

バイオディーゼルを用いたディーゼル機関の
燃焼・排出ガス特性に関する研究

**A Study on Effects of Biodiesel on Diesel Engine
Combustion and Emissions Characteristics**

2014年02月

崔 晓丹

XIAODAN CUI

バイオディーゼルを用いたディーゼル機関の
燃焼・排出ガス特性に関する研究

**A Study on Effects of Biodiesel on Diesel Engine
Combustion and Emissions Characteristics**

2014年02月

早稲田大学 環境・エネルギー研究科

崔 曉丹

XIAODAN CUI

目次

第1章 序論	1
1.1. 研究の背景	1
1.1.1. はじめに	1
1.1.2. 地球温暖化対策	3
1.1.3. 自動車の燃費改善および排気ガス低減	6
1.1.4. バイオ燃料	8
1.1.5. 数値シミュレーション	14
1.2. 本研究の目的	16
1.3. 本論文の構成	18
第2章 研究方法	20
2.1. 燃料性状	20
2.2.1. BDF の燃料成分分析	20
2.2.2. BDF と軽油の燃料性状比較	22
2.1.3. 燃料の選択	24
2.2. 燃料性能実験	25
2.2.1. エンジンベンチ試験	25
2.2.2. PM 分析	34
2.2.3. 噴霧観察	39
2.3. 数値シミュレーション	43
2.3.1. 0次元化学反応モデル	44
2.3.2. 3次元燃焼反応モデル	52
第3章 実験結果と考察	61
3.1. エンジンベンチ試験の結果と考察	61
3.1.1. 燃料種の違いによる通常燃焼および排出ガス特性に与える影響	61
3.1.2. 高圧噴射において燃料種の違いによる燃焼および排出ガス特性に与える影響	75
3.1.3. 高 EGR 率において燃料種の違いによる燃焼および排出ガス特性に与える影響	77

3.1.4. 燃料種の違いによる PCCI 燃焼および排出ガス特性に与える影響	82
3.2. PM の粒子測定の結果と考察	87
3.2.1. 燃料種の違いによる PM の粒子排出特性に与える影響	87
3.2.2. 高圧噴射において燃料種の違いによる PM の粒子排出特性に与える影響	92
3.2.3. 高 EGR 率において燃料種の違いによる PM の粒子排出特性に与える影響	93
3.2.4. 燃料種の違いによる PCCI 燃焼の PM の粒子排出特性に与える影響	95
3.3. 噴霧観察の結果と考察	98
3.3.1. 燃料種の違いによる噴霧特性に与える影響	98
3.3.2. 噴射圧において燃料種の違いによる噴霧特性に与える影響	104
3.4. まとめ	105
第 4 章 計算結果と考察 -----	107
4.1.0 次元化学反応計算結果と考察	107
4.1.1. バイオ燃料の着火特性	107
4.1.2. バイオ燃料の PM と NO _x の ϕ -T マップ上の生成分布	113
4.2.3 次元燃焼反応計算結果と考察	115
4.2.1 各燃料の熱物性値の推定結果	115
4.2.2 噴霧モデルの検証	119
4.2.3 3次元燃焼反応計算結果と考察	124
4.3. まとめ	136
第 5 章 結 論 -----	139
5.1. 得られた知見の概要	139
5.2. 今後の課題	142
5.2.1 本研究における課題	142
5.2.2 BDF の普及に関する課題	143
5.3. 研究の発展性	143
5.3.1 セタン価向上剤としての応用	144
5.3.2 より幅広いバイオ燃料の利用に関する評価手法の確立	147
5.4. まとめ	147
付 録 A (エンジンベンチ試験装置諸元) -----	148
付 録 B (燃焼計算及び排出ガス計算式) -----	157

付 録 C (素反応リスト)	168
付 録 D (発表した論文)	183
参考文献	238

謝 辞

記号表

略語	名称	Name
ATDC	上死点後	After Top Dead Center
BDF	バイオディーゼル燃料	Bio-Diesel Fuel
BSEC	正味エネルギー消費率	Brake Specific Energy Consumption
BSFC	正味燃料消費率	Brake Specific Fuel Consumption
CH ₄	メタン	Methane
CO	一酸化炭素	Carbon Monoxide
CO ₂	二酸化炭素	Carbon Dioxide
DI	筒内直接噴射	Direct Injection
DOC	ディーゼル酸化触媒	Diesel Oxidation Catalyst
DPNR	PM と NO _x 同時低減触媒	Diesel PM-NO _x Reduction
DPF	ディーゼル酸化触媒	Diesel Particulate Filter
EGR	排気ガス再循環	Exhaust Gas Recirculation
FAME	脂肪酸メチルエステル	Fatty Acid Methyl Esters
ϕ	当量比	Equivalence ratio
λ	空気過剰率	Excess air ratio
P _{inj}	燃料噴射圧	Fuel Injection Pressure
GC/MS	ガスクロマトグラフ質量分析器	Gas Chromatography / Mass Spectrometer
JME	ジャトロファから作られたバイオディーゼル	Jatropha-derived Biodiesel
HACA	水素引き抜きアセチレン付加	Hydrogen-Abstraction/C ₂ H ₂ -Addition
HCCI	予混合圧縮着火	Homogeneous Charge Compression Ignition
IMEP	図示平均有効圧	Indicated Mean Effective Pressure
IPCC	気候変動に関する政府間パネル	Intergovernmental Panel on Climate Change
KH-RT	右記 2 つの不安定性理論	Kelvin-Helmholtz / Rayleigh-Taylor
LNT	NO _x	Lean NO _x Trap
LTC	低温燃焼	Low Temperature Combustion
MA	アラキジン酸メチル	Methyl Arachidate
MFB	燃焼質量割合	Mass Fraction of Burned fuel
MFB50%	燃焼質量割合 50%位置	50% Mass Fraction of Burned fuel
ML	リノール酸メチル	Methyl Linoleate
MM	ミリスチン酸メチル	Methyl Myristate
MO	オレイン酸メチル	Methyl Oleate
MP ₀	パルミチン酸メチル	Methyl Palmitate
MP ₁	パルミトレイン酸メチル	Methyl Palmitoleate
MS	ステアリン酸メチル	Methyl Stearate
N ₂ O	亜酸化窒素	Nitrogen Monoxide
NO _x	窒素酸化物	Oxides of nitrogen
PCCI	予混合圧縮着火	Premixed Charge Compression Ignition
dP/d θ _{max}	最大圧力上昇率	Maximum Pressure Rising rate
PM	粒子状物質	Particulate Matter
PN	粒子排出数	Particle Number
PaSR	部分的に混合が進んだ反応器	Partially Stirred Reactor

R.H.R.	熱発生率	Rate of Heat Release
SCR	選択式還元触媒	Selective Catalytic Reduction
SOF	可溶性有機成分	Soluble Organic Fraction
T	燃焼温度	Combustion Temperature
TDC	上死点	Top Dead Center
THC	炭化水素	Total Hydrocarbon
3D-CFD	3次元数値流体力学	Three Dimensional-Computational Fluid Dynamics

第1章 序論

1.1 研究背景

1.1.1 はじめに

近年、化石燃料の大量消費に伴う大気中の二酸化炭素濃度の増加により、地球温暖化が深刻な問題となっている。図 1.1 に示すように、日本の総排出量に対して運輸部門が占める割合は 23%となっており、その中でも乗用車による 54%、貨物車による 34%を占めている(2011 年)¹⁾。したがって、温室効果ガスの削減には、自動車からの二酸化炭素排出量の削減が絶対不可欠な状況にあると言える。

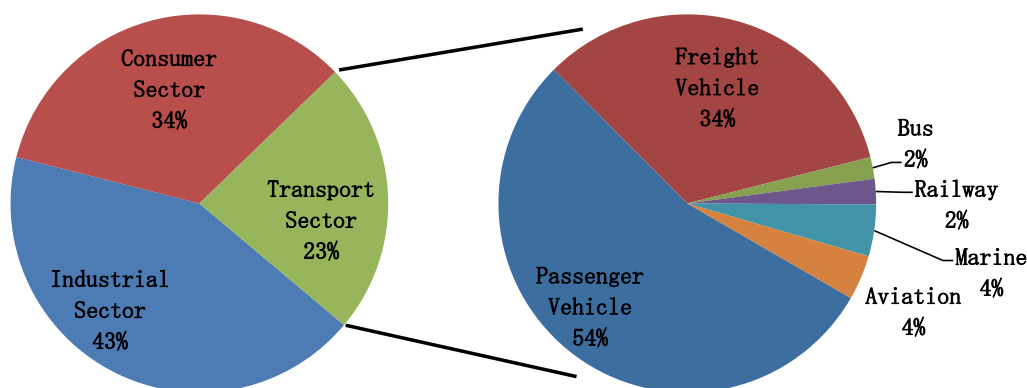


図 1.1 2011 年度日本における二酸化炭素排出の割合（部門別および輸送機関別）

一方で、欧州では燃費の観点からディーゼル乗用車が乗用車市場の約 50%を占めるという現状にあるが²⁾、日本国内ではディーゼル乗用車の占める割合が 0.1%以下であり³⁾、ガソリン乗用車が圧倒的に主流となっている。日本国内においては、ディーゼルエンジンの低燃料消費率という利点よりも、排出ガス規制への対応にはコストが増加することや粒子状物質（PM : Particulate Matter）排出という欠点に対する消費者の意識が高いために、普及に至らないのが現状である。したがって、国内においても乗用車市場にディーゼルエンジンが普及することで、二酸化炭素排出量の大幅な削減が見込めるものと考えられる。図 1.2 に示すように、重量車と同様にディーゼル乗用車に対しても、日米欧において厳しい排出ガス規制値が設定されており、ディーゼルエンジンの欠点とされている高濃度の NOx,

PM の排出を抑制することが必要とされている。また、近年 PM の粒子サイズが小さいほど健康に悪影響が大きいと報告され⁴⁾、PM の排出量だけではなく、PM の粒子排出数 (PN: Particle Number) も注目されている。このような状況のもと、燃焼技術、排気後処理技術、燃料技術それぞれの改善や新たな制御技術の開発が必要とされる。

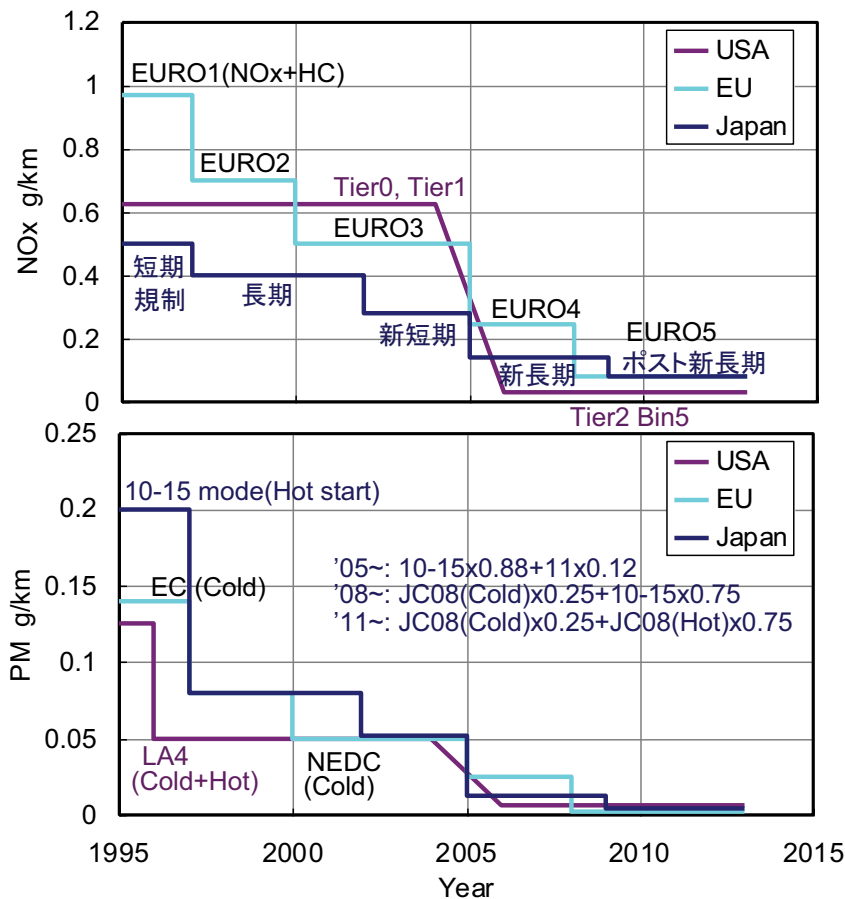


図 1.2 日米欧におけるディーゼル乗用車の排出ガス規制値の推移⁵⁾

従来のディーゼルの燃焼方式では、燃焼領域が PM, NOx 両生成域を通過するため、燃焼後の PM, NOx の同時低減が困難であった。近年の研究では多量 EGR (Exhaust Gas Recirculation) や吸気温度の低温化, 有効圧縮比の低下等により, 着火遅れの長期化を図り, PM, NOx の同時低減が可能になることが報告されている⁶⁻⁸⁾。これらの報告は HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) や PCCI (Premixed Charge Compression Ignition) といった予混合燃焼が NOx, PM のトレードオフ関係を打開する有効な燃焼形態であることを示している。

従来の燃焼方式やこれらの新たに燃焼方式において、生物や未利用資源の廃食油から製造され、石油に代替するバイオディーゼル燃料(脂肪酸メチルエステル, 以下 BDF と略す)を燃料として用いることで、より一層の環境負荷低減効果が期待されている。BDF はディーゼルエンジンの燃料として実用可能であることを多くの研究によって示されている⁹⁻¹¹⁾。BDF は従来の軽油の代替燃料としての有効性に加えて、PM の排出を著しく低減する効果が得られる¹²⁾。また、地球レベルの気候変動に関わる CO₂ 排出量の増加の問題に対して、BDF は燃焼時の CO₂ 排出が避けられないが、再生可能なバイオマス燃料として、CO₂ の排出が閉ループサイクルを形成することができる¹³⁾。その上、BDF 燃料の使用により、石油の輸入の依存を減少することができる。

しかしながら、非常に多くの研究者が BDF の混合により、NO_x の排出量が増加することを報告している。そのため、NO_x の排出の抑制が必要とされ、また、低温流動性が悪く、酸化による燃料性状の変化やゴム素材の劣化などが問題とされており¹⁴⁾、これらがバイオディーゼルの実用化における重要な課題となっている。また、現在の BDF は大豆、パームなどの食糧から作られたものであるため、BDF を生産する発展途上国においては、食糧競合するため、社会的な問題となる可能性がある¹⁵⁾。

このように、自動車をもたらす地球温暖化、大気汚染、エネルギー需給などの問題の解決が重要な課題となっている。その解決のためには、燃料性状の改善、燃焼技術と排出ガス後処理技術の開発・実用化、および代替燃料の実用化が最も重要な課題として取り込まれている。

1.1.2 地球温暖化対策

人間の活動によって生じる環境負荷が地球規模にまで拡大した結果、環境容量を超え、これまでの生態系の精妙な均衡が崩れつつあるのが現状である。さらに、途上国での人口増加と経済成長を背景に、環境への負荷が一層増大していく恐れがあることが指摘されている¹⁶⁾。これは、「21 世紀環境立国戦略」から取り出した地球規模での環境問題の深刻化の概略である。これはつまり、「将来世代のニーズを損なうことなく、現在世代のニーズを満足させる発展」という持続可能な発展が要求されていることに他ならない¹⁷⁾。そのうち、地球温暖化問題は人類の生存基盤に関わる最も重要な環境問題と言える。

気候変動に関する政府パネル(IPCC)の第4次報告¹⁸⁾により、現状の世界の温室効果ガスの排出量は自然界の吸収量の2倍を超えており、このまま進むと、図 1.3 に示すように、

世界の温室効果ガス排出量は今後数十年に渡って引き続き増加するものとされ、地球全体の平均気温の上昇は約 4.0°C に達すると予測されている。また、スターン報告では、気温上昇が 2°C 以下では影響はそれほど大きくないが、 $2\sim 3^{\circ}\text{C}$ を超えると影響が甚大になり、 5°C になるともはや被害は予測不能となると指摘されている。この報告では、この結果を踏まえ、気温上昇が 3°C 程度と予測される 550ppm に CO_2 濃度を安定化させることが重要であるとしている。

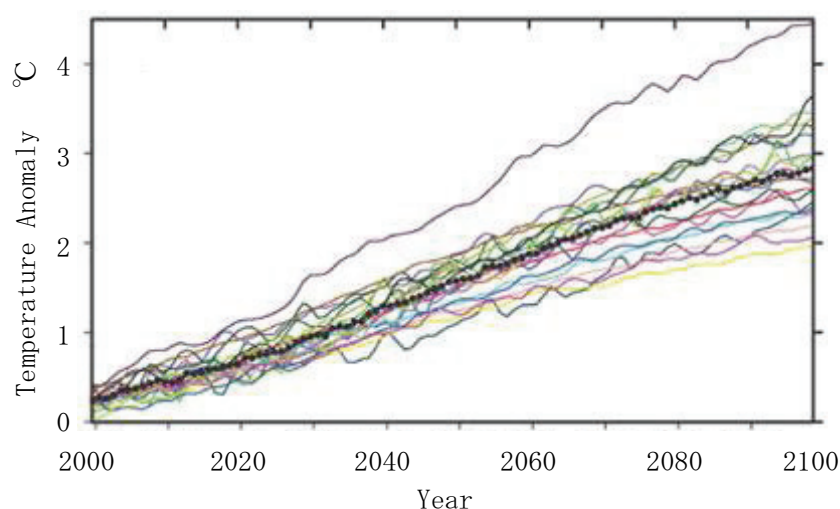


図 1.3 IPCC 第 4 次報告における世界平均気温変動の将来予測¹⁸⁾

このような地球温暖化の結果、異常気象の頻発、気候システムの急激な変動といった影響を引き起こすのみならず、生態系への影響に加え、数億人規模の水不足の深刻化、農業への打撃、感染症の増加、自然災害の激化など、我々の社会・経済活動に様々な悪影響が複合的に生じる可能性があることが指摘されている¹⁹⁾。現在既に、地球温暖化によって水資源や脆弱な生態系などでは悪影響が生じており、今後の気温上昇に従って、より深刻な影響が世界のあらゆる地域で生じることが予測されている。

放射強制力は気候に与える影響力を定量的に評価するものであり、地球のエネルギー収支バランスを変化させる人為起源および自然起源の要因の影響力を示すものである²⁰⁾。図 1.4 に示すように、産業革命以前 (1750 年頃) を基準とした 2005 年時点の放射強制力の内訳においては、長寿命の温室ガス (二酸化炭素 (CO_2), メタン (CH_4), 亜酸化窒素 (N_2O) など) および対流圏オゾンの増加とりわけ CO_2 の増加による温室効果の寄与が大きいことがわかる¹⁸⁾。

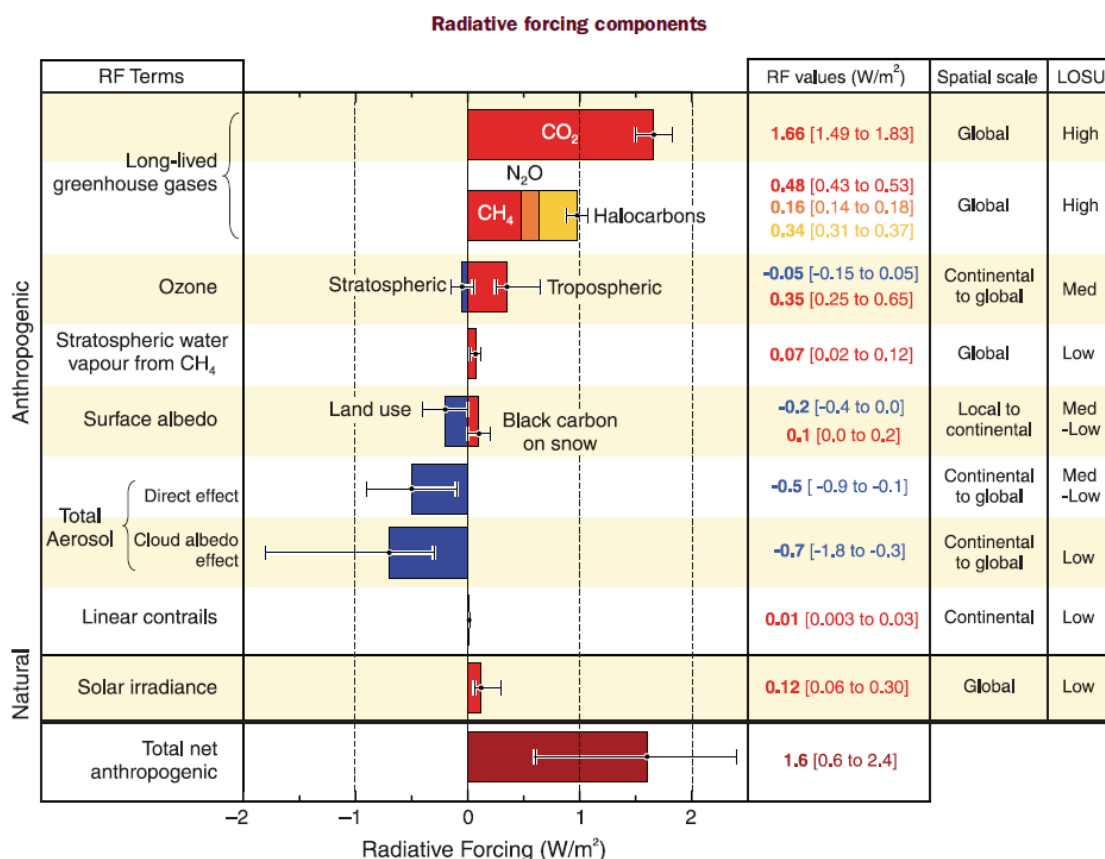


図 1.3 2005 年時点で世界平均した放射強制力の推定値（1750 年頃を基準）¹⁸⁾

地球温暖化問題は、地球全体の環境に深刻な影響を及ぼすものであり、人類すべてが自主的かつ積極的に地球温暖化を防止するという課題に取り込むことが重要である。日本においては、「地球温暖化対策推進法」という法律に基づき、地球温暖化対策の推進を図っているところである²¹⁾。また、2005 年には温室効果ガスの削減についての法的拘束力のある約束などを定めた気候変動（地球温暖化）に関する国際連合枠組条約の京都議定書が発効し、2008 年～2012 年の 5 年間を第 1 約束期間として、先進国及び市場経済移行国全体の温室効果ガスを 1990 年レベルと比較して少なくとも 5%削減することが目標とされ、日本については、1990 年比で 6%の温室効果ガス削減が義務づけられている²²⁾。

日本国内総排出量に対して運輸部門が占める割合は 23%となっており、そのうち、自動車による排出が約 90%を占めている¹⁾。燃料の燃焼によって排出される CO₂ の削減が地球温暖化対策につながるため、特に運輸部門においては、燃料の消費削減を達成することが求められている。今後、日本において重量車に対しても、特に地球温暖化対策と省エネルギー

ギーの両面から燃費規制が導入されることが決定している。また、交通流対策、道路整備、モーダルシフト・物流の効率化、公共交通機関の利用促進等をはじめとする自動車の利用に関わる諸対策も重要である。このような自動車の利用対策の推進については、温暖化対策と大気汚染対策の両面で効果が期待される。

1.1.3 自動車の燃費改善および排出ガス低減

近年、石油資源の枯渇や地球温暖化などの問題が深刻化しており、自動車における燃費改善とCO₂排出の低減が求められている。自動車の動力原であるエンジンに対しては、エンジンの一層の高効率化が必要とされている。

自動車エンジンには、火花点火ガソリンエンジンと圧縮着火のディーゼルエンジンがある。ガソリンエンジンは、常に理論混合比での運転となるように精緻に制御され、また三元触媒が排出ガス後処理装置として広く利用され、NO_x、HC、COを同時に大幅に低減することが可能となっている²³⁾。これにより、近年のガソリンエンジンの排出ガスは極めて低レベルとなっている。しかしながら、ガソリンエンジンにおいては、熱効率向上のため、圧縮比を増加させると、火炎が伝播する前にシリンダ壁近傍の未燃ガスが自己着火するノックが生じる可能性がある。これによって潤滑油が蒸発してエンジンが焼き付く危険性がある²⁴⁾。そのため、ガソリンエンジンでは高圧縮比には限界がある。その対策として、ノックを回避するためオクタン価の高い燃料が使われ、また、リーンバーンエンジンや燃料をシリンダ内に直接噴射する直噴ガソリンエンジンなどが開発され、ポンプロスの低減、比熱比の増大、燃焼温度の低温化による熱損失の低減、耐ノック性に改善による高圧縮比化などにより、熱効率は向上するが²⁵⁾、今後とも一層の改善が必要とされている。

一方、ディーゼルエンジンでは、セタン価が高く自己着火を起こし易い軽油を使用し、燃料の自己着火燃焼であるため、ノックの危険性が低く、圧縮比を高く設定することができる。また、ポンプ損失がガソリンエンジンに比べて少なく、希薄燃焼であるために比熱比が大きく熱損失が少ない。このような特性によって、ディーゼル車は熱効率が高く、CO₂排出量がガソリン車より少ないことが利点とされている。したがって、ディーゼル車は、地球温暖化の防止に対して非常に有効であると言える。しかしながら、ディーゼルエンジンにおいては、燃料噴霧内の空気が十分ある領域ではNO_xが生成し、燃料過剰の領域ではPMが発生するため、両者はトレードオフの関係にあり、これまでそれらを同時に低減することが極めて困難とされてきた。その上、ディーゼル燃焼は希薄燃焼であり、また熱

効率が高いために排気温度も低く、ガソリンエンジンにおける三元触媒のような後処理装置の開発が困難であった²⁶⁾。

近年のディーゼルエンジンでは、排出ガス再循環 (EGR : Exhaust Gas Re-circulation)²⁷⁾、ターボチャージ²⁸⁾、コモンレール式の燃料噴射システム²⁹⁾、多段噴射³⁰⁾、燃料噴射ノズルの小噴孔径化³¹⁾、燃焼室形状の改良³²⁾、低圧縮比化³³⁾、筒内流動 (スワール比) の最適化³⁴⁾等の拡散燃焼を主体としたディーゼル燃焼を改善する技術が採用され、排出ガスの低減が図られてきた。また、排気後処理装置として、酸化触媒(DOC: Diesel Oxidation Catalyst)³⁵⁾、DPF (Diesel Particulate Filter)³⁶⁾、NOx 吸蔵還元触媒 (LNT : Lean NOx Trap)³⁷⁾、尿素 SCR (Selective Catalytic Reduction) システム³⁸⁾、DPNR (Diesel PM-NOx Reduction) システム等が実用化されている³⁹⁾。これらの適用に当たっては、触媒の硫黄中毒を抑制するため、燃料中の硫黄分を低減するなどの燃料性状の改善が必要とされている。したがって、燃焼技術、排気後処理技術、燃料技術を高い次元で組み合わせることがディーゼルエンジンの低公害化に直結すると言える。特に、排出後処理に伴って燃費が悪化する傾向があるため、燃焼室内での燃焼改善によって、排気後処理の負担を大幅に軽減することが必要である。

このような理由から、NOx と PM の同時低減が困難な従来のディーゼル燃焼形態を変更することによって、それらの同時低減を可能とする予混合圧縮着火 (HCCI: Homogeneous Charge Compression Ignition) 燃焼方式が提案されている⁴⁰⁾。これは、燃焼し始める以前に、燃料と空気を十分に予混合し、希薄な混合気の自己着火を行う燃焼方式である。この燃焼方式は、ガソリンエンジンの混合気形成法とディーゼルエンジンの着火方式を併せ持つ燃焼方式とも言える。HCCI 燃焼は、極めて希薄な燃料となるため NOx と PM の同時低減が可能であり、後処理装置の負担を大幅に低減する可能性がある。

ディーゼルエンジンに対して、島崎らは、上死点近傍における筒内直接燃料噴射を用いた場合でも、多量の EGR などの燃焼制御により着火遅れを確保しながら局所的に過濃領域のない混合気が形成できれば、燃料を圧縮行程早期に噴射する場合と同様に HCCI 燃焼が実現することが可能であるとしている、また、この手法は燃焼効率向上 (CO, THC の低減と燃費改善) の観点から有用なことを見出している⁴¹⁾。そのような上死点近傍での噴射によってディーゼルエンジンで可能となる HCCI 燃焼は、一般的には PCCI (Premixed Charge Compression Ignition) 燃焼と呼ばれ、最近様々な研究成果が報告されている⁴²⁻⁴⁴⁾。しかしながら、いずれも高 EGR、燃料の高圧噴射および燃焼期間の遅角化に伴う燃費の悪化や、燃焼騒音と PM の増加が認められる⁴⁵⁾。したがって、NOx の低減のために EGR 率を高め

る制御が今後取り入れられていくものと考えられるが、高 EGR 率条件での PM の増加を同時に抑制する燃焼法の確立が望まれている。特に、中負荷から高負荷運転条件へと移行すると、NO_x、PM、燃費、騒音の同時低減は極めて困難となる傾向がある。

1.1.4 バイオ燃料

「農林漁業有機物資源のバイオ燃料の原材料としての利用の促進に関する法律」では、『「バイオ燃料」とは、農林漁業有機物資源を原材料として製造される燃料（単なる乾燥又は切断その他の簡易な方法により製造されるものを除く。）をいう』と定義され、以下のような燃料が例示されている⁴⁶⁾。

- 1) 木炭、木質ペレットなどの固形燃料
- 2) 発酵により得られるエタノール、発酵や熱分解により得られるメタノール、植物油から製造される脂肪酸メチルエステル（バイオディーゼル燃料）、炭化水素油等の液体燃料
- 3) 発酵により得られるメタン、熱分解により得られるメタン、水素、一酸化炭素等の気体燃料

バイオ燃料を利用する意義としては、地球温暖化の原因となる二酸化炭素の排出の削減効果が挙げられる。バイオ燃料は、バイオマスを原料として製造されることから、京都議定書に基づくカーボンニュートラルの考え方により、バイオ燃料の燃焼によって排出された二酸化炭素は温室効果ガス排出量として計上されない。植物油を原料とする食用油を廃棄する際、排水とともに流した場合には、河川などに流入し、水質汚染など環境問題を引き起こす。このような廃食用油を使ってバイオディーゼル燃料を製造・利用することは、地域で発生する廃棄物をリサイクルして有効利用することとなり、廃棄物の抑制、資源の有効利用に寄与する⁴⁷⁾。

バイオ燃料は、バイオマスを原材料として製造される燃料の総称であり、ガソリンの代替燃料であるバイオエタノール、軽油の代替燃料であるバイオディーゼル燃料などが含まれる。バイオエタノールは、サトウキビ、テンサイなどの糖質原料、米、小麦、トウモロコシといったでんぷん質原料等から製造される⁴⁸⁾、一方、BDFは植物油等をメチルエステル化し、精製して製造される脂肪酸メチルエステル（Fatty Acid Methyl Esters）である。BDF原料としては菜種油、パーム油、オリーブ油、ひまわり油、大豆油、コメ油、ヘンプ・オイル（大麻油）などの植物油、魚油や豚脂、牛脂などの獣脂及び廃食用油（いわゆる天ぷら油等）などがある⁴⁹⁾。BDFの使用に対して、欧州では菜種油、中国ではオウレンボク等、

北米及び中南米では大豆油, 東南アジアではアブラヤシやココヤシ, ナンヨウアブラギリ(ジャトロファ)から得られる油が主に利用されている⁵⁰⁾. 一般的なBDFの製造過程は, 図1.6に示すとおりで, これによってトリアシルグリセリドとメタノールをアルカリ触媒下でエステル交換して得られる脂肪酸メチルエステルが得られる.

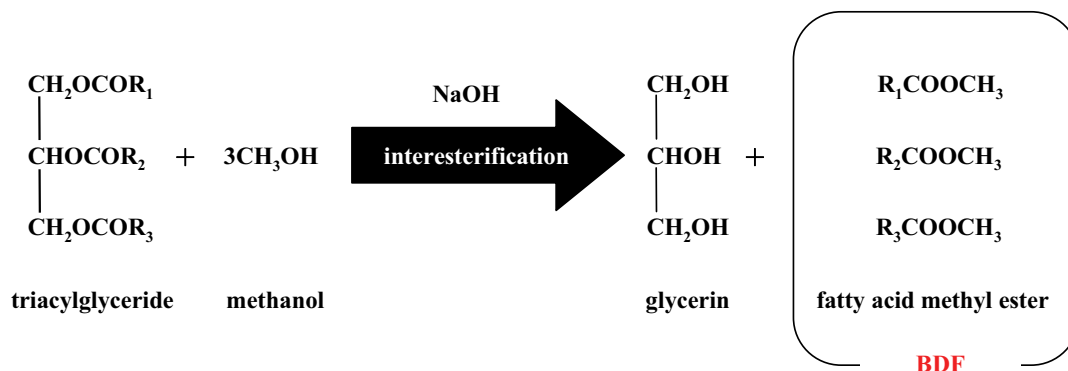


図 1.6 BDF 生成反応概要

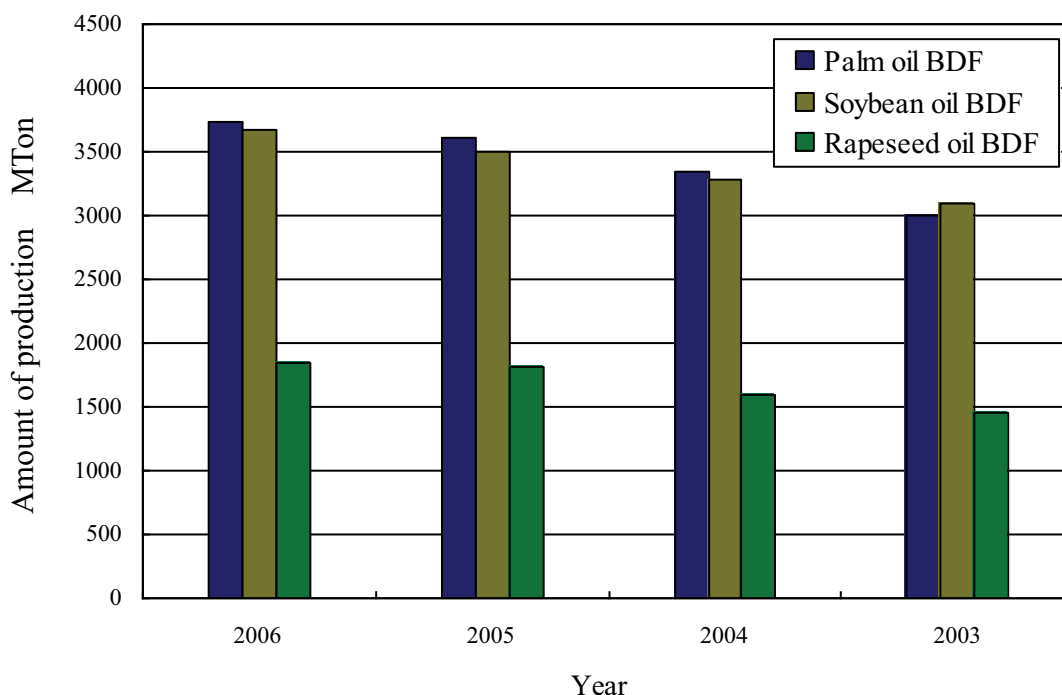
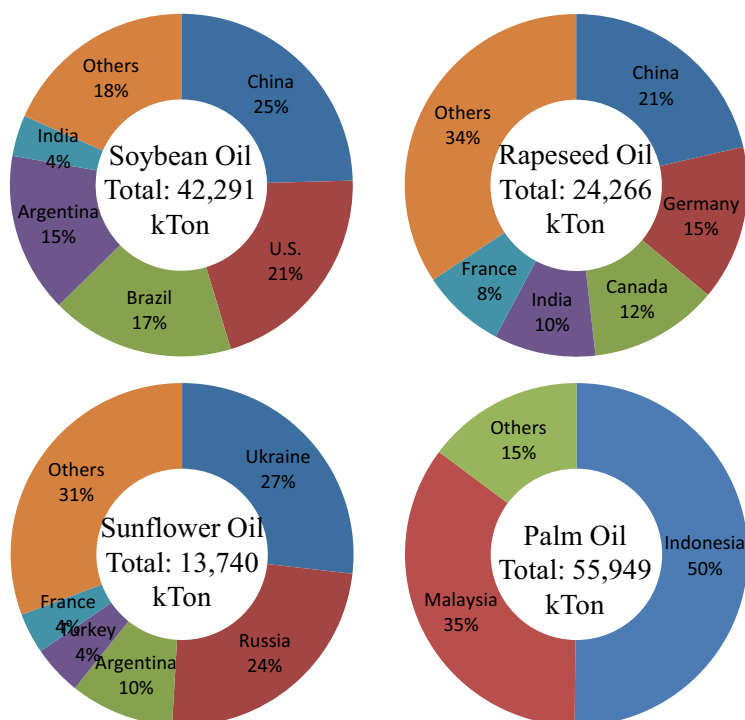


図 1.7 各種 BDF の世界生産量⁵²⁾

図 1.8 各種 BDF の主産国の割合⁵³⁾

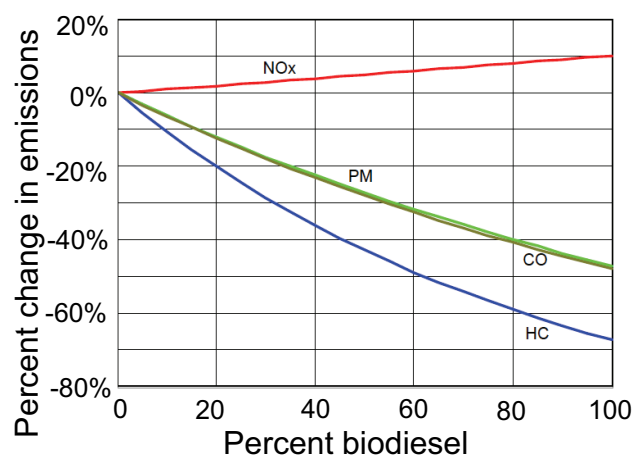
世界の BDF 生産量を図 1.7 に、その主産国の割合を図 1.8 にそれぞれ示す。前述したように、BDF は主に大豆、パームなどの食糧から作られているのが現状であり、主な BDF の生産国である発展途上国においては、近年 BDF の生産量を増加するとともに、食糧との競合が問題となる可能性が指摘されている。これに対して、最近ジャトロファという植物から製造された BDF に注目が集まっている。ジャトロファは毒性を持つため食料と競合せず、また、干ばつに強く、通常食用植物の栽培が行われない酸性土壌でも育ち、収穫率と採油率が高いという特徴を持っている⁵¹⁾。

製造・精製された BDF の主成分は脂肪酸メチルエステルであり、表 1.1 に示すように、原料の種類により成分の中の脂肪酸の炭素の数や飽和度などが異なる。また、その炭素の数や飽和度などの違いにより、BDF の粘度、密度などの物理特性が相違し、その上、BDF の着火特性などの化学反応特性も大幅に差がある。炭素の数が少ないほど、または飽和度が高いほど着火しやすく、低温での着火遅れが短くなる傾向がある⁵⁵⁾。

表 1.1 各種原料から作られた BDF の脂肪酸成分⁵⁴⁾

Carbon Number	Double-bond Number	Fatty Acid	Coconut	Palm	Rapeseed	Jatropha	Cooking oil	Soybean
8	0	Caprylic Acid	8					
10	0	Capric Acid	8					
12	0	Lauric Acid	45					
14	0	Myristic Acid	18	1				
16	0	Palmitic Acid	10	45	4	15	10	11
16	1	Palmitoleic Acid				1		
18	0	Stearic Acid	2	6	2	7	3	5
18	1	Oleic Acid	8	38	62	46	42	25
18	2	Linoleic Acid	2	9	20	31	35	52
18	3	Linolenic Acid			8		5	7
>20					1			

従来の研究から、BDF 燃料はディーゼルエンジンの燃料として実用可能なことが示されており、従来のディーゼル燃料の代替燃料として注目されている。

図 1.9 バイオ燃料の混合による排出ガスの変化割合⁵⁶⁾

US EPA のレポートでは⁵⁶⁾、図 1.9 に示すように、大豆から作られた BDF 燃料において、軽油と体積割合で 20% を混合した場合、PM の平均減少が 12%、NO_x の平均増加が 2% であり、BDF 燃料が 100% の場合、PM の平均減少が 47%、NO_x の平均増加が 10% であることが報告されている。また、BDF 燃料を混合すること(体積割合で 1~2%)によって、ディーゼル燃料の潤滑性の向上が期待できると指摘されている。また、BDF の使用に伴う NO_x

排出量の増加について多くの研究例が見られる.

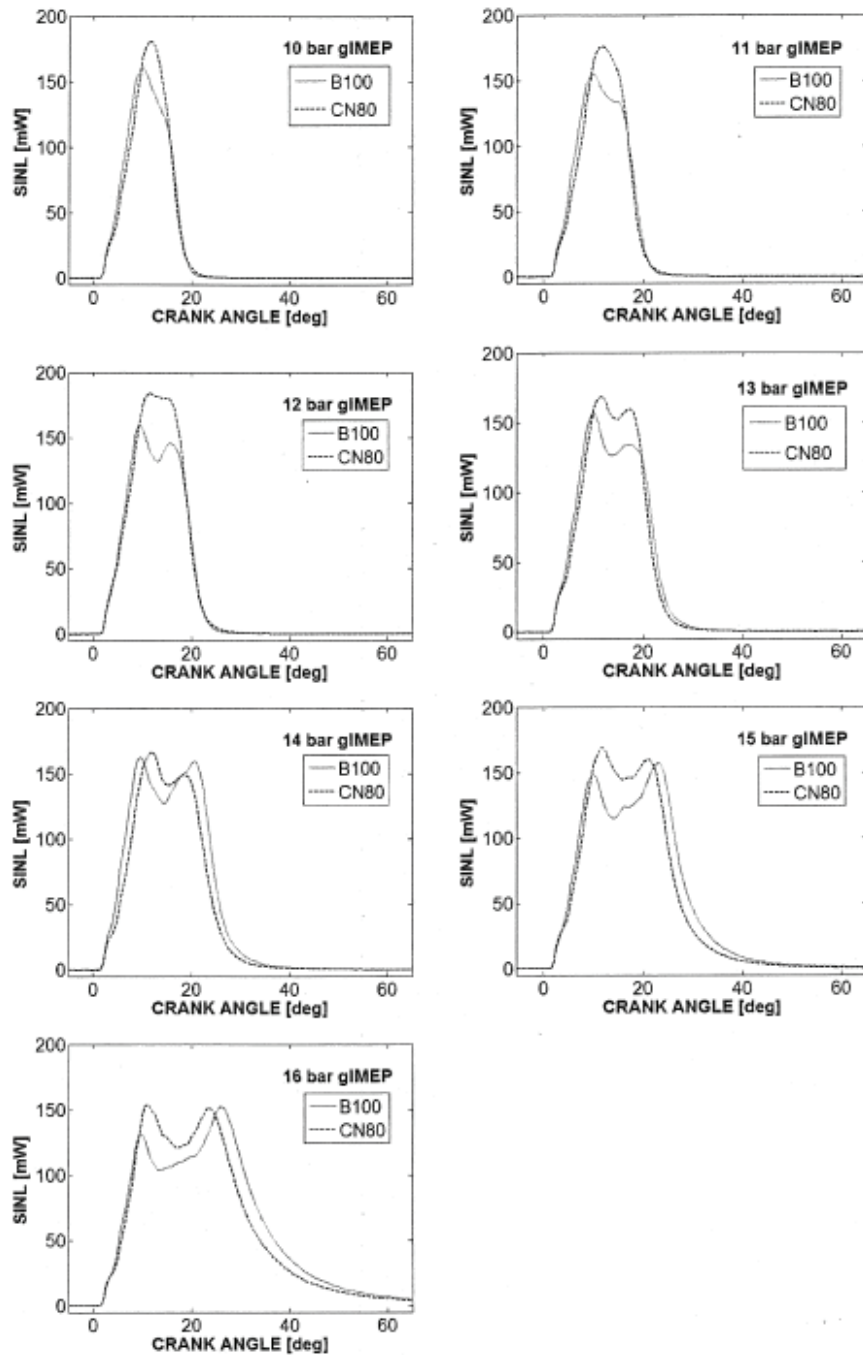


図 1.10 SINL 曲線⁵⁷⁾

A.S.Cheng ら⁵⁷⁾は、研究用の可視化直噴ディーゼルエンジンを用いた実験で BDF 燃料のシリンダ内の温度上昇によって NO_x の排出量が増加すると指摘している。図 1.10 に示す

ように、各エンジン負荷における、NO_x の増加率と最大放射熱伝達率 (SINL_{max}: Spatially Integrated Natural Luminosity Max) レベルの減少率の比較をすると、SINL_{max} が減少することにより、NO_x が増加することを推測できる。これはシリンダ内の温度が上昇することによりサーマル NO_x が生成され NO_x の排出が増加したためと考えられる。R.L.McCormick ら^{58,59)}の研究では、図 1.11 に示すように BDF 燃料のヨウ素価により、NO_x の排出が異なり、ヨウ素価が高いほど、NO_x の排出量が多い結果が得られている。このように、BDF 燃料が添加剤により、NO_x の排出量が低減できる可能性がある。また、多量 Cooled EGR の利用により、燃焼温度を下がり、NO_x の排出量が低減できると報告例がある⁶⁰⁾。

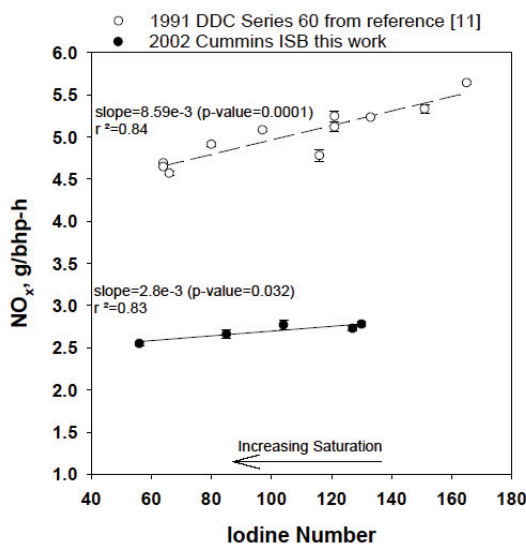


図1.11 BDF燃料のヨウ素価によるNO_x排出量の変化⁵⁹⁾

また、BDF を使用により PM の排出量の大幅低減が可能になる一方、健康への影響の視点から、BDF の使用により排出される粒子数 (PN) の検討が必要となる。従来の研究において、図 1.12 に示すように、BDF の排出の PM の粒子サイズが軽油より小さくなり、PN が多くなると報告されている例がある⁶¹⁻⁶³⁾。それに対して、排出された PM の特徴が軽油と大きく変化する一方、後処理装置 DPF に与える影響ほとんどないことが報告されている⁶⁴⁾。また、BDF には硫黄成分が極めて少ないことから、DPF や LNT などの触媒の硫黄被毒が抑制でき、浄化効率が改善することが可能である。

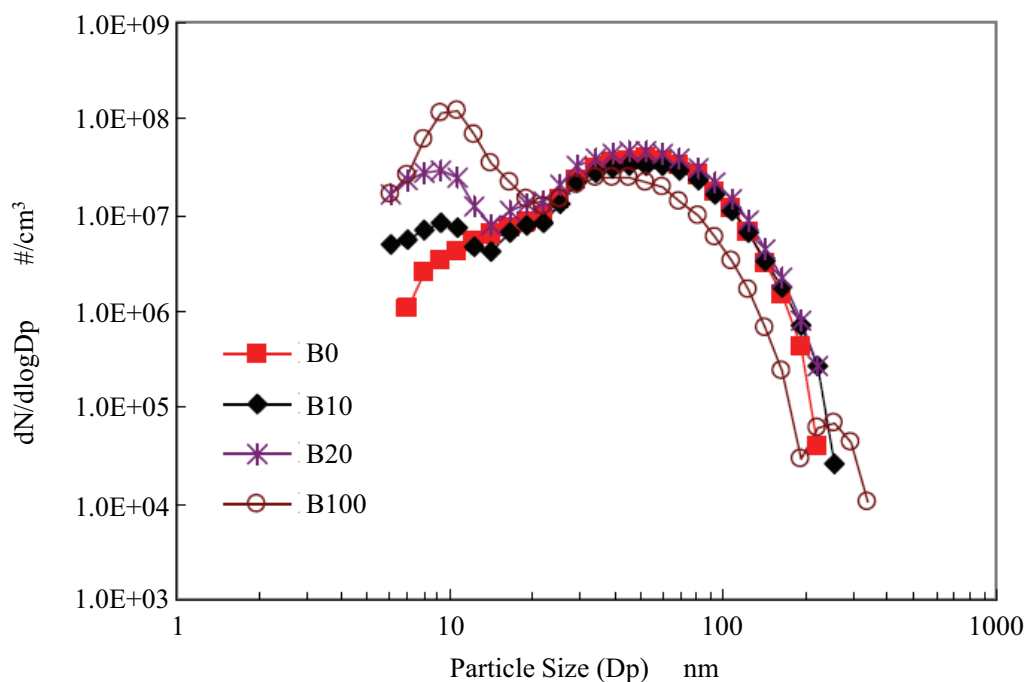


図 1.12 PM の粒子数が粒子サイズにおける分布 (BMEP=0.10MPa) ⁶¹⁾

1.1.5 数値シミュレーション

近年のディーゼルエンジン開発においては、排出ガス低減と燃費改善の両面から、非常に多くの設計・運転パラメータを最適に組み合わせて燃焼制御を行う必要があり、その最適化には膨大な時間と費用が必要となる。また、最適解が実験的に導き出されたとしても、その現象の本質的な理解が得られることが困難であり、エンジン制御技術の方向性を検討することが難しい面がある。エンジン実験は実現象の情報を得ることができるが、さらに空間・時間解像度の高い情報を得るためのツールが必要である。実験で得られる知見を補う上では、CAE (Computer-Aided Engineering) によって得られる筒内現象に関わる情報が有用となる。このような目的のため、予測精度の高い CFD (Computational Fluid Dynamics) コードを構築して利用することにより、エンジン筒内の燃焼現象の理解を促し、低環境負荷型のディーゼルエンジンの開発効率の向上に繋がる可能性がある。

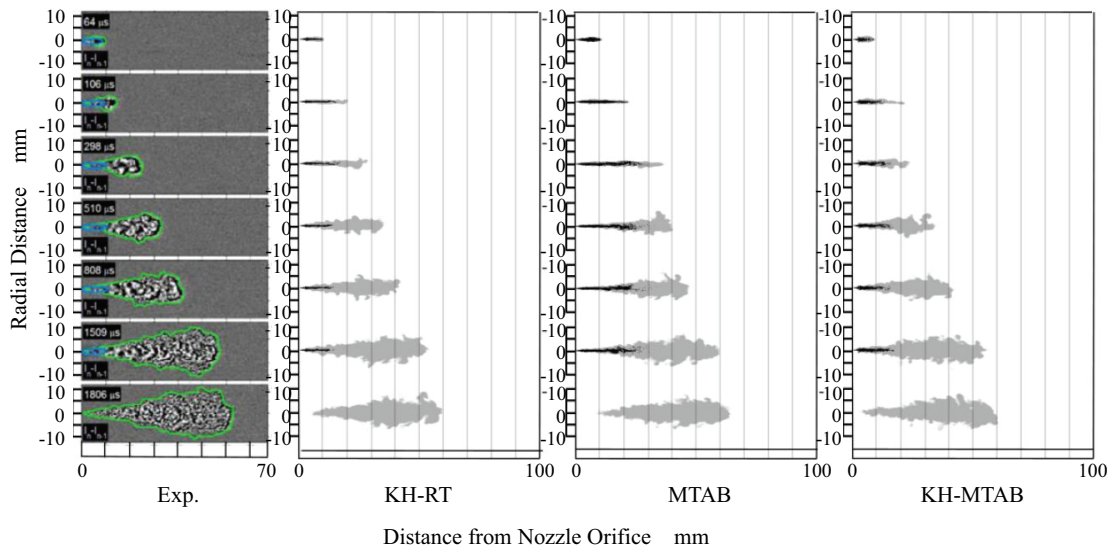


図 1.13 各モードにおける噴霧画像⁶⁵⁾

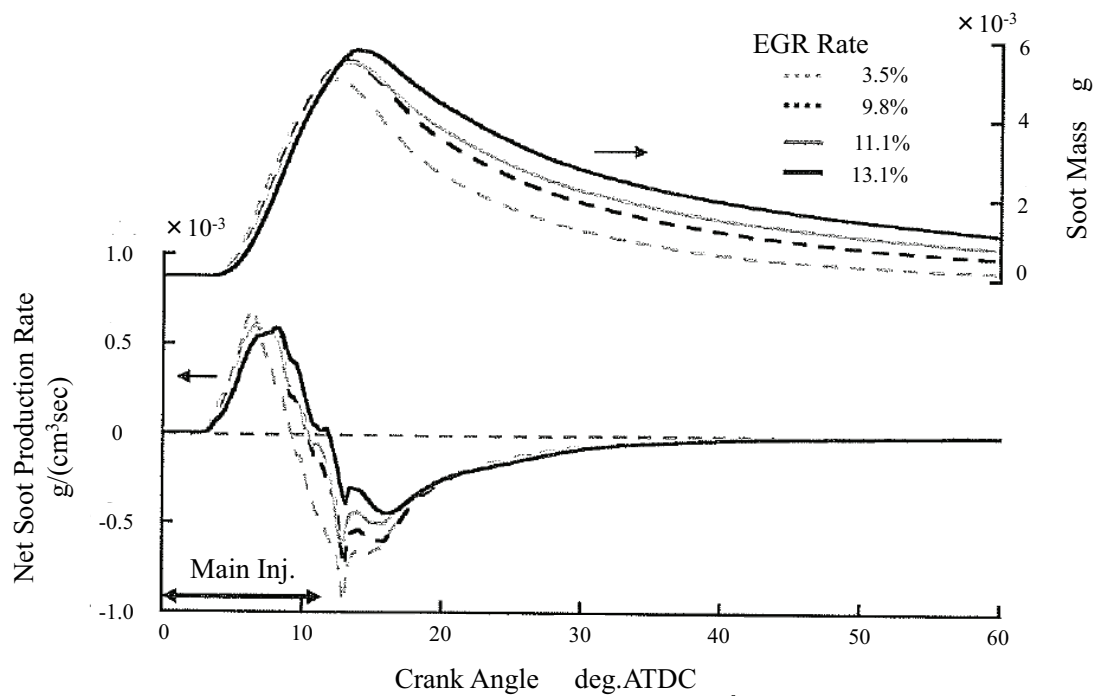


図 1.13 Soot のエンジン筒内履歴⁶⁸⁾

近年、CFDコードの発展により、ディーゼルエンジンの燃料噴霧、燃焼過程、および排出ガス特性の解析および予測が可能となり、エンジンの最適化のための実用的なツールとなりつつある。北口らの研究において、図1.13に示すように、KH-MTAB (Kelvin-Helmholtz and

Modified Taylor Analogy Breakup) モデルによって、軽油の蒸発噴霧の巨視的特性を再現可能とし、噴霧内部の非定常性を表現できるとしている⁶⁵⁾。冬頭らは、ディーゼル燃焼のCO排出の要因を数値シミュレーションにより追求し、その低減方法について検討している⁶⁶⁾。児玉らは詳細な素反応過程を考慮した数値流体コードを用いて、反応速度の遅い芳香族成分の含有率により、ディーゼル燃焼および排出ガス特性に及ぼす影響を解析している⁶⁷⁾。また、神永らは、現象論的Sootモデルを構築し、図1.13に示すように、ディーゼル燃焼のSootの生成と酸化メカニズムの解析が可能にしている⁶⁸⁾。

さらに、Yang らは、BDF の燃焼反応メカニズムを明らかにし⁶⁹⁾、図 1.14 に示すように各燃料における断熱火炎温度の計算を可能とした上で、BDF の燃焼特性および排出ガス特性を解明し、BDF の使用時のエンジン制御の最適化を行っている。

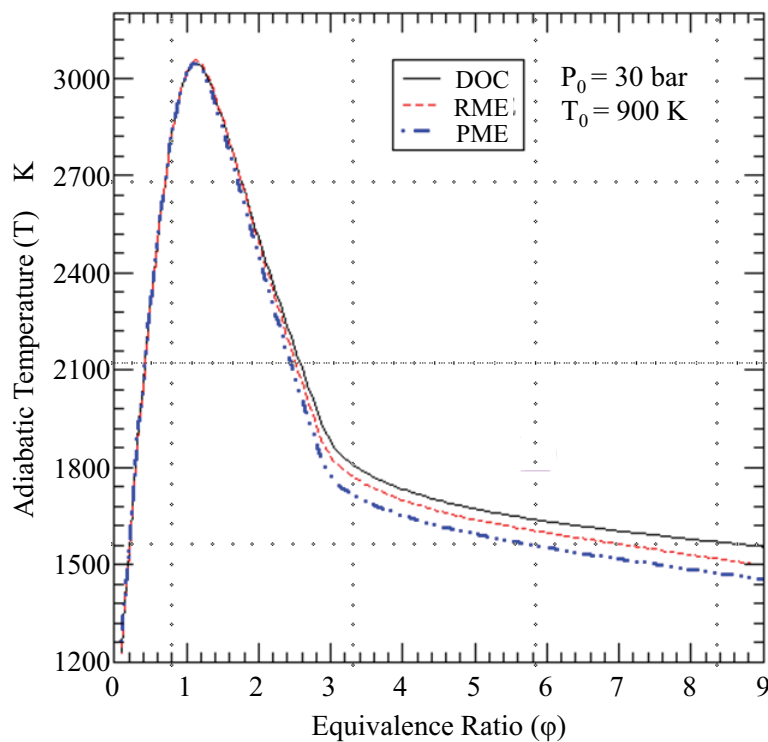


図 1.14 各燃料における断熱火炎温度 (DOC: Diesel, RME: $C_{19}H_{36}O_2$, PME: $C_{17}H_{34}O_2$)⁷⁰⁾

1.2 研究目的

上述の背景を踏まえて、本研究においては、ジャトロファから作られた BDF 燃料は軽油の代替燃料として実用化されることを想定して、それを用いた際のディーゼル機関の燃焼特性と排出ガス特性に及ぼす影響を実験により調査し、さらに、数値シミュレーションモ

デルによってそれらの特性を解明することを目的とする。

近年、地球温暖化や燃料枯渇の問題が深刻化しており、高効率であるディーゼルエンジンが注目されている。BDF はディーゼルエンジンの代替燃料として実用可能なことが実証されており、CO₂排出量の抑制対策として、有効とされている。

従来の軽油を燃料とする場合、ディーゼルエンジンにおいてはNO_xの排出を抑制するために多量 Cooled EGR を適用すると、燃焼温度が低温化するためにNO_xの低減が可能となるが、それに伴って混合気内に局所的に燃料過濃な領域が形成されて Soot は増加するのが一般的な傾向である。その対策として、軽油にBDFを混合した際に、Cooled EGRによりNO_xの排出が低減するとともに、含酸素燃料のため Soot の同時低減が期待される。また、軽油の場合、コモンレールシステムを用いた高圧燃料噴射により、燃料噴霧の微粒化と、燃料と空気の混合が促進され、Sootの排出が低減されるが、BDFを混合した際に、燃料の粘度や密度などの物性値の影響を受け、Sootの排出が増加することが懸念される。

また、軽油の場合、広く用いられているパイロット噴射により、着火遅れを短縮して初期燃焼を抑え、燃焼温度を低下させることでNO_xを低減し、同時に騒音・振動の低減が可能となる。しかしながら、より低温領域による燃料噴射にて Soot の増加が見られている。BDFを軽油と混合した場合には、パイロット燃料によりNO_xの排出低減とともに Soot の同時低減が期待される。従来のディーゼル燃焼形態をPCCI燃焼の形態に転換することで、NO_xと Soot の同時低減が可能となることが実証されているが、この燃焼方式をBDF混合燃料に適用した際の効果についてはこれまで調査例が乏しく、その有用性について検討する必要がある。

また、従来のBDFを用いたエンジンの研究では、実験用エンジンを使っている例がほとんどであるが、実用化に当たって量産化されたエンジンにおける研究が必要とされている。BDFを使用した際のNO_xの生成に関しては多く研究されているが、Sootの生成に関する詳しい調査は極めて少ないのが現状である。前述したように、Sootに関しては、排出量だけでなく、排出粒子の数とサイズに関する調査も必要である。さらに、多量 Cooled EGR、多段噴射、高圧噴射およびPCCI燃焼などのディーゼル燃焼の改善に関する研究は通常軽油のみで行われており、BDFの混合による効果に関する調査の例は乏しく、それらの効果についてエンジン実験により詳しく調べる必要がある。

また、従来のディーゼル燃焼を記述する数値シミュレーションコードにおいては、軽油をベースとして開発されたものがほとんどであり、軽油以外の燃料を単独、あるいは軽油

に混合して利用した場合の燃焼の予測については検証されていないのが現状である。従来の研究では、BDFの素反応の構築が検討されてきたが、CFDコードへの反応モデルの適用についてはまだ十分に検討されていない。このように、BDFの燃焼特性および排出ガス特性を数値シミュレーションモデルにより解析に対する研究例は極めて少ないことが実情である。

このような実情を踏まえ、本研究では実用化が想定されるBDFを燃料として、市販車用の量産型ディーゼルエンジンを対象に、パイロット噴射、高圧噴射、EGRおよびPCCI燃焼における燃焼・排出ガス特性に及ぼす影響を調査し、エンジンの実走行運転における排出ガス低減のための最適条件を検討した。

また、BDFの燃焼に関わる0次元の燃焼反応モデルを用いて、その反応特性が燃焼と排出ガスに与える基礎的な影響を詳しく解明する。さらに、3次元CFDコードに対して、BDFの噴霧、燃焼、排出ガス生成に関わるサブモデルを組み込み、BDFの混合とエンジン運転の最適条件を予測し、これらの結果から、排出ガス対策を考慮したBDFの有効利用のための具体的なエンジン制御の指針を得ることを目的とする。

1.3 本論文の構成

本論文は5章で構成される。各章の概要を以下に述べる。

第1章 序論

地球温暖化や燃料枯渇の問題が深刻化しており、BDFはディーゼルエンジンの代替燃料として実用可能であり、CO₂の排出抑制対策として有効とされている。そこで本研究では、ジャトロファから製造されたBDFが軽油の代替燃料として実用化されることを想定して、ディーゼルエンジンの燃焼特性と排出ガスの特性に及ぼす影響を実験により調査する。さらに、数値シミュレーションモデルによってそれらの特性を解明し、排出ガス対策を考慮してBDFを有効利用するための具体的なエンジン制御の指針を得ることを目的とする。

第2章 研究方法

本研究における供試機関の諸元と実験装置を説明し、エンジン実験の方法について説明し、運転条件の選定について検討する。また、定容容器を用いたBDFを含む燃料の噴霧測定について述べる。次に、本研究で数値解析に用いる0次元化学反応モデルおよび3次元熱流体コードの概要とそれに組み込む噴霧・燃焼モデルについて述べる。また、本研究の対象とするBDFに関する成分分析を行い、軽油との燃料性状の比較を行い、燃料の特性の

相違について述べる。

第3章 実験結果と考察

本実験では、BDFの燃焼特性の解明と実走行での利用の両面から、日欧米実走行モードにおいて使用頻度が高いエンジン運転条件を用い、量産エンジンが搭載されている市販車のECU（エンジン制御ユニット）の設定値を元に設定した条件をベース条件とする。その上で、燃料の燃焼質量割合50%（MFB50）の位置と一致するように噴射時期を調整し、トルク一定法によって性能と排気の測定を行い、Cooled EGR、多段噴射、高圧噴射およびPCCI燃焼において、BDF混合燃料を使用した際の燃焼特性および排出ガス特性について述べる。さらに、高温・高圧の条件を再現する定容容器内に噴射したBDFを対象に高速ビデオカメラにより撮影し、非定常噴霧に及ぼすBDFの燃料性状の影響について説明し、その特性を次章の数値シミュレーションモデルにおける噴霧モデルに利用することを述べる。

第4章 計算結果と考察

BDFの燃焼反応モデルを含む0次元の化学詳細反応コードを用いて、BDFが燃焼と排出ガスに与える基本的な特性を明確にする。また、軽油をベースとして開発された噴霧モデルを対象に、BDFの噴霧観察の結果を元にBDFに適用できるように修正した噴霧モデルを構築する。さらに、3次元の数値流体シミュレーションによりエンジン燃焼室におけるBDFの燃焼・排出ガス特性を解析し、現象論的Sootモデルを用いてSootの生成と酸化のメカニズムを明確にし、その排出を低減するための混合気形成過程について考察する。

第5章 結論

本論文で得られた知見をまとめて研究の成果を総括して結論とするとともに、今後取り組むべき研究課題や研究成果を踏まえた発展性について述べる。

第2章 研究方法

本章では、本研究の対象とするジェットロファから作られたバイオディーゼル（JME）と通常の軽油と性状分析を行って両者を比較し、燃料の特性について考察する。また、本研究で用いる供試機関の諸元と実験装置を示し、バイオディーゼル（BDF）を用いたエンジン実験の方法について述べ、実験と燃焼解析の対象とする運転条件の選定について検討する。さらに、高温高圧場を再現する定容容器を用いて、燃料の噴霧観察方法について述べる。次に、燃焼室内で想定される JME 混合気における PM と NO_x の生成特性を明らかにするため、化学反応を考慮した数値解析に用いる 0 次元化学反応モデル、および燃焼室内での噴霧・燃焼モデルを含む 3 次元熱流体コードについて述べる。

2.1 燃料性状

2.1.1 BDF の成分分析

本研究の対象とする JME に対して、図2.1に示すガスクロマトグラフ質量分析（GC/MS : Gas Chromatography / Mass Spectrometer）装置を用いて、表2.1に示す分析条件で成分分析の測定を行う。



図2.1 GC/MS分析装置図

表2.1 GC/MSの分析条件

GC	Column Temperature	40°C, 12°C/min	MS	Inlet Temperature °C	300
		320°C (10min)		Interface Temperature °C	280
	Column Specific	DB-1MS		Ion Source Temperature °C	300
		L: 60m, D: 0.25mm, T: 0.25µm		Condition	No mind scan
		He Speed: 1.2mm/min		Measurement Range (MW)	40~500

まず、GC/MSにてカラム DB-1MS を用いて、JME の成分の定性分析を行い、表 2.1 に示すように、40°Cから毎分 12°Cの速度で 320°Cまでに昇温させ、320°Cで 10 分間を安定させる。この方法によって得られた結果を図 2.2 に示す。この結果より、JME のすべての成分は脂肪酸メチルエステル (FAME : Fatty Acid Methyl Ester) から成り、そのうちの主な成分はパルミチン酸メチル (MP₀ : Methyl Palmitate, C₁₇H₃₄O₂)、オレイン酸メチル (MO : Methyl Oleate, C₁₉H₃₆O₂)、ステアリン酸メチル (MS : Methyl Stearate, C₁₉H₃₈O₂) であり、それ以外に、ミリスチン酸メチル (MM : Methyl Myristate, C₁₅H₃₀O₂)、パルミトレイン酸メチル (MP₁ : Methyl Palmitoleate, C₁₇H₃₂O₂)、リノール酸メチル (ML : Methyl Linoleate, C₁₉H₃₄O₂)、アラキジン酸メチル (MA : Methyl Arachidate, C₂₁H₄₂O₂) が微量に含まれていることが分かった。

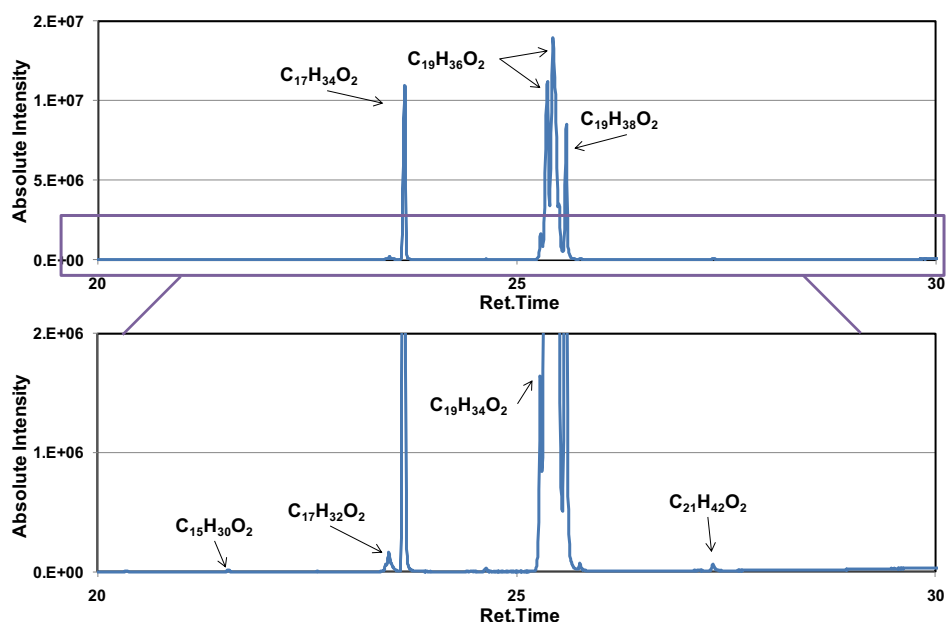


図 2.2 JME の定性分析の結果

次に、定性分析の結果に基づいて、表 2.2 に示すような基準試料を用意し、内部標準法¹⁾によって、JME の定量分析を行った結果を表 2.3 に示す。この結果より、JME の主成分は MO であり、70%以上が含まれていることが明らかであり、MO を JME の代表成分として、燃焼解析を行うこととする。また、JME の定性分析においては 7 成分が検出されたが、その定量分析においては MP₀, ML, MO と MS 以外の成分については測定することができなかった。

表 2.2 定量分析用標準試料

Formula			FAME	Pure Grad	State at Ambient Temperatures
C	H	O			
15	30	2	MM	0.995	Liquid
17	32	2	MP ₁	0.95	Liquid
17	34	2	MP ₀	0.98	Solid
19	34	2	ML	0.95	Liquid
19	36	2	MO	0.96	Liquid
19	38	2	MS	0.98	Solid
21	42	2	MA	0.99	Liquid

表 2.3 JME の定量分析結果

Ingredients	Chemical Formula			Quantitative Analysis %
	C	H	O	
MP ₀	17	34	2	15.3
ML	19	34	2	1.5
MO	19	36	2	71.1
MS	19	38	2	12.1

2.1.2 BDF と軽油の燃料性状比較

a) 燃料成分の比較

図 2.2 により JME の成分は含酸素燃料の FAME であり、成分の種類が少ないことが明らかである。これに対して、本研究で使用する JIS#2 軽油では、JME と同様な定性分析を行った結果、図 2.3 に示すように、主な成分は酸素を含まない直鎖系炭化水素であり、それ以外には非常に多くの種類の芳香族成分が含まれているが、各成分の量が非常に少ないため、検出が困難であった。また、JME においては、MO 成分が 70% を超える主成分であり、ほかの成分においても炭素数の違いほとんどなかった。これに対して、軽油においては、50% 以上含まれる単一成分がなく、直鎖炭化水素は炭素数が 8 から 22 まで幅広く含まれていることが分かった。なお、JME の成分では MO などの不飽和 FAME が多いことに対して、軽油の成分ではほぼ飽和の直鎖炭化水素であることが分かった。

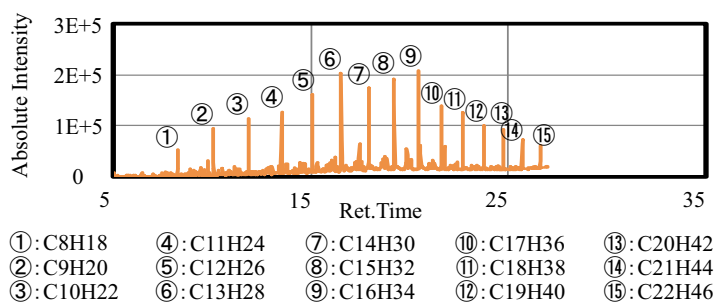


図 2.3 軽油の定性分析結果

b) 燃料性状の比較

表 2.4 に本論文に使用する各燃料の燃料性状を示す。

表 2.4 各燃料の燃料性状

Item		D100	MO40	MO100	J40	JME
Density (15deg.C) g/cm ³		0.8318	0.8487	0.8740	0.8498	0.8768
Kinetic viscosity (30deg.C) mm ² /s		3.212	4.041	4.041	5.040	5.040
CHO mass %	C	86.0	82.4	77.0	82.4	76.7
	H	13.7	13.1	12.2	13.2	12.3
	O	0	4.5	10.8	4.4	11.00
Aromatic vol. %		18.8	11.3	0.0	11.3	0.0
Lower heating value kJ/kg		42970	41431	39123	41447	39163
Flash point deg.C		73.5	-	174.0	-	>200
Sulfur mass ppm		6	3.6	0	4.6	2.5
Cetane number		58.3	61.5	66.2	57.9	57.2

ここで、軽油 (D100)、純オレイン酸メチル (MO100 と呼ぶ) と JME の燃料性状は (株) エス・ブイ・シー東京により測定されたものである。また、MO100 が量割合 40% で D100 と混合した燃料 (MO40 を呼ぶ) および JME が質量割合 40% で D100 と混合した燃料 (J40 と呼ぶ) の燃料性状については、式 2.1²⁾ により算出したものである。しかしながら、燃料の粘度については、参考文献³⁾ により推定した値を使用した。

$$Q_m = \sum_i \sum_j y_i y_j Q_{ij} \quad (2.1)$$

ここで、 Q_m は混合燃料の燃料性状; Q_{ij} は各燃料性状; y_i と y_j は各燃料の体積混合割合である。

その結果、すべてのBDF (MO40, MO100, J40とJME)において、軽油 (D100) に比べ、密度が高い、粘度が非常に高い、沸点が高い、低発熱量が低い、芳香族成分が少ない (含まれていない)、硫黄成分が少ない (MO100 においては含まれていない) 等の特徴がある。また、MO100とJMEの燃料性状が若干異なったが、MO40とJ40の燃料性状がほぼ一致することが分かった。

2.1.3 燃料の選択

表 2.5 燃料使用表

Fuels	Composition	Engine-bench Test	Particle Test	Spray Observance	Numerical Simulation
D100	JIS#2	○	○	○	○
	Diesel fuel				
MO100	100%	○	×	○	○
	$C_{19}H_{36}O_2$				
MO40	40%MO100	○	○	○	○
	60%D100				
J40	40%JME	○	×	○	×
	60%D100				

本研究においては、JMEを研究対象としている。しかしながら、JMEの生産技術はまだ研究段階であり、本研究の実施に当たっては実験に必要な量の確保が困難なことから、前述の分析結果、MO40とJ40の燃料性状がほぼ一致したことから、その主成分であるMOを代表燃料として使用することとした。また現状では、各国において市販軽油にBDFが体積割合3%~10%混合することが認められており、今後混合率が20%以上になる可能性や予定がある⁴⁾。そこで、BDFの高濃度混合による影響を明らかにするため、その混合率を質量割合40%とした。また、JMEのすべての成分に関する燃焼反応モデルが存在しないため、燃焼反応の数値シミュレーションが不可能であるが、MOの単一成分に関する燃焼反応モデルについては研究されているので、それを用いた反応計算を行うことは可能である。以

上より、本研究において実験と数値シミュレーションで対象とする各燃料を表 2.5 にまとめて示す。

2.2 燃料性能実験

本研究においては、BDF の実用化のため、一般的な軽油に対応し、EU で普及しているディーゼル乗用車の排出ガス基準である EURO4 に適合している量産型のエンジンを選択した。

2.2.1 エンジンベンチ試験

a) 実験装置

本研究では、量産型の総排気量2.2 L、ターボインタークーラー付き乗用車用ディーゼルエンジン(i-CTDi N22A2)を導入し、全体の実験設備を構築した。主要なエンジン諸元を表 2.6に、エンジンレイアウトと温度、圧力、排出ガスの測定ポイントを図2.4にそれぞれ示す。

表2.6 エンジン諸元

Item	Specifications
Engine type	Water-cooled, 4-stroke-cycle, TI Diesel engine
Valve train	DOHC 4 valves
Cylinder	L4
Bore x Stroke	85.0 x 97.1 mm
Displacement	2,204 cc
Compression ratio	16.7
Fuel supply	Common-rail (Max.: 160 MPa)
Fuel injector	ϕ 0.133 mm x 6 holes, Spray angle: 153 deg.
EGR system	HP-Hot-EGR / HP-Cooled-EGR
Boost control	VNT turbocharger
Swirl control	Continuously variable (Swirl ratio: 1.2-4.4)
Max. power	103(140)/4000 kW(PS)/rpm
Max. torque	340(251)/2000 Nm(lb.ft)/rpm

本エンジンには、コモンレール式(ソレノイドタイプ)の燃料噴射システム、VNTターボチャージャー、可変スワール機構が備えられている。また、本エンジンはEGRクーラーのバイパスラインを有しており、Cooled-EGRとHot-EGRの切り替え制御が可能である。さらに吸気ポートは、2つの吸気バルブそれぞれに独立した吸気ポートがあり、一方の吸気ポート(SECONDARY PORT)の入口にスワールコントロールバルブ(以下、SCV)が設けられており、この開度を変えることでスワール比を無段階に設定することができる。EGRガスはSCVが設置されていない側のポート(PRIMARY PORT)にのみ還流し、EGRガスに由来する堆積物によるSCVの固着を防止している。

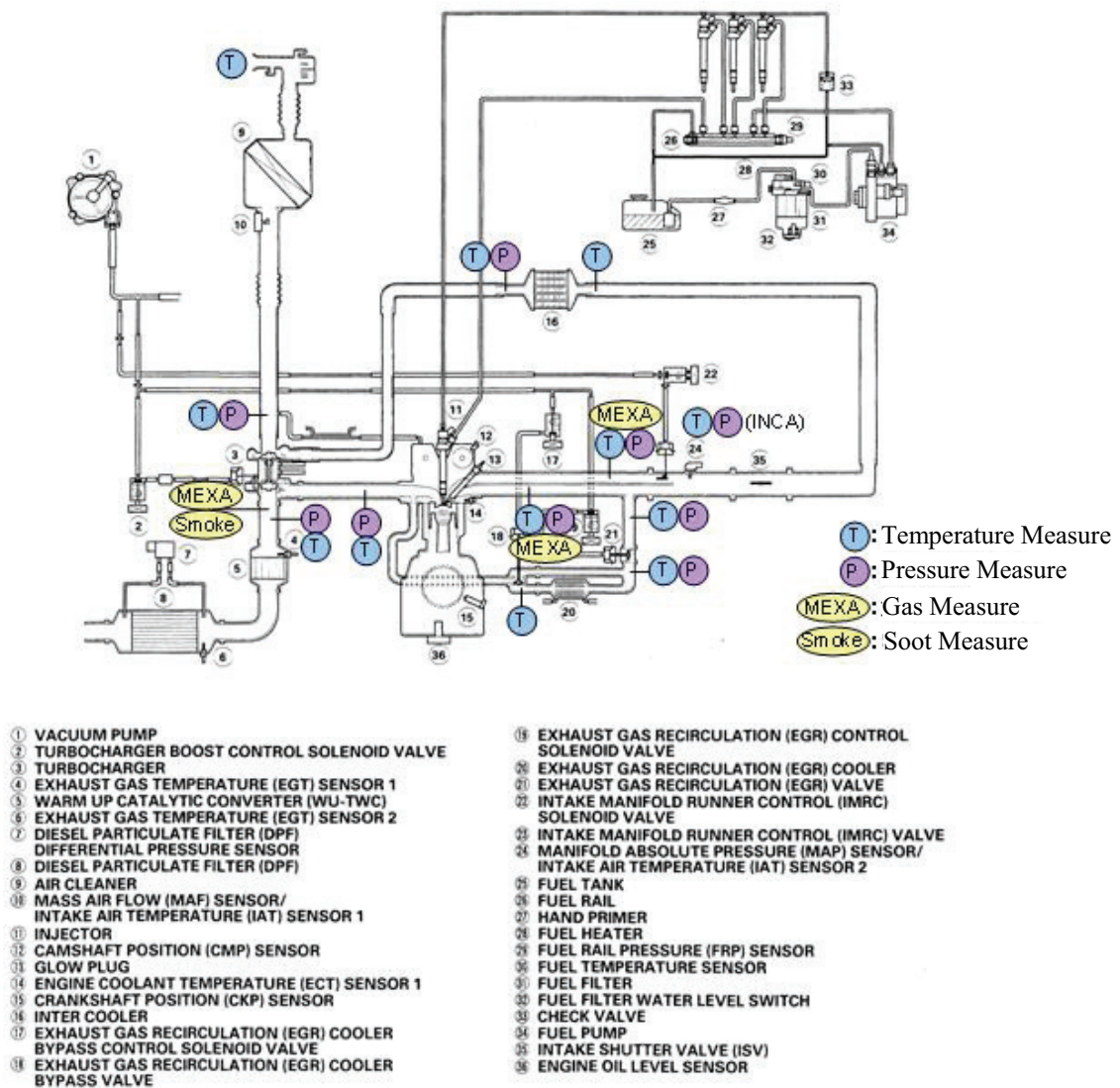


図2.4 エンジンレイアウトと温度、圧力、排出ガスの測定ポイント

ここで、吸気ポート部の拡大図と計測ポイントを図2.5に示す。SCVがない側のポートはPRIMARY PORTと呼ばれ、大きなスワール流を生成する。一方、SCVのあるSECONDARY PORTでは、その流動を打ち消す小さな渦流を生成することでスワール比が調節される。SCV開度を絞るとSECONDARY PORTに流れるガス量が減少するため、図2.6のようにスワール比が上昇する。しかしながら、このような吸気ポートを2つに分け、各ポートにおける吸気成分が異なるような設定は必ずしも一般的ではなく、またこのような設定ではEGR率の測定が困難である。そこで、本研究では、図2.7に示すように、吸気混合室を設置し、EGRガスを上流側から導入して新気と混合してから、各ポートに導入するようにした。これにより、各ポートの吸気成分が同等となり、EGR合流後のポートのガス分析が可能となった。

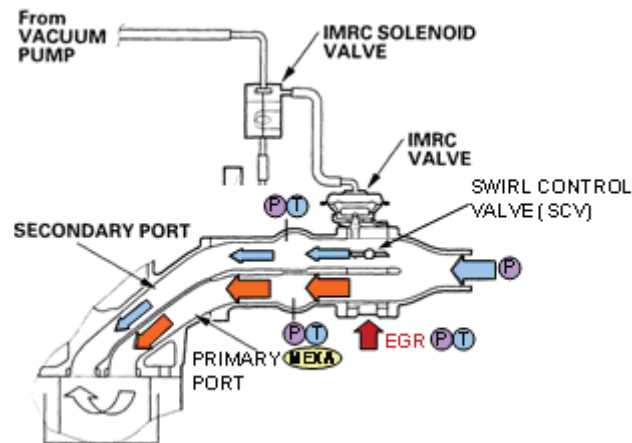


図2.5 吸気レイアウトと計測ポイント

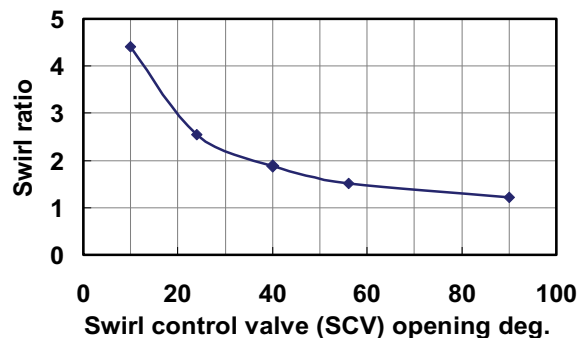


図2.6 スワールコントロールバルブ開度とスワール比の関係

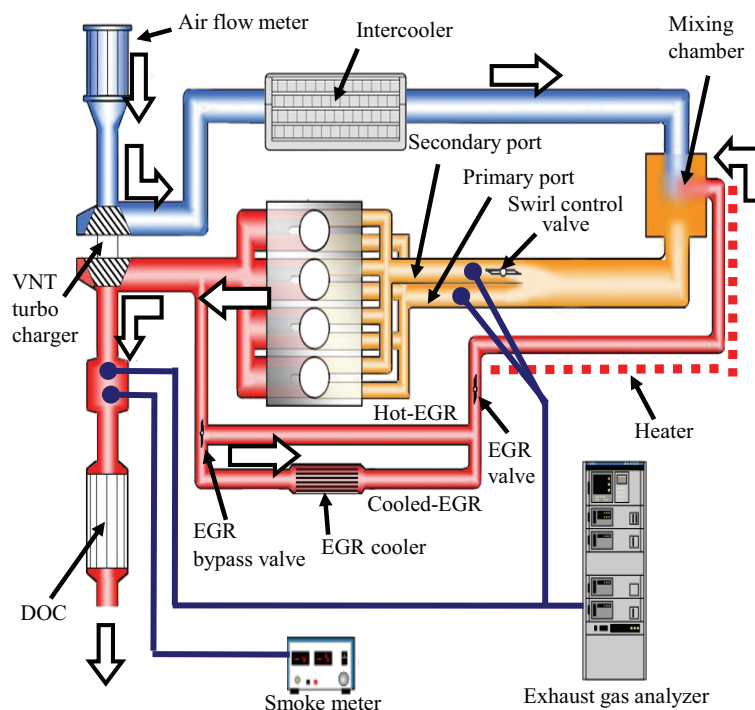


図2.7 吸気ラインのレイアウト

実験装置の外観と各種計測機器を図2.8～2.10に示す。動力計には、明電舎製の渦電流式電気動力計(ECDY)を使用した。燃料流量の測定には容積式流量検出器(小野測器製FP-2140H)を用い、各定常試験においては、30秒間の積算質量流量を3回測定し、その平均値を測定値とした。また、層流型空気流量計(司測研製LFE-150B)により吸入空気量を測定した。排気中のCO、CO₂、THC、NO_x、O₂濃度については、堀場製作所製の自動車用排ガス測定装置(MEXA-1500DEGR)を用いて直接測定法により計測した。ここで、COとCO₂はNDIR(Non-Dispersive Infrared Analyzer)法、THCはFID(flame ionization detector)法、NO_xはCLD(Chemiluminescence Detector)法によっている。さらに、Soot濃度の測定にはAVL社製スモークメータ(415SE)を用いた。なお、燃料、エンジン冷却水、インタークーラー後のガスについては、温度を一定に制御するために温度調整器を用いた。

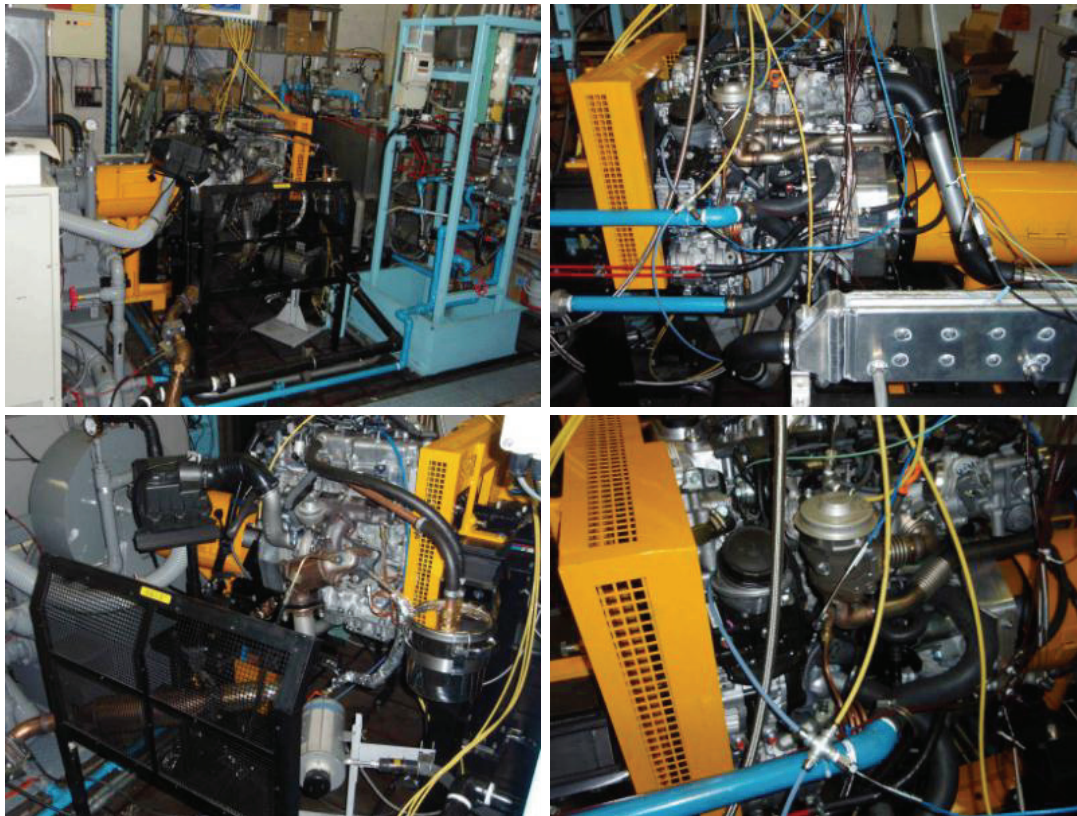


図2.7 実験装置(早大 第3機関室)

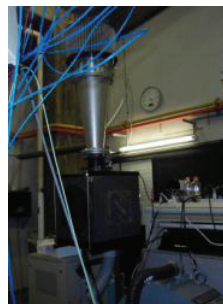
◆自動車用排出ガス分析計
 MEXA-1500DEGR,
 堀場製作所製(CO, CO₂,
 NO/NO_x, THC, O₂)



◆渦電流式電気動力計
 (ECDY) TWD-220 kW,
 明電舎製



◆層流型空気流量計
 LFE-150B, P7D, DPR-
 7, サージタンク,
 司測研製



◆スモークメータ AVL415, AVL製(フイ
 ルターペーパー式)



◆ECDY制御ユニット
 (IED-852C), 明電舎製



◆熱電対, CHINO製

◆ガス圧力センサ, 一
 般産業用デジタル圧
 力計 GC61,
 長野計器製

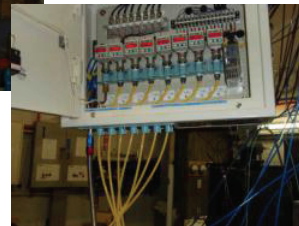


図2.8 実験装置(早大 第3機関室)



図2.9 実験装置(早大 第3機関室)

各種エンジン制御パラメーターの変更には、ETAS社製の自動車ECU制御プログラムINCA5.4によってエンジンのMAP値を書き換えることにより制御した。同時に、National Instruments社製LabVIEWにより、各部のガス温度、圧力、排出ガス濃度、吸入空気量等の各種試験データを一括してファイルに保存した。また、エンジンの第1気筒にはグロープラグアダプタを介してキスラー製の筒内圧力センサ（6055CSP120）を取り付け、クランク角度センサから得られるエンジンのクランク角度に対して、100サイクル分の筒内圧力を測定し、移動平均処理を加えたデータを保存する。しかしながら、本研究においては量産エンジンを使用したため、筒内圧力を測定する際に圧力センサまでの管路の振動が発生するため移動平均によるノイズを低減するには限界があるため、ここで長尾らの研究⁵⁾により圧力取り出し管によるインジェクタの誤差を減少するため開発された式(2.2)のような伝達関数を用いて、100サイクル分の筒内圧力を測定し、アンサンブル平均を取り、移動平均処理を加えたデータを保存するとともに、そのデータを用いて熱発生率を計算した。本研究で使用した燃料噴射用インジェクタには、針弁リフトセンサが付属していないため、燃料噴射開始時期を判断する目安として電流プローブを用いてインジェクタへの通電信号を記録した。

$$P_z(t) = \left(\frac{1}{\omega^2}\right) P_G''(t) + \left(\frac{2\zeta}{\omega}\right) P_G'(t) + P_G(t) \quad (2.2)$$

ここで、 P_G は計測圧力、 P_z は補正された圧力、 ω は二次系近似伝達関数の固有角速度、 ζ は二次系近似伝達関数の粘性減衰率である。

b) エンジン試験条件の選定

本供試機関のエンジン回転数に対する全負荷時の燃料噴射量を図2.10に示す。本研究では、欧州及び米国の排出ガス認証モード (NEDC, US06) において使用頻度が高い重要な評価ポイントとして、図2.10に示す7ポイントを対象とし、トルク一定法で定常エンジンベンチ試験を実施した。量産エンジンのECU設定においては、これらの評価ポイントNo.1～5ではパイロット噴射とメイン噴射による多段噴射を行い、評価ポイントNo.6と7では単段噴射を行っている。

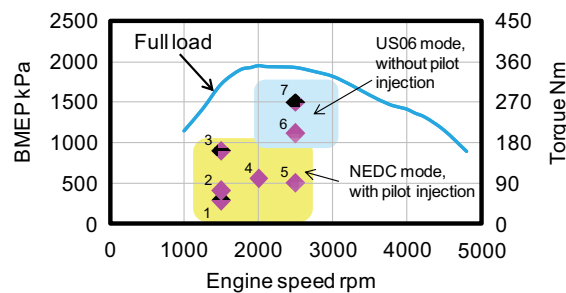


図2.10 評価ポイント

表2.7 評価ポイント条件

Exp. No.	Engine speed rpm	Torque Nm	BMEP kPa	EGR ratio %	Swirl ratio	Inj.press. MPa	Inj.quantity pilot / main mg/st.	Inj. timing pilot / main deg.ATDC
1	1500	50	291	39	3.4	58	1.60 / 10.5	-11 / -4.5
2	1500	72	411	36	3.4	73	1.69 / 13.2	-11 / -4.0
3	1500	160	916	3.5	2.6	107	1.30 / 29.1	-11 / -2.0
4	2000	100	570	24	2.8	111	2.38 / 17.9	-15 / 4.5
5	2500	90	515	24	2.6	132	2.57 / 17.5	-20 / 6.5
6	2500	200	1136	17	2.1	142	(w/o) / 40.6	(w/o) / -9.0
7	2500	270	1539	5	1.3	150	(w/o) / 51.0	(w/o) / -12.0

各評価ポイントにおける制御パラメーターの設定値を表2.7に示す。本供試機関のECUで

は、過渡運転特性を考慮し、DPFの装着を前提としてマップ化しており、量産エンジンの設定の実験ではこの条件でのMAP値をそれぞれ用いている。

表2.8 マップ運転条件

Engine speed rpm	Torque Nm	BMEP kPa	EGR ratio %	Swirl ratio	Inj.press. MPa	Inj.quantity pilot / main Mg/st.	Inj. timing pilot / main deg.ATDC
1250	50	285	44	3.5	48	1.76 / 11.2	-14.5 / -4.4
1250	70	396	39	3.5	56	1.70 / 14.8	-14.4 / -3.9
1250	90	512	31	3.3	68	1.75 / 18.2	-13.8 / -3.0
1250	120	683	22	3.1	81	1.72 / 23.6	-12.8 / -1.8
1250	160	910	1.6	2.2	90	1.10 / 31.7	-15.8 / -1.8
1500	50	291	39	3.4	58	1.60 / 10.5	-11.0 / -4.5
1500	72	411	36	3.4	73	1.69 / 13.2	-11.0 / -4.0
1500	90	514	32	3.2	80	1.75 / 18.0	-14.2 / -3.2
1500	120	697	24	3.2	97	1.80 / 23.5	-13.1 / -2.1
1500	160	916	7	2.6	107	1.30 / 29.1	-11.0 / -2.0
2000	50	279	42	2.5	75	1.92 / 11.3	-20.6 / -5.6
2000	70	399	35	2.8	90	2.00 / 14.8	-20.1 / -5.1
2000	90	510	27	2.8	105	2.30 / 18.8	-19.6 / -4.6
2000	120	684	23	2.6	125	2.10 / 24.0	-20.3 / -5.3
2000	160	906	16	2.4	130	(w/o) / 32.4	(w/o) / -5.5
2500	50	283	37	2.1	98	1.90 / 11.5	-26.8 / -6.8
2500	70	400	32	2.5	116	2.22 / 16.2	-26.5 / -6.5
2500	90	515	24	2.6	132	2.57 / 17.5	-20.0 / -6.5
2500	120	679	21	2.5	136	2.30 / 24.8	-26.6 / -6.6
2500	160	908	18	2.3	140	(w/o) / 33.8	(w/o) / -8.2
3000	50	286	16	1.7	108	2.37 / 12.1	-29.2 / -7.7
3000	70	411	14	1.7	115	2.49 / 15.8	-29.6 / -8.1
3000	90	514	13	1.6	129	2.57 / 19.3	-31.1 / -9.6
3000	120	694	15	1.6	138	2.68 / 24.7	-32.4 / -10.9
3000	160	925	11	1.5	142	(w/o) / 32.6	(w/o) / -13.3
3500	50	283	0	1.2	116	2.20 / 14.8	-33.9 / -9.4
3500	70	397	0	1.2	125	2.38 / 18.0	-35.6 / -11.0
3500	90	514	0	1.2	136	2.61 / 21.3	-38.0 / -13.1
3500	120	685	0	1.2	140	(w/o) / 26.7	(w/o) / -16.3
3500	160	913	0	1.2	148	(w/o) / 34.0	(w/o) / -17.9

各種燃料の比較実験においては、各評価ポイントでは、燃焼質量割合が50%(MFB50: Mass Fraction of Burned Fuel 50%)となる位置が量産のECU設定と等しくなるようにメイン噴射時期とメイン噴射量を調節する。なお、パイロット噴射を含む条件では、パイロット噴射時期、パイロット噴射量は量産エンジンのECU設定と同一に設定している。その際、吸入新気量、スワールコントロールバルブ開度は、量産のECU設定と一致するように設定して

おり、ターボ過給機のVNT開度は、インタークーラー(I.C.)出口のガス圧力が量産のECU設定値と等しくなるように調整している。量産エンジンの設定条件では、Primary portとSecondary portに異なるCO₂濃度のガスが流れることになり、それぞれの流量を測定することができないため、前述のように吸気ラインを改造し、排気ポート及びEGR合流後の吸気ポートのCO₂濃度を測定し、式(2.3)よりEGR率を算出した。

$$\text{EGR Rate} = \frac{\text{吸気のCO}_2\text{濃度} - \text{大気のCO}_2\text{濃度}}{\text{排気のCO}_2\text{濃度} - \text{大気のCO}_2\text{濃度}} \times 100 \quad (2.3)$$

BDFのエンジン燃料としての実用化に当たっては、幅広い運転領域で各燃料の燃焼特性と排出ガス特性を調査することが必要となる。このため、欧州及び米国の認証モードで使用頻度が高い点を含む格子状の評価ポイントとして、表2.8に示すように、多段噴射と単段噴射の両方含む回転数1250rpm～3500rpm，負荷50Nm～160Nm計30ポイントを対象とし、前述した方法で定常エンジンベンチ試験を実施した。

また、多量Cooled EGRと高圧噴射におけるBDFの影響を調査するため、表2.9と表2.10に示すような条件において実験を行った。

表2.9 EGR条件

Rotation speed	rpm	2000
Torque	Nm	100
BMEP	kPa	570
Fuel injection pressure	MPa	111
Swirl ratio		2.8
MFB 50%	deg.ATDC	12.1
Pilot injection	mg/st.	2.38
EGR rate	%	30, 25, 24, 20, 17, 10, 0
Fresh air	mg/st.	380, 390, 405, 425, 450, 500, 700
Main injection timing	deg.ATDC	-5.3, -5.2, -5.1, -4.7, -4.5, -4.1, -4.0
Pilot injection timing	deg.ATDC	-19.5

最後に、PCCI燃焼と高圧噴射による影響を調査するため、表2.11に示すような条件において実験を行った。従来のPCCI燃焼においては、早期噴射により空気と燃料の予混合を促進する燃焼方式が採られる。しかしながら、早期噴射による燃料の着火タイミングのコントロールが非常に難しく、またBDFの燃料性状により低温での燃料噴霧の到達距離が長くなるものと予想される。このため、本実験においては早期噴射を行わず、上死点近辺で噴

射を行い、高スワール比と高噴射圧による空気と燃料の予混合を促進することでPCCI燃焼を実現する方法を採った。

表2.10 高圧噴射条件

Rotation speed	rpm	1500
Torque	Nm	72
BMEP	kPa	408
Fuel injection pressure	MPa	73, 160
Swirl ratio		3.4
MFB 50%	deg.ATDC	10.3
Pilot injection	mg/st.	1.69
EGR rate	%	36
Fresh air	mg/st.	308
Main injection timing	deg.ATDC	-3.9, -1.3
Pilot injection timing	deg.ATDC	11.0

表2.11 PCCI燃焼条件

Rotation speed	rpm	1500
Torque	Nm	72
BMEP	kPa	408
Fuel injection pressure	MPa	50, 73, 120
Swirl ratio		3.4
MFB 50%	deg.ATDC	10.3
Pilot injection	mg/st.	1.69
EGR rate	%	36
Fresh air	mg/st.	308
Main injection timing	deg.ATDC	-7.3, -6.5, -5.1
Pilot injection timing	deg.ATDC	w/o

2.2.2 PMの成分分析

ディーゼルエンジンから排出されたPM成分は、図2.11に示すように、主に可溶性有機成分 (SOF : Soluble Organic Fraction) と煤 (固体酸素, Soot) となる⁶⁾。ここで、Soot成分についてはスモークメータにより正確に測定できる。しかしながら、軽油においてはSootの排出量とPMの排出量が線形的に変化することが証明されているが⁷⁾、含酸素燃料に対する関係については報告されていない。そこで、Sootの排出量だけの測定により、PMの排出量が推定できるかどうかの判定が必要となる。また、含酸素燃料におけるPMの粒子数と粒子

サイズへの影響について調査することも重要である。そこで、本研究において、SOF成分の分析およびPMの粒子数・粒子サイズの測定を行い、BDFのPM排出特性について考察する。

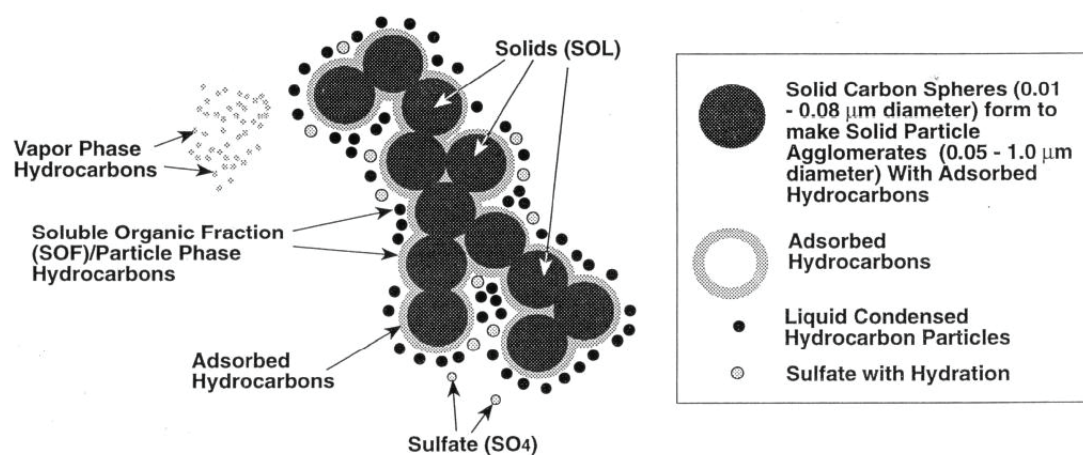


図2.11 PM粒子の組成⁶⁾

a) SOF成分の定性分析

燃料の違いによるPMの排出特性を把握するため、各燃料における排出されたPMをフィルターにより捕集し、そのSOF成分を抽出し、GC/MSにより定性に測定した。捕集時間が非常に長くなっているため、各条件において実験するのが不可能である。そこで、欧州及び米国の認証モード(NEDC, US06)で使用頻度が最も高いポイントである1500rpm, 72Nm, 各燃料により排出ガスの違いが最も大きいポイントである2000rpm, 100Nm, および1500rpm, 72NmにおけるPCCI燃焼方式の3つの条件でPMの捕集と分析を行った。



図2.12 フィルターホルダー装置図

表2.12 フィルターホルダーの諸元

Name/Model	Diesel Filter holder/FH-1000
Diameter of filter	Φ 47mm
Inlet/Outlet	Rc1/2
Quality of material	Stainless
Dimension	87.3(W)×98.0(H) mm

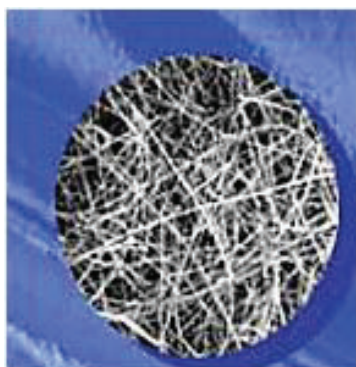


図2.13 純石英フィルター

表2.13 純石英フィルター諸元

Name/Model	Quartz filter/2500 QAT-UP
Dimension	25~110 mm
Thickness	432 μm
Weight	5.8 mg/cm ³
Flow rate (water)	220mLPM/cm ³
Flow rate (air)	73mLPM/cm ³
Max temperature(air)	1093 °C
Efficiency of collection	99.9%
pH	6.5-7.5
Strength	210 g/cm ³
Moisture absorption	0.04 mg
Usage	Measurement of atmosphere

具体的な分析方法について以下に述べる。まず、エンジンの排気管にフィルターホルダー（図 2.12 および表 2.12）を取り付け、純石英フィルターを用いて、前述の 3 つの条件で、流量が 15L/min のポンプを使用し、各条件において 20min 間の捕集を行った。次に、捕集

したサンプルは溶媒のジクロロメタン溶液 100ml に溶かし、超音波抽出器により超音波を 10min かけて SOF 成分を抽出した。また、抽出された試料は真空濾過器により濾過し、ロータリーエバポレーターにより 5ml まで濃縮し、窒素の吹き付けにより 1ml まで濃縮した。最後に、GC/MS により定性分析を行った。

ここで、一般的に排気分析用のフィルターの規格品としては、防湿のためフッ素加工された石英フィルターを使用するが多い。しかしながら、GC/MS 分析においては、微量成分に敏感で、フッ素加工された石英フィルターの不純物が多く検出されたため、純石英フィルター(図 2.13, 表 2.13)を使用した。SOF の抽出に当たっては、通常ソックスレー抽出法が使用されるが、一回分析に 8 時間を要する。今回の分析では定性分析であるため、超音波抽出器による抽出で十分な抽出率が得られたので、分析時間の短縮のため、超音波抽出方法を用いた。

b) PMの粒子分析

Engine Exhaust Particle Sizer Spectrometer (EEPS) Model-3090 (図 2.14) により、エンジンベンチ試験と同様な条件 (表 2.8~2.11) において、PM の粒子数及び粒径分布の測定を行った。また、代表ポイントで、EGR 率、高圧噴射及び PCCI 燃焼による影響を調査した。EEPS3090 の諸元を表 2.14 に示す。実験プロジェクトは図 2.15 に示すように、エンジン排気を 1l/min の流量で希釈装置に導入し、約 608 倍希釈した上で EEPS により粒子計測を行う。



図 2.14 EEPS3090 装置図

表 2.14 EEPS3090 の諸元

Item	Specifications
Particle Sizer Type	3090 Engine Exhaust Particle Sizer
Particle Size Range nm	5.6 ~ 560
Particle Size Resolution	16 channels per decade (32 to total)
Charger Mode of Operation	Unipolar diffusion charger
Inlet Cyclone 50% Cut-point μm	1
Time Resolution	10 size distributions/sec
Flow Rates	Sample Flow : 10 L/min Sheath Air : 40 L/min
Inlet Sample Temperature °C	10 ~ 52
Operating Temperature °C	0 ~ 40
Storage Temperature °C	-20 ~ 50
Atmospheric Pressure Correction Range kPa(Mbar)	70 ~ 103 (700 ~ 1034)
Humidity %	0 ~ 90 RH (noncondensing)

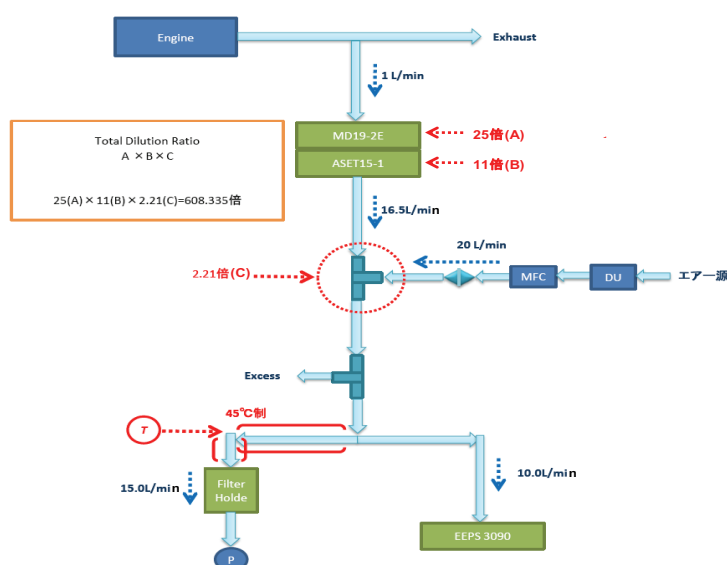


図 2.15 EEPS3090 の実験プロジェクト

ここで、EEPS3090 による PM の分析は諸条件の影響を受けやすい傾向がある。特に、希釈時のサイズのロスや、凝集(coagulation)、不均質凝縮などに影響される⁸⁾。このため、希釈時に温度の制御が必要となる。一般的な方法であるマイクロトンネル法では希釈時に温度のコントロールが難しいため、ローターリングディスク法を用いた⁹⁾。原理を図 2.16

に示すが、穴のあるディスクの回転によって希釈し、回転速度により希釈率を変化させる。MD19-2E 希釈装置(図 2.17)は、ローターリングディスク法により、温度を 120°C に保って希釈を行う。希釈範囲としては約 15~300 である。本実験においては、3 段階の希釈を行っているため、トータル希釈率は約 608 となる。

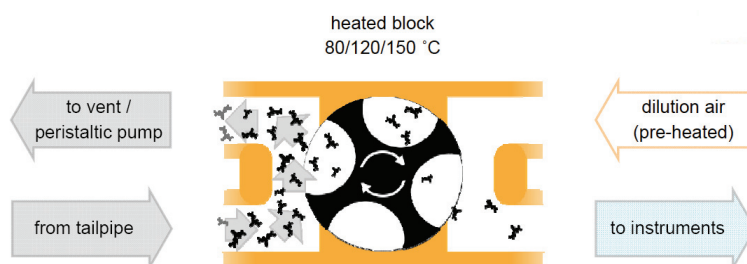


図 2.16 ローターリングディスク法⁹⁾

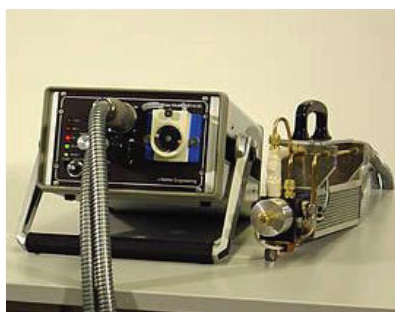


図 2.17 MD19-2E 希釈装置図

2.2.3 噴霧観察

定容容器を用いた噴霧・燃焼の可視化解析には長年にわたる多くの研究例があり、様々な可視化計測法が確立されている。本研究では、背景光散乱法を用いて、定容容器内の高温高圧場における各燃料の非燃焼蒸発噴霧の観察を行った。背景光散乱法の概略を図2.18に示す。この方法は、観察する対象物を光源とカメラの間に置くもので、光源として用いるストロボライトからの平行背景光が対象物である燃料噴霧により遮られることで、噴霧が影として記録されるものである。この方法はシュリーレン法とは異なり、気相の密度勾配に対して感度がないため液相のみを撮影するものであるが、非蒸発噴霧の輪郭を巨視的に確認するには十分な方法である¹⁰⁾。

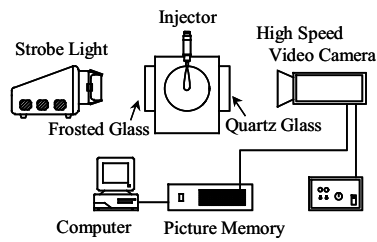


図2.18 背景光散乱法

a) 実験装置

本研究では、可視化用石英ガラス(φ80 mm)を装着した定容燃焼容器(容積668 cm³)を使用してディーゼルエンジンの筒内上死点近傍のガス状態を再現した。実験装置概略を図2.19に示す。

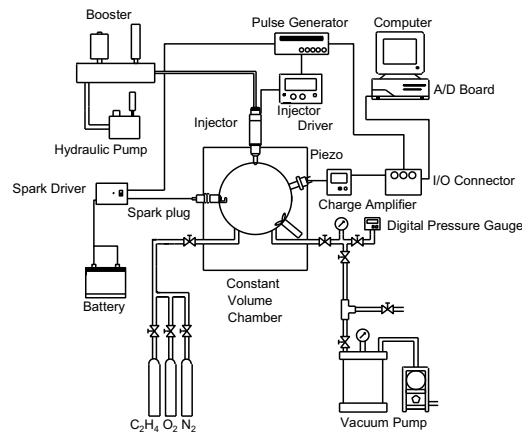


図2.19 実験装置概略

定容容器には、ピエゾ式圧力変換器、吸排気用バルブ、点火プラグ、また上部には容器中心方向に燃料を噴射するようにインジェクタが取り付けられている。小型電動油圧ポンプとブースタにより、軽油を30～160 MPaの任意の圧力に昇圧することができる。ディーゼルエンジンの燃焼室内と同等の雰囲気条件を定容容器内で再現するために、補助燃料であるエチレンと窒素、酸素を充填し、スパークプラグで火花点火させて容器内に高温高压場を形成した後、本供試機関に搭載されている多噴孔インジェクタ(φ0.133 mm×6 holes, Spray angle : 153 deg.) から燃料を噴射する。この際、6噴孔のうち、1つの噴霧が真下に噴射されるよう、容器の上ふたを設計し、インジェクタの取り付け角度を適切に設定した。

燃料噴射率が実機と同様とするため単噴孔ノズルは使用していない。容器内の平均圧力はピエゾ式圧力変換器を用いて計測し、容器内の平均温度は平均圧力より算出した。

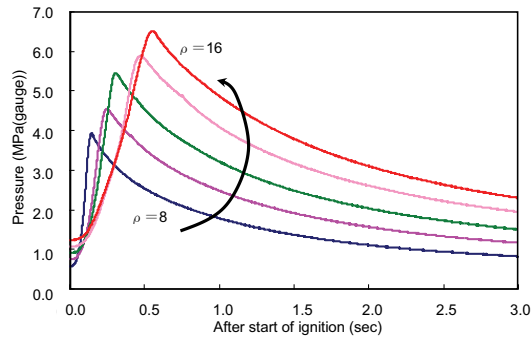


図2.20 高温高圧場を定容容器内に形成するためのエチレン燃焼圧力線図

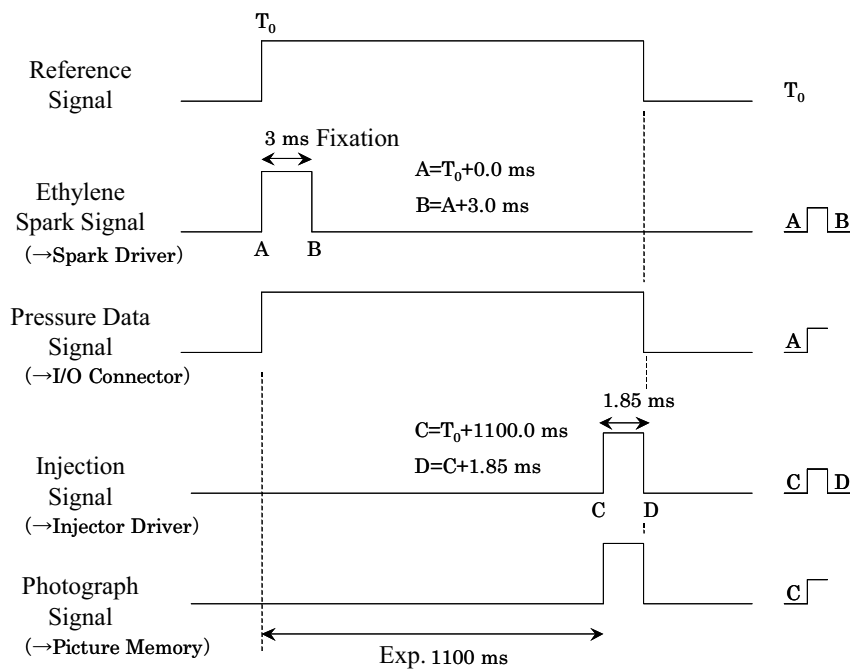
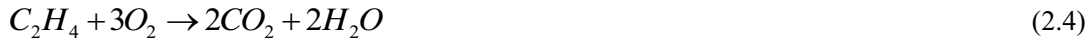


図2.21 制御信号フローチャート

図2.20にエチレン燃焼による容器内圧力の時間履歴，図2.21に制御信号をそれぞれ示す。エチレン燃焼用のスパーク入力信号を基準に遅れ時間をとることで，任意の雰囲気条件下で燃料を噴射することが可能となる。エチレンのスパーク指令信号と同期して圧力センサによる容器内圧力の測定を開始し，燃料噴射と同期して高速度ビデオカメラによる撮影を行う。雰囲気密度は，容器体積が一定であることと質量保存則より，エチレン点火前の封

入気体の密度を設定することで調節する．本実験では，初期封入ガスの密度(すなわち燃料噴射時の雰囲気密度 ρ)を $\rho = 8 \sim 16 \text{ kg/m}^3$ まで任意に設定することができる．

エチレンが完全燃焼した際の理論反応式を式(2.4)に示す．



高温，高圧場において，エチレンの燃焼によって酸素がすべて消費され残らないようにすることで，蒸発を伴う非燃焼燃料噴霧の挙動を観察することが可能である．そのような非活性場(酸素：窒素+その他=3：97)が実現するエチレン，酸素，窒素の封入割合を求める．

$$O'_2 : (CO'_2 + H_2O' + N'_2) = (O_2 - 3C_2H_4) : (4C_2H_4 + N_2) = 3 : 97 \quad (2.5)$$

$$C_2H_4 + O_2 + N_2 = 100 \quad (2.6)$$

エチレン燃焼前後の各気体モル割合(圧力割合，体積割合)をそれぞれ O_2 ， N_2 ， C_2H_4 ， O'_2 ， N'_2 と $C_2H'_4$ とすると，式(2.5)のようになり，式(2.5)，式(2.6)より式(2.7)となる．

$$O_2 = 3C_2H_4 + 3 ; \quad N_2 = -4C_2H_4 + 97 \quad (2.7)$$

エチレンの物性値は表2.15に示している．そのエチレンのモル割合を実験的に3.8%に設定すると，各実験条件における酸素，窒素の気体封入割合はそれぞれ，12.9%，83.3%となる．

表2.16 エチレンの物性値

Formula	C ₂ H ₄
Molar Weight	28.054
Density kg/m ³ (1atm, 25°C)	1.155
Lower Heating Value MJ/kg	47.17
Flammability Limit vol % (1 atm, 25°C)	2.75 ~ 28.60
Max Flame Speed m/s	68.3
[Fuel Consistency vol %]	[7.40]

b) 撮影画像の解析

高速度ビデオカメラによって撮影された画像はBMPファイル(8bit)として保存される．本研究では，日本ローバー社のImage-Pro Plus 4.0Jを用いて，BMPファイルの各ピクセルの明度を0～255の数値に置き換えること画像解析を行った．図2.22に示すように，燃料噴射のないバックグラウンド画像と燃料噴霧撮影画像から不要な部分(容器の影，噴孔部分)を

差し引いたものに対して、その時刻におけるノズル噴孔先端からの噴霧到達距離を求めた。ここで、各ピクセルについて中央とその周囲9点の値を平均することでノイズ除去等の操作を行った。

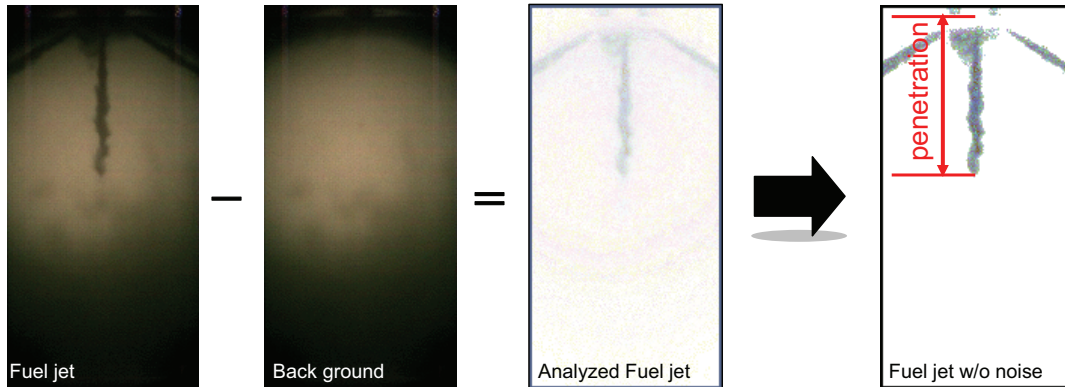


図2.22 噴霧画像から噴霧先端到達距離を解析する方法

2.3 数値シミュレーション

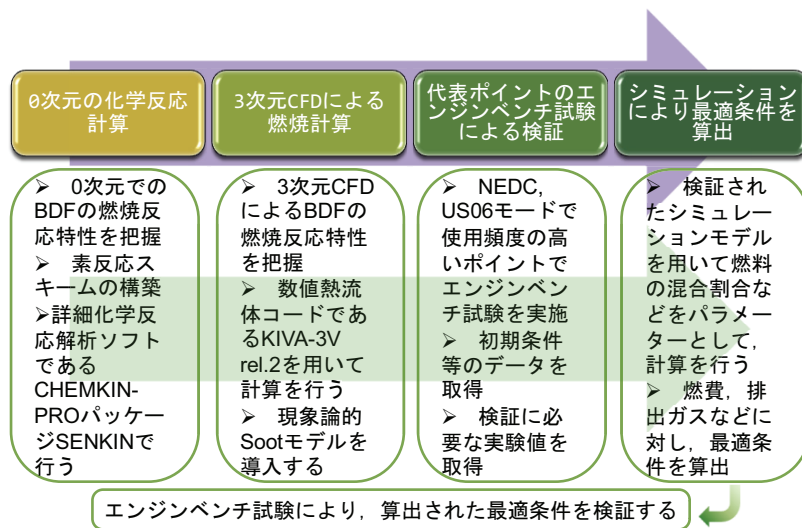


図2.23 数値シミュレーション手順

BDFの基本的な燃焼反応特性を把握するため、0次元でのMOの素反応スキームを構築し、CHEMKIN-PROを用いて化学反応計算を行う。また、3次元CFDによるBDFの燃焼反応特性を把握するため、KIVA-3Vを用いてFAMEの反応スキームを導入し、燃焼計算を行う。計算結果はエンジンベンチ試験により検証し、燃焼特性と排出ガス特性を解明し、最適条件

を算出することとする。これらの計算手順は図2.23に示す。

2.3.1 0次元化学反応モデル

本研究で行う0次元モデルでは、シリンダ内の温度、圧力、化学種濃度等は均一であると仮定している。このような解析を行うことにより、定性的な反応現象の理解が可能となる。0次元化学反応計算にはCHEMKIN-PROに含まれるパッケージSENKINを用いる。CHEMKIN-PROの概要を図2.24に示す。

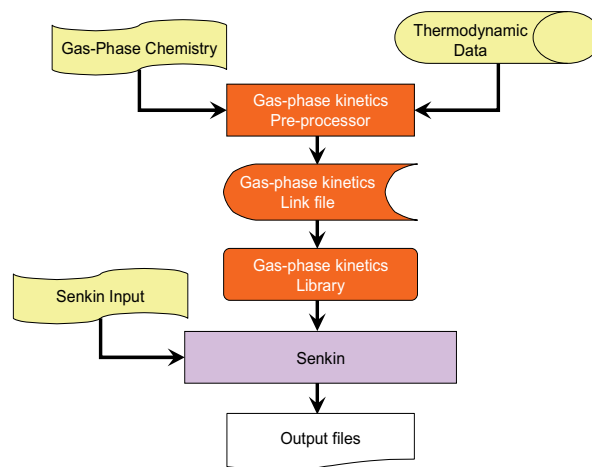


図 2.24 CHEMKIN-PRO 概要

SENKINには、5つのプログラム（A. 圧力一定の断熱システム；B. 体積一定の断熱システム；C. 体積を時間の関数として与える断熱システム；D. 圧力と温度が一定のシステム；E. 圧力が一定で温度が時間の関数で定義されたシステム）が用意されている¹¹⁾。

エンジンの燃焼解析には、A~Cが主に用いられる。0次元解析においては、Aを用いて行った。次に、SENKINにおける質量とエネルギーの保存式の概要について述べる。システムは閉じた系が仮定されているので、境界からの物質の出入りはない。従って、反応気体の全質量 m は、式(2.8)となる。

$$m = \sum_{k=1}^K m_k = \text{const.} \quad (2.8)$$

$$dm/dt = 0$$

ここで、 m_k は k 番目の化学種の質量であり、 K は反応気体中の化学種の数である。

各化学種の変化は、式(2.9)と(2.10)のように記述される。全質量は一定であるので、式(2.9)は質量割合を用いて以下のように書き換えられる。式(2.10)はプログラムA~Eまで共通であ

る。DとEに関しては、温度が既知であるので、エネルギー方程式は必要なく、プログラムは式(2.10)のみにより規定される。一方、A~Cは各ケースの拘束条件からエネルギー方程式を導き出さなければならない。

$$\frac{dm_k}{dt} = V\omega_k W_k \quad (2.9)$$

$$k = 1, \dots, K$$

$$\frac{dY_k}{dt} = V\omega_k W_k \quad (2.10)$$

$$k = 1, \dots, K$$

ここで、 t は時間、 ω_k と W_k は、素反応による k 番目の化学種の生成速度と分子量、 V は体積である。 $Y_k = m_k/m$, $v = V/m$ である。

閉じた系における断熱状態での純物質の熱力学第一法則は、理想気体を仮定すると、式(2.11)となる。内部エネルギー e は、式(2.12)で表される。従って、 de は式(2.13)のようになる。

$$de + pdv = 0 \quad (2.11)$$

ここで、 e は比内部エネルギーで、 p は圧力である。

$$e = \sum_{k=1}^K e_k Y_k \quad (2.12)$$

ここで、 e_k は、 k 番目の化学種の内部エネルギーである。

$$de = \sum_{k=1}^K Y_k de_k + \sum_{k=1}^K e_k dY_k \quad (2.13)$$

ここで、理想気体を仮定すると、 $de_k = c_{v,k} dT$ である。 T は温度を、 $c_{v,k}$ は k 番目の定容比熱である。

反応気体の平均定容比熱は、 $c_v = \sum_{k=1}^K Y_k c_{v,k}$ で、これらを用いてエネルギー式を式(2.14)

のように表すと、式(2.20)を用いて上式を書き直し、式(2.15)を得られる。

$$c_v \frac{dT}{dt} + \sum_{k=1}^K e_k \frac{dY_k}{dt} + p \frac{dv}{dt} = 0 \quad (2.14)$$

$$c_v \frac{dT}{dt} + p \frac{dv}{dt} + v \sum_{k=1}^K e_k \omega_k W_k = 0 \quad (2.15)$$

また、理想気体の状態方程式から、圧力は式(2.16)となる。プログラムCの場合、体積は時間の関数として与えられるので、式(2.17)のように表される。以上より、プログラムCでは、式(2.15)と式(2.18)が用いられる。また、プログラムBでは、体積が一定のため、式(2.15)は、式(2.19)となる。プログラムAでは、エンタルピーが一定であり、エンタルピーは $h=e+pv$ であり、微分すると式(2.20)となり、圧力一定であるから、 $dh=0$ となる。反応気体のエンタルピーは、式(2.21)と表される。以上より、定圧条件でのエネルギー式は、式(2.22)となる。

$$p = \frac{\rho RT}{W} \quad (2.16)$$

ここで、 R は一般ガス定数、 W は反応気体の平均分子量、 ρ は密度である。

$$v(t) = \frac{V(t)}{m} \quad (2.17)$$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{m} \frac{dV}{dt} \quad (2.18)$$

$$c_v \frac{dT}{dt} + v \sum_{k=1}^K e_k \omega_k W_k = 0 \quad (2.19)$$

$$dh = de + vdp + pdv \quad (2.20)$$

$$h = \sum_{k=1}^K Y_k h_k \quad (2.21)$$

ここで、 h_k は k 番目の化学種のエンタルピーである。

$$c_p \frac{dT}{dt} + v \sum_{k=1}^K h_k \omega_k W_k = 0 \quad (2.22)$$

ここで、平均定圧比熱は、 $c_p = \sum_{k=1}^K Y_k c_{p,k}$ で表される。

各化学種の反応速度 ω_k は、すべての反応式より算出される。各反応は、質量作用の法則に従って進行し、修正アレニウス関数の正の反応速度定数は、式(2.23)となる。

$$k_f = AT^\beta \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (2.23)$$

ここで、 E_a は活性化エネルギー、 β は温度指数、 A は頻度因子であり、方程式のパラメーターである。

化学反応に関する計算は、CHEMKIN サブルーチンライブラリを用いて行われる。

a) 炭化水素 (D100) の酸化反応モデル

炭化水素燃料の低温酸化反応および高温酸化反応の説明図¹²⁾を図 2.24 に示す。低温酸化反応の反応経路として、炭化水素からの水素引き抜きによって生じたアルキルラジカル ($R\cdot$) への酸素付加, および分子内異性化による過酸化物の生成を経て, 2 度目の酸素付加から OH ラジカル ($OH\cdot$), アルデヒド, ケトン類に分解していく経路を中心として, 分子内異性化の後に, 環状エーテル類を生成する反応, 炭素数の小さなアルデヒド, オレフィン類に分解し OH を放出する反応, 燃料から水素が 2 個取れたオレフィンが生成する反応が報告されている¹³⁾。この過程で放出された OH は, 燃料やその他の中間生成物と反応して CO, 水を生成し, また, アルデヒドの生成自体も発熱反応であるため, これらの発熱が場の若干の温度上昇につながる。

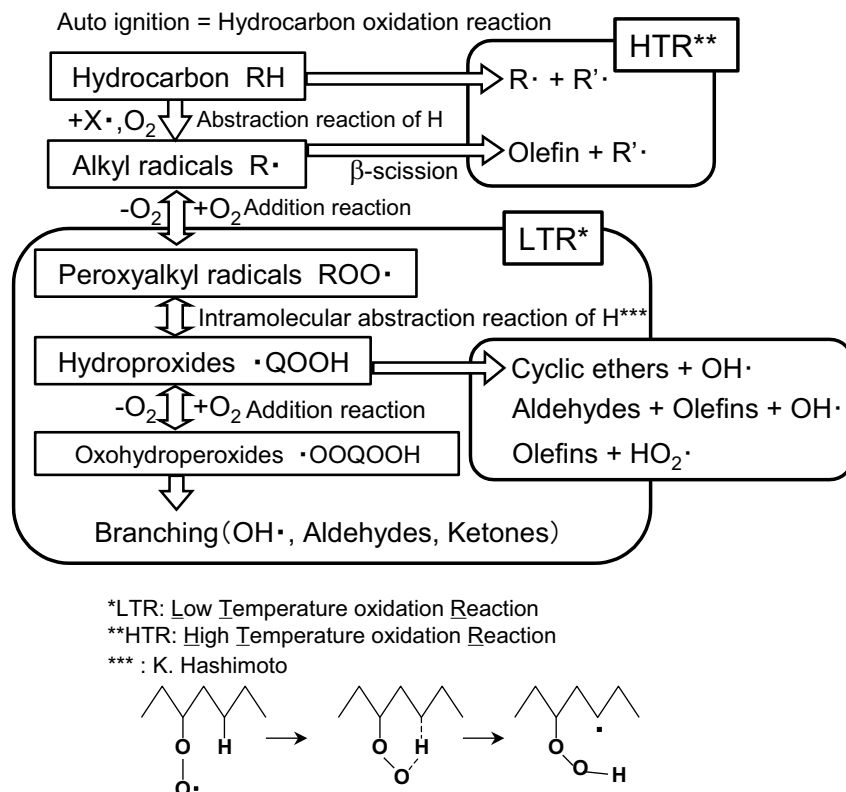


図 2.24 炭化水素の酸化反応過程¹²⁾

低温酸化反応は温度上昇により, $R\cdot$ への酸素付加や分子内異性化といった反応の逆反

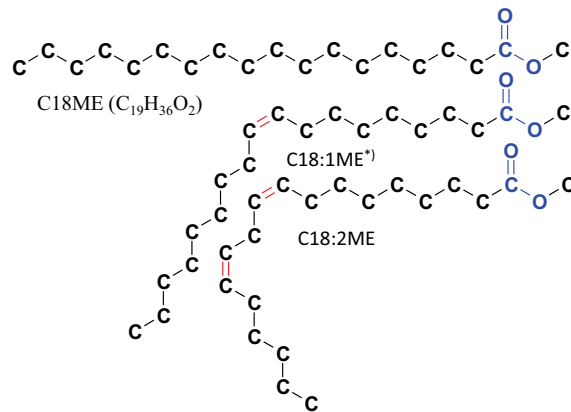
応の速度が上昇し、分子数の小さな $R\cdot$ やオレフィンへの分解反応が支配的となり、 OH や HO_2 による連鎖反応が縮退することが知られている。この間、アルデヒドやオレフィンが蓄積され、 HO_2 も安定な H_2O_2 の形で蓄積されていく。場の温度が 900 K 以上になると、蓄積された H_2O_2 は OH へと分解し、ここで生成された OH が高温側の連鎖反応を始動する、低温酸化で蓄積されたアルデヒドやオレフィンと反応して CO , H_2O を生成することになる。反応の発熱により、燃焼場の温度は 1200 K 以上に上昇し、反応としては熱炎反応が支配的となり、 OH , O , H , HO_2 等を連鎖担体として活発な酸化が行われるようになり、 CO は CO_2 へと酸化され、 CO 以外の残存燃料や中間生成物も燃料分子の熱分解や、ラジカルの β -scission により炭素数の小さな $R\cdot$, オレフィン, アルデヒド等に分解された後に CO , CO_2 へと酸化されて燃焼が完了することが知られている¹⁴⁾。

実際のディーゼル燃料は多数の脂肪族や芳香族の化合物から成り、これらの燃焼は極めて複雑であるため、包括的な化学反応機構を用いてモデル化することは困難である。これまでセタン価が約56で軽油と同等である *n*-haptane の反応機構が軽油の代替反応として用いられてきたが、燃料中に含まれる芳香族成分や高い分子量の燃焼を表現することが困難であるため、すすの生成量は実際の軽油に比較して少なく見積もられてしまう¹⁵⁾。そこで、本研究では Golovitchev らの提唱する Diesel oil surrogate ($C_{14}H_{28}$) メカニズム¹⁶⁾ (化学種数: 71, 素反応数: 325) を用いた。この反応メカニズムは、LLNL (Lawrence Livermore National Laboratory) により公開されている衝撃波管から得られた *n*-heptane の詳細な化学反応機構に対し、CHEMKIN-II を用いた感度解析により、特に影響度の強い化学反応を中心として編成した機構に Toluene の反応機構を組み込んでいる。サロゲート燃料 $C_{14}H_{28}$ は式(2.24)に示すように、グローバル反応によってパラフィン系炭化水素 (*n*-haptane) と芳香族炭化水素 (Toluene) に分割され、反応が進行する。



b) オレイン酸メチル (MO100) の酸化反応モデル

図 2.25 に各メチルエステルの構造¹⁷⁾を示す。燃焼特性は成分毎の化学反応への影響が大きいため、燃焼シミュレーションの構築においては、詳細な燃焼反応機構の理解が重要である。本研究においては、 $C_{19}H_{36}O_2$ は MO100 とし、反応スキームを構築する対象とした。



(*) C18:1 とは炭素数 18 で二重結合が 1 つの脂肪酸にメチル基が付加した脂肪酸メチルエステル.

図 2.25 脂肪酸メチルエステルの構造¹⁷⁾

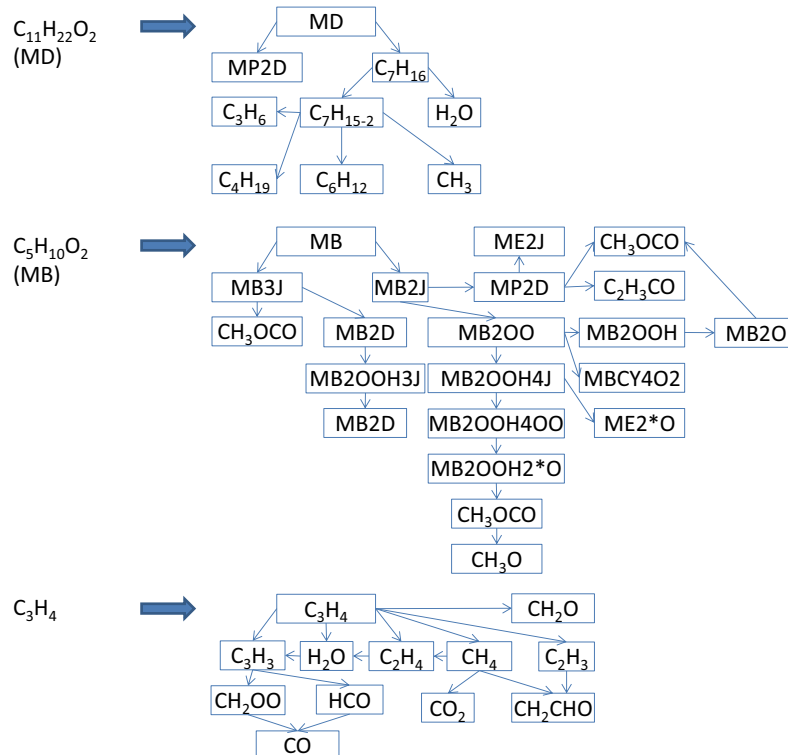
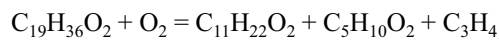
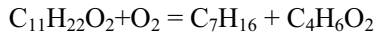
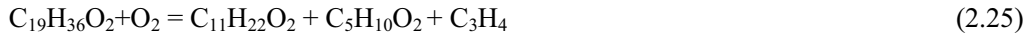


図2.26 MOの酸化反応メカニズム

MO100 サロゲートを単純化するため, 図 2.26 に示すようなバイオディーゼルの化合物

燃焼メカニズム¹⁸⁾を用いると、式(2.25)に示すように、グローバル反応によってパラフィン系炭化水素(n-haptane)と短鎖メチルエステルに分割され、反応が進行する。その n-haptane は軽油の酸化反応と一致し、短鎖メチルエステルには、図 2.26 に示すような酸化反応メカニズムにより反応が進行する。



ここで、 $C_5H_{10}O_2$, $C_4H_6O_2$ の反応スキームは文献¹⁹⁾により構築した。0次元の計算において、それらの詳細反応スキームを用い、化学種数および素反応数については、図2.26に示すような反応メカニズムにより、309個化学種・1472個素反応から32個化学種・89個素反応にまで削減し、その着火遅れの計算結果を図2.27に示す。この結果により、削減した反応メカニズムが有効であり、MOの燃焼反応を代替できるものと判断される。

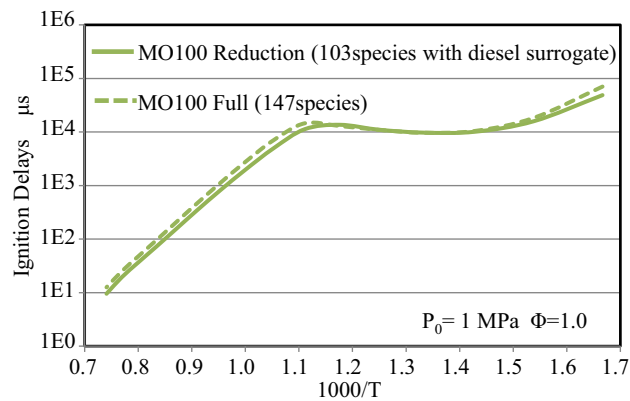


図2.27 着火遅れの比較

c) 混合燃料について

軽油と BDF による混合燃料では、理想混合状態と仮定し、混合燃料の二体相互作用を無視できると仮定すると、文献²⁰⁾により、式(2.26)~(2.28)から、各熱物性値が得られる。

$$Q_m = \sum_i \sum_j y_i y_j Q_{ij} \quad (2.26)$$

$$Q_{ij} = (Q_{ii} Q_{jj})^{1/2} \quad (2.27)$$

$$Q_m = \left(\sum_i y_i Q_i^{1/2} \right)^2 \quad (2.28)$$

ここで、 Q_m は混合燃料の各熱物性値、 Q_{ij} は平均熱物性値、 Q_{ii} , Q_{jj} は各燃料の熱物性値、

y_i, y_j は各燃料の体積割合である.

d) 排出ガス反応モデル

Sootについて

表2.16 Soot反応モデル²¹⁾

No.	Process	Chemical reactions
1.	Precursor radical formation	Detailed chemistry up to A_2R_5
2.	Acetylene formation	Detailed chemistry
3.	Precursor radical oxidation	Detailed chemistry
4.	Acetylene oxidation	Detailed chemistry
3.	Graphitization	$A_2R_5 \rightarrow C(s) + H_2$ $C_4H_2 \rightarrow C(s) + H_2$
6.	Soot particle oxidation	$C(s) + O_2 \rightarrow O + CO$ $C(s) + H_2O \rightarrow CO + H_2$ $C(s) + OH \rightarrow CO + H$ $C(s) + OH + OH \rightarrow CO_2 + H_2$ $C(s) + OH + O \rightarrow CO_2 + H$ $C(s) + NO_2 \rightarrow CO + NO$

0次元での計算に用いた化学反応機構には、表2.16に示すようなSootの生成機構を統合している²¹⁾。はじめにPolyeneやPAHといった主要なSoot前駆物質が形成され、さらに、図2.28に示すように、FrenklachらによるHACA(Hydrogen Abstraction C_2H_2 Addition)機構²²⁾に基づいたアセナフチレン(A_2R_5)までの芳香族環の成長が表現される。芳香族環の成長は A_2R_5 までとしたが、これは A_2R_5 が黒鉛に変化する“黒鉛化”過程によってSootの形成開始を予測するという仮定に基づくものである。使用したスキームでは、 A_2R_5 及び C_4H_2 がグローバル反応によって固体カーボンC(s)に変化するよう考慮している。ここで、C(s)の熱物性値は黒鉛のそれとして扱っている。一方、Sootの酸化はOH・、 H_2O 、 NO_2 、 O_2 による酸化反応を考慮している。また、素反応に含まれる全ての化学種の熱物性値はLLNLとMIT (Massachusetts Institute of Technology) のデータベースによって与えられた。

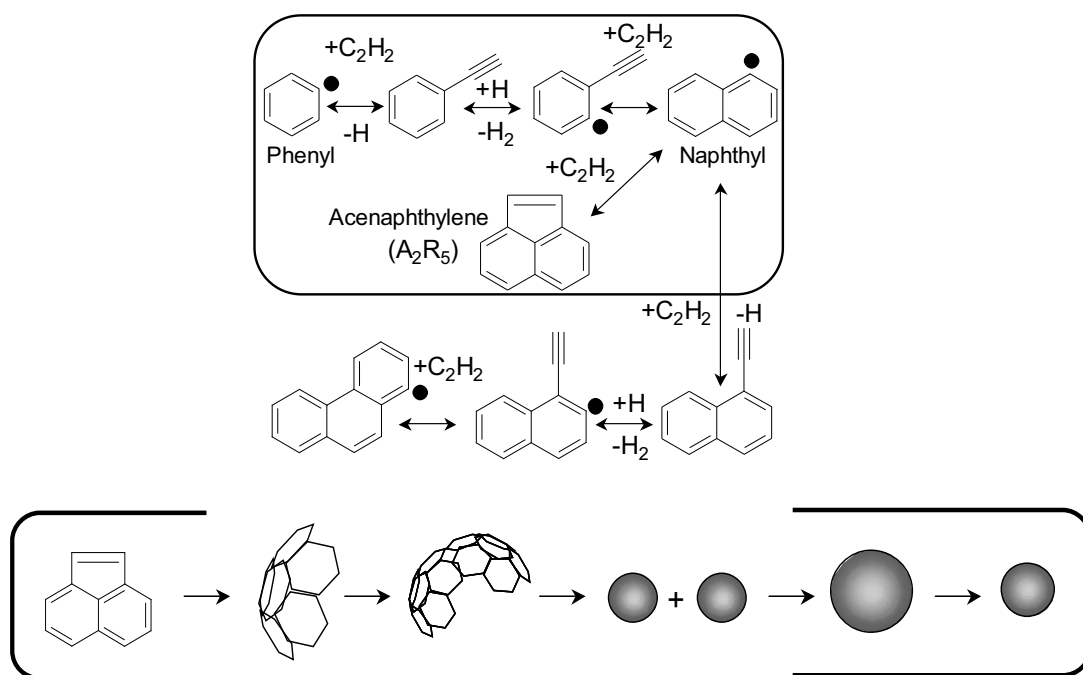


図2.28 HACAにおけるSoot反応メカニズム²²⁾

NO_xについて

拡大Zel'dovich機構²³⁾を含む計15本のNO_x生成に関する素反応式を考慮している．表2.17にこれらをまとめて示す．

表2.17 NO_x反応メカニズム²³⁾

Mechanism	Chemical reactions
Extended Zeldovich	$\text{N} + \text{NO} = \text{N}_2 + \text{O}$ $\text{N} + \text{O}_2 = \text{NO} + \text{O}$ $\text{N} + \text{OH} = \text{NO} + \text{H}$ $\text{N} + \text{CO}_2 = \text{NO} + \text{CO}$
N ₂ O formation and destruction	$\text{N}_2\text{O} + \text{O} = \text{N}_2 + \text{O}_2$ $\text{N}_2\text{O} + \text{M} = \text{N}_2 + \text{O} + \text{M}$ $\text{N}_2\text{O} + \text{H} = \text{N}_2 + \text{OH}$ $\text{N}_2\text{O} + \text{OH} = \text{N}_2 + \text{HO}_2$ $\text{N}_2\text{O} + \text{NO} = \text{N}_2 + \text{NO}_2$
NO to NO ₂ (low Ef – i.e. at low temperatures)	$\text{NO} + \text{HO}_2 = \text{NO}_2 + \text{OH}$ (Main NO to NO ₂ branch) $\text{NO} + \text{O} + \text{M} = \text{NO}_2 + \text{M}$ $\text{NO}_2 + \text{O} = \text{NO} + \text{O}_2$ $\text{NO}_2 + \text{H} = \text{NO} + \text{OH}$ $\text{NO}_2 + \text{N} = \text{NO} + \text{NO}$
N ₂ O to NO	$\text{N}_2\text{O} + \text{O} = \text{NO} + \text{NO}$

2.3.2 3次元燃焼反応モデル

本研究では、米国Los Alamos国立研究所にて開発されたCFDコードKIVA-3V rel.2²⁴⁾をベースコードとして、各種サブモデルに改良を加えたものを使用した。この数値流体コードの概要を表2.18に示す。

このコードにおいて、燃料噴霧の微粒化、蒸発を含む混合気形成過程を再現する噴霧モデルを導入するとともに、燃焼モデルでは詳細な素反応過程を考慮することでモデルの精度向上を図った。これまで草鹿ら²⁵⁾は、詳細な素反応における速度式を高精度で解くことでこのような数値計算を実施してきたが、多元の連立速度式を解くためには多大な計算時間が必要であった。そこで、従来のKIVAコードが採用するoperator-splitting procedureに基づき拡張されたPaSR(Partially Stirred Reactor)モデル²⁶⁾を導入することで、計算の高速化を図り、比較的短時間で3次元解析を行うことを可能とした。蒸発噴霧の可視化実験及びエンジン試験結果との比較を通じてこれらのモデルの検証と解析を行い、ディーゼル噴霧燃焼に対して有用なモデル化の方法となり得るよう検証していくこととした。

表2.18 KIVA-3V rel.2のスキーム概要²⁴⁾

Phase	Solved equations	Specific features	
Phase A	Droplet collision and oscillation / breakup terms Mass and energy source terms due to chemistry and spray effects	Lagrangian	Implicit
Phase B	Acoustic mode terms (pressure gradient in the momentum equation and velocity dilatation terms in mass and energy equations) Spray momentum source terms Terms due to diffusion of mass momentum, and energy		Coupled Implicit SIMPLE* PDC**
Phase C	Convective transport	Eulerian	Subcycled explicitly

*SIMPLE: Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations

**PDC: Partially Donor Cell

a) 噴霧モデル

3次元CFDコードを用いたディーゼルエンジンの燃焼および排出物生成過程の予測には、まず燃料噴霧の微粒化と蒸発を含む混合気形成過程を再現することが前提条件となる。そこで以下のそれぞれの項目に対して物理モデルを適用し、現象を表現した。

燃料が筒内に噴射される過程は液体と気体の2相流となるが、KIVA-3Vにおいては気体の流れは固定された計算格子を用いてEuler的に解き、燃料液滴の計算は離散液滴法(DDM:

Discrete Droplet Model)²⁷⁾に基づき, Lagrange的に液滴を追跡する方法により解く. ただし, 全ての液滴を追跡するには計算負荷が大きいので, パーセルと呼ばれるグループにまとめ, このパーセルを追跡して解く方法を採用している. パーセルは, 位置, 速度, 半径, 温度等の特徴が同じである液滴の数を表現する. 燃料噴射は, 噴射率波形データより決定された初期速度をもつパーセルが筒内に導入されることで表現される. ノズルから噴射された液滴の直径はノズルの直径と等しいものとし, 液滴の分裂や蒸発により減少するか, あるいは衝突による合体で増加する.

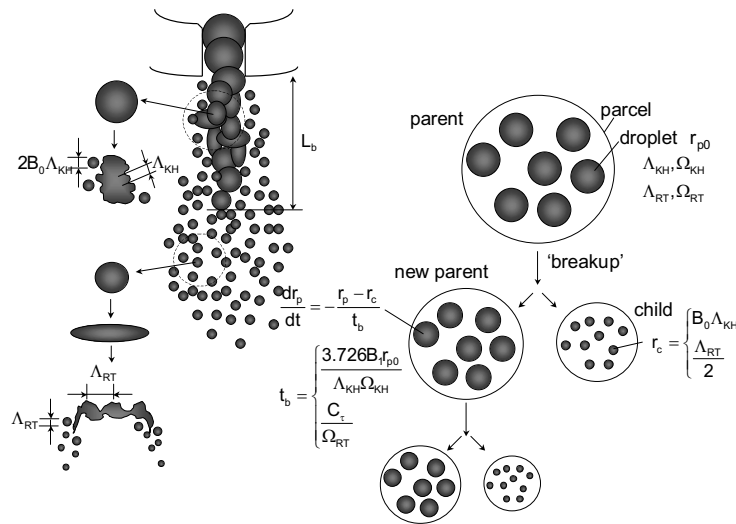


図2.29 KH-RT分裂モデルの概略

液滴の表面に作用する空力学的な外力が, 液滴の表面張力を超える条件においては分裂が起こると考えられ, それをモデル化することは必要である. そこで本研究では, 図2.29に示すように, 燃料液滴の分裂に対してReitzら²⁸⁾によるKH-RT(Kelvin-Helmholtz-Rayleigh-Taylor)ハイブリッドモデルを導入した. Kelvin-Helmholtzの不安定性とは, 速度の異なる不連続面に生じる不安定性である. これは高密度の雰囲気中に高速の初期速度で噴射された燃料が, 空気とのせん断力により引きちぎられて分裂していく過程を表現するものである. また, ディーゼル噴霧液滴は, 雰囲気ガスから受ける流体抵抗により急速に減速することが知られている. このような過程では, Rayleigh-Taylorの不安定性もまた液滴の微粒化現象の表現に重要な役割を果たす可能性がある. Rayleigh-Taylorの不安定性とは, 密度の異なる2種の流体がその境界線に対して垂直方向に加速度運動をする時に, その境界線が不安定になる現象である. ディーゼル噴霧の到達距離は, 分裂長さの前後で異なった

挙動を示すことが広安ら²⁹⁾により実験的に示され、式(2.29)のようにLevichの理論³⁰⁾に基づき分裂長さが定式化されている。

$$L_b = C_b \cdot d_0 \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (2.29)$$

ここに、 d_0 は噴孔径、 ρ_l 、 ρ_g はそれぞれ燃料と雰囲気ガスの密度であり、 C_b はノズルの形状等に依存する任意定数である。

また、液滴密度の大きな領域では、液滴同士の合体や反発作用といった衝突効果を考慮することが必要になる。Niklas³¹⁾は、モデルのメッシュ依存性に注意を払い、従来のO'Rourkeのモデルを改良してKIVA-3Vに導入していた。2つのパーセルの進行方向が交差し、ひとつの計算時間ステップ内で交差するポイントに到達するときだけ衝突が起こるというモデルが提案されている。そのモデルにより、メッシュの依存性を低減することができた。

b) 燃焼モデル

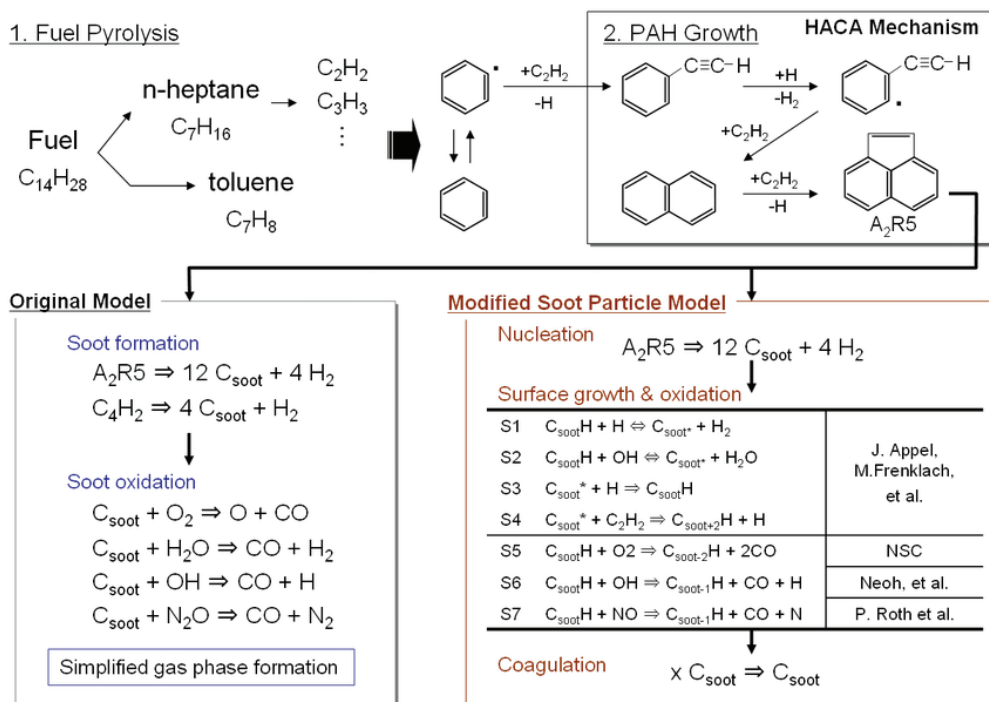


図 2.30 Soot 微粒子形成概念図³²⁾

各燃料の反応モデルについて、0次元計算を行ったものと同様であり、またNOxの生成

モデルも同様である。一方、Soot モデルにおいては、草鹿らにより開発された Soot 微粒子の形成過程により近く、エンジン内の Soot の生成と酸化の履歴を計算できる現象論的 Soot モデル³²⁾を用いて、計算を行った。

ディーゼルエンジンから排出される粒子状物質の形成過程は極めて複雑であり、未解明な点も多い。一般的には、前述したように気相化学種から固相物質が形成される化学的、物理的因子が混在した相変化を経て生成されることが知られている。Soot の形成過程において、前駆物質形成過程を経て、前駆物質からの凝縮核形成、粒子核同士の衝突・合体による凝集、粒子表面での表面反応による成長、及び酸化による減少、さらには成熟した粒子同士の凝集塊形成により進行するものとして仮定される³³⁾。

前節で述べた図 2.30 に示すような Soot 生成機構²¹⁾をもとに、本研究においても気相反応において前駆物質の形成を考慮し、続いて現象論的モデルにより各種 Soot 表面反応や衝突合体による物理的要因が関係するプロセスを考慮した上で Soot 排出量の予測を実施した。

本 Soot モデルにおける輸送方程式を式(2.30)に示す。本モデルでは、簡単のため粒子は気相化学種と同等に扱い、特に濃度拡散項については隣接するセルにおける幾何学平均径の粒子が輸送されるものとした³²⁾。

$$\frac{\partial \rho_{soot}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_{soot} \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left[\rho_{tot} D \nabla \left(\frac{\rho_{soot}}{\rho_{tot}} \right) \right] + \rho_{soot}^c \quad (2.30)$$

ここで、 ρ_{soot} は Soot 密度、 ρ_{tot} はセル内の全質量、 ρ_{soot}^c は Soot の生成項、 \mathbf{u} は速度ベクトルである。

さらに、Soot 質量の変化は式(2.31)に、粒子数密度の変化は式(2.32)に従うものとした³³⁾。

$$\frac{d[C(s)]}{dt} = \omega_{NC} + \omega_{SG} + \omega_{O_2} + \omega_{OH} + \omega_{NO} \quad (2.31)$$

$$\frac{df_n}{dt} = \frac{df_{n,NC}}{dt} + \frac{df_{n,CG}}{dt} \quad (2.32)$$

ここで、 ω は質量変化速度、 f_n は微粒子数密度である。また、添字 NC は核形成、 SG は表面成長反応であり、 O_2 、 OH 、 NO はそれぞれの化学種による Soot の酸化を表す。

Soot の核形成過程としては、気相化学種において最も分子量が大きく、また球形などの立体構造を形成しうる五員環構造を有したアセナフチレン(A_2R5)を候補として採用した。

核形成のプロセスは式(2.33)により記述され、それに伴う Soot 微粒子の質量増加は式(2.34)と式(2.35)に従うものとした³²⁾.



$$\omega_{NC} = k_{NC} [A_2R5] \quad (2.34)$$

$$k_{NC} = 1.0 \times 10^3 \exp(-5000/RT) \quad (2.35)$$

また、核形成による粒子数密度変化は式(2.36)により記述され、この時の一次粒子炭素数 (C_{\min})は本モデルでは 100 と設定した³³⁾. なお、 N_A はアボガドロ定数である.

$$\frac{df_{n,NC}}{dt} = \frac{N_A}{C_{\min}} 12\omega_{NC} \quad (2.36)$$

表 2.19 表面反応速度係数

No.	Reactions	$k = AT^b \exp(-E/RT)$		
		A ($\text{cm mol}^{-1} \text{s}^{-1} / \text{cm atm}^{-1} \text{s}^{-1}$)	b	E (cal / mol)
SG1	$C_{\text{Soot}} + H \Leftrightarrow C_{\text{Soot}}^* + H_2$	4.20E+13	—	13000
SG2	$C_{\text{Soot}}H + OH \Leftrightarrow C_{\text{Soot}}^* + H_2$	1.00E+10	0.734	1430
SG3	$C_{\text{Soot}}^* + H \Rightarrow C_{\text{Soot}}H$	2.00E+13	—	—
SG4	$C_{\text{Soot}}^* + C_2H_2 \Rightarrow C_{\text{Soot}+2}H + H$	8.00E+06	0.78	3800
SO1	$C_{\text{Soot}}H + O_2 \Rightarrow C_{\text{Soot}-2}H + 2CO$	Nagle Strickland-Constable Model		
SO2	$C_{\text{Soot}}H + OH \Rightarrow C_{\text{Soot}-1}H + CO + H$	$\gamma_{OH} = 0.30$	(K.G. Neoh et al.)	
SO3	$C_{\text{Soot}}H + NO \Rightarrow C_{\text{Soot}-2}H + 2N_2$	$\gamma_{NO} = 1.82 \exp(-30000/T)$	(P. Roth et al.)	

核形成を経た後、表面反応モデルに従い、Soot 微粒子の成長と酸化量を見積もる。本 Soot モデルで考慮した各種表面反応を表 2.19 に示す。まず Soot の表面成長に関わる反応式 SG1~SG4 に関しては、Frenklach らの提案する表面反応モデルに基づきモデル化した³⁴⁾³⁵⁾。Soot 微粒子の表面では、アセチレンが反応可能な活性サイトと反応できない不活性サイトから成り立つと考え、式(2.37)のように不活性サイト密度が準定常であることを仮定した場合、活性サイト密度は式(2.38)により導かれる。

$$\omega_{SG1,f} - \omega_{SG1,b} + \omega_{SG2,f} - \omega_{SG1,b} - \omega_{SG3} - \omega_{SG4} = 0 \quad (2.37)$$

$$\chi_{\text{Soot}}^* = \chi_{\text{Soot}} \frac{k_{SG1,f} [H] + k_{SG2,f} [OH]}{k_{SG1,b} [H_2] + k_{SG2,b} [H_2O] + k_{SG3} [H] + k_{SG4} [C_2H_2]} \quad (2.38)$$

ここで、EGRを導入しない条件では x_{soot} を 2.32×10^{17} sites/cm² とし、EGR導入条件では 9.048×10^{17} sites/cm² とした。また、 $k_{SG1,f}$ は SG1 正反応速度定数； $k_{SG1,b}$ は SG1 逆反応速度定数； $k_{SG2,f}$ は SG2 正反応速度定数； $k_{SG2,b}$ は SG2 逆反応速度定数； k_{SG3} は SG3 正反応速度定数； k_{SG4} は SG4 正反応速度定数； χ_{soot} は不活性サイト数密度となる。

従って、活性サイトのみにアセチレンが付加することを仮定した場合、表面成長速度は式(2.39)として表現されることになる。また α は粒子表面の表面反応温度依存性を表現したものであり、式(2.40)から計算される³⁴⁾³⁵⁾。

$$\omega_{SG} = k_s P_{C_2H_2} \left\{ \alpha \frac{\chi_{soot}^i}{N_A} A_{soot} f_n \right\} \quad (2.39)$$

ここで、 A_{soot} は Soot の表面積であり、 $P_{C_2H_2}$ はアセチレンの分圧である。

$$\alpha = \frac{1}{2} \left\{ \tanh\left(\frac{8168}{T} - 4.57\right) + 1 \right\} \quad (2.40)$$

Soot の表面酸化において、本モデルでは、O₂、OH、NO の合計 3 つの酸化剤による Soot 微粒子の表面酸化反応を考慮した。

O₂ による Soot 粒子酸化反応モデルとしては、Nagle Strickland-Constable モデル³⁶⁾ (以下 NSC モデルと呼ぶ) を採用した。この酸化モデルでは、表面成長反応と同様に Soot 微粒子の表面を不活性サイト、活性サイトから成り立つと仮定した上で、二つの異なる反応経路を考慮し、酸化速度を見積もる。総括反応を式(2.41)に、NSC モデルに基づく酸化速度式を式(2.42)、(2.43)にそれぞれ示す。



$$\omega_{O_2} = A_{soot} \cdot f_n \cdot \left\{ \frac{k_A P_{O_2}}{1 + k_z P_{O_2}} x_A + k_B P_{O_2} (1 - x_A) \right\} \quad (2.42)$$

$$x_A = \left(1 + k_T / k_B P_{O_2} \right)^{-1} \quad (2.43)$$

ここで、 P_{O_2} は酸素分子の分圧であり、 x_A は活性サイト割合である。また k_A 、 k_B 、 k_z 、 k_T はそれぞれアレニウス型の反応速度定数であり、式(2.44)~(2.47)により見積もられる。

$$k_A = 20 \exp\left(\frac{-15100}{RT}\right) \quad (2.44)$$

$$k_B = 4.46E - 3 \exp\left(\frac{-7640}{RT}\right) \quad (2.45)$$

$$k_T = 1.51E + 5 \exp\left(\frac{-48800}{RT}\right) \quad (2.46)$$

$$k_Z = 21.3 \exp\left(\frac{2060}{RT}\right) \quad (2.47)$$

OH と NO による Soot 微粒子の酸化反応に関しては、分子運動論に基づく酸化モデルを使用した。OH による酸化は Neoh らにより提唱されており³⁷⁾、その酸化速度式は式(2.48)になり、本モデルでは 30% と定めた。

$$\omega_{OH} = 3\gamma_{OH} [OH] A_{soot} f_n \left\{ \frac{RT}{2\pi M_{OH}} \right\}^{1/2} \quad (2.48)$$

ここで、 γ_{OH} は活性衝突確率(=0.30)であり、 M_{OH} は OH 分子の分子量である。

NO による酸化も同様に分子運動論に基づくこととし、式(2.49)に示す Roth らにより提唱されているアレニウス型の活性衝突確率を用いた³⁸⁾。

$$\gamma_{NO} = 1.82 \exp\left(\frac{-30000}{T}\right) \quad (2.49)$$

Soot 粒子はこれまでに記述した表面反応の進行とともに、粒子間で衝突を起こすことも知られている。衝突による Soot 粒子の挙動は衝突合体過程の凝析、および鎖状凝集過程の凝集といった過程を経ることとなる³⁸⁾。凝析とは微小粒子同士が衝突により合体し、密な衝突過程にて球状に近い衝突後の形態を取るものと理解される。本 Soot モデルでは、対象とした計算セルにおいて、粒子は均一に分布し、衝突前後において粒子は球形を維持し、粒子サイズはセル代表値で取り扱うこととして式(2.50)に示すように Graham らの修正 Smoluchowski 方程式を用いた³⁸⁾。

$$\frac{df_{n,CG}}{dt} = -\frac{6}{5} \kappa \cdot f_v^{1/6} f_n^{11/6} \quad (2.50)$$

$$\kappa = \frac{5}{12} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/6} \left(\frac{6k_B T}{\rho_p} \right)^{1/2} G \cdot C_\alpha \quad (2.51)$$

ここで、 f_v は Soot 微粒子体積割合； k_B はボルツマン定数； G は球状粒子係数 (Spherical Particle Factor = 1.0E-4)； C_α は自己保持粒径分布係数 (Self-preserving Size Distribution Factor = 6.55) となる。

微小粒子は上述した凝析モードによる衝突過程を経て成長するが、ある程度まで成長した時点で球状となるのが難しくなる。しかし、Soot のような炭素質の物体は荷電量によ

るクーロン力が働くため近距離の粒子は凝集する。それらの凝集過程が凝集であり、排気行程以降のみならず膨張行程にも進行していることが知られている³⁹⁾。本 Soot モデルでは、上記凝集による凝集速度式を凝集過程まで式(2.52)に示すように拡張したものを記述した。

$$\frac{df_n}{dt} = -\frac{6}{5}\kappa \cdot f_v^{1/6} f_n^{11/6} \cdot \frac{\pi R_g^2}{\pi d_{cell}^2 / 4} \quad (d_{cell} > d_p) \quad (2.52)$$

ここで、 R_g は凝集粒子群回転半径； d_{cell} は計算格子代表点における出力粒子径； d_p は初期粒子径となる。

上式により、実際に算出される計算格子代表点の粒子径が初期粒子径よりも大きくなっている場合には鎖状凝集した広がりを持った粒子として扱うことで衝突断面積を増加させ、凝集量を増加させる操作を行うこととなる。凝集体衝突断面積には上記回転半径 R_g を使用し、式(2.53)と(2.54)のような過程を経て算出することとした。なお、初期粒子径 d_p 、前因子 k_f 、フラクタル次元 D_f は実測にて求める必要がある。これらの値が不明である場合、初期粒子径 d_p を極端に大きい値に設定することにより、凝集過程をキャンセルすることが可能である。

$$R_g = d_p \left(\frac{n}{k_f} \right)^{1/D_f} \quad (2.53)$$

$$n = \frac{\pi d_{cell}^3 / 6}{\pi d_p^3 / 6} = \left(\frac{d_{cell}}{d_p} \right)^3 \quad (2.54)$$

ここで、 n は凝集粒子群中における初期粒子数である。

第3章 実験結果と考察

本実験においては、BDFの燃焼特性の解明とそれを用いる車両の実走行での利用の両面から、日欧米の実走行モードにおいて使用頻度が高いエンジン運転条件を対象とした。具体的には、量産型エンジンが搭載されている市販車のECU設定値を元に設定した条件をベース条件とし、燃料の燃焼質量割合50% (MFB50)の位置と一致するように噴射時期を調整し、トルク一定法によって測定を行い、Cooled EGR、多段噴射、高圧噴射およびPCCI燃焼において、BDFの使用による燃焼特性および排出ガス特性に与える影響を述べる。さらに、定容容器を用いて高速ビデオカメラにより、BDFの噴霧挙動を撮影し、燃料性状によりディーゼル噴霧に与える影響について考察する。

3.1 エンジンベンチ試験の結果と考察

本研究においては、ジャトロファから作られたBDF燃料(JME)は軽油の代替燃料として実用化されることを想定して、ディーゼル機関の燃焼特性と排出ガスの特性に及ぼす影響を実験により調査した。そのため、第2章に述べた乗用車用量産型ディーゼルエンジンを用いて、トルク一定法により、Cooled EGR、多段噴射、高圧噴射およびPCCI燃焼の実験を行い、JMEの燃焼特性および排出ガス特性を明らかにし、JMEの使用における最適運転条件を導いた。

3.1.1 燃料種の違いによる通常燃焼と排出ガス特性に与える影響

JMEの実用可能性を調査するため、量産エンジンが搭載されている市販車のECU設定値を元に設定した実車走行に相当する条件をベース条件とし、燃料の燃焼質量割合50% (MFB50)の位置と一致するように噴射時期を調整し、トルク一定法によってエンジン実験を行い、燃費と排出ガスの測定を行った。

a) 7ポイント実験結果および考察

エンジン回転数、負荷の異なる幅広い条件において燃料の違いが燃焼・排出ガス特性に及ぼす影響を調査するため、NEDCモードとUS06モードにおいて使用頻度の高い運転条件を7点抽出し、定常運転状態での燃焼圧力、熱発生および排出ガスを測定した。これら

の運転条件はこのエンジンが搭載されている市販車で使用条件を元に設定した。低、中負荷が主な対象となる NEDC モードを代表するポイント(No.1~5)ではパイロット噴射を含む2段噴射を、また高負荷が主な対象となる US06 モードを代表したポイント(No.6,7)では単段噴射を行っている。これらの条件の詳細は第2章の表 2.7 に示したとおりである。

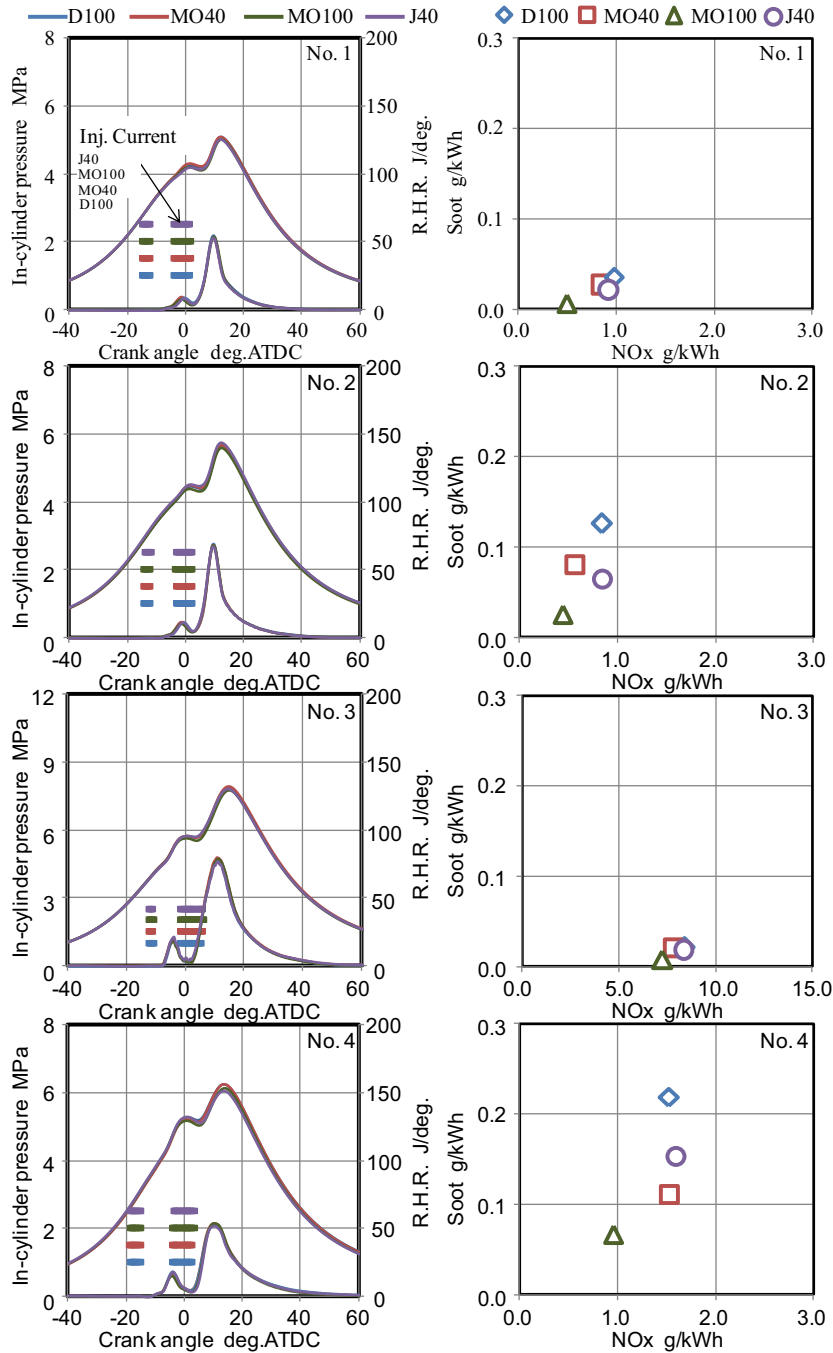


図 3.1 各燃料における 7 ポイントでの燃焼特性および Soot と NOx の排出特性(No.1-4)

図 3.1 に示す各多段噴射の運転条件 (No.1~4) および図 3.3 に示す各単段噴射の運転条件 (No.6 と 7) における各燃料の燃焼圧力と熱発生履歴は各燃料の結果を比較すると、燃料の違いによる影響がほとんど見られなかった。しかしながら、図 3.3 (No.5) に示す運転条件において、含酸素燃料 (MO40, MO100 と J40) ではパイロット噴射による燃焼が促進されていることが明らかである。これは、より低温かつ高当量比の条件において、含酸素燃料の方が軽油 (D100) によりも燃焼反応が促進されるものと考えられる¹⁾。

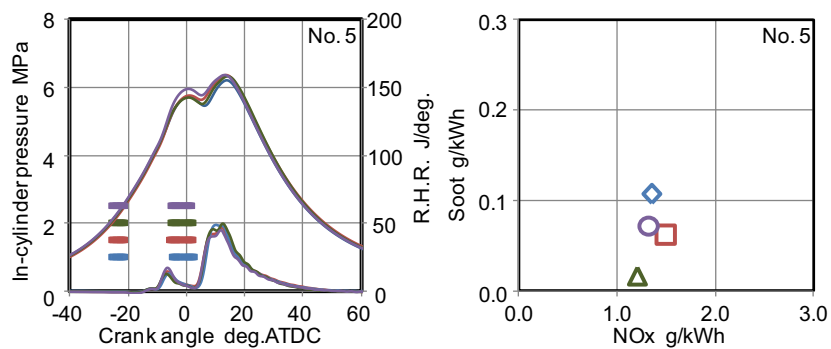


図 3.2 各燃料における 7 ポイントでの燃焼特性および Soot と NOx の排出特性 (No.5)

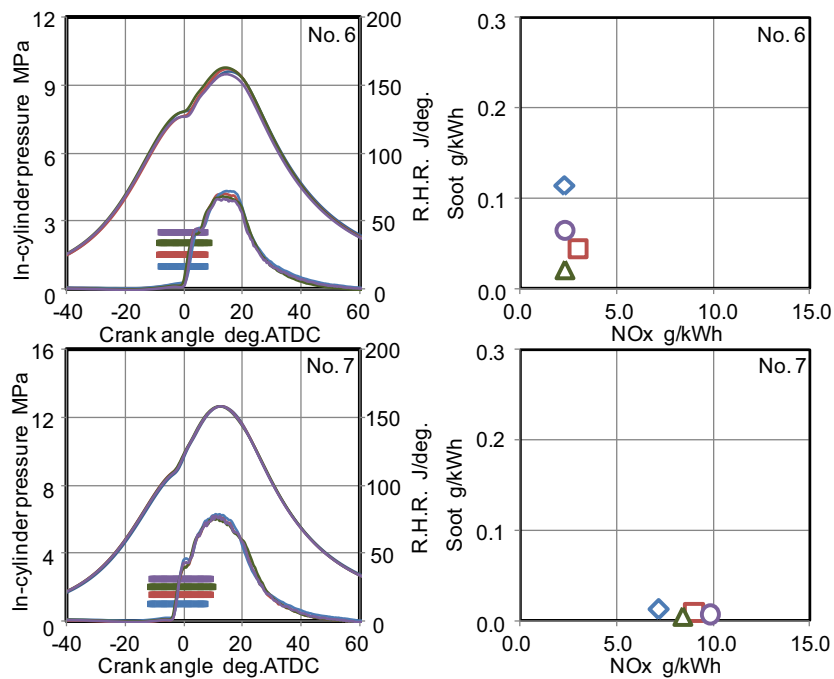


図 3.3 各燃料における 7 ポイントでの燃焼特性および Soot と NOx の排出特性 (No.6-7)

次に、各条件における Soot 排出については、含酸素燃料を使用した場合、すべての条件において大幅に減少することがわかった。これは、含酸素燃料であるため、燃焼領域での局所的当量比が減少し、Soot の生成が抑えられ、酸化も促進されたためであると考えられる²⁾。また、MO は Soot 生成の要因となる芳香族成分を含まないことも原因しているものと推察される。

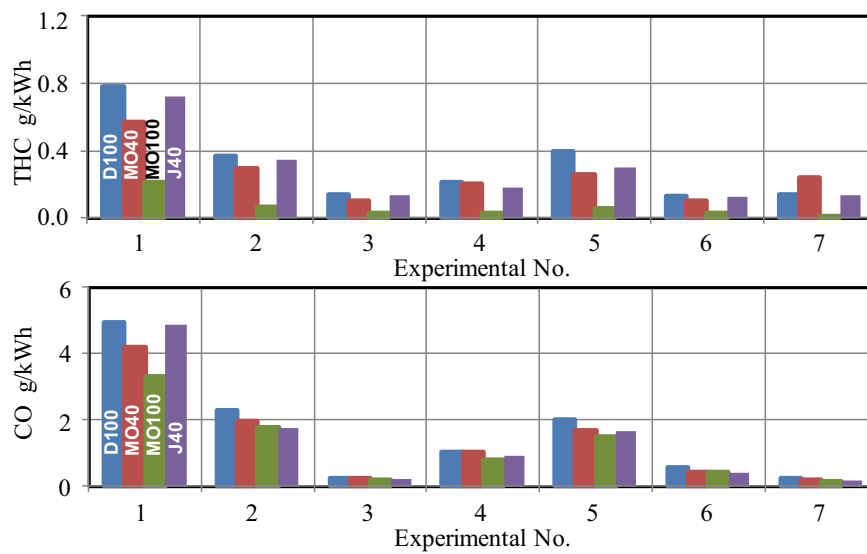


図 3.4 各燃料における 7 ポイントでの未燃成分 (CO と THC) の排出特性

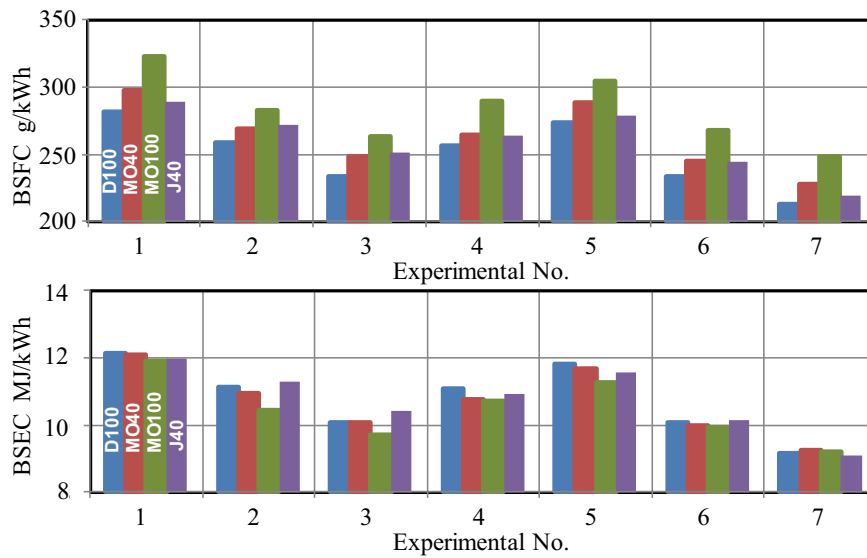


図 3.5 各燃料における 7 ポイントでの燃費特性

また、低回転速度で高 EGR 率の条件(No.1~No.5)において、含酸素燃料の NOx の排出量が減少する傾向が認められた。これは、含酸素燃料において、パイロット噴射により燃焼が促進され、その後の主燃焼が緩和され、燃焼温度の低減効果がもたらされるものと推測され、それにより NOx が低減されるものと考えられる³⁾。

MO40 と J40 の 2 つ燃料を比較すると、燃焼と排出ガス特性がほとんど一致していることがわかった。

図 3.4 に THC, CO の排出量の結果を示す。含酸素燃料を使用した場合、THC と CO に関しては排出量が減少している。これは、含酸素燃料では燃焼領域における局所的当量比が減少することが未燃成分低減する原因であると推測される。

また、図 3.5 に燃費の結果を示すが、含酸素燃料では正味燃料消費率(BSFC)が D100 より若干高くなっているものの、これは低発熱量が低いためであり、正味エネルギー消費率(BSEC)として求めた燃費としては悪化が見られなかった。特に MO100 の場合においては、燃費の改善がみられた。これは含酸素燃料では燃焼反応が促進されることにより、燃焼効率が上昇し、未燃成分の排出も減少し、燃費が改善されるためと考えられる。

表 3.1 7 条件の各モードにおける加重平均

Exp. No.	Engine speed rpm	Torque Nm	BMEP kPa	Load rate %	Weight average (NEDC) %	Weight average (US06) %
1	1500	50	291	16	44.9	5.0
2	1500	72	411	25	32.3	2.6
3	1500	160	916	55	9.0	23.8
4	2000	100	570	30	3.4	2.6
5	2500	90	515	25	7.6	6.2
6	2500	200	1136	60	2.7	38.0
7	2500	270	1539	80	0.1	21.8

さらに、BDF の使用した際、各モードにおける排出ガスと燃費に与える影響を調査した。本研究においては、使用した動力計の特性により、定常試験のみを行ったが、7 条件における定常条件での結果をもとに、NEDC および US06 モードの加重平均を算出し（表 3.1 に示す）、排出ガスと燃費に与える影響を算出した。低負荷運転が中心になる NEDC モードにおける結果を図 3.6 に示す。この結果から、含酸素燃料の使用によりすべての排出ガ

スの低減が見られ、燃費が改善することが分かった。また、高負荷運転が中心になる US06 モードにおける結果を図 3.7 に示す。この結果から、排出ガスに関しては NEDC モードと同様の結果が得られたが、燃費の改善が見られなかった。

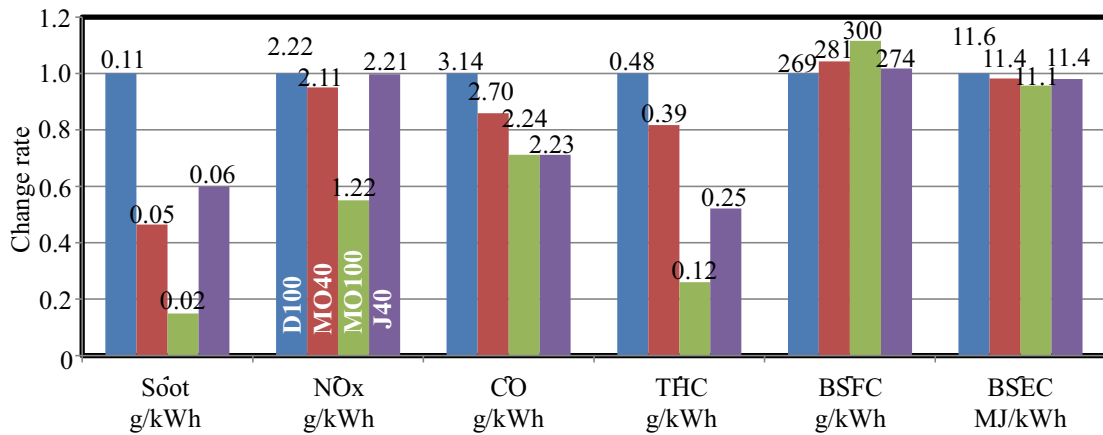


図 3.6 NEDC モードにおける燃料による影響

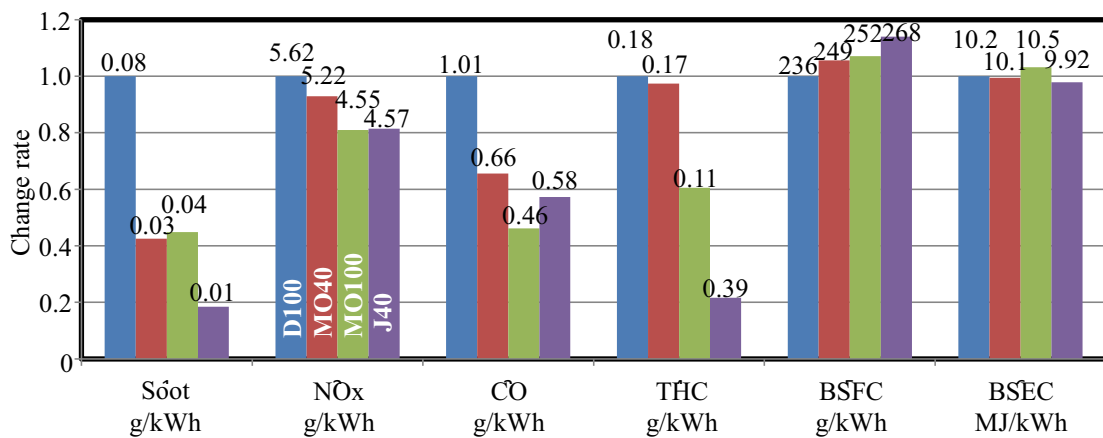


図 3.7 US06 モードにおける燃料による影響

b) マップ実験の結果と考察

次に、BDF の実用化に当たって、幅広い運転領域で各燃料の燃焼特性と排出ガス特性を調査する必要がある。そこで、欧州及び米国の認証モードで使用頻度が高い点を含む格子状の評価ポイントとして、第 2 章の表 2.8 に示したように、多段噴射と単段噴射の両方含む回転数 1250rpm~3500rpm, 負荷 50Nm~160Nm 計 30 ポイントを対象とし、上述の方法で定常エンジンベンチ試験を実施した。

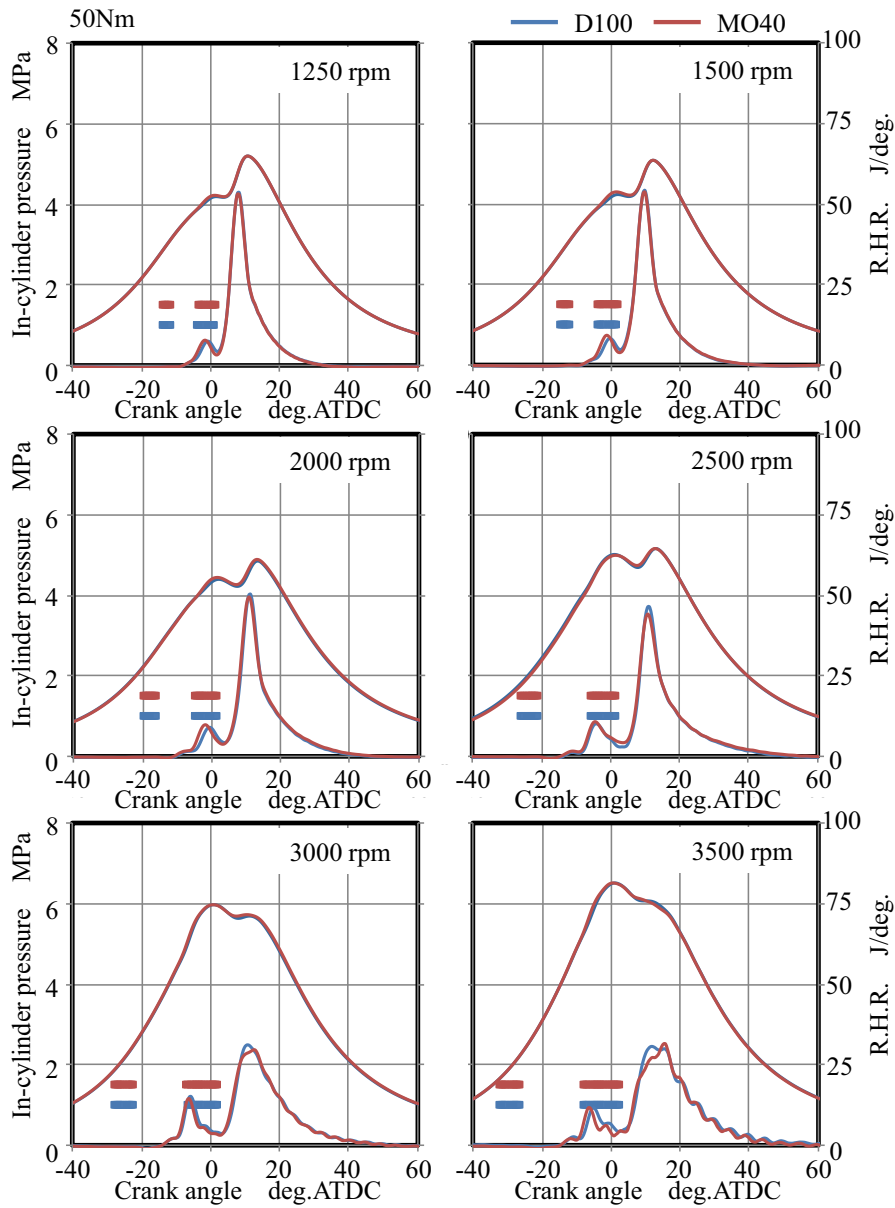


図 3.8 各燃料における燃料特性（トルク：50Nm，回転数：1250~3500rpm）

条件が多いため，ここで，燃料は D100 と MO40 を使用した．また，トルク一定法により，MO40 の場合において，低発熱量が低いため，燃料噴射量を増加している．その際，パイロット噴射量において両燃料が一致するように設定し，メイン噴射量のみ増加している．

図 3.8~図 3.12 に，回転数 1250rpm~3500rpm，負荷 50Nm~160Nm 計 30 ポイント条件において，負荷別で回転数変化での燃焼特性を示した．ここで，図 3.8~図 3.10 では，低・

中負荷条件であり、パイロット噴射条件での燃焼特性の結果を示している。図 3.11 は、中負荷条件の結果を示すが、低・中回転数の条件（1250～3000rpm）ではパイロット噴射を、高回転条件（3500rpm）では単段噴射を行っている。図 3.12 は、高負荷条件であり、低回転数条件（1250～1500rpm）ではパイロット噴射を、中・高回転条件（2000～3500rpm）では単段噴射での燃焼特性の結果を示している。

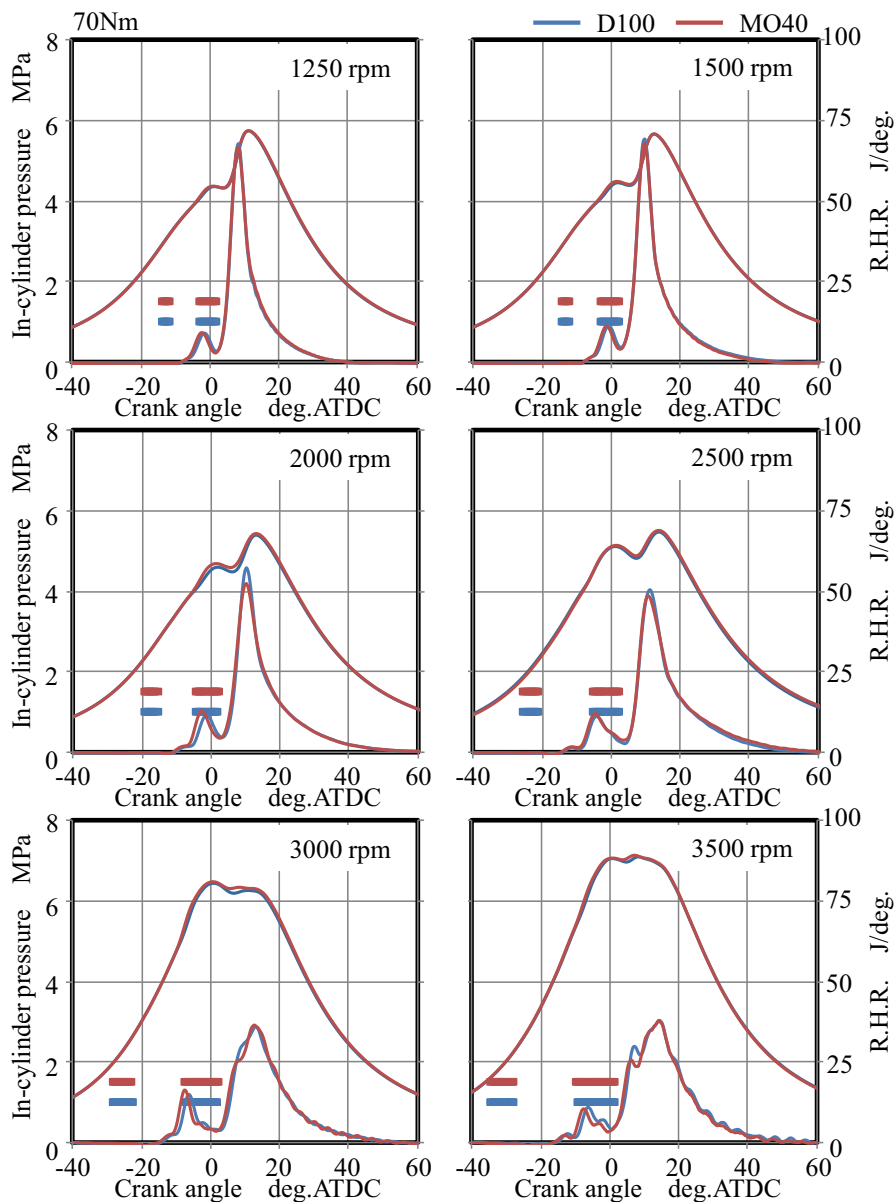


図 3.9 各燃料における燃料特性（トルク：70Nm，回転数：1250～3500rpm）

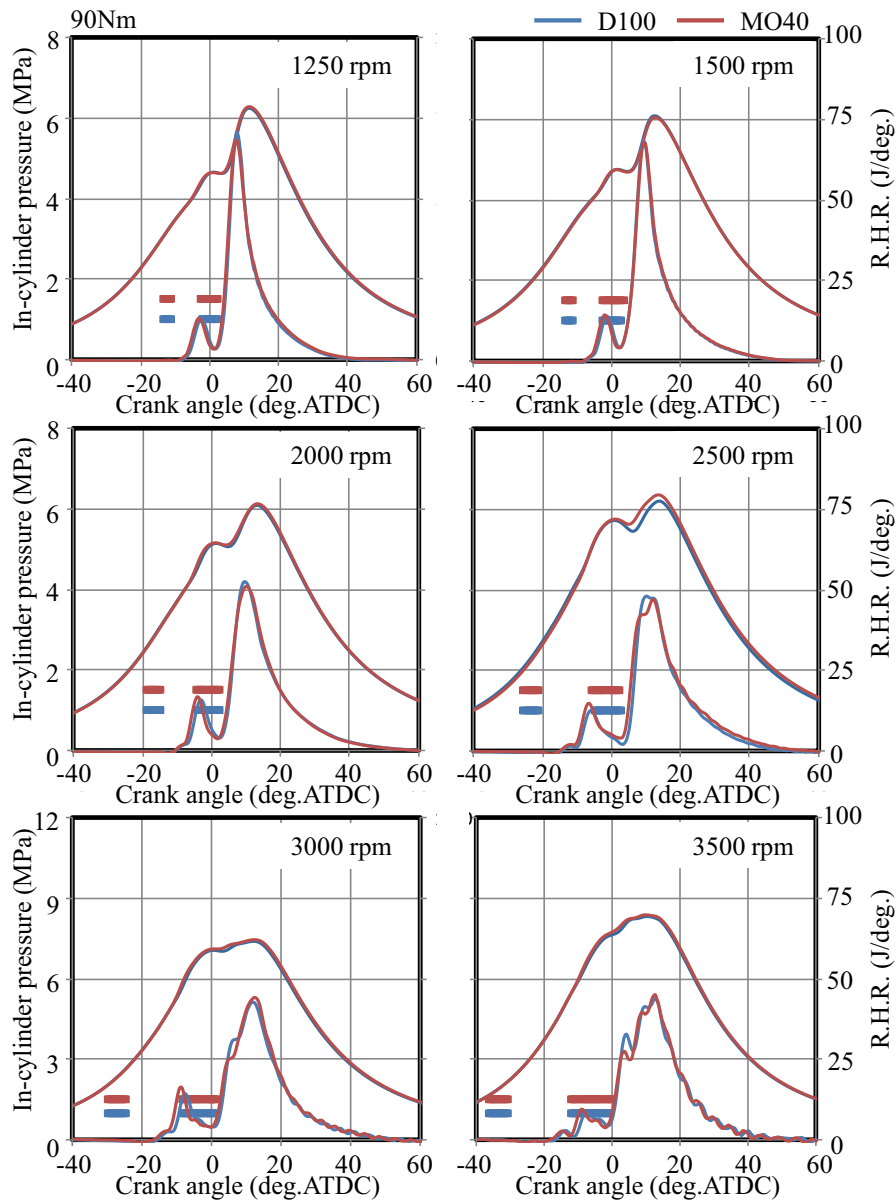


図 3.10 各燃料における燃料特性（トルク：90Nm，回転数：1250~3500rpm）

すべてのパイロット噴射を行う負荷条件において、燃料種の違いにより燃焼圧力に与える影響が見られなかったが、熱発生率を比較すると、含酸素燃料ではパイロット噴射により燃焼が促進されており、高回転数においてはその効果が一層明らかになった。これらの結果から、各条件において含酸素燃料は低温での酸化反応を促進することが原因であると推測される。

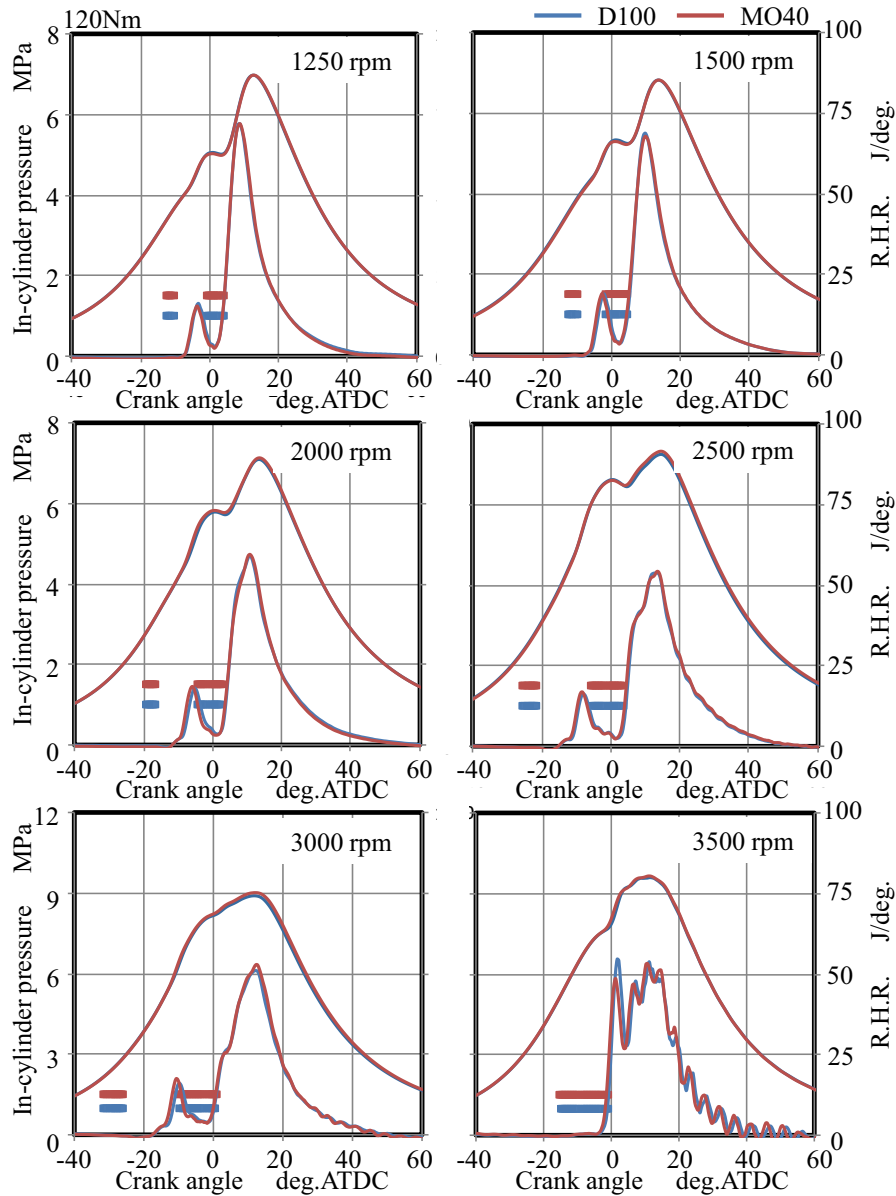


図 3.11 各燃料における燃料特性（トルク：120Nm，回転数：1250~3500rpm）

一方，すべての単段噴射の条件において，燃焼圧力および熱発生率については燃料種の違いによる影響が極めて少ないことが分かった．各燃料において MFB50 の位置を一致するように調整したことにより，燃焼率の重心位置が一致している．また，単段噴射の条件は高回転・高負荷条件であり，高噴射圧・高過給圧の条件であるため，燃料のセタン価により着火遅れに与える影響が少なくなる傾向が認められる．

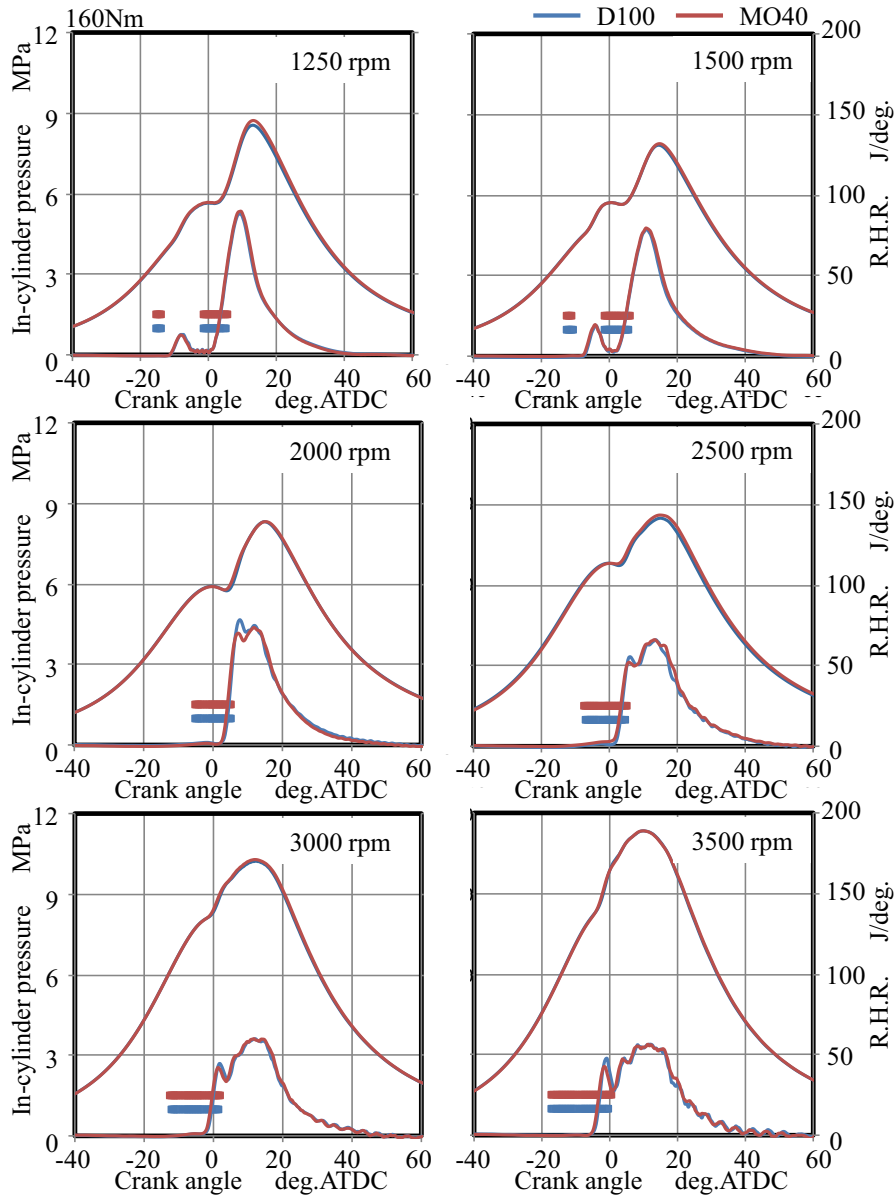


図 3.12 各燃料における燃料特性 (トルク : 160Nm, 回転数 : 1250~3500rpm)

図 3.13~図 3.16 は、燃料の違いによる排出ガスに与える影響を、図 3.17 は燃焼の違いによる燃費に与える影響をそれぞれ調査した結果を示している。図 3.13 では、両燃料とも同様の Soot の排出傾向が見られ、低回転・中負荷の条件において Soot の排出量が多い領域があり、これを中心として環状形に低下していることがわかる。また、MO40 の方が、D100 よりも全体的に排出量が少なくなっていることが明らかである。特に、排出量が最も多い低回転・中負荷条件において減少が著しくなっている。これは、MO40 中の酸素成分により、局所的当量比が低下し、Soot の生成が減少するためと考えられる。

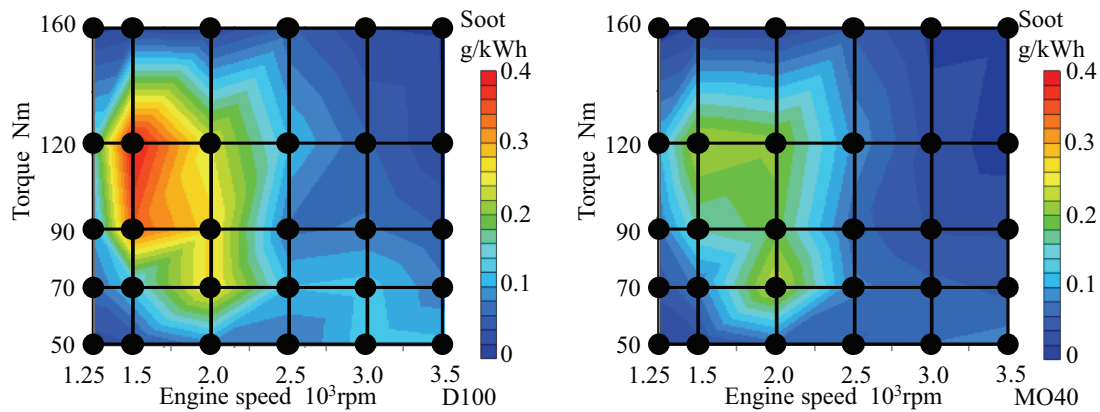


図 3.13 各燃料における排出ガス特性 (Soot)

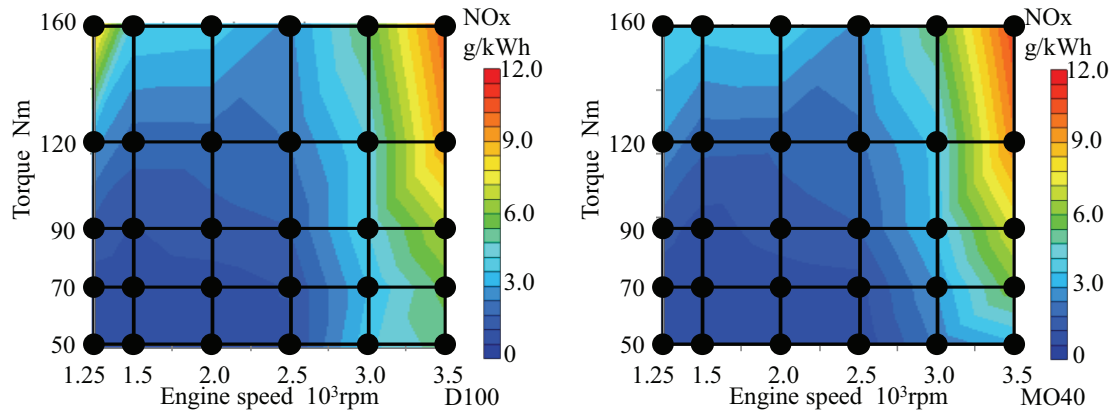


図 3.14 各燃料における排出ガス特性 (NOx)

図 3.14 に示すように、マップ上においては、両燃料の NOx の排出傾向が似ており、高回転・高負荷になるほど NOx の排出量が増加することがわかる。全体として、MO40 の使用により NOx の排出の悪化は見られなかった。また、低回転・高負荷の条件において NOx の排出の改善が見られる。これは、MO では、低回転条件において Cooled EGR により燃焼温度が低下するとともに、パイロット噴射によって着火がより促進され、さらに燃焼温度を低減し、NOx の排出が低減されるものと推測される。また、Soot の排出は局所的な当量比による影響が大きい一方、NOx は、局所的当量比よりも燃焼温度による影響が大きいものと考えられる⁴⁾。

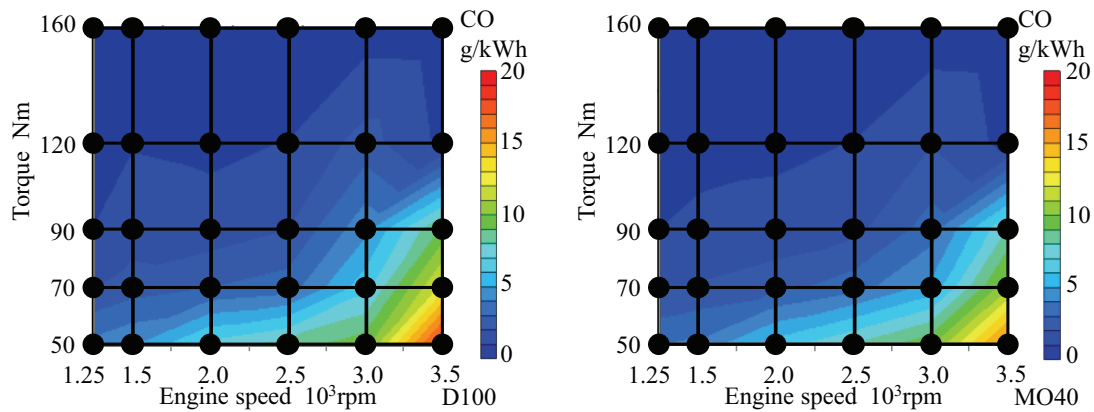


図 3.14 各燃料における排出ガス特性 (CO)

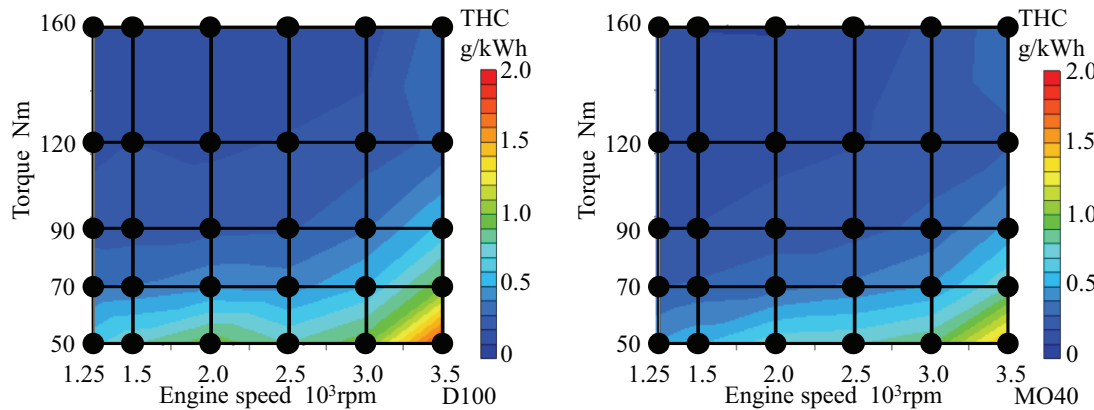


図 3.15 各燃料における排出ガス特性 (THC)

図 3.14 と図 3.15 は、それぞれ未燃成分 (CO と THC) の排出特性を示している。これらのマップから、両燃料の排出傾向が類似していることが明らかである。また、すべての低負荷の条件において、MO40 の使用により、未燃成分の排出が少ないことがわかる。特に、高回転・低負荷の条件においてはその減少が著しくなっている。これは、MO40 の酸素成分により、局所的当量比が減少することが一因と考えられる。また、高回転において燃料と空気の混合時間が短くなり、混合が不十分となり局所的に燃料過剰な領域が増加するが、MO40 の酸素成分により、未燃成分の酸化を促進されるものと推察される。

図 3.17 に示すように、両燃料の燃費 (BSEC) 特性については、マップ上でほぼ同様の傾向となっていることが分かった。また、MO40 の使用により、高回転・低負荷 (3500rpm, 50Nm) の条件を除き、燃費の悪化は見られなかった。しかしながら、高回転・低負荷の条

件では, MO40の方が未燃成分が少なく, SootとNOxの排出量はほぼ同等であることから, 燃焼効率が増加しているものと考えられる. これに対して, 燃費の悪化は燃焼以外の原因が考えられる.

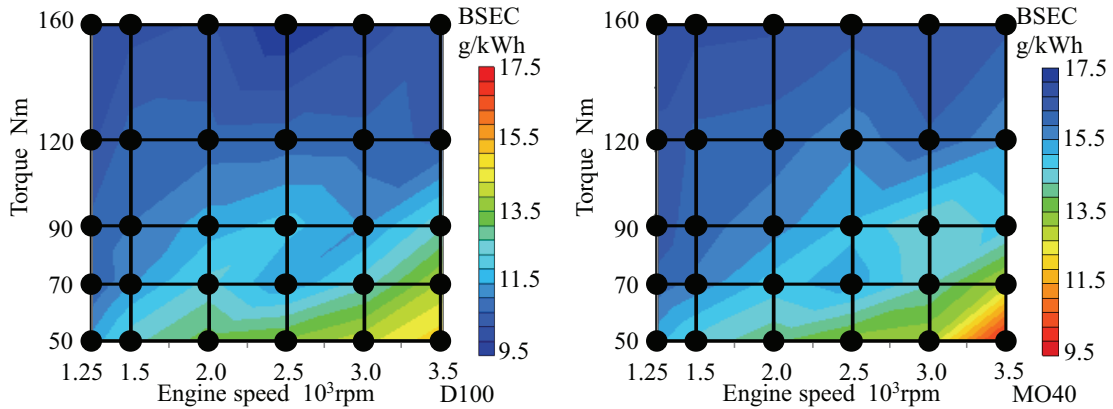


図 3.17 各燃料における燃費特性

さらに, BDF の使用が各モードにおける排出ガスと燃費に与える影響を調査した. 30 条件において, NEDC および US06 モードの加重平均を算出することで排出ガスと燃費に与える影響を算出した. 図 3.18 は低負荷運転が中心になる NEDC モードにおける結果を, 図 3.19 は高負荷運転が中心になる US06 モードにおける結果をそれぞれ示す. すべての結果は7条件と同様な傾向が見られた.

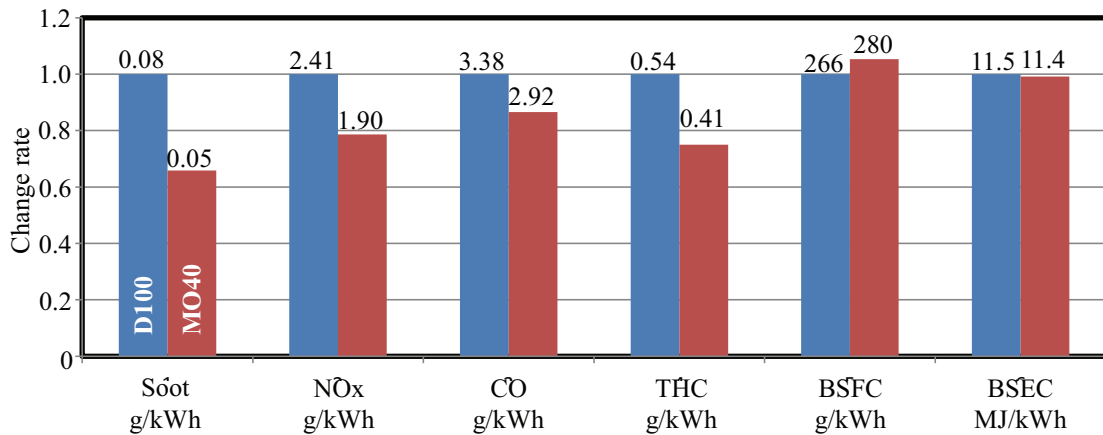


図 3.18 NEDC モードにおける燃料による影響

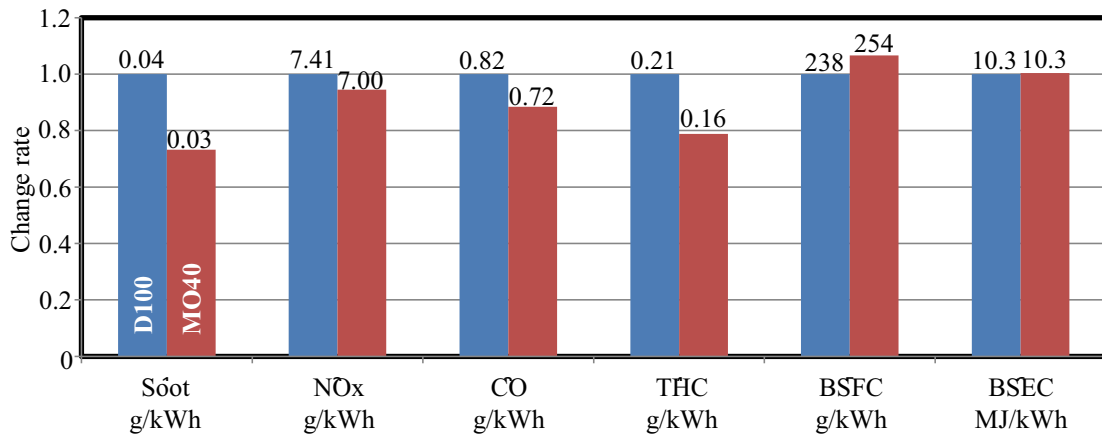


図 3.19 US06 モードにおける燃料による影響

c) まとめ

本実験から、含酸素燃料は、広い運転範囲においてディーゼルエンジンの設計と制御と同等の条件で運転が可能なが確認された。また、パイロット噴射により燃焼が促進され、広い運転領域において、NOx の排出量を維持しながら Soot の排出量を大幅に低減でき、さらに燃費を悪化せずに、未燃成分の排出量が低減されることが確認された。

3.1.2 高圧噴射における燃料種の違いが燃焼・排出ガス特性に与える影響

近年、ディーゼルエンジンにおいて、特に低負荷条件を中心に高圧噴射によって燃料噴霧の微粒化を促進し、燃料と空気の混合を速めることで予混合的な燃焼を実現して、Soot の排出を大幅に低減する方法が注目されている。一方、燃焼温度の上昇によって NOx が増加することや急激な燃焼によって圧力上昇率が増加し振動・騒音の増加を招くことが問題となっている。そこで、BDF を使った際の高圧噴射の影響を調査した。その運転条件は第2章の表 2.10 に示したとおりである。ここでは、ディーゼルエンジンの運転領域において使用頻度が最も高い低回転・低負荷（回転数：1500rpm；トルク：72Nm；負荷率：25%）の条件を選択した。また、通常の噴射圧 73MPa をベース条件とし、160MPa までに増加した条件で実験を行い、D100 と J40 を比較した。

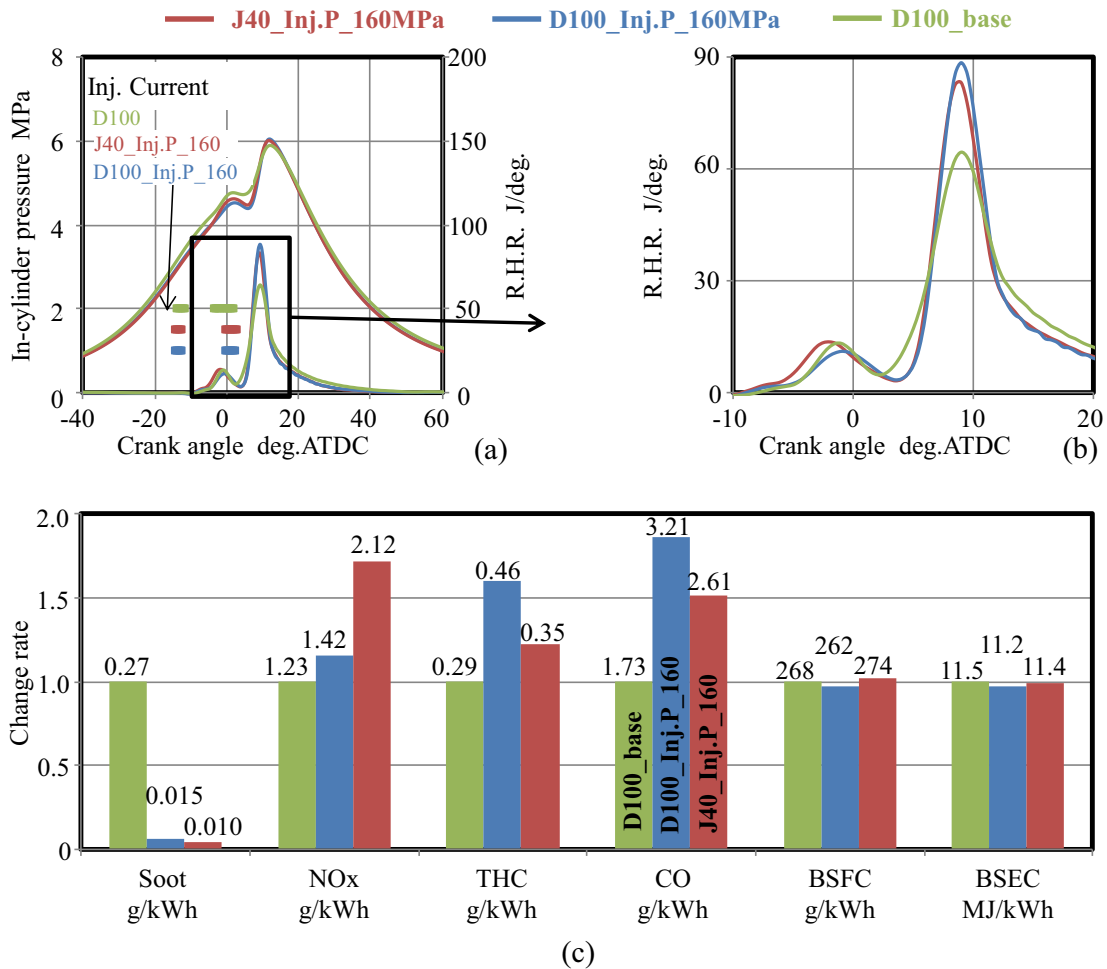


図 3.20 各燃料における高圧噴射による影響

図 3.20(a)に示したように、高圧噴射によって両燃料ともに噴射期間が短縮し、噴霧の微粒化が促進されて、主燃焼は予混合的な燃焼となり、圧力上昇率の増加する傾向が見られた。しかしながら、燃焼圧力については燃料種の違いによる影響がほとんど認められなかった。一方、図 3.20(b)に示すように、高圧噴射においても含酸素燃料はパイロット噴射による燃焼を促進することができることが分かった。これによって、燃焼が促進され、Soot の排出量が大幅に減る一方、NOx の排出量が増加する傾向が見られる(図 3.20(c))。これは、含酸素燃料による Soot の酸化が促進するとともに、燃焼温度が上昇することが NOx の排出量の増加の原因と考えられる。また、予混合燃焼と同時に希薄な混合気が増えて未燃成分が増加する傾向となっている。J40 の場合、含酸素燃料であるため、局所的な酸素濃度がより高いため燃焼が促進され、D100 より未燃成分が少なくなる一方、燃焼温度がより高

くなり、NO_xの排出量が大幅に増加することがわかった。また、高圧噴射により、燃焼が促進されるため、燃焼効率は上昇し、燃費が改善される結果となった。

3.1.3 高 EGR 率における燃料種の違いが燃焼・排出ガス特性に与える影響

通常のディーゼルエンジンでは、多量 Cooled EGR の適用により、NO_x の排出が大幅に低減できる反面、燃費の悪化や PM 排出の増加が避けられないことが課題とされている。その対策として JME を使用することで、それらを改善することが期待される。

a) 高 EGR 率において J40 による影響

ディーゼルエンジンの運転領域において使用頻度が最も高い低回転・低負荷（回転数：1500rpm；トルク：72Nm；負荷率：25%）の条件を選択し、36%という高い EGR 率とした。これにより、さらに高い EGR 率(42%)条件と EGR がなしに近い条件(2%)において、比較実験を行った。

その結果、図 3.21(a)に示すように、ベース条件に比べて、低 EGR 率では当量比が低いいため、両燃料においてパイロット噴射により燃焼が促進され、燃料種の違いによる影響がほとんど見られなかった。一方、高 EGR 率の条件では、J40 を使用することで、パイロット噴射による燃焼はベース条件とほぼ同等であり、かつ D100 より主燃焼が促進されることが分かった。ここで、図 3.21(b)に示すように、より希薄な条件では、熱発生と排出ガスに関しては燃料種の違いによる影響がほとんど見られなかった。これは、シリンダー内が全体的に希薄な状態であり、燃料中の酸素成分が局所的な当量比に与える影響はほとんど無視できるためと考えられる。J40 を使用する場合では、より過濃な条件において、燃料中の酸素成分により、局所的な当量比が小さくなり、パイロット噴射による燃焼が促進することが分かった。また、より低温で過濃な条件においては、含酸素燃料が着火しにくくなるものと推察される。これにより、図 3.21(c)に示すように、J40 では、EGR 率が高い場合でも D100 のベース条件に比べて、Soot と NO_x の排出量は同時に低減し、THC も少なくなっている。

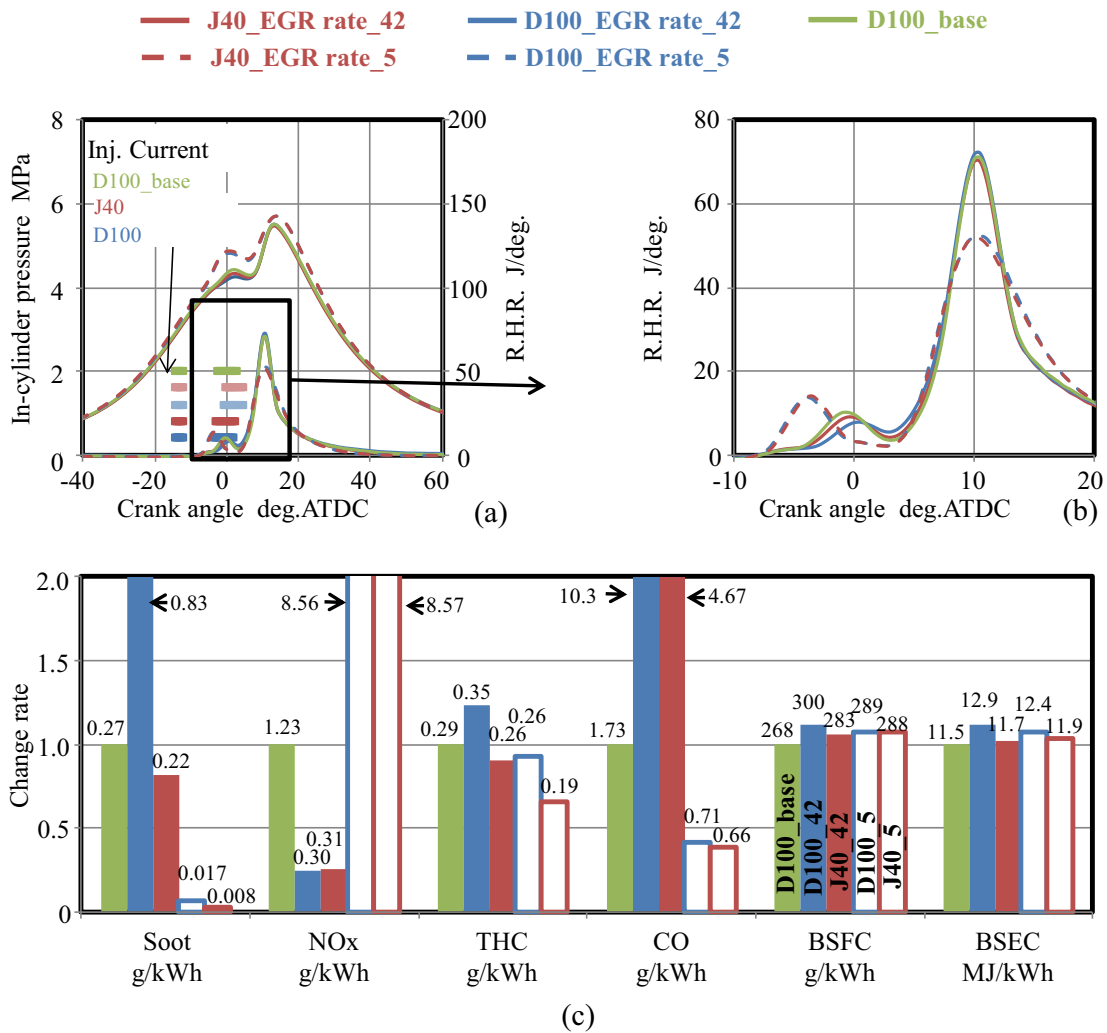


図 3.21 各燃料における EGR 率による影響

b) EGR 率の変化における MO40 による影響

含酸素燃料による EGR 率の影響を明らかにし、その最適な EGR 条件を見出すため、量産型エンジンにおける ECU 設定の条件で燃料種による違いが顕著に見られる条件として中回転・中負荷（回転数：2000rpm；トルク：100Nm）を選択して実験を行った。具体的には、第2章の表 2.9 に示す条件を用いて、D100 と MO40 について吸入新気量のコントロールにより EGR 率を 0 から 30 までに変化させた。

その結果、図 3.22 に示すように、EGR 率の変化によって燃料の違いが燃焼特性に与える影響が極めて少ないことがわかった。

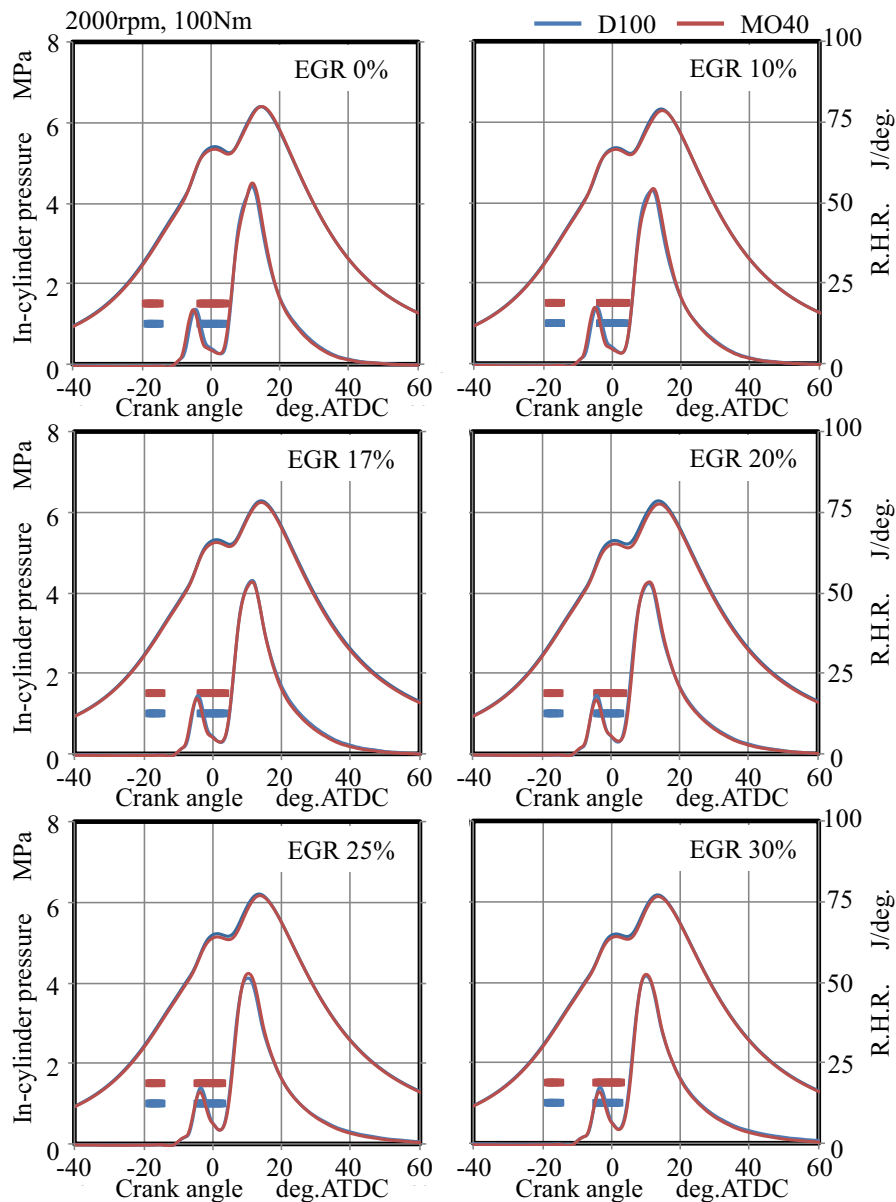


図 3.22 各燃料における EGR 率による燃料特性に与える影響

図 3.23 に EGR 率の変化に対する燃料の違いによる Soot と NO_x の排出に与える影響を示す。この図から、Soot の排出量については、全ての EGR 率の条件において、MO40 の方が少ないことが分かる。特に、EGR 率が高くなるほど、低減率が増大する傾向が認められる。また、EGR 率が低い場合、MO40 の場合 NO_x の排出量が多くなる一方、EGR 率が高くなると NO_x の増加率が減少し、D100 に比べて NO_x の排出量が少なくなることが分かる。これは、燃料の違いにより燃焼温度の増加する効果と比べ、多量の Cooled EGR により、燃焼温度の下がる効果の方が NO_x の排出量に与える影響が大きいためと考えられる⁵⁾。

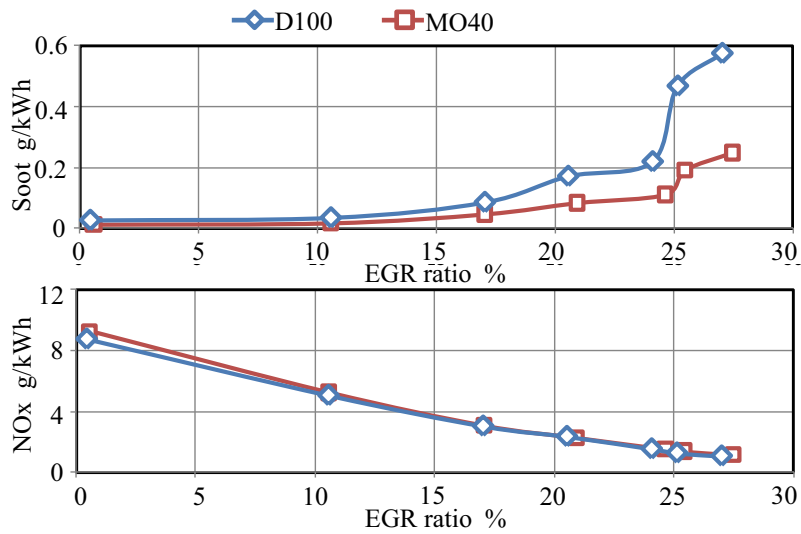


図 3.23 各燃料における EGR 率による排出ガス特性に与える影響 (Soot と NOx)

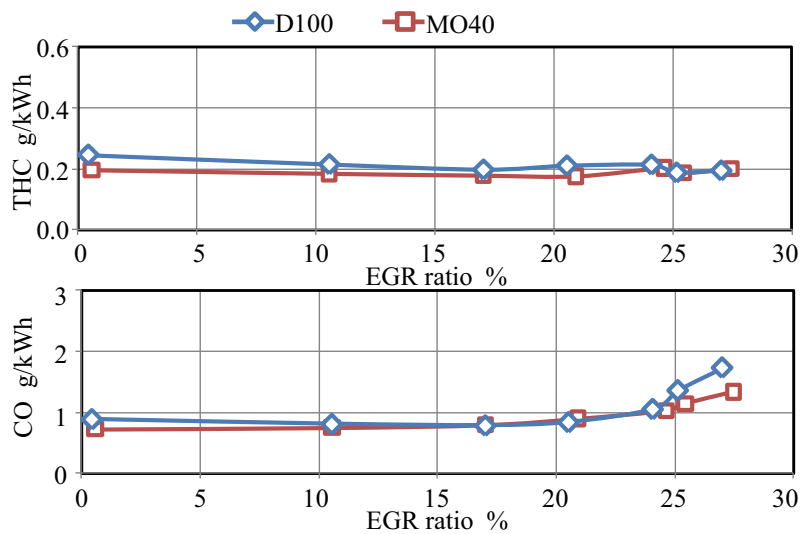


図 3.24 各燃料における EGR 率による未燃成分 (CO と THC) の排出に与える影響

図 3.24 より、低 EGR 率の場合、MO40 の方が THC の排出量が少ない一方、高 EGR 率では、燃料の違いによる THC の排出量に与える影響がほとんどないことが分かる。また、いずれの燃料も EGR 率の増加により CO の排出量が増加するが、MO40 の方が D100 よりも排出量が少なくなることが確認された。このことから、含酸素燃料は D100 に比べて、より高い当量比において燃焼が促進され、燃焼効率が向上するものと判断される。

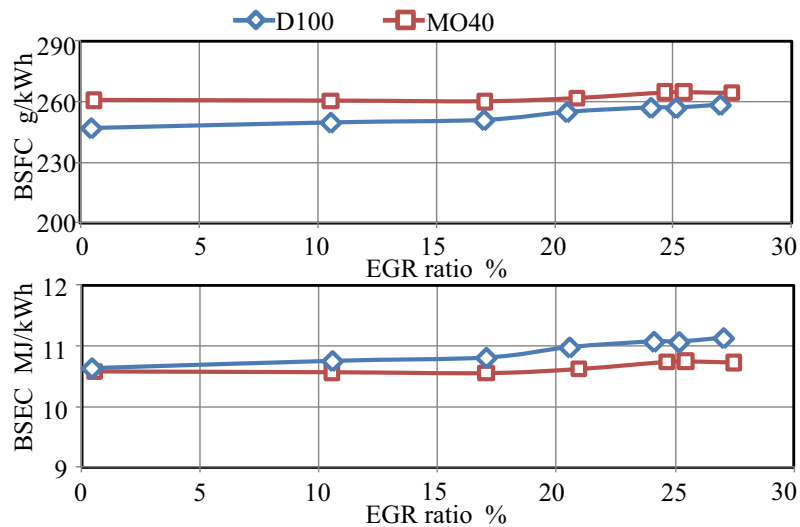


図 3.25 各燃料における EGR 率による燃費に与える影響

図 3.25 に EGR 率変化における燃料の違いが燃費に与える影響を示す。D100 では、EGR 率の増加につれて燃費の悪化が見られるが、MO40 では、EGR 率の変化が燃費に与える影響が極めて少ないことが分かる。また、低 EGR 率の場合、D100 と MO40 の燃費がほぼ一致している。一方、高 EGR 率の場合、MO40 の方が燃費がよくなっている。これは、高 EGR 率条件において、MO40 の燃焼効率が高くなっていることが原因と考えられる。

c) まとめ

含酸素燃料の使用によって、NO_x の排出を低減するのが本来の目的である多量 Cooled EGR を適用した際に増加する Soot の排出を抑えながら NO_x の大幅な低減が可能でことが確認された。またその際、軽油よりも燃焼効率が向上するため、未燃成分の排出が低減し、燃費の改善も同時に実現できることが分かった。

3.1.4 燃料種の違いによる PCCI 燃焼および排出ガス特性に与える影響

一般的な PCCI 燃焼は、多量 EGR により NO_x の排出を低減し、早期噴射で燃料の予混合を促進して Soot の排出を低減することを狙いとしている。しかしながら、早期噴射による場合、着火時期のコントロールが難しく、急激な燃焼によって発生する騒音・振動の制御が困難となる。そこで、本研究では、早期噴射をせず、上死点近辺で高圧噴射し、高スワール比によって予混合を促進することで PCCI 燃焼を実現する方法を採った。

a) 燃料種の違いによる PCCI 燃焼に与える影響

本実験では、D100 と J40 を用いて、単段噴射として噴射圧を 160MPa に設定し、ベース条件（回転数：1500rpm；トルク：72Nm）で MFB50 の位置を一致するように噴射時期を調整して比較実験を行った。

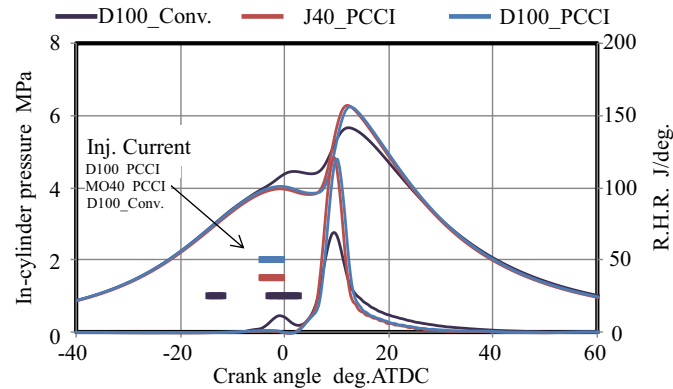


図 3.26 各燃料が PCCI 燃焼特性に与える影響

その結果、図 3.26 に示すように、J40 においても、D100 と同様に予混合時間（噴射終了後から燃焼質量割合 5%までの時間と定義する）が長くなり PCCI 燃焼が生じていることが確認された。J40 では着火がわずかに早まるのは、セタン価が D100 より高いことが理由と考えられる。

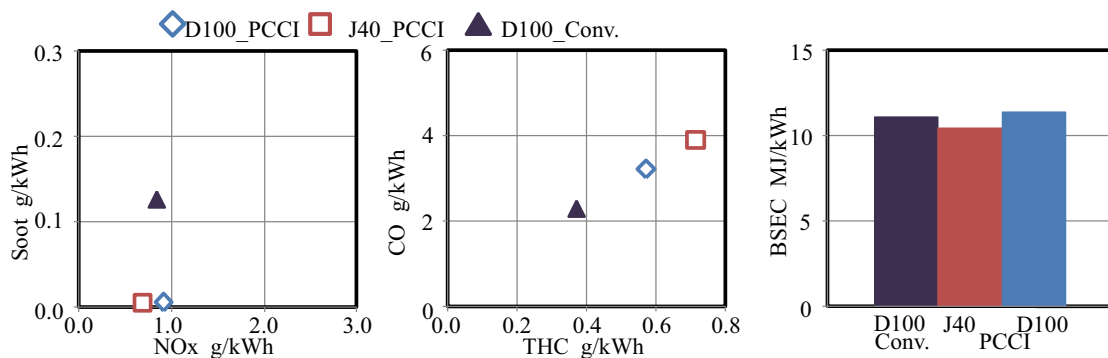


図 3.27 各燃料が PCCI 燃焼における排出ガスと燃費に与える影響

図 3.27 に各燃料の PCCI 燃焼時の各排出ガス及び燃費の特性を示す。排出ガスに関しては、いずれの燃料も PCCI 燃焼によって NOx の排出量を一定に保ちながら Soot の大幅な低

減が可能なが分かる。また、燃焼の予混合低温化と急激な燃焼の効果により、J40 においては NOx の排出量は従来の拡散燃焼を主体とするディーゼル燃焼とほぼ同等となることが確認された。また、未燃成分 (CO と THC) に関しては、燃料によらずディーゼル燃焼(D100_Conv.)と比べて増加する傾向が認められた。一方、図 3.20 に示したように、未燃成分は、ディーゼル燃焼では、含酸素燃料の方が D100 より減少する傾向があるが、PCCI 燃焼では、J40 の方が D100 よりも増加する傾向がある。これは、すべての含酸素燃料が軽油に比べて沸点が高く、蒸発性が悪いため、より低温で低密度場に高圧噴射されることによって噴霧の到達距離が増大し、壁面に付着する燃料が増加し、未燃成分が増加するためと考えられる⁶⁾。なお、その場合でも燃費の悪化が見られなかった。

b) 燃料種の違いにおける噴射圧の変化が PCCI 燃焼に与える影響

3.1.3 節に述べたように、D100 においては高圧噴射の効果が明らかである一方、含酸素燃料においては高圧噴射のメリットは極めて少ないことが分かった。そこで、噴射圧を 50MPa, 73MPa, 120MPa と低減し、第2章の表 2.12 に示した条件を用いて、D100 と J40 を用いて PCCI 燃焼に与える影響を比較調査した。

その結果、図 3.28 に示すように、燃料種の違いによる燃焼圧力に与える影響が極めて少ないことが分かった。また、噴射圧が 160MPa の条件で見られた J40 の着火進角がこの3つの条件では認められなかった。

従来研究において、PCCI 燃焼が低温酸化反応と高温燃焼反応という2段燃焼反応となることが説明されている⁷⁾。そこで、燃料種の違いにおける PCCI の着火と燃焼に与える影響を詳しく調査するため、図 3.28 に示す熱発生率のグラフに領域(a) (クランク角度：-10～0deg.ATDC；熱発生率：0～5J/deg.) と領域(b) (クランク角度：0～10deg.ATDC；熱発生率：0～20J/deg.) を図 3.29 に拡大して示す。

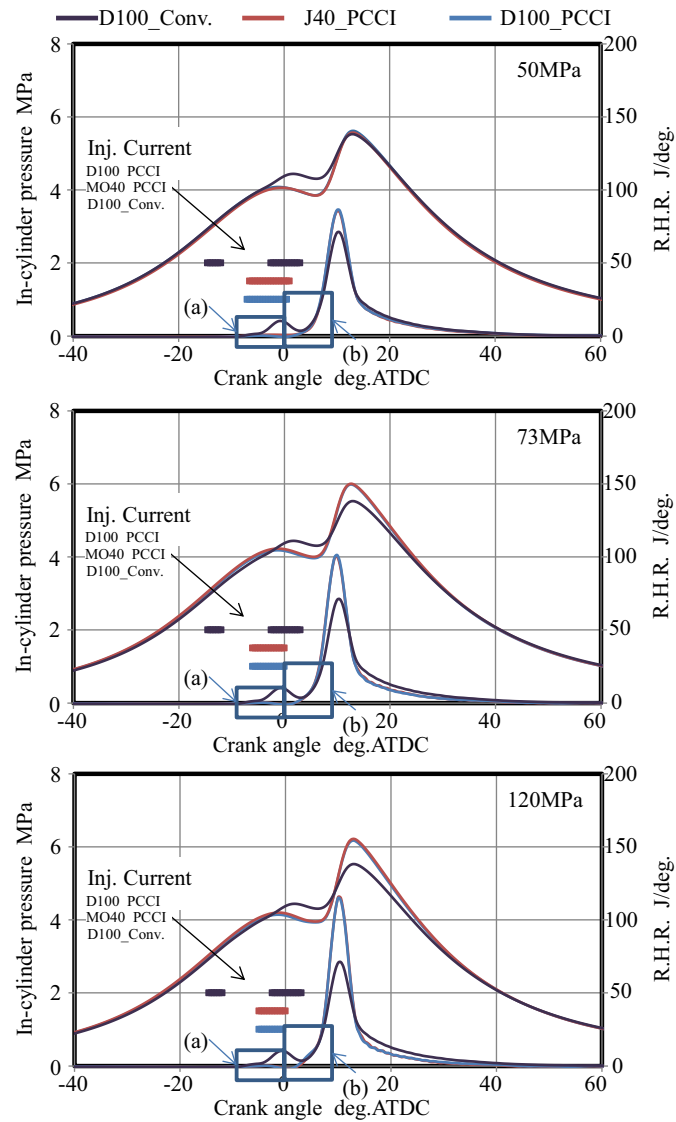


図 3.28 各燃料における噴射圧が PCCI 燃焼に与える影響 (燃焼特性)

図 3.29(a)に各噴射圧における各燃料の低温酸化反応の熱発生率を示す。噴射圧が高くなるほど、両燃料とも、低温酸化反応の熱発生率の割合が少なくなっていることが明らかである。これは、噴射圧が高くなると、噴射期間が短くなり、噴霧の液滴の速度が速くなり、低温酸化する時間が短縮するためと考えられる。また、噴射圧が 50MPa の場合、J40 を用いる方が、低温酸化反応による熱発生率の割合が大きくなっていることから、含酸素燃料は低温酸化反応しやすいものと推測される。図 3.29(b)に各噴射圧における各燃料の高温燃焼反応での着火時の熱発生率を示す。低噴射圧においては燃料種の違いによる影響がほとんど見られなかったが、高噴射圧では、J40 の場合、着火が若干遅くなっていることが分

かった。これは、J40の蒸発性がD100より悪いであることが原因と考えられる。

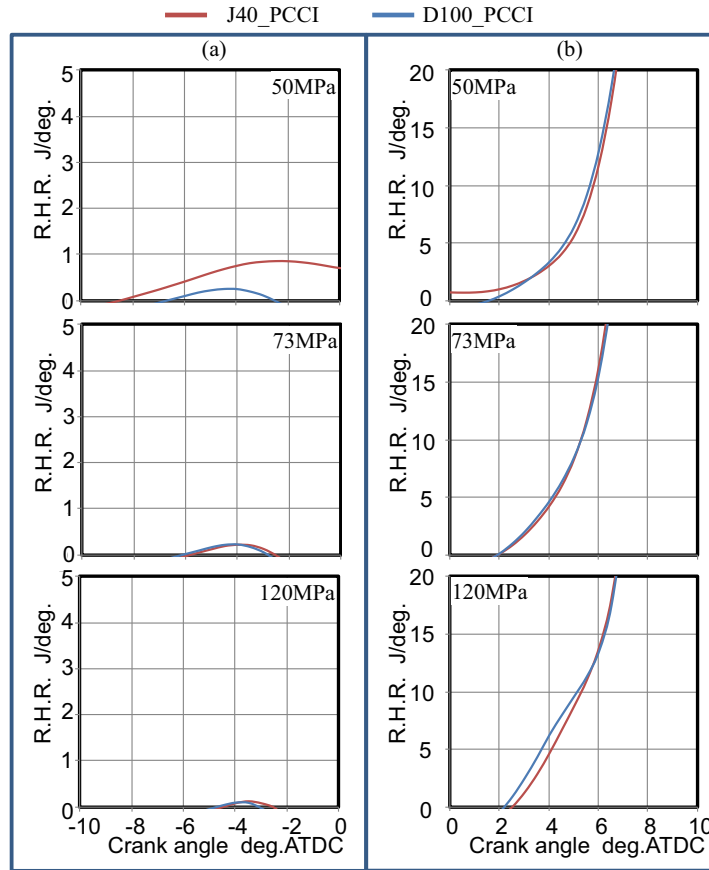


図 3.29 各燃料における噴射圧が PCCI の着火と燃焼に与える影響

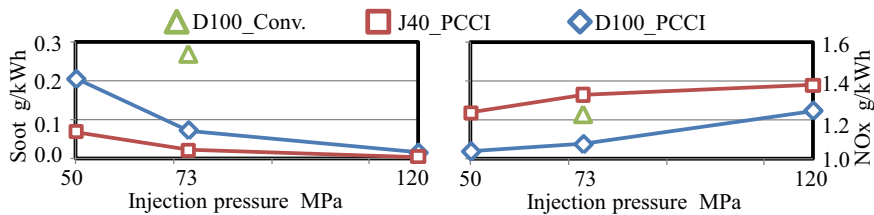


図 3.30 各燃料における噴射圧が PCCI の排出ガスに与える影響 (Soot と NOx)

図 3.30 に PCCI 燃焼において各噴射圧により、各燃料種が Soot と NOx の排出に与える影響を示す。すべての噴射条件において、ディーゼルの拡散燃料であるベース条件に比べて、両燃料において、Soot の排出量が大幅低減することが明らかである。しかしながら、噴射圧の増加により NOx の排出量が増加することが分かった。これは、3.1.2 節で述べた

高压多段噴射の結果と一致している。一方、噴射圧が 50MPa までに下がることによって、J40 では NOx の排出量はベース条件とほぼ同等となり、Soot の排出が大幅低減することが分かった。このように、J40 では噴射圧を低くすることで Soot と NOx の同時低減が可能なことが確認された⁸⁾。

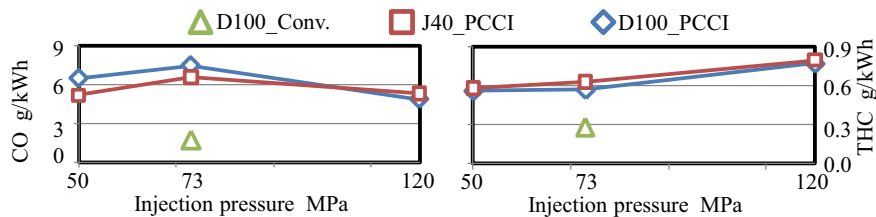


図 3.31 各燃料における噴射圧が PCCI 燃焼での排出ガスに与える影響（未燃成分）

図 3.31 に示すように、燃料種および噴射圧を問わず未燃成分の排出が増加する傾向があることが分かった。両燃料において、噴射圧の低減によって未燃成分の低減が見られたが、ベース条件までは低減できなかった。また、低噴射圧では、J40 による低減が著しくなっていることが確認された。

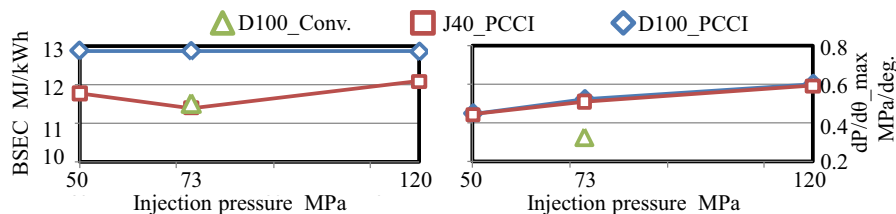


図 3.32 各燃料における噴射圧が PCCI 燃焼の燃費・騒音に与える影響

図 3.32 に示すように、D100 においては燃費の悪化が見られる一方、J40 では噴射圧を問わず燃費の悪化が抑えられることが明らかである。また、振動・騒音に影響する最大圧力上昇率 ($dp/d\theta_{max}$) については、噴射圧が減少するとともに減少することが分かった。特に噴射圧が 50MPa までに下がることによって、最大圧力上昇率が 0.5MPa/deg.以下になり、実用化が可能なレベルに抑えられていると考えられる。

c) まとめ

含酸素燃料においては、PCCI燃焼により、NOxの排出を維持しながらSootの排出の大幅

な低減を実現できることが検証された。また、J40を使用した場合、噴射圧を下げる方が排出ガスの低減と燃費・騒音の改善に効果的であることが明らかになった。

3.2 PMの粒子測定の結果と考察

PMの粒子サイズが小さいほど呼吸器系の悪影響が大きいことが報告され、このため、PMの排出量だけではなく、PMの粒子排出数(PN)に注目されている。そこで、各燃料のPMの排出に対して、総排出量だけではなく、粒子数(PN)と粒径(Nd)の測定とともに、PM中のSOF成分の分析を行った。また、その結果を数値シミュレーションの比較条件とするため、数値シミュレーションが可能なMO40を用いてエンジン実験を実施した。

3.2.1 燃料種の違いがPMの粒子排出特性に与える影響

幅広いエンジン運転条件において、第2章に述べたPMの分析方法により、欧州及び米国の認証モードで使用頻度が高い点を含む格子状の評価ポイントを設定した。具体的には、第2章の表2.8に示すように、多段噴射および単段噴射両方含む回転数1250rpm～3500rpm、負荷50Nm～160Nm計30ポイントを対象として実験を行った。

a) PMの粒子数および粒径分布

従来の研究では、BDFの使用により、排出されるPMにおいて粒径が小さい粒子(粒径<50nm)の排出数が増加することを報告されている^{9),10)}。すなわち、BDFの使用により、PMの核モードでの粒子が軽油より多く排出されることが示されている。そこで、本実験では上述したすべての条件において、EEPS3090を用いて、PMの粒径に対する粒子数の関係を測定した。

まず、図3.33に各回転における25%負荷での粒径とPNの関係を示す。まず、低回転(1500rpm)の条件では、核モード(Nuclei Mode: 粒径<50nm)¹¹⁾の範囲で、MO40のPNの排出がD100より増加する傾向が見られる一方、蓄積モード(Accumulation Mode: 50nm<粒径<100nm)¹¹⁾の範囲で、MO40の方がPNが少なくなっていることが分かる。次に、中回転(2500rpm)の条件では両燃料における違いがほぼないことが分かった。また、高回転(3500rpm)の条件では、MO40の使用により、各粒径のPNが少なくなることが明らかである。

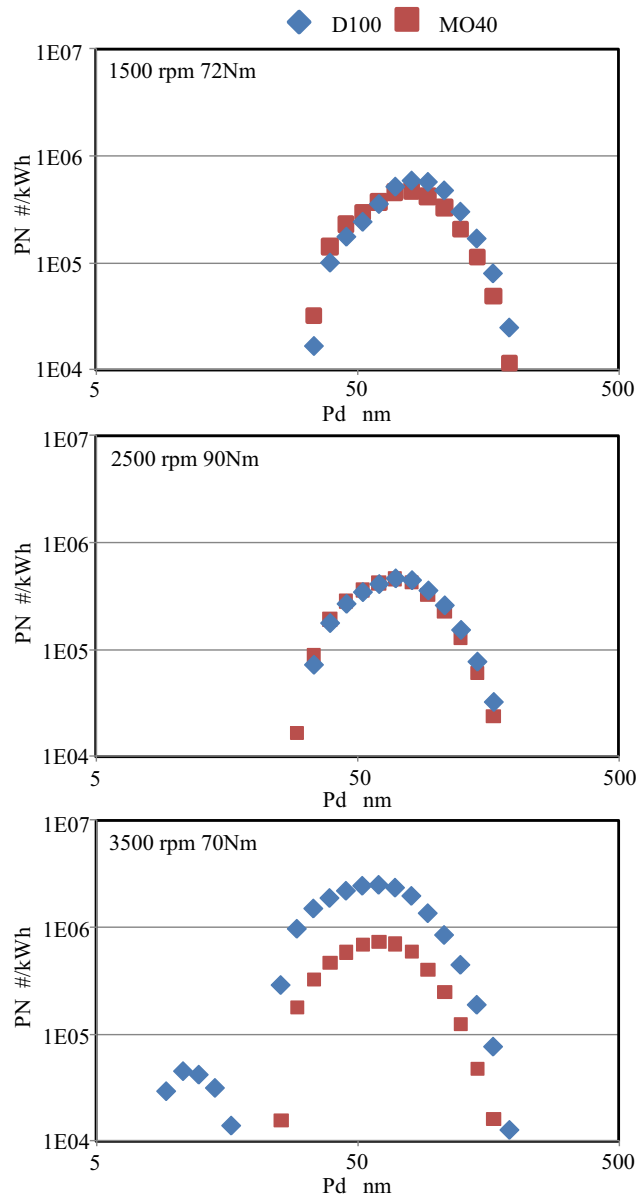


図 3.33 各燃料における 25%負荷時の PN に対する粒径分布

次に、各燃料において、すべての運転条件での粒子数 (PN) 分布を図 3.34 に示す。両燃料において、低回転領域でが負荷の増加による PN が少なくなる一方、高回転領域では PN の排出の変化が極めて少ないことが分かった。また、すべての負荷条件において、両燃料ともにエンジン回転数の増加につれて排出が増加する傾向があった。特に軽油の場合においては、高回転での PN の増加が著しいことが分かった。その原因としては、低回転領域において、負荷が増加により EGR 率が少なくなり、PM の排出量が全体的に少なくなる一方、高回転領域では EGR 率の負荷による変化がほぼなかったためと考えられる。

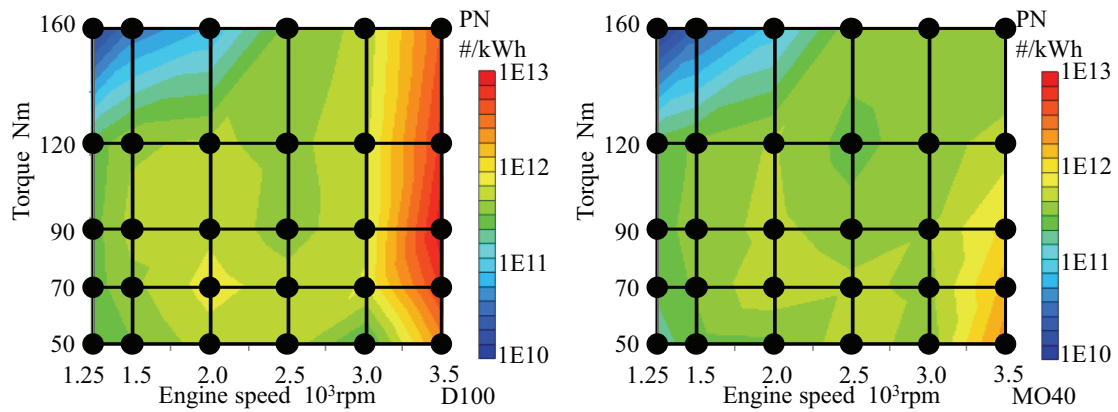


図 3.34 マップ上での各燃料における PN 分布

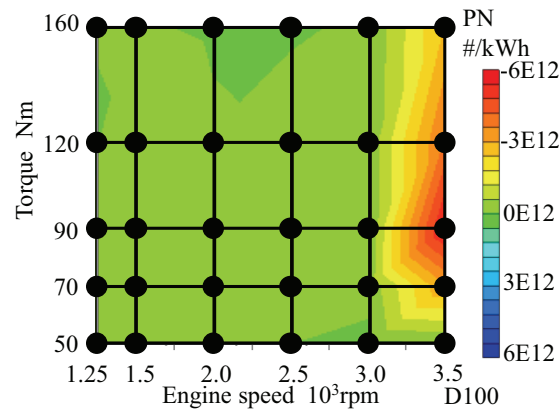


図 3.35 D100 を基準とする場合の MO40 の PN の排出量の変化量

図 3.35 に D100 を基準として、MO40 の PN の基準からの変化量を示す。この図から、MO40 では、低回転領域において Soot の PN が D100 とほぼ同等である一方、高回転領域では、D100 より PN が減少する傾向が見られた。つまり、粒子数については、燃料により、高回転領域でその差は広がり、低回転領域ではほぼ同等となる。これは、高回転において、MO40 の中に酸素が含まれ、芳香族も少ないことにより、PM の粒子の生成が抑制されるためと考えられる。

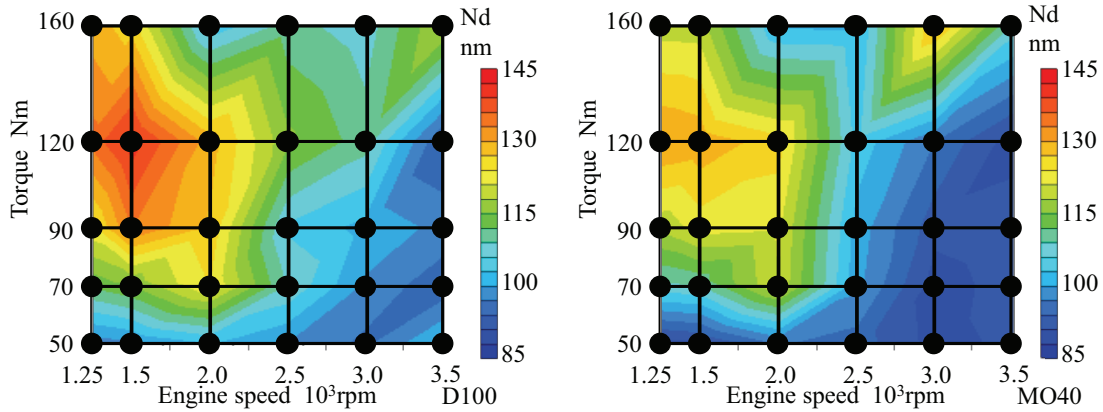


図 3.36 マップ上、各燃料における平均粒径分布

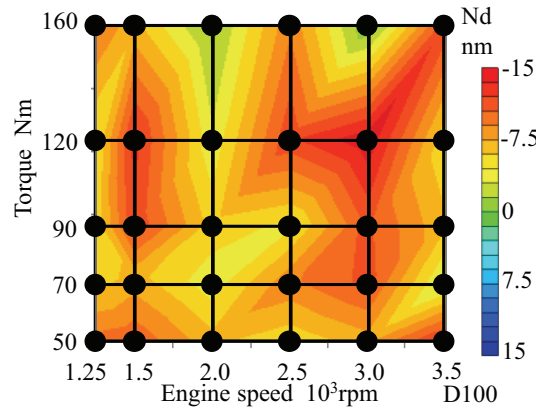


図 3.37 D100 を基準とする場合の MO40 の平均粒径の変化量

また、図 3.36 に各燃料における平均粒径分布を示し、ここで、平均粒径については式(3.1)により算出した。両燃料ともに平均粒径分布の形が図 3.13 に示した Soot の排出量分布と類似していることが分かる。また、図 3.37 には、D100 を基準とし、MO40 の平均粒径の基準からの変化量を示す。MO40 では、全体的に平均粒径が小さいことが分かった。これは、MO40 の中に酸素が含まれることにより、PM の酸化が促進されることが理由と推測される。

$$N_d = \frac{\sum(m_i d_i)}{\sum m_i} \tag{3.1}$$

ここで、 m_i は各代表粒径における平均質量、 d_i は代表粒径である。

b) SOF 成分分析結果

使用頻度が最も多い条件である低回転・低負荷（1500rpm, 72Nm）において，GC/MSにより測定を行った SOF 成分の分析結果を図 3.38 に示す．また，ここでの測定では，SOF の成分が非常に少ないため，定量分析は困難であったため，定性分析のみを行うこととした．

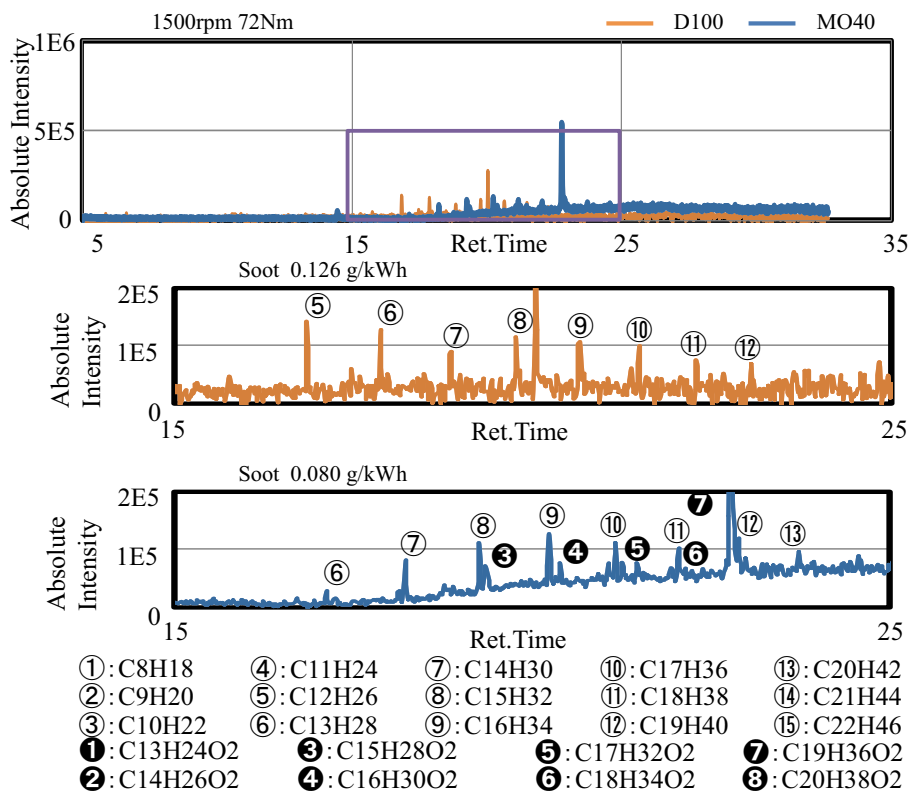


図 3.38 SOF 成分分析結果

図 3.38 より，両燃料においては，SOF の主成分は残留燃料であることがわかった．また，ここでは，定性分析であるため，具体的な量は特定できないが，捕集条件，抽出条件，及び分析条件全てが同様であるため，ガスクロマトグラフで同じリテーションタイムであるピークの高さから，同成分の増減の傾向を考察することが可能と考えられる¹²⁾．そこで，SOF 成分の同成分の排出量においては，D100 の方が排出が多いものと推察される．また，検出された SOF 成分は図 2.3 に示すような D100 の燃料成分と比べ，より高級炭化水素から成ることが分かった．これは，燃料中の低級炭化水素が気化しやすくなり，液体にならず，排気中未燃成分（THC）として排出されたものが多いためと考えられる．

c) まとめ

MO40におけるPNは、低中回転数の条件ではD100とほぼ一致し、高回転条件で大幅低減している。また、すべての条件において、平均粒径が小さくなる傾向があることが分かった。SOF成分については、両燃料ともに残留燃料が主な成分となっていることが分かった。

3.2.2 高圧噴射における燃料種の違いがPMの粒子排出特性に与える影響

高圧噴射において燃料種の違いによるPMの粒子排出特性に与える影響を調査するため、3.1.2節で述べた実験と同様の条件で、EEPS3090により測定を行った。その結果を図3.39に示す。図3.20に示したように、各燃料において高圧噴射条件により、Sootの排出が大幅に減少することが分かっている。それに対して、図3.39に示すようにPNの測定結果から、両燃料ともに高圧噴射の条件によりPNが減少することが分かった。これは、高圧噴射により、燃料噴霧の微粒化および蒸発が促進されるため、燃料と空気の混合が進み、PMの生成が抑制されるものと考えられる。また、高圧噴射条件では、PNの核モード領域での排出に対して両燃料がほぼ同等である一方、蓄積モード領域での排出については、MO40の方が少なくなっていることが分かった。これは、MO40の酸素成分によりPMの酸化が促進されるためと推測される。

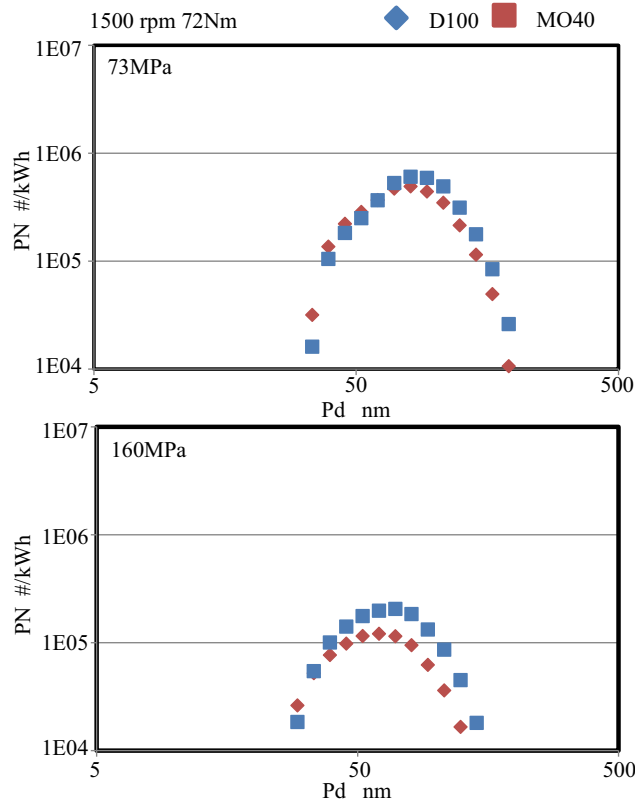


図 3.39 各燃料における噴射圧での PN が粒径による分布

3.2.3 高 EGR 率において燃料種の違いが PM の粒子排出特性に与える影響

多量の Cooled EGR を適用した際の PM の排出特性を解明するため、EEPS3090 を用いて、第 2 章の表 2.9 の条件により、PN と平均粒径の測定を行った。その結果を図 3.40 と図 3.41 に示す。

図 3.40 に示すように、EGR 率が増加するとともに、PN と平均粒径が増加することが分かる。また、PN については、低 EGR 率の条件では燃料種の違いによる影響がほぼない一方、高 EGR 率条件では MO40 により PN の排出量が少なくなることが確認された。このような傾向は、図 3.23 に示すような Soot の排出量の EGR 率による変化傾向と一致していることが分かる。また、平均粒径については、すべての EGR 率条件において、MO40 の方がほぼ同等な程度で小さくなっている。これは、EGR 率の変化が PN の排出に与える影響が大きく、また燃料種の違いが平均粒径に与える影響が大きいためと推測される。

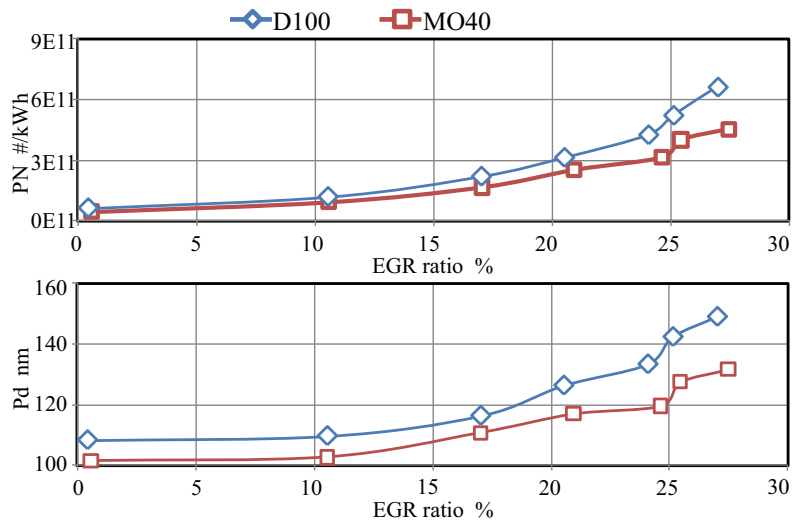


図 3.40 各燃料における EGR 率が PN と平均粒径に与える影響

PN の特性を詳しく解析するため、図 3.41 に各燃料における各 EGR 率での粒径に対する PN の示す。D100 においては、EGR 率の低減により、Soot の OH による酸化反応が促進し、Soot の排出量と PN が低減することが報告されている¹³⁾。本実験においては、MO40 の Soot と PN の EGR 率による変化傾向が D100 とほぼ同等であるため、Soot および PN の排出量が EGR 率の低減による減少することは、同じく Soot の OH による酸化反応が促進する原因であると考えられる。また、高 EGR 率の条件において、MO40 により、核モード領域での PN の排出量が D100 より多くなる一方、蓄積モード領域での排出量が少なくなっていることが分かった。低 EGR 率の条件においては、両燃料ともに核モード領域での PN が非常に少なくなり、MO40 の方が蓄積モード領域で PN が少なく、有害性がより低いことが確認された。

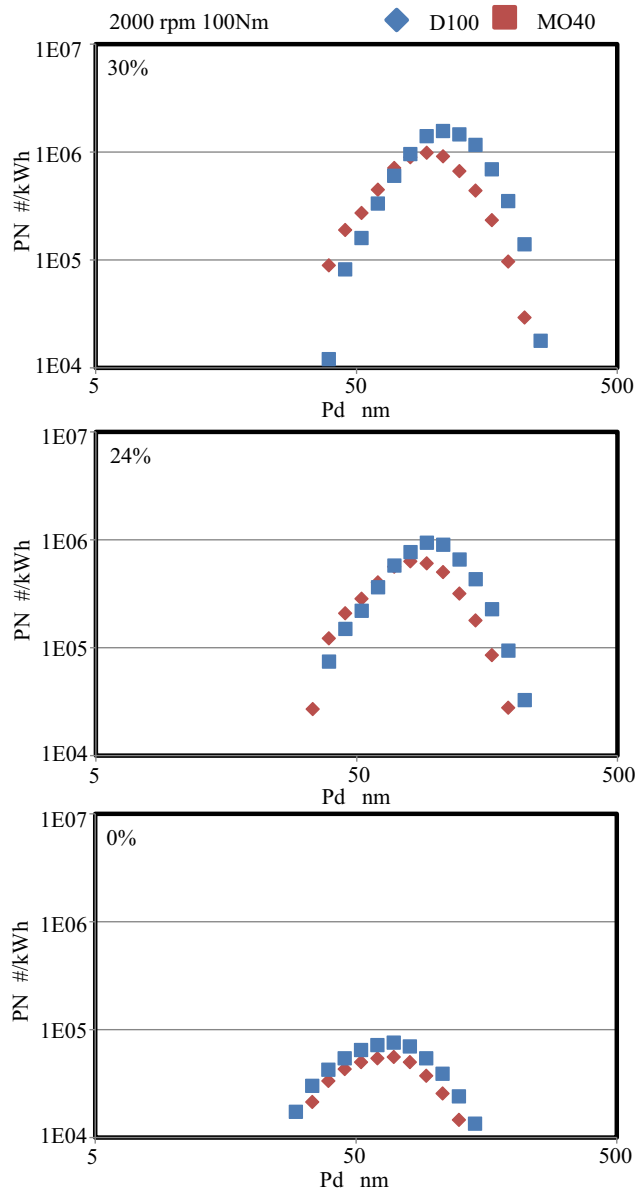


図 3.41 各燃料における各 EGR 率での PN が粒径上による分布

3.2.4 燃料種の違いによる PCCI 燃焼の PM の粒子排出特性に与える影響

3.1.4 節に述べた燃料は上死点近辺に噴射し、高圧噴射および高スワール比により予混合を促進する PCCI 燃焼条件を用いて、EEPS3090 により、PN および平均粒径の測定を行った。また、燃焼方式による SOF 成分に与える影響を調査するため、GC/MS により、SOF 成分分析を行った。

a) PCCI 燃焼が PN と平均粒径に与える影響

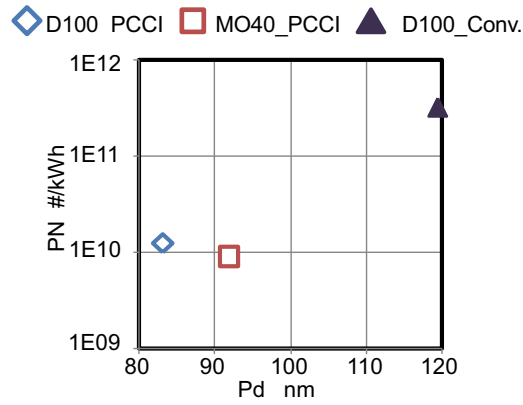


図 3.42 各燃料における PCCI 燃焼が PN と平均粒径に与える影響

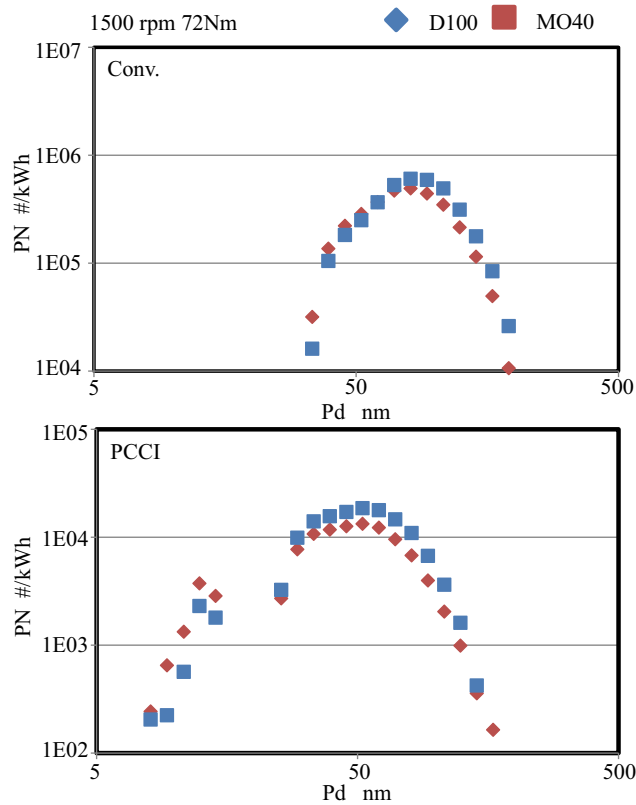


図 3.43 各燃料における PCCI 燃焼での PN が粒径上による分布

図 3.42 に各燃料における PCCI 燃焼により PN および平均粒径の結果を示す. PN と平均

粒径については、両燃料ともに低減していることが分かる。また、PN については、一般的な拡散燃焼の場合と同じく、MO40 の方が少ない傾向となっている一方、平均粒径において拡散燃料の傾向と逆に MO40 のほうが大きくなっていることが確認された。

図 3.43 に各燃料における PCCI 燃焼が PN の分布に及ぼす影響を示す。核モード領域における PN は MO40 の方が多く、蓄積モード領域での PN は D100 の方が多いという拡散燃料と同様の傾向となっている一方、MO40 では、粗モード (Coarse Mode : 100nm<粒径)¹¹⁾ 領域での PN は D100 より多いことが分かった。PCCI 燃焼においては、図 3.27 に示すように、MO40 は D100 より THC の排出が多くなっていることは、MO40 では PM の生成後の凝集が促進され、粗モード領域での PN の排出が増加することが原因であると考えられる。

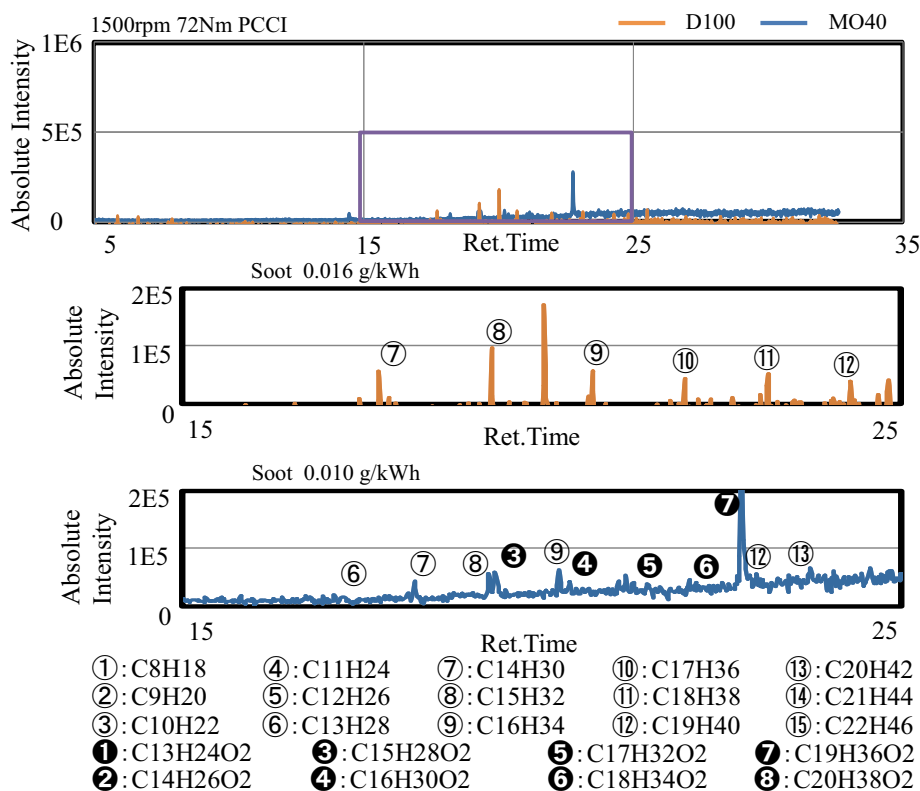


図 3.44 各燃料における PCCI 燃焼での SOF 成分分析結果

b) PCCI 燃焼での SOF 成分の分析結果

MO40 を使用した際の燃焼方式が SOF 成分に与える影響を調べた結果を図 3.44 に示す。これより、図 3.38 に示したように拡散燃焼と同様、SOF 成分の主成分が残留燃料となっていることが分かった。また、PCCI 燃焼の方が、拡散燃焼よりも SOF 成分が少ないことが

分かる。これは、Sootの排出量と同じ傾向になっている。しかしながら、Sootの排出量がPCCI燃焼の場合、拡散燃焼の1/10になっていることに比べ、SOF成分の減少量が少ない傾向がある。特にMO40においては、MO成分が多く残されていることが分かった。

c) まとめ

PCCI燃焼により、PNと平均粒径については、両燃料ともに低減し、SOF成分も低減することが明らかになった。また、PNについては、拡散燃焼の場合と同じ傾向となる一方、平均粒径では拡散燃料と逆傾向となり、MO40の方がSOF成分における残留燃料が多くなることが分かった。

3.3 噴霧観察の結果と考察

本研究で用いる供試機関に搭載されているインジェクターと同じものを使用し、6噴孔のうちの一つの噴霧を観察した。エンジン運転の低回転・低負荷（1500rpm, 72Nm）に対応した雰囲気ガス温度と密度を定容容器内で再現して噴射を行い、燃料の違いが燃料噴霧の先端到達距離に及ぼす影響について考察した。

3.3.1 燃料種の違いが噴霧特性に与える影響

各燃料において、雰囲気密度（ $\rho_{\text{abm}}=12\text{kg/m}^3$ ）、燃料噴射圧力（73MPa）の条件での燃料噴霧の撮影画像について噴射開始後1.6 msecまでの結果を図3.45に示す。また、これを用いて噴霧先端到達距離の時系列データを求めた結果を図3.46に、また噴霧先端最大到達距離を図3.47にそれぞれ示す。これらの結果より、J100では、到達距離が長くなることが確認された。

$$V_1 = C_d \cdot A \cdot \sqrt{\frac{\Delta P}{\rho}} \quad (3.2)$$

ここで、 V_1 は噴射速度； ΔP は噴射圧と雰囲気圧力の差； C_d は縮流係数； ρ は燃料密度； A は噴口断面積である。

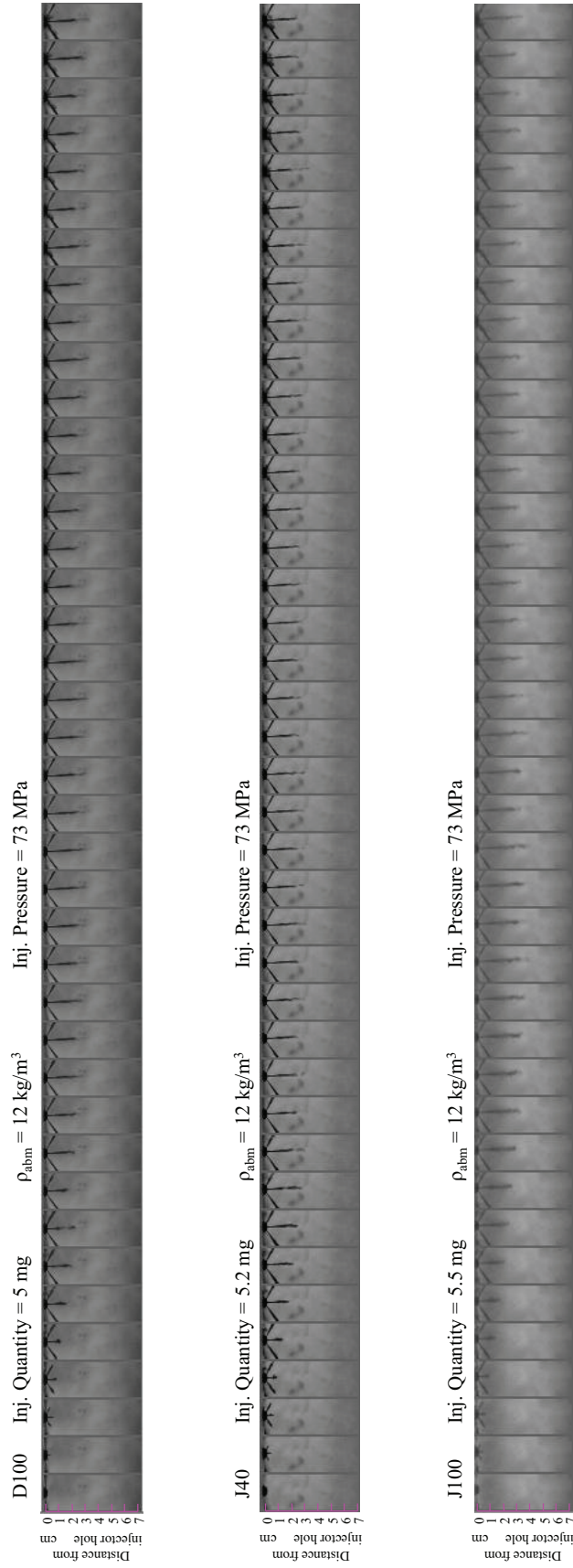


図 3.45 各燃料における噴霧画像

燃料の噴射速度の予測方法として、一般的に式(3.2)に示すようなベルヌーイの式によって計算を行うやりかたが採られる。しかしながら、同式は非粘性の仮定により成立するものであるため、インジェクターと噴射圧・雰囲気密度の条件が同等であれば、噴射速度は単純に噴射圧と燃料密度で表せる一方、本研究で対象としたJ40は動粘度が高いため、その影響を無視することはできない。また、表2.4に示すように、J40の動粘度が高いものの、噴霧の最大到達距離はD100とほぼ同等であった。これより、噴霧の最大到達距離については、動粘度よりも密度と蒸発特性の影響が大きいものと推測される。

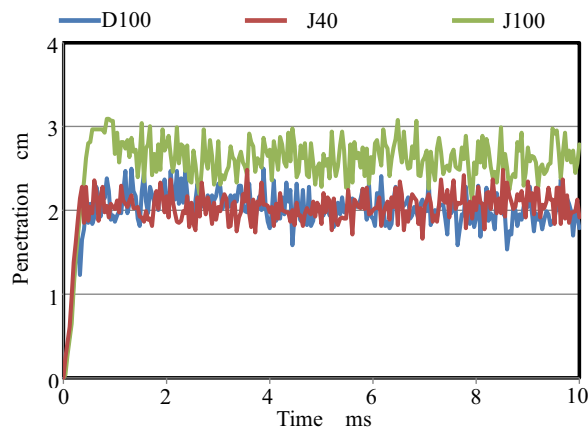


図 3.46 各燃料における噴霧先端到達距離

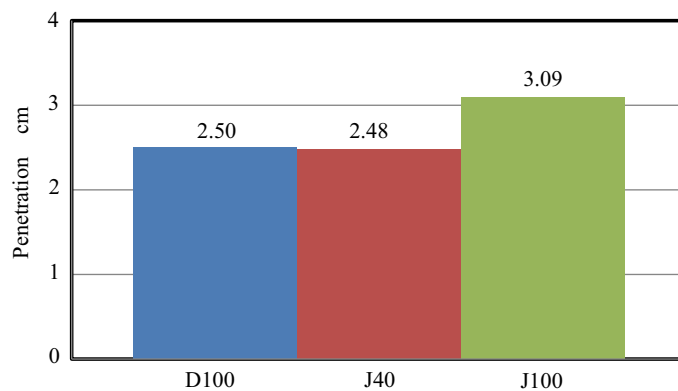


図 3.47 各燃料における噴霧先端最大到達距離



図 3.48 D100 により各噴射圧の噴霧画像

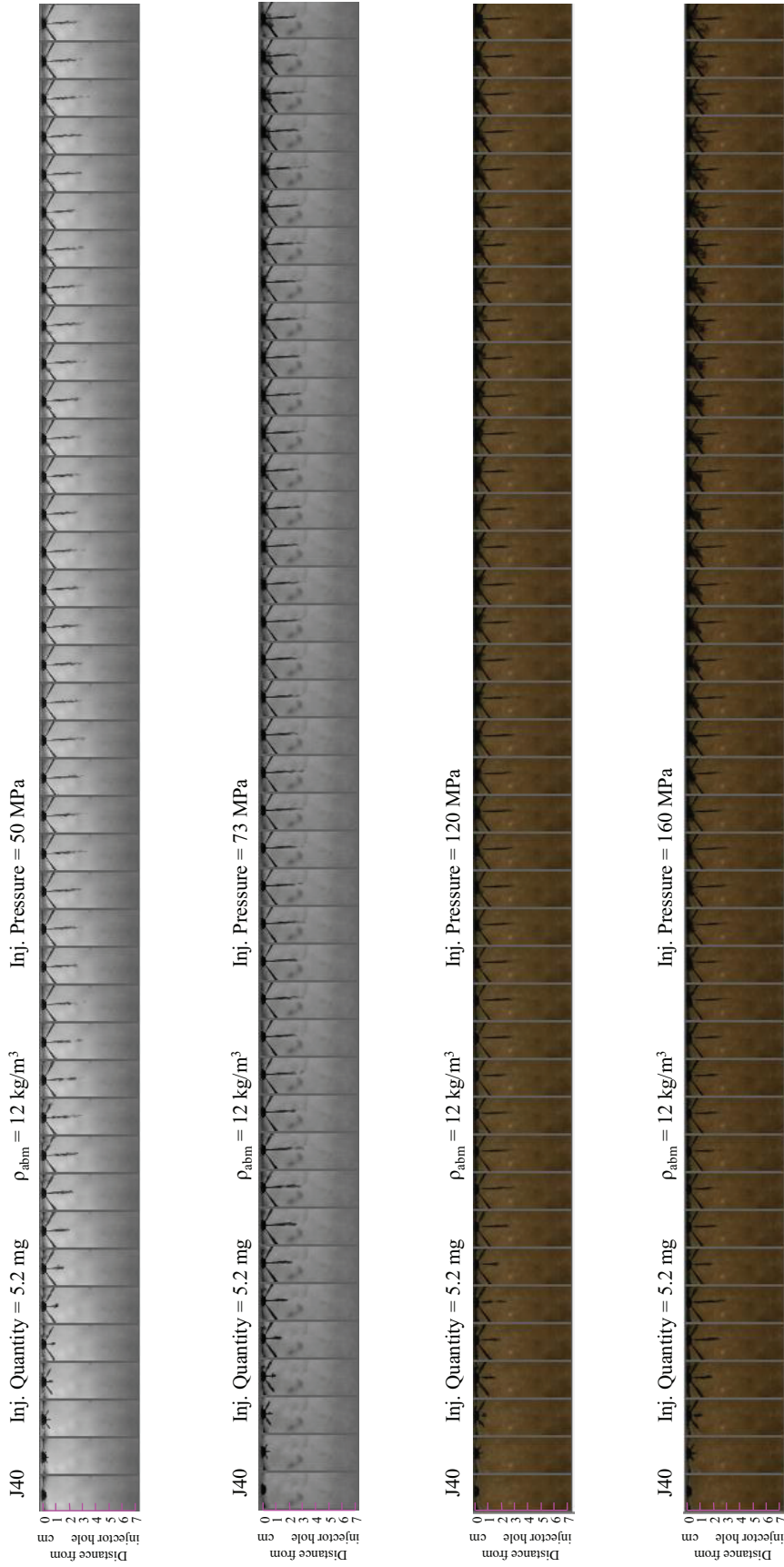


図 3.49 J40 により各噴射圧の噴霧画像

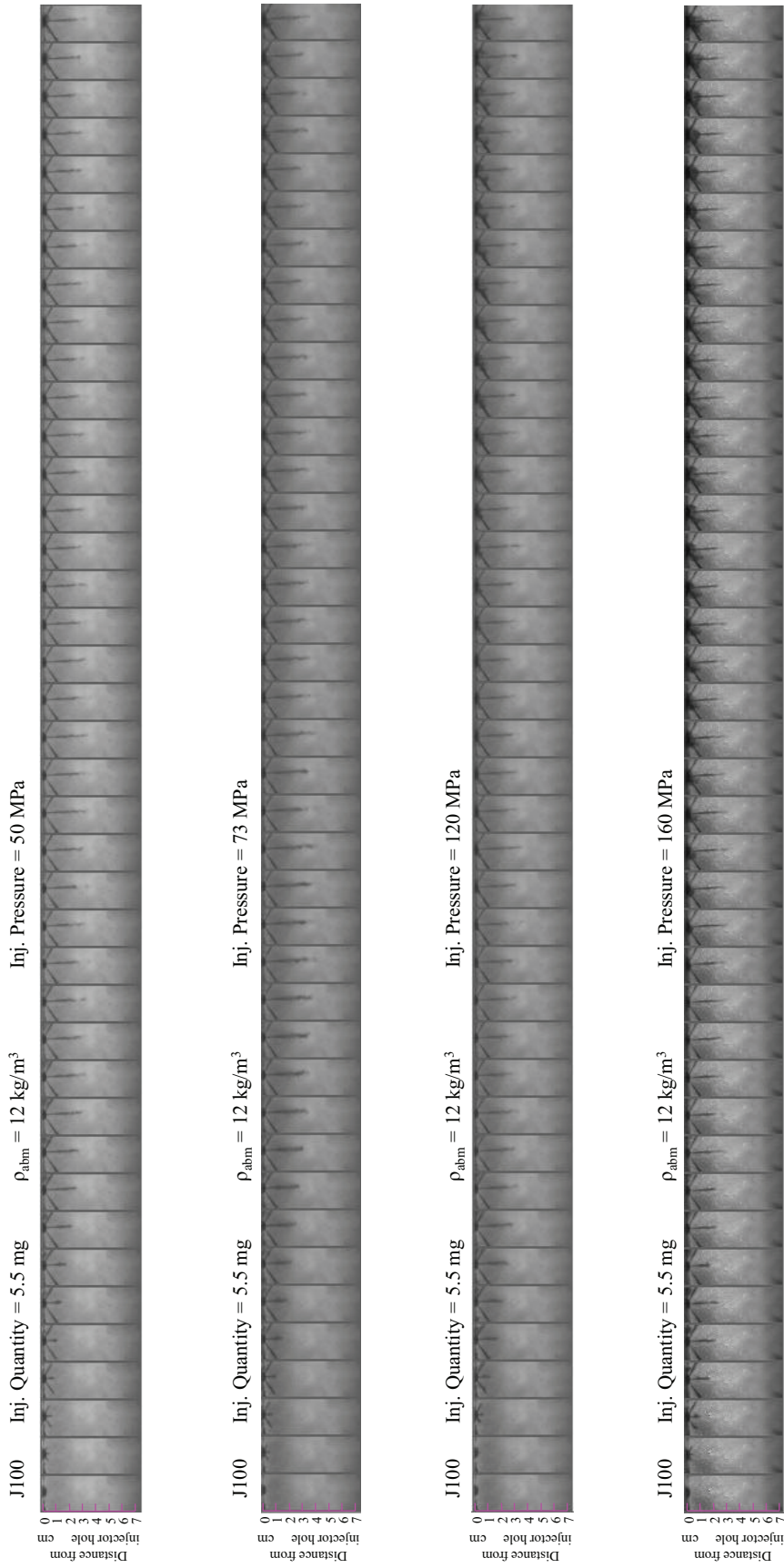


図 3.50 J100 により各噴射圧の噴霧画像

3.3.2 噴射圧における燃料種の違いが噴霧特性に与える影響

燃料種の違いによって噴射圧がディーゼル噴霧に与える影響を調査するため、噴射圧は50MPa, 73MPa, 120MPa および 160MPa の条件において噴霧撮影を行った。その結果を図 3.48～図 3.50 を、噴霧先端最大到達距離を図 3.51 にそれぞれ示す。さらに、各噴射圧における各燃料の密度が噴霧先端最大到達距離に及ぼす影響を図 3.52 に示す。

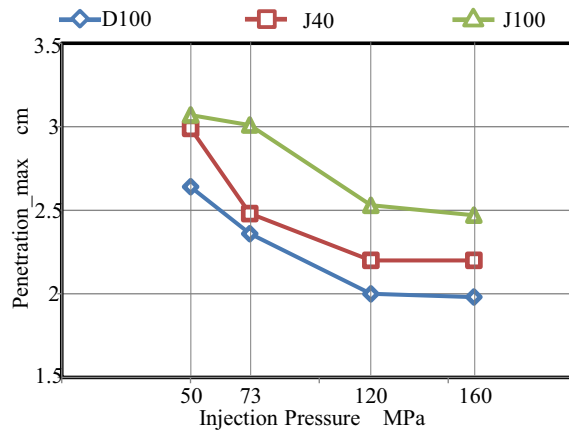


図 3.51 各燃料における各噴射圧での噴霧最大到達距離

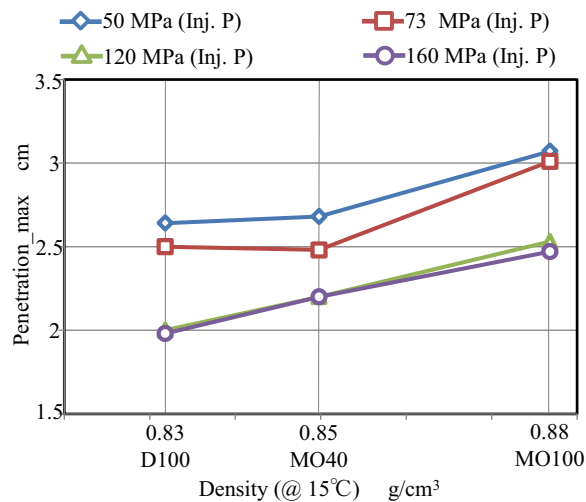


図 3.52 各燃料におおける各噴射圧での推定噴射速度

図 3.51 に示すように、両燃料において、噴射圧の増加によって噴霧の到達距離が短縮することが分かる。これは、高圧噴射によって噴霧の微粒化を進み、燃料の蒸発が促進されるためと考えられる。また、すべての噴射条件において J100 は D100 より噴霧到達距離が

長くなっていることが確認された。

図 3.52 に示すように、両燃料において、燃料密度が増加するとともに、噴霧の最大到達距離が増加することが明らかである。特に、高圧噴射において、噴霧の最大到達距離が燃料密度と線形的に増加する傾向となっている。この結果から、高圧噴射においては燃料の動粘度が噴霧の最大到達距離に与える影響は無視できるとものと考えられる。

3.4 まとめ

本章では、量産型ディーゼルエンジンを用い、日欧米実走行モードにおいて使用頻度が高い運転条件を対象に、BDF 使用時の Cooled EGR、多段噴射、高圧噴射および PCCI 燃焼が燃焼特性と排出ガス特性に与える影響を実験的に調査した。また、定容容器を用いて高速ビデオカメラにより、BDF の噴霧を撮影した。その結果をまとめると以下のとおりである。

- 1) 含酸素燃料 (J40, MO40 と MO100) を用いた場合、全運転領域においてディーゼルエンジンの一般設計と同等の条件で運転が可能である。また、パイロット噴射により燃焼が促進され、全領域において、NOx の排出量を維持しながら Soot の排出量を大幅低減が可能である。また、PN は低中回転数の条件で、D100 とほぼ同等であり、高回転条件で大幅低減し、すべての条件において平均粒径が小さくなる。SOF 成分については、両燃料ともに残留燃料が主な成分である。そして、含酸素燃料によって燃費を悪化させず未燃成分の排出量を低減することができる。
- 2) 高圧噴射により、両燃料ともに Soot の排出量が大幅に減る反面、NOx の排出量が増加し、含酸素燃料においては、D100 より NOx の排出量がさらに増加する傾向がある。また、PN の核モード領域での排出については、両燃料はほぼ同等である一方、蓄積モード領域での排出については、MO40 の方が少ない傾向がある。また、両燃料ともに未燃成分が増加する傾向となり、燃費の悪化が見られる。
- 3) 含酸素燃料では、D100 と比べて多量 Cooled EGR の使用により、Soot の排出を抑えながら NOx の低減が可能となる。また、Soot および PN の EGR 率による変化傾向は D100 とほぼ同等であり、高 EGR 率の条件においては、核モード領域での PN の排出量が D100 より多くなる一方、蓄積モード領域での排出量は少なくなる。さらに、D100 よりも未燃成分の排出が低減し、燃費の改善も同時に可能である。
- 4) 含酸素燃料においては、PCCI 燃焼によって NOx の排出を同等としながら、Soot の排

出を大幅に低減することができ、噴射圧を下げることによって排出ガス低減と燃費・騒音の改善に効果的である。また、PN と平均粒径については、両燃料ともに低減し、SOF 成分も低減する。

5) 含酸素燃料の使用により、すべての条件において噴霧到達距離が長くなり、燃料密度が増加するとともに噴霧の最大到達距離に増加し、高噴射圧において線形的な傾向を示す。

以上のことにより、高いBDF混合率において、量産型ディーゼルエンジンへの応用が可能となり、高EGR率および低噴射圧の条件をすることで軽油での運転に対して燃焼と排出ガスの改善が可能であり、PCCI燃焼の実現も可能である。

第4章 計算結果と考察

本章では、第2章で説明したBDFを燃料とする噴霧特性と燃焼反応に関わる数値シミュレーションモデルを用いた計算結果について説明し、考察する。まず、BDFの燃焼反応モデルを用いて、0次元の化学詳細反応コードにより燃焼および排出ガスに与える影響を解明する。また、軽油をベースとして開発した噴霧モデルを用いて、BDFの噴霧観察の結果により検証し、BDFに適用し得る噴霧モデルを構築する。さらに、3次元の数値流体シミュレーションによりBDFの燃焼・排出ガス特性を解析し、現象論的Sootモデルを用いてエンジン筒内のSootの生成および酸化のメカニズムを解析し、その排出を低減するために求められる混合気形成過程と燃焼温度の制御について考察する。

4.1 0次元化学反応計算結果と考察

本研究で行う0次元モデルでは、シリンダ内の温度、圧力、化学種濃度等は均一であると仮定し、BDFと軽油に対して、第2章に述べた各燃料の燃焼反応モデルおよび排出ガスモデルを用いて、CHEMKIN-PROにより、0次元化学燃焼反応計算を行い、各燃料の燃焼特性と排出ガス特性を解明した。

4.1.1 バイオ燃料の着火特性

第2章に述べた式(2.24)および式(2.25)に示す各燃料の燃焼反応スキームを用いて、各燃料の着火遅れと断熱火炎温度を計算した。ここで、各燃料の定圧比熱、エンタルピーおよびエントロピーについては式(4.1)~式(4.3)に示すようなNASAの多項式に基づき、表4.1に示すNASA多項式の係数を用いて計算した。そのエンタルピーの結果(D100とMO100)を図4.1と図4.2に示す。

$$\frac{C_p}{R} = \alpha_1 + \alpha_2 T + \alpha_3 T^2 + \alpha_4 T^3 + \alpha_5 T^4 \quad (4.1)$$

$$\frac{H}{RT} = \alpha_1 + \frac{\alpha_2 T}{2} + \frac{\alpha_3 T^2}{3} + \frac{\alpha_4 T^3}{4} + \frac{\alpha_5 T^4}{5} + \frac{\alpha_6}{T} \quad (4.2)$$

$$\frac{S}{R} = \alpha_1 \ln T + \alpha_2 T + \frac{\alpha_3 T^2}{2} + \frac{\alpha_4 T^3}{3} + \frac{\alpha_5 T^4}{4} + \alpha_7 \quad (4.3)$$

ここで、 $\alpha_1 \sim \alpha_7$ は表4.1に示す係数である。この表に示す14個の係数のうち、1000K以上の高温領域においては前半の7個を、それ以下の低温領域においては後半の7個をそれぞれ用いる。

表4.1 NASA多項式係数¹⁾

C19H36O2	T02/08	C 19 H 36 O 2 N 0 G	5000.0	1000.0
4.0919E+01	1.0746E-01	-4.1993E-05	7.5084E-09	-5.0445E-13
-7.9480E+04	-1.6642E+02	1.4835E+00	1.8133E-01	-4.1169E-05
-6.6952E-08	3.8538E-11	-6.6447E+04	4.6631E+01	
C14H28	T 5/99	C 14 H 28 O 0 N 0 G	200.0	6000.0
3.7019E+01	5.5472E-02	-1.9208E-05	3.0818E-09	-1.8480E-13
-5.2698E+04	-1.6145E+02	2.1326E+01	-3.8639E-02	3.9948E-04
-5.0668E-07	2.0070E-10	-4.2248E+04	-4.8585E+01	

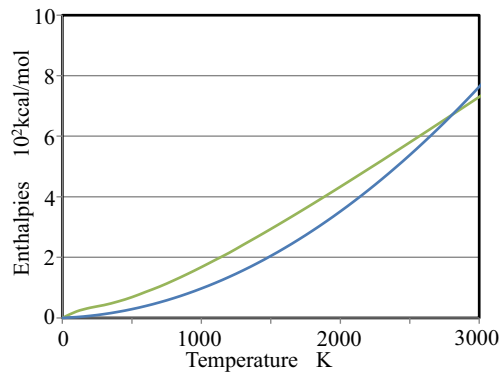


図4.1 各燃料におけるエンタルピー（KIVA用）の計算結果

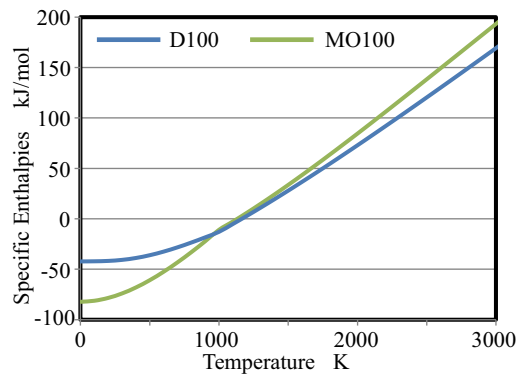


図4.2 各燃料における比エンタルピーの計算結果

a) 着火遅れについて

初期圧力5MPa, 初期当量比1の条件において, 各燃料における着火遅れの計算結果を図4.3に示す. この図から, 初期当量比1の場合, 含酸素燃料 (MO40, MO100) の方がD100よりも低温領域での着火遅れが著しく短くなっていることが明らかである. このことから,

含酸素燃料では、より低温での燃焼が促進されるものと推察される。また、高温領域において、両燃料の着火遅れがほぼ同等になることが分かった。

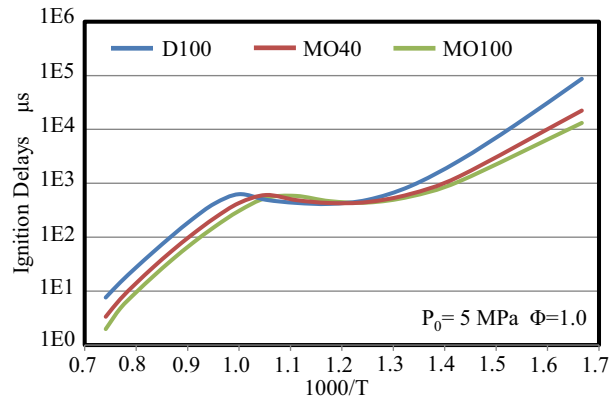


図4.3 各燃料における着火遅れ計算

次に、噴射時期による燃料の着火の違いを調べるため、初期圧力を1MPaと5MPaの条件において計算を行った結果を図4.4に示す。含酸素燃料においては圧力を増加すると着火遅れが短くなり、その傾向は軽油の場合と同様であることが分かった。また、初期圧力が高くなると、燃料間の違いが少なくなることが確認された。このような傾向は、多段噴射において、パイロット噴射はより雰囲気圧が低い時期に行われるので、含酸素燃料の方が早まるが、メイン燃焼では雰囲気圧が高い場に噴射されるため燃料による違いがなくなることが説明できるものと考えられる。

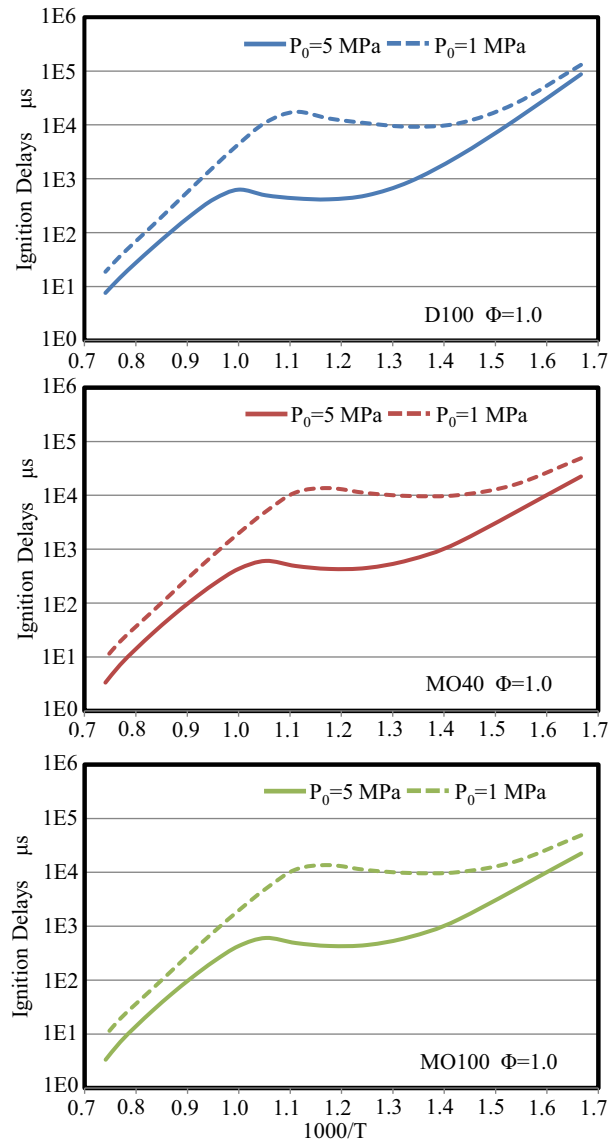


図4.4 各燃料における初期圧力の違いが着火遅れに与える影響

EGR率による燃料の着火を調査するため、初期当量比を0.25, 0.5, 1.0および1.5の条件において計算を行った結果を図4.5と図4.6に示す。図4.5は、各燃料における初期当量比の違いが着火遅れに与える影響を示す。これにより、各燃料において、当量比の増加によって着火遅れが短くなることが分かった。また、高温領域では、当量比の増加により着火遅れの変化量が少なくなり、燃料間の違いが少ない一方、低温領域において、D100と違い、含酸素燃料において着火遅れが著しく減少することが分かった。

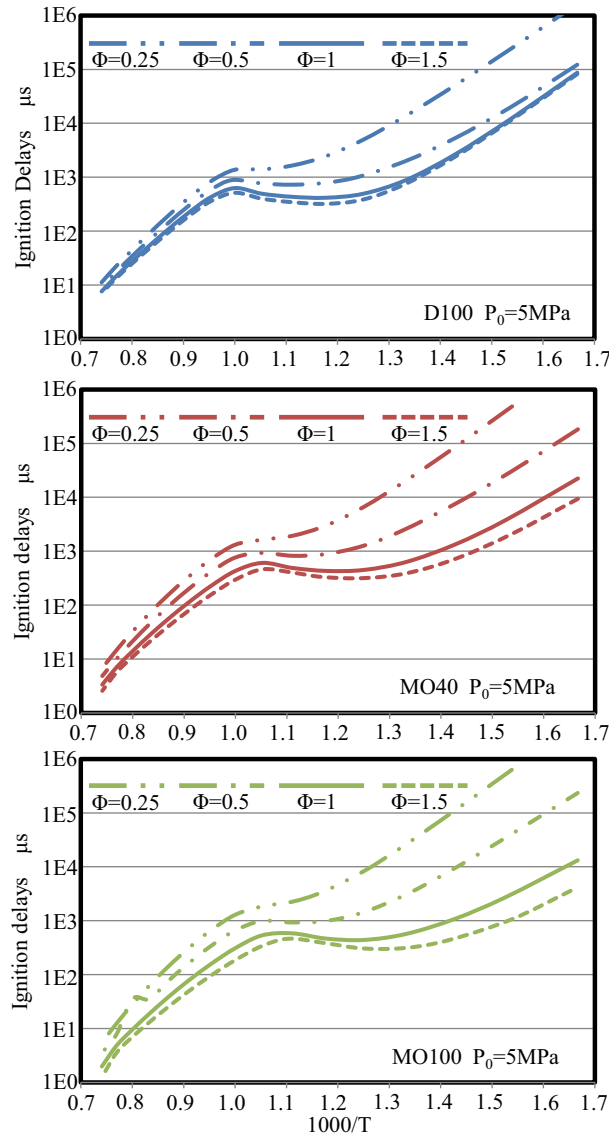


図4.5 各燃料における初期当量比の違いが着火遅れに与える影響

図4.6に各当量比における燃料の違いによる着火遅れに与える影響を示す。これより、当量比が低い場合 ($\phi=0.5$) において、含酸素燃料は、D100に比べて低温領域においては着火遅れが長くなり、高温領域において逆に短くなる事が明らかである。また、1000K前後において、着火遅れがほぼ同等なことが分かった。

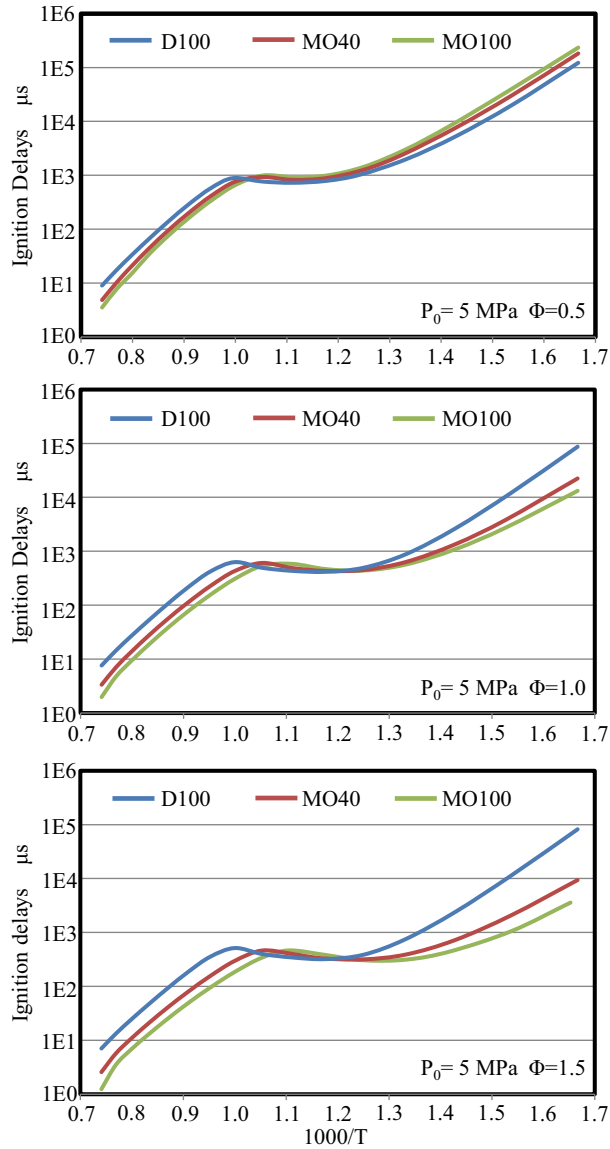


図4.6 各当量比における燃料の違いが着火遅れに与える影響

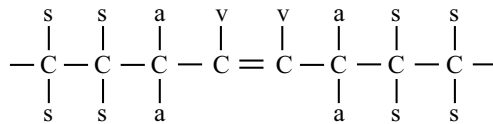


図4.7 二重結合のイメージ

MOは不飽和であり、図4.7に示すように二重結合が持っている。この二重結合のC-H (図4.7のv) の結合エネルギーは一般のC-H (図4.7のs) より大きい一方、その二重結合の付近

のC-H (図4.7のa) のエネルギーは逆に小さい。これは、酸素過剰な状態で低温 (800K以下) の条件において、二重結合はRとすると、 $R+O_2$ により RO_2 結合を形成しやすくなり、その結合の酸化安定性が非常に低いため、酸化されやすく、またRになることにより燃焼反応に進まないこととなる。また、高温 (800K以上) では、二重結合の付近のC-H (図4.7のa) により燃焼反応が進み、着火が早くなる傾向がある²⁾³⁾。

b) 断熱火炎温度

初期温度1000K、初期圧力5MPaの圧縮終わりの条件において、各燃料の断熱火炎温度の計算結果を図4.8に示す。当量比1前後の最高断熱火炎温度において両燃料ともに同等の値をとる。高当量比領域においては、MO100の蒸発潜熱 (501kJ/kg) がD100 (358kJ/kg) よりも高いため、断熱火炎温度は低下する傾向がある。

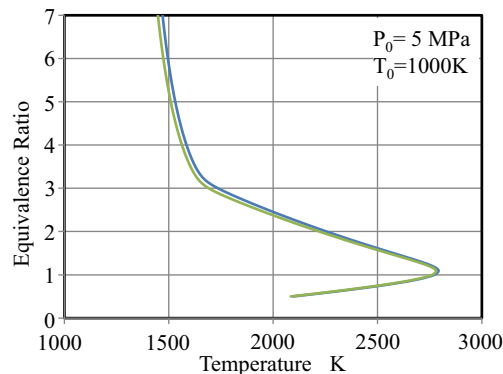


図4.8 各燃料における断熱火炎温度の計算結果

4.1.2 バイオ燃料のPMとNOxの ϕ -Tマップ上の生成分布

第2章で述べた排出ガス反応モデルを用いて、25%負荷の条件相当の燃焼初期圧力5MPaを初期条件とし、各燃料のSootとNOxの排出領域を算出し、いわゆる ϕ -Tマップ上における分布を図4.9に示す。

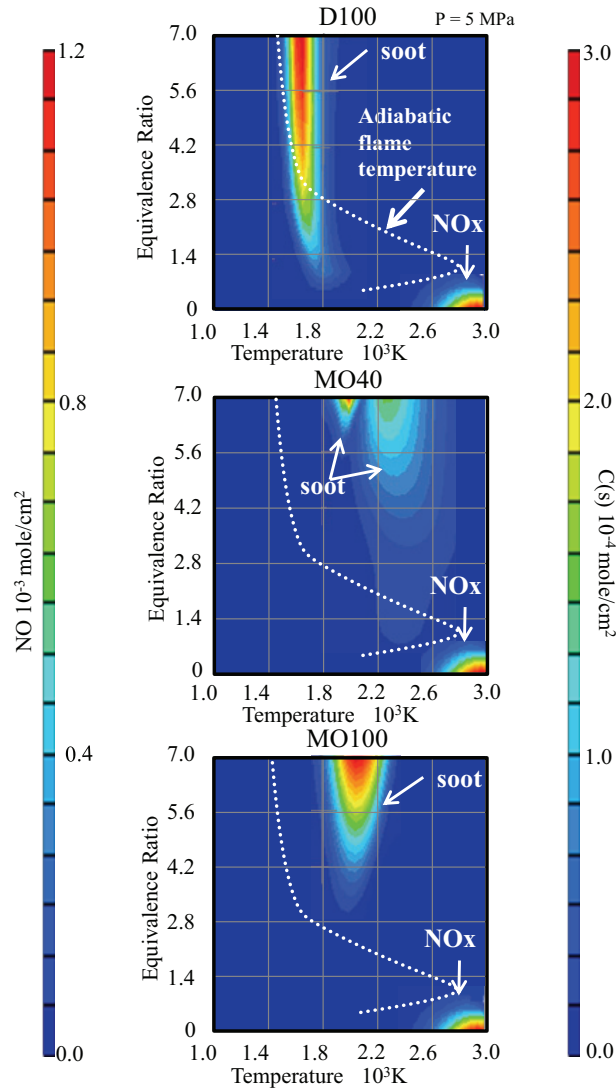


図 4.9 Soot-NO_x の ϕ -T マップ

この図から、D100では、SootがMOよりも低い温度領域で生成し、MO40においては、Sootが2つの領域で生成することが分かる。また、燃料の種類によらずNO_xの生成領域はほとんど変化しないことが明らかである。さらに、この計算条件($T_0=1000$, $P_0=5\text{MPa}$)においては、D100の火炎がSootとNO_xの生成領域の両方を通過する一方、MOでは、火炎がSootの生成領域に通過しないことから、エンジン内において、より低温で過濃な条件でもSootの排出が少ない傾向が説明される。

4.2 3次元燃焼反応計算結果と考察

本研究では、第2章で述べたCFDコードKIVA-3V rel.2をベースコードとして、各種サブモデルに改良を加えたものを用いて、BDFの燃焼・排出ガスを解析し、現象論的Sootモデルによりエンジン筒内のSootの生成および酸化のメカニズムを解析し、その排出を低減するために求められる混合気形成過程と燃焼温度の制御について考察する。

4.2.1 各燃料の熱物性値の推定結果

本研究で使用する噴霧モデルと燃焼モデルにおいて、燃料の各種物理特性（蒸気圧、蒸発潜熱、粘度、表面張力、熱伝達率およびエンタルピー）が必要となる。D100については表4.2に示すようなJIS#2を対象としてKIVA-3Vで採用されているそれぞれの物性値を用いて計算を行った。

表4.2 KIVA-3Vに使用したD100の熱物性値

Enthalpy	n-dodecane (C ₁₂ H ₂₆)
Latent heat of vaporization	n-hexadecane (C ₁₆ H ₃₄)
Vapor pressure	JIS#2
Liquid viscosity	n-hexadecane
Surface tension	n-hexadecane
Thermal conductivity	JIS#2

一方、MOの熱物性に関する実験値が存在しないので、以下のように推定計算を行った。混合燃料においては、第2章で述べたように理想混合状態と仮定し、混合燃料の二体相互作用を無視して、式(2.26)~(2.28)から各熱物性値を求めた。

a) 臨界条件

臨界温度と圧力は、Fedorsの方法⁴⁾を用いて式(4.4)、(4.5)によって得られる。

$$T_c = T_b [0.584 + 0.96 \sum(\Delta_T) - (\sum(\Delta_T))^2]^{-1} \quad (4.4)$$

$$P_c = (0.113 + 0.003n_A - \sum(\Delta_P))^{-2} \quad (4.5)$$

ここで、 n_A は分子のなかの原子の数である。また、文献⁴⁾より臨界温度 $T_c=764$ K、臨界圧力 $P_c=1.28E6$ Pa となる。

b) 蒸気圧

蒸気圧については Gamez-Thodos の方法⁵⁾によって式(4.6)から求められる.

$$\ln P_{VPr} = \beta \left[\frac{1}{T_r^m} - 1 \right] + \gamma [T_r^7 - 1] \quad (4.6)$$

ここで, γ は式(4.7)より得られる.

$$\gamma = ah + b\beta \quad (4.7)$$

また, a, b, β, m と h は式(4.8)~(4.12)によって求められる.

$$a = \frac{1 - 1/T_{br}}{T_{br}^7 - 1} \quad (4.8)$$

$$b = \frac{1 - 1/T_{br}^m}{T_{br}^7 - 1} \quad (4.9)$$

$$\beta = -4.267 - \frac{221.79}{h^{2.5} \exp(0.0384h^{2.5})} + \frac{3.8126}{\exp(2272.44/h^3)} + \Delta^* \quad (4.10)$$

$$m = 0.78425 \exp(0.089315h) - \frac{8.5217}{\exp(0.74826h)} \quad (4.11)$$

$$h = T_{br} \frac{\ln(P_c) / 1.01325}{1 - T_{br}} \quad (4.12)$$

ここで, $T_r = T/T_c$, $T_{br} = T_b/T_c$ (T_b は沸点である)

以上の式を用い, Lydersen の方法⁶⁾によって式(4.13)のような近似式が得られる.

$$P_{VPr} = \exp \left[187.49 - 19153/T - 22.989 \ln T + 7.2769E(-6)T^2 \right] \quad (4.13)$$

この式によって, 蒸気圧が簡単に算出される. その結果を図 4.10 に示す.

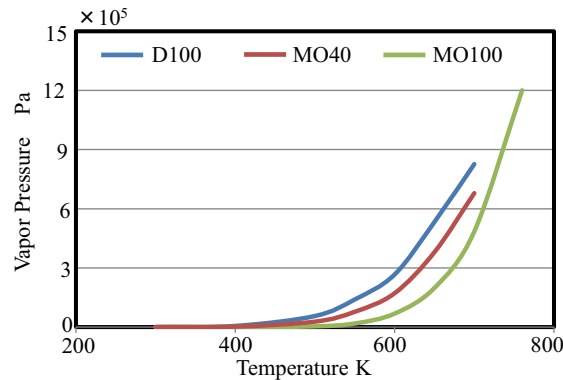


図 4.10 各燃料における蒸気圧の計算結果

c) 蒸発潜熱

一般的に蒸発潜熱は式(4.14)によって求められるが⁵⁾, また Lydersen の方法⁶⁾によって式(4.15)のようは近似式で表わされる.

$$\Delta H_V = RT_c[7.08(1 - T_r)^{0.354} + 10.95\omega(1 - T_r)^{0.456}] \quad (4.14)$$

$$\Delta H_V = 1.22E8(1 - T_r)^{(0.395)} \quad (4.15)$$

その結果を図 4.11 に示す.

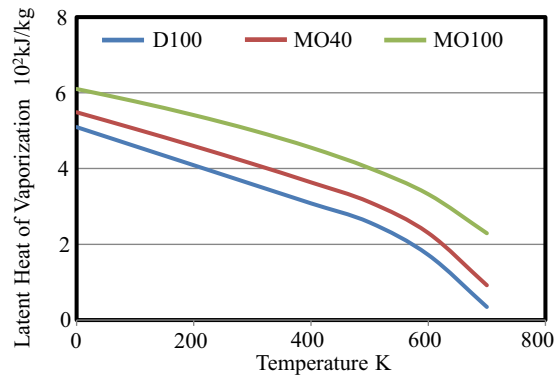


図 4.11 各燃料における蒸発潜熱の計算結果

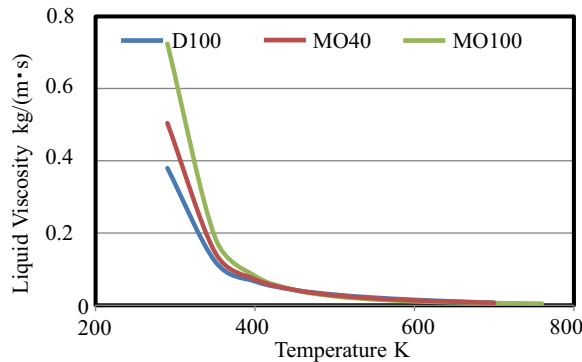


図 4.12 各燃料における粘度の計算結果

d) 粘度

一般的に粘度は式(4.16)によって求められるが⁵⁾, また Lydersen の方法⁶⁾によって式(4.17)のような近似式で表わされる.

$$\ln \frac{n_L}{\rho_L M} = A + \frac{B}{T} \quad (4.16)$$

$$n_L = \exp[-9.059 + 2116.7/T - 0.5587 \ln T] \quad (4.17)$$

その結果を図 4.12 に示す。

e) 表面張力

一般的に表面張力は式(4.18)によって求められるが⁴⁾, Lydersen の方法⁶⁾によって式(4.19)のように近似できる。

$$\sigma = ([P]_{\rho_{Lb}})^4 \left(\frac{1-T_r}{1-T_{br}} \right)^{4n} \quad (4.18)$$

$$\sigma = 0.058(1 - T_r)^{(1.248)} \quad (4.19)$$

その結果を図 4.13 に示す。

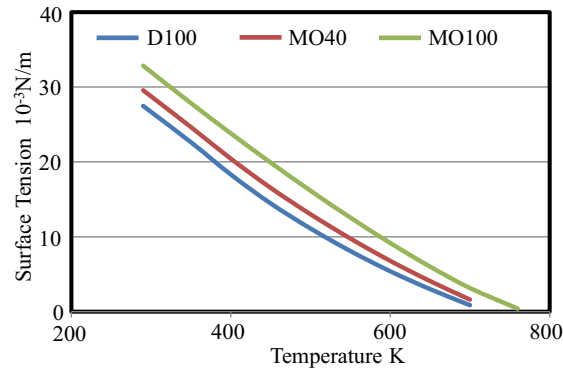


図 4.13 各燃料における表面張力の計算結果

f) 熱伝導率

一般的に熱伝導率は式(4.20)によって求められるが⁵⁾, Lydersen の方法⁶⁾によって式(4.21)のように近似できる。

$$\lambda_L = \frac{A(1-T_r)^{0.38}}{T_r^{1/6}} \quad (4.20)$$

$$\lambda_L = 0.14 - 1.33E(-4)T \quad (4.21)$$

その結果を図 4.14 に示す。

g) エンタルピー

エンタルピーは表 4.1 に示す NASA 多項式の係数を用いて式(4.2)により算出し、その結果は図 4.2 に示すとおりである。

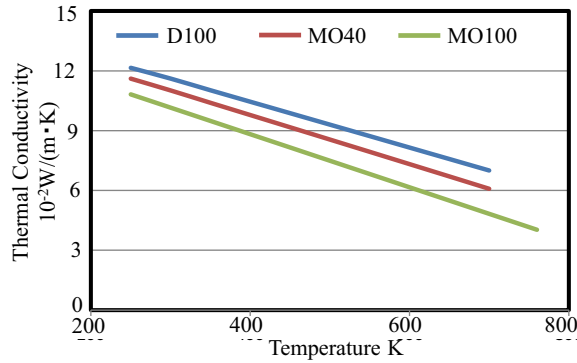


図 4.14 各燃料における熱伝導率の計算結果

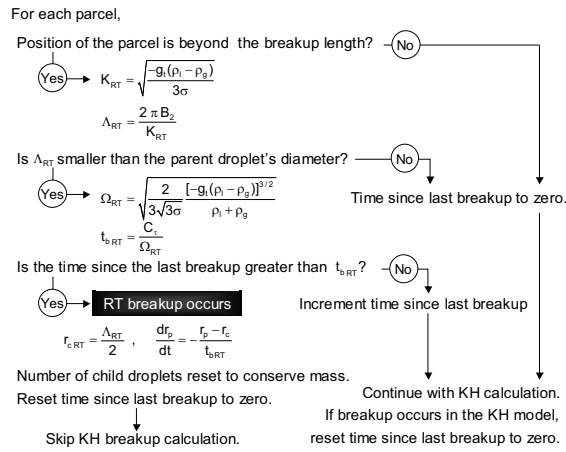


図4.15 KH-RTモデルの計算フローチャート⁷⁾

4.2.2 噴霧モデルの検証

本研究では、燃料噴霧の分裂モデルとして第2章で述べたKH-RTモデルを導入した。本モデルの計算フローチャートを図4.15に示す。

a) Kelvin-Helmholtzモデル⁸⁾

Reitzは円柱状液体(半径 r_p)の表面において最も速く成長する(すなわち最も起こりうる)液滴表面波(Kelvin-Helmholtz wave)の波長 Λ_{KH} と、その最大成長率 Ω_{KH} を式(4.22)で与えた。

$$\Lambda_{KH} = \frac{9.02r_p(1+0.45\sqrt{Z})(1+0.4T^{0.7})}{(1+0.865W_{eg}^{1.67})^{0.6}} \quad (4.22)$$

$$\Omega_{KH} = \frac{0.34+0.38W_{eg}^{1.5}}{(1+Z)(1+1.4T^{0.6})} \sqrt{\frac{\sigma_l}{\rho_l r_p^3}}$$

ここで、 ρ_l は液滴の密度、 σ_l は液滴の表面張力、 W_{eg} は雰囲気ガスのウェーバー数であり、Ohnesorge数 Z とTaylor数 T は式(4.23)のような無次元パラメータである。

$$Z = \frac{\sqrt{W_{ei}}}{R_{ei}}, \quad T = Z\sqrt{W_{eg}} \quad (4.23)$$

なお、ウェーバー数 W_{ei} 、 W_{eg} および液体の物理的性質に基づくレイノルズ数 R_{ei} は式(4.24)のように定義される。

$$W_{ei} = \frac{\rho_l v_{rel}^2 r_p}{\sigma_l}, \quad W_{eg} = \frac{\rho_g v_{rel}^2 r_p}{\sigma_l}, \quad R_{ei} = \frac{\rho_l v_{rel} r_p}{\mu_l} \quad (4.24)$$

ここで、 v_{rel} は液滴と雰囲気ガスとの相対速度、 μ_l は液滴の(静)粘度である(動粘度 $\nu_l = \mu_l / \rho_l$)。

このKHモデルにおいては、ノズル出口において噴孔径と同じ直径を持つ”Blob”が与えられ、Kelvin-Helmholtz waveによって表現されたずれ流動により、”Blob”の分裂が始まる。つまり、液滴表面波の波長 Λ_{KH} により、親液滴(半径 r_p)から式(4.25)のような半径 r_{cKH} の新しい子液滴が形成されるとしている。

$$r_{cKH} = B_0 \Lambda_{KH} \quad (4.25)$$

また、分裂後の親液滴は新しい親液滴と呼ぶ。液滴の分裂により、(親パーセル内の)親液滴の半径 r_p は式(4.26)に従って減少するものとしている。

$$\frac{dr_p}{dt} = -\frac{r_p - r_{cKH}}{t_{bKH}} \quad (4.26)$$

ここで、 t_{bKH} は液滴分裂時間であり、式(4.27)により算出する。

$$t_{bKH} = \frac{3.726B_1 r_p}{\Lambda_{KH} \Omega_{KH}} \quad (4.27)$$

ここで、 B_0 は液滴径定数であり、 B_1 は分裂時間定数である。また、親のパーセルに含まれる液滴の数は保存するものとし、質量保存則により、子のパーセルに含まれる液滴数を求める。

b) Rayleigh-Taylorモデル⁸⁾

燃料の粘度を無視し($\mu_l=0.0$), 表面張力のみを考慮すると, 液滴表面で成長する Rayleigh-Taylor waveの最大成長率 Ω_{RT} と波の数 K_{RT} はBellmanとPenningtonによって式(4.28)のように表されている.

$$\Omega_{RT} = \sqrt{\frac{2}{3\sqrt{3}\sigma} \frac{[-g_t(\rho_l - \rho_g)]^{3/2}}{\rho_l + \rho_g}} \quad (4.28)$$

$$K_{RT} = \sqrt{\frac{-g_t(\rho_l - \rho_g)}{3\sigma}}$$

ここで, \vec{g} を重力, \vec{a} を液滴の加速度, \vec{j} を単位ベクトルとすると, 液滴進行方向における加速度 g_t は, 式(4.29)によって算出する. また, 液滴の加速度 \vec{a} は, 式(4.30)に示す液滴の運動方程式より得られる.

$$g_t = \vec{g} \cdot \vec{j} + \vec{a} \cdot \vec{j} \quad (4.29)$$

$$m_d \vec{a} = \rho_l V_d \frac{d\vec{v}}{dt} = C_D A_f \frac{\rho_g U^2}{2} \cdot \frac{\vec{U}}{|\vec{U}|} \quad (4.30)$$

ここで, $\vec{U}(\equiv \vec{u} - \vec{v})$ は液滴と周囲の気体との相対速度であり, 式(4.31)により, それぞれ球を仮定した場合の液滴の体積, 液滴の前面投影面積である.

$$V_d = \frac{4\pi r^3}{3}, \quad A_f = \pi r^2 \quad (4.31)$$

液滴の抵抗係数 $C_d(=C_{d,sphere})$ に関しては, Stokesの抗力法則の修正版より, 液滴のレイノルズ数を用いて式(4.32)のように表される.

$$C_D = \frac{24}{Re_d} \left(1 + \frac{1}{6} Re_d^{\frac{2}{3}} \right) \quad Re_d \leq 1000 \quad (4.32)$$

$$C_D = 0.424 \quad Re_d > 1000$$

液滴の抵抗係数に対する液滴の振動や歪みの効果を考慮するために, TABモデルを用いる. 液滴の抵抗係数は液滴の変形の大きさ $y(=y_0p(n))$ に関連すると推定でき, 式(4.33)により算出される.

$$C_D = C_{D,sphere} (1 + 2.632 y) \quad (4.33)$$

したがって, 液滴の加速度 \vec{a} は, 式(4.34)により算出し, もし液滴が球であると仮定するならば, 式(4.35)となる.

$$\bar{a} = \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{C_D A_f}{\rho_l V_d} \cdot \frac{\rho_g U^2}{2} \cdot \frac{\vec{U}}{|\vec{U}|} \quad (4.34)$$

$$\bar{a} = \frac{3}{8} \cdot \frac{\rho_g U}{\rho_l r} \cdot \vec{U} \cdot C_D \quad (4.35)$$

したがって式(4.28)より、表面張力 1.774×10^{-2} N/mをもつ軽油を想定した場合、最大成長率 Ω_{RT} と波の数 K_{RT} の間には、式(4.36)のような関係が存在することになる。

$$\Omega_{RT}^2 = 5 \times 10^4 K_{RT} - 24.6 K_{RT}^3 \quad (4.36)$$

一方、燃料の粘度と表面張力の両方を考慮したとき($\mu_l \neq 0.0$)、静的粘度 7.46×10^{-4} sN/m²をもつ軽油に対するRayleigh-Taylor waveの最大成長率 Ω_{RT} と波の数 K_{RT} の関係は、BellmanとPenningtonによって式(4.37)のように表される。

$$\frac{-3.6 \times 10^4 K_{RT} + 17.74 K_{RT}^3 + 0.72 \Omega_{RT}^2}{\sqrt{(7.46 \times 10^{-3})^2 K_{RT}^2 + 5.37 \times 10^{-3} \Omega_{RT}^2}} + 4 \Omega_{RT} K_{RT} = 0 \quad (4.37)$$

なお、いずれの場合においても空気の密度と粘度は燃料のそれと比べて非常に小さく、また、 $g_t = 500 \text{ m/s}^2$ であるという仮定のもとで、式(4.36)、(4.37)が導出されている。以上の式をもとに、燃料の表面張力のみを考慮した場合と粘度と表面張力の両方を考慮したときの $W_{RT} \cdot K_{RT}$ 線図の比較がRicartら^[8]により示されており、両者の結果はほぼ一致している。これは、軽油の場合において粘度の影響を無視することが妥当な仮定であることを示している。ここで、BDFの粘度および表面張力は軽油よりさらに高くなっているため、BDFの場合においてもその粘度の影響を無視できると考えられる。

Rayleigh-Taylor waveの波長は $2\pi B_2/K_{RT}$ であり、それと親液滴の直径を比較する。波長が液滴の直径より小さい場合に、Rayleigh-Taylor waveが液滴の表面において成長するものとする。いま、波が成長した積算時間を、式(4.38)で表される液滴分裂時間 t_{bRT} と比較すると、分裂時間 t_{bRT} を経過すると、式(4.39)で表される半径を持つ子液滴が含まれるパーセルが生成する。また、液滴の分裂により、親液滴の半径 r_p はKHモデルと同様に式(4.40)に従って減少する。

$$t_{bRT} = \frac{C_\tau}{\Omega_{RT}} \quad (4.38)$$

ここで、 C_τ は任意定数であり、一般的に0.1～5.33が与えられる。

$$r_{cRT} = \frac{\Lambda_{RT}}{2} = \frac{\pi B_2}{K_{RT}} \quad (4.39)$$

ここで、 $B_2=0.13$ を用いる.

$$\frac{dr_p}{dt} = -\frac{r_p - r_{GRT}}{t_{bRT}} \quad (4.40)$$

親のパーセルに含まれる液滴の数は保存するものとし、質量保存則から子のパーセルに含まれる液滴数が求まるのも同様である.

c) モデルの定数設定および検証

本研究における燃料噴霧の可視化実験は、雰囲気密度 12kg/m^3 、雰囲気温度 900K の条件で行った. そこで、ここでは温度 900K の高温条件を中心として分裂モデル定数を決定するとともに、各燃料における噴射圧に対してその傾向を表現できることを目標とした.

表 4.3 KH-RT モデルの定数

Fuel	D100	MO100
B0:KH break up coefficient for droplet radius	0.61	0.61
B1:KH break up coefficient for timing (before wall impingement)	60	50
B1:KH break up coefficient for timing (after wall impingement)	1.73	1.73
B2:RT break up coefficient for droplet radius	0.13	0.13
C_τ :RT break up coefficient for timing	0.1	0.1
C_b (distant): break up coefficient for length (L_b)	2.0	3.0

図 4.16 に示すノズルを使用し、図 4.17 に示す計算メッシュにより、表 4.3 に示すモデル定数を用いて、噴射圧力 73MPa 、 120MPa 、 160MPa における計算結果と実験結果を図 4.18 に比較して示す. ここでは、燃料噴射期間中に燃料の供給と蒸発が平衡に達した期間での噴霧先端到達距離について検討を行った. 計算結果から、各燃料における噴射圧に対する傾向が再現できていることから、今後このモデル定数を使用することとした. ここで、混合燃料においては、第 3 章に述べたように、MO40 と D100 の噴霧先端到達距離の違いがほとんどなく、これにより混合質量割合 50%以下に対して、D100 の係数を使用し、50%以上では MO100 の係数を使用することにした. なお、噴霧の蒸発の観察は行っていないので、噴霧モデルの蒸発モデルの検討は行っていない.

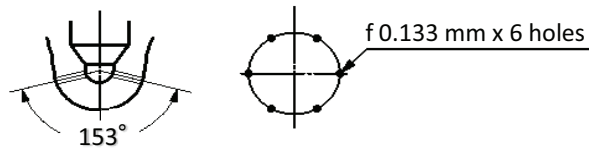


図 4.16 ノズル形状

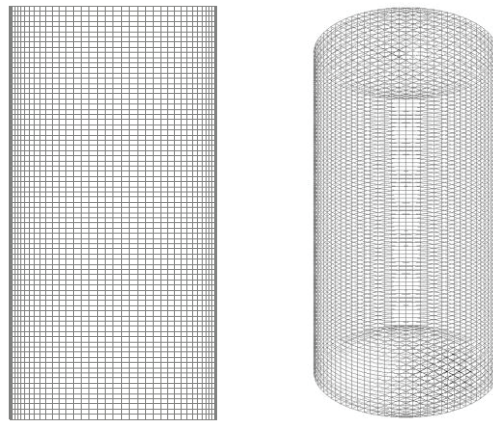


図 4.17 定容容器の計算メッシュ

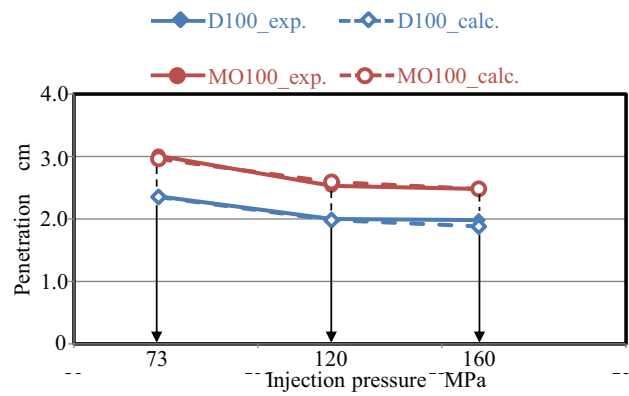


図4.18 噴霧先端到達距離の検証

4.2.3 3次元燃焼反応計算結果と考察

a) 計算条件

KIVA-3V コードを用い、表 4.4 に示す詳細モデルを加えて計算を行った。また、各モードにおいて使用頻度最も高い条件（1500rpm, 72Nm）を計算条件とし、図 4.19 に示すよう

に噴射ノズルが6噴孔を持つので、1つの噴霧を対象として60°のセクターメッシュを使用し、実験で得られた吸気組成から、表4.5に示す計算の吸気条件をにおいて計算を行った。また、吸気バルブが閉じるタイミング（上死点前154°）を計算開始時期とし、排気バルブが開くタイミング（上死点后157°）を計算終了時期とした。

表4.4 KIVA-3V コードの詳細モデル

Combustion model	PaSR model ⁹⁾
Chemical reaction mechanism	Diesel oil surrogate model ¹⁰⁾ / FAME surrogate model ¹¹⁾
Turbulence model	RNG k- ϵ ¹⁾
Spray breakup model	KH-RT hybrid model ⁸⁾
Soot formation model	Phenomenological soot model ¹²⁾
NOx formation model	Extended Zeldovich mechanism ¹³⁾

表4.5 吸気組成

Intake air components (Experimental)		
O ₂	vol. %	3.20
CO ₂	vol.%	16.56
Intake air components (Calculated)		
N ₂	mole rate	4.525
O ₂	mole rate	1.000
CO ₂	mole rate	1.655
H ₂ O	mole rate	1.655

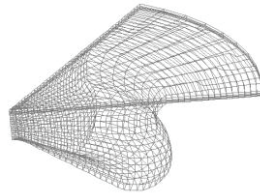


図 4.19 60° セクターメッシュ

b) 実験値と計算値の比較

図 4.20 に示すように、各燃料において燃焼圧力、熱発生率、Soot の排出量のモデルによる計算値は実験値とほぼ一致していることが分かった。ここで、MO の使用により、パイロット噴射で燃焼が促進される傾向や、MO の混合率が増加すると Soot の排出量が減少する傾向も予測されている。

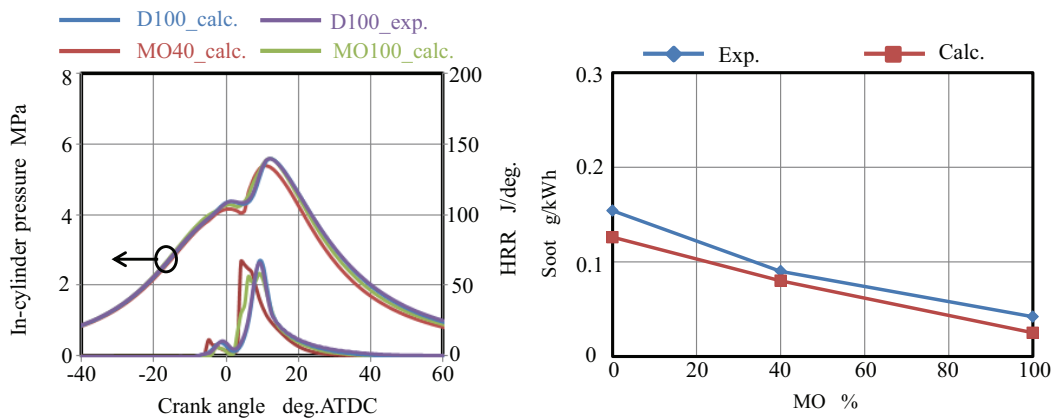


図 4.20 実験値と計算値の燃焼圧力、熱発生率および Soot の排出量の比較

c) 各燃料が噴霧特性に与える影響

図 4.21 に各燃料における筒内当量比分布を示す。これは、噴霧の蒸気相に相当する。この結果から、MO100 においては到達距離が長くなり、噴霧の中心部に濃い燃料領域が存在しないことが分かった。この結果は噴霧観察実験と同様の結果となり、また、燃料の蒸発特性が噴霧特性に与える影響がほとんどないことが確認された。

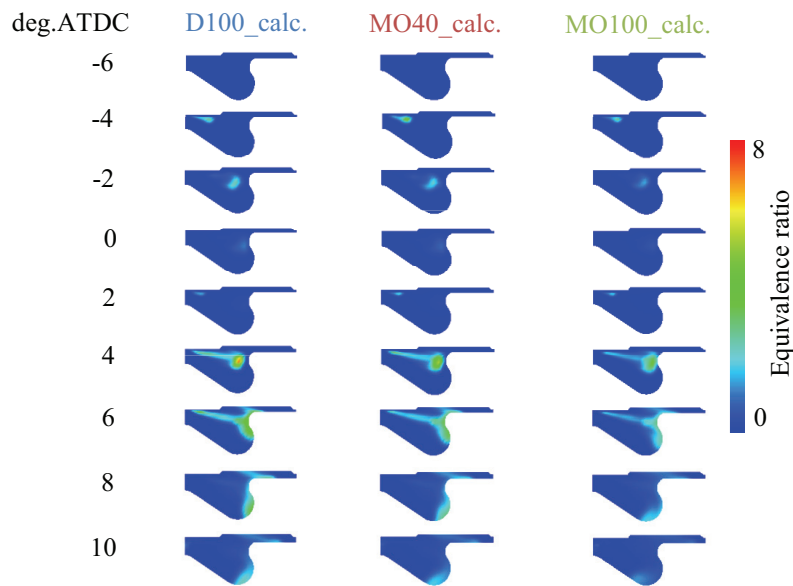


図 4.21 各燃料における筒内当量比分布

d) 各燃料におけるSootの生成と酸化メカニズムの解析

Sootの排出量の実験から、低回転・低負荷の条件においては、粒子数(PN)はほぼ同等であるが、平均粒径はMOの方が小さくなっていることが分かった。図4.22に粒子数の密度および平均粒径の筒内履歴を示す。この結果から、MOの使用により、PN]と粒径が減少することが確認された。PNの密度と粒径は空気過剰率の増加により減少することが報告されている¹⁴⁾。本研究では、燃料によって空気過剰率が変化しない一方、MOの使用により局所当量比が減少することは空気過剰率が増加することと同様であると考えられる。

また、図4.23に示すように、MOの使用により、Sootの質量と生成率の立ち上がりが遅くなり、表面成長が速くなる一方、最終ほぼ同等となることが予測された。また、Sootの質量と生成率のピーク値がMOの方が低くなる一方、すべての燃料においてSootの酸化率がほぼ同等であった。

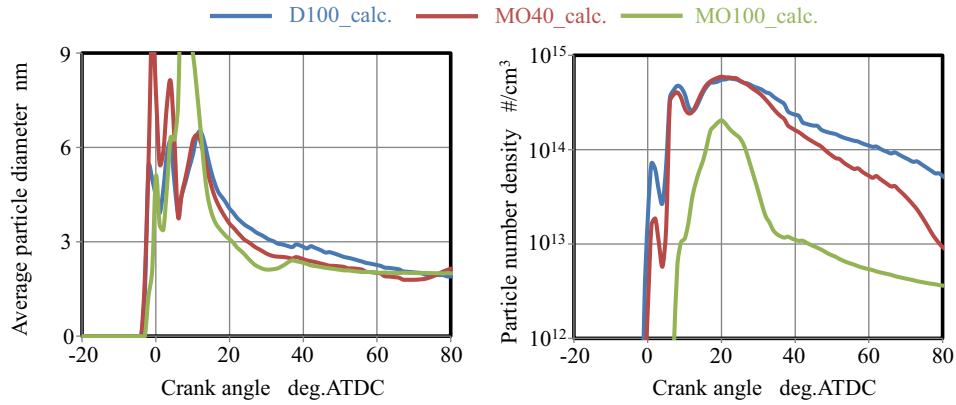


図 4.22 各燃料における平均粒径履歴と粒子数密度の履歴

第2章に示すように、活性サイトのみにアセチレンが付加すること仮定した場合、表面成長速度は式(2.39)として表現される。また、 α は粒子表面の表面反応温度依存性を表現したものであり、式(2.40)から計算される。パイロット噴射による燃焼の違いにより、その反応温度が異なり、MOの使用では表面反応温度が低く、活性サイト密度の大きくなり、かつ平均粒径が多くなっている。しかしながら、その後、メイン燃焼はほぼ同等であり、MOの使用によってアセチレンの生成が少なくなり、活性サイト密度の減少が大きくなっていることが分かる。従って、MOの最終的な平均粒径は小さくなっている。

$$\omega_{SG} = k_s P_{C_2H_2} \left\{ \alpha \frac{\chi_{soot^i}}{N_A} A_{soot} f_n \right\} \quad (2.39)$$

ここで、 A_{soot} はSootの表面積であり、 $P_{C_2H_2}$ はアセチレンの分圧である。

$$\alpha = \frac{1}{2} \left\{ \tanh\left(\frac{8168}{T} - 4.57\right) + 1 \right\} \quad (2.40)$$

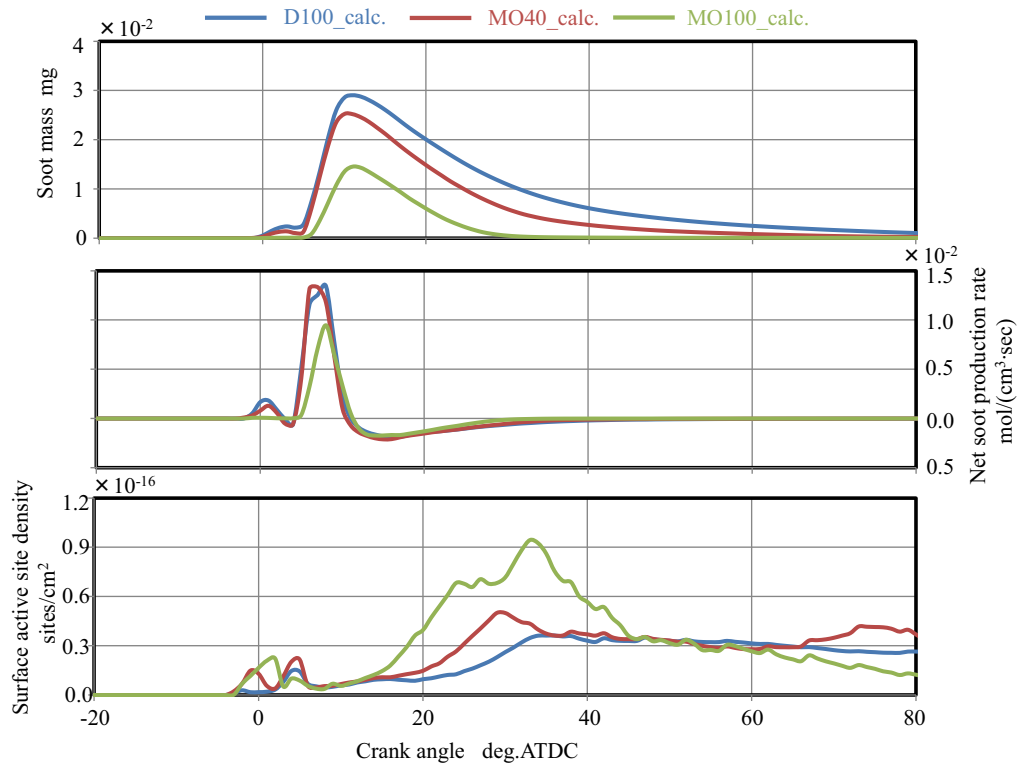


図 4.23 各燃料における Soot 履歴, Soot 生成率履歴および表面活性サイト密度の履歴

第2章に述べたように, Soot の核形成過程としては, 気相化学種において最も分子量が大きく, また球形などの立体構造を形成しうる五員環構造を有するアセナフチレン(A_2R5)を採用した. 核形成のプロセスは式(2.33)により記述され, それに伴う Soot 微粒子の質量増加は式(2.34)と式(2.35)に従うものとした.



$$\omega_{NC} = k_{NC} [A_2R5] \quad (2.34)$$

$$k_{NC} = 1.0 \times 10^3 \exp(-5000/RT) \quad (2.35)$$

また, 核形成による粒子数密度変化は式(2.36)により記述され, この時の一次粒子炭素数(C_{min})は本モデルでは 100 と設定した. なお, N_A はアボガドロ定数である.

$$\frac{df_{n,NC}}{dt} = \frac{N_A}{C_{min}} 12\omega_{NC} \quad (2.36)$$

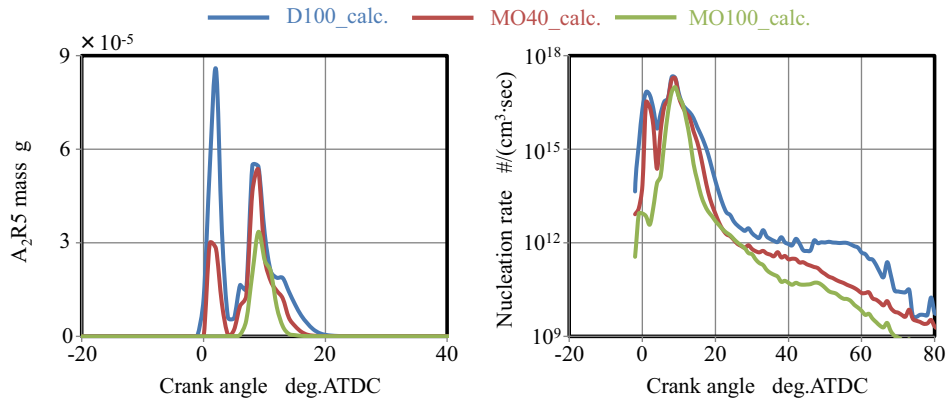


図 4.24 各燃料における Soot 粒子の核生成履歴 (A_2R_5 の生成および核生成率)

それによって、図 4.24 に示すように、 A_2R_5 の質量履歴および核生成率は MO の使用により減少することが分かった。特に、パイロットの部分において、MO の A_2R_5 生成が極めて少なく、それにより、核生成も少なくなっている。しかしながら、メイン燃焼においての違いはほぼないことが分かった。

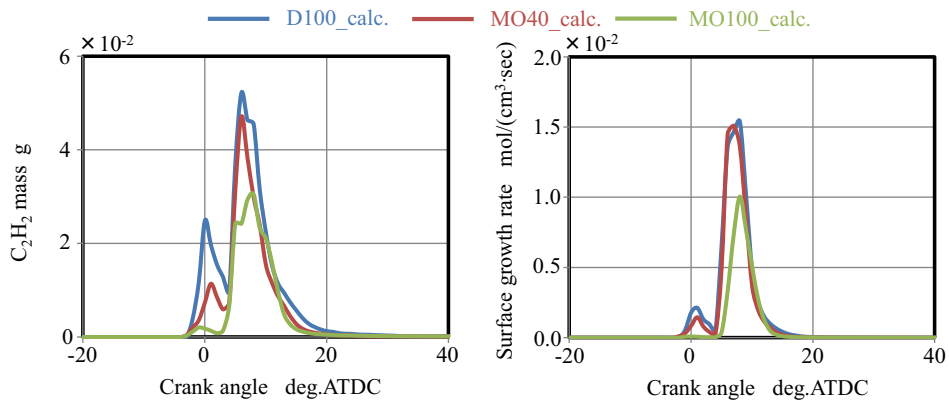


図 4.25 各燃料における Soot の表面成長の履歴 (C_2H_2 の生成および表面成長率)

アセチレン(C_2H_2)は表面成長の仲介物質であり、図 4.25 に示すように、MO により生成が少なくなっていることが分かる。また、 A_2R_5 、 C_2H_2 および表面成長率が同じ傾向を表している。

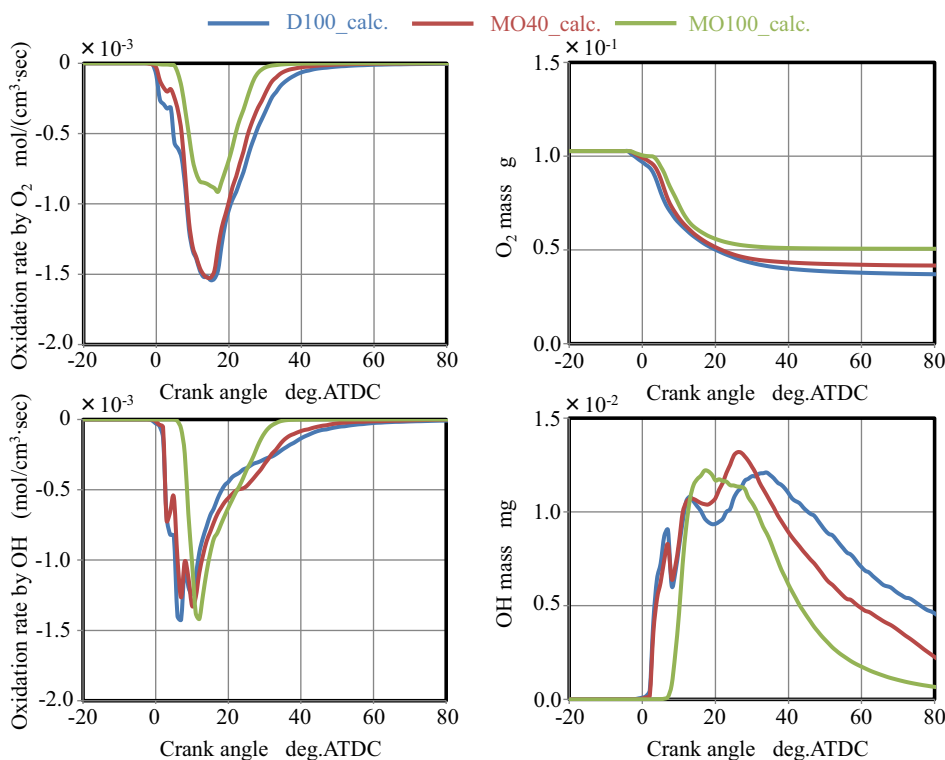


図 4.26 各燃料における Soot の酸化メカニズム
(Soot の酸化率および O_2 と OH の生成率)

Soot の酸化は主に O_2 、OH および NO によるものである。本研究において NO による酸化がわずかであるため、無視できるものとした。図 4.26 に O_2 および OH による酸化を示している。OH による表面酸化反応は Soot の酸化において支配的であることが報告されている¹⁵⁾。しかしながら、MO では核生成と表面成長が軽油より少なくなっているため、 O_2 による酸化が少なくなっている。これは、MO において核生成と表面成長が少なくなっているためである。一方、OH による酸化はほぼ同等であることが分かる。

e) 各燃料における Soot の生成および酸化メカニズムの分布

図 4.27 に各燃料における筒内温度分布を示す。これより、パイロット噴射による燃焼において、MO により温度が低く、メイン燃焼においてほぼ同等であることが分かる。また、各燃料において最高燃焼温度の差がほぼないことから、 NO_x の排出がほぼ差がないことが分かった。

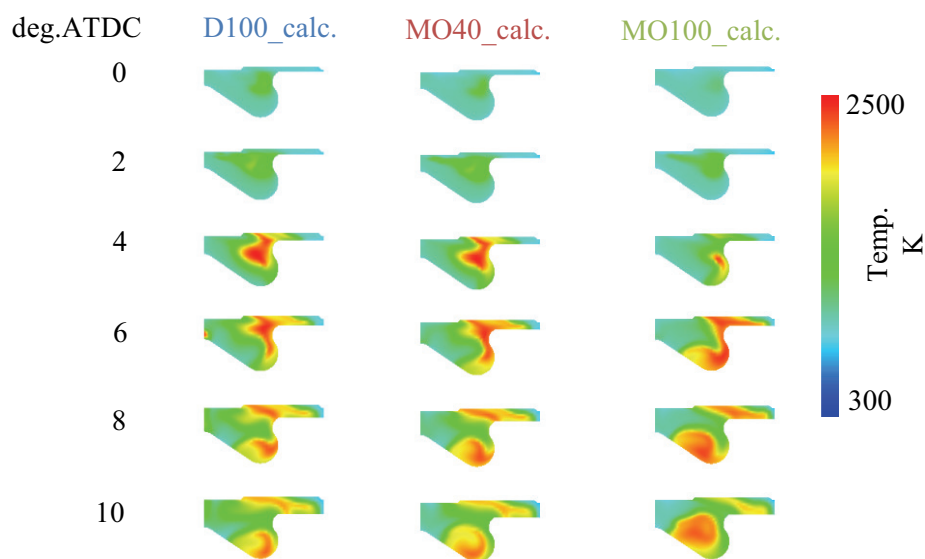


図 4.27 各燃料における筒内温度分布

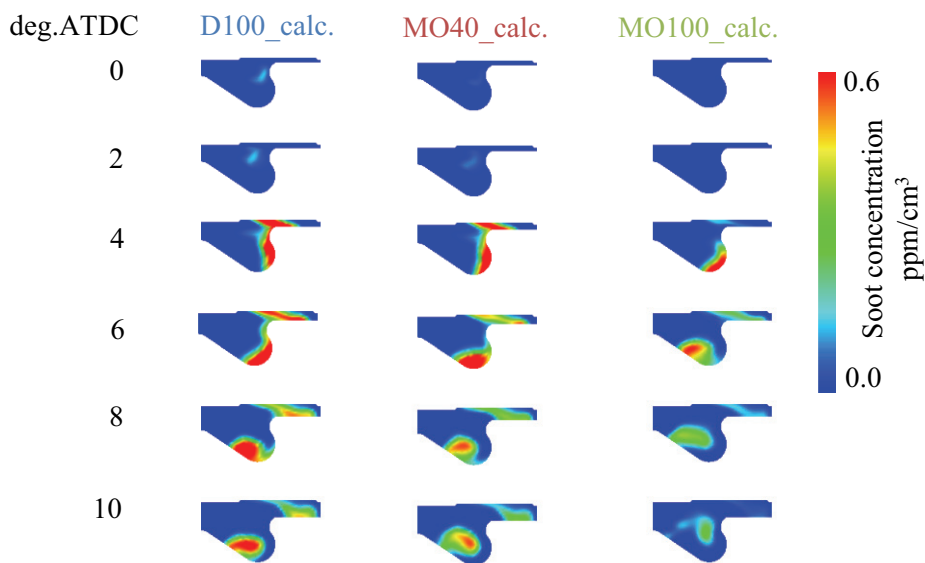


図 4.28 各燃料における Soot 生成筒内分布

図 4.28 に Soot 生成の筒内分布を示す。これより、Soot はピストンおよびボアのキャビティ部分から生成し、スキッシュ流れによりシリンダ内の中心側に移動すること、また、Soot の生成分布については、燃料の違いによる差がほとんどないことが分かった。

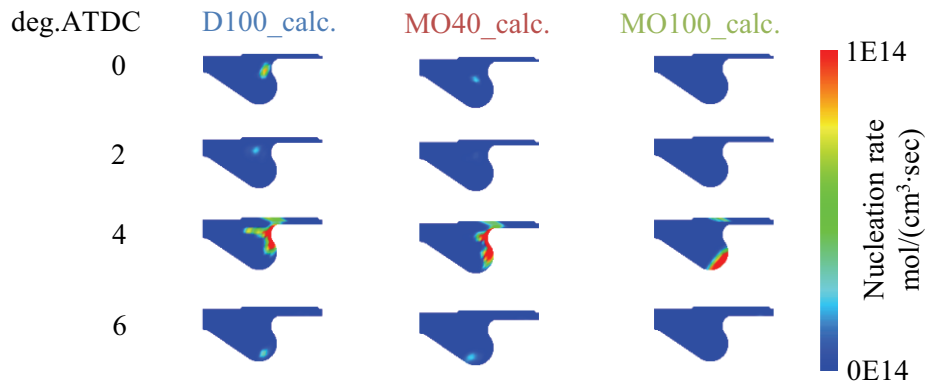


図 4.29 各燃料における核生成率の筒内分布

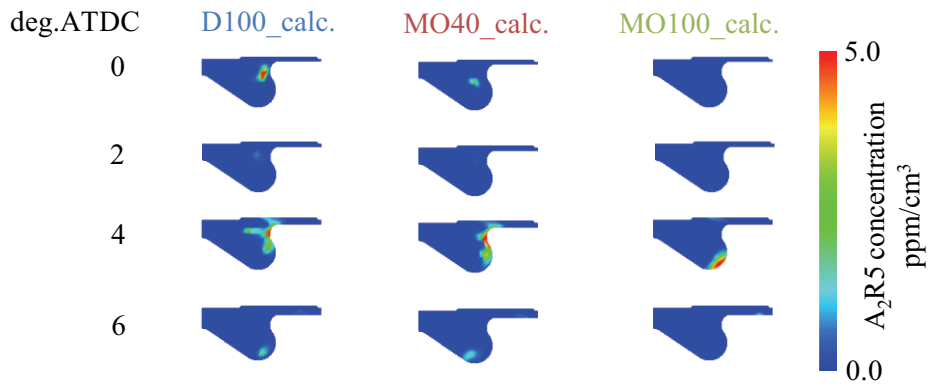


図 4.30 各燃料における A₂R5 の生成の筒内分布

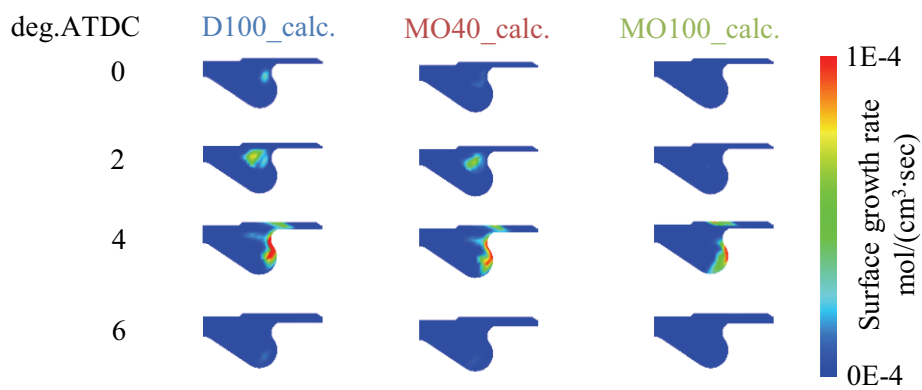


図 4.31 各燃料における表面成長率の筒内分布

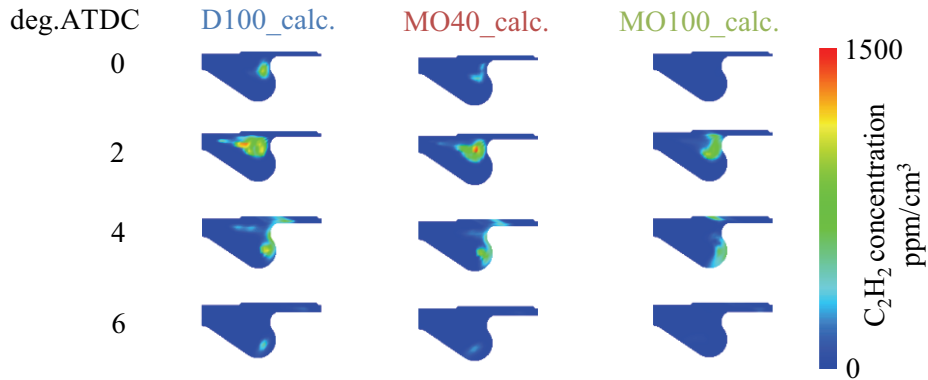


図 4.32 各燃料における C_2H_2 の生成の筒内分布

本研究では、Soot の形成過程において、前駆物質形成過程を経て、前駆物質からの凝縮核形成、粒子核同士の衝突・合体による凝集、粒子表面での表面反応による成長、および酸化による減少、さらには成熟した粒子同士の凝集塊形成により進行するものと仮定している。

図 4.29 から図 4.32 に示すように、詳細な解析では、 A_2R5 の生成による核生成と C_2H_2 の生成による表面反応があり、筒内分布が同様になることが分かった。これより、 A_2R5 は主に燃料過剰で低温の領域において生成され、 C_2H_2 は、燃料噴霧の領域と一致し、燃料蒸発のリフトオフ領域で生成されるものと考えられる¹⁶⁾。また、MO100 ではパイロット噴射による核生成と表面成長は見られなかった。

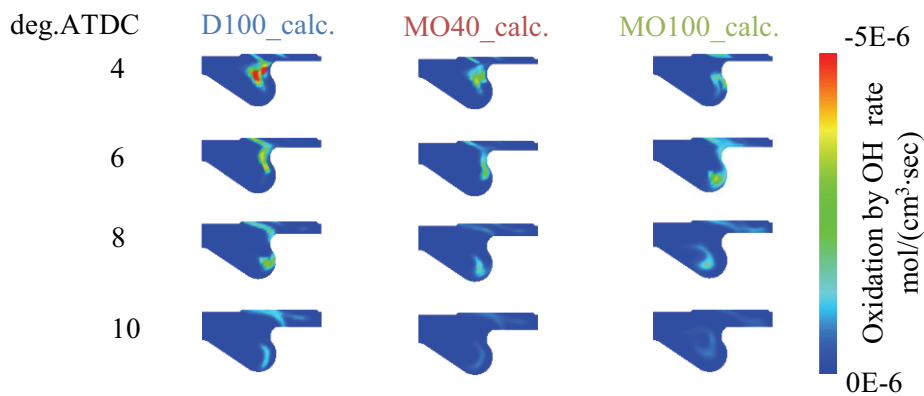


図 4.33 各燃料における OH による Soot の酸化率の筒内分布

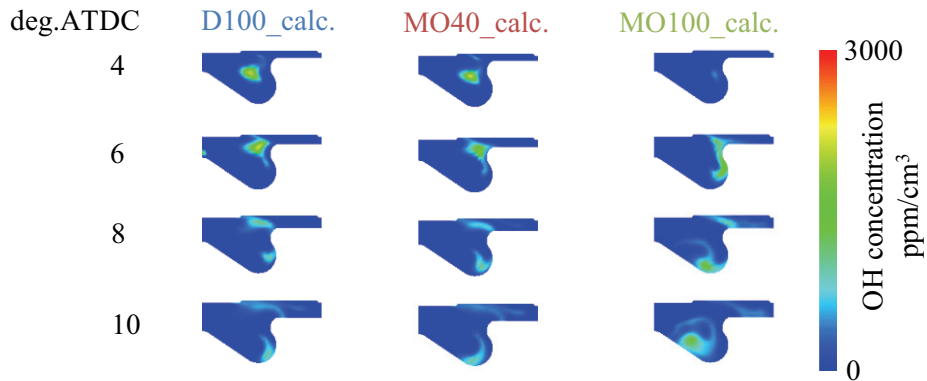


図 4.34 各燃料における OH の生成の筒内分布

また、 A_2R5 と C_2H_2 の核生成反応と表面成長反応が主な反応となり、それらが完結した後、Soot の酸化反応が燃焼室内での支配的反応となる。

図 4.33 と図 4.34 に OH の生成の筒内分布と OH による Soot の酸化率の筒内分布を示す。Soot の酸化としては OH が最も重要な成分であり、OH は噴霧の外側に生成されることが報告されている。また、OH の生成領域と OH による Soot の酸化領域が一致している。さらに、ピストンのキャビティ内において高濃度の OH 生成が見られた。一方、各燃料において、OH による Soot の酸化量はほぼ同等なことが分かった。

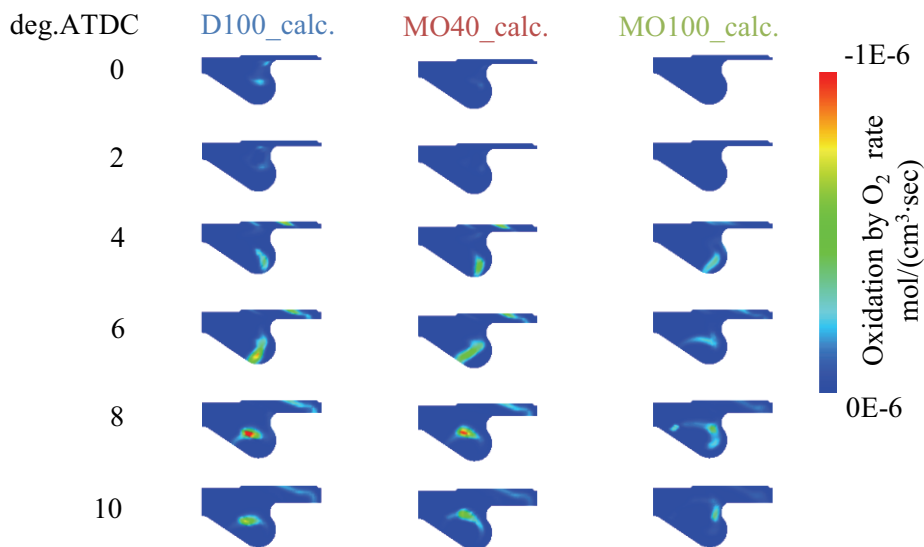


図 4.35 各燃料における O_2 による Soot の酸化率の筒内分布

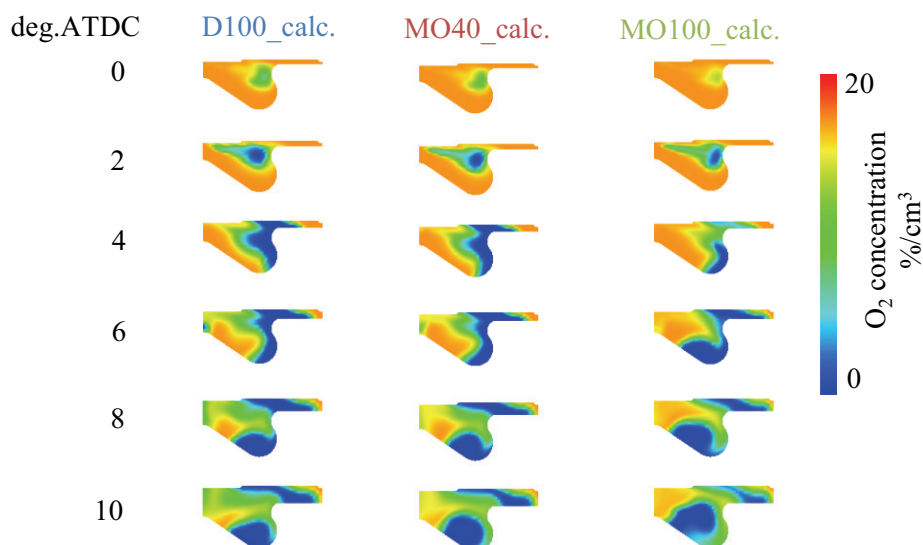


図 4.36 各燃料における O_2 の生成の筒内分布

図 4.36 に示すように、すべての燃料において O_2 の筒内分布は同様であり、図 4.35 に示すように、 O_2 による Soot の酸化率の分布も同様の傾向になること、MO100 では、 O_2 による Soot の酸化がほかの燃料に比べて少なくなること分かった。さらに、 O_2 の反応において OH の生成になることが分かった。

4.3 まとめ

BDF の燃焼反応モデルを用いて、0 次元の化学詳細反応コードを用いて、シリンダ内の温度、圧力、化学種濃度等は均一であると仮定し、BDF および軽油に対して、CHEMKIN-PRO により、燃焼反応計算を行い、各燃料の燃焼特性と排出ガス特性を解明した。

- 1) 含酸素燃料では、低温領域での着火遅れが D100 よりも著しく短くなり、低温での燃焼を促進する。
- 2) 高温領域において、両燃料の着火遅れはほぼ同等であり、初期圧力が増加すると着火遅れが短くなり、燃料間の違いが少なくなる。従って、より雰囲気圧が低いパイロット噴射による着火では、含酸素燃料の場合、促進されるものの、より雰囲気圧が高いメイン燃焼では燃料による違いがほぼないことが説明される。
- 3) 各燃料において、当量比の増加によって着火遅れが短くなり、高温領域では、着火遅れの変化が少なくなり、燃料間の違いが少なくなる一方、低温領域では、含酸素燃料にお

いて著しく減少する。また、含酸素燃料では、当量比が小さくなると、低温領域においては着火遅れが長くなり、高温領域においては逆に短くなり、1000K前後において、着火遅れがほぼ同等となる。

- 4) 当量比 1 前後の最大断熱火炎温度において両燃料ともにほぼ同等であり、高当量比領域において、MO100 の蒸発潜熱が D100 より高いため、断熱火炎温度が低下する。
- 5) MO では、Soot が D100 によりも高い温度領域で生成し、MO40 では、Soot が 2 つの領域で生成する。また、燃料の種類によらず NO_x の生成領域がほとんど変わらない。
- 6) D100 の燃焼では Soot と NO_x の両生成領域を通過する一方、MO の燃焼では、Soot の生成領域に通過しないことから、より低温で過濃な条件においても Soot の排出が少ないことが説明される。

また、軽油をベースとして開発した噴霧モデルを用いて、BDF の噴霧観察の結果により検証し、BDF に使用できる噴霧モデルを構築した。

- 1) 本研究で行った燃料噴霧の可視化実験により、温度 900 K の高温条件を中心として分裂モデル定数を決定した。
- 2) 燃料噴射期間中に燃料の供給と蒸発が平衡に達した期間での噴霧先端到達距離について検討し、各燃料における噴射圧に対する特性を再現することができた。

さらに、3次元の数値流体シミュレーションにより BDF の燃焼・排出ガス特性を解析し、現象論的 Soot モデルによりエンジン筒内の Soot の生成と酸化のメカニズムを明確にし、その排出を低減するために求められる混合気形成過程と燃焼温度について考察した。

- 1) 各燃料において燃焼圧力、熱発生率および Soot の排出量は計算値と実験値がほぼ一致し、本モデルを検証することができた。このモデルにより、MO ではパイロット噴射による燃焼が促進され、MO の混合率が増加とともに Soot の排出量が減少する実験と同様な傾向が得られた。
- 2) MO では、粒子数および粒径が減少し、またこれらは空気過剰率の増加により減少する。
- 3) MO では、Soot の質量と生成率の立ち上がりが遅くなり、表面成長が速くなる一方、最終的にはほぼ同等となり、Soot の質量および生成率のピーク値は MO の方が低くなる。また、すべての燃料において Soot の酸化率はほぼ同等である。
- 4) 各燃料における筒内温度分布から、MO では、パイロット噴射による燃焼ではより温度が低く、メイン燃焼ではほぼ同等と判断される。また、各燃料において最高燃焼温度の

差がほぼないことにより、 NO_x の排出にはほとんど差がない。

5) Soot 生成の筒内分布により、Soot はピストンおよびボアのキャビティ部分から生成し、スキッシュ流れによりシリンダ内の中心側に移動し、燃料の違いによる差がほぼないと判断される。

6) Soot 生成の過程において、 A_2R_5 と C_2H_2 の核生成反応および表面成長反応が主な反応となり、それらが完結した後、Soot の酸化反応が燃焼室内での支配的な反応となる。

第5章 結論

本章ではバイオディーゼルを用いたディーゼル機関の燃焼と排出ガス特性について、実験的に調査した結果と、数値解析により得られた知見を要約して結論とするとともに、今後の研究課題や成果を踏まえた発展性について述べる。

5.1 得られた知見の概要

地球温暖化や燃料枯渇の問題が深刻化しており、バイオディーゼル（BDF）はディーゼルエンジンの代替燃料として実用可能であり、CO₂ 排出量の抑制対策としても有効とされている。本研究においては、ジャトロファから製造された BDF が軽油の代替燃料として、実用化されることを想定して、これを用いた際のディーゼルエンジンの燃焼特性と排出ガスの特性に及ぼす影響を実験により調査した。また、数値シミュレーションモデルによってそれらの特性を解明し、排出ガス対策を考慮して BDF を有効利用するための具体的なエンジン制御の指針を得ることを本研究の目的とする。

総排気量 2.2l 直列 4 気筒の量産ディーゼルエンジンを用いて、日欧米で適用されている乗用車の実走行モードにおいて使用頻度が高い代表的なエンジン運転条件を対象に、多量 Cooled EGR、多段噴射、高圧噴射および PCCI 燃焼において、BDF の使用による燃焼特性および排出ガス特性に与える影響を実験的に調査した。

まず、含酸素燃料（J40、MO40 と MO100）を用いた場合、全運転領域においてディーゼルエンジン用として設計された制御条件での運転が可能であった。具体的には、パイロット噴射によって燃焼を促進することができ、NO_x の排出量を維持しながら Soot の排出量を大幅低減できることを確認した。また、PN は低中回転速度の条件で D100 とほぼ一致し、高回転条件で大幅低減し、すべての条件において平均粒径が小さくなり、SOF 成分については、いずれの燃料残留した未燃焼の燃料が主な成分であることを明らかにした。さらに、含酸素燃料により燃費（BSEC）を悪化させずに、未燃成分の排出量の低減が可能なことを示した。

次に、いずれの燃料も、高圧噴射により Soot の排出量が大幅に減る一方、NO_x 排出量の増加を招き、含酸素燃料では D100 を上回る NO_x が排出されることが分かった。また、核モード領域（平均粒径<50nm）での PN はいずれの燃料もほぼ同等である一方、蓄積モ

ード領域（50nm<平均粒径<100nm）でのPNは、MO40の方が少なくなっていることが確認された。また、いずれも未燃成分が増加する傾向があり、燃費の悪化が認められた。

含酸素燃料ではD100と比べ、多量Cooled EGRの使用により、Sootの排出を抑えながらNOxの低減が可能となった。また、PM排出量とPNのEGR率による変化傾向はD100とほぼ同等であり、高EGR率の条件では、核モード領域でのPNはD100より多くなる一方、蓄積モード領域でのPNが少なくなることが分かった。なお、D100よりも未燃成分の排出が低減して燃焼効率が向上するため、燃費の改善も同時に実現できることが確認された。

さらに、含酸素燃料では、PCCI燃焼により、NOxの排出を維持するとともに、Sootの排出が大幅に低減されるため、噴射圧を下げることにより排出ガス低減と燃費・騒音の改善に効果的であることが明らかになった。また、PNとPMの平均粒径については、いずれの燃料も低減し、SOF成分も低減することが確認された。

高温・高圧場を再現する定容容器内に噴射した燃料噴霧を高速ビデオカメラにより観察した。その結果、含酸素燃料の使用により、すべての条件において噴霧到達距離が長くなり、低噴射圧では噴射速度が速くなり、高圧噴射においてD100とほぼ同等になることが分かった。

以上のことにより、高BDF混合率において、量産型ディーゼルエンジンへの応用が可能となり、高EGR率および低噴射圧の条件にすることで、軽油よりも燃焼が改善され、排出ガスが低減されることが明らかになった。また、このような特性によってPCCI燃焼の実現も可能となった。

このような実験結果を理論的に説明するため、BDFの燃焼反応モデルによる0次元の化学詳細反応コードを用いて、シリンダ内の温度、圧力、化学種濃度等は均一であると仮定して燃焼反応計算を行い、BDFと軽油の燃焼特性および排出ガス特性の解明を試みた。その結果、含酸素燃料はD100よりも低温領域での着火遅れが著しく短くなり、低温燃焼が促進されるものと推察された。高温領域においては、いずれの燃料の着火遅れもほぼ同等であり、初期圧力増加すると着火遅れが短くなり、燃料間の違いは少なくなる傾向が認められた。

この結果から、より雰囲気圧が低い条件で行うパイロット噴射により、含酸素燃料では着火が早まり、より雰囲気圧が高い主燃焼においては燃料による違いがわずかな実験事実が説明される。いずれの燃料も、当量比の増加によって着火遅れが短くなり、高温領域で

は、着火遅れの変化量が少なくなり、燃料間の違いが少なくなる一方、低温領域において、含酸素燃料において著しく減少する。また、含酸素燃料においては、当量比が小さくなると、低温領域においては着火遅れが長くなり、高温領域においては逆に短くなり、1000K前後において、着火遅れがほぼ同等となった。当量比1前後の最高断熱火炎温度はいずれの燃料もほぼ同等であるが、高当量比領域では、MO100の蒸発潜熱がD100より高いため、断熱火炎温度の低下が見られた。MOの場合、D100により、Sootがより高い温度領域で生成し、MO40においては、Sootが2つの領域で生成する。また、燃料の種類によらずNOxの生成領域がほとんど変化しないことが分かった。D100の火炎がSootとNOxの生成領域を通過する一方、MOでは、火炎がSootの生成領域に通過しないことから、より低温で過濃な条件においてもSootの排出が少ないことが説明できる。

また、軽油をベースとして開発された噴霧モデルにおいてBDFの噴霧特性を記述できるようBDFの噴霧観察の結果を用いて修正し、雰囲気温度900Kの高温条件を中心として噴射燃料の分裂モデル定数を決定した。燃料噴射期間中に燃料の供給と蒸発が平衡に達した期間での噴霧先端到達距離について検討した結果、各燃料における噴射圧に対する傾向が再現することができた。

さらに、3次元の数値流体シミュレーションによりBDFの燃焼・排出ガス特性を明らかにし、現象論的Sootモデルを用いてエンジン燃焼室内のSootの生成および酸化のメカニズムを解析して、その排出を低減するために必要される混合気形成の要件について考察した。

まず、各燃料において、燃焼圧力、熱発生率およびSootの排出量の計算値は実験値とほぼ一致することを確認し、MOでは、パイロット噴射により燃焼が促進され、MOの混合率が増加とともにSootの排出量が減少するという実験の傾向を説明することができた。

次に、MOの使用により、粒子数および粒径が減少し、粒子数の密度および粒径は空気過剰率の増加により減少する傾向があり、Sootの質量と生成率の立ち上がりが遅くなり、かつSootの質量と生成率のピーク値が低くなることが確認された。なお、すべての燃料においてSootの酸化率がほぼ同等であった。

また、各燃料における筒内温度分布の計算結果から、MOではパイロット噴射による燃焼の開始早まる一方、主燃焼ではd100とほぼ同等であった。また、各燃料において最高燃焼温度の差がほぼなかったことにより、NOxの排出にはほとんど差がなかった。

さらに、Soot生成の筒内分布の計算結果より、Sootはピストンおよびボアのキャビテ

ィ部分から生成し、スキッシュ流れによりシリンダ内の中心側に移動するが、燃料の違いによる差がほとんどなかった。Sootの生成過程に関しては、 A_2R5 と C_2H_2 の核生成反応および表面成長反応が主な反応となり、それらが終了した後、Sootの酸化反応が燃焼室内での支配的な反応となることが確認された。

以上の計算結果から、BDFの使用に伴うSootの低減メカニズムを解明することができ、 NO_x の排出が増加しないことが確認された。

5.2 今後の課題

5.2.1 本研究における課題

本研究において、高いBDF混合率で量産型のディーゼルエンジンを運転することが可能なことが確認され、高EGR率と低噴射圧の条件で軽油での燃焼を改善し、同時に排出ガスの低減も可能なことが明らかとなった。しかしながら、BDFの曇り点が高いため、より低い環境温度において、BDFの凝集および析出し、インジェクターの噴口の詰まりの原因となる問題が懸念される。その対策として、本研究ではエンジン実験の終了後、JIS#2軽油による運転を行ってそのような問題が生じないように努めたが、この対策法は現実的ではないので、他の解決策を考案する必要がある。

また、BDFの原料であるジャットロファは猛毒であるため、生産時において脱毒する必要があるため、それによってコストが増加し、普及の障害となることが懸念される。また、酸化安定性については、本研究で使用したBDFは部分水素化した高品質BDF¹⁾であるため、半年間の経過においても燃料性状の劣化は見られず、部分水素化は技術的には有用な方法であろうが、それに伴うコストの増加が問題となっている。改善方法としては、ジャットロファからBDFを抽出した後の残渣の利用によって油製品を生産して、全体として無駄なく原料を活用するやり方を検討すべきであろう²⁾。

高温・高圧の定容容器内に噴射した燃料噴霧の可視化実験により、温度900 Kの高温条件を中心として燃料の分裂モデルにおける定数を決定して、燃料噴射期間中に燃料の供給と蒸発が平衡に達した期間での噴霧先端到達距離について調べることで、各燃料における噴射圧に対する傾向が再現できた。しかしながら、噴霧の蒸気相の観察が実現するには至らなかったため、BDFの噴霧の蒸発特性については検証することができなかった。今後、レーザー誘起蛍光法(LIF法)を適用することで、高温場での噴霧の蒸気相を観察し、蒸発モ

デルを検討する必要がある。

また、3次元の数値流体シミュレーションにより BDF の燃焼・排出ガス特性を解析し、現象論的 Soot モデルを用いてエンジン筒内の Soot の生成および酸化のメカニズムを解析ができた。しかしながら、本研究で使用した KIVA-3V コードでは、単成分燃料による計算コードとなっているため、混合燃料において簡単に理想混合状態と仮定して、混合燃料の二体相互作用を無視するなどの改良を行った。これにより、2種類の燃料の混合についてはシミュレーションが可能となったが、それ以上の多成分の燃料混合が難しく、特に、BDF のすべての成分のモデル化は難しく、また、燃料の粘度においても燃料間の相互作用が考慮しなければならないため、今後、多成分燃料の使用が可能な KIVA-4 コードを導入し、多成分の影響を調べる必要がある。

5.2.2 BDF の普及に関する課題

本研究においては、食糧と競合しないジャトロファから作られた BDF に注目して研究を行った。本研究は、JST と JICA による日本とタイの共同事業「非食糧系バイオマスの輸送用燃料化基盤技術」（2009 年~2014 年）の課題の一環として行われたものである。このプロジェクトでは、タイで BDF を用いた実車走行試験が行われ、ジャトロファから作られた BDF を混合したディーゼル燃料において通常運転が可能であり、エンジンの耐久性などに影響がほとんどないことが確認された。

しかしながら、本研究に使用されている BDF は製造単価が高く、その普及に当たっては量産化によって単価を下げる必要がある。また、量産化する際に、原料であるジャトロファ自体の増殖が必要となるが、発展途上国においても人件費の増加傾向にあるため、ジャトロファの栽培や収穫の機械化と自動化により、人件費の抑制が望まれている。さらに、ジャトロファの栽培により生態系を含む自然環境への影響を調査することも重要な課題となっている。

5.3 研究の発展性

5.3.1 セタン価向上剤としての応用

将来、自動車用の石油燃料の供給不足枯渇が懸念されるなか、石油製造企業では、重油から分解してディーゼルエンジン用の軽油を生産する³⁾ことが検討されている。しかしな

がら、そのようにして生産された軽油はセタン価が低く、芳香族成分が多くなるものと予測される。それによって、着火遅れが長くなるため予混合的な燃焼となり、Sootの排出が減少する反面、未燃成分(CO, THCなど)とNO_xの排出量の増加する上、振動・騒音の悪化が問題となる可能性がある。そこで、セタン価を向上させてそのような弊害を解消するため、熱分解し易く、かつその熱分解生成物が燃料酸化を促進する硝酸アルキル(EHN)がセタン価向上剤として燃料に混合して使用されている。その反応メカニズムは図5.1に示す²⁾。

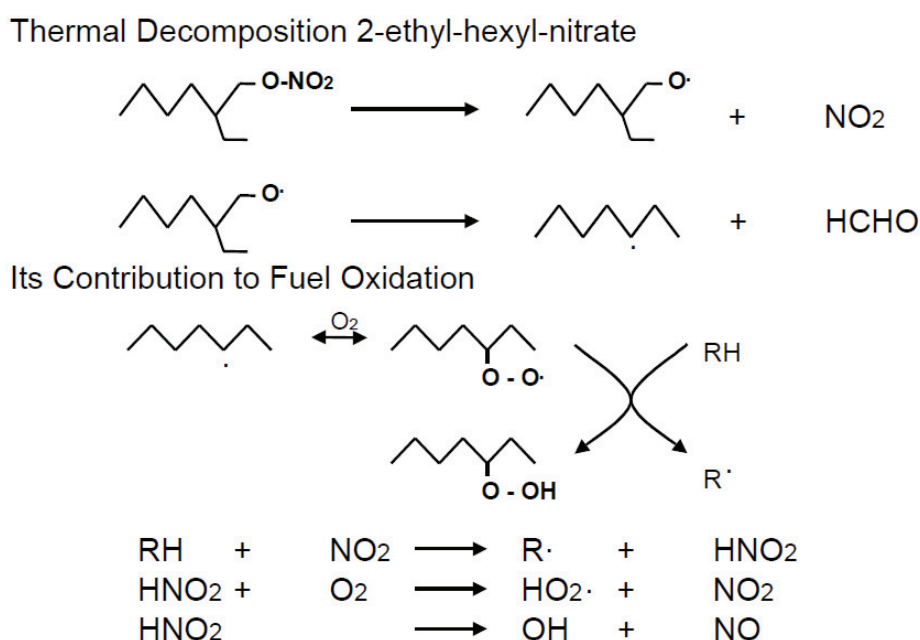


図 5.1 EHN の反応メカニズム³⁾

EHNは、着火遅れを短縮させる反面、窒素が含まれているためNO_xの排出量が増加し、また、着火遅れが軽油と同等となり、Sootの抑制には繋がらない傾向がある。これに対して、本研究に得られた結果として、低温燃焼を促進する効果があるBDFをセタン価向上剤として用いることが可能であると推測し、追加的にエンジン実験を行った。その燃焼、排出ガスおよび燃費特性は図5.2～図5.4に示す。ここで、低セタン価燃料はセタン価45の軽油(CN45)、EHNをセタン価向上剤としてセタン価が約50である燃料(CN50+EHN)、CN45にBDFの代替燃料オレイン酸メチル(MO)を質量割合40%で混合して、セタン価が約50となる燃料(CN50+MO)およびJIS#2軽油を比較し、各モードで使用頻度高い7

条件において比較実験を行った。

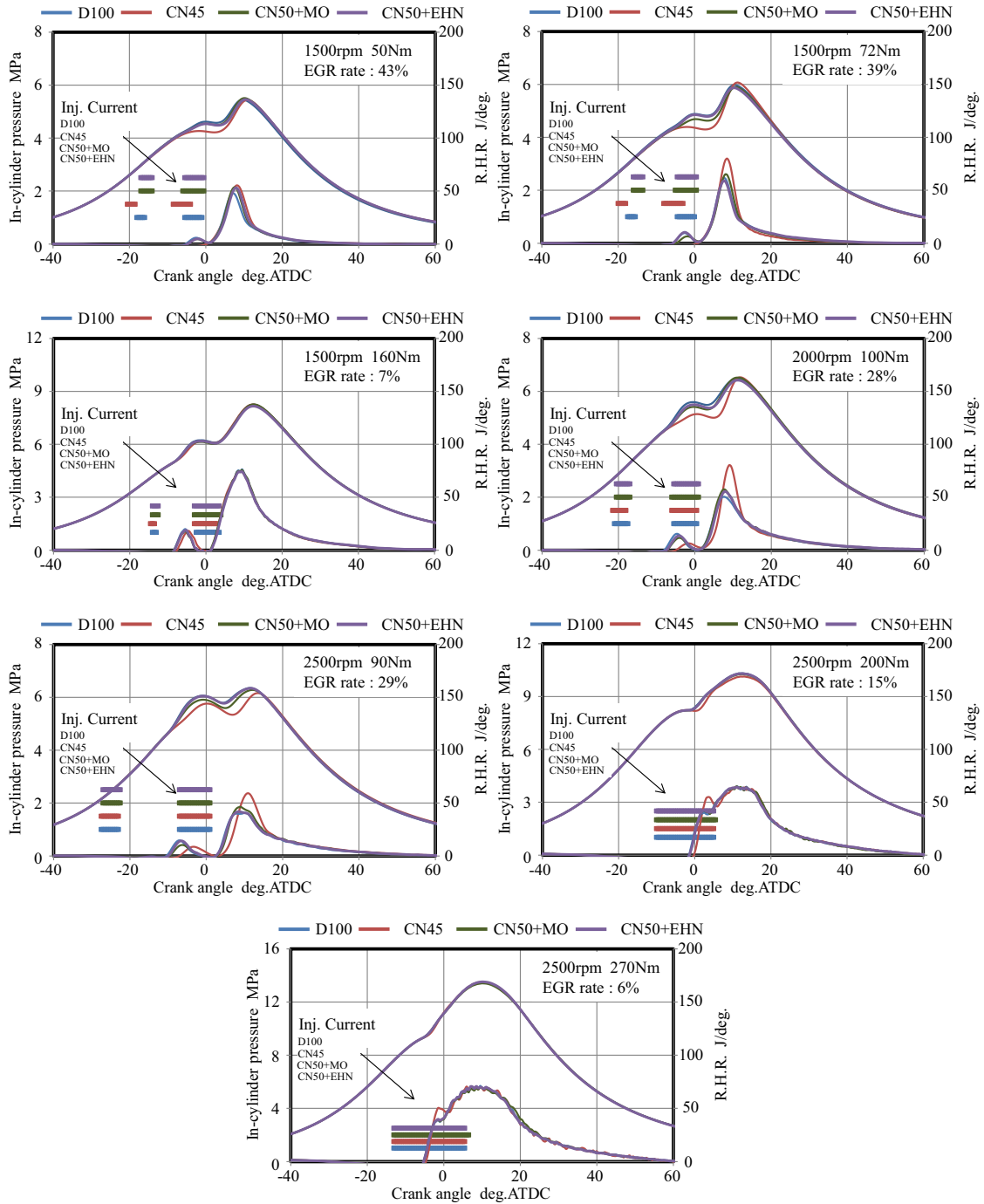


図 5.2 各燃料の燃焼特性

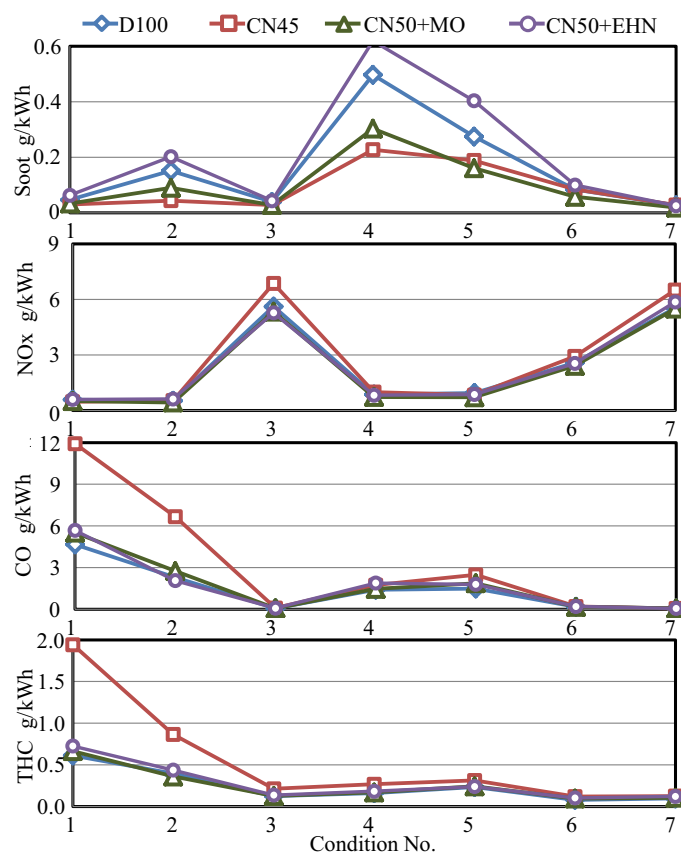


図 5.3 各燃料の排出ガス特性

その結果、図 5.3 に示すように、MO の混合によって EHN と同等な効果が得られた。図 5.4 より、MO の混合で低温領域での燃焼が促進し、NO_x の排出量は JIS#2 軽油と同等でありながら、Soot の排出の大幅に低減することができることが確認された。また、混合した MO は低発熱量が低いため、正味燃料消費率 (BSFC) が悪化する一方、正味エネルギー消費率 (BSEC) は JIS#2 軽油とほぼ同等であった。

以上の実験結果から、BDF はセタン価向上剤としても有用なことが分かった。しかしながら、一般的にセタン価向上剤は少量で着火遅れの短縮する効果を発揮することは期待されるものであるが、ここでは、BDF を 40%まで混合することで効果が得られた。今後は、どの程度の混合割合の BDF でセタン価の向上効果が得られるかをさらに詳細に調査する必要がある。

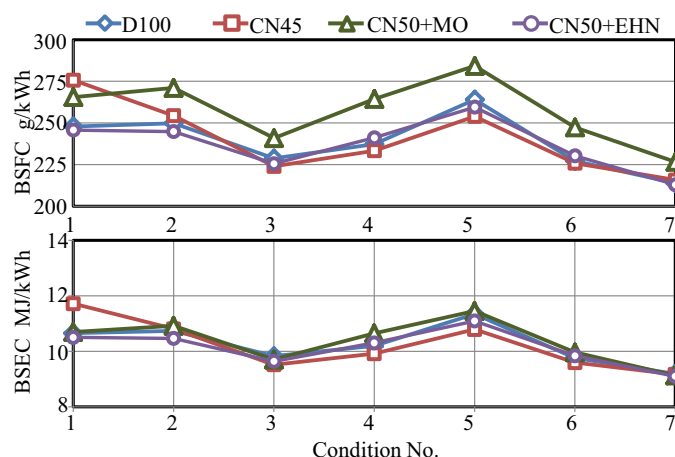


図 5.4 各燃料の燃費

5.3.2 より幅広いバイオ燃料の利用に関する評価手法の確立

本研究においては、ジャトロファから作られた BDF を対象としてその効果を評価したが、今後、新たな植物油から BDF が作られることも予測される。例えば、ひまわり油、ココナツ油、ポンガミヤ油などが挙げられる。これらすべての新燃料に対してエンジン実験を行うと膨大な手間とコストが必要となる。そこで、本研究に得られた BDF の燃焼反応モデルを用いて、予め燃焼過程と排出ガス特性を予測し、それに基づいてエンジン実験の計画を立て、さらにはエンジン制御の最適化を行うことで、開発のコストと時間の削減が可能になるものと考えられる。

5.4 まとめ

今後の地球温暖化や石油燃料の不足などの問題に対応するため、バイオディーゼルを有効利用するための研究が今後も活発化に行われるものと予想される。本研究により明確にされたバイオディーゼルが及ぼすエンジンの燃焼・排出ガス特性への影響度を利用することで、CO₂ 排出の低減と排出ガスの低減に寄与するものと期待される。将来は、バイオディーゼルの性状改良の技術が進展し、ディーゼルエンジンの一層の排気浄化を達成した上で、低セタン価軽油への適用も含めて利用範囲が広がり、低排出ガスディーゼルエンジンの研究開発が促進され、大気環境の改善につながることを望まれる。

付 録 A

表 A.1 渦流式電気動力計

製造所	明電舎
名称	ECDY PTW - DAD
形式	渦流式電気動力計
耐用回転数	700 - 8000 rpm
要求冷却水	100L / min
冷却水圧力	0.047 MPa
冷却水温度	32 °C

表 A.2 燃料流量計

製造所	小野測器
名称	容積式流量検出器
形式	FP-2140H
測定範囲	0.3 - 120 L / h
測定可能燃料	ガソリン, 軽油, 灯油, 並びに一般石油系作動油
精度	±0.2 %
最小分解能	0.01 mL
使用最大圧力	980 kPa
使用温度範囲	0 - 65°C

表 A.3 燃料流量計表示部

製造所	小野測器
名称	流量計
形式	FM-1500
サンプリング時間	0 – 10 s
精度	±0.2 %
使用温度範囲	0 – 100°C

表 A.4 リラクタンス型差圧センサー

製造所	司測研
型式	P7D
圧力測定モード	差圧(中ライン圧)
ライン圧力	-1～70 kgf/cm ²
圧力レンジ	(1) 0 ～ 70 mmAq (12) 0 ～5000 mmAq
	(2) 0 ～ 100 " (13) 0 ～ 500 mmHg
	(3) 0 ～ 150 " (14) 0 ～ 760 "
	(4) 0 ～ 200 " (15) 0 ～1000 "
	(5) 0 ～ 350 " (16) 0 ～ 2 kgf/cm ²
	(6) 0 ～ 500 " (17) 0 ～3.5 "
	(7) 0 ～ 700 " (18) 0 ～ 7 "
	(8) 0 ～1000 " (19) 0 ～10 "
	(9) 0 ～1500 " (20) 0 ～15 "
	(10) 0 ～ 2000 " (21) 0 ～20 "
	(11) 0 ～ 3500 " (22) 0 ～35 "
許容過大圧力	圧力レンジの 2 倍
精度(非直線性+ヒステリシス)	±1 %FS BSL
温度係数	±0.05 %FS/°C
温度補償範囲	-26 °C～74 °C
使用可能温度範囲	-40 °C～120 °C
ダイヤフラム固有振動数	(1) レンジにて 2000 Hz
圧力変換感度	20 MV/V/FS 圧力
ダイヤフラム材質	17-4PH ステンレス鋼
圧力室容積	65 mm ³
圧力室容積変化	5 mm ³ /FS
加速度エラー	70 mmAq レンジ 0.2 %FS/g 以下
センサー重量	450 g

表 A.5 リラクタンス型差圧センサー用増幅器

製造所	司測研
型式	DPR-7
直線性	インダクタンス変化 – 出力特性 ±0.5 %以内
周波数応答	DC～1 kHz ±5 %
サンプル周期	2.5 回/秒
確度	±0.2 %読み取り値
出力	0～10 VFS/FS 圧力 出力抵抗 100 Ω以下

表 A.6 層流流量計

製造所	司測研
型式	LFE-150B
定格流量測定範囲	0 –150 L / sec
最大流量測定範囲	225 L / sec
差圧 (定格時)	約 0.65 kPa
差圧 (最大流量時)	約 1 kPa

表 A.7 エンジン排ガス測定装置

製造所	堀場製作所
型式	MEXA-1500DEGR
外形寸法	570 (W)×710 (D)×1980 (H) mm
重量	約 200 kg
電源	AC 100 ± 10% 50/60 Hz ± 0.5 Hz
周囲温度, 湿度	温度 5~35 °C, 相対湿度 80%以下

表 A.8 自動車用排出ガス分析計

測定成分	CO/CO ₂		THC/NO _x	O ₂
型式	AIA-240		FCA-246	IMA-24X
測定方法	NDIR		FID, CLD	磁気圧式
レンジ数	2	2	4	2
測定範囲	0 - 1 / 16 vol. %	0 - 8 / 16 vol. %	0 - 50000 ppm 0 - 5000 ppm	0 - 10 / 25 vol. %
再現性	フルスケールに対して±1%以内			

表 A.9 クランクアングル検出部

製造所	小野測器
出力パルス数	1 P/R, 360, 720, 3600 P/R
回転数範囲	0~15000 r/min
使用温度範囲	0~120 °C
ケーブル	光ファイバーケーブル
型式番号	CP-5900
耐震性	ラジアル方向 500 m/s ² , スラスト方向 250 m/s ²

表 A.10 クランクアングル信号増幅器

製造所	小野測器
型式	CP-6000A
直線性	インダクタンス変化 - 出力特性 ±0.5 %以内
応答周波数	最大 300 Hz
使用温度	0 - 40 °C

表 A.11 グロープラグアダプター

製造所	KISTLER
型式	6535Q306
耐用圧力	250 bar

表 A.12 筒内圧力センサ

製造所	KISTLER
型式	6055Csp120
測定圧力範囲	0 – 250 bar
最大圧力	300 bar
精度	-20 pC/bar 以下
応答周波数	130 kPa
使用温度	-20 – 350 °C

表 A.13 チャージアンプ

製造所	KISTLER
型式	5011
応答周波数	0 – 300 kHz
使用温度	0 – 50°C

表 A.14 LabVIEW

製造所	National Instruments
型式	Lab VIEW8.0
種類	計測制御ソフト

表 A.15 熱電対

製造所	CHINO
種類	シース熱電対
型式	T 型, K 型
常用限度温度	T 型 300 °C, K 型 650 °C

表 A.16 圧力計

製造所	長野計器
種類	デジタル圧力計
型式	GC61
圧力範囲	-0.1 – 0.5 MPa

表 A.17 温度調節器

製造所	CHINO
型式	LT230
種類	小型デジタル指示調節器
測定範囲	-199.9 – 400 °C
精度	測定範囲の±0.25%
サンプリング周期	0.5 sec
使用温度	-10 – 50 °C

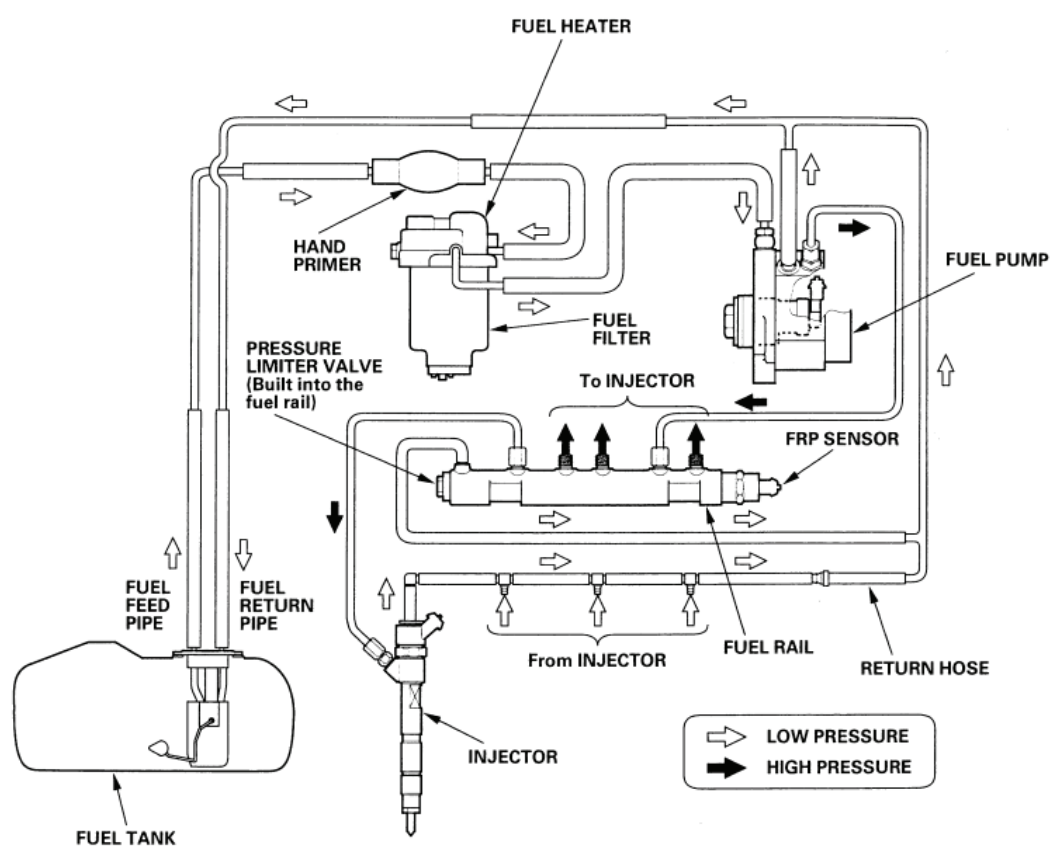


図 A.1 燃料供給系レイアウト

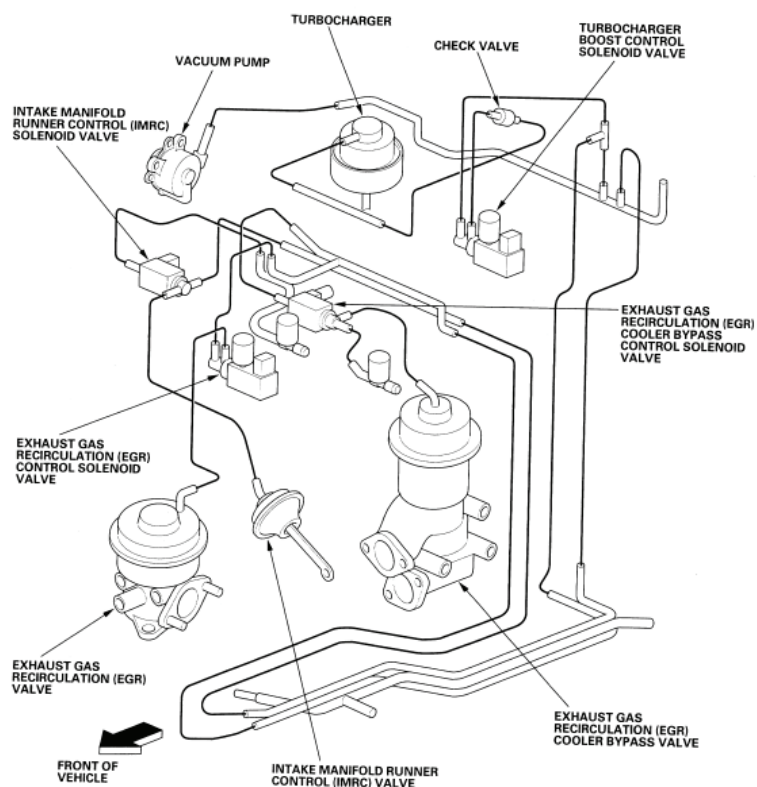


図 A.2 バキュームエアレイアウト

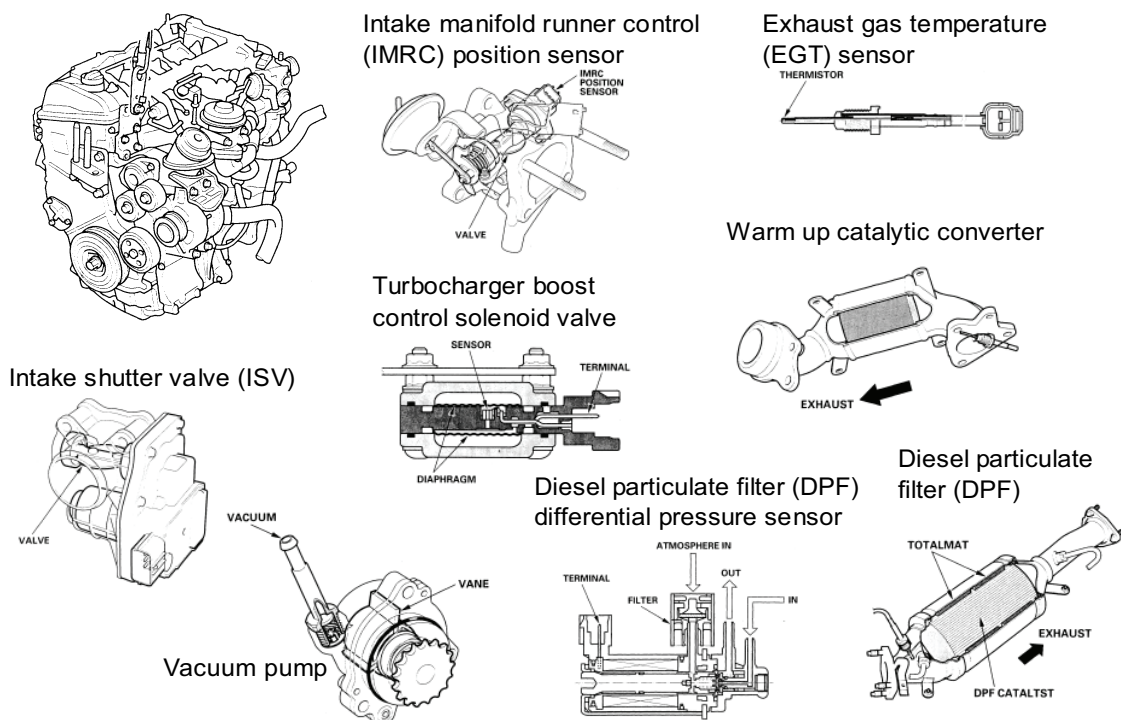


図 A.3 各種エンジン部品

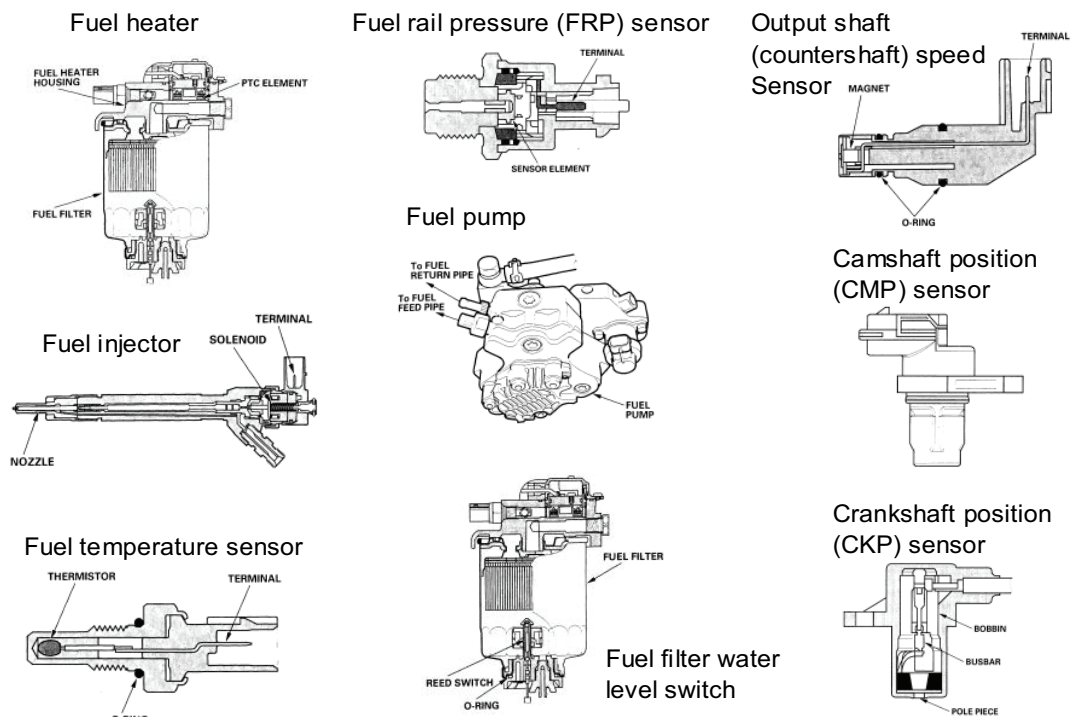


図 A.4 各種エンジン部品

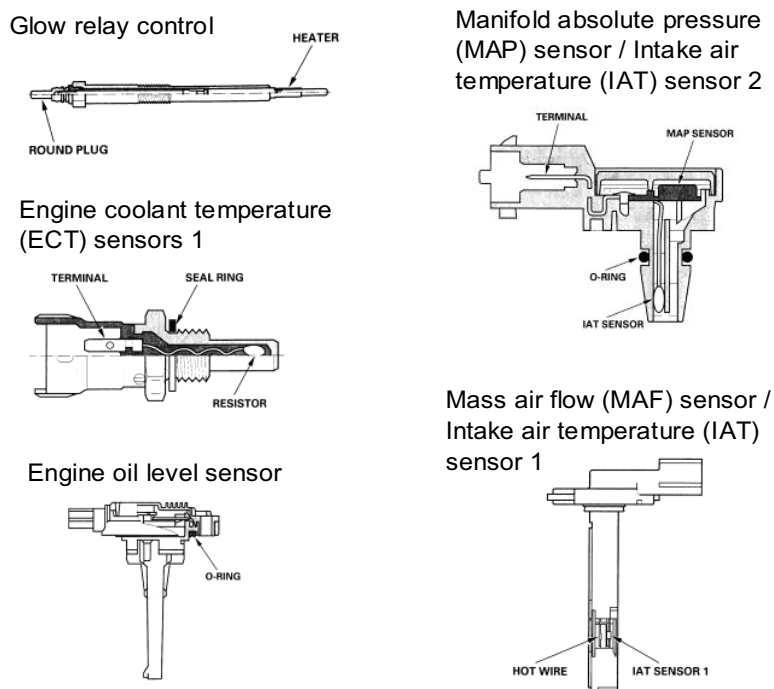


図 A.5 各種エンジン部品

付 録 B

B.1 燃焼計算方法

a) 筒内圧力の補正

圧力センサの取り付け部の気柱共振によるノイズを軽減するために、以下の式によって圧力波形を補正する.

$$P_z(t) = \left(\frac{1}{\omega^2}\right)P_G''(t) + \left(\frac{2\zeta}{\omega}\right)P_G'(t) + P_G(t) \quad (\text{B.1})$$

P_G : 計測圧力

P_z : 補正された圧力

ω : 二次系近似伝達関数の固有角速度

ζ : 二次系近似伝達関数の粘性減衰率

ここで、 ω と ζ は式(B.2), (B.3), (B.4)によって算出できる.

$$\omega = \frac{\omega_0}{\sqrt{1-\zeta^2}} \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{\omega_0 l}{a_0} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{V}{fl}}} \quad (\text{B.3})$$

$$\zeta = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \sqrt{1 - \frac{1}{M_p^2}} \right)} \quad (\text{B.4})$$

ω_0 : 一次共振角速度

a_0 : 管内音速

V/fl : 背容積

M_p : 一次共振振幅比

b) 水蒸気分圧

実験時における大気条件として、大気圧・乾球温度・湿球温度を実験開始時に測定した。これらは以下に示す水蒸気分圧の計算に用いる。

まず、湿球温度 T_w より飽和水蒸気分圧を求める。

$$P_{sw} = \frac{\exp\left(B \times \ln(T_w) + \sum_{i=0}^9 (F_i \cdot T_w^{i-2})\right)}{133.322} \quad [\text{mmHg}] \quad (\text{B.5})$$

ただし、

$B = -12.150799$	$F5 = -1.1460454\text{E}-8$
$F0 = -8499.22$	$F6 = +2.1701289\text{E}-11$
$F1 = -7423.1865$	$F7 = -3.610258\text{E}-15$
$F2 = +96.1635147$	$F8 = +3.8504519\text{E}-18$
$F3 = +2.4917646\text{E}-2$	$F9 = -1.4317\text{E}-21$
$F4 = -1.3160119\text{E}-5$	

式中の温度は絶対温度である。

次に、大気圧 P_a 、乾球温度 T_d 、飽和水蒸気分圧より水蒸気分圧 P_w を求める。

$$P_w = P_{sw} - \frac{0.5(T_d - T_w) \cdot P_a}{755} \quad [\text{mmHg}] \quad (\text{B.6})$$

大気圧力 P_a は更に水蒸気分圧 P_w と一緒に吸入空気（新気）中の水蒸気の容積割合 C_{avH2O} を決める。

$$C_{avH2O} = \frac{P_w}{P_a} \times 100 \quad [\%] \quad (\text{B.7})$$

c) 図示トルク T_i : [N・m]

$$T_i = \frac{IMEP \times V_s \times 1000}{4 \times \pi} \quad (\text{B.8})$$

$IMEP$: 図示平均有効圧 [kPa]

V_s : 行程容積 [m³]

d) 図示出力 L_i : [kW]

$$L_i = \frac{T_i \times N_e \times 2 \times \pi}{60 \times 1000} \quad (\text{B.9})$$

N_e : 機関回転数 [rpm]

e) 図示燃料消費率 $ISFC$: [g/kWh]

$$ISFC = \frac{3600 \times m_f}{L_i} \quad (\text{B.10})$$

m_f : 燃料消費量 [g/sec]

f) 全供給熱量 Q_{in} : [kW]

$$Q_{in} = \frac{H_u \times m_f}{1000} \quad (\text{B.11})$$

H_u : 軽油の低発熱量 43092.0 [kJ/kg]

g) 図示熱効率 η_e : [%]

$$\eta_e = \frac{L_i}{Q_{in}} \times 100 \quad (\text{B.12})$$

h) 湿り理論吸入空気量 g_{airth} : [g/sec]

$$g_{airth} = \frac{V_s \times N_e \times \text{density_wet_air} \times 1000}{2 \times 60} \quad (\text{B.13})$$

density_wet_air : 湿り空気の密度 [kg/m³]

$$\text{density_wet_air} = \frac{\frac{\text{press}}{760} \times 101.325 - \frac{\text{hum}}{100} \times ps}{R_a \times (\text{temp} \times 273.15)} + \frac{\frac{\text{hum}}{100} \times ps}{\frac{R_0}{M_{H_2O}} \times (\text{temp} \times 273.15)} \quad (\text{B.14})$$

R_a : 空気のガス定数 0.28704 [kJ/kgK]

R_0 : 一般ガス定数 8.3143 [kJ/kmolK]

M_{H_2O} : 水の平均分子量 18.016 [kg/kmol]

i) 乾き理論必要空気量 n_{airth} : [g/(sec·cyl)]

$$n_{airth} = \frac{M_{O_2}}{MF_{O_2_a}} \times \left\{ \frac{fc_d}{cyl_num} \times \left(\frac{MF_c_d}{M_c} + \frac{MF_h_d}{2 \times M_{h_2}} \right) \right\} \quad (B.15)$$

MF_c_d : 軽油に含まれる炭素の重量割合 0.8610

MF_h_d : 軽油に含まれる水素の重量割合 0.1380

$MF_{O_2_a}$: 乾き空気中における酸素の重量割合 0.2314

M_c : 炭素の分子量 31.999 [kg/kmol]

M_{O_2} : 酸素の分子量 12.011 [kg/kmol]

M_{h_2} : 水素の分子量 2.016 [kg/kmol]

j) 吸入空気量 g_{air} : [g/sec] , g_{air_st} : [mg/st]

$$g_{air} = 2.3399 \times cc \times in_delta_p \quad (B.16)$$

in_delta_p : 層流流量計による測定値 [mmAq]

$$g_{air_st} = \frac{g_{air} \times 60 \times 1000 \times 2}{Ne \times cyl_num} \quad (B.17)$$

k) 空気過剰率 λ

$$\lambda = \frac{g_{air}}{(1+x) \times n_{airth}} \quad (B.18)$$

x : 絶対湿度

$$x = \frac{\frac{M_{H_2O}}{M_{air}} \times \frac{hum}{100} \times ps}{\frac{press}{760} \times 101.325 - \frac{hum}{100} \times ps} \quad (B.19)$$

M_{air} : 空気の平均分子量 28.97 [kg/kmol]

l) 容積効率 η_{me} : [%]

$$\eta_{me} = \frac{g_{air}}{g_{airth}} \times 100 \quad (B.20)$$

m) シリンダ容積 $V(n)$

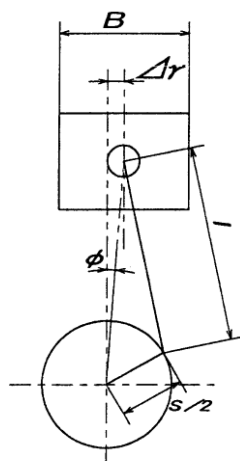
シリンダ容積（燃焼室容積） $V(n)$ は、次式により分解能ごとに求める。

$$\varphi = \sin^{-1} \left(\frac{\Delta\gamma}{\frac{S}{2} + 1} \right) \quad (\text{B.21})$$

$$\theta = (n \cdot D_deg - BTDC_deg) \cdot \frac{\pi}{180} \quad (\text{B.22})$$

$$L(n) = \sqrt{\left(\frac{S}{2} + 1\right)^2 - \Delta\gamma^2} - \frac{S}{2} \cos(\theta + \varphi) - \sqrt{1^2 - \left(-\frac{S}{2} \sin(\theta + \varphi) + \Delta\gamma\right)^2} \quad [\text{m}] \quad (\text{B.23})$$

$$V(n) = \frac{\pi}{4} B^2 \left(L(n) + \frac{S}{e-1} \right) \quad [\text{m}^3], \quad 0 \leq n < \text{datanum} - 1 \quad (\text{B.24})$$



図B.1 シリンダ容積

$BTDC_deg$: 圧力データ開始ピストン位置と上死点位置の角度差 [deg.]

D_deg : 角度分解能 [deg.]

B : ボア径 [m]

$\Delta\gamma$: オフセット長(Deltar) [m]

S : ストローク長(Stroke) [m]

l : コンロッド長(Conrod) [m]

L : ピストン移動量 [m]

datanum : サイクルあたりのデータ数 [m]

n) 熱発生率 $dQ/d\theta$ (RHR_i) : [J/deg.]

熱発生率 $dQ/d\theta$ は以下の式により計算する.

$$dQ = dQ_n + dQ_w \quad (\text{B.25})$$

dQ_n : 隣り合うデータn-1, n間の燃焼室内ガスに与えられた熱量

dQ_w : 隣り合うデータn-1, n間の燃焼室ガス燃焼室壁に逃げる熱量

ここで, dQ_n, dQ_w は以下のように求める.

$$dQ_n(n) = \frac{1}{K(n)-1} (V(n) \cdot dP(n) + K(n) \cdot P(n) \cdot dV(n)) \quad [\text{J/deg.}] \quad (\text{B.26})$$

$K(n)$: nステップでの比熱比

$V(n)$: nステップでの燃焼室容積 [m³]

$dP(n)$: nステップでの筒内圧力上昇率 [Pa/deg.]

$P(n)$: nステップでの筒内圧力 [Pa]

$dV(n)$: nステップでの燃焼室容積変化率 [m³/deg.]

$$\begin{aligned} dQ_w = \frac{4.18605}{6 \cdot N_e \cdot 3600} & \left((dQ_{wig} + dQ_{wisl}) \cdot S_{wl}(n) \cdot (T(n-1) - T_{wl}) \right. \\ & + (dQ_{wig} + dQ_{wish}) \cdot S_{wh} \cdot (T(n-1) - T_{wh}) \\ & \left. + (dQ_{wig} + dQ_{wispl}) \cdot S_{wp} \cdot (T(n-1) - T_{wp}) \right) \quad [\text{J/deg.}] \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

o) 熱発生量 $Q(\theta)$

熱発生量 $Q(\theta)$ は, 次式により分解能ごとに求める.

燃焼質量割合開始点の前のデータ :

$$Q(n) = Q(n-1) \quad [\text{J}], \quad 0 \leq n < C_{start} \quad (\text{B.28})$$

燃焼質量割合範囲内のデータ :

$Q(n) > 0$ のとき :

$$Q(n) = Q(n-1) + dQ(n) \cdot D_deg \quad [\text{J}], \quad 0 \leq n \leq C_{end} \quad (\text{B.29})$$

$Q(n) \leq 0$ のとき :

$$Q(n) = Q(n-1) \quad [\text{J}] \quad (\text{B.30})$$

燃焼質量割合終了点の後のデータ :

$$Q(n) = Q(C_{end}) \quad [\text{J}], \quad n > C_{end} \quad (\text{B.31})$$

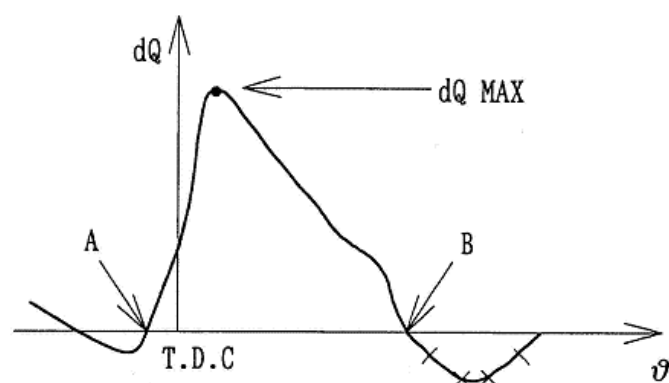
D_deg : 角度分解能 [deg.]

C_{start} : 燃焼質量割合開始点データ番号

C_{end} : 燃焼質量割合終了点データ番号

※ 燃焼質量割合開始点, 燃焼質量割合終了点

燃焼質量割合開始点(下図のA点)は熱発生率 dQ が最大値 dQ_{MAX} から左へ検索し, 3ポイント連続して0以下の値となった時の最後の正の値のクランク角度とし, この点の前のポイントは燃焼質量割合0%となる. 燃焼質量割合終了点(下図のB点)は熱発生率 dQ が3ポイント連続して0以下の値となった時の最後の正の値のクランク角度とし, この点は燃焼質量割合100%のポイントとなる.



図B.2 燃焼割合

p) 燃焼質量割合 $X(\theta)$

燃焼質量割合 $X(\theta)$ は, 次式により分解能ごとに求める.

$$X(\theta) = \frac{Q(n)}{Q_{max}} \cdot 100 \quad [\%], \quad 0 \leq n < \text{datanum} \quad (\text{B.32})$$

Q : 熱発生量 [J]

Q_{max} : 最大熱発生量 [J]

datanum : サイクルあたりのデータ数

B.2 排出ガス量の計算方法

各種排出ガス成分の排出率は, 新・道路運送車両の保安基準(省令・告示全条文)交文社に記載された別添41 重量車用排出ガスの測定方法の試験法を参考に算出した. 以下にその方法を示す.

a) 試験室の大気条件

1) 乾燥大気圧の計算

大気条件係数の計算に用いる乾燥大気圧は、次式により求める。

$$P_s = P_a - P_w \quad (\text{B.33})$$

P_s : 試験室乾燥大気圧 (kPa)

P_a : 試験室内大気圧 (kPa)

P_w : 試験室内水蒸気圧 (kPa)

水蒸気圧 P_w の算出には、通風乾湿球湿度計の乾球温度及び湿球温度を測定し、次式により求める。

$$P_w = P_{e_2} - 0.5(\theta_1 - \theta_2) \times (P_a / 755) \quad (\text{B.34})$$

P_w : 試験室内水蒸気圧 (kPa)

P_{e_2} : θ_2 の飽和水蒸気圧 (kPa)

P_a : 試験室内大気圧 (kPa)

θ_1 : 試験室内乾球温度 (K)

θ_2 : 試験室内湿球温度 (K)

なお、飽和水蒸気圧 P_e は、次式により算出する。ただし、式中の絶対温度は、 θ (K) = (t °C + 273.15) とする。

$$\begin{aligned} \ln(P_e) = & -6096.9385 \times (\theta)^{-1} + 21.2409642 \\ & - 2.711193 \times 10^{-2} \times (\theta) \\ & + 1.673952 \times 10^{-5} \times (\theta)^2 \\ & + 2.433502 \times \ln(\theta) \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

$$P_e = P_e \times 10^3 \quad (\text{B.36})$$

θ : 飽和水蒸気圧を求める温度 (K)

P_e : 乾球又は湿球温度における飽和水蒸気圧 (kPa)

絶対湿度 H_a は、次式により求める。

$$H_a = 622 \times P_w / P_s \quad (\text{B.37})$$

H_a : 試験室内絶対湿度 (g/kg)

P_s : 試験室内乾燥大気圧 (kPa)

P_w : 試験室内水蒸気圧 (kPa)

2) 大気条件

測定されたエンジン吸入空気温度 T_a 及び(1)の規定により求められた乾燥大気圧 P_s を用い、以下の式によって求めた大気条件係数の値、 F が0.96以上、1.06以下でなければならない。

圧縮着火過給エンジンの場合

$$F = \left(\frac{99}{P_s} \right)^{0.7} \times \left(\frac{T_a}{298} \right)^{1.5} \quad (\text{B.38})$$

b) 排出ガス量の計算方法

本研究では、排出ガスを直接測定法によって測定する。以下に排出ガス量の計算方法を示す。

1) 瞬時排出ガス質量流量の測定

排出ガス直接測定法においては、湿潤状態の瞬時排出ガス質量流量 $Q_{mew, i}$ を以下に記載する方法にて測定する。

空気及び空燃比測定による方法

$$Q_{mew, i} = Q_{maw, i} \times \left(1 + \frac{1}{A/F_{st} \times \lambda_i} \right) \quad (\text{B.39})$$

$Q_{maw, i}$: 瞬時吸入空気質量流量 (kg/s)

A/F_{st} : 理論空燃比 (kg/kg)

軽油 : 14.61

λ_i : 瞬時空気過剰率

軽油 : $\lambda_i = \frac{1 + 0.00475 \times CO_{2d, i}}{0.07024 \times CO_{2d, i}}$

$CO_{2d, i}$ は排出ガス中の乾燥状態で計測された CO_2 濃度 (%)

2) 軽油を燃料とする場合のCO等の排出量の計算方法

(a) 湿潤状態への換算

瞬時で測定したCO等の濃度が湿潤状態で測定されていない場合には、以下の方法により湿潤状態への換算係数 K_W を求め、(b)以降に記載された排出ガス中のCO等の濃度に乘ずる。

① 吸入空気質量流量、燃料流量から求める場合

$$K_W = \left(1 - \frac{1.2439 \times H_a + 1528.7 \times \frac{G_f}{G_a}}{773.4 + 1.2439 \times H_a + \frac{G_f}{G_a} \times 764.4} \right) \times 1.008 \quad (\text{B.40})$$

G_a : 吸入空気質量流量 (kg/h)

G_f : 燃料流量 (kg/h)

H_a : 吸入空気の絶対湿度(g/kg), 求め方は2.2.1(1)による。

② 排出ガス濃度から求める場合

$$K_W = \left(\frac{1}{1 + 1.9 \times 0.005 \times \text{CO}_{2d}} - K_{W2} \right) \times 1.008 \quad (\text{B.41})$$

$$K_{W2} = \frac{1.608 \times H_a}{1000 + 1.608 \times H_a}$$

CO_{2d} : 排出ガス中の乾燥状態のCO₂濃度 (%)

(b) COの排出量

$$\text{CO}_{\text{mass}} = \sum_{i=1}^{i=n} 0.000966 \times \text{CO}_{\text{conc}, i} \times Q_{\text{mew}, i} \times \frac{1}{f} \quad (\text{B.42})$$

$Q_{\text{mew}, i}$: 瞬時排出ガス質量流量 (kg/s)

CO_{mass} : モード全体のCOの排出量 (g/test)

0.000966 : COの質量比 (g/kg)

$\text{CO}_{\text{conc}, i}$: 排出ガス中のCOの瞬時濃度 (ppm)

f : 測定周期 (Hz)

n : データの数

(c) THCの排出量

$$\text{THC}_{\text{mass}} = \sum_{i=1}^{i=n} 0.000480 \times \text{THC}_{\text{conc}, i} \times Q_{\text{me w}, i} \times \frac{1}{f} \quad (\text{B.43})$$

THC_{mass} : モード全体のTHCの排出量 (g/test)

0.000480 : THCの質量比 (g/kg)

$\text{THC}_{\text{conc}, i}$: 排出ガス中のTHCの瞬時濃度 (ppmC)

(d) NO_xの排出量

$$\text{NO}_{\text{x mass}} = \sum_{i=1}^{i=n} 0.001587 \times \text{NO}_{\text{x conc}, i} \times Q_{\text{me w}, i} \times K_{\text{HD}, i} \times \frac{1}{f} \quad (\text{B.44})$$

$\text{NO}_{\text{x mass}}$: モード全体のNO_xの排出量 (g/test)

0.001587 : NO_xの質量比 (g/kg)

$\text{NO}_{\text{x conc}, i}$: 排出ガス中のNO_xの瞬時濃度 (ppm)

また、 $K_{\text{HD}, i}$ は湿度補正係数であり、次式により求める。

$$K_{\text{HD}, i} = \frac{1}{1 - 0.0182 \times (H_a - 10.71) + 0.0045 \times (T_a - 298)} \quad (\text{B.45})$$

T_a : 吸入空気温度 (K)

H_a : 吸入空気の絶対湿度, 求め方は2.2.1(1)による。

(e) CO₂の排出量

$$\text{CO}_{2\text{ mass}} = \sum_{i=1}^{i=n} 0.001518 \times \text{CO}_{2\text{ conc}, i} \times Q_{\text{me w}, i} \times \frac{1}{f} \quad (\text{B.46})$$

$\text{CO}_{2\text{ mass}}$: モード全体のCO₂の排出量 (g/test)

0.001518 : CO₂の質量比 (g/kg)

$\text{CO}_{2\text{ conc}, i}$: 排出ガス中のCO₂の瞬時濃度 (ppm)

以上の式より算出したCO等の排出ガス量を仕事量で除することにより、平均排出量 (g/kWh)を求める。

付 録C

素反応リスト

Reactions considered										k=AT ⁿ exp(-E/RT)					
										A	n	E	UNIT		
1	C19H36O2	+	O2		=	C11H22O2	+	C5H10O2	+	C3H4	G	5.00E+11	0	30000	CGS
2	C11H22O2				=	MP2D	+	C7H16			G	5.00E+11	-0.6	30000	CGS
3	C14H28	+	O2		=	C7H8	+	C7H16	+	H2O	G	1.00E+13	0	30000	CGS
4	C14H28	+	H2O		=	C7H16	+	O2			G	1.00E+13	0	30000	CGS
5	C7H16	+	O2		=	HCO	+	H2O			G	5.00E+11	0	27500	CGS
6	C7H14O2H	+	O2		=	C7H14O4H					C	4.60E+11	0	0	CGS
7	C7H14O4H				=	C7KET21	+	OH			C	2.97E+13	0	26700	CGS
8	C7KET21				=	C5H11CO	+	CH2O	+	OH	C	1.50E+16	0	44200	CGS
9	C7H16	+	C7H7		=	C7H15-1	+	C7H8			C	5.00E+12	0	0	CGS
10	C7H16	+	C7H7		=	C7H15-2	+	C7H8			C	5.00E+12	0	0	CGS
11	C7H16	+	C6H5		=	A1	+	C7H15-1			C	1.00E+12	0	0	CGS
12	C7H16	+	C6H5		=	A1	+	C7H15-2			C	5.00E+11	0	0	CGS
13	C7H16	+	O2		=	C7H15-1	+	HO2			C	1.50E+13	0	48810	CGS
14	C7H16	+	O2		=	C7H15-2	+	HO2			C	3.00E+14	0	47380	CGS
15	C7H16	+	H		=	C7H15-1	+	H2			C	5.60E+07	2	7667	CGS
16	C7H16	+	H		=	C7H15-2	+	H2			C	4.38E+07	2	4750	CGS
17	C7H16	+	OH		=	C7H15-1	+	H2O			C	8.61E+09	1.1	1815	CGS
18	C7H16	+	OH		=	C7H15-2	+	H2O			C	6.80E+09	1.3	690.5	CGS
19	C7H16	+	HO2		=	C7H15-1	+	H2O2			C	8.00E+12	0	19300	CGS
20	C7H16	+	HO2		=	C7H15-2	+	H2O2			C	1.00E+13	0	16950	CGS
21	C7H16				=	C4H9	+	C3H7			C	3.40E+16	0	80710	CGS
22	C7H16				=	C5H11	+	C2H5			C	3.40E+16	0	80710	CGS
23	C7H15-1	+	O2		=	C7H15O2					C	2.00E+12	0	0	CGS

24	C7H15-2	+	O2		=	C7H15O2					C	2.50E+12	0	0	CGS
25	C7H15O2				=	C7H14O2H					C	5.00E+12	0	20380	CGS
26	C7H14O2H	+	O2		=	C7H14O4H					D	2.00E+11	0	0	CGS
27	C7H14O4H				=	C7KET21	+	OH			D	1.00E+11	0	23850	CGS
28	C7KET21				=	C5H11CO	+	CH2O	+	OH	D	1.50E+16	0	42400	CGS
29	C5H11CHO	+	O2		=	C5H11CO	+	HO2			C	2.00E+13	0.5	42200	CGS
30	C5H11CHO	+	OH		=	C5H11CO	+	H2O			C	1.00E+13	0	0	CGS
31	C5H11CHO	+	H		=	C5H11CO	+	H2			C	4.00E+13	0	4200	CGS
32	C5H11CHO	+	O		=	C5H11CO	+	OH			C	5.00E+12	0	1790	CGS
33	C5H11CHO	+	HO2		=	C5H11CO	+	H2O2			C	2.80E+12	0	13600	CGS
34	C5H11CHO	+	CH3		=	C5H11CO	+	CH4			C	1.70E+12	0	8440	CGS
35	C5H11CO				=	C5H11	+	CO			C	1.00E+11	0	9600	CGS
36	C5H11				=	C2H5	+	C3H6			C	3.20E+13	0	28300	CGS
37	C7H15-1				=	C2H4	+	C5H11			C	2.50E+13	0	28810	CGS
38	C7H15-2				=	CH3	+	C6H12			C	3.00E+13	0	29800	CGS
39	C6H12				=	C3H7	+	C3H5			C	1.00E+16	0	68000	CGS
40	C6H12				=	C3H6	+	C3H6			C	1.00E+16	0	68000	CGS
41	C6H12	+	OH		=	C5H11	+	CH2O			C	1.00E+11	0	-4000	CGS
42	C6H12	+	O		=	C5H11	+	HCO			C	1.00E+11	0	-1050	CGS
43	C7H15-2				=	C4H9	+	C3H6			C	1.50E+13	0	28600	CGS
44	C7H15-1				=	C7H15-2					C	2.00E+11	0	18050	CGS
45	C4H9				=	C3H6	+	CH3			C	7.36E+17	-1.4	30230	CGS
46	C4H9				=	C2H5	+	C2H4			C	2.50E+13	0	28810	CGS
47	C3H7				=	C2H4	+	CH3			C	9.60E+13	0	30950	CGS
48	C3H7				=	C3H6	+	H			C	1.25E+14	0	36900	CGS
49	C3H7	+	CH3		=	C2H5	+	C2H5			C	1.90E+13	-0.3	0	CGS
50	C3H7	+	O2		=	C3H6	+	HO2			C	1.00E+12	0	4980	CGS
51	C3H7	+	H		=	CH3	+	C2H5			C	4.06E+06	2.19	890	CGS
52	C3H6				=	C2H3	+	CH3			C	6.25E+15	0	85500	CGS

53	C3H6	+	H		=	C3H5	+	H2		C	5.00E+12	0	1500	CGS	
54	C3H6	+	CH3		=	C3H5	+	CH4		C	9.00E+12	0	8480	CGS	
55	C3H6	+	O2		=	C3H5	+	HO2		C	4.00E+12	0	39900	CGS	
56	C3H5	+	HO2		=	C2H3	+	CH2O	+	OH	C	1.00E+12	0	0	CGS
57	C3H5	+	H		=	C3H4	+	H2		C	1.00E+13	0	0	CGS	
58	C3H5	+	O2		=	CH3	+	CH2O	+	CO	C	4.00E+12	0	0	CGS
69	C3H4	+	OH		=	C2H3	+	CH2O		C	1.00E+12	0	0	CGS	
60	C3H4	+	OH		=	C2H4	+	HCO		C	1.00E+12	0	0	CGS	
61	C3H4	+	O2		=	C3H3	+	HO2		C	4.00E+13	0	39160	CGS	
62	CH3O	+	CO		=	CH3	+	CO2		C	1.57E+14	0	11800	CGS	
63	CH3O	+	H		=	CH2O	+	H2		C	2.00E+13	0	0	CGS	
64	CH3O	+	H		=	CH3	+	OH		C	1.00E+14	0	0	CGS	
65	CH3O	+	OH		=	CH2O	+	H2O		C	5.00E+12	0	0	CGS	
66	CH3O	+	O		=	CH2O	+	OH		C	1.00E+13	0	0	CGS	
67	CH3O	+	O2		=	CH2O	+	HO2		C	4.28E-13	7.6	-3530	CGS	
68	CH3O				=	CH2O	+	H		C	3.00E+12	0	27420	CGS	
69	C3H3	+	C3H3		=	A1				C	2.00E+12	0	0	CGS	
70	C4H5	+	C2H3		=	A1	+	H2		C	1.84E+13	0	7070	CGS	
71	C7H8	+	H		=	A1	+	CH3		C	1.20E+12	0	5148	CGS	
72	C7H8	+	C6H5		=	C7H7	+	A1		C	2.10E+12	0	4400	CGS	
73	C6H5CHO	+	H		=	A1	+	HCO		C	1.20E+13	0	5148	CGS	
74	C6H5CHO	+	C6H5		=	C6H5CO	+	A1		C	7.01E+11	0	4400	CGS	
75	C6H5CO	+	HO2		=	C6H5	+	CO2	+	OH	C	2.00E+13	0	0	CGS
76	C6H5CO	+	O2		=	C6H5O	+	CO2		C	3.00E+11	0	2870	CGS	
77	A1	+	O2		=	C6H5	+	HO2		C	6.30E+13	0	60000	CGS	
78	A1	+	OH		=	C6H5	+	H2O		C	1.60E+08	1.42	1450	CGS	
79	C6H5	+	CH2O		=	A1	+	HCO		C	1.75E+10	0	0	CGS	
80	A1	+	O		=	C6H5	+	OH		C	2.00E+13	0	14704	CGS	
81	C6H5	+	H		=	A1				C	2.20E+14	0	0	CGS	

82	CO	+	OH			=	CO2	+	H				C	3.51E+07	1.3	70	CGS
83	CO	+	O2			=	CO2	+	O				C	4.60E+13	0	41000	CGS
84	CO	+	HO2			=	CO2	+	OH				C	1.50E+14	0	23650	CGS
85	CO	+	O	+	M	=	CO2	+	M				C	6.17E+14	0	3000	CGS
86	H2	+	O2			=	OH	+	OH				C	1.70E+13	0	47780	CGS
87	H2	+	OH			=	H2O	+	H				C	1.17E+09	1.3	3626	CGS
88	O	+	OH			=	O2	+	H				C	2.04E+14	-0.4	0	CGS
89	O	+	H2			=	OH	+	H				C	5.06E+04	2.7	6290	CGS
90	O	+	OH	+	M	=	HO2	+	M				C	1.00E+16	0	0	CGS
91	H	+	O2	+	M	=	HO2	+	M				C	3.61E+17	-0.7	0	CGS
92	OH	+	HO2			=	H2O	+	O2				C	7.50E+12	0	0	CGS
93	H	+	HO2			=	OH	+	OH				C	1.70E+14	0	874	CGS
94	O	+	HO2			=	O2	+	OH				C	1.40E+13	0	1073	CGS
95	OH	+	OH			=	O	+	H2O				C	6.00E+08	1.3	0	CGS
96	H	+	H	+	M	=	H2	+	M				M	1.00E+18	-1	0	CGS
H2/0.0/ H2O /0.0/ CO2/0.0/																	
97	H	+	H	+	H2	=	H2	+	H2				C	9.20E+16	-0.6	0	CGS
98	H	+	H	+	H2O	=	H2	+	H2O				C	6.00E+19	-1.3	0	CGS
99	H	+	H	+	CO2	=	H2	+	CO2				C	5.49E+20	-2	0	CGS
100	H	+	OH	+	M	=	H2O	+	M				C	1.60E+22	-2	0	CGS
101	H	+	O	+	M	=	OH	+	M				C	6.20E+16	-0.6	0	CGS
102	O	+	O	+	M	=	O2	+	M				C	1.89E+13	0	-1788	CGS
103	H	+	HO2			=	H2	+	O2				C	1.25E+13	0	0	CGS
104	HO2	+	HO2			=	H2O2	+	O2				C	2.02E+12	0	0	CGS
105	H2O2	+	M			=	OH	+	OH	+	M		C	4.30E+16	0	45500	CGS
106	H2O2	+	H			=	HO2	+	H2				C	1.60E+12	0	3800	CGS
107	H2O2	+	OH			=	H2O	+	HO2				C	1.00E+13	0	1800	CGS
108	H2O2	+	H			=	H2O	+	OH				C	1.00E+13	0	3590	CGS
109	H2O2	+	O			=	H2O	+	O2				C	8.40E+11	0	4260	CGS

付 録 C

110	H2O2	+	O		=	OH	+	HO2			C	2.00E+13	0	5900	CGS
111	H2	+	HO2		=	H2O	+	OH			C	6.50E+11	0	18800	CGS
112	CH2O	+	O2		=	HCO	+	HO2			C	1.00E+14	0	39000	CGS
113	CH2O	+	HO2		=	HCO	+	H2O2			C	3.00E+12	0	8000	CGS
114	CH2O	+	CH3		=	HCO	+	CH4			C	5.54E+03	2.81	5860	CGS
115	CH2O	+	M		=	HCO	+	H	+	M	C	3.30E+16	0	81000	CGS
116	HCO	+	HCO		=	CH2O	+	CO			C	3.01E+13	0	0	CGS
117	HCO	+	HCO		=	CO	+	CO	+	H2	C	3.01E+13	0	0	CGS
118	HCO	+	OH		=	H2O	+	CO			C	3.00E+13	0	0	CGS
119	HCO	+	H		=	H2	+	CO			C	1.19E+13	0.3	0	CGS
120	HCO	+	O		=	OH	+	CO			C	3.00E+13	0	0	CGS
121	HCO	+	O		=	H	+	CO2			C	3.00E+13	0	0	CGS
122	HCO	+	O2		=	HO2	+	CO			C	3.30E+13	-0.4	0	CGS
123	HCO	+	M		=	H	+	CO	+	M	C	1.87E+17	-1	17000	CGS
124	HCO	+	HO2		=	CO2	+	OH	+	H	C	3.00E+13	0	0	CGS
125	CH4	+	O2		=	CH3	+	HO2			C	7.90E+13	0	56000	CGS
126	CH4	+	H		=	CH3	+	H2			C	6.60E+08	1.6	10840	CGS
127	CH4	+	OH		=	CH3	+	H2O			C	1.60E+06	2.1	2460	CGS
128	CH4	+	O		=	CH3	+	OH			C	1.02E+09	1.5	8604	CGS
129	CH4	+	HO2		=	CH3	+	H2O2			C	1.00E+13	0	18700	CGS
130	CH4	+	CH2		=	CH3	+	CH3			C	4.00E+12	0	-570	CGS
131	CH3	+	HCO		=	CH4	+	CO			C	1.20E+14	0	0	CGS
132	CH3	+	HCO		=	CH2O	+	CH2			C	3.00E+13	0	0	CGS
133	CH3	+	H		=	CH4					C	1.90E+36	-7	9050	CGS
134	CH3	+	H		=	CH2	+	H2			C	9.00E+13	0	15100	CGS
135	CH3	+	CH3O		=	CH4	+	CH2O			C	4.30E+14	0	0	CGS
136	CH3	+	CH3		=	C2H6					D	2.12E+16	-1	620	CGS
137	CH3	+	CH3	(+M)	=	C2H6	(+M)				F	8.77E+16	-1.2	654	CGS
LOW / 1.400E+41 -7.030 2762.00/															

TROE/ .6190 73.20 1180.00 9999.00 /																
H2/2.0/ H2O/6.0/ CH4/2.0/ CO/1.50/ CO2/2.0/ C2H6/3.0/																
138	CH3	+	CH3			=	C2H5	+	H			C	4.99E+12	0.1	10600	CGS
139	CH3	+	O			=	CH2O	+	H			C	8.00E+13	0	0	CGS
140	CH3	+	OH			=	CH2	+	H2O			C	7.50E+06	2	5000	CGS
141	CH3	+	OH			=	CH2O	+	H2			C	4.00E+12	0	0	CGS
142	CH3	+	CH2			=	C2H4	+	H			C	3.00E+13	0	-570	CGS
143	CH3	+	HO2			=	CH3O	+	OH			C	5.00E+13	0	0	CGS
144	CH3	+	O2			=	CH3O	+	O			C	4.67E+13	0	30000	CGS
145	CH3	+	O2			=	CH2O	+	OH			C	2.31E+12	0	20310	CGS
146	CH3	+	C2H4			=	CH4	+	C2H3			C	6.62E+00	3.7	9482	CGS
147	CH3	+	CH3			=	C2H4	+	H2			C	1.00E+15	0	31000	CGS
148	CH2	+	OH			=	CH2O	+	H			C	2.50E+13	0	0	CGS
149	CH2	+	O2			=	HCO	+	OH			C	4.30E+10	0	-500	CGS
150	CH2	+	O2			=	CO2	+	H2			C	6.90E+11	0	500	CGS
151	CH2	+	O2			=	CO	+	H2O			C	2.00E+10	0	-1000	CGS
152	CH2	+	O2			=	CH2O	+	O			C	5.00E+13	0	9000	CGS
153	CH2	+	O2			=	CO2	+	H	+	H	C	1.60E+12	0	1000	CGS
154	CH2	+	O2			=	CO	+	OH	+	H	C	8.60E+10	0	-500	CGS
155	CH2	+	CH2			=	C2H2	+	H2			C	1.20E+13	0	800	CGS
156	CH2	+	CH2			=	C2H2	+	H	+	H	C	1.20E+14	0	800	CGS
157	CH2	+	CO2			=	CH2O	+	CO			C	1.00E+11	0	1000	CGS
158	C2H4	+	H			=	C2H3	+	H2			C	1.10E+14	0	8500	CGS
159	C2H4	+	O			=	CH3	+	HCO			C	1.60E+09	1.2	746	CGS
160	C2H4	+	O			=	CH2O	+	CH2			C	3.00E+04	1.88	180	CGS
161	C2H4	+	O			=	C2H3	+	OH			C	1.51E+07	1.91	3790	CGS
162	C2H4	+	OH			=	CH2O	+	CH3			C	6.00E+13	0	960	CGS
163	C2H4	+	HO2			=	C2H3	+	H2O2			C	7.10E+11	0	17110	CGS
164	C2H4	+	OH			=	C2H3	+	H2O			C	6.02E+13	0	5955	CGS

165	C2H4	+	M		=	C2H2	+	H2	+	M	C	1.50E+15	0	55800	CGS
166	C2H4	+	M		=	C2H3	+	H	+	M	D	2.60E+17	0	96570	CGS
167	C2H4	+	H		=	C2H5					C	2.60E+43	-9.3	52580	CGS
168	C2H6	+	O2		=	C2H5	+	HO2			C	1.00E+13	0	48960	CGS
169	C2H5	+	O2		=	C2H4	+	HO2			C	2.00E+10	0	-2200	CGS
170	C2H4	+	O2		=	C2H3	+	HO2			C	4.20E+14	0	57590	CGS
171	C2H4	+	C2H4		=	C2H5	+	C2H3			C	5.00E+14	0	64700	CGS
172	C2H5	+	HO2		=	C2H4	+	H2O2			C	3.00E+11	0	0	CGS
173	C2H2	+	O2		=	HCO	+	HCO			C	4.00E+12	0	28000	CGS
174	C2H2	+	O		=	CH2	+	CO			C	1.02E+07	2	1900	CGS
175	C2H2	+	H	+	M	=	C2H3	+	M		C	5.54E+12	0	2410	CGS
176	C2H3	+	H		=	C2H2	+	H2			C	4.00E+13	0	0	CGS
177	C2H3	+	O2		=	CH2O	+	HCO			C	4.00E+12	0	-250	CGS
178	C2H3	+	O2		=	C2H2	+	HO2			C	1.34E+06	1.61	-384	CGS
179	C2H3	+	OH		=	C2H2	+	H2O			C	5.00E+12	0	0	CGS
180	C2H3	+	CH2		=	C2H2	+	CH3			C	3.00E+13	0	0	CGS
181	C2H3	+	HCO		=	C2H4	+	CO			C	6.03E+13	0	0	CGS
182	C2H3	+	C2H3		=	C2H2	+	C2H4			C	1.45E+13	0	0	CGS
183	C2H3	+	O		=	C2H2	+	OH			C	1.00E+13	0	0	CGS
184	C2H2	+	CH2		=	C3H3	+	H			C	1.20E+13	0	6620	CGS
185	C3H3	+	OH		=	C3H2	+	H2O			C	1.00E+13	0	0	CGS
186	C3H3	+	O		=	CH2O	+	C2H			C	1.00E+13	0	0	CGS
187	C2H3				=	C2H2	+	H			C	4.60E+40	-8.8	46200	CGS
188	C2H2				=	C2H	+	H			C	2.37E+32	-5.3	1E+05	CGS
189	C2H	+	O2		=	HCO	+	CO			C	5.00E+13	0	1500	CGS
190	C2H	+	H2		=	H	+	C2H2			C	4.90E+05	2.5	560	CGS
191	C2H2	+	O		=	C2H	+	OH			C	4.60E+19	-1.4	28950	CGS
192	C2H2	+	OH		=	C2H	+	H2O			C	3.37E+07	2	14000	CGS
193	C2H2	+	OH		=	CH2CO	+	H			C	2.18E-04	4.5	-1000	CGS

194	C2H2	+	OH		=	CH3	+	CO		C	4.83E-04	4	-2000	CGS	
195	C2H2	+	C2H		=	C4H2	+	H		C	9.60E+13	0	0	CGS	
196	C4H	+	H2		=	H	+	C4H2		C	4.90E+05	2.5	560	CGS	
197	C4H2	+	OH		=	C4H	+	H2O		C	3.37E+07	2	14000	CGS	
198	C4H2	+	C2H		=	C4H	+	C2H2		C	2.00E+13	0	0	CGS	
199	C4H2	+	O		=	C3H2	+	CO		C	2.70E+13	0	1720	CGS	
200	C3H2	+	O		=	C2H2	+	CO		C	5.80E+13	0	0	CGS	
201	C3H2	+	OH		=	HCO	+	C2H2		C	5.80E+13	0	0	CGS	
202	C3H2	+	CH2		=	C4H3	+	H		C	3.00E+13	0	0	CGS	
203	C3H3	+	C3H3		=	C6H5	+	H		C	2.00E+12	0	0	CGS	
204	C3H2	+	HCCO		=	C4H3	+	CO		C	1.00E+13	0	0	CGS	
205	CH2CO	+	H		=	HCCO	+	H2		C	5.00E+13	0	8000	CGS	
206	CH2CO	+	H		=	CH3	+	CO		C	1.13E+13	0	3428	CGS	
207	CH2CO	+	O		=	HCCO	+	OH		C	1.00E+13	0	8000	CGS	
208	C2H2	+	C2H2		=	C4H2	+	H2		C	1.00E+17	0	81000	CGS	
209	C2H2	+	C2H		=	C4H3				C	4.50E+37	-7.7	7100	CGS	
210	C2H3	+	C2H2		=	C4H5				C	8.10E+37	-8.1	13400	CGS	
211	C2H2	+	O		=	HCCO	+	H		C	1.02E+07	2	1900	CGS	
212	C4H5	+	O2		=	C2H4	+	CO	+	HCO	C	4.16E+10	0	2500	CGS
213	C4H3	+	M		=	C4H2	+	H	+	M	C	1.00E+14	0	30000	CGS
214	C4H3	+	H		=	C2H2	+	C2H2		C	6.30E+25	-3.3	10014	CGS	
215	C4H3	+	H		=	C4H2	+	H2		C	1.50E+13	0	0	CGS	
216	C4H3	+	OH		=	C4H2	+	H2O		C	5.00E+12	0	0	CGS	
217	C2H	+	OH		=	H	+	HCCO		C	2.00E+13	0	0	CGS	
218	C4H3	+	C2H2		=	C6H5				C	2.80E+03	2.9	1400	CGS	
219	C6H6	+	H		=	A1	+	H		D	3.70E+20	-2.4	6800	CGS	
220	C4H3	+	C2H2		=	A1-				C	1.90E+63	-15	30600	CGS	
221	C4H5	+	C2H2		=	A1	+	H		C	1.60E+18	-1.9	7400	CGS	
222	C6H5				=	A1-				C	3.50E+46	-10	33600	CGS	

223	C6H5	+	C2H		=	A1C2H					C	2.54E+17	-1.5	9 1541.0	CGS
224	A1	+	H		=	A1-	+	H2			C	2.59E+14	0	16000	CGS
225	A1	+	OH		=	A1-	+	H2O			C	1.06E+08	1.42	1450	CGS
226	A1-	+	H		=	A1					C	1.00E+14	0	0	CGS
227	C4H3	+	C4H2		=	A1C2H-					C	1.90E+63	-15	30600	CGS
228	A1	+	C2H		=	A1C2H	+	H			C	5.00E+13	0	0	CGS
229	A1-	+	C2H2		=	A1C2H2					C	7.90E+29	-5.2	13700	CGS
230	A1-	+	C2H2		=	A1C2H	+	H			C	2.50E+29	-4.4	26400	CGS
231	A1C2H	+	H		=	A1C2H2					C	1.60E+32	-5.7	11090	CGS
232	A1C2H	+	H		=	A1C2H-	+	H2			C	2.50E+14	0	16000	CGS
233	A1C2H	+	OH		=	A1C2H-	+	H2O			C	1.60E+08	1.42	1450	CGS
234	A1C2H-	+	H	+	M	=	A1C2H	+	M		C	1.00E+14	0	0	CGS
235	A1-	+	C2H3		=	A1C2H2	+	H			C	9.40E+00	4.14	23234	CGS
236	A1-	+	C4H2		=	A2-1					C	5.10E+48	-11	28000	CGS
237	A1C2H2	+	H		=	A1C2H	+	H2			C	1.50E+13	0	0	CGS
238	A1C2H2	+	OH		=	A1C2H	+	H2O			C	2.50E+12	0	0	CGS
239	A1C2H-	+	C2H2		=	A2-1					C	5.10E+48	-11	28000	CGS
240	A1C2H-	+	C2H2		=	A1C2H)2	+	H			C	2.10E+10	0.85	13700	CGS
241	A1C2H)2	+	H		=	A2-1					C	1.50E+51	-11	25500	CGS
242	A1C2H	+	C2H		=	A1C2H)2	+	H			C	5.00E+13	0	0	CGS
243	A1C2H2	+	C2H2		=	A2	+	H			C	1.60E+18	-1.9	7400	CGS
244	A2	+	H		=	A2-1	+	H2			C	2.50E+14	0	16000	CGS
245	A2	+	OH		=	A2-1	+	H2O			C	1.60E+08	1.42	1450	CGS
246	A2-1	+	O2		=	A1C2H	+	HCO	+	CO	C	2.10E+12	0	7470	CGS
247	A2-1	+	C2H2		=	A2R5	+	H			C	1.10E+07	1.71	3900	CGS
248	A2R5	+	O		=	A2-1	+	HCCO			C	2.20E+13	0	4530	CGS
249	A2R5-	+	O2		=	A2-1	+	CO	+	CO	C	2.10E+12	0	7470	CGS
250	A2R5	+	H		=	A2R5-	+	H2			C	2.50E+14	0	16000	CGS

251	A2R5	+	OH		=	A2R5-	+	H2O		C	1.60E+08	1.42	1450	CGS	
252	A2R5-	+	H		=	A2R5				C	1.00E+14	0	0	CGS	
253	HCCO	+	O2		=	OH	+	CO	+	CO	C	1.60E+12	0	854	CGS
254	HCCO	+	CH2		=	C2H3	+	CO		C	3.00E+13	0	0	CGS	
255	C2H	+	C2H		=	C4H2				C	1.80E+13	0	0	CGS	
256	C3H4	+	O		=	HCCO	+	CH3		C	6.30E+12	0	2010	CGS	
257	HCCO	+	HCCO		=	C2H2	+	CO	+	CO	C	1.00E+13	0	0	CGS
258	CH2O	+	O		=	HCO	+	OH		C	3.80E+13	0	3540	CGS	
259	CH2O	+	H		=	HCO	+	H2		C	2.30E+10	1.05	3270	CGS	
260	CH2O	+	OH		=	HCO	+	H2O		C	1.43E+10	1.2	-447	CGS	
261	C2H5	+	O		=	CH3HCO	+	H		C	1.09E+14	0	0	CGS	
262	C2H5	+	O		=	CH2O	+	CH3		C	4.24E+13	0	0	CGS	
263	C2H5	+	O		=	C2H4	+	OH		C	3.46E+13	0	0	CGS	
264	CH2CO	+	O		=	HCO	+	HCO		C	1.05E+13	0	2400	CGS	
265	CH2CO	+	OH		=	HCCO	+	H2O		C	1.50E+13	0	2000	CGS	
266	CH2CO	+	OH		=	HCO	+	CH2O		C	2.04E+12	0	0	CGS	
267	CH2CO	+	OH		=	CH3	+	CO2		C	3.10E+13	0	0	CGS	
268	CH2CO	+	M		=	CH2	+	CO	+	M	C	3.00E+16	0	#####	CGS
269	C2H3	+	O		=	CH2CO	+	H		C	3.00E+13	0	0	CGS	
270	C3H3	+	O2		=	CH2CO	+	HCO		C	3.00E+10	0	2878	CGS	
271	C3H4	+	O		=	CH2CO	+	CH2		C	2.00E+07	1.8	1000	CGS	
272	C4H3	+	O2		=	HCCO	+	CH2CO		C	1.00E+12	0	0	CGS	
273	C6H5	+	O2		=	CH2CO	+	CH2CO	+	C2H	C	7.80E+16	-1.8	0	CGS
274	A1C2H	+	OH		=	A1-	+	CH2CO		C	2.18E-04	4.5	-1000	CGS	
275	A1C2H)2	+	OH		=	A1C2H-	+	CH2CO		C	2.18E-04	4.5	-1000	CGS	
276	A2	+	OH		=	A1C2H	+	CH2CO	+	H	C	1.30E+13	0	10600	CGS
277	A2	+	O		=	CH2CO	+	A1C2H		C	2.20E+13	0	4530	CGS	
278	A2R5	+	OH		=	A2-1	+	CH2CO		C	1.30E+13	0	10600	CGS	
279	C4H5	+	C3H4		=	C7H8	+	H		C	2.00E+11	0	3600	CGS	

280	C7H7	+	H		=	C7H8					C	1.20E+14	0	0	CGS
281	C7H8				=	C6H5	+	CH3			C	1.40E+16	0	99800	CGS
282	C7H8	+	O2		=	C7H7	+	HO2			C	3.00E+14	0	42400	CGS
283	C7H8	+	OH		=	C7H7	+	H2O			C	1.78E+13	0	2583	CGS
284	C7H8	+	O		=	C7H7	+	OH			C	1.00E+08	1.5	8000	CGS
285	C7H8	+	H		=	C7H7	+	H2			C	1.50E+14	0	8235	CGS
286	C7H8	+	CH3		=	C7H7	+	CH4			C	3.16E+11	0	9500	CGS
287	C7H8	+	C2H3		=	C7H7	+	C2H4			C	3.98E+12	0	8000	CGS
288	C7H7	+	O		=	C6H5CHO	+	H			C	5.00E+13	0	0	CGS
289	C7H7	+	O		=	C6H5	+	CH2O			C	8.00E+13	0	0	CGS
290	C7H7	+	HO2		=	C6H5CHO	+	H	+	OH	C	6.00E+13	0	0	CGS
291	C7H7	+	HO2		=	C6H5	+	CH2O	+	OH	C	6.00E+12	0	0	CGS
292	C7H7	+	OH		=	C7H8O					C	5.00E+13	0	0	CGS
293	C7H7	+	C6H5OH		=	C7H8	+	C6H5O			C	1.05E+11	0	9500	CGS
294	C7H8O	+	OH		=	C6H5CHO	+	H2O	+	H	C	8.43E+12	0	2583	CGS
295	C7H8O	+	O2		=	C6H5CHO	+	H	+	HO2	C	2.00E+14	0	41400	CGS
296	C7H8O	+	H		=	C6H5CHO	+	H	+	H2	C	8.00E+13	0	0	CGS
297	C7H8O	+	H		=	C7H8	+	OH			C	2.21E+13	0	7910	CGS
298	C7H8O	+	C7H7		=	C6H5CHO	+	C7H8	+	H	C	2.11E+11	0	9500	CGS
299	C6H5CHO	+	O2		=	C6H5CO	+	HO2			C	1.02E+13	0	38950	CGS
300	C6H5CHO	+	OH		=	C6H5CO	+	H2O			C	1.71E+09	1.18	-447	CGS
301	C6H5CHO	+	H		=	C6H5CO	+	H2			C	5.00E+13	0	4928	CGS
302	C6H5CHO	+	O		=	C6H5CO	+	OH			C	9.04E+12	0	3080	CGS
303	C6H5CO				=	C6H5	+	CO			C	3.98E+14	0	29400	CGS
304	C6H5	+	CH3		=	C7H7	+	H			C	5.70E-02	5	15700	CGS
305	C6H5	+	HO2		=	C6H5O	+	OH			C	5.00E+13	0	1000	CGS
306	C6H5	+	O2		=	C6H5O	+	O			C	2.60E+13	0	6120	CGS
307	C6H5O				=	C5H5	+	CO			C	2.51E+11	0	43900	CGS
308	C6H5	+	OH		=	C6H5O	+	H			C	5.00E+13	0	0	CGS

309	C6H5O	+	O		=	C5H5	+	CO2		C	1.00E+13	0	0	CGS	
310	C6H5OH	+	H		=	C6H5O	+	H2		C	1.15E+14	0	12400	CGS	
311	C6H5OH	+	O		=	C6H5O	+	OH		C	2.81E+13	0	7352	CGS	
312	C6H5OH	+	HO2		=	C6H5O	+	H2O2		C	3.00E+13	0	15000	CGS	
313	C6H5OH	+	C2H3		=	C2H4	+	C6H5O		C	6.00E+12	0	0	CGS	
314	C6H5OH	+	OH		=	H2O	+	C6H5O		C	1.39E+08	1.43	-962	CGS	
315	C3H7	+	HO2		=	CH3CHO	+	CH3	+	OH	C	2.41E+13	0	0	CGS
316	C3H7	+	O		=	CH3CHO	+	CH3		C	4.82E+13	0	0	CGS	
317	C2H4	+	HO2		=	CH3CHO	+	OH		C	6.03E+09	0	7949	CGS	
318	C2H5	+	O		=	CH3CHO	+	H		C	6.62E+13	0	0	CGS	
319	C2H3	+	OH		=	CH3CHO				C	3.01E+13	0	0	CGS	
320	CH3CHO				=	CH3	+	HCO		C	7.00E+15	0	81674	CGS	
321	CH3CHO	+	O2		=	HO2	+	CH3	+	CO	C	3.01E+13	0	39150	CGS
322	C2H3	+	O2		=	CH2CHO	+	O		C	3.50E+14	-0.6	5260	CGS	
323	C2H4	+	O		=	CH2CHO	+	H		C	1.21E+06	2.08	0	CGS	
324	O	+	CH2CHO		=	H	+	CH2	+	CO2	C	1.50E+13	0	0	CGS
325	O2	+	CH2CHO		=	OH	+	CO	+	CH2O	C	2.00E+13	0	4200	CGS
326	O2	+	CH2CHO		=	OH	+	HCO	+	HCO	C	2.35E+10	0	0	CGS
327	H	+	CH2CHO		=	CH3	+	HCO		C	2.20E+13	0	0	CGS	
328	H	+	CH2CHO		=	CH2CO	+	H2		C	1.10E+13	0	0	CGS	
329	OH	+	CH2CHO		=	H2O	+	CH2CO		C	1.20E+13	0	0	CGS	
330	N	+	NO		=	N2	+	O		C	3.50E+14	0	330	CGS	
331	N	+	O2		=	NO	+	O		C	9.00E+09	1	6500	CGS	
332	N	+	OH		=	NO	+	H		C	7.33E+13	0	1120	CGS	
333	N	+	CO2		=	NO	+	CO		C	1.90E+11	0	3400	CGS	
334	N2O	+	O		=	N2	+	O2		C	1.40E+12	0	10810	CGS	
335	N2O	+	O		=	NO	+	NO		C	2.90E+13	0	23150	CGS	
336	N2O	+	H		=	N2	+	OH		C	4.40E+14	0	18880	CGS	
337	N2O	+	OH		=	N2	+	HO2		C	2.00E+12	0	21060	CGS	

338	N2O	+	NO			=	N2	+	NO2			C	2.75E+14	0	50000	CGS
339	NO2	+	N			=	NO	+	NO			C	1.00E+12	0	0	CGS
340	NO	+	HO2			=	NO2	+	OH			C	2.11E+12	0	-480	CGS
341	NO	+	O	+	M	=	NO2	+	M			C	1.06E+20	-1.4	0	CGS
342	NO2	+	O			=	NO	+	O2			C	3.90E+12	0	-240	CGS
343	NO2	+	H			=	NO	+	OH			C	1.32E+14	0	360	CGS
344	N2O	+	M			=	N2	+	O	+	M	C	1.30E+11	0	59620	CGS
345	C6H4O2	+	O			=	2CO	+	C2H2	+	CH2CO	C	3.00E+13	0	5000	CGS
346	MP3J	+	C7H15-1			=	C11H22O2					C	8.00E+12	0	0	CGS
347	MP3J	+	C7H15-2			=	C11H22O2					C	1.00E+13	0	0	CGS
348	MB2J	+	H			=	C5H10O2					C	1.00E+14	0	0	CGS
349	MB3J	+	H			=	C5H10O2					C	1.00E+14	0	0	CGS
350	C5H10O2	+	O2			=	HO2	+	MB3J			C	2.00E+13	0	51050	CGS
351	C5H10O2	+	OH			=	H2O	+	MB3J			C	4.68E+07	1.61	-35	CGS
352	C5H10O2	+	C2H5			=	C2H6	+	MB3J			C	5.00E+11	0	10400	CGS
353	C5H10O2	+	C2H3			=	C2H4	+	MB3J			C	4.00E+11	0	16800	CGS
354	ME2J	+	C2H5			=	C5H10O2					C	8.00E+12	0	0	CGS
355	C5H10O2	+	O2			=	HO2	+	MB2J			C	4.00E+13	0	41300	CGS
356	C5H10O2	+	CH3			=	CH4	+	MB2J			C	2.01E+11	0	7900	CGS
357	C5H10O2	+	H			=	H2	+	MB2J			C	6.52E+14	0	7300	CGS
358	C5H10O2	+	HO2			=	H2O2	+	MB2J			C	4.32E+12	0	14400	CGS
359	C5H10O2	+	O			=	OH	+	MB2J			C	2.20E+13	0	3280	CGS
360	C5H10O2	+	OH			=	H2O	+	MB2J			C	1.15E+11	0.5	63	CGS
361	C5H10O2	+	C2H3			=	C2H4	+	MB2J			C	4.00E+11	0	14300	CGS
362	C5H10O2	+	C2H5			=	C2H6	+	MB2J			C	2.00E+11	0	7900	CGS
363	C5H10O2	+	MB2OO			=	MB2OOH	+	MB2J			C	2.16E+12	0	14400	CGS
364	MP2D	+	CH3			=	MB2J					C	1.00E+10	0	7600	CGS
365	MB2D	+	H			=	MB2J					C	1.00E+13	0	2900	CGS
366	MB2J	+	O2			=	MB2OO					C	1.41E+13	0	0	CGS

付 録 C

367	HO2	+	MB2J		=	OH	+	MB2O		C	7.00E+12	0	-1000	CGS	
368	MB2OO	+	HO2		=	MB2OOH	+	O2		C	1.75E+10	0	-3275	CGS	
369	MB2OO	+	MB2OO		=	O2	+	MB2O	+	MB2O	C	1.40E+16	-1.6	1860	CGS
370	MB2OO	+	MB2J		=	MB2O	+	MB2O		C	7.00E+12	0	-1000	CGS	
371	MB2OO	+	CH3		=	CH3O	+	MB2O		C	7.00E+12	0	-1000	CGS	
372	MB2OOH				=	MB2O	+	OH		C	6.00E+15	0	42540	CGS	
373	CH3CHO	+	C3H7		=	C5H10O2				C	1.81E+13	0	0	CGS	
374	MP2D	+	CH3		=	C2H3CO	+	CH2O	+	CH4	C	4.52E-01	3.65	7154	CGS
375	C2H3	+	CH3OCO		=	MP2D				C	1.00E+13	0	0	CGS	
376	MP2D	+	H		=	C2H3CO	+	CH2O	+	H2	C	9.40E+04	2.75	6280	CGS
377	MP2D	+	O		=	CH3OCO	+	CH2CHO	+	H2	C	5.01E+07	1.76	76	CGS
378	CO	+	CH3O		=	CH3OCO				C	1.50E+11	0	3000	CGS	
379	CO2	+	CH3		=	CH3OCO				C	1.50E+11	0	36730	CGS	
380	C2H4	+	CH3OCO		=	MP3J				C	1.06E+11	0	7350	CGS	
381	C2H3CO				=	C2H3	+	CO		C	2.04E+14	-0.4	31450	CGS	
382	MP2D	+	H		=	MP3J				C	1.00E+13	0	2900	CGS	
383	MB2OO	+	H2O2		=	MB2OOH	+	HO2		C	2.40E+12	0	10000	CGS	
384	MB2OOH	+	HO2		=	MB2OO	+	H2O2		C	2.40E+12	0	10000	CGS	
385	CH2CO	+	CH3O		=	ME2J				C	5.00E+11	0	-1000	CGS	
386	MP2D	+	O		=	ME2J	+	HCO		C	1.58E+07	1.76	-1216	CGS	
387	ME2*O	+	H		=	ME2J*O	+	H2		C	4.00E+13	0	4200	CGS	
388	ME2*O	+	CH3		=	ME2J*O	+	CH4		C	1.70E+12	0	8440	CGS	
389	ME2*O	+	HO2		=	ME2J*O	+	H2O2		C	2.80E+12	0	13600	CGS	
390	ME2*O	+	OH		=	ME2J*O	+	H2O		C	2.69E+10	0.76	-340	CGS	
391	ME2*O	+	O		=	ME2J*O	+	OH		C	5.00E+12	0	1790	CGS	
392	ME2*O	+	C2H5		=	MB2O				C	1.50E+11	0	11900	CGS	
393	CH3OCO	+	CO		=	ME2J*O				C	1.50E+11	0	3000	CGS	
394	C3H6	+	CH3OCO		=	MB3J				C	1.06E+11	0	7350	CGS	
395	MB2D	+	H		=	MB3J				C	1.00E+13	0	2900	CGS	

付 録 C

396	CH3	+	MP2D3J		=	MB2D					C	1.00E+13	0	0	CGS
397	C2H2	+	CH3OCO		=	MP2D3J					C	1.61E+40	-8.6	20330	CGS
398	MB2OO				=	MB2OOH4J					C	6.00E+10	0	22000	CGS
399	MB2OOH4J				=	MBCY4O2	+	OH			C	7.50E+10	0	15250	CGS
400	MBCY4O2	+	H		=	MP2D	+	HCO	+	H2	C	4.80E+08	1.5	2785	CGS
401	MBCY4O2	+	OH		=	MP2D	+	HCO	+	H2O	C	2.40E+06	2	-1192	CGS
402	MBCY4O2	+	HO2		=	MP2D	+	HCO	+	H2O2	C	4.00E+12	0	14398	CGS
403	MBCY4O2	+	H		=	C2H4	+	ME2J*O	+	H2	C	2.40E+08	1.5	2005	CGS
404	MBCY4O2	+	OH		=	C2H4	+	ME2J*O	+	H2O	C	1.20E+06	2	-1192	CGS
405	MBCY4O2	+	HO2		=	C2H4	+	ME2J*O	+	H2O2	C	2.00E+12	0	13261	CGS
406	MB2OOH4J	+	O2		=	MB2OOH4OO					C	4.52E+12	0	0	CGS
407	CH2CO	+	CH3OCO		=	MP3J2*O					C	1.00E+11	0	9200	CGS
408	MB2D	+	CH3		=	C5H7O2	+	CH4			C	1.00E+12	0	7300	CGS
409	MB2D	+	H		=	C5H7O2	+	H2			C	3.70E+13	0	3900	CGS
410	C5H7O2	+	OH		=	MB2D	+	O			C	7.00E+11	0	29900	CGS
411	MB2D	+	OH		=	C5H7O2	+	H2O			C	3.00E+13	0	1230	CGS
412	MB2D	+	HO2		=	C5H7O2	+	H2O2			C	1.50E+11	0	14190	CGS
413	C5H7O2				=	C2H3	+	HCCO	+	CH3O	C	2.50E+12	0	45000	CGS
414	C2H3CO	+	CH3O		=	MP2D					E	3.00E+13	0	0	CGS

付 録D
発表した論文

131-20115585 バイオディーゼルを用いたディーゼル機関の燃焼と排出ガス特性に関する研究*

崔 曉丹¹⁾ 清松 聖統²⁾ 藤間 浩平³⁾ 久留 裕貴⁴⁾ 草鹿 仁⁵⁾ 大聖 泰弘⁶⁾

The Effects on Diesel Engine Combustion and Emission Characteristics by Using Biodiesel

Xiaodan Cui Masato Kiyomatsu Kouhei Touma Yuki Hisatome Jin Kusaka Yasuhiro Daisho

Engine tests and numerical simulation were conducted to investigate the effect of 40% and 100% methyl oleate representing Jatropher-derived biodiesel on diesel combustion and emission characteristics over a wide range of DI diesel engine operating conditions. Emissions measurements and heat release analysis show that biodiesel can significantly reduce PM without influencing NOx emission and brake thermal efficiency under the conditions tested. Detailed analyses were made on particle size distribution and chemical components including soluble organic fraction.

Key Words: biodiesel, DI engine, combustion, emission, PM, NOx, SOF, particle size, particle number

1. はじめに

近年、地球温暖化や燃料枯渇の問題が深刻化しており、高効率であるディーゼルエンジンが注目されている。バイオディーゼル（脂肪酸メチルエステル、FAME、BDF）はディーゼルエンジンの燃料として実用可能なことが証明されている。気候変動に関わる CO₂ 排出量の抑制策として、バイオディーゼルは CO₂ 排出抑制に有効とされている。また、PM 排出量は著しく減少する一方、増加する NOx の排出抑制が必要とされ、これがバイオディーゼルの実用化における重要な課題となっている。

従来研究においては、BDF を軽油に対し体積割合で 20% 混合した場合、PM の平均減少率が 12% であり、BDF が 100% の場合、PM の平均減少率が 47%、NOx の平均増加率が 10% であると報告されていることは US EPA のレポートに報告されている¹⁾。また、BDF を混合すること（体積割合で 1~2%）によって、ディーゼル燃料の潤滑性の向上が期待できる。BDF は低温流動性が悪く、酸化による燃料性状の変化、ゴム素材の劣化が問題となっている。パーム油、菜種油や大豆油に対して、実験的に多く研究されているものの^{2)~4)}、軽油を使用することを前提に最適化されたエンジンにおいて燃料の及ぼす影響を検討した例の数が少ない。

そこで本研究では、食料の供給を圧迫することなく、干ばつに強く、酸性土壌でも栽培でき、収穫率と採油率が高いジャトロファから作られた BDF を用いて、軽油の代替燃料として、市販車用の量産型ディーゼル機関を運転し、燃焼特性と

排出ガス特性に与える影響について幅広い運転条件で調査した。また、EURO6 においては粒子数が規制され、それに対して、EEPS3090 を用いて、PM の粒子の排出数及び粒径を測定し、PM の排出特性を解明する。

本研究では、EGR 率の変化や、NOx と Soot のトレードオフが解消できるとして研究が行われている PCCI 燃焼⁵⁾などに代替燃料が及ぼす影響も合わせて実験的に調査した。

2. 供試燃料及びエンジン

本研究においては、注目されるジャトロファから作られる BDF に対して、オレイン酸メチル(Methyl Oleate, MO)が主成分である(約 50%)ことから、MO が BDF の代替燃料として、実験を行った。

性能比較の際に、JIS2 号軽油(D100)はベース燃料とし、MO40(MO がベース軽油と体積割合 40%で混合した燃料)、MO100(100%オレイン酸メチル)を用いてエンジンベンチ試験を行った。

実験には、2.2L、4 気筒、インタークーラーVTN ターボ過給、コモンレール式直噴ディーゼルエンジンを使用した。本エンジンは EURO4 対応エンジンとして、欧州で市販車に搭載されていたものである。表 1 にエンジン諸元を、図 1 に実験装置の概略図を示す。

*2010年10月1日自動車技術会秋季学術講演会において発表。

1)・2)・3)・4)・5)・6) 早稲田大学(169-8555 東京都新宿区大久保 3-4-1)

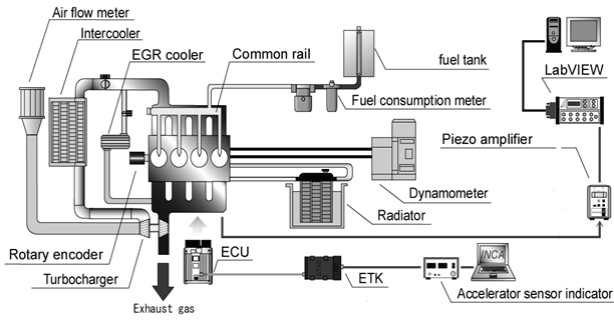


Fig.1 Engine layout

Table 1 Engine specifications

Item	Specifications
Engine type	Water-cooled, 4-stroke-cycle, TI Diesel engine
Valve train	DOHC 4 valves
Cylinder	L4
Bore x Stroke mm	85.0 x 97.1
Displacement cc	2204
Compression ratio	16.7
Fuel supply	Common-rail (Max.160 MPa) Nozzle cone angle 153° φ0.133mm × 6 holes
EGR system	HP-Hot-EGR / HP-Cooled-EGR
Boost control	VNT turbocharger
Swirl control	Continuously variable (Swirl ratio: 1.2-4.4)
Max. power kW/rpm	103/4000
Max. torque Nm/rpm	340/2000

3. 実験結果及び考察

3.1. 各燃料における各運転条件での測定結果

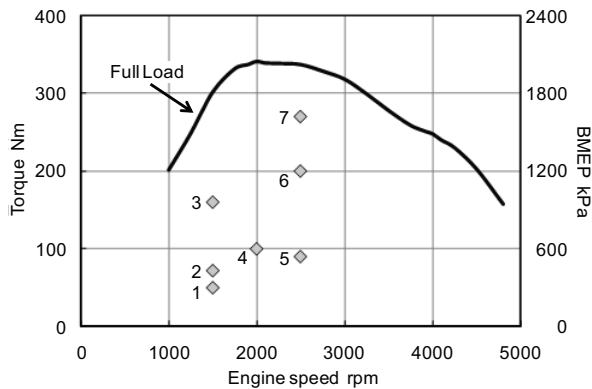


Fig.2 Load map

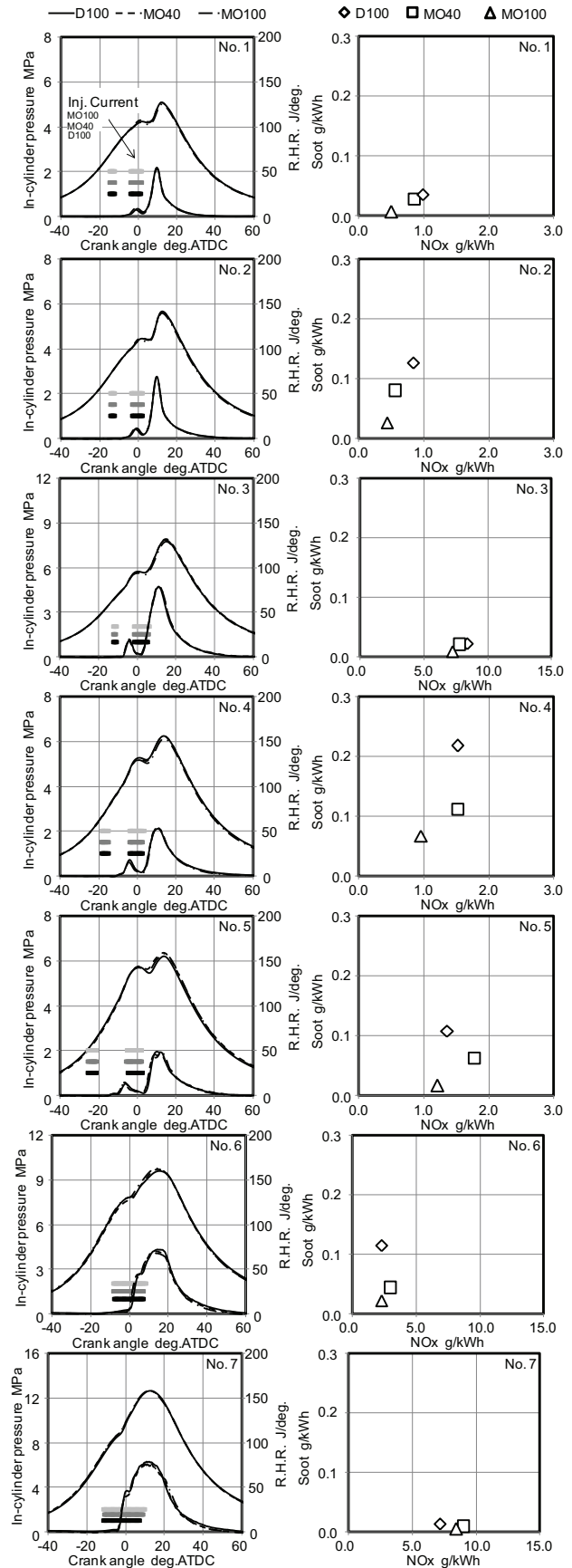


Fig.3 Comparison of Combustion characteristics

Fig.4 Comparison of Soot and NOx emission

エンジン回転数、負荷の異なる幅広い条件において燃料の違いが燃焼、排出ガス特性に及ぼす影響を調査するため、NEDCモード、US06モードにおいて使用頻度の高い運転条件を7点抽出し、定常試験を行い、燃焼圧力、熱発生と排出ガスの測定をした。これらの運転条件はこのエンジンが搭載されている市販車の設定値を元に設定した。低、中負荷が主な対象となるNEDCモードを代表するポイント(No.1~5)ではパイロット噴射を含む2段噴射を、高負荷が主な対象となるUS06モードを代表したポイント(No.6,7)では単段噴射を行っている。負荷領域を図2に示す。

図3は各運転条件における燃料の燃焼圧力と熱発生履歴を示す。各燃料の比較した結果については、各運転条件において、燃料種の違いによる影響がほとんど見られなかった。特に、MOの場合において燃料性状によって、着火遅れが長くなることを予測したが、実験結果によりあまり変化しなかったことがわかった。理由としては、D100のセタン価(58.3)とMO100のセタン価(57.2)がほぼ同等であるので、MO燃料の着火特性があまり変化していないと考えられる。

図4は各条件における排出ガスの結果を示す。MOを使用した場合、すべての条件においてSootの排出量が大幅に減少することがわかった。これは、含酸素燃料であるために当量比が減少し、Sootの酸化が促進されたためであると考えられる。また、MOにおいて芳香族成分が含まれていないであるためと考えられる。そして、低回転、高EGR条件において、NOxの排出量は減少する傾向になっていたことがわかった。

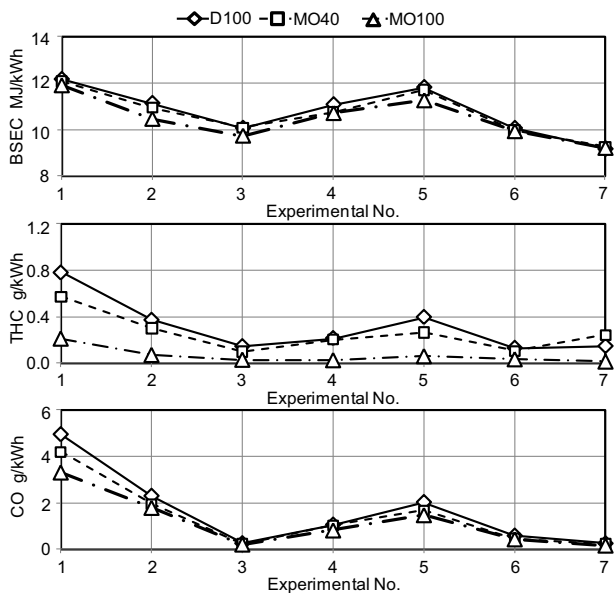


Fig.5 Comparison of fuel consumption, THC and CO

図5はTHC、COと燃費の結果を示す。MOを使用した場合、THCとCOに関しては排出量が減少している。また、MOにおいては正味燃料消費率が軽油より高くなっているものの、低発熱量が低いため、正味エネルギー消費率における燃費の

悪化が見られなかった。

3.2. PMの粒子数及び粒径測定

(1) 幅広い運転領域における定常試験

Engine Exhaust Particle Sizer Spectrometer (EEPS) Model 3090を用いて、1250rpm~3500rpm、50Nm~160Nmの範囲で市販車の設定値を元にトルク一定法によりマップ上計30条件で定常運転において、ローターリングディスク法で275倍に希釈し、質量分析法により、PMの平均粒径及び粒子数の濃度分布の測定を行った。負荷領域は図6に示す。

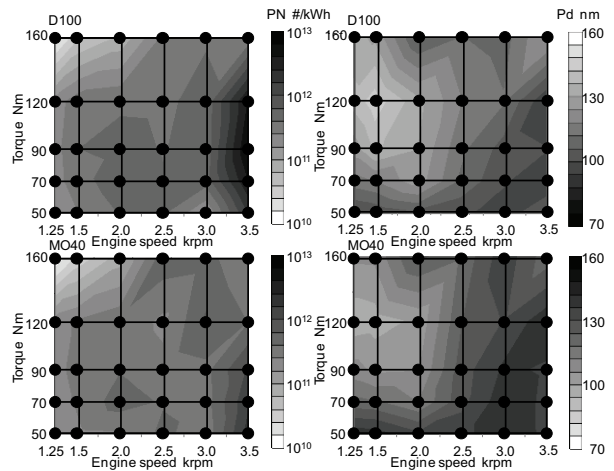
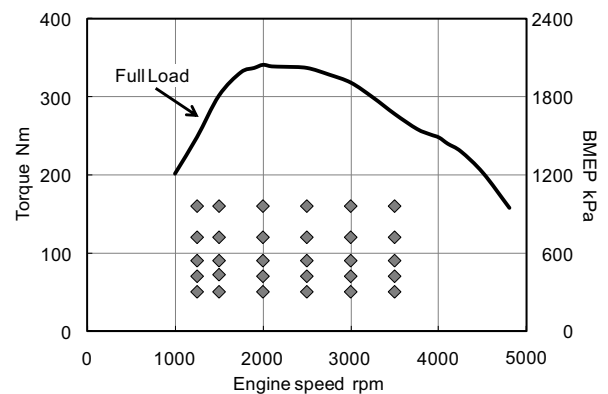


Fig.7 Particle number

Fig.8 Particle size

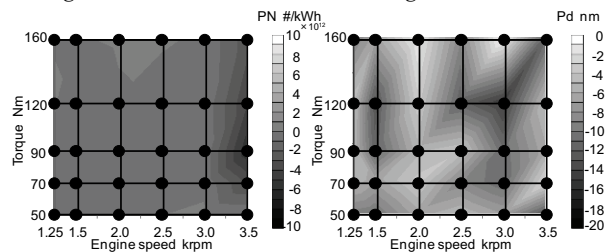


Fig.9 Comparison of particle number and size

図7は各燃料において、排出されたPMの粒子数分布を表している。粒子数はエンジンの回転数の増加により増加することが分かった。図8は各燃料における排出されたPM粒子

の平均粒径分布を表している。ここで平均粒径が式(1)により算出する。ここで m_i は各代表粒径における平均質量、 d_i は代表粒径である。

$$N_d = \frac{\sum(m_i d_i)}{\sum m_i} \quad (1)$$

図 9 は PM の粒子数及び平均粒径において、D100 が基準として、MO40 の絶対変化量をあらわしている。D100 においては高回転になるほど、粒子数が増加し、MO40 においては、低回転領域で、Soot の排出量が減少することにもかかわらず、粒子数がほとんど D100 と同等であり、高回転領域では、D100 と比べ、粒子数の減少する傾向が見られた。また、MO40 においては、D100 に比較し、平均粒径が全体的に小さくなっていることが分かった。これは、MO40 の中に含まれた芳香族が少ないことにより、PM の粒子の生成が抑制し、燃料中に酸素が含まれることにより、PM の酸化が促進することが理由と考えられる。

(2) EGR 率による影響

MO を燃料とした時、EGR による排出ガス特に PM の排出に与える影響を代表ポイントで Soot, NOx の減少が最も多いポイント No.4 において、調査した。

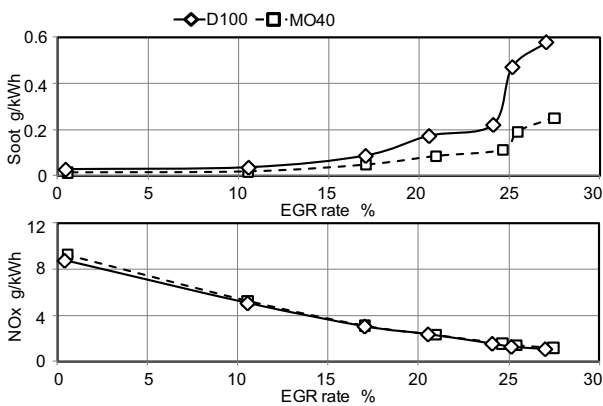


Fig.10 Effect of EGR rate on Soot and NOx emissions

図 10 に EGR 率変化における燃料の違いによる Soot と NOx の排出量に与える影響を示す。EGR 率を変化させることで Soot, NOx 排出量がトレードオフとなる一般的に知られた傾向がみられた。そして、Soot の排出量については、全ての EGR 率の条件において、MO40 を燃料とした場合の Soot の排出量が少なくなっていることが分かる。また、EGR 率が低い場合において、MO40 を燃料とする場合の NOx の排出量が多く、一方、EGR 率が高くなると NOx の増加率が減少することが分かる。これは、燃料の違いにより燃焼温度の増加する効果⁶⁾と比べ、多量クールド EGR の使用により燃焼温度の下がる効果のほうが NOx の排出量に与える影響が大きい

と考えられる。MO の使用によって、高 EGR 条件において、Soot の増加を抑えて NOx の大幅低減を可能と期待できる。

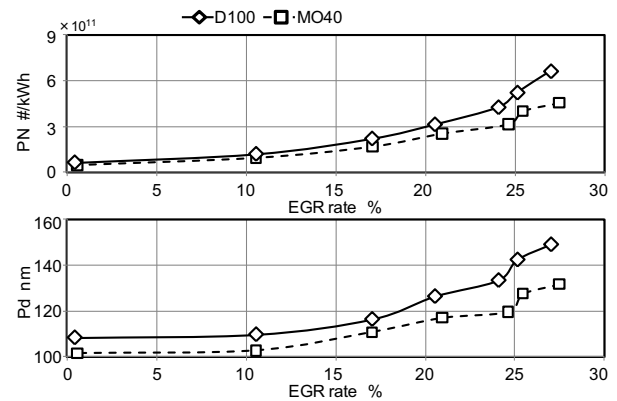


Fig.11 Effect of EGR rate on particle number and size

図 11 は EGR 率変化における各燃料による排出された PM の粒子数および平均粒径に与える影響を示す。EGR 率の増加につれて、粒子数の排出量が増加し、各燃料において粒子数の変化傾向が Soot の排出量の傾向と同様になっていることが分かった。また、EGR 率の増加につれて、粒子の平均粒径が増加する。しかしながら、各燃料において粒子の平均粒径変化傾向が Soot の排出量の傾向と違い、全ての EGR 率条件において MO40 が軽油より、ほぼ同等の程度に小さくなっていることが分かった。これは MO 中の酸素成分が PM の凝集に妨害すると考えられる。

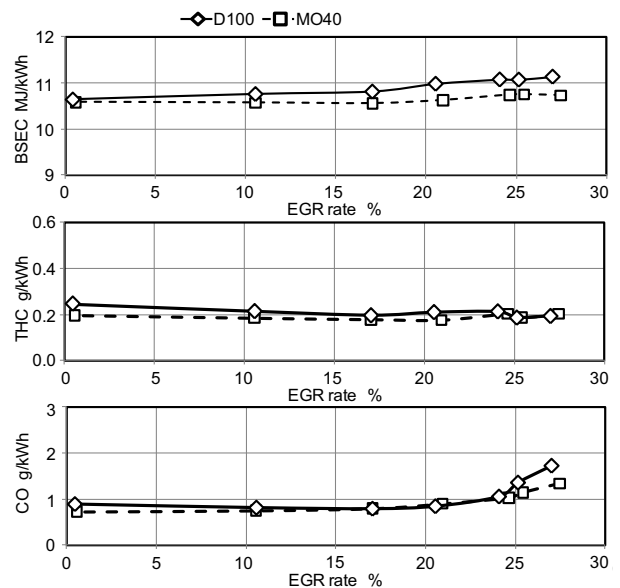


Fig.12 Effect of EGR rate on BSEC, THC and CO

図 12 に EGR 率変化における燃料の違いによる燃費及び THC と CO の排出量に与える影響を示す。軽油を燃料とする

場合においては、EGR 率の増加につれて燃費の悪化が見られ、MO40 を燃料とする場合においては、EGR 率の変化による燃費に与える影響がほとんど見られなかった。また、低 EGR 率の場合においては軽油と MO40 の燃費がほぼ一致する一方、高 EGR 率の場合においては MO40 を燃料とするときの燃費がよくなっていることが分かった。また、低 EGR 率の場合において MO40 を燃料とする場合が THC の排出量が少なく、一方、高 EGR 率の場合において燃料の違いによる THC の排出量に与える影響がほとんど無かったことが分かった。EGR 率の増加により CO の排出量がどの燃料においても増加し、MO40 を燃料とする場合において CO の排出量が軽油より少なくなっていることが分かった。これは、MO の燃料の中の酸素により、特に筒内温度が低い条件で、燃焼反応の酸化を促進される⁽⁷⁾と考えられる。

(3) PCCI 燃焼に及ぼす影響

NOx と Soot の同時低減が可能な PCCI 燃焼においては、噴射時期によって着火時期をコントロールすることができないため、従来の拡散的な燃焼以上に燃料性状が性能に与える影響が大きくなることが予想される。そこで、高圧、単段噴射により燃焼の予混合化し、燃料の違いにより、燃焼、排出ガス特性に及ぼす影響を性能試験により調査した。運転パラメータは表 2 に示す。

Table 4 Engine operating condition at PCCI

Engine speed (rpm)	Torque (Nm)	BMEP (kPa)	EGR rate (%)	Swirl ratio (-)	Inj. press. (MPa)	Inj. timing (deg.ATDC)
1500	72	412	35	3.4	160	-5.0

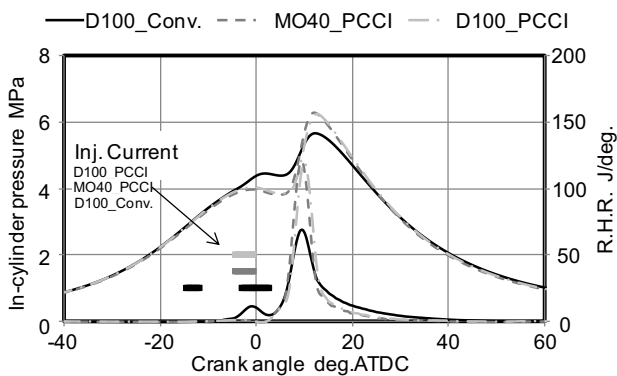


Fig.13 Effect of PCCI combustion on combustion characteristics

図 13 は各燃料により、燃焼圧力と熱発生履歴に及ぼす影響を示す。図 14 は各燃料の PCCI 燃焼時の各排出ガス及び燃費の特性を示している。MO40 を使用した場合においては、高圧、単段噴射により燃焼の予混合化をし、PCCI 燃焼を実現し

た。MO40 の場合においては着火時期が若干の進角が起きているが、大きな違いは見られなかった。その一方で、排出ガスに関しては、燃料に関わらず、NOx の排出量が維持しながら、Soot の大幅な低減し、PM の粒子数及び平均粒径も大幅に減少している。また、燃焼の低温化により MO40 の場合において、NOx の生成が抑えていることが分かった。CO、THC に関しては、燃料によらず従来の拡散的な燃焼と比べ増加している。ここで、MO40 を使用した場合においては、PM の平均粒径、CO と THC が D100 に比較した傾向が拡散的な燃焼の減少する傾向と違い、逆に、増加していることが分かった。これは MO が軽油に比べ、沸点が高く、蒸発性が悪いであるため、低温、低密度場に高圧噴射されることによって噴霧の到達距離が増大し、壁面付着する燃料が増加し、未燃燃料成分が増加することが原因であると考えられる。また、燃費の悪化は見られなかった。

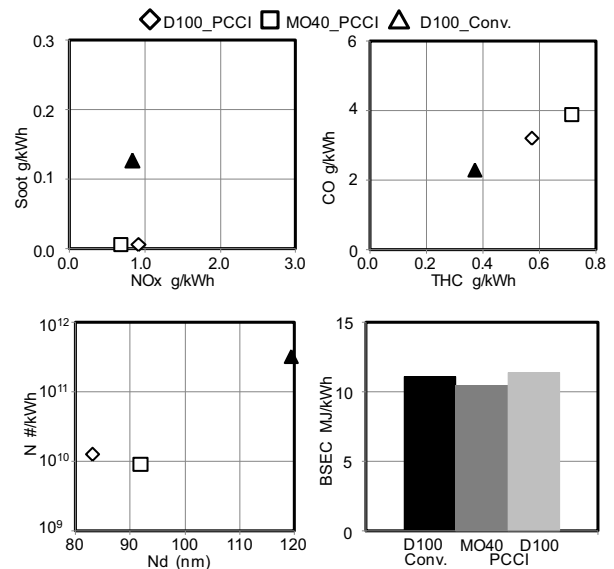


Fig.14 Effect of PCCI combustion on emissions and consumption

4. 結論

軽油はベース燃料とし、注目されるジェットロファから作られる BDF の主成分であるオレイン酸メチルが BDF の代替燃料として体積割合 40% で混合した燃料と、100% オレイン酸メチルの燃料、計 3 種の燃料を用いて、欧州で市販車に搭載されていた EURO4 対応エンジンでの実際の走行条件を模擬した 7 点での定常試験を行い、燃焼、排出ガス特性に及ぼす影響を実験的に調査した結果、得られた知見を以下に示す。

- (1) 燃料の違いが燃焼圧力、熱発生率に与える影響はほとんどなかった。
- (2) 含酸素燃料である MO を使用することで、当量比が低下することによってほぼ全ての運転領域で NOx の排出量が増加せず、Soot の排出量が大幅に減少し、THC、CO の排出量も

減少する。

(3)燃料にかかわらず、燃費の悪化が見られなかった。

軽油と MO40 を用いて、1250rpm~ 3500rpm、50Nm~160Nm の範囲で実際の走行条件を模擬した 30 点での定常試験に加え、EGR 率の変化及び PCCI 燃焼を行い、Engine Exhaust Particle Sizer Spectrometer (EEPS) Model 3090 により、PM の平均粒径及び粒子数の濃度分布の測定を行った。燃焼、排出ガ斯特性に及ぼす影響を実験的に調査した結果、得られた知見を以下に示す。

(1)PM の粒子数は高回転になるほど排出量が増加するが、低回転領域で燃料の違いによる粒子数の排出量の変化が見られなかった。高回転領域において、MO は軽油に比べて粒子数の排出量が大幅に減少することが分かった。

(2)MO を使用した場合、軽油より、排出された粒子の平均粒径が小さくなっていることが分かった。

(3)MO の使用によって、高 EGR 条件において、Soot の増加を抑えて NOx の大幅低減を可能と期待できる。

(4) MO40 を使用した場合においては、PCCI 燃焼を実現でき、NOx の排出量が維持しながら、Soot の大幅な低減し、PM の粒子数及び平均粒径も大幅に減少できる。MO が軽油に比べ、沸点が高く、蒸発性が悪いであるため、未燃燃料成分が増加することで、PM の平均粒径、CO と THC が D100 に比較し増加していることが分かった。

参 考 文 献

(1) United States Environmental Protection Agency 2002. “A Comprehensive Analysis of Biodiesel Impacts on Exhaust Emissions”, Draft Technical Report, EPA420-P-02-001

(2) A S Cheng, A Upatnieks, C J Mueller “Investigation of the impact of biodiesel fuelling on NOx emissions using an optical direct injection diesel engine”, Int. J. Engine Res. Vol. 7

(3) Marek Tatur, Harsha Nanjundaswamy, Dean Tomazic, Matthew Thornton, Robert L. McCormick “Biodiesel effect on U.S. light-duty Tier 2 engine and emission control systems - part 2”, SAE international 2009-01-0281

(4) R L McCormick, C J Tennant, R Robert Hayes, S Black, J Ireland, T McDaniel, A Williams, M Frailey “Regulated Emissions from Biodiesel Tested in Heavy-Duty Engines Meeting 2004 Emission Standards”, SAE Technical Paper 2005-01-2200

(5) 村田豊, 川野大輔, 草鹿仁, 大聖泰弘, 鈴木央一, 石井素, 後藤雄一, 小高松男 : 可変バルブタイミングによる予混合ディーゼル燃焼の中速中負荷域への適用, 自動車技術会論文集, vol.36, No.6, p.73-78(2005)

(6) R L McCormick, J R Alvarez, M S Graboski, “Fuel Additive and Blending Approaches to Reducing NOx Emissions from Biodiesel”, SAE Technical Paper 2002-01-1658

(7) 久留裕貴, 大久保拓哉, 崔暁丹, 松本康義, 藤田翔平, 大

聖泰弘, 大橋敏宏, 高林徹 : バイオディーゼル燃料が乗用車用ディーゼル機関の性能と排出ガスに及ぼす影響, 自動車技術会 2010 年秋季大会学術講演会前刷集, No.148-10, p.7-11



The Effects of Jatropha-derived Biodiesel on Diesel Engine Combustion and Emission Characteristics

2012-01-1637

Published
09/10/2012

XiaoDan Cui, Teagun Kim, Yusuke Fujii, Jin Kusaka and Yasuhiro Daisho
WASEDA University

Manida Tongroon and Nuwong Chollacoop
MTEC

Copyright © 2012 SAE International

doi:10.4271/2012-01-1637

ABSTRACT

The objective of the present research is to investigate the effects on diesel engine combustion and NO_x and PM emission characteristics in case of blending the ordinary diesel fuel with biodiesel in passenger car diesel engines. Firstly, we conducted experiments to identify the combustion and emissions characteristics in a modern diesel engine complying with the EURO 4 emission standard. Then, we developed a numerical simulation model to explain and generalize biodiesel combustion phenomena in detail and generalize emission characteristics. The experimental and simulation results are useful to reduce biodiesel emissions by controlling engine operating and design parameters in the diesel engine.

Engine tests were conducted and a mathematical model created to investigate the effects of 40% and 100% methyl oleate modeled fuel representing Jatropha-derived biodiesel on diesel combustion and emission characteristics, over a wide range of passenger car DI diesel engine operating conditions.

The thermal efficiency and emissions of these fuels were compared to real Jatropha-derived biodiesel. The engine used in this study complies with the EURO4 emission regulation, having a displacement of 2.2 L for passenger car applications.

In the engine tests, seven steady-state engine operating conditions typically encountered in the NEDC and US06 modes were chosen. Emissions measurements and heat release analyses showed that biodiesel can significantly reduce PM (particulate matter) without influencing heat release rate, NO_x emission and brake thermal efficiency

under the tested conditions. Detailed analyses were made of particle size distributions and chemical components including the soluble organic fraction. For comparison with experimental results, we developed a zero-dimensional reaction model with detailed chemical kinetics to identify the effects on engine combustion, performance and emissions. The results show that 100% methyl oleate tends to emit soot at a higher temperature region while the blended fuel emits soot at lower temperatures much closer to those at the region where the ordinary diesel fuel emits soot. However, NO_x emission did not vary significantly between diesel fuel and biodiesel. The ignition delay of methyl oleate is shorter than that of diesel and tends to be shorter as the injection pressure increases.

Based on the experimental and simulation results, the engine operating and design parameters of the diesel engine fueled with biofuel can be optimized to ensure thermal efficiency along with sufficiently reducing emissions.

INTRODUCTION

Global warming and fuel depletion issues are becoming serious in the transportation sector. To resolve them, diesel engines with high-efficiency and low fuel-consumption are becoming one of the effective measures across the world. Better still, biodiesel (fatty acid methyl esters, FAME, BDF) is a renewable fuel derived from vegetable oil, which can be blended with diesel fuel and used in diesel engine without changing engine design parameters. Furthermore, BDF is useful to reduce CO₂ emissions through the life cycle. While PM emissions are significantly reduced, it is necessary to reduce the increased NO_x emission, which is still an issue for the commercial utilization of biodiesel.

In previous studies, the U.S. EPA has reported that when using fuel blends of 20% biodiesel, the PM emission is reduced by 12% on average but NOx emission increases by 2%, while with 100% biodiesel, the PM emission is reduced by 47% but NOx emission increases by 10%. Additionally, blending BDF (1 to 2% in volume fraction) can improve the lubricity of diesel fuel [1]. Nonetheless, BDF has some problems to induce the poor cold flow, deterioration of oxidative stability and degradation of the rubber material.

Although the particle mass is reduced to comply with the recent emission regulations by using after-treatment such as an oxidation catalyst and a DPF (diesel particulate filter), there is increasing concern about the particle number (PN) influencing human health[2-3]. Both the particles number and size characteristics can affect the performance of DPF and LNT [4-5]. PN and particles size distribution from the diesel engine are influenced by fuel specifications as well [6,7,8]. Although many studies have been experimentally done by using palm oil, rapeseed oil or soybean oil [9,10,11,12], the present study uses biodiesel from *Jatropha* blended with normal diesel in the conventional diesel engine.

In recent years, some researchers have been trying to develop biodiesel combustion kinetics models [13,14,15,16]. These models would be useful to explain biodiesel combustion processes based on 3-D CFD code. Then, they could simulate in-cylinder combustion processes accompanied by mixing and chemistry processes and be utilized to determine engine control and design parameters to reduce emissions in case of diesel fuel blended with biodiesel. However, few of these models have been validated sufficiently by using test data on combustion and emissions in recently developed diesel engines. The engine tested in this study is equipped with an ECU we can flexibly handle to employ not only EGR and pilot injection but also premixed charge compression ignition (PCCI) combustion by changing injection timing.

In this study, we focus on *Jatropha* which doesn't have competition with food, can be grown in the drought area or even acid soil, and contain high oil content, has gained much attention recently [17]. Using BDF made from *Jatropha* as an alternative fuel, we studied its effects on the combustion and emission characteristics over a wide range of engine operating conditions in a passenger car diesel engine. We characterized PM emission in terms of particle number (PN) and particle diameter (Pd), considering the future EU regulation on particle number. Effects of EGR and premixed charge compression ignition (PCCI) combustion were explored to simultaneously reduce Soot and NOx [18]. Lastly, a numerical simulation model was developed to explain the effects of biodiesel on diesel engine combustion and emission characteristics.

EXPERIMENTAL SETUP & TEST PROCEDURE

Engine Facility

The engine used for this study is a production turbocharged DI diesel for passenger cars, complying with the Euro 4 regulation. The main specifications of the engine are shown in [Table 1](#).

The engine and measuring apparatus were configured as shown in [Fig.1](#). The fuel consumption was measured using an FP-2140H standard flow rate type series volumetric flow detector. Exhaust gases were sampled at the engine outlet before the DOC, and measured by MEXA 1500DEGR, while an AVL 415SE smoke meter was used for the measurement of filter smoke number with conversion to soot emission (g/kWh). The intake gas composition was also recorded to calculate the EGR rate.

Table 1. Engine specifications

Item	Specifications
Engine type	Water-cooled, 4-stroke-cycle, DI Diesel engine
Valve train	DOHC 4 valves
Cylinder	L4
Bore x Stroke mm	85.0 x 97.1
Displacement cc	2204
Compression ratio	16.7
Fuel supply	Common-rail (Max.160 MPa) Nozzle cone angle 153° φ0.133mm×6 holes
EGR system	HP-Hot-EGR / HP-Cooled-EGR
Boost control	VNT turbocharger
Swirl control	Continuously variable (Swirl ratio: 1.2-4.4)
Max. power kW/rpm	103/4000
Max. torque Nm/rpm	340/2000

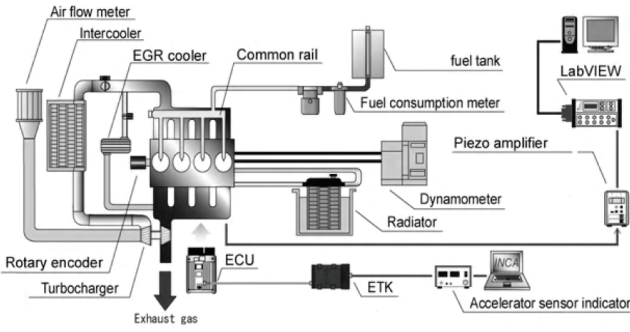


Fig.1. Experimental setup

During the tests, all the engine control parameters were controlled by ETAS ECU control program INCA 5.4, which was directly connected to the engine ECU. For all operating conditions, the 50% mass fraction of burned fuel (MFB50) was kept at the same crank angle for the different fuels at same engine speed and torque conditions by the injection strategy control for fair comparison. Moreover, the piezo-type pressure transducer (6055CSP120 by KISTLER) integrated into the glow plug in No.1 cylinder, which was used for the combustion control, was equipped to measure the in-cylinder pressure. Since the engine was a production one, a pressure passage between the transducer and the engine surface caused high frequency noise. So it was filtered by a low-pass filter and a transfer function shown in Eq. (1) [19] to prevent aliasing errors and signal distortion. In this equation, P_G is the measured pressure, P_z is the correction pressure, ω is the quadric approximate specific angular velocity which can be calculated by caliber ratio for a glow plug, and ζ is the quadric approximate damping coefficient which can be calculated by flow rate and air viscosity. After this processing, we used the ensemble average pressure data using 100 consecutive cycles. The pressure and temperature about intake and exhaust gases were recorded by thermocouple and digital manometer. For management of all the data, LabVIEW 8.5 (National Instruments) was used. And we repeated the engine tests three times on consecutive days for each condition to ensure data reproducibility.

$$P_z(t) = \left(\frac{1}{\omega^2}\right) P_G''(t) + \left(\frac{2\zeta}{\omega}\right) P_G'(t) + P_G(t) \quad (1)$$

Measuring and Sampling System

A TSI model 3090 engine exhaust particle sizer (EEPS) was used to record the PN and Pd distributions of exhaust PM under different engine operating conditions. Such analysis conditions were shown in Table 2. Since the measurements of PN and Pd distribution were very sensitive and reveal subtle effects for size selective losses, coagulation, heterogeneous condensation and homogeneous nucleation, the measuring points were required to be as close to source as possible for minimal coagulation, and the dilution line needed thermal conditioning to prevent condensation [20]. The dilution

method was shown in Fig.2. The design of the sampling line was shown in Fig.3. Engine exhaust gases were firstly drawn into the rotating disk thermodiluter (MD19-2E) and then diluted by mixing with filtered dilution air. The temperature of the dilution air was adjusted by heating apparatus at 120 °C in the dilution line. The MD19-2E unit can maintain the dilution ratio steadily by an adjustable valve, which automatically adjust rotation speed of rotating disk, with total dilution rate of 275 times. Finally, the diluted exhaust was returned to ambient temperature then introduced into the EEPS for analysis. The test particle size range of the EEPS was 5.6 to 560nm.

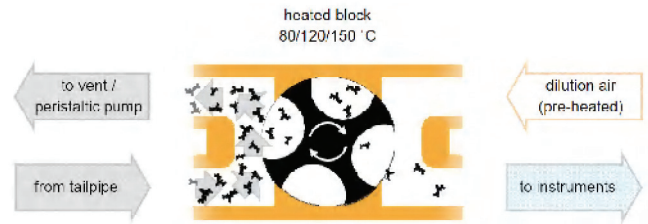


Fig.2. Rotating disc dilution concept

Table 2. EEPS3090 conditions

Particle sizer type	3090 Engine exhaust particle sizer
Inlet Cyclone 50% Cut point	1 μm
Time Resolution	10 size distributions/sec
Flow Rates	Sample Flow : 10 L/min Sheath Air : 40 L/min
Inlet Sample Temperature	10 to 52 °C
Operating Temperature	0 to 40 °C
Storage Temperature	-20 to 50 °C
Atmospheric Pressure Correction Range	70 to 103 kPa (700 to 1034 mbar)

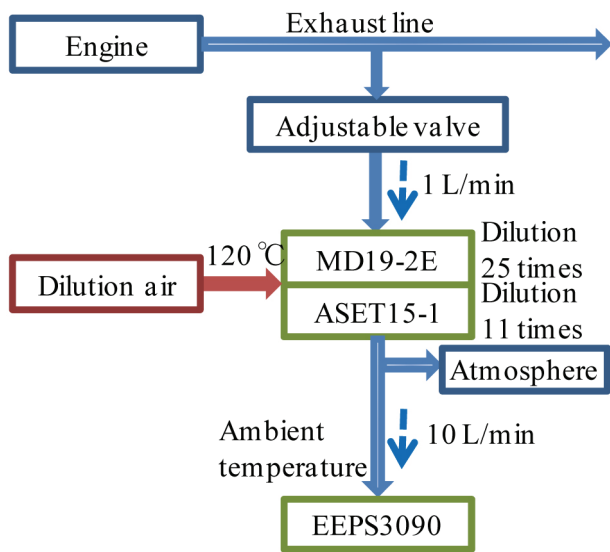


Fig.3. Particle sampling line and measurement

Fuels

Experiments were performed using the following four fuels which were shown in Table 3.

D100: standard ultra low sulphur diesel fuel compliant with JIS#2 (sulphur < 10 ppm)

MO100: 100% methyl oleate (C₁₉H₃₆O₂) which can be used in numerical simulation

MO40: 40% vol. blend of MO100 with D100

J40: 40% vol. blend of Jatropha-derived biodiesel (JME) with D100. This JME was produced from conventional transesterification but with partial hydro-generation method at for improving oxidation stability. Their constituents were shown in Table 4.

Table 3. Experiments fuels

fuels	composition	engine-bench test	particle test	numerical simulation
D100	JIS#2 Diesel fuel	○	○	○
MO100	100% C ₁₉ H ₃₆ O ₂	○	×	○
MO40	40%MO100 60%D100	○	○	○
J40	40%JME 60%D100	○	×	×

Table 4. JME constituents

No	Chemical Formula			Ingredients	Quantitative Analysis %
	C	H	O		
1	17	34	2	Methyl Palmitate	15.3
2	19	34	2	Methyl Linoleate	1.5
3	19	36	2	Methyl Oleate	71.1
4	19	38	2	Methyl Stearate	12.1

The composition (from GC/MS) and properties of tested fuels were listed in Table 5. Note that the lower heating value was calculated by the Dulong function.

Table 5. Composition and properties of fuels

Item	D100	MO100	JME	
Density (15deg.C) g/cm ³	0.8318	0.8740	0.8768	
Viscosity (30deg.C) mm ² /s	3.212	4.041	5.040	
CHO mass %	C	86.0	76.90	76.65
	H	13.7	12.14	12.35
	O	0	10.79	11.00
Aromatic vol. %	18.8	0.0	0.0	
Lower heating value kJ/kg	42970	39021	39163	
Flash point deg.C	73.5	174.0	>200	
Sulfur mass ppm	6	0	2.5	
Cetane number	58.3	-	57.2	

TEST RESULTS

Engine-bench Test

Table 6. Engine operating conditions

Exp. No.	Engine speed (rpm)	BMEP (kPa)	EGR ratio (%)	Swirl ratio (-)	Inj.press. (MPa)	Pilot Inj.
1	1500	291	39	3.4	58	Y
2	1500	411	36	3.4	73	Y
3	1500	916	3.5	2.6	107	Y
4	2000	570	24	2.8	111	Y
5	2500	515	24	2.6	132	Y
6	2500	1136	17	2.1	142	N
7	2500	1539	5	1.3	150	N

First, D100, MO40, MO100, and J40 fuels were used for engine experiments. In order to identify the effects of the different fuels over a wide range of engine speeds and torque, seven steady-state engine operating conditions typically encountered in NEDC and US06 modes were chosen, as shown in Table 5. Prior to the engine tests, the calibration test was conducted on D100 without any additional change in control on injection algorithm in order to obtain baseline ECU controlled data (such as injection pressure, fresh air quantity, swirl ratio, etc.) in each operating condition. As shown in Table 6, the typical NEDC mode for mid and low load (No.1~5) conditions include pilot injection, and the typical US06 mode for high load (No.6, 7) conditions do not include pilot injection. When other fuels were used, the torque and MFB50 were maintained to be the same as those in case of D100 by changing fuel quantity and injection timing, but keeping other ECU output exactly the same as those for D100.

In the mid and low engine speed conditions (No.1~4, in Fig. 4) and high engine speed conditions (No.6, 7, in Fig.6), the results showed little difference among the four test fuels unlike our expectations. Before the test, we predicted that the ignition delay would be longer when using MO40, MO100 and J40, but this was not the case. Because the cetane number was similar for each of the fuels, the ignition characteristics were similar. Furthermore, the effect of pilot injection combustion was minimal since there is hardly any change in No.1~4 conditions. However, for No.5 condition (Fig.5), the heat release rate was higher for MO40, MO100 and J40 at the first phase of combustion, which can be explained as follows. Since the density and viscosity of MO40, MO100 and J40 were higher, the premixed of the pilot injection spray could be enhanced at high injection pressure. The viscosity of MO40 and J40 were similar to MO100 and JME [21].

However, this postulate should be confirmed by the future spray observance study we are preparing.

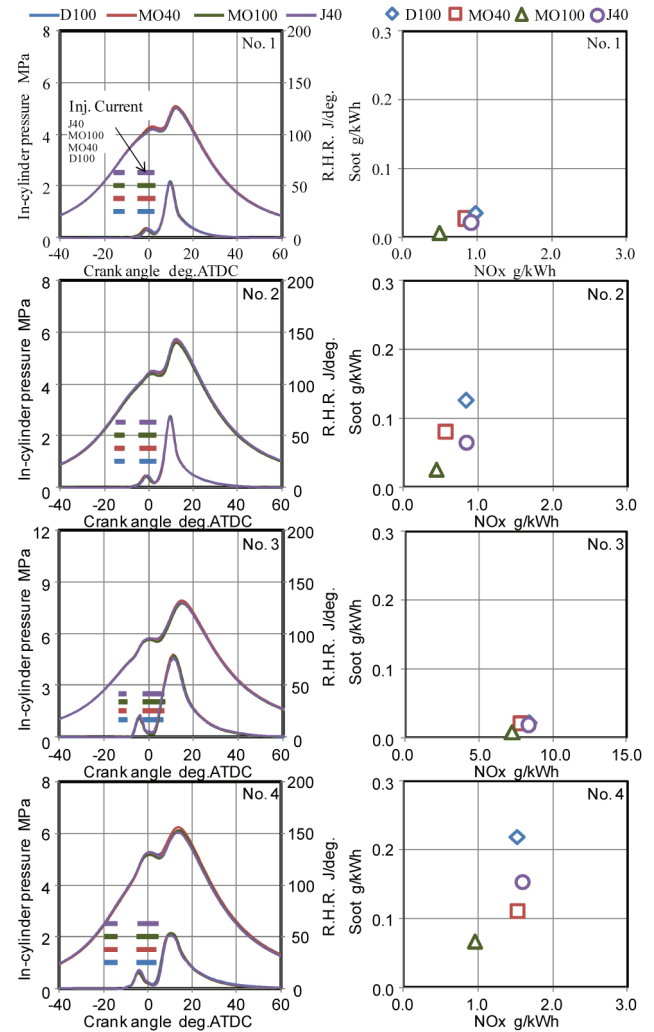


Fig.4. Comparison of combustion characteristics and soot/NOx emission (No.1~4)

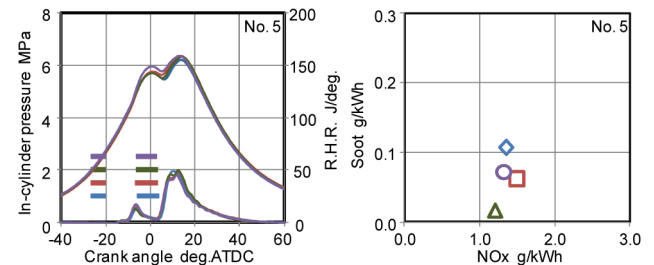


Fig.5. Comparison of combustion characteristics and soot/NOx emission (No.5)

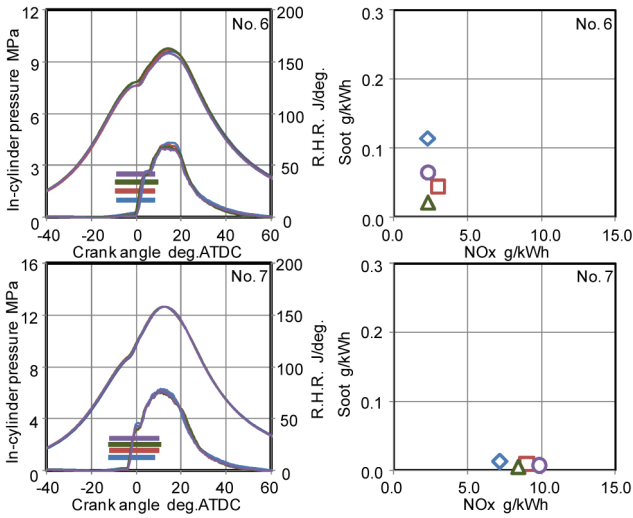


Fig.6. Comparison of combustion characteristics and soot/NOx emission (No.6, 7)

For all conditions from Figs 4 and 5, the soot emission was reduced with MO100, MO40 and J40 fuels at different extent because these fuels include oxygen, which can reduce the equivalence ratio in the local combustion region, enhance the oxidation reaction and reduce soot generation. In addition, these fuels contain no aromatic components so that the soot nucleation is reduced. No significant change in NOx emission was found with MO40 and J40 in comparison to D100 because NOx formation is not reactive as soot reaction even when local oxygen concentrations change. Nevertheless, NOx emission was reduced by using MO100 in low engine speed and high EGR rate conditions. Fig.7 showed reductions in CO and THC emissions for MO and JME because higher local oxygen concentration in these fuels could increase the combustion efficiency.

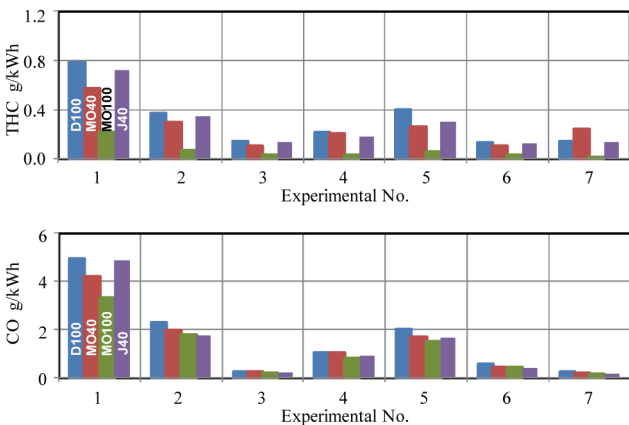


Fig.7. Comparison of CO and THC emissions

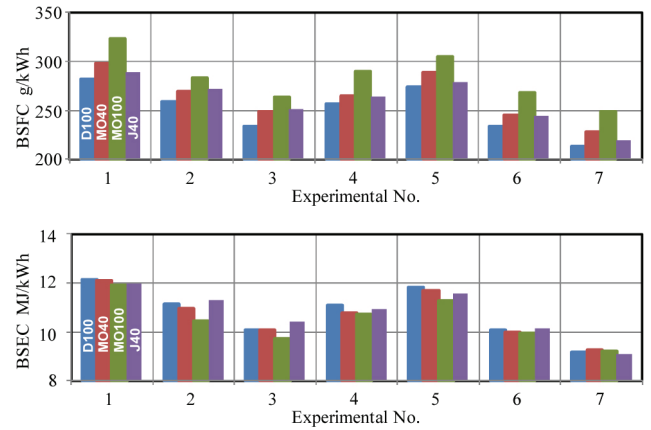


Fig.8. Comparison of fuel consumption

Brake specific fuel consumption (BSFC) of MO and JME was worse than that of D100 because of their low lower heating value. However, the specific energy consumption (BSEC) was not changed with different fuels (Fig.8).

These experiment results indicate that the emission and combustion characteristics of MO40 and J40 were similar under all conditions tested, so MO40 could be used as substitute for J40.

Particle Test

Since PN and particles size distribution in the diesel exhaust were affected by fuel specifications, this study focused on the effects of the test fuels and engine conditions on PN and average particle diameter (Pd). The Pd was calculated by Eq. 2, where d_i was the particle diameter, and m_i was the mass of a particle with that d_i . Measurement of PN and Pd in each condition was conducted three times by using EEPs. Thirty operating conditions were chosen the same ECU calibration data (MAP TEST). Changing EGR ratio was conducted at No.4 condition, which showed the biggest difference for emissions between fuels (EGR ratio TEST), as well as the PCCI combustion condition (PCCI TEST). MO40 and D100 were used for this test.

$$P_d = \frac{\sum(m_i d_i)}{\sum m_i} \quad (2)$$

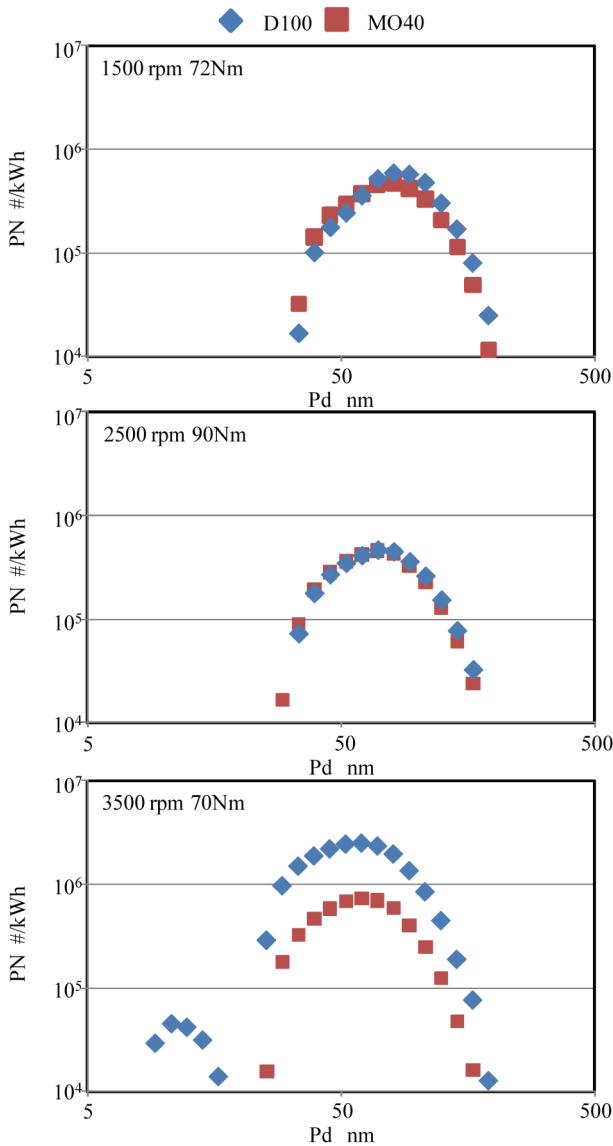


Fig.9. The PN distribution for Pd at 25% load rate in each engine speed

The results about PN distribution for Pd at 25% load at each engine speed are shown in Fig.9. We obtained the similar tendencies to the results shown in the previous studies ([6] and [8]) by using D100. However, the results for MO40 are different. No peak value at Pd below 20nm was observed at lower engine speed while PN was significantly reduced at higher engine speed. This is probably because under these conditions, pilot injection and high EGR rates were employed, changing local oxygen concentration. Particle numbers were lower than other those observed in the previous studies ([6] and [8]) under all operating conditions due to the same reason stated above.

Map Test Results

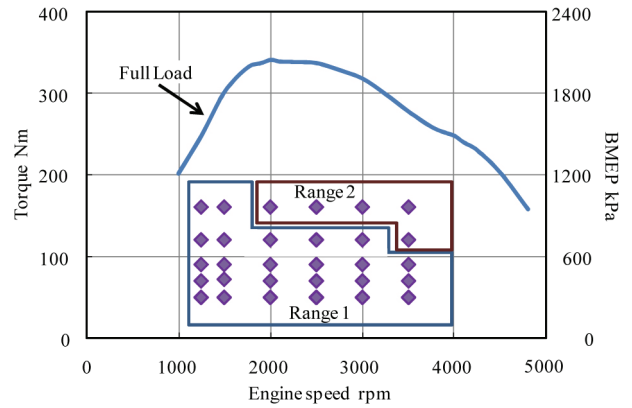


Fig.10. Load map

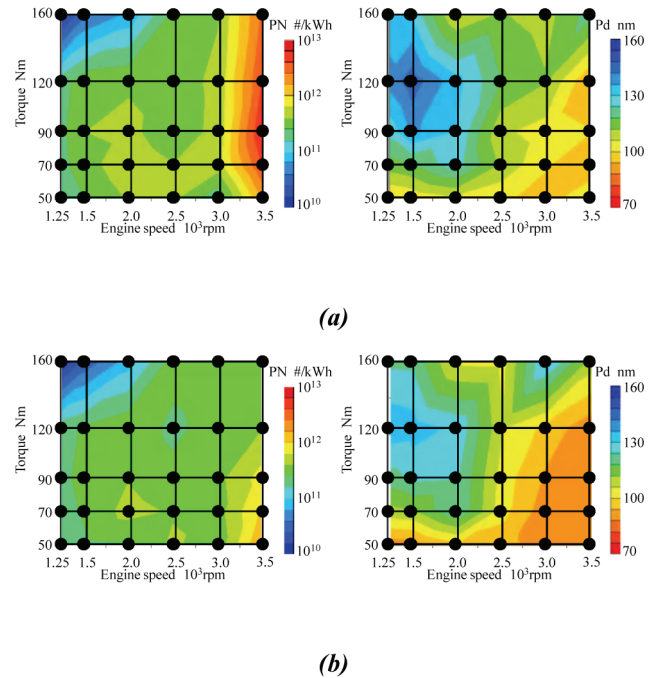


Fig.11. EEPS measured results for (a) D100 and (b) MO40

The engine was operated for the thirty conditions, where the engine speed was from 1250 to 3500rpm, and the torque was from 50 to 160Nm. The actual combinations of engine speed and torque used were shown in Fig.10, where the conditions in range 1 were with pilot injection and the others (range 2) were without pilot injection.

As shown in Fig.11, the PN distribution showed that the number increased with increasing engine speed but not with increasing torque in the same engine speed. This is because particle coagulation is limited in time when engine speed increases. The Pd distribution tendency was similar to soot distribution (see Fig.12) for each fuel, having a larger Pd in more soot emission range (Fig.11). In this range, since EGR ratio was high and the injection quantity was large, the local

oxygen concentration was reduced so that particle formation was enhanced. With low engine speed, the particle coagulation was further enhanced. The PN variation distribution (Fig.12) showed that the number was the same between fuels in low engine speed range but PN was reduced with MO40 in high engine speed range (red color region in Fig.13(left)). Particle size was smaller with MO40 in all conditions (scatter red region in Fig.13 (right)). This may be because MO40 contains oxygen, which could reduce local equivalence ratio, and contains no aromatic components, which could constrict particle nucleation generation.

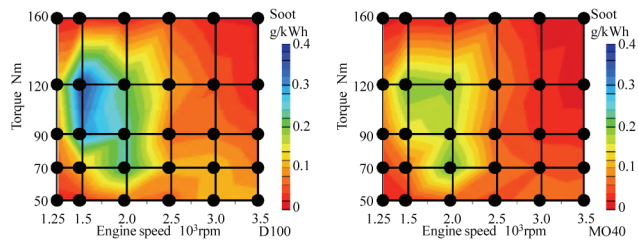


Fig. 12. Soot emission results for each fuels

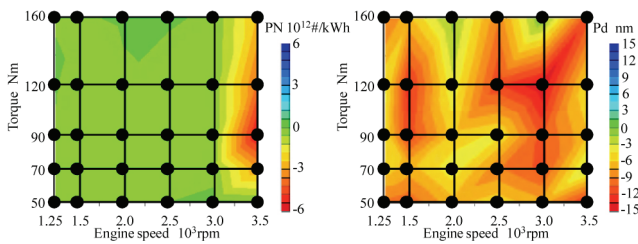


Fig.13. Variation calculated by subtracting results for MO40 from D100

EGR Test Results

The operating condition No.4 was chosen from engine-bench test due to the largest difference for emissions between the test fuels. EGR ratio was varied from 0 to 30% by controlling fresh air quantity, whereas, MFB 50 was kept by changing injection timing and set the boost pressure by using a variable nozzle turbo in calibration test.

From Fig.14, when soot emission increased, NOx emission was reduced by EGR ratio in both fuels. Soot emission was less for MO40 in all EGR ratio conditions. In particular, soot emission was significantly reduced by MO40 in high EGR ratio condition, where NOx emission was very low at the range similar to D100. In low EGR ratio conditions, the NOx emission of MO40 was slightly higher since higher local oxygen concentration from oxygen content in the fuel could enhance soot oxidation, resulting in higher combustion temperature and inevitably increased NOx emission [22-23]. In contrast, when EGR ratio increased, the combustion temperature was lowered by cooled EGR gas. At these conditions, the NOx reaction was not too reactive as soot reaction by local oxygen concentration changing [24]. Thus,

high EGR ratio could effectively reduce NOx emission while simultaneously constricting soot emission with MO.

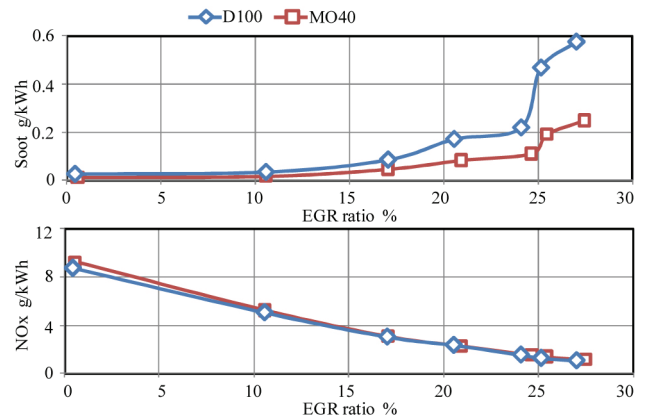


Fig.14. Effect of EGR ratio on soot and NOx emissions

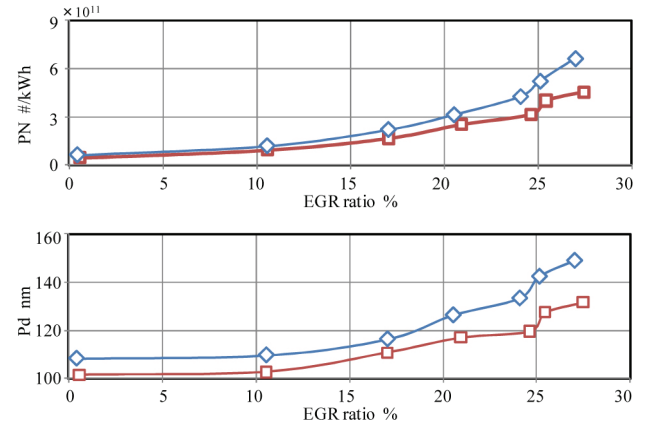


Fig.15. Effect of EGR ratio on PN and Pd

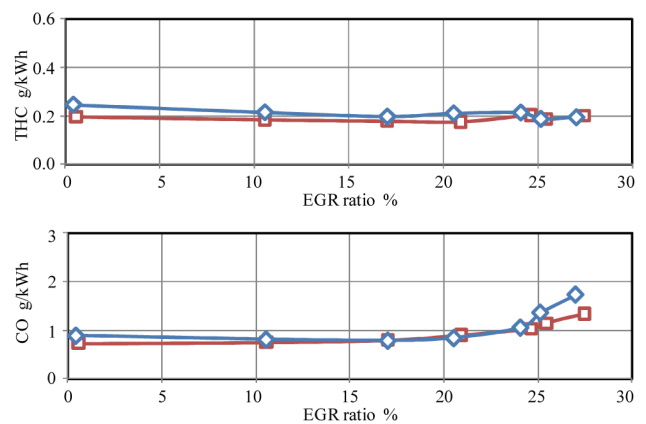


Fig.16. Effect of EGR ratio on CO and THC emissions

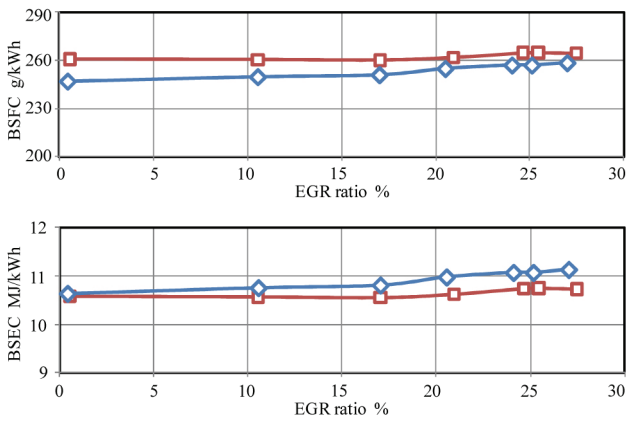


Fig. 17. Effect of EGR ratio on fuel consumption

The effect of EGR ratio for PN and Pd with each fuel was shown in Fig. 15. When EGR ratio increased, PN increased in the similar manner as soot. At low EGR ratios, PN was not significantly changed between the fuels whereas at high EGR ratios, PN was significantly reduced by using MO40. This is because at high EGR ratio, soot oxidation was enhanced by oxygen in fuel. Pd increased with increasing EGR ratios as well, and MO40 tended to yielded smaller Pd at all EGR ratios. The reason was similar to the case of PN affected by MO40.

Fig. 16 showed that CO emission was effectively reduced by MO40 at high EGR ratios while THC emission was reduced by MO40 at low EGR ratios. Fig. 17 indicates that MO40 showed worse BSFC for in all EGR ratios while better BSEC was obtained in all EGR ratios. It is worth noting that when EGR ratio increased, the consumption of D100 was worse, but that of MO40 was rather unchanged. These could proof higher combustion efficiency in low temperature and high EGR ratio with MO40 [25].

PCCI Test

In the PCCI combustion test, ignition timing was controlled with difficulties by changing the injection timing. The effect of combustion with fuel characteristics was expected to increase in PCCI combustion compared to conventional (conv.) diffusive combustion. Injection pressure was increased to 160MPa without pilot injection to encourage fuel and gas mixing while MFB50 and boots pressure were maintained from calibration test of engine-bench test No.2 condition.

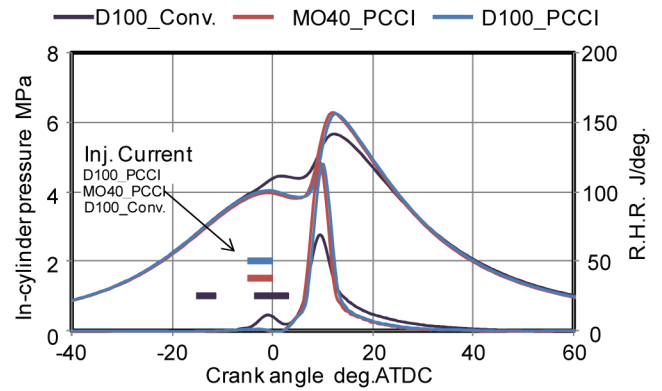


Fig. 18. Effect of PCCI combustion on combustion characteristics

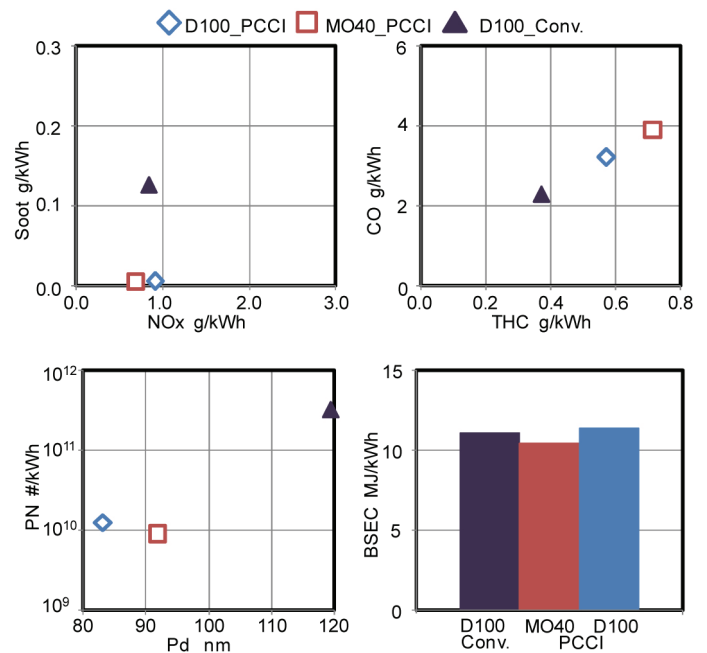


Fig. 19. Effect of PCCI combustion on emissions and consumption

First, the experiment proved that MO40 can be used for PCCI combustion in high injection pressure condition. Then the ignition was advanced for MO40, but little change was found compared with D100 (Fig. 18). Fig. 19 showed the effect of PCCI combustion on emissions and consumption with different fuels. The soot emission was significantly reduced with little or no NOx emission increased in both fuel while PN and Pd were also significantly reduced for PCCI combustion. On the other hand, CO and THC emissions were increased for all fuels. For conventional diesel combustion, which was shown in Fig. 6, CO and THC emissions from MO40 were lower than those of D100, but they were higher for PCCI combustion. Compared to D100, MO40 with higher boiling point would increase its spray penetration with high injection pressure in low temperature and low density field. Thus, the fuel quantity attached to the combustion chamber wall was increased, resulting in an increase in unburned fuel

emission [26]. Nonetheless, the BSEC was better in PCCI combustion than conventional combustion with MO40.

NUMERICAL SIMULATION RESULTS

In addition to the engine tests explained above, a zero-dimensional reaction model was conducted with detailed chemical kinetics model CHEMKin-Pro to identify the effects on engine combustion, performance and emissions. CHEMKin-Pro was specifically designed for extensive chemical simulation applications requiring complex mechanisms, and was highly structured and modular, consisting of three basic utilities packages. GAS KINETICS is one of the packages forming the core set of utilities [27]. The schematic represented the relationship of GAS- PHASE KINETICS and the application SENKIN was shown in Fig. 20.

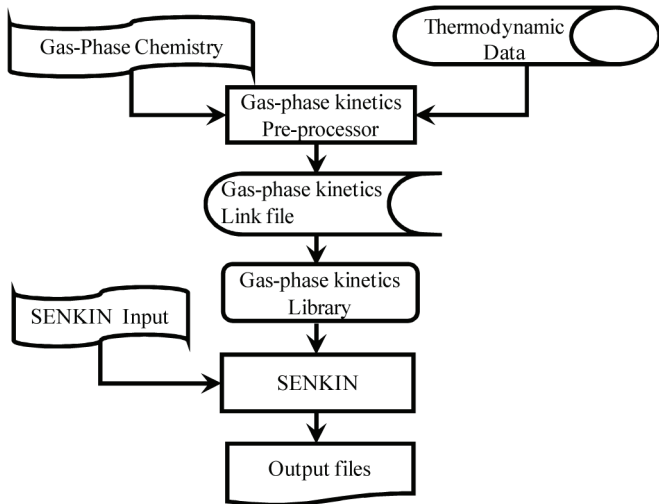
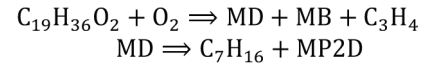


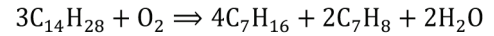
Fig.20. The schematic of CHEMKin-Pro

As mentioned earlier, the test results from JME and MO were similar so the present numerical study focused on MO to simulate engine combustion, performance and emissions with CHEMKin-Pro. Due to long chain methyl ester, MO tends to generate a significant number of species during combustion process. The reaction mechanism was proposed in a form of a surrogate as a blend assumed to be the 1:1:1 mixture consisting of methyl decanoate (MD, $C_{11}H_{22}O_2$), methyl butanoate (MB, $C_5H_{10}O_2$) and propyne (C_3H_4). MB was a short chain ester while MD was a long chain methyl ester like MO. The second surrogate was formed as MD decomposed into n-heptane (C_7H_{16}) and methyl propanoate (MP2D, $C_4H_6O_2$). To describe the MO surrogate decomposition into the constituent components, two global reactions were added to the mechanism, as shown in Eq. 3 [28]. The MO mechanism consisted of 309 species taking part in 1472 reactions, which was taken from Chalmers University [29].



(3)

On the other hand, diesel surrogate model was well-known modeled as a 2:1 mixture of C_7H_{16} and toluene (C_7H_8) to achieve the same C/H proportion and cetane number as real diesel [30]. The global reaction was shown in Eq.4, with mechanism of diesel taken from Chalmers University [29].



(4)

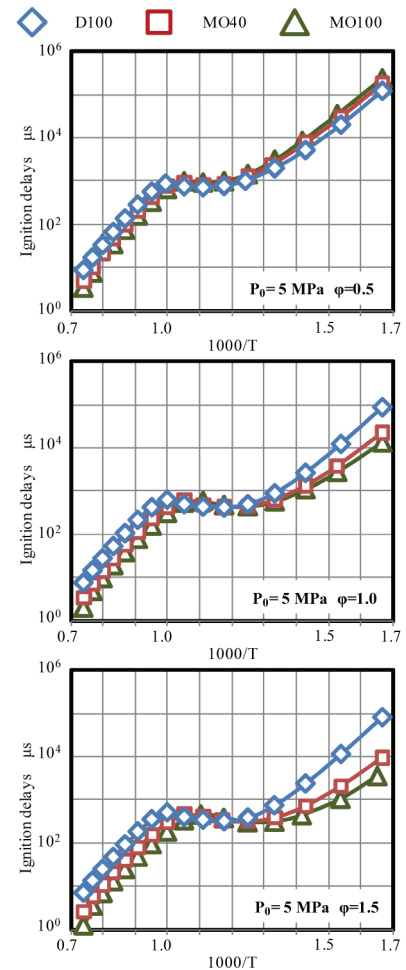


Fig.21. Effect of ϕ on ignition delay between fuels

The ignition delay (ID) was calculated with D100, MO40 and MO100 to identify the initiation of combustion. The calculation conditions and results were shown in Fig.21, where the P_0 was initial pressure and ϕ was equivalence ratio. The ID was similar between fuels in low equivalence ratio, but when ϕ increased the ID was shortened specifically in the low temperature range. From the engine test results in this study, little difference was found between the test fuels because the tests were conducted at the equivalence ratio ϕ lower than 1.0, even under high EGR ratio conditions.

Moreover, the low temperature oxidation reaction was enhanced by using MO.

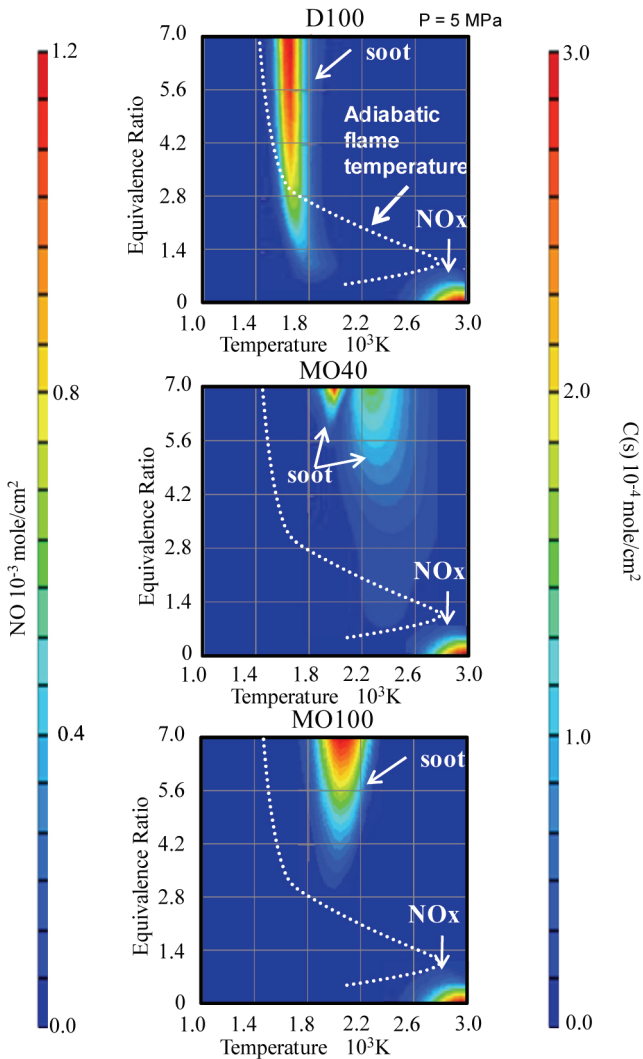


Fig.22. Soot-NOx ϕ -T map

Then, the adiabatic flame temperature was calculated along with C(s) and NO formation reactions to simulate combustion and soot and NOx emissions. In these calculations, the initial pressure was 5MPa, and the initial temperature was 1000K to reproduce No.2 condition in engine-bench tests. NOx and soot models were employed, which were included in the diesel surrogate mechanism taken from Chalmers University [29]. The results were shown in the ϕ -T map, as shown in Fig.22. The 100% methyl oleate tends to emit soot at a higher temperature region while the blended fuel emits soot at lower temperatures much closer to those at the region where the ordinary diesel fuel emits soot. However, NOx emission did not vary so much between diesel fuel and biodiesel. The adiabatic flame temperature curve was well consistent to the soot generation range of D100 at low temperatures and high equivalence ratios, but it was not found with MO. That was the reason why there was reduced soot emission with a high EGR ratio but with no increase in NOx emission. We

calculated NOx and PM formation tendencies at a high pressure and temperature condition encountered at the start of injection in the combustion chamber. In this case, no significant difference was observed between the fuels in terms of adiabatic flame temperature, focusing on the effect of local equivalence ratios and temperatures. A more detailed numerical simulation model is being developed based on a 3-D CFD code to identify the effects on engine combustion, performance and emissions.

CONCLUSIONS

In this study, a EURO4 turbocharged common-rail production DI engine for passenger cars was used to evaluate and compare the effect by four different fuels (D100, MO100, MO40 and J40) on engine performance and emissions over a wide range engine speed and torque. Standard ultra low sulphur diesel fuel compliant with JIS#2 (D100), 100% methyl oleate (MO, C₁₉H₃₆O₂), 40% vol. blend of MO100 with D100 (MO40) and 40% vol. blend of Jatropha-derived biodiesel (JME) with D100 (J40) were used in the study.

Firstly, seven steady-state engine operating conditions typically encountered in NEDC and US06 modes was chosen for engine-bench tests for comparison.

There was no significant effect on engine combustion characteristics in all conditions except No.5 condition.

In No.5 condition, the heat release rate was higher for those of MO40, MO100 and J40 at the initial combustion phase. The soot emission was significantly reduced by using MO and JME fuels without an increase in NOx emission for all conditions.

The apparent BSFC was worsened but BSEC, defined on the energy basis, was not changed with different fuels. The CO and THC emissions were reduced by using MO and JME.

These engine test results indicate that the emission and combustion characteristics were similar between MO40 and J40 in all engine operating conditions. Thus, J40 could be substituted by MO40 for the subsequent numerical study.

Secondly, the effect of particle number (PN) and average particle diameter (Pd) were investigated for various engine operating conditions and fuels by using EEPS.

At the thirty engine operating conditions, PN was increased with an increase in engine speed, but not with an increase in torque while Pd increased with an increase in soot. PN tendency was the same between fuels in low engine speed range but it was reduced with MO40 in high engine speed range. On the other hand, Pd was smaller with MO40 in all conditions.

In EGR test, soot emission was less for MO40 than for D100 in all EGR ratio conditions. At high EGR ratios, soot emission was significantly reduced by using MO40 while NO_x emission was very low, which is similar to D100 NO_x emission. When EGR ratio increased, PN increased in the similar manner to soot formation behavior. Pd increased with increasing EGR ratio for both fuels with MO40 being lower than D100 in all EGR ratio conditions. The BSFC was worse for MO40 under all EGR ration conditions, but the BSEC was not different between fuels. The CO emission was reduced by MO40 under high EGR ratio conditions but THC was not changed.

In PCCI combustion test, MO40 was used for PCCI combustion under high injection pressure condition. The ignition was advanced with MO40. However, compared with D100 no significant change was founded. The soot emission was significantly reduced without an increase in NO_x emission in both fuels. The PN and Pd were reduced for PCCI combustion, but CO and THC emissions were increased. Compared with conventional combustion, the unburned fuel emission was increased with MO40 in PCCI combustion.

Finally, a zero-dimensional reaction model was conducted using CHEMKIN-Pro to identify the effects on engine combustion, performance and emissions.

The ignition delay (ID) was calculated with D100, MO40 and MO100 to identify the combustion characteristics. The ID was similar between these fuels at low equivalence ratios. However, when ϕ increased, the ID was shorten specifically in low temperature range.

The adiabatic flame temperature, C(s) generation reaction and NO generation reaction were calculated to simulate combustion, soot generation and NO_x generation. From the results, 100% methyl oleate tends to emit soot at a higher temperature region while the blended fuel emits soot at lower temperatures much closer to the region where the ordinary diesel fuel emits soot. However, NO_x emission did not significantly vary between diesel fuel and biodiesel. The adiabatic flame temperature curve was well consistent to that of soot generation range with D100 in low temperatures and high equivalence ratios, but it was not the case with MO.

Following the present study, a spray observance study will be conducted to confirm the effect of fuel physical properties and dynamics at various fuel injection strategies under high injection pressure conditions. Furthermore, additional numerical simulation based on a 3-D CFD code will be explored to identify the effects on engine combustion, performance and emissions. Finally, engine operating and design parameters of the diesel engine fueled with biofuel will be optimized to ensure thermal efficiency along with sufficiently reducing emissions.

REFERENCES

1. United States Environmental Protection Agency 2002. "A Comprehensive Analysis of Biodiesel Impacts on Exhaust Emissions", Draft Technical Report, EPA420-P-02-001
2. Air Quality Management District, "Powering the Future", <http://www.aqmd.gov/pubinfo/PDF/poweringthefuture.pdf>
3. Oberdorster, et al., "Nanotoxicology: An Emerging Discipline Evolving from Studies of Ultrafine Particles", *Environmental Health Perspective*, 2005, 113: 823-839
4. De Filippo, A., Ciaravino, C., Millo, F., Vezza, D. et al., "Particle Number, Size and Mass Emissions of Different Biodiesel Blends Versus ULSD from a Small Displacement Automotive Diesel Engine," SAE Technical Paper [2011-01-0633](https://doi.org/10.4271/2011-01-0633), 2011, doi:[10.4271/2011-01-0633](https://doi.org/10.4271/2011-01-0633).
5. De Filippo, A., "Particle Size and Number Emissions from Modern Light-Duty Diesel Vehicles," SAE Technical Paper [2011-01-0632](https://doi.org/10.4271/2011-01-0632), 2011, doi:[10.4271/2011-01-0632](https://doi.org/10.4271/2011-01-0632).
6. Tan, P., Hu, Z., Lou, D., and Li, B., "Particle Number and Size Distribution from a Diesel Engine with Jatropa Biodiesel Fuel," SAE Technical Paper [2009-01-2726](https://doi.org/10.4271/2009-01-2726), 2009, doi:[10.4271/2009-01-2726](https://doi.org/10.4271/2009-01-2726).
7. Jung, Heejung, Kittelson, David B., and Zachariah, Michael R., "Characteristics of SME Biodiesel-fueled Diesel Particle Emissions and the Kinetics of Oxidation", *Environ. Sci. Technol.* 2006, 40, 4949-4955
8. Yao, D., Lou, D., Hu, Z., and Tan, P., "Experimental Investigation on Particle Number and Size Distribution of a Common Rail Diesel Engine Fueling with Alternative Blended Diesel Fuels," SAE Technical Paper [2011-01-0620](https://doi.org/10.4271/2011-01-0620), 2011, doi:[10.4271/2011-01-0620](https://doi.org/10.4271/2011-01-0620).
9. McCormick, Robert L., Graboski, Michael S., Alleman, Teresa L., Herring, Andrew M. and Tyson, K. Shaine, "Impact of Biodiesel Source Material and Chemical Structure on Emissions of Criteria Pollutants from a heavy-duty Engine", *Environ. Sci. Technol.* 2001, 35, 1742-1747
10. Hess, Melissa A., Haas, Michael J., Foglia, Thomas A., and Marmer, William N., "Effect of Antioxidant Addition on NO_x Emissions from Biodiesel", *Energy & Fuels* 2005, 19, 1749-1754
11. Szybist, James P., Boehman, Andre L., Taylor, Joshua D., and McCormick, Robert L., "Evaluation of Formulation Strategies to Eliminate the Biodiesel NO_x effect", *Fuel Processing Technology* 86 (2005) 1109-1126
12. Yamane, K., Kawasaki, K., Sone, K., Hara, T., and Prakoso, T., "Oxidation Stability of Biodiesel and its Effects on Diesel Combustion and Emission Characteristics", DOI: [10.1243/14680874JER00207](https://doi.org/10.1243/14680874JER00207).
13. Curran, HJ, Fischer, SL, and Dryer, FL, "The reaction kinetics of dimethyl ether, II: low-temperature pyrolysis and

oxidation in flow reactors”, *Int J Chem Kinet* 2000, 32, 741-59

14. Rochaya, D., “Numerical simulation of spray combustion using bio-mass derived liquid fuels”, Cranfield University, PhD Thesis, Bedfordshire, 2007

15. Brakora, J., Ra, Y., Reitz, R., McFarlane, J. et al., “Development and Validation of a Reduced Reaction Mechanism for Biodiesel-Fueled Engine Simulations,” *SAE Int. J. Fuels Lubr.* 1(1):675-702, 2009, doi: [10.4271/2008-01-1378](https://doi.org/10.4271/2008-01-1378).

16. Golovitchev, Valeri I., Yang, Junfeng, “Construction of combustion models for rapeseed methyl ester bio-diesel fuel for internal combustion engine applications”, *Biotechnology Advances* 27, 2009, 641-655

17. Malhotra, RK, and Sarin, R., “Bio-diesel for energy security, environment protection and employment generation”, SAE Publication, No. 2004-28-030

18. Murata, Y, Nishio, Y, Kusaka, J, Daisho, Y, Kawano, D, Suzuki, H, Ishii, H, and Goto, Y, “Numerical Analysis of Miller-Premixed Charge Compression Ignition Combustion on a Dynamic ϕ -T Map”, *IMEchE* 2010, *Int. J. Engine Res.* Vol. 11, 89-98

19. Nagao, and Ikegami, “Errors of an Indicator Due to a Connecting Passage”, *The Japan Society of Mechanical Engineers*, 1974-1975, 30, No.213, 645-653

20. Krinke, Thomas, “Benefits of Adding Particle Size Information to Vehicle Emission Regulation Measurements (PMP)”, *Global Aerosol Education*, TSI™

21. Soloiu, V., Lewis, J., Covington, A., Nelson, D. et al., “Oleic Methyl Ester Investigations in an Indirect Injection Diesel Engine; Stage One: Combustion Investigations,” *SAE Int. J. Fuels Lubr.* 4(1):58-75, 2011, doi: [10.4271/2011-01-0616](https://doi.org/10.4271/2011-01-0616).

22. McCormick, R., Alvarez, J., Graboski, M., Tyson, K. et al., “Fuel Additive and Blending Approaches to Reducing NOx Emissions from Biodiesel,” *SAE Technical Paper* 2002-01-1658, 2002, doi: [10.4271/2002-01-1658](https://doi.org/10.4271/2002-01-1658).

23. Cheng, A S, Upatnieks, A, and Mueller, C J, “investigation of the impact of biodiesel fuelling on NOx emissions using an optical direct injection diesel engine”, *IMEchE* 2006, *Int. J. Engine Res.* Vol. 7, 297-318

24. Matsumoto, Yasuyoshi, Cui, Xiaodan, Daisho, Yasuhiro, Nishio, Yui, Murata, Yutaka, Koubayashi, Takeharu, and Kimura, Tomio, “The Effect of In-cylinder EGR Gas Stratification on Diesel Emission”, *The 20th Internal Combustion Engine Symposium*, 2009, 97-102

25. Hisadome, Yuki, Ohkubo, Takuya, Cui, Xiaodan, Matsumoto, Yasuyoshi, Fujita, Syohei, Daisho, Yasuhiro, Ohashi, Toshihiro, and Takabayashi, Toru, “The Effect of Use of Biodiesel Fuel on Diesel Emission”, *Transactions of Society of Automotive Engineers of Japan*, Vol.42 No.2 March 2011, 527-532

26. Cui, Xiaodan, Kiyomatsu, Masato, Touma, Kouhei, Hisadome, Yuki, Kusaka, Jin, and Daisho, Yasuhiro, “The Effects on Diesel Engine Combustion and Emission Characteristics by Using Biodiesel”, 2011 JSAE Annual Congress (Autumn), 131-20115585

27. Reaction Design, “Application Programming Interface Manual”, CK-API-15082-0809-UG-1, 18-22

28. Yang, Junfeng, Johansson, Monica, and Golovitchev, Valeri, “Engine Performance and Emissions Formation for RME and Conventional Diesel Oil: A Comparative Study”, *Proceeding of the ASME Internal Combustion Engine Division 2009 Spring Technical Conference*, ICES2009-76121

29. <http://www.tfd.chalmers.se/~valeri/MECH.html>

30. Gustavsson, J. and Golovitchev, V., “Spray Combustion Simulation Based on Detailed Chemistry Approach for Diesel Fuel Surrogate Model,” *SAE Technical Paper* 2003-01-1848, 2003, doi: [10.4271/2003-01-1848](https://doi.org/10.4271/2003-01-1848).

CONTACT INFORMATION

Xiaodan Cui
Graduate School of Environment and Energy Engineering
WASEDA University
Room 226, No.58, 3-4-1 Okubo, Shinjuku-ku, Tokyo, Japan,
169-8555
yoshikieric@fuji.waseda.jp
Phone: +81-3-5286-3252

ACKNOWLEDGMENTS

This study is a part of “Innovation on Production and Automotive Utilization of Biofuels from Non-food Biomass” project and sustained by Japan Science and Technology Agency.

ABBREVIATIONS

ATDC - after top dead centre
BDF - bio-diesel fuel
BSEC - brake specific energy consumption
BSFC - brake specific fuel consumption
C(s) - solid carbon
CFD - computation fluid dynamics
CO - carbon monoxide
CO₂ - carbon dioxide
DI - direct injection
DOC - diesel oxidation catalyst
DPF - diesel particulate filter
ECU - engine control unit
EEPS - engine exhaust particle sizer
EGR - exhaust gas recirculation

EPA - US Environmental Protection Agency
EURO4 - European emission standard 2005
FAME - fatty acid methyl esters
GC/MS - gas chromatography/mass spectrometry
ID - ignition delay
JIS#2 - Japanese industrial standards No.2
JME - Jatropha-derived biodiesel
LNT - lean NOx trap
MB - methyl butanoate
MD - methyl decanoate
MFB - mass fraction of burned fuel
MP2D - methyl propanoate
NEDC - new European driving cycle
NO - nitric oxide
NOx - nitrogen oxide
PCCI - premixed charge compression ignition
Pd - average particle diameter
PM - particulate matter
PN - particle number
R.H.R - heat release rate
T - temperature
THC - total hydrocarbons
US06 - high speed driving cycle as a supplement to the Federal Test Procedure

The Engineering Meetings Board has approved this paper for publication. It has successfully completed SAE's peer review process under the supervision of the session organizer. This process requires a minimum of three (3) reviews by industry experts.

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording, or otherwise, without the prior written permission of SAE.

ISSN 0148-7191

Positions and opinions advanced in this paper are those of the author(s) and not necessarily those of SAE. The author is solely responsible for the content of the paper.

SAE Customer Service:

Tel: 877-606-7323 (inside USA and Canada)

Tel: 724-776-4970 (outside USA)

Fax: 724-776-0790

Email: CustomerService@sae.org

SAE Web Address: <http://www.sae.org>

Printed in USA

バイオディーゼルを用いたディーゼル機関の燃焼と排出ガス特性に関する研究 *

—詳細な燃焼と反応解析—

崔 暁丹¹⁾ 金 兌根²⁾ 藤井 祐介³⁾ 草鹿 仁⁴⁾ 大聖 泰弘⁵⁾

Effects of Biodiesel on Diesel Engine Combustion and Emission Characteristics - Detailed Combustion and Chemical Kinetic Analyses -

Xiaodan Cui Teagun Kim Yousuke Fujii Jin Kusaka Yasuhiro Daisho

Engine tests were conducted along with chemical kinetics modeling to investigate the effects of 40% Jatropa-derived biodiesel on combustion and emission characteristics over a wide range of engine operating conditions in a passenger car diesel engine. Emissions measurements and heat release analyses showed that biodiesel can significantly reduce PM (particulate matter) without significantly influencing heat release rates, NO_x emission and brake thermal efficiency under the conditions in the NEDC. For comparison with experimental results, we utilized a zero-dimensional reaction model with detailed chemical kinetics to identify the effects on engine combustion and emissions.

KEY WORDS: Heat Engine, Biodiesel, DI Engine, Combustion, Emission, PM, NO_x (A1)

1. はじめに

近年、地球温暖化や燃料枯渇の問題が深刻化しており、高効率であるディーゼルエンジンが注目されている。バイオディーゼル（脂肪酸メチルエステル、FAME、BDF）はディーゼルエンジンの代替燃料として実用可能なことが実証されており、CO₂排出量の抑制対策として、有効とされている⁽¹⁾⁻⁽⁴⁾。

また、US EPA のレポート等から、BDF の使用によって、PM 排出量は著しく減少する一方、NO_x が増加することが指摘されている。また低温流動性が悪く、酸化による燃料性状の変化、ゴム素材の劣化などが問題となっており⁽⁵⁾、これらがバイオディーゼルの実用化における重要な課題となっている。

筆者らは、BDF の主成分であるオレイン酸メチル(MO)を BDF の代表燃料としてエンジン実験を行った。その結果、燃料の違いが燃焼圧力、熱発生率に与える影響はほとんどなく、含酸素特性による当量比の低下によってほぼ全ての運転領域で NO_x の排出量が増加せず、Soot の排出量が大幅に減少し、THC、CO の排出量も減少し、また、燃費の悪化も見られないことを確認した⁽⁶⁾。

そこで本研究では、食料との競合がなく、干ばつに強く、酸性土壌でも栽培でき、収穫率と採油率が高いジャトロファから作られた BDF を軽油の代替燃料⁽⁷⁾として用い、市販車用の量産型ディーゼル機関を対象に、パイロット噴射、高圧噴

射、EGR および PCCI 燃焼(Premixed Charged Compression Ignition Combustion)⁽⁸⁾が燃焼・排出ガス特性に及ぼす影響を調査し、さらに、化学反応モデル(Chemkin-Pro)を用いて、BDF に関わる反応特性の影響を解明することを目的とした。

2. 供試燃料及びエンジン

本研究では、ジャトロファを原料として部分水素化された高品質の BDF(JME)を用いて実験を行った。この BDF の成分を GC/MS により定量的分析した結果は表 1 に示す。

Table 1 Constituents of Jatropa-derived biodiesel

No	Chemical Formula			Ingredients	Quantitative Analysis %
	C	H	O		
1	17	34	2	Methyl Palmitate	15.3
2	19	34	2	Methyl Linoleate	1.5
3	19	36	2	Methyl Oleate	71.1
4	19	38	2	Methyl Stearate	12.1

性能比較の際に、JIS2 号軽油(D100)をベース燃料とし、その特徴を明確にする目的で J40(JME がベース軽油と質量割合 40%で混合した燃料)を用いてエンジンベンチ試験を行った。燃料性状は表 2 に示す。

*2012 年 10 月 3 日受理。2012 年 10 月 3 日自動車技術会秋季学術講演会において発表。

1)・2)・3)・4)・5) 早稲田大学(169-8555 東京都新宿区大久保 3-4-1)

Table 2 Compositions and properties of fuels tested

Item	D100 (JIS2#)	JME (Jatropha BDF)	J40 (Mass 40% blend with JIS2#)
Density (15deg.C) g/cm ³	0.8318	0.8768	0.8498
Viscosity (30deg.C) mm ² /s	3.212	5.040	5.040 ⁽⁹⁾
CHO mass %	C	86.0	82.26
	H	13.7	13.16
	O	0	4.40
Aromatic vol. %	18.8	0.0	11.0
Lower heating value kJ/kg	42970	39163	41447
Flash point deg.C	73.5	>200	-
Sulfur mass ppm	6	2.5	4.6
Cetane number	58.3	57.2	-

ここで、J40の粘度のデータは測定値ではなく、参考文献(9)により推定した値である。

Table 3 Engine specifications

Item	Specifications
Engine type	Water-cooled, 4-stroke-cycle, TI Diesel engine
Valve train	DOHC 4 valves
Cylinder	L4
Bore x Stroke mm	85.0 x 97.1
Displacement cc	2204
Compression ratio	16.7
Fuel supply	Common-rail (Max.160 MPa) Nozzle cone angle 153° φ0.133mm × 6 holes
EGR system	HP-Hot-EGR / HP-Cooled-EGR
Boost control	VNT turbocharger
Swirl control	Continuously variable (Swirl ratio: 1.2-4.4)
Max. power kW/rpm	103/4000
Max. torque Nm/rpm	340/2000

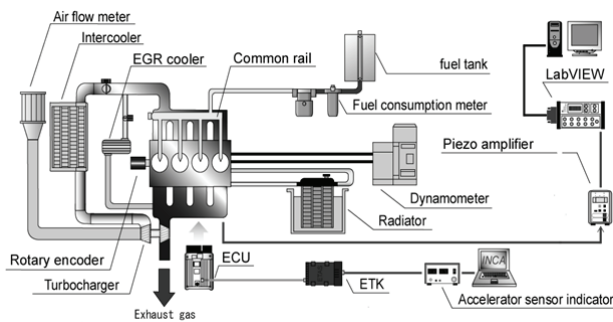


Fig.1 Test engine setup

エンジン実験では、2.2L, 4気筒、インタークーラー-VTNターボ過給、コモンレール式直噴ディーゼルエンジンを使用した。本エンジンはEURO4に適合しており、欧州で市販車に搭載されているもので、これにECUの設定を変更する範囲でBDFを利用できるかどうかを確認することを狙いとした。表3にエンジン諸元を、図1に実験装置の概略図をそれぞれ示す。

3. エンジン実験の結果及び考察

本実験においては、BDFの燃焼特性の解明と実走行での利用の両面から、ここではNEDCモードにおいて最も使用頻度が高く、BDFで最も効果が大きいことが前報²⁾で確認されている中速で低負荷(25%負荷)の運転条件を対象とした。また、このエンジンが搭載されている市販車のECU設定値を元に設定した条件をベース条件とし、詳細は表4に示す。

すべての実験においては、ベース条件のMFB50(燃料の燃焼質量割合50%)の位置と一致するように噴射時期を調整し、トルク一定法によって測定を行った。すべてのEGR条件においては、EGRガスをEGRクーラーにより冷却した上で、吸気系の十分上流側で空気と混合した。

Table 4 Base operation condition

Engine speed rpm	1500
Torque Nm	72
BMEP kPa	411
EGR ratio %	36
Swirl ratio	3.4
Boost press. kPa	12
Inj.press. MPa	73
Inj.quantity pilot / main mg/str.	1.69 / 13.2
Inj. timing pilot / main deg.ATDC	-11 / -4.0
MFB50 deg.ATDC	10.3

3.1. パイロット噴射による影響

表4のベース条件に基づき、振動・騒音の防止を狙いとして設定されているパイロット噴射条件でJ40を用いて定常試験を行い、燃焼圧力、熱発生と排出ガスの測定をした。その結果は図2に示す。

図2(a)において、主燃焼に対する燃料種の違いによる影響がほとんど見られなかった。しかしながら、図2(b)に示すように、J40では、より低温低圧でのパイロット噴射による燃焼を促進することが分かった。Westbrookらの研究⁽¹⁰⁾においてもオレイン酸メチルの混合により低温での反応を促進することが示されており、より低温での反応の増加によりNO_xの生成が少なくなっていると考えられる。それにより、図2(c)に示すように、Sootの排出量の低減とともに、NO_xの排出

量も低減している。また、含酸素燃料であるため、未燃成分(THC, CO)も低減する。それらによって燃焼効率が上昇し、低発熱量が低いものの、燃費が悪化しないことが分かった。

3.2. 高圧噴射による影響

表4のベース条件に基づき、噴射圧力を160MPaにした場合、J40の燃焼圧力、熱発生と排出ガスを測定した。その結果を図3に示す。

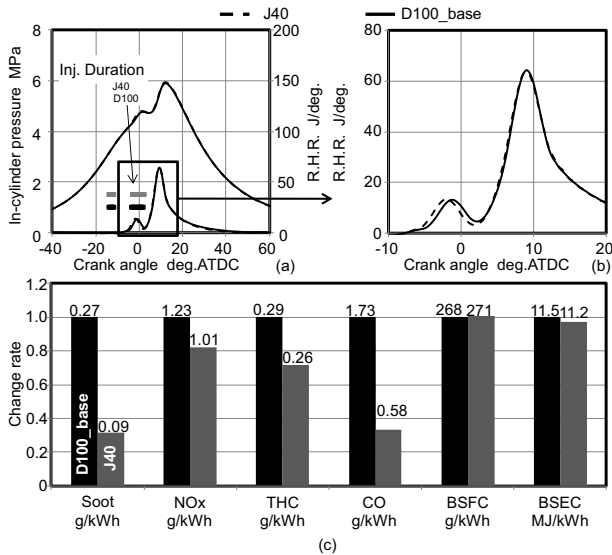


Fig.2 Results at base condition

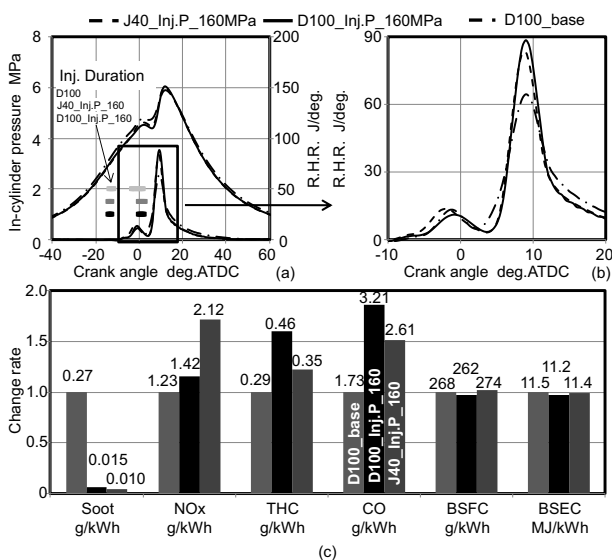


Fig.3 Results at high injection pressure (160MPa) condition

図3(a)において、上述の実験と同様に主燃焼に対する燃料種の違いによる影響がほとんど見られなかった。しかしながら、図3(b)に示すように、ベース条件に比べ、噴射圧の高圧化は、噴射期間を短縮し、噴霧の微粒化を促進し⁽¹⁾、より予混合的な燃焼となる傾向が認められる。そのため、燃焼が促

進され、Sootの排出量が大幅に減る一方、燃焼温度が上昇し、NOxの排出量が増加した(図3(c))。また、希薄な予混合気の増加により、未燃成分が増加する傾向が見られた。さらに、J40の含酸素特性によって局所的酸素濃度が高くなり、NOxの排出量が大幅に増加する結果となった。なお、高圧噴射により、いずれの条件でも燃焼が促進されるため、燃費(BSEC)は改善されている。

3.3. EGR率による影響

表4のベース条件においては、低負荷のNOx低減のためEGR率が36%という高い率となっている。そこで、さらに高いEGR率(42%)条件および、EGRなしに近い条件(5%)において、J40の使用における燃焼圧力、熱発生、排出ガスを測定し、燃焼に与える影響を調査した。その結果を図4と図5に示す。

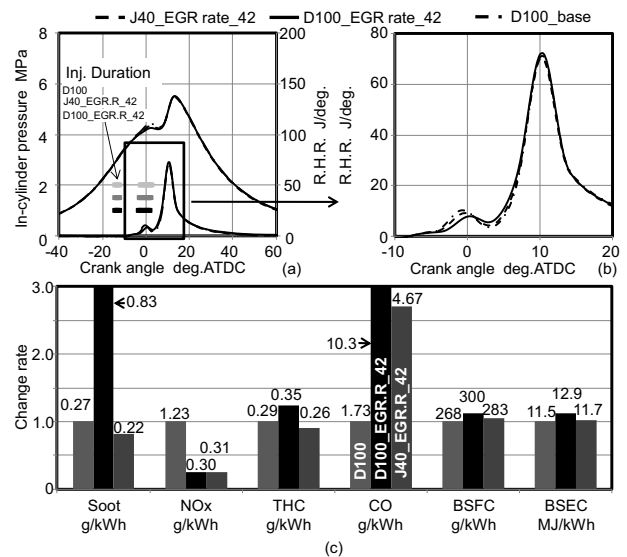


Fig.4 Results at high EGR rate (42%) condition

図4(a)と図5(a)において、前述と同様に主燃焼に対する燃料種の違いによる影響はほとんど見られなかった。ここで、図5(b)と(c)に示すように、酸素が十分ある条件では、熱発生と排出ガスに関しては、燃料種の違いによる影響がほとんど見られなかった。これは、シリンダー内全体で酸素が十分ある状態では、燃料中の酸素成分が局所的な当量比に与える影響はほとんど無視できるためと考えられる。それに対して、図4(b)に示すように、EGRによって不活性ガスが増えて酸素濃度が低下する条件では、J40の燃料中の酸素成分により、局所的な当量比が小さくなり、パイロット噴射による燃焼の促進効果が増すと考えられる。また、より低温で酸素濃度が低い条件においては、含酸素燃料の方が着火しやすくなる傾向があるといえる。その結果、図4(c)に示すように、EGR率が高いにもかかわらず、D100のベース条件に比べ、J40の方

が, Soot と NO_x は同時に低減し, THC も少なくなっている。

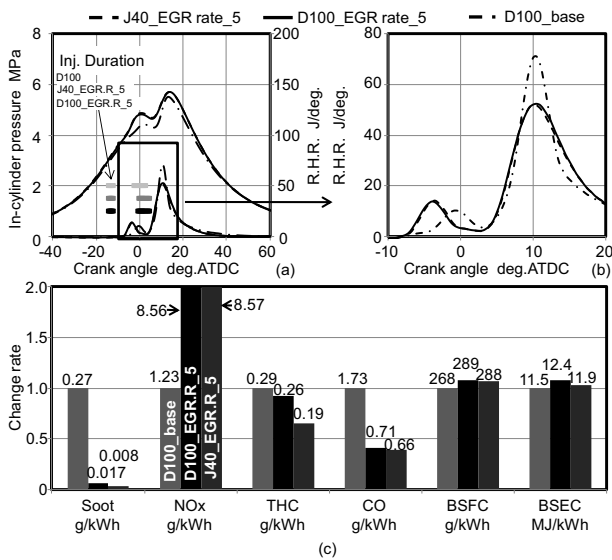


Fig.5 Results at low EGR rate (2%) condition

3.4. PCCI 燃焼による影響

一般的な予混合圧縮着火(PCCI)燃焼は, 早期噴射によって燃料の予混合気の形成時間を増やして Soot の発生を抑え, 同時に多量の EGR により NO_x の排出を低減するのが狙いである。しかしながら, 早期噴射によって着火時期のコントロールが難しくなり, また急激な燃焼になるため騒音の制御が難しくなる。そこで, 本研究では, 燃料の早期噴射を行わず, 上死点近辺で噴射し, 高圧噴射と高スワール比により予混合を促進することで PCCI 燃焼を実現する方法⁶⁾を試みた。従来研究において, 含酸素燃料にしても PCCI 燃焼を実現できることが確認されている⁶⁾。

ここで, BDF が PCCI 燃焼に与える影響を調査するため, 単段噴射となるように設定した。また, 軽油においては高圧噴射にする効果が明らかである一方, 前述したように BDF において高圧噴射の有効性があまりないことが分かったので, 噴射圧を 50MPa, 73MPa, 120MPa と変化し, 燃料種の違いが PCCI 燃焼に与える影響を調べた。その結果を図 6, 7 に示す。

図 6(a), (d), (g)において, 燃料種の違いが燃焼圧力に与える影響がほとんど見られなかった。従来研究においては PCCI 燃焼が低温酸化反応と高温燃焼反応という 2 段燃焼反応となることが確認されている⁹⁾。そこで, 各噴射圧における各燃料の低温酸化反応の熱発生率を比較した結果を図 6(b), (e), (h) に示す。噴射圧が高くなるほど, 両燃料とも, 低温酸化反応の熱発生の割合が少なくなっていることがわかる。これは, 噴射圧が高くなると, 噴霧の液滴の微粒化と蒸発が早まり, 低温酸化の時間が短縮するためと考えられる。また, 噴射圧が 50MPa の場合, J40 の方が低温酸化反応による熱発生量の

割合が大きくなることから, より低温酸化反応しやすい傾向があるものと推察される。各噴射圧における各燃料の高温燃焼反応の着火時の熱発生率を図 6(c), (f), (i)に示した。低噴射圧においては燃料種の違いによる影響がほとんど見られなかったが, 高噴射圧において, J40 の場合, 着火が若干遅くなっていることが分かった。これは J40 の蒸発性が D100 より悪いことが原因しているものと考えられる。

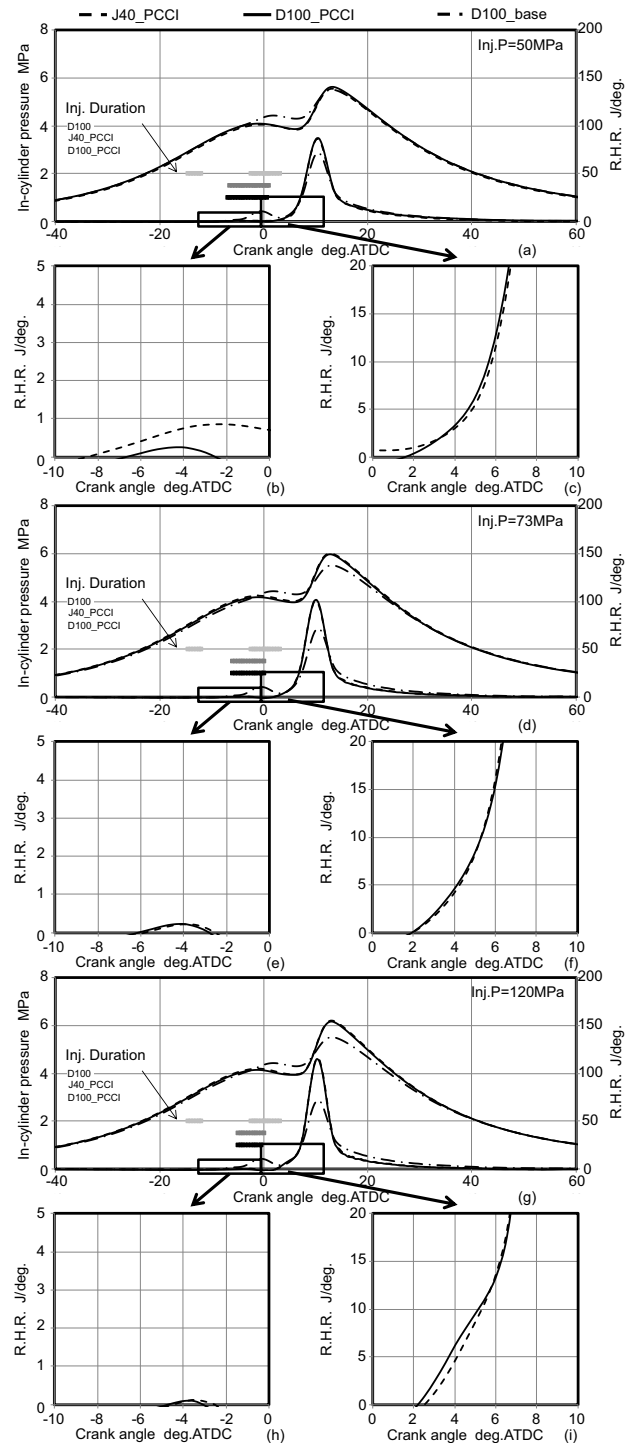


Fig.6 PCCI combustion at different injection pressure conditions

PCCI 燃焼において、各噴射圧での各燃料種による排出ガスと燃費を比較した結果を図 7 に示す。この図から、軽油を燃料とするベース条件に比べ、J40 では、噴射圧を低くすることで Soot と NOx の同時低減が可能であり、燃費および騒音の悪化が抑えられることがわかった。しかしながら、高噴射圧化は燃料種によらず希薄領域を増大させ、未燃成分の増加につながることをわかる。

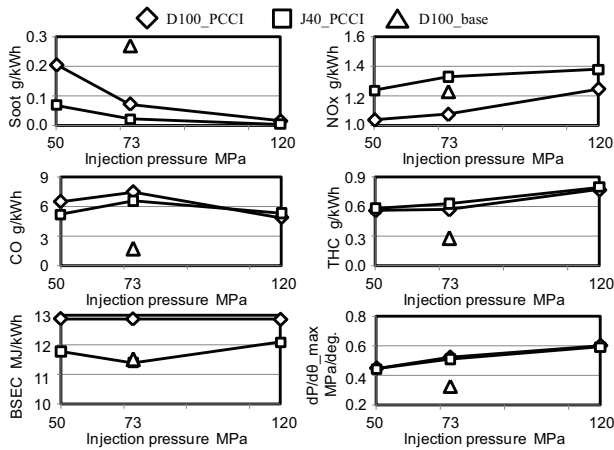


Fig.7 PCCI combustion emissions at different injection pressure conditions

4. BDF の反応モデルによる計算結果

本研究で適用する 0 次元モデルでは、シリンダー内の温度、圧力、化学種濃度等は均一であると仮定し、そのような条件が局所的に存在していると想定している。0 次元解析では、短時間の計算が可能であり、定性的な現象の理解が可能である。ここでは、CHEMKIN-PRO に含まれるパッケージ SENKIN を用いた。

4.1. BDF の反応モデルの構築

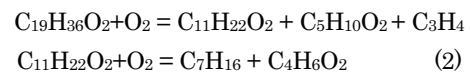
実際のディーゼル燃料は多数の脂肪族や芳香族の化合物からなり、これらの燃焼は極めて複雑であるため、包括的な化学反応機構を用いてモデル化することは困難である。これまでセタン価が約 56 で軽油と同等と見なせる n-haptane の反応機構を軽油の代替反応として適用される例が多いが、燃料中に含まれる芳香族や高分子量の成分を表現することが困難であるため、すすの生成量は実際の軽油に比較して少なく見積もられるおそれがある。そこで、本研究では Golovitchev らの提唱する Diesel oil surrogate (C₁₄H₂₈) メカニズム⁽¹²⁾を(化学種数: 71, 素反応数: 325)用いた。このサロゲート燃料は、式(1)に示すようにグローバル反応によってパラフィン系炭化水素(n-haptane)と芳香族炭化水素(Toluene)に分割され、反応が進行するものと仮定している。



本研究に使用した BDF の主成分は表 1 に示すようにオレイ

ン酸メチル(Methyl Oleate, MO)であり、MO40(MO と軽油 40%混合)のエンジン実験では、J40 の実験結果とほぼ同様の傾向が得られた⁽¹³⁾。Westbrook の研究⁽¹⁰⁾でも、不飽和脂肪酸メチルエステルは飽和脂肪酸メチルエステルより低温で着火しやすく、反応に促進する効果大きいことが示されている。本研究では、飽和成分の効果については、反応のモデル化も含めて今後の課題とし、主成分である不飽和の影響をより明確にすることに主眼を置き、反応スキームを構成する対象として C₁₉H₃₆O₂(MO)を選定し、反応計算を行うこととした。

また、MO サロゲートを単純化するため、バイオディーゼルの化合物燃焼メカニズム⁽¹⁴⁾を用いて、式(2)に示すように、グローバル反応によってパラフィン系炭化水素(n-haptane)と短鎖メチルエステルに分割され、反応が進行するものとした。



ここで、C₅H₁₀O₂、C₄H₆O₂の反応スキームは文献(15)により構築した。

4.2. 計算結果

表5に示す係数を用いて、式(3)のNASA多項式により各燃料のエンタルピーを算出し、その結果を図8(a)に示す。これを用いて、各燃料の反応スキームにより、各燃料の断熱火炎温度を算出した結果を図8(b)に示す。MOの低発熱量がD100より低くなっている一方、断熱火炎温度がほとんど変化しない結果が得られた。

$$\frac{H}{RT} = \alpha_1 + \frac{\alpha_2 T}{2} + \frac{\alpha_3 T^2}{3} + \frac{\alpha_4 T^3}{4} + \frac{\alpha_5 T^4}{5} + \frac{\alpha_6}{T} \quad (3)$$

Table 5 Polynomial coefficients (NASA)⁽¹⁶⁾

C19H36O2	T02/08	C	19	H	36	O	2	N	0	G	5000.0	1000.0	
4.0919E+01	1.0746E-01	-4.1993E-05	7.5084E-09	-5.0445E-13									
-7.9480E+04	-1.6642E+02	1.4835E+00	1.8133E-01	-4.1169E-05									
-6.6952E-08	3.8538E-11	-6.6447E+04	4.6631E+01										
C14H28	T5/99	C	14	H	28	O	0	N	0	G	200.0	6000.0	1000.0
3.7019E+01	5.5472E-02	-1.9208E-05	3.0818E-09	-1.8480E-13									
-5.2698E+04	-1.6145E+02	2.1326E+01	-3.8639E-02	3.9948E-04									
-5.0668E-07	2.0070E-10	-4.2248E+04	-4.8585E+01										

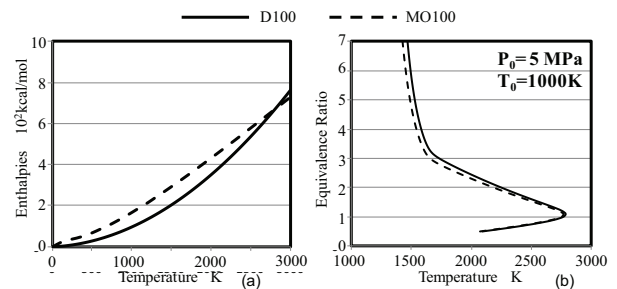


Fig.8 Calculated enthalpy and adiabatic flame temperature

図9は各当量比における燃料の違いによる着火遅れに与え

る影響を示す。それにより、各燃料において、当量比の増加により、着火遅れが短くなることがわかる。また、高温領域では、各燃料において、着火遅れの変化量がほぼ同等である一方、低温領域において、D100と違い、MOの方が著しく減少することが明らかである。このことから、前述の高EGR率の場合において、J40の方がパイロット噴射により着火しやすくなり、より低温領域での燃焼が促進されることが説明できる。

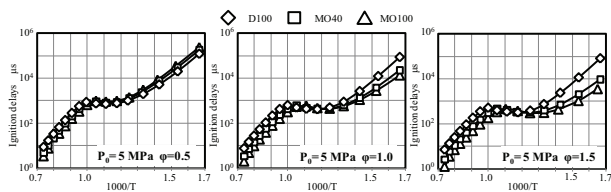


Fig.9 Comparison of ignition delay

Soot の反応モデルはHiroyasu Soot生成モデル⁽¹⁷⁾およびNSC酸化モデル⁽¹⁸⁾を用いて計算し、NOxについては拡大Zel'dovichモデル⁽¹⁹⁾を用いて計算した。その結果を図10に示すように、 ϕ -Tマップ上に表した。それによって、MOの場合、D100に比べ、Sootがより高い温度領域で生成し、MO40においては、Sootが2つの領域で生成する。また、燃料の種類によらずNOxの生成領域がほとんど変化しないことがわかる。さらに、この計算条件($T_0=1000$, $P_0=5$ MPa)においては、D100の火炎がSootおよびNOxの生成領域を両方通過する一方、MOでは、火炎がSootの生成領域に通過しないことから、より低温で過濃な条件においてもSootの排出が少ないことが説明できる。

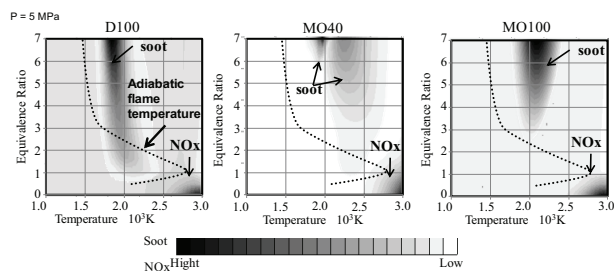


Fig.10 Calculated Soot and NOx on ϕ -T map

5. 結論

本研究では、ジェットロフアから作られたBDFを混合した軽油を用いて、市販車用の量産型ディーゼル機関を運転し、実用化を想定してECUの設定変更の範囲内で行えるパイロット噴射、高圧噴射、EGRおよびPCCI燃焼における燃焼特性を調査した。その結果をまとめると以下のとおりである。

- (1) J40 の場合、より低温低圧でのパイロット噴射による燃焼を促進する。
- (2) 高圧噴射では、噴射期間が短縮し、噴霧の微粒化と蒸発が促進され予混合的な燃焼となる傾向があり、J40 では、

局所的酸素濃度がより高いので、燃焼が促進され、燃焼温度が高くなり、NOxの排出量が大幅に増加する。

- (3) 低 EGR 率条件では、熱発生および排出ガスにおいて、燃料種の違いによる影響がほとんどない、一方、高 EGR 率条件では、J40 の場合、パイロット噴射により燃焼が促進され、Soot と NOx の排出量は同時に低減できる。
- (4) 両燃料とも噴射圧が高くなるほど、低温酸化反応の熱発生の割合が少なくなる。また、低圧噴射の場合、J40 の方が、低温酸化反応による熱発生量の割合が大きくなるが、高噴射圧では、着火が若干遅くなる。

また、Chemkin-Pro を用いた BDF の反応スキームにより着火遅れ特性と排出ガス特性を調べた結果をまとめると、下記のとおりである。

- (5) MO の低発熱量は D100 より低い一方、断熱火炎温度はほとんど変化しない。
- (6) 各燃料において、当量比の増加により、着火遅れが短くなる傾向がある。MO では、低温領域において含酸素特性の反応により着火遅れは著しく減少する。
- (7) MO の場合においては、D100 に比べ、Soot がより低い温度領域で生成し、MO40 においては、Soot が 2 つの領域で生成する。また、NOx の生成領域は燃料種によらず、温度と当量比に支配される。

謝 辞

本研究は、科学技術振興機構の研究課題名「非食糧系バイオマスの輸送用燃料化基盤技術」の一環として行われたものであり、関係各位に対して心から謝意を表す。

参 考 文 献

- (1) Robert L. McCormick, Michael S. Graboski, Teresa L. Alleman, Andrew M. Herring and K. Shaine Tyson, "Impact of Biodiesel Source Material and Chemical Structure on Emissions of Criteria Pollutants from a heavy-duty Engine", Environ. Sci. Technol. 2001, 35, 1742-1747
- (2) Melissa A. Hess, Michael J. Haas, Thomas A. Foglia, and William N. Marmer, "Effect of Antioxidant Addition on NOx Emissions from Biodiesel", Energy & Fuels 2005, 19, 1749-1754
- (3) James P. Szybist, Andre L. Boehman, Joshua D. Taylor, and Robert L. McCormick, "Evaluation of Formulation Strategies to Eliminate the Biodiesel NOx effect", Fuel Processing Technology 86 (2005) 1109-1126
- (4) K Yamane, K Kawasaki, K Sone, T Hara, and T Prakoso, "Oxidation Stability of Biodiesel and its Effects on Diesel Combustion and Emission Characteristics", International Journal of Engine Research June 1, 2007

- (5) United States Environmental Protection Agency 2002. “A Comprehensive Analysis of Biodiesel Impacts on Exhaust Emissions”, Draft Technical Report, EPA420-P-02-001
- (6) 崔曉丹ほか, 「バイオディーゼルを用いたディーゼル機関の燃焼と排出ガス特性に関する研究」, 自動車技術会学術講演会前刷集, No.119-11, p.1-6, (2011)
- (7) Malhotra RK, and Sarin R., “Bio-diesel for energy security, environment protection and employment generation”, SAE Publication, No. 2004-28-030
- (8) Y Murata, Y Nishio, J Kusaka, Y Daisho, D Kawano, H Suzuki, H Ishii, and Y Goto, “Numerical Analysis of Miller-Premixed Charge Compression Ignition Combustion on a Dynamic ϕ -T Map”, IMechE 2010, Int. J. Engine Res. Vol. 11, 89-98
- (9) Shigeyuki Tanaka, et al “Two-stage ignition in HCCI combustion and HCCI control by fuels and additives”, Combustion and Flame 132 (2003) 219-239
- (10) Charles K. Westbrook, “Recent Advances in Autoignition Kinetics of Automotive fuels”, COMODIA 2012, July 23-26, 2012, Fukuoka, Japan, PL-3
- (11) 中北清己ほか, 「高圧噴射ディーゼル機関の燃焼解析」, 日本機械学会論文集(B編), 60巻 577号 1994-9, No. 93-1706
- (12) Valeri.I.Golovitchev, et al “Analysis of Combustion Regimes in Compression Ignited Engine Using Parametric ϕ -T Dynamic Maps”, 2007 JSAE/SAE International Fuels and Lubricants Meeting, JSAE20077260 /SAE2007-01-1838
- (13) Cui, et al “The Effects of Jatropa-derived Biodiesel on Diesel Engine Combustion and Emission Characteristics”, SAE International, 2012-01-1637
- (14) A S Cheng, et al “Investigation of the impact of biodiesel fuelling on NOx emissions using an optical direct injection diesel engine”, Int. J. Engine Res. Vol. 7
- (15) E. .M. Fisher, et al “Detailed Chemical Kinetic Mechanisms for Combustion of Oxygenated Fuels” Proceedings of the Combustion Institute, 28: 1579-1586, 2000
- (16) <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/THERM.DAT>
- (17) H. Hiroyasu and T. Kadota, “Models for combustion and formation of nitric oxide and soot in DI diesel engines”, SAE paper, 760129, 1976
- (18) J. Nagle and R. F. Strickland-Constable, “Oxidation of Carbon Between 1000-2000°C”, Proceedings of the 5th Carbon conference 1 (1962), 265-325
- (19) D. L. Baulch, et al “Summary Table of Evaluated

A Numerical Study of the Effects of FAME Blends on Diesel Combustion and Emissions Characteristics Using a 3-D CFD Code Combined with Detailed Kinetics and Phenomenological Soot Formation Models

XiaoDan Cui, Beini Zhou, Mitsuhiro Matsunaga, Yusuke Fujii, Jin Kusaka, and Yasuhiro Daisho
Waseda Univ

ABSTRACT

The objective of the present research is to analyze the effects of using oxygenated fuels (FAMES) on diesel engine combustion and emission (NO_x and soot). We studied methyl oleate (MO), which is an oxygenated fuel representative of major constituents of many types of biodiesels. Engine tests and numerical simulations were performed for 100% MO (MO100), 40% MO blended with JIS#2 diesel (MO40) and JIS#2 diesel (D100). The effects of MO on diesel combustion and emission characteristics were studied under engine operating conditions typically encountered in passenger car diesel engines, focusing on important parameters such as pilot injection, injection pressure and exhaust gas recirculation (EGR) rate.

We used a diesel engine complying with the EURO4 emissions regulation, having a displacement of 2.2 L for passenger car applications. In engine tests comparing MO with diesel fuel, no effect on engine combustion pressure was observed for all conditions tested. However, combustion was enhanced by using MO under low temperature and high EGR rate (high equivalence ratio) conditions. Using MO, soot emission was significantly reduced without a concomitant increase in NO_x emission, but the apparent brake specific fuel consumption (BSFC) was worsened. However, the brake specific energy consumption (BSEC), defined on an energy basis, did not change significantly between the tested fuels. In addition, CO and THC emissions were reduced by using MO. These effects were due to the enhancement of low temperature reactions with oxygenated fuels like MO.

We also conducted a 3-D numerical study using the KIVA-3V code with modified chemical and physical models. To predict soot emission, a model dealing with the formation of precursors including polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) was coupled with a detailed phenomenological particle formation model, taking into account soot nucleation from the precursors, surface growth/oxidation and particle coagulation. We adopted an engine condition of 25% load and 1500 rpm because it is typically encountered in the NEDC mode.

The calculated in-cylinder pressure traces and heat release rates (HRRs) for all the fuels were in close agreement with the measured engine data and the results on soot emission also agree with analyzed data. Further, the numerical results suggested that the oxygenated fuel did not greatly affect soot oxidation rates and rates of oxidation by OH radicals. Instead, soot nucleation from the precursors and surface growth were found to be major factors influencing soot emission for the oxygenated fuel.

CITATION: Cui, X., Zhou, B., Matsunaga, M., Fujii, Y. et al., "A Numerical Study of the Effects of FAME Blends on Diesel Combustion and Emissions Characteristics Using a 3-D CFD Code Combined with Detailed Kinetics and Phenomenological Soot Formation Models," *SAE Int. J. Fuels Lubr.* 6(3):2013, doi:10.4271/2013-01-2689.

INTRODUCTION

Global warming and fossil depletion issues are of increasing concern in the transportation sector. To help alleviate these problems, diesel engines with high-efficiency

and low fuel-consumption are being introduced in the worldwide market. However, the exhaust from diesel engines contains high particulate matter (PM). Biodiesel fuel (BDF) has attracted considerable interest over the last few decades as a potential substitute for fossil fuels. In addition to being a

Table 1. Components of BDFs

Material	Fatty acid methyl ester %									
	Caprylic acid methyl ester	Methyl decanoate	Methyl laurate	Methyl myristate	Methyl palmitate	Methyl stearate	Methyl oleate	Methyl linoleate	Methyl Linolenate	Others
	C ₉ H ₁₈ O ₂	C ₁₁ H ₂₂ O ₂	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	C ₁₅ H ₃₀ O ₂	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	C ₁₉ H ₃₈ O ₂	C ₁₉ H ₃₆ O ₂	C ₁₉ H ₃₄ O ₂	C ₁₉ H ₃₂ O ₂	C>21
Soybean					11	5	25	52	7	
Rapeseed					4	2	62	20	8	1
Palm				1	45	6	38	9		
Jatropha					15	12	71	2		
Coconut	8	8	45	18	10	2	8	2		
Cooking oil					10	3	42	35	5	

renewable fuel derived from vegetable oil, BDF has the advantage that it can be used as a blend with diesel fuel without the need for changing engine design parameters. Furthermore, BDF is useful to reduce CO₂ emissions through the life cycle, as well as to significantly reduce PM emissions [1, 2, 3].

In recent years, numerous researchers have reported an increase in NO_x emissions from diesel engines fueled with BDF, and several biodiesel combustion kinetics models have been developed [4, 5, 6, 7, 8] to explain this behavior. These models could be used to simulate in-cylinder combustion processes coupled with mixing and chemical processes in order to determine optimal engine control and design parameters to reduce NO_x emissions with blended BDFs. However, few of these models have been validated sufficiently against test data on combustion and emissions, specifically on PM emissions in recently developed diesel engines.

The objective of the present research is to analyze the effects of using BDF on diesel engine combustion and emission by employing both engine tests and numerical simulation. BDF consists of several fatty acid methyl esters (FAMES), e.g., methyl palmitate (C₁₇H₃₄O₂), methyl oleate (C₁₉H₃₆O₂), methyl linoleate (C₁₉H₃₄O₂) and so forth. We chose methyl oleate (MO) as a test fuel representative of major constituents of many types of BDFs (as shown in Table 1[9]) and compared different fuel compositions, i.e., 100%

MO (MO100), 40% MO blended with JIS#2 diesel (MO40) and JIS#2 diesel (D100).

The engine tested in this study was equipped with an ECU, allowing not only exhaust gas recirculation (EGR) and injection pressure control but also pilot injection combustion. Although the effects on diesel combustion have been investigated under similar conditions [10, 11, 12, 13, 14], in the present study, we attempted to explain FAME combustion processes with the aim of optimizing engine operating parameters to ensure high thermal efficiency together with reduced emissions.

In a previous study, we used a zero-dimensional reaction model adopting in CHEMKIN-Pro to identify factors affecting engine combustion and emissions [15]. The results obtained with the numerical model suggested that the ignition delay with D100, MO40 and MO100 was almost similar at low equivalence ratios. By contrast, when equivalence ratio (ϕ) increased, the ignition delay decreased specifically in the low temperature range with MO. Further, MO100 resulted in emission of soot at high temperatures, whereas the blended fuel resulted in emission of soot at lower temperatures similar to ordinary diesel fuel. However, NO_x emission did not vary significantly between diesel fuel and biodiesel.

In the present study, we used the 3-D CFD code based on the reaction model described previously to investigate the effect of MO on engine combustion processes. We also employed a phenomenological soot formation model to identify the soot generation mechanism with MO.

EXPERIMENTAL SETUP

Test Engine

The engine used in the present study was a production turbocharged 2.2 L DI diesel engine designed for passenger cars, complying with the Euro 4 regulation. The main specifications of the engine are shown in Table 2.

Table 2. Engine specifications

Item	Specifications
Engine type	Water-cooled, 4-stroke-cycle, DI diesel engine
Valve train	DOHC 4 valves
Cylinder	L4
Bore x Stroke mm	85.0 x 97.1
Displacement cc	2204
Compression ratio	16.7
Fuel supply	Common-rail (Max.160 MPa) Nozzle cone angle 153° Φ 0.133mm×6 holes
EGR system	HP-Hot-EGR / HP-Cooled-EGR
Boost control	VNT turbocharger
Swirl control	Continuously variable (Swirl ratio: 1.2-4.4)
Max. power kW/rpm	103/4000
Max. torque Nm/rpm	340/2000

conversion to soot emission (g/kWh). The intake gas composition was also recorded to calculate the EGR rate.

Fuels

The following fuel compositions were used:

D100: standard ultra low sulfur diesel fuel compliant with JIS#2 (sulfur < 10 ppm).

MO100: 100% methyl oleate (C₁₉H₃₆O₂), which is representative of major constituents of many types of BDFs.

MO40: 40% mass blend of MO100 with D100.

The properties of the tested fuels are listed in Table 3.

Table 3. Composition and properties of fuels

Item	D100	MO100	MO40	
Density (@ 15°C) g/cm ³	0.8318	0.8740	0.8487	
Viscosity (@30°C) mm ² /s	3.212	4.041	4.041*	
CHO mass %	C	86.0	76.9	82.4
	H	13.7	12.1	13.2
	O	0.0	10.8	4.4
Aromatic vol. %	18.8	0.0	11.3	
Lower heating value kJ/kg	42970	36980	40574	
Flash point °C	73.5	174.0	-	
Sulfur mass ppm	6	0	3.6	
Cetane number	58.3	66.1	61.4	

This viscosity value marked with * is an estimated value based on reference [16]. The other values for MO40 were calculated from D100 and MO100 values as shown in Equation (1).

$$Q_m = \sum_i \sum_j y_i y_j Q_{ij} \quad (1)$$

where, Q_m is the property of the blend, Q_{ij} is the mean property, and y_i and y_j are the volumetric ratios of each pure component.

Although binary interactions between D100 and MO100 would be considered ideally, these were considered negligible [17].

EXPERIMENTAL RESULTS

Experimental Conditions

To analyze the effects of using MO on diesel engine combustion and emission characteristics, we set the engine at a speed of 1500 rpm and load of 25% as the base condition

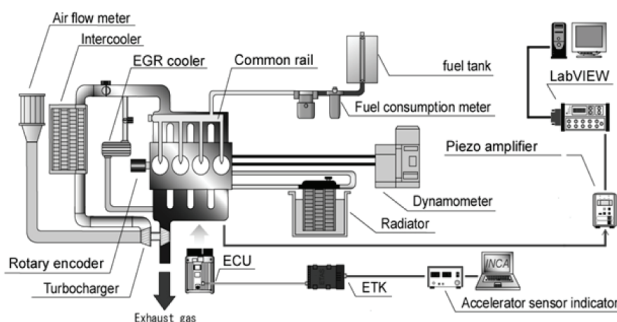


Figure 1. Experimental setup

The engine and measuring apparatus were configured as shown in Figure.1. Fuel consumption was measured using an FX-1100 gravity flow sensor developed by ONO SOKKI.

Exhaust gases were sampled at the engine outlet before the DOC using a MEXA 1500DEGR, while an AVL 415SE smoke meter was used to measure filter smoke number with

typically encountered in NEDC and JC08 modes. Details of the base conditions are listed in [Table 3](#). In the engine tests, the EGR rate and injection pressure was varied to evaluate the combustion reactions of MO. For all conditions, the 50% mass fraction of burned fuel (MFB50) was kept at the same crank angle by adjusting injection timing to enable fair comparison between the different fuels. The detailed base condition is shown in [Table 4](#). D100 and MO40 fuels were used for the engine experiments. For all EGR conditions, the cooled EGR gas was mixed with fresh air upstream of the intake pipe.

Table 4. Engine base operating conditions

Engine speed	rpm	1500	
Torque	Nm	72	
BMEP	kPa	411	
Load rate	%	25	
EGR ratio	%	36	
Swirl ratio		3.4	
Boost pressure	kPa	12	
Injection pressure	MPa	73	
Injection quantity	pilot	mg/str.	1.69
	main	mg/str.	13.2
Injection timing	pilot	deg.ATDC	-11
	main	deg.ATDC	-4.0
MFB50	deg.ATDC	10.3	

Experimental Results

Pilot injection

Pilot injection, originally utilized to prevent diesel engine noise and vibration by reducing ignition delay with diesel fuel, has been investigated in many studies [18, 19, 20]. In the present study, we measured in-cylinder pressure, heat release rate (HRR) and emissions using MO40 as a typical biodiesel fuel to analyze the effects on combustion process.

The results showed no significant differences in the main combustion characteristics between MO40 and D100, as shown in [Figure.2 \(a\)](#). However, the combustion phase with pilot injection was advanced by using MO40 due to enhancement of the combustion reactions in the low temperature range, as shown in [Figure.2 \(b\)](#). The ignition delay was shorter with MO than diesel at low temperatures and for high equivalence ratios, as calculated in [15]. NOx emission was reduced by using MO40 as shown in [Figure.2 \(c\)](#), owing to the increased combustion at low temperatures. Further, the local equivalence ratio was increased by using

MO40, resulting decreases in the total hydrocarbons, CO and soot emissions as shown in [Figure.2 \(c\)](#). The combustion efficiency was also improved by using MO40, and thus the brake specific energy consumption (BSEC) with MO40 was better than with D100. However, the brake specific fuel consumption (BSFC) with MO40 was worse than with D100 because MO40 had a lower heating value, as shown in [Figure.2 \(c\)](#).

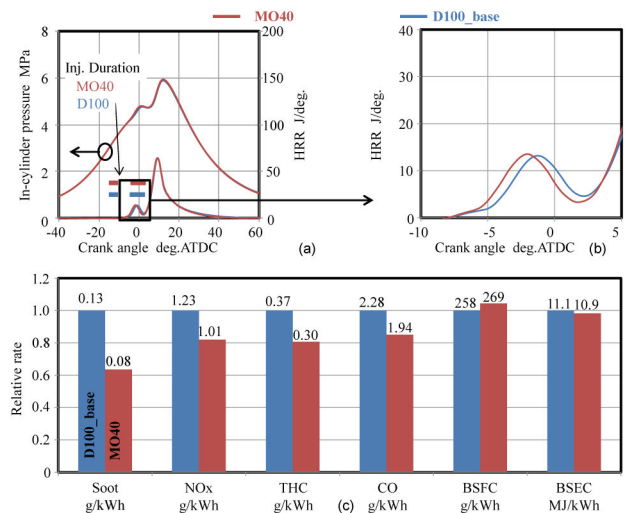


Figure 2. Results for pilot injection: (a) injection duration, in-cylinder pressure and heat release rate for each fuel, (b) effect on the heat release rate of using the different fuels showing differences in the combustion phase between MO40 and D100, (c) emissions and consumption results

High Pressure Injection

High pressure injection can enhance the atomization and evaporation of spray as well as reduce soot emission [12-13]. In this study, we increased the injection pressure to 160 MPa, and examined the effects of using MO40 on combustion and emission characteristics.

Because of the enhancement of atomization and evaporation of the spray for high pressure injection, the injection timing was shortened and the mixture timing for fuel and air was lengthened [13]. This meant that premixed combustion was observed for both fuels. Thus, the maximum in-cylinder pressure and maximum rate of pressure rise were higher than with pilot injection for both fuels as shown in [Figure.3 \(a\)](#). On the other hand, combustion in low temperature range was enhanced, but there was slight decrease in main combustion with MO40, as shown in [Figure.3 \(b\)](#). Owing to the increased mixture timing, soot emission was reduced. However, NOx emission was increased for both fuels but was significantly increased for MO40, as shown in [Figure.3 \(c\)](#).

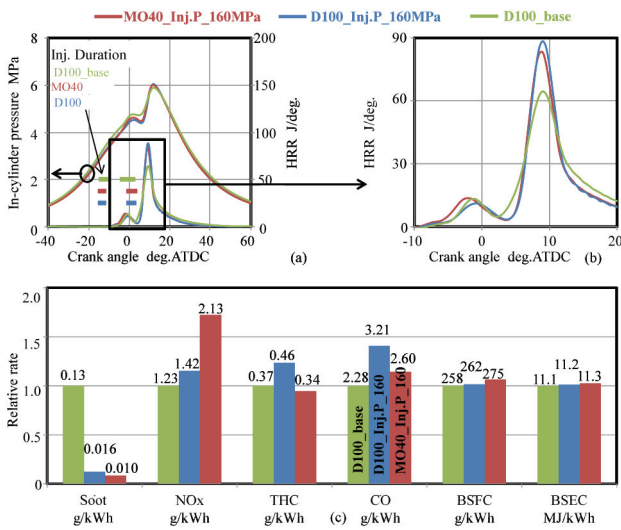


Figure 3. Results for high pressure injection: (a) injection duration conditions, in-cylinder pressure and heat release rate for each fuel, (b) effects on the heat release rate of using the different fuels, (c) emissions and consumption results

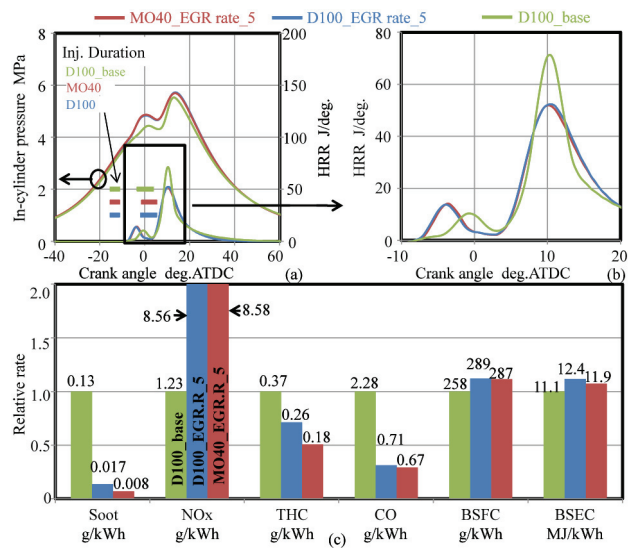


Figure 5. Results under a low EGR rate: (a) injection duration, in-cylinder pressure and heat release rate for each fuel, (b) effects on the heat release rate of using different fuels, (c) emissions and consumption results

EGR rate

External exhaust gas recirculation (EGR) is a well-known method to reduce NOx emissions from diesel engines and offers the possibility of decreasing the temperature during combustion. However, soot emission has been shown to increase under high EGR rate conditions [14]. In this study, we varied the EGR rate from 5% to 42% to investigate the effects of using MO40 on the combustion and emission characteristics.

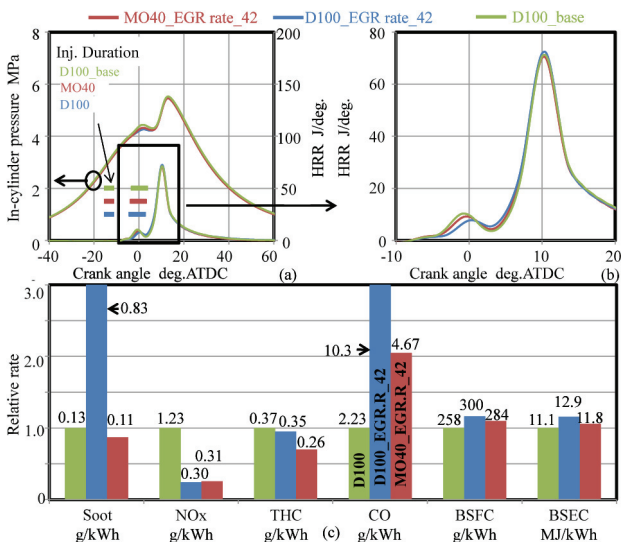


Figure 4. Results under a high EGR rate: (a) injection duration, in-cylinder pressure and heat release rate for each fuel, (b) effects on the heat release rate of using different fuels, (c) emissions and consumption results

Increased inlet heat capacity due to the higher specific heat capacity of recirculated CO₂ and H₂O compared with O₂ and N₂ has been shown to result in lower gas temperatures during combustion, particularly a lower flame temperature [14, 21, 22, 23]. Thus, in the present study, the ignition delay increased under the high EGR rate condition with D100 specifically for pilot injection combustion, but was unchanged with MO40, as shown in Figure.4 (b). This was because the combustion reaction was enhanced by using MO40 under low temperatures and for a high equivalence ratio. On the other hand, the ignition delay was decreased under the low EGR rate condition and the heat release rate was similar for both fuels as shown in Figure.5 (b). This is because the equivalence ratio was so low that the effect of the local equivalence ratio on the combustion with different fuels could be ignored. Compared to the results under the base conditions, soot emission was reduced with MO40 even when the EGR rate was increased. However, soot emission was significantly increased with D100 when the EGR rate was increased as shown in Figure.4 (c). Thus, the results suggest that soot and NOx emissions can be reduced simultaneously without a deterioration in consumption (BSEC) by using MO40.

Experimental Summary

The experimental results suggested that for a low engine speed and load, soot and NOx emissions could be reduced without compromising consumption by using MO40 coupled with a high EGR rate, low injection pressure and pilot injection. Thus, we performed numerical simulations for these conditions to analyze and explain the combustion and emission processes using MO.

CALCULATION METHOD

Calculation Conditions

We used the KIVA-3V code [24] developed at the Los Alamos National Laboratory as a base code. Detailed explanations of this code are given in references [25-26]. The additions and amendments made in the present study are listed in Table 5.

Table 5. Modifications to the KIVA-3V code

Combustion model	PaSR model [27]
Chemical reaction mechanism	Diesel oil surrogate model [28] / FAME surrogate model [29-30]
Turbulence model	RNG k-ε
Spray breakup model	KH-RT hybrid model [31]
Soot formation model	Phenomenological soot model [32]
NOx formation model	Extended Zeldovich mechanism [33]

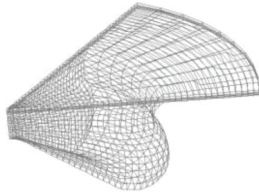


Figure 6. The 60 degree sector computational mesh

Table 6. Intake air components

Intake air components (Experimental)		
O ₂	vol. %	3.20
CO ₂	vol.%	16.56
Intake air components (Calculated)		
N ₂	mole rate	4.525
O ₂	mole rate	1.000
CO ₂	mole rate	1.655
H ₂ O	mole rate	1.655

A 60 degree sector computational mesh was used to model the test engine combustion chamber geometry, as shown in Figure.6. Simulations were performed for the base conditions shown in Table 3. The calculation started at 154 deg. BTDC when the intake valve is closed and finished at 157 deg. ATDC when the exhaust valve is opened. The calculated intake air components are shown in Table 6 together with experimental values for comparison.

Thermo-Physical Properties

In the spray model, the liquid fuel's thermo-physical properties, e.g., enthalpy, viscosity, latent heat of vaporization, vapor pressure, thermal conductivity and surface tension, are important parameters affecting the spray characteristics. The properties of the diesel oil were assumed to be the same as those set for diesel oil in the KIVA-3V fuel library [34]. In contrast, the properties of MO were calculated using various empirical methods [35], as shown in Equations (2), (3), (4), (5), (6). Thus, all thermo-physical properties were considered to depend on temperature alone.

Viscosity:

$$\omega = e^{(-9.059 + \frac{2.1167 \times 10^3}{T} - 0.5587 \ln T)} \quad (2)$$

Latent heat of vaporization:

$$\Delta H_V = 1.22 \times 10^8 (1 - T_r)^{0.395} \quad (3)$$

where T_r is the reduced temperature = T/T_c , and T_c is critical temperature = 764 K [35].

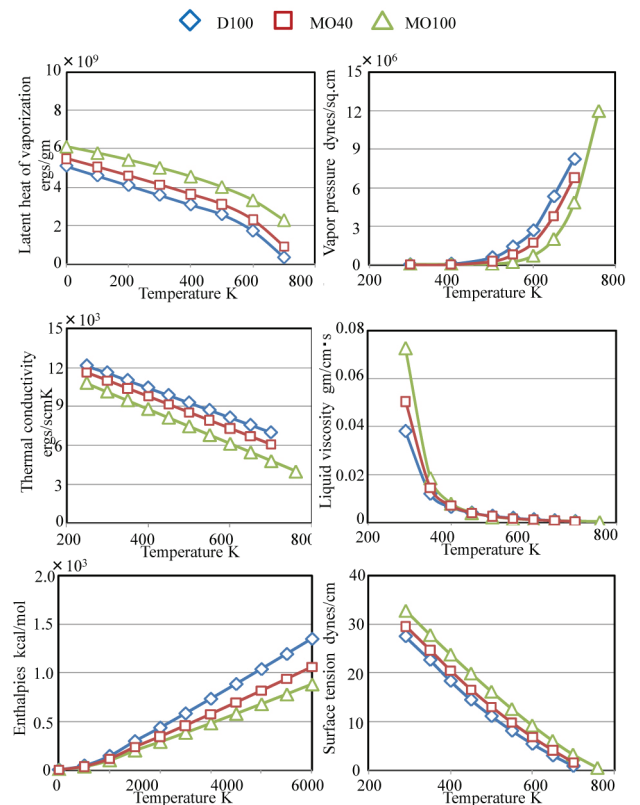


Figure 8. Thermo-physical properties of each fuel

Vapor pressure:

$$P_V = e^{(187.49 - \frac{1.9153 \times 10^4}{T} - 22.989 \ln T + 7.2769 \times 10^{-6} \times T^2)} \quad (4)$$

Thermal conductivity:

$$\lambda_L = 0.1402 - 1.3316 \times 10^{-4} \times T \quad (5)$$

Surface tension:

$$\sigma = 5.806 \times 10^{-2} (1 - T_r)^{1.248} \quad (6)$$

The enthalpy (H), entropy (S) and heat capacity (c_p) for the fuel vapor were then predicted from NASA polynomial coefficients [36], as shown in Figure.7 and Equations (7), (8), (9).

C19H36O2	C	19	H	36	O	2	N	0	G	5000.0	1000.0
4.0742E+01	1.1313E-01	-4.4292E-05	7.9264E-09	-5.3264E-13							
-9.5318E+04	-1.6125E+02	1.0390E+00	1.8950E-01	-4.9021E-05							
-6.2465E-08	3.7696E-11	-8.2267E+04	5.2486E+01								

Figure 7. The polynomial coefficients (NASA) for MO, in the data form, the first seven coefficients starting from the second row of each species' entry are for the high temperature range, the following seven coefficients are for the low temperature range.

$$\frac{H}{RT} = \alpha_1 + \frac{\alpha_2 T}{2} + \frac{\alpha_3 T^2}{3} + \frac{\alpha_4 T^3}{4} + \frac{\alpha_5 T^4}{5} + \frac{\alpha_6}{T} \quad (7)$$

$$\frac{c_p}{R} = \alpha_1 + \alpha_2 T + \alpha_3 T^2 + \alpha_4 T^3 + \alpha_5 T^4 \quad (8)$$

$$\frac{S}{R} = \alpha_1 \ln T + \alpha_2 T + \frac{\alpha_3 T^2}{2} + \frac{\alpha_4 T^3}{3} + \frac{\alpha_5 T^4}{4} + \alpha_7 \quad (9)$$

A similar relationship to that as shown in Equation (1) was used to calculate the blended fuel's (MO40) properties. The calculated results are shown in Figure.8.

Phenomenological Soot Formation Model

The generally soot formation in diesel combustion has been attributed to a sequence of reactions and processes in which polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are formed from unsaturated hydrocarbons produced by thermal decomposition of fuel components, nucleation, surface growth/oxidation and coagulation [37].

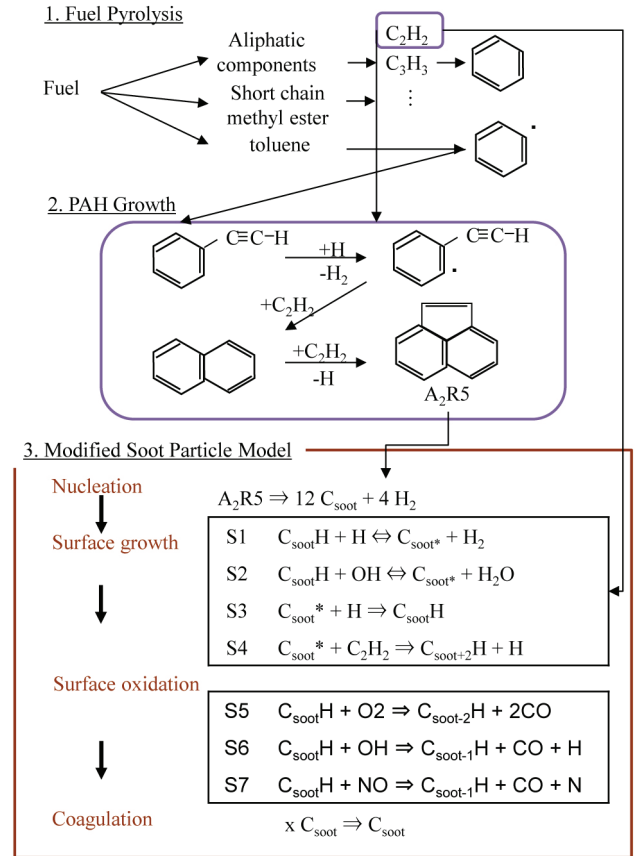


Figure 9. The phenomenological soot formation model combined with the detailed gas phase PAH growth chemical model

In this study, we used a phenomenological soot formation model as shown in Figure.9, which handled soot particles as gas phase species; for simplicity their diameters and number densities were calculated in each computational cell independently [38]. Therefore, changes in soot particle mass and number densities could be expressed by Equations (10) and (11). A detailed explanation of this phenomenological soot formation model is given in reference [32].

$$\frac{d[c(s)]}{dt} = \omega_{NC} + \omega_{SG} + \omega_{O_2} + \omega_{OH} + \omega_{NO} \quad (10)$$

$$\frac{df_n}{dt} = \frac{df_{n,NC}}{dt} + \frac{df_{n,CG}}{dt} \quad (11)$$

CALCULATION RESULTS

Spray Verification

Spray characteristics have significant effects on combustion processes in diesel engines and are highly dependent on the fuel's thermo-physical properties [39]. Therefore, the spray break-up model and associated model parameters had to be verified by experiment for each fuel. Sprays were examined by shadowgraph photography in a

constant-volume chamber under non-combustion conditions for each fuel. The spray experiments were conducted at an ambient gas density of 12 kg/m³ and temperature of 900 K to approximate actual combustion conditions used in the numerical simulations. The measured and calculated spray break-up lengths (liquid penetration lengths) for each fuel at different injection pressures are shown in Figure.10. Close agreement between the calculated results and measured data confirmed the validity of the break-up model for each fuel.

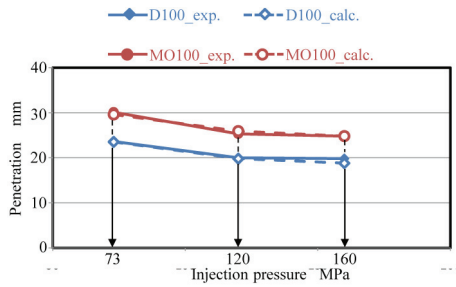


Figure 10. Experimental (constant-volume chamber) and calculated spray penetration length

Calculation Results

Combustion & soot emissions verification

The calculated combustion and soot emission characteristics for each fuel are shown in Figure.11. It can clearly be seen that the calculated in-cylinder pressures, heat release rates (HRR) traces and soot emissions are in close agreement with measured engine data, and that soot emission is reduced by using MO.

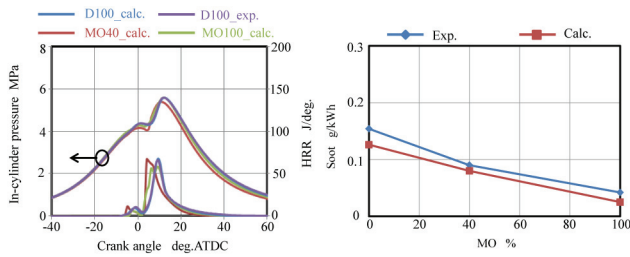


Figure 11. Comparing of the calculated and experimental in-cylinder pressure, HRR and soot emissions for each fuel

Soot formation & oxidation processes for different fuels

Regarding soot emission, the particle number was the same for all fuels. However, the average particle diameter (measured at engine out before the DOC using an EEPS3090 particle sizer in reference [15]) was smaller with MO40 than D100 under the specific engine operating conditions used. The calculated results showed that not only exhaust soot mass but also average particle diameters and particle number densities decreased as the MO blended rate was increased as

shown in Figure.12. Soot particle density and diameter have been reported to increase as the excess air ratio is reduced [40]. In our case, the excess air ratio was unchanged. However, the local equivalence ratio reduced when MO blended rate was increased, which had the same effect as increasing the excess air ratio.

In addition, soot mass and net soot production tended to occur later for fuels containing MO than for diesel, as shown in Figure.13. This is probably because more surface sites are activated in the case of MO fuels than for D100. In addition, the peak soot mass and net soot production was lower with MO than with D100. Thus, the results indicate that soot emission with MO is lower than with D100. In contrast, soot oxidation was similar for all fuels as shown in Figure.13.

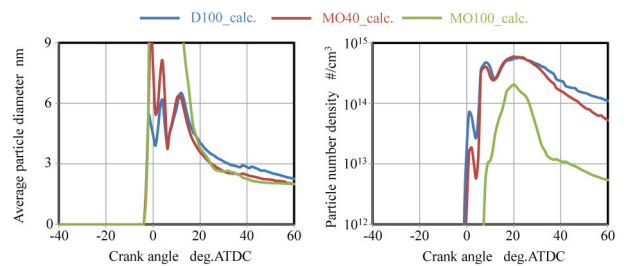


Figure 12. Calculated time courses of average particle diameter and particle number density for each fuel

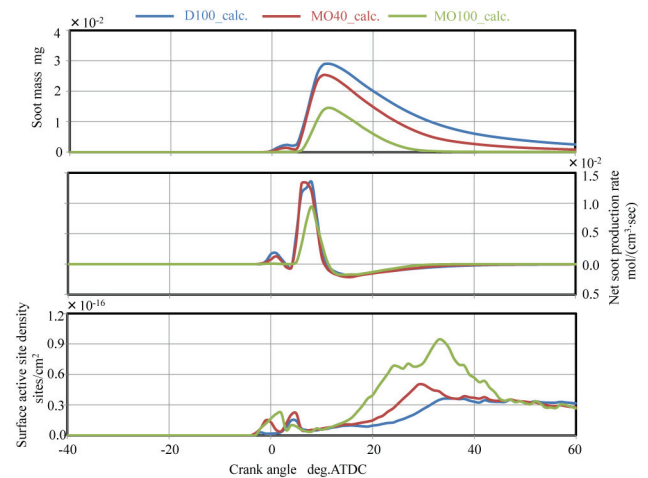
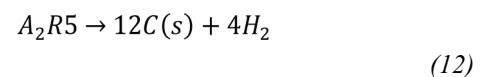


Figure 13. Effects of different fuels on soot mass histories, net soot production rates and soot particle surface active site density

The mass of acenaphthylene (A₂R5) was reduced with increasing MO blended rate. Thus, the nucleation rate, constant (κ_{NC}) calculated according to Equations (12), (13), (14) [35], decreased with increasing MO blended rate as shown in Figure.14.



$$\omega_{NC} = k_{NC}[A_2R5] \tag{13}$$

$$k_{NC} = 1.0 \times 10^3 \exp(-5000/RT) \tag{14}$$

Surface growth mediated by acetylene (C₂H₂) addition was the dominant mechanism responsible for the observed increases in soot mass, as shown in Figure.15. The mass of acetylene was also reduced using MO, but the reduction was not as large as for acenaphthylene.

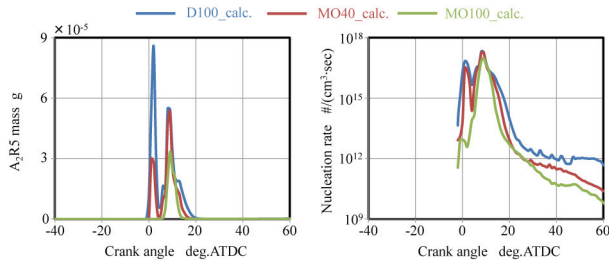


Figure 14. Calculated time courses of soot particle nucleation formation processes (A₂R5 masses and particle nucleation rate) for each fuel

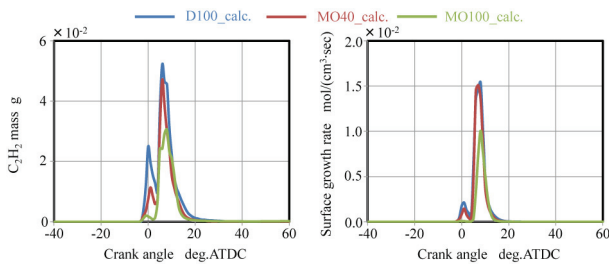


Figure 15. Calculated time courses of soot surface growth processes (C₂H₂ masses and surface growth rates) for each fuel

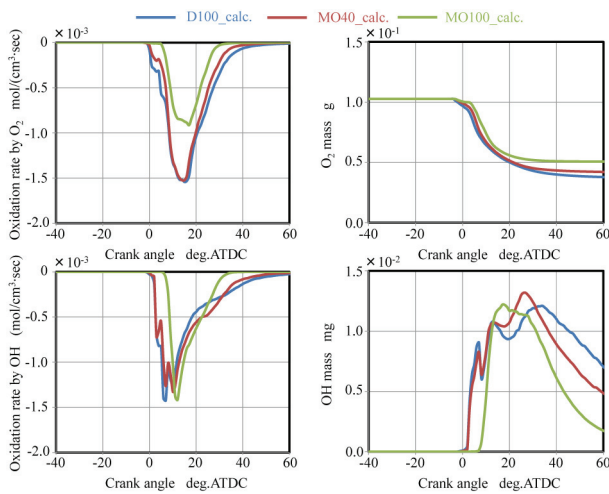


Figure 16. Calculated time courses of soot oxidation rates and oxidant masses (O₂ and OH) for each fuel

The concentrations and effects of three oxidants (O₂, OH and NO) were considered in the soot particle oxidation calculations. Soot oxidation by OH has been reported as the dominant oxidizing reaction [41]. However, in the present study, oxidation by OH and O₂ occurred to a similar extent for MO40 and D100, specifically, the oxidation rate due to OH was similar among all fuels, as shown in Figure.16. These results imply that the soot oxidation rate due to OH is simply controlled by the OH concentration. In contrast, the oxidation rate due to O₂ was lower for MO100 than for the other fuels. The reason for this is considered that the specific area of particles and particle number density are reduced by using MO100, as shown in Figure.12. Compared with soot oxidation by O₂ and OH, oxidation by NO was negligible.

Soot formation & oxidation distribution for different fuels

The fuel spray behavior for each fuel was analyzed from in-cylinder temperature distributions, as shown in Figure.17. The results show that soot initially forms near the piston bowl cavity and then moves inside the piston with the squish flow as shown in Figure.18. No significant differences were observed between the soot concentration distributions for the different fuels. Moreover, the temperature, which could affect NOx formation, was not changed so much with MO.

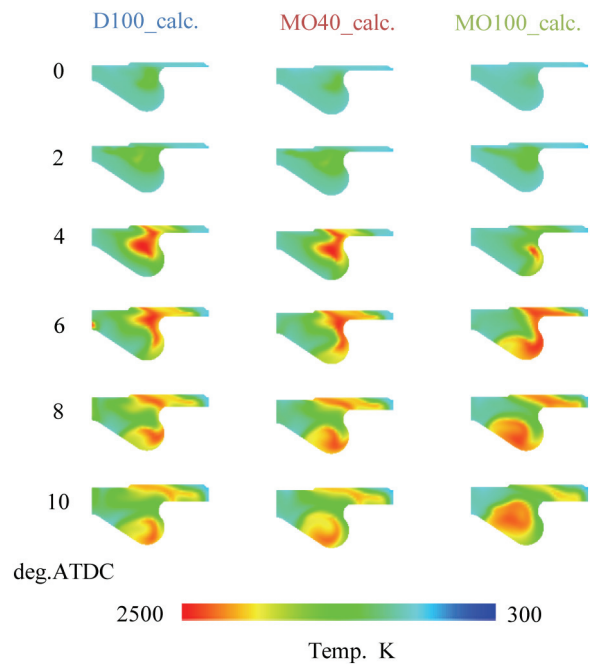


Figure 17. Temperature distributions for each fuel calculated every 2 degrees from a crank angle of 0 deg. ATDC to 10 deg. ATDC

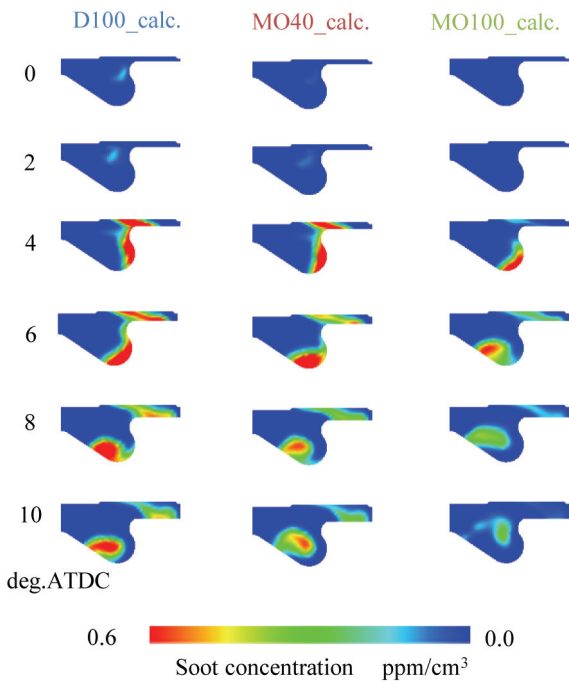


Figure 18. Soot concentration distributions for each fuel calculated every 2 degrees from a crank angle of 0 deg. ATDC to 10 deg. ATDC

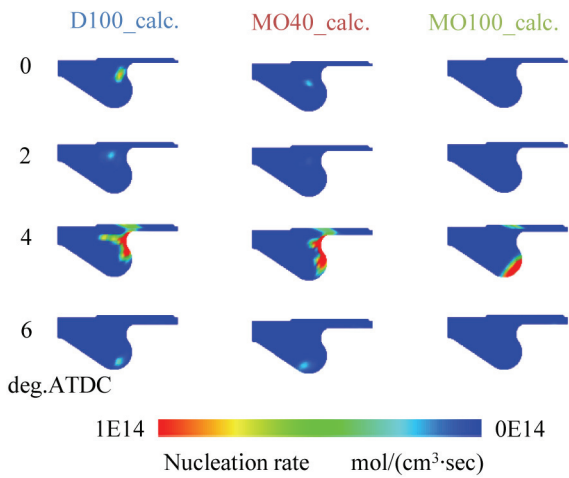


Figure 19. Nucleation rate distributions for each fuel calculated every 2 degrees from a crank angle of 0 deg. ATDC to 6 deg. ATDC

Detailed analysis of the calculated distributions suggests that nucleation, which is the first step of soot formation, starts just after acenaphthylene is formed and that acetylene surface abstraction begins at approximately the same time as shown from Figures.19, 20, 21, 22. In addition, acenaphthylene forms predominantly in fuel rich and low temperature regions. This is because acenaphthylene starts to form near the lift-off region of the injected fuel vapor, which corresponds to the edge of the fuel spray at temperatures higher than 2000 K [42]. Subsequently, acetylene and acenaphthylene, which are

the major soot related species, are fully consumed and oxidation processes start to become dominant throughout the combustion chamber.

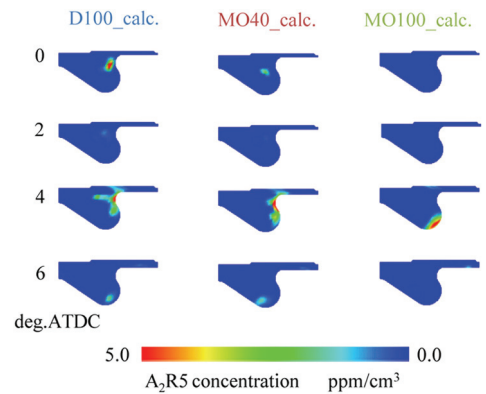


Figure 20. A₂R₅ concentration distributions for each fuel calculated every 2 degrees from a crank angle of 0 deg. ATDC to 6 deg. ATDC

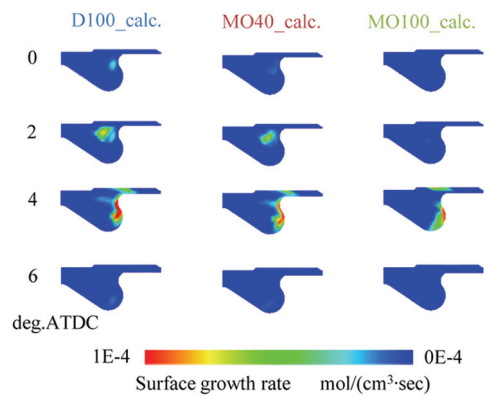


Figure 21. Surface growth rate distributions for each fuel calculated every 2 degrees from a crank angle of 0 deg. ATDC to 6 deg. ATDC

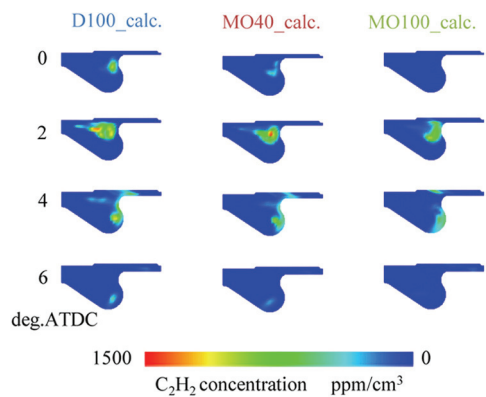


Figure 22. C₂H₂ concentration distributions for each fuel calculated every 2 degrees from a crank angle of 0 deg. ATDC to 6 deg. ATDC

The highest rate of soot oxidation by OH was predicted to be at the outside edge of the fuel spray where OH is largely formed [41], as shown in Figure.23 and 24. Consequently, the oxidation rate by OH rate and OH concentration exhibited similar distributions. Moreover, OH was found to occur in high concentrations at the center of the piston cavity.

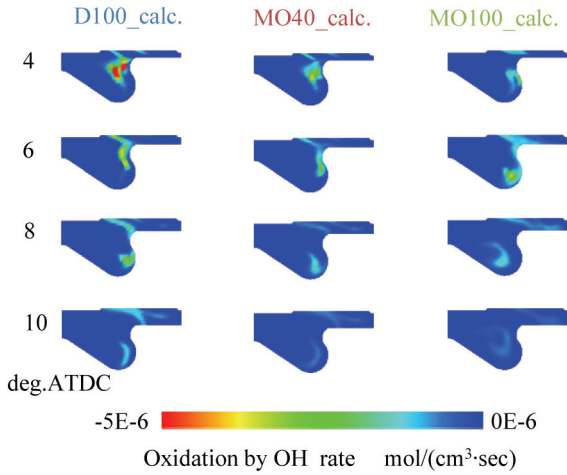


Figure 23. Rate of oxidation by OH rates for each fuel calculated every 2 degrees from a crank angle of 4 deg. ATDC to 10 deg. ATDC

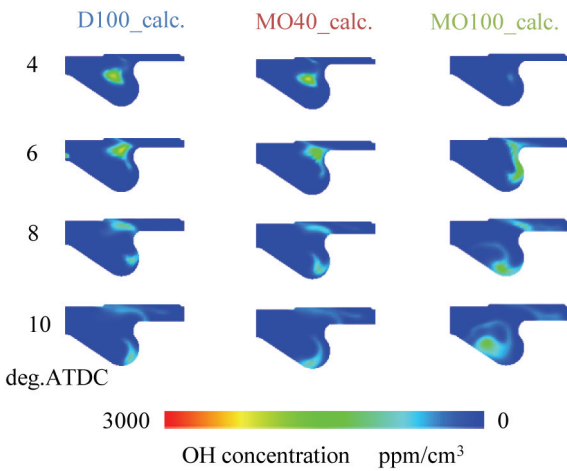


Figure 24. OH concentration distributions for each fuel calculated every 2 degrees from a crank angle of 4 deg. ATDC to 10 deg. ATDC

The rates of oxidation by O₂ were similar among all fuels, as shown in Figure.25. Even though the results suggested that O₂ concentrations were highest during soot formation and oxidation reactions with MO as shown in Figure.26, the rate of oxidation by O₂ was not significantly higher with MO than with the other fuels.

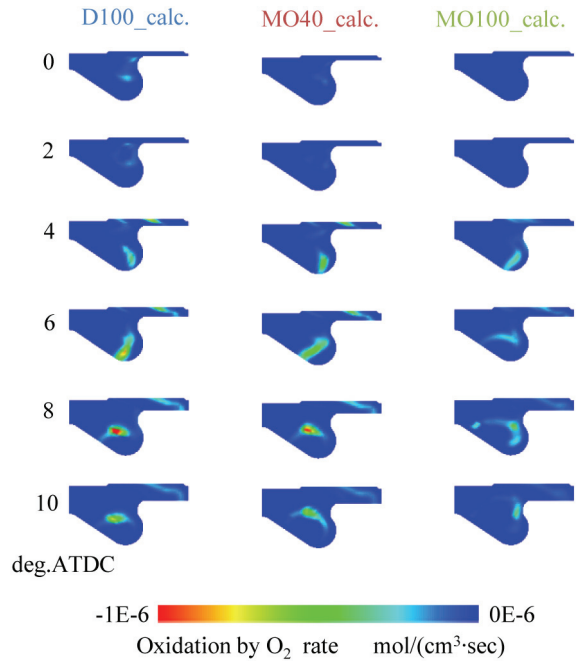


Figure 25. Rate of oxidation by O₂ for each fuel calculated every 2 degrees from a crank angle of 0 deg. ATDC to 10 deg. ATDC

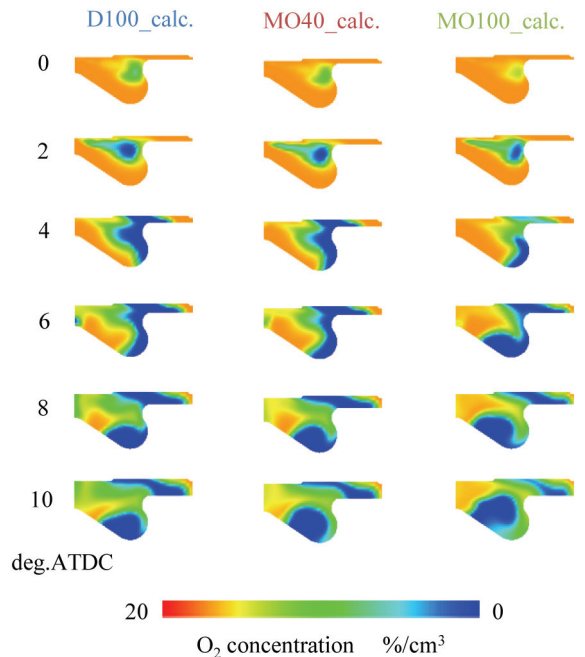


Figure 26. O₂ concentration distributions for each fuel calculated every 2 degrees from a crank angle of 0 deg. ATDC to 10 deg. ATDC

CONCLUSIONS

In this study, we analyzed the effects of methyl oleate (MO) on diesel engine combustion and emission characteristics. MO was chosen as an oxygenated fuel representative of major constituents of many types of biodiesels. 100% MO (MO100), 40% MO blended with JIS#2 diesel (MO40) and JIS#2 diesel (D100) were used in this study for engine tests and numerical simulations.

A diesel engine complying with the EURO4 emissions regulation, having a displacement of 2.2 L for passenger car applications was used. Engine tests were conducted with 40% MO blended with JIS#2 diesel (MO40) and neat JIS#2 diesel (D100). The results showed that:

1. The combustion phase with pilot injection was advanced by using MO40, resulting in enhancing the combustion reaction at low temperatures. NO_x emission was also reduced by using MO40 because combustion in the low temperature range was increased. In contrast, the local equivalence ratio was increased with MO40, resulting in a reduction of total hydrocarbons, CO and soot emissions. Moreover, the combustion efficiency was improved by using MO40 as the BSEC with MO40 was lower than with D100.

2. Since high pressure injection led to enhanced atomization and evaporation of the spray, the maximum in-cylinder pressure and rate of pressure rise increased with both fuels. The increased mixture timing resulted in a reduction in soot emission. However, NO_x emission was increased for both fuels, particularly for MO40.

3. Ignition delay was found to increase under high EGR rate conditions with D100 particularly for pilot injection combustion. However, the ignition delay was not affected with MO40. In contrast, the ignition delay was reduced under low EGR rates conditions and the heat release rate was similar for both fuels because the local equivalence ratio had a negligible effect on combustion. The results suggest that soot and NO_x emissions can be reduced simultaneously without compromising energy consumption (BSEC) by using MO40.

The experimental results, suggest that under low engine speed and load, the optimal parameters for reducing soot and NO_x emissions with MO40 includes a high EGR rate, low injection pressure and pilot injection.

Using a 3-D CFD code (KIVA3V) combined with detailed kinetics and phenomenological soot formation models, combustion was modeled with MO40, D100 and MO100 (100% MO). The following results were obtained:

1. The calculated in-cylinder pressure, heat release rate (HRR) traces and soot emission agree closely with the experimental data.

2. As well as the soot mass emission, the average particle diameter and particle number density tend to be reduced when MO blended rate is increased due to a reduction in the local equivalence ratio.

3. MO does not greatly affect soot oxidation rates, even for OH radicals. Instead, soot nucleation from precursors and surface growth are major factors influencing soot emission.

4. No significant differences were found between the soot concentration distributions for the different fuels. Moreover, the temperature, which can affect NO_x formation, is not changed with MO. So using MO can reduce soot emission without increase NO_x emission.

REFERENCES

1. United States Environmental Protection Agency 2002. "A Comprehensive Analysis of Biodiesel Impacts on Exhaust Emissions", Draft Technical Report, EPA420-P-02-001
2. Sharma Y. C., Singh B., and Upadhyay S. N., "Advancements in development and characterization of biodiesel: A review", Fuel, Volume 87, Issue 12, 2008-09, P 2322-2373
3. Satyanarayana M., and Muraleedharan C., "A comparative study of vegetable oil methyl esters (biodiesels)", Energy Volume 36, Issue 4, 2011-4, P 2129-2137
4. Curran HJ, Fischer SL, and Dryer FL, "The reaction kinetics of dimethyl ether, II: low-temperature pyrolysis and oxidation in flow reactors", Int J Chem Kinet 2000, 32, 741-59
5. Rochaya D., "Numerical simulation of spray combustion using biomass derived liquid fuels", Cranfield University, PhD Thesis, Bedfordshire, 2007
6. Brakora, J., Ra, Y., Reitz, R., McFarlane, J. et al., "Development and Validation of a Reduced Reaction Mechanism for Biodiesel-Fueled Engine Simulations," SAE Int. J. Fuels Lubr. 1(1):675-702, 2008, doi: 10.4271/2008-01-1378.
7. Golovitchev V., and Yang J., "Construction of combustion models for rapeseed methyl ester bio-diesel fuel for internal combustion engine applications", Biotechnology Advances 27, 2009, 641-655
8. Cheng A. S., Upatnieks A., and Mueller C. J., "Investigation of the impact of biodiesel fuelling on NO_x emissions using an optical direct injection diesel engine", Int. J. Engine Res., 2006-8-1, P 297-318
9. Yoshimoto Y., and Kinoshita E., "Applied technology of vegetable oils for diesel engines - use of biodiesel fuel", Journal of the Combustion Society of Japan, Vol.51, No.156 (2009), 121-128
10. Carlucci, P., Ficarella, A., and Laforgia, D., "Effects of Pilot Injection Parameters on Combustion for Common Rail Diesel Engines," SAE Technical Paper 2003-01-0700, 2003, doi:10.4271/2003-01-0700.
11. Wang X., H.Z., Kuti O. A., Zhang W., and Nishida K., "Experimental and analytical study on biodiesel and diesel spray characteristics under ultra-high injection pressure", International Journal of Heat and Fluid Flow 31, 2010, P 659-666
12. Nakakita K., Kondoh T., and Watanabe S., "A study on diesel combustion with high-pressure fuel injection (improvement of combustion and exhaust emissions using small-hole-diameter nozzles)", The Japan Society of Mechanical Engineers, 60-577, 1994-9, P 254-262
13. Suzuki M., Nishida K., and Hiroyasu H., "Mixture formation process in a diesel spray with high injection pressure (behavior of spray injected into a model combustion chamber)", The Japan Society of Mechanical Engineers, 60-569, 1994-1, P 327-334
14. Maiboom A., Tazvia X., and Hetet J. F., "Experimental study of various effects of exhaust gas recirculation (EGR) on combustion and emissions of an automotive direct injection diesel engine", Energy, 33, 2008, P 22-34
15. Cui, X., Kim, T., Fujii, Y., Kusaka, J. et al., "The Effects of Jatrophaderived Biodiesel on Diesel Engine Combustion and Emission Characteristics," SAE Technical Paper 2012-01-1637, 2012, doi: 10.4271/2012-01-1637.
16. Szybist James P., Boehman Andre L., Taylor Joshua D., and McCormick Robert L., "Evaluation of formulation strategies to eliminate the biodiesel NO_x effect", Fuel Processing Technology 86 (2005) 1109-1126
17. Reid R. C., and Prausnitz J. M., "The properties of gases and liquids", McGRAW-HILL, Inc., 4th ed., 1987
18. Nakakita K., Kondoh T., Ohsawa K., Takahashi T., and Watanabe S., "Optimization of pilot injection pattern and its effect on diesel combustion with high-pressure injection", JSME international Journal, Series B, Fluids and Thermal Engineering, 1994, vol.37, P 966-973
19. Ishida M., Chen Z. L., Luo G. F., and Ueki H., "Effect of pilot injection on combustion in a turbocharged D.I. diesel engine", SAESA2, 95-005154-012
20. Tanaka T., Ando A., and Ishizaka K., "Study on pilot injection of DI diesel engine using common-rail injection system", JSAE Review, Volume 23, Issue 3, 2002-6, P 297-302

21. Ladommatos, N., Abdelhalim, S., Zhao, H., and Hu, Z., "The Dilution, Chemical, and Thermal Effects of Exhaust Gas Recirculation on Diesel Engine Emissions - Part 4: Effects of Carbon Dioxide and Water Vapour," SAE Technical Paper 971660, 1997, doi:10.4271/971660.
22. Ladommatos, N., Abdelhalim, S., Zhao, H., and Hu, Z., "Effects of EGR on Heat Release in Diesel Combustion," SAE Technical Paper 980184, 1998, doi:10.4271/980184.
23. Jacobs, T., Assanis, D., and Filipi, Z., "The Impact of Exhaust Gas Recirculation on Performance and Emissions of a Heavy-Duty Diesel Engine," SAE Technical Paper 2003-01-1068, 2003, doi:10.4271/2003-01-1068.
24. Amsden A. A., "KIVA-3: A KIVA program with block-structured mesh for complex geometries", Report LA-12503-MS, Los Alamos National Laboratory, 1993
25. Kusaka, J., Horie, N., Daisho, Y., Golovichev, V. et al., "Numerical Simulation Accounting for the Finite-Rate Elementary Chemical Reactions for Computing Diesel Combustion Process," SAE Technical Paper 2005-24-051, 2005, doi:10.4271/2005-24-051.
26. Kusaka J., Montorsi L., Golovitchev V., and Denbratt I., "Numerical simulation of combustion in a heavy duty diesel engine", FISITA 2006, F2006P398
27. Tao, F., Golovitchev, V., and Chomiak, J., "Self-Ignition and Early Combustion Process of n-Heptane Sprays Under Diluted Air Conditions: Numerical Studies Based on Detailed Chemistry," SAE Technical Paper 2000-01-2931, 2000, doi:10.4271/2000-01-2931.
28. Gustavsson, J. and Golovitchev, V., "Spray Combustion Simulation Based on Detailed Chemistry Approach for Diesel Fuel Surrogate Model," SAE Technical Paper 2003-01-1848, 2003, doi:10.4271/2003-01-1848.
29. Yang J., Johansson M., and Golovitchev V., "Engine Performance and Emissions Formation for RME and Conventional Diesel Oil: A Comparative Study", Proceeding of the ASME Internal Combustion Engine Division 2009 Spring Technical Conference, ICES2009-76121
30. Yang J., Golovitchev V., Lurbe P. R., and Sanchez J. L., "Chemical kinetic study of nitrogen oxides formation trends in biodiesel combustion", International Journal of Chemical Engineering, Volume 2012, 898742
31. Beale J., and Reitz R. D., "Modeling spray atomization with the Kelvin Helmholtz/Rayleigh-Taylor hybrid model", Atomization and Sprays, 1999-9, P 623-650
32. Kaminaga T., Kusaka J., and Ishii Y., "A three-dimensional numerical study on exhaust gas emissions from a medium-duty diesel engine using a phenomenological soot particle formation model combined with detailed chemistry", Int. J. Engine Res., vol. 9, P 283-296
33. Hill S. C., and Smoot L. Douglas, "Modeling of nitrogen oxides formation and destruction in combustion systems", Prog. Energy Combust., Sci., 2000, 26, P 417-458
34. Amsden A. A., "KIVA-3: A block-structured KIVA program for engines with vertical or canted valves", LA-13313-MS, Los Alamos National Laboratory, 1997
35. Daubert T., and Danner R., "Physical and thermodynamic properties of pure chemicals, data compilation", Taylor & Francis Group, 1994
36. <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/THERM.DAT>
37. Vlasov P. A., and Warnatz J., "Detailed kinetic modeling of soot formation: Results, problems, and prospects", German-Russian Workshop on Reactive flows, 2002
38. Morishima A., Kusaka J., and Daisho Y., "Numerical and experimental study on particulate matter formation process in diesel combustion - analysis in fuel-rich HCCI combustion", JSAE, 20074133 2007.
39. Yang J., "Biodiesel spray combustion modeling based on a detailed chemistry approach", Department of Applied Mechanics Division of Combustion, Chalmers University of Technology Gothenburg, Sweden 2012, P 5-18
40. Crookes R. J., Sivalingam G., Nazha M. A. A., and Rajakaruna H., "Prediction and measurement of soot particulate formation in a confined diesel fuel spray-flame at 2.1 MPa", Int. J. Thermal Sci., 2003, 42, P 639-646
41. Tao F., Forster D. E., and Reitz R. D., "Characterization of soot particle distribution in conventional, non-premixed DI diesel flame using a multi-step phenomenological soot model", Proc. Combust. Inst., 2007, 31, P 2991-2998
42. Ito, T., Hosaka, T., Ueda, M., Senda, J. et al., "Detailed Kinetic Modeling and Laser Diagnostics of Soot Formation Process in Diesel Jet Flame," SAE Technical Paper 2004-01-1398, 2004, doi:10.4271/2004-01-1398.

CONTACT INFORMATION

Xiaodan Cui
 Address: Graduate School of Environment and Energy Engineering
 WASEDA University
 Room 226, No.58, 3-4-1 Okubo, Shinjuku-ku
 Tokyo, Japan, 169-8555
yoshikieric@fuji.waseda.jp
 Phone: +81-3-5286-3252

ACKNOWLEDGMENTS

This study was conducted as part of a project entitled "Innovation on Production and Automotive Utilization of Biofuels from Non-food Biomass" funded by the Japan Science and Technology Agency.

DEFINITIONS/ABBREVIATIONS

ATDC - after top dead centre
A₂R5 - acenaphthylene
BDF - bio-diesel fuel
BMEP - brake mean effective pressure
BSEC - brake specific energy consumption
BSFC - brake specific fuel consumption
BTDC - before top dead centre
C₂H₂ - acetylene
CFD - computation fluid dynamics
CO - carbon monoxide
CO₂ - carbon dioxide
DI - direct injection
DOC - diesel oxidation catalyst
DOHC - Double Over Head Camshaft
ECU - engine control unit
EEPS - engine exhaust particle sizer
EGR - exhaust gas recirculation
EURO4 - European emission standard 2005
FAME - fatty acid methyl esters
JIS#2 - Japanese industrial standards No.2
MFB - mass fraction of burned fuel
NEDC - new European driving cycle
NO - nitric oxide
NO_x - nitrogen oxide
PAHs - polycyclic aromatic hydrocarbons
PM - particulate matter
HRR - heat release rates
T - temperature
THC - total hydrocarbons



Utilizing FAME as a Cetane Number Improver for a Light-duty Diesel Engine

2014-01-1392
Published 04/01/2014

XiaoDan Cui, Peng Lu, Hiroki Nakamura, Mitsuhiro Matsunaga, Akira Kikusato, Kusaka Jin, and Yasuhiro Daisho

Waseda Univ.

CITATION: Cui, X., Lu, P., Nakamura, H., Matsunaga, M. et al., "Utilizing FAME as a Cetane Number Improver for a Light-duty Diesel Engine," SAE Technical Paper 2014-01-1392, 2014, doi:10.4271/2014-01-1392.

Copyright © 2014 SAE International

Abstract

As the petroleum depletion, some of this demand will probably have to be met by increasing the production of diesel fuels from heavy oil or unconventional oil in the near future. Such fuels may inevitably have a lower cetane number (CN) with a higher concentration of aromatic components. The objective of the present research is to identify the effects of a typical biodiesel fuel as a CN improver for a light-duty diesel engine for passenger cars.

Our previous study indicates that methyl oleate (MO), which is an oxygenated fuel representative of major constituents of many biodiesel types, can reduce soot and NO_x emissions simultaneously by optimizing performance under exhaust gas recirculation (EGR) when used as a diesel fuel additive. In addition, it was found that MO tends to reduce the ignition delay.

We employed a 2.2 L passenger car DI diesel engine complying with the Euro 4 emissions regulation. Four different fuels were compared: JIS#2 diesel fuel, which has a CN of 57 (D100) for a reference fuel, a very low CN diesel fuel (CN45), a blend of CN45 with 40% MO (named CN45+MO), and a blend of CN45 with an alternative CN improver, 2-Ethyl-Hexyl-Nitrate (EHN), which has the same CN as D100 (named CN45+EHN). These fuels were compared in terms of their thermal efficiency, combustion and exhaust emission characteristics.

Experiments were performed using seven engine torque and speed combinations that were selected to reflect typical operating conditions in passenger car diesel engines, focusing on the effects of important parameters such as pilot injection, injection pressure, EGR ratio and the use of premixed charged compression ignition (PCCI).

The engine test results showed that CN45 generated longer ignition delays than the other tested fuels under all operating conditions and that pilot injection with this fuel was not sufficient to ensure ignition and effective main combustion at low engine speeds and loads, particularly when using high EGR ratios. This increased fuel consumption and unburned fuel emissions (CO & THC). It was judged that too much amount of MO must be added to improve the deterioration brought by CN45. We therefore compared the performance of CN45+MO to that of CN45+EHN under low temperature and enhanced EGR conditions. CN45+MO produced lower soot and NO_x emissions. In addition, the brake specific energy consumption (BSEC), defined on an energy basis, for CN45+MO did not differ significantly from those for CN45+EHN or D100. These effects are due to the enhancement of low temperature reactions brought by oxygenated fuels such as MO. Moreover, MO can reduce maximum pressure rise rates associated with engine noise and vibration observed in case of CN45.

In summary, MO is a useful CN improver for light-duty diesel engine.

Introduction

Global warming and fossil depletion issues are of increasing concern in the transportation sector. To help alleviate these problems, diesel engines with high-efficiency and low fuel-consumption are being introduced in the worldwide market. It is predicted that some portion of diesel fuels will be derived from ordinary heavy oil or unconventional oil to meet the increased diesel fuel demands in many areas in the near future. Such fuels generally have lower cetane number (CN) than conventional diesel as well as higher contents of aromatic components and sulfur [1].

The use of low CN diesel will increase the ignition delay of diesel combustion itself. Therefore, engine emissions will be significantly increased [2, 3]. Moreover, the use of low CN diesel has adverse effects on pilot injection combustion and fuel consumption [4]. It is therefore necessary to treat such diesels with additives to increase their CN values. 2-Ehtyl-Hexyl-Nitrate (EHN) is widely used as a CN improver because of its low cost and high effectiveness [5]. Di-tertiary-butyl-peroxide (DTBP) is also used in some cases because it does not contain nitrogen. Both EHN and DTBP form highly reactive alkoxy radicals that in turn generate fuel radicals and thereby accelerate the ignition process at low temperatures [6,7]. Biodiesel fuels (BDFs) also have the potential to serve as CN improvers in light-duty diesel engines based on their ability to promote low temperature oxidation reactions and reduce the ignition delay [8].

BDFs have attracted considerable interest over the last few decades as potential substitutes for fossil fuels. In addition to being renewable fuels derived from vegetable oils, BDFs have the advantage that they can be blended with conventional diesel fuel without having to change engine design parameters. Furthermore, BDF is useful to reduce CO₂ emissions through the life cycle as well as to significantly reduce PM emissions [9].

The objective of the present study was to viability of FAME as a CN improver for a light-duty diesel engine. BDF consists of several fatty acid methyl esters (FAMEs) such as methyl palmitate (C₁₇H₃₄O₂), methyl oleate (C₁₉H₃₆O₂), methyl linoleate (C₁₉H₃₄O₂) and so on. We selected methyl oleate (MO) as a test fuel that is representative of the major constituents of many BDFs [10,11].

The engine tested in this study was equipped with an ECU, allowing modifying not only exhaust gas recirculation (EGR), injection pressure control and pilot injection combustion but also premixed charged compression ignition (PCCI) combustion. The effects of MO on diesel combustion have previously been investigated under similar conditions [12, 13, 14, 15, 16], revealing that optimal engine operating parameters with this fuel blend at low engine speeds and loads requires a comparatively high EGR ratio, low injection pressure, and pilot injection. Under these conditions, soot and NO_x emissions are both reduced without adverse effects on fuel consumption [8]. In the present study, we evaluated MO as a CN improver in a blend with a low CN diesel, and compared its performance to that of EHN, with the aim of optimizing the engine operating parameters in order to achieve a high thermal efficiency while also reducing emissions.

Experimental Setup

Test Engine

The engine used in the present study was a production turbocharged 2.2 L DI diesel engine (Honda CRV 2.2L I-CTDI-N22A2/2008) designed for passenger cars in compliance with the Euro 4 emission regulations. The main specifications of the engine are presented in Table 1.

The engine and measuring apparatus were configured as shown in Fig.1. Fuel consumption was measured using an FX-1100 gravity flow sensor developed by ONO SOKKI. Exhaust gases were sampled at the engine exhaust outlet before the diesel oxidation catalyst (DOC) using a MEXA 1500DEGR, while an AVL 415SE smoke meter was used to measure the filter smoke number and convert the measured values to soot emissions (g/kWh) by Equation (1). The intake gas composition was also measured to calculate the EGR ratio.

$$Soot = \frac{Soot_m}{1000} \times \frac{Q_{air}}{P} \quad (1)$$

where Soot is the result of Soot emission (g/kWh), Soot_m is the measured data of Soot emission (mg/m³), Q_{air} is the intake air quantity (m³/h), and P is the engine output power.

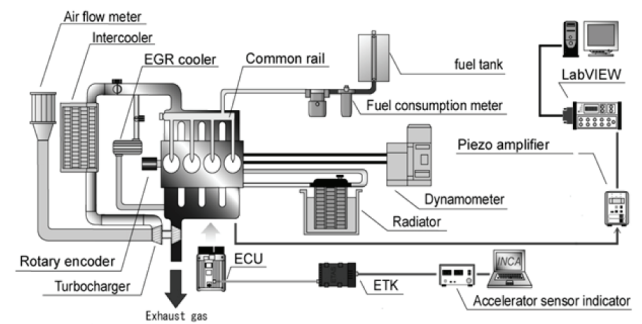


Figure 1. Experimental setup

Table 1. Engine specifications

Item	Specifications
Engine type	Water-cooled, 4-stroke-cycle, DI diesel engine
Valve train	DOHC 4 valves
Cylinder	L4
Bore x Stroke mm	85.0 x 97.1
Displacement cc	2204
Compression ratio	16.7
Fuel supply	Common-rail (Max.160 MPa) Nozzle cone angle 153° Φ 0.133mm×6 holes
EGR system	HP-Hot-EGR / HP-Cooled-EGR
Boost control	VNT turbocharger
Swirl control	Continuously variable (Swirl ratio: 1.2-4.4)
Max. power kW/rpm	103/4000
Max. torque Nm/rpm	340/2000

Table 2. Composition and properties of fuels

Item		D100	CN45	MO100	CN45+MO	CN45+EHN
Density (@ 15°C) g/cm ³		0.8318	0.8485	0.8740	0.8587	0.8442
Viscosity (@30°C) mm ² /s		3.212	3.116	4.041	4.041*	2.893
CHO mass %	C	86.0	86.7	76.9	82.8	86.9
	H	13.7	13.2	12.1	12.8	13.0
	O	0.0	0.0	10.8	4.4	0
Aromatic vol. %		18.8	31.4	0.0	18.84	30.0
Lower heating value kJ/kg		42970	42490	36980	40286	42740
Sulfur mass ppm		6	4	0	2.4	4
CN		58.3	45.1	66.1	-	51.2

During the tests, all the engine control parameters were controlled by ETAS ECU program INCA 5.4, which was directly connected to the engine ECU. For all operating conditions, the 50% mass fraction of burned fuel (MFB50) was kept at the same crank angle for the different fuels at same engine speed and torque conditions by the injection strategy control for comparison. For this control, the piezo-type pressure transducer (6055CSP120 by KISTLER) was inserted into the glow plug in cylinder No.1, which was used for the combustion control, was equipped to measure the in-cylinder pressure.

The swirl ratio was controlled by using a swirl control valve, and the optimal swirl ratio was determined for each base operating condition using D100. The same swirl ratio, injection pressure, fresh air quantity and boost pressure were applied to other fuels.

Fuels

The following fuel compositions were used:

D100: a standard ultra low sulfur diesel fuel compliant with the JIS#2 regulations (sulfur content < 10 ppm) and high CN.

CN45: a low CN diesel with a CN of 45.

MO100: 100% methyl oleate (C₁₉H₃₆O₂). MO is representative of major constituents of many BDFs.

CN45+MO: a blend of MO100 and CN45. The addition of MO to low CN diesel can potentially reduce CO₂ emission and improve the fuel's CN.

CN45+EHN: a blend of CN45 and the CN improver EHN (0.15% by mass), which has a CN close to that of general diesel fuel.

The properties of the tested fuels are listed in [Table 2](#).

Viscosity value marked with * is estimate based on literature results [17]. The other values for CN45+MO were calculated from the known properties of CN45 and MO as shown in [Equation \(2\)](#).

$$Q_m = \sum_i \sum_j y_i y_j Q_{ij} \quad (2)$$

where Q_m is the property of the blend, Q_{ij} is the mean property, and y_i and y_j are the volumetric ratios of the pure components.

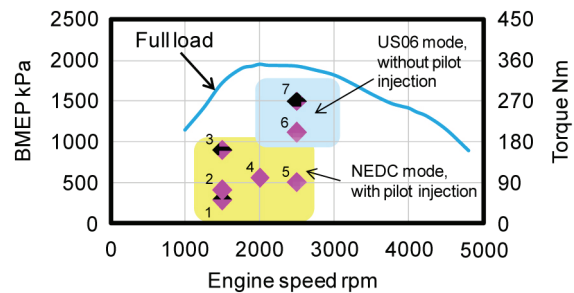


Figure 2. Operating conditions

Although it is possible that binary interactions between CN45 and MO could affect the properties of the blend, their impact was assumed to be negligible [18].

Table 3. Engine operating conditions used to evaluate the performance of the different fuels

Exp. No.	Engine speed rpm	Torque Nm	BMEP kPa	Boost Pressure kPa[g]	EGR ratio %	Swirl ratio	MFB50 deg.ATDC	Inj.press. MPa	Pilot Inj. mg/st.
1	1500	50	300	11.0	43.5	3.2	8.5	60	1.57
2	1500	72	410	11.8	39.0	3.4	9.0	70	1.67
3	1500	160	906	25.5	7.2	2.6	11.2	110	1.32
4	2000	100	575	22.5	28.0	2.8	11.0	105	2.29
5	2500	90	515	36.6	29.0	2.5	13.2	125	2.42
6	2500	200	1130	96.5	14.5	2.1	13.5	140	-
7	2500	270	1539	110.0	6.5	1.6	11.7	150	-

Experimental Results

In order to determine the effects of the different fuels on combustion at a wide range of engine speeds and torques, seven steady-state engine operating conditions typically encountered in the NEDC and US06 modes were selected for experimental evaluation as shown in [Table 3](#) and [Figure 2](#). Prior to the engine tests, the calibration test was conducted using D100 without any additional change in control on injection algorithm in order to obtain baseline ECU controlled data (such as injection pressure, fresh air quantity, boost pressure, swirl ratio, etc.) in each operating condition. As shown in [Table 3](#), the typical NEDC mode conditions for intermediate and low loads (experiments No.1~5) involve pilot injection, while the typical US06 mode for high load (experiments No.6, 7) do not use pilot injection. When other fuels were used, the torque and 50% mass fraction burned (MFB50) values were maintained to be the same as those in the case of D100 by changing injection fuel quantity and injection timing, with all of the other ECU outputs being held constant.

Testing the Effect of Varying the MO Admixture

Because the general CN improver such as EHN can enhance combustion even in blends where it is a relatively minor component (below 1% by mass) [19], and the current regulations of many countries stipulate that the BDF content of blended diesel fuels should not exceed 5% [20], we performed experiments using several blends of MO with CN45 in which the MO content ranged from 5% to 40% in order to further evaluate the utility of MO as a CN improver. These studies were performed under conditions of low load and engine speed (1500rpm, 72Nm) or intermediate load and engine speed (2000rpm, 100Nm) because there were significant differences between the combustion processes for CN45 and CN45+MO under these conditions. The details of the experimental conditions are listed in [Table 3](#) (conditions 2 and 4).

The rate of heat release profiles generated in these experiments (as shown in [Figure 3](#)) showed that MO can enhance combustion at low temperatures even when it accounts for only 5% of the fuel by mass. In fact, the degree of MO blending had relatively little effect on the results obtained.

[Figure 4](#) clearly shows that the trends in soot and NO_x experiments were similar for both sets of operating conditions examined in these experiments. Soot emissions increased when using the 5% MO blend because this fuel favored low temperature combustion, reducing the ignition delay and the duration available for fuel-air mixing. Both soot and NO_x emissions declined as the degree of MO blending increased, the reasons would be discussed in the section on the engine operating conditions experiments.

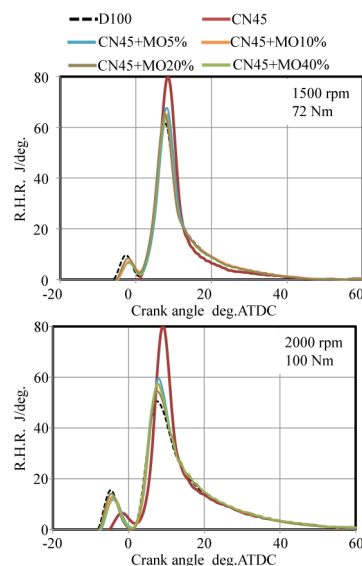


Figure 3. Effects of varying the degree of MO admixture on the rate of heat release

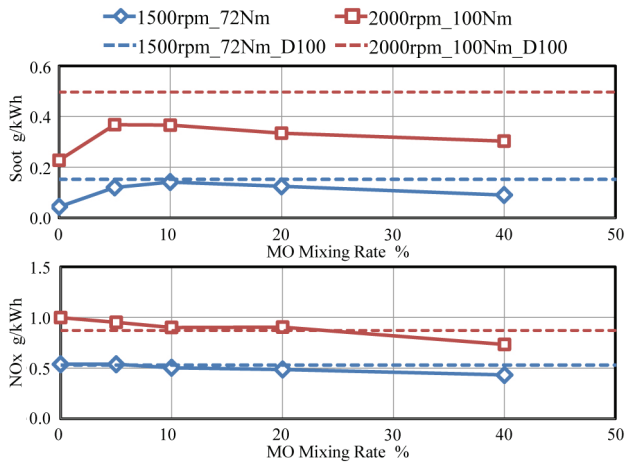


Figure 4. Effects of varying the degree of MO admixture on emissions (Soot & NOx)

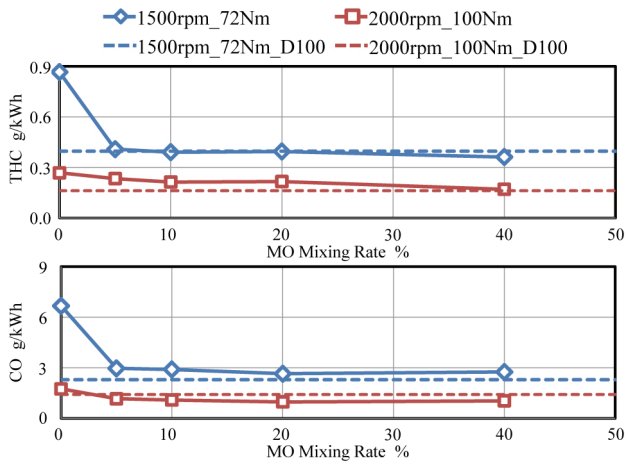


Figure 5. Effects of varying the degree of MO admixture on emissions (THC & CO)

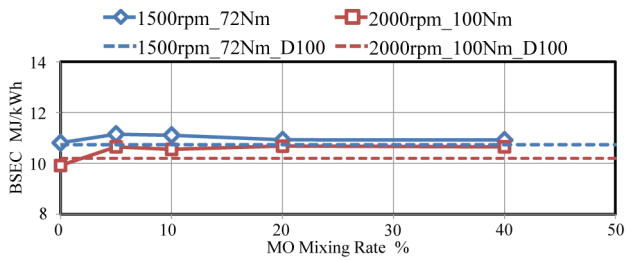


Figure 6. Effects of varying the degree of MO admixture on fuel consumption (BSEC)

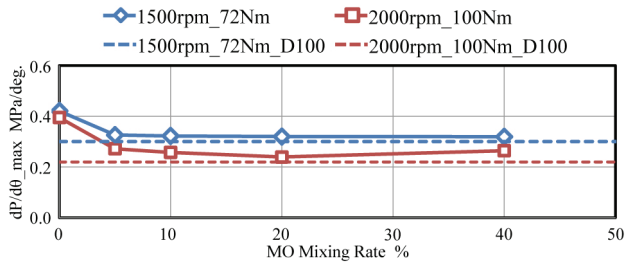


Figure 7. Effects of varying the degree of MO admixture on the maximum in-cylinder pressure rise rate

The Effects of Combustion under Different Engine Operating Conditions

Table 4. Effects of fuels on premixed timing

Exp.	Fuel	Premixed timing ms	Inj. Timing deg. ATDC
1	D100	0.21	-4.8
	CN45	0.60	-7.5
	CN45+MO	0.21	-5.1
	CN45+EHN	0.20	-4.8
2	D100	-0.05	-3.6
	CN45	0.33	-7.0
	CN45+MO	-0.02	-4.0
	CN45+EHN	-0.02	-3.6
3	D100	-0.10	-1.7
	CN45	-0.09	-1.9
	CN45+MO	-0.13	-1.9
	CN45+EHN	-0.10	-1.7
4	D100	-0.51	-5.0
	CN45	0.23	-5.5
	CN45+MO	-0.34	-5.5
	CN45+EHN	-0.42	-5.0
5	D100	0.28	-6.4
	CN45	0.36	-7.0
	CN45+MO	0.29	-6.4
	CN45+EHN	0.29	-6.4
6	D100	-0.28	-9.3
	CN45	-0.21	-9.0
	CN45+MO	-0.30	-9.3
	CN45+EHN	-0.27	-9.3
7	D100	-0.55	-12.3
	CN45	-0.54	-12.3
	CN45+MO	-0.60	-12.3
	CN45+EHN	-0.54	-12.3

Increasing the degree of MO blending reduced unburned fuel emissions under both sets of operating conditions, as shown in Figure 5. This is because the local equivalence ratio was reduced when the oxygen content of the fuel increased. This result also demonstrates that MO promotes oxidation reactions even when it accounts for only 5% of the fuel by mass. The presence of MO increased the BSEC relative to that for CN45 alone, but it did not increase further as the degree of MO blending rose (as shown in Figure 6). Blending MO reduced the maximum cylinder pressure rise rate but there were no significant differences between the different MO-containing blends with respect to this parameter (as shown in Figure 7).

These findings demonstrate that MO can enhance combustion and reduce ignition delay even at a blending rate of only 5%. In addition, under high levels of MO blending, MO can not only reduce emissions such as Soot, NOx and unburned fuel emissions, but also reduce the maximum cylinder pressure rise rate. Then the high MO mixing rate can reduce CO₂ emission. In this study, we chose 40% (by mass) blend of MO with CN45 for reduce CO, THC, NOx, Soot and CO₂ emissions and improve fuel's CN simultaneously.

D100, CN45, CN45+MO (a 40% (by mass) blend of MO100 with CN45) and CN45+EHN were used in this part. The engine operating conditions in this part were seven steady-state conditions typically encountered in the NEDC and US06 modes as shown in Table 3 and Figure 2.

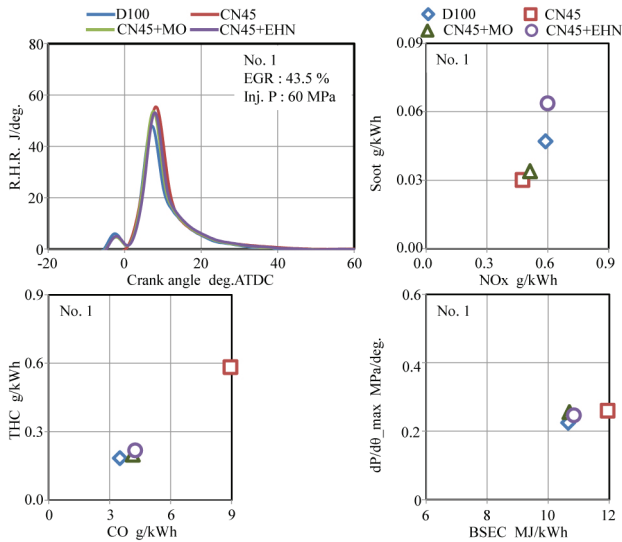


Figure 8. Rate of heat release, emissions (Soot, NOx, THC and CO), fuel consumption (BSEC) and the maximum cylinder pressure rise rate results for each fuel under the No.1 (1500rpm, 50Nm) experimental condition

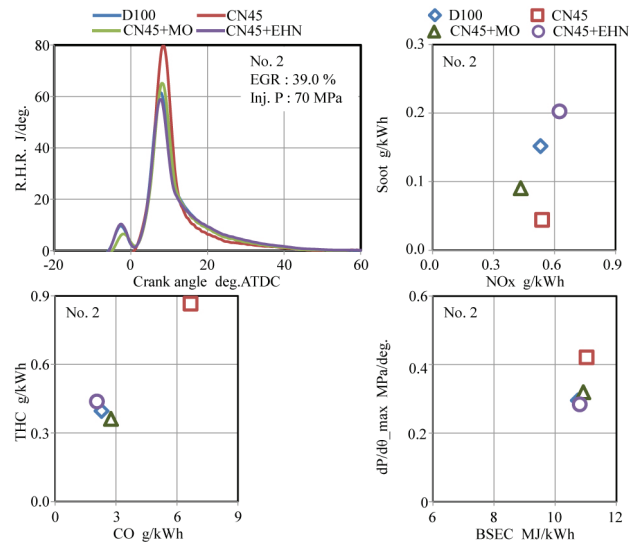


Figure 9. Rate of heat release, emissions (Soot, NOx, THC and CO), fuel consumption (BSEC) and the maximum cylinder pressure rise rate results for each fuel under the No.2 (1500rpm, 72Nm) experimental condition

In this study, the premixed timing was defined the time between the end of injection signal and 5% of MFB. The premixed timings for each fuel were shown in Table 4. The minus data mean that no premixed timing happened in that condition.

Under conditions of low load (load rate lower than 25%) and low engine speed (as shown in Figures 8 and 9), the pilot combustion did not occur when using CN45, and the premixed timing was increased as shown in Table 4. Therefore, combustion using CN45 produced lower soot emissions than were observed with normal diesel (D100). In addition, the high EGR ratio reduced the combustion temperature, so NOx emissions were not increased. However, unburned fuel emissions (CO & THC) increased significantly when using CN45 because of the low in-cylinder temperature and equivalence ratio. Then, the combustion efficiency was decreased. Thus, the brake specific energy consumption (BSEC) was worse with CN45.

In addition, the maximum cylinder pressure rise rate increased when using CN45, leading to elevated levels of engine noise and vibration due to the increased premixed combustion. Conversely, pilot combustion occurred without issue when using either CN45+EHN or CN45+MO, which reduced the ignition delay. The combustion processes observed using either of the blended fuels were similar to that for D100. However, CN45+EHN increased soot emission significantly due to this fuel's high content of aromatic components. In case of CN45, the increased ignition delay was longer than other fuels, so the premixed timing of air and fuel was increased. The longer ignition delay can increase the mixing timing of fuel and air, resulting in lower soot emission. This is the reason for lower soot emission level with CN45.

The CN45+MO blend, which uses MO as a CN improver, produced significantly lower soot emission than D100. This is because MO is an oxygenated fuel and so can reduce soot particle nucleation and surface growth [21]. NO_x emission was also reduced by using CN45+MO. It has previously been reported that oxygenated fuels can cause increases in NO_x emission because the oxygenated fuel enhanced the Soot oxidation reaction which is exothermic reaction that increase the combustion temperature [22]. However, it was also argued that the use of high EGR ratios with high equivalence ratios and low in-cylinder temperatures during MO combustion would reduce soot formation and therefore reduce the impact of Soot oxidation reactions. This reduced level of soot oxidation would in turn reduce the combustion temperature, leading to lower NO_x emission. The emissions of CO and THC along with the BSEC and the maximum in-cylinder pressure rise rate observed with D100 were similar to those for CN45+EHN and CN45+MO because all three fuels generate similar combustion process. These results identify MO as a useful CN improver that can reduce emissions simultaneously under low load and low engine speed conditions.

Under condition of high load (load rate higher than 50%) and low engine speed (as shown in [figure 10](#)), all of the tested fuels yielded similar rates of heat release. This happened because the effects of ignition were weak due to the high in-cylinder temperatures and the premixed timings were no significant difference as shown in [Table 4](#). However, the ignition delay for pilot combustion was longer with CN45 than with the other tested fuels. In addition, CN45 combustion produced higher NO_x, CO and THC emissions. However, CN45+EHN and CN45+MO generated NO_x emission that was very similar to those for D100. Moreover, the maximum in-cylinder pressure rise rate and BSEC were similar for all of the tested fuels. Overall, there were no significant differences between the fuels under conditions of high load and low engine speed.

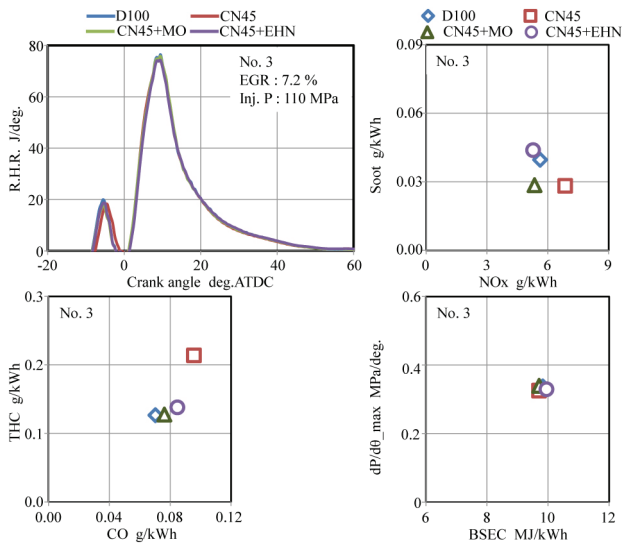


Figure 10. Rate of heat release, emissions (Soot, NO_x, THC and CO), fuel consumption (BSEC) and the maximum cylinder pressure rise rate results for each fuel under No.3 (1500rpm, 160Nm) experimental condition

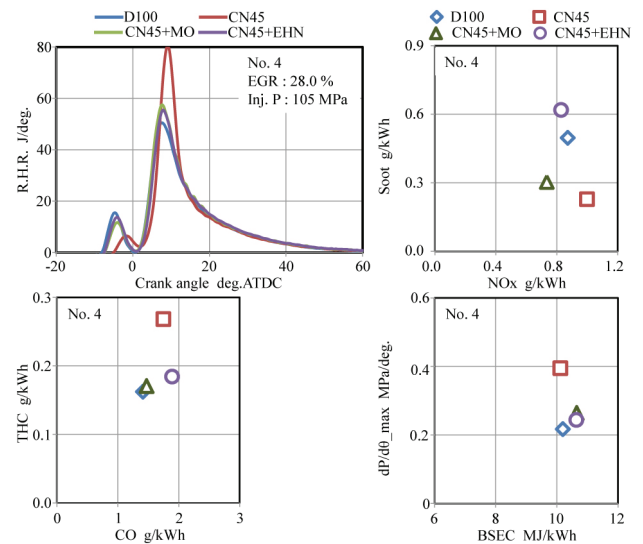


Figure 11. Rate of heat release, emissions (Soot, NO_x, THC and CO), fuel consumption (BSEC) and the maximum cylinder pressure rise rate results for each fuel under the No.4 (2000rpm, 100Nm) experimental condition

At intermediate load (load rate is 30%) and intermediate engine speed (as shown in [Figure 11](#)), the use of CN45 increased the ignition delay for both pilot combustion and main combustion. In addition, the heat release during pilot combustion with CN45 was lower than with other fuels, so only a fraction of pilot injection fuel was burned. The soot emission was significantly reduced (relative to the case for D100) under these conditions, but NO_x emission was increased. This happened because the use of CN45 increased the premixed timing as shown in [Table 4](#), which in turn increased the combustion temperature and hence the increased of NO_x emission. Moreover, due to the long ignition delay, the combustion was premixed combustion although pilot injection was employed. As a result, the maximum cylinder pressure rise rate was increased and there were high levels of unburned fuel emissions. The use of either CN45+EHN or CN45+MO significantly improved the combustion process, making it very similar to that achieved with D100. However, whereas combustion with CN45+EHN produced high soot emission, CN45+MO yielded reduced soot emission for the same reasons that applied in the low load and low engine speed case. The CO and THC emissions generated using CN45+EHN and CN45+MO were similar to those for D100, as were the BSEC and the maximum in-cylinder pressure rise rate. Under these conditions, MO was a more useful CN improver than EHN, yielding lower emissions at intermediate load and engine speed.

Under condition of low load (load rate is 25%) and high engine speed (as shown in [figure 12](#)), the use of CN45 increased the ignition delay for both pilot combustion and main combustion, as was observed for the intermediate load and engine speed case. However, the low load and high engine speed condition produced a greater heat release for the pilot combustion when using CN45 because the high engine speed increased the in-cylinder temperature and pressure. Consequently, the maximum cylinder pressure rise rate observed with CN45 was

similar to that for the other fuels. The results achieved with CN45+EHN and CN45+MO were similar to those for the low load and low engine speed conditions.

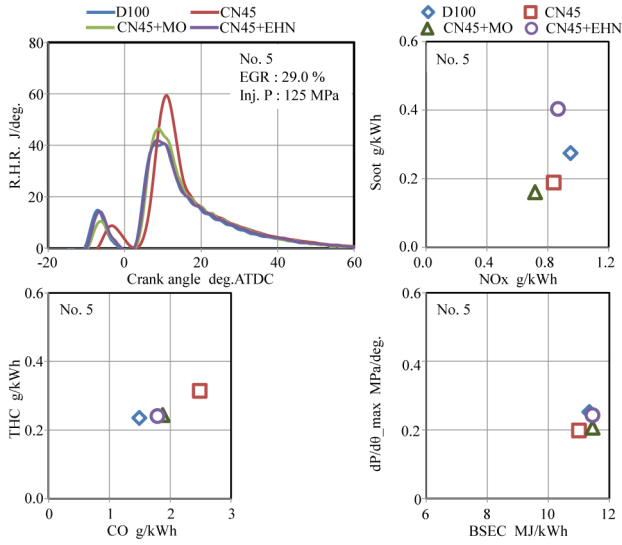


Figure 12. Rate of heat release, emissions (Soot, NOx, THC and CO), fuel consumption (BSEC) and the maximum cylinder pressure rise rate results for each fuel under the No.5 (2500rpm, 90Nm) experimental condition

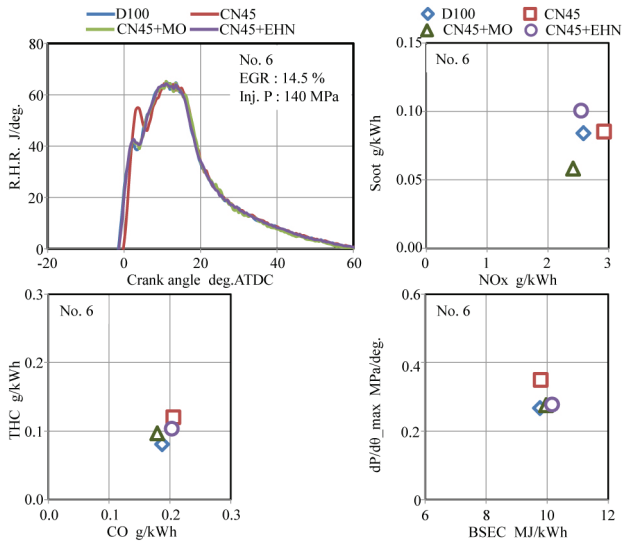


Figure 13. Rate of heat release, emissions (Soot, NOx, THC and CO), fuel consumption (BSEC) and the maximum cylinder pressure rise rate results for each fuel under the No.6 (2500rpm, 200Nm) experimental condition

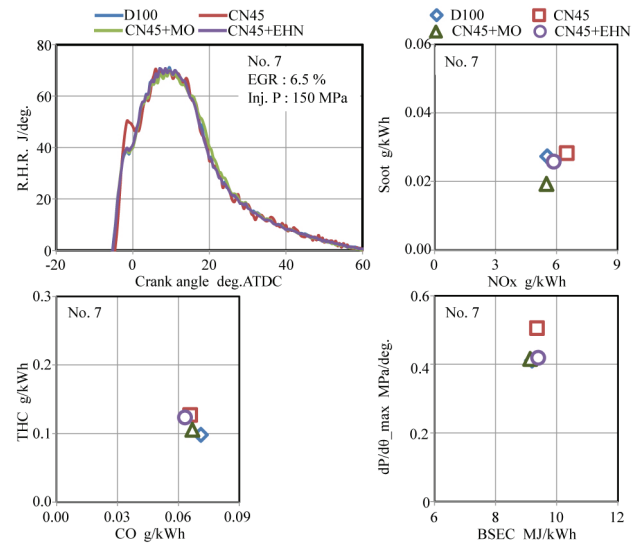


Figure 14. Rate of heat release, emissions (Soot, NOx, THC and CO), fuel consumption (BSEC) and the maximum cylinder pressure rise rate results for each fuel under the No.7 (2500rpm, 270Nm) experimental condition

At high load (load rate is higher than 50%) and high engine speed (as shown in Figures 13 and 14), the first phase of combustion was higher with CN45 because of the high percentage of aromatic composition. Subsequently, there were no significantly differences between the fuels under high load and high engine speed conditions, making this case similar to that involving high load and low engine speed.

Overall, the results of the 7 point test indicate that there is a need to increase the CN of the CN45 diesel in order to achieve good performance under low load conditions. Moreover, MO was a more useful CN improver than EHN in terms of it can improve combustion and reduce emissions simultaneously. Under high load conditions, the tested fuels all provided similar combustion performance and emissions.

Testing the Effect of Varying the EGR Ratio

External exhaust gas recirculation (EGR) is a well-known method for reducing NOx emissions from diesel engines, and offers the possibility of decreasing the temperature during combustion [23]. However, the use of high EGR ratios has been shown to increase soot emission in some cases [16]. As demonstrated in the preceding section, high EGR ratios also have adverse effects on combustion when using low CN fuel, which can be alleviated by using a CN improver additive; MO is more useful for this purpose than EHN. To further evaluate the usefulness of MO as a CN improver, we performed combustion experiments adopting EGR ratios ranging from 2% to 43% in order to determine its effects on the combustion process and emissions. The detail experimental conditions used are presented in Table 5.

Table 5. EGR ratio operating conditions

Rotation speed	rpm	1500
Torque	Nm	72
BMEP	kPa	410
Fuel injection pressure	MPa	70
Swirl ratio		3.4
MFB 50% deg.ATDC		9.0
Pilot injection	mg/st.	1.67
EGR ratio	%	43, 40, 39, 36, 31, 27, 20, 16, 2
Fresh air	mg/st.	280, 290, 305, 320, 350, 380, 420, 450, 550

In the case of CN45 combustion did not occur when using EGR ratios above 40%, and MO did not enhance combustion when using a ratio of 43%. This is because the oxygen content was so low on high EGR ratio condition [24, 25]. When using low EGR ratios (as shown in Figure 15), pilot injection fuel was burned efficiently and the ignition occurred during main combustion in the same way as for other fuels due to the low equivalence ratio under these conditions.

The soot and NOx emissions for each tested fuel are shown in Figure 16. The soot emission tendencies for D100 and CN45+MO are very similar: in both cases, increases in the EGR ratio caused increased soot emissions. However, in the case of CN45, when the EGR ratio was increased above 30%, soot emissions began to fall because CN45 does not burn efficiently at high equivalence ratios and low temperatures. Consequently, premixed combustion occurs with CN45 under these conditions, which can reduce soot emissions. There were no significant differences between the tested fuels with respect to NOx emissions at any EGR ratio. In general, NOx emissions declined as the EGR ratio increased.

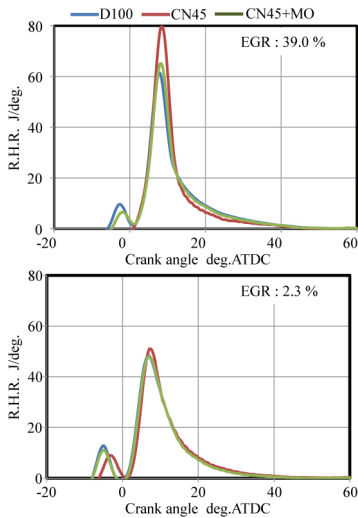


Figure 15. Effects of EGR ratio on rate of heat release for each fuel

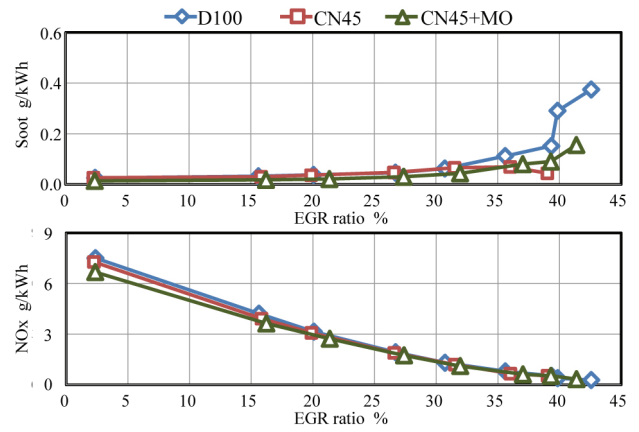


Figure 16. Effects of EGR ratio on emissions (Soot & NOx) for each fuel

The relationship between the EGR ratio and unburned fuel emissions is shown in Figure 17. D100 and CN45+MO behaved similarly in that unburned fuel emissions rose as the EGR ratio increased. The unburned fuel emissions for CN45 were higher than those for the other fuels at all EGR ratios; this trend was especially pronounced at high EGR ratios.

Emissions of unburned fuel and soot increased with the EGR ratio, indicating a decrease in the efficiency of combustion. Therefore, as the EGR ratio increased, the BSEC also increased for all fuels. This behavior was observed for all of the tested fuels, as shown in Figure 18.

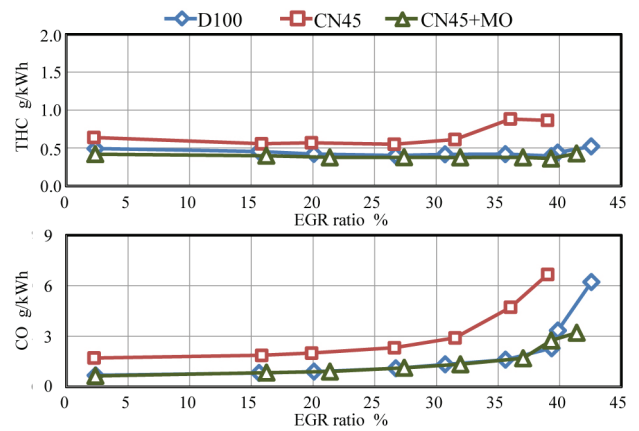


Figure 17. Effects of EGR ratio on emissions (THC & CO) for each fuel

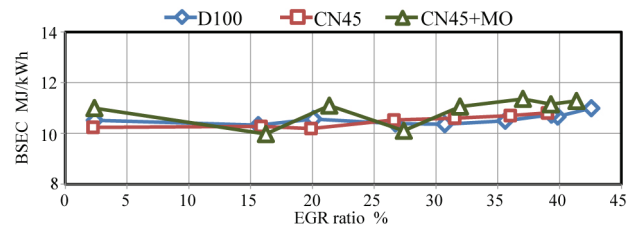


Figure 18. Effects of EGR ratio on fuel consumption (BSEC) for each fuel

The effect of varying the EGR ratio on the maximum cylinder pressure rise rate, which was used as a measure of engine noise and vibration, is shown in Figure 19. When using CN45, high EGR ratios (>30%) increased the maximum cylinder pressure rise rate because under such conditions, the pilot injection fuel did not burn and so the fuel injected during the pilot injection mixed with the main injection fuel and the two burned simultaneously. This resulted in rapid combustion, causing significant engine noise and vibration.

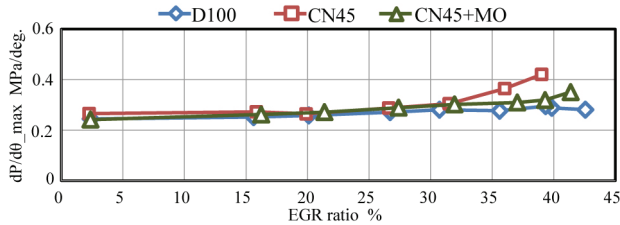


Figure 19. Effects of EGR ratio on the maximum cylinder pressure rise rate for each fuel

There were no significant differences between the fuels with respect to emissions when using low EGR ratios. However, high EGR ratios, which are aimed at low emissions of NOx, caused an increase in unburned fuel emissions and the maximum cylinder pressure rise rate when burning CN45. Under such conditions, the use of MO as a CN improver makes it possible to reduce engine noise and vibration while maintaining a high EGR ratio and low emissions. However, MO stops being useful once the EGR ratio exceeds 40%.

Testing the Effect of Varying the Injection Pressure

High pressure injection can enhance the atomization and evaporation of the fuel spray and also reduce soot emissions [14,15]. We conducted experiments using injection pressures ranging from 50 MPa to 160 MPa in order to determine how this affects the impact of MO as a CN improver and its ability to improve combustion and emissions characteristics. The conditions used in these studies are shown in Table 6.

Table 6. Experimental conditions used in the injection pressure experiments

Rotation speed	rpm	1500
Torque	Nm	72
BMEP	kPa	410
Fuel injection pressure	MPa	50, 70, 90, 120, 160
Swirl ratio		3.4
MFB 50%	deg.ATDC	9.0
Pilot injection	mg/st.	1.67
EGR ratio	%	39
Fresh air	mg/st.	305

The effects of varying the injection pressure on the rate of heat release are shown in Figure 20. When using CN45, the ignition delay did not vary appreciably with the injection pressure. For CN45+MO and D100, increases in the injection pressure led to shorter injection durations by promoting increased fuel spray atomization and evaporation. This also increased the amount of time available for fuel-air mixing [15]. Consequently, high injection pressures created premixed-like combustion conditions for these fuels. However, the increased spray atomization and evaporation at high injection pressures also reduced the in-cylinder temperature. Therefore, the pilot combustion rate declined when high injection pressures were used with D100. In contrast, the pilot combustion rate for CN45+MO did not depend strongly on the injection pressure because the MO facilitated low temperature combustion [8]. In addition, the rate of heat release during the main combustion phase was somewhat lower for CN45+MO than for D100.

The effects of varying the injection pressure on soot and NOx emissions are shown in Figure 21. For all fuels, soot emissions decreased as the injection pressure increased. CN45 and CN45+MO yielded lower soot emissions than D100 at all injection pressures, but the trend was most pronounced when the injection pressure was low. NOx emissions increased with the injection pressure when using D100 or CN45 because this resulted in almost premixed combustion conditions with high combustion temperatures. However, high injection pressures reduced NOx emissions when using CN45+MO because pilot combustion was more intense under these conditions. Consequently, the rate of heat release during the main combustion phase was reduced.

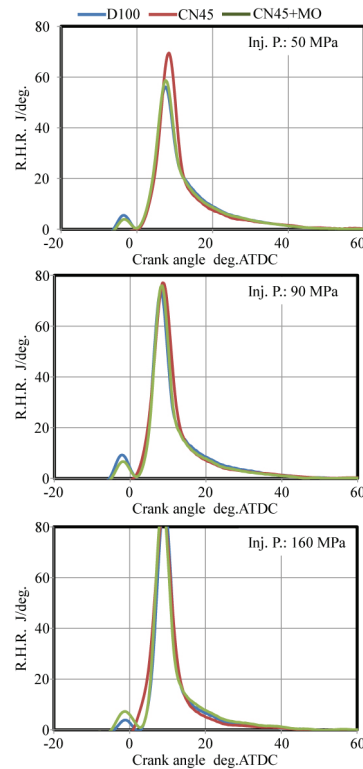


Figure 20. Effects of injection pressure on rate of heat release for each fuel

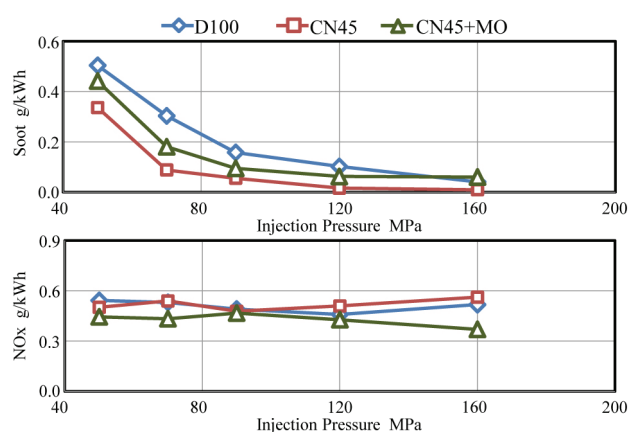


Figure 21. Effects of injection pressure on emissions (Soot & NOx) for each fuel

The effect of varying the injection pressure on unburned fuel emissions is shown in Figure 22. In all cases, raising the injection pressure increased unburned fuel emissions. However, while D100 and CN45+MO yielded similar unburned fuel emissions, those for CN45 were comparatively high. All of the tested fuels generated similar BSEC values at the tested injection pressures, as shown in Figure 23.

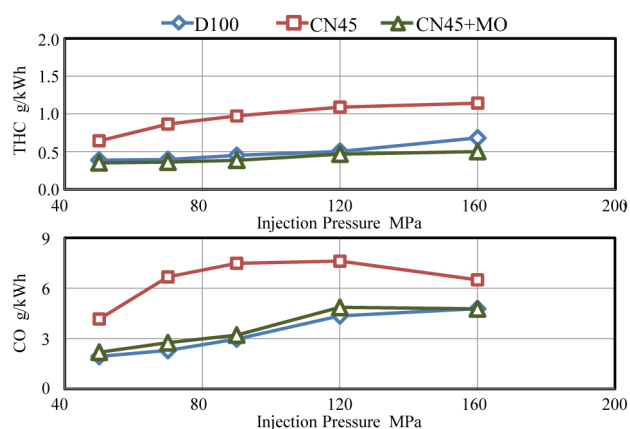


Figure 22. Effects of injection pressure on emissions (THC & CO) for each fuel

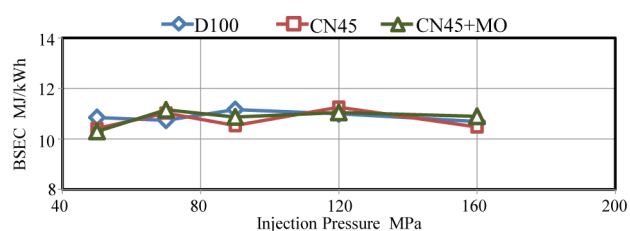


Figure 23. Effects of injection pressure on fuel consumption (BSEC) for each fuel

As shown in Figure 24, the maximum cylinder pressure rise rate increased with the injection pressure for all fuels because this reduced the injection timing and therefore increased the time available for fuel-air mixing. However, when low injection pressures were used, CN45 yielded a higher maximum cylinder pressure rise rate than the other tested fuels.

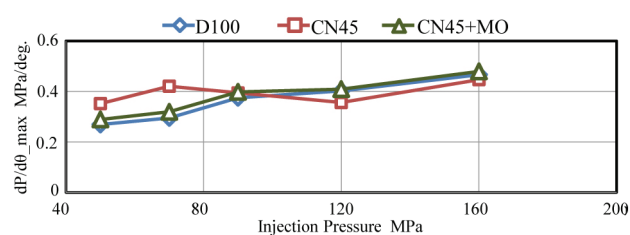


Figure 24. Effects of injection pressure on the maximum cylinder pressure rise rate for each fuel

These results demonstrate that MO is capable of reducing emissions regardless of the injection pressure, although its beneficial effects are most pronounced under low injection pressure conditions.

PCCI Combustion Test

Experiments using early injection were conducted to evaluate the effects of premixed charge compression ignition (PCCI) combustion as a means of reducing soot emissions during premixed combustion and NOx emissions at high EGR ratios [26]. However, the use of early injection made the ignition timing difficult to control, and the high rate of premixed combustion caused increased engine noise and vibration [27]. In this study, we used a high injection pressure and swirl ratio to enhance the mixing of fuel and air, near the top dead center in order to control the ignition timing [28]. The conditions used in these studies are specified in Table 7.

Table 7. PCCI operating conditions

Rotation speed	rpm	1500
Torque	Nm	72
BMEP	kPa	410
Fuel injection pressure	MPa	70
Swirl ratio		3.4
MFB 50% deg.ATDC		9.0
Pilot injection	mg/st.	-
EGR ratio	%	39
Fresh air	mg/st.	305

The use of MO advanced the ignition timing slightly but yielded results that were otherwise similar to those observed with D100, as shown in Figure 25. CN45 and CN45+MO significantly lowered soot emissions than D100, with negligible increases in NOx emissions. On the other hand, PCCI combustion produced significantly higher unburned fuel emissions (CO and THC) than conventional combustion with all fuels, and especially with CN45. PCCI also increased the BSEC and the maximum cylinder pressure rise rate as a result of the increased unburned fuel emissions, reducing combustion efficiency.

These results show that while PCCI combustion generates higher unburned fuel emissions (CO and THC) than conventional combustion, there are no significant differences between the tested fuels with respect to their performance in this mode.

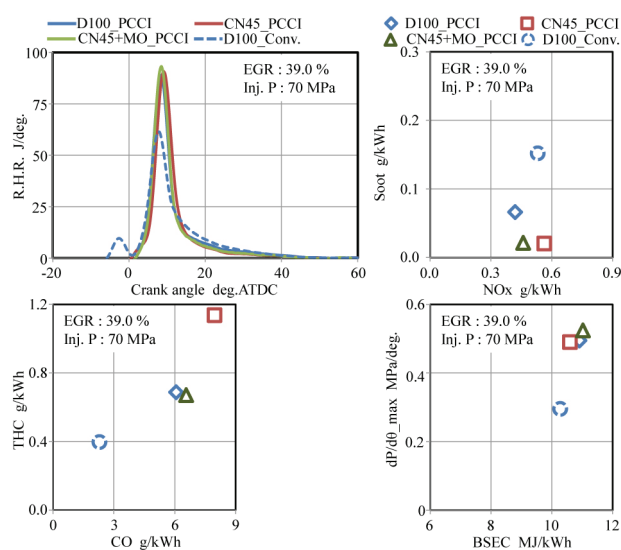


Figure 25. Effects of PCCI combustion on the rate of heat release, emissions, fuel consumption (BSEC) and maximum cylinder pressure rise rate for each fuel

Conclusions

This work focused on the potential of biodiesel fuels (BDFs) as CN improvers for use in light duty diesel engines. MO was selected as an oxygenated fuel that is representative of typical BDF components. All experiments were conducted in a diesel engine that was designed for use in passenger cars, has a displacement of 2.2 L, and complies with the Euro 4 emissions regulations. Engine tests were conducted using a low CN diesel (CN45), a 40% blend of MO with CN45 (CN45+MO), a blend of CN45 with the general CN improver EHN (CN45+EHN), and neat JIS#2 diesel (D100). A reaction mechanism that explains the ability of MO to facilitate ignition was proposed. In addition, results were obtained showing that:

1. MO can enhance combustion and reduce ignition delays even when it only accounts for 5% of the fuel (by mass). In addition to reducing emissions of soot, NOx, and unburned fuel, fuels containing high levels of MO also reduce the maximum cylinder pressure rise rate.
2. It is important to use a CN improver when using low-CN diesel under low load conditions. MO is more useful than EHN for this purpose, allowing for better combustion and lower emissions. However, the tested fuels all offered similar performance under high load conditions.
3. There were no significant differences among the tested fuels with respect to emissions under low EGR ratio conditions. However, high EGR ratios tend to yield low emissions of NOx and unburned fuel along with high maximum cylinder pressure rise rates. These tendencies were worsened when using CN45 as the fuel. The addition of MO as a CN improver reduced emissions and engine noise/vibration under these conditions. However, MO was only useful for

this purpose as long as the EGR ratio was below 40%.

4. MO reduced emissions at all tested injection pressures, but its effects were especially pronounced when using low injection pressures.
5. All of the fuels offered similar performance during PCCI combustion. However, CN45 produced higher unburned fuel emissions than the other tested fuels.

References

1. Japan Petroleum Energy Center, http://www.pecj.or.jp/japanese/jpecnews/jpecnews_H19.html, 2009, 11
2. Ladommatos N., Parsi M. and Knowles A., "The effect of fuel cetane improver on diesel pollutant emissions", *Fuel*, Vol. 75, No. 1, P8-14, 1996
3. chaluvadi Nihanth, Vijay P., Puli R., dadi Yogeswar, Pavan CH. V. V. N., "Diesel Engine Performance Improvement by Using Cetane Improver", *International Journal of Engineering and Innovative Technology*, Vol. 2, Issue 10, P179-182, 2013, 4
4. Shudo T., Nakajima T., Ogawa H. and Suzuki K., "Combustion Control by Pilot Fuel Injection for Utilizing Low Cetane Number Fuels in Diesel Engines", *The Japan Society of Mechanical Engineers*, Vol. 73-733, P180-186, 2007, 9
5. Rode A. B., Chung K., Kim Y. and Hong I. S., "Synthesis and Cetane-Improving Performance of 1,2,4,5-Tetraoxane and 1,2,4,5,7,8-Hexaoxonane Derivatives", *Energy Fuels* 2010, 24, P1636-1639, 2010, 10
6. Salooja, K. C., "The Role of Combustion Promoters", *J. Inst. Petroleum*, 48 (460), P119-129, 1962
7. Hashimoto K., Akutsu Y., Arai M. and Tamura M., "Chemical Reaction Mechanism of Cetane Number Improving Agents", *Sekiyu Gakkaishi*, Vol. 41 (5), P341, 1998
8. Cui, X., Kim, T., Fujii, Y., Kusaka, J. et al., "The Effects of Jatropa-derived Biodiesel on Diesel Engine Combustion and Emission Characteristics," *SAE Technical Paper 2012-01-1637*, 2012, doi:10.4271/2012-01-1637.
9. United States Environmental Protection Agency 2002. "A Comprehensive Analysis of Biodiesel Impacts on Exhaust Emissions", Draft Technical Report, EPA420-P-02-001
10. Cui X., Kim T., Fujii Y., Kusaka J., Daisho Y., "Effects of Biodiesel on Diesel Engine Combustion and Emission Characteristics - Detailed Combustion and Chemical Kinetic Analyses", *Transactions of Society of Automotive Engineers of Japan*, Vol. 44, No. 2, P311-318, 2013, 3
11. Yoshimoto Y., and Kinoshita E., "Applied technology of vegetable oils for diesel engines - use of biodiesel fuel", *Journal of the Combustion Society of Japan*, Vol.51, No.156 (2009), 121-128
12. Carlucci P., Ficarella A., and Laforgia D., "Effects of pilot injection parameters on combustion for common rail diesel engines", *SAE transactions*, 2003, Vol. 112, P 932-943

13. Wang X., Kuti Z. H., O. A., Zhang W., and Nishida K., "Experimental and analytical study on biodiesel and diesel spray characteristics under ultra-high injection pressure", *International Journal of Heat and Fluid Flow* 31, 2010, P 659-666
14. Nakakita K., Kondoh T., and Watanabe S., "A study on diesel combustion with high-pressure fuel injection (improvement of combustion and exhaust emissions using small-hole-diameter nozzles)", *The Japan Society of Mechanical Engineers*, 60-577, 1994-1999, P 254-262
15. Suzuki M., Nishida K., and Hiroyasu H., "Mixture formation process in a diesel spray with high injection pressure (behavior of spray injected into a model combustion chamber)", *The Japan Society of Mechanical Engineers*, 60-569, 1994-2001, P 327-334
16. Maiboom A., Tauzia X., and Hetet J. F., "Experimental study of various effects of exhaust gas recirculation (EGR) on combustion and emissions of an automotive direct injection diesel engine", *Energy*, 33, 2008, P 22-34
17. Szybist James P., Boehman Andre L., Taylor Joshua D., and McCormick Robert L., "Evaluation of formulation strategies to eliminate the biodiesel NOx effect", *Fuel Processing Technology* 86 (2005) 1109-1126
18. Reid R. C., and Prausnitz J. M., "The properties of gases and liquids", McGRAW-HILL, Inc., 4th ed., 1987
19. Tanaka S., "A Chemical Kinetics Study of Fuel Effects on HCCI Combustion", PhD Thesis, Waseda University, 2004
20. <http://www.enecho.meti.go.jp/hinnkakuhou/data/anzenbdf.pdf>
21. Cui X., Zhou B., Matsunaga M., Fujii Y., Kusaka J., Daisho Y., "A Numerical Study of the Effects of FAME Blends on Diesel Combustion and Emissions Characteristics Using a 3-D CFD Code Combined with Detailed Kinetics and Phenomenological Soot Formation Models", *SAE International*, 2013-01-2689
22. Cheng A. S., Upatnieks A., and Mueller C. J., "Investigation of the impact of biodiesel fuelling on NOx emissions using an optical direct injection diesel engine", *Int. J. Engine Res.*, 2006-8-1, P 297-318
23. Matsumoto Y., Cui X., Daisho Y., Nishio Y., Murata Y., Koubayashi T. and Kimura T., "The Effect of In-cylinder EGR Gas Stratification on Diesel Emission", *The 20th Internal Combustion Engine Symposium*, 2009, 97-102
24. Ladommatos, N., Abdelhalim, S., Zhao, H., and Hu, Z., "Effects of EGR on Heat Release in Diesel Combustion," *SAE Technical Paper 980184*, 1998, doi:10.4271/980184.
25. Johnson, Rodney. "A Fundamental Study of the Oxidation Behavior of SI Primary Reference Fuels with Propionaldehyde and DTBP as an Additive", PhD diss., Drexel University, 2008
26. Murata Y, Nishio Y, Kusaka J, Daisho Y, Kawano D, Suzuki H, Ishii H, and Goto Y, "Numerical Analysis of Miller-Premixed Charge Compression Ignition Combustion on a Dynamic-T Map", *IMEchE 2010, Int. J. Engine Res. Vol. 11*, 89-98
27. Hisadome Y., Ohkubo T., Cui X., Matsumoto Y., Fujita S., Daisho Y., Ohashi T. and Takabayashi T., "The Effect of Use of Biodiesel Fuel on Diesel Emission", *Transactions of Society of Automotive Engineers of Japan*, Vol.42 No.2 March 2011, 527-532
28. Cui X., Kiyomatsu M., Touma K., Hisadome Y., Kusaka J., and Daisho Y., "The Effects on Diesel Engine Combustion and Emission Characteristics by Using Biodiesel", 2011 *JSAE Annual Congress (Autumn)*, 131-20115585

Contact Information

Xiaodan Cui

Address: Graduate School of Environment and Energy Engineering

WASEDA University

Room 226, No.58, 3-4-1 Okubo

Shinjuku-ku, Tokyo, Japan, 169-8555

yoshikieric@fuji.waseda.jp

Phone: +81-3-5286-3252

Acknowledgments

This study was conducted as part of a project entitled "Innovation on Production and Automotive Utilization of Biofuels from Non-food Biomass" funded by the Japan Science and Technology Agency.

Definitions/Abbreviations

ATDC - after top dead centre

BDF - bio-diesel fuel

BMEP - brake mean effective pressure

BSEC - brake specific energy consumption

BSFC - brake specific fuel consumption

BTDC - before top dead centre

CN - cetane number

CO - carbon monoxide

CO₂ - carbon dioxide

DI - direct injection

ECU - engine control unit

EGR - exhaust gas recirculation

EURO4 - European emission standard 2005

FAME - fatty acid methyl esters

JIS#2 - Japanese industrial standards No.2

MFB - mass fraction of burned fuel

MO - methyl oleate

NEDC - new European driving cycle

NO - nitric oxide

NOx - nitrogen oxide

PCCI - premixed charge compression ignition

PM - particulate matter

RHR - rate of heat release

T - temperature

THC - total hydrocarbons

The Engineering Meetings Board has approved this paper for publication. It has successfully completed SAE's peer review process under the supervision of the session organizer. The process requires a minimum of three (3) reviews by industry experts.

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording, or otherwise, without the prior written permission of SAE International.

Positions and opinions advanced in this paper are those of the author(s) and not necessarily those of SAE International. The author is solely responsible for the content of the paper.

ISSN 0148-7191

<http://papers.sae.org/2014-01-1392>

参考文献

第1章

- (1) 資源エネルギー庁, 総合政策課, “平成 23 年度 (2011 年度) におけるエネルギー需給実績 (確報)”, 2013 年 4 月 12 日
- (2) <http://www.acea.be/>
- (3) 金子 タカシ, “蘇る日本の乗用車用ディーゼル 1~将来のディーゼル燃料~”, ENGINE REVIEW, Society of Automotive Engineers of Japan, Vol. 3, No.2, 2013
- (4) Oberdorster, et al., “Nanotoxicology: An Emerging Discipline Evolving from Studies of Ultrafine Particles”, Environmental Health Perspective, 2005, 113: 823-839
- (5) <http://www.env.go.jp/air/report/h21-01/ref3-1.pdf>
- (6) Yutaka Murata, Jin Kusaka, Yasuhiro Daisho, Daisuke Kawano, Hisakazu Suzuki, Hajime Ishii, Yuichi Goto, “Miller-PCCI Combustion in an HSDI Diesel Engine with VVT”, SAE Paper 2008-01-0644, 2008
- (7) Y Murata, Y Nishio, J Kusaka, Y Daisho, D Kawano, H Suzuki, H Ishii, and Y Goto, “Numerical Analysis of Miller-Premixed Charge Compression Ignition Combustion on a Dynamic ϕ -T Map”, IMechE 2010, Int. J. Engine Res. Vol. 11, P89-98
- (8) 小川 英之, “低温予混合ディーゼル燃焼”, 第 3 回北海道地域燃焼応用研究会, 北海道大学, 2007 年 6 月 20 日
- (9) Andrea De Filippo, Claudio Ciaravino, Federico Millo, Davide Vezza, Debora Fino, Nunzio Russo and Theodoros Vlachos, “Particle Number, Size and Mass Emissions of Different Biodiesel Blends Versus ULSD from a Small Displacement Automotive Diesel Engine”, SAE International, 2011-01-0633
- (10) Heejung Jung, David B. Kittelson, and Michael R. Zachariah, “Characteristics of SME Biodiesel-fueled Diesel Particle Emissions and the Kinetics of Oxidation”, Environ. Sci. Technol. 2006, 40, 4949-4955
- (11) Robert L. McCormick, Michael S. Graboski, Teresa L. Alleman, Andrew M. Herring and K. Shaine Tyson, “Impact of Biodiesel Source Material and Chemical Structure on Emissions of Criteria Pollutants from a heavy-duty Engine”, Environ. Sci. Technol. 2001, 35, 1742-1747
- (12) 吉本 康文, 木下 英二, “植物油燃料のエンジン適用技術ーバイオディーゼル燃料に

- ついて一”，日本燃焼学会誌，第 51 卷 156 号，2009, P121-128
- (13) http://www.env.go.jp/earth/ondanka/mechanism/carbon_offset/mats/ap01.pdf
- (14) <http://www.meti.go.jp/committee/materials/downloadfiles/g60612b04-2j.pdf>
- (15) 吉野 稔，“バイオ燃料の利用拡大とその発展途上国に及ぼす影響について一食料供給および生活・労働環境面を中心に一”，日本福祉大学経済論集，第 39 号，2009 年 9 月
- (16) “21 世紀環境立国戦略”，2007 年 6 月 1 日
- (17) <http://www.caa.go.jp/seikatsu/shingikai/kikaku/21th/080703sanko1.pdf>
- (18) <http://www.env.go.jp/earth/ipcc/4th/ar4syrr.pdf>
- (19) 文部科学省，気象庁，環境省，“気候変動の観測・予測および影響評価総合レポート「日本の気候変動とその影響」（2012 年度版）”，2013 年 3 月
- (20) http://www.ktr.mlit.go.jp/ktr_content/content/000009685.pdf
- (21) “平成 23 年度における地球温暖化対策の推進に関する法律に基づく「政府がその事務および事業に関し温室効果ガスの排出抑制等のため実行すべき措置について定める計画」の実施状況について”，地球温暖化対策推進本部幹事会，2013 年 3 月
- (22) 地球温暖化対策推進本部，“京都議定書目標達成計画の進捗状況”，2013 年 4 月 5 日
- (23) <http://www.nistep.go.jp/achiev/ftx/jpn/stfc/stt117j/report1.pdf>
- (24) http://www.mazda.co.jp/philosophy/gihou/pdf/giho_all2006.pdf
- (25) <http://www.jsae.or.jp/~dat1/mr/motor35/08.pdf>
- (26) <http://www.ntscl.go.jp/kouenkai/h17/17-02.pdf>
- (27) 藤本 昌彦，志茂 大輔，片岡 一司，藤本 英史，山本 博之，“ディーゼル機関における多量 EGR と吸気冷却によるエミッション低減”，マツダ技報，No.25，2007，P146-151
- (28) 中田 輝男，“自動車用ディーゼルエンジンの燃焼改善”，日本機械学会誌，2008.6, Vol. 111, No. 1075
- (29) 伊藤 昇平，中村 兼仁，“コモンレールによるディーゼル排気ガスの浄化”，デンソーテクニカルレビュー，Vol. 7, No. 1, 2002
- (30) 神谷 憲太郎，宮本 祐輔，村田 豊，菅野 秀昭，草鹿 仁，大聖 泰弘，“多段噴射による大型ディーゼルエンジンの排出ガス低減”，自動車技術会論文集，Vol. 38, No. 2, 2007，P161-166
- (31) 中北 清己，近藤 照明，渡部 哲，“高圧噴射ディーゼル機関の燃焼解析（小噴孔径

- ノズルによる燃焼・排気改善効果)”, 日本機械学会論文集 (B 編), 60 巻 577 号, 1994-9, No. 93-1706, P3198-3206
- (32) 堀田 義博, 中北 清己, 稲吉 三七二, “渦流室式ディーゼル機関の燃焼改善による排気浄化”, 豊田中央研究所 R&D レビュー, Vol. 32, No. 4, 1997.12
- (33) <http://ns.jsae.jp/~dat1/mr/motor36/05.pdf>
- (34) 福澤 順博, 沼田 明, 山田 太郎, 小田 裕司, 遠藤 浩之, “環境対応ディーゼルエンジンのエコサイレント燃焼技術”, 三菱重工技報, Vol. 42, No. 1, 2005-1, P8,9
- (35) <http://www.sokken.co.jp/files/downloads/GasAnalyzers/HFR500/HFR05v01.pdf>
- (36) http://www.mazda.co.jp/philosophy/gihou/pdf/2005_No020.pdf
- (37) 津曲 一郎, 平林 浩, 竹中 嘉英, 細谷 満, 下田 正敏, “NO_x 吸蔵還元触媒システムの NO_x 低減率改善の研究”, 自動車技術会学術講演会前刷集, No.85-06, 2006, P15-18
- (38) 伊藤 総一郎, 菊池 裕, 田中 陽, 大聖 泰弘, 鈴木 央一, 石井 素, “尿素 SCR システムの NO_x 浄化率向上に関する研究 (第 7 報) -鉄および銅ゼオライト系 SCR 触媒の比較と N₂O 排出要因の解明-”, 自動車技術会論文集, Vol. 44, No. 2, 2013 年 3 月, P351-356
- (39) <http://search.toyota.jp/page/DPNR.html>
- (40) <http://www.jsae.or.jp/~dat1/mr/motor21/mr20052107.pdf>
- (41) 長谷川 亮, 柳原 弘道, 仲原 彰治, “予混合圧縮着火ディーゼルの着火制御法の開発”, 自動車技術会論文集, Vol. 34, No. 1, 2003, P47-52
- (42) 河本 桂二, 青木 敦, 小川 弘志, 木村 修二, “低温予混合燃焼を適用する DI ディーゼルエンジンにおける出力性能改善”, 自動車技術会学術講演会前刷集, No. 93-00, 2000, P13-16
- (43) 島崎 直基, 西村 輝一, “上死点近傍燃料噴射による予混合型ディーゼル燃焼の排気改善”, 自動車技術会論文集, Vol. 34, No. 1, 2003, P53-58
- (44) Yutaka Murata, Jin Kusaka, Matsuo Odaka, Yasuhiro Daisho, Daisuke Kawano, Hisakazu Suzuki, Hajime Ishii, Yuichi Goto, “Emissions Suppression Mechanism of Premixed Diesel Combustion with VVT”, International Journal of Engine Research, Vol. 8, No. 5, 2007, P415-428
- (45) Yutaka Murata, Jin Kusaka, Matsuo Odaka, Yasuhiro Daisho, Daisuke Kawano, Hisakazu Suzuki, Hajime Ishii, Yuichi Goto, “Potential of Emissions Reduction by Premixed Diesel

- Combustion with Variable Valve Timing”, Review of Automotive Engineering, Vol.27, JSAE 20064446, 2006, P379-386
- (46) <http://law.e-gov.go.jp/htmldata/H20/H20HO045.html>
- (47) http://www.env.go.jp/recycle/waste/conf_dcbp/01/mat05_2.pdf
- (48) <http://www.enecho.meti.go.jp/energy/newenergy/biomass.pdf>
- (49) <http://kaisyaannai.jp/pdf/p4/p4-024.pdf>
- (50) <http://ja.goldenmap.com/>
- (51) http://www.jie.or.jp/biomass/AsiaBiomassHandbook/Japanese/All_J-080917.pdf
- (52) <http://www.oil.or.jp/>
- (53) http://www.oil.or.jp/kiso/seisan/seisan02_01.html
- (54) <http://www.enecho.meti.go.jp/hinnkakuhou/data/anzenbdf.pdf>
- (55) Charles K. Westbrook, “Recent Advances in Autoignition Kinetics of Automotive fuels”, COMODIA 2012, July 23-26, 2012, Fukuoka, Japan, PL-3
- (56) United States Environmental Protection Agency 2002. “A Comprehensive Analysis of Biodiesel Impacts on Exhaust Emissions”, Draft Technical Report, EPA420-P-02-001
- (57) A S Cheng, A Upatnieks, C J Mueller “Investigation of the impact of biodiesel fuelling on NOx emissions using an optical direct injection diesel engine”, International Journal of Engine Research, Vol. 7, 2006
- (58) R L McCormick, J R Alvarez, M S Graboski, “Fuel Additive and Blending Approaches to Reducing NOx Emissions from Biodiesel”, SAE Technical Paper 2002-01-1658
- (59) R L McCormick, C J Tennant, R Robert Hayes, S Black, J Ireland, T McDaniel, A Williams, M Frailey “Regulated Emissions from Biodiesel Tested in Heavy-Duty Engines Meeting 2004 Emission Standards”, SAE Technical Paper 2005-01-2200
- (60) 金子淳司, 小宮 怜, 足立悠介, 村田 豊, 草鹿 仁, 大聖泰弘, 川野大輔, 鈴木央一, 石井 素, 後藤雄一, “多気筒ディーゼル機関における各種 EGR 方式の適用性(第 1 報) –HPL-EGR と LPL-EGR の効果比較–”, 2007 年度自動車技術会秋季大会, 自動車技術会学術講演会前刷集, JSAE 20075625, 2007 年 10 月
- (61) Pi-qiang Tan, Ahi-yuan Hu, Di-ming Lou, and Bo Li, “Particle Number and Size Distribution from a Diesel Engine with Jatropha Biodiesel Fuel”, SAE International 2009-01-2726, 2009
- (62) Heejung Jung, David B. Kittelson, and Michael R. Zachariah, “Characteristics of SME

- Biodiesel-fueled Diesel Particle Emissions and the Kinetics of Oxidation”, *Environ. Sci. Technol.* 2006, 40, 4949-4955
- (63) Di Yao, Diming Lou, Ahiyuan Hu and Piqiang Tan, “Experimental Investigation on Particle Number and Size Distribution of a Common Rail Diesel Engine Fueling with Alternative Blended Diesel Fuels”, SAE International, 2011-01-620, 2011
- (64) K Yamane, K Kawasaki, K Sone, T Hara, and T Prakoso, “Oxidation Stability of Biodiesel and its Effects on Diesel Combustion and Emission Characteristics”, DOI: 10.1243/14680874JER00207
- (65) 北口 浩二, 藤井 辰則, 堀 司, 千田 二郎, “LES によるディーゼル噴霧構造および着火の数値解析”, 第 23 回内燃機関シンポジウム, 2012 年 11 月 29 日
- (66) 冬頭 孝之, 植田 玲子, 服部 義昭, 水田 準一, 秋濱 一弘, 青木 秀樹, 梅原 努, 伊藤 寿記, 川口 暁生, “ディーゼル燃焼の CO 排出要因解析—CO 排出低減方法とその検証—”, 自動車技術会論文集, Vol. 44, No. 2, 2013 年 3 月, P237-244
- (67) 兒玉 貴義, 中山 隆雄, 草鹿 仁, 石井 義範, 島崎 直基, 三又 秀行, 佐々木 隆, “燃料の物理的および化学的特性がディーゼル燃焼と排出ガス特性に及ぼす影響因子の数値解析”, 自動車技術会論文集, Vol. 44, No. 2, 2013 年 3 月, P327-334
- (68) T. Kaminaga, J. Kusaka, and Y. Ishii, “A three-dimensional numerical study on exhaust gas emissions from a medium-duty diesel engine using a phenomenological soot particle formation model combined with detailed chemistry”, *Int. J. Engine Res.*, vol. 9, P 283-296
- (69) Junfeng Yang, Monica Johansson, and Valeri Golovitchev, “Engine Performance and Emissions Formation for RME and Conventional Diesel Oil: A Comparative Study”, *Proceeding of the ASME Internal Combustion Engine Division 2009 Spring Technical Conference*, ICES2009-76121
- (70) Valeri I. Golovitchev, Junfeng Yang, “Construction of Combustion Models for Rapeseed Methyl Ester Bio-diesel fuel for Internal Combustion Engine Applications”, *Biotechnology Advances* 27, 2009, P641-655

第 2 章

- (1) 不破 敬一郎 他著, 中村 洋 他訳, R. Kellner 他編, “ケルナー分析化学 II”, 株

- 式会社科学技術出版, P1218
- (2) R. C. Reid, and J. M. Prausnitz, "The properties of gases and liquids", McGRAW-HILL, Inc., 4th ed., 1987
 - (3) James P. Szybist, Andre L. Boehman, Joshua D. Taylor, and Robert L. McCormick, "Evaluation of formulation strategies to eliminate the biodiesel NOx effect", Fuel Processing Technology 86, 2005, P1109-1126
 - (4) http://www.enecho.meti.go.jp/policy/fuel/shinnenryou_hontai.pdf
 - (5) 長尾 不二夫, 池上 詢, "圧力取出し管によるインジケータの誤差", 日本機械学会論文集, 30 巻 213 号, 昭 39-5, P645-653
 - (6) John H. Johnson, Susan T. Bagley, Linda D. Gratz, David G. Leddy, "A Review of Diesel Particulate Control Technology and Emissions Effects – 1992 Horning Memorial Award Lecture", SAE Technical Paper 940233, 1994
 - (7) 小川 忠男, "ディーゼル排出ガスに及ぼす軽油性状の影響 (第 3 報) 軽油の精密分析法", 豊田中央研究所 R&D レビュー, Vol. 33, No. 3, 1998.9
 - (8) Thomas Krinke, "Benefits of Adding Particle Size Information to Vehicle Emission Regulation Measurements (PMP)", Global Aerosol Education, TSI™
 - (9) Kasper, M., Matter, U., Burtscher, H., Bukowiecki, N. et al., "NanoMet, a New Instrument for On-line Size- and Substance- Specific Particle Emission Analysis", SAE Technical Paper 2001-01-0216, 2001
 - (10) <http://www.pecj.or.jp/japanese/report/2000report/00M4.1.3.pdf>
 - (11) "Application Programming Interface Manual", CHEMKIN-PRO マニュアル
 - (12) Glassman, I., "Combustion, Third Edition", Academic Press, 1996, P84
 - (13) H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, "A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation", Combustion and Flame, Vol. 114, 1998.6, P149-177
 - (14) N. Peters, "Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-premixed Turbulent Combustion", Progress in Energy and Combustion Science, Vol. 10, 1984, P319-339
 - (15) https://www-pls.llnl.gov/data/docs/science_and_technology/chemistry/combustion/nc7_ver3.1_mech.txt
 - (16) J. Gustavsson, and V.I. Golovitchev. "Spray Combustion Simulation Based on Detailed Chemistry Approach for Diesel Fuel Surrogate Model", SAE Paper, 2003-01-1848, 2003

-
- (17) Sarah Bax, Mohammed Hichem Hakka, Pierre-Alexandre Glaude, Olivier Herbiner, Frederique Battin-Leclerc, “Experimental study of the oxidation of methyl oleate in a jet-stirred reactor”, *Combustion and Flame*, 157, 2010, P1220-1229
- (18) Junfeng Yang, Monica Johansson, and Valeri Golovitchev, “Engine Performance and Emissions Formation for RME and Conventional Diesel Oil: A Comparative Study”, *Proceeding of the ASME Internal Combustion Engine Division 2009 Spring Technical Conference*, ICES2009-76121
- (19) <http://www.tfd.chalmers.se/~valeri/MECH.html>
- (20) R. C. Reid, and J. M. Prausnitz, “The properties of gases and liquids”, McGRAW-HILL, Inc., 4th ed., 1987
- (21) H. Bockhorn and T. Schofer, “Growth of Soot Particles in Premixed Flames by Surface Reactions”, *Soot Formation in Combustion*, Springer Series in Chemical Physics Vol. 59, 1994, P253-274
- (22) M. Frenklach and H. Wang, “Detailed Mechanism and Modeling of Soot Particle Formation”, *Soot Formation in Combustion*, Springer Series in Chemical Physics Vol. 59, 1994, P165-192
- (23) Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, Jr, William C. Gardiner, Vitali V. Lissianski, and Zhiwei Qin, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- (24) A. A. Amsden, “KIVA-3: A KIVA program with block-structured mesh for complex geometries”, Report LA-12503-MS, Los Alamos National Laboratory, 1993
- (25) J. Kusaka, N. Horie, Y. Daisho, V. Golovitchev, and S. Nakayama, “Numerical simulation accounting for the finite-rate elementary chemical reactions for computing diesel combustion process”, SAE, 2005-24-051
- (26) Valeri.I.Golovitchev, K.Atarashiya, K.Tanaka, S.Yamada, “Towards universal EDC-Based Combustion Model for Compression Ignited Engine Simulations”, 2003 JSAE/SAE International Fuels & Lubricants Meeting, JSAE20030181/SAE2003-01-1849
- (27) A. A. Amsden, P. J. O'Rourke, T. D. Butler, “KIVA-2: A computer program for chemically reactive flows with sprays”, Report LA-11560-MS, Los Alamos National Laboratory, 1989
- (28) Reitz R.D., “Mechanism of Atomization Processes in High-Pressure Vaporizing Sprays”, *Atomization and Spray Technology*, Vol. 3, 1987, P309-337

-
- (29) 広安博之, 新井雅隆, ”ディーゼル噴霧の到達距離と噴霧角”, 自動車技術会論文集, No. 21, 1980, P5-11
- (30) V. G. Levich, ”Physicochemical Hydrodynamics”, Prentice-Hall, Inc., 1962, P639
- (31) Niklas Nordin, ”A Mesh Independent Collision Condition for Lagrangian Sprays”, Thermo and Fluid Dynamics, 2000
- (32) T. Kaminaga, J. Kusaka, and Y. Ishii, “A three-dimensional numerical study on exhaust gas emissions from a medium-duty diesel engine using a phenomenological soot particle formation model combined with detailed chemistry”, Int. J. Engine Res., vol. 9, P 283-296
- (33) A. Morishima, J. Kusaka, and Y. Daisho, “Numerical and experimental study on particulate matter formation process in diesel combustion – analysis in fuel-rich HCCI combustion”, JSAE, 20074133, 2007
- (34) Jorg Appel, Henning Bockhorn, Michael Frenklach, “Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: laminar premixed flames of C₂ hydrocarbons”, Combustion and Flame, Vol. 121, 2000.4, P122-136
- (35) Tao, F., Golovitchev, V. and Chomiak, J. “A Phenomenological model for the prediction of soot formation in diesel spray combustion”, Combustion and Flame 136, 2004, P270-282
- (36) Nagle, J. and Strickland-Constable, R.F. “Oxidation of Carbon Between 1000-2000 deg. C”, Proc. Fifth Carbon Conference, Vol. 1, 1962, P571-164
- (37) Neoh, K.G., Howard, J.B. and Sarofim, A.F. Effect of Oxidation on the Physical Structure of Soot, Twentieth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, 1984, P951-957
- (38) Graham, S. C. and Robinson, A. “A comparison of numerical solutions to the self-preserving size distribution for aerosol coagulation in the free-molecule regime”, Journal of Aerosol Science, Vol. 7, 1976, P261-273
- (39) http://www.jsae.or.jp/engine_rev/docu/engineview_02_03.pdf

第3章

- (1) X. Cui, T. Kim, Y. Fujii, J. Kusaka, Y. Daisho, M. Tongroon, and N. Chollacoop, “The effects of jatropha-derived biodiesel on diesel engine combustion and emission characteristics”, SAE International, 2012-01-1637, 2012

- (2) Valentin Soloiu, Jeff Lewis, April Covington, David Nelson, and Norman Schmidt, “Oleic Methyl Ester Investigations in an Indirect Injection Diesel Engine; Stage One: Combustion Investigations”, SAE International, 2011-01-0616, 2011
- (3) 崔 曉丹, 清松 聖統, 藤間 浩平, 久留 裕貴, 草鹿 仁, 大聖 泰弘, “バイオディーゼルを用いたディーゼル機関の燃焼と排出ガス特性に関する研究”, 自動車技術会学術講演会前刷集, No. 119-11, 2011, P1-6
- (4) 松本康義, 崔曉丹, 西尾唯, 村田豊, 大聖泰弘, 香林丈治, 木村富雄, “ディーゼル機関における筒内 EGR ガス成層が排気に及ぼす影響”, 第 20 回内燃機関シンポジウム, 早稲田大学, 2009 年 9 月 1 日
- (5) R L McCormick, J R Alvarez, M S Graboski, “Fuel Additive and Blending Approaches to Reducing NOx Emissions from Biodiesel”, SAE Technical Paper, 2002-01-1658, 2002
- (6) 久留 裕貴, 大久保 拓哉, 崔 曉丹, 松本 康義, 藤田 翔平, 大聖 泰弘, 大橋 敏宏, 高橋 徹, “バイオディーゼル燃料が乗用車用ディーゼル機関の性能と排出ガスに及ぼす影響”, 自動車技術会論文集 Vol.42, No.2, P527~532, 2011 年 3 月
- (7) Charles K. Westbrook, “Recent Advances in Autoignition Kinetics of Automotive fuels”, COMODIA 2012, July 23-26, 2012, Fukuoka, Japan, PL-3
- (8) 崔曉丹, 金 兌根, 藤井 祐介, 草鹿 仁, 大聖泰弘, “バイオディーゼルを用いたディーゼル機関の燃焼と排出ガス特性に関する研究 -詳細な燃焼と反応解析”, 自動車技術会論文集 Vol.44, No.2, P311~318, 2013 年 3 月
- (9) Pi-qiang Tan, Ahi-yuan Hu, Di-ming Lou, and Bo Li, “Particle Number and Size Distribution from a Diesel Engine with Jatropha Biodiesel Fuel”, SAE International, 2009-01-2726, 2009
- (10) Di Yao, Diming Lou, Ahiyuan Hu and Piqiang Tan, “Experimental Investigation on Particle Number and Size Distribution of a Common Rail Diesel Engine Fueling with Alternative Blended Diesel Fuels”, SAE International, 2011-01-620, 2011
- (11) David Kittelson, Winthrop Watts, Jason Johnson, “Diesel Aerosol Sampling Methodology – CRCE-43”, TECHNICAL SUMMARY AND CONCLUSIONS, P4, 2002
- (12) <http://www.chem.agilent.com/Library/technicaloverviews/Public/5989-3425JAJ.Pdf>
- (13) Ladommatos, N., Abdelhalim, S., Zhao, H., and Hu., Z., “Effects of EGR on Heat Release in Diesel Combustion”, SAE Technical Paper 980184, 1998

第 4 章

- (1) <http://www.tfd.chalmers.se/~valeri/MECH.html>
- (2) Olivier Herbinet, William J. Pitz, Charles K. Westbrook, “Detailed chemical kinetic mechanism for the oxidation of biodiesel fuels blend surrogate”, *Combustion and Flame*, Vol. 157, 2010.5, P893-908
- (3) Yu Zhang, Andre L. Boehman, “Autoignition of binary fuel blends of n-heptane and C₇ esters in a motored engine”, *Combustion and Flame*, Vol. 159, 2012.4, P1619-1630
- (4) T. Daubert and R. Danner, “Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals, Data Compilation”, Taylor & Francis Group, 1994
- (5) R. C. Reid, J.M. Prausnitz, “The Properties of Gase and Liquids”, McGRAW-HILL, Inc., 4th ed., 1987
- (6) Junfeng Yang, “Biodiesel Spray Combustion Modeling Based on a Detailed Chemistry Approach”, PhD thesis., Chalmers University of Technology, 2012
- (7) Rolf D. Reitz, ”SPRAY TECHNOLOGY SHORT COURSE”, Pittsburgh, PA, (1996)
- (8) Jennifer C. Beale, Rolf D. Reitz, “Modeling Spray Atomization with the Kelvin-Helmholtz / Rayleigh-Taylor Hybrid Model”, *Atomization and Sprays*, Vol. 9, 1999, P625-650
- (9) Ricart L. and Reitz R.D., “In-cylinder Measurement and Modeling of Liquid Fuel Spray Penetration in a Heavy-Duty Diesel Engine”, SAE paper 971591, 1997
- (10) Golovitchev V.I., Atarashiya K., Tanaka K. and Yamada S., “Towards Universal EDC-Based Combustion Model for Compression Ignited Engine Simulations”, SAE paper, 2003-01-1489, 2003
- (11) Junfeng Yang, Monica Johansson, and Valeri Golovitchev, “Engine Performance and Emissions Formation for RME and Conventional Diesel Oil: A Comparative Study”, *Proceeding of the ASME Internal Combustion Engine Division 2009 Spring Technical Conference*, ICES2009-7612
- (12) T. Kaminaga, J. Kusaka, and Y. Ishii, “A three-dimensional numerical study on exhaust gas emissions from a medium-duty diesel engine using a phenomenological soot particle formation model combined with detailed chemistry”, *Int. J. Engine Res.*, vol. 9, P 283-296
- (13) Gregory P. Smith, David M. Golden, Michael Frenklach, Nigel W. Moriarty, Boris Eiteneer, Mikhail Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, Soonho Song, Jr, William C.

-
- Gardiner, Vitali V. Lissianski, and Zhiwei Qin, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/
- (14) R. J. Crookes, G. Sivalingam, M. A. A. Nazha, and H. Rajakaruna, “Prediction and measurement of soot particulate formation in a confined diesel fuel spray-flame at 2.1 MPa”, *Int. J. Thermal Sci.*, 2003, 42, P639-646
- (15) F. Tao, D. E. Forster, and R. D. Reitz, “Characterization of soot particle distribution in conventional, non-premixed DI diesel flame using a multi-step phenomenological soot model”, *Proc. Combust. Inst.*, 2007, 31, P 2991-2998
- (16) T. Ito, T. Hosaka, J. Senda, and H. Fujimoto, “Detailed kinetic modeling and laser diagnostics of soot formation process in diesel jet flame”, *SAE*, 2004-01-1398, 2004

第 5 章

- (1) Kazuhisa Murata, Yanyong Liu, Megumu Inaba, Isao Takahara, “Production of synthetic diesel by hydrotreatment of jatropha oils using Pt-Re/H-ZSM-5 catalyst”, *Energy & Fuels*, 24(4), 2010, P2404-2409
- (2) http://www.pecj.or.jp/japanese/open_info/H23/H23business_report.pdf
- (3) 田中 重行, “予混合圧縮着火燃焼に及ぼす燃料性状の影響に関する反応速度論的研究”, 博士論文, 早稲田大学, 2004

謝 辞

本研究の計画から実施，さらに論文の作成に至るまで，指導教官として，終始懇切なご指導を賜りました早稲田大学 大学院 環境・エネルギー研究科 大聖 泰弘教授に深甚なる謝意を表します。大聖教授には，著者が学部3年生として研究室に配属されてからこれまでの7年間，その時々の研究の成否にかかわらず常に暖かく励まして頂きました。これまでに大聖教授から教えて頂いた全てが，著者の成長と今後の人生設計にとって貴重な糧となっております。また，本論文の作成に当たって貴重なご助言を頂きました早稲田大学 創造理工学研究科 総合機械工学専攻の勝田 正文教授と草鹿 仁教授にも心から感謝の意を表します。

本研究は，科学技術振興機構の研究課題名「非食糧系バイオマスの輸送用燃料化基盤技術」の一環として行われたものであり，日本とタイの共同事業として，日本側では本学と産業技術総合研究所 新燃料自動車技術研究センターとタイの The National Metal and Materials Technology Center の協力のもとに実施されました。その間，両国の研究の調整に当たられ，ご指導頂いた本学環境総合研究センターの西嶋 昭生教授にも厚くお礼申し上げます。また，実験に当たってご支援頂いた本学サーマル・フルード部門の職員の方々に感謝致します。

本論文は，私が早稲田大学 大学院理工学研究科 修士課程および博士後期課程に在学中，さらに早稲田大学理工学術院助手に在職中に実施してきた成果をまとめたものであり，本研究は，大聖研究室 OB の皆様による研究の蓄積を活用し，研究室に在学中の学生の方々の協力を得て成し遂げられたものでした。研究面で有意義な助言を頂き，常に目標としてきた村田 豊先輩，西尾 唯先輩，藤田 翔平先輩，日々ともに討論し情報交換してきた同輩の松本 康義君と周ベイニさんにも厚くお礼申し上げます。また，後輩の久留 裕貴君，藤間 浩平君，清松 聖統君，金 兌根君，藤井 祐介君，松永 光弘君，呂 鵬君，中村 裕紀君の協力があつたことを特記します。

学外では，多くの視野を広げる機会を賜りました(株)本田技術研究所 高林 徹主任研究員に深く感謝の意を表します。また，国内外の学会，とりわけ自動車技術会・ディーゼル機関部門委員会，関連の研究会やシンポジウム等では，多くの方々に貴重なご意見やご示唆を頂いたことを記し，関係各位に厚くお礼申し上げます次第です。

末筆ながら，これまで著者を支えてくれた多くの友人，先輩・後輩，さらには両親に心から感謝致します。