

■原著論文/ORIGINAL PAPER■

火花点火希薄燃焼の着火限界のシミュレーション

Numerical Calculation of the Ignition Limit on Lean-Burn SI Engines

太田 晴也^{1*}・橋本 公太郎²・新井 充²・田村 昌三²OHTA, Haruya^{1*}, HASHIMOTO, Kohtarō², ARAI, Mitsuru², and TAMURA Masamitsu³¹ 東京ガス株式会社フロンティア研究所 〒230-0045 横浜市鶴見区末広町1-7-7
Tokyo Gas Co., Ltd., 1-7-7, Suehiro-cho, Tsurumi-ku, Yokohama, Kanagawa, 230-0045, Japan² 東京大学大学院新領域創成科学研究科環境学専攻 〒113-0077 文京区本郷7-3-1
Tokyo University, 7-3-1, Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan

2004年7月6日受付; 2005年1月13日受理/Received 6 July, 2004; Accepted 13 January 2005

Abstract: A model predicting the ignition probability of the lean-burn SI engine in the vicinity of the lean-burn limit was constructed using the percolation model in continuous space. Calculated percolation probabilities reproduced the experimental results when the following conditions were applied, considering the actual ignition on SI engine. First, the heat generation of the spark plug should be larger (15 to 20 times) than that of the exothermic reaction of the fuel particle. Second, the scale of the percolation should be more than the twice of the range of the heat generation of the spark plug. This result suggested that the size of the flame core would have about the twice size as the effective range of heating by the spark plug.

Key Words: SI engine, Ignition limit, Numerical Calculation, Combustion

1. 緒言

希薄燃焼とは、燃料混合気が化学量論比よりも希薄な条件において燃焼することである。希薄燃焼の長所は、1 サイクルあたりの燃料の噴射量が少ないために低燃費であること、燃焼温度が低いことからNO_xの生成量も抑制されることが挙げられる。このため、自動車の内燃機関に希薄燃焼を用いるリーンバーンエンジンの開発が進められている。しかし、希薄燃焼は燃焼限界に近いために制御が難しく、不完全な燃焼により未燃炭化水素 (THC) やすす (soot) の排出が増加するため、燃焼限界についての理解を深めることは、リーンバーンエンジンの開発に貢献するものと期待される。

火花点火エンジンの希薄限界に関する研究は、数多くなされてきている[1-3]。火花点火エンジンの着火機構についても研究がなされており、点火プラグによる火花が火炎核を形成し、この火炎核が乱流場で燃焼反応熱と未燃混合気や点火プラグへの熱損失のバランスで成長するかどうかで、着火が決まると考えられている[4]。そして、詳細な数

値計算による、火炎核成長のモデル化の研究もなされている[5]。これらの数値モデルでは、初期条件によって着火するか否かが決定する。しかしながら、実際の火花点火エンジンの希薄限界近傍では、ある希薄限界で着火確率が1から0に変化するのではなく、ある濃度の幅をもって1から0に変化する。従って、着火限界近傍の着火確率を求めるためには、決定論的モデルではなく、確率モデルを用いる必要がある。また、一般的なエンジンのシミュレーションでは、化学反応計算や流体力学計算により、化学反応や熱力学過程による発熱や吸熱を表現する。しかし燃料分子の酸化反応には、多くの化学反応が関与する。燃料分子に含まれる炭素数が増えると、反応式の数は指数関数的に増加するため、エンジンで用いられる燃料の酸化反応を網羅することは困難である。そこで、本研究では、より簡便に希薄燃焼の着火限界をシミュレートする確率モデルを考えた。

希薄燃焼における着火限界付近での着火確率を再現するためには、燃料粒子が酸化反応を起こして発熱し、その熱が他の燃料粒子に伝わり新たに酸化反応を起こす、反応の連鎖を表現することが重要である。「ものつながり方」を表現するモデルとしては、パーコレーションモデルがよく知られている。パーコレーションモデルは、「つながり」

* Corresponding author. E-mail: haruya@tokyo-gas.co.jp

という一般的な概念を取り扱うため、素粒子や磁石、金属、高分子、地震発生メカニズムや渦状星雲の生成まで、広い分野に応用が可能である[6,7]。太田らは格子状パーコレーションモデルを用いて燃焼発生機構の考察を行っている[8]。

本研究では、燃料粒子の位置は任意として、希薄燃焼における着火の連鎖をパーコレーション理論に則して調べた。ここで、パーコレーションモデルを用いたのは、火炎核が成長するか否かを確率的に表すためであり、混合気の不均一性を議論する訳ではないことを記す。

2. 計算方法および実験装置・実験方法

2.1. 計算方法

火花点火エンジンではスパークプラグにおける電位差から生じるスパーク一点のみが反応の元となり、圧縮着火エンジンのように複数の燃料粒子が同時に反応を起こすのではない。放電による熱エネルギーは周りの燃料粒子を加熱し、一定温度を超えた燃料粒子は反応を起こし発熱する。この発熱が他の燃料粒子を加熱する、という繰り返しにより発熱反応が伝播し、着火の元となる火炎核を形成するものと考えられる。

作成したモデルでは、連続的な空間に燃料粒子を設定した個数ランダムに分布させる。粒子の初期温度は 300 K とした。次に連続空間の中心に配置したスパークプラグにおいて、発熱を起こす。発熱は、その時点において、すべての燃料粒子が温度上昇を起こすことで表現する。この研究では、加熱の影響の伝播則を式 (2) の形に仮定して考えた。

$$\Delta T_i = k / r_{ij}^2 \quad (2)$$

ΔT_i は、一回のステップにおける i 番目の粒子の温度上昇、 $j=0$ とした場合の r_{ij} は、スパークプラグ ($j=0$) と i 番目の粒子との距離、 k は比例定数である。 k が大きいほど粒子の温度上昇が大きく、 k が小さいほど温度上昇が小さいことを示す。つまり k は発熱の大きさを表すパラメータである。

温度上昇により 1000 K を超えた燃料粒子は、次のステップで発熱反応を起こすものとする。この発熱によって他の燃料粒子も式 (2) と同様の加熱を受けることになるが、スパークプラグの放電による加の方が、燃料粒子の発熱反応による加熱よりも大きい。すなわちスパークプラグの発熱における比例定数 k を k_1 、燃料の発熱における比例定数 k を k_2 とおくと、 $k_1 > k_2$ とすることで発熱量の大小が表現される。1000 K を超えた燃料粒子が複数ある場合は、前のステップで発熱した粒子から最も近い燃料粒子が発熱反応を起こす。

この繰り返しによって燃料粒子の酸化反応は伝播し、スパークプラグから一定距離 L 以上離れた燃料粒子が反応を起こしたら火炎核が形成したと見なし、着火と判定した。

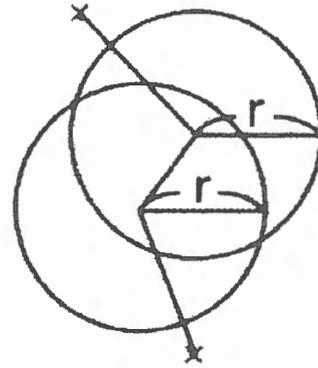


Fig.1 Connection of ignition reactions

逆に、加熱しても次のステップで酸化反応を起こす燃料粒子がない場合には、失火と判定した。以上の手続きを、燃料濃度を変化させて行うことで、燃料濃度と着火確率との関係を求めた。ある燃料濃度における着火確率は、燃料粒子の初期配置をランダムに設定した 200 パターンに対する計算結果から算出した。

通常のパーコレーションモデルとの関係で考えると、比例定数 k は連続空間でのパーコレーションモデルにおける、つながりの半径 r に対応する。ここでは $k = 700$ とすることで、つながりの範囲が半径 1 の球である連続空間パーコレーションモデルとほぼ同じものとなる。パーコレーションは、燃料粒子の発熱により、他の燃料粒子が酸化反応を起こすという反応の連鎖に相当する。つまり、火炎核の形成は「連鎖が起きる半径 r 内に次の燃料粒子が存在する」という連鎖によって、スパークプラグから距離 L の地点まで到達することによって表現される (図 1)。これはパーコレーションモデルでのクラスターの形成と対応する。

通常のパーコレーションモデルと異なる点は、つながりの範囲の外にある燃料粒子に対しても、粒子間の距離に依存する影響 (温度上昇) を与えることである。燃料粒子の熱の伝達では、ある距離以上離れたとしても、熱が全く伝わらなくなることはないためである。従って、発熱した粒子からの距離が r よりわずかに遠い場所にあった粒子でも、再度わずかな温度上昇を受けることにより、酸化反応を起こすことになる。もう一つの相違点は、火花着火エンジンでのスパークプラグにおける発熱を、燃料粒子 1 つの反応による発熱よりも大きいと設定することである。これは、スパークプラグの発熱によるつながりの半径 R を、燃料粒子の発熱によるつながりの半径 r よりも大きくすること、すなわちスパークプラグにおける比例定数 k_1 を燃料の発熱における比例定数 k_2 よりも大きくすることで表現される。

シミュレーションを行うにあたって決定すべきパラメータは 2 つある。一つは火炎核の大きさの設定で、スパークプラグからどれだけ離れた距離にある粒子が反応を起こしたら着火と見なすか、という距離 L によって表される。も

う一つは、スパークプラグによる発熱が、粒子一つの発熱に比べてどれだけ大きな規模であるかという比である。これは、スパークプラグでの発熱でのつなりの半径 R と粒子の発熱におけるつなりの半径 r との比 R/r によって表される。今回は $k_2 = 700$ とすることで粒子の発熱によるつなりの半径 r を 1 とし、スパークプラグの発熱によるつなりの半径 R によって表すことにした。実際の計算においては、発熱における比例定数 k_1 と k_2 の比によって決定した。この2つのパラメータ L と R を変化させた場合の影響から、実際の着火現象を左右する要素が何かを調べる。

2.2. 実験方法

火花点火エンジンを用いて均一燃焼での燃料希薄条件において運転を行い、燃料の濃度と着火確率の関係を測定した。測定に用いたエンジンはトヨタ D-4 エンジンをリカルド社が単気筒エンジンに改造したものである。装置図を図2、運転条件を表1に示す。エンジンは均一燃焼条件で運転し、空気過剰率 λ を変えることで燃料濃度を変化させた。希薄着火限界付近の燃料濃度において運転を行い、測定された失火率から着火確率を調べた。ある空気過剰率毎に100 サイクル運転を行い、圧力上昇が 100 kPa 以下であったサイクルを失火とみなし、失火したサイクル数から失火率を算出した。

3. 結果および考察

3.1. 実験による燃料濃度と着火確率の関係

エンジンでの測定によって得られた失火率から着火確率を算出した結果を図3に示す。横軸は空気過剰率 λ の逆数で、これは燃料の濃度に比例する。空気過剰率 λ は量論混合比の空気量を 1 とした場合の空気量であり、燃料の体積は小さく無視できる。swirl 100 がスワール弁の開度を 100 (全開) とした場合、swirl 0 がスワール開度を 0 (全閉) とした場合である。スワール弁を開くと燃焼室内の空気の流れることができるため、燃料噴霧の混合が促進される。従って、swirl 100 は燃料粒子の分布が比較的均一な場合、swirl 0 は分布が不均一な部分が多い場合を表すと考えられる。

結果から、着火確率はある着火限界濃度において突然 0 から 1 になるのではなく、ある濃度範囲で徐々に上昇していることがわかる。これは、希薄着火限界に近い濃度での着火現象が、濃度により決定論的に決まっているのではなく、確率現象であることを示している。着火確率曲線が 0 から立ち上がる部分を比較すると、スワール弁を開いた場合では燃料濃度が 0.4 付近で立ち上がるのに対し、閉じた場合には 0.3 付近で立ち上がっている。また前者は着火確率のカーブが比較的なだらかだが、後者の方が角度が急である。結果として、同じ濃度における着火確率を比較した場合には、スワールがない方が着火確率が高い。これはスワールがない場合に、部分的に燃料濃度が高い部分に着火するケースが出てくるためだと考えられる。

Table 1 Engine operating condition

Fuel	iso-octane
Engine Speed	1200rpm
Fuel Injection Pressure	12MPa
Throttle Opening	100%
Ignition Timing	18° BTDC
Swirl Valve Opening	0, 100

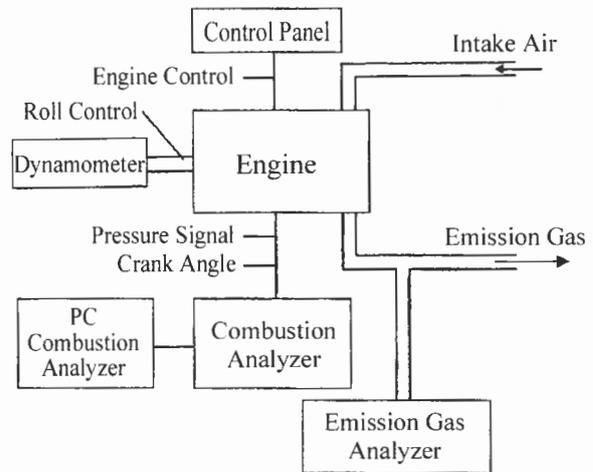


Fig.2 Experimental engine and measurement apparatuses

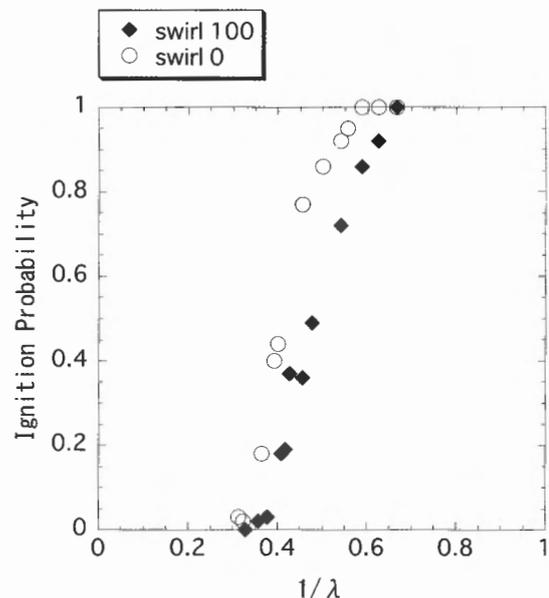


Fig.3 Experimental ignition ability for deferent fuel concentration

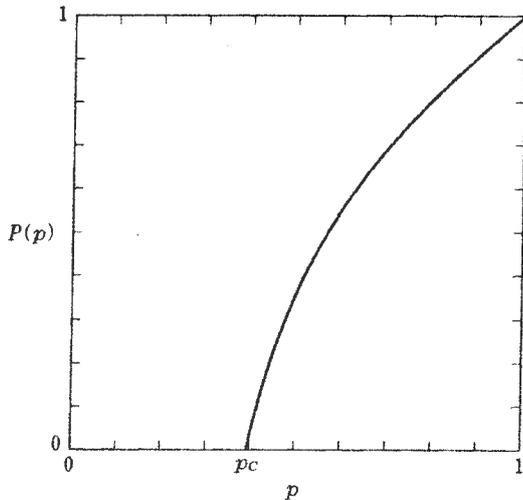


Fig.4 Percolation probability (P) for concentration in 2-dimensional-grid percolation model

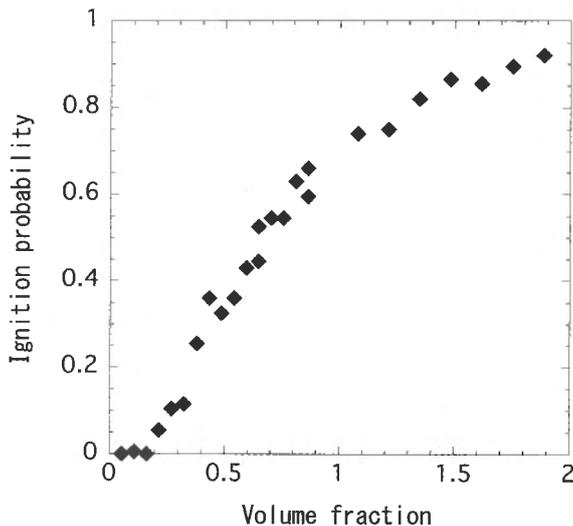


Fig.5 Ignition probability for volume fraction

3.2. シミュレーションによる燃料濃度と着火確率の関係

3.2.1. R が着火確率に及ぼす影響

$R=1$ の場合は、スパークプラグは特別な点ではなく、他の燃料粒子と同等である。この場合は、モデルは単純なパーコレーションモデルとなる。着火の可否は、スパークプラグが、距離 L より遠くまで続く燃料粒子のクラスターに含まれているかどうかで決まる。 $R=1$ では、スパークプラグと燃料粒子の区別はないため、任意の粒子が巨大なクラスターに含まれている確率と同値である。これは、パーコレーションモデルという浸透確率、すなわち選んだ任意の点が無限の大きさのクラスターに含まれる確率と同義である。二次元正方格子サイトにおける浸透確率 P と濃度 p との関係[2]を図 4 に、 $R=1$ 、 $L=8$ とした場合の計算結果を図 5 に示す。図 5 横軸の体積分率は、燃料粒子の体積の

総和を想定している空間の体積で割った値であり、図 4 (および図 11) の横軸の濃度 p と同義である。

パーコレーションモデルにおいては、無限に大きなクラスターが存在し始める臨界濃度、つまり浸透閾値は次元数のみによって決まり、二次元の場合には面積分率 0.45、三次元の場合には体積分率が約 0.16 のときであることが知られている[2]。図 4 と図 5 の比較において、二次元と三次元の違いがよく見られる。図 5 では、着火確率が 0 から立ち上がる部分、つまり大きなクラスターが発生し始める体積分率は 0.1 と 0.2 の間であり、上記の値と一致している。以上より、 $R=1$ の場合には、通常のパーコレーションモデルと同じ特徴を持つことが確認された。しかし図 5 の結果は、実験結果と比較した場合に、着火確率の上昇が緩やかであり、着火確率が 1 へなかなか到達しないためこのずれを解消する必要がある。

次にパラメータ R を 3, 5, 10, 15, 20 とし、それぞれの R の値に対して L を 8, 10, 15, 20, 30, 40 ($R=20$ のみ) と変化させ、体積分率と着火確率の関係を調べた。ここで $L > R$ である。 R を大きくすることは、スパークプラグからの発熱の規模を、燃料粒子一つの発熱よりどの程度大きくするか、ということの意味する。この部分が、火花点火エンジンにおける着火の特徴を表現している。まず $R=3$ の場合について、 L を 8, 10, 15, 20 と変化した結果を図 6、 $R=5$ の場合を図 7、 $R=10$ の場合を図 8、 $R=15$ の場合を図 9 に、 $R=20$ の場合を図 10 に示す。

R を 1 から 3 へ増やしたことにより、臨界濃度が約 0.1 程度に低くなった。また、着火確率が 1 へ近づくまでの立ち上がり格段に早くなった。 $R=1$ の場合は、着火確率と臨界濃度が対応していた。しかし、 $R=3$ となったことで、着火確率は「半径 1 の任意の粒子が大きなクラスターに含まれる確率」ではなく、「半径 3 の球の一部が大きなクラスターに含まれる確率」へと変化した。この体積 27 倍への変化により、大きなクラスターが存在していれば、スパークプラグの発熱がそこに届きやすくなったものと考えられる。 R をさらに大きくしていくと、着火確率は、大きなクラスターが存在する確率そのものに近づいていく。この系の両端を結ぶクラスターの出現確率を図 11 に示す[2]。 R が大きくなると、系の端まで達する大きなクラスターがある場合に、そのクラスターにスパークプラグからの発熱が届く確率が高くなる。つまり、 R を 1 から大きくすることで、着火確率は図 4 から図 11 に近づいて行くことが予想される。図 3 の実験結果を見ると、明らかに図 4 よりも図 11 に近い。これはスパークプラグの発熱が大きいという、火花点火エンジンの特徴が表れているものと推測される。

3.2.2. L の変化が着火確率に及ぼす影響

着火と判定する距離 L を変化させた影響を調べる。パーコレーションモデルにおいては、系の大きさを変えると、無限の大きさのクラスターが生成する確率の、濃度に対す

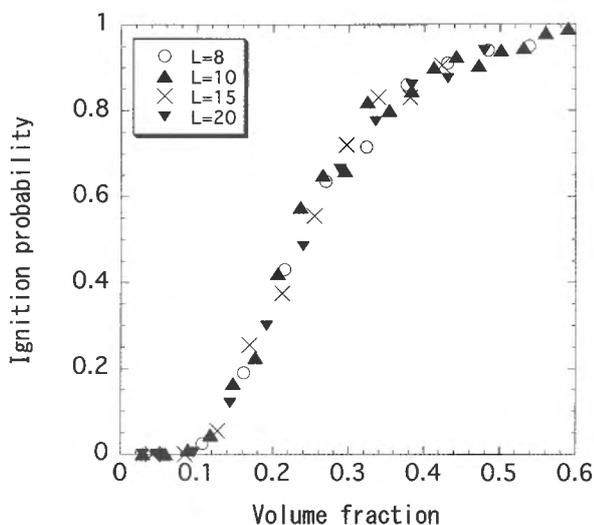


Fig.6 Ignition probability for volume fraction

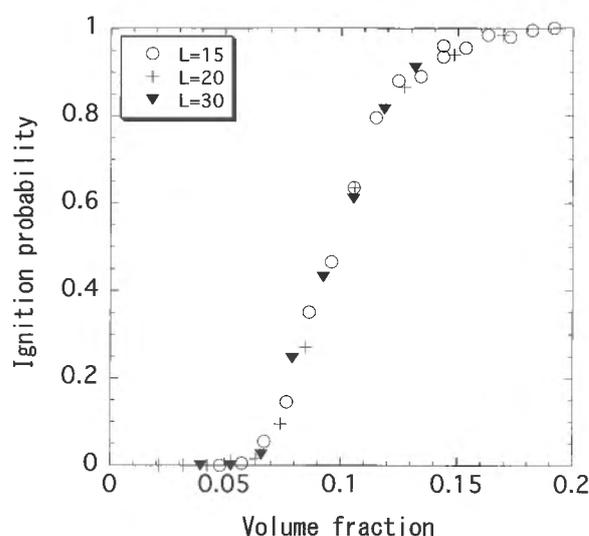


Fig.8 Ignition probability for volume fraction

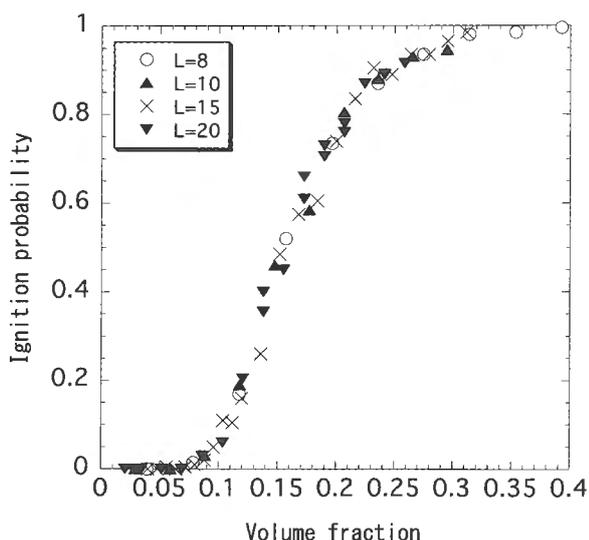


Fig.7 Ignition probability for volume fraction

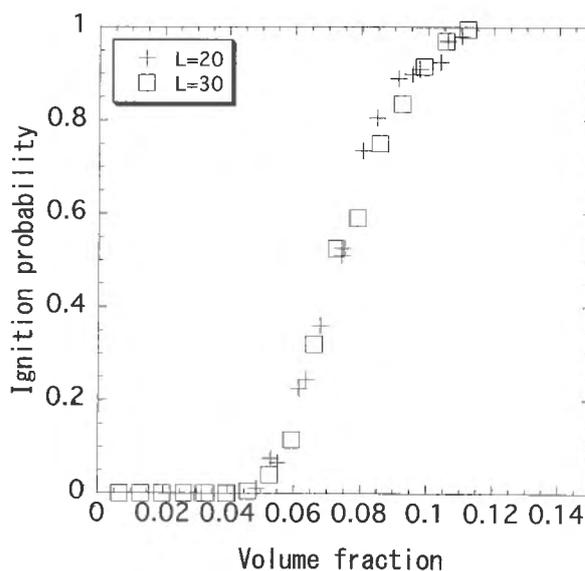


Fig.9 Ignition probability for volume fraction

る依存性が変化する。パーコレーションモデルにおける、系の両端を結ぶクラスターの出現確率の図 11 において、系の大きさが有限である場合(細線)には、着火確率はなだらかに変化していくが、系の大きさが無限になると(太線)臨界濃度 p_c を超えた濃度では必ず大きさが無限大のクラスターが出現する。従って、パラメータ L を変えることは、大きなクラスターの出現確率、つまり着火確率の濃度による影響が変化するものと予想される。具体的には、濃度変化に対する着火確率の立ち上がり之急になっていくことが考えられる。

しかし $R=3, 5, 10, 15, 20$ (図 6 - 図 10) それぞれについて L を変化した場合において、着火確率が 1 に近くなる部分での傾きに多少変化が見られるものの、立ち上がりの角度に変化は見られなかった。発熱反応の伝播の可否は、

系のサイズよりも燃料の濃度によって左右され、系はある程度の大きさがあればそれ以上の拡大は不要であることが示唆された。

3.2.3. 計算と実験との比較

各条件の計算結果を見ると、「濃度 0 から立ち上がり始めるまでの濃度変化」と、「立ち上がり始めてから着火確率が 1 に達するまでの濃度変化」の比率が R によって変化することがわかる。実験結果では両者の比率が 1:1 から 1:2 の間であるのに対し、計算結果では $R=15$ または $R=20$ の場合にこの範囲内の結果が得られたが、 R が 10 より小さい場合は、1:3 以上となった。従って、スパークプラグの放電による加熱が、燃料の発熱反応による加熱よりも大きいことを表現するためには、 R がある程度以上の大き

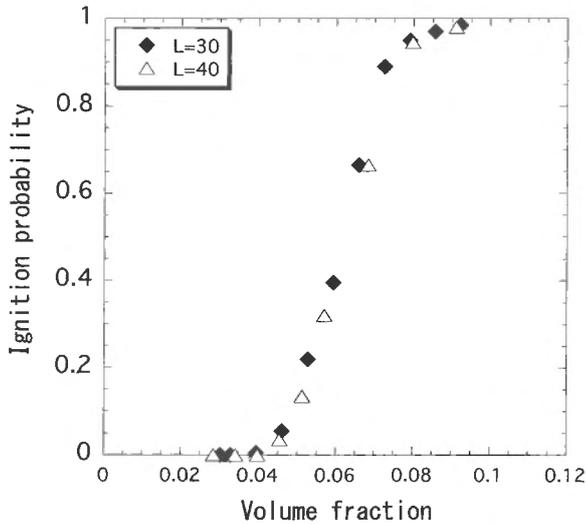


Fig.10 Ignition probability for volume fraction

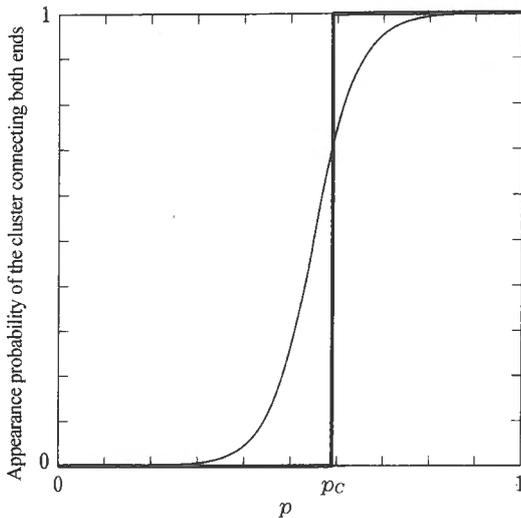


Fig.11 Appearance probability of the large cluster which connects both ends of the area (2D)

さであることが必要である。計算結果では、 R の変化が、着火確率が立ち上がる濃度 (閾値) に大きな影響を与えているが、これは実際のエンジンにおいてスパークプラグのエネルギーが着火確率に大きな影響を与えることと類似性を見せている。また、今回の計算結果では、 R と L が 1 : 2、すなわちスパークプラグによる加熱の有効範囲が、火炎核のサイズの半分以上の場合に実験結果に近い着火確率曲線が得られた。これは火炎核のサイズは、スパークプラグによる加熱の有効範囲の倍程度であることを示唆している。ここでは、スワールが強い場合と弱い場合の影響と R 、 L との関係を確認するには至らなかった。

4. 結言

火花点火エンジンの希薄着火限界における着火現象を、連続空間でのパーコレーションモデルを用いることで、簡便にシミュレートした。火花点火エンジンによる着火を表現するため、以下の条件を適用したところ、実際のエンジンでの試験結果をよくシミュレートできることがわかった。

1. スパークプラグの発熱によるつながりの範囲を、燃料の発熱によるつながりの範囲よりも大きく設定する (15 - 20 倍)
2. 到達距離 L はスパークプラグの発熱によるつながりの範囲 R の倍以上とする

前者はスパークプラグの放電による加熱が燃料の反応による加熱よりも大きいことを表現し、後者は反応がここまで進めば着火を起こす、という火炎核のサイズがスパークプラグによる加熱の有効範囲の倍程度であることを示している。

謝辞

本研究を行うにあたり、パーコレーションモデルについて助言をいただいた東京大学地震研究所小屋口剛博教授、実験に関してご助力頂いた JOMO テクニカルリサーチセンターの方々に謝意を表す。

References

1. Hamamoto, Y., Wakisaka, T., and Ohigashi, S., *Proc. Sixteenth Int. Congr. FISITA* 2-53 (1976).
2. Wakisaka, T., and Hamamoto, Y., *Bulletin of the JSME* 22: 282 (1979).
3. Peters, B. D., *I. Mech. E. C* 92: 63 (1979).
4. Arici, O., Tabaczynski, R. J., and Arpaci, V. S., *Combust. Sci. Tech.* 30: 31 (1983).
5. Pischinger, S., and Heywood, J. B., *Proc. 23rd Symp. (int.) Combust.* 1033 (1990).
6. Odagaki, T., *Introduction to Percolation Physics* (in Japanese) (1992).
7. Odagaki, T., *Science of Connection* (in Japanese) (2000).
8. Takamori, S., and Umemura, A., *Application of Percolation Theory to Spray Combustion*, *J. Combust. Soc. Japan* 45:95-102 (2003).