

反応性流体シミュレーションのための炭化水素燃料
簡略化反応モデルの構築

メタデータ	言語: Japanese 出版者: 公開日: 2013-01-10 キーワード (Ja): キーワード (En): 作成者: 酒井, 康行 メールアドレス: 所属:
URL	http://hdl.handle.net/10098/7059

平成23年度福井大学研究育成経費「若手研究者による今後の進展が期待できる研究」

反応性流体シミュレーションのための 炭化水素燃料簡略化反応モデルの構築

研究代表者：酒井 康行（工学研究科・助教）

概 要	
	<p>エンジン設計への利用を目指して、筒内燃焼の三次元数値流体力学 (3D-CFD) シミュレーションの技術開発が進められている。しかしながら、数千の中間化学種を含む複雑な炭化水素燃料の燃焼反応機構をモデル化して3D-CFDシミュレーションに組み込むと、解くべき反応方程式の数の多さにより、現実的な時間内にシミュレーションをすることが困難となる。本課題は、「炭化水素系燃料の複雑な反応過程の本質を明らかにし、単純化したモデルを構築する」という独自の化学的アプローチにより問題の解決を試みることを目的とした。エンジン上死点付近の温度・圧力雰囲気場での素反応経路解析結果から燃料の自着火に關与する数十の化学種と素反応を抽出し、3D-CFDに組み込み可能なサイズに簡略化された自着火反応モデルを構築し、モデルの妥当性を確認した。</p>
関連キーワード	エンジン設計, 三次元数値流体力学シミュレーション, 化学反応モデル

研究の背景および目的

バイオエタノール・バイオディーゼル（脂肪酸メチルエステル）等の生物由来燃料の利用促進、オイルサンド・シェールガス等の化石燃料源の変化という状況から、自動車に使用される実燃料組成の変化が想定される。これまでの機械的側面のアプローチに加えて、燃料とその燃焼方法の組み合わせが新たな環境負荷低減技術のキーワードとなる。一例として、予混合圧縮着火 (HCCI: Homogeneous Charge Compression Ignition) 燃焼の実現は、着火性等の燃料の化学的性質の利用がポイントとなっている。

ー化学反応モデルに対する課題ー

新しい燃料と新しい燃焼制御手法の無数の組み合わせの中からの最適解導出、また、既存エンジンのNO_x, PM低減技術の開発といったようなエンジン燃焼設計に対し、燃料の「化学過程」とエンジン形状、混合気形成、シリンダ内流動のような「物理過程」の相互作用を明らかにすることが必要となる。そのための有効な一つの手段として、化学過程と物理過程をモデル化したシミュレーション技術の開発が進められている。一例として、三次元数値流体力学 (3D-CFD) シミュレーションの利用が挙げられるが、このような多次元・多領域のエンジン燃焼シミュレーションは、燃料の化学反応のモデル化がネックとなっている。その理由として、炭化水素燃料の燃焼のような複雑な反応系の詳細な化学反応機構はモデル化されているものの、膨大な数の化学種と素反応を含んだもの（詳細反応モデルと呼ばれている）であり、反応性流体計算に組み込む際に、化学種の数に比例して解くべき方程式の数が増加すること、*Stiffness* のために数値計算の時間刻みを小さくしなければならないこ

とが挙げられる。したがって多次元・多領域のエンジン燃焼シミュレーション実現のためには、燃焼の化学反応モデルの簡略化・*Stiffness* の解決が要求される。

ー簡略化に関する国内・国外の動向ー

DRG (Directed Relation Graph) 法¹, PCA (Principal Component Analysis) 法², CSP (Computational Singular Perturbation) 法³, ILDM (Intrinsic Low-Dimensional Manifold) 法⁴, RCCE (Rate-Controlled Constrained Equilibrium) 法^{5,6}などは、詳細反応モデルの簡略化や *Stiffness* 緩和に有効な方法であるが、大規模な反応機構を有する炭化水素系燃料に対する効果は未解決である。またいくつかの化学種、素反応をまとめて仮想的な反応を考えるランピング法⁷がある。しかしながらランピングされた反応の速度定数が燃料や反応条件に依存すること、推定方法論がないなどの問題点がある。本課題では、ランピング法による反応モデル簡略化の手法の確立と検証を目的とする。

[1] T. Lu, C. K. Law, Proc. Combust. Inst. 30 (2005) 1333-1341.

[2] S. Vajda, P. Valko, T. Turanyi, Int. J. Chem. Kinet. 17 (1985) 55-81.

[3] S. H. Lam, D. A. Goussis, Int. J. Chem. Kinet. 26 (1994) 461-486.

[4] U. Mass, S. B. Pope, Combust. Flame 88 (1992) 239-264.

[5] J. C. Keck, Prog. Energy Combust. Sci. 16 (1990) 125-154.

[6] Y. Shimizu, M. Koshi, Proceedings of the 47th Combustion Symposium in Japan (2009) 390-391.

[7] M. J. Pilling, Low-temperature combustion and autoignition, Chap. 4 (1997) Elsevier.

研究の内容および成果

数百化学種・数千反応を含むアルカンの詳細反応モデルの0次元シミュレーションの結果から、炭化水素燃料が反応開始から自着火に至るまでの複雑な素反応過程を整理した。炭化水素燃料の着火過程を、図1に示す低温酸化過程(LTO)と呼ばれる小さな発熱過程、それが停止する負の温度係数(NTC)領域、熱着火準備期間、熱着火の期間に区分したところ、下記(a)-(c)の知見が得られ、炭化水素燃料の着火過程をシンプルに記述することができる可能性が見出された。

- (a) 各期間を支配する反応群はわずか10反応程度
- (b) 燃料分子構造の特徴が現れるのはLTO, NTC期間
- (c) 熱着火準備期間、熱着火の反応は燃料に依らず共通

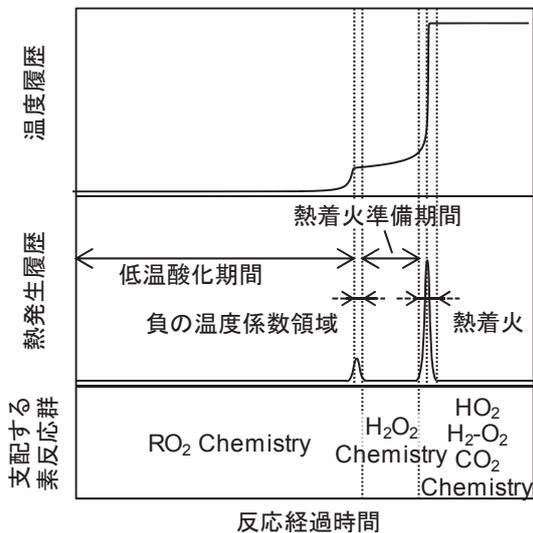


図1 炭化水素燃料の着火過程の整理

次に、詳細反応モデルから着火を支配する素反応群を抜き出し、さらにLTO, NTCに必要な素反応群に対しては異性体を一つの化学種にランピン

グすることにより1034化学種から25化学種に大幅に削減された簡略化反応モデルを構築した。図2は詳細モデルと簡略化モデルにより予測した各温度条件下において燃料が着火までに要する時間の比較である。詳細反応モデルは実験により検証済みのものである。化学反応モデルには、エンジン上死点近傍の温度領域(700-1000 K)で燃料の着火タイミングを正しく記述できることが要求される。本課題で構築した25化学種のモデルと1034化学種から構成されるモデルの予測値が要求される温度条件ではほぼ一致することがわかる。

以上の結果から、本課題の成果は以下の2点にまとめられる。

- ・エンジン設計用3D-CFDに組み込み可能なサイズのアルカン燃料の化学反応モデルを完成させた。
- ・簡略化モデル構築手法は様々な炭化水素燃料に適用できる可能性がある。

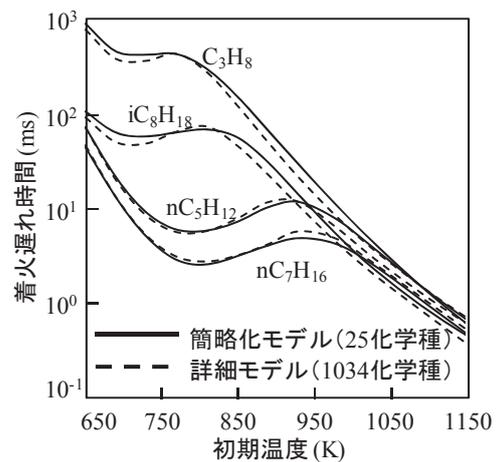


図2 簡略化モデルと詳細モデルによる着火遅れ時間の予測値の比較

本助成による主な発表論文等、特記事項および競争的資金・研究助成への申請・獲得状況

「主な発表論文等」

学術論文2報

[1] 酒井 康行, 安東 弘光, 桑原 一成, "アルカン簡略化燃焼反応モデルの中間生成物反応パッケージ," 自動車技術会論文集 Vol.42, No.1 (2011) 213-218.

[2] Yasuyuki Sakai, Hiromitsu Ando, Kazunari Kuwahara, "Lumped Chemical Kinetic Model Based on the Detailed Analysis of Hydrocarbon Fuel Ignition," SAE Technical Paper (2011) 2011-01-1782.

その他, 学会発表3件

「競争的資金・研究助成への申請・獲得状況」

[1] 日本学術振興会・科学研究費助成事業・若手研究(A)・平成25年度(申請予定)