

令和 2 年 7 月 5 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H03180

研究課題名(和文) マイクロ燃焼場における振動燃焼現象を利用した計測と数値解析の融合に関する研究

研究課題名(英文) Study on fusion of measurement and numerical analysis using oscillatory combustion phenomenon in micro combustion field

研究代表者

丸田 薫 (Maruta, Kaoru)

東北大学・流体科学研究所・教授

研究者番号：50260451

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,600,000円

研究成果の概要(和文)：反応性流体，特に複雑な化学反応を伴う燃焼現象は，未だに数値予測のみに基づき機器設計を行うことが困難な分野として知られている。本研究はこの現状に一石を投じる目的で，当研究グループ独自のマイクロ燃焼現象を対象に，数値解析による燃焼現象予測を実施した。計測と数値解析の融合については現象の追尾が困難を極めたため，数値計算の精度を大きく向上させることを最初に行う方針に転換，研究期間中に正ヘプタンによる振動燃焼現象の数値的再現に成功している。計測融合の目標は未達であるが，数値解析結果は基礎燃焼分野で世界最高水準とされる学術誌に投稿され，採択となっている。今後も計測融合への試みを継続する。

研究成果の学術的意義や社会的意義

燃焼は，数値予測のみに基づき機器設計を行うことが未だに困難な分野として知られる。本研究ではその原因が「数値解析の対象となりうる標準的動的燃焼現象がそもそも存在しなかったこと」にあると考えた。そこで本グループの既往成果であるマイクロ燃焼現象，中でもFlames with repetitive extinction and ignition (FREI) と呼ばれる振動燃焼現象に着目した。その結果，実用燃料の成分であり低温酸化反応を呈する正ヘプタンによるFREIを，詳細化学反応を考慮した数値解析により再現した。実用燃焼器で鍵となる，自着火アシスト型燃焼を数値的に再現できた意義は大きい。

研究成果の概要(英文)：Reactive fluids, especially combustion phenomena involving complicated chemical reactions, are still known as fields where it is difficult to design equipment based only on numerical predictions. For the purpose of focusing on this situation, we carried out the prediction of combustion phenomenon by numerical analysis for the micro combustion phenomenon unique to this research group. Regarding the fusion of measurement and numerical analysis, it was extremely difficult to track the phenomenon, so we switched to our policy of first improving the accuracy of numerical calculation greatly, and succeeded in numerically reproducing the oscillatory combustion phenomenon with normal heptane during the research period. Although the goal of measurement fusion has not been achieved, the numerical analysis result has been submitted to the world's highest level academic journal in the field of fundamental combustion and accepted. We will continue to try to integrate measurements and computations.

研究分野：燃焼工学

キーワード：振動燃焼

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

本研究の当所の目的は、未だに数値予測のみによって予測することが困難な燃焼現象を対象に、数値予測を可能とする実験と数値解析の融合研究を実施することにあつた。対象には当研究グループ独自のマイクロ燃焼現象、中でも FREI を対象とすることで、数値予測の精度やその評価を定量的に行うことを目指した。

実験による現象の追尾を目指したが、火炎の追尾自体が困難を極めたため、方針を転換し、まずは FREI を対象に詳細化学反応を用いた計算が実施可能な水準を見極めることとした。これにより従来は未達であった低温酸化反応を呈する燃料による燃焼現象の数値予測技術向上に資することが出来ると考えた。

2. 研究の目的

前項で述べた背景に基づき、研究期間の途中で研究の直近の目的を転換し、低温酸化過程を含む FREI の反応過程及びそのダイナミクスを明らかにすることを目指した。そのためまずは、低温酸化を示さない炭化水素燃料であるメタンの FREI の数値計算を実施、その後ガソリン燃料の主成分の一つであり、強い低温酸化反応を示す炭化水素燃料である n-ヘプタンの FREI の数値計算を行うこととした。

3. 研究の方法

本研究では、マイクロ燃焼現象を観察するために独自に開発した、温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いる。MFR には対象とする混合気の消炎直径以下の内径を有する石英管をリアクタとして用い、外部熱源によって加熱することで管の上流側から下流側にかけて壁面温度が緩やかに上昇するような定常な壁面温度分布を与える。リアクタに流入させた燃料と酸化剤の予混合気は下流に流れるにつれ、壁面からの熱伝達によって加熱され、リアクタ内部に火炎が形成される。

MFR では流入流速の違いによって、3 つの異なる火炎形態が観察される。高流入流速条件では定常な伝播火炎 Normal flame が観察される。Normal flame は燃料の投入後、高い壁面温度領域で自着火した火炎が上流方向に伝播し、予混合気の局所の流速と熱損失を受けた燃焼速度が一致する位置で定在する。中流入流速条件では、非定常火炎 Flames with repetitive extinction and ignition (FREI) が観察される。FREI は下流の高温域で自着火により生じた火炎が上流に伝播し、上流の低温域で熱損失が大きくなるため消炎した後、下流に流された予混合気が再び自着火するサイクルを高速に繰り返す現象である。低流入流速条件では、着火反応が熱暴走に至らないため、微弱な発光を有する Weak flame が観察される。本研究では FREI を対象とした研究を行う。

数値計算にはオープンソースの CFD ソフトウェアである OpenFOAM を用い、MFR の計算領域は壁面と気相間の熱輸送を考慮できるように 2 次元軸対称でモデル化した。また、支配方程式には、ナビエ-ストークス方程式、エネルギー方程式、化学種保存式を解いた。燃料にはメタン/空気及び n-ヘプタン/空気予混合気を用い、メタンの反応モデルには 38 化学種、291 素反応からなる詳細化学反応機構 FFCM-1 を、n-ヘプタンには Lawrence Livermore National Laboratory の n-Heptane, Detailed Mechanism を Yoo らによって簡略化された反応機構(以降 Lu-mech.)を用いた。

計算領域は流れ方向(x 方向)に 100 mm、半径方向 (r 方向)に 1 mm とし、格子点数は x 方向に 7000 点、r 方向に 100 点とした。格子収束は、x 方向 10000 点の数値計算と自着火位置及び消炎位置で比較し、結果が一致することを確認した。

境界条件は、メタン及び n-ヘプタンで同様の条件とし、流入境界条件は当量比 $\phi = 1.0$ 、流入流速 u は実験での FREI の観測条件である $u = 15.0$ cm/s とした。また、圧力は大気圧条件である 1.0 atm とした。壁面の速度境界条件は滑りなしとし、温度境界条件は、等温境界条件を tanh 関数によって与えた。このとき、流入温度は $T_{min} = 300.0$ K、最高温度 $T_{max} = 1350.0$ K とし、係数 β は過去に行った実験をもとに非線型最小二乗法を行い決定した。非線型最小二乗法は tanh 関数のようにモデル関数のパラメータが線形結合でない場合に Gauss-Newton 反復により近似曲線を求めることができる手法である。また、本計算では初期条件として計算領域を全て窒素で満たして、温度を 300K とし計算を開始した。

4. 研究成果

4.1 2次元分布

n-ヘプタン/空気予混合気の FREI の 10 サイクル目における熱発生速度の分布の時間履歴を図 1 に示す。この時、画像間の時間間隔は $\Delta t = 2.0$ ms であり、9 サイクル目の FREI の消炎後を t

= 0 msec と設定した。図 1 の熱発生速度の分布より、 $t =$ 約 12 msec から、低温の壁面温度域に熱発生が現れることがわかる。この低温の壁面温度域における熱発生速度は生成後、少し上流側に移動したのち、壁面温度約 710 K 付近で定在する。この低温の熱発生は燃料 n -C₇H₁₆ の低温酸化で CH₂O が生成するという冷炎の反応である。下流の高音域で現れる熱炎の着火後、熱炎が定在冷炎より下流領域を伝播する時、冷炎生成物である CH₂O も消費されていく

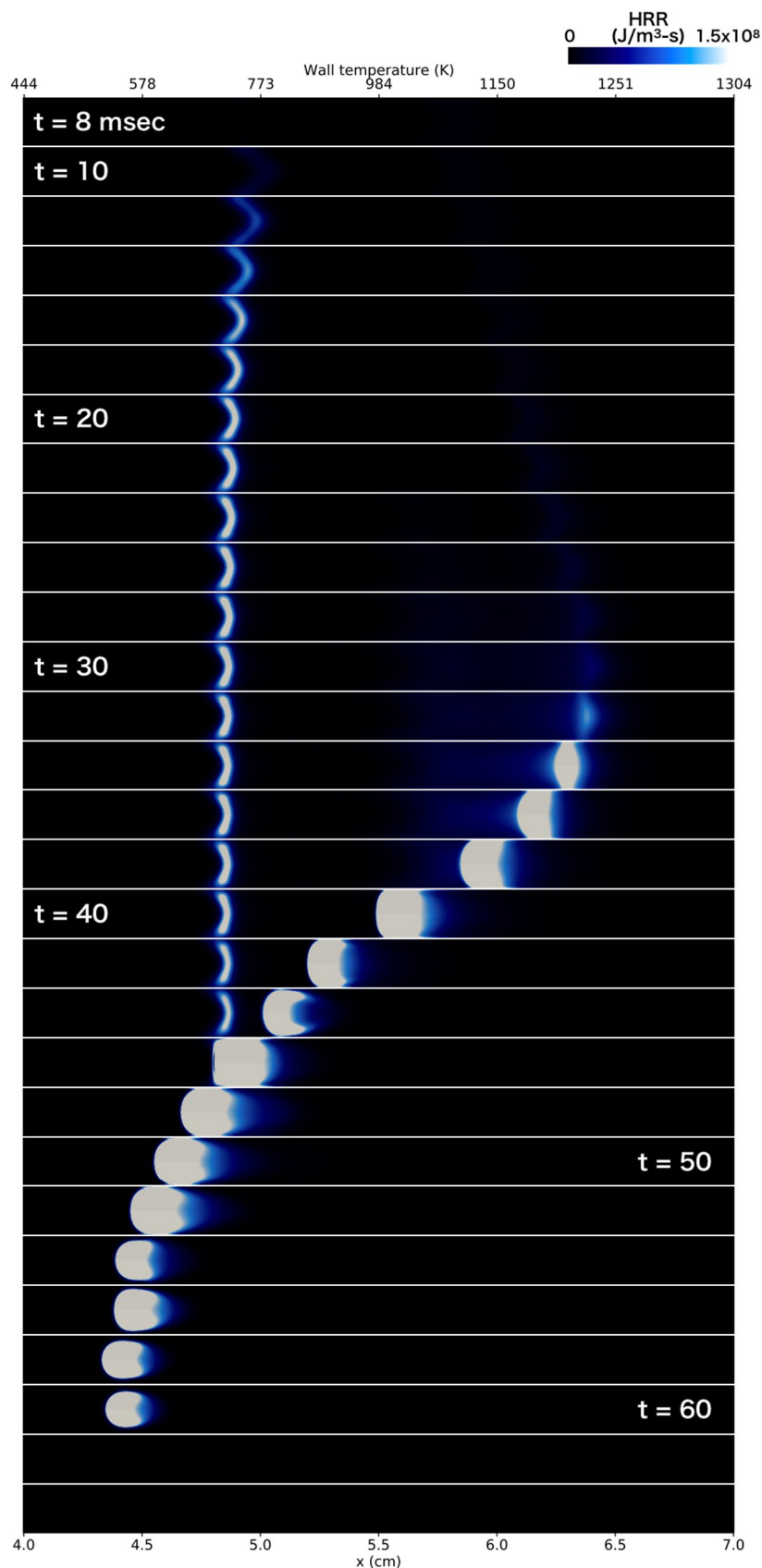


Fig. 1 Heat release rate distributions ($0 - 1.5 \times 10^8 \text{ J/m}^3\text{-s}$) at the selected time steps for a stoichiometric n -heptane/air mixture at $p = 1 \text{ atm}$, $u = 15 \text{ cm/s}$.

4.2 中心軸上における化学種分布及び熱発生速度

ここでは、低温火炎を含むより詳細な反応過程を調査するため、(I)から(VI)の6ステップに分けて、各ステップにおける中心軸上における熱発生速度、温度、n-C7H16、CO、CO₂、CH₂O、H₂O₂のモル分率を図2に示す。まず、始めに熱炎消炎後の図8(I) $t = 0$ msecに着目すると、 $x = 5.6$ と $x = 4.6$ cmの位置に熱発生速度のピークが存在しており、これらをそれぞれP1、P2とする。熱発生速度ピークP2の位置には流入燃料であるn-C7H16と生成物であるCO₂が存在している。よって、P2はn-C7H16の微量な酸化反応によって生じる熱発生速度ピークであると考えられる。一方、熱発生速度ピークP1の位置では、燃料であるn-C7H16は存在せず、中間生成物であるCOが多く分布している。よって、P1は前サイクルで熱炎が伝播している際に完全に酸化しきらず残ったCO等の中間生成物により生じる熱発生速度ピークであると考えられる。

次に、図2(II) $t = 21$ msecになると、熱発生速度ピークP1とP2はともに下流への流されていることがわかる。この時、P2の熱発生速度は急激に増加している一方、P1はより高い壁面温度域側に流されているにもかかわらず、P1の熱発生速度はほとんど変化がない。温度分布に着目すると、P2のピーク位置において気相温度が壁面温度に比べ約140 Kの増加がみられた。次にP2における化学種分布に着目すると、n-C7H16の消費及び、CO、CH₂O、H₂O₂の生成が確認できる。特にCH₂O、H₂O₂は冷炎の代表的な生成物として知られており、P2は冷炎によって生じる熱発生速度ピークであることがわかる。

図2(III) $t = 32$ msecでは、冷炎の熱発生速度であるP2の下流域では、燃料のn-C7H16でなく冷炎生成物であるCH₂OやH₂O₂が下流へと流されていることがわかる。熱発生速度分布に着目すると、P1とP2の間の領域である $x = 5.77$ cmの位置にP3が、 $x = 5.28$ cmの位置にP4が現れることがわかる。この内、まずP3について、P3位置の付近では、CH₂OやH₂O₂の消費反応とCOの生成反応が観察される。このCH₂O、H₂O₂の酸化によってCOが生成する反応は、青炎の反応として知られ、P3は青炎によって生じる熱発生であることがわかる。また、過去に行われた低流入流速条件で観察されるWeak flameを対象にした実験及び数値計算から、大気圧条件下での青炎の反応は緩やかに進行することが分かっており、本数値計算においても、P3付近の熱発生速度分布や、CH₂O、H₂O₂消費反応が緩やかでありその傾向が一致する。次に、P4は非常に小さい熱発生速度であり、P2の下流領域に存在する。この熱発生速度ピークP4の生成理由としては、LLNLの詳細反応モデルを用いて過去に行われたweak flameの数値計算で明らかとなっており、冷炎反応の酸化反応が反応する温度域の違いにより、P2とP4に分離したものである。1つ目のピークであるP2は高級炭化水素が酸化され、低級の炭化水素になるまでに生じる熱発生であり、2つ目のピークP4はC1の炭化水素と酸水素系の反応により生じる発熱である。

図2(IV) $t = 43$ msecでは、P1の熱発生速度が急激に上昇しており、P1が上流方向に伝播することがわかる。また、このn-ヘプタン/空気予混合気FREIのP1での着火を見ると、3章で述べたメタン/空気予混合気の前半のサイクルや、過去に行われた低級炭化水素を対象としたFREIの研究で観察されている着火核の分離現象は現れなかった。これは、前サイクルの時に反応しきらずに残った中間生成物によって生じる緩やかな進行する着火反応であるためだと考えられる。次に、図2(V) $t = 48$ msecでは、冷炎であるP2の下流領域を熱炎が上流に伝播している。この時、火炎面P1位置では、CH₂OとH₂O₂の急速な消費とCOとCO₂の生成が確認できる。よって、定在する冷炎を通過する前の熱炎は、冷炎生成物と反応しながら上流方向に伝播する。

図2(VI) $t = 55$ msecでは、熱炎であるP1は定在する冷炎の上流側を伝播している。この時、熱炎は冷炎生成物でなく流入燃料のn-C7H16やO₂と反応し伝播する。また、熱炎が伝播している際に、次サイクルの熱炎の着火につながる熱発生速度ピークP1'が生じる。また、P1の伝播後、下流方向に流される小さい熱発生速度ピークP5が現れる。

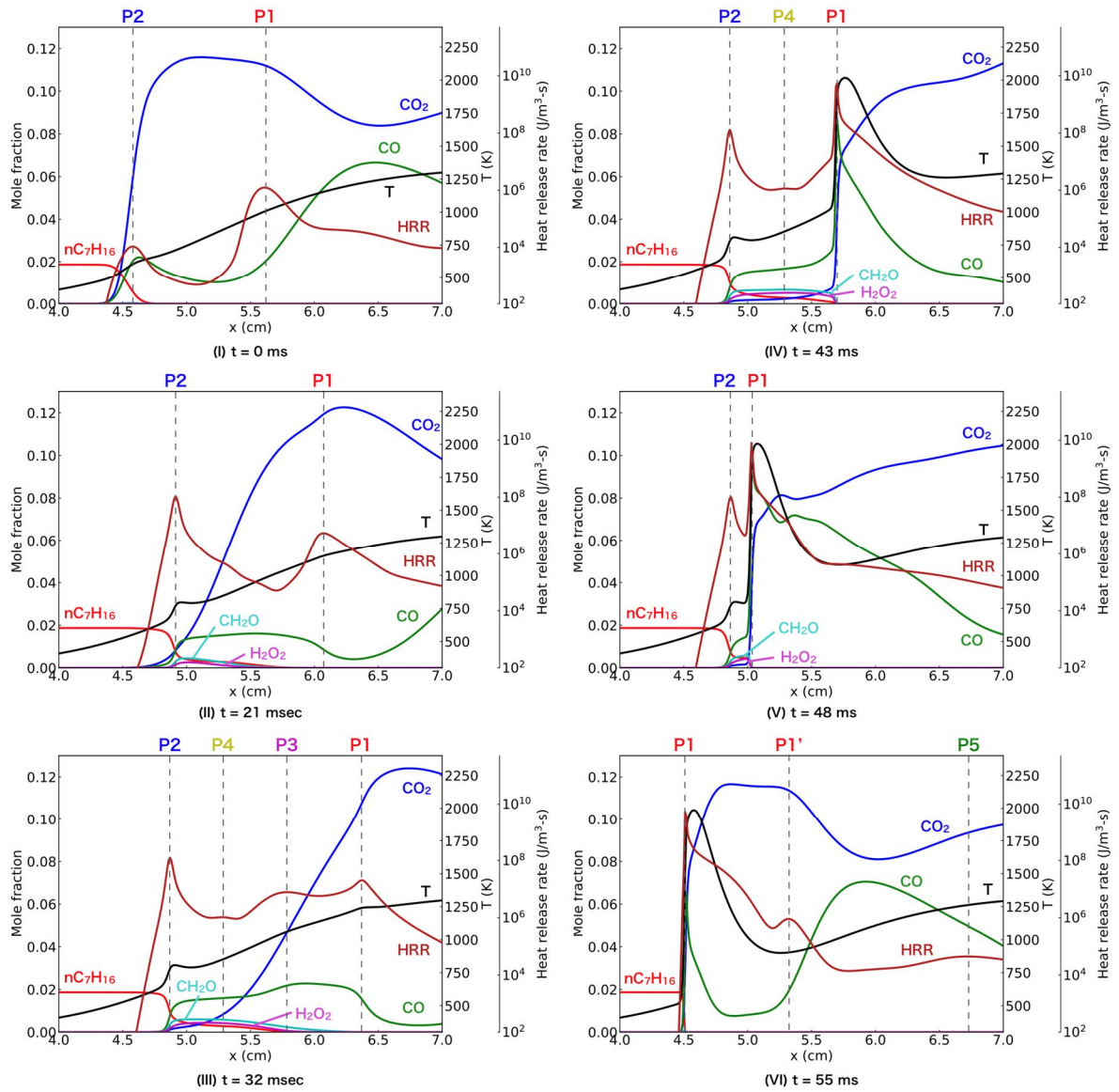


Fig. 2 Mole fraction, temperature and heat release rate distributions on the central axis at the selected time steps for a stoichiometric *n*-heptane/air mixture.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件(うち査読付論文 1件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件)

1. 著者名 Keisuke Akita, Youhi Morii, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Kaoru Maruta	4. 巻 38
2. 論文標題 2D computations of FREL with cool flames for n-heptane/air mixture	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of the Combustion Institute	6. 最初と最後の頁 TBD
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) not assigned since just accepted	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計1件(うち招待講演 0件/うち国際学会 1件)

1. 発表者名 Keisuke Akita, Yuhi Morii, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Susumu Hasegawa, Kaoru Maruta
2. 発表標題 Verification of Calculation Model on Unsteady Flame in a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile toward Data Assimilation
3. 学会等名 37th International Symposium on Combustion, WiP Poster, 2P088 (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	中村 寿 (Nakamura Hisashi) (40444020)	東北大学・流体科学研究所・准教授 (11301)	
研究分担者	森井 雄飛 (Morii Youhi) (50707198)	東北大学・流体科学研究所・助教 (11301)	