

予混合圧縮着火機関の着火燃焼に及ぼす圧力の影響

陳之立*

Effects of Pressure on Ignition and Combustion in HCCI Engine

by

Zhili Chen

Abstract

To investigate the effects of pressure on ignition and combustion for homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine fueled by methane/DME (dimethyl ether) mixture, a series of bench tests and combustion simulations with constant pressure were conducted. Findings from the result are showing as follows: Engine can run over a wide load range if the compression ratio of the engine were changed according to avoiding of misfire or rapid combustion. Higher pressure enhances the progress of low temperature oxidation subsequently advances the start of high temperature oxidation. The peak of heat release rate of high temperature oxidation is not affected by pressure.

Keywords: Compression Ignition Engine, Alternative Fuel, Combustion, Simulation / DME, Variable Compression Ratio, Low/High Temperature Oxidation, Degenerate, HCCI

1. まえがき

均一予混合圧縮着火(HCCI)機関に対して、地球温暖化、エネルギー有効利用、低公害などの観点から関心が高まり、近年、研究が急ピッチに進められている。このタイプの機関の主な問題点は着火および燃焼の制御にある。筆者らは、これまでに機関の圧縮比を変化させることによる制御の可能性と有効性を示した⁽¹⁾。しかし、圧力の変化が着火や燃焼に及ぼす影響のメカニズムは明らかになっていない。実機関や急速圧縮装置を用いた研究がなされているが、着火後の温度変化に伴って圧力も変化するので、定量的な評価は難しい⁽²⁾。

本研究では圧縮比の異なる実機関において着火や燃焼の圧力影響を評価し、素反応モデルを用いて燃焼シミュレーションとあわせて、着火および燃焼に及ぼす圧力の影響を明らかにする。

2. 供試機関および供試燃料

メタンのような自着火温度の高い燃料を予混合圧縮自着火させるために、適量な着火性の高い DME を添加すれば、容易に運転できる。図 1 に実験装置の概略を示す。耐圧タンクに充填されたメタンガスおよび DME は圧力調整器によって減圧され、流量計と混合器を通過した後、当量比のサイクル毎の変動を避けるために吸気弁の上流 600mm~900mm の吸気管に 4 カ所に分けて導入した。DME の流量は精度 0.1g の電子天秤、メタンの流量は精度 0.1% の乾式流量計と質量流量計で計測した。供

試機関はヤンマーディーゼル製の汎用単気機関で、ボア 92mm、ストローク 96mm、排気量 638 cm³、標準圧縮比 17.7 である。ガasketの厚さを変えることによって圧縮比を変化させる。

3. 素反応モデル、計算条件 およびシミュレーション手法

筆者らのこれまで研究では、DME とメタン混合した場合、DME の低温酸化反応が先に起り、続けて DME の一次、二次高温酸化反応、メタンの酸化反応との順序で燃焼は進行することが明らかにされている⁽¹⁾。このため、DME の圧力影響を明らかにすることは、HCCI の着火や初期燃焼の解明の鍵となる。本研究では、低温酸化反応の機構を考慮されている Curran らの反応スキーム⁽³⁾をもちいた。このスキームが複数の研究者より、実機関のラジカル発光およびガスサンプリング⁽⁴⁾や排気分析⁽⁵⁾による反応過程における主要化学種変化の追跡が行われ、モデルの妥当性が示されている。化学種は 78、素反応数は 336、適用温度圧力範囲はそれぞれ 650-1300K、0.1-4.0MPa である。このスキームを CHEMKIN II とリンクさせ、燃焼場の濃度、温度を均一と仮定して計算を行った。DME の当量比は ϕ 0.4、初期温度は 700K 一定にして、圧力を実機実験の圧縮比を変化させたときの死点圧力(モータリング時)に合わせて設定した。

* 工学部動力機械工学科助教授

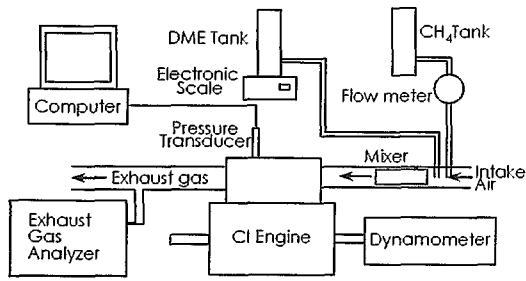


Fig.1 Schematic Diagram of the Bench Test System

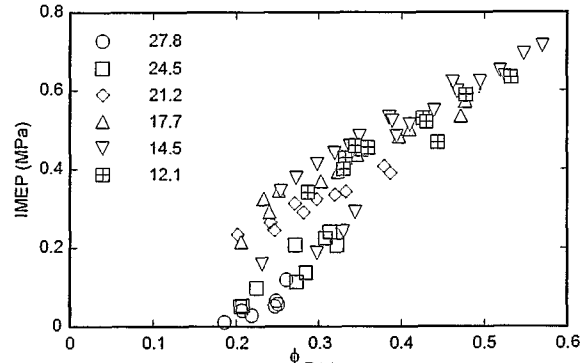


Fig.2 The Relationships of Indicated Mean Effective Pressure (IMEP) and Total Fuel Equivalent Ratio for Varied Compression Ratios

Table 1 Property of the Fuels

Attribute	Methane	DME	Diesel Fuel
Cetane Numbe	0	>55	40~55
Autoignition Temp. °C	630	235	250
Boiling Point °C	-161.5	-25	180~370
Stoichi. AF	17.2	9	14.6
Hu MJ/kg	50.1	28.4	42.5

4. 実機実験および考察

HCCI 機関では一般的に、失火とノッキングによって運転範囲は制限される。例えば、この機関の標準圧縮比 17.7 の場合、運転可能な当量比範囲は 0.21~0.47 で、図示平均有効圧力は約 0.2~0.5MPa となる。この当量比範囲より燃料を少なくすると混合気が薄すぎて着火せず、機関の運転できなくなる。逆に燃料を多く投入すると、燃焼は爆発的に起り、ノッキングが発生してやはり運転が不可能になる。このような運転範囲は機関の出力の制限は、HCCI 機関の実用化に大きな制約となる。図 2 に圧縮比を変化させたときの図示平均有効圧力を筒内総括当量比 (投入したDMEとメタンの当量比の和) に対して整理した結果を示す。圧縮比を高めると、運転領域は低負荷側 (希薄側) に移動し、逆に圧縮比を低下させると運転運転範囲は高負荷側 (リッチ側) に移動する。その結果、運転可能な当量比範囲が 0.18~0.58 に拡大され、機関の出力は 0 から約 0.7MPa までカバーできるようになる。

以上のような運転範囲の拡大は圧縮比の変化によって着火および燃焼の形態が変化した結果だと考えられる。図 3 に圧縮比による熱発生率の変化の一例を示す。低い圧縮比に比べて高い圧縮比のほうが着火は早く、燃焼は激しく、燃焼期間は短い。これは圧縮比が高いときにノッキングリミットによる出力制限の原因となる。逆に、低い圧縮比では熱発生率は緩やかになり、高負荷域まで運転範囲が拡大できる。また、いずれの圧縮比においても、燃焼は段階的に進行することが観察される。これらは DME の低温酸化反応、DME の一次高温酸化反応および DME 二次高温酸化反応⁽⁴⁻⁵⁾とメタンの高温酸化反応である⁽¹⁾である。図 4 に実機関の着火時期を圧縮比に対して整理した結果を示す。ただし、低温および高温酸化反応の開始は、それぞれ低温および高温酸化反応の発熱量の 2.5%に達した時期と定義した。図から、低温、高温酸化反応ともに、圧力が高いときに着火が早くなる。

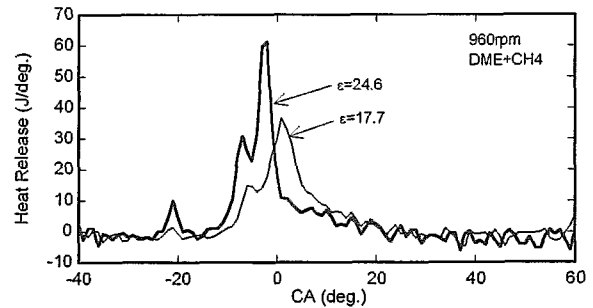


Fig.3 Compare the Heat Release Rates at Higher Compression Ratio with at Lower One

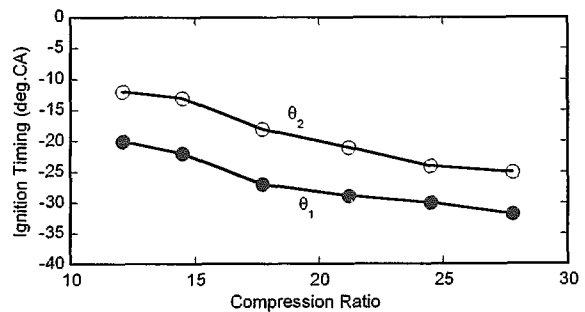


Fig.4 The Relationships between Ignition Timing of Low and High Temperature Oxidation for Varied Compression Ratios

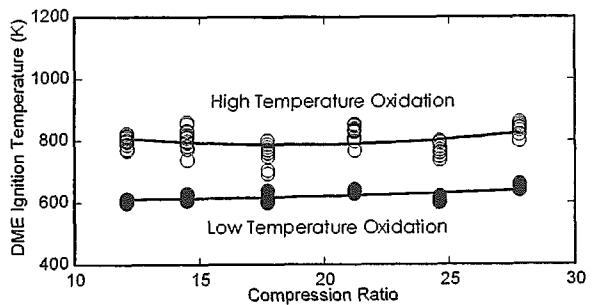


Fig.5 Ignition Temperatures of Low and High Temperature Oxidation for Varied Compression Ratios

本研究の圧縮比の変化幅と回転速度 (960rpm) において、その変化幅はそれぞれ 11deg.CA と 14deg.CA である。図 5 に実機実験の着火温度を示す。低温および高温酸化反応開始温度のいずれも圧縮比によらずほぼ一定である。

以上、圧縮比による着火開始時期や熱発生率への影響は、圧縮による筒内平均温度の変化が主因と考えられる。とくに図 5 に示した低温および高温酸化反応の開始温度は圧縮比に関係しない結果は、温度が予混合着火を支配していると示唆する。以下、着火や燃焼の形態に対する圧力の影響を定圧場の燃焼シミュレーションによって検討する。

5. 燃焼シミュレーションによる圧力の影響の検討

5.1 着火および縮退時期の定義

実機実験と異なって定圧場での着火はピストン圧縮よりも徐々に始まり、通常の熱発生率の急激な立ち上がり比べて分かりにくいので、着火時期は熱発生率の微分値を用いて定義した。図 6 に低温酸化反応着火時期 τ_1 、高温酸化反応着火時期 τ_2 、低温酸化反応縮退時期 τ_d の定義を示す。

τ_1 および τ_2 はそれぞれ計算開始から低温酸化反応および高温酸化反応が開始するまでの時間であり、 τ_p は計算開始から低温酸化反応の縮退するまでの時間を表す。これらは以下のように定義した。

τ_1 : 低温酸化反応の開始時期。本研究の計算範囲で最も着火が遅く、反応速度が遅い圧力 2.65MPa の場合の低温酸化反応発縮退まで反応熱 (ΣQ_{Low}) の 2.5% に達する時点の熱発生率の変化率 (d^2Q/dt^2) を低温酸化反応の開始 τ_1 と定義した (本研究では 0.297J/msec² であった)。

τ_2 : 高温酸化反応の開始時期。上述 τ_1 と同様に一次高温酸化反応の反応熱 ($\Sigma Q_{High 1}$) の d^2Q/dt^2 (本研究では 0.499J/msec²) を求め、これに達する時間を τ_2 と定義する。

τ_d : 低温酸化反応の縮退終了時期。低温酸化反応の縮退が終了するとき、 d^2Q/dt^2 が負から正に変る時間 ($d^2Q/dt^2=0$) を τ_d と定義する。

5.2 着火開始時期の圧力影響

燃焼シミュレーションによる熱発生率の一例を図 7 に示す。実機実験と同じように、燃焼は低温酸化反応から始まり、一段縮退して、高温酸化反応が開始する。また、低温および高温酸化反応のいずれも圧力が高いときに着火開始時期は早く、ピーク値も高い。図 8 は着火開始時期 τ_1 および τ_2 を圧力に対して整理した結果である。圧力が高くなると τ_1 と τ_2 がともに短くなる。これは反応速度が反応物濃度の指数関数の乗積であるので、反応物の量が一定であれば、圧力が高い方濃度が高いため反応は早くなる。一方、 τ_1 よりも τ_2 が圧力の影響を強く受ける。これについては 5.3 節で検討する。また、シミュレーションの着火開始時期は図 4 に示した実機実験の結果と定性的に一致している。定量的評価については、シミュレーションの計算開始温度が 700K および定圧場を仮定したため、また、着火開始時期の定義も実機実験と相違があるので定量的に一致しないが、各圧力におけるピークの位置から判断して、明らかに圧力の変化によって着火開始時期と同じ傾向を示すので、上記定量的評価は妥当だと考える。

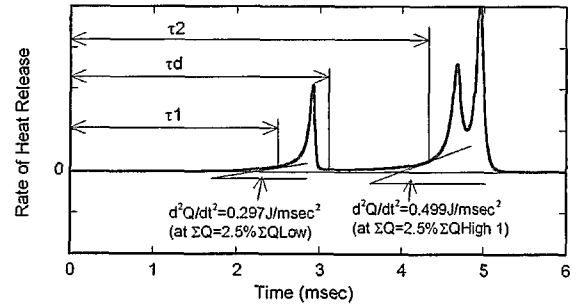


Fig.6 The Definitions of the Start Time in Simulation.

□1: Low Temperature Oxidation.

□2: High Temperature Oxidation.

□d: Degeneration of Low Temperature Oxidation.

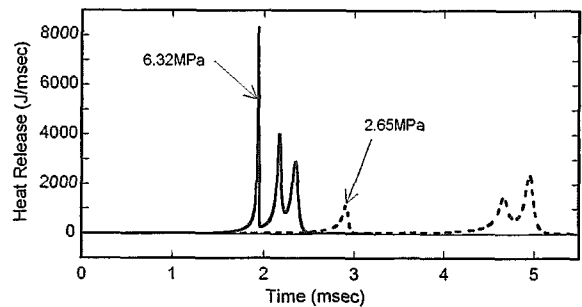


Fig. 7 Comparison of Heat Release Rates at Low and High Pressure in Simulation.

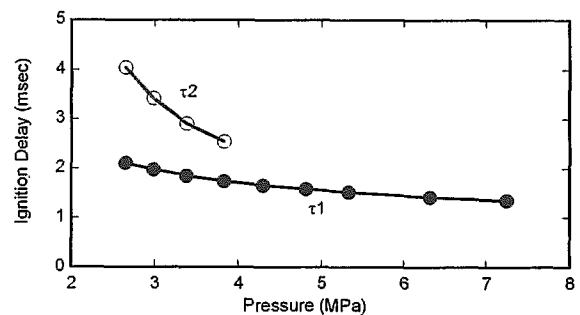


Fig. 8 Relationships of Ignition Timing and Pressure for Low and High Temperature Oxidation in Simulation

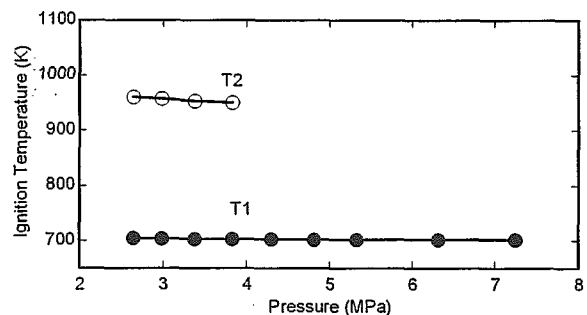


Fig.9 Relationships of Ignition Temperature and Pressure for Low and High Temperature Oxidation in Simulation

また、圧力が 3.82MPa 以上になると、低温酸化と高温酸化の熱発生が連続するため、高温酸化反応の着火時期と着火温度が読み取れなくなるので、発熱、温度や縮退についての検討はこの圧力までとする。

図 9 に低温および高温酸化反応の着火温度を示す。両方ともほぼ一定である。これは実機実験の結果と一致して、着火はほぼ温度に支配されることを示唆している。

図 10 に縮退終了時期 τ_d までの反応熱 (ΣQ_{Low}) と高温酸化反応開始時期 τ_2 までの反応熱 (ΣQ_2) を示す。図 11 に同じ時期の温度を示す。圧力が高い場合の低温酸化反応の縮退終了時までの発熱量は多く、温度も高い。一方、高温酸化反応を開始させるための必要な発熱量と温度はほぼ一定である。このため、圧力が低いほど、縮退後から高温酸化反応開始までの間の累積発熱量および温度の差が大きい。この差は圧力上昇につれて縮小し、ある圧力以上でなくなり、すなわち、縮退の途中に高温酸化反応が開始し、低温と高温酸化反応が連続して発生する。

5.3 低温酸化反応の発熱量の圧力影響

上述から、圧力の変化は低温酸化反応の発熱量に影響する。この影響を検討するために、DME の低温酸化反応機構を簡単に整理する。

DME の低温酸化反応の主に次の素反応からなる⁽³⁻⁵⁾。

- No.312: ch3och3+oh =ch3och2+h2o
- No.320: ch3och2 =ch2o+ch3
- No.325: ch3och2+o2 = ch3och2o2
- No.331: ch3och2o2 =ch2och2o2h
- No.332: ch2och2o2h =oh+ch2o+ch2o
- No.333: ch2och2o2h+o2 =o2ch2och2o2h
- No.334: o2ch2och2o2h =ho2ch2ocho+oh
- No.335: ho2ch2ocho =och2ocho+oh

DME は 312 の水素引き抜き反応の後、第一回酸素付加反応 (325) と第二回酸素付加反応 (333) が優勢であれば、反応 334 と 335 によって OH ラジカルが倍増し、連鎖分枝反応が加速する。逆に、それと競争する CH₂O の生成反応 320 と 332 が優勢のとき、連鎖移動反応のみ起り、OH の数が増えないので、反応は加速されない。図 12、13 にそれぞれ第一回と第二回酸素付加反応 (325 と 333) およびこれらと競争する CH₂O の生成反応 (320 と 332) の速度と温度の関係を示す。太線は圧力 6.32MPa、細線は圧力 3.82MPa を示す。一方、実線は 325 または 333 による酸素付加反応、破線は 320 または 332 による CH₂O の生成を示す。第一回酸素付加反応 (325) は温度温度によらず常に CH₂O の生成 (320) より優勢である。また、325 は第二回酸素付加反応 (333) に比べて速度は高いので、333 は連鎖のネックとなることが分る。図 13 により、反応が開始初期に 333 が優勢だが、温度が上昇につれて、332 が優勢になる。このため、333 の反応物である CH₂OCH₂O₂H が CH₂O に分解してしまい、反応物の消失による反応進行の低下が、OH ラジカル連鎖分枝率を低下させる一因と考える。一方、333 の正、逆反応速度係数は図 14

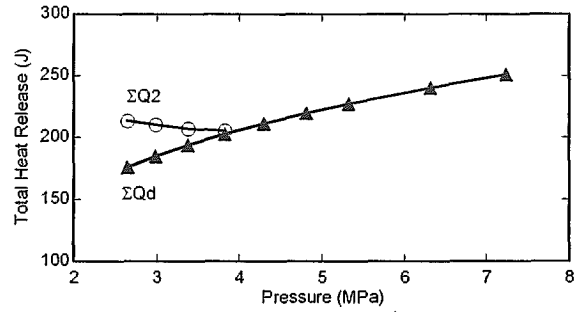


Fig.10 Total Heat Release at the End/Start of Low/High Temperature Oxidation

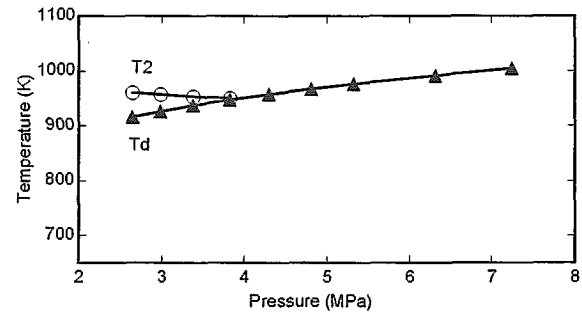


Fig.11 Temperatures at the End/Start of Low/High Temperature Oxidation

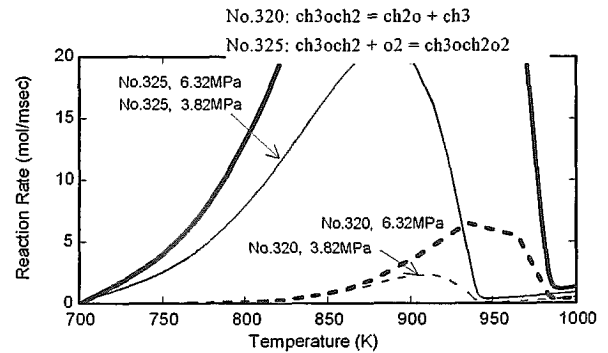


Fig.12 Reaction Rates of No.320 and No.325 for Lower and Higher Pressure

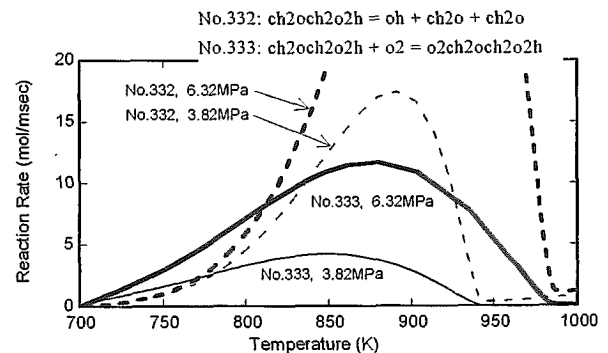


Fig.13 Reaction Rates of No.320 and No.325 for Lower and Higher Pressure

に示すように、全温度域に亘って負の温度依存性を持つ。このため、低温酸化反応の進行に伴う温度の上昇はこの反応が進まなくなるもう一つの原因となる。この二つ要因が縮退に寄与する度合について、今後検討する予定が、いずれにしても、図 13 に示すように、圧力は高いときに 322 が 333 より優勢に転じるのは比較的高い温度のときに起る。このため、圧力が高い場合の低温酸化反応の縮退は遅くなり、低温酸化反応が正方向（右方向）により多く進行できる。その結果、図 10 と 11 に示したように、圧力が高いときの低温酸化反応の発熱量は多くなる。多量発熱の結果、温度も高くなる。逆に圧力が低い場合、発熱量が減少し、温度も低い。

一方、先に述べたように、圧力が変化しても高温酸化反応を開始させるための累積発熱量と温度はほぼ一定である。このため、図 10 と 11 から分るように、圧力が低いほど、縮退から高温酸化反応開始のために必要な発熱量および温度の差が大きい。図 15 に一例として圧力 2.65MPa の場合の低温酸化反応が縮退から高温酸化反応開始までの OH ラジカルを供給する主な素反応の反応速度を示す。低温と高温酸化反応の間に 334 と 335 からの OH の供給がほとんどなく、それまでに蓄積した H₂O₂ の解離(51)がもっとも重要な供給源となっている。これらの反応からの OH は DME の水素引き抜き反応(321)を引き続き進行させ、高温酸化反応が開始できる温度レベルまで反応熱を発生させる。図 7 に示した圧力 2.65MPa 熱発生率と比べると、この過程は低温酸化反応の時間よりも長く、非常にゆっくりと進行する。そのため、見かけ上の高温酸化反応の熱発生が急激に立ち上げるまでに時間がかかる。この時間は圧力が低ければ低いほど、低温酸化反応の縮退と高温酸化反応の開始の発熱や温度差が大きいため長くなる。ただし、圧力は約 4MPa 以上になると低温酸化反応と高温酸化反応が続けて発生するので、この過程は消失する。

5.2 節の図 8 から、低温酸化反応の着火開始時期 τ_1 より高温酸化反応の着火開始時期 τ_2 は圧力による影響を強く受けるという結果が得られたが、その理由は以下のように考える。 τ_1 は反応物濃度の指数関数の乗積による圧力依存性がある。これは反応物の量が一定であれば、濃度は圧力の変化に伴って変化するため反応速度も変化する。ただし、 τ_1 はこの影響のみ受ける。これに対して、 τ_2 はこの影響のほか、圧力の変化による低温酸化反応における進行度合の変化の影響も受ける。この二つの影響を併せて高温酸化反応の着火時期 τ_2 に対する圧力の影響となるので、 τ_1 に比べて圧力の影響は顕著である。

5.4 熱発生率の圧力影響

図 16 に圧力が異なる場合の発熱の積算値を示す。当量比が一定であるため、最終的な発熱は一定となるが、低温酸化反応、第一次高温酸化反応と第二次高温酸化反応の境となる変曲点の位置の変化から、圧力はこれらの発熱量に影響することが分る。図 17 と図 18 はそれぞれにこれらの酸化反応の発熱量および熱発生率のピーク値（低温酸化反応 ΣQ_{Low} と dQ_{maxLow} 、第一次高温酸化反応 ΣQ_{High1} と $dQ_{maxHigh1}$ 、第二次高温酸化反応 ΣQ_{High2} と $dQ_{maxHigh2}$ ）と圧力の関係を示す。図 19 に CO、CO₂ 生成量の変化に対しての圧力影響を示す。

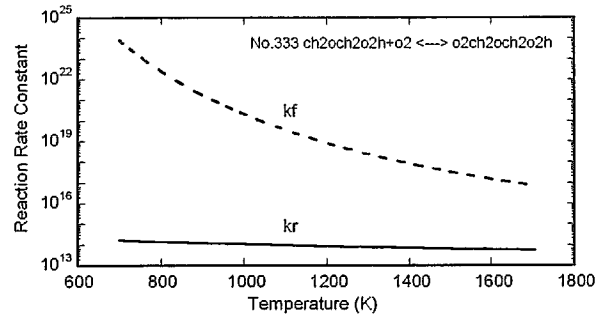


Fig.14 Forward and Reverse Rate Constant of No.333

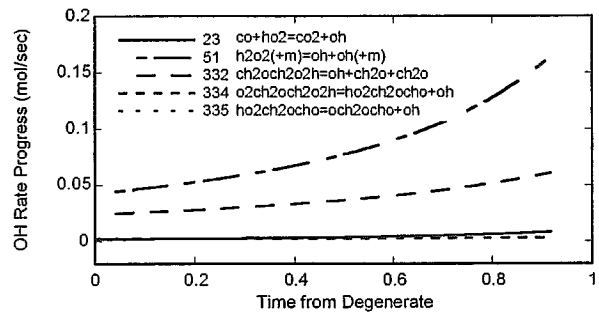


Fig.15 OH Rate Progress from the Degeneration of Low Temperature Oxidation to the Start of High Temperature Oxidation.

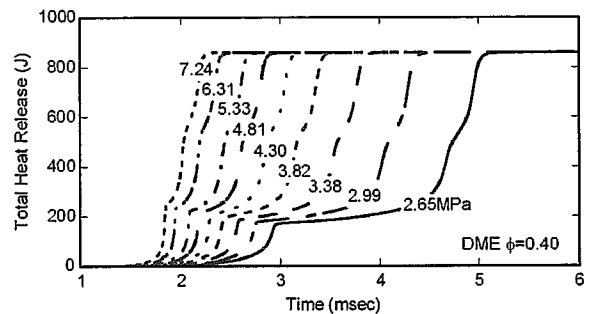


Fig.16 Total Heat Release for Varied Pressures

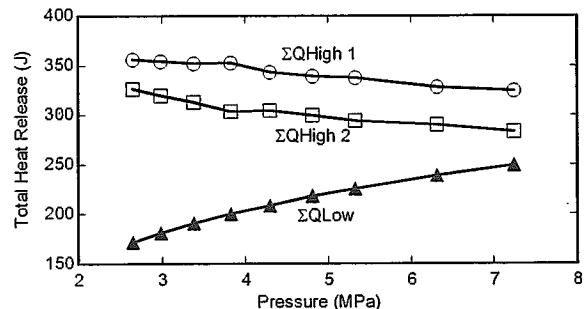


Fig.17 Total Heat Release of Low/First High/Second High Temperature Oxidation for Varied Pressures

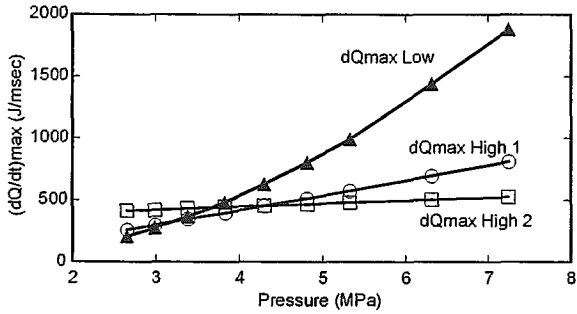


Fig.18 Maximum Heat Release Rates of Low/First High/ Second High Temperature Oxidation for Varied Pressures

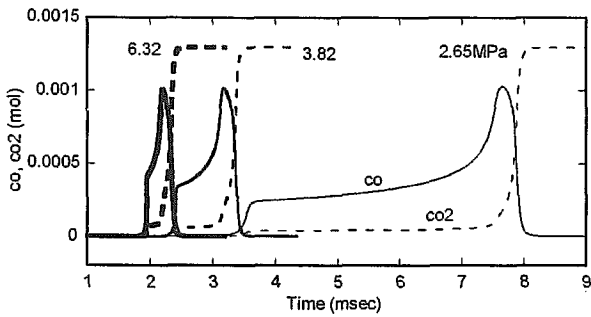


Fig.19 CO and CO2 Formation in First and Second High Temperature Oxidation

ΣQ_{Low} については、すでに前述したが圧力が高いときに多い。 ΣQ_{High1} と 2 はこれと逆に、圧力が高いときに少ない。これは圧力が高い場合の縮退は遅く、低温酸化反応はより多く進行し、図 19 に示したように、低温酸化反応の段階で CO と CO₂ がより多く生成して反応は前倒して進行したからである。熱発生率のピーク値については、 dQ_{maxLow} の場合、図 13 に示したように、圧力は高くなると 333 の反応速度は高くなるので、高くなると考える。もちろん、図 13 では素反応 332 と 333 しかモニタしていないが、この反応は DME の低温酸化反応の進行を支配しているので、この反応の活発によって反応全体の速度が増加すると考える。一方、CO と CO₂ の生成が主反応とする第一次および第二次高温酸化反応の熱発生率の最大値に対して圧力の影響は弱い。特に $dQ_{maxHigh2}$ はほとんど圧力と無関係である。このことは CO₂ の生成は温度によって支配されている反応速度に制約されていることを示唆する。詳細については今後検討するが、図 3 に示したような実機実験の圧縮比が低い場合、高温酸化反応発熱率のピーク値が下がったのは、圧力降下が直接の原因ではなく、それによる熱力学的な温度の低下は原因ではないかと考える。

6 結論

1. 圧縮比を変化させることによって、HCCI 機関の運転範囲が拡大でき、その結果機関の出力範囲も拡大する。
2. 着火は温度に支配されるが、低温酸化反応の進行割合は圧力に支配される。圧力が高くなると低温酸化反応は進み、より多量の発熱が起因で温度は上昇し、高温酸化反応が早く開始する。逆に着火開始時期が遅くなる。

3. 定圧場における低温酸化反応の熱発生率の最大値が圧力に影響されるが、高温酸化反応は影響されない。よって、実機実験における圧縮比の低下による高温酸化反応ピークの低下は、圧力の熱力学的な温度影響ではないかと考える。

参考文献

1. 陳、金野、加藤、圧縮比による予混合圧縮着火機関の燃焼制御、自動車技術会学術講演会前刷集、No.20025125、2002.7
2. 太田、往復式内燃機関に関する自着火と低温度炎、エンジンテクノロジー、Vol. 2, No. 5, pp94-99, 2000.9
3. H. J. Curran, W. J. Pitz, et al., A Wide Range Modeling Study of Dimethyl Ether Oxidation, 26th Symposium. Int. Combustion, pp627-632, 1996
4. 金野、陳、他 4 名、ジメチルエーテル予混合圧縮着火燃焼に関する化学反応論的研究、自動車技術会学術講演会前刷集、No.20025237、2002.7
5. 山田、須崎、手崎、4 重極質量分析器を用いた筒内における低温酸化反応の機構検討、自動車技術会学術講演会前刷集、No.20015588、2002.10