

# 高圧環境乱流燃焼の直接数値解析に適用可能な反応機構開発

## — 多様な低環境負荷燃料への適用 —

バイオ燃料, 水素, 石炭改質燃料など低環境負荷およびエネルギーセキュリティーに優れた多様な燃料の極限環境先端的数値解析を可能にする反応機構と計算技術を確立する。

数百本オーダーの素反応から構成される詳細反応機構

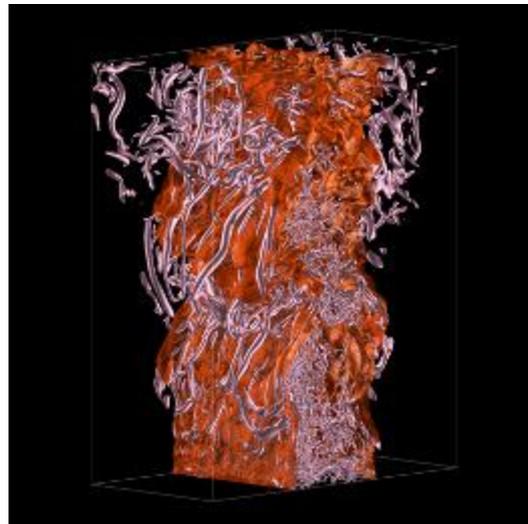


詳細反応機構の簡略化技術  
Princeton大・Ju教授

Considered species			
C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH, O <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O, CO <sub>2</sub> , CO, H <sub>2</sub> , H, OH, O, HO <sub>2</sub> , H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> , CH <sub>2</sub> O, CH <sub>4</sub> , CH <sub>3</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> , CH <sub>2</sub> CO, HCCO, CH <sub>3</sub> OH, CH <sub>3</sub> CHO, C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>6</sub> , Ar, He, N <sub>2</sub>			
QSS species			
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O, C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>3</sub> , C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> , CH <sub>2</sub> OH, C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> , CH <sub>3</sub> CHOH, CH, T-CH <sub>2</sub> , C <sub>2</sub> H, I-C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> , C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> , HCO, N-C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> , CH <sub>3</sub> O, CH <sub>3</sub> CH <sub>2</sub> O, CH <sub>2</sub> CHO, S-CH <sub>2</sub> , CH <sub>3</sub> CO, CH <sub>2</sub> CH <sub>2</sub> OH			
No	Global reactions		
R1	H + O <sub>2</sub>	⇌	OH + O
R2	O + H <sub>2</sub>	⇌	H + OH
R3	OH + H <sub>2</sub>	⇌	H + H <sub>2</sub> O
R4	2H	⇌	H <sub>2</sub>
R5	OH + O	⇌	HO <sub>2</sub>
R6	2OH	⇌	H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>
R7	OH + CO	⇌	H + CO <sub>2</sub>
R8	H + CH <sub>3</sub>	⇌	CH <sub>4</sub>
R9	2H + CO	⇌	CH <sub>2</sub> O
R10	O + CH <sub>3</sub>	⇌	H + CH <sub>2</sub> O
R11	O + C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	⇌	2H + CH <sub>2</sub> CO
R12	OH + 2CH <sub>3</sub>	⇌	H + H <sub>2</sub> O + C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
R13	2CH <sub>3</sub>	⇌	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
R14	2OH + 2CH <sub>3</sub>	⇌	2H + 2H <sub>2</sub> O + C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>
R15	O + C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	⇌	H + HCCO
R16	H + CH <sub>3</sub> OH	⇌	H <sub>2</sub> O + CH <sub>3</sub>
R17	H + HO <sub>2</sub> + CH <sub>2</sub> CO	⇌	O <sub>2</sub> + CH <sub>3</sub> CHO
R18	H + C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	⇌	OH + 2CH <sub>3</sub>
R19	H + O + C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	⇌	CO + C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>
R20	O + C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	⇌	2H + CO + C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>

開発したバイオエタノール簡略化反応機構の一例 流体研・小林教授

簡略化反応機構のDNSへの適用



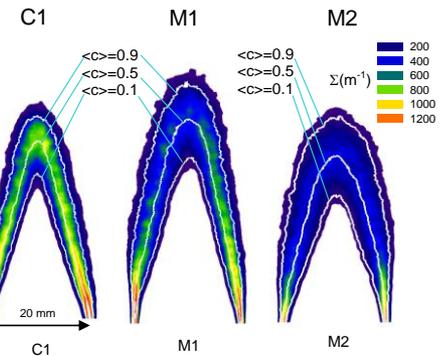
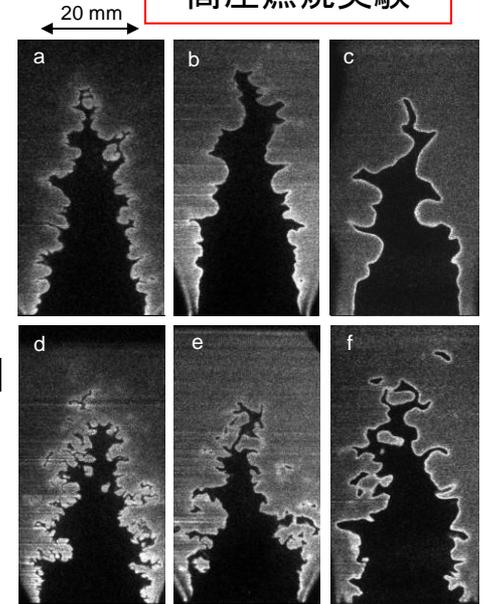
スロット型乱流バーナによる直接数値解析(DNS)

東工大・店橋准教授



高圧燃焼実験結果を用いた反応機構検証と計算技術開発

高圧燃焼実験



高圧乱流火炎のレーザー計測と画像解析 流体研・小林教授

