

Navier-Stokes-Forchheimer 方程式における 反応性流体有限要素解析

Reactive Fluid Finite Element Analysis in the Navier-Stokes-Forchheimer Equations

松本純一¹⁾澤田有弘²⁾

Junichi Matsumoto and Tomohiro Sawada

¹⁾博(工) 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 材料・化学領域 CD-FMat 研究チーム長
(〒 305-8568 つくば市梅園 1-1-1 中央第 2, E-mail: matsumoto-junichi@aist.go.jp)

²⁾博(科) 国立研究開発法人 産業技術総合研究所 材料・化学領域 CD-FMat 研究チーム長
(〒 305-8568 つくば市梅園 1-1-1 中央第 2, E-mail: tomohiro-sawada@aist.go.jp)

In this paper, orthogonal basis bubble function element stabilization method is proposed for reactive fluid with Brinkman-Forchheimer model. An implicit finite element method is used in time discretization. 3D reactive fluid analysis in a cylindrical, centrally porous reactor is shown.

Key Words : Reactive Fluid, Orthogonal Basis Bubble Function Element, Navier-Stokes-Forchheimer Equations, Darcy-Brinkman Equations, Compressible Viscous Flow, Implicit Finite Element Method

1. はじめに

直交基底気泡関数要素安定化法を用いた Navier-Stokes-Forchheimer 方程式における化学反応を考慮した陰的有限要素法について説明する。本研究では、円筒形状の中央に多孔質部がある反応器内の 3 次元反応性流体解析を示す。

2. 基礎方程式

化学反応を考慮し、多孔質体内の流れに Brinkman-Forchheimer モデルを用いた圧縮性粘性流体の基礎方程式は、混合気体の密度 ρ , 流速 \mathbf{u} , 圧力 p , 温度 T , 化学種の質量分率 Y_i ($i = 1 \cdots N$) を未知量として以下のように表される [1,2]。

連続方程式

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{\epsilon} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

運動方程式

$$\rho \left(\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{1}{\epsilon^2} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) + \nabla \cdot \mathbf{P} = \rho \sum_{i=1}^N (Y_i \mathbf{f}_i) - \frac{\mu}{K} \mathbf{u} - \frac{c_F \rho}{\sqrt{K}} |\mathbf{u}| \mathbf{u} \quad (2)$$

エネルギー方程式

$$\rho c_v \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{\epsilon} \mathbf{u} \cdot \nabla T \right) - \nabla \cdot (\lambda \nabla T) = T \sum_{i=1}^N (R_i w_i) - \sum_{i=1}^N h_i w_i - T \sum_{i=1}^N \{ R_i \nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{V}_i) \} - \sum_{i=1}^N (\rho Y_i \mathbf{V}_i) \cdot (C_{pi} \nabla T) - \frac{1}{\epsilon} \mathbf{P} : (\nabla \mathbf{u}) \quad (3)$$

理想混合気体の状態方程式

$$p = \rho T R \quad (4)$$

化学種成分の連続方程式

$$\rho \left(\frac{\partial Y_i}{\partial t} + \frac{1}{\epsilon} \mathbf{u} \cdot \nabla Y_i \right) + \nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{V}_i) = w_i \quad (5)$$

ここで

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \left[p + \frac{1}{\epsilon} \left(\frac{2}{3} \mu - \kappa \right) (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} - \frac{\mu}{\epsilon} \{ (\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T \} \right] \\ \sum_{i=1}^N Y_i &= 1, \quad Y_i \mathbf{V}_i = -D_i \nabla Y_i \\ D_i &= (1 - Y_i) \left(\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{X_j}{D_{ij}} \right)^{-1}, \quad X_i = \frac{Y_i}{m_i} m, \quad m = \left(\sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{m_i} \right)^{-1} \\ R_i &= \frac{R_0}{m_i}, \quad R = \sum_{i=1}^N Y_i R_i \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} c_p &= \sum_{i=1}^N Y_i c_{pi}, \quad c_v = c_p - R \\ h_i &= h_i^0 + \int_{T_0}^T c_{pi} dT \end{aligned}$$

$$w_i = m_i \sum_{k=1}^M (v''_{ik} - v'_{ik}) B_k T^{\alpha_k} \exp \left(-\frac{E_k}{R_0 T} \right) \prod_{j=1}^N \left(\frac{\rho Y_j}{m_j} \right)^{v'_{jk}}$$

である。連続方程式、運動方程式の μ , κ , ϵ , K , c_F , \mathbf{f}_i は、混合気体の有効粘性係数、体積粘性係数、空隙率、固有透水係数、Forchheimer 係数、化学種 i に作用する外力ベクトルである。 $c_F = 0$ の場合、式 (2) は Darcy-Brinkman モデルの方程式となる。エネルギー方程式、理想混合気体の状態方程式、化学種成分の連続方程式の λ , c_v , R_0 は、混合気体の有効熱伝導率、混合気体の

有効定積比熱、普遍気体定数である。 D_{ij} は相互拡散係数を示し、 m_i 、 c_{pi} 、 h_i 、 h_i^0 、 D_i は、各化学種における分子量、定圧比熱、エンタルピー、標準生成エンタルピー、有効拡散係数である。 M 、 N は、素反応機構の化学反応式の数（素反応の総数）、化学種の数（化学反応式で現れる化学種の総数）である。 w_i は化学種*i*の正味の質量生成速度を示し、 v'_{ik} 、 v''_{ik} 、 B_k 、 α_k 、 E_k は、各化学反応式における反応前の量論係数、反応後の量論係数、温度係数、温度次数、活性化エネルギーである。また、 μ 、 λ 、 D_{ij} 、 c_{pi} は、文献[3]に従って計算を行う。

3. 空間方向と時間方向の離散化

空間方向の離散化には、有限要素法を採用し、未知量(ρ , \mathbf{u} , p , T , Y_i)の補間関数は、図-1に示す気泡関数要素[4]を用いる。式(1)から(5)の計算の安定化

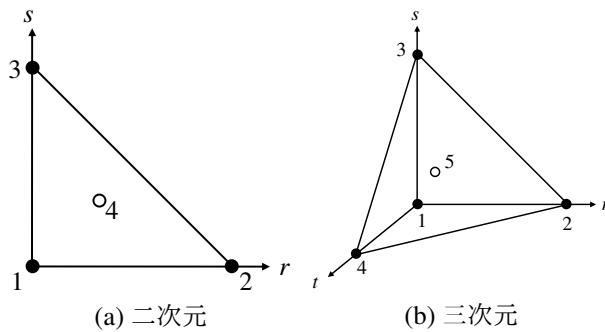


図-1 気泡関数要素

については、直交基底気泡関数要素安定化法[5]を用いる。時間方向の離散化には、安定性に優れ時間増分を大きくとれる陰的解法を適用する。

4. 反応器内の解析例

図-2の円筒形状の中央に多孔質部（青色の部分）を有する計算モデルにおける反応器内の解析を行う。図-2の左から右方向に一定流量を与える、化学種はAからDの四つ($N=4$)からなり、中央の多孔質部において化学種A(Y_1)が化学反応をおこし、化学種B(Y_2)、化学種C(Y_3)、化学種D(Y_4)が生成される問題である。初期条件は、解析領域全体で $Y_1=1.0$ 、 $Y_2=Y_3=Y_4=0.0$ としている。図-3、図-4に計算結果を示す。図-3、図-4ともに赤色が大きな値、青色が小さな値を示している。図-3を見ると、流速ベクトルは中央の多孔質部付近で流れが遅くなり、圧力は急激に変化していることが確認できる。図-4を見ると、中央の多孔質部において化学種Aが化学反応をおこし、化学種B、化学種C、化学種Dが生成されていることがわかる。



図-2 計算モデル



(a) 流速ベクトル



(b) 圧力

図-3 流速ベクトルと圧力の計算結果



(a) 化学種 A



(b) 化学種 B



(c) 化学種 C



(d) 化学種 D

図-4 各化学種の計算結果

5. おわりに

本研究では、化学反応を考慮し、多孔質体内の流れにBrinkman-Forchheimerモデルを用いた圧縮性粘性流れ解析を提案した。円筒形状の中央に多孔質部がある反応器内の3次元反応性流体解析を行った。多孔質体内のポアズイユ流れ、浸透係数の異なる二層の多孔質体を有する流れの厳密解との比較におけるベンチマーク問題の解析例は講演時に示す。

参考文献

- [1] Nield, D.A. and Bejan, A.: *Convection in porous media*, Springer, 2017.
- [2] Daly, E. et al.: Exact solutions of the Navier-Stokes equations generalized for flow in porous media, *Eur. Phys. J. Plus*, Vol.133: 173, 2018.
- [3] 小林敏雄 編集委員長: 数値流体力学ハンドブック, 丸善, 2003.
- [4] Fortin, M. and Fortin, A.: Newer and newer elements for incompressible flow, *Finite Elements in Fluids*, Vol.6, John Wiley & Sons Ltd, pp.171-187, 1985.
- [5] Matsumoto, J.: A relationship between stabilized FEM and bubble function element stabilization method with orthogonal basis for incompressible flows, *Journal of Applied Mechanics*, JSCE, Vol.8, pp.233-242, 2005.