

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 24 年 5 月 18 日現在

機関番号：32601

研究種目：基盤研究（B）

研究期間：2009～2011

課題番号：21360420

研究課題名（和文）バイオ燃料のデトネーションを含む燃焼機構に関する研究

研究課題名（英文）Study on combustion Mechanism of Bio Fuel Including Detonation

研究代表者

林 光一（HAYASHI KOICHI）

青山学院大学・理工学部・教授

研究者番号：60156437

研究成果の概要（和文）：本研究では、まずデトネーションの基礎研究として、火炎からデトネーションに遷移する詳細な機構を明らかにした。これは世界的にも重要な結果である。次に、エタノールの燃焼特性を明らかにし、それがデトネーションエンジンなどにどのように有効であるかを示した。エタノールの場合、ジェット燃料として使われている JP10 燃料と同等の推力があることが分かった。また、将来有望なバイオ燃料の一つのヤシ油については、その代替燃料が概ねブタン酸メチルとして確定でき、その代替燃料によってヤシ油の燃料特性などが計算できるようになった。

研究成果の概要（英文）：In this report fundamental detonation study was carried out to show finally the detailed DDT mechanism, which is the important outcome worldwide. Then we clarified the combustion characteristics of ethanol to show ethanol has a similar thrust performance and is useful for detonation engine. Finally about palm oil which will be one of the promising bio-fuels, a possible alternative fuel is specified by butanoic acid methyl ester and a calculation of palm oil's combustion characteristics can be performed using such alternative fuel.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	7,800,000	2,340,000	10,140,000
2010年度	4,000,000	1,200,000	5,200,000
2011年度	2,400,000	720,000	3,120,000
年度			
年度			
総計	14,200,000	4,260,000	18,460,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：総合工学・航空宇宙工学

キーワード：推進・エンジン

1. 研究開始当初の背景

バイオ燃料は環境にやさしいという点が考慮されて、石油製品に対する代替燃料として注目を浴びている。バイオ燃料を使い出したのはかなり昔で、地域の事情と関係が深い。例えば、サトウキビを多く生産するハワイでは、航空機用燃料として 30 年以上も使用し

ており、ブラジルでは自動車用燃料と使用しているのは有名である。このような燃料の多くはエタノールで、水を加えて薄めることも出来、薄めたバイオ燃料で動くエンジン（OMNIVOROUS Engine）も開発されている。このように、これらのバイオ燃料により動力を得るエンジンは多く開発されている

が、その安全性も含めた燃料の性質はまだ十分に調べられていない。

本研究グループは、長年気体や固-気二相の火炎やデトネーションの研究を行ってきており、多くの成果を挙げている。しかし、近年の気-液二相燃焼のデータの必要性から、これまでに開発した数値解析プログラムの技術をもとに、気-液二相火炎・デトネーションプログラムを開発し、バイオ燃料の性質を調べるのに役立てようということが、本研究の背景となっている。

2. 研究の目的

本研究では、(1)バイオ燃料（エタノールやヤシ油など）の燃焼反応モデルを開発し、(2)これらの液体燃料に対する蒸発モデルを構築し、(3)実験を通して、バイオ燃料の火炎とデトネーションの構造を説明できる気-液二相数値解析プログラムを開発することを目的とする。これにより、航空機エンジン内の燃焼、パルスデトネーションエンジン燃焼、液体ロケット燃焼、自動車のエンジン内の燃焼、気-液混合気体の爆発安全性などの機構と問題点を解明できると考える。

3. 研究の方法

本研究は3年間かけて、青山学院大学・理工学部（代表者：林 光一，研究分担者：山田英助）と（独）宇宙航空研究開発機構・宇宙科学研究本部（研究分担者：坪井伸幸）の二箇所で行われた。青山学院大学では実験、数値解析ならびに総括を行い、宇宙航空研究開発機構では数値解析を行った。

一年目は実験研究に集中し、二年目に数値シミュレーションを実験と並行して行う。そして、三年目は実験と数値解析のまとめをすることが当初の予定であった。

研究が何らかの理由で進まなくなった場合は、代表者（林）の問題であれば JAXA/ISAS の坪井が代表を代行するとした。また、人員が欠けるような場合は、研究補助員を追加したりして、研究がスムーズに達成されるように計画した。また、得られた結果は、国内の学会で発表を行い、研究成果発表（12月の日本燃焼学会主催の「燃焼シンポジウム」や「衝撃波シンポジウム」と研究打ち合わせの会合（年に8月と2月に行う）を行うことで研究の推進を行った。海外では、「国際燃焼シンポジウム」や「国際爆発と反応性気体力学のコロキアム」、「国際衝撃波シンポジウム」などに発表する予定であった。また、大学院学生2人を雇い（研究補助員）、本研究の数値解析をサポートする。これらの研究成果は、学会で発表するだけでなく、当初は学会誌に少なくとも1-2編投稿するとしたが、関連した内容も含めて、学会誌には14編が発表された。

4. 研究成果

研究成果としては本研究を三つに分類して示すことができる。一つ目は、デトネーションの基礎研究、二つ目はバイオ燃料の主役であるエタノールの燃焼特性に関する研究、三つ目は期待されるバイオ燃料の一つであるヤシ油の燃焼特性に関する研究である。

(1) デトネーションの基礎研究

本研究により、この15年程行ってきたデトネーションの一つの章を完結できたのではと考える。これまで、実験においてデフラグレーションからデトネーションに遷移する現象は確認されてきたが、その詳細は十分に分かっていなかった。今回の研究により、酸水素また空気/水素の混合気体であるが、デフラグレーションからデトネーションにどのように遷移するかが解明された。Fig.1は、その数値解析による結果の一例である。

Adiabatic wall case

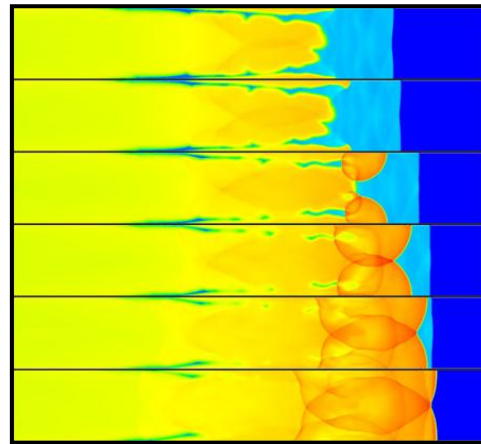


Fig.1 DDT for adiabatic wall condition

この図は、デフラグレーションからデトネーションに遷移する場合に、上下の壁の条件が断熱壁の場合の数値解で、実験でも見られる壁での着火とそれからのデトネーションへの遷移が解明されている。この内容は、国際学会でも発表され、近々論文に掲載される予定である。この他に、デトネーションの煤膜模様で、細かい模様が時に現れるが、これがどうして現れるかということも数値的に解明した。これらの基礎的な発見は、バイオ燃料を用いた時に、デフラグレーション（高速火炎）からデトネーションにどのように遷移し、どのようにしたらその遷移が防げるかなどを解明するのに役立つ。

(2) エタノールの燃焼特性

エタノールの燃焼特性は、常温で液体燃料であることもあって、割に詳しく理解されていない。今回の研究で、エタノールの詳細な化学反応機構が数種類開発されたのを確認

した。今回は、この数種類のエタノールの反応機構のどれがこれからの解析に有効なのかを確認できた。

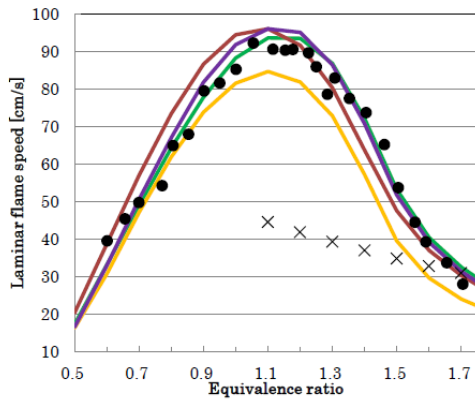


Fig.2 Laminar flame speed for ethanol/air mixture at 0.1MPa & 453K.

Fig.2 で×印を除いて、他のエタノール/空気の反応機構は、実験 (●) と良い一致をしていることが分かる。しかし、デトネーションなどの高圧におけるエタノール反応機構となると、またこれらの反応機構は合わなくなる。

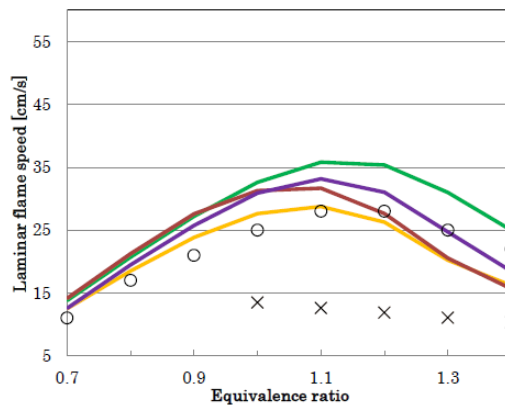


Fig.3 Ethanol laminar flame speed for 1.0 MPa & 358K

Fig.3 では、圧力が 1.0 MPa で温度が 358K でのエタノールの層流火炎速度を、実験値 (○) と比べている。×印は除くと、紫色の線が実験値に近いと考えられる。しかし、今回分かったことは、高圧での有効なエタノール/空気の反応機構はまだ見つけられていないとした。ちなみに、紫色の線は、Miyoshi によるモデルである。

エタノールのデトネーションとしての燃焼特性は今回の研究で、同じ液体のジェット燃料である JP10 とそのデトネーション速度が、当量比 0.8~1.4 に対してほぼ同じの 1800~2000m/s で、デトネーションの性質を知るパラメータのセルサイズが JP10/air の

混合気の場合よりは 10~20mm 大きいことが分かった。このセルサイズが大きくなることは、燃焼器の大きさが大きくなることを示している。液体の割合に対するセルサイズや液滴の大きさに対するセルサイズは、JP10 の燃料を使った場合とほぼ同じであることが分かった。このようにエタノールは JP10 などのジェット燃料と同じ性能を持つことから、エタノール燃料がジェット燃料と同じようにデトネーションエンジンの燃料として有効であることが分かった。

また、パルスデトネーションエンジンに実際応用した数値シミュレーションからは、水素などの燃料を使った場合と違い、デトネーションエンジンとしての安定した動作領域が、水素よりも狭いことも分かった。これは、エタノールが液体であるということが主な理由であるが、エタノールエンジンを少し大きめに設計することで、この問題は解決すると考える。

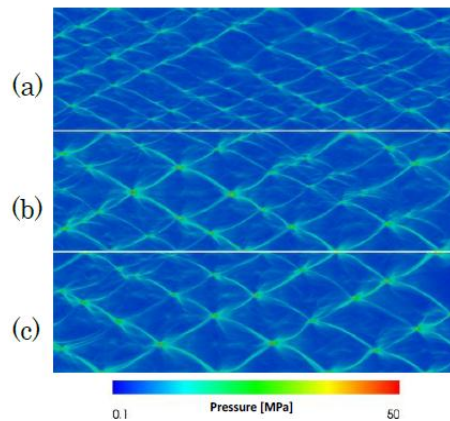


Fig.4 Numerical soot records for (a) Gaseous case, (b) droplet size of 3micron and 30% liquid, (c) droplet size of 5 micron and 50%liquid.

Fig.4 は、エタノール/空気の混合気体に対するセル構造を数値シミュレーションで示したものである。Fig.4 から分かるように、気体エタノールの場合がセルサイズが一番小さく、液滴サイズが大きくなるに従って、二相混合気体の場合の方がセルサイズが大きくなっていることが分かる。前にも述べたように、このセルサイズの大きさがデトネーションエンジンの構造の大きさに影響する。

(3) ヤシ油の燃料特性に関する研究

ヤシ油は世界的にもこれから期待されるバイオ燃料の一つである。トウモロコシのように、食料としての依存度が少ないので、世界の食糧事情を乱す危険が少ないと理解されている。しかしながら、その化学構造と

種々の化学種な混じった複雑な燃料であることから、具体的な燃焼特性は得られていない。ヤシ油自体は粘度の高い物質なので、普通はエステル化したものであるパームオイルメチルエステル (PME) が燃料などに使われている。本研究では、まずその複雑構造から、PME の代替燃料を捜し出し、その代替燃料により PME の性質を調べることが本研究の目的で、世界的にもまだ行われていない未知の研究領域である。

まず、PME の化学構造を調べた。PME は 9 種ほどの物質からなっており、 $C_nH_nO_2$ と $C_nH_{n-2}O_2$ の構造を持つ物質でその 90% を占めることが分かり、このふたつの物質を $C_nH_nO_2$ で代替することにした。 $C_nH_nO_2$ の中で、今回代表にできる化学種として、ブタン酸メチル ($n=5$, BME), オクタン酸メチル ($n=9$, OME), デカン酸メチル ($n=11$, DME) を選んだ。これらのエステルは、その化学反応機構が良く研究されていて、それらの機構が得られていたので、その反応機構で空気との混合気体を使って層流火炎速度や着火遅れ時間を調べた。

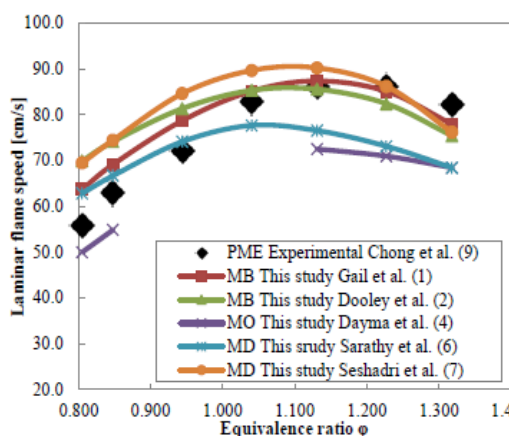


Fig.5 Laminar flame speed for PME, BME, OME, and DME.

層流火炎速度については、この結果から PME を良く表しているのは Gail らのブタン酸メチルの反応機構 (295 化学種, 1498 反応) であることが分かった。

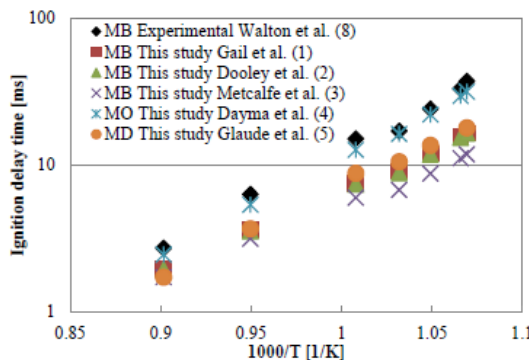


Fig.6 Ignition delay for PME, BME, OME, and DME ($\Phi=0.4$, $P=1.0\text{MPa}$)

また、着火遅れ時間については、Fig.6 に示されているように、Dayma らのオクタン酸メチル (OME, 383 化学種, 2781 反応) の化学反応機構を使ったものが PME の実験による着火遅れ時間のデータに近いことが分かった。

層流火炎速度と着火遅れ時間の両方の結果を総合的にみると、Gail らのブタン酸メチル (BME) の反応機構がパームオイルメチルエステル (PME) の代替燃料として使えるのではという結論になった。

今回の研究では、当初マレーシア工科大学の Saqr 氏からヤシ油の熱力学データや反応関連のデータを取得する予定であったが、研究を始めてその調査を進めるに従って、エステル系の研究が進んでいることが分かり、世界のエステル系の研究について深く調べることができた。

今回の 3 年間に渡る研究から、バイオ燃料は、エタノールをはじめとしてヤシ油などの燃料が種々の推力機関に対する燃料として使えることが判明した。この種のバイオ燃料は、その基礎的な燃焼特性などがまだ十分に調べられていないことも判明した。将来の重要な燃料の一つとして、これらのバイオ燃料の性質を十分に把握しておくことが急務であると考えられる。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 14 件)

- ① E. Dzieminska, M. Fukuda, A.K. Hayashi, E. Yamada, "Fast Flame Propagation in Hydrogen-Oxygen Mixture," Combustion Science and Technology, 査読有, 掲載決定済
- ② Edyta Dzieminska, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, Nobuyuki Tsuboi, Lewis number profiles in propagating flame and DDT process, Sci. Tech. Energetic Materials, 査読有, 掲載決定済
- ③ Makoto Asahara, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, Nobuyuki Tsuboi, Generation and Dynamics of Sub Transverse Wave of Cylindrical Detonation, Combustion, Science and Technology, 査読有, 掲載決定済
- ④ Makoto Asahara, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada,

- Two-Dimensional Analysis of Cylindrical Hydrogen/Oxygen Detonation Using AUSMDV Scheme, *Archivum Combustionis*, 査読有, 31, 2011, 177-186
- ⑤ Edyta Dziemenska, Motoki Fukuda, A. Koichi Hayashi, Nobuyuki Tsuboi, Transition to Detonation after a ‘Volume Explosion’ – Oppenheim Experiment Validation with a Numerical Calculation, *Archivum Combustionis*, 査読有, 31, 2011, 187-195
- ⑥ A. Koichi Hayashi, AKO’s Some Scientific Thoughts and Related Work at AGU, *Archivum Combustionis*, 査読有, 31, 2011, 139-158
- ⑦ Eisuke Yamada, Naoki Kitabayashi, A. Koichi Hayashi, Nobuyuki Tsuboi, Mechanism of High Pressure Hydrogen Auto-Ignition when Spouting into Air, *International Journal of Hydrogen Energy*, 査読有, 36, 2011, 2560-2566
- ⑧ 坪井伸幸, 阿達聡, 林光一, 山田英助, 内田正宏, 藤森俊郎, 須田俊之, 90° 曲管における H₂/O₂ デトネーションの流体力学的効果に関する数値解析, *日本燃焼学会誌*, 査読有, 52, 2010, 213-223
- ⑨ Tsuboi, N., Daimon, Y., Hayashi, A.K., Numerical Simulation of a Continuous Spinning Detonation in a Circular Tube, *Deflagrative and Detonation Combustion*, Torus Press, 査読有, 2010, 247-256
- ⑩ Kitano, S., Sato, H., Hayashi, A.K., Tangirala, V., Tsuboi, N., Fujiwara, T., Development of Micro-Pulse Detonation Engine and its Performance Evaluation, *Deflagrative and Detonative Combustion*, Torus Press, 査読有, 2010, 373-379
- ⑪ M. Asahara, N. Tsuboi, A.K. Hayashi, E. Yamada, Two-Dimensional Simulation on Propagating Mechanism of H₂/O₂ Cylindrical Detonation with a Detailed Reaction Mechanism: Influence of Initial Energy and Propagation Mechanism, *Combustion Science and Technology*, 査読有, 182, 2010, 1884-1900
- ⑫ Takayuki Yamada, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, Nobuyuki Tsuboi, Venkat E. Tangirala, Toshi Fujiwara, “Detonation limit thresholds in H₂/O₂ rotating detonation engine,” *Combustion, Science and Technology*, 査読有, Vol.182, Issue 11 & 12, 2010, 1901-1914
- ⑬ 木村勇一朗, 坪井伸幸, 林光一, 山田英助, 排気ノズルを有するパルスデトネーションエンジンの数値解析による推力性能評価 第1報: 詳細反応モデルによる基本性能の評価, *日本航空宇宙学会論文集*, 査読有, 58, 2010, 91-99
- ⑭ M. Asahara, N. Tsuboi, A.K. Hayashi, E. Yamada, Numerical study on propagation of cylindrical detonation, *Science and Technology of Energetic Materials*, 査読有, 70, 2009, 49-52
- [学会発表] (計 75 件)
- ① 林光一, 複雑なバイオ燃料の反応機構と燃焼特性, 平成23 年度航空宇宙空力班シンポジウム「航空宇宙工学における空気力学の挑戦2012」, 2012年1月27日, 東北大学青葉記念会館 (宮城県)
- ② A. Koichi Hayashi, Tatsuya Aoki, Eisuke Yamada, Bio Fuel and its Pulse Detonation Engine, 3rd Int. Workshop on Detonation/Detonation Engine, 2011.11.19, AoyamaGakuin University, Sagamihara Campus
- ③ Takashi Shimada, Eisuke Yamada, A. Koichi Hayashi, Nobuyuki Tsuboi, Numerical Study on the Ethanol/Air Two-Phase Detonation, 23rd Int. Colloq. On the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, 査読有, 2011.7.27, University of California, Irvine, California, USA
- ④ T. Shimada, A.K. Hayashi, E. Yamada, N. Tsuboi, Development of an ethanol/air reduced mechanism and its application to two-phase detonation, 28th International Symposium on Shock Waves, 査読有, 2011.7.21, University of Manchester, England
- ⑤ 青木達也, 坪井伸幸, 林光一, 山田英助, エタノールを用いたパルスデトネーションエンジンに関する数値解析, 第43 回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム2011, 日本航空宇宙学会, 2011年7月8日, 早稲田大学 (東京都)
- ⑥ 辰巳唯斗, 林光一, 島田隆司, 山田英助, エタノール/酸素詳細反応機構の燃焼特性, (社)火薬学会第70回通常総会並びに2011 年度春季研究発表会, 2011 年5月26日, 慶應義塾大学日吉キャンパス 協生館 2F (神奈川県)
- ⑦ 竹久祐貴, 林光一, Philippe Dagaut, 山田英助, パームオイルの代替燃料の反応機構, (社)火薬学会第70回通常総会並びに2011 年度春季研究発表会, 20

- 11年5月26日, 慶應義塾大学日吉キャンパス 協生館 2F (神奈川県)
- ⑧ 島田隆司, 林光一, 山田英助, 坪井伸幸, バイオ燃料のデトネーション限界, 2010年度火薬学会春季研究発表会, 2010年5月20~21日, 慶応大学日吉キャンパス
 - ⑨ 竹久祐貴, 林光一, 山田英助, パームオイルの代替燃料の妥当性, 平成22年度衝撃波シンポジウム, 2011年3月16~18日, 青山学院大学相模原キャンパス
 - ⑩ 青木達也, 林光一, 山田英助, 坪井伸幸, エタノールを用いたパルスデトネーションエンジンに関する数値解析, 平成22年度衝撃波シンポジウム, 2011年3月16~18日, 青山学院大学相模原キャンパス
 - ⑪ 細田英明, 深尾翔太郎, 林光一, 山田英助, ナノサイズのアルミニウム粒子-酸素二相デトネーションの数値解析, 平成22年度衝撃波シンポジウム, 2011年3月16~18日, 青山学院大学相模原キャンパス
 - ⑫ 島田隆司, 山田英助, 林光一, 坪井伸幸, JET-A燃料のデトネーション伝播特性に関する数値解析, 平成22年度衝撃波シンポジウム, 2011年3月16~18日, 青山学院大学相模原キャンパス
 - ⑬ 辰巳唯斗, 島田隆司, 山田英助, 林光一, 越光男, バイオ燃料の化学反応モデルの数値解析, 平成22年度衝撃波シンポジウム, 2011年3月16~18日, 青山学院大学相模原キャンパス
 - ⑭ T. Shimada, A.K. Hayashi, E. Yamada, N. Tsuboi, M. Koshi, Numerical Study on Detonation Characteristics Using a Bio-Fuel, 49th AIAA Aerospace Science Meeting, 査読有, 2011.1.4-7, Orlando World Center Marriott Resort & Convention Center, Orland, Florida, USA
 - ⑮ T. Shimada, A.K. Hayashi, E. Yamada, N. Tsuboi, Numerical Simulation of a Bio-Fuel/Air Two-Phase Detonation -Detonation Propagation Mechanism Using Ethanol-, 8th ISHPMIE, 査読有, 2010.9.5-10, Keio University, Hiyoshi Campus
 - ⑯ N. Masuda, A.K. Hayashi, V.E. Tangirala., One- and Two-Dimensional Analysis on Jet A/Air Two-Phase Detonation, 22nd ICDERS, 査読有, 2009.7.31, Palace of Trade UnionsS2, Oktyabrskay Square, City Centre, Minsk, Belarus

6. 研究組織

(1) 研究代表者

林 光一 (HAYASHI KOICHI)
青山学院大学・理工学部・教授
研究者番号：60156437

(2) 研究分担者

坪井 伸幸 (TSUBOI NOBUYUKI)
九州工業大学・大学院工学研究院・准教授
研究者番号：40342620
山田 英助 (YAMADA EISUKE)
青山学院大学・理工学部・助教
研究者番号：60453487