

エタノール簡略化反応機構による2次元予混合/拡散火炎の数値計算

2-D Ethanol Premixed and Diffusion Flame Calculations using a Reduced Kinetic Mechanism

- 奥山 昌紀, 東北大学流体科学研究所, 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1, okuyama@flame.ifs.tohoku.ac.jp
 平野 慎一郎, シャープ株式会社, 大阪市阿倍野区長池町 22-22
 川瀬 雅大, 新日本石油精製株式会社, 東京都港区西新橋 1-3-12
 大上 泰寛, 東北大学流体科学研究所, 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1, ogami@flame.ifs.tohoku.ac.jp
 中村 寿, 東北大学流体科学研究所, 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1, nakamura@edyn.ifs.tohoku.ac.jp
 小林 秀昭, 東北大学流体科学研究所, 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1, kobayashi@ifs.tohoku.ac.jp
 Masaki OKUYAMA, Institute of Fluid Science, 2-1-1, Katahira, Aoba-ku, Sendai, Miyagi, 980-8577, Japan
 Shinichiro HIRANO, Sharp Corporation, 22-22 Nagaike-cho, Abeno-ku, Osaka, Osaka, 545-8522, Japan
 Masao KAWASE, Nippon Petroleum Refining Corporation, 1-3-12, Nishi-Shinbashi, Minato-ku, Tokyo, 105-8412, Japan
 Yasuhiro OGAMI, Institute of Fluid Science, 2-1-1, Katahira, Aoba-ku, Sendai, Miyagi, 980-8577, Japan
 Hisashi NAKAMURA, Institute of Fluid Science, 2-1-1, Katahira, Aoba-ku, Sendai, Miyagi, 980-8577, Japan
 Hideaki KOBAYASHI, Institute of Fluid Science, 2-1-1, Katahira, Aoba-ku, Sendai, Miyagi, 980-8577, Japan

Numerical simulations of ethanol combustion with a reduced kinetic mechanism were performed for two-dimensional Bunsen flames and diffusion flames. A reduced kinetic mechanism was generated based on the quasi-steady-state assumption (QSSA) using the Computational Singular Perturbation (CSP) method and its validity and the application range were tested using one-dimensional premixed flame calculations prior to the 2-D simulations. Numerical results, i.e., temperature, chemical species profiles of the detailed mechanism and reduced kinetic mechanism were in good agreement for both 2-D Bunsen and diffusion flame, which showed the validity of the reduced kinetic mechanism of the present study. Bunsen flame calculations showed the large reduction of calculation cost when the reduced mechanism was used. Two-dimensional diffusion flame calculations also showed the advantage of a reduced kinetic mechanism over In-situ Adaptive Tabulation (ISAT) method.

1. 緒言

持続可能なエネルギー源であるバイオエタノールを用いた燃焼器の開発には、燃焼反応を含む数値計算による支援が必要不可欠である。しかし、現在利用可能なエタノール詳細反応機構は、いずれも数百の素反応を含み、計算負荷が非常に大きい。従って実用的な多次元数値計算を行うためには、反応機構レベルでの計算コスト削減が必要不可欠である。そこで本研究では、実用燃焼器の数値計算への適用を目指し、準定常近似に基づくエタノール簡略化反応機構を構築した。さらにこれを2次元ブンゼン火炎および拡散火炎の数値計算に適用し、簡略化反応機構による計算コスト削減効果や、計算結果の妥当性、反応機構の適用可能範囲を検証した。

2. 数値計算方法

本研究では、LuらによるCSP法を応用した手法⁽¹⁾により簡略化反応機構を構築した。またStarting mechanismとして、Williamsらによる46化学種・235素反応からなるエタノール詳細反応機構⁽²⁾を用いた。2次元数値計算コードとして、実用燃焼器の数値計算に広く用いられている汎用熱流体解析コードFLUENT6.3.26⁽³⁾を利用した。通常、汎用熱流体解析コードでは簡略化反応機構による計算を行えないが、本研究グループが開発した簡略化反応機構の反応速度計算ルーチンをユーザ定義関数(UDF)として組み込むことにより、これを可能とした。なおブンゼン火炎及び拡散火炎の計算領域は、いずれも左端を対称境界とした。

3. 数値計算結果のまとめ

前節に述べた手法により構築した20段エタノール簡略化反応機構を、2次元予混合ブンゼン火炎および2次元燃料噴流拡散火炎の数値計算に適用し、いずれにおいても収束解を得た。この時、準定常化学種のモル分率を求める代数計算に起因する計算不安定性を回避するため、初期解として総括1段反応を用いた計算結果を与えた。図1に2次元ブンゼン火炎及び2次元拡散火炎の数値計算結果の一例を示す。いずれの計算においても、温度分布や化学種濃度分布はエタノール詳細反応機構を用いた計算結果と良好一致を示し、簡略化反応機構の妥当性が確認された。また図2に、ブンゼン火炎の数値計算において計測された、反復計算回数とCPU時間との関係を示す。簡略化反応機構を用いることで、反復計算に要する時間が約1/6に短縮された。また簡略化反応機構と

In-situ Adaptive Tabulation (ISAT)法⁽⁴⁾を組み合わせることにより、更なる収束時間の削減が可能となった。その他拡散火炎の数値計算により、中間化学種の計算精度等の簡略化反応機構の利点が明らかになった。

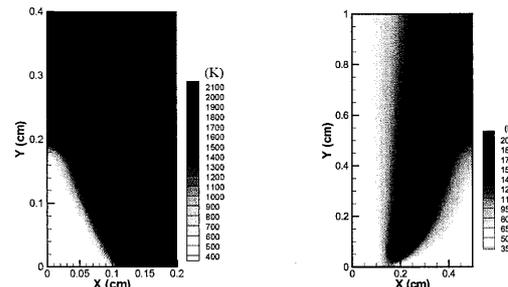


Fig. 1 Temperature profile calculated with 20-step reduced kinetic mechanism. (Left: $\phi = 1.0$, $P = 0.1$ MPa, $T = 300$ K, Right: C_2H_5OH : 1.0 m/s, air: 0.2 m/s, $P = 0.1$ MPa, $T = 300$ K)

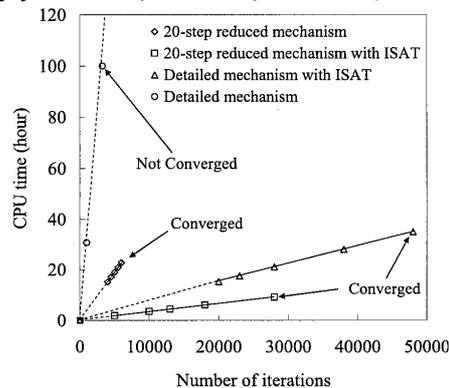


Fig. 2 Relationship between number of iterations and CPU time (C_2H_5OH /air Bunsen flame; $\phi = 1.0$, $P = 0.1$ MPa, $T = 300$ K)

参考文献

- (1) Lu, T., Ju, Y. and Law, C. K., *Combust. Flame* 126: 1445-1455 (2001).
- (2) Saxena, P. and Williams, F. A., *Proc. Combust. Inst.* 31: 1149-1156 (2007).
- (3) <http://www.fluent.com/>
- (4) Pope, S. B., *Combustion Theory and Modeling* 1: 41-63 (1997).