濃度・温度不均一を考慮した CFD による 天然ガス PCCI 燃焼の数値解析*

川那辺 洋^{*1}, 石山 拓二^{*1}, 藤原 信久^{*2}

Prediction of PCCI Combustion Using CFD with Heterogeneity of Mixture Concentration and Temperature

Hiroshi KAWANABE^{*3}, Takuji ISHIYAMA and Nobuhisa FUJIWARA

^{*3} Graduate School of Energy Science, Kyoto University,
Yoshida Honmachi, Sakyo-ku, Kyoto, 606-8501 Japan

The combustion process of natural gas in a premixed charged compression ignition (PCCI) engine is analyzed using computational fluid dynamics included in heterogeneity of mixture concentration and temperature with stochastic approach. The non-uniform states of turbulence mixing, ignition process is statistically described using the probability density functions (PDF). The results show that the course of in-cylinder pressure is good agreement with experimental data and the effect of mixture heterogeneity on the ignition delay and the rate of heat release is revealed.

Key Words: Internal Combustion Engine, Computational Fluid Dynamics, Turbulent Mixing, Stochastic Approach, Premixed Charged Compression Ignition Combustion

1. ま え が き

予混合圧縮着火(PCCI)方式は均一度の高い希薄混合気を高圧縮比のもとで着火させるために、燃焼温度が低く等容度の高い燃焼形態となり、NOx排出量を抑えたまま高効率を実現できる可能性がある、近年、天然ガスをこの燃焼方式に適用する試みがなされている^①。しかし、PCCI方式では着火によって燃焼開始時期が決まるために、運転可能な回転数および負荷が著しく制限を受ける。すなわち、低い当量比では失火し、高い当量比では急激な燃焼によるノッキングが生じる。そこで、運転範囲を拡大するために均一予混合吸気方式において過給^②や外部EGR^③、添加剤^④などを用いて運転した際の性能および排気特性が示されている。さらに、筆者らは筒内直接噴射により混合気濃度に不均一を与えて着火・燃焼の制御を試みており^⑤、

燃料の噴射時期および噴射条件を適切に選ぶことによって運転範囲の拡大および熱効率が向上できることを明らかにした。すなわち、着火するまでにできるだけ燃焼室中心部に燃料の濃度の比較的高い混合気を形成することによって、燃焼効率および熱効率を向上できる可能性を示した。このように筒内における混合気分布に不均一を与えることは熱効率向上のみならず排気改善の有力な手段となりうるが、燃料分布の不均一が着火・燃焼および有害排出物の生成過程に及ぼす影響は十分明らかにされているとはいえない。

そこで本研究では、このように燃料濃度に不均一がある場合の燃焼過程を数値計算により詳しく検討する。このために、筆者らが開発した確率密度により不均一を表し、乱流混合により均一化する過程をモンテカルロ法により計算する方法^⑥を天然ガスを燃料としたPCCI燃焼過程の解析に適用する。これにより、燃料-空気の乱流混合および着火に至る過程を計算し、混合気不均一が燃焼に及ぼす影響について明らかにする。

* 原稿受付 2004年1月5日。

^{*1} 正員、京都大学エネルギー科学研究科(〒606-8501 京都市左京区吉田本町)。

^{*2} 京都大学大学院エネルギー科学研究科。

E-mail: kawanabe@energy.kyoto-u.ac.jp

2. 数値計算モデルおよび対象

2.1. 濃度・温度不均一の記述

ここで、計算対象とするのはエンジンシリンダ内において燃料濃度や温度が著しく不均一な混合気の着火・燃焼過程であり、従来から数値計算を行う際によく用いられてきた時間平均乱流モデルに基づく乱流混合モデルでは微視的不均一を十分に記述できない可能性がある。そこでここでは、各計算格子において燃料濃度と温度の結合確率密度を考え、その輸送を計算して、時間・空間変化を求める。まず、時刻 t 、位置 x におけるエンタルピー h 、成分質量分率 m_f の確率密度関数(PDF)の Favre 平均を f で表せば、その変化を計算する輸送式は、平均流速 u を用いて次のようになる⁹⁾。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \langle \rho \rangle f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\langle \rho \rangle u_i f \right) + \frac{\partial}{\partial h} \left(\langle \rho \rangle S_h f \right) + \frac{\partial}{\partial m_f} \left(\langle \rho \rangle S_{m_f} f \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial h} \left(\left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J^h_i}{\partial x_i} \middle| h, m_f \right\rangle \langle \rho \rangle f \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial m_f} \left(\left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J^{m_f}_i}{\partial x_i} \middle| h, m_f \right\rangle \langle \rho \rangle f \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\langle \rho \rangle D_{ij} \frac{\partial f}{\partial x_j} \right) \quad (1) \end{aligned}$$

Fig. 1 An example of ignition process

Fig. 2 Change of τ_{id} and $1/\tau_{cd}$

ただし、 J^h, J^{m_f} はそれぞれ h, m_f の分子混合によるフラックス、 $\langle \cdot \rangle$ はアンサンブル平均を表す。乱流拡散係数 D_{ij} は k - ϵ 乱流モデルを用いれば乱れエネルギー k とその散逸率 ϵ により $D_{ij} = 0.09 k^2 / \epsilon$ と表せる。計算では式(1)を連続の式、運動方程式および k, ϵ の保存式と連立して解くことによって各位置における f の時間変化を求める。なおここでは、本手法をエンジンシリンダ内の流動に用いるので、 k - ϵ モデルは流体の圧縮および膨張の効果を考慮した Morel らの式¹⁰⁾に基づき、輸送式中の係数は Ikegami らの値⁹⁾を用いる。

2.2. 燃焼モデル

ここでは幅広い温度、圧力、当量比範囲における天然ガスの着火過程について、計算器負荷を低減しつつ合理的に記述するために、GRI-Mech 3.0¹⁰⁾を用いた詳細反応動力学計算を行い、その結果に基づいて一段総括反応を用いた簡便な燃焼モデルを構築する。図1に天然ガスを模擬した混合燃料(CH_4 : 88%, C_2H_6 : 6%, C_3H_8 : 6%)が圧力 $p = 0.1$ MPa、当量比 $\phi = 0.2$ 、初期温度 $T_i = 1000$ K の条件で定圧燃焼した際の温度経過を燃焼過程の一例として示す。これによると、35 ms 程度の着火遅れののち温度が上昇し始め、5 ms ほどで化学平衡に達する。本研究で対象とするのは比較的希薄な条件であるので、着火遅れの予測だけでなく温度が上昇するのにかかる時間も考慮し、燃焼モデルでは着火過程を3段階に分けて考える。すなわち、平衡温度の5%まで温度が上昇するまでの着火遅れ期間 τ_{id} 、それか

ら95%まで温度上昇する期間 τ_{cd} 、およびそれ以降の平衡期間とし、 τ_{cd} の期間では温度が図1のように直線的に変化すると仮定する。さらに、着火遅れ τ_{id} および温度上昇率 $1/\tau_{cd}$ は以下のアレニウス型の式で記述する。

$$\tau_{id} = 6.3 \times 10^{-13} [F]^{-0.38} [O]^{-0.42} \exp\left(\frac{21000}{T_u}\right) \quad (2)$$

$$1/\tau_{cd} = 6.1 \times 10^{31} \left(\frac{\rho}{M}\right)^{-29.2} [F]^{3.2} [O]^{26.5} \exp\left(-\frac{12500}{T_u}\right) \quad (3)$$

ただし、 $[F]$ 、 $[O]$ はそれぞれ燃料、酸素のモル濃度、 T_u は発熱開始前の混合気温度、 ρ 、 M はそれぞれ密度、混合気平均分子量である。図2にこれらの式を用いて計算した種々の条件における τ_{id} および $1/\tau_{cd}$ を詳細反応を用いて求めた結果と併せて示す。これによると広い範囲の条件においてほぼ等しい値が得られており、 ϕ が低いあるいは T_i が低いほど温度上昇期間が長くなることをあらわすことができる。

計算では、各計算要素において $1/\tau_{id}$ の時間積分を求め、これが1を越えたときに着火して発熱を開始するとする。さらに、発熱開始と同時に $1/\tau_{cd}$ の時間積分を開始して、その積分値に比例した温度になると扱い。

この値が1を越えると化学平衡に達すると考える。

2.3. 計算対象

これらのPDFモデルおよび燃焼モデルをエンジンシリンダ内の流動解析コード⁽¹⁾に組み込み、天然ガス圧縮着火機関(シリンダ径102mm、行程105mm、圧縮比18.0、機関回転数1200rpm、スワール比2.6)を対象として計算を行う。計算は図3に示すような格子系を用いて軸対称2次元で行う。ただし、PDFを表すためのモンテカルロ粒子数は計算負荷を勘案して各セルにおいて80個とする⁽¹²⁾。

3. 計算結果

以上の方法で、種々の総括当量比 ϕ_r および吸気弁閉時-135℃CAの筒内温度 T_{in} について均一混合吸気の計算を行い、圧力 p および熱発生率 $\dot{q}$ のクランク角 θ 経過を実験値と比較する。ただし、 T_{in} は実験条件の吸気温度 T_i における圧縮行程の温度経過が表せるように決定する。図4はその結果であり、着火時期はほぼ実験結果を予測できていることがわかる。ただし、燃焼期間が実験値に比べて小さく見積もられており、その結果、 p および $\dot{q}$ の最大値もやや高い。これは希

Fig. 3 Grid system

Fig. 4 Courses of predicted in-cylinder pressure p and heat release rate $\dot{q}$ for a variety of condition with experimental data

Fig. 5 Schematic of mixture distribution

Fig. 6 PDF of m_f at -135°CA

薄条件における τ_{cd} が十分に予測できていない可能性があり、さらなる検討が必要である。

つぎに、燃料分布に不均一を与えた場合の燃焼過程について検討する。すなわち、図5に示すように吸気弁閉時の -135°CA においてシリンダ軸中心近傍に比較的濃い混合気を偏って配置する case D および微細なスケールの濃度変動が筒内に一様に分布する case H について考える。その際、燃料と空気が完全に分離した case 0、やや混合が進行した case 1 および均一に近い case 2 の三条件について計算を行う。ただし、case 1 および2は燃料と空気が完全に分離した状態から一様乱流によって無次元混合時間¹³⁾ 1 および2だけ混合が進行した状態に対応しており、その際の燃料質量分率 m_f の筒内における PDF を図6に示す。図7はこれらの条件における筒内圧力経過 p を $T_{in} = 430\text{ K}$ 、 $\phi_T = 0.22$ について計算したものであり、着火時期はいずれの条件もほぼ同時である。case H では case 0、1、2 のいずれの条件においても同様の圧力経過であり、図4

Fig. 7 Courses of p for heterogeneous mixture condition Fig. 8 Courses of p for heterogeneous mixture condition of case 1

の完全均一の結果にほぼ等しい。これに対して case D については、完全に分離した case 0 では燃焼が緩慢でかつ最高圧も低く 20°CA においても燃焼が完了していないが、case 2 では図4の完全均一の結果にほぼ等しく、case 1 はそれよりもやや緩やかな圧力上昇となり燃焼もほぼ完了している。すなわち、圧縮前の燃料の不均一分布を適切に制御することによって着火時期をほとんど変えることなく着火後の圧力上昇率を下げることができることを示唆している。

さらに、図8に種々の T_{in} および ϕ_T における case 1 の結果を case H と case D について比較して示す。これによると case H ではいずれの条件においても図4の完全均一にほぼ等しい。一方、case D では case H に比べて着火後の圧力上昇が緩慢であり、とくに ϕ_T が小さい条件において顕著である。このことをさらに詳しく調べるために、 $T_{in} = 430\text{ K}$ 、 $\phi_T = 0.22$ について圧縮行程中の燃焼室全体における m_f の PDF のクランク角経過を case D と case H で比較する。図9はその結果であり、図中の $\blacktriangle$ は筒内平均を表す。case D では筒内平均よりやや小さい m_f においてピークとなり、 m_f の大きい側に裾を引く分布となっている。このように

Fig. 9 Change of PDF of m_f against crank angle θ Fig. 10 In-cylinder distribution of $\langle \phi \rangle$ and $\langle T \rangle$ around ignition

case Dでは着火直前 -5°CA において平均当量比より低い当量比の混合気の確率が高く、それらの燃焼期間が長いために着火後の圧力上昇率が小さくなることが分かる。一方、case Hでは -90°CA においてすでに筒内平均を中心としたガウス分布に近く、着火直前の -5°CA ではほぼ均一になっている。

最後に、 $T_{in} = 430$ K, $\phi_T = 0.22$ における case D, case I の着火付近のクランク角における計算格子平均の温度 $\langle T \rangle$ および当量比 $\langle \phi \rangle$ の空間分布を図 10 に示す。この条件では -3°CA 近傍で着火する。これによると、シリンダ中心に比較的当量比の高い部分が分布し、そのあたりが着火直後にすばやく高温になる。その後、周辺の比較的当量比の低い混合気が緩やかに温度上昇していることが分かる。

4. ま と め

以上、CFD に確率過程の手法を組み込んだ数値計算コードを天然ガス PCCI 燃焼に適用し、燃料濃度不均一が着火および燃焼に及ぼす影響を検討した。その結果、以下のことが明らかになった。

- (1) 本手法を用いれば、いずれの条件においても着火時期はほぼ実験結果を予測できる。ただし、燃焼期間が実験値に比べて小さく見積もられる。
- (2) 筒内一様に混合気不均一を与えれば、圧縮行程中にすばやく混合が進行し着火時期にはほぼ均一となるのに対して、比較的濃い混合気を偏って分布させると上死点近傍まで不均一が残る。
- (3) 圧縮前の燃料の不均一分布を適切に制御することによって着火時期をほとんど変えることなく着火後の圧力上昇率を下げることができる。

なお、本研究は平成 15 年度技術研究助成事業 (NEDO) の助成を受けて行ったものである。

文 献

- (1) M. Christensen, et al., Trans. SAE, Paper No. 972874 (1997), 1104-1114.
- (2) Y. Kawabata, et al., Proc. ASME, AES Vol. 39 (1999), 459-464.
- (3) S. Morimoto, et al. SAE Paper No. 2001-01-1034 (2001), 1-7.
- (4) 太田・古谷・ほか 2 名, 自技論, Vol. 31, No. 3 (2000), 39-43.
- (5) 石山・塩路・田中・中川・中井, 自技論, Vol. 34, No. 3 (2003), 29-34.
- (6) 川那辺・塩路・池上, 第 36 回燃焼シンポジウム前刷集 (1998), 563-565.
- (7) Pope, S. B., Prog. Energy Combust. Sci. 11(1985), 119-192.
- (8) Morel, T. and Mansour, N. N., SAE Paper 820040 (1982).
- (9) Ikegami, M., et al., SAE Paper 870372 (1987), 1-15.
- (10) GRI-Mech 3.0: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- (11) 池上・木戸口・石黒, 機論 B, 53-491 (1986), 2241-2250.
- (12) 川那辺・塩路・池上, 機論 B, 65-635 (1999), 2434-2438.
- (13) 塩路・河崎・川那辺・江, 機論 B, 67-663 (2001), 2805-2811.