

ガソリン燃焼チーム クラスター23 (燃料・ノック班)

福井大学 学術研究院 工学系部門 機械工学分野 酒井 康行

素反応機構の構築およびその簡略化

目的

理論化学に立脚したガソリンの詳細/簡略化反応機構を開発

世界初：着火遅れ・火炎伝播の両方を定量的に再現する簡略化反応機構

→ 従来の経験モデルを超え、未知の燃焼領域の解析が可能に

→ 0次元ノックモデル, CFD計算の高精度化 → ノッキングの理解 → ノッキング抑制コンセプト提案 → 熱効率向上

研究方法

- 量子化学計算および統計理論により詳細反応機構を構築 (広島大学と共同)
- 実験により着火遅れ・火炎伝播速度の定量的再現性を検証 (上智大学・茨城大学・火炎伝播班と共同)
- 反応経路解析・感度解析結果を基に、ランピング/リダクション法により簡略化・詳細反応機構に対して検証

主な成果 (簡略化反応機構)

簡略化反応機構SIP-Gr1.0の公開

モデルサイズ

S5 : 106化学種

S3 (TRF) : 68化学種

着火遅れ時間検証範囲

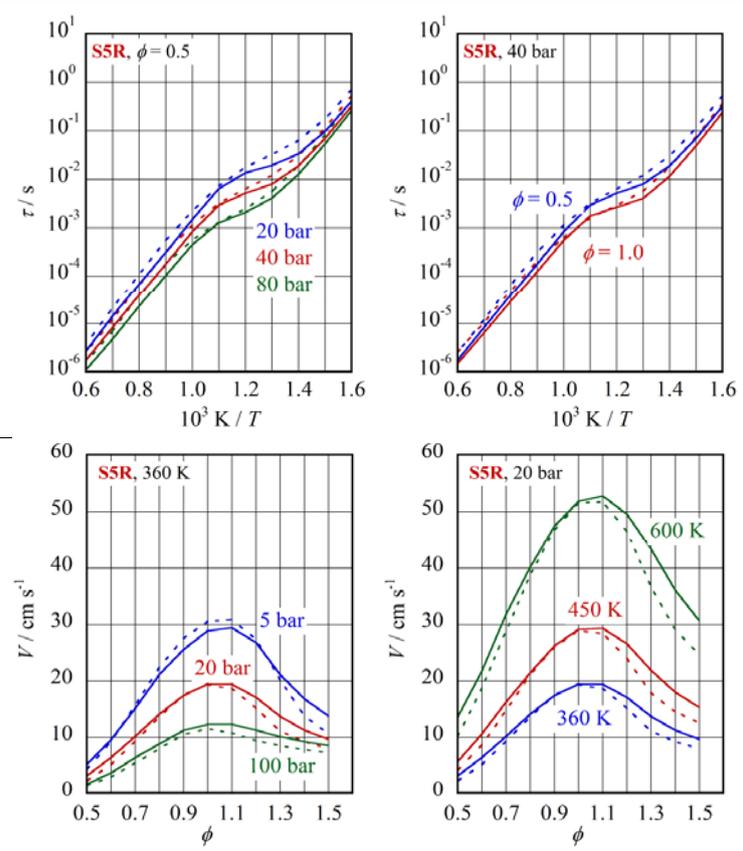
$T=625\sim 1666\text{ K}$, $p=20\sim 80\text{ bar}$, $\phi=0.5\sim 1.0$

層流燃焼速度検証範囲

$T=298\sim 600\text{ K}$, $p=1\sim 100\text{ bar}$, $\phi=0.5\sim 1.6$

モデル概要

サブモデル	化学種数	構築手法
nC_7H_{16}	9	skeletal ROO 4異性体を1つ
iC_8H_{18}	12	skeletal ROO 4異性体を1つ
$C_6H_5CH_3$	12	reduced
cC_7H_{14}	11	skeletal ROO 5異性体を1つ
eC_8H_{16}	25	skeletal 水素引き抜き: ROO 3異性体を1つ OH付加: ROO 2異性体を1つ HO ₂ 付加: 付加生成物 2異性体を1つ
cross reactions	4	
C ₀ -C ₂ base	33	reduced C ₂ H ₆ ・C ₂ H ₄ ・C ₂ H ₂ ・CH ₄ の 燃焼に重要な化学種



詳細反応機構に対して検証済
破線: 詳細SIP-Gd1.0 (1761化学種)
実線: 簡略SIP-Gr1.0 (106化学種)

今年度の取組

簡略反応機構のエンジン燃焼への展開

低温酸化のタイミングと発熱量

の予測精度向上

残留ガス影響の予測精度検証

NO反応機構の必要性

既燃ガス混合影響の予測精度検証

化学反応モデルを言い訳にさせない!

研究計画

