

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 5 月 19 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2013～2015

課題番号：25630061

研究課題名(和文) フーリエ級数型熱発生速度モデルの開発と燃焼数値計算の革新的高速化

研究課題名(英文) Development of reaction model with Fourier series and advanced acceleration of combustion numerical simulations

研究代表者

中村 寿 (NAKAMURA, Hisashi)

東北大学・流体科学研究所・准教授

研究者番号：40444020

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,600,000円

研究成果の概要(和文)：詳細反応モデルを用いた燃焼数値計算の高い計算コストを低減するために、本研究では「簡易反応モデル構築」という新しいアプローチを採用した。すなわち、様々な基礎燃焼特性を表現することができるように、現象論的に数段階程度の反応式を構築し、半経験的にモデル定数を決定した。開発したモデルを実際に燃焼数値計算に利用し、モデルの正確性および計算負荷の低減効果(50倍以上の高速化)を確認した。さらなる高速化のため、フーリエ級数による近似を導入することで、アレニウス式の非線形性に起因する硬直性の緩和も試みたが、これは未達となった。

研究成果の概要(英文)：To reduce high computational costs for combustion numerical simulations with detailed reaction models, a new approach “building-up” was taken for constructing a simple reaction model in this study. Several steps of reactions were selected based on combustion phenomenology and model parameters were determined by a semi-empirical method to examine multiple combustion characteristics. The developed simple reaction model was employed in combustion numerical simulations, and satisfactory agreement with computational results obtained by a detailed reaction model and significant reduction of computational time (50 times faster) was confirmed. For further acceleration, the relaxation of stiffness due to strong non-linearity of Arrhenius expressions was tested by Fourier series, which was not completed.

研究分野：燃焼工学

キーワード：燃焼 着火 火炎 簡略化 素反応

### 1. 研究開始当初の背景

ガスタービン、エンジン、工業炉等の燃焼器の開発には、燃焼数値計算による燃焼現象の予測が重要な役割を果たしている。正確な燃焼現象の予測のためには、正確な燃焼反応モデルが不可欠である。反応動力学に基づき構築された詳細反応モデルは、着火遅れ時間や燃焼速度といった燃焼基礎特性と比較検証され、幅広い温度・圧力・濃度条件に対して良好な燃焼予測を実現しつつある。一方で、詳細反応モデルに含まれる化学種や素反応式の数が増加し続けており(引用文献)、実用燃焼器スケールの燃焼数値計算では現実的な時間内で解を得ることができないほど、詳細反応モデルが巨大化している。

この問題を解決するために、近年は燃焼反応モデルの簡略化手法が研究されている。簡略化とは、詳細反応モデルをベースに、燃焼特性に寄与が小さい化学種と素反応式を削除し、燃焼反応モデルの規模を小さくすることである。削除候補の選定手法等の違いにより、様々な手法が提案されている(引用文献)。しかしながら、一定の数学的厳密性を維持すると、簡略化後の燃焼反応モデルをある大きさより小さくすることは難しく(引用文献)、依然として数値計算に要する計算負荷が高いため、さらに小規模な燃焼反応モデルの開発が求められている。

### 2. 研究の目的

燃焼数値計算の燃焼反応モデルに起因する計算負荷の問題を抜本的に解決するために、本研究では「簡易反応モデル構築」という新しいアプローチをとる。すなわち、様々な基礎燃焼特性を表現することができるように、現象論的に数段程度の反応式を構築し、半経験的にモデル定数を決定する。この時、指標とする燃焼特性として、本研究グループ独自の温度分布制御マイクロフローリアクタ(MFR)における通常伝播火炎と微弱火炎を対象に含める。さらに、アレニウス型の反応速度の定式化を脱却し、フーリエ級数による近似を導入することで、アレニウス式の非線形性に起因する硬直性の緩和を試みる。また、開発したモデルを実際に燃焼数値計算に利用し、モデルの正確性および計算負荷の低減効果を確認する。

### 3. 研究の方法

本研究では、メタンを対象燃料とし、詳細反応モデルを用いて得られた燃焼特性を指標として、簡易反応モデルを構築する。手順として、以下の四段階をとった。

#### (1) 詳細反応モデルの検証(微弱火炎)

初めに、詳細反応モデルの検証を行った。詳細反応モデルは燃焼速度や着火遅れ時間について正確に予測できるようになっており、モデル間の差異もさほど大きくない。しかしながら、MFRの微弱火炎位置に着目する

と、詳細反応モデルによる予測が実験結果と大きく異なることが報告されている(引用文献)。そこで、定在微弱火炎位置を指標とした詳細反応モデルのスクリーニングを行い、また、微弱火炎のガス分析結果と比較することで、反応過程のモデルの正確性を確認した。

図1にMFRの概略図を示す。内径2mmの石英管をリアクタとして用い、これを外部熱源(水素/空気予混合火炎)により加熱することで、図に示すような壁面温度分布を形成する。低温側からメタン/空気予混合気を流入させ、管内に形成された火炎をカメラで撮影し、火炎画像から火炎位置を決定した。ガス分析は、微小なサンプリングプローブをT字型にリアクタに接続し、質量分析器で分析した。バーナの位置を変化させることで、サンプリング位置の壁面温度を変化させた。MFRの系の数値計算には、一次元予混合火炎計算コードPREMIXに壁面との熱伝達項を加した計算コードを用いた(参考文献)。

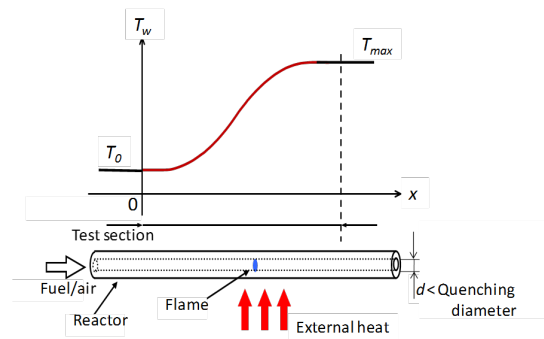


図1 MFRの概略図

#### (2) 簡易反応モデル構築

選定された詳細反応モデルの数値計算結果と比較しながら、簡易反応モデルの構築を行った。本研究では下記5種類の燃焼特性を指標として選定した。

- SL: 層流燃焼速度の初期温度依存性
- IG: 着火遅れ時間の初期温度依存性
- NF: MFRにおける通常伝播火炎位置の流入流速依存性
- WF: MFRにおける微弱火炎位置の流入流速依存性
- PC: 自由伝播火炎における燃焼反応進行度(Progress of combustion, COモル分率分布を使用)

SLとIGは基本的な燃焼特性の代表である。近年の多くの燃焼器が予熱による熱効率向上を図っていることから、温度依存性に特に着目した。NFは予熱時の非断熱予混合火炎に相当する。WFは物質散逸がある場における着火特性に相当する。PCは完全燃焼の進行度を示す。

#### (3) モデル検証

開発した簡易反応モデルを燃焼数値計算に使用して、詳細反応モデルの数値計算結果

と比較検証した。対象として、工業用熱再生バーナにおける層流同軸噴流火炎のリフト高さに注目した。この火炎リフト高さは様々な燃焼特性に影響を受ける。

燃焼数値計算には FLUENT14.5.0 を用いた。図2に計算領域を示す。計算には軸対象モデルを適用し、圧力ベースソルバー、full multi-component 拡散モデルを用いた。境界条件は、図2における右側境界を軸対象モデルの軸、上側境界を標準状態の Pressure outlet、左側境界及びノズルをすべりなし断熱壁として下側境界を燃料流及び酸化剤流の Velocity inlet と定義した。このとき燃料流として窒素によりモル分率で0.2まで希釈したメタンを用いた。酸化剤には空気を用いた。酸化剤及び燃料流の流入流速はそれぞれ22, 1.8 m/sとした。酸化剤及び燃料流の流入温度を共に変化させることにより、各反応機構における火炎リフト高さの流入温度依存性を調べた。

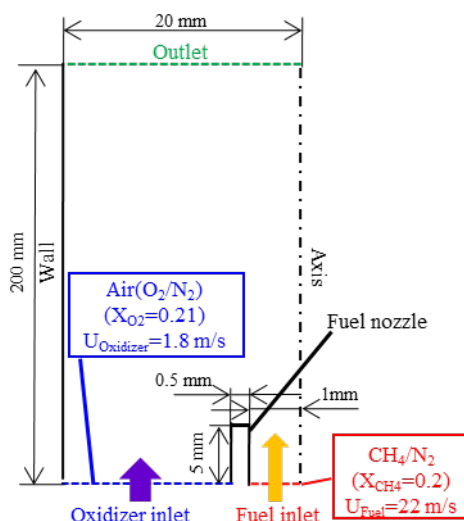


図2 計算領域の概略図

#### (4) 硬直性の緩和

フリー工級数による近似を導入することで、アレニウス式の非線形性に起因する硬直性の緩和を検討したが、本研究項目は未達となった。

### 4. 研究成果

#### (1) 詳細反応モデルの検証 (微弱火炎)

図3に三種類の詳細反応モデルを用いて計算された熱発生速度分布と実験で得られた火炎位置を示す。熱発生速度分布のピーク位置を火炎位置とみなすことができる。図より、San Diego 詳細反応モデルで予測される火炎位置が最も実験結果と良い一致を示した。

図4に壁面温度を横軸に取った場合のメタンのモル分率分布について、実験(プロット)と San Diego 詳細反応モデルを用いた計算結果(実線)の比較を示す。San Diego 詳細反応モデルは実験結果を良く再現していることが分かる。ここでは示していないが、酸素

やCOについても、良好な一致が得られた。

以上のことから、以後の詳細反応モデルとしては、San Diego 詳細反応モデルを用いることとした。

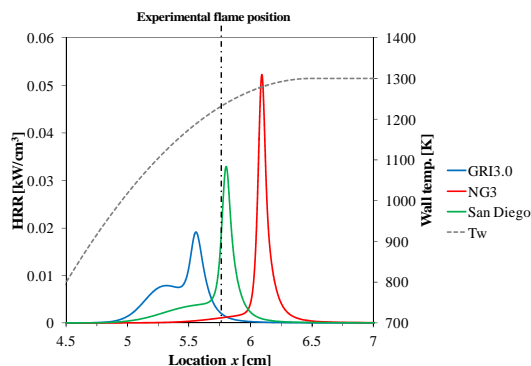


図3 微弱火炎の熱発生速度分布と実験で得られた火炎位置

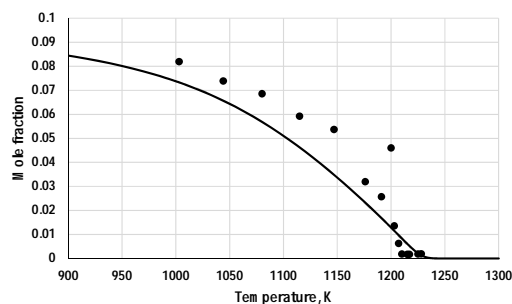
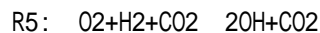
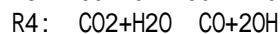
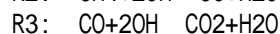
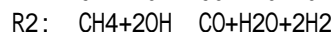
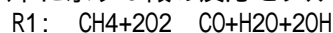


図4 微弱火炎のメタンモル分率分布  
(実験：プロット，計算：実線)

#### (2) 簡易反応モデル構築

5種類の燃焼特性について、詳細反応モデルで得られた計算結果と一致するように、モデル定数を半経験的に調整した。現象論的に反応式の選定を試行し、本研究では最終的に以下に示す5段の反応モデルを構築した。



R1はCH4からCOへの部分酸化を示しており、主に着火特性を制御する。生成されたCOはR3でCO2に酸化される。R2はOHラジカルによるCH4の酸化を示している。R5は火炎帯における連鎖分岐反応を示しており、R2へのOHラジカルの主要な供給源としてふるまう。R2によるOHの消費とR5によるOHの生成を調整することで、火炎伝播特性を制御する。R4はCOからCO2に酸化する反応の逆反応を示しており、R3によるCO消費とR4によるCO生成のバランスを調整することで、COを制御する。

図5に5種類の燃焼特性について詳細反応モデルと構築した簡易反応モデルを比較した結果を示す。いずれの燃焼特性についても、構築した簡易反応モデルは詳細反応モデル

で得られる傾向を良く再現しており、非常に少ない反応式で様々な燃焼特性を再現することに成功した。

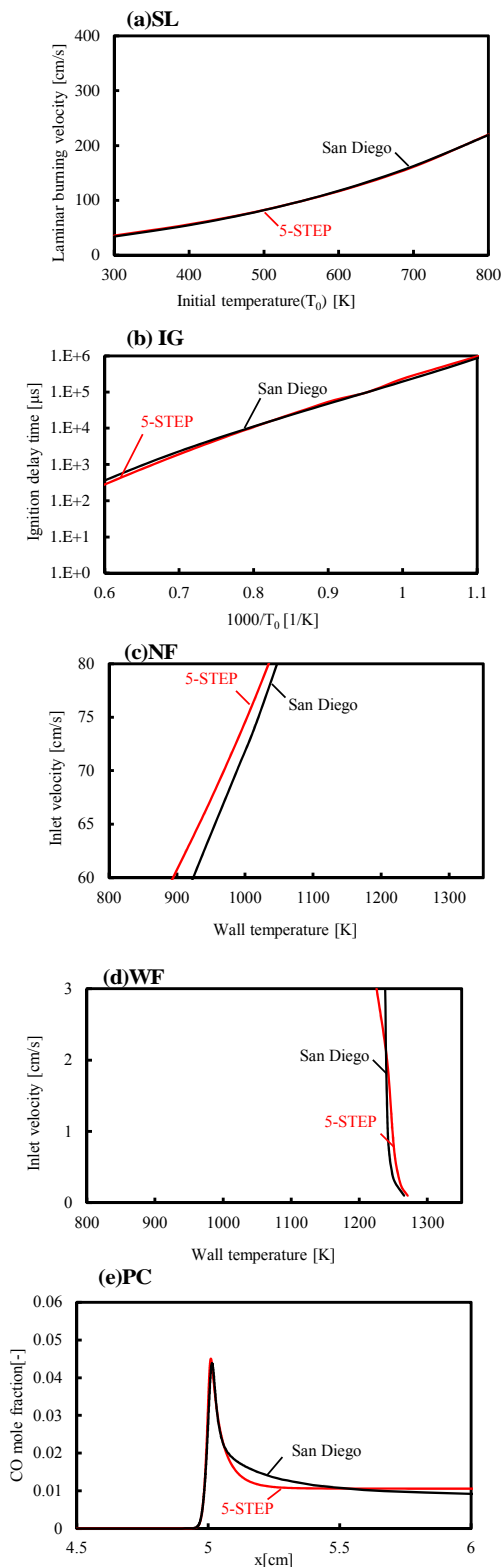


図5 詳細反応モデルと構築した簡易反応モデルの比較

### (3) モデル検証

図6に詳細反応モデルで計算した層流同軸噴流火炎の温度分布を示す。流入温度が高いとき、火炎はノズルに付着しているが、流入

温度が低いとき、火炎はリフトしている。また、流入温度が低下するにつれて、火炎リフト高さが増加することが分かる。

図7に詳細反応モデルと構築した簡易反応モデルで得られた火炎リフト高さの比較を示す。リフト開始の流入温度およびリフト時のリフト高さのいずれについても、開発した簡易反応モデルは詳細反応モデルの結果を良く再現している。計算に要するCPU時間について、簡易反応モデルは詳細反応モデルより50倍以上高速化できた。

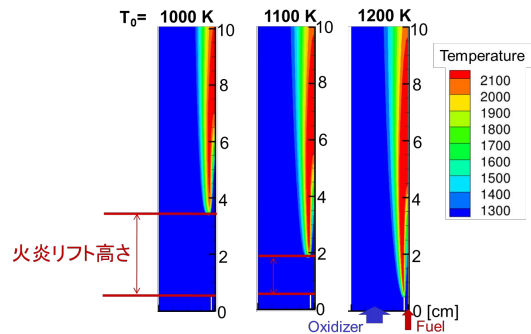


図6 詳細反応モデルによる層流同軸噴流火炎の温度分布

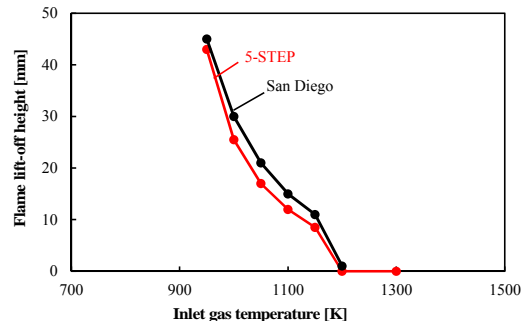


図7 詳細反応モデルと構築した簡易反応モデルで得られた火炎リフト高さの比較

### <引用文献>

- T. Lu, C. K. Law, Prog. Energy Combust. Sci. 35 (2009) 192-215.
- T. Lu, C.K. Law, Proc. Combust. Inst. 30 (2005) 1333-1341.
- P. Pepiot-Desjardins, H. Pitsch, Combust. Flame 154 (2008) 67-81.
- A. Massias, D. Diamantis, E. Mastorakost, D. A. Goussist, Combust. Theory Modelling 3 (1999) 233-257.
- T. Lu, Y. Ju, C.K. Law, Combust. Flame 126 (2001) 1445-1455.
- U. Maas, S. B. Pope, Combust. Flame 88 (1992) 239-264.
- A. S. Tomlin, M. J. Pilling, T. Turanky, J.H. Merkin, J. Brindley, Combust. Flame 91 (1992) 107-130.
- T. Kamada, H. Nakamura, T. Tezuka, S.

Hasegawa, K. Maruta, Combust. Flame 161  
(2014) 37-48.

K. Maruta, T. Kataoka, N.I. Kim, S.  
Minaev, R. Fursenko, Proc. Combust.  
Inst. 30 (2005) 2429-2436.

## 5. 主な発表論文等

[学会発表](計1件)

大西正悟, 中村寿, 手塚卓也, 丸田薫, 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた簡易反応機構の構築, 第52回日本伝熱シンポジウム, 2015年6月3~5日, 福岡国際会議場(福岡県・福岡市)

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

中村 寿 (NAKAMURA, Hisashi)  
東北大学・流体科学研究所・准教授  
研究者番号: 40444020

### (2) 研究分担者

丸田 薫 (MARUTA, Kaoru)  
東北大学・流体科学研究所・教授  
研究者番号: 50260451