

■特集／FEATURE ■

— CO₂ 低減のための自動車用燃料と燃焼特性／Combustion Characteristics of Automotive Fuels for CO₂ Reduction —

燃料の燃焼特性はどこまで生かせるのか？

How Far Can We Take Advantage of Combustion Characteristics of Fuels?

三好 明*

MIYOSHI, Akira*

広島大学大学院先進理工系科学研究科 〒739-8527 東広島市鏡山 1-4-1

Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University, 1-4-1 Kagamiyama, Higashi-Hiroshima, 739-8527, Japan

Abstract: How far can we take advantage of combustion characteristics of fuels? It depends on how well we know about the combustion properties of fuels. The effect of modifying or changing fuels on the SI combustion has been investigated in terms of the fundamental combustion properties calculated by detailed kinetic models. Several previous studies suggested that the lean limit of SI combustion is significantly improved by the additives like nitromethane and by using high octane sensitivity fuels. The effects of the addition of nitromethane to methane and butane have been investigated based on the extinction flame stretch rate as well as the well-known properties including ignition delay time and laminar flame propagation velocities. The results suggested that the addition of nitromethane or the increase of octane sensitivity expands the lean and stretch extinction limit of early flame propagation. Also, recent experimental works have identified ethanol as a fuel with extended lean limit for SI combustion due to improved anti-knock and initial flame propagation. However, a part of reason may be in the smaller molecular weight and size which decrease Lewis number. For the elucidation of the effect of this Lewis number on the flame stretch-extinction behavior, numerical calculations have been performed by artificially modifying the collision diameters of the fuel molecules. The results indicate that both Lewis number and chemistry affects the extinction limit in the same order of magnitude.

Key Words: Fuels, SI Combustion, Octane Rating, Octane Sensitivity, Burning Velocity, Extinction Stretch Rate

1. 緒言

従来から自動車用燃料に用いられてきた燃料は化石燃料に由来する多種多様な炭化水素化合物の混合物である。ガソリン・軽油などは定められた規格内で市場に供給され、ガソリンエンジン・ディーゼルエンジンは市場燃料性状の範囲内で良好な燃焼を実現できるように開発されてきた。このことは、現在よりも高効率・低排出な内燃機関に適した燃料は必ずしも従来の燃料ではないことを意味している。

今後のエネルギー源の炭素中立化には自動車用の動力の電動化は重要な技術である一方で、早期の実質的な低炭素化の実現には内燃機関燃焼のさらなる効率化を、今後の導入が検討されている自然エネルギー由来の合成燃料の活用を念頭に置いて進めることは急務であると考えられる。合成燃料製造技術においては、従来燃料の性状に適合することだけを念頭におかず、むしろ高効率・低排出燃焼が実現できる燃料の性状を目指すのが、近道であると考えられる。

いくつかの重要な燃焼特性は明らかに燃料に依存する。

一方でほとんど燃料には依存しない燃焼特性も存在する。このような燃料の特性を生かせるかどうかは、どれだけ我々が燃料の特性を知っているにかかっている。本稿では、従来からよく理解されている燃料の燃焼特性だけでなく、必ずしも認識されてこなかった燃焼特性の持つ可能性についても述べたいと思う。

2. オクタン価、オクタン感度と希薄限界

ガソリンの重要な燃焼特性の指標のひとつとして、オクタン価が使われてきた。オクタン価は耐ノック性能の指標であり、リーン燃焼の希薄限界拡大など新たな技術に対応するためには異なった観点の指標が必要であると考えられている。一方で、歴史的な理由で 2 種類の異なった条件におけるオクタン価、すなわちリサーチ法オクタン価 (RON) とモーター法オクタン価 (MON) が知られている。これらの違いを利用することで、耐ノック性能のみでない燃料特性の評価が可能であることも示唆されてきた。図 1 に示すように RON と MON は相関の強い指標であるが、燃料の化学構造によって系統的に異なる[1, 2]こともよく知られてい

* Corresponding author. E-mail: akiramys@hiroshima-u.ac.jp

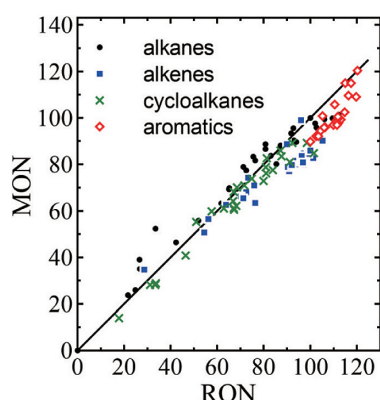


Fig. 1 Correlation and comparison of octane ratings MON and RON [1, 2] for pure substances.

る。一次標準燃料 (PRF) が鎖状飽和炭化水素であるため、不飽和炭化水素や芳香族炭化水素ではその差が大きい傾向がある。RON と MON の差であるオクタン感度 $OS = RON - MON$ を、オクタン価と直交する指標として利用する試み [3-6] も広く行われてきた。

RON と MON の違いを温度・圧力などの単純な物理条件の違いに帰属することは乱暴ではあるが、吸気温度と機関回転速度 [2] の違い (RON: 600 rpm, MON: 900 rpm) から MON の方がやや高温の混合気の自着火性を見ていると考えることができる。これをガソリンサロゲート燃料 [7] と PRF (オクタン価の一次標準燃料) の量論混合気 2 MPa の着火遅れ時間を用いて模式的に示したものが図 2 である。国内の JIS 一号 (ハイオク) および二号 (レギュラー) ガソリンを模擬した 5 成分サロゲート混合物 S5H および S5R の着火遅れ時間がそれらの実測の RON または MON の PRF と一致する温度を探すと、およそ RON が 790 K, MON が 880 K の自着火特性を見ていると考えられる。同様な図を全圧 4 MPa で書くとこの温度は異なるが、MON の方がより高温の着火性を示しているという傾向は変わらない。

Kalghatgi [4] は現在の自動車用ガソリンエンジンについて、実測に基づく耐ノック性指標 OI (オクタンインデックス) を次式で相関することを試みた。

$$OI = RON - K \times OS \quad (1)$$

ここで K は機関や運転条件で決まる定数、 OS はオクタン感度 ($= RON - MON$) である。 $K = 0$ であれば $OI = RON$, $K = 1$ であれば $OI = MON$ となるので、ある特定の機関・運転条件の耐ノック性 OI を RON と MON を補間して表現しようとしたものである。ところが現在の多くの SI 機関では K は負 ($K < 0$) であることが見出された。図 2 のように RON と MON の違いが「見る」温度の違いであるとする、 $K < 0$ は RON より低温側を見ることを意味する。しかし現在の高圧縮比エンジンでノック発生温度が低温化しているとは思えない。別の言い方をすれば、 $K < 0$ は RON が同じなら高温ノック耐性の MON は小さい方がよいことを意味している。しかしながら、実測に基づくこの奇妙な相関に対する

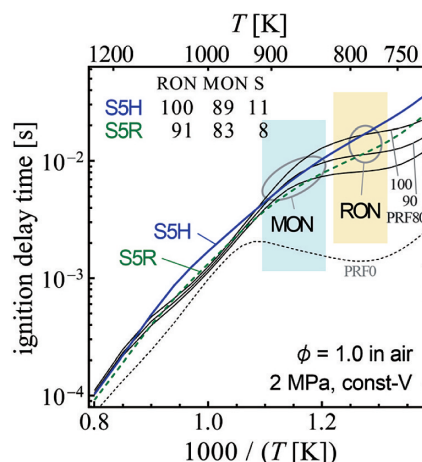


Fig. 2 Temperature dependence of ignition delay times of stoichiometric fuel/air mixtures under 2 MPa. PRF $_{nn}$ are primary reference fuels for octane number nn . S5H and S5R are five-component gasoline surrogates for JIS #1 and #2 gasolines.

明瞭な説明は行われていない。

ノック耐性は、よく知られているように燃焼速度にも影響を受ける。燃焼速度が小さいと早期点火が必要であり、エンドガスが高温高圧にさらされる時間が増加し、自着火 (ノック) の可能性が増大するためである。Yokoo ら [8] はいくつかの燃料についてリーン限界が層流燃焼速度と相関を持つことを示した。中でも PRF あるいはガソリンサロゲートにフランとニトロメタン (CH_3NO_2) を混合した燃料は良好な耐ノック特性とリーン限界を示した。三代ら [9] は同じ燃料について層流燃焼速度を測定した。フラン添加は層流燃焼速度を増大したが、ニトロメタンの効果はリーン側では認められなかった。また前田ら [10] は、対向流拡散火炎を用いて消炎特性を報告しているが、ニトロメタン添加では大きな変化はみられていない。筆者はニトロメタン混合燃料の反応機構を構築し、基礎燃焼特性を計算した [11, 12]。筒内条件においてもニトロメタンの混合は層流燃焼速度をわずかに上昇するに過ぎず、主な効果は着火遅れ時間に現れることがわかった。Yokoo らはまた、ニトロメタンの希薄限界の拡張効果は SI 初期燃焼期間 CA0-10 を短縮する結果であることを示唆している。乱流中の初期火炎の伝播が火炎伸張による消炎の影響を受けていると考えることができるが、燃料や燃料添加物の火炎伸張による消炎限界への影響について実験あるいは数値計算から検討した例は少ない。

対向流一次元予混合火炎伝播の計算手法を用いると、火炎伸張による消炎限界を求めることができる [13]。詳細反応機構が得られれば数値計算による検討は可能であり、本研究ではこの方法によって消炎限界を計算することとした。

3. 数値計算

本研究の反応計算は Chemkin II [14] もしくは Chemkin Pro [15] を用いて行った。火炎伸張による消炎限界は Chemkin

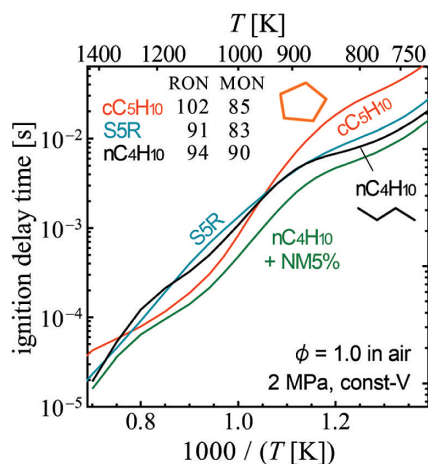


Fig. 3 Temperature dependence of ignition delay times of stoichiometric fuel/air mixtures under 2 MPa for cyclopentane, butane, butane + 5% nitromethane and gasoline surrogate S5R.

Pro に実装された西岡らのアルゴリズム[16]を用いて計算した。バーナー間距離 2 mm (メタン/ニトロメタン) もしくは 1 mm (ブタン/ニトロメタン, シクロペンタン, エタノール) の窒素と予混合火炎の対向流バーナーにより計算を行った。メタンおよびエタノールの反応機構には KUCRS [17] のベース反応機構を用い, ブタンの反応機構は KUCRS で生成した。いずれもさらに火炎伝播速度再現性を向上するための改変[7]を行った。ニトロメタン添加の効果を検討するための反応機構は上記の反応機構に Brequigny ら[18]によるニトロメタン燃焼反応機構を追加した。比較的低温の交互反応を考慮するために熱力学データを改定し, ペルオキシラジカルを追加した[11, 12]。シクロペンタンの反応機構は骨格を KUCRS で生成し, 量子化学計算を用いて改良した[19, 20]。量子化学計算には Gaussian [21]を用い反応速度定数と熱力学データの推定には GPOP [22]を用いた。

上述の反応機構を用いて SI 機関筒内の上死点付近の圧力 (2 MPa) で計算した着火遅れ時間を図 3 に示す。ブタンはオクタン価からも示唆されるように, この温度領域ではレギュラーガソリンサロゲート (S5R) に近い着火遅れ時間を示している。またブタンの着火遅れ時間へのニトロメタン添加効果は明瞭であり, 既報で示した[11, 12]ガソリンサロゲートへの添加効果と同様であることがわかる。高オクタン感度燃料として検討を行ったシクロペンタンは低温の着火遅れ時間は S5R およびブタンよりも明確に長い, 高温ではニトロメタン 5% を混合した燃料に近い着火遅れ時間を示している。

図 4a に計算された層流火炎伝播速度を示す。消炎火炎伸張速度の計算は定常火炎伝播の収束計算を数十点行う必要があるため, 本研究では反応機構が比較的小さい混合燃料を計算対象とした。過去の研究[11, 12]で示したように, ガソリンサロゲートとニトロメタンの混合燃料では, ニトロメタンの添加は火炎伝播速度にほとんど影響を与えない。この傾向はブタンでも同様であることが確認された。一方でメタンの場合は燃料に対して 2 ~ 4% の混合でも明瞭な

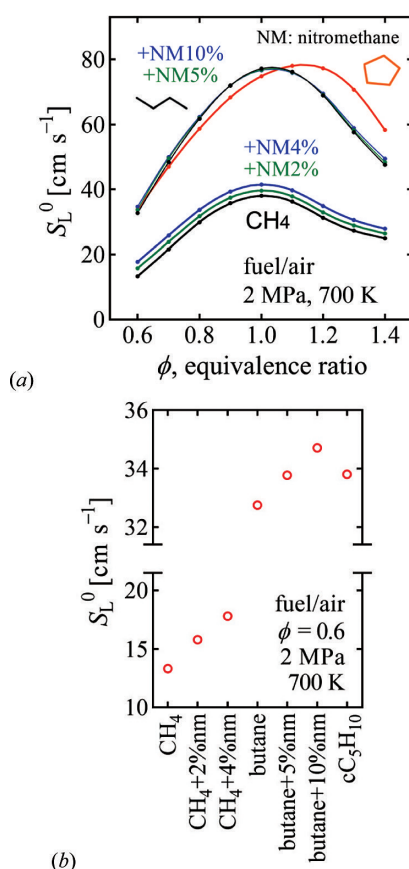


Fig. 4 Calculated laminar burning velocity S_L^0 of CH_4 (+nitromethane) / air, butane (+nitromethane) / air and cyclopentane / air mixtures under 2 MPa and 700 K. (a) equivalence ratio ϕ dependence from 0.6 to 1.4. (b) burning velocities at $\phi = 0.6$ only (expanded for comparison).

火炎伝播速度のすべての当量比でみられている。ブタンの場合は図 4a ではほとんどわからないが, 消炎限界に近い当量比 0.6 における火炎伝播速度の違いを拡大して示した図 4b では微小な効果があることがわかる。以下ではこれらの違いを念頭に置いて, 消炎火炎伸張速度について議論する。

4. ルイス数

本研究で報告する希薄条件のルイス数 Le は, 常温 (298 K)・常圧 (1 atm) 条件で次式から計算された値である。

$$Le = \frac{\alpha}{D_{jk}} \quad (2)$$

ここで α は混合気の温度拡散率である。 D_{jk} は希薄条件では燃料 j の混合気 k に対する拡散係数である。本研究では混合気の物性値は N_2 の値で代用した。 D_{jk} は次式[23, 24]から計算した。

$$D_{jk} = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi k_B^3 T^3 / m_{jk}}}{P n \sigma_{jk}^2 \Omega^{(1,1)*}} \quad (3)$$

換算質量 m_{jk} および衝突直径 σ_{jk} は次式から計算した.

$$m_{jk} = \frac{m_j m_k}{m_j + m_k} \quad (4)$$

$$\sigma_{jk} = \frac{\sigma_j + \sigma_k}{2} \quad (5)$$

m_j , m_k , σ_j , σ_k は燃料および窒素の質量と衝突直径である. 衝突積分 $\Omega^{(1,1)*}$ は 1 とみなした.

5. メタンの消炎限界火炎伸張とニトロメタンの影響

図 5 に圧力 2 MPa および未燃温度 700 K のメタン-空気火炎の火炎伸張による消炎限界挙動を示す. 図 5a は量論混合気体, 図 5b は燃料希薄 (当量比 0.6) 混合気体の消炎挙動を示している. 図の横軸は火炎の伸張速度であり, 縦軸は最高火炎温度である. 円弧の右端が消炎火炎伸張速度に相当する. バーナーは間隔が 2 mm の対向流であり, 一方は予混合気中に火炎が存在し, 他方は窒素のみである. 火炎伸張速度が大きくなるにつれて火炎温度は低下し消炎する様子を示している.

ニトロメタンの添加量は燃料中のモル分率で示してい

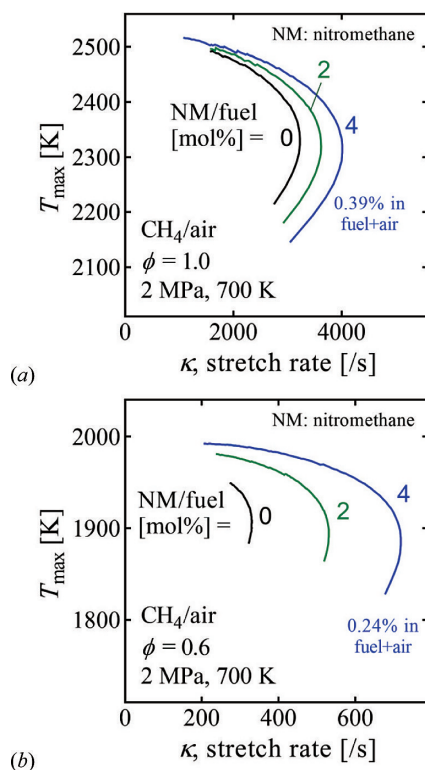


Fig. 5 Effects of the addition of nitromethane CH_3NO_2 to methane CH_4 on the extinction stretch rate calculated by the premixed laminar flame with opposed non-reactive nitrogen stream under 2 MPa and unburned temperature of 700 K (burner gap = 2 mm).

(a) Stoichiometric CH_4 flame with added nitromethane of 2 and 4% (mole fraction to fuel).

(b) Lean ($\phi = 0.6$) CH_4 flame with added nitromethane.

る. 量論混合気体, 希薄混合気ともにニトロメタンの添加によって消炎火炎伸張速度が増加するが, 相対的な効果は希薄混合気の場合に特に大きい. ニトロメタンが希薄限界付近の CA0-10 を短縮する現象との関連が示唆される. 図 4b に示したようにニトロメタンの添加によって火炎伝播速度も増加し, 消炎限界は火炎伝播速度と関連する. しかし希薄混合気の場合の火炎伸張限界への効果は相対的に非常に大きく (ニトロメタン 1% について 30% 程度), その効果の本質が火炎伝播速度の増加 (ニトロメタン 1% につき 1.5% 程度) であるとは言い難い.

ただし上述のようにメタン火炎は, ニトロメタンの添加が火炎伝播速度に影響が見られるので, SI 燃焼への影響を議論するためにはガソリンに近い, より炭素数の多い炭化水素が望ましいと考えられる.

6. ブタン火炎とニトロメタンの影響

ガソリンサロゲートの反応機構を用いた同様な計算は現時点では困難と考えられたため, 本研究ではブタン (n -ブタン) を燃料として計算を行うこととした. 図 3 に示したように着火遅れ時間はガソリンサロゲートに近く, ニトロメタンを添加したときのその変化もガソリンサロゲートと類似している. また図 4 に示したように火炎伝播速度に対するニトロメタンの効果がほとんどない, という点でもガソリンサロゲートと共通する部分が多い.

計算された火炎伸張による消炎挙動を図 6 に示す. 炭素数が大きく異なるためメタンの場合と同様に, ニトロメタンの添加量をメタンのモル数 (物質質量) 基準で同等とすると, 混合気中のニトロメタンの量は極端に少なくなってしまうため, 添加量は燃料基準で 5% および 10% とした. この場合の混合気中のニトロメタン濃度はメタンの場合よりやや少ないか同程度になっている (図 5 及び図 6 中の混合気中のニトロメタン濃度を参照).

図 6a に示すように量論混合気体では, 消炎限界の火炎伸張速度はニトロメタンの添加に全く影響を受けない. これは量論混合気の火炎伝播速度についても同様でニトロメタン濃度との相関は見られない. 一方で図 6b に示すように燃料希薄気体では明確なニトロメタンの添加効果が見られた. 図 4a では当量比 0.6 の火炎伝播速度のニトロメタン添加効果はほとんどわからないが, 図 4b のように拡大するとこれも火炎伝播速度と相関があることがわかる. しかしながらメタン場合と同様に, ニトロメタンの及ぼす効果の原因を火炎伝播速度の変化に求めるのは難しいと考えられる.

図 7 にニトロメタンとフランをガソリンサロゲート S5H に混合した燃料の着火遅れ時間を S5H と比較したものを示す. ニトロメタン混合により中高温 (1000~1200 K) の着火遅れ時間が短くなっており, 低温の着火遅れ時間の増大はフランの効果である. 図 7 にはさらに, 良好なりん燃焼特性を示すエタノールの着火遅れ時間も示した. ニトロメ

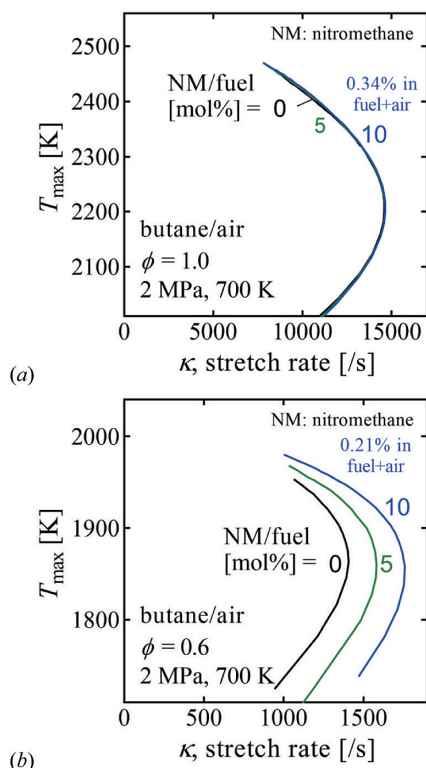


Fig. 6 Effects of nitromethane CH_3NO_2 addition to butane C_4H_{10} on the stretch-extinction behavior calculated for the premixed laminar flame with opposed non-reactive nitrogen stream under 2 MPa and unburned temperature of 700 K (burner gap = 1 mm). (a) Stoichiometric C_4H_{10} flame with added nitromethane of 5 and 10% (mole fraction to fuel). (b) Lean ($\phi = 0.6$) C_4H_{10} flame with added nitromethane.

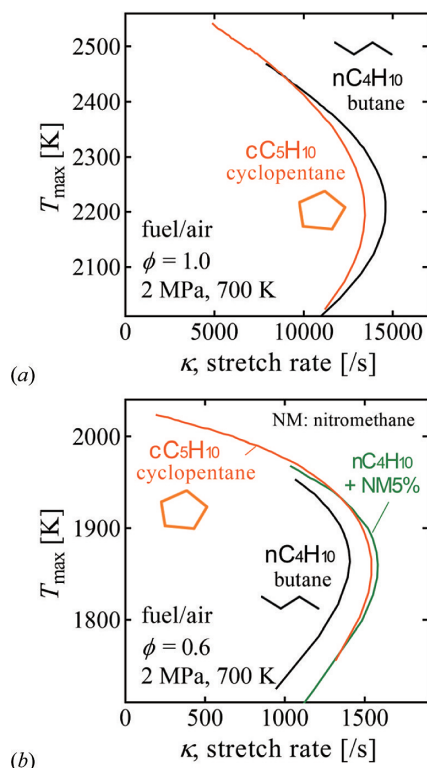


Fig. 8 Stretch-extinction response curves for the premixed laminar cyclopentane/air flame with opposed nitrogen stream under 2 MPa and unburned temperature of 700 K (burner gap = 1 mm). (a) Stoichiometric cyclopentane flame in comparison with butane. (b) Lean ($\phi = 0.6$) cyclopentane flame in comparison with butane and butane with 5% nitromethane.

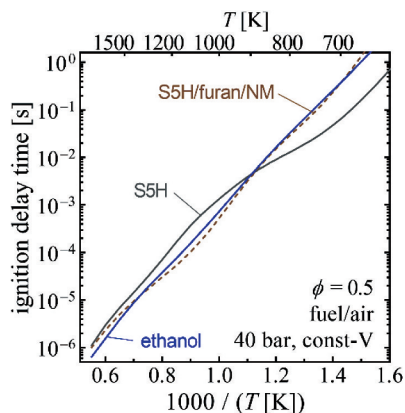


Fig. 7 Constant-volume ignition delay times of lean ($\phi = 0.5$) fuel-air mixtures at 40 bar for premium gasoline surrogate S5H, S5H mixed with furan and nitromethane, and ethanol.

タン / フラン / S5H 混合燃料と同様な着火遅れ時間の曲線になっていることが興味深い。エタノールについては後述するように消炎限界の火炎伸張の計算も行った。

7. シクロペンタンとオクタン感度

シクロペンタン ($c\text{-C}_5\text{H}_{10}$) はオクタン価が知られている飽和炭化水素中で最もオクタン感度が大きい ($\text{RON} = 102$,

$\text{MON} = 85$, $\text{OS} = 17$)。図 8 にシクロペンタンの火炎伸張による消炎特性をブタンと比較する。結果は図 4 の層流火炎伝播速度と相関しているように見える。すなわち、シクロペンタン量論混合気の燃焼速度は明らかにブタンより小さく消炎限界も低いが、当量比 0.6 の希薄条件ではブタンより大きく、燃焼速度も消炎限界もブタンにニトロメタンを 5 % 添加した場合と同程度である。これらのいずれの挙動を見ても、燃焼速度との相関はよい。しかしながら、燃焼速度の $\sim 3\%$ 程度の変化で消炎限界歪速度の $\sim 10\%$ の変化を説明することは難しいと思われる。

一方で図 3 のシクロペンタン、ブタン、ブタン + 5 % NM (ニトロメタン) の着火遅れ時間を比較することは興味深い。およそ 900 K 以下の低温ではシクロペンタンはブタンよりも明らかに自着火しにくい、1100 ~ 1200 K 程度の高温の着火遅れ時間はブタンよりも短く、ブタン + 5 % NM と同程度である。図 7 の当量比 0.6 の消炎限界の火炎温度は 1800 ~ 1900 K と低く、1100 ~ 1200 K 程度の着火遅れを短縮する反応が火炎の伝播を助けている可能性が考えられる。さらにオクタン感度との関係を考えて、同じ RON の燃料であれば、MON が低ければその外挿に相当する 1100 ~ 1200 K 程度の着火遅れを短くすることが考えられる。一見矛盾するように思われるオクタン感度の議論は、1100 K 程度以上

の高温の着火積が火炎伝播を補助すると考えると合理的に説明できる可能性がある。

8. エタノールの火炎伸張消炎特性

エタノールとブタンの混合燃料の火炎伸張による消炎特性を図9に示す。消炎限界火炎伸張率はリーン条件 (a) $\phi = 0.6$ においても量論条件 (b) $\phi = 1.0$ においても、ブタンよりもエタノールが大きいことがわかる。燃料の混合比に対する消炎限界の変化は線形ではないが、エタノールの混合率に対して単調増加に消炎限界は大きくなることわかる。同じ圧力におけるブタンとエタノールの火炎伝播速度の計算値を図10に示す。いずれの当量比においても火炎伝播速

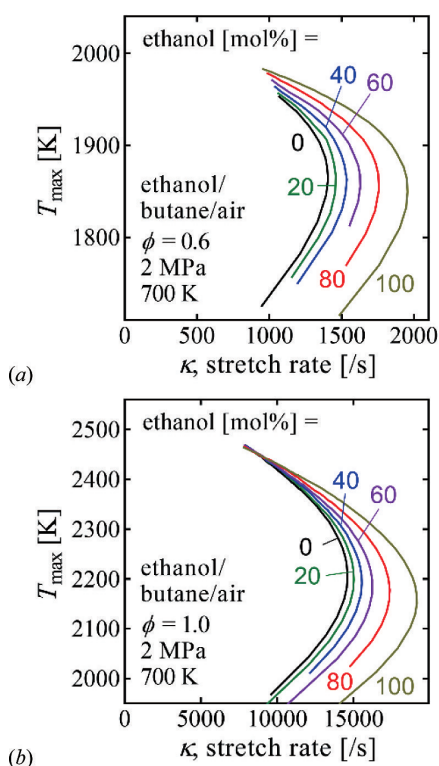


Fig. 9 Flame stretch-extinction behavior of ethanol/butane-air mixtures under (a) lean ($\phi = 0.6$) and (b) stoichiometric conditions at 2 MPa and 700 K.

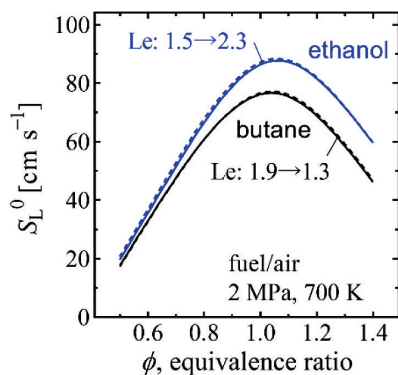


Fig. 10 Laminar burning velocities of ethanol-air and butane-air mixtures at 2 MPa and 700 K.

度はエタノールの方が大きい。ニトロメタンをブタンに添加した場合は、火炎伝播速度には違いが現れないのに対して、エタノールでは伝播速度が大きいことが当量比によらず火炎伸張に強い理由の一つであると考えられる。

9. ルイス数の効果

一般に希薄条件で炭化水素燃料と空気の混合気のルイス数は1より大きく、燃料の拡散は熱伝導よりも遅く律速になっている。ことため、ルイス数が小さく拡散が速い方が、伸張を受けた火炎は安定化し消炎に強くなることが予想される。本研究ではこの効果を、燃料の燃焼反応機構は変えずに衝突直径のみを変化させることでルイス数の影響を検討することを考えた。

希薄混合気のルイス数は主に燃料の混合気に対する拡散係数によって支配されることが考えられる。このため、拡散係数の計算に使われる燃料分子の衝突直径 σ_f を変化させることで、ルイス数を変化させることが可能である。

図11aにエタノールの衝突直径を $2^{1/2}$ 倍にして拡散係数を小さくした場合の消炎特性の計算結果をエタノールおよびブタンと比較した。拡散が速い (ルイス数が小さい) ことはエタノールの消炎特性に影響を与えているが、ブタン混合気よりもルイス数を大きくしてもブタンと同等にはならない。このことはルイス数のみで消炎挙動が決まっているわけではないことを示している。図11bには逆にブタンの

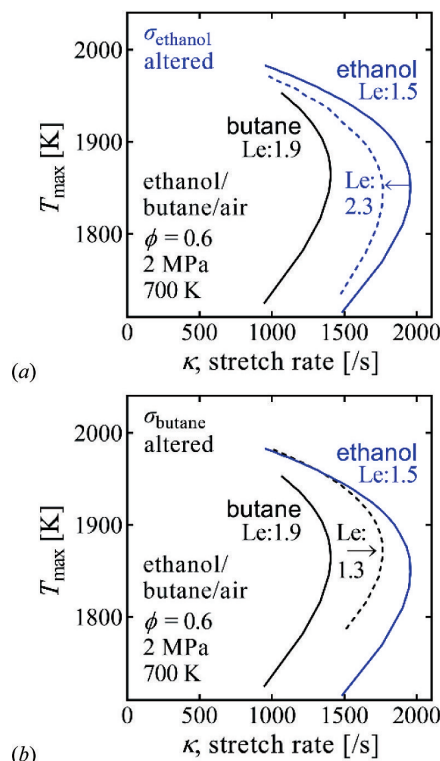


Fig. 11 Flame stretch-extinction behavior of ethanol-air and butane-air mixtures with varied Lewis numbers by changing the collision diameters (a) at lean ($\phi = 0.6$) and (b) stoichiometric conditions.

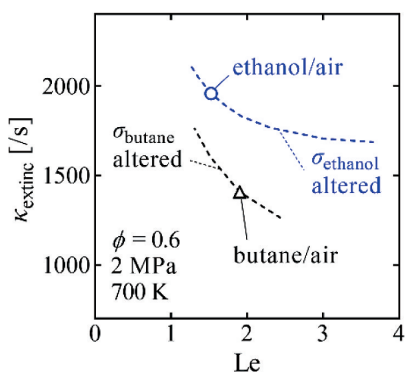


Fig. 12 Extinction stretch rate calculated by varied Lewis number by changing the collision diameter of fuel.

衝突直径を $1/2^{1/2}$ にして拡散係数を大きくした場合の消炎特性を示す。消炎限界は大きくなるが、エタノールよりもルイス数を小さくするようにしても、消炎限界はエタノールよりも小さい。

ルイス数による消炎限界火炎伸張の変化を図 12 にまとめた。ブタン、エタノールいずれもルイス数の低下により消炎限界が拡大し、ルイス数 1 付近で急激に立ち上がることがわかる。一方でルイス数が同じであっても燃料、すなわち化学反応による違いは明確に存在していることがわかる。

10. 低級アルカンの消炎限界火炎伸張特性

渡邊ら[25]は製油過程で得られる軽質アルカン・アルケン成分がリーン燃焼の希薄限界拡大に有効であることを示している。上で見てきたようにこれには燃料の化学構造に由来する燃焼特性の違いと分子量が小さいことによるルイス数の効果が関係していると考えられる。図 13 に比較的高オクタン価の近い構造の軽質アルカンを選択して、消炎限界火炎伸張を検討した結果を示す。

消炎限界火炎伸張は分子量が大きくなるにつれて低下することがわかる。このことは分子量 (ルイス数) の効果が大きいことを示している。しかしながら、この検討はオクタン価の比較的近い、エンジン実験の可能な炭化水素に限った傾向であることに注意が必要であると考えられる。

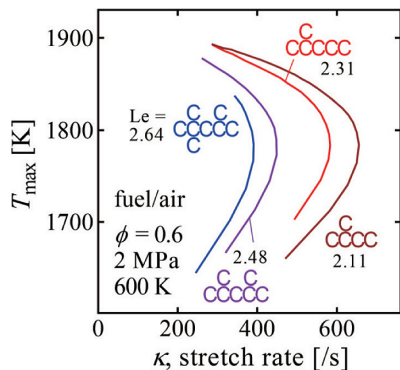


Fig. 13 Flame stretch-extinction behavior of alkane-air mixtures under lean ($\phi = 0.6$) conditions at 2 MPa and 600 K.

11. 結論

ニトロメタンの CA0-10 の短縮に見られる SI 初期燃焼への大きな効果は、観測された小さな層流燃焼速度の変化と相関を持つが、層流燃焼速度の変化が直接的な原因とは考え難い。本研究では火炎伸張による消炎限界を計算することで、より直接的な影響を持つ基礎燃焼特性である可能性を示した。

消炎限界火炎伸張速度は、他の基礎燃焼特性と全く独立であるわけではなく、層流燃焼速度に依存し、着火遅れ時間の計算結果が示唆するように、中高温 (1000 ~ 1200 K) の自着火性が消炎を回避して火炎伝播を助けている可能性が示唆される。同様なことは SI 燃焼における点火初期の火炎の挙動にも強く影響するために CA0-10 などに大きな影響を与える可能性が高いと考えられる。

自着火性が関連しているので、火炎伸張による消炎限界はオクタン感度と関連すると考えてよい。現在使われている燃料では同じ RON を持つ場合、オクタン感度が大きいと MON は小さく、比較的高温 (1000 ~ 1500 K) の着火性が改善されるために SI 燃焼速度を向上しこれが耐ノック性を改善している可能性がある。実測の耐ノック性については、このような外挿が現在の燃料について統計的に正しいことを示している。しかし、新たな化合物の場合にオクタン感度が高ければよいかどうかを保証するものではない。

対向流火炎の消炎伸張コードを用いて消炎特性に対する燃料の化学反応と輸送係数の影響を検討した。エタノールとブタンではエタノールの消炎限界火炎伸張が大きい。このことにはルイス数が小さいことも影響しているが、ルイス数のみを変化しても同じ限界火炎伸張とはならないことが示された。

低級アルカンの消炎特性の計算からは分子量の影響が大きいことが示されたが、化学構造に由来する違いの影響も大きいことが示唆される。

謝辞

本研究の一部は、自動車用内燃機関技術研究組合との共同研究事業の成果である。関係者各位に深く感謝の意を表する。

References

1. W.C. Lovell, *Ind. Eng. Chem.* 40: 2388-2438, 1948.
2. J.M. Derfer, C.E. Boord, F.C. Burk, R.E. Hess, W.G. Lovell, R.A. Randall and J.R. Sabina, *Knocking Characteristics of Pure Hydrocarbons*, ASTM Special Technical Publication 225, Cincinnati, OH, 1958.
3. W.R. Leppard, *SAE Paper* # 902137, 1990.
4. G.T. Kalghatgi, *SAE Paper* # 2001-01-3584, 2001; *ibid* # 2001-01-3585, 2001.

5. C.K. Westbrook, M. Mehl, W.J. Pitz and M. Sjöberg, *Combust. Flame*, 175: 2-15, 2017.
6. E. Singh, J. Badra, M. Mehl and S.M. Sarathy, *Energy Fuel* 31: 1945-1960, 2017.
7. 三好 明, 酒井 康行, 自動車技術会論文集, 48: 1021-1026, 2017, # 20174744.
8. N. Yokoo, Y. Miyamoto, K. Nakata, K. Obata, T. Naiki, M. Watanabe, JSAE 20199062, SAE 2019-01-2256 (2019 PF&L Kyoto).
9. 三代 泰輔, 前田 琢磨, 佐竹 洋輔, 田上 公俊, 嶋田 不美生, 小畠 健, 内木 武虎, 渡邊 学, 第 56 回燃焼シンポジウム講演論文集, 講演 # D132, 2018 年 11 月 14 ~ 16 日, 堺.
10. 前田 琢磨, 三代 泰輔, 佐竹 洋輔, 田上 公俊, 嶋田 不美生, 小畠 健, 内木 武虎, 渡邊 学, 第 56 回燃焼シンポジウム講演論文集, 講演 # D131, 2018 年 11 月 14 ~ 16 日, 堺.
11. 三好 明, 第 29 回内燃機関シンポジウム講演予稿集, 講演 # 33, 2018 年 11 月 26 ~ 28 日, 京都.
12. A. Miyoshi, Proceedings of the 12th Asia-Pacific Conference on Combustion, OS11-4, ASPACC2019-1227, July 1-5, 2019, Fukuoka, Japan.
13. R.J. Kee, J.A. Miller, G.H. Evans and G. Dixon-Lewis, *Proc. Combust. Inst.* 22: 1479-1494, 1988.
14. R.J. Kee, F.M. Rupley, J.A. Miller, Sandia Report, SAND89-8009B • UC 706 (1995).
15. CHEMKIN-PRO 2019R2, ANSYS, San Diego, 2019.
16. M. Nishioka, C.K. Law and T. Takeno, *Combust. Flame*, 104: 328-342, 1996.
17. A. Miyoshi, KUCRS software library, rev. 2011.01.07m14, <http://akrmys.com/KUCRS/> (accessed: Aug. 1, 2019).
18. P. Brequigny, D. Dayma, F. Halter, C. Mounaïm-Rousselle, T. Dubois, P. Dagaut, *Proc. Combust. Inst.* 35: 703-710, 2015.
19. 三好 明, 第 56 回燃焼シンポジウム講演論文集, 講演 # B321, 2018 年 11 月 14 ~ 16 日, 堺.
20. A. Miyoshi, SAE paper, # 2019-01-2305 / # JSAE 20199171, 2019. (presented at SAE/JSAE PF&L 2019, August 26-29, 2019, Kyoto).
21. M.J. Frisch et al., Gaussian 16, Revision B.01, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.
22. A. Miyoshi, GPOP software, rev. 2013.07.15m7, <http://akrmys.com/gpop/> (accessed: Aug. 1, 2019).
23. R.J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M.E. Coltrin and J.A. Miller, A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multicomponent Transport Properties, Sandia Report, SAND86-8246, UC-401, 1995.
24. J.O. Hirshfelder, C.F. Curtiss and R.B. Bird, *Molecular Theory of Gases and Liquids*, John Wiley & Sons, New York, 1954.
25. 渡邊 学, 安武 優希, 内木 武虎, 小畠 健, 自動車技術会論文集, 53, 202-206, #20224056 (2022).