

気液平衡理論を考慮したエタノール-燃料系蒸発噴霧の数値解析

背景および目的

- アルコール系成分はバイオマスから生産可能なことから、再生可能な代替燃料として注目されている
- アルコール-燃料系は共沸混合物であり、脂肪族炭化水素同士の混合物とは気液平衡特性が異なる
- アルコール-燃料系に利用可能な気液平衡(Vapor-Liquid Equilibrium: VLE)計算法を三次元CFDコードに組み込む
- 特にエタノール-燃料系に対し、VLE特性と蒸発潜熱が燃料噴霧の蒸発過程に及ぼす影響のメカニズムを明らかにする。

気液平衡

- 気液平衡計算用のコードは基本的にpredictive Soave-Redlich-Kwong法 [1]による
- 気液平衡条件は以下のとおり

$$y_i \phi_i^V = x_i \phi_i^L \quad (i=1,2,\dots,n)$$

気相、液相のフガシティー係数は以下の計算から求められる

$$\ln \phi_i = \frac{b_i}{b} \left(\frac{pv}{RT} - 1 \right) - \ln \frac{p(v-b)}{RT} - \ln \left(\frac{v+b}{v} \right) \left[\frac{1}{A_1} \left(\ln \gamma_i + \ln \frac{b}{b_i} + \frac{b_i}{b} - 1 \right) + \frac{a_i}{b_i RT} \right]$$

ここで体積 v は Soave-Redlich-Kwong 状態式によって計算される

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b)}$$

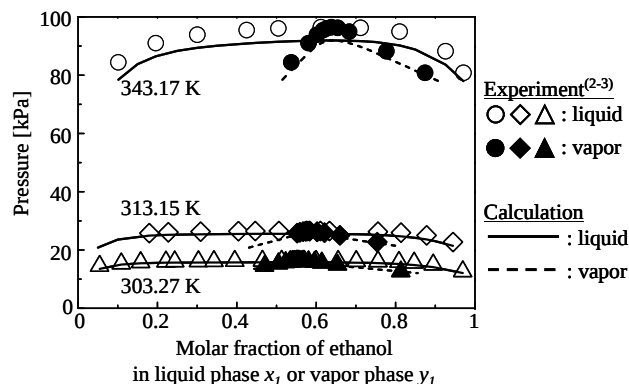
混合物のパラメータ a と b は modified Huron-Vidal 1st order モデルと 次の混合則により求める

$$a = b^2 \left\{ \sum_{i=1}^n x_i \frac{a_i}{b_i} + \frac{RT}{A_1} \left(\sum_{i=1}^n x_i \ln \gamma_i + \sum_{i=1}^n \ln \frac{b}{b_i} \right) \right\} \quad b = \sum_{i=1}^n x_i b_i$$

活量係数 γ_i の算出は UNIFAC 法による [1]。

- 右上の図は n -ヘプタン-エタノール系を対象に、気液平衡モデルによる計算結果と実験結果[2,3]を比べている

- 計算結果は実験値をよく再現しており、 n -ヘプタン単体、エタノール単体に比べ、混合物の平衡圧力が高くなる特徴も記述している



燃料噴霧の計算条件

- 上記の気液平衡計算コードを KIVA3V をベースに開発した多成分燃料モデル[4]に組み込み、燃料成分と雰囲気気体としての窒素との気液平衡計算に用いた
- 蒸発モデルには、修正タイプの Spalding モデルを用いた
- 雰囲気気圧力 1.51 MPa、雰囲気気温度 600 K、燃料噴射圧力 15 MPa として計算した

- 気液平衡特性とエタノールの高い蒸発潜熱の影響を独立に考察するため、以下の模擬燃料を計算した

“Pseudo-1 C₂H₅OH- n -C₇H₁₆ blends”

n -ヘプタン-エタノール系の気液平衡特性とエタノールの蒸発潜熱を有する模擬燃料

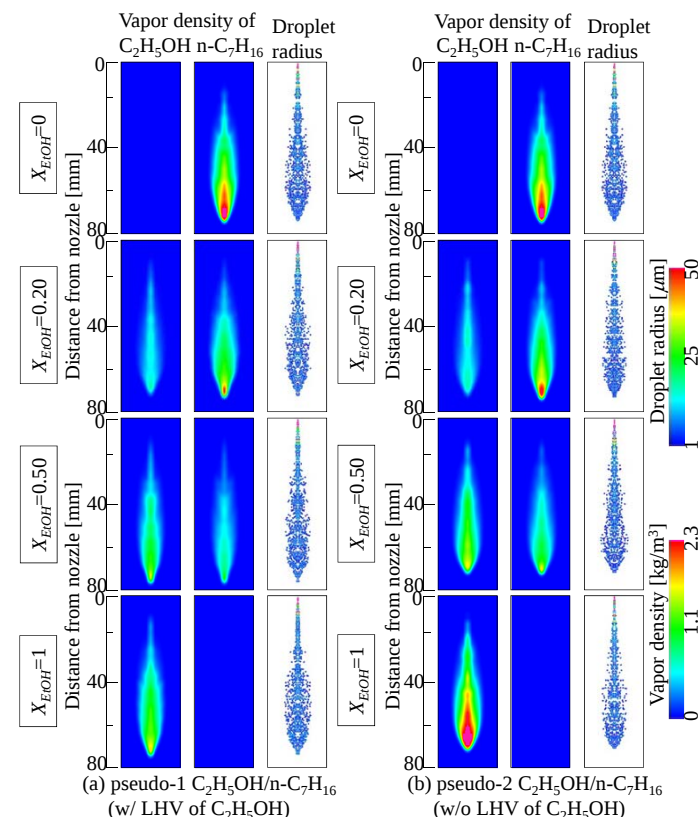
ただし、密度、粘度、表面張力などの輸送物性値は n -ヘプタン単体と同一とする

“Pseudo-2 C₂H₅OH- n -C₇H₁₆ blends”

n -ヘプタン-エタノール系の気液平衡特性を有するが、蒸発潜熱と輸送物性値(密度、粘度、表面張力など)は n -ヘプタンと同一とする模擬燃料

計算結果および考察

- エタノールはその混合割合が 0.50 以下の場合、 n -ヘプタンよりも蒸発速度が速い
- エタノールの高い蒸発潜熱は、蒸発を抑制する
- エタノールの混合割合が 0.1、0.2 付近で蒸発量は最大となる



<参考文献>

- Holderbaum, T. and Gmehling J., "PSRK: A Group Contribution Equation of State Based on UNIFAC," *Fluid Phase Equilibria*, Vol.70, Issues 2-3, pp.251-265, 1991.
- Barro, C., Rogalski, M. and Pénéloux, A., *Fluid Phase Equilibria*, Vol.8, Issue 1, pp.55-73, 1982.
- Janaszewski, B., Oracz, P., Goral, M. and Warycha, S., *Fluid Phase Equilibria*, Vol.9, Issue 3, pp.295-310, 1982.
- Kobashi, Y., Fujimori, K., Maekawa, H., Kato, S., Kawano, D. and Senda, J., "Modeling of Auto-Ignition and Combustion Processes for Dual-Component Fuel Spray," *SAE Int. J. Engines* 4(2):2193-2206, 2011.