

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：二段階着火・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)
- 燃料の着火メカニズムによりランピング法とリダクション法を使い分けたオリジナルの簡略化手法

主な成果 (簡略化反応機構)

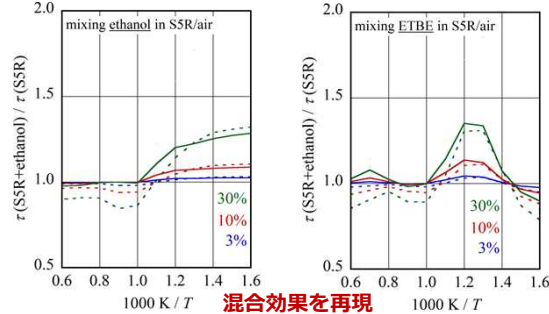
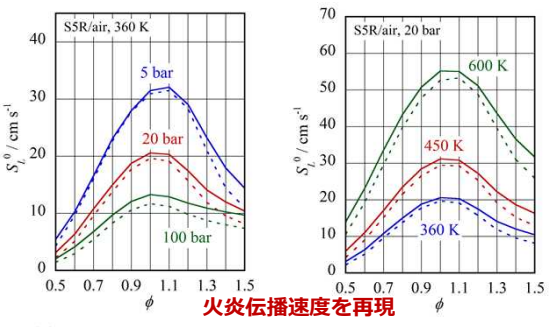
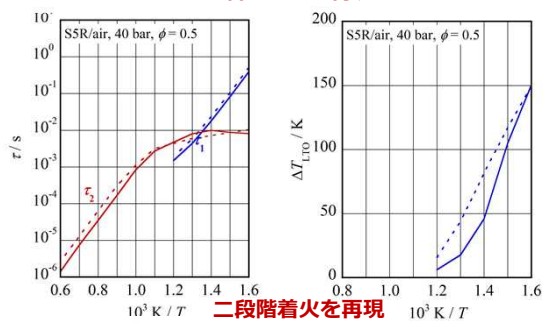
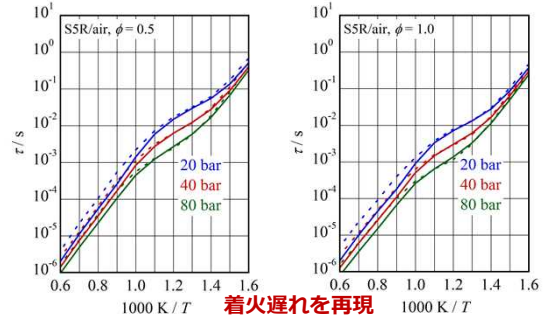
簡略化反応機構SIP-Gr2.0の公開 (予定)

ガソリンエンジンの解析に適した以下の特徴を有する

- モデルサイズ
S5+エタノール+ETBE : 132化学種・5840反応
- 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 (サブモデル群から構成されている)

サブモデル	化学種数	構築手法
ノルマルヘプタン	12	ランピング・ROO4異性体を1つ
イソオクタン	14	ランピング・ROO4異性体を1つ
トルエン	12	リダクション
メチルシクロヘキサン	11	ランピング・ROO5異性体を1つ
ジイソブチレン	22	ランピング・ 水素引き抜きROO3異性体を1つ OH付加ROO2異性体を1つ HO ₂ 付加生成物2異性体を1つ
エタノール	3	リダクション
ETBE	18	ランピング・ROO3異性体を1つ
C ₀ -C ₃ base	40	リダクション C ₃ H ₆ ・C ₂ H ₆ ・C ₂ H ₄ ・C ₂ H ₂ ・CH ₄ の 燃焼に重要な化学種

- ETBEとエタノールの混合効果を検証済み
- EGR効果を検証済み
CO₂・N₂・H₂Oで希釈された燃料の
着火遅れと火炎伝播速度を再現
- NO_x生成メカニズムを追加した簡略反応機構も公開



破線：詳細SIP-Gd2β (1768化学種・5840反応)
実線：簡略SIP-Gr2.0 (132化学種・459反応)