G23 エタノール拡散火炎の消炎及び着火特性に関する数値解析

Numerical study of Extinction and Ignition Properties in Ethanol Diffusion Flame

○学 柏田 太志(大分大学大学院) 学 田尻 隆之(大分大学大学院) 正 田上 公俊(大分大学)

Hiroshi KASHIWADA, Takayuki TAJIRI, Kimitoshi TANOUÉ

Department of Engineering, Oita University

Key Words : Ethanol, Diffusion Flame, Extinction, Ignition

1. 緒言

現在の内燃機関技術には、地球環境問題とエネルギー資源枯渇問題から低公害な代替燃料の利用と高効率な燃焼技術の開発が求められている。石油代替燃料として注目されているエタノール (C_2H_5OH) は植物や木材から生成が可能なバイオマスであるため、カーボンニュートラルな特徴を有する環境調和型のエネルギー資源としてその役割が強調されており、これまで、拡散火炎の消炎、着火に関する Seiser ら⁽¹⁾、Holley ら⁽²⁾の研究等、いくつかの研究が行われてきた。消炎特性は燃料の高温酸化反応を、着火特性は燃料の低・中温酸化反応を体現した現象であるため、反応機構・燃焼モデルの構築及び検証のための重要な基礎データとなる。そこで本研究では、詳細化学反応機構を用いた対向流火炎モデルの数値解析により、大気圧での C_2H_5OH の着火、消炎特性を調べ、対向流バーナを用いた実験と比較することで、既存の化学反応機構の検証を行う。

2. 数値計算手法

本研究では、着火・消炎に関する数値計算手法として西岡らが開発した 1 次元対向流火炎の計算コード⁽³⁾を使用した。本研究では本コードを用いて Flame-Controlling Continuation method により消炎および自着火条件を特定した。また、火炎温度の算出のための平衡計算には Reynolds などによって開発された STANJAN に基づく EQUIL⁽⁴⁾を、さらに、本研究で使用する各熱物性値および輸送係数は CHEMKIN⁽⁴⁾から算出した。

本研究で使用了化学反応機構を表 1 に示す。それぞれ San Diego⁽⁵⁾、Fischer et al.⁽⁶⁾、Marinov⁽⁷⁾の反応機構(以下、それぞれ SDG05、FDC00、MRN99 と記す)である。

Table 1 Kinetic mechanisms used to simulate

Mechanism	Species	Reactions
SDG05 ⁽⁵⁾	46	235
FDC00 ⁽⁶⁾	81	359
MRN99 ⁽⁷⁾	57	383

モデルとする対向流バーナの概略図を図 1 に示す。対向流バーナ上下のノズルから燃料と酸化剤を噴出しバーナの中央部によどみ面を設置し、よどみ面近傍に伸張のある火炎を形成すると考える。この際、火炎伸張は次式から求める。

$$a_2 = 2|V_2|/L \left(1 + |V_1|\sqrt{\rho_1}/|V_2|\sqrt{\rho_2} \right) \quad (s^{-1}) \quad (1)$$

ここで、 ρ は密度、 V はダクト出口での速度である。添え字 1, 2 は燃料と酸化剤それぞれを示す。 L はバーナ間隔であり、消炎時 8mm、着火時 10mm とした。本研究では、よどみ平面が両ダクト間の中央付近に形成されるように、両ダクト出口での流体の運動量を以下のように等しくした。

$$\rho_1 V_1^2 = \rho_2 V_2^2$$

拡散燃焼場において混合層 (Mixing layer) 内の相対的な火炎位置は以下の stoichiometric mixture fraction, Z_{st} により表すこ

とができる。

$$Z_{st} = (1 + Y_{F,1} W_O v_O / Y_{O_2,2} W_F v_F)^{-1} \quad (2)$$

ここで W は分子量、 v は量論比のモル数である。添字 O, F は、酸化剤と燃料それぞれの物理量を示す。

Fig. 1 Schematic illustration of counterflow configuration

3. 計算結果及び考察

3. 1 消炎に及ぼす平衡温度の影響

まず、本研究では酸化剤に空気 ($Y_{O_2,2}=0.233$) を使い、燃料の質量濃度 Y_F を変化させた場合の消炎特性を調べた。

図 2 の(a)に燃料の質量濃度 Y_F と、消炎時の火炎伸張率 $a_{2,E}$ の実験結果を計算結果とともに示し、(b)に平衡温度 T_{eq} と消炎時の火炎伸張率 $a_{2,E}$ を示す。

図 2 の(a)の計算結果と実験結果を比較すると、定量的、定性的共に燃料の全ての反応機構は実験結果をよく再現している。また、図 2 の(b)では平衡温度 T_{eq} は消炎時の火炎伸張率 $a_{2,E}$ 従い上昇しており、このグラフの傾向により消炎時の火炎伸張率 $a_{2,E}$ の増加に従って耐消炎特性が向上することが分かる。従って燃料の質量分率 $Y_{F,1}$ が増加することにより平衡温度 T_{eq} が増加し、酸化反応がより早く進むことが分かる。よって燃焼がより完全燃焼に近づき、燃焼における未燃の損失が減る為、消炎時の火炎伸張率 $a_{2,E}$ が増加する、つまり耐消炎特性が向上するものと考えられる。

3. 2 消炎に及ぼす火炎構造の影響

本研究では燃料にエタノール (C_2H_5OH) を用いて平衡温度 T_{eq} を一定にし、火炎構造 Z_{st} を変化させた場合の消炎特性を調べた。図 2 に平衡温度 $T_{eq}=2050K$ 一定の場合における消炎時の火炎伸張率 $a_{2,E}$ と火炎構造 Z_{st} の関係を実験結果と共に示す。

図 3 にて解析結果と実験結果を比較すると、実験結果では消炎時の火炎伸張率 $a_{2,E}$ は火炎構造 Z_{st} に比例して増加しているのに対し、解析結果では $a_{2,E}$ が Z_{st} に対し最小値をとる点まで減少してから増加しており、定性的に差異が見られる。

(a) Fuel Mass Fraction, as a function of the Strain Rate at Extinction

(b) Equilibrium flame temperature, as a function of Strain Rate at Extinction

Fig. 2 Fuel Mass Fraction and Equilibrium Flame Temperature, in the fuel stream, as a function of the Strain Rate at Extinction

また、火炎構造 Z_{st} が 0.3 付近における消炎時の火炎伸張率 $a_{2,E}$ では計算値と実験値は近い差であるが、 Z_{st} が 0.70 付近における $a_{2,E}$ の差が大きいことが分かる。つまり Z_{st} が低い値では、解析結果と実験結果には差が小さいが、 Z_{st} が大きい領域では定量的に大きい差があることが分かる。よって、 $T_{eq} = 2050\text{K}$ 一定の条件において、いずれの反応機構においても解析は定性的に実験を再現していない。従って数値計算に用いた 3 つの反応機構はいずれも今条件下において改善の余地がある。

3.3 着火に及ぼす酸化剤側温度の影響

さらに本研究では燃料側のモル分率 X_f を一定にし、酸化剤側の温度を変化させた場合の着火特性を調べた。

図 4 に酸化剤側の温度 $T_{2,1}$ と自着火時の火炎伸張率 $a_{2,1}$ の関係を実験結果とともに示す。図 4 から計算結果と実験結果を比較すると、全ての反応機構において自着火時の火炎伸張率の増加に伴い酸化剤側の温度は増加している。よって自着火特性に及ぼす熱拡散及び物質拡散の影響が大きいことが分かる。

全ての反応機構において計算結果は実験結果より酸化剤側の温度が全体的にやや低い値になったが、差異は 4% 以下である。また酸化剤側の温度に比例して自着火時の火炎伸張率も増加し定性的にも全ての反応機構で一致している。よって本研究の結果は全ての反応機構においてエタノールに関する中低温酸化反応の再現性を有していることが分かる。

Fig. 3 Extinction Strain Rates, as a function of Stoichiometric Mixture Fraction, all with the same Equilibrium Temperature

Fig. 4 The temperature of the oxidizer stream at ignition, as a function of the strain rate

4. 結論

1. 酸化剤に空気 ($Y_{O_{2,2}} = 0.233$) を用いて、平衡火炎温度を変化させた場合の消炎特性を調べ実験結果と比較したところ、全ての反応機構において定量的、定性的とも一致していた。
2. $T_{eq} = 2050\text{K}$ を固定し、 Z_{st} を変化させた場合の消炎特性調べたところ、 Z_{st} が低い領域では定量的に差が小さく、 Z_{st} が高い領域では差が大きい。また実験と比較し定性的に違いが見られ、定量的、定性的ともこの条件下において改善の余地がある。
3. 酸化剤側の X_f を一定とし、酸化剤側の温度 $T_{2,1}$ を変化させた場合の着火特性を調べ実験結果と比較したところ、全ての反応機構において定量的、定性的共に一致し、中低温酸化反応の再現性を有していた。

参考文献

- (1) Seiser, R., Humer, S., Seshadri, K. and Pucher, E., *Proc. Combustion Inst.* 31, p.1173-1180 (2007).
- (2) Holley, A. T., Dong, Y., Andac, M. G. and Egolfopoulos, F. N., *Combustion and Flame*, 144, p.448-460 (2006)
- (3) Nishioka, M., Law, C.K. and Takeno, T., *Combustion and Flame*, vol.104, 1996, p.328-342.
- (4) Kee, R. J. Rupley, F. M. and Miller J. A. et al., CHEMKIN Collection, Release 3.7, Reaction Design, Inc., San Diego, CA, (2003)
- (5) <http://www.mae.ucsd.edu/~combustion/cermech/>, Version 20051201
- (6) Fischer, S. L., Dryer, F. L. and Curran, H. J., *Int. J. Chem. Kinet.* 32, p.713-740, 2000.
- (7) Marinov, N. M., *Int. J. Chem. Kinet.*, 31, p.183-220, 1999