

往復動内燃機関の火炎構造と化学組成に関する研究

山 岸 進*

Flame Structures and Chemical Compositions of Reciprocating Engine

By
Susumu YAMAGISHI

Abstract

The first part of this report describes the results of high speed schlieren motion pictures which show two types of flame propagation while the combustion of the single compression test engine processing.

The latter part contains the calculations based on the flame structure for chemical compositions of burning gas in the cylinder.

This model is made to calculate the variation of 11 equilibrium constituents and nitric mono-oxide according to Zeldovich kinetic mechanism.

With this simulation, the variation of constituents in the cylinder is followed at each crank angle and influences of flame structure on those constituents is calculated.

目 次

1. まえがき
2. 単圧縮機関による火炎構造観測
 - 2.1 実験装置
 - 2.2 シュリーレン光学系と計測器
 - 2.3 実験結果
3. 燃焼過程のシミュレーション
 - 3.1 熱力学過程
 - 3.2 計算モデル
 - 3.3 計算結果
4. あとがき
5. 参考文献
 - 付 1
 - 付 2
 - 付 3
 - 付 4

1. ま え が き

環境汚染対策の研究発展に従って、内燃機関の燃焼研究もより精密になり、発光分光、局所サンプリング法等による多くの実験研究によりシリンダー内のガス組成が時間的のみならず空間的にも不均一である事が明らかにされた。これにより内燃機関の排気ガス中の大気汚染物質の発生には、極めて局所的な温度や組成が非常に大きな影響を与える事が判った。これに伴い燃費改善と排気清浄化の研究にはシリンダー内の燃焼過程をより詳細に取り扱って予測計算する必要性が益々大きくなってきた^{2) 4) 7) 9)}。特に汚染物質の中で NO の生成については、サイクル性能的には十分といわれていた平衡論的化学反应の扱いでは不十分で、生成反応速度が遅く火炎後流に於ける反応も対象とした非平衡計算の必要があると指摘されている。

燃焼過程研究で実際にシミュレーション計算を適用する場合は多くの不確定要素をもつ^{4) 6) 11)}。高温ガスとシリンダー壁との非定常熱伝達問題、流れと燃焼の相互干渉問題、燃料のクラッキング及びクエンチングゾ

* 機関性能部 原稿受付：昭和51年11月4日

ーンの問題、吸排気のガス交換混合の問題、各種の漏れや摩擦の問題等いずれも困難で十分信頼のおける資料の無いものが多い。しかしシミュレーションで燃焼過程を解析する事により、実機では殆んど実測不可能な多種の中間生成物を含む化学反応機構の理解が深められ、又実機で運転不可能な条件の仮想実験ができ性能予測資料が早く得られる。

本研究では計算に際して、観測実験例が多く又より直接的データの得やすい火炎伝播過程観察から得られる火炎構造を基にする方法を採用した。これに対して質量燃焼率を仮定する方法は、実験データとの突き合わせに使用する熱発生率の測定値が先の非定常熱伝達問題を含む事になり、両者を比較すると、火炎構造を基にした解析の方がより直接的でかつ基本的な燃焼過程の解明に資するものと思う。

本報では2.で円筒燃焼室を持つ単圧縮機関を用いた火炎伝播状況のシュリーレン高速撮影による観測結果を示し、3.で火炎構造を基にしたシリンダー内燃焼ガス組成計算モデルと計算結果について述べる。このモデルは11成分の平衡計算とNOについてのZeldovich機構¹⁴⁾に従った非平衡計算によりシリンダー燃焼行程を計算できるものである。このシミュレーションにより得られた各々のクランクアングルに対してシリンダー内ガス組成の変化過程を示し、火炎構造によってこれ等がどのような影響を受けるかを計算した結果を述べる。

2. 単圧縮機関による火炎観測

実機での燃焼は吸排気系の流れが非常に複雑に影響するために、適用範囲の広い観測結果を得る事が困難である。定容器燃焼やバーナーによる火炎観測の基礎研究⁹⁾は多くなされているが、これ等はピストン行程を持つ内燃機の燃焼とはかなり相異している。

本研究では実機と定容器燃焼の中間的な過程として単純圧縮、膨脹行程を一回のピストン行程で行いその間に点火燃焼させる単圧縮実験機により、基本的な火炎伝播過程を求めようとするものである。

2.1 実験装置

燃焼室形状は円筒形で、点火栓はシリンダー側壁とシリンダーカバー上面中央にありいずれかを使う。Fig. 1は実験装置概略図を示す。機関の諸元はTable 1の様である。

燃料としてn-ヘキサンを使用した¹⁾。

実験要領は次の様である。

(96)

Table 1 実験機諸元

ボア	9.0cm
ストローク	7.0cm
全容積	548.9cm ³
圧縮比	5.3
燃焼室	円筒
点火方式	コイル+バッテリー

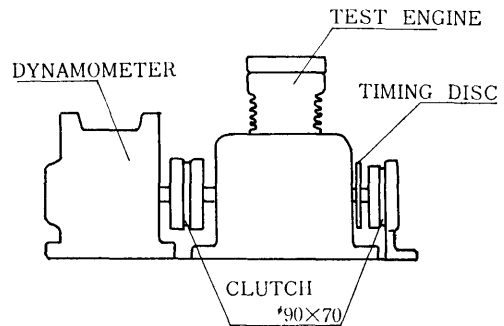


Fig 1 Experimental Set up

(イ) 電気動力計を駆動装置とフライホイールの役として使用し、回転数を設定値に合わせる。(ロ) 実験機関のタイミングを設定する。(ハ) マイクロヒーターで壁温を設定値まで上げる。(ニ) 燃料を入れる。(ホ) ファンで充分攪拌する。この攪拌が足りないと火炎が不安定で不規則な形状になるがある程度以上攪拌すれば火炎構造上大きな相異は無かった。この攪拌時間は温度によって変わるが、数分のオーダーで実験を行った。(ヘ) 高速カメラのスタートスイッチを入れる。(ト) (イ)の動作後所定の間隔をおいて電磁クラッチを接続して実験機関を駆動し、点火燃焼させる。(チ) 電磁クラッチを切ると共に電磁ブレーキを作動させて急速停止させる。

2.2 シュリーレン光学系と計測器

火炎の可視光発光強度の弱い予混合燃料燃焼の場合直接撮影は困難で、シュリーレン観測が適している。高速シュリーレン撮影と同期して得られた指圧計、静電探針、タイミングディスク等の電気信号は全てデータレコーダーに収録する。Fig. 2はシュリーレン光学系を示す。実験機のピストン頭部に表面蒸着平面鏡を接着機で固定して、シリンダーカバーを燃焼室全面が観測できる様に石英ガラス窓にしておく。ピストンの垂直上方に水平面と45°に傾けた平面鏡を固定して凹面鏡からの光を燃焼室に導びく。

撮影に使用した高速度カメラは HICAM (最高速度 11000コマ/秒) である。Fig. 3 は測定器取付図を示す。Fig. 4 に示す静電探針電極は金蒸着の平面電極

で、印加電圧は直流90Vとし、この信号から火炎到着の確認を行っている。

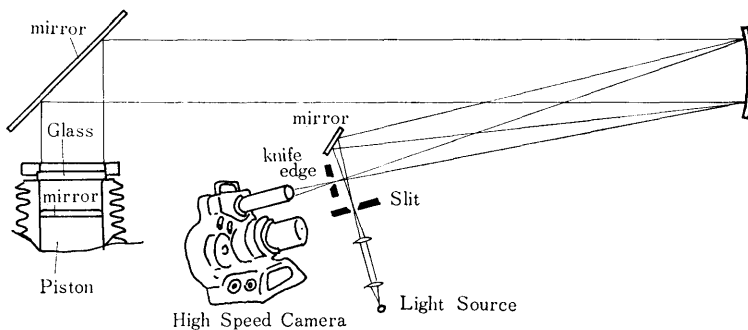


Fig 2 Schieren System

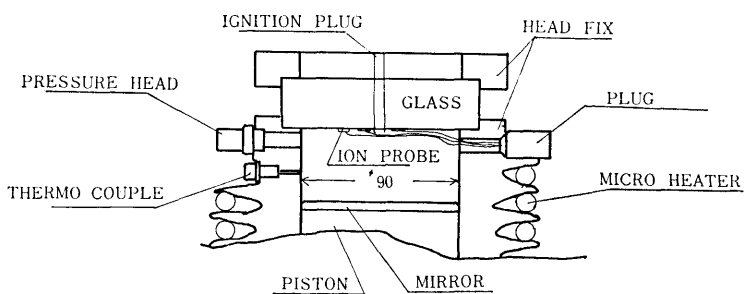


Fig 3 Opparatus Set

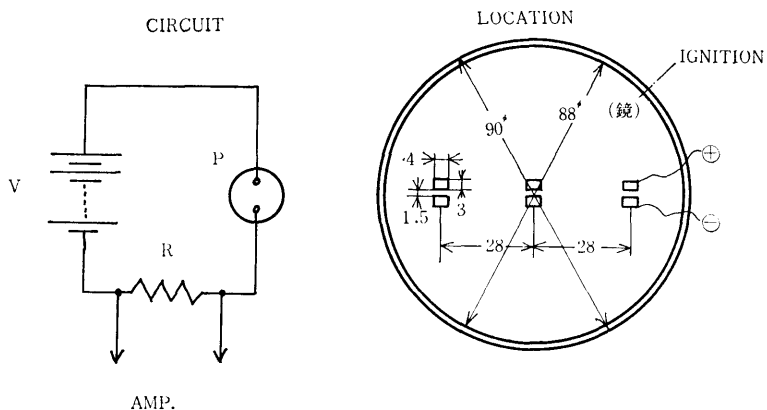


Fig 4 Electro-Static Probe

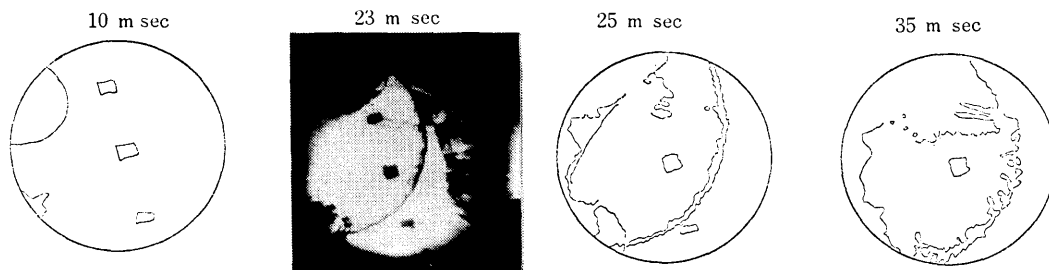


Fig 5 Schlieren Photo (Ignition at Cylinder Wall)

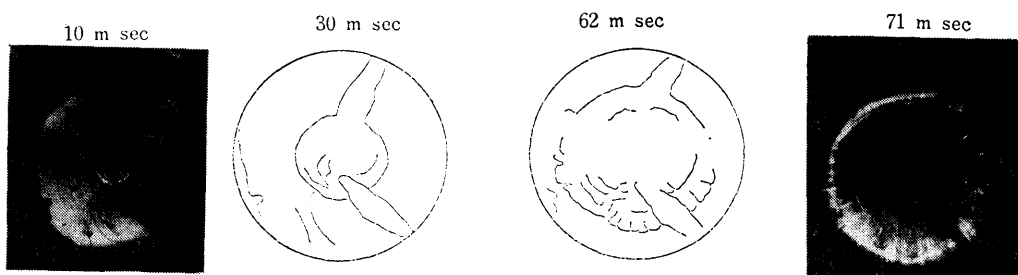


Fig 6 Schlieren Photo (Ignition at Center)

2.3 実験結果

a 火炎構造

Fig 5 はシュリーレン高速撮影結果を示す。

側壁点火；写真の様に燃焼初期形状は、球の一部の形のまま広がっていく、広がるにしたがって火炎前縁に細かいシュリーレンが見られる同様なものが前縁よりかなり内側にも観測される。写真と静電探針信号との対比の結果、火炎前縁が静電探針用電極を通過した後にイオン信号が観測されている。これ等の事から火炎は立体的な構造をしている事が判る。この様に火炎は球状に発達してやがてシリンダー上面に接しそのまま未燃混合気へ広がり、終期にその形状が乱れて全体に不規則な流れが見える。

Fig 7 はイオン電流波形と指圧線図を示す。第一、第二探針への信号の時間差から火炎伝播速度が確かめられる。尚、静電探針によるイオン信号は火炎前縁が電極を通過した後も20~30m/secにわたって観測されていることから、見かけ上の火炎前縁が通過した後もかなり長い間イオン濃度の高い部分が存在する事を示しており、少なくとも壁面近くにはいわゆるクエンチングゾーンがある事を示しているものと考えられる。

中心点火；Fig 6 は中心点火の場合である。シリンダー面の中央の白い部分が火炎の前縁で、少し歪んだ円状をしている。この円が広がるに従って前縁は歪みが少なくなり同心円状の大きなシュリーレンが現われ

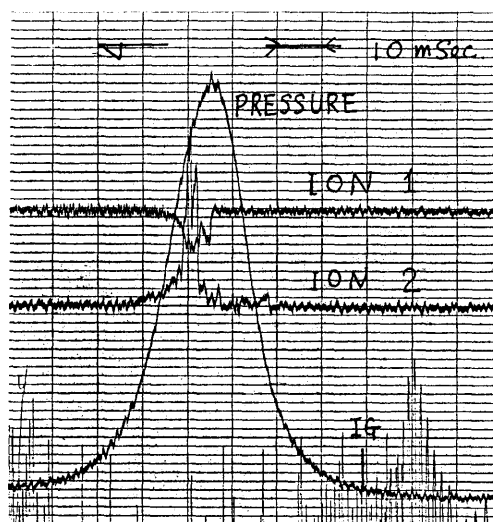


Fig 7 Ion Current and Pressure

て次に部分的に細胞状のシュリーレが見られる。前縁がシリンダー壁に近づくとき大きく崩れていく、その後はシリンダー面全体に不規則な流れが現われる。この事から予想される火炎構造はシリンダーカバーに端を接した球状のまま膨脹し、やがてシリンダーカバーに接した半球形状をかなり長く保って全体に広がるものと考えられる。このことからピストン運動のもとで行われる燃焼でも火炎構造はかなり安定した形状を燃焼終期まで保っている事が分かった。

b 火炎伝播速度

写真観測から得られた結果によると、単圧縮機関の火炎構造は燃焼初期と終期の一部を除くと大部分規則的な形をしている。Fig 8 は写真から求めた火炎前縁の広がり速度を求めたものである。図中の実線はシミ

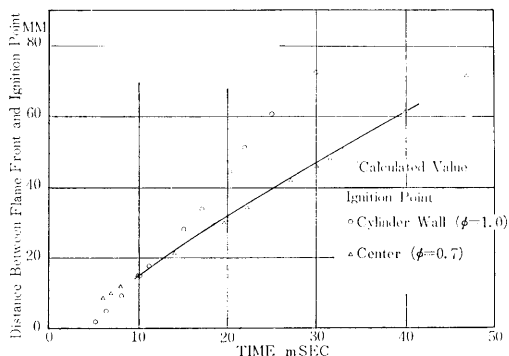


Fig 8 Flame Propagation

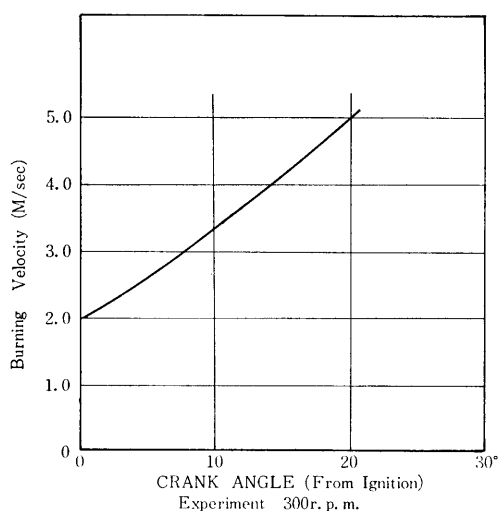


Fig 9 Burning Velocity

ュレーション計算による火炎前縁の動きである。

Fig 9 は火炎伝播からシミュレーション計算により逆算した燃焼速度パターンである。燃焼速度を拡散燃焼速度と乱れによる混合促進による増速分とに分けて考えるとこの燃焼速度増加パターンは吸入行程の流れの影響を除いた単圧縮機関による燃焼速度特性と燃料混合気の特徴を示すものである⁶⁾。

3. 燃焼過程のシミュレーション

実験により推定される単圧縮機関の火炎構造を基にして、シリンダー内の混合気を適宜区分し、各々が逐次燃焼した時の混合気状態量、組成の変化を計算する。計算には火炎構造と共に燃焼速度が必要であるが、これは燃焼とピストン行程によるシリンダー内ガスの状態変化を計算しシミュレーションで求めた火炎前縁の動きを、実験機関の撮影で観測された火炎伝播状況と対比して逆算すれば得られる。この計算手法を実機に過用する場合は吸入、排気行程による流れの影響が考慮されていない点を補うために火炎構造と燃焼速度への流の影響を何んらかの形で求めれば基本的に同様な扱いをすることができる。シミュレーションモデルに使用した基礎式と計算結果について述べる。

3.1 熱力学過程

シリンダー内混合気を Fig 10 の様に区分して扱い、その状態変化過程をT-S線図 Fig 11 の様考える。未燃混合気は圧縮初めの状態A (T_1, P_1) から着火直前状態B (T_1, P_1) までピストンにより圧縮される。まず部分①で燃焼が始まるとする、これは他の未燃部分を圧縮すると同時にピストン仕事をして状態E (T_2, P_2) になる。その後①の燃焼ガスは②~④の各

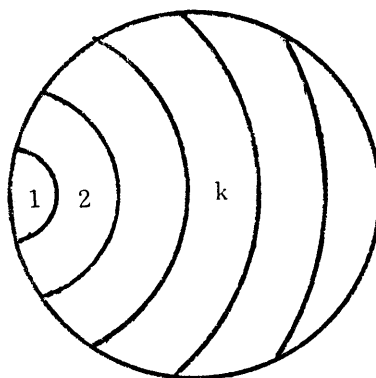


Fig 10 Burning Part

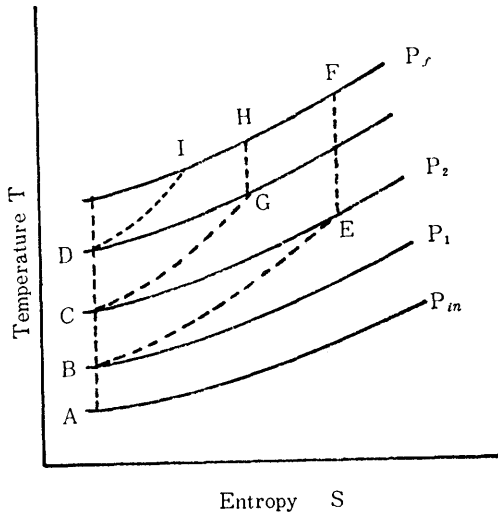


Fig 11 T-S Diagram

部が燃焼する度に断熱圧縮されて状態Fになる。次に燃焼する部分②は状態Aから未燃混合気のまま断熱圧縮されて状態Cになり、燃焼して状態Gになる。その間に①の燃焼ガス及び③~⑩の未燃ガスを圧縮すると同時にピストン仕事をする。その後部分②は①同様に他の未燃部分へ燃焼が広がる度に断熱圧縮を繰返されて状態Hになる。以上の過程を全区分について計算する。

3.2 計算モデル

シミュレーション計算モデルを作るに際して、次の仮定をする。

- (イ) 混合気は一区分内で瞬時に完全混合する、そして区分境界の移動は膨脹圧縮のみによって行われ流れによる移動は考えない。
- (ロ) 燃焼反応は十分速く反応帯で化学平衡が保たれるものとし、未燃混合気中では温度が低く燃料の反応は遅く無視できるとする。
- (ハ) 未燃ガス、燃焼ガスは半理想気体混合物とみなせる。即ち温度によるエントロピー変化は考慮している。
- (ニ) 圧力伝播は燃焼速度に比して十分速く、シリンダー内が一様とする。
- (ホ) 放熱は重要な問題であるが、現在種々提案されている熱伝達係数の時間的変化を示す式¹⁵⁾は実験的に定める係数を必要とし、又火炎伝播の相異なる様なシリンダー内の空間分布を考慮したものが無い。火炎構造に関連した熱伝達の問題は

火炎及びガスからの輻射と対流の項に関し精しい検討を必要とするが、ここでは火炎構造の相異なるによる熱伝達の変化は少ないとして放熱効果については考えない。

- (ヘ) 火炎構造は予想される3種類の形について計算する。計算に使用する燃焼速度は半実験的方法で求めた燃焼速度パターンを使用する。

以下各計算過程について述べる。

(a) エンジン諸元と初期値

(1) エンジン諸元

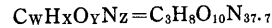
Table 2 エンジン諸元

ボア	10.0 cm
ストローク	7.0 cm
全容積	682 cm ³
圧縮比	5.3
クランク半径	5.7 cm
コンロッド長さ	25.4 cm

- (2) 圧縮初めシリンダー内圧 P_{in} 1 atrn
- (3) 着火時期 θ_{ig} 5~45° BTDC
- (4) 混合比 (当量比)

$$PHE = (\text{燃料}/\text{空気}) / (\text{燃料}/\text{空気})_{\text{stoich}}$$

- (5) 燃料 プロパン (C₃H₈)
- (6) 空気組成 窒素 79.04%
酸素 20.96%
- (7) 理論混合気組成



- (8) シリンダー内全モル数 n^0

$$n^0 = (Y_S + Z_S) / (2 \cdot PHE) + 1$$

Y_S ; 燃料1モルの完全燃焼に関与する

酸素原子数

Z_S ;

"

窒素原子数

(b) 断熱変化過程

ピストン行程と燃焼過程に生ずる未燃ガス及び燃焼ガスの膨脹、圧縮による断熱変化の計算は次の様にする。

ガス混合は各部瞬時に行われ、圧力は一様、ガスは半理想気体混合物として扱う。

計算には次の基礎式が成立する。

- (1) 状態方程式

$$Pv = nRT \quad (3-1)$$

これは各成分それぞれに対して成立つものとする。

- (2) 分圧式

$$P = \sum_i P_i \quad (3-2)$$

Table 3 係数 a_{in}

$i \backslash n$	1	2	3	4
O_2	6.085	3.63×10^{-3}	1.71×10^{-6}	3.13×10^{-10}
N_2	6.903	3.75×10^{-4}	1.93×10^{-6}	6.86×10^{-10}
C_3H_8	-9.96×10^{-1}	7.28×10^{-2}	-3.76×10^{-6}	7.58×10^{-9}

i 成分の分圧はそのモル数に比例し、全成分の和は全圧に等しい。

(3) 等エントロピー変化

状態が t から $t+1$ 変化する時にエントロピー変化が無い。

$$\Delta S = S_{t+1} - S_t = 0 \quad (3-3)$$

各状態のエントロピーは燃焼ガスの場合、逐時組成計算を行って各成分のエントロピーを求めその和として与えられる。

$$S = \sum X_i \cdot S_i \quad (3-4)$$

未燃ガスの場合 エントロピーをヌッセルト関数 $F(T)$ を使用して計算する。

$$S = F(T) + R \ln V + S_0 \quad (3-5)$$

$F(T)$ の関数形は次の様に表わされる。

$$F(T) = \sum X_i \cdot F_i(T) \quad (3-6)$$

X_i は i 成分のモル分率を表わし $F_i(T)$ は次の多項式で与える。

$$F_i(T) = a_{i1} \ln(T) + a_{i2} \cdot T + \frac{a_{i3}}{2} \cdot T^2 + \frac{a_{i4}}{3} \cdot T^3$$

係数 a_{in} は Table 3 の値を使用する (3-7)

(4) 平衡組成

未燃ガスの組成変化は無く、区分内一様一定とする。

燃焼ガスの場合は逐次平衡計算を行って各々の状態におけるガス組成を計算する。(平衡計算の項参照)

(5) 質量保存則

シリンダーからのガス漏れは無く、変化過程を通じて質量保存則が成り立つ。

$$M_t = \sum M_{ui} + \sum M_{bi} \quad (3-8)$$

M_t ; 全重量 [kg]

M_{ui} ; i 成分の未燃ガス重量 [kg]

M_{bi} ; i 成分の燃焼ガス重量 [kg]

(6) 体積条件式

状態が変わる度に各区分の体積が変わるがその合計がピストン行程によって定まるシリンダー容積と一致しなければならない。

$$V_{cyl.} = \sum_i V_{ui} \cdot M_{ui} + \sum_i V_{bi} \cdot M_{bi} \quad (3-9)$$

$V_{cyl.}$; シリンダー容積
付4参照

V_{ui} ; 未燃ガス比容積

V_{bi} ; 燃焼ガス比容積

(c) 燃焼過程

燃焼過程では (b) の (1), (2), (4), (5), (6) の式が成立する他、等エントロピーの式の代りに (3) のエネルギー保存則が成り立つ

(1) 状態方程式

(2) 分圧式

(3) エネルギー保存則

各区分の燃焼は常に定容燃焼のもとに行われエネルギー保存則が成り立つ。

t から $t+1$ への変化を考えると、燃焼区分の外部仕事は他の未燃ガスと燃焼ガスの内部エネルギー変化とピストン仕事の和である。

$$\Delta U + W_{tot} = 0 \quad (3-10)$$

但し $W_{tot} = M_u(U_{t+1} - U_t)$

$+ M_b(U_{t+1} - U_t)$

$$+ \frac{1}{J} \int_{V_t}^{V_{t+1}} p dV$$

(4) 平衡式

(5) 質量保存則

(6) 体積条件式

(d) 火炎構造

Fig 13 に示す A, B, C 三種類⁹⁾ を計算する。

A は側壁に着火点がある場合で火炎構造を円筒形に近似したもので、燃焼が上死点近くの燃焼室容積の小さい所で終了するものと考えている。これによると計算時間は短縮されるが、燃焼初期の熱発生を B, C よりかなり大きく見積ることになる。B は側壁に着火点がある事は A と同様であるが火炎構造をピストンとシ

リンダー壁で仕切られた球として扱っており、Aより実際に近いと考えられる。Cは中心着火の火炎構造を半球の拡がりとして扱ったものである。

各燃焼区分の体積は燃焼速度と火炎構造によって定まるものだが、炭化水素の燃焼を速度論と流体運動方程式から導びくことは、前があまりに複雑でデータが不足しており現在の所ほとんど不可能である。そこで

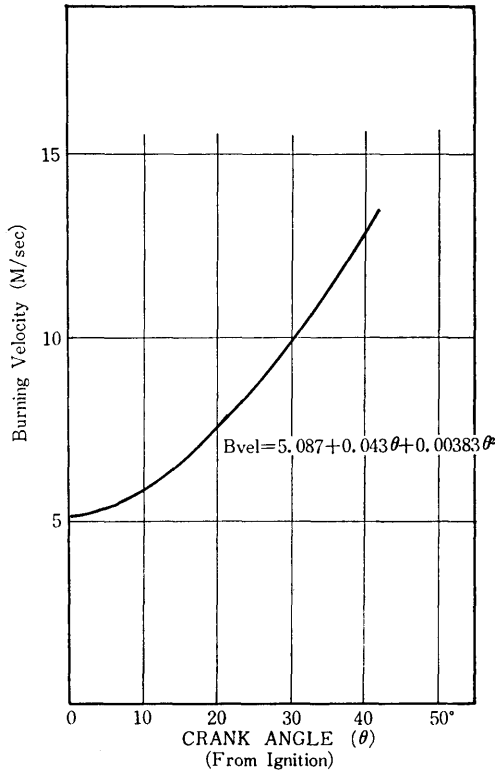


Fig 12 Fig Burning Velocity

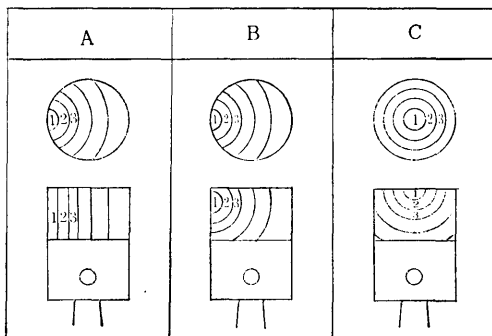


Fig 13 Flame Structure

これ等を半実験的に求める多くの提案があるが、いずれも実験条件によって大きく変り得る定数を含むものが多く、その適用範囲の狭いものが大部分である。本実験では実験機であるために流れの影響が実際のエンジンより極めて小さく適当な資料が無い。そのため層流燃焼実験資料から基準燃焼速度を得て、これに基づいて火炎構造から逆算して求めた半実験式を使用した。 Fig 12

$$B_{vel} = 5.087 + 0.043\theta + 0.00383\theta^2 \quad (3-11)$$

但し θ ; 着火時からのクランク角

(e) 組成計算

組成計算に際して、化学反応速度は非常に速く燃焼区分内で平衡組成が瞬時に達成され濃度が一様になるものとする。この計算手法はサイクル性能に関しては妥当とされているが、問題にされている NO の反応は他の成分に比べて遅、火炎後流でも反応が進み、非平衡計算を取り入れねばならないとされている。

平衡計算; 炭化水素燃焼に関与する成分は H, OH, H₂, H₂O, N, NO, N₂, O, O₂, CO, CO₂ の 11 種類を考える。平衡計算に使用した式は次の通りである。

(1) 濃度式

燃料混合気的全モル数を n° とし

$$A = \frac{1}{n^\circ} \text{ とすると次式が成立する。}$$

$$A(C_w H_x O_y N_z) = \sum_{i=1}^{11} n_i \quad (2-12)$$

(2) 原子数の式

各原子数は反応前後で変化しないから次式が成立する。

$$A_w = n_{CO_2} + n_{CO} \quad (3-13)$$

$$A_x = 2n_{H_2O} + 2n_{H_2} + n_{OH} + n_H \quad (3-14)$$

$$A_y = n_{H_2O} + n_{OH} + 2n_{CO_2} + n_{NO} + 2n_{O_2} + n_O \quad (3-15)$$

$$A_z = 2n_{N_2} + n_{NO} + n_N \quad (3-16)$$

(3) 質量作用則

反応が次式で表わされるとすれば

$$n_A \cdot A + n_B \cdot B + \dots \rightleftharpoons n_E \cdot E + n_F \cdot F + \dots \quad (3-17)$$

モル数 n_A, n_B, \dots と分圧 P_A, P_B, \dots は比例するので平衡係数 K_P を分圧を使って表わすと

$$K_P = \frac{P_B^{n_B} \cdot P_F^{n_F} \dots}{P_A^{n_A} \cdot P_B^{n_B} \dots} \quad (3-18)$$

平衡係数 K_P は次の熱力学関係式を満たす。

$$\Delta G^\circ = \Delta H_f^\circ - T \Delta S_f^\circ \quad (3-19)$$

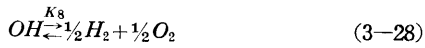
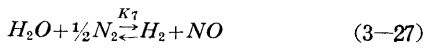
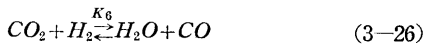
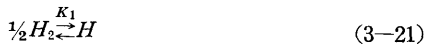
$$RT \ln k_p = -\Delta G^\circ \quad (3-20)$$

ここで ΔG° は生成ギッポの自由エネルギー
 ΔH_f° は生成エンタルピー、 ΔS_f° は生成エントロピー
 を示す。各成分の K_P の値は $\log K_P$ の形で JANAF
 のデータに与えられている。しかし反応式中にはデ
 ータから直接求められないものがある、この場合は
 (3-19), (3-20) の関係式を用いて計算する。

Fig 14 は $\log K_P$ の値を T に関する多項式で近似
 したものである。グラフ中の K_{-1} , K_{-2} は次の解離式
 中の付号と一致する。

(4) 解離式

計算に使用した解離式は以下の11である。



この解式中 (3-28)~(3-31) までの式は K_5 , K_6 , K_7
 の計算のために使用する。

平衡計算には以上の(1), (2), (3), (4)の関係式を連立
 させて解き、各成分濃度を計算する。

計算に際しては時間節約のため特定の値に注目した
 収束計算法を行う。

$PHE \leq 1$ の場合; H_2OH_2 の値を仮定して、酸素原
 子数の式と反応に関与した全モル数の和(濃度式)を
 所定の値に収束させる。

$PHE < 1$ の場合; CO_2/CO の値を仮定して、水素と
 酸素原子数の式と全モル数の和を所定の値に収束させ
 る。消費される酸素はまず低温で CO に、残りが H_2O
 次に CO_2 の順に反応が進むものとする。

NO の非平衡計算; NO , N の化学反応速度は比較
 的遅く火炎後流においても反応が進行する。この NO
 生成機構は、 $PHE < 1$ では Zeldovich 機構により説

明できるとされている。その後の研究により火炎中酸
 素濃度の小さい部分では OH の関与する拡大 Zel-
 dovich 機構及び Prompt NO 生成機構による NO の
 生成があると指摘されているが、特に Prompt NO に
 ついては未だ不明な点が多い。しかし燃料濃度の高い
 $PHE > 1$ の部分では NO の生成に関与する平衡成分
 自体が少ないためこれ等の生成機構により説明される
 NO の寄与は少なく、ピストン行程により排気される
 燃焼ガス中の NO 量を問題とする場合は Zeldovich
 機構で近似できると考えて計算する。したがって部分
 的には NO の生成量を低く見積ることになる。計算の
 初期値として平衡濃度を使い、 N の生成についても準
 定常を仮定して平衡濃度を使った。又 NO 生成に関与
 する N , O は全て N_2 , O_2 から供給されるとした。

反応式は次の4式である。



各々の反応速度定数は次の通りである。

$$k_1 = 7.0 \times 10^{13} \exp(-75000/RT) \quad (3-36)$$

$$k_2 = 13.3 \times 10^9 \exp(-7080/RT) \quad (3-37)$$

$$k_3 = 1.55 \times 10^{13} \quad (3-38)$$

$$k_4 = 3.2 \times 10^9 \exp(-39100/RT) \quad (3-39)$$

X_i° を各濃度の基準値とし α を NO のモル分率変化
 分とする。

$$\alpha = X_{NO} - X_{NO}^\circ \quad (3-40)$$

(3-32), (3-33), (3-34), (3-35) 式を連立させて
 α について解くと α は次式で表わされる。付3参照

$$\alpha = \left(\frac{\eta}{\xi} \right) \left\{ 1 - \exp(-\xi \Gamma \Delta t) \right\} \quad (3-41)$$

$$\begin{aligned} \text{但し } \eta = & k_1 X_{N_2}^\circ X_O^\circ + k_2 X_{O_2}^\circ X_N^\circ - k_3 X_{NO}^\circ X_N^\circ \\ & - k_4 X_{NO}^\circ X_O^\circ \end{aligned}$$

$$\xi = \frac{1}{2} \left[k_1 X_O^\circ + k_2 X_N^\circ \right] + k_3 X_N^\circ + k_4 X_O^\circ$$

$$\Gamma = \rho / MW \quad \left[\frac{\text{mole}}{\text{cm}^3} \right] \quad (3-42)$$

従って t 時の NO モル分率は次式で表わされる。

$$(X_{NO})_t = (X_{NO})_{t-1} + \alpha t \quad (3-43)$$

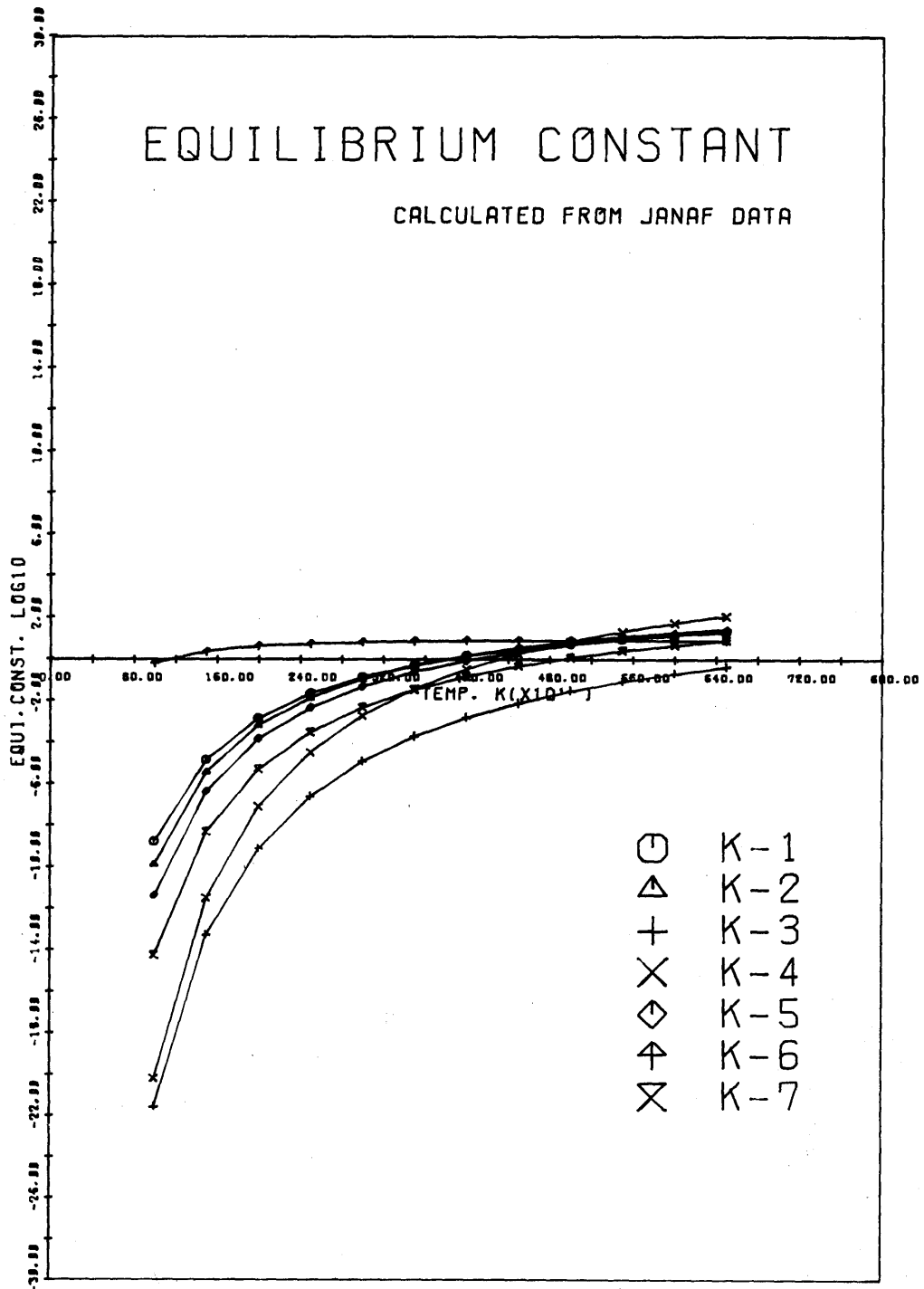


Fig 14 Equilibrium Constant

(f) 状態量 C_P , C_V , H , S の計算

ガスは半理想気体混合物とみなし、各成分の状態量 C_{Pi} , C_{Vi} , h_i , S_i にモル分率を掛け和をとって求める。

$$C_P = \sum_i X_i C_{Pi} \quad \left[\frac{\text{Cal}}{\text{mole} \cdot ^\circ\text{K}} \right] \quad (3-44)$$

$$C_V = \sum_i X_i C_{Vi} \quad \left[\frac{\text{Cal}}{\text{mole} \cdot ^\circ\text{K}} \right] \quad (3-45)$$

$$H = \sum_i X_i h_i \quad \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mole}} \right] \quad (3-46)$$

$$S = \sum_i X_i S_i \quad \left[\frac{\text{Cal}}{\text{mole} \cdot ^\circ\text{K}} \right] \quad (3-47)$$

C_{Pi} , C_{Vi} , h_i , S_i は JANAF のデーターを基に多項式近似して計算する。 付 2 参照

(g) 計算法

以下燃焼が終了するまでの計算手順について述べ、そのフローチャートを Fig 15 に示す。

- ① 入力データーとして運転条件、初期条件エンジン諸元を与えてルーチンに入るための準備計算をする
- ② クランクアングルが進む度に燃焼ガスの体積区分を修正計算する。その場合状態が変化しても燃焼ガスの質量は各区分毎に保たれるものとする。
- ③ クランクアングルを進める。
- ④ 1 区分燃焼終了時の圧力を仮定する。
- ⑤ 燃焼速度式と火炎構造から新規燃焼体積を計算する。増加分が大きすぎるときはクランク角の進み方を小さくしてこのルーチンをやり直す。
- ⑥ 未燃分があるときはその部分の断熱変化を計算して新たな状態量を求めておく。
- ⑦ 燃焼ガスについては各区分毎にその組成計算をやり直し、各々が断熱変化して新たな状態量を持つことにする。
- ⑧ 1 区分の燃焼終了したときの外部仕事を計算する。
- ⑨ 定容燃焼過程を考えて、エネルギーの保存則が成立するように、外部仕事分だけ内部エネルギーが新規燃焼区分より減ずる。
- ⑩ 平衡計算して平衡条件式が不成立の場合仮定圧力を修正してルーチンを繰返す。
- ⑪ ガスの状態方程式から求まる各区分の体積の和とシリンダー容積を比較する。この一致精度が悪いときは圧力を修正してルーチンを繰返す。
- ⑫ 燃焼を終了後での燃焼ガスの断熱変化

⑬ 燃焼過程計算終了後 NO の非平衡計算を平衡計算値を初期値として行う。

使用した計算機データーは次の様である。

計算メモリー 40k
CPU 0.5/100~10/100 hour (TOSBAC 5600)
収束条件 1/1000~2/100

3.3 計算結果

平衡組成、シリンダー内空間分布、着火時期及び火炎構造の組成に及ぼす影響についてシミュレーション計算した結果を述べる。

(a) 平衡組成

Fig 16, 17, 18 は温度に対する理論混合気燃焼ガスの組成モル分率を圧力 1 atm と 40 atm の場合について示す。圧力が高いと成分の分解が高温側にずれることが分る。

Fig 19, 20 は混合比に対する $T=2000^\circ\text{K}$ の燃焼ガス組成モル分率を圧力 1 atm と 20 atm について示す。 $PHE=1.0$ を境に $PHE>1$ 側では O_2 , O , OH , NO , N の濃度が激減していることが分る。

Fig 21, 22, 23 は圧力に対する $T=2000^\circ\text{K}$ の燃焼ガス組成モル分率を $PHE=0.6, 1.0, 1.4$ の場合について示す。

(b) 空間分布

Fig 24 はシリンダー内の温度が時間的に変化する様子を各区分毎に示したものであり、急激な温度上昇の見られる位置が燃焼している区分である。早く燃焼した部分の温度が高くなっていることが明らかである。

Fig 25 は NO の非平衡計算によるモル濃度の区分別時間的变化を示したものである。

(c) 着火タイミング

Fig 26 は着火時期を変化させた時の、最高圧 P_{max} と NO の最高濃度 NO_{max} の変化する様子を示したものである。

(d) 火炎構造

火炎構造の相異に対して燃焼ガス組成がどの様に変化するかを計算するに際して使用した運転条件は次の様である。

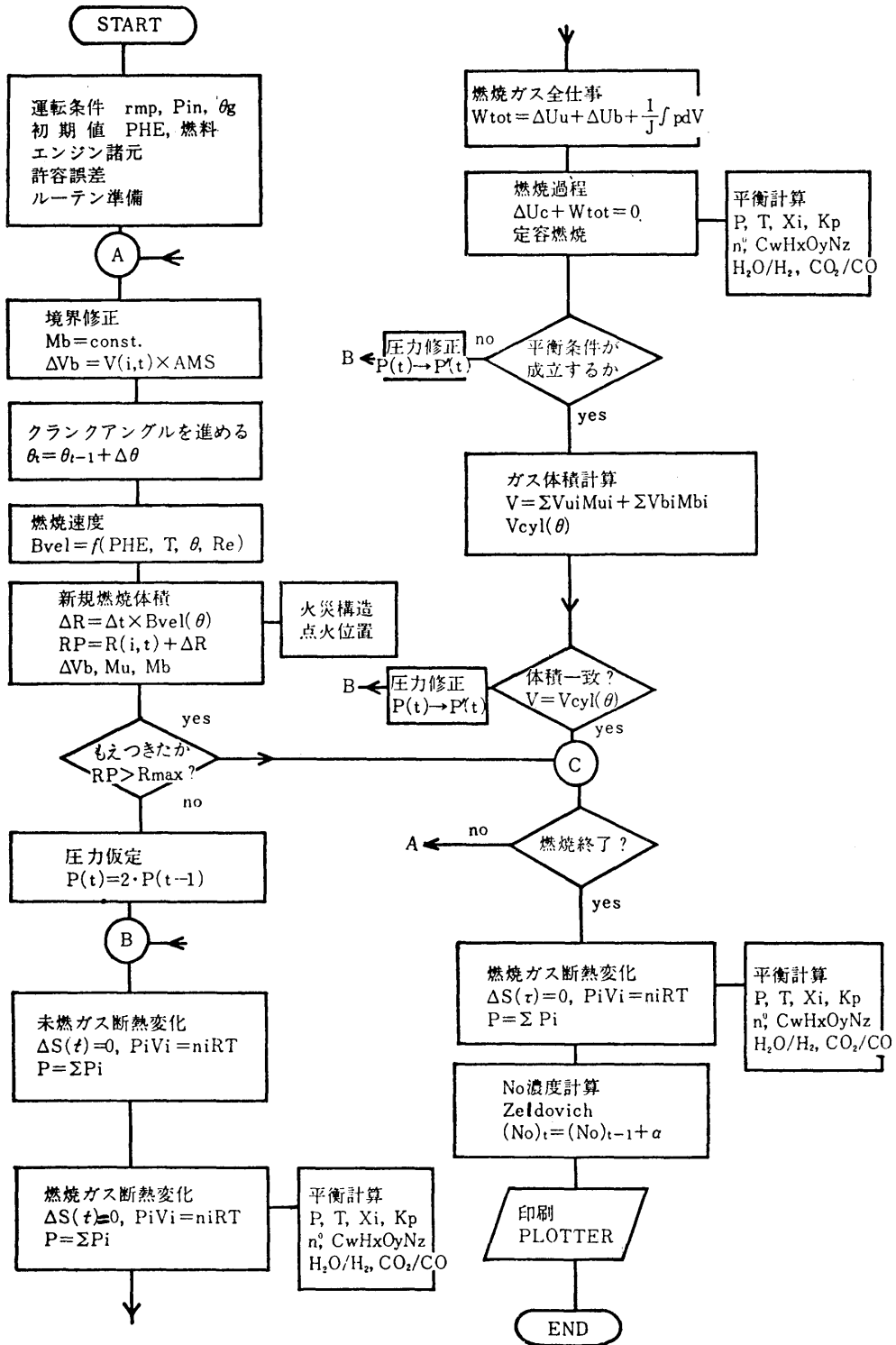


Fig 15 Flow chart

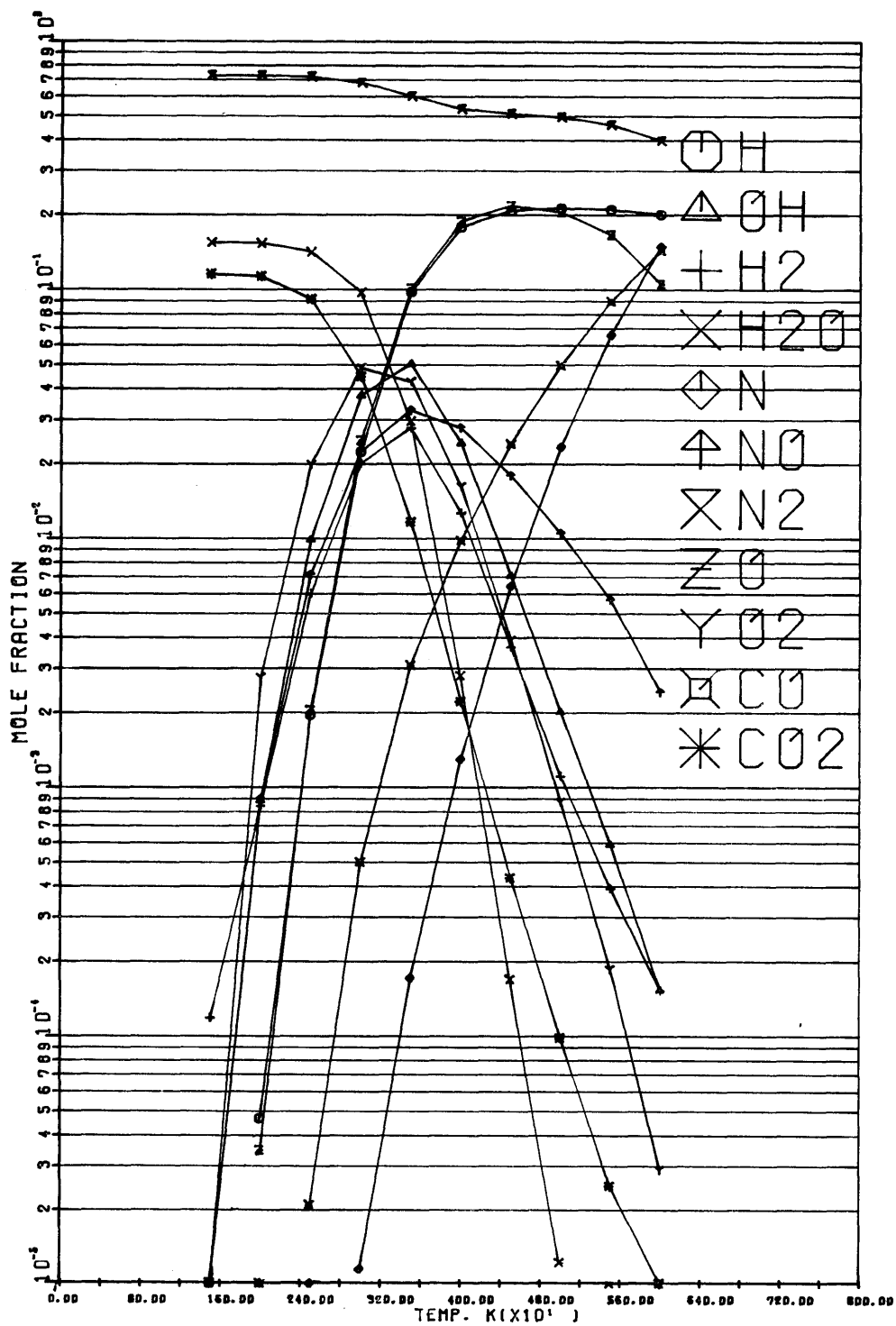


Fig 16 Equilibrium Mole Fraction $P=1$ atm, $PHE=0.999$

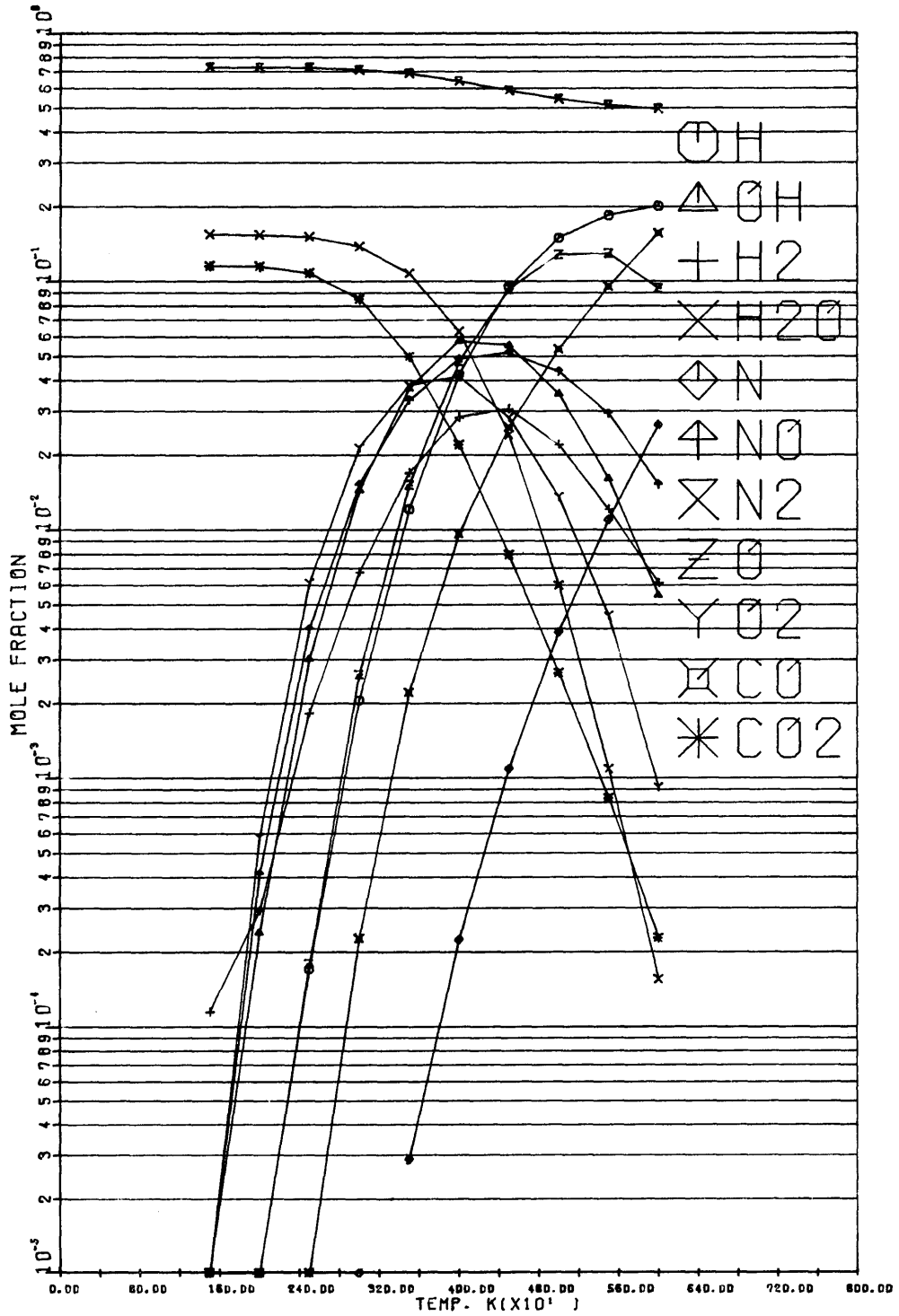


Fig 17 Equilibrium Mole Fraction P=40 atm, PHE=0.6

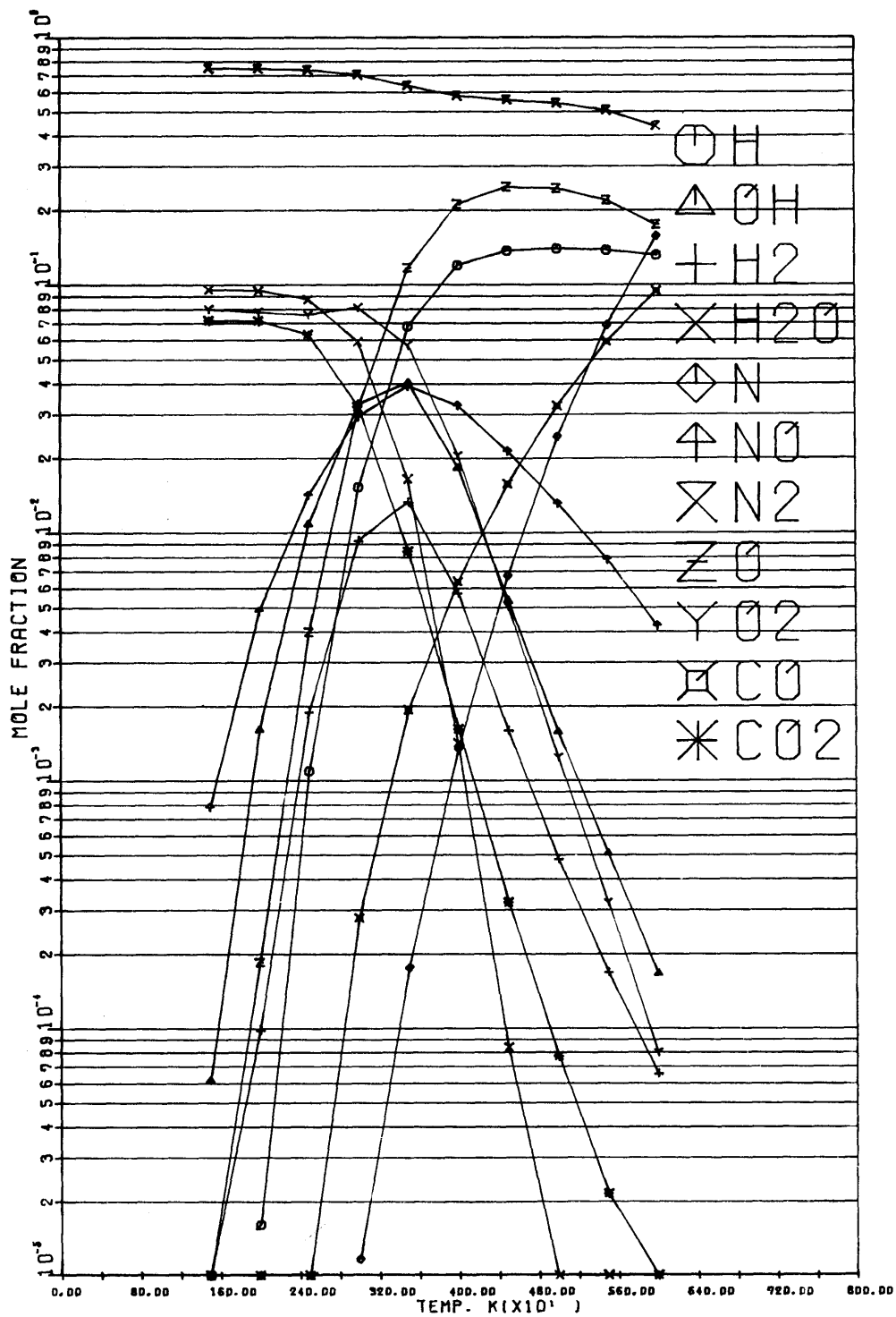


Fig 18 Equilibrium Mole Fraction P=1 atm, PHE=0.6

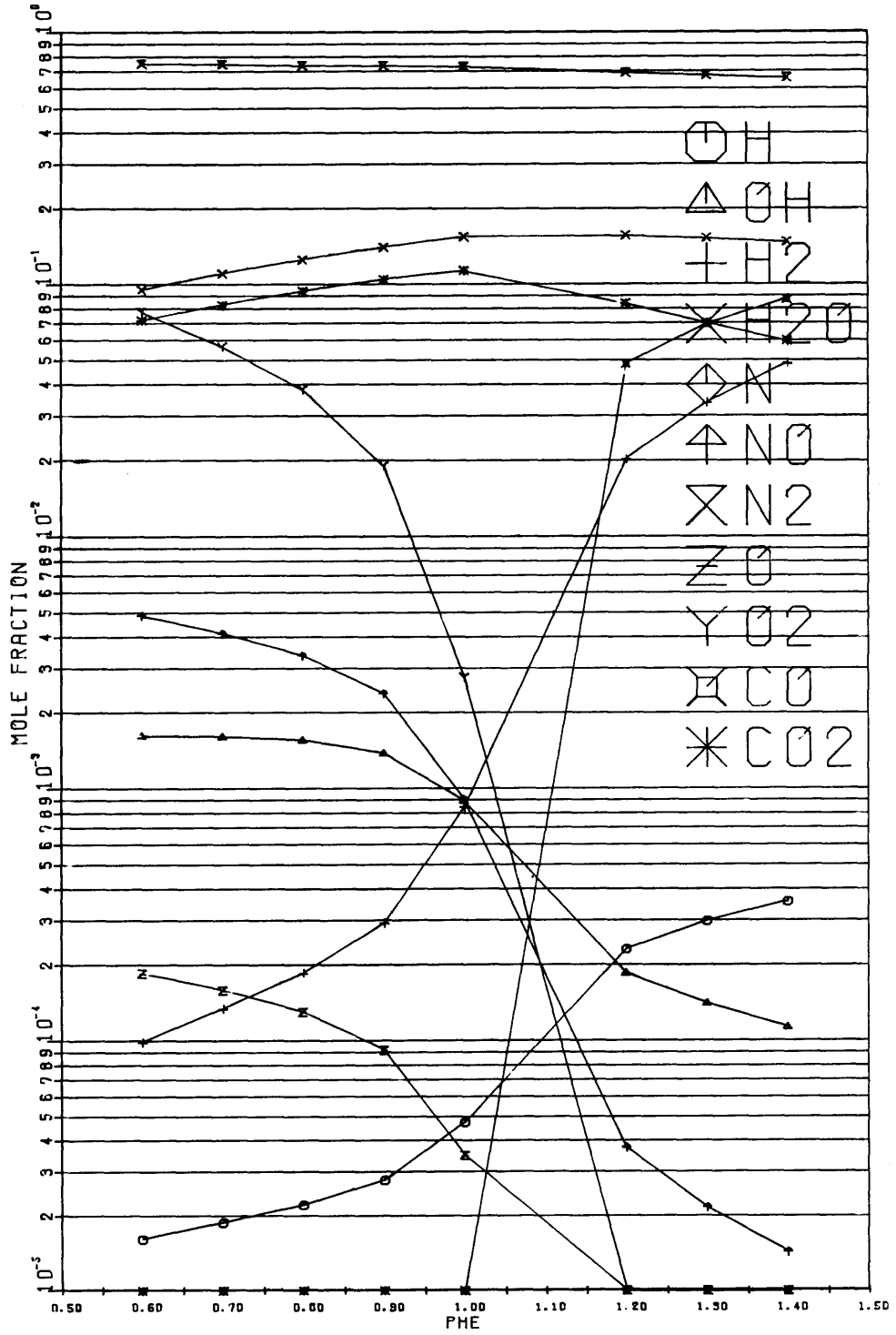


Fig 19 Equilibrium Mole Fraction P=1 atm, T=2×10³ °K

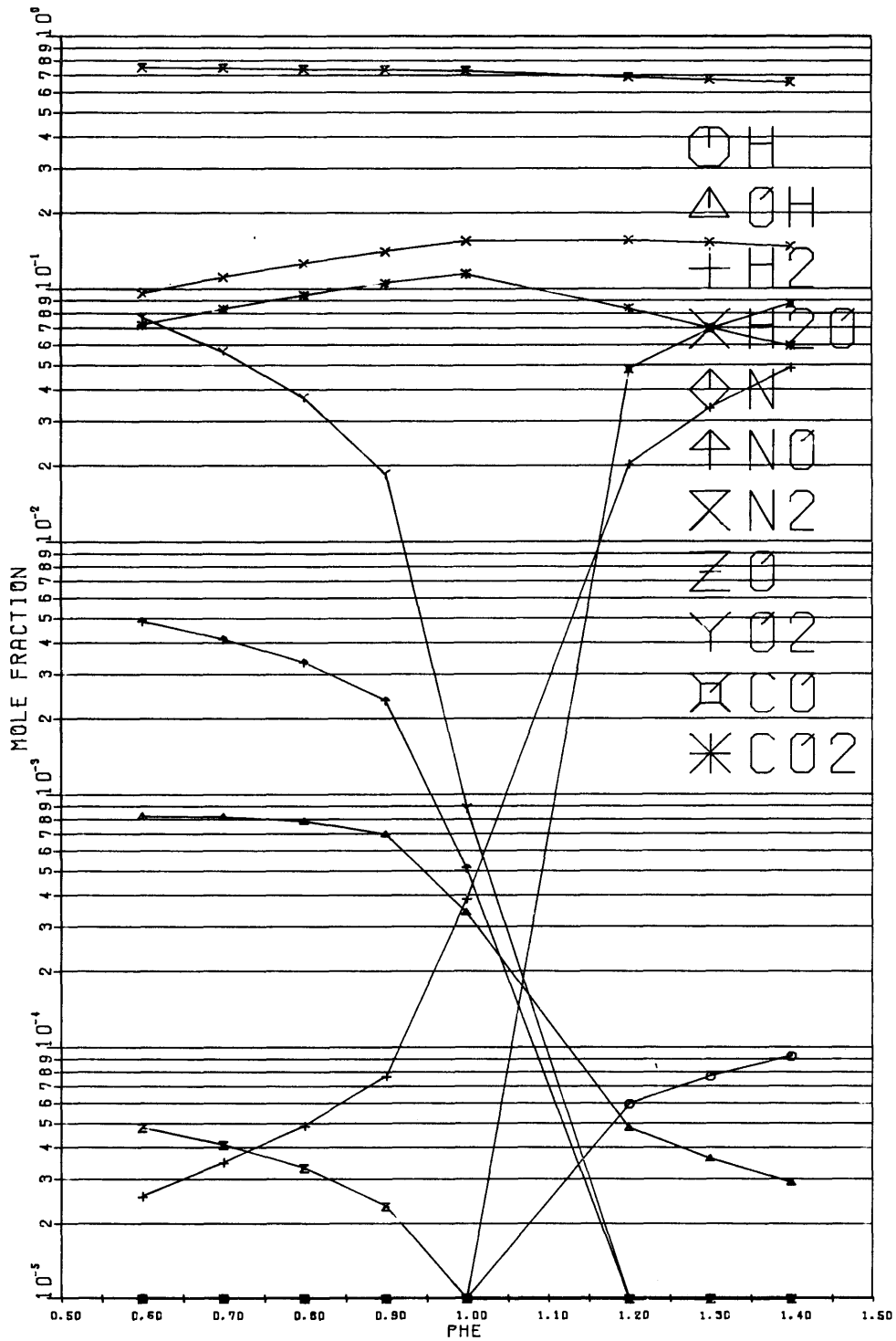


Fig 20 Equilibrium Mole Fraction PHE=20 atm, T=2×10³ °K

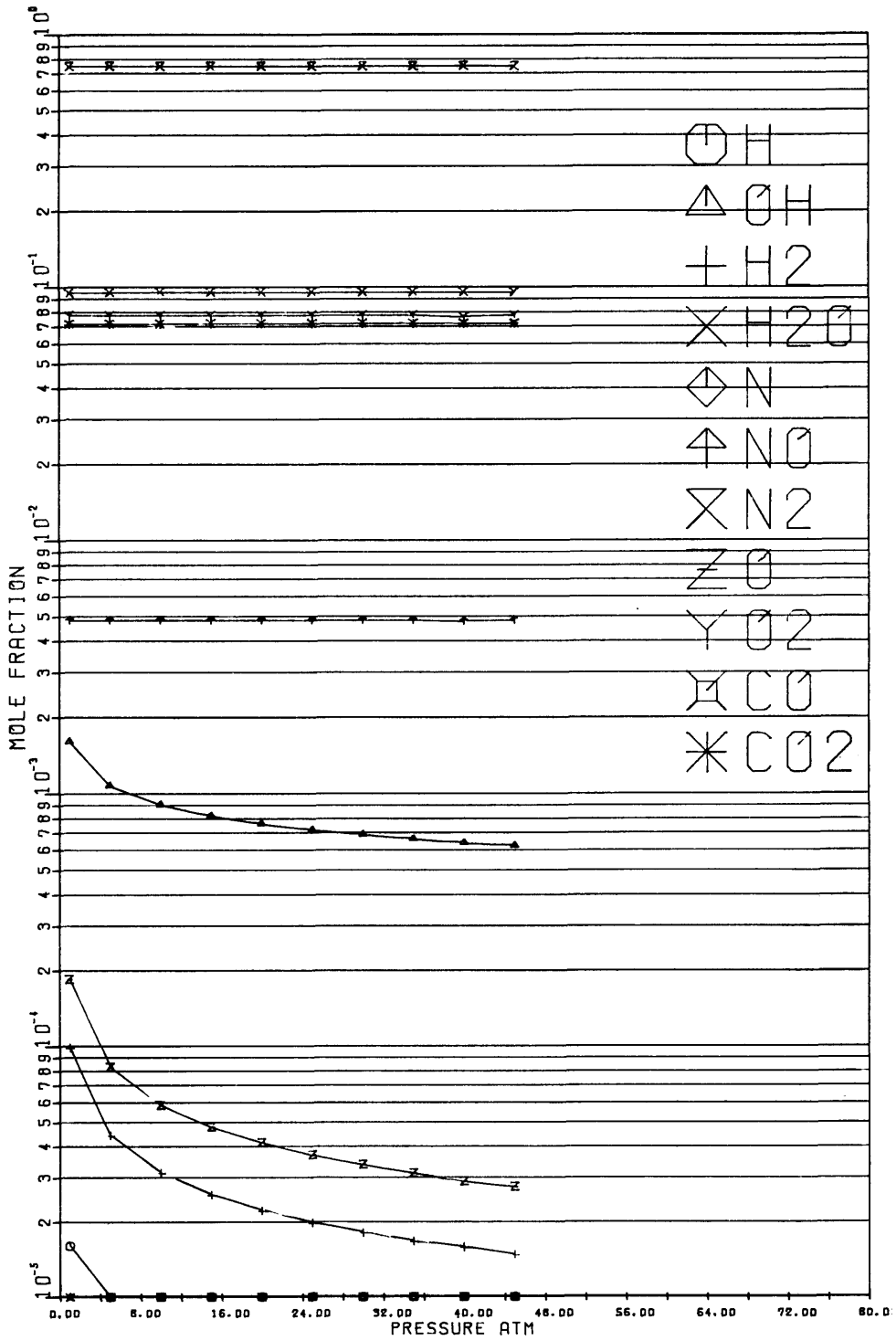


Fig 21 Equilibrium Mole Fraction PHE=0.999, T=2×10³ °K

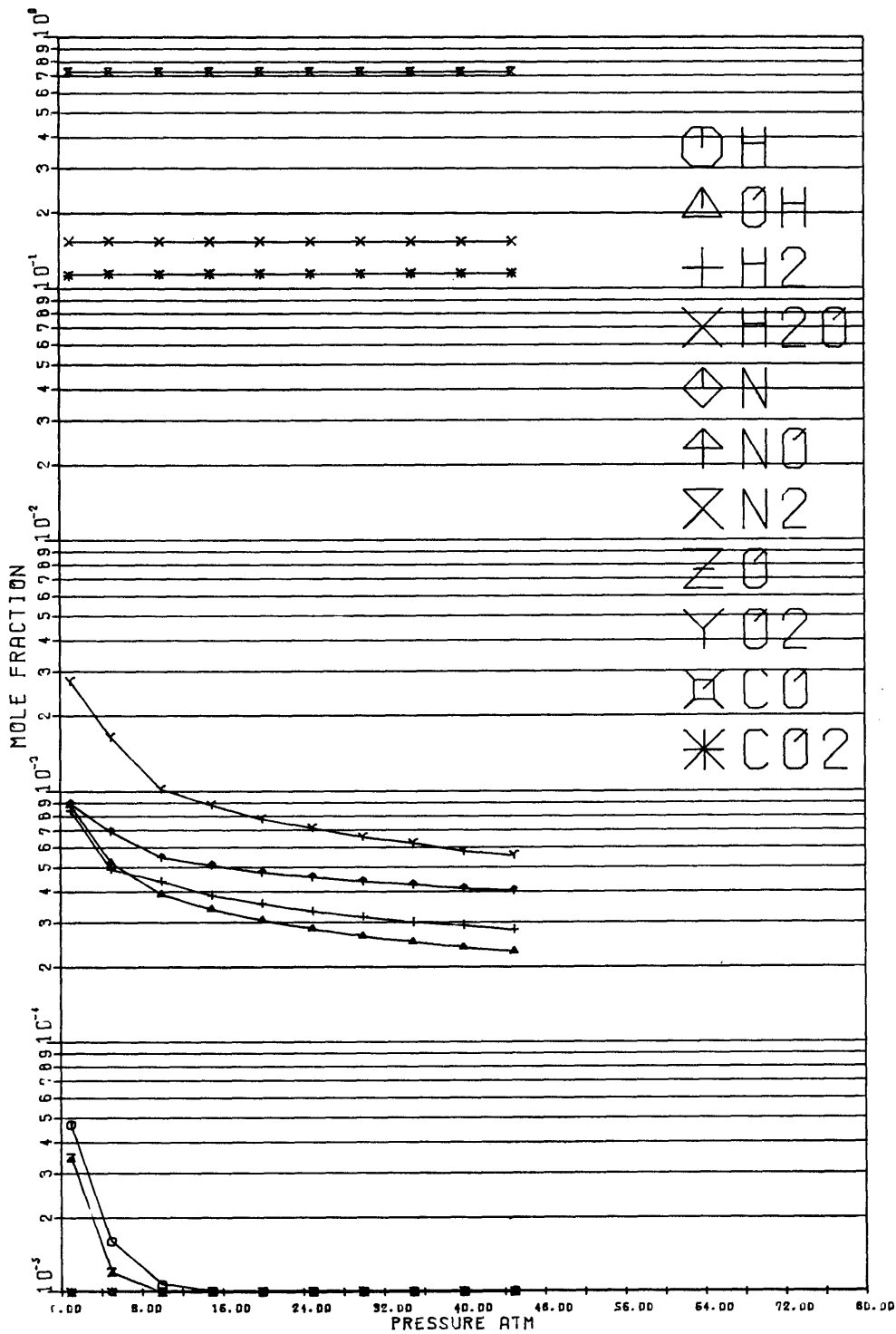


Fig 22 Equilibrium Mole Fraction, PHE=0.999, T=2×10³ °K

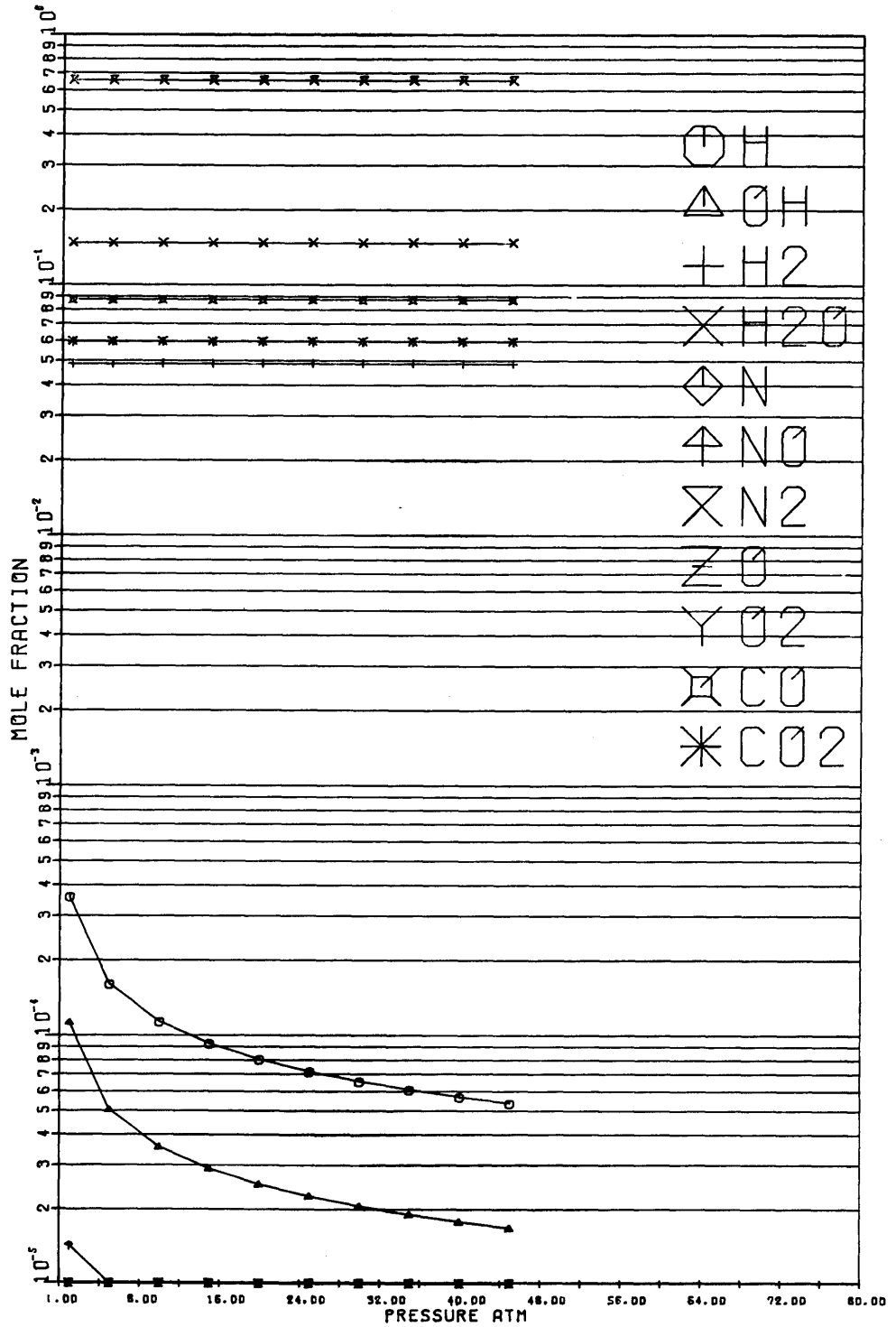


Fig 23 Equilibrium Mole Fraction PHE=1.4, T=2×10⁸ °K

運 転 条 件

エンジン諸元	Table 2
回 転 数	1200 r.p.m.
混 合 比	PHE=1.0
着 火 時 期	35° BTDC

火炎構造は Fig 13 に示した A, B, C について計算する。燃焼速度は Fig 12 のものを使用する。火炎構造が変わると燃焼速度にも影響が現われるが、この流れの燃焼速度への相関作用は他の要素に比して小さいとしここでは一種類を使用する。計算による質量燃焼率及び体積燃焼率は Fig 27, 28 の様である。Fig 29, 30, 31 は各々の火炎構造に対して平衡組成がどの様になるかを、横軸クランクアングル縦軸モル分率に対して示したものである。

Fig 32 は P-V 線図を示す。

Fig 33 は 温度、圧力のクランクアングルに対する変化を示す。

Fig 34 は NO の非平衡計算結果であり各々の火炎構造について空間分布の最高値を示す区分の NO モル分率をクランクアングルに対して表わしたものである。以上の結果火炎構造の相異はシリンダー内の温度、圧力に大きな影響を与えており、NO 生成にも影響がある、その傾向は上死点直前に急激な質量燃焼増加がみられる C 形が最も高い NO 濃度を示し、平均的な燃焼が行われる A 形が最も低くなっている。

上の傾向は放熱を考慮した計算によればさらに助長されるものと考えられる。

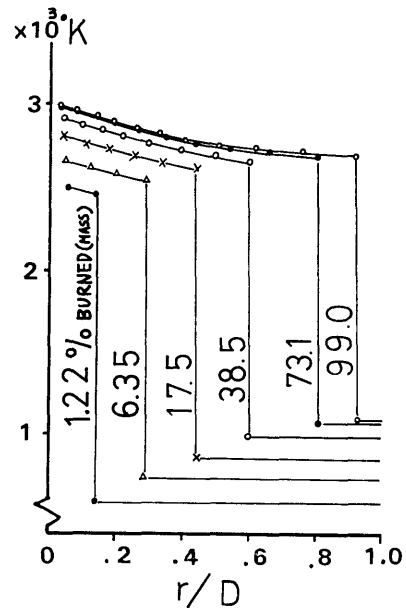


Fig 24 Temperature of each part

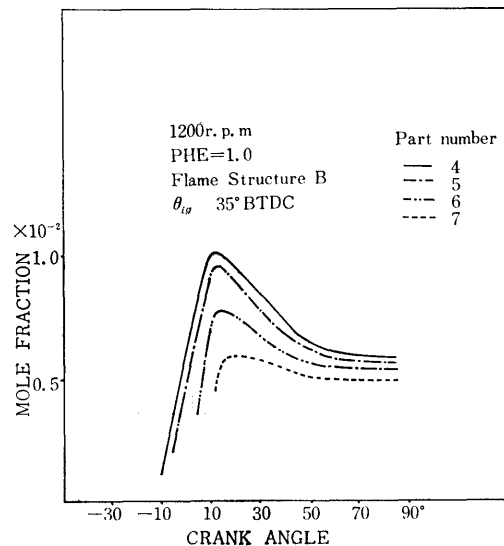


Fig 25 Variation of NO Mole Fraction

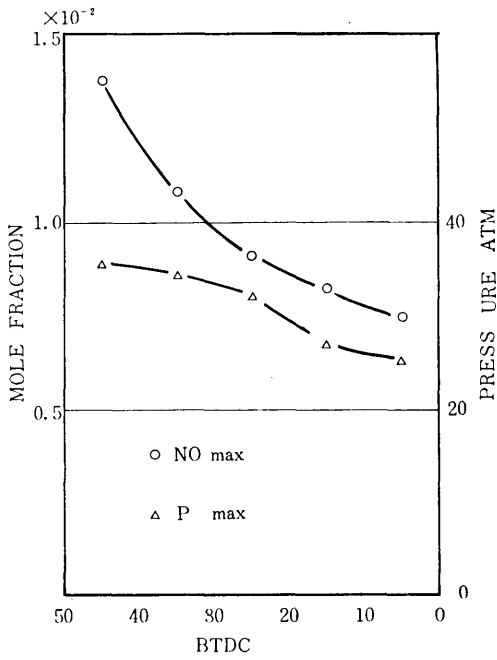


Fig 26 Influence of Ignition Timing

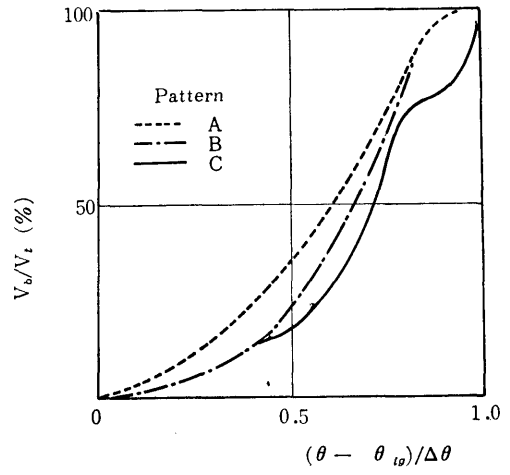


Fig 28 Burned Volume Ratio

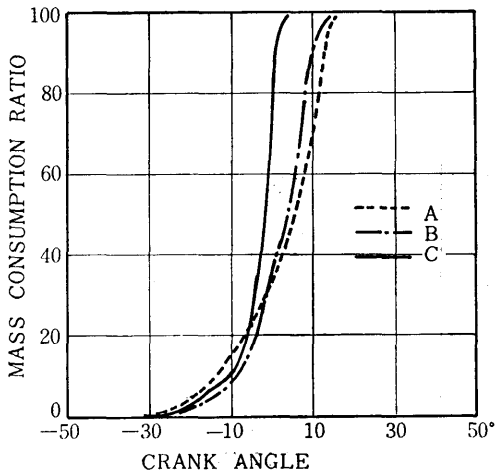


Fig 27 Mass Consumption Ratio

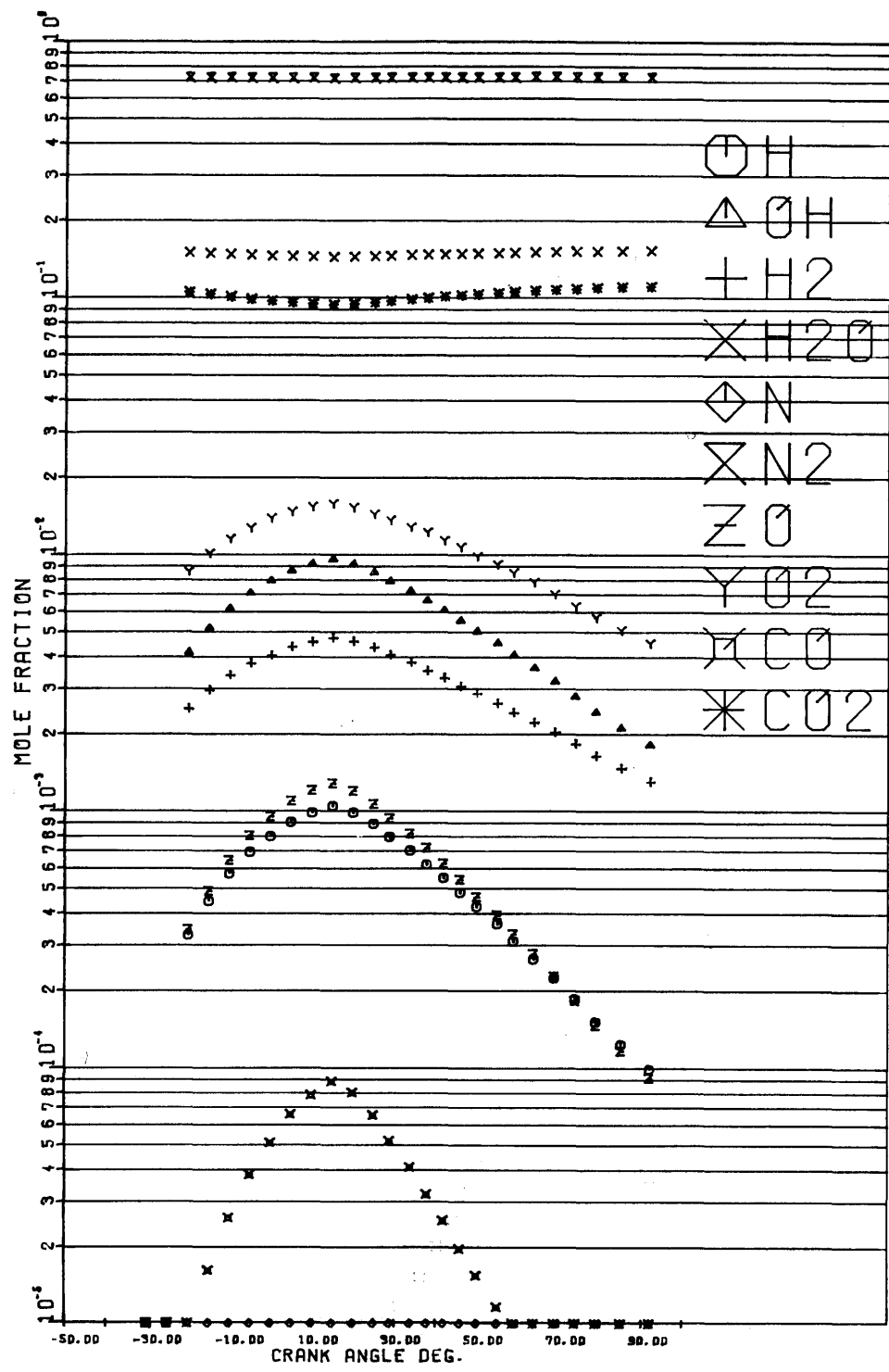


Fig 29 Equilibrium Mole Fraction Pattern A

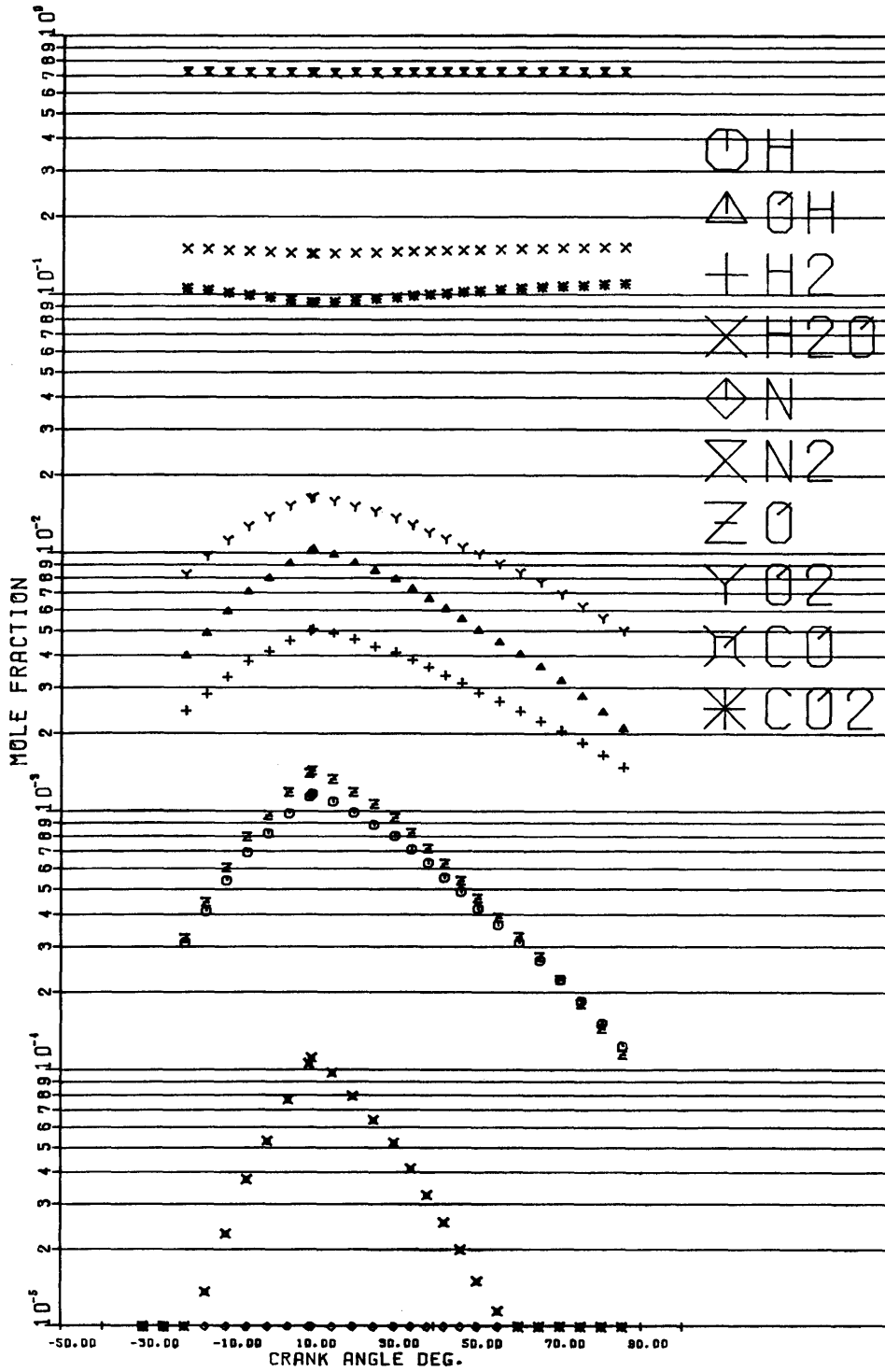


Fig 30 Equilibrium Mole Fraction Pattern B

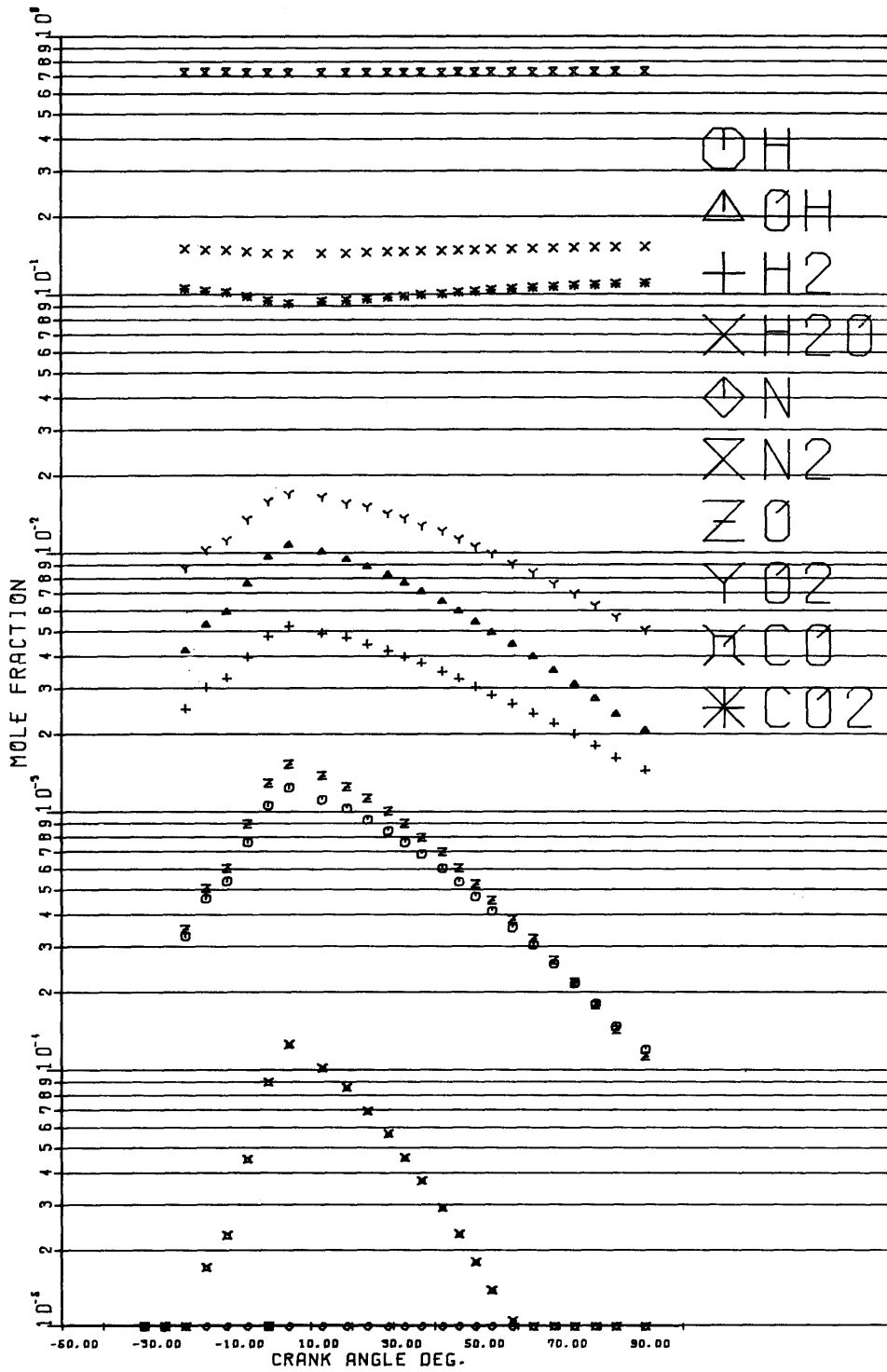


Fig 31 Equilibrium Mole Fraction Pattern C

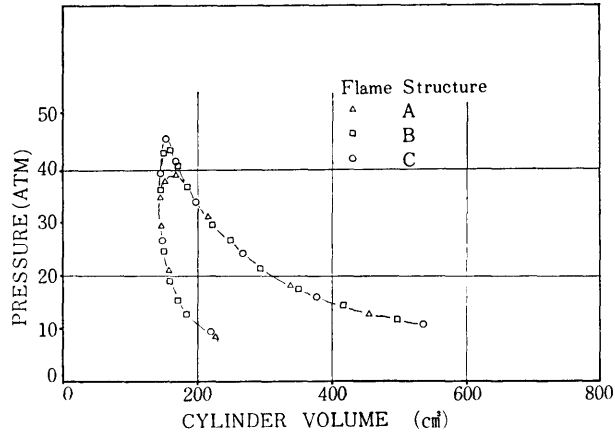


Fig 32 P-V diagram

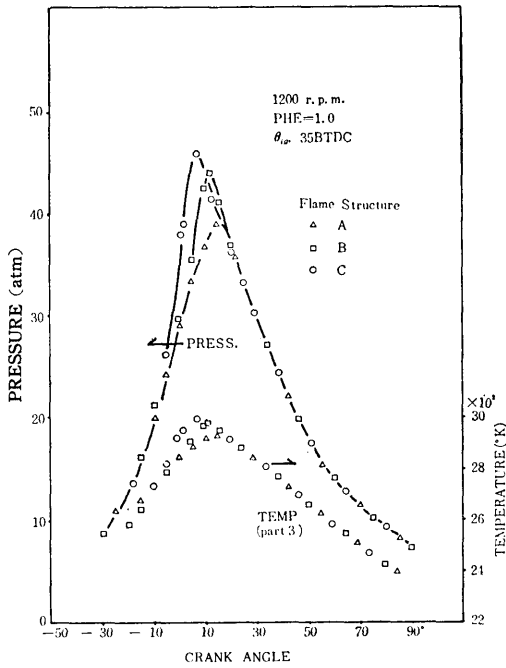


Fig 33 P, T diagram

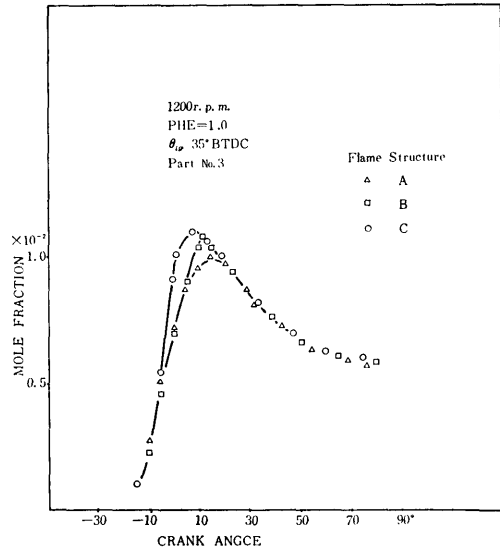


Fig 34 Variation of NO mole Fraction

4. あとがき

本報のシミュレーション計算結果は多くのエンジン排気測定データと比較してみても、傾向は把握できていると思うが、流れの影響や燃焼ガスからの放熱等大きな問題が残されているため、未だ不十分なものである。しかしこのシミュレーション計算は時間的及び空間的濃度組成の把握が一応可能であり、又設計上、火炎構造が燃焼ガス組成に及ぼす影響についての指針を与えてくれるものと思う。今後実験によるデータとの比較検討を重ねてこの解析モデルの評価と改良を進めたい。未だ計算すべきものも多く残こされているが現在までの結果を報告したものである。

尚、単圧縮機関を使用した火炎伝播過程撮影にあたっては、東大生研の平尾収教授に多大の便を計っていただいた事に厚く感謝致します。

参考文献

- Carr, R.C., Stakman, E.S. and Sawyer, R.F. "The Influence of Fuel Composition on Emissions of Carbon Monoxide and Oxides of Nitrogen" SAE Transaction 700470.
- Eyzart, P. and Guibet, J.C. "A New Look at Nitrogen Oxides Formation in Internal Combustion Engines" SAE Paper 680124
- Huff, V. N., Gordon S., and Morrel, V. E. "General method and Thermodynamic Tables for computation of Equilibrium composition and Temperature of Chemical Reactions" NACA Report 1037
- 八田桂三, 佐野妙子 "点火機関の燃焼および性能に関する数値実験的研究 第一報" 東大宇宙航空研究所報告 第10巻 4号 (1974)
- JANAF Thermochemical Data The Dow Chemical Company, Midland Michigan (1965).
- 金栄吉 "ガソリン機関の燃焼速度の解析法と燃焼の特質" 機構論 No. 720-5.
- Lavie, G.A., Heywood, J.B. and Keck, J.C. "Experimental and Theoretical Study of nitric Oxides Formation in Internal combustion Engines" Combustion Science and Technology 1970 Vol. 1.
- Lichty, L. C.; Combustion Engine Processes Mc Graw-Hil 1967.
- Muzio, L. J. "Theoretical and Experimental Investigation of Temperature and Concentration during Combustion in a Closed Sytem" Ph. D. Thesis University of California, Berkeley 1970.
- Newhall, H. K.; "Kinetics of Engine-Generated nitrogen Oxides and Carbon monoxide" 12th Snymp on Comb. (1969).
- 長尾不二夫; 内燃機関講義 上, 下 養賢堂
- 谷下市松; 工業熱力学 上, 下
- Lewis, B. and Von. Elbe, G.; Combustion, Flames and Explosions of Gases, Academic Press.
- Zeldovich, Y. B., "The Oxidation of nitrogen in Combstion Explosions" Acta Physico-chimica U.S.S.R. 21 537-628.
- G. Woschni, "A Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine" SAE Trans. 670931.

付1 使用した主な諸号

$A =$	$1/n^\circ$	$\left[\frac{1}{mole} \right]$
C_P	定圧比熱	$\left[\frac{cal}{mole \cdot ^\circ K} \right]$
C_{Pi}	i 成分定圧比熱	$\left[\quad \quad \right]$
C_V	定容比熱	$\left[\quad \quad \right]$
C_{Vi}	i 成分定容比熱	$\left[\quad \quad \right]$
ΔG	ギッポの自由エネルギー	$\left[\frac{Cal}{mole} \right]$
H	エンタルピー	$\left[\frac{Kcal}{mole} \right]$
h_i	i 成分エンタルピー	$\left[\quad \quad \right]$
ΔH_f	生成エンタルピー	$\left[\quad \quad \right]$
J	仕事関数 427	$\left[\frac{Kg-m}{Kcal} \right]$
K_P	平衡係数	
K_1, \dots, K_{11}	"	

k_1, k_2, k_3, k_4 反応速度定数

M_{bi}	燃焼ガス質量	[kg]
M_{ui}	未燃ガス質量	["]
M_i	全質量	["]
M_W	単位重量あたりのモル数	[$\frac{mole}{Kg}$]
n_i	i 成分モル数	[mole]
n°	全モル数	["]
P	圧力	[atm]
P_i	分圧 i 成分	["]
PHE	混合比=(燃料/空気)/(燃料/空気)stoich	
R	気体定数	1.987 [Cal/mole $\cdot^\circ K$]
S	エントロピー	[$\frac{Cal}{mole\cdot^\circ K}$]
S_i	i 成分エントロピー	["]
ΔS_f	生成エントロピー	["]
T	温度	[$^\circ K$]
U	内部エネルギー	[$\frac{Kcal}{kg}$]
$V_{cyl.}$	シリンダー全容積	[cm^3]
V_b	燃焼ガス比容積	[$\frac{cm^3}{kg}$]
V_u	未燃ガス比容積	["]
W_{tot}	$\frac{1}{J}$ ・全仕事(=ピストン仕事+圧縮仕事)	[Kcal]
W	炭素原子数	
X_i	i 成分モル分率	
X	水素原子数	
Y	酸素原子数	
Y_S	理論混合比の燃料1モルあたりの酸素原子数	
Z	窒素原子数	
Z_S	理論混合比の燃料1モルあたりの窒素原子数	
$^\circ$	基準値を示す	
i	成分を示す	
t	時刻を示す	

付 2

C_{Pi}, h_i, s_i の状態量は次の多項式近似により計算した。この多項式の係数は JANAF のデーターを基に計算したものである。尚この式は標準状態を基にし生成エンタルピーも含んだものである。

(122)

(1) $1200 < T < 6000^\circ K$

$$C_{Pi} = \frac{C_{5i}}{T^4} + \frac{C_{4i}}{T^3} + \frac{C_{3i}}{T^2} + \frac{C_{2i}}{T} + C_{1i} \quad (1)$$

$$h_i = 10^8 \left(-\frac{C_{5i}}{3T^3} - \frac{C_{4i}}{2T^2} - \frac{C_{3i}}{T} + C_{2i} \ln T \right) + C_{1i} \cdot T + C_{11i} \quad (2)$$

$$S_i = -\frac{C_{5i}}{4T^4} - \frac{C_{4i}}{3T^3} - \frac{C_{3i}}{2T^2} - \frac{C_{2i}}{T} C_{1i} \ln T + C_{12i} \quad (3)$$

(2) $298 \leq T \leq 1200^\circ K$

$$C_{Pi} = C_{10i}T^4 + C_{9i}T^3 + C_{8i}T^2 + C_{7i}T + C_{6i} \quad (4)$$

$$h_i = 10^8 \left(-\frac{C_{10i}T^5}{5} + \frac{C_{9i}T^4}{4} + \frac{C_{8i}T^3}{3} + \frac{C_{7i}T^2}{2} + C_{6i}T \right) + C_{13i} \quad (5)$$

$$S_i = \frac{C_{10i}T^4}{4} - \frac{C_{9i}T^3}{3} - \frac{C_{8i}T^2}{2} + C_{7i}T + C_{6i} \ln T + C_{14i} \quad (6)$$

Table 4 C_{ni}

$n \setminus i$	H	OH	H ₂
1	4.966	10.198	12.655
2	0.0	-6.182	-23.867
3	0.0	8.605	52.948
4	0.0	-10.388	-61.099
5	0.0	5.273	27.013
6	4.968	7.490	6.156
7	0.0	-1.581	4.657
8	0.0	1.119	-9.672
9	0.0	0.813	8.783
10	0.0	-0.512	-2.704
11	5.062×10^4	9.288×10^3	2.345×10^4
12	3.341×10	4.844×10	2.866×10
13	5.062×10^4	7.157×10^3	-1.972×10^3
14	3.341×10	5.340×10	3.763×10

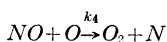
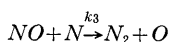
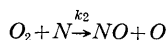
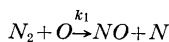
$n \setminus i$	H ₂ O	N	NO
1	15.521	10.820	9.612
2	-6.769	-47.159	-3.480
3	0.717	137.105	7.113
4	-2.122	-170.538	-9.200
5	2.697	76.312	4.168
6	8.046	4.968	8.196
7	-1.854	0.0	-7.900
8	7.273	0.0	18.609
9	-4.763	0.0	-14.991
10	1.149	0.0	4.211
11	-6.657×10^4	1.829×10^5	2.118×10^4
12	4.914×10	2.623×10	5.743×10
13	-6.017×10^4	1.115×10^5	1.935×10^4
14	5.512×10	4.263×10	6.192×10

$n \setminus i$	N_2	O	O_2
1	9.733	6.504	10.789
2	-4.960	-11.224	-0.928
3	11.235	30.220	-17.235
4	-15.292	-35.257	32.871
5	7.289	15.061	-17.756
6	7.531	5.921	7.166
7	-4.093	-3.708	-3.390
8	8.949	5.073	12.977
9	-5.910	-4.300	-12.154
10	1.328	1.178	3.730
11	1.403×10^3	7.420×10^4	-1.204×10^4
12	5.188×10	4.050×10	5.521×10
13	-2.131×10^3	5.792×10^4	-2.077×10^3
4	5.576×10	4.651×10	5.821×10

$n \setminus i$	CO	CO_2
1	9.674	16.948
2	-4.237	-12.943
3	9.075	31.593
4	-12.083	-40.905
5	5.638	18.767
6	7.600	4.427
7	-4.866	19.821
8	11.540	-19.318
9	-8.508	10.484
10	2.167	-2.433
11	-2.604×10^4	-8.566×10^4
12	5.370×10	5.822×10
13	-2.859×10^4	-9.610×10^4
14	5.74×10	5.192×10

付 2

NO の非平衡計算



$\alpha = X_{NO} - X_{NO}^0$ とおく

各濃度は次式で表わされる

$$X_{O_2} = X_{O_2}^0 - \alpha/2$$

$$X_{N_2} = X_{N_2}^0 - \alpha/2$$

$$X_O = X_O^0$$

$$X_N = X_N^0$$

NO の増加を生成と分解の和として計算する

$$\frac{d\alpha}{dt} = \Gamma(\eta - \xi\alpha)$$

$$\text{但し } \eta = k_1 X_{N_2}^0 X_O^0 + k_2 X_{O_2}^0 X_N^0 - k_3 X_{NO}^0 X_N^0 - k_4 X_{NO}^0 X_O^0$$

$$\xi = \frac{1}{2}(k_1 X_O^0 + k_2 X_N^0) + k_3 X_N^0 + k_4 X_O^0$$

$$A\rho = \rho/MW$$

Δt 時間の増加分は $\frac{d\alpha}{dt}$ の式を積分して

$$\exp(-\xi\Gamma\Delta t) = -\frac{\xi}{\eta}\alpha + 1$$

これを α について解くと

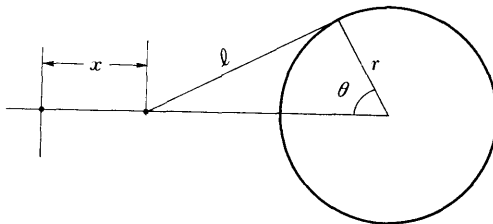
$$\alpha = \left(\frac{\eta}{\xi}\right) \left\{1 - \exp(-\xi\Gamma\Delta t)\right\}$$

したがって t 時の NO モル分率は次式になる

$$(X_{NO})_t = (X_{NO})_{t-1} + \alpha t$$

付 4

シリンダー容積 $V_{Cyl.}$ の計算は次の式に従う。



ストロークは

$$x = r \left[(1 - \cos\theta) + \lambda \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\sin^2\theta}{\lambda^2}} \right) \right]$$

したがってシリンダー容積 $V_{Cyl.}(\theta)$

$$V_{Cyl.}(\theta) = V_T \left\{ \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon} \left[\frac{1}{2}(1 - \cos\theta) + \lambda \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\sin^2\theta}{\lambda^2}} \right) \right] + \frac{1}{\varepsilon} \right\}$$

但し $V_{Cyl.}(\theta)$; シリンダー容積

V_T ; 最大シリンダー容積

ε ; 圧燃比

λ ; e/r

e ; コネクティングロッド長さ

r ; クランク半径