

令和 4 年 6 月 13 日現在

機関番号：11301

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2021

課題番号：19K14881

研究課題名(和文) 次世代超臨界流体システムに向けた多成分系超臨界流体熱流動の解明

研究課題名(英文) Numerical Simulation of Multi-component Supercritical Fluid Flows in Next-Generation Supercritical fluid Systems

研究代表者

古澤 卓 (Furusawa, Takashi)

東北大学・情報科学研究科・准教授

研究者番号：80637710

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,500,000円

研究成果の概要(和文)：超臨界流体は様々な分野で利用が拡大しているものの、超臨界流体の熱流動は十分に明らかになっていない。局所的に非平衡凝縮が生じる場合やナノ粒子が生成する場合、熱分解が生じる場合などでは様々な成分を含む超臨界流体の流動を解明する必要がある。本研究では、熱分解反応を伴う超臨界炭化水素流動について、多成分炭化水素の熱物性値を考慮した流動解析を実施して加熱管路内部の熱流動を再現した。また、前処理法におけるDouble Fluxモデルを提案した。さらに、連続水熱合成反応の超臨界水と常温水溶液の混合流動や遠心圧縮機動静翼列周りの非平衡凝縮を考慮した流動の数値計算を実施した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

超臨界水は酸化金属ナノ粒子生成の溶媒として用いられ、超臨界二酸化炭素はブレイトンサイクルやアラムサイクルの作動流体、急速膨張法のナノ粒子生成の溶媒として用いるなど超臨界流体は微粒子生成や抽出、薄膜生成、発電システムなどの様々な工業的な利用が提案されており、エネルギー効率や環境面の優位性からさらなる利用の拡大が期待されている。一方で高圧条件であることから実験による詳細な流動の解明は難しく、超臨界流体の流動は十分に明らかになっていなかった。本研究によって多成分の超臨界流体流動や液滴が混ざった高圧気体流動について流動解析が達成されたことで、今後の超臨界流体の利用拡大に貢献した。

研究成果の概要(英文)：Supercritical fluids have been widely used as reasonable and safe solvents and coolants in many industrial fields. The supercritical-fluid flow is different from that under normal pressure conditions due to rapid changes in density and isobaric specific heat near the pseudo-critical temperature. Furthermore, the multicomponent effects of thermophysical properties may affect the thermal flow at supercritical conditions. We conducted supercritical hydrocarbon flow simulations with pyrolysis and considered the multicomponent effects of the changes in thermophysical properties. We developed a double flux model for preconditioned fundamental equations. The mixing flow of supercritical water in continuous hydrothermal synthesis and the nonequilibrium condensation in a radial compressor were simulated.

研究分野：数値流体力学

キーワード：数値流体力学 超臨界流体 炭化水素流れ 非平衡凝縮

1. 研究開始当初の背景

超臨界水は酸化金属ナノ粒子生成において溶媒として用いられ、超臨界二酸化炭素はブレイトンサイクルやアラムサイクルの作動流体、急速膨張法のナノ粒子生成の溶媒として用いられるなど微粒子生成や抽出、薄膜生成、発電システムなどの様々な領域で超臨界流体の工業的な利用が提案されており、エネルギー効率や環境面の優位性からさらなる利用の拡大が期待されている。臨界点近傍では密度や定圧比熱などの熱物性値が急激かつ連続的に変化することが知られており、超臨界流体の流動は理想気体とは大きく異なる。また、高圧高温条件のために超臨界流体の熱流動はほとんど明らかになっていない。特に実際の工業利用の多くでは超臨界流体は単体で用いられるわけではなく、複数の物質が溶解もしくは混合している。例えば、次世代航空機用スクラムジェットエンジンに用いられる超臨界炭化水素を用いた熱交換器では加熱に伴う熱分解によって管路の中に複数の物質が生じる。また、超臨界二酸化炭素ブレイトンサイクルでは局所的に凝縮が生じるために気相中に微小な液滴が混在している。これらの流動は単一の超臨界流体の流動特性とは大きく異なることが予想されるために、臨界点近傍の多成分流体の熱流動を正確に予測することができる数値計算法の確立が急務となっていた。

2. 研究の目的

本研究では次世代発電サイクルにおける回転機械内部の熱流動、化学反応プロセスにおける反応器内部流動、化学反応を伴う熱交換器内部流動などの臨界点近傍の複数流体が混在した流動問題の解決を目的とし、臨界点近傍の複数流体、液滴などが混在した流動問題の解決を図る。特に理想気体、単一流体の流動とは大きく異なる多成分超臨界流体の熱流動を明らかにすることで、超臨界流体の工業利用における流動の諸問題の解決に寄与することを目的とした。

3. 研究の方法

再生冷却法とは燃料もしくは酸化剤を冷媒として使用する航空宇宙機の高効率冷却システムであり、再使用型宇宙往還機における使用を想定した高分子炭化水素燃料による再生冷却法が検討されている。高分子炭化水素は、高密度のため燃料タンクの小型化が可能であることや、取り扱いが容易であることなど、航空機燃料としての好ましい特性を備えているものの、冷却管路の内部流動には未解明の点が多い。特に高温条件下では熱分解によって複数の流体が混在した超臨界条件での流動となる。本研究では KUCRS に定義されている反応モデルを用いて、Cantera にて 0 次元計算を行うことで反応速度を温度の関数とした加熱分解モデルを構築した。また、熱物性値について以下のような熱物性値の補間式を用いて流動解析を行った。ここで、各物質の熱物性値はすべて REFPROP に定義された多項式型の状態方程式によって算出した。

$$\frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{\rho_i(p, T)}$$

$$\rho_p = \rho^2 \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{\rho_i^2} \frac{\partial \rho_i}{\partial p}, \quad \rho_T = \rho^2 \sum_{i=1}^n \frac{Y_i}{\rho_i^2} \frac{\partial \rho_i}{\partial T}, \quad \rho_{Y_i} = \rho^2 \left(\frac{1}{\rho_n} - \frac{1}{\rho_i} \right)$$

超臨界水を反応溶媒として利用したナノ粒子合成法の一つとして連続超臨界水熱合成が提案されている。この方法は流通式の反応器内部で常温金属塩水溶液を超臨界水と混合し、急速昇温することで酸化金属ナノ粒子を生成させる手法である。特に臨界点近傍では水の極性の変化により反応速度、溶解度が連続的かつ急激に変化するため、ナノサイズの酸化金属粒子を均質に生成させることができる。この反応では、微粒子の生成や成長が反応器内の超臨界水の熱流動に大きく影響されるため、混合における温度分布や流速分布などの詳細な評価が求められる。原料となる金属塩、生成物である酸化金属の保存式を基礎方程式に追加して混合流動と水熱合成反応の関係を評価した。また、反応率として図1に示す実験によって得られた反応速度を用いた。

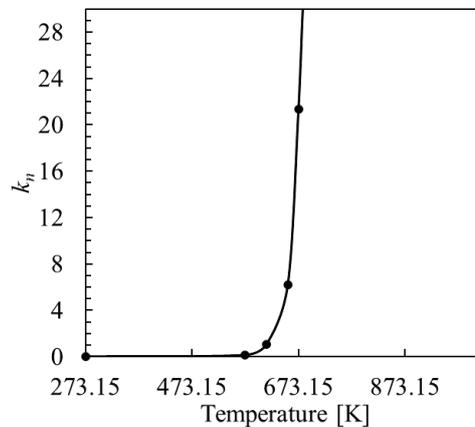


図1. 水熱合成反応の反応速度。

超臨界二酸化炭素ブレイトンサイクルは多様な熱源を選択できること、低温の熱源を利用可能であること、設備の小型化が可能なことから研究開発が進められている。超臨界二酸化炭素ブレイトンサイクルの圧縮機翼前縁では流れが加速されることで温度・圧力が低下し、蒸気圧曲線をまたいで非平衡凝縮を起こす可能性が指摘されているものの、その評価は十分ではなかった。そこで凝縮による潜熱放出、液滴の密度を考慮した流動解析を実施した。ここで液滴核の生成率には実在気体効果を考慮した次式を用いた。

$$r^* = \frac{2\sigma}{\phi \rho_l R_g T \ln S - \Delta p v_l}$$

4. 研究成果

超臨界炭化水素を用いた再生冷却管路内部流動などの実在気体効果の強い遷臨界流れや異なる流体が混合する反応流では、界面における急峻な熱物性勾配によって圧力などに数値振動が生じやすいことが知られている。こうした数値振動を回避するためにまず Double Flux モデルを前処理法を用いた基礎方程式に導入した。数値流束は次式のようになる。

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{F}}_{j+1/2}^R &= \tilde{\mathbf{F}}_{j+1/2}(\hat{Q}_{j+1/2}^L, \hat{Q}_{j+1/2}^R; \varphi_{j+1}) \\ \tilde{\mathbf{F}}_{j+1/2}^L &= \tilde{\mathbf{F}}_{j+1/2}(\hat{Q}_{j+1/2}^L, \hat{Q}_{j+1/2}^R; \varphi_j).\end{aligned}$$

ここで $\varphi = T$ もしくは $\varphi = T$ and Y_1 である。

再生冷却法における加熱管路を模擬したオクタンおよびドデカンの流動解析を実施し、それぞれの結果を実験結果と比較した。図2にデカンの加熱管路の温度分布および密度分布を示す。1 2成分程度を考慮することで加熱管路内部の流動を再現できることを明らかにし、特に加熱面近傍における熱分解により低級炭化水素が多く存在し、単成分の場合と温度分布が大きく異なる結果となった。また、各物質および熱物性値に関して参照テーブルを作成し、それらを計算中で使用することで大幅な計算時間の短縮を達成した。

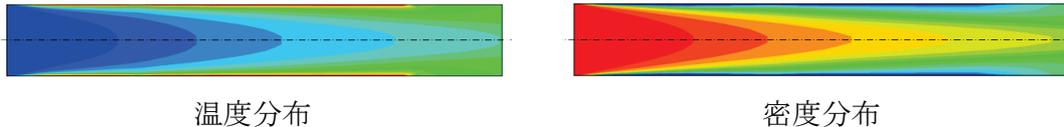


図2 ドデカンの加熱管路流動

連続水熱合成反応における超臨界水と常温水溶液を混合流動では、二流体の界面における大きな密度差や熱物性値の急激な変化によって、液体同士の混合とは全く異なる流動となると考えられる。しかし、反応器内部は高温高压となっており、混合部の管路幅は約 1 mm と細いため、実験による流動の詳細な解析は困難であり、数値計算による流動解析が必要とされている。図3に示すように温度条件およびレイノルズ数条件の異なる混合流動の解析を実施して実験結果との比較を行った。また、LES 流動解析も実施して密度差が非定常流動に大きな影響を及ぼすことを示した。一方で、本解析では水熱合成の反応率と混合流動を主に評価しており、粒子の生成および粒子と流動の相互関係の解明のためにさらなる数理モデルの構築、実験データの収集が望まれる。

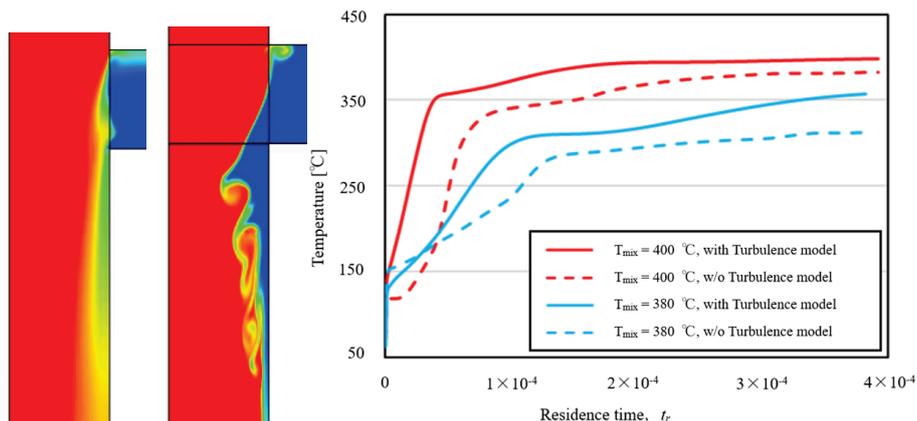


図3 超臨界水と常温水溶液の混合流動

超臨界二酸化炭素ブレイトンサイクルで使用される遠心圧縮機動静翼列を対象にチップクリアランスや非平衡凝縮を考慮した流動シミュレーションを行い、高压気体条件および臨界点近傍条件での計算結果を比較した。臨界点近傍条件で入口温度や流量係数の違いによって、入口温度が飽和蒸気圧曲線に近い場合や質量流量係数が大きい場合には液滴質量分率が高くなることを明らかにした。二次元 NACA0012 翼周りの非平衡凝縮を伴う超臨界二酸化炭素の流動解析を行い、翼上面の加速領域で温度および圧力が低

下することで過冷却となり, 非平衡凝縮に伴う液滴の生成, 成長が起ることを示した.

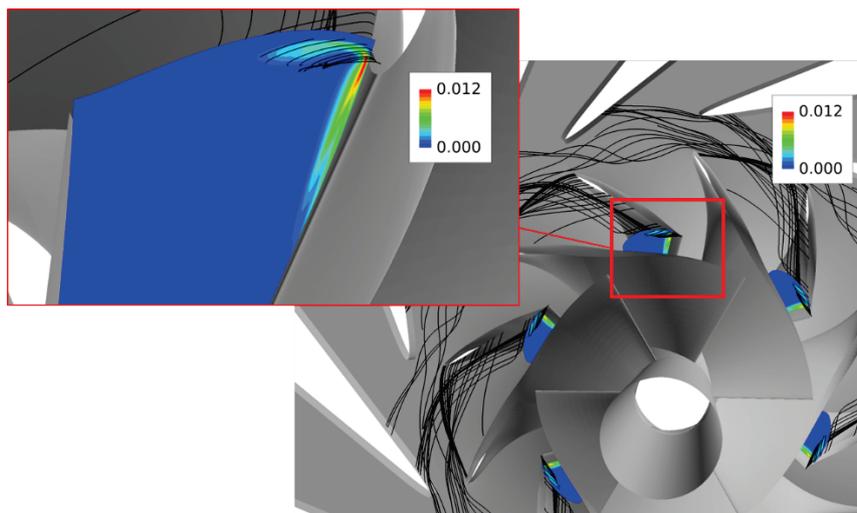


図4 遠心圧縮機内部の非平衡凝縮領域

【参考文献】

1. Takashi Furusawa, Shota Moriguchi, Hironori Miyazawa and Satoru Yamamoto, Real Gas Simulation for High-pressure and Low-pressure Nonequilibrium Condensation in Transonic Flows, Proceedings of Global Power and Propulsion Society, GPPS-BJ-2019-009, (2019).
2. Takashi Furusawa, Jianming Hao, Shota Moriguchi, Hironori Miyazawa and Satoru Yamamoto, Numerical Investigation of Supercritical CO₂ Flow in a Radial Compressor with Real Gas Model, Proceedings of International Gas Turbine Congress 2019, IGTC-2019-106, (2019).
3. Shuto Yatsuyanagi, Takashi Furusawa, Satoru Yamamoto, Takuo Onodera, Sadatake Tomioka, Numerical Investigation of Supercritical n-Dodecane Flows in a Heated Circular Pipe with Thermal Cracking, Proc. ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, FEDSM2021-65261, (2021),
4. Takashi Furusawa, Kenta Matsui, Shuto Yatsuyanagi, Satoru Yamamoto, Akira Yoko, Tadafumi Adschiri, Turbulent Flow Simulation of Supercritical Hydrothermal Synthesis in T-Shaped Channel, Proc. ASME Fluids Engineering Division Summer Meeting, (2021).
5. Shuto Yatsuyanagi, Takashi Furusawa, Hironori Miyazawa, Satoru Yamamoto, Takuo Onodera, Sadatake Tomioka, Numerical Study of Supercritical Octane Flow with Multicomponent Effects by Pyrolysis, International Journal of Thermal Sciences, 171, 107103, (2022).
6. Shuto Yatsuyanagi, Takashi Furusawa, Satoru Yamamoto, Double-flux Model for Supercritical Multicomponent Flows at Low Mach Numbers with Preconditioning Method, Journal of Computational Physics, 158, 111091, (2022).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 7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 Yatsuyanagi Shuto, Furusawa Takashi, Miyazawa Hironori, Yamamoto Satoru, Onodera Takuo, Tomioka Sadatake	4. 巻 171
2. 論文標題 Numerical study of supercritical octane flows with multicomponent effects by pyrolysis	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International Journal of Thermal Sciences	6. 最初と最後の頁 107193
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.ijthermalsci.2021.107193	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yatsuyanagi Shuto, Furusawa Takashi, Yamamoto Satoru	4. 巻 458
2. 論文標題 Double-flux model for supercritical multicomponent flows at low Mach numbers with preconditioning method	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Computational Physics	6. 最初と最後の頁 111091
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.jcp.2022.111091	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Takashi Furusawa, Kenta Matsui, Shuto Yatsuyanagi, Satoru Yamamoto, Akira Yoko, Tadafumi Adschiri	4. 巻 FEDSM2021-66023
2. 論文標題 Turbulent Flow Simulation of Supercritical Hydrothermal Synthesis in T-Shaped Channel	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of the ASME 2021 FED Summer Meeting	6. 最初と最後の頁 1-7
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Shuto Yatsuyanagi, Takashi Furusawa, Satoru Yamamoto, Takuo Onodera, Sadatake Tomioka	4. 巻 FEDSM2021-65261
2. 論文標題 NUMERICAL INVESTIGATION ON SUPERCRITICAL N-DODECANE FLOWS IN A HEATED CIRCULAR PIPE WITH THERMAL CRACKING	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Proceedings of the ASME 2021 FED Summer Meeting	6. 最初と最後の頁 1-9
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takashi Furusawa, Noriyuki Taki, Shuto Yatsuyanagi, Satoru Yamamoto, Takuto Miyaura, Sadatake Tomioka	4. 巻 AJKFluids2019-4797
2. 論文標題 Numerical Simulation of Supercritical Octane Flows in a Heated Circular Tube with Simple Thermal Cracking Mode	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proc. ASME-JSME-KSME 2019 8th Joint Fluids Engineering Conference	6. 最初と最後の頁 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Takashi Furusawa, Shota Moriguchi, Hironori Miyazawa and Satoru Yamamoto	4. 巻 GPPS-BJ-2019-009
2. 論文標題 Real Gas Simulation for High-pressure and Low-pressure Nonequilibrium Condensation in Transonic Flows	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Proceedings of Global Power and Propulsion Society	6. 最初と最後の頁 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 -

1. 著者名 山本悟, 古澤卓	4. 巻 47-6
2. 論文標題 非平衡凝縮を伴うマルチフィジックス熱流動のシミュレーション技術	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 日本ガスタービン学会誌	6. 最初と最後の頁 389-395
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計11件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 3件)

1. 発表者名 Kenta Matsui, Shuto Yatsuyanagi, Takashi Furusawa, Akira Yoko, Satoru Yamamoto, Tadafumi Adschiri
2. 発表標題 Numerical Simulation of Turbulent Mixing Flow in Supercritical Hydrothermal Synthesis Reactors
3. 学会等名 18th International Conference on Flow Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Shuto Yatsuyanagi, Takashi Furusawa, Satoru Yamamoto, Sadatake Tomioka, Takuo Onodera
2. 発表標題 Numerical Study on Supercritical N-Dodecane Flows with Endothermic Pyrolysis Reaction
3. 学会等名 18th International Conference on Flow Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 古澤卓, 山本勝將, 宮澤弘法, 山本悟
2. 発表標題 非平衡凝縮を伴う超臨界CO ₂ 遠心圧縮機内部流動解析
3. 学会等名 第99期流体工学部門講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 松井建太, 古澤卓, 山本悟, 横哲, 阿尻雅文
2. 発表標題 連続水熱合成反応器における超臨界水の乱流混合流動シミュレーション
3. 学会等名 第35回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 八柳秀門, 古澤卓, 山本悟, 小野寺卓郎, 富岡定毅
2. 発表標題 水平加熱矩形管内部における遷臨界炭化水素流動のLES
3. 学会等名 第35回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 古澤卓, 小島匠, 宮澤弘法, 山本悟
2. 発表標題 実在気体効果を考慮した高圧二酸化炭素の非平衡凝縮流れの数値解析
3. 学会等名 第34回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 八柳秀門, 古澤卓, 山本悟
2. 発表標題 熱分解を伴う遷臨界炭化水素流れの数値解析
3. 学会等名 第34回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Shuto Yatsuyanagi, Takashi Furusawa, Satoru Yamamoto, Sadatake Tomioka, Takuo Onodera
2. 発表標題 Numerical Investigation of Supercritical Hydrocarbon Flows with Pyrolysis
3. 学会等名 Proc. 17th International Conference on Flow Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 八柳秀門, 古澤卓, 山本悟, 志牟田晃大, 富岡定毅
2. 発表標題 熱分解反応を考慮した超臨界オクタンの加熱円管内部流動シミュレーション
3. 学会等名 第33回数値流体力学シンポジウム
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hao Jianming, 森口昇太, 宮澤弘法, 古澤卓, 山本悟
2. 発表標題 超臨界二酸化炭素の遠心圧縮機内部流動シミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会2019年度年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 八柳 秀門, 古澤 卓, 山本 悟, 志牟田 晃大, 富岡 定毅
2. 発表標題 熱分解を伴う超臨界オクタンの加熱円管内熱流動シミュレーション
3. 学会等名 日本機械学会2019年度年次大会
4. 発表年 2019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

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関