DME 噴霧着火バイオガス・都市ガス混合燃料エンジンにおける
化学動力学に基づく3次元燃焼解析のための素反応スキームの構築*高瀬 秀 樹** 吉原 大 佑***
高田 洋 吾**** 脇坂 知行****Construction of Elementary Reaction Scheme for Three-Dimensional Combustion Analysis
Based on Chemical Kinetics in Bio Gas and City Gas Mixture Fueled Engines Ignited with DME Spray

By Hideki Takase, Daisuke Yoshihara, Yogo Takada and Tomoyuki Wakisaka

Bio gas fueled engines have proved effective in helping the environment; such as reducing methane gas which has a large greenhouse effect, alongside an ozone layer destructing effect, because the main composition of bio gas is methane, and it is not emitted into the atmosphere, but burned up within the engine. In this study, by combining the GRI-Kojima reduced elementary reaction scheme and the DME reduced elementary reaction scheme, which had been constructed by the authors' group, the authors constructed a reduced elementary reaction scheme originally for the mixture of bio gas, city gas, DME and air for investigating the combustion characteristics of a bio gas and city gas mixture fueled engine which was ignited with DME (dimethyl ether) spray. On the basis of chemical kinetics with the proposed elementary reaction scheme, the authors conducted three-dimensional numerical analysis of the combustion process within a practical computation time in a bio gas and city gas mixture fueled engine which was ignited with a small amount of DME spray, using different mixture ratios of bio gas and city gas.

1. 緒 言

バイオガスとは、生ゴミや家畜糞尿などのバイオマスを嫌気性発酵させることにより得られるガスであり、循環型社会に適したエネルギー源として近年注目されている。バイオガス(乾燥状態)は、主にメタン(約60%)、二酸化炭素(30数%)とその他のガスからなっている。バイオガスエンジンでは、温室効果やオゾン層破壊効果が高いメタンを大気中に放出せず燃料として使用するため、温暖化現象やオゾン層破壊などの問題に効果的である。一方、バイオガスの発熱量は LNG(液化天然ガス)ベースの都市ガス 13A⁽¹⁾と比較すると約 1/2 に低下するため、火花点火バイオガスエンジンの場合、点火不良や出力低下等の問題が懸念される。そこで、この問題を解決するため、ガスエンジン用燃料として、バイオガスに都市ガスを混合するとともに、液体燃料の噴霧で着火することが考えられる。

現在、天然ガス(あるいは都市ガス 13A)エンジンの燃焼方式として、天然ガスと空気の均一混合気をエンジン筒内に吸入させ、少量の軽油を着火源として直接噴射して燃焼させるデュアルフュエル方式を採用し、さらに過給することで、高出力、高熱効率、かつ低 NOx 化を図れ

ることが報告されている⁽²⁾。このエンジンにバイオガスと都市ガスの混合燃料(混合割合は任意)を吸入させ、さらに軽油の代わりに、バイオガスと同様に循環型社会に適したエネルギー源とされているジメチルエーテル(以下、DME と記す)を噴射することで、石油系燃料を一切使用しないガスエンジン(DME 噴霧着火バイオガス・都市ガス混合燃料エンジン)を実現することができる。このエンジンを開発するためには、バイオガスと都市ガスを任意の割合で混合した燃料のエンジン筒内における燃焼特性を、数値計算によって精度良く予測できることが望ましい。

本研究では、DME 噴霧着火バイオガス・都市ガス混合燃料エンジンの燃焼過程について、実用的計算時間で化学動力学に基づく 3 次元数値解析を行えるようにするため、バイオガス・都市ガス・DME 混合燃料と空気との混合気の燃焼に対する独自の簡略化素反応スキームを構築する。そして、著者らのグループが軽油噴霧着火天然ガスエンジンの 3 次元燃焼解析に用いた乱流燃焼モデル⁽³⁾(その概要を次節に記す)を組み込んだ著者らの GTT-CHEM コード⁽⁴⁾を用いて、DME 噴霧着火バイオガス・都市ガス混合燃料エンジンの化学動力学に基づく 3 次元燃焼解析を行い、バイオガスと都市ガスの混合比率の変化による燃焼特性の変化が予測できるかを調べる。

2. 数値解析手法

本研究で解析対象とする DME 噴霧着火ガスエンジンでは、バイオガスと都市ガスの混合燃料と空気の予

*原稿受付 平成 21 年 1 月 19 日

**正会員 大阪市立大学 大学院工学研究科 後期博士課程
(〒558-8585 大阪市住吉区杉本 3-3-138)

***大阪市立大学 大学院工学研究科 前期博士課程

****正会員 大阪市立大学 大学院工学研究科 機械物理系専攻

混合気をエンジン筒内に吸入した後、圧縮上死点近傍で噴射した少量の DME を着火源として火炎伝播によって燃焼が進行する。その際、混合燃料の予混合気が圧縮により自己着火して燃焼する場合もある。そのため、以前の研究⁽³⁾と同様に Kong らの素反応を考慮した乱流燃焼モデル⁽⁵⁾に修正を加えたモデルを導入して、燃焼の数値解析を行う。

Kong らのモデルでは時間刻み Δt 後の計算セル内における各気体成分の質量分率 Y_j^{n+1} は、次式で表される。

$$Y_j^{n+1} = Y_j^n + \frac{\tau_{kin,j}}{\tau_{kin,j} + f\tau_t} \Delta Y_j \quad (1)$$

ここで、 Y_j^n は現時刻における混合気の各気体成分の質量分率、 ΔY_j は時間刻み Δt の間に CHEMKIN による化学反応計算で算出される質量分率変化量、 $\tau_{kin,j}$ は化学反応速度により決まる特性時間であり、下添字 j は各気体成分を表す。 τ_t は乱流混合速度により決まる特性時間で、次式で与えられる。

$$\tau_t = \frac{C_t k}{\varepsilon} \quad (2)$$

ここで、上式中の k は乱れエネルギー、 ε は乱れエネルギーの散逸率、 C_t はモデル定数 ($C_t=12.0$) である。

Kong らによると、 $\tau_{kin,j} = \tau_{kin,fuel} = (-Y_{fuel} / \Delta Y_{fuel}) \Delta t$ である (Y_{fuel} : 燃料の質量分率)。

反応進行度 f は、次式で表される。

$$f = \frac{1 - e^{-r^*}}{0.632} \quad (3)$$

ここで、 r^* は希薄側および過濃側でも適用できるように、次式のように修正を加えた修正燃焼生成物割合 (CO_2 , H_2O , CO , H_2 は燃焼生成物) である。

$$r^* = \frac{Y_{\text{CO}_2} + Y_{\text{H}_2\text{O}} + Y_{\text{CO}} + Y_{\text{H}_2}}{1 - Y_{\text{N}_2} - \Delta Y} \quad (4)$$

$$\Delta Y = Y_{fuel} + Y_{\text{O}_2} - (1 + s) \min(Y_{fuel}, Y_{\text{O}_2} / s) \quad (5)$$

(s : 量論比混合気における酸素質量の燃料質量に対する比)

また、混合気の火炎伝播による燃焼を考慮して、上記の燃焼モデルに以下のような修正を加えた。式(7)で定義した新たな関数 g を導入し、式(1)を次式(6)のように変更した。

$$Y_j^{n+1} = Y_j^n + \frac{\tau_{kin,j}}{\tau_{kin,j} + \{\min(f, g)\}\tau_t} \Delta Y_j \quad (6)$$

$$g = \frac{1}{1 + \exp\{C_1(r^* - C_2)\}} \quad (7)$$

ただし、 g は燃焼後半において、乱流混合速度により決まる特性時間 τ_t の影響を小さくするための任意の関数である。 C_1 , C_2 はモデル定数である ($C_1=11.0$, $C_2=0.13$)。

パラメータ r^* に対する関数 f, g の変化を図 1 に示す。

Fig.1 Variations of the functions f and g with parameter r^*

Kong らの反応進行度を表す関数 f は、乱流拡散燃焼において、総括反応モデルによる化学反応特性時間に対して乱流混合特性時間の影響を表す関数である。各計算格子内において、燃料と酸素の反応が進行することにより燃料と酸素が消費されると、その後の燃焼は新しい燃料と酸素の混合を待たなければならなくなり、燃焼は乱流混合で律速されるようになる。したがって、関数 f は反応の進行とともに乱流混合時間の影響が大きくなる関数となっている。しかし、Kim らの研究結果⁽⁶⁾に示されるように、素反応モデルに Kong らの燃焼モデルをそのまま適用した場合(関数 g を導入しない場合)には、燃焼の後半において新たに高温度ガス領域に噴射供給された燃料噴霧は、高温度ガス領域で瞬時に反応するため、化学反応特性時間が小さく見積もられることにより、乱流混合時間の影響が過大となる。しかし、関数 g を導入し、モデル式を式(6)のように修正することにより、燃焼後半における乱流混合時間の影響を適正化すれば、Kim らの計算結果⁽⁶⁾に示されるように、熱発生率の実験結果における燃焼後半部分の計算による再現性を向上することができる。また、本研究のように予混合気を燃料噴霧により着火させる燃焼形態では、局所で着火し、火炎が形成された後に、予混合火炎伝播によりエンジン筒内で燃焼が進行していくことになる。燃焼初期には、既燃部と未燃部の乱流混合の影響を受ける(関数 f で表現される)が、燃焼が進行しガス温度が上昇すると、ガス温度が反応速度を律速するようになり、急速に乱流混合の影響が小さくなる(関数 g で表現される)と考えられる。そのため、予混合火炎伝播燃焼の場合にも、拡散燃焼の場合と同様に、式(6)により燃焼をモデル化できると考える(4 節に実験結果との比較検証を記す)。以上より、本計算手法は、拡散燃焼、予混合火炎伝播燃焼、自着火燃焼のいずれの形態の乱流燃焼にも適用することができる汎用的な乱流燃焼モデルであると考えられる。

3. バイオガス・都市ガス・DME 簡略化素反応スキームの構築

都市ガス 13A には、Methane 以外に、燃料成分として Ethane, Propane, n-Butane がある程度含まれており⁽¹⁾ (表

Table 1 Engine specifications and calculation conditions

Bore×Stroke	φ 112 mm×115 mm
Compression ratio	18.8
Engine speed	800 rpm
Intake air temperature	380 K
Intake air pressure	160 kPa

Table 2 Chemical species compositions of various fuels

Mixture mole ratio	Mole fraction (%)							
Bio gas:City gas	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	n-C ₄ H ₁₀	CO ₂	O ₂	N ₂	H ₂
100 : 0	59.91	0.00	0.00	0.00	32.90	1.34	3.23	2.62
75 : 25	67.21	1.68	0.73	0.32	24.67	1.00	2.42	1.97
50 : 50	74.53	3.35	1.45	0.63	16.45	0.67	1.61	1.31
25 : 75	81.82	5.03	2.18	0.95	8.22	0.33	0.81	0.66
0 : 100	89.13	6.70	2.91	1.26	0.00	0.00	0.00	0.00

2 参照), それらを考慮した素反応スキームが必要であるが, 天然ガス用の GRI-Mech 素反応スキーム⁽⁷⁾ (化学種: 53, 反応式: 325)は n-Butane を含まないので, 以前の研究⁽³⁾において, GRI-Mech 素反応スキームと小島の n-Butane 素反応スキーム⁽⁸⁾ (化学種: 141, 反応式: 470) を結合し, 重複する 83 個の素反応式を除いた合成スキーム (化学種: 164, 反応式: 712. 以下, GRI-小島詳細素反応スキームとする) に対して感度解析を行い, 重要でない反応を省略して, GRI-小島簡略化素反応スキーム (化学種: 61, 反応式: 109) を独自に構築した⁽³⁾. この GRI-小島簡略化素反応スキームを, バイオガスと都市ガスの混合燃料に対する 0 次元エンジン圧縮着火解析 (CHEMKIN-II⁽⁹⁾) を使用) に適用し, GRI-小島詳細素反応スキームによる解析結果と比較して, 解析精度の検証を行った. 使用したエンジン諸元および計算条件を表 1 に示す. 表 2 の燃料組成に示すように, バイオガスと都市ガス 13A の混合比率 (モル比) を変えた 5 通りの混合燃料と空気との混合気 (当量比 ϕ は 1.0) について計算を行った. 筒内ガス圧力の両スキームによる計算結果 (圧縮上死点を 360 deg. ATDC とする) の比較を図 2 に示す. また, バイオガスと都市ガスの混合比率が 50 : 50 の場合の計算結果における代表的化学種の濃度履歴の比較を図 3 に示す.

図 2 によれば, バイオガスに対する都市ガスの混合割合が増加して, 燃料成分が増加し二酸化炭素が減少していくにつれて, 着火時期が進んでいくことが判る. 図 2 および図 3 より, いずれの燃料混合比率の場合でも, GRI-小島簡略化素反応スキームを用いた計算結果は, GRI-小島詳細素反応スキームを用いて計算した筒内ガス圧力および各化学種濃度の履歴を良好に再現していることが判る.

本研究で提案する DME 噴霧着火バイオガス・都市

Fig. 2 Comparison of cylinder gas pressures between the detailed scheme and the reduced scheme ($\phi=1.0$)

Fig. 3 Comparison of the mole fractions of main species between the detailed scheme and the reduced scheme

ガス混合燃料エンジンの 3 次元燃焼解析を行うには, バイオガスと都市ガスの成分に加え, DME も考慮した簡略化素反応スキームを構築する必要がある. そこで, Curran らの DME 詳細素反応スキーム⁽¹⁰⁾ (化学種:

Table 3 Elementary reaction schemes, fuels and equivalence ratios ϕ used for validation

Condition	Elementary reaction scheme		Fuel
	Reduced scheme	Detailed scheme	
A	Reduced scheme for the mixture of bio gas, city gas and DME (Species : 70, Reactions : 132)	Curran's DME scheme (Species : 80, Reactions : 339)	DME $\phi = 0.3$
B		GRI-Kojima scheme (Species : 164, Reactions : 712)	Mixture of bio gas and city gas (Mixture ratio = 50:50) $\phi = 0.6$

80, 反応式 : 339) をもとに, 著者らのグループが簡略化を行った DME 簡略化素反応スキーム⁽⁴⁾(化学種:30, 反応式 : 48) を, 上記の GRI-小島簡略化素反応スキームに結合し, 重複する 25 個の素反応式を除いて, バイオガス・都市ガス・DME 用簡略化素反応スキーム(化学種 : 70, 反応式 : 132)を構築した.

新たに構築した上記のバイオガス・都市ガス・DME 用簡略化素反応スキームについて, 0 次元エンジン圧縮着火シミュレーションを行い, 筒内ガス圧力の計算結果を, 結合前の各詳細素反応スキームと比較することにより解析精度の検証を行った. エンジン諸元および計算条件は, 当量比を除いて GRI-小島簡略化素反応スキームの検証の場合と同様で, 表 1 に示すとおりである. 比較したスキーム, 使用燃料, 当量比の各条件を表 3 に示す.

上記のように結合したスキームにおいて重複する 25 個の素反応式における前指数因子 A_i の値については, GRI-小島簡略化素反応スキームでの値を用いた場合と, DME 簡略化素反応スキームでの値を用いた場合のそれぞれについて計算を行い, いずれの A_i の値を採用す

るかについて検討した. 筒内ガス圧力の計算結果を図 4 に示す. 図 4(a)より, DME の圧縮着火において, A_i 値の異なる 2 通りの簡略化素反応スキームによる筒内ガス圧力の計算結果の差は小さい. 一方, 図 4(b)より, DME 噴霧着火ガスエンジンにおいて燃料量のほとんどを占めるバイオガス・都市ガス混合燃料の圧縮着火において, 重複する素反応式における A_i の値については, DME 簡略化素反応スキームでの値ではなく, GRI-小島簡略化素反応スキームでの値を用いた場合の方が, GRI-小島詳細素反応スキームによる筒内ガス圧力の計算結果を良好に再現できることが判る. そこで, 以下では重複する素反応式について GRI-小島簡略化素反応スキームでの A_i の値を用いた簡略化素反応スキームを, バイオガス・都市ガス・DME 用簡略化素反応スキームとして, 以後使用することにする. この素反応スキームの詳細を表 4 に示す.

Table 4 Elementary reaction scheme for the mixture of bio gas, city gas, DME and air

i	Reactions	$k_i = A_i T^{b_i} \exp(-E_i/RT)$		
		A_i	b_i	E_i
1	$O + CH_4 \rightleftharpoons OH + CH_3$	1.02×10^9	1.5	8600
2	$O_2 + CH_2O \rightleftharpoons HO_2 + HCO$	1.00×10^{14}	0.0	40000
3	$H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$	2.80×10^{18}	-0.9	0
4	$H + 2O_2 \rightleftharpoons HO_2 + O_2$	2.08×10^{19}	-1.2	0
5	$H + O_2 + H_2O \rightleftharpoons HO_2 + H_2O$	1.13×10^{19}	-0.8	0
6	$H + O_2 + N_2 \rightleftharpoons HO_2 + N_2$	2.60×10^{19}	-1.2	0
7	$H + O_2 \rightleftharpoons O + OH$	2.65×10^{16}	-0.7	17041
8	$H + HO_2 \rightleftharpoons O_2 + H_2$	4.48×10^{13}	0.0	1068
9	$H + CH_4 \rightleftharpoons CH_3 + H_2$	6.60×10^8	1.6	10840
10	$H + CH_2O (+M) \rightleftharpoons CH_3O (+M)$	5.40×10^{11}	0.5	2600
11	$OH + H_2 \rightleftharpoons H + H_2O$	2.16×10^8	1.5	3430
12	$2OH (+M) \rightleftharpoons H_2O_2 (+M)$	7.40×10^{13}	-0.4	0
13	$OH + HO_2 \rightleftharpoons O_2 + H_2O$	1.45×10^{13}	0.0	-500
14	$OH + H_2O_2 \rightleftharpoons HO_2 + H_2O$	1.70×10^{18}	0.0	29410
15	$OH + CH_2 \rightleftharpoons H + CH_2O$	2.00×10^{13}	0.0	0
16	$OH + CH_3 (+M) \rightleftharpoons CH_3OH (+M)$	2.79×10^{18}	-1.4	1330
17	$OH + CH_3 \rightleftharpoons CH_2 + H_2O$	5.60×10^7	1.6	5420
18	$OH + CH_4 \rightleftharpoons CH_3 + H_2O$	1.00×10^8	1.6	3120

Fig. 4 Comparison of cylinder gas pressures between the detailed scheme and the reduced schemes

19	$\text{OH}+\text{CO}\rightleftharpoons\text{H}+\text{CO}_2$	4.76×10^7	1.2	70	67	$\text{O}+\text{n-C}_4\text{H}_{10}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{s-C}_4\text{H}_9$	5.20×10^{13}	0.0	4446
20	$\text{OH}+\text{CH}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}$	3.43×10^9	1.2	-447	68	$\text{OH}+\text{n-C}_4\text{H}_{10}\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{n-C}_4\text{H}_9$	4.13×10^7	1.7	752.9
21	$\text{OH}+\text{CH}_3\text{OH}\rightleftharpoons\text{CH}_3\text{O}+\text{H}_2\text{O}$	6.30×10^6	2.0	1500	69	$\text{OH}+\text{n-C}_4\text{H}_{10}\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{s-C}_4\text{H}_9$	7.22×10^7	1.6	-246
22	$\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_6\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_5+\text{H}_2\text{O}$	3.60×10^6	2.0	2500	70	$\text{n-C}_4\text{H}_9\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_4+\text{C}_2\text{H}_5$	3.70×10^{13}	0.0	28681
23	$\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_6\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_5+\text{H}_2\text{O}$	3.54×10^6	2.1	870	71	$\text{s-C}_4\text{H}_9\rightleftharpoons\text{CH}_3+\text{C}_3\text{H}_6$	2.30×10^{14}	0.0	32744
24	$2\text{HO}_2\rightleftharpoons\text{O}_2+\text{H}_2\text{O}_2$	4.20×10^{14}	0.0	12000	72	$\text{O}_2+\text{s-C}_4\text{H}_9\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{\#1-C}_4\text{H}_8$	1.12×10^{10}	0.0	-1505
25	$\text{HO}_2+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{O}_2+\text{CH}_4$	1.00×10^{12}	0.0	0	73	$\text{O}_2+\text{s-C}_4\text{H}_9\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{\#2-C}_4\text{H}_8$	1.12×10^{10}	0.0	-1505
26	$\text{HO}_2+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CH}_3\text{O}$	3.78×10^{13}	0.0	0	74	$\text{O}_2+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{H}+\text{O}+\text{CH}_4\text{O}$	1.50×10^{13}	0.0	28681
27	$\text{HO}_2+\text{CO}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CO}_2$	1.50×10^{14}	0.0	23600	75	$\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{CHO}+\text{CH}_4$	1.00×10^{11}	0.0	6095
28	$\text{HO}_2+\text{CH}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}_2$	5.60×10^6	2.0	12000	76	$\text{O}_2+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{CH}_3\text{O}_2$	7.20×10^{11}	0.0	0
29	$\text{CH}_3+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{O}+\text{CH}_3\text{O}$	3.56×10^{13}	0.0	30480	77	$\text{CH}_3\text{O}_2\text{H}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CH}_3\text{O}$	3.98×10^{15}	0.0	43021
30	$\text{CH}_3+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CH}_2\text{O}$	2.31×10^{12}	0.0	20315	78	$\text{HO}_2+\text{CH}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{CHO}+\text{H}_2\text{O}_2$	1.00×10^{12}	0.0	10038
31	$\text{CH}_3+\text{H}_2\text{O}_3\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{CH}_4$	2.45×10^4	2.5	5180	79	$\text{O}_2+\text{n-C}_4\text{H}_{10}\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{s-C}_4\text{H}_9$	3.98×10^{13}	0.0	47562
32	$2\text{CH}_3(+\text{M})\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_6(+\text{M})$	6.77×10^{16}	-1.2	654	80	$\text{O}_2+\text{s-C}_4\text{H}_9\rightleftharpoons\text{s-C}_4\text{H}_9\text{O}_2$	1.00×10^{13}	0.0	0
33	$\text{CH}_3+\text{CH}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{HCO}+\text{CH}_4$	3.32×10^3	2.8	5860	81	$\text{s-C}_4\text{H}_9\text{O}_2\rightleftharpoons\text{CH}_3(\text{CHO}_2\text{H})\text{CHCH}_3$	1.39×10^{12}	0.0	28203
34	$\text{HCO}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{CO}$	1.34×10^{13}	0.0	400	82	$(\text{CH}_2\text{O}_2\text{H})\text{CH}_2\text{CHCH}_3\rightleftharpoons$ $\text{OH}+(-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}-)\text{CH}_3$	1.30×10^{10}	0.0	15034
35	$\text{CH}_3\text{O}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{CH}_2\text{O}$	4.28×10^{13}	7.6	-3530	83	$\text{CH}_3(\text{CHO}_2\text{H})\text{CH}_2\text{CH}_2\rightleftharpoons$ $\text{OH}+(-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}-)\text{CH}_3$	1.30×10^{10}	0.0	15034
36	$\text{C}_2\text{H}_5+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{C}_2\text{H}_4$	8.40×10^{11}	0.0	3875	84	$\text{n-C}_4\text{H}_{10}+\text{CH}_3\text{O}_2\rightleftharpoons\text{s-C}_4\text{H}_9+\text{CH}_3\text{O}_2\text{H}$	1.12×10^{13}	0.0	17686
37	$\text{N}+\text{NO}\rightleftharpoons\text{N}_2+\text{O}$	2.70×10^{13}	0.0	355	85	$\text{n-C}_4\text{H}_{10}+\text{CH}_3\text{O}_2\rightleftharpoons\text{n-C}_4\text{H}_9+\text{CH}_3\text{O}_2\text{H}$	1.68×10^{13}	0.0	20435
38	$\text{N}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{NO}+\text{O}$	9.00×10^9	1.0	6500	86	$\text{O}_2+\text{CH}_3(\text{CHO}_2\text{H})\text{CHCH}_3\rightleftharpoons$ $\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2\text{H}(\text{CHO}_2)\text{CH}_3$	1.00×10^{13}	0.0	0
39	$\text{N}_2\text{O}+\text{O}\rightleftharpoons 2\text{NO}$	2.90×10^{13}	0.0	23150	87	$\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_3\text{O}_2\rightleftharpoons\text{CHO}+\text{CH}_3\text{O}_2\text{H}$	1.00×10^{12}	0.0	10038
40	$\text{N}_2\text{O}+\text{OH}\rightleftharpoons\text{N}_2+\text{HO}_2$	2.00×10^{12}	0.0	21060	88	$\text{CH}_3+\text{CH}_3\text{O}_2\rightleftharpoons 2\text{CH}_3\text{O}$	3.61×10^{13}	0.0	0
41	$\text{N}_2\text{O}(+\text{M})\rightleftharpoons\text{N}_2+\text{O}(+\text{M})$	7.91×10^{10}	0.0	56020	89	$\text{HO}_2\text{C}_2\text{H}_4(\text{CHO}_2)\text{CH}_3\rightleftharpoons$ $\text{CHOCH}_2(\text{CHOOH})\text{CH}_3+\text{OH}$	1.73×10^{11}	0.0	21989
42	$\text{O}+\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{H}+\text{H}_2+\text{CO}$	3.37×10^{13}	0.0	0	90	$\text{CHOCH}_2(\text{CHOOH})\text{CH}_3\rightleftharpoons$ $\text{CHOCH}_2(\text{CHO})\text{CH}_3+\text{OH}$	7.00×10^{15}	0.0	41587
43	$\text{OH}+\text{HO}_2\rightleftharpoons\text{O}_2+\text{H}_2\text{O}$	5.00×10^{15}	0.0	17330	91	$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}_2\text{H}(\text{CHO}_2)\text{CH}_3\rightleftharpoons$ $\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_3\text{O}(\text{CHOOH})\text{CH}_3$	6.93×10^{11}	0.0	24618
44	$\text{C}_2\text{H}_5+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{O}+\text{CH}_2\text{CHO}$	3.03×10^{11}	0.3	11	92	$\text{C}_2\text{H}_3\text{O}(\text{CHOOH})\text{CH}_3\rightleftharpoons$ $\text{OH}+\text{CH}_3(\text{CO})(\text{CHO})\text{CH}_3$	7.00×10^{15}	0.0	41587
45	$\text{O}_2+\text{CH}_2\text{CHO}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CO}+\text{CH}_2\text{O}$	1.81×10^{10}	0.0	0	93	$\text{O}_2+\text{C}_2\text{H}_3\rightleftharpoons\text{CHO}+\text{CH}_2\text{O}$	4.00×10^{12}	0.0	251
46	$\text{CH}_3+\text{C}_2\text{H}_5(+\text{M})\rightleftharpoons\text{C}_3\text{H}_8(+\text{M})$	9.43×10^{12}	0.0	0	94	$\text{HO}_2+\text{n-C}_4\text{H}_{10}\rightleftharpoons\text{s-C}_4\text{H}_9+\text{H}_2\text{O}_2$	1.68×10^{13}	0.0	20435
47	$\text{O}+\text{C}_3\text{H}_8\rightleftharpoons\text{OH}+\text{C}_3\text{H}_7$	1.93×10^{05}	2.7	3716	95	$\text{HO}_2+\text{n-C}_4\text{H}_{10}\rightleftharpoons\text{s-C}_4\text{H}_9+\text{H}_2\text{O}_2$	1.12×10^{13}	0.0	17686
48	$\text{OH}+\text{C}_3\text{H}_8\rightleftharpoons\text{C}_3\text{H}_7+\text{H}_2\text{O}$	3.16×10^{07}	1.8	934	96	$\text{HO}_2+\text{C}_3\text{H}_8\rightleftharpoons\text{n-C}_3\text{H}_7+\text{H}_2\text{O}_2$	1.68×10^{13}	0.0	20435
49	$\text{C}_3\text{H}_7+\text{H}_2\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{C}_3\text{H}_8$	3.78×10^2	2.7	1500	97	$\text{HO}_2+\text{C}_3\text{H}_8\rightleftharpoons\text{i-C}_3\text{H}_7+\text{H}_2\text{O}_2$	5.60×10^{12}	0.0	17686
50	$\text{HO}_2+\text{C}_3\text{H}_7\rightleftharpoons\text{OH}+\text{C}_2\text{H}_5+\text{CH}_2\text{O}$	2.41×10^{13}	0.0	0	98	$\text{HO}_2+\text{C}_2\text{H}_6\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_5+\text{H}_2\text{O}_2$	1.70×10^{13}	0.0	20435
51	$\text{O}+\text{CH}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CHO}$	3.50×10^{13}	0.0	3513	99	$\text{OH}+\text{\#1-C}_4\text{H}_8\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{C}_4\text{H}_7$	2.25×10^{13}	0.0	2218
52	$\text{OH}+\text{CH}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{CHO}$	3.00×10^{13}	0.0	1195	100	$\text{OH}+\text{\#2-C}_4\text{H}_8\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{C}_4\text{H}_7$	4.13×10^7	1.7	752.9
53	$\text{O}_2+\text{CHO}\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{CO}$	3.00×10^{12}	0.0	0	101	$\text{O}_2+\text{C}_4\text{H}_7\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{C}_4\text{H}_6$	1.12×10^{10}	0.0	-1506
54	$\text{CHO}+\text{M}\rightleftharpoons\text{H}+\text{CO}+\text{M}$	2.50×10^{14}	0.0	16802	102	$\text{OH}+\text{C}_4\text{H}_6\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{C}_4\text{H}_5$	2.17×10^{13}	0.0	4183
55	$2\text{CH}_3\rightleftharpoons\text{H}_2+\text{C}_2\text{H}_4$	1.00×10^{16}	0.0	32027	103	$\text{O}_2+\text{C}_4\text{H}_5\rightleftharpoons\text{CHO}+\text{C}_3\text{H}_4\text{O}$	3.00×10^{10}	0.0	2868
56	$\text{O}+\text{C}_2\text{H}_4\rightleftharpoons\text{CHO}+\text{CH}_3$	1.60×10^9	1.2	470.9	104	$\text{OH}+\text{C}_3\text{H}_4\text{O}\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{CO}+\text{C}_2\text{H}_3$	1.75×10^{13}	0.0	0
57	$\text{CH}_3+\text{C}_2\text{H}_5\rightleftharpoons\text{C}_3\text{H}_8$	7.00×10^{12}	0.0	0	105	$\text{OH}+\text{C}_3\text{H}_6\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{C}_3\text{H}_5$	1.05×10^{10}	1.0	1587
58	$\text{O}+\text{C}_3\text{H}_8\rightleftharpoons\text{OH}+\text{n-C}_3\text{H}_7$	3.00×10^{13}	0.0	5760	106	$\text{HO}_2+\text{C}_3\text{H}_5\rightleftharpoons\text{OH}+\text{C}_3\text{H}_4\text{O}$	8.91×10^{12}	0.0	0
59	$\text{O}+\text{C}_3\text{H}_8\rightleftharpoons\text{OH}+\text{i-C}_3\text{H}_7$	2.60×10^{13}	0.0	4469	107	$\text{C}_3\text{H}_5\text{O}\rightleftharpoons\text{H}+\text{C}_3\text{H}_4\text{O}$	1.00×10^{14}	0.0	19001
60	$\text{OH}+\text{C}_3\text{H}_8\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{n-C}_3\text{H}_7$	1.05×10^{10}	1.0	1587	108	$\text{CH}_3\text{CO}(+\text{M})\rightleftharpoons\text{CO}+\text{CH}_3(+\text{M})$	3.00×10^{12}	0.0	16730
61	$\text{OH}+\text{C}_3\text{H}_8\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{i-C}_3\text{H}_7$	4.67×10^7	1.6	-34.9	109	$\text{CO}+\text{CH}_3(+\text{M})\rightleftharpoons\text{CH}_3\text{CO}(+\text{M})$	1.06×10^6	1.5	1601
62	$\text{n-C}_3\text{H}_7\rightleftharpoons\text{CH}_3+\text{C}_2\text{H}_4$	3.00×10^{14}	0.0	33222	110	$\text{O}+\text{H}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{OH}$	5.08×10^4	2.7	6292
63	$\text{i-C}_3\text{H}_7\rightleftharpoons\text{H}+\text{C}_3\text{H}_6$	2.00×10^{14}	0.0	38719	111	$\text{O}+\text{H}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{OH}$	1.21×10^5	2.6	15370
64	$\text{O}+\text{C}_3\text{H}_6\rightleftharpoons\text{CH}_3+\text{CH}_3\text{CO}$	5.00×10^{12}	0.0	454.1					
65	$2\text{C}_2\text{H}_5\rightleftharpoons\text{n-C}_4\text{H}_{10}$	1.00×10^{13}	0.0	0					
66	$\text{O}+\text{n-C}_4\text{H}_{10}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{n-C}_4\text{H}_9$	3.00×10^{13}	0.0	5736					

112	$\text{HCO}+\text{M}\rightleftharpoons\text{H}+\text{CO}+\text{M}$	1.86×10^{17}	-1.0	17000
113	$\text{C}_2\text{H}_4+\text{O}\rightleftharpoons\text{CH}_3+\text{HCO}$	1.32×10^8	1.6	427
114	$\text{H}+\text{C}_2\text{H}_4(+\text{M})\rightleftharpoons\text{C}_2\text{H}_5(+\text{M})$	2.63×10^{13}	0.0	2160
115	$\text{H}_2\text{O}+\text{M}\rightleftharpoons\text{H}+\text{OH}+\text{M}$	1.84×10^{27}	-3.0	22600
116	$\text{CH}_2\text{O}+\text{H}\rightleftharpoons\text{HCO}+\text{H}_2$	2.19×10^8	1.8	3001
117	$\text{HO}_2+\text{O}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{O}_2$	1.81×10^{13}	0.0	-397
118	$\text{CH}_3\text{OH}+\text{OH}\rightleftharpoons\text{CH}_2\text{OH}+\text{H}_2\text{O}$	6.62×10^4	2.5	-960
119	$\text{CH}_2\text{OH}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{CH}_2\text{O}+\text{HO}_2$	1.00×10^{14}	0.0	5000
120	$\text{HCO}_2+\text{M}\rightleftharpoons\text{H}+\text{CO}_2+\text{M}$	2.29×10^{26}	-3.0	35070
121	$\text{HCO}_2+\text{M}\rightleftharpoons\text{CO}+\text{OH}+\text{M}$	2.19×10^{23}	-1.9	35270
122	$\text{CH}_3\text{OCH}_3+\text{OH}\rightleftharpoons\text{CH}_3\text{OCH}_2+\text{H}_2\text{O}$	1.40×10^8	1.6	-35
123	$\text{CH}_3\text{OCH}_3+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{CH}_3\text{OCH}_2+\text{HO}_2$	4.10×10^{13}	0.0	44910
124	$\text{CH}_3\text{OCH}_2\rightleftharpoons\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_3$	1.60×10^{13}	0.0	25500
125	$\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2\rightleftharpoons\text{CH}_3\text{OCH}_2+\text{O}_2$	4.68×10^{17}	-1.2	38240
126	$\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2\rightleftharpoons\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}$	7.42×10^{11}	0.0	18500
127	$\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_2\text{O}$	1.25×10^{13}	0.0	18160
128	$\text{O}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}\rightleftharpoons\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}+\text{O}_2$	4.99×10^{17}	-1.2	38260
129	$\text{O}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}\rightleftharpoons\text{HO}_2\text{CH}_2\text{OCHO}+\text{OH}$	3.71×10^{11}	0.0	18500
130	$\text{HO}_2\text{CH}_2\text{OCHO}\rightleftharpoons\text{OCH}_2\text{OCHO}+\text{OH}$	1.01×10^{20}	-1.5	44090
131	$\text{OCH}_2\text{OCHO}\rightleftharpoons\text{CH}_2\text{O}+\text{HCO}_2$	5.05×10^{16}	-1.6	15400
132	$\text{OH}+\text{N}\rightleftharpoons\text{NO}+\text{H}$	4.00×10^{13}	0.0	0

Units : $\text{cm}^3\cdot\text{cal}\cdot\text{mol}\cdot\text{K}$

4. DME 噴霧着火バイオガス・都市ガス混合燃料エンジンの3次元燃焼シミュレーション

前章で検証したバイオガス・都市ガス・DME 用簡略化素反応スキームを用いて、GTT-CHEM コードにより3次元エンジン燃焼シミュレーションを行った。計算に使用したエンジン⁽²⁾の諸元を表5に、計算格子を図5に示す。

計算条件は、表6に示すCase1～4の4条件である。

Table 5 Engine specifications

Engine type	1 cylinder, 4 stroke cycle, water cooled
Bore×Stroke	$\phi 96\text{ mm}\times108\text{ mm}$
Displacement	839 cm^3
Compression ratio	16.0
Combustion system	Direct injection
Spray	Case 1 & 2 : 3 holes ($\phi 0.10\text{ mm}$) Case 3 & 4 : 4 holes ($\phi 0.10\text{ mm}$) Spray angle : 140°
Injection pressure	40 MPa
Combustion chamber	Shallow dish

Fig.5 Computational grid for the test engine (Grid division number : $40\times40\times12$)

Table 6 Calculation conditions

Case	1	2	3	4
Engine speed	1000 rpm			
Charging pressure	101 kPa	200 kPa	101 kPa	
Intake fuel	Natural gas		Biogas	Bio gas + City gas (50:50)
Fuel injection timing	352 deg.ATDC	356 deg.ATDC	353 deg.ATDC	
Fuel injection period	4.0 deg		6.0 deg	
Injected fuel	$\text{C}_{14}\text{H}_{28}$		DME	
Injected fuel mass	2.0 mg		2.97 mg	
Equivalence ratio	0.6		0.64

(a) Case 1

(b) Case 2

Fig.6 Comparison of cylinder gas pressures and the rates of heat release between Case 1 and Case 2 (Expt. ⁽²⁾)

Case 1 および Case 2 は、著者らのグループが本研究と同様の手法により、GRI-小島簡略化素反応スキームと軽油相当燃料簡略化素反応スキームを結合して構築した天然ガス・軽油用簡略化素反応スキームと式(6)の乱流燃焼モデルを用いて、少量の軽油噴霧で着火する天然ガスエンジンの3次元燃焼解析を行った条件⁽³⁾である。本燃焼解析手法の検証例として、実験結果⁽²⁾との比較を図6に示す。この図において、筒内ガス圧力および熱発生率の計算結果は、実験結果をほぼ再現できており、本燃焼解析手法の妥当性が確認できている。

そこで、吸入燃料をバイオガスのみとした場合 (Case 3)、およびバイオガスと都市ガスの混合燃料 (混合比率 50 : 50) とした場合 (Case 4) について、バイオガス・都市ガス・DME 用簡略化素反応スキームと式(6)の乱流燃焼モデルを用いて、少量のDME 噴霧で着火するガスエンジンの3次元燃焼シミュレーションを行った。Case 3 と Case 4 で、DME の噴射条件は同一であり、DME の噴射量は、Case 1 と Case 2 の軽油噴射の場合

Fig.7 Comparison of cylinder gas pressures and the rates of heat release between Case 3 and Case 4

と噴射燃料の発熱量が同じになるように、軽油噴射量の約 1.5 倍に設定している。また、そのため噴射期間は 1.5 倍長くしてある。

Case 3 と Case 4 における筒内ガス圧力および熱発生率の計算結果を図 7 に示す。この図より、いずれのケースも、DME 噴霧を着火源とした燃焼が可能であることが判る。しかし、吸入燃料がバイオガスのみの Case 3 では、バイオガスと都市ガスの混合燃料の Case 4 に比べると、着火時期が遅く、燃焼期間が長くなっている。バイオガスのみの場合には、燃料ガス中に二酸化炭素がモル分率で約 33% 存在するために、噴射された DME の着火が抑制されたものと考えられる。

図 8 に筒内ガス温度分布の計算結果を示す。この図より、吸入燃料をバイオガスのみ (Case 3) から、バイオガスに都市ガスを 50% 混合する (Case 4) ことにより、噴射された DME の着火に伴う高温領域の発生時期が早期化し、また高温領域の広がりも早くなっており、クランク角度 406 deg.ATDC においては、筒内の全域で燃焼が完了していることが判る。また、図 7 に示す筒内ガス圧力は、圧縮上死点後の 390 deg.ATDC 付近までは、混合燃料を用いた Case 4 の場合の方がバイオガスのみの Case 3 の場合より高くなっているが、405 deg.ATDC においては、Case 4 の場合の方が Case 3 の場合より、圧力が若干低くなっている。このことから、Case 4 の場合の方が等容度の向上により、熱効率が改善されていると考えられる。

Fig.8 Comparison of gas temperature distributions between Case 3 and Case 4

以上のように、バイオガスに都市ガスを 50% 混合することは、燃料ガス中の二酸化炭素の混合割合が約 16% に低下することにより、発熱量を増大させる効果だけでなく、DME の着火が促進され燃焼期間が短縮して、熱効率が改善される効果のあることが明らかとなった。

5. 結 言

本研究では、著者らのグループが構築した GRI-小島簡略化素反応スキームが、バイオガスおよびバイオガス・都市ガス混合燃料と空気との混合気の圧縮着火の数値解析において、GRI-小島詳細素反応スキームと比べて、十分な精度を有していることを確認した。この簡略化素反応スキームに、さらに著者らのグループが構築した DME 簡略化素反応スキームを結合し、バイオガス・都市ガス・DME 混合燃料と空気との混合気の燃焼に対する独自の簡略化素反応スキームを構築した。

このバイオガス・都市ガス・DME 用簡略化素反応スキームと、独自の乱流燃焼モデルを適用することにより、DME 噴霧着火ガスエンジンにおける化学動力学に基づく 3 次元燃焼解析が、現実的な計算時間 (1.8 GHz の Opteron 4CPU による並列計算で約 75 時間。詳細素反応スキームの場合には、同計算機にて約 25 日) で実行できることを確認した。

上記の 3 次元燃焼解析の結果、吸入燃料がバイオガスのみの場合と、バイオガスに都市ガスを 50% 混合した場合を比較すると、後者の場合は、着火時期が早期化し燃焼期間が短縮化することにより、熱効率が改善される効果のあることが明らかとなった。

参考文献

- (1) <http://www.osakagas.co.jp/osakagas/index.html>
- (2) 深谷, 富田ほか 3 名, 自動車技術会学術講演会前刷集, No.79-06 (2006), pp.1-4.
- (3) Takada, Y., Yoshihara, D. Yamauchi, T., Kim, S.-K., Matsumoto, A. and Wakisaka, T., Review of Automotive Engineering, 28 (2007), pp.345-350.
- (4) Kim, S.-K., Ito, K., Yoshihara, D. and Wakisaka, T., JSME Int. J., Ser.B, 48-4 (2005), pp.717-724.
- (5) Kong, S. C., et al., SAE Paper 2001-01-1026, (2001).
- (6) Kim, S.-K., Ito, K., Yoshihara, D. and Wakisaka, T., COMODIA 2004, 34 (2004), (CD-ROM).
- (7) http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/index.html
- (8) Kojima, S., et al., Combustion and Flame, 99 (1994), pp.87-136.
- (9) Kee, R. J., et al., Sandia National Laboratories Report, SAND 89-8009B, (1989).
- (10) Curran, H. J., et al., Int. J. Chemical Kinetics, 30-3 (1998), pp.229-241.