LPG と DME の2種燃料を用いた火花点火機関における 各燃料の空間的分布が燃焼に及ぼす影響* -化学動力学モデルに基づく3次元燃焼解析

表 洪 志** 山 中 雄 市** 中 園 徹***
高 田 洋 吾** 脇 坂 知 行**

Effects of LPG and DME Spatial Distributions on Combustion in LPG-DME Spark Ignition Engine
- Three-dimensional Numerical Analysis Based on Chemical Kinetic Model

By Hiroshi Omote, Yamanaka Yuichi, Tohru Nakazono, Yogo Takada, and Tomoyuki Wakisaka

In order to understand the combustion phenomenon in a spark ignition engine fueled with the homogeneous mixture of LPG (main component : Propane) and DME (Dimethyl Ether), the authors previously developed a chemical kinetic model (Propane-DME reduced elementary reaction model and turbulent combustion model) for three-dimensional numerical analysis of the combustion process in the engine. The authors' GTT-CHEM code with that chemical kinetic model was able to reproduce an auto-ignition phenomenon at the last period of combustion in the engine. In this study, the authors have investigated the effects of Propane and DME heterogeneous spatial distributions on combustion in the LPG-DME spark ignition engine by three-dimensional numerical analysis using the GTT-CHEM code with the previously developed chemical kinetic model, for better understanding about the contributions of Propane and DME to the auto-ignition phenomenon. The unburned zone DME fraction and its homogeneity were employed to discuss and explain the results. It is found that a well mixed and highly DME contented propane gas locating at end gas region is in the most danger of strong auto-ignition.

1. 緒 言

石油資源の枯渇やCO₂排出量の増加に起因する地球温暖化への強い懸念から、石油以外の燃料を用いた動力源についての関心が高くなっている。その中でDME (Dimethyl Ether: CH₃OCH₃) はセタン価が高く自着火性に優れており、また黒煙を全く発生しないことから、近年、圧縮着火機関用の軽油代替燃料として注目され、年々その生産量が伸びている。

一方、LPG (主成分はPropane: C₃H₈) は、自動車や、ガスヒートポンプ、コージェネレーションシステムの火花点火機関用の燃料として広く用いられている。現在、DME の供給方法として最も容易であると考えられるのは、物理的特性が近似しているLPG とDME を混合し、既存のLPG 供給設備をそのまま流用する方法である。しかし、この方法でDME の早期普及を加速させるには、供給先である末端の内燃機関を含む各種のLPG 機器がDME の混入に対応できる必要がある。

一般に内燃機関の燃焼方式は、オクタン価が高いLPG に対しては火花点火による燃焼方式を採用し、セ

タン価が軽油と同等以上に高いDME に対しては圧縮着火による燃焼方式を採用するのが常である。しかし、相反する燃焼方式を要求するLPG とDME を混合した燃料を内燃機関に用いる場合、火花点火による燃焼、圧縮着火による燃焼のいずれの方式を採用しても、潜在的な燃料と燃焼方式の不一致によるノッキング限界の低下や失火といった問題が生じる。また、その燃焼過程については不明な点が多い。

上記の背景のもとで、著者らはLPG とDME および空気予混合気を用いるコージェネレーション用の火花点火機関を対象に、エンジン燃焼解析コードGTT-CHEM⁽¹⁾ (著者らのGTTコードに、CHEMKIN-II⁽²⁾のサブルーチンSENKINを直接リンクさせて構築)を用いた化学動力学に基づく3次元燃焼解析を行い、シリンダ内圧力および熱発生率の計算結果を実験結果と比較して妥当性を検証するとともに、ノッキングに至る前兆の自着火現象の解明を行ってきた⁽³⁾。

本研究では、上記の火花点火機関を対象に、初期条件として意図的にPropane とDME をシリンダ内に不均一に分布させて、上記のGTT-CHEMコードを用いた化学動力学に基づく3次元燃焼解析を行い、各燃料の空間分布が燃焼特性、とくに自着火の発生に及ぼす影響について調査した。

*原稿受付 平成21年7月13日。

** 大阪市立大学 大学院工学研究科 機械物理系専攻(大阪市住吉区杉本3-3-138)。

*** ヤンマー (株) 中央研究所 (滋賀県米原市梅ヶ原1600-4)。

なお、化学動力学計算に必要な素反応スキームとしては、以前の研究⁽³⁾と同様に、既存の天然ガス詳細素反応スキーム GRI-Mech⁽⁴⁾ (このスキームには CH₄ 以外に C₃H₈ も含まれる) と、Curran らの DME 詳細素反応スキーム⁽⁵⁾ をそれぞれ簡略化してできた 2 つのスキームを結合した Propane - DME 簡略化素反応モデル (化学種 : 42, 反応式 : 102) を使用した。また、乱流燃焼モデルとしては、素反応を考慮した Kong らの乱流燃焼モデル⁽⁶⁾ に修正を加えたモデル⁽¹⁾ を使用した。これらの簡略化素反応モデルおよび乱流燃焼モデルの妥当性は、以前の研究⁽³⁾ で確かめられている。

2. 機関諸元と計算条件

解析対象の機関は、LPG を燃料とするコージェネレーション用の 3 気筒無過給 OHV 式火花点火機関を LPG-DME 混合燃料用に改造した機関で、その機関諸元を表 1 に示す。本機関は産業用ディーゼル機関を転用して開発されているため、吸気ポートやシリンダヘッド面、燃焼室形状はディーゼル機関のそれらに近い形状をしている。この機関に対する計算格子を図 1 に示す。

計算における点火手法については、点火時期 335 deg. ATDC (吸気上死点を 0 deg. とする) に達したときに、点火プラグ位置から半径 4.25 mm 以内に属する計算格子において火炎核を形成させることとし、GTT-CHEM コードのサブルーチン SENKIN 内で、上記の計算格子内のガス温度を強制的に 1800 K に設定して燃焼反応を開始させている。

Table 1 Engine specifications and operating conditions

Engine	3 cylinder N/A spark ignition engine
Bore × Stroke	88 mm × 90 mm
Displacement volume	1.64 L
Compression ratio	12.0
Piston cavity	Deep dish type
Firing deck configuration	Flat
Valve train	OHV 2 valve
Swirl ratio	2.3
Rated power	10 kW at 1500 rpm

初期条件は、図 2 に示すように圧縮下死点 (180 deg. ATDC) でシリンダ内 (以後、ピストンキャビティ部を含む) に Propane と DME および空気の均一混合気を配置したケース (Case P+D)、シリンダ上部が Propane と空気の均一混合気で下部が DME と空気の均一混合気のケース (Case P/D)、シリンダ上部が DME と空気の均一混合気で下部に Propane と空気の均一混合気の 3 ケース (Case D/P) について検討した。Propane と DME の混合比については、9 : 1, 8 : 2, 7 : 3 の 3 ケースを検討した。計 9 ケースのケース名を表 2 に示す。なお、シリンダ内の空気過剰率 λ は全域 1.0 で均一としている。

Fig.2 Initial distributions of propane-air and DME-air mixtures ($\lambda=1.0$) at BDC (Case P+D, Case P/D, Case D/P)

Table 2 Naming of calculation cases

Types of fuel distributions		Propane: DME (mole ratio)		
		9:1	8:2	7:3
Homogeneous Case P+D		P9+D1	P8+D2	P7+D3
Upper and lower distribution	upper: propane lower: DME Case P/D	P9/D1	P8/D2	P7/D3
	upper: DME lower: propane Case D/P	D1/P9	D2/P8	D3/P7

3. 計算結果と考察

DME と Propane をシリンダ内の上下に分布させた Case P/D (DME が下) および Case D/P (DME が上) の場合について、3 次元燃焼解析を行って得られたシリンダ内圧力と熱発生率の履歴を図 3 に示す。この図には、DME と Propane を均一に混合した Case P+D の場合の結果も示す。燃料中の DME 比率が増加するにつれ、燃焼が急峻になって行く。

また、熱発生終了間際に自着火により生じている熱発生率の再上昇の様子も、DME 比率が増加するに従って急峻になることが判った。特に初期条件として、DME をシリンダ上部に配置した Case D/P の場合は、均一に混合した Case P+D の場合や、シリンダ下部に DME を配置した Case P/D の場合に比べ、熱発生終了

間際の自着火の度合いが強くなっている。

上記のDMEを上部に配置したCase D/Pの場合においては、燃料中のDMEモル比率が20%、30%のケースで、燃焼終了間際の自着火現象は熱発生率の計算結果に現われていないように見えるが、これは自着火による熱発生が主燃焼による大きな熱発生に隠れているためである。

DMEモル比率が30%のCase D3/P7の場合について、Formaldehyde (HCHO)の空間分布の推移を図4に示す。これを見ると明らかに、シリンダ中心から火炎が伝播するのに従って移動する火炎帯のHCHOとは別に、エンドガス部においてHCHOが発生しており、これにより自着火が起こっていることが判る。このことから、

Fig.3 Cylinder gas pressure and the rate of heat release (ROHR)

初期にDMEをシリンダ上部に配置したCase D/Pの場合が、最も自着火が発生し易く、ノッキングへと発展し易いと考えられる。

同じくDMEモル比率が30%であるが、シリンダ下部にDMEを配置したCase P7/D3の場合についても、HCHOの空間分布の推移を図5に示す。この図より、圧縮行程中にピストンキャビティの底部に押込められたDMEから生成したHCHO領域が、Propane領域の火炎帯で発生しているHCHO領域と圧縮上死点(360 deg.ATDC)付近で合流し、スキッシュエリア部でシリンダ壁へ向かって広がって行くことが判る。このことから、Case P/Dの場合の熱発生率曲線に現れた燃焼終了間際の熱発生率再上昇の主たる要因は、Case D/Pで見られたエンドガスの自着火によるものではなく、DMEの酸化が燃焼後期にも徐々に進行していることによるものと考えられる。

そこで、図6に示すように、各ケースについて燃焼期間中の未燃焼領域における燃料中のDME比率(モル比率)を求め、比較を行った。なお、未燃焼領域と既燃焼領域の区別には、CO₂濃度を閾値(燃料が完全燃焼した時のCO₂濃度の1%)として用いている。DMEをシリンダ下部に配置したCase P/Dでは、点火直後は、点火プラグ付近のPropaneが先ず火炎伝播により燃焼して行くため、DME比率は増加傾向にあるが、圧縮上死点少し前に一旦急激に下降し、その後は未燃焼領域が消滅するまで緩やかに減少している。この原因は、ピストンキャビティとその上部空間、およびスキッシュエリアで構成されている燃焼空間の形状の影響と、低温酸化反応から高温酸化反応へ移行するのに時間が掛かるDMEの燃焼特性の影響との相互作用であると考えられる。一方、Case P/Dの場合とは逆に、DMEをシリンダ上部に配置したCase D/Pの場合、点火直後は、点火プラグ付近のDMEが先ず火炎伝播により燃焼して行くため、DME比率は減少傾向であるが、未燃焼領域が消滅する直前にDME比率が急激に上昇した後、下降することが判った。これは、この時期にPropaneが急速に燃焼、すなわち自着火していることを意味する。

次に、この未燃焼領域におけるDME比率の均一性指標を算出し、図7に示す。この均一性指標には、次式で示すHomogeneity Indexを用いた。

$$\text{Homogeneity Index} = 1 - \sigma / \sigma_{n,h}$$

$$\sigma_{n,h} = \sqrt{[\text{DME} / \text{Fuel}] / (1 + [\text{DME} / \text{Fuel}])}$$

ここで、 σ は未燃焼領域におけるDME比率の分布の標準偏差、 $\sigma_{n,h}$ は完全不均一分布の場合における σ の値である。また、 $[\text{DME} / \text{Fuel}]$ は、燃料中のDMEの

モル比率である。Homogeneity Index が 1 のとき完全均一分布を表し、0 のとき完全不均一分布を表す。

図7の結果より、シリンダ上部にDMEを配置したCase D/P の場合の方が、下部にDMEを配置したCase P/D の場合よりも、早期から Homogeneity Index がより大きな値となっている。また、Case D/P の場合は、未燃焼領域の消滅直前まで DME と Propane が均一に近い状態まで混ざる方向であるのに対し、Case P/D の場合は、

燃焼後期の未燃焼領域において DME と Propane の混合が進んでいない。このように、Case D/P の場合の方が、圧縮行程中に DME と Propane が混ざり易いことが示されているが、これはスキッシュ流の影響によるものと考えられる。この結果と、図6における未燃焼領域の DME 比率の推移と合わせて考えると、シリンダ上部にDMEを配置したCase D/P では、燃焼が進むにつれて未燃焼領域での DME と Propane との混合が

Fig. 4 Variation of HCHO distribution for Case D3/P7 (mole fraction from 5×10^{-4} to 10×10^{-4})

Fig. 5 Variation of HCHO distribution for Case P7/D3 (mole fraction from 5×10^{-4} to 10×10^{-4})

促進されるだけでなく、DME の比率が高くなる。そして、DME から低温酸化反応により発生した HCHO が Propane の高温酸化反応を引き起すため、燃焼終期の自着火の度合いが他のケースに比べて強く、ノッキングに至る可能性が高いと考えられる。

一方、シリンダ下部（ピストンキャビティを含む）に DME を配置した Case P/D の場合は、燃焼後期の未燃焼領域において DME と Propane の混合が進まないため、DME 領域で低温酸化反応により HCHO が発生しても、それにより Propane の高温酸化が引き起されないために急激な自着火が発生せず、ノッキングに至る可能性は小さいと考えられる。そして、混合が促進されなかった DME 領域は、高温酸化反応へ移行するのに時間が掛かる DME の燃焼特性の影響で、燃焼終期に緩慢な熱発生が続くと考えられる。

次に、Propane と空気の均一混合気を、シリンダ軸を中心とした同心円の内側に配置して、その外側に DME と空気の均一混合気を配置した（実際には計算格子に合わせて配置した）図 8 に示すケースにおいて、DME モル比率が 30% の場合（Case P7-D3）についての 3 次元燃焼解析を行い、前記のシリンダ上部に DME を配置した Case D3/P7 の場合と比較を行った。

図 9 に示すように、同心円状分布の Case P7-D3 の場合の方が、Case D3/P7 の場合よりも熱発生率曲線の立ち

上がり・下がりが、ともに時期が早くかつ急峻となっている。また、図 10 に示すように、火炎帯の HCHO とは別にスキッシュエリアで発生する HCHO の領域は、図 4 に示す Case D3/P7 のそれよりも早期かつ広く分布しているため、シリンダ外周のエンドガス領域に相当する領域に予め DME を配置した場合の方が、シリンダ上部に DME を配置した場合よりも、ノッキングを引き起す可能性が高いと考えられる。

さらに、未燃焼領域における燃料中の DME 比率とその均一性指標(Homogeneity Index)の履歴を図 11 に示す。シリンダの外周部に DME を配置すると、スワールとスキッシュ流の影響で、シリンダ上部に DME を配置した場合より、点火時期前に DME が Propane とより良く混合することが判った。また、燃焼期間において未燃焼混合気に含まれる DME の比率が点火直後から増加し、燃焼終期にピークに達した後、急減することが判った。これらのことから、シリンダ外周に予め DME を配置した Case P7-D3 の場合は、圧縮行程において DME が Propane とある程度混合し、その高濃度の DME から低温酸化反応により HCHO が発生して、それが Propane の高温酸化反応を引き起こし、燃焼が急激に進行しているものと考えられる。したがって、このケースはノッキングに至る可能性が高いと推察される。

Fig.6 Histories of unburned zone DME fractions

Fig.7 Histories of the homogeneity indexes of unburned zone DME fractions

Fig.8 Concentric distribution (Case P-D)

Fig.9 Rates of heat release for Case P7-D3 and Case D3/P7

Fig.10 HCHO distribution for Case P7-D3
(354 deg. ATDC mole fraction from 5×10^{-4} to 10×10^{-4})

(a) Histories of unburned zone DME fractions
(b) Histories of the homogeneity indexes of unburned zone DME fractions

Fig.11 Histories of unburned zone DME mole fractions and homogeneity indexes of them

4. 結 言

コージェネレーション用を想定した LPG (主に Propane) と DME の 2 種燃料を使用する火花点火機関を対象に、初期条件として圧縮下死点において各燃料をシリンダ内に不均一に分布させて、化学動力学に基づく 3 次元燃焼解析を行い、各燃料の空間分布が燃焼特性、とくに自着火の発生に及ぼす影響について調査

した。この燃焼解析には、独自に構築した Propane - DME 簡略化素反応モデルを組み込んだ著者らの GTT-CHEM コードを用いた。

Propane と DME のモル比が 9 : 1, 8 : 2, 7 : 3 の各ケースについて、熱発生率の推移や HCHO の空間分布を調査した結果、初期条件として、圧縮下死点で空気過剰率を全域 1.0 に設定した上でシリンダ外周部に DME を配置し、その内側に Propane を配置した場合、熱発生率の立ち上がり・下がりが最も急峻となっており、ノッキングに至る可能性が最も高いことが判った。

一方、初期にシリンダ上部に Propane を、シリンダ下部 (ピストンキャビティを含む) に DME をそれぞれ配置した場合は、他のケースに比べ圧縮行程中に DME と Propane の混合が進行しないので、DME と Propane があたかも別々に燃焼しているような状態になり、低温酸化から高温酸化に移行するのに時間の掛かる DME 領域で、燃焼終期に緩慢な熱発生が続く結果となった。したがって、LPG - DME 火花点火機関で、DME の比率をできるだけ高められるようにするには、吸気行程において Propane と空気のみを吸入させ、DME は圧縮行程においてピストンキャビティに向けて噴射し、DME がピストンキャビティ内に滞留するようにすれば、ノッキングを回避できる可能性のあることが判った。

本研究の 3 次元燃焼解析には、リアルコンピューティング(株)製の RC Server CALM 2000 クラスタシステム (AMD Opteron 2.2GHz, 8 CPU, 16 Core 並列処理システム) を用いた。7 Core を用いた場合、1 ケースの計算時間は約 27 時間であった。

以上のように、簡略化素反応モデルに基づく 3 次元燃焼解析手法は、詳細素反応スキームを用いるのに比べて計算時間は実用的に許容できる範囲であり、本研究のような 2 種類の燃料を使用する新燃焼方式機関の検討にも有効な実用的手法であることを示せた。

参考文献

- (1) Kim, S.-K., et al., JSME Int. J., Ser. B, 48-4 (2005), pp.717-724
- (2) Kee, R. J., et al., "CHEMKIN II", Sandia National Laboratories Report, SAND89-8009B, (1993)
- (3) 高田, 脇坂, 高井, 表, 中園, 西村, 自動車技術会論文集, Vol.39, No.2, (2008), pp.147-152
- (4) http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/index.html
- (5) Curran, H. J., et al. : Int. J. Chem. Kinet., 30-3, (1998), pp.229-241
- (6) Kong, S. C., et al., SAE Paper 2001-01-1026, (2001)