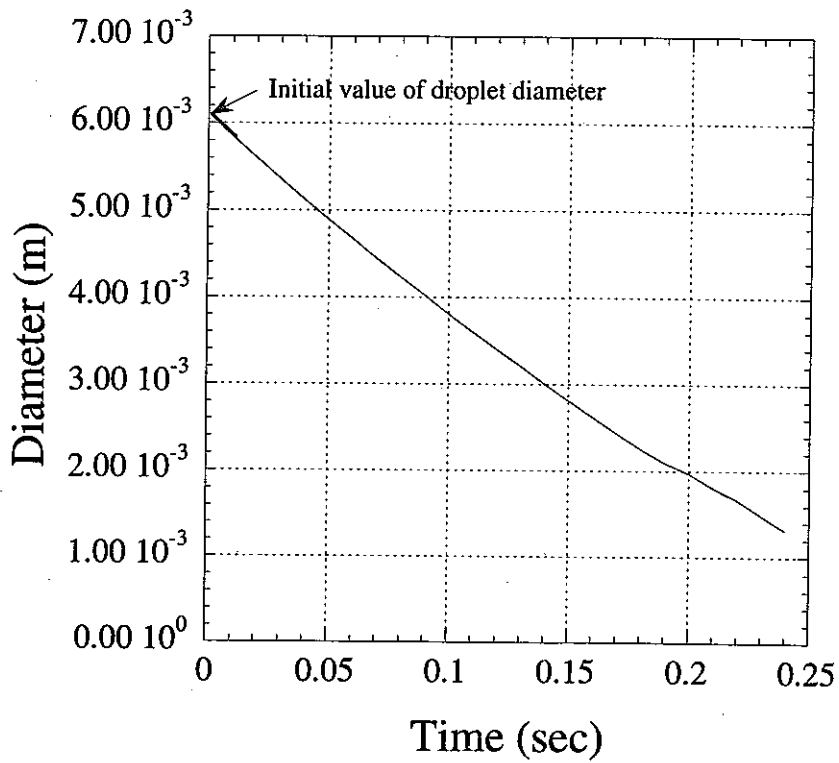


Fig. 10 Diameter change with time of liquid sodium droplet

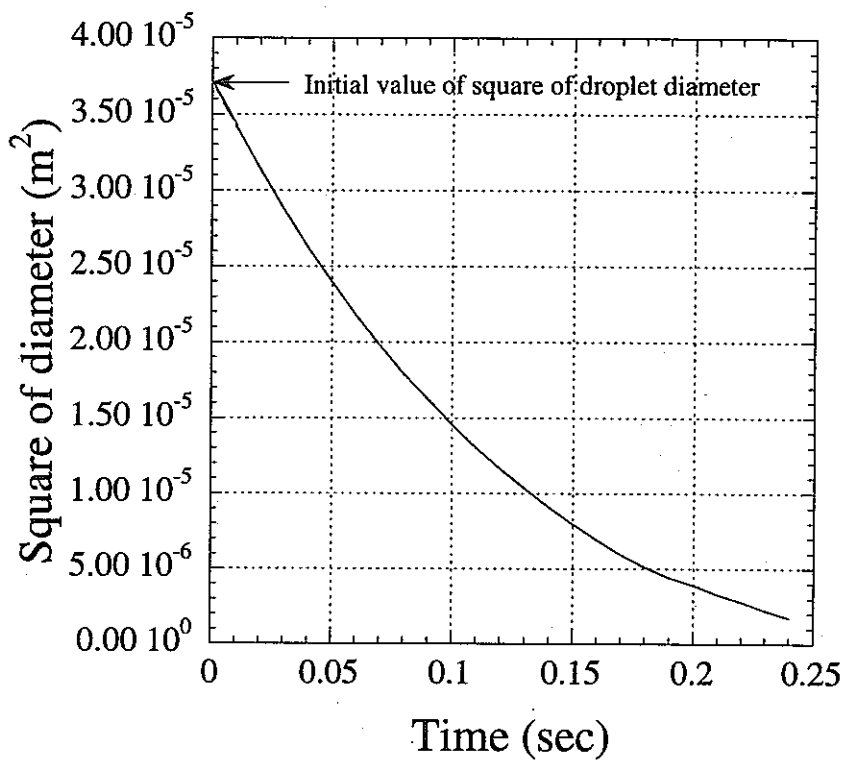
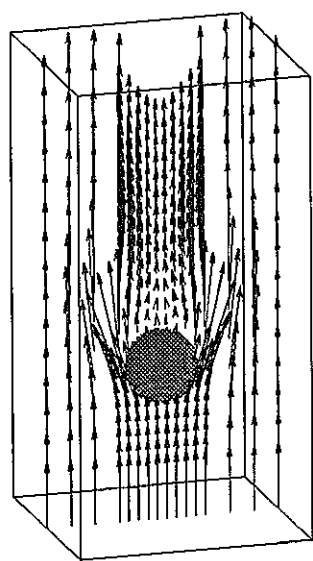
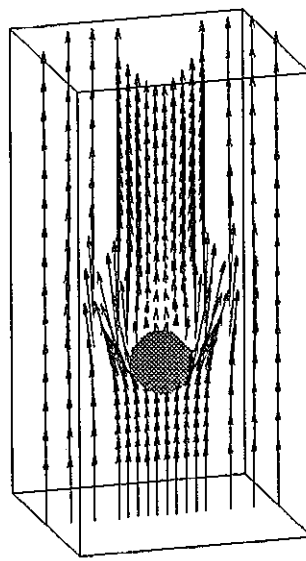


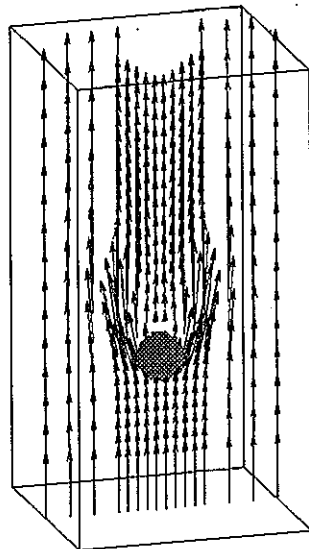
Fig. 11 Square of diameter change with time of liquid sodium droplet



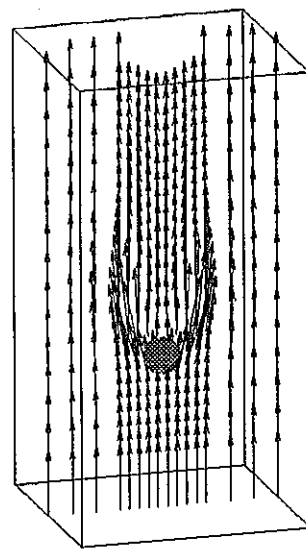
(a) $T = 0.01$ sec



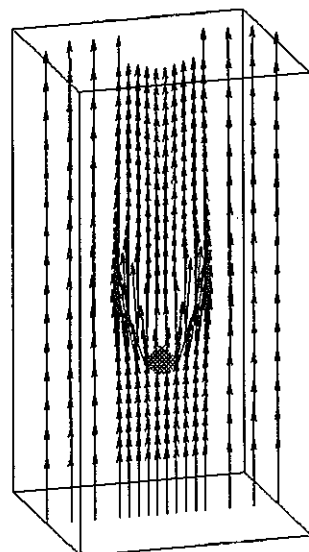
(b) $T = 0.05$ sec



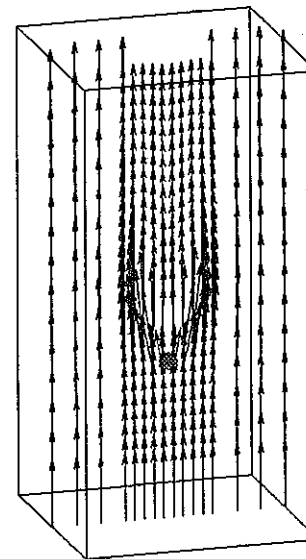
(c) $T = 0.10$ sec



(d) $T = 0.15$ sec



(e) $T = 0.20$ sec



(f) $T = 0.24$ sec

↑ 5.0 m/s

Fig.12 Velocity vectors in x-z plane

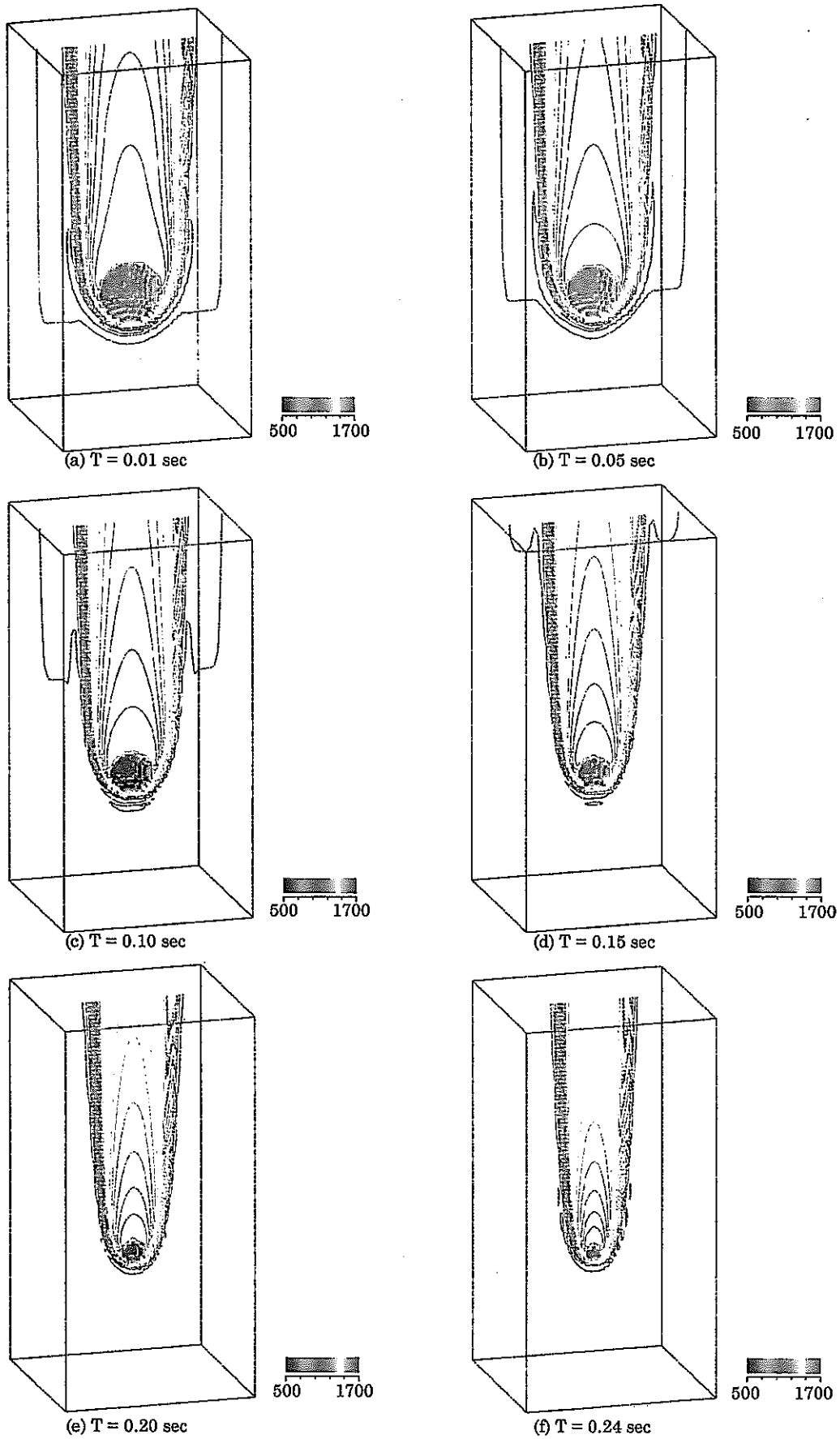


Fig.13 Contour lines of temperatures in x-z plane (Unit in K)

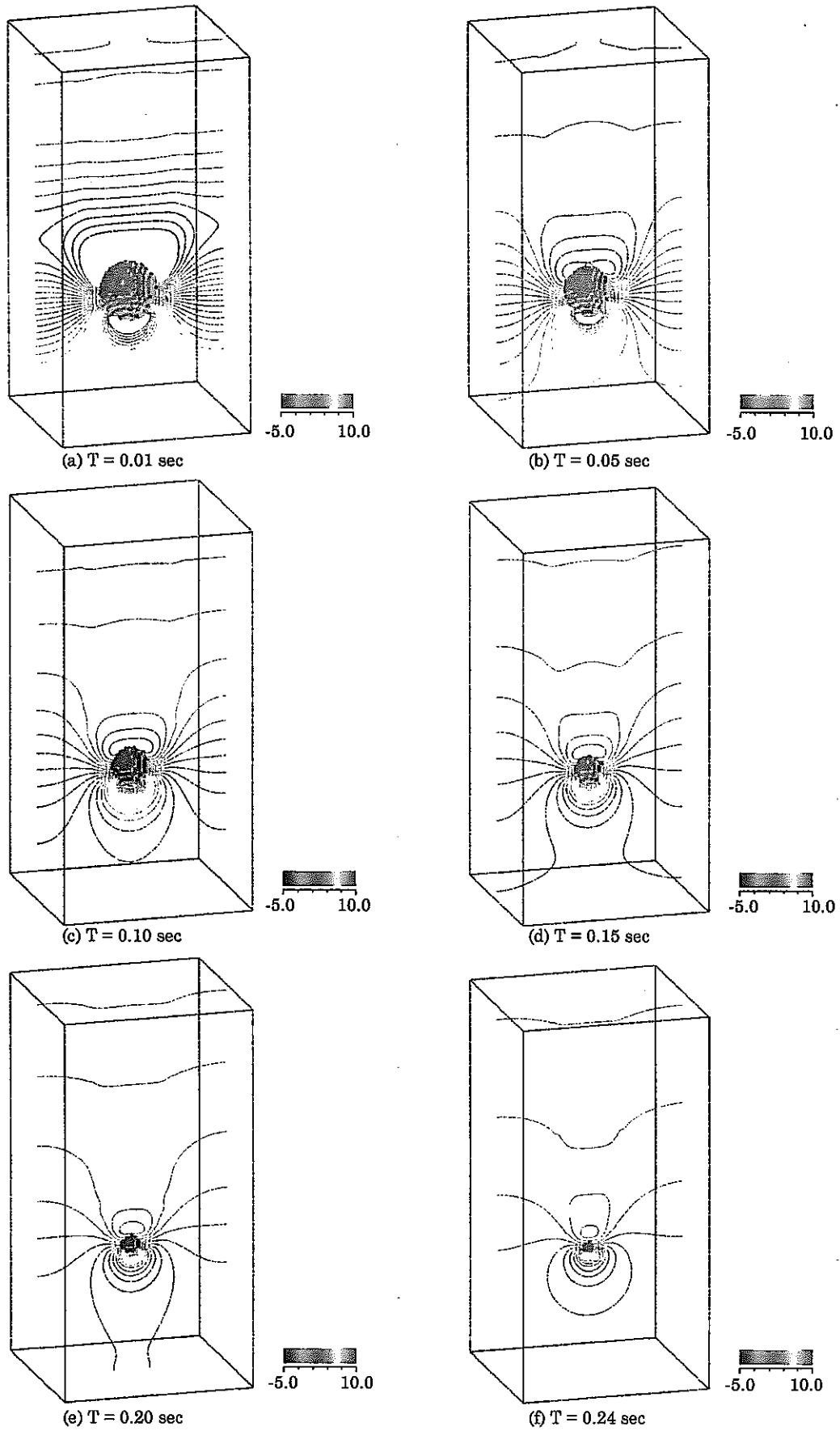


Fig.14 Contour lines of spatial pressure variation in x-z plane (Unit in Pa)

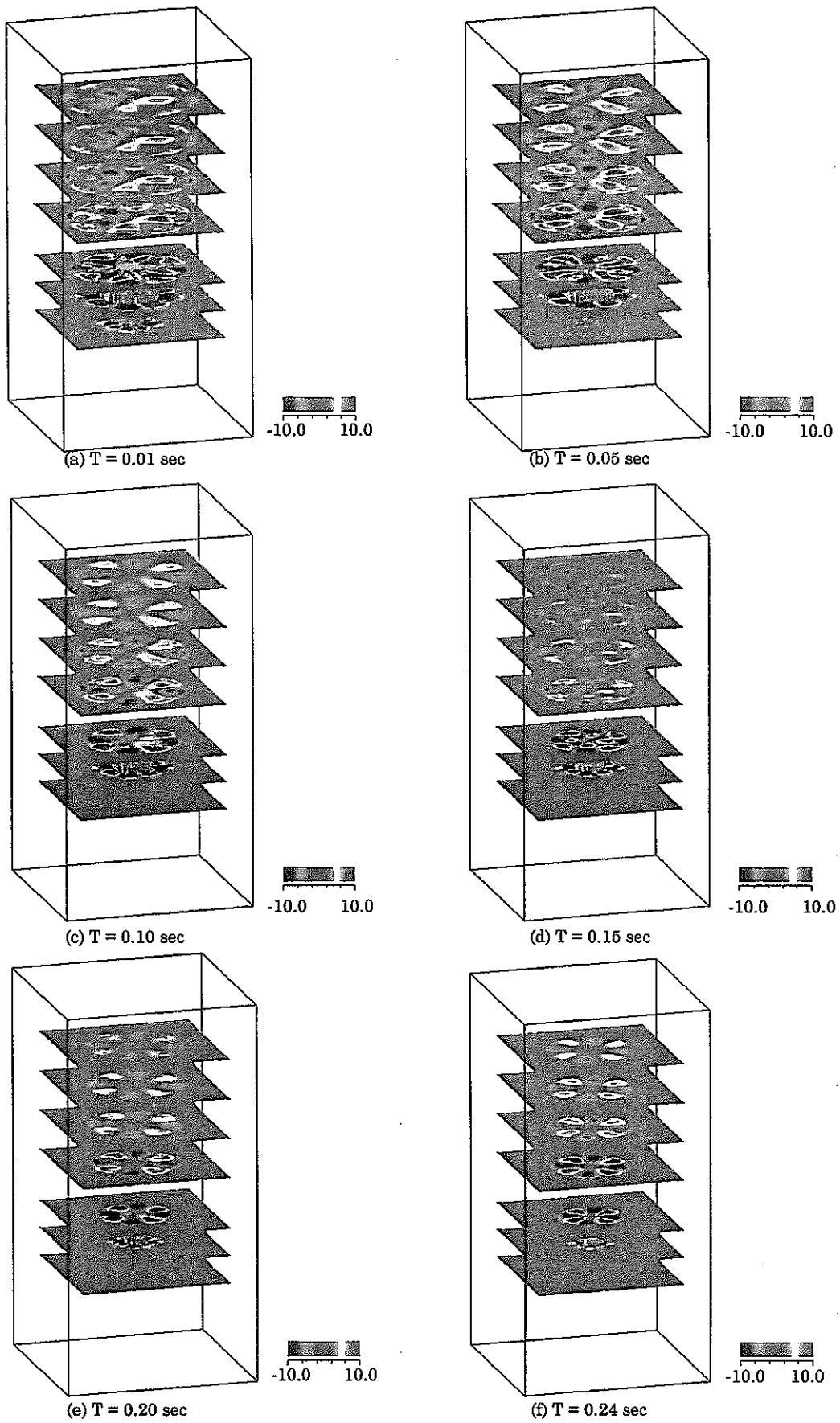


Fig. 15 Z-direction component of vorticity vector in x-y planes (Unit in sec^{-1})

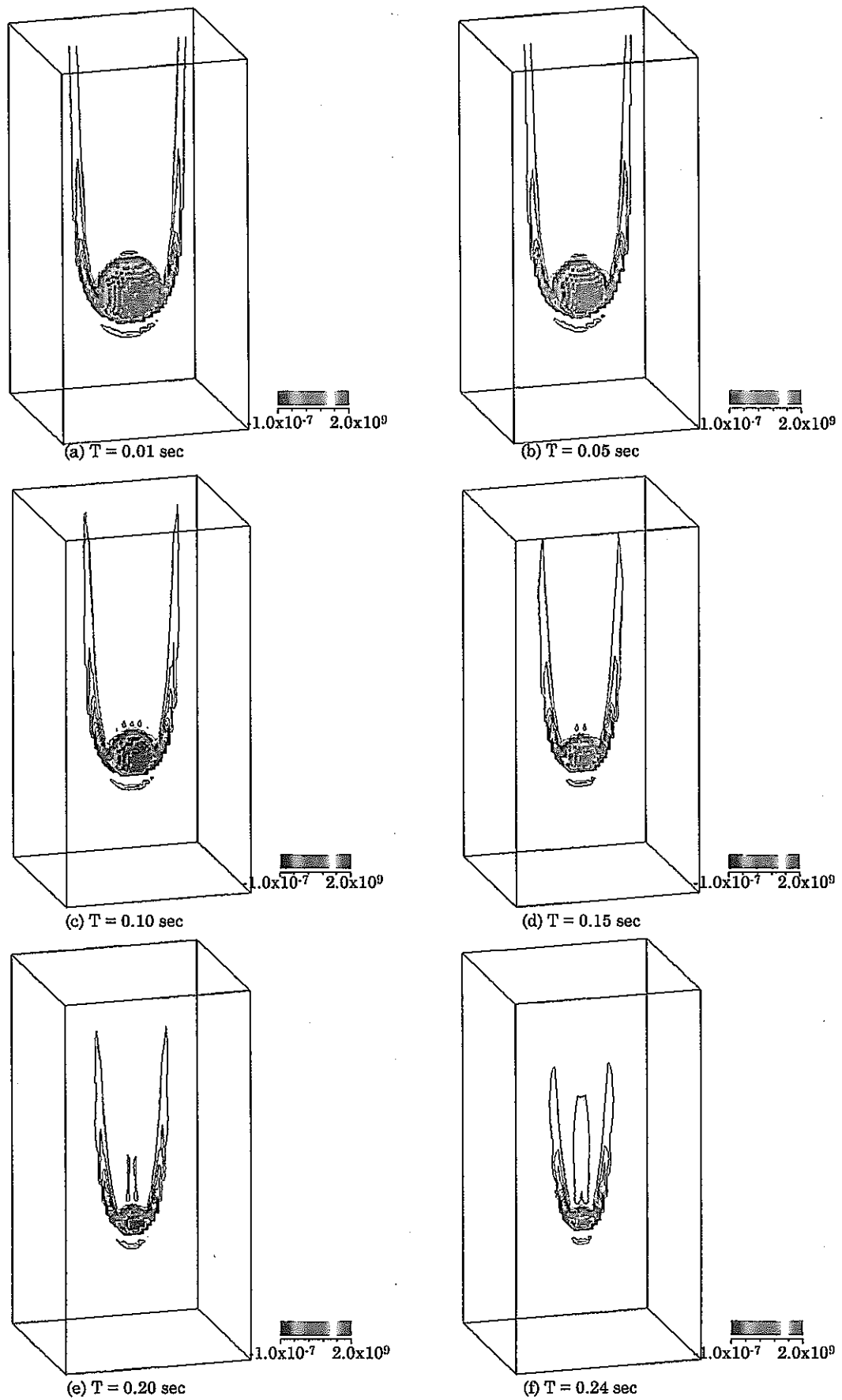


Fig.16 Contour lines of heat release rate of chemical reaction in x-z plane (Unit in W)

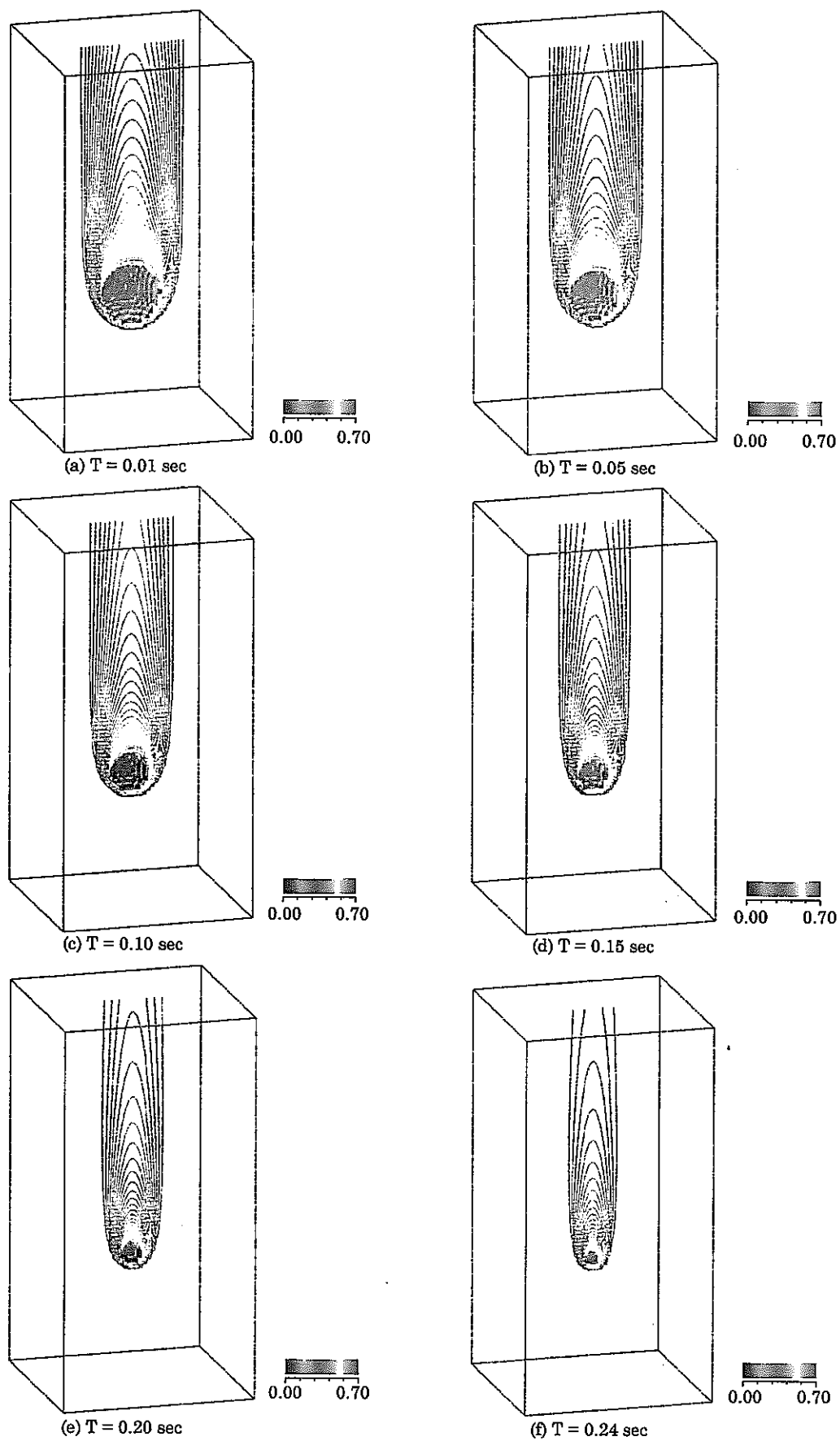


Fig.17 Contour lines of mass fraction ratio of sodium (Na) in x-z plane

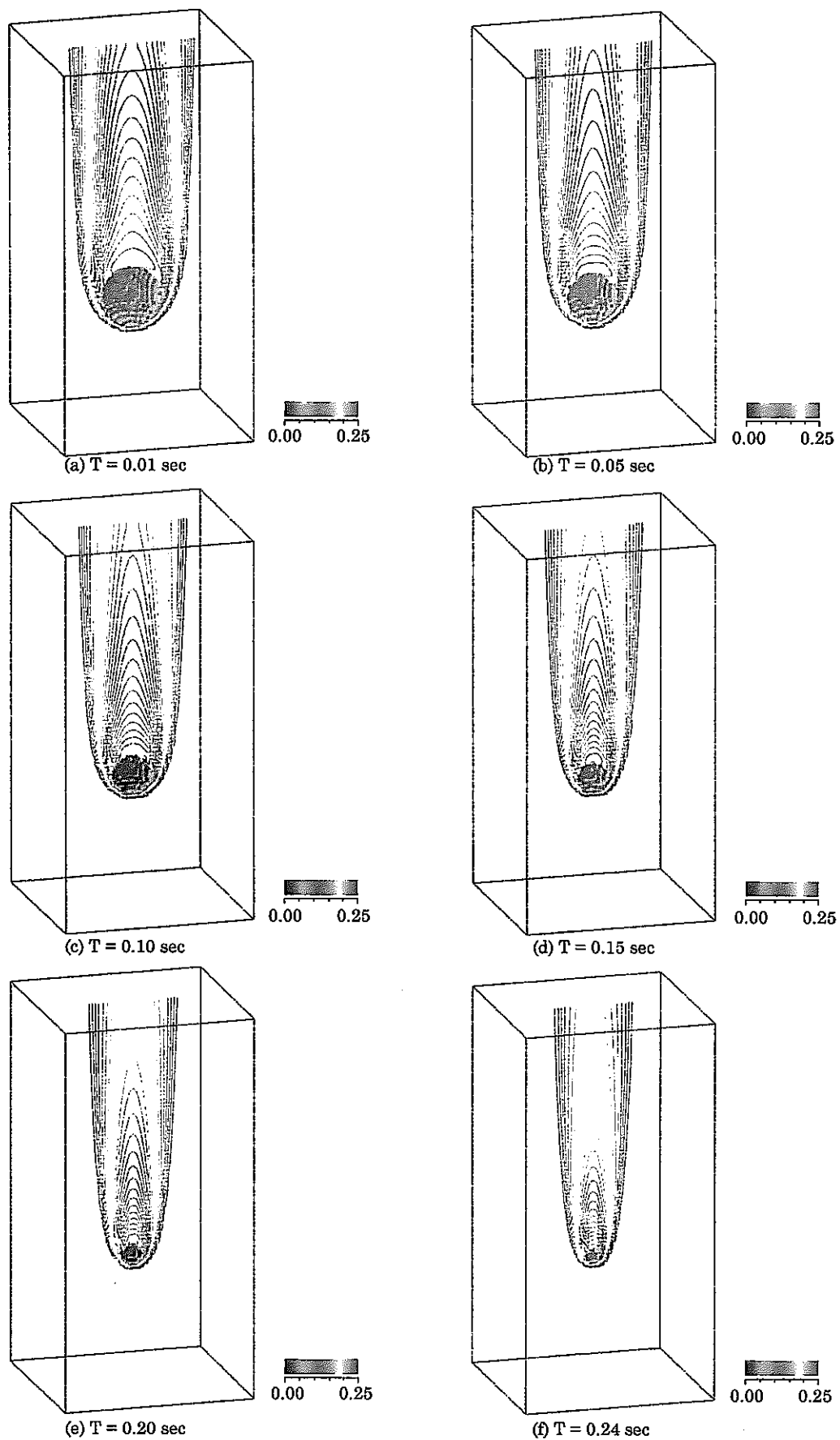


Fig.18 Contour lines of mass fraction ratio of oxygen (O_2) in x-z plane

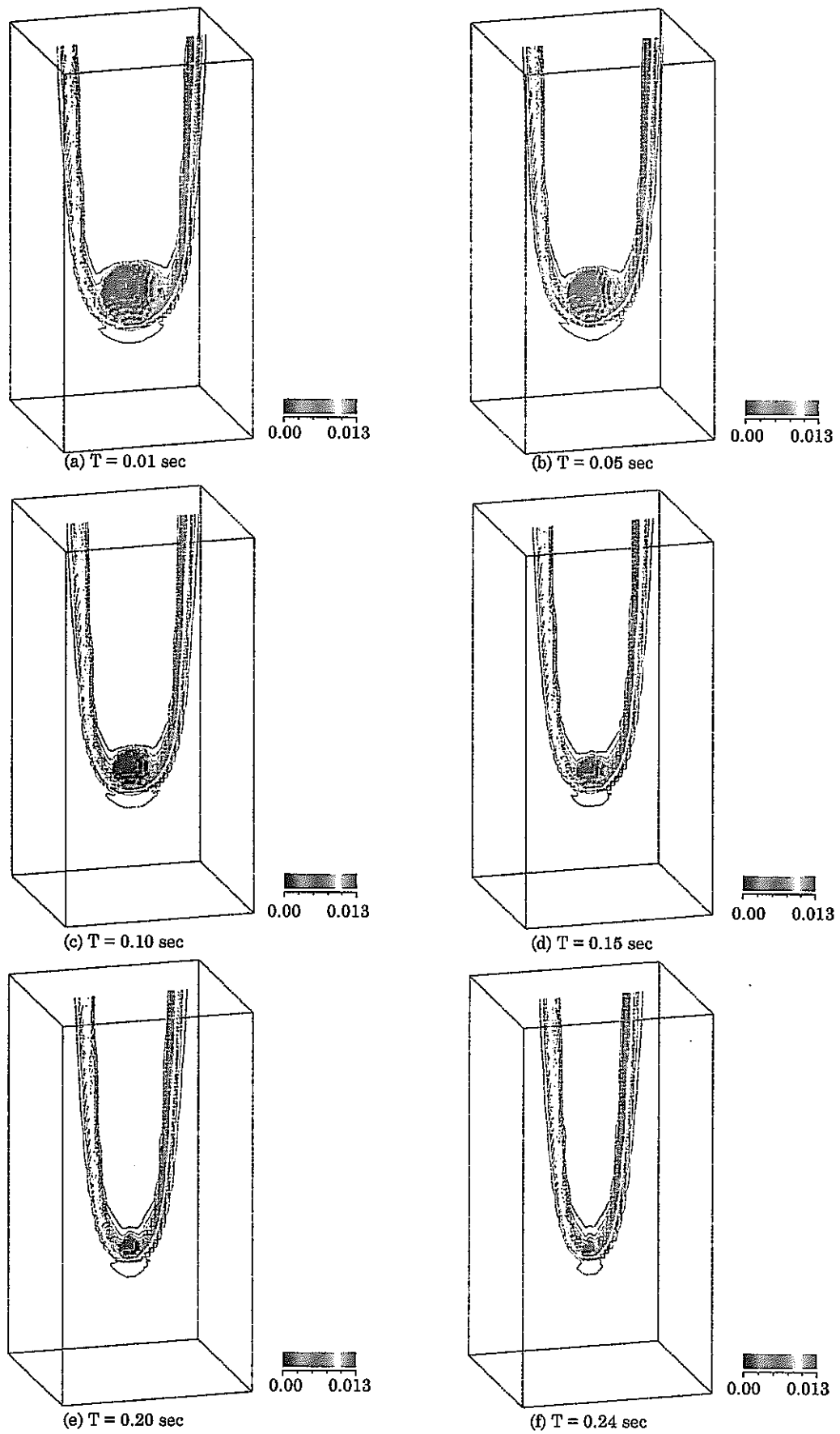


Fig.19 Contour lines of mass fraction ratio of water (H_2O) in x-z plane

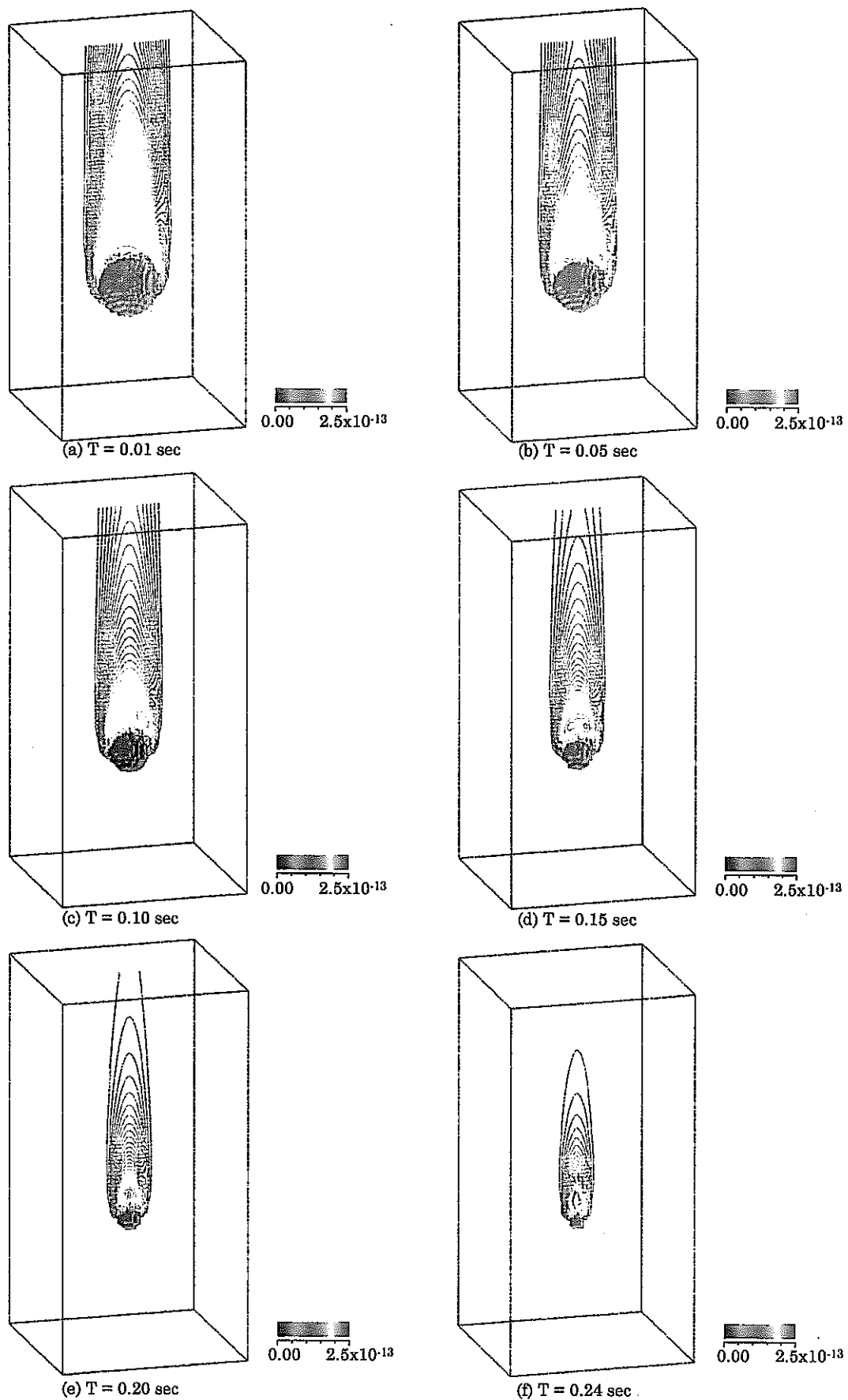


Fig.20 Contour lines of mass fraction ratio of hydrogen (H_2) in x-z plane

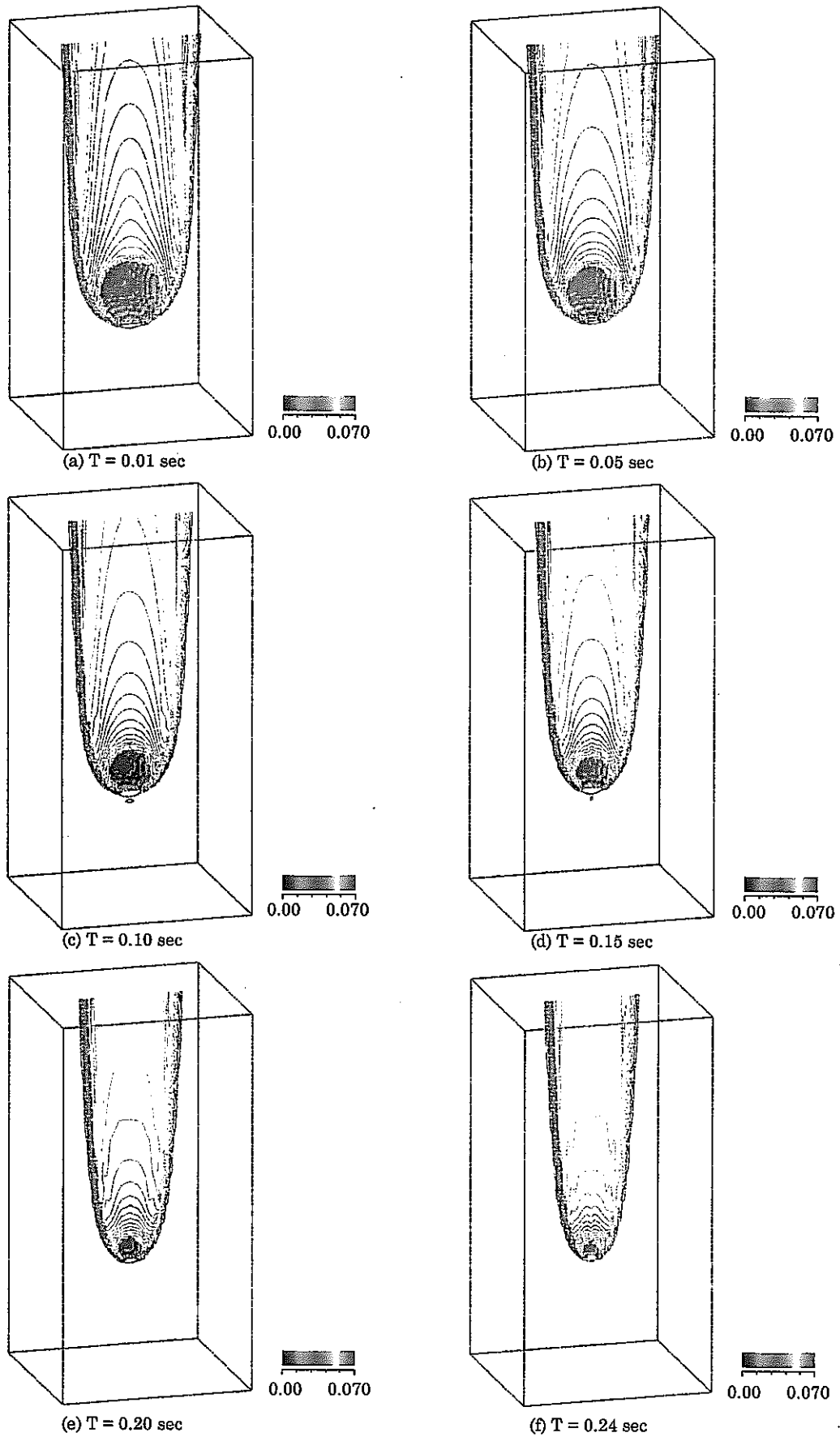


Fig.21 Contour lines of mass fraction ratio of sodium hydroxide (NaOH) in x-z plane

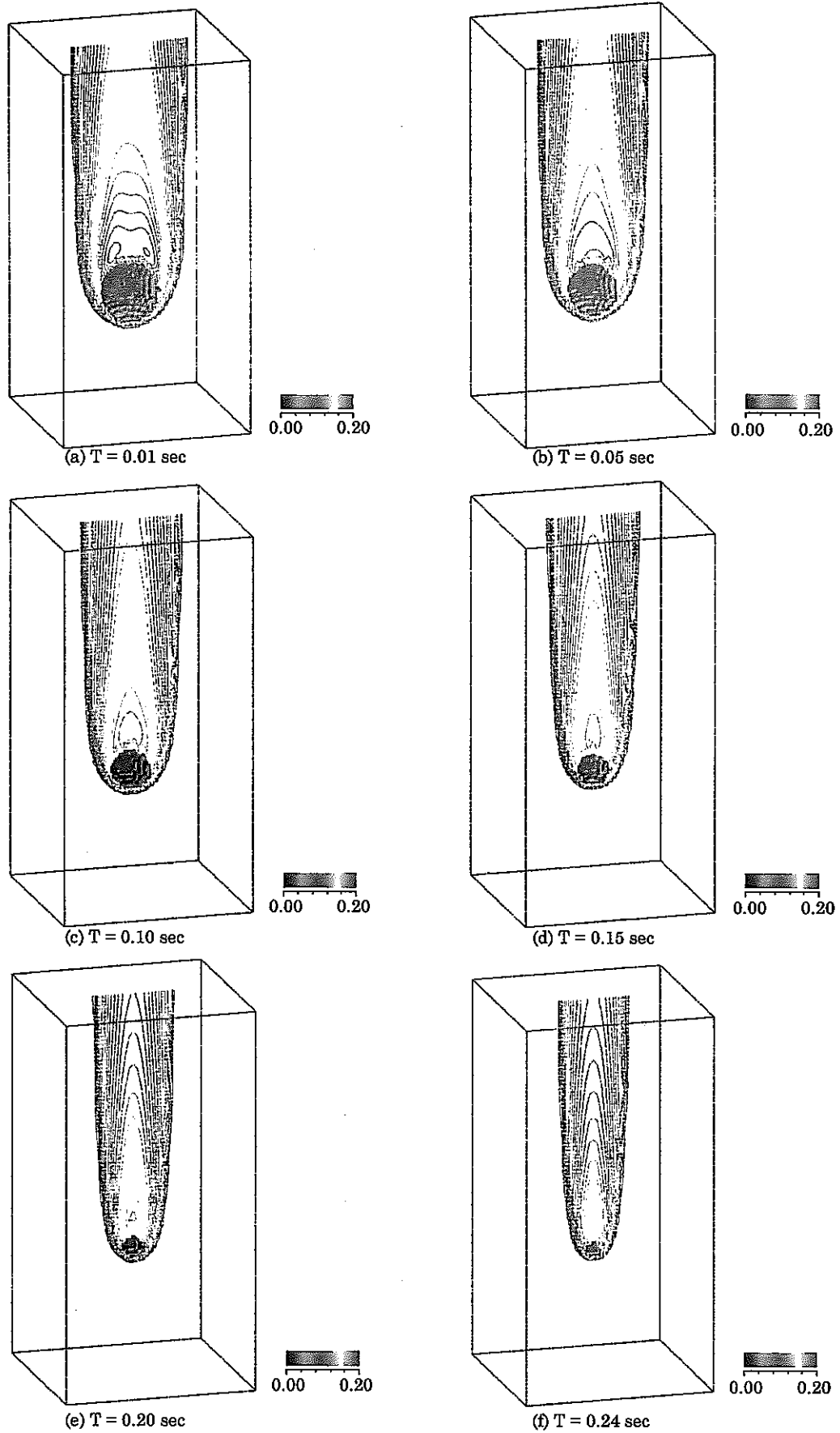


Fig.22 Contour lines of mass fraction ratio of sodium oxide (Na_2O) in x-z plane

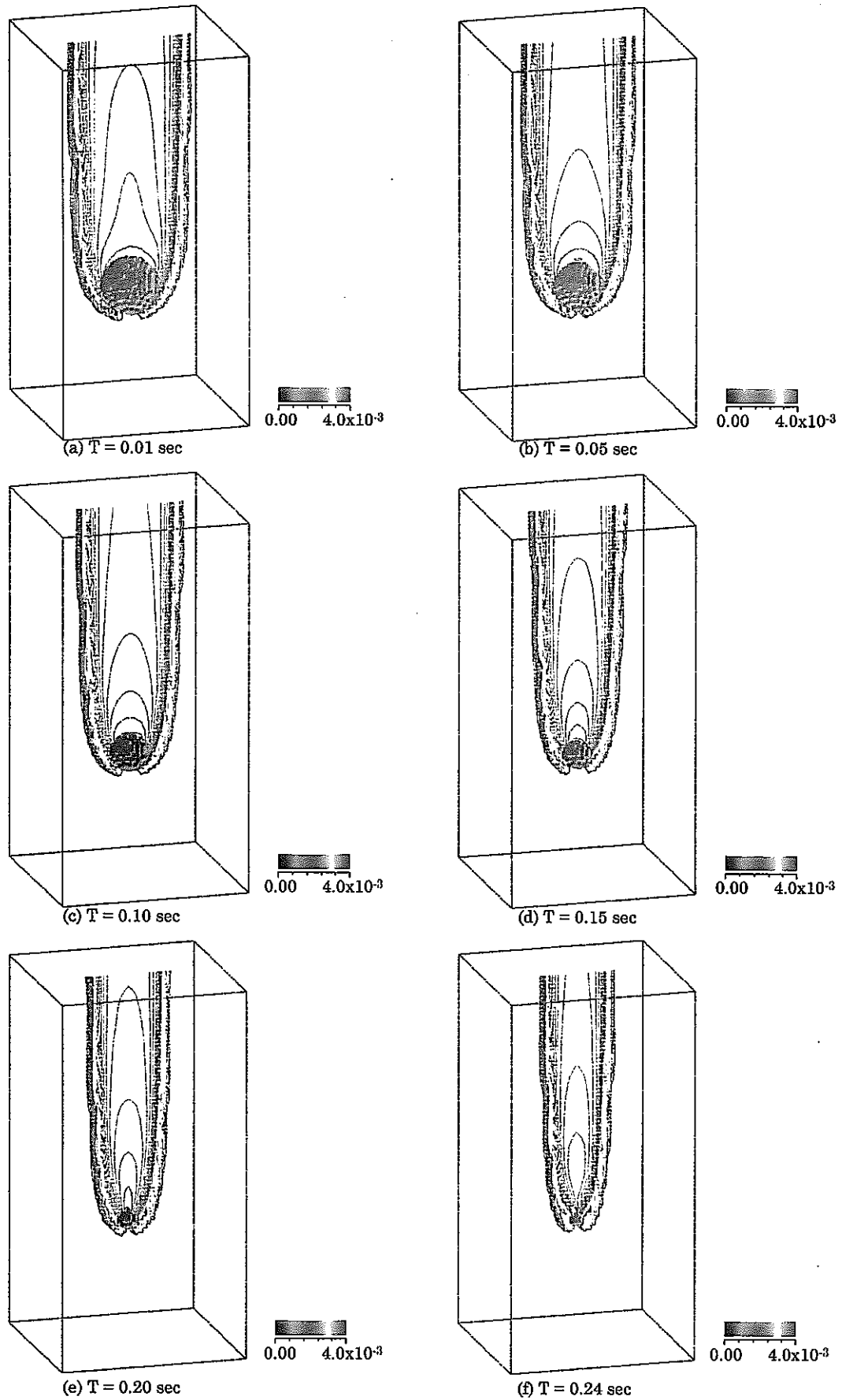


Fig.23 Contour lines of mass fraction ratio of disodium peroxide (Na_2O_2) in x-z plane

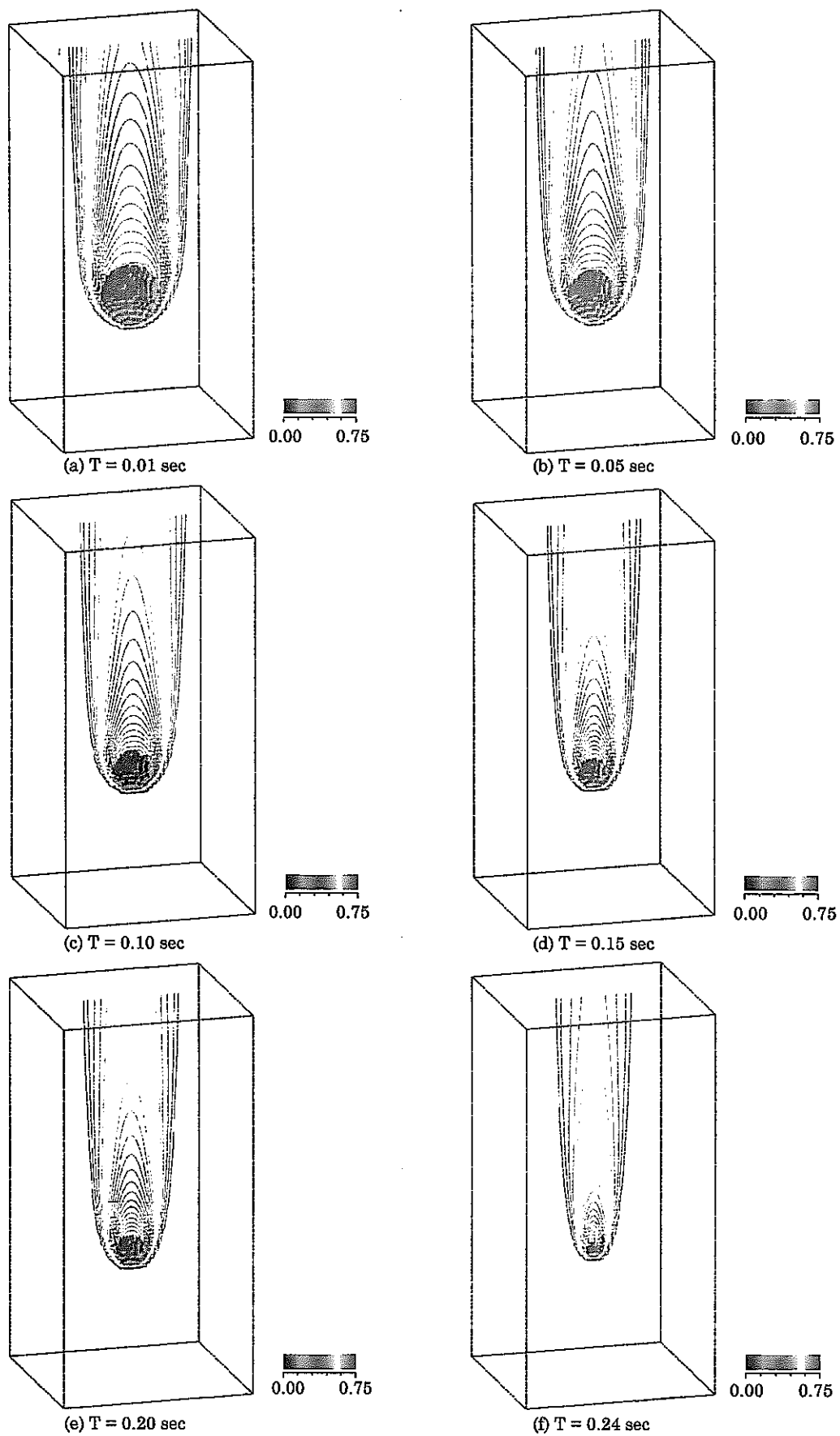


Fig.24 Contour lines of mass fraction ratio of nitrogen (N_2) in x-z plane