

■原著論文/ORIGINAL PAPER ■

乱流燃焼モデルと簡易化学動力学モデルの連成計算による
ガソリンエンジンのノッキング予測解析Knock Prediction on Gasoline Engines by Coupling with Turbulence Combustion Model and
Simple Chemical Kinetics Model中間 健二郎^{1*}・村瀬 栄二¹・草鹿 仁²・大聖 泰弘²NAKAMA, Kenjiro^{1*}, MURASE, Eiji¹, KUSAKA, Jin², and DAISHO, Yasuhiro²¹ スズキ株式会社 〒224-0046 横浜市都筑区桜並木2-1
SUZUKI MOTOR CORPORATION, 2-1 Sakuranamiki, Tuzuki-ku, Yokohama, 224-0046, Japan² 早稲田大学理工学部 〒169-8555 新宿区大久保3-4-1
Waseda University, 3-4-1, Okubo, Shinjyuku-ku, Tokyo, 169-8555, Japan

2005年6月15日受付；2005年8月27日受理／Received 15 June, 2005; Accepted 27 August, 2005

Abstract : A multi dimensional model for the simulation of flow and combustion in combustion chamber was extended to knock calculation by coupling turbulence combustion model with simple chemical kinetics model. A Flamelet model proposed by Tahry that based on the probability of finding the flame and take into account of the strain rate has been implemented for the accurate prediction of flame propagation in homogeneous-charge turbulent pre-mixed combustion. A Shell model proposed by Halstead, modified to satisfy the principle of mass conservation and conservation of oxygen atom was used for knock calculation and combined with the Flamelet model to estimate the knock onset location and the timing. Visualizations were performed in order to verify the calculation accuracy for flame propagation and knock onset location. Flame propagation was visualized in an optical access engine, while knock detection was visualized in an actual engine. Moreover, the Effects of in cylinder flow on knock onset location were examined at different conditions such as tumble, reverse tumble and swirl flow field. The results confirmed that the calculations predicted flame propagation well. Simulation of the knock onset location was also shown to be possible. Applying this calculation to different in cylinder flow conditions, these were show that in cylinder flow affects knock onset location greatly. Furthermore, these calculations well agreed with experimental results.

Key Words : Knocking, SI engine, Combustion, Computational Fluid Dynamics, Flamelet model, Auto-ignition model

1. 緒言

火花点火式ガソリン機関において、理論熱効率向上の有効な手段として、点火時期や圧縮比の最適化が挙げられる。火花点火式ガソリン機関のトルクは、一般的に点火時期を進角することで増大し、MBTで最大となる。また、圧縮比を増加させるほど理論熱効率は向上する。しかし、これらの手段による熱効率の向上はノッキング(以下ノック)の発生によって制約を受ける。したがって、火花点火機関における熱効率向上には、ノックの抑制が課題となる。このため、ノックに関する研究が古くから行われている [1]。近年では、コンピュータの高性能化にともない、計算流体

力学を基盤とした数値計算でノックを予測する研究が盛んに行われるようになってきた。

数値計算によるノックの予測は大きく二種類に大別できる。一つはノックの発生時期予測を目的とした0次元計算である。燃焼室内の温度、圧力、混合気分布を空間的に均一と仮定し、非定常計算を行うもので、ノックの予測にはCHEMKIN II[2]に代表されるような詳細化学動力学計算やLivengood-Wu積分[3]による着火遅れ計算などを用いる。もう一つは多次元計算である。多次元流体計算と前述のモデルを組み合わせ、ノックの発生時期に加え、発生位置を予測することを目的としたものである。ノック特性に影響する主要因の明確化やノックを効果的に回避する手法を模索するためには、多次元による計算が有効であると考えられる。

実用的なレベルで計算を行うためには、実現象との差異

* Corresponding author. E-mail: knakama@hhq.suzuki.co.jp

を許容範囲内に留め、計算コストを最小限とする必要がある。このような観点から考えると Livengood-Wu 積分をノックモデルとして用いる利点は大きい。寺地ら[4,5]は反応動力学計算で予め着火遅れ時間のテーブルデータを作成し、温度、圧力履歴に沿って Livengood-Wu 積分を行うことで、ノックの定性的な予測を行っている。しかし、この手法では膨大なテーブルデータが必要になる可能性がある。また、温度、圧力履歴に沿って計算を行う場合、一般的にノック発生時期や発生位置に影響を与えると考えられる中間生成物の移流の影響を表現することが難しい。

一方、詳細化学動力学計算を用いた場合、生成物の移流効果やその酸化反応機構を検討することが可能となる。しかし、数千におよぶその酸化反応機構を多次元計算に展開するためには膨大な計算コストがかかる。また、単一もしくは数成分の炭化水素系燃料の詳細反応モデルは明らかになっているが、ガソリンの詳細反応は未だ解明されていない。

そこで筆者らは、上記問題を解決するモデルとして、ガソリンエンジンのノック予測モデルとして Halstead らにより提案された Shell 簡易化学動力学計算[6]に注目し、多次元計算へ適用することとした。本研究では火炎伝ばモデルと自着火モデルを組み合わせ、ノック発生位置予測計算を行い、実験と比較することでその妥当性を示すとともに、異なる筒内流れ場におけるノック発生位置予測精度を検証した結果について報告する。

2. 乱流燃焼モデル

ノックの予測に当たっては乱流燃焼の正確なモデル化が必要になる。そこで筆者らは、火炎の存在確立の輸送方程式をベースとし、乱流ひずみ速度が火炎伝ば速度へ与える影響を考慮した Tahry ら[7,8]のモデルを適用することで、乱流燃焼のモデル化を行った。

2.1. Flamelet モデル

Flamelet モデルは乱流火炎を局所的には層流火炎素面として扱うモデルである。化学反応は未燃ガスに進行する層流火炎前面のわずかな領域で起こり、化学時間スケールが流体時間スケールよりも極めて短いときにモデルは成立する。Flamelet モデルは大別すると火炎面積密度の輸送方程式を基礎としたもの[9,10]と火炎の存在確立の輸送方程式を基礎としたもの[7,11]に分類できる。本研究で用いたモデルは後者に属する。モデル化にあたっては、流れの輸送方程式に加えて二つの輸送方程式が必要になる。一つは反応の局所平均こう配を示す平均反応進行変数 $\tilde{C}(x,t)$ に関する輸送方程式である。ここで記号“ \sim ”は密度加重平均を示す。もう一つは火炎の存在確立 $\gamma(x,t)$ に関する輸送方程式である。 $\tilde{C}(x,t)$ と $\gamma(x,t)$ に関する式は以下の通りである。

$$\frac{\partial(\langle \rho \rangle \tilde{C})}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \tilde{U} \tilde{C}) = \nabla \cdot (\Gamma_C \nabla \tilde{C}) + \gamma \rho_u s_l / \delta_l \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\langle \rho \rangle \tilde{\gamma})}{\partial t} + \nabla \cdot (\langle \rho \rangle \tilde{U} \tilde{\gamma}) = \nabla \cdot (\Gamma_\gamma \nabla \tilde{\gamma}) - c_1 \gamma \rho_u s_l / \delta_l + c_2 (1 - \gamma) \rho_u [\tilde{C}(1 - \tilde{C}) - M \gamma] \varepsilon / k \quad (2)$$

ここで、 s_l は層流火炎速度、 Γ_C と Γ_γ はそれぞれ \tilde{C} と γ の乱流輸送係数、 c_1 と c_2 はモデル定数である。式(2)は文献[7]の \tilde{Z} に関する方程式を $\tilde{Z} = M \gamma$ の関係式を用いて置き直したものである。 \tilde{Z} は $\tilde{Z} = \tilde{C}(1 - \tilde{C})$ で定義される変数であり、 M は

$$M = \int_0^1 C(1-C)f(C)dC \quad (3)$$

である。 $f(C)$ は C の確率密度関数である。なお、 M は熱力学的条件にほとんど影響を受けないという予測から、一定であると仮定し定数として扱った。モデルには c_1 、 c_2 および M の定数が存在することになるが、各々の値は Khalighi ら[8]が1次元の乱流火炎伝ば計算を元に設定した値を用いた。

ここで、本モデルと火炎面積密度 Σ で定式化されたモデルの関係を明らかにするために、 γ と Σ の関係を示しておく。体積 V (例えば1計算セル)内の平均燃料消費率 $\bar{\omega}_f$ は、火炎の単位面積あたりの平均燃料消費率 $\rho_u Y_{fu} \bar{s}_l$ に体積 V における火炎表面積 $\bar{\Sigma}$ を乗ずることで表すことができる。

$$\bar{\omega}_f = \rho_u Y_{fu} \bar{s}_l \bar{\Sigma} \quad (4)$$

ここで ρ_u は未燃ガス密度、 Y_{fu} は未燃ガス内の燃料の質量分率である。“ $\bar{\quad}$ ”は V 内の火炎面における面積平均を意味し、“ \sim ”は体積内における体積平均を意味する。また同様に、平均燃料消費率は、火炎の単位体積あたりの消費率 $\rho_u Y_{fu} \bar{s}_l / \delta_l$ に体積 V 内での火炎の存在確立 $\bar{\gamma}$ を乗ずることで表現できる。

$$\bar{\omega}_f = \rho_u Y_{fu} \bar{s}_l \bar{\gamma} / \delta_l \quad (5)$$

(4)(5) 式を同等とすると、火炎表面積 $\bar{\Sigma}$ と火炎存在確立 $\bar{\gamma}$ には以下の関係があることが分かる。

$$\bar{\Sigma} = \bar{\gamma} / \delta_l \quad (6)$$

なお式(6)は平均値記号“ $\bar{\quad}$ ”を外すとそのまま局所値となる。

$$\Sigma = \gamma / \delta_l \quad (7)$$

2.2. 乱流ひずみ速度が火炎伝ば速度へ与える影響

ひずみ速度は予混合層流火炎の火炎速度に大きな影響を

与える。ひずみ速度が十分に大きい場合, Flamelet モデルの概念そのものが成り立たなくなる[12]。しかしながら, Blint ら[13]は, ひずみ速度が火炎伝ば速度に与える影響に関して, IC エンジンの運転条件内では, ひずみの無い条件での火炎速度と火炎厚さにわずかな修正を加えることで, 予測することが可能であるとしている。ひずみ速度が火炎に与える影響を評価する基準として, Damköhler 数の逆数で表現されるひずみ Karlovitz 数 (Ka) が挙げられる。 Ka は化学反応特性時間スケールと流体時間スケールの比であり, ひずみ速度が大きいと Ka は大きくなる。そこで, Tahry らは層流火炎速度 s_l に Damköhler 数による修正を施すことでひずみ速度の影響を考慮している[8]。ひずみ速度の影響は化学反応特性時間 τ_{cm} を以下のように仮定することにより考慮される。

$$\tau_{cm} = \delta_l / s_l + c_l \tau_r / \exp(Da_r) \quad (8)$$

ここで c_l は定数, τ_r は参照化学反応特性時間スケールである。また, Da_r は Damköhler 数で以下のように定義される。

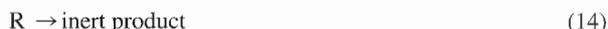
$$Da_r = k / (\varepsilon \tau_r) \quad (9)$$

今回の計算では, τ_r は計算領域における τ_{cm} の平均値として, 一定の定数として扱うこととした。なお, 式(8)の指数部分は, Damköhler 数が小さいときに反応速度が急激に変化するという実験結果[13]を元に定義されている。また, 定数は Tahry らにより行われた乱流予混合火炎の数値計算[12]を元に設定されている。式(8)は分母に Da_r を含む指数部分を持つため, 反応速度に対して, Da_r が大きい場合は緩やかに, Da_r が小さくなると急激に変化する。このため, 式(8)は多くの乱流燃焼モデルで問題になる壁近傍で反応が増速するという現象を抑制する効果がある。しかしながら, ひずみのメカニズムに関しては, 今回用いた大スケール渦の特性 k/ε の他にも色々な選択肢が考えられるため, 今後議論していく必要がある。

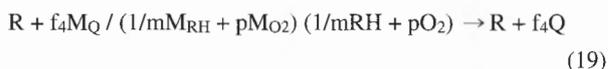
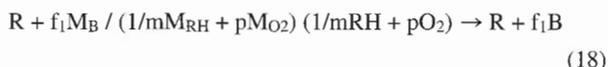
3. 自着火モデル

3.1. Shell モデル

筆者らはエンドガスの自着火を予測するためのモデルとして, Halstead らにより考案された Shell モデル[6]を用いた。Shell モデルはアルカン燃料の低温酸化反応を表現するために開発された簡易反応モデルであり, 一般化された5つの化学種と8つの反応式からなる。以下にその反応式群を示す。



ここで, RH は燃料 ($RH = C_nH_{2m}$), O_2 は酸素, R はアルキルラジカル, B は分岐担体, Q は中間生成物, Product は最終生成物 (CO, CO_2, H_2O) を示す。Shell モデルを多次元へ適用する場合, 一般化された化学種の質量(分子量)を特定化して, 各反応における質量保存則を満足する必要がある。Halstead らのモデルでは, 式(12)や式(15)のように, 新たに B や Q が生じるために, 質量保存則を満たさなくなってしまう多次元への適用ができない。そこで, Schäpertöns ら[14]は, 以下の式(18)(19)のように B, Q の生成と共に燃料と酸素を消費するものとして B, Q の生成式を変形し, 多次元への適用を可能としている。



ここで, M は各化学種の分子量。しかしながら, 燃料と酸素から B と Q が生成される化学反応式(18)(19)は反応式(10)(13)(17)をベースにした化学反応式と矛盾する。Sloane ら[15]は式(18)(19)を以下のように改良することで, この問題を解決している。



そこで本報告では Sloane らによる改良手法を用いて, Shell モデルを多次元問題へ展開することとした。

反応を簡易化した Shell モデルの反応速度定数は, 実験値との調整により決定される。Halstead らは文献[6]の中で, RON90 の PRF (Primary Reference Fuel) に対して, 急速圧縮装置 (RCM : Rapid Compression Machine) で得られた予混合気の着火遅れの実験値に対して計算値が一致するよう定数を設定している。本研究で使用する市販レギュラガソリンは RON90 であるため, Halstead らの反応速度定数を利用した。しかしながら, Halstead の反応速度定数は熱損失を考慮した0次元での解析で求めた定数である。このため, 断熱計算において彼らの反応速度定数を使って着火遅れを計算すると, 実験の着火遅れより短くなることは明白である。このことは, Schäpertöns らも文献[14]で指摘している。しかし同時に, その計算精度がノック発生位置予測のケーススタディを行うのに十分な精度を持っていることも述べている。なお, 本モデルの計算精度については, Halstead ら[6]の RCM による着火遅れ実験結果と彼らの RCM を模擬した三次元モデルを用いた着火遅れ計算結果を比較する

ことで検証を行っており, Schäpertöns ら[14]の検証結果と同程度の誤差に収まっていることを確認できている。

次に, Shell モデルで取り扱う化学種の物性値について説明を行う。先に述べた通り, Shell モデルを多次元へ拡張する場合, 一般化された化学種の質量を特定化する必要がある。これら化学種の特定化に関しては, 次に示す Schäpertöns ら[14]により提案された方法を用いることとした。化学種 R の分子量は, 式(10)より

$$M_R = (M_{\text{fuel}} + M_{\text{O}_2}) / 2 \quad (22)$$

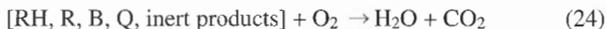
により求める。同様にして, 化学種 Q および化学種 B の分子量は, 式(13)および式(17)から求まり,

$$M_B = M_Q = 2 M_R \quad (23)$$

となる。また, 温度計算に必要な比熱や一般化された化学種の輸送計算に必要な拡散係数などの物性値に関しては, O₂ と同様であると仮定して計算を行うこととした。

3.2. 熱炎反応モデル

前述の Shell モデルはアルカン燃料の低温酸化反応を表現するためのモデルであり, その後に続く熱炎反応を表現することは出来ない。熱炎反応は熱発生に寄与する重要な反応であり, ノック発生時の筒内現象を正確に再現するためには, これを記述する必要がある。そこで筆者らは Theobald ら[16]により提案された一段の熱炎反応モデルを用いることとした。反応式を以下に示す。



反応式(24)の反応速度定数は以下の通りである。

$$k = A \exp(-E_a/RT) [\text{RH}]^a [\text{O}_2]^b \quad (25)$$

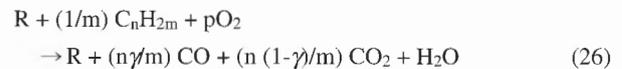
反応速度パラメータは Theobald らがドデカン C₁₂H₂₆ で設定した値[16]を用いた。ドデカンをベースにした反応速度パラメータを用いることは, ガソリン燃料におけるノック発生後の現象を正確に模擬する上では問題を含んでいる。しかしながら, 本報告では火炎伝播からノックに至る過程をモデル化し, ノック発生位置および発生時期についてモデルの妥当性を検討することを目的としている。本計算においてはノック発生位置や発生時期を中間生成物 Q が急激に増加する位置や時期を元に定義している(5.3節)。この中間生成物 Q の増加に寄与する反応は Shell モデルの化学反応式であるため, ドデカンをベースとした反応速度パラメータがノック発生位置や発生時期に影響を与えることは無い。ただし, ノック強度等を計算にて検討する場合, 熱炎反応は非常に重要な役割を果たすため, 今後検討が必要

である。

3.3. 発熱量の取り扱い

自着火モデルにおいては, 式(11)および式(24)により, 発熱を表現している。本節では, 式(11)の Shell モデルの発熱量の取り扱いについて説明を行う。なお, 式(24)に関しては, 同様の取り扱いとなるため, ここでは説明を省略する。

燃料より 2 個の水素原子が引き抜かれ, 最終生成物である H₂O が 1 個生成されると仮定すると, 式(11)は以下のように表される。



ここで, γ は -CH₂- の酸化により生成される CO と CO₂ の比に相当し 0.67 と定義している。また, 式中の p は

$$p = (n\gamma/m + n(1-\gamma)/m + 1)/2 \quad (27)$$

である。以上の反応式より, Shell モデルにおける発熱量 q は次のように計算される。

$$\begin{aligned} dq/dt = k_p [\text{R}] & \{ -(1/m) E_{\text{fuel}} \\ & + (n\gamma/m) E_{\text{CO}} + (n(1-\gamma)/m) E_{\text{CO}_2} + E_{\text{H}_2\text{O}} \} \end{aligned} \quad (28)$$

ここで, k_p は式(26)における反応速度定数を, E はそれぞれの化学種の真発熱量を, [R] は R のモル分率を示す。なお, 発熱量の取り扱いの詳細に関しては文献[6,16]を参照されたい。

4. 計算および実験方法

本研究では前述の Flamelet モデルおよび Shell 改良モデルを三次元流体燃焼解析コード GMTEC[8]に組み込み計算を行った。流れの基礎方程式にはアンサンブル平均化された圧縮性 Navier-stokes 方程式を, 各化学種に関しては取り扱い化学種数に応じた輸送方程式を用いた。乱流モデルには標準 $k-\epsilon$ モデルを使用し, 壁面には壁法則を用いた。基礎方程式は有限体積法にて離散化されている。圧力解法には PISO アルゴリズムを使用した。空間差分には一次精度の風上差分と二次精度の中心差分を組み合わせたハイブリッドスキームを用いた。計算方法の詳細については文献[17]を参考されたい。

次に, Flamelet モデルおよび自着火モデルを組み込んだ GMTEC 内の計算処理の概略について記す。GMTEC 内の計算処理は, 1) 計算パラメータ, 熱物性値の読み込み, 2) 積分時間の更新, 3) メッシュ移動, 4) 自着火モデル計算, 5) Flamelet モデル計算, 6) 流れ場計算, 7) 圧力, 温度計算, の順序で行われる。4), 5) で各化学種の質量や発熱量の変

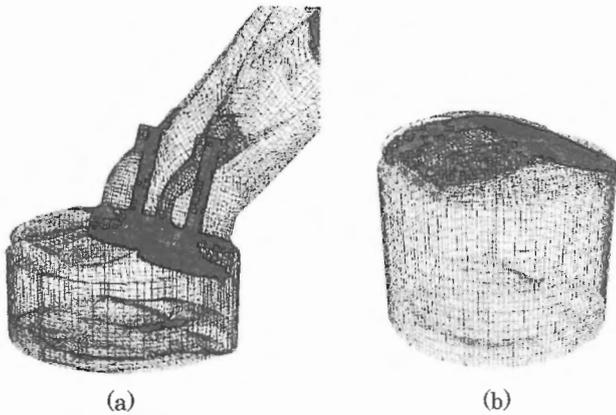


Fig.1 Numerical meshes used in the computation: (a) intake stroke mesh. (b) compression stroke mesh.

化量が計算され, それぞれ, 各化学種の輸送方程式の生成項およびエネルギー方程式の生成項を通して, 流れ場と連成されることとなる. ここで, 4) の自着火モデルの計算は, 5) の Flamelet モデルにおける未燃領域にのみ適用されている. つまり, 点火プラグから成長する火炎の伝播および熱発生や化学種の変化量に関する計算は Flamelet モデルで行い, それ以外の領域に自着火モデルを適用し, 低温酸化反応から熱炎反応に至る計算を行うこととなる. なお, 4) の自着火モデル計算に関しては, 2) の積分時間を更に分割したサブサイクル計算を行っている.

実験との比較検証に用いた計算用解析モデルを図 1 に示す. 計算時間の削減や圧縮行程での詳細な計算を目的に, 吸気行程用と圧縮行程用の二種類のメッシュを用いた. 吸気行程用のメッシュ (a) は吸気ポートを含めて約 15 万セル, 圧縮行程用のメッシュ (b) は約 9 万セルである. なお, このセル数はメッシュサイズが計算に与える影響を予め調査し, メッシュの影響を無視できるサイズであることを確認している.

燃焼モデルを検証するために行った火炎の自発光撮影および筒内の流速分布の計測は, 表 1 に示す諸元の可視化エンジンを用いて行った. 本エンジンは延長ピストン頂部およびシリンダ側面に可視化範囲 $\phi 60$ mm の石英観測窓を装着できる構造になっている. 火炎の自発光撮影は高速度ビデオカメラにより行い, 光量は ND フィルタにより調整した. 筒内流速分布の計測には PIV を利用した. 光源には 2 機の Nd-YAG の第 2 高調波 ($\lambda = 532$ nm) を利用し, トレー

Table 1 Optical access engine specifications

Engine	4-Stroke, 4-Valve, 1.3L, I-4
Combustion Chamber	Pentroof Type
Bore×Stroke	78×69.5 mm
Compression Ratio	10
Throttle Opening	WOT
Engine Speed	1200 r/min

Table 2 Specifications of knock experimental engine

Engine	4-Stroke, 4-Valve, 1.6L, I-4
Combustion Chamber	Pentroof Type
Bore×Stroke	78×83 mm
Compression Ratio	10.4
Throttle Opening	WOT
Engine Speed	1500 r/min

Table 3 Initial conditions and boundary conditions

Inlet pressure	100.0 kPa
Inlet temperature	350.0 K
Intake port wall temperature	350.0 K
Intake valve temperature	423.0 K
Piston temperature	450.0 K
Sleeve temperature	370.0 K

サ粒子として酸化チタンを用いた. 得られた画像は 20 サイクルで平均処理を行っている.

一方, ノックの発生位置精度を検証するために行った実験は, 表 2 に示す 1.6 L 直列 4 気筒エンジンで行った. 本エンジンは表 1 に示したエンジンに対して, ストロークを 69.5 mm から 83 mm に延長しているが, その他の諸元は表 1 のエンジンと同様である. ノックの発生位置の検出には AVL 社製の VisioKnock™ を用いた. VisioKnock™ は点火プラグに円周上に配置された 40 本の光ファイバにより, 火炎の輝度を計測することでノック発生位置を検出する装置である. 筒内圧力はピエゾタイプの筒内圧センサにて計測を行った. 両実験とも, 燃料供給はポートインジェクションによって行い, 燃料には RON90 のレギュラガソリンを使用した.

ノック予測計算で用いた境界条件を表 3 に示す. 各値は前述のノック実験で得られた値を元に設定した. 燃焼室壁面の温度はノックの予測精度に影響を与えるため, 正確に与える必要がある. 本計算において吸気バルブの温度は Alkidas による経験式 (18) を元に, ピストンの温度は Hanra による実験結果 (19) を元に見積もりを行い, それぞれ 423 K および 450 K とした.

5. 結果および考察

5.1. 乱流ひずみ速度が火炎形状へ与える影響

2.2 節で, Tahry ら[7,8]の仮定を用い, 乱流ひずみ速度が火炎伝ば速度へ与える影響を考慮することで, 壁近傍で反応が増速するという現象を抑制する効果があることを説明した. そこで, この仮定が計算結果に与える影響を示す. ひずみ速度の影響は化学反応特性時間 τ_m を式 (8) のように仮定することで考慮される. 乱流によるひずみの影響を考慮しない場合, 化学反応特性時間 τ_m は以下の通りとなる.

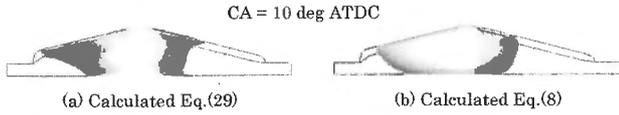


Fig.2 Effects of turbulent strain rate on flame propagation. Flame surface was defined at the location of reaction rate 25 %.

$$\tau_{cm} = \delta_l / s_l \quad (29)$$

図2は、クランク角10° ATDCにおける式(8)および式(29)による反応速度の計算結果を示す。式(29)では火炎の進行方向に対して、火炎面形状が凹であるのに対して、式(8)では凸形状になっていることが分かる。火炎面形状が進行方向に対して凹形状となるのは、Flameletモデルがその生成項に乱流混合特性時間 k/ϵ に逆比例する要素を含んでいることによる。このように壁面近傍で燃焼率が高くなり、火炎面の形状が進行方向に対して凹形状となる現象が実現象に対して不合理のあることはWeller[20]らによって指摘されている。これに対し、式(8)では τ_{cm} がその逆の特性を持っているため、結果的に壁面での反応が押さえられることとなる。

5.2. 乱流燃焼モデルの計算精度検証

ノックの予測を行うためには、その前段となる乱流燃焼を正確に予測することが必要となる。そこで、Flameletモデルの火炎伝ば挙動、筒内圧力履歴および質量燃焼割合に関する予測精度の検証を行った。

表1に示す諸元の可視化エンジンにおける自発光撮影結果を図3(a)に示す。エンジンの運転条件は回転速度1200 r/min、空燃比14.6、スロットル開度全開、点火タイミング8° BTDCである。シリンダ中央に設置された点火プラグにより着火した火炎は、吸気側への伝ばが遅れ不均一な構造になっていることが分かる。これは、図4(c)のCA=40° BTDC、ヘッドデッキ面1mm下方における筒内流速

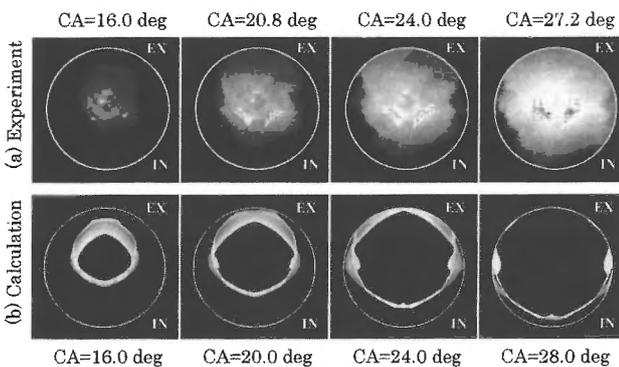


Fig.3 Comparison of flame propagation between (a) experimental results and (b) calculated results at table 1 condition. (a) Chemiluminescence's photograph. (b) Flame surface was defined at the location of reaction rate 25 %.

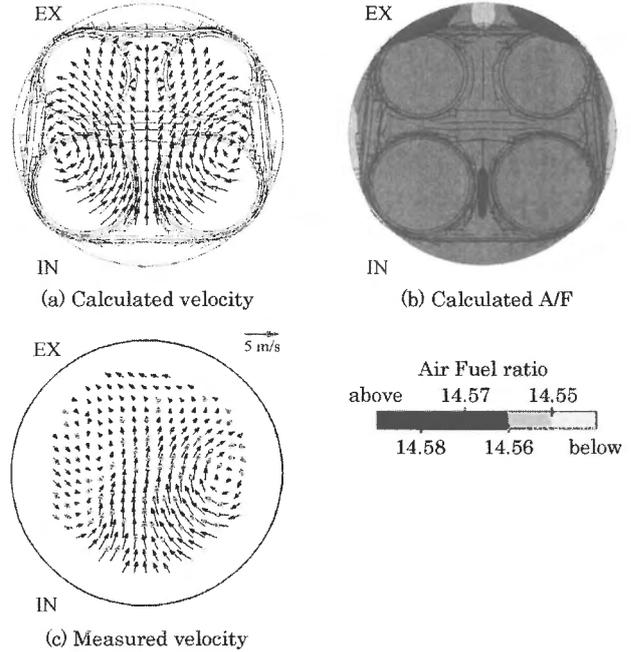


Fig.4 Comparison of in cylinder velocity between (a) calculated velocity and (c) measured velocity at 1 mm below from head deck. Velocity image was taken by using the Particle Image Velocimetry instrument. (b) Calculated results of Air-Fuel ratio distribution at table 1 condition.

ベクトル可視化結果から分かるように、筒内の流れ場が吸気側から排気側への強い方向性を持っていることによる。このことは、図4(a)の計算流速ベクトルが実験と同様に吸気側から排気側への強い方向性を持っていることと、図4(b)の混合気分布が均一であることから推測できる。図3(b)に計算によって得られた火炎面の結果を示す。可視化実験結果と同様、吸気側への伝ばが遅れ不均一な構造となっていく様子を正確に再現している。また、火炎の伝ば速度に関しても正確に実験を再現していることが分かる。このことから、火炎伝ば挙動に関して計算が十分な精度を有していることが確認された。

次に、表2に示す諸元の実機エンジンにて計測を行った筒内圧力履歴と熱発生履歴および質量燃焼割合を計算と比較した結果を図5, 6に示す。エンジンの運転条件は回転速度1500 r/min、空燃比12.9、スロットル開度全開、点火タイミング2.5° BTDCである。アンサンブル平均された計算値と実験値を比較するために、実験値は100サイクルの平均データを用いた。図5の圧力履歴と熱発生履歴から、計算結果は実験結果の圧力ピーク位置や熱発生ピーク位置を正確に予測できていることが分かる。また、図6の質量燃焼割合に関しても、計算結果はその実験結果を概ね再現していることが分かる。しかしながら、それらの絶対値に関しては、各値とも実験結果に対してわずかながら過大に見積もっていることが分かる。これは、壁面熱伝達の計算にLaunderとSpalding[21]により提案された非圧縮性で定義される無次元温度を用いていることによる。Hanらは文

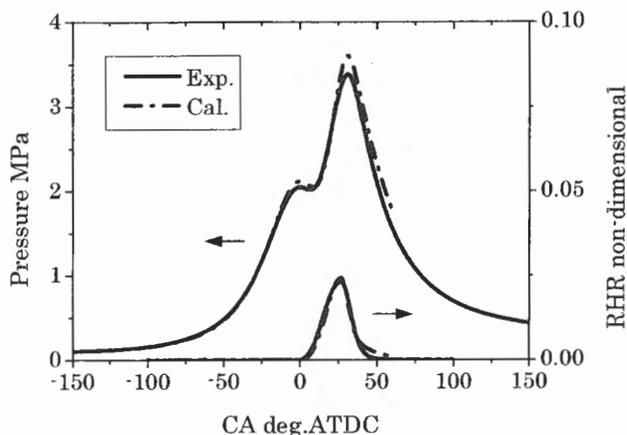


Fig.5 Comparison of in cylinder pressure and rate of heat release between experiment and calculated results at table 2 condition.

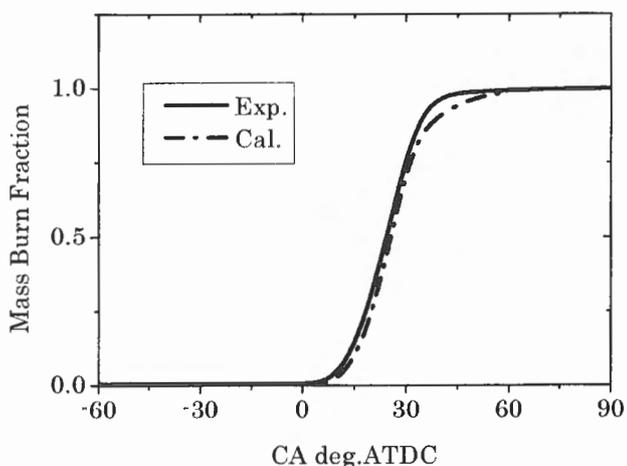


Fig.6 Comparison of mass burn fraction between experiment and calculated results at table 2 condition.

献[22]にてこの問題を指摘しており, 今後圧縮性で定義される無次元温度を用いることで改善できると考えられる. また, 寺地ら[5]は化学反応による発熱量に関して, 熱解離の影響を考慮する必要性も指摘している. この問題に関しても今後改善が必要である.

5.3. ノック発生位置予測計算精度の検証

前節では, 乱流燃焼モデルのモデル化とその計算精度について述べた. これにより, ノック予測前段の計算が十分な精度を持っていることを確認できた. 本節では, 燃焼室内でのノックの発生位置に関する検証を行う. 検証に用いる計測は表 2 に示したエンジンで行った. エンジンの運転条件は回転速度 1500 r/min, 空燃比 12.5, スロットル開度全開である. 点火タイミングはヘビーノック発生確率が 50% 以上になるように設定した. なお, ノックの計測は 4 気筒全てで行っているが, ノックの気筒間ばらつきを確認した結果, 本条件において, 各気筒におけるノック発生確率が高い位置の変化は $\pm 9^\circ$ 以内に収まり, その傾向は変わ

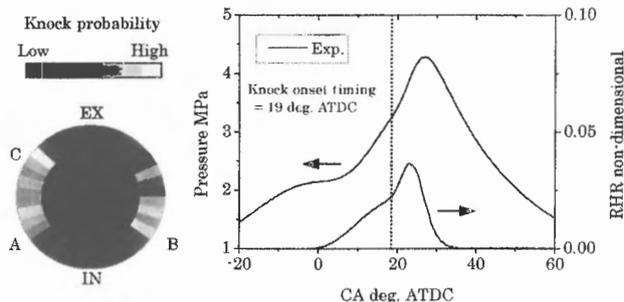


Fig.7 Knock onset location, pressure and RHR history. Left figure shows probability distribution of knock onset location at table 2 condition. Knock onset location was detected using VisioKnockTM. Right figure shows in cylinder pressure and rate of heat release.

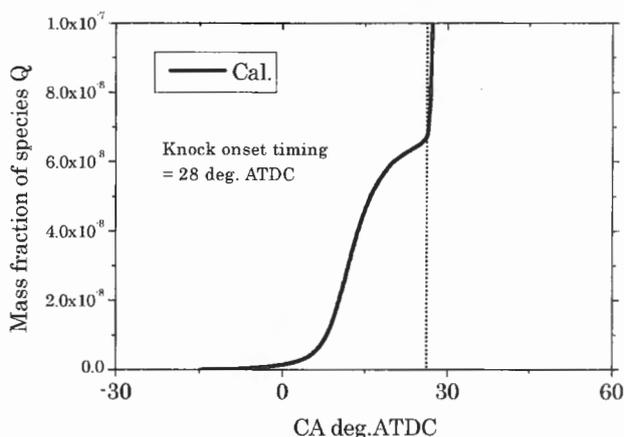


Fig.8 History of the mass fraction of species Q in cylinder at table 2 condition.

らないことが確認された. そこで, 以後では 3 番気筒における計測結果を示す.

図 7 左の実験で得られたノック発生位置の確率分布から, 燃焼室側面の吸気バルブ近傍の A, B 点においてノックの発生確率が高いことが分かる. また排気バルブ側 C 点においても発生確率が高くなる傾向がある.

図 8 に計算によって得られた筒内全域における中間生成物 Q の生成履歴を示す. 熱炎反応の因子となる Q は, TDC を越えたあたりから増加しはじめ, 28° ATDC 近傍で急激に増加する傾向を示す. この Q が急激に増加する時期は筒内圧力および温度が急激に増加する時期と一致する. このことから Q が急激に増加する時期をノック発生時期と定義した.

図 9 にヘッドデッキ面 1 mm 下方における火炎面(実線)と Q の濃度分布(等濃度面)を時系列で示す. 火炎は吸気側への伝ばが遅れる不均一な挙動を示す. 特に, 吸気バルブ方向へ伝ばする火炎は燃焼室壁面への到達が遅れている. 一方, Q は火炎の到達が遅れる地点で生成され, 28° ATDC のノック発生時期前後で急激に増加している. その位置は, 図 7 の実験結果でノックの発生確率が高かった A,

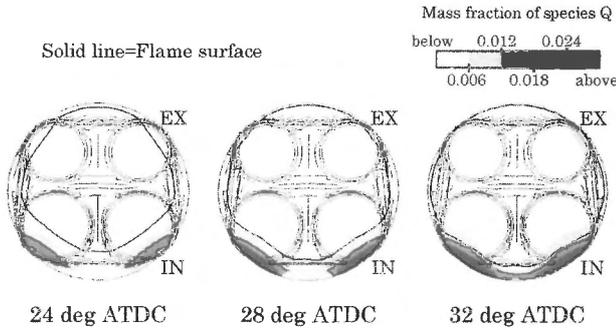


Fig.9 Relation between flame propagation with mass fraction of species Q at table 2 condition. Flame surface was defined at the location of reaction rate 25 %.

B 点と概ね一致する。また、排気バルブ方向へ伝ばする火炎も燃焼室壁面への到達が遅れており、わずかに Q が生成されているが、この位置は、図7のC点と一致する。ノック発生の一つの要因として、燃焼室エンドへの火炎伝ばが遅れ、エンドガスが長時間高温高压の条件下にさらされることで、低温酸化反応が進行することが挙げられる[1]。火炎伝播が遅れる地点と Q の生成位置は一致していることから、計算はその過程を再現できていると言える。以上の結果から、ノック発生位置予測に関して、計算が十分な精度を有していることが確認できた。

次に、ノック発生時期についての検証結果を示す。図7右に示したノックサイクルにおける筒内平均熱発生履歴(200 サイクル平均)から、約 19° ATDC でノックによる熱発生率の急激な増加を確認できる。一方、計算で得られたノック発生時期は約 28° ATDC であり、ノック発生時期は大きく異なっている。この要因として壁面温度の違い、壁面熱伝達や熱解離の取り扱い、Shell モデルの反応速度定数に熱損失を考慮した Halstead らの反応速度定数を用いたことが考えられる。今後、更なる精度向上のため、これらの項目を検討していく必要がある。

5.4. 異なる筒内流動におけるノック発生位置予測計算精度の検証

前節の結果から、本計算手法がノック発生位置予測に有効であることが確認できた。しかしながら、実際の解析にあたっては、燃焼室やポート形状が変更された場合におけるノック発生位置の変化を再現する必要がある。そこで、

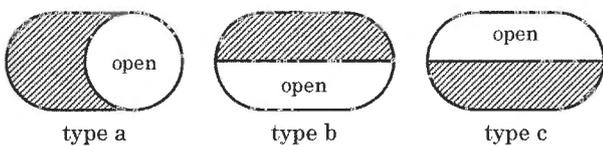


Fig.10 Shapes of the gasket installed in intake manifold. type a: For strong swirl flow, type b: For strong tumble flow, type c: For strong tumble flow.

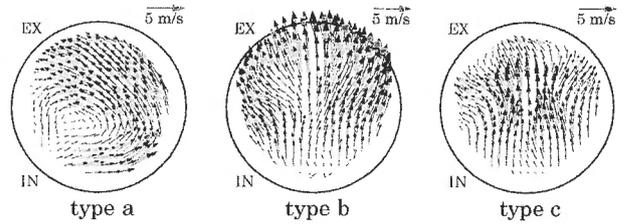


Fig.11 Experimental results of in-cylinder flow in each gasket at 1 mm below from head deck at table 1 condition. CA = 60 deg. BTDC.

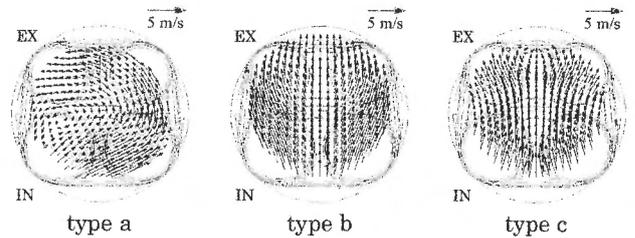


Fig.12 Calculation results of in-cylinder flow in each gasket at 1 mm below from head deck at table 1 condition. CA = 60 deg. BTDC.

異なる筒内流動場におけるノック発生位置予測精度の検証を行った。また、火炎伝ば遅れの要因と火炎伝ば遅れがノック発生位置に与える影響について、火炎の自発光撮影、PIV による筒内の速度分布の計測結果および計算結果から考察を行った。

筒内流動は吸気ポートと吸気マニホールド間に設置したガスケットの開口面積を図10のように変更することで変化させた。図10 type a はスワール流を強化させるタイプのガスケット、type b および type c はタンブル流を強化させるタイプのガスケットである。

これらのガスケットにより生成される筒内流動の特徴を示すため、図11に60° BTDC、ヘッドデッキ面1mm下方における筒内速度分布可視化結果を示す。なお、運転は表1の条件で行った。図より、type a のガスケットを使用した場合、シリンダ鉛直方向軸を中心に反時計回りに旋回する速度場を持つことが分かる。また、type b のガスケットでは、吸気側から排気側に向かう速度場が形成され、吸気側から排気側に向かうにしたいが、シリンダ外周部へ広がる特徴を持つことが分かる。一方、type c のガスケットでは、type b と同様に吸気側から排気側に向かう速度場が形成されるが、吸気側においてはシリンダ中心に向かう速度場を、シリンダ中心から排気側にかけては外周部へ広がる速度場が形成されていることが確認できる。

ノックに至る筒内現象を理解するためには、このような筒内流動の違いが、計算で正確に再現されている必要がある。そこで、図12に上記可視化実験と同一の条件における筒内速度分布の計算結果を示す。type a では、シリンダ鉛直方向軸を中心に反時計回りに旋回する速度場を、type b では、吸気側から排気側に向かい、吸気側から排気側に向か

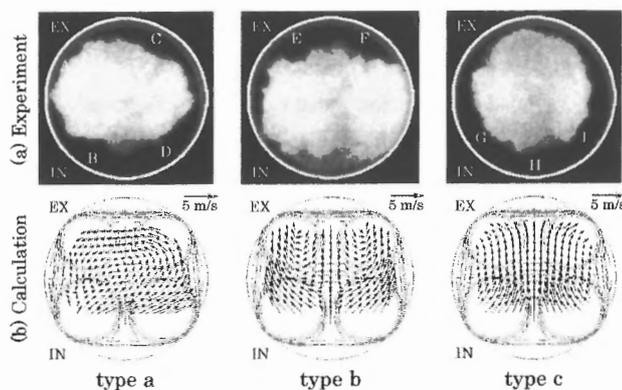


Fig.13 Experimental results of flame propagation behavior in each gasket at 2.0 ms ASOI and calculation results of in-cylinder flow at spark ignition timing of spark point. Experiments and calculations were performed at table 1 condition. (a) Chemiluminescence's photograph. (b) Calculated velocity vector at spark ignition timing of spark point.

うにしたがい、シリンダ外周部へ広がる速度場を、type c では吸気側においてはシリンダ中心に向かう速度場を、シリンダ中心から排気側にかけては外周部へ広がる速度場となっていることが分かる。これらの特徴は、前述の実験で得られた筒内流動の特徴と一致しており、流れ場の計算において妥当な精度を持っていると言える。また、上記結果から、以降では可視化範囲外の領域における筒内流動については、計算結果を元に推測を行い、その影響を検討する。

次に、筒内流動が火炎伝ばに及ぼす影響を確認するため、図 13 に点火開始後 2.0 ms における自発光撮影結果と点火時期における点火プラグ位置での筒内速度分布計算結果を示す。type a のガasketの場合、(a) の撮影結果から、火炎は排気側 C 点および吸気側 B, D 点への伝ばが遅れ、排気側 A 点に向かって進行していることが分かる。これは (b) の点火プラグ位置における速度ベクトル計算結果から分かるように、筒内左側に渦中心を持つ反時計回りのスワール流が生成され、排気側 A 点に向かう強い流れが存在することによる。一方、type b のガasketの場合、(b) の速度ベクトルから、点火時期において点火プラグ部では排気側から吸気側へ向かう流れとなっていることが分かる。この影響を受け、初期火炎は吸気側へ伝ばすることとなり、(a) の撮影結果のように、後半においても排気側 E, F 方向への伝ばが遅れる構造を維持する。type c のガasketの場合、(b) の速度ベクトルから、点火時期において、点火プラグ部では吸気側から排気側へ向かう流れとなっていることが確認できる。このため、火炎は排気側へ伝ばしていき、吸気側 G, H, I 方向への伝ばが遅れる構造となる。以上より、各ガasket形状における火炎伝ばの遅れ領域が明らかとなった。また、その領域が点火プラグ近傍の流れを強く受けていることが分かった。

次に、このような火炎伝ばの遅れる領域とノック発生確率が高い位置の関係を確認するために、表 2 の条件にてノッ

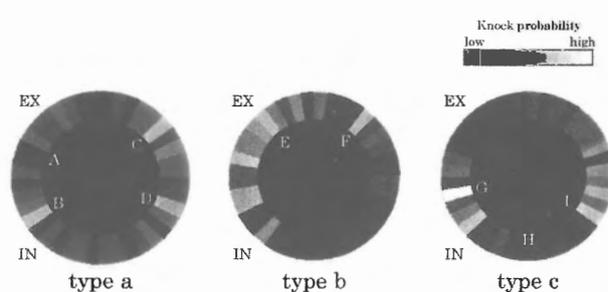


Fig.14 Probability distribution of knock onset location in each gasket at table 2 condition.

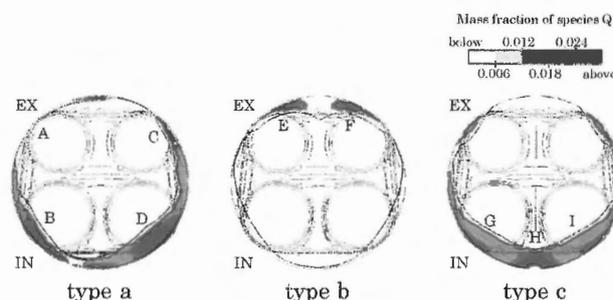


Fig.15 Distribution of species Q mass fraction and flame propagation behavior in each gasket at knock onset timing. Calculations were performed at table 2 condition. Flame surface was defined at the location of reaction rate 25 %. (a) CA = 26 deg. ATDC, (b) CA = 24 deg ATDC, (c) CA = 22 deg ATDC.

ク発生位置検出実験を行った結果を図 14 に示す。ノック発生位置の確率分布より、type a のガasketではノック発生位置が分散しているが、特に、吸気側 B, D 点と排気側 C 点においてその発生確率が高いことが分かる。type b のガasketにおいては、ノック発生確率が高い位置が排気側 E, F 点に集中していることが分かる。また、type c においては吸気側 G, I 点に集中していることが確認できる。これらの位置は、図 13 の自発光撮影結果によって示された火炎伝ばの遅れる領域と概ね一致しており、筒内流動の影響により生じた火炎伝ばの遅れが、ノックの発生位置に影響を与えていることが分かる。

最後に、異なる筒内流動場におけるノック発生位置計算予測精度を検証するために、図 15 に計算で得られたヘッドデッキ面 1 mm 下方の火炎面(実線)と Q の濃度分布(等濃度面)を示す。図 14 の実験においてノック発生確率の高い位置(B, C, D, E, F, G, I)と計算における Q の生成位置は、各条件ともおおそ一致していることから、本計算手法が異なる筒内流動場においても適用可能であり、定性的にノック発生位置を予測するための計算精度を有していると言える。しかしながら、例えば type c の結果において、可視化実験、計算結果ともに排気側への火炎伝ばが遅れ、また、計算において中間性生物 Q が多量に生成されている H 点において、実際にはノックの発生が確認できない。この様に、実験と計算で結果が一致しない部分も存在する。

この要因として5.3節で述べた要因の他に、本計算で考慮されていない壁面温度分布の影響や計算開始時における残留ガス温度の違いなどが考えられる。今後、更なる精度向上のため、これらの項目に関しても検討していく。

6. 結言

乱流ひずみ速度を考慮した Flamelet モデルと質量保存および酸素原子の保存を考慮した改良 Shell モデルを組み合わせ、ガソリンエンジンのノック発生位置を予測する手法を構築した。本計算を可視化エンジンおよび実機エンジンに適用し、実験結果と比較することでその手法の妥当性についての検討を行った。以下に得られた知見を示す。

- (1) 乱流ひずみ速度を考慮した Flamelet モデルと質量保存および酸素原子の保存を考慮した改良 Shell モデルを組み合わせることで、ノック発生位置を定性的に予測することが可能となった。
- (2) 本手法を異なる筒内流動場に適用した結果、各筒内流動場におけるノック発生位置の違いを計算が再現可能であることを確認できた。
- (3) ノック発生の一つの要因として、燃焼室エンドへの火炎伝ばが遅れ、エンドガスが長時間高温高圧の条件下にさらされることで、低温酸化反応が進行することが挙げられる。異なる筒内流動場における実験および計算結果から、本研究においても火炎伝ばの遅れがノックの発生位置に影響を与えていることが確認された。
- (4) ノックの発生位置や発生時期の違いは、壁面温度や壁面温度分布、残留ガス温度の違い、壁面熱伝達や熱解離の取り扱い、熱損失を考慮した Halstead らの反応速度定数を用いたことがその要因として考えられる。

References

1. J.B. Heywood, *Internal Engine Combustion Fundamentals*, McGraw-Hill, 450-478 (1988).
2. A.E. Lutz, Robert J.Kee, and J.A. Miller, SENKIN: A Fortran Program for Predicting Homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics with Sensitivity Analysis, *Sandia National Laboratories Report*, SAND 87-8248.
3. J.C. Livengood, P.C. Woo, Correlation of Autoignition Phenomena in Internal Combustion Engines and Rapid Compression Machines, *5th, Symp. (Int.) on Combustion*, 347-356 (1955).
4. A. Teraji, T. Tsuda, T. Noda, M. Kubo, and T. Itoh, Development of Three Dimensional Knocking Simulation for Spark Ignition Engines (in Japanese with English summary), *JSAE Paper* 20044730 (2004).
5. A. Teraji, T. Tsuda, T. Noda, M. Kubo, and T. Itoh, Three-Dimensional Simulation of Spark Ignition Engine Combustion using a High-accuracy Flame Propagation (in Japanese with English summary), *JSAE Paper* 20054045 (2005).
6. M.P. Halstead, L.J. Kirsch, and C.P. Quinn, The Autoignition of Hydrocarbon Fuels at High Temperature and Pressure Fitting of Mathematical Model, *Combust. Flame* 30: 45-60 (1977).
7. S.H.El. Tahry, A Turbulence Combustion Model for Premixed Charge Engines, *Combust. Flame*, 79: 122-140 (1990).
8. B. Khalighi, S.H.El. Tahry, D.C. Haworth, and M.S. Huebler, Computation and Measurement of Flow and Combustion in a Four-Valve Engine with Intake Variations, *SAE Paper* 950278 (1995).
9. R.S. Cant, S.B. Pope, and K.N.C. Bray, Modeling of Flamelet Surface-to-Volume Ratio in Turbulence Premixed Combustion, *22nd Symp. (Int.) on Combust. The Combustion Institute*, Pittsburgh, 791-799 (1988).
10. P. Boudier, S. Henriot, T. Poinso, and T. Baritaud, *24th Symp. (Int.) on Combust. The Combustion Institute*, Pittsburgh, 503-510 (1992).
11. K.N.C. Bray and P. Libby, Passage Times and Flamelet Crossing Frequencies in Premixed Turbulent Combustion, *Combust. Sci. Technol.* 47: 253-274 (1986).
12. S.H.El. Tahry, C.J. Rutland, and J.H. Ferziger, Structure and Propagation Speeds of Turbulent Premixed Flames - A Numerical Study, *Combust. Flame* 83: 155-173 (1991).
13. R.J. Blint, Stretch in Premixed Laminar Flames Under IC Engine Condition, *Combust. Sci. Technol.* 75: 115-128 (1991).
14. H. Schäpertöns and W. Lee, Multidimensional Modeling of Knocking Combustion in SI Engines, *SAE Paper* 850502 (1985).
15. T.M. Sloane, General Motors R & D Center, Personal communication (2001).
16. M.A. Theobald, W.K. Cheng, A numerical study of diesel ignition. *ASME Paper* 87-FE-2 (1987).
17. K. Nakama., E. Murase, J. Kusaka, and Y. Daisho, Effects of High Temperature fuel on In-Cylinder Fuel Mixture Formation Process for Direct Injection Engine. *SETC Paper* 2003-32-0003 (2003).
18. Alkidas, A.C., Intake-Valve Temperature and the Factors Affecting It, *SAE Paper* 971729 (1997).
19. Han, Z., Reitz, R.D., Claybaker, P., Rutland, C.J., Yang, J., and Anderson, R.W., Modeling the Effects of Intake Flow Structures on Fuel/Air Mixing in a Direct-Injected Spark-Ignition Engine, *SAE Paper* 961192 (1996).
20. Weller, H.G., Uslu, S., Gosman, A.D., Maly, R.R., Herweg, R., and Heel, B., Prediction of Combustion in Homogeneous-Charge Spark-Ignition Engines, *COMODIA94*, 163-169 (1994).

21. B.E., Launder and D.B., Spalding, The Numerical Computation of Turbulent flows, *Comput. Meth. Appl. Mech. Engng* 3: 269 (1974).
22. Z. Han and R.D. Reitz, A Temperature Wall Function Formulation for Variable-Density Turbulent Flows with Application to Engine Convective Heat Transfer Modeling, *Int.J.Heat Mass Transfer*. Vol.40 No.3 613-625 (1997).