

K-1

## 正ヘプタンとメチルシクロヘキサンの混合燃料の反応が三段自発点火の熱炎の圧力上昇率に与える影響

### Influence of *n*-heptane/methyl-cyclohexane Blended Fuel Chemistry on Pressure Rise Rate of Hot Flame in Three-Stage Spontaneous Ignition

○寺崎大智<sup>1</sup>, 眞柄蒼士<sup>1</sup>, 永尾琉貴<sup>2</sup>, 佐賀太洋<sup>2</sup>, 齊藤允教<sup>3</sup>, 田辺光昭<sup>3</sup>

\*Daichi Terasaki<sup>1</sup>, Aoshi Magara<sup>1</sup>, Ryuki Nagao<sup>2</sup>, Taiyo Saga<sup>2</sup>, Masanori Saito<sup>3</sup>, Mitsuaki Tanabe<sup>3</sup>

We found H-abstraction from MCH+OH reaction to be the dominant pathway with negative sensitivity through sensitivity analysis. This reaction is exothermic and competes with chain-branching, forming a second stage and extending the time between second and third stage, which slows pressure rise rate.

現在、内燃機関には有害排気物質の低減や、熱効率の向上が求められ、予混合圧縮着火 (HCCI) 燃焼が注目される。しかし、燃焼時の急激な圧力上昇が課題の一つとなっている。これを緩慢化する方法として、三段自発点火がある。Sarathy らにより、*n*-heptane や *n*-heptane/MCH などの燃料を使用する場合、特定条件下で三段自発点火が発生することが示された<sup>[1][2]</sup>。*n*-heptane の二段点火では、一段目で冷炎、二段目では高温の熱炎に至る。一方、三段自発点火では、二段目で停止反応が強く作用し、反応性の高い反応と競合することで、中温域での発熱を抑制し、二段目を形成する。この二段目の形成が段階的な圧力上昇をもたらし、三段目の熱炎を形成する<sup>[1]</sup>。*n*-heptane/MCH 混合燃料でも、二段目と三段目の間の期間が長くなり、圧力上昇率  $dp/dt$  が緩慢化することが確認されている<sup>[2]</sup>。*n*-heptane は反応経路が既知であるが、MCH を混合した場合の詳細な反応経路は不明な点が多く、圧力上昇率の制御にはその解明が必要である。

本研究では、数値解析に 0 次元反応シミュレーションを用いて、MCH の体積分率が 40% の場合の、温度に対する反応速度の感度解析を行った。結果を Fig.1 に示す。R5349 の反応が、発熱を抑制する負の感度を示す上位の反応として確認された。これは MCH の主要反応の水素引き抜き反応である<sup>[3]</sup>。

R5349 の反応の二段目の圧力上昇率に対する抑制効果が吸熱反応によるものである可能性があるため、Cantera を用いて反応エンタルピーを算出した。その結果を Table 1 に示す。反応エンタルピーは負の値となること

から R5349 は発熱反応であることを確認した。

MCH の水素引き抜き反応とその反応により生成される安定した化学種である H<sub>2</sub>O や C<sub>7</sub>H<sub>13</sub> ラジカルの後続の反応が、*n*-heptane の連鎖分岐反応と競合している可能性がある。系の全体の反応性が一時的に低下し、結果として二段目での発熱を抑制し、熱炎の  $dp/dt$  が緩慢化する可能性がある。したがって、上記の反応が三段自発点火の熱炎発生時の圧力上昇率にどのように影響するかを議論する。

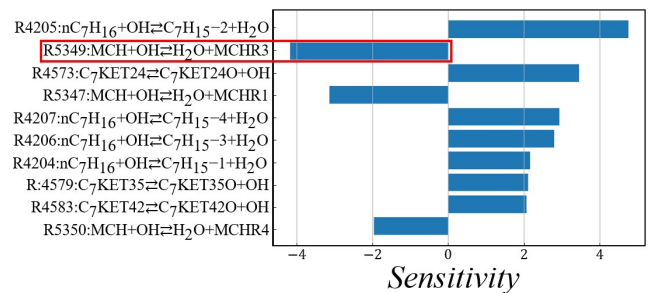


Figure 1 Sensitivity analysis with 40 vol% MCH.

Table 1 Reaction enthalpy of R5349.

Reaction Number	5349
Reaction Enthalpy [J/kmol]	-91.417

#### 参考文献

- [1] S. Mani Sarathy et al.: Three-stage heat release in *n*-heptane auto-ignition, Proceedings of the Combustion Institute, Vol.37, pp.485-492, 2019
- [2] Abdullah S. AlRamadan et al.: Three-stage auto-ignition of *n*-heptane and methyl-cyclohexane mixtures at lean conditions in a flat piston rapid compression machine, Proceedings of the Combustion Institute, Vol.38, pp.5539-5548, 2021
- [3] Tong Yao et al.: Compact Chemical Mechanism for Autoignition and Combustion of Methylcyclohexane under Engine Relevant Conditions, Energy & Fuels, Vol.31, No.11, pp.11337-11347, 2017

1: 日大理工・学部・航宇 2: 日大理工・院 (前)・航宇 3: 日大理工・教員・航宇