

Dimethyl ether (DME)の燃焼特性の解明に関する研究

Studies on the clarification of fundamental combustion properties of Dimethyl ether (DME)

田上 公俊, 大分大学工学部, 准教授

Kimitoshi Tanoue, Associate Professor, Faculty of Mechanical Engineering, Oita University

要旨: 地球規模での環境問題や資源枯渇問題解決のため, ディーゼルエンジンにおいても大気汚染の主な原因である窒素酸化物 (NO_x) および微粒子 (PM) の低減が強く求められている. その有力な解決手法として低エミッション代替燃料の利用が挙げられる. 取り分け DME は高セタン価を有し圧縮自着火運転が可能であり, かつ軽油運転時と同程度の熱効率を維持しつつ無煙運転が可能なることから軽油代替燃料として近年注目されている. しかしながら DME の燃焼は軽油とは異なるため, 実用低公害エンジンの効率的な開発のためにはその基礎的な燃焼特性を把握する必要があるが, これまで世界的にもそのような研究は少ない. そこで本研究では2種類の燃焼器を使用し, DME 燃料の基礎燃焼特性を詳細に調べる. 最終的に本研究で得られた基礎データを用いることで高効率・低公害な DME 燃焼器の効率的な開発が期待できるものとする.

Abstract: Recently there have been many problems related with automotive engineering, such as environmental issues and energy problems. These social circumstances motivate the adoption of urgent measures such as alternative fuel and new combustion techniques for the internal combustion engine. In this context, dimethyl ether (DME) is thought to be a potential alternative to diesel fuel due to lower overall pollutant emissions and more excellent fuel economy. DME has no carbon-carbon bonds and lowest possible carbon to hydrogen ratio after methane. Several recent publications have already presented results from diesel engines operated on pure DME. These experiments showed that DME is an excellent diesel fuel with a high cetane number. This fuel produces very low particulate emissions, while the NO_x emissions are similar to those from current diesel fuel under the same engine operating conditions. This allows the engine operating conditions to be adjusted to reduce NO_x without an accompanying increase in particular emissions. The purposes of this paper are to examine the extinction and autoignition properties of DME flames using a counterflow burner, which should be useful data for combustion modeling and simulation.

1. 研究目的

現在の内燃機関の設計は, 地球環境問題とエネルギー資源枯渇問題から, 低公害なエネルギー燃料の利用と高効率な燃焼技術が求められている. 軽油代替燃料として注目されているジメチルエーテル (以下, DME と示す) は最も低分子のエーテルであり, 毒性もメタノールに比べてかなり低く, 沸点が -25°C であることから, 早い混合気の形成, 着火遅れの低減, 良好な始動特性を有し, さらにセタン価が 55 から 60 であることから, ディーゼル燃料として良好な自着火性の特徴を有する. また, 含酸素燃料で炭素同士の結合がないことから無煙な燃焼であり, 同時に EGR による燃焼温度制御により NO_x の削減も期待できる. 一般にディーゼル機関内の燃焼は拡散燃焼が支配的とされるため, DME を実機に適用する場合, その拡散燃焼特性を把握する必要がある. 中でも着火, 消炎は出力,

燃費, 排気ガス特性などの機関特性に大きな影響を及ぼすため, 機関性能向上のためには着火, 消炎特性の把握が求められている. 拡散火炎の消炎に関する研究には Humer らや Chen らの研究があるが, DME 火炎の消炎特性の研究は見受けられない. 一方, DME の着火に関しては均質系燃焼に関して Dagaut らの研究, Pfahl らの研究があり, これらの結果を基に Fisher らと Curran らは反応機構の開発, 改良を行った. 一方, 非均質系燃焼の着火に関する研究は少なく対向流バーナーを用いた Zheng らの研究がある程度であるが, Zheng らの研究は DME 単体の研究であり, 他の燃料との比較は行われていない. そこで本研究では対向流バーナーによる実験と詳細な化学反応を考慮した数値計算により DME の着火, 消炎特性の解明を目的とする. 本報告書では特に消炎特性について報告する.

2. 研究経過

図1に本研究に使用する対向流バーナーの概略図を示す。本研究に使用する対向流バーナーは過去の研究と同じであり、図1に示すように上下2本のダクトにより構成されており、ダクト1より燃料と希釈剤（窒素又は二酸化炭素）を、ダクト2より酸素と希釈剤（窒素又は二酸化炭素）を噴出する。周囲空気の影響を阻止するために、各ダクトを囲んで窒素のカーテン流が燃料流及び酸化剤流と平行に流れる。実験において各流量は、コンピュータ制御のマスフローコントローラ（Advanced Energy FC-780）で制御する。マスフローコントローラの測定精度は±1%以下である。また、ダクト間の距離 L は8mmとした。図1において Y_F , Y_{O_2} はそれぞれ燃料と酸素の質量分率、 V は流速、 T は温度、 ρ は密度であり、添え字1, 2はそれぞれダクト1, ダクト2の物理量に対応する。本研究ではダクト出口での接線方向流れはないものと仮定し、両ダクト出口流速は体積流量とダクト出口面積の比から算出した。実験は大気圧下で行い、両ノズル間の中央部付近でよどみ面を形成させ、この近傍に伸張のある火炎が形成される。この際、火炎伸張 a_2 は次式から求める。

$$a_2 = \frac{2|V_2|}{L} \left(1 + \frac{|V_1| \sqrt{\rho_1}}{|V_2| \sqrt{\rho_2}} \right) \quad (s^{-1})$$

この際本研究では、よどみ平面が両ダクト間の中央付近に形成されるように、両ダクト出口での流体の運動量を等しくした ($\rho_1 V_1^2 = \rho_2 V_2^2$)。拡散燃焼場において混合層 (mixing layer) 内の相対的な位置は以下の mixture fraction, Z により表すことができる。

$$Z = \frac{Y_F/W_F v_F + (Y_{O_2,2} - Y_O)/W_O v_O}{Y_{F,1}/W_F v_F + Y_{O_2,2}/W_O v_O}$$

ここで、 Y は質量分率、 W は分子量、 v はストイキのモル数である。添字 O, F は、酸化剤と燃料それぞれを示す。 Z は mixing layer の酸化剤側が0, 燃料側が1になる。この時火炎構造を特徴付ける火炎位置は以下の stoichiometric mixture fraction, Z_{st} で表わされる。

$$Z_{st} = (1 + Y_{F,1} W_O v_O / Y_{O_2,2} W_F v_F)^{-1}$$

本研究では消炎実験は以下の手順で行った。即ち、実験 I は消炎に及ぼす断熱火炎温度の影響

を調べるために、火炎構造を一定にし、断熱火炎温度を変化させて消炎条件を特定した。この際、希釈剤として窒素を用いた。実験 II は消炎に及ぼす火炎構造の影響について調べるために、断熱火炎温度を一定にし、火炎構造を変化させて消炎条件を特定した。この場合も希釈剤として窒素を用いた。さらに本研では消炎に及ぼす不活性ガス種の影響を調べるために、不活性ガス N_2 を CO_2 に置換した混合気を用いて実験 I 及び実験 II と同様な実験を行い、消炎条件を特定した。

また本研究では、数値計算手法として西岡らが開発した1次元対向流火炎の計算コードを使用した。本コードは Sandia National Laboratories で開発された CHEMKIN のサブルーチンを使い詳細な化学反応機構を用いた解析を行うことができる。本研究では本コードを用いて Flame-Controlling Continuation method により消炎及び自着火条件を特定した。支配方程式中の DME の反応機構は351種類の素反応と80種類の化学種を含んだ Curran らの詳細反応機構を使用した。詳細は発表論文参照。

3. 研究成果

3.1. 消炎に及ぼす断熱火炎温度の影響(実験 I)

本研究では、まず DME を使用して火炎構造を一定にし、断熱火炎温度を変化させた場合の消炎特性を調べた。希釈剤としては窒素を用い、火炎構造を一定にするため、酸化剤側、燃料側、それぞれの窒素量を調節して Z_{st} が0.1になるように組成を特定した。図2に火炎構造を $Z_{st}=0.1$ にしたときの酸化剤側の酸素の質量分率 $Y_{O_2,2}$ (図2(a)) 又は断熱火炎温度 T_{ad} (図2(b)) と、消炎時の火炎伸張 $a_{2,E}$ の関係を計算結果とともに示す。実験結果と計算結果を比較するとよく一致することがわかる。このことから Curran らの反応機構は $Z_{st}=0.1$ の場合の DME の消炎をよく再現していることが分かる。また、図2から、酸素濃度の低下及び断熱火炎温度の低下にともない低い伸張率で消炎に至ることが分かる。このことから、火炎構造が一定の場合、断熱火炎温度は消炎特性に影響を及ぼすといえる。

次に本研究では消炎に及ぼす不活性ガス種の影響を調べるために、不活性ガス N_2 を CO_2 に置換した混合気を用いて同じ実験を行った。図2に

N₂ 希釈, CO₂ 希釈の比較を示す. 図から N₂ 希釈の場合に比べて, 同一酸素質量分率 $Y_{O_2,2}$ 及び同一断熱火炎温度 T_{ad} の場合, CO₂ 希釈時の消炎時の火炎伸張 $a_{2,E}$ は大きくなる事が分かる. このことから不活性ガスとして CO₂ で希釈することで耐消炎特性は向上することが分かる.

3.2. 消炎に及ぼす火炎構造の影響 (実験 II)

次に本研究では断熱火炎温度を一定にし, 火炎構造を変化させた場合の消炎特性を調べた. 本研究ではまず, 燃料側に窒素を添加して断熱火炎温度 T_{ad} を変化させた基準混合気 DN1 を作成した. 基準混合気の組成と断熱火炎温度を表 1 に示す.

Table 1 Flame considered for experiment 2

Name	Compositions	T_{ad} [K]
DN1	DME+4N ₂ +Air	2050
DC1	DME+3O ₂ +8.94CO ₂	2050

基準混合気に対して火炎温度を一定にして Z_{st} を変化させるため, 各混合気の組成を保持したまま, 酸化剤側と燃料側の窒素量を調節し, その他の燃料組成を決定した. 図 3 に断熱火炎温度を一定のまま Z_{st} を変化させた場合の消炎時の火炎伸張率 $a_{2,E}$ の実験結果と数値解析結果の比較を示す. 図 3 から, 実験結果と数値解析結果を比較すると, 数値解析結果は低い値となった. 一方, 両者の定性的傾向は一致しており, $Z_{st}=0.5$ 付近で消炎時の火炎伸張率 $a_{2,E}$ が最小となり, その後, Z_{st} の増加にともない $a_{2,E}$ は増加することが分かる. このことから, Curran らの反応機構は実験による消炎機構を定性的には再現しているものの, Z_{st} が 0.2 以上では定量的には改善の余地があると言える.

次に希釈剤として CO₂ を用いて実験 II と同様に断熱火炎温度を一定にし, 火炎構造を変化させた場合の消炎特性を調べた. この場合, 基準となる N₂ 希釈混合気は表 1 の DN1 を使用し, 同一断熱火炎温度になるように基準混合気 DC1 を設定した. 図 3 に N₂ 希釈, CO₂ 希釈の比較を数値解析の結果とともに示す. 図から同一 Z_{st} で比較すると, CO₂ 希釈の場合が消炎時の火炎伸張 $a_{2,E}$ は大きくなる事が分かる. このことから実験 I の場合と同様に CO₂ で希釈することで耐消炎特性は向上することが分かる.

4. 今後の課題と発展

本研究では定容燃焼器と対向流バーナーの 2 種類の燃焼器を用いて DME の燃焼特性及び火炎構造の把握を目的としている. 本報告書では特に対向流バーナーを用いた消炎実験について報告したが, 定容燃焼器を用いた実験も予定通り多くの知見が得られた (発表論文参照). 課題であった高圧実験は定容燃焼器で行った. 今後の課題は対向流バーナーを用いた高圧下での着火・消炎に関する研究である. この研究に関しては, 現在準備中である.

5. 発表論文リスト

1. 田上公俊, 森秀芳, 嶋田不美生, 三重野渉, 宮原 朋広, DME 火炎の消炎特性に及ぼす火炎構造の影響, 自動車技術会論文集 Vol.38, No.1, pp.139-144, 2007
2. 田上公俊, 三重野渉, 宮原朋広, 梅田純司, 嶋田不美生, DME 拡散火炎の消炎特性に及ぼす火炎構造の影響, 第 19 回内燃機関シンポジウム講演論文集, 2007.1.
3. 田上公俊, 三重野渉, 宮原朋広, 梅田純司, 嶋田不美生, DME 拡散火炎の消炎特性と火炎構造の影響, 第 44 回燃焼シンポジウム講演論文集, pp.520-521, 2006.12.
4. K.Tanoue, F.Shimada, Studies of Combustion Properties of Dimethyl Ether flames, Review of Automotive Engineering, Vol.26, No.2 pp.129-136, 2005.

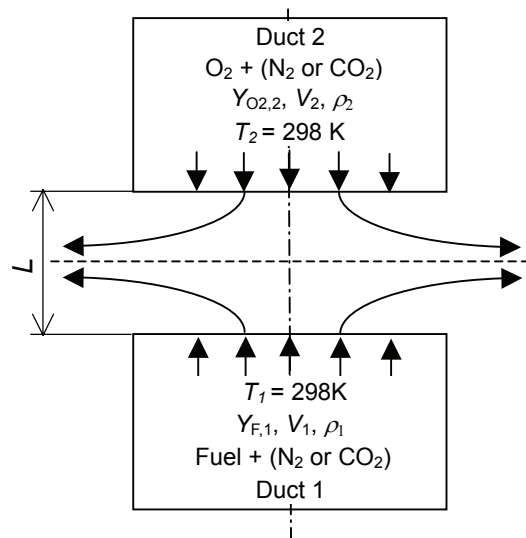
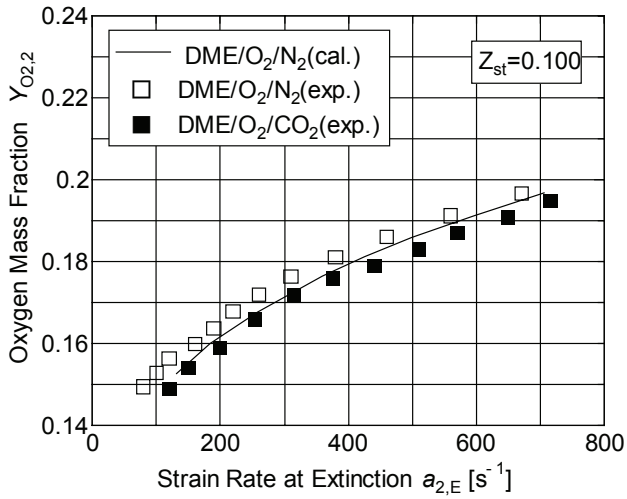
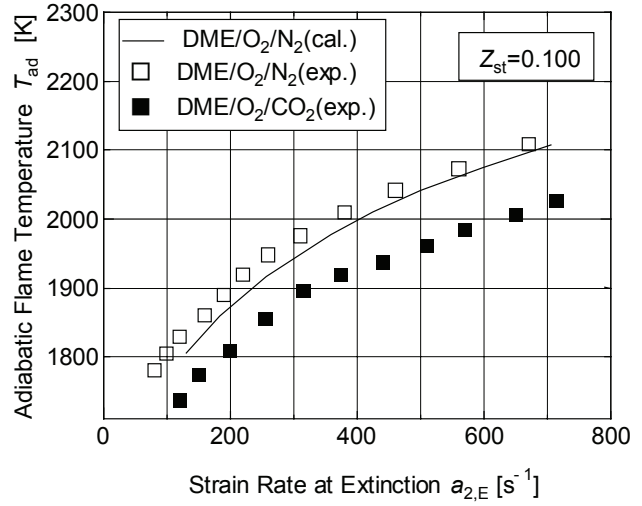


Fig.1 Schematic illustration of the counterflow configuration



(a) Oxygen mass fraction, as a function of the strain rate at extinction



(b) Adiabatic flame temperature as a function of the strain rate at extinction

Fig.2 Oxygen mass fraction and adiabatic flame temperature, in the oxidizer stream, as a function of the strain rate at extinction

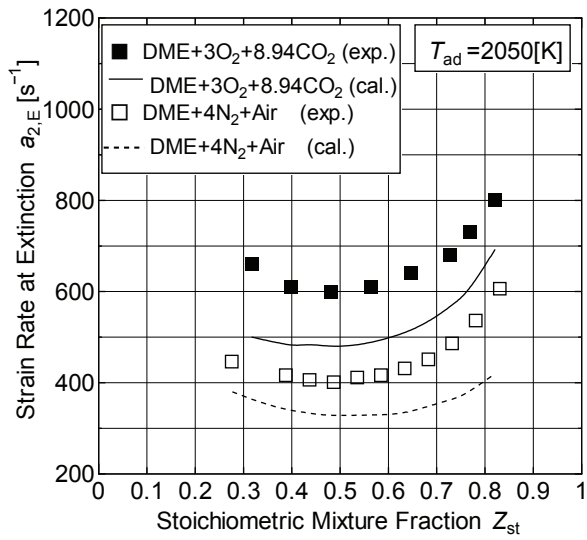


Fig.3 Extinction strain rates as a function of stoichiometric mixture fraction, all with the same adiabatic flame temperature