

ディーゼル燃焼クラスター大学(10) (グループ3)

大阪工業大学工学部機械工学科

桑原 一成

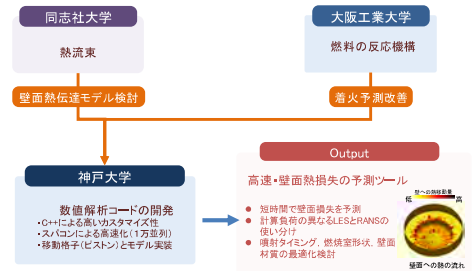


ディーゼルモデル燃料の高精度簡略化反応メカニズムの構築

研究の目的と位置付け

- グループ3では低熱損燃料コンセプトを実現するためノルマルトリデカン ($n\text{-C}_{13}\text{H}_{28}$)をモデル燃料として実験、解析を実施
- 低熱損燃料コンセプトの効果の検証のためには3次元数値解析が必要
- 3次元数値解析のためには高精度かつ小規模な反応メカニズムが必要
- ノルマルドデカン ($n\text{-C}_{12}\text{H}_{26}$)の簡略化反応メカニズムは既存 (化学種数105, 反応数420, Luo et al.)
- ノルマルトリデカンについては新規構築が必要

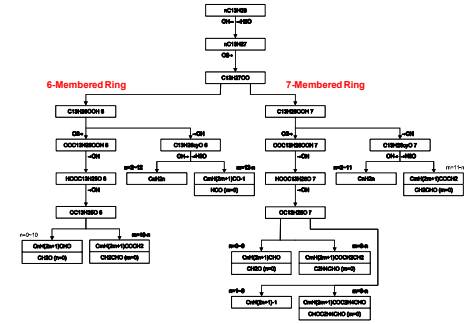
3次元数値解析のための連携



研究の方法

- KUCRS (Knowledge-basing Utilities for Complex Reaction Systems, 三好)により構築された詳細反応メカニズムをベースメカニズムとして採用 (化学種数1493, 反応数3641)
- 従来の簡略化手法は簡略化実施条件でのみ精度を保証
- コントリビューションマトリックス法 (桑原ら)により詳細反応メカニズムが記述する反応経路を解釈
- 知識と直感にもとづき簡略化を実施

T₀ = 650 Kにおける主要な燃料系反応経路



主な成果

- 詳細反応メカニズムが記述する着火特性を広範囲かつ高精度に再現可能な簡略化反応メカニズムを構築 (化学種数1493→43, 反応数3641→85, 78条件中76条件で+/-10%の精度で着火遅れ時間を再現)
- フラグメントアルキルラジカルをC₃H₇, C₂H₅, CH₃, アルケンをC₇H₁₄, C₃H₆, C₂H₄, アルデヒドをC₃H₇CHO, CH₂Oにより代表
- 反応メカニズムを燃料系反応, C7・C4系反応, C3系反応, C2系反応, C1系反応, H₂O₂ループ系反応, H₂/O₂システム系反応に分類, 各反応系によるOH生成を再現
- 小規模化と精度維持をこのレベルで両立させたことは革新的

ノルマルトリデカンの簡略化反応メカニズム

Fuel-Series Reactions

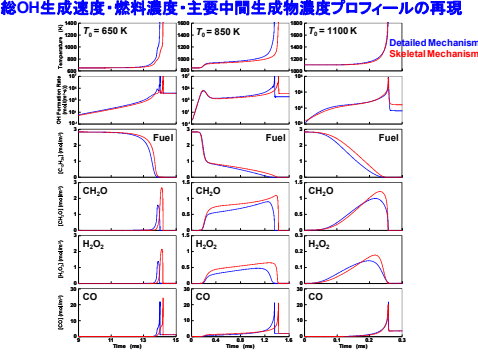
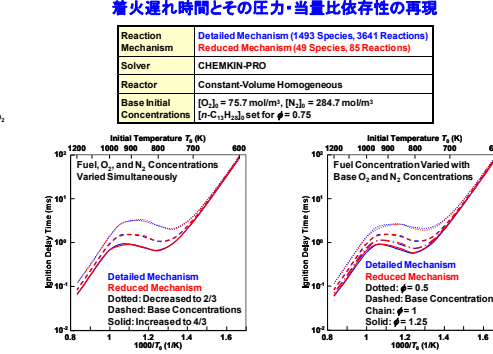
(R1) C₁₃H₂₈ + O₂ → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R2) C₁₃H₂₈ + OH → C₁₃H₂₇ + H₂O
 (R3) C₁₃H₂₈ + HO₂ → C₁₃H₂₇ + H₂O₂
 (R4) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R5) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R6) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R7) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R8) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R9) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R10) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R11) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R12) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R13) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R14) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R15) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R16) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R17) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R18) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R19) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R20) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R21) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R22) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R23) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R24) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R25) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R26) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R27) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R28) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R29) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R30) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R31) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R32) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R33) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂
 (R34) C₁₃H₂₈ + O₂(M) → C₁₃H₂₆ + H₂O₂

C₂-Series Reactions

(R35) C₂H₂ + O₂ → C₂H + H₂O₂
 (R36) C₂H₂ + OH → C₂H + H₂O
 (R37) C₂H₂ + HO₂ → C₂H + H₂O₂
 (R38) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R39) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R40) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R41) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R42) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R43) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R44) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R45) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R46) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R47) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R48) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R49) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R50) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R51) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R52) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R53) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R54) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R55) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R56) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R57) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R58) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R59) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R60) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R61) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R62) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R63) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R64) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R65) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R66) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R67) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R68) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R69) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R70) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R71) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R72) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R73) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R74) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R75) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R76) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R77) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R78) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R79) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R80) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R81) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R82) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R83) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R84) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R85) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R86) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R87) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R88) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R89) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R90) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R91) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R92) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R93) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R94) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R95) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R96) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R97) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R98) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R99) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂
 (R100) C₂H₂ + O₂(M) → C₂H + H₂O₂

C₃-Series Reactions

(R91) C₃H₄ + O₂ → C₃H₃ + H₂O₂
 (R92) C₃H₄ + OH → C₃H₃ + H₂O
 (R93) C₃H₄ + HO₂ → C₃H₃ + H₂O₂
 (R94) C₃H₄ + O₂(M) → C₃H₃ + H₂O₂
 (R95) C₃H₄ + O₂(M) → C₃H₃ + H₂O₂
 (R96) C₃H₄ + O₂(M) → C₃H₃ + H₂O₂
 (R97) C₃H₄ + O₂(M) → C₃H₃ + H₂O₂
 (R98) C₃H₄ + O₂(M) → C₃H₃ + H₂O₂
 (R99) C₃H₄ + O₂(M) → C₃H₃ + H₂O₂
 (R100) C₃H₄ + O₂(M) → C₃H₃ + H₂O₂



今後の展開

- 前すす物質濃度を高精度に再現するために簡略化反応メカニズムを改良
- 壁面近傍の化学反応が壁面熱損失におよぼす影響を解明
- 3次元数値解析による低熱損燃焼コンセプトの効果の検証, 制御パラメータの最適化