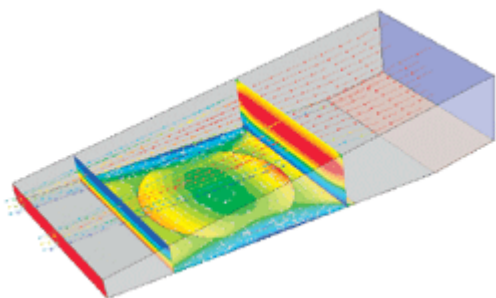
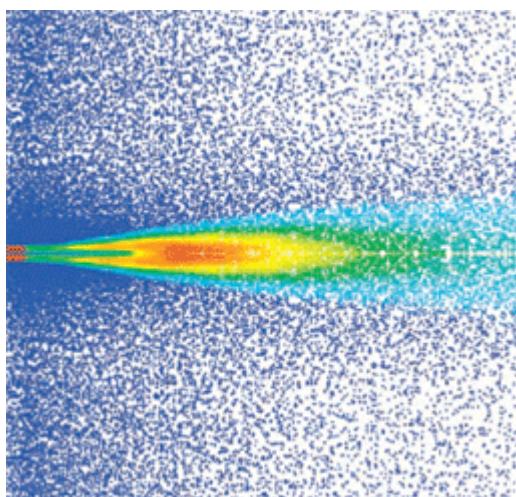


## FLUENTの反応流モデル

Kum Graham Goldin, Genong Li (Fluent Inc.)



回転基板上的のガリウムと素の成長。反応器の壁面にも堆積している。



乱流噴流拡散火炎におけるPDF輸送モデルの粒子。色は温度を示す。

FLUENT 6.1では、類をみない広範な機能を利用した反応流のシミュレーションが可能です。FLUENT 6.1には、気相反応と表面反応の両方について、気体、固体、液体の燃焼モデルが数多く装備されています。

気相燃焼モデルでは、解を高速に求めるため、渦消散(Magnussen)モデル、燃料混合分率化学平衡モデル、予混合モデルの各モデルで化学反応が迅速に進

行するものとしています。これらは現在、燃焼シミュレーションで広く使用されているモデルです。渦消散モデルでは、反応が瞬時に発生した後、その速度が乱流混合速度に支配されると仮定します。燃料混合分率化学平衡モデルでは、複数の化学種を追跡するのではなく、混合分率とその変化を追跡します。その際、PDF機能を利用しながら乱流と化学反応の相互作用を考慮します。燃料混合分率化学平衡モデルの反応系には、反応が高速で、かつ中間種とラジカルが平衡状態にあると仮定できる場合に限り、中間種とラジカルが考慮できます。層流火炎片モデルは燃料混合分率化学平衡モデルを拡張したもので、流れのひずみ速度が大きい場合に反応速度が有限になる効果が含まれます。

FLUENTには最新の気相燃焼モデルが搭載されており、完全な有限速度化学反応が火炎シミュレーションに組み込まれています。また、詳細な化学反応メカニズムをCHEMKINフォーマットでインポートでき、しかもISAT(10~11ページ参照)が利用可能なため、化学反応の多次元シミュレーションが手の届くものになっています。EDCモデルとPDF輸送モデルはコーネル大学のStephen Pope教授との共同研究で実現したもので、乱流と化学反応の相互作用が考慮できます。両モデルはともに任意の複雑な反応メカニズムを取り扱うことが可能です。

石炭の燃焼は、石炭粒子の揮発分放出から始まります。この燃焼プロセスは最終的に火炎の温度を(つまり、汚染物質の生成も)支配するため、プロセスを正確に捉えるべく、多くの試みがなされてきました。最近になって導入されたCPD(Chemical Percolation Devolatilization)モデルは、核磁気共鳴(NMR)による

実測値に基づく石炭の構造データにより、揮発分放出の特性を記述するもので、オフガスの予測値は測定データとよく一致しています。液体燃料の燃焼では、それが霧状になり、液滴に分裂する様子が正確に記述されます。続いて、液滴の蒸発、燃焼が順に起こります。以上の液体燃焼プロセスはすべてFLUENTでモデル化でき、そのモデルは変形メッシュモデルでも利用可能なため、エンジン筒内の燃焼シミュレーションにも容易に適用できます。

表面反応モデルは半導体業界で利用されるばかりでなく、ガス改質器や触媒コンバーターといった用途にも利用されています。表面反応モデルには、気相中や表面上にある化学種どうしの反応が絡んでいます。堆積プロセスの場合、気相化学種が表面で吸収され、そこで反応が起きると、堆積した表面化学種が残るため、別の化学種が気相に放出されます。エッチング工程の場合は、堆積する表面化学種がない場合があり、反応で生成する化学種だけが気相に放出されます。堆積とエッチングを両方正しくモデル化するため、FLUENTには気相化学種、サイト化学種(表面で吸収される)、バルク化学種(反応が終わると表面に残る)という3種類の化学種が用意されており、反応物または生成物のいずれにも設定できます。

他にも、数多くの反応モデルがあります。NO<sub>x</sub>やすすといった汚染物質の生成予測モデルは広く使用されており、必要に応じてカスタマイズが可能です。また、充填層反応器での化学反応のシミュレーションは多孔質媒体モデルまたは固定層オイラーグラニュラー混相モデルで実施でき、反応をゾーン別に指定するオプションもあります。こうした多くの内蔵された機能に加えて、マイクロミキシングまたはポピュレーションバランスの理論に基づいた反応シミュレーションをユーザー定義関数で実施できます。

FLUENT の反応モデルは完成された機能であり、幅広い用途をカバーしています。本ニュースレターの各記事は、その一例にすぎません。Fluent の Web サイト([www.fluent.com](http://www.fluent.com))にアクセスするか、お近くの Fluent オフィスまたは販売代理店にご連

絡くだされば、さらに多くの事例をご覧いただけます。