

予混合圧縮自己着火燃焼に及ぼす  
燃料成分の影響

2005 年度

佐藤 進

<目次>

<目次> .....	i
<記号表> .....	iv
<b>第1章 序論</b> .....	<b>1</b>
1.1. 研究背景.....	1
1.2. 予混合圧縮自己着火機関.....	3
1.3. 関連研究.....	7
1.3.1. 予混合気の圧縮自己着火燃焼に関する研究.....	7
1.3.2. 圧縮自己着火燃焼のモデリングおよび数値計算に関する研究.....	8
1.3.3. 化学反応機構に関する研究.....	9
1.3.4. EGR を用いた予混合圧縮自己着火燃焼に制御に関する研究.....	11
1.3.5. 予混合気の不均質性導入による燃焼制御に関する研究.....	12
1.3.6. 混合燃料を用いた予混合圧縮自己着火燃焼に関する研究.....	13
1.4. 燃料最適化の必要性 .....	14
1.5. 研究目的.....	17
1.6. 本論文の構成 .....	20
<b>第2章 燃焼実験方法および素反応数値計算方法</b> .....	<b>22</b>
2.1. 燃焼実験方法 .....	23
2.1.1. 単一成分燃料実験方法 .....	23
2.1.2. 二成分混合燃料実験方法.....	25
2.1.3. 燃焼実験解析方法.....	27
2.2. 素反応数値計算方法.....	31
2.2.1. 反応モデル .....	31
2.2.2. 空間モデル.....	34
2.2.3. 本研究で使用する反応モデルと空間モデルの組み合わせ .....	35
2.2.4. 0次元計算の妥当性.....	36
2.2.5. 計算手法 .....	38
2.2.6. 本研究における計算手法.....	42
<b>第3章 単一成分燃料の予混合圧縮自己着火燃焼</b> .....	<b>45</b>
3.1. 実験条件および計算条件.....	46
3.2. 当量比, 吸気温度の変化が DME 予混合圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響.....	47
3.2.1. 当量比の変化が圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響.....	47

3.2.2. 吸気温度の変化が圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響 .....	55
3.3. 燃焼完結性の確保 .....	58
3.4. DME 予混合圧縮自己着火燃焼における酸化反応機構 .....	61
3.5. DME 予混合圧縮自己着火燃焼の燃焼反応速度に関する考察 .....	66
3.6. 第 3 章のまとめ .....	68
<b>第 4 章 二成分混合燃料の予混合圧縮自己着火燃焼.....</b>	<b>69</b>
4.1. 二成分混合燃料の自己着火特性 .....	70
4.2. 計算条件 .....	73
4.3. Methane / DME の混合割合が圧縮自己着火燃焼過程に及ぼす影響 .....	75
4.3.1. Methane / DME の混合割合が化学種のモル分率履歴に及ぼす影響 .....	75
4.3.2. Methane / DME の酸化反応機構 .....	78
4.4. Methane / <i>n</i> -Butane の混合割合が圧縮自己着火燃焼過程に及ぼす影響 .....	82
4.4.1. Methane / <i>n</i> -Butane の混合割合が化学種のモル分率履歴に及ぼす影響 .....	82
4.4.2. Methane / <i>n</i> -Butane の酸化反応機構 .....	84
4.5. Methane / 水素の混合割合が圧縮自己着火燃焼過程に及ぼす影響 .....	88
4.5.1. Methane / 水素の混合割合が化学種のモル分率履歴に及ぼす影響 .....	88
4.5.2. Methane / 水素の酸化反応機構 .....	90
4.6. 二成分混合燃料の混合割合と着火時期および着火温度の関係 .....	93
4.7. 二成分燃料の混合割合と燃焼反応速度および 50% 熱発生時期の関係 .....	95
4.8. 第 4 章のまとめ .....	101
<b>第 5 章 二成分混合燃料の混合割合が予混合圧縮自己着火機関の運転領域に及ぼす影響</b>	<b>103</b>
5.1. 実験条件 .....	104
5.2. Methane / DME 混合時の予混合圧縮自己着火燃焼 .....	105
5.2.1. Methane / DME の部分当量比と運転領域の関係 .....	105
5.2.2. Methane / DME 部分当量比の変化に対する圧縮自己着火特性の変化 .....	106
5.2.3. Methane / DME の混合割合と酸化反応開始時期および温度の関係 .....	112
5.3. Methane / <i>n</i> -Butane 混合時の予混合圧縮自己着火燃焼 .....	113
5.3.1. Methane / <i>n</i> -Butane の部分当量比と運転領域の関係 .....	113
5.3.2. Methane / <i>n</i> -Butane 部分当量比の変化に対する圧縮自己着火特性の変化 .....	114
5.3.3. Methane / <i>n</i> -Butane の混合割合と酸化反応開始時期および温度の関係 .....	120
5.4. 高熱効率, 高出力実現に必要な運転条件に関する考察 .....	121
5.5. 第 5 章のまとめ .....	129
<b>第 6 章 結論 .....</b>	<b>130</b>

<謝辞> .....	134
<参考文献> .....	135

## &lt; 記号表 &gt;

量記号	名称	Name	単位
$C$	濃度	Consistency	%
$C_p$	定圧比熱	Specific Heat at Constant Pressure	J/(mol K)
$C_v$	定容比熱	Specific Heat at Constant Volume	J/(mol K)
$D$	分子量	Molecular Weight	g/mol
$F$	流量	Flow Volume	l/s
$L$	低位発熱量	Low Calorific Value	J/mol J/kg
$m$	質量	Mass	kg/cycle
$n$	モル数	Number of Moles	mol
$Ne$	機関回転速度	Engine Speed	rpm
$P$	圧力	Pressure	Pa
$Q$	熱量	Calory	J
$dQ/dt$	熱発生率	Rate of Heat Release	J/s
$dQ/d\theta$	熱発生率	Rate of Heat Release	J/deg
$q$	1 モル当りの熱量	Calory per Mole	J/mol
$r$	クランクアーム長さ	Length of Crank Arm	m
$R$	気体定数	Gas Constant	J/mol K
$t$	時間	Time	s
$T$	温度	Temperature	K
$U$	内部エネルギー	Internal Energy	J
$u$	1 モル当りの内部エネルギー	Internal Energy per Mole	J/mol
$V$	体積	Volume	m <sup>3</sup>
$W$	仕事	Work	J
$w$	1 モル当りの仕事	Work per Mole	J/mol
$X$	モル分率	Mole Fraction	mol/mol
$\varepsilon$	圧縮比	Compression Ratio	-
$\eta$	効率	Efficiency	%
$\theta$	クランク角度	Crank Angle	deg
$\kappa$	比熱比	Ratio of Specific Heat	-
$\rho$	密度	Density	kg/m <sup>3</sup>
$\phi$	当量比	Equivalence Ratio	-

## 添え字

添字記号	名称	Name
<i>c</i>	1 サイクル	Per Cycle
<i>c</i>	燃焼	Combustion
<i>c</i>	クランク	Crank
$CH_4$	メタン	Methane
$CO$	一酸化炭素	Carbon Monoxide
<i>d</i>	行程	Displacement
<i>DME</i>	ジメチルエーテル	Dimethyl Ether
<i>ex</i>	排気	Exhaust
<i>exp</i>	実験	Experiment
<i>f</i>	新気	fresh
<i>fuel</i>	燃料	Fuel
$H_2$	水素	Hydrogen
<i>HTR</i>	高温酸化反応	High Temperature Reaction
<i>HTR_start</i>	高温酸化反応開始	High Temperature Reaction Start
<i>HTR_end</i>	高温酸化反応終了	High Temperature Reaction End
<i>i</i>	i 番目	Number
<i>i</i>	図示	Indicated Mean
<i>ideal</i>	理論	Ideal
<i>in</i>	吸気	Intake
<i>in</i>	投入	Input
<i>LTR</i>	低温酸化反応	Low Temperature Reaction
<i>LTR_start</i>	低温酸化反応開始	Low Temperature Reaction Start
<i>LTR_end</i>	低温酸化反応終了	Low Temperature Reaction End
<i>max</i>	最高	Maximum
<i>n-C4H10</i>	ノルマルブタン	Normal Butane
<i>r</i>	残留	Residual
<i>r</i>	コンロッド	Connecting Rod
<i>0</i>	圧縮開始時	Start of Compression
<i>CA50</i>	発熱量 50%時	50% Heat Release

# 第1章 序論

## 1.1. 研究背景

現在，世界中で使用されている動力源の元となるエネルギーは，石油資源に大きく依存している。しかし石油資源は枯渇状態にあるため，それに依存しない代替動力源の誕生が望まれており，それが実質的に地球温暖化に代表される環境問題の改善につながる。自動車用動力源もその例にもれず，内燃機関の高効率化，低公害化が求められている。現在，内燃機関の代替動力源として，燃料電池等が注目を集めている。燃料電池は，自動車用はもちろんのこと小型家電用に開発が進められている。しかし自動車に搭載される場合には，燃料電池本体はもちろんのこと，システムを構成するコンポーネントの小型化，高効率化，低コスト化，耐久性，信頼性，システム構成の最適化や制御手法の検討が未確立である。また燃料電池自動車を普及させるためには，インフラ整備などの課題があり実用化にはまだ時間を要する。インフラ整備の課題は，水素自動車あるいは電気自動車にも言えることである。

現在，主に利用されている内燃機関についてみると，火花点火機関は三元触媒との組み合わせにより排気中の $\text{NO}_x$ ，CO，未燃HCは低減できるが，熱効率は約33%程度[1][2]に留まっている。一方，ディーゼル機関では約45%程度の熱効率[1][2]は望めるが，拡散燃焼に伴う排気中の $\text{NO}_x$ ，すすが問題となる。これら内燃機関を取りまく現状に対して，ガソリン機関においては，熱効率の向上を目指して，燃焼室内への燃料の直接噴射方式を採用し，層状吸気での希薄燃焼による熱効率の向上策などが採られている。また，ディーゼル機関においては，電子制御を使った燃料噴射量，噴射期間の最適制御，また噴射ノズルの微細化，コモンレールシステムによる高圧噴射などによって燃料と空気の予混合化を促進した燃焼により，排気中の $\text{NO}_x$ ，すすの低減を目指した研究開発が行われている。一方，従来機関とは異なる燃焼方式を採用した予混合圧縮自己着火(HCCI: Homogeneous Charge Compression Ignition)機関が注目を集めている。

予混合圧縮自己着火機関は，シリンダ内に燃料と空気の予混合気を供給し，ピストンによる断熱圧縮により一斉に自己着火燃焼させる方式である。この燃焼方式では，火花点火機関の火炎伝ば燃焼よりも超希薄な混合気で燃焼可能であり，拡散燃焼のディーゼル機関で問題となるすすは，均質燃焼のため生成されない。また希薄燃焼に伴う火炎温度の低下により $\text{NO}_x$ はほとんど排出されず，バルク燃焼に伴う燃焼期間の短期化により高効率を実現できる。一方，熱効率の確保には着火時期の最適化が必要であるが，自己着火は燃料と酸化剤の化学反応に依存しており，従来機関の火花点火，燃料噴射といった物理的な着火手段が適用できないため，化学反応論に基づいた手法を確立すること，ノッキングを回避して運転可能領域を拡大すること，また排気中のHC，COの低減し燃焼完結性を確保する

ことが課題とされる。運転可能領域に関して言えば、予混合圧縮自己着火機関を実用化するためには、少なくとも発電機用ディーゼル機関並みの熱効率（図示熱効率で 45%）、出力（図示平均有効圧力：IMEP で 0.6MPa）が必要となる[3][4]。

これらの課題を解決するために、EGR（排気再循環）による燃焼制御、予混合気中の燃料濃度に不均質性を導入する手法などにより予混合圧縮自己着火機関の実用化に向けた研究が行われてきている（次節にて示す）。本研究では、反応性の異なる二成分の燃料を混合する手法に着目し、予混合圧縮自己着火機関用燃料の最適化を図った。素反応数値計算および燃焼実験により混合燃料を用いたときの圧縮自己着火燃焼機構を解明し、また高効率、高出力を同時に実現できる燃料の組み合わせを解明し、予混合圧縮自己着火機関に求められる燃料性状に関する有用な知見を提供する。



## 1.2. 予混合圧縮自己着火機関

予混合圧縮自己着火燃焼機関とは、燃焼室内に供給された燃料空気予混合気をピストンにより圧縮し、予混合気の自己着火により運転する機関であり、火炎伝ば燃焼方式の火花点火機関、拡散燃焼方式のディーゼル機関の利点を併せ持つ。自己着火を促すために高圧縮比を行うことにより高効率を実現できる。また、燃焼室内の予混合気は超希薄で均質燃焼が可能となり、NO<sub>x</sub> およびすすの同時低減が可能となる。図 1-1、図 1-2、図 1-3 に各機関の特徴を示し、表 1-1 にその特徴をまとめる。

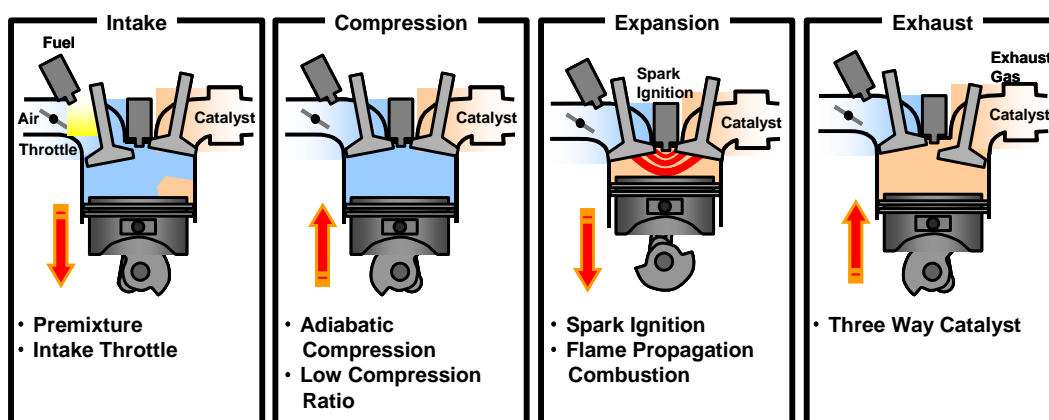


図 1-1 火花点火機関

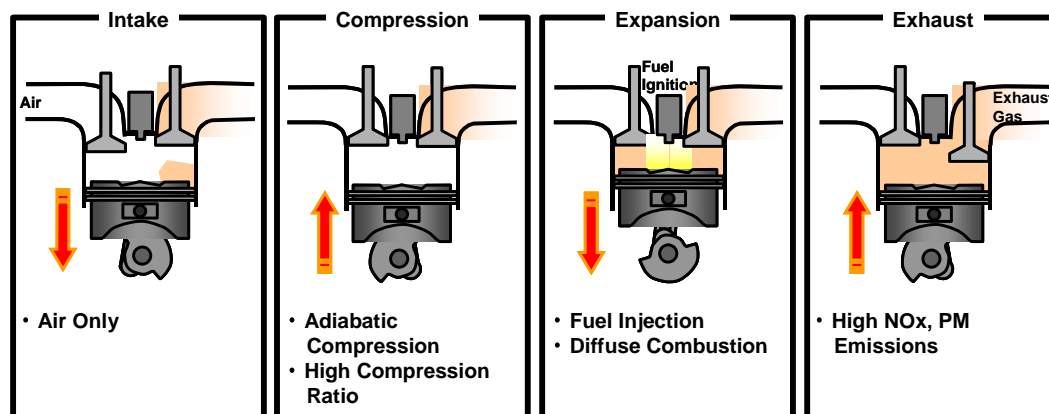


図 1-2 ディーゼル機関

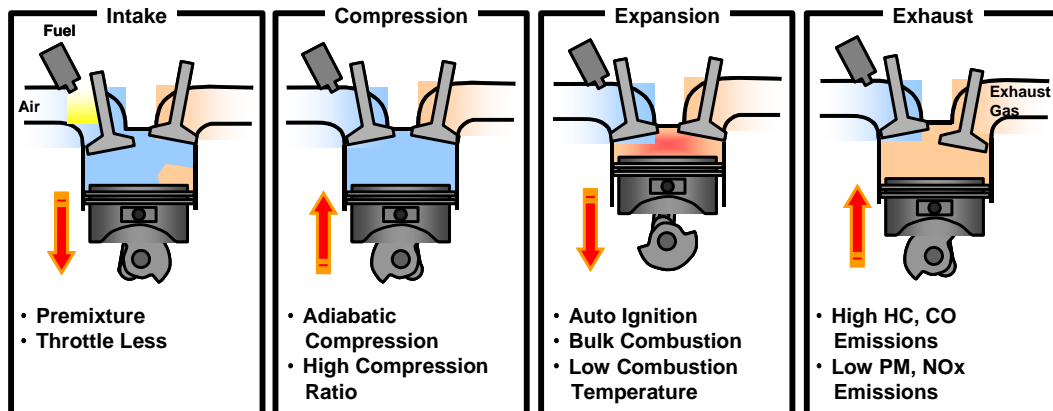


図 1-3 予混合圧縮自己着火燃焼機関

表 1-1 従来機関の比較

機関種類	火花点火機関	ディーゼル機関	予混合圧縮自己着火機関
着火方式	火花点火	燃料噴射	多点同時自己着火
燃焼形態	火炎伝ば燃焼	拡散燃焼	バルク燃焼
利点	低NO <sub>x</sub> , CO, THC排出 PM排出なし	高熱効率	低NO <sub>x</sub> 排出, PM排出なし 高熱効率
課題	低熱効率	高NO <sub>x</sub> , PM排出	着火時期の制御 ノッキングの回避 燃焼効率の確保

予混合圧縮自己着火燃焼は、大西ら[5]による2ストローク機関での火炎伝ば燃焼に代わる燃焼方式として発見されたことに端を発する。大西らはこの燃焼方式を ATAC (Active Thermo-Atmosphere Combustion) と呼び、発電用の2ストローク機関に採用し、サイクル毎の圧力履歴の変動が火炎伝ば燃焼に比べ小さいことを確認し、燃料消費量の低減を実現した。また予混合圧縮自己着火燃焼の実現には十分な温度、残留ガスと新気の燃料空気予混合気の燃焼室内での十分な均一化が必要であるとしている。Noguchi ら[6]は2ストロークエンジンを可視化し、圧縮自己着火燃焼 (T-S 燃焼: Toyota-Soken Combustion) 機構を調査した。火炎伝ば燃焼では、スパークプラグ付近から、火炎が広がっていく様子が観察されたのに対し、圧縮自己着火燃焼時には、バルク的に燃焼室全域で燃焼が確認され、明確な火炎面が観測されないことを明らかにしている。

Najt ら[7]は4ストロークエンジンに予混合圧縮自己着火燃焼を適用した。4ストロークの様に残留ガスがほとんどない状態でも、吸気系で空気を加熱することにより予混合圧縮自己着火燃焼を実現した。また予混合圧縮自己着火燃焼の着火は1000K以下の低温域での化学反応(低温酸化反応)に支配され、燃焼は1000K以上の高温域の化学反応(高温酸化反応)に支配されているとし、従来の火花点火機関の燃焼が火炎伝ばに依存していること、ディーゼル機関での燃料と空気の混合に依存していることとは異なる燃焼形態であると結論付けている。また大西らの2ストローク機関同様、着火時期の制御、運転領域が限られていることを問題として挙げている。Thring ら[8]は4ストロークエンジンでガソリンを用い、残留ガス、当量比をパラメータに予混合圧縮自己着火を実現できる領域を調査した結果、高負荷域では圧縮自己着火運転ができないことから、乗用車での使用では、予混合圧縮自己着火燃焼、従来燃焼の切り替えによる運転を提案している。

予混合圧縮自己着火機関の研究において、機関としては2ストローク、4ストロークに分けられ、また混合気の形成に関して、ガソリン機関をベースとした燃料の吸気ポートへの噴射、ディーゼル機関をベースとした燃焼室への早期直接噴射、遅期直接噴射方式に大きく分類できる。

2ストローク機関の吸気ポート噴射方式において、Ishibashi ら[9]は可変排気ポートを設け、残留ガスを適切に調節し、エンジンの運転領域の1/3で圧縮自己着火運転することに成功した。4ストロークで吸気ポートへの噴射方式において、Ryan ら[10]は軽油を用いて実験を行った結果、ディーゼル機関ほど高圧縮比にはできないこと、吸気加熱を充分に行わないと、軽油が蒸発しきれずに拡散燃焼を招き、すすの排出が多くなったと報告している。4ストロークで早期の直接噴射方式を用いた実験は、Takeda ら[11]によって行われた。Takeda らは、NO<sub>x</sub> が大幅に低減することを確認し、また過度の希薄化はHC、COの増加を招くことも確認している。4ストロークで遅期の直接噴射方式を用いた研究は、Mase ら[12]によって行われた。通常のディーゼル機関よりも遅く噴射し、大量のEGRと強いスワールにより混合を促進させ、圧縮自己着火燃焼を引き起こさせる。これにより、NO<sub>x</sub>、す

すを抑えつつ、着火時期を遅らせることにより、熱の逃げを小さくでき、熱効率を上昇させることができた。以上のように圧縮自己着火機関はNO<sub>x</sub>、すすを低減し、高効率を確保できる機関としての能力は持ち合わせているが、着火時期の制御、運転領域の拡大（ノッキングに至らないように燃焼期間の制御）に加え、未燃HC、COの排出が圧縮自己着火燃焼機関の実現に向けての課題として挙げられる。

着火および燃焼制御の支配因子として、燃料種、吸気温度、圧縮比、残留ガス量、過給、エンジン回転数などを変化させ、圧縮自己着火燃焼の基本特性の調査、着火時期、燃焼期間の制御を試みる実験的研究も活発に行われている。五十嵐ら[13]は*n*-Butane、DMEを燃料に、吸気温度、圧縮比、エンジン回転数を変化させ、熱発生率の形状に及ぼす影響を明らかにし、低温酸化反応および高温酸化反応は温度に強い依存性があることを報告している。森本ら[14]は天然ガスを燃料とする圧縮自己着火機関にEGRを導入し、燃焼反応速度を低下させる効果を確認し、また高出力化も実現できたが、HCの排出は依然として多い報告している。Junら[15]は、日本国内で市販されている都市ガスを燃料として選択し、吸気温度、吸気圧力の変化が圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響を調査した。パラメータの変化に関わらず、サイクル中の最高到達温度が1500Kに到達すれば、高い燃焼効率が確保され未燃HC、COの排出量が低減されることを明らかにしている。

### 1.3. 関連研究

本節ではこれまで行われてきた予混合圧縮自己着火機関の着火燃焼機構の解明，燃焼制御に関連のある研究例を紹介する。研究例について，予混合気の圧縮自己着火燃焼に関する研究，圧縮自己着火燃焼のモデリングに関する研究，化学反応機構に関する研究，EGRを用いた予混合圧縮自己着火燃焼に制御に関する研究，予混合気の不均質性導入による燃焼制御に関する研究，混合燃料を用いた予混合圧縮自己着火燃焼に関する研究に分類しまとめた。

#### 1.3.1. 予混合気の圧縮自己着火燃焼に関する研究

予混合圧縮自己着火機関の実現には，予混合気の自己着火燃焼機構を把握することが重要である。予混合気の自己着火現象に関する研究としては，火花点火機関のノッキング現象を対象にした研究が先立ち，ここで得られた結果は予混合圧縮自己着火機関の着火燃焼機構の解明には多大な恩恵をもたらしている。

エンジン内での自己着火燃焼は温度，圧力が時々刻々と変化すること，前サイクルの残留ガスとの混合など様々な要素が複雑に絡み合っている。そこで，ショックチューブのようにステップ状に温度，圧力が上昇する単純な条件での着火遅れの計測，またショックチューブよりも低温域での着火遅れの計測に関しては，急速圧縮装置を用いて，着火遅れの計測等により予混合気の自己着火特性を調査した研究がある。

Burcat[16]らは，Methane，Ethane，Propane，*n*-Butane，Pentane のアルカン系燃料と酸素，アルゴンの当量比 1.0 の予混合気についてショックチューブを用いて圧縮自己着火燃焼実験を行い，10atm，1200-1900K の温度範囲で着火遅れを解析した。Methane，Ethane 以外の燃料の着火遅れはほぼ同じとなった。これより，炭素数の小さい燃料の特性を調査することにより，炭素数の大きな燃料を推し量ることができるとしている。

Pfahl ら[17]は，燃料に軽油と関連の深い芳香族の  $\alpha$ -Methylnaphthalene，アルカン系の *n*-Decane，軽油の代替燃料として有望な DME を燃料とした予混合気を用いてショックチューブで 840-1300K，1.0MPa の温度圧力域での圧縮着火実験を行っている。 $\alpha$ -Methylnaphthalene 予混合気ではショックチューブで圧縮した際の温度が 960K 以上で着火が生じ，温度の上昇に対し着火遅れも短くなった。一方，*n*-Decane，DME は 800K から 1000K の温度域で，温度の上昇に対して，着火遅れが長くなる negative temperature coefficient (NTC) 領域が存在することを示しており，燃料によって自己着火特性が大きく異なることを示している。またこれらの燃料を混合して，70%*n*-Decane，30% $\alpha$ -Methylnaphthalene で圧縮自己着火させると，NTC 領域が存在し，800K から 1000K にかけて当量比の依存性が強く現れると報告している[18]。

Minetti ら[19]は急速圧縮装置を用いて，圧縮期間 20ms のもと，ショックチューブよりも低温の 700-900K，0.9-1.1MPa で *n*-Butane 空気予混合気を圧縮着火させ，NTC 領域が存在

することを確認している。

小堀ら[20]は急速圧縮装置に Cetane と Heptamethylnonane の混合燃料を用い、近年のディーゼル機関の噴射条件での着火遅れを、雰囲気圧力、噴口径を変化させて調査した。噴射圧力 30MPa で雰囲気圧力を変化させたところ、雰囲気の圧力上昇に伴い、着火遅れは短縮した。この時、温度に対する着火遅れの傾きは、低温側で大きくなっており、雰囲気圧力の上昇に伴い、温度に対する着火遅れの傾きが変化する点は、低温側へ移動した。また噴射圧 100MPa のもと、噴口径を変化させると、噴口径 0.05mm 以下ではショックチューブ実験での着火遅れと温度の関係と定性的に一致すると報告している。

これらの着火遅れの結果、また反応容器での、容器通過後の化学種の濃度結果は詳細な反応過程の反応速度定数を決定する際のレファレンス結果として用いられる。

### 1.3.2. 圧縮自己着火燃焼のモデリングおよび数値計算に関する研究

圧縮自己着火燃焼の着火、燃焼が化学反応に大きく依存することから、化学反応機構の把握が着火、燃焼制御には重要となる。また着火、燃焼の制御には数々の手法が考えられることから、それらの効果を実験的に検証するには多大な費用、時間が要することとなる。近年の計算機技術の発達により、詳細な反応過程の計算や、混合過程の計算も現実的な時間で可能となっており、圧縮自己着火燃焼機関の研究においても計算による研究は重要かつ活発に行われている。モデリングの考え方としては、反応モデルと空間モデルの大きく 2 つの要素に分類される。反応モデルには詳細な反応過程を考慮した素反応モデル[21]～[33]、主要な反応のみを抜き出した簡略化反応モデル[34]～[36]がある。空間モデルとしては、燃焼室内を 0 次元[37]～[40]、多次元で扱うモデル[43]～[47]がある。素反応モデルは多次元モデルと組み合わせると計算コストが非常に大きくなるため、0 次元場での使用が多く、純粋に化学反応過程を解析する目的での研究が主となる。多次元モデルでは混合気の形成過程の解析、燃焼室内の温度、濃度分布の影響の調査に用いられるが化学反応過程も考慮する場合は簡略化モデルと組み合わせることが多くなる。

また簡略化モデルを使用する際の計算コストをさらに削減するために、予混合気が着火にいたるまでは Livengood-Wu 積分[48]のようなモデルを使用し、着火後に簡略化の反応モデルを組み合わせる手法も取られる[49]。Livengood-Wu 積分は実験値から算出された経験則であり、着火に至るまでの時間を積分式で表す。この積分式を予混合圧縮自己着火燃焼のモデリングに適用するために、燃料種別にその妥当性を検証する試みも行われている[50]。また多次元と詳細反応モデルの組み合わせる場合には、温度分布のみをまず計算し、その後素反応計算を個々の領域について適応するような、計算コストを削減する手法も取られている[51]。

## 1.3.3. 化学反応機構に関する研究

## a) 化学反応モデルに関する研究

圧縮自己着火燃焼を理解するためには、化学反応機構の把握が重要である。今までに SHELL モデル[34], MIT モデル[35], SHUREIBER モデル[36]などの簡略化反応モデルを用いてエンジン内での着火遅れ時間の予測は行われていたが、詳細な反応過程を把握するには至らない。また詳細な反応モデルの研究では、その反応速度定数を定めることを主としている。エンジン燃焼を解析する場合には反応速度定数の選定に重きを置くのではなく、それを利用して着火、燃焼の解析をすることが重要である。詳細な反応機構の解明、素反応モデルの構築では Westbrook ら[52]のグループ, Warnatz ら[53]のグループらが盛んに行い、詳細な反応過程を考慮した自己着火燃焼の計算機を用いた解析が行われ始めた。

往復動型エンジンでは、燃焼室内の予混合気は低温（大気温程度）からピストンにより圧縮され、高温（圧縮比 18 で 1000K 程度）に至る。化学反応過程も温度域によって主となる反応過程が異なる。パラフィン系の燃料の場合、次に示すように各温度域での主要経路が説明されている[54][55]。

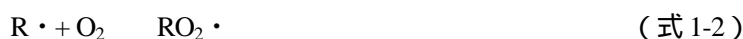
## &lt; Low Temperature Oxidation Reaction (&lt;850K) &gt;

850K 以下の低温の領域では燃料からの水素の引き抜きから開始する。



( $\cdot$  はラジカルを表す。)

水素の抜けた位置に酸素が付加する。



( 1st O<sub>2</sub> addition )

反応(2)は強い温度依存性があり、低温時には平衡は右に、温度が上がると左に移行する。

次に RO<sub>2</sub>・ は内部で水素の引き抜きが起こる。

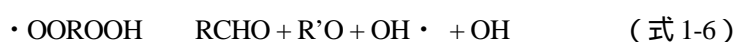


・ ROOH は次の反応へと進む。



( 2nd O<sub>2</sub> addition )

低温域では反応 (5) が、活性化エネルギーが低いいため主となる。



2つの OH・ が放出される連鎖分岐反応が進行し、酸化反応は O<sub>2</sub> addition の平衡が左側に偏るような温度域になるまで進行する。

< Intermediate-Temperature Oxidation Reaction (1200K-850K) >

850K 以上 1200K 未満のような温度域では,  $\text{H}_2\text{O}_2$  から生成される  $\text{OH}\cdot$  の連鎖伝ば反応が主となる。まずは  $\text{H}_2\text{O}_2$  の生成から始まり, 第3体反応で  $\text{OH}\cdot$  を生成する。



< High Temperature Oxidation Reaction (>1200K) >

1200K 以上の高温域では(1)の水素引き抜き反応の後, 低級の炭化水素への分解が主な反応となる。



上記は各温度域での主要な反応を示しているもので, 詳細な反応モデルではこの他にも多くの反応を取り扱い, 例えば Methane の素反応スキーム[24]は化学種数 53, 反応数 325, *n*-Butane[22]では化学種数 141, 反応数 470, *n*-Heptane[56]では化学種数 544, 反応数 2446 となる。これに対し, 簡略化反応モデルの SHELL モデル[34]は化学種数 7, 反応数 8 となっている。

一方で燃料の個性と燃焼化学反応過程に強く依存する予混合圧縮自己着火燃焼のモデリングには, 詳細化学反応機構の発展が不可欠であることは事実である。三好[57]はショックチューブ等での実験結果から詳細反応機構を組み立てるのではなく, 炭化水素燃料の燃焼詳細反応機構を自動生成するエキスパートシステム, 知識ベースシステムの構築を行った。自動生成された詳細反応機構をショックチューブ等での結果と比較し, オクタン価と着火遅れは概ね再現されることを示している。

#### b) 圧縮自己着火燃焼の発光計測に関する研究

励起状態の化学種が基底状態へ遷移する際には, 化学種固有の波長の光を発する。そのため特定の波長の光を時間履歴で計測することにより, 化学反応の進行過程を捉えることが可能となる。これにより素反応数値計算から得られた化学種の濃度履歴と比較することにより, 化学反応に踏み込んだ段階で計算結果の妥当性を確認できるようになる。また自発光の二次元画像の計測を行うことにより, 燃焼室内の濃度分布などを計測することができ, 燃焼室内の圧力計測のみでは把握できない不均一性の影響を明らかにすることが可能となる。

飯田ら[58]はガソリン, Methanol, Methane 予混合火炎の構造を把握するために, 層流バーナー火炎のラジカル発光計測を行い, 燃料種の違いが発光スペクトル分布に及ぼす影響を明らかにした。またラジカルの発光強度の比,  $\text{OH}/\text{C}_2$ ,  $\text{CH}/\text{C}_2$  は当量比に強い相関があることを明らかにし, ラジカル発光強度の計測により, 当量比予測の可能性を示した。



飯田ら[59]は2ストローク ATAC エンジンの燃焼室内を可視化し、ラジカル発光のスペクトル解析と2次元画像の撮影を行った。ATAC は従来の火炎伝ば燃焼とは異なり、バルク状に燃焼が開始、進行することを確認した。また OH ラジカルの発光強度がピークを迎えた後に C<sub>2</sub> および CH の発光がピークを迎えることを明らかにした。

池田ら[60]は、4ストローク可視化ガソリン機関およびカセグレン光学系を用いて、燃焼室局所のラジカル発光計測を行い、火炎伝ば速度、火炎帯厚さ、局所当量比を明らかにした。

手崎ら[61]は、DME を燃料とした4ストローク可視化己着火燃焼機関を用い、LIF 法により計測した HCHO の濃度履歴と素反応数値計算で求められた HCHO 濃度の比較を行い、同時に四重極型質量分析器を用いて排気中の中間生成物濃度の解析も行った。その結果、投入した DME の量の 30% が消費された時点で冷炎（低温酸化）反応は停止し縮退期間に移行すること、またその時点で生成される HCHO と消費される DME の量がほぼ 1 : 1 になることを明らかにしている。

Collin ら[62]は、4ストローク直噴可視化エンジンを *n*-Heptane と *iso*-Octane の混合燃料で運転し、PLIF 法によって燃焼室内の HCHO、OH の濃度計測を行った。その結果、燃料噴射時期が早い場合には HCHO、OH とともに低温酸化反応の終了時期に燃焼室内全域に分布し、遅い場合には噴霧方向に生成され、その多くが燃焼室壁面付近に分布することを明らかにした。

#### 1.3.4. EGR を用いた予混合圧縮自己着火燃焼に制御に関する研究

予混合圧縮自己着火機関においては、着火時期のコントロールが困難であること、ノッキングにより運転領域が制限されることが大きな課題となっていることは前に述べた。これらの課題を解決し、高効率運転を実現するための手段として EGR を用いた燃焼制御がその1つとして挙げられる。

池本ら[63]は、DME の自己着火温度が低く、圧縮比の低い機関でも HCCI 燃焼が成立する点に着目し、小型軽量の発電機用 HCCI 機関を開発した。エンジンは小型でシンプルな構造とするために、従来の HCCI 機関で必要とされている圧縮比、バルブタイミングなどの可変機構を一切持たない。予混合気と高温の内部 EGR ガスと低温の外部 EGR ガスの供給量を4つのスロットルバルブを操作することで調整し、給気の温度管理を行うことで広範囲の HCCI 燃焼を最適化している。内部 EGR の導入方法として吸気工程中に排気バルブを開ける二段排気カム機構を用いている。

Douglas ら[64]は、可変バルブタイミングを可能にするカムシャフトを4ストロークエンジンに適用し、内部 EGR ガスのマネージメントを行うことで、圧縮自己着火燃焼での運転領域を拡大と低燃費化に成功している。浦田ら[65]は、電磁式の可変バルブタイミング機構をエンジンに導入して、予混合圧縮自己着火燃焼の運転領域拡大を試みている。可変

バルブタイミングにより EGR の残留量を調整すると同時に、高負荷領域では筒内直噴インジェクタを用い圧縮行程中に燃料噴射を行い、一方低負荷領域では負のオーバーラップ中に燃料噴射を行うことで運転領域の拡大に成功している。山岡ら[66][67]は、Variable valve event and lift system、Valve timing control system で構成される連続可変バルブシステムを導入し、それをベースとしたガソリン予混合圧縮自己着火制御システムを構築した。S.I.燃焼と比較して低燃費と低排気を実現できることを示した。

#### 1.3.5. 予混合気の不均質性導入による燃焼制御に関する研究

予混合圧縮自己着火機関は、燃料と空気の均質な予混合気を燃焼室内に導入し、ピストンによる断熱圧縮によって自己着火させる燃焼方式の機関である。しかし実際には、燃焼室壁面付近での冷却熱損失などに起因する温度不均質性、燃焼室内での流動による濃度不均質性、残留ガスとの混合過程で生じる組成の不均質性が存在する。予混合圧縮自己着火機関では燃焼室内でほぼ同時に着火が起こり、燃焼が進行する。この現象はノッキングを引き起こす急速燃焼の1つの原因であるため、上記のような不均質性を導入することでノッキングの回避を試みる研究も行われている。

熊野ら[68]は、予混合圧縮自己着火機関に供給する空気予混合気の燃料濃度の不均質性が予混合圧縮自己着火燃焼に与える影響を調査した。4 ストローク単気筒可視化エンジンを使用し、燃焼室内で生じるラジカル発光像を観測した。予混合気中の燃料濃度が不均質の場合は、均質の場合に比べ、予混合圧縮自己着火燃焼における熱発生率のピーク値が下がり燃焼期間が長くなる。二次元発光画像によると均質条件では、燃焼室の全域で同時に発光が生じ短期間の発光が観測され、一方、不均質条件では、燃焼室内の局所において異なるタイミングで発光が生じること、一度発光した局所の領域では、それ以降のコマでは再度発光が観測されないことが明らかにされた。

石山ら[69]は、天然ガスを燃料とする予混合圧縮自己着火機関において、予混合気中の燃料濃度の不均質性に差を持たせるために、吸気管上流、吸気バルブ直前、筒内直接噴射に燃料噴射ポートを設け燃焼特性の調査を行っている。筒内直接噴射を行った場合には、熱発生率のピーク値を低くなり、燃焼期間に幅を持たせることが可能である。

Amano ら[51]は、CFD 計算で燃焼室内の温度あるいは濃度分布を計算し、その温度・濃度分布を階層化して異なる温度・濃度条件を与えて素反応数値計算を行った。この計算では、燃焼室を複数のセルに分割し、各セル間には圧力伝達はあるが、化学種の移動・熱交換はないものとしている。セルごとに異なる初期温度・初期濃度を設定して0次元計算を行っている。不均質条件の計算結果では、均質条件と比較して実機の結果に近い(0次元の均質条件の計算結果よりも)緩やかな圧力上昇が得られている。

### 1.3.6. 混合燃料を用いた予混合圧縮自己着火燃焼に関する研究

予混合圧縮自己着火機関において着火時期を制御する一番容易な方法は、使用する燃料の自己着火温度を変えることである。着火温度は個々の燃料でほぼ一意に決まっているが、優れた着火特性を有する(自己着火温度の低い)燃料を着火し難い(自己着火温度の高い)燃料と混合すると、広い範囲で着火温度を調節できる可能性がある。

Konno ら[70]、山下ら[71]、Muto ら[72]は、自己着火温度の高い Methane と、自己着火温度の低い DME を混合することで、自己着火温度を最適化し、予混合圧縮自己着火機関を広い範囲で運転できることを示した。山下らの結果[71]によれば、Methane 部分当量比と DME 部分当量比の組み合わせにより、アイドリングから IMEP で 0.46MPa までの負荷条件まで連続して運転することが可能である。

金子ら[73]は、DME を主燃料とする予混合圧縮自己着火機関に、DME に比べて着火し難い Methanol を筒内噴射するシステムを構築した。このシステムでは Methanol の噴射量を調整することで、IMEP0.9MPa を達成している。この DME と Methanol の組み合わせの着火機構に関しては、山田ら[74]によって検証が行われており、Methanol 添加による冷炎での燃料消費、熱発生量の減少による着火時期遅延効果が確認された。また冷炎での燃料消費割合は初期燃料に対する添加した Methanol の割合のみに依存し、その値が増加すると直線的に減少することが示されている。

首藤ら[75]は、DME 改質エンジンシステムを開発した。DME を改質して水素、一酸化炭素を生成し、それを DME と共に燃料として予混合圧縮自己着火機関に供給する。改質反応は吸熱反応であるため エンジン排気熱の回収が可能であり 熱効率向上に寄与する。DME と比較して水素、一酸化炭素の自己着火温度が高いため、DME と改質ガスの混合比率を最適化することで、着火時期の調整が可能であり、最大熱効率 40% を達成している。

Shibata ら[76]は、パラフィン系、オレフィン系、アロマティクス系といった炭化水素燃料の配合比の変化が、予混合圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響を調査し、個々の成分の影響を実験的に調査している。

また現行の内燃機関で燃料として用いられるガソリンと軽油を混合することにより、燃料のオクタン価を調節し、運転可能負荷範囲を広げる試みも成されている[77]~[82]。

### 1.4. 燃料最適化の必要性

前節までで紹介したように、予混合圧縮自己着火機関の研究では、従来機関で使用されるガソリン、軽油はもちろんのこと、多種多様な燃料種が用いられている。従来の火花点火機関、ディーゼル機関の機関性能は、使用する燃料のオクタン価、セタン価に依存する部分が多い。つまり高オクタン価であるほど火花点火機関に向いており、逆に高セタン価であるほどディーゼル機関に向いている。図 1-4 に示したのは、Lovell[83]によって整理された炭化水素系燃料の炭素数とオクタン価の関係である。オクタン価 0 のラインに *n*-Heptane が位置し、一方でオクタン価 100 のラインに *iso*-Octane が位置する。従来機関に適用される燃料は、これを基準として燃料のアンチノック性が定められる。直鎖のものと見ると、炭素数が低いほどオクタン価が高く、逆に炭素数が多いほどオクタン価が低いことになる。また同炭素数での異性化、メチル基の増加によりオクタン価は高くなる。

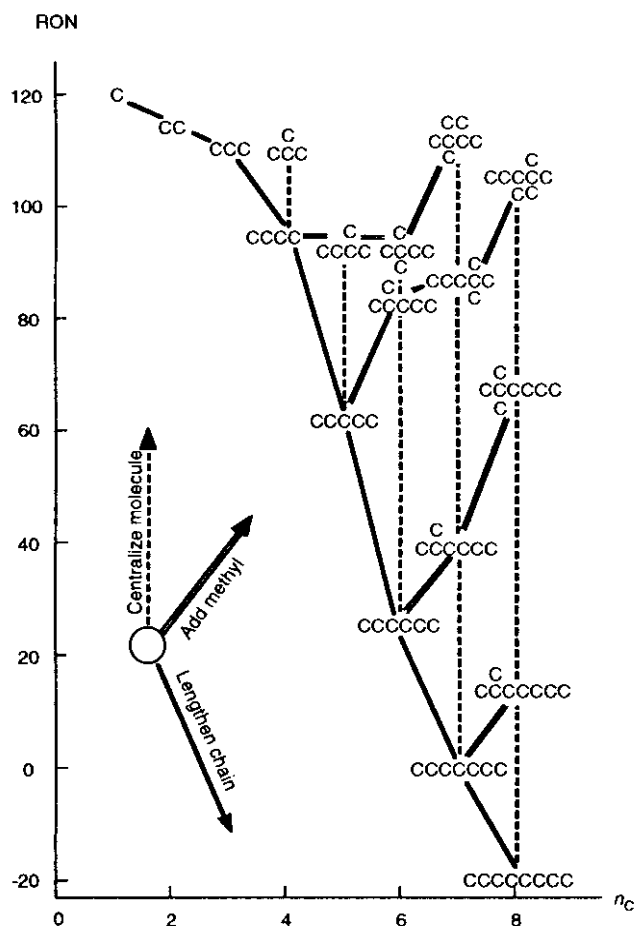


図 1-4 炭素数とオクタン価の関係[83]

従来機関の場合には、このようなオクタン価またはセタン価で整理される燃料の特性によって機関性能が左右されるが、予混合圧縮自己着火機関の場合にはそれが当てはまらない。つまりピストンによる断熱圧縮によって多点で自己着火させる方式のため、オクタン価の高い燃料を使用しても自己着火に至りにくく、一方でオクタン価が低い燃料を使用しても早く自己着火に至るとノッキングしてしまう。予混合圧縮自己着火機関の実用化のためには、オクタン価とは別の指標で燃料を最適化することが必要である。実際に 1.3.6. で紹介したような複数の燃料を混合する方法がその例といえる。

本研究においても、複数の燃料を混合する方法に着目する。自己着火温度の高い燃料と低い燃料を選択して混合する方法を取るが、自己着火温度の高い燃料としてオクタン価が最も高い Methane を選択する。一方の自己着火温度の低い燃料としては、Methane と同じく常温において気体であり、アルカン系炭化水素の中で最もオクタン価が低い *n*-Butane をその 1 つとして選択する。また自己着火温度が低く、エーテル系燃料の中で最も分子構造が単純であり、かつ常温において気体である燃料として DME (Di Methyl Ether) を選択する。DME はセタン価が軽油よりも高く、またその扱いやすさから代替燃料として注目を集めている。

越らは[84]、DME について、着火源が無い場合の自着火限界（熱的な爆発限界）を、詳細反応機構を用いた反応シミュレーションに基づく着火誘導時間の計算結果から予測している。図 1-5 に示したのは、着火誘導期間が 1sec となる点を自己着火の限界と仮定した場合の限界曲線である。図中で曲線の右側が爆発領域、左側が非爆発領域を示している。これらの結果はいずれも量論混合比の燃料と空気の混合気について計算を行ったものである。アルカン系燃料の場合は、Methane が最も着火しにくく、炭素数が増えるに従って自着火しやすくなる傾向があるが、DME は *n*-Butane よりもさらに自己着火に至りやすいことを示している。

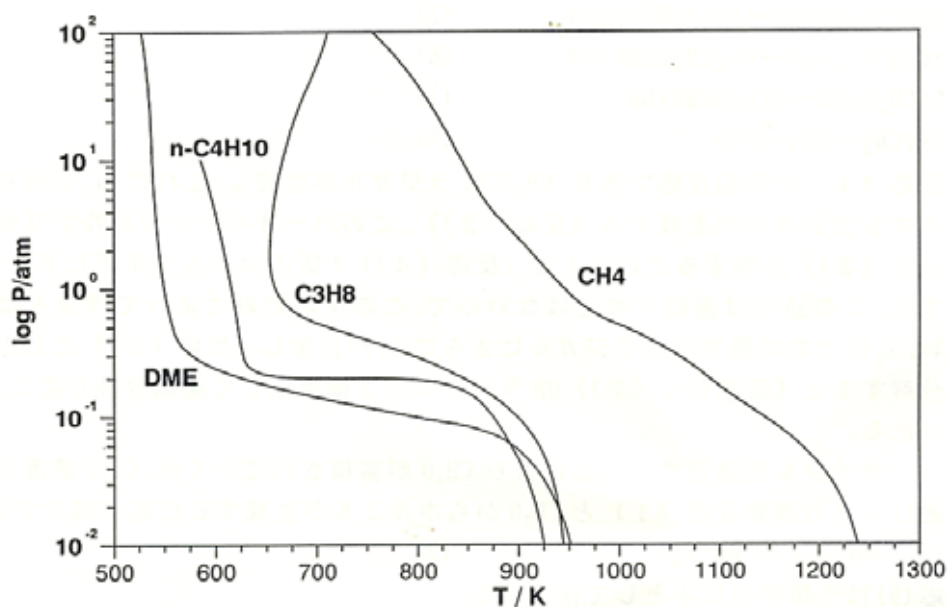


図 1-5 DME およびアルカン系燃料の自着火限界（当量比 1 の燃料/空気混合気体）[84]

また首藤ら[75]が行っている改質ガスを考慮した予混合圧縮自己着火燃焼においては、主燃料に加えて改質反応によって生じた水素、一酸化炭素も燃料として利用される。このシステムの利点は、排気成分中に含まれる水および二酸化炭素と主燃料を触媒内で反応させ水素、一酸化炭素に改質することで、排気熱回収が可能となりシステム全体の熱効率向上が可能となることである。改質反応により生成された水素、一酸化炭素は、主燃料とともに燃焼室内で自己着火に至るが、水素、一酸化炭素の存在により自己着火特性は変化する。本研究で行う二成分混合燃料の検討においても、この改質ガスの成分の効果を考察するために、Methane に対して水素あるいは一酸化炭素を混合する方法も選択する。

## 1.5. 研究目的

予混合圧縮自己着火機関は、空気と燃料の予混合気を燃焼室内に導入し、ピストンによる断熱圧縮により高温・高圧とすることで多点同時に自己着火させる機関である。予混合圧縮自己着火燃焼は、いわゆる低温度燃焼を実現できることから、NO<sub>x</sub> およびすすを全く生成しない高効率機関を実現する燃焼方式として注目されている。予混合圧縮自己着火機関は、その燃焼方式ゆえに高効率・低公害を実現しうる機関として注目されており、地球環境問題や石油資源の枯渇問題を緩和しうる手法の一つとしてその実用化が求められている。しかし予混合圧縮自己着火機関が実用機関として成立するには、熱効率を確保するため、着火時期の最適化が必要である。従来火花点火機関では着火時期の最適化は火花点火により、ディーゼル機関では燃料噴射といった物理的な手法により行われる。それに対し、予混合圧縮自己着火機関における着火は、燃料と酸化剤の酸化反応過程に大きく依存しており、従来の物理的な手法が適応できず、化学反応論に基づいた新たな手法の確立が必要である。また急峻な熱発生により高熱効率が獲得できる利点はあるが、急峻すぎるとノッキングを引き起こす可能性があり、ノッキング回避のために適切な燃焼期間を確保することが必要とされる。また超希薄燃焼による燃焼温度の低下により、NO<sub>x</sub> は大幅に低減できるものの、高い燃焼効率が確保できないこと、同時に未燃 HC, CO の排出量が多いことが問題である。

上記の課題に対して、前節の関連研究で示したように、EGR ガスのマネージメントによる着火時期の適切化、予混合気に不均質性を導入することによる急峻な燃焼反応の回避といった手法が多く提案されている。しかし予混合圧縮自己着火機関の実用化には、そうした解決手法に加えて使用する燃料の最適化が必須である。つまり従来機関で使用される燃料はそのオクタン価によって性能が評価されるが、同じ評価方法は予混合圧縮自己着火機関には適応されない。そこで本研究では、予混合圧縮自己着火機関に使用する燃料の最適化の1つの方法として、反応性の異なる2つの燃料を混合する手法に着目する。混合する燃料成分の違いおよびその混合割合の変化が予混合圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響を調査し、その調整により着火温度、着火時期をコントロールし、高熱効率、高出力を実現可能な二成分混合燃料の混合条件を解明することが本研究の目的である。

二成分混合燃料を用いた予混合圧縮自己着火機関の燃焼を考える上で、まずは単一成分燃料で運転する予混合圧縮自己着火機関の燃焼特性を把握する必要がある。単一成分燃料としてDMEを選択し、単気筒機関の燃焼実験および0次元の詳細素反応数値計算により、高い燃焼効率を確保するための条件を調査する。また計算結果と燃焼実験結果を比較・検討することで、単一成分燃料で運転する予混合圧縮自己着火燃焼の限界点を提示する。

次にMethaneをベースにして、Methaneよりも着火温度の低い燃料としてDME、*n*-Butane、水素を、またMethaneよりもさらに着火温度の高い一酸化炭素を混合し、二成分混合燃料の予混合圧縮自己着火燃焼について0次元の素反応数値計算により解析を行う。その解析

結果より二成分混合燃料の混合割合が予混合圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響を明らかにし、二成分混合燃料を用いる際に取り扱うべき指標を示す。

それらの解析結果を受けて、最後に二成分混合燃料を用いて実機で燃焼実験を行い、その混合割合によって運転可能領域がどのように変化するかを調査する。また高熱効率、高出力を確保した予混合圧縮自己着火燃焼を実現するためには、どのような混合条件が要求されるのか考察を行う。

以上より得られら知見をもとに、予混合圧縮自己着火機関の実用化に有効な提案をすることを目的とする。

図 1-6 に本研究の要因図を示す。



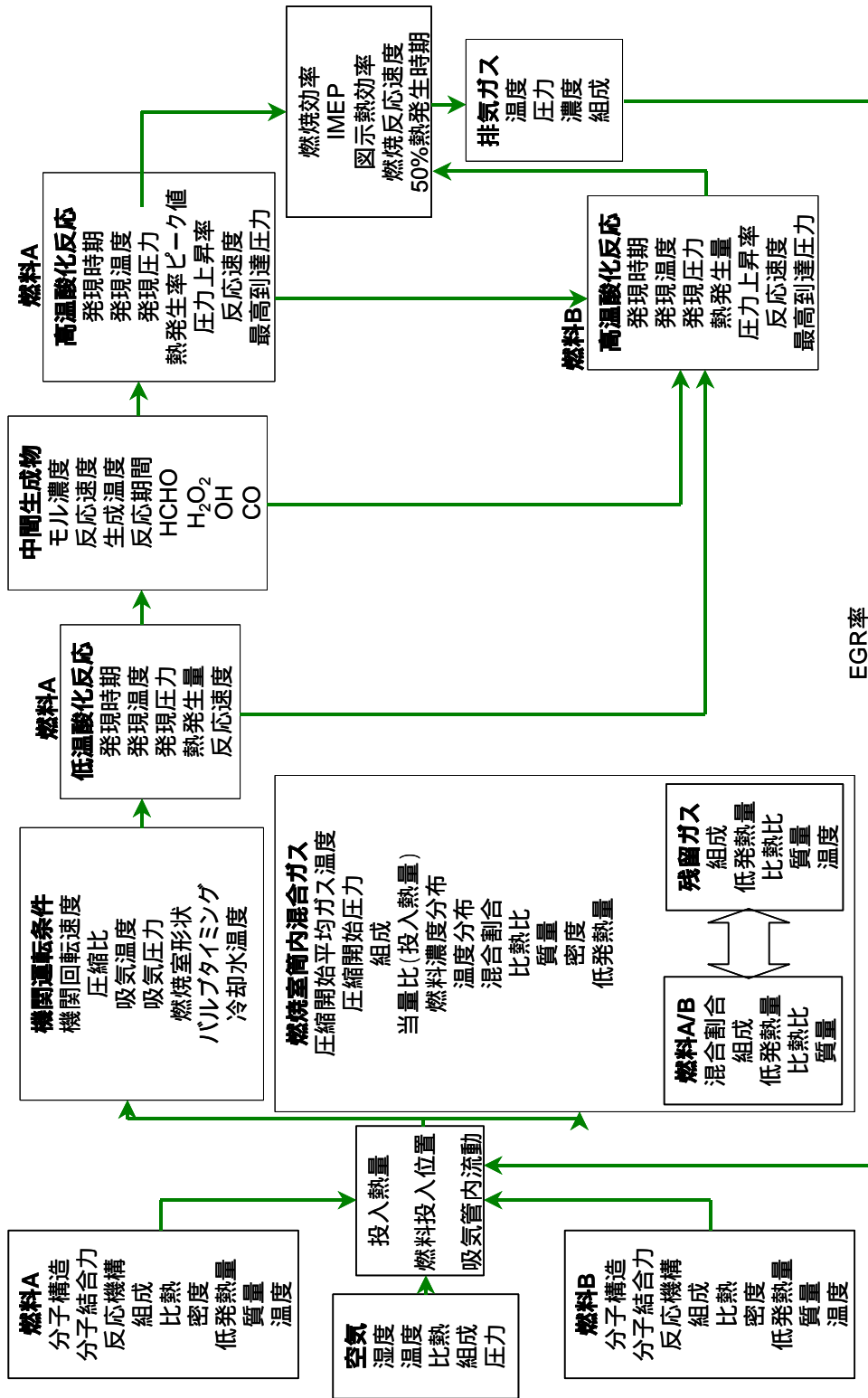


図1-6 本研究の要因図

## 1.6. 本論文の構成

本論文は6章から成る。各章の概要を以下に述べる。

### 第1章 序論

現行の内燃機関に代わる高効率機関として注目を集める予混合圧縮自己着火機関を取り上げ、関連研究を示すことで実用化に向けての課題、その課題解決のために何が成されてきたかを明確にした。また現行内燃機関の燃料の評価に使われるオクタン価が、予混合圧縮自己着火燃焼には適応できないことを明示した。その上で予混合圧縮自己着火機関の燃料の最適化手法として、反応性の異なる二成分の燃料を混合する方法を挙げ、本研究の目的を示した。本研究の目的は、混合する燃料成分の違いおよびその混合割合の変化が予混合圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響を調査し、その調整により着火時期、燃焼期間をコントロールし、高熱効率、高出力を実現可能な二成分混合燃料の混合条件を解明することである。

### 第2章 燃焼実験方法および素反応数値計算方法

第2章では、本研究で行う燃焼実験方法および素反応数値計算方法について述べる。特に素反応数値計算については、エンジン燃焼のモデリングにおいて取られる手法について説明を施し、その上で本研究において行う計算に要求されることと、その方法の妥当性について解説した。

### 第3章 単一成分燃料の予混合圧縮自己着火燃焼

混合燃料を用いた予混合圧縮自己着火機関の燃焼を考える上で、まずは単一成分燃料で運転する予混合圧縮自己着火燃焼特性を把握する必要がある。単一成分燃料として DME を選択し、0次元の詳細素反応数値計算により、DME 予混合圧縮自己着火機関の酸化反応過程を明らかにし、予混合圧縮自己着火燃焼で課題となる燃焼完結性を確保するための必要条件を調査する。また計算結果と燃焼実験結果を比較し、燃焼完結性とノッキングの指標となる燃焼反応の進行速度を解析することで、単一成分燃料で運転する予混合圧縮自己着火燃焼の限界点を提示する。

### 第4章 二成分混合燃料の予混合圧縮自己着火燃焼

第4章では着火温度の高い燃料として Methane、着火温度の低い燃料として DME、*n*-Butane および水素を選択し、二成分燃料の混合割合の変化が予混合気の酸化反応過程に及ぼす影響について0次元素反応数値計算により調査した。また Methane よりもさらに着火温度の高い燃料として一酸化炭素を選択し、Methane と組み合わせたケースについても同様の調査を行った。投入熱量一定条件のもとで、Methane と DME、*n*-Butane、水素ある

いは一酸化炭素の混合割合を変化させ、着火時期、着火温度、燃焼反応速度、酸化反応過程について解析した。そして二成分混合燃料を予混合圧縮自己着火燃焼に適用するための指標として、50%熱発生時期（総熱発生量の50%の発熱が起こるタイミング）というものを取り上げる。二成分混合燃料の50%熱発生時期と燃焼完結性、燃焼反応の進行速度との関係を解析し、その結果から二成分混合燃料を用いる際に燃焼進行時期を調整するのに有効な燃料の組み合わせを示す。

#### 第5章 二成分混合燃料の混合割合が予混合圧縮自己着火機関の運転領域に及ぼす影響

第5章では、第4章の計算結果を受けて、着火温度の高い燃料として Methane、着火温度の低い燃料として DME と *n*-Butane を選択し、2つの組み合わせの二成分混合燃料を用いて燃焼実験を行い、運転可能領域と燃焼効率、IMEP、図示熱効率、着火温度および50%熱発生時期の関係を調査した。発電機用ディーゼル機関で得られている図示熱効率45%、IMEP0.6MPa を目標として、運転範囲の拡大を目指した。この結果から、混合割合の変化により高熱効率、高出力を獲得するための混合条件を解明する。

#### 第6章 結論

第6章では、本論文で得られた知見をまとめ結論を述べる。

## 第2章 燃烧実験方法および素反応数値計算方法

第2章では、まず本論文中で取り扱う予混合圧縮自己着火燃烧の実験データの取得方法およびその解析手法について説明する。また素反応数値計算の計算方法について説明し、本論文で使用した計算結果の有用性について説明する。

## 2.1. 燃焼実験方法

本論文では、第3章および第5章において燃焼実験データを取り扱っている。本節ではその燃焼実験でのデータ取得方法およびその解析手法について説明する。

### 2.1.1. 単一成分燃料実験方法

第3章では、DMEを燃料とする単一成分燃料実験を扱う。実験に使用したエンジンの諸元を表2-1に、実験システムを図2-1に示す。使用するエンジンは市販の4ストロークディーゼルエンジンを予混合圧縮自己着火燃焼での運転が可能ないように改造を施したものである。純正のピストンはトロイダル型で圧縮比16.1に設定されているが、本研究では平型のピストンを採用した。さらに平型ピストンのヘッド部分を交換可能にすることで、圧縮比を複数設定できるようにした。第3章のDME単一成分燃料実験では、圧縮比 $\epsilon=12.9$ に設定した。また機関回転速度は直流動力計により $N_e=800\text{rpm}$ 一定に保った。吸入する空気については、層流式流量計により計測した。燃料投入口は吸気弁より1500mm上流の吸気管内に設け、燃料の常時投入を行った。燃料の拡散による空気との混合を促すため、ノズルの向きを吸気の流れる方向と逆方向に設けた。燃料は設定流量になるようマスフローコントローラにより制御した。筒内圧力はシリンダヘッドに取り付けたピエゾ式圧力変換器により測定し、クランク角度1 degreeごとのデータを取り込み、連続64サイクルのデータにより燃焼解析を行った。以後、示す実験の圧力データは64サイクルのアンサンブル平均である。吸気温度 $T_m$ 、排気温度 $T_{ex}$ はそれぞれ吸気弁から80mm上流、排気弁から125mm下流でK型熱電対により計測した。また排気については、THC、CO、CO<sub>2</sub>を計測対象とした。

表 2-1 実験エンジン諸元 (単一成分燃料実験)

<b>Process</b>	<b>4-stroke</b>
<b>Piston type</b>	<b>Flat type</b>
<b>Displacement</b>	<b>1132 cc</b>
<b>Bore</b>	<b>112 mm</b>
<b>Stroke</b>	<b>115 mm</b>
<b>Length of conrod</b>	<b>205 mm</b>
<b>Crank radius</b>	<b>57.5 mm</b>
<b>Intake valve open</b>	<b>TDC</b>
<b>Intake valve close</b>	<b>ABDC 47°</b>
<b>Exhaust valve open</b>	<b>BBDC 47°</b>
<b>Exhaust valve close</b>	<b>TDC</b>
<b>Engine speed <math>N_e</math></b>	<b>800 rpm</b>
<b>Compression ratio <math>\varepsilon</math></b>	<b>12.9</b>

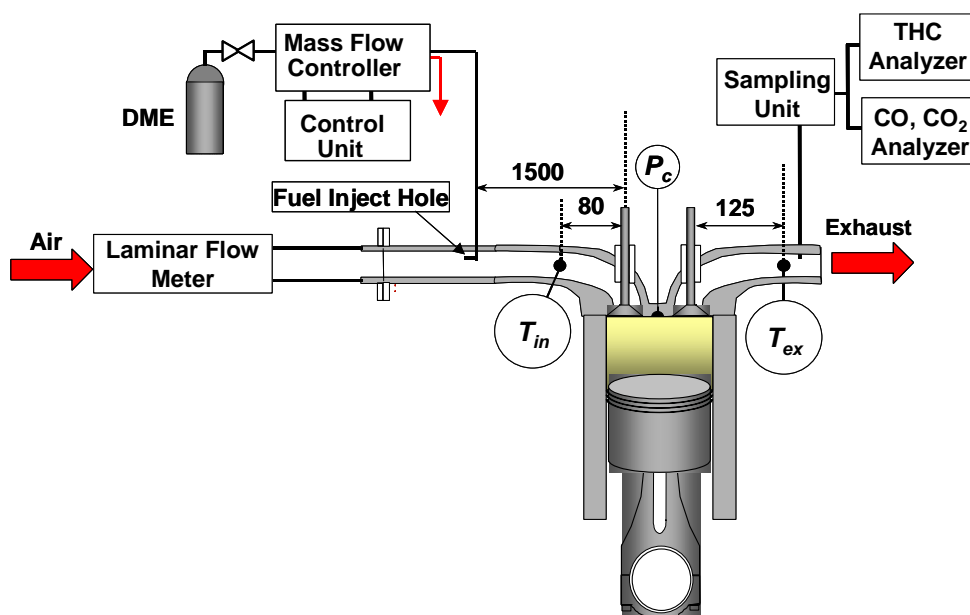


図 2-1 単一成分燃料実験の実験システム図

## 2.1.2. 二成分混合燃料実験方法

第5章では、Methane と DME、また Methane と *n*-Butane をそれぞれ燃料とする二成分混合燃料実験を扱う。実験に使用したエンジンの諸元を表 2-2 に、実験システムを図 2-2 に示す。使用するエンジンは前項で示したのと同じであるが、圧縮比を $\varepsilon=21.6$ に設定してある。また機関回転速度は直流動力計により  $N_e=960\text{rpm}$  一定に保った。吸入空気流量、筒内圧力、吸気圧力、吸気温度、排気温度および排気成分の測定方法、燃料流量の設定方法は単一成分燃料実験と同じである。燃料投入口は吸気弁より 1595mm、1500mm 上流の吸気管内に設け、それぞれの燃料投入口より Methane、DME あるいは *n*-Butane を常時投入した。なお二成分の燃料をより均質に空気と混合して燃焼室に投入できるように、燃料投入口の直後に2種類のオリフィスを設置した。図 2-3 に二成分混合燃料の混合概念図を示す。1 番目のオリフィスは $\phi 18$  を 1 個、2 番目のオリフィスは $\phi 3$  を 29 個とし、1 番目のオリフィスによりラージスケールの混合、2 番目のオリフィスによりスモールスケールの混合を行い、予混合気の均質化を促した。

表 2-2 実験エンジン諸元（二成分混合燃料実験）

<b>Process</b>	<b>4-stroke</b>
<b>Piston type</b>	<b>Flat type</b>
<b>Displacement</b>	<b>1132 cc</b>
<b>Bore</b>	<b>112 mm</b>
<b>Stroke</b>	<b>115 mm</b>
<b>Length of conrod</b>	<b>205 mm</b>
<b>Crank radius</b>	<b>57.5 mm</b>
<b>Intake valve open</b>	<b>TDC</b>
<b>Intake valve close</b>	<b>ABDC 47°</b>
<b>Exhaust valve open</b>	<b>BBDC 47°</b>
<b>Exhaust valve close</b>	<b>TDC</b>
<b>Engine speed <math>N_e</math></b>	<b>960 rpm</b>
<b>Compression ratio <math>\varepsilon</math></b>	<b>21.6</b>

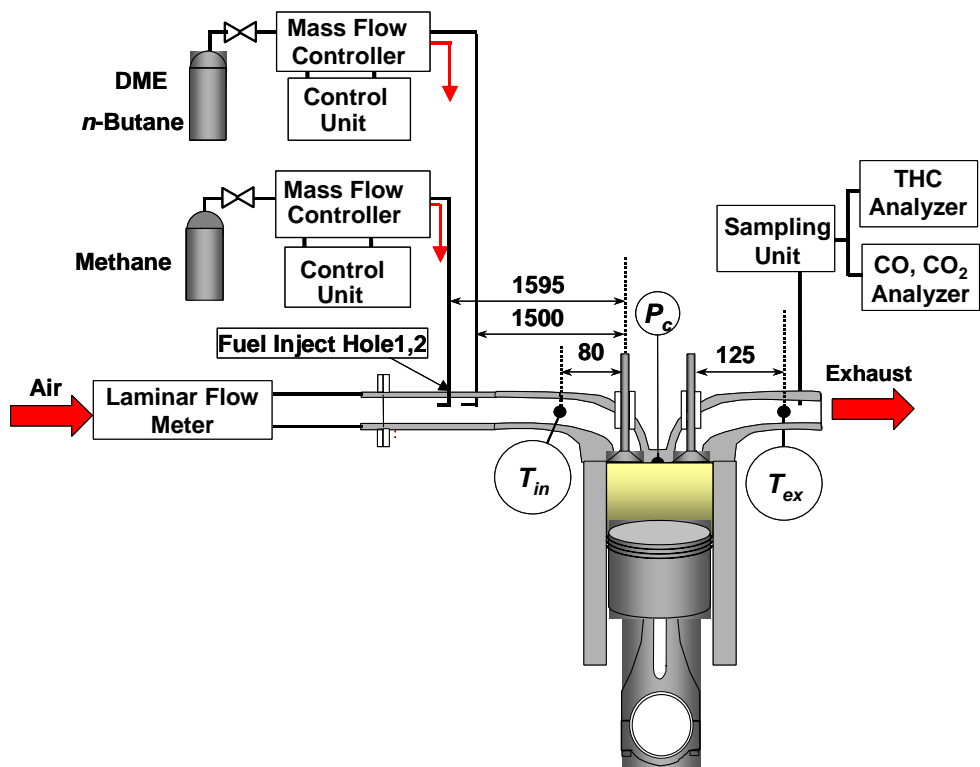


図 2-2 二成分混合燃料の実験システム図

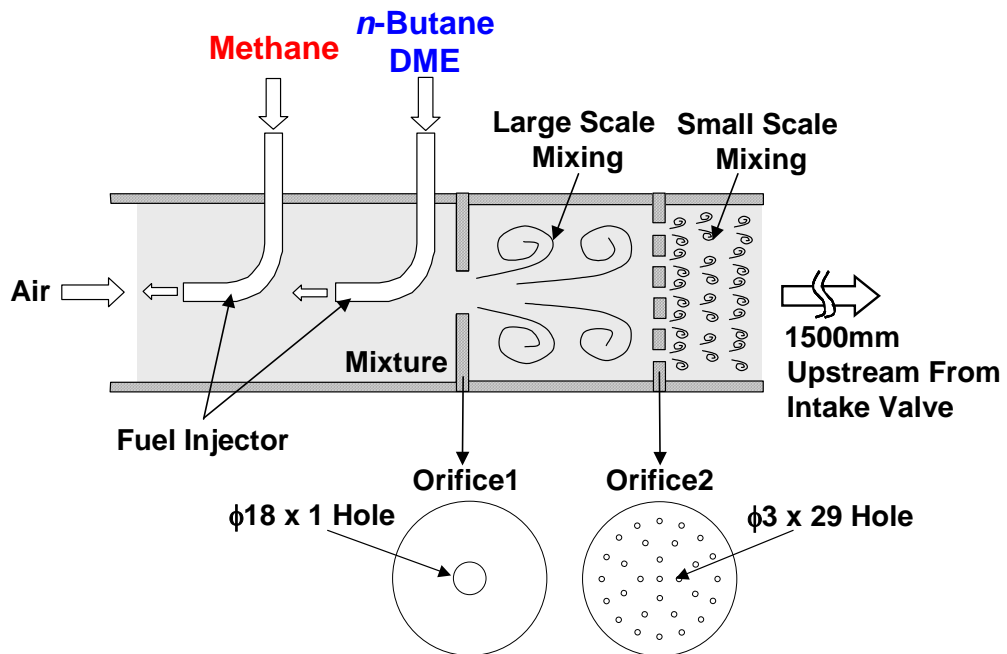


図 2-3 二成分混合燃料の混合概念図



## 2.1.3. 燃焼実験解析方法

前項で説明したように燃焼実験においては、燃焼室内ガスの情報としては筒内圧力のみを計測している。本研究では得られた筒内ガスの情報から、熱発生率、筒内ガス温度、燃焼効率、等を解析している。本節ではその解析手法について説明する。

## a) 熱発生率の算出方法

エンジン筒内における燃焼は、様々な因子の影響を受けて極めて複雑である。しかし得られた筒内ガス圧力データを利用して、単位時間当たりの発生した見かけの熱量を解析することで、その燃焼特性を解析可能となる。

熱力学の第一法則により次式が成り立つ。

$$\frac{dq}{dt} = \frac{du}{dt} + \frac{dw}{dt} \quad (\text{式 2-1})$$

$q$  : 系内に入る 1mol 当たりの熱量 [J/mol]

$u$  : 1mol 当たりの内部エネルギー [J/mol]

$w$  : 系が外部にする 1mol 当たりの仕事 [J/mol]

ここで、 $du$ 、 $dw$  はそれぞれ以下のように表される。

$$du = c_v \cdot dT \quad (\text{式 2-2})$$

$$dw = P \cdot dv \quad (\text{式 2-3})$$

$c_v$  : 定容比熱 [J/mol·K]

$T$  : 系内の圧力 [Pa]

$P$  : 系内の温度 [K]

$v$  : 系内のモル体積 [ $\text{m}^3/\text{mol}$ ]

また、微少変化における気体の状態方程式は以下のように表される。

$$P \cdot \frac{dv}{dt} + v \cdot \frac{dP}{dt} = R \cdot \frac{dT}{dt} \quad (\text{式 2-4})$$

$$R = c_p - c_v \quad (\text{式 2-5})$$

式 2-2、式 2-3、式 2-4、式 2-5 を式 2-1 に代入して整理すると以下ようになる。

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\kappa}{(\kappa-1)} \cdot P \cdot \frac{dv}{dt} + \frac{1}{(\kappa-1)} \cdot v \cdot \frac{dP}{dt} \quad (\text{式 2-6})$$

$$\kappa = \frac{c_p}{c_v} \quad (\text{式 2-7})$$

式 2-6 は理論計算によるものであり、実際の熱発生率の計算においては、様々な熱量の出入りを考える必要がある。また $\kappa$ の値は筒内ガスの温度および組成によって変化する。エンジン燃焼室内での熱発生率を解析する場合には、時間  $t$  の代わりにクランク角度  $\theta$  を用いることが多い。式 2-6 を変数変換すると以下のように表される。

$$\frac{dq}{d\theta} = \frac{\kappa}{(\kappa-1)} \cdot P \cdot \frac{dv}{d\theta} + \frac{1}{(\kappa-1)} \cdot v \cdot \frac{dP}{d\theta} \quad (\text{式 2-8})$$

#### b) 着火時期の定義方法

予混合圧縮自己着火燃焼においては、SI 燃焼やディーゼル燃焼のような物理的な着火制御手段がなく、着火は燃料と空気の酸化反応にのみ依存する。燃焼室内の予混合気がピストンにより断熱圧縮を受け、ある温度に達すれば着火に至る。その温度は燃料種によって異なるため、予混合圧縮自己着火燃焼の解析時には、その燃料種固有の着火温度を把握することが重要となる。しかし燃焼室内のガス温度を直接測定することは不可能であるため、計測した圧力から算出しなければならず、着火温度も何らかの手法によって定義した着火時期によって決定しなければならない。そこで本節では、着火時期の定義方法について説明する。

着火時期は前節の手法から算出した熱発生率によって定義を行った。その定義方法を図 2-4 に示す。熱発生率履歴中において、初めて 1J/deg を超えた時期を低温酸化反応開始時期  $\theta_{LTR\_START}$ 、低温酸化反応の山が終わり 4J/deg を下回る時期を低温酸化反応終了時期  $\theta_{LTR\_END}$ 、再び 4J/deg を越える時期を高温酸化反応開始時期  $\theta_{HTR\_START}$ 、高温酸化反応の山が終わり 1J/deg を下回る時期を高温酸化反応終了時期  $\theta_{HTR\_END}$  とした。 $\theta_{LTR\_START}$ 、 $\theta_{HTR\_START}$  における筒内ガス温度をそれぞれ低温酸化反応開始温度  $T_{LTR\_START}$ 、高温酸化反応開始温度  $T_{HTR\_START}$ 、筒内ガス圧力をそれぞれ低温酸化反応開始圧力  $P_{LTR\_START}$ 、高温酸化反応開始圧力  $P_{HTR\_START}$  として定義した。

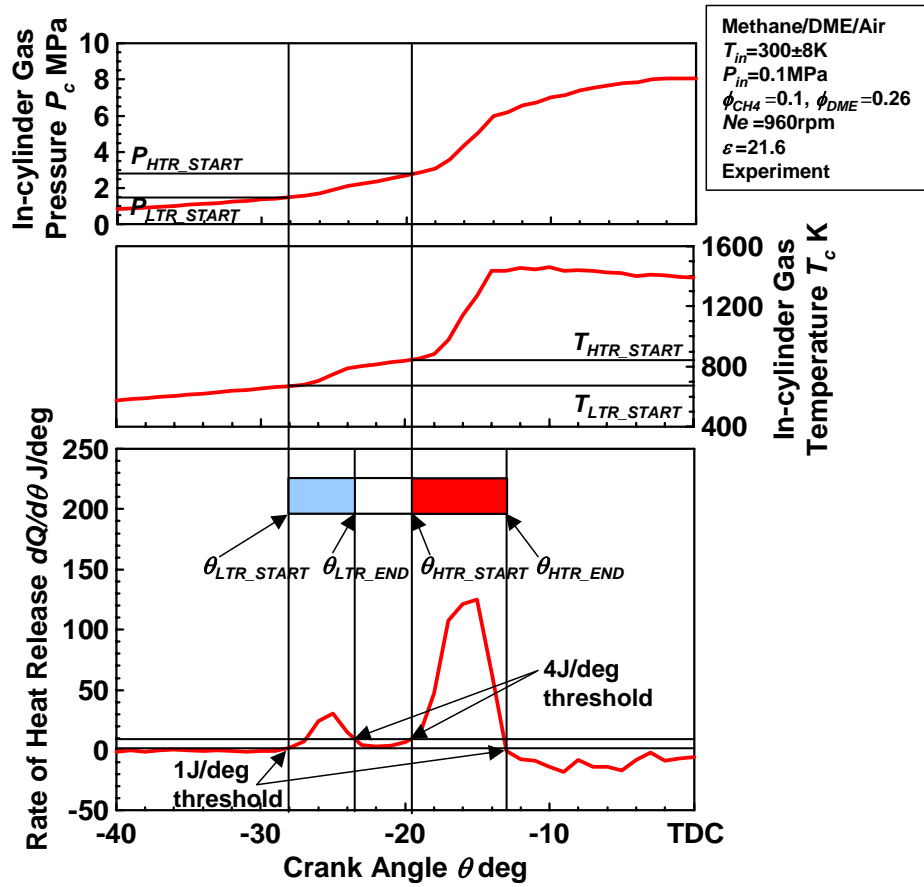


図 2-4 本研究における着火時期の定義方法

c) 筒内ガス温度の算出方法

本章の実験においては筒内ガス温度を以下の手順により算出した。筒内ガスの初期温度  $T_0$  は吸気バルブが閉じ、予混合気の圧縮が始まる ABDC47° の筒内ガス温度であり、新気温度  $T_f$ 、残留ガス温度  $T_r$ 、新気質量  $m_f$ 、残留ガス質量  $m_r$ 、新気定圧比熱  $c_{p,f}$ 、残留ガス定圧比熱  $c_{p,r}$  を用い、新気と残留ガスのエンタルピーバランス式より求めた (式 2-9)。

$$T_0 = \frac{m_f \cdot c_{p,f} \cdot T_f + m_r \cdot c_{p,r} \cdot T_r}{m_f \cdot c_{p,f} + m_r \cdot c_{p,r}} \quad (\text{式 2-9})$$

$T_0$ : 圧縮開始時筒内ガス温度 [K]

$T_f$ : 新気温度 [K]

$T_r$ : 残留ガス温度 [K]

$m_f$ : 新気質量 [kg]

$m_r$ : 残留ガス質量 [kg]

$c_{p,f}$ : 新気定圧比熱 [J/(kg·K)]

$c_{p,r}$ : 残留ガス定圧比熱 [J/(kg·K)]

なお上記式 2-9 において用いた  $T_f, T_r$  は、それぞれ実験測定項目である吸気温度  $T_{in}$ 、排気温度  $T_{ex}$  に等しいと仮定した。

$$T_f = T_{in} \quad (\text{式 2-10})$$

$$T_r = T_{ex} \quad (\text{式 2-11})$$

$T_{in}$  : 吸気温度 [K]

$T_{ex}$  : 排気温度 [K]

筒内ガス温度は圧縮開始から着火までは断熱を仮定し、断熱変化の式より求めた(式 2-12)。断熱圧縮式を用いたのは、最も温度の高いと思われる燃焼室内中心付近のバルクの温度を想定しているためである。

$$T_c(\theta_i) = \left( \frac{P_c(\theta_i)}{P_c(\theta_{i-1})} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} T_c(\theta_{i-1}) \quad (\text{式 2-12})$$

$T_c$  : 筒内ガス温度 [K]

$P_c$  : 筒内ガス圧力 [MPa]

$\theta_i$  :  $i$  番目のクランク角度 [deg]

$\theta_{i-1}$  :  $i-1$  番目のクランク角度 [deg]

$\kappa$  : 比熱比

着火後は、発熱が起こり断熱を仮定できなくなると考え、理想気体の状態方程式を用いて筒内ガス温度を算出した(式 2-13)。

$$T_c(\theta_i) = \frac{P_c(\theta_i) \cdot V_c(\theta_i) \cdot n(\theta_{i-1})}{P_c(\theta_{i-1}) \cdot V_c(\theta_{i-1}) \cdot n(\theta_i)} T_c(\theta_{i-1}) \quad (\text{式 2-13})$$

$V_c$  : 筒内ガス体積 [ $\text{m}^3$ ]

$n$  : モル数 [mol]

#### d) 燃焼効率の算出方法

本研究では予混合圧縮自己着火燃焼の効率の指標の1つとして燃焼効率を用いている。燃焼効率は a) で説明した熱発生率の積算値と投入熱量の比として算出した(式 2-14)。

$$\eta_c = \frac{\sum dQ/d\theta}{Q_{in}} \quad (\text{式 2-14})$$

$\eta_c$  : 燃焼効率

$dQ/d\theta$  : クランク角度 1deg ごとの熱発生率 [J/deg]

$Q_{in}$  : 投入熱量 [J]

## 2.2. 素反応数値計算方法

エンジン燃焼室内のモデリングを行うためには、燃料の反応モデルと燃焼室の空間モデルを組み合わせる必要がある。反応モデルと空間モデルの組み合わせによって、解析できる項目の種類、また精度が変化する。本節では、各モデルの特徴について述べ、本研究の中で行うモデリングに要求される仕様を把握する。

### 2.2.1. 反応モデル

#### a) 詳細素反応モデル

炭化水素系燃料の場合 酸化反応式は一般的に  $C_mH_n + (m+n/4) O_2 = n/2 H_2O + mCO_2$  と表され、これは総括反応式 (overall reaction) と言われる。しかし、実際の酸化反応過程はいくつかの段階に分かれており、その各反応をそれぞれ素反応 (elementary reaction) と呼ぶ。

図 2-5 には素反応モデルの例として、*n*-Butane の素反応の一部を示す[22]。素反応過程を考慮した場合、燃料である *n*-Butane と空気の成分である、 $N_2$ 、 $O_2$ 、Ar 以外にもさまざまな化学種を取り扱うこととなる。なお、反応と共に示されている  $A$ 、 $\beta$ 、 $E$  の数値は、それぞれの素反応の反応速度定数をアレニウスの式で表した際のそれぞれの係数である。

Reactions	A	$\beta$	E
1 : H + O2 = O + OH	1.91E+14	0	6.88E+01
2 : O + H2 = H + OH	5.08E+04	2.67	2.63E+01
3 : OH + H2 = H + H2O	2.16E+08	1.51	1.44E+01
4 : 2OH = O + H2O	1.23E+04	2.62	-7.86
5 : 2H + M = H2 + M	6.40E+17	-1	0
6 : H + OH + M = H2O + M	7.50E+21	-2	0
7 : H + O2 + H2 = HO2 + H2	2.00E+18	-0.8	0
8 : H + HO2 = 2OH	1.50E+14	0	4.2
9 : H + HO2 = H2 + O2	2.50E+13	0	2.9
10 : O + HO2 = OH + O2	2.00E+13	0	0
11 : OH + HO2 = O2 + H2O	2.00E+13	0	0
12 : OH + CO = H + CO2	4.40E+06	1.5	-3.1
13 : H + CH4 = H2 + CH3	2.20E+04	3	3.66E+01
14 : O + CH4 = OH + CH3	1.20E+07	2.1	3.19E+01
15 : OH + CH4 = H2O + CH3	1.60E+06	2.1	1.03E+01
16 : O + CH3 = H + CH2O	7.00E+13	0	0
17 : H + CH2O = H2 + CHO	2.50E+13	0	1.67E+01
18 : O + CH2O = OH + CHO	3.50E+13	0	1.47E+01
19 : OH + CH2O = H2O + CHO	3.00E+13	0	5
.	.	.	.
.	.	.	.
.	.	.	.
73 : 2C2H5 = N-C4H10	1.00E+13	0	0
74 : H + N-C4H10 = H2 + N-C4H9	1.30E+14	0	4.03E+01
75 : H + N-C4H10 = H2 + S-C4H9	2.00E+14	0	3.49E+01
76 : O + N-C4H10 = OH + N-C4H9	3.00E+13	0	2.40E+01
77 : O + N-C4H10 = OH + S-C4H9	5.20E+13	0	1.86E+01
78 : OH + N-C4H10 = H2O + N-C4H9	4.13E+07	1.73	3.15
79 : OH + N-C4H10 = H2O + S-C4H9	7.22E+07	1.64	-1.03
80 : N-C4H9 = C2H4 + C2H5	3.70E+13	0	1.20E+02
81 : S-C4H9 = CH3 + C3H6	2.30E+14	0	1.37E+02
82 : H2O2 + M = 2OH + M	1.10E+17	0	1.90E+02
83 : HO2 + CH3 = OH + CH3O	5.00E+13	0	0
84 : CH3 + N-C4H10 = CH4 + N-C4H9	1.29E+12	0	4.85E+01
85 : CH3 + N-C4H10 = CH4 + S-C4H9	7.94E+11	0	3.97E+01
86 : O2 + N-C4H9 = HO2 + #1-C4H8	1.12E+10	0	-6.3
87 : O2 + S-C4H9 = HO2 + #1-C4H8	1.12E+10	0	-6.3
88 : O2 + S-C4H9 = HO2 + #2-C4H8	1.12E+10	0	-6.3
89 : 2O + M = O2 + M	1.00E+17	-1	0
90 : H + O + M = OH + M	1.00E+16	0	0
91 : H + H2O2 = H2 + HO2	1.70E+12	0	1.57E+01
92 : H + H2O2 = OH + H2O	1.00E+13	0	1.50E+01
93 : O + H2O2 = OH + HO2	2.80E+13	0	2.68E+01
94 : OH + H2O2 = H2O + HO2	7.00E+12	0	6
95 : H + H2 + CO = H2 + CHO	6.90E+14	0	7
96 : O + 2CO = CO + CO2	5.30E+13	0	-1.90E+01
97 : HO2 + CO = OH + CO2	1.50E+14	0	9.87E+01
98 : O2 + CO = O + CO2	2.50E+12	0	2.00E+02
.	.	.	.
.	.	.	.
.	.	.	.

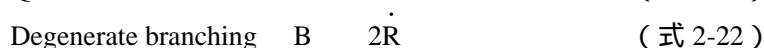
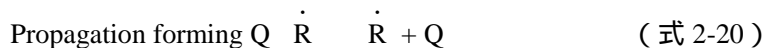
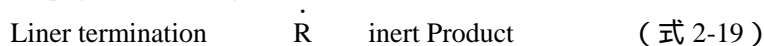
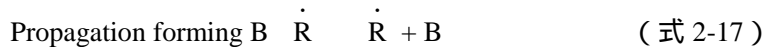
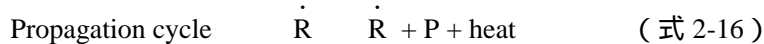
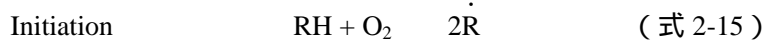
$k_{fi} = A_i T^\beta \exp(-E/RT)$ ,  $k_{fi}$ : 反応  $i$  の正反応の速度定数,  $A_i$ : アレニウス係数,  $T$ : アレニウスの温度係数,  $E$ : 活性化エネルギー,  $R$ : 気体定数

図 2-5  $n$ -Butane の素反応スキーム[22]

## b) 簡略化反応モデル

詳細素反応モデルに対して簡略化反応モデルがある。着火遅れ等の特定の予測対象となる数値に影響を及ぼさないように素反応モデル中の反応を削減、統括したもので、SHELLモデル[34]，MITモデル[35]，SHUREIBERモデル[36]等といったものが代表的なものである。多次元の空間モデルとの組み合わせも比較的用意に行え、計算コストも低い。しかしながら反応の簡略化モデルは反応過程の各種化学種の濃度履歴などは記述できないために、詳細な反応機構を明らかにすることはできない。

簡略化モデルの例として、SHELLモデルを以下に示す。



RHは燃料， $\dot{\text{R}}$ は燃料由来の活性化学種，Qはアルデヒド類などの含酸素生成物，Bは $\text{RO}_2\text{H}$ や $\text{H}_2\text{O}_2$ などの連鎖分岐ラジカル，Pは最終生成物(CO,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ )を示す。これらは特定の化学種を示すものではなく、同様の働きを持つ化学種をまとめて一般化したものである。

SHELLモデルでは、連鎖開始反応として式2-15のように、燃料分子1つと酸素分子1つから2個の燃料由来のラジカル $\dot{\text{R}}$ が生じる。反応活性化学種には複数考えられるが、すべて $\dot{\text{R}}$ としている。

連鎖伝ば反応によって生じたラジカルは反応式2-16により伝ばする。この過程で最終生成物Pを生じると同時に発熱が起こる。また反応式2-17, 2-18, 2-20においても反応が伝ばされる。

反応式2-22により連鎖分岐基Bは2つの活性化学種を生成する。この反応は本来、温度域によって異なる化学種に起因するものであるが、SHELLモデルではこの反応を総括している。

反応式2-19, 2-21が連鎖停止反応を表している。

簡略化モデルはこのように、化学反応の進行状況の概略は解析できるが、特定化学種の生成、消滅までは解析することはできない。

### 2.2.2. 空間モデル

#### a) 多次元モデル

多次元モデルは燃烧室内の圧力分布，温度分布，化学種濃度の不均質性，さらには燃烧室内ガス流動を考慮するものである。燃烧室内での圧力，温度，化学種濃度等の不均質性が，着火および燃烧，排気に及ぼす影響を考慮するには，多次元モデルが必要となる。特に直噴の予混合圧縮自己着火機関の研究等においては，不均一の考慮は重要となる。しかし素反応過程を考慮したモデルとの組み合わせは，計算コストが膨大となる。

#### b) 0次元モデル

0次元モデルは燃烧室内で，圧力，温度，化学種濃度を均質とするものである。実機では予混合圧縮自己着火燃烧時でも，何らかの不均質は必ず存在する（例えばシリンダ壁と予混合気との熱の授受）ため，圧力，温度，熱発生率の最大値等を過大予測すること等も考えられるが，詳細な反応モデルとの組み合わせには適している。



## 2.2.3. 本研究で使用する反応モデルと空間モデルの組み合わせ

エンジン内の燃焼数値計算には反応モデルと、空間モデルを組み合わせることにより行われる。ここまで述べてきた反応モデルおよび空間モデルを組み合わせさせた場合の特徴を表2-3にまとめる。

本研究の目的は、二成分燃料の燃料成分の違いおよびその混合割合の変化が予混合圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響を調査することである。そのためには燃料成分の違い、混合割合の変化が燃料と空気の酸化反応過程に及ぼす影響を知ることが不可欠である。つまり、燃料成分、中間生成物を含めた化学種の挙動を詳細に調べられることが必要となる。

以下の仕様が要求される。

- ・予混合気の圧縮自己着火燃焼での詳細な化学反応過程を明らかにできる。
- ・シリンダ壁との熱の出入りの影響等は排除し、純粋に化学反応の影響のみを取り扱うことができる。
- ・低い計算コスト

以上より、本論文では反応モデルには詳細素反応モデル、空間モデルには計算コストの面から0次元モデルを採用することにした。

表 2-3 計算モデルの特徴

		反応モデル	
		素反応モデル	簡略化反応モデル
空間モデル	0次元モデル	計算コスト : 中 不均質解析 : × 化学反応過程解析 :	計算コスト : 小 不均質解析 : × 化学反応過程解析 :
	多次元モデル	計算コスト : 大 不均質解析 : 化学反応過程解析 :	計算コスト : 中 不均質解析 : 化学反応過程解析 :

#### 2.2.4. 0次元計算の妥当性

0次元モデルの詳細な素反応過程を考慮した数値計算結果では、実際の予混合圧縮自己着火燃焼と比べて、着火時に急激な圧力上昇、極端に高い熱発生率と短い熱発生期間（急峻な燃焼反応速度）が算出される。実機において同等の圧力上昇や熱発生が起こったとすれば、間違いなくエンジンが破壊されてしまう。

Amano ら[51]は、CFD 計算で燃焼室内の温度あるいは濃度分布を計算し、その温度・濃度分布を階層化して異なる温度・濃度条件を与えて素反応数値計算を行った。この計算では、燃焼室を27セルに分割し、各セル間には圧力伝達はあるが、化学種の移動・熱交換はないものとしている。セルごとに異なる初期温度・初期濃度を設定して0次元計算を行っているが、圧力伝達があるためこの計算は全体として見れば1次元計算に分類される。図2-6にCFD計算より算出した燃焼室内温度分布を、図2-7に実験より得られた圧力履歴と燃焼室内温度分布が均質および不均質の条件を想定した1次元計算より得られた圧力履歴の比較図を示す。

この結果より不均質条件の計算結果は、均質条件と比較して実機の結果に近づいていることが分かる。図2-7の均質条件では全てのセルにおいて同じ初期温度を設定しており、この結果がまさしく0次元の計算結果を示している。実際のエンジン内には化学種の移動、熱交換、また温度・濃度の不均質性が存在する。しかしAmano らが行った計算のように、燃焼室を複数セルに分割してそれぞれのセルに異なる初期温度・初期濃度を設定して不均質性を与え、セルごとに0次元計算を行うことで実機での結果に近づけることが可能である。その意味で0次元計算の有効性は低くないと考えられる。

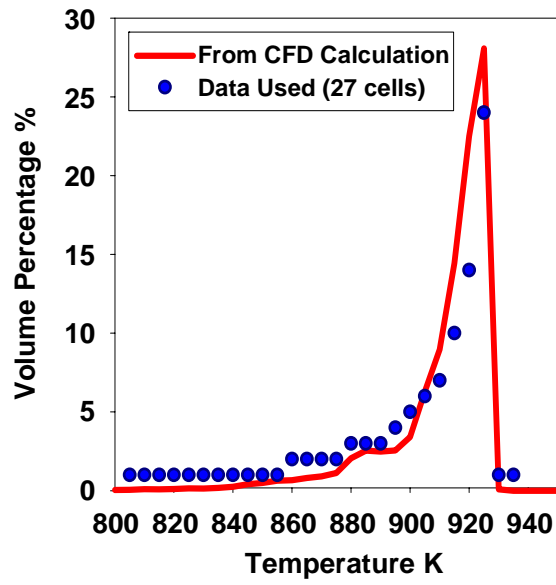


図 2-6 CFD 計算より算出した上死点における温度分布と 27 個のセルに与える温度設定点[51]

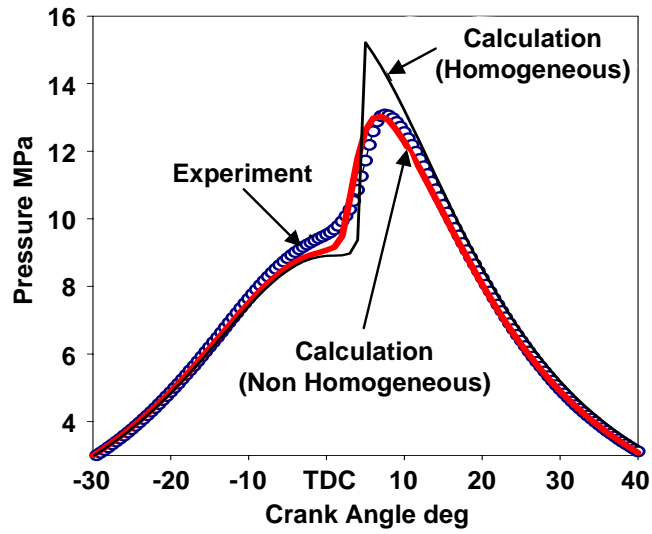


図 2-7 均質条件と不均質条件における 27 セルの圧力履歴と 実験から得られた圧力履歴の比較[51]

## 2.2.5. 計算手法

素反応数値計算には CHEMKIN II[85]を用いる。CHEMKIN は素反応シミュレーションを容易に出来るように作られたサブルーチンライブラリーである。

初期型の CHEMKIN は 1980 年にアメリカの Sandia National Laboratory から発表された。1990 年に改訂された CHEKIN II では圧力依存のある反応の記述方法が的確かつ能率的方法になるなど能力が上がった。さらに 1996 年に改訂された CHEMKIN III では非平衡の様々な流体系を扱うことができる。オープンコードとなっているのは、CHEMKIN II までなので、本研究では、CHEMKIN II を使用する。CHEMKIN は FORTRAN コード 2 組と 2 つのファイルから構成されている。

- Interpreter (code)
- Gas-Phase Subroutine Library (code)
- Thermodynamic Database (file)
- Linking File (file)

図 2-8 に CHEMKIN の構成を示す。まず CHEMKIN フォーマットで書かれた反応スキームを準備する必要がある。Interpreter を実行することで、反応機構を記述している記号を読み取り、Thermodynamic Database から反応に関係する化学種の熱力学的情報が抜き出され Linking File が作成される。Gas-Phase Subroutine Library はサブルーチン群であり、Linking File の情報を基に、元素、反応、熱力学的特性、生成速度の情報を返す。これらの値を利用し、解きたい問題を解く計算式を Application Code に書き実行する。Application Code に相当するプログラムには CHEMKIN パッケージに含まれる SENKIN[86]を一部変更したものをを用いた。SENKIN は予混合気の時々刻々の体積変化を与えることができ、往復同型機関のように予混合気の圧縮、膨張行程を再現する。

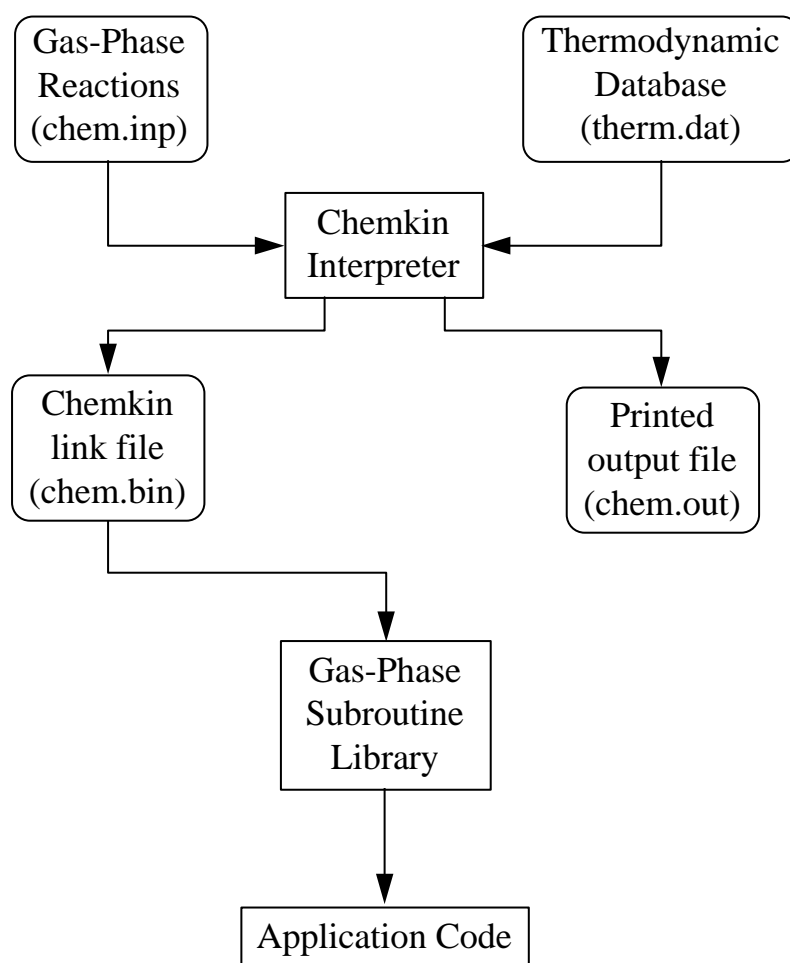


図 2-8 CHEMkin の構成[85]

CHEMKIN での計算行程の概要は以下に述べる。

$K$  個の成分を含む反応素反応  $i$  は次のように表現できる。

$$\sum_{k=1}^K v'_{ki} \chi_k \Leftrightarrow \sum_{k=1}^K v''_{ki} \chi_k \quad (i = 1, \dots, I) \quad (\text{式 2-23})$$

素反応  $i$  の反応速度  $q_i$  [mol/m<sup>3</sup>] は以下のように算出される。

$$q_i = k_{f_i} \prod_{k=1}^K [X_k]^{F_{ki}} - k_{r_i} \prod_{k=1}^K [X_k]^{R_{ki}} \quad (\text{式 2-24})$$

$$k_{f_i}(T) = A_i \cdot T^{\beta_i} \exp(-E_i / RT) \quad (\text{式 2-25})$$

各反応の反応速度から化学種  $k$  の生成速度が算出される

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^I q_i (v''_{ki} - v'_{ki}) \quad (K = 1, \dots, K) \quad (\text{式 2-26})$$

ここで,

$A_i$ : 反応  $i$  の頻度因子,  $\beta_i$ : 反応  $i$  の温度乗数,  $E_i$ : 反応  $i$  の活性化エネルギー,  $F_{ki}$ : 反応  $i$  の正反応における化学種  $k$  の反応次数,  $k_{f_i}$ : 反応  $i$  の正反応速度定数,  $k_{r_i}$ : 反応  $i$  の逆反応速度定数,  $R$ : 一般ガス定数 [J/mol·K],  $R_{ki}$ : 反応  $i$  の逆反応における化学種  $k$  の反応次数,  $x_k$ : 化学種  $k$  の化学記号,  $v'_{ki}$ : 反応  $i$  における反応種  $k$  の量論係数,  $v''_{ki}$ : 反応  $i$  における生成種  $k$  の量論係数,  $[X_k]$ : 化学種  $k$  のモル濃度 [mol/m<sup>3</sup>],  $\dot{\omega}_k$ : 化学種  $k$  の生成速度

次に, 断熱の条件では, 熱力学の第一法則により

$$du + Pdv = 0 \quad (\text{式 2-27})$$

$$u = \sum_{k=1}^K u_k \cdot Y_k \quad (\text{式 2-28})$$

式 2-28 の微分形を考えると

$$du = \sum_{k=1}^K Y_k \cdot du_k + \sum_{k=1}^K u_k \cdot dY_k \quad (\text{式 2-29})$$

ここで, 理想気体を仮定すれば,

$$du_k = c_{v,k} \cdot dT \quad (\text{式 2-30})$$

式 2-27, 2-29, 2-30 より

$$\sum_{k=1}^K Y_k \cdot c_{v,k} \cdot dT + \sum_{k=1}^K u_k \cdot dY_k + Pdv = 0 \quad (\text{式 2-31})$$

予混合気の平均定容比熱  $c_v$  を  $c_v = \sum_{k=1}^K Y_k \cdot c_{v,k}$  とすると

$$c_v \cdot \frac{dT}{dt} + \sum_{k=1}^K u_k \cdot \frac{dY_k}{dt} + P \frac{dv}{dt} = 0 \quad (\text{式 2-32})$$

また質量保存則より

$$\frac{dm}{dt} = 0 \quad (\text{式 2-33})$$

$$\frac{dm_k}{dt} = V \dot{\omega}_k W_k \quad (\text{式 2-34})$$

$$\frac{dY_k}{dt} = v \dot{\omega}_k W_k \quad (\text{式 2-35})$$

式 2-32 , 2-35 より ,

$$c_v \cdot \frac{dT}{dt} + P \frac{dv}{dt} + v \sum_{k=1}^K u_k \cdot \dot{\omega}_k \cdot W_k = 0 \quad (\text{式 2-36})$$

式 2-36 と理想気体の状態方程式  $PV=mRT$  を用い , 体積履歴を与えることにより , 圧力 , 温度が算出される。

ここで ,

$u$  : 単位質量あたりの内部エネルギー [J/kg] ,  $P$  : 圧力 [Pa] ,  $V$  : 体積 [ $\text{m}^3$ ] ,  $Y_k$  : 化学種  $k$  の質量分率 [kg/kg] ,  $C_{vk}$  : 化学種  $k$  の定容比熱 ,  $T$  : 温度 [K] ,  $v$  : 比体積 [ $\text{m}^3/\text{kg}$ ] ,  $W_k$  : 化学種  $k$  の分子量 [kg/ $\text{m}^3$ ] ,  $m$  : 混合気の質量 [kg] ,  $m_k$  : 化学種  $k$  の質量 [kg]

## 2.2.6. 本研究における計算手法

本研究では、エンジンの幾何学的な体積変化を与えて計算を行う。想定したエンジンの諸元は基本的に燃焼実験で使用するエンジンと同じである。第3章では単一成分燃料の予混合圧縮自己着火燃焼、第4章では二成分混合燃料の予混合圧縮自己着火燃焼を解析する。それぞれの章で想定したエンジンの諸元を表2-4に示す。これらの諸元は2.1.1.、2.1.2.で示した燃焼実験に使用したエンジンの諸元と同じである。

表2-4 第3章、第4章の数値計算に用いたエンジン諸元

	単一成分燃料の数値計算 に用いたエンジン諸元 (第3章)	二成分混合燃料の数値計算 に用いたエンジン諸元 (第4章)
<b>Process</b>	Only 1 compression & expansion	←
<b>Displacement</b>	1132 cc	←
<b>Bore</b>	112 mm	←
<b>Stroke</b>	115 mm	←
<b>Length of conrod</b>	205 mm	←
<b>Crank radius</b>	57.5 mm	←
<b>Intake valve close</b>	ABDC 47°	←
<b>Engine speed <math>N_e</math></b>	800 rpm	960 rpm
<b>Compression ratio <math>\varepsilon</math></b>	12.5	21.6



表 2-4 中にも表記したが、吸気バルブが閉じて、閉じた系になるのは燃焼実験と同じ ABDC 47°である。素反応数値計算ではこの吸気バルブが閉じた瞬間が計算の開始点となる。つまり計算の初期条件を与えるのは、ABDC 47°の時点でのガスに対してということになる。想定した行程は、表にあるように実機で考えた場合に閉じた系となっている圧縮行程と膨張行程のみである。サイクルとしては、1/2 サイクルということになる。閉じた系が終わるのは本来であれば、排気バルブが開く時点であり、その時点で計算が終了することになる。しかし本研究では、排気バルブの開く BBDC 47°まで閉じた系の燃焼室ガス体積  $V_c$  を与え、BBDC 47°以降は排気ブローダウンによって、大気圧と等しくなるまで一定の速度で体積  $V'$  を膨張させた。大気圧と等しくなった時刻のガス成分を用いて排気成分の解析を行い、計算を終了させた。つまり、燃焼実験において排気成分の分析は、排気バルブから排出され大気圧まで圧力が下がったガスをその対象としているため、数値計算においてもその過程を再現する方式を採った。図 2-9 に本研究で行った数値計算の概念図を示す。

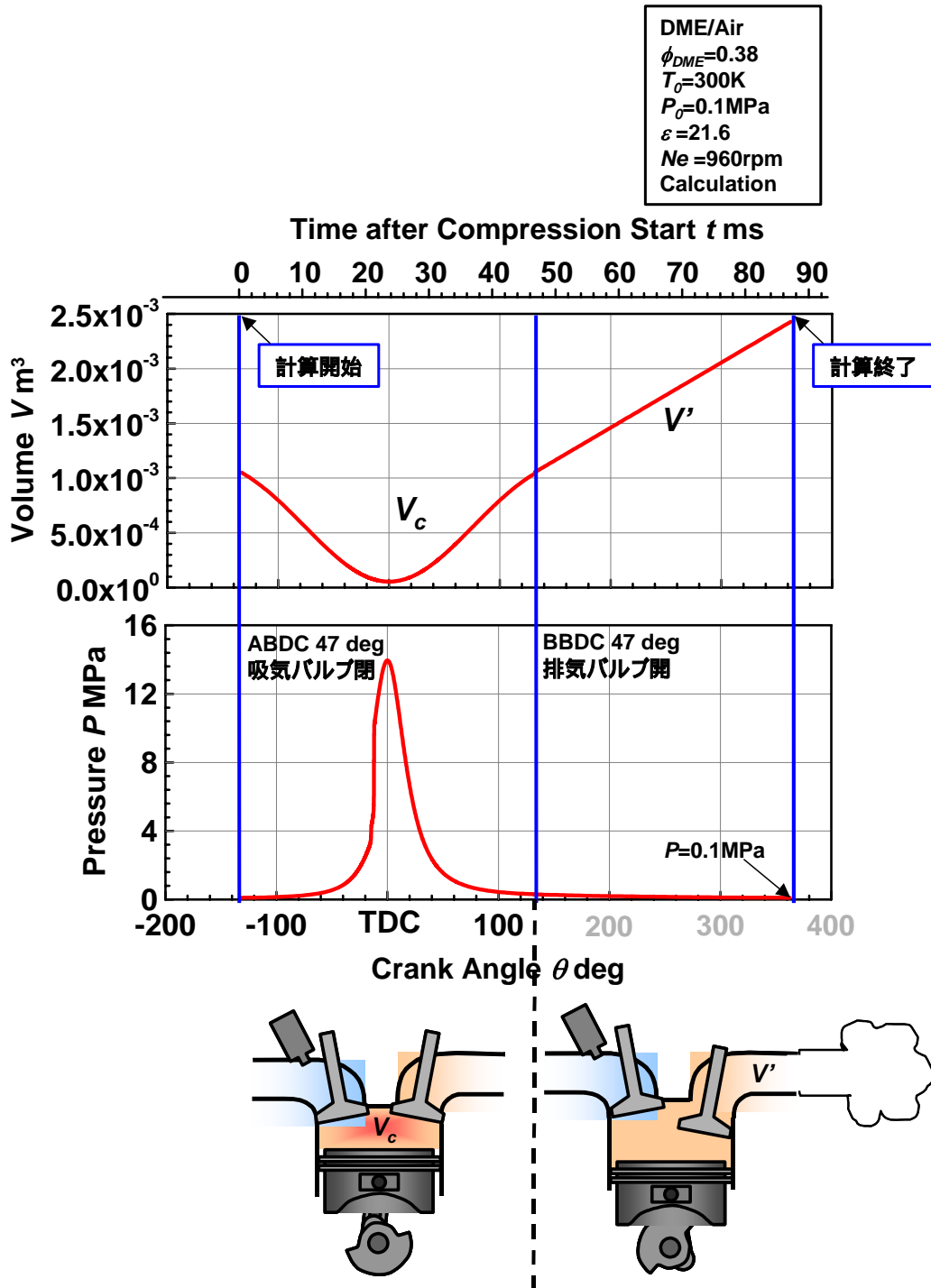


図 2-9 素反応数値計算の計算概念図

## 第3章 単一成分燃料の予混合圧縮自己着火燃焼

混合燃料を用いた予混合圧縮自己着火機関の燃焼を考える上で、まずは単一成分燃料で運転する予混合圧縮自己着火燃焼特性を把握する必要がある。単一成分燃料として DME を選択し、0次元の詳細素反応数値計算により、DME 予混合圧縮自己着火機関の酸化反応過程を明らかにし、予混合圧縮自己着火燃焼で課題となる燃焼完結性を確保するための必要条件を調査する。また計算結果と燃焼実験結果を比較し、燃焼完結性とノッキングの指標となる燃焼反応の進行速度を解析することで、単一成分燃料で運転する予混合圧縮自己着火燃焼の限界点を提示する。

### 3.1. 実験条件および計算条件

本章での燃焼実験の方法については2.1.1.で示した通りである。実験を行う際には、投入するDME空気予混合気の当量比 $\phi$ と吸気温度 $T_{in}$ をパラメータとした。

また素反応数値計算での計算手法および想定するエンジンの諸元は、2.2.6.で示した通りである。計算を行う際には、DME予混合の当量比 $\phi$ と初期温度 $T_0$ をパラメータとした。またDMEの素反応スキームとして、Curranらのモデル(化学種数78, 素反応数336)[23]を選択した。

### 3.2. 当量比, 吸気温度の変化が DME 予混合圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響

本節では, DME を単一燃料とする予混合圧縮自己着火燃焼について, 素反応数値計算および燃焼実験により解析を行った。代表的なパラメータとして当量比と初期温度を選択した。

#### 3.2.1. 当量比の変化が圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響

機関回転速度  $N_e=800\text{rpm}$ , 圧縮比  $\varepsilon=12.5$ , 初期温度  $T_0=300\text{K}$ , 初期圧力  $P_0=0.1\text{MPa}$ , EGR 率  $\gamma_{\text{EGR}}=0\%$  の条件において, 当量比  $\phi$  を変化させた場合の素反応数値計算結果から算出された圧力履歴および温度履歴を図 3-1 に示す。 $\phi=0.2$  の条件では低温酸化反応による 1 段の圧力上昇, 温度上昇が見られ,  $\phi=0.236$  になると低温酸化反応だけでなく高温酸化反応も起こり 2 段の上昇が見られるようになる。 $\phi=0.25$  の条件においては, 特に温度履歴中で 3 段の温度上昇が認められる。温度履歴の図中には燃焼効率も示してあるが, 当量比の増加に伴ってサイクル中の最高温度が上昇し同時に燃焼効率が増加していくことが分かる。実際  $\phi=0.25$  以上では燃焼効率が 100% にまで達している。なお燃焼効率  $\eta_{\text{comb}}$  は, 発生した熱量の積算値が投入した熱量中に占める割合として算出した。

また機関回転速度  $N_e=800\text{rpm}$ , 圧縮比  $\varepsilon=12.9$ , 吸気温度  $T_{in}=300\text{K}$ , 吸気圧力  $P_{in}=0.1\text{MPa}$  の条件において, 当量比  $\phi$  を変化させた場合の燃焼実験で得られた筒内ガス圧力履歴および筒内ガス温度履歴を図 3-2 に示す。 $\phi=0.15$  では, 低温酸化反応による 1 段の圧力・温度上昇が現れるが, それ以上の当量比で高温酸化反応も発現し 2 段の上昇が見られる。この傾向は計算結果と同じである。当量比の増加に伴い, 最高温度の上昇と燃焼効率の上昇が同時に起こることも同じだが, 計算結果と比較して燃焼効率の値は低い。

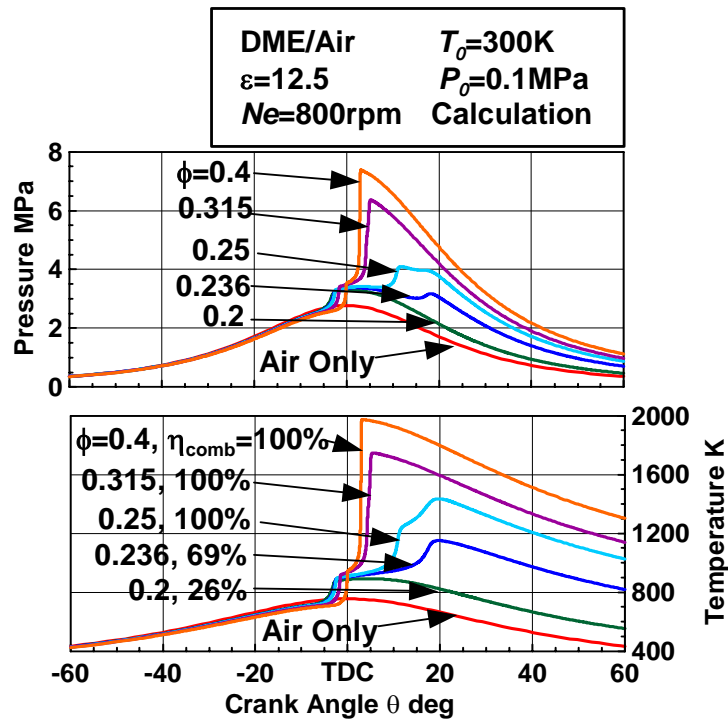


図 3-1 当量比の変化と圧力履歴，温度履歴の関係（計算）

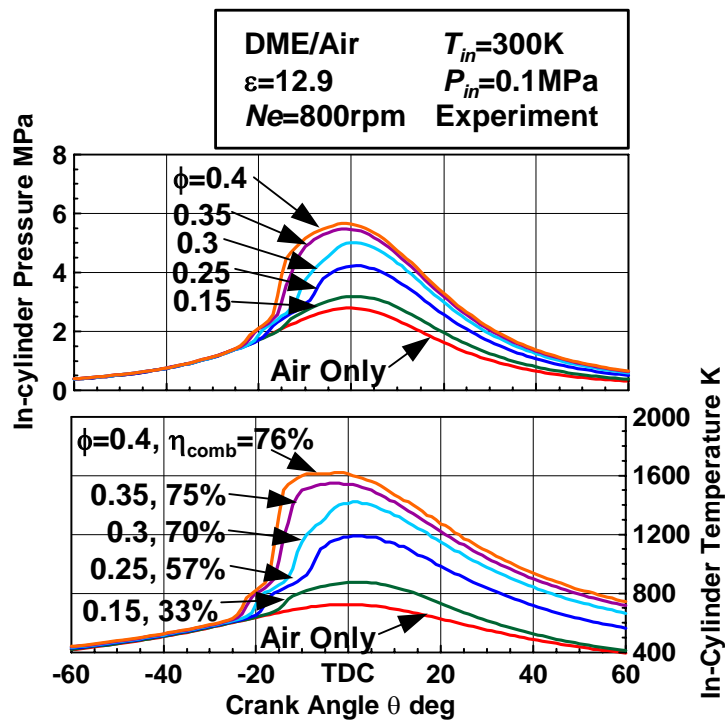


図 3-2 当量比の変化と筒内ガス圧力履歴，筒内ガス温度履歴の関係（実験）

図 3-3 には素反応数値計算で算出された、当量比の変化に対する熱発生率履歴を示す。図中には 2 種類の履歴が表示されているが、実線で表示してあるのが図 3-1 と同じ条件、つまり残留ガスを考慮していない計算結果、点線で示されているのは残留ガスを考慮した計算結果である。まず EGR を考慮していない条件の履歴を見ると、 $\phi=0.2$  で低温酸化反応による 1 段の熱発生が確認される。0.24 で高温酸化反応も発現し 2 段になる。さらに 0.28 では、高温酸化反応の山が 2 段に分かれるが、0.4 まで上昇すると高温酸化反応での 2 段の山が 1 つになっている。当量比が 0.2 から 0.4 まで増加すると、低温酸化反応の発現時期は約 5deg 遅くなり、一方、高温酸化反応の発現時期は当量比が 0.24 から 0.4 まで増加すると約 10deg 早くなる。熱発生率のピーク値は低温酸化反応、高温酸化反応ともに当量比の増加に伴い、上昇する。

図 3-4 に燃焼実験から算出された、当量比の変化に対する熱発生率履歴を示す。図 3-3 の計算結果同様に、当量比の増加に伴い低温酸化反応のみの 1 段、低温酸化反応と高温酸化反応の 2 段、高温酸化反応の山の 2 段化、その結合という熱発生率の形状になる。しかしそれぞれの反応の発現時期について見ると、図 3-3 の実線の履歴と比較して異なった傾向が見られた。実験結果では、当量比の増加により低温酸化反応、高温酸化反応いずれの発現時期も早期化している。低温酸化反応の発現時期は 0.1 から 0.4 まで増加すると約 10deg 早期化、また高温酸化反応の発現時期は 0.2 から 0.4 まで増加すると約 10deg 早期化している。

燃焼実験においては当量比の増加に伴い燃焼効率が上昇し、燃焼ガスの温度が上昇する。その燃焼ガスの一部が燃焼室内に残留し次サイクルの新気と混合するため、当量比の増加に伴い圧縮開始時の筒内ガス温度も上昇することになる。つまり実験結果において、当量比の増加は初期温度の上昇の要素も含むことになる。そこで素反応数値計算においても内部残留ガスを考慮した計算を行った。図 3-3 に点線で示した履歴がその結果である。図中に示した  $T_{mix}$  は残留ガスを考慮した場合の圧縮開始時の筒内ガス温度を示している。残留ガスを考慮することで、低温酸化反応の発現時期は実験結果のように早期化しないものの、遅延化することはほとんどない。当量比の増加に対する熱発生率履歴の依存性は、計算においても定性的に表現できることが明らかになった。

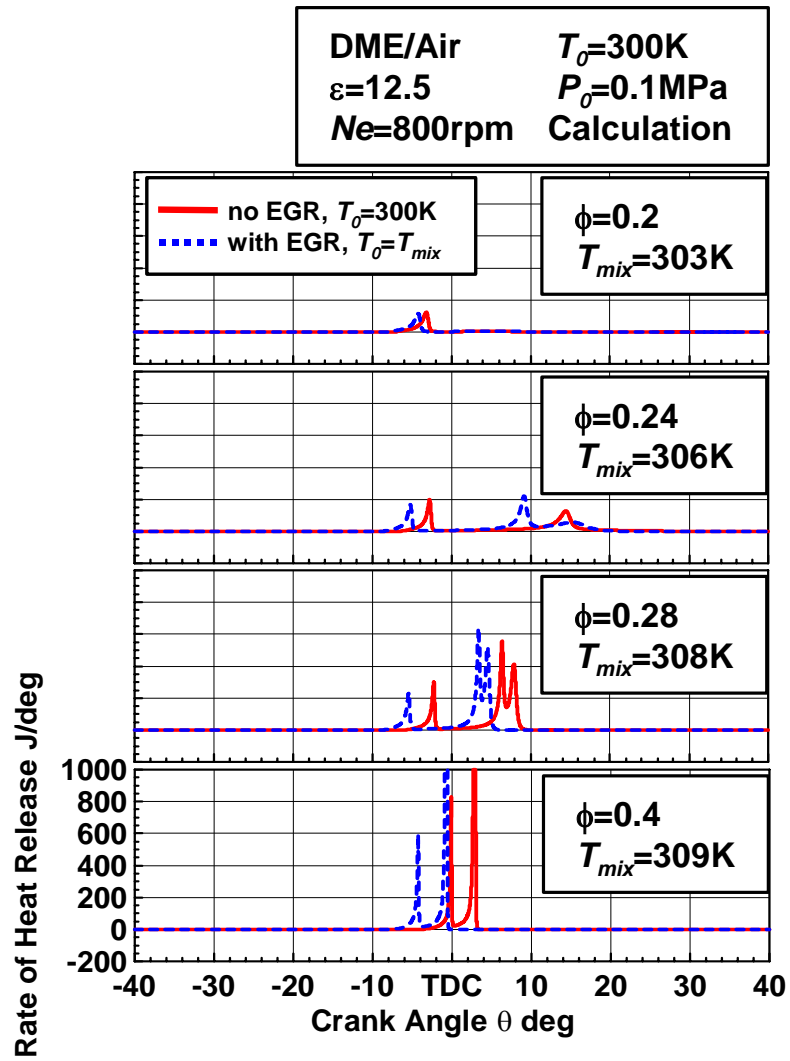


図 3-3 当量比の変化と熱発生率履歴の関係 (計算)  
 (実線: 残留ガスを考慮しない条件, 点線: 残留ガスを考慮した条件)



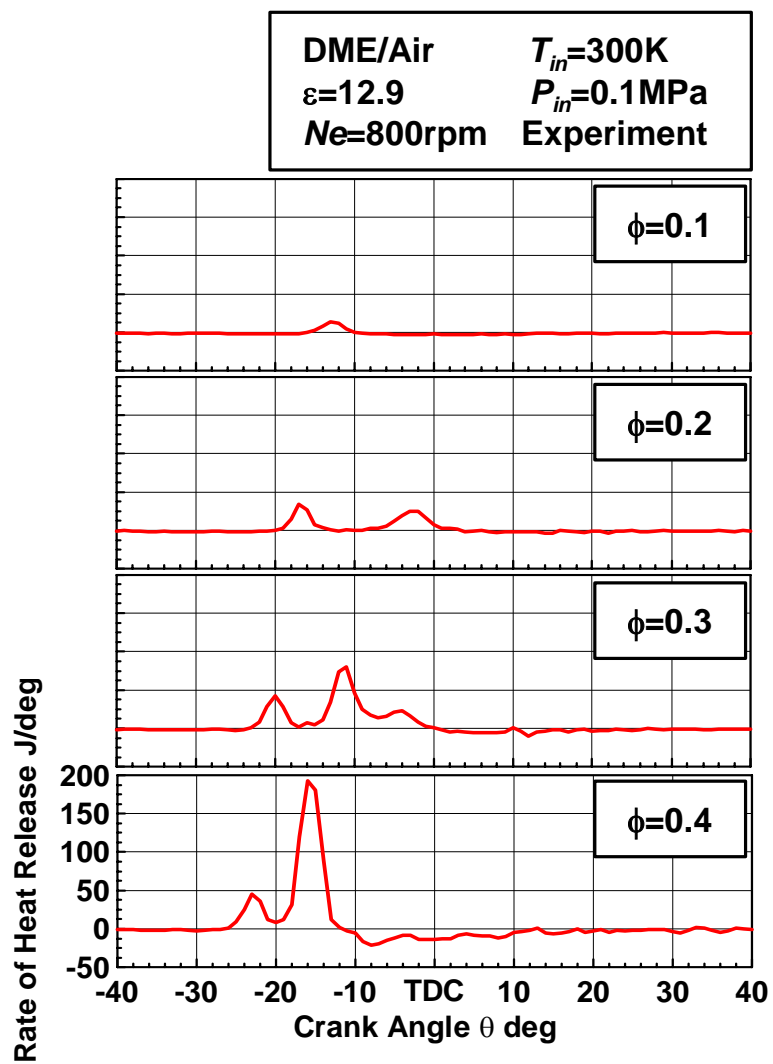


図 3-4 当量比の変化と熱発生率履歴の関係 (実験)

図3-5に計算で得られた当量比の変化に対する燃焼効率およびTHC, CO, CO<sub>2</sub>の排出量を示す。 $\phi=0.2$ までは燃焼効率は横ばいだが、それ以上の当量比では当量比の増加に伴い燃焼効率が上昇し、 $\phi=0.25$ で燃焼効率は100%に達する。燃焼効率が横ばいの領域では、当量比の増加、つまり投入するDME量の増加に伴いTHC, COの排出量は直線的に増加する。 $\phi=0.2$ 以上では燃焼効率の上昇に合わせて、THC, COの排出量は減少に転ずるが、THCの排出量がほぼ0となる当量比のほうが、COの排出量が0となる当量比よりも低いことが分かる。燃焼効率が100%に達する $\phi=0.25$ で、いずれの排出量もほぼ0となる。CO<sub>2</sub>排出量は $\phi=0.25$ 以上で直線的に増加する。

図3-6に燃焼実験により得られた当量比の変化に対する燃焼効率およびTHC, CO, CO<sub>2</sub>の排出量を示す。当量比の増加に伴い燃焼効率が上昇していき、 $\phi=0.35$ で80%弱に達して最大となる。運転可能な当量比は最大で0.4であり、それ以上の当量比ではノッキングに至り実験継続が不可能となった。THCの排出量は $\phi=0.15$ まで直線的に増加し、それ以上の当量比で減少に転じ、 $\phi=0.4$ で最小値を取った。一方、COの排出量は $\phi=0.25$ まで直線的に増加し、 $\phi=0.25$ で最大となる。それ以上の当量比では減少しつづけ、 $\phi=0.4$ で最小値を取る。CO<sub>2</sub>の排出量は燃焼効率の高くなる $\phi=0.3$ 以上で直線的に増加する。

計算と実験の結果いずれも、THCの排出量が減少に転じる当量比が、COのそれと比較して低い。これはCOの酸化には、より高い燃焼効率が必要であることを示している。HC, CO等の排出濃度が実験と計算で値が異なっているが、これは実機においては、ピストン壁面近傍やピストンクレビス部分では熱損失により、反応が凍結し酸化されない燃料分が存在し、それらが排出されずに残っていることが原因と考えられる。

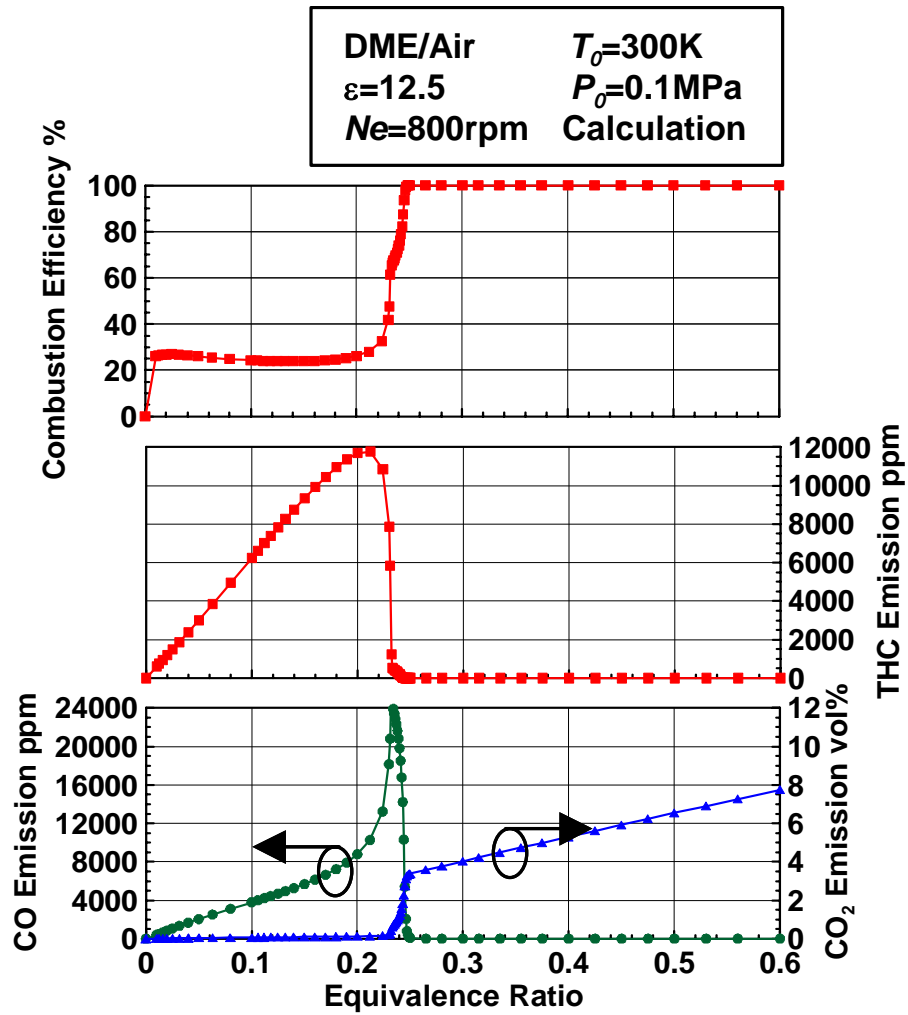


図 3-5 当量比の変化に対する燃焼効率，THC，CO，CO<sub>2</sub>排出量の変化（計算）

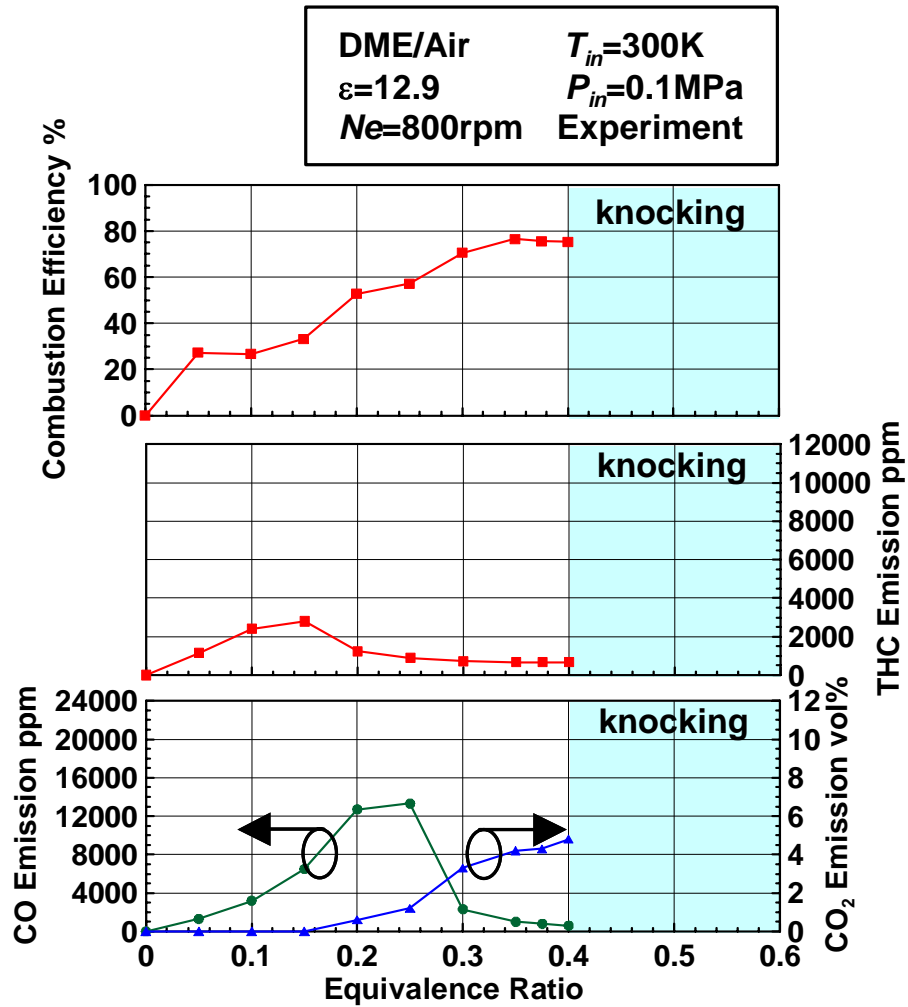


図 3-6 当量比の変化に対する燃焼効率，THC，CO，CO<sub>2</sub>排出量の変化（実験）

## 3.2.2. 吸気温度の変化が圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響

機関回転速度  $N_e=800\text{rpm}$ ，圧縮比 $\varepsilon=12.5$ ，当量比 $\phi=0.2$ ，初期圧力  $P_0=0.1\text{MPa}$ ，EGR 率  $\gamma_{EGR}=0\%$  の条件において，初期温度  $T_0$  を変化させた場合の素反応数値計算結果から算出された PT 線図を図 3-7 に示す。初期温度の上昇に伴い，サイクル中の最高到達温度が上昇していく。図中には各条件における燃焼効率も併記してあるが， $T_0=330\text{K}$  のとき燃焼効率が 90% を超え， $T_0=355\text{K}$  で燃焼効率が 100% に達する。サイクル中の最高到達温度は燃焼効率と大きな相関があると考えられる。最高到達温度と燃焼効率の値を分けると，最高到達温度 1250K 以上で燃焼効率 90%，1400K 以上で 100% と分けることが可能であった。

次に機関回転速度  $N_e=800\text{rpm}$ ，圧縮比 $\varepsilon=12.9$ ，当量比 $\phi=0.25$ ，吸気圧力  $P_{in}=0.1\text{MPa}$  の条件において，吸気温度  $T_{in}$  を変化させた場合の燃焼実験から得られた PT 線図を図 3-8 に示す。計算結果同様に最高到達温度と燃焼効率の関係を調べると， $T_{in}=335\text{K}$  の条件で 1400K に達し 70% の燃焼効率， $T_{in}=355\text{K}$  で 1500K に達し 80% の燃焼効率を確保した。実験と比較して，燃焼効率は低いものの，最高到達温度に対する燃焼効率の依存性は同じ傾向が見られることが分かる。

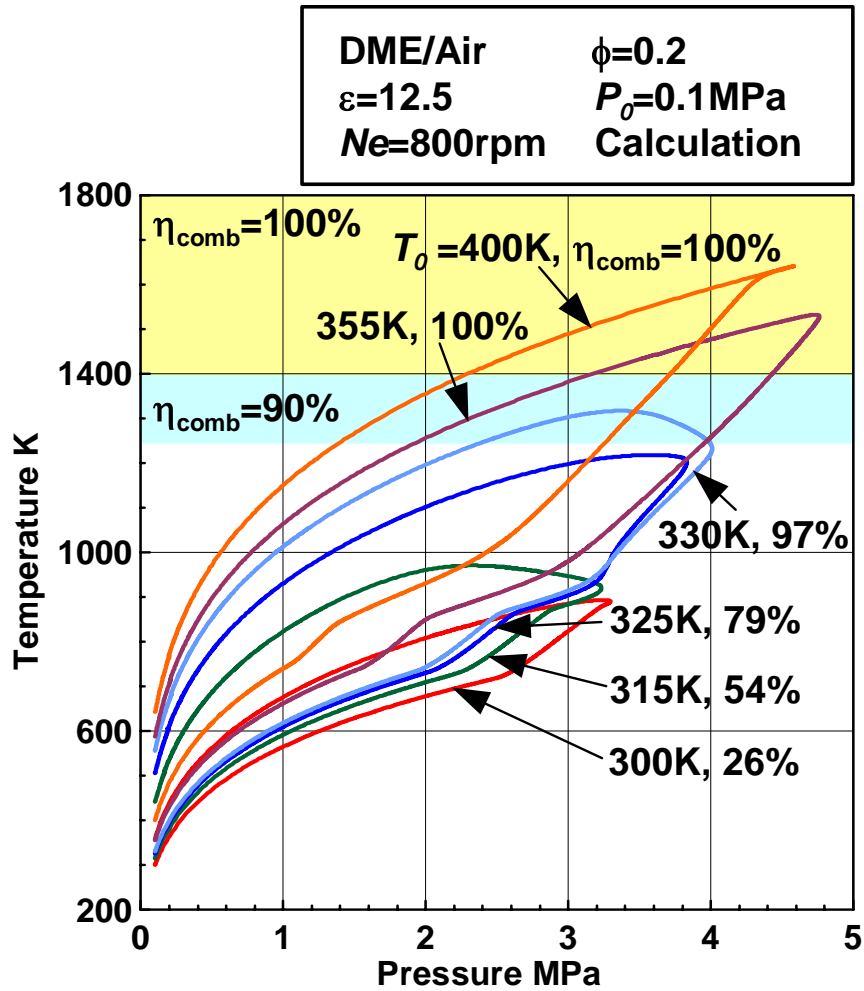


図 3-7 初期温度を変化させた場合の T-P 線図  
および最高到達温度と燃焼効率の関係 (計算)

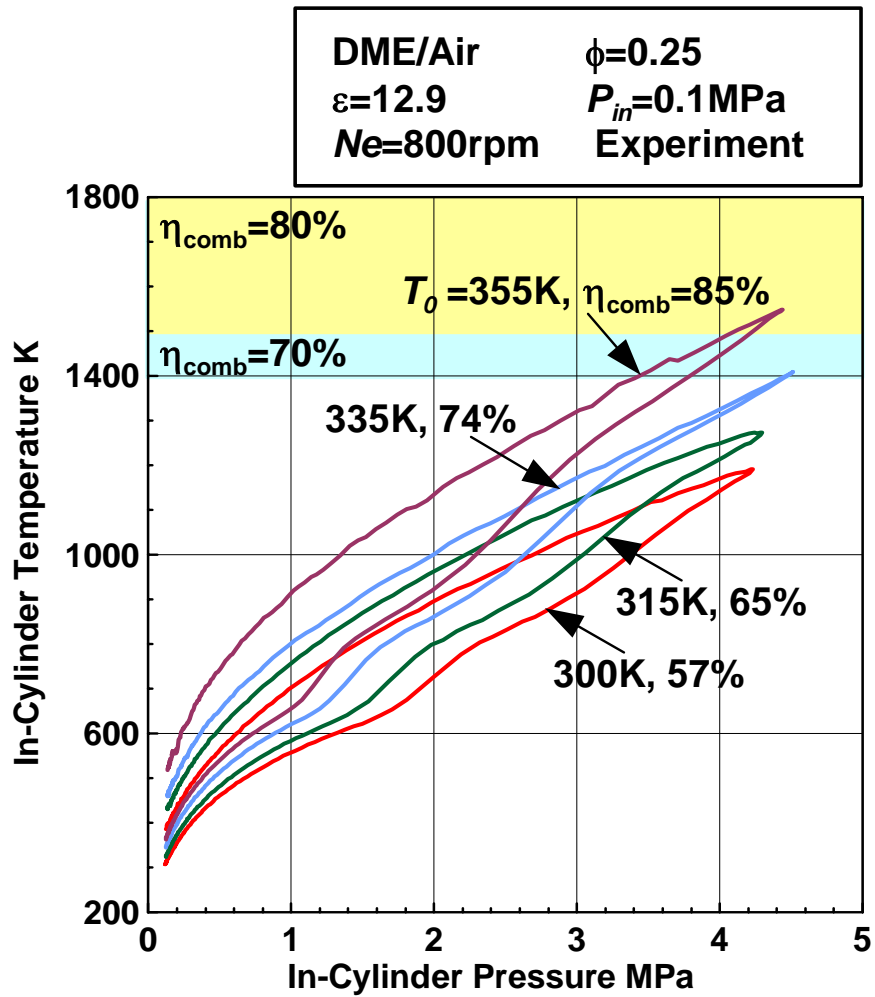


図 3-8 初期温度を変化させた場合の T-P 線図  
および最高到達温度と燃焼効率の関係 (実験)

### 3.3. 燃焼完結性の確保

3.2.で示したように、当量比変化の場合も吸気温度変化の場合も最高到達温度の上昇によって燃焼効率が上昇していくことを考えると、燃焼効率・排気特性と最高到達温度の間には相関があると考えられる。そこでサイクル中の最高到達温度と燃焼効率および各種排気の関係性を調査した。

素反応数値計算において、圧縮比、機関回転速度、初期圧力を固定し、当量比と初期温度を変化させた場合の全計算点について、サイクル中の最高到達温度と燃焼効率、THC、CO、CO<sub>2</sub>の排出量との関係を解析した。その結果を図3-9に示す。燃焼効率は最高到達温度の増加とともに上昇し、3.2.2.で示したのと同様に、1250Kで90%、また1400Kで100%に達している。排気の値についてみると、最高到達温度が1000Kに達せず燃焼効率が20%～30%付近のところでは、THC、COともに増加している。1250Kに達するとTHC、COともに急激に減少し、同時に燃焼が進行することでCO<sub>2</sub>の排出量が増加する。燃焼効率が100%に達する1400K付近では、どちらも0に近い値を示すことが分かる。

また燃焼実験において、同様に圧縮比、機関回転速度、吸気圧力を固定し、当量比と吸気温度を変化させた場合の全実験点についても、サイクル中の最高到達温度と燃焼効率、THC、CO、CO<sub>2</sub>の排出量との関係を解析した。その結果を図3-10に示す。実験結果においては最高到達温度の上昇に対し、燃焼効率は直線的に増加する。THCの排出量は約800Kで最大となるが、1200K以上では0にはならないものの、低い値で横ばいになる。COの排出量については1200Kで最大となり、1500K以上で0に近づくことが分かる。

まとめるとDMEの予混合圧縮自己着火燃焼において、燃焼完結性を確保するためには、サイクル中の最高到達温度が重要な指標となる。THC、COともに酸化させ燃焼効率を高めるには、1500K以上の最高到達温度が必要となり、この温度はCOが酸化するのに必要な温度である。

しかしこれらの結果は計算と実験の結果で、HC、CO等の排出濃度が実験と計算で値が異なっている。これは3.2.1でも述べたが、実機においては、ピストン壁面近傍やピストンクレビス部分では熱損失により、反応が凍結し酸化されない燃料分が存在し、それらが排出されずに残っていることが原因と考えられる。この部分が0次元の素反応数値計算の限界点である。



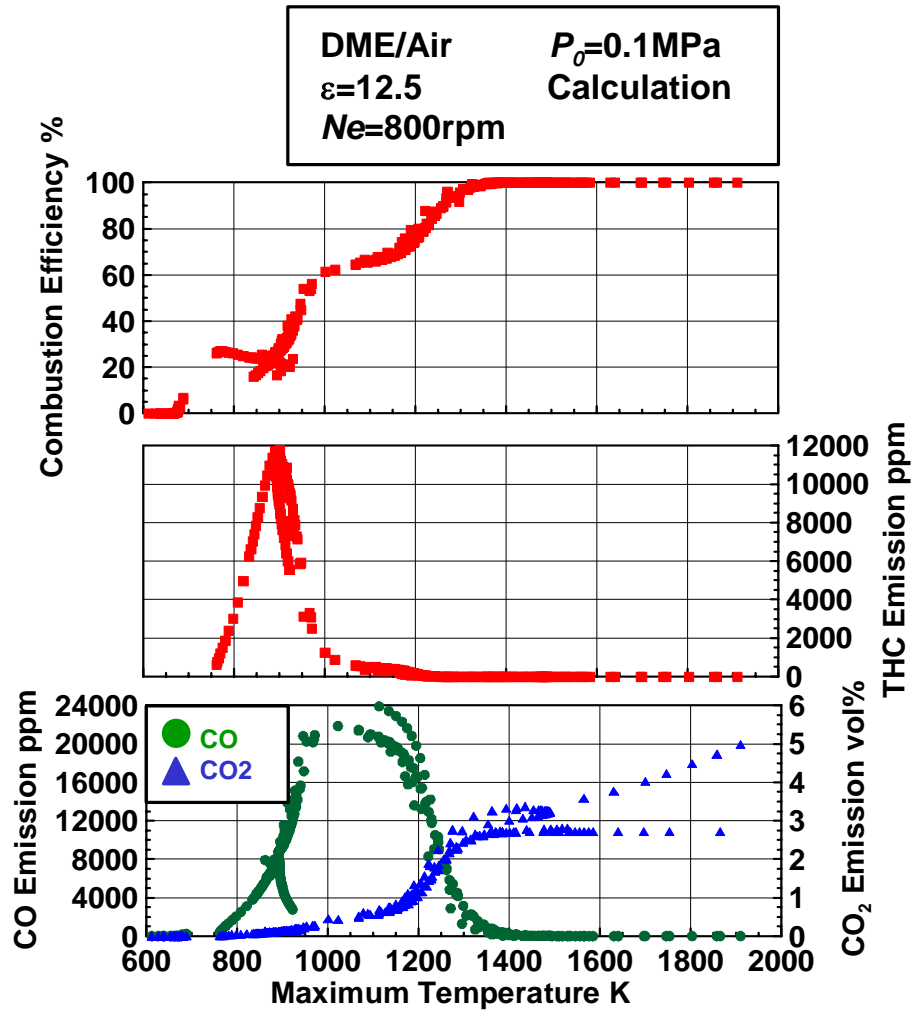


図 3-9 サイクル中の最高到達温度と燃焼効率，THC，CO，CO<sub>2</sub>排出量の関係（計算）

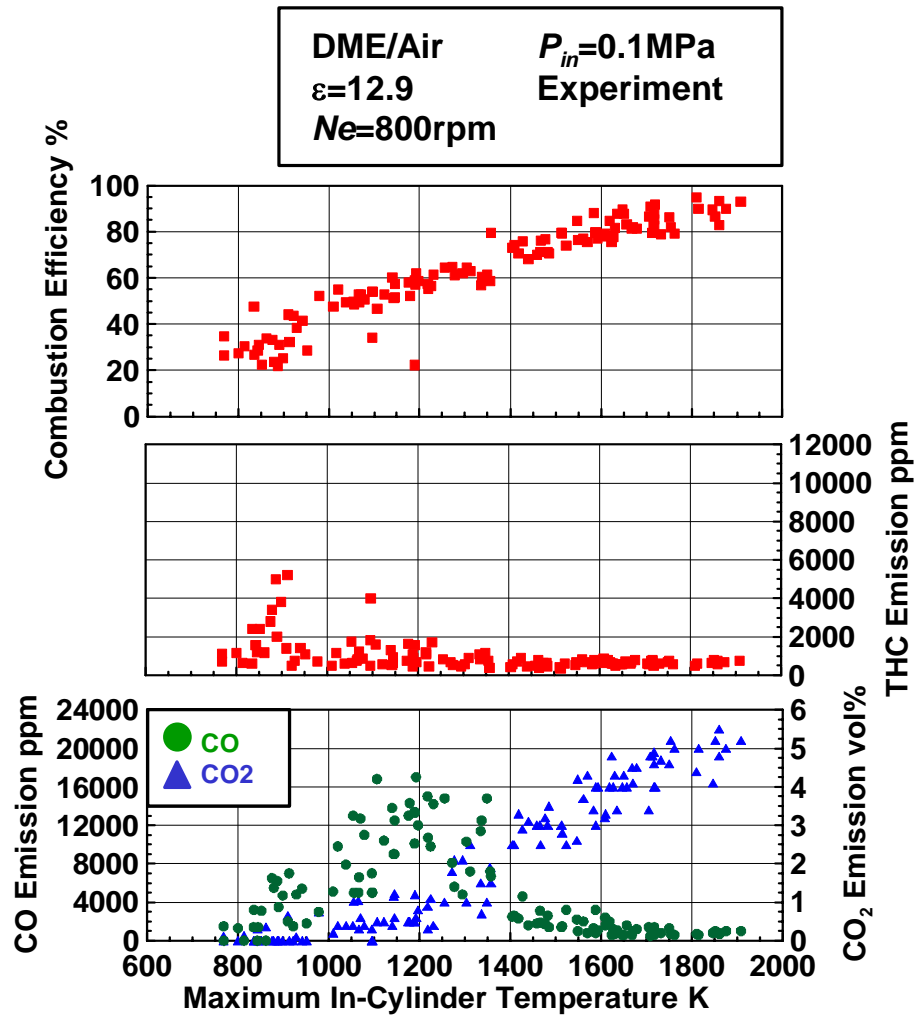


図 3-10 サイクル中の最高到達温度と燃焼効率，THC，CO，CO<sub>2</sub>排出量の関係（実験）

### 3.4. DME 予混合圧縮自己着火燃焼における酸化反応機構

前節で示したとおり，DME の予混合圧縮自己着火燃焼においては，燃焼完結性の確保のためにはサイクル中の最高到達温度が重要な指標となり，その確保には 1500K 以上の温度が必要であることが明らかになった。その結果を受け，本節ではサイクル中の温度と DME / 空気予混合気の酸化反応機構について，素反応数値計算から解析を行った。

3.2.1. で示した当量比変化の計算結果について，低温酸化反応のみ発現する条件 ( $\phi=0.2$ ，燃焼効率  $\eta_{comb}=26\%$ )，低温酸化反応および高温酸化反応の 1 段目まで発現する条件 ( $\phi=0.24$ ， $\eta_{comb}=74\%$ )，低温酸化反応および高温酸化反応の 2 段目まで発現する条件 ( $\phi=0.28$ ， $\eta_{comb}=100\%$ ) の 3 条件を解析した。それぞれの解析結果から得られた，主要化学種のモル分率履歴を図 3-11，図 3-12，図 3-13 にそれぞれ示す。図中には，圧力，温度，熱発生率履歴も併記した。

低温酸化反応のみ発現する  $\phi=0.2$  (図 3-11) においては，熱発生と同時期に燃料の DME ( $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ ) は消費され始め，CO， $\text{CO}_2$ ，HCHO， $\text{H}_2\text{O}_2$  は急激に増加する。特に低温酸化反応での DME の消費量と HCHO の関係は手崎ら[61]によって明らかにされており，元の DME の約 30% が消費された時点で低温酸化反応は停止し，縮退期間に入る。低温酸化反応で消費される DME の量と HCHO の量は 1 : 1 である。また OH の履歴は熱発生率の履歴と挙動が一致しており，ピーク値を取る時期が一致している。この条件においては最高到達温度が 900K 程度までしか上がらず，その後の反応が起こっていないために CO，HCHO， $\text{H}_2\text{O}_2$  は消費されず残る。

低温酸化反応および高温酸化反応の 1 段目まで発生する  $\phi=0.24$  (図 3-12) では，低温酸化反応時に増加した CO， $\text{CO}_2$ ，HCHO， $\text{H}_2\text{O}_2$  のうち HCHO， $\text{H}_2\text{O}_2$  は高温酸化反応の熱発生時に減少し始めている。しかし CO に関しては高温酸化反応の熱発生時にさらに増加し，その後も残り続けている。この条件では最高到達温度は 1200K に留まり燃焼効率が 74% である。このことと CO が残っていることから，低温酸化反応に加え高温酸化反応が起こっていても燃焼は完結していないということが分かる。

低温酸化反応および高温酸化反応の 2 段目まで発生する  $\phi=0.28$  (図 3-13) では，高温酸化反応の熱発生が 2 段に分かれて計 3 段の反応が生じている。 $\phi=0.24$  のときと同様に HCHO， $\text{H}_2\text{O}_2$  は高温酸化反応発現時に減少するが， $\phi=0.24$  のときに残っていた CO に関しても高温酸化反応の 2 段目の発現と同時期に急激に減少していく。このとき最高到達温度は 1600K に達し，燃焼が完結していることが分かる。

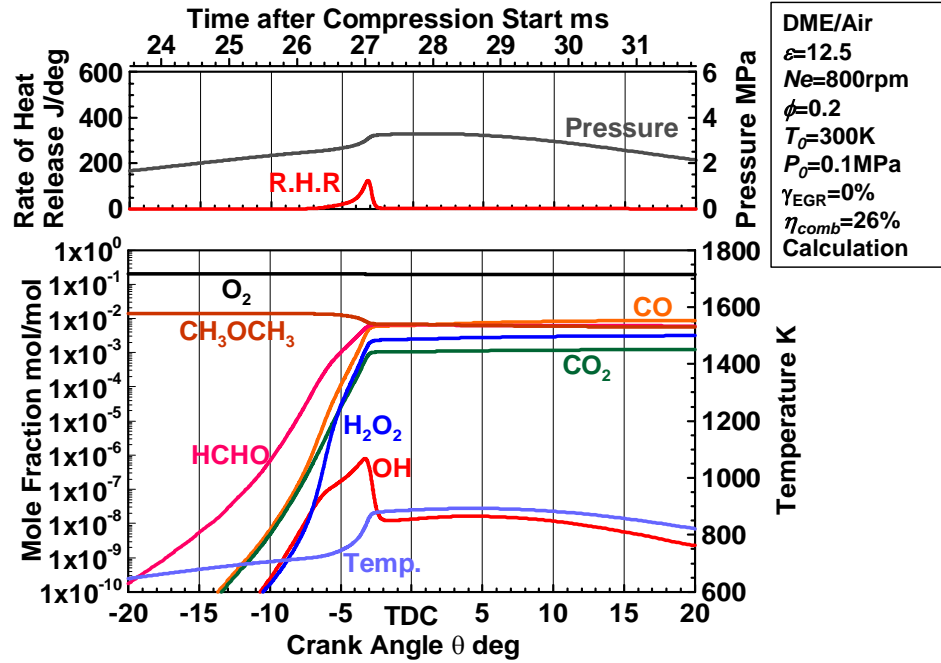


図 3-11 低温酸化反応のみ発現する条件における主要化学種のモル分率履歴（計算）

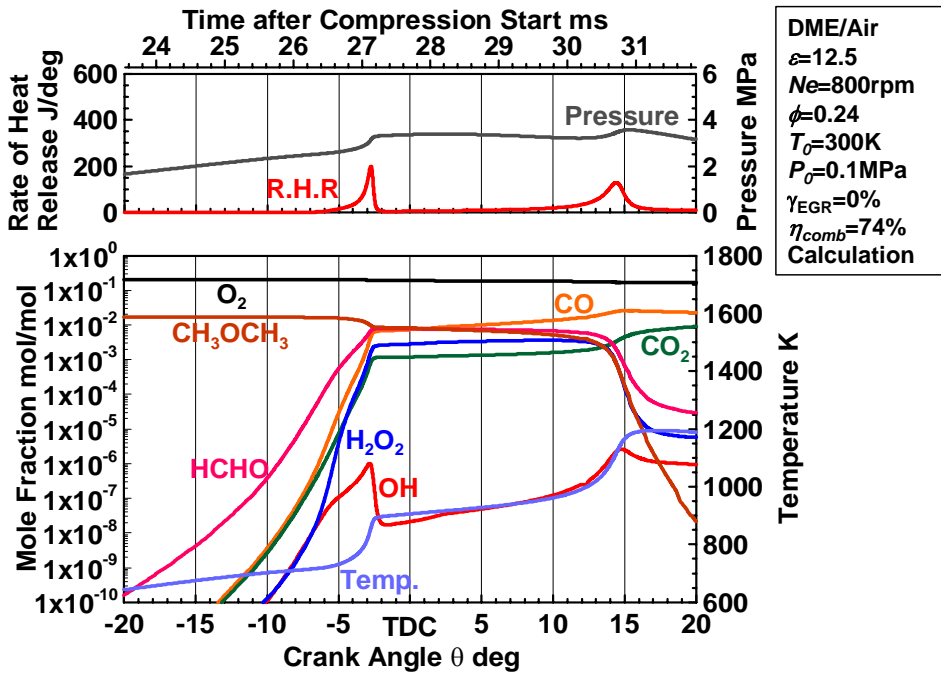


図 3-12 低温酸化反応および高温酸化反応1段目が発現する条件における主要化学種のモル分率履歴（計算）

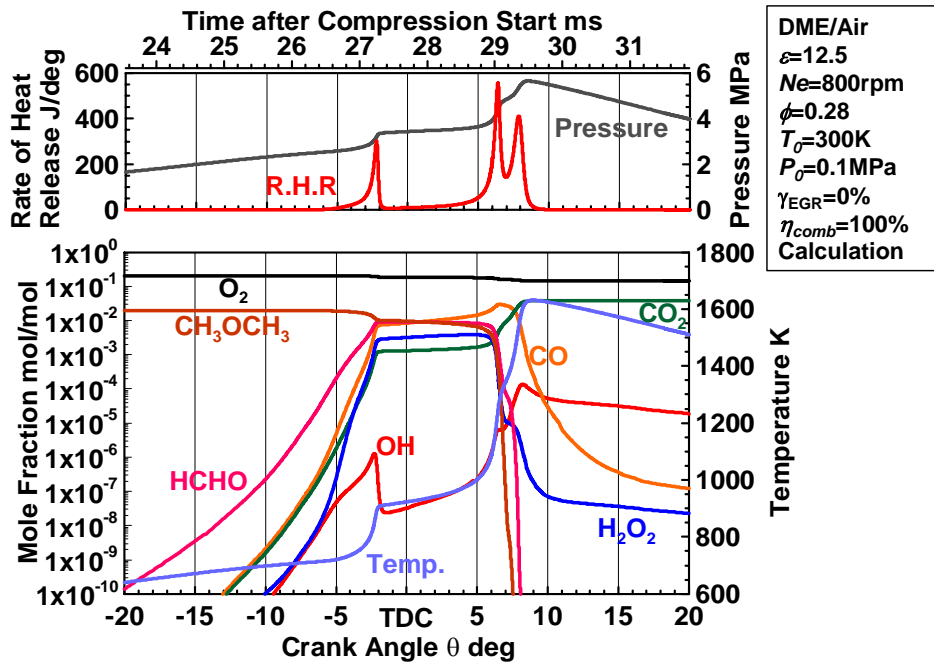


図 3-13 低温酸化反応および高温酸化反応 2 段目が発現する条件における主要化学種のモル分率履歴 (計算)

また低温酸化反応，高温酸化反応における各素反応での熱発生率を解析した結果を図3-14に示す。図中の番号はCurranらのモデル[23]における反応番号を示しており，図中右側の表の反応に対応している。この結果を見ると，高温酸化反応の1段階においては，46 ( $\text{HCO} + \text{O}_2 = \text{CO} + \text{HO}_2$ ) の反応から熱発生が最も大きい。高温酸化反応が発現しても燃焼の完結性が確保されないことは前にも述べたが，高温酸化反応の初期段階ではCOは酸化されず，むしろ大量に生成されることがそのことを裏付けている。またこの高温酸化反応の1段階においては51 ( $\text{H}_2\text{O}_2 (+\text{M}) = \text{OH} + \text{OH} (+\text{M})$ ) という反応も進行しており，COの酸化反応に使用されるOHラジカルが同時期に大量に生成されることを示している。

高温酸化反応の2段階まで反応が進行すると，26 ( $\text{H} + \text{O}_2 (+\text{M}) = \text{HO}_2 (+\text{M})$ ) の反応による $\text{HO}_2$ の生成に次いで，7 ( $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$ ) の反応による，COのOHラジカルによる酸化が大きい。つまり高温酸化反応の2段階まで進行する温度までガス温度が達すれば，COの酸化まで反応が進行することになり，燃焼が完結する。

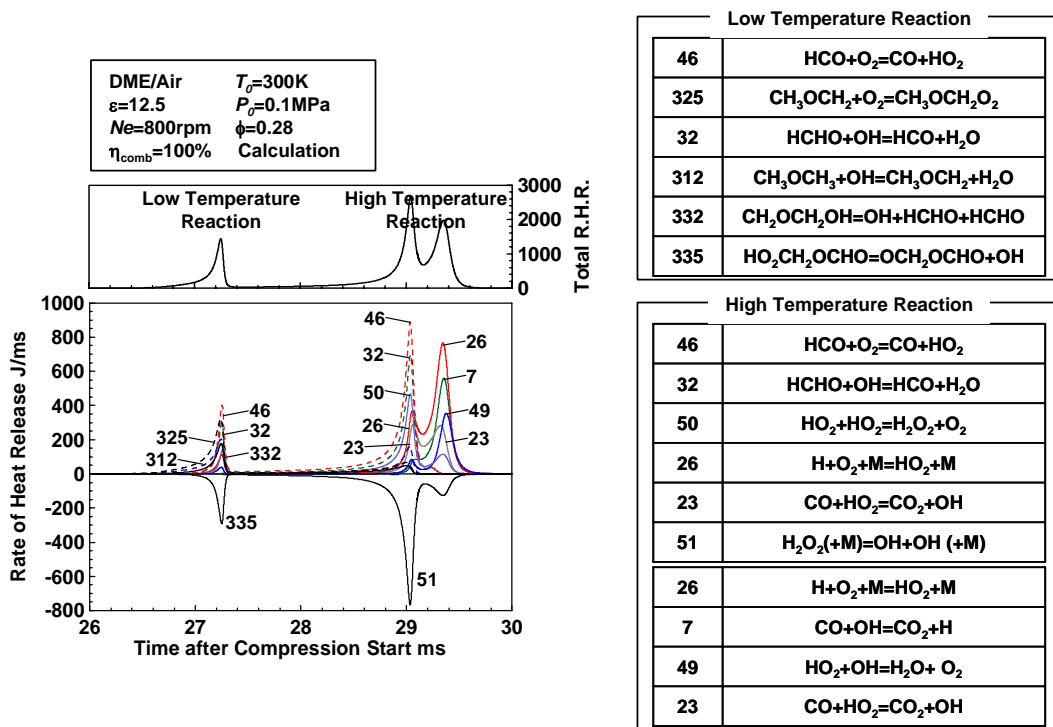


図 3-14 各素反応における熱発生率履歴 (計算)

### 3.5. DME 予混合圧縮自己着火燃焼の燃焼反応速度に関する考察

前節までの解析結果より，DME を単一燃料とする予混合圧縮自己着火燃焼では，燃焼完結性の確保には高い最高到達温度を経験させることが必須条件であることが明らかになった。しかしその温度が高すぎると，ノッキングを引き起こすことになり，実機では運転が不可能となってしまふ。そこで本節では，DME を単一燃料とした場合の投入燃料量と最高到達温度およびノッキングの関係について解析した。ノッキングの指標として，燃焼反応速度  $v_c$  を用いる。これは算出された熱発生率の最大値を投入燃料質量で割った値であり，Yamasaki ら[87]もノッキング発生の指標として用いている。

本章で行った素反応数値計算で算出された結果のうち，DME の当量比を変化させた場合の結果について，投入熱量と燃焼反応速度およびサイクル中の最高到達温度の関係を調べた。図 3-15 がそれである。投入熱量の増加に従い，最高到達温度も上昇するものの，燃焼反応速度も指数関数的に上昇してしまふ。これまでの結果から 90% 以上の燃焼効率を確保するには，サイクル中の最高到達温度が 1500K 以上になることが必要であることを述べたが，そのためには約 1050J の熱量投入が必要である。3.2.1. で示した実験結果から考えると，当量比 0.4 以上でノッキングが発生しエンジンの運転が不可能となった。その当量比 0.4 の熱量のラインを引くと，1600K 弱である。つまり燃焼完結性を確保するには最低限の投入燃料量が必要であるが，燃焼反応速度を抑えるためには投入熱量の値にも限界が生じてしまふ。

Yamasaki ら[87]によれば，*n*-Butane を単一成分燃料として用いた場合にも，燃焼反応速度は燃料の投入量に大きく依存しており，希釈化あるいは希薄化によって燃料投入量を減少させなければ，燃焼反応速度を低下させることができないことが明らかになっている。

これらのことを総合的に考えると，単一成分燃料を用いた場合には，高い最高到達温度と低い燃焼反応速度を同時に確保することは困難であり，狭い投入熱量範囲で予混合圧縮自己着火燃焼を成立させなければならないことが明らかになった。



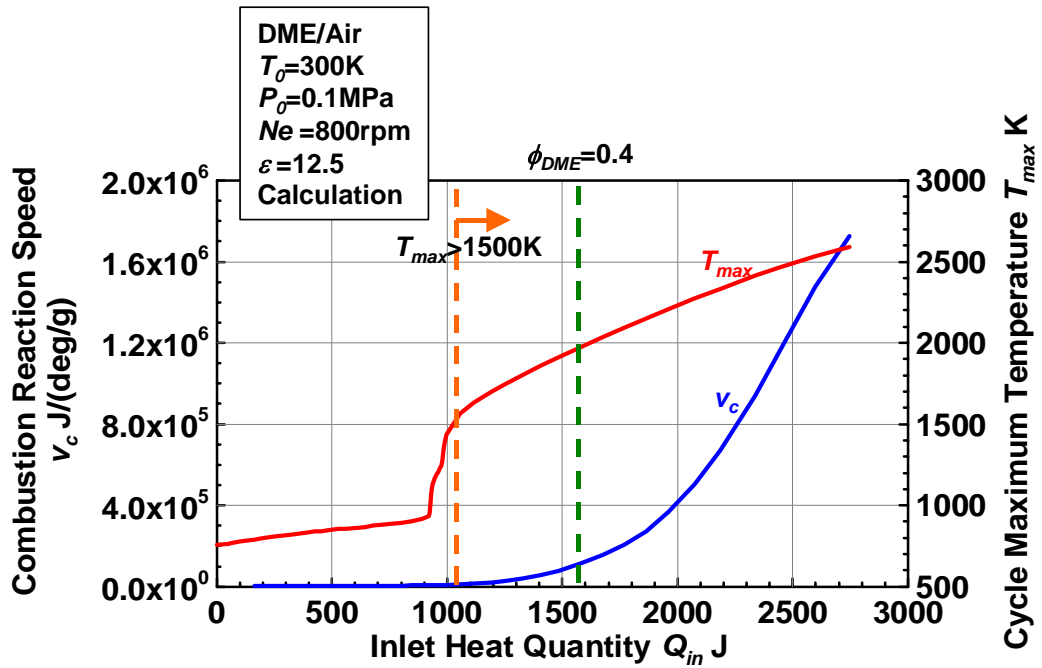


図 3-15 投入する燃料量と燃焼反応速度の関係 (計算)

### 3.6. 第3章のまとめ

本章では、DME を単一成分燃料として運転する予混合圧縮自己着火機関の燃焼特性について調査した。燃焼実験と0次元の素反応数値計算により、高燃焼効率を確保するための条件について調査し、未燃 HC、CO を低減するための酸化反応のメカニズムを解析した。また燃焼反応速度と燃焼完結性の関係を調べることで、単一成分燃料の予混合圧縮自己着火燃焼の限界を調査した。

素反応数値計算および燃焼実験の結果より、サイクル中の最高到達温度が 1500K 以上に到達すれば高い燃焼効率が確保され、未燃 HC、CO の排出量はほぼ0となり、燃焼が完結することが明らかになった。予混合圧縮自己着火燃焼においては高温酸化反応が発現することは、単純に燃焼反応が完結することを意味しない。高温酸化反応の初期段階までしか反応が進行しなかった場合には、CO は酸化されるどころか蓄積される。高温酸化反応の後半部分まで反応が進行することで CO の酸化が完了することになる。そのためには上記の 1500K 以上の温度が必須条件となる。

しかし単一成分燃料の予混合圧縮自己着火燃焼では、燃焼完結性を確保するためには最低限の投入熱量が必要である。投入熱量の増加に従い、最高到達温度も上昇するものの、燃焼反応速度も指数関数的に上昇してしまう。単一成分燃料を用いた場合、燃焼完結性を確保することと、燃焼反応速度を抑制することはトレードオフの関係にあり、同時に実現するのは困難である。つまり狭い投入熱量範囲で予混合圧縮自己着火燃焼を成立させなければ、高燃焼効率を確保しつつノッキングを回避した運転が実現できないことが明らかになった。

## 第4章 二成分混合燃料の予混合圧縮自己着火燃焼

第4章では着火温度の高い燃料として Methane, 着火温度の低い燃料として DME, *n*-Butane および水素を選択し, 二成分燃料の混合割合の変化が予混合気の酸化反応過程に及ぼす影響について0次元反応数値計算により調査した。また Methane よりもさらに着火温度の高い燃料として一酸化炭素を選択し, Methane と組み合わせたケースについても同様の調査を行った。投入熱量一定条件のもとで, Methane と DME, *n*-Butane, 水素あるいは一酸化炭素の混合割合を変化させ, 着火時期, 着火温度, 燃焼反応速度, 酸化反応過程のついて解析した。そして二成分混合燃料を予混合圧縮自己着火燃焼に適用するための指標として, 50%熱発生時期(総熱発生量の50%の発熱が起こるタイミング)というものを取り上げる。二成分混合燃料の50%熱発生時期と燃焼完結性, 燃焼反応の進行速度との関係を解析し, その結果から二成分混合燃料を用いる際に燃焼進行時期を調整するのに有効な燃料の組み合わせを示す。

#### 4.1. 二成分混合燃料の自己着火特性

本章では、二成分混合燃料を使用した予混合圧縮自己着火燃焼について、その酸化反応過程を調査するが、その前に二成分混合燃料の基本的な自己着火特性が、混合割合によってどのように変化するかを知る必要がある。そこで本節では、ショックチューブのような、瞬時に高温・高圧場が形成される条件を想定して計算を行い、二成分混合燃料の着火遅れが混合割合によってどう変化するかを算出した。

着火遅れを算出するにあたり、SENKIN[86]のコード上で定容条件を設定した。本節で計算の対象としたのは、Methane/DME、Methane/*n*-Butane、Methane/水素の、3つの燃料の組み合わせである。計算条件については、初期圧力  $P_0$ 、総当量比  $\phi_{total}$  を燃料の組み合わせごとに任意に設定し、二成分混合燃料の混合割合と初期温度  $T_0$  をパラメータとした。なお設定する混合割合は、例えば Methane と DME を混合する場合、Methane、DME の混合割合をそれぞれ  $X_{CH_4}$ 、 $X_{DME}$  とし、以下の式で表す。

$$X_{CH_4} = \frac{n_{CH_4}}{n_{CH_4} + n_{DME}} \quad (\text{式 4-1})$$

$$X_{DME} = \frac{n_{DME}}{n_{CH_4} + n_{DME}} \quad (\text{式 4-2})$$

ここで、

$X_{CH_4}$  : Methane の混合割合 [mol/mol]、 $X_{DME}$  : DME の混合割合 [mol/mol]、 $n_{CH_4}$  : Methane のモル数 [mol]、 $n_{DME}$  : DME のモル数 [mol]

なお Methane と *n*-Butane、Methane と水素を混合する場合、混合割合  $X_{CH_4}$  と  $X_{n-C_4H_{10}}$ 、 $X_{CH_4}$  と  $X_{H_2}$  も上記 2 式と同様に、Methane のモル数  $n_{CH_4}$ 、*n*-Butane のモル数  $n_{n-C_4H_{10}}$ 、水素のモル数  $n_{H_2}$  の関係式で表される。

図 4-1 に Methane、DME 混合時の着火遅れのアレニウスプロットを示す。また図 4-2 に Methane、*n*-Butane 混合時、図 4-3 に Methane、水素混合時の着火遅れを示す。横軸は設定した初期温度  $T_0$  の逆数、縦軸は着火遅れ  $\tau$  を対数で示している。本節では着火遅れを計算するに当たり、Methane と DME の素反応スキームとして Curran らのスキーム[23] (化学種数: 79, 素反応数: 336)、Methane と *n*-Butane の素反応スキームとして Kojima らのスキーム[22] (化学種数: 141, 素反応数: 470)、Methane と水素の素反応スキームとして GRI-Mech 3.0 スキーム[24] (化学種数: 53, 素反応数: 325) を選択した。

初期温度の変化に対する着火遅れの変化を見ると、Methane 単体、水素単体では温度が上昇しても着火遅れは直線的に値が小さくなるが、DME、*n*-Butane 単体では着火遅れが温度の上昇に対して短くならない NTC 領域が発現している。また 3 つの図において、Methane 単体時の着火遅れの温度に対する傾向が異なっている。これは図 4-3 の計算で使用した

GRI-Mech 3.0 スキーム[24]は, Methane のスキームとして開発されたため, 低温酸化反応の発現しない Methane の特性をよく表している。図 4-1, 図 4-2 は, それぞれ DME のスキームである Curran らのモデル[22], *n*-Butane のスキームである Kojima らのモデル[23]を使用した結果であり, そのスキーム内に含まれる Methane を使用しているため, ラインの差が生じている。DME, *n*-Butane, 水素の混合割合の増加に伴い着火遅れは短くなり, その変化は Methane に対する, DME, *n*-Butane, 水素の混合割合が小さいほど著しい。

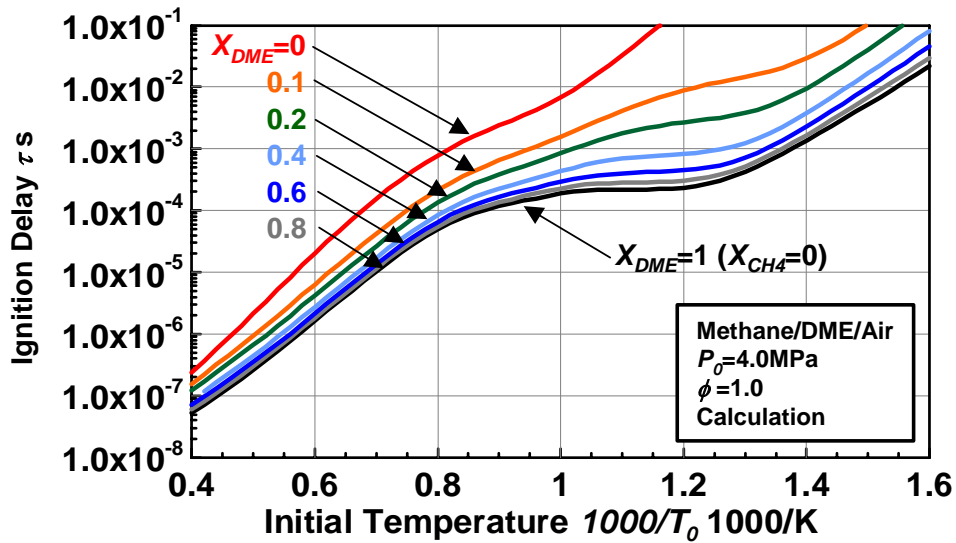


図 4-1 Methane , DME 混合時の着火遅れのアレニウスプロット

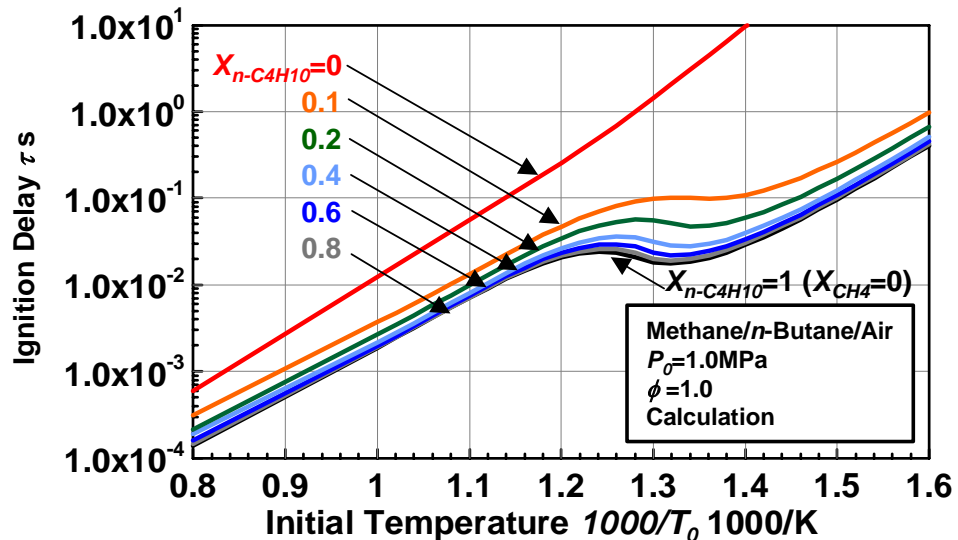


図 4-2 Methane , *n*-Butane 混合時の着火遅れのアレニウスプロット

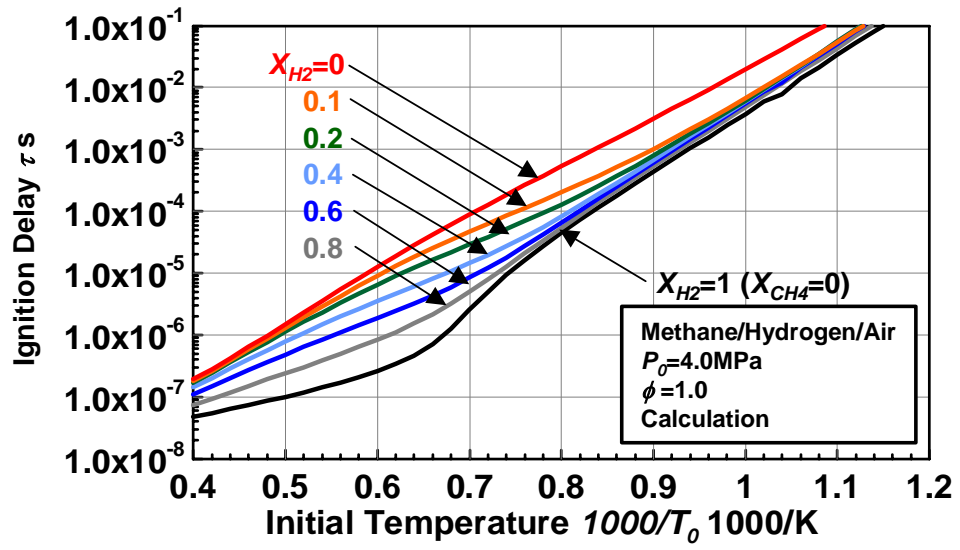


図 4-3 Methane , 水素混合時の着火遅れのアレニウスプロット

## 4.2. 計算条件

本章で行う素反応数値計算の方法および想定したエンジンの諸元は 2.2.6. で示した通りである。計算初期条件については、初期圧力  $P_0$  は 0.1MPa に設定し、初期温度  $T_0$  は Methane と DME、Methane と *n*-Butane の混合時には 300K に設定した。なお Methane と水素の混合時には、両燃料とも自己着火温度が高く、 $T_0=300\text{K}$  では自己着火に至らなかったため、 $T_0=375\text{K}$  に設定した。同様に Methane と一酸化炭素の混合時は  $T_0=500\text{K}$  に設定した。また予混合圧縮自己着火燃焼においては、第3章の実験結果で示したように、当量比の増加(投入熱量の増加)により、着火時期が早期化していく。そこで本章の計算では、投入熱量の大小の影響を無視できるように、投入熱量を一定条件として2種の燃料の混合割合を変化させた。混合割合の変化時には 図 4-4 に示すように、Methane の部分当量比  $\phi_{CH_4}$  に対して、DME、*n*-Butane、水素、一酸化炭素の部分当量比  $\phi_{DME}$ 、 $\phi_{n-C_4H_{10}}$ 、 $\phi_{H_2}$ 、 $\phi_{CO}$  をそれぞれ投入熱量一定の直線上で変化させた。

本章で取り扱う燃料種の組み合わせは、前節の Methane と DME、Methane と *n*-Butane および Methane と水素、また Methane と一酸化炭素である。Methane と DME の素反応スキームとして Curran らのスキーム[23](化学種数:79,素反応数:336)、Methane と *n*-Butane の素反応スキームとして Kojima らのスキーム[22](化学種数:141,素反応数:470)、Methane と水素、および Methane と一酸化炭素の素反応スキームとして GRI-Mech 3.0 スキーム[24](化学種数:53,素反応数:325)を選択した。

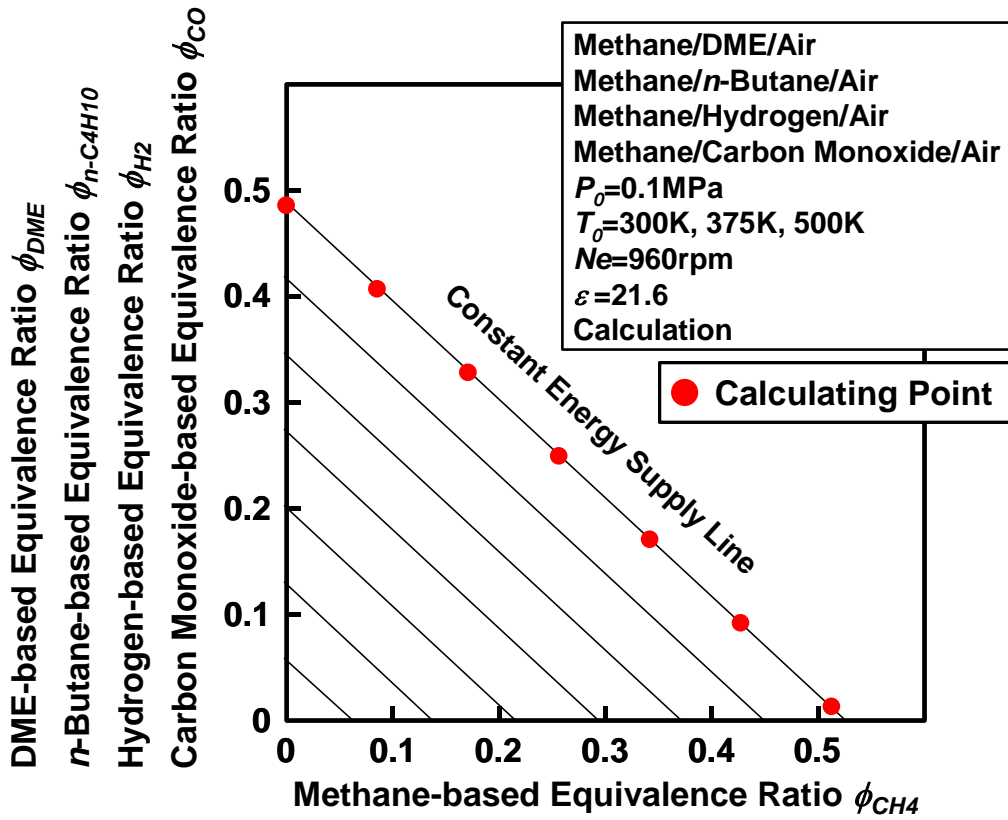


図4.4 本章の計算条件および計算点



### 4.3. Methane / DME の混合割合が圧縮自己着火燃焼過程に及ぼす影響

#### 4.3.1. Methane / DME の混合割合が化学種のモル分率履歴に及ぼす影響

図4-5に投入熱量  $Q_{in}=1471\pm 2\text{J}$  一定、初期温度  $T_0=300\text{K}$ 、初期圧力  $P_0=0.1\text{MPa}$ 、圧縮比  $\varepsilon=21.6$ 、機関回転速度  $N_e=960\text{rpm}$  の条件において、Methane と DME の混合割合を変化させた場合の、温度履歴、熱発生率履歴、 $\text{O}_2$ 、 $\text{CH}_4$ 、 $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ 、 $\text{HCHO}$ 、 $\text{H}_2\text{O}_2$ 、 $\text{CO}$  および  $\text{OH}$  のモル分率履歴を示す。熱発生率履歴については、拡大図も示した。図に示した条件は、Methane 部分当量比、DME 部分当量比を、それぞれ  $[\phi_{\text{CH}_4}=0, \phi_{\text{DME}}=0.38]$ 、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.1, \phi_{\text{DME}}=0.291]$ 、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.25, \phi_{\text{DME}}=0.158]$ 、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.3, \phi_{\text{DME}}=0.113]$  と変化させた場合の履歴である。これらの4条件の混合割合は、それぞれ  $X_{\text{DME}}=1, 0.66, 0.30, 0.20$  である。

DME 単体の条件では、約-15deg で低温酸化反応による発熱、約-12deg で高温酸化反応による発熱が見られる。Methane 割合の増加に伴い、低温酸化反応、高温酸化反応の発現時期は遅くなり、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.3, \phi_{\text{DME}}=0.113]$  の条件では低温酸化反応の発現は約-10deg、高温酸化反応の発現は5deg まで遅延化する。低温酸化反応の反応期間は変化せず、いずれの条件においても約3deg である。しかし高温酸化反応の反応期間は、Methane 割合の増加に伴い長期化し、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.3, \phi_{\text{DME}}=0.113]$  の条件では10deg となった。低温酸化反応による熱発生率のピーク値は、Methane 割合の増加に伴い減少し、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0, \phi_{\text{DME}}=0.38]$  の条件の600J/deg に対し、40J/deg まで小さくなる。一方、高温酸化反応による熱発生は、反応期間が長くなったことにより、DME の圧縮自己着火過程で見られる2段の山が特徴的に現れる。ピーク値は、その時期が圧縮行程となる  $[\phi_{\text{CH}_4}=0, \phi_{\text{DME}}=0.38]$ 、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.1, \phi_{\text{DME}}=0.291]$ 、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.25, \phi_{\text{DME}}=0.158]$  の3条件ではMethane 割合の増加に伴い上昇しているが  $[\phi_{\text{CH}_4}=0.3, \phi_{\text{DME}}=0.113]$  ではピーク時期が膨張行程まで遅延化することで大幅に減少することが分かる。

DME 単体を燃料として投入した場合、低温酸化反応中に大量の  $\text{HCHO}$ 、 $\text{H}_2\text{O}_2$  が蓄積され、DME ( $\text{CH}_3\text{OCH}_3$ ) の消費が一端停止する。 $\text{HCHO}$ 、 $\text{H}_2\text{O}_2$ 、また  $\text{CO}$  は1段目高温酸化反応の時期まで増加し続ける。2段目高温酸化反応の時期には、 $\text{HCHO}$ 、 $\text{H}_2\text{O}_2$  はすでに消費されるものの、 $\text{CO}$  は高温酸化反応が完全に終了するときに酸化される。この中間生成物の挙動は、Methane 割合が増加しても同じである。しかしMethane とDME 両方を投入した場合、低温酸化反応中に微量ながらMethane ( $\text{CH}_4$ ) が消費されていることが分かる(例えば  $[\phi_{\text{CH}_4}=0.3, \phi_{\text{DME}}=0.113]$  の履歴で、-10deg ~ TDC の期間)。本来、高温酸化反応でしか酸化しないMethane が、DME を混合することで低温酸化反応中でも酸化されることを示している。Methane の酸化開始は  $\text{OH}$  ラジカルによる  $\text{H}$  原子の引き抜きがメインであるが[24]、Methane が存在する場合にも低温酸化反応中に生成される  $\text{OH}$  がMethane の酸化を促進していることになる。つまりDME の酸化反応過程において、 $\text{HCHO}$  からの  $\text{OH}$  ラジカル、1st  $\text{O}_2$  addition、2nd  $\text{O}_2$  addition からの  $\text{OH}$  ラジカルが、Methane の酸化に使われるということである。また1段目高温酸化反応においてMethane の酸化がさらに進行しているが、これは低温酸化反応中に蓄積された  $\text{H}_2\text{O}_2$  が1000K 付近の温度域に達したことで2つの  $\text{OH}$

ラジカルに分解され、その OH ラジカルが酸化促進の役割を果たしていることを示す。

低温酸化反応、1 段階目高温酸化反応において生成された OH ラジカルは、本来の Methane の酸化反応開始温度域よりも低い温度域、また早い時期で Methane の酸化を促進する。結果として、高温酸化反応での熱発生（本来の Methane の熱発生）が低温側へ引っ張られることとなり、高温酸化反応による熱発生を緩慢にする。

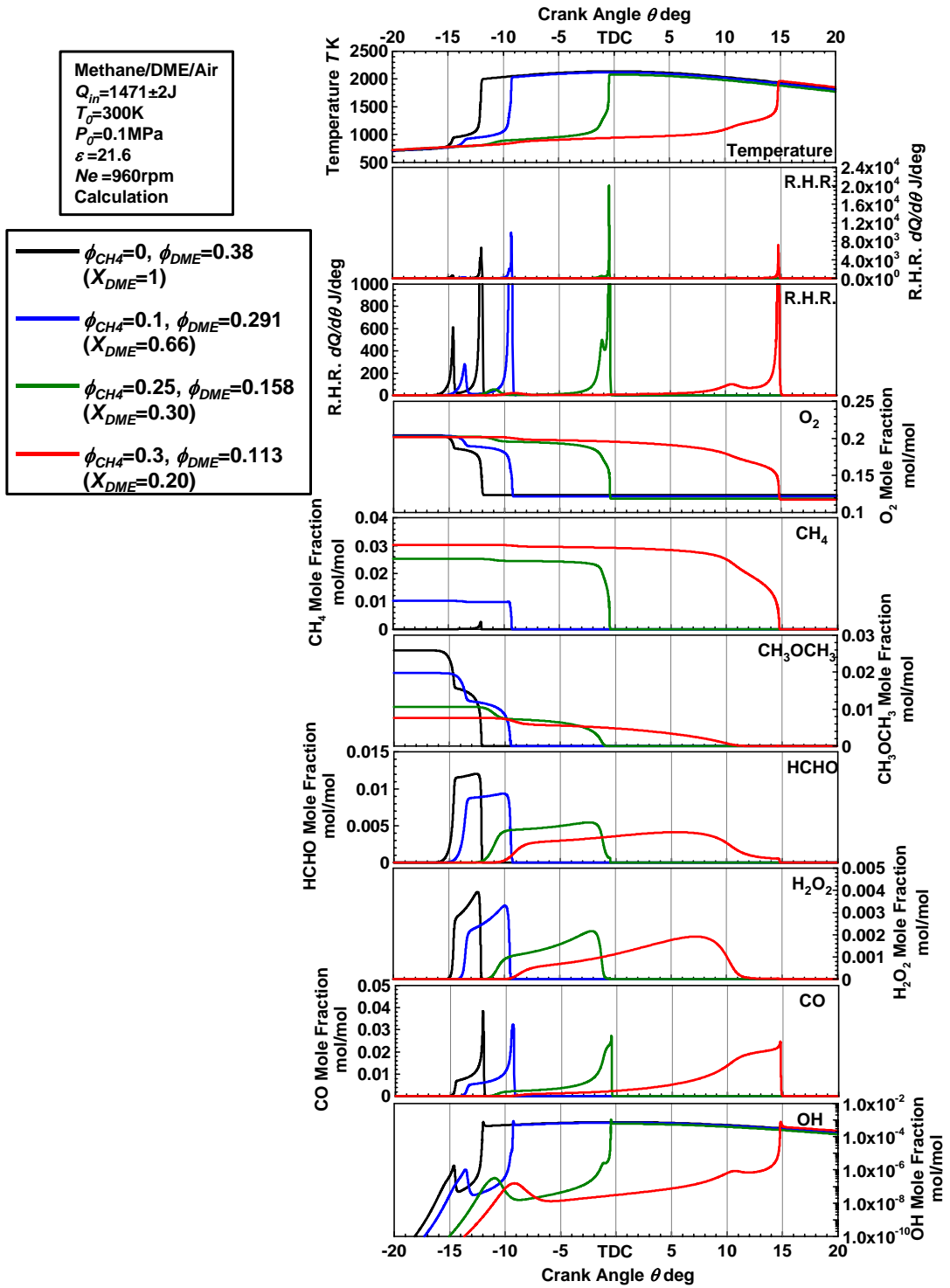


図 4-5 Methane, DME の混合割合変化に対する温度, 熱発生率  
 および主要化学種のモル分率履歴

## 4.3.2. Methane / DME の酸化反応機構

次に図 4-5 で示した計算結果について、主要素反応がどの温度域で進行したのかを調べるために、温度と各素反応の反応速度の関係を調査した。図 4-6 がそれである。図中のグラフは横軸が温度、縦軸が反応速度を示している。4 本のラインは、図 4-5 で示した 4 本のラインと同一条件である。またそれぞれのグラフに表記した反応の番号は計算に使用した Curran の反応スキームの番号に対応する。選択した素反応は、Methane と DME の酸化反応に関係のあるものである。

反応温度域は大きく分けて 3 つある。すなわち 750K ~ 950K, 1000K ~ 1500K, 1500K 以上の 3 つである。750K ~ 950K の温度域は DME の低温酸化反応の反応領域であり、DME の低温酸化反応に関連する反応が起こっていることが分かる（反応 312, 325, 331, 332, 336）。これらの反応の反応速度は DME の混合割合の増加に伴い上昇する。低温酸化反応の反応性が高い DME の場合、低温酸化反応で生成される OH ラジカルが比較的多いため、Methane と混合した場合に、低温域から Methane の酸化反応を促進することが考えられる。実際に反応 3 の拡大図を見てみると、微量ながら Methane の酸化が 750K ~ 950K の温度域でも進んでいることが分かる。

1000K ~ 1500K の温度域では上記の DME の低温酸化反応が引き続き進行しており（反応 312, 325, 331, 332, 336）、DME の混合割合が大きいほど反応速度が高い。さらにこの温度域では HCO の酸化による HO<sub>2</sub> の生成（反応 46）、2 つの HO<sub>2</sub> の結合による H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> の生成（反応 50）、H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> が乖離し OH ラジカル 2 つを生成する反応（反応 51）が進む。この連鎖反応が成り立つことで、Methane の酸化が促進されることになる。反応 3 のグラフを見て分かるように、Methane の OH ラジカルによる酸化の反応速度のピークは 1500K 以上の温度域にあるものの、1000K ~ 1500K の温度域でも反応が進行している。

1500K 以上の温度域では、上述した連鎖反応は引き続き起こる。大量に OH ラジカルが生成されることになり、Methane の酸化のみならず CO の酸化まで進行し、燃焼が完結する。この温度域では、Methane, DME の混合割合は反応速度の値と関係は見られず、図 4-5 で示した熱発生率のピーク値が高い順に反応速度が高くなっている。

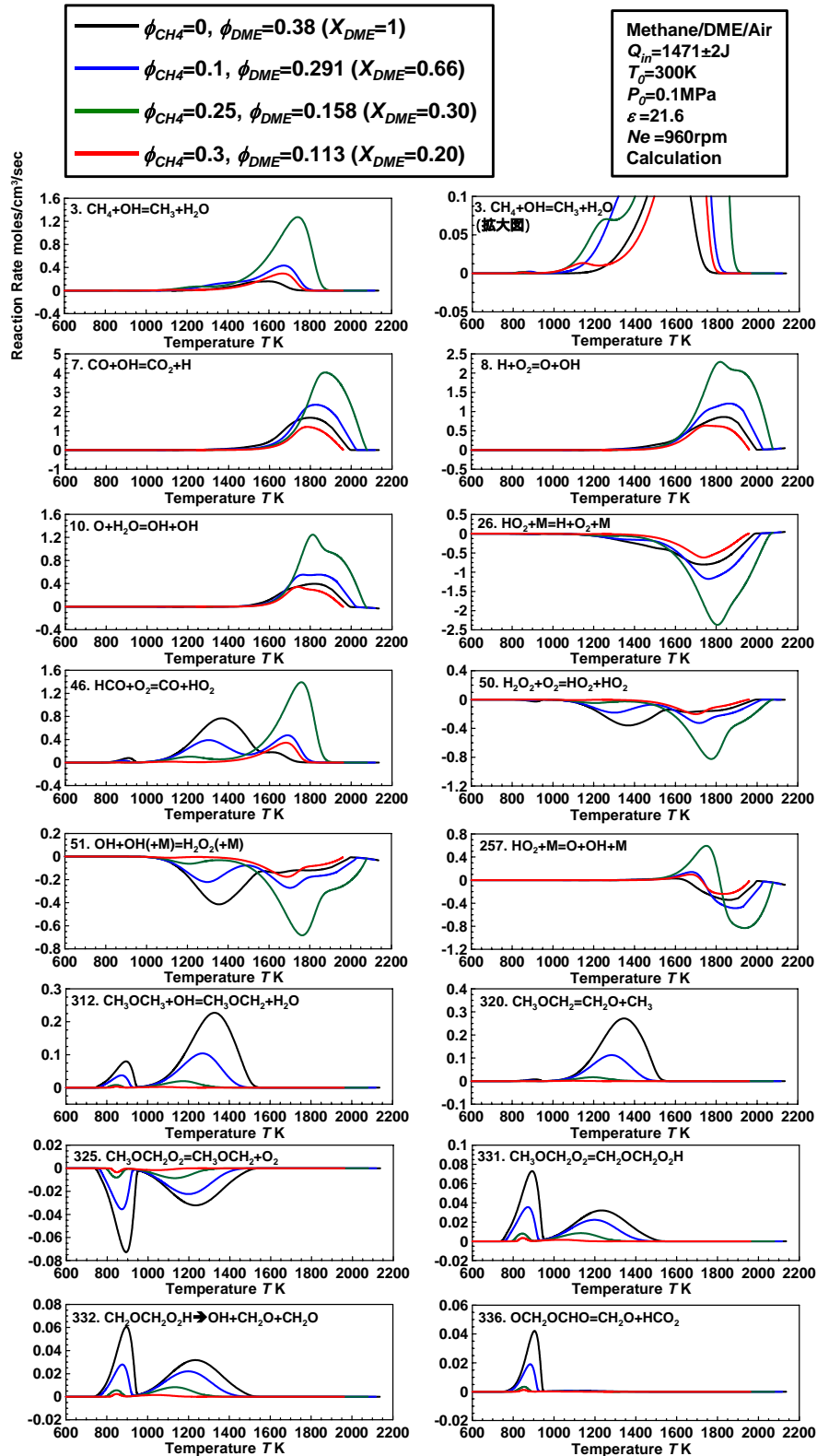


図 4-6 Methane/DME 混合時の温度と主要素反応の反応速度との関係

本項では、これまでの結果のまとめとして、Methane/DME の酸化反応機構について考察する。図 4-7 に Methane/DME の酸化反応機構を示す。Methane は分子間結合力が強く、その酸化反応は 1100K を超える高温に達しなければ、着火に至らない。一方 DME は約 750K の低い温度でも H 原子が簡単に引き取られ低温酸化反応が開始する。それから 1000K までは低温酸化反応の経路をたどり 1st O<sub>2</sub> Addition, 2nd O<sub>2</sub> Addition を経て、2 つの OH ラジカルを放出し HCHO を形成する。1st O<sub>2</sub> Addition 後に HCHO を直接形成する過程も存在し、そこでも 1 つの OH ラジカルを形成する。1000K 以上の高温に至ると、HCHO から作られた H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> は OH ラジカルに分解していく。

H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> から OH ラジカルが生成される過程は高温酸化反応に含まれるため、この OH ラジカルは Methane の酸化反応を大きく促進する。それだけではなく、これまでの結果から考えると、低温酸化反応過程で生成される OH ラジカルも少なからず Methane の酸化反応に寄与している。つまりこの機構は Methane の側から見れば、OH ラジカルが供給されることで着火が促進されることになるが、DME の側から見れば、自身の酸化に必要な OH ラジカルが Methane に奪われることになるため、着火が抑制されていることを意味する。

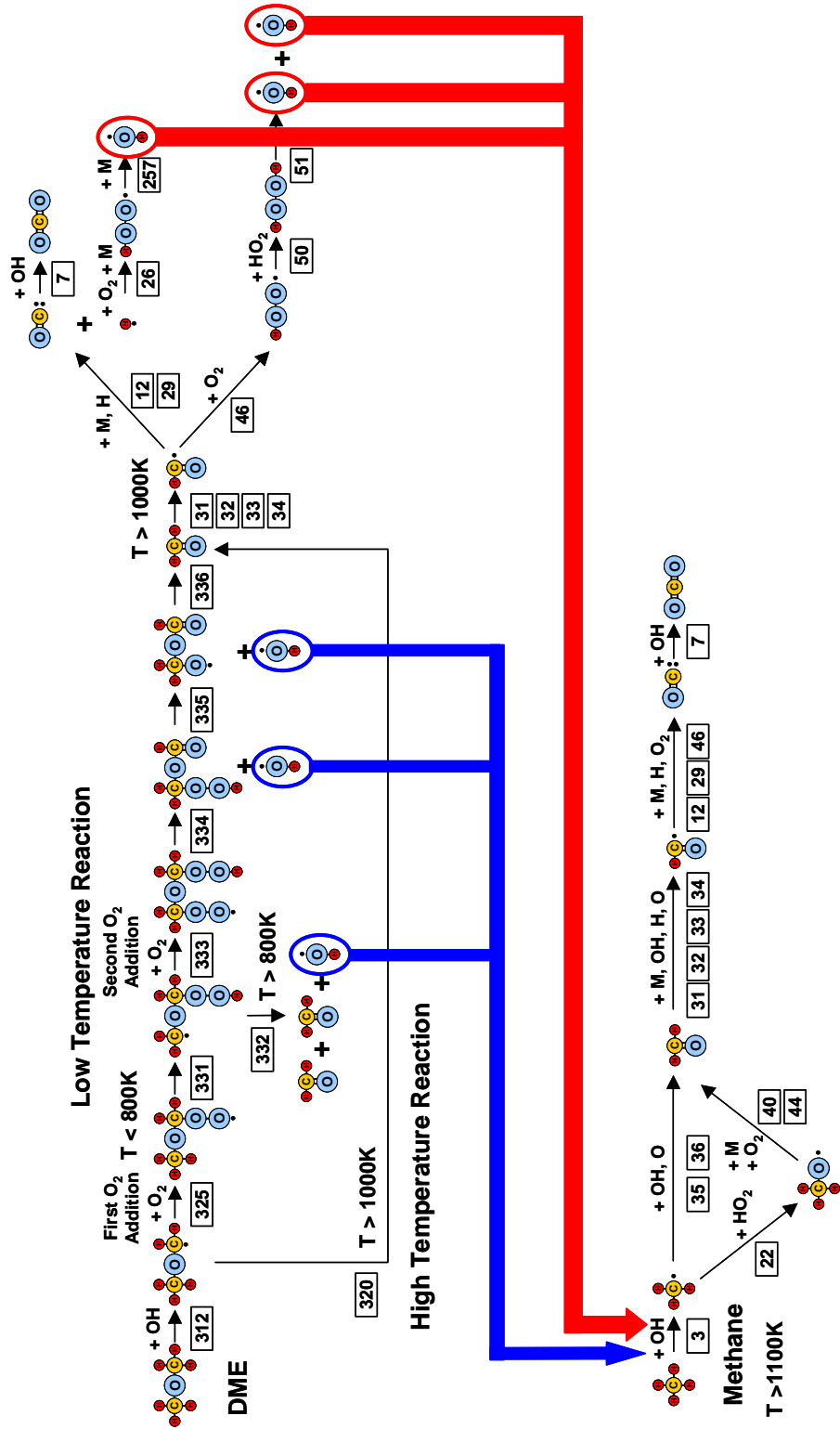


図4-7 Methane/DMEの酸化反応機構

#### 4.4. Methane / *n*-Butane の混合割合が圧縮自己着火燃焼過程に及ぼす影響

##### 4.4.1. Methane / *n*-Butane の混合割合が化学種のモル分率履歴に及ぼす影響

図4-8に投入熱量  $Q_{in}=1537\pm 1\text{J}$  一定、初期温度  $T_0=300\text{K}$ 、初期圧力  $P_0=0.1\text{MPa}$ 、圧縮比  $\varepsilon=21.6$ 、機関回転速度  $N_e=960\text{rpm}$  の条件において、Methane と *n*-Butane の混合割合を変化させた場合の、温度履歴、熱発生率履歴、 $\text{O}_2$ 、 $\text{CH}_4$ 、*n*- $\text{C}_4\text{H}_{10}$ 、 $\text{HCHO}$ 、 $\text{H}_2\text{O}_2$ 、 $\text{CO}$  および  $\text{OH}$  のモル分率履歴を示す。熱発生率履歴については、拡大図も示した。図に示した条件は、Methane 部分当量比、*n*-Butane 部分当量比を、それぞれ  $[\phi_{\text{CH}_4}=0, \phi_{n\text{-C}_4\text{H}_{10}}=0.425]$ 、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.05, \phi_{n\text{-C}_4\text{H}_{10}}=0.378]$ 、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.1, \phi_{n\text{-C}_4\text{H}_{10}}=0.33]$ 、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.2, \phi_{n\text{-C}_4\text{H}_{10}}=0.235]$  と変化させた場合の履歴である。これらの4条件の混合割合は、それぞれ  $X_{n\text{-C}_4\text{H}_{10}}=1, 0.70, 0.50, 0.27$  である。

*n*-Butane は4.1.でも示した通り、NTC領域が存在し、低温酸化反応を持つ燃料であるが、本節で行った計算結果においては、いずれの条件においても低温酸化反応が発現しなかった。*n*-Butane 単体の条件では、膨張行程において高温酸化反応による発熱が見られる。Methane 割合の増加に伴い、高温酸化反応の発現時期は遅くなり、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.1, \phi_{n\text{-C}_4\text{H}_{10}}=0.33]$  の条件では高温酸化反応の発現は約10degまで遅延化したが、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.2, \phi_{n\text{-C}_4\text{H}_{10}}=0.235]$  の条件では失火した。高温酸化反応の反応期間は、Methane 割合の増加に伴い長期化する。高温酸化反応による熱発生は、反応期間が長くなったことにより、Methane/DMEの場合と同様に、2段の山が特徴的に現れる。そのピーク値は、Methane の混合割合が増加し膨張行程で遅延化することにより、減少していく。

*n*-Butane 単体を燃料として投入した場合、膨張行程に入ってから *n*-Butane (*n*- $\text{C}_4\text{H}_{10}$ ) の消費が始まり、同時期に  $\text{HCHO}$ 、 $\text{H}_2\text{O}_2$  の生成されていく。高温酸化反応が終了する前に *n*-Butane は完全に酸化される。また  $\text{CO}$  は高温酸化反応の前半部分で急激にその量が増え、高温酸化反応が完全に終了する時期に酸化される。Methane と *n*-Butane 両方を投入した場合、1段目高温酸化反応において、*n*-Butane、 $\text{H}_2\text{O}_2$  の量はほぼ0となる。しかし Methane、 $\text{HCHO}$ 、 $\text{CO}$  は酸化のタイミングが異なっており、2段目高温酸化反応が終了する時期まで酸化が完了しない。

DME と比べて低温酸化反応の反応性が低い *n*-Butane の場合、高温酸化反応に至るまでに生成される  $\text{OH}$  ラジカルの量は極めて低いものの、1段目高温酸化反応において Methane の消費が開始されることから、1000K付近での  $\text{OH}$  ラジカルの生成が Methane の酸化を促進する。



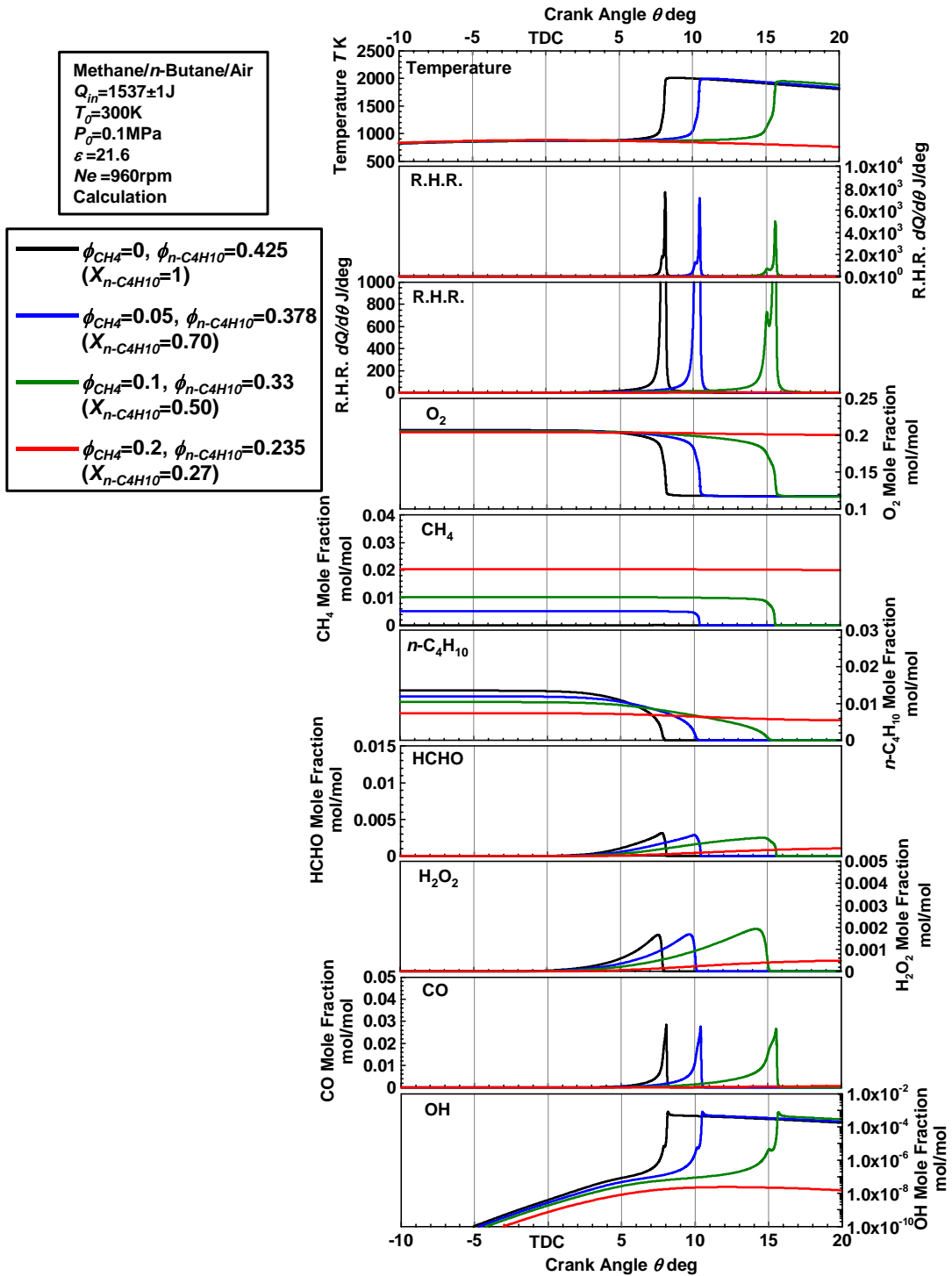


図4-8 Methane, *n*-Butane の混合割合変化に対する主要化学種のモル分率履歴

4.4.2. Methane / *n*-Butane の酸化反応機構

次に図 4-8 で示した計算結果について、主要素反応がどの温度域で進行したのかを調べるために、温度と各素反応の反応速度の関係を調査した。図 4-9 がそれである。図中のグラフは横軸が温度、縦軸が反応速度を示している。4 本のラインは、図 4-8 で示した 4 本のラインと同一条件である。またそれぞれのグラフに表記した反応の番号は計算に使用した Kojima の反応スキームの番号に対応する。選択した素反応は、Methane と *n*-Butane の酸化反応に関係のあるものである。

この条件での計算結果においては、低温酸化反応の温度域での反応はほとんど進行していない。*n*-Butane 単体の条件においても、図 4-8 で示したように低温酸化反応による熱発生は確認されなかった。*n*-Butane の初期反応である、OH ラジカルによる H 原子の引き抜きは 800K 付近の温度域では進行しておらず（反応 79）、低温酸化反応での 1st O<sub>2</sub> Addition 後の S-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>O<sub>2</sub> の異性化（反応 140）や、異性化後の OH ラジカルの乖離（反応 146）の反応速度の値は極めて低い。それ故に、Methane と DME の混合時に見られたような、低温酸化反応の温度域での Methane の酸化は進行しない。

1000K ~ 1300K の温度域になると CHO の酸化による HO<sub>2</sub> の生成（反応 24）、2 つの HO<sub>2</sub> の結合による H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> の生成（反応 453）、H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> が乖離し OH ラジカル 2 つを生成する反応（反応 82）が進む。この連鎖反応が成り立つことで、Methane の酸化が促進されることになる。この温度域での OH ラジカル生成につながる連鎖反応のプロセスは、Methane と DME を混合した場合と同じである。一方で、反応 24 等で生成された HO<sub>2</sub> は、CH<sub>3</sub> との結合により CH<sub>3</sub>O となり（反応 83）、その CH<sub>3</sub>O が酸化することで HO<sub>2</sub> をまた生成する連鎖にもつながる（反応 296）。

1500K 以上の温度域では、上述した連鎖反応が引き続き起こり、CO の酸化（反応 12）、H 原子の酸化（反応 1）、H<sub>2</sub>O の生成（反応 418）へとつながる。

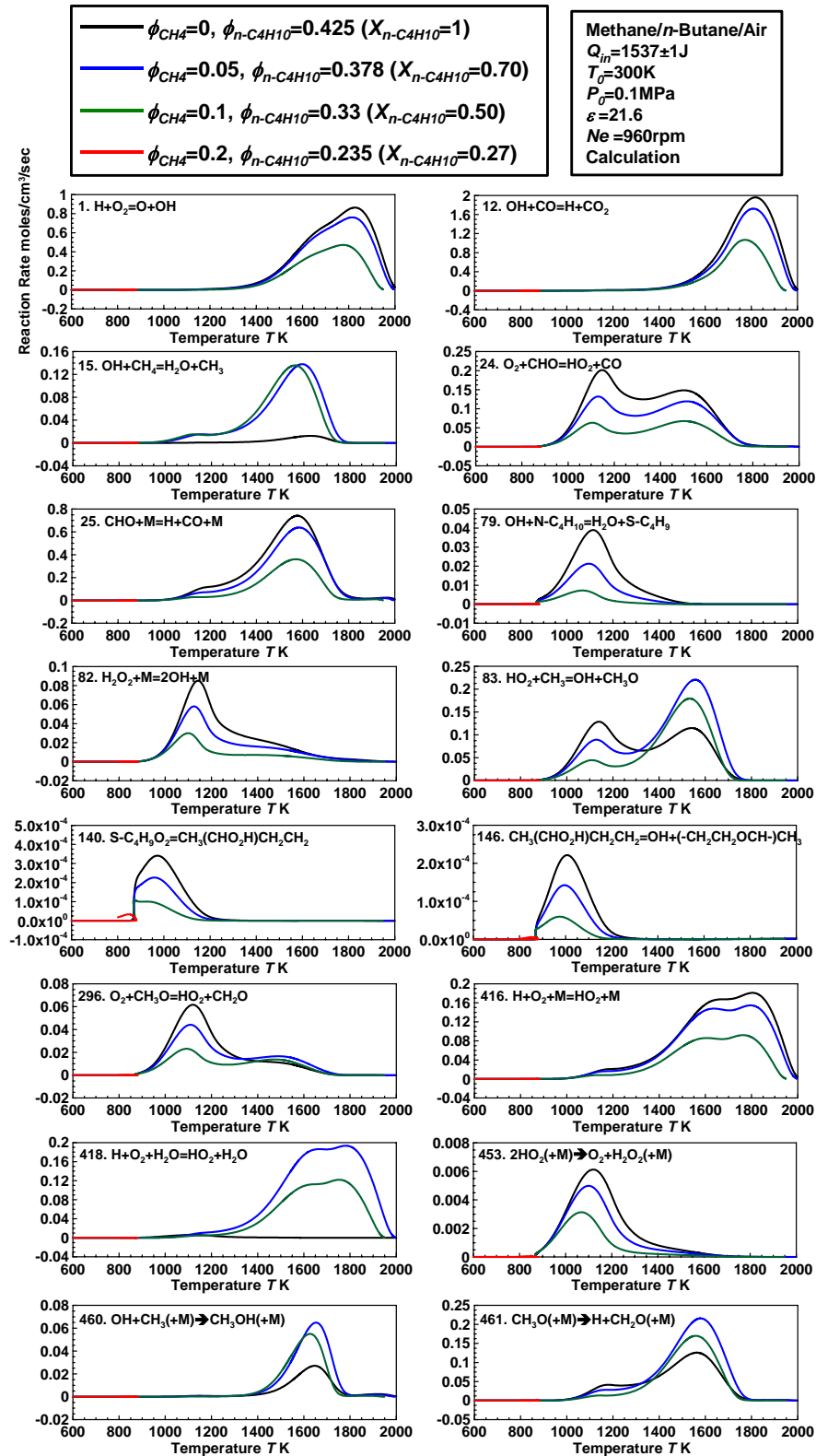


図 4-9 Methane/n-Butane 混合時の温度と主要素反応の反応速度との関係

Methane/*n*-Butane の酸化反応機構について考察する。図 4-10 に Methane/*n*-Butane の酸化反応機構を示す。Methane の反応性については 4.3.2.でも説明したが、1100K を超える高温に達しなければ、着火に至らない。一方計算でも使用した Kojima モデル[22]等でも説明される *n*-Butane の酸化反応過程では、800K から 1000K の温度域で 1st O<sub>2</sub> Addition, 2nd O<sub>2</sub> Addition を経て HCHO を生成する低温酸化反応が存在する。1000K 以上の高温に至ると、HCHO から作られた H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> は OH ラジカルに分解していく。

H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> から OH ラジカルが生成される過程は高温酸化反応に含まれるため、この OH ラジカルは Methane の酸化反応を大きく促進することは、Methane/DME の場合と同じである。しかし DME と異なり低温酸化反応の反応性が弱いために、着火促進の効果は DME と比較して弱い。

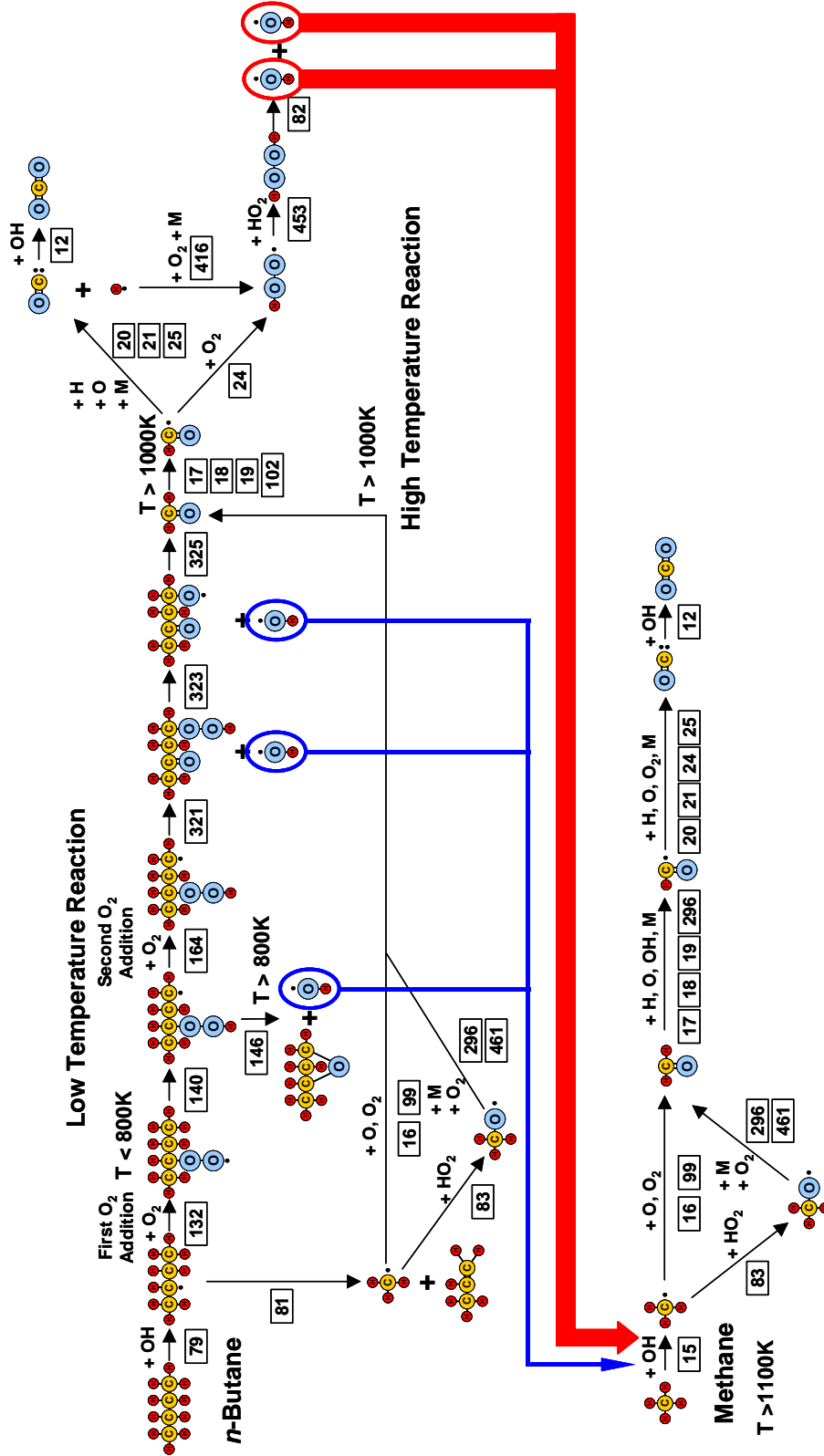


図4-10 Methane/*n*-Butaneの酸化反応機構

## 4.5. Methane / 水素の混合割合が圧縮自己着火燃焼過程に及ぼす影響

### 4.5.1. Methane / 水素の混合割合が化学種のモル分率履歴に及ぼす影響

図4-11に投入熱量  $Q_{in}=1188\pm 2\text{J}$  一定、初期温度  $T_0=375\text{K}$ 、初期圧力  $P_0=0.1\text{MPa}$ 、圧縮比  $\epsilon=21.6$ 、機関回転速度  $Ne=960\text{rpm}$  の条件において、Methane と水素の混合割合を変化させた場合の、温度履歴、熱発生率履歴、 $\text{O}_2$ 、 $\text{CH}_4$ 、 $\text{H}_2$ 、 $\text{HCHO}$ 、 $\text{H}_2\text{O}_2$ 、 $\text{CO}$  および  $\text{OH}$  のモル分率履歴を示す。熱発生率履歴については、拡大図も示した。図に示した条件は、Methane 部分当量比、水素部分当量比を、それぞれ  $[\phi_{\text{CH}_4}=0, \phi_{\text{H}_2}=0.4]$ 、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.1, \phi_{\text{H}_2}=0.307]$ 、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.2, \phi_{\text{H}_2}=0.214]$ 、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.4, \phi_{\text{H}_2}=0.029]$  と変化させた場合の履歴である。これらの4条件の混合割合は、それぞれ  $X_{\text{H}_2}$  = 初期温度を  $T_0=375\text{K}$  に設定したのは、Methane、水素ともに自己着火温度が高く、 $T_0=300\text{K}$  では着火に至らないためである。

水素単体の条件では、約-8deg で高温酸化反応による発熱が見られる。Methane 割合の増加に伴いその発現時期は遅延化し、 $[\phi_{\text{CH}_4}=0.4, \phi_{\text{H}_2}=0.029]$  の条件では-1deg となる。また反応期間は、Methane 割合の増加に伴い長期化する。熱発生率のピーク値は、Methane 割合の増加に伴い減少し  $[\phi_{\text{CH}_4}=0, \phi_{\text{H}_2}=0.4]$  と  $[\phi_{\text{CH}_4}=0.4, \phi_{\text{H}_2}=0.029]$  の条件で比較すると約 1/15 となる。しかしピーク値は、Methane/DME、Methane/*n*-Butane の場合と比較して非常に高く、10 倍近いオーダーとなり、急峻な燃焼反応が起きていることを示している。

水素単体を燃料として投入した場合、燃料中に C 原子が含まれないため、 $\text{HCHO}$ 、 $\text{CO}$  は生成されない。また  $\text{H}_2\text{O}_2$  の増減の挙動は熱発生率の挙動と一致しており、水素、 $\text{H}_2\text{O}_2$  は同時期に消費される。Methane を混合した場合も、Methane、水素、 $\text{HCHO}$ 、 $\text{H}_2\text{O}_2$  は熱発生終了とともに急激に消費される。また Methane の酸化は、水素の酸化と同じタイミングで開始する。

水素の圧縮自己着火過程においては、低温酸化反応は存在せず、 $\text{H}_2\text{O}_2$  が分解する 1000K 付近において酸化反応が急激に進行する。Methane も高温酸化反応しか発現しないため、水素の酸化反応開始温度と近い温度域で酸化が進む。そのため水素の存在により Methane の酸化が促進することは確かだが、両者の酸化反応開始温度が近いために着火後の燃焼反応が急激となる。

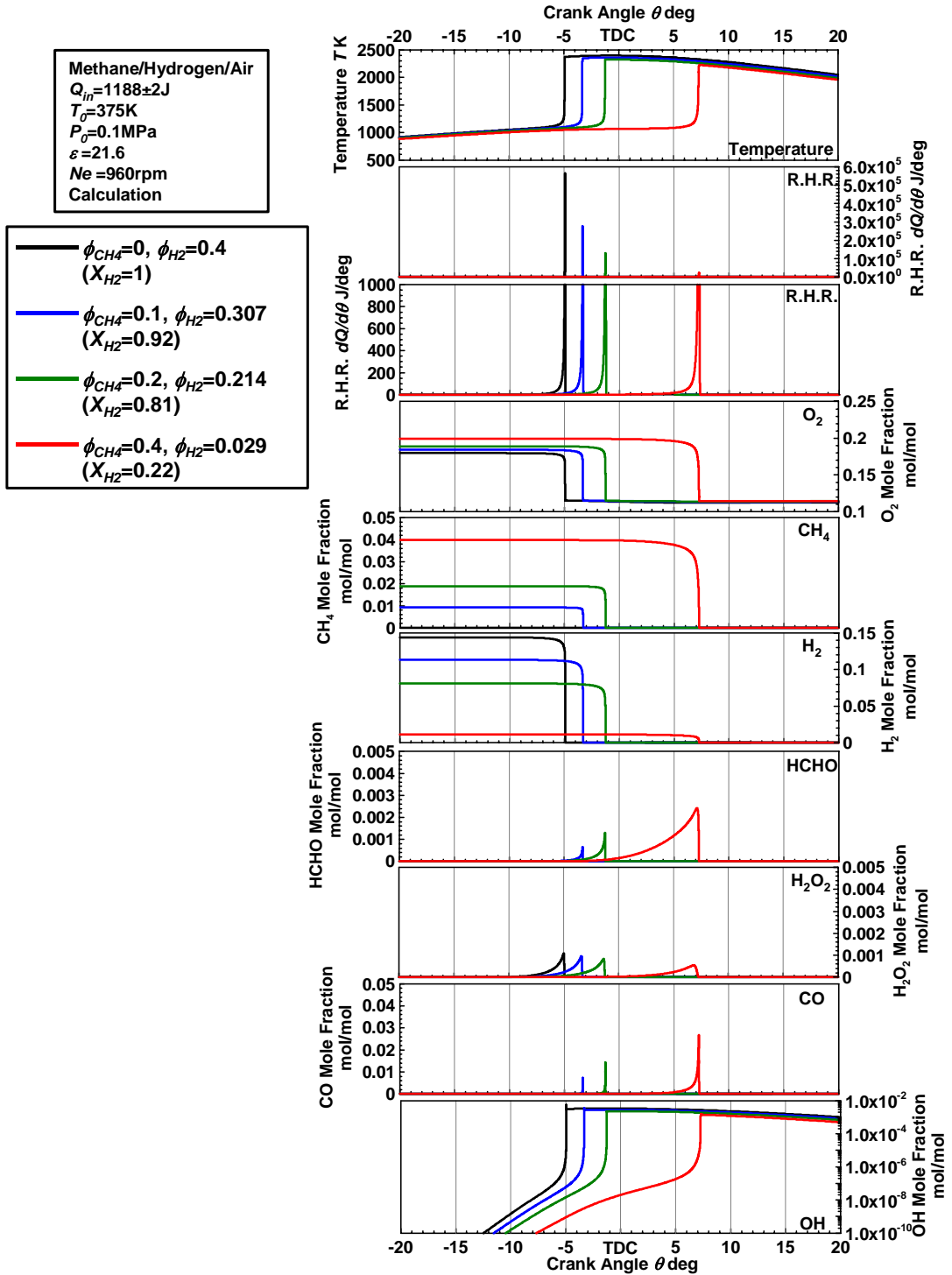


図 4-11 Methane, 水素の混合割合変化に対する主要化学種のモル分率履歴

## 4.5.2. Methane / 水素の酸化反応機構

次に図4-11で示した計算結果について、主要素反応がどの温度域で進行したのかを調べるために、温度と各素反応の反応速度の関係を調査した。図4-12がそれである。図中のグラフは横軸が温度、縦軸が反応速度を示している。4本のラインは、図4-11で示した4本のラインと同一条件である。またそれぞれのグラフに表記した反応の番号は計算に使用したGRI-Mech 3.0の反応スキームの番号に対応する。

水素の酸化反応は、2つの $\text{HO}_2$ から $\text{H}_2\text{O}_2$ が生成され(反応116)、それが2つのOHラジカルに分解するプロセス(反応85)がキーとなる。Methaneが存在する場合には、反応98により $\text{CH}_3$ が生成され、O原子あるいは $\text{HO}_2$ によりその $\text{CH}_3$ が $\text{CH}_2\text{O}$ 、 $\text{CH}_3\text{O}$ へと変化する(反応10,119)。反応119で生成された $\text{CH}_3\text{O}$ は分解されてH原子を生じ(反応57)、そのH原子を元に、 $\text{HO}_2$ が再び生成される連鎖反応が起こる(No.35)。

水素の存在により、反応84によりH原子が生成されるが、これも $\text{HO}_2$ 生成へつながることで $\text{CH}_3$ の分解が活性化される。またH原子の反応を考慮すると、反応33,38も存在し、いずれの反応も $\text{CH}_3$ の消費を高めることになる。



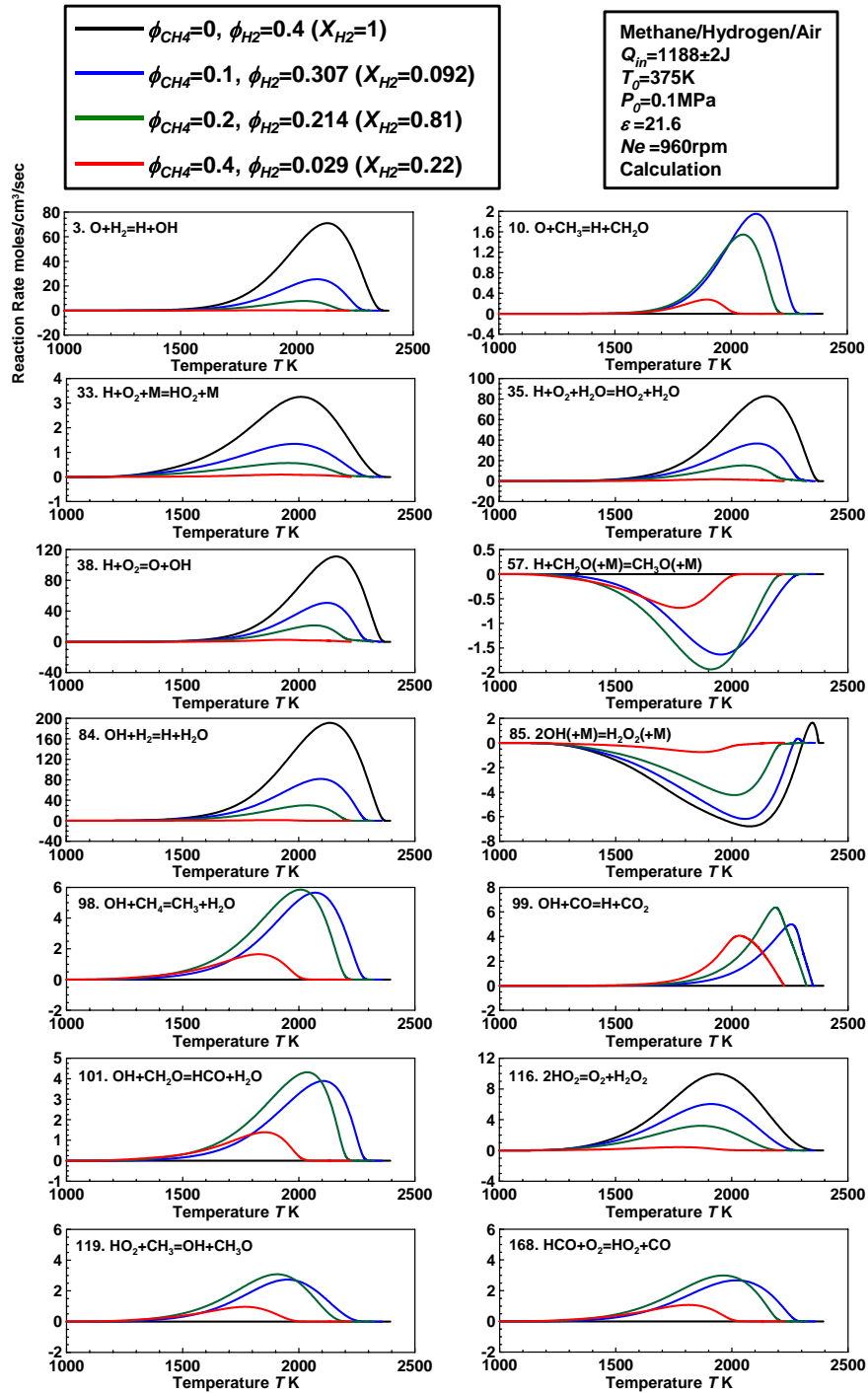


図 4-12 Methane/水素混合時の温度と主要素反応の反応速度との関係

本項では，Methane/水素の酸化反応機構について考察する。図4-13にMethane/水素の酸化反応機構を示す。水素の酸化は1000Kに達すると開始し， $O_2$ と反応してH原子と $HO_2$ を作る。2つの $HO_2$ から $H_2O_2$ が生成され，それがOHラジカルに分解される。一方，最初に作られたH原子は $O_2$ および $H_2$ と結合し，OHラジカルとH原子を生成する。そのH原子が再び $O_2$ と結合することでOHラジカルを生成するサイクルが形成されることになる。これらのサイクルの中で作られるOHラジカルがMethaneの酸化を促進することになるが，水素の酸化反応開始とMethaneの酸化反応開始が，近い温度域で起こるために熱発生が急峻となる。

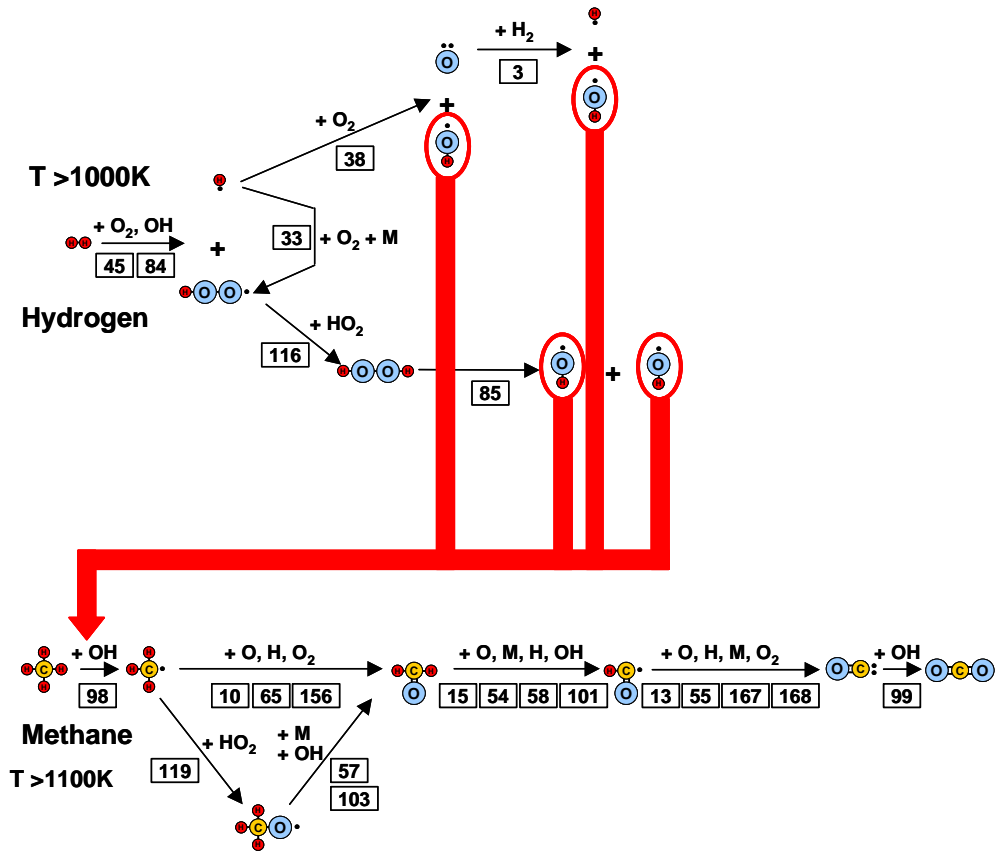


図4-13 Methane/水素の酸化反応機構

#### 4.6. 二成分混合燃料の混合割合と着火時期および着火温度の関係

4.3. 4.4. 4.5.で示した計算結果 および Methane と一酸化炭素を混合した場合について、二成分混合燃料の混合割合が着火時期および着火温度に及ぼす影響について考察した。図 4-14 に Methane/DME, Methane/*n*-Butane, Methane/水素, Methane/一酸化炭素の混合割合に対する低温酸化反応および高温酸化反応の開始時期, 開始温度を示した。下図の横軸は DME, *n*-Butane, 水素, 一酸化炭素の混合割合, 上図の横軸は Methane の混合割合を示している。

Methane と DME を混合した場合, DME の混合割合が  $X_{DME}=0 \sim 0.2$  の範囲では着火に至らない。DME の混合割合を減少させ, Methane の混合割合を増加させると, 前節で示したように低温酸化反応, 高温酸化反応の開始時期はともに遅延化する。また酸化反応の開始温度は, Methane の混合割合の増加に従って上昇し, 低温酸化反応開始温度は 739K から 823K, 高温酸化反応開始温度は 955K から 984K まで上昇する。

Methane と *n*-Butane を混合した場合, *n*-Butane の混合割合が  $X_{n-C_4H_{10}}=0 \sim 0.46$  の範囲では着火に至らない。またこの計算結果においては, 低温酸化反応は発現しなかった。着火した  $X_{n-C_4H_{10}}=0.46 \sim 1$  の計算点は全て膨張行程で着火しており,  $X_{n-C_4H_{10}}=0.46$  では 14deg で着火している。高温酸化反応の発現温度は着火した範囲では変化は見られず, 約 885K で一定であった。初期温度を上昇させるなどのパラメータ変化によって, *n*-Butane の混合割合が低い範囲でも着火させれば, Methane/DME の結果同様に高温酸化反応の開始温度が変化することが予測される。

Methane と水素を混合した場合の計算結果では初期温度を  $T_0=375K$  に設定したため, 着火に至っている範囲が広い。水素単体の場合, -9deg で着火する。Methane の混合割合の増加に伴い着火時期は遅延化し,  $X_{H_2}=0.22$  の条件において -1deg で着火する。高温酸化反応の発現温度は着火した範囲では変化は見られず, 約 1060K で一定であった。Methane と水素の自己着火温度が近いこと, 投入熱量一定条件では高温酸化反応開始温度がほとんど変化しなかったと考えられる。

また Methane と一酸化炭素を混合した場合は, 一酸化炭素の着火温度が高いため初期温度を  $T_0=500K$  とした。上述の 3 つの組み合わせの場合と異なり, Methane 単体において着火に至っている。Methane 単体の場合, 着火温度は約 1180K であるが, 一酸化炭素が少量加わることで 20K 程度上昇していることが分かる。 $X_{CO}=0.08 \sim 0.67$  の範囲では約 1200K で自己着火に至っており, それ以上の範囲では失火する混合割合まで着火温度は低温化した。この低温化する範囲では, 着火時期も早期化する。Methane に対して一酸化炭素を混合させた場合, 一酸化炭素の混合割合が小さい範囲において着火温度が高温化するという知見は Sato らによっても示されている[90]。

これらの結果より, 二成分混合燃料を用いて着火時期を調節することを考える場合, Methane に対して DME, *n*-Butane, 水素を混合することが有効と思われる。つまり, Methane

に対する混合割合に対して、着火時期が単調に変化し、着火温度が一意的に決定する組み合わせが、この3つということである。Methane と一酸化炭素を組み合わせた場合には、混合割合に対して着火温度が二次曲線的に変化してしまうために、二成分の燃料を混合した着火時期を調節することには適用できないことが予想される。

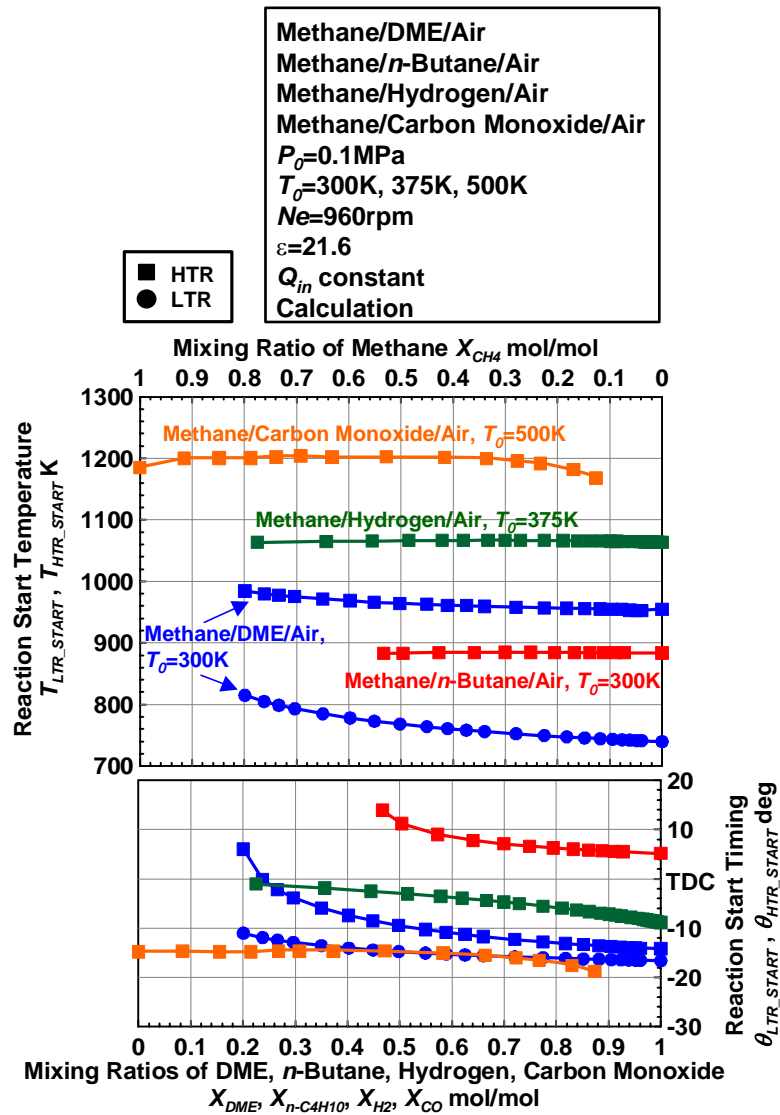


図 4-14 DME, *n*-Butane, 水素, 一酸化炭素の混合割合に対する着火時期, 着火温度

#### 4.7. 二成分燃料の混合割合と燃焼反応速度および50%熱発生時期の関係

4.3から4.5.では、Methane に対して反応性の異なる DME, *n*-Butane, 水素をそれぞれ混合し、その混合割合が圧縮自己着火過程における酸化反応に及ぼす影響を調査した。いずれの組み合わせにおいても酸化反応の開始時期を調節できる可能性が示唆されるが、実機の予混合圧縮自己着火機関に適する燃料の組み合わせを考える必要がある。そもそも予混合圧縮自己着火機関においては、燃料と空気の予混合気の燃焼が急激に進行するためにノッキングを生じ、運転領域が制限されてしまうという課題がある。それを回避するためには、燃焼反応の進行速度を抑制しつつ燃料の投入量を確保する必要がある。本節では、その必要性を満たす燃料の組み合わせに関して、これまでの計算結果から考察を行った。

その考察を行う際に、2つの指標を用いることとした。1つは3.5.でも使用した燃焼反応速度  $v_c$  である。これは計算結果で算出された熱発生率の最大値を投入燃料量で割った値であり、Yamasaki ら[87]もノッキング発生の指標として用いている。もう1つは、50%熱発生時期  $\theta_{CA50}$  である。この指標はOlsson ら[88]によって提唱されたものであり、予混合圧縮自己着火機関において高効率、高出力運転を確保するための重要な指標とされる。図4-15にその定義を示す。 $dQ/d\theta$  は熱発生率履歴、 $\Sigma dQ/d\theta$  は積算熱発生率の履歴を示している。積算熱発生率の履歴において、最終的に発生した熱量の50%に当たる熱発生量が発生したクランクアングルを50%熱発生時期  $\theta_{CA50}$  として定義する。

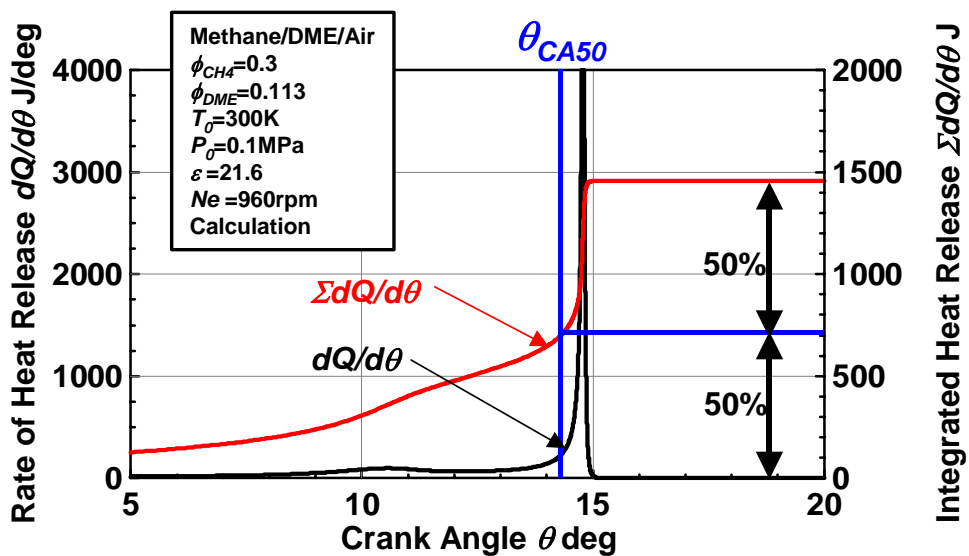


図4-15 50%熱発生時期  $\theta_{CA50}$  の定義方法

図 4-16 に Methane/DME, Methane/*n*-Butane, Methane/水素の混合割合に対する燃焼反応速度および 50% 熱発生時期を示す。下図の横軸は DME, *n*-Butane, 水素の混合割合を, 上図の横軸は Methane の混合割合を示しており, それぞれの混合割合が示す値は図 4-5, 図 4-8, 図 4-11 と同じである。また図 4-16 に示した結果は全て燃焼効率が 100% に到達した計算点をピックアップしたものである。

Methane/DME の場合, DME 割合が減少し Methane 割合が増加するにつれて燃焼反応速度が上昇していくが, これは 50% 熱発生時期が圧縮行程で変化する場合のみであり, その時期が膨張行程に入り遅延化するのに伴い減少する。また燃焼効率が 100% となる点において 50% 熱発生時期は約 27deg の範囲で調節可能であった。Methane/*n*-Butane の場合には, 50% 熱発生時期が全て膨張行程になっているが, *n*-Butane 割合の減少, Methane 割合の増加に伴い燃焼反応速度は低下する。また 50% 熱発生時期が全て膨張行程であるにも関わらず, 約 12deg の範囲で調節可能であり, かつ上死点後 19deg まで遅延化される。Methane/水素の場合, 水素の混合割合の減少, Methane 割合の増加に伴い, 燃焼反応速度は低下していくものの, その速度の値が非常に高い。またその燃焼反応速度の変化は 50% 熱発生時期が圧縮行程にあるか膨張行程にあるかということとは関係なく, 混合割合の変化にのみ依存する。また完全燃焼に至る混合割合の範囲が 3 つの燃料の組み合わせの中で最も広いにも関わらず, 50% 熱発生時期の調節範囲は Methane/DME と比較して狭いことが分かる。

Methane/DME と Methane/*n*-Butane の結果について, 50% 熱発生時期が膨張行程となる範囲で比較すると, Methane/DME の場合には  $X_{DME}=0.2 \sim 0.3$  の範囲で運転可能, また Methane/*n*-Butane の場合には  $X_{n-C_4H_{10}}=0.46 \sim 1$  の範囲で運転可能であり, 混合割合の範囲で見れば Methane/*n*-Butane の方が広い。

エンジン燃焼において着火が圧縮行程の早い時期に起こってしまうと, 出力を稼ぐことは困難となる (PV 線図で囲まれる面積が小さくなる)。高出力を得るには, 上死点近傍で着火が起こり膨張行程に入る過程で燃焼が進行することが理想的である。本節の結果から言えることは, 膨張行程で燃焼が進行し, 高燃焼効率を確保しつつ, 燃焼反応速度を抑えて予混合圧縮自己着火燃焼させるためには, 50% 熱発生時期を膨張行程まで遅延化させることが必須ということである。またその調節を行うためには, 50% 熱発生時期が膨張行程となるときに燃焼反応速度を低下させることが可能な Methane/DME と Methane/*n*-Butane の組み合わせが適することが明らかになった。さらに 50% 熱発生時期を膨張行程で調節可能な混合割合の範囲としては, Methane/*n*-Butane のほうが広いことが明らかになった。

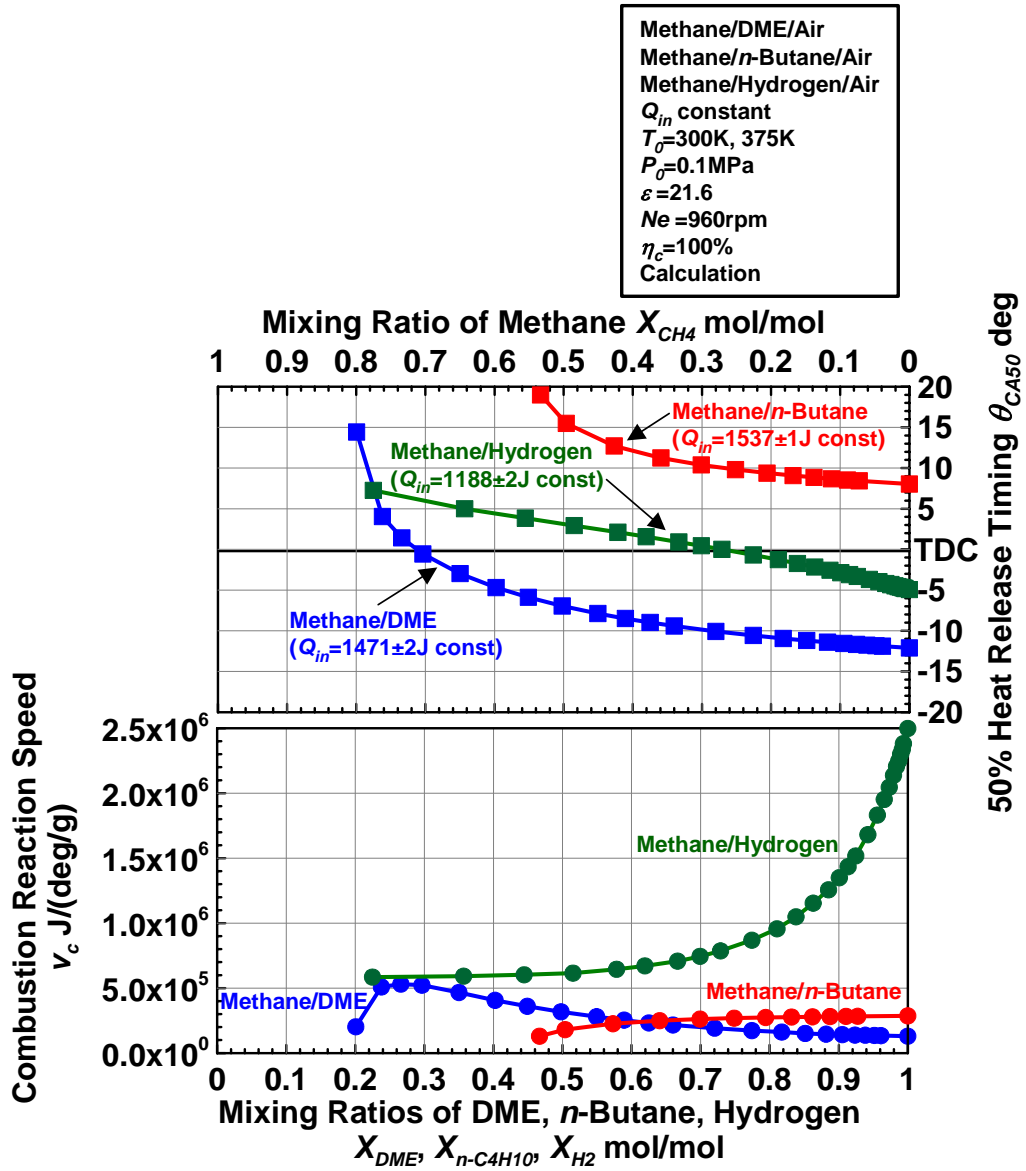


図 4-16 Methane/DME , Methane/*n*-Butane , Methane/水素の混合割合に対する  
燃焼反応速度および 50% 熱発生時期

図4-16で示した結果は全て圧縮比を $\varepsilon=21.6$ に設定して行った計算結果である。予混合圧縮自己着火機関を実用化することを考えた場合には、当然圧縮比が変化することを考慮に入れなくてはならない。そこで図4-16において、50%熱発生時期を膨張行程まで遅らせることが可能であった、Methane/DME および Methane/*n*-Butane の組み合わせについて、圧縮比を変化させて計算を行った。

図4-17に示したのは、Methane/DME 混合時に圧縮比を $\varepsilon=18, 21.6, 25, 28, 31.5$ と変化したときの、DME 混合割合に対する50%熱発生時期と燃焼反応速度である。図中の $\varepsilon=21.6$ のラインは図4-16の結果と共通である。この図より圧縮比が変化しても、50%熱発生時期が圧縮行程に存在する範囲ではDME 割合が減りMethane 割合が増加したときの、燃焼反応速度の傾向、50%熱発生時期との関係は変化しない。しかし50%熱発生時期が膨張行程に存在し、Methane 割合の増加により燃焼反応速度が減少する混合割合の範囲では、燃焼反応速度の減少傾向が圧縮比によって大きく異なる。

これは圧縮比が増加することで、膨張行程での体積の膨張率が高くなり、発熱が起こっても膨張による吸熱が伴い燃焼反応速度が大きく低下することを示している。つまり50%熱発生時期が圧縮行程に位置するときは、二成分混合燃料の混合割合によって燃焼反応速度と50%熱発生時期が決定されるが、50%熱発生時期が膨張行程に位置するときは、混合割合よりも燃焼反応速度そのものが体積膨張率と兼ね合いで支配的となり、膨張行程での燃焼持続性を決定すると推察される。

図4-18には、Methane/*n*-Butane 混合時に圧縮比を $\varepsilon=21.6, 25, 28, 31.5$ と変化したときの、*n*-Butane 混合割合に対する50%熱発生時期と燃焼反応速度である。 $\varepsilon=18$ の条件でも計算を行ったが、いずれの点も着火に至らなかった。この図より、Methane/*n*-Butane 混合時も、Methane/DME 混合時と同じく、50%熱発生時期が膨張行程に位置するときは、圧縮比変化に対する燃焼反応速度の変化が大きくなっており、Methane/DME の場合と同じことが推察される。



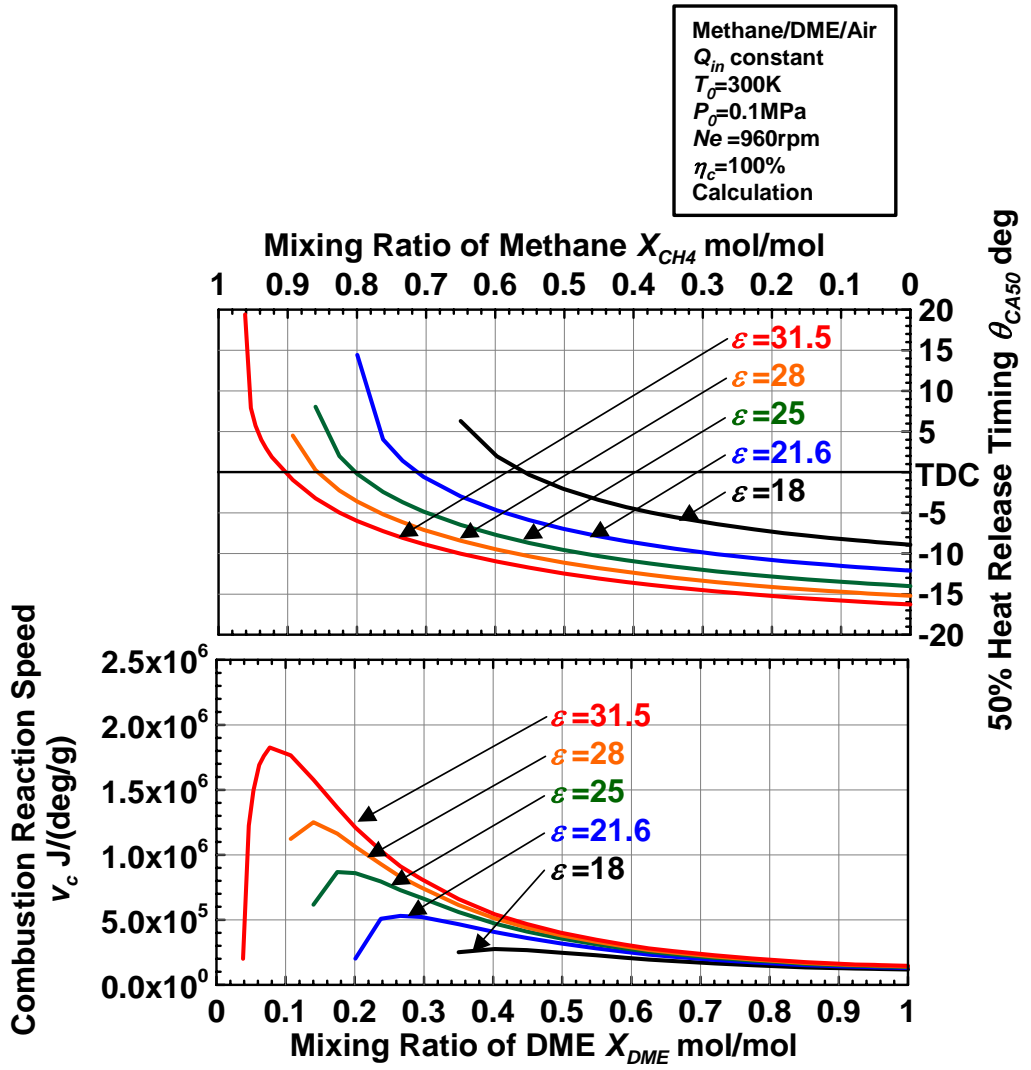


図4-17 圧縮比を変化させた場合のDME混合割合に対する50%熱発生時期および燃焼反応速度

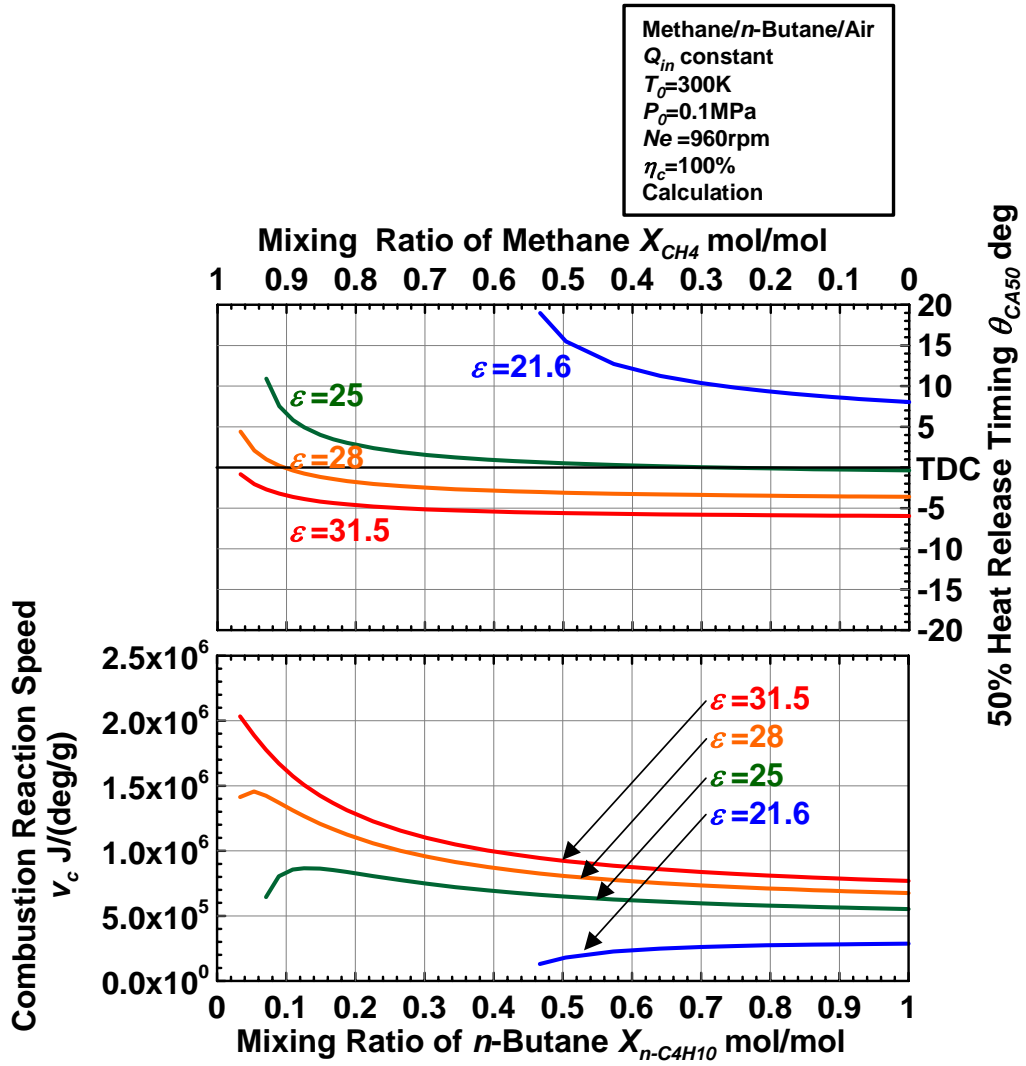


図4-18 圧縮比を変化させた場合の *n*-Butane 混合割合に対する  
50%熱発生時期および燃焼反応速度

#### 4.8. 第4章のまとめ

第4章では着火温度の高い燃料として Methane, 着火温度の低い燃料として DME, *n*-Butane および水素を選択し, 二成分燃料の混合割合の変化が予混合気の酸化反応過程に及ぼす影響について0次元反応数値計算により調査した。また Methane よりもさらに着火温度の高い燃料として一酸化炭素を選択し, Methane と組み合わせたケースについても同様の調査を行った。投入熱量一定条件のもとで, Methane と DME, *n*-Butane, 水素あるいは一酸化炭素の混合割合を変化させ, 着火時期, 着火温度, 燃焼反応速度, 酸化反応過程のついて解析した。そして二成分混合燃料を予混合圧縮自己着火燃焼に適用するための指標として, 50%熱発生時期というものを取り上げた。二成分混合燃料の50%熱発生時期と燃焼完結性, 燃焼反応の進行速度との関係を解析し, その結果から二成分混合燃料を用いる際に燃焼進行時期を調整するのに有効な燃料の組み合わせを示す。

Methane/DME の場合には, Methane の混合割合の増加に伴い, 低温酸化反応開始時期, 高温酸化反応開始時期が遅延化し, その時期が膨張行程まで遷移すると熱発生率のピーク値が小さくなる。このメカニズムは DME の低温酸化反応における反応性が強いいため, その過程で生成される多量の OH ラジカルが, 低温酸化反応の進行時にも関わらず Methane の酸化を促進する。また Methane 本来の酸化反応開始温度である 1100K よりも低い 1000K 付近で, DME の初期高温酸化反応で  $H_2O_2$  から生成された OH ラジカルが, さらに Methane の酸化を早める。結果として, 高温酸化反応での熱発生が緩慢となりその反応期間が長期化する。

Methane/*n*-Butane の場合, 本章における計算結果では低温酸化反応が発現しなかった。*n*-Butane の低温酸化反応の反応性は DME と比較すると弱いために, 低温酸化反応が発現したとしても OH, HCHO,  $H_2O_2$  等の中間生成物の生成量は少ない。ただし初期高温酸化反応での Methane の酸化促進が起こることで, 高温酸化反応での熱発生が緩慢になるのは, Methane/DME の場合と同じである。Methane/*n*-Butane の場合には膨張行程において燃焼反応が進行し, Methane の混合割合の増加に伴い熱発生率のピーク値を下げる結果となった。

また Methane/水素の場合には, Methane 本来の酸化反応開始温度と水素のそれが近いために, 急峻な燃焼が確認された。高温酸化反応開始時期を調整できるクランクアングル範囲も狭い。Methane/一酸化炭素の場合には, 少量の一酸化炭素の混合により着火温度が高温化するものの, 一酸化炭素の量が増加すると着火温度は低温化した。この低温化する範囲では, 着火時期も早期化する。

これらの結果より, 二成分混合燃料を用いて着火時期を調節することを考える場合, Methane に対して DME, *n*-Butane, 水素混合することが有効と思われる。つまり, Methane に対する混合割合に対して, 着火時期が単調に変化し, 着火温度が一意的に決定する組み合わせが, この3つということである。Methane と一酸化炭素を組み合わせた場合には,

混合割合に対して着火温度が二次曲線的に変化してしまうために、二成分の燃料を混合した着火時期を調節することには適用できないことが予想される。

上記の結果を解析する際に、50%熱発生時期(総熱発生量の50%の熱量が発生する時期)と第3章でも使用した燃焼反応速度を用いた。Methane/DMEの場合、DME割合が減少しMethane割合が増加するにつれて燃焼反応速度が上昇していくが、これは50%熱発生時期が圧縮行程で変化する場合のみであり、その時期が膨張行程に入り遅延化するのに伴い減少する。Methane/*n*-Butaneの場合には、50%熱発生時期が全て膨張行程になったが、*n*-Butane割合の減少、Methane割合の増加に伴い燃焼反応速度は低下する。また50%熱発生時期が全て膨張行程であるにも関わらず、広い範囲で調節可能である。Methane/水素の場合、水素の混合割合の減少、Methane割合の増加に伴い、燃焼反応速度は低下していくものの、その速度の値が非常に高い。またその燃焼反応速度の変化は50%熱発生時期が圧縮行程にあるか膨張行程にあるかということとは関係なく、混合割合の変化にのみ依存する。また完全燃焼に至る混合割合の範囲が3つの組み合わせが最も広いにも関わらず、50%熱発生時期の調節範囲はMethane/DMEと比較して狭い。Methane/DMEとMethane/*n*-Butaneの結果について、50%熱発生時期が膨張行程となる範囲で比較すると、混合割合の範囲で見ればMethane/*n*-Butaneの方が運転可能範囲が広い。

膨張行程で燃焼反応が進行し、高燃焼効率を確保しつつ、燃焼反応速度を抑えて予混合圧縮自己着火燃焼させるためには、50%熱発生時期を膨張行程まで遅延化させることが必須ということである。またその調節を行うためには、50%熱発生時期が膨張行程となるときに燃焼反応速度を低下させることが可能なMethane/DMEとMethane/*n*-Butaneの組み合わせが適することが明らかになった。ただしこれらの結果は圧縮比に代表される機関条件によって変化する。特に50%熱発生時期が膨張行程に位置する混合割合においては、体積膨張率によって燃焼反応速度が大きく変化し、膨張行程における燃焼持続性も変化することになる。

## 第 5 章 二成分混合燃料の混合割合が予混合圧縮 自己着火機関の運転領域に及ぼす影響

第 5 章では、第 4 章の計算結果を受けて、着火温度の高い燃料として Methane、着火温度の低い燃料として DME と *n*-Butane を選択し、2 つの組み合わせの二成分混合燃料を用いて燃焼実験を行い、運転可能領域と燃焼効率、IMEP、図示熱効率、着火温度および 50% 熱発生時期の関係を調査した。この結果から、混合割合の変化により高熱効率、高出力を獲得するための混合条件を解明する。

### 5.1. 実験条件

本章で行う二成分燃料の燃焼実験方法および使用したエンジンの諸元は、2.1.2.で示した通りである。実験条件は、吸気温度  $T_{in}=300\pm 8\text{K}$ ，吸気圧力  $P_{in}=0.1\text{MPa}$ ，機関回転速度  $Ne=960\text{rpm}$ ，圧縮比  $\varepsilon=21.6$  の一定条件の下，Methane および DME の部分当量比  $\phi_{CH_4}$ ， $\phi_{DME}$  をパラメータとして，ノッキングが発生する条件まで実験を行った。同様に Methane および *n*-Butane の混合実験においてもそれぞれの部分当量比  $\phi_{CH_4}$ ， $\phi_{n-C_4H_{10}}$  をパラメータとして実験を行った。なお部分当量比を変化させた場合には，総当量比  $\phi_{total}$  も変化することになる。図 5-1 に燃焼実験を行う実験点を示す。横軸が Methane の部分当量比  $\phi_{CH_4}$ ，縦軸が DME あるいは *n*-Butane の部分当量比  $\phi_{DME}$ ， $\phi_{n-C_4H_{10}}$  を表している。当量比の値は標準数に従って設定したが，実際の燃焼実験では図に示した全点で運転可能なわけではなく，失火およびノッキングにより運転可能領域が制限される。また燃焼状態が通常燃焼とノッキングの遷移状態にある実験点付近では，図に示した当量比の設定点とは関係なく細かい値を設定した。

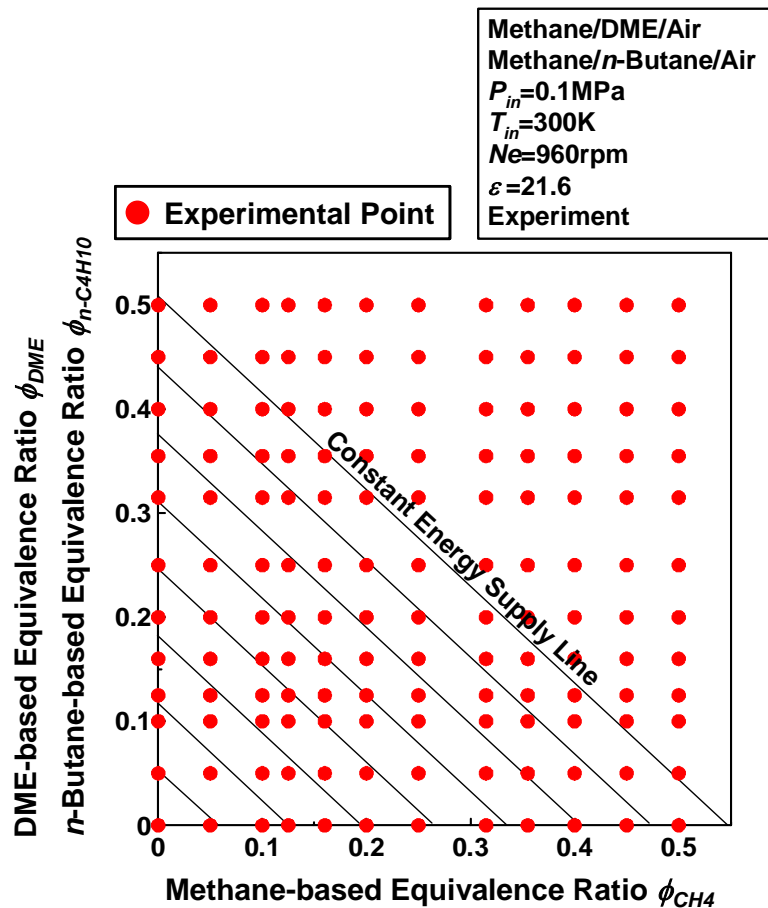


図 5-1 混合燃料実験における当量比の設定点

## 5.2. Methane / DME 混合時の予混合圧縮自己着火燃焼

### 5.2.1. Methane / DME の部分当量比と運転領域の関係

吸気温度  $T_{in}=300\pm 8\text{K}$  , 吸気圧力  $P_{in}=0.1\text{MPa}$  , 機関回転速度  $N_e=960\text{rpm}$  ,  $\varepsilon=21.6$  の一定条件の下 , Methane および DME の部分当量比  $\phi_{CH_4}$  ,  $\phi_{DME}$  をパラメータとして燃焼実験を行った。図 5-2 に実験を行った全点と , 運転領域を示した。× は失火した点 ( 燃焼効率が 10% 未満となった点) , ● は予混合圧縮自己着火燃焼が可能であった点 , ▲ はノッキングが生じた点 ( エンジンからの甲高い金属音とオシロスコープに表示される圧力波形の乱れが生じた点) を示す。また 1 サイクルに投入される熱量の指標として , 等投入熱量線を示した。

この図より DME 部分当量比を増加させた場合にはノック限界が低いのに対して , Methane 部分当量比を増加させた場合には運転可能な限界領域が拡大されることが分かる。特に , DME 部分当量比  $\phi_{DME}=0.1$  のときに Methane 部分当量比を増加させると最大で  $\phi_{CH_4}=0.5$  ( 総当量比  $\phi_{total}=0.6$  ) まで運転が可能であり , 半島のような形状で領域が拡大される。

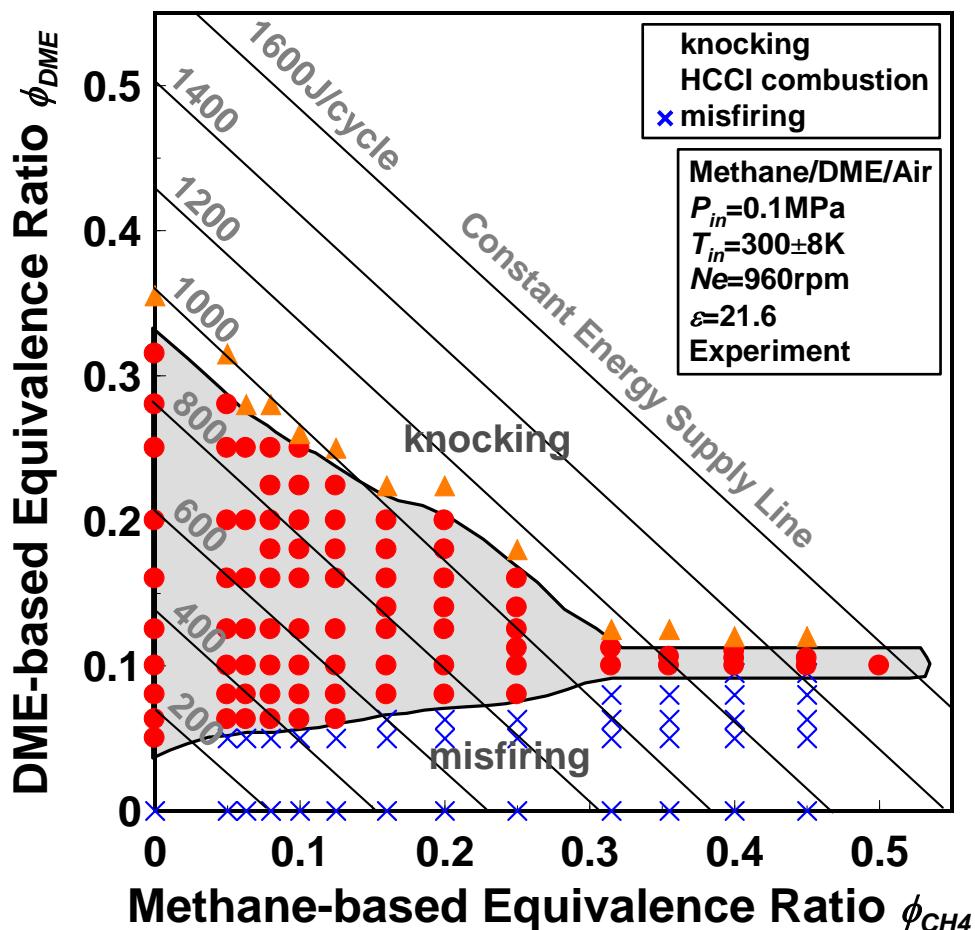


図 5-2 Methane / DME の部分当量比と運転領域の関係

## 5.2.2. Methane / DME 部分当量比の変化に対する圧縮自己着火特性の変化

本項では図 5-2 中で示した実験点の中で、Methane, DME 両方を燃料として投入した場合について、Methane の部分当量比, DME の部分当量比の変化が予混合圧縮自己着火燃焼特性に与える影響を調査した。

## a) Methane 部分当量比の影響

図 5-2 中において、DME の部分当量比が  $\phi_{DME}=0.1$  一定条件において、Methane の部分当量比を変化させた場合の実験点をピックアップし、解析を行った。図 5-3 に示したのは、DME 部分当量比  $\phi_{DME}=0.1$  一定のときに、Methane の部分当量比を  $\phi_{CH_4}=0, 0.1, 0.25, 0.4, 0.45, 0.5$  と変化させた場合の筒内ガス圧力履歴、筒内ガス温度履歴および熱発生率履歴である。 $\phi_{CH_4}=0$ 、つまり燃料が DME のみの場合には、低温酸化反応による温度圧力の上昇、また小さいが高温酸化反応による上昇も見られる。 $\phi_{CH_4}=0.25$  まで上昇させると、高温酸化反応によるはっきりとした圧力、温度の上昇が確認され、熱発生率履歴が計 3 段に分かれる。 $\phi_{CH_4}=0.4$  では、高温酸化反応による熱発生率のピークがほぼ上死点となる。その  $\phi_{CH_4}=0.4$  までは、Methane の部分当量比の上昇に伴い、熱発生率の最大値が上昇していくが、それ以上に上昇すると傾向が変化する。つまり  $\phi_{CH_4}=0.45, 0.5$  と上昇させると、低温酸化反応による熱発生が弱くなり、圧力、温度の上昇幅も小さくなる。しかし膨張行程において発熱が起こり、圧力、温度が上昇する。熱発生率のピーク値としては、投入熱量が増加するにも関わらず値が小さくなる。また  $\phi_{CH_4}=0.4$  のときに見られる高温酸化反応終了時期での熱発生率の振幅は、 $\phi_{CH_4}=0.45, 0.5$  と上昇すると小さくなりノッキングが回避されていることが分かる。また高温酸化反応による熱発生期間は、 $\phi_{CH_4}=0.4$  までは短くなるが、熱発生が緩慢になる  $\phi_{CH_4}=0.45$  以上ではその期間が広がる。

図 5-4 に DME の部分当量比が  $\phi_{DME}=0.1$  一定条件において、Methane の部分当量比を変化させた場合の、燃焼効率  $\eta_c$ 、図示熱効率  $\eta_i$ 、50%熱発生時期  $\theta_{CA50}$ 、IMEPP<sub>i</sub> を示す。燃焼効率は第 2 章等と同じ算出方法を用いており、積算した熱発生量の投入熱量に対する割合とした。また 50%熱発生時期については、4.6. で示した素反応数値計算の場合と同じ定義から算出している。この図中の 50%熱発生時期の値は、図示熱効率および IMEP が正の値として算出された実験点についてのみ示した。Methane 部分当量比の増加に伴い、燃焼効率が上昇し  $\phi_{CH_4}=0.355$  以上で 80% を超える。図示熱効率も同様に上昇し、 $\phi_{CH_4}=0.5$  で 34% に達する。また同じ点において IMEP が最も確保され 0.46MPa に至る。50%熱発生時期は Methane 部分当量比の増加に伴い遅延化するが、 $\phi_{CH_4}=0.315$  以上ではその遅延化と IMEP の上昇が同じ傾向を辿る。



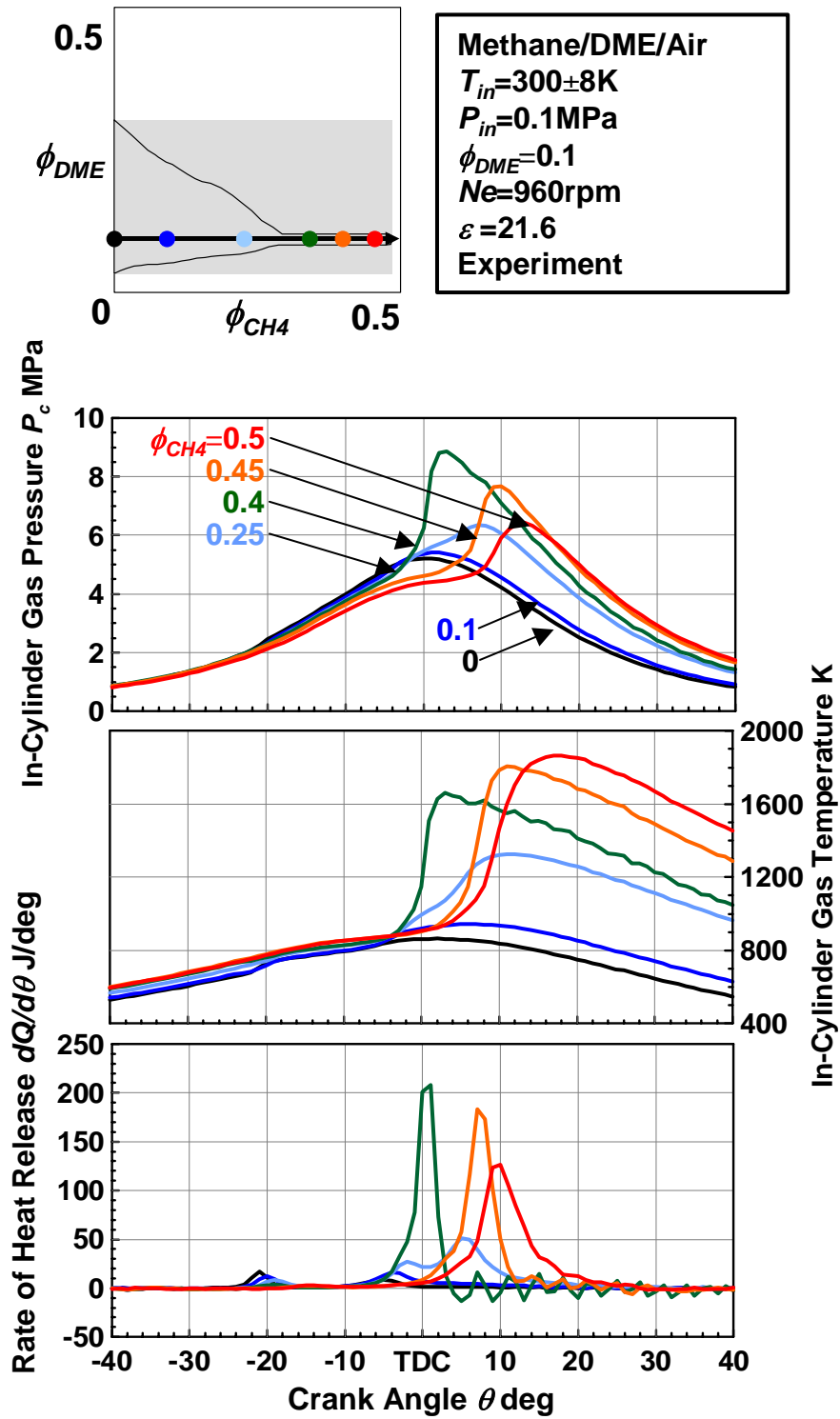


図 5-3 DME 部分当量比一定条件において Methane 部分当量比を上昇させたときの筒内ガス圧力履歴，筒内ガス温度履歴および熱発生率履歴

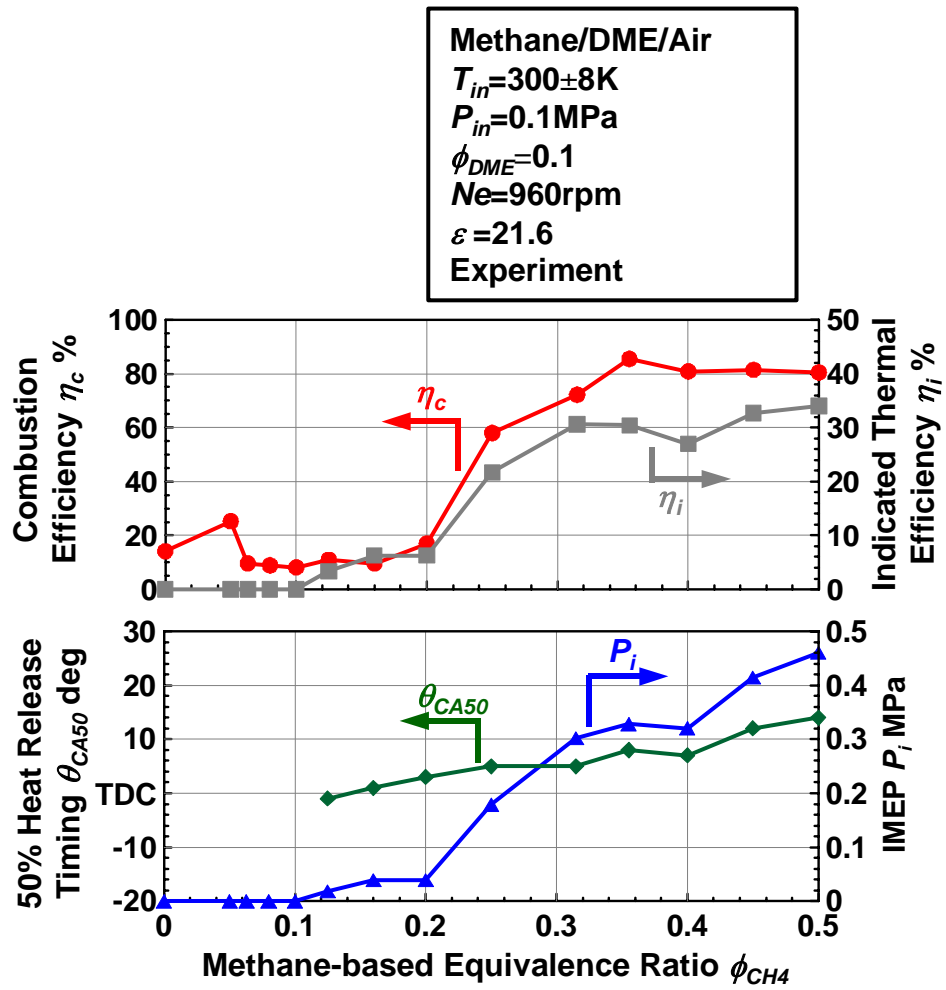


図5-4 DME 部分当量比一定条件において Methane 部分当量比を上昇させたときの  
 燃焼効率，図示熱効率，50%熱発生時期および IMEP

## b) DME 部分当量比の影響

図 5-2 中において、Methane の部分当量比が  $\phi_{CH_4}=0.1$  一定条件において、DME の部分当量比を変化させた場合の実験点をピックアップした。図 5-5 に示したのは、Methane 部分当量比  $\phi_{CH_4}=0.1$  一定のときに、DME の部分当量比を  $\phi_{DME}=0, 0.1, 0.16, 0.2, 0.25$  と変化させた場合の筒内ガス圧力履歴、筒内ガス温度履歴および熱発生率履歴である。 $\phi_{DME}=0$  においては、図 5-2 中でも示した通り着火に至らない。 $\phi_{DME}=0.1$  以上では低温酸化反応、高温酸化反応による圧力、温度上昇が確認され、熱発生率も 2 段あるいは 3 段確認される。DME 部分当量比の上昇に伴い、低温酸化反応、高温酸化反応の発現時期が早期化していき、熱発生期間が短くなる。熱発生率ピーク値は DME 部分当量比の増加に伴い上昇し、圧縮行程中に急峻な燃焼が発生していることが分かる。

図 5-6 には Methane の部分当量比が  $\phi_{CH_4}=0.1$  一定条件において、DME の部分当量比を変化させた場合の、燃焼効率  $\eta_c$ 、図示熱効率  $\eta_i$ 、50% 熱発生時期  $\theta_{C450}$ 、IMEPP<sub>i</sub> を示す。DME 部分当量比の増加に伴い、燃焼効率が上昇し  $\phi_{DME}=0.22$  以上で 80% 弱まで到達する。サイクル中の最高到達温度の上昇に伴い燃焼効率が上昇するものの、着火時期が膨張行程で早期化するため図示熱効率は 20% 以下となってしまう。その結果、IMEP の値は 0.15MPa 程度しか確保できない。50% 熱発生時期は、DME 部分当量比の増加に伴い膨張行程で早期化し、図示熱効率、IMEP が確保できないことを裏付けている。

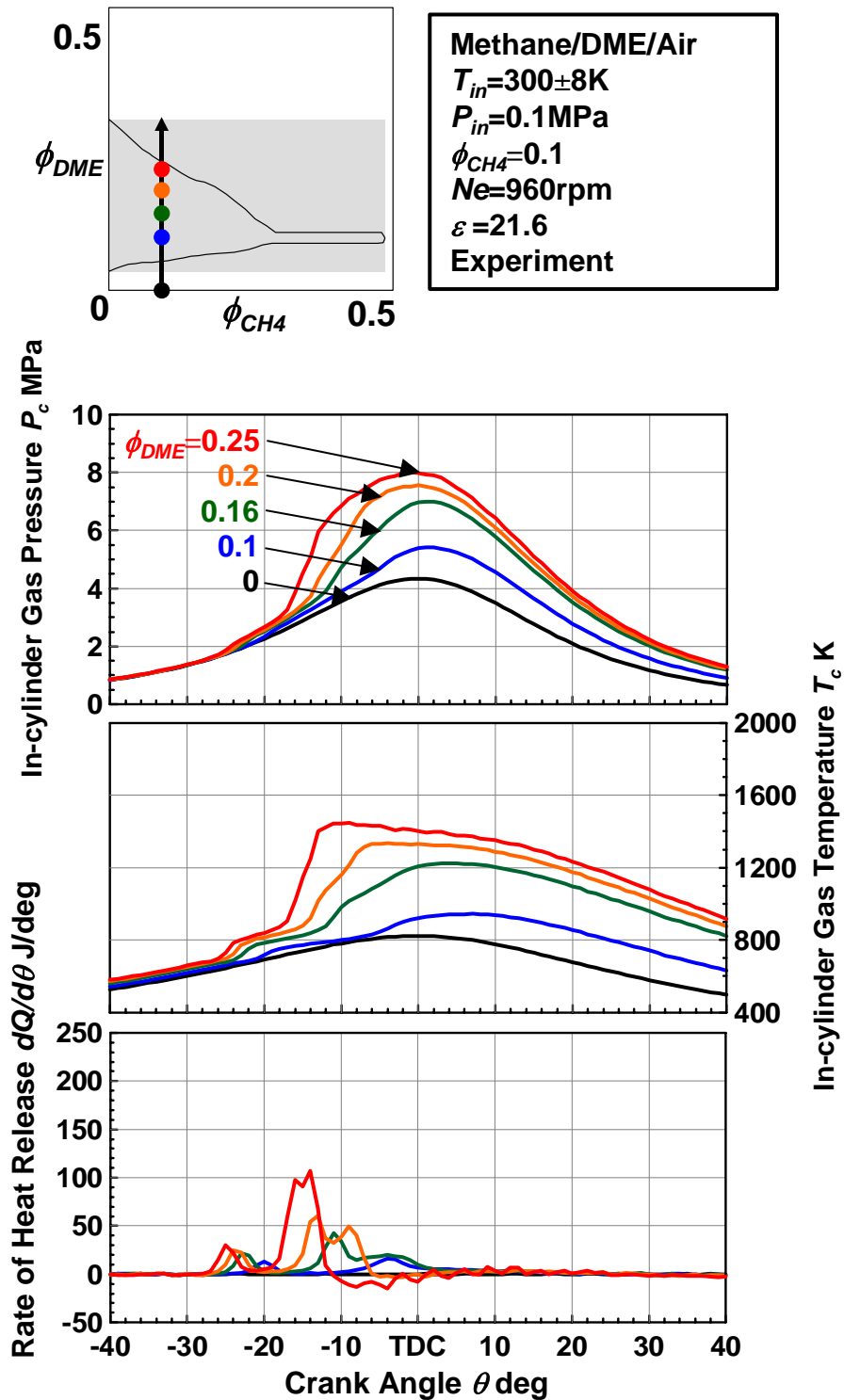


図 5-5 Methane 部分当量比一定条件において DME 部分当量比を上昇させたときの筒内ガス圧力履歴，筒内ガス温度履歴および熱発生率履歴

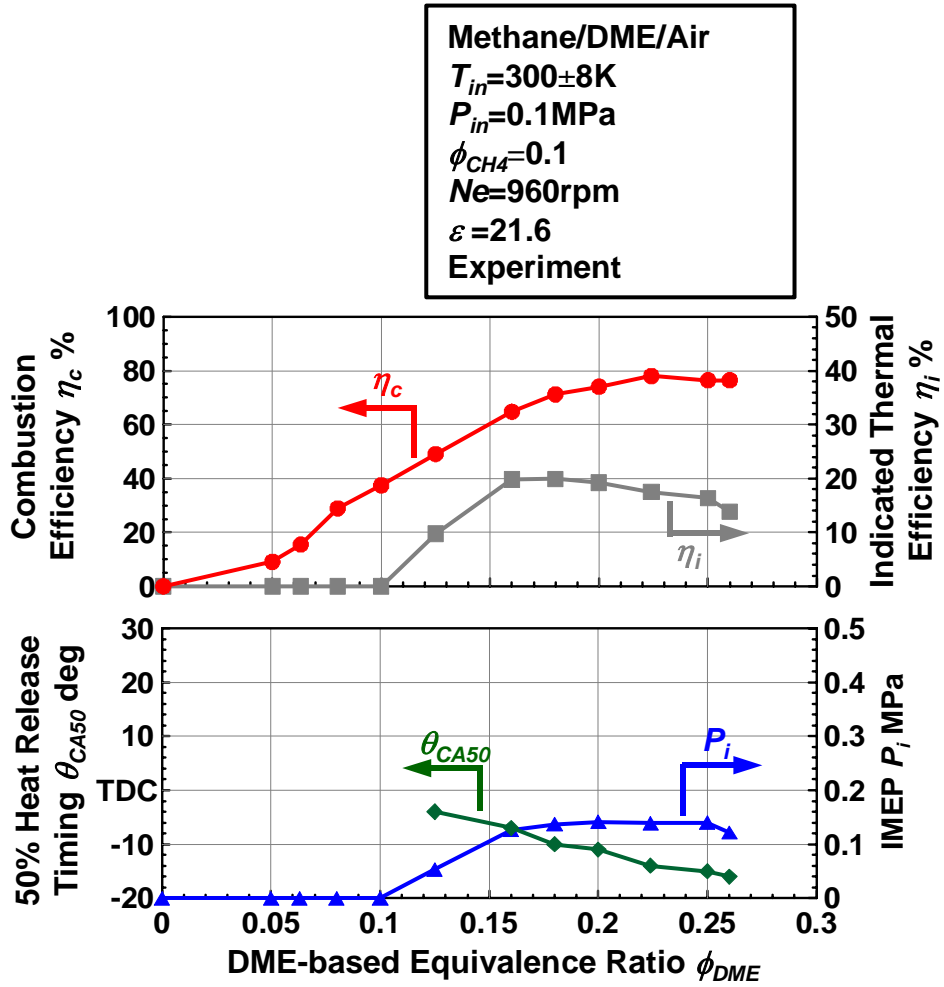


図 5-6 Methane 部分当量比一定条件において DME 部分当量比を上昇させたときの  
 燃焼効率，図示熱効率，50%熱発生時期および IMEP

5.2.3. Methane / DME の混合割合と酸化反応開始時期および温度の関係

図 5-2 中で示した実験点について、両燃料の混合割合に対する酸化反応開始時期および酸化反応開始温度の関係を調査した。4.6.の計算結果で示したように、素反応数値計算においては Methane と DME の混合割合は低温酸化反応、高温酸化反応の開始温度と関係が大きい。この関係について、実験結果についても検証を行った。

図 5-7 に示したのは、図 5-2 中の実験点について燃焼効率が 50% 以上となった実験点について、Methane/DME の混合割合に対する低温酸化反応、高温酸化反応の開始時期、開始温度である。下図の横軸が DME の混合割合、上図横軸が Methane の混合割合を示す。Methane 単体のみの条件においては着火に至らなかったために、同じエンジンを用いて過給、加熱により Methane 単体で燃焼させた Jun らのデータ[86]を参照した（酸化反応開始温度のみ参照）。DME 混合割合の減少、Methane 混合割合の増加に伴い低温酸化反応、高温酸化反応開始時期は遅延化し、また低温酸化反応、高温酸化反応開始温度は高温側にシフトする。酸化反応開始温度は特に DME の混合割合が少ない範囲でその変化が大きい。図中の点は投入熱量が異なる点を含んでいるため、酸化反応開始時期についてはばらつきがあるものの、低温酸化反応開始温度、高温酸化反応開始温度は、混合割合に大きく依存しており近似することが可能である。つまり Methane, DME を混合した場合、低温酸化反応開始温度、高温酸化反応開始温度は投入熱量に関係なく、両燃料の混合割合によって一意的に決まることが明らかになった。

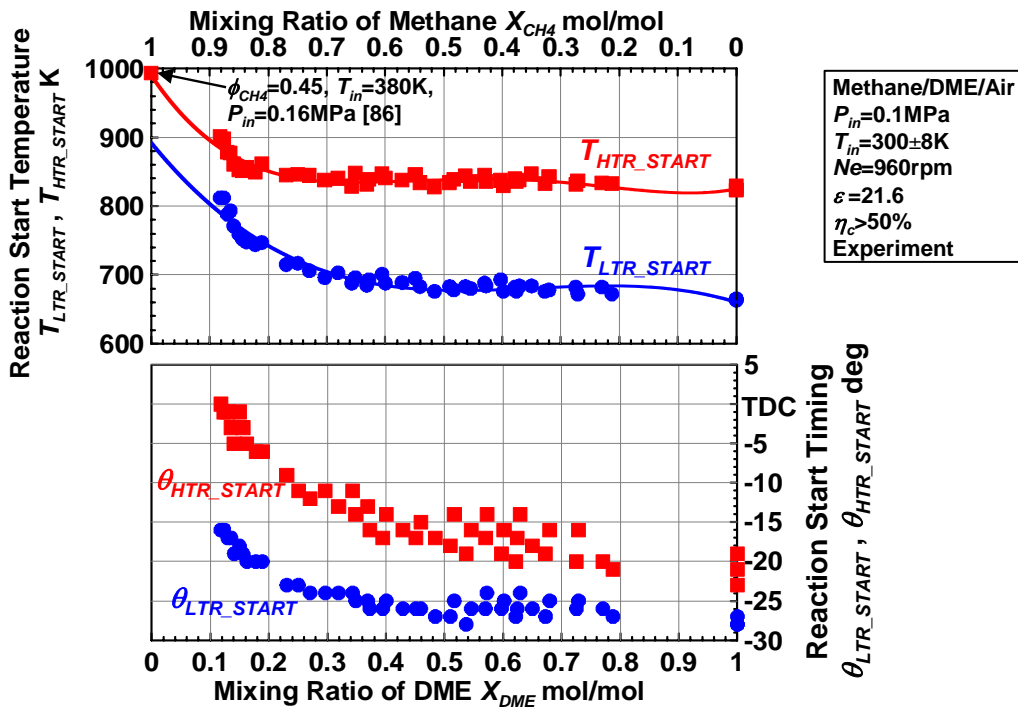


図 5-7 Methane / DME の混合割合の変化が酸化反応開始時期，温度に及ぼす影響

### 5.3. Methane / *n*-Butane 混合時の予混合圧縮自己着火燃焼

#### 5.3.1. Methane / *n*-Butane の部分当量比と運転領域の関係

吸気温度  $T_{in}=300\pm 8\text{K}$  , 吸気圧力  $P_{in}=0.1\text{MPa}$  , 機関回転速度  $N_e=960\text{rpm}$  ,  $\varepsilon=21.6$  の一定条件の下 , Methane および *n*-Butane の部分当量比  $\phi_{CH_4}$  ,  $\phi_{n-C_4H_{10}}$  をパラメータとして燃焼実験を行った。図 5-8 に実験を行った全点と , 運転領域を示した。図中の  $\times$  ,  $\bullet$  ,  $\triangle$  が示す意味は 5.2.1. の図 5-2 と同じである。

5.2.1. で示した Methane/DME の場合の運転領域と , その形が大きく異なる。運転可能領域は *n*-Butane の部分当量比が高いところに存在する。*n*-Butane の部分当量比を増加させた場合のノッキング限界は投入熱量のラインとは相関がなく , Methane の部分当量比によらず ,  $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.4$  付近で限界となる。Methane の部分当量比を増加させた場合には ,  $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.4$  のラインで運転領域が拡大される。最も燃料を投入することができた点は総当量比  $\phi_{total}=0.59$  であった。

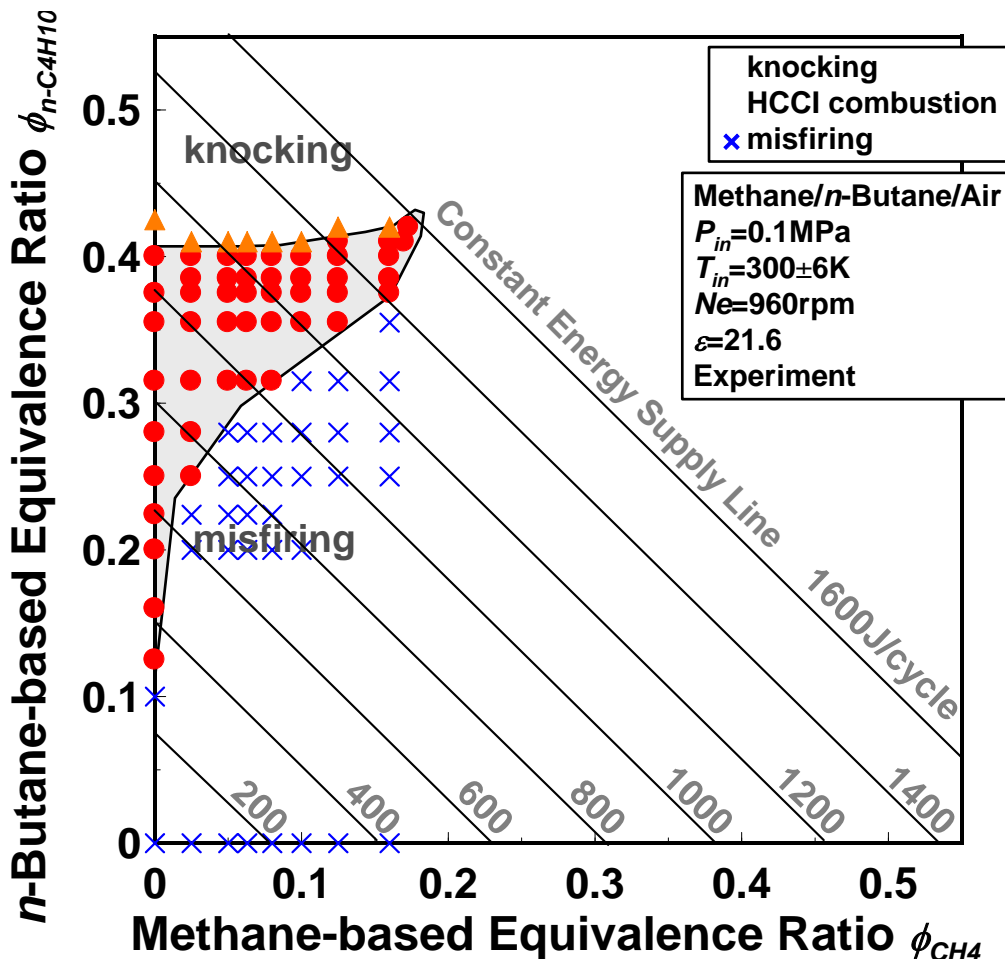


図 5-8 Methane / *n*-Butane の部分当量比と運転領域の関係

5.3.2. Methane / *n*-Butane 部分当量比の変化に対する圧縮自己着火特性の変化

本項では図 5-8 中で示した実験点の中で、Methane, *n*-Butane 両方を燃料として投入した場合について、Methane の部分当量比、*n*-Butane の部分当量比の変化が予混合圧縮自己着火燃焼特性に与える影響を調査した。

## a) Methane 部分当量比の影響

図 5-8 中において、*n*-Butane の部分当量比が  $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.4$  一定条件において、Methane の部分当量比を変化させた場合の実験点をピックアップし、解析を行った。図 5-9 に示したのは、*n*-Butane 部分当量比  $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.4$  一定のときに、Methane の部分当量比を  $\phi_{CH_4}=0, 0.05, 0.1, 0.16$  と変化させた場合の筒内ガス圧力履歴、筒内ガス温度履歴および熱発生率履歴である。 $\phi_{CH_4}=0$ 、つまり燃料が *n*-Butane のみの場合には、圧力、温度の履歴中では低温酸化反応による上昇はほとんど認められない。熱発生率履歴を見ると、わずかながら低温酸化反応による熱発生が認められる。Methane の部分当量比を増加させると、高温酸化反応の発現時期が遅延化し、 $\phi_{CH_4}=0.16$  まで上昇させると、高温酸化反応に圧力、温度が上昇するタイミングが上死点後 10deg 付近となる。熱発生率のピーク値は、Methane 部分当量比が 0 から 0.05 になると高くなるものの、それ以上になると投入熱量が増加するにも関わらず値が小さくなる。また  $\phi_{CH_4}=0$  のときに見られる高温酸化反応終了時期での熱発生率の振幅は、 $\phi_{CH_4}=0.05$  以上に上昇すると小さくなりノッキングが回避されていることが分かる。また高温酸化反応による熱発生期間は Methane 部分当量比の増加に従い広くなり、熱発生が緩慢になる。

図 5-10 に *n*-Butane の部分当量比が  $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.4$  一定条件において、Methane の部分当量比を変化させた場合の、燃焼効率  $\eta_c$ 、図示熱効率  $\eta_i$ 、50%熱発生時期  $\theta_{CA50}$ 、IMEPP<sub>*i*</sub> を示す。 $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.4$  のラインでは、いずれの点においても燃焼効率が 80% を超えており、図示熱効率は最大で 38%、IMEP は最大で 0.48MPa に達する。50%熱発生時期は Methane 部分当量比の増加に伴い遅延化し、 $\phi_{CH_4}=0.16$  では上死点後 17deg となる。50%熱発生時期の変化が IMEP の変化と同じ傾向になるのは、Methane/DME の場合と同じである。

これらの結果より Methane の部分当量比を増加させると、50%熱発生時期を膨張行程まで遷移させると、投入熱量が上昇しているにも関わらずノッキングが回避され、安定した燃焼が実現される。



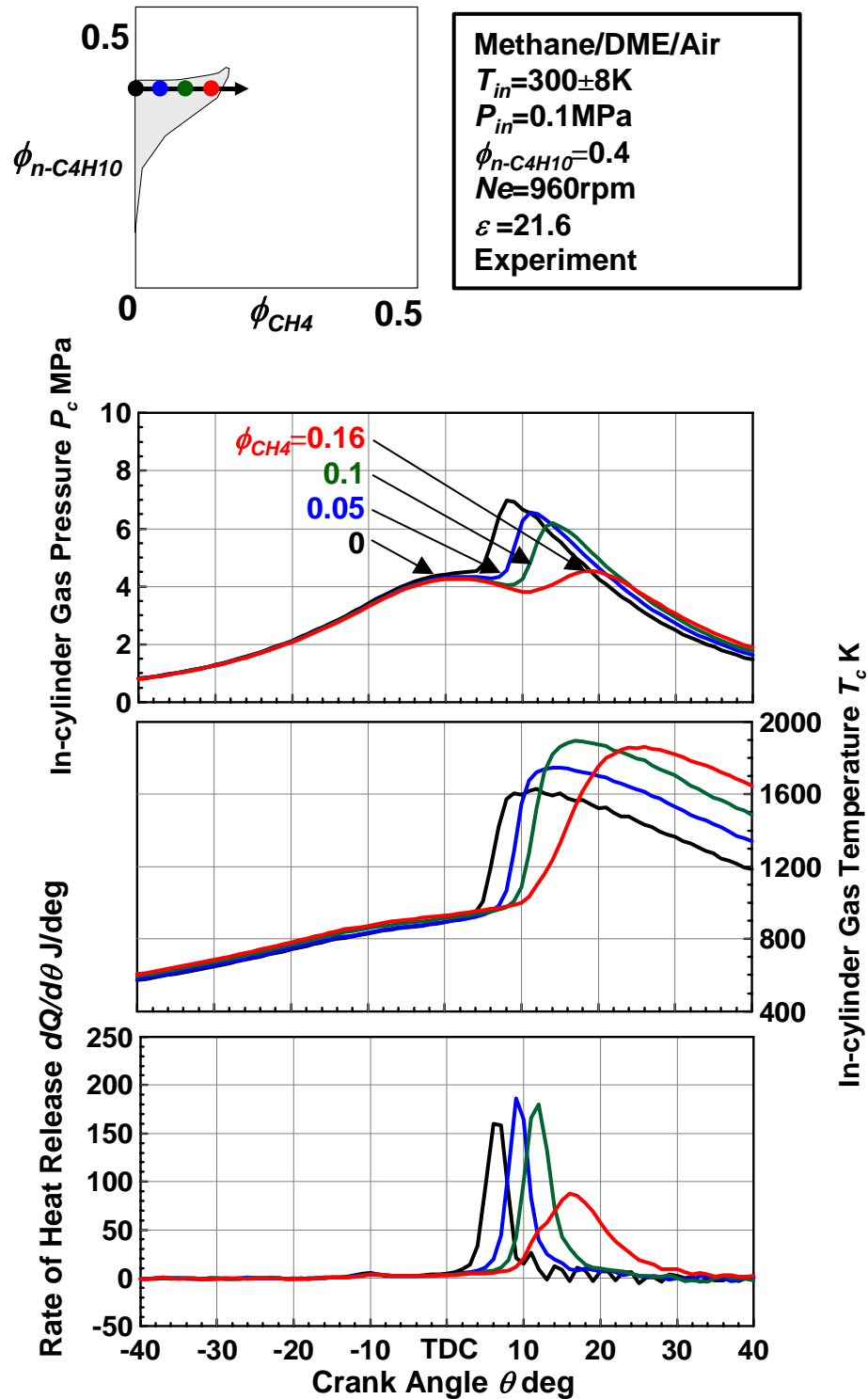


図 5-9 *n*-Butane 部分当量比一定条件において Methane 部分当量比を上昇させたときの筒内ガス圧力履歴，筒内ガス温度履歴および熱発生率履歴

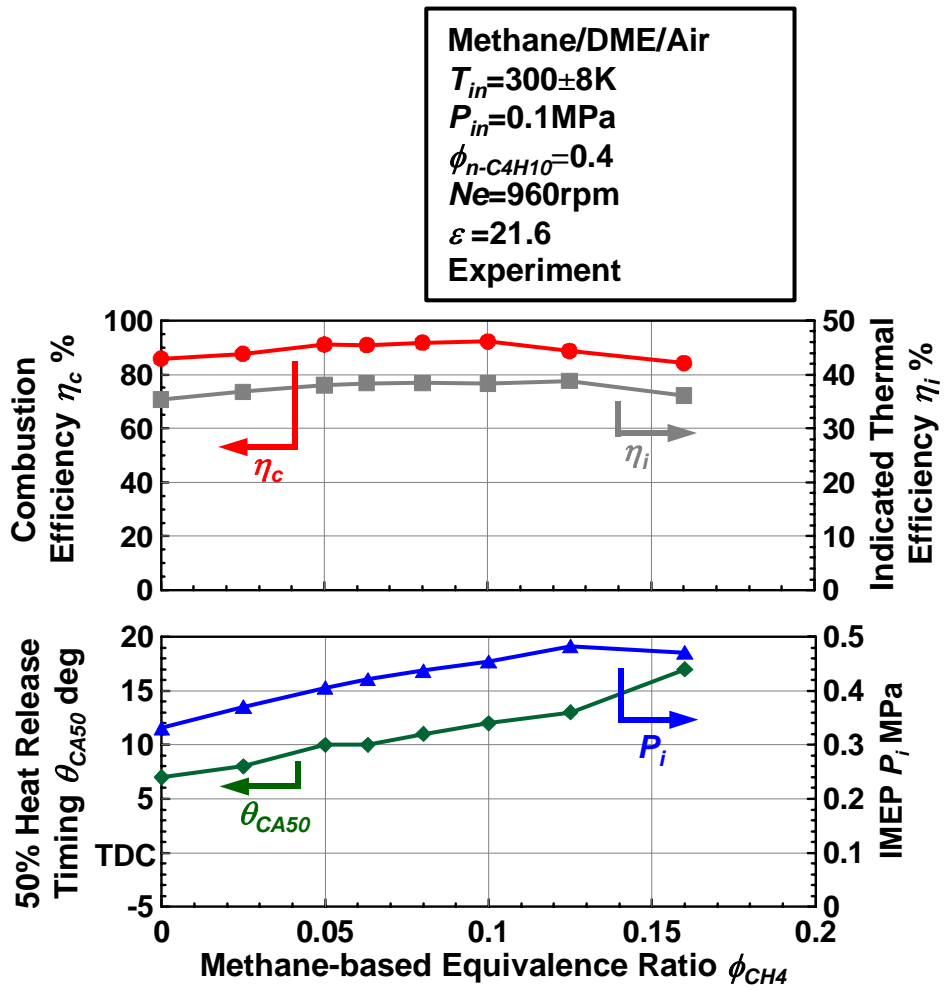


図 5-10 *n*-Butane 部分当量比一定条件において Methane 部分当量比を上昇させたときの  
 燃焼効率，図示熱効率，50%熱発生時期および IMEP

b) *n*-Butane 部分当量比の影響

図 5-8 中において、Methane の部分当量比が  $\phi_{CH_4}=0.05$  一定条件において、*n*-Butane の部分当量比を変化させた場合の実験点をピックアップした。図 5-11 に示したのは、Methane 部分当量比  $\phi_{CH_4}=0.05$  一定のときに、*n*-Butane の部分当量比を  $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.25, 0.315, 0.355, 0.4, 0.42$  と変化させた場合の筒内ガス圧力履歴、筒内ガス温度履歴および熱発生率履歴である。 $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.25$  においては、図 5-8 中でも示した通り着火に至らない。 $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.315$  では微弱な圧力、温度の上昇が見られる。熱発生率履歴を見ると低温酸化反応による熱発生が確認可能である。 $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.355$  以上になると高温酸化反応による発熱が起こり、*n*-Butane の部分当量比の増加に伴い圧力、温度の立ち上がる時期が早期化する。*n*-Butane の部分当量比が上昇すると、高温酸化反応による熱発生のピーク値が増加し、 $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.42$  では急峻な熱発生経過とともに、ノッキングによる熱発生率の振幅が確認される。熱発生期間も *n*-Butane の部分当量比の増加に従い短期化する。

図 5-12 には Methane の部分当量比が  $\phi_{CH_4}=0.05$  一定条件において、*n*-Butane の部分当量比を変化させた場合の、燃焼効率  $\eta_c$ 、図示熱効率  $\eta_i$ 、50% 熱発生時期  $\theta_{C_{450}}$ 、IMEPP<sub>i</sub> を示す。 $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.355$  以上で *n*-Butane 部分当量比の増加に伴い燃焼効率が上昇し、 $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.42$  のときに 90% を超える。*n*-Butane 部分当量比の増加に伴い 50% 熱発生時期は早期化するが、その時期が膨張行程にあるために、図示熱効率で 40% 弱、IMEP で 0.41MPa まで上昇する。

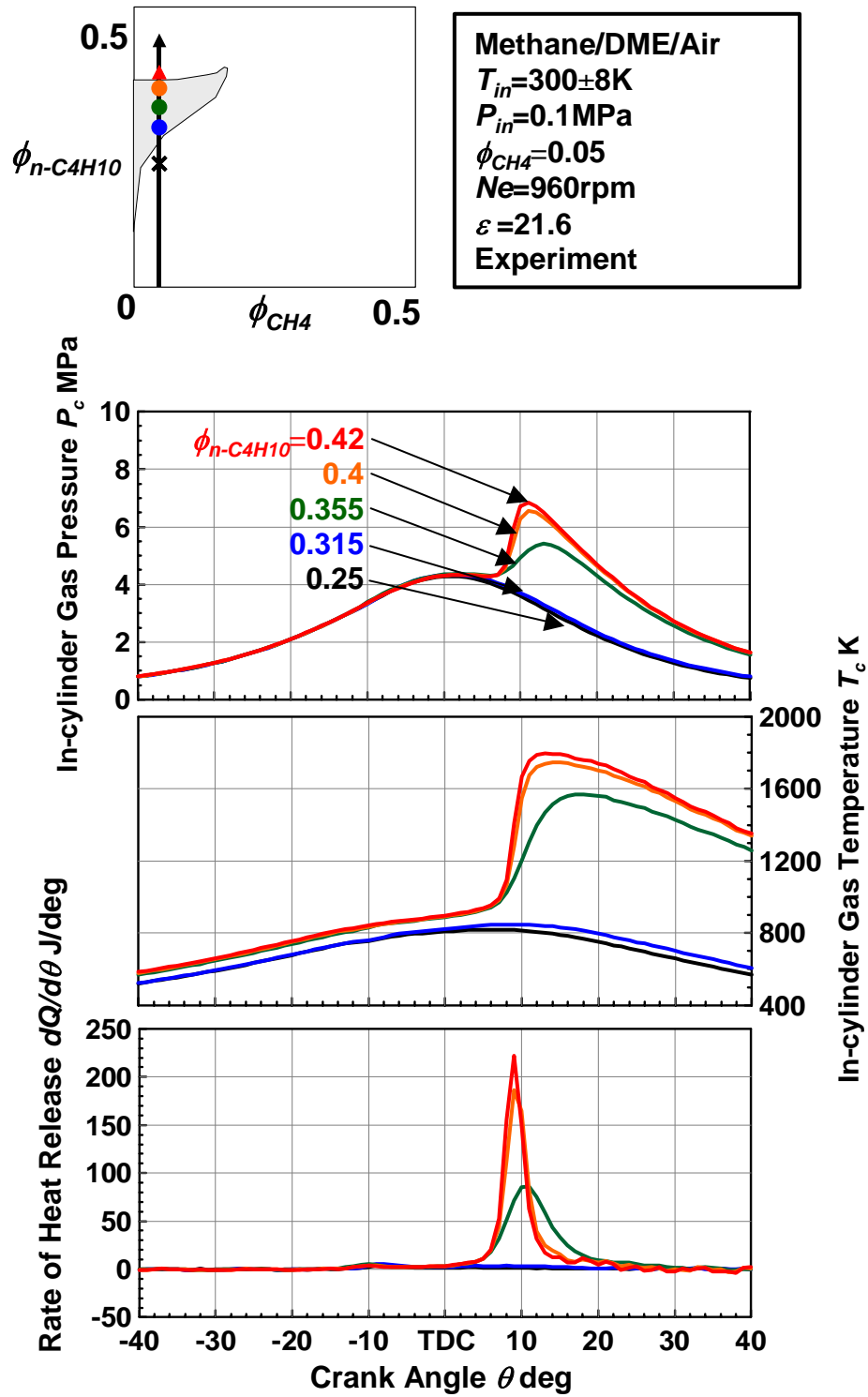


図 5-11 Methane 部分当量比一定条件において *n*-Butane 部分当量比を上昇させたときの筒内ガス圧力履歴，筒内ガス温度履歴および熱発生率履歴

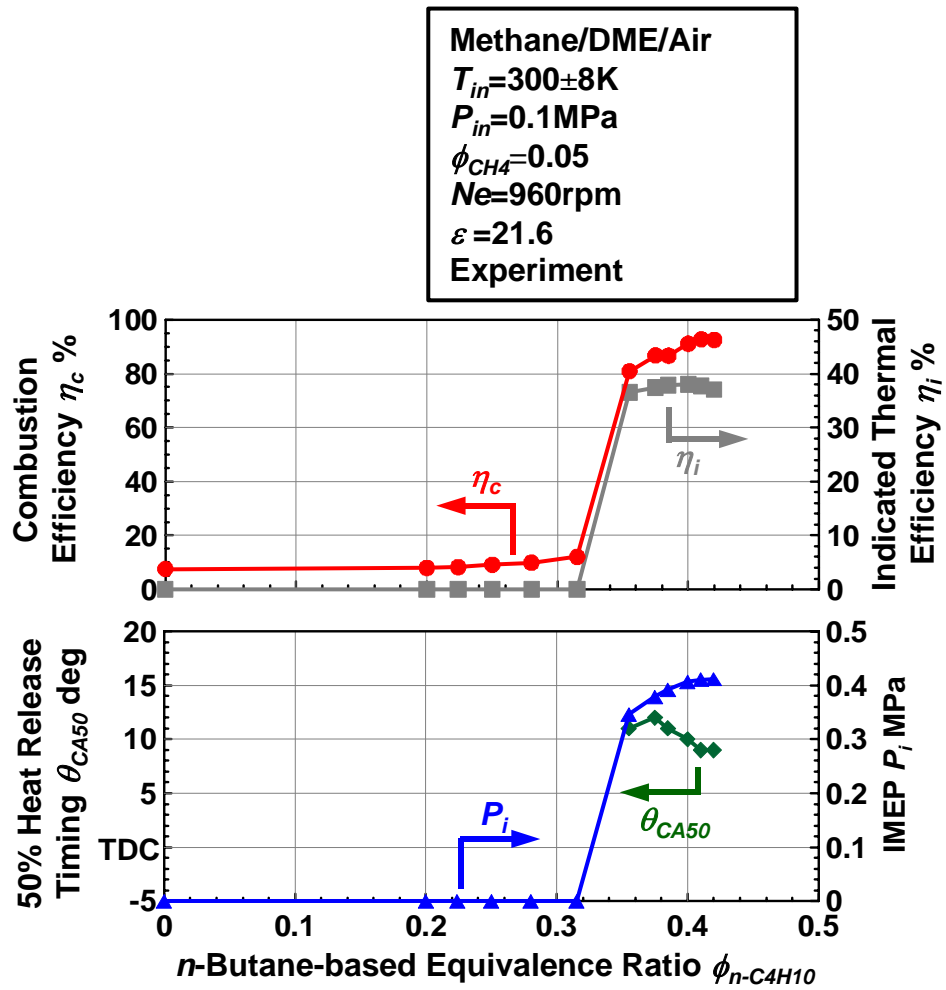


図5-12 Methane 部分当量比一定条件において  $n$ -Butane 部分当量比を上昇させたときの  
 燃焼効率，図示熱効率，50%熱発生時期および IMEP

5.3.3. Methane / *n*-Butane の混合割合と酸化反応開始時期および温度の関係

図 5-8 中で示した実験点について、両燃料の混合割合に対する酸化反応開始時期および酸化反応開始温度の関係を調査した。

図 5-13 に示したのは、図 5-8 中の実験点について燃焼効率が 50% 以上となった実験点について、Methane/*n*-Butane の混合割合に対する低温酸化反応、高温酸化反応の開始時期、開始温度である。下図の横軸が *n*-Butane の混合割合、上図横軸が Methane の混合割合を示す。Methane 単体のみの高温酸化反応開始温度については 図 5-7 同様に Jun らのデータ[86]を参照した。*n*-Butane の混合割合減少、Methane の混合割合増加に伴い、低温酸化反応、高温酸化反応開始時期は遅延化するが、その変化範囲は 5deg 以内であり、Methane/DME の場合と比較して小さい。また低温酸化反応、高温酸化反応開始温度は高温側にシフトする。*n*-Butane の混合割合が 0~0.42 の範囲では着火に至らなかったため、その範囲での酸化反応開始温度の傾向は分からないが、低温酸化反応開始温度、高温酸化反応開始温度は、混合割合に大きく依存しており近似することが可能である。つまり Methane/DME の場合同様に、低温酸化反応開始温度、高温酸化反応開始温度は投入熱量に関係なく、Methane/*n*-Butane の混合割合によって一意的に決まる。

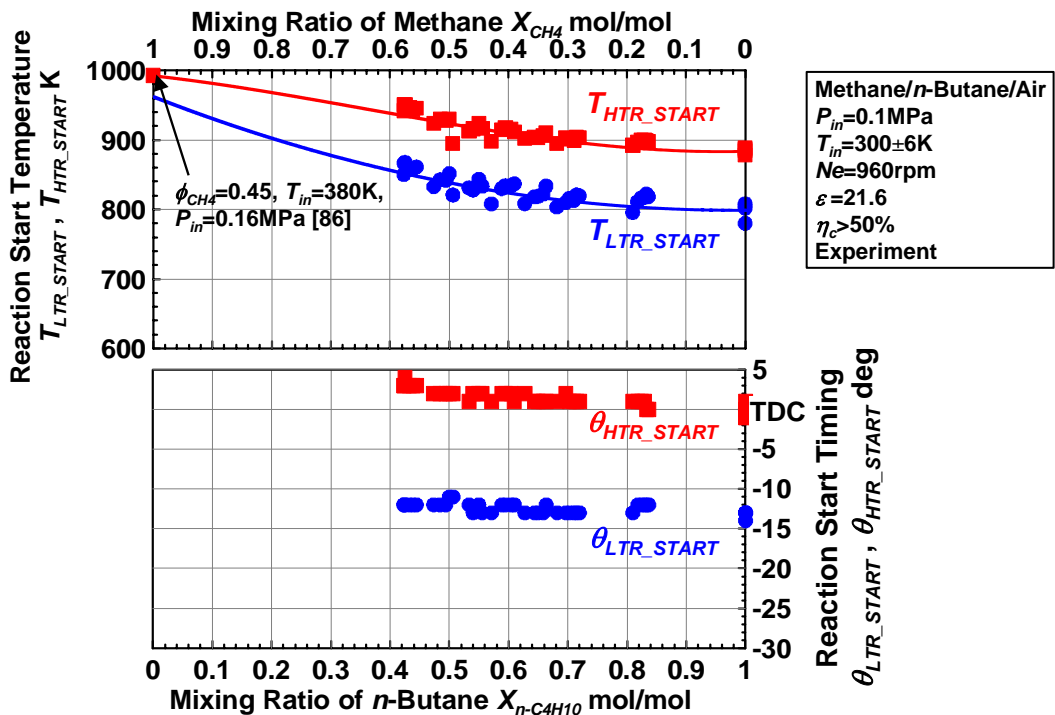


図 5-13 Methane / *n*-Butane の混合割合の変化が酸化反応開始時期，温度に及ぼす影響

#### 5.4. 高熱効率、高出力実現に必要な運転条件に関する考察

これまでの Methane/DME 混合実験および Methane/*n*-Butane 混合実験の結果から、反応性の異なる二成分の混合燃料を用いた予混合圧縮自己着火燃焼において、高熱効率、高出力を同時に実現可能にするための条件について考察を行う。ここでは図 5-2 と図 5-8 の運転領域マップ中に、熱効率と出力の指標として図示熱効率 $\eta_i$ と IMEPP $_i$ 、また熱効率と出力に大きな影響を及ぼすと考えられる燃焼効率 $\eta_c$ と 50%熱発生時期 $\theta_{C450}$ を等高線として記載していくことで、その考察を行っていく。

図 5-14 に Methane/DME 混合時の運転領域と図示熱効率の関係、図 5-15 に Methane/*n*-Butane 混合時の運転領域と図示熱効率の関係を示す。Methane/DME 混合時は、DME の部分当量比が低い値のときに、Methane の部分当量比が増加することで運転領域が拡大しているが、その拡大の方向に向かって図示熱効率の値が高くなり、半島の先端部分では 35%以上の値が確保される。一方、Methane/*n*-Butane 混合時は、*n*-Butane の部分当量比が増加する方向に図示熱効率の値が高くなり、 $\phi_{CH_4}=0.05$ 以上、 $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.4$ 以上で 35%を超え、最も投入熱量が多い点で 38%まで到達した。次に図 5-16 に Methane/DME 混合時の運転領域と IMEP の関係、図 5-17 に Methane/*n*-Butane 混合時の運転領域と IMEP の関係を示す。IMEP は図示熱効率の変化と傾向が同じであり、35%以上の図示熱効率が確保される点において、高い値を示す。Methane/DME 混合時は最大で 0.46MPa (図 5-4 参照)、Methane/*n*-Butane 混合時は最大で 0.5MPa まで到達している。

予混合圧縮自己着火燃焼において、上記マップ中において高熱効率、高出力を得るためには、投入した熱量がどれだけ発熱したかという燃焼の完結性と、その燃焼がどのタイミングで進行したか、ということが重要な指標となることが考えられる。特に燃焼進行のタイミングは熱発生進行速度に関わる問題であり、ノッキングを回避するためには押さえておくべき指標である。そこでこれまで示した運転領域とそれらの関係を考察した。

図 5-18 に Methane/DME 混合時の運転領域と燃焼効率の関係、図 5-19 に Methane/*n*-Butane 混合時の運転領域と燃焼効率の関係を示す。第 3 章では、単一燃料の予混合圧縮自己着火燃焼においては投入熱量がサイクル中の最高到達温度と密接な関係があり、その温度によって燃焼効率が決まることを示した。二成分燃料の場合も同じことが言える。図 5-18、図 5-19 とともに、マップ右上方向に投入熱量の値が大きくなる。Methane/DME 混合時、Methane/*n*-Butane 混合時いずれの場合にも、運転可能な領域の中で右上方向に燃焼効率が高くなっており、投入熱量に対する依存性が高い。Methane/DME 混合時はノッキングが発生した一部の点で 90%以上、拡大された運転領域で 80%以上の燃焼効率が得られている。一方、Methane/*n*-Butane 混合時も運転可能領域上部で 90%に達した。ノッキングに至らなければ、高い燃焼効率を確保しつつ運転が可能な範囲があるということである。

次に第 4 章および本章を通じて重要な指標であることが示された、50%熱発生時期と運転領域の関係について述べる。図 5-20 に Methane/DME 混合時の運転領域と 50%熱発生時

期の関係，図 5-21 に Methane/*n*-Butane 混合時の運転領域と 50% 熱発生時期の関係を示す。これら 2 つの図より，Methane/DME 混合時，Methane/*n*-Butane 混合時いずれの場合にも，マップ右下方向に向かって，50% 熱発生時期が遅延化していく傾向が見られる。Methane/DME 混合時に図示熱効率，IMEP とともに低い値になった領域では，50% 熱発生時期が圧縮行程になっている。しかし高い値を確保できた半島部分では，全て膨張行程になっている。この違いから，50% 熱発生時期が圧縮行程に位置する場合には，ピストンによる断熱圧縮と熱発生が重なってしまうことで急峻に燃焼反応が進行し，熱効率，出力ともに低くなってしまいが，50% 熱発生時期が膨張行程に位置する場合には，ピストンが上死点から下がり始めているものの，燃料の発熱により失火することなく燃焼が進行するため燃焼が緩慢になるため，ノッキングを回避した運転が可能となった，ということが分かる。この 50% 熱発生時期が膨張行程に位置する場合の現象が Methane/*n*-Butane 混合時の実験点において確認される。50% 熱発生時期が上死点后 18deg まで遅延化しても，燃焼が進行したことで，ノッキングを避けて高熱効率を高出力が確保された。つまり二成分の燃料を混合する場合に，投入熱量を増加させて燃焼効率を確保し，その混合比の調整により 50% 熱発生時期を膨張行程まで遅延化させれば，高熱効率，高出力な予混合圧縮自己着火燃焼が可能である。



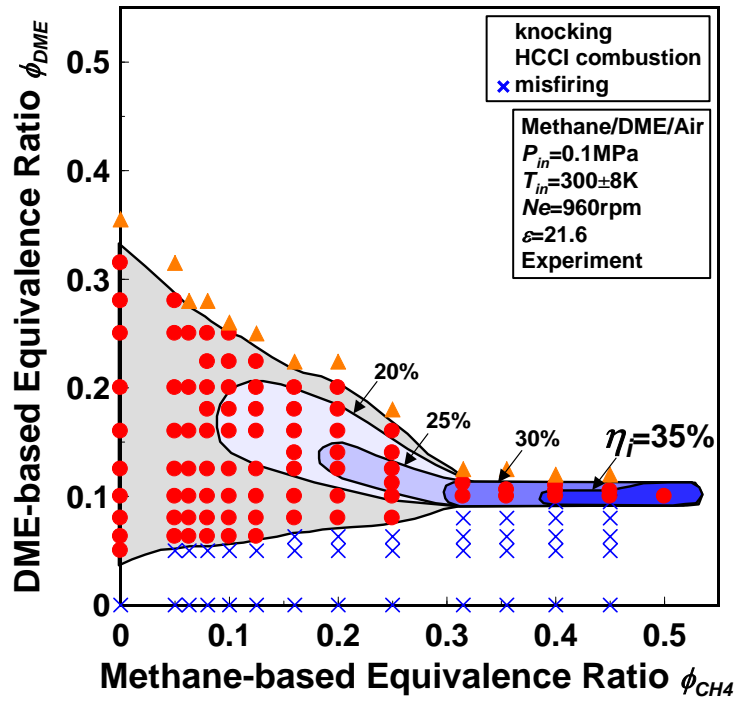


図 5-14 Methane/DME 混合時の運転領域と図示熱効率の関係

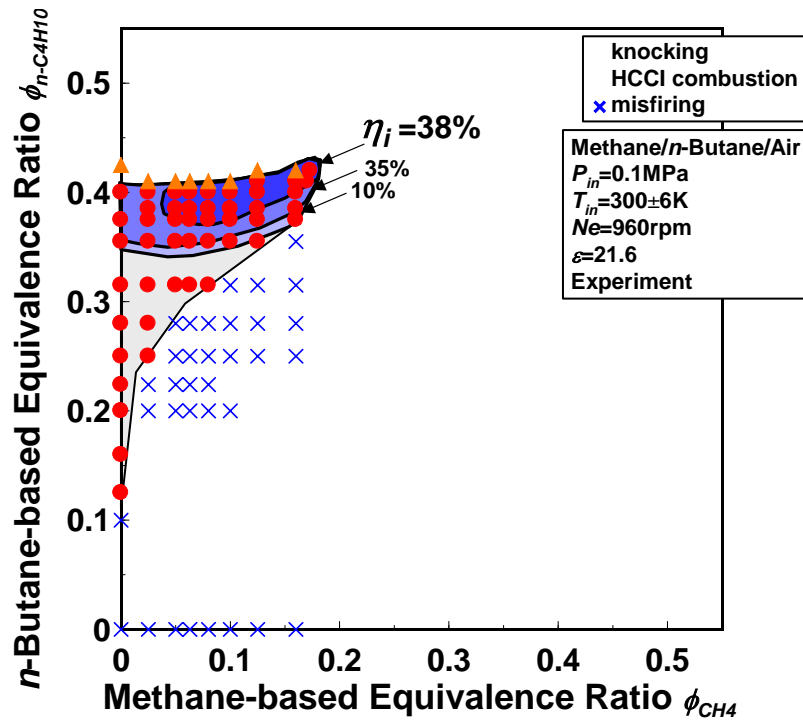


図 5-15 Methane/n-Butane 混合時の運転領域と図示熱効率の関係

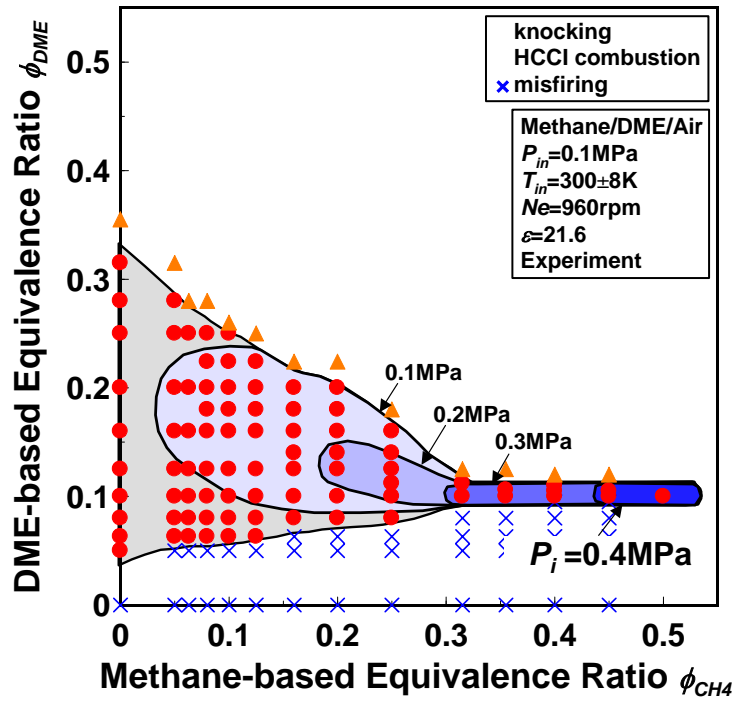


図 5-16 Methane/DME 混合時の運転領域と IMEP の関係

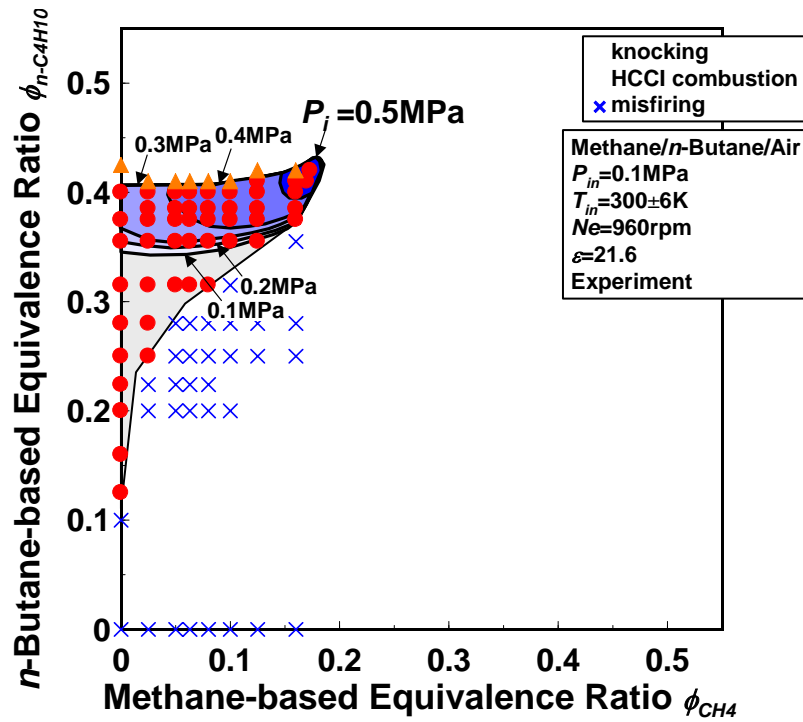


図 5-17 Methane/n-Butane 混合時の運転領域と IMEP の関係

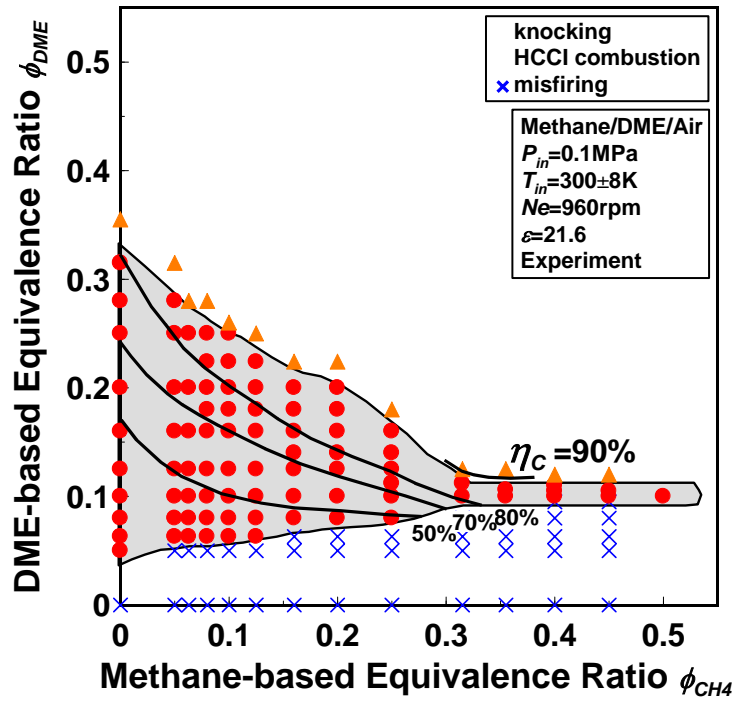


図 5-18 Methane/DME 混合時の運転領域と燃焼効率の関係

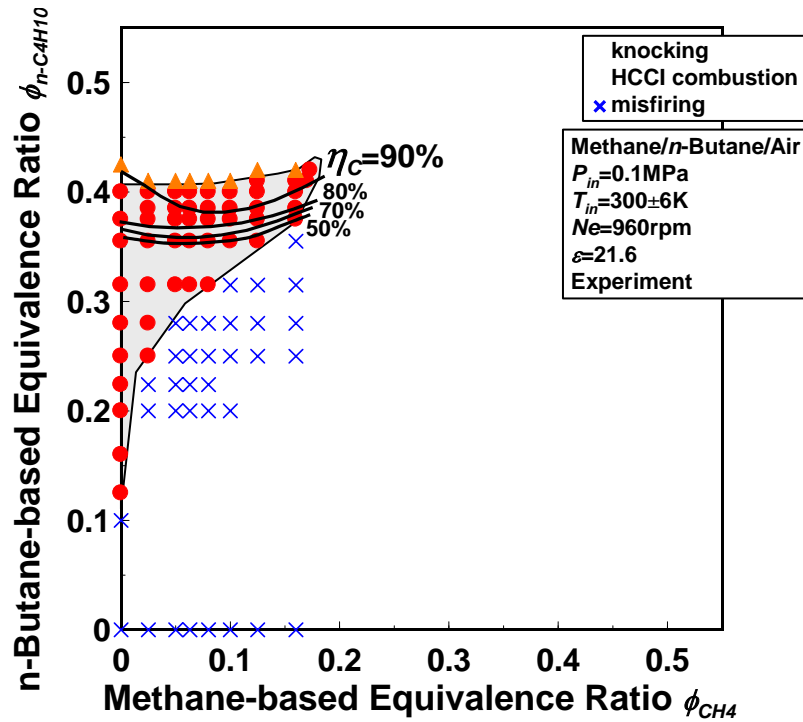


図 5-19 Methane/n-Butane 混合時の運転領域と燃焼効率の関係

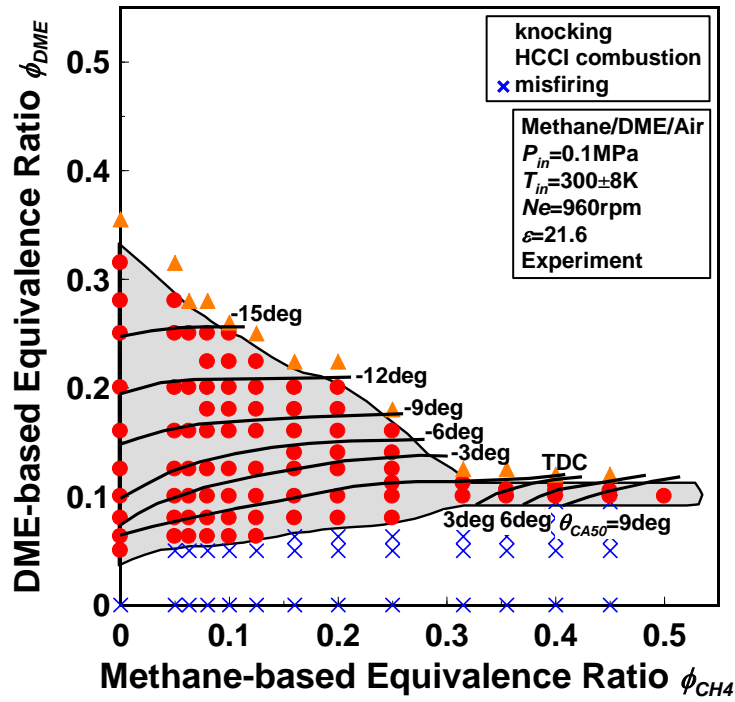


図 5-20 Methane/DME 混合時の運転領域と 50% 熱発生時期の関係

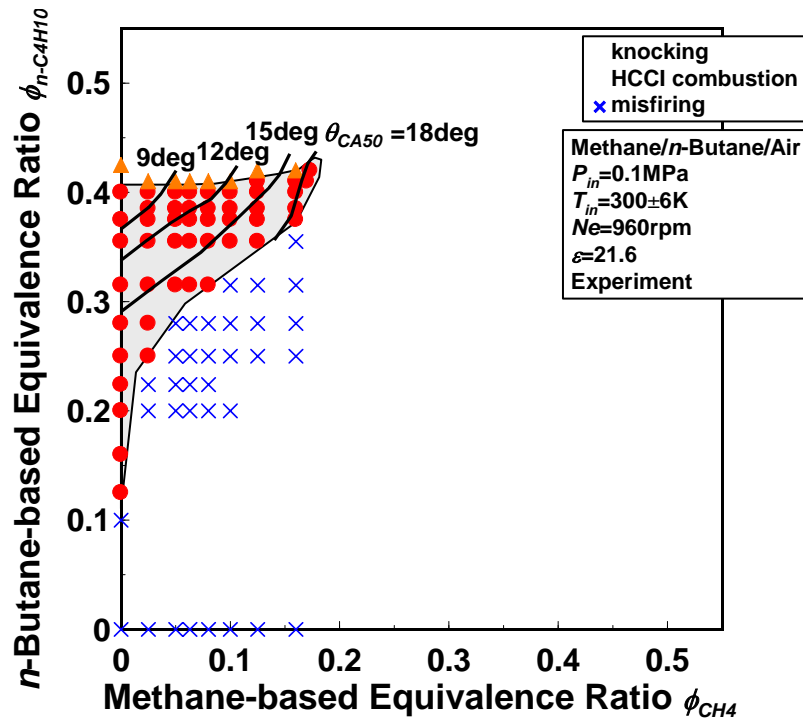


図 5-21 Methane/n-Butane 混合時の運転領域と 50% 熱発生時期の関係

次にこれまで示した運転領域に対して、第4章の計算結果でも使用した二成分混合燃料の混合割合をマップ中に表記すると、図 5-22、図 5-23 のようになる。図中にはそれぞれ DME の混合割合、*n*-Butane の混合割合を直線で表記した。Methane/DME 混合時には、DME の割合が低い領域で運転領域が拡大される。この領域では 50% 熱発生時期が膨張行程に位置することで出力が確保される。この混合割合に対する結果は、第4章で示した混合割合に対する 50% 熱発生時期の変化と同じ傾向であり、その意味で素反応数値計算の結果は実験結果を表現できていると言える。それは Methane/*n*-Butane 混合時も同じことであり、*n*-Butane の混合割合で  $X_{n-C_4H_{10}}=0.46 \sim 1$  の範囲で 50% 熱発生時期が膨張行程に位置するという計算結果は、まさしく図 5-23 の結果を表している。

予混合圧縮自己着火機関の実用化を考えた場合、これらの運転領域中で 1 点のみを選んで運転し続けることは困難である。機関を運転開始から定常運転まで持っていくことを考えた場合、例えば Methane/*n*-Butane の混合時で考えると、 $X_{n-C_4H_{10}}=0.5$  のラインでは燃料を増加させても失火からいきなり予混合圧縮自己着火領域に入り、すぐにロッキング限界に達してしまう。であるならば、機関の始動時は *n*-Butane のみでマップ縦方向に燃料を増加させ、出力が取れる点（例えば  $\phi_{n-C_4H_{10}}=0.3$ ）からマップ横方向に Methane を加えていくことで、定常運転まで持続させることが考えられる。

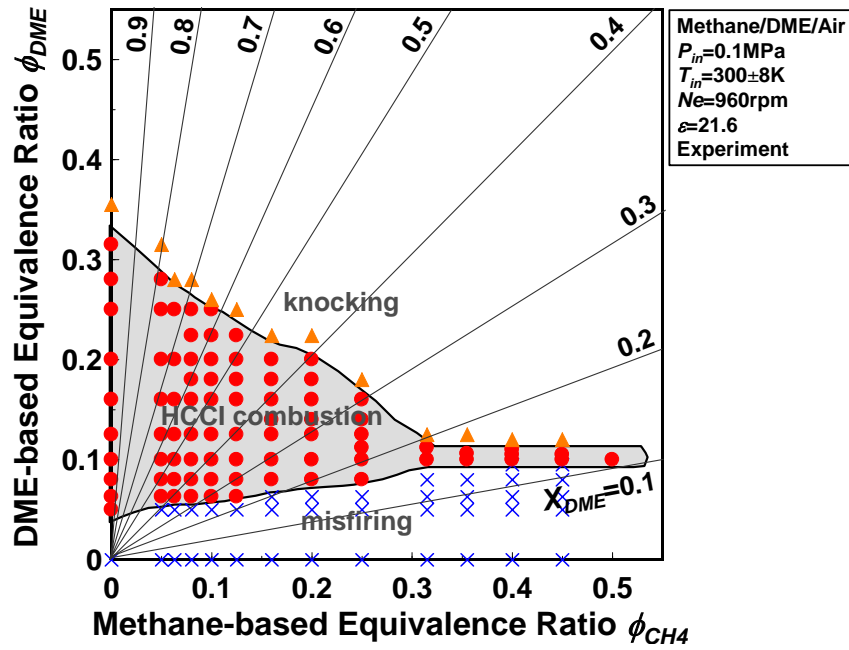


図 5-22 Methane/DME 混合時の運転領域と DME 混合割合の関係

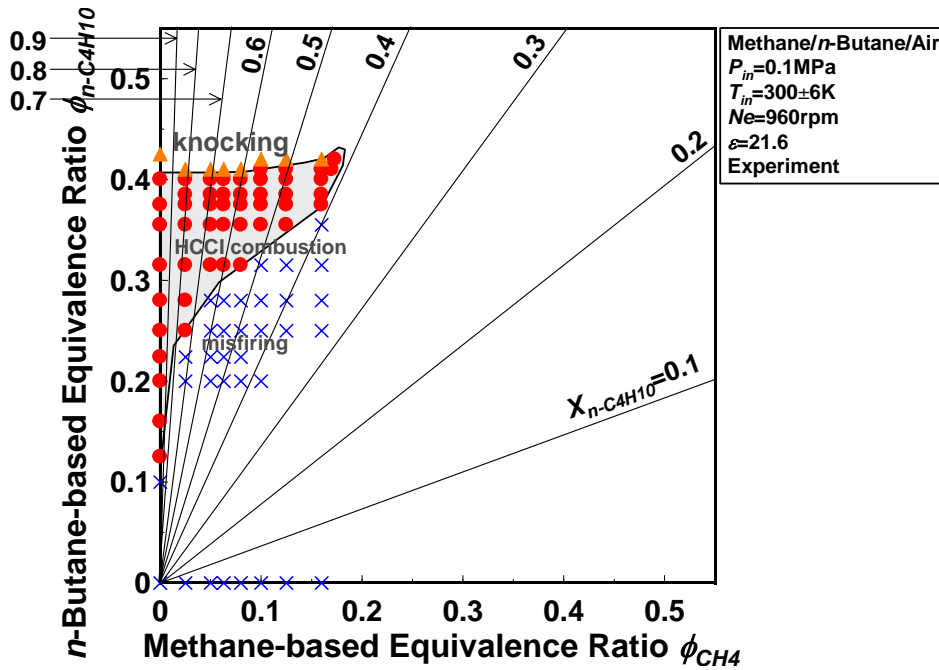


図 5-23 Methane/n-Butane 混合時の運転領域と n-Butane 混合割合の関係

### 5.5. 第5章のまとめ

第5章では、第4章の計算結果を受けて、着火温度の高い燃料として Methane、着火温度の低い燃料として DME と *n*-Butane を選択し、2つの組み合わせの二成分混合燃料を用いて燃焼実験を行い、運転可能領域と燃焼効率、IMEP、図示熱効率、着火温度および50%熱発生時期の関係を調査した。この結果から、混合割合の変化により高熱効率、高出力を獲得するための混合条件を解明した。

Methane の部分当量比と DME の部分当量比、また Methane の部分当量比と *n*-Butane の部分当量比をパラメータとして燃焼実験を行った。Methane/DME の場合、DME の部分当量比が0.1のときに、予混合圧縮自己着火燃焼が可能な範囲が拡大され、総当量比0.6まで運転可能であった。一方、Methane/*n*-Butane の場合には運転可能範囲が Methane/DME とは異なり、*n*-Butane の部分当量比0.4のときに範囲が拡大され、総当量比0.59まで運転可能であった。運転可能範囲が拡大できた領域においては、Methane の部分当量比が上昇すると、低温酸化反応開始時期、高温酸化反応開始時期が遅延化し、熱発生率ピーク値が下がり、高温酸化反応での熱発生が緩慢になった。

低温酸化反応開始温度、高温酸化反応開始温度について調べると、投入熱量の値は酸化反応開始温度に対する依存性がなく、二成分混合燃料の混合割合によって一意的に決定する。これは Methane/DME、Methane/*n*-Butane いずれの場合にも当てはまる。

また第4章および本章を通じて重要な指標であることが示された、50%熱発生時期と運転領域の関係について調べると、Methane/DME 混合時、Methane/*n*-Butane 混合時いずれの場合にも、Methane の混合割合が大きい方向に向かって、50%熱発生時期が遅延化していく傾向が見られる。50%熱発生時期が膨張行程に位置している場合には、ピストンが上死点から下がり始めているものの、燃料の発熱により失火することなく燃焼が進行し燃焼が緩慢になるため、ノッキングを回避した運転が可能となった、ということである。一方で燃焼効率は単一燃料の場合と同様に、投入熱量に依存しその量が増加すれば燃焼効率は確保される。つまり二成分の燃料を混合する場合に、投入熱量を増加させて燃焼効率を確保し、その混合比の調整により50%熱発生時期を膨張行程まで遅延化させれば、高熱効率、高出力な予混合圧縮自己着火燃焼が可能となる。

さらに二成分混合燃料を用いて予混合圧縮自己着火機関を始動から定常状態まで運転することを考えた場合には、1つの混合割合を選択して運転し続けるのではなく、単一成分燃料で運転を開始し、ある程度出力が取れた点から混合割合を調整して運転を持続させる手法が有効である。

## 第6章 結論

予混合圧縮自己着火機関は、均一希薄な予混合気を燃焼室に供給し、圧縮により自己着火燃焼を行う機関である。この機関は、火花点火機関では運転不可能な超希薄予混合気での運転が可能であり、ディーゼル機関の課題である窒素酸化物  $\text{NO}_x$  とすすの排出が極端に少ないため、高効率・低公害な次世代機関として注目されている。しかしその着火および燃焼は、予混合気中の燃料の酸化反応過程に大きく依存するため、着火時期の制御が困難なこと、未燃炭化水素 HC、一酸化炭素 CO の排出が多いこと、急峻な燃焼によりノッキングが発生し運転可能範囲が限られること、等の課題がある。

予混合圧縮自己着火機関に使用する燃料の最適化の1つの方法として、反応性の異なる2つの燃料を混合する手法に着目する。混合する燃料成分の違いおよびその混合割合の変化が予混合圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響を調査し、その調整により着火温度、着火時期をコントロールし、高熱効率、高出力を実現可能な二成分混合燃料の混合条件を解明することが本研究の目的である。

単一成分燃料の予混合圧縮自己着火燃焼では、サイクル中の最高到達温度が 1500K 以上に到達すれば高い燃焼効率が確保され、未燃 HC、CO の排出量はほぼ 0 となり、燃焼が完結することが明らかになった。しかし燃焼完結性を確保するためには最低限の投入熱量が必要であるが、それは同時に燃焼反応速度を上昇させることになる。単一成分燃料を用いた場合、燃焼完結性を確保することと、燃焼反応速度を抑制することはトレードオフの関係にあり、同時に実現するのは困難である。

二成分混合燃料の予混合圧縮自己着火燃焼では、まず Methane/DME の場合には、Methane の混合割合の増加に伴い、低温酸化反応開始時期、高温酸化反応開始時期が遅延化し、その時期が膨張行程まで遷移すると熱発生率のピーク値が小さくなる。このメカニズムは DME の低温酸化反応における反応性が強いこと、その過程で生成される多量の OH ラジカルが、低温酸化反応の進行時に関わらず Methane の酸化を促進する。また Methane 本来の酸化反応開始温度である 1100K よりも低い 1000K 付近で、DME の初期高温酸化反応で  $\text{H}_2\text{O}_2$  から生成された OH ラジカルが、さらに Methane の酸化を早める。結果として、高温酸化反応での熱発生が緩慢となりその反応期間が長期化する。

Methane/*n*-Butane の場合、*n*-Butane の低温酸化反応の反応性が DME と比較すると弱いために、低温酸化反応が発現したとしても OH、HCHO、 $\text{H}_2\text{O}_2$  等の中間生成物の生成量は少ない。ただし初期高温酸化反応での Methane の酸化促進が起こることで、高温酸化反応での熱発生が緩慢になるのは、Methane/DME の場合と同じである。Methane/*n*-Butane の場合



には膨張行程において燃焼反応が進行し、Methane の混合割合の増加に伴い熱発生率のピーク値を下げる結果となった。

また Methane/水素の場合には、Methane 本来の酸化反応開始温度と水素のそれが近いために、急峻な燃焼が確認された。高温酸化反応開始時期を調整できるクランクアングル範囲も狭い。Methane/一酸化炭素の場合には、少量の一酸化炭素の混合により着火温度が高温化するものの、一酸化炭素の量が増加すると着火温度は低温化した。この低温化する範囲では、着火時期も早期化する。

二成分混合燃料を用いて着火時期を調節することを考える場合、混合割合に対して着火時期が単調に変化し、着火温度が一意的に決定する組み合わせは、Methane と DME、Methane と *n*-Butane、Methane と水素を混合することが有効と思われる。

また 50% 熱発生時期と燃焼反応速度について解析した結果、Methane/DME の場合、DME 割合が減少し Methane 割合が増加するにつれて燃焼反応速度が上昇していくが、これは 50% 熱発生時期が圧縮行程で変化する場合のみであり、その時期が膨張行程に入り遅延化するのに伴い減少する。Methane/*n*-Butane の場合には、50% 熱発生時期が全て膨張行程になったが、*n*-Butane 割合の減少、Methane 割合の増加に伴い燃焼反応速度は低下する。また 50% 熱発生時期が全て膨張行程であるにも関わらず、広い範囲で調節可能である。Methane/水素の場合、水素の混合割合の減少、Methane 割合の増加に伴い、燃焼反応速度は低下していくものの、その速度の値が非常に高い。またその燃焼反応速度の変化は 50% 熱発生時期が圧縮行程にあるか膨張行程にあるかということとは関係なく、混合割合の変化にのみ依存する。また完全燃焼に至る混合割合の範囲が 3 つの組み合わせが最も広いにも関わらず、50% 熱発生時期の調節範囲は Methane/DME と比較して狭い。Methane/DME と Methane/*n*-Butane の結果について、50% 熱発生時期が膨張行程となる範囲で比較すると、混合割合の範囲で見れば Methane/*n*-Butane の方が運転可能範囲が広い。

膨張行程で燃焼反応が進行し、高燃焼効率を確保しつつ、燃焼反応速度を抑えて予混合圧縮自己着火燃焼させるためには、50% 熱発生時期を膨張行程まで遅延化させることが必須ということである。またその調節を行うためには、50% 熱発生時期が膨張行程となるときに燃焼反応速度を低下させることが可能な Methane/DME と Methane/*n*-Butane の組み合わせが適することが明らかになった。ただしこれらの結果は圧縮比に代表される機関条件によって変化する。特に 50% 熱発生時期が膨張行程に位置する混合割合においては、体積膨張率によって燃焼反応速度が大きく変化し、膨張行程における燃焼持続性も変化するようになる。

着火温度の高い燃料として Methane、着火温度の低い燃料として DME と *n*-Butane を選択し、2 つの組み合わせの二成分混合燃料を用いて機関を運転させると、Methane/DME の場合、DME の部分当量比が 0.1 のときに、予混合圧縮自己着火燃焼が可能な範囲が拡大さ

れ、総当量比0.6まで運転可能であった。一方、Methane/*n*-Butaneの場合には運転可能範囲がMethane/DMEとは異なり、*n*-Butaneの部分当量比0.4のときに範囲が拡大され、総当量比0.59まで運転可能であった。運転可能範囲が拡大できた領域においては、Methaneの部分当量比が上昇すると、低温酸化反応開始時期、高温酸化反応開始時期が遅延化し、熱発生率ピーク値が下がり、高温酸化反応での熱発生が緩慢になった。

低温酸化反応開始温度、高温酸化反応開始温度について調べると、投入熱量の値は酸化反応開始温度に対する依存性がなく、二成分混合燃料の混合割合によって一意的に決定する。これはMethane/DME、Methane/*n*-Butaneいずれの場合にも当てはまる。

また50%熱発生時期と運転領域の関係について調べると、Methane/DME混合時、Methane/*n*-Butane混合時いずれの場合にも、Methaneの混合割合が大きい方向に向かって、50%熱発生時期が遅延化していく傾向が見られる。50%熱発生時期が膨張行程に位置している場合には、ピストンが上死点から下がり始めているものの、燃料の発熱により失火することなく燃焼が進行し燃焼が緩慢になるため、ノッキングを回避した運転が可能となった、ということである。一方で燃焼効率は単一成分燃料の場合と同様に、投入熱量に依存しその量が増加すれば燃焼効率は確保される。つまり二成分の燃料を混合する場合に、投入熱量を増加させて燃焼効率を確保し、その混合比の調整により50%熱発生時期を膨張行程まで遅延化させれば、高熱効率、高出力な予混合圧縮自己着火燃焼が可能となる。

さらに二成分混合燃料を用いて予混合圧縮自己着火機関を始動から定常状態まで運転することを考えた場合には、1つの混合割合を選択して運転し続けるのではなく、単一成分燃料で運転を開始し、ある程度出力が取れた点から混合割合を調整して運転を持続させる手法が有効である。

以上の知見より予混合圧縮自己着火燃焼を実機に適用するための提案を以下に記す。

- ・単一成分燃料で燃焼完結性を確保しつつ、燃焼反応速度を抑えてノッキングを回避して予混合圧縮自己着火運転させることは困難である。単一燃料での運転を実現させるためには、可変バルブタイミング機構や可変圧縮比機構といった、複雑な構造を持つEGRガスのマネージメントシステムを構築することが必要である。
- ・二成分燃料を用いて予混合圧縮自己着火運転させるためには、低温酸化反応を有する燃料と低温酸化反応を持たない燃料を組み合わせることが望ましい。燃焼完結性を確保するための最低限の投入燃料量が確保できれば、その後はその2つの燃料の配合比をコントロールして燃焼反応が進行するタイミングを膨張行程まで遷移させることで、高熱効率、高出力を実現可能となる。
- ・二成分混合燃料を用いた予混合圧縮自己着火機関の実用化のためには、決められた配合比の燃料を用意するのではなく、始動状態では単一成分燃料での運転を行い、ある程度の出力が確保された後に二成分の燃料の配合比を適切に制御することで、高負荷側に遷

移させ定常運転させる手法が有効である。しかしこのような二成分混合燃料での運転手法を確立するには、高精度の燃料流量制御手法が必須となる。

<謝辞>

本研究は、著者が慶應義塾大学大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻に在籍中に、本学理工学部システムデザイン工学科、飯田訓正教授のもとで行ったものであり、同教授より賜ったご指導に対し、深く感謝します。研究室での日々の研究活動はもとより、学外での学会活動、国際会議での研究発表を行う機会を与えて頂いたことは、広く学識、見識を身につけることができただけでなく、多くの方と知り合うことができ貴重な経験になりました。

本学理工学部機械工学科の宗宮詮教授、植田利久教授、泰岡顕治助教授には、ご多忙中、本論文の審査において副査を務めていただき、丁寧なご指導を頂きましたことに対し深く御礼申し上げます。

また本学文学部西洋史学専攻神崎忠昭助教授には卒業論文の指導に留まらず、理工学部への転部という無謀な挑戦を全面的に支援していただいたことに深く御礼を申し上げます。

飯田研究室の諸先輩方、後輩諸君には、研究活動に留まらず御指導、御助言を頂いたことに感謝します。山崎由大さん、田大秀さんには、研究に関して指導をしていただきました。また小西純一君、権淳杓さん、山下大輔君、尾崎隼平君には同じチームとして、実験をサポートしていただきました。皆さんの協力のもと、本論文を完成させることが出来ました。ありがとうございました。

最後に、本論文完成までに、陰ながら支えてくれた両親に感謝します。

< 参考文献 >

- [1] 村中重夫, “高効率・超低排気ガソリンエンジンへの挑戦”, 日本機械学会誌, Vol.105, No.1007, pp.656-660 (2002)
- [2] 青柳友三, “超高効率ディーゼル機関への挑戦”, 日本機械学会誌, Vol.105, No.1007, pp.667-671 (2002)
- [3] DENYO ホームページ, <http://www.denyo.co.jp/>
- [4] HONDA 発電機カタログ
- [5] S. Onishi, S. H. Jo, K. Shida, P. D. Jo and S. Kato, “Active Thermo Atmosphere Combustion (ATAC) – A New Combustion Process for Internal Combustion Engines”, SAE Paper 790501 (1979)
- [6] M. Noguchi, Y. Tanaka, T. Tanaka and Y. Takeuchi, “A Study on Gasoline Engine Combustion by Observation of Intermediate Reactive Products during Combustion”, SAE Paper 790840 (1979)
- [7] P. M. Najt and D. E. Foster, “Compression-Ignited Homogeneous Charge Combustion”, SAE Paper 830264 (1983)
- [8] R. H. Thring, “Homogeneous-Charge Compression Ignition (HCCI) Engines”, SAE Paper 892068 (1989)
- [9] Y. Ishibashi and M. Asai, “Improving the Exhaust Emissions of Two-Stroke Engines by Applying the Activated Radical Combustion” SAE Paper 960742 (1996)
- [10] T. W. Ryan III and T. J. Callahan, “Homogeneous Charge Compression Ignition of Diesel Fuel”, SAE Paper 961160 (1996)
- [11] T. Takeda, K. Nakagome and K. Niimura, “Emission Characteristics of Premixed Lean Diesel Combustion with Extremely Early Staged Fuel Injection”, SAE Paper 961163 (1996)
- [12] Y. Mase, J. Kawashima, T. Sato and M. Eguchi, “Nissan’s New Multivalve DI Diesel Engine Series,” SAE Paper 981039 (1998)
- [13] 五十嵐哲也, 飯田訓正, “予混合圧縮着火エンジンにおける DME および n-Butane 燃料の自己着火・燃焼過程”, 日本機械学会論文集(B編), Vol.64, No.618, pp.279-286(1998)
- [14] 森本智史, 川端康晴, 桜井輝浩, 天野寿二, “天然ガスを燃料とする希薄予混合気圧縮自着火エンジンの運転特性 EGR による性能向上”, 自動車技術会論文集, Vol.32, No.3, pp.31-36 (2001)
- [15] D. Jun, K. Ishii and N. Iida, “Combustion Analysis of Natural Gas in a Four Stroke HCCI Engine Using Experiment and Elementary Reactions Calculation”, SAE Paper 2003-01-1089 (2003)
- [16] A. Burcat, K. Scheller and A. Lifshitz, “Shock-Tube Investigation of Comparative Ignition

- Delay Times for C1-C5 Alkanes”, *Combustion and Flame*, Vol.16, pp.29-33 (1971)
- [17] U. Pfahl, K. Fieweger and G. Adomeit, “Self-Ignition of Diesel-Relevant Hydrocarbon-Air Mixtures under Engine Conditions”, 26th International Symposium on Combustion, pp.781-789 (1996)
- [18] U. Pfahl and G. Adomeit, “Self-Ignition of Diesel-Engine Model Fuels at High Pressures”, SAE Paper 970897 (1997)
- [19] R. Minetti, M. Ribaucour, M. Carlier, C. Fittschen, and L. R. Sochet, “Experimental and Modeling Study of Oxidation and Autoignition of Butane at High Pressure” *Combustion and Flame*, Vol.96, pp.201-211, (1994)
- [20] 小堀繁治, 神本武征, “ディーゼル機関の着火遅れに及ぼす雰囲気条件, 噴射条件および燃料性状の影響”, *日本機械学会論文集( B 編 )*, Vol.65 ,No.631 ,pp.1152-1158( 1999 )
- [21] V. Warth, N. Stef, P. A. Glaude, F. Battin-Leclerc, G. Scacchi and G. M. Côme, “Computer-Aided Derivation of Gas-Phase Oxidation Mechanisms: Application to the Modeling of the Oxidation of n-Butane”, *Combustion and Flame*, Vol.114, pp.81-102 (1998)
- [22] S. Kojima “Detailed Modeling of n-Butane Autoignition Chemistry” *Combustion and Flame*, Vol.99, pp.87-136 (1994)
- [23] H. J. Curran, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, P. Dagaut, J. C. Boettner and M. Cathonnet “A Wide Range Modeling Study of Dimethyl Ether Oxidation” *International Journal of Chemical Kinetics*, Vol 30, No.3, pp229-241 (1998)
- [24] [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/)
- [25] B. Heyberger, F. Battin-Leclerc, V. Warth, R. Fournet, G. M. Côme and G. Scacchi, “Comprehensive Mechanism for the Gas-Phase Oxidation of Propene”, *Combustion and Flame*, Vol.126, pp.1780-1802 (2001)
- [26] B. Heyberger, N. Belmekki, V. Conraud, P. A. Glaude, R. Fournet and F. Battin-Leclerc, “Oxidation of Small Alkenes at High Temperature” *International Journal of Chemical Kinetics*, Vol.34, No.12, pp.666-677 (2002)
- [27] G. M. Côme, V. Warth, P. A. Glaude, R. Fournet, F. Battin-Leclerc and G. Scacchi, “Computer Aided Design of Gas-Phase Oxidation Mechanism: Application to the Modelling of n-Heptane and iso-Octane Oxidation”, 26th International Symposium on Combustion, pp.755-762 (1997)
- [28] P. A. Glaude, V. Warth, R. Fournet, F. Battin-Leclerc, G. Scacchi and G. M. Côme “Modelling of the Oxidation of n-Octane and n-Decane Using an Automatic Generation of Mechanisms”, *International Journal of Chemical Kinetics*, Vol.30, No.12, pp.949-959 (1998).
- [29] R. Fournet, F. Battin-Leclerc, P. A. Glaude, B. Judenherc, V. Warth, G. M. Côme, G. Scacchi, A. Ristori, G. Pengloan, P. Dagaut and M. Cathonnet “Experimental and Modeling Study of the Gas-Phase Oxidation of n-Hexadecane”, *International Journal of Chemical Kinetics*, Vol.33, No. 10, pp.574-586 (2001)
- [30] 佐藤和孝, 山根将嗣, 樋高義昭, “ジメチルエーテルの反応性と高温酸化反応機構”,

- 第 36 回燃焼シンポジウム, pp.88-90 (1998)
- [31] P. Dagaut, J. C. Boettner and M. Cathonnet, "Chemical Kinetic Study of Dimethylether Oxidation in a Jet Stirred Reactor from 1 to 10 atm: Experiments and Kinetic Modeling", 26th International Symposium on Combustion, pp.627-632 (1996)
- [32] P. A. Glaude, B. Judenherc, R. Fournet, F. Battin-Leclerc, V. Warth, G. M. Côme and G. Scacchi, "Experimental and Modelling of the Gas-Phase Oxidation of Methyl and Ethyl Tert Butyl Ether", Combustion and Flame, Vol.121, pp.345-355 (2000)
- [33] 中野道王, 久保修一, 浅井健 " ガソリンの素反応モデル開発 第 1 報 : 着火遅れ時間と圧縮着火燃焼 " 第 35 回燃焼シンポジウム, pp.208-210 (1997)
- [34] M. P. Halstead, L. J. Kirsch and C. P. Quinn, "The Autoignition of Hydrocarbon Fuels at High Temperatures and Pressure-Fitting of Mathematical Model". Combustion and Flame, Vol.30, pp.45-60 (1977)
- [35] J. S. Cowart, J. C. Keck and J. B. Heywood, "Engine Knock Prediction Using a Fully-Detailed and a Reduced Chemical Kinetics Mechanism" 23rd International Symposium on Combustion, pp.1055-1062 (1990)
- [36] M. Schreiber, A. S. Sakak, A. Lingens and J. F. Griffiths, "A Reduced Thermokinetic Model for the Autoignition of Fuels with Variable Octane Ratings", 25th International Symposium on Combustion, pp.933-940 (1994)
- [37] P. Amneus, D. Nilson, F. Mauss, M. Christensen and B. Johansson, "Homogeneous Charge Compression Ignition Engine: Experimental and Detailed Kinetic Calculations", COMODIA 98, pp.567-572 (1998)
- [38] Y. Yamasaki and N. Iida, "Numerical Simulation of Auto-Ignition and Combustion of n-Butane and Air Mixtures in a 4 Stroke HCCI Engine by Using Elementary Reactions", SAE Paper 2000-01-1834 (2000)
- [39] T. Koyama, Y. Ibaragi and N. Iida, "Numerical Analysis of Auto-Ignition and Combustion Process of Dimethyl Ether / Air Mixtures", ISAF XIII, Part II 13 (2000)
- [40] J. E. Dec, "A Computational Study of the Effects of Low Loading and EGR on Heat Release Rates and Combustion Limits in HCCI Engines", SAE Paper 2002-01-1309 (2002)
- [41] S. M. Aceves, D. L. Flowers, C. K. Westbrook, J. R. Smith, W. Pitz, R. Dibble, M. Christensen and B. Johansson. "A Multi-Zone Model for Prediction of HCCI Combustion and Emissions" SAE Paper 2000-010327 (2000)
- [42] T. Noda and D. Foster, "A Numerical Study to Control Combustion Duration of Hydrogen-Fueled HCCI by Using Multi-Zone Chemical Kinetics Simulation" SAE paper 2001-01-0250 (2001)
- [43] S. C. Kong, C. Marriott, R. D. Reitz and M. Christensen, "Modeling and Experiments of HCCI Engine Combustion Using Detailed Chemical Kinetics with Multidimensional CFD", SAE Paper 2001-01-1026 (2001)

- [44] S. B. Fiveland and D. N. Assanis, "Development of a Two-Zone HCCI Combustion Model Accounting for Boundary Layer Effects" SAE Paper 2001-01-1028 (2001)
- [45] S. M. Aceves, D. L. Flowers, J. Martinez-Frias, J. R. Smith, C. K. Westbrook, W. J. Pitz, R. W. Dibble, J. F. Wright, W. C. Akinyei and R. P. Hessel, "A Sequential Fluid-Mechanic Chemical-Kinetic Model of Propane HCCI Combustion" SAE Paper 2001-01-1027 (2001)
- [46] W. L. Easley, A. Agarwal and G. A. Lavoie, "Modeling of HCCI Combustion and Emissions Using Detailed Chemistry", SAE Paper 2001-01-1029 (2001)
- [47] T. Wakisaka, N. Kato, T. T. Nguyen, K. Okude, S. Takeuchi and Y. Isshiki, "Numerical Prediction of Mixture Formation and Combustion Process in Premixed Compression Ignition Engines", COMODIA 2001 (2001)
- [48] J. C. Livengood and P. C. Wu, "Correlation of Autoignition Phenomena in Internal Combustion Engines and Rapid Compression Machines", 5th International Symposium on Combustion, pp.347-356 (1955)
- [49] 脇坂知行, 金尚奎, 高田洋吾, 瀧山武, "予混合圧縮着火機関における混合気形成過程のシミュレーション -混合気均一度に及ぼす燃料噴射時期, ガス流動, 燃焼室形状の影響-", 第 17 回内燃機関シンポジウム, pp.327-332 (2002)
- [50] 佐藤進 飯田訓正, "素反応数値計算による Livengood-Wu 積分着火遅れモデルの検証", 自動車技術会論文集, Vol.36, No.1, pp.65-71 (2005)
- [51] T. Amano, S. Morimoto and Y. Kawabata, "Modeling of the Effect of Air/Fuel Ratio and Temperature Distribution on HCCI Engines", SAE Paper 2001-01-1024 (2001)
- [52] C. K. Westbrook and W. J. Pitz, "Detailed Kinetic Modeling of Autoignition Chemistry", SAE Paper 872107, (1987)
- [53] C. Chevalier, P. Louessard, U. C. Muller and J. Warnatz, "A Detailed Low-Temperature Reaction Mechanism of n-Heptane Auto-Ignition", COMODIA 90, pp.93-97 (1990)
- [54] C. K. Westbrook, "Chemical Kinetics of Hydrocarbon Ignition in Practical Combustion System", U.S. Department of Commerce, DE-2002-791580 (2000)
- [55] M. J. Pilling "Low-Temperature Combustion and Autoignition", Combustion and Flame, Vol.35, pp.13-16 (1977)
- [56] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz and C. K. Westbrook, "A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation", Combustion and Flame, Vol.114, pp.149-177 (1998)
- [57] 三好明, "燃焼詳細反応機構自動生成システムの開発", 自動車技術会講演論文集, No.105-04, pp.35-40 (2004)
- [58] 飯田訓正, 木戸口和浩, 久保進, "予混合火炎からのラジカル発光計測に関する研究 (ガソリン, メタノール, メタン火炎の発光スペクトルの特徴と当量比依存性)" 日本機械学会論文集 (B編), Vol.59, No.568, pp.301-307 (1993)



- [59] N. Iida, "Combustion Analysis of Methanol-Fueled Active Thermo Atmosphere Combustion (ATAC) Engine Using a Spectroscopic Observation", SAE Paper 940684 (1994)
- [60] 池田裕二, 衣笠敦志, 金子誠, 中島健, "局所火炎発光(OH\*, CH\*, C<sub>2</sub>\*)計測によるS.I.エンジン内の火炎特性に関する研究", 日本機械学会論文集(B編), Vol.67, No.657, pp.172-179 (2001)
- [61] 手崎衆, "0次元モデルの検討 DME", 日本機械学会 RC176 エンジンの燃焼モデリングに関する調査研究分科会研究報告書, pp.335-344 (2002)
- [62] R. Collin, J. Nygren, M. Richter, M. Aldén, L. Hildingsson and B. Johansson, "Studies of the Combustion Process with Simultaneous Formaldehyde and OH PLIF in a Direct-Injected HCCI Engine", COMODIA 2004, pp.311-317 (2004)
- [63] 池本雅里, 小島雄一郎, 飯田訓正, "DMEを燃料とするHCCI機関のEGRによる制御システムの開発", 自動車技術会講演論文集, No.40-05, pp.13-18 (2005)
- [64] K. J. Douglas, N. Milovanovic, J. W. Turner and D. Blundell, "Fuel Economy Improvement Combined CAI and Cylinder Deactivation (CDA) - An Initial Study-", SAE Paper 2005-01-0110 (2005)
- [65] 浦田泰弘, 粟坂守良, 高梨淳一, 梅本篤, "電磁式自在バルブタイミング機構を備えたガソリン圧縮着火エンジンの研究", 第41回燃焼シンポジウム, pp.493-494 (2003)
- [66] 山岡士朗, 角谷啓, 島田敦史, 木原裕介, 助川義寛, "ガソリン HCCI 制御システムの開発(第1報)-HCCI 安定制御のためのパラメータ抽出-", 自動車技術会講演論文集, No.45-05, pp.1-4 (2005)
- [67] 角谷啓, 山岡士朗, 島田敦史, 鈴木邦彦, 佐藤真也, "ガソリン HCCI 制御システムの開発(第2報)-気筒別燃料制御による多気筒エンジンのHCCI燃焼の安定化-", 自動車技術会講演論文集, No.45-05, pp.5-8 (2005)
- [68] 熊野賢吾, 山崎由大, 飯田訓正, "ラジカル発光計測による予混合気中の燃料濃度不均質性がHCCI機関の着火・燃焼に与える影響の解析", 日本機械学会論文集B編, Vol.71, No.701, pp.295-302 (2005)
- [69] 石山拓二, 塩路昌宏, 大橋健司, 中川秀樹, 中井俊作, "天然ガスを燃料とする直接噴射式PCCI機関の性能と排気に及ぼす噴射条件の影響", 自動車技術会論文集, Vol.35, No.4, pp.35-40 (2004)
- [70] M. Konno and Z. Chen, "Ignition Mechanisms of HCCI Compression Process Fueled with Methane/DME Composite Fuel", SAE Paper 2005-01-0182 (2005)
- [71] 山下大輔, 権淳杓, 佐藤進, 飯田訓正, "HCCI機関におけるメタン/DME混合燃料の自着火と燃焼機構に関する研究", 自動車技術会講演論文集, No.25-05, pp.1-6 (2005)
- [72] T. Muto, H. Shoji and K. Yoshida, "A Study of Ignition Timing Control in an HCCI Engine Effects of Compression Ratio Changes and Methane Additive", The 13th International Pacific Conference on Automotive Engineering, pp.647-652 (2005)

- [73] 金子真也, 安藤博和, 小川英之, 宮本登, “DME を吸入する予混合圧縮着火機関の燃焼制御 反応抑制物質の直接噴射による運転領域の拡大”, 自動車技術会講演論文集, No.99-01, pp.1-6 (2001)
- [74] 山田裕之, 東野学, 手崎衆, “DME へのメタノール添加による HCCI 機関の着火時期遅延機構の検証”, 日本機械学会論文集 B 編, Vol.70, No.697, pp.2455-2461 (2004)
- [75] 首藤登志夫, 小野義敬, 高橋健洋, “DME 改質ガスによる DME 予混合圧縮着火機関の着火制御”, 日本機械学会論文集 B 編, Vol.70, No.696, pp.2205-2212 (2004)
- [76] G. Shibata, K. Oyama, T. Urushihara and T. Nakano, “The Effect of Fuel Properties on HCCI Engine Combustion Characteristics and Performances”, IFP International Conference 2004, pp.45-58 (2004)
- [77] J. Zheng, D. Miller, N.P. Cernansky, D. Liu and M. Zhang, “The Effect of Active Species in Internal EGR on Preignition Reactivity and on Reducing UHC and CO Emissions in Homogeneous Charge Engines”, SAE Paper, 2003-01-1831 (2003)
- [78] R. J. Osborne, G. Li, S. M. Sapaford, T. H. Lake and M. R. Heikal, “Evaluation of HCCI for Future Gasoline Powertrains”, SAE Paper 2003-01-0750 (2003)
- [79] L. Koopmans, H. Storms, S. Lundgren, O. Backlund and I. Denbratt, “Demonstrating a SI-HCCI-SI Mode Change on a Volvo 5-Cylinder Electronic Valve Control Engine”, SAE Paper 2003-01-0753 (2003)
- [80] R. Chen, N. Milovanovic, J. Turner and D. Blundell, “The Thermal Effect of Internal Exhaust Gas Recirculation on Controlled Auto Ignition”, SAE Paper 2003-01-0751 (2003)
- [81] T. Urushihara, K. Hiraya, A. Kakuhou and T. Itoh, “Expansion of HCCI Operating Region by the Combination of Direct Fuel Injection, Negative Valve Overlap and Internal Fuel Reformation”, SAE Paper 2003-01-0749 (2003)
- [82] T. W. Ryan III, D. Mehta and T. J. Callahan, “HCCI: Fuel and Engine Interaction”, IFP International Conference 2004, pp.59-67 (2004)
- [83] W. G. Lovell, “Knocking Characteristics of Hydrocarbons”, Industrial and Engineering Chemistry, Vol.40, pp.2388-2438 (1948)
- [84] “平成 15 年度経済産業省委託 DME 燃料実用化基盤事業に関する報告書 DME 燃料の安全性を確保する技術開発”, 高圧ガス保安協会液化石油ガス研究所 (2004)
- [85] R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller; “CHEMKIN-II: A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics”, Sandia National Laboratories Report, SAND89-8009B (1989)
- [86] A. E. Luz, R. J. Kee and J. A. Miller; “SENKIN: A FORTRAN Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics With Sensitivity Analysis”, Sandia National Laboratories Report, SAND87-8248 (1988)

- [87] Y. Yamasaki and N. Iida, "Numerical Analysis of Auto-Ignition and Combustion of n-Butane and Air Mixtures in the Homogeneous Charge Compression Ignition Engine by Using Elementary Reactions", SAE Paper 2003-01-1090 (2003)
- [88] J. O. Olsson, P. Tunestål and B. Johansson, "Closed-Loop Control of an HCCI Engine", SAE Paper 2001-01-1031 (2001)
- [89] D. Jun, K. Ishii and N. Iida, "Combustion Analysis of Natural Gas in a Four Stroke HCCI Engine Using Experiment and Elementary Reactions Calculation", SAE Paper 2003-01-1089 (2003)
- [90] S. Sato, Y. Yamasaki, H. Kawamura and N. Iida, "Research on the Influence of Hydrogen and Carbon Monoxide on Methane HCCI Combustion", JSME International Journal (Series B), Vol.48, No.4, pp.725-734 (2005)