

ロケットエンジンの 化学反応機構

越 光男、寺島 洋史

東京大学工学系研究科 総合研究機構
JAXA社会連携講座

2012.9.27

「ロケットエンジンシミュレーションの最先端」シンポジウム

ロケットエンジンシミュレーション =CFD+化学反応

化学反応の取り扱い

1. Sheet model (=infinitely fast chemistry)
特に乱流拡散燃焼: 混合速度 \ll 反応速度
EBU, EDCなど
2. Flamelet model
火炎構造は混合分率によって一意的に決まる
Flamelet table
3. 詳細反応機構
非定常現象(着火、消炎)
保炎機構、振動燃焼

概要

1. ロケットエンジン燃焼の詳細反応機構

- 1.1 水素の高圧燃焼反応 (LE-7,LE-X)
- 1.2 ヒドラジンの自己着火反応機構(衛星スラスタ)

2. 詳細反応機構のCFDコードへの組み込み法に関する研究

- 2.1 詳細反応機構の簡略化法(RCCE法)
- 2.2 反応機構の高速積分法(MTS法)

目標: 詳細反応機構に基づく

反応性流体シミュレーション技術の獲得



1.1 水素の高圧燃焼反応



新しい高圧燃焼速度のデータ

M.P.Burke, M.Chaos, F.L.Dryer, and Y.Ju, AIAA 2009-990

M.P.Burke, F. L.Dryer, and Y.Ju, AIAA 2010-776

M.P.Burke, M.Chaos, F.L.Dryer, and Y.Ju, Combust. Flame, 157 (2010) 618-631



(a) 1 atm

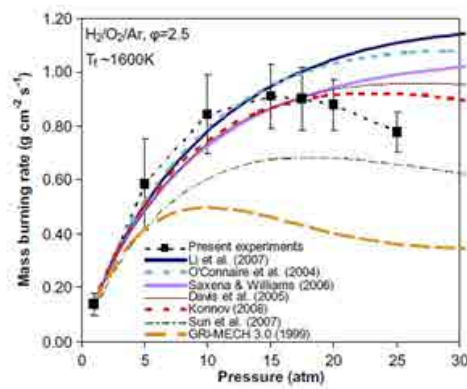
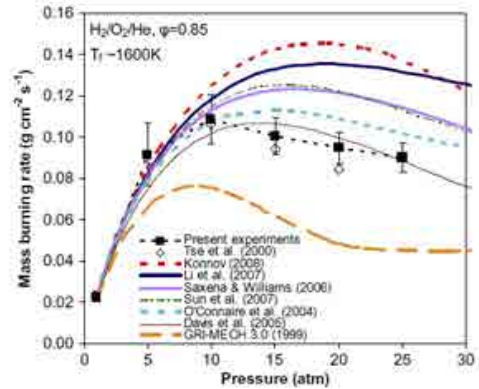


(b) 15 atm



(c) 25 atm

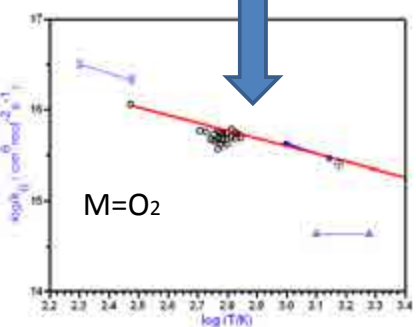
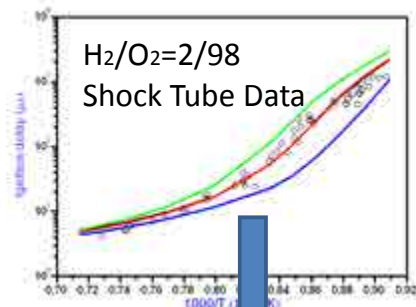
Fig. 2. Schlieren images of propagating flames at $x_f = 2.5$ cm for an $H_2/O_2/Ar$ mixture of equivalence ratio 2.5 and flame temperature of ~ 1600 K for various pressures.



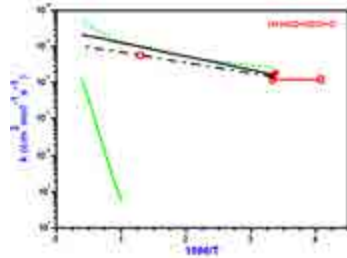
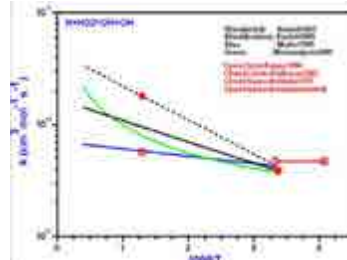
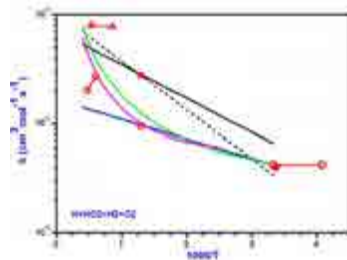
反応機構の再構築



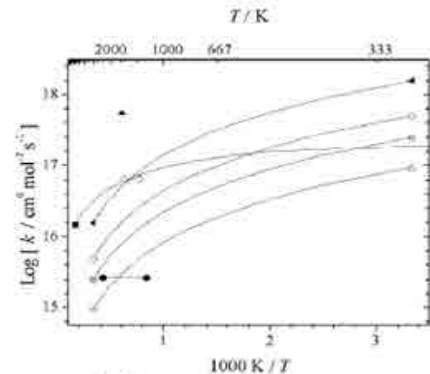
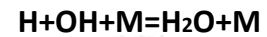
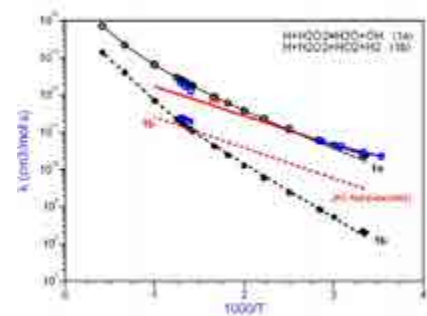
Third Body efficiencies



H+HO₂ channels

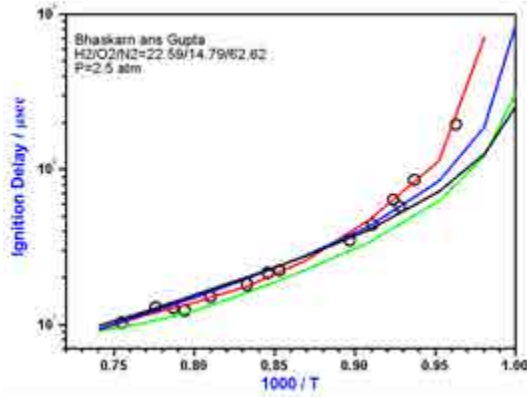
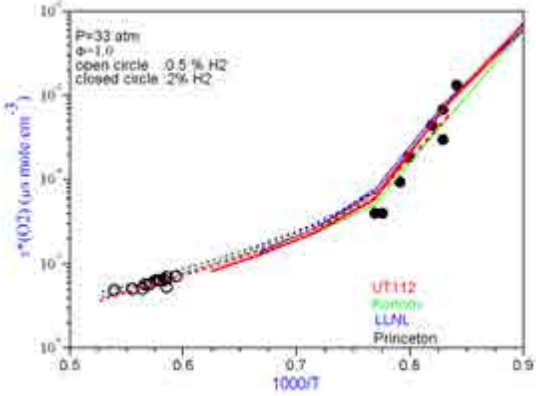


H+H₂O₂ Reactions

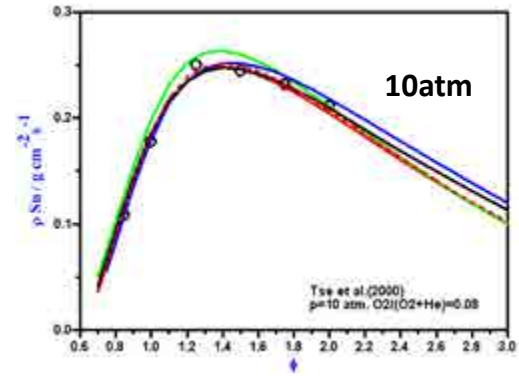
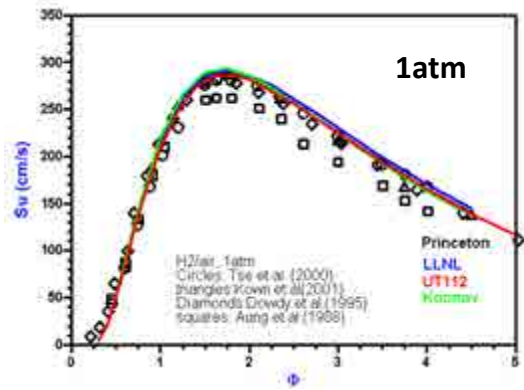


Validation

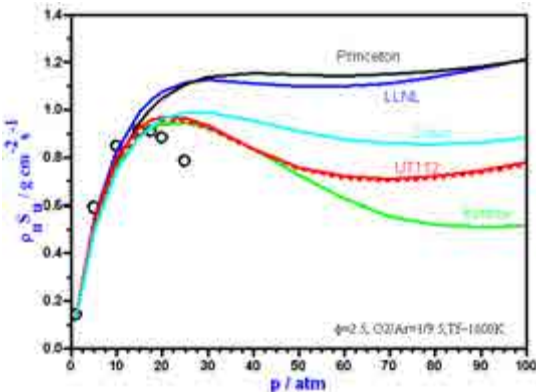
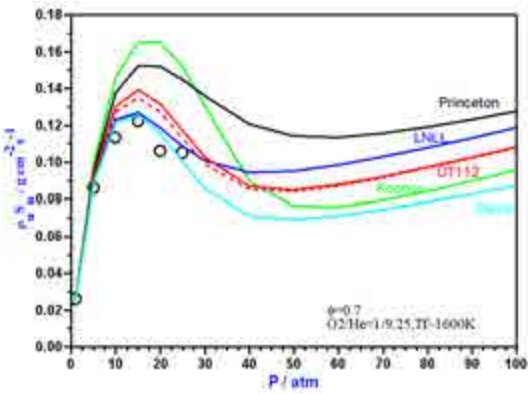
Ignition Delay



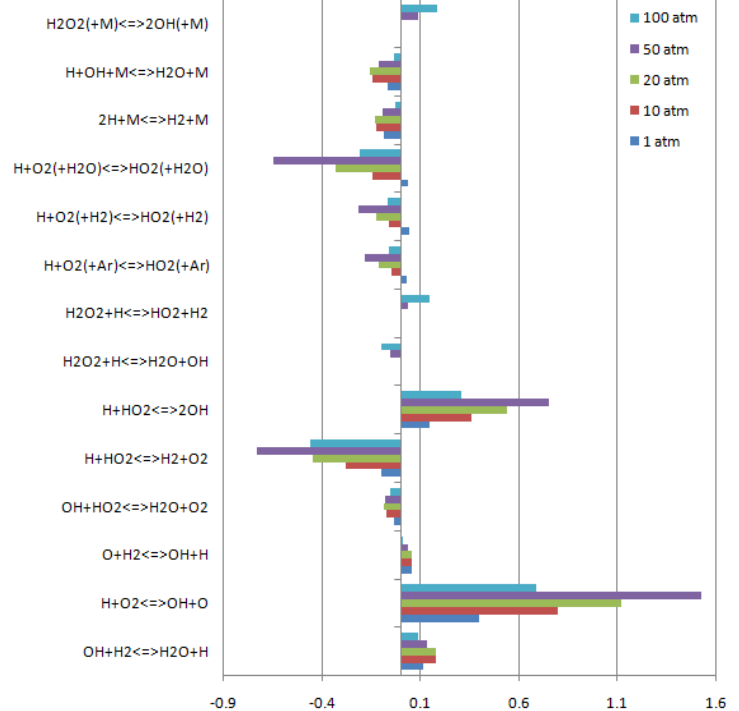
Burning Velocity



燃焼速度の圧力依存



Sensitivity Analysis $\phi=2.5, \text{H}_2/\text{O}_2/\text{Ar}$



水素の高圧燃焼:まとめ

水素の詳細反応機構に含まれるすべての素反応の速度定数を再検討し、新規反応機構を提案した。

(主要な改良点)

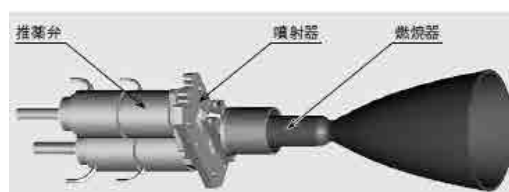
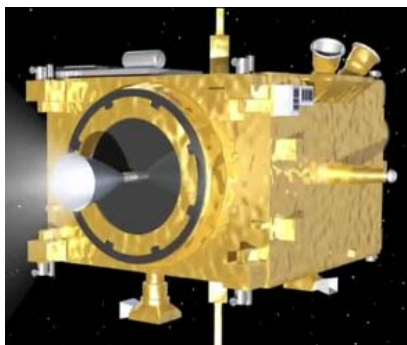
- ・ $H+O_2+M$ の第三体効果 ($M=H_2O, O_2, H_2$)
- ・ $H+HO_2$ 、 $H+H_2O_2$ の反応速度定数

既往の機構に対して

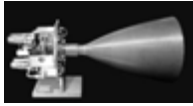
燃焼速度の圧力依存性が改善された。

燃料過多の反応機構に関してはさらなる検討が必要。

1.2 ヒドラジンの自己着火反応機構



研究の背景

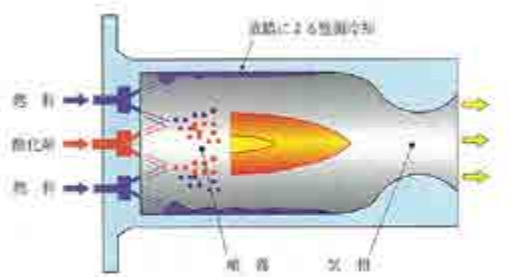


宇宙機の軌道・姿勢制御のためのロケットエンジン(スラスタ)

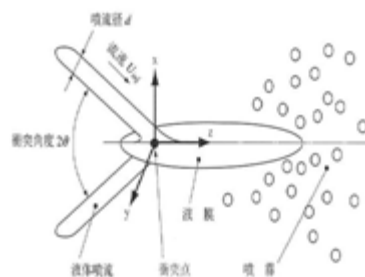


(あかつき: JAXAホームページより)

(コウノトリ: JAXA ホームページより)



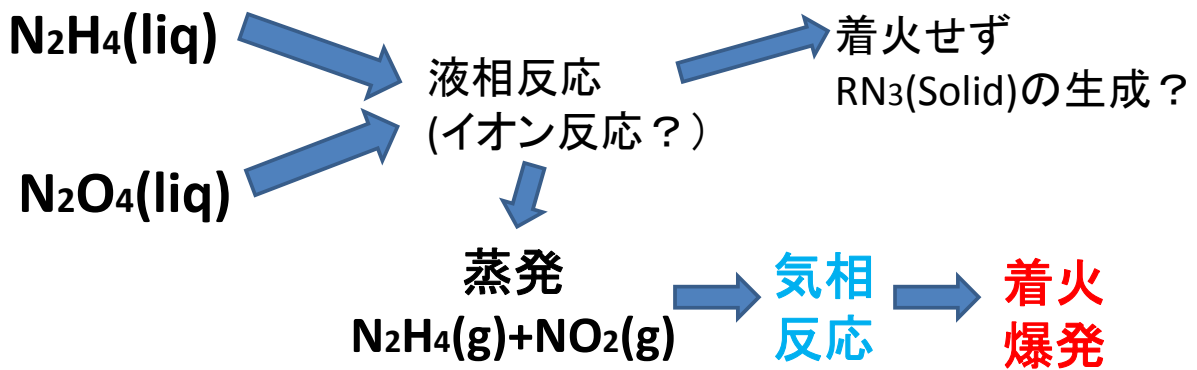
第1図 二液スラスタ
Fig. 1 Bi-propellant thruster



第2図 衝突噴流式ノズル
Fig. 2 Schematic of impinging jets

松野ら:
石川島播磨技報
44(2004)

既往の研究のまとめと問題点



疑問点？

1. 液相反応の機構と生成物 (RN₃はなぜできるか)
2. 沸点以下のN₂H₄がなぜ瞬時に蒸発できるのか
(化学反応による発熱？ または 共沸？)
3. N₂H₄(g)+NO₂(g)はなぜ着火源なしに着火するのか

N₂H₄/NO₂の気相反応機構の構築.

Available Information

1. A N₂H₄ thermal decomposition mechanism:

Konnov A.A., Ruyck, J.D., "Kinetic modeling of the decomposition and flames of hydrazine", Comb. Flame 124:1060126 (2001).

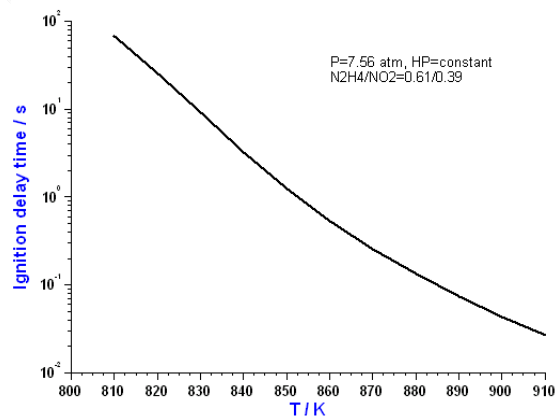
2. A review on N/H/O elementary reactions:

Dean, A.M., Bozzelli, J.W., "Combustion chemistry of nitrogen", in Gas Phase Combustion Chemistry, ed. By Gardiner, W.C.Jr., Springer-Verlag (2000).

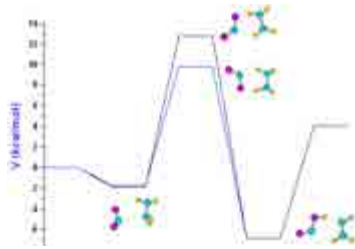
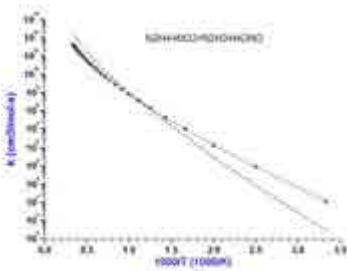
A Base Mechanism: 34 species with 239 reactions

(Ohminami et al., AIAA-2009-5044)

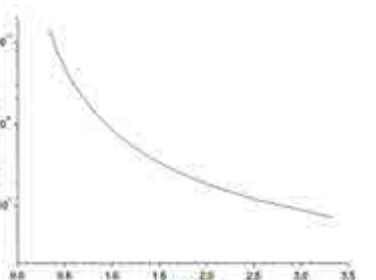
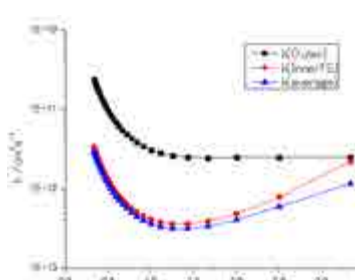
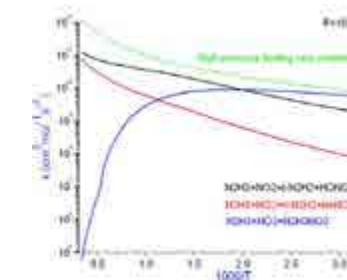
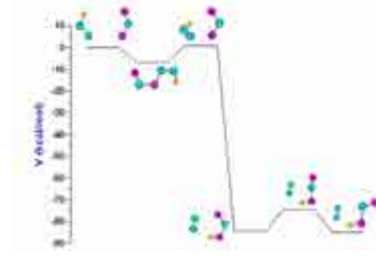
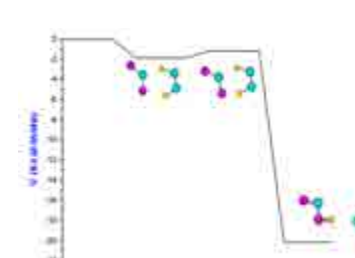
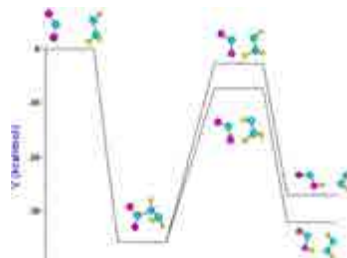
これまでの情報のみから
 作った反応機構では
 800K以下では自着火しない!
 => Missing Reactions
 NO₂+N₂H₄



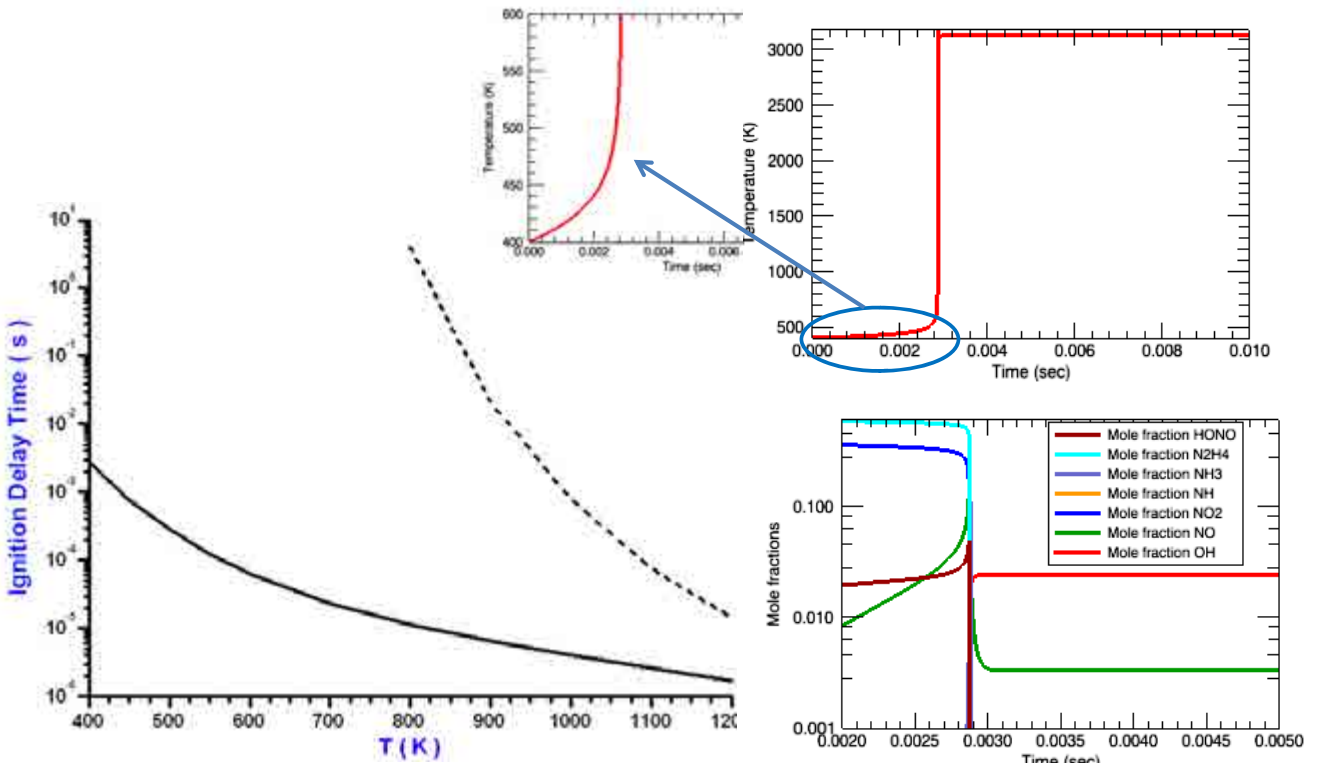
NO₂とN₂H₄は直接反応するか？



N₂H₄+NO₂ = N₂H₃+HONO
 N₂H₃+NO₂ = N₂H₂+HONO
 N₂H₂+NO₂ = N₂H+HONO
 N₂H+NO₂ = N₂+HONO
 N₂生成による熱発生
 =>反応の加速=>熱爆発



NO₂+N₂H_mを含む反応機構によるシミュレーション



HP=constant, P=7.54 atm,
N₂H₄/NO₂=0.61/0.39

実験値との比較

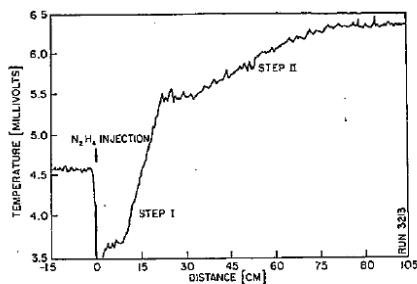
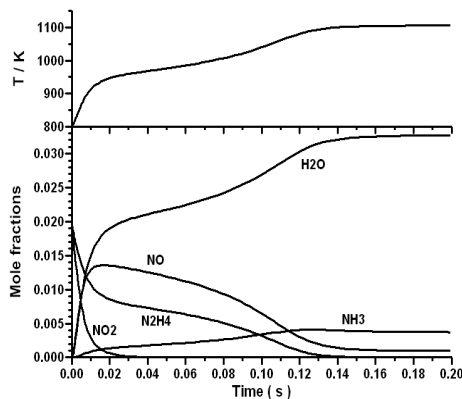
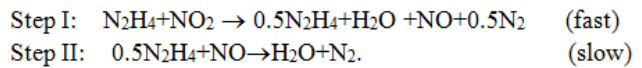
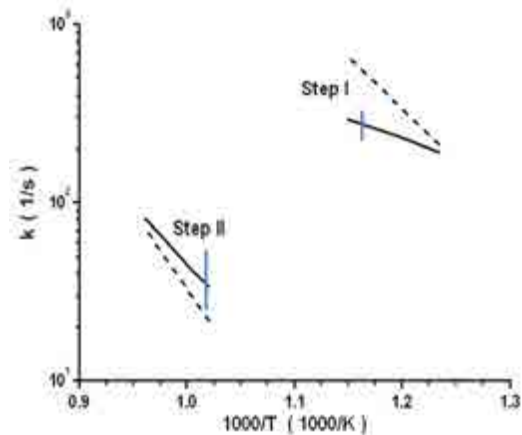


FIG. 2. Flow-reactor-temperature profile for the reaction of hydrazine and nitrogen dioxide, showing a two-step behavior.

R. F. Sawyer and I. Glassman,
Proc. Inst. Combust., pp.861-869 (1967)
A flow tube experiment,
NO₂/N₂ flow (T=810-1000K)
Liq. N₂H₄ injection



T₀=800 K, P₀=1 atm, p(N₂H₄)=p(NO₂)=15 Torr



ヒドラジンの反応:まとめ

ヒドラジンとNO₂の詳細反応機構を構築した。

N₂H₄+NO₂とその後続反応

量子化学計算+支配方程式解析により

反応経路を明らかにして速度定数を算出した。

低温でのヒドラジン/NO₂混合気の自己着火反応機構
が明らかになった。

NO₂によるN₂H_nからの逐次的な水素引き抜きによるN₂生成

N₂生成による発熱と反応の加速=>熱爆発

ヒドラジンのNO₂による燃焼反応は2段階で起こる。

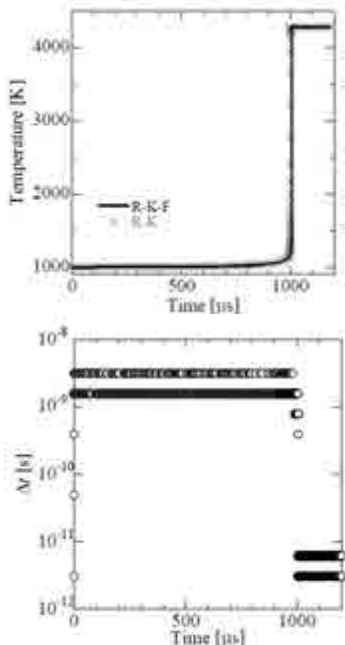
Step I: $\text{N}_2\text{H}_4 + \text{NO}_2 \rightarrow 0.5\text{N}_2\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O} + \text{NO} + 0.5\text{N}_2$ (fast)

Step II: $0.5\text{N}_2\text{H}_4 + \text{NO} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{N}_2$ (slow)

2. 詳細反応機構の CFDコードへの組み込み法 に関する研究

詳細反応機構をCFDコードに組み込む場合の問題点

- 1) 化学反応式硬直性 (stiffness) による時間刻み幅の制限,
- 2) 化学種移流方程式数の増加,
- 3) 多成分輸送係数の計算時間の増加



H₂/O₂=2/1, T₀=1000K, P₀=150 atm

Huge Number of Species and Reactions

```

species
h h2 o o2 oh h2o n2 co hco co2 ch3 ch4 ho2 h2o2 ch2o ch3o c2h6
c2h4 c2h5 ch2 ch c2h c2h3 ch3oh ch2oh ch2co hcco c2h5oh
pc2h4oh sc2h4oh ch3co ch2cho ch3cho c3h4-a c3h4-p c3h6 c4h6 nc3h7
ic3h7 c3h8 ic4h7 ic4h8 c4h7 c4h8-2 c4h8-1 sc4h9 pc4h9 tc4h9 ic4h9
ic4h10 c4h10 ch3coch3 ch3coch2 c2h5cho c2h5co c5h9 c5h10-1 c5h10-2
ic5h12 ac5h11 bc5h11 cc5h11 dc5h11 ac5h10 bc5h10 cc5h10 ic5h9
nc5h12 c5h11-1 c5h11-2 c5h11-3 neoc5h12 neoc5h11 c2h5o ch3o2
c2h5o2 ch3o2h c2h5o2h c2h3o2 ch3o2 c2h4o2-2 c2h4o2h o2c2h4oh
ch3co3 ch3co3h c2h3co c2h3cho c3h5o c3h5oh-2 c3h5oh-3 c3h6ooh2-1
c3h6ooh1-2a2 c3h6ooh1-3a2 c3h6ooh2-1a2 nc3h7o ic3h7o nc3h7o2h
ic3h7o2h nc3h7o2 ic3h7o2 c3h6o1-3 ic4h8o ic4h8oh io2c4h8oh ic4h7o
c4h7o c4h8oh-1 c4h8oh-2 o2c4h8oh-1 o2c4h8oh-2 c4h8ooh1-2a2 c4h8ooh1-3a2
c4h8ooh1-4a2 c4h8ooh2-1a2 c4h8ooh2-2a2 c4h8ooh2-4a2 tc4h8ooh-1a2
ic4h8ooh-1a2 ic4h8ooh-2a2 c4h8ooh1-2 c4h8ooh1-3 c4h8ooh1-4 c4h8ooh2-1
c4h8ooh2-3 c4h8ooh2-4 ic4h8o2h-1 ic4h8o2h-2 tc4h8o2h-1 c4h8o1-2
c4h8o1-3 c4h8o1-4 c4h8o2-3 cc4h8o pc4h9o sc4h9o ic4h9o tc4h9o
pc4h9o2h sc4h9o2h ic4h9o2h tc4h9o2h tc4h9o2 ic4h9o2 sc4h9o2 pc4h9o2
ch3coch2o2 ch3coch2o2h ch3coch2o c4h10o c2h3-cho2 ac5h11o2 bc5h11o2
cc5h11o2 dc5h11o2 ac5h11o
bc5h11o cc5h11o dc5h11o a
bc5h10ooh-a bc5h10ooh-b
dc5h10ooh-a dc5h10ooh-b d
ac5h10ooh-c2 ac5h10ooh-d
cc5h10ooh-a2 cc5h10ooh-b
dc5h10ooh-c2 a-ac5h10o
b-dc5h10o c-dc5h10o c5h11
c5h11o2h-2 c5h11o2h-3 c5h

```

CH2=CH2	2.300e-16	0.000	85300.0
CH2=CH2	2.430e-16	1.180	-447.0
CH2=CH2	2.250e-16	1.770	2021.0
CH2=CH2	4.160e-11	0.170	2762.0
CH2=CH2	4.000e-12	0.000	0.0
CH2=CH2	1.300e-12	0.000	20000.0
CH2=CH2	4.800e-13	0.000	26000.0
CH2=CH2	1.500e-13	1.815	1862.0
CH2=CH2	2.200e-11	0.500	0.0
CH2=CH2	1.000e-11	0.000	27420.0
CH2=CH2	3.330e-14	0.000	77220.0
CH2=CH2	1.800e-13	0.000	-267.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	24000.0
CH2=CH2	7.600e-13	0.000	2700.0
CH2=CH2	2.620e-11	0.000	0.0
CH2=CH2	9.260e-12	0.000	412.0
CH2=CH2	1.600e-13	0.000	874.0
CH2=CH2	8.400e-11	0.630	1241.0
CH2=CH2	1.800e-14	-0.000	0.0
CH2=CH2	1.840e-12	-0.460	5210.0
CH2=CH2	1.230e-14	-0.370	0.0
CH2=CH2	2.070e-13	0.000	4217.0
CH2=CH2	1.120e-13	0.000	24440.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	24000.0
CH2=CH2	2.900e-12	-0.200	123300.0
CH2=CH2	4.670e-14	-0.000	126700.0
CH2=CH2	6.300e-14	0.000	128700.0
CH2=CH2	2.000e-13	0.000	0.0
CH2=CH2	2.145e-11	-0.870	2044.0
CH2=CH2	4.170e-13	0.000	5051.0
CH2=CH2	2.120e-13	0.000	3064.0
CH2=CH2	1.100e-13	0.000	3796.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	14100.0
CH2=CH2	4.000e-12	0.000	28000.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	15000.0
CH2=CH2	6.000e-12	0.000	7000.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	17000.0
CH2=CH2	4.000e-13	0.000	4300.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	7000.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	7000.0
CH2=CH2	1.000e-14	0.000	3700.0
CH2=CH2	1.000e-11	0.480	20500.0
CH2=CH2	2.700e-11	0.670	25700.0
CH2=CH2	1.300e-11	0.670	25700.0
CH2=CH2	1.300e-11	0.670	25700.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	0.0
CH2=CH2	6.400e-11	1.130	-262.0
CH2=CH2	6.400e-11	0.000	5310.0
CH2=CH2	4.000e-13	0.000	6200.0
CH2=CH2	4.150e-12	1.170	7170.0
CH2=CH2	2.800e-12	1.520	2380.0
CH2=CH2	1.000e-14	0.000	2000.0
CH2=CH2	1.800e-14	-0.000	24500.0
CH2=CH2	9.000e-14	2.000	3670.0
CH2=CH2	2.500e-14	2.750	1260.0
CH2=CH2	2.200e-11	0.000	200.0
CH2=CH2	1.100e-13	0.000	2400.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	2400.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	62000.0
CH2=CH2	5.000e-13	0.000	8000.0
CH2=CH2	7.000e-13	0.000	8000.0
CH2=CH2	7.000e-13	0.000	8000.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	0.0
CH2=CH2	1.000e-14	0.000	0.0
CH2=CH2	3.600e-13	0.000	2000.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	25400.0
CH2=CH2	1.000e-13	0.000	62000.0
CH2=CH2	7.140e-11	0.000	0.0
CH2=CH2	7.140e-11	0.000	0.0
CH2=CH2	1.130e-13	0.000	70070.0
CH2=CH2	1.100e-11	0.000	12460.0
CH2=CH2	1.170e-11	0.000	842.0
CH2=CH2	2.000e-13	0.000	2500.0

CFDへの組み込み <= 反応機構の簡略化 Reduction とLumping

- DRG: Directed Relation Graph
T.Lu, C.K.Law, Proc. Combust. Inst., 30 (2005) 1333
- PCA: Principal Component Analysis
S.Vajda, P.Valko, T.Turnyi, Int. J. Chem. Kinet., 17(1985) 55
- CSP: Computaional Singular Perturbation
S.H.Lam, D.A.Goussls, Int. J. Chem. Kinet., 26(1994) 461
- ILDM: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds
U.Maas, S.B.Pope, Combust. Flame, 88 (1992) 239
- RCCE: Rate-Controlled Constrained Equilibrium
J.C.Keck, D.Gillespie, Combust. Flame, 17,237(1971)

2.1 RCCE法の開発と問題点

RCCE (Rate-Controlled Constraint-Equilibrium)

Jones and Rigopoulos, *Combust. Theory Modelling*, 11, 755 (2007)

Gibbs Free energy and chemical potential

$$g = \sum_{j=1}^N \mu_j n_j \quad (1) \quad N: \text{number of chemical species, } n_j : \text{mol/g}$$

$$\mu_j = \mu_j^0 + RT \ln p_j / p^0 = \bar{\mu}_j^0 + RT \ln n_j / n \quad (2) \quad p^0 : 1\text{bar}$$

$$\bar{\mu}_j^0 = \mu_j^0 + RT \ln p / p^0 = H_j^0 - TS_j^0 + RT \ln p / p^0 \quad (3)$$

$$n = \sum_j n_j \quad (4)$$

Constraints

$$b_i = \sum_{j=1}^N a_{ij} n_j \quad (i = 1, \dots, M_e) \quad (5) \quad M_e = \text{number of elements}$$

$$d_k = \sum_{j=1}^N c_{kj} n_j \quad (k = 1, \dots, M_c) \quad (6) \quad M_c = \text{number of constraints}$$

Lagrangean : L $L = g + \sum_i \bar{\lambda}_i b_i + \sum_k \bar{\beta}_k d_k$

$$\frac{\partial L}{\partial n_j} = 0 \Rightarrow n_j = n \exp\left(-\frac{\bar{\mu}_j^0}{RT}\right) \exp\left(\sum_i \bar{\lambda}_i a_{ij}\right) \exp\left(\sum_k \bar{\beta}_k c_{kj}\right) \quad (7)$$

$$\lambda_i = -\bar{\lambda}_i / RT, \quad \beta_k = -\bar{\beta}_k / RT$$

For H,p=constant conditions

Thermodynamic constraints $h = \sum_j H_j n_j$ (8)

$p = n\rho RT$ (9)

Kinetic constraints $d(d_k)/dt = \sum_j c_{kj}(dn_j/dt) = \sum_j c_{kj}W_j$ (10)

$W_j \Leftarrow$ From detailed chemical kinetic mechanism

Index 1 Solution: Solve the algebraic Eqs.(5),(6),(8),(9) and differential eq. (10).

Index 0 Solution: (constraint potentials) formulation
Differential equations for $M_e + M_c + 2$ variables

$\rho, T, \lambda_i (i=1, \dots, M_e), \beta_k (k=1, \dots, M_c)$

From eq.(7)

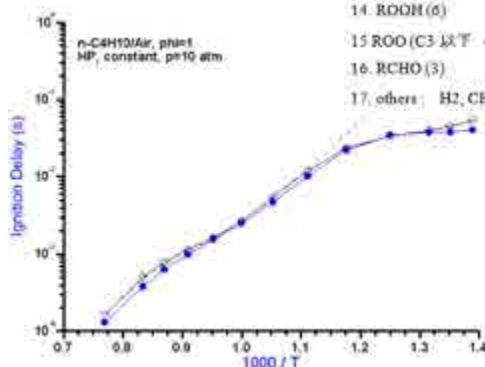
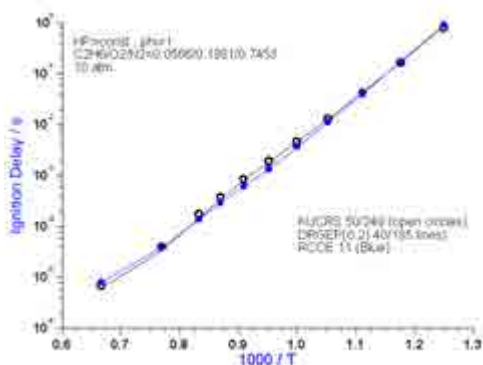
$$\frac{\partial n_j}{\partial \lambda_i} = a_{ij} n_j \quad \frac{\partial n_j}{\partial \beta_k} = c_{kj} n_j \quad \frac{\partial n_j}{\partial T} = \frac{1}{T} \left(\frac{H_j^0}{RT} - 1 \right) n_j \quad \frac{\partial n_j}{\partial \rho} = -\frac{n_j}{\rho} \quad (11)$$

Solver of DAE used in the present study: **DASPK**

RCCE (H,P=一定) の例: C₂H₆ と n-C₄H₁₀

1	Fuel	C2H6			
2	Oxidant	O2			
3		H			
4		O	OH		
5	Products	H2O	O2		
6	RCO	CO			
7	RCOO	HO2	CH3OO	C2H5OO	
8	ROOH	H2O2	CH3OO	C2H5OO	
			H	H	
9	RCHO	CH2O	CH3CH		
			O		
10		H2	CH4	C2H4	C2H2
11	M				

1. BASE 束縛条件 (H2-O2 系, 8 つ)
O2, H2+CO2, CO, H, OH+O, M
2. RH (燃料)
3. R (C4H9 の異性体 4 種類)
4. ROO (C4H9 2 種類)
5. QOOH (C4H9OOH 6 種)
6. QOOH (C3 以下 3 種)
7. HOOQOO (HOOC4H9OO 6 種)
8. ketOOH (3)
9. ketRO (3)
10. AldOOH (5)
11. Alken (4)
12. Alkyl (2)
13. CycEther (7)
14. ROOH (6)
15. ROO (C3 以下 4 種類)
16. RCHO (3)
17. others: H2, CH4, C2H6, C2H2, CH2CHO



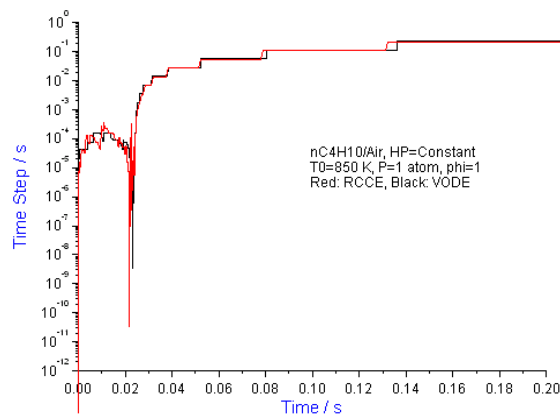
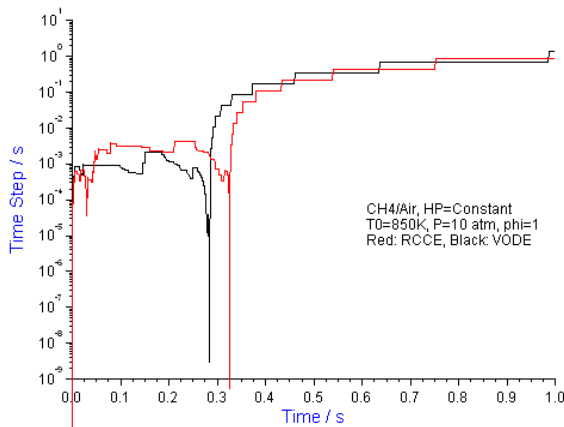
DRGEP (黒)実線(88/338) 点線(69/291)
RCCE (青)36束縛条件

RCCE法で高速化されるか？

H,P=Const. の場合の計算時間 (秒)

($T_0=850$ K, $P=10$ atm, $\phi=1$)

	CH ₄ /Air	C ₂ H ₄ /Air	nC ₄ H ₁₀ /Air	nC ₇ H ₁₆ /Air
Species/Reactions	66/337	48/249	111/426	373/1071
VODE	0.85	0.73	2.02	9.19
RCCE	0.61	0.45	3.37	8.97
(# of constraints)	(9)	(11)	(36)	(26)



CFDへのRCCE法の組み込み

<1次元オイラー方程式の場合>

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} = S$$

$$Q = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ e \\ \rho Y_k \end{bmatrix}, \quad E = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (e + p)u \\ \rho u Y_k \end{bmatrix}, \quad S = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega}_k \end{bmatrix}$$

$k=1, \dots, N$
 N : speciesの数

2nd order Strang-type Fractional Step method

$$Q^{n+1} = L_{PDE}^{\frac{1}{2}\Delta t} L_{ODE}^{\Delta t} L_{PDE}^{\frac{1}{2}\Delta t} Q^n$$

$$L_{PDE}^{\frac{1}{2}\Delta t} : \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial E}{\partial x} = 0 \quad \leftarrow \text{流体計算}$$

$$L_{ODE}^{\Delta t} : \frac{dQ}{dt} = S \quad \leftarrow \text{反応計算} \quad \leftarrow \rho, e \text{が一定のRCCE法}$$

流体計算における化学種の保存式 (N組)をどうするか？

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Y_k}{\partial x} = 0, \quad k = 1 \dots N$$

束縛条件に対する保存式

束縛条件
$$b_l = \sum_{k=1}^N a_{lk} n_k, \quad l = 1, \dots, M$$

M:束縛条件の数 ($M \ll N$)

化学種の保存式

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u Y_k}{\partial x} = 0, \quad k = 1 \dots N$$

$Y_k = W_k n_k$ なので

$$\frac{\partial \rho n_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u n_k}{\partial x} = 0$$

a_{lk} を掛けてkについての和をとると

$$\frac{\partial \rho b_l}{\partial t} + \frac{\partial \rho u b_l}{\partial x} = 0, \quad l = 1, \dots, M$$

N組の保存式の代わりにM($\ll N$)組の式を解けばよい。

RCCE法:まとめ

RCCE法を適用することにより

1. 化学反応方程式

化学種の微分方程式(数百~数千)

=>束縛条件の微分方程式(数十)

2. 移流方程式

化学種の移流(数百~数千)

=>束縛条件の移流(数十)

未解決の問題

RCCE法のDAEがよりstiffになってしまう

場合がある

=> MTS(時間積分) + RCCE(移流)

2.2 反応方程式の高速積分法 MTS (Multi TimeScale) 法

素反応の特性時間

• H₂/O₂ = 2.0/1.0, T=1000 K, p = 0.1 atm

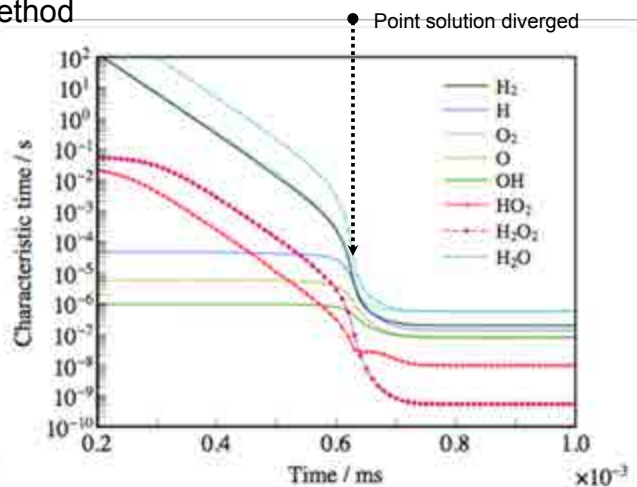
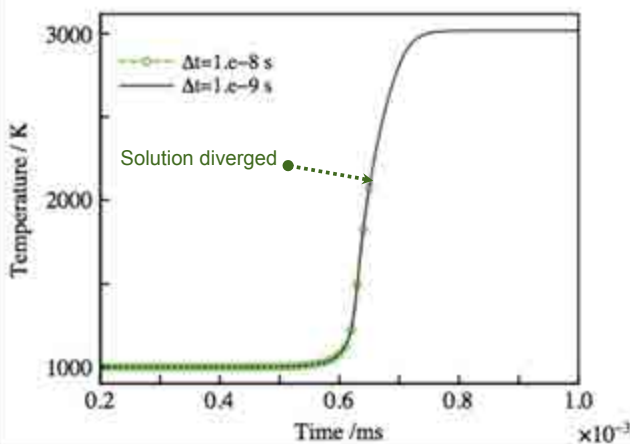
• 11 species, 34 reactions

$$\frac{dY_k}{dt} = \omega_k \frac{W_k}{\rho}$$

$$\frac{dT}{dt} = - \frac{\sum h_k \omega_k W_k}{\rho c_p}$$

• The characteristic time evaluated with CHEMKIN-II library: $\tau_k = \frac{X_k}{D_k} \quad \omega_k = C_k - D_k$

• Time integration with the Euler explicit method

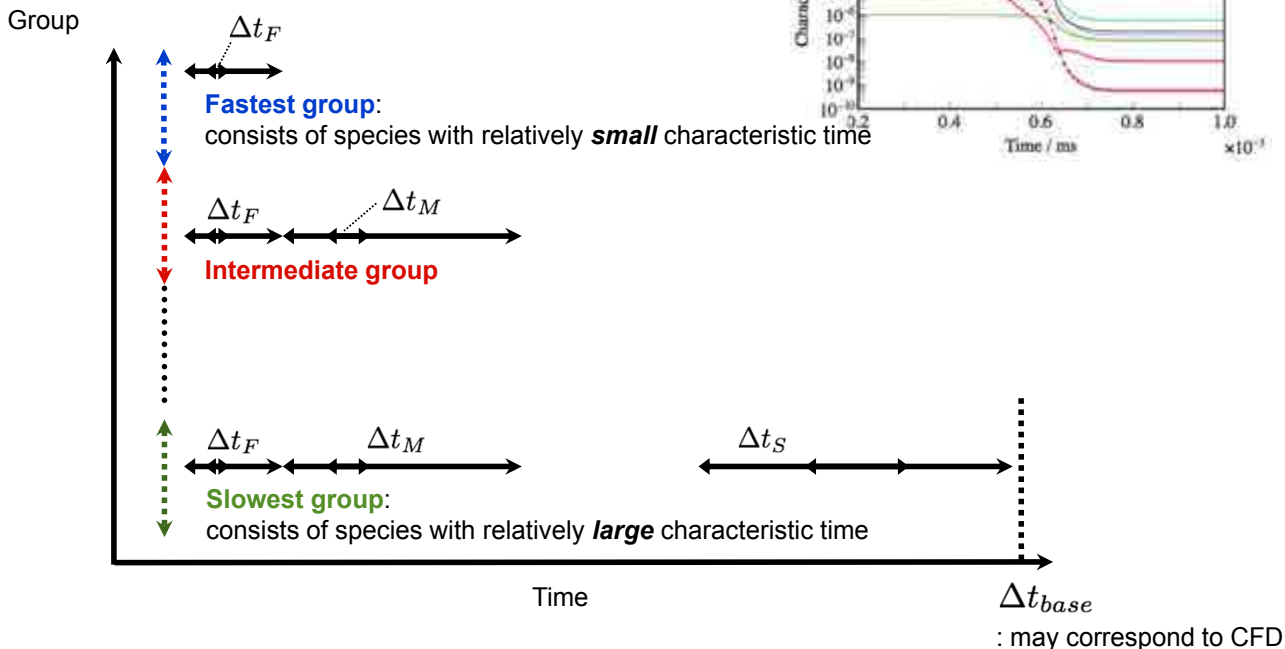
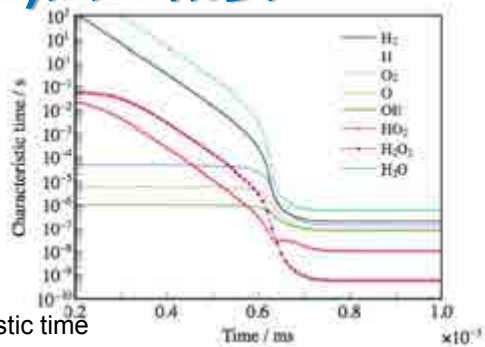


▶ The computation with $\Delta t = 1.e^{-8}$ s failed

▶ The characteristic time could be comparable to the time step size required

Multi-timescale (MTS)法の概要

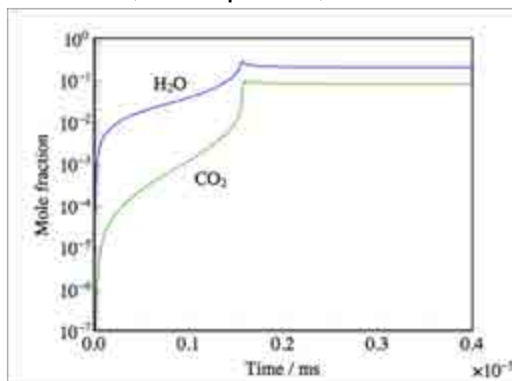
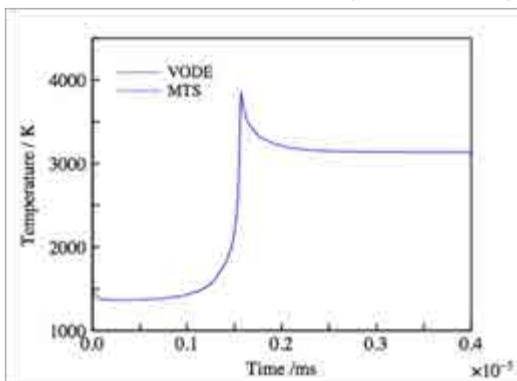
Ref.: X. Gou, W. Sun, Z. Chen, and Y. Ju,
Combustion and Flame, 2010



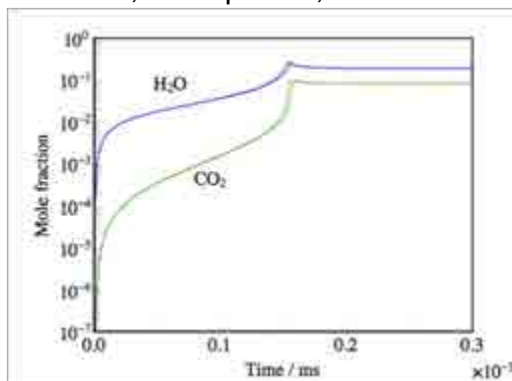
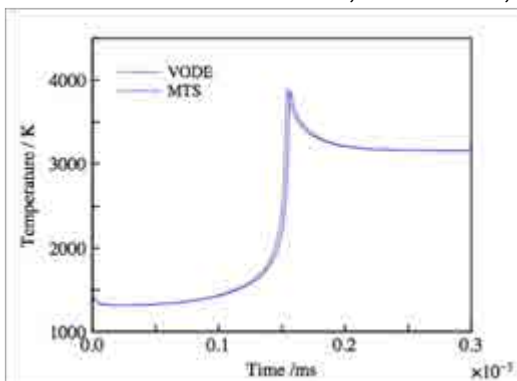
• An assumption: Fast groups are expected to converge quickly

MTS と VODE (陰解法) の比較

• nC4H10/O2 = 2.0/13.0, T=1500 K, p = 0.1 atm, 146 species, 554 reactions)



• nC7H16/O2 = 1.0/11.0, T=1500 K, p = 0.1 atm, 373 species, 1071 reactions)



MTSとVODEの計算時間の比較

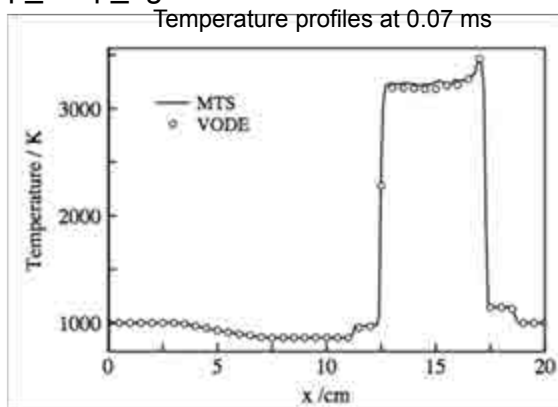
- Computations on iMac, quad core, Intel Core i7

/O2	species #	Initial temperature	Initial pressure	CPU time / s		Saving / %
				VODE	MTS	
H2	11	1000	0.1	9.53	7.99	16.1
CH4	68	1800	0.1	231.3	40.26	82.6
C4H10	146	1500	0.1	537.7	53.67	90.0
C7H16	373	1500	0.1	2424.0	100.03	95.8

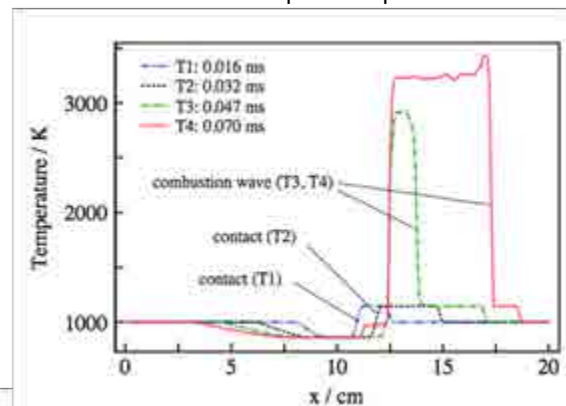
- Saving = (VODE-MTS)/VODE
- Note: elapsed times are different among each case; CPU time not proportional to species #
- Note: VODE without initialization parameter provides much faster CPU time

MTS法のCFDへの組み込みの例: 衝撃波問題

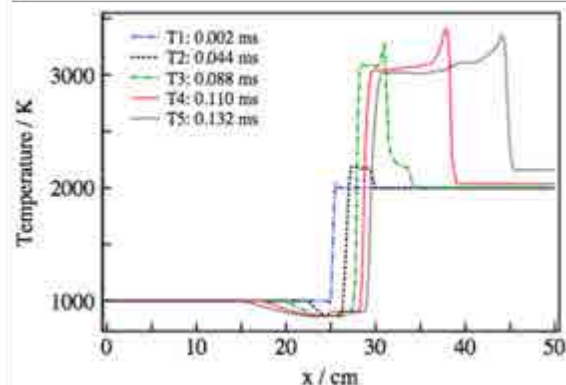
- Stoichiometric H2/O2 mixture at 1000 K
- 11 species, 34 reactions
- $p_{left}/p_{right}=1.0/0.3$



Time histories of temperature profiles with MTS



- Stoichiometric CH4/Air mixture
- 68 species, 334 reactions by KUCRS
- $p_{left}/p_{right}=1.0/0.3$,
 $T_{left}/T_{right}=1000/2000$



MTS法:まとめ

- ・MTS法による反応方程式の高速解法を開発
広範な条件で安定・高速・高精度であることを実証
化学種の数が多くなるとVODEより大幅に高速
- ・MTS法のCFDへの組み込みの実証
MTS法は陽解法であるため特に有利

今後の課題

- ・可変時間刻みによるさらなる高速化
- ・移流・拡散を解くための化学種のReduction
<=RCCE/MTS法の開発