

領域の分割数とその位置は、干渉縞の数と位置に合わせているため、縞が少ない場合や縞間隔が広い部分では計算点が少なく、また計算値のばらつきが大きい場合もあるので計算精度が不十分と思われる。今後例えば等間隔に円環領域を分割するなど計算方法の改良が必要である。

参 考 文 献

- 1) 佐藤ほか2, 第35回船舶技研研究発表会講演集, (1980), 144.
- 2) 日本機械学会, 技術資料, 燃焼に伴う環境汚染物質の生成機構と抑制法, (昭55), 207.
- 3) 佐藤ほか2, 日本機械学会関西支部, 第58期定時総会講演会講演論文集, 834-8, (昭58-3), 1.
- 4) 佐藤ほか2, 第16回燃焼シンポジウム前刷集, (昭53-12), 232.

31. 燃焼ガスの平衡組成計算プログラム

機関性能部 山 岸 進

1. プログラムの目的及び概要

炭化水素燃焼ガスの平衡組成を、与えられた平衡温度のもとで計算するプログラムである。公表されている大規模なプログラムはサブルーチンとして取り込むことが困難であり、¹⁾²⁾又簡易形のものに限られ目的に合わせているため適用範囲が狭い欠点がある。³⁾実際の燃焼計算においては、何らかの形で温度が与えられて、そのガス組成だけを知りたい場合が屢々ある。これだけに限ると適用範囲の広いプログラムでもかなり小形化でき、サブルーチン化しておくで大変便利である。本プログラムは予め平衡温度を与えて熱力学的性質を求めておいて平衡組成を計算するものである。組成計算部は Huff 等の手法¹⁾を基にしており、解離式、質量保存則、分圧の式から成る非線形連立方程式を Newton-Raphson 法で解いて、燃料種、空燃比、温度について幅広い条件に対処し易くしている。また、成分の熱力学的性質は JANAF のデータを基に計算するようにした。⁴⁾

2. プログラムの内容

2.1 プログラムの名称

炭化水素燃焼ガスの平衡組成計算

2.2 製作者

機関性能部 山岸 進

2.3 製作年月日

昭和51年8月, 昭和58年8月 FACOM 用に改良

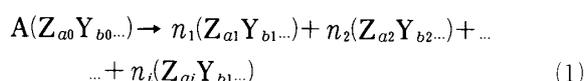
2.4 計算の概要

燃焼ガスの平衡組成を、解離式、質量保存則、分圧

の式を連立させて、Newton-Raphson 法で解いて求める。

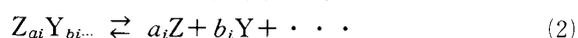
計算に際して使用する主な仮定は次の様である。(1)断熱過程, (2)理想気体, (3)定圧燃焼, (4)固体の折出が無い。

今、対象とする反応式を次の様に表わす。



A は反応式の数, Y, Z, … は元素名, n はモル数, 添字 a, b, … は成分中の原子数, 添字 0 は反応前を示し, 1, 2, … i は成分を示す。

〔解離式〕 i 成分 (Z_{ai}Y_{bi}…) が全てガス状原子に解離するとして次の式で表わす。



反応が一定容積で行われ、理想気体とすれば $p_i = n_i$ が成り立ち、分圧をモル分率で置き換える事ができる。

平衡状態では(2)式の平衡定数を K_i として次の質量作用則が成り立つ。

$$K_i = \frac{p_i}{p_z^{a_i} \cdot p_y^{b_i} \cdot \dots} \quad (3)$$

ここで、 p_i は i 成分の分圧を表わす。

一方、熱力学の関係から平衡定数は反応前後の自由エネルギー変化 (ΔF) を用いて次式で表わすことができる。

$$\ln K_i = (-\Delta F/RT)i \quad (4)$$

$$\Delta F = \Delta H_f - T \Delta S_f \quad (5)$$

ここで、R は気体定数、T は絶対温度、 H_f は生成

エンタルピー、 S_f は生成エントロピー、 Δ は反応前後の差を示す。定圧燃焼を考えている場合、 ΔF はGibbの自由エネルギーになる。 K_i は理想気体で温度のみの関数となり、JANAFのデータ集では $\log K_i$ の形で与えられているが、直接値の求まらないものは、(4)、(5)式から計算する。

〔質量保存則〕各成分を構成している元素の原子数の総和は反応の前後で変化しないから次式が成り立つ。

$$a_0 = \frac{1}{A} \sum_i a_i n_i \quad (6)$$

〔分圧の式〕理想気体の状態方程式が成り立ち、Daltonの分圧則が満足される。本計算の場合分圧 P_i はモル分率 n_i で置き換えることができる。

$$P = \sum_i p_i (= \sum_i n_i) \quad (7)$$

(3)、(6)、(7)の非線形連立方程式をNewton-Raphson法で解く。

これは、関数 F の $X_0 + \Delta X$ における値をTaylor展開の一次式で近似し、関数値との差 $\Delta F = F(X_0) + F'(X_0) \cdot \Delta X - F(X_0 + \Delta X)$ を計算し、 $\Delta F = 0$ を満足するように $X = X_0 + \Delta X$ を定める方法である。

まず、推定値を与えて得られる(3)式の K_i と、温度を与えて(4)、(5)式から求まる K_i との比を求める式を作る。

収束を早めるため(3)式の対数をとって微分すると、対数で表わした増分について一次式が得られる。この式は解離式の数だけあり(8)式になる。

$$\left. \begin{aligned} x_1 - a_1 x_z - b_1 x_r - \dots &= -\delta_1 \\ x_2 - a_2 x_z - b_2 x_r - \dots &= -\delta_2 \\ &\vdots \\ x_i - a_i x_z - b_i x_r - \dots &= -\delta_i \end{aligned} \right\} (8)$$

但し、 $x_i = \Delta \log x_i = \Delta \log p_i$

$$\delta_i = \log K_i - (\log p_i - a_i \log p_z - b_i \log p_r - \dots)$$

質量保存則(6)式において推定値から得られる $\frac{1}{A} \sum_i a_i n_i$ が予じめ与えられた a_0 に等くなったとき正解が得られたことになり、前と同様に線形化した(9)式が得られる、式の数はいくつかである。

$$\left. \begin{aligned} \sum_i a_i n_i x_i - A a x_A &= \delta_a \\ \sum_i b_i n_i x_i - A b x_A &= \delta_b \\ &\vdots \end{aligned} \right\} (9)$$

但し $x_A = \Delta \log A$

$$\delta_a = A a \log(a_0/a)$$

$$\delta_b = A b \log(b_0/b)$$

分圧の式についても同様に

$$\sum_i p_i x_i = \delta_p \quad (10)$$

但し $\delta_p = P \log P_0/P$

(8)―(10)の連立方程式を解いて、 k 番目の変化分(x_i) k が求まると $k+1$ 番目の推定値として次の値を用いて新たな推定値とする。

$$\left. \begin{aligned} \log(n_i)_{k+1} &= \log(n_i)_k + \lambda \cdot x_i \\ \log(A)_{k+1} &= \log(A)_k + \lambda \cdot x_A \end{aligned} \right\} (11)$$

求める解は(12)式で表わす誤差の総和が予じめ与えた ϵ_0 以下になったときの n_i 、 A である。

$$\epsilon = \sum_i \delta_i + \log \left| \frac{a_0}{a} \right| + \dots + \log \left| \frac{P_0}{P} \right| \quad (12)$$

計算の途中で対数の真数が負にならないように λ に条件を付けて増加分が2.0を越えないようにしている。

$$\lambda = \min(1.0, 2.0/\max |x_i|) \quad (13)$$

2.5 計算の手順

図-1のフローチャートに従う。

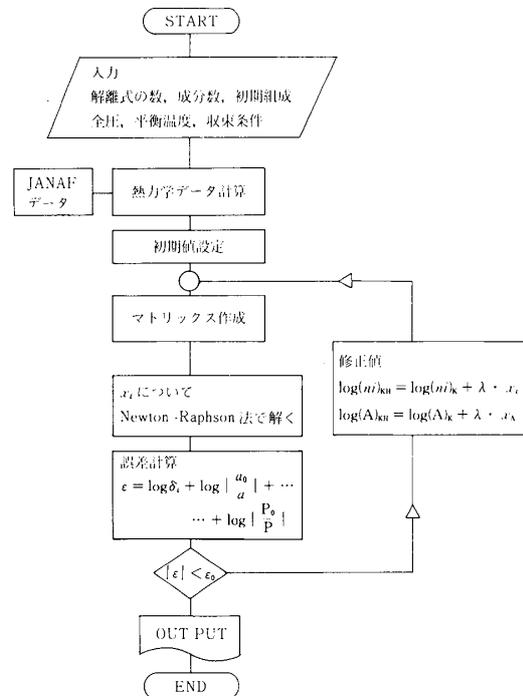


図-1 計算のフローチャート

2.6 計算機種および制限事項

このプログラムは初め TOSBAC 5600用に作り、後 FACOM 180 II用に改めたもので、標準組み込み関数 (ABS, ALOG10, AMAX1, AMIN1, EXP 等) を使用している。

現在、解のマトリックスとして C_2H_2 - 空気用が組み込まれており、12成分 (H_2 , O_2 , N_2 , OH, H_2O , CO, CO_2 , NO, H, O, N, Cgas) の組成が $5000^\circ K \sim 450^\circ K$ の範囲で計算できる。その際の使用メモリーは 64 bit 浮動小数点形 (AUTODBL) で約 128 K (LOAD MODULE) であり、CPU は約 0.23 sec ($3500^\circ K$) である。

マトリックスの繰返し計算を行うため、解の精度は計算機の機能に大きく依存することとなる。

例えば、本プログラムを 1 語長 128 bit の実数形で計算すると微量成分を含んだ 18 成分の計算でも収束について問題はない、64 bit 形だと初期値と温度条件に注意しなければならない、32 bit 形だと微量成分についてはかなりの制約を受けることになる。

3. プログラムの応用

本プログラムは温度が与えられた場合の平衡組成を計算してモル分率を求めるものであるが、未燃物のエ

ンタルピーが与えられた場合の燃焼ガスの平衡温度、あるいは等エントロピー変化過程の平衡温度を求めるためにそれ等の式と本プログラムを連立させて解くように改めることは容易である。

4. あとがき

平衡計算における難しい点の一つは、条件によって飛び抜けて微量な値しか持たない成分を含む時の計算精度と計算時間に関するものである。計算機によって、目的に応じた成分の選択と計算方法に工夫が必要となる。

参考文献

1. V. N. Huff, S. Gorden and V. E. Morrel, NACA Report 1037 (1951)
2. S. Gorden and B. J. McBride, NASA SP-273 (1971)
3. A. G. Gaydon and H. G. Wolfhard, "Flames, Their Structure and Temperature", Chapman and Hall (1970)
4. Anon, "JANAF Thermochemical Data", Dow Chemical Co., Midland, Michigan (1967)
5. 山岸, 船研報告 Vol. 14, No 2 (1977)

32. 一体型炉蒸気発生器静特性解析プログラム

原子力船部 松 岡 猛

1. プログラムの目的および概要

船舶技術研究所に設置されている一体型船用炉模擬装置の内装貫流型蒸気発生器の静特性実験及び一般的な一体型炉蒸気発生器の静特性の解析を目的としている。

模擬炉心の一次側温度及び、蒸気発生器二次側の入口流量、入口圧力、入口温度を入力データとして与え、管内流体の伝熱および流動状態を一次元モデルにより計算する。解析結果と実験データとの比較により、計算に使用した各実験式等の評価を行う事もできる。

2. プログラムの内容

2.1 プログラムの名称

(262)

一体型炉蒸気発生器静特性解析プログラム
ASCOTS

A program for an Analysis of Static Characteristics of Once-Through type Stream Generator for Integral Type Reactor

2.2 製作者

原子力船部 松 岡 猛

2.3 製作年月日

昭和54年5月

2.4 計算の概要

蒸気発生器二次側の流れを一次元モデルとして取り扱い、伝熱管の各位置においては熱力学的平衡状態を仮定している。蒸気発生器伝熱管を多数の小区間に分割し、各小区間において定常状態の式を解き、その区