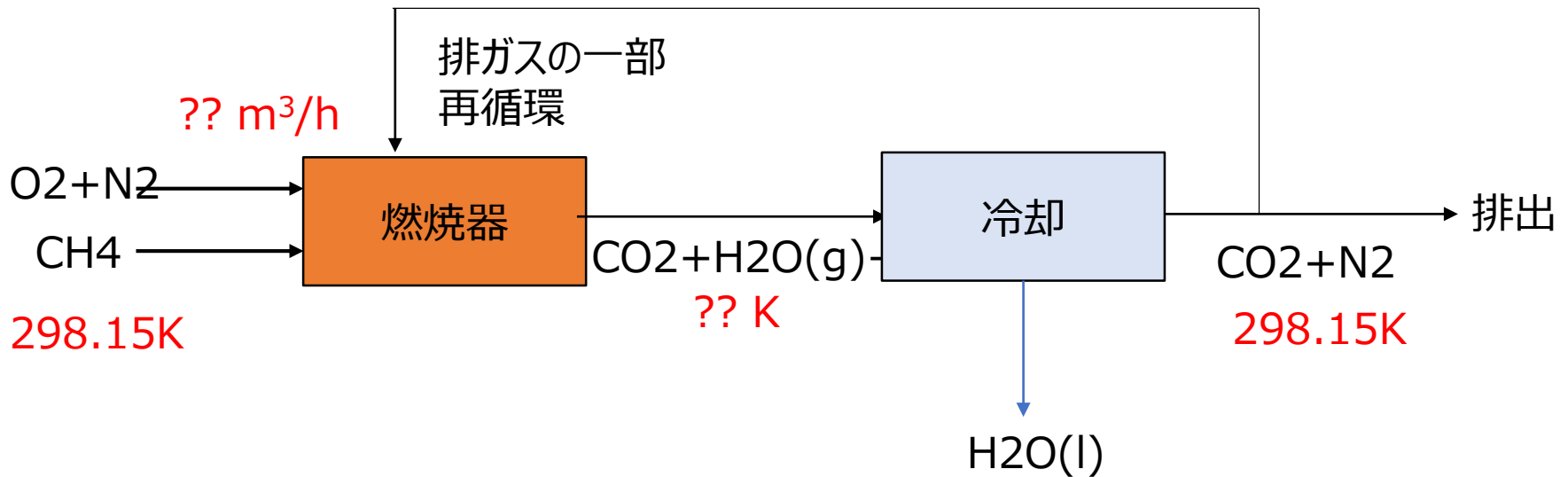


Modelicaライブラリ勉強会

2018/11/24

やりたいこと：熱物質収支計算をOpenModelicaで

目標：打倒As●en！



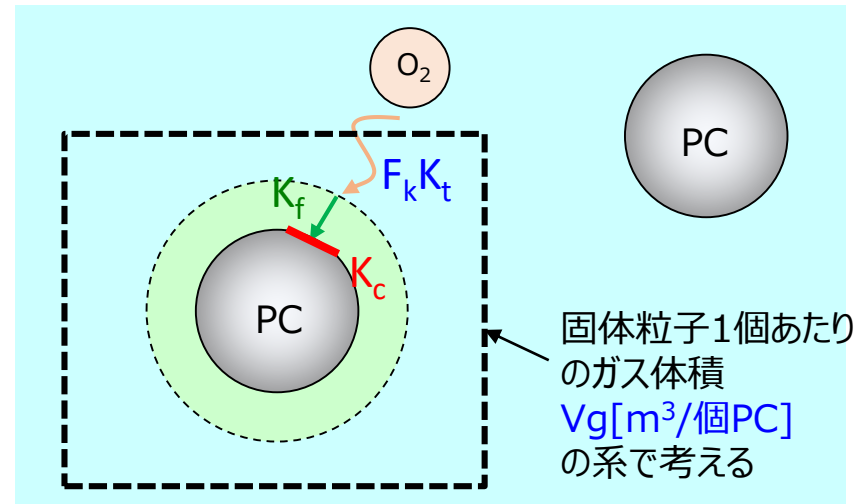
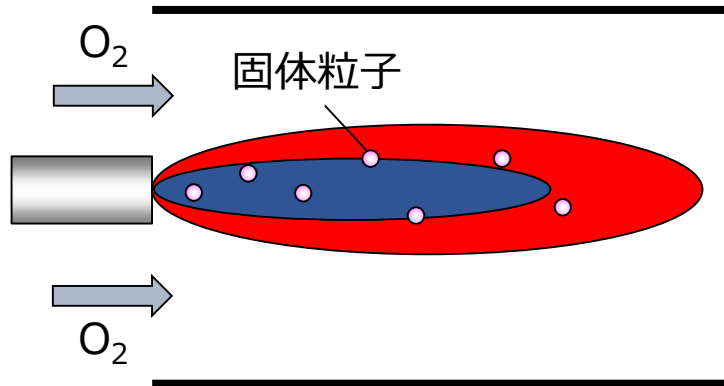
【本日のお題目】

①たくさんの微分方程式をModelicaで解く

(*)今回の内容は上図とは関係ありません。

0次元固体粒子燃焼モデル

S. Yagi, D. Kunii: Symposium (International) on Combustion, 5 (1955), 231.



$$\frac{1}{K} = \frac{1}{K_c} + \frac{1}{K_f} + \frac{1}{F_k K_t}$$

燃焼 速度	表面 反応	境界 膜拡散	乱流 混合
----------	----------	-----------	----------

★ $F_k(>1)$: バーナーによる混合促進効果

$$K_c = 6.5 \times 10^5 \cdot T_f^{0.5} \exp\left(-\frac{22000}{T_f}\right)$$

$$K_f = 3.7 \times 10^{-5} \cdot \frac{1}{D_p} \cdot \frac{101325}{P} \cdot \left(\frac{T_f}{273}\right)^{1.75}$$

$$K_t = 0.06774 \frac{V_g(t)}{D_p^2(t)} \frac{U_f(t)}{D_f}$$

$$\left[D_f = \sqrt{\frac{4V_f}{\pi D_R}}, \quad U_f(t) = \frac{V_g(t) \frac{W_s^0}{m_p^0}}{\frac{\pi}{4} D_f^2} \right]$$

0次元固体粒子燃焼モデル(連立常微分方程式)

固体粒子1個あたりの連立微分方程式

まずはCだけ燃焼と考える

$$\frac{dm_p(t)}{dt} \frac{E_C}{M_C} = 2 \frac{dn_{O_2}(t)}{dt}$$

(1) 固体粒子中Cガス化速度[kmol/s/個PC]

$$\frac{dn_{O_2}(t)}{dt} = -\pi \left(D_p(t) \right)^2 K(t) \frac{n_{O_2}(t)}{V_g'(t)}$$

(2) 酸素消費速度[kmol/s/個PC]

$$\frac{dn_{CO}(t)}{dt} = -2 \frac{dn_{O_2}(t)}{dt}$$

(3) CO生成速度[kmol/s/個PC]

$$\frac{dH_g(t)}{dt} = - \frac{dm_p(t)}{dt} Q$$

(4) 燃焼発熱速度[J/s/個PC] (*) 熱は全量ガスへ行く

$$n_t(t) = n_{O_2}(t) + n_{N_2} + n_{CO}(t)$$

(5) モル数換算式

$$H_g(t) = n_t(t) \cdot C_{pg}(T_g(t) - T_{ref})$$

(6) 温度換算式

$$V_g'(t) = \frac{n_t(t) R T_g(t)}{P}$$

(7) 体積換算式

$$\eta(t) = \frac{m_p(0) - m_p(t)}{m_p(0) E_C}$$

(8) 燃焼率換算式

$V_g'(t)$: 固体粒子1個あたりのガス体積(m³/個PC)

$n_{O_2}(t), n_{N_2}(t), n_{CO}(t), n(t)$: 1粒子あたりの周囲ガスにおけるO₂、N₂、CO、トータル分子モル数(kmol/個PC)

C_p : ガスの比熱 ~7/2R(J/kmol/K)

Q : 固体粒子1kg中が燃焼した際の発熱量(J/kgPC) = $\frac{E_C}{M_C} h_{CO}^0$ (注)生成ガス: COのみを仮定

$H_g(t)$: 1粒子あたりの周囲ガスのエンタルピー(J/個PC), $T_g(t)$: ガス温度(K)

$h_{CO}^0 = -110.53$ kJ/mol

$m_p(t)$: 固体粒子質量(kg/個PC)

$M_C = 12.0107$ kg/kmol

地味な問題発生

```
model test
```

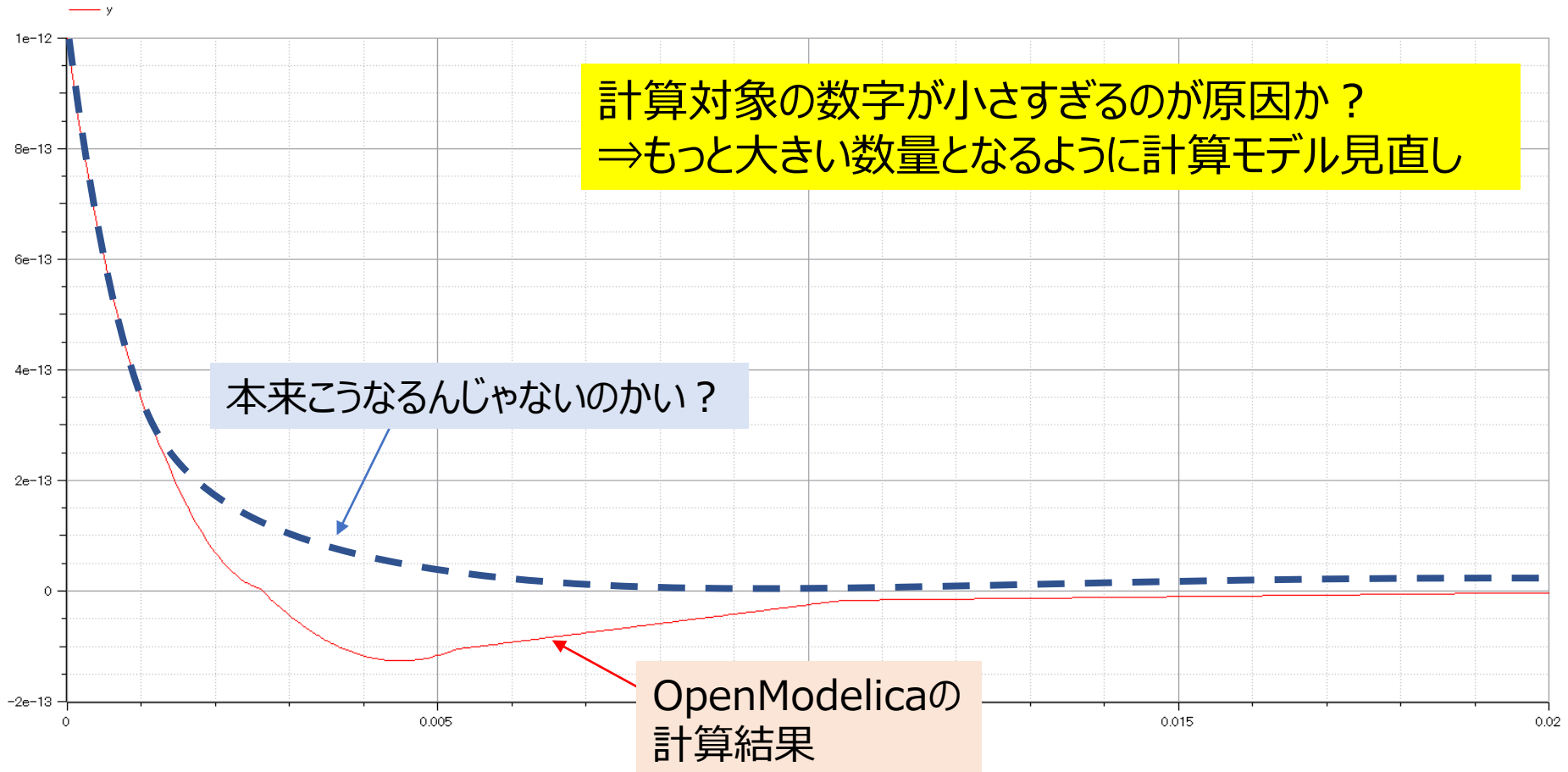
```
Real y(start=1.0e-12);
```

```
equation der(y)=-1000*y;
```

```
end test;
```

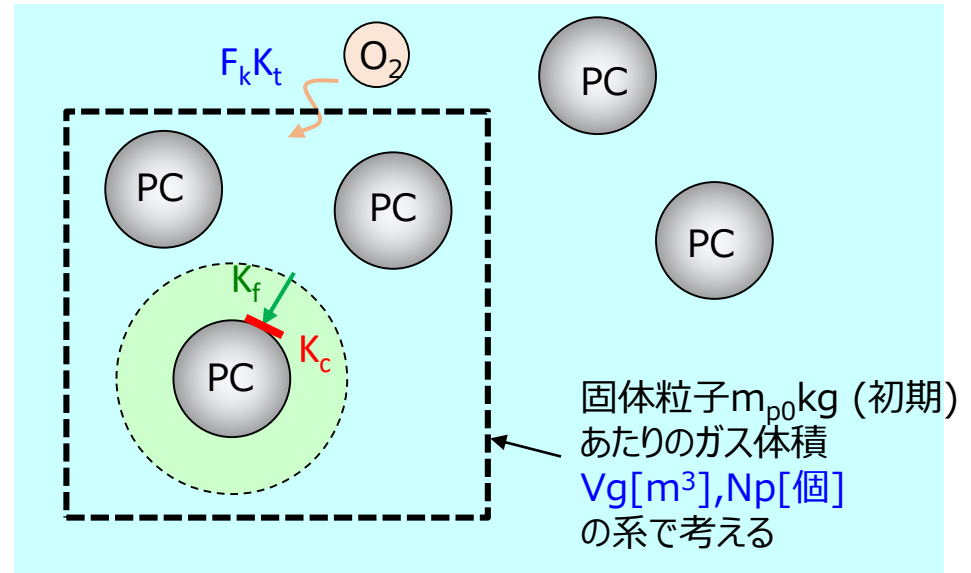
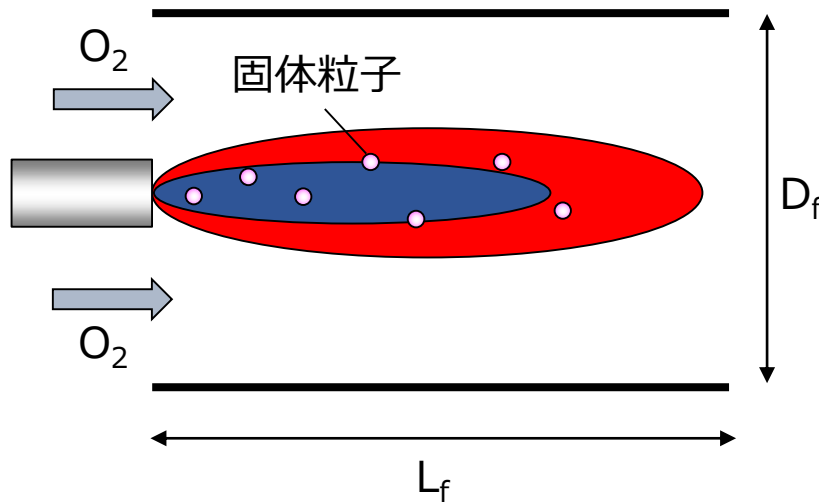
⇒解析解

$$y = 1.0 \times 10^{-12} \exp(-1000t)$$



0次元固体粒子燃焼モデル

S. Yagi, D. Kunii: Symposium (International) on Combustion, 5 (1955), 231.



$$\frac{1}{K} = \frac{1}{K_c} + \frac{1}{K_f} + \frac{1}{F_k K_t}$$

燃焼 速度	表面 反応	境界 膜拡散	乱流 混合
----------	----------	-----------	----------

★ $F_k (>1)$: バーナーによる混合促進効果

$$K_c = 6.5 \times 10^5 \cdot T_f^{0.5} \exp\left(-\frac{22000}{T_f}\right)$$

$$K_f = 3.7 \times 10^{-5} \cdot \frac{1}{D_p} \cdot \frac{101325}{P} \cdot \left(\frac{T_f}{273}\right)^{1.75}$$

$$K_t = 0.06774 \cdot \frac{V_g(t)}{N_p} \frac{1}{D_p^2(t)} \frac{U_f(t)}{D_f}$$

0次元固体粒子燃焼の式(連立常微分方程式)

固体粒子 m_{p0} kgの連立微分方程式

$$\frac{dm_p(t)}{dt} \frac{E_C}{M_C} = 2 \frac{dn_{O_2}(t)}{dt}$$

$$\frac{dn_{O_2}(t)}{dt} = -N_p \frac{\pi (D_p(t))^2}{m_p^1} K(t) \frac{n_{O_2}(t)}{V_g(t)}$$

$$\frac{dn_{CO}(t)}{dt} = -2 \frac{dn_{O_2}(t)}{dt}$$

$$\frac{dH_g(t)}{dt} = - \frac{dm_p(t)}{dt} Q$$

$$n_t(t) = n_{O_2}(t) + n_{N_2} + n_{CO}(t)$$

$$H_g(t) = n_t(t) \cdot C_{pg} (T_g(t) - T_{ref})$$

$$V_g(t) = \frac{n_t(t) R T_g(t)}{P}$$

$$\eta(t) = \frac{m_p(0) - m_p(t)}{m_p(0) E_C}$$

まずはCだけ燃焼と考える

(1) 固体粒子中Cガス化速度[kmol/s]

(2) 酸素消費速度[kmol/s]

(3) CO生成速度[kmol/s]

(4) 燃焼発熱速度[J/s/kgPC(daf)]

(5) モル数換算式

(*) 熱は全量ガスへ行く

(6) 温度換算式

(7) 体積換算式

(8) 燃焼率換算式

$V_g(t)$: 固体粒子 m_{p0} kgあたりのガス体積(m^3)

$n_{O_2}(t), n_{N_2}(t), n_{CO}(t), n(t)$: 固体粒子 m_{p0} kgあたりの周囲ガスにおける O_2, N_2, CO , トータル分子モル数(kmol)

C_p : ガスの比熱 $\sim 7/2R$ (J/kmol/K)

Q : 固体粒子(可燃分)1kgが燃焼した際の発熱量(J/kgPC(daf)) = $\frac{E_C}{M_C} h_{CO}^0$ (注) 生成ガス: COのみを仮定

$H_g(t)$: 固体粒子 m_{p0} kgあたりの周囲ガスのエンタルピー(J), $T_g(t)$: ガス温度(K)

N_p : 固体粒子 m_{p0} kgあたりの粒子個数 = $\frac{m_p(0)}{\rho_p(0) \frac{\pi}{6} \pi (D_p(0))^3}$

$h_{CO}^0 = -110.53$ kJ/mol

$M_C = 12.0107$ kg/kmol

ソース “run” (1)

```
model run
  Real mp(unit="kg/h") "Mass of Solid Particles";
  Real no2(unit="kmol/h") "O2 mol";
  Real nco(unit="kmol/h") "CO mol";
  Real nn2(unit="kmol/h") "N2 mol";
  Real nt(unit="kmol/h") "Total mol";
  Real hg(unit="J/h") "Gas Enthalpy";
  Real tg(unit="K") "Gas Temperature";
  Real vg(unit="m3") "Gas Volume";
  Real k(unit="m/s") "Reaction rate coefficient";
  Real cpg(unit="J/mol/K") "Heat capacity of the gas";
  Real eta "Combustion efficiency";
  Real np(unit="1/h") "Particle number";
  Real uf(unit="m/s") "Gas Velocity";
  Real x(unit="m",start=0.0) "position";
```

主要変数

no2 : 酸素モル数

nco : COモル数

hg : ガスエンタルピー (比熱CPは一定 = $7/2R$ とした)

k : 固体燃料表面の反応速度係数(前述)

vg: ガス体積 (燃焼が進むと膨張して酸素濃度が下がる効果を入れるため)

ソース “run” (2)

```
_parameter Real tg0(unit="K")=298.15 "Initial Gas Temperature";
parameter Real vo20(unit="Nm3/h")=21.0 "Initial O2 Volume";
parameter Real vn20(unit="Nm3/h")=79.0 "Initial N2 Volume";
parameter Real vco0(unit="Nm3/h")=0.0 "Initial CO Volume";
parameter Real mp0(unit="kg/h")=10.0 "Initial mass of particles";
parameter Real rhop0(unit="kgPC0/m3")=1000.0 "Initial Particle density";
parameter Real dp0(unit="m")=5.0e-5 "Initial particle diameter";
parameter Real p(unit="Pa")=101325.0 "Absolute Pressure";
parameter Real EC(unit="kg-C/kgPC0")=0.88 "Carbon contents in solid particle";
parameter Real Q(unit="J/kgPC0")=9202627.657
                                "Combustion heat of particles, C+O2->CO";
parameter Real TF(unit="K")=2273.15 "Flame Temperature";
parameter Real DF(unit="m")=0.1 "Flame diameter";
constant Real MC(unit="kg-C/kmol")=12.0107 "Atmic Weight of C";
constant Real R(unit="J/kmol/K")=8314.4598 "Gas Constant";
constant Real PI=3.141592653589793238;
```

【計算条件】

空気：100Nm³/h

固体燃料：10kg/h

(粒径50μm、88%グラファイト)

} 酸素過剰率1.2くらい

火炎(炉壁)温度=2000℃ (固体燃料は輻射加熱で燃える)

ソース “run” (3)

Algorithm

```
cpg:=7.0/2.0*R;  
np:=mp0/(rhop0*PI*dp0*dp0*dp0/6.0);
```

} 定数
(Algorithmに書くのが良いのか?)

initial equation mp=mp0;

```
no2=101325.0*vo20/(R*298.15);  
nn2=101325.0*vn20/(R*298.15);  
nco=101325.0*vco0/(R*298.15);  
hg=nt*cpg*(tg0-298.15);
```

} 初期条件構築
Nm3⇒mol換算
温度⇒エンタルピー換算

Equation

```
uf=vg/(PI*DF*DF/4.0)/3600.0;  
k=kr(tf=TF,dp=dp0,p=p,vg=vg,df=DF,uf=uf,np=np);  
der(mp)*EC/MC=2.0*der(no2);  
der(no2)=-np*PI*dp0*dp0*no2/vg;  
der(nco)=-2.0*der(no2);  
der(nn2)=0.0; ←これ入れないとエラー  
der(hg)=-der(mp)*Q;  
nt=no2+nn2+nco;  
hg=nt*cpg*(tg-298.15);  
vg=nt*R*tg/p;  
eta=(mp0-mp)/(mp0*EC);  
der(x)=uf;  
end run;
```

} 前述式(1)-(8)
+nn2の式1個

移動距離 (おまけ)

ソース “kr”

```
function kr "Reaction Rate Constant (m/s)"
```

```
  input Real tf(unit="K");  
  input Real dp(unit="m");  
  input Real p(unit="Pa");  
  input Real vg(unit="m3/h");  
  input Real df(unit="m");  
  input Real uf(unit="m/s");  
  input Real np(unit="1/h");  
  output Real k(unit="m/s");
```

```
Protected
```

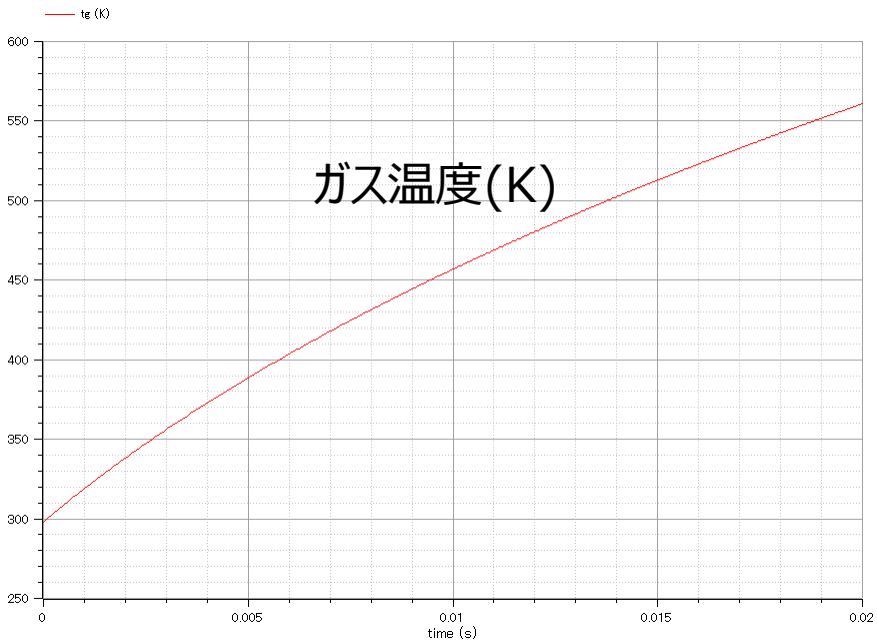
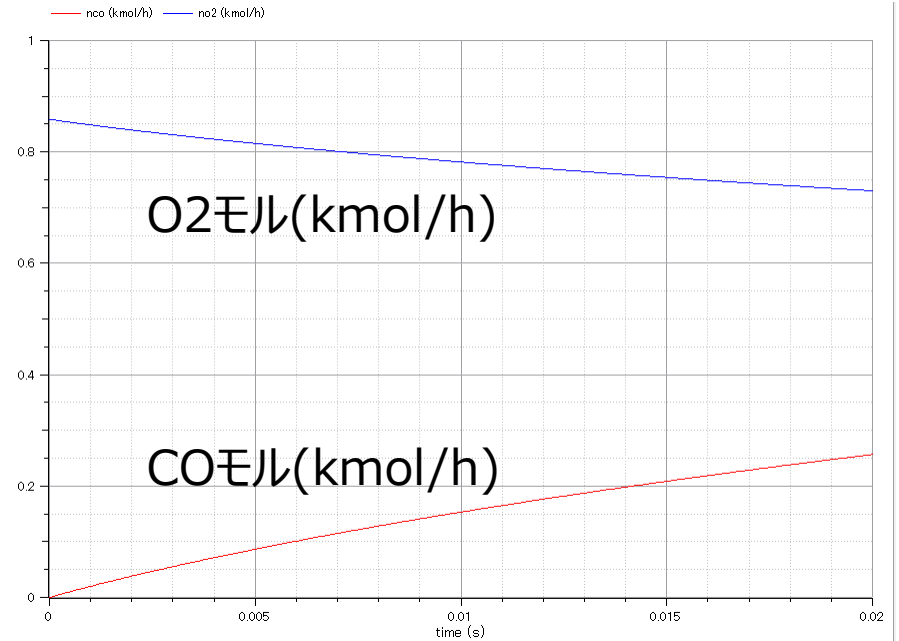
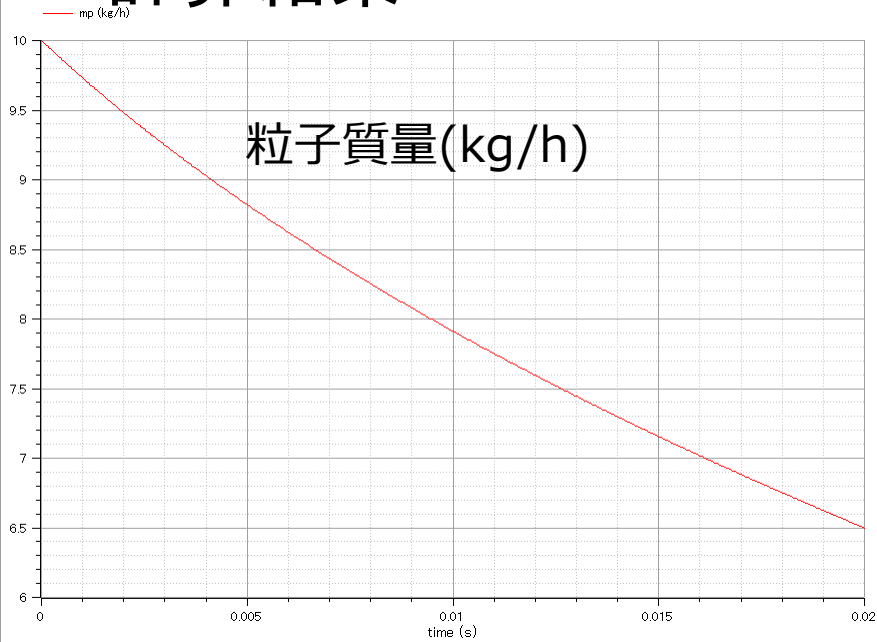
```
  Real kc(unit="m/s");  
  Real kf(unit="m/s");  
  Real kt(unit="m/s");  
  Real pi=3.141592653589793238;
```

```
Algorithm
```

```
  kc:=6.5e5*(tf^0.5)*exp(-22000.0/tf);  
  kf:=3.7e-5/dp*(101325.0/p)*(tf/273.15)^1.75;  
  kt:=0.06774*vg*uf/(np*dp*dp*df); k:=1.0/((1.0/kc)+(1.0/kf)+(1.0/kt));  
end kr;
```

前述の粒子表面の反応速度係数

計算結果



一応解けた。(あっているかどうかは未確認)

このまま計算を続けると、粒子質量がマイナスまで行ってしまう問題はあるが、まあよいか。。。

まとめ

【よかったところ】

- 一般的なツールで微分方程式を解く際は、解ける形に式変形をする必要があるが、Modelicaでは不要。
- 物理的意味を残したままコーディングできるので、後々理解しやすい。

【困っていること】

- 計算結果のデータが数字で取り出せない。
(さすがにプリントスクリーンでは。。。)
- 謎のエラー。何が悪いのだ??
[1] 18:41:59 Translation Warning
Assuming fixed start value for the following 1 variables:
x:VARIABLE(start = 0.0 unit = "m") "position" type: Real
- 微分変数は時間(s)だけ？ 位置x(m)微分方程式もつくりたいのだが。