

# エタノール混合軽油の燃焼解析

柳野 哲史\*<sup>1</sup> 陳 之立\*<sup>2</sup>

## Combustion Analysis of Ethanol Diesel Blends

by

Satoshi YANAGINO \*<sup>1</sup> and Zhili CHEN \*<sup>2</sup>

(Received on March. 31, 2010 and accepted on May. 19, 2010)

### Abstract

This study was carried out by CHEMKINII for the combustion analysis of ethanol diesel blends by the application of elementary reactions. The simplified model of ethanol diesel blends model used in this study was constructed based on the Curran n-heptane model and the elementary reaction model of ethanol extracted from the Curran DME model. The effects of ethanol diesel blends on ignition delay, decrease of combusted heat value in low temperature oxidation, and decrease of PM emission were compared and clarified between experiment and analysis. Increase of ignition delay and decrease of combusted heat value in low temperature oxidation were observed in both of experiment and analysis, caused by the decrease of OH radical from the consumption by ethanol. In addition, decrease of combusted heat value in low temperature oxidation was also observed due to the decrease of ethanol activation energy.

**Keywords:** Combustion analysis, Ethanol, Low/high temperature oxidation, CHEMKIN

## 1. 研究背景

温室効果ガスであるCO<sub>2</sub>の排出量削減に効果的としてディーゼル機関が注目され、特にディーゼルの新燃焼方式として知られている燃焼は予混合化のためNO<sub>x</sub>およびPMが同時に低減ができるので、予混合ディーゼル機関(PCI)が盛んに研究されている<sup>[1]</sup>。しかし、PCI機関の着火が早く燃焼速度が高いためノッキングが生じ、運転領域が狭まり高負荷での運転が難しい。軽油にエタノールを混合することにより、着火遅れ、発熱量の低減、PMの排出量を低減できるが、詳細な燃焼メカニズムは不明である。CHEMKINを用いた解析は様々な研究機関で行われているが<sup>[2][3]</sup>、エタノール混合軽油の燃焼解析は行われていない。

そこで、本研究ではエタノール混合による着火遅れ、発熱量の低減、PM低減等が燃焼におよぼす影響を、素反応を考慮した燃焼シミュレーションコードCHEMKIN IIを用いて実機関と比較検討する。燃焼メカニズムを明確にすることで、排気中での有害物質の低減、運転領域の拡大、燃焼を制御することにより高効率化が行えると考えられる。解析に用いる燃料は、軽油の代用としてTable 1に示すように物性値に近いことよりn-heptaneを用いた。

## 2. 計算方法

化学動力学計算には米国のSandia National Laboratoryで開発されたCHEMKIN IIを用いた。CHEMKIN IIは気相反応解析および輸送物性推算の汎用解析を目的としたプログラムである<sup>[4]-[6]</sup>。本研究では、軽油の代用としてCurranらの簡易n-heptane素反応モデル<sup>[7]</sup>を、CurranらのDMEモデル<sup>[8]</sup>からエタノールに関係する重要な素反応を抽出し、簡易n-heptane素反応モデルに組み込んだ簡易型エタノール混合軽油素反応モデルを用いる。Curranらの素反応モデルは妥当性が高く様々な研究機関で使用されており、小山らの研究<sup>[9]</sup>によると、Curranらの素反応モデルは高温酸化反応および低温酸化反応発現時期の当量比、温度依存性の定性的評価に使用できることが確認されている。計算条件は0次元での解析で燃焼室内の温度、圧力、混合気の組成が均一と仮定し、冷却損失は一切考慮しない。

Table 1 Physical properties of each fuel

燃料	軽油	n-heptane	エタノール
化学式	—	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH
分子量	g/mol	100.2	46.07
セタン価	—	59	8
理論混合比	kg/kg	14.60	9.00
発火点	°C	240	365
低位発熱量	kJ/g	43.0	26.8

\*1 工学研究科機械工学専攻修士課程

\*2 工学部動力機械工学科教授

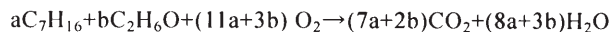
### 3. エタノール混合軽油モデルの作成と妥当性検証

#### 3.1 エタノール混合軽油モデルの作成

本研究で用いる素反応モデルの作成方法は、Curran らの DME モデルに含まれるエタノールの素反応での解析を行い、モデルをより簡略なモデルにするため、感度が活発な素反応を抽出する。Curran らの n-heptane 簡易モデルには化学種が 35 種類、素反応数は 41 あり、この素反応を Table 2 に表し、n-heptane 燃焼反応による温度に対する反応速度の変化を Fig.1 に示す。Fig.1 より No.30 以下の値、約  $0.025[\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{s}]$  は無視とする。また、この値を超える素反応で抽出しない反応は元々 Curran らの n-heptane 簡易モデルに存在する素反応や連鎖反応に参与していないことより無視している。DME モデル内に存在するエタノール素反応数は 24 あり、エタノール素反応を Table 3 に表す。Table 3 に示したエタノール素反応を用いて、エタノール燃焼反応による温度に対する反応速度の変化を Fig.2 に示し、それぞれのエタノール素反応での感度を考察する。Fig.2 に示す感度が活発な 4 つの素反応 No.118, 119, 130, 182 に着目した。4 つの素反応で生成される  $\text{sC}_2\text{H}_4\text{OH}$ ,  $\text{pC}_2\text{H}_4\text{OH}$ ,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$  など反応中で関与し、これらの素反応を Table 4, 5, 6 に表す。ここで、s や p 元素記号ではなくは C H O H の異性体である。s は光学異性体であり、p は幾何異性体である。Table 4, 5, 6 より、エタノール燃焼反応による温度に対する反応速度の変化をそれぞれ Fig.3, 4, 5 に示し、個々のエタノール素反応での感度を考察する。これらの図より、 $\text{sC}_2\text{H}_4\text{OH}$  は No.186,  $\text{pC}_2\text{H}_4\text{OH}$  は No.118,  $\text{C}_2\text{H}_5\text{O}$  は No.181 を抽出した。エタノールに参与する 24 の素反応から抽出したエタノール素反応を、Curran らの簡易 n-heptane モデルの素反応スキームに追記し、抽出したエタノール素反応と化学種をそれぞれ Table 7, 8 に表す。

#### 3.2 エタノール混合軽油モデルの妥当性検証

エタノール混合 n-heptane の完全燃焼時の反応はエタノールの混合割合によって変化するので、完全燃焼したとき、 $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  が何倍生じるか考える。ただし n-heptane とエタノールの化学反応係数をそれぞれ a, b とする。



計算条件を当量比  $\phi = 0.30$ , エタノール混合割合 30% とすると、n-heptane, エタノール, 酸素の化学反応係数はそれぞれ 1 : 1.07 : 14.2 となる。これらが完全燃焼したとき、 $\text{CO}_2$  および  $\text{H}_2\text{O}$  が何倍生じるかを考える。



上式より、 $\text{CO}_2$  生成量 9.13 倍、 $\text{H}_2\text{O}$  生成量 11.2 倍とする。解析結果では  $\text{CO}_2$  生成量 8.92 倍、 $\text{H}_2\text{O}$  生成量 10.7 倍となり、最大で 4.5% の誤差が生じる。この誤差は素反応モデルを改良し実験を行い、詳細なデータを取って作成したものであり、今回異なる 2 つのモデルを組み合わせた際、同じ素反応が異なる係数を持っているため、生じた誤差である。従って、エタノール混合 n-heptane の計算結果には 5% 程度の誤差がある上での計算とする。一方、

エタノール混合無しの条件で Curran らの n-heptane 簡易モデルとエタノール混合軽油モデルを比較した結果、量論比と同様に 5% 以下の誤差で一致した。

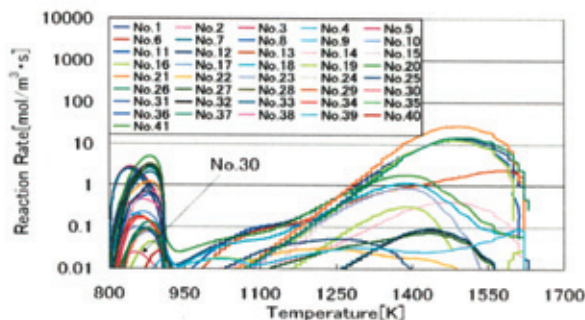


Fig. 1 Rate of reaction in n-heptane combustion reaction (Equivalence ratio  $\phi = 0.30$ , Onset temperature = 800K, 1150rpm)

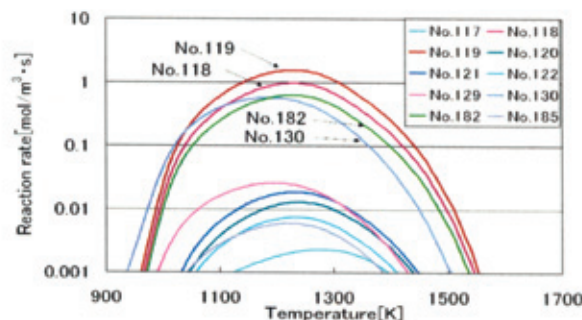


Fig. 2 Rate of reaction in ethanol combustion reaction (Equivalence ratio  $\phi = 0.30$ , Onset temperature = 800K, 1150rpm)

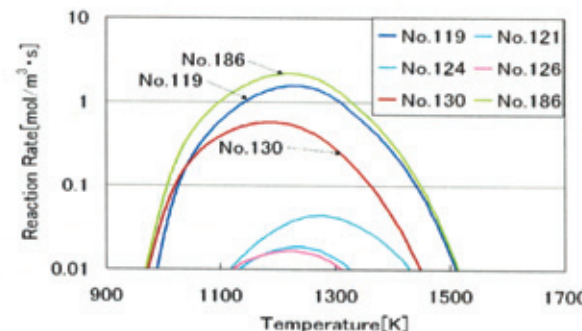


Fig. 3 Rate of reaction in  $\text{sC}_2\text{H}_4\text{OH}$  (Equivalence ratio  $\phi = 0.30$ , Onset temperature = 800K, 1150rpm)

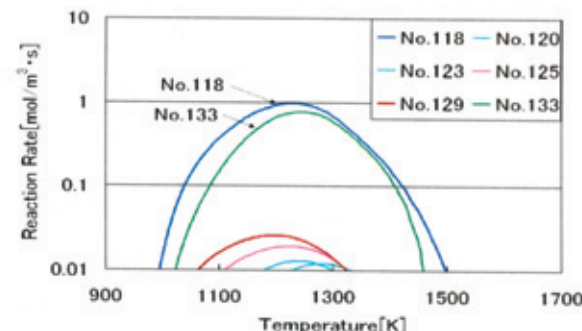


Fig. 4 Rate of reaction in  $\text{pC}_2\text{H}_4\text{OH}$  (Equivalence ratio  $\phi = 0.30$ , Onset temperature = 800K, 1150rpm)

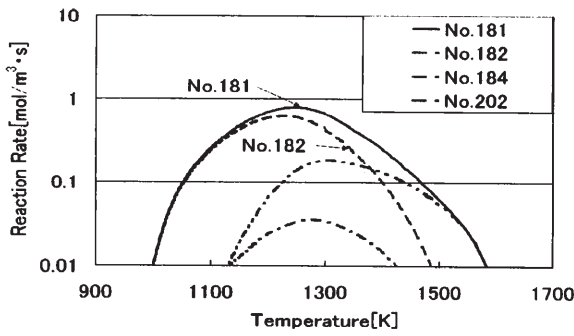


Fig. 5 Rate of reaction in  $C_2H_5O$   
(Equivalence ratio  $\phi = 0.30$ , Onset temperature=800K, 1150rpm)

Table 2 n-heptane elementary reactions

No.1	$nC_7H_{16}+OH=C_7H_{15}-3+H_2O$
No.2	$nC_7H_{16}+HO_2=C_7H_{15}-3+H_2O_2$
No.3	$nC_7H_{16}+O_2=C_7H_{15}-3+HO_2$
No.4	$C_7H_{15}O_2-3=C_7H_{15}-3+O_2$
No.5	$C_7H_{15}O_2-3=C_7H_{14}OOH_3-5$
No.6	$C_7H_{14}OOH_3-5O_2=C_7H_{14}OOH_3-5+O_2$
No.7	$C_7H_{14}OOH_3-5O_2=nC_7KET35+OH$
No.8	$nC_7KET35=C_2H_5CHO+C_2H_5COCH_2+OH$
No.9	$C_7H_{14}OOH_3-5=OH+C_2H_5CHO+C_4H_8-1$
No.10	$C_7H_{15}-3=C_4H_8-1+nC_3H_7$
No.11	$H_2O_2+OH=H_2O+HO_2$
No.12	$H_2O_2+O_2=HO_2+HO_2$
No.13	$OH+OH(+M)=H_2O_2(+M)$
No.14	$H_2O_2+O_2=HO_2+HO_2$
No.15	$H+O_2=O+OH$
No.16	$O+H_2O=OH+OH$
No.17	$C_2H_3+O_2=CH_2O+HCO$
No.18	$CH_2O+OH=HCO+H_2O$
No.19	$HCO+M=H+CO+M$
No.20	$HCO+O_2=CO+HO_2$
No.21	$CO+OH=CO_2+H$
No.22	$C_2H_5+O_2=C_2H_4+HO_2$
No.23	$C_2H_4+OH=C_2H_3+H_2O$
No.24	$C_2H_5CO=C_2H_5+CO$
No.25	$C_2H_5CHO+OH=C_2H_5CO+H_2O$
No.26	$C_2H_5+HO_2=C_2H_5O+OH$
No.27	$C_2H_5O=CH_3+CH_2O$
No.28	$C_2H_5COCH_2=CH_2CO+C_2H_5$
No.29	$C_4H_8-1+OH=C_4H_7+H_2O$
No.30	$C_4H_7+O_2=C_4H_6+HO_2$
No.31	$C_4H_7+HO_2=C_4H_7O+OH$
No.32	$C_4H_6+OH=C_2H_5+CH_2CO$
No.33	$CH_2CO+OH=CH_2O+HCO$

No.34	$C_4H_7O=CH_3CHO+C_2H_3$
No.35	$CH_3CHO+OH=CH_3CO+H_2O$
No.36	$CH_3CO+M=CH_3+CO+M$
No.37	$HO_2+M=H+O_2+M$
No.38	$CH_3+O_2=CH_3O+O$
No.39	$CH_3O+O_2=CH_2O+HO_2$
No.40	$CH_2O+HO_2=HCO+H_2O_2$
No.41	$nC_3H_7=CH_3+C_2H_4$

Table 3 All ethanol elementary reactions

No.114	$C_2H_5OH+M=CH_2OH+CH_3+M$
No.115	$C_2H_5OH+M=C_2H_5+OH+M$
No.116	$C_2H_5OH+O_2=pC_2H_4OH+HO_2$
No.117	$C_2H_5OH+O_2=sC_2H_4OH+HO_2$
No.118	$C_2H_5OH+OH=pC_2H_4OH+H_2O$
No.119	$C_2H_5OH+OH=sC_2H_4OH+H_2O$
No.120	$C_2H_5OH+H=pC_2H_4OH+H_2$
No.121	$C_2H_5OH+H=sC_2H_4OH+H_2$
No.122	$C_2H_5OH+H=C_2H_5+H_2O$
No.123	$C_2H_5OH+O=pC_2H_4OH+OH$
No.124	$C_2H_5OH+O=sC_2H_4OH+OH$
No.125	$C_2H_5OH+CH_3=pC_2H_4OH+CH_4$
No.126	$C_2H_5OH+CH_3=sC_2H_4OH+CH_4$
No.127	$C_2H_5OH+C_2H_5=pC_2H_4OH+C_2H_6$
No.128	$C_2H_5OH+C_2H_5=sC_2H_4OH+C_2H_6$
No.129	$C_2H_5OH+HO_2=pC_2H_4OH+H_2O_2$
No.130	$C_2H_5OH+HO_2=sC_2H_4OH+H_2O_2$
No.131	$C_2H_5OH+C_2H_3=pC_2H_4OH+C_2H_4$
No.132	$C_2H_5OH+C_2H_3=sC_2H_4OH+C_2H_4$
No.182	$C_2H_5OH+OH=C_2H_5O+H_2O$
No.183	$C_2H_5OH+H=C_2H_5O+H_2$
No.184	$C_2H_5OH+O=C_2H_5O+OH$
No.185	$C_2H_5OH+CH_3=C_2H_5O+CH_4$
No.254	$C_2H_5CHO+C_2H_5O=C_2H_5CO+C_2H_5OH$

Table 4 All  $sC_2H_4OH$  elementary reactions

No.117	$C_2H_5OH+O_2=sC_2H_4OH+HO_2$
No.119	$C_2H_5OH+OH=sC_2H_4OH+H_2O$
No.121	$C_2H_5OH+H=sC_2H_4OH+H_2$
No.124	$C_2H_5OH+O=sC_2H_4OH+OH$
No.126	$C_2H_5OH+CH_3=sC_2H_4OH+CH_4$
No.128	$C_2H_5OH+C_2H_5=sC_2H_4OH+C_2H_6$
No.130	$C_2H_5OH+HO_2=sC_2H_4OH+H_2O_2$
No.132	$C_2H_5OH+C_2H_3=sC_2H_4OH+C_2H_4$
No.134	$sC_2H_4OH+M=CH_3CHO+H+M$
No.186	$sC_2H_4OH+O_2=CH_3CHO+HO_2$

Table 5 All pC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>OH elementary reactions

No.116	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+O <sub>2</sub> =pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+HO <sub>2</sub>
No.118	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+OH=pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+H <sub>2</sub> O
No.120	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+H=pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+H <sub>2</sub>
No.123	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+O=pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+OH
No.125	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+CH <sub>3</sub> =pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+CH <sub>4</sub>
No.127	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> =pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
No.129	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+HO <sub>2</sub> =pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
No.131	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> =pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
No.133	pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH=C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +OH
No.212	O <sub>2</sub> C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH=pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+O <sub>2</sub>

Table 6 All C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>O elementary reactions

No.181	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O=CH <sub>3</sub> +CH <sub>2</sub> O
No.182	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+OH=C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O+H <sub>2</sub> O
No.183	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+H=C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O+H <sub>2</sub>
No.184	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+O=C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O+OH
No.185	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+CH <sub>3</sub> =C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O+CH <sub>4</sub>
No.187	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O+O <sub>2</sub> =CH <sub>3</sub> CHO+HO <sub>2</sub>
No.193	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> H=C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O+OH

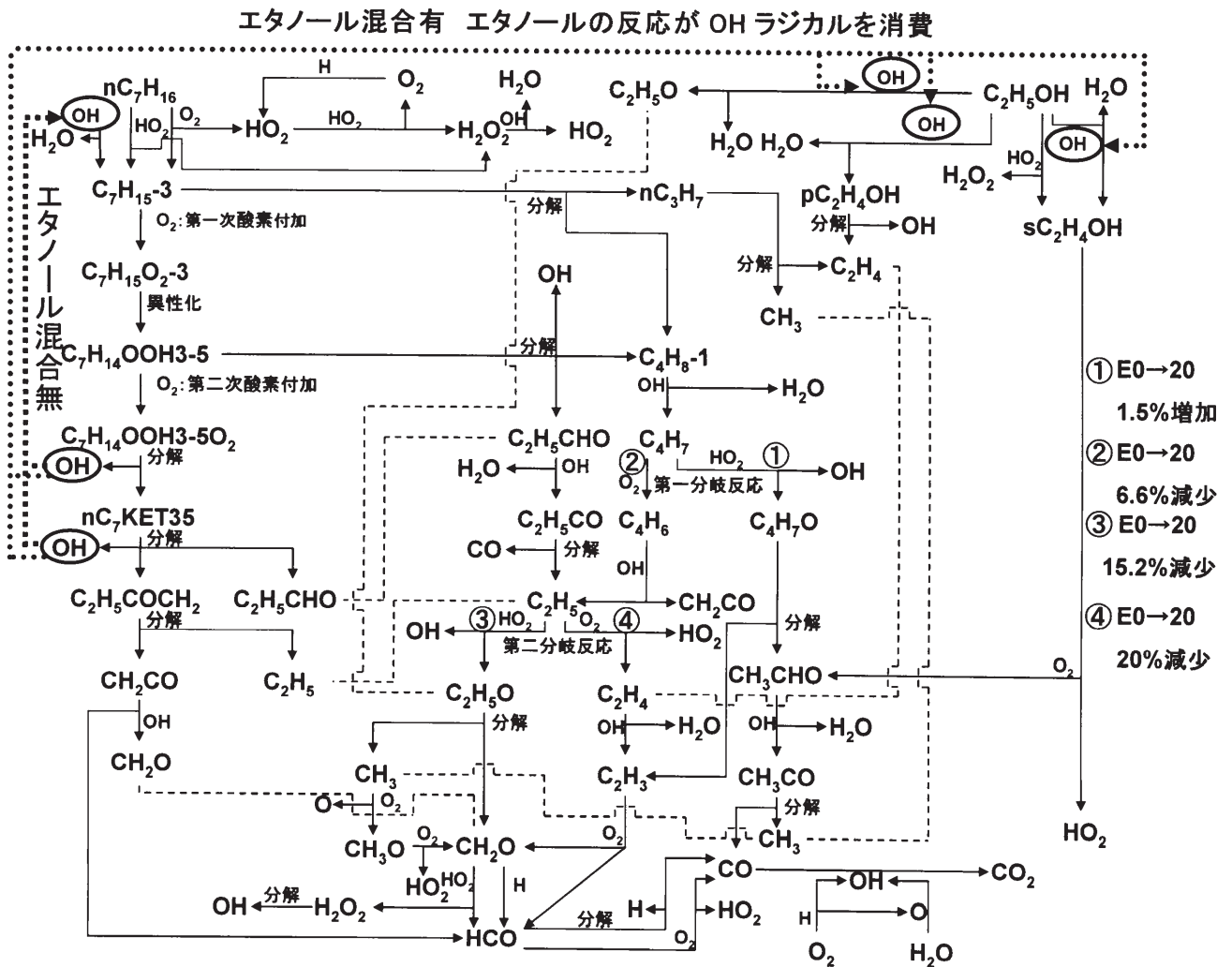
No.202	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> +HO <sub>2</sub> =C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O+OH
No.204	CH <sub>3</sub> O <sub>2</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> =CH <sub>3</sub> O+C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O
No.237	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub> =C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O1-2+C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O
No.254	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> CHO+C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O=C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> CO+C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH

Table 7 Selected ethanol elementary reactions

No.42	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+OH=pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+H <sub>2</sub> O
No.43	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+OH=sC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+H <sub>2</sub> O
No.44	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+HO <sub>2</sub> =sC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
No.45	pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH=C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> +OH
No.46	sC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+O <sub>2</sub> =CH <sub>3</sub> CHO+HO <sub>2</sub>
No.47	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH+OH=C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O+H <sub>2</sub> O
No.48	sC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH+M=CH <sub>3</sub> CHO+H+M

Table 8 selected ethanol chemical species

No.36	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH
No.37	sC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH
No.38	pC <sub>2</sub> H <sub>4</sub> OH



3.3 エタノール混合が低温酸化反応におよぼす影響

素反応モデルから  $nC_7H_{16}$  とエタノールの反応経路を Fig.6 に示す。Fig.6 より、低温酸化反応では主に 2 回の酸素付加反応が主経路となる。 $nC_7H_{16}$  では開始反応、第一次酸素付加、異性化、第二次酸素付加を経由し、OH ラジカルを生成する分解反応により反応が連鎖分岐する。実機関では Fig.7 よりエタノール 10%~20%混合による低温酸化反応の発熱量減少と着火遅れ、高温酸化反応での着火遅れが確認できる。エタノール 10%~20%混合による解析結果を Fig.8 に示す。HCCI エンジンと同様に、低温酸化反応の発熱量減少と着火遅れ、高温酸化反応での着火遅れも確認できる。

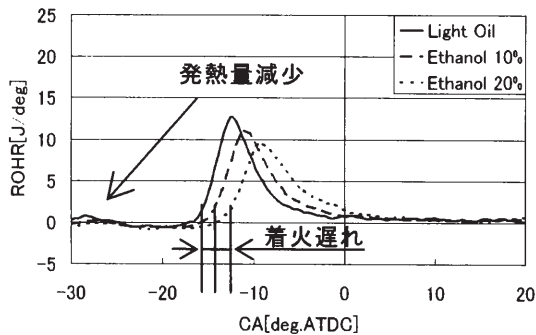


Fig. 7 Effect of ethanol blends concentration on ignition delay by measurement in HCCI engine (Equivalence ratio  $\phi = 0.10$ , 1150rpm)

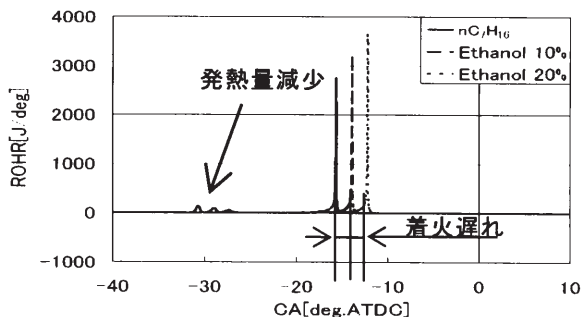


Fig. 8 Effect of ethanol blends concentration on ignition delay by CHEMKN analysis (Equivalence ratio  $\phi = 0.30$ , Onset temperature=700K, 1150rpm)

次にエタノール混合割合変化が低温酸化反応におよぼす影響を Fig.9 に示す。Fig.9 より、エタノール混合による  $nC_7H_{16}$  の着火遅れは、エタノール混合割合の増加に伴い増加し、正比例的に遅延することが確認できる。エタノール混合による  $nC_7H_{16}$ 、エタノールの OH ラジカル消費の影響を見るため  $nC_7H_{16}$  とエタノールの OH ラジカルの活性化エネルギーの差を比較する。比較図を Fig.10 に示す。その結果、エタノールの OH ラジカル消費反応による活性化エネルギーが約 15.7%小さくなる。この減少により、エタノール混合による着火遅れと低温酸化反応のピーク減少は、Fig.6 より  $nC_7H_{16}$  の OH ラジカル消費による循環反応が減少し、エタノール反応により OH ラジカルが消費された。

3.4 エタノール混合が高温酸化反応におよぼす影響

高温酸化反応では主に、ホルムアルデヒド( $CH_2O$ )から CO に分解する初期反応と CO が  $CO_2$  に変化する後期反応の 2 段階燃焼からなる。また、実機関でエタノール混合すると一般的に PM 排出量が減少する。ここで、PCI 機関でのエタノール混合による PM 排出量を Fig.11 に示す。Fig.11 より PCI 機関では、エタノール 20%混合による PM 排出量が最大で 75%の減少が確認できる。

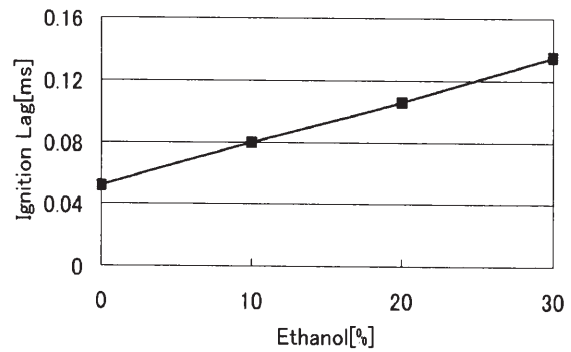


Fig. 9 Effect of ethanol blends concentration on ignition delay by CHEMKN analysis (Equivalence ratio  $\phi = 0.30$ , ethanol blend 0~30%, Onset temperature=900K, 1150rpm)

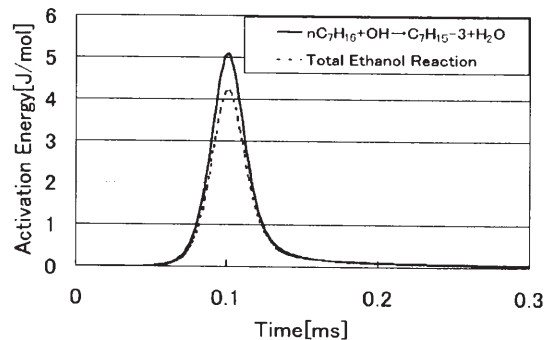


Fig. 10 A comparison between the activation energy of ethanol and n-heptane (Equivalence ratio  $\phi = 0.30$ , ethanol blend 20%, Onset temperature=900K, 1150rpm)

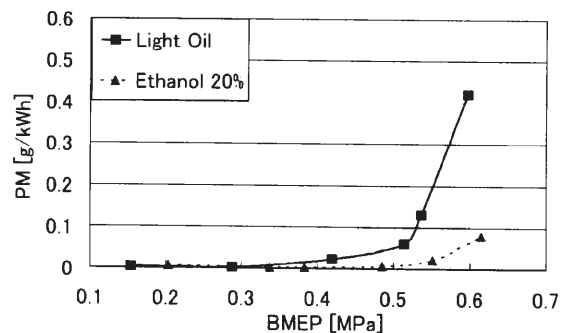


Fig. 11 Effect of ethanol blends on PM emission by measurement (Injection timing =30deg.BTDC, 1150rpm)

## 4. 結果および考察

解析でのエタノール混合がおよぼす高温酸化反応の反応速度と物質生成の影響を見ると、Fig.6の高温酸化反応経路では第1分岐反応と第2分岐反応が起こる。エタノール混合による分岐反応速度を Fig.6の①～④に示し、エタノール混合割合0%、20%混合による影響を考察する。

(1)第1分岐反応での分岐反応速度と生成

第1分岐反応での素反応を以下に示す。



第1分岐反応速度と生成量を比較するとエタノール混合により、 $C_4H_7$ の分岐反応速度は $C_4H_6$ より $C_4H_7O$ へ進行する反応速度が約7倍大きい。また生成量に関して、 $C_4H_6$ の生成量が約25%減少した。この第1分岐反応での温度に対する $C_4H_6$ 生成量の変化を Fig.12に示す。

(2)第2分岐反応での分岐反応速度と生成

第2分岐反応での素反応を以下に示す。



第2分岐反応速度と生成量を比較するとエタノール混合により、 $C_2H_5$ の分岐反応速度は $C_2H_4$ より $C_2H_5O$ へ進行する反応速度が約13.8倍大きい。また生成量に関して、 $C_2H_4$ の生成量が約3.3%減少した。この第2分岐反応での温度に対する $C_2H_4$ 生成量の変化を Fig.13に示す。

Fig.11によるPM排出量低減の原因は解析結果より、エタノール混合での高温酸化反応の分岐反応ではHC( $C_4H_6$ ,  $C_2H_5$  etc)生成経路を迂回するためHC生成量の減少が確認できた。これらのHCはスス前駆物質であると一般的に結論付けられている。よって、エタノールを混合することによるPM排出量の減少は、高温酸化反応の分岐反応でのHC生成経路を迂回するためであると検討できた。

## 5. 結論

(1)低温酸化反応ではエタノール混合により着火遅れ、発熱量の低下が見られた。これはエタノールがOHラジカルを消費するためである。また、エタノール反応の活性化エネルギーが低いために発熱量の低下が起こった。

(2)高温酸化反応では、エタノール混合により第1分岐反応では $C_4H_6$ の反応速度低下と生成量の減少、第2分岐反応では $C_2H_4$ の反応速度低下と生成量の減少が確認できた。

(3)エタノール混合による実機関でのPM排出量低減の原因は、解析によるとエタノール混合時に第1・2分岐反応でのHC生成経路を迂回することによりHC生成量が減少する。そのため実機関でのPM排出量低減ができた。

## 参考文献

[1]OKUDE Keiichi, 他4名, Premixed Compression Ignition Combustion for Simultaneous Reduction of  $NO_x$  and Soot in Diesel Engine, SAE transactions, Vol.113, p.1002-1013 (2004)

[2]山田裕之, 他3名: 予混合圧縮着火過程における高温燃焼発生メカニズム, 日本機械学会論文集(B編), Vol.72, No.721, p.211-217 (2006)

[3]伊藤貴之, 他4名: ディーゼル噴霧火炎内のすす生成に関する化学反応論的解析, 日本機械学会論文集(B編), Vol.71, No.701, p.288-294 (2005)

[4]R.J.Kee, F.M.Rupley, J.A.Miller, Sandia Report, SAND87-8215B, UC-4(1994)

[5]A.E.Lutz, 他2名, Sandia Report, SAND87-8248, UC-401(1995)

[6]R.J.Kee, 他2名, Sandia Report, SAND89-8009B, UC-706 (1995)

[7]H.J.Curran, 他4名, Combustion and Flame, p.114-149(1998)

[8]H.J.Curran, 他6名, A Wide Range Modeling Study of Dimethyl Ether Oxidation, UCRL-JC-127071, p.1-20(1997)

[9]小山崇, 他2名, 日本機械学会論文集(B編), Vol.67, No.657, p.165-171 (2001)

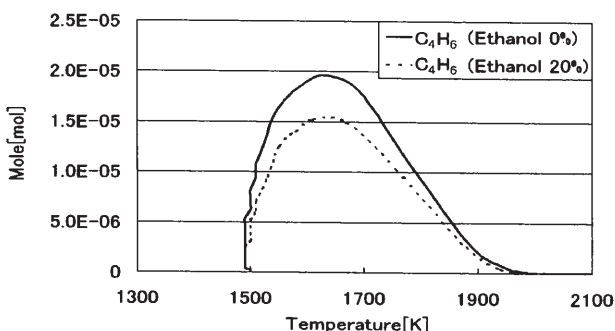


Fig. 12 Effect of ethanol blend on  $C_4H_6$  formation

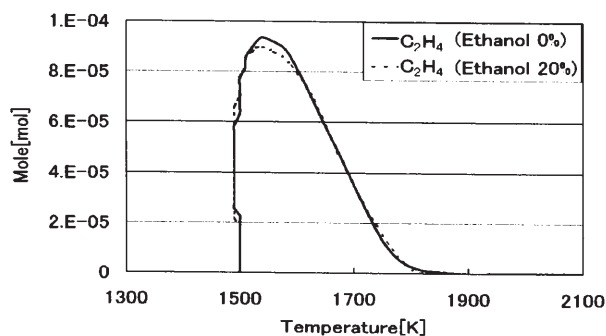


Fig. 13 Effect of ethanol blend on  $C_2H_4$  formation