

HCCI エンジンにおける燃焼の
素反応数値解析およびエンジン制御への応用

2014 年度

鄭 棟元

学位論文 博士(工学)

HCCI エンジンにおける燃焼の
素反応数値解析およびエンジン制御への応用

2014 年度

慶應義塾大学大学院理工学研究科

鄭 棟元

目次

目次.....	i
記号表.....	iv
添え字.....	v
第1章 序論	1
1. 1. 研究背景.....	1
1. 2. HCCI エンジン.....	2
1. 3. 関連研究.....	4
1. 3. 1. HCCI エンジンにおける燃焼に関する研究.....	4
1. 3. 2. HCCI 燃焼の素反応数値計算に関する研究.....	5
1. 3. 3. HCCI 燃焼に及ぼす EGR の影響に関する研究.....	7
1. 3. 4. HCCI 燃焼に及ぼす過給の影響に関する研究.....	7
1. 3. 5. HCCI 燃焼における燃料着火特性の影響に関する研究.....	8
1. 3. 6. HCCI エンジンの燃焼制御に関する研究.....	9
1. 4. 研究目的.....	9
1. 5. 本論文の構成.....	10
第2章 素反応数値計算の妥当性	12
2. 1. 素反応数値計算の手法.....	12
2. 2. 反応モデル.....	14
2. 2. 1. 素反応モデル.....	14
2. 2. 2. 熱力学データ.....	15
2. 2. 3. 反応モデルの妥当性検証.....	16
a) ショックチューブ (Shock Tube) での着火遅れ (Ignition Delay).....	16
b) 素反応数値計算と実験での着火遅れの比較.....	19
2. 3. 計算モデル.....	20
2. 3. 1. 計算モデルに用いた仮定.....	21
2. 3. 2. 計算モデルの妥当性検証.....	22
a) ショックチューブおよび HCCI エンジンにおける着火および燃焼過程の比較.....	22
b) エンジン回転速度の影響.....	23
2. 4. 素反応数値計算の妥当性検証.....	25
2. 5. 第2章のまとめ.....	25
第3章 素反応数値計算による HCCI 燃焼特性の解析	27
3. 1. HCCI エンジンにおける燃焼.....	27
3. 2. 寄与度行列.....	28

3. 3. 初期温度が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響.....	33
3. 3. 1. 初期温度と最大圧力上昇率との関係.....	33
3. 3. 2. 初期温度による燃焼位相の変化と最大圧力上昇率との関係.....	34
3. 3. 3. 初期温度による素反応の熱発生率の変化.....	40
3. 4. 初期圧力が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響.....	40
3. 4. 1. 初期圧力と最大圧力上昇率との関係.....	40
3. 4. 2. 初期圧力による燃焼位相の変化と最大圧力上昇率との関係.....	41
3. 4. 3. 初期圧力による各素反応の熱発生率の変化.....	46
3. 5. 第3章のまとめ.....	48
第4章 素反応数値計算に基づくEGRおよび過給がHCCI燃焼に及ぼす影響の解析.....	50
4. 1. EGR および過給による予混合気組成の変化.....	50
4. 2. EGR の考慮.....	51
4. 3. 初期温度が一定の場合.....	54
4. 3. 1. EGR と最大圧力上昇率との関係.....	54
4. 3. 2. EGR による燃焼位相の変化と最大圧力上昇率との関係.....	56
4. 3. 3. EGR および過給と最大圧力上昇率との関係.....	59
4. 3. 4. EGR および過給による燃焼位相の変化と最大圧力上昇率との関係.....	60
4. 4. 初期温度と初期圧力の調節により燃焼位相が一定の場合.....	60
4. 4. 1. EGR が最大圧力上昇率に及ぼす影響.....	61
4. 4. 2. EGR および過給が最大圧力上昇率に及ぼす影響.....	61
4. 5. EGR および過給が HCCI 燃焼に及ぼす影響.....	62
4. 5. 1. HCCI 燃焼および寄与度行列の比較.....	62
4. 5. 2. 総発生率および各素反応の熱発生率の比較.....	62
4. 6. 第4章のまとめ.....	62
第5章 素反応数値計算に基づく燃料の自己着火特性がHCCI燃焼に及ぼす影響の解析.....	70
5. 1. 想定供試燃料.....	70
5. 1. 1. 各想定供試燃料の反応モデル.....	70
5. 1. 2. 各想定供試燃料の着火遅れの比較.....	71
5. 1. 3. 想定供試燃料の HCCI 燃焼の比較 (燃焼位相を揃えた時).....	72
5. 1. 4. 各想定供試燃料の HCCI 燃焼における寄与度行列.....	76
a) メタン (Methane).....	76
b) ノルマル・ヘプタン (Normal heptane).....	78
c) イソオクタン (Iso-octane).....	81
5. 2. 初期温度が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較.....	84
5. 3. 初期圧力が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較.....	86

5. 4. 当量比が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較.....	88
5. 5. EGR 率が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較.....	90
5. 6. 燃焼位相を揃えた時における EGR および過給が最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較.....	92
5. 7. 第5章のまとめ.....	94
第6章 リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンにおける EGR の影響.....	96
6. 1. リブレッシング EGR 型 HCCI エンジン.....	96
6. 1. 1. ツーステージエキゾーストカムおよび外部 EGR ループ.....	96
6. 1. 2. 各ガスの流量, 圧力, 温度の計測システム.....	98
6. 1. 3. スロットルバルブ.....	100
6. 1. 4. 圧縮開始時の質量平均ガス温度.....	102
6. 2. リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンにおける EGR の影響.....	103
6. 2. 1. EGR 導入による質量平均ガス温度の変化が燃焼位相および 最大圧力上昇率に及ぼす影響.....	103
6. 2. 2. 燃焼位相の遅延による HCCI 燃焼のサイクル変動.....	106
6. 3. 第6章のまとめ.....	109
第7章 素反応数値計算に基づく HCCI 燃焼に及ぼす化学種の影響の解析および HCCI エンジンを用いた燃焼制御.....	111
7. 1. 素反応数値計算に基づく HCCI 燃焼に及ぼす化学種の影響の解析.....	111
7. 1. 1. 燃焼効率による排気ガス組成の変化.....	111
7. 1. 2. 排気ガスの導入が次サイクルの燃焼位相に及ぼす影響.....	113
7. 2. HCCI エンジンの燃焼制御.....	118
7. 2. 1. PID 制御.....	118
7. 2. 2. 当量比, 燃焼位相, 燃焼効率を用いた HCCI エンジンの燃焼制御.....	118
7. 3. 第7章のまとめ.....	122
第8章 結論.....	124
謝辞.....	130
参考文献.....	131

記号表

量記号	名称	Terminology	単位
C	体積モール濃度	Concentration	mol/m ³
C_p	定圧比熱	Specific Heat at Constant Pressure	J/(mol·K)
C_v	定容比熱	Specific Heat at Constant Volume	J/(mol·K)
M	分子量	Molecular Weight	g/mol
F	流量	Flow Rate	ℓ/min
HHV	高位発熱量	High Heating Value	J/mol·g
LHV	低位発熱量	Low Heating Value	J/mol·g
m	質量	Mass	g/cycle
n	モル数	Number of Moles	mol
RPM	エンジン回転速度	Engine Speed	rpm
P	圧力	Pressure	Pa
Q	熱量	Calorie	J
dQ/dt	時間ベース熱発生率	Heat-Release Rate	J/ms
$dQ/d\theta$	クランク角度ベース熱発生率	Heat-Release Rate	J/deg
q	1 モル当りの熱量	Calorie per Mole	J/mol
r	EGR 率	EGR ratio	—
R	気体定数	Gas Constant	J/mol K
t	時間	Time	s
T	温度	Temperature	K
U	内部エネルギー	Internal Energy	J
u	1 モル当りの内部エネルギー	Internal Energy per Mole	J/mol
V	体積	Volume	m ³
W	仕事	Work	J
X	モル分率	Mole Fraction	mol/mol
ε	圧縮比	Compression Ratio	—
η	効率	Efficiency	%
θ	クランク角度	Crank Angle	deg
κ	比熱比	Specific Heat Ratio	—
ρ	密度	Density	kg/m ³
ϕ	当量比	Equivalence Ratio	—

添え字

添字記号	名称	Terminology
cycle	1 サイクル	Per Cycle
i	i 番目	Number
CO	一酸化炭素	Carbon Monoxide
CO ₂	二酸化炭素	Carbon Dioxide
d	行程	Displacement
deg	クランク角度	Crank Angle
aTDC	上死点後	After Top Dead Center
DME	ジメチルエーテル	Dimethyl Ether
i-Octane	イソオクタン	Iso Octane
n-Heptane	ノルマル・ヘプタン	Normal Heptane
Exp	実験	Experiment
Cal	計算	Calculation
Fuel	燃料	Fuel
O ₂	酸素	Oxygen
HTR	高温酸化反応	High Temperature Reaction
LTR	低温酸化反応	Low Temperature Reaction
o	初期条件	Initial Condition
max	最高	Maximum
CA50	発熱量 50%時	50% Heat Release
PRR	圧力上昇率	Pressure-Rise Rate
HRR	熱発生率	Heat-Release Rate
EGR	排気再循環	Exhaust Gas Recirculation
EEGR	外部 EGR	External Exhaust Gas Recirculation
REGR	リブレスニング EGR	Rebreathing Exhaust Gas Recirculation
IMEP	図示平均有効圧	Indicated Mean Effective Pressure
HCCI	予混合圧縮着火	Homogenous Charge Compression Ignition
COV	変動係数	Coefficient Of Variation

第1章 序論

1. 1. 研究背景

現在, 世界中で使用されている動力源の元となるエネルギーは, 石油資源に大きく依存している. しかし石油資源は枯渇状態にあるため, それに依存しない代替動力源の誕生が望まれており, それが実質的に地球温暖化に代表される環境問題の改善につながる. 自動車用動力源もその例にもれず, 内燃機関の高効率化, 低公害化が求められている. 現在, 内燃機関の代替動力源として, 燃料電池等が注目を集めている. 燃料電池は, 自動車用はもちろんのこと小型家電用に開発が進められている. しかし自動車に搭載される場合には, 燃料電池本体はもちろんのこと, システムを構成するコンポーネントの小型化, 高効率化, 低コスト化, 耐久性, 信頼性, システム構成の最適化や制御手法の検討が未確立である. また燃料電池自動車を普及させるためには, インフラ整備などの課題があり実用化にはまだ時間を要する. インフラ整備の課題は, 水素自動車あるいは電気自動車にも言えることである.

現在, 主に利用されている内燃機関についてみると, ガソリンエンジンは三元触媒との組み合わせにより排気中の窒素酸化物, 一酸化炭素, 未燃炭化水素は低減できるが, 熱効率は約 33%程度[1][2]に留まっている. 一方, ディーゼルエンジンでは約 45%程度の熱効率[1][2]は望めるが, 拡散燃焼に伴う排気中の窒素酸化物, 粒子状物質が問題となる. これら内燃機関を取りまく現状に対して, ガソリン機関においては, 熱効率の向上を目指して, 燃焼室内への燃料の直接噴射方式を採用し, 層状吸気での希薄燃焼による熱効率の向上策などが採られている. また, ディーゼル機関においては, 電子制御を使った燃料噴射量, 噴射期間の最適制御, また噴射ノズルの微細化, コモンレールシステムによる高圧噴射などによって燃料と空気の予混合化を促進した燃焼により, 排気中の窒素酸化物, 粒子状物質の低減を目指した研究開発が行われている. 一方, 従来機関とは異なる燃焼方式を採用した予混合圧縮自己着火(HCCI: Homogeneous Charge Compression Ignition)エンジンが注目を集めている.

HCCI エンジンは, シリンダ内に燃料と空気の予混合気を供給し, ピストンによる断熱圧縮により一斉に自己着火燃焼させる方式である. この燃焼方式では, ガソリンエンジンの火炎伝播燃焼よりも超希薄な混合気で燃焼可能であり, 拡散燃焼のディーゼルエンジンで問題となる粒子状物質は, 均質燃焼のため生成されない. また希薄燃焼に伴う火炎温度の低下により窒素酸化物はほとんど排出されず, バルク燃焼に伴う燃焼期間の短期化により高効率を実現できる. 一方, 熱効率の確保には着火時期の最適化が必要であるが, 自己着火は燃料と酸化剤の化学反応に依存しており, 従来機関の火花点火, 燃料噴射といった物理的な着火手段が適用できないため, 化学反応論に基づいた手法を確立すること, 失火およびノッキングを回避して運転可能領域を拡大すること, また排気中の一酸化炭素, 炭化水素を低減し燃焼完結性を確保することが課題とされる. 運転可能領域に関して言えば, HCCI エンジンを実用化するためには, 少なくとも発電機用ディーゼルエンジン並みの熱効率(図示熱効率で 45%), 出力(図示平均有効圧力:IMEP で 0.6MPa)が必要となる[3][4]. これらの課題を解決するために, 排気再循環(EGR: Exhaust Gas Recirculation)の導入および予混合気を過給する手法などによりHCCIエンジンの実用化に向けた研究が行われてきている. また様々な解決手法を最適化する燃焼制御の研究も行われている.

本論文では素反応数値計算を用いて断熱圧縮開始時の燃焼室内ガスの温度, 圧力, 当量比, EGR 率の

変化が、着火特性が異なる4種類燃料ジメチルエーテル(Dimethyl ether: DME)、メタン(Methane)、ノルマルヘプタン(Normal heptane)、イソオクタン(Iso-octane)のHCCI 燃焼に及ぼす影響を熱力学および素反応論的に解析する。また素反応数値計算から得られた解析結果をエンジン制御に応用し、リブレスニング EGR 型 HCCI エンジンと DME を用いて燃焼制御実験を行った。

1. 2. HCCI エンジン

HCCI エンジンとは、燃焼室内に供給された燃料空気予混合気をピストンにより圧縮し、予混合気の自己着火により運転するエンジンであり、火炎伝播燃焼方式のガソリンエンジン、拡散燃焼方式のディーゼルエンジンの利点を併せ持つ。自己着火を促すために高圧縮比を行うことにより高効率を実現できる。また、燃焼室内の予混合気は超希薄で均質燃焼が可能となり、NO_x およびすすの同時低減が可能となる。図 1-1 に各エンジンにおける燃焼の特徴を示す。

HCCI エンジンは、Onishi ら[5]による 2 ストロークエンジンでの火炎伝播燃焼に代わる燃焼方式として発見されたことに端を発する。大西らはこの燃焼方式を Active Thermo-Atmosphere Combustion(ATAC)と呼び、発電用の 2 ストロークエンジンに採用し、サイクル毎の圧力履歴の変動が火炎伝播燃焼に比べ小さいことを確認し、燃料消費量の低減を実現した。また HCCI 燃焼の実現には十分な温度、残留ガスと新気の燃料空気予混合気の燃焼室内での十分な均一化が必要であるとしている。Noguchi ら[6]は 2 ストロークエンジンを可視化し、圧縮自己着火燃焼(T-S 燃焼:Toyota-Soken Combustion)機構を調査した。火炎伝播燃焼では、スパークプラグ付近から、火炎が広がっていく様子が観察されたのに対し、圧縮自己着火燃焼時には、バルク

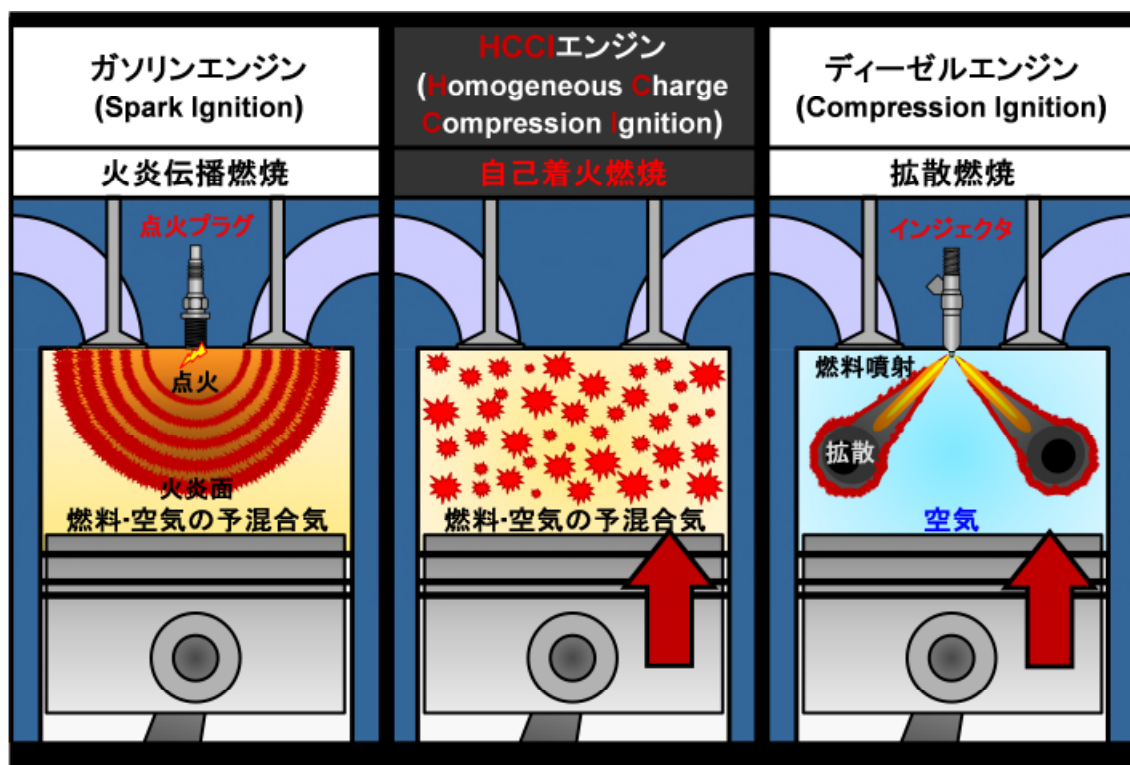


図1-1 各エンジンにおける燃焼の特徴

的に燃焼室全域で燃焼が確認され、明確な火炎面が観測されないことを明らかにしている。

Najt ら[7]は 4 ストロークエンジンに HCCI 燃焼を適用した。4 ストロークの様に残留ガスがほとんどない状態でも、吸気系で空気を加熱することにより HCCI 燃焼を実現した。また HCCI 燃焼の着火は 1000K 以下の低温域での化学反応(低温酸化反応)に支配され、燃焼は 1000K 以上の高温域の化学反応(高温酸化反応)に支配されているとし、従来のガソリンエンジンの燃焼が火炎伝播に依存していること、ディーゼルエンジン機関での燃料と空気の混合に依存していることとは異なる燃焼形態であると結論付けている。また大西らの 2 ストロークエンジン同様、着火時期の制御、運転領域が限られていることを問題として挙げている。Thring ら[8]は 4 ストロークエンジンでガソリンを用い、残留ガス、当量比をパラメータに HCCI を実現できる領域を調査した結果、高負荷域では圧縮自己着火運転ができないことから、乗用車での使用では、HCCI 燃焼、従来燃焼の切り替えによる運転を提案している。

HCCI エンジンの研究において、エンジンとしては 2 ストローク、4 ストロークに分けられ、また混合気の形成に関して、ガソリンエンジンをベースとした燃料の吸気ポートへの噴射、ディーゼルエンジンをベースとした燃焼室への早期直接噴射、遅期直接噴射方式に大きく分類できる。2 ストロークエンジンの吸気ポート噴射方式において、Ishibashi ら[9]は可変排気ポートを設け、残留ガスを適切に調節し、エンジンの運転領域の 1/3 で圧縮自己着火運転することに成功した。4 ストロークで吸気ポートへの噴射方式において、Ryan ら[10]は軽油を用いて実験を行った結果、ディーゼルエンジンほど高圧縮比にはできないこと、吸気加熱を充分に行わないと、軽油が蒸発しきれずに拡散燃焼を招き、粒子状物質の排出が多くなったと報告している。4 ストロークで早期の直接噴射方式を用いた実験は、Takeda ら[11]によって行われた。Takeda らは、窒素酸化物が大幅に低減することを確認し、また過度の希薄化は一酸化炭素、炭化水素の増加を招くことも確認している。4 ストロークで遅期の直接噴射方式を用いた研究は、Mase ら[12]によって行われた。通常のディーゼル機関よりも遅く噴射し、大量の EGR と強いスワールにより混合を促進させ、圧縮自己着火燃焼を引き起こさせる。これにより、窒素酸化物、粒子状物質を抑えつつ、着火時期を遅らせることにより、熱損失を小さくでき、熱効率を上昇させることができた。以上のように圧縮自己着火機関は窒素酸化物、粒子状物質を低減し、高効率を確保できる機関としての能力は持ち合わせているが、着火時期の制御、運転領域の拡大(ノッキングに至らないように燃焼期間の制御)に加え、未燃一酸化炭素、炭化水素の排出が圧縮自己着火燃焼機関の実現に向けての課題として挙げられる。着火および燃焼制御の支配因子として、燃料種、吸気温度、圧縮比、残留ガス量、EGR、過給、エンジン回転速度などを変化させ、圧縮自己着火燃焼の基本特性の調査、着火時期、燃焼期間の制御を試みる実験的研究も活発に行われている。五十嵐ら[13]は n-Butane, DME を燃料に、吸気温度、圧縮比、エンジン回転数を変化させ、熱発生率の形状に及ぼす影響を明らかにし、低温酸化反応および高温酸化反応は温度に強い依存性があることを報告している。森本ら[14]は天然ガスを燃料とする圧縮自己着火機関に EGR を導入し、燃焼反応速度を低下させる効果を確認し、また高出力化も実現できたが、炭化水素の排出は依然として多いと報告している。Jun ら[15]は、日本国内で市販されている都市ガスを燃料として選択し、吸気温度、吸気圧力の変化が圧縮自己着火燃焼に及ぼす影響を調査した。パラメータの変化に関わらず、サイクル中の最高到達温度が 1500K に到達すれば、高い燃焼効率が確保され未燃一酸化炭素、炭化水素の排出量が低減されることを明らかにしている。

1. 3. 関連研究

本節ではこれまで行われてきた HCCI エンジンの燃焼機構の解明、燃焼制御に関連のある研究例を紹介する。研究例について、HCCI エンジンの燃焼に関する研究、HCCI エンジンにおける EGR に関する研究、HCCI エンジンにおける過給に関する研究、HCCI エンジンにおける燃料着火特性に関する研究、HCCI エンジンの素反応数値計算に関する研究、HCCI エンジンの燃焼制御に関する研究に分類しまとめた。

1. 3. 1. HCCI エンジンにおける燃焼に関する研究

HCCI エンジンの実現には、HCCI 燃焼機構を把握することが重要である。HCCI 現象に関する研究としては、ガソリンエンジンのノッキング現象を対象にした研究が先立ち、ここで得られた結果は HCCI エンジンの着火燃焼機構の解明には多大な恩恵をもたらしている。

エンジン内での自己着火燃焼は温度、圧力が時々刻々と変化すること、前サイクルの残留ガスとの混合など様々な要素が複雑に絡み合っている。そこで、ショックチューブのようにステップ状に温度、圧力が上昇する単純な条件での着火遅れの計測、またショックチューブよりも低温域での着火遅れの計測に関しては、急速圧縮装置を用いて、着火遅れの計測等により予混合気の自己着火特性を調査した研究がある。

Burcat[16]らは、Methane, Ethane, Propane, n-Butane, Pentane のアルカン系燃料と酸素、アルゴンの当量比1.0 の予混合気についてショックチューブを用いて圧縮自己着火燃焼実験を行い、1.01325MPa, 1200-1900K の温度範囲で着火遅れを解析した。Methane, Ethane 以外の燃料の着火遅れはほぼ同じとなった。これより、炭素数の小さい燃料の特性を調査することにより、炭素数の大きな燃料を推し量ることができるとしている。

Pfahl ら[17]は、燃料に軽油と関連の深い芳香族の α -Methylnaphthalene, アルカン系の n-Decane, 軽油の代替燃料として有望な DME を燃料とした予混合気を用いてショックチューブで 840-1300K, 1.0MPa の温度圧力域での圧縮着火実験を行っている。 α -Methylnaphthalene 予混合気ではショックチューブで圧縮した際の温度が 960K 以上で着火が生じ、温度の上昇に対し着火遅れも短くなった。一方、n-Decane, DME は 800K から 1000K の温度域で、温度の上昇に対して、着火遅れが長くなる negative temperature coefficient (NTC) 領域が存在することを示しており、燃料によって自己着火特性が大きく異なることを示している。またこれらの燃料を混合して、70%n-Decane, 30% α -Methylnaphthalene で圧縮自己着火させると、NTC 領域が存在し、800K から 1000K にかけて当量比の依存性が強く現れると報告している[18]。

Minetti ら[19]は急速圧縮装置を用いて、圧縮期間 20ms のもと、ショックチューブよりも低温の 700-900K, 0.9-1.1MPa で n-Butane 空気予混合気を圧縮着火させ、NTC 領域が存在することを確認している。

小堀ら[20]は急速圧縮装置に Cetane と Heptamethylnonane の混合燃料を用い、近年のディーゼルエンジンの噴射条件での着火遅れを、雰囲気圧力、噴口径を変化させて調査した。噴射圧力 30MPa で雰囲気圧力を変化させたところ、雰囲気圧力の上昇に伴い、着火遅れは短縮した。この時、温度に対する着火遅れの傾きは、低温側で大きくなっており、雰囲気圧力の上昇に伴い、温度に対する着火遅れの傾きが変化する点は、低温側へ移動した。また噴射圧 100MPa のもと、噴口径を変化させると、噴口径 0.05mm 以下ではショックチューブ実験での着火遅れと温度の関係と定性的に一致すると報告している。

これらの着火遅れの結果、また反応容器での容器通過後の化学種の濃度結果は、詳細な反応過程の反応速度定数を決定する際のレファレンス結果として用いられている。

1. 3. 2. HCCI 燃焼の素反応数値計算に関する研究

HCCI燃焼の着火は化学反応に大きく依存することから、化学反応機構の把握が燃焼制御には重要となる。また燃焼制御には数々の手法が考えられることから、それらの効果を実験的に検証するには多大な費用、時間が要することとなる。近年の計算機技術の発達により、詳細な反応過程の計算や、混合過程の計算も現実的な時間で可能となっており、HCCI エンジンの研究においても計算による研究は重要かつ活発に行われている。モデリングの考え方としては、反応モデルと空間モデルの大きく2つの要素に分類される。反応モデルには詳細な反応過程を考慮した素反応モデル[21] - [33]、主要な反応のみを抜き出した簡略化反応モデル[34] - [36]がある。空間モデルとしては、燃焼室内を0次元[37] - [40]、多次元で扱うモデル[43] - [47]がある。素反応モデルは多次元モデルと組み合わせると計算コストが非常に大きくなるため、0次元場での使用が多く、純粋に化学反応過程を解析する目的での研究が主となる。多次元モデルでは混合気の形成過程の解析、燃焼室内の温度、濃度分布の影響の調査に用いられるが化学反応過程も考慮する場合は簡略化モデルと組み合わせることが多くなる。

また簡略化モデルを使用する際の計算コストをさらに削減するために、予混合気が着火にいたるまでは Livengood-Wu 積分[48]のようなモデルを使用し、着火後に簡略化の反応モデルを組み合わせる手法も取られる[49]。Livengood-Wu 積分は実験値から算出された経験則であり、着火に至るまでの時間を積分式で表す。この積分式を HCCI 燃焼のモデリングに適用するために、燃料種別にその妥当性を検証する試みも行われている[50]。また多次元と詳細反応モデルの組み合わせる場合には、温度分布のみをまず計算し、その後素反応計算を個々の領域について適応するような、計算コストを削減する手法も取られている[51]。

圧縮自己着火燃焼を理解するためには、化学反応機構の把握が重要である。今までに SHELL モデル[34]、MIT モデル[35]、SHUREIBER モデル[36]などの簡略化反応モデルを用いてエンジン内での着火遅れ時間の予測は行われていたが、詳細な反応過程を把握するには至らない。また詳細な反応モデルの研究では、その反応速度定数を定めることを主としている。エンジン燃焼を解析する場合には反応速度定数の選定に重きを置くのではなく、それを利用して着火、燃焼の解析をすることが重要である。詳細な反応機構の解明、素反応モデルの構築では Westbrook ら[52]のグループ、Warnatz ら[53]のグループらが盛んに行い、詳細な反応過程を考慮した自己着火燃焼の計算機を用いた解析が行われ始めた。

往復動型エンジンでは、燃焼室内の予混合気は低温(大気温程度)からピストンにより圧縮され、高温(圧縮比 18 で 1000K 程度)に至る。化学反応過程も温度域によって主となる反応過程が異なる。パラフィン系の燃料の場合、次に示すように各温度域での主要経路が説明されている[54][55]。

<Low-Temperature Reaction (<850K)>

850K 以下の低温の領域では燃料からの水素の引き抜きから開始する。



(•はラジカルを表す。)

水素の抜けた位置に酸素が付加する。

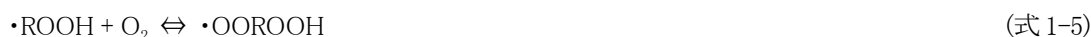
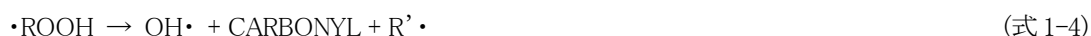


(1st O-addition)

反応(2)は強い温度依存性があり、低温時には平衡は右に、温度が上がると左に移行する。次に $RO_2\cdot$ は内部で水素の引き抜きが起こる。



$\cdot ROOH$ は次の反応へと進む。



(2nd O_2 addition)

低温域では反応(5)が、活性化エネルギーが低いため主となる。



2つの $OH\cdot$ が放出される連鎖分岐反応が進行し、酸化反応は 2nd O_2 addition の平衡が左側に偏るような温度域になるまで進行する。

< Intermediate-Temperature Reaction (1200K - 850K) >

850K 以上 1200K 未満のような温度域では、 H_2O_2 から生成される $OH\cdot$ の連鎖伝ば反応が主となる。まずは H_2O_2 の生成から始まり、第3体反応で $OH\cdot$ を生成する。



< High-Temperature Reaction (>1200K) >

1200K 以上の高温域では(1)の水素引き抜き反応の後、低級の炭化水素への分解が主な反応となる。



上記は各温度域での主要な反応を示しているもので、詳細な反応モデルではこの他にも多くの反応を取り扱い、例えば Methane の素反応スキーム[24]は化学種数 53, 反応数 325, n-Butane[22]では化学種数 141, 反応数 470, n-Heptane[56]では化学種数 544, 反応数 2446 となる。これに対し、簡略化反応モデルの SHELL モデル[34]は化学種数 7, 反応数 8 となっている。

一方で燃料着火特性と燃焼化学反応過程に強く依存する HCCI 燃焼のモデリングには、詳細化学反応機構の発展が不可欠であることは事実である。三好[57]はショックチューブ等での実験結果から詳細反応機構を組み立てるのではなく、炭化水素燃料の燃焼詳細反応機構を自動生成するエキスパートシステム、知識ベースシステムの構築を行った。自動生成された詳細反応機構をショックチューブ等での結果と比較し、オク

タン価と着火遅れは概ね再現されることを示している。

1. 3. 3. HCCI 燃焼に及ぼす EGR の影響に関する研究

HCCI エンジンにおいては、着火時期のコントロールが困難であること、ノッキングにより運転領域が制限されることが大きな課題となっていることは前に述べた。これらの課題を解決し、高効率運転を実現するための手段として EGR を用いた燃焼制御がその 1 つとして挙げられる。EGR とは一度排気された既燃ガスを再び筒内に導入する機構および残留ガスを燃焼室内に残す機構のことである。EGR ガスを用いることで、燃焼を緩慢にし、急峻な圧力上昇を避けることでノッキングの回避を図る。EGR ガスは一度燃焼したガスのため、CO₂ や H₂O などの三原子分子を多く含み、比熱が高く、比熱比が低い。そのため温度上昇抑制効果があり、反応速度を下げ、圧力上昇率を下げることでノッキングを回避することが狙いである。排気バルブの隙間を通してシリンダ内から排出された既燃ガスの一部は、熱交換器を通り冷却されたのちに、吸気と合流し、吸気バルブの隙間を通してシリンダ内へとトラップされる。バルブタイミングを変えて筒内に温度が高い残留ガスを導入する手法も取られる。EGR ガスは空気に比べ定容比熱の値が大きいことが分かる。つまり、与えられた熱量が同じとき、温度変化が小さくなり、温度上昇抑制効果があるといえる。

池本ら[58]は、DME の自己着火温度が低く、圧縮比の低い機関でも HCCI 燃焼が成立する点に着目し、小型軽量の発電機用 HCCI エンジンを開発した。エンジンは小型でシンプルな構造とするために、従来の HCCI エンジンで必要とされている圧縮比、バルブタイミングなどの可変機構を一切持たない。予混合気と高温の内部 EGR ガスと低温の外部 EGR ガスの供給量を 4 つのスロットルバルブを操作することで調整し、給気の温度管理を行うことで広範囲の HCCI 燃焼を最適化している。内部 EGR の導入方法として吸気工程中に排気バルブを開ける二段排気カム機構を用いている。Douglas ら[59]は、可変バルブタイミングを可能にするカムシャフトを 4 ストロークエンジンに適用し、内部 EGR ガスのコントロールを行うことで、圧縮自己着火燃焼での運転領域を拡大と低燃費化に成功している。浦田ら[60]は、電磁式の変バルブタイミング機構をエンジンに導入して、HCCI 燃焼の運転領域拡大を試みている。可変バルブタイミングにより EGR の残留量を調整すると同時に、高負荷領域では筒内直噴インジェクタを用い圧縮行程中に燃料噴射を行い、一方低負荷領域では負のオーバーラップ中に燃料噴射を行うことで運転領域の拡大に成功している。山岡ら[61][62]は、変化させる VVT (Variable Valve Timing) システムで構成される連続可変バルブシステムを導入し、それをベースとしたガソリン HCCI 制御システムを構築した。SI 燃焼と比較して低燃費と低排気を実現できることを示した。

1. 3. 4. HCCI 燃焼に及ぼす過給の影響に関する研究

HCCI エンジンでは出力の低さが実用化への妨げとなっている。HCCI エンジンの出力向上のための一つの手法として過給が目ざされている。Olsson ら[63]は n-heptane, ethanol を用いて、過給圧を変化させて出力向上について実験と計算により調査を行った。その結果、過給圧 0.13 - 0.29MPa の範囲で IMEP が 0.75 - 1.7MPa をカバーすることが出来た。しかし、過給圧 0.29MPa の時には二段インタークーラーを用いたターボ

チャージャーを使用しなければ過給できないため、ポンピングロスが大きく、0.08MPa の損失が出てしまっている。出力限界はシリンダ内最高到達圧力に依存し、ガス交換効率に妨げられて、シリンダ内最高到達圧力を 25MPa にしてもそれ以上は得られなかったとしている。原ら[27]はセタン価 20 相当の軽油を燃料とし燃焼室に早期に燃料を噴射する希薄予混合ディーゼル燃焼(Premixed Lean Diesel Combustion: PREDIC)を用いて、0 - 0.245MPa まで過給を行うことで IMEP0.2 - 1.15MPa, 熱効率は最大 49.8%を達成した。Magnusら[64]は、熱伝達や残留ガスが筒内ガス温度に与える影響についてエンジン実験ならびにシミュレーションによって検討を行った。圧縮開始時の筒内のガス温度は前サイクルの残留ガスに影響を受けること、新気とエンジンとの間の熱伝達は吸気時の流動(エンジン回転速度や吸気管形状に依存する)が強いほど促進されることを明らかにした。

1. 3. 5. HCCI 燃焼における燃料着火特性の影響に関する研究

HCCI エンジンにおいて着火時期を制御する一番容易な方法は、使用する燃料の自己着火温度を変えることである。着火温度は個々の燃料でほぼ一意に決まっているが、優れた着火特性を有する(自己着火温度の低い)燃料を着火し難い(自己着火温度の高い)燃料と混合すると、広い範囲で着火温度を調節できる可能性がある。

Konnoら[65], 山下ら[66], Mutoら[67]は、自己着火温度の高い Methane と、自己着火温度の低い DME を混合することで、自己着火温度を最適化し、HCCI エンジンを広い範囲で運転できることを示した。山下らの結果[66]によれば、Methane 部分当量比と DME 部分当量比の組み合わせにより、アイドリングから IMEP で 0.46MPa までの負荷条件まで連続して運転することが可能である。

金子ら[68]は、DME を主燃料とする HCCI エンジンに、DME に比べて着火し難い Methanol を筒内噴射するシステムを構築した。このシステムでは Methanol の噴射量を調整することで、IMEP 0.9MPa を達成している。この DME と Methanol の組み合わせの着火機構に関しては、山田ら[69]によって検証が行われており、Methanol 添加による冷炎での燃料消費、熱発生量の減少による着火時期遅延効果が確認された。また冷炎での燃料消費割合は初期燃料に対する添加した Methanol の割合のみに依存し、その値が増加すると直線的に減少することが示されている。

首藤ら[70]は、DME 改質エンジンシステムを開発した。DME を改質して水素、一酸化炭素を生成し、それを DME と共に燃料として HCCI エンジンに供給する。改質反応は吸熱反応であるため、エンジン排気熱の回収が可能であり、熱効率向上に寄与する。DME と比較して水素、一酸化炭素の自己着火温度が高いため、DME と改質ガスの混合比率を最適化することで、着火時期の調整が可能であり、最大熱効率 40%を達成している。

Shibataら[71]は、パラフィン系、オレフィン系、アロマティクス系といった炭化水素燃料の配合比の変化が、HCCI 燃焼に及ぼす影響を調査し、個々の成分の影響を実験的に調査している。また現行の内燃機関で燃料として用いられるガソリンと軽油を混合することにより、燃料のオクタン価を調節し、運転可能負荷範囲を広げる試みも成されている[72] - [77]。

1. 3. 6. HCCI エンジンの燃焼制御に関する研究

鹿ノ戸ら[78]は、スロットルを用いて当量比1の予混合気、リブレッシング EGR, 外部 EGR の供給比を調節する機構を構築し、フィードフォワード制御およびフィードバック制御 (PID 制御)により IMEP, CA50, 当量比を制御するシステムを構築した。燃焼実験により、フィードフォワード制御では、設定値と測定値に偏差が生じてしまうことを確認した。また、フィードバック制御では、フィードフォワード制御に比べ、偏差を少なくすることができるが、応答特性が劣ることを確認した。永井ら[79]は、スロットルを用いてストイキの予混合気、リブレッシング EGR, 外部 EGR の供給比を調節する機構を構築し、2つの方法によりサイクル変動の低減を試みた。1つ目は、CA50に閾値を設け、外部EGRの供給量を制御することにより、サイクル変動増大を阻止する試みであった。2つ目は、サイクル変動の大きな期間から脱出するためのアルゴリズムで、過去2サイクルの燃焼効率に閾値を設け、外部 EGR および燃料の供給量を制御するものであった。また、(株)マツダの Kakuda ら[80]はディーゼルエンジンにおける着火時期の制御をモデルベースで行った。Arrhenius の式、Livengood-wu 積分の式から着火遅れの式を求め、そこからエンジン運転想定範囲の中で何百回とエンジンを運転し、モデルの係数を決定した。筒内の圧力、温度、酸素濃度を予測する下位モデルからの出力より着火時期を予測し、仮想エンジンと着火時期予測モデルをループさせて燃料噴射時期を決定する、という制御をフィードフォワードで行っている。

1. 4. 研究目的

レシプロ型内燃機関は自動車用動力源として広く使用されているが、二酸化炭素排出量削減の要求から熱効率の高いエンジンが求められる。予混合圧縮自己着火(Homogeneous Charge Compression Ignition: HCCI)エンジンは、燃料と空気の超希薄な予混合気を燃焼室内に供給し、圧縮行程における燃焼室内の温度および圧力の上昇により予混合気を自己着火・燃焼させ、動力を取り出すものである。HCCI エンジンは既存のガソリンエンジンやディーゼルエンジンに比べて燃焼温度が低いため、高い熱効率を確保しつつ、NO_x とPM 排出の同時低減が可能である。しかし、HCCI 燃焼の自己着火燃焼は、着火時期が燃料固有の着火温度に依存しており燃焼過程が様々な素反応により進行するため、急激な負荷変動における燃焼位相の制御および急峻な燃焼室内ガスの圧力上昇によるノッキングの回避が、課題として挙げられる。HCCI エンジンの課題を解決する第一歩として、素反応数値計算に基づいて着火特性が異なる燃料における HCCI 燃焼の化学反応機構を把握するとともに、圧縮開始時の初期条件の変化が HCCI 燃焼に及ぼす影響を明らかにする必要がある。また HCCI エンジンで用いられている燃焼技術として EGR および過給があり、素反応数値計算に基づいて、EGR 率と過給圧を変化させた時に燃焼位相および燃焼時の最大圧力上昇率に影響を与えると考えられる各要因について個別に調査する必要がある。

本論文は、素反応数値計算に基づいて、HCCI エンジンにおける初期温度、初期圧力、当量比、EGR 率の変化が、燃料の着火特性が異なる HCCI 燃焼の燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認および比較するとともに、各想定供試燃料における HCCI 燃焼の熱発生に大きく寄与する素反応を把握することを目的とする。最後に素反応数値解析から得られた知見をエンジン制御に応用し、HCCI エンジンの燃焼制御の可能性を検証する。

1. 5. 本論文の構成

本論文は8章から成る. 各章の概要を以下に述べる.

第1章 序論

HCCI 燃焼の化学反応機構の解析における素反応数値計算の必要性を示し, 本論文の目的を提示する.

第2章 素反応数値計算の妥当性

本論文で行う素反応数値計算の手法として CHEMKIN を選択し, CHEMKIN に用いる反応モデルおよび計算モデルについて説明する. 第一に反応モデルに関する素反応モデルおよび熱力学データについて説明し, ショックチューブにおける素反応数値計算と実験の着火遅れを比較することで, 反応モデルの妥当性を検証する. 第二に計算モデルの妥当性を検証するために, エンジン回転速度が HCCI 燃焼における酸化反応の開始時期および燃焼過程に及ぼす影響を示し, HCCI エンジンでの素反応数値計算と実験の回転速度による温度履歴の変化を比較する. 最後に HCCI エンジンにおける素反応数値計算と実験での圧力, 温度, 熱発生率履歴の比較により素反応数値計算の妥当性を検証する.

第3章 素反応数値計算による HCCI 燃焼特性の解析

素反応数値計算を用いて HCCI エンジンにおける燃焼の特性を示し, HCCI 燃焼による圧力上昇率と熱発生率との関係を確認する. 熱発生率は燃焼時の圧力上昇率に大きく影響を与えるため, 寄与度行列を用いて HCCI 燃焼の熱発生に寄与する重要な素反応を調査するとともに, 各素反応の寄与度を把握する. 次に, 初期温度と初期圧力が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を明らかにするとともに, 初期条件, 燃焼位相, 最大圧力上昇率との関係を把握する. 最後に初期温度および初期圧力が寄与度行列から得られた重要な各素反応の熱発生率に及ぼす影響を確認する.

第4章 素反応数値計算に基づく EGR および過給が HCCI 燃焼に及ぼす影響の解析

素反応数値計算に基づいて, まず燃焼室内に EGR ガスを導入するときに, 初期温度と初期圧力が一定の条件と, 初期温度と初期圧力 (過給) の調節により燃焼室内の酸素体積モル濃度が一定の条件における EGR 率による HCCI 燃焼の変化を示し, EGR 率が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認する. 次に HCCI 燃焼に及ぼす燃焼位相の影響を消し EGR のみの影響を確認するため, EGR ガスによって燃焼位相が変化するときの結果を, 初期温度と初期圧力の調節により燃焼位相が一定の条件で現れる結果と比較する. その上, 燃焼位相が一定の条件において, EGR と過給がない場合, EGR だけがある場合, EGR と過給が同時にある場合の三つの条件を考慮し, それぞれの HCCI 燃焼の比較により EGR および過給が HCCI 燃焼に及ぼす影響を解析する. また寄与度行列を用いて HCCI 燃焼の熱発生に寄与する素反応の変化および各素反応の熱発生率の変化を確認する.

第5章 素反応数値計算に基づく燃料の自己着火特性が HCCI 燃焼に及ぼす影響の解析

ジメチルエーテル (Dimethyl ether), メタン (Methane), ノルマル・ヘプタン (Normal heptane), イソオクタン (Iso octane) を想定供試燃料として選択し, 素反応数値計算に基づいて, まずショックチューブにおける各想定供試燃料の着火遅れを比較する. 次に燃焼位相を揃えた時において, HCCI エンジンにおける各想定供

試燃料の燃焼特性を示し、HCCI 燃焼による圧力上昇率と熱発生率との関係を確認する。また熱発生率は燃焼時の圧力上昇率に大きく影響を与えるため、各想定供試燃料に対する寄与度行列を用いて、HCCI 燃焼の熱発生に寄与する重要な素反応を調査するとともに、各素反応の寄与度を把握する。続いて初期条件である初期温度、初期圧力、当量比、EGR 率の変化が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認するとともに、初期条件、燃焼位相、最大圧力上昇率との関係を把握する。最後に各想定供試燃料において、EGR および過給によって変化する燃焼位相を揃えるため要求される初期温度を比較し、EGR および過給が各想定供試燃料の HCCI 燃焼における最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較する。

第6章 リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンにおける EGR の影響

素反応数値解析から得られた DME の HCCI 燃焼に及ぼす EGR の影響を確認および比較するため、リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンを用いて実験を行う。まず外部 EGR の導入による燃焼室内の各ガスの質量および温度の変化を確認し、圧縮開始時の質量平均ガス温度を算出する。算出した質量平均ガス温度と燃焼位相の関係を示し、燃焼位相が最大圧力上昇率に及ぼす影響を把握する。最後に定常運転時と燃焼位相の遅延による非定常運転時における燃焼室内に供給される圧縮開始時の燃料、空気、外部 EGR、リブレッシング EGR の質量と温度および質量平均ガス温度のサイクル変動比較し、定常運転時と非定常運転時に現れる CA50 および IMEP の変動についてリターンマップにより示す。

第7章 素反応数値計算に基づく HCCI 燃焼に及ぼす化学種の影響の解析および

リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンを用いた燃焼制御

第6章の実験結果の中で、圧縮開始時の質量平均温度が最も低いサイクルで IMEP が最大になるサイクルが現れたため、この原因を化学的な影響によるものであると考え、素反応数値計算に基づいて前サイクルからのリブレッシング EGR およびリブレッシング EGR にある各化学種が次サイクルの燃焼位相に及ぼす影響を調査する。始めに燃焼効率が 10%から 90%まで、10%ずつの HCCI 燃焼を再現し、各燃焼効率での排気ガスを実験でのリブレッシング EGR として導入し、燃焼効率による排気ガス組成の変化と排気ガスの導入量の変化が燃焼位相に及ぼす影響を比較する。その上、燃焼効率が 10%、40%、90%の場合、排気ガスにある各化学種を次サイクルに燃焼効率に対応した量で導入し、各化学種が燃焼位相にどの程度寄与するかを確認する。続いて燃焼位相の遅延によるサイクル変動を抑える方法として PID 制御による HCCI エンジンの燃焼制御を提案し、燃焼位相、当量比、燃焼効率を入力に用いた制御器を作成する。それをリブレッシング EGR 型 HCCI エンジンに適用し、サイクル変動が起こる時の燃焼制御を行い、燃焼制御による CA50 と IMEP の変化をリターンマップにより確認することで、HCCI エンジンの燃焼制御の可能性を検証する。

第8章 結論

素反応数値計算およびエンジン実験から得た結果をまとめ、結論を述べた。

第2章 素反応数値計算の妥当性

HCCI エンジンにはガソリンエンジンの点火プラグやディーゼルエンジンのインジェクタのような燃焼を直接制御するシステムがないため、着火時期および燃焼期間の制御が課題として挙げられる。HCCI エンジンにおける燃焼は燃焼室内の燃料と空気および化学種間の化学反応によって進行するため、HCCI エンジンの課題を解決する第一歩として素反応数値計算を用いて HCCI 燃焼の化学反応機構を把握する必要がある。

第2章では、本論文で行う素反応数値計算の手法として CHEMKIN を選択したため、CHEMKIN を構成する反応モデルおよび計算モデルについて説明する。第一に反応モデルに関する素反応モデルおよび熱力学データについて説明し、ショックチューブにおける素反応数値計算と実験の着火遅れを比較することで、反応モデルの妥当性を検証する。第二に計算モデルの妥当性を検証するため、にエンジン回転速度が HCCI 燃焼における酸化反応の開始時期および燃焼過程に及ぼす影響を示し、HCCI エンジンでの素反応数値計算と実験の回転速度による温度履歴の変化を比較する。最後に HCCI エンジンにおける素反応数値計算と実験での圧力、温度、熱発生率履歴の比較により素反応数値計算の妥当性を検証する。

2.1. 素反応数値計算の手法

本論文で行なう素反応数値計算の手法として CHEMKIN-PRO[81]にある CHEMKIN を選択した。反応速度論にもとづく化学反応シミュレーションソフトウェアである CHEMKIN は 1980 年にアメリカの Sandia National Laboratory から発表された。1990 年に改訂された CHEKIN II[82]では圧力依存のある反応の記述方法が的確かつ能率的方法になるなど性能が上がり、1996 年に改訂された CHEMKIN III[83]では非平衡の様々な流体系を扱うことができた。さらに現在 CHEMKIN-PRO[81]にある CHEMKIN では既存の CHEMKIN に比べて 25倍以上計算速度が速くなった。FORTRAN コード2組と2つのファイルから構成されている。図2-1に CHEMKIN の構成を示す。まず CHEMKIN の構成に書かれた反応モデルを素反応モデルと熱力学データを

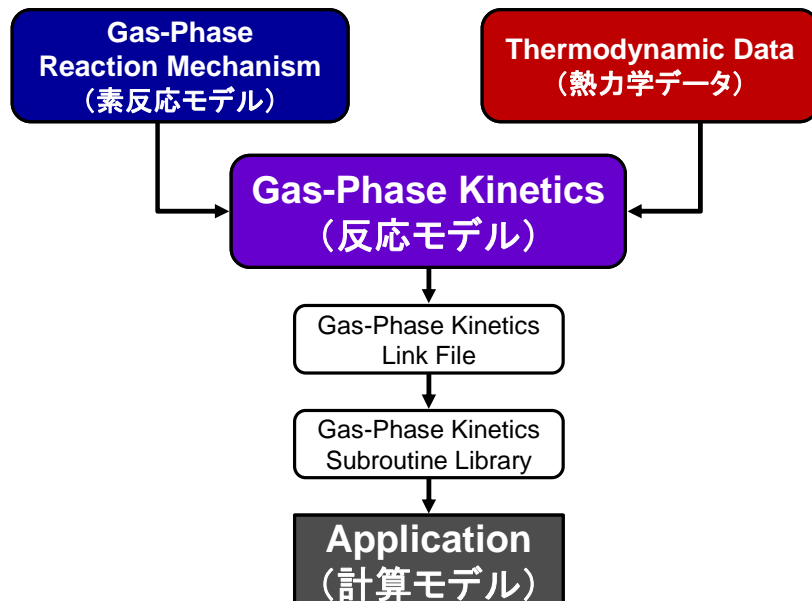


図2-1 CHEMKINの構成

用いて準備する必要がある。Pre-Processor 実行することで、素反応モデルにある各素反応機構を記述している記号を読み取り、熱力学データから素反応に関係する化学種の熱力学的情報を抜き出し、Gas-Phase Kinetics Link File が作成される。Gas-Phase Kinetics Subroutine Library はサブルーチン群であり、Gas-Phase Kinetics Link File の情報を基に、元素、反応、熱力学的特性、生成速度の情報を返す。これらの値を利用し、HCCI 燃焼を解析する計算式を計算モデルに書き、素反応数値計算を実行する。

CHEMKIN での計算行程の概要は以下に述べる。K 個の成分を含む反応素反応 i は次のように表現できる。

$$\sum_{k=1}^K v'_{ki} \chi_k \Leftrightarrow \sum_{k=1}^K v''_{ki} \chi_k \quad (i = 1, \dots, I) \quad (\text{式 2-1})$$

素反応 i の反応速度 q_i [mol/m³] は以下のように算出される。

$$q_i = k_{f_i} \prod_{k=1}^K [X_k]^{F_{ki}} - k_{r_i} \prod_{k=1}^K [X_k]^{R_{ki}} \quad (\text{式 2-2})$$

$$k_{f_i}(T) = A_i \cdot T^{\beta_i} \exp(-E_i / RT) \quad (\text{式 2-3})$$

各反応の反応速度から化学種 k の生成速度が算出される

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^I q_i (v''_{ki} - v'_{ki}) \quad (K = 1, \dots, K) \quad (\text{式 2-4})$$

A_i : 反応 i の頻度因子, β_i : 反応 i の温度乗数, E_i : 反応 i の活性化エネルギー, F_{ki} : 反応 i の正反応における化学種 k の反応次数, k_{f_i} : 反応 i の正反応速度定数, k_{r_i} : 反応 i の逆反応速度定数, R : 一般ガス定数 [J/mol·K], R_{ki} : 反応 i の逆反応における化学種 k の反応次数, x_k : 化学種 k の化学記号, v'_{ki} : 反応 i における反応種 k の量論係数, v''_{ki} : 反応 i における生成種 k の量論係数, $[X_k]$: 化学種 k のモル濃度 [mol/m³], $\dot{\omega}_k$: 化学種 k の生成速度

次に、断熱の条件では、熱力学の第一法則により

$$du + Pdv = 0 \quad (\text{式 2-5})$$

$$u = \sum_{k=1}^K u_k \cdot Y_k \quad (\text{式 2-6})$$

式 2-6 の微分形を考えると

$$du = \sum_{k=1}^K Y_k \cdot du_k + \sum_{k=1}^K u_k \cdot dY_k \quad (\text{式 2-7})$$

ここで、理想気体を仮定すれば、

$$du_k = c_{v,k} \cdot dT \quad (\text{式 2-8})$$

式 2-5, 2-7, 2-8 より

$$\sum_{k=1}^K Y_k \cdot c_{v,k} \cdot dT + \sum_{k=1}^K u_k \cdot dY_k + Pdv = 0 \quad (\text{式 2-9})$$

予混合気の平均定容比熱 c_v を $c_v = \sum_{k=1}^K Y_k \cdot c_{v,k}$ とすると

$$c_v \cdot \frac{dT}{dt} + \sum_{k=1}^K u_k \cdot \frac{dY_k}{dt} + P \frac{dv}{dt} = 0 \quad (\text{式 2-10})$$

また質量保存則より

$$\frac{dm}{dt} = 0 \quad (\text{式 2-11})$$

$$\frac{dm_k}{dt} = V \dot{\omega}_k W_k \quad (\text{式 2-12})$$

$$\frac{dY_k}{dt} = v \dot{\omega}_k W_k \quad (\text{式 2-13})$$

式 2-10, 2-13 より,

$$c_v \cdot \frac{dT}{dt} + P \frac{dv}{dt} + v \sum_{k=1}^K u_k \cdot \dot{\omega}_k \cdot W_k = 0 \quad (\text{式 2-14})$$

u : 単位質量あたりの内部エネルギー [J/kg], P : 圧力 [Pa], V : 体積 [m³], Y_k : 化学種 k の質量分率 [kg/kg], $C_{v,k}$: 化学種 k の定容比熱, T : 温度 [K], v : 比体積 [m³/kg], W_k : 化学種 k の分子量 [kg/m³], m : 混合気の質量 [kg], m_k : 化学種 k の質量 [kg]

式 2-14 と理想気体の状態方程式 $Pv=mRT$ を用い, 体積履歴を与えることにより, 圧力, 温度が算出される。

2. 2. 反応モデル

2. 2. 1. 素反応モデル

炭化水素系燃料の場合, 酸化反応式は一般的に $\text{CaHbOc} + (a + b/4 - 2/c)\text{O}_2 = a\text{CO}_2 + (b/2)\text{H}_2\text{O}$ と表され, これは総括反応式 (overall reaction) と言われる. Dimethyl ether (DME, ジメチルエーテル) の総括反応式を例として式 2-15 に示す.



これに対し, 実際の酸化反応過程はいくつかの段階に分かれており, その各反応をそれぞれ素反応 (elementary reaction) と呼ぶ. 図 2-2 には式 2-15 にある DME (CH_3OCH_3) の総括反応に対する素反応モデルの一部を示す[23]. 素反応過程を考慮した場合, 燃料 (DME: CH_3OCH_3) と空気の成分 (N_2 , O_2 , Ar) 以外に, さまざまな化学種を取り扱うこととなる. なお, 反応と共に示されている A , β , E の数値は, それぞれの素反応の反応速度定数をアレニウスの式で表した際のそれぞれの係数である.

図 2-2 に示した反応の反応速度 q は反応物の体積モル濃度に依存性を持っている. 例えば,

$$v'_1 \chi_1 + v'_2 \chi_2 \Rightarrow \sum_{k=1}^K v_k'' \chi_k \quad (\text{化学種: } k=1, \dots, K) \text{ という反応を仮定するとその反応速度 } q \text{ は}$$

No.	Reaction	A	n	E
1.	$\text{CH}_3+\text{H}(+\text{M})=\text{CH}_4(+\text{M})$	2.14E+15	-0.40	0
2.	$\text{CH}_4+\text{H}=\text{CH}_3+\text{H}_2$	1.73E+04	3.00	8224.
3.	$\text{CH}_4+\text{OH}=\text{CH}_3+\text{H}_2\text{O}$	1.93E+55	2.40	2106.
	⋮	⋮	⋮	⋮
349.	$\text{CH}_2[\text{s}]+\text{CH}_3=\text{C}_2\text{H}_4+\text{H}$	2.00E+13	0.00	0.
350.	$\text{CH}_2[\text{s}]+\text{CH}_2\text{CO}=\text{C}_2\text{H}_4+\text{CO}$	1.60E+14	0.00	0.
351.	$\text{C}_2\text{H}_3+\text{O}_2=\text{CH}_2\text{CHO}+\text{O}$	3.50E+14	-0.61	5260.

図2-2 DMEの素反応モデル[23]

$$q = k[\chi_1]^{F_1}[\chi_2]^{F_2} \quad (\text{式 2-16})$$

q: 反応速度(mol/m³・s)

[χ_1], [χ_2]: 化学種の体積モル濃度(mol/m₃)

v'_1, v'_2 : 化学量論係数

F_{1p}, F_{2p} : 反応の次数

という形で表される。この式に含まれる反応速度定数kは以下のアレニウスの式によって表される。この式は1889年にSvante Arrheniusによって実験的速度測定の結果をもとに示されたもので、化学反応速度が温度に強く依存することを示している。

$$k(T) = A \cdot T^\beta \exp(-E/RT) \quad (\text{式 2-17})$$

k: 正反応の速度定数

A: 前指数因子または頻度因子

T: 温度(K)

β : 温度定数

E: 活性化エネルギー

R: 気体定数

以上のように、アレニウス式から化学反応速度定数が求められるから、一つの反応についてみれば温度に対して反応速度は線形性を持つといえる。しかし、燃焼反応は多くの素反応が複雑に関係しあっている。式 2-16 で示されるように反応速度は濃度にも依存しているため、温度が上昇してもある素反応に必要な化学種がその他の素反応によって生成されない限り、どんなに温度が高くてもその反応は進行しない。このことから、総括反応の反応速度を考えた場合には燃焼温度に対する線形性は有していない。

2.2.2. 熱力学データ

総括反応および素反応に関係する各化学種の熱力学的物性値を求めるのに必要な係数を記述したのが熱力学データである。例として、DMEの素反応モデルに関する熱力学データの一部を図2-3に示す[23]。熱力学的物性値の算出方法について述べる。

化学種 k の定圧モル比熱 C_{pk}^0 (cal/(mol・K)) を温度のみの関数とし多項式近似すると、

化学種	温度	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7
Ar	300-1000K	0.025E+02	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	-0.075E+04	0.044E+02
	1000-5000K	0.025E+02	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	-0.075E+04	0.044E+02
H	300-1000K	0.025E+02	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.025E+06	-0.046E+01
	1000-5000K	0.025E+02	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.025E+06	-0.046E+01
H ₂	300-1000K	0.030E+02	0.070E-02	-0.056E-06	-0.092E-10	0.016E-13	-0.084E+04	-0.014E+02
	1000-5000K	0.033E+02	0.082E-02	-0.081E-05	-0.095E-09	0.041E-11	-0.010E+05	-0.033E+02
HOCH ₂ O ₂ H	300-1422K	1.163E+01	7.151E-03	-2.390E-06	3.658E-10	-2.102E-14	-4.311E+04	-3.243E+01
	1422-5000K	1.857E+00	3.232E-02	-2.699E-05	1.117E-08	-1.813E-12	-4.003E+04	1.909E+01
OCH ₂ O ₂ H	300-1420K	1.154E+01	5.343E-03	-1.819E-06	2.820E-10	-1.636E-14	-1.682E+04	-3.207E+01
	1420~4000K	1.938E+00	3.015E-02	-2.611E-05	1.095E-08	-1.783E-12	-1.382E+04	1.850E+01
HOCH ₂ O ₂	300-1412K	9.045E+00	7.152E-03	-2.370E-06	3.600E-10	-2.058E-14	-2.494E+04	-1.742E+01
	1412~5000K	2.854E+00	2.337E-02	-1.881E-05	7.967E-09	-1.363E-12	-2.297E+04	1.517E+01

図2-3 DMEの熱力学データ[23]

$$\frac{C_{pk}^o}{R} = \sum_{n=1}^N a_{nk} T_k^{(n-1)} \quad (\text{式 2-18})$$

a_{nk} : パラメータ

上付き文字の0は標準状態の1気圧を示している。しかし、定圧比熱は理想気体であれば圧力に依存しないため、標準状態の値はそのまま実際の状態の値となる。

エンタルピー H_k^0 (cal/mol)は、

$$H_k^0 = \int_0^{T_k} C_{pk}^0 dT + H_k^0(0) \quad (\text{式 2-19})$$

$$\therefore \frac{H_k^0}{RT_k} = \sum_{n=1}^N \frac{a_{nk} T_k^{(n-1)}}{n} + \frac{a_{N+1,k}}{T_k} \quad (\text{式 2-20})$$

R: 一般ガス定数

$a_{N+1,k}$: 0Kにおける標準生成熱

エントロピー S_k^0 (cal/(mol·K))は式 2-21 のように書ける。

$$S_k^0 = \int_{298}^{T_k} \frac{C_{pk}^0}{T} dT + S_k^0(298) \quad (\text{式 2-21})$$

$$\frac{S_k^o}{R} = a_{1k} \ln T_k + \sum_{n=2}^N \frac{a_{nk} T_k^{(n-1)}}{(n-1)} + a_{N+2,k} \quad (\text{式 2-22})$$

$a_{N+2,k}$: 標準状態 298Kにおけるエントロピー

上記の方程式、式 2-18 から式 2-22 までは任意のオーダーの多項式であるが、CHEMKIN では7つの係数 $a_{1k} \sim a_{7k}$ を使って計算しており、この7つの係数が熱力学データに格納されている。そのため CHEMKIN では定圧モル比熱、エンタルピーおよびエントロピーを、

$$\frac{C_{pk}^0}{R} = a_{1k} + a_{2k} T_k + a_{3k} T_k^2 + a_{4k} T_k^3 + a_{5k} T_k^4 \quad (\text{式 2-23})$$

$$\frac{H_k^0}{RT_k} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2} T_k + \frac{a_{3k}}{3} T_k^2 + \frac{a_{4k}}{4} T_k^3 + \frac{a_{5k}}{5} T_k^4 + \frac{a_{6k}}{T_k} \quad (\text{式 2-24})$$

$$\frac{S_k^0}{R} = a_{1k} \ln T_k + a_{2k} T_k + \frac{a_{3k}}{2} T_k^2 + \frac{a_{4k}}{3} T_k^3 + \frac{a_{5k}}{4} T_k^4 + a_{7k} \quad (\text{式 2-25})$$

という近似式を用いて計算している。また、定容比熱 C_{vk}^0 (cal/(mol·K))は、

$$C_{vk}^0 = C_{pk}^0 - R \quad (\text{式 2-26})$$

内部エネルギー U_k^0 (cal/kg)は、

$$U_k^0 = H_k^0 - RT_k \quad (\text{式 2-27})$$

と計算できる。

理想気体では比熱、エントロピーおよび内部エネルギーは圧力に依存しないためそのまま計算に用いることができるが、エントロピーは圧力によって値が変化するので、以下の式を用いて計算する。

$$S_k = S_k^0 - R \ln X_k - R \ln(P/P_{atm}) \quad (\text{式 2-28})$$

以上で、求められる大文字の熱力学的特性値は 1 モルあたりの値であり、これらを分子量 W_k で割ることで、単位質量あたりの値となる。

2. 2. 3. 反応モデルの妥当性検証

a) ショックチューブ (Shock Tube) での着火遅れ (Ignition Delay)

反応モデルはショックチューブ (Shock Tube, 衝撃波管) という装置で行われた実験結果を基に構成されている。科学反応機構をも引いた計算が、この実験結果と同様の燃焼の形態をとるように素反応モデルのパラメータを合わせこんで作成している。ショックチューブは管内に発生する衝撃波を利用して、主として気相中の燃焼反応を研究するための実験装置である。図2-4にショックチューブの設定温度 (T_{st}) を 700K, 1000K, 1300K とした時の温度履歴を示す。ショックチューブの設定温度を変化させると各酸化反応の開始温度が変わるので、各酸化反応の開始までの時刻である着火遅れが変わる。ショックチューブの設定温度が上がると高温酸化反応および低温酸化反応の開始時点が早くなり着火遅れが短くなる。しかし、着火遅れ時間はショ

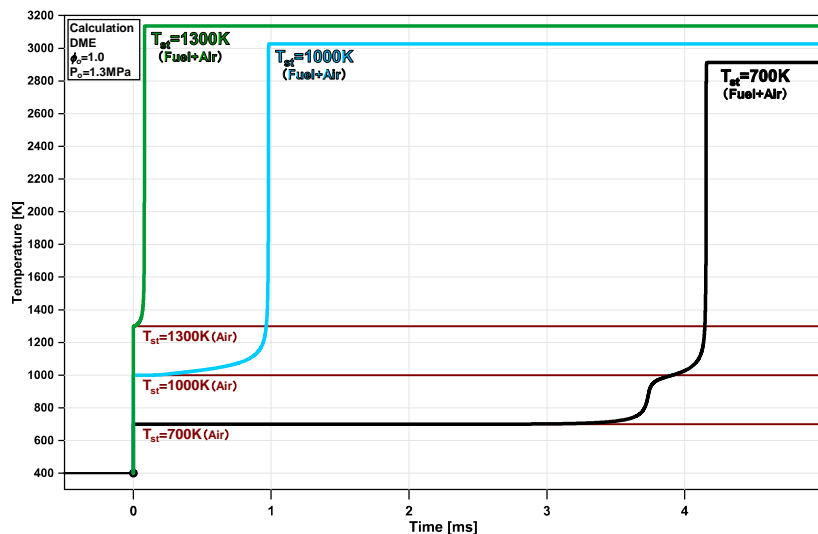


図2-4 ショックチューブを模擬した条件での素反応数値計算における温度履歴

ックチューブの設定温度と比例しない。すなわちショックチューブの設定温度が 700K から 1000K まで 300K 上げた時、高温酸化反応の着火遅れ時間は約 3.3ms であった。一方、ショックチューブの設定温度を 1000K から 1300K まえ 300K 上げた時の高温酸化反応の着火遅れは約 0.9ms であった。またショックチューブの設定温度を上げると高温酸化反応の開始温度が高くなり、燃焼による最高到達温度も高くなる。ここで注目すべきはショックチューブの設定温度がある温度以上になると低温酸化反応が現れないことである。(図2-4 でショックチューブの設定温度が 1000K から 1300K の時低温酸化反応は見られない)。

反応モデルの妥当性検証のため素反応数値計算での着火遅れ(τ)を定義する。図2-5に初期温度(T_0)を 400K、設定温度(T_{st})を 700K とし、ショックチューブに燃焼と空気の予混合気を燃焼させた時の素反応数値計算による温度履歴を示す。燃料と空気の予混合気の温度が初期温度から設定温度まで瞬間的に上昇すると、そのままの温度を維持する。ある時間を経過した後、酸化反応による温度上昇が現れ、約 800K で低

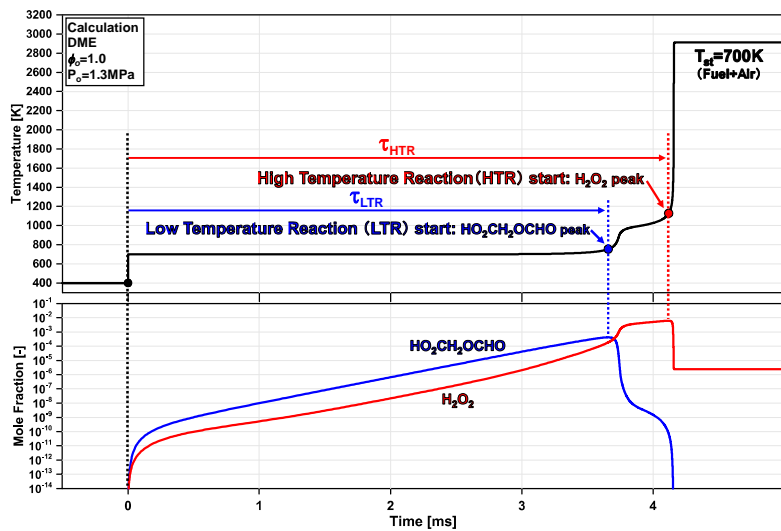


図2-5 素反応数値計算における着火遅れの定義

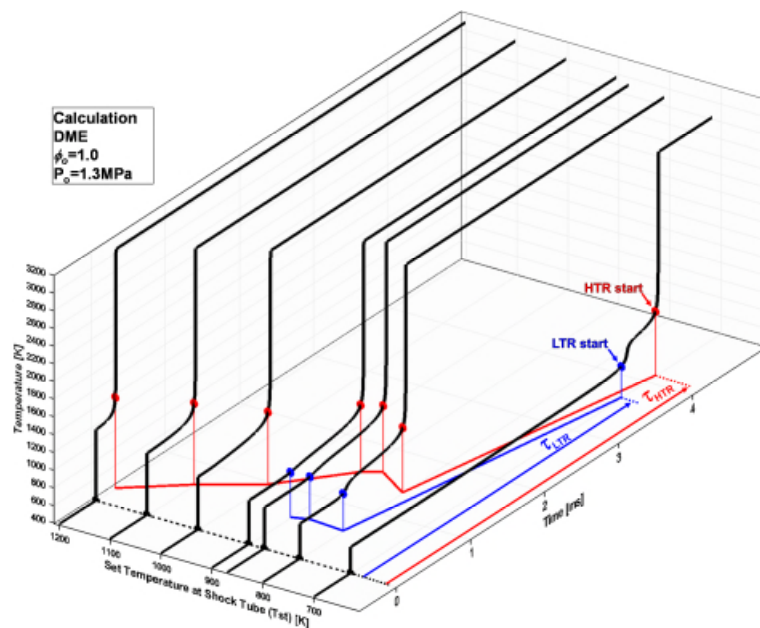


図2-6 着火遅れに及ぼすショックチューブの設定温度(T_{st})影響

低温酸化反応 (Low Temperature Reaction; LTR) が起こり、続いて約 1050K で高温酸化反応 (High Temperature Reaction; HTR) が起こる。本論文では低温酸化反応の開始時点を $\text{HO}_2\text{CH}_2\text{OCHO}$ (Ketoperoxide) のモル分率のピークとし、高温酸化反応の開始時点を H_2O_2 (Hydrogen Peroxide) のモル分率のピークとする。低温酸化反応と高温酸化反応の着火遅れは初期時点 ($t=0\text{ms}$) から各酸化反応の開始時点 (τ_{LTR} , τ_{HTR}) までと定義する。

図2-5に示した着火遅れの定義を用いて着火遅れをに及ぼすショックチューブの設定温度の影響を図2-6に示す。設定温度が 700K から 800K に高くなると低温酸化反応 (τ_{LTR}) と高温酸化反応 (τ_{HTR}) の着火遅れが短くなる。設定温度が 869.57K の場合、設定温度 800K より高くなっても低温酸化反応と高温酸化反応の着火遅れが長くなる縮退期間 (Negative Temperature Coefficient: NTC) の領域が現れた。設定温度が 869.57K 以上の場合は設定温度の上昇とともに着火遅れが短くなるが設定温度 1000K からは低温酸化反応が消え、高温酸化反応だけが見られた。

b) 素反応数値計算と実験での着火遅れの比較

DME の反応モデルを用い、ショックチューブの設定温度が 625K から 1428.571K まで変化させ素反応数値計算を行った。素反応数値計算により算出した着火遅れの計算結果を図2-7に示す。赤の実線は高温酸化反応の着火遅れを示し、青の実線は低温酸化反応の着火遅れを示す。反応モデルの妥当性の検証をするため、同一の設定温度、圧力、当量比で Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) が行った素反応数値計算による着火遅れの結果 (茶色の破線: 高温酸化反応, 水色の破線: 低温酸化反応) [23] と比較する。本論文で示した着火遅れと Lawrence Livermore National Laboratory の計算結果がほとんど一致するので、図2-5に示した着火遅れの定義は妥当であると言える。また本論文で示した着火遅れは、RWTH Aachen University のショックチューブの実験から得られた着火遅れの結果 [18] と概ね一致し、実線で現れたショッ

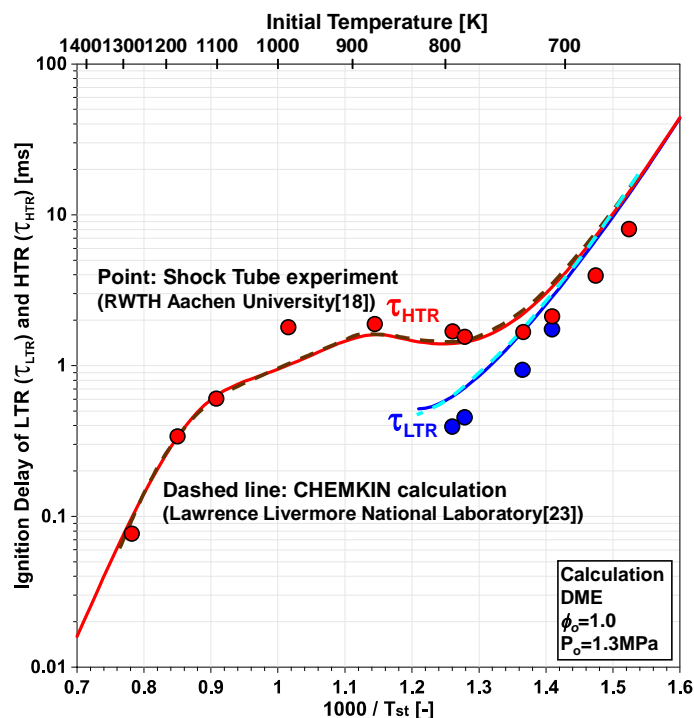


図2-7 ショックチューブの設定温度 (T_{st}) による素反応数値計算と実験での着火遅れの比較

クチューブの設定温度が上がっても着火遅れが長くなる縮退期間領域も計算の結果で確認することができた。加えて、図2-6の素反応数値計算結果で確認したショックチューブの設定温度がある温度以上になると、低温酸化反応が消える現象も実験結果で確認できた。素反応数値計算で得られたショックチューブでの着火遅れが他の素反応数値計算の結果の概ね一致し、ショックチューブ実験で現れた着火遅れに関する現象も素反応数値計算の結果で確認できたことから、本論分に用いる反応モデルの妥当性が検証できた。

2. 3. 計算モデル

2. 3. 1. 計算モデルに用いた仮定

計算モデルを行うにあたっては、質量の保存則およびエネルギー保存則が成り立ち、すべての気体は理想気体であり、系の外との熱の授受は行われない断熱変化を仮定して行う。

- ・ 質量の保存則

K 種類の化学種から構成される作動ガスの質量 m は保存され、その質量 m は次のように表される。

$$m = \sum_{k=1}^K m_k \quad (\text{式 2-29})$$

$$\frac{dm}{dt} = 0 \quad (\text{式 2-30})$$

m :系の中の総質量(kg)

m_k :化学種 k の質量(kg)

K :化学種数

t :時間(s)

作動ガス中の各化学種は以下の支配方程式で化学反応により生成、崩壊する。

$$\frac{dm_k}{dt} = V\dot{\omega}_k W_k, \quad k = 1, \dots, K \quad (\text{式 2-31})$$

t :時間(s)

$\dot{\omega}_k$:モル生成率(mol/m³・s)

V :体積(m³)

W_k :分子量(kg/mol)

式 2-31 は、質量分率 Y_k を用いて以下のように書き直すことができる。

$$\frac{d \frac{m_k}{m}}{dt} = \frac{V}{m} \dot{\omega}_k W_k, \quad k = 1, \dots, K \quad (\text{式 2-32})$$

$$\therefore \frac{dY_k}{dt} - v\dot{\omega}_k W_k = 0, \quad k = 1, \dots, K \quad (\text{式 2-33})$$

Y_k :質量分率

v :比体積(m³/kg)

- ・ エネルギー保存則

熱力学の第一法則と断熱条件より、

$$du + Pdv = 0 \quad (\text{式 2-34})$$

u : 単位質量辺りの内部エネルギー(cal/kg)

P : 圧力(Pa)

作動ガスがK種の化学種から成り立っている場合,

$$u = \sum_{k=1}^K (u_k \cdot Y_k) \text{ を微分して,}$$

$$du = \sum_{k=1}^K (Y_k \cdot du_k) + \sum_{k=1}^K (u_k \cdot dY_k) \quad (\text{式 2-35})$$

より, 式 2-34 に式 2-35 を代入すると, 式 3.36 が得られる.

$$\sum_{k=1}^K (Y_k \cdot du_k) + \sum_{k=1}^K (u_k \cdot dY_k) + Pdv = 0 \quad (\text{式 2-36})$$

ここで作動ガスを理想気体と仮定すると,

$$du_k = c_{v,k} \cdot dT \quad (\text{式 2-37})$$

これを式 2-36 に代入して,

$$\sum_{k=1}^K (Y_k \cdot c_{v,k} \cdot dT) + \sum_{k=1}^K (u_k \cdot dY_k) + Pdv = 0 \quad (\text{式 2-38})$$

作動ガスの平均定容比熱 c_v を $c_v = \sum_{k=1}^K Y_k \cdot c_{v,k}$ と定義すれば,

$$c_v \cdot dT + \sum_{k=1}^K (u_k \cdot dY_k) + Pdv = 0 \quad (\text{式 2-39})$$

$$\therefore c_v \cdot \frac{dT}{dt} + \sum_{k=1}^K (u_k \cdot \frac{dY_k}{dt}) + P \frac{dv}{dt} = 0 \quad (\text{式 2-40})$$

c_v : 平均定容比熱(J/mol/K)

式 2-33 を式 2-40 に代入すると,

$$c_v \cdot \frac{dT}{dt} + P \frac{dv}{dt} + v \sum_{k=1}^K (u_k \cdot \dot{\omega}_k \cdot W_k) = 0 \quad (\text{式 2-41})$$

となる.

・ 理想気体

$$PV = nRT \quad (\text{式 2-42})$$

P : ガス圧力(Pa)

V : ガス体積(m³)

n : モル数(mol)

R : 一般ガス定数(J/mol・K)

t : ガス温度(K)

・ 断熱変化

$$dq = du + P \cdot dv = 0 \quad (\text{式 2-43})$$

q :比熱量(J/kg)
 u :比内部エネルギー(J/kg)
 P :混合気の圧力(Pa)

2. 3. 2. 計算モデルの妥当性検証

a) ショックチューブおよびHCCIエンジンにおける着火および燃焼過程の比較

ショックチューブとエンジンでの温度上昇履歴について、空気のみで燃焼が起こらない場合と燃料と空気の予混合気が酸化反応により燃焼が起こる場合の二つ分けて比較する。その結果を図2-8に示す。まず空気のみで燃焼が起こらない場合、図2-4に説明したようにショックチューブでは初期温度($T_0=400\text{K}$)からショックチューブの設定温度まで、温度が一気に上がったまま保たれる。これに比べ、エンジンでは初期温度からピストンの圧縮行程により、時間とともに燃焼室内空気の温度が徐々に上がっていき、温度が最高になってから膨張行程により温度が徐々に下がる。ここでショックチューブとエンジンでの最高到達温度がほぼ同じになるようにショックチューブの設定温度($T_{st}=944\text{K}$)とエンジンの初期温度($T_0=400\text{K}$)を設定する。

ショックチューブでは空気の場合と同様に燃料と空気の予混合気がある場合でも、ショックチューブの設定温度の 944K まで温度が一気に上がって時間が少し経った後、低温酸化反応が始まり続いて高温酸化反応が始まって燃焼が起こる。その後、最高到達温度を保ちながら進行する。一方、エンジンでは初期温度の 400K からピストンの圧縮行程で燃焼室内ガスの温度が時間とともに徐々に上昇し、温度が約 800K に達すると低温酸化反応の熱発生により温度が上昇し、約 1050K に達すると高温酸化反応の熱発生により温度が最も上昇する。エンジンでの低温酸化反応の開始温度はショックチューブでの低温酸化反応の開始温度より低い、高温酸化反応の開始温度はほぼ同じである。ショックチューブの設定温度は最初から低温酸化反応が起こる温度より高かったため、ショックチューブでの低温酸化反応の開始温度が高いと考えられる。またエンジンでの最高到達温度はショックチューブでの最高到達温度とほぼ同じになるが、エンジンでの最高到達温度に達した後、膨張行程により燃焼室内ガスの温度が徐々に下がる。ショックチューブとエンジンの燃焼による温度上昇の形を比較すると、ショックチューブでの温度上昇はエンジンでの温度上昇より温度上昇の傾きが急である。ショックチューブでは低温酸化反応が現れない高い温度で酸化反応により燃焼が起こる

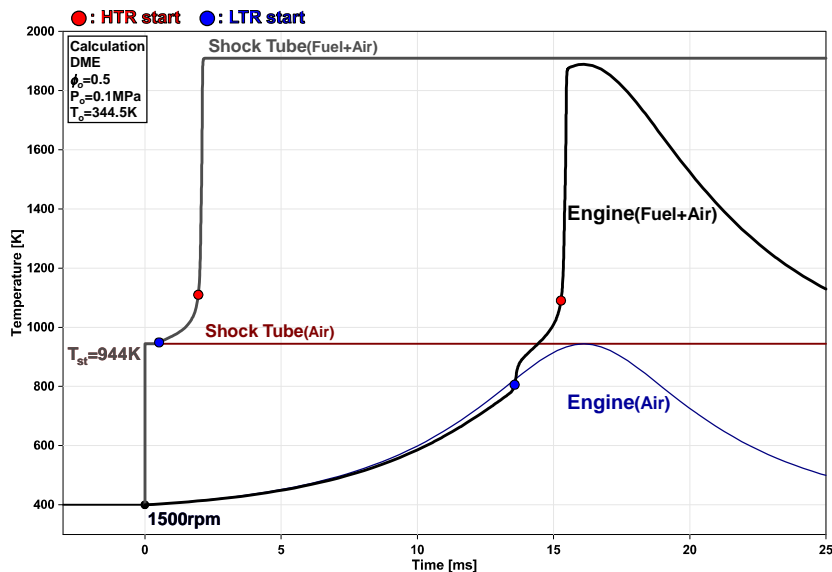


図2-8 ショックチューブおよびHCCIエンジンにおける温度履歴の比較

たので温度上昇の傾きが急になったと考えられる。

b) エンジン回転速度の影響

エンジンを考えるに当たって、ショックチューブには存在しないエンジン回転速度という概念について説明する。エンジン回転速度はエンジンのフライホイールの回転速度である。フライホイールはピストンの往復運動(圧縮行程と膨張行程)により回転するため、フライホイールの回転運動はピストンの往復運動と直接関係している。したがってエンジン回転速度が速いということはピストンが往復する速度が速いということであり、燃焼室内のガスが短い時間で圧縮および膨張されることを意味する。HCCI エンジンにおけるエンジン回転速度による温度履歴を図2-9で比較する。空気のみで燃焼が起こらない場合、エンジン回転速度(ピストンの往復速度)が速くなると、圧縮時間は短くなるのでより早く温度が上昇し膨張時間も短くなるのでより早く温度が低下する。ショックチューブの燃焼行程は、エンジン回転速度が無限で極めて短い時間で圧縮して温度上昇し、また膨張行程が存在せず最高到達温度を維持するエンジンの燃焼行程と近似である。ここで注目

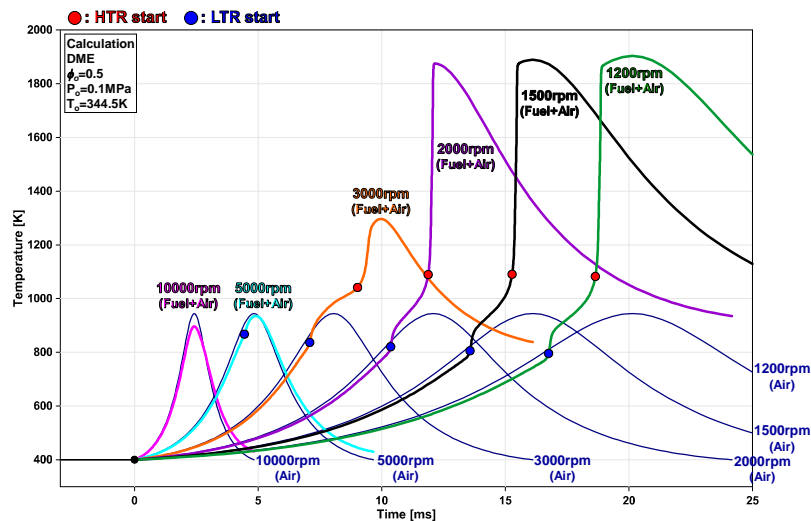


図2-9 HCCI エンジンにおけるエンジン回転速度による温度履歴の変化

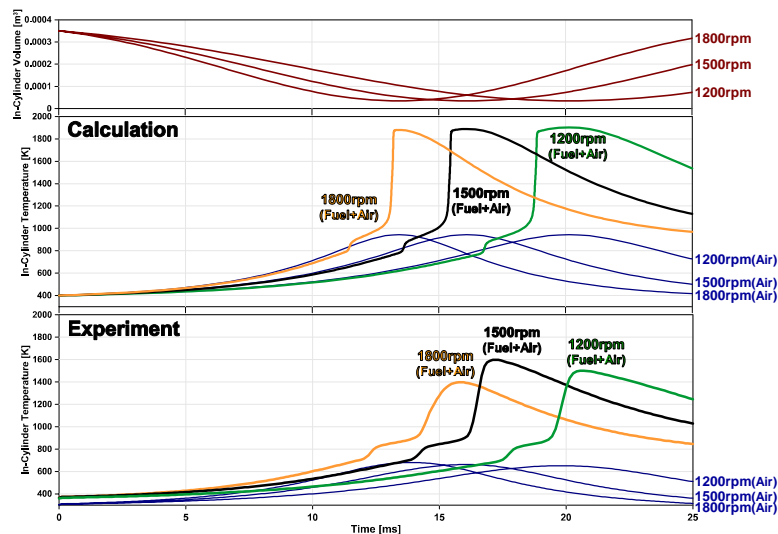


図2-10 素反応数値計算と実験でのエンジン回転速度による温度履歴の比較

すべきはピストンの圧縮によって達する最高到達温度はエンジン回転速度に関係なく一定であることである。燃料と空気の予混合気が酸化反応により燃焼が起こる場合、エンジン回転速度が速くなると酸化反応の開始時点が早くなり2000rpmまでは完全燃焼が見られる。エンジン回転速度が3000rpmのときには低温酸化反応、高温酸化反応ともに発生するが、燃焼が完結せず不完全燃焼が見られる。これは最高到達温度が低くなっていることで確認することができる。更にエンジン回転速度をあげていくと、5000rpm以上では燃焼による温度上昇は見られず失火している。これは高温酸化反応および低温酸化反応がなくなることで確認できる。エンジン回転速度が速くなることで不完全燃焼および失火が起きる理由は、ピストンの膨張速度が早くなることで燃料と空気の酸化反応が進行する時間よりも膨張による温度低下が早く起きてしまうためである。ピストンの膨張による不完全燃焼および失火が起こるのは熱発生率でも確認できる。不完全燃焼のとき(3000rpm)見られた熱発生率履歴において、低温酸化反応による発熱はエンジン回転速度が低い(2000rpm以下)ときと同様に見られるが、高温酸化反応による発熱の期間は長くなっている。この理由として、高温酸化反応期間中に膨張行程に入り燃焼による温度の上昇と燃焼室内ガスの膨張による温度の低下が同時に発生することで燃焼時間が長くなったと考えられる。

計算モデルの妥当性を検証するため計算と実験でのエンジン回転速度が HCCI 燃焼に及ぼす影響を比較したものを図2-10に示す。エンジン回転速度が1200rpm, 1500rpm, 1800rpmの場合を比較すると燃焼室内の体積は計算と実験に関係なく同じである。2. 3. 1. 節に説明した計算の仮定(燃焼室内ガスの温度と組成が均質, 熱損失を考慮しない, 燃焼室内ガスは理想気体)により最高到達温度とそこに達するまでの時刻に違いが生じる。ピストンの圧縮と膨張に伴って温度が上下する。図2-10で述べたエンジン回転速度が速くなると着火時期が進角し燃焼が起こる現象が実験でも見られる。計算と実験とでこの現象が確認できたので、本論文で用いる計算モデルは妥当であると言える。

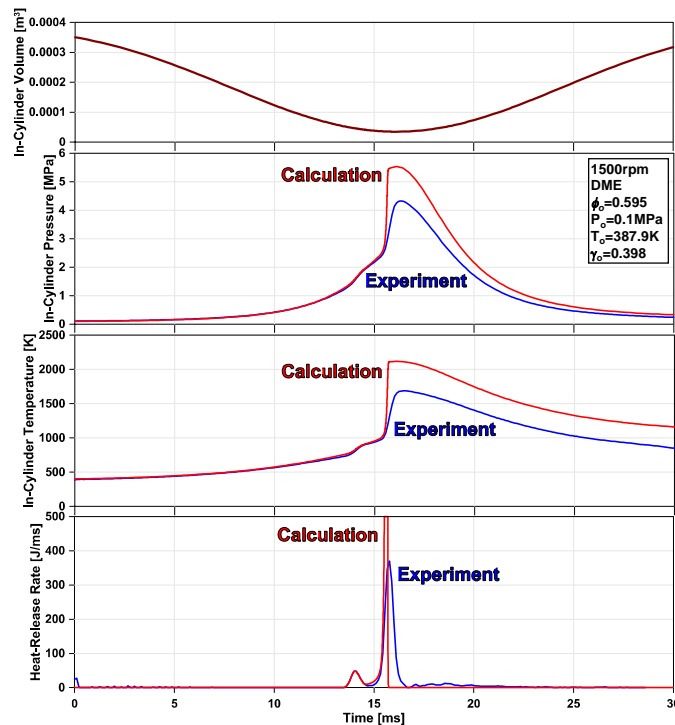


図2-11 HCCI エンジンにおける素反応数値計算と実験での圧力, 温度, 熱発生率の比較

2. 4. 素反応数値計算の妥当性検証

本論文に用いる素反応数値計算の妥当性を検証するため計算と実験で比較を行う。エンジン回転速度が 1500rpm, 燃料が DME, 当量比が 0.5, 初期圧力(P_0)が 0.1MPa, 初期温度(T_0)が 387.9K の条件で素反応数値計算と実験を行う。素反応数値計算と実験とで燃焼室の体積が同様に变化するようエンジンの諸元を設定する。図2-11に HCCI エンジンにおける素反応数値計算と実験での圧力, 温度, 熱発生率の比較を示す。実験と計算の両方の場合で低温酸化反応と高温酸化反応による二段の熱発生が現れる。また二段の熱発生による圧力と温度の上昇も確認できる。素反応数値計算による圧力のピーク, 温度のピーク, 熱発生率のピークが実験のものより高くなっているのは2. 3. 1. 節に説明した計算に用いる仮定によるものと考えられる。実験で現れた二段の熱発生が素反応数値計算でも確認できたので, 素反応数値計算の妥当性を検証した。

2. 5. 第2章のまとめ

本章では, 本論文で行う素反応数値計算の手法として CHEMKIN を選択したので, CHEMKIN を構成する反応モデルおよび計算モデルについて説明した。第一に反応モデルに関する素反応モデルおよび熱力学データについて説明し, ショックチューブでの素反応数値計算と実験の着火遅れを比較することで反応モデルの妥当性を検証した。第二に計算モデルの妥当性を検証するためにエンジン回転速度が着火時期および燃焼期間に及ぼす影響を示し, HCCI エンジンでの計算と実験の回転速度による温度履歴の変化を比較した。最後に HCCI エンジンにおける計算と実験での圧力, 温度, 熱発生率履歴の比較により素反応数値計算の妥当性を検証した。

ショックチューブでは初期温度(T_0)から設定温度(T_{st})まで瞬間的な温度上昇が見られ, その後設定温度が維持される。それに対し, エンジンでの温度上昇は初期温度(T_0)からピストンの圧縮により温度が徐々に上がり, またピストンの膨張により温度が下がっていく。

本論文では低温酸化反応(Low Temperature Reaction:LTR)の開始時点を $\text{HO}_2\text{CH}_2\text{OCHO}$ (Ketoperoxide) のモル分率をピークとし, 高温酸化反応(High Temperature Reaction: HTR)の開始時点を H_2O_2 (Hydrogen Peroxide) のモル分率のピークとした。低温酸化反応と高温酸化反応の着火遅れは初期時点(Initial Condition: 0ms)から各酸化反応が開始する時点までと定義した。ショックチューブの設定温度(T_{st})が高ければ高いほど高温酸化反応および低温酸化反応の開始時点が早くなり着火遅れが短くなる。しかし, 着火遅れ時間はショックチューブの設定温度(T_{st})と比例しない。またショックチューブの設定温度(T_{st})を高くすると高温酸化反応の開始温度が高くなり, 燃焼による最高到達温度も高くなる。

素反応数値計算により算出した着火遅れの計算結果を, 同一の設定温度, 圧力, 当量比で Lawrence Livermore National Laboratory が行った素反応数値計算による着火遅れの結果と RWTH Aachen University のショックチューブの実験から得られた着火遅れの結果を比較し, 概ね一致することで反応モデルの妥当性の検証ができた。

燃料と空気の酸化反応により燃焼が起こる場合, ショックチューブの設定温度(T_{st})まで温度が一気に上がり時間が少し経った後低温酸化反応が始まり, 続いて高温酸化反応が始まって燃焼が起こる。その後最高到達温度を保ちながら燃焼は進行する。一方, エンジンでは初期温度(T_0)からピストンの圧縮行程で温度が時間と共に徐々に上昇し, 温度が約 800K に達すると低温酸化反応が, 約 1050K に達すると高温酸化反応が

発生する。エンジンでの低温酸化反応の開始温度はショックチューブでの低温酸化反応の開始温度より低い、高温酸化反応の開始温度はほぼ同じである。またエンジンでの最高到達温度はショックチューブでの最高到達温度とほぼ同じになるが、エンジンでは最高到達温度に達した後、膨張行程で徐々に温度は下がっていく。

エンジン回転速度が速くなると酸化反応の開始時点が早くなり 2000rpm までは完全燃焼が見られる。エンジン回転速度が 3000rpm のときには低温酸化反応、高温酸化反応ともに発生するが、燃焼が完結せず不完全燃焼が見られる。これは最高到達温度が低くなっていることで確認することができる。更にエンジン回転速度をあげていくと、5000rpm 以上では燃焼による温度上昇は見られず失火している。これは高温酸化反応および低温酸化反応がなくなることで確認できる。エンジン回転速度が速くなることで不完全燃焼および失火が起きる理由は、ピストンの膨張速度が早くなることで燃料と空気の酸化反応が進行する時間よりも膨張による温度低下が早く起きてしまうためである。ピストンの膨張による不完全燃焼および失火が起こるのは熱発生率でも確認できる。不完全燃焼のとき(3000rpm)見られた熱発生率履歴において、低温酸化反応による発熱はエンジン回転速度が低い(2000rpm 以下)ときと同様に見られるが、高温酸化反応による発熱の期間が長くなっている。この理由として、高温酸化反応期間中に膨張行程に入り燃焼による温度の上昇と燃焼室内ガスの膨張による温度の低下が同時に発生することで燃焼時間が長くなったと考えられる。

計算モデルの妥当性を検証するため、素反応数値計算と実験でのエンジン回転速度が 1200rpm, 1500rpm, 1800rpm の場合を比較した。素反応数値計算の仮定(燃焼室内ガスの温度と組成が均質、熱損失を考慮しない、燃焼室内ガスは理想気体)により最高到達温度とそこに達するまでの時刻に違いが生じるが、エンジン回転速度が速くなると着火時期が進角し燃焼が起こる現象が実験でも見られるため、本論文で用いる計算モデルの妥当性が検証できた。

最後に本論文に用いる素反応数値計算の妥当性を検証するため、同一の初期条件で行った計算と実験での燃焼室内ガスの圧力、温度、熱発生率を比較した。実験と計算の両方の場合で低温酸化反応と高温酸化反応による二段の熱発生が現れ、二段の熱発生により燃焼室内ガスの圧力と温度が上昇することが確認できた。素反応数値計算でも実験で現れる二段の熱発生が確認できたので、素反応数値計算の妥当性が検証できた。

第3章 素反応数値計算による HCCI 燃焼特性の解析

HCCIエンジンにおける燃焼は、燃焼室内に導入された燃料と空気の予混合気がピストンにより圧縮され、高温・高圧になることで多点同時に自己着火する特性がある。HCCI 燃焼の特性である自己着火燃焼は、着火時期が燃料固有の着火温度に依存しており、燃焼過程が様々な素反応により進行するため、ガソリンエンジンの火炎伝播燃焼やディーゼルエンジンの拡散燃焼に比べて、燃焼位相の制御および高負荷運転時での急峻な圧力上昇率によるノッキングの回避が課題として挙げられる。HCCI 燃焼の課題を解決する第一歩として、素反応数値計算を用いて HCCI 燃焼の自己着火および燃焼過程に関する化学反応機構を把握し、燃焼時の圧力上昇率に及ぼす原因を調べる必要がある。また、初期条件(初期温度、初期圧力)と燃焼位相の関係を確かめ、初期条件による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を把握することが重要である。

第3章では、素反応数値計算を用いて HCCI エンジンにおける燃焼の特性を示し、HCCI 燃焼による圧力上昇率と熱発生率との関係を確認する。熱発生率は燃焼時の圧力上昇率に大きく影響を与えるため、寄与度行列を用いて HCCI 燃焼の熱発生に寄与する重要な素反応を調査するとともに、各素反応の寄与度を把握する。次に、初期温度と初期圧力が燃焼位相および最大圧力上昇率(Maximum Pressure-Rise Rate: PRR_{max})に及ぼす影響を明らかにするとともに、初期条件、燃焼位相、最大圧力上昇率との関係を把握する。最後に初期温度および初期圧力が寄与度行列から得られた重要な各素反応の熱発生率に及ぼす影響を確認する。

3. 1. HCCI エンジンにおける燃焼

HCCI エンジンにおける燃焼を調査する前に燃焼が起こるエンジンの圧縮行程(Compression stroke)および膨張行程(Expansion stroke)について説明する。図3-1にエンジンにおいて燃焼室内空気をピストンにより圧縮および膨張させた時の燃焼室内ガスの体積、圧力、温度、圧力上昇率の履歴を示す。エンジンの圧縮行程ではピストンが下死点(Bottom of Center: BDC)から上がり、燃焼室内空気の体積が小さくなることで

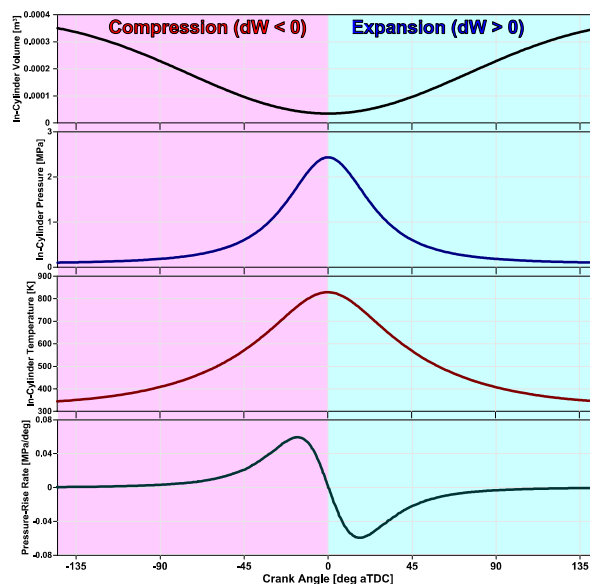


図3-1 エンジンにおいて燃焼室内空気をピストンにより圧縮および膨張させた時の燃焼室内ガスの体積、圧力、温度、圧力上昇率の履歴

燃焼室内空気の圧力が徐々に上がるとともに燃焼室内空気の温度も徐々に上がる。ピストンが上死点(Top Dead Center: TDC)まで上がると、燃焼室内ガスの圧力と温度がピークになる。エンジンの膨張行程ではピストンが上死点から下がり、燃焼室内空気の体積が大きくなることで燃焼室内空気の圧力が徐々に下がるとともに燃焼室内空気の温度も徐々に下がる。すなわちピストンの往復運動により燃焼室内ガスの体積が変わることで、燃焼室内ガスの圧力と温度が上昇および減少する。燃焼室内空気の圧力上昇率は上死点の直前に最大値になり上死点の直後に最低値になることで、上死点の前後に燃焼室内ガスの圧力および温度の変化が大きいことが分かる。

エンジン回転速度が 1500rpm, 燃料が DME, 当量比が 0.5, 初期圧力(P_0)が 0.1MPa, 初期温度(T_0)が 344.5K の条件で素反応数値計算を行い, HCCI エンジンにおける燃焼について説明する。まず図3-2に DME の HCCI 燃焼における燃焼室内ガスの温度および熱発生率の履歴を示す。エンジンの圧縮行程では燃

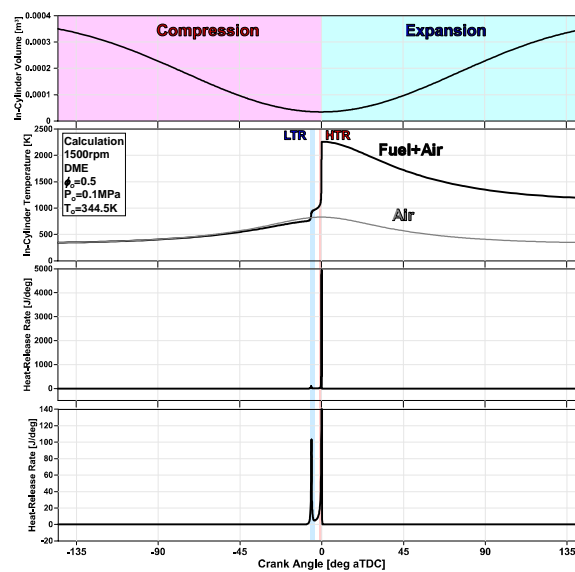


図3-2 DME の HCCI 燃焼における燃焼室内ガスの温度および熱発生率の履歴

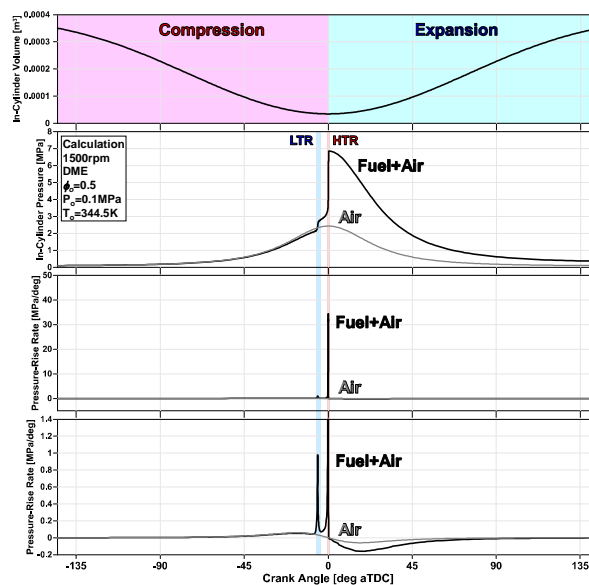


図3-3 DME の HCCI 燃焼における燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴

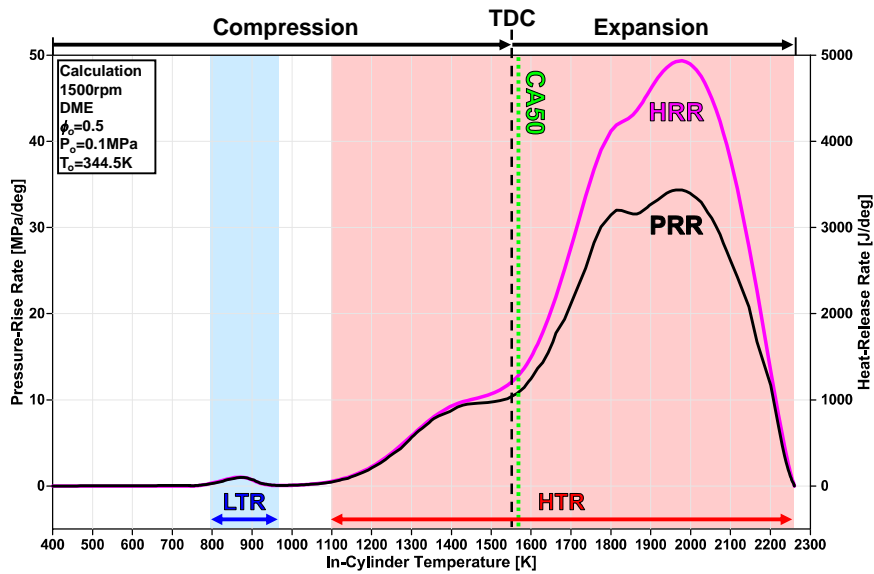


図3-4 DME の HCCI 燃焼における圧力上昇率と熱発生率の関係

料と空気の予混合気がピストンにより圧縮され、ある温度に達すると低温酸化反応による熱発生が起こり燃焼室内ガスの温度が上がる。低温酸化反応が終わり、続いて燃焼室内ガスの圧縮と酸化反応により燃焼室内ガスの温度が上昇し、ある温度で高温酸化反応による急峻な熱発生が起こり燃焼室内ガスの温度が一気に上がる。DME の HCCI 燃焼は低温酸化反応と高温酸化反応による二段熱発生の特徴がある。図3-3に DME の HCCI 燃焼における燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴を示す。図3-2で現れた二段の温度上昇により二段の圧力上昇が確認でき、それにより二段圧力上昇率が現れる。図3-2の熱発生率と図3-3の圧力上昇率を比較すると両方二つのピークがあることで圧力上昇率に主に影響を与えるのが熱発生率だと考えられる。そこで熱発生が圧力上昇にどの程度で影響を与えるかを確認するために図3-4に圧力上昇率と熱発生率の履歴を比較する。この図に見えるように圧力上昇率の履歴と熱発生率の履歴は非常に似ている。とくに低温酸化反応期間の熱発生による熱発生率は圧力上昇率とほぼ一致しており、また高温酸化反応期間の熱発生による熱発生率と圧力上昇率が似ている。これにより、HCCI 燃焼時の圧力上昇率は主に熱発生率に影響を受けているのが確認できる。HCCI 燃焼の課題にある高負荷運転時での急峻な圧力上昇率を解決するためには、まず熱発生率について調べる必要がある。

3. 2. 寄与度行列[84]

前節では熱発生率が圧力上昇率に主に影響を与えることを確認した。HCCI 燃焼の熱発生は様々な素反応の熱発生の結果であり、燃焼室内ガスの温度の上昇とともに進行していくことから、様々の素反応の中で熱発生率に大きく寄与する重要な素反応を把握することが必要である。しかし素反応モデルには普通多くの素反応により構成されているため(例:Curran の DME の素反応モデルには 351 個の素反応がある[23])、HCCI 燃焼の熱発生に大きく寄与する素反応を探すのが難しい。本論文で熱発生率に大きく寄与する重要な素反応は探す方法として寄与度行列(Contribution Matrix)を用いる。寄与度行列とは、時々刻々燃焼温度が変化していく燃焼過程において、数多く依存する素反応の中から反応に大きく寄与する素反応のみを抜き出すことができる手法であり、燃料に関する複雑な化学反応において重要な素反応について解析を簡便に

行うことができる。寄与度行列の作成方法は、ある燃焼温度におけるある素反応が熱発生に占める割合を寄与度 CHR とし式 3-1 で定義し、ある燃焼温度に対しすべての素反応についてこの寄与度を算出し、これを一定の温度間隔で行っていく。

$$CHR_{j,Tt} = \frac{HR_{j,Tt}}{\sum_{j=1}^N abs(HR_{j,Tt})} \times 100 \quad (\text{式 3-1})$$

N : 反応モデルの素反応数

$CHR_{j,Tt}$: 経過温度 Tt における熱発生への素反応 j の寄与度(%)

$HR_{j,Tt}$: 素反応 j の熱発生率

これにより、各燃焼温度に対する各素反応の寄与度を示す行列が作成され、一定の閾値を設定し対象とした温度範囲のうち一度でも閾値を超えることのある素反応のみを抽出することで、燃焼過程中に熱発生に大きく寄与する素反応を把握することができる。

図3-4の熱発生率に関する寄与度行列が図3-5である。横軸は DME の HCCI 燃焼に関する素反応であり、縦軸は 20K の温度間隔で示した燃焼温度である。まずセルの中で色が入っているところはある燃焼温度で熱発生に 3%以上寄与する素反応意味する。色が入っているセルの中で、茶色は各燃焼温度の熱発生に最も寄与する素反応を、赤色は二番目に寄与する素反応を、オレンジ色は三番目に寄与する素反応を示している。黄色は各燃焼温度の熱発生にただ 3%以上寄与する素反応を意味する。寄与度行列により DME の素反応モデルにある 351 個の素反応の中で、DME の HCCI 燃焼における熱発生に大きく寄与する 29 個の重要な素反応が把握できる。また各素反応がどんな燃焼温度でどのくらい寄与しているのかも確認できる。ここで注目することは寄与度行列により把握した熱発生に 3%以上寄与する 29 個の素反応でも最も寄与する素反応は 13 個である(茶色、赤色、オレンジ色のセル)。しかし、寄与度行列には各燃焼温度での熱発生率に寄与する素反応および各素反応の寄与度は確認できるが、他の燃焼温度との比較ができない。燃焼温度の進行に対する素反応の熱発生率を比較するため図3-6に DME の HCCI 燃焼における熱発生率(ピンク色)および寄与度行列で現れた熱発生に 3%以上寄与する各素反応の熱発生率(赤色:発熱反応, 青色:吸熱反応)を示す。まず発熱反応である $H+O_2(+M)=HO_2(+M)$, $HO_2+OH=H_2O+O_2$, $CO+OH=CO_2+H$ の素反応が熱発生率に主に寄与するのが確認できる。三つの反応で酸素(O_2)があるため、酸素が熱発生に大きく影響与えると考えられる。次に吸熱反応である $H+O_2=O+OH$ と $O+H_2O=OH+OH$ の素反応が確認できる。吸熱反応は熱発生にマイナスであるが、二つの素反応により O と OH のラジカルが生成されるため、上に示した三つの発熱反応に大きく寄与すると考えられる。二つの吸熱反応とともに発熱反応にある $HO_2+O=OH+O_2$ と $H+OH+M=H_2O+M$ の素反応が確認できる。この二つの発熱反応の熱発生率に比べては小さいが、発熱反応である $CH_3+O=CH_2O+H$, $CH_3OH(+M)=CH_3+OH(+M)$, $OH+H_2=H+H_2O$ も確認できる。低温酸化反応と高温酸化反応の間では発熱反応である $HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$, $HCO+O_2=CO+HO_2$, $CH_2O+OH=HCO+H_2O$ と吸熱反応である $H_2O_2(+M)=OH+OH(+M)$ の素反応が確認できる。熱発生率に比べて低温酸化反応に寄与する素反応の熱発生率は小さいため、図3-6の燃焼温度 400K から 1000K を図3-7に拡大する。まず低温酸化反応と呼ばれる素反応の中で、発熱反応である $CH_3OCH_2+O_2=CH_3OCH_2O_2$, $CH_2OCH_2O_2H+O_2=O_2CH_2OCH_2O_2H$, $O_2CH_2OCH_2O_2H=HO_2CH_2OCHO+OH$, $CH_3OCH_3+OH=CH_3OCH_2+H_2O$ の素反応と、吸熱反応である $CH_3OCH_2O_2=CH_2OCH_2O_2H$ と $HO_2CH_2OCHO=OCH_2OCHO+OH$ の素反応が低温酸化反

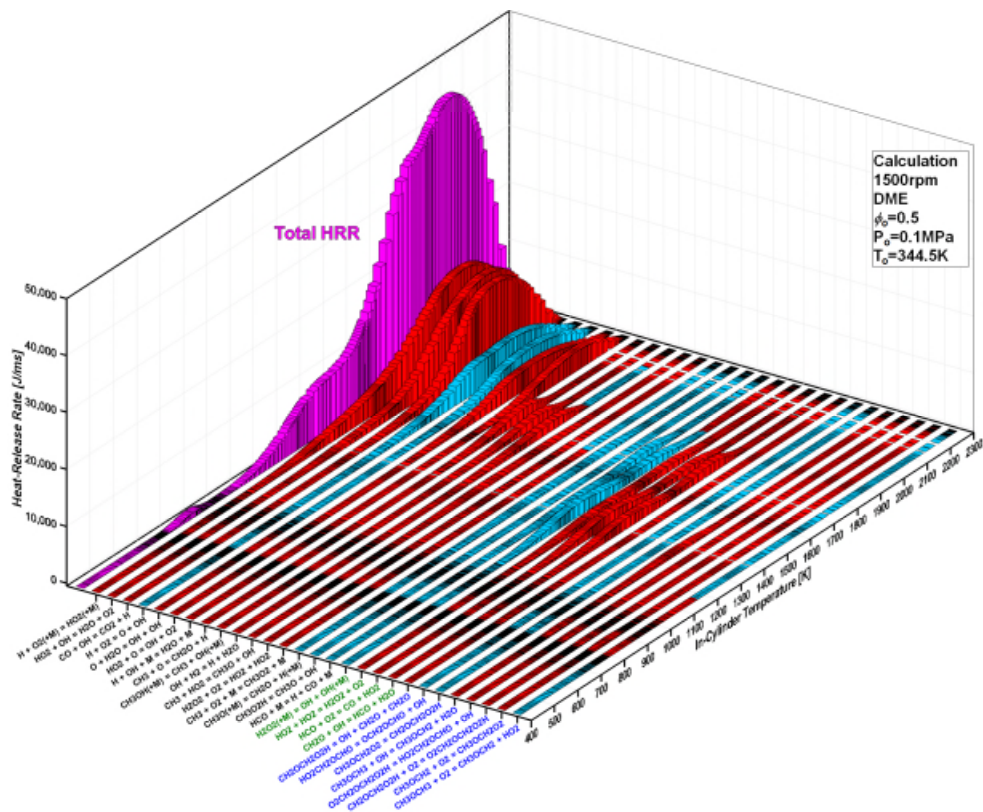


図3-6 DME の HCCI 燃焼における熱発生率および熱発生に 3%以上寄与する各素反応の熱発生率 (赤色:発熱反応, 青色:吸熱反応)

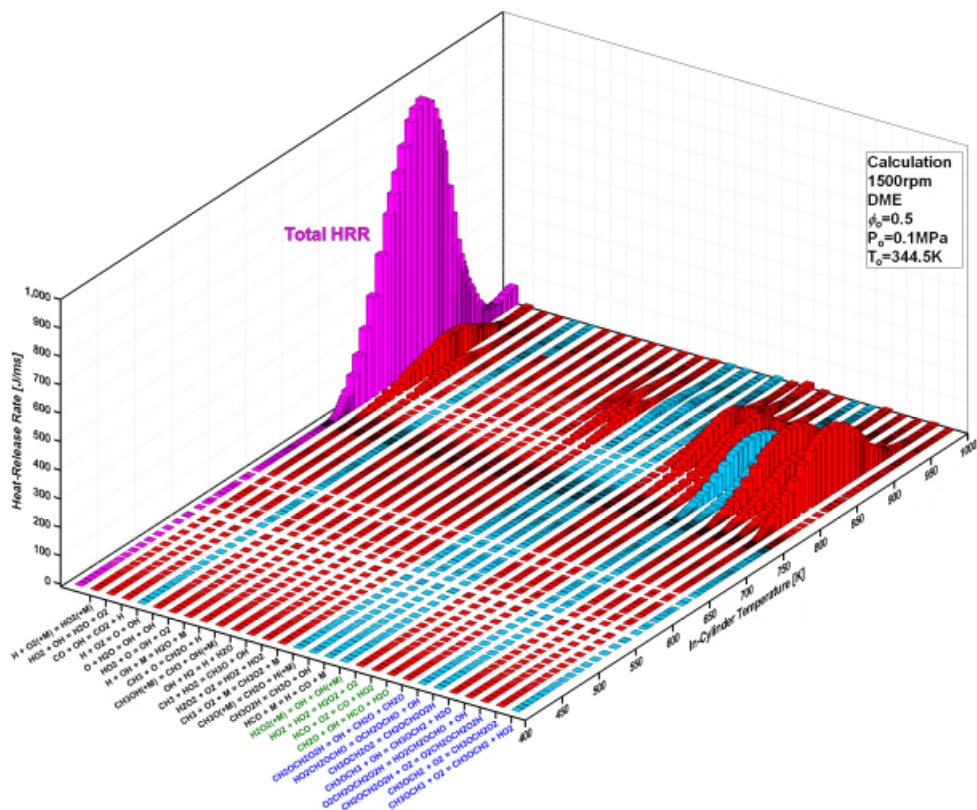


図3-7 図3-6の低温酸化反応の拡大図(赤色:発熱反応, 青色:吸熱反応)

応の熱発生に寄与すること確認できる。ここで注目することは、高温酸化反応に熱発生率に大きく寄与する $H+O_2(+M)=HO_2(+M)$ と $HO_2+OH=H_2O+O_2$ の素反応が低温酸化反応による熱発生率にも寄与していることである。

3. 3. 初期温度が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響

3. 3. 1. 初期温度と最大圧力上昇率との関係

HCCI 燃焼は燃料と空気の予混合気の化学反応に大きく依存して進行するため、その化学反応の反応速度は主に温度により変わる物理量である。それにより燃焼室内ガスの温度は HCCI 燃焼にとって重要なパラメータだと言える。初期温度と呼ぶ圧縮開始時の燃焼室内ガスの温度は HCCI 燃焼の自己着火および燃焼過程に大きく影響を与えるとともいろいろな方法で調節が可能である。本章では初期温度が HCCI 燃焼に及ぼす影響について確認する。

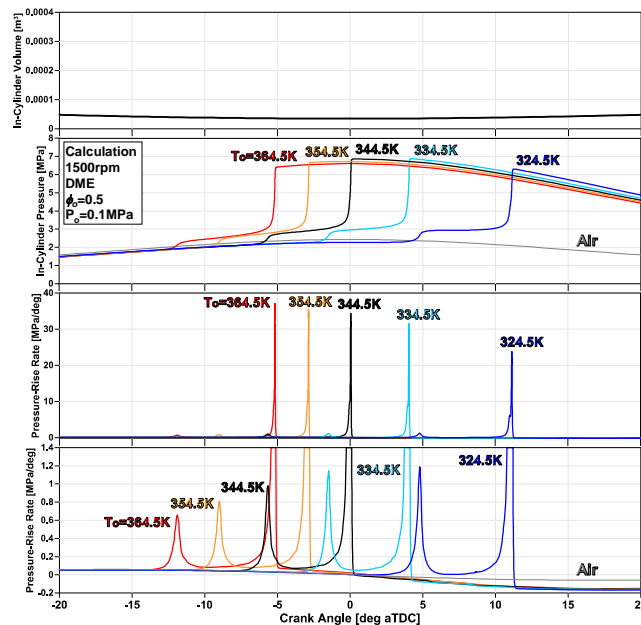


図3-8 初期温度による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化

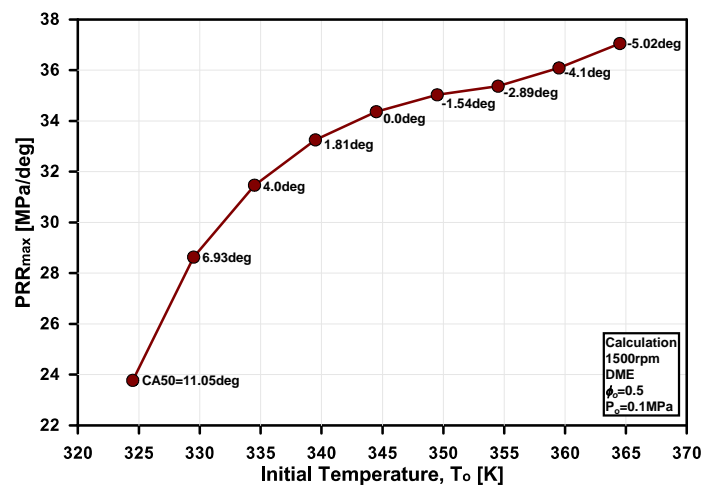


図3-9 初期温度と最大圧力上昇率との関係

エンジン回転速度が 1500rpm, 燃料が DME, 当量比が 0.5, 初期圧力(P_0)が 0.1MPa の条件で初期温度 ($T_0=324.5\text{K}$, 334.5K, 344.5K, 354.5K, 364.5K) による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化を図3-8に示す。初期温度が上がると低温酸化反応と高温酸化反応による燃焼室内ガスの圧力上昇の時期が進角するが, 高温酸化反応による圧力上昇率のピークは高くなり, 低温酸化反応による圧力上昇率のピークは低くなる。また低温酸化反応による圧力上昇率ピークと高温酸化反応によるピークの間が狭くなることで燃料期間が短くなった考えられる。図3-9に初期温度と最大圧力上昇率との関係を示す。図3-8に確認したように最大圧力上昇率は初期温度が上がると高くなる。しかし最大圧力上昇率は初期温度に比例して上昇しないので圧力上昇率に影響を与える他の原因があると考えられる。

3. 3. 2. 初期温度による燃焼位相の変化と最大圧力上昇率との関係

本節では図3-9の結果である初期温度が上がると最大圧力上昇率が高くなる原因について調べる。まず図3-8の結果である初期温度による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化に対する燃焼室内ガスの温度, 熱発生率, 積算熱発生履歴の変化を図3-10に示す。図3-8で現れた燃焼室内ガスの圧力変化の傾向と同じに, 初期温度が上がると低温酸化反応と高温酸化反応による燃焼室内ガスの温度上昇の時期が進角する。しかし, 最大圧力は初期温度および初期温度による燃焼位相の影響を同時に受けるため, 初期温度と最大圧力との関係が明らかに見えないが, 最高温度は初期温度上がると高くなる。また初期温度が上がると, HCCI 燃焼が高い温度の中で行われる。それで初期温度の上昇により燃焼が高い温度で行われるとともに最高温度が高くなることで, 燃焼に関する反応速度が早くなる。初期温度により反応速度が早くなるのは, 低温酸化反応と高温酸化反応による熱発生率発生進角と高温酸化反応による熱発生率のピークが高くなることで分かる。しかし熱発生率の履歴の変化は圧力上昇率の履歴の傾向と同様に, 初期温度が上がると高温酸化反応による熱発生率のピークは高くなるが, 低温酸化反応による熱発生率のピークは低くなる。それは初期条件である当量比と初期圧力が一定の条件で初期温度が上がると, 初期温度が上昇した分圧縮開始時の燃焼室内ガスの体積モル濃度が小さくなることで, 燃料と酸素の体積モル濃度も小さ

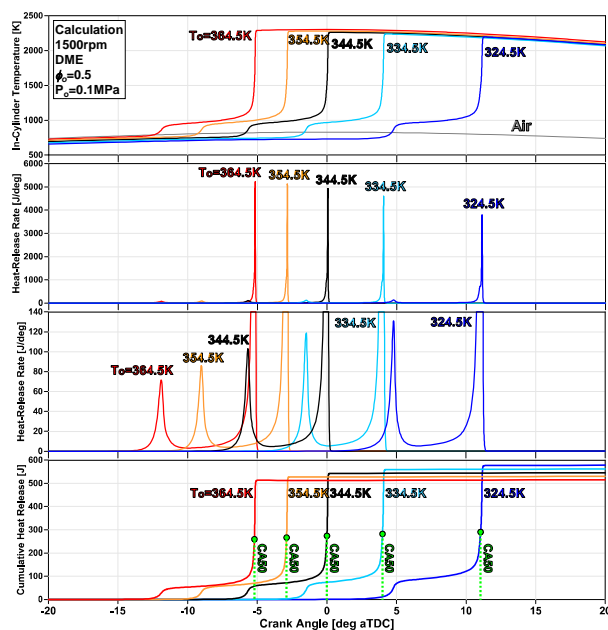


図3-10 初期温度による燃焼室内ガスの温度, 熱発生率, 積算熱発生履歴の変化

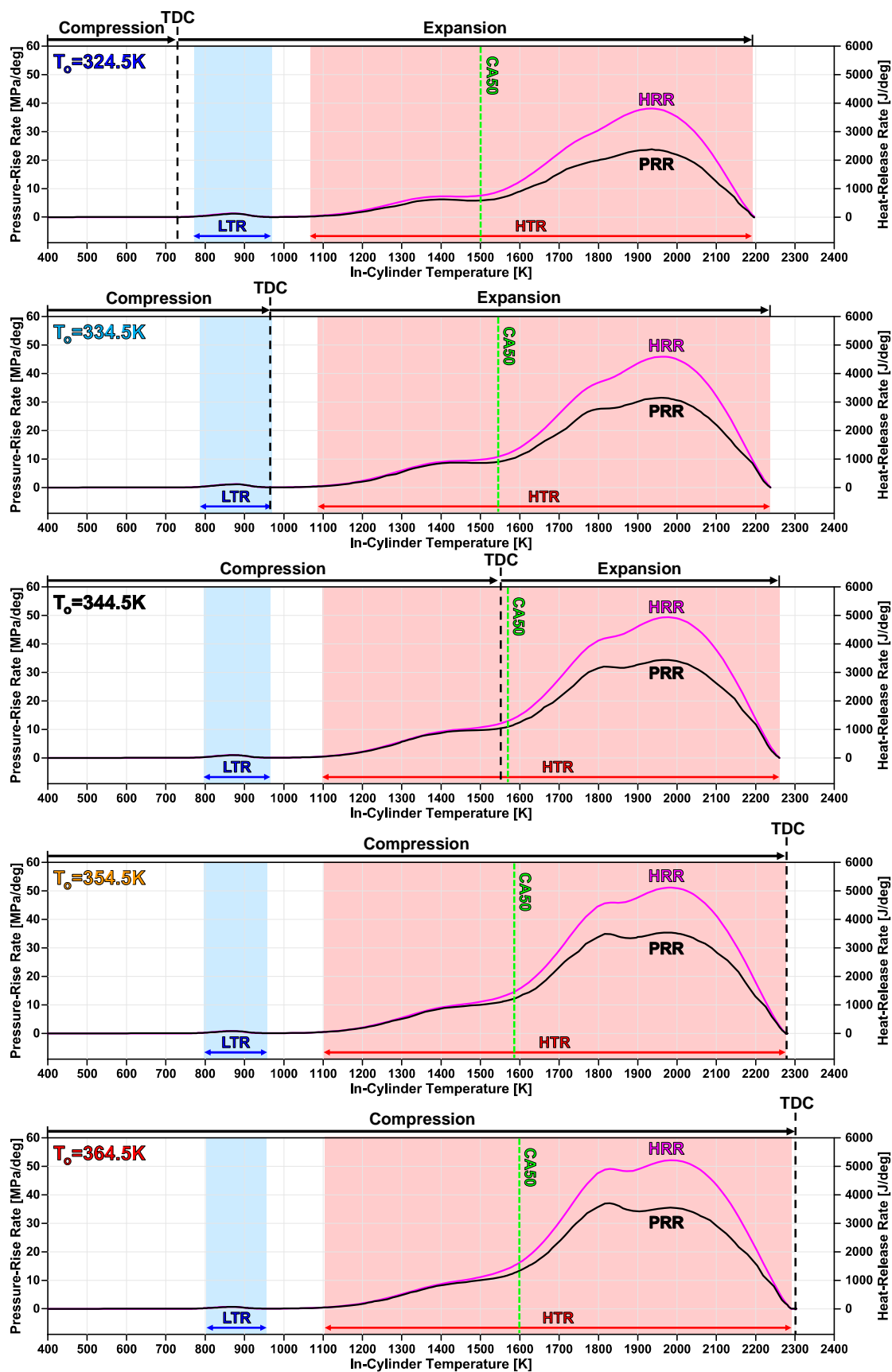


図3-11 各初期温度におけるDMEのHCCI燃焼における圧力上昇率と熱発生率の関係

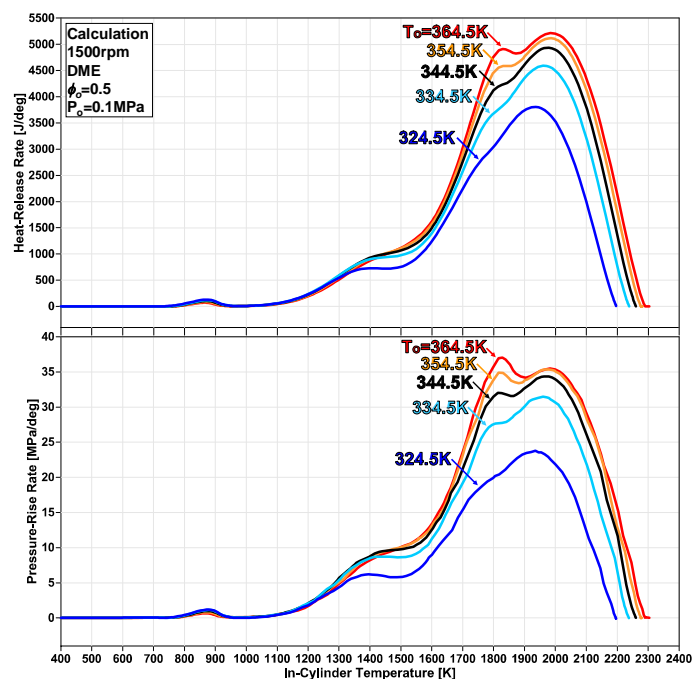


図3-12 初期温度による熱発生率および圧力上昇率の変化

くなるのが原因だと考えられる。低温酸化反応による熱発生は圧縮開始時の燃焼と酸素の体積モル濃度が上昇すると大きくなるため、初期温度が上がると低温酸化反応による熱発生率のピークが低くなる。初期温度による圧縮開始時の燃料と酸素の体積モル濃度の減少の影響は、積算熱発生率の履歴の変化によりもっと明確に確認できる。初期温度が上がると燃料と酸素の体積濃度が減少することで、低温酸化反応と高温酸化反応による熱発生が少なくなり、最後の精算熱発生が少なくなる。3. 2節で説明したようにエンジンには圧縮行程と膨張行程があるため、燃焼位相が燃焼の完結性に大きく影響を与える。低温酸化反応と高温酸化反応の開始時期またはピーク時期などを燃焼位相の指標として考慮されるが、各反応の開始時期やピーク時期は初期条件や燃焼過程により大きく変わるため、HCCI 燃焼の指標としては妥当ではない。本論文では積算熱発生 50%に相当するクランク角度を燃焼指標として選び、CA50 と呼ぶ。図3-10の積算熱発生の履歴に見えるように、初期温度の上昇により低温酸化反応と高温酸化反応の開始時期が進角し、また CA50 も進角するのが確認できる。エンジンではピストンによる燃焼室内ガスの体積変化が燃焼室内ガスの圧力および温度に最も大きい影響を与えるため、HCCI 燃焼特性を解析するためには初期温度が及ぼす影響以外にも初期条件による燃焼位相の変化が及ぼす影響を考慮する必要がある。

図3-4により示したように圧力上昇率は熱発生率に大きく影響をされるため、図3-9にある初期温度と最大圧力上昇率との関係を調査するためには、圧力上昇率と熱発生率の関係を把握必要がある。図3-11に各初期温度におけるDMEのHCCI燃焼における圧力上昇率と熱発生率の関係を示す。図3-4である結果の傾向と同様に、今回考慮した初期温度の条件($T_0=324.5\text{K}$, 334.5K , 344.5K , 354.5K , 364.5K)でも圧力上昇率の履歴は熱発生率の履歴と似ている。圧力上昇率は初期温度に関係なく熱発生率に大きく影響を受けることが確認できる。

初期温度および初期温度による燃焼位相の変化が圧力上昇率および熱発生率に及ぼす影響について説明する。図3-10に示したように初期温度が上がると低温酸化反応と高温酸化反応の時期が進角するため、HCCI燃焼が圧縮行程で起こるが、逆に初期温度が低くなると低温酸化反応と高温酸化反応の時期が遅

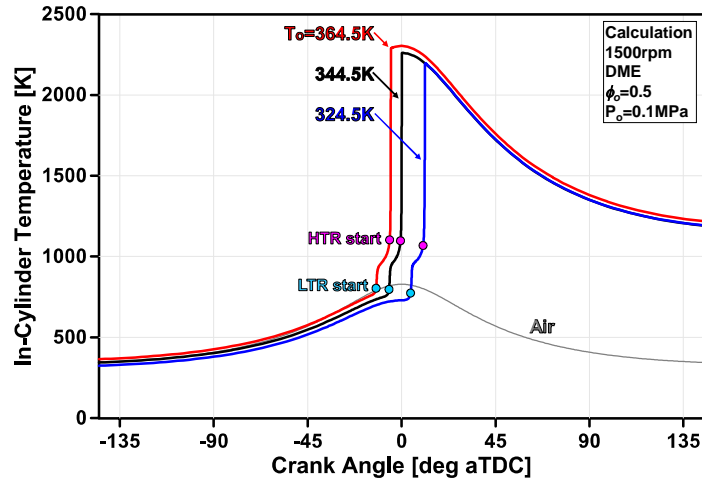


図3-13 初期温度による温度履歴および着火時期の変化

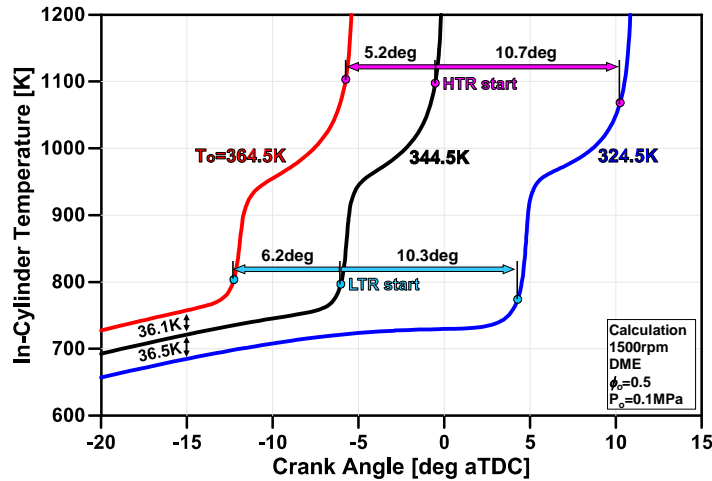


図3-14 初期温度による温度履歴および着火時期の変化(反応開始部分の拡大)

延するため、HCCI 燃焼が膨張行程で起こる可能性が高くなる。初期温度により燃焼位相が変わるため、初期温度による熱発生率の変化を調べるには HCCI 燃焼に直接に及ぼす初期温度の影響以外に燃焼位相の影響も考慮する必要があると考えられる。次に初期温度により低温酸化反応と高温酸化反応の開始時の温度を比較する。低温酸化反応と高温酸化反応の開始時の温度は初期温度が上がると高くなる。低温酸化反応終了時の温度はあまり変わらないが、高温酸化反応終了時の温度は初期温度が上がると高くなる。CA50の時の温度を比較すると、初期温度の上昇により CA50 の温度は高くなる。

初期温度による熱発生率および圧力上昇率の変化を明確に確認するため、図3-12で比較する。図3-11に示したように圧力上昇率と熱発生率のピークは初期温度が上がると高くなる。しかし、熱発生率と圧力上昇率のピークになる温度は一致しているのではない。例えば初期温度が 364.5K の場合、圧力上昇率のピークは約 1830K であり熱発生率のピークは約 1980K である。熱発生率と圧力上昇率のピークになる温度が異なることは、圧力上昇率は熱発生率に大きく影響をされるが、燃焼位相が進角し HCCI 燃焼に関する酸化反応が圧縮行程で起こると、ピストンのみによる燃焼室内ガスの圧力上昇率の増加が熱発生率による圧力上昇率に影響を与えると考えられる。すなわち HCCI 燃焼の課題にある急峻な圧力上昇率の低減のためには初期温度による熱発生率および燃焼位相の変化の両方を考慮する必要がある。

初期温度の上昇による反応速度の加速化の影響以外に燃焼位相が HCCI 燃焼に大きく影響を与えることが図3-12で確認できたので、次に初期温度により燃焼位相が変化するメカニズムを説明する。図3-13に初期温度が $T_0=344.5\text{K}$ の場合に現れた温度履歴を基準にし(黒線)、初期温度が基準より 20K 高い場合(赤線, $T_0=364.5\text{K}$)と初期温度が基準より 20K 低い場合(青線, $T_0=324.5\text{K}$)の温度履歴を比較する。図3-10で示したように初期温度が上がると低温酸化反応と高温酸化反応の開始時期および燃焼位相が進角するのが明らかである。また図3-11でも見えるように低温酸化反応と高温酸化反応の開始温度が高くなるのが確認できる。図3-13のクランク角度 -20deg aTDC から 15deg aTDC 、燃焼室内ガスの温度 600K から 1200K までの範囲を拡大したのが図3-14である。初期温度が基準より 20K 高い場合(赤線, $T_0=364.5\text{K}$)、20K の温度差が、低温酸化反応開始の直前(-15deg aTDC)ではさらに広がり 36.1K の温度差で高くなる。燃焼室内ガスの温度が高くなったことで低温酸化反応が起こる温度まで早く到達し、その結果低温酸化反応の開始時期が 6.1deg 進角する。それは初期温度が上がることで燃焼室内ガスが高い温度で圧縮されるため、低温酸化反応前に起こる素反応による熱発生が燃焼室内ガスの温度を上昇したと考えられる。低温酸化反応の開始時期が進角することで低温酸化反応による温度上昇も早くなるため、高温酸化反応が起こる温度まで早く到達する。これにより高温酸化反応の開始時期は 5.2deg 早くなる。同じ現象を初期温度が基準より 20K 低い場合

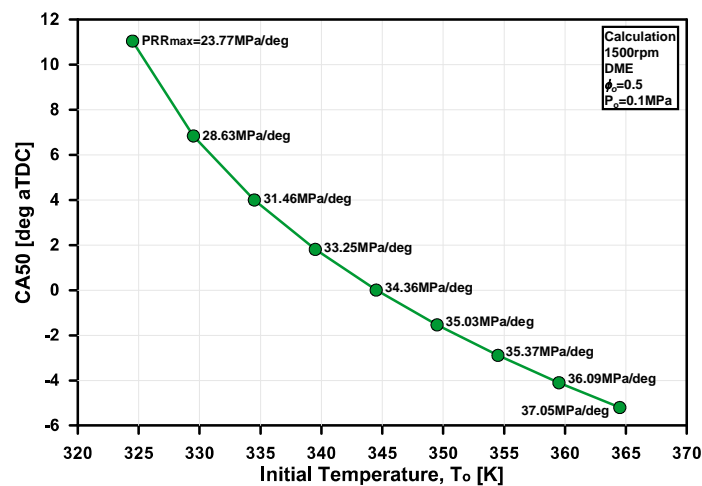


図3-15 初期温度と燃焼位相との関係

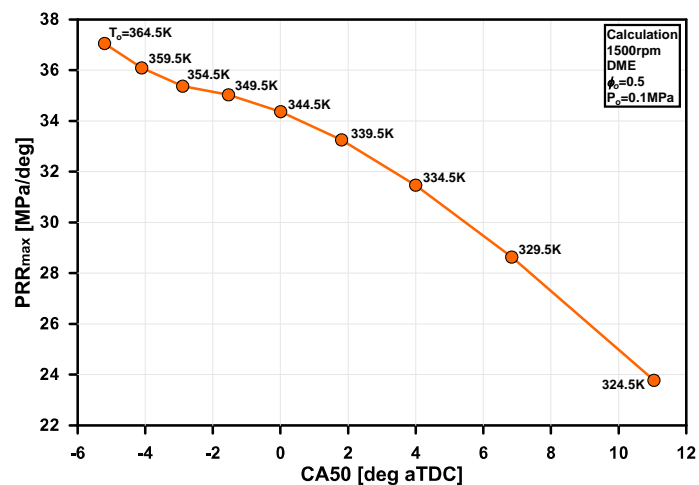


図3-16 初期温度による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響

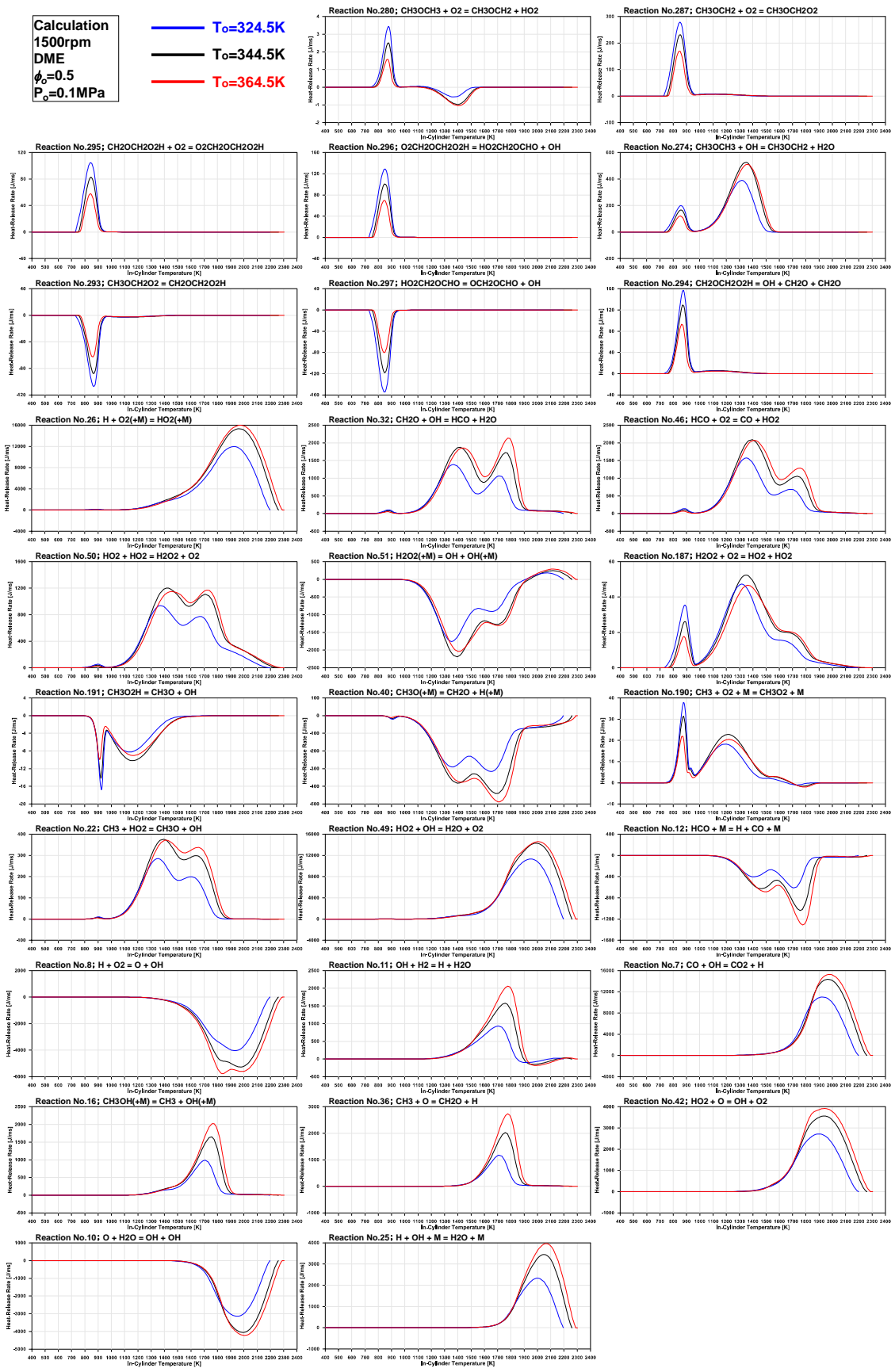


図3-17 初期温度による熱発生に 3%以上寄与する各素反応の熱発生率の変化

(青線, $T_0=324.5\text{K}$)でも確認できる. 初期温度が20K低い場合にも, 20Kの温度差が低温酸化反応開始の直前(-15deg aTDC)にはさらに広がり 36.5K の温度差で低くなる. 燃焼室内ガスの温度が低くなったことで低温酸化反応が起こる温度まで遅く到達し, 低温酸化反応の開始時期が10.3deg遅くなる. 低温酸化反応の開始時期の遅延により低温酸化反応による温度上昇も遅くあるため, 高温酸化反応がおこる温度まで遅く到達する. 従って高温酸化反応の開始時期は10.7deg遅延する. ここで注目することは, 初期温度が基準より高い場合(赤線, $T_0=364.5\text{K}$)と低い場合(青線, $T_0=324.5\text{K}$)での低温酸化反応が開始する直前の温度差はほぼ同じであるが($\Delta T_0=36.4\text{K}$), 初期温度が低いと低温酸化反応と高温酸化反応の開始時期が更に遅延する. これは初期温度低くなることで各酸化反応の開始時期が膨張行程に入り, 燃焼室内ガスの膨張により燃焼位最も遅延したと言える.

初期温度と燃焼位相との関係を図3-15に示す. 燃焼位相は初期温度の上昇とともに進角する. 続いて初期温度による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を図3-16に示す. 燃焼位相が遅延すると最大圧力上昇率が減少する. しかし最大圧力上昇率が燃焼位相と比例して変化することはない. これは圧力上昇率には燃焼位相以外に, 初期温度による反応速度の影響を大きく受けるためと言える.

3. 3. 3. 初期温度による素反応の熱発生率の変化

初期温度による各素反応の熱発生率の変化を確認する. 図3-5にある寄与度行列から得られた素反応に対して初期温度による各素反応の熱発生率を図3-17に示す. まず低温酸化反応である素反応 ($\text{CH}_3\text{OCH}_3+\text{O}_2=\text{CH}_3\text{OCH}_2+\text{HO}_2$, $\text{CH}_3\text{OCH}_2+\text{O}_2=\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2$, $\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}+\text{O}_2=\text{O}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}$, $\text{O}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}=\text{HO}_2\text{CH}_2\text{OCHO}+\text{OH}$, $\text{CH}_3\text{OCH}_3+\text{OH}=\text{CH}_3\text{OCH}_2+\text{H}_2\text{O}$, $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2=\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}$, $\text{HO}_2\text{CH}_2\text{OCHO}=\text{OCH}_2\text{OCHO}+\text{OH}$, $\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}=\text{OH}+\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_2\text{O}$)の熱発生率は初期温度が高いと低い. これにより低温酸化反応である素反応の熱発生率は初期温度による反応速度の加速化の影響より, 圧縮開始時の燃料と酸素の体積モル濃度に最も影響を受けると言える. 低温酸化反応である素反応以外の素反応の熱発生率は初期温度が上がると高くなる. 初期温度が上がると, 燃料と酸素の体積モル濃度が小さくなることで, 低温酸化反応である素反応(熱発生がわりに小さい素反応)の熱発生率は低くなるが, 他の素反応(熱発生がわりに大きい素反応)の熱発生率は高くなることで, 初期温度の上昇とともに最大圧力上昇率が上がる.

3. 4. 初期圧力が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響

3. 4. 1. 初期圧力と最大圧力上昇率との関係

当量比と初期温度が一定である場合, 燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度は初期圧力により大きく変わるため, 燃料と空気の科学反応に依存して進行するHCCI燃焼において, 初期圧力は初期温度とともに重要な初期条件である. HCCI燃焼の特性を把握するためには初期圧力がHCCI燃焼による最大圧力上昇率に及ぼす影響について確認する必要がある. エンジン回転速度が1500rpm, 燃料がDME, 当量比が0.5, 初期温度(T_0)が344.5Kの条件で初期圧力($P_0=0.06\text{MPa}$, 0.08MPa , 0.1MPa , 0.12MPa , 0.14MPa)による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化を図3-18に示す. 初期圧力が上がると全クランク角度に掛けて燃焼室内ガスの圧力が最も高い. また低温酸化反応と高温酸化反応による圧力上昇率のピークが両方同時に高くなり, ピークの時期が進角するとともにピークの間が短くなる. 初期圧力および初期温度が上

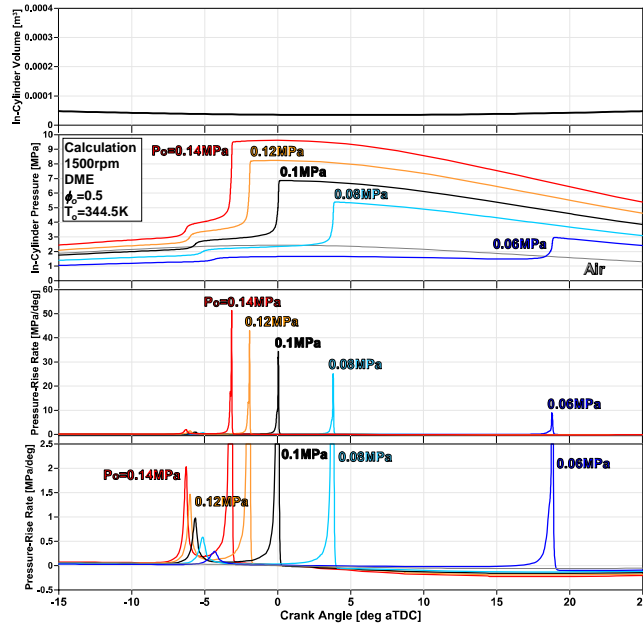


図3-18 初期圧力による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化

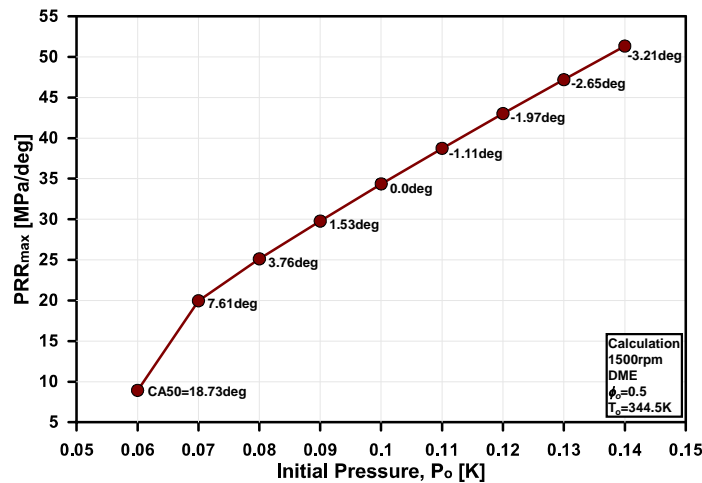


図3-19 初期圧力と最大圧力上昇率との関係

がると高温酸化反応による圧力上昇率が高くなるのは同じ現象であるが、低温酸化反応による圧力上昇率が高くなるのは初期圧力が上がる場合である。図3-19に初期圧力と最大圧力上昇率との関係を示す。図3-18に確認したように初期圧力 0.06MPa の最大圧力上昇率以外は、初期圧力が上がると最大圧力上昇率が初期圧力にほぼ比例して高くなる。これは図3-9に示した初期温度と最大圧力上昇率との関係とは異なる。

3. 4. 2. 初期圧力による燃焼位相の変化と最大圧力上昇率の関係

本節では図3-19の結果である初期圧力が上がると最大圧力上昇率が高くなる原因について調べる。まず図3-18の結果である初期圧力による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化に対する燃焼室内ガスの温度、熱発生率、積算熱発生の履歴の変化を図3-20に示す。図3-18で現れた燃焼室内ガスの圧力変化の傾向と同じに、初期圧力が上がると低温酸化反応と高温酸化反応による燃焼室内ガスの温度上昇の時期が進角する。最大圧力は初期圧力および初期圧力による燃焼位相の影響を同時に受ける

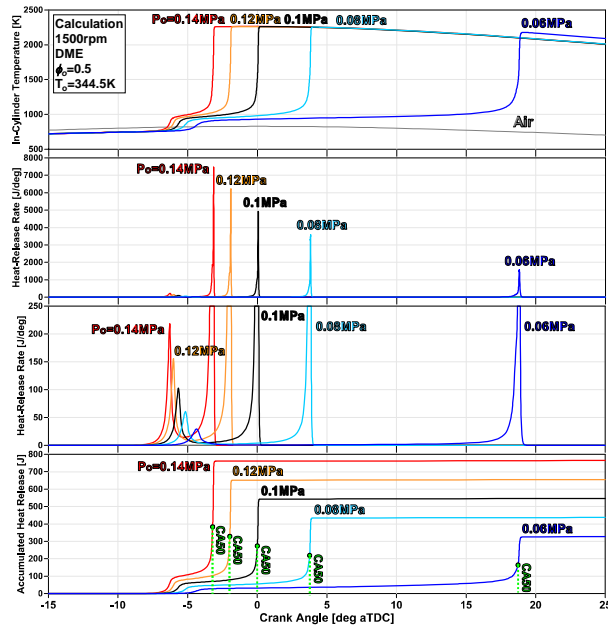


図3-20 初期圧力による燃焼室内ガスの温度，熱発生率，積算熱発生の履歴の変化

ため，初期圧力と最大圧力との関係が明らかに見える。しかし，最高温度は初期圧力が上がってもほぼ同じである。また低温酸化反応と高温酸化反応による熱発生率のピークが初期圧力による圧力上昇率の傾向と同じく初期圧力が上がると両方高くなる。初期圧力が上がると高温酸化反応による熱発生率のピークが高くなるのは初期温度が上がる場合と一致するが，低温酸化反応による熱発生率のピークも高くなることは初期温度が上がる場合現れた結果と逆である。初期圧力が上がると低温酸化反応と高温酸化反応による二つの熱発生率が同時に高くなる理由は，当量比と初期温度が一定の条件で初期圧力が上がると，初期圧力が増加した分燃料と酸素の体積モル濃度が増加したことによる。逆に初期温度が下がると燃料と酸素の体積モル濃度が減少するとともに燃焼位相が遅延するため，燃焼位相の影響が最も大きい。それにより初期圧力が低い場合 ($P_0=0.06\text{MPa}$) の熱発生率のピークが小さくなる。初期圧力による燃料と酸素体積モル濃度の変化の影響が積算熱発生率の履歴に明確に現れる。すなわち初期圧力が上がると，低温酸化反応と高温酸化反応による積算熱発生の上昇が高くなる。また燃焼位相の表示である CA50 も初期圧力により低温酸化反応と高温酸化反応の開始時期が早くなることで進角する。

図3-4により示したように圧力上昇率は熱発生率に大きく影響されるため，図3-19にある初期圧力と最大圧力上昇率との関係を調査するためには，圧力上昇率と熱発生率の関係を把握する必要がある。図3-21に各初期圧力におけるDMEのHCCI燃焼における圧力上昇率と熱発生率の関係を示す。図3-4である結果の傾向と同様に，今回考慮した初期圧力の条件 ($P_0=0.06\text{MPa}$, 0.08MPa , 0.1MPa , 0.12MPa , 0.14MPa) でも圧力上昇率の履歴は熱発生率の履歴と似ている。圧力上昇率は初期圧力に関係なく熱発生率に大きく影響を受けることが確認できた。また図3-20に示したように初期圧力が上がると燃焼位相が進角し，低温酸化反応と高温酸化反応が圧縮行程で起こることで熱発生率による圧力上昇率が最も高くなる。初期圧力 $P_0=0.12\text{MPa}$ と $P_0=0.14\text{MPa}$ である圧力上昇率と熱発生率を比較すると，たとえ両方圧縮行程で燃焼が起きても，初期圧力により燃料と酸素の体積モル濃度が増加することで初期圧力が高い方の圧力上昇率と熱発生率が高い。

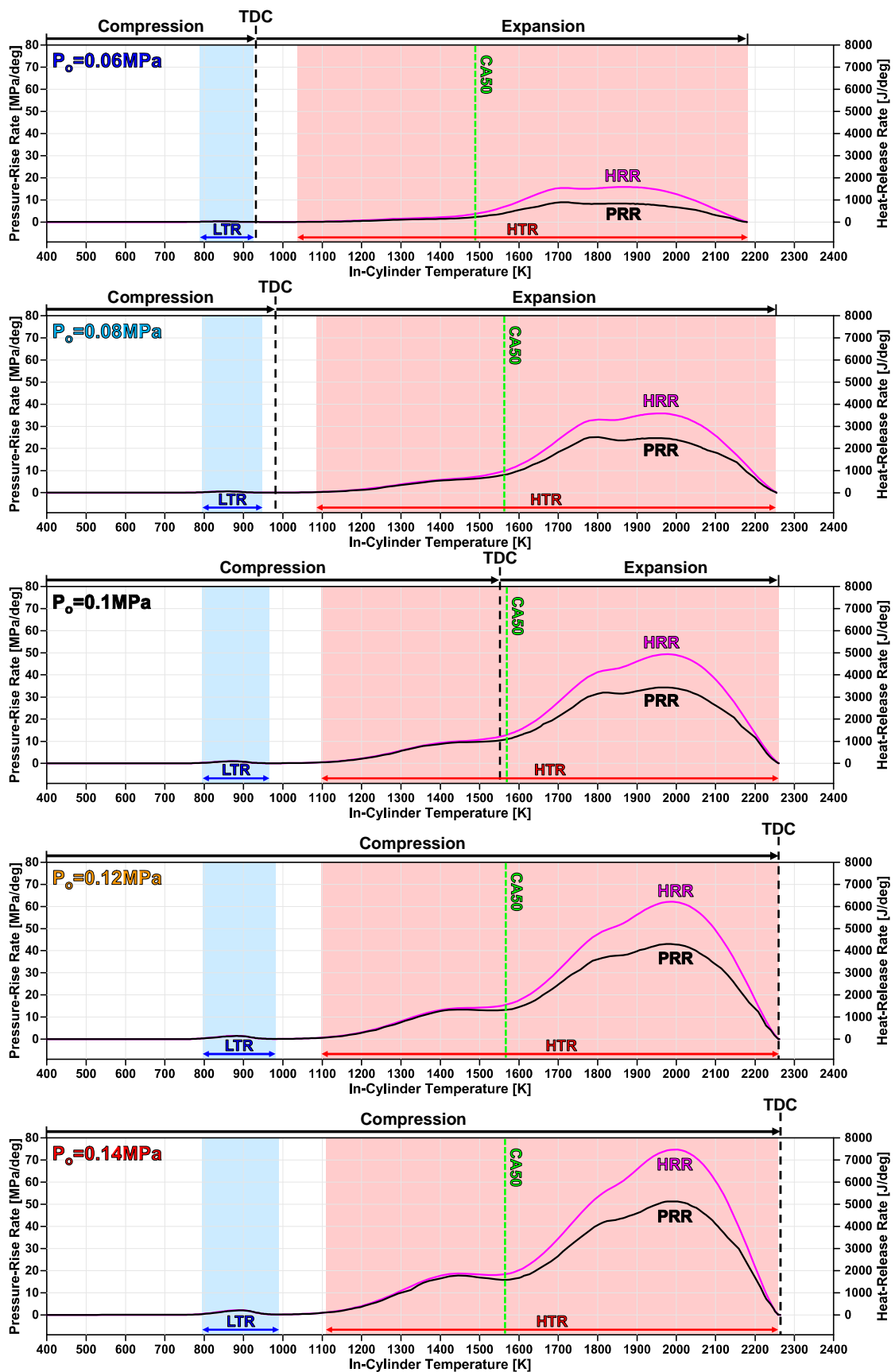


図3-21 各初期圧力におけるのDMEのHCCI燃焼における圧力上昇率と熱発生率の関係

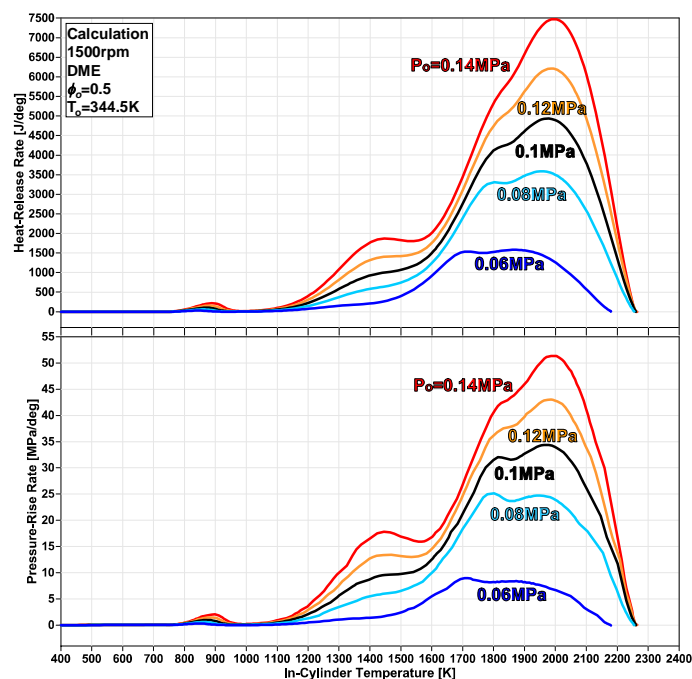


図3-22 初期圧力による熱発生率および圧力上昇率の変化

次に低温酸化反応と高温酸化反応の開始温度および終了温度を確認する。初期圧力が上がるにもかかわらず低温酸化反応の開始温度はほとんど変わらないが、低温酸化反応の終了温度は高くなることで低温酸化反応が起こる温度の範囲が広がる。続いて初期圧力が上がると高温酸化反応の開始温度および終了温度が高くなる。CA50の時の温度を比較すると、初期圧力の上昇によりCA50の温度は高くなる。これは初期温度がCA50の時の温度に及ぼす影響と同じである。

初期圧力により燃焼位相が変わるため初期圧力による熱発生率の変化を調べるためには酸化反応に直接に及ぼす初期圧力の影響以外に燃焼位相の影響も考慮する必要があると考えられる。初期圧力による熱発生率および圧力上昇率の変化を図3-22で比較する。図3-21に説明したように燃焼室内ガスの圧力上昇率と熱発生率のピークは初期圧力が上がると高くなる。しかし初期圧力が低い場合($P_0=0.06\text{MPa}$ と 0.08MPa)はピークになる温度が違うことが確認できる。

初期圧力による燃料と酸素の体積モル濃度の変化および燃焼位相の変化が熱発生率および圧力上昇率に及ぼす影響を明確に比較するため、初期圧力による熱発生率および圧力上昇率の変化を図3-22に示す。初期温度が上がる時に現れた熱発生率と圧力上昇率の傾向と最も異なるのは、初期圧力が上がると低温酸化反応と高温酸化反応の間の熱発生率と圧力上昇率が上昇することである。上に説明したように初期圧力による燃料と酸素の体積モル濃度の増加は全温度範囲に掛けて、熱発生率と圧力上昇率を高くする。図3-22に注目することは初期圧力 $P_0=0.06\text{MPa}$ 場合、熱発生率ピークの温度と圧力上昇率ピークが一致していないことである。これは燃料と酸素の体積モル濃度の影響以外に燃焼位相の影響も大きくあることを意味する。

初期圧力の上昇による燃料と酸素の体積モル濃度の影響以外に、燃焼位相がHCCI燃焼に大きく影響を与えることが確認できたので、初期圧力により燃焼位相が変化するメカニズムを説明する。図3-23に初期圧力 $P_0=0.1\text{MPa}$ 場合に現れた温度履歴を基準にし(黒線)、初期圧力が基準により 0.04MPa 高い場合(赤線、 $P_0=0.14\text{MPa}$)と初期圧力が基準より 0.04MPa 低い場合(青線、 $P_0=0.06\text{MPa}$)の温度履歴を比較する。図3-2

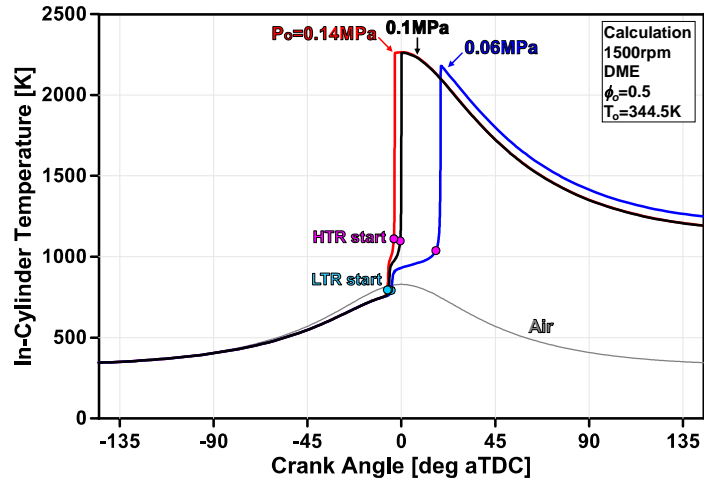


図3-23 初期圧力による温度履歴および着火時期の変化

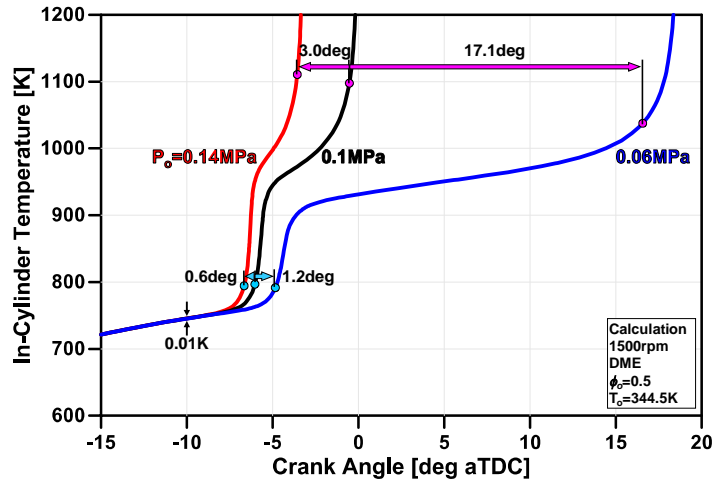


図3-24 初期圧力による温度履歴および着火時期の変化(反応開始部分の拡大)

0で示したように初期圧力が上がると低温酸化反応と高温酸化反応の開始時期の進角により燃焼位相が早くなるということが明らかに見える。また図3-21で示したように低温酸化反応と高温酸化反応の開始温度が高くなることが確認できる。図3-23のクランク角度-15deg aTDCから 20deg aTDC、温度 600Kから 1200Kまでの温度範囲を拡大したのが図3-24にある。初期圧力が基準より 0.04MPa高い場合(赤線, $P_0=0.14\text{MPa}$)と初期圧力が基準より 0.04MPa低い場合(青線, $P_0=0.06\text{MPa}$)、低温酸化反応が開始する直前(-10deg aTDC)での温度差はほぼ同じである。初期圧力が高い場合低温酸化反応の開始が 0.6deg早くなる。低温酸化反応による温度上昇が大きいので、高温酸化反応が起こる温度までも早く到達する。従って高温酸化反応の開始は 3.0deg早くなる。初期圧力が 0.04MPa低くなった場合($P_0=0.06\text{MPa}$)、低温酸化反応による温度上昇が、初期圧力が高い時の低温酸化反応による温度上昇に比べて小さいため、低温酸化反応の開始が 1.2deg遅延する。低温酸化反応の開始が早くなり低温酸化反応による温度上昇も遅くなるため、高温酸化反応が起こる温度までも遅く到達する。従って高温酸化反応の開始は 17.1deg遅延する。低温酸化反応が開始する直前の温度差は初期温度が高い場合と低い場合とほぼ同じであるが、初期温度が 20K低くなった場合に低温酸化反応および高温酸化反応の開始の遅延が大きくなっている。初期圧力が下がることで延焼位相が遅延すると低温酸化反応の熱発生が小さい時に燃焼室内ガスが膨張され、最も遅延する。

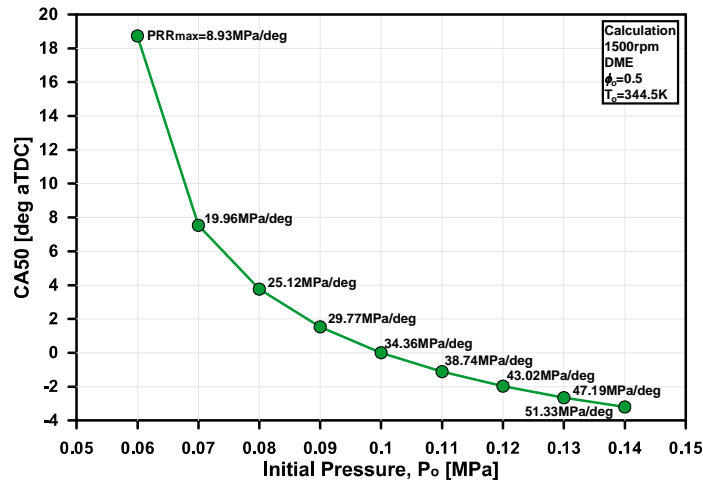


図3-25 初期圧力と燃焼位相との関係

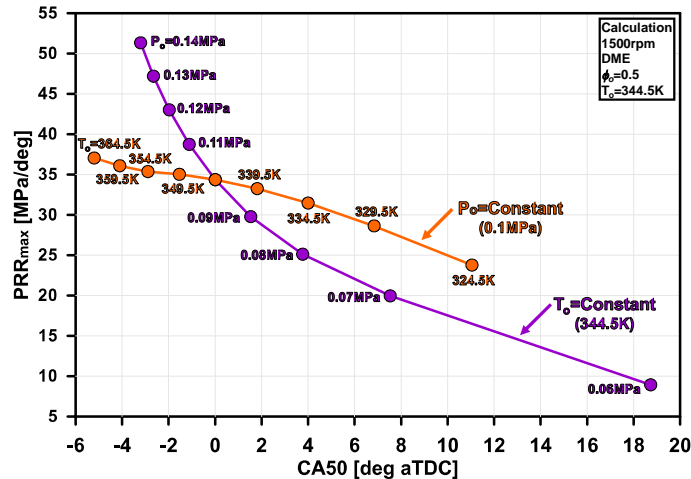


図3-26 初期温度および初期圧力による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響

初期温度と燃焼位相との関係を図3-25に示す. 図3-24に説明したように初期圧力が上がると燃焼位相が進角する. しかし図3-25の線が図3-15の線より曲がって急に上がるのは初期圧力の減少が燃焼位相に及ぼす影響が大きいことを意味する. 次に初期圧力による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を図3-26に示す. また初期温度による燃焼位相の変化がしだい圧力上昇率に及ぼす影響と比較するため図3-26の結果(オレンジ線)も示す. 燃焼位相が遅延すると最大圧力上昇率が減少する. しかし初期温度による燃焼位相の変化が圧力上昇率に及ぼす影響と初期圧力による燃焼位相の変化が圧力上昇率に及ぼす影響は非常に異なる. 初期温度が下がると反応速度が遅くなっても燃料と酸素の体積モル濃度は増えるため, 燃焼位相の影響が小さい. 初期圧力が下がると反応速度の変化は小さく, 燃料と酸素の体積モル濃度が減少するため燃焼位相の影響が大きい.

3. 4. 3. 初期圧力による各素反応の熱発生率の変化

初期圧力による各素反応の熱発生率の変化を確認する. 図3-5にある寄与度行列から得られた素反応に対して初期温度による各素反応の熱発生率を図3-27に示す. 図3-17で示した初期温度が高いと熱発生率が低くなる素反応($\text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{O}_2 = \text{CH}_3\text{OCH}_2 + \text{HO}_2$, $\text{CH}_3\text{OCH}_2 + \text{O}_2 = \text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2$, $\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H} + \text{O}_2 =$

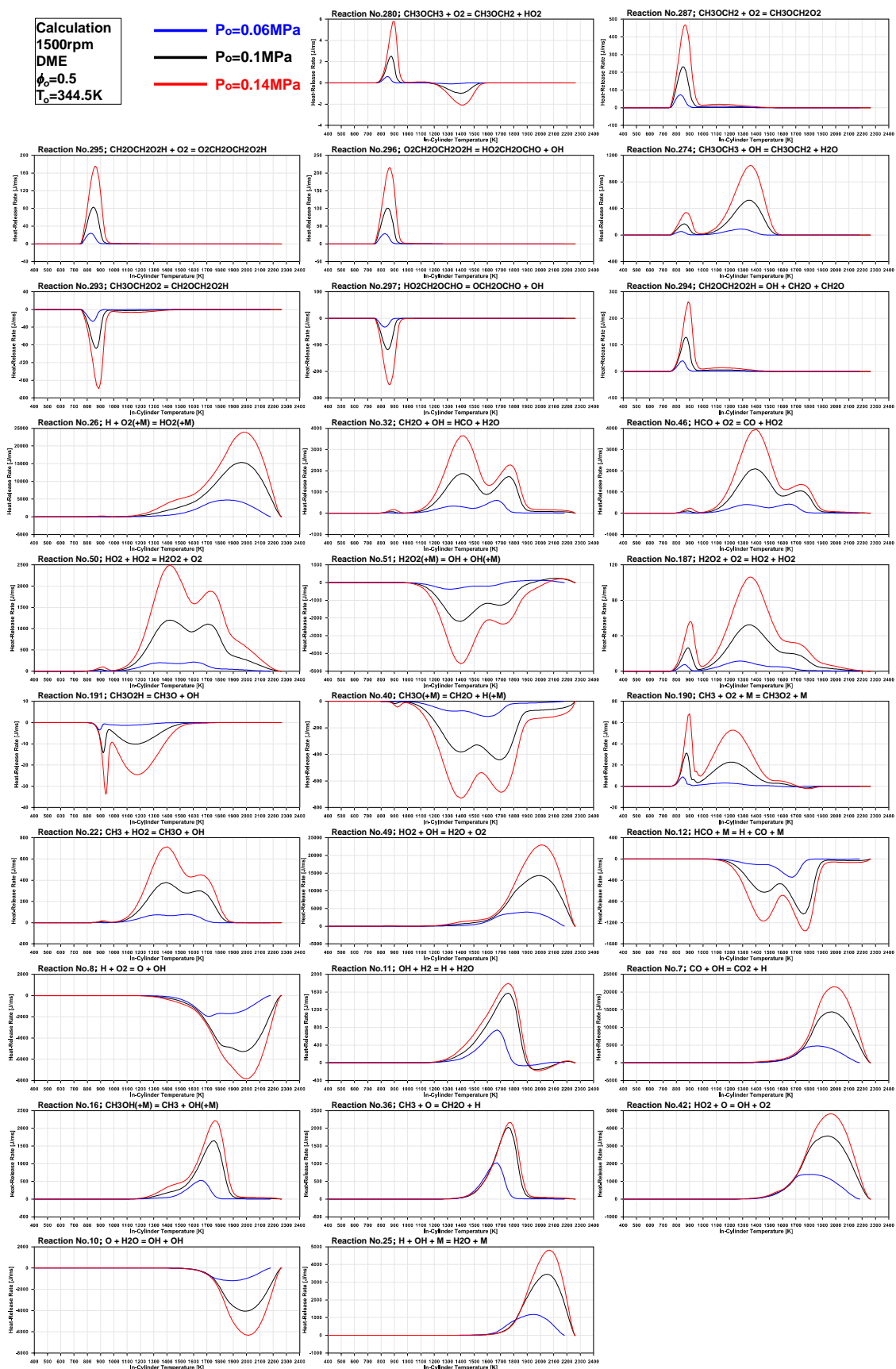


図3-27 初期圧力による熱発生に3%以上寄与する各素反応の熱発生率の変化

$O_2CH_2OCH_2O_2H$, $O_2CH_2OCH_2O_2H=HO_2CH_2OCHO+OH$, $CH_3OCH_3+OH=CH_3OCH_2+H_2O$, $CH_3OCH_2O_2=CH_2OCH_2O_2H$, $HO_2CH_2OCHO=OCH_2OCHO+OH$, $CH_2OCH_2O_2H=OH+CH_2O+CH_2O$)を含め低温酸化反応および高温酸化反応に関する全素反応の熱発生率が高くなる。これは前節で説明したように、当量比と初期温度が一定の条件で初期圧力が上がると、初期圧力が増加した分燃料と酸素の体積モル濃度が増加することで、全素反応の熱発生率が高くなってと言える。

3. 5. 第3章のまとめ

本章では、素反応数値計算を用いてHCCIエンジンにおける燃焼の特性を示し、HCCI燃焼による圧力上昇率と熱発生率との関係を確認した。熱発生率は燃焼時の圧力上昇率に大きく影響を与えるため、寄与度行列を用いてHCCI燃焼の熱発生に寄与する重要な素反応を把握し、熱発生に及ぼす各素反応の寄与度を確認した。その上、初期条件として初期温度と初期圧力が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響調査し、初期条件、燃焼位相、最大圧力上昇率との関係を把握した。最後に初期温度および初期圧力が、寄与度行列から得られた重要な各素反応の熱発生率に及ぼす影響を確認した。

HCCIエンジンにおける燃焼は予混合気中の燃料と酸素がピストンの圧縮により分解され、新たな化学種が作られ、燃料と酸素および科学種間の素反応により低温酸化反応が起こり、続いて高温酸化反応が起こる自己着火燃焼であった。自己着火による熱発生は燃焼室内ガスの圧力の上昇に大きく影響を与えるため、HCCI燃焼の課題にある高負荷運転時での急峻な圧力上昇率を解決するためには、まず熱発生について調べる必要があった。熱発生に大きく寄与する素反応を調査するために寄与度行列を用い、DMEのHCCI燃焼における熱発生には発熱反応である $H+O_2(+M)=HO_2(+M)$, $HO_2+OH=H_2O+O_2$, $CO+OH=CO_2+H$ の素反応が熱発生率に主に寄与するのが確認できた。次に吸熱反応である $H+O_2=O+OH$ と $O+H_2O=OH+OH$ の素反応が確認できた。吸熱反応は熱発生には直接に寄与しないが、二つの素反応によりOとOHのラジカルが生成されるため、上に示した三つの発熱反応に大きく寄与すると考えられる。二つの吸熱反応とともに発熱反応にある $HO_2+O=OH+O_2$ と $H+OH+M=H_2O+M$ の素反応が確認できた。この二つの発熱反応の熱発生率に比べては小さいが、発熱反応である $CH_3+O=CH_2O+H$, $CH_3OH(+M)=CH_3+OH(+M)$, $OH+H_2=H+H_2O$ も確認できた。低温酸化反応と高温酸化反応の間では発熱反応である $HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$, $HCO+O_2=CO+HO_2$, $CH_2O+OH=HCO+H_2O$ と吸熱反応である $H_2O_2(+M)=OH+OH(+M)$ の素反応が確認できた。低温酸化反応と呼ばれる素反応の中で、発熱反応である $CH_3OCH_2+O_2=CH_3OCH_2O_2$, $CH_2OCH_2O_2H+O_2=O_2CH_2OCH_2O_2H$, $O_2CH_2OCH_2O_2H=HO_2CH_2OCHO+OH$, $CH_3OCH_3+OH=CH_3OCH_2+H_2O$ の素反応と、吸熱反応である $CH_3OCH_2O_2=CH_2OCH_2O_2H$ と $HO_2CH_2OCHO=OCH_2OCHO+OH$ の素反応が低温酸化反応の熱発生に寄与すること確認できた。ここで注目することは高温酸化反応に熱発生率に大きく寄与する $H+O_2(+M)=HO_2(+M)$ と $HO_2+OH=H_2O+O_2$ の素反応が低温酸化反応による熱発生率にも寄与していることであった。

初期温度(T_0)が上がると最大圧力上昇率が高くなった。初期温度により最大圧力上昇率が増加する原因として、初期温度が上がると燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度が小さくなるが、高い温度の中で反応が進行するため、反応速度が早くなることが考えられる。また初期温度の上昇により燃焼位相が進角し膨脹行程の影響が小さくなり、それで最大圧力上昇率が高くなった。初期温度による各素反応の熱発生の変化を確認したところ、初期温度が上がると低温酸化反応である素反応 ($CH_3OCH_3+O_2=CH_3OCH_2+HO_2$,

$\text{CH}_3\text{OCH}_2+\text{O}_2=\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2$, $\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}+\text{O}_2=\text{O}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}$, $\text{O}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}=\text{HO}_2\text{CH}_2\text{OCHO}+\text{OH}$,
 $\text{CH}_3\text{OCH}_3+\text{OH}=\text{CH}_3\text{OCH}_2+\text{H}_2\text{O}$, $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{O}_2=\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}$, $\text{HO}_2\text{CH}_2\text{OCHO}=\text{OCH}_2\text{OCHO}+\text{OH}$,
 $\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{O}_2\text{H}=\text{OH}+\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_2\text{O}$)の熱発生率は初期温度が高いと低かった。

初期圧力(P_0)が上がると最大圧力上昇率が高くなった。初期温度により最大圧力上昇率の増加は、初期圧力が上がると燃料と酸素の体積モル濃度が増加するとともに燃焼位相が進角したことであった。初期温度による各素反応の熱発生の変化を確認したところ、全素反応の熱発生率が高くなった。

最後に初期温度による燃焼位相の変化が圧力上昇率に及ぼす影響と初期圧力による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較すると、燃焼位相の遅延による最大圧力上昇率の減少の傾向が非常に異なり初期温度が下がると反応速度が遅くなっても燃料と酸素の体積モル濃度が増えるため、最大圧力上昇率に及ぼす燃焼位相の影響は小さいが、それに比べて初期圧力が下がると反応速度の変化は小さく燃料と酸素の体積モル濃度が燃焼位相の遅延とともに減少するため、最大圧力上昇率に及ぼす燃焼位相の影響が最も大きかった。

第4章 素反応数値計算に基づく EGR および過給が HCCI 燃焼に及ぼす影響の解析

HCCI エンジンの自己着火燃焼における熱発生は、燃焼室内ガスの温度の上昇により様々な素反応の化学反応が起こることによって生じる。熱発生に関する素反応の反応速度は、燃焼室内ガスの温度が上昇するとともに速くなり、またある素反応の熱発生により燃焼室内ガスの温度が上昇すると自己加速化するため、熱発生率が最も高くなる。特に高負荷運転時では多量の燃料と空気の酸化反応により自己着火燃焼が起こるため、急激な熱発生により燃焼室内ガスの圧力上昇率が急峻になることでノッキングが発生しやすくなる。それで高負荷運転時でのノッキングの発生により、HCCI エンジンにおける運転領域が低負荷に限られているため、運転領域の拡大が課題として挙げられる。HCCI エンジンの運転領域を広げる燃焼技術として、燃焼後の排気ガス一部を取り出し吸気側へ導き再度供給させる EGR (Exhaust Gas Recirculation, 排気再循環) が用いられている。燃焼室内に EGR ガスが導入されると、燃焼室内ガスの比熱比が下がり酸素体積モル濃度が減少することで、燃焼位相の遅延と同時に HCCI 燃焼の熱発生が抑えられるため最大圧力上昇率が減少する。ただし EGR ガスを燃焼室内に入れすぎると、失火が起こる問題がある。また EGR ガスの導入による燃焼室内の酸素体積モル濃度の減少と燃焼位相の遅延が最大圧力上昇率に及ぼす影響は、EGR ガス自体の影響ではないため、最大圧力上昇率に及ぼす EGR のみの影響を明らかにする必要がある。燃焼室内の酸素体積モル濃度が一定の条件で EGR ガスの導入ができる方法として、空気の吸気圧力を大気圧以上に高め、強制的に多量の空気を燃焼室内へ送り込む過給 (Boost Pressure, 初期圧力) と EGR を同時に適用することがある。HCCI エンジンに EGR および過給を同時に適用すると、EGR により HCCI 燃焼の最大圧力上昇率を減少し、過給により HCCI エンジンの出力が増加することで、運転領域が拡大すると考えられる。それで、EGR および過給が HCCI 燃焼に及ぼす影響を解析する必要がある。

第4章では、素反応数値計算に基づいて、まず燃焼室内に EGR ガスを導入するときに、初期温度と初期圧力が一定の条件と、初期温度と初期圧力 (過給) の調節により燃焼室内の酸素体積モル濃度が一定の条件における EGR 率による HCCI 燃焼の変化を示し、EGR 率が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認する。次に HCCI 燃焼に及ぼす燃焼位相の影響を消し EGR のみの影響を確認するため、EGR ガスによって燃焼位相が変化するときの結果を、初期温度と初期圧力の調節により燃焼位相が一定の条件で現れる結果と比較する。その上、燃焼位相が一定の条件において、EGR と過給がない場合、EGR だけがある場合、EGR と過給が同時にある場合の三つの条件を考慮し、それぞれの HCCI 燃焼の比較により EGR および過給が HCCI 燃焼に及ぼす影響を解析する。また寄与度行列を用いて HCCI 燃焼の熱発生に寄与する素反応の変化および各素反応の熱発生率の変化を確認する。

4. 1. EGR および過給による予混合気組成の変化

素反応数値計算に基づいて EGR および過給が HCCI 燃焼に及ぼす影響を解析するため、本論文で考慮した EGR および過給の概念を図4-1により説明する。図4-1に EGR および過給による予混合気の組成の変化に関する概念図を示す。まず基準である予混合気「1」は、EGR および過給がない燃料と空気の予混合気である。EGR 導入である予混合気「2」は、予混合気「1」の燃料体積モル濃度が一定の条件で EGR ガスを導入することである。燃料体積モル濃度が一定の条件で EGR ガスが導入されると、EGR ガスが増加した分酸

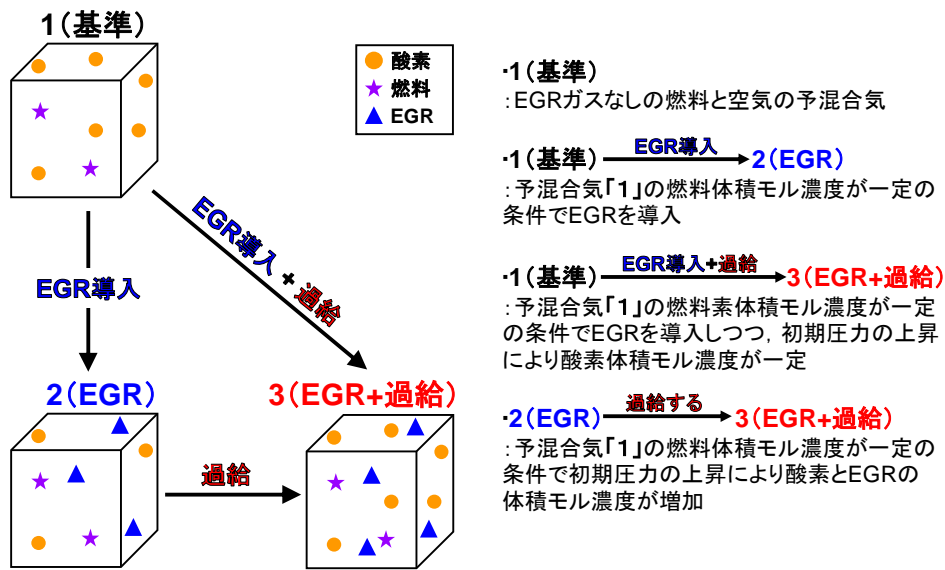
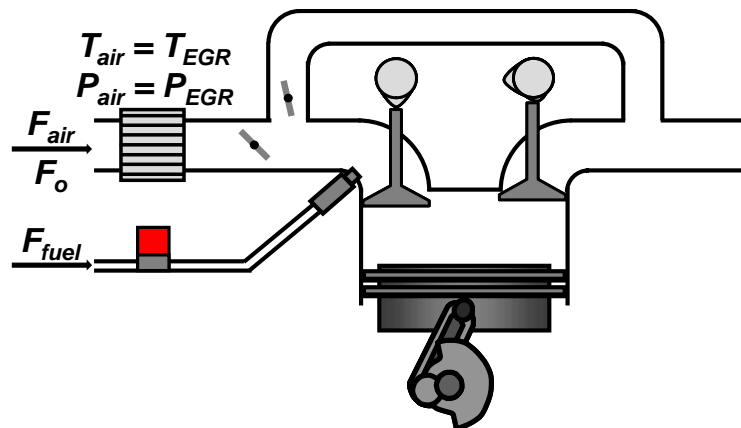


図4-1 EGR および過給による予混合気の組成の変化に関する概念図

素体積モルが減少し当量比が上がる。EGR 導入および過給である予混合気「3」は、予混合気「1」の燃料体積モル濃度が一定の条件で EGR ガスを導入することは予混合気「2」と同じであるが、EGR ガスを導入しても酸素体積モル濃度が一定になるように過給(初期圧力の増加)をする。予混合気「1」の燃料と酸素の体積モル濃度を一定であるため当量比は予混合気「1」と同じであるが、EGR ガスの増加により全体ガスの体積モル濃度はあがる。予混合気「2」から予混合気「3」は、燃料体積モル濃度が一定の条件で予混合気「3」の酸素体積モル濃度が予混合気「1」の酸素体積モル濃度になるまで過給(初期圧力の増加)することである。

4. 2. EGR の考慮

実エンジンにおける EGR 率に基づいて、素反応数値計算で考察した EGR 率 γ を定義する。図4-2に本論文で定義する EGR 率を示す。実エンジンにおける EGR ガスの導入は、排気行程で排出された燃焼後の排気ガス一部が EGR ループを通して吸気側へ導き再度供給されることである。供給される EGR ガ



$$\text{EGR 率, } \gamma = \frac{F_o - F_{air}}{F_o}$$

F_o : EGRなし時の空気流量 [m³/s]
 F_{air} : EGR希釈時の空気流量 [m³/s]

図4-2 EGR 率の定義

その量は吸気側のバルブの開閉により調節される。空気の吸気温度 (T_{air}) と吸気圧力 (P_{air}) が, EGR ガスの供給温度 (T_{EGR}) と供給圧力 (P_{EGR}) と一定であるものと仮定する, 吸気される空気流量 (F) は EGR ガスの導入により変わる。吸気側に EGR ガスの導入しない時の空気流量 (F_0) を, EGR ガスの導入する時の空気流量 (F_{air}) により引いて, それを吸気側に EGR ガスの導入しない時の空気流量 (F_0) で割る数値を EGR 率と定義する。

次に, 以上の仮定および定義の下, EGR 率 0 でのあるサイクル (0 サイクルとする) において EGR ガスを与えた際に予混合気の組成の変化について検討する。0 サイクル目に EGR 率 0 である時に燃焼後のガスを EGR ガスとして, 次の 1 サイクル目に燃料のモル分率が一定の条件で EGR 率により供給する。0 サイクル目で EGR 率 γ が与えられると, 次の 1 サイクル目で新気に給気される空気は 0 サイクル目の量に対して $(1-\gamma)$ 倍の量となり, 残りが 0 サイクル目の燃焼後のガスが EGR ガスとして供給されることになる。同様に 1

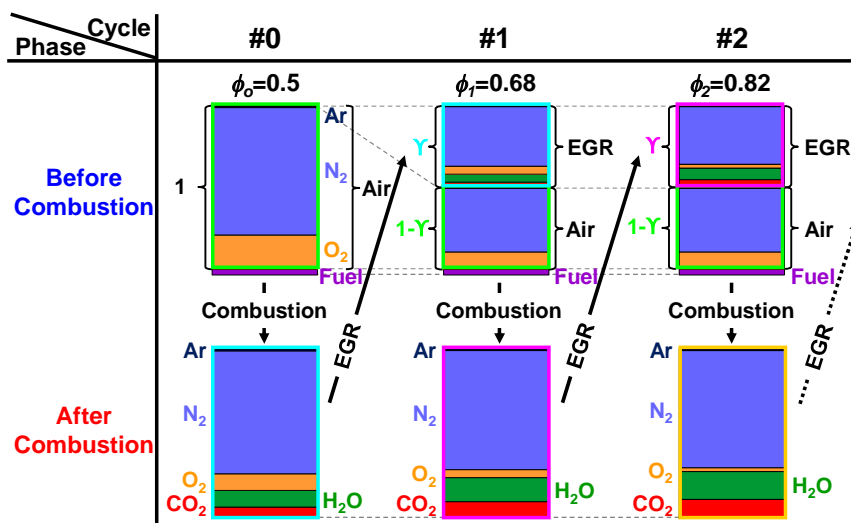


図4-3 EGR ガスの導入によるサイクル毎の予混合気組成の変化 (DME, $\phi_0=0.5$, $\gamma=0.5$)

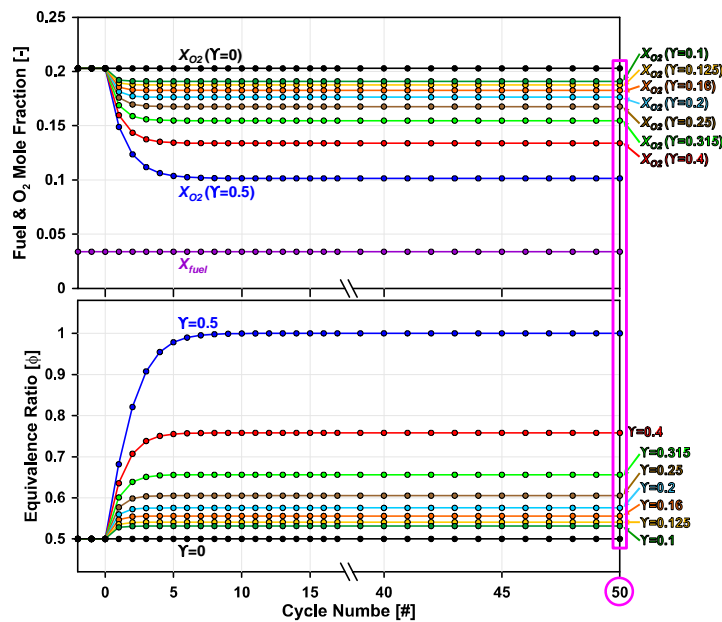


図4-4 燃料モル分率が一定の条件で EGR 導入による酸素モル分率の変化と当量比との関係

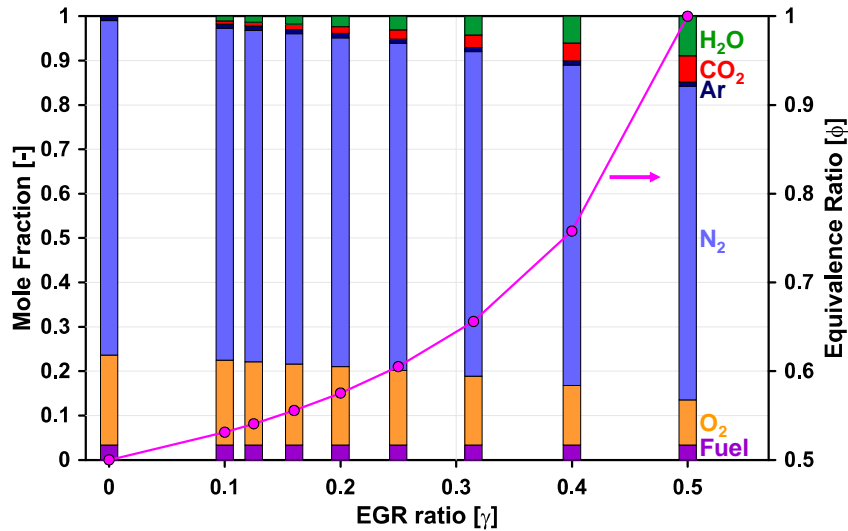


図4-5 各 EGR 率における 50 サイクル目の予混合気の組成 (初期温度と初期圧力一定, 1→2)

サイクル目の燃焼後のガスを EGR ガスとして 2 サイクル目に供給し燃焼させ燃焼後のガスを次サイクルへという行程を 50 サイクル繰り返す。ただし、燃焼は完全燃焼が起こったと仮定するため、EGR ガスとして導入されるガスは完全燃焼による生成物にある CO_2 、 H_2O 、 N_2 、 O_2 、 Ar と構成されている。図4-3に0サイクル目の当量比 0.5, EGR 率 0.5, 燃料 DME とした時の例を示す。

図4-4にサイクル数による燃料と酸素のモル分率および当量比の変化を示す。燃料のモル分率が一定の条件で EGR ガスを導入するので、EGR 導入により酸素体積モル濃度が減るためサイクルが進行することに対し当量比は上昇する。しかし、サイクルの進行がある程度過ぎると EGR ガスに含まれている酸素体積モル濃度がほとんどなくなるため 10 サイクル目以降は当量比の変化がほとんどない。また、EGR 率に比例し酸素体積モル濃度が減るため、EGR 率が高ければ高いほど急峻な当量比の上昇とともに高くなる。50 サイクル目の当量比を示すと、EGR 率 0.1 では $\phi=0.531$, EGR 率 0.125 では $\phi=0.541$, EGR 率 0.16 では

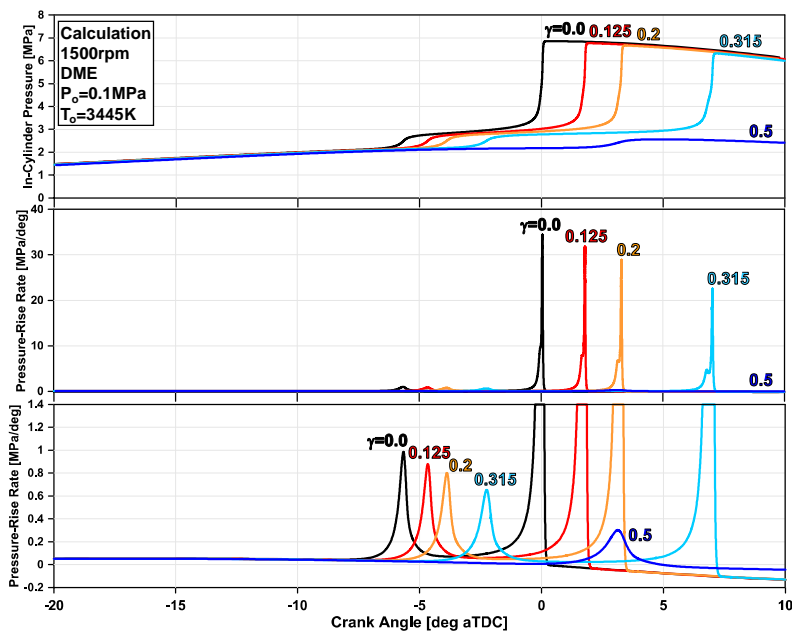


図4-6 EGR 率による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化 (初期温度と初期圧力一定, 1→2)

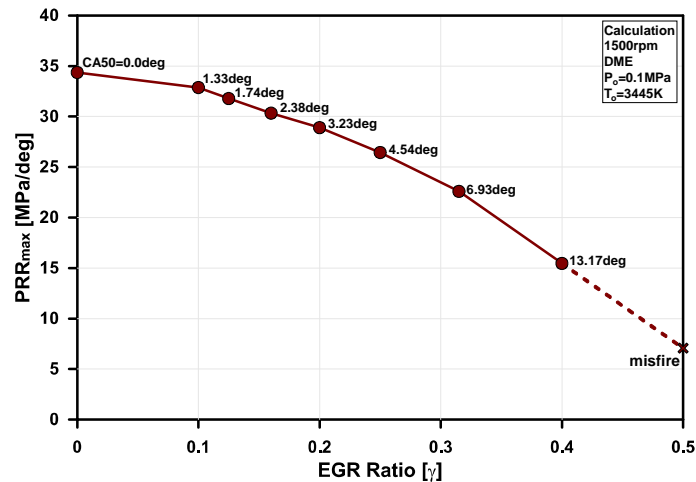


図4-7 EGR 率と最大圧力上昇率との関係(初期温度と初期圧力一定, 1→2)

$\phi=0.556$, EGR 率 0.2 では $\phi=0.575$, EGR 率 0.25 では $\phi=0.605$, EGR 率 0.315 では $\phi=0.656$, EGR 率 0.4 では $\phi=0.758$, EGR 率 0.5 では $\phi=1.0$ である。

4. 3. 初期温度が一定の場合

4. 3. 1. EGR と最大圧力上昇率との関係

図4-5に各EGR 率における50 サイクル目の予混合気の組成および当量比を示す(初期温度と初期圧力一定, 1→2). 図4-4で説明したように, 燃料モル分率が一定の条件でEGR ガスを導入するため, EGR ガスの導入により酸素モル分率が減少する分当量比が増加する. 図4-5に示した予混合気を用いて素反応数値計算を行い EGR ガスの導入が HCCI 燃焼に及ぼす影響を調査する. エンジン回転速度が 1500rpm, 燃料が DME, 初期温度(T_0)が 344.5K, 初期圧力(P_0)が 0.1MPa の条件で EGR 率($\gamma=0.0$,

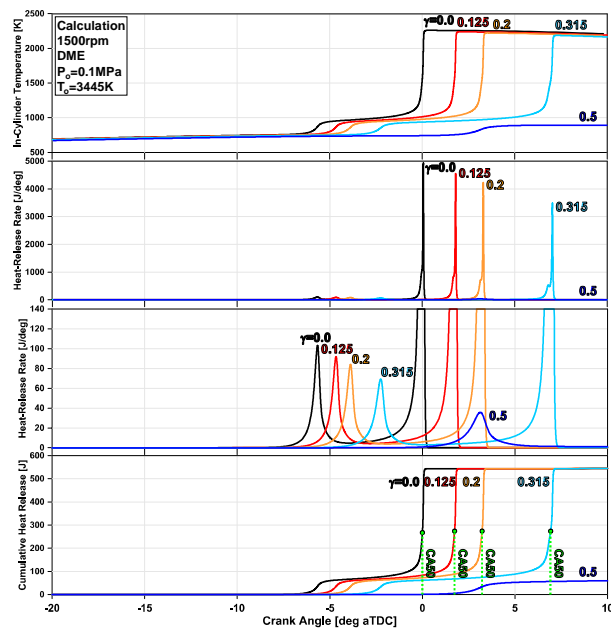


図4-8 EGR 率による燃焼室内ガスの温度, 熱発生率, 積算熱発生履歴の変化(初期温度と初期圧力一定, 1→2)

0.125, 0.2, 0.315, 0.5)による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化を図4-6に示す。EGR 率が増加すると低温酸化反応と高温酸化反応による燃焼室内ガスの圧力上昇時期が遅延し、最大圧力が下がる。また高温酸化反応および低温酸化反応による燃焼室内ガスの圧力上昇率のピークも減少する。しかしEGR 率が0.5 のときに、燃焼位相が過度に遅延しても低温酸化反応による低い圧力上昇率のピークが現れるが、高温酸化反応が起こらないため失火が起こる。

図4-7にEGR 率と最大圧力上昇率との関係を示す(初期温度と初期圧力一定, 1→2)。図4-6で確認し

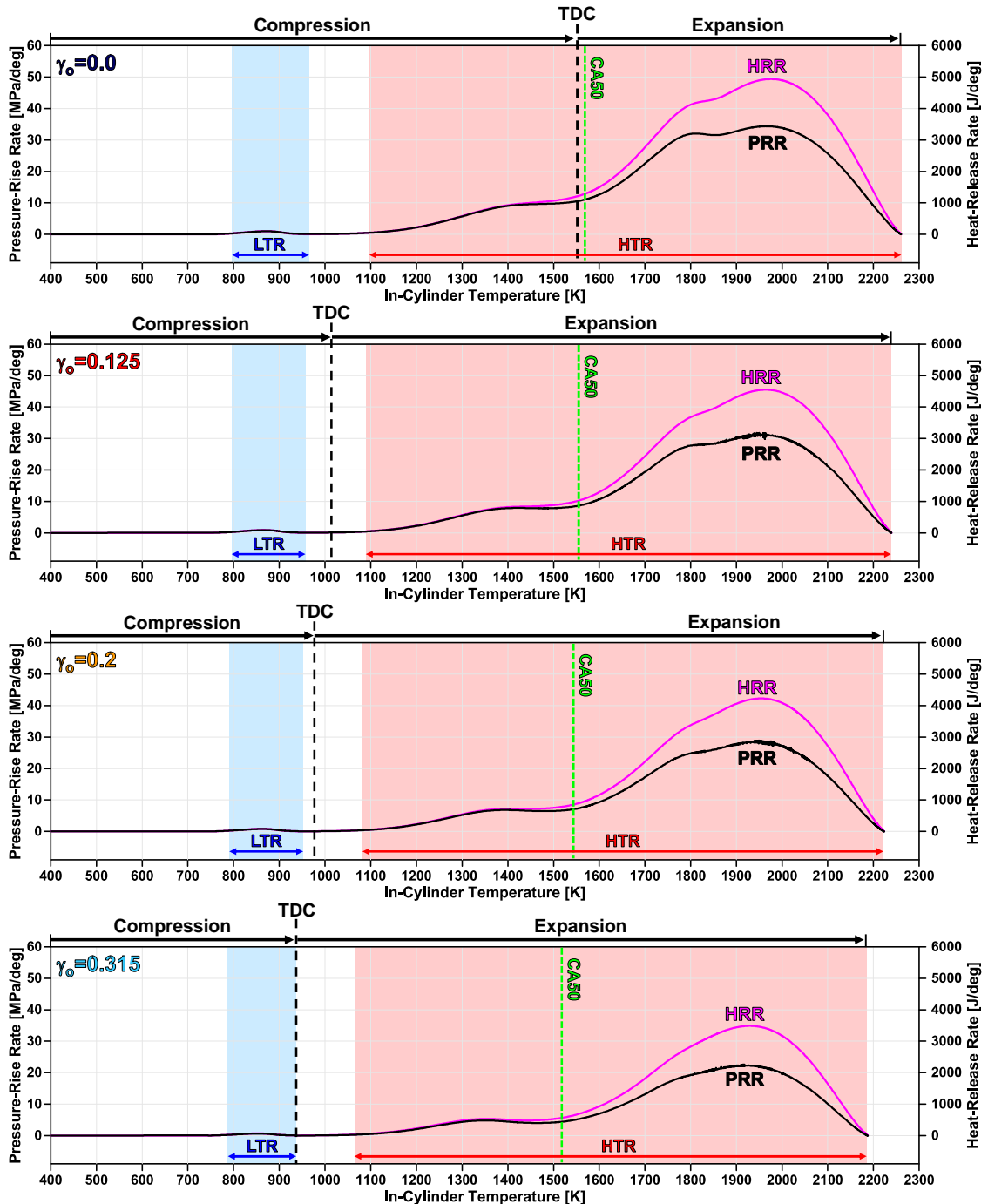


図4-9 各EGR 率においてのDME のHCCI 燃焼における圧力上昇率と熱発生率の関係(初期温度と初期圧力一定, 1→2)

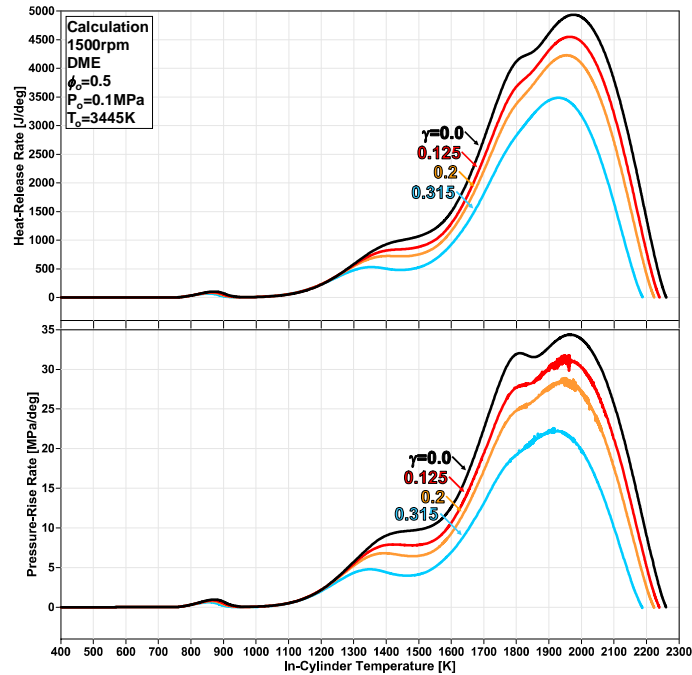


図4-10 EGR 率による熱発生率および圧力上昇率の変化(初期温度と初期圧力一定, 1→2)

たように, EGR 率上がると燃焼室内ガスの圧力上昇率は下がる. しかし最大圧力上昇率は EGR 率に比例して上昇しないので, これは圧力上昇率に及ぼす EGR ガスによる燃焼位相の遅延の影響だと考えられる.

4. 3. 2. EGR による燃焼位相の変化と最大圧力上昇率との関係

図4-7の結果である EGR 率が上がると最大圧力上昇率が下がる原因について調べる. まず図4-6の結果である EGR 率による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化に対する燃焼室内ガスの温度, 熱発生率, 積算熱発生履歴の変化を図4-8に示す(初期温度と初期圧力一定, 1→2). 図4-6で現れた燃焼室内ガスの圧力変化の傾向と同じに, EGR 率が上がると低温酸化反応と高温酸化反応による燃焼室内ガスの温度上昇の時期が遅延する. 燃焼室内に EGR ガスが導入されると, EGR ガスである CO_2 と H_2O により圧縮開始時の燃焼室内ガスの比熱比が下がり, これにより圧縮行程でのピストンによる燃焼室内ガスの温度が上がりにくくなるため, 低温酸化反応と高温酸化反応の熱発生が遅くあること燃焼位相が遅延する. また燃焼室内ガスの比熱比が下がると HCCI 燃焼における熱発生が全燃焼過程にかけて抑えられるため, 燃焼位相が遅延する. EGR 率の増加により減少する燃焼室内ガスの比熱比の影響以外に, EGR ガスの導入に代わりに酸素がなくなるため, これも燃焼位相の遅延に及ぼす一つの原因だと考えられる. それで燃焼室内への EGR ガスの導入による比熱比と酸素体積モル濃度の減少, またそれによる燃焼位相の遅延が含まれて HCCI 燃焼の熱発生を最も抑え, 燃焼室内ガスの最大圧力上昇率が下がると考えられる. これが図4-8に明確に示されている.

図4-9に各 EGR 率における DME の HCCI 燃焼における圧力上昇率と熱発生率の関係を示す(初期温度と初期圧力一定, 1→2). 図3-4である結果の傾向と同様に, 今回考慮した EGR 率の条件 ($\gamma=0.0, 0.125, 0.2, 0.315$) でも圧力上昇率の履歴は熱発生率の履歴と似ている. 圧力上昇率は初期温度に関係なく熱発生率に大きく影響を受けることが確認できる. しかし EGR 率が増加すると全燃焼温度に対する圧力上昇率と熱発生率の履歴が小さい. 低温酸化反応がにおける燃焼温度範囲を比較すると, 開始温度は約 800K

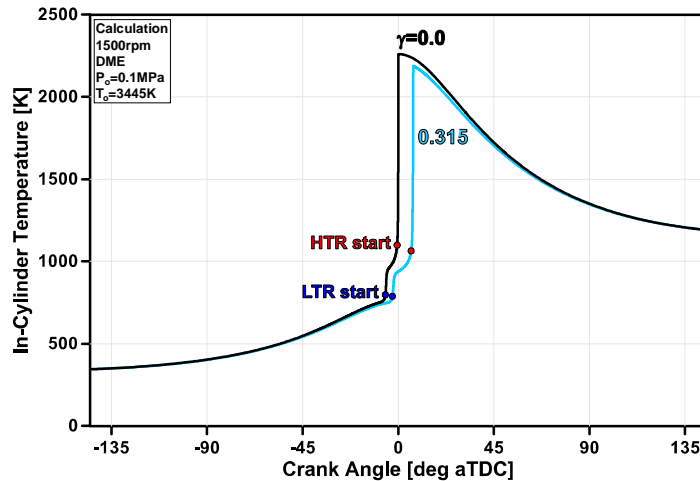


図4-11 EGR 率による温度履歴および着火時期の変化(初期温度と初期圧力一定, 1→2)

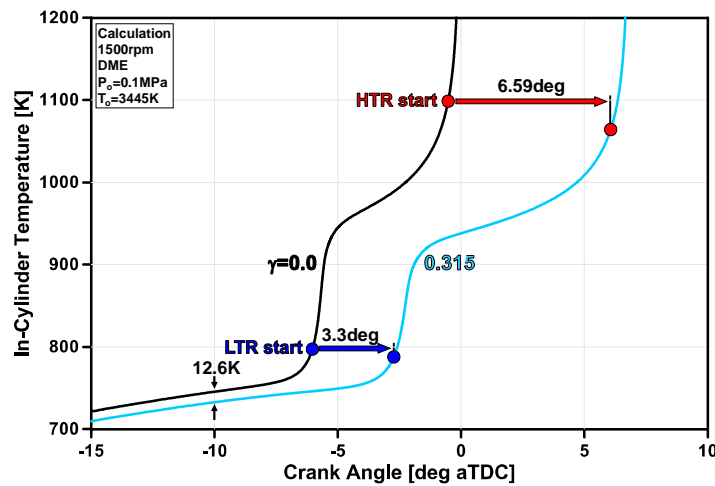


図4-12 図4-11の拡大(初期温度と初期圧力一定, 1→2)

でほとんど同じであるが EGR 率が上がると終了温度が低くなることで、燃焼温度範囲が少し狭くなる。高温酸化反応における燃焼温度範囲を比較すると、EGR 率が上がると開始温度と終了温度が少し低くなること確認できる。CA50 に相当する燃焼温度は、EGR 率が上がると低くなる。EGR 率による熱発生率および圧力上昇率の変化を明確に確認するため、図4-10で比較する(初期温度と初期圧力一定, 1→2)。EGR が増加すると熱発生率の減少により圧力上昇率の減少する。特に EGR 率が 0.315 の場合、熱発生率に及ぼす燃焼位相の影響も大きく受けるため、熱発生率と圧力上昇率が最も減少している。

EGR 率の増加による燃焼室内ガスの比熱比と酸素体積モル濃度の減少外に、EGR ガスの導入による燃焼位相の変化が HCCI 燃焼に大きく影響を与えることが図4-8で確認できたので、次に初期温度により燃焼位相が変化するメカニズムを説明する。図4-11に EGR 率が 0.0 の場合に現れた温度履歴を基準にし(黒線)、EGR 率が 0.315 の場合(水色線)の温度履歴を比較する(初期温度と初期圧力一定, 1→2)。図4-8で示したように EGR 率が上がると低温酸化反応と高温酸化反応の開始時期および燃焼位相が遅延するのが明らかである。また低温酸化反応と高温酸化反応の開始温度が高くなるのが確認できる。図4-11のクランク角度-15deg aTDC から 10deg aTDC、燃焼室内ガスの温度 700K から 1200K までの範囲を拡大したのが図4-12である(初期温度と初期圧力一定, 1→2)。EGR 率が増加した場合(水色線, $\gamma=0.0$)、圧縮開始時

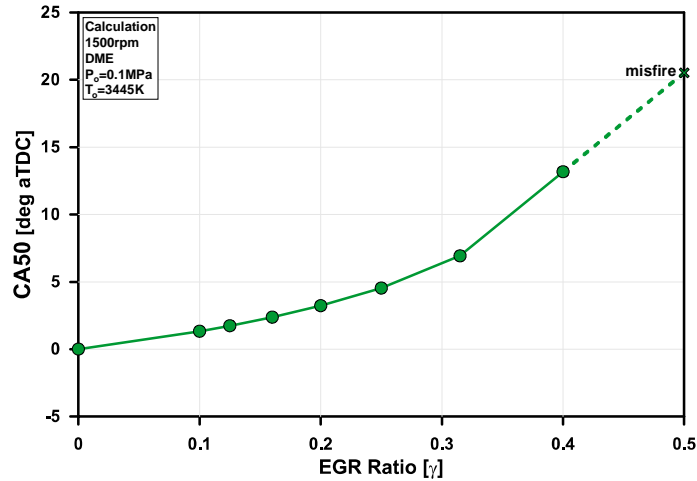


図4-13 EGR 率と燃焼位相との関係(初期温度と初期圧力一定, 1→2)

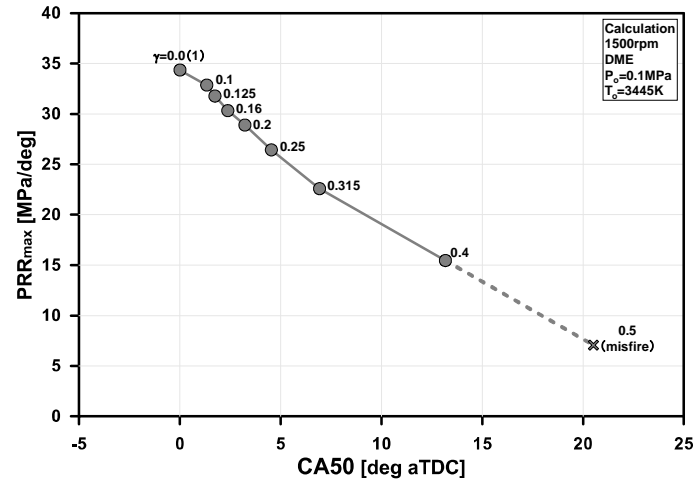


図4-14 EGR 率による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響(初期温度と初期圧力一定, 1→2)

の 0K の温度差が、低温酸化反応開始の直前(-10deg aTDC)ではさらに広がり 12.6K の温度差で低くなる。燃焼室内ガスの温度が低くなったことで低温酸化反応が起こる温度まで遅く到達し、その結果低温酸化反応の開始時期が 3.3deg 遅延する。それは上に説明したように、EGR 率の増加により燃焼室内ガスの比熱比が低くなると、圧縮行程における燃焼室内ガスの温度が上がりにくくなるため、温度の差が生じたと考えられる。また EGR ガスの導入により酸素体積モル濃度が下がるため、低温酸化反応前の反応がうまく行けなかったことも燃焼位相遅延の原因である。低温酸化反応の開始時期が遅延することで低温酸化反応による温度上昇も遅くなるため、高温酸化反応が起こる温度まで遅く到達する。これにより高温酸化反応の開始時期は 6.53deg 遅くなる。

EGR 率と燃焼位相との関係を図4-13に示す。燃焼位相は EGR 率の増加とともに遅延する(初期温度と初期圧力一定, 1→2)。また燃焼位相の遅延は EGR 率が高ければ高いほどさらに遅延する。EGR 率の増加とともに燃焼位相が遅延過ぎると失火が起こることが確認できる。続いて EGR 率による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を図4-14に示す(初期温度と初期圧力一定, 1→2)。燃焼位相が遅延すると最大圧力上昇率がほぼ比例して減少する。

4. 3. 3. EGR および過給と最大圧力上昇率との関係

図4-15に各 EGR 率における 50 サイクル目の予混合気の組成を示す(初期温度と酸素体積モル濃度一定, 1→3). EGR ガスの導入と過給をしても燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度を一定するため, 各 EGR 率において 50 サイクル目の予混合気の当量比が 0.5 になるように, 0 サイクル目の当量比を変える必要があるため, 図4-5に示した組成と異なる. 図4-16に EGR 率による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化を示す(初期温度と酸素体積モル濃度一定, 1→3). 酸素体積モル濃度を一定するため燃焼室内への EGR ガスの導入により燃焼位相は遅延するが, 0.5 まではほとんど遅延しない. 図4-17に EGR 率と最大圧力上昇率との関係を示す(初期温度と酸素体積モル濃度一定, 1→3). 燃焼室内温度と熱発生率を確認しても同じ傾向が現れた.

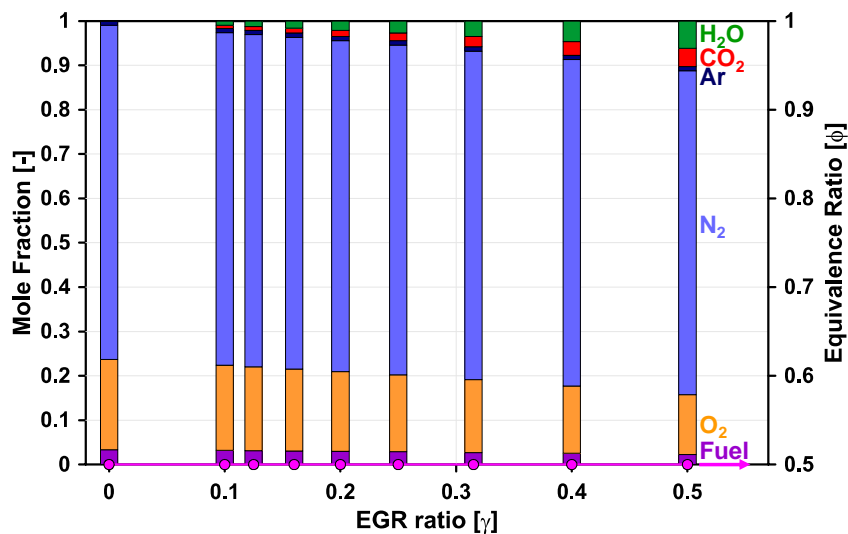


図4-15 各 EGR 率における 50 サイクル目の予混合気の組成 (初期温度と酸素体積モル濃度一定, 1→3)

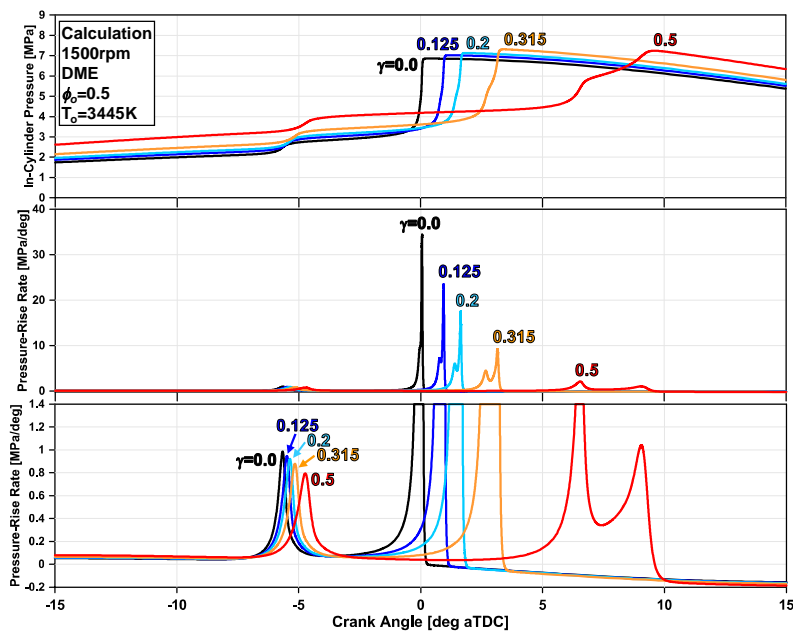


図4-16 EGR 率による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化 (初期温度と酸素体積モル濃度一定, 1→3)

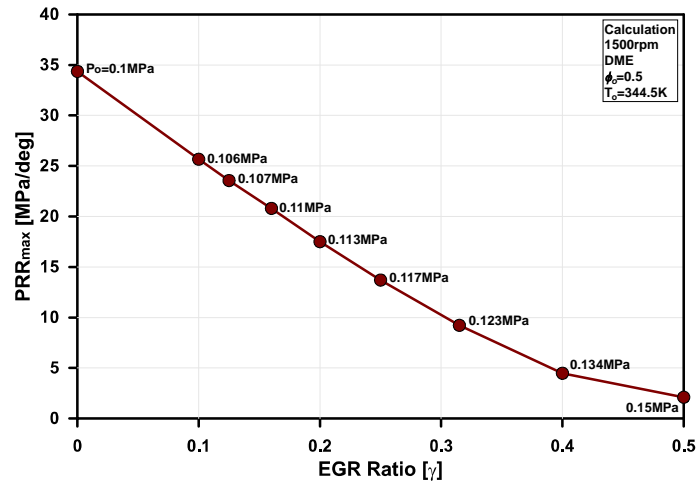


図4-17 EGR 率と最大圧力上昇率との関係(初期温度と酸素体積モル濃度一定, 1→3)

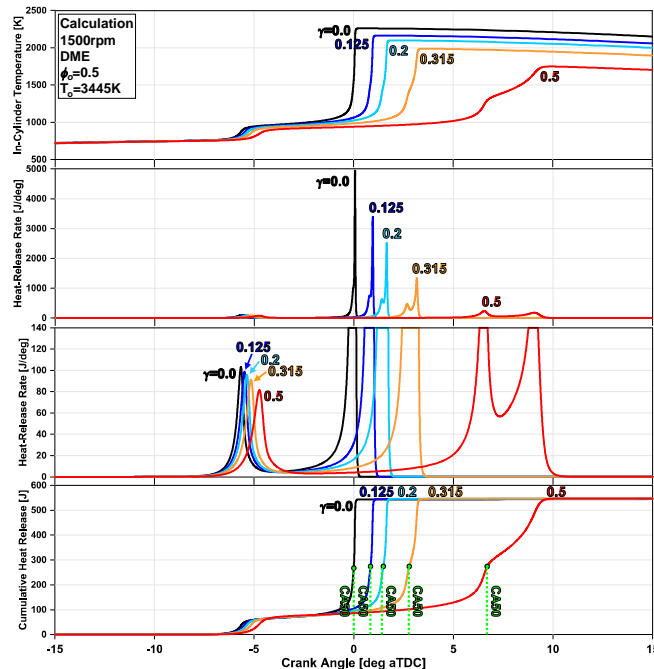


図4-18 EGR 率による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化(初期温度と酸素体積モル濃度一定, 1→3)

4. 3. 4. EGR および過給による燃焼位相の変化と最大圧力上昇率との関係

図4-18に EGR 率による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化を示す(初期温度と酸素体積モル濃度一定, 1→3). 図4-19 EGR 率と燃焼位相との関係を示す(初期温度と酸素体積モル濃度一定, 1→3). 図4-20 EGR 率による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を示す(初期温度と酸素体積モル濃度一定, 1→3).

4. 4. 初期温度と初期圧力の調節により燃焼位相が一定の場合

図4-21に燃焼位相を揃えた時に1→2と1→3の場合における初期温度, 初期圧力, 酸素体積モル濃度, 比熱比, 熱容量の変化を示す.

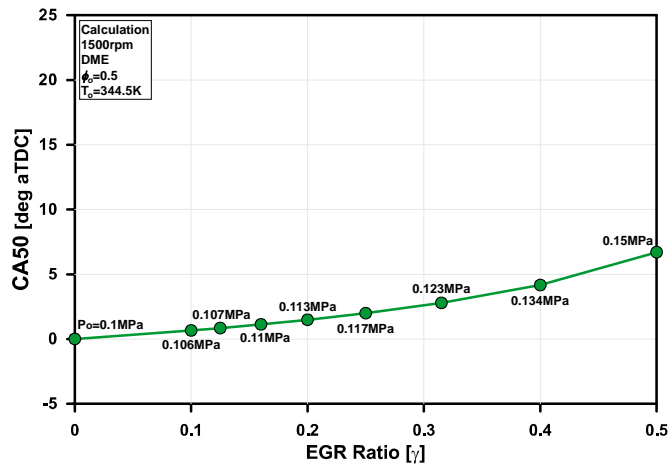


図4-19 EGR 率と燃焼位相との関係(初期温度と酸素体積モル濃度一定, 1→3)

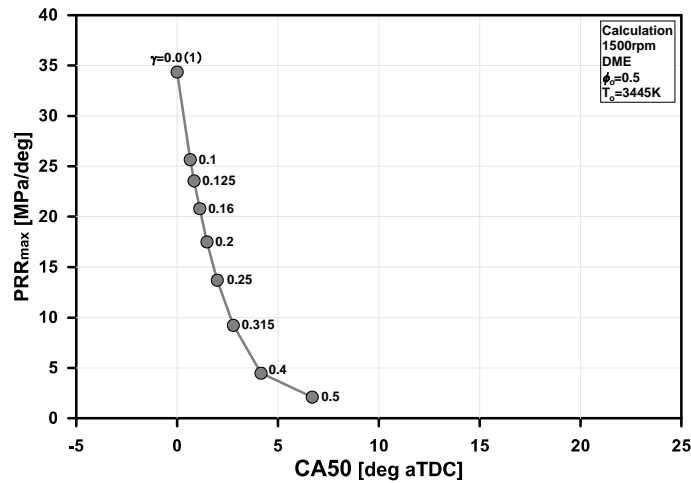


図4-20 EGR 率による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響(初期温度と酸素体積モル濃度一定, 1→3)

4. 4. 1. EGR が最大圧力上昇率に及ぼす影響

図4-22に EGR 率による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化を示す(燃焼位相一定, 1→2). 図4-23に最大圧力上昇率に及ぼす EGR および燃焼位相の影響(1→2)を示す.

4. 4. 2. EGR および過給が最大圧力上昇率に及ぼす影響

図4-24に EGR 率による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化を示す(燃焼位相と酸素体積モル濃度一定, 1→3). 図4-25に最大圧力上昇率に及ぼす EGR および燃焼位相の影響(1→3)を示す. 図4-26に燃焼位相を揃えた時に(CA50=0deg aTDC)EGR および過給が HCCI 燃焼の最大圧力上昇率に及ぼす影響を示す.

4. 5. EGR および過給が HCCI 燃焼に及ぼす影響

図4-27に燃焼位相を揃えた時の条件1, 2, 3における予混合気の組成および体積モル濃度の比較を示す.

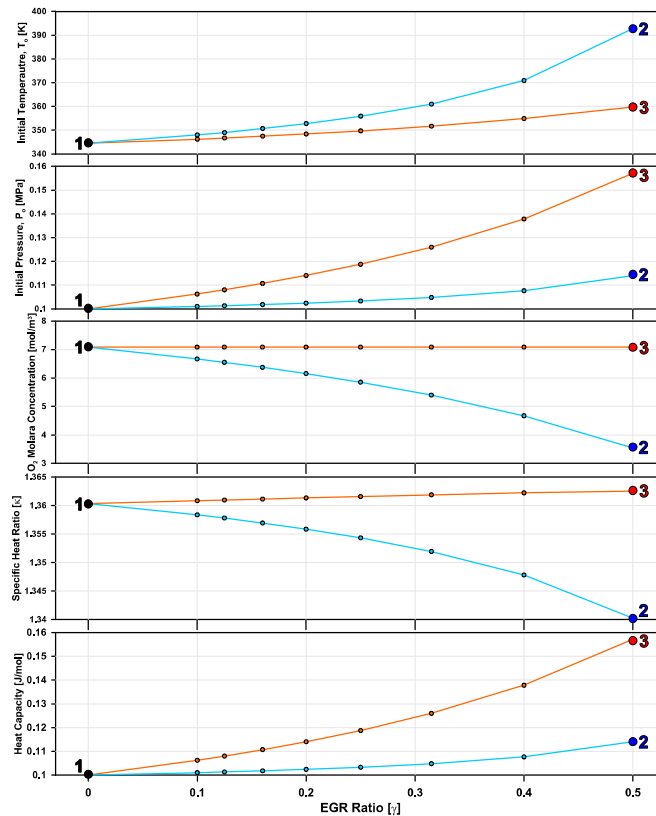


図4-21 燃焼位相を揃えた時に1→2と1→3の場合における初期温度, 初期圧力, 酸素体積モル濃度, 比熱比, 熱容量の変化

4. 5. 1. HCCI 燃焼および寄与度行列の比較

図4-28に燃焼位相を揃えた時の条件1, 2, 3における燃焼室内ガスの圧力, 温度, 熱発生率の比較を示す. 図4-29に燃焼位相を揃えた時の条件1, 2, 3における熱発生率を比較する. 図4-30に燃焼位相を揃えた時の条件1と2における寄与度行列を比較する. 図4-31に燃焼位相を揃えた時の条件1と3における寄与度行列を比較する.

4. 5. 2. 総発生率および各素反応の熱発生率の比較

図4-32に燃焼位相を揃えた時の条件1, 2, 3における熱発生に大きく寄与する素反応の熱発生率を比較する.

4. 6. 第4章のまとめ

想定供試燃料として DME を用いて素反応数値計算によって, EGR ガスを導入すると圧縮開始時の燃焼室内ガスの組成変わることによって HCCI 燃焼がどのように変化するか, またその要因が何であるかを調査した. その結果, EGR ガスに含まれる三原子分子である H_2O と CO_2 の影響で比熱比が下がることで圧縮行程のピストンによる燃焼室内ガスの温度上昇が小さくなり, 高温酸化反応の開始時期を遅延化させ, また膨張行程で温度が下がることによって失火が起こると確認できた. また, 燃焼位相を揃えるために EGR ガス量の増加に伴って初期温度を上げても, 最大圧力上昇率の低減効果があることが確認できた. これは, EGR ガスによって比熱比が下がることと, 酸素の体積モル濃度が下がるため

あると考えられる。燃料体積モル濃度が一致の条件で過給(初期圧力の上昇)をすると酸素の体積モル濃度が増加し、比熱費が最も下がり熱容量が増加するため、圧力上昇率を抑えることが可能となった。酸素の体積モル濃度を一定のまま EGR に加えて過給をすると、燃料の体積モル濃度は変わらないが、燃焼室内ガスの密度が上がることで HCCI 燃焼がうまく起こり、最大圧力上昇率の上昇を抑えることが確認できた。つまり、酸素の体積モル濃度が一定で燃料の体積モル濃度が増えても、EGR ガスによって比熱比が下がること、過給によって熱容量が増えることによって圧力上昇率を抑えることができる。下に HCCI 燃焼に及ぼす EGR および過給の影響を整理する。

・EGR の影響

1. 燃焼室内への EGR ガスの導入により燃焼室内ガスの比熱比が下り、圧縮行程による燃焼室内ガスの温度

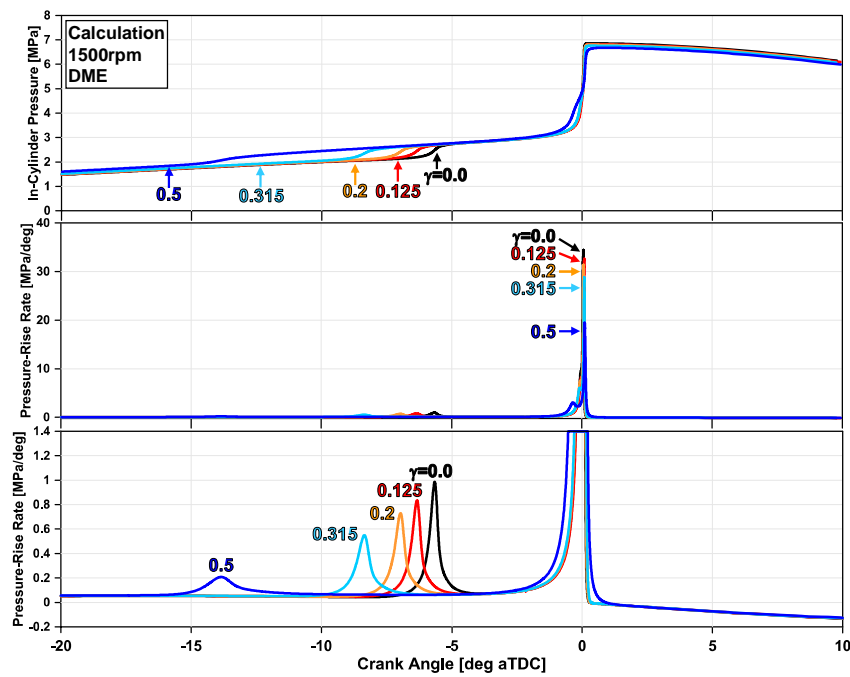


図4-22 EGR 率による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化(燃焼位相一定, 1→2)

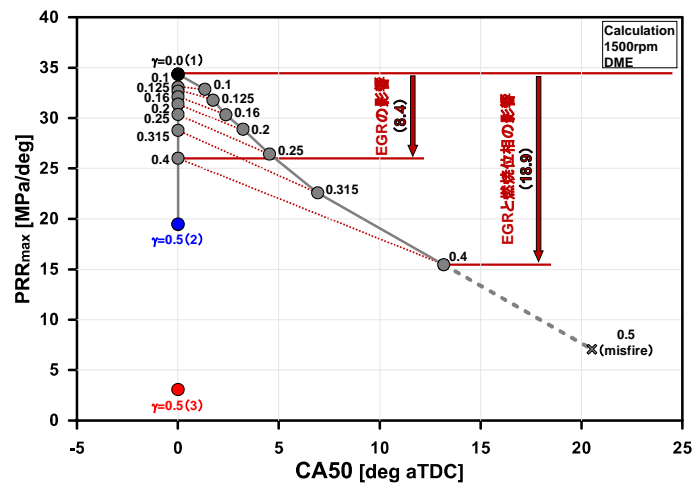


図4-23 最大圧力上昇率に及ぼす EGR および燃焼位相の影響(1→2)

の上昇が小さくなることで燃焼位相が遅延する。これによりHCCI燃焼位相が膨張行程入り、燃焼室内ガス温度が下がることによって失火が起こる。また EGR ガスの導入による燃焼室内ガスの比熱比の減少は、全燃焼過程かけて影響を与えるため、HCCI 燃焼の熱発生を抑えることで燃焼位相が最も遅延したする。

2.過給(初期圧力の増加)なし、燃焼室内に EGR ガスを導入すると EGR ガス増える分酸素がなくなるため、低温酸化反応および高温酸化反応がうまく起こらないため燃焼位相を遅延する一つの原因でいた。

3.HCCI 燃焼に及ぼす燃焼位相の影響を消し、EGR ガスのみの影響を確認するため初期温度と初期圧力により燃焼位相を揃えるとき、EGR 率の増加に伴って初期温度の上昇により反応速度が早くなっても、EGR ガスによる比熱比の減少と酸素体積モル濃度が下がることで最大圧力上昇率が低減した。

・EGR および過給の影響

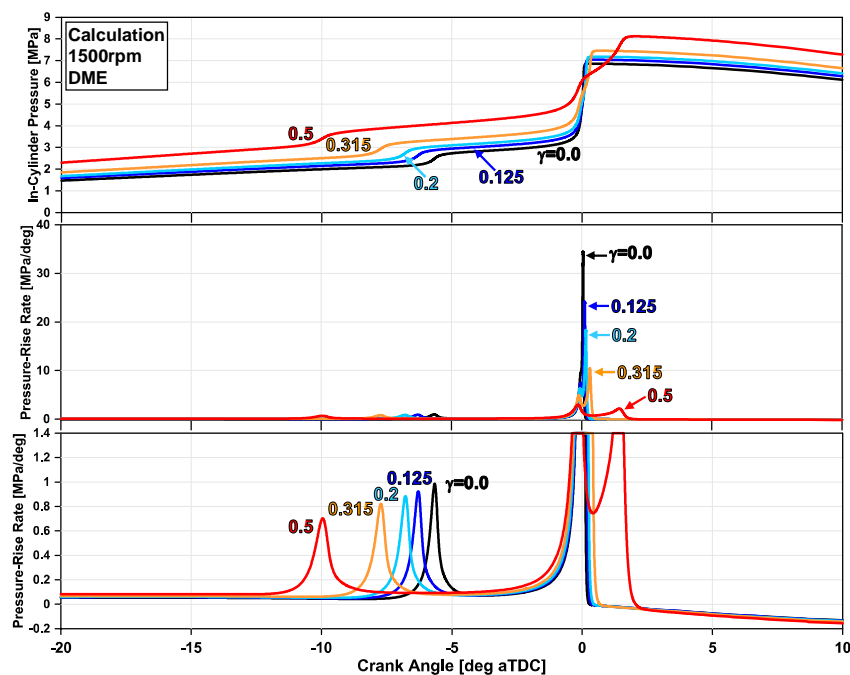


図4-24 EGR 率による燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴の変化 (燃焼位相と酸素体積モル濃度一定, 1→3)

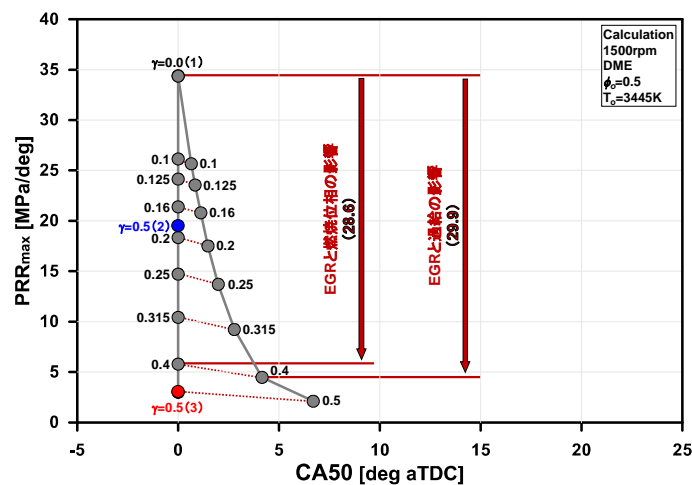


図4-25 最大圧力上昇率に及ぼす EGR および燃焼位相の影響(1→3)

-燃焼室内に EGR ガスを導入しながら過給(初期圧力の増加)をすると、酸素体積モル濃度を一定のまま EGR 率に加えるため、燃焼室内の密度が上がることで HCCI エンジンの出力が上がり、EGR ガスによって比熱比が下がることと過給によって熱容量が増えることによって最大圧力上昇率を抑えることができる。

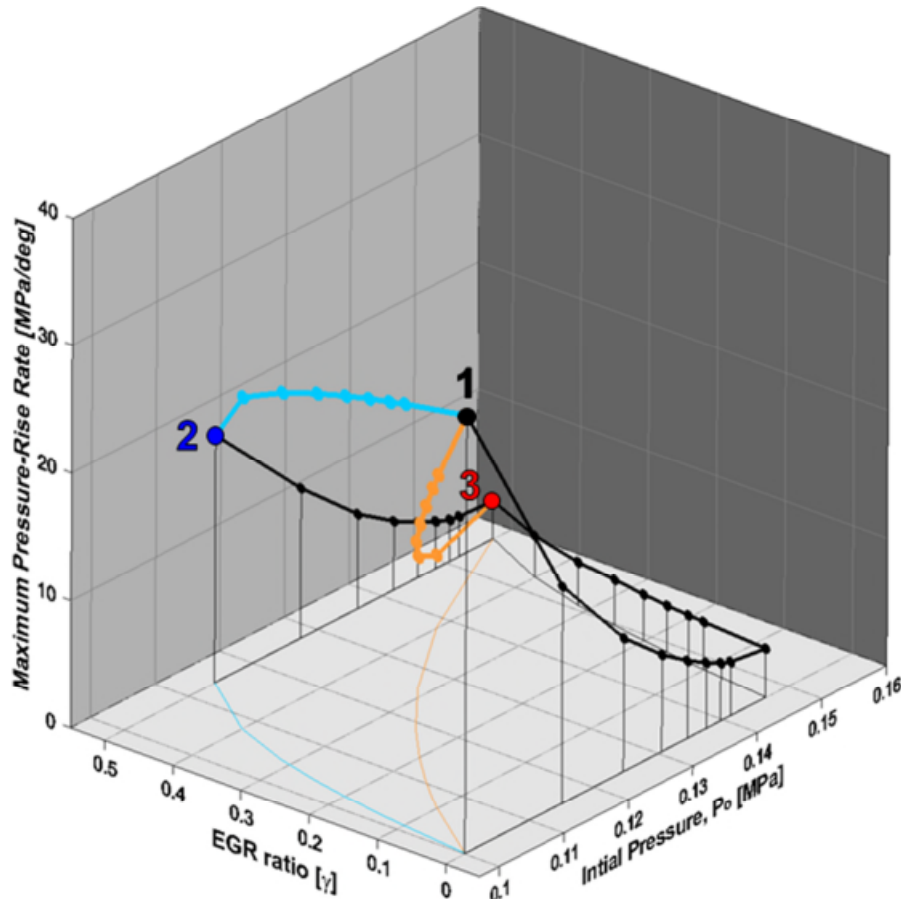


図4-26 燃焼位相を揃えた時に(CA50=0deg aTDC)EGR および過給が HCCI 燃焼の最大圧力上昇率に及ぼす影響

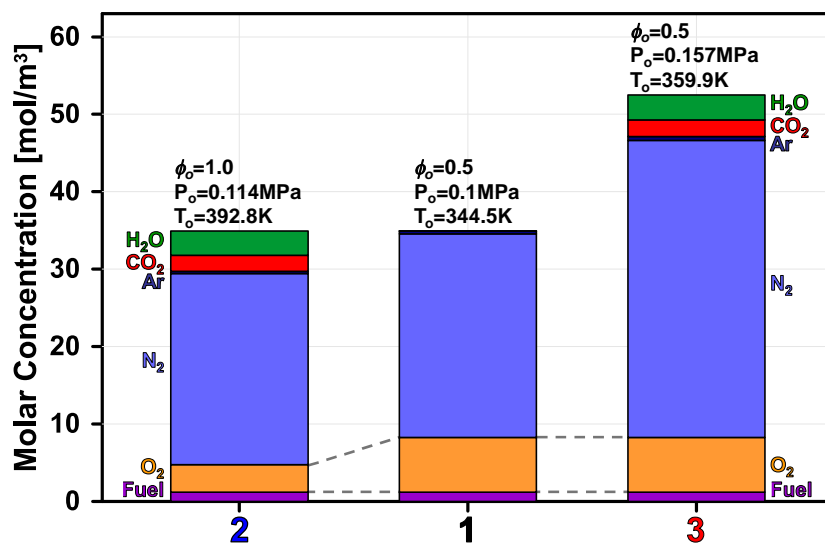


図4-27 燃焼位相を揃えた時の条件1, 2, 3における予混合気の組成および体積モル濃度の比較

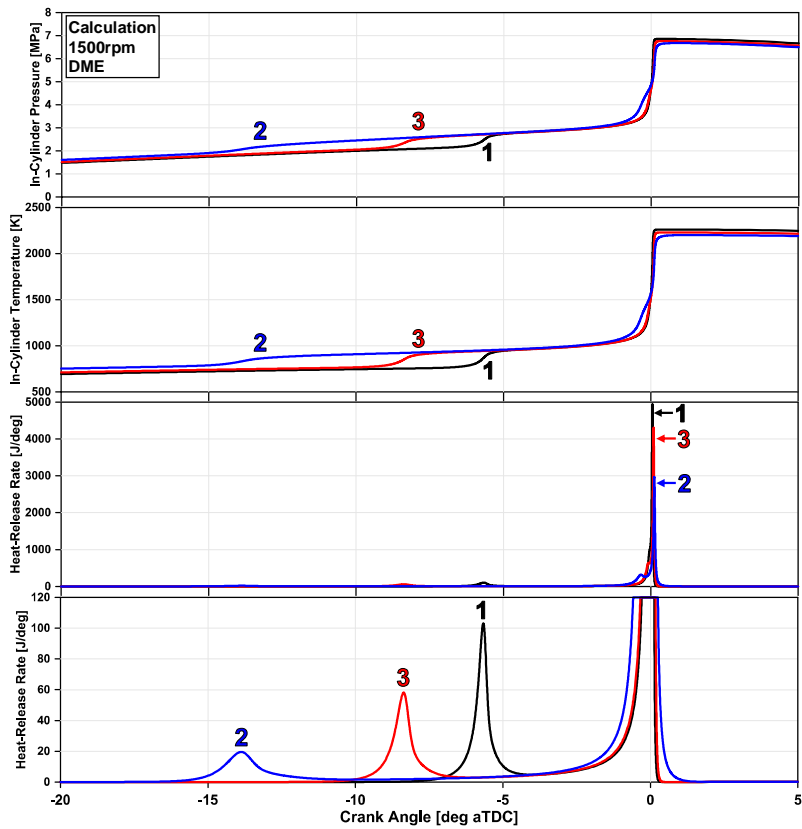


図4-28 燃焼位相を揃えた時の条件1, 2, 3における燃焼室内ガスの圧力, 温度, 熱発生率の比較

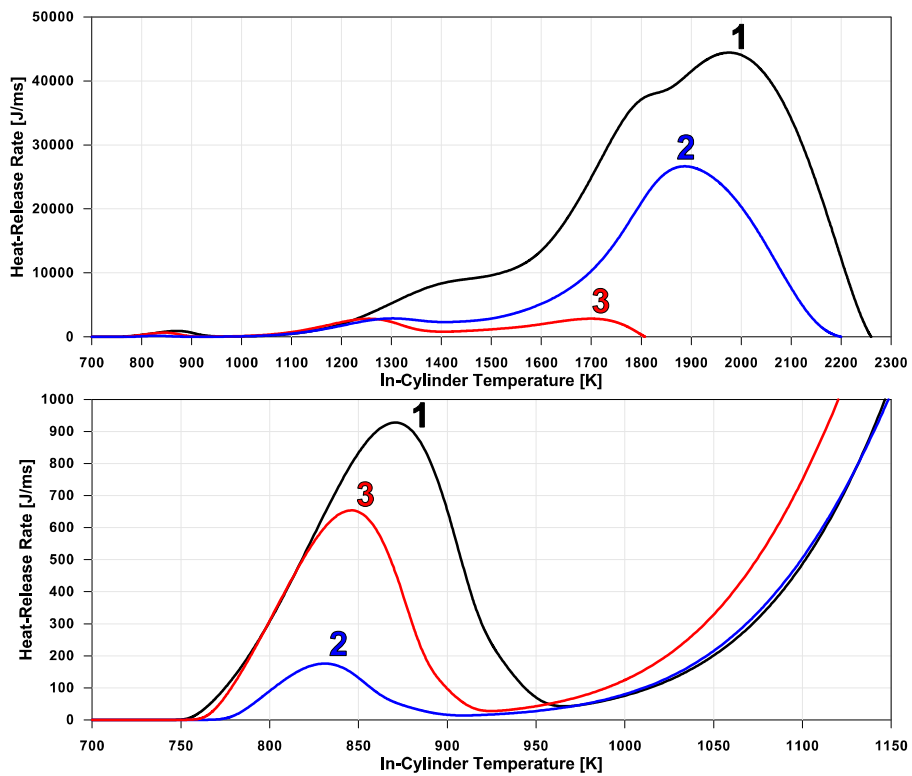


図4-29 燃焼位相を揃えた時の条件1, 2, 3における熱発生率の比較

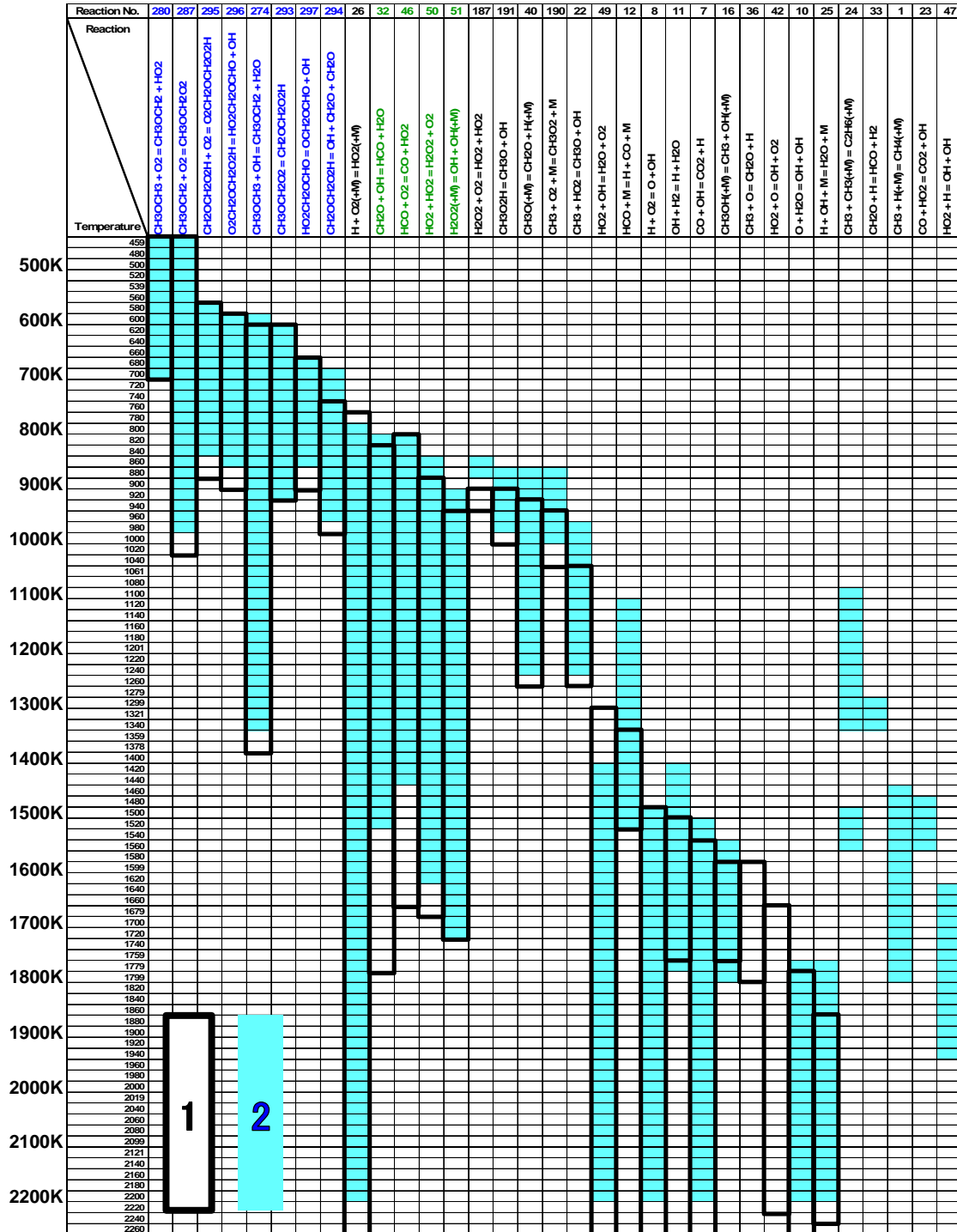


図4-30 燃焼位相を揃えた時の条件1と2における寄与度行列の比較

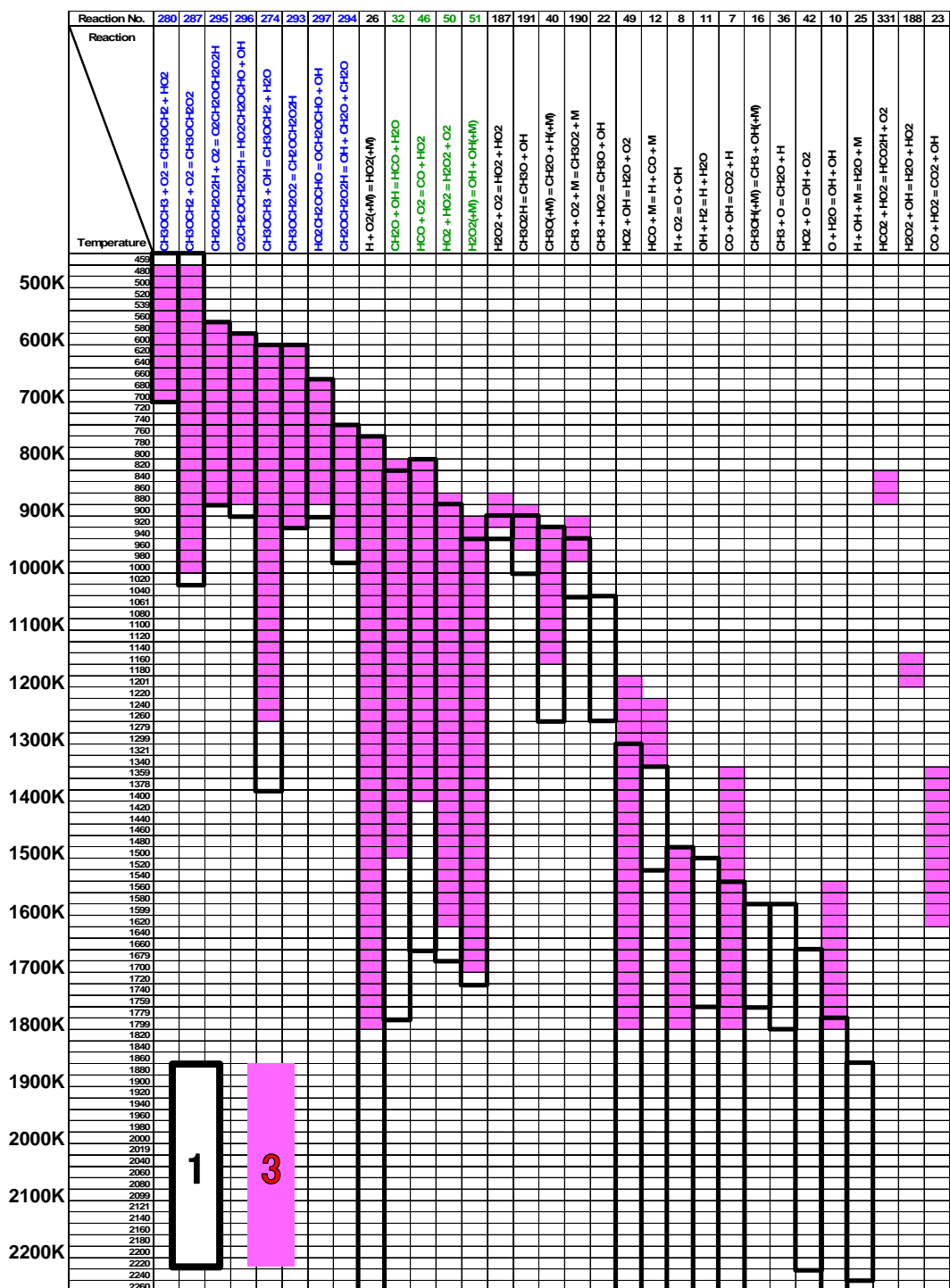


図4-31 燃焼位相を揃えた時の条件1と3における寄与度行列の比較

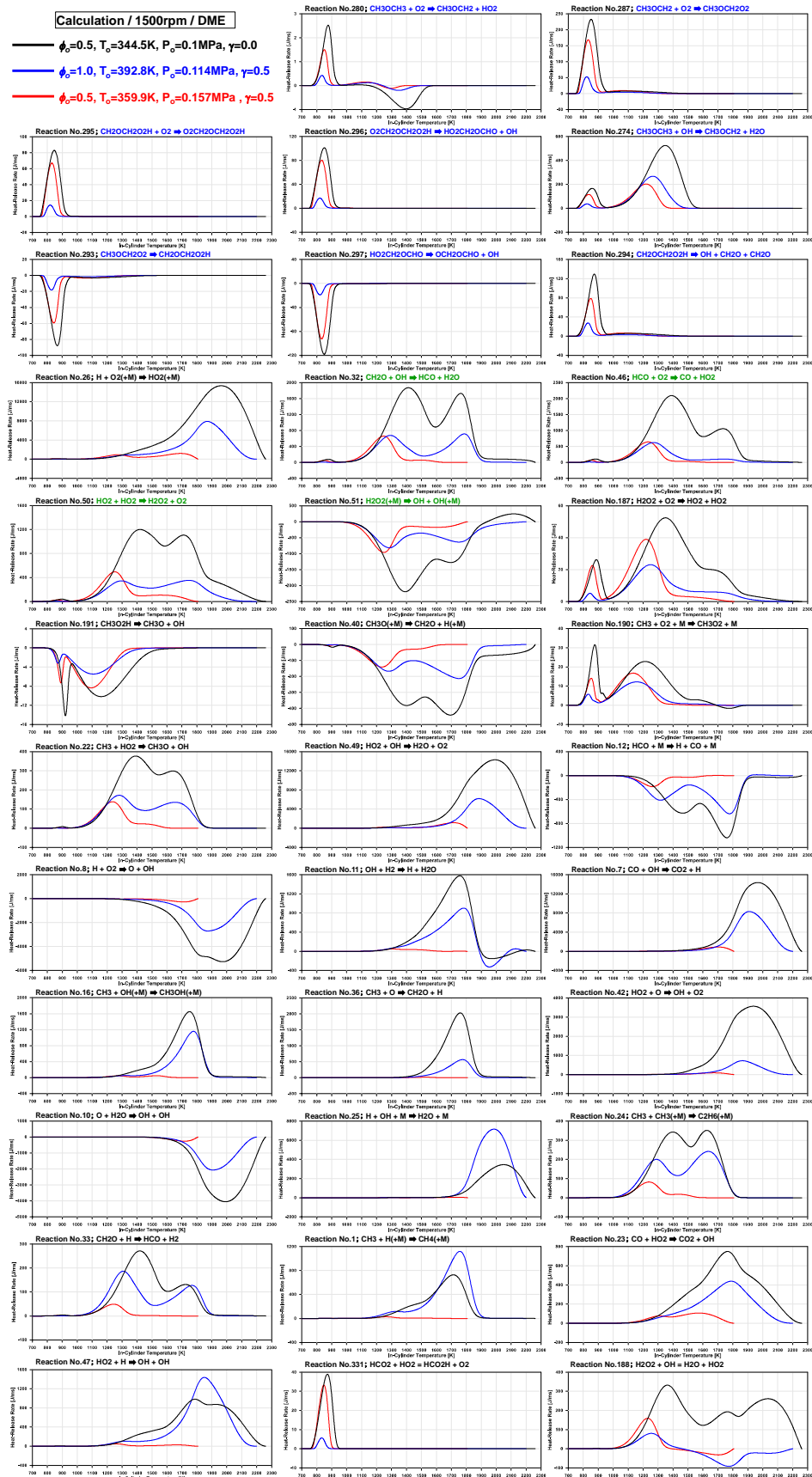


図4-32 燃焼位相を揃えた時の条件1, 2, 3における熱発生に大きく寄与する素反応の熱発生率の比較

第5章 素反応数値計算に基づく燃料の着火特性が HCCI 燃焼に及ぼす影響の解析


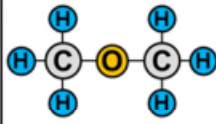
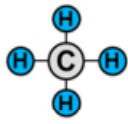

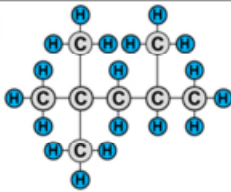
HCCI エンジンはガソリンエンジンやディーゼルエンジンとは違って、ジメチルエーテル(Dimethyl ether; DME)やメタン(Methane)等の気体燃料からノルマル・ヘプタン(Normal heptane; n-Heptane)やイソオクタン(Iso octane; i-Octane)等の液体燃料まで様々な燃料が使える長所がある。しかし、HCCI 燃焼は燃料固有の自己着火温度および化学反応機構に依存するため、HCCI エンジンに様々な燃料を適用するためには素反応数値計算に基づいて燃料種毎に燃料の着火特性が HCCI 燃焼に及ぼす影響を解析する必要がある。

第5章では、DME, Methane, n-Heptane, i-Octane を想定供試燃料として選択し、まずショックチューブにおける各想定供試燃料の着火遅れを比較する。次に燃焼位相を揃えた時において、HCCI エンジンにおける各想定供試燃料の燃焼特性を示し、HCCI 燃焼による圧力上昇率と熱発生率との関係を確認する。また熱発生率は燃焼時の圧力上昇率に大きく影響を与えるため、各想定供試燃料に対する寄与度行列を用いて、HCCI 燃焼の熱発生に寄与する重要な素反応を調査するとともに、各素反応の寄与度を把握する。続いて初期条件である初期温度、初期圧力、当量比、EGR 率の変化が燃焼位相および最大圧力上昇率(Maximum Pressure-Rise Rate: PRR_{max})に及ぼす影響を確認するとともに、初期条件、燃焼位相、最大圧力上昇率との関係を把握する。最後に各想定供試燃料において、EGR および過給によって変化する燃焼位相を揃えるため要求される初期温度を比較し、EGR および過給が各想定供試燃料の HCCI 燃焼における最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較する。

5. 1. 想定供試燃料

5. 1. 1. 各想定供試燃料の反応モデル

本研究では Dimethyl ether (DME, CH_3OCH_3), Methane (CH_4), Normal heptane (n-Heptane, C_7H_{16}), Iso-octane (i-Octane, C_8H_{18})を想定供試燃料として選択する。各想定供試燃料の化学構造および反応モデルを図5-1に示す。DME の化学式は CH_3OCH_3 で示される。一般に酸素原子にアルキル基が2個結合したものをエーテルというが、 CH_3 が 2 つ(ラテン語で1はモノ(Mono-)、2はジ(Di-)、3はトリ(Tri-)結合するの

	DiMethyl Ether (DME)	Methane	Normal Heptane (n-Heptane)	Iso Octane (i-Octane)
化学構造	CH_3OCH_3	CH_4	C_7H_{16}	C_8H_{18}
分子構造 				
素反応モデル	*LLNL[23]	**GRI-Mech3.0[24]	*LLNL_Ver.3.1[56]	*LLNL_Ver.3.0[85]
化学種数	79	53	654	874
素反応数	351	325	2827	3796
熱力学データ	*LLNL	**GRI	*LLNL	*LLNL

*LLNL: Lawrence Livermore National Laboratory / **GRI: Gas Research Institute

図5-1 各想定供試燃料の化学構造および反応モデル

で、ジメチルエーテルとなる。常温では無色無臭の気体で、灯油に近い燃焼特性と液化石油ガス(LPG)に近い物性を持つ。Methaneの化学式は CH_4 で示される。最も単純な構造の炭化水素で、天然ガスの主成分をなしており、石炭ガスにも25~30%含まれる。n-Heptaneの化学式は C_7H_{16} で示される。直鎖アルカンであり、オクタン価0の指標となる物質である。外見は無色の液体で、揮発性を有し石油に似た臭いを示す。i-Octaneの化学式は C_8H_{18} で示され2,2,4-トリメチルペンタンである。ガソリンのアンチノック性測定用の標準燃料で、オクタン価100と規定されている。

DME[23], n-Heptane[56], i-Octane[85]はLawrence Livermore National Laboratory(LLNL)の反応モデルを使用する。LLNLにはMethane[24]の反応モデルがないため、Gas Research Institute(GRI)の反応モデルを使用する。各反応モデルはショックチューブ、急速圧縮装置、反応器等の実験に基づいて作られ検証されている。

5.1.2. 各想定供試燃料の着火遅れの比較

各想定供試燃料の化学構造が全く違うため、各想定供試燃料の着火特性も異なると考えられる。各想定供試燃料の着火特性を把握するため、初期圧力(P_0)が4.0MPa、当量比が1.0の条件において初期温度500K(1000/T=2.0)~1428.571K(1000/T=0.7)の範囲で素反応数値計算を行い、ショックチューブでの各想定供試燃料の着火遅れを図5-2で比較する。まず割り低い初期温度の範囲では、全想定供試燃料について初期温度の上昇とともに着火遅れが短くなる。特に初期温度の上昇によるDMEの着火遅れの変化が大きいたことが確認できる。初期温度が約740K以上になると、DME, n-Heptane, i-Octaneの着火遅れでは、初期温度が上昇しても着火遅れが長くなるNTC(Negative Temperature Coefficient)領域が現れる。しかしNTC領域が現れる初期温度の範囲とNTC領域における着火遅れの変化は燃料種により異なる。まずn-HeptaneのNTC領域を確認すると、最も高い初期温度の範囲でNTC領域が現れ、NTC領域の初期温度の範囲も広い。

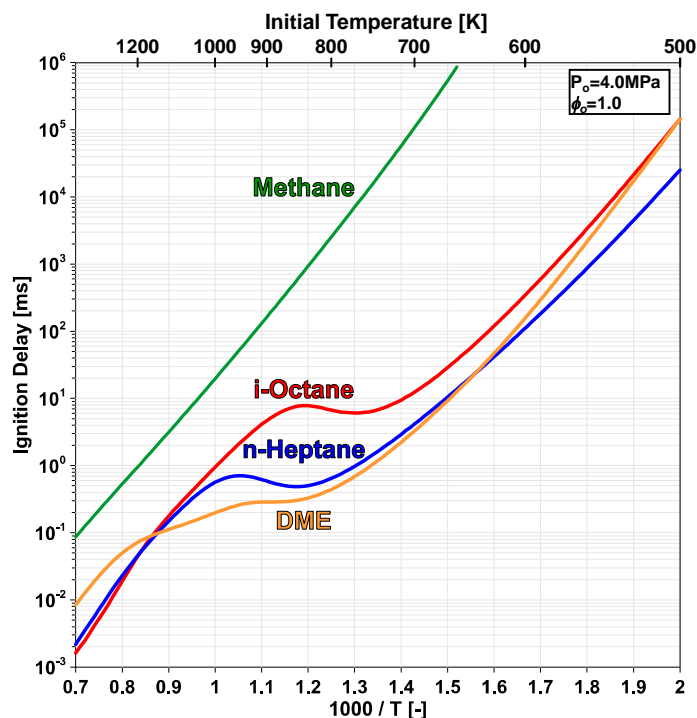


図5-2 各想定供試燃料の着火遅れの比較

また NTC 領域における初期温度の上昇による着火遅れの変化も大きい。DME の NTC 領域を n-Heptane の NTC 領域と比べると、割り高い初期温度の範囲で NTC 領域が現れるのは同じであるが、NTC 領域における初期温度の上昇による着火遅れの変化は小さい。また NTC 領域が終わった後、高い初期温度の範囲でも初期温度の上昇による着火遅れの減少が小さい。i-Octane の NTC 領域を確認すると、割に低い初期温度の範囲(約 750K)で NTC が現れ、n-Heptane の NTC 領域のように、NTC 領域の初期温度の範囲が広くて、NTC 領域における初期温度の上昇による着火遅れの変化も大きい。また NTC 領域が終わる直後の初期温度までは、DME と n-Heptane の着火遅れに比べて長い、高い初期温度の範囲では初期温度の上昇により急峻に短くなって、初期温度 1428.571K(1000/T=0.7)では最も短くなるのが確認できる。続いて Methane における初期温度の上昇による着火遅れの変化を確認する。Methane の着火遅れは DME、n-Heptane、i-Octane の着火遅れに比べて、全初期温度の領域において最も長い。また NTC 領域が現れずに着火遅れが初期温度の上昇にほぼ比例して短くなる特徴がある。

5. 1. 3. 各想定供試燃料の HCCI 燃焼の比較(燃焼位相を揃えた時)

ショックチューブにおける着火遅れの比較により各想定供試燃料の着火特性を確認したため、HCCI エンジンにおける各想定供試燃料の燃焼特性を確認および比較する。エンジン回転速度が 1500rpm、当量比が 0.5、初期圧力(P_0)が 0.1MPa の条件で、初期温度により燃焼位相(CA50)を 0deg aTDC(TDC)に揃えた時の燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率を図3-8で比較する。まず各想定供試燃料において燃焼位相を CA50=0deg aTDC に揃えるために要求される初期温度を確認すると、DME の初期温度は 344.5K、Methane の初期温度は 570.6K、n-Heptane の初期温度は 361.7K、i-Octane の初期温度は 502.2K である。まず各想定供試燃料の HCCI 燃焼における燃焼室内ガスの圧力を比較すると、燃焼位相を揃えるために要求される初期温度が低ければ低いほど最大圧力が高い。まず初期温度により燃焼位相を揃えているため、燃焼室内ガスの圧力に及ぼす燃焼位相の影響はほとんどないと考えられる。初期圧力と当量比が一定の条件で燃焼位相を揃えるために初期温度が下がると、圧縮開始時の燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度が上がることで、増加した燃料と酸素の酸化反応により燃焼室内ガスの圧力が増加する。ただし高温酸化反応による燃焼室内ガスの圧力上昇率のピークは Methane、i-Octane、DME、n-Heptane の順番である。図3-8により説明したように、初期温度が上がると高温酸化反応による燃焼室内ガスの圧力上昇率のピークは高くなる傾向がある。しかし n-Heptane の場合、燃焼位相を揃えるために要求される初期温度が DME の初期温度より高いにもかかわらず、n-Heptane の HCCI 燃焼による燃焼室内ガスの圧力上昇率のピークが DME の HCCI 燃焼による燃焼室内ガスの圧力上昇率のピークより高い。HCCI 燃焼による燃焼室内ガスの圧力上昇率のピークというのは、主に初期温度により変わり、圧縮開始時の燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度の影響も受けることが確認できた。続いて低温酸化反応による燃焼室内ガスの圧力上昇率を比較すると、まず低温酸化反応による圧力上昇率は HCCI エンジンにおける燃焼の中で低温酸化反応が現れる DME と n-Heptane のみで確認できた。ただし n-Heptane の低温酸化反応による圧力上昇率を DME の低温酸化反応による圧力上昇率と比べると、低温酸化反応による圧力上昇率のピークが低く発生時期が進角している。

各想定供試燃料の HCCI 燃焼における燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の履歴が異なる原因を明らかにするため、各想定供試燃料の HCCI 燃焼における燃焼室内ガスの温度、熱発生率、積算熱発生図

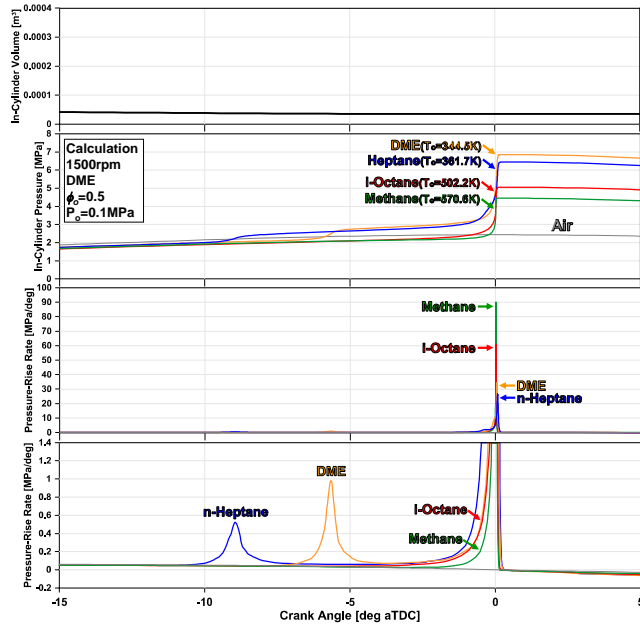


図5-3 各想定供試燃料の HCCI 燃焼における燃焼室内ガスの圧力および圧力上昇率の比較

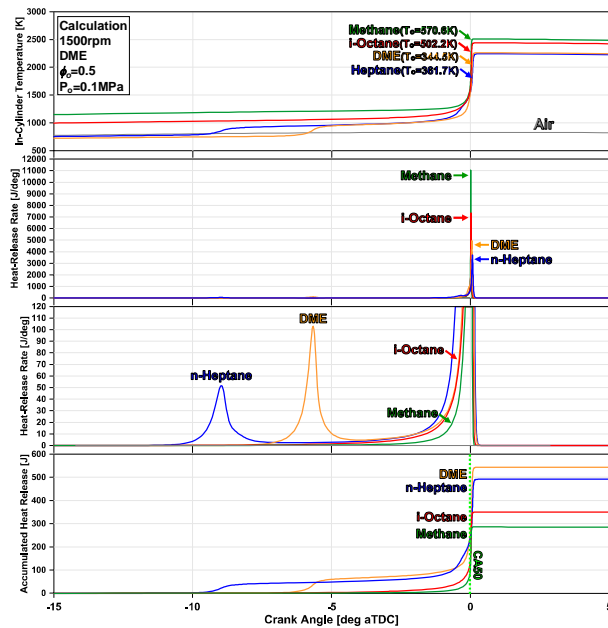


図5-4 各想定供試燃料の HCCI 燃焼における燃焼室内ガスの温度, 熱発生率, 積算熱発生量の比較

5-4で比較する。まず各想定供試燃料の HCCI 燃焼による燃焼室内ガスの最高到達温度を確認すると、Methane, i-Octane, DME, n-Heptane の順番である。図3-10により示したように、初期温度が高くなると最高到達温度も高くなる関連性があり、Methane と i-Octane の場合、燃焼位相を揃えるために要求される初期温度が高いため、HCCI 燃焼が高い燃焼室内ガス温度で行われるとともに燃焼室内ガスの最高到達温度も高い。それにより Methane と i-Octane における HCCI 燃焼の反応速度が早くなることで、高温酸化反応による熱発生率のピークが高くなる。しかし n-Heptane の場合、DME の初期温度より高いにもかかわらず、燃焼室内ガスの最高到達温度が DME より低い。それで n-Heptane における HCCI 燃焼の反応速度が DME における HCCI 燃焼の反応速度より遅くなると考えられ、高温酸化反応による熱発生率のピークも DME より低く

なり、それにより熱発生率のピークが低くなったと言える。n-Heptane の低温酸化反応による圧力上昇率が DME の低温酸化反応による圧力上昇率より、圧力上昇率のピークが低く発生時期が進角していることを説明するため、n-Heptane と DME の低温酸化反応による熱発生率を確認する。燃焼室内ガスの圧力上昇率と同様の傾向で、n-Heptane の低温酸化反応による熱発生率のピークが低くて発生時期が進角している。これは n-Heptane の燃焼位相を揃えるために要求される初期温度が DME の初期温度より高いため、低温酸化反応が起こる燃焼室内ガスの温度までは早く達するが、圧縮開始時の燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度が低いことで低温酸化反応による熱発生は少ないのが原因である。また初期温度により圧縮開始時の燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度が減少することで、燃焼位相を揃えるために要求される初期温度が低ければ低いほど、積算熱発生が高くなることも説明できる。

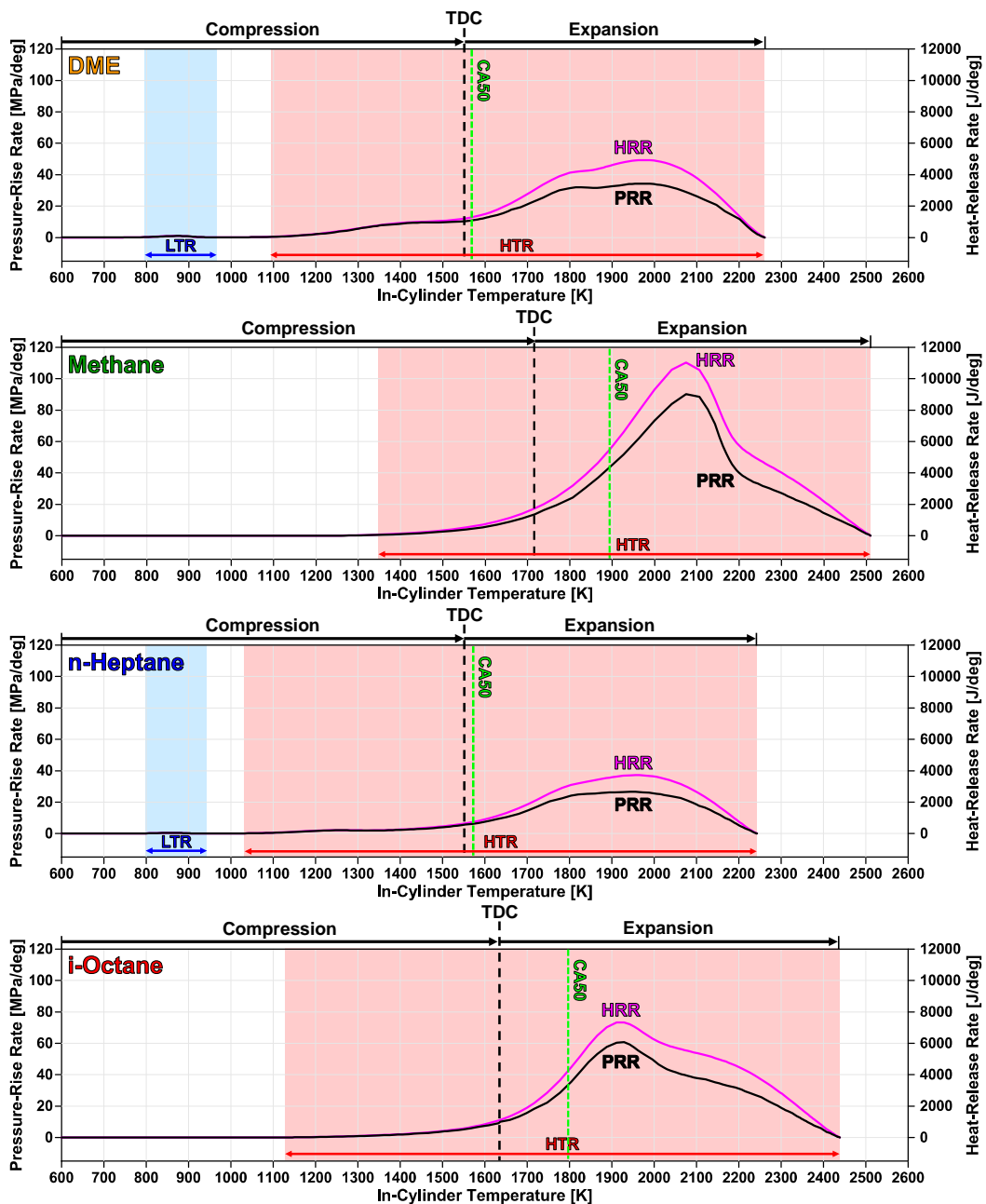


図5-5 各想定供試燃料における HCCI 燃焼における圧力上昇率と熱発生率との関係

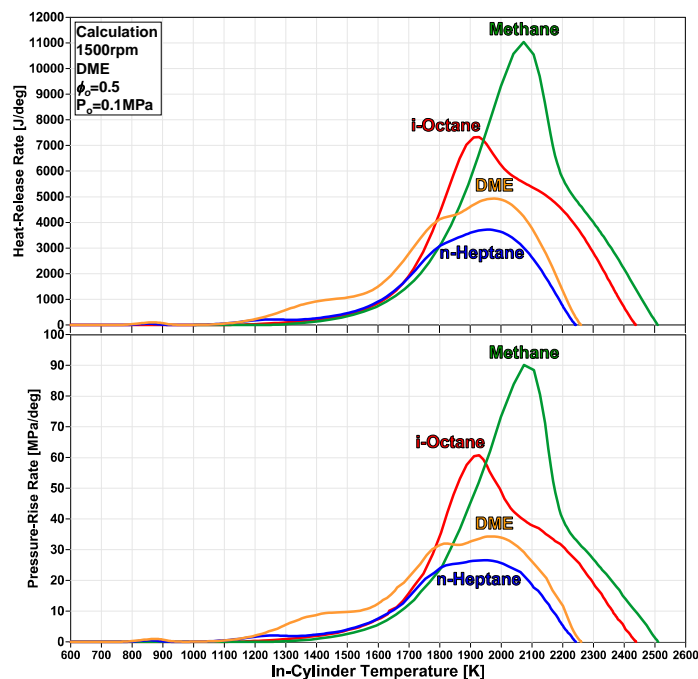


図5-6 各想定供試燃料の HCCI 燃焼における熱発生率と圧力上昇率の比較

図5-3の圧力上昇率と図5-4の熱発生率で説明したように、各想定供試燃料の HCCI 燃焼による燃焼室内ガスの圧力上昇率は熱発生率により大きく変わるため、各想定供試燃料における HCCI 燃焼における圧力上昇率と熱発生率との関係を図5-5で確認する。まず圧力上昇率は燃料の着火特性とは関係なく、熱発生率に大きく影響を受けることが確認できる。しかし高温酸化反応と低温酸化反応の開始温度および終了温度が、燃料の着火特性によって違うため、各想定供試燃料における HCCI 燃焼における圧力上昇率と熱発生率の履歴も異なる。特に Methane と i-Octane における HCCI 燃焼のように、低温酸化反応はなく高温酸化反応のみであるという HCCI 燃焼の共通点があったとしても、燃料の着火特性が違うことで圧力上昇率と熱発生率の履歴が最も異なる。次に高温酸化反応と低温酸化反応の開始温度および終了温度を比較する。まず低温酸化反応がない Methane と i-Octane における HCCI 燃焼の高温酸化反応が割に高い温度で起こることが確認できる。また i-Octane における HCCI 燃焼の高温酸化反応が低い温度から始まり、終了温度が高いため高温酸化反応が起こる温度範囲が最も広い。n-Heptane における HCCI 燃焼の高温酸化反応は最も低い温度で始まり、DME における HCCI 燃焼の高温酸化反応の終了温度とほぼ同じで終わる。また n-Heptane における低温酸化反応の開始温度は DME における低温酸化反応の開始温度とほぼ同じであるが、低温酸化反応が起こる温度範囲が狭い。

各想定供試燃料の HCCI 燃焼における熱発生率と圧力上昇率との関係を明確に確認するため、図5-6に熱発生率と圧力上昇率を別々に比較する。各想定供試燃料の着火特性が異なるため、熱発生が生じる温度が最も異なる。Methane と i-Octane の熱発生率は、熱発生率のピーク後の温度でも熱発生が続いて起こり、熱発生率の温度範囲が n-Heptane と DME の熱発生率の温度範囲より広い。n-Heptane と i-Octane の熱発生率を比較すると、約 1700K までの履歴がほぼ同じであるのが、約 1700K 以後の熱発生率履歴は非常に違うことが確認できる。DME の熱発生率は約 1200K から約 1800K まで他の燃料の熱発生より高い特徴がある。それにより、熱発生率のピークにより圧力上昇率がピークになる温度も違う。Methane の HCCI 燃焼により圧力上昇率がピークになる温度は 2074.182K で最も高い。i-Octane の HCCI 燃焼により圧力上昇率がピーク

になる温度は 1928.778K で最も低い. n-Heptane と DME の HCCI 燃焼により圧力上昇率がピークになる温度は 1943.604 K と 1963.042K である.

5. 1. 4. 各想定供試燃料の HCCI 燃焼における寄与度行列

前節では各想定供試燃料においての HCCI 燃焼における圧力上昇率が燃料の着火特性に関係なく主に熱発生率に影響を受けることを確認した. 3. 1節でも説明したように, HCCI 燃焼の熱発生は様々な素反応の熱発生の結果であり, 燃焼室内ガスの温度の上昇とともに進行していくことから, 様々な素反応の中で熱発生率に大きく寄与する重要な素反応を把握の必要である. しかし素反応モデルには普通多くの素反応により構成してあるため, HCCI 燃焼の熱発生に大きく寄与する素反応を探すのが難しい. それで本節では, 3. 1節に提案した寄与度行列(Contribution Matrix)を用いて, Methane, n-Heptane, i-Octane の HCCI 燃焼における熱発生率に大きく寄与する重要な素反応は探すことともに, 熱発生率における各素反応の寄与度を把握する.

a) メタン(Methane)

図5-6の Methane の熱発生率に関する寄与度行列が図5-7である. 横軸は Methane の HCCI 燃焼に関する素反応であり, 縦軸は 20K の温度間隔で示した燃焼温度である. まずセルの中で色が入っているところはある燃焼温度で熱発生に 3%以上寄与する素反応を意味する. 色が入っているセルの中で, 茶色は各燃焼温度の熱発生に最も寄与する素反応を, 赤色は二番目に寄与する素反応を, オレンジ色は三番目に寄与する素反応を示している. 黄色は各燃焼温度の熱発生に 3%以上寄与する素反応を意味する. 寄与度行列により Methane の素反応モデルにある 325 個の素反応の中で, Methane の HCCI 燃焼における熱発生に大きく寄与する 24 個の重要な素反応が把握できる. また各素反応がどんな燃焼温度でどのくらい寄与しているのかも確認できる. ここで注目することは寄与度行列により把握した熱発生に 3%以上寄与する 24 個の素反応でも最も寄与する素反応は 11 個である(茶色, 赤色, オレンジ色のセル). 特に燃焼温度 577K から 1000K までは $\text{CH}_4 + \text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{CH}_3$ の素反応が, 燃焼温度 1020K から 1060K までは $\text{CH}_3 + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{CH}_2\text{O}$ の素反応が, 燃焼温度 1200K から 1840K までは $\text{HO}_2 + \text{CH}_3 = \text{OH} + \text{CH}_3\text{O}$ と $\text{HCO} + \text{O}_2 = \text{HO}_2 + \text{CO}$ の素反応が, 燃焼温度 1860K から 2500K までは $\text{HO}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$ の素反応が各燃焼温度範囲で熱発生に大きく寄与している. しかし, 寄与度行列には各燃焼温度での熱発生率に寄与する素反応および各素反応の寄与度は確認できるが, 他の燃焼温度との比較ができない. 燃焼温度の進行に対する素反応の熱発生率を比較するため図5-8に Methane の HCCI 燃焼における熱発生率(ピンク色)および寄与度行列で現れた熱発生に 3%以上寄与する各素反応の熱発生率(赤色: 発熱反応, 青色: 吸熱反応)を示す. まず発熱反応である $\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$, $\text{HO}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$, $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$ の素反応と, 吸熱反応である $\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$ の素反応が熱発生率に主に寄与するのが確認できる. この四つの重要な素反応は H, O_2 , HO_2 , OH, CO, H_2O の化学種により発熱反応が起こるため, その化学種を生成する素反応も把握する必要がある. 次に発熱反応である $\text{O} + \text{CH}_3 = \text{H} + \text{CH}_2\text{O}$, $\text{OH} + \text{H}_2 = \text{H} + \text{H}_2\text{O}$, $\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} = \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$, $\text{H} + \text{O}_2 + \text{N}_2 = \text{O} + \text{OH} + \text{N}_2$ の素反応と, 吸熱反応である $\text{O} + \text{H}_2\text{O} = \text{OH} + \text{OH}$ の素反応が確認できる. 吸熱反応である $\text{O} + \text{H}_2\text{O} = \text{OH} + \text{OH}$ の素反応は二つの OH のラジカルが生成するため, $\text{HO}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$ と $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$ の素反応の熱発生に寄与すると考えられる. 上の九つの素反応より熱発生率が少し小さいが, 発熱反応である $\text{O} + \text{CH}_3 = \text{H} + \text{H}_2 + \text{CO}$,

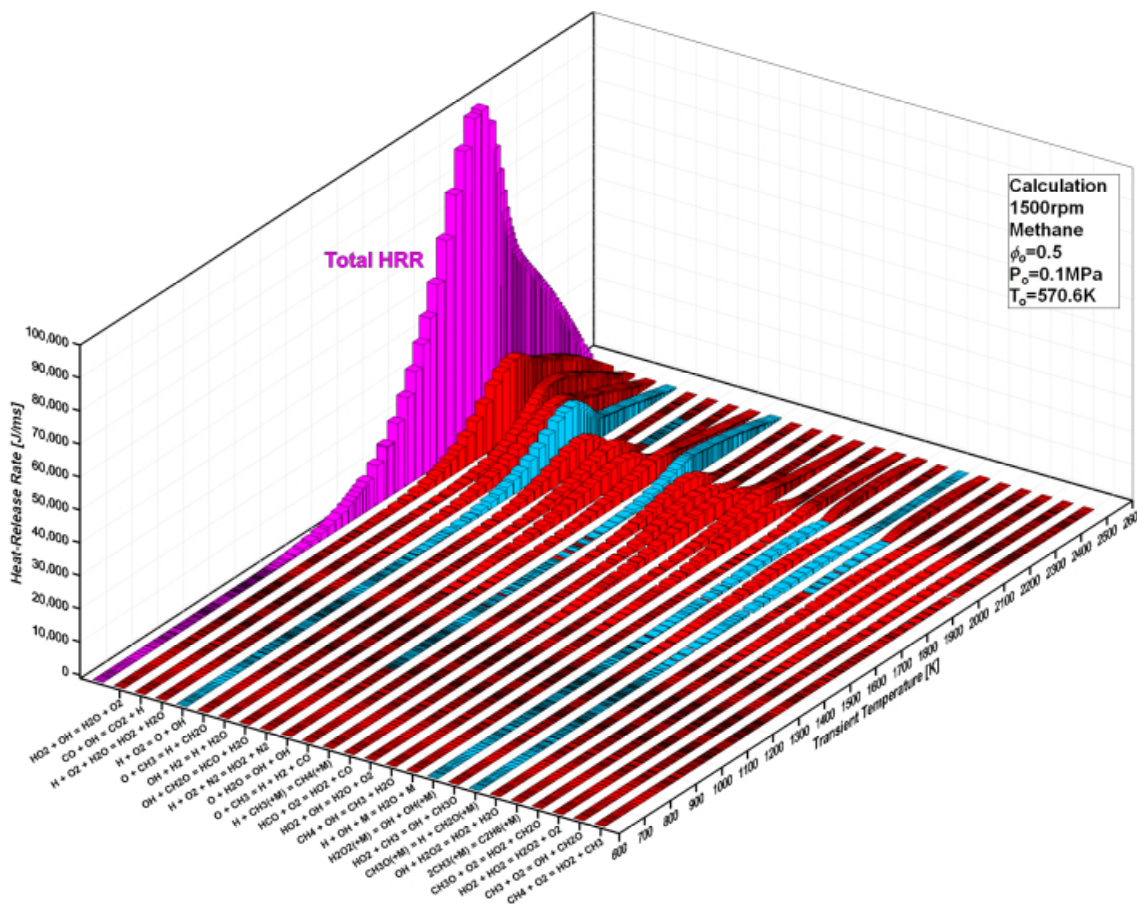


図5-8 Methane の HCCI 燃焼における熱発生率および熱発生に 3%以上寄与する各素反応の熱発生率 (赤色:発熱反応, 青色:吸熱反応)

$H+CH_3(+M)=CH_4(+M)$, $HCO+O_2=HO_2+CO$, $HO_2+OH=H_2O+O_2$, $CH_4+OH=CH_3+H_2O$ の素反応が確認できる。

b) ノルマル・ヘプタン(Normal heptane)

図5-6の n-Heptane の熱発生率に関する寄与度行列が図5-9である。横軸は n-Heptane の HCCI 燃焼に関する素反応であり、縦軸は 20K の温度間隔で示した燃焼温度である。まずセルの中で色が入っているところはある燃焼温度で熱発生に 3%以上寄与する素反応を意味する。色が入っているセルの中で、茶色は各燃焼温度の熱発生に最も寄与する素反応を、赤色は二番目に寄与する素反応を、オレンジ色は三番目に寄与する素反応を示している。黄色は各燃焼温度の熱発生にただ 3%以上寄与する素反応を意味する。寄与度行列により n-Heptane の素反応モデルにある 2827 個の素反応の中で、n-Heptane の HCCI 燃焼における熱発生に大きく寄与する 34 個の重要な素反応が把握できる。また各素反応がどんな燃焼温度でどのくらい寄与しているのかも確認できる。ここで注目することは寄与度行列により把握した熱発生に 3%以上寄与する 34 個の素反応でも最も寄与する素反応は 18 個である(茶色, 赤色, オレンジ色のセル)。特に燃焼温度 520K から 840K までは $NC_7H_{16}+O_2=C_7H_{15}\cdot_2+HO_2$, $NC_7H_{16}+O_2=C_7H_{15}\cdot_3+HO_2$, $NC_7H_{15}O_2\cdot_2+O_2=C_7H_{15}\cdot_2+O_2$, $NC_7H_{15}O_2\cdot_3+O_2=C_7H_{15}\cdot_3+O_2$, $NC_7H_{16}+OH=C_7H_{15}\cdot_2+H_2O$, $NC_7H_{16}+OH=C_7H_{15}\cdot_3+H_2O$ の素反応が低温酸化反応に大きく寄与するのが確認できる。燃焼温度 880K から 1460K までは $HCO+O_2=CO+HO_2$, $H_2O_2(+M)=$

Reaction No.	1993	1994	1995	2187	2188	2189	2190	2313	2319	2323	1981	1982	2349	2355	9	43	27	14	16	114	15	125	64	572	13	242	239	24	25	1	12	4	8	21
Reaction	NC7H16 + O2 = C7H15-2 + HO2																																	
Temperature	NC7H16 + O2 = C7H15-3 + HO2																																	
	NC7H16 + O2 = C7H15-4 + HO2																																	
	C7H15O2-1 = C7H15-1 + O2																																	
	C7H15O2-2 = C7H15-2 + O2																																	
	C7H15O2-3 = C7H15-3 + O2																																	
	C7H15O2-4 = C7H15-4 + O2																																	
	C7H14OOH2-4 + O2																																	
	C7H14OOH3-5O2 = C7H14OOH3-5 + O2																																	
	C7H14OOH4-2O2 = C7H14OOH4-2 + O2																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-2 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-3 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-4 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-5 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-6 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-7 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-8 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-9 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-10 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-11 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-12 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-13 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-14 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-15 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-16 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-17 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-18 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-19 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-20 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-21 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-22 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-23 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-24 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-25 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-26 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-27 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-28 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-29 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-30 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-31 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-32 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-33 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-34 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-35 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-36 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-37 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-38 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-39 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-40 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-41 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-42 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-43 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-44 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-45 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-46 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-47 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-48 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-49 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-50 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-51 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-52 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-53 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-54 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-55 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-56 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-57 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-58 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-59 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-60 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-61 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-62 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-63 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-64 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-65 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-66 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-67 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-68 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-69 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-70 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-71 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-72 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-73 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-74 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-75 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-76 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-77 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-78 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-79 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-80 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-81 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-82 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-83 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-84 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-85 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-86 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-87 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-88 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-89 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-90 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-91 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-92 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-93 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-94 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-95 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-96 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-97 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-98 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-99 + H2O																																	
	NC7H16 + OH = C7H15-100 + H2O																																	

図5-9 n-Heptane の HCCI 燃焼における寄与度行列

(各燃焼温度で熱発生に最も寄与する素反応(茶色), 二番目に寄与する素反応(赤色), 三番目に寄与する素反応(オレンジ色), 熱発生に3%以上寄与する素反応(黄色))

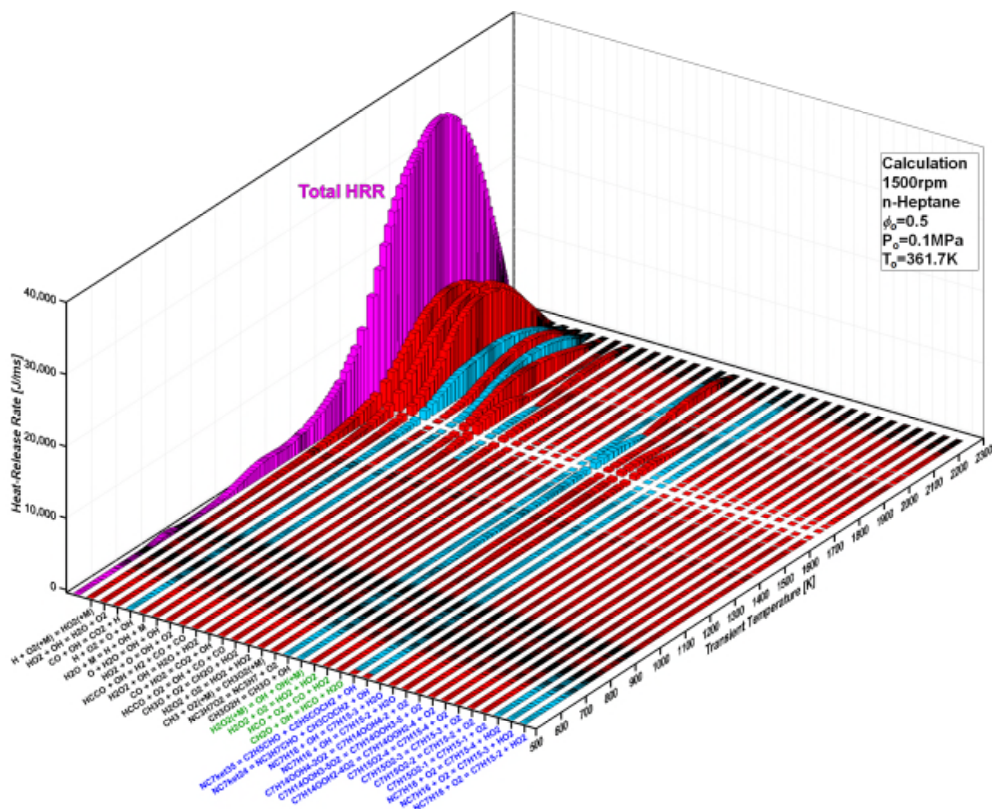


図5-10 n-Heptane の HCCI 燃焼における熱発生率および熱発生に 3%以上寄与する各素反応の熱発生率 (赤色:発熱反応, 青色:吸熱反応)

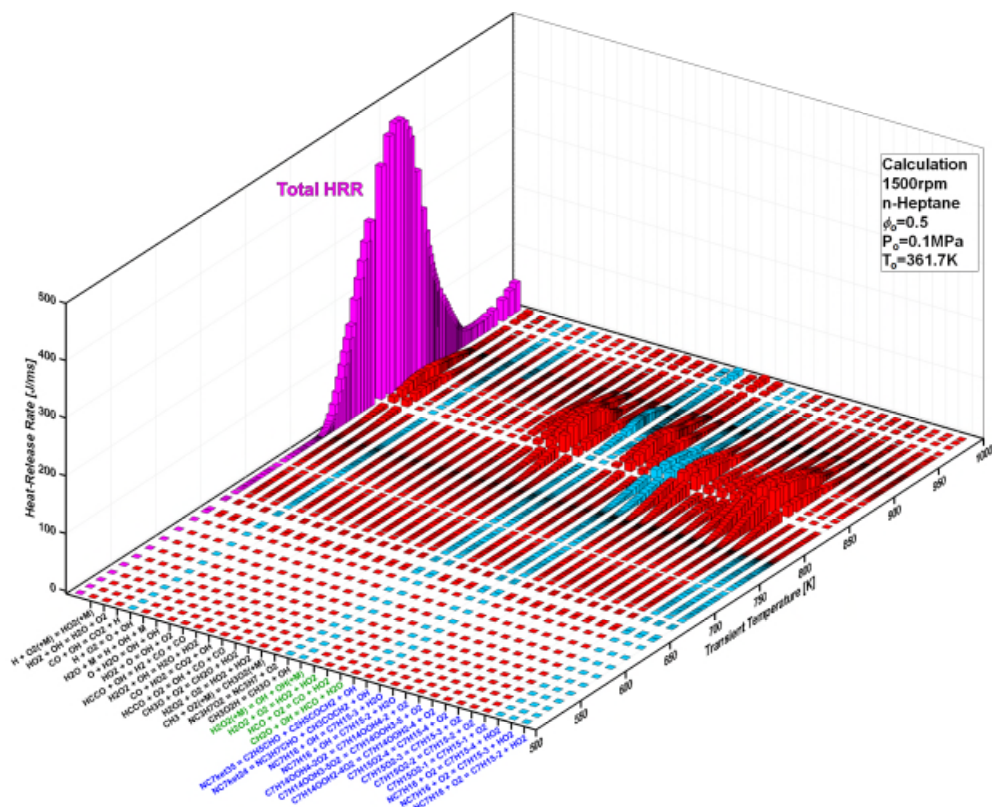


図5-11 図5-10の低温酸化反応の拡大図(赤色:発熱反応, 青色:吸熱反応)

OH+OH(+M)の素反応が、燃焼温度 1480K から 2240K までは $\text{HO}_2+\text{OH}=\text{H}_2\text{O}+\text{O}_2$, $\text{CO}+\text{OH}=\text{CO}_2+\text{H}$ の素反応が各燃焼温度範囲で熱発生に大きく寄与している。 $\text{H}+\text{O}_2(+\text{M})=\text{HO}_2(+\text{M})$ の素反応は燃焼温度 920K から 2240K までの広い温度範囲で熱発生に寄与している。

しかし、寄与度行列には各燃焼温度での熱発生率に寄与する素反応および各素反応の寄与度は確認できるが、他の燃焼温度との比較ができない。燃焼温度の進行に対する素反応の熱発生率を比較するため、図5-10に n-Heptane の HCCI 燃焼における熱発生率(ピンク色)および寄与度行列で現れた熱発生に 3% 以上寄与する各素反応の熱発生率(赤色:発熱反応, 青色:吸熱反応)を示す。まず発熱反応である $\text{H}+\text{O}_2(+\text{M})=\text{HO}_2(+\text{M})$, $\text{HO}_2+\text{OH}=\text{H}_2\text{O}+\text{O}_2$, $\text{CO}+\text{OH}=\text{CO}_2+\text{H}$ の素反応が熱発生率に主に寄与するのが確認できる。この三つの重要な素反応は H, O_2 , HO_2 , OH, CO, (M)の化学種により発熱反応が起こるため、その化学種を生成する素反応も把握する必要がある。次に発熱反応である $\text{H}_2\text{O}+\text{M}=\text{H}+\text{OH}+\text{M}$, $\text{HO}_2+\text{O}=\text{OH}+\text{O}_2$, $\text{HCCO}+\text{OH}=\text{H}_2+\text{CO}+\text{CO}$ の素反応と、吸熱反応である $\text{H}+\text{O}_2=\text{O}+\text{OH}$, $\text{O}+\text{H}_2\text{O}=\text{OH}+\text{OH}$ の素反応が確認できる。二つの吸熱反応により三つの OH が生成され、重要な素反応である $\text{HO}_2+\text{OH}=\text{H}_2\text{O}+\text{O}_2$ と $\text{CO}+\text{OH}=\text{CO}_2+\text{H}$ に寄与すると考えられる。

熱発生率に比べて低温酸化反応に寄与する素反応の熱発生率は小さいため、図5-10の燃焼温度 500K から 1000K を図5-11に拡大する。まず低温酸化反応と呼ばれる素反応の中で、発熱反応である $\text{C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2-1=\text{C}_7\text{H}_{15}-1+\text{O}_2$, $\text{C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2-2=\text{C}_7\text{H}_{15}-2+\text{O}_2$, $\text{C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2-3=\text{C}_7\text{H}_{15}-3+\text{O}_2$, $\text{C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2-4=\text{C}_7\text{H}_{15}-4+\text{O}_2$, $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{OOH}_2-4\text{O}_2=\text{C}_7\text{H}_{14}\text{OOH}_2-4+\text{O}_2$, $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{OOH}_3-5\text{O}_2=\text{C}_7\text{H}_{14}\text{OOH}_3-5+\text{O}_2$, $\text{C}_7\text{H}_{14}\text{OOH}_4-2\text{O}_2=\text{C}_7\text{H}_{14}\text{OOH}_4-2+\text{O}_2$, $\text{NC}_7\text{H}_{16}+\text{OH}=\text{C}_7\text{H}_{15}-2+\text{H}_2\text{O}$, $\text{NC}_7\text{H}_{16}+\text{O}_\text{H}=\text{C}_7\text{H}_{15}-3+\text{H}_2\text{O}$ の素反応と、吸熱反応である $\text{NC}_7\text{ket}24=\text{NC}_3\text{H}_7\text{CHO}+\text{CH}_3\text{COCH}_2+\text{OH}$, $\text{NC}_7\text{ket}35=\text{C}_2\text{H}_5\text{CHO}+\text{C}_2\text{H}_5\text{COCH}_2+\text{OH}$ 素反応が低温酸化反応の熱発生に寄与すること確認できる。低温酸化反応が終わった後は、発熱反応である $\text{HO}_2+\text{HO}_2=\text{H}_2\text{O}_2+\text{O}_2$, $\text{HCO}+\text{O}_2=\text{CO}+\text{HO}_2$, $\text{CH}_2\text{O}+\text{OH}=\text{HCO}+\text{H}_2\text{O}$, $\text{NC}_3\text{H}_7\text{O}_2=\text{NC}_3\text{H}_7+\text{O}_2$, $\text{CH}_3+\text{O}_2(+\text{M})=\text{CH}_3\text{O}_2(+\text{M})$, $\text{H}_2\text{O}_2+\text{O}_2=\text{HO}_2+\text{HO}_2$, $\text{H}_2\text{O}_2+\text{O}_2=\text{HO}_2+\text{HO}_2$, $\text{CH}_3\text{O}+\text{O}_2=\text{CH}_2\text{O}+\text{HO}_2$ の素反応と、吸熱反応である $\text{H}_2\text{O}_2(+\text{M})=\text{OH}+\text{OH}(+\text{M})$, $\text{CH}_3\text{O}_2\text{H}=\text{CH}_3\text{O}+\text{OH}$ の素反応が確認できる。ここで注目することは高温酸化反応に熱発生率に大きく寄与する $\text{H}+\text{O}_2(+\text{M})=\text{HO}_2(+\text{M})$ と $\text{HO}_2+\text{OH}=\text{H}_2\text{O}+\text{O}_2$ の素反応が低温酸化反応による熱発生率にも寄与していることである。

c) イソオクタン (Iso-octane)

図5-6の i-Octane の熱発生率に関する寄与度行列が図5-12である。横軸は i-Octane の HCCI 燃焼に関する素反応であり、縦軸は 20K の温度間隔で示した燃焼温度である。まずセルの中で色が入っているところはある燃焼温度で熱発生に 3%以上寄与する素反応を意味する。色が入っているセルの中で、茶色は各燃焼温度の熱発生に最も寄与する素反応を、赤色は二番目に寄与する素反応を、オレンジ色は三番目に寄与する素反応を示している。黄色は各燃焼温度の熱発生にただ 3%以上寄与する素反応を意味する。寄与度行列により i-Octane の素反応モデルにある 3796 個の素反応の中で、i-Octane の HCCI 燃焼における熱発生に大きく寄与する 43 個の重要な素反応が把握できる。また各素反応がどんな燃焼温度でどのくらい寄与しているのかも確認できる。ここで注目することは寄与度行列により把握した熱発生に 3%以上寄与する 43 個の素反応でも最も寄与する素反応は 17 個である(茶色, 赤色, オレンジ色のセル)。特に燃焼温度 502K から 760K までは $\text{iC}_8\text{H}_{18}+\text{O}_2=\text{bC}_8\text{H}_{17}+\text{HO}_2$, $\text{iC}_8\text{H}_{18}+\text{O}_2=\text{cC}_8\text{H}_{17}+\text{HO}_2$, $\text{aC}_8\text{H}_{17}\text{O}_2=\text{aC}_8\text{H}_{17}+\text{O}_2$, $\text{bC}_8\text{H}_{17}\text{O}_2=\text{bC}_8\text{H}_{17}+\text{O}_2$,

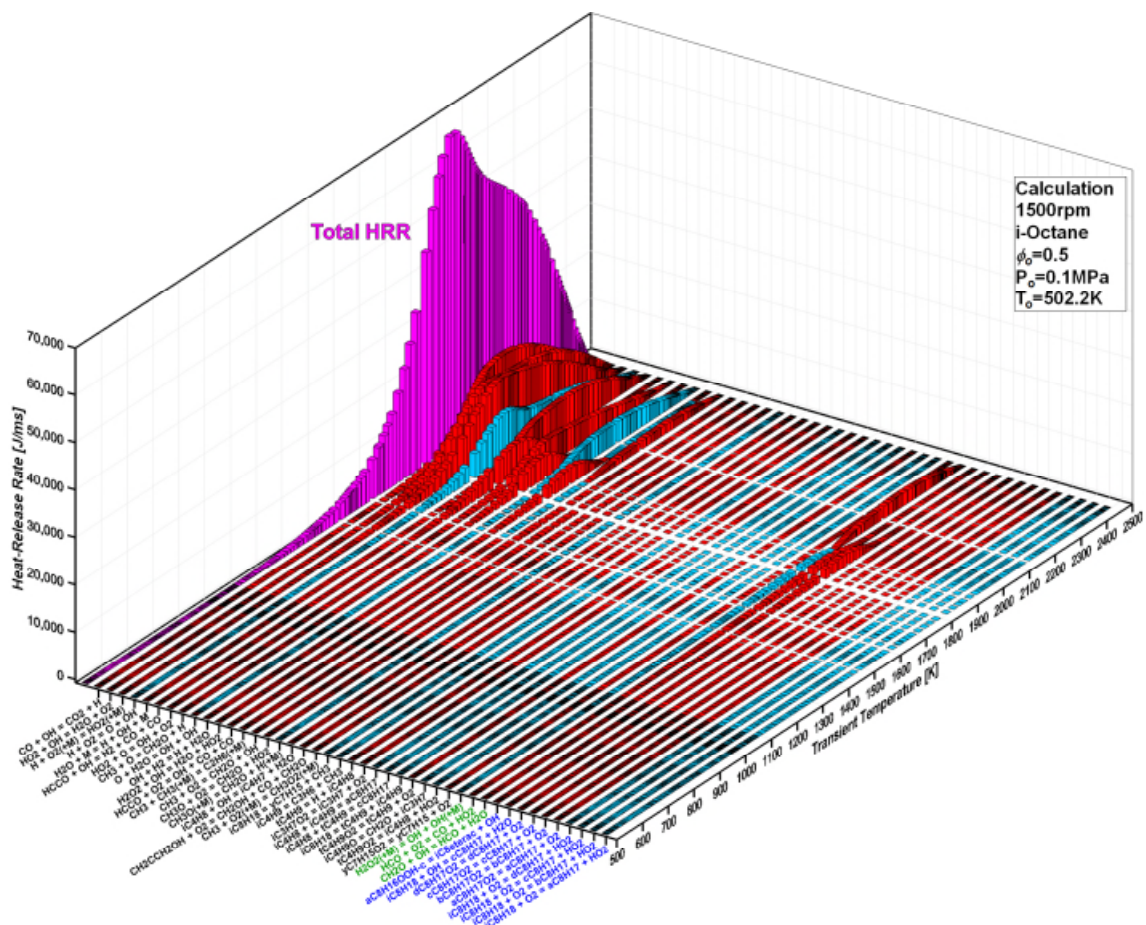


図5-13 i-Octane の HCCI 燃焼における熱発生率および熱発生に 3%以上寄与する各素反応の熱発生率 (赤色:発熱反応, 青色:吸熱反応)

$c_8H_{17}O_2 = c_8H_{17} + O_2$ の素反応が低温酸化反応として寄与するのが確認できる。燃焼温度 680K から 1020K までは $tC_4H_9O_2 = tC_4H_9 + O_2$, $iC_8H_{18} = yC_7H_{15} + CH_3$, $CH_3 + O_2(+M) = CH_3O_2(+M)$, $tC_4H_9 = H + iC_4H_8$ の素反応が、燃焼温度 1040K から 1560K までは $HCO + O_2 = CO + HO_2$, $H_2O_2(+M) = OH + OH(+M)$ の素反応が、燃焼温度 1580K から 2420K までは $HO_2 + OH = H_2O + O_2$, $HCCO + OH = H_2 + CO + CO$, $H + O_2 = O + OH$, $CO + OH = CO_2 + H$, $H_2O + M = H + OH + M$ の素反応が各燃焼温度範囲で熱発生に大きく寄与している。 $H + O_2(+M) = HO_2(+M)$ の素反応は燃焼温度 940K から 2400K までの広い温度範囲で熱発生に寄与している。

しかし、寄与度行列には各燃焼温度での熱発生率に寄与する素反応および各素反応の寄与度は確認できるが、他の燃焼温度との比較ができない。燃焼温度の進行に対する素反応の熱発生率を比較するため図 5-13 に i-Octane の HCCI 燃焼における熱発生率(ピンク色)および寄与度行列で現れた熱発生に 3%以上寄与する各素反応の熱発生率(赤色:発熱反応, 青色:吸熱反応)を示す。まず発熱反応である $H + O_2(+M) = HO_2(+M)$, $HO_2 + OH = H_2O + O_2$, $CO + OH = CO_2 + H$ の素反応が熱発生率に主に寄与するのが確認できる。この三つの重要な素反応は H, O_2 , HO_2 , OH, CO, (M) の化学種により発熱反応が起こるため、その化学種を生成する素反応も把握する必要がある。次に発熱反応である $H_2O + M = H + OH + M$, $HO_2 + O = OH + O_2$, $HCCO + OH = H_2 + CO + CO$, $CH_3 + O = CH_2O + H$, $OH + H_2 = H + H_2O$ の素反応と、吸熱反応である $H + O_2 = O + OH$, $O + H_2O = OH + OH$ の素反応が確認できる。二つの吸熱反応により三つの OH ラジカルと一つの O ラジカルが

か生成され、重要な素反応である $\text{HO}_2 + \text{OH} = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2$ と $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$ の熱発生に寄与すると考えられる。また発熱反応である $\text{HCO} + \text{O}_2 = \text{CO} + \text{HO}_2$ 、 $\text{CH}_2\text{O} + \text{OH} = \text{HCO} + \text{H}_2\text{O}$ の素反応と、吸熱反応である $\text{H}_2\text{O}_2(+\text{M}) = \text{OH} + \text{OH}(+\text{M})$ の素反応が確認できる。

5. 2. 初期温度が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較

3. 3節では DME の HCCI 燃焼により、初期温度が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認した。初期温度が上がると、低温酸化反応が起こる温度まで燃焼室内ガスの温度が早く到達し、低温酸化反応による熱発生の開始時期が早くなる。低温酸化反応による熱発生の開始時期が早くなると、低温酸化反応の熱発生による温度の上昇も早くなり、高温酸化反応が起こる温度まで燃焼室内ガスの温度が早く到達することで、燃焼位相が進角する。燃焼位相が進角すると、燃焼が圧縮行程に入り、酸化反応を抑える膨張行程の影響が小さくなる。また初期温度が上がると、全体の燃焼過程が高い燃焼室内温度の中で進行するとともに、最高到達温度が高くなるため、反応速度が速くなる。それで初期温度の上昇により、燃焼位相が進角するとともに反応速度が速くなるため最大圧力上昇率が高くなる。DME の HCCI 燃焼により確認した、初期温度が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を、初期温度が Methane, n-Heptane, i-Octane の HCCI 燃焼に及ぼす影響と比較する。

図5-14に各想定供試燃料における初期温度と最大圧力上昇率との関係を比較する。横軸の T_0 (TDC) は各想定供試燃料における HCCI 燃焼の燃焼位相(CA50)を 0deg aTDC (TDC)に揃えるために要求される初期温度である。-は T_0 (TDC)より低い温度を+は T_0 (TDC)より高い温度を意味する。図3-9で DME の HCCI 燃焼により確認したように、燃料の着火特性に関係なく初期温度が上がると最大圧力上昇率が上がる。ただし初期温度の増加による最大圧力上昇率の上昇量は燃料により異なる。Methane と i-Octane の場合、初期温度が 40K 変わることによって最大圧力上昇率の変化量が約 22.0MPa/deg であり、DME と n-Heptane における HCCI 燃焼で現れた、初期温度の増加による最大圧力上昇率の上昇量より最も高い。ここで注目することは、図5-6でも確認したように、n-Heptane における燃焼位相を揃えるために要求される初期温度が DME の初期温度より 17.2K 高いにもかかわらず、初期温度の変化に関係なく最大圧力上昇率が低く、最大圧力上昇率の差がほぼ同じである。

図5-15に各想定供試燃料における初期温度と燃焼位相との関係を比較する。まず燃料の着火特性に関係なく、燃焼位相が圧縮行程または膨張行程であっても、初期温度が上がると燃焼位相が進角する傾向は同じである。その中で、初期温度による DME の HCCI 燃焼における燃焼位相の変化が最も大きい。また初期温度の変化による Methane と n-Heptane の HCCI 燃焼における燃焼位相の変化量がほぼ同じであることが確認できる。Methane と n-Heptane の HCCI 燃焼における燃焼位相が初期温度の変化に関係なくほぼ同じであるにもかかわらず、図5-14に示したように初期温度による最大圧力上昇率の変化量が n-Heptane の HCCI 燃焼より Methane の HCCI 燃焼のほうが大きいのは、Methane の HCCI 燃焼の反応速度は初期温度により大きく影響を受けるためと考えられる。これは図5-16により明確に確認できる。

図5-16に各想定供試燃料における初期温度による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較する。まず HCCI 燃焼で低温酸化反応がない Methane と i-Octane の場合、燃焼位相の変化による最大圧力上昇率の変化量が、HCCI 燃焼で低温酸化反応がある n-Heptane と DME の最大圧力上昇率の変化量より大きい。これは低温酸化反応の影響によるものと説明できる。低温酸化反応により熱が発生すると、初期

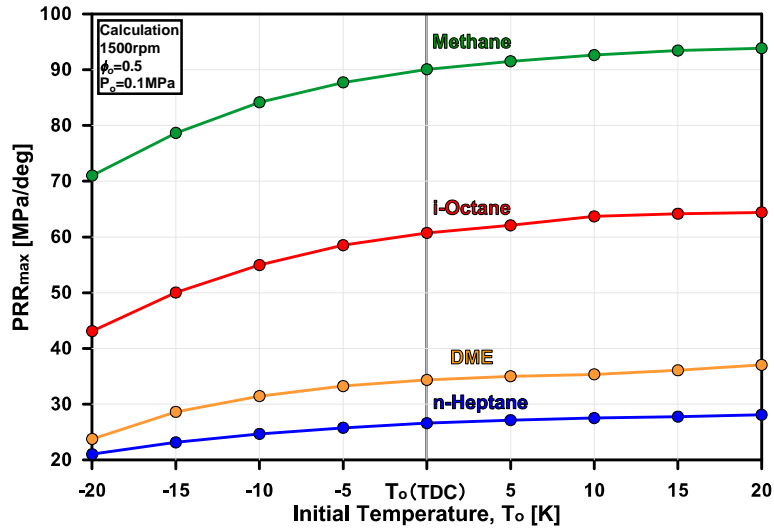


図5-14 各想定供試燃料における初期温度と最大圧力上昇率との関係の比較

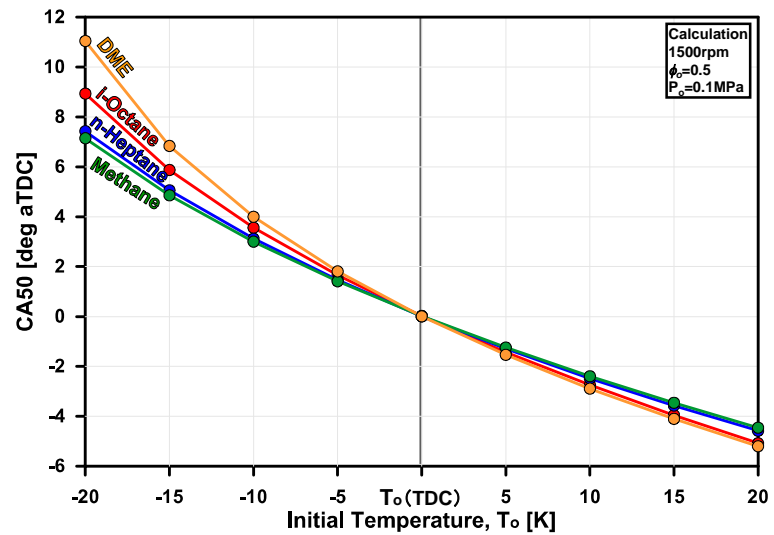


図5-15 各想定供試燃料における初期温度と燃焼位相との関係の比較

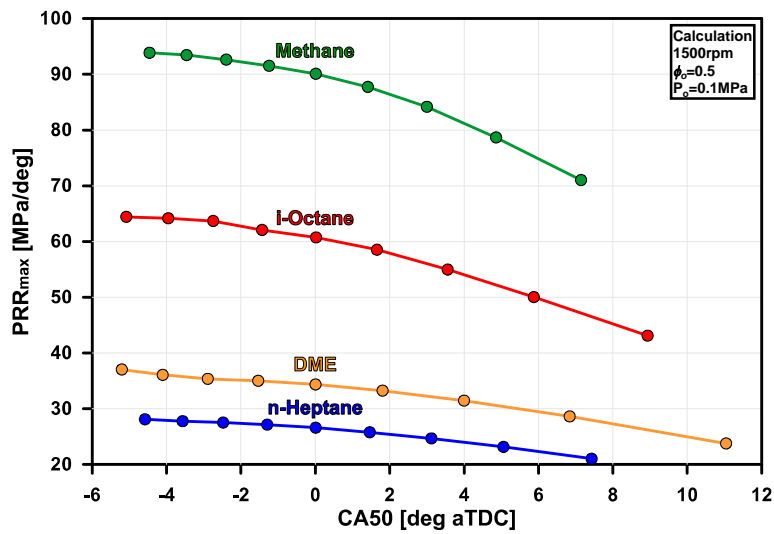


図5-16 各想定供試燃料における初期温度による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較

温度を高くしなくても、低温酸化反応の熱発生により燃焼室内ガスの温度が上昇する。低温酸化反応が終わっても、低温酸化反応の熱発生により燃焼室内ガスの温度上昇率が高くなっているため、燃焼位相が遅延しても高温酸化反応が起こる温度まで安定に到達する可能性が高くなる。燃焼位相の大きな遅延が可能であり、最大圧力上昇率に及ぼす燃焼位相の影響が割に小さい。逆に低温酸化反応がない燃料は、ただ初期温度に依存して燃焼が進行するため、初期温度の減少により燃焼位相が遅延すると、割に低い燃焼室内ガスの温度で膨張行程の影響を大きく受けることで、最大圧力上昇率の減少が大きい。

5. 3. 初期圧力が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較

3. 4節では DME の HCCI 燃焼により、初期圧力が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認した。初期圧力が上がると、圧縮開始時の燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度が増加する。DME と n-Heptane のような HCCI 燃焼で低温酸化反応が現れる燃料の場合、初期圧力が増加すると燃焼室内ガスの密度が高くなることで、低温酸化反応による熱発生の開始時期が早くなる。それとともに、低温酸化反応による熱発生量は圧縮開始時の燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度に比例して増加するため、低温酸化反応の熱発生による燃焼室内ガスの温度の上昇が最も大きくなる。高温酸化反応が起こる温度までさらに早く達するため、高温酸化反応による熱発生の開始時期が早くなることで燃焼位相が進角する。高温酸化反応による熱発生量も圧縮開始時の燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度に比例して増加するため、初期圧力が上がると大きい熱発生が進角した燃焼位相で起こることで燃焼室内ガスの圧力上昇率が上昇する。DME の HCCI 燃焼により確認した初期圧力が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を、初期圧力が Methane, n-Heptane, i-Octane の HCCI 燃焼に及ぼす影響と比較する。

図5-17に各想定供試燃料における初期圧力と最大圧力上昇率との関係を比較する。図3-19で DME の HCCI 燃焼により確認したように、燃料の着火特性に関係なく初期圧力が上がると最大圧力上昇率がほぼ比例して上昇する。ただし初期圧力による最大圧力上昇率の上昇量は燃料により異なる。特に Methane における HCCI 燃焼の場合、初期圧力が 0.08MPa 変わることによって最大圧力上昇率の変化が 34.895MPa/deg から 138.471MPa/deg まで、約 103.575MPa/deg (約 3 倍) が上がる。初期温度が 40K 変わることによって最大圧力上昇率が約 22.0MPa/deg 上がるものと比べると、変化量が非常に大きい。初期温度が上がると燃焼位相が進角するとともに、高い燃焼室内ガスの温度により反応速度が早くなることで主に最大圧力上昇率は増加するが、圧縮開始時の燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度が小さくなるため、熱発生量の減少が最大圧力上昇率の減少に影響を与える。これに比べて初期圧力が上がると燃焼位相が進角するとともに、圧縮開始時の燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度が増加することで熱発生量が最も増え、非常に温度上昇により燃焼が加速化され、最大圧力上昇率は上がる。それで初期圧力の変化が初期温度の変化より最大圧力上昇率に大きく影響を与えと言えらる。

図5-18に各想定供試燃料における初期圧力と燃焼位相との関係を比較する。まず燃料の着火特性に関係なく、燃焼位相が圧縮行程または膨張行程であっても、初期圧力が上がると燃焼位相が進角する傾向は同じである。その中で、DME と n-Heptane の HCCI 燃焼における燃焼位相の変化は初期圧力により大きく変わる。ただし n-Heptane の場合、初期圧力 0.06MPa の条件では燃焼位相が遅延しすぎて失火が起こる。逆に初期圧力による Methane と i-Octane の HCCI 燃焼における燃焼位相の変化量がほぼ同じであることが確認できる。低温酸化反応が存在する DME と n-Heptane における HCCI 燃焼の場合、低温酸化反応による

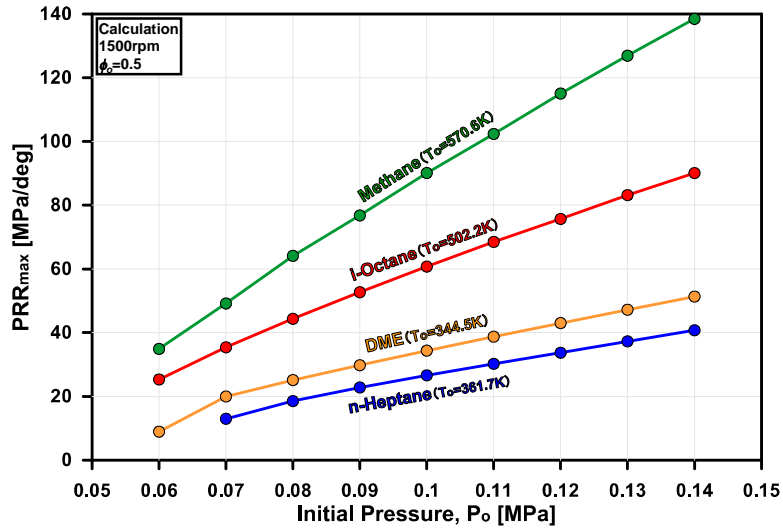


図5-17 各想定供試燃料における初期圧力と最大圧力上昇率との関係の比較

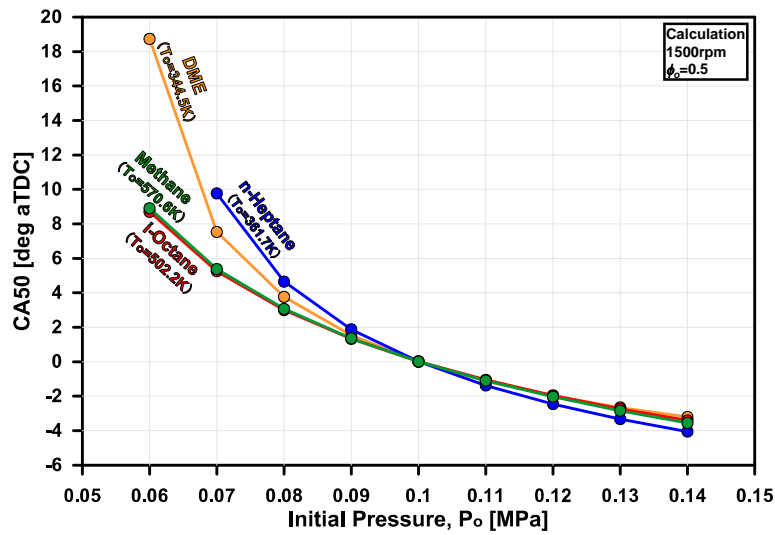


図5-18 各想定供試燃料における初期圧力と燃焼位相との関係の比較

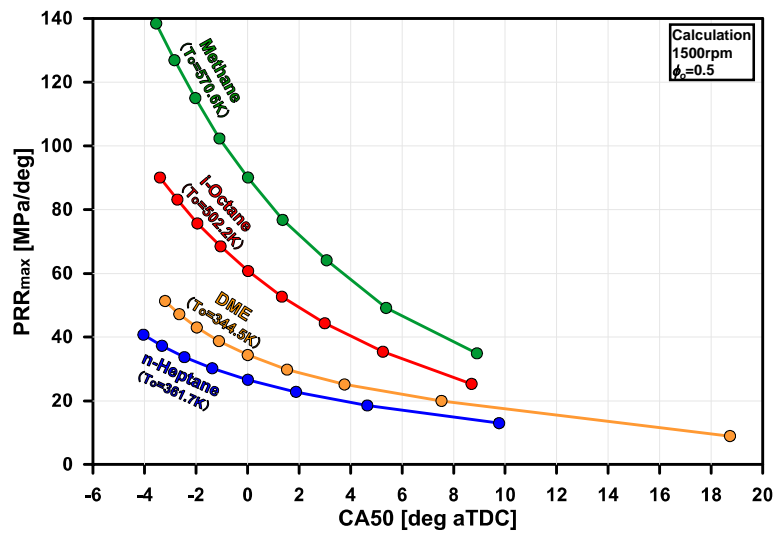


図5-19 各想定供試燃料における初期圧力による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較

熱発生量が初期圧力により最も変わり、それが燃焼位相に大きく影響を与えるため、初期圧力による燃焼位相の変化量が大きいと考えられる。

図5-19に各想定供試燃料における初期圧力による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較する。まず HCCI 燃焼で低温酸化反応が現れない Methane と i-Octane の場合、燃焼位相の変化による最大圧力上昇率の変化量が、HCCI 燃焼で低温酸化反応が現れる n-Heptane と DME の最大圧力上昇率の変化量より大きい。図5-16で説明したように、低温酸化反応の熱発生により燃焼室内ガスの温度が上昇すると燃焼位相が遅延しても高温酸化反応が起こる温度まで到達する可能性が高くなるため、燃焼位相の大きな遅延が可能であり、最大圧力上昇率に及ぼす燃焼位相の影響が小さい。さらに初期圧力が増加すると低温酸化反応による熱発生量が最も増加するため、DME と n-Heptane の HCCI 燃焼における最大圧力上昇率に及ぼす燃焼位相の影響はさらに小さくなったと言える。

5. 4. 当量比が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較

図5-20に各想定供試燃料における当量比と最大圧力上昇率との関係を比較する。当量比が上がることは、予混合気における燃料モル分率は増加し、酸素モル分率は減少することである。燃料モル分率の増加により投入熱量が増えるため、HCCI 燃焼による熱発生量も増加すると考えられる。また当量比が 1.0 に近づくと、燃料と空気がうまく酸化反応するため反応速度が早くなると考えられる。それで燃料の着火特性に関係なく、当量比 0.2 では最大圧力上昇率がほとんど 0 にあり、当量比が増加するとともに最大圧力上昇率が上昇する。ただし当量比の増加による最大圧力上昇率の上昇の傾向は燃料により異なる。特に Methane の場合、当量比 0.8 から減少が始まり、当量比 1.0 で急に下がる。また当量比が割に低いときには、当量比の増加による Methane と i-Octane の圧力上昇率の上昇量が大きい。当量比 0.8 以後は DME と n-Heptane の圧力上昇率の上昇量が大きい。それで当量比 1.0 での最大圧力上昇率は n-Heptane, DME, iso-Octane, Methane 順番である。

図5-21に各想定供試燃料における当量比と燃焼位相との関係を比較する。当量比の増加による燃焼位相の変化は燃料の着火特性により最も異なる。Methane と i-Octane における HCCI 燃焼の燃焼位相は当量比の増加とともに遅延し、燃焼位相の変化量は i-Octane より Methane のほうが大きい。特に Methane の燃焼位相の変化を見ると、当量比 1.0 で急に約 17deg 遅延する (CA50=30deg aTDC)。図5-20で確認した、当量比 1.0 での Methane の最大圧力上昇率は燃焼位相の大きな遅延により急に減少したと言える。DME と n-Heptane の場合、割に低い当量比では当量比の増加により燃焼位相が進角するが、ある当量比からは遅延する。まず燃料の着火特性に関係なく、割に高い当量比では、当量比の増加とともに燃焼位相が遅延することは、燃焼モル分率の増加により圧縮開始時の燃料と空気の予混合気の比熱比が減少することが理由である。圧縮開始時の予混合気の比熱比が下がると、ピストンの圧縮による燃焼室内ガスの温度上昇が抑えられる。それで燃焼室内ガスの圧縮開始から低温酸化反応および高温酸化反応が起こる温度まで達する期間が長くなるため、燃焼位相が遅延する。ただし HCCI 燃焼に低温酸化反応がある DME と n-Heptane の場合、当量比の増加とともに低温酸化反応による熱発生量が増えるため、当量比の増加により予混合気の比熱比が減少することで、低温酸化反応の開始時期がちょっと遅れても、割に高い当量比では当量比による燃焼位相の変化が小さい。また割に低い当量比では、当量比による燃焼位相の変化が大きいため、比熱比の影響より低温酸化反応による熱発生の影響が大きいと考えられる。

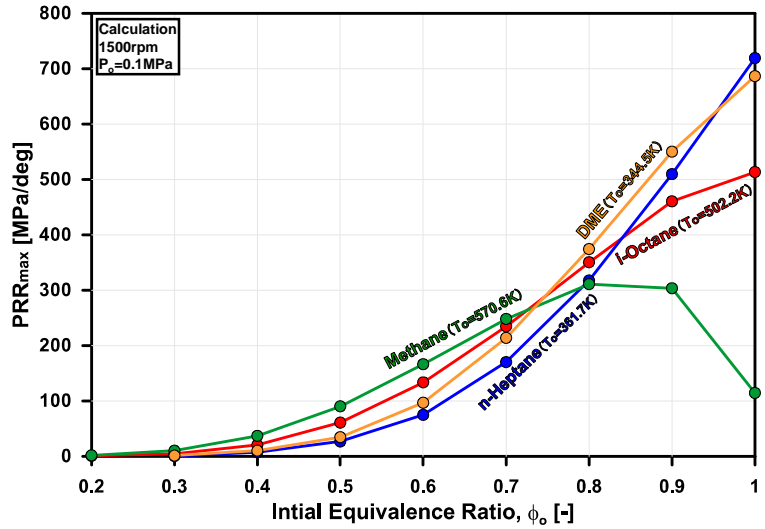


図5-20 各想定供試燃料における当量比と最大圧力上昇率との関係の比較

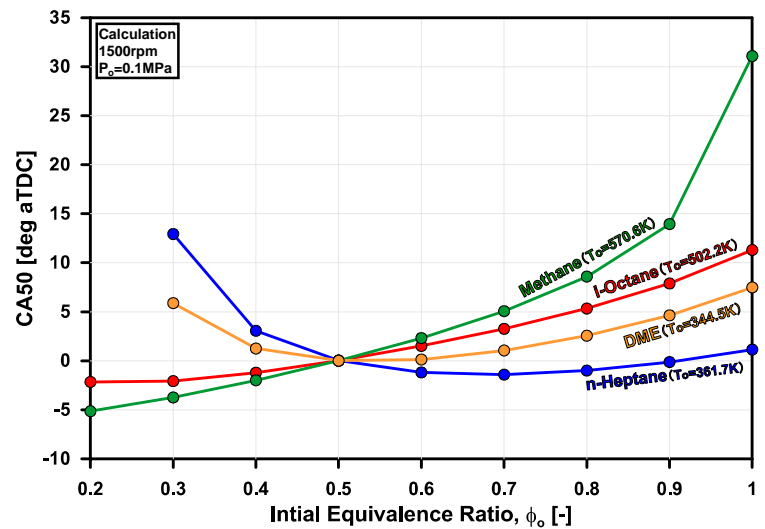


図5-21 各想定供試燃料における当量比と燃焼位相との関係の比較

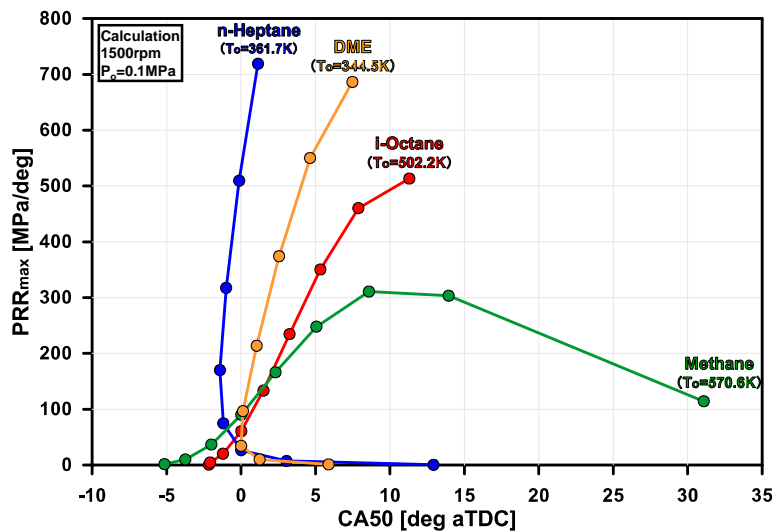


図5-22 各想定供試燃料における当量比による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較

図5-22に各想定供試燃料における当量比による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較する。当量比による燃焼位相の変化と最大圧力上昇率と関係は明確に見えないが、燃焼位相の遅延が遅延しても最大圧力上昇率が増加する特徴がある。その中、Methaneの場合、上で述べたように当量比が1.0に近づくと燃焼位相が非常に遅延し、燃焼位相の大きな遅延により最大圧力上昇率の減少する。当量比が上がると、圧縮開始時の予混合気の比熱比が下がるため、燃焼位相は遅延するが、当量比が上がった分熱発生量が最も増えるとともに反応速度が早くなるため(当量比が1.0まで)最大圧力上昇率は増加する。さらにHCCI燃焼で低温酸化反応があるDMEとn-Heptaneの場合、当量比の増加により低温酸化反応の熱発生量が上昇することで燃焼位相の遅延が小さいため、最大圧力上昇率の増加が最も大きい。

5. 5. EGR 率が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較

4. 3節ではDMEのHCCI燃焼により、圧縮開始時の燃焼室内ガスのEGR率が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認した。EGR率が上がると、EGRガスに主にあるCO₂とH₂Oの定圧熱比が高いため、圧縮開始時の燃焼室内ガスの比熱比が下がる。燃焼室内ガスの比熱比が下がると、ピストンの圧縮による燃焼室内ガスの温度上昇が抑えられ、燃焼室内ガスの圧縮開始から低温酸化反応および高温酸化反応が起こる温度までの期間が長くなると、燃焼位相が遅延する。また燃焼室内ガスが低い比熱比であるため、DMEのHCCI燃焼の熱発生に大きく寄与する各素反応の熱発生率を全燃焼過程で抑える。それで燃焼室内ガスのEGR率が増加すると、燃焼位相の遅延により膨張行程の効果が大きくなり、熱発生率が抑えられるため、最大圧力上昇率が減少する。DMEのHCCI燃焼により確認した、圧縮開始時の燃焼室内のEGR率の増加が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を、EGR率がMethane, n-Heptane, i-OctaneのHCCI燃焼に及ぼす影響と比較する。

図5-23に各想定供試燃料におけるEGR率と最大圧力上昇率との関係を比較する。本論文では第4章でも説明したように、燃焼室内の燃料モル分率が一定の条件でEGRの導入を行うため、EGRガスが燃焼室内に導入された分燃焼室内の酸素モル分率が燃焼することで、当量比は増加する。それでEGR率0.0での当量比が0.5の条件で、EGRの導入により、EGR率0.4では当量比が0.758になる。燃料の着火特性に関係なく、EGR率が上がると最大圧力上昇率が下がる。特にMethaneの場合、EGR率が0.35増加することで、最大圧力上昇率が90.1MPa/degから28.5MPa/degまで、約61.6MPa/deg減少し、i-Octaneの最大圧力上昇率より小さくなった。またi-Octaneの場合にも、EGR率が0.4増加することで、最大圧力上昇率が60.7MPa/degから25.2MPa/degまで、約35.6MPa/deg減少した。それで全般的に、低温酸化反応がないMethaneとn-HeptaneのHCCI燃焼における最大圧力上昇率がEGRガスの影響を大きく受けることが確認できる。

図5-24に各想定供試燃料におけるEGR率と燃焼位相との関係を比較する。まず燃料の着火特性に関係なく、EGR率が上がると燃焼位相が遅延し、燃焼位相の変化の傾向が似ている。ただしEGR率による燃焼位相の変化量は燃料により異なる。特にMethaneの場合、EGR率が上がることで燃焼位相が過度に遅延し、EGR率0.4では失火が起こる。またn-Heptaneとi-Octaneの場合、EGR率の増加による燃焼位相の変化量がほぼ同じであり、その変化量がDMEのHCCI燃焼における燃焼位相の変化量より小さい。それでEGR率による燃焼位相の変化は、燃料の着火特性と特に関係がないと考えられる。

図5-25に各想定供試燃料におけるEGR率による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を

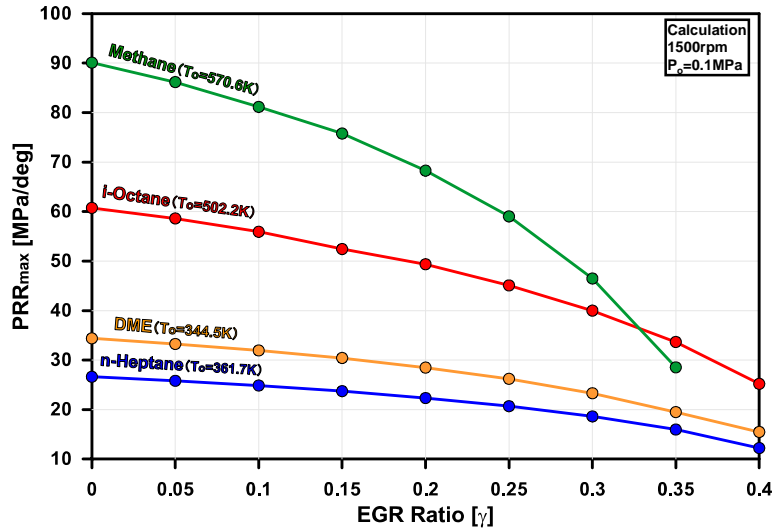


図5-23 各想定供試燃料における EGR 率と最大圧力上昇率との関係の比較

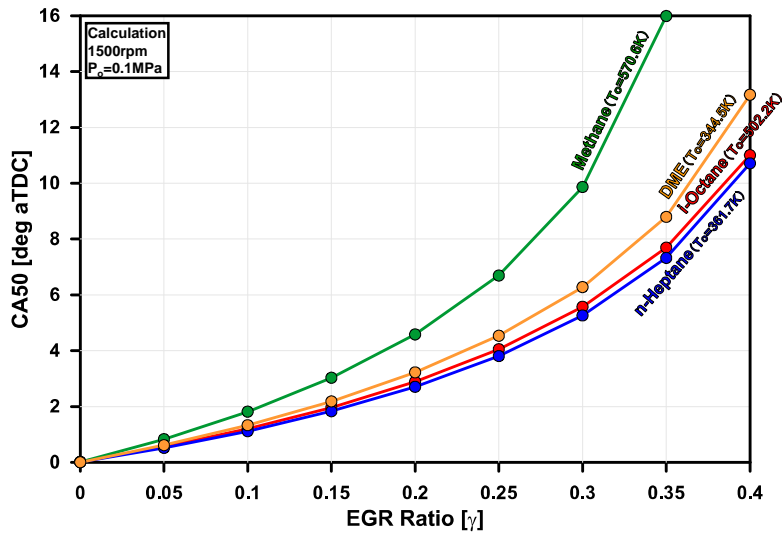


図5-24 各想定供試燃料における EGR 率と燃焼位相との関係の比較

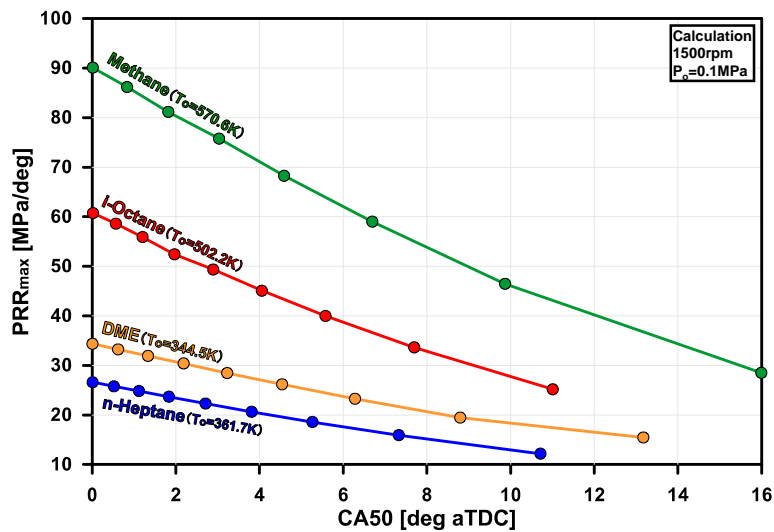


図5-25 各想定供試燃料における EGR 率による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較

比較する。燃料の着火特性に関係なく、EGR ガスの導入による燃焼位相の遅延により、最大圧力上昇率が減少する。特に大きな燃焼遅延による Methane における最大圧力上昇率の減少量が最も大きい。これにより EGR ガスを導入する方法は、燃料の着火特性が異なる HCCI 燃焼でも最大圧力上昇率を減少させることができるといえる。

5. 6. 燃焼位相を揃えた時に EGR および過給が最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較

5. 2節～5. 5節では、初期温度、初期圧力、当量比、EGR 率の変化および初期温度、初期圧力、当量比、EGR 率による燃焼位相の変化が各想定供試燃料における HCCI燃焼の最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認した。第4章に示したように、エンジンの特徴である燃焼位相は、HCCI 燃焼に及ぼす初期条件の変化の影響以外に、初期条件の変化による燃焼位相の変化そのままでも、HCCI 燃焼に最も大きい影響を与える。特に HCCI 燃焼を膨張行程で起こらせる燃焼位相遅延は、燃焼室内ガスの最大圧力上昇率の減少に最も効果的な方法であることが確認できた。それで各想定供試燃料における HCCI燃焼の最大圧力上昇率に及ぼす燃焼位相の影響を消して、EGR および過給(初期圧力)が最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認するため、第4章で行ったように初期温度および初期圧力の調節により燃焼位相を揃えた時に現れた最大圧力上昇率を比較する。

まず各想定供試燃料に対し、EGR および過給により変化する燃焼位相を揃えるために要求される初期温度を図5-26で比較する。EGR 率と過給圧に関係なく、燃焼位相を揃えるために要求される初期温度は、Methane(緑)、i-Octane(赤)、n-Heptane(青)、DME(オレンジ)の順番で高い。全般的に低温酸化反応がないMethaneとi-Octaneにおける燃焼位相を揃えるために要求される初期温度は高い。特にMethaneの初期温度はDMEの初期温度に比べて、基準(1)で226.1K高くなっていて、EGR 率および過給圧が上がることで初期温度の差が最も大きくなる。これは低温酸化反応の熱発生により説明できる。図5-4で DME と n-Heptane の HCCI 燃焼における燃焼室内ガスの温度と熱発生率から確認できるように、ある燃焼室内ガス

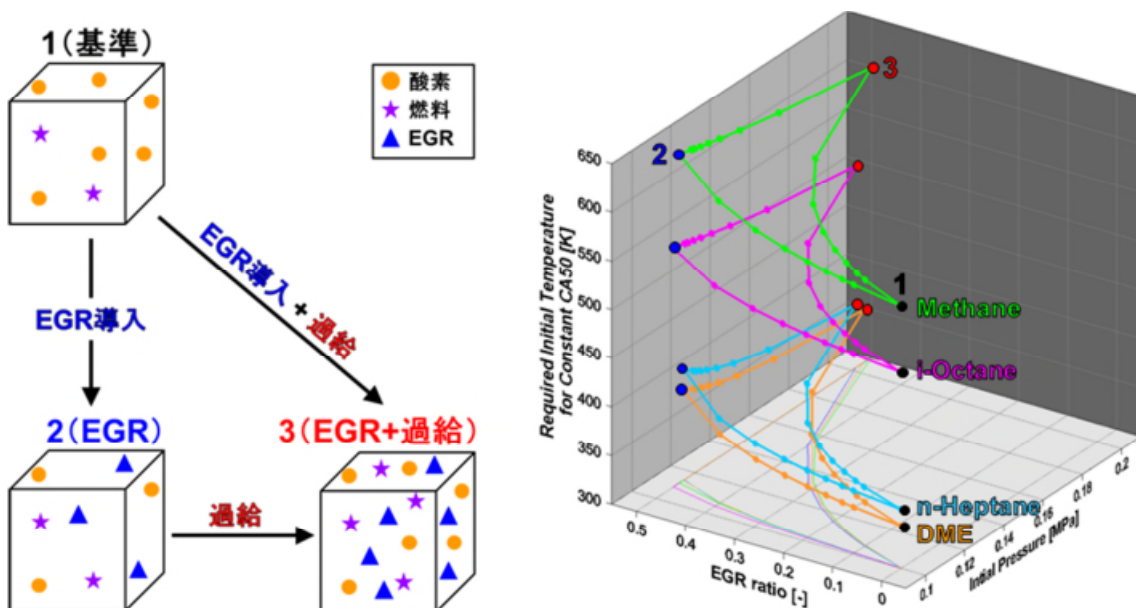


図5-26 各想定供試燃料に対し EGR および過給により変化する燃焼位相を揃えるために要求される初期温度の比較

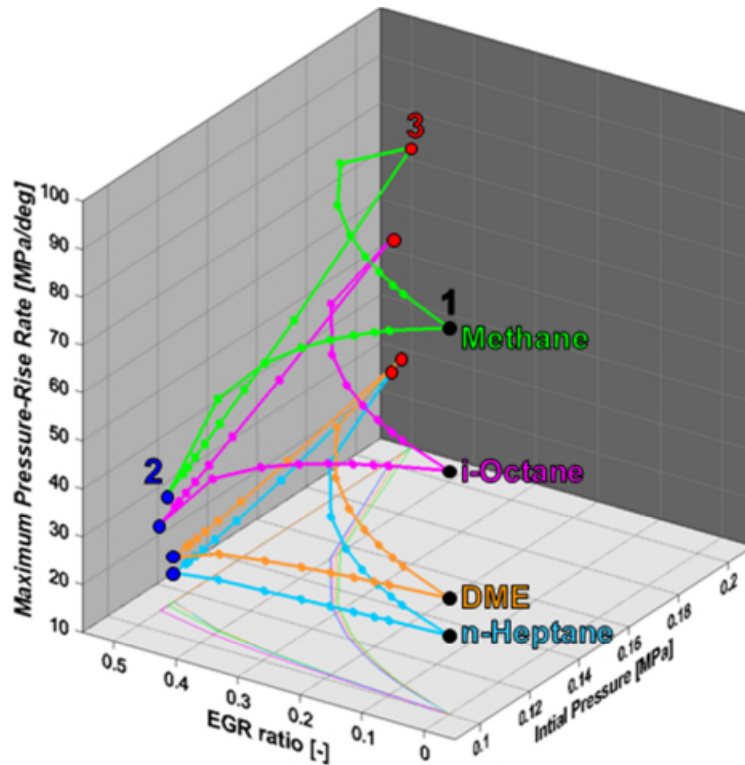


図5-27 各想定供試燃料における燃焼位相を揃えた時に (CA50=0deg aTDC) EGR および過給が HCCI 燃焼の最大圧力上昇率に及ぼす影響の比較

の温度で低温酸化反応により熱が発生すると、圧縮開始時の燃焼室内ガスの初期温度や初期圧力に関係なく、燃焼室内ガスの温度が増加する。低温酸化反応の熱発生により燃焼室内ガスの温度が増加すると、高温酸化反応が起こる温度まで早く達するため、燃焼位相が進角する。それで、低温酸化反応がある DME と n-Heptane の HCCI 燃焼における燃焼位相を、低温酸化反応がない Methane と i-Octane の HCCI 燃焼における燃焼位相と同一にさせるためには、低温酸化反応の熱発生により燃焼室内ガスの温度が増加した分、初期温度を下げる必要がある。初期圧力の場合は、燃焼位相を揃えるために初期温度が変わると燃焼室内の燃料体積モル濃度が変わるため、EGR ガスの導入により初期温度が増加しても、燃焼室内ガスの燃料体積モル濃度を一定するため、初期温度が変化した場合初期圧力を調節する。

燃料の着火特性に関係なく、圧縮開始時の燃焼室内に EGR ガスを導入するとき(1→2)に、図5-24に示したように EGR 率の増加とともに燃焼位相が遅延するため、燃焼位相を揃えるためには初期温度を上げる必要がある。また燃焼室内に EGR を導入しながら、酸素体積モル濃度を一定にするために過給をするとき(1→3)にも、燃焼位相を揃えるために初期温度を上げる。ただし図3-25に示したように、燃焼室内ガスを過給(初期圧力の増加)だけさせるとき(2→3)には、初期圧力の増加により燃焼位相が進角するため、初期温度を下げても燃焼位相を揃える必要がある。

図5-27に各想定供試燃料における燃焼位相を揃えた時に EGR および過給が最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較する。まず圧縮開始時の燃焼室内に EGR ガスを導入するとき(1→2)に、図5-26に示したように燃焼位相を揃えるため初期温度が上がると反応速度が早くなることで、最大圧力上昇率が高くなるはずであるが、燃焼位相が揃えても燃料の着火特性に関係なく燃焼室内ガスの最大圧力上昇率は減少する。これは圧縮開始時の燃焼室内に導入された EGR ガスにより、燃焼室内ガスの比熱比が下がることで熱発生が

抑えられ、最大圧力上昇率が減少したと考えられる。EGR ガスである CO_2 と H_2O が、HCCI 燃焼の熱発生に関する素反応に化学的な影響を与えると予想されるが、これは今後の研究課題である。続いて燃焼室内に EGR を導入しながら、酸素体積モル濃度を一定にするために過給をするとき(1→3)に、EGR 率が 0.4 になるまでは過給(初期圧力の増加)とともに最大圧力上昇率が上がるが、EGR 率が 0.5 になると急に下がる。過給により圧縮開始時の燃焼室内の酸素体積モル濃度が一定の条件で燃焼が起こると出力が増加する。それで燃料の着火特性に関係なく、EGR および過給により、出力を上げながら最大圧力を下げられる可能性が確認できた。

5. 7. 第5章のまとめ

本章では、DME、Methane、n-Heptane、i-Octane を想定供試燃料として選択し、最初にショックチューブにおける各想定供試燃料の着火遅れを比較した。次に燃焼位相を揃えた時において、HCCI エンジンにおける各想定供試燃料の燃焼特性を示し、HCCI 燃焼による圧力上昇率と熱発生率との関係を確認した。また熱発生率は燃焼時の圧力上昇率に大きく影響を与えるため、各想定供試燃料に対する寄与度行列を用いて、HCCI 燃焼の熱発生に寄与する重要な素反応を把握するとともに、各素反応の寄与度を確認した。続いて初期温度、初期圧力、当量比、EGR 率の変化が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認し、初期条件、燃焼位相、最大圧力上昇率との関係を把握した。最後に各想定供試燃料において、EGR および過給により変化する燃焼位相を揃えるために要求される初期温度を比較し、EGR および過給が各想定供試燃料の HCCI 燃焼における最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較した。

DME、n-Heptane、i-Octane は Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) からの反応モデルを使用し、Methane は Gas Research Institute (GRI) からの反応モデルを使用した。各想定供試燃料の着火特性を把握するため、初期圧力 (P_0) が 4.0MPa、当量比が 1.0 の条件において初期温度 500K~1428.571K の範囲で素反応数値計算を行い、ショックチューブでの各想定供試燃料の着火遅れを比較した。その結果、DME、n-Heptane、i-Octane の着火遅れでは、初期温度が上昇しても着火遅れが長くなる NTC (Negative Temperature Coefficient) 領域が現れたが、Methane の着火遅れでは NTC 領域が現れずに着火遅れが初期温度の上昇にほぼ比例して短くなる特徴があった。

HCCI エンジンにおける各想定供試燃料の燃焼特性を確認するため、エンジン回転速度が 1500rpm、当量比が 0.5、初期圧力が 0.1MPa、燃焼位相 (CA50) が初期温度の調節により 0deg aTDC (TDC) に揃えた条件で素反応数値計算を行った。各想定供試燃料において燃焼位相を CA50=0deg aTDC に揃えるために要求される初期温度は、DME の初期温度は 344.5K、Methane の初期温度は 570.6K、n-Heptane の初期温度は 361.7K、i-Octane の初期温度は 502.2K であった。Methane と i-Octane における HCCI 燃焼は低温酸化反応が現れなかったかが、DME と n-Heptane における HCCI 燃焼には低温酸化反応が現れた。HCCI 燃焼に低温酸化反応があると、低温酸化反応の熱発生により温度が上昇するため、燃焼位相を揃えるための初期温度を下げる必要があった。初期温度が下がると、HCCI 燃焼が割に低い温度で進行し、また最高到達温度も低くなるため、反応速度が遅くなることで熱発生による最大圧力上昇率が小さくなった。ただし、n-Heptane の場合、燃焼位相を揃えるために要求される初期温度が DME より高いにもかかわらず、最大圧力上昇率は DME より小さかった。

燃料の着火特性に関係なく、HCCI 燃焼による燃焼室内の圧力上昇率は熱発生率とほぼ同じに変わった

め、熱発生率の影響を大きく受けることが確認できた。ただし、各想定供試燃料における HCCI 燃焼の低温酸化反応と高温酸化反応の開始温度および終了温度が異なり、熱発生に関する素反応が異なるため、HCCI 燃焼における熱発生率の履歴が非常に異なった。それで寄与度行列を用いて、各想定供試燃料の HCCI 燃焼における熱発生に大きく寄与する素反応を確認した。HCCI 燃焼の熱発生に寄与する素反応は燃料により異なったが、発熱反応である $H+O_2(+M)=HO_2(+M)$, $HO_2+OH=H_2O+O_2$, $CO+OH=CO_2+H$ の素反応が各想定供試燃料の HCCI 燃焼における熱発生率に主に寄与することが共通に確認できた。

各想定供試燃料における初期温度が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較した。まず燃料の着火特性に関係なく、初期温度が上がると燃焼位相が進角するとともに、HCCI 燃焼の反応速度が早くなることで、最大圧力上昇率が増加した。ただし、低温酸化反応がない Methane と i-Octane における HCCI 燃焼の場合、初期温度の変化による最大圧力上昇率の変化が、低温酸化反応がある DME と n-Heptane における HCCI 燃焼の最大圧力上昇率の変化より大きかった。

各想定供試燃料における初期圧力が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較した。まず燃料の着火特性に関係なく、初期圧力が上がると燃焼位相が進角し、圧縮開始時の燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度の増加することで HCCI 燃焼による熱発生量が最も上昇するため、最大圧力上昇率が上がる。ただし DME と n-Heptane の HCCI 燃焼における低温酸化反応の熱発生量は、初期圧力により大きく変わるため、初期圧力による燃焼位相の変化は大きいですが、燃焼位相による最大圧力上昇率の変化は小さい。

各想定供試燃料における当量比が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較した。当量比が上がると燃料モル分率の増加により投入熱量が増えるため、HCCI 燃焼による熱発生量も増加し、また当量比が 1.0 に近づくと HCCI 燃焼の反応速度が早くなるため、燃焼室内の圧力上昇率が増加した。ただし当量比の増加による最大圧力上昇率の上昇の傾向は燃料により異なった。特に Methane の場合、当量比 0.8 から減少が始め、当量比 1.0 で急に下がった。DME と n-Heptane の場合、低温酸化反応による熱発生量は当量比により最も変わるため、初期圧力と燃焼位相の関係が明確に現れなかった。また燃焼位相が遅延しても最大圧力上昇率が増加することを確認した。

各想定供試燃料における EGR 率が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較した。燃料の着火特性に関係なく、EGR 率が上がると、燃焼室内ガスの比熱比および酸素体積モル濃度が下がることで燃焼位相が遅延し、また燃焼室内ガスの低い比熱比により HCCI 燃焼における熱発生が抑えられるため、燃焼室内の最大圧力上昇率が減少する。その中、大きな燃焼遅延による Methane における最大圧力上昇率の減少量が最も大きかった。これにより燃焼室内に EGR ガスを導入することは、燃料の着火特性が異なる HCCI 燃焼でも最大圧力上昇率を減少させる効果的な方法だと言える。

最後に各想定供試燃料に対し EGR および過給により変化する燃焼位相を揃えるために要求される初期温度を比較し、燃焼位相を揃えた時に EGR および過給が最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較した。燃料の着火特性に関係なく、EGR 率の増加とともに燃焼位相が遅延するため、燃焼位相を揃えるためには初期温度を上げる必要があった。しかし初期温度が高くなっても EGR ガスにより熱発生が抑えられ、最大圧力上昇率が減少した。燃焼室内に EGR を導入しながら酸素体積モル濃度を一定にするために過給をすると、燃焼位相を揃えるための初期温度は増加するが、最大圧力上昇率は下がった。過給により圧縮開始時の燃焼室内の酸素体積モル濃度が一定の条件で燃焼が起こると出力が増加するため、燃料の着火特性に関係なく、EGR および過給の同時適用により、出力を上げながら最大圧力を下げられる方法が確認できた。

第6章 リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンにおける EGR の影響

実エンジンの燃焼室内は素反応数値計算で用いた仮定(質量の保存則, エネルギー保存則, 理想気体, 断熱変化)と異なり, 全サイクルからの燃焼ガスが残留し, 燃焼室内に吸気する燃料と空気の予混合気が完全な均質ではないため燃焼室内ガスの組成はいつも不均質である. またシリンダの壁やピストンヘッドからの熱伝達があり, 燃焼室内ガスの温度も不均質である. 燃焼室内ガスの組成や温度の不均質性は HCCI 燃焼に大きく影響を与えるため, 素反応数値解析から得られた HCCI 燃焼に及ぼす EGR の影響について実験で確かめる必要がある.

第6章では, 素反応数値解析から得られた DME の HCCI 燃焼に及ぼす EGR の影響を確認および比較するため, リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンを用いて実験を行う. まず外部 EGR の導入による燃焼室内の各ガスの質量および温度の変化を確認し, 圧縮開始時の質量平均ガス温度を算出する. 算出した質量平均ガス温度と燃焼位相の関係を示し, 燃焼位相が最大圧力上昇率に及ぼす影響を把握する. 最後に定常運転時と燃焼位相の遅延による非定常運転時における燃焼室内に供給される圧縮開始時の燃料, 空気, 外部 EGR, リブレッシング EGR の質量と温度および質量平均ガス温度のサイクル変動比較し, 定常運転時と非定常運転時に現れる CA50 および IMEP の変動についてリターンマップにより示す.

6. 1. リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンにおける EGR の影響

本章では小型発電機に用いられている空冷単気筒 4 ストロークエンジン, Honda GX340K1 を使用する. 図6-1にリブレッシング EGR 型 HCCI エンジンの外観写真を, 表6-1にリブレッシング EGR 型 HCCI エンジンの緒元を示す. 基はガソリンエンジンだが HCCI 燃焼の研究のため HCCI エンジン用に改造した. 燃焼室内上の中心にあったスパークプラグの代わりに圧力センサーを設置している. 吸気バルブと排気バルブが一つずつある.

6. 1. 1. ツーステージエキゾーストカムおよび外部 EGR ループ

図6-2にリブレッシング EGR 型 HCCI エンジンのシステムを示す. まずリブレッシング EGR 型 HCCI エンジンの最大の特徴はツーステージエキゾーストカム(Two-stage exhaust cam)である. 図6-3に吸気バルブと排気バルブの開閉タイミングとバルブリフト量を示す. 横軸に圧縮上死点を基準としたクランク角度をとり, バルブリフト量をとっている. 青線が吸気バルブ, 赤線と茶色線が排気バルブ履歴である. ツーステージエキゾーストカムにより吸気行程の途中で排気バルブがもう一回開くことで, 排気行程により排出された排気ガスが燃焼室内に再導入される. 排気ガスは行きガスが吸気行程で燃焼室内に再導入する現象をエキゾーストリブレッシング(Exhaust rebreathing)と言って, 燃焼室内に再導入された排気ガスはリブレッシング EGR (Rebreathing EGR: REGR)と言う. エキゾーストリブレッシングにより燃焼室内にリブレッシング EGR が増えると, 燃焼室内ガスの温度が上昇するとともに中間生成物の量も増加する. このリブレッシング EGR 型 HCCI エンジンには外部 EGR(External EGR: EEGR) ループもある. 排気行程により排出された排気ガスが EGR クーラーを通過して, 供給される空気と混ざりながら燃焼室内に供給される. 外部 EGR には CO_2 と H_2O が多いため, 燃焼室内に外部 EGR が増えると比熱比が下がる.

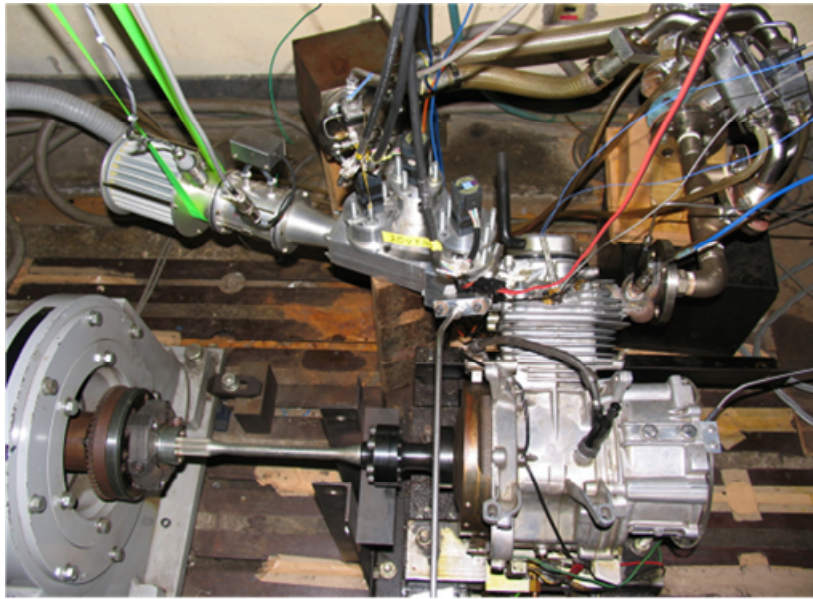


図6-1 リブレス EGR 型 HCCI エンジンの外観写真

表6-1 リブレス EGR 型 HCCI エンジンの緒元

Engine type	4stroke
Displacement (single cylinder)	337.81 cm ³
Bore	82 mm
Stroke	64 mm
Connecting rod length	112 mm
Compression ratio	10.76
Number of valves	2
Maximum power	7.1kW@3600rpm
Maximum torque	22.1N·m@2500rpm

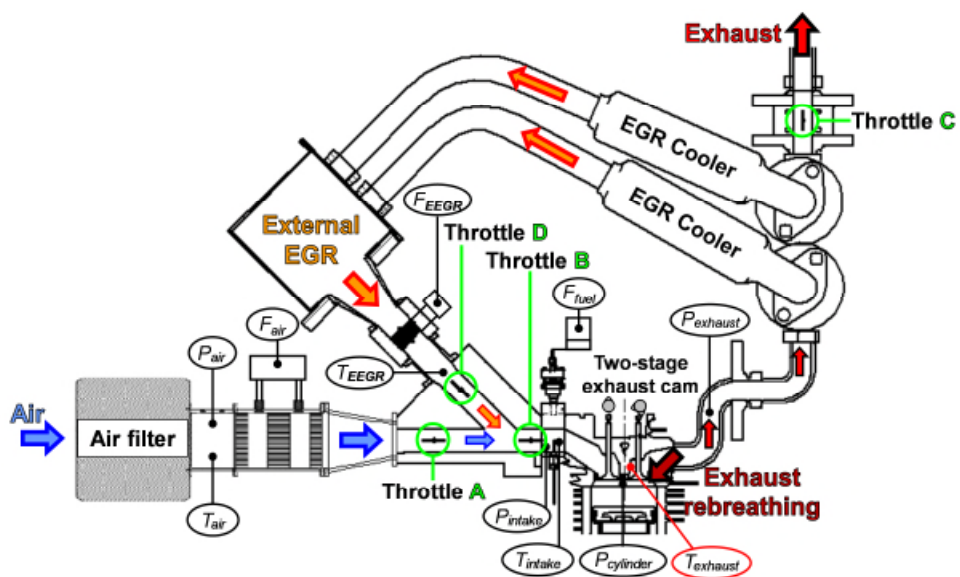


図6-2 リブレス EGR 型 HCCI エンジンのシステム

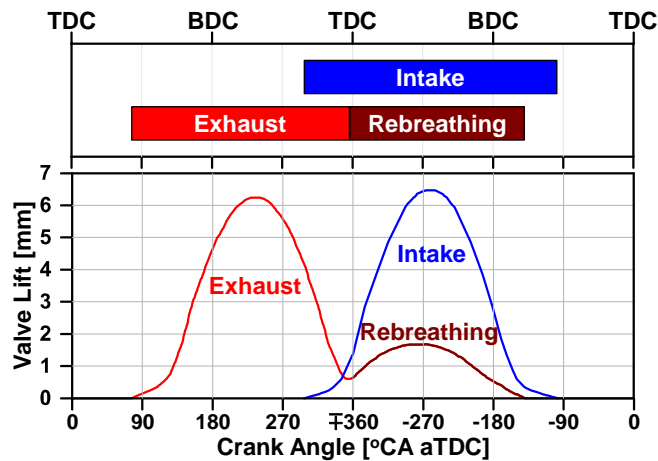


図6-3 バルブ開閉タイミングとバルブリフト量

6. 1. 2. 各ガスの流量, 圧力, 温度の計測システム

実エンジンでは吸気行程により燃焼内に供給される予混合気の温度および組成が均質ではないため、HCCI 燃焼に大きく影響を与えると考えられる圧縮開始時の燃焼室内ガスの状態を把握する必要がある。そのため燃焼室内に供給される各ガスの質量と温度を計測することが重要である。リブレス EGR 型 HCCI エンジンにはいくつかの流量計, 圧力センサー, 熱電対が付いていて, 燃料, 空気, 外部 EGR, リブレス EGR の流量, 圧力, 温度の計測ができる。各物理量の計測位置を図6-2に示す。流量計測の場合, 3つの流量計を用いて空気流量(F_{air}), 吸気流量(F_{intake}), 燃料流量(F_{fuel})を計測する。燃料の噴射量は, 燃焼流量とインジェクタの開弁期間を操作することで制御する。圧力計測の場合, 4つの圧力センサーを用いて空気圧力(P_{air}), 吸気圧力(P_{intake}), 排気圧力($P_{exhaust}$), 燃焼室内ガスの圧力($P_{cylinder}$)を計測する。温度計測の場合, 4つの熱電対を用いて空気温度(T_{air}), 吸気温度(T_{intake}), 外部 EGR 温度(T_{EEGR}), 排気温度($T_{exhaust}$)を計測する。特に排気ガスの温度は次サイクルの圧縮開始時の質量平均ガス温度に大きく影響を与えるため, 正確に排気ガス温度を計測するためには排気行程により排出される燃焼後の排気ガスの温度と吸気行程により再導入されるリブレス EGR の温度を短い時間で速やかに計測する必要がある。そこで, 高感度の

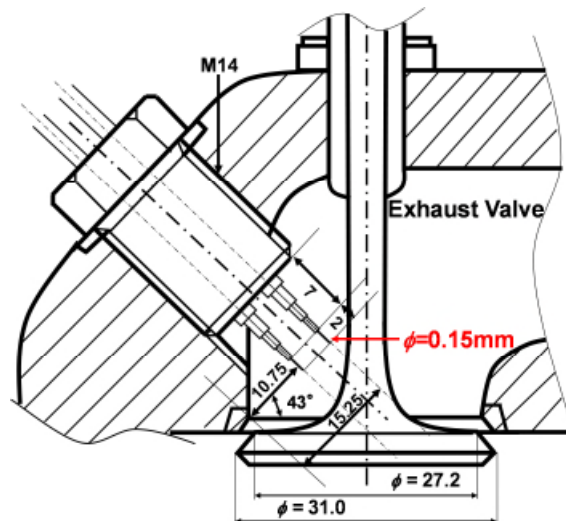


図6-4 排気ガスおよびリブレス EGR の温度を計測する熱電対の設置箇所と緒元

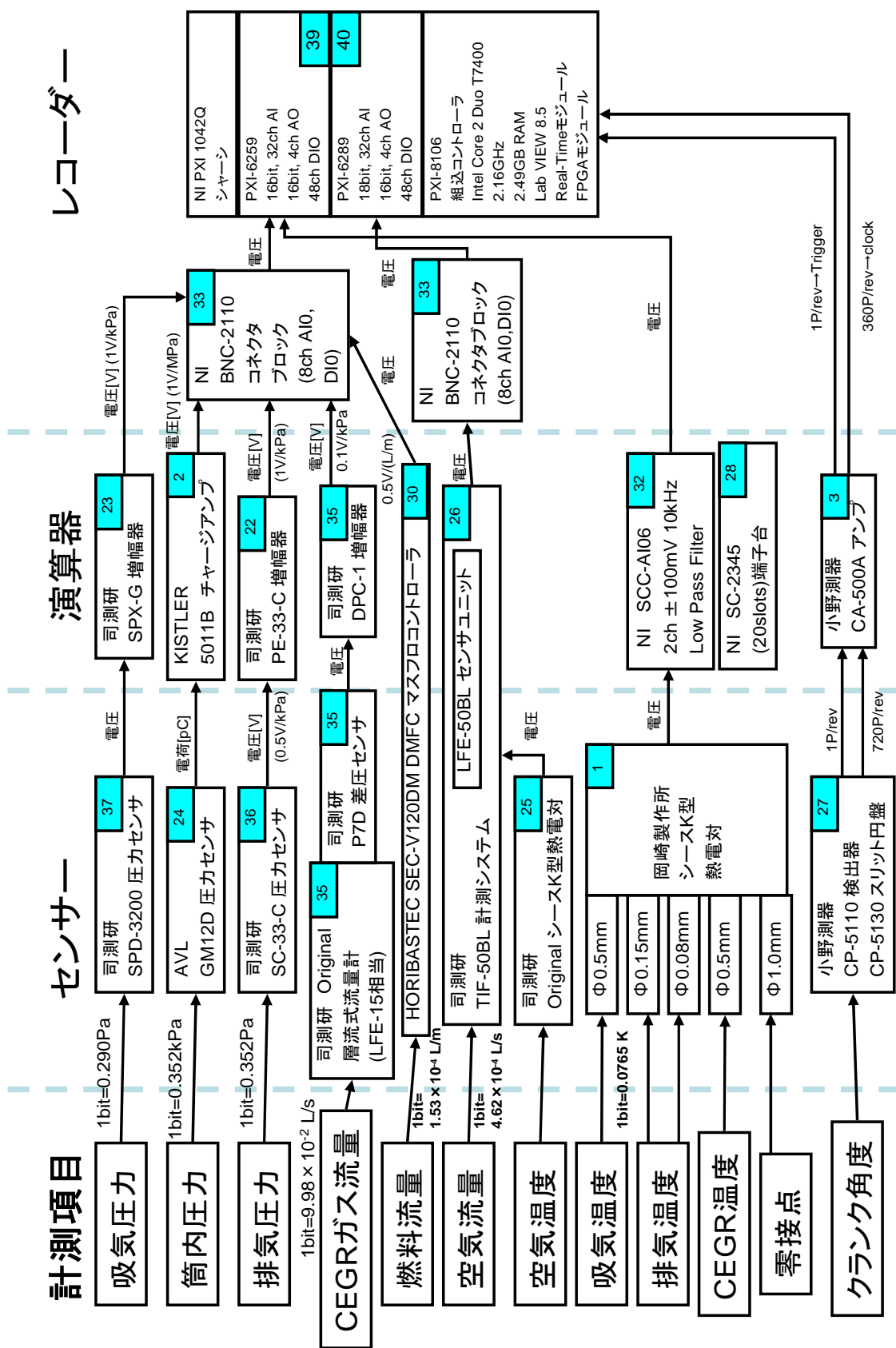


図6-5 計測システム系統図

細い熱電対($\phi=0.15\text{mm}$)を排気バルブの近くに設置し、燃焼後の排気ガスの温度と再導入されるリブレスィング EGR の温度を計測し、リブレスィング EGR (REGR) の温度を質出する。図6-4に排気ガスおよびリブレスィング EGR の温度を計測する熱電対の設置個所と諸元を示す。最後に全体の計測システム系統を図6-5に示す。この計測システム系統により、各ガスの流量、圧力、温度をクランク角度 1deg ずつ計測し記録する。

6. 1. 3. スロットルバルブ

リブレスィング EGR 型 HCCI エンジンには4つのスロットルバルブがあり(Throttle A, Throttle B, Throttle C, Throttle D)、図6-2に緑線で各スロットルの位置が表示されている。各スロットルの開度を別々に変更されることで、圧縮開始時の燃焼室内に供給される空気、外部 EGR、リブレスィング EGR の質量の調節ができる。大気から空気フィルターを通過して、吸気管に入る空気(Air)はスロットル A とスロットル B により調節され、吸気系、吸気バルブの隙間を通り、燃焼室内に供給される。外部 EGR (EEGR) は、排気された既燃ガスが EGR ループを通る途中で EGR クーラーにより空気と同程度まで冷却され、スロットル D により吸気系に導いたものであり、吸気系にて空気と混合し、スロットル B により調節され燃料室内に供給される。リブレスィング EGR (REGR) は、排気バルブから排出された既燃ガスを、吸気行程において排気バルブを開くことで、もう一度シリンダ内に供給させることであり、スロットル C により調節される。燃料は燃料流量計より調節され、吸気バルブ直前の吸気マニホールド内にインジェクタから噴射する。噴射された燃料は、空気と外部 EGR と混合し、燃焼室内に供給される。それで吸排気系設けた 4 つのスロットル開度を操作することにもインジェクタの噴射期間により燃料の噴射量を制御することで燃焼室内に供給される空気、外部 EGR、リブレスィング EGR、燃料の供給比が調整できる。図6-6にリブレスィング EGR 型 HCCI エンジンの燃焼室内に供給される各ガスの模式図を示す。

スロットルの開度が燃焼室内に供給される各ガスの供給比に及ぼす影響を確認するため、まず空気のみのモータリング時にスロットル A とスロットル D の開度が圧縮開始時の燃焼室内に供給されるの空気 (Air)、

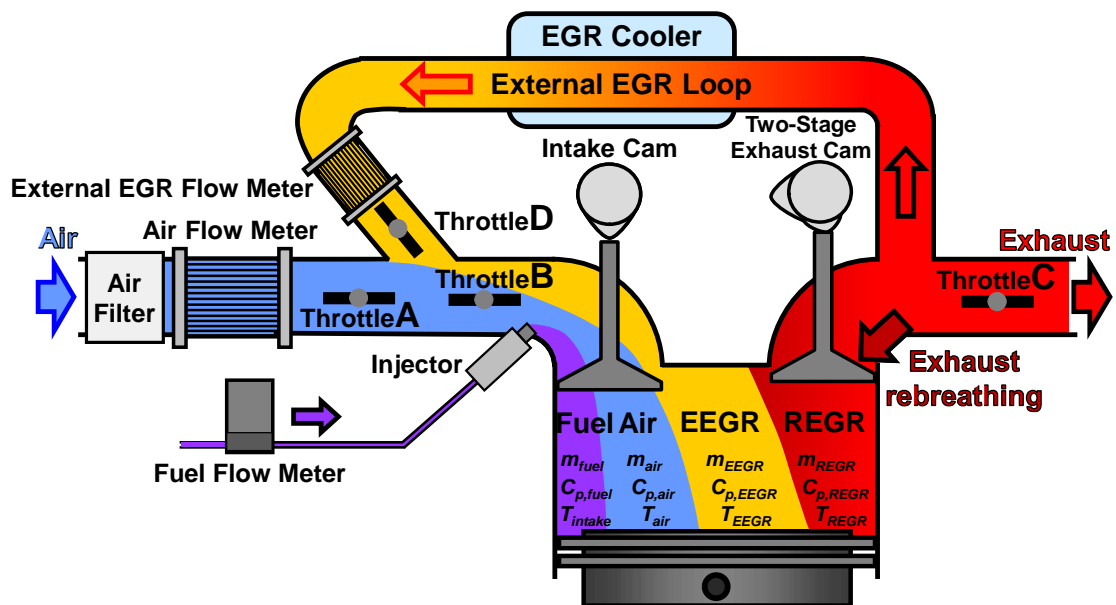


図6-6 リブレスィング EGR 型 HCCI エンジンの燃焼室内に供給される各ガスの模式図

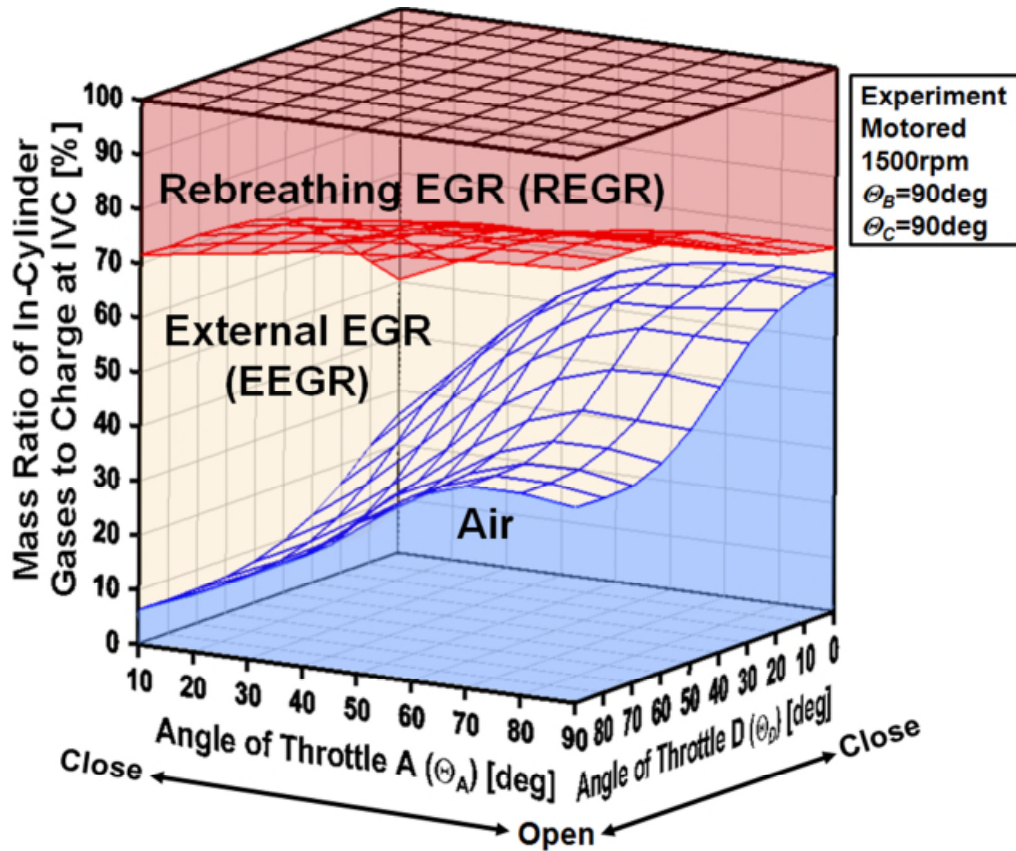


図6-7 スロットル A とスロットル D の開閉により燃焼室内に供給される圧縮開始時の空気、外部 EGR、リブレスニング EGR の質量比の変化(モータリングの時)

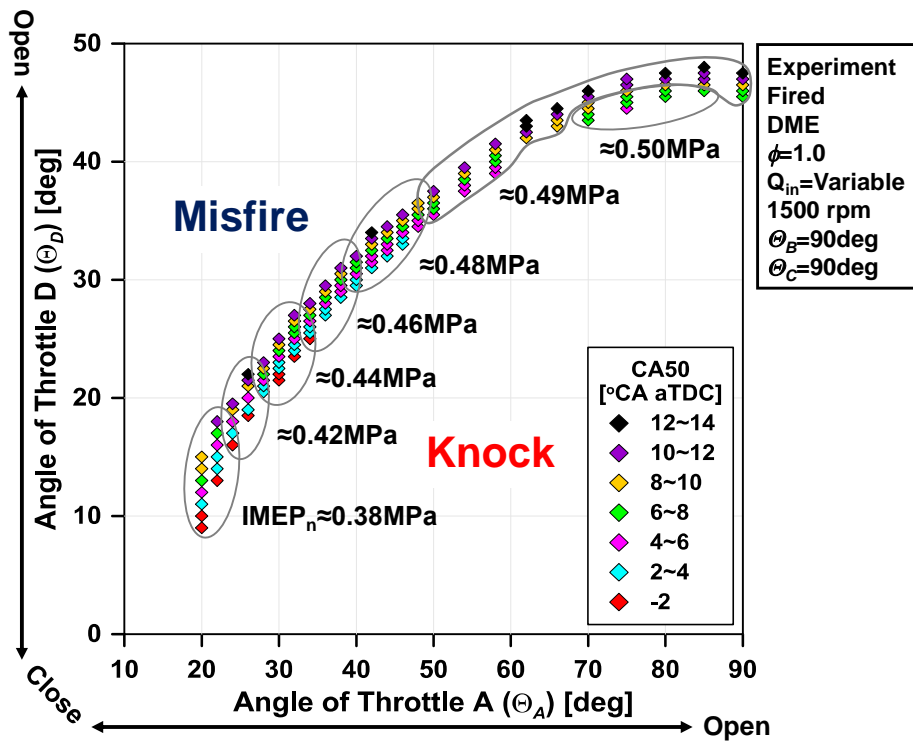


図6-8 スロットル A とスロットル D の開閉によるリブレスニング EGR 型 HCCI エンジンの運転可能範囲

外部 EGR (EEGR), リブレッシング EGR (REGR) の質量比に及ぼす影響を図 6-7 に示す。スロットル A とスロットル D のみの影響を明確に確認するため、スロットル B およびスロットル C は全開 (90 度) に固定している。スロットル A を開くことで、空気の質量を増やすことができる。またスロットル D を開くことで、外部 EGR の質量を増やすことができる。ただし燃焼室内に供給される空気、外部 EGR, リブレッシング EGR は相互に関係しており、スロットル A とスロットル D の開度に対し空気の質量と外部 EGR の質量が比例しない。例えばスロットル A を開くと空気が増加するとともに低温 EGR ガスが減少する。よって、1 つのスロットルだけで圧縮開始時の燃焼室内に供給される各ガスの供給比を制御することができないため、各スロットルの開度を同時に調整する必要がある。

図 6-8 にスロットル A とスロットル D の開閉および燃料の噴射量の操作による、リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンの運転可能範囲を燃焼位相および IMEP とともに示す。スロットル A とスロットル D の開閉により変化する燃焼室内に供給される空気の質量に対して、当量比が 1.0 になるように供給燃料量をインジェクタの噴射期間により制御した。スロットル A を開き、量論比予混合気を増加させ、IMEP を増加させることで失火を抑える。スロットル D を開き、外部 EGR の質量を増加させ、燃焼位相を遅延させることでノッキングを抑える。本研究では、集録した 64 サイクルのデータの中で 1 つのサイクルでも最大圧力上昇率が 0.4MPa/deg 以上となった場合、ノッキングが起きる可能性が高いため、ノッキング (Knock) とする。また IMEP の変動係数が 9% 以上の値をとる時、不完全燃焼により大きなサイクル変動が起こるため失火 (Misfire) と定義する。それで、IMEP の変動係数 (Coefficient of Variation: COV) 9% 未満かつ、最大圧力上昇率 0.4MPa/deg 未満の時を定常運転時と判断する。図 6-8 の中でプロットの色は、燃焼位相の値を示している。灰色で囲った範囲は、IMEP がある値の範囲内にあるプロットを示している。スロットル A およびスロットル D の開度を小さくすれば、相対的なリブレッシング EGR の質量が増え、低 IMEP でも失火が起こらずに燃焼を維持することができる。高 IMEP を得ようとする時には、燃料噴射量を増やすとともにスロットル A とスロットル D の開度を大きくし、燃焼位相を遅延させ燃焼させることで、ノッキングをさけた安定燃焼を維持している。しかし、高 IMEP 側に行くにしたがい、失火とノッキングの間の領域が狭くなる。つまり、高 IMEP 側に行くにしたがい制御が難しくなることが予想される。そこで本論文の実験で用いるリブレッシング EGR 型 HCCI エンジンは、エンジン回転速度 1500rpm, 燃料 DME, 当量比 1.0 の条件で、各スロットルの開度および燃焼の噴射量を手動で操作により、IMEP を 0.38MPa~0.50MPa の範囲で運転できることが確認できた。

6. 1. 4. 圧縮開始時の質量平均ガス温度

HCCI 燃焼は燃料と空気および化学種間の化学反応によって進行するため、圧縮開始時の燃焼室内ガスの状態 (温度, 圧力, 組成等) により着火時期および燃焼過程が大きく変わる。その中、3. 3 節の素反応数値計算により確認したように、初期温度 (T_0)、実験では圧縮開始時の燃焼室内ガスの温度が HCCI エンジンにおける燃焼の燃焼位相および最大圧力上昇率に最も影響を与えられと考えられるため、まず圧縮開始時の燃焼室内ガスの温度を算出する必要がある。実エンジンの燃焼室内ガスには必ず温度と組成の不均質が存在する。そのため圧縮開始時の燃焼室内ガスの温度として、燃焼室内ガスの不均質性を考慮する質量平均ガス温度 (T_{AV}) を選択する。質量平均ガス温度はリブレッシング EGR 型 HCCI エンジンの燃焼室内に供給される 4 つのガス (空気 (Air), 燃料 (fuel), 外部 EGR (EEGR), リブレッシング EGR (REGR)) は、計測した各ガスの定圧比熱 ($C_{p,fuel}$, $C_{p,Air}$, $C_{p,EEGR}$, $C_{p,REGR}$), 質量 (m_{fuel} , m_{Air} , m_{EEGR} , m_{REGR}), 温度 (T_{fuel} , T_{Air} , T_{EEGR} , T_{REGR}) を用

いて式 6-1 により計算される。

$$\bar{T}_{IVC} = \frac{C_{p_fuel} m_{fuel} T_{in} + C_{p_Air} m_{Air} T_{Air} + C_{p_EEGR} m_{EEGR} T_{EEGR} + C_{p_REGR} m_{REGR} T_{REGR}}{C_{p_fuel} m_{fuel} + C_{p_Air} m_{Air} + C_{p_EEGR} m_{EEGR} + C_{p_REGR} m_{REGR}} \quad (式 6-1)$$

c_p : 定圧比熱 [J/(K·kg)]

m : ガス質量 [kg/cycle]

T : ガス温度 [K]

Air : 空気

$fuel$: 燃料

$EEGR$: 外部 EGR

$REGR$: リブレッシング EGR

吸気側のバルブが閉じてから、化学反応が開始し熱発生が始まるまで、もしくは、熱発生がない場合は排気側のバルブが開くまで、燃焼室内ガスは断熱変化しているものとみなせるので、燃焼室内ガスの平均温度に関しては式 6-2 が成り立つ。また、熱発生が始まってから排気側のバルブが開くまでは、気体の状態方程式、式 6-3 により、燃焼室内ガスの平均温度を求めている。

$$T_c(\theta) = \bar{T}_c(\theta_{IVC}) \left(\frac{V_c(\theta_{IVC})}{V_c(\theta)} \right)^{\kappa-1} \quad (式 6-2)$$

$$T_c(\theta) = \frac{P_c(\theta) \cdot V_c(\theta)}{n \cdot R} \quad (式 6-3)$$

T_c : 燃焼室内ガスの平均温度 [K]

$T_{c(\theta_{IVC})}$: 圧縮開始時の質量平均ガス温度 [K]

$V_c(\theta)$: 燃焼室内ガスの体積 [m³]

$V_{c(\theta_{IVC})}$: 圧縮開始時ガス体積 [m³]

κ : 比熱比

n : モル数 [mol]

R : 一般ガス定数 [J/(mol·K)]

6. 2. リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンにおける EGR の影響

6. 2. 1. EGR 導入による質量平均ガス温度の変化が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響

HCCI エンジンにおける燃焼は燃料と空気の化学反応に大きく依存しており、燃焼位相の制御および高負荷運転時での急峻な圧力上昇率によるノッキングの発生が課題としてある。燃焼時の圧力上昇率を抑える方法として、外部 EGR の導入により燃焼位相を膨張行程まで遅延させ、燃焼室内ガスの膨張により最大圧力上昇率を防ぐことがある。しかし燃焼位相が過度に遅延し膨張行程に入りすぎると、燃焼室内ガスの膨張による温度低下の効果が強すぎて安定な燃焼が起こり、燃焼のサイクル変動が大きくなる。本章では、リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンを用いてまず外部 EGR 導入による燃焼室内ガスの質量と温度の変化が圧縮開始時の質量平均ガス温度に及ぼす影響を確認した後、質量平均ガス温度と燃焼位相との関係を示す。その上、導入される外部 EGR と外部 EGR 導入による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認する。

図6-9にスロットル D の開閉により燃焼室内に供給される圧縮開始時の燃料、空気、外部 EGR、リブレッシング EGR の質量と温度および質量平均ガス温度の変化を示す。まず圧縮開始時の各ガスの質量の場合、スロットル D を開くほど外部 EGR の質量が増える代わりに、空気とリブレッシング EGR の質量が減少する。

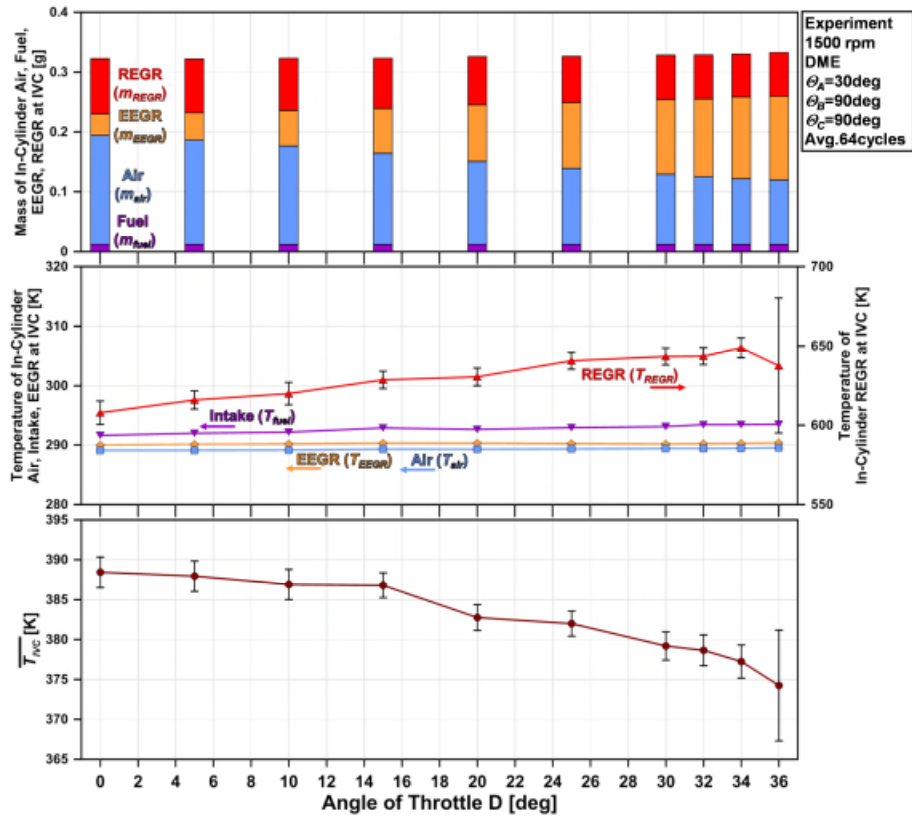


図6-9 スロットル D の開閉により燃焼室内に供給される圧縮開始時の燃料，空気，外部 EGR，リブレスイング EGR の質量と温度および質量平均ガス温度の変化

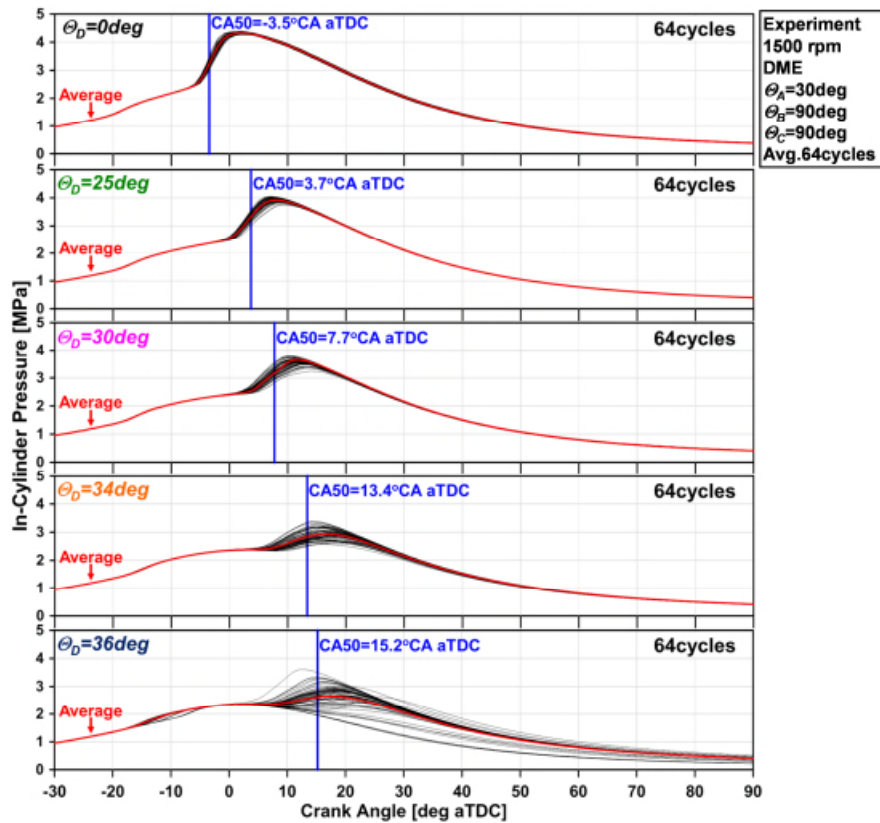


図6-10 スロットル D の開閉による燃焼位相の変化が HCCI 燃焼に及ぼす影響

その結果、EGR 率(EGR 率の定義は圧縮開始時における外部 EGR 質量とリブレッシング EGR 質量が全体のガス質量に占める割合とする)が上がるとともに質量平均ガスの温度が低下し、ガス密度が上昇することで、供給した総ガス質量が増加する。圧縮開始時の各ガスの温度の場合、スロットル D を開けても空気と外部 EGR の温度は変わらないが、リブレッシング EGR ガス温度が上昇する。しかし、スロットル D 開度が 36 度の時にリブレッシング EGR 温度は下がり、サイクル毎の大きな変動が見える。図6-9に示す圧縮開始時の質量平均ガス温度は、式 6-1 によって算出される質量平均ガス温度である。この温度は、6. 1. 4 節で説明したように各ガスそれぞれの質量および温度により算出される。スロットル D を開くほど質量平均ガス温度が低下し、質量平均ガス温度のサイクル変動も大きくなる。質量平均ガス温度のサイクル変動による HCCI 燃焼のサイクル変動を確認するため、図6-10にスロットル D の角度が 0, 25, 30, 34, 36deg に現れた 64 サイクル燃焼室内ガスの圧縮および64サイクルの平均燃焼位相を示す。スロットルDを開くほど質量平均ガス温度が減少することで燃焼位相が遅延し、64 サイクルの燃焼室内ガスの圧力が平均値に大きく外れることで、燃焼室内ガスの圧力の変動が大きくなることが確認できる。

まず図6-11に圧縮開始時の質量平均ガス温度と燃焼位相との関係を示す。素反応数値計算から得られた結果(図3-15)の傾向と同様に、圧縮開始時の燃焼室内ガスの温度(素反応数値計算では初期温度(T_c))

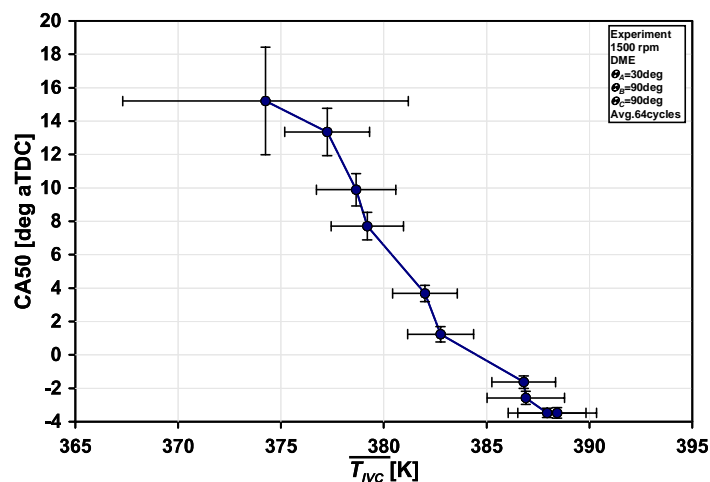


図6-11 実験での圧縮開始時の質量平均ガス温度と燃焼位相との関係

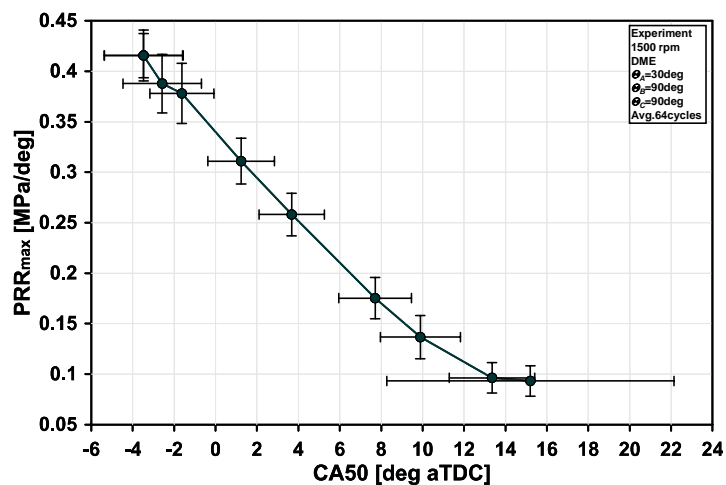


図6-12 実験での外部 EGR 導入による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響

が下がると燃焼位相が遅延することが明確に見える。ただし、1サイクル燃焼を考慮する素反応数値計算と異なり、実験では64サイクルの燃焼を考慮するため、質量平均ガス温度のサイクル変動による燃焼位相のサイクル変動を確認する必要がある。質量平均ガス温度が高い時は、質量平均ガス温度のサイクル変動が現れても燃焼位相のサイクル変動は小さいが、質量平均ガス温度の減少とともに質量平均ガス温度のサイクル変動が大きくなると燃焼位相のサイクル変動が最も大きくなる。続いて外部 EGR 導入による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を図6-12に示す。素反応数値計算から得られた結果(図3-26)の傾向と同様に、燃焼位相の遅延により最大圧力上昇率が下がる。しかし、燃焼位相の遅延とともに燃焼位相のサイクル変動が大きくなっても、最大圧力上昇率のサイクル変動は小さくなる。これは燃焼位相が過度に遅延しすぎて、ほとんどの燃焼が失火してしまうため、燃焼位相のサイクル変動が増加しても最大圧力上昇率のサイクル変動は小さくなったと考えられる。

6. 2. 2. 燃焼位相の遅延による HCCI 燃焼のサイクル変動

外部 EGR の導入により圧縮開始時の質量平均ガス温度が下がることで、燃焼位相が遅延し最大圧力上昇率は最も減少する。しかし燃焼位相が過度に遅延すると、不完全燃焼により HCCI 燃焼のサイクル変動が大きくなるため、燃焼位相遅延の限界が現れた。HCCI エンジンの課題である高負荷運転時の急峻な圧力上昇率によりノッキングの発生を抑える効果的な方法である外部 EGR の導入による燃焼位相を HCCI エンジンに適用するためには、まず燃焼位相の遅延により生じる燃焼室内ガスの質量および温度のサイクル変動と質量平均ガス温度のサイクル変動との関係を把握する必要がある。また燃焼室内ガスの質量および温度のサイクル変動が燃焼位相および IMEP のサイクル変動に及ぼす影響について確認することが重要である。本節ではスロットル D の角度が 34deg (64 サイクルの CA50 平均値が 13.46deg aTDC: 定常運転時) と 36deg (64 サイクルの CA50 平均値が: 非定常運転時) の条件で現れた結果を比較する。まず定常運転時(上)と非定常

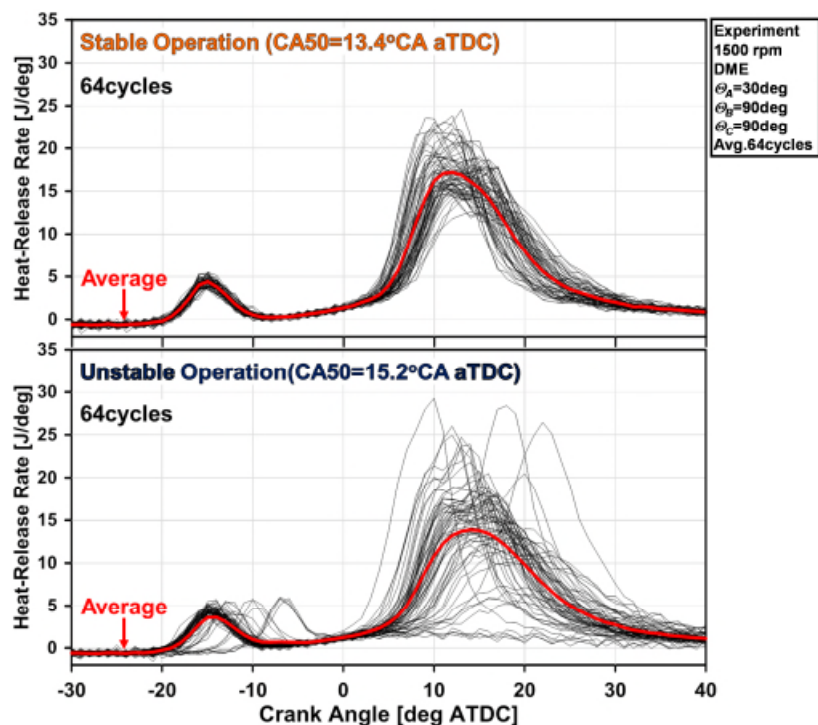


図6-13 定常運転時(右)と非定常運転時(右)における64サイクルの熱発生率比較

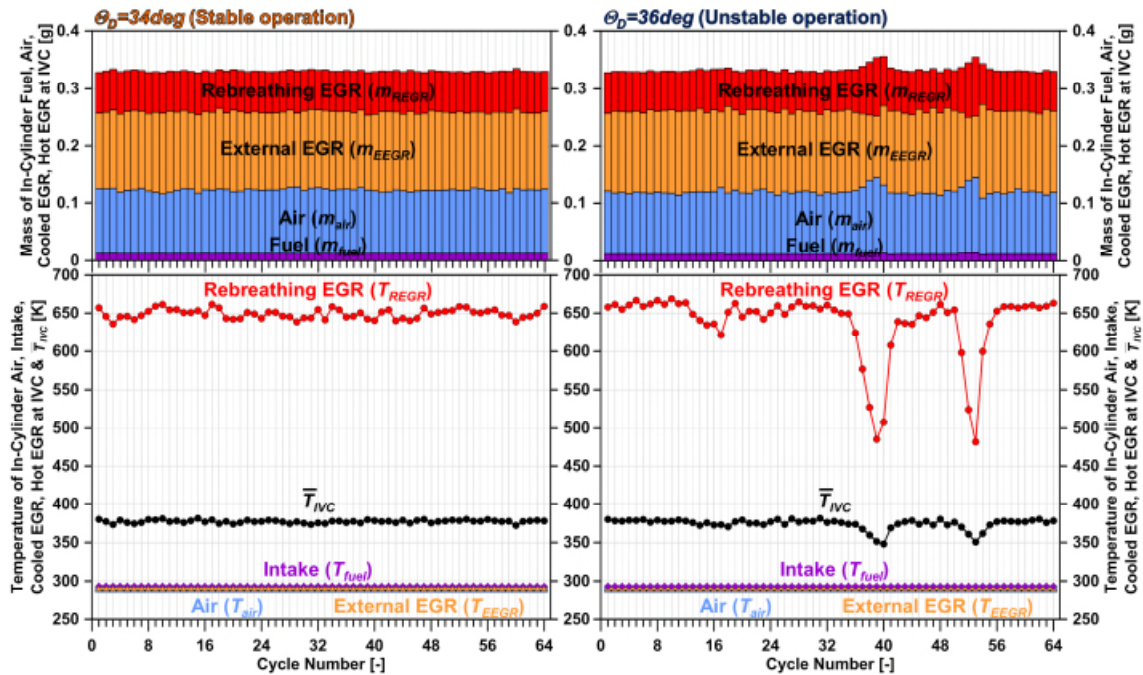


図6-14 定常運転時(左)と非定常運転時(右)における燃焼室内に供給される圧縮開始時の燃料, 空気, 外部EGR, リブレスィングEGRの質量と温度および質量平均ガス温度のサイクル変動を比較

運転時(下)に対する64サイクルの熱発生率を図6-13に示す。赤線は64サイクルの熱発生率の平均値である。定常運転での低温酸化反応による各サイクルの熱発生率は平均値とほとんど一致しており、高温酸化反応による各サイクルの熱発生率もサイクル変動が少し見えるが平均値に近い。一方、非定常運転時では低温酸化反応と高温酸化反応による各サイクルの熱発生率の開始時期およびピークのサイクル変動が最も大きく、その平均値が定常運転時での平均値より低い。

図6-14に定常運転時(左)と非定常運転時(右)における燃焼室内に供給される圧縮開始時の燃料, 空気, 外部EGR, リブレスィングEGRの質量と温度および質量平均ガス温度のサイクル変動を比較する。定常運転時の場合(左), 燃焼室内の燃料, 空気, 外部EGR, リブレスィングEGRの質量および温度のサイクル変動が小さいことで, 質量平均ガス温度のサイクル変動が小さい。一方, 非定常運転時の場合(右), 1サイクルから33サイクルまでの燃焼室内の燃料, 空気, 外部EGR, リブレスィングEGRの質量および温度のサイクル変動による質量平均ガス温度のサイクル変動は定常運転時とほぼ同じに小さいが, 34サイクルから41サイクルまでと48サイクルから54サイクルまでの際には, 空気の質量と外部EGRの質量が上がって下がり, またリブレスィングEGRの質量が下がり上がることで, 質量平均ガス温度が下がり上がるサイクル変動が現れる。しかし空気の温度, 外部EGRの温度, 燃料の温度(燃料温度は吸気温度に仮定する)はHCCI燃焼のサイクル変動に関係なくほとんど一定である。

図6-10に示したように燃焼位相の遅延による質量平均ガス温度のサイクル変動はHCCI燃焼のサイクル変動に最も影響を与えるため, 定常運転時と非定常運転時におけるCA50およびIMEPのサイクル変動の傾向を比較する必要がある。まず図6-15に定常運転時(オレンジ)と非定常運転時(ネイビー)におけるCA50のサイクルの変動をリターンマップにより比較する。CA50のリターンマップは横軸にnサイクル目のCA50を, 縦軸にn+1サイクル目のCA50示している。定常運転時のCA50のサイクル変動は小さいめ, 約10deg aTDC ~ 15deg aTDCの中央に集まりプロットの範囲が狭い。それに比べて非定常運転時のCA50のサイクル変動

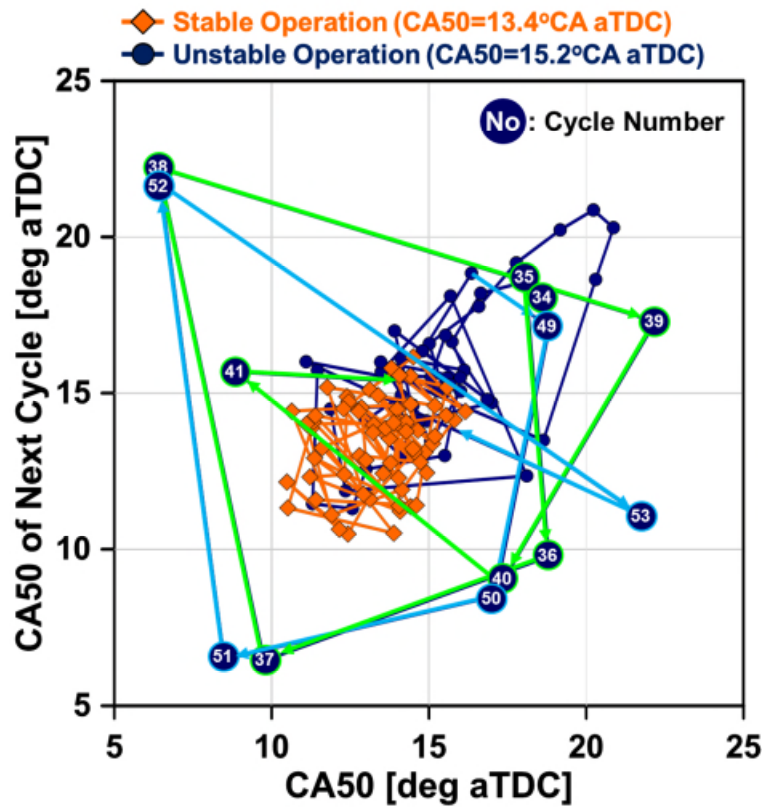


図6-15 定常運転時(オレンジ)と非定常運転時(ネイビー)におけるCA50のリターンマップの比較

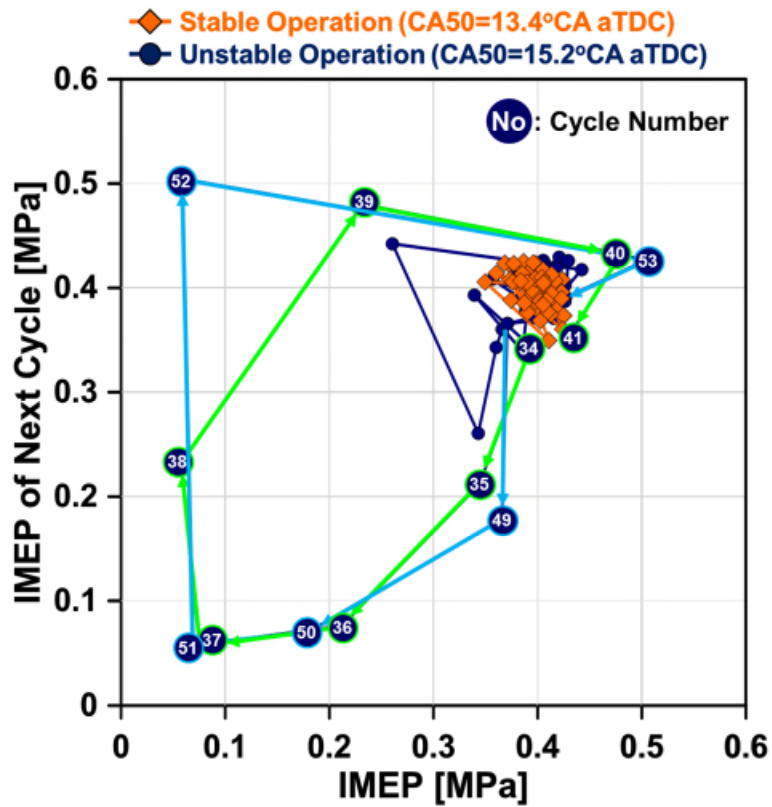


図6-16 定常運転時(オレンジ)と非定常運転時(ネイビー)におけるIMEPのリターンマップの比較

は大きいため、プロットの範囲が広い。CA50 の変動数値は定常運転時に 10.6%であり、非定常運転時変に 21.2%である。続いて図6-16に定常運転時(オレンジ)と非定常運転時(ネイビー)における IMEP のサイクルの変動をリターンマップにより比較する。横軸に n サイクル目の IMEP を、縦軸に $n+1$ サイクル目の IMEP を示している。定常運転時での IMEP は約 0.4MPa 付近に集中している。それに比べて非定常運転時は、IMEP が小さい領域から大きい領域まで、時計周りの方向にサイクル変動が起こる。図6-14で確認した 34 サイクルから 41 サイクルまでと 48 サイクルから 54 サイクルまでの間に現れた燃焼室内の燃料、空気、外部 EGR、リブレッシング EGR の質量および温度のサイクル変動による質量平均ガス温度のサイクル変動により、IMEP のサイクル変動が周期的な変化をしていることが確認できる。IMEP の変動係数は定常運転時の 3.6% に比べ、非定常運転時は 23.3%で最も増加した。

前サイクルが不完全燃焼により失火または部分燃焼が起こると、リブレッシング EGR の温度は低下し、次サイクルも不完全燃焼になるため、圧縮開始時の質量平均ガス温度が低下し、IMEP も低下する。しかし、圧縮開始時の質量平均ガス温度が最も低いサイクルで IMEP が最大になることが、38 サイクルと 52 サイクルに現れた。この原因を化学的な影響によるものであると考え、第7章では素反応数値計算に基づいてリブレッシング EGR ガスが燃焼位相に及ぼす影響を調査する。

6. 6. 第6章のまとめ

素反応数値解析から得られた、DME の HCCI 燃焼に及ぼす EGR の影響を実験で確認するため、リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンを用いて実験を行った。まず外部 EGR の導入による燃焼室内の各ガスの質量および温度の変化を確認し、圧縮開始時の質量平均ガス温度を算出した。算出した圧縮開始時の質量平均ガス温度と燃焼位相の関係を示し、燃焼位相が最大圧力上昇率に及ぼす影響を把握した。最後に定常運転時と燃焼位相の遅延による非定常運転時における燃焼室内に供給される圧縮開始時の燃料、空気、外部 EGR、リブレッシング EGR の質量と温度および質量平均ガス温度のサイクル変動比較し、定常運転時と非定常運転時に現れる CA50 および IMEP の変動についてリターンマップにより示した。

リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンではスロットル D を開くほど、外部 EGR の質量が増える代わりに空気とリブレッシング EGR の質量が減少した。また空気と外部 EGR の温度は変わらなかったが、リブレッシング EGR ガス温度が上昇した。燃焼室内に供給される空気、燃料、外部 EGR、リブレッシング EGR により算出される質量平均ガスの温度が下がることで燃焼位相が遅延し、HCCI 燃焼のサイクル変動が生じた。質量平均ガス温度のサイクル変動による燃焼位相のサイクル変動は、質量平均ガス温度が高い時には質量平均ガス温度のサイクル変動が現れても燃焼位相のサイクル変動は小さいが、質量平均ガス温度の減少とともに質量平均ガス温度のサイクル変動が大きくなると燃焼位相のサイクル変動も最も大きくなるのが確認できた。素反応数値計算の結果と同じように、燃焼位相の遅延により最大圧力上昇率は下がるが、燃焼位相の遅延とともに燃焼位相のサイクル変動が大きくなっても、逆に最大圧力上昇率のサイクル変動は小さかった。これは燃焼位相が過度に遅延しすぎて、ほとんどの燃焼が失火してしまうため、燃焼位相のサイクル変動が増加しても最大圧力上昇率のサイクル変動は小さくなったと言える。しかし燃焼位相が過度に遅延すると、不完全燃焼により HCCI 燃焼のサイクル変動が大きくなるため、燃焼位相遅延の限界が現れた。それで、定常運転時と非定常運転時に対する 64 サイクルの熱発生率を比較すると、定常運転での熱発生率は平均値とほとんど一致して上がり、非定常運転時での熱発生率の開始時期およびピークのサイクル変動が最も大きくなった。

続いて定常運転時と非定常運転時における燃焼室内に供給される圧縮開始時の燃料, 空気, 外部 EGR, リブレスニング EGR の質量と温度および質量平均ガス温度のサイクル変動を比較すると, 定常運転時ではサイクル変動が小さいことで, 質量平均ガス温度のサイクル変動が小さかったが, 非定常運転時では空気の質量と外部 EGR の質量が上がって下がり, またリブレスニング EGR の質量が下がり上がることで, 質量平均ガス温度が下がり上がるサイクル変動が現れた. しかし空気の温度, 外部 EGR の温度, 燃料の温度(燃料温度は吸気温度に仮定する)は HCCI 燃焼のサイクル変動に関係なくほとんど一定であった.

最後に定常運転時と非定常運転時における CA50 および IMEP のサイクル変動の傾向をターンマップにより比較した. 定常運転時の CA50 のサイクル変動は変動数値 10.6%で小さく, 約 10deg aTDC~15deg aTDC の中央に集まりプロットの範囲が狭かった. それに比べて非定常運転時の CA50 のサイクル変動は変動数値 21.2%で大きいため, プロットの範囲が広がった. 定常運転時での IMEP は変動数値 3.6%で約 0.4MPa 付近に集中していた. それに比べて非定常運転時は変動数値 23.3%で, IMEP が小さい領域から大きい領域まで, 時計周りの方向にサイクル変動が現れた.

第7章 素反応数値計算に基づく HCCI 燃焼に及ぼす化学種の影響の解析および HCCI エンジンを用いた燃焼制御

第6章では、外部 EGR の導入により燃焼位相の遅延に伴い HCCI 燃焼のサイクル変動が生じるとき、圧縮開始時の燃焼室内に供給される空気、燃料、外部 EGR、リブレスイング EGR の質量および温度のサイクル変動を確認した。HCCI 燃焼のサイクル変動が起きると、外部 EGR の質量が減少するとともに空気とリブレスイング EGR の質量は増加し、リブレスイング EGR の温度は低下した。前サイクルが部分燃焼および失火すると、次サイクルにおける圧縮開始時の質量平均温度が低下することで、次サイクルの失火または部分燃焼により IMEP が下がる。しかし、圧縮開始時の質量平均温度が最も低いサイクルで IMEP が最大になるサイクルが現れた(図6-16の 38 サイクルと 52 サイクル)。この原因を化学的な影響によるものと考え、第7章では素反応数値計算に基づいて前サイクルからのリブレスイング EGR およびリブレスイング EGR にある各化学種が次サイクルの燃焼位相に及ぼす影響を調査する。

始めに燃焼効率が 10%から 90%まで、10%ずつの HCCI 燃焼を再現し、各燃焼効率での排気ガスを実験でのリブレスイング EGR として次サイクルに EGR 率 0.2, 0.25, 0.3 で導入し、燃焼効率による排気ガス組成の変化と排気ガスの導入量の変化が燃焼位相に及ぼす影響を比較する。その上、燃焼効率が 10%, 40%, 90%の場合、排気ガスにある各化学種を次サイクルに燃焼効率に対応した量で導入し、各化学種が燃焼位相にどの程度寄与するかを確認する。

続いて燃焼位相の遅延によるサイクル変動を抑える方法として PID 制御による HCCI エンジンの燃焼制御を提案し、燃焼位相、当量比、燃焼効率を入力に用いた制御器を作成する。それをリブレスイング EGR 型 HCCI エンジンに適用し、サイクル変動が起こる時の燃焼制御を行い、燃焼制御による CA50 と IMEP の変化をリターンマップにより確認することで HCCI エンジンの燃焼制御の可能性を検証する。

7. 1. 素反応数値計算に基づく HCCI 燃焼に及ぼす化学種の影響の解析

7. 1. 1. 燃焼効率による排気ガス組成の変化

燃料と空気の予混合気が化学反応による燃焼によって排気ガスが生成されるため、燃焼効率により排気ガスの組成が変わる。排気ガスの組成が変化すると排気ガスを構成する各化学種のモル分率が変わるため、次サイクルの HCCI 燃焼に及ぼす排気ガスの影響も異なると考えられる。それで、まず燃焼効率に対応する排気ガスの組成を模擬するため、DME を用いた素反応数値計算により燃焼効率が 10%から 90%まで、10%ずつの HCCI 燃焼を再現する。燃焼効率が高い場合、高い燃焼温度により NO_x が多く生成され排気ガスに存在すると考えられる。排気ガスに存在する NO_x は HCCI エンジンの高負荷運転時に、燃焼位相を進角しノッキングの発生を誘導する[86]。そこで NO_x 反応モデル[87]を加えた DME の反応モデル作成し、それを用いて素反応数値計算を行う。既存の DME の素反応モデル[23] (科学種 80 個, 素反応 351 個) に比べて、NO_x 反応モデルを加えた DME の反応モデルは科学種 123 個, 素反応 506 個であることで、化学種は 43 個, 素反応は 155 個増えた。NO_x として反応モデルに挿入した化学種は N, NO, NO₂, NO₃, HNO, HONO, HONO₂, HNO₂, NH, NH₂, NH₃, NNH, N₂, N₂O, CN, HCN, NCO, HCNO, HNCO, HOCN, H₂CN, HCNN, CH₃NO, CH₃NO₂, CH₃ONO, CH₃ONO₂, C₃H₅NO₂ である。

図7-1に DME の HCCI 燃焼の各燃焼効率に相当する燃焼室内ガスの温度、燃料モル分率、酸素モル

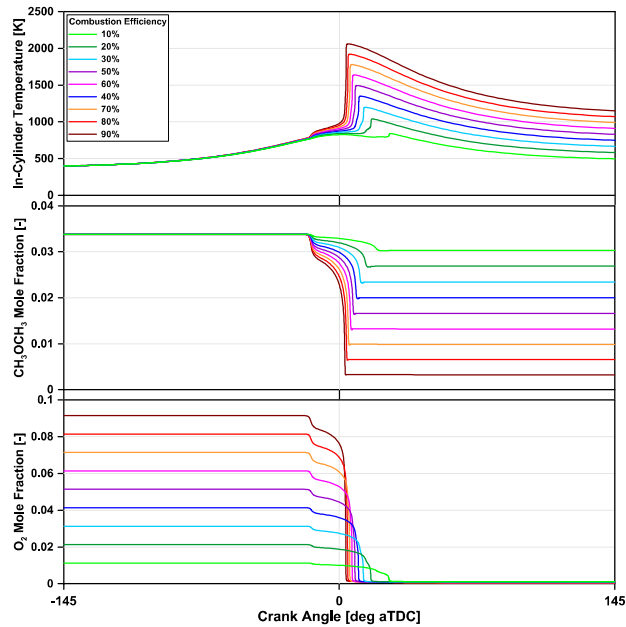


図7-1 各燃焼効率に相当する燃焼室内ガスの温度, 燃料モル分率, 酸素モル分率の履歴

分率の履歴を示す. -145deg aTDC は圧縮行程の開始時であり 145deg aTDC は膨張行程の終了時である. 燃料と酸素の酸化反応により燃料モル分率と酸素モル分率が減少することで燃焼が起こり, 燃焼室内ガスの温度が上昇する. 燃焼により最高到達温度が上がると燃焼効率が高くなる. 膨張行程の終了時の 145deg aTDC は, 実エンジンで排気バルブが開くことで排気ガスが排出されるタイミングであるので, この時の燃焼室内ガスを排気ガスとして仮定する.

図7-2に 145deg aTDC での各燃焼効率に相当する排気ガスの組成および最高到達温度を示す. 燃焼効率0%と100%に相当する排気ガスの組成は素反応数値計算で再現できないため, DMEの完全燃焼の化学反応式により算出する. すなわち燃焼効率0%の排気ガスの組成は, 燃焼が起こらずに燃料と空気がそのまま排出されることを意味する. また燃焼効率100%の排気ガス組成は, 燃料と空気の完全燃焼により空気, CO_2 , H_2O が排出されることを意味する. 燃焼が起こらないと(燃焼効率0%)排気ガスに酸素が残るが, 燃焼が起こると図7-1にも示したように, 酸素が全部消費される. また燃焼効率が高くなると排気ガスとしての燃料も減少する. 排気ガスの温度は図7-1にも見えるように, 燃焼効率が上がると高くなる. 排気ガスの温度が高くなると, 次サイクルの圧縮開始時の燃焼室内ガスの温度(質量平均ガス温度)が上昇するため, 化学種の化学影響と別に燃焼位相が進角すると考えられる. そこで本節の素反応数値計算では HCCI 燃焼に及ぼす化学種の影響のみを確認するため, 燃焼効率による排気ガスの温度の変化が次サイクルの燃焼に及ぼす影響は考慮しない. 図7-2には完全燃焼による排気ガスの化学種(H_2O , CO_2)と空気の化学種(N_2 , O_2 , Ar)以外に, 中間生成物の化学種が示されているが, そのモル分率が全体(モル分率1)に比べて小さいため, 図7-3に燃焼効率に相当する中間生成物だけのモル分率を拡大して示す. 燃焼効率が上がると中間生成物のモル分率が上がる. これは燃料と酸素の酸化反応により, 燃料と酸素のモル分率が下がることで中間生成物が生成されたと言える. 中間生成物の化学種のモル分率を確認すると CO , H_2 , CH_2O , CH_4 , NO , OH の順番である. 燃焼効率が上がると中間生成物である CO , H_2 , NO , OH , $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{OH}$ のモル分率は増加する. CH_2O と CH_4 のモル分率の場合, 燃焼効率の増加とともに増加し, また減少する.

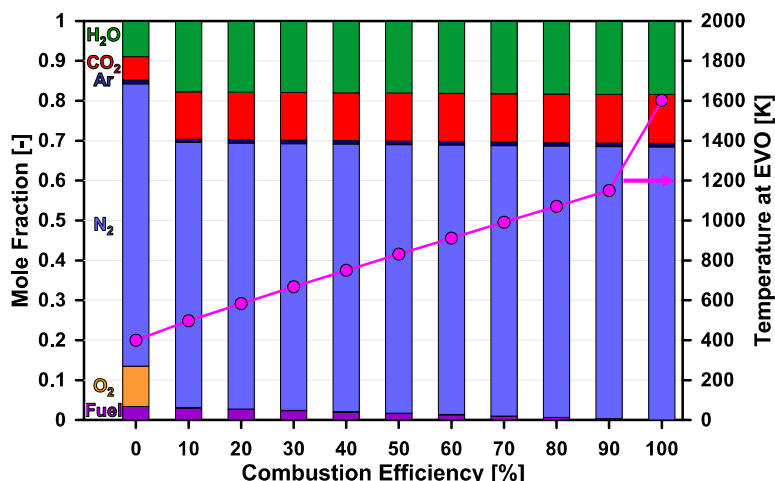


図7-2 各燃焼効率に相当する排気ガスの組成および温度

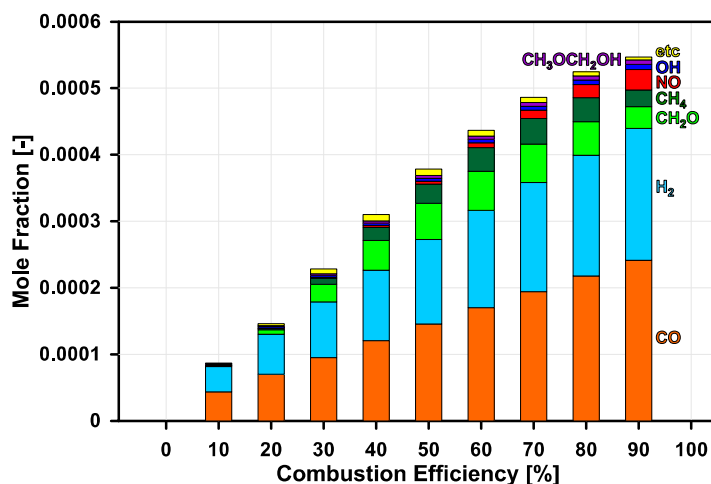


図7-3 各燃焼効率に相当する排気ガスの組成(中間生成物の拡大)

7. 1. 2. 排気ガスの導入が次サイクルの燃焼位相に及ぼす影響

排気ガスの導入が次サイクルの燃焼位相に及ぼす影響を確認するため、図7-4に示してある予混合気を用いて素反応数値計算を行う。図7-4はDMEのHCCI燃焼による排気ガス(図7-1の145deg aTDCでの燃焼室内ガス)を、実験でのリプレッシング EGR(REGR)として次サイクルにEGR率0.2, 0.25, 0.3導入したときの予混合気の組成を示す。第6章で行った実験は、外部EGR(EEGR:完全燃焼による排気ガス(空気, CO₂, H₂O)と仮定する)の導入により燃焼位相が過度に遅延したときに生じたサイクル変動であるので、実験における燃焼室内の予混合気の組成を再現するために燃料, 空気, EEGRの予混合気に加えREGRを加えた。

図7-5に燃焼効率による排気ガス(REGR)の導入量(0.2, 0.25, 0.3)および組成の変化が次のサイクルの燃焼位相に及ぼす影響を示す。燃焼効率100%以外の各燃焼効率に相当する排気ガスを次サイクルに導入すると、各排気ガスの組成が燃焼効率により異なるにも関わらず、導入量に関係なく燃焼位相が進角する。燃焼効率100%に相当する排気ガスには、燃料と空気の完全燃焼により中間生成物はなく、H₂OとCO₂が多量に入っているため、次サイクルに導入すると燃焼室内の予混合気の比熱比が下がることで燃焼位相が遅延する。燃焼効率0%に相当する排気ガスを導入するときも燃焼位相が進角するが、排気ガスの組成が燃料と空気のみであるため、中間生成物の化学影響ではない。続いて燃焼位相に及ぼす排気ガスの導入量の

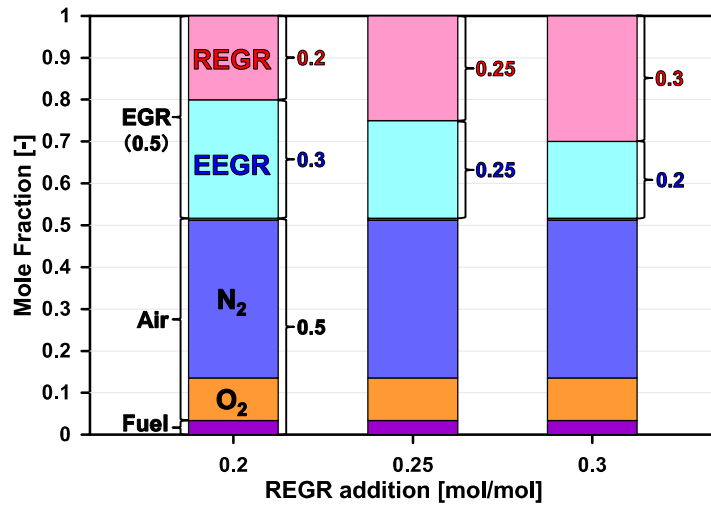


図7-4 排気ガス(REGR)の導入による(REGR=0.2, 0.25, 0.3)予混合気組成の変化

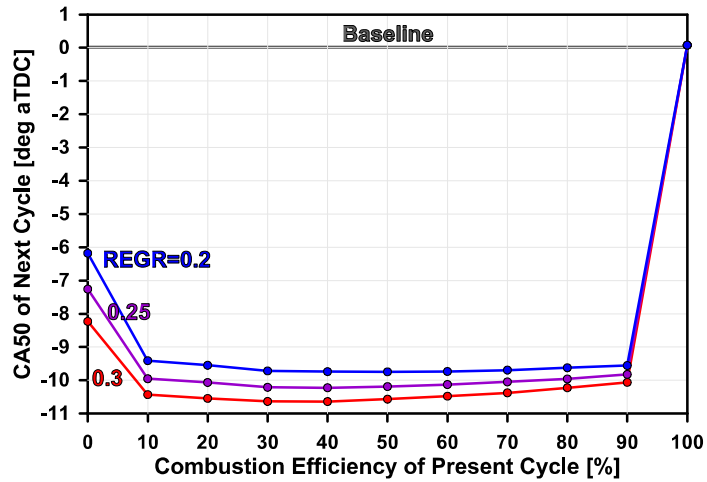


図7-5 燃焼効率による排気ガスの導入量および組成の変化が次サイクルの燃焼位相に及ぼす影響

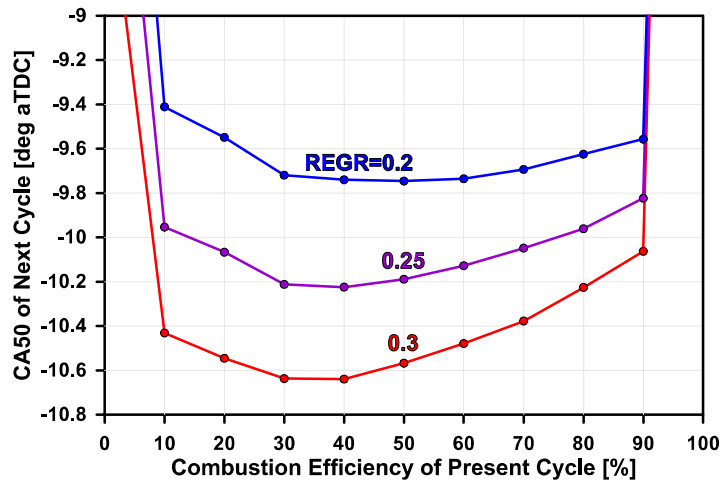


図7-6 図7-5の拡大

影響を確認すると、排気ガスの導入量が多くなると燃焼位相が最も進角する。

燃焼効率に相当する排気ガスの組成および導入量の変化が次サイクルの燃焼位相に及ぼす影響を詳しく確認するため、図7-5を拡大し図7-6に示す。まず各燃焼効率に相当する排気ガスの導入量に関係なく、燃焼効率40%に相当する排気ガスによる次サイクルの燃焼位相の進角が最も大きい。燃焼効率40%に対する燃焼位相を基準にして、燃焼効率40%以外の燃焼効率に相当する排気ガスが燃焼位相に及ぼす影響を比較すると、燃焼効率が40%より小さくても大きくても、次サイクルの燃焼位相の進角効果は小さい。しかし実験では最も燃焼効率が低いサイクル(例えば素反応数値計算の燃焼効率10%)の次サイクルでCA50が進角しIMEPが増加しており、素反応数値計算の結果とは異なる。これを説明するためにリブレスイングEGRの質量に着目すると、燃焼効率が下がるとリブレスイングEGRの質量は多くなり、リブレスイングEGRの質量がある値を超えると、圧縮開始時の質量平均温度が低くても失火せずに燃焼することが図6-14で確認できる。つまり燃焼効率が低いと排気行程で出る排気ガスの量が減り、リブレスイングEGRガスの質量が増える。次のサイクルでリブレスイングEGRガスとして導入される排気ガスの質量は多いため、化学種が燃焼位相に与える影響は、燃焼効率によって変動するリブレスイングEGRガスの質量によるのと考えられる。

次に排気ガスに含まれる各化学種が燃焼位相にどの程度寄与するかを確認するため、REGRの導入量が0.3の場合に燃焼効率が10%、40%、90%に相当する排気ガスの中に含まれる各化学種を次サイクルの燃料、空気、EEGRの予混合気を導入する。図7-7は燃焼効率10%の排気ガスに含まれる各化学種のモル分率を示し(上)、それを個別に次サイクルに導入する時に変化した燃焼位相を示す(下)。赤で書かれている化学種は燃焼位相の進角に寄与する化学種で、青で書かれている化学種は燃焼位相の遅延に寄与する化学種である。燃焼効率50%の排気ガス(REGR)全量0.3(300000ppm)を導入すると燃焼位相が10.43deg進角するのに対し、OHの0.47064ppm導入により燃焼位相は7.81deg進角、Oの0.01195ppm導入により燃焼位相は5.28deg進角、Hの0.18547ppm導入により燃焼位相は4.93deg進角、CH₃OCH₂O₂の0.00817ppm導入により燃焼位相は4.43deg進角、CH₃OCH₃の9098.994ppm導入により燃焼位相は3.46deg進角、CH₃O₂の0.03023ppm導入により燃焼位相は3.43deg進角、HO₂の0.01017ppm導入により燃焼位相は2.6deg進角、

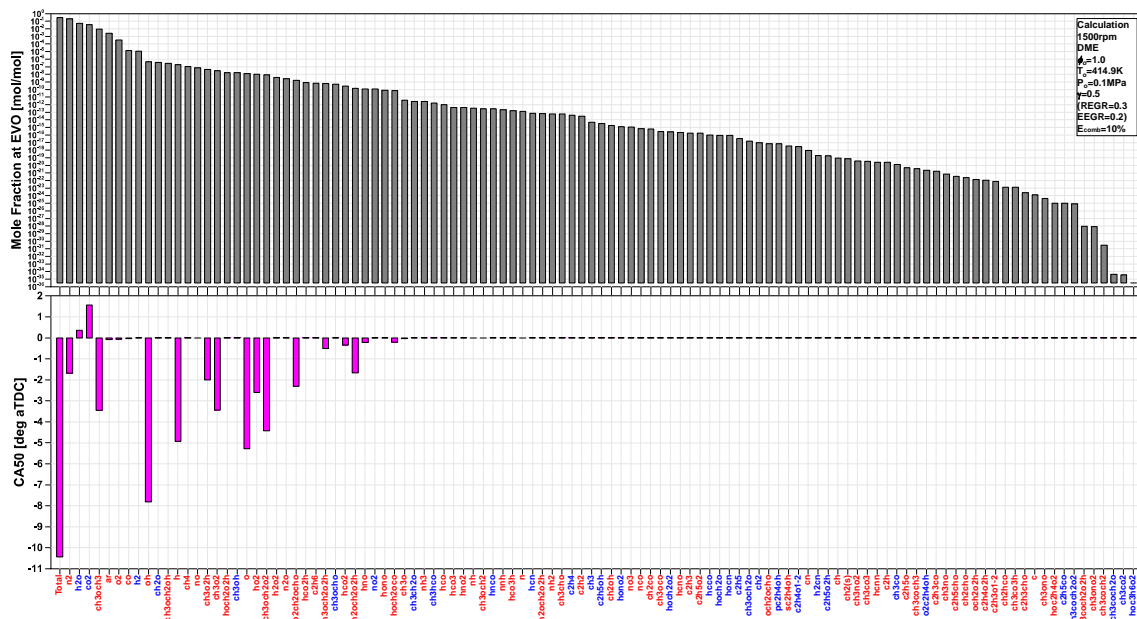


図7-7 燃焼効率が10%時の排気ガスに含まれる各化学種の導入が燃焼位相に及ぼす影響(REGR=0.3)

HO₂CH₂OCHO の 0.01017ppm 導入により燃焼位相は 2.31deg 進角, CH₃O₂H の 0.04242ppm 導入により燃焼位相は 2.0deg 進角, N₂ の 199182.18ppm 導入により燃焼位相は 1.68deg 進角, O₂CH₂OCH₂O₂H の同時に導入されている化学種間で化学反応を起こし燃焼位相の進角に寄与する化学種が消費されるためと考えられる. OH ラジカルはいわゆる活性酸素と呼ばれる分子種の中では最も反応性が高く, 最も酸化力強いので燃焼位相の進角に最も寄与したと言える. しかし, その反応性の高さゆえ通常的环境下では長時間存在することはできず生成後速やかに消滅するため, 実際に燃焼に影響を考えるかは今後更なる実験が必要である. DME の ketohydroperoxide である HO₂CH₂OCHO は低温酸化反応の過程で生成され, HO₂CH₂OCHO が分解し HOCH₂OCHO と OH の2つのラジカルを作ることで低温酸化反応による熱発生が起こる. O₂CH₂OCH₂O₂H の 0.00015ppm 導入により燃焼位相は 1.66deg 進角, CH₃OCH₂O₂H の 0.03023ppm 導入により燃焼位相は 0.52deg 進角, HCO₂ の 0.00029ppm 導入により燃焼位相は 0.34deg 進角, HNO の 0.00012ppm 導入により燃焼位相は 0.22deg 進角, HOCH₂OCO の 0.00007ppm 導入により燃焼位相は 0.21deg 進角する. 逆に CO₂ の 35512.98ppm 導入により燃焼位相は 1.57deg 遅延, H₂O の 53277.57ppm 導入により燃焼位相は 0.36deg 遅延する. ここで注目すべきは, 排気ガス全量を導入したときの燃焼位相の進角数よりも個別の化学種を導入したときの進角数の和の方が大きいということである.

図7-8に燃焼効率 40%の排気ガスに含まれる各化学種の本分率を示し(上), それを個別に次サイクルに導入する時に变化した燃焼位相を示す(下). 一番左は排気ガス全量を導入した場合である. 燃焼効率 50%の排気ガス(REGR)全量 0.3(300000ppm)を導入すると燃焼位相が 10.64deg 進角することに對し, OH の 1.065747ppm 導入により燃焼位相は 8.52deg 進角, CH₃OCH₂O₂ の 0.13763ppm 導入により燃焼位相は 6.74deg 進角, O の 0.01317ppm 導入により燃焼位相は 5.36deg 進角, H の 0.25276ppm 導入により燃焼位相は 5.16deg 進角, CH₃O₂ の 0.17071ppm 導入により燃焼位相は 4.87deg 進角, HO₂CH₂OCHO の 0.03009ppm 導入により燃焼位相は 4.52deg 進角, O₂CH₂OCH₂O₂H の 0.0025ppm 導入により燃焼位相は 3.71deg 進角, CH₃O₂H の 0.4298ppm 導入により燃焼位相は 3.69deg 進角, HO₂ の 0.03953ppm 導入により燃焼位相は 3.59deg 進角, CH₃OCH₃ の 5993.589ppm 導入により燃焼位相は 2.5deg 進角, CH₃OCH₂O₂H の 0.01ppm

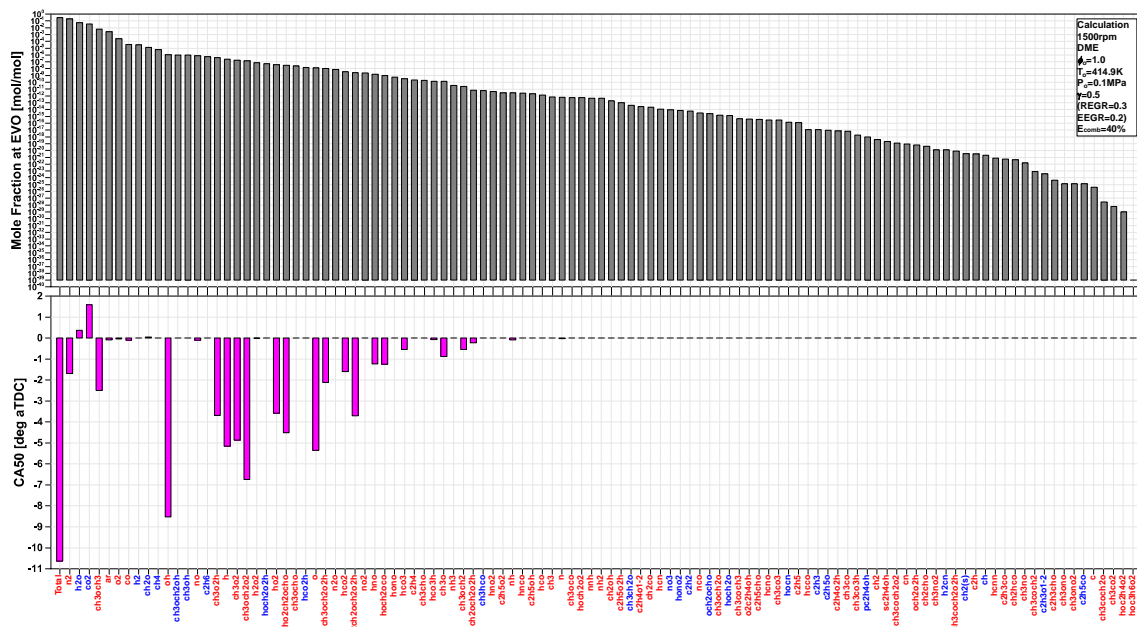


図7-8 燃焼効率が 40%時の排気ガスに含まれる各化学種の導入が燃焼位相に及ぼす影響(REGR=0.3)

導入により燃焼位相は 2.12deg 進角, N₂ の 201226.32ppm 導入により燃焼位相は 1.7deg 進角, HCO₂ の 0.0037ppm 導入により燃焼位相は 1.59deg 進角, HOCH₂OCO の 0.001ppm 導入により燃焼位相は 1.25deg 進角, HNO の 0.00145ppm 導入により燃焼位相は 1.23deg 進角, CH₃O の 0.00013ppm 導入により燃焼位相は 0.88deg 進角, CH₃OCH₂ の 0.00002ppm 導入により燃焼位相は 0.55deg 進角, HCO₃ の 0.00031ppm 導入により燃焼位相は 0.55deg 進角, CH₂OCH₂O₂H の 0.00001ppm 導入により燃焼位相は 0.23deg 進角する. 逆に CO₂ の 35931.6ppm 導入により燃焼位相は 1.59deg 遅延, H₂O の 53922.27ppm 導入により燃焼位相は 0.36deg 遅延する.

図7-9に燃焼効率 90%の排気ガスに含まれる各化学種のモル分率を示し(上), それを個別に次サイクルに導入する時に変化した燃焼位相を示す(下). 燃焼効率 50%の排気ガス(REGR)全量 0.3(300000ppm)を導入すると燃焼位相が 10.06deg 進角することに対し, OH の 2.32435ppm 導入により燃焼位相は 9.16deg 進角, O の 0.017498ppm 導入により燃焼位相は 5.59deg 進角, H の 0.329997ppm 導入により燃焼位相は 5.35deg 進角, CH₃OCH₂O₂ の 0.025349ppm 導入により燃焼位相は 5.33deg 進角, HO₂ の 0.044762ppm 導入により燃焼位相は 3.68deg 進角, HO₂CH₂OCHO の 0.007362ppm 導入により燃焼位相は 3.43deg 進角, CH₃O₂ の 0.028204ppm 導入により燃焼位相は 3.38deg 進角, HNO の 0.012376ppm 導入により燃焼位相は 2.73deg 進角, CH₃O₂H の 0.083491ppm 導入により燃焼位相は 2.48deg 進角, O₂CH₂OCH₂O₂H の 0.000393ppm 導入により燃焼位相は 2.34deg 進角, N₂ の 204552.06ppm 導入により燃焼位相は 1.72deg 進角, CH₃OCH₂O₂H の 0.002558ppm 導入により燃焼位相は 1.23deg 進角, HCO₂ の 0.00789ppm 導入により燃焼位相は 0.71deg 進角, NO の 9.227309ppm 導入により燃焼位相は 0.69deg 進角, NH の 0.000022ppm 導入により燃焼位相は 0.51deg 進角, HCO₃ の 0.000284ppm 導入により燃焼位相は 0.5deg 進角, CH₃OCH₃ の 974.9607ppm 導入により燃焼位相は 0.48deg 進角, HOCH₂OCO の 0.000182ppm 導入により燃焼位相は 0.44deg 進角, CO の 72.38493ppm 導入により燃焼位相は 0.2deg 進角, CH₃OCH₂ の 0.000006ppm 導入により燃焼位相は 0.18deg 進角, CH₂OCH₂O₂H の 0.000005ppm 導入により燃焼位相は 0.18deg 進角, CH₃O の 0.00013ppm 導入により燃焼位相は 0.15deg 進角, N の 0.000002ppm 導入により燃焼位相は 0.1deg 進角する. 逆に CO₂ の

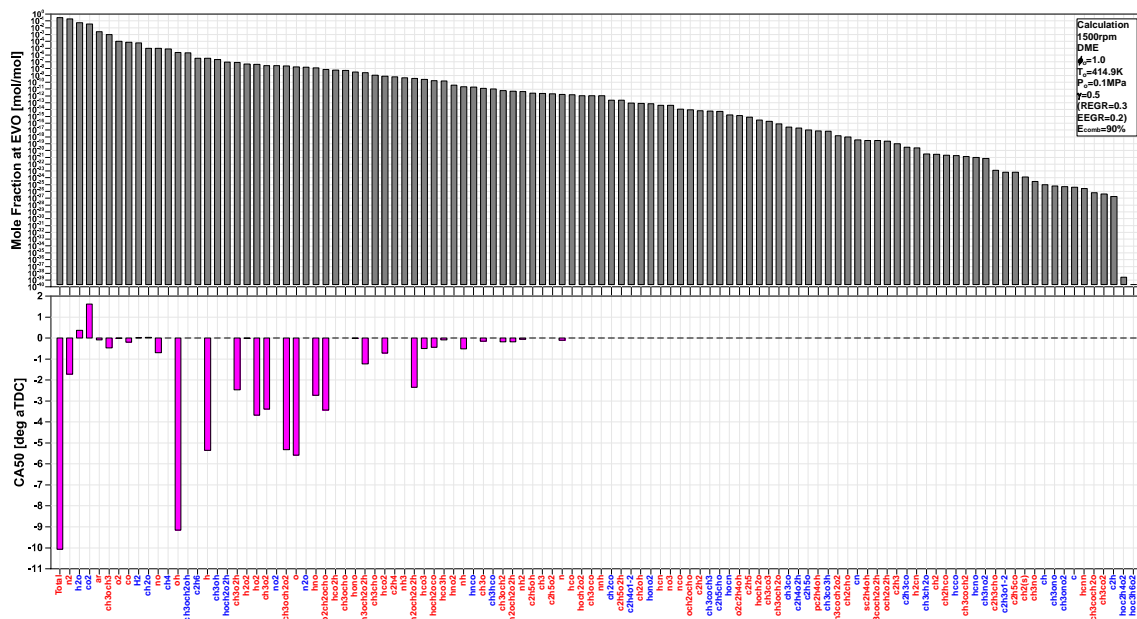


図7-9 燃焼効率が 90%時の排気ガスに含まれる各化学種の導入が燃焼位相に及ぼす影響(REGR=0.3)

36614.76ppm 導入により燃焼位相は 1.62deg 遅延, H₂O の 54970.83ppm 導入により燃焼位相は 0.37deg 遅延する。

7. 2. HCCI エンジンの燃焼制御

7. 2. 1. PID 制御

PID 制御(Proportional Integral Derivative Controller)は、フィードバック制御の一種であり、入力値の制御を出力値と目標値との偏差、その積分、および微分の3要素によって行う方法である[88]。1入力1出力の古典制御であり、現在でも産業界で幅広く使われている制御方式である。偏差が小さければ操作量も小さく、偏差が大きくなればそれに応じて操作量も大きくするのが適当であるから、制御側には偏差に比例する項を含める。これを比例動作という。比例制御のみを行うと、目標値や外乱のステップ状変化に対して最終的に一定の偏差が残ってしまう。これを定常偏差またはオフセットという。この定常偏差は、偏差の積分に比例する項を制御側に含めることで除去が可能である。これを積分動作と呼ぶ。偏差の増減の動向を操作量の決定に反映して、制御特性の改善を図るために、偏差の微分に比例する項も制御側に含める。これを微分動作といい、これら3つの動作を含むものをPID 制御という。図7-10にPID 制御ブロック線図を示す。

7. 2. 2. 当量比, 燃焼位相, 燃焼効率を用いた HCCI エンジンの燃焼制御

外部EGRの導入により燃焼位相の遅延に伴うHCCI燃焼のサイクル変動を抑える方法として、本論文ではリブレッシング EGR 型 HCCI エンジンを用いて PID 制御による燃焼制御を行う。PID 制御の因子として当量比, 燃焼位相, 燃焼効率を選択し、それらを用いて作成したPID 制御ロジックを図7-11に示す。PID 制御に設定した当量比とCA50の要求値は、HCCI 燃焼のサイクル変動が大きい(図6-10のスロットル D が 36deg aTDC 場合)ときの 64 サイクルの平均値を参考にして決定した。まず当量比の要求値を満たすために、燃焼室内に供給される燃料の質量が一定であるため、燃焼室内に供給される空気の質量を制御する必要がある。6. 1. 3 節に説明したように、リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンにおける燃焼室内に供給される空気の質量はスロットル A により主に調節されるため、スロットル A の開閉を調節することで当量比を制御する。またスロットル D を開けると外部 EGR が燃焼室内に供給されることで、供給される空気の質量が減り、当量比が上がる。従って HCCI 燃焼のサイクル変動が生じるときに当量比の要求値にある $\phi=1.0$ に満たすため、PID 制御によりスロットル A とともにスロットル D の開度を同時に調節する。また CA50 の要求値を満たすために、燃焼

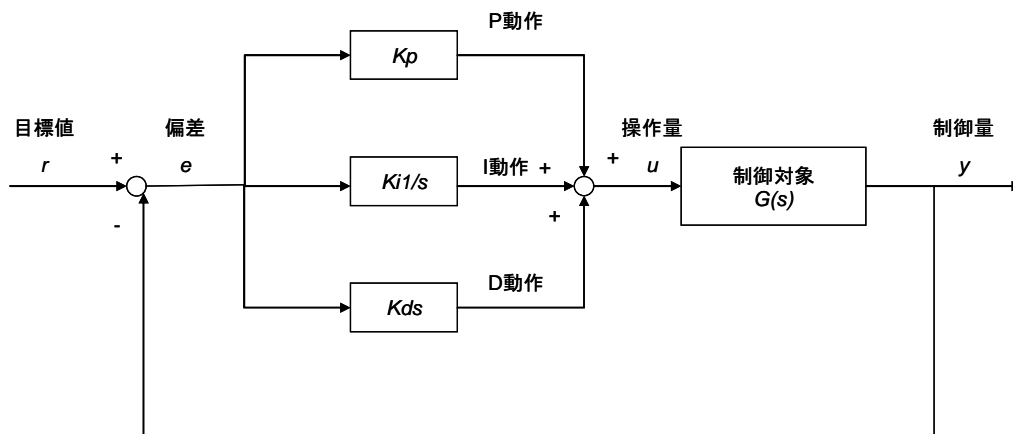


図7-10 PID 制御ブロック線図

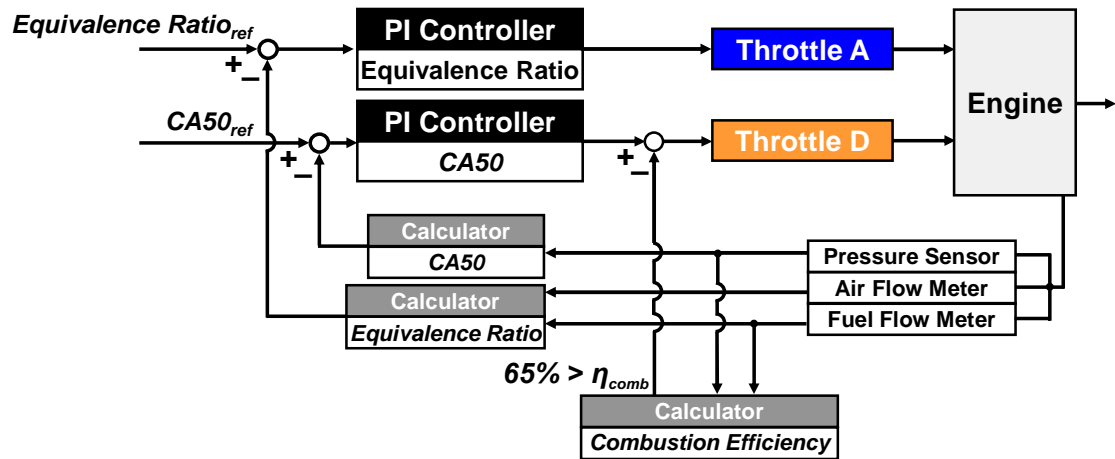


図7-11 PID制御ロジック

室内に供給される外部 EGR の質量を制御する必要がある。6. 1. 3 節に説明したように、リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンにおける燃焼室内に供給される外部 EGR の質量はスロットル D により主に調節されるため、スロットル D の開度を調節することで燃焼位相を制御する。燃焼位相はスロットル A を開けることで空気の質量が増え進角することもあるが、スロットル D の開度に最も大きく影響を受ける。従って CA50 のサイクル変動が生じるときに CA50 の要求値にある 14.0deg aTDC に満たすため、スロットル D の開度を制御する。燃焼効率の制御については、部分全燃、失火、完全燃焼の順で HCCI 燃焼のサイクル変動が起きることから、次のような制御を考える。失火が起きたサイクル(燃焼効率が 65%以下)が観測された場合、スロットル D を一定角度閉じる。すると次サイクルに燃焼室内に供給される外部 EGR の質量が減り、リブレッシング EGR の質量が増える。その結果、質量平均ガス温度が上昇し、着火時期が早くなることで燃焼位相が進角する。この手法では、リブレッシング EGR に含まれる中間生成物を多く再利用できる。さらに、燃焼室内に供給される燃料の質量をわずかに減らすことでノッキングを回避することができる。

図7-12に 1 サイクルから 640 サイクルまで燃焼制御を行わずスロットル D だけを調節するときと、641 サイクルから 960 サイクルまで燃焼制御を行ってスロットル A とスロットル D を同時に調節するときの、空気の質量、燃焼の質量、CA50、当量比、燃焼効率、最大圧力上昇率、IMEP の変化を示す。スロットル A の開度が一定でスロットル D を開くと、燃焼室内に供給される外部 EGR の質量が増え、燃焼位相が遅延する。それで燃焼位相が膨張行程に差しかかることで最大圧力上昇率は減少する。また燃焼室内に供給される燃料の質量は一定であるため、外部 EGR の導入により空気の質量が減り、当量比が上がる。しかしスロットル D の開度に関係なく、燃焼効率は約 80%であり、IMEP は約 0.4MPa である。スロットル D を開けすぎると(スロットル D が 36deg)、燃焼位相が過度に遅延するため、空気と外部 EGR のサイクル変動が大きくなり、CA50、当量比、燃焼効率のサイクル変動が大きくなる。燃焼位相が過度に遅延しても、最大圧力上昇率のサイクル変動は小さいが IMEP のサイクル変動は大きくなることが確認できる。HCCI 燃焼のサイクル変動が大きくなったときに制御器を用いて燃焼制御を行うと(641 サイクルから)、スロットル A とスロットル D が一気に開いて空気の質量と外部 EGR の質量を速やかに調整する。HCCI エンジンの燃焼制御が行われていることで、CA50、当量比、燃焼効率が概ね要求値通り安定することが確認できる。燃焼制御でスロットル A を開けることで、燃焼室内に供給される空気の質量が増え、最大圧力上昇率がわずかに上がるが、ノッキング限界(0.4MPa)には達しない。ここで注目すべきは、IMEP が燃焼制御により高くなることである。これは HCCI 燃焼が燃焼制御によ

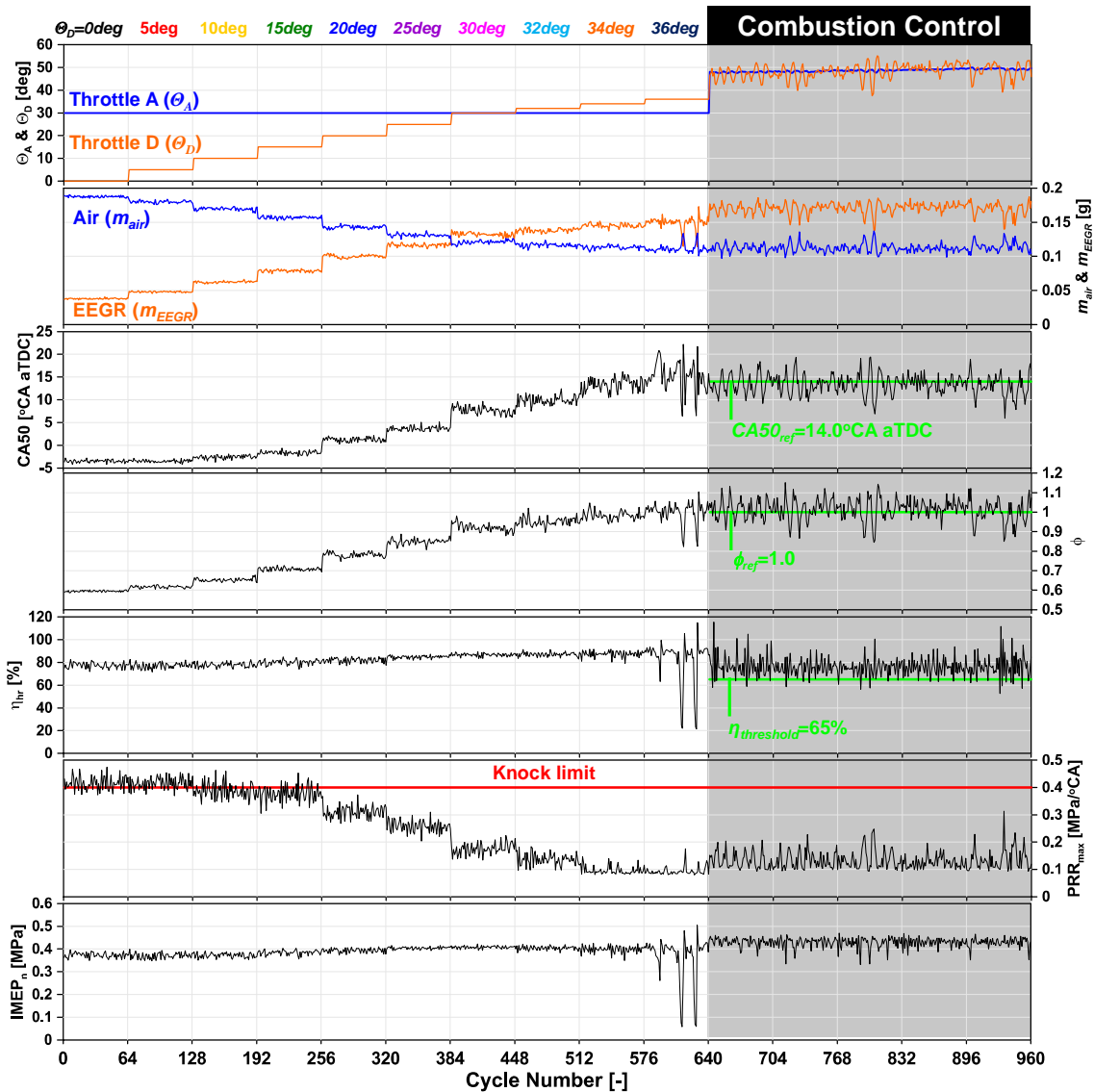


図7-12 燃焼位相, 当量比, 燃焼効率の制御による最大圧力上昇率および IMEP の変化

り当量比が1.0 のところで起こること, 燃焼室内に供給される空気が増えることによるものだと考えられる。

HCCI エンジンの燃焼制御による CA50 のサイクル変動の変化を確認するため, 図7-13に CA50 のリターンマップで示す。燃焼制御行わないときの CA50 の結果(オレンジ: 定常運転時, ネイビー: 非定常運転時)は図6-15の結果と同じである。非定常運転時に燃焼制御を行うと CA50 のサイクル変動(ネイビー)が抑えられ, IMEP が0.4MPa~0.5MPa の範囲に集まってくるのが確認できる。燃焼制御を行ったときのリターンマップのプロット群は, 燃焼制御しないときの定常状態で示すプロット群よりも広く分布するが, 大きなサイクル変動が起きるときのプロット群よりは狭い範囲に収まる。HCCI エンジンの燃焼制御による IMEP のサイクル変動の変化を確認するため図7-14の IMEP のリターンマップで示す。燃焼制御を行うと IMEP のサイクル変動(ネイビー)が抑えられ, 中央に集まってくるのが確認できる。燃焼制御を行わないときの IMEP の結果(オレンジ: サイクル変動が小さい時, ネイビー: サイクル変動が大きい時)は図6-16の結果と同じである。IMEP も CA50 のリターンマップと同様, 燃焼制御を行ったときのリターンマップのプロット群は, 燃焼制御しないときの

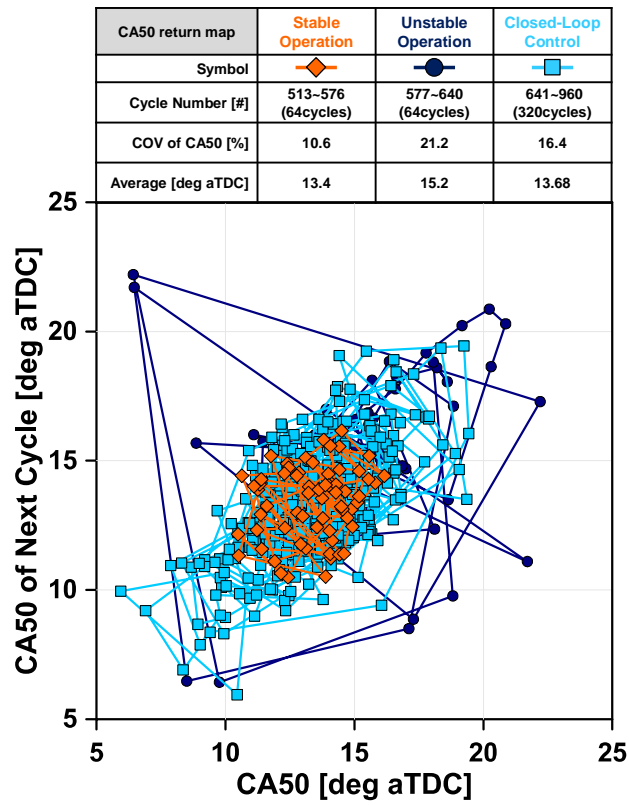


図7-13 制御なしの安定燃焼時(オレンジ), 制御なしの不安定燃焼時(ネイビー), 制御あり(水色)の CA50 のリターンマップ

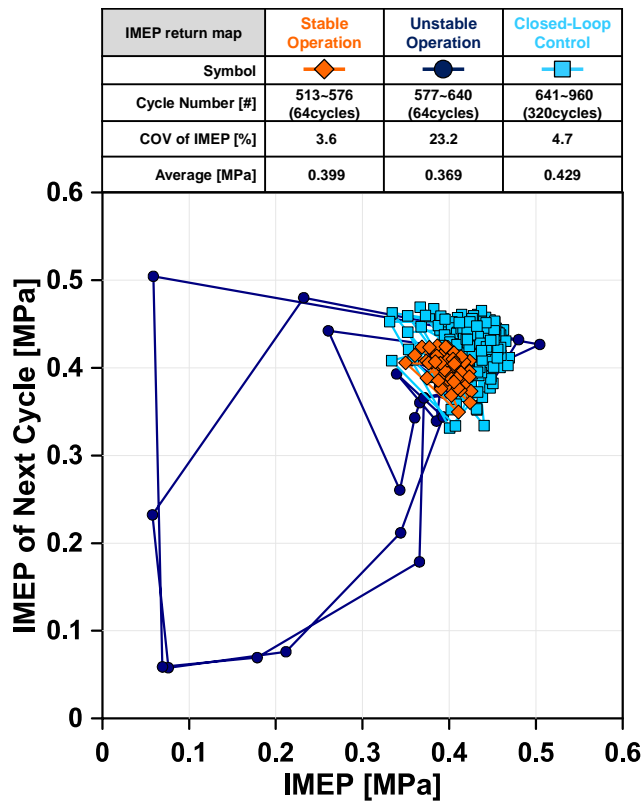


図7-14 制御なしの安定燃焼時(オレンジ), 制御なしの不安定燃焼時(ネイビー), 制御あり(水色)の IMEP のリターンマップ

定常状態で示すプロット群よりも広く分布するが、大きなサイクル変動が起きるときのプロット群より狭い範囲におさまる。また燃焼制御によりIMEPのサイクル変動は安定しIMEP自体も高くなる。燃焼位相が遅延しても、HCCI燃焼のサイクル変動が小さくなるとともにIMEPが増加するため、リブレッシングEGR型HCCIエンジンの性能が上がったと言える。

7.3. 第7章のまとめ

第6章で、圧縮開始時の質量平均ガス温度が最も低いサイクルでCA50が進角しIMEPが最大になるサイクルが確認され、この原因を化学的な影響によるものであると考え、本章では素反応数値計算に基づいてHCCI燃焼のサイクル変動が生じるときにリブレッシングEGR(排気ガス)が次サイクルの燃焼位相に及ぼす影響を調査した。始めにHCCI燃焼の燃焼効率が10%から90%まで、10%ずつの燃焼を再現し、各燃焼効率に相当する排気ガスの次サイクルへの導入が燃焼位相に及ぼす影響を確認した。また燃焼効率が10%、40%、90%の場合、排気ガスにある各化学種を次サイクルに燃焼効率に対応した量で導入し、各化学種が燃焼位相にどの程度寄与するかを確かめた。続いて燃焼位相の遅延によるサイクル変動を抑える方法としてPID制御によるHCCIエンジンの燃焼制御を提案し、燃焼位相、当量比、燃焼効率を入力に用いた制御器を作成した。リブレッシングEGR型HCCIエンジンを用いて、サイクル変動が起こるときに燃焼制御を行い、燃焼制御によるCA50およびIMEPの変化を確認することで燃焼制御の性能を確かめた。

排気ガス(REGR)をリブレッシングEGRガスとして次サイクルに0.2、0.25、0.3導入すると、燃焼効率に関係なく燃焼位相が進角した。その中で燃焼効率40%に相当する排気ガスを導入したときに、燃焼位相が最も進角した。しかし、燃焼効率が、40%より低い燃焼効率と高い燃焼効率に相当する排気ガスは次のサイクルを進角する効果が小さくなった。また燃焼位相の進角効果は排気ガスの導入量が増えると大きくなった。しかし実験では最も燃焼効率が低いサイクルの次サイクルでCA50が進角しIMEPが増加しており、素反応数値計算の結果とは異なった。それで実験でのリブレッシングEGRの質量に着目すると、燃焼効率が下がるとリブレッシングEGRの質量は多くなり、リブレッシングEGRの質量がある値を超えると、圧縮開始時の質量平均温度が低くても失火せずに燃焼したため化学種が燃焼位相に与える影響は、燃焼効率によって変動するリブレッシングEGRガスの質量によるものと考えられる。

リブレッシングEGRガスに含まれる各化学種位相にどの程度寄与するか確認するため、排気ガス(REGR)の導入量が0.3(300000ppm)の場合、燃焼効率10%、40%、90%のときの排気ガス中に含まれる各化学種を次サイクルの燃料と空気の予混合気を導入した。燃焼位相は排気ガスに含まれる各化学種の中でOH、O、H、CO₃OCH₂O₂、CH₃OCH₃、CH₃O₂、HO₂、HO₂CH₂OCHO、CH₃O₂H、N₂、O₂CH₂OCH₂O₂H、CH₃OCH₂O₂H、HCO₂、HNO、HOCH₂OCOにより進角するのが確認できた。またCO₂とH₂Oにより遅延するのが確認できた。排気ガス全量を導入したときの燃焼位相の進角より、個別の化学種を導入したときの進角の方が大きかった。これは排気ガス全量を導入したときには同時に挿入されている化学種間で化学反応を起こし燃焼位相の進角に寄与する化学種が消費されるためと考えられる。

燃焼位相の遅延によるサイクル変動を抑える方法としてPID制御によるHCCIエンジンの燃焼制御を行った。PID制御に用いる因子として当量比、燃焼位相、燃焼効率を選択した。変動が大きくなったときにPID制御により燃焼制御を行い、スロットルAとスロットルDを一気に開いて空気と外部EGR量を調整することでCA50、当量比、燃焼効率が概ね要求値通り安定していることが確認できた。またCA50のサイクル変動が抑

えられ、またIMEPのサイクル変動は安定しIMEP自体も高くなった。燃焼制御を行うことで燃焼位相が遅延してもサイクル変動が小さくなるため、リブレスシング EGR 型 HCCI エンジンの性能が上がった。

第8章 結論

レシプロ型内燃機関は自動車用動力源として広く使用されているが、石油資源枯渇問題や地球環境問題の主原因であるため、高効率・低公害が実現できるエンジンが要求されている。予混合圧縮自己着火 (Homogeneous Charge Compression Ignition: HCCI) エンジンは、燃料と空気の超希薄な予混合気を燃焼室内に供給し、ピストンにより燃焼室内の温度および圧力が上昇することで予混合気を自己着火・燃焼させ、動力を取り出すものである。HCCI エンジンは既存のガソリンエンジンやディーゼルエンジンに比べて、高い熱効率を確保しつつ、窒素酸化物と粒子状物質の同時低減が可能である。しかし、HCCI エンジンにおける自己着火燃焼は、着火時期が燃料固有の着火温度に依存しており燃焼過程が様々な素反応により進行するため、燃焼位相の制御および急峻な圧力上昇率によるノッキングの回避が課題として挙げられる。HCCI エンジンの課題を解決する第一歩として、素反応数値計算に基づいて着火特性が異なる燃料における HCCI 燃焼の化学反応機構を把握するとともに、圧縮開始時の初期条件の変化が HCCI 燃焼に及ぼす影響を明らかにする必要がある。また HCCI エンジンで用いられている燃焼技術として EGR および過給があり、素反応数値計算に基づいて、EGR 率と過給圧を変化させた時に燃焼位相および燃焼時の最大圧力上昇率に影響を与えると考えられる各要因について個別に調査する必要がある。

本論文では素反応数値計算に基づいて、HCCI エンジンにおける燃焼の化学反応機構を確認し、圧縮開始時の初期温度、初期圧力、当量比、EGR 率の変化が、HCCI 燃焼における燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認した。その上、着火特性が異なる4種類の燃料(ジメチルエーテル (Dimethyl ether), メタン (Methane), ノルマルヘプタン (Normal heptane), イソオクタン (Iso-octane))を用いて素反応数値計算を行い、各燃料の HCCI 燃焼における化学反応機構を確認するとともに、燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす初期温度、初期圧力、当量比、EGR 率の影響を比較した。次にリブレッシング EGR 型 HCCI エンジンを用いて、燃焼室内への EGR ガス導入が HCCI 燃焼の燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を実験的に確認し、燃焼位相の遅延により生じる HCCI 燃焼のサイクル変動について調査した。HCCI 燃焼のサイクル変動に及ぼすレッシング EGR の化学的な影響を素反応数値計算に基づいて確認した後、素反応数値解析から得られた知見をエンジン制御に応用し、HCCI エンジンの燃焼制御の可能性を検証した。

本論文で行う素反応数値計算の手法として CHEMKIN を選択したので、CHEMKIN を構成する反応モデルおよび計算モデルについて説明した。第一に反応モデルに関する素反応モデルおよび熱力学データについて説明し、ショックチューブでの素反応数値計算と実験の着火遅れを比較することで反応モデルの妥当性を検証した。素反応数値計算により算出した着火遅れの計算結果を、同一の設定温度、圧力、当量比で Lawrence Livermore National Laboratory が行った素反応数値計算による着火遅れの結果と RWTH Aachen University のショックチューブの実験から得られた着火遅れの結果を比較し、概ね一致することで反応モデルの妥当性の検証ができた。第二に計算モデルの妥当性を検証するためにエンジン回転速度が着火時期および燃焼期間に及ぼす影響を示し、HCCI エンジンでの計算と実験の回転速度による温度履歴の変化を比較した。計算モデルの妥当性を検証するため、素反応数値計算と実験でのエンジン回転速度が 1200rpm, 1500rpm, 1800rpm の場合を比較した。素反応数値計算の仮定(燃焼室内ガスの温度と組成が均質、熱損失を考慮しない、燃焼室内ガスは理想気体)により最高到達温度とそこに達するまでの時刻に違いが生じるが、エンジン回転速度が速くなると着火時期が進角し燃焼が起こる現象が実験でも見られるため、計算モデルの

妥当性が検証できた。最後に HCCI エンジンにおける計算と実験での圧力、温度、熱発生率履歴の比較により素反応数値計算の妥当性を検証した。素反応数値計算の妥当性を検証するため、同一の初期条件で行った計算と実験での燃焼室内ガスの圧力、温度、熱発生率を比較した。実験と計算の両方の場合で低温酸化反応と高温酸化反応による二段の熱発生が現れ、二段の熱発生により燃焼室内ガスの圧力と温度が上昇することが確認できた。素反応数値計算でも実験で現れる二段の熱発生が確認できたので、素反応数値計算の妥当性が検証できた。

素反応数値計算を用いて HCCI エンジンにおける燃焼の特性を示し、HCCI 燃焼による圧力上昇率と熱発生率との関係を確認した。熱発生率は燃焼時の圧力上昇率に大きく影響を与えるため、寄与度行列を用いて HCCI 燃焼の熱発生に寄与する重要な素反応を把握し、熱発生に及ぼす各素反応の寄与度を確認した。その上、初期条件として初期温度と初期圧力が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響調査し、初期条件、燃焼位相、最大圧力上昇率との関係を把握した。また初期温度および初期圧力が、寄与度行列から得られた重要な各素反応の熱発生率に及ぼす影響を確認した。

HCCI エンジンにおける自己着火燃焼の熱発生は燃焼室内ガスの圧力上昇率に大きく影響を与えるため、HCCI 燃焼の課題にある高負荷運転時での急峻な圧力上昇率を解決するためには、まず熱発生について調べる必要があった。熱発生に大きく寄与する素反応を調査するために寄与度行列を用い、DME の HCCI 燃焼における熱発生には発熱反応である $H+O_2(+M)=HO_2(+M)$, $HO_2+OH=H_2O+O_2$, $CO+OH=CO_2+H$ の素反応が熱発生率に主に寄与するのが確認できた。次に吸熱反応である $H+O_2=O+OH$ と $O+H_2O=OH+OH$ の素反応が確認できた。吸熱反応は熱発生には直接に寄与しないが、二つの素反応により O と OH のラジカルが生成されるため、上に示した三つの発熱反応に大きく寄与すると考えられる。二つの吸熱反応とともに発熱反応にある $HO_2+O=OH+O_2$ と $H+OH+M=H_2O+M$ の素反応が確認できた。この二つの発熱反応の熱発生率に比べては小さいが、発熱反応である $CH_3+O=CH_2O+H$, $CH_3OH(+M)=CH_3+OH(+M)$, $OH+H_2=H+H_2O$ も確認できた。低温酸化反応と高温酸化反応の間では発熱反応である $HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$, $HCO+O_2=CO+HO_2$, $CH_2O+OH=HCO+H_2O$ と吸熱反応である $H_2O_2(+M)=OH+OH(+M)$ の素反応が確認できた。低温酸化反応と呼ばれる素反応の中で、発熱反応である $CH_3OCH_2+O_2=CH_3OCH_2O_2$, $CH_2OCH_2O_2H+O_2=O_2CH_2OCH_2O_2H$, $O_2CH_2OCH_2O_2H=HO_2CH_2OCHO+OH$, $CH_3OCH_3+OH=CH_3OCH_2+H_2O$ の素反応と、吸熱反応である $CH_3OCH_2O_2=CH_2OCH_2O_2H$ と $HO_2CH_2OCHO=OCH_2OCHO+OH$ の素反応が低温酸化反応の熱発生に寄与すること確認できた。高温酸化反応に熱発生率に大きく寄与する $H+O_2(+M)=HO_2(+M)$ と $HO_2+OH=H_2O+O_2$ の素反応が低温酸化反応による熱発生率にも寄与していることであった。初期温度が上がると最大圧力上昇率が高くなった。初期温度により最大圧力上昇率が増加する原因として、初期温度が上がると燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度が小さくなるが、高い温度の中で反応が進行するため、反応速度が早くなることが考えられる。また初期温度の上昇により燃焼位相が進角し膨脹行程の影響が小さくなり、それで最大圧力上昇率が高くなった。初期温度による各素反応の熱発生の変化を確認したところ、初期温度が上がると低温酸化反応である素反応の熱発生率は初期温度が高いと低かった。初期圧力が上がると最大圧力上昇率が高くなった。初期温度により最大圧力上昇率の増加は、初期圧力が上がると燃料と酸素の体積モル濃度が増加するとともに燃焼位相が進角したことであった。初期温度による各素反応の熱発生の変化を確認したところ、全素反応の熱発生率が高くなった。初期温度による燃焼位相の変化が圧力上昇率に及ぼす影響と初期圧力による燃焼位相の変化が最大圧力上昇率に及ぼす影響を比

較すると、燃焼位相の遅延による最大圧力上昇率の減少の傾向が非常に異なり初期温度が下がると反応速度が遅くなっても燃料と酸素の体積モル濃度が増えるため、最大圧力上昇率に及ぼす燃焼位相の影響は小さいが、それに比べて初期圧力が下がると反応速度の変化は小さく燃料と酸素の体積モル濃度が燃焼位相の遅延とともに減少するため、最大圧力上昇率に及ぼす燃焼位相の影響が最も大きかった。

想定供試燃料として DME を用いて素反応数値計算によって、EGR ガスを導入すると圧縮開始時の燃焼室内ガスの組成変わることによって HCCI 燃焼がどのように変化するか、またその要因が何であるかを調査した。その結果、EGR ガスに含まれる三原子分子である H_2O と CO_2 の影響で比熱比が下がることで圧縮行程のピストンによる燃焼室内ガスの温度上昇が小さくなり、高温酸化反応の開始時期を遅延化させ、また膨張行程で温度が下がることによって失火が起こることが確認できた。また、燃焼位相を揃えるために EGR ガス量の増加に伴って初期温度を上げても、最大圧力上昇率の低減効果があることが確認できた。これは、EGR ガスによって比熱比が下がることと、酸素の体積モル濃度が下がるためであると考えられる。燃料体積モル濃度が一致の条件で過給(初期圧力の上昇)をすると酸素の体積モル濃度が増加し、比熱費が最も下がり熱容量が増加するため、圧力上昇率を抑えることが可能となった。酸素の体積モル濃度を一定のまま EGR に加えて過給をすると、燃料の体積モル濃度は変わらないが、燃焼室内ガスの密度が上がることで HCCI 燃焼がうまく起こり、最大圧力上昇率の上昇を抑えることが確認できた。つまり、酸素の体積モル濃度が一定で燃料の体積モル濃度が増えても、EGR ガスによって比熱比が下がることと、過給によって熱容量が増えることによって圧力上昇率を抑えることができる。

DME、Methane、n-Heptane、i-Octane を想定供試燃料として選択し、最初にショックチューブにおける各想定供試燃料の着火遅れを比較した。次に燃焼位相を揃えた時において、HCCI エンジンにおける各想定供試燃料の燃焼特性を示し、HCCI 燃焼による圧力上昇率と熱発生率との関係を確認した。また熱発生率は燃焼時の圧力上昇率に大きく影響を与えるため、各想定供試燃料に対する寄与度行列を用いて、HCCI 燃焼の熱発生に寄与する重要な素反応を把握するとともに、各素反応の寄与度を確認した。続いて初期温度、初期圧力、当量比、EGR 率の変化が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を確認し、初期条件、燃焼位相、最大圧力上昇率との関係を把握した。最後に各想定供試燃料において、EGR および過給により変化する燃焼位相を揃えるために要求される初期温度を比較し、EGR および過給が各想定供試燃料の HCCI 燃焼における最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較した。

DME、n-Heptane、i-Octane は Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) からの反応モデルを使用し、Methane は Gas Research Institute (GRI) からの反応モデルを使用した。各想定供試燃料の着火特性を把握するため、初期圧力 (P_0) が 4.0MPa、当量比が 1.0 の条件において初期温度 500K~1428.571K の範囲で素反応数値計算を行い、ショックチューブでの各想定供試燃料の着火遅れを比較した。その結果、DME、n-Heptane、i-Octane の着火遅れでは、初期温度が上昇しても着火遅れが長くなる NTC (Negative Temperature Coefficient) 領域が現れたが、Methane の着火遅れでは NTC 領域が現れずに着火遅れが初期温度の上昇にほぼ比例して短くなる特徴があった。HCCI エンジンにおける各想定供試燃料の燃焼特性を確認するため、エンジン回転速度が 1500rpm、当量比が 0.5、初期圧力が 0.1MPa、燃焼位相 (CA50) が初期温度の調節により 0deg aTDC (TDC) に揃えた条件で素反応数値計算を行った。各想定供試燃料において燃焼位相を CA50=0deg aTDC に揃えるために要求される初期温度は、DME の初期温度は 344.5K、Methane の初期温度は 570.6K、n-Heptane の初期温度は 361.7K、i-Octane の初期温度は 502.2K であった。Methane

と i-Octane における HCCI 燃焼は低温酸化反応が現れなかったが、DME と n-Heptane における HCCI 燃焼には低温酸化反応が現れた。HCCI 燃焼に低温酸化反応があると、低温酸化反応の熱発生により温度が上昇するため、燃焼位相を揃えるための初期温度を下げる必要があった。初期温度が下がると、HCCI 燃焼が割に低い温度で進行し、また最高到達温度も低くなるため、反応速度が遅くなることで熱発生による最大圧力上昇率が小さくなった。ただし、n-Heptane の場合、燃焼位相を揃えるために要求される初期温度が DME より高いにもかかわらず、最大圧力上昇率は DME より小さかった。燃料の着火特性に関係なく、HCCI 燃焼による燃焼室内の圧力上昇率は熱発生率とほぼ同じに変わるため、熱発生率の影響を大きく受けることが確認できた。ただし、各想定供試燃料における HCCI 燃焼の低温酸化反応と高温酸化反応の開始温度および終了温度が異なり、熱発生に関する素反応が違いため、HCCI 燃焼における熱発生率の履歴が非常に異なった。それで寄与度行列を用いて、各想定供試燃料の HCCI 燃焼における熱発生に大きく寄与する素反応を確認した。HCCI 燃焼の熱発生に寄与する素反応は燃料により異なったが、発熱反応である $H+O_2(+M)=HO_2(+M)$, $HO_2+OH=H_2O+O_2$, $CO+OH=CO_2+H$ の素反応が各想定供試燃料の HCCI 燃焼における熱発生率に主に寄与することが共通に確認できた。

各想定供試燃料における初期温度が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較した。まず燃料の着火特性に関係なく、初期温度が上がると燃焼位相が進角するとともに、HCCI 燃焼の反応速度が早くなることで、最大圧力上昇率が増加した。ただし、低温酸化反応がない Methane と i-Octane における HCCI 燃焼の場合、初期温度の変化による最大圧力上昇率の変化が、低温酸化反応がある DME と n-Heptane における HCCI 燃焼の最大圧力上昇率の変化より大きかった。各想定供試燃料における初期圧力が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較した。まず燃料の着火特性に関係なく、初期圧力が上がると燃焼位相が進角し、圧縮開始時の燃焼室内の燃料と酸素の体積モル濃度の増加することで HCCI 燃焼による熱発生量が最も上昇するため、最大圧力上昇率が上がる。ただし DME と n-Heptane の HCCI 燃焼における低温酸化反応の熱発生量は、初期圧力により大きく変わるため、初期圧力による燃焼位相の変化は大きい。燃焼位相による最大圧力上昇率の変化は小さい。各想定供試燃料における当量比が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較した。当量比が上がると燃料モル分率の増加により投入熱量が増えるため、HCCI 燃焼による熱発生量も増加し、また当量比が 1.0 に近づくと HCCI 燃焼の反応速度が早くなるため、燃焼室内の圧力上昇率が増加した。ただし当量比の増加による最大圧力上昇率の上昇の傾向は燃料により異なった。特に Methane の場合、当量比 0.8 から減少が始め、当量比 1.0 で急に下がった。DME と n-Heptane の場合、低温酸化反応による熱発生量は当量比により最も変わるため、初期圧力と燃焼位相の関係が明確に現れなかった。また燃焼位相が遅延しても最大圧力上昇率が増加することを確認した。各想定供試燃料における EGR 率が燃焼位相および最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較した。燃料の着火特性に関係なく、EGR 率が上がると、燃焼室内ガスの比熱比および酸素体積モル濃度が下がることで燃焼位相が遅延し、また燃焼室内ガスの低い比熱比により HCCI 燃焼における熱発生が抑えられるため、燃焼室内の最大圧力上昇率が減少する。その中、大きな燃焼遅延による Methane における最大圧力上昇率の減少量が最も大きかった。これにより燃焼室内に EGR ガスを導入することは、燃料の着火特性が異なる HCCI 燃焼でも最大圧力上昇率を減少させる効果的な方法だと言える。各想定供試燃料に対し EGR および過給により変化する燃焼位相を揃えるために要求される初期温度を比較し、燃焼位相を揃えた時に EGR および過給が最大圧力上昇率に及ぼす影響を比較した。燃料の着火特性に関係なく、EGR 率の増加とともに燃焼位相が遅延

するため、燃焼位相を揃えるためには初期温度を上げる必要があった。しかし初期温度が高くなっても EGR ガスにより熱発生が抑えられ、最大圧力上昇率が減少した。燃焼室内に EGR を導入しながら酸素体積モル濃度を一定にするために過給をすると、燃焼位相を揃えるための初期温度は増加するが、最大圧力上昇率は下がった。過給により圧縮開始時の燃焼室内の酸素体積モル濃度が一定の条件で燃焼が起こると出力が増加するため、燃料の着火特性に関係なく、EGR および過給の同時適用により、出力を上げながら最大圧力を下げられる方法が確認できた。

素反応数値解析から得られた、DME の HCCI 燃焼に及ぼす EGR の影響を実験で確認するため、リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンを用いて実験を行った。まず外部 EGR の導入による燃焼室内の各ガスの質量および温度の変化を確認し、圧縮開始時の質量平均ガス温度を算出した。算出した圧縮開始時の質量平均ガス温度と燃焼位相の関係を示し、燃焼位相が最大圧力上昇率に及ぼす影響を把握した。最後に定常運転時と燃焼位相の遅延による非定常運転時における燃焼室内に供給される圧縮開始時の燃料、空気、外部 EGR、リブレッシング EGR の質量と温度および質量平均ガス温度のサイクル変動比較し、定常運転時と非定常運転時に現れる CA50 および IMEP の変動についてリターンマップにより示した。

リブレッシング EGR 型 HCCI エンジンではスロットル D を開くほど、外部 EGR の質量が増える代わりに空気とリブレッシング EGR の質量が減少した。また空気と外部 EGR の温度は変わらなかったが、リブレッシング EGR ガス温度が上昇した。燃焼室内に供給される空気、燃料、外部 EGR、リブレッシング EGR により算出される質量平均ガスの温度が下がることで燃焼位相が遅延し、HCCI 燃焼のサイクル変動が生じた。質量平均ガス温度のサイクル変動による燃焼位相のサイクル変動は、質量平均ガス温度が高い時には質量平均ガス温度のサイクル変動が現れても燃焼位相のサイクル変動は小さいが、質量平均ガス温度の減少とともに質量平均ガス温度のサイクル変動が大きくなると燃焼位相のサイクル変動も最も大きくなるのが確認できた。素反応数値計算の結果と同じように、燃焼位相の遅延により最大圧力上昇率は下がるが、燃焼位相の遅延とともに燃焼位相のサイクル変動が大きくなっても、逆に最大圧力上昇率のサイクル変動は小さかった。これは燃焼位相が過度に遅延しすぎて、ほとんどの燃焼が失火してしまうため、燃焼位相のサイクル変動が増加しても最大圧力上昇率のサイクル変動は小さくなったと言える。しかし燃焼位相が過度に遅延すると、不完全燃焼により HCCI 燃焼のサイクル変動が大きくなるため、燃焼位相遅延の限界が現れた。それで、定常運転時と非定常運転時に対する 64 サイクルの熱発生率を比較すると、定常運転での熱発生率は平均値とほとんど一致して上がり、非定常運転時での熱発生率の開始時期およびピークのサイクル変動が最も大きくなった。続いて定常運転時と非定常運転時における燃焼室内に供給される圧縮開始時の燃料、空気、外部 EGR、リブレッシング EGR の質量と温度および質量平均ガス温度のサイクル変動を比較すると、定常運転時ではサイクル変動が小さいことで、質量平均ガス温度のサイクル変動が小さかったが、非定常運転時では空気の質量と外部 EGR の質量が上がって下がり、またリブレッシング EGR の質量が下がり上がることで、質量平均ガス温度が下がり上がるサイクル変動が現れた。しかし空気の温度、外部 EGR の温度、燃料の温度(燃料温度は吸気温度に仮定する)は HCCI 燃焼のサイクル変動に関係なくほとんど一定であった。定常運転時と非定常運転時における CA50 および IMEP のサイクル変動の傾向をターンマップにより比較した。定常運転時の CA50 のサイクル変動は変動数値 10.6%で小さく、約 10deg aTDC~15deg aTDC の中央に集まりプロットの範囲が狭かった。それに比べて非定常運転時の CA50 のサイクル変動は変動数値 21.2%で大きいため、プロットの範囲が広がった。定常運転時での IMEP は変動数値 3.6%で約 0.4MPa 付近に集中していた。それ

に比べて非定常運転時は変動数値 23.3%で、IMEP が小さい領域から大きい領域まで、時計周りの方向にサイクル変動が現れた。

圧縮開始時の質量平均ガス温度が最も低いサイクルで CA50 が進角し IMEP が最大になるサイクルが確認され、この原因を化学的な影響によるものと考え、本章では素反応数値計算に基づいて HCCI 燃焼のサイクル変動が生じるときにリブレスシング EGR (排気ガス) が次サイクルの燃焼位相に及ぼす影響を調査した。始めに HCCI 燃焼の燃焼効率が 10% から 90% まで、10% ずつの燃焼を再現し、各燃焼効率に相当する排気ガスの次サイクルへの導入が燃焼位相に及ぼす影響を確認した。また燃焼効率が 10%, 40%, 90% の場合、排気ガスにある各化学種を次サイクルに燃焼効率に対応した量で導入し、各化学種が燃焼位相にどの程度寄与するかを確かめた。続いて燃焼位相の遅延によるサイクル変動を抑える方法として PID 制御による HCCI エンジンの燃焼制御を提案し、燃焼位相、当量比、燃焼効率を入力に用いた制御器を作成した。リブレスシング EGR 型 HCCI エンジンを用いて、サイクル変動が起こるときに燃焼制御を行い、燃焼制御による CA50 および IMEP の変化を確認することで燃焼制御の性能を確かめた。

排気ガス(REGR)をリブレスシング EGR ガスとして次サイクルに 0.2, 0.25, 0.3 導入すると、燃焼効率に関係なく燃焼位相が進角した。その中で燃焼効率 40% に相当する排気ガスを導入したときに、燃焼位相が最も進角した。しかし、燃焼効率が、40% より低い燃焼効率と高い燃焼効率に相当する排気ガスは次のサイクルを進角する効果が小さくなった。また燃焼位相の進角効果は排気ガスの導入量が増えると大きくなった。しかし実験では最も燃焼効率が低いサイクルの次サイクルで CA50 が進角し IMEP が増加しており、素反応数値計算の結果とは異なった。それで実験でのリブレスシング EGR の質量に着目すると、燃焼効率が下がるとリブレスシング EGR の質量は多くなり、リブレスシング EGR の質量がある値を超えると、圧縮開始時の質量平均温度が低くても失火せずに燃焼したため化学種が燃焼位相に与える影響は、燃焼効率によって変動するリブレスシング EGR ガスの質量によるものと考えられる。リブレスシング EGR ガスに含まれる各化学種位相にどの程度寄与するか確認するため、排気ガス(REGR)の導入量が 0.3(300000ppm)の場合、燃焼効率 10%, 40%, 90% のときの排気ガス中に含まれる各化学種を次サイクルの燃料と空気の子混合気を導入した。燃焼位相は排気ガスに含まれる各化学種の中で OH, O, H, CO₃OCH₂O₂, CH₃OCH₃, CH₃O₂, HO₂, HO₂CH₂OCHO, CH₃O₂H, N₂, O₂CH₂OCH₂O₂H, CH₃OCH₂O₂H, HCO₂, HNO, HOCH₂OCO により進角するのが確認できた。また CO₂ と H₂O により遅延するのが確認できた。排気ガス全量を導入したときの燃焼位相の進角より、個別の化学種を導入したときの進角の方が大きかった。これは排気ガス全量を導入したときには同時に挿入されている化学種間で化学反応を起こし燃焼位相の進角に寄与する化学種が消費されるためと考えられる。燃焼位相の遅延によるサイクル変動を抑える方法として PID 制御による HCCI エンジンの燃焼制御を行った。PID 制御に用いる因子として当量比、燃焼位相、燃焼効率を選択した。変動が大きくなったときに PID 制御により燃焼制御を行い、スロットル A とスロットル D を一気に開いて空気と外部 EGR 量を調整することで CA50、当量比、燃焼効率が概ね要求値通り安定していることが確認できた。また CA50 のサイクル変動が抑えられ、また IMEP のサイクル変動は安定し IMEP 自体も高くなった。燃焼制御を行うことで燃焼位相が遅延してもサイクル変動が小さくなるため、リブレスシング EGR 型 HCCI エンジンの性能が上がった。

謝辞

本論文は、著者が慶応義塾大学大学院理工学研究科に在学中に、本塾理工学部システムデザイン工学科、飯田訓正教授のもとで行ったものであり、同教授より賜ったご指導に対し、深く感謝します。研究室での日々の研究活動はもとより、学外での学会活動、国際会議での研究発表を行う機会を与えて頂いたことは、本論文研究に対する内容に限らず広く学識、見識を身につけることができました。

本塾理工学部機械工学科の植田利久教授、松尾亜紀子教授、横森剛准教授には、本論文を作成するにあたり、丁寧なご指導を頂きましたことに対し、御礼申し上げます。

私の慶応義塾大学への留学を進めて下さって陰から支えて応援して下さいました修士の恩師のウルサン大学機械工学部機械・自動車工学科林玉澤教授に深く感謝します。

飯田研究室の諸先輩方、学生諸君には、研究活動に留まらず御指導、御助言を頂いたことに感謝します。皆さんの協力のもと、本論文を完成させることが出来ました。

最後に、著者の長い留学生生活を陰から支えて応援して下さった叔母さん、両親、従兄弟、兄に感謝します。

参考論文

- [1] 村中重夫, “高効率・超低排気ガソリンエンジンへの挑戦”, 日本機械学会誌, Vol.105, No.1007, pp.656-660(2002)
- [2] 青柳友三, “超高効率ディーゼル機関への挑戦”, 日本機械学会誌, Vol.105, No.1007, pp.667-671 (2002)
- [3] DENYO ホームページ, <http://www.denyo.co.jp/>
- [4] HONDA 発電機カタログ
- [5] S. Onishi, S. H. Jo, K. Shida, P. D. Jo and S. Kato, “Active Thermo Atmosphere Combustion (ATAC) - A New Combustion Process for Internal Combustion Engines”, SAE Paper 790501 (1979)
- [6] M. Noguchi, Y. Tanaka, T. Tanaka and Y. Takeuchi, “A Study on Gasoline Engine Combustion by Observation of Intermediate Reactive Products during Combustion”, SAE Paper 790840 (1979)
- [7] P. M. Najt and D. E. Foster, “Compression-Ignited Homogeneous Charge Combustion”, SAE Paper 830264 (1983)
- [8] R. H. Thring, “Homogeneous-Charge Compression Ignition (HCCI) Engines”, SAE Paper 892068 (1989)
- [9] Y. Ishibashi and M. Asai, “Improving the Exhaust Emissions of Two-Stroke Engines by Applying the Activated Radical Combustion” SAE Paper 960742 (1996)
- [10] T. W. Ryan III and T. J. Callahan, “Homogeneous Charge Compression Ignition of Diesel Fuel”, SAE Paper 961160 (1996)
- [11] T. Takeda, K. Nakagome and K. Niimura, “Emission Characteristics of Premixed Lean Diesel Combustion with Extremely Early Staged Fuel Injection”, SAE Paper 961163 (1996)
- [12] Y. Mase, J. Kawashima, T. Sato and M. Eguchi, “Nissan’s New Multivalve DI Diesel Engine Series,” SAE Paper 981039 (1998)
- [13] 五十嵐哲也, 飯田訓正, “予混合圧縮着火エンジンにおける DME および n-Butane 燃料の自己着火・燃焼過程”, 日本機械学会論文集(B編), Vol.64, No.618, pp.279-286 (1998)
- [14] 森本智史, 川端康晴, 桜井輝浩, 天野寿二, “天然ガスを燃料とする希薄予混合気圧縮自着火エンジンの運転特性 EGR による性能向上”, 自動車技術会論文集, Vol.32, No.3, pp.31-36 (2001)
- [15] D. Jun, K. Ishii and N. Iida, “Combustion Analysis of Natural Gas in a Four Stroke HCCI Engine Using Experiment and Elementary Reactions Calculation”, SAE Paper 2003-01-1089 (2003)
- [16] A. Burcat, K. Scheller and A. Lifshitz, “Shock-Tube Investigation of Comparative Ignition Delay Times for C1-C5 Alkanes”, Combustion and Flame, Vol.16, pp.29-33 (1971)
- [17] U. Pfahl, K. Fieweger and G. Adomeit, “Self-Ignition of Diesel-Relevant Hydrocarbon-Air Mixtures under Engine Conditions”, 26th International Symposium on Combustion, pp.781-789 (1996)

- [18] U. Pfahl and G. Adomeit, "Self-Ignition of Diesel-Engine Model Fuels at High Pressures", SAE Paper 970897 (1997)
- [19] R. Minetti, M. Ribaucour, M. Carlier, C. Fittschen, and L. R. Sochet, "Experimental and Modeling Study of Oxidation and Autoignition of Butane at High Pressure" *Combustion and Flame*, Vol.96, pp.201-211, (1994)
- [20] 小堀繁治, 神本武征, "ディーゼル機関の着火遅れに及ぼす雰囲気条件, 噴射条件および燃料性状の影響", *日本機械学会論文集(B編)*, Vol.65, No.631, pp.1152-1158 (1999)
- [21] V. Warth, N. Stef, P. A. Glaude, F. Battin-Leclerc, G. Scacchi and G. M. Côme, "Computer-Aided Derivation of Gas-Phase Oxidation Mechanisms: Application to the Modeling of the Oxidation of n-Butane", *Combustion and Flame*, Vol.114, pp.81-102 (1998)
- [22] S. Kojima "Detailed Modeling of n-Butane Autoignition Chemistry" *Combustion and Flame*, Vol.99, pp.87-136 (1994)
- [23] Fischer, S. L., Dryer, F.L., and Curran, H.J., "The Reaction Kinetics of Dimethyl Ether. I: High-Temperature Pyrolysis and Oxidation in Flow Reactors", *Int. J. Chem. Kinet.*, Vol.32, pp.713-740 (2000)
https://www-pls.llnl.gov/?url=science_and_technology-chemistry-combustion-dme
- [24] http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- [25] B. Heyberger, F. Battin-Leclerc, V. Warth, R. Fournet, G. M. Côme and G. Scacchi, "Comprehensive Mechanism for the Gas-Phase Oxidation of Propene", *Combustion and Flame*, Vol.126, pp.1780-1802 (2001)
- [26] B. Heyberger, N. Belmekki, V. Conraud, P. A. Glaude, R. Fournet and F. Battin-Leclerc, "Oxidation of Small Alkenes at High Temperature" *International Journal of Chemical Kinetics*, Vol.34, No.12, pp.666-677 (2002)
- [27] G. M. Côme, V. Warth, P. A. Glaude, R. Fournet, F. Battin-Leclerc and G. Scacchi, "Computer Aided Design of Gas-Phase Oxidation Mechanism: Application to the Modelling of n-Heptane and iso-Octane Oxidation", 26th International Symposium on Combustion, pp.755-762 (1997)
- [28] P. A. Glaude, V. Warth, R. Fournet, F. Battin-Leclerc, G. Scacchi and G. M. Côme "Modelling of the Oxidation of n-Octane and n-Decane Using an Automatic Generation of Mechanisms", *International Journal of Chemical Kinetics*, Vol.30, No.12, pp.949-959 (1998).
- [29] R. Fournet, F. Battin-Leclerc, P. A. Glaude, B. Judenherc, V. Warth, G. M. Côme, G. Scacchi, A. Ristori, G. Pengloan, P. Dagaut and M. Cathonnet "Experimental and Modeling Study of the Gas-Phase Oxidation of n-Hexadecane", *International Journal of Chemical Kinetics*, Vol.33, No. 10, pp.574-586 (2001)
- [30] 佐藤和孝, 山根将嗣, 樋高義昭, "ジメチルエーテルの反応性と高温酸化反応機構", 第36回燃焼シンポジウム, pp.88-90 (1998)
- [31] P. Dagaut, J. C. Boettner and M. Cathonnet, "Chemical Kinetic Study of Dimethylether Oxidation in a Jet

- Stirred Reactor from 1 to 10 atm: Experiments and Kinetic Modeling”, 26th International Symposium on Combustion, pp.627–632 (1996)
- [32] P. A. Glaude, B. Judenherc, R. Fournet, F. Battin-Leclerc, V. Warth, G. M. Côme and G. Scacchi, “Experimental and Modelling of the Gas-Phase Oxidation of Methyl and Ethyl Tert Butyl Ether”, *Combustion and Flame*, Vol.121, pp.345–355 (2000)
- [33] 中野道王, 久保修一, 浅井健“ガソリンの素反応モデル開発 第1報:着火遅れ時間と圧縮着火燃焼” 第35回燃焼シンポジウム, pp.208–210(1997)
- [34] M. P. Halstead, L. J. Kirsch and C. P. Quinn, “The Autoignition of Hydrocarbon Fuels at High Temperatures and Pressure-Fitting of Mathematical Model”. *Combustion and Flame*, Vol.30, pp.45–60 (1977)
- [35] J. S. Cowart, J. C. Keck and J. B. Heywood, “Engine Knock Prediction Using a Fully-Detailed and a Reduced Chemical Kinetics Mechanism” 23rd International Symposium on Combustion, pp.1055–1062 (1990)
- [36] M. Schreiber, A. S. Sakak, A. Lingens and J. F. Griffiths, “A Reduced Thermokinetic Model for the Autoignition of Fuels with Variable Octane Ratings”, 25th International Symposium on Combustion, pp.933–940 (1994)
- [37] P. Amneus, D. Nilson, F Mauss, M. Christensen and B. Johansson, “Homogeneous Charge Compression Ignition Engine: Experimental and Detailed Kinetic Calculations”, *COMODIA 98*, pp.567–572 (1998)
- [38] Y. Yamasaki and N. Iida, “Numerical Simulation of Auto-Ignition and Combustion of n-Butane and Air Mixtures in a 4 Stroke HCCI Engine by Using Elementary Reactions”, *SAE Paper 2000-01-1834* (2000)
- [39] T. Koyama, Y. Ibaragi and N. Iida, “Numerical Analysis of Auto-Ignition and Combustion Process of Dimethyl Ether / Air Mixtures”, *ISAF XIII, Part II 13* (2000)
- [40] J. E. Dec, “A Computational Study of the Effects of Low Loading and EGR on Heat Release Rates and Combustion Limits in HCCI Engines”, *SAE Paper 2002-01-1309* (2002)
- [41] S. M. Aceves, D. L. Flowers, C. K. Westbrook, J. R. Smith, W. Pitz, R. Dibble, M. Christensen and B. Johansson. “A Multi-Zone Model for Prediction of HCCI Combustion and Emissions” *SAE Paper 2000-010327* (2000)
- [42] T. Noda and D. Foster, “A Numerical Study to Control Combustion Duration of Hydrogen-Fueled HCCI by Using Multi-Zone Chemical Kinetics Simulation” *SAE paper 2001-01-0250* (2001)
- [43] S. C. Kong, C. Marriott, R. D. Reitz and M. Christensen, “Modeling and Experiments of HCCI Engine Combustion Using Detailed Chemical Kinetics with Multidimensional CFD”, *SAE Paper 2001-01-1026* (2001)
- [44] S. B. Fiveland and D. N. Assanis, “Development of a Two-Zone HCCI Combustion Model Accounting for Boundary Layer Effects” *SAE Paper 2001-01-1028* (2001)
- [45] S. M. Aceves, D. L. Flowers, J. Martinez-Frias, J. R. Smith, C. K. Westbrok, W. J. Pitz, R. W. Dibble, J.

- F. Wright, W. C. Akinyei and R. P. Hessel, "A Sequential Fluid-Mechanic Chemical-Kinetic Model of Propane HCCI Combustion" SAE Paper 2001-01-1027 (2001)
- [46] W. L. Easley, A. Agarwal and G. A. Lavoie, "Modeling of HCCI Combustion and Emissions Using Detailed Chemistry", SAE Paper 2001-01-1029 (2001)
- [47] T. Wakisaka, N. Kato, T. T. Nguyen, K. Okude, S. Takeuchi and Y. Isshiki, "Numerical Prediction of Mixture Formation and Combustion Process in Premixed Compression Ignition Engines", COMODIA 2001 (2001)
- [48] J. C. Livengood and P. C. Wu, "Correlation of Autoignition Phenomena in Internal Combustion Engines and Rapid Compression Machines", 5th International Symposium on Combustion, pp.347-356 (1955)
- [49] 脇坂知行, 金尚奎, 高田洋吾, 瀧山武, "予混合圧縮着火機関における混合気形成過程のシミュレーション -混合気均一度に及ぼす燃料噴射時期, ガス流動, 燃焼室形状の影響-", 第17回内燃機関シンポジウム, pp.327-332 (2002)
- [50] 佐藤進, 飯田訓正, "素反応数値計算による Livengood-Wu 積分着火遅れモデルの検証", 自動車技術会論文集, Vol.36, No.1, pp.65-71 (2005)
- [51] T. Amano, S. Morimoto and Y. Kawabata, "Modeling of the Effect of Air/Fuel Ratio and Temperature Distribution on HCCI Engines", SAE Paper 2001-01-1024 (2001)
- [52] C. K. Westbrook and W. J. Pitz, "Detailed Kinetic Modeling of Autoignition Chemistry", SAE Paper 872107, (1987)
- [53] C. Chevalier, P. Louessard, U. C. Muller and J. Warnatz, "A Detailed Low-Temperature Reaction Mechanism of n-Heptane Auto-Ignition", COMODIA 90, pp.93-97 (1990)
- [54] C. K. Westbrook, "Chemical Kinetics of Hydrocarbon Ignition in Practical Combustion System", U.S. Department of Commerce, DE-2002-791580 (2000)
- [55] M. J. Pilling "Low-Temperature Combustion and Autoignition", Combustion and Flame, Vol.35, pp.13-16 (1977)
- [56] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz and C. K. Westbrook, "A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation", Combustion and Flame, Vol.114, pp.149-177 (1998)
https://www-pls.llnl.gov/?url=science_and_technology-chemistry-combustion-n_heptane_version_3
- [57] 三好明, "燃焼詳細反応機構自動生成システムの開発", 自動車技術会講演論文集, No.105-04, pp.35-40 (2004)
- [58] 池本雅里, 小島雄一郎, 飯田訓正, "DMEを燃料とするHCCI機関のEGRによる制御システムの開発", 自動車技術会講演論文集, No.40-05, pp.13-18 (2005)
- [59] K. J. Douglas, N. Milovanovic, J. W. Turner and D. Blundell, "Fuel Economy Improvement Combined CAI and Cylinder Deactivation (CDA) - An Initial Study-", SAE Paper 2005-01-0110 (2005)
- [60] 浦田泰弘, 栗坂守良, 高梨淳一, 梅本篤, "電磁式自在バルブタイミング機構を備えたガソリン圧縮着

- 火エンジンの研究”, 第 41 回燃焼シンポジウム, pp.493-494(2003)
- [61] 山岡士朗, 角谷啓, 島田敦史, 木原裕介, 助川義寛, “ガソリン HCCI 制御システムの開発(第 1 報) -HCCI 安定制御のためのパラメータ抽出-”, 自動車技術会講演論文集, No.45-05, pp.1-4(2005)
- [62] 角谷啓, 山岡士朗, 島田敦史, 鈴木邦彦, 佐藤真也, “ガソリン HCCI 制御システムの開発(第 2 報) -気筒別燃料制御による多気筒エンジンの HCCI 燃焼の安定化-”, 自動車技術会講演論文集, No.45-05, pp.5-8(2005)
- [63] J. O. Olsson, P. Tunestal and B. Johansson, “Boosting for High Load HCCI”, SAE Paper 2004-01-0940 (2004)
- [64] M. Sjöberg, J. E. Dec, “An Investigation of the Relationship Between Measured Intake Temperature, BDC Temperature, and Combustion Phasing for Premixed and DI HCCI Engines”, SAE Paper 2004-01-1900 (2004)
- [65] M. Konno and Z. Chen, “Ignition Mechanisms of HCCI Compression Process Fueled with Methane/DME Composite Fuel”, SAE Paper 2005-01-0182 (2005)
- [66] 山下大輔, 権淳杓, 佐藤進, 飯田訓正, “HCCI 機関におけるメタン/DME 混合燃料の自着火と燃焼機構に関する研究”, 自動車技術会講演論文集, No.25-05, pp.1-6(2005)
- [67] T. Muto, H. Shoji and K. Yoshida, “A Study of Ignition Timing Control in an HCCI Engine Effects of Compression Ratio Changes and Methane Additive”, The 13th International Pacific Conference on Automotive Engineering, pp.647-652 (2005)
- [68] 金子真也, 安藤博和, 小川英之, 宮本登, “DME を吸入する予混合圧縮着火機関の燃焼制御 反応抑制物質の直接噴射による運転領域の拡大”, 自動車技術会講演論文集, No.99-01, pp.1-6(2001)
- [69] 山田裕之, 東野学, 手崎衆, “DME へのメタノール添加による HCCI 機関の着火時期遅延機構の検証”, 日本機械学会論文集 B 編, Vol.70, No.697, pp.2455-2461(2004)
- [70] 首藤登志夫, 小野義敬, 高橋健洋, “DME 改質ガスによる DME 予混合圧縮着火機関の着火制御”, 日本機械学会論文集 B 編, Vol.70, No.696, pp.2205-2212(2004)
- [71] G. Shibata, K. Oyama, T. Urushihara and T. Nakano, “The Effect of Fuel Properties on HCCI Engine Combustion Characteristics and Performances”, IFP International Conference 2004, pp.45-58 (2004)
- [72] J. Zheng, D. Miller, N.P. Cernansky, D. Liu and M. Zhang, “The Effect of Active Species in Internal EGR on Preignition Reactivity and on Reducing UHC and CO Emissions in Homogeneous Charge Engines”, SAE Paper, 2003-01-1831 (2003)
- [73] R. J. Osborne, G. Li, S. M. Sapaford, T. H. Lake and M. R. Heikal, “Evaluation of HCCI for Future Gasoline Powertrains”, SAE Paper 2003-01-0750 (2003)
- [74] L. Koopmans, H. Storms, S. Lundgren, O. Backlund and I. Denbratt, “Demonstrating a SI-HCCI-SI Mode Change on a Volvo 5-Cylinder Electronic Valve Control Engine”, SAE Paper 2003-01-0753 (2003)
- [75] R. Chen, N. Milovanovic, J. Turner and D. Blundell, “The Thermal Effect of Internal Exhaust Gas

- Recirculation on Controlled Auto Ignition”, SAE Paper 2003-01-0751 (2003)
- [76] T. Urushihara, K. Hiraya, A. Kakuhou and T. Itoh, “Expansion of HCCI Operating Region by the Combination of Direct Fuel Injection, Negative Valve Overlap and Internal Fuel Reformation”, SAE Paper 2003-01-0749 (2003)
- [77] T. W. Ryan III, D. Mehta and T. J. Callahan, “HCCI: Fuel and Engine Interaction”, IFP International Conference 2004, pp.59-67 (2004)
- [78] 鹿ノ戸義彦, “EGR を用いた HCCI 機関の燃焼制御とサイクル解析”, 慶應義塾大学修士論文(2007)
- [79] 永井健一郎, “HCCI 機関における燃焼サイクル変動の解析と制御”, 慶應義塾大学修士論文(2008)
- [80] Y. Kakuda, S. K. Kim, D. Shimo, K. Maruyama, T. Hashimoto, H. Hayashibara and M. Tetsuno, “Model-Based Control for Ignition Timing of Premixed Compression Ignition Combustion in a Diesel Engine”, The Eighth International Conference on Modeling and Diagnostics for Advanced Engine System(COMODIA2012), July 23-26, Fukuoka, Japan (2012)
- [81] R. J. Kee, F. M. Rupley, J. A. Miller, M. E. Coltrin, J. F. Grcar, E. Meeks, H. K. Moffat, A. E. Lutz, G. Dixon-Lewis, M. D. Smooke, J. Warnatz, G. H. Evans, R. S. Larson, R. E. Mitchell, L. R. Petzold, W. C. Reynolds, M. Caracotsios, W. E. Stewart, P. Glarborg, C. Wang, C. L. McLellan, O. Adigun, W. G. Houf, C. P. Chou, S. F. Miller, P. Ho, P. D. Young, D. J. Young, D. W. Hodgson, M. V. Petrova and K. V. Pudukkamm, CHEMKIN Release 4.1.1, Reaction Design, San Diego, CA (2007)
- [82] R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller, “CHEMKIN-II: A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics”, Sandia National Laboratories Report, SAND89-8009B (1989)
- [83] R. J. Kee, F. M. Rupley and J. A. Miller, “Chemkin-iii: a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics,” Sandia National Laboratories Report No. SAND96-8216 (1996)
- [84] H. Ando, Y. Sakai and K. Kuwahara, “Universal Rule of Hydrocarbon Oxidation”, SAE Paper 2009-01-0948 (2009)
- [85] M. Mehl, H.J. Curran, W.J. Pitz and C.K. Westbrook, “Chemical kinetic modeling of component mixtures relevant to gasoline”, European Combustion Meeting, Vienna, Austria (2009)
https://www-pls.llnl.gov/?url=science_and_technology-chemistry-combustion-iso_octane_version_3
- [86] M. Sjöberg and J. E. Dec, “Influence of Fuel Autoignition Reactivity on the High-Load Limits of HCCI Engines”, SAE Paper 2008-01-0054 (2008)
- [87] N. M. Marinov, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, M. Hori, and N. Matsunaga, “An Experimental and Kinetic Calculation of the Promotion Effect of Hydrocarbons on the NO-NO₂ Conversion in a Flow Reactor”, Proceedings of the Combustion Institute, Vol. 27, pp. 389-396 (1998)
- [88] 荒木光彦, 川合成治, 川上潤三, 木内 誠, 桑田龍一, 黒岩重雄, 斎藤忠良, 重政 隆, 須田信英, 曾

禰寛純, 竹山良雄, 土屋基是, 野村政英, 広井和男, 藤原敏勝, 藤原良一, 横川信幸, PID 制御, システム制御学会, 朝倉出版