

# 1

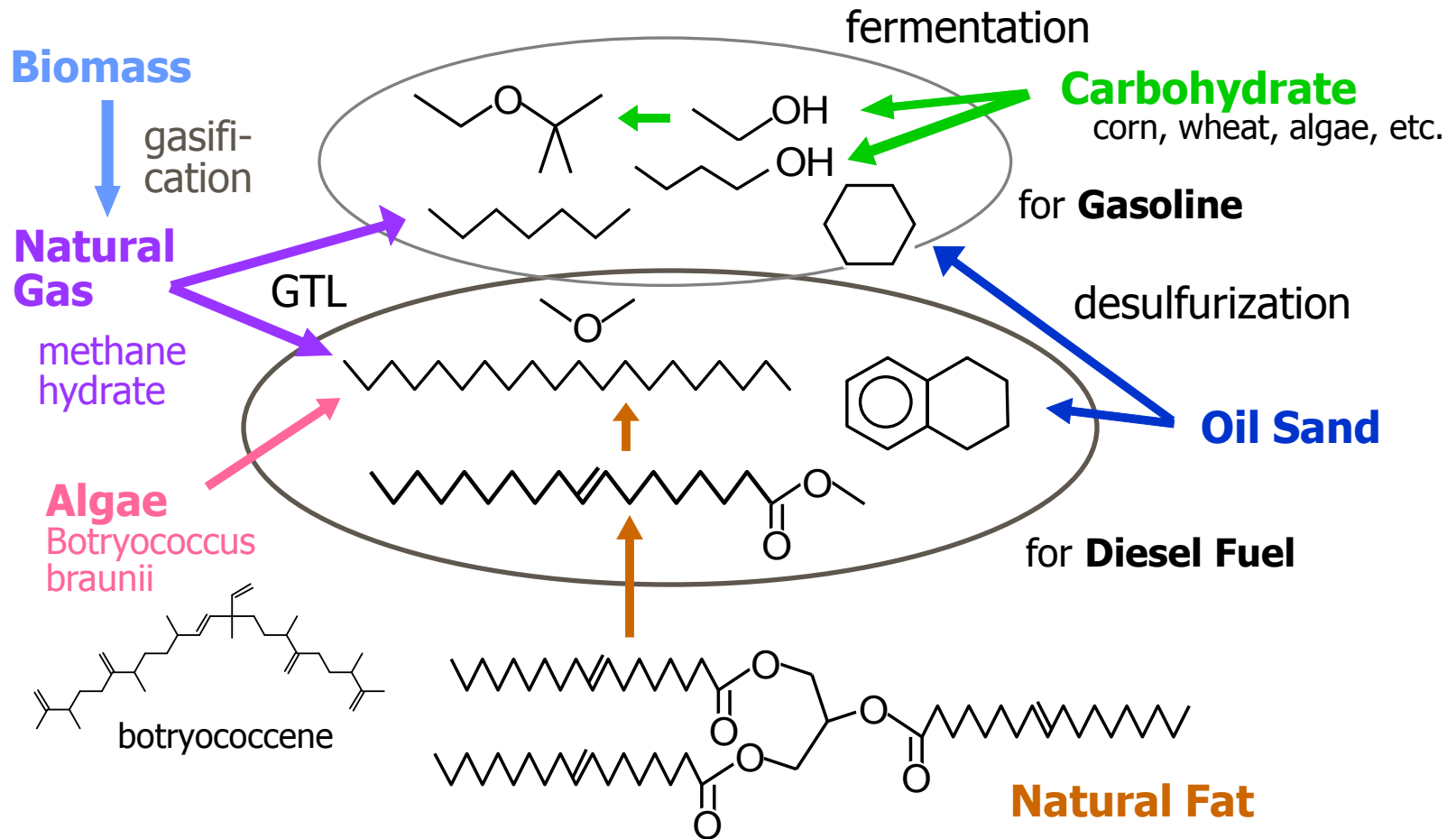
# 燃焼反応モデルの可能性

## Prospect of the Kinetic Models for Combustion

東京大学 大学院工学系研究科 化学システム工学専攻

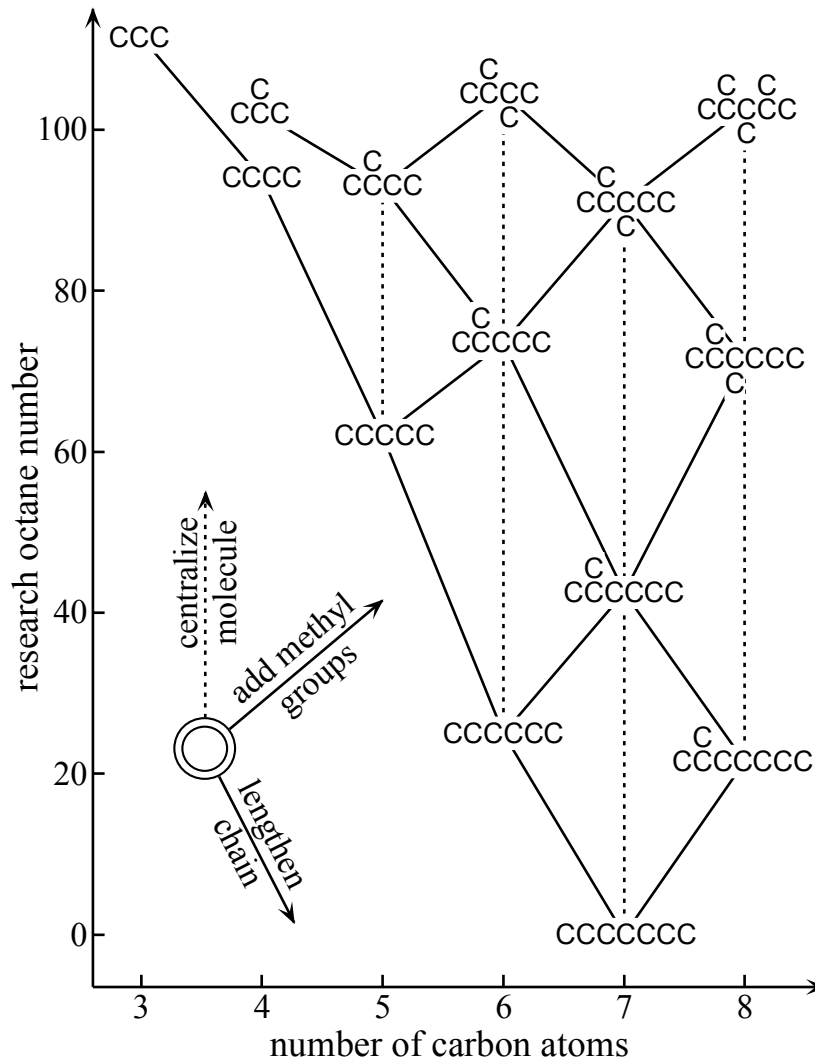
三好 明

# 燃料資源の多様化



→ 化学反応論に基づく最適化！

# アルカン - 自着火性の化学構造による変化



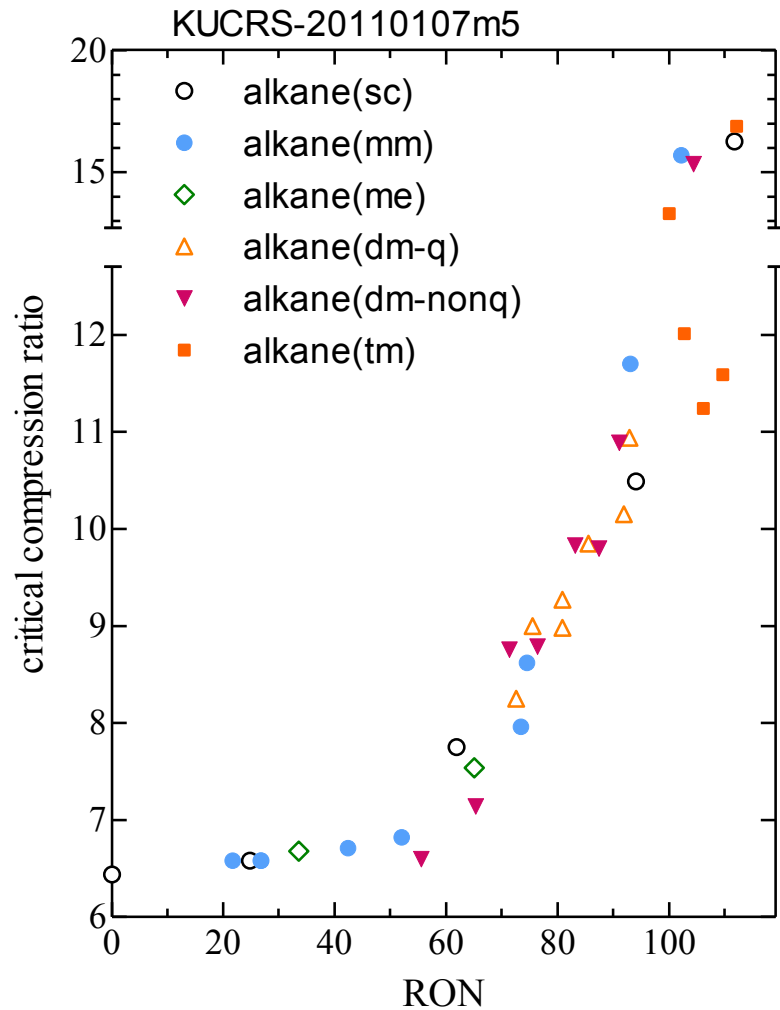
- 60年以上前から既知

- (反応モデルによる) 定量的な説明なし

based on:

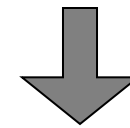
W. G. Lovell,  
*Ind. Eng. Chem.*  
**40**, 2388–2438  
(1948).

# アルカン - 詳細反応モデルの現状



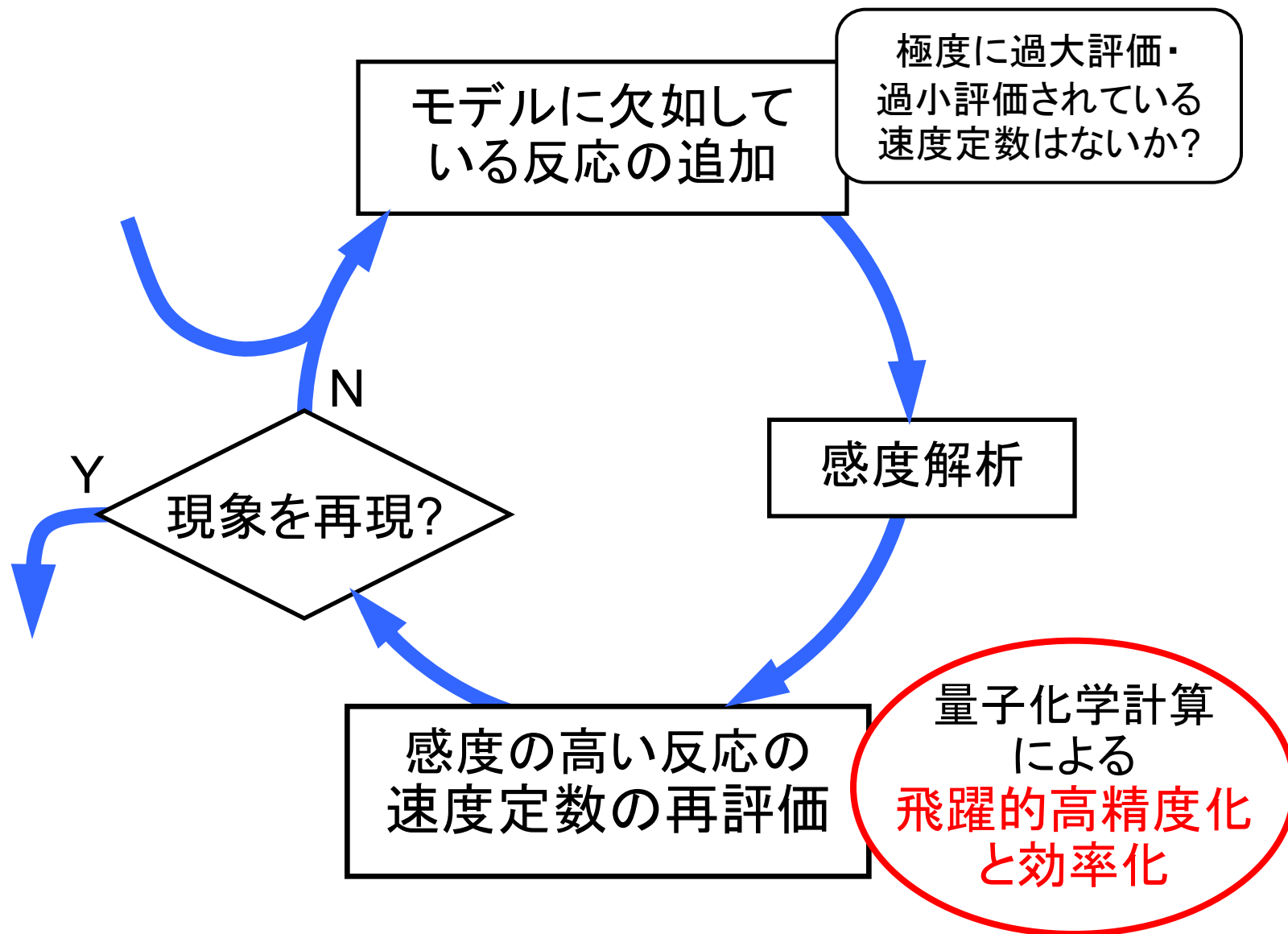
## RON を予測可能

- 速度則構築手法
- 反応機構自動生成手法  
の確立



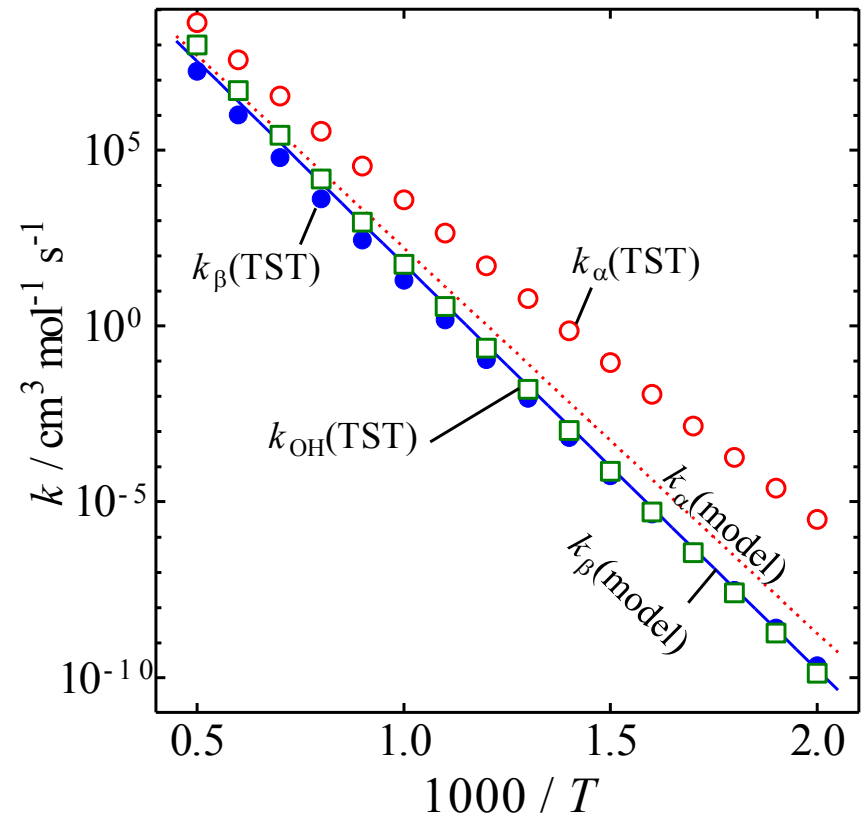
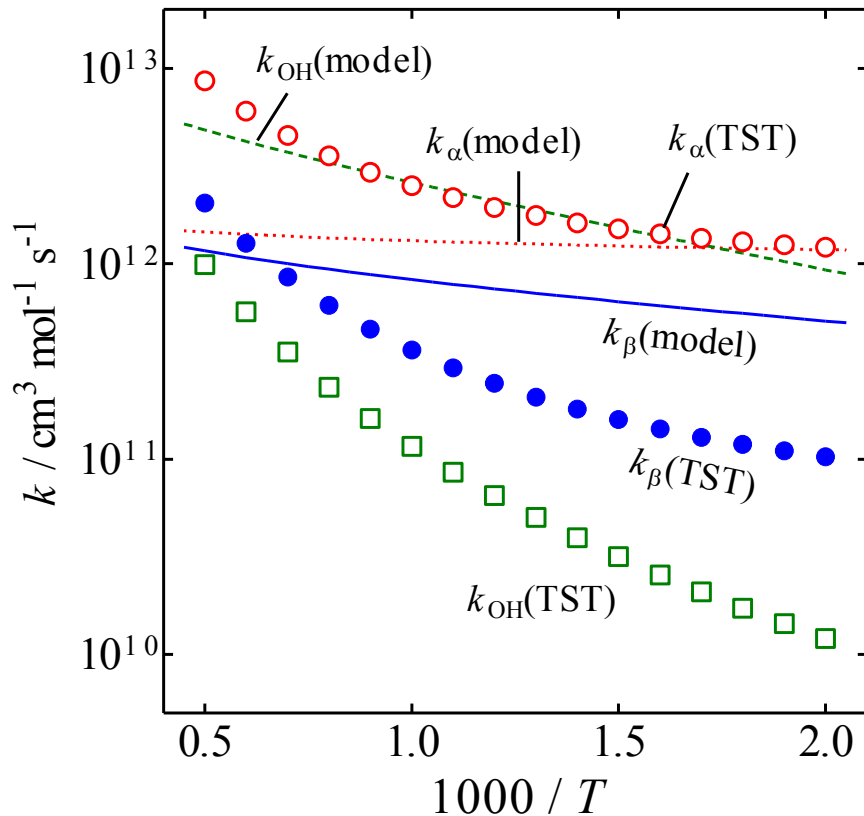
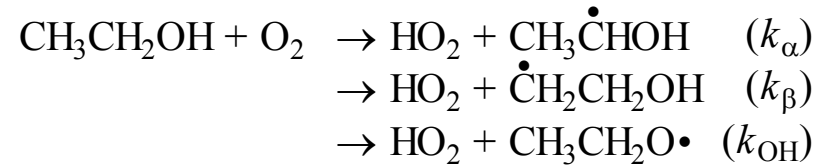
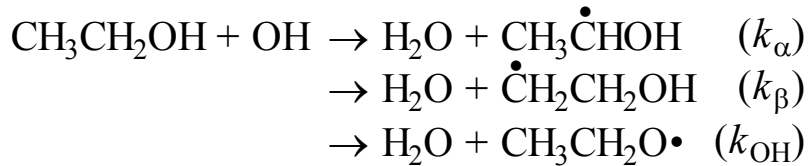
調整可能なパラメータ  
adjustable parameters  
の画期的減少

# モデルの構築



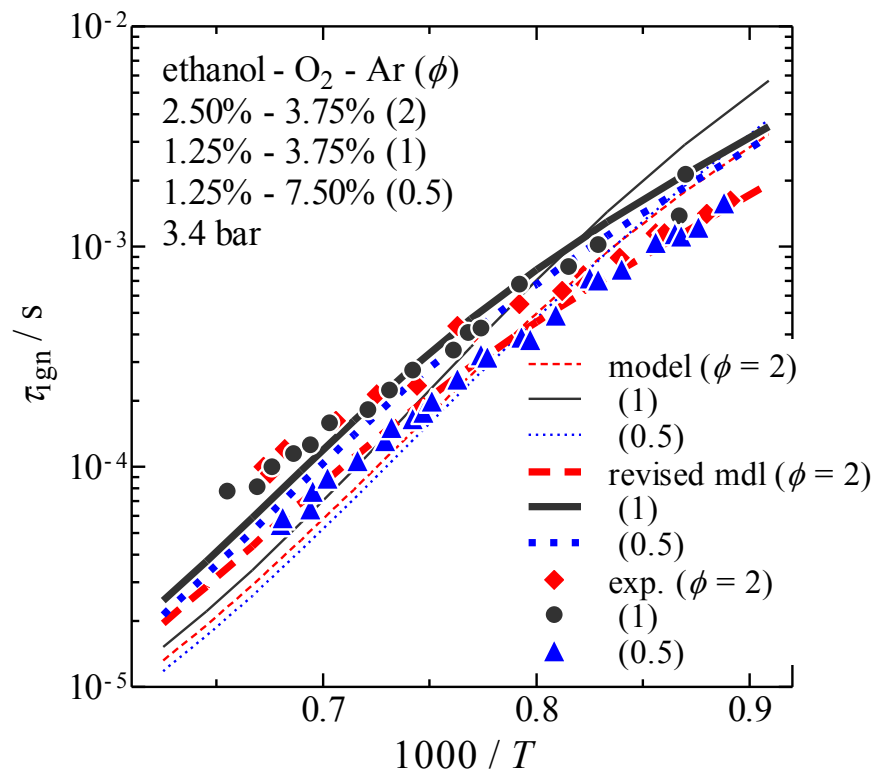
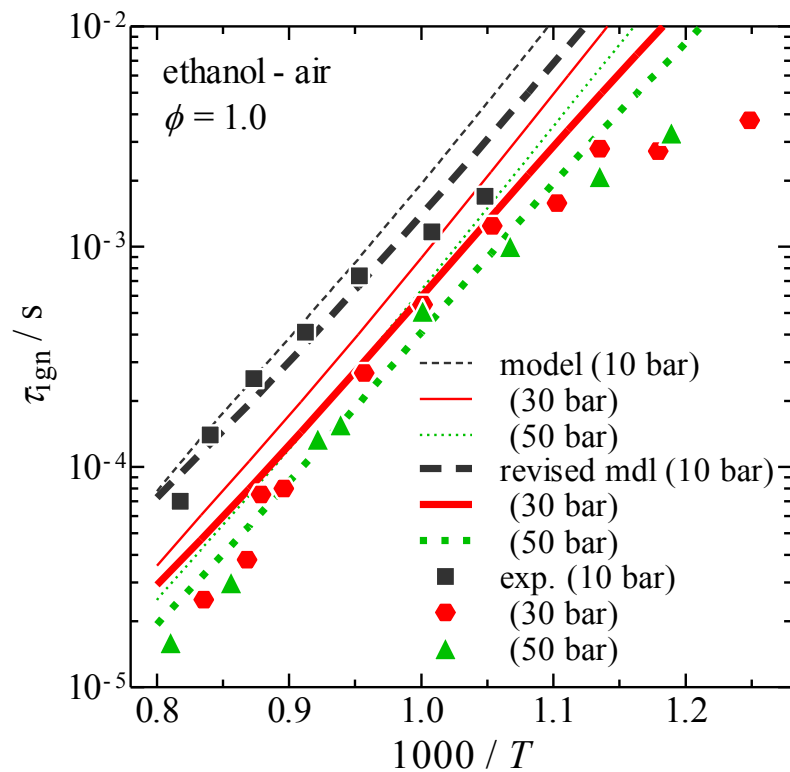
# エタノール

- 既存モデルの速度定数は、決して正しくない  
(誤りは compensate されている)



# エタノール (詳細反応モデル)

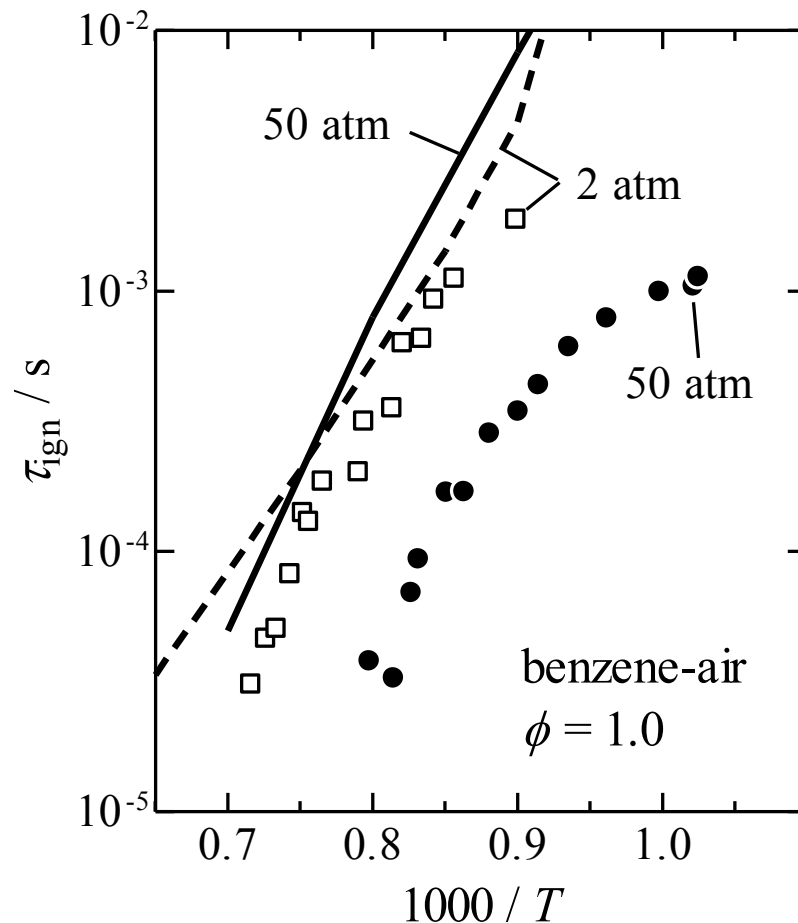
- 既存モデルは compensation により実験データを再現している
- 信頼性の高いモデルを再構築  
(実験データの再現性の改善は、大きい)



# ベンゼン

## — ベンゼン-空気混合気の着火遅れ時間

- 既存モデルはベンゼン-空気混合気の高圧の着火遅れ時間を再現できない



実験データ:

井上・佐々木・田中・高橋

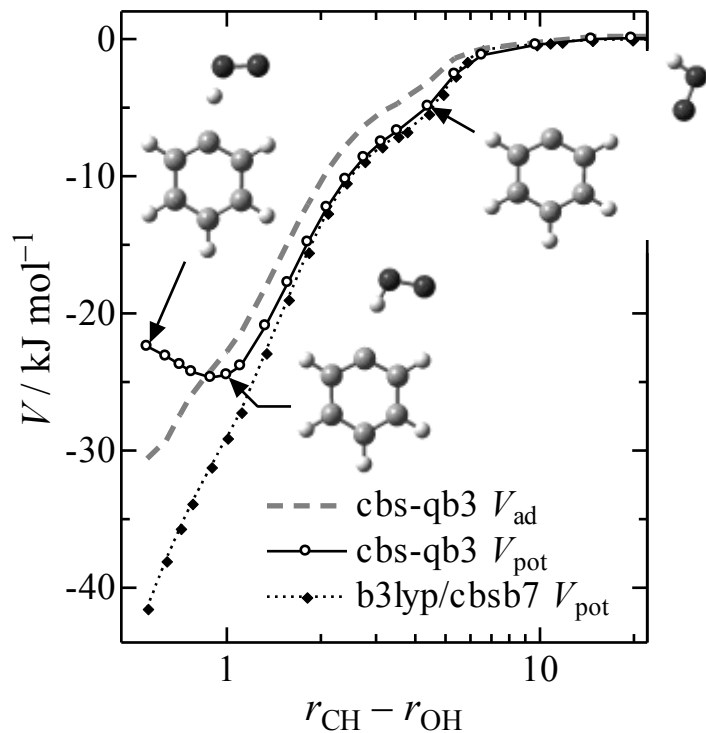
第48回燃焼シンポジウム C122

ベースモデル:

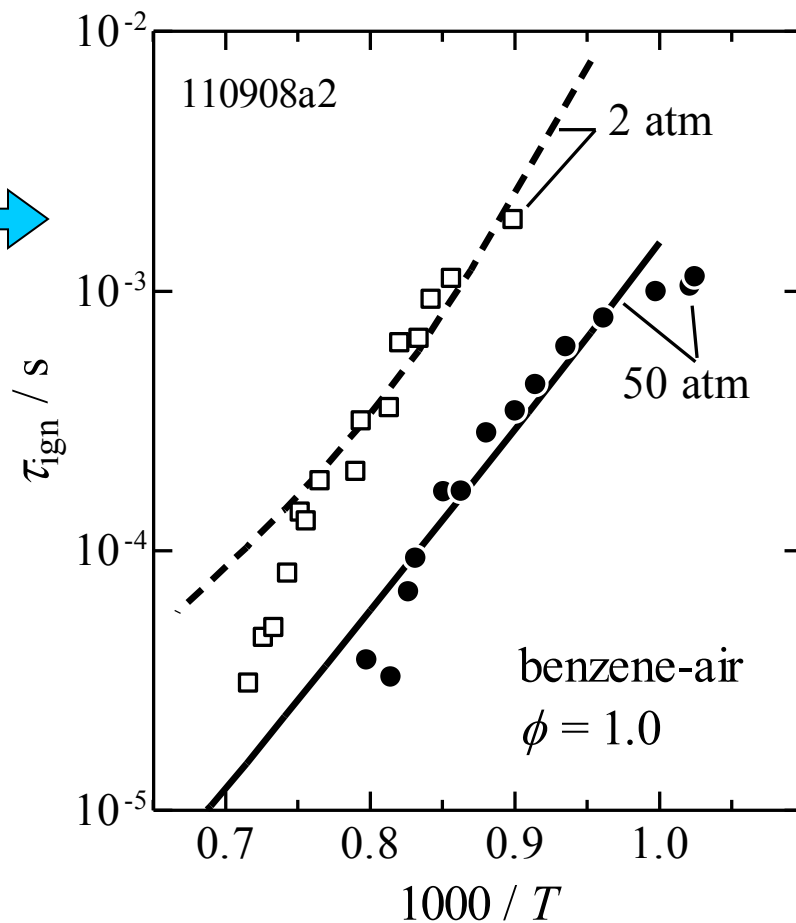
Sakai, Miyoshi, Koshi, and Pitz,  
Proc. Combust. Inst. 32:411–418  
(2009).



# ベンゼン – 主要な反応の再検討



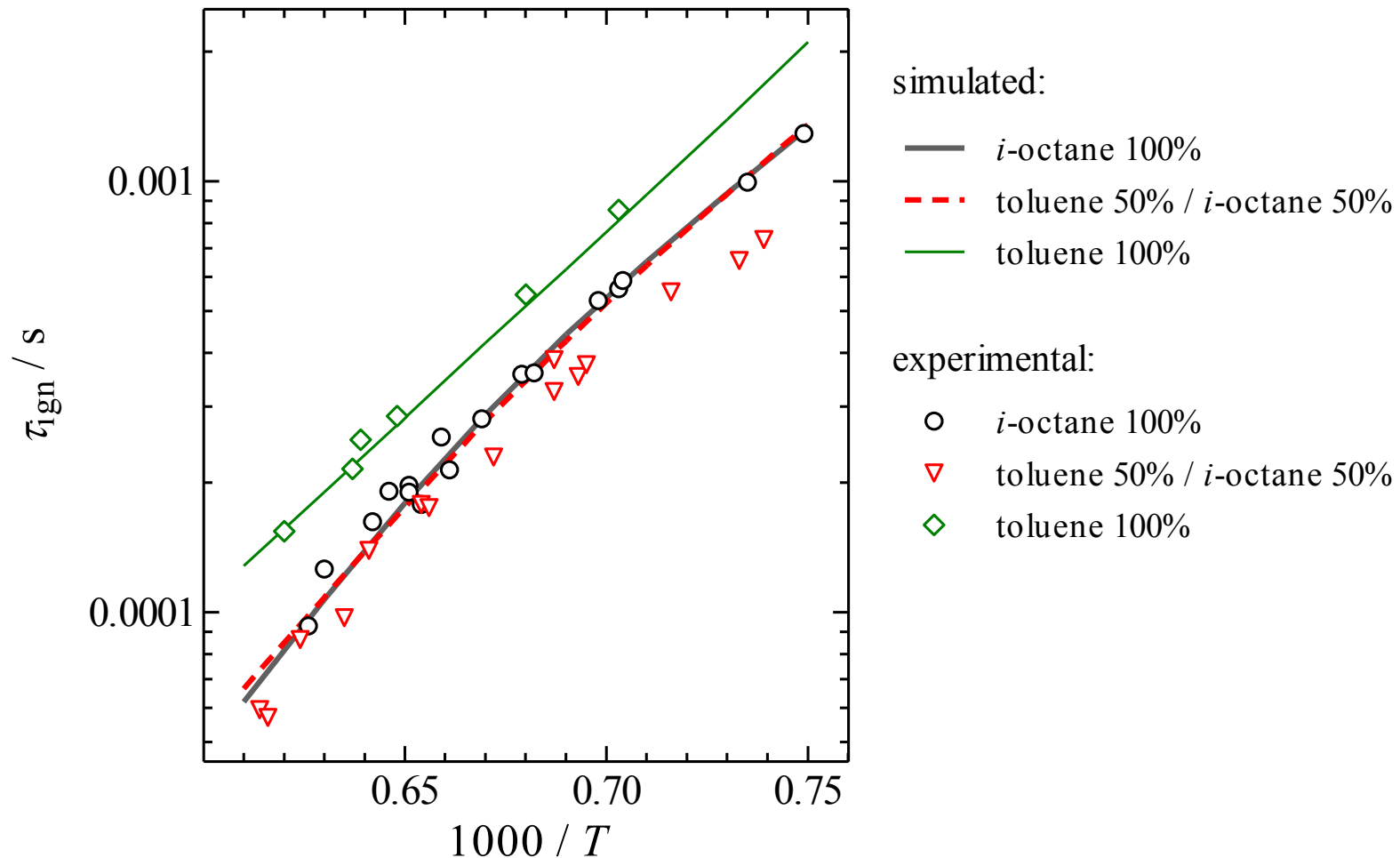
- 実験データとの一致の大幅な改善



# トルエン/アルカン混合燃料

## —トルエン/*i*-オクタンの着火遅れ時間

- アリル/プロペン、メチルアリル/イソブテンの高温反応の改善



# 燃焼反応モデルの将来

## — 燃焼反応モデル

- 必要性 / 近未来的な可能性

## — 詳細モデルの信頼性

- $H_2 > C_1-C_2 > \text{アルカン} > \text{ナフテン} > \text{アルケン} \cdot \text{アルコール} > \text{芳香族}$
- $C_2$  でも完全ではない

## — 改善できるか

- 改善の大幅なスピードアップが可能になっている
- ... それでも技術と執念は不可欠

## — 簡略化できるか

- 従来型の簡略化手法 +
  - スケレトンモデル (アルカンの低温酸化)
  - RCCE (反応式は減少せず解法の画期的高速化)