予混合圧縮着火機関における燃料濃度分布の不均一性と

ガス流動が燃焼に及ぼす影響*

-化学動力学を考慮した燃焼過程の三次元数値解析

金 尚 奎** 高 田 洋 吾** 脇 坂 知 行**

Effects of Mixture Inhomogeneity and Gas Flow on Combustion in Premixed-charge Compression Ignition Engines —Three-dimensional Numerical Analysis of Combustion Process in Consideration of Chemical Kinetics

By Sang-kyu Kim, Yogo Takada and Tomoyuki Wakisaka

In order to investigate the effects of mixture inhomogeneity and gas flow on combustion and emissions in a premixed-charge compression ignition engine, three-dimensional numerical analysis of the combustion process was carried out by using the authors' GTT-CHEM code, which was linked to the CHEMKIN-II code. Combustion processes of gas oil and air mixtures (overall equivalence ratio was set at 0.4) under various initial conditions of mixture inhomogeneity and gas flow (swirl or tumble flow) were computed in consideration of chemical kinetics. It has been found that the maximum rate of pressure rise decreases as the mixture inhomogeneity becomes higher. On the contrary, the concentrations of combustion products NO, CO and HC increase, and the combustion efficiency becomes lower with the increase of mixture inhomogeneity. As a result, it has been shown that there exist appropriate initial conditions of mixture inhomogeneity and gas flow for suppressing the maximum rate of pressure rise with relatively low emissions of NO, CO and HC at high combustion efficiency.

1. 緒 言

ディーゼル機関は熱効率がよく、自動車・船舶を始め多くの産業機械に幅広く利用されているが、近年地球環境問題への関心の向上に伴い、低燃費化・低エミッション化への要求が強くなっている。その中で、NO_x と PM の同時低減の可能性を有する予混合圧縮着火機関が注目されているが、運転領域が狭く着火時期の制御が困難という問題がある。また、運転条件によっては、急激な燃焼によるシリンダ内圧力の急上昇により、ディーゼルノックや騒音の原因になるため、最大圧力上昇率を抑制することが必要となる。

内燃機関における燃焼特性は、燃焼場の温度、圧力、ガス流動、また燃料と空気の混合状態などに影響される。これらのガス流動、混合気形成、燃焼および燃焼ガス成分の生成という物理的・化学的な一連の非定常現象は極めて複雑であるので、実験的手法のみによる諸現象の解明は困難であり、数値計算によって精度良く予測することができれば、エンジンシリンダ内にお

ける諸現象の理解に役立つと共に、エンジンの開発を効率的に行う上で有効であると考えられる。

本研究では、軽油を燃料とする予混合圧縮着火機関を対象として、そのシリンダ内における燃料濃度分布の不均一性およびガス流動が燃焼に及ぼす影響について調べることを目的とする。そこで、著者らのエンジン燃焼解析コード (GTT-CHEM コード^①) を用いて、化学動力学を考慮した三次元燃焼解析を行い、燃料濃度分布の不均一性およびガス流動が圧力上昇率、熱発生率、燃焼生成物および燃焼効率に及ぼす影響について検討を行った。

2. 解析手法

2.1 GTT-CHEM コード

エンジン燃焼解析コード GTT^②と化学動力学解析コード CHEMKIN-II^③を結合した GTT-CHEM コードのスキーム概略を図1に示す。このコードには、離散液滴モデルに基づく噴霧サブモデルが組み込まれており、噴霧の計算が可能であるが、本研究では混合気形成過程を単純化するため、燃料噴射は行わず、圧縮行程下死点で適当な濃度の燃料蒸気と空気の混合気分布を与えて、以後の圧縮着火・燃焼過程の解析を行った。

*原稿受付 平成 18 年 9 月 25 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)。

Fig. 1 Scheme of GTT-CHEM code

2.2 燃焼モデル 素反応に基づく化学反応と乱流混合の両者の影響を考慮する燃焼モデルとして、検証例の多い Kong らのモデル⁽⁴⁾を用いた。このモデルにおいて、時間ステップ n における混合気中の各気体成分の質量分率 Y_j の変化は、式(1)のように表される。

$$Y_j^{n+1} - Y_j^n = \frac{\tau_{kin}}{\tau_{kin} + f\tau_{turb}} \Delta Y_j \quad (1)$$

ここで、 τ_{kin} は化学動力学に基づく反応速度により決まる特性時間であり、 τ_{turb} は乱流混合速度により決まる特性時間である。特性時間 τ_{kin} は、燃料質量分率 Y_{fuel} の混合気において、時間刻み dt の間の化学動力学に基づく反応計算前後の燃料質量分率の変化量 ΔY_{fuel} と、化学平衡状態における燃料質量分率 Y_{fuel}^* ($Y_{fuel}^* = 0$) とを用いて次式のように定義される。

$$\tau_{kin} = \left(\frac{Y_{fuel}^* - Y_{fuel}}{\Delta Y_{fuel}} \right) dt \quad (2)$$

また、特性時間 τ_{turb} は乱れエネルギー k とその散逸率 ε を用いて次式のように定義される。 C_t はモデル定数 ($C_t = 0.142$)⁽⁴⁾ である。

$$\tau_{turb} = C_t \frac{k}{\varepsilon} \quad (3)$$

また、式(1)における重み係数 f は燃焼生成物割合 r の規格化関数であり、次式で決定される。

$$f = \frac{1 - e^{-r}}{0.632} \quad (4)$$

$$r = \frac{Y_{CO_2} + Y_{H_2O} + Y_{CO} + Y_{H_2}}{1 - Y_{N_2}} \quad (5)$$

(Y_j : 成分 j の質量分率)

2.3 均一度評価指数 H.I. 本研究では、シリンダ内混合気の均一度を定量的に表現するため、Lee ら⁽⁵⁾ が提唱した均一度指数 Homogeneity Index (H.I.)を用いる。これは、燃料蒸気質量分率 Y_{fuel} の空間的分布の標準偏差に基づいて、次式のように定義される。

$$H.I. = 1 - \sigma / \sigma_{n.h} \quad (6)$$

ここで、 σ は Y_{fuel} の標準偏差であり、 $\sigma_{n.h}$ は燃料と空気が全く混合していない“完全不均一な状態”での標準偏差を表し、次式で求められる (A/F : 全体の空燃比)。

$$\sigma_{n.h} = \sqrt{A/F} / (1 + A/F) \quad (7)$$

上記の定義より、シリンダ内における混合気の混合状態に応じて、H.I.の値は、0.0 (完全不均一な状態) 以上で、1.0 (完全均一な状態) 以下の値となる。

2.4 簡略化素反応スキーム 圧縮着火機関における化学動力学に基づく三次元燃焼解析は、燃焼過程と燃焼生成物の予測精度が良好であるが、一方、数多くの化学種と反応式を扱うため膨大な計算時間を要する。そこで本研究では、計算時間を短縮するため、Golovitchev らの軽油相当燃料 ($C_{14}H_{28}$) の素反応スキーム⁽⁶⁾ (化学種数 71, 反応式数 291. 以下、詳細スキームと称する) について簡略化を行い、新たな独自の簡略化素反応スキーム (化学種数 47, 反応式数 86. 以下、簡略スキームと称する) の構築を行った。簡略化には、化学動力学解析パッケージの CHEM-KIN-II および研究室で開発した素反応簡略化支援ツールの Scheme Reduction Tool⁽⁷⁾を使用し、感度解析に基づいて反応に深く関与する素反応式の選別を行った。

以下に簡略化の手順を示す。

- [Step 1] 燃料からの水素引き抜き反応の選別
- [Step 2] 化学種の生成・消滅速度、素反応式の反応速度の評価
- [Step 3] 0次元エンジン燃焼シミュレーションによる熱発生率および各化学種の濃度履歴の比較
- [Step 4] 炭素数を減少させる反応の選別
- [Step 5] 各反応経路について Step 2, Step 3 を実施
- [Step 6] Step 4 ~ Step 5 の繰り返し

本研究で新たに構築した簡略スキームの妥当性について調べるために、0次元エンジン燃焼シミュレーション (当量比 1.0, 初期圧力 0.1 MPa, 初期温度 300 K, 熱損失無し) において、簡略スキームを用いた計算結果と詳細スキームを用いた計算結果を比較した。図 2(a), (b)に、各スキームによるシリンダ内ガス圧力と熱

発生率の計算結果を示す。また図 3(a), (b)には、主要化学種の濃度履歴の計算結果を示す。これらの計算結果より、構築した簡略スキームは、元の詳細スキームによる燃焼経過および主要化学種の濃度履歴を良好に再現していることが確かめられた。

この簡略化スキームを三次元燃焼解析に適用し、5 台の PC (CPU : 3.0~3.4 GHz の Pentium 4) を用いて MPI (Message Passing Interface) 方式による並列計算を行った結果、計算時間は 1 ケース当たり 30 時間程度であり、十分実用的な三次元解析が可能となった。

(a) Cylinder gas pressure (b) Rate of heat release
Fig. 2 Calculated results of cylinder gas pressure and rate of heat release

(a) $C_{14}H_{28}$ and HCHO (b) CO, CO_2 and NO
Fig. 3 Calculated results of main species

3. 計算条件

モデル機関⁸⁾の諸元を表 1 に、計算格子を図 4 に示す。燃料濃度分布の不均一性が燃焼に及ぼす影響について検討するために、圧縮行程下死点 (180 deg.ATDC) において、図 5 に示すような 5 ケース (Case 1~Case 5) の初期混合気分布をシリンダ内を与えた (いずれのケースも、シリンダ内の平均当量比は 0.4 である)。Case 1 は当量比 $\phi = 0.4$ の均一混合気分布であり、Case 2, 3, 4, 5 はそれぞれ $\phi = 0.77, 1.23, 3.0, 10.8$ の軽油蒸気と空気の一様混合気塊を、図 5 のようにシリンダ下方に配置し、残りの部分には空気を配置した。実際に軽油を噴射した場合、下死点状態では、噴霧はほとんど蒸発しないが、仮想的に完全に蒸発したものとして、上記のような初期混合気分布を与え、その後、クランク角の進行と共に混合が進んで生じた燃料濃度分布の不均一性が燃焼に及ぼす影響を検

討する。さらに、各々の初期混合気分布条件 (初期圧力 0.1 MPa, 初期温度 373 K) において、圧縮行程下死点での初期ガス流動として、スワール比 (SR) が 1 と 2 の剛体渦、あるいはタンブル比 (TR) が 1 と 2 の縦渦を図 6(a)~(d) (各図において右回りの流動, (a) と (b) はシリンダヘッドとピストンヘッドの間の中央部における横断面図, (c) と (d) はシリンダ軸方向の縦断面図) のように設定し、合計 20 条件について三次元燃焼解析を行った。

Table 1 Engine specifications

Bore $\times$ Stroke	$\phi 135 \text{ mm} \times 140 \text{ mm}$
Compression ratio	16.5
Engine speed	1000 rpm
Overall equivalence ratio	0.4
Fuel quantity	54.3 mg/str.

Fig. 4 Computational grid (division number : 28 $\times$ 28 $\times$ 28)

4. 計算結果

計算結果の一例として、Case 3 の初期混合気分布の場合について、圧縮行程後期の 330 deg.ATDC における燃料濃度分布を図 7 に示す。スワール比が 1 および 2 の場合は、縦方向の混合が遅いのに対して、タンブル比が 2 の場合は、縦方向の混合が活発になり、最も均一度指数 H.I. が高くなっている。一方、タンブル比が 1 の場合は、燃焼室の片側に濃い混合気が偏在しており、最も均一度指数 H.I. が低くなっていることが判る。

各ガス流動条件におけるシリンダ内燃料濃度分布の計算結果から求めた均一度指数 H.I. の推移を図 8 に示す。いずれのガス流動条件においても、混合気の初期均一度指数が、より低いケースほど (Case 1 $\rightarrow$ 5)、時間の経過に対する均一度指数の向上が大きい傾向が見られる。スワール比の異なる SR = 1 と SR = 2 の場合では、図 7 から推測されるように、同一ケースにおいて、スワール比による均一度指数の差が小さい。

一方、タンブル比の異なる TR = 1 と TR = 2 の場合では、TR = 1 では圧縮行程後期においても均一度指数

の変化が緩慢であるのに対して, $TR = 2$ では圧縮行程後期 (300 deg.ATDC 以後) において均一度指数が急速に上昇し, とくに初期均一度指数の最も低い Case 5 の場合に均一度指数が急に高くなる. これは, 縦渦の

崩壊による乱れの増加⁹⁾により, 乱流拡散が活発になったことによるものと考えられる. これらの結果より, 強い縦渦 (タンブル流) には混合を活発化させる作用があり, 均一化への効果が大いことが確かめられた.

Fig. 5 Fuel-air mixture distributions at BDC of compression stroke (180 deg.ATDC)

Fig. 6 Velocity distributions at BDC of compression stroke (180 deg.ATDC)

Fig. 7 Calculated results of equivalence ratio distributions at 330 deg.ATDC for Case 3

Fig. 8 Calculated results of homogeneity index H.I.

図 9～12 には、各ガス流動条件におけるシリンダ内ガス圧力、圧力上昇率および熱発生率の計算結果を示す。ただし各図には、混合気の初期分布条件として Case 1, 3, 5 の結果を代表的に示す。これらの計算結果から、いずれのガス流動条件においても、低温酸化開始時期は 335 deg.ATDC 付近であるが、初期燃料濃度分布がより不均一になるとともに (Case 1 → 5)、シリンダ内ガス圧力、圧力上昇率および熱発生率のピーク値がいずれも低下することが明らかである。これらの傾向は、スワール比の異なる $SR = 1$ と $SR = 2$ とでは、ほとんど差が見られないのに対して、タンブル比の異なる $TR = 1$ と $TR = 2$ とでは、その傾向の差が大きくなっている。またスワールの場合と縦渦の場合を比較すると、混合気の初期均一度指数の低下に対するシリンダ内ガス圧力、圧力上昇率および熱発生率のピーク値における低下の度合は、スワールを与えた場合には大きいものに対して、強い縦渦を与えた場合 ($TR = 2$) にはかなり小さくなっている。 $TR = 2$ の場合、混合気の初期均一度指数が低くても、着火時期には均一度指数が高くなることと、乱れの増加により、燃焼が活発になることによるものと考えられる。

図 13 には、低温酸化開始直前の時期 330 deg.ATDC における混合気の均一度指数 (H.I.@330 と記す) と最大圧力上昇率との関係を示す。いずれのガス流動条件においても、最大圧力上昇率は、H.I.@330 の低下、すなわち燃料濃度分布がより不均一になるほど抑制されるが (ただし、 $TR = 2$ の Case 4→Case 5 は逆の傾向)、その効果は H.I.@330 が 0.9 より低下すると小さくなることが判る。

図 14 および図 15 には、H.I.@330 あるいは最大圧力上昇率と燃焼効率 (燃焼前後のガス組成より計算) との関係を示す。図 14 によると、いずれの流動条件の場合も、H.I.@330 が 0.85 程度より大きいと、燃焼効率は 1 に近い。しかし、H.I.@330 が 0.85 程度より小さくなると (ただし、 $TR = 2$ の場合、H.I.@330 は 0.85 より小さくならない)、燃焼効率が急激に低下するが、その度合は $TR = 1$ の場合が最も顕著となっている。また図 15 によると、燃料濃度分布をより不均一化して最大圧力上昇率を低下させていくと、 $TR = 2$ の場合を除き、最大圧力上昇率のある値から燃焼効率が急激に低下するが、その最大圧力上昇率の値はガス流動条件によって異なり、 $SR = 1$ の場合に最も小さくなっている。

図 16(a), (b), (c) には、330 deg.ATDC における混合気の均一度指数 (H.I.@330) と、NO, CO および炭化水素 HC の生成量 (450 deg.ATDC における計算値で代表) との関係を示す。HC の濃度としては、C 原子と H 原子の両方を持つ化学種の濃度の総和とした。これらの図によると、CO および HC の生成量 (図 16(b),

(c) の縦軸は対数スケール) は、いずれのガス流動条件においても、H.I.@330 が低下するほど急激に増加する傾向を示しているが (これは、混合気の初期不均一性が高くなると、着火時期に当量比が 1 を超える領域が多くなるためと考えられる)、同一の H.I.@330 に対するそれらの生成量は、スワールの場合よりも縦渦の場合の方が多いう傾向がある。一方、NO の生成傾向 (図 16(a) の縦軸はリニアスケール) は、ガス流動条件によって非常に異なっている。すなわち、 $SR = 1$ の場合は、H.I.@330 の低下とともに、NO は増加し続けるが (これは、混合気の初期不均一性が高くなると、着火時期に当量比が 1 に近い領域が多くなるためと考えられる)、他の流動条件の場合は、均一度指数の低下とともに、ある均一度指数までは、NO はほぼ直線的に増加し、ピークに達した後、急激に減少するという傾向がある。この傾向は、縦渦の場合 ($TR = 1$, $TR = 2$) に顕著であり、混合気の初期均一度指数が最も低い Case 5 の場合には、NO 濃度がかなり低下している。これは、燃焼時に混合気の均一度指数が低いと、ガス温度の低い領域 (未燃焼ガスまたは既燃焼ガス) が存在し、これが高温の燃焼ガスと急激に混合してガス温度を低下させることによるものと考えられる。なお、このように、全体として希薄な混合気において、燃料濃度分布の不均一性が、ある度合より著しくなると、NO 生成量が低下するという現象は、深谷らの定積容器における燃焼実験⁽¹⁰⁾でも見出されている。

図 17(a), (b), (c) には、最大圧力上昇率と NO, CO および HC の生成量との関係を示す。CO と HC の生成量は、いずれのガス流動条件においても、最大圧力上昇率に対してほぼトレードオフの関係にある。ただし CO については、その生成量が急増するのは、 $SR = 1$ と $SR = 2$ の場合は最大圧力上昇率が 0.5 MPa/deg. 程度より小さい範囲、また $TR = 1$ と $TR = 2$ の場合は 0.6 MPa/deg. 程度より小さい範囲であり、それらの最大圧力上昇率の値より大きい範囲では、CO の生成量は数 10 ppm 程度に留まることが判る。一方、最大圧力上昇率と NO の生成量との関係 (図 17(a)) は、 $SR = 1$ の場合以外は、トレードオフ関係ではない。すなわち、最大圧力上昇率がある値 (その値はガス流動条件によって異なる) になるまでは、最大圧力上昇率が低下するほど、NO の生成量は増加するが、その後、急激に低下する傾向を示している。

以上の結果より、燃料濃度分布を不均一化することによって、最大圧力上昇率は抑制できるが、過度に不均一化すると、CO および HC の生成量が大幅に増加し、燃焼効率も低下することが明らかとなった。しかし、ガス流動条件によっては、あまり大きなデメリット無しに、最大圧力上昇率を抑制できる可能性がある。

Fig. 9 Calculated results at swirl ratio of 1

Fig. 10 Calculated results at swirl ratio of 2

Fig. 11 Calculated results at tumble ratio of 1

Fig. 12 Calculated results at tumble ratio of 2

Fig. 13 Homogeneity index at 330 deg.ATDC vs. maximum rate of pressure rise

Fig. 14 Homogeneity index at 330 deg.ATDC vs. combustion efficiency

Fig. 15 Maximum rate of pressure rise vs. combustion efficiency

(a) NO

(b) CO

(c) HC

Fig. 16 Homogeneity index at 330 deg.ATDC vs. combustion products (calculated results)

(a) NO

(b) CO

(c) HC

Fig. 17 Maximum rate of pressure rise vs. combustion products (calculated results)

本研究における三次元燃焼計算結果を基に、最大圧力上昇率の抑制および燃焼生成物と燃焼効率の悪化防止の観点から、Case 1～Case 5の各初期混合気分布について、燃焼状態の評価を行った。その結果を表2に示す（各ケースについて、表の注釈に示す①～④の各評価項目を満たす場合に、その項目番号を記している）。初期燃料濃度分布が完全に均一なCase 1の場合は、いずれのガス流動条件でも、NO、COおよびHCの生

成量が少なく燃焼効率も高い反面、最大圧力上昇率が高いという問題がある。この表より、初期混合気分布に少し不均一性を与えたCase 2の場合には（初期混合気において、当量比が1を超える領域は存在しない）、ガス流動条件のSR=1（弱いスワール）あるいはTR=2（強い縦渦）で、最大圧力上昇率を抑制しつつ、比較的低いNO、COおよびHC濃度と高い燃焼効率の良好な燃焼となるが、特にSR=1の場合は、最大圧力上

昇率を均一混合気の場合の約 60%程度に抑制できることが判った。

Table 2 Evaluation of calculated results

Gas flow	Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5
SR = 1	②③④	①②③④	①② ④	①②	①
SR = 2	②③④	①② ④	①② ④	①②	①
TR = 1	②③④	①② ④	①②	①	①
TR = 2	②③④	①②③④	①② ④	①②	①②③

Note:

- ① Low max. rate of pressure rise (under 0.7 MPa/deg.)
- ② High combustion efficiency (over 98 %)
- ③ Low NO production (under 300 ppm)
- ④ Low CO production (under 30 ppm)

5. 結 言

予混合圧縮着火機関における燃料濃度分布の不均一性とガス流動の相異（スワールまたは縦渦の強さ）が燃焼に及ぼす影響を調べるために、軽油蒸気 - 空気混合気（シリンダ内の平均当量比は 0.4）を対象に、化学動力学を考慮した三次元燃焼数値解析を行った。その結果、以下のことが明らかとなった。

- (1) CO および HC の生成量は、シリンダ内燃料濃度分布の不均一性の増大と共に急激に増加する。
- (2) NO の生成傾向については、ガス流動条件によって差はあるものの、燃料濃度分布の不均一性の増大、すなわち混合気の均一度指数が低下すると共に NO 生成量は増加するが、ある均一度指数で最大となり、さらに均一度指数が低下すると、急激に減少する。
- (3) シリンダ内の燃料濃度分布を不均一化することによって、最大圧力上昇率は抑制できるが、過度に不均一化すると、CO および HC の生成量が大幅に増加し、燃焼効率も低下する。
- (4) 強い縦渦（TR = 2）はスワールに比べて、混合気の均一化への効果が大きく、また燃焼を活発化させる効果がある。
- (5) 三次元燃焼計算結果を基に、最大圧力上昇率の抑制および燃焼生成物と燃焼効率の悪化防止の観点から燃焼状態の評価を行った。その結果、初期混

合気分布に少し不均一性を与えた場合（Case 2）には、弱いスワール（SR = 1）あるいは強い縦渦（TR = 2）の条件で、最大圧力上昇率を抑制しつつ、比較的低い NO、CO および HC 濃度と高い燃焼効率の良好な燃焼となる。

参考文献

(1) Kim, S.-K., Ito, K., Yoshihara, D. and Wakisaka, T., JSME Int. J., Ser.B, 48-4 (2005), 717-724.
(2) Wakisaka, T., et al., COMODIA 2001, (2001), 426-433.
(3) Kee, R. J., et al., Sandia Report, SAND 89-8009B, (1989).
(4) Kong, S. C., et al., SAE Paper 2001-01-1026, (2001).
(5) Lee, J.-H., et al., SAE Paper 2000-01-1831, (2000).
(6) Golovitchev, V. I. : <http://www.tfd.chalmers.se/~valeri/MECH.html>.
(7) 松本, 伊藤, 吉原, 金, 高田, 脇坂, 機械学会関西学生会平成 16 年度卒業研究発表講演会前刷集, (2005-3), 9・8.
(8) 原田, 佐々木, 宮本, 赤川, 辻村, 自動車技術会論文集, 29-4 (1998), 41-46.
(9) Wakisaka, T., et al., COMODIA 90, (1990), 487-492.
(10) 深谷, 宮藤, 百瀬, 富田, 機械学会論文集 (B 編), 72-719 (2006-7), 1843-1849.