

自動車用火花点火エンジンにおける
ノッキング指標に関する研究

2017 年度

横尾 望

学位論文 博士（工学）

自動車用火花点火エンジンにおける
ノッキング指標に関する研究

2017 年度

慶應義塾大学大学院理工学研究科

横尾 望

目 次

目 次
記号表
略号表

第 1 章 序論.....	1
1.1 研究背景	1
1.1.1 自動車用火花点火エンジン (ガソリンエンジン)	1
1.1.2 ガソリンエンジン用の燃料 (市販ガソリン) の特徴	4
1.1.3 ガソリンエンジンの熱効率とノッキング	6
1.1.4 市販ガソリンのノッキング指標	8
1.2 研究目的	14
1.3 本論文の構成	15
第 2 章 高圧縮比エンジンにおけるノッキングの発生特性.....	16
2.1 はじめに	16
2.2 実験方法	21
2.2.1 評価エンジン	21
2.2.2 評価燃料	22
2.3 エンジン実験結果	23
2.4 考察	25
2.4.1 筒内未燃ガス温度の算出方法について	25
2.4.2 高圧縮比による燃焼位相と温度・圧力の時間変化への影響	28
2.4.3 エンジン回転速度による燃焼位相と温度・圧力の時間変化への影響	31
2.4.4 燃料のオクタン価による燃焼位相と温度・圧力の時間変化への影響	34
2.5 結論	37
第 3 章 高圧縮比エンジンのノッキングにおける未燃ガスの素反応過程の特性.....	38
3.1 はじめに	38
3.2 詳細反応計算によるノッキング解析に用いるモデルについて	39
3.2.1 本研究で取り扱う数値解析モデルの考え方	39
3.2.2 ガソリン混合気のノッキングに関与する詳細反応機構	39
3.2.3 PRF 混合気のノッキングに関与する詳細反応計算結果の解釈について	43
3.3 詳細反応計算によるノッキングの解析方法	44
3.4 ノッキングの解析結果と考察 (1) 初期温度 $T_{i, st}$ での検討	45
3.4.1 高圧縮比による混合気の化学反応への影響	45
3.4.2 エンジン回転速度による混合気の化学反応への影響	48
3.4.3 燃料の RON による混合気の化学反応への影響	51
3.5 ノッキングの解析結果と考察 (2) 初期温度 $T_{i, chem}$ での検討	54
3.5.1 高圧縮比による混合気の化学反応への影響	55
3.5.2 エンジン回転速度による混合気の化学反応への影響	57
3.5.3 燃料の RON による混合気の化学反応への影響	59
3.6 結論	61

第4章 実用エンジンの異常燃焼に対するノッキング指標についての検討	62
4.1 はじめに	62
4.2 標準燃料 (PRF) と市販ガソリンを模擬したサロゲート燃料の着火遅れ時間 p - T マップの比較	63
4.2.1 市販ガソリンを模擬したサロゲート燃料の選定	63
4.2.2 サロゲート燃料の着火遅れ時間の p - T マップ	66
4.3 サロゲート燃料についての PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) p - T マップ	68
4.3.1 RON と MON の計測条件の違いについての考察	68
4.3.2 サロゲート燃料についての PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) p - T マップ	74
4.4 PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) p - T マップを用いたノッキング指標の活用	77
NA (自然吸気) エンジンと過給エンジンのノッキング条件	
4.4.1 エンジン実験と計算方法	77
4.4.2 計算結果とノッキング指標についての考察	80
4.5 結論	88
第5章 Livengood-Wu (LW) 積分によるノッキング発生時期の予測方法の改良	89
5.1 はじめに	89
5.2 LW 積分によるノッキング発生時期の予測方法	91
5.2.1 計算に用いた実験結果	91
5.2.2 LW 積分の算出	91
5.2.3 着火遅れ時間の算出	91
5.3 LW 積分によるノッキング発生時期の予測結果と考察	94
5.3.1 case1 (初期温度 $T_{i, st}$, Douaud の着火遅れ時間の場合)	94
5.3.2 case2 (初期温度 $T_{i, st}$, Douaud の着火遅れ時間の係数を最適化させた場合)	95
5.3.3 case3 (初期温度 $T_{i, chem}$, Douaud の着火遅れ時間の場合)	96
5.3.4 case4 (初期温度 $T_{i, chem}$, Douaud の着火遅れ時間の係数を最適化させた場合)	97
5.3.5 case5 (初期温度 $T_{i, chem}$, 詳細化学反応計算による PRF の着火遅れ時間の場合)	98
5.4 結論	101
第6章 結論	102

参考文献

謝辞

Appendix1 燃焼重心(CA50)の求め方

Appendix2 PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) p - T マップを用いたノッキング指標の応用

～NA (自然吸気) エンジンと過給エンジンのプレイグニッション条件の検討～

記号表

量記号	単位	正式名 (日本語)	正式名 (英語)
c_p	J/(Kmol)	定圧モル比熱	molar specific heat at constant pressure
c_v	J/(Kmol)	定積モル比熱	molar specific heat at constant volume
n_a	mol	吸入空気分子のモル数	intake air mole number
n_{EGR}	mol	残留ガスのモル数	residual exhaust gas mole number
n_f	mol	燃料分子のモル数	fuel mole number
p	Pa	燃焼室内圧力	cylinder pressure
p_{exp}	Pa	実験で計測された 200 サイクル平均筒内圧力	measured cylinder pressure (200cycle average)
p_{IVC}	Pa	筒内圧力センサーから求めた圧縮開始時の筒内平均圧力	cylinder pressure at IVC
p_m	Pa	m 番目のクランク角度 (θ_m) における筒内圧力	cylinder pressure of combustion chamber at θ_m
R	J/(Kmol)	気体定数	gas constant
S	-	センシティブティ	sensitivities
t	ms	圧縮開始からの経過時間	time after IVC
T_b	K	燃焼室内の既燃ガス温度	burned gas temperature
T_m	K	m 番目のクランク角度 (θ_m) における燃焼室内の未燃ガス温度	unburned gas temperature of combustion chamber at θ_m
T_u	K	燃焼室内の未燃ガス温度	unburned gas temperature
V	m ³	燃焼室の容積	volume of combustion chamber
V_c	m ³	TDC のときの燃焼室容積	volume of combustion chamber at TDC
V_d	m ³	行程容積	piston displacement
V_{IVC}	m ³	圧縮開始時の燃焼室容積	volume of combustion chamber at IVC
V_m	m ³	m 番目のクランク角度 (θ_m) における燃焼室容積	volume of combustion chamber at θ_m
V_t	m ³	BDC のときの燃焼室容積	volume of combustion chamber at BDC
var	-	分散	variance
W	J	図示仕事 (1 サイクルでピストンに対してされる仕事)	indicated work
θ	ATDC	クランク角度	crank angle
θ_m	ATDC	m 番目のクランク角度	crank angle at m [ATDC]
ε	-	圧縮比	Compression ratio
η_{th}	-	エンジン熱効率	Engine thermal efficiency
κ	-	比熱比	Specific heat ratio
λ	-	空気過剰率	air excess ratio
$\tau(T,p)$	s	初期温度 T , 初期圧力 p における着火遅れ時間	ignition delay time
τ_D	s	Douaud の式で求められた着火遅れ時間	ignition delay time calculated by Douaud equation
$\tau_{D,fit}$	s	係数最適化後の Douaud の式で求められた着火遅れ時間	ignition delay time calculated by Douaud equation after optimization

尚, 燃焼室内の未燃ガス温度(T_u), 燃焼室内圧力(p), クランク角度(θ), 圧縮開始からの経過時間(t), 着火遅れ時間(τ)については, 本文中で次の添え字により時期と求め方を識別している.

1. 時期に関する添え字

<i>i</i>	IVC, 計算開始時期, 圧縮開始時期
<i>ig</i>	着火時期
<i>knock</i>	ノッキング発生時期
<i>pre-ig</i>	プレイグニッション発生時期

2. 場所に関する添え字

<i>in</i>	吸気
<i>ex</i>	排気

3. 求め方に関する添え字

<i>ad</i>	断熱圧縮の式
<i>chem</i>	詳細反応計算
<i>exp</i>	実験
<i>h</i>	エンタルピー保存式
<i>predicted</i>	LW 積分式
<i>PRF</i>	燃料を PRF としたときの詳細反応計算
<i>st</i>	状態方程式
<i>S5</i>	燃料をサロゲート燃料 (S5R, S5H) としたときの詳細反応計算

略号表

略号	正式名 (英語)	正式名 (日本語)
A/F	Air fuel ratio	空燃比
ACI	Advanced Compression Ignition	先進的圧縮着火
AKI	Anti-Knock Index	耐ノック指標
BDC	Bottom Dead Center	下死点位置
CA50	50% mass fraction burned Crank Angle	50%質量燃焼割合時期 [ATDC]
CFD	Computational Fluid Dynamics	数値流体力学
CFR	Cooperative Fuel Research	燃料研究協同組合
CNG	Compressed Natural Gas	圧縮天然ガス
CR	Compression Ratio	圧縮比
CRC	Coordinating Research Council	アメリカの燃料研究評議会
DI	Direct Injection	筒内直接噴射
DRG	Directed Relation Graph	直接関係グラフ
ECU	Engine Control Unit	エンジンコントロールユニット
EGR	Exhaust Gas Recirculation	排気ガス再循環
ETBE	Ethyl Tertiary Butyl Ether	エチルターシャリーブチルエーテル
EVC	Exhaust Valve Close timing	排気バルブ閉時期
EVO	Exhaust Valve Open timing	排気バルブ開時期

略号	正式名（英語）	正式名（日本語）
FACE	Fuels for Advanced Combustion Engine	将来燃焼用サロゲート燃料
FCA	Fiat Chrysler Automobile	フィアット・クライスラー・オートモービルズ
FT 法	Fischer-Tropsch process	フィッシュャートロプシュ法
GHG	Green House Gases	温室効果ガス
GM	General Motors Company	ゼネラルモーターズ
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition	予混合圧縮着火
IVC	Intake Valve Close timing	吸気バルブ閉時期
IVO	Intake Valve Open timing	吸気バルブ開時期
JIS	Japanese Industrial Standards	日本工業規格
KCS	Knock Control System	ノックコントロールシステム
KLSA	Knock Limited Spark Advance	ノック限界点火時期
KUCRS	Knowledge-basing Utilities for Complex Reaction Systems	詳細反応機構自動生成システム
LES	Large Eddy Simulation	ラージエディシミュレーション
LLNL	Lawrence Livermore National Laboratory	リバモア国立研究所（米国）
LSPI	Low Speed Pre-Ignition	過給エンジンの低速プレイグ
LTO	Low Temperature Oxidation reaction	低温酸化反応
LW 積分	Livengood-Wu integral	リーベングッドウー積分
MBT	Minimum advance for the Best Torque	MBT 点火時期
MON	Motor Octane Number	モーターオクタン価
NA	Natural Aspirated	自然吸気
NTC	Negative Temperature Coefficient	負の温度係数
OEM	Original Equipment Manufacturer	完成車メーカー
OI	Octane Index	オクタンインデックス
PFI	Port Fuel Injection	ポート噴射
PRF	Primary Reference Fuel	標準燃料
RCM	Rapid Compression Machine	急速圧縮装置
RON	Research Octane Number	リサーチオクタン価
S	Sensitivity (=RON-MON)	センシティビティ (=RON-MON)
SI	Spark Ignition	火花点火
SIP	cross-ministerial Strategic Innovation promotion Program	内閣府戦略的イノベーション創造プログラム
SIP-Gd1.0	Gasoline surrogate details reaction mechanism version 1.0	ガソリンサロゲート詳細反応機構バージョン 1.0
TDC	Top Dead Center	上死点位置
TK	Trace Knock	トレースノック点火時期
WOT	Whole Open Throttle	スロットル全開状態
WWFC	Worldwide Fuel Charter	世界燃料憲章

第1章 序論

1.1 研究背景

1.1.1 自動車用火花点火エンジン（ガソリンエンジン）

現代社会の中において、交通機関の役割は非常に重要になっており、特に、自動車は人々の生活に欠かすことができない物となっている。自動車には図 1-1 に示すように 200 年以上の歴史がある。動力源を振り返ると、蒸気機関や電気自動車が主力となった時代もあるが、エネルギー密度や出力、航続距離等の観点から、現代に至るまで内燃機関が主に活用されて来た。1950 年以降の経済発展とともに自動車の普及台数も飛躍的に増加した結果、内燃機関からの CO₂ 排出量も増大している。そのために、世界的な気候変動への影響が懸念されており、電気自動車や、燃料電池自動車など、燃焼を伴わない動力源を持つ自動車が注目されており、普及に向けた取り組みが進んでいる。しかしながら、電気自動車の開発においては、エネルギー密度が石油などの液体燃料に比べて小さいことから、自動車としては航続距離で課題があること、充電時間やインフラの整備の観点から、ユーザーの利便性に課題があることなど解決すべき技術課題は少なくない。燃料電池車の開発においても、水素供給を行なうインフラの整備の課題がある。併せて、電気自動車や燃料電池車においては、コスト低減の課題等もある。パワートレインは多様化しているがこれらの課題もあることから、内燃機関は引き続き主要な役割を演じていくために進化することが期待されている。

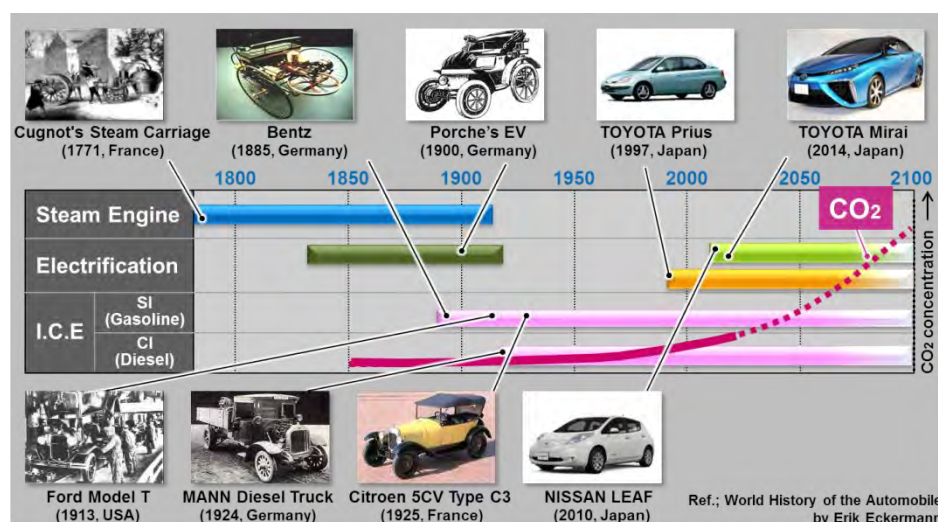


Fig.1-1 History of power train and CO₂ concentration.

内燃機関の起源としては、1876年にニコラウス・オットーにより発明された火花点火式の往復ピストンエンジン、1924年にルドルフ・ディーゼルにより発明された圧縮着火式の往復ピストンエンジンが知られている。往復ピストンエンジン（レシプロエンジン：以降エンジンと表記）は、燃焼に伴い燃焼室内の圧力が高まり、そのガス膨張のエネルギーをピストンの往復運動に変換することで動力を取り出している。そして、このピストンの往復運動をクランク機構によってクランク軸の回転運動に変換している。クランク軸の回転運動は変速機を介してタイヤに伝わり、自動車の走行性能を生み出すために使われている。内燃機関は燃焼方式の違いによって、「火花点火式」や「圧縮着火式」に分類されているが、それぞれの燃焼方式の特徴から使用されている燃料の種類も異

なっており、前者がガソリンエンジン、後者がディーゼルエンジンと分類されることが多い。本論文では、乗用車用に普及している火花点火エンジン（ガソリンエンジン）を取り扱うこととする。

図1-2に示すように、一般的なガソリンエンジンは、ピストンとクランクシャフトがコネクティングロッドによって連結された構造となっている。各部の動作については、クランクシャフトの回転角 (θ) の変化に伴い、ピストンが上死点位置 (Top Dead Center :TDC) から下死点位置 (Bottom Dead Center :BDC) までの往復運動を繰り返す。TDC のときの燃焼室容積 (V_c) と、BDC の時の燃焼室容積 (V_t) の差を行程容積 (V_d) とよび、圧縮比 (Compression Ratio :CR) を式(1-1)で定義する (Heywood, 1989)。

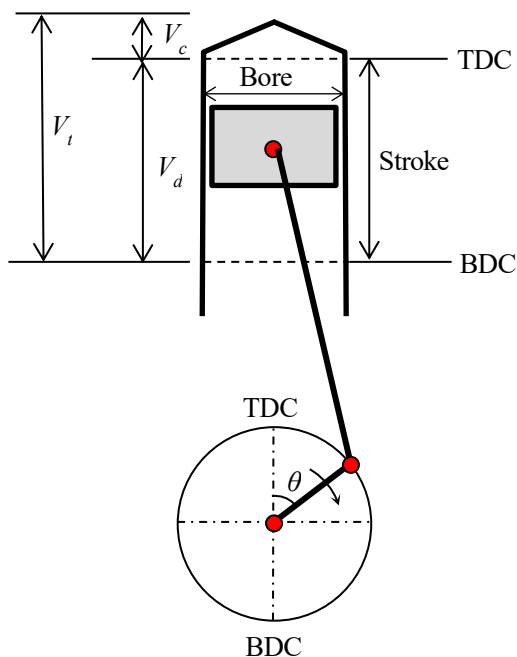


Fig.1-2 Basic geometry of the reciprocating internal combustion engine.

$$CR = \frac{(V_c + V_d)}{V_c} = \frac{V_t}{V_c} \quad (1-1)$$

また、エンジンの動作として燃焼室筒内の作動ガスの挙動に着目すると、図1-3に示すように、ピストンの動きに合わせて時系列で4つの行程に分かれることになる。吸気バルブ開時期 (Intake Valve Open Timing: IVO) から吸気バルブ閉時期 (Intake Valve Close Timing: IVC) の間に空気が燃焼室筒内に充填される吸気行程、IVCからピストンの上昇により燃焼室筒内の混合気が圧縮される圧縮行程、燃焼によるガス膨張によりピストンが押し下げられる膨張行程、排気バルブ開時期 (Exhaust Valve Open Timing: EVO) から排気バルブ閉時期 (Exhaust Valve Close Timing: EVC) の間に燃焼ガスが排出される排気行程の4行程であり、4ストロークエンジンともよばれている。なお、ガソリンエンジンの混合気の形成については、吸気ポートにインジェクタを配置しているポート噴射 (Port Fuel Injection: PFI) 方式や筒内に直接燃料を噴射する筒内直接噴射 (Direct Injection: DI) 方式、そして両方を備えた方式が市場に導入されている。

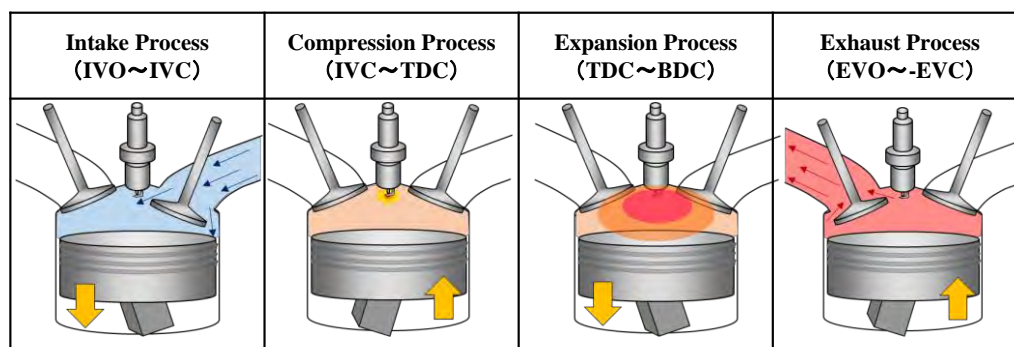


Fig.1-3 The four stroke operating cycle.

ガソリンエンジンのクランクアングルに対する燃焼室の容積 (V)、燃焼室内圧力 (p)、燃焼室内の既燃ガス温度 (T_b) と未燃ガス温度 (T_u) を図 1-4 に示す。圧縮行程で燃焼室筒内の圧力、温度が大きく上昇したところでスパークプラグの点火により燃焼が開始する。点火により生じた火炎核は、筒内の流動を受けながら成長し、ガソリンと空気の混合気中を伝播していく。この行程の中で、燃焼に伴い熱エネルギーが発生し燃焼室筒内の圧力が高くなることで、ピストンを押し下げる仕事 (W) となる。この仕事は、式 (1-2) で表すことができる。

$$W = \oint p dV \quad (1-2)$$

詳細については、Heywood によって発刊されている内燃機関の書物 (Heywood, 1989) を参照されたいが、実用エンジンではドライバーの要求に対して仕事を効率良く取り出すために、吸入空気流量やエンジン回転速度を調整することで運転条件を決定している。混合気の燃焼を捉えるためには、初期の圧力や温度状態に加えて、燃焼室の容積変化、即ち、燃焼室内の圧力や温度が時間的に変化していることから、過渡的な挙動を理解する必要がある。そして、エンジン開発を行う時には、この燃焼について理解した上で設計、制御を考えることが重要となる。

ガソリンエンジンは、冒頭にも記載したが、乗用車の動力源として世界中で普及している一方で、燃焼を伴うことから CO_2 などの温室効果ガス (Green House Gases: GHG) や、窒素酸化物、粒子状物質のような大気環境に影響を与える物質を排出しており、これらの物質の排出は各国の排出ガス規制の対象となっている。また、ガソリンは枯渇が懸念されている石油資源を原料に精製されることから、石油エネルギーの安定調達、つまりエネルギーセキュリティの側面から各国の政治、経済と大きなかかわりを持っている。

特に CO_2 に関しては、2015 年の COP21 で採択されたパリ協定に対応するために、各国政府における燃費規制がよりいっそう厳しくなることが予測される。こうした背景を踏まえて、自動車の車両の軽量化技術と共に、内燃機関の更なる CO_2 排出量の低減、すなわち熱効率の向上に関する技術革新や、バイオ燃料などの活用による Well To Wheel (油田から車輪) での CO_2 低減に関する取り組みが進められている。

ガソリンエンジンにおける熱効率向上に向けた取り組みは後述するが、ノッキングの改善に伴う圧縮比の向上や排気ガスの一部をシリンダーに戻す EGR (Exhaust Gas Recirculation) の活用等により、市販のガソリンエンジンにおいても熱効率の最大値は 40% 以上にまで高められている (Nakata, 2014, Yamada, et. al., 2014, Takahashi, et. al., 2015, Itabashi, et. al., 2017)。

また、熱効率を高めることは社会的にも極めて重要であることから、日本では、熱効率向上の研究に対して、2014 年度から内閣府が主導する戦略的イノベーション創造プログラム (Cross-ministerial Strategic Innovation Promotion Program: SIP) 「革新的燃焼技術」が開始された。このプロジェクトは産官学一丸となったプロジェクトであり、基礎研究から応用研究までの包括的な取り組みを行うことにより、新規技術の創出を実現し、エンジンの最高熱効率 50% の実現を目指したプロジェクトとなっている (Daisho, 2015, Yokomori, et. al., 2016)。日本以外の国においても、アメリカにおける Co-optima、欧州における Horizon2020、ドイツにおける TMFB (Hoppe, et.al, 2016)、e-fuel 等、同様のプロジェクトが組織されており、内燃機関の熱効率向上と CO_2 低減に対する取り組みは世界中で進められている。

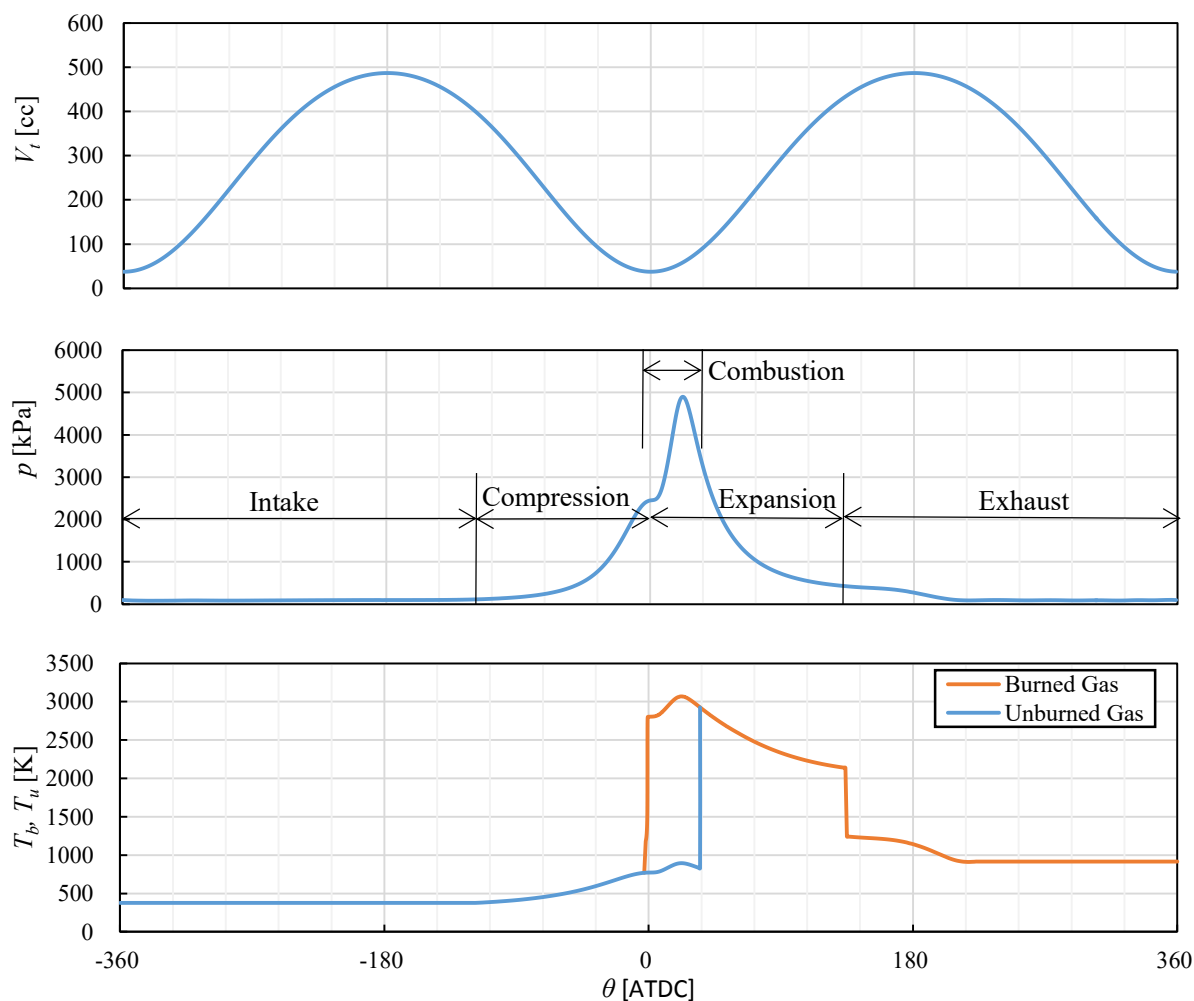


Fig.1-4 Sequence of events in four-stroke spark-ignition engine operating cycle. Cylinder volume V_l , cylinder pressure p , cylinder temperature T_b , T_u (T_b , burned gas temperature; T_u , unburned gas temperature) are plotted against crank angle.

1.1.2 ガソリンエンジン用の燃料（市販ガソリン）の特徴

石油製品であるガソリンは、石油精製法にしたがって生産されている。基本となる技術は蒸留であるが、ガソリン留分の量の確保と品質向上（高オクタンガソリン化、低硫黄化）のために接触分解法、アルキル化法、接触改質法、水素化分解法などを用いて、重油の改質を進めたり、低オクタン価燃料を高オクタン価燃料に変換したりして利用している（小西, 1991, 神谷, 1987）。特に、国内においては、2010年にエネルギー供給構造高度化法が制定され、前述の技術等を活用して生産設備の効率化が進められている。

自動車に望ましいと考えられるガソリンの品質に関しては、日米欧の自動車業界が共同で、自動車の使用状況や、排気ガス規制に対応するための要求品質を具体的な条件、数値でまとめており、WWFC（Worldwide Fuel Charter）として発行している（日本自動車工業会, 2017）。また、国内においては、自動車業界や使用者団体、石油業界により自動車用の市販ガソリンに対する要求品質を協議し、日本工業規格（Japanese Industrial Standard: JIS）として定めている。表 1-1 に国内の市販ガソリン規格である JIS K 2202-2012 を示す。リサーチオクタン価（Research Octane Number, RON）と酸素分の有無でそれぞれ 2 水準に分かれており、密度や蒸留特性、蒸気圧特性、硫黄濃度などが定められている（JIS, 2012）。

Table 1-1 Properties of Japanese Gasoline (JIS K 2202-2012).

Property	Premium	Premium(E)	Regular	Regular(E)	Test Method
RON, min	96		89		JIS K 2280
Density @ 15°C, g/cm ³ , max	0.783				JIS K 2249
Distillation					JIS K 2254
T10, °C, max	70				
T50, °C, max	110	105	110	105	
T50, °C, min	70	70(s)/65(w)	70	70(s)/65(w)	
T90, °C, max	180				
FBP, °C, max	220				
Residue, vol%, max	2				
Copper corrosion, 3hr @ 50°C, merit	1				JIS K 2513
Sulfur, ppm, max	10				JIS K 2541-1, JIS K 2541-2, JIS K 2541-6, JIS K 2541-7
RVP @37.8°C, kPa, min	44	44(s)/55(w)	44	44(s)/55(w)	JIS K 2258
RVP @37.8°C, kPa, max	65(s)/93(w)				
Existent gum (solvent washed), mg/100ml, max	5				JIS K 2261
Oxidation stability (Induction period), minutes, min	240				JIS K 2287
Benzene, vol%, max	1				JIS K 2536-2, JIS K 2536-3, JIS K 2536-4
Ethers (5 or more C atoms), vol%, max	7				JIS K 2536-2, JIS K 2536-4, JIS K 2536-5, JIS K 2536-6
Ethanol, vol%, max	3	10	3	10	JIS K 2536-2, JIS K 2536-4, JIS K 2536-6
Oxygen, wt%, max	1.3	3.7	1.3	3.7	JIS K 2536-2, JIS K 2536-4, JIS K 2536-6
Oxygen, wt%, min	-	1.3	-	1.3	
Color	Orange				Visual

ガソリンの原料に関しては、地球温暖化への対応の観点から非化石燃料や、低CO₂燃料へのシフト、また石油資源の供給量や価格変動に対応するために地域的に非石油資源への多様化が進んでいる。図 1-5 にその模式図を示す。

特にバイオ由来の燃料（バイオ燃料）に関しては、地域作物との協業を行ないつつ普及してきており、ブラジルやアメリカ、タイなどのアジア地域、欧州地域において市販ガソリンへのエタノールの混合利用が進んでいる。エタノールはガソリンエンジンに適用することができるが、燃料配管等での腐食に対する材料での対応や、濃度変化に伴う発熱量の相違に対応させるために、インジェクタの選定なども重要となる。そこで、日本や欧州などの一部の地域においては、エタノールよりもガソリンに近い成分として、エタノール由来の ETBE (Ethyl Tert-Butyl Ethel) をバイオ燃料として混合したガソリンも市販化されている。

こうしたバイオ燃料は、とうもろこしやサトウキビを原料としているが、食料需給への影響を避ける必要があることから、供給量に制約がある。そこで、エタノールや ETBE 以外の低CO₂燃料として CNG (Compressed Natural Gas) の普及や合成燃料の開発も進んでいる。CNG はガス燃料であることから、タンクとインジェクタを改造するためのキットや、CNG 専用車の販売が行なわれている。合成燃料は、石炭やバイオマスをガス化分解して得られた合成ガス（水素と一酸化炭素の混合ガス）から FT 法 (Fischer-Tropsch process) によりガソリンに含まれるような炭化水素成分を合成した燃料であるが、収率向上やコストの低減、原料や生成物の多様化に向けた研究が継続されている。

このようにガソリンの原料が多様化することで、精製可能なガソリンの性状が変化してくることが予測される。燃料規格は、そうした時代の変化に合わせて自動車業界や石油業界などの産業界と関係省庁が協力して決めていく必要がある。とくに自動車業界は、将来における燃料性状の変化がエンジンの性能や燃費、排気に与える影響を明らかにすることが重要な役割であると考えられる。

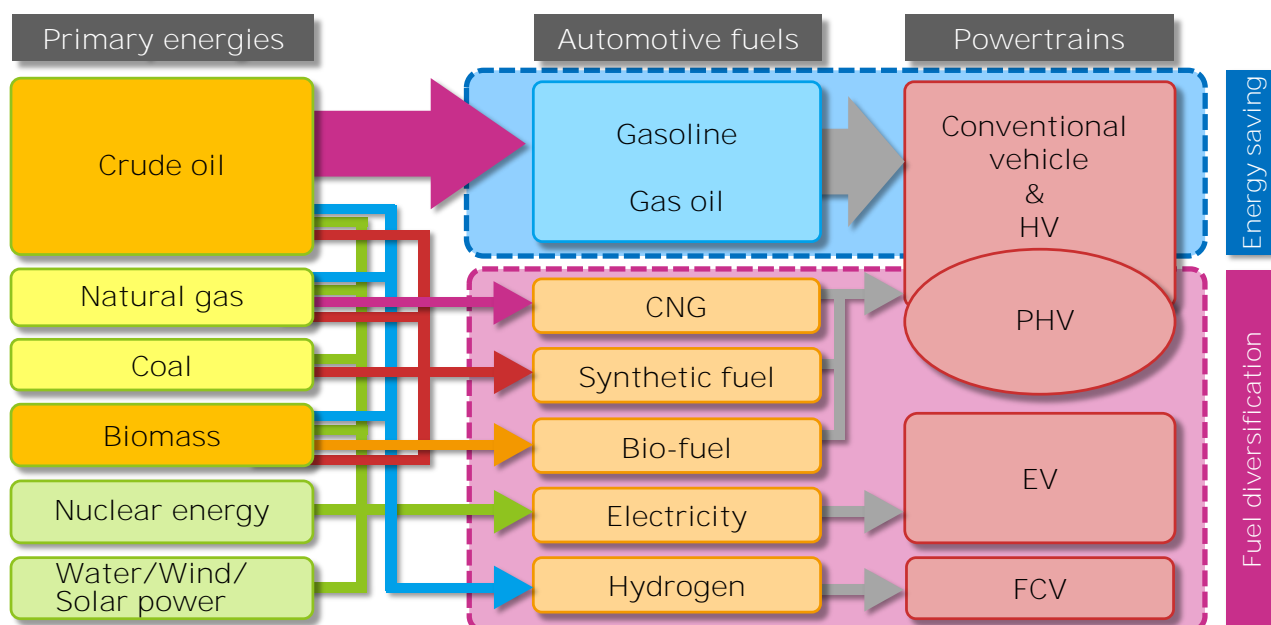


Fig.1-5 Fuel diversification.

1.1.3 ガソリンエンジンの熱効率とノッキング

本項では、ガソリンエンジンの熱効率向上の手法と本論文で着目するノッキングについて述べる。ガソリンエンジンは、熱力学的にはオットーサイクルとして記述され、その熱効率は理論的に式 (1-3) のように示される。

$$\eta_{th} = 1 - \frac{1}{\varepsilon^{\kappa-1}} \quad (1-3)$$

η_{th} :理論熱効率, ε :圧縮比 (=CR), κ :比熱比 (定圧比熱と定容比熱の比: c_p/c_v)

式 (1-3) より、理論的には、圧縮比を高めること、比熱比を高めることが有効であることが判る。実機のエンジンにおいては、IVC と EVO は任意に設定出来ることから、IVC から TDC まで圧縮を受ける実際の圧縮比と、TDC から EVO までの実際の膨張比が一致することは稀である。そのために、実際のエンジン開発においては、膨張比を高めることが重要となってくる。膨張比を高める手段としては、実際の設計の際には、式 (1-1) に示した圧縮比を高めておく方法や、EVO を遅くする方法がある。また、比熱比の観点からは、リーンバーンや低温燃焼が有効であることを意味している。また、実際のエンジンにおいては、摩擦損失、ポンプ損失、冷却損失、排気損失、未燃損失などの各損失があることから、これらの各種損失を低減させていくことが重要である。この要求に応えるために、ガソリンエンジンでは、自然吸気 (Natural Aspiration: NA) エンジンでの高圧縮比化や過給ダウンサイズエンジンの開発に加えて、燃焼促進による EGR 限界の拡大やフリクシオン低減技術の開発、吸排気バルブの作動範囲を制御する動弁系の開発などが進められている。また、企業においても過給リーンバーンエンジンの研究が進んでいる (Nakata, et. al., 2015, Hanabusa, et. al., 2013)。

一方で、高圧縮比エンジンや過給ダウンサイズエンジンでは、ノッキングやホットスポットに起因するプレイグニッション、オイルの飛散が起因していると言われていた過給ダウンサイズエンジン特有の LSPI (Low Speed Pre-Ignition) 等の異常燃焼が発生しやすくなることが知られている。

Nakata らが示しているノッキングの例を図 1-6、図 1-7 に示す。圧縮比を高めることにより、部分負荷では熱効率を高めることが出来るが (図 1-6)、高負荷時にはノッキングが発生し性能低下に繋がるなど市販用のエンジンとしては仕様を満たさなくなる (図 1-7) (Nakata, et. al., 2011)。ノッキングの発生には混合気の温度や圧

力、ピストンによる圧縮と火炎伝播にかかる時間が影響していることが知られていることから、エンジン開発においては、燃焼を促進させたり、冷却系の改善が進められたりしてきた。

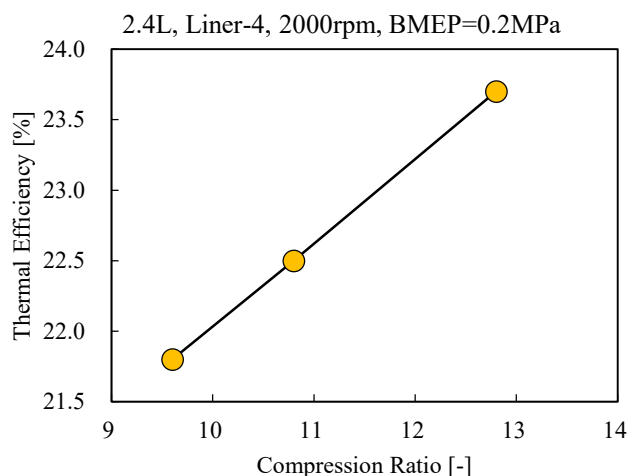


Fig.1-6 Effect of compression ratio on engine thermal efficiency with 2.4L, liner-4 engine.

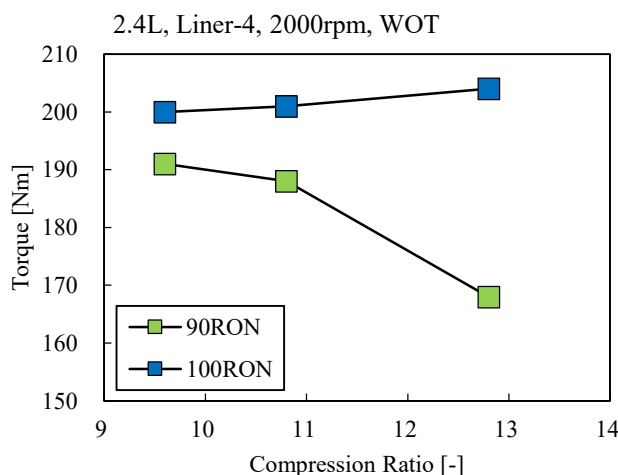


Fig.1-7 Effect of compression ratio on engine performance with 2.4L, liner-4 engine.

圧縮比を上げることによってノッキングやプレイグニッションなどの異常燃焼が起りやすくなることや、冷却系の改良によりそれらを抑制できることから判るように、ノッキングの発生しやすさには、混合気の温度が大きく影響していることが知られている。また、物理的には筒内の圧力と化学反応時間、すなわち、ピストンによる圧縮と火炎伝播にかかる時間が影響していることも知られている。図 1-4 に未燃ガス（混合気）と既燃ガス（火炎伝播後の気体）の温度履歴が示されているが、ノッキングの起源となる未燃ガスはピストンによる圧縮の後、既燃ガスの膨張による圧縮を受けて、圧力と共に温度が上昇する。この温度上昇により、火炎伝播が終了する前に未燃ガスが自己着火を引き起こすと、そこを起点に圧力波が生じ、ドアをノックするような甲高い音が発生する。この音をノッキングと呼んでいる。ノッキングは、音の不快感と併せて、燃焼室内で生じる圧力上昇に伴うエンジンダメージの観点から、抑制することが求められている。実際の自動車では、ノックコントロールシステム(Knock Control System: KCS)を用いた制御システムの活用が広がっており、ブロック壁等に取り付けられたセンサーでノッキングを検知すると、点火時期を遅らせるなどの制御を行ってエンジンを運転している。この

制御を採用すると、ノッキングが発生しやすいエンジンの高負荷領域ではエンジンの保護が出来る一方で、点火時期を遅角させることから、エンジン性能の低下や燃費の悪化を伴う。

ノッキングの発生過程を見ていくと、未燃ガスの自己着火と、それを起点にした圧力波の形成に分けられる (Nakajima, et. al., 1984, Nakagawa, et. al., 1984, Hayashi, et. al., 1984)。本論文では、未燃ガスの自己着火に関して取り進むことから、その内容については次節に譲り、ここでは先に圧力波の形成の概要について記載する。

未燃ガスの自己着火により生じた圧力波は燃焼室内を伝播することから、燃焼室のボア径に依存する 5~9kHz (1次モード)、10~18kHz (2次モード) の周期にピークを持つ圧力波を形成する。ゼネラルモーターズ (General Motors Company: GM) の Eng は、この振動モードと音との関係について解析しており、燃焼形式により周波数と強度の分布に異なる傾向が見られることを報告している (Eng, 2002)。ノッキングによって生じる圧力波の強さは、これまで未燃ガスの量と自己着火のタイミングに依存するとされてきた (Kono, et. al., 1983)。しかし、近年の過給ダウンサイズエンジンにおいてエンジン回転速度が低い条件で突発的に生じる LSPI は、圧縮行程中に発生することから、従来のノッキングに比べて大きな圧力振幅が引き起こされることが報告されている (Zahdeh, et. al., 2011, Okada, et. al., 2014)。このような大きな圧力振幅は、未燃ガスの自己着火を起点に圧力波が音速を超える速度で伝播しているために発生すると考えられており、この圧力波に関する研究も取り込まれるようになってきた (Zeldovich, 1980, Bradley, et. al., 2002)。

ノッキングの改善のために、産業界では上述のように燃焼改善や冷却系の改善などの実用的な対応が進められてきた。他方で、学術的には、CFD (数値流体力学, Computational Fluid Dynamics) 計算に用いる物理モデルについての研究や、詳細反応機構の構築による素反応解析手法の高度化が進められており、ノッキング発生メカニズムに関する研究が発展してきている。ただし、これらの研究成果をエンジン開発に活用するためには計算に長時間を要すること、市販ガソリンの素反応をモデル化することが難しいことなど課題がある。そして、エンジンを用いた詳細な計測が難しいことから、ダイナミックに変化するエンジン運転条件や、エンジンの諸元の違いに対応したモデルの検証が進んでいないことも、エンジン開発に利用されにくい要因の一つであると考えられる。

一方で、今後のエンジン開発においては、熱効率の更なる向上が求められており、ノッキングの抑制や異常燃焼の回避がますます重要になってくる。そこで、学術的な取り組みの成果をエンジン開発の際に利用可能な指標やモデルとして活用していくことは重要である。

1.1.4 市販ガソリンのノッキング指標

前項で述べたように、ノッキングの発生は未燃ガスの自己着火が起点になると考えられており、この未燃ガスの自己着火特性は、混合気の組成、即ち、燃料の着火特性や混合気の空気と燃料の重量費である空燃比 (Air fuel ratio: A/F) に依存することが知られている。ガソリンエンジンは、排気ガス浄化に三元触媒を用いることからストイキ空燃比 (当量比 $\Phi=1$) で運転されている。そこで本研究では、こうした影響因子のうち、空燃比の影響は取り扱わずに、燃料の着火特性による影響に着目する。

市販ガソリンの着火特性を示すノッキング特性の指標には、リサーチオクタン価 (Research Octane Number, RON) とモーターオクタン価 (Motor Octane Number, MON) があり、国内の市販ガソリンは RON, 欧州や中国の市販ガソリンは RON と MON, アメリカの市販ガソリンは式 (1-4) で示す AKI (Anti Knock Index) で規格化されている。

$$AKI = \frac{RON+MON}{2} \quad (1-4)$$

例えば、国内のレギュラーガソリンとプレミアムガソリンのオクタン価は、表 1-1 で示した JIS K 2202-2012 によりそれぞれ 89RON, 96RON 以上と定められている (実際に市場に出ているものはレギュラーガソリン

90RON, プレミアム(ハイオク)ガソリン 100RON 程度). アメリカでは, レギュラーガソリンで AKI87 (= 91RON), プレミアム(ハイオク)ガソリン AKI91 (=95RON), 欧州では 95RON, 98RON の 2 水準, 中国 (国 4) では 90RON, 93RON, 97RON の 3 水準と規格化されている.

RON と MON の計測は, 1928 年にアメリカの燃料研究協同組合 (Cooperative Fuel Research: CFR) で提案された単気筒可変圧縮比エンジンが用いられている (Horning, 1931). このエンジンは CFR エンジンとよばれ, 現在も世界中で使用されている.

表 1-2 に ASTM D2699 -17 で規定される RON と ASTM D2700-17 で既定される MON の計測条件を示す (ASTM, 2017a, 2017b). RON と MON の計測条件の大きな違いは初期温度とエンジン回転速度である. 特に, 初期温度に関しては, 100K 程度の違いがあり, RON は MON よりも温度の低い条件でノッキングを計測している. また, エンジン回転速度に関しては, RON は 600rpm で計測をしているのに対して, MON は 900rpm で計測を行なっていることが判る. このことから, RON の方が MON よりも混合気を低温場で時間をかけて圧縮し火炎伝播させたときのノッキングの発生しやすさを評価していることが判る.

Table 1-2 Test Condition of RON and MON.

	RON	MON
Intake Air Temperature	52°C	149°C
Intake Air Pressure	atmospheric	atmospheric
Coolant Temperature	100°C	100°C
Engine Speed	600rpm	900rpm
Spark Timing	13BTDC	14-26BTDC
Compression Ratio	4-18	4-18

このようにして計測されたノッキングは, ノッキングレベルが等しい標準燃料中のイソオクタン¹の体積%割合の値を用いてオクタン価として規定されている. この標準燃料は, RON, MON 共にノルマルヘプタン (n-heptane, C₇H₁₆) とイソオクタン (iso-octane, C₈H₁₈) の 2 成分の混合燃料が用いられており, 標準燃料 (Primary Reference Fuel, PRF) とよばれている. そして, イソオクタン¹の体積%割合を末尾に記載し, 例えばイソオクタン 90vol.% とノルマルヘプタン 10vol.%の基準燃料は PRF90 とよぶ. PRF90 とリサーチ法によるノッキングレベルレベルが等しい燃料を 90RON, モーター法によるノッキングレベルが等しい燃料を 90MON と定義している. RON, MON とともに値が高いほど, 測定試験においてのノッキングは起こりにくいことを意味している. また, 100RON を超える燃料に関しては, 標準燃料に加えるトルエンや四エチル鉛の添加割合から推定する手法でオクタン価を計測している.

表 1-3 に標準燃料に用いているノルマルヘプタンとイソオクタン (2,2,4-tri-methyl-pentane) と国内の市販ガソリン, 市販ガソリンに含まれる主な成分のオクタン価を示している.

Table 1-3 RON and MON of fuel molecular.

	RON	MON
n-heptane	0	0
2,2,4-tri-methyl-pentane	100	100
Japanese regular gasoline	90	(80-85)
Japanese premium gasoline	100	(86-92)
pentane	62	66
1-pentene	90.9	77.1
toluene	124	112
cyclohexane	83	77.2
etahnol	111	92

市販ガソリンは、数百種類の炭化水素からなる混合物であり（金子，1998），そのそれぞれが異なるオクタン価を持つことは，前述のとおりである．主な炭化水素の RON と MON の値をプロットしたものを図 1-8 に示す（ASTM, 1958）．多くの分子は，RON と MON が等しいか，RON が MON よりも高い値をとっている．成分ごとに比較をすると，芳香族成分（アロマ）は，RON, MON とともに高い値をしめす傾向があり，不飽和炭化水素（オレフィン）では RON が MON よりも高くなる傾向が強い様子が判る．分子構造の違いがノッキングの起こりやすさに与える影響については，素反応論から解明が進んでいる．詳細は第3章で述べることにする．なお，市販ガソリンの成分で鎖状飽和炭化水素をパラフィン，環状飽和炭化水素をナフテンとよんでいる．

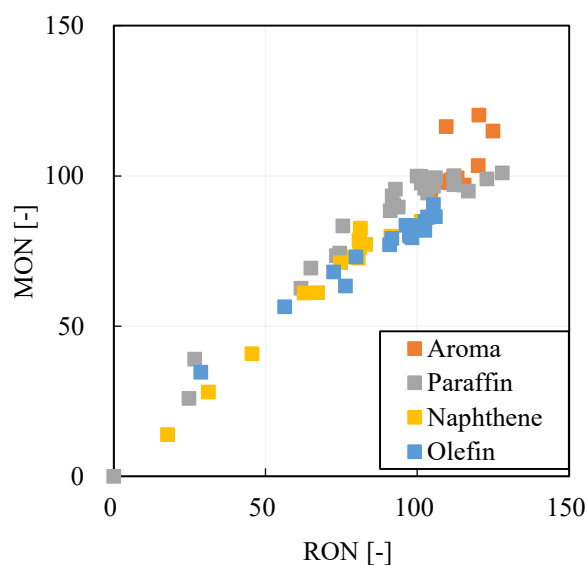


Fig.1-8 RON and MON of fuel molecular.

ここでは，ガソリン燃料のノッキングの指標であるオクタン価とノッキングなどの異常燃焼の関係について述べる．

ノッキングの指標である RON や MON の計測条件は，前述のとおり 1930 年代のアメリカで開発された．図 1-9 に米国運輸省から報告された自動車の圧縮比と市販ガソリンの AKI（RON と MON の平均値）の変遷を示す（Stork, 2016）．1930 年代のエンジンの圧縮比は 5~6 程度と現在のエンジン（CR≒10）に対して，非常に低いことが判る．また，当時のガソリンの精製には，現在のような高オクタンガソリンを精製する改質のプロセスは使わ

れておらず、パラフィンやナフテンを主成分とするガソリンであったために AKI についても 65 程度 (RON≒65~70) と現在のレギュラーガソリン (90RON) よりも非常に低いガソリンであった。その後、AKI は製油所のプロセスの改良や燃料組成の変化により徐々に高まっており、1970 年頃に燃料の無鉛化が進んだが、燃料製造の技術も進んだことから AKI の低下は小幅に留まっている。一方で、エンジンの圧縮比については、AKI の上昇とともに高まって来ているが、近年では、エンジンの技術開発でノッキングが改善されており、オクタン価が大きく変化しない中でも圧縮比を高めている。

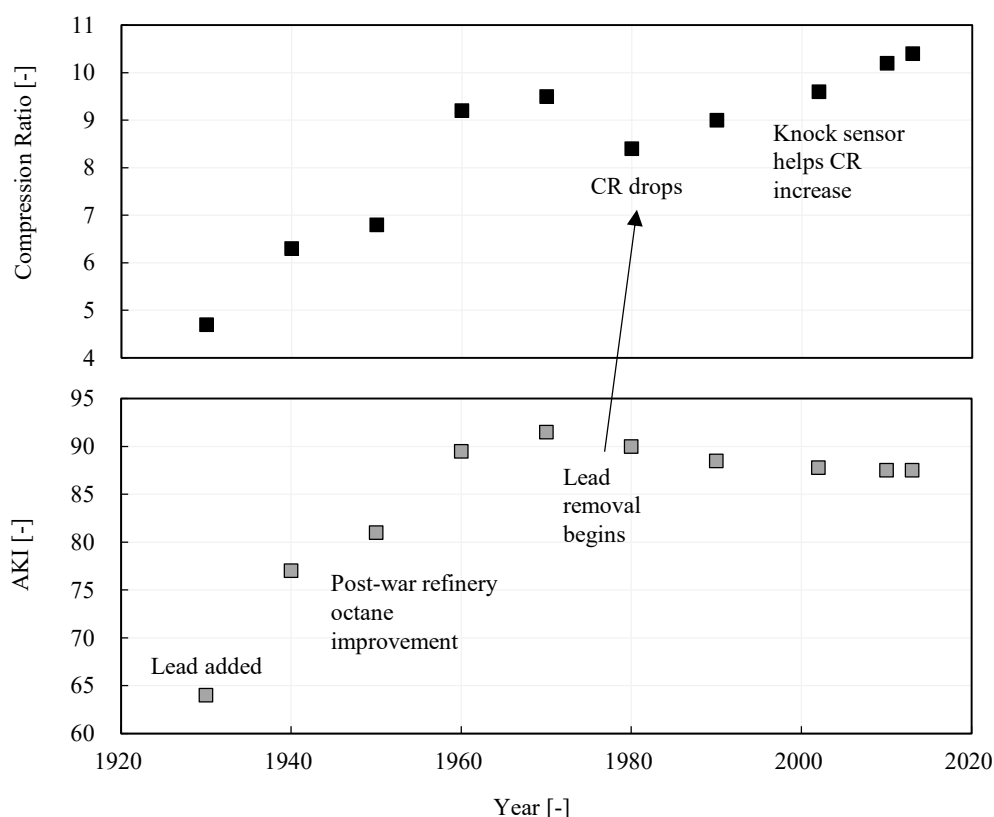


Fig.1-9 History of AKI and engine compression ratio. (Stork, 2016)

RON と MON を用いたノッキングの指標には、平均値である AKI のほかに、RON と MON の差であるセンシティビティ (Sensitivity, S) を用いて表現する OI (Octan Index) が Shell Global Solution の Kalghatgi らを中心に研究され、提案されてきた。OI の算出方法を式 (1-5), (1-6) に示す。式 (1-5) は実験から得られたノッキングが発生する限界点火時期 (Knock limited spark advance: KLSA) と RON, MON の関係を示しており、式 (1-6) は式 (1-5) で示している OI を RON と S (=RON-MON) で表現している。(Kalghatgi, 2001a, 2001b, Kalghatgi, et. al., 2005)。式 (1-6) で OI を表現するのに用いられる K 値は実際のエンジンでの実験結果から算出される指標で、エンジンの緒元や運転条件によって変化する。K 値が 0 であれば、OI=RON であり、燃料の RON が指標であることを示す。同様に、K 値が 1 のときは、MON が指標であり、K 値が負の値をとるときは、RON が高く、RON と MON の差である S が大きいほどノッキング等が起こりにくいことを表現している。

$$\begin{aligned} \text{KLSA} &= c + a \text{ RON} + b \text{ MON} \\ &= c + (a+b)\text{OI} \end{aligned} \quad (1-5)$$

$$\text{OI} = (1-K) \times \text{RON} + K \times \text{MON} = \text{RON} - K \times S \quad (1-6)$$

$$S: \text{sensitivity} = \text{RON} - \text{MON},$$

$$K = b/(a+b)$$

次にこれらのノッキング指標とノッキングやプレイグニッションなどのエンジンの異常燃焼に関する研究結果についてまとめる。

ガソリンエンジンの熱効率向上のために、高圧縮比や高過給化、過給リーンバーン等の技術開発が進んでいる。Nakata らはそれらの技術に対して高 RON 燃料が、熱効率を大きく向上させることを報告している。(Nakata, et al., 2007). また、種々の燃料による熱効率の違いに関する検討の比較から、RON と最高熱効率との間には相関があり、特に、ノッキングの起こりやすい過給リーンバーンエンジンでは、高 RON 燃料の活用が重要であることが示されている (Nakata, et al., 2011, Williams, et. al., 2009, 2010).

Lenone らは、RON が 3 向上すると同等のノッキング感度として圧縮比を 1 あげることに対応することが報告し、高 RON 燃料の活用によって、エンジン諸元を変更して熱効率を上げることが可能であることを示している (Leone, 2015). この論文はフォード・モーター (Ford Motor Company), GM, フィアット・クライスラー・オートモービルズ (Fiat Chrysler Automobile: FCA) の 3 社の共同発表であることから、アメリカでの影響力が大きい。

一方で、過給ダウンサイズエンジンなどの低回転高負荷領域では、式 (1-6) のオクタンインデックス (OI) における K は負の値を取り、同じ RON の燃料においては、センシティビティ ($S=RON-MON$) の大きい燃料、すなわち MON の低い燃料ほど、耐ノック性に優れた性質を示すと報告されている。(Remmert, et. al., 2014) また、MIT の Mittal らは、エンジンの 1 次元数値計算などを用いて、近年のガソリンエンジンにおけるノッキング指標の経年変化を算出し、センシティビティ S ($=RON-MON$) の影響度合いを示す K 値は、1930 年頃では 1 の値、つまり $OI=MON$ であったが、値が年々小さくなっており近年では 0 の値、つまり $OI=RON$ に近い値になっていると考察している (Mittal, et. al., 2008, 2009, 2010). またメタノールやエタノールなどのアルコール燃料については、RON や MON 以外にも、燃料の蒸発潜熱の大きさがノッキングに影響を与えているという報告もある (Kasseris, et. al., 2012) .

エンジン開発においては、ノッキング以外の異常燃焼についても避ける必要がある。著者らは、これまでエンジン燃焼室内の熱源 (ホットスポット) が起点となり発生すると言われている、熱面着火型プレイグニッションについても研究を行ってきた。高圧縮比エンジンや過給エンジンでは、混合気の圧力と温度が、従来普及してきたエンジンよりも上昇するために、燃焼室内のホットスポットの温度が上昇する。また、ホットスポットの周辺の混合気も同様に圧力と温度が高くなっており、ホットスポット周辺の混合気が着火した際に火炎伝播を開始する可能性が高まる。熱面着火型プレイグニッションとは、このホットスポットによる火炎伝播の開始のタイミングが点火時期よりも早くなる現象であり、一度発生すると燃焼による圧力上昇が大きくなるために、ホットスポットの温度が上昇し、次のプレイグニッションを誘発し、連続的に発生する。プレイグニッションを引き起こす熱源の温度とオクタン価との関係を調べたところ、エンジン回転速度が高い条件では RON よりも、MON の方が指標として適していることが判っている。(Sasaki, et. al., 2011, 2012)

図 1-10 にエンジンの運転条件や異常燃焼の種類ごとの燃料の指標についてまとめている。

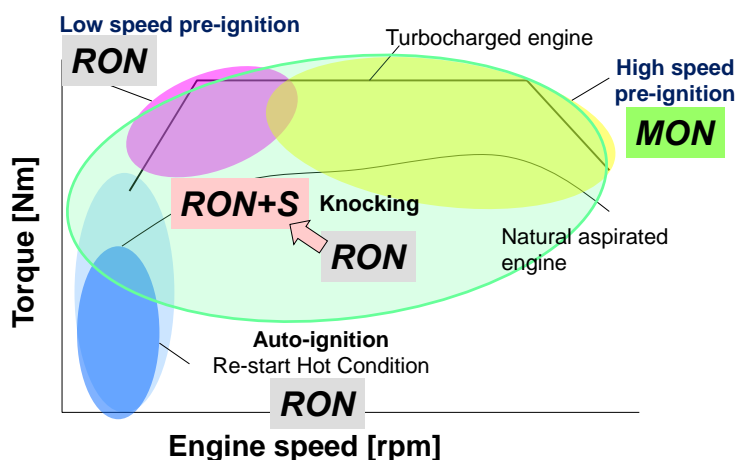


Fig.1-10 Summary of the engine abnormal combustion (knocking, pre-ignition) and octane index.

エンジンの運転条件ごとに、ノッキングやプレイグニッションの指標が異なることの理由に、エンジン燃焼室内の混合気の圧力と温度の条件が異なることがあげられる。図1-11に各運転条件における燃焼室内の混合気の圧力と温度の履歴を示す。赤い線で示したNAエンジンのノッキング条件における圧力と温度に対して、過給エンジンのノッキング条件では、混合気は圧力の高い条件で運転されている。また、前述のプレイグニッションに関しては、黄色い線で示すように温度の高い条件を通っていることが判る。そのことに加えて、図中のZ軸にRONやMONを計測するときに使用する標準燃料（Primary Reference Fuel, PRF）の着火遅れ時間（着火しやすさの指標）を示しているが、標準燃料の着火遅れ時間は800K~900Kを境に高温側と低温側とで異なる挙動を示していることが判り、異常燃焼の解析には、エンジン運転条件に対する圧力や温度に着目した解析と燃料の素反応の理解が必要になってくることが判る。

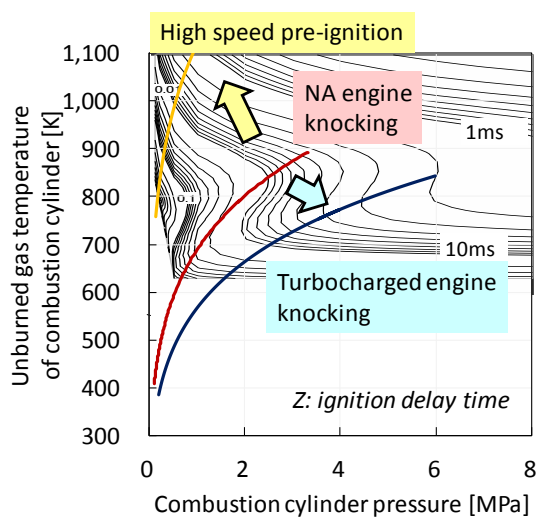


Fig.1-11 Pressure and temperature of the cylinder gas of each abnormal combustion. Z axis shows ignition delay time of PRF91.

1.2 研究目的

前項までで述べたように、産業界では燃焼改善や冷却系の改善を中心にノッキングを改善してきた。そして燃料の影響に関する研究も、車両の性能を決めるトルクや燃費、エミッションに着目した評価が中心であった。一方で、学術的にはエンジンのノッキングを素反応論から理解するために、市販ガソリンやバイオ燃料に対応する様々な分子についての詳細反応機構の構築や、サロゲート燃料の開発に関する研究が進んできているが計算時間が長いという課題があった。しかし、近年ではエンジンへ適用するための詳細反応計算の簡略化や詳細反応計算が可能なソフトの市販化が行われており、詳細反応計算によるエンジン実験結果の解析環境が整いつつある。そこで、エンジン技術者においてもエンジンの燃焼室内の環境を圧力や温度の時間変化などの物理量に置き換えることで、素反応論に基づいた解析が可能になると考えられる。

また、こうした解析が必要になった理由としては、近年のエンジン開発環境の変化が上げられる。従来のエンジン開発では、市販ガソリンのRONをノッキングの指標として扱うことで対応できていたが、エンジンの熱効率を追及した高圧縮比エンジンや過給ダウンサイズエンジンが市販化されてきたことで、ノッキングの指標がRONだけでは現せない領域がでてきたり、プレイグニッションのような新たな異常燃焼が起りやすくなったりしてきている。また、燃料側についてもバイオ燃料やシェールオイルの普及により、将来的に、石油由来の炭化水素に対して、オクタン価の特性が異なるものが普及する可能性が出てきている。

本研究では、エンジンの圧縮比や回転速度、評価燃料のRONの値を変更することで、燃焼室筒内の圧力や未燃ガスの温度、圧縮から燃焼、膨張にかかる時間、評価燃料の着火特性を変化させて、それぞれのパラメータがノッキングの起りやすさに与える影響を実験的に検証している。そして、得られた実験結果を圧力や温度の時間変化に置き換えて、ノッキングの発生時期に対する各実験パラメータの変化の影響が、物理量をどのように変化させて、混合気の素反応にどのような変化を与えているかについて定量的に検討を行う。

また、最近のエンジンと市販ガソリンにおけるノッキング条件に対応する燃料の指標を明らかにするために、標準燃料 (PRF) とサロゲート燃料を用いて、実験データの詳細反応計算を実施し、素反応の違いを考察する。従来の指標であるRONやMONの計測条件についても同様の検討を行うことで、RONとMONが示す素反応の違いを明確にし、エンジン運転条件を考察する。そして、標準燃料 (PRF) とサロゲート燃料の着火遅れ時間 p - T マップを作成して比較を行なうことで、素反応の違いと従来の指標との対応を模式化し、エンジン運転条件との対応を容易に行なえる表現について検討を行う。この手法により、入手しにくい燃料であっても、実験や詳細反応計算のような煩雑な検証手順を減らして燃料の影響を推定できたり、エンジン実験で危険を伴うプレイグニッションなどの異常燃焼に対しても予測が可能となったりすると考える。

本研究の中では、エンジン開発で多用されている1次元モデルでのノッキングの予測手法の一つであるLivengood-Wu積分についてもこの考え方を適用する。エンジン実験結果との検証を行いながら解析手法を改良し、ノッキングの予測精度を向上させることを検討している。

将来の車両燃費の向上のためには、エンジンの改良と同様に、燃料の進化というのも大きく貢献できる技術である。こうした研究の成果を将来の燃料の方向性を検討するツールとして活用したり、エンジン開発に活用したりすることで、エンジン諸元の変化や、市販ガソリンの変化への迅速な対応に貢献し、将来のモビリティ社会をより便利で豊かなものに発展させていきたい。

1.3 本論文の構成

第1章は序論であり、エンジンと市販ガソリンの変遷、ガソリンエンジンの熱効率に対するノッキングの影響、ガソリン燃料の組成がノッキングに与える影響に関する既往の研究についてまとめて、本研究の目的と構成について述べる。

第2章では、高圧縮比エンジンにおけるノッキング特性について実験を行い、エンジン圧縮比、エンジン回転速度、及び、市販ガソリンのノッキング指標であるRONの違いが、エンジン燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度の時間変化に対して与える影響を明確にし、ノッキングの発生時期への影響を考察する。

第3章では、第2章で行なったエンジン実験により得られたエンジン燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度の時間変化、及び、評価燃料のRONの違いによるノッキング発生時期の変化について、0次元の詳細反応計算を用いて解析し、それぞれの因子が混合気の化学反応に与える影響を明らかにしている。また、詳細反応計算から初期温度を推定することでノッキングの発生時期付近の反応特性を明確にすることを検討している。

第4章では、RONとMONの計測条件とPRFの着火遅れ時間の p - T マップを、市販ガソリンを模擬したサロゲートガソリンのものと比較をすることで、混合気の自己着火特性に対するRON以外の指標が影響する p - T 領域を簡易的に推定している。この推定手法を用いることで、過給ダウンサイズエンジンのノッキングや、高速プレイグなど、RON以外の指標が影響すると既報のある条件において、詳細反応計算の結果が同様の傾向を示すことを確認している。今後エンジン実験での検証も進め、確かなものにしていきたい。

第5章では、ノッキングの発生時期の予測に多用されるLivengood-Wu積分を用いる課題について、混合気の温度と圧力の時間変化と着火遅れ時間の特性に着目して検討を行った。その上で、Livengood-Wu積分を用いたノッキング発生時期の予測には温度の正確な推定と着火遅れ時間の適切な推定が重要であることを明らかにしている。

第6章では、全体を総括し、本論文の結論を述べている。

第2章 高圧縮比エンジンにおけるノッキングの発生特性

2.1 はじめに

ノッキングを改善させる技術としては、様々なものが取り組まれてきている。よく知られているものとしては、前章にも記述したエンジン冷却系の改良や筒内直接噴射（Direct Injection, DI）による混合気温度の低減、残留ガス量の低減、燃焼期間の短縮などが挙げられる。また、これらの技術に加えて水冷クーラーをもつ EGR、すなわちクールド EGR は、近年において、ノッキング改善技術の主流になりつつある。

図 2-1 に EGR の導入による正味燃料消費率の低減効果を示す。データは、排気量 1.5L、圧縮比 13 の列型 4 気筒エンジンでの例である。点火時期は MBT（Minimum advance for the best torque）、もしくは、トレースノック点（Trace knock: TK）となっている。図 2-1 の左のグラフ(a)は、横軸としてエンジン回転速度を、縦軸としてエンジントルクを示してあり、図中の等高線は EGR を導入していない場合の正味燃料消費率の値である。負荷が高くなるとポンプ損失、冷却損失、摩擦損失が相対的に低下することから、熱効率が高くなることが確認できる。次に、エンジン回転速度の影響について見ると、1500rpm 以下の高負荷条件で、正味燃料消費率が悪化しているのが判る。これは、ノッキングを避けるために、点火時期を遅角したことによる等容度の低下が主因である。その他の要因としては、低回転化すると、燃焼行程から膨張行程での時間が長くなることから、冷却損失割合が増大することも知られている。同じトルクで高回転化すると、熱効率が若干低下する様子が見られるが、これはエンジンのフリクションが増大するためである。これらの理由から、正味燃料消費率が最も小さくなる領域、言い方を変えると、最高熱効率が得られる領域は、多くのエンジンでは 2500rpm から 3000rpm となっている。中央の図(b)では、クールド EGR を導入した場合の正味燃料消費率を示している。EGR を導入しない場合に比べて、最小正味燃料消費率が小さくなっていることに加えて、正味燃料消費率の小さい範囲、即ち、熱効率の高い領域が広がっていることが確認できる。これは、クールド EGR によるノッキング抑制効果と、ポンプ損失の低減、冷却損失の低減の効果である。右の図(c)は、EGR 導入による熱効率の向上率を示しており、左の図(a)で得られた正味燃料消費率と中央の図(b)の正味平均燃料消費率から算出している。低回転の中負荷から高負荷の領域で大きく熱効率が向上していることが判る。これは、低回転においてノッキングが厳しくなることから、クールド EGR によるノッキング改善効果が大きくなるためである。この結果からも、クールド EGR の導入がノッキング改善に大きな効果をもたらすことが分かる。最新のエンジンでは、このクールド EGR の効果を最大化するために、高タンプルを採用することで EGR の燃焼限界を拡大させたり、EGR の気筒毎の分配を最適化するための吸気系の改良がなされたりしている。

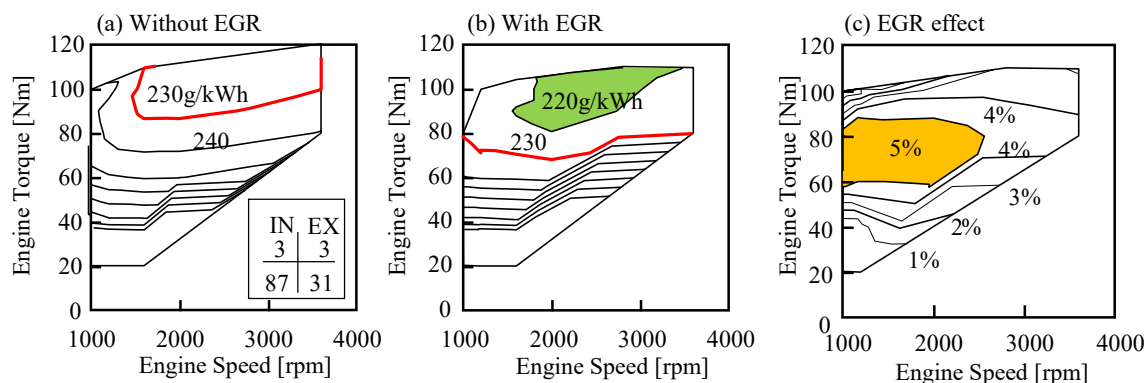


Fig2-1. Effect of cooled EGR on fuel consumption with 1.5 L in-line 4-cylinder engine with CR13. (a) Break specific fuel consumption without EGR, (b) Break specific fuel consumption with EGR, (c) Improvement ratio of break specific fuel consumption with EGR.

これまでに記載したように、EGRを導入し混合気的气体成分を変更することで、ノッキングの抑制が可能となることから、これらの技術は市販車においても広く活用されている。そこで、燃料の影響を検討する前に、空气中に多量に含まれている窒素の影響についての検討も実施した。図2-2には、クールドEGR、リーンバーン、窒素を添加することが、燃焼やノッキング特性に与える影響を示している。窒素添加については、ポンペを用いて供給したことから、窒素の供給量に限界が出た。そこで、実験は、列型エンジンに変更を加えることで、単気筒エンジンとして行った。圧縮比はノッキングの影響を明確にするために14まで高めてある。排気量は0.5Lである。ノッキングの指標として、ノッキングが発生する点火時期での50%質量燃焼割合時期(50% mass fraction burned crank angle: CA50, Appendix1に算出方法を記載)を比較してある。リーンバーンでは、CA50の値が遅角側から進んでおらず、ノッキングが改善されていないことを示している。一方で、クールドEGRや窒素の割合を増やしていくと、CA50が進角していることが判り、ノッキングが抑制されていることを確認できる。また、クールドEGRと窒素を比較すると、ノッキングレベルは同じレベルとなっているが、窒素を用いることで熱効率が高くなっている。これは、窒素はクールドEGRに対して高い比熱比を有することに加えて、燃焼速度が速いことや燃焼変動が改善されているためである。本報では、燃料の反応を中心に研究を進めるが、燃焼現象を解明するためにはガス側の組成に応じた反応の研究も必要であると考えているので、将来的には解明していきたい。

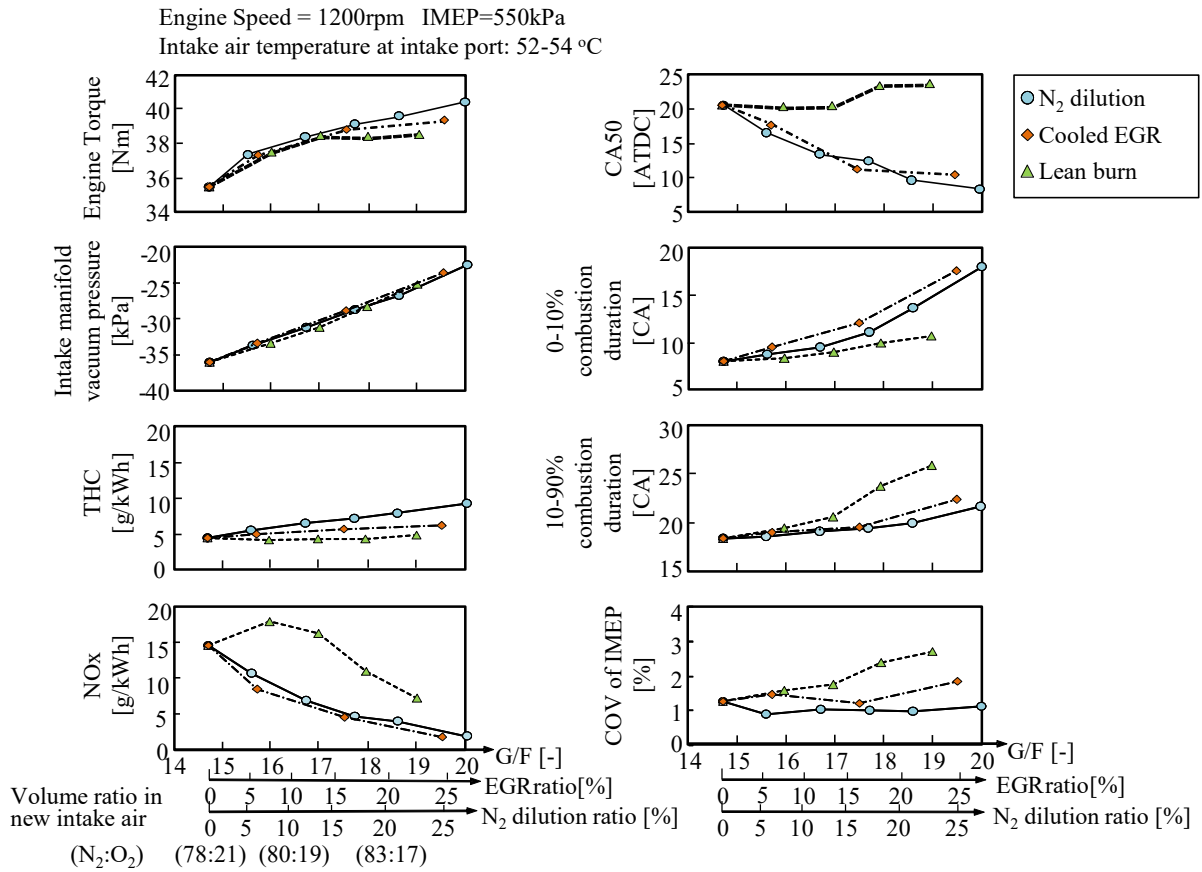


Fig.2-2 Comparison between air lean burn, cooled EGR and nitrogen with CR14, single cylinder engine (0.5L).

第1章で述べたように、ガソリンエンジンの熱効率を向上させる方法としては、理論的には圧縮比を高めることが有効であることから、DIの採用、前述のクールドEGRなどの技術を導入、可変バルブタイミング機構などの活用で吸気バルブの閉じ時期を遅くさせるなどしてノッキングを抑制することで、圧縮比を向上させる取り組みが進んできている。図2-3に、市販NAエンジンにおける圧縮比の変遷を示す。DIの導入、動弁系の開発、クールドEGRの導入などが進んだことから、1990年以降圧縮比が大きく上昇している様子が確認できる。

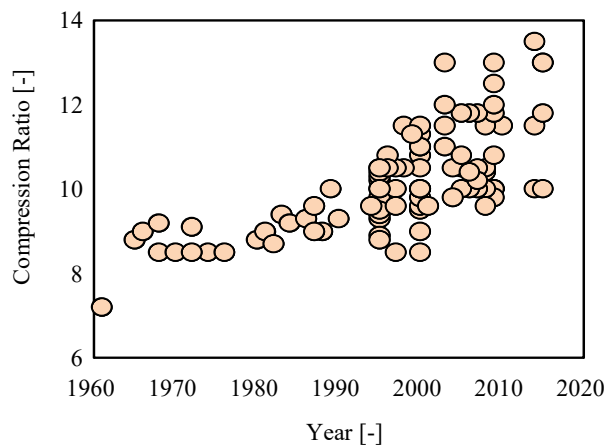


Fig.2-3 History of compression ratio of Toyota SI engine.

図 2-4 に NA エンジンにおける圧縮比及びエンジン回転速度を変更したときの燃焼室内の圧力と、温度の変化を示す。吸気バルブの閉じ時期 (Intake Valve Closed Timing, IVC), 即ち, 圧縮開始時期のクランク角度 (θ_{IVC}) を計算開始時期 ($=\theta_i$) としている。このときの温度圧力と燃焼室容積をそれぞれ T_i, p_i, V_i として燃焼室壁を断熱と仮定すると, 各クランク角 θ_m におけるピストン位置から求めた V_m のときの温度と圧力 T_m, p_m は式 (2-1), (2-2) から求められる。初期圧力は 0.1MPa, 初期温度は 370K とし残留ガスの影響は無視して簡易的に計算をしている。また, 今回は比熱比 κ については固定値 1.32 を用いて計算を行っている。時間に関しては, IVC, 即ち, 圧縮開始時期を -118ATDC に設定し, -118ATDC~TDC を計算区間として圧縮開始時期からの経過時期で表している。

$$p_m = p_i \left(\frac{V_i}{V_m} \right)^\kappa \tag{2-1}$$

$$T_m = T_i \left(\frac{p_m}{p_i} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} \tag{2-2}$$

ピストン上昇による圧縮により混合気の温度圧力は上昇する。まず, 圧縮比の違いに着目を見ると, 圧縮比 9 では, TDC での温度圧力は 700K, 1.2MPa 程度であるが, 圧縮比が 14 ではそれぞれ 757K, 2MPa まで上昇する。炭化水素の混合気の場合, 700K~900K 程度の温度域に負の温度係数 (Negative temperature coefficient, NTC) 領域が生じていることから, ピストン上昇中に低温酸化反応 (Low temperature oxidation reaction, LTO) 混合気の部分酸化が開始していることが推測される。また, この NTC 領域は炭化水素の種類によって大きく特性が変化することから, ノッキングの起こりやすさに影響することが考えられる。

次にエンジン回転速度に着目を見ると, 圧縮行程に要する時間は回転速度に反比例しており, 1200rpm では 16.4ms かかっていたのに対して, 6000rpm ではその 1/5 の 3.3ms で TDC にいたっている。エンジン回転速度が低い条件ほどピストン上昇にかかる時間が長くなる影響で, 混合気の部分酸化が進行し, NTC の影響も大きくなることが想定される。

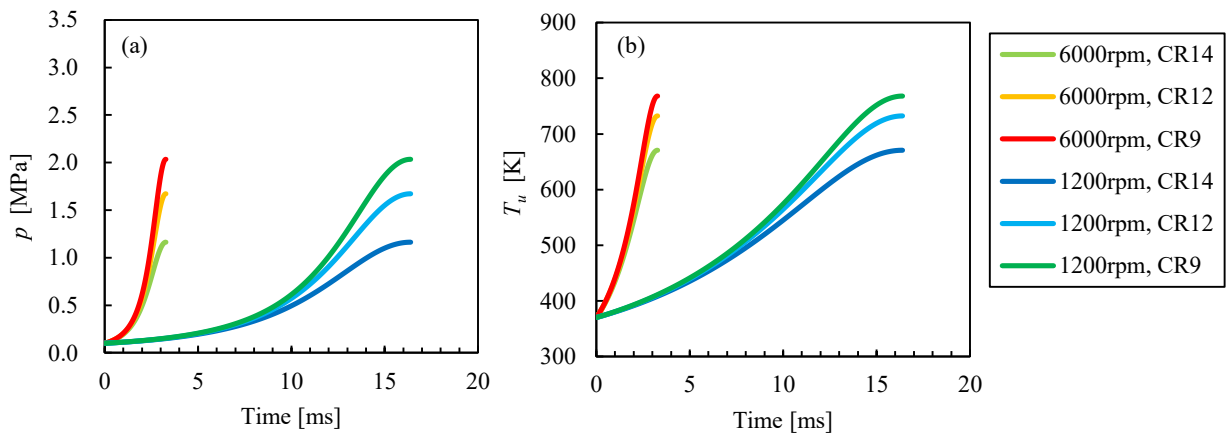


Fig.2-4 Cylinder pressure (a) and unburned gas temperature (b) of each engine speed and CR condition.

最後に燃料のオクタン価として RON を変更した時の着火遅れ時間への影響を例として比較する。計算ソフトは, ANSYS 社の CHEMKIN-PRO15151 を用いており, 詳細反応機構はアメリカのリバモア国立研究所(Laurence Livermore National Laboratories, LLNL) のガソリンサロゲート詳細反応機構を使用した (LLNL, 2017)。計算条件は, NTC 領域の影響が見られるように初期温度 800K, 圧力 3MPa の定圧断熱容器を模擬するものとした。図 2-5 にこの条件で算出した PRF75 (75RON), PRF83 (83RON), PRF91 (91RON), PRF100 (100RON) のストイキ混合気の温度変化の様子を示す。着火遅れ時間は, 計算開始から混合気が 1500K に到達するまでにかかる時間として定義している。

図2-5の温度の履歴を比較すると、低オクタン価のPRF75では、1ms過ぎに100K程度の温度上昇があり、その後3ms過ぎから急激な温度上昇が発生していることが確認できる。最初のわずかな温度上昇は、LTOによる冷炎により生じている。RONが高いものでは、LTOによる温度上昇が小さくなり、発生時期も遅くなっている。更にRONの違いにより着火遅れ時間は大きく変わっており、PRF75では3.4ms程度だったものが、PRF100では15.2ms程度と5倍程度時間がかかっていることが判る。

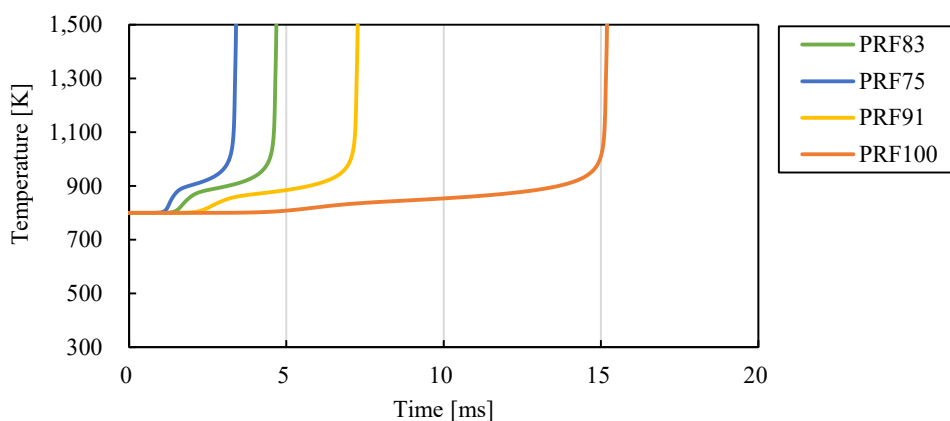


Fig.2-5 Effect of RON on the ignition delay time.

以上の検討より、エンジンの高圧縮比化により、混合気の状態がNTC領域、つまりLTOを経験する運転条件が拡大すること、エンジン回転速度の変化により混合気の反応時間が変化すること、RONが低くなることによりLTOによる冷炎の発生量が増加し、着火時期が早くなることが確認できる。ノッキングは燃焼室内の未燃領域に残存する混合気の自己着火に起因すると考えられることから、エンジン実験においても各因子の影響によりノッキングの発生時期が変化していると考えられる。

そこで、本章では、高圧縮比エンジンにおけるWOT性能（スロットル全開性能、Whole Open Throttle）について実験を行い、ノッキングの発生特性に対するエンジンの圧縮比、回転速度、評価燃料の着火特性（RON）の影響を明確にする。各条件における混合気の温度と圧力の時間変化を解析し、設定条件の変化が混合気の状態変化に与える影響を明確にする。

2.2 実験方法

2.2.1 評価エンジン

実験に用いたエンジンの諸元を表 2-1 に示す。市販の 1.8L、列型 4 気筒 NA エンジンを用いて、タンブル比を高めることに加えて、圧縮比 (CR) を 12, 13, 14 の 3 諸元に設定してある。また、評価条件は、エンジン回転速度を 1300rpm, 2000rpm, 4000rpm, 5200rpm の 4 条件として、それぞれの圧縮開始時期を -98ATDC, -108 ATDC, -118 ATDC、-118 ATDC に設定した。ここで、圧縮開始時期は、IVC で定義してある。吸入空気量はスロットル全開 (WOT) の状態か、後述するように圧縮自着火が発生しないように空気量を制限する状態にしてある。

Table2-1. Engine Specification

Engine	1.8L, L4
Bore [mm]	80.5
Stroke [mm]	88.3
Compression Ratio [-]	12, 13, 14
Fuel Injection System	PFI
Intake Valve Open [BTDC]	-12~29
Intake Valve Close [ABDC]	102~61
Exhaust Valve Open [BBDC]	31
Exhaust Valve Close [ATDC]	-3

図2-6に実験に用いたエンジンの構成図を示す。解析には4番気筒(#4)の温度と圧力の計測値を用いている。吸気温度($T_{in,exp}$)は#4吸気ポートで計測した平均温度, 吸気圧力($p_{in,exp}$)はサージタンクで計測した平均圧力, 排気温度($T_{ex,exp}$)は#4排気ポートで計測した平均温度, 排気圧力($p_{ex,exp}$)は三元触媒の手前で計測した平均圧力を用いている。サイクル毎の燃焼室内圧力(p_{exp})は圧力センサー(AVL, GH15D)を#4燃焼室Rr側から挿入して計測している。また, 排気ガス成分は排気圧力と同様に三元触媒の手前で計測し, 排気ガス分析装置(HORIBA, MEXA1600D-EGR)でCO, CO₂, NO_x, THCを計測し空燃比の算出に用いている。

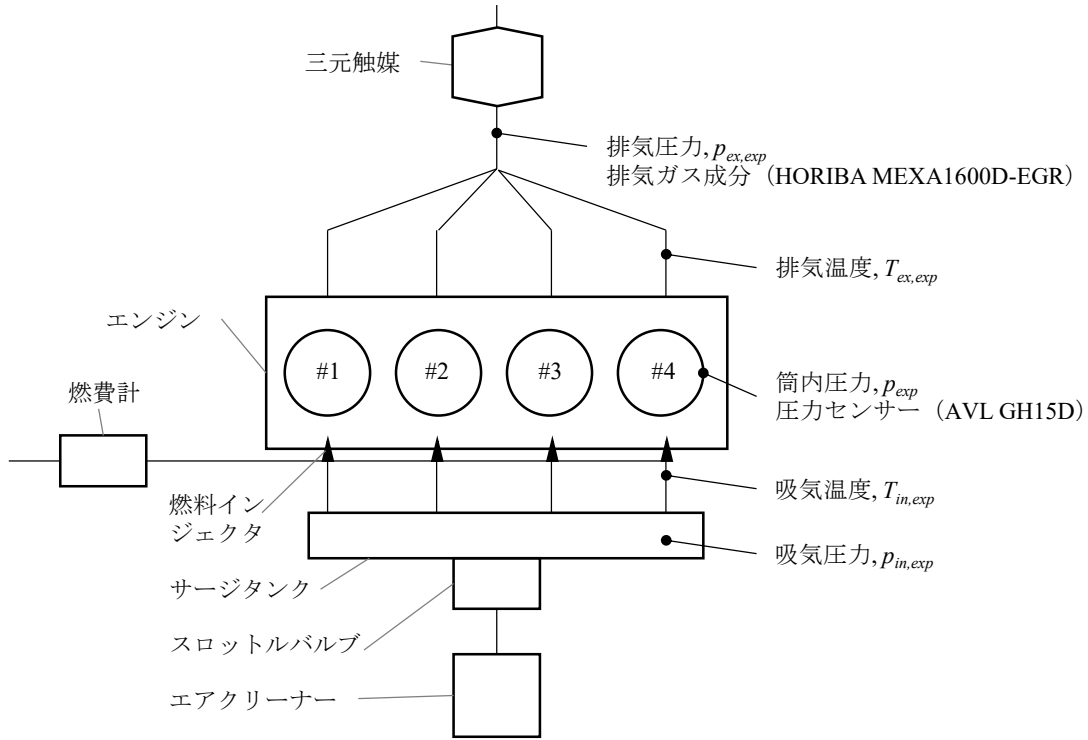


Fig.2-6 Engine experimental condition.

2.2.2 評価燃料

評価燃料は, 市販ガソリンを模擬している4種類の燃料を使用した。燃料のRONはそれぞれ Fuel1 (75RON), Fuel2 (83RON), Fuel3 (91RON), Fuel4 (100RON) であり, Fuel3 (91RON) は国内レギュラー燃料, Fuel4 (100RON) は国内ハイオク燃料を模擬している。全ての評価燃料は, 炭化水素成分のみで構成されており, 含酸素燃料を含んでいない。燃料のRON, MONの値を表2-2に示す。

Table2-2. Test fuel octane number

	Fuel 1	Fuel 2	Fuel 3	Fuel 4
RON	75	83	91	100
MON	70	76	83	87

2.3 エンジン実験結果

図2-7に、実験結果を示す。実験結果はすべての運転条件において混合気が点火時期の前に圧縮自着火しない範囲での最大の空気量におけるTK点で取得している。圧縮自着火を回避するために空気量を制限してある条件は、圧縮比14で取得した1300rpm, 2000rpmにおけるFuel1(75RON)を用いた時の2条件であり、その他の条件は、すべてスロットル全開状態(WOT)で計測している。また、各運転条件における空気過剰率(λ)は1に設定されているが、排気温度が870°Cを超える場合には、空気過剰率を下げることで、いわゆる燃料増量を行うことで排気温度を制御した。

エンジン回転速度の違いによる傾向を見ると、エンジン回転速度が速いほど、体積効率が上昇している。これはIVCを変更していることと吸入空気の慣性効果等の影響である。また、エンジン回転速度が速くなると排気温度が高くなることから、空気過剰率を小さくしている。いわゆるリッチ運転を行っている。一部の領域ではこれらのエンジン保護のための運転を実施しているが、圧縮自着火が発生する2条件を除いた全ての運転条件において、エンジン回転速度が速いほどTKでの点火時期は進角している。次に、圧縮比の影響を比較すると、圧縮比が低いほどTKでの点火時期は進角し、エンジントルクが高まることが確認された。そして、RONの影響を比較すると、圧縮自着火が発生する2条件を除くすべての条件において、燃料のRONが高いほどTKでの点火時期が進角し、エンジントルクが高まることが確認された。

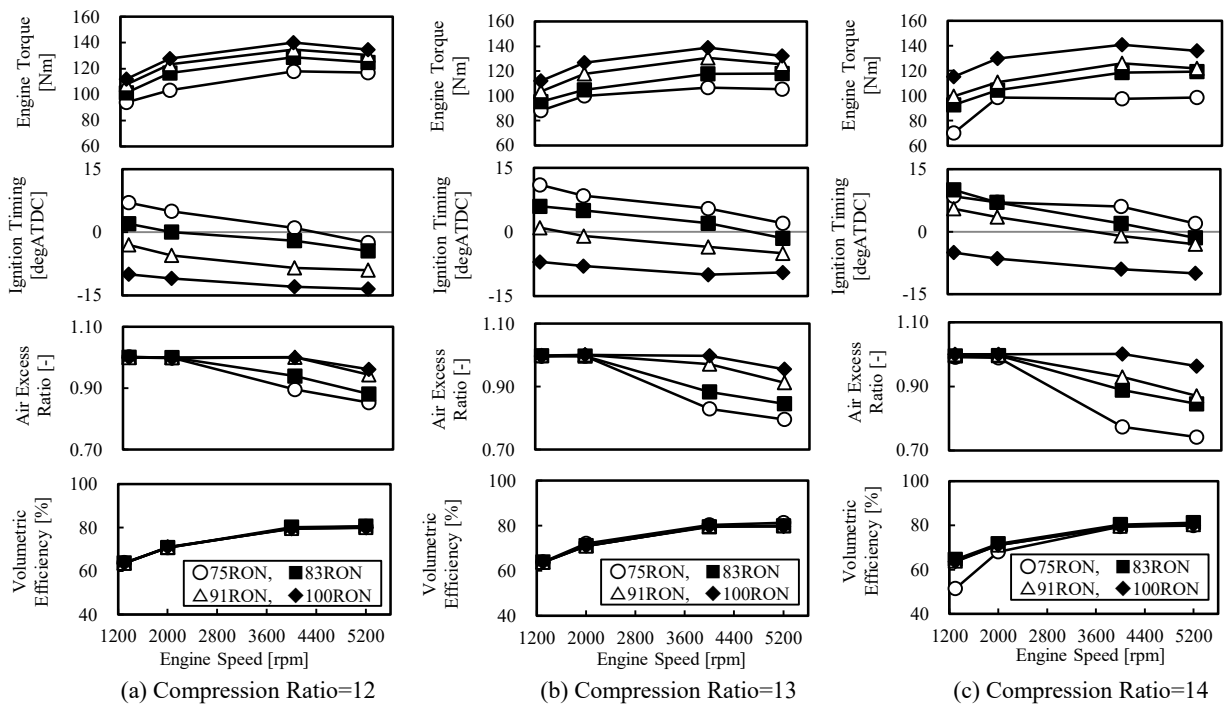


Fig.2-7 Engine experimental results with Fuel1 (75RON,○), Fuel2 (83RON,■), Fuel3 (91RON,△), Fuel4 (100RON,◆).
 (a) Engine CR=12, (b) Engine CR=13, (c) Engine CR=14.

次に、ノッキングにより点火時期が遅角することで燃焼位相が変化することから、その量について比較するために、CA50、すなわち燃焼重心とエンジントルクの関係について比較を行なった。燃焼重心(CA50)の求め方は、Appendix1に記載している。各燃料と圧縮比の組み合わせにおけるCA50とエンジントルクの関係を図2-8に示す。エンジン回転速度毎に(a)1300rpm, (b)2000rpm, (c)4000rpm, (d)5200rpmの順に示しているが、燃料の違いによらず、燃焼重心がMBT(CA50≒8ATDC)に近いほどエンジントルクが高くなり、そこから遅くなるほど、すなわちCA50が大きくなるほどエンジントルクが低下する様子が見られた。また、Fuel4(100RON)におい

では、圧縮比 14 の条件で、圧縮比 12 や 13 の結果に対してエンジントルクが大きくなる結果が得られた。これについては、第 1 章で述べたように、圧縮比が高まることで理論熱効率が上昇することが考えられる。また、最近では、高圧縮比エンジンにおいては冷炎による熱発生量が無視できないことが報告されていることから

(Miyoshi, 2016), 燃焼重心に加えて冷炎発生タイミングがトルクの上昇に影響していることも考えられる。

ただし、圧縮比 14 で取得した 1300rpm, 2000rpm において、Fuel 1 (75RON) を用いた時の 2 条件では、混合気の自着火を避けるために吸入空気流量を制限する必要があった。そのために特に 1300rpm の条件では、トルクが大きく低下している。

混合気の冷炎反応などの化学反応に関する詳細は第 3 章で詳しく述べることとして、この章では、エンジンの回転速度、圧縮比、燃料のオクタン価がエンジンのノッキング発生に与える影響について考察を行なうことにする。

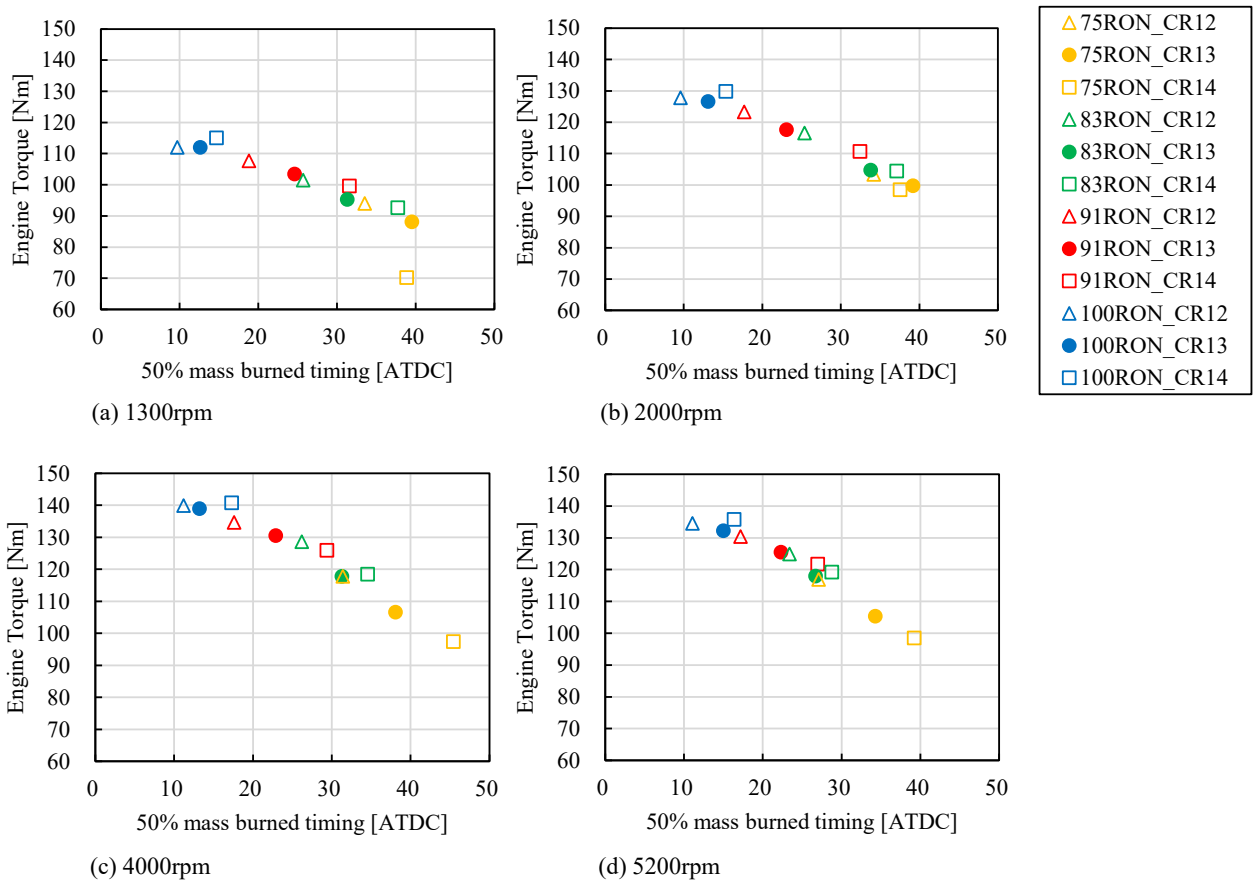


Fig.2-8 Relationship between 50% mass burned timing (CA50) and engine torque. (a) 1300rpm, (b) 2000rpm, (c) 4000rpm, (d) 5200rpm.

2.4 考察

2.4.1 筒内未燃ガス温度の算出方法について

エンジン実験における混合気の初期温度 ($T_{i,st}$) は、圧縮開始時期の燃焼室容積、混合気圧力 (p_{exp})、混合気組成から、(2-3) に示す状態方程式を用いて求めた。

$$T_{i,st} = \frac{p_{i,exp} \times V_i}{(n_a + n_f + n_{EGR}) \times R} \quad (2-3)$$

$T_{i,st}$: 状態方程式により求めた IVC の筒内ガス温度 [K]

$p_{i,exp}$: 筒内圧力センサーから求めた IVC の 200 サイクル平均筒内圧力 [Pa]

V_i : IVC の燃焼室体積 [m³]

n_a : 吸入空気分子のモル数 [mol]

n_f : 燃料分子のモル数 [mol]

n_{EGR} : 残留ガスモル数 [mol]

R : 気体定数 [J/(K·mol)]

ここで、吸入空気分子のモル数は、燃費計で計測をした燃料流量に排気ガス成分より算出した A/F をかけた吸入空気流量から求めた。燃料分子のモル数は、燃費計で計測をした質量燃料流量を用いて算出している。燃料の計算にはガソリンの平均的な値として、平均炭素数 6.6、H/C1.9、平均分子量 91.74g/mol を用いた。残留ガスのモル数は排気バルブ閉じ時期 (Exhaust Valve Closed timing, EVC) の燃焼室容積と排気マニホールドのガス温度 ($T_{ex,exp}$)、排気マニホールドの平均圧力 ($p_{ex,exp}$)、残留ガス組成から状態方程式で算出した。ここで、残留ガスの組成は混合気の完全燃焼を仮定している。この結果得られた値を図 2-9 に示す。各運転条件で、残留ガスの温度や量に違いがあることから $T_{i,st}$ は異なる値をとっている。また、高回転になるにつれて IVC の設定により残留ガス量に対する吸入空気量の割合が増えることから $T_{i,st}$ は低下するが、4000rpm 以上では、吸気バルブ開閉時期は一定であり残留ガス量に対する吸入空気量の割合は変わらず、残留ガスの温度と圧力が増加することから、 $T_{i,st}$ が高くなる傾向になると考えられる。

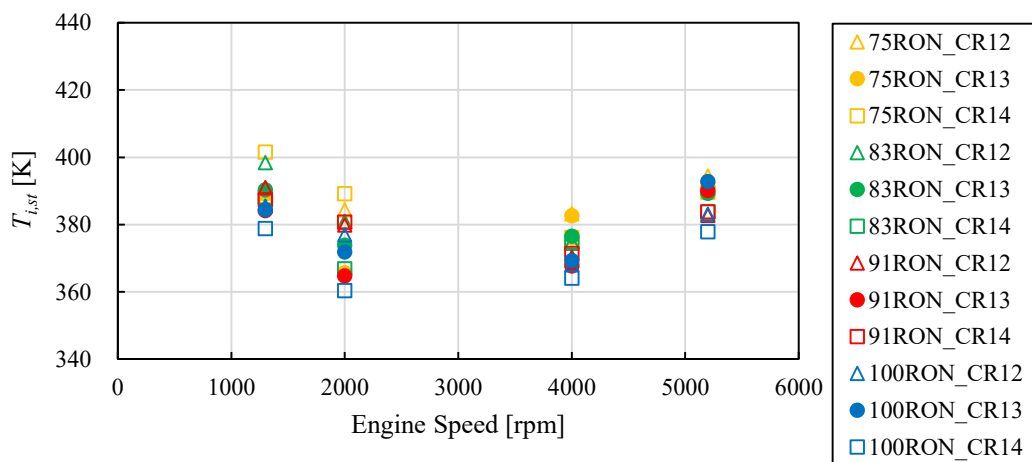


Fig.2-9 Temperature at IVC calculated by state equation.

参考に、図 2-10 には、エンタルピーバランスの式により求めた初期温度($T_{i,h}$)を比較した。 $T_{i,h}$ は式 (2-4) によって求めている。

$$T_{i,h} = \frac{(m_a \times c_{p,a} + m_f \times c_{p,f})T_{in,exp} + m_{EGR} \times c_{p,EGR} \times T_{ex,exp}}{(m_a \times c_{p,a} + m_f \times c_{p,f} + m_{EGR} \times c_{p,EGR})} \quad (2-4)$$

$T_{i,h}$: エンタルピーバランスの式により求めた IVC の筒内ガス温度 [K]

$T_{in,exp}$: 吸気ポート内における吸入空気温度 [K]

$T_{ex,exp}$: エキマニホールド内における排気ガス温度 [K]

m_a : 吸入空気の質量 [kg]

m_f : 燃料分子の質量 [kg]

m_{EGR} : 残留ガス質量 [kg]

$c_{p,a}$: 吸入空気の定圧比熱 [J/(kg·K)]

$c_{p,f}$: 燃料分子の定圧比熱 [J/(kg·K)] (ここでは、イソオクタンの値を使用)

$c_{p,EGR}$: 残留ガス定圧比熱 [J/(kg·K)]

状態方程式により算出した初期温度 ($T_{i,st}$) は、エンタルピーバランスの式により算出した初期温度 ($T_{i,h}$) に対して、高い値を得た。これは、エンタルピーバランスの式において、 $T_{in,exp}$ を吸気ポートで計測した温度、 $T_{ex,exp}$ を排気マニホールド内で計測した温度で計算をしているが、実際には、 $T_{in,exp}$ については、空気が流入する過程で、吸気バルブとの干渉や壁面からの受熱により温度が上昇する効果、及び $T_{ex,exp}$ については、排気ポート内で放熱する熱量の影響を考慮できていないことから、実際よりもエンタルピーを過小評価しているためと推察される。

そこで本研究では、状態方程式により算出した初期温度 ($T_{i,st}$) を IVC の筒内ガス温度として使用した。

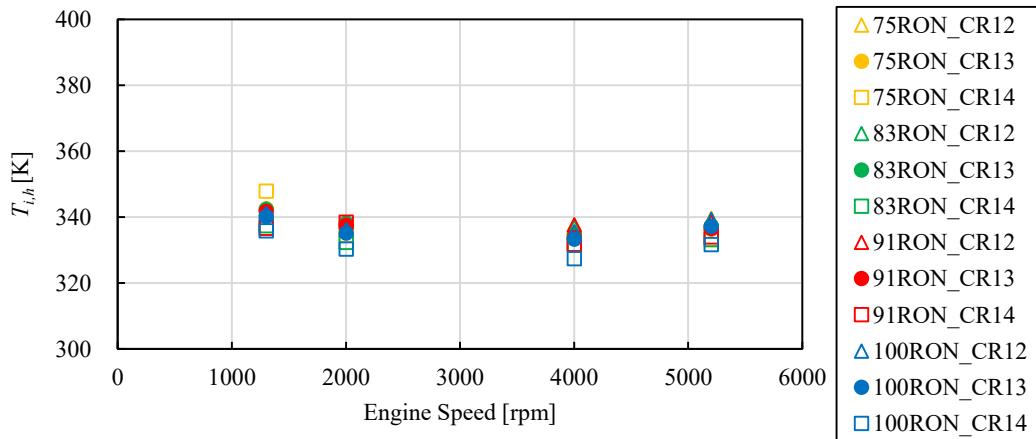


Fig.2-10 Temperature at IVC calculated by conservation law of enthalpy.

次に、IVC の筒内ガス温度 ($T_{i,st}$) を用いて、圧縮開始後のクランク角 (θ_m) における筒内未燃ガス温度 ($T_{u,m}$) を算出した。筒内未燃ガス温度 ($T_{u,m,ad}$) は、式 (2-5) に示す断熱変化の式を用いて算出している。今回は、燃焼室筒内圧力に実験で得られた値 (p_{exp}) を用いているが、この値は混合気が燃焼室壁面で受ける冷却の影響を含んでいる。そのため、温度の推定には断熱圧縮の式を用いており、壁との熱交換を考慮していない。

$$T_{u,m,ad} = \left(\frac{p_{m,exp}}{p_{m-1,exp}} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} T_{u,m-1,ad} \quad (2-5)$$

$T_{u,m,ad}$: θ_m における断熱圧縮計算により求めた筒内未燃ガス温度 [K]

$p_{m,exp}$: θ_m における筒内圧力センサーから求めた 200 サイクル平均筒内圧力 [Pa]

κ : 比熱比[-] (定圧比熱と定容比熱の比: $c_p/c_v=c_p/(c_p-R)$)

混合気の比熱比は、定圧比熱 (c_p) と定容比熱 (c_v) の比で表されるが、定圧比熱 (c_p) は温度の影響を受けることから NIST (National Institute of Standards and Technology) の定圧比熱の温度関数を用いて算出した (NIST, Chemistry WebBook, 2017)。また、式 (2-5) により算出した温度から再び定圧比熱を求めて式 (2-5) を算出しなおすという操作を、数回繰り返して行った。その結果、5 回程度計算を繰り返すことで筒内未燃ガス温度が収束したことから、このときの値を最終的な筒内未燃ガス温度 ($T_{u,m,ad}$) としている。また、ガソリンは混合成分のため、燃料の比熱比はイソオクタン値、吸入空気の比熱比は酸素 21%、窒素 79%、残留ガスは混合気の完全燃焼を仮定した組成で算出した。混合気のガソリン成分は前述のとおり、ガソリンの平均的な値として、平均炭素数 6.6、H/C1.9、平均分子量 91.74g/mol を用いた。

次項以降の図 2-11, 2-15, 2-18 には、代表的な条件において、クランク角 (θ) に対して得られた 200 サイクルの平均圧力 (p_{exp}) と筒内未燃ガス温度 ($T_{u,ad}$) の比較を示してある。また、図 2-14, 2-17, 2-21 には全ての運転条件における CA50 を示してある。CA50 は、図 2-8 に示すように、エンジントルクとの相関が高いことが判る。一般的に、 $\lambda=1$ に設定している場合においては、MBT 点での CA50 は 8ATDC 前後の値を取ることから、エンジン技術者はこのタイミングからの遅角量でノッキングの厳しさを判断している。図 2-8 の結果においても、過去の知見と同様の傾向を示しているため、各条件におけるノッキングの厳しさが推測できる。

この実験では、複数のパラメータを変化させていることから、次節以降でエンジン回転速度の影響、圧縮比の影響、オクタン価の影響に着目して論じていく。

2.4.2 高圧縮比による燃焼位相と温度・圧力の時間変化への影響

図2-11に、Fuel 3 (91RON)を用いたときの圧縮比の違いがクランク角 (θ) に対する筒内圧力 (p_{exp}) や筒内の未燃ガス温度 ($T_{u,ad}$) に与える影響を比較している。運転条件は2000rpmとしている。

TDCにおける圧力を比較すると、高圧縮比になるほど高まることが確認できる。TDC後においては、ピストンは膨張に転じることから燃焼室の容積は大きくなるが、筒内の圧力は、燃焼による既燃ガスの温度上昇と分子数の増加の結果高くなる。点火時期後の燃焼による圧力上昇の特徴を考察する。点火時期は圧縮比12, 13, 14でそれぞれ-5.5, -1.0, 3.5ATDCであり、高圧縮比になるほどノッキングが厳しくなることから点火時期が遅角していることが判る。また、サイクル毎にノッキングの解析を行なうと、ノッキングの圧力振幅の開始時期 (θ_{knock}) が筒内圧力の最大値の時期と一致していた。そこで、200サイクルの平均圧力の解析においても同様に、 θ_{knock} を圧力最大値時期と定義することとする。この場合に、圧縮比12, 13, 14で θ_{knock} はそれぞれ22, 28, 36ATDCである。また、図2-12に示すように、圧縮比を14まで高めると、点火時期(3.5ATDC)よりも前に熱発生 ($dQ/d\theta$:算出方法はAppendix1参照)が始まっている様子が見られる。燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度の条件が着火しやすい状態になっていることを示唆しており、ノッキングも発生しやすくなっていると考えられる。

次に、未燃ガス温度に関して考察する。初期温度に関しては、前項で比較をしたように、低圧縮比ほど残留ガスの量は増えるが、高圧縮比ほど残留ガスの温度が高くなる。そのバランスにより初期温度が決まるために圧縮比13が一番低い温度になっている。その後の筒内の未燃ガス温度は式(2-5)に示すように圧力比から算出しているために圧力変化の履歴と同じ傾向をたどる。初期温度と筒内圧力変化の履歴から、TDCまでの筒内の未燃ガス温度は圧縮比14が一番高くなることが判る。

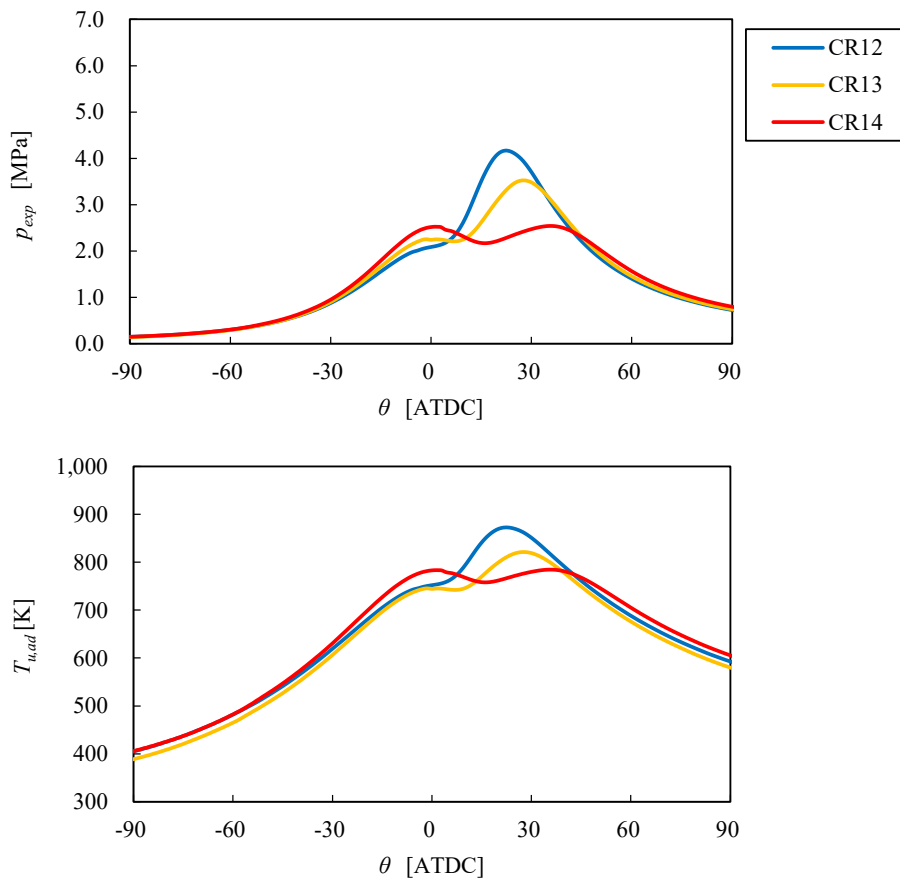


Fig.2-11 Cylinder pressure and unburned gas temperature of each compression ratio with Fuel 3 (91RON), 2000rpm. X axis is crank angle.

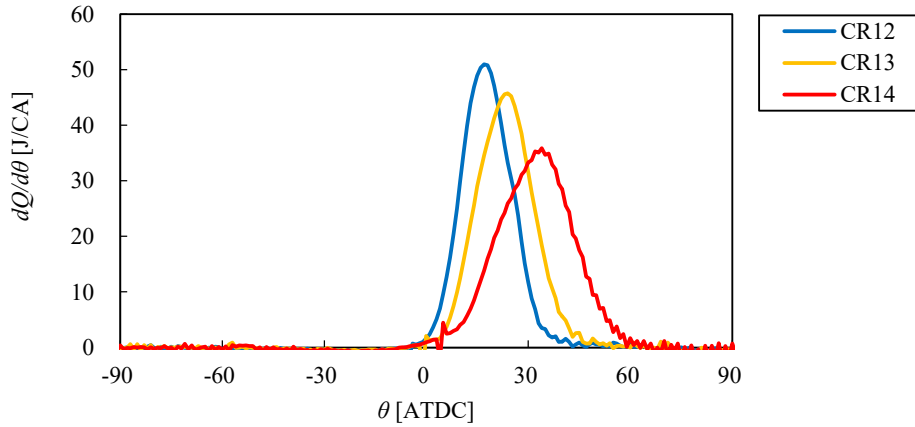


Fig.2-12 Heat release ratio of each compression ratio with Fuel 3 (91RON), 2000rpm.

続いて、この筒内圧力 (p_{exp}) や筒内の未燃ガス温度 ($T_{u,ad}$) を圧縮開始からの時間 (t) で示し、ノッキングの発生時期 (t_{knock}) を比較した。その結果を図 2-13 に示す。点火時期は、圧縮比 12, 13, 14 において、それぞれ 8.5, 8.9, 9.3ms の時期となっている。ノッキングの発生時期 (t_{knock}) はそれぞれ 10.8, 11.3, 12ms となっており、高圧縮比ほど長期化している。また、 t_{knock} 、すなわち筒内圧力の最大値時期における p_{exp} と $T_{u,ad}$ は、圧縮比 12 で圧力 4.2MPa、温度 873K、圧縮比 13 で圧力 3.5MPa、温度 821K、圧縮比 14 で圧力 2.5MPa、温度 784K となっており、高圧縮比ほどノッキングを避けるために点火時期を遅角する影響のために燃焼重心が遅れ、圧力温度共に大きく低下する傾向が見られた。

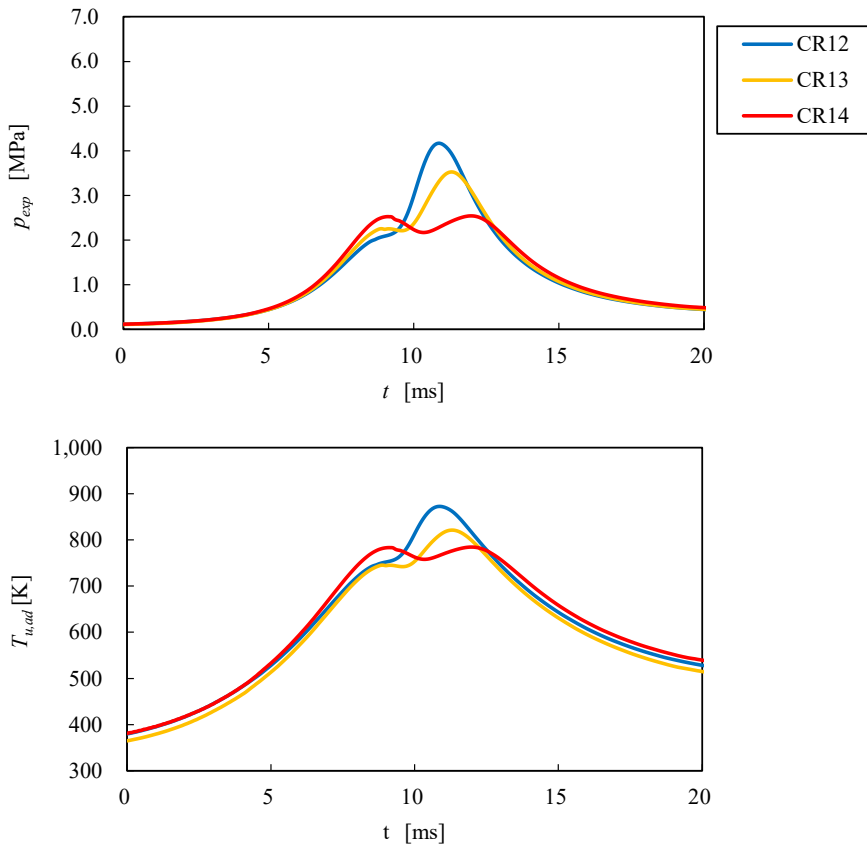


Fig.2-13 Cylinder pressure and unburned gas temperature of each compression ratio with Fuel 3 (91RON), 2000rpm. X axis is time after IVC.

圧縮比によるノッキング悪化の影響で遅くなる燃焼重心を比較するために、各条件における圧縮比と CA50 との関係を図 2-14 に比較した。Fuel 1 (75RON), Fuel 2 (83RON), Fuel 3 (91RON), Fuel 4 (100RON) 全てにおいて、圧縮比が上がるほどノッキングが厳しくなっていることから、オクタン価が異なっても、全てのエンジン回転速度において、圧縮比を高めることはノッキングを厳しくするということが判る。Fuel 1 (75RON), Fuel 2 (83RON), Fuel 3 (91RON) では圧縮比 1 に対して、6CA 程度遅角している。ただし、Fuel 4 (100RON) は MBT の条件に近いことから（前述のように MBT は CA50≒8ATDC）圧縮比 1 に対する遅角幅は 3CA 程度と小さくなっている。

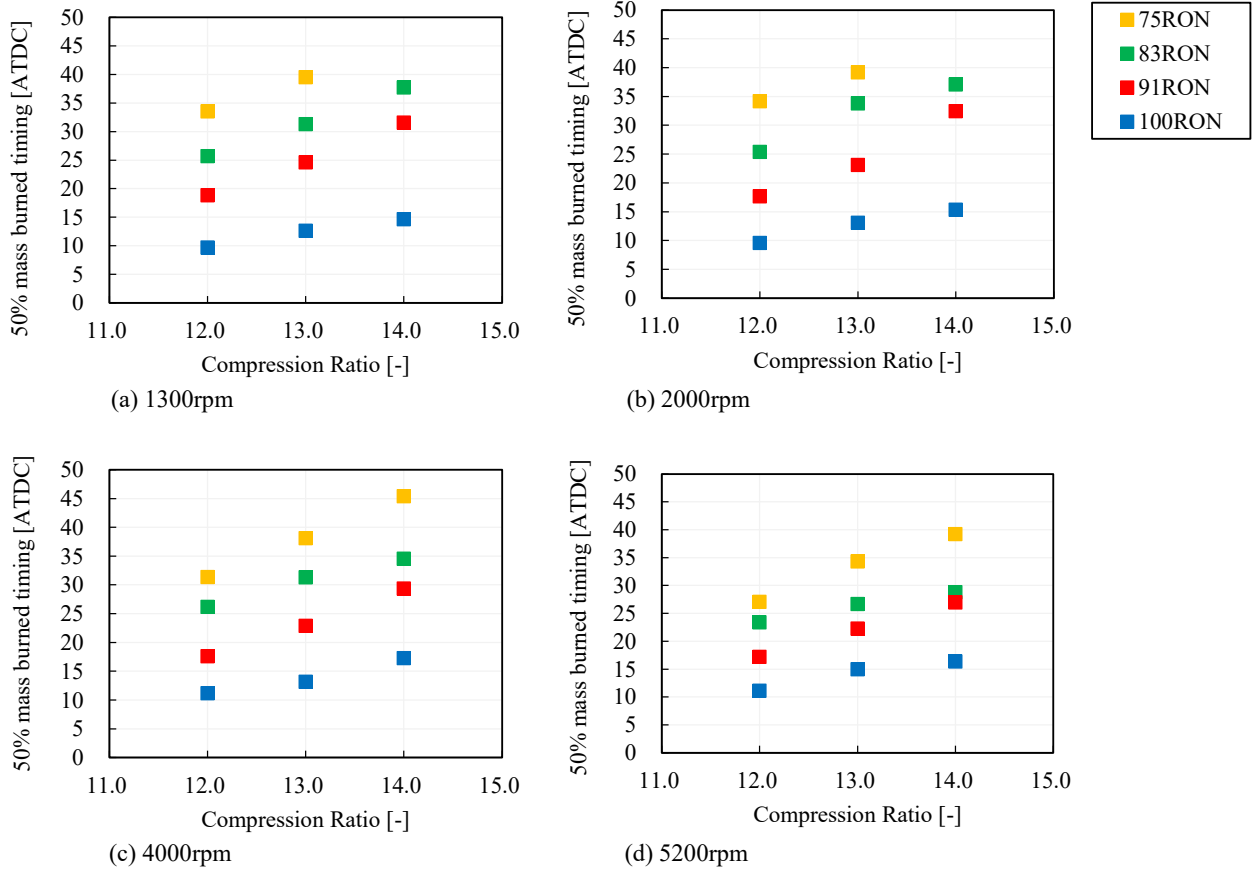


Fig.2-14 50% mass burned timing (CA50) variation with compression ratio for different RON fuel.

2.4.3 エンジン回転速度による燃焼位相と温度・圧力の時間変化への影響

図2-15, 2-16に Fuel 3(91RON), 圧縮比 13 の条件におけるエンジン回転速度が筒内の圧力と未燃ガス温度に与える影響を示している。図2-15は、クランク角 (θ) [ATDC]に対して得られた筒内の圧力 (p_{exp}) と未燃ガス温度 ($T_{u,ad}$) の関係を示している。

TDCにおける圧力を比較すると、回転速度が上がるほど高まることが確認できる。これは、実験条件で述べたように高回転ほど IVC を早めていることから、実圧縮比が高まっていることと、図2-7に示したように燃焼室容積に対する新気の空気量である体積効率は回転速度が上がるほど大きくなるためである。実際のエンジンでの吸入空気量の特性は、体積効率で表現することが多く、エンジンの最大トルクや最高出力の目標に応じて吸気系等の設計を行うことになることから、一般的には、体積効率は高回転側で高くなっている。点火時期はエンジン回転速度 1300rpm, 2000rpm, 4000rpm, 5200rpm でそれぞれ 1.0, -1.0, -3.5, -5.0ATDC であり高回転ほどノッキングが起こりにくく点火時期が進角している。そのために、燃焼位相は回転速度があがるほど早くなり、圧力のピークの値も大きくなっている。このとき θ_{knock} はエンジン回転速度 1300rpm, 2000rpm, 4000rpm, 5200rpm でそれぞれ 31, 28, 27, 26ATDC である。

次に、温度に関して記載する。初期温度 ($T_{i,st}$) は図2-9に示すように、1300rpm では吸入空気流量が少ないことに加えて、壁との熱交換の時間も長くなることから、壁受熱割合が大きくなり吸入空気温度が高くなる影響が見られる。一方、エンジン回転速度があがるにつれて、残留ガス割合は小さくなるが、残留ガスの温度が高くなることから、初期温度は高くなる。また、エンジン回転速度が高い条件ほど圧縮開始時期も早まることから、TDC までの筒内の未燃ガス温度は 5200rpm が一番高くなるのが判る。

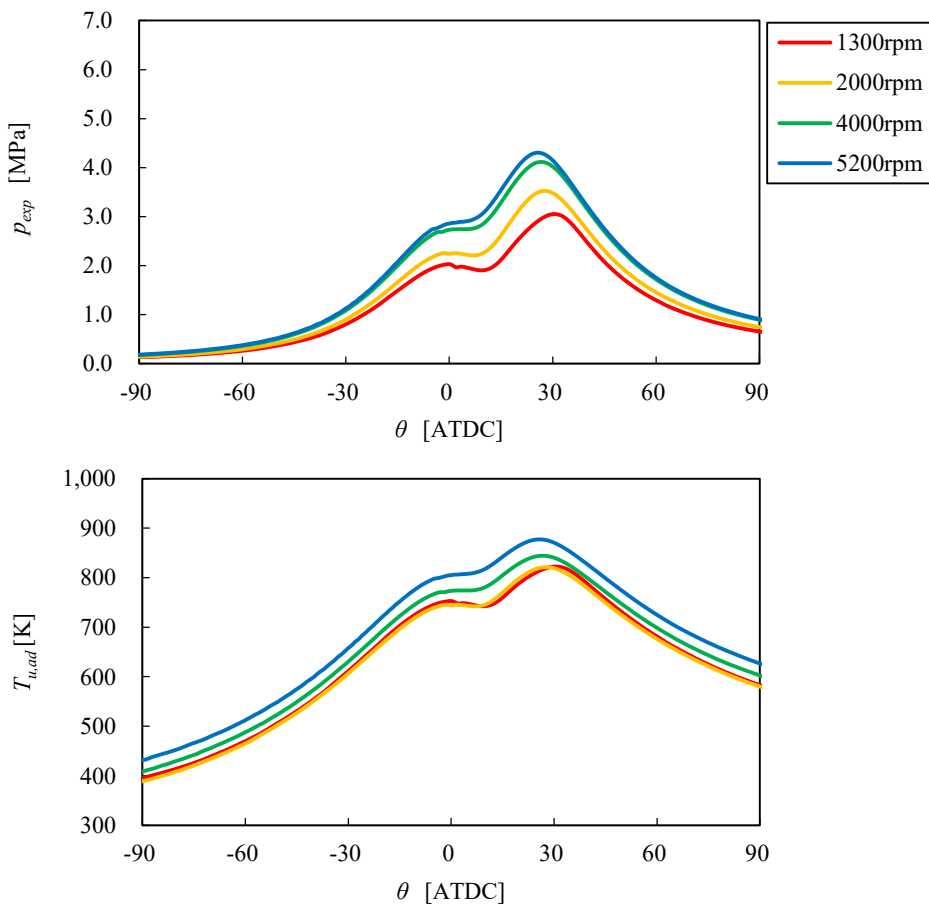


Fig.2-15 Cylinder pressure and unburned gas temperature of each engine speed with Fuel 3 (91RON), CR13. X axis is crank angle.

続いて、この筒内圧力 (p_{exp}) や筒内の未燃ガス温度 ($T_{u,ad}$) を圧縮開始からの時間 (t) で示し、ノッキングの発生時期 (t_{knock}) を比較した。その結果を図 2-16 に示す。点火時期はエンジン回転速度 1300rpm, 2000rpm, 4000rpm, 5200rpm でそれぞれ 12.7, 8.9, 4.8, 3.6ms であり、ノッキングの発生時期 (t_{knock}) はそれぞれ 16.5, 11.3, 6.0, 4.6ms とエンジン回転速度が遅いほど長期化している。一方で、 t_{knock} , すなわち筒内圧力の最大値時期における p_{exp} と $T_{u,ad}$ は、1300rpm で圧力 3.1MPa, 温度 822K, 2000rpm で圧力 3.5MPa, 温度 821K, 4000rpm で圧力 4.1MPa, 温度 844K, 5200rpm で圧力 4.3MPa, 温度 877K となっており、エンジン回転速度が遅いほどノッキングを避けるために点火時期を変更する影響により燃焼重心が遅れ、圧力温度共に低下する傾向が見られた。しかし、エンジン回転速度の影響は、圧縮比の変更の影響に対して小さいことが判る。

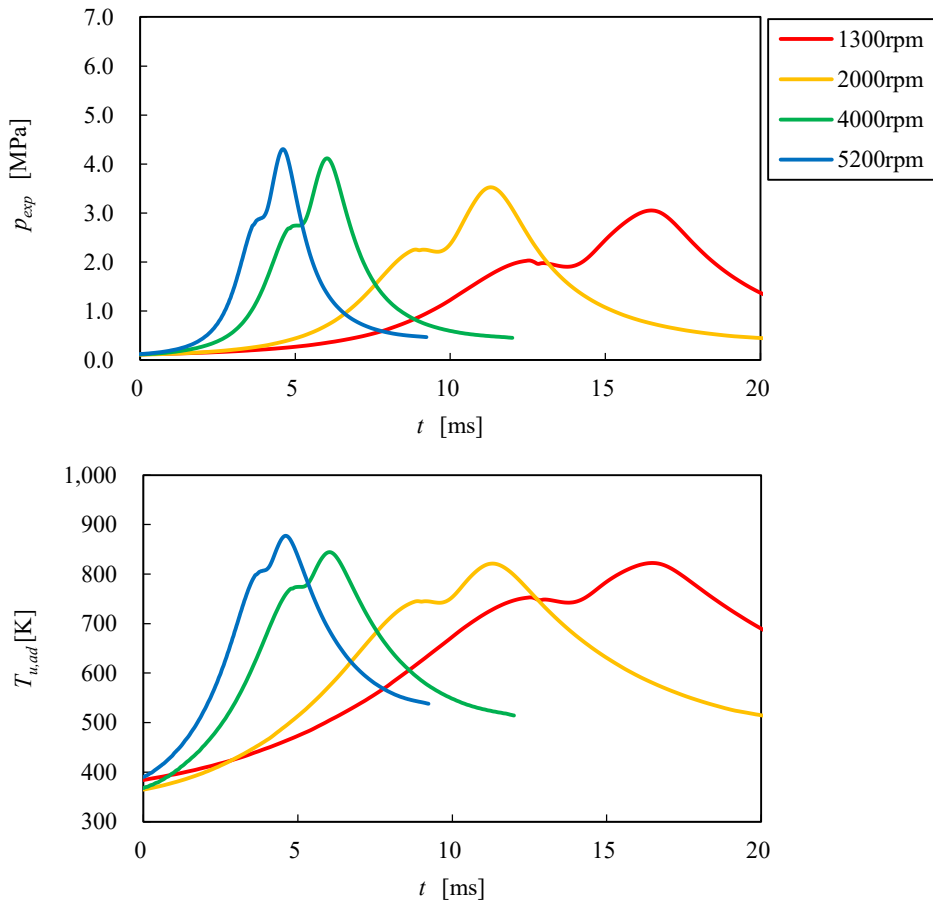


Fig.2-16 Cylinder pressure and unburned gas temperature of each engine speed with Fuel 3 (91RON), CR13. X axis is time after IVC.

エンジン回転速度の変化によってノッキングの起こりやすさが変わることによる燃焼重心の変化を明確にするために、各条件に対しての、エンジン回転速度と CA50 との関係を図 2-17 に示す。Fuel 1(75RON), Fuel 2 (83RON), Fuel 3(91RON)では、回転速度が上がるほど、燃焼重心が早くなる傾向が見られた。Fuel 4(100RON)については、回転速度による影響はほとんどなかった。回転速度が上がるほど、燃焼重心が早くなる燃料のうち、圧縮比が低い条件、RON が高い条件では 1000rpm に対して 5CA 程度燃焼重心が進角している。同様に圧縮比が高く、RON が低い条件では 1000rpm に対して 15CA 程度燃焼重心が進角する傾向があった。

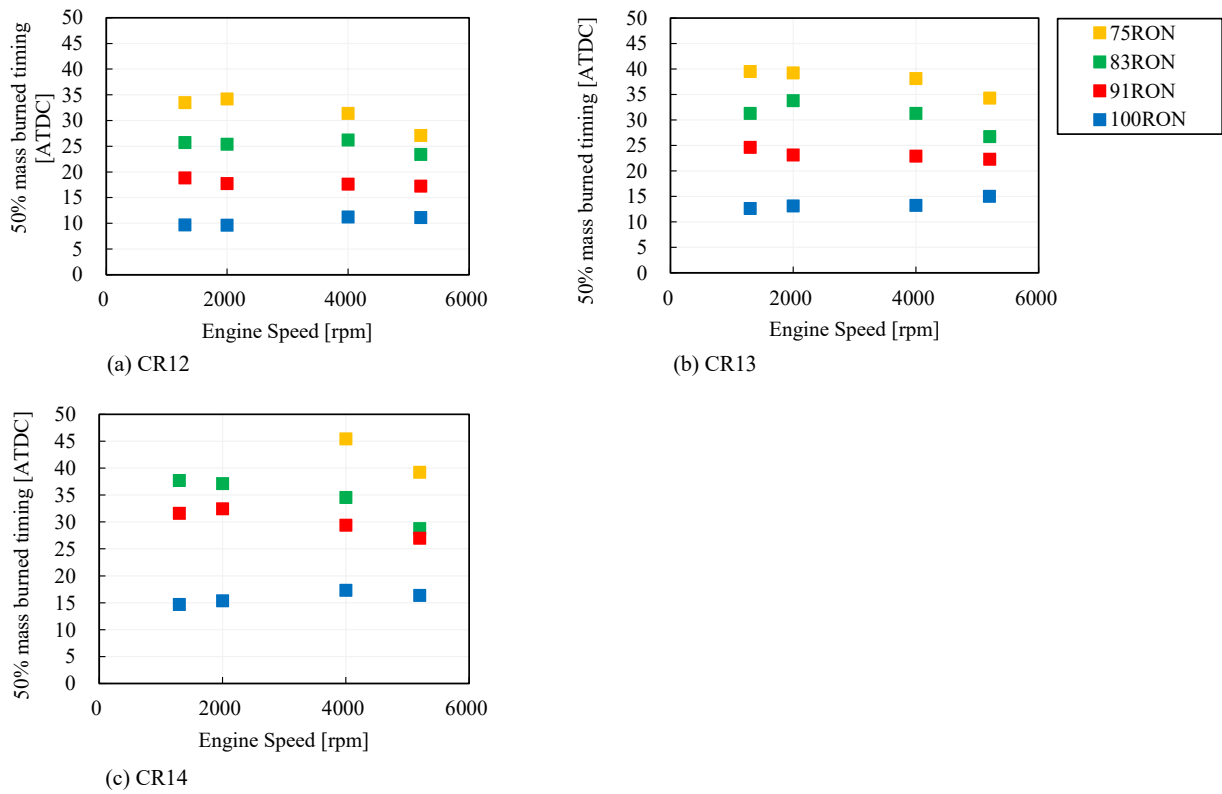


Fig.2-17 50% mass burned timing (CA50) variation with engine speed for different RON fuel.

2.4.4 燃料のオクタン価による燃焼位相と温度・圧力の時間変化への影響

図 2-18 に、CR13, 2000rpm における燃料のオクタン価 (RON) の違いがクランク角 (θ) に対する筒内圧力 (p_{exp}) や筒内の未燃ガス温度 ($T_{u,ad}$) に与える影響を比較している。TDC における圧力には大きな差は見られないが、Fuel 1(75RON), Fuel 2(83RON)においては、TDC 後にわずかな圧力上昇が見られる。これは図 2-19 に示すように、点火時期 (Fuel1 : 8.5ATDC, Fuel2 : 5ATDC) よりも前に熱発生が始まっているためと考えられる。また、このことにより、上述したように、ノッキングも発生しやすくなっていると考えられる。Fuel 3 (91RON), Fuel 4 (100RON) の点火時期はそれぞれ-1.0, -8.0ATDC であり、RON が低いほどノッキングが厳しくなることから点火時期が遅角していることが判る。TDC 後の燃焼による圧力上昇については、点火時期を遅角している RON が低い燃料ほど、燃焼位相すなわち圧力のピークの発生時期は遅くなり、圧力の上昇も小さい。このときの θ_{knock} は Fuel 1 (75RON), Fuel 2 (83RON), Fuel 3 (91RON), Fuel 4 (100RON) でそれぞれ 43, 38, 28, 18ATDC である。

温度に関しては、低オクタン価ほど残留ガスの温度が高くなるが、初期温度に対する影響は小さく、その後の断熱圧縮過程においては、圧力の履歴と同じ傾向をたどっている。

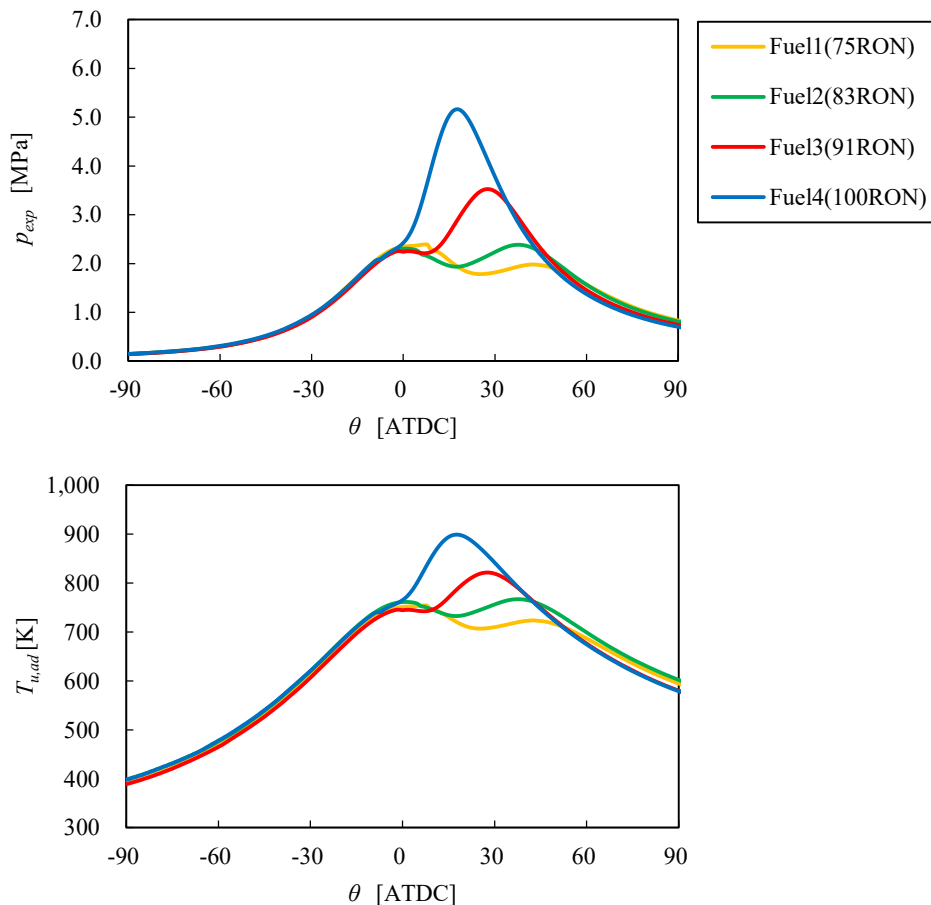


Fig.2-18 Cylinder pressure and unburned gas temperature of each fuel, with CR13, 2000rpm. X axis is crank angle.

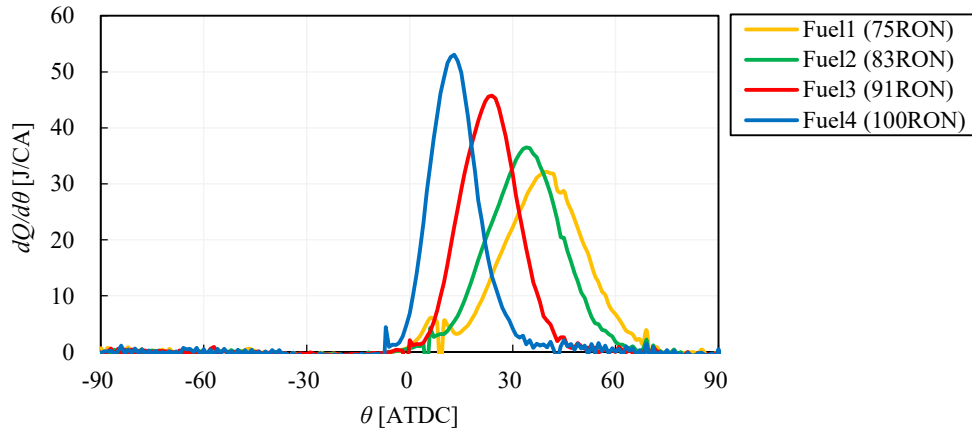


Fig.2-19 Heat release ratio of each fuel with CR13, 2000rpm.

続いて、この筒内圧力 (p_{exp}) や筒内の未燃ガス温度 ($T_{u,ad}$) を圧縮開始からの時間 (t) で示し、ノッキングの発生時期 (t_{knock}) を比較した。その結果を図 2-20 に示す。点火時期は Fuel 1 (75RON), Fuel 2 (83RON), Fuel 3 (91RON), Fuel 4 (100RON) でそれぞれ 9.7, 9.4, 8.9, 8.3ms であり、ノッキングの発生時期 (t_{knock}) はそれぞれ 12.6, 12.2, 11.3, 10.5ms と RON が低いほど長期化している。一方で、 t_{knock} , すなわち筒内圧力の最大値時期における p_{exp} と $T_{u,ad}$ は、Fuel 1 (75RON) で圧力 2.0MPa, 温度 723K, Fuel 2 (83RON) で圧力 2.4MPa, 温度 767K, Fuel 3 (91RON) で圧力 3.5MPa, 温度 821K, Fuel 4 (100RON) で圧力 5.2MPa, 温度 899K となっており、RON が低いほどノッキングを避けるために点火時期を変更する影響により燃焼位相が遅れ、圧力温度共に低下する傾向が見られた。

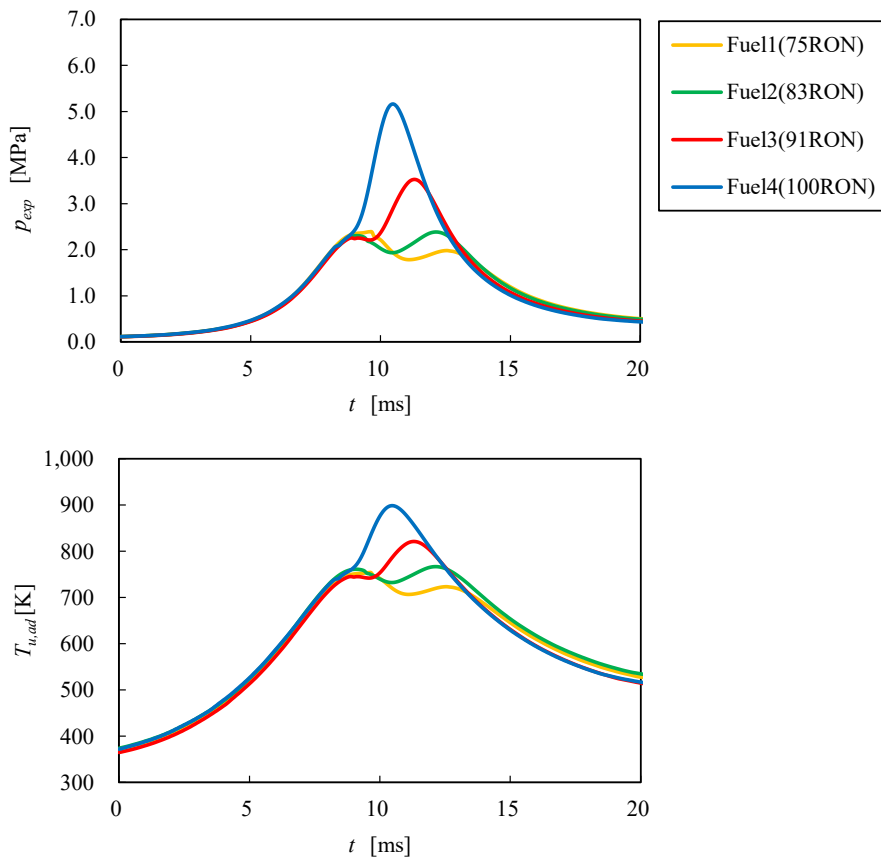


Fig.2-20 Cylinder pressure and unburned gas temperature of each fuel, with CR13, 2000rpm. X axis is time after IVC.

低 RON を用いることでノッキングが悪化し、結果として遅角する燃焼重心を比較するために、各条件における RON と CA50 との関係を図 2-21 に示す。圧縮比によらず RON が低いほどノッキングが起りやすくなり、TK での燃焼重心は遅角した。圧縮比 14 の 1300rpm, 2000rpm においては RON で 1 の変化に対して 1.2CA 程度遅角している。また、圧縮比 12, 13 については RON で 1 の変化に対して 1CA 程度遅角している。また 5200rpm では少し感度が鈍くなり、RON で 1 の変化に対する遅角幅は 0.8CA 程度と小さくなっている。

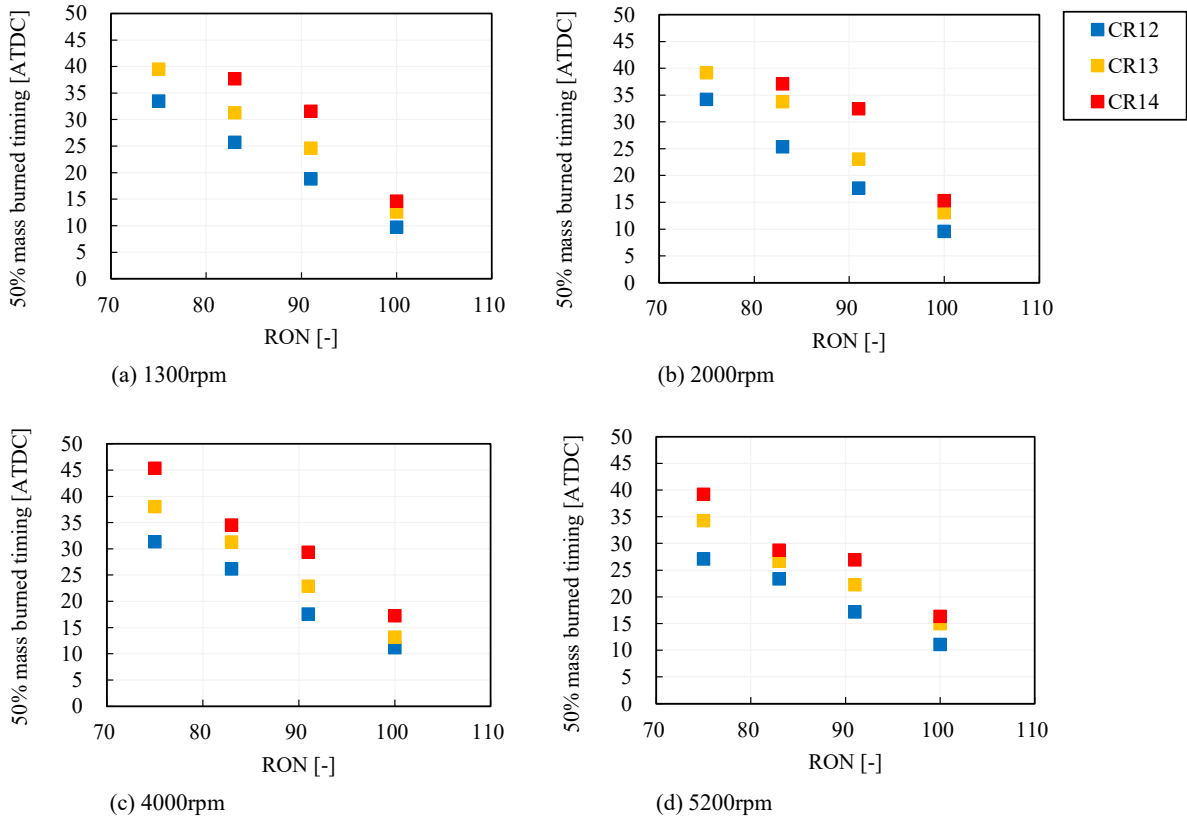


Fig.2-21 50% mass burned timing (CA50) variation with engine speed for different compression ratio.

2.5 結論

高圧縮比エンジンにおけるノッキングの発生特性に対するエンジンの圧縮比，回転速度，評価燃料の着火特性（RON）の影響について以下の知見を得た。

エンジンのトルクは，燃焼重心（CA50）と相関があり，燃焼重心が MBT（CA50 \approx 8ATDC）に近いほどエンジントルクは高くなる。この状態から燃焼重心が遅くなるほど，即ち，CA50 が大きくなるほどエンジントルクが低下することが判った。

エンジンの圧縮比の変更に対しては，全てのエンジン回転速度，および RON の条件で，圧縮比が高いほどノッキングが起りやすくなり，TK での燃焼重心は遅角した。遅角の度合いを定量的に見ると，RON が高く TK が MBT に近い条件で運転をしている Fuel4（100RON）では圧縮比 1 に対して 3CA 程度であったが，TK が MBT から 10CA 以上遅角している Fuel3（91RON），Fuel2（83RON），Fuel1（75RON）では圧縮比 1 に対して 6CA 程度と大きくなっていった。

エンジン回転速度の変化に対しては，エンジン回転速度が高いほど，吸気バルブの開閉時期が早期化しており吸入空気量が多く，実圧縮比も高まっている。その条件においても Fuel1（75RON），Fuel2（83RON），Fuel3（91RON）では，回転速度が上がるほど，燃焼重心が早くなる傾向が見られた。Fuel4（100RON）については，回転速度による影響はほとんどなかった。回転速度が上がるほど，燃焼重心が早くなる燃料（Fuel1~3）のうち，圧縮比が低く，RON が高い条件では 1000rpm に対して 0.5CA 程度燃焼重心が進角している。同様に圧縮比が高く，RON が低い条件では 1000rpm に対して 1.5CA 程度燃焼重心が進角する傾向があった。

評価燃料の RON の変化に対しては，圧縮比によらず RON が低いほどノッキングが起りやすくなり，TK での燃焼重心は遅角した。圧縮比 14 の 1300rpm，2000rpm においては RON で 1 の変化に対して 1.2CA 程度遅角している。また，圧縮比 12，13 については RON で 1 の変化に対して 1CA 程度遅角している。また 5200rpm では少し感度が鈍くなり，RON で 1 の変化に対する遅角幅は 0.8CA 程度と小さくなっていることが判った。

また，実験で計測をした燃焼室内の圧力から混合気の未燃ガス温度を算出することで各設定条件の変化が混合気の状態変化に与える影響を解析し，以下の知見を得た。

圧縮比を上げることにより TDC までの圧力上昇は大きくなる。その影響で圧縮比 14 では，点火時期の前に熱発生が始まる傾向が確認できた。また点火時期後の燃焼による圧力上昇に対しては，燃焼重心が早い定圧縮比の条件ほど，燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度は高くなっていることが判る。燃焼後の圧力上昇に関しては，回転速度や RON の検討結果も同様に燃焼重心の影響を受けている。また，回転速度の変化は，圧縮開始からノッキングの発生にいたるまでにかかる時間に影響している。

本章のエンジン実験の結果と考察により，エンジンの圧縮比や回転速度，評価燃料の RON の値を変更することによるノッキングの発生時期に対する影響と，各設定条件の変化が混合気の状態変化に与える影響を明確にした。第3章からは，本章で解析したノッキングの発生に影響する各パラメータの変化が，混合気の素反応にどのような影響を与えるか考察する。

第3章 高圧縮比エンジンのノッキングにおける未燃ガスの素反応過程の特性

3.1 はじめに

第2章におけるエンジン実験において、圧縮比の変更、エンジン回転速度の変更、評価燃料のRONの変更はノッキングの発生時期に影響を与え、燃焼重心(CA50)に影響すること、すなわちエンジンの出力に影響することが示された。

また、実験で計測をした燃焼室筒内の圧力から混合気の未燃ガス温度を算出することで圧縮比やエンジン回転速度などのエンジン側の変更は、筒内の圧力や未燃ガス温度の変化に影響を与えていること、燃料のRONの変化は混合気の着火特性に影響を与えていることが明らかになった。

本章では、燃焼室筒内の未燃混合気についての0次元詳細反応計算による解析方法を検討して、第2章で明らかにしたノッキングの発生特性に影響する各パラメータの変化が、混合気の素反応にどのような影響を与えるか考察することを目的としている。

3.2 詳細反応計算によるノッキング解析に用いるモデルについて

3.2.1 本研究で取り扱う数値解析モデルの考え方

ガソリンエンジンの燃焼においては、吸入空気の流れや乱れが一様ではないことから、混合気の濃度に濃淡が生じたり、混合気の燃焼室壁面からの熱の授受によって混合気の温度が空間的、時間的な分布が生じたり、サイクル毎に変化する燃焼の影響で残留ガスの量や温度が一定にならないことが知られている (Dec, et. al., 2009, Takahashi, et. al., 2012, Omura, et. al., 2016). これらの時間的、空間的なばらつきを対象としたモデルの研究開発は盛んに行なわれているが、エンジン燃焼室筒内の熱流体を取り扱うためには3次元の計算格子が必要になる。

一方で、エンジンのような高温高圧場での素反応を計算するために十分な時間分解能を確保することは、計算時間の課題があり難しい。そこで、素反応を扱うモデルについては、空間的な状態の変化やサイクル間の変動に対しては、特徴を捉えつつ簡略化をして数値解析モデルとすることが一般的である。

本章においては、第2章で明らかになったノッキングの発生に影響する各パラメータの変化が、混合気の素反応にどのような影響を与えているかについての考察を行なうことを目的にしていることから、空間を0次元として、時間に対する状態変化を模擬した0次元の数値解析モデルで素反応の解析を行なうことにする。

3.2.2 ガソリン混合気のノッキングに関与する詳細反応機構

ガソリン混合気の素反応のモデル化には、分子間（あるいは分子内）に起こる化学反応に加えて、対象となる系の分子の密度、熱容量、圧縮率などに代表される熱力学的性質、熱伝導、物質拡散係数などに代表される輸送特性などの物理量を詳細にモデル化することが必要である。熱力学的性質や、輸送特性については、現在も詳細な研究が行われており、NIST REFPROP program (NIST, 2017)や、AIChE DIPPR software (Rowley, et. al., 2007)などにそのデータベースやソフトウェアが公開されている。

ガソリンは炭素数3~12程度の炭化水素で構成されており、それらの炭化水素と空気の混合気の反応は気相のラジカル連鎖反応が主反応である。ラジカル連鎖反応は、分子の衝突頻度と活性化エネルギーからなるアレニウスの式を用いて表すことができる。(アレニウスの式を用いる理論的な根拠については、教科書に詳しい記載がある(一例として Atkins, 2001))。燃焼室内に生じる中間生成物を含む各化学種に対応して、反応式や反応速度定数を実験等の結果から算出してまとめたものを詳細反応機構とよび、研究が進められている。(Miyoshi, 2008, Oguchi, 2009, Murakami, 2009)

ガソリンエンジンのノッキング解析に適用するための詳細反応機構は、1990年頃から研究が始まっており、LLNLや、ExxonMobil Research and Engineeringを筆頭とするアメリカの研究チームを中心に、ガソリンサロゲート燃料 (Pitz, et. al, 2007a, 2007b), ディーゼルサロゲート燃料 (Farrel, et. al, 2007) についての実験データの蓄積と、それに基づく詳細反応機構のデータベース化が行われてきた。特に、炭化水素系燃料の詳細反応機構の開発状況は、アイルランド国立大学の Simmie による総説に詳しくまとめられていて、C1~C9のパラフィンやナフテン、C3~C4のオレフィン(ジエンを含む)、アロマの他に、中間生成物であるC2~C4アルキンとジアセチレンについて報告されている (Simmie, 2003)。

ガソリンサロゲート燃料として用いられる化学種(分子)の詳細反応機構を示しノッキングに関与する素反応の例を示す。

1991年に Westbrook らは、ガソリンエンジンでのノッキングに関与するアルカン(パラフィン系炭化水素)の素反応を解析した(Westbrook, et. al., 1991)。それによると、ラジカル(R)の生成に関与する連鎖開始反応として、

式 (3-1) に示す燃料の熱乖離による反応, 式 (3-2) に示す酸素による水素の引き抜き反応を挙げている. 特に式 (3-2) に示す反応は分子構造の影響を大きく受けるために, 燃料に含まれる成分の分子構造の違いが燃料の RON すなわちノッキングの起こりやすさに影響していると考えられている.



(R:アルキルラジカル)

式 (3-2) に関しては, 酸素以外にも OH, H, O, CH₃, HO₂, CH₃O, C₂H₅, C₂H₃, CH₃O₂などのラジカルは, 燃料から水素を引き抜き新たなラジカルを生成している (例として式 (3-3), 式 (3-4)). また, 式 (3-4) で生成された過酸化水素 (H₂O₂) は式 (3-5) により OH ラジカルを生成する (M は反応に寄与しない第3体を示す). 式 (3-5) で示す過酸化水素の分解は温度依存性があり, 主に 900K 以上の高温で生じる反応である.



燃料からの水素引き抜き反応において, 水素の引き抜きやすさは第1級水素 (1°) < 第2級水素 (2°) < 第3級水素 (3°) のように, 水素の級数, すなわち, 図 3-1 に示すように水素が結合する炭素の級数で表される. 炭素の級数はその炭素が結合している炭素の数, すなわち, 炭素の C-C 結合の数を示している. 水素の引き抜きやすさが級数に依存するのは, C-H 結合の強さに依存するためである. つまり, C-H 結合の弱い第3級炭素に結合する水素は引き抜きやすくラジカルも安定することからラジカルの生成速度が速い. 一方で, C-H 結合の強い第1級炭素に結合する水素は引き抜きにくくラジカルの生成速度が遅い. パラフィン为例として代表的な水素の級数を図 3-1 に示している. 第1級水素は黒, 第2級水素は青, 第3級水素は赤で示している. 直鎖の炭化水素に対して分枝の炭化水素は第1級水素が多く水素の引抜きが起こりにくい. (詳細は有機化学の教科書に詳しい. 例えば Morrison, R. T. et. al, 2000)

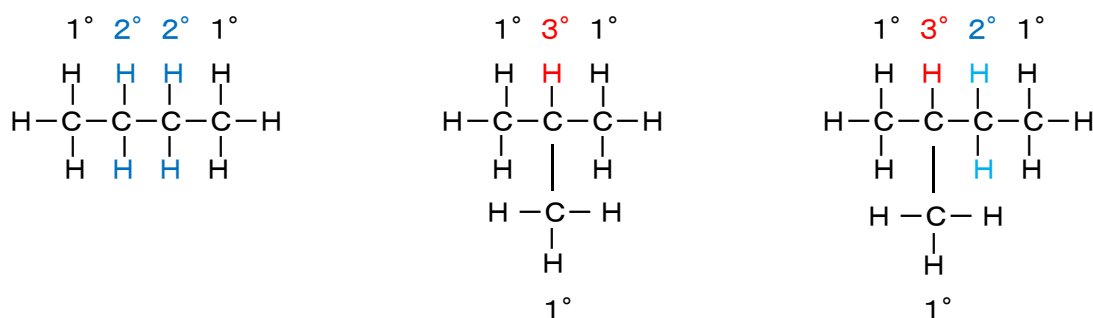
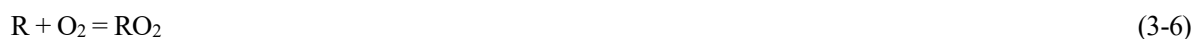
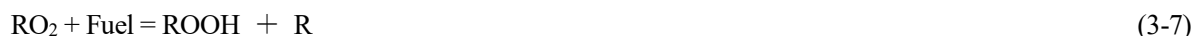


Fig.3-1 Molecule structures and Hydrogen's class.

また, エンジンの燃焼室内は, 混合気が大気圧, 大気温度に近い状態から, 圧力は 100 気圧, 温度は 1000K を超えるまでのダイナミックな変化を経る. そこで, 500K-950K の低温度領域で起こる式 (3-6) に示す反応により生成されるアルキルパーオキシラジカル (RO₂) に続く反応が, 燃料の分子構造や大きさによるノックの発生特性を決定づけると考察している.



RO₂が関与する反応には (a) RO₂の分解反応, (b) 水素引き抜き反応による ROOH, RO, OH の生成, (c) RO₂の分子内水素引き抜き反応がある. (a)は (3-6) の化学平衡により起こる逆反応で, 900K 以上の高温で引き起こる. (b) は燃料分子などの他分子からの水素引き抜きである. 代表例として式 (3-7) に燃料からの水素引き抜きを示してある. 式 (3-7) で生じる ROOH はすぐに O-O 結合が分解して式 (3-8) に示すように OH を生じることから, (b) を通じて少なくとも 2 つ以上のラジカルが生成されることになる.



最後に (c) の RO₂の分子内水素引き抜き反応について説明をする. この反応は, (3-9) の式で示され, 反応速度は, RO₂からの分子内での水素の引き抜かれやすさ (式 (3-2) ~式 (3-4) で説明をしたような水素が結合する炭素の級数) と O-O ラジカルが引き抜く H と O-O ラジカルとの距離が影響する. これは, 分子内酸化においては, O-O ラジカルが引き抜く水素に結合して環状の遷移構造を取る過程において, その立体構造が構造的に不安定であるほど立体障害が大きいと言われており, その立体障害の大きさが反応速度に影響するためである. 例えば, 一番距離の近い O-O が結合する炭素に結合する水素 (図 3-2 で d 位置の水素) を引き抜くことを考えると, C-H-O-O-の 4 原子で環状構造を作ることになるが, これは, 結合角が狭くなることから立体障害が大きい. 環状構造が大きいほど立体障害が小さくなり, 6~7 原子で作る環状構造の立体障害が最小となる. この説明は, 図 3-2 のような燃料分子から生じた RO₂において, O-O が a の位置の水素に結合すると 7 原子の環状構造, b の位置の水素に結合をすると 6 原子の環状構造を形成するが, a と b の水素を比較すると, a は 1 級水素であり b は 3 級水素であることから, 3 級水素の b と環状構造を形成する方がエネルギー障害は小さく反応速度が速くなることを示している. そして, QOOH は環状エーテルと OH を生じる (式 (3-12)).

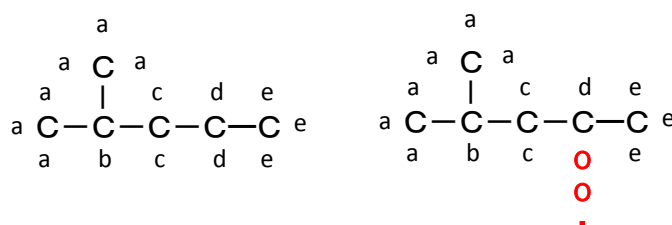


Fig.3-2 Molecule structures and intramolecular oxidation.

また, 感度解析の結果, 次に示す式 (3-7), 式 (3-10), 式 (3-11), 式 (3-12) の反応の寄与も大きいことが分かった. このうち式 (3-11) に示す過酸化水素の分解は 950K 以上で生じている. 式 (3-12) の QOOH の分解はより低温で生じるが, 一部の QOOH では Q と HO₂ を生成し酸化反応を阻害する効果がある.



その後, Curran らは, PRF の構成分子である, イソオクタン (Curran, et. al., 2002) とノルマルヘプタン (Curran, et. al., 1998) について, 反応毎のステップに分けて詳細にまとめ, 噴流拡散反応器, 流通式反応器, 衝撃波管, ガ

ソリンエンジンでの結果とモデルとの比較を行った。その研究によると、イソオクタン、ノルマルヘプタンの反応は、次の25のステップで示されており、このうち、1~9が高温酸化反応(>850K)、10~25が低温での酸化反応(<900K)を示している。ノルマルヘプタンの低温酸化反応では、分枝連鎖反応を忠実に示すことが重要であり、反応23, 24のケトヒドロパーオキシサイトの生成、分解と、その競合反応である反応19~21のヒドロパーオキシアルキルの分解反応の理解が必要であるとしている。また、イソオクタンでは、式(3-9)で説明をした12の他に23の反応が、ノルマルヘプタンよりも抑制されることを示した。

1. Unimolecular fuel decomposition
2. H atom abstraction from the fuel
3. Alkyl radical decomposition
4. Alkyl radical + O₂ to produce olefin + HO(·)₂ directly
5. Alkyl radical isomerization
6. Abstraction reactions from Olefin by O(·)H, H(·), O(·), and C(·)H₃
7. Addition of radical species to olefin
8. Alkenyl radical decomposition
9. Olefin decomposition
10. Addition of alkyl radicals to O₂
11. R(·) + R' O(·)₂ = R' O(·) + RO(·)
12. Alkyl peroxy radical isomerization (RO(·)₂ ⇌ Q(·)OOH)
13. RO(·)₂ + HO(·)₂ = RO₂H + O₂
14. RO(·)₂ + H₂O₂ = RO₂H + HO(·)₂
15. RO(·)₂ + CH₃O₂ = RO(·) + CH₃O(·) + O₂
16. RO(·)₂ + R' O(·)₂ = RO(·) + R' O(·) + O₂
17. RO₂H = RO(·) + O(·)H
18. RO(·) decomposition
19. Q(·)OOH = cyclic ether + O(·)H (cyclic ether formation via cyclisation of diradical)
20. Q(·)OOH = olefin + HO(·)₂ (radical site β to OOH group)
21. Q(·)OOH = olefin + carbonyl radical (radical site γ to OOH group)
22. Addition of Q(·)OOH to O₂
23. Isomerization of O(·)₂QOOH and formation of carbonylhydroperoxide and O(·)H
24. Decomposition of carbonylhydroperoxide to form oxygenated radical species and O(·)H
25. Cyclic ether reactions with O(·)H and HO(·)₂

※ (·) はラジカルを示す。

3.2.3 PRF 混合気のノッキングに関与する詳細反応計算結果の解釈について

安東らは、PRF (Primary Reference Fuel, 第1章参照) の詳細反応計算の感度解析を実施して、PRF が着火に至るまでの素反応には、温度の上昇に伴って変化する3つの反応の影響が大きいことを報告している (Ando, et al., 2009b)

～950K : LTO, NTC 領域 : CH_2O や H_2O_2 を生成する燃料の O_2 付加反応, 分離反応
 950K～1500K : 熱着火準備期間 : 燃料フラグメントの反応, $\text{H}_2\text{-O}_2$ ループによる反応
 1500K～ : 熱着火 : 水酸基システム反応

安東らの考察によると、反応開始から温度が 950K 以下の段階では、低温酸化反応 (Low Temperature Oxidation Reaction, LTO) や負の温度係数 (Negative Temperature Coefficient, NTC) 領域とよばれる反応が進行し、冷炎とよばれる熱発生を生じる。この温度域では、ホルムアルデヒド (CH_2O) や H_2O_2 を生成しながら徐々に温度を上昇させる。その後、熱着火準備期間では、燃料フラグメントの反応による H_2O_2 の生成と、 $\text{H}_2\text{-O}_2$ ループによる CO の生成で徐々に温度が上昇する。 H_2O_2 ループの反応速度は、それまでに蓄積された H_2O_2 の濃度によって決まることが述べられている。また、初期温度が LTO, NTC 以上の場合、 H_2O_2 の生成と H_2O_2 ループは同時に進行するとされている。

つまり、混合気の着火反応は、LTO における冷炎発生の熱的な効果に加えて、LTO の反応性生物であるアルデヒドや H_2O_2 の濃度が H_2O_2 ループ反応 (連鎖縮退反応とも呼ばれる。) の速度に与える影響や、燃料フラグメントの反応による着火準備期間での温度上昇速度についても考慮する必要があると考えられる。

第2章の解析より、高圧縮比エンジンの運転条件では、950K 以下の温度域を経ることから、LTO による熱的な影響や、LTO で生じる H_2O_2 の濃度の違いが着火時期に影響していることが予測される。そこで、目的としているノッキングの発生特性に影響する各パラメータの変化が、混合気の素反応にどのような影響を与えるかについて、特に LTO とその後の熱着火準備期間の反応とに着目をして考察を行なっていく。

3.3 詳細反応計算によるノッキングの解析方法

本章においては、第2章で明らかになったノッキングの発生に影響する各パラメータの変化が、混合気の素反応にどのような影響を与えているかについての考察を行なうことを目的にしていることから、空間を0次元として、時間に対する状態変化を模擬した素反応モデルで解析を行なうことにしている。

解析には商用ソフト ANSYS 社の CHEMKIN-PRO 15151 を用いており、また、反応器としては、CHEMKIN-PRO に組み込まれている Closed Homogeneous Batch Reactor を使用して0次元詳細反応計算を行った。混合気の状態変化は、エンジン実験を行うことで得られたクランク角 (θ) に対しての200サイクルの平均圧力 (p_{exp}) を圧縮開始時期 (IVC) からの時間に対する圧力変化に置き換えて用いることとし、反応器内の圧力は実験から得られた圧力と一致するように体積を変更して計算を行っている。境界条件としては初期温度 ($T_{i, st}$) を与えている。また、燃焼室内の混合気の最高温度を予測できるようにするために、壁面からの熱損失については考慮していない。計算条件を表3-1に示す。詳細反応機構にはアメリカリバモア国立研究所 (LLNL) で開発された、LLNL ガソリンサロゲート詳細反応機構 (Mehl, et. al., 2011, LLNL, 2017) を選定した。この詳細反応機構は、ノルマルヘプタン、イソオクタン、トルエン、C5-C6 オレフィンの反応機構が含まれており、ショックチューブや定容容器での実験結果との検証も行なわれている。このモデルに含まれる化学種数は1389、反応数は5935である。

Table3-1. CHEMKIN-PRO calculation settings.

Mechanism	LLNL Gasoline Surrogate Detailed mechanism
Reactor	Closed Homogeneous batch Reactor
Problem Type	Constrain Pressure And Solve Energy Equation
Pressure	Experimental data measured by Pressure sensor
Heat Loss	none
Equivalence Ratio	Same as Experimental Data

混合気は、実験で用いた Fuel1~Fuel4 の RON に対応するように、Fuel1 (75RON) を PRF75, Fuel2 (83RON) を PRF83, Fuel3 (91RON) を PRF91, Fuel4 (100RON) を PRF100 に対応させて計算を行っている。各 PRF のイソオクタンとノルマルヘプタンのモル濃度を表3-2に示す。空気のモル組成は、窒素 79%, 酸素 21%とし、筒内に残存する残留ガスの組成は考慮に入れていない。

Table3-2. PRF for calculation.

	Fuel1	Fuel2	Fuel3	Fuel4
	75RON	83RON	91RON	100RON
	PRF75	PRF83	PRF91	PRF100
iso-octane (IC8H18) [mol%]	72.7	81.2	90	100
n-heptane (NC8H16) [mol%]	27.3	18.8	10	0

3.4 ノッキングの解析結果と考察 (1) 初期温度 $T_{i, st}$ での検討

3.4.1 高圧縮比による混合気の化学反応への影響

図3-3に圧縮比の変更を比較するために計算に用いた筒内圧力 (p_{exp}) と0次元詳細反応計算により得られた未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) を示す。条件は、2000rpmのFuel 3 (91RON)で、計算はPRF91で行った。 $T_{u,chem}$ は、第2章で式(2-5)によって求めた未燃ガス温度 (Fig.2-13, $T_{u,ad}$) に対してTDC付近(9ms)まではほぼ同じ温度を示しているが、10ms以降で反応による熱発生から温度が上昇している。特に、圧縮比の高いCR14に着目すると、10ms以降の圧力上昇は小さいが、温度については、CR13よりも高くなっていることから化学反応による熱発生の影響と考えられる。

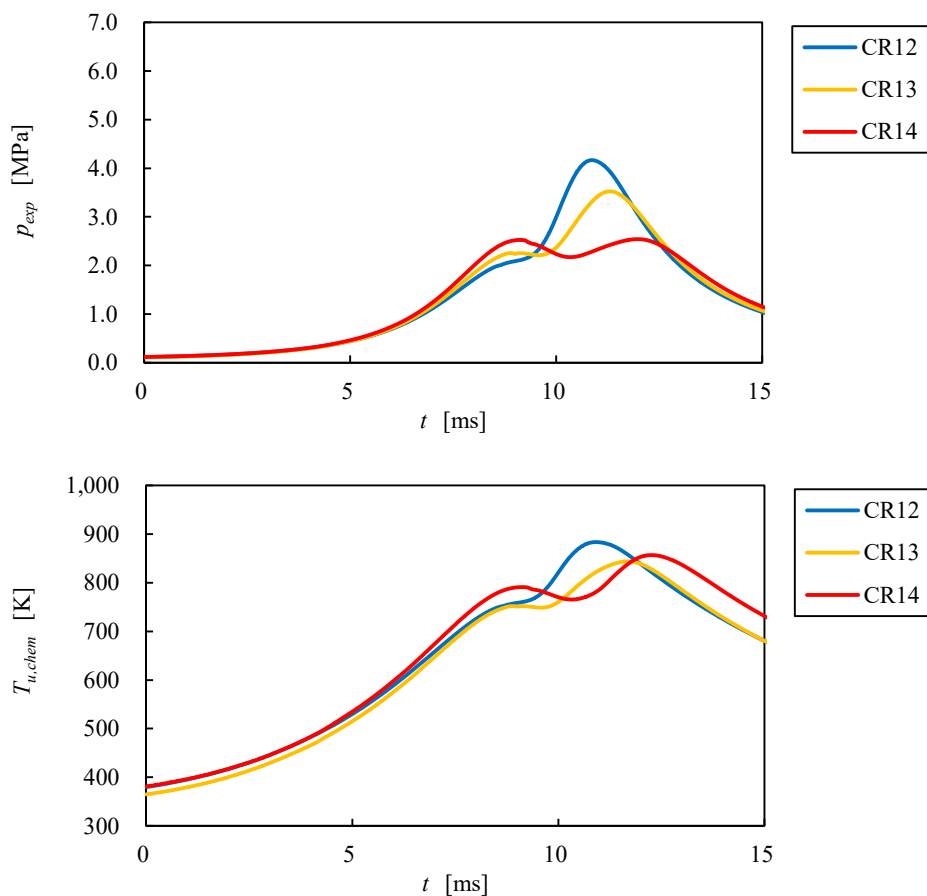


Fig.3-3 Cylinder pressure and unburned gas temperature of each compression ratio with PRF91 (Fuel 3), 2000rpm. X axis is time after IVC, unburned gas temperature is calculated by 0D detail reaction analysis.

次にこの時のホルムアルデヒド (CH_2O) と OH ラジカルの濃度を比較する (図 3-4). 圧縮比の高い圧縮比 14 の条件では, 圧縮行程中から CH_2O , OH の濃度が高くなっていることが判る. OH は 11ms 付近でピークを迎えている. CH_2O は OH よりも少し遅れて 12ms 付近で最大値をとっている. これは, ピストンが TDC まで移動する圧縮行程での筒内圧力と未燃ガス温度の上昇により, LTO が進行し, CH_2O や冷炎の兆候である OH のピークが生じたためと考えられる. 圧縮比 13 は圧縮比 12 と比較をして CH_2O の生成速度に大きな違いが見られない. 11ms 以降では燃焼開始による筒内圧力の上昇により未燃ガス温度も上昇しているが, 今回の計算条件では着火に至らなかった.

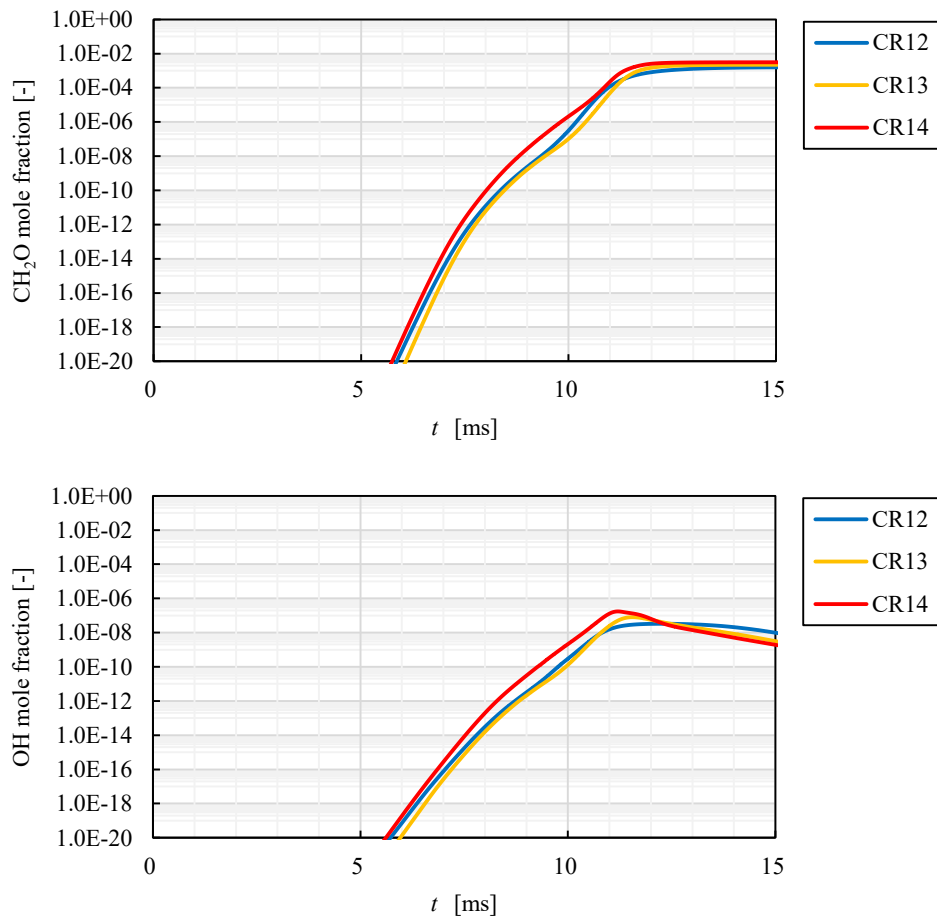


Fig.3-4 CH_2O , OH mole fraction of each compression ratio with PRF91 (Fuel3), 2000rpm. X axis is time after IVC.

図3-5には、未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) に対する CH_2O , OH の濃度を比較している。圧縮比 12, 13 で TDC 近傍での温度である 750K 以下の領域では、圧縮比によらず未燃ガス温度に対して CH_2O , OH はほぼ同じ濃度であることが確認出来た。その後の燃焼開始後の筒内圧力の上昇に伴う未燃ガス温度の昇温状態は、圧縮比の相違によって異なる値を取っていることから、異なる温度域の経過時間の影響で各種ラジカルの濃度が変化していると考えられる。

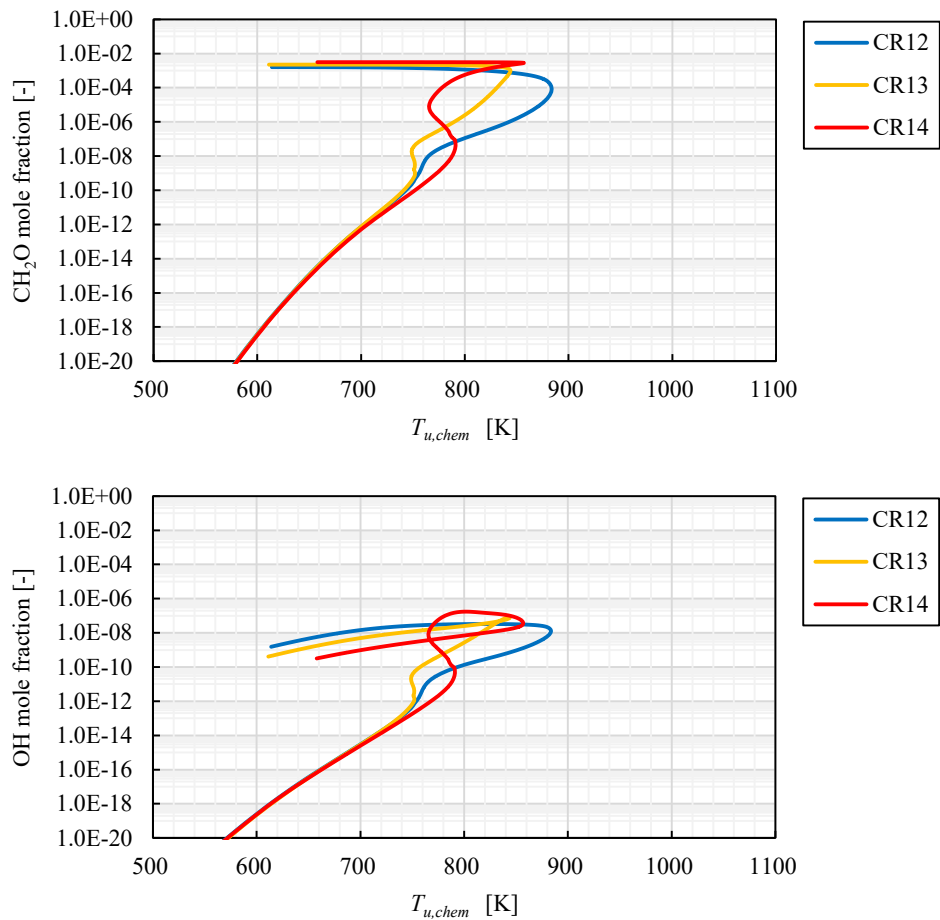


Fig.3-5 CH_2O , OH mole fraction of each compression ratio with PRF91 (Fuel3), 2000rpm. X axis is unburned gas temperature calculated by 0D detail chemical reaction analysis.

3.4.2 エンジン回転速度による混合気の化学反応への影響

図 3-6 にエンジン回転速度の異なる運転条件における筒内圧力 (p_{exp}) と未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) を示す。条件は、CR13 の Fuel3 (91IRON) で、計算は PRF91 で行った。TDC の時期はそれぞれ 1300rpm の時は 12.6ms, 2000rpm の時は 9.0ms, 4000rpm の時は 4.9ms, 5200rpm の時は 3.8ms である。 $T_{u,chem}$ は、第 2 章で式 (2-5) によって求めた未燃ガス温度 (Fig.2-16, $T_{u,ad}$) と同様の傾向で、エンジン回転速度が高いほど圧力、未燃ガス温度共に高くなっており、TDC における $T_{u,chem}$ は、1300rpm の時は 759K, 2000rpm の時は 751K, 4000rpm の時は 781K, 5200rpm の時は 813K であった。TDC 以降ではエンジン回転速度が低い条件であるほど、反応に伴う熱発生による温度上昇が起こっており、第 2 章で式 (2-5) によって求めた未燃ガス温度 (Fig.2-16, $T_{u,ad}$) よりも、詳細反応計算によって求めた未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) が高温になっている。特に、エンジン回転速度が低い条件でその影響が大きくなっており、1300rpm では未燃ガス温度の最大値は他のエンジン回転速度に対して高くなっている。

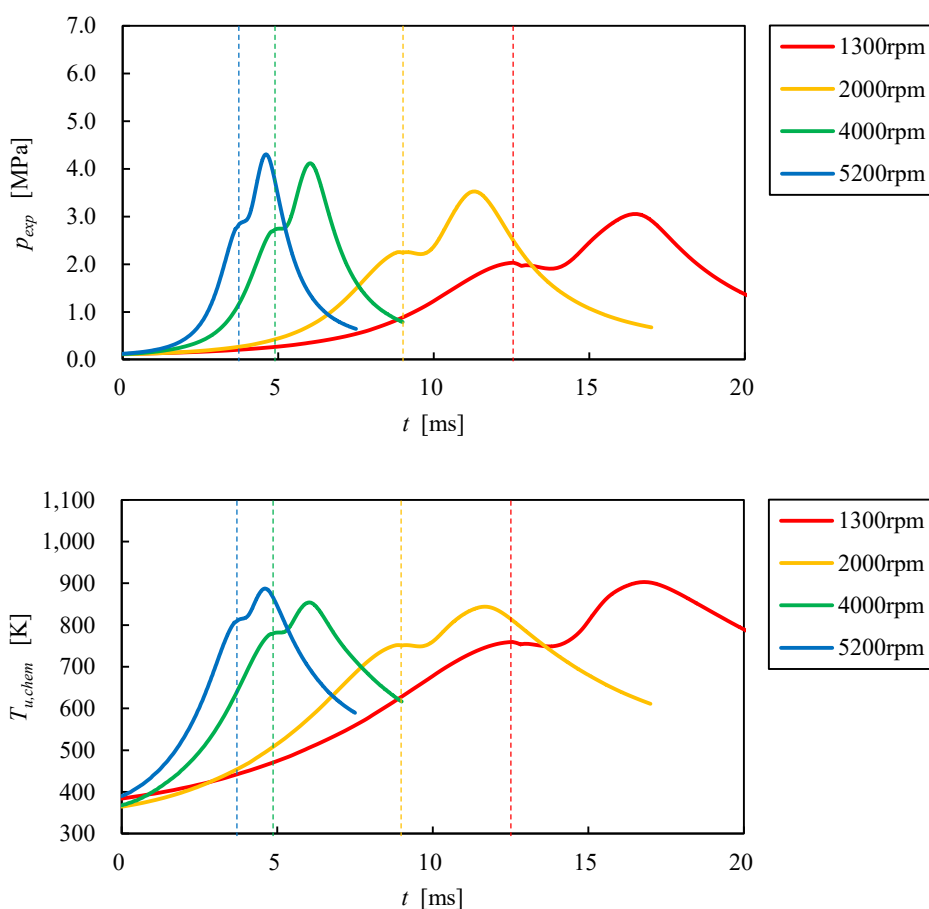


Fig.3-6 Cylinder pressure and unburned gas temperature of each engine speed with CR13, PRF91 (Fuel3). X axis is time after IVC, unburned gas temperature is calculated by 0D detail chemical reaction analysis.

次に、この時のホルムアルデヒド (CH_2O) と OH ラジカルの濃度を比較する (図 3-7)。TDC での濃度を比較すると、1300rpm の条件では、 CH_2O 、 OH の濃度が高くなっているが、他の回転速度では大きな違いがないことが判る。 CH_2O 、 OH の濃度のピークの値を比較しても、1300rpm が高い傾向を示し、5200rpm が低い傾向を示すが、2000rpm と 4000rpm はほぼ同等である。TDC 以降では燃焼開始による筒内圧力の上昇により未燃ガス温度も上昇しているが、今回の計算条件では着火に至らなかった。

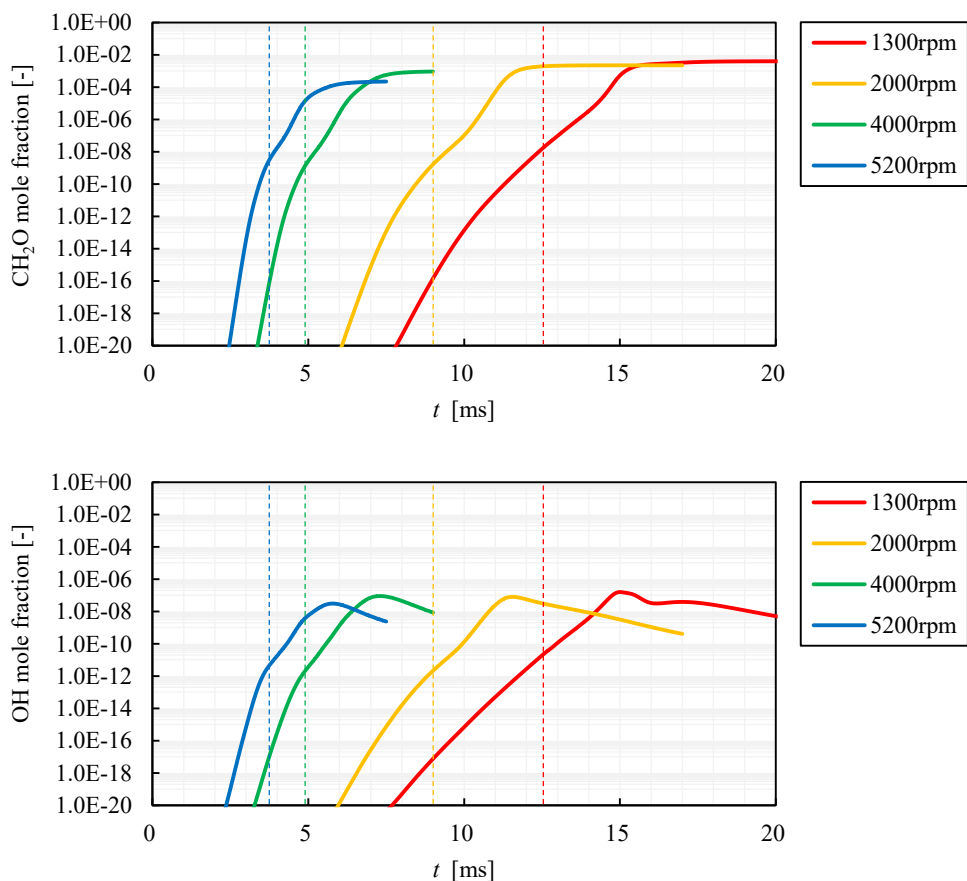


Fig.3-7 CH_2O , OH mole fraction of each engine speed with CR13, PRF91 (Fuel3). X axis is time after IVC.

図3-8には、未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) に対する CH_2O , OH の濃度を比較している。圧縮比の比較の時とは異なり、700K以下の温度域から差が見られた。同じ未燃ガス温度の条件では、エンジン回転速度が低い程 CH_2O , OH の濃度が高くなること判る。1300rpmから5200rpmと速度が4倍（反応時間が1/4）になると、同じ濃度になるために必要な温度は30K~40K程度異なっている。しかし、図3-6で示したように、TDCにおける未燃ガス温度は1300rpmで759K、5200rpmで813Kと64K異なることから、エンジン回転速度の変化によるLTOへの影響は小さいと推定される。

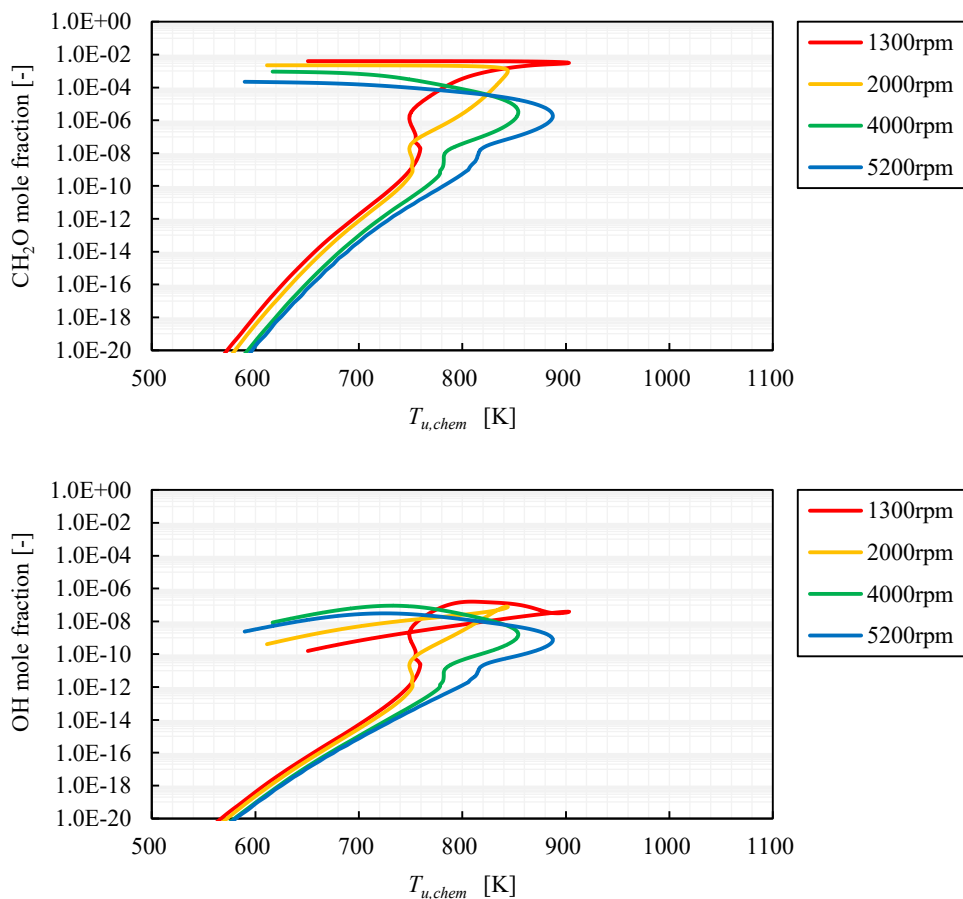


Fig.3-8 CH_2O , OH mole fraction of each engine speed with CR13, PRF91 (Fuel3). X axis is unburned gas temperature calculated by 0D detail chemical reaction analysis.

3.4.3 燃料のRONによる混合気の化学反応への影響

図3-9に前項と同様に求めた筒内圧力 (p_{exp}) と未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) を示す。条件は、CR13の2000rpmの条件で、Fuel1(75RON), Fuel2(83RON), Fuel3(91RON), Fuel4(100RON)の評価燃料の結果に対して、それぞれPRF75, PRF83, PRF91, PRF100で詳細反応計算を行っている。TDCの時期は9.0msである。未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) を比較すると、第2章で断熱圧縮の式(2-5)によって求めた未燃ガス温度 (Fig.2-16, $T_{u,ad}$) とTDC付近までは同様の傾向であるが、PRF75 (Fuel 1), PRF83 (Fuel 2)では、その後反応の影響で温度が上昇する様子が確認できた。しかし、実験で得られたノック発生時期 (t_{knock}) までに着火に至らなかった。

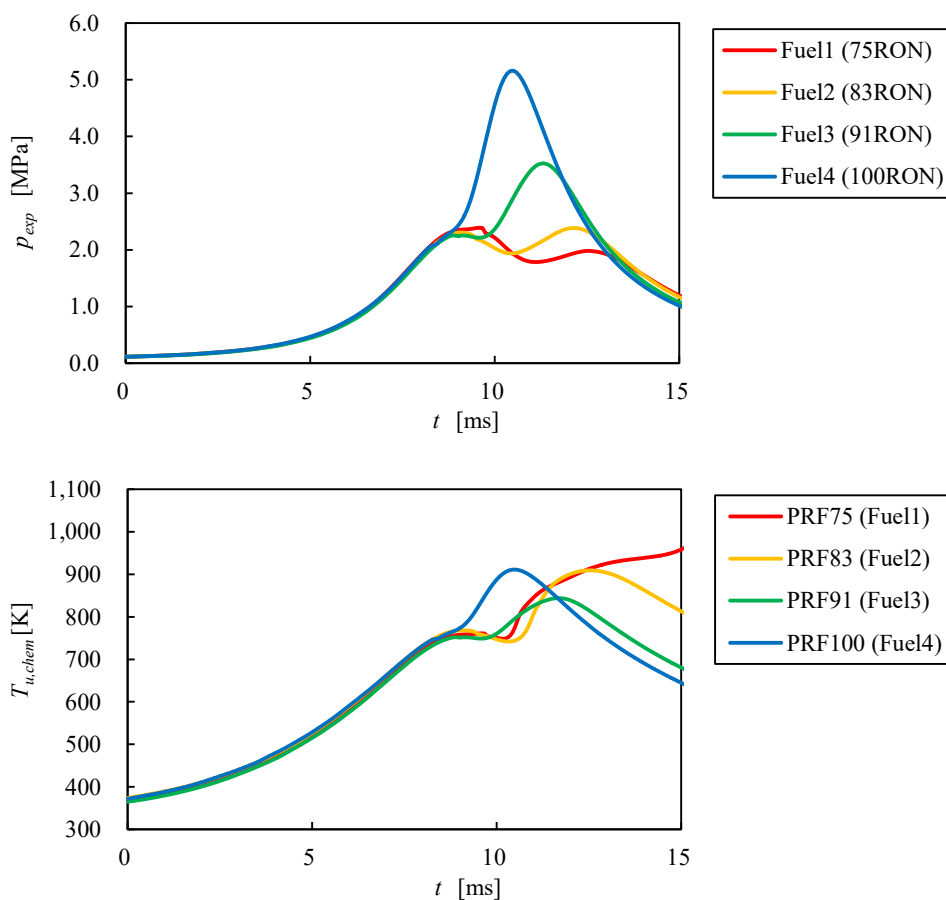


Fig.3-9 Cylinder pressure and unburned gas temperature of each fuel with CR13, 2000rpm. X axis is time after IVC, unburned gas temperature is calculated by 0D detail chemical reaction analysis.

次にこの時のホルムアルデヒド (CH_2O) と OH ラジカルの濃度を比較する (図 3-10). PRF75 (Fuel1), PRF83 (Fuel2) の計算結果は, TDC (9ms) より少し早い時間 (8ms 付近) から PRF91 (Fuel3), PRF100 (Fuel4) に対して CH_2O , OH の濃度が高くなっている. また, PRF75 (Fuel1), PRF83 (Fuel2), PRF91 (Fuel3) の結果では LTO の冷炎の影響と見られる OH のピークが生じており, RON が低いほど時期が早まる傾向がある. TDC 以降では燃焼開始による筒内圧力の上昇により未燃ガス温度も上昇しており, PRF75 (Fuel1) で 12ms 以降において OH の上昇が見られるが, 今回の計算条件では着火に至らなかった. 他の条件においては, OH は上昇することなく着火に至っていない.

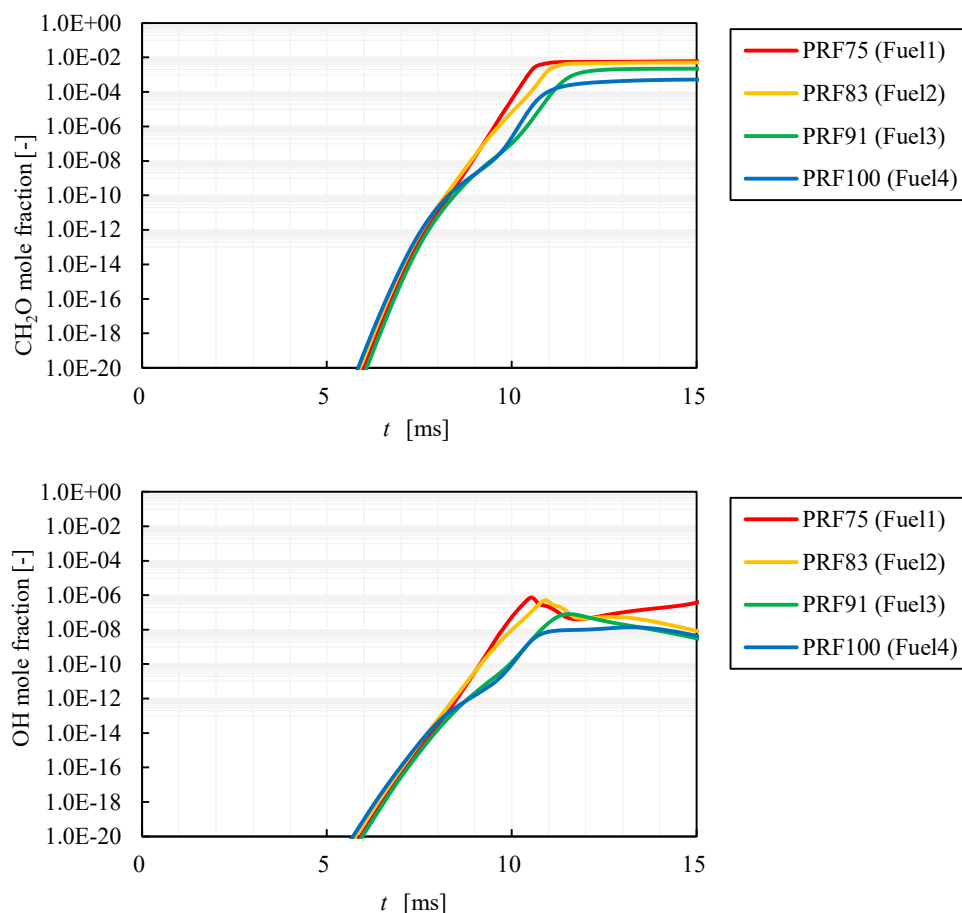


Fig.3-10 CH_2O , OH mole fraction of each fuel with CR13, 2000rpm. X axis is time after IVC.

図 3-11 には, 未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) に対する CH_2O , OH の濃度を比較している. 740K 以下では RON によらず未燃ガス温度に対して CH_2O , OH はほぼ同じ濃度である. 一方, PRF75 (Fuel1), PRF83 (Fuel2) の計算結果は, 740K から 760K の範囲において CH_2O , OH の濃度が大きく上昇する傾向が見られる. この温度域は, TDC (9ms) より少し早い時期 (8ms 付近) に相当している. この後で, この混合気は LTO による OH のピークを経て 10ms 付近で温度が急激に上昇している. 燃料によって CH_2O , OH の上昇に差が生じた理由としては, LTO の温度域で生成される化学種の濃度が RON によって異なる傾向があったためと考えられる. TDC 以降では燃焼開始による筒内圧力の上昇により未燃ガス温度も上昇しているが, PRF75 (Fuel1) で 12ms 以降に OH の上昇が見られるが, その他の条件では OH は減少しており, 今回の計算条件では着火に至らなかった.

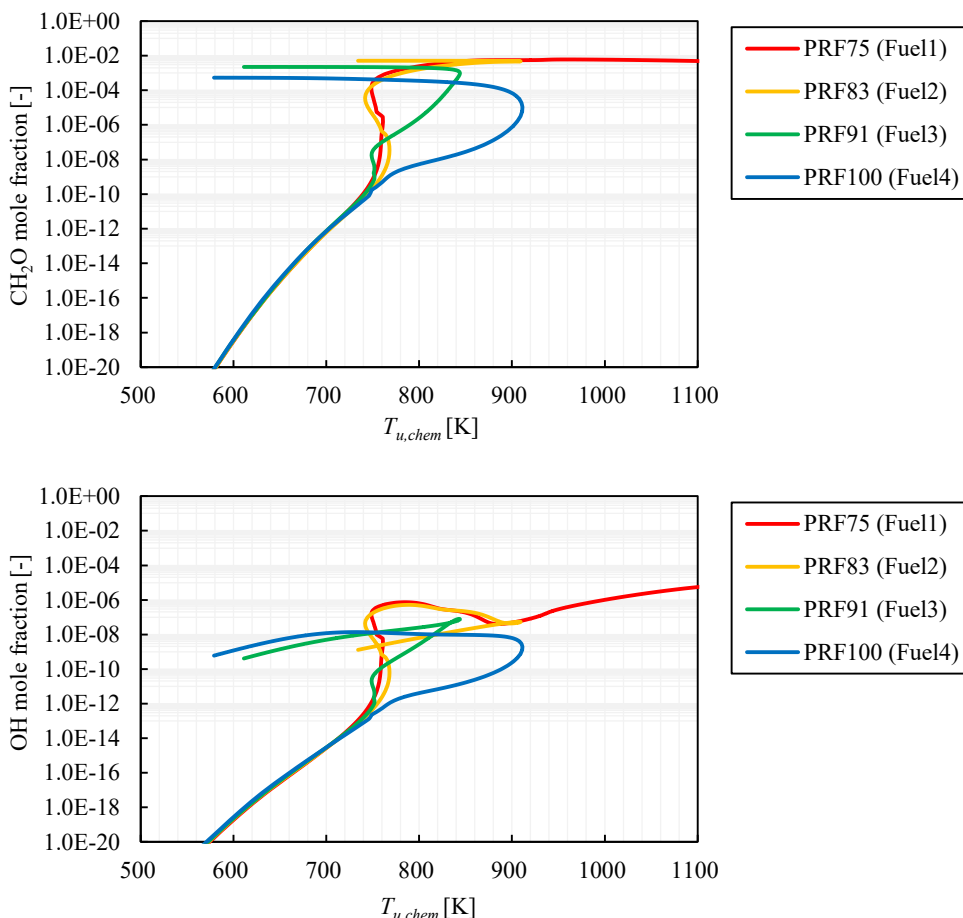


Fig.3-11 CH₂O, OH mole fraction of each fuel with CR13, 2000rpm. X axis is unburned gas temperature calculated by 0D detail chemical reaction analysis.

以上より、圧縮比、エンジン回転速度、RON の変化により素反応が受ける影響について以下の知見を得た。

圧縮比 14 では、TDC までのピストンによる圧縮中の筒内圧力と未燃ガス温度の上昇により、LTO が進行し、CH₂O や冷炎の兆候である OH のピークが発生している。一方で、圧縮比 13 は圧縮比 12 と比較をすると CH₂O の生成速度に大きな違いが見られなかった。

エンジン回転速度の異なる条件を、未燃ガス温度に対する CH₂O, OH の濃度で比較をすると、エンジン回転速度が低い程 CH₂O, OH の濃度が高くなるのが判る。1300rpm から 5200rpm と速度が 4 倍（反応時間が 1/4）になると、同じ濃度になるために必要な温度は 30K~40K 程度異なっている。この傾向から、LTO の化学反応の進行には、筒内圧力や未燃ガス温度に加えて温度の時間変化率、すなわち反応時間も影響していることが判る。

RON の異なる条件を比較すると、PRF75 (Fuel1), PRF83 (Fuel2) の計算結果は、TDC (9ms) より少し早い時期 (8ms 付近) から PRF91 (Fuel3), PRF100 (Fuel4) に対して CH₂O, OH の濃度が高くなっている。これは、740K から 760K の範囲に対応していることから、LTO の温度域で生成される化学種の濃度が RON によって異なる傾向があるためと考えられる。

3.5 ノッキングの解析結果と考察 (2) 初期温度 $T_{i, chem}$ での検討

ノッキングの発生，すなわち混合気の自己着火のタイミングを考察するためには，LTO の後に起こる反応である熱着火準備期間～着火にかかる時間についても着目する必要があるが，3.4 節の検討では混合気が着火に至らなかったことから考察することが出来なかった．今回の素反応モデルの計算で着火に至らなかった要因には，3.2.1 項で述べたように，3.4 節で検討に用いた素反応モデルは，空間的な状態の変化やサイクル間の変動に対しては，0 次元に簡略化していることが挙げられる．そこで，本節では，空間的な温度のばらつきに着目をして，0 次元計算の境界条件の中で，混合気の初期温度の設定に着目し検討する．

エンジン開発においては，部品の信頼性を確保するために燃焼室内の各部位の温度を計測する．今回のエンジンでも燃焼室ヘッドの温度を定常的に計測しており，その結果を図 3-12 に比較すると，全ての点において計算から求めた $T_{i,st}$ に対して高い温度を示すことが判った．また， $T_{i,st}$ との違いの特徴として，エンジン回転速度に比例して燃焼室壁の温度が上がっている点がある．これは，エンジン回転速度が高いほど，発熱量が増すことから部品が冷えにくくなるためと考えられる．図 3-12 の温度は，平均計測の温度であり，吸気行程などの瞬時の温度は計測出来ていない．また，燃焼室の壁よりも高温の部位（例えば，排気バルブや点火プラグ）が存在することから，混合気が吸気行程で局所的に受熱している量を定量的に算出することは，今回の検討では難しい．

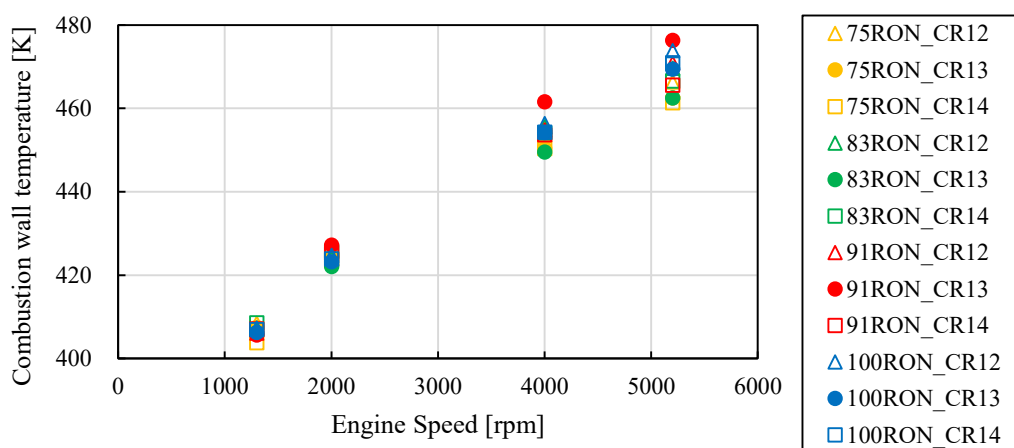


Fig.3-12 Example of combustion wall temperature of each experimental condition.

そこで，3.5 節では，エンジンの圧縮比，回転速度，燃料の RON がノッキングの発生に与える影響として，特に熱着火準備期間～着火の反応を比較するために，初期温度を変更しながら詳細反応計算を行い，実験においてノッキングが発生した時期 ($t_{knock,exp}$) と，詳細反応計算での混合気の着火時期 ($t_{ig,chem}$) が等しくなる時の初期温度 ($T_{i,chem}$) を算出している．詳細反応計算での混合気の着火時期 ($t_{ig,chem}$) は混合気の温度 ($T_{u,chem}$) が 1500K に到達する時期とした．算出した $T_{i,chem}$ の結果を，図 3-13 に示す．同じ燃料でのエンジン回転速度の違いを比較すると，エンジン回転速度が高い条件の方が，低い条件に比べて 20K～30K 程度高い $T_{i,chem}$ をとることが判る．圧縮比の違いについては，圧縮比が高いほど $T_{i,chem}$ が上がっていて，PRF91(Fuel3)の 2000rpm では，CR14 が CR12 に対して 20K 高くなっている．また， $T_{i,st}$ (図 2-10) との比較をすると， $T_{i,chem}$ は $T_{i,st}$ に対して，Fuel 4 (100RON) で 50K 程度高く，RON の低い燃料ほどその差が広がる傾向があり，Fuel 1 (75RON) , Fuel 2 (83RON) で 100K 程度高い値となった．この燃料による差については，モデルとして用いている PRF と評価に使用した燃料との間に，着火特性や熱力学的特性の違いがあることが要因の一つと考えられる．実験に用いた燃料に近い特性を持つ計算用の模擬燃料（サロゲート燃料）を選択することも，詳細反応計算の準備の中で非常に重要であることが判る．

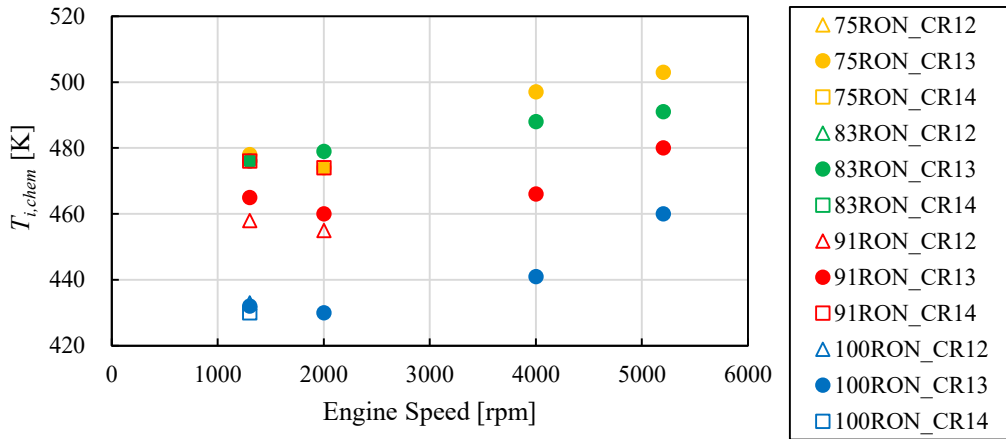


Fig.3-13 Initial temperature estimated by CHEMKIN ($T_{i,chem}$).

3.5.1 高圧縮比による混合気の化学反応への影響

初めに、圧縮比の影響について検討した。図 3-14 に $T_{i,chem}$ を用いた 0 次元詳細反応計算により得られた未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) を示す。条件は、3.4.1 と同じ 2000rpm の Fuel 3 (91RON) であり、計算は PRF91 で行った。 $T_{u,chem}$ は、第 2 章で式 (2-5) によって求めている。TDC での温度は CR12, 13, 14 それぞれ 888K, 919K, 956K と圧縮比が高いほど高くなっている。

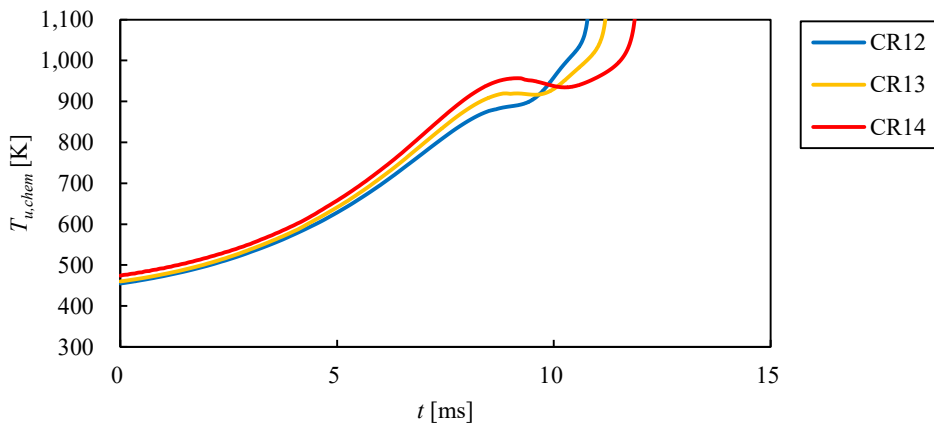


Fig.3-14 Unburned gas temperature of each compression ratio with Fuel 3 (91RON), 2000rpm. X axis is time after IVC, unburned gas temperature is calculated by 0D detail chemical reaction analysis with $T_{i,chem}$.

図 3-15 に低温酸化反応 (LTO) から着火準備期間、そして着火に至るまでの化学反応生成物の変化を比較するために、LTO により生成されるホルムアルデヒド (CH_2O) と過酸化水素 (H_2O_2)、および $\text{H}_2\text{-O}_2$ ループ、いわゆる熱着火準備期間で生成される一酸化炭素 (CO)、および熱着火中に生成されるヒドロキシラジカル (OH) の生成濃度を比較している。圧縮開始後、4 つの成分が指数関数的に増加している時期を LTO、その後 CH_2O や OH に上に凸の変曲点がみられるが、それ以降を着火準備期間、 H_2O_2 、 CH_2O の最大値時期～ CO 、 OH の最大値時期を熱着火と定義している。

着火準備期間～着火にかかる時間に関しては、圧縮比が低いほど短く、燃焼による筒内圧力と未燃ガス温度の上昇が混合気の化学反応に影響していることが確認された。一方で、初期温度変更前に比べて、TDC における

CH₂O の濃度の傾向は異なっており、圧縮比 14 と圧縮比 12 の TDC (9ms) における CH₂O の濃度に違いは約 2 桁まで広がっていた。TDC における LTO の反応が 3.4 節での検討結果と異なる傾向を示す要因の一つに、詳細反応計算での解析に、混合気に含まれる残留ガス (既燃焼ガス) の影響を考慮していないことが挙げられる。式

(2-3) で算出した燃焼室内の残留ガス量を比較すると、CR12 では 3.94mol%, CR13 では 3.52mol%, CR14 では 3.16mol% と高圧縮比ほど少なく、着火しやすい混合気であると推定される。残留ガス量の考慮については、今後の検討課題である。

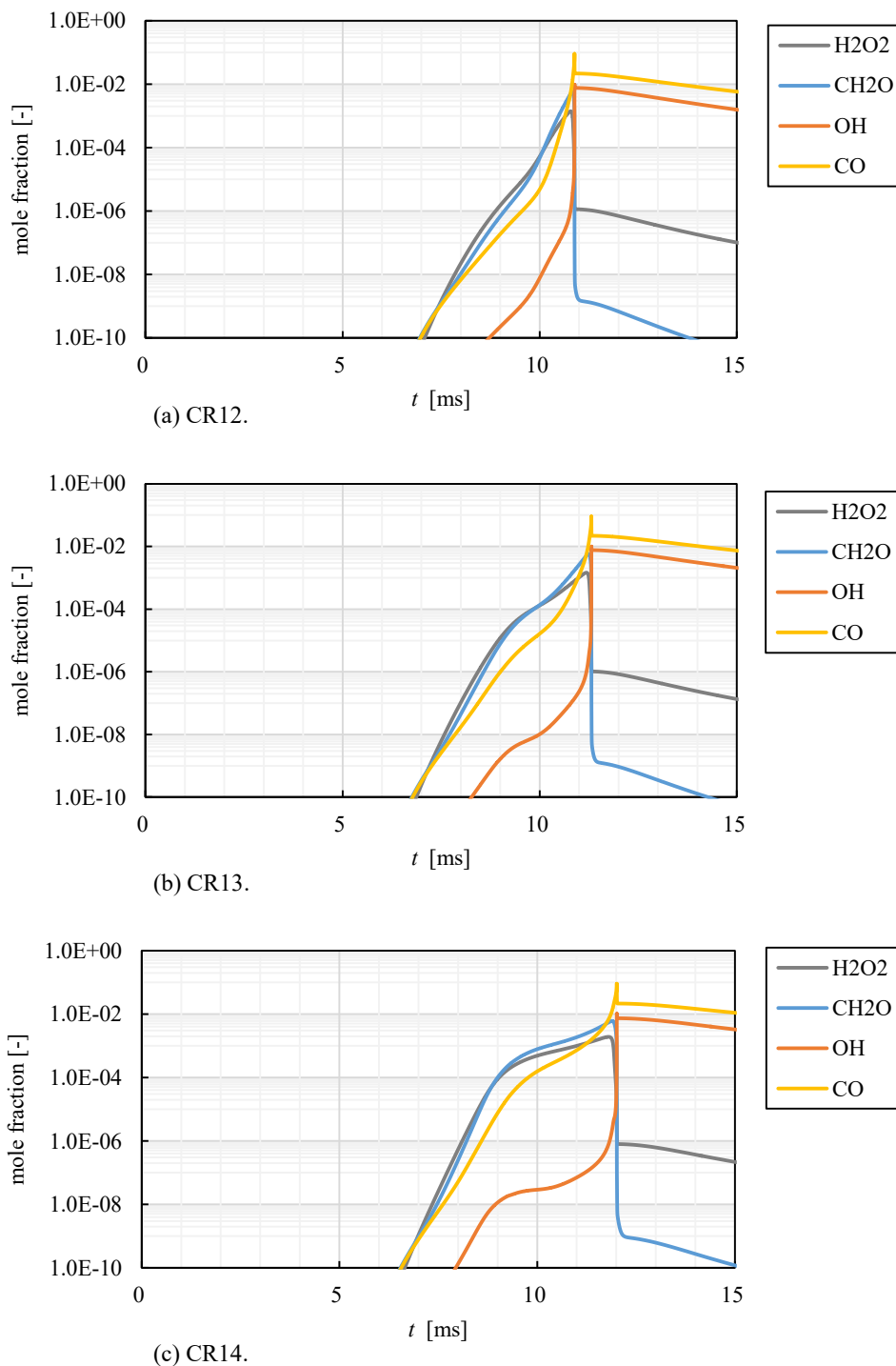


Fig.3-15 Mole fraction of H₂O₂, CH₂O, OH and CO of each compression ratio with PRF91 (Fuel3) CR13, 2000rpm. X axis is time after IVC.

3.5.2 エンジン回転速度による混合気の化学反応への影響

次に、エンジン回転速度の影響について検討した。図3-16に $T_{i,chem}$ を用いて0次元詳細反応計算により得られた未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) を示す。条件は、3.4.2と同じCR13のFuel 3 (91RON)で、計算はPRF91で行った。TDCの時期を示すと、1300rpmは12.6ms、2000rpmは9ms、4000rpmは4.9ms、5200rpmは3.8msであり、この時の温度はそれぞれ898K、919K、958K、971Kとエンジン回転速度があがるほど高くなっている。

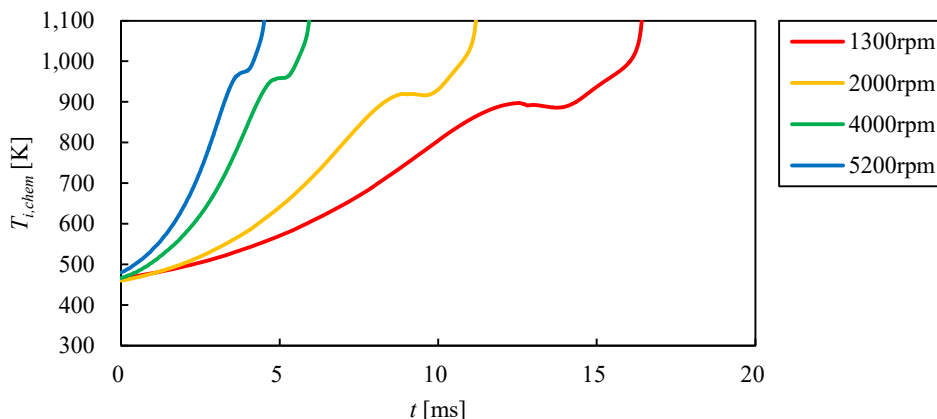


Fig.3-16 Unburned gas temperature of each engine speed with CR13, Fuel 3 (91RON). X axis is time after IVC, unburned gas temperature is calculated by 0D detail chemical reaction analysis with $T_{i,chem}$.

図3-17に着火に至るまでの化学反応の生成物の変化を比較している。前述のとおり、TDCにおける圧力と温度は、エンジン回転速度が高くなるほど高くなる傾向があるが、TDCにおける CH_2O の濃度を比較すると、回転速度による違いは小さい。また、1300rpm、2000rpm、4000rpmの条件では、TDCの後に CH_2O や H_2O_2 の濃度上昇の変曲点を迎えている。CR13, Fuel 3 (91RON)における燃焼重心の変化の感度は0.5CA/1000rpmと小さいことから、TDC付近の化学反応の傾向に回転速度の影響が小さいと考える。同様に、着火準備期間～着火にかかる時間に関しては、回転速度に反比例をして短くなっていることから、燃焼による筒内圧力と未燃ガス温度の上昇が混合気の化学反応に影響していることが確認できる。

図3-18に3.4節で特徴が見られた、未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) に対する CH_2O , OH の濃度を比較している。3.4節の結果と同様に、同じ未燃ガス温度の条件では、エンジン回転速度が低い程 CH_2O , OH の濃度が高くなっており、1300rpmから5200rpmと速度が4倍（反応時間が1/4）になる時に同じ濃度到達する温度の差は30K～40K程度である。しかし、図3-16で示したように、TDCにおける未燃ガス温度は1300rpmで898K、5200rpmで971Kと73K異なることから、エンジン回転速度の変化によるLTOへの影響が小さくなっていると推定される。

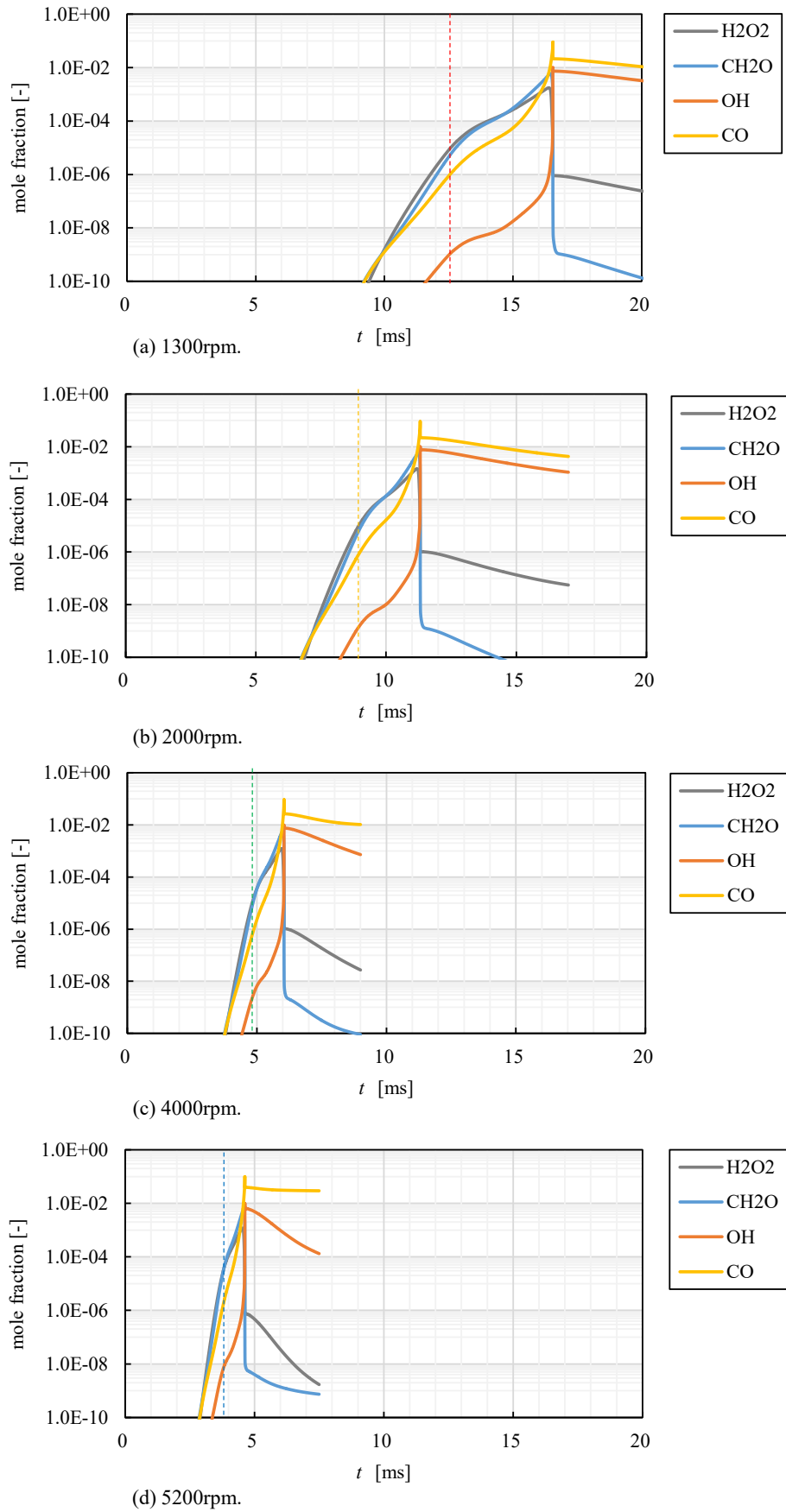


Fig.3-17 Mole fraction of H_2O_2 , CH_2O , OH and CO of each engine speed with CR13, Fuel 3 (91RON). X axis is time after IVC.

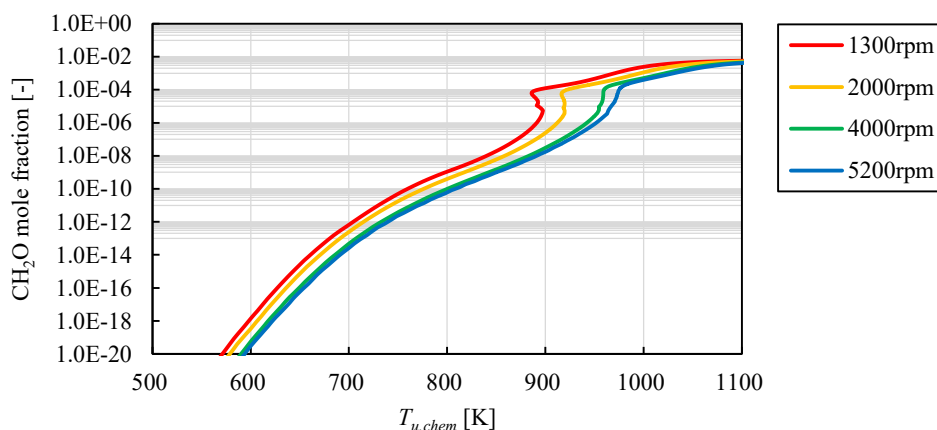


Fig.3-18 CH₂O mole fraction of each engine speed with CR13, Fuel 3 (91RON). X axis is unburned gas temperature calculated by 0D detail chemical reaction analysis with $T_{i,chem}$.

3.5.3 燃料のRONによる混合気の化学反応への影響

最後に、燃料のRONの影響について検討した。図3-18に $T_{i,chem}$ を用いて0次元詳細反応計算により得られた未燃ガス温度($T_{u,chem}$)を示す。条件は、3.4.3と同じCR13の2000rpmの条件で、計算はFuel1(75RON), Fuel2(83RON), Fuel3(91RON), Fuel4(100RON)の評価燃料の結果に対して、それぞれPRF75, PRF83, PRF91, PRF100で行った。TDCでの温度はPRF75, 83, 91, 100 (Fuel1, 2, 3, 4)それぞれ950K, 952K, 919K, 877KとRONによって異なっている。

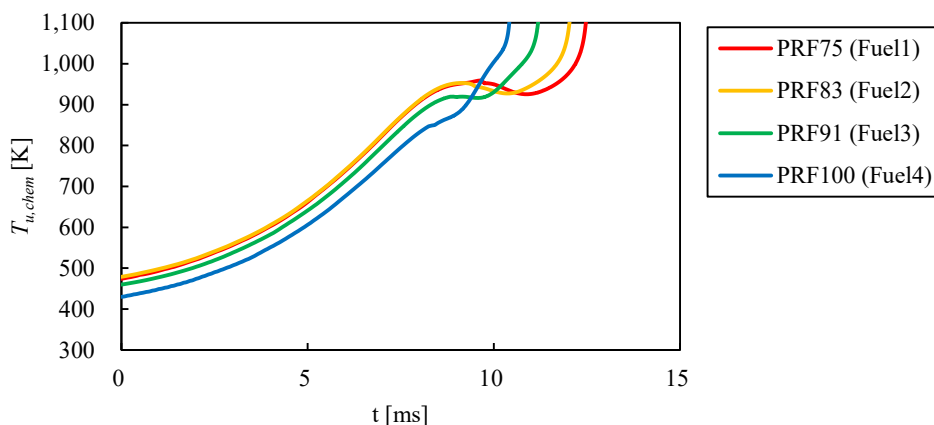


Fig.3-18 Unburned gas temperature of each fuel with CR13, 2000rpm. X axis is time after IVC, unburned gas temperature is calculated by 0D detail chemical reaction analysis with $T_{i,chem}$.

図3-19に着火に至るまでの化学反応生成物の変化を比較している。着火準備期間～着火にかかる時間に関しては、RONが低いほど長く、燃焼による筒内圧力と未燃ガス温度の上昇の違いが影響していると考えられる。LTOに関しては、初期温度変更前に比べてRONの影響が大きくなっており、PRF 75 (Fuel 1)とPRF 100 (Fuel 4)のTDCにおけるCH₂Oの濃度は約2桁以上違っていた。3.5節の冒頭で述べたように、計算に用いた燃料が初期温度の違い影響していることも一つの要因と考えられる。

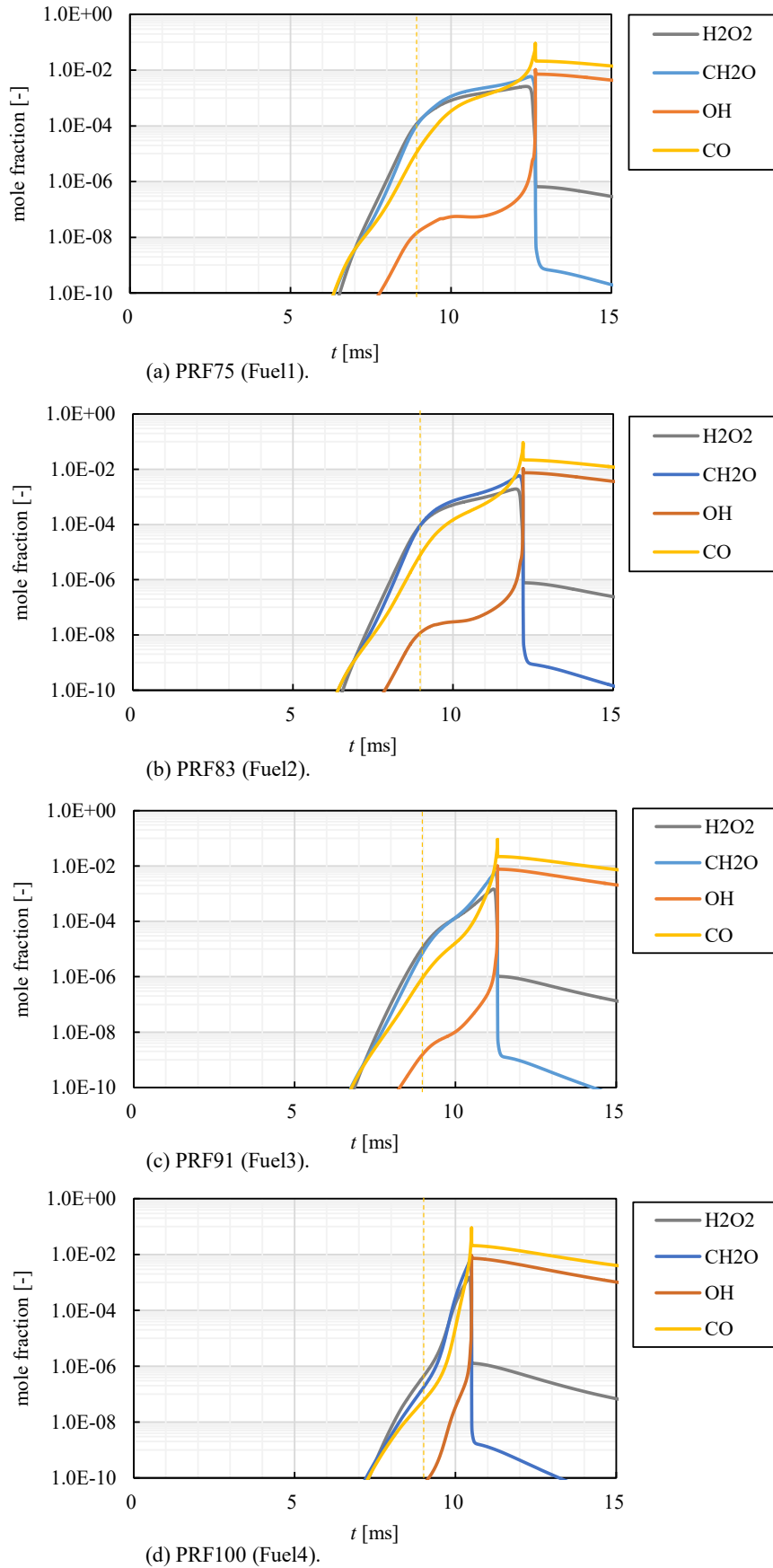


Fig.3-19 Mole fraction of H₂O₂, CH₂O, OH and CO of each fuel with CR13, 2000rpm. X axis is time after IVC.

3.6 結論

以上より、圧縮比、エンジン回転速度、RONの変化により素反応が受ける影響について以下の知見を得た。

圧縮比の変化による影響は、圧縮比 14 において顕著な差が見られたが、圧縮比 12, 13 の間には大きな違いが見られなかった。具体的には、圧縮比 14 では、TDC までの圧縮行程における筒内圧力と未燃ガス温度の上昇により、LTO が進行し、 CH_2O や冷炎の兆候である OH のピークが発生している。一方で、圧縮比 13 は圧縮比 12 と比較をして CH_2O の生成速度に大きな違いが見られなかった。

エンジン回転速度の変化による影響を見るために TDC での CH_2O の濃度を比較すると、1300rpm の条件では、 CH_2O , OH の濃度が高くなっているが、他の回転速度では大きな違いが確認できなかった。回転速度の違いは、燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度の上昇速度の違いを意味している。その差を考察するために、未燃ガス温度に対する CH_2O , OH の濃度で比較をしたところ、エンジン回転速度が低い程 CH_2O , OH の濃度が高い傾向が見られ、1300rpm から 5200rpm と回転速度が 4 倍（反応時間が 1/4）になる状態では、同じ濃度になるために必要な温度の差は 30K から 40K 程度と確認出来た。TDC における未燃ガス温度の差は 1300rpm から 5200rpm で 64K であることから、エンジン回転速度の変化による LTO 影響は小さいと考えられる。

RON の変化による影響は、TDC 近傍までの 740K から 760K の領域での CH_2O , OH の濃度の上昇に顕著に現れており、RON の低い RF75 (Fuel1), PRF83 (Fuel2) では、RON の高い PRF91 (Fuel3), PRF100 (Fuel4) に対して LTO が進んでいることが確認出来た。

一方で、使用した素反応モデルでの検討では、詳細反応計算の結果を用いても混合気が着火に至らなかった。これは、燃焼室内の空間的な状態の変化やサイクル間の変動分を考慮出来ていないなどの理由と考えられる。そこで、素反応モデルで使用した初期温度について検討を加え、熱着火準備期間から着火の反応を比較することを試みた。方法としては、初期温度を変更しながら詳細反応計算を行い、実験においてノッキングが発生した時期 ($t_{knock,exp}$) と、詳細反応計算での混合気の着火時期 ($t_{ig,chem}$) が等しくなるときの初期温度 ($T_{i,chem}$) を算出してその時の素反応を比較した。その結果、以下の知見を得た。

圧縮比の変化に対応させるために算出した初期温度 ($T_{i,chem}$) は、圧縮比が高いほど高くなっていた。着火準備期間から着火に至る時間に関しては、圧縮比が高いほど長く、燃焼による筒内圧力と未燃ガス温度の上昇が混合気の化学反応に影響していることが確認された。一方で、初期温度変更前に比べて、TDC における CH_2O の濃度の傾向は異なっており、圧縮比 14 と圧縮比 12 の TDC における CH_2O の濃度に違いは約 2 桁まで広がっていた。TDC における LTO の反応が、初期温度変更前の検討結果と異なる傾向を示す要因のひとつに、詳細反応計算での解析では、混合気に含まれる残留ガス（既燃焼ガス）の影響を考慮していないことが挙げられる。残留ガス量の影響については、今後の検討課題である。

エンジン回転速度の変化による影響は、エンジン回転速度が速いほど、算出した初期温度 ($T_{i,chem}$) が高くなる傾向があった。着火準備期間から着火に至る時間は、燃焼による筒内圧力と未燃ガス温度の上昇に依存しており、回転速度に反比例をして短くなっていた。LTO の傾向についても、初期温度変更前と同様に回転速度の影響は小さかった。

RON の変化に対して、求めた初期温度 ($T_{i,chem}$) は RON が低いほど高くなっていた。着火準備期間から着火に至る時間に関しては、RON が低いほど長く、燃焼による筒内圧力と未燃ガス温度の上昇の違いが影響していると考えられる。LTO に関しては、初期温度変更前に比べて RON の影響が大きくなっており、PRF 75 (Fuel 1) と PRF 100 (Fuel 4) の TDC における CH_2O の濃度は約 2 桁以上違っており初期温度の違いが影響していることが推定される。また、燃料による初期温度 ($T_{i,chem}$) の差の要因のひとつに、モデルとして用いている PRF と評価に使用した燃料との間に、着火特性や熱力学的特性の違いがあることが要因のひとつと考えられる。実験に用いた燃料に近い特性を持つ計算用の模擬燃料（サロゲート燃料）を選択することも、詳細反応計算の準備の中で非常に重要であると考えられる。

第4章 実用エンジンの異常燃焼に対するノッキング指標についての検討

4.1 はじめに

第3章までの検討で、実験結果に見られたノッキングの発生時期に対しての各パラメータの影響が、どのような因子によって起こるかについて素反応論的には、詳細反応計算を用いて解釈することが可能になってきたと考えられる。詳細反応計算の結果からは、燃焼室筒内の混合気は、運転条件によってピストンによる圧縮の途中から低温酸化反応（LTO）を起こしていることが示唆されており、燃焼室筒内の圧力や未燃ガス温度の変化がLTOの反応速度を変化させて、ノッキングの起こりやすさに影響を与えることが考察された。また、燃料のRONを変更した実験結果の解析については、RONが等しい標準燃料（PRF）を用いて計算を行ったが、定量的な解釈は難しかった。このことから、詳細反応計算に用いる模擬燃料（サロゲート燃料）の選定も重要であることが判った。

本研究で取り扱う課題の一つとして、詳細反応計算を用いることでノッキングの指標を素反応論から明確にすることがある。これは、従来のエンジン開発では、市販ガソリンのRONをノッキングの指標として扱うことで対応出来ていたが、エンジンの熱効率を追及した高圧縮比エンジンや過給ダウンサイズエンジンが市販化されてきたことで、ノッキングの指標がRONだけでは表せない領域が出てきたり、プレイグニッションのような新たな異常燃焼が起こりやすくなったりしてきているためである。また、燃料側についてもバイオ燃料やシェールオイルの普及により、将来的に、石油由来の炭化水素とはオクタン価の特性が異なるものが普及する可能性が出てきており、素反応論の理解は、こうした燃料の多様化に対応できるものであることが期待される。そのためには、詳細反応計算での解析に用いるサロゲート燃料の選定が、より重要性を増してくると考えられる。

そこで本章では、標準燃料（PRF）とサロゲート燃料を用いて、実験データの詳細反応計算を実施し、着火遅れ時間やエンジン運転条件における素反応の違いを考察する。また、従来のノッキングの指標であるRONやMONの計測条件についても同様の検討を行うことで、RONとMONが示す素反応の違いを明確にし、近年の過給ダウンサイズエンジン等と言われている同じRONならMONが低い燃料、即ち、センシティブティ（ $S=RON-MON$ ）の大きい燃料がノッキング抑制では優れているという事象に対して素反応論からの考察を行なう。

また、標準燃料（PRF）とサロゲート燃料の着火遅れ時間 $p-T$ マップを作成して比較を行なうことで、素反応の違いと従来の指標との対応を模式化し、エンジン運転条件との対応を容易に行なえる表現について検討を行う。この手法により、手に入りにくい燃料であっても、実験や詳細反応計算のような煩雑な検証手順を簡素化したとしても影響を明確にできたり、プレイグニッションなどの異常燃焼に対して、危険を伴うエンジン実験の回数を減らしたとしても燃料の影響を推定したりすることが可能となり、従来の燃料の指標より広範囲なエンジン諸元や運転条件に対応した推定が可能になると考える。

4.2 標準燃料 (PRF) と市販ガソリンを模擬したサロゲート燃料の着火遅れ時間 $p-T$ マップの比較

4.2.1 市販ガソリンを模擬したサロゲート燃料の選定

市販ガソリンを模擬したサロゲート燃料やその詳細反応機構の開発は、第3章までで検討したようなノッキングの素反応論的な解析への利用だけではなく、ガソリンエンジンの燃焼全体を検討する3次元CFDモデルの開発に対しても重要なモデルであることから、研究開発が進められている。

アメリカでは、LLNLを中心に、1980年代から詳細反応機構の構築を継続している。Mehlらは、イソオクタン、トルエン、1-ヘキセンの混合燃料について、それぞれのクロスリアクションを考慮したガソリンのサロゲート燃料の詳細反応モデルを提案した。このモデルは、アメリカの市販ガソリン（レギュラ）RD387の着火遅れ時間の特性を模擬する形で、サロゲート燃料に使用する分子とその混合比が検討されている。（Mehl, et. al., 2011, Gauthier, et. al., 2004, Kukkadapu, et. al., 2012, 2015）。

また、アメリカでは、将来エンジンの熱効率向上技術として、Advanced Compression Ignition (ACI) と呼ばれる素反応制御による圧縮着火燃焼（kinetically-controlled and compression-ignition combustion）の研究を行っており、それらのエンジン用の燃料（Fuels for Advanced Combustion Engines: FACE）として、パラフィン系のガソリン（FACE-A, C）や、それと同じ成分比・オクタン価のサロゲート燃料（PRF84, FACE-A surrogate, FACE-C surrogate）の着火特性と詳細反応機構の開発が進められている（Sarathy, et. al., 2015）。

日本国内の市販ガソリンを模擬したサロゲート燃料の開発は、橋本らによって試みられた。このサロゲート燃料は、HCCI（Homogeneous Charge Compression Ignition）エンジンでの着火特性の模擬を想定しており、イソオクタン、ノルマルヘプタン、トルエン、イソオクテン、メチルシクロヘキサン、エタノール、ETBEで構成されている。イソオクタンとノルマルヘプタンのみで構成されるPRFとは異なり、市販ガソリンの成分であるアロマ（トルエン）やオレフィン（イソオクテン）、ナフテン（メチルシクロヘキサン）、含酸素燃料（エタノール、ETBE）が含まれている。このサロゲート燃料に対応する詳細反応機構の開発においては、イソオクテン、メチルシクロヘキサンの詳細反応機構は、三好が開発したKUCRS（Knowledge-basing Utilities for Complex Reaction Systems, (Miyoshi, 2005, 2011)）の自動生成機能を用いて作成されている。他の分子については、既存の詳細反応機構の一部修正を加えた後に、Directed Relation Graph (DRG) 法を用いて、803化学種、3222反応式に簡略化を行っている。着火特性の検証は、急速圧縮装置（Rapid Compression Machine: RCM）で計測した着火遅れ時間でなわれ、過去の詳細反応機構からの改善が確認された（Hashimoto, et. al., 2013）。

国内の最新の研究では、SIP「革新的燃焼技術」のガソリン燃焼チームにおいて、国内の市販レギュラガソリンと市販ハイオクガソリンを模擬した5成分サロゲート燃料（S5R:レギュラガソリン相当、S5H:ハイオクガソリン相当）が提案されている（SIP Innovative Combustion Technology, Gasoline Combustion Team, 2017）。表4-1にS5R, S5HのRONとMON、構成成分であるイソオクタン、ノルマルヘプタン、メチルシクロヘキサン、ジイソブチレン、トルエンの体積割合とA/Fや発熱量などのガソリンとしての性状を示している。

また、このサロゲート燃料は、同チームにおいて調整・準備された市販ガソリンである SIP 共通ガソリン（レギュラ・ハイオク）を模擬している。この SIP 共通ガソリンの性状を表 4-2 に示す。PRF の成分であったパラフィンに加え、アロマやオレフィンが含まれている。また、国内の市販ガソリンの特性として、含酸素成分（主に ETBE）が含まれている。レギュラの RON は 91, MON は 82.6 であり, S5R の RON の 90.8, MON の 82.9 とほぼ等しい。ハイオクについても, RON が 100, MON が 87.5 であり, S5H の RON の 100.2, MON の 88.8 とほぼ等しい値をとっている。また、その他の性状についてもサロゲート燃料は共通ガソリンに近い値をとっていることが特徴である。

Table 4-1. Composition and properties of SIP common gasoline surrogate mixtures

	S5R	S5H
RON	90.8	100.2
MON	82.9	88.8
isooctane(C ₈ H ₁₈) ^{a)} [vol.%]	29.00	31.00
n-heptane(C ₇ H ₁₆) [vol.%]	21.50	10.00
methylcyclohexane(C ₇ H ₁₄) [vol.%]	5.00	5.00
diisobutylene(C ₈ H ₁₆) ^{b)} [vol.%]	14.00	14.00
toluene(C ₇ H ₈) [vol.%]	30.50	40.00
H/C	1.77	1.63
O/C	0.00	0.00
A/F	14.40	14.19
Heat Value [MJ/kg]	42.49	42.43
Density [g/cm ³]	0.7545	0.7721

a) 2,2,4-trimethylpentane

b) Approximately 4:1 mixture of 2,4,4-trimethyl-1-pentene and 2,4,4-trimethyl-2-pentene

Table 4-2. Properties of SIP common gasolines

	Regular ^{a)}	Premium ^{a)}
RON	91	100
MON	82.6	87.5
Paraffin [vol.%]	58.1	41
Aromatics [vol.%]	25.4	36.6
Olefins [vol.%]	13	19.6
Oxygen [vol.%]	3.5	2.8
H/C	1.79	1.70
O/C	0.005	0.003
A/F	14.33	14.22
Heat Value [MJ/kg]	42.63	42.28
Density [g/cm ³]	0.73	0.7476

a) Regular stands for JIS 2nd grade. Premium stands for JIS 1st grade

同プロジェクトにおいて、三好らは、S5R, S5H の基本燃焼特性（着火遅れ時間と層流燃焼速度）をほぼ再現する詳細反応機構を開発した。この詳細反応機構は、ガソリンサロゲート詳細反応機構バージョン 1.0

（Gasoline surrogate details reaction mechanism version 1.0: SIP-Gd1.0）として公開されており、今後のエンジン開発への適用が期待されている(Miyoshi, 2016, Miyoshi, et. al., 2017b, SIP Innovative Combustion Technology, Gasoline Combustion Team, 2017).

本章では、サロゲート燃料として、実験に用いた評価燃料 (Fuel3, Fuel4) のオクタン価 (RON, MON) に近い S5R, S5H を用いることにした。また、詳細反応機構には、このサロゲート燃料に対応させて、三好らにより開発されたガソリンサロゲート詳細反応機構バージョン 1.0 (SIP-Gd1.0) を用いることとした。

図 4-1 に計算に用いる PRF90, PRF100 と S5R, S5H のオクタン価 (RON, MON) を示し比較する。また、同じ図に第 2 章で評価に使用した Fuel 3 (91RON) と Fuel 4 (100RON) の値も参考に示している。○で示す凡例が国内レギュラ (90RON) 相当の燃料であり、△が国内ハイオク (100RON) 相当の RON の燃料である。濃い赤で示す S5R, S5H と黄色で示す評価燃料 (Fuel3, Fuel4) は、濃い青で示す同じ RON の PRF に対して、MON が低い傾向であり、評価燃料 (Fuel3, Fuel4) は S5R, S5H に近い特性を持つことが判る。

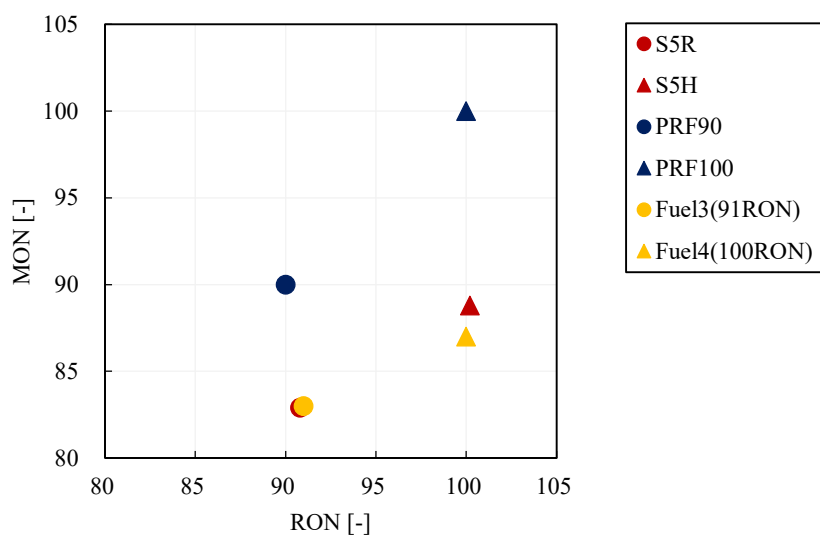


Fig.4-1 RON and MON properties of each fuel.

4.2.2 サロゲート燃料の着火遅れ時間の p - T マップ

本章では、エンジン運転条件ごとに異なる混合気の着火特性を、素反応に基づいて理解することを目的としている。そこで、各燃料による混合気の、圧力と温度の条件毎に着火特性を明確にするために、サロゲート燃料の S5R と S5H、標準燃料の PRF90、PRF100 の混合気の着火遅れ時間を詳細反応計算により算出し、圧力と温度に対するマップ上にまとめて比較を行なう。

混合気の着火遅れ時間の計算は、CHEMKIN-PRO の Closed Homogeneous Batch Reactor を用いて行っている。詳細反応機構は、三好らによって開発されたガソリンサロゲート詳細反応機構バージョン 1.0 (SIP-Gd1.0) を用いている。計算方法は、初期条件として圧力、温度と混合気組成を入力した後に、定容容器を仮定して、容積一定の条件で計算している。着火遅れ時間は、混合気の温度が 1500K に達するまでにかかる時間とした。表 4-3 に計算条件を示す。

Table 4-3. CHEMKIN-PRO calculation settings for ignition delay time

Mechanism	Gasoline surrogate details reaction mechanism version 1.0 ^{a)}
Reactor	Closed Homogeneous batch Reactor
Problem Type	Constrain Volume and Solve Energy Equation
Heat Loss	none
Pressure	0.1MPa – 15MPa
Temperature	640K – 1100K
Equivalence Ratio	$\phi=1$

a) Miyoshi, et. al., 2017b

混合気の計算に用いた燃料の組成を表 4-4 に示す。標準燃料の PRF90、PRF100 は、RON と MON が等しくセンシティブリティ S (=RON-MON) は 0 である。一方サロゲート燃料の S5R と S5H は MON が RON よりも低い値をとっており、センシティブリティはそれぞれ 7.9 と 11.4 である。RON と MON の値は図 4-1 に示しているものと同じである。空気のモル組成は、窒素 79%、酸素 21%とし、当量比は酸素と燃料が完全燃焼をする $\Phi=1$ の条件で計算をしている。

Table4-4. Fuel properties for detail reaction calculation.

	PRF90	S5R	PRF100	S5H
RON	90	90.8	100	100.2
MON	90	82.9	100	88.8
S (=RON-MON)	0	7.9	0	11.4
isooctane(C ₈ H ₁₈) [vol.%]	90	29.0	100	31.0
n-heptane(C ₇ H ₁₆) [vol.%]	10	21.5	0	10.0
methylcyclohexane(C ₇ H ₁₄) [vol.%]	-	5.0	-	5.0
diisobutylene(C ₈ H ₁₆) [vol.%]	-	14.0	-	14.0
toluene(C ₇ H ₈) [vol.%]	-	30.5	-	40.0

各燃料による混合気の初期圧力、温度に対する着火遅れ時間を図4-2, 4-3に示す。図4-2は90RON燃料の比較で、(a)にPRF90, (b)にS5Rの着火遅れ時間を示している。PRF90, S5R共に圧力や温度が高くなると、着火遅れ時間は指数関数的に短くなる傾向がある。PRFでは700Kから900Kの温度域で温度が上がっても着火遅れ時間が大きく変化しない領域が生じている。これが負の温度係数(NTC)領域であり、低温酸化反応(LTO)の影響により冷炎が生じることで低温度域での着火遅れ時間が短くなることが要因と考えられている。S5Rにおいても同様の領域が見られるが、PRF90のように明確な形になっていない。このことから、RONが同じPRF90とS5Rの着火遅れ時間も、圧力と温度の領域によって異なる傾向となることが判る。

図4-3は100RON燃料の比較で、(a)にPRF100, (b)にS5Hの着火遅れ時間を示している。90RONの燃料での比較と同様に、着火遅れ時間は、圧力や温度が高くなると指数関数的に短くなる傾向がある。PRF100はPRF90と同様に負の温度計数(NTC)領域が生じているが、S5HではPRF100のように明確な形にはなっていない。90RON燃料の比較と同様に、RONが同じPRF100とS5Hの着火遅れ時間も、圧力と温度の領域によって異なる傾向となることが判った。

また、90RON, 100RON燃料の双方で、標準燃料とサロゲート燃料の着火特性の違いがNTC領域の傾向にあることから、RONとMONの値の違いには、LTOの違いが影響していると推定される。

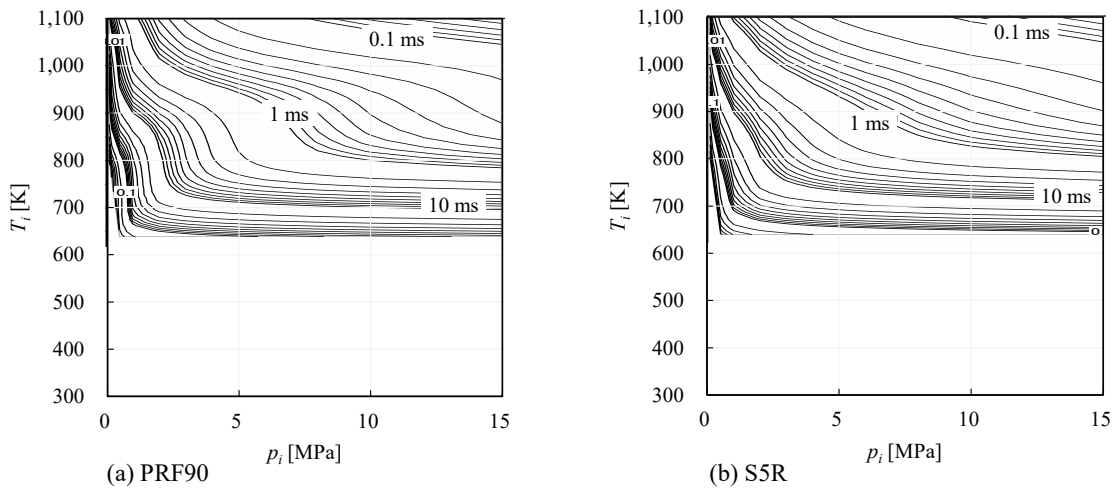


Fig.4-2 Comparison of ignition delay time p - T map for 90RON fuels.

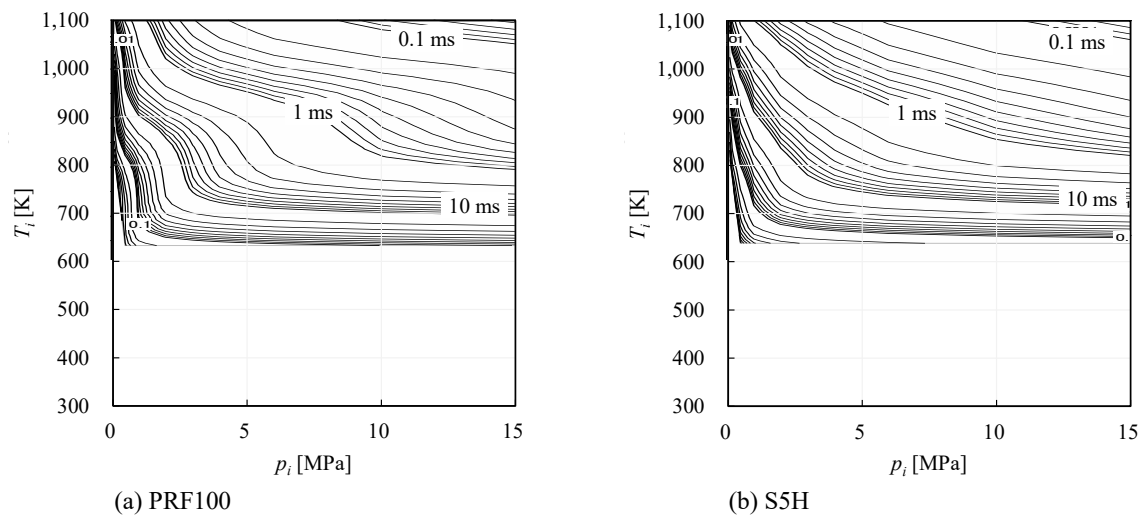


Fig.4-3 Comparison of ignition delay time p - T map for 100RON fuels.

4.3 サロゲート燃料についての PRF との着火遅れ時間差 (Δt) p - T マップの比較

4.3.1 RON, MON の計測条件の違いについての考察

前項での標準燃料とサロゲート燃料の着火遅れ時間の考察から、RON と MON の値の違いやエンジン運転条件の違いによる燃料影響の差には、低温酸化反応 (LTO) の違いが影響していると推定された。そこで、本項では、RON と MON の計測条件が着火性に与える影響を混合気の圧力と温度の観点から論じ、標準燃料とサロゲート燃料の着火特性の違いや LTO の発生の違いを詳細反応計算で明らかにする。

RON と MON の計測条件における燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度の違いを考察するために、RON と MON の計測に用いる CFR エンジンでの運転条件を確認する (ASTM, 2017a, 2017b)。表 1-2 は第 1 章で述べた RON と MON の運転条件である。RON と MON の運転条件の大きな違いは吸気温度の設定にある。ASTM によると、RON の計測では大気圧に応じて吸入空気の温度を設定 (1 気圧の時 52°C (325K)) し、その後燃料気化器で燃料を供給している。MON の計測では、吸入空気の温度ではなく、燃料を供給した後の混合気の温度を調整して 149°C (422K) として評価を行なっている。またエンジン回転速度も RON は 600rpm であるのに対して、MON は 900rpm と異なっている。

Table 1-2 Test Condition of RON and MON.

	RON	MON
Intake Air Temperature	52°C	149°C
Intake Air Pressure	atmospheric	atmospheric
Coolant Temperature	100°C	100°C
Engine Speed	600rpm	900rpm
Spark Timing	13BTDC	14-26BTDC
Compression Ratio	4-18	4-18

次に、CFR エンジンの諸元と運転条件から、圧縮開始から TDC までの燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度の推定を行なった。初期の温度、圧力と燃焼室容積をそれぞれ T_i, p_i, V_i として燃焼室壁を断熱と仮定しており、各クランク角 θ_m におけるピストン位置から求めた V_m の時の温度と圧力 T_m, p_m は式 (2-1), (2-2) から求めている。この時、比熱比 κ については固定値 1.32 を用いて計算を行った。 V_m を算出する際のエンジンの諸元には、CFR エンジンの諸元であるボア直径 82.55mm, ストローク長 114.3mm を用いている。CFR エンジンに変圧縮比エンジンであり、圧縮比の設定は評価方法やオクタン価によって異なるが、ここでは圧縮比の上下限值である CR18 と CR4 で計算を行った。圧縮開始時期は IVC の時期である -146 ATDC, 初期圧力 (p_i) は 0.1MPa (大気圧) としている。

$$p_m = p_i \left(\frac{V_i}{V_m} \right)^\kappa \quad (2-1)$$

$$T_m = T_i \left(\frac{p_m}{p_i} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} \quad (2-2)$$

図 4-4 に CFR エンジンでの RON と MON の計測時における圧縮開始からの時間と圧力の履歴を、図 4-5 にエンジン燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度の推定値、及び Lappard によって報告されている実際の RON, MON 計測条件における燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度の最大値示している (Lappard, 1990)。図 4-4 よりエンジン回転速度の違いにより RON の計測条件の方が穏やかに圧力上昇することが判る。図 4-5 より初期温度の設定の違いにより、MON の計測条件の方が、高い温度条件を通っている。また、Lappard による実測結果を比較する

と、燃料のオクタン価の違いにより、最大値が異なっており、RONの計測結果は温度が低くやや圧力の高い点であるのに対して、MONの計測結果は温度が高い点になっていることが判る。また、どちらの条件においてもオクタン価が高いほどノッキングが起りにくいために点火時期が進角もしくは圧縮比を高めることができる。そのため、計測結果の燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度の最大値は共に高くなっていると考えられる。

一方で、RONの計測条件では、温度の推定値とLappardの実験結果に100K程度の差がみられた。これは初期温度に換算すると、約50Kの差に相当する。そこで、本研究における詳細反応計算での比較には、RON計測条件における初期温度は前述の吸入空気の温度である52°Cから50°C高い102°C (=375K)を設定した。一方で、MON計測条件における初期温度は前述の予混合気の設定温度である149°C (=422K)を用いている。またCFRの設定圧縮比は、10として検討を行うことにした。検討に用いた諸元で計算をした圧力と温度の履歴を図4-6に示す。

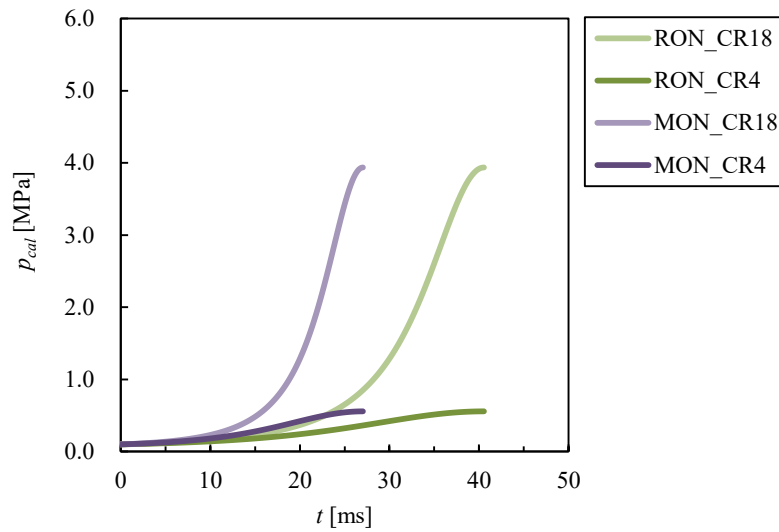


Fig.4-4 Estimated cylinder pressure of RON and MON measurement condition.

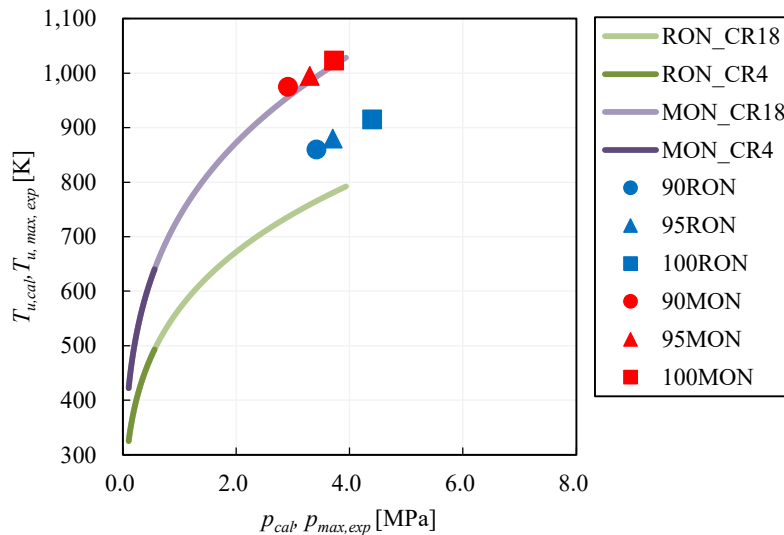


Fig.4-5 Estimated cylinder pressure and temperature of RON and MON measurement condition. Measured maximum cylinder pressure and temperature of CFR engine RON and MON measurement (Lappard, 1990).

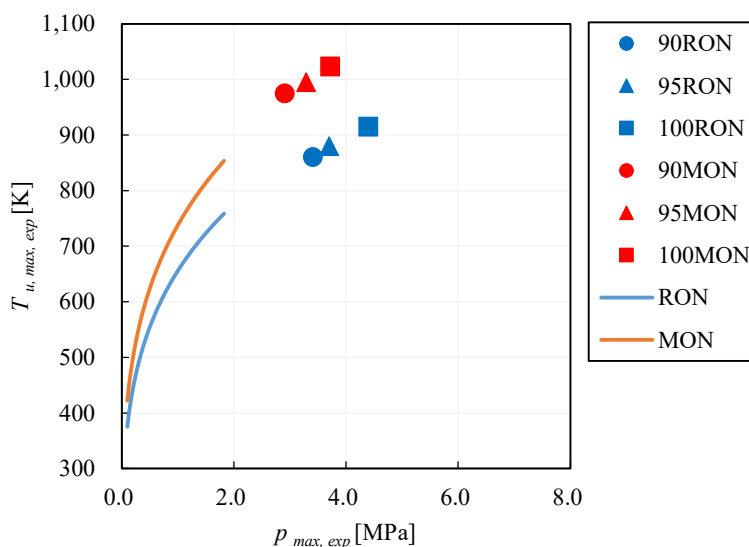


Fig.4-6 Estimated cylinder pressure and temperature of RON and MON measurement condition for this study (CR10, Ti=375K for RON, Ti=422K for MON). Measured maximum cylinder pressure and temperature of CFR engine RON and MON measurement (Lappard, 1990).

詳細反応計算は、第3章で行った手法で、圧力の時間変化に一致するように体積を変更して計算を行っている。また、詳細反応機構は、三好らによって開発されたガソリンサロゲート詳細反応機構バージョン1.0 (SIP-Gd1.0) を用いている。設定条件を表4-5に示した。混合気の計算には表4-4に示したPRF100とS5Hを燃料の組成として用いた。空気のモル組成は、窒素79%、酸素21%とし、筒内に残存する残留ガスの組成は考慮に入っていない。また、計算ではTDCまでの圧力上昇として式(2-1)から求めた圧力の履歴を使用しており、その後はTDCの圧力を100msまで維持させて混合気の自己着火までにかかる時間を比較した。

図4-7に計算に用いた筒内圧力(p)の履歴と式(2-1)で求めた未燃ガス温度の履歴を示す。RONとMONの計測条件の違いは、燃焼室筒内の圧力や未燃ガス温度に加えて、エンジン回転速度の違いによる圧縮時間の差としても確認することが出来る。

Table4-5. CHEMKIN-PRO calculation settings.

Mechanism	Gasoline surrogate details reaction mechanism version 1.0 ^{a)}
Reactor	Closed Homogeneous batch Reactor
Problem Type	Constrain Pressure And Solve Energy Equation
Heat Loss	none
Equivalence Ratio	$\phi=1$

a) Miyoshi, et. al., 2017b

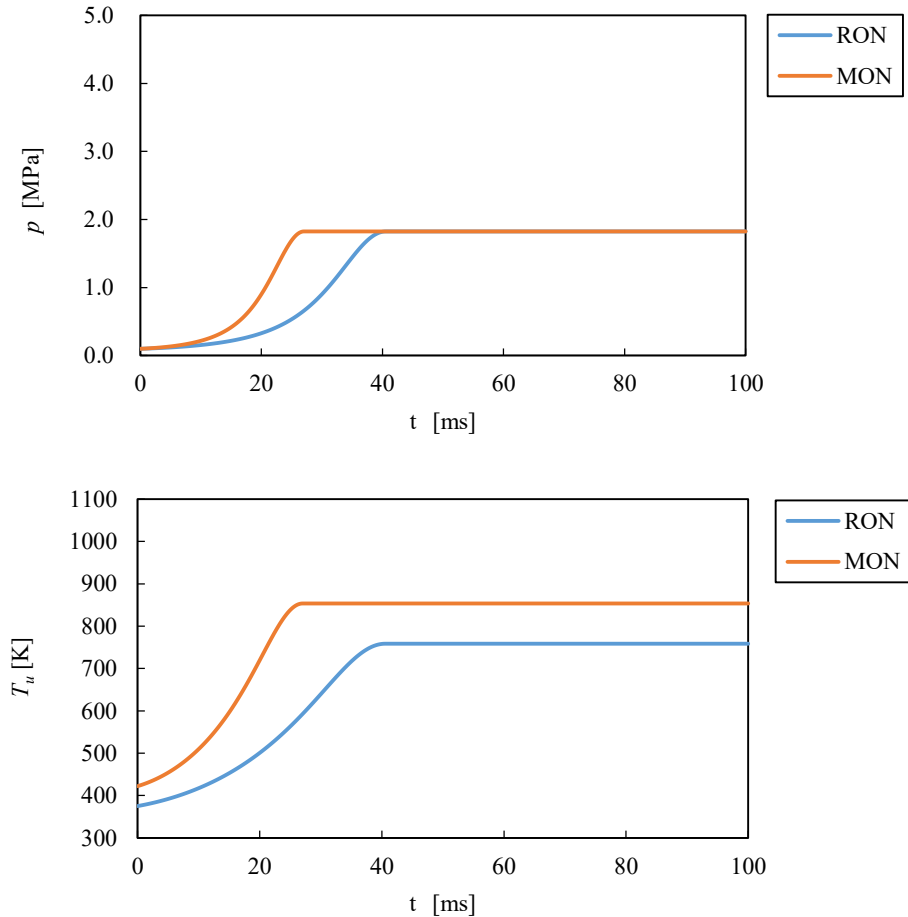
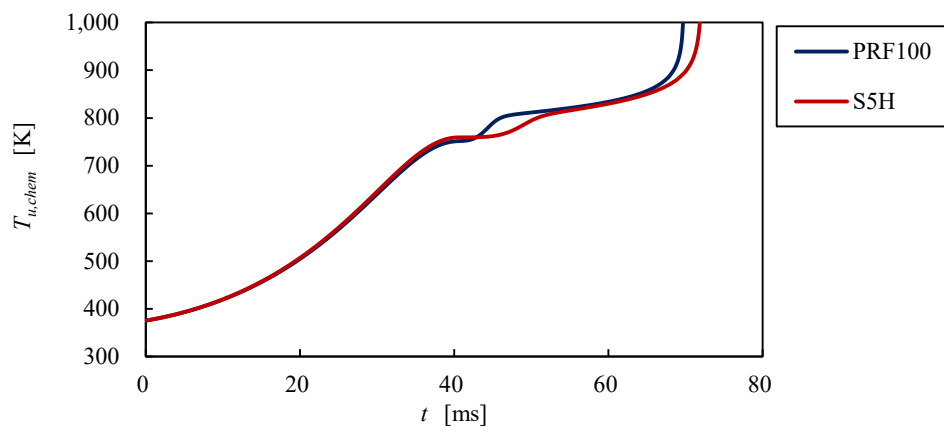


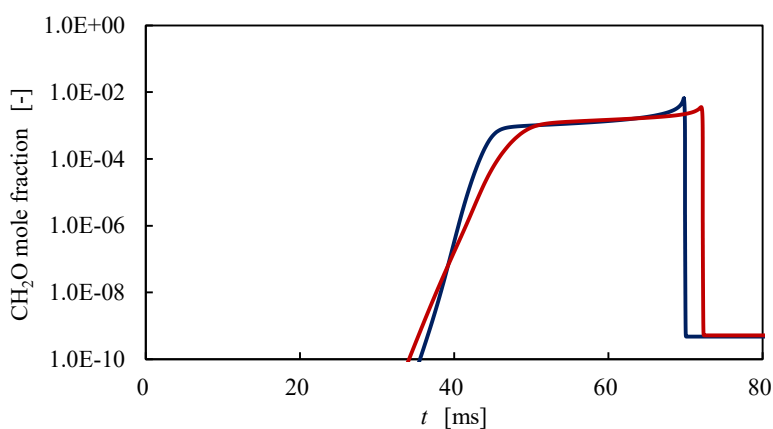
Fig.4-7 Cylinder pressure and temperature history for calculation.

図 4-8 には、RON の計測条件を想定した圧力履歴を用いて、PRF100 と S5H の未燃ガス温度($T_{u,chem}$)とホルムアルデヒド (CH_2O) のモル濃度、OH ラジカルのモル濃度を比較している。これらの値は、詳細反応計算によって求められたものである。TDC のタイミングである 40.5 ms 付近から LTO による冷炎が生じている様子が判る。特に、PRF100 では S5H に対して CH_2O の生成速度や OH のピーク量が大きく、20K 程度の温度上昇が生じている。この結果、PRF100 の着火時期は、S5H の着火時期に対して、2.3ms (=3%) 早くなっている。

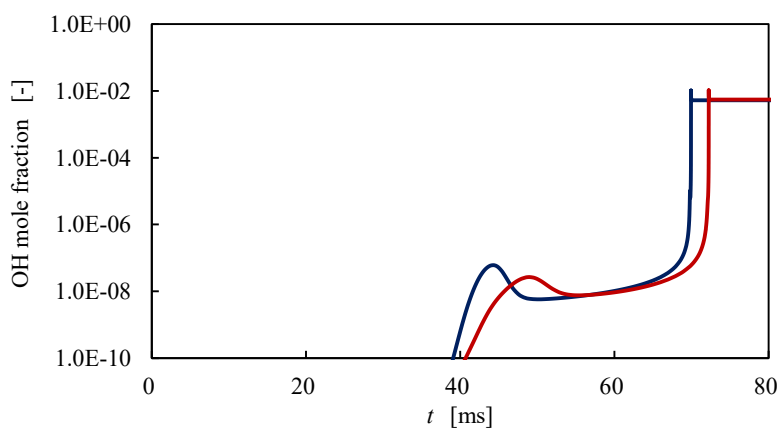
続いて、図 4-9 に MON の計測条件を想定して、図 4-8 の RON の場合と同様に詳細反応計算を行い求めた未燃ガス温度($T_{u,chem}$)とホルムアルデヒド (CH_2O) のモル濃度、OH ラジカルのモル濃度を示している。TDC のタイミングである 27 ms 付近では LTO による CH_2O の生成速度や温度上昇は生じておらず、PRF100 と S5H はほぼ同じ反応速度で進行している。しかし、その後の CH_2O や OH の生成量は S5H の方が大きく、着火準備期間が短縮されている。着火時期は、S5H の着火時期が PRF100 に対してに対して、4.1ms (=10%) 早くなっている。RON の条件と比較をすると、PRF100 と S5H の違いが大きく現れており、MON の値が低くなっている S5H の方が着火しやすい運転条件となっていることが計算からも示されている。



(a) Unburned gas temperature.

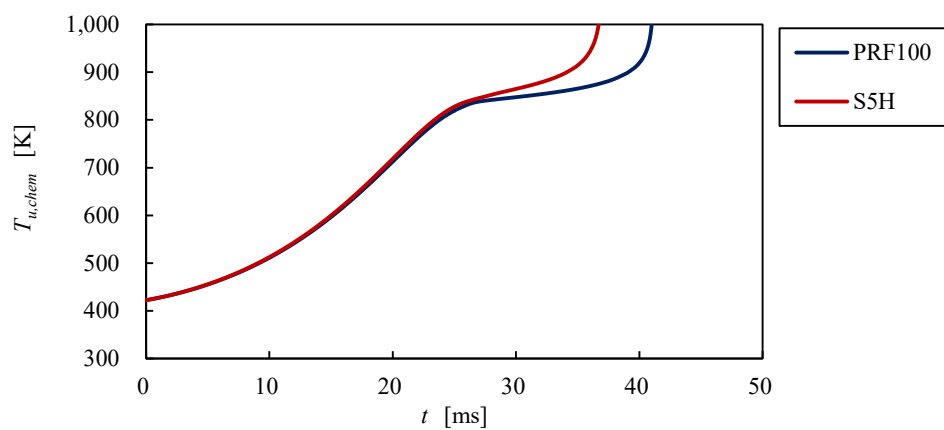


(b) CH₂O mole fraction.

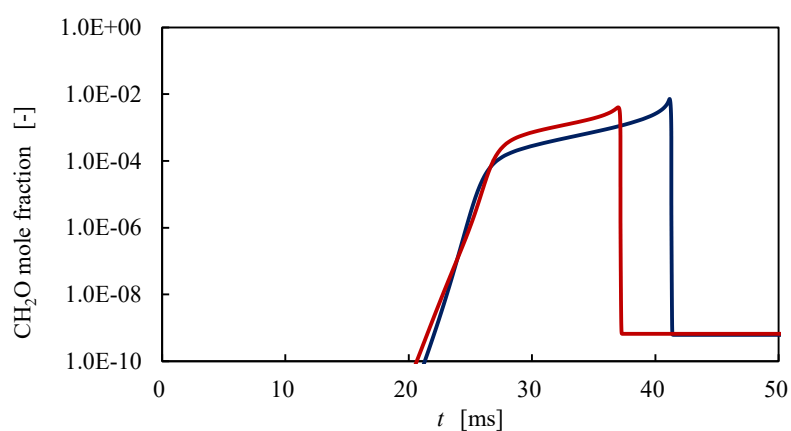


(c) OH mole fraction.

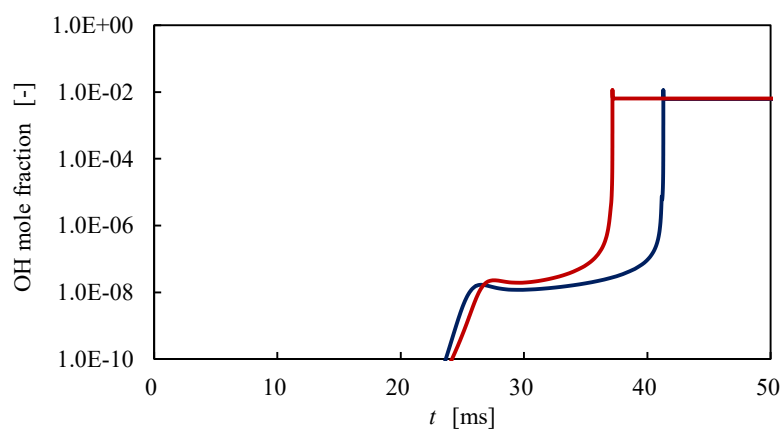
Fig.4-8 (a) Unburned gas temperature, (b) CH₂O mole fraction, (c) OH of each surrogate fuel for RON measurement condition.



(a) Unburned gas temperature.



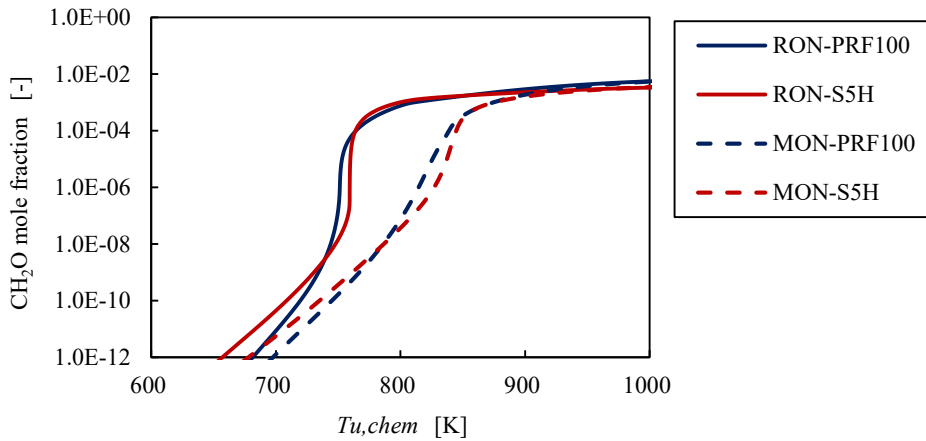
(b) CH_2O mole fraction.



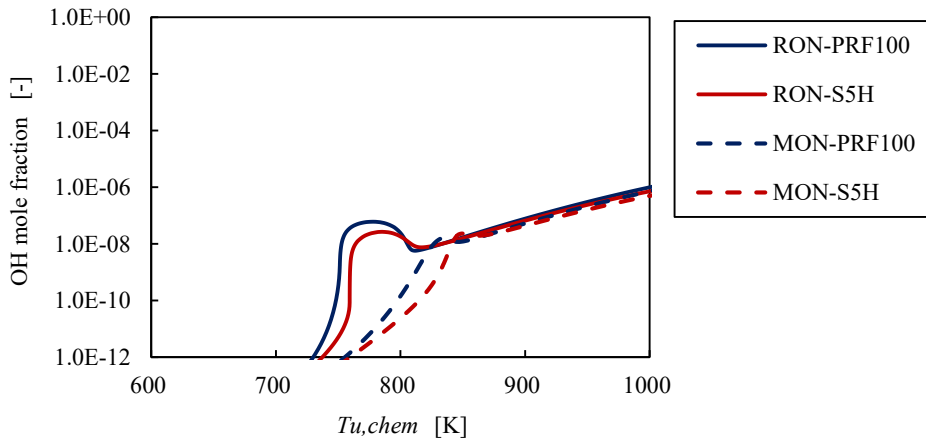
(c) OH mole fraction.

Fig.4-9 (a) Unburned gas temperature, (b) CH_2O mole fraction, (c) OH of each surrogate fuel for MON measurement condition.

図4-10には、未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) に対する CH_2O , OH の濃度を比較している。RON の計測条件を実線、MON の計測条件を破線で示して比較をしている。RON の計測条件では、MON の計測条件と比較をして、TDC 付近の温度である 750K で CH_2O , OH の濃度が上昇している様子が見られ、特に OH は大きなピークを示している。RON の計測条件では TDC 付近で LTO の影響を受けるためにその温度域に滞在する時間が長くなっており、圧縮行程で LTO の温度帯を通過する MON の計測条件とは異なっている。この為に、RON の計測条件では、LTO による反応の影響を強く受けており、LTO の傾向が大きく現れる PRF100 と LTO が小さい S5H では RON, MON の運転条件の違いによる着火時期の変化の傾向に差が生じたと考えられる。



(a) CH_2O mole fraction.



(b) OH mole fraction.

Fig.4-10 CH_2O , OH mole fraction of each surrogate fuel for RON and MON measurement condition.

4.3.2 サロゲート燃料についての PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) p - T マップ

RON と MON との計測条件を詳細反応計算により比較をしたところ、RON の計測条件では PRF100 に LTO による冷炎の発生による温度上昇や反応促進の影響が見られるが、MON の計測条件では PRF100 に LTO の影響は見られず、S5Hの方が CH_2O の濃度の上昇が早く着火時期が早まっていることが判った。こうした反応の違いは、RON と MON の計測条件における燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度の条件に依存していると考えられる。

そこで、4.2 節で求めた標準燃料 (PRF90, PRF100) とサロゲート燃料 (S5R, S5H) の着火遅れ時間 (τ) の差 ($\Delta\tau$) を比較することで、混合気の圧力と温度の時間に対する LTO の影響の差を明確にする。

着火遅れ時間の差($\Delta\tau$)は 90RON, 100RON に対してそれぞれ式 (4-1), (4-2) を用いて算出した。

$$\Delta\tau_{90RON}[\%] = \frac{(\tau_{PRF90} - \tau_{S5R})}{\tau_{PRF90}} \times 100 \tag{4-1}$$

$$\Delta\tau_{100RON}[\%] = \frac{(\tau_{PRF100} - \tau_{S5H})}{\tau_{PRF100}} \times 100 \tag{4-2}$$

図 4-11 に PRF90 に対する S5R の着火遅れ時間の差 ($\Delta\tau_{90RON}$) を表現する p - T マップを示す。着火遅れ時間の差 ($\Delta\tau_{90RON}$) の大きさによって、赤、白、青に色分けを行なった。赤い領域は $\Delta\tau_{90RON}$ が -20% 以下の領域、即ち、PRF90 に対して S5R の着火遅れ時間が短くなる領域を示している。白い領域は $\Delta\tau_{90RON} < \pm 20\%$ の領域であり、PRF90 と S5R の着火遅れ時間がほぼ等しいことを示している。青い領域は $\Delta\tau_{90RON}$ が +20% 以上の領域であり、PRF90 に対して S5R の着火遅れ時間が長くなる領域を示している。白い領域から赤い領域にかけては、 $\Delta\tau_{90RON}$ が小さい値を取るに従って PRF90 の LTO の影響が強くなり、サロゲート燃料 (S5R) に対しては着火遅れ時間が短くなっていると考えられる。一方で、青い領域では LTO の影響が小さく、PRF90 の着火遅れ時間が長期化している。図 4-11 には前項で検討をした RON と MON の計測条件における燃料室筒内の圧力と未燃ガス温度の履歴と、Lappard によって示された RON, MON の計測条件における燃焼室筒内の最大圧力と最大未燃ガス温度を同時に示している。RON の計測条件は、いずれも白い領域から赤い領域、即ち、PRF90 の LTO の影響が強くなりサロゲート燃料 (S5R) に対して着火遅れ時間が短くなる領域を通っている。一方で、MON の計測条件は青い領域から白い領域、即ち、LTO の影響が小さく、PRF90 の着火遅れ時間が長期化している領域を通っている。

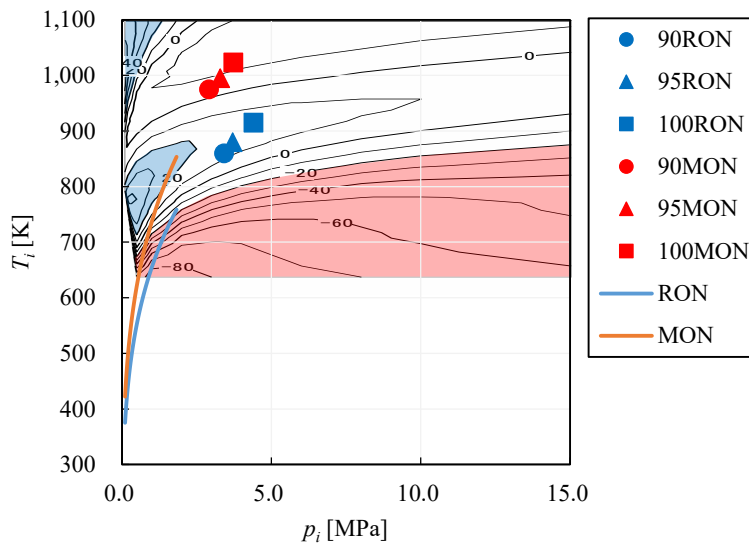


Fig.4-11 Longer ratio of 90RON ignition delay time of PRF90 from S5R ($\Delta\tau_{90RON}$). Blue area means ignition delay time of PRF90 is more than 20% longer than that of S5R. Red area means ignition delay time of PRF90 is more than 20% shorter than that of S5R. RON and MON measurement conditions are also plotted.

図 4-12 には PRF100 に対する S5H の着火遅れ時間の差 ($\Delta\tau_{100RON}$) を示す p - T マップを示す。着火遅れ時間の差 ($\Delta\tau_{100RON}$) の大きさによって、赤、白、青に色分けを行なっているが、90RON の着火遅れ時間の差 ($\Delta\tau_{90RON}$) を示す p - T マップ (図 4-10) に対して、赤い領域が高温域にも広がっている結果となっている。図 4-12 にも図 4-11 と同様に RON と MON の計測条件における燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度の履歴と、Lappard によって示された RON, MON の計測条件における燃焼室筒内の最大圧力と最大未燃ガス温度を示している。100RON

の場合も 90RON の時と同様に、RON, MON の計測条件における燃料室筒内の圧力と未燃ガス温度の履歴は、それぞれ赤から白の領域、青から白の領域を通過している。

詳細反応で計算をしている TDC までの圧力の履歴を比較する。詳細反応計算の結果では、RON の計測条件の履歴は赤い領域を通過しており、PRF100 の着火時期が S5H の着火時期に対して 3%早くなっていた。MON の計測条件の履歴は白～青い領域を通過しており、S5H の着火時期が PRF100 の着火時期に対して 10%早くなっていた。着火遅れ時間の差 ($\Delta\tau_{100RON}$) の p - T マップには時間の概念を織り込むことができていないが、RON や MON 計測の詳細反応計算結果と定性的に一致していると捉えることができる。

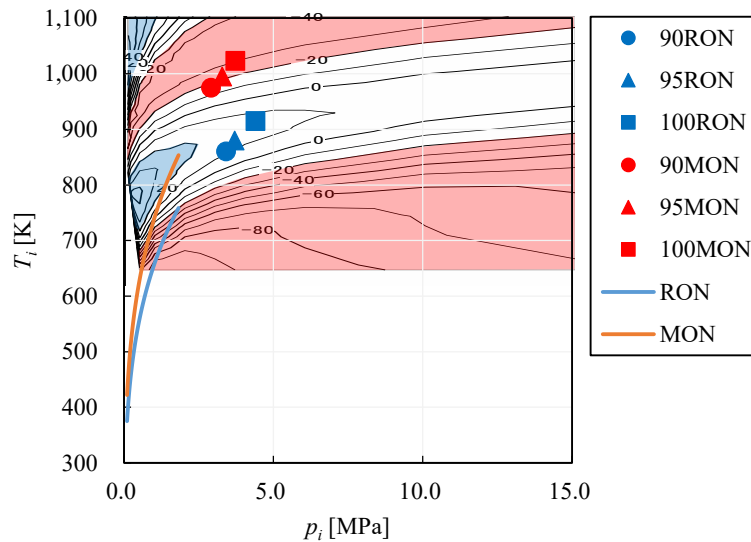


Fig.4-12 Longer ratio of 100RON ignition delay time of PRF100 from that of S5H ($\Delta\tau_{100RON}$). Blue area means ignition delay time of PRF100 is more than 20% longer than that of S5H. Red area means ignition delay time of PRF100 is more than 20% shorter than that of S5H. RON and MON measurement conditions are also plotted.

以上より、PRF の混合気の着火特性は、RON の計測条件では LTO の影響を受けており、MON の計測条件は、LTO の影響が小さい条件で評価されていることが判る。このために、市販ガソリンのように PRF に比べて LTO が小さい燃料では、RON に対して MON が小さい値をとっていると考えられる。この結果よりセンシティブリティ $S (=RON-MON)$ の大きさは、RON の計測条件における混合気の LTO の影響の大きさに依存すると考えられる。LTO の影響が大きい混合気ほど燃料のセンシティブリティは負の値を取り、LTO の影響が小さい混合気ほど燃料のセンシティブリティは正の大きな値を取ることが推定される。

また、市販ガソリンを模擬したサロゲート燃料と PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) p - T マップの比較から、LTO の影響が小さいサロゲート燃料では、温度の低い領域では PRF に対して着火遅れ時間が長くなる傾向があり、圧力が低く温度の高い領域では着火遅れ時間が短くなる条件があることが判った。更に、こうした着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) p - T マップにエンジンの運転条件を重ねることで、ノッキングの起こりやすさの傾向が推定できる可能性が示唆されている。

4.4 PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) p - T マップを用いたノッキング指標の活用 NA (自然吸気) エンジンと過給エンジンのノッキング条件

4.4.1 エンジン実験と計算方法

4.3 節における標準燃料 (PRF90, PRF100) とサロゲート燃料 (S5R, S5H) の詳細化学反応計算の比較から, PRF との市販ガソリンの RON と MON の値の差は, RON の計測条件における PRF との LTO 違いによることが判った. このことから, LTO の影響が大きい混合気ほど燃料のセンシティブティは負の値を取り, LTO の影響が小さい混合気ほど燃料のセンシティブティは正の大きな値を取ることも推察される. 市販ガソリンのセンシティブティ S ($=RON-MON$) は高 RON 化やバイオ燃料の普及により高まることが推定されるために, PRF との着火特性の違いが大きくなることが予測されている. 一方で, RON や MON の計測条件における燃焼室筒内の混合気の圧力と温度の関係を p - T マップ上に示すと, 初期圧力が大気圧であることから, 圧力が低く未燃ガス温度は高い条件での結果を用いていることが分かる. 一方で, 過給ダウンサイズエンジンでは, 初期圧力が過給域の条件があることから, 混合気の圧力が高く温度がより低い条件での着火特性に対する影響が出てくることが予測される. サロゲート燃料の PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) p - T マップ上で比較すると, 温度の低い領域では LTO 有無による着火特性への影響が大きくなると考えられる.

ここでは, 様々なエンジン運転条件で計測したノッキング発生時の燃焼室筒内圧力履歴を用いて, 標準燃料 (PRF90, PRF100) とサロゲート燃料 (S5R, S5H) の詳細反応計算によるノッキング発生時期 ($\theta_{knock, chem}$) を比較する. その上で, PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) p - T マップ上でサロゲート燃料でのノッキング発生時期が PRF でのノッキング発生時期に対してどのような傾向を示すかについて推定することが可能か検討を行なう.

ノッキング発生時の燃焼室筒内圧力履歴は, 実験により計測している. 実験に用いたエンジンの諸元を表 4-6 に, 燃料のオクタン価を表 4-7 に, 運転条件を表 4-8 にまとめる.

エンジン A は NA エンジンであり, ピストンの形状を変更することで, 圧縮比 (CR) を 5, 10.4, 20 の 3 諸元に設定している. また, 評価条件としては, 回転速度を 1200rpm とし, CR10.4 の場合のみ 6000rpm の条件を追加している. 燃料は第 2 章で使用した Fuel 3 (91RON) を用いている.

エンジン B は過給エンジンであり, 回転速度を 2000rpm と 4400rpm としている. 燃料については, 第 2 章で使用した Fuel 3 (91RON) と Fuel 4 (100RON) の 2 種類を用いている.

運転条件は WOT, $\Phi=1$ の条件であるが, case3 の NA エンジン CR20 の条件のみ点火時期の前に混合気の自己着火が発生することから, 混合気の自己着火が起こらない条件まで空気量を減らして計測している. また, case8 は排気温度を下げるために燃料を増量 ($\Phi=1.2$) して運転しており, case6 は case8 の当量比で運転をするために, 排気温度の上限にあわせて過給圧を抑制して計測をしている.

Table 4-6. Engine Specification

	A	B
Engine	2.5L, Inline 4	2.0L, Inline 4
Bore [mm]	90	86
Stroke [mm]	98	86
Compression ratio	5:1, 10.4:1, 20:1	10:1
Fuel injection system	PFI	DI
Intake system	NA	Turbocharged

Table 4-7. Fuel octane number

	Fuel 3	Fuel 4
RON	91	100
MON	83	87

Table 4-8. Experimental conditions

	Engine	CR	Fuel	Engine Speed [rpm]	Φ	IVC [ATDC]	Ignition Timing [ATDC]	$\theta_{knock, exp}$ [ATDC]
case 1	A	10.4:1	Fuel 3	1200	1.0	-119	-4	30
case 2	A	5:1	Fuel 3	1200	1.0	-119	-40	9
case 3	A	20:1	Fuel 3	1200	1.0	-119	-5	11
case 4	A	10.4:1	Fuel 3	6000	1.0	-119	-24	18
case 5	B	10:1	Fuel 3	2000	1.0	-150	1.5	38
case 6	B	10:1	Fuel 3	4400	1.2	-135	-2.0	43
case 7	B	10:1	Fuel 4	2000	1.0	-150	-5.0	27
case 8	B	10:1	Fuel 4	4400	1.2	-135	-13.5	21

図 4-13 にそれぞれの実験条件においての、クランクアングルに対する圧力履歴を示す。Case1 (NA, CR10.4, 1200rpm) と case2 (NA, CR5, 1200rpm) を比較すると圧縮比の違いは TDC 前の圧力上昇の違いに現れている。Case3 (NA, CR20, 1200rpm) は前述のとおり空気量を絞っていることから、TDC の圧力は CR10.4 の case1 にほぼ等しい。また、case1 (NA, CR10.4, 1200rpm) の回転数違いの条件である case4 (NA, CR10.4, 6000rpm) では、エンジンの回転速度が高く、点火時期が TDC 前 24CA (=24ATDC) まで進角していることから、TDC での圧力は燃焼により高くなっている。エンジン B の結果である case5~8 については、過給エンジンの結果であることから、TDC 前の圧力上昇が NA エンジンに対して大きいことが判る。回転速度の影響については、燃料によって異なっており、case6 (過給, 4400rpm, Fuel3 (91RON)) は case5 (過給, 2000rpm, Fuel3 (91RON)) に対して点火時期は 3.5CA 進角しているものの燃焼位相が遅くなっている。これは当量比が異なる影響によると考えられる。一方、case8 (過給, 4400rpm, Fuel4 (100RON)) は case7 (過給, 2000rpm, Fuel4 (100RON)) に対して点火時期が 8.5CA 進角して燃焼位相も早くなっており燃焼圧力が上昇している。Fuel3 (91RON) の時と比較をして点火時期の進角量が大きいことから、当量比の影響よりも点火時期の進角による影響が大きくなり、燃焼位相も早くなったと考えられる。一方で、オクタン価の影響に対しては、case7 (過給, 2000rpm, Fuel4 (100RON)) は case5 (過給, 2000rpm, Fuel3 (91RON)) に対して点火時期が 6.5CA 進角して燃焼位相も早くなっており、case8 (過給, 4400rpm, Fuel4 (100RON)) は case6 (過給, 4400rpm, Fuel3 (91RON)) に対して点火時期が 11.5CA 進角して燃焼位相も早くなっていて、筒内圧力も高くなっていることが判る。

図 4-14 にそれぞれの実験条件においての、IVC からの経過時間に対する圧力履歴を示す。TDC は、case1~3 が 16.5ms, case4 が 3.3ms であり、case5 と case7 が 12.5ms, case6 と case8 が 5.1ms である。

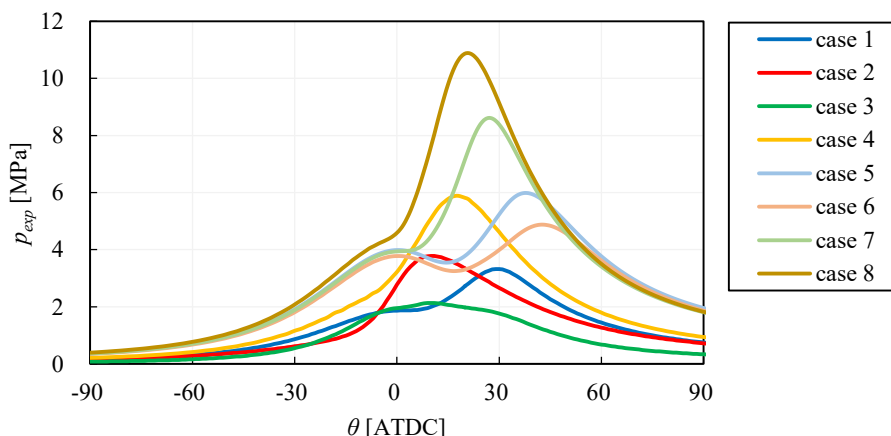


Fig.4-13 Cylinder pressure histories of each experimental case for crank angle.

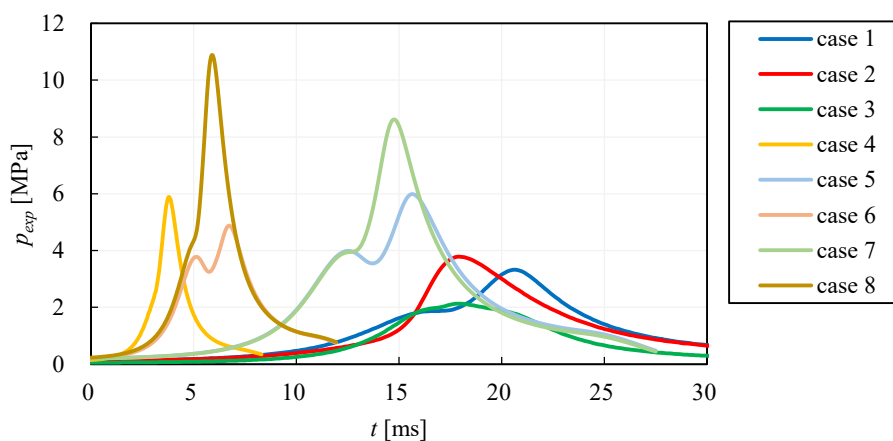


Fig.4-14 Cylinder pressure histories of each experimental case for time after IVC.

次に、各運転条件におけるノッキングの発生条件について、PRFの素反応とサロゲート燃料の素反応を詳細反応計算により比較した。詳細反応計算は、第3章で行った手法で、圧力の時間変化に一致するように体積を変更して計算を行っている。また、詳細反応機構は、三好らによって開発されたガソリンサロゲート詳細反応機構バージョン1.0 (SIP-Gd1.0) を用いている。設定条件を表4-9に示している。混合気の計算にはFuel 3(91RON)の実験結果に対してはPRF90とS5R、Fuel 4(100RON)の実験結果に対してはPRF100とS5Hを用いている(表4-4)。空気のモル組成は、窒素79%、酸素21%とし、筒内に残存する残留ガスの組成は考慮に入れていない。

Table4-9. CHEMKIN-PRO calculation settings.

Mechanism	Gasoline surrogate details reaction mechanism version 1.0 ^{a)}
Reactor	Closed Homogeneous batch reactor
Problem Type	Constrain Pressure And Solve Energy Equation
Pressure	Experimental data measured by pressure sensor
Heat Loss	none
Equivalence Ratio	Same as experimental data

a) Miyoshi, et. al., 2017b

Table4-4. Fuel properties for detail reaction calculation.

	PRF90	S5R	PRF100	S5H
RON	90	90.8	100	100.2
MON	90	82.9	100	88.8
S (=RON-MON)	0	7.9	0	11.4
isooctane(C ₈ H ₁₈) [vol.%]	90	29.0	100	31.0
n-heptane(C ₇ H ₁₆) [vol.%]	10	21.5	0	10.0
methylcyclohexane(C ₇ H ₁₄) [vol.%]	-	5.0	-	5.0
diisobutylene(C ₈ H ₁₆) [vol.%]	-	14.0	-	14.0
toluene(C ₇ H ₈) [vol.%]	-	30.5	-	40.0

この検討では着火時期に与える影響を比較するために、初期温度は S5R, S5H の詳細反応計算による着火時期 ($\theta_{ig,SS}$) がノックの発生時期 ($\theta_{knock,exp}$) と同じになる時の温度 ($T_{i,chem,SS}$) を用いている。図 4-15 に各条件における計算から求められた初期温度 ($T_{i,chem,SS}$) と状態方程式から求めた初期温度 ($T_{i,st}$) を比較する。

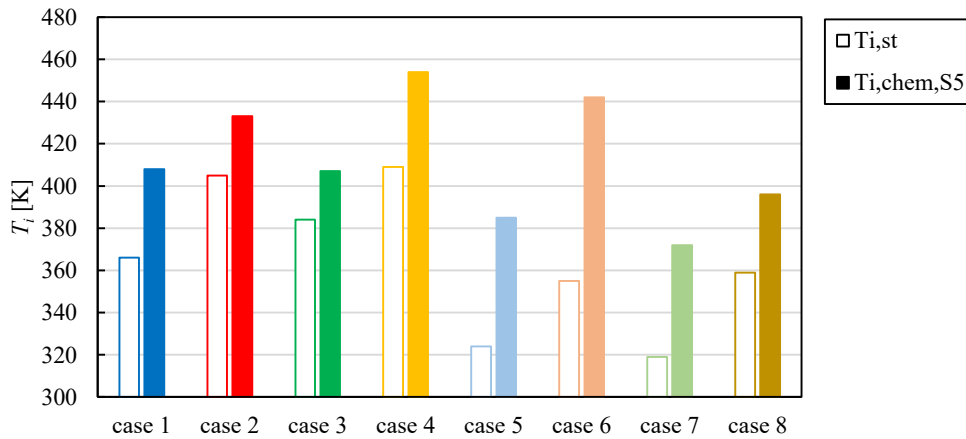


Fig.4-15 Initial temperature of each test condition. White bars are calculated by state equation ($T_{i,st}$) and colored bars are calculated by detail reaction calculation ($T_{i,chem,SS}$).

4.3.2 PRF とサロゲート燃料の着火時期についての考察

各 case の筒内圧力履歴 (p_{exp}) と初期温度 ($T_{i,chem,SS}$) を用いて、PRF とサロゲート燃料 (S5R, S5H) の混合気における着火時期を算出して比較を行った。図 4-16 にそれぞれの条件に対する S5R, S5H の詳細反応計算による着火時期 ($\theta_{ig,SS}$) と PRF90, PRF100 の詳細反応計算による着火時期 ($\theta_{ig,PRF}$) を比較している。Case5, case6 を除いては、PRF の混合気で求めた着火時期とサロゲート燃料 (S5R, S5H) で求めた着火時期のクランク角での差は小さかった。一方で、同様に着火時期を IVC からの時間 ($t_{ig,PRF}$, $t_{ig,SS}$) で示した値を図 4-17 に示している。

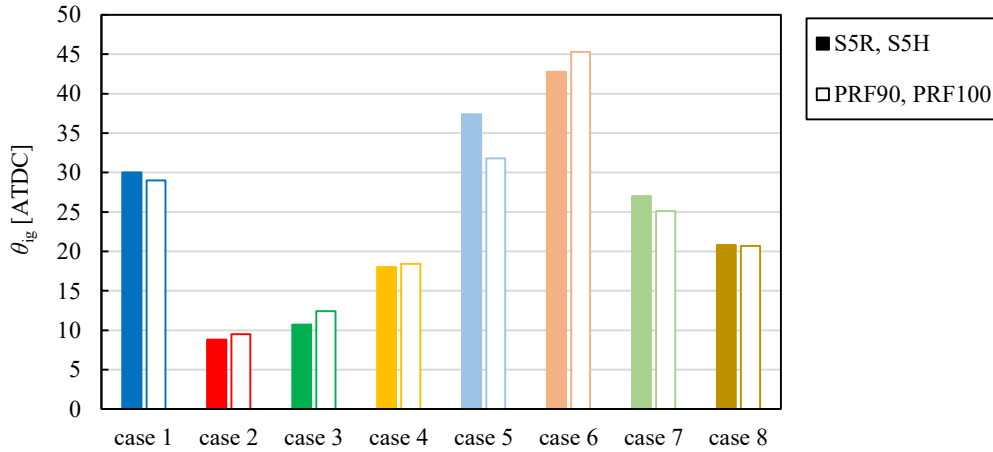


Fig.4-16 Estimated ignition timing (θ_{ig}) of each experimental condition. Colored bars are estimated with surrogate fuels (S5R, S5H) and white bars are estimated with PRFs (PRF90, PRF100).

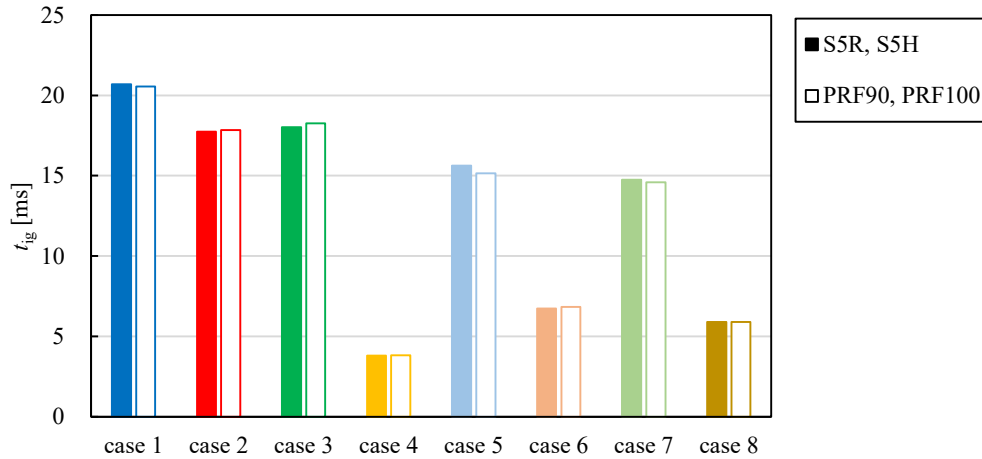


Fig.4-17 Estimated ignition timing (t_{ig}) of each experimental condition. Colored bars are estimated with surrogate fuels (S5R, S5H) and white bars are estimated with PRFs (PRF90, PRF100).

それぞれの条件について PRF とサロゲート燃料 (S5) の着火時期の差 ($\theta_{ig, PRF} - \theta_{ig, S5}$) を図 4-18 に示している。同様に着火時期を IVC からの時間 ($t_{ig, PRF}$, $t_{ig, S5}$) については式 (4-3) により比較をして図 4-19 に示している。

$$\Delta t_{ig} [\%] = \frac{(t_{ig, PRF} - t_{ig, S5})}{t_{ig, PRF}} \times 100 \quad (4-3)$$

図 4-18, 4-19 ともに値が 0 に近い場合は PRF で算出した着火時期 ($t_{ig, PRF}$) とサロゲート燃料 (S5) で算出した着火時期 ($t_{ig, S5}$) が等しいことから、着火時期に対して燃料のセンシティブティ S (=RON-MON) の影響が小さいと計算された条件である。Case5 を除いては、着火時期の差は 2% 以内であることから、ノッキングに対して燃料の RON の影響が大きく、センシティブティ S (=RON-MON) の影響は小さい運転条件と考えられる。

一方で、case5 (過給, 2000rpm, Fuel 3 (91RON)) は $\theta_{ig, PRF} - \theta_{ig, S5}$ が -5.6CA, Δt_{ig} が -3.1% と負の値に大きいことから、PRF90 で算出した着火時期がサロゲート燃料 (S5R) に対して早くなっている。これはノッキングに対し

て燃料の RON の影響に加えて、センシティブリティ $S (=RON-MON)$ が大きい燃料ほどノッキングが起こりやすくなる運転条件であることが推定される。

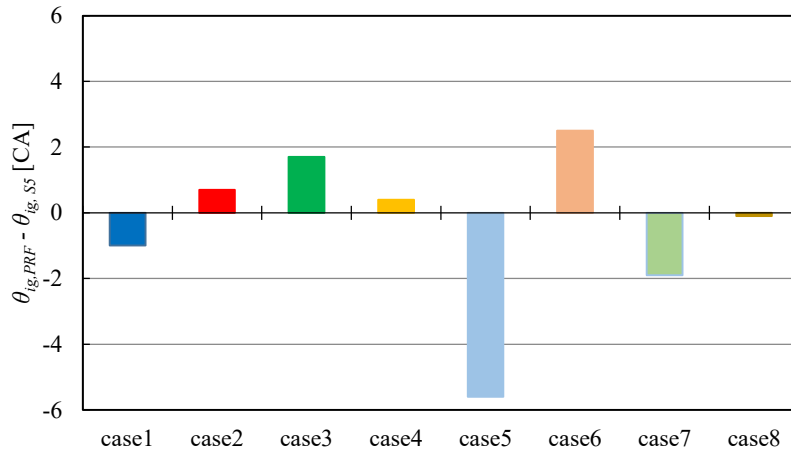


Fig.4-18 Comparison of the estimated ignition timing (θ_{ig}) of each experimental condition between those estimated with PRF ($\theta_{ig,PRF}$) and those estimated with surrogate fuels ($\theta_{ig,S5}$).

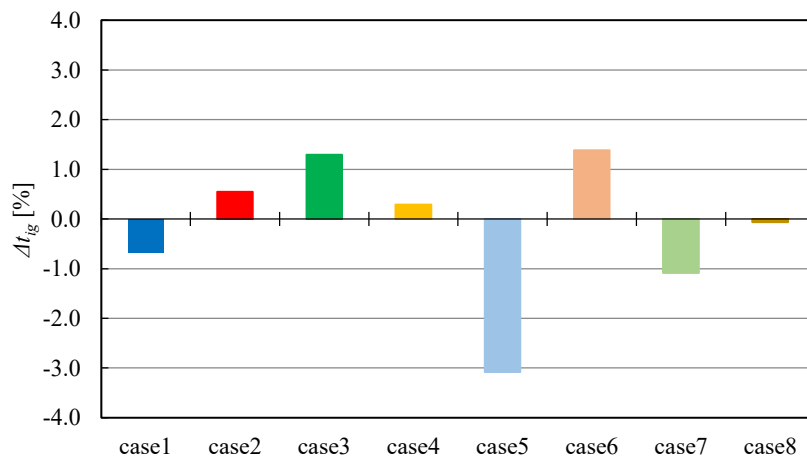


Fig.4-19 Comparison of different ratio of estimated ignition timing ($\Delta\theta_{ig}$) calculated with equation 4-3.

次に、 $\Delta\theta_{ig}$ の傾向に違いの見られた case1 と case5 についてそれぞれの詳細反応計算の結果を比較する。

Case1 の計算結果を図 4-20 に示す。Case1 では TDC は 16.5ms のタイミングであるが、燃焼室筒内の圧力 (p_{exp}) は 1.9MPa まで上昇している。その後、燃焼による圧力上昇により、最大値は 3.3MPa まで上昇していることが実験結果より判っている。この時の燃焼室筒内の未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) の変化と LTO で生成されるホルムアルデヒド (CH_2O) と冷炎及び熱着火中に生成される OH ラジカルのモル分率を比較している。その結果、PRF90 の CH_2O の生成速度は S5R に比べて速く、LTO が大きいことが確認できる。冷炎による OH ラジカルの発生時期も早まっており、ピークの生成量も多くなっている。その後の着火準備期間は、S5R の方が短く、急速に OH が生成されることから、熱着火による温度の上昇や着火時期については PRF90 での計算結果とほぼ同時期になっており、RON の計測条件の詳細反応計算による解析結果と似たような傾向であることが判った。

case5 の計算結果を図 4-21 に示す。Case5 では TDC は 12.5ms のタイミングであるが、燃焼室筒内の圧力 (p_{exp}) は 4.0MPa まで上昇している。その後、膨張行程で一旦圧力が低下するが、その後に燃焼による圧力が再上昇して、最大値は 6.0MPa まで到達している。この時の燃焼室筒内の未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) の変化と CH_2O , OH のモル分率を比較すると、case1 の結果と同様に、PRF90 の方が S5R の結果に対して CH_2O の生成速度が速くなっており、この事に伴い 13.3ms (9ATDC) から温度上昇が始まって着火に至っていることが判る。一方で S5R の計算結果では、13.7ms (14ATDC) から温度上昇が開始しており、着火時期が PRF90 での計算結果に対して遅くなっていることが判った。

Case5 の解析により、圧力が高く温度の低い条件で着火する過給エンジンの運転条件においては、RON の計測条件に比べて混合気の着火時期に LTO がより大きな影響を与えていることが考察された。これは、他の研究機関で報告されている過給ダウンサイズエンジンのノックに対してセンシティブリティ S (=RON-MON) の大きい燃料にてノッキングが起こりにくい傾向と一致する。ただし、case5 の燃焼室筒内の圧力や未燃ガス温度は RON の計測条件と大きく異なることから、燃料の種類によって異なる LTO の圧力や温度の依存性をセンシティブリティのみで表現することが可能かについては、更なる検証が必要である。

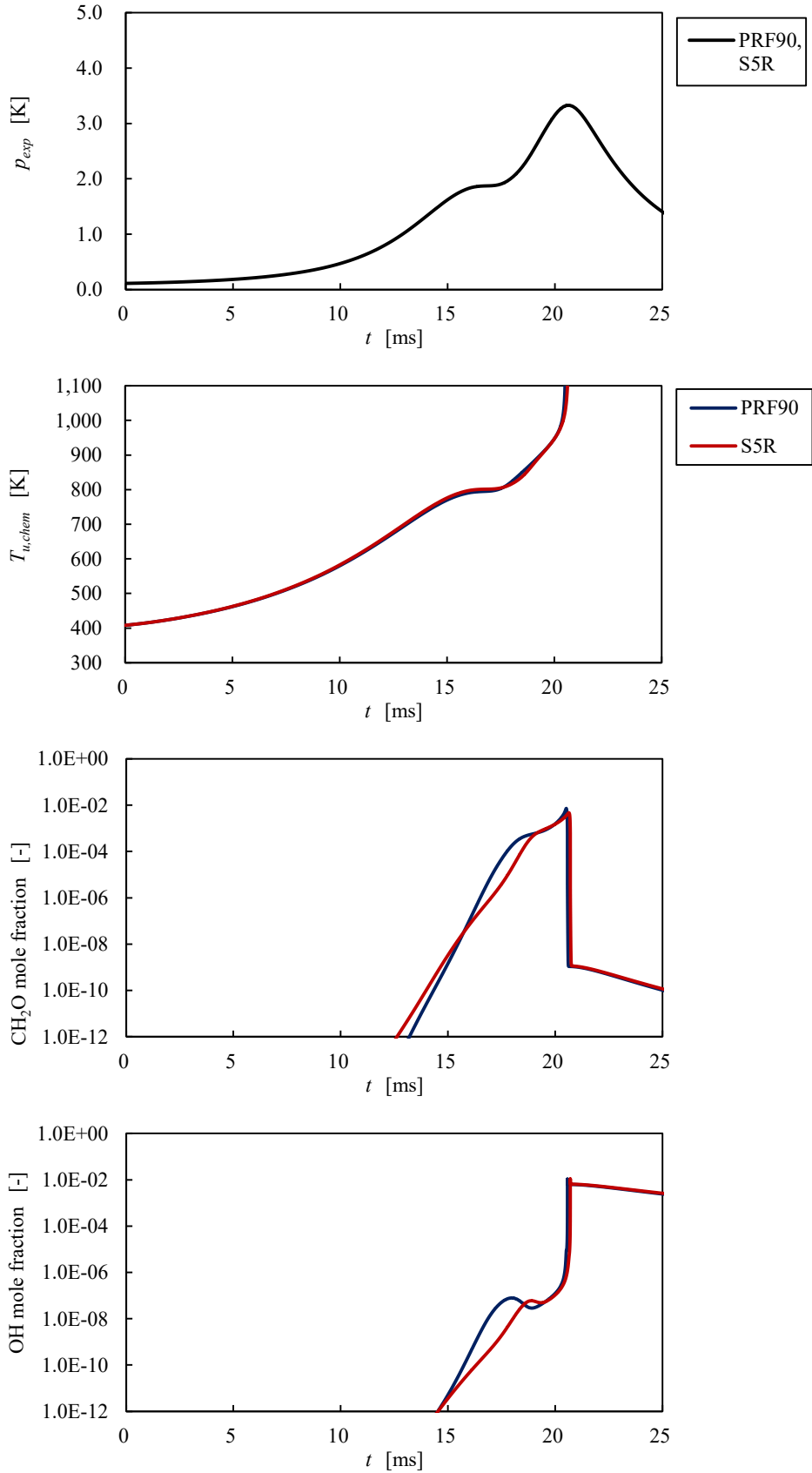


Fig.4-20 Cylinder pressure (p_{exp}), unburned gas temperature ($T_{u,chem}$), CH_2O and OH mole fraction calculated with PRF90 and S5R for case 1 (Engine A (NA), CR10.4, 1200rpm, Fuel 3 (91RON)).

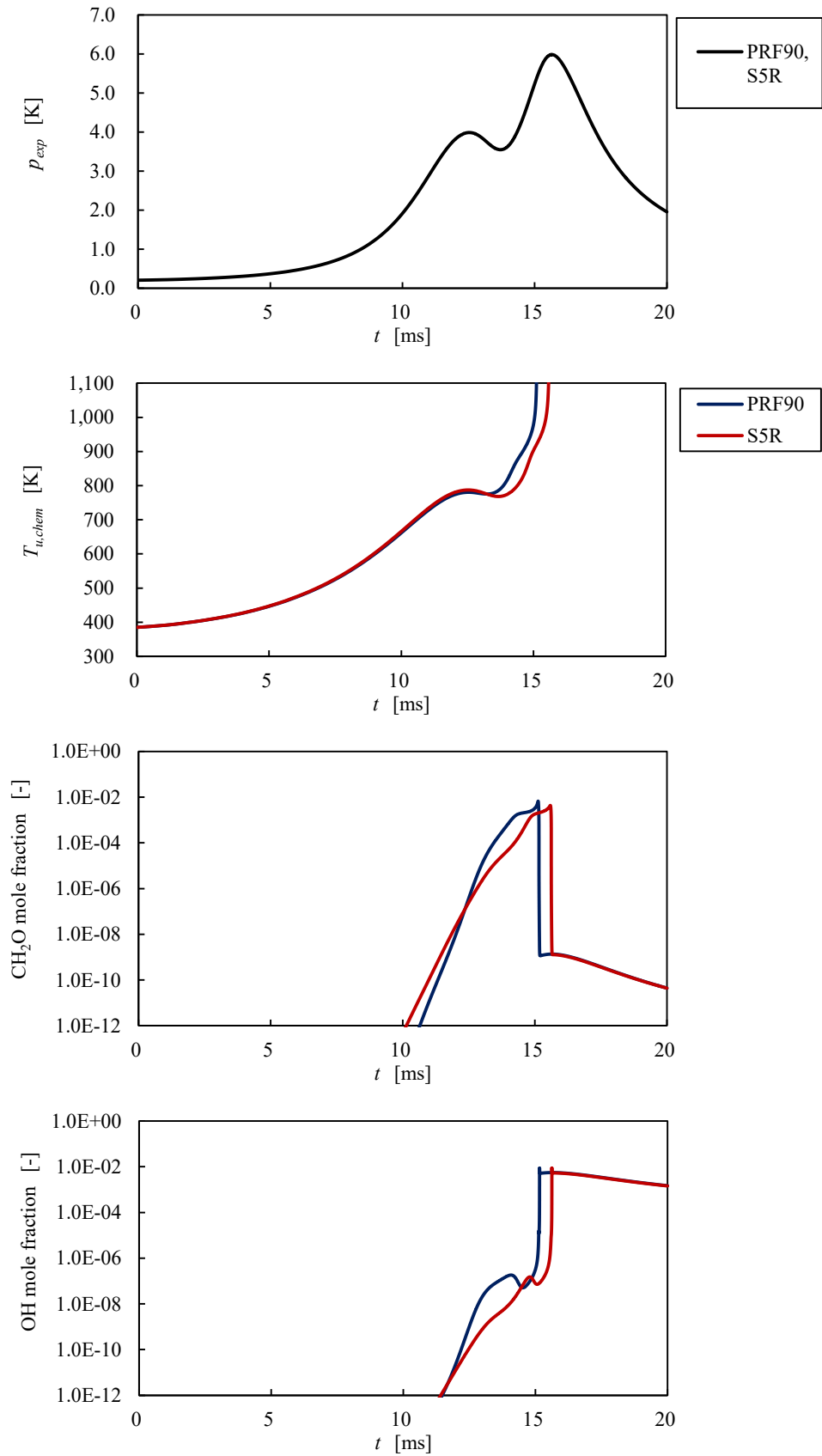


Fig.4-21 Cylinder pressure (p_{exp}), unburned gas temperature ($T_{u,chem}$), CH_2O and OH mole fraction calculated with PRF90 and S5R for case 1 (Engine B (Turbocharged), CR10, 2000rpm, Fuel 3 (91RON)).

図4-22に4.3.1節で作成をした $\Delta\tau_{90RON}$ の p - T マップに case1~6 (Fuel 3 (91RON))の燃焼室筒内圧力 (p_{exp}) と未燃ガス温度 ($T_{u,ad}$) の履歴を重ねて示している. 初期温度には S5R の詳細反応計算により求めた $T_{i,chem,S5}$ を用いている. また同様に, 図4-23には $\Delta\tau_{100RON}$ の p - T マップに case7,8 (Fuel 4 (100RON))の燃焼室筒内圧力 (p_{exp}) と未燃ガス温度 ($T_{u,ad}$) の履歴を重ねて示している. 初期温度には S5H の詳細反応計算により求めた $T_{i,chem,S5}$ を用いている.

圧力履歴による解析結果において PRF の LTO の影響が大きく, S5R の着火時期が PRF の着火時期に対して大きく遅くなる傾向があった case5 では, TDC の時期は $\Delta\tau_{90RON}$ が負の値を取る赤い領域にある. 一方で, case1~6のうち, case5以外において, TDC 時期は白い領域にあり, TDC 以降における燃焼室筒内の圧力と未燃ガス温度の条件での着火遅れ時間差 ($\Delta\tau_{90RON}$) の傾向が, 圧力履歴を用いての詳細反応計算結果の傾向と一致した. 一方で, case7, case8 については TDC 時期が case5 と同様に $\Delta\tau_{90RON}$ が負の値を取る赤い領域にあるが, 圧力履歴を用いての詳細反応計算の結果では, PRF と S5R の着火時期の差が小さかった. これらの条件は, 燃焼による TDC 以降の圧力上昇が大きいために, LTO の温度域を短い時間で通過していることが影響していると考えられる. 今後の課題としては, 混合気の圧力や温度の履歴については時間変化も考慮した検討が必要である. TDC 以降の圧力変化による違いについても検討を継続する.

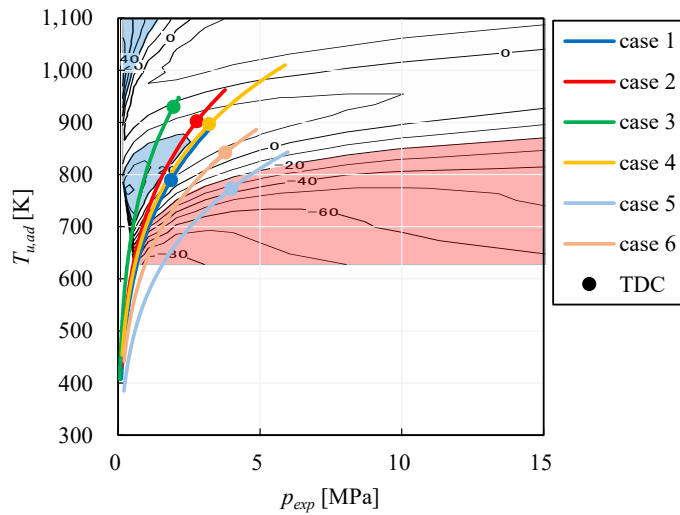


Fig.4-22 Cylinder pressure and unburned gas temperature for each test case (Fuel3) on $\Delta\tau_{90RON}$ p - T map.

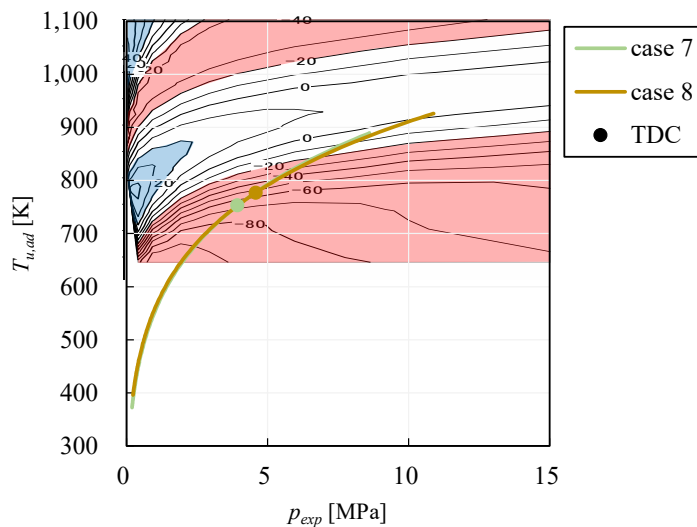


Fig.4-23 Cylinder pressure and unburned gas temperature for each test case (Fuel4) on $\Delta\tau_{100RON}$ p - T map.

今回の検討において、case5に相当する運転条件は、過給ダウンサイズエンジンの低回転でのノッキングの条件であり、近年報告されている、同じRONならMONが低い燃料、即ち、センシティブティの大きい燃料がノッキング抑制では優れているという事象に対応した条件である。また、Appendix2に記載しているが、MONが高いほど起こりにくいことが判っている高速のブレイクニッションについても、今回と同様の考え方をを用いて素反応過程から考察を行なうことで、説明をつけることが可能であると考えられる。ただし、 p - T マップ上には、エンジンでの検証ができていない領域があることや、時間の概念を考慮できていないなどの課題があることから、継続した検討が必要である。

4.5 結論

RON や MON の計測に使用している標準燃料 (PRF90, PRF100) と国内の市販ガソリンを模擬したサロゲート燃料 (S5R, S5H) の着火特性について詳細反応機構を用いて比較を行なったところ、以下の知見を得た。

標準燃料 (PRF)、サロゲート燃料の着火遅れ時間を比較すると、どちらも圧力や温度が高くなると指数関数的に短くなる傾向がある。しかし、PRF では 700K から 900K の温度域で温度が上がっても着火遅れ時間が大きく変化しない領域である負の温度係数 (NTC) 領域であり、サロゲート燃料に比べて低温酸化反応 (LTO) の影響が大きいことが明らかになった。サロゲート燃料においては、PRF のようなはっきりとした NTC 領域は見られなかった。

次に、RON と MON の計測条件について圧力の時間履歴や圧力温度条件について検討を行い、標準燃料 (PRF) とサロゲート燃料の着火特性を比較した。その結果、RON の計測条件は、MON の計測条件に比べて温度の低い条件で運転されており、エンジン回転速度が低いことから、着火までの時間が長いことが確認できた。詳細反応計算の結果からも、PRF の混合気は、RON の計測条件では LTO の影響を大きく受け、MON の計測条件では、サロゲート燃料と比べて LTO が同等であることが示されている。つまり、RON は LTO の有無を含んだ指標であり、MON はその影響が小さい指標であることが判る。また、この結果からセンシティブリティ $S (=RON-MON)$ の大きさについても考察すると、センシティブリティは RON の計測条件における混合気の LTO の影響の大きさに依存すると考えられ、LTO の影響が大きい混合気ほど燃料のセンシティブリティは負の値を取り、LTO の影響が小さい混合気ほど燃料のセンシティブリティは正の大きな値を取ることが推察される。

同様に様々なエンジン運転条件でのノッキングの発生条件について、同様の比較を行なったところ、過給ダウンサイズエンジンの低回転のノッキングの条件では PRF90 の LTO がサロゲート燃料 (S5R) に対して非常に大きく、着火時期が 5.6CA 相当早まることが計算から示された。文献等で報告されている同じ RON なら MON が低い燃料、すなわちセンシティブリティの大きい燃料がノッキング抑制では優れているという事象に対応した結果であり、この事象を素反応論的に説明できた例である。

一方で、市販ガソリンを模擬したサロゲート燃料と PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) p - T マップの比較から、LTO の影響が小さいサロゲート燃料では、温度の低い領域では PRF に対して着火遅れ時間が長くなる傾向があり、圧力が低く温度の高い領域では着火遅れ時間が短くなる条件があることが判った。着火遅れ時間の差が 20%以上ある領域を優位な差として示した着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) p - T マップにエンジンの運転条件を重ねることで、ノッキングの起こりやすさにたいする燃料の指標の傾向が簡易的に推定できる可能性が示唆されている。

ただし、 p - T マップ上には、エンジンでの検証ができていない領域があることや、詳細反応計算での比較とは異なり時間の概念を考慮できていないなどの課題がある。そこで、今後更なる検討を加えることで、予測精度を向上させて、エンジン開発段階で燃料影響を推定できるツールに成長させていくことが望まれる。

第5章 Livengood-Wu (LW) 積分によるノッキング発生時期の予測手法の改良

5.1 はじめに

第4章までの検討により、0次元の詳細反応計算を行うことでノッキングの発生に対するエンジン運転条件の相違や燃料の RON が素反応に与える影響が明らかになった。また、市販ガソリンを模擬したサロゲート燃料を用いることで、エンジン運転条件の違いにより、燃料の指標が異なること、即ち、エンジンの運転条件によって、RON だけではなく、センシティブリティ $S (=RON-MON)$ や MON が影響する領域を明らかにし、素反応論からの考察を加えた。また、PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta\tau$) の $p-T$ マップを作成することで、入手しにくい燃料や評価が難しいエンジン運転条件での燃料の着火特性についても推定することが可能になってきていることが判る。

一方で、エンジン開発においては1次元や3次元 CFD 計算が主流であり、計算時間がかかる詳細反応計算を適用することは難しい。その為に、Livengood-Wu 積分 (Livengood, et. al., 1955) (以降 LW 積分と表記) とよばれる手法がノッキングの発生時期を予測する方法として多用されている。

式(5-1)に、LW 積分でのノック発生時期 (t_{knock}) を算出するのに用いられている式を示す。

$$\int_{t=0}^{t=t_{knock}} \frac{1}{\tau} dt = 1.0 \quad (5-1)$$

ここで τ は M.I.T. 急速圧縮装置 (Massachusetts Institute of Technology Rapid Compression Machine) を用いて計測した着火遅れ時間を用いている。Livengood らによると式 (5-1) は次のようにして求められた。

まず、ノッキングの発生は混合気の着火にいたる反応であることからある反応時間における反応生成物 x の反応速度を式 (5-2) で示している。

$$\frac{d(x)}{dt} = f_1(p, T, t), f_2(\Phi, \text{chemical composition, etc}) \quad (5-2)$$

- p : 混合気圧力
- T : 混合気温度
- t : 反応時間
- Φ : 当量比

X の反応速度は式 (5-2) に示すように混合気の組成や温度、圧力で異なる。そこで、図 5-1 のように規格化をして相対速度を用いると、式 (5-3) を導くことができる。

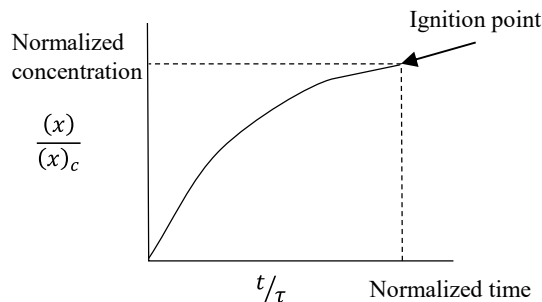


Fig.5-1 Relative time and concentration for auto-ignition.

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{(x)}{(x)_c} \right] = f \left(\frac{t}{\tau} \right) \quad (5-3)$$

式 (5-3) より式 (5-4) を導ける.

$$\frac{(x)}{(x)_c} = \int_{t=0}^{t=t_e} f \left(\frac{t}{\tau} \right) dt = 1.0 \quad (5-4)$$

ここで、反応速度が一定だと仮定すると、式 (5-5) が成り立つので、式 (5-1) が成立すると考えられる.

$$f \left(\frac{t}{\tau} \right) = \frac{1}{\tau} \quad (5-5)$$

この概念は 1950 年代に提案されたものであり、混合気の温度、圧力、当量比に対する着火遅れ時間 $\tau(T, p, \Phi)$ を(5-1)式で積分をする単純なものであるが、その後、様々なエンジンにおけるノッキングの例に適用されて、経験的にノッキングの予測に有効であることが示されてきた (Douaud, 1978).

また、最近では詳細反応計算を用いた検討や検証も行われている. 安東らは LW 積分で算出している”x”に関する考察をしており、積分値は熱発生量と相関があることを示した(Ando, et. al., 2009a).

佐藤らは、素反応数値計算を用いて、予混合圧縮自己着火 (Homogeneous Charge Compression Ignition: HCCI) エンジンにおいて LW 積分の着火遅れ時間モデルの検証を行った (Sato, et. al., 2005). その結果、メタンのような NTC 領域の存在しない分子では着火遅れ時間はほぼ一致したが、NTC 領域の存在する DME, n-Butane では、初期温度が NTC 領域よりも低い時に、両者から算出した着火遅れ時間に大きな乖離が生じることを報告している. 中野らは、同様の検討を火花点火 (Spark Ignition: SI) エンジンのノッキングに対しても解析している (Negoro, et. al., 2014, Nakano, et. al., 2015). その結果、Douand らの着火遅れ時間を用いた LW 積分は、ノッキングの発生時期を良く表しているが、更に、詳細反応機構を用いて計算したガソリンサロゲート燃料の着火遅れ時間を組み合わせることで、更に高いノッキングの予測精度を実現出来ることが考えられる.

三好は 0 次元詳細化学反応計算で求めた着火時期と、詳細化学反応計算により求めた着火遅れ時間を用いた LW 積分値による着火時期を比較することで、800K から 900K 程度で起こる混合気の連鎖着火が支配的なノッキングについては、式 (5-1) が成立するという検討結果を示した. 一方で、それよりも高温で起こる連鎖縮退反応、すなわち熱着火準備期間の反応に対しては、積分値が定量性を持たないことを示唆している. (Miyoshi, 2017a).

また、最近では、LW 積分の着火遅れ時間の式を、EGR 燃焼に拡張させた研究(Hopke, et. al., 2012)や、LES (Large Eddy Simulation) などの 3 次元 CFD 計算に適用したもの (Rechard, et. al., 2009, Lafossas, et. al., 2002) などで多岐にわたって使用されている.

本章では、第 2 章、第 3 章で得られた実験結果と計算結果を用いて、LW 積分によるノッキングの発生時期の予測を行なう. また、実験結果と比較をしながら混合気の温度の設定や着火遅れ時間の算出方法について検討を行い、LW 積分を用いたノッキング発生時期の予測精度を向上させることを目的とする.

5.2 LW 積分を用いたノッキング発生時期の計算方法

5.2.1 計算に用いた実験結果

第 5 章での LW 積分の解析には、第 2 章で行なったエンジン実験の結果を用いている。

5.2.2 LW 積分の算出

ノッキング発生時期の予測には、式 (5-1) に示す、LW 積分を用いている。積分開始時期は IVC (吸気バルブ閉じ時期) とし、積分刻み(dt)は ICA としている。

$$\int_{t=0}^{t=t_{knock}} \frac{1}{\tau} dt = 1.0 \quad (5-1)$$

5.2.3 着火遅れ時間の算出

LW 積分に使用する着火遅れ時間 $\tau(T, p)$ は、温度 T 、圧力 p に設定された混合気が着火に至るまでに要する時間を用いている。第 4 章の結果のように市販ガソリンを想定すると、地域による成分の違いや混合気の温度圧力の条件によって非線形な着火特性を持っているが、エンジンの開発の現場では温度、圧力、当量比、RON などの関数として表すことが一般的である。

今回の検討では、着火遅れの算出式の中でも、古くから一般的に使用されている Douaud らによって導かれた式 (5-6) を用いて着火遅れ時間 τ_0 を算出した(Douaud, 1978)。式 (5-6) は、混合気の温度 (T) と圧力 (p) および燃料の RON の関数となっている。前述したように反応生成物 x の反応速度である式 (5-2) がアレニウスの式で表現できると仮定して、その衝突頻度を圧力と RON の関数、活性化エネルギーを係数として表す形をとっている。

$$\tau = Ap^{-n} \exp\left(\frac{B}{T}\right) \quad (5-6)$$

$$A = c \left(\frac{RON}{100}\right)^d$$

$$B = 3800$$

$$c = 0.01869$$

$$d = 3.4017$$

$$n = 1.7$$

$$\tau[\text{s}], p[\text{kgf/cm}^3], T[\text{K}]$$

本章において計算に用いる混合気の温度と圧力は、第 2 章、第 3 章と同じ方法で求めている。圧力は、クランク角 (θ) に対して実験で得られた 200 サイクルの燃焼室筒内平均圧力 (p_{exp}) を、温度は断熱圧縮の式 (2-5) により求めた燃焼室内の未燃ガスの温度 ($T_{u,ad}$) とした。初期温度 (T_i) は、第 2 章で使用している状態方程式 (2-3) から算出した $T_{i,st}$ と、第 3 章で算出した詳細反応計算から求めた $T_{i,chem}$ を使用している。

ノッキングの発生時期についても、第 2 章、第 3 章で定義したノッキング発生時期(θ_{knock} , t_{knock})を使用している。これは、筒内圧力が最大となる時期であり、トレースノック点の 200 サイクル分の筒内圧力のうち、ノッキングが実際に発生したサイクルを抽出して調べたところ、ノッキングの発生時期が、そのサイクルの筒内圧力の最大値の時期にほぼ一致することを確認しているためである。

また、式 (5-6) には温度や圧力以外に、 $A(c,d)$, B , n という3つの係数が用いられている。この係数は、式 (5-6) を適用する温度と圧力の範囲によって変化することが推定されることから、今回の検討では、これらの係数についても最適化を行う試みを実施した。係数 $A(c,d)$, B , n の最適化には、実験で得られたノッキング発生時期(t_{knock})の LW 積分値を算出し、ノッキングの発生時期の定義である積分値 (=1) からの分散の値(var)を式 (5-7)で算出し、この値が最小値をとるように式 (5-6) の係数 $A(c,d)$, B , n を算出した。こうして得られた着火遅れ時間を、 $\tau_{D,fit}$ と記載する。

$$var = \frac{1}{N} \times \sum_{i=1}^N \left[\int_{t=0}^{t=t_{knock}} \frac{1}{\tau} dt - 1 \right]^2 \quad (5-7)$$

着火遅れ時間の3つ目の算出方法としては、詳細反応計算を用いて算出した PRF の着火遅れ時間 τ_{chem} を用いている。詳細反応機構には第3章で用いた LLNL Gasoline Surrogate Detailed Mechanism (Mehl, et. al., 2011, LLNL, 2017) を用いており、第3章と同様に評価に用いた燃料の RON に対応した PRF を用いている (表3-2)。

混合気の着火遅れ時間の計算方法は、第4章と同様に CHEMKIN-PRO の Closed Homogeneous Batch Reactor を用いて行っている。計算方法は、初期条件として温度と圧力、混合気組成を入力した後に、定容容器を仮定して、容積一定の条件で計算している。着火遅れ時間は、混合気の温度が 1500K に達するまでにかかる時間とした。表 5-1 に計算条件を示す。

Table5-1. CHEMKIN-PRO calculation settings for ignition delay time

Mechanism	LLNL Gasoline Surrogate Detailed mechanism
Reactor	Closed Homogeneous batch Reactor
Problem Type	Constrain Volume and Solve Energy Equation
Heat Loss	none
Pressure	0.1MPa – 8MPa
Temperature	640K – 1100K
Equivalence Ratio	$\phi=1$

図 5-2 に詳細反応計算により算出された(a) PRF75, (b) PRF83, (c) PRF91, (d) PRF100 の着火遅れ時間 (τ_{chem}) を示す。RON が低い PRF ほど着火遅れ時間が短くなっている。また、900K 以上の高温域においては、着火遅れ時間が指数関数的に短くなるのに対して、900K 以下の領域では、温度が高くなっても着火遅れ時間が短くならない負の温度係数 (NTC) 領域が生じている。また、NTC は圧力が低い条件ほど顕著であり着火遅れ時間も長くなる傾向があるが、特に、750K 以下の反応については 3MPa 以上で圧力の感度が小さくなり、着火遅れ時間が等しくなることも特徴的である。

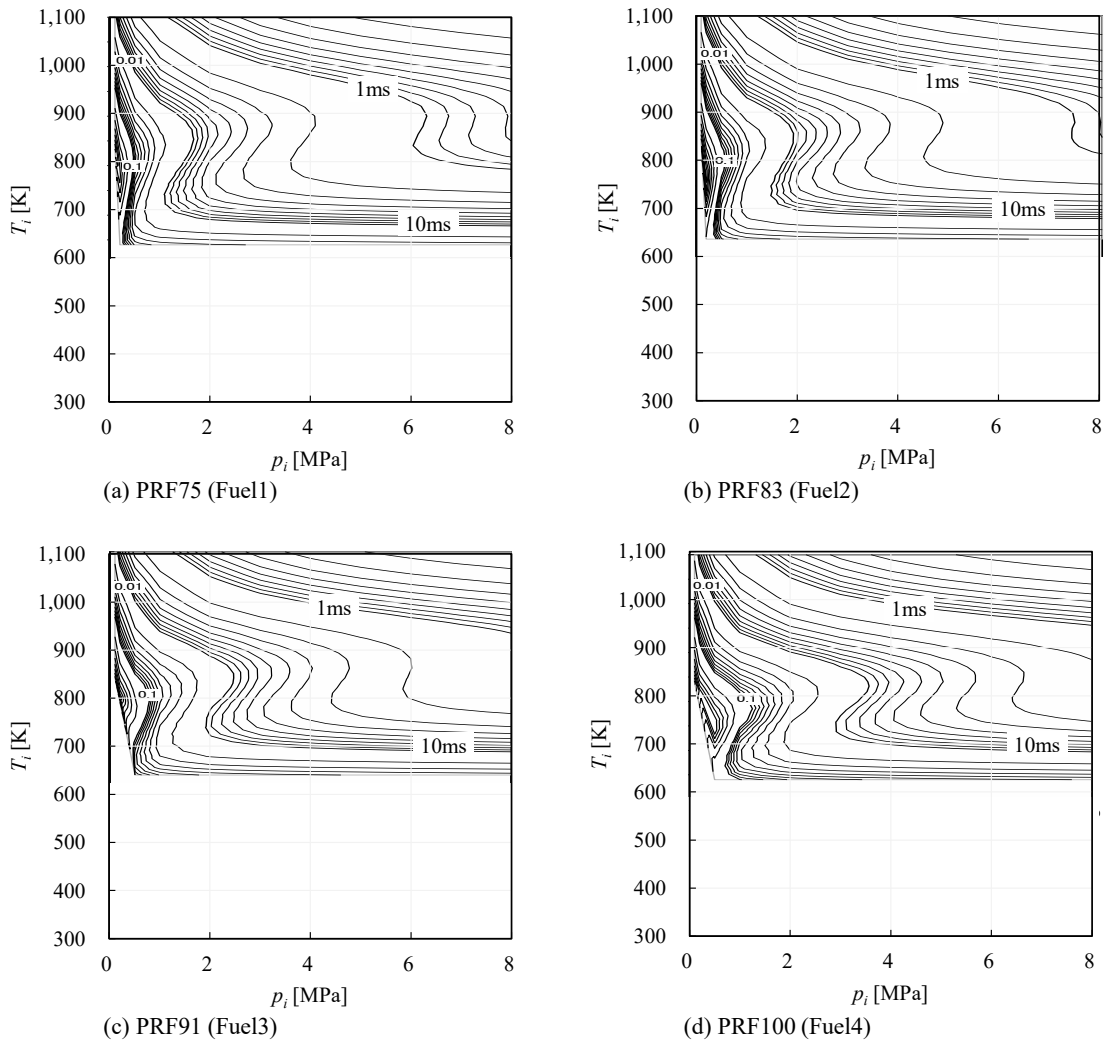


Fig.5-2 Ignition delay time calculated by detail reaction calculation (τ_{chem}) for each PRF.

5.3 LW 積分によるノッキング発生時期の予測結果と考察

LW 積分に用いた初期温度 (T_i) と着火遅れ時間の組み合わせを表 5-2 に示す. それぞれの結果について考察する. ノッキング予測の計算は, IVC から EVC の 149ATDC まで行っている.

Table 5-2. Condition for LW integral calculation

case	1	2	3	4	5
T_i [K]	$T_{i, st}$	$T_{i, st}$	$T_{i, chem}$	$T_{i, chem}$	$T_{i, chem}$
τ [s]	τ_D	$\tau_{D, fit}$	τ_D	$\tau_{D, fit}$	τ_{chem}

5.3.1 case1 (初期温度 $T_{i, st}$, Douaud の着火遅れ時間 (τ_D) の場合)

Case1 では, 状態方程式から算出した初期温度 ($T_{i, st}$) と, 式 (5-6) で求めた Douaud の着火遅れ時間 (τ_D) を用いて LW 積分によりノッキング発生時期の算出を行なっている. 図 5-3 にエンジン回転数, 圧縮比, RON の異なる 48 ケースで算出したノッキングの発生予測時期 ($\theta_{predicted}$) と実験で得られたノッキング発生時期 (θ_{knock}) との差を示しており, 0 に近いほど LW 積分によるノッキングの発生予測精度が高いことを示している. また, 正の値はノッキングの発生予測時期 ($\theta_{predicted}$) が実際のノッキング発生時期よりも遅くなる場合を示しており, 負の値はノッキングの発生予測時期が実際のノッキング発生時期よりも早くなる場合を示している. Case1 では, 48 条件のうち 18 条件で積分値が実際のノッキング発生時期の $\pm 60\text{CA}$ 以内に 1 に達し, ノッキングの発生時期を予測することが出来ている. 予測出来ていない条件は, ノッキング発生時期 (θ_{knock}) から 60CA 以内のタイミングまでに積分値が 1 に至らなかったことを示している. また Case1 では, ほぼ全ての条件で実際のノッキング発生時期 (θ_{knock}) がノッキング発生予測時期 ($\theta_{predicted}$) よりも早くなっていた. 特に, 高回転側の条件においてはその傾向が大きいことが判った.

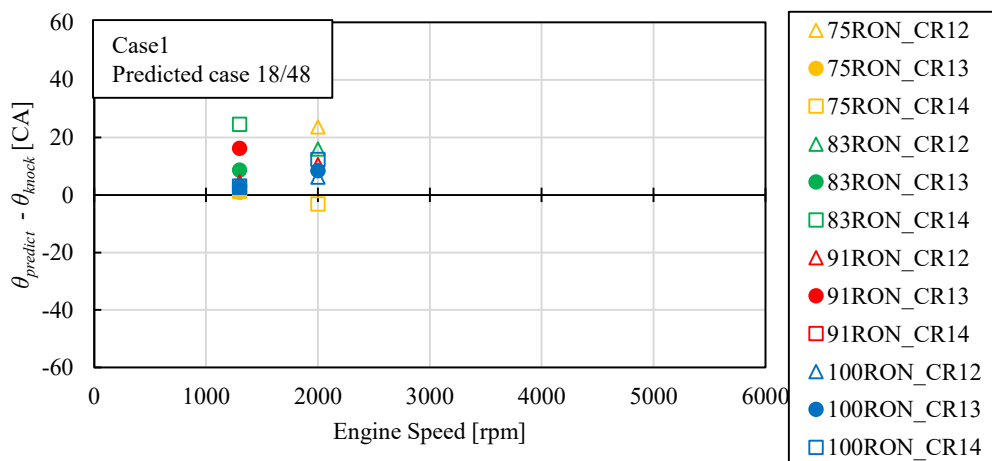


Fig.5-3 Difference of the predicted knocking timing ($\theta_{predicted}$) and experimental knock timing (θ_{knock}). The prediction is conducted by using Livengood-Wu integral with initial temperature calculated by state equation ($T_{i, st}$), and ignition delay time is calculated by Douaud's equation with original coefficient (τ_D).

5.3.2 case2 (初期温度 $T_{i, st}$, Douaud の着火遅れ時間の係数を最適化させた場合 ($\tau_{D, fit}$))

Case1 のノッキング発生時期の予測では、LW 積分が 1 に到達せず、ノッキングを予測出来ていないケースが多くなっている。要因のひとつには、式 (5-6) で求めた Douaud の着火遅れ時間 (τ_D) が今回の運転条件におけるエンジン燃焼室内の混合気の着火遅れ時間の特性を表現出来ていないためと考えられる。

そこで、case2 では、式 (5-6) の係数について式 (5-7) で計算される分散の値が最小となるように調整を行っている。その結果、A の算出に用いた c, d は、 $c=0.017, d=2.6$ と式 (5-6) に対して小さい値をとった。B, n についてはそれぞれ 3700, 1.8 と変更は小さかった。これらの係数により着火遅れ時間が短くなっている。この結果、分散 (var) の平均値は、case1 で 0.19 だったのに対して、case2 では 0.07 まで減少している。

Case2 の各条件におけるノッキング発生予測時期 ($\theta_{predicted}$) とノッキング発生時期 (θ_{knock}) の差を図 5-4 に示す。実際のノッキング発生時期の $\pm 60\text{CA}$ 以内に 1 に達しノッキングが予測出来ている条件は、case1 では 18 条件だったが、case2 では 42 条件にまで増加している。一方で、エンジン回転速度が低い条件ほどノッキングの発生予測時期は実際のノッキング発生時期よりも早く予測されており、回転速度が高い条件では、ノッキングの発生予測時期は実際のノッキング発生時期よりも遅く予測されることが判る。

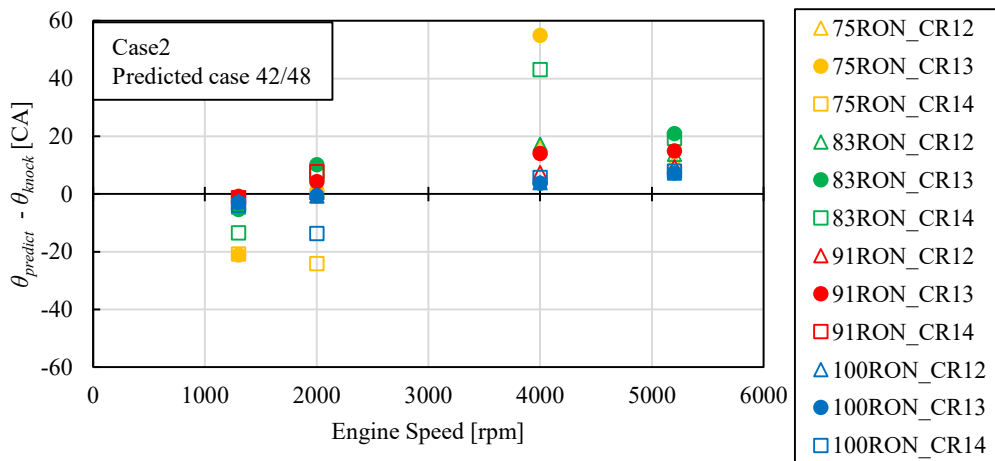


Fig.5-4 Difference of the predicted knocking timing ($\theta_{predicted}$) and experimental knock timing (θ_{knock}). The prediction is conducted by using Livengood-Wu integral with initial temperature calculated by state equation ($T_{i, st}$), and ignition delay time is calculated by Douaud's equation with modified coefficient ($\tau_{D, fit}$).

5.3.3 case3 (初期温度 $T_{i,chem}$, Douaud の着火遅れ時間 (τ_D) の場合)

Case1,2 の結果より, 回転速度が大きく異なると, 式 (5-6) の着火遅れ時間を用いた LW 積分によるノッキング発生時期の予測が難しいことが判った.

第3章での詳細反応計算を用いた検討では, エンジン回転速度が速いほど, ピストン速度は高速化し, 混合気の圧縮開始からノッキング発生までにかかる時間は短くなる. その為に, 同じ温度圧力を経ても CH_2O などの生成速度は遅くなり, ノッキングが起こりにくくなっていることが考察された. また, 詳細反応計算から推定された初期温度 ($T_{i,chem}$) はエンジン回転速度が高い条件ほど高くなっており, 状態方程式により算出した初期温度 ($T_{i,st}$) と異なる傾向を示すことも判っている.

式 (5-1) の LW 積分での計算ではエンジン回転速度の違いによる反応速度の違いを考慮することは難しい. そこで, 今回の検討では, 第3章で算出した詳細反応計算から推定された初期温度 ($T_{i,chem}$) のみを考慮して, 予測精度の向上を試みる. 燃焼室内の未燃ガス温度 ($T_{u,chem}$) は詳細反応計算から推定された初期温度 ($T_{i,chem}$) を用いて算出した. 着火遅れ時間の計算は式 (5-6) を用いており, 係数も Douaud のものを用いている. LW 積分での結果は, 詳細反応計算で初期温度 ($T_{i,chem}$) を算出している 20 条件の結果を用いている.

Case3 の各条件におけるノッキング発生予測時期 ($\theta_{predicted}$) とノッキング発生時期 (θ_{knock}) の差を図 5-5 に示す. 計算を行った全ての条件でノッキング発生時期を予測することが出来ており, case1, 2 と比較して, 高回転でのノッキングの予測精度が高くなっていることが判る. 一方で, オクタン価が低くなるほど, ノッキングの発生時期が早く予測される傾向がある. また, 回転速度についての傾向は, case1, 2 に対して改善されているものの, 回転速度が低い条件ではノッキングの発生予測時期が早く予測される傾向がある.

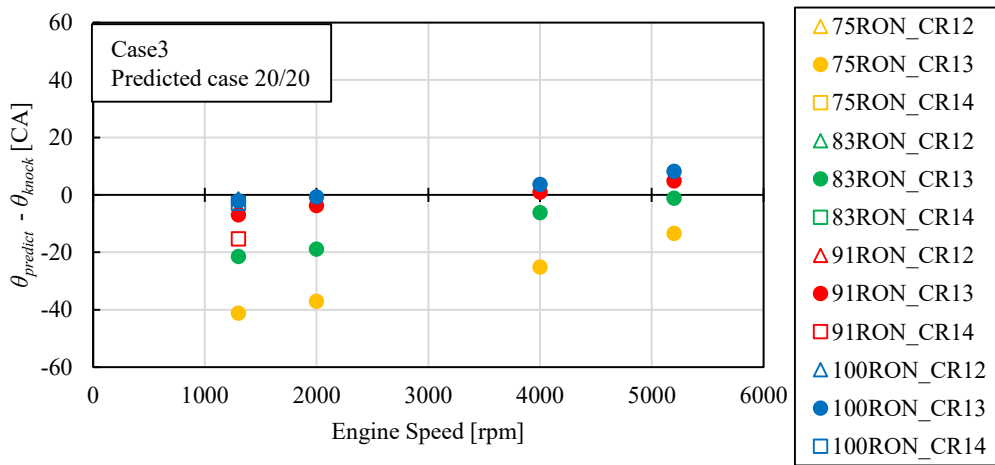


Fig.5-5 Difference of the predicted knocking timing ($\theta_{predicted}$) and experimental knock timing (θ_{knock}). The prediction is conducted by using Livengood-Wu integral with initial temperature estimated by detail reaction calculation ($T_{i,chem}$), and ignition delay time is calculated by Douaud's equation with original coefficient (τ_D).

5.3.4 case4 (初期温度 $T_{i,chem}$, Douaud の着火遅れ時間の係数を最適化させた場合 ($\tau_{D,fit}$))

Case4 では、初期温度に詳細反応計算により予測した温度 ($T_{i,chem}$) を用いることで、回転速度が高い領域のノッキング予測精度が向上することを確認出来た。しかし、オクタン価が低くなるほど、ノッキングの発生時期が早く予測される傾向があるなど、予測値と実測値の差が 40CA 以上ずれる点もあることから、case2 と同様に、式 (5-6) の係数について式 (5-7) で計算される分散の値が最小となるように調整を行っている。その結果、A の算出に用いた c, d は、 $c=0.014, d=1.4$ と式 (5-6) に対して小さい値をとった。B, n についてはそれぞれ 3850, 1.6 と変更は小さかった。これらの係数により着火遅れ時間が長くなっている。

Case4 の各条件におけるノッキング発生予測時期 ($\theta_{predicted}$) とノッキング発生時期 (θ_{knock}) の差を図 5-6 に示す。着火遅れ時間の係数を最適化することにより、式 (5-7) でもとめられる分散の値は、case3 の 0.28 から 0.05 まで小さくなった。とくに、case3 に比べて、燃料の RON が低い条件の予測精度が向上している。しかし、回転速度の影響については、他のケースと同様にエンジン回転速度が低いところでは早めに予測されて、回転速度が高いところでは遅めに予測される傾向がある。

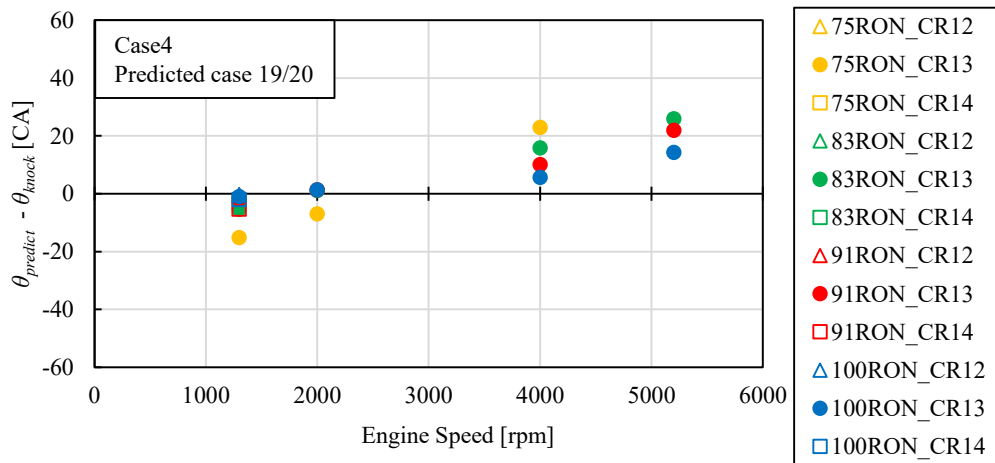


Fig.5-6 Difference of the predicted knocking timing ($\theta_{predicted}$) and experimental knock timing (θ_{knock}). The prediction is conducted by using Livengood-Wu integral with initial temperature estimated by detail reaction calculation ($T_{i,chem}$), and ignition delay time is calculated by Douaud's equation with modified coefficient ($\tau_{D,fit}$).

5.3.5 case5 (初期温度 $T_{i, chem}$ 詳細化学反応計算による PRF の着火遅れ時間 (τ_{chem}) の場合)

前章までに考察してきたように、高圧縮比エンジンや、低オクタン価燃料の運転においては、ノッキングが発生しやすくなることから点火時期を遅角しており、燃焼による圧力上昇が小さいことから、混合気の未燃ガスは圧力と温度が低い緩慢な状態を経てノッキングにいたることが判っている。点火時期が遅角している運転条件においては、燃焼重心も遅くなることからノッキングの発生までにかかる時間が長期化している。これは、Douaud らが検証した当時のエンジンのノッキング特性とは異なることが予測されるため、更に考察を加えた。

まず初めに、case4 で用いた着火遅れ時間 ($\tau_{D,fit}$) と詳細化学反応により計算をした着火遅れ時間 (τ_{chem}) についての比較を行った。図 5-7 に圧力を 3MPa とした時の、温度に対する着火遅れ時間の結果を示す。詳細化学反応機構を用いて計算をした着火遅れ時間は、1000K 以下の温度では、RON によってそれぞれ異なる値を取っている。特に、700K から 950K の間における負の温度係数領域においては、一桁に近い着火遅れ時間の差が生じている。一方で、case4 で使用した着火遅れ時間は、RON に対する着火遅れ時間の差が小さい。また、case4 で使用した着火遅れ時間は、詳細化学反応メカニズムを用いて計算をしたものに対して、温度に対する傾きが小さいことが判る。

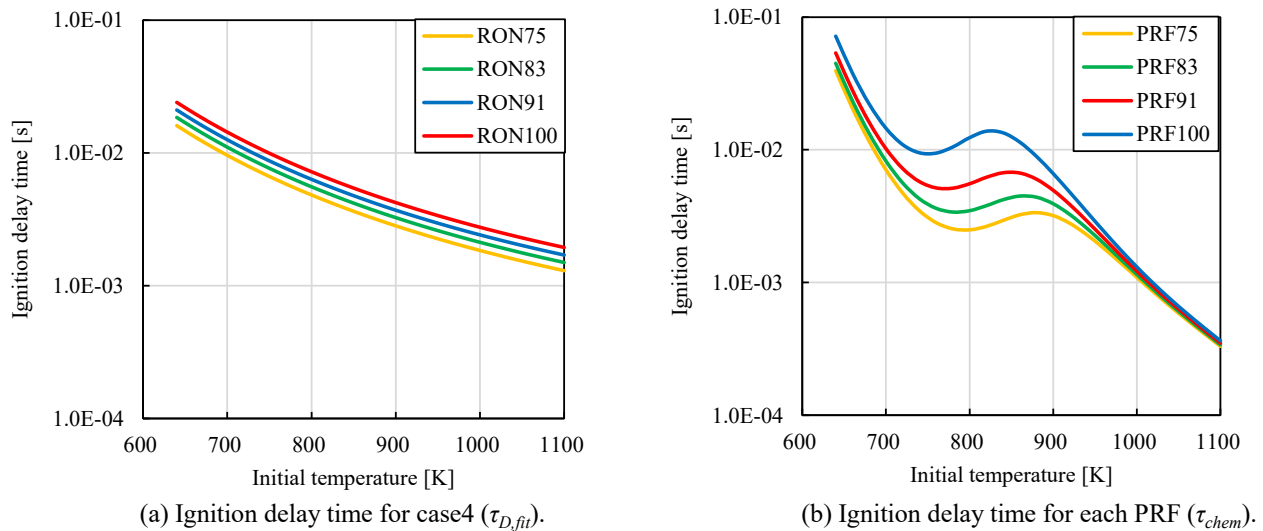


Fig.5-7 Ignition delay time at 3MPa with various temperature.

図 5-8 に着火遅れ時間の p - T マップを比較する。図 5-7 と同様に、case4 で用いた着火遅れ時間 ($\tau_{D,fit}$) と詳細化学反応により計算をした PRF91 の着火遅れ時間 (τ_{chem}) についての比較を行った。また、エンジンの実験条件のうち、CR13, 5200rpm, Fuel3 (91RON) で計測した時の燃焼室筒内の圧力 (p_{exp}) と未燃ガス温度 ($T_{u,ad}$) の履歴も重ねている。Case4 の着火遅れ時間 (a) は、詳細化学反応により計算をした着火遅れ時間 (b) に対して、圧力に対する感度が大きく、温度に対する感度が小さいことを示している。しかしながら TDC 付近から最高圧力に到達する時期の着火遅れ時間についてはほぼ同等であり、そのために、LW 積分の計算がノッキングをよく表現できていると考えられる。

case4 で用いた着火遅れ時間 ($\tau_{D,fit}$) は温度に対する感度が小さいことから、回転速度の差のような温度の変化に対して圧力の変化が小さい運転条件では、感度が小さく見積もられていると予測される。また、負荷の変更や過給圧の変更では混合気の圧力温度履歴が大きく変化することから、条件毎に係数を変更することが必要となることも推察される。

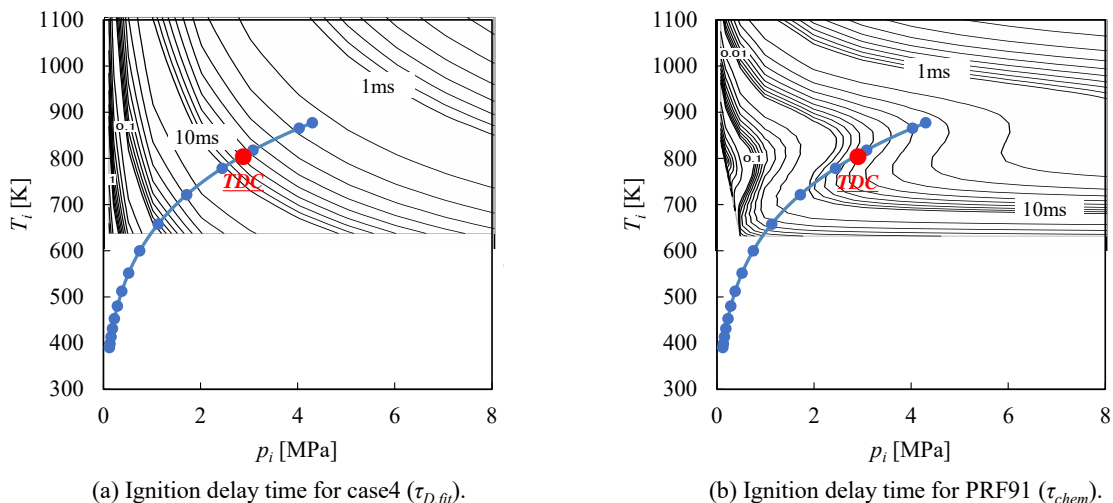


Fig.5-8 Ignition delay time p - T map for case4 and PRF91. Cylinder pressure and temperature history of air fuel mixture. Experimental condition is CR13, 5200rpm and fuel 3(91RON).

Case5 では、詳細化学反応計算により算出した着火遅れ時間 (τ_{chem}) を用いて、LW 積分値を算出し、ノッキング発生時期を予測することとした。

Case5 の各条件におけるノッキング発生予測時期 ($\theta_{predicted}$) とノッキング発生時期 (θ_{knock}) の差を図 5-9 に示す。ノッキング発生予測時期と実際のノッキングの時期との乖離は全ての条件において 15CA 以内である。特に、Fuel 2 (83RON), Fuel 3 (91RON), Fuel 4 (100RON)については 7CA 以内となっており、回転速度が変化をしてもノッキングの予測精度に大きな差は生じなくなることが判る。

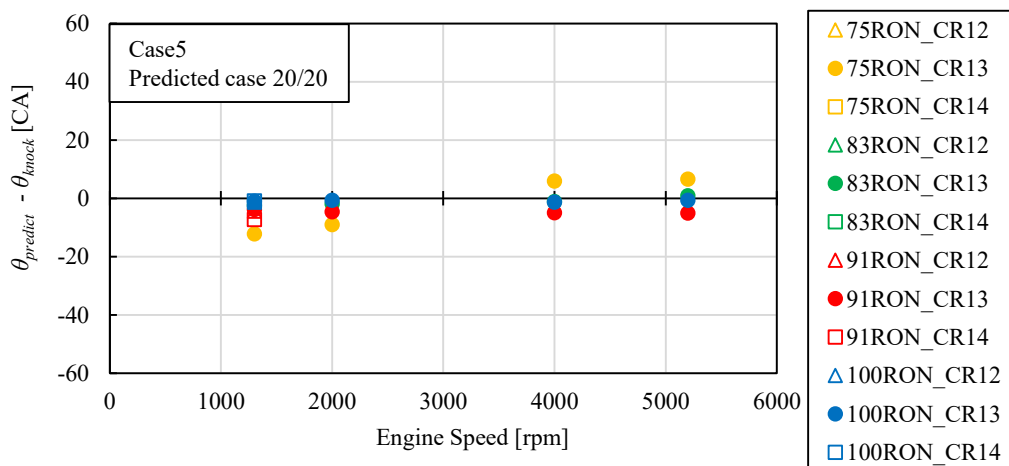


Fig.5-9 Difference of the predicted knocking timing ($\theta_{predicted}$) and experimental knock timing (θ_{knock}). The prediction is conducted by using Livengood-Wu integral with initial temperature estimated by detail reaction calculation ($T_{i,chem}$), and ignition delay time is calculated by detail reaction calculation (τ_{chem}).

また、実験において得られた実際のノッキング発生時期とノッキングの予測時期との関係を図 5-10 に示す。Case5 において、予測値の乖離が大きくなった Fuel 1 (75RON) では、ノッキングの発生時期が 37ATDC 以降であり、TDC からは大きく遅れた時期となっている。このような条件下においては、LW 積分によるノッキング発生予測が有効であるかどうかは、今後の課題である。

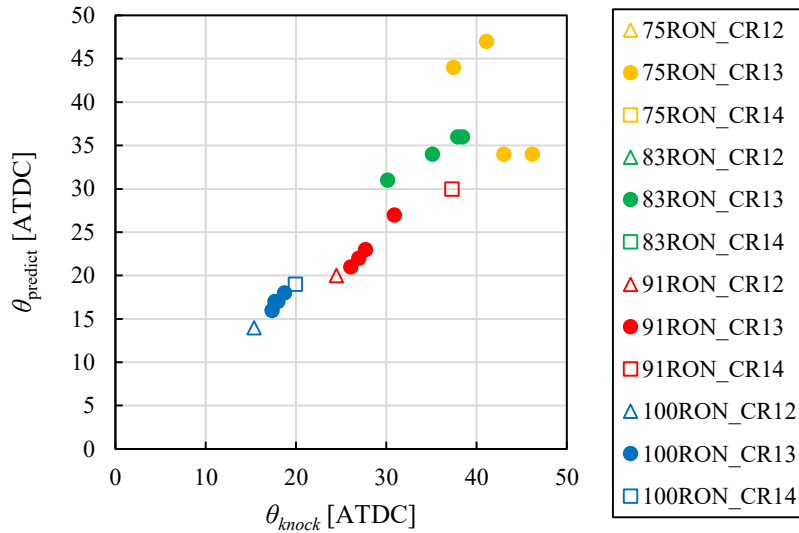


Fig.5-10 Relationship between experimental knock timing (θ_{knock}) and predicted knocking timing ($\theta_{predicted}$) for case5.

今回計算を行った詳細化学反応メカニズムは PRF を用いており実際の燃料とは異なることから、第4章で用いたような市販ガソリンの特性に近いサロゲート燃料の着火遅れ時間を用いることで、より高精度なノッキング予測が可能となることが期待される。

今後は、サロゲート燃料での着火遅れ時間での検証や、未燃ガス温度の検証を行なうことで、LW 積分によるノッキング発生時期の予測に関しても、燃料の特性を考慮した予測が可能になるように精度向上を継続したい。

5.4 結論

表 5-3 に case1~5 の計算条件と、得られた係数、及び分散の値をまとめる。

Table5-3. Condition for LW integral calculation and variation results

case		1	2	3	4	5
T_i [K]		$T_{i, st}$	$T_{i, st}$	$T_{i, chem}$	$T_{i, chem}$	$T_{i, chem}$
T [K]		T_{ad}	T_{ad}	T_{ad}	T_{ad}	T_{ad}
τ [s]		τ_D	$\tau_{D, fit}$	τ_D	$\tau_{D, fit}$	τ_{chem}
A	c	0.01869	0.017	0.01869	0.014	/
	d	3.4017	2.6	3.4017	1.4	
	n	1.7	1.8	1.7	1.6	
	B	3800	3700	3800	3850	
	V	0.19	0.07	0.28	0.05	
$Case No.$		18 / 48	44 / 48	20 / 20	20 / 20	20 / 20

エンジン運転条件や燃料の RON を変更させた実験結果を用いて、LW 積分によるノッキングの発生時期の予測の検証を行い、以下の知見を得た。

LW 積分を用いたノッキング発生時期の予測には、着火遅れ時間を用いている混合気の特徴に合わせて設定することが重要である。詳細反応計算により求めた着火遅れ時間を用いることで、燃焼室筒内の圧力や未燃ガス温度の条件が広く変わるエンジン運転条件にも対応した予測が可能となる。

一方で、詳細反応計算により着火遅れ時間を算出するのが難しい場合、Douaud の着火遅れ時間を用いるには燃焼室筒内の未燃ガス温度の適正な推定と、予測に用いる圧力と温度範囲に応じた係数の最適化を行なうことが精度を向上させるために有効である。

今回計算を行った詳細化学反応メカニズムは PRF を用いており実際の燃料とは異なることから、第4章で用いたような市販ガソリンの特性に近いサロゲート燃料の着火遅れ時間を用いることで、より高精度なノッキング予測が可能となることが期待される。

今後は、サロゲート燃料での着火遅れ時間での検証や、未燃ガス温度の検証を行なうことで、LW 積分によるノッキング発生時期の予測に関しても、燃料の特性を考慮した予測が可能になることが望まれる。特に、エンジンの開発現場においては、開発期間の短縮化に伴い、高精度でノッキングの発生を予測することの重要性が高まっていることから、本観点での研究は重要性を増していると考えている。

第6章 結論

現代社会の中において、交通機関の役割は非常に重要になっており、特に自動車は人々の生活に欠かすことができない物となっている。一方でモータリゼーションの拡大に伴い、自動車を使用するエネルギー資源の量が増えることに伴いCO₂排出量は増大し気象変動の原因とも言われている。このような、エネルギー源の多様化や気候変動に対応するためには、燃費の大幅な低減や燃料多様化への対応、燃料電池自動車、電動化車両の活用を促進していくことが重要である。

乗用車のパワートレインとして多く用いられている火花点火エンジン（ガソリンエンジン）は、熱力学的にはオットーサイクルに分類される。オットーサイクルの理論熱効率の向上には圧縮比（膨張比）と比熱比の向上が必要であることから、エンジンの開発においては高圧縮比化やEGR（排気ガス再循環）システムを用いての低温燃焼が推進されてきた。またエンジンの実用面においては、高負荷での運転時に生じるノッキングを抑制することにより、エンジンの熱効率を高めることが重要である。

市販ガソリンのノッキングの指標は、RON（リサーチオクタン価）とMON（モーターオクタン価）によって表現されている。RONとMONの計測方法は、ガソリンエンジンが自動車のパワートレインとして大量生産されるようになった1930年頃にアメリカのCFR（Cooperative Fuel Research）とよばれる石油メーカーと自動車OEM（Original Equipment Manufacturer）による団体が議論されて制定された。その当時のエンジンの平均的な圧縮比は5~6、RONは65~70であり、現在の平均的な圧縮比10程度、RONが90~100であることと比較すると大きく異なっていた。2000年頃まではRONやRONとMONの平均値であるAKI（Anti Knock Index）を用いることでノッキングなどの異常燃焼の起こりやすさを表すことができていたものの、近年のエンジン熱効率を追及した高圧縮比エンジンや過給ダウンサイズエンジンでは、従来から用いられてきたRONをノッキング等の指標として扱うことが難しくなっている。さらに、市販の燃料の変化としては、バイオ燃料やシェールオイルの普及などの多様化に伴い、将来的には、石油由来の炭化水素群で構成されている燃料に対して、センシティブティS(=RON-MON)の大きい低MON燃料や、センシティブティが0に近いような燃料が普及する可能性も想定される。これらの燃料とエンジンでの燃焼の関係を理解するためには、燃料ごとの素反応に着目したノッキングの起こりやすさについての検討も重要性が増している。

ノッキングはエンジン燃焼室内の燃料と空気による混合気の自己着火を起点として生じる現象であることから、混合気の化学反応を理解することが必要である。ガソリン混合気の化学反応については、1980年代から研究が進められて詳細反応機構が開発されてきた。素反応を詳細に計算するためには非常に短い時間スケールでの解析が必要であることから、計算負荷が高く時間がかかるという課題がある。しかし、近年では詳細反応機構の簡略化や詳細反応機構を用いた解析ソフトが市販化されるようになっており、詳細反応計算はエンジン開発者にとっても利用可能なツールとなることが期待されている。

本研究では、エンジンの実験結果と詳細反応計算による混合気の素反応の解析をつなげるために、最近の高圧縮比エンジンにおけるノッキングの発生特性に対するエンジンの圧縮比、回転速度、評価燃料の着火特性

(RON)の影響について実験を行なった。エンジンの運転条件では、ノッキングを避けるために点火時期を遅角させているが、点火時期を遅角した分、燃焼重心(CA50)が遅くなり、エンジントルクが低下する。燃焼重心が遅くなる感度は、圧縮比1高くなるのに対して3~6CA、エンジン回転速度が1000rpm遅くなるのに対して0.5~1.5CA、燃料のRONが1下がるのに対して0.8~1.2CAであり全てのパラメータの変化がノッキングに影響していることが明らかになった。続いて、この実験で計測したエンジンの燃焼室内の圧力データ(200サイクル平均値)から燃焼室内の未燃ガス温度を算出し、運転条件ごとの物理量の変化を明確にして詳細反応計算による解析を試みた。詳細反応計算は、計算負荷の課題から0次元での解析を選択しており、時間に対する圧力の変化をエンジンの実験結果と対応させている。計算開始時期は吸気バルブの閉じ時期(Intake valve closed timing,

IVC)として、境界条件である混合気の温度(初期温度)は実験結果から状態方程式を用いて算出した。この計算方法で解析を行なったところ、圧縮比やエンジン回転速度、RONの異なる実験結果に対応して、燃焼開始前までの低温酸化反応(LTO)の素反応の進行の違いは確認できたが、混合気は着火にいたらず、着火時期について定量的な議論は難しかった。ここには、解析モデルで考慮できていないサイクル毎の燃焼変動による影響や燃焼室内の空間的な温度の分布を考慮できていないという2つの課題があると考えられる。今回の検討では、特に、燃料の混合気の温度に着目をして、詳細反応計算から初期温度を算出して比較をすることを行なっている。詳細反応計算から算出した初期温度は、エンジン回転速度が高くなるほど高温になっており、燃焼室内の高温の部品の温度の傾向を定性的に再現している事が判った。一方で、RONの変化に対しては、RONが低いほど初期温度が高くなっており、実験結果と異なる傾向を示した。この要因のひとつには、詳細反応計算に用いた標準燃料(PRF)と評価に使用した燃料(市販ガソリン相当)との間に、着火特性や熱力学的特性の違いがあることが考えられる。燃料の影響を検討するには、実験に用いた燃料に近い特性を持つ計算用の模擬燃料(サロゲート燃料)を選択することも必要であることが判った。

本研究の目的の一つには、詳細反応計算を活用することで最近のエンジンと市販ガソリンにおけるノッキング条件に対応する燃料の指標を明らかにすることであった。そこで、RONやMONの計測に使用している標準燃料(PRF)と、市販ガソリンの着火特性の比較を行ない、RONとMONの計測条件の違いやセンシティブリティS(=RON-MON)の違いの素反応論的な解釈についても検討を行っている。詳細反応計算での検討には、SIP「革新的燃焼技術」のガソリン燃焼チームの三好らによって開発された、SIPガソリンサロゲート燃料詳細反応機構バージョン1.0(SIP-Gd1.0)(Miyoshi, et. al., 2017)を用いており、同チームで提案された国内の市販レギュラガソリンと市販ハイオクガソリンを模擬した5成分サロゲート燃料(S5R:レギュラガソリン相当, S5H:ハイオクガソリン相当)を用いている。解析の結果、標準燃料(PRF)は低温酸化反応(LTO)が大きく生じるために負の温度計数領域(NTC)が存在してNTCよりも温度の低い領域での着火が起こりやすくなっている。一方で市販ガソリンにおいては、NTCはほとんど存在しておらず、LTOもPRFに対して小さい。RONの計測条件における燃焼室内の混合気の圧力と温度条件は、NTC付近を通っており、かつエンジン回転速度が低いためにサロゲート燃料に対してLTOが大きいことが計算から示された。一方で、MONの計測条件においては混合気の温度が高いために、NTCよりも高温側の条件を使用しており、サロゲート燃料に対してLTOがほぼ同等であった。着火時期に関しては、LTOよりも高温条件で生じる着火準備期間～着火の反応速度も考慮する必要がある。PRFとサロゲート燃料を比較すると、着火準備期間～着火の反応速度についてはサロゲート燃料の方が早くなっている。その為に、MONの計測条件においてはサロゲート燃料のほうが着火時期が早まっており、PRFに比べてMONが低い値になっていると考えられる。簡単に言い換えると、RONは低温酸化反応(LTO)の影響が小さいほど高い値になるが、MONは着火準備期間～着火の反応速度が遅いほど高い値になる指標といえる。

しかし、実際には燃料によってLTOが生じる圧力温度領域や着火準備期間～着火の反応速度の圧力温度依存性は異なることから、燃料毎、あるいは圧力や温度条件毎に標準燃料(PRF)との比較をする必要がある。そこでRONが等しいPRFとサロゲート燃料の着火遅れ時間 p - T (圧力-温度)マップを作成して比較を行なうことで、素反応の違いと従来の指標(RON, MON)との対応を模式化して、エンジン運転条件との対応を容易に行なえる表現についての検討を行った。作成した着火遅れ時間の p - T マップに対して、着火遅れ時間の差20%以上を優位な差として識別したところ、圧力3MPa以下の700K以上の領域において、サロゲート燃料がPRFよりも顕著に着火しやすい領域が確認できた。この領域ではMONが着火特性に影響していると示唆される。一方で、900K以下の領域にはPRFがサロゲート燃料よりも顕著に着火しやすい領域が確認でき、この領域は、RONに加えてセンシティブリティ(S=RON-MON)の大きさが着火特性に影響していることが示唆された。また実際のエンジン実験データから得られた混合気の p - T 履歴を用いて比較を行なった場合にも、過去の知見を再現する傾向が確認できている。ただし、 p - T マップ上には、エンジンでの検証ができていない領域があることや、時間の概念を考慮できていないことなどの課題がある。今後更なる検討を加えることで、予測精度を向上させて、エンジン開発段階で燃料影響を推定できるツールに成長させていきたい。

前述のように、詳細反応計算は計算時間がかかることから実用性を考えると1次元や3次元数値シミュレーションへの適用は現段階では難しい。そのため、エンジン開発の現場においては、Livengood-Wu積分(LW積分)

によるノッキングの予測が多く用いられている。LW 積分は燃焼室内の圧力や温度条件に対応する着火遅れ時間を算出して時間積分を行なうことで化学反応の進行を表現して着火にいたる時期すなわちノッキングの発生時期を予測している。実際のエンジン実験結果を用いた検証の結果、LW 積分を用いたノッキング発生時期の予測においても、LW 積分で使用する着火遅れ時間の選択が重要であることが判った。特に、高圧縮比エンジンにおいては、混合気が LTO の領域を通ることから、詳細反応計算により求めた着火遅れ時間を用いることで予測精度が向上する。また、詳細反応計算により着火遅れ時間を算出するのが難しい場合、Douaud の着火遅れ時間を用いるには燃焼室筒内の未燃ガス温度の適正な推定と、予測に用いる圧力と温度範囲に応じた係数の最適化を行なうことが精度を向上させるために有効であることも明らかになった。

最近のガソリンエンジンの特徴である高圧縮比や過給エンジンを題材に、エンジンの熱効率向上に大きく影響するノッキングについて実験結果と数値シミュレーションによる検討を結びつけ、詳細反応計算による燃料の化学反応の影響について考察を加えた。その上で、将来のエンジンや燃料の多様性に対応できる指標を構築するためにノッキングに与える燃料の影響について素反応論的に明らかにし、かつエンジン開発者が活用可能なツールとして提供できる形に変換を行なった。

これらの研究を通して、近年のエンジンでは同じ RON なら MON が低い燃料、即ち、センシティブティの大きい燃料がノッキング抑制では優れているという事象に対しても素反応過程から考察を行うことで一定の説明がつくことも判った。今後、得られた成果をエンジン開発の効率化や、将来の燃料の方向性を検討するツールとして活用することで、車両燃費の向上すなわち自動車の CO₂ 排出量の低減に貢献し、将来のモビリティ社会をより便利で豊かなものに発展させていきたい。

参 考 文 献

- Ando, H., Ohta, Y., Kuwahara, K. and Sakai, Y., What is X in Livengood-Wu integral?, *Review of Automotive Engineering*, Vol. 30, No. 4 (2009a), pp.363-370.
- Ando, H., Sakai, Y. and Kuwahara, K., Universal rule of hydrocarbon oxidation, *SAE Technical Paper 2009-01-0948* (2009b).
- ASTM, Knocking Characteristics of pure hydrocarbons, *ASTM 662.6-A512k* (1958), pp.1-96.
- ASTM D2699 - 17, Standard Test Method for Research Octane Number of Spark-Ignition Engine Fuel (2017a).
- ASTM D2700 - 17, Standard Test Method for Motor Octane Number of Spark-Ignition Engine Fuel (2017b).
- Atkins, P.W.著, 千原英昭, 中村亘男訳, アトキンス物理化学 第6版, 東京化学同人 (2001) (in Japanese).
- Bradley, D., Morley, C., Gu, X. J., Emerson, D. R., Amplified pressure waves during autoignition: relevance to CAI engines, *SAE Technical Paper 2002-01-2868* (2002).
- Curran, H. J., Gaffuri, P., Pitz, W. J. and Westbrook, C. K., A comprehensive modeling study of n-Heptane oxidation, *Combustion and Flame* 144, pp.149-177 (1998).
- Curran, H. J., Gaffuri, P., Pitz, W. J. and Westbrook, C. K., A comprehensive modeling study of iso-Octane oxidation, *Combustion and Flame* 129, pp.253-280 (2002).
- Daisy, Y., 自動車用パワートレインの高効率化技術に関する動向と将来展望 (Recent trends and future perspectives on high efficiency automotive powertrain technologies), *Journal of Society of Automotive Engineers of Japan*, Vol.69, No.9, pp.10-17 (2015) (in Japanese).
- Dec, J. E., Hwang, W., Characterizing the Development of Thermal Stratification in an HCCI Engine Using Planar-Imaging Thermometry, *SAE International Journal of Engines* Vol. 2, No.1 (2009), pp.421-438.
- Douaud, A. M. and Eyzat, P., Four-octane-number method for predicting the anti-knock behavior of fuels and engine, *SAE Technical Paper 780080* (1978).
- Eng, J. A., Characterization of pressure waves in HCCI combustion, *SAE Technical Paper 2002-01-2859* (2002).
- Farrell, J. T., Cernansky, N. P., Dryer, F. L., Law, C. K., Friend, D. G., Hergart, C. A., McDavid, R. M., Patel, A. K., Mueller, C. J. and Pitsch, H., Development of an experimental database and kinetic models for surrogate diesel fuels, *SAE Technical Paper 2007-01-0201* (2007).
- Gauthier, B. M., Davidson, D. F. and Hanson, R. K., Shock tube determination of ignition delay times in full-blend and surrogate fuel mixtures, *Combustion and Flame* 139 (2004), pp.300-311.
- Ghosh, P., Hickey, K. J. and Jeffe, S. B., Development of a detailed gasoline composition-based octane model, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol.45, No.1 (2006), pp.337-345.
- Hanabusa, H., Kondo, T., Hashimoto, K. and Sono, H., Study on Homogeneous Lean Charge Spark Ignition Combustion, *SAE Technical Paper 2013-01-2562* (2013)
- Hashimoto, K., Koshi, M., Miyoshi, A., Murakami, Y., Oguchi, T., Sakai, Y., Ando, H. and Tsuchiya, K., Development of gasoline combustion reaction model, *SAE Technical Paper 2013-01-0887* (2013).
- Hayashi, T., Taki, M., Kojima, S. and Kondo, T., Photographic observation of knock with a rapid compression and expansion machine, *SAE Technical Paper 841336*, *SAE Trans.*, vol93, (1984).
- Hernandez, J. J., Lapuerta, M., and Sanz-Argent, J., Autoignition prediction capability of the Livengood-Wu correlation applied to fuels of commercial interest, *International Journal of Engine Research*, Vol. 15(7) (2014), pp.817-829.
- Heywood, J. B., *Internal Combustion Engine Fundamentals*, McGRAW-HILL INTERNATIONAL EDITIONS (1989).
- Hopke, B., Jannsen, S., Kasseris, E. and Cheng, W. K., EGR effects on boosted SI engine operation and knock integral correlation, *SAE International Journal of Engines*, Vol.5, No.2 (2012), pp.547-559.
- Hoppe, F., Heuser, B., Thewes, M., Kremer, F., Pischinger, S., Dahmen, M., Hechinger, M. and Marquardt, W., Tailor-made fuels for future engine concepts, *International Journal of engine research*, Vol. 17, No.1 (2016), pp16-27.
- Horning, H., *The Cooperative Fuel-Research Committee Engine*, *SAE Technical Paper 310019* (1931)
- Itabashi, S., Murase, E., Tanaka, H., Yamaguchi, M., Muraguchi, T., *New Combustion and Powertrain Control Technologies for Fun-to-Drive Dynamic Performance and Better Fuel Economy*, *SAE Technical Paper 2017-01-0589* (2017).
- JIS2202:2012, 日本工業規格, 自動車ガソリン(Motor gasoline), (2012) (in Japanese).
- Kalghatgi, G. T., Fuel anti-knock quality –Part 1. Engine studies, *SAE Technical Paper 2001-01-3584* (2001a).
- Kalghatgi, G. T., Fuel anti-knock quality- Part 2. Vehicle studies – How relevant is motor octane number (MON) in modern engines? *SAE Technical Paper 2001-01-3585* (2001b).

- Kalghatgi, G. T., Nakata, K., Mogi, K., Octane appetite studies in direct injection spark ignition (DISI) engines, SAE Technical Paper 2005-01-0244 (2005).
- 神谷佳男, 燃料と燃焼の化学 (3訂), 大日本図書 (1987) (in Japanese).
- 金子タカシ, “ガソリン品質の市場調査結果”. 日石レビュー・第40巻 第3号 (1998年8月) (in Japanese).
- Kasseris, E., Heywood, J. B., Charge cooling effects on knock limits in SI DI engines using gasoline/ethanol blends: Part 1- Quantifying charge cooling, SAE Technical Paper 2012-01-1275 (2012).
- 小西誠一, 燃料工学概論, 裳華房 (1991) (in Japanese).
- Kono, M., Shiga, S., Kumagai, S., Iinuma, K., Thermodynamic and experimental determinations of knock intensity by using a spark-ignited rapid compression machine, Combustion and Flame 54 (1983), pp.33-47.
- Kukkadapu, G., Kumar, K., Sung, C-J., Mehl, M. and Pitz, W. J., Experimental and surrogate modeling study of gasoline ignition in a rapid compression machine, Combustion and Flame 159 (2012), pp.3066-3078.
- Kukkadapu, G., Kumar, K., Sung, C-J., Mehl, M., Pitz, W. J. Autoignition of gasoline surrogate at low temperature combustion conditions, Combustion and Flame 162 (2015), pp.2272-2285.
- Lappard, W. R., The chemical origin of fuel octane sensitivity, SAE902137
- Lafossas, F. -A., Castangne, M., Dumas, J. P., Henriot, S., Development and validation of a knock model in spark ignition engines using a CFD code, SAE Technical Paper 2002-01-2701 (2002).
- Leone, T. G., Anderson, J. E., Davis, R. S., Iqbal, A., Resse, R. A. II, Shelby, M. H. and Studzinski, W. M., The effect of compression ratio, fuel octane rating, and ethanol content on spark-ignition engine efficiency, Environmental science and technology, Vol.49 (2015), pp.10778-10789
- Li, J., Kazakov, A., Dryer, F. L., Experimental and numerical studies of ethanol decomposition reactions, J. Phys. Chem. A, Vol.108 (2004), pp.7671-7680.
- Livengood, J. C., Wu, P. C., Correlation of autoignition phenomena in internal combustion engines and rapid compression machines, Symposium (International) on Combustion, Vol. 5, Issue 1 (1955), pp347-356.
- LLNL, <https://combustion.llnl.gov/mechanisms/surrogates/gasoline-surrogate> (参照日 2017年10月9日)
- Mehl, M., Pitz, W. J., Westbrook, C. K. and Curran, H. J. Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions, Proceedings of the Combustion Institute Vol. 33(2011), pp193-200.
- Metcalf, W. K., Pitz, W. J., Curran, H. J., Simmie, J. M., Westbrook, C. K. The development of a detailed chemical kinetic mechanism for diisobutylene and comparison to shock tube ignition times, Proceedings of the Combustion Institute Vol. 31 (2007), pp.377-384.
- Mittal, V. and Heywood, J. B., The relevance of fuel RON and MON to knock onset in modern SI engines, SAE Technical Paper 2008-01-2414 (2008).
- Mittal, V. and Heywood, J. B., The shift in relevance of fuel RON and MON to knock onset in modern SI engines over the last 70 years, SAE International Journal of Engines Vol. 2, No. 2 (2009), pp.1-10.
- Mittal, V., Heywood, J. B. and Green, W. H., The Underlying Physics and Chemistry behind Fuel Sensitivity, SAE International Journal of Fuels and Lubricants Vol. 3, No. 1 (2010), pp.256-265.
- Miyoshi, A., 燃焼詳細反応機構自動生成システムの開発 (Development of an Auto-generation System for Detailed Kinetic Model of Combustion), Transactions of the Society of Automotive Engineers of Japan, Vol.36, No.5 (2005), pp.35-40. (in Japanese)
- Miyoshi, A., 燃焼化学反応モデリングへの誘い (An Invitation to Chemical Kinetic Modeling of Combustion), Journal of the Combustion Society of Japan Vol.50 No. 154 (2008) pp.325-330 (in Japanese).
- Miyoshi, A., Systematic computational study on the unimolecular reactions of alkylperoxy (RO₂), hydroperoxyalkyl (QOOH), and hydroperoxyalkylperoxy (O₂QOOH) radicals, J. Phys. Chem. A., 115 (2011), pp.3301-3325.
- Miyoshi, A., Chemical Kinetic Analysis on the Effect of the Occurrence of Cool Flame on SI Knock, International Journal of Automotive Engineering, 8(3), (2017), pp.130-136.
- Miyoshi, A., 0次元ノックモデルと Livengood-Wu 積分 (Zero-dimensional Knock Modeling and the Livengood-Wu Integral), 自動車技術会論文集 Vol.48, No.1 (2017a), pp41-46 (in Japanese).
- Miyoshi, A., Sakai, Y., ガソリンサロゲート詳細反応機構の構築 (Construction of a Detailed Kinetic Model for Gasoline Surrogate Mixtures), 自動車技術会論文集 Vol.48, No.5 (2017b), pp1021-1026 (in Japanese).
- Morrison, R. T., Boyd, R. N.著, 中西香爾, 黒野昌庸, 中平靖弘訳, モリソンボイド有機化学 第6版, 東京化学同人 (2000) (in Japanese).
- Murakami, Y., 量子化学的手法による燃焼素反応研究の進展(Progress in Elementary Reaction Kinetics of Combustion

- by Quantum Chemical Methods), Journal of the Combustion Society of Japan Vol. 51 No. 157 (2009) pp.192-199 (in Japanese).
- Nakagawa, Y., Takagi, Y., Itoh, T., and Iijima, T., Laser Shadowgraphic Analysis of Knocking in S. I. Engine, SAE Technical Paper 845001 (1984).
- Nakajima, Y., Nagai, T., Iijima, T., Yokoyama, J., and Nakamura, K., Analysis of Combustion Patterns Effective in Improving Anti-Knock Performance of a Spark-Ignition Engine, JSAE Rev., vol. 13 (1984), pp.9-17.
- Nakano, K., Matsuura, K., Sato, Y., Shimizu, K., Nishi, M., Iida, N., Livengood-Wu 積分によるエンドガス自着火時刻の予測制度に関する考察 (An Investigation for Accuracy of Predicting Auto-ignition Timing of End-gas based on Livengood-Wu Integration), The 26th Internal Combustion Engine Symposium, 20158048 (2015), pp1-6 (in Japanese).
- Nakata, K., Uchida, D., Ota, A., Utsumi, S., Kawatake, K., The Impact of RON on SI Engine Thermal Efficiency, SAE Technical Paper 2007-01-2007 (2007).
- Nakata, K., Sasaki, N., Ota, A., Kawatake, K., The effect of fuel properties on thermal efficiency of advanced spark-ignition engines, International journal of engine research, Vol.12 (2011), pp.274-281.
- Nakata, K., ガソリンエンジンの低燃費化技術 (Engine Technology for Improving Fuel Economy) , Toyota Technical Review, Vol. 60 (2014), pp14-19. (in Japanese)
- Nakata, K., Nogawa, S., Takahashi, D., Yoshihara, Y., Kumagai, A., Suzuki, T., Engine Technologies for Achieving 45% Thermal Efficiency of S.I. Engine, SAE International Journal of Engines Vol.9, No.1 (2015), pp179-192.
- Negoro, K., Seki, Y., Nishi, M., Iida, N., SI エンジンにおけるノッキング発生要因の Livengood-Wu 積分および素反応数値計算を用いた解析 (Analysis for Cause of Knocking in SI Engine based on Livengood-Wu Integral and Numerical Calculation) , The 25th Internal Combustion Engine Symposium, No.6 p.1 , 20143818 (2014) (in Japanese).
- Kasseris, E., Heywood, J. B., Charge cooling effects on knock limits in SI DI engines using gasoline/ethanol blends: Part 1- Quantifying charge cooling, SAE Technical Paper 2012-01-1275 (2012).
- 日本自動車工業会, http://www.jama.or.jp/eco/wwfc/wwfc_05.html (参照日 2017年12月24日) .
- NIST Chemistry WebBook, <http://webbook.nist.gov/chemistry/> (参照日 2017年12月24日) .
- NIST Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties Database (REFPROP): Version 10, <http://www.nist.gov/srd/nist23.cfm> (参照日 2017年10月9日)
- 野田徹, 久保賢明, 木村修二, 伊東輝行, 化学素反応モデルを適用した0次元エンジンサイクルシミュレーションによるノッキング予測, 日本機学会論文集 (B編)70巻694号 (2004), pp.1639-1646 (in Japanese).
- Oguchi, T., 量子化学計算から燃焼反応機構への道標—理論化学的手法の現状と将来— (A Guide to Chemical Kinetic Model Construction from Quantum Chemistry Calculation for Combustion Modeling: Present and Future Work on the Theoretical Method) , Journal of the Combustion Society of Japan Vol.51 No. 157 (2009), pp.182-191 (in Japanese).
- Ogura, T., Sakai, Y., Miyoshi, A., Koshi, M., Phillippe Dagaut, “Modeling of the Oxidation of Primary Reference Fuel in the Presence of Oxygenated Octane Improvers: Ethyl Tere-Butyl Ether and Ethanol, Energy Fuels 2007, Vol. 21, No. 6, pp.3233-3239.
- Okada, Y., Miyashita, S., Izumi, S., Hayakawa, Y., Study of Low-Speed Pre-Ignition in Boosted Spark Ignition Engine, SAE International Journal of Engines Vol.7, No.2 (2014), pp.584-594.
- Omura, T., Nakata, K., Yoshihara, Y., Takahashi, D., Research on the Measures for Improving Cycle-to-Cycle Variations under High Tumble Combustion, SAE Technical Paper 2016-01-0694 (2016).
- Pitz, W. J., Cernansky, N. P., Egolfopoulos, F. L., Farrell, J. T., Friend, D. G., Pitsch, H., Development of an Experimental Database and Chemical Kinetic Models for Surrogate Gasoline Fuels, SAE Technical Paper 2007-01-0175 (2007a).
- Pitz, W. J., Naik, C. V., Mhaolduin, T. N., Westbrook, C. K., Curran, H. J., Orme, J. P., Simmie, J. M., Modeling and experimental investigation of methylcyclohexane ignition in a rapid compression machine, Proceedings of the Combustion Institute Vol. 31 (2007b), pp. 267-275.
- Rechard, S., Bougrine, S., Font, G., Berr. F., L., Pollutant emissions and fuel efficiency prediction for a downsized spark ignition engine using a 0-dimensional combustion model, Proceeding of the SIA conference (2009)
- Remmert, S., Campbell, S., Cracknell, R., Schuetze, A., Lewis, A., Giles, K., Akehurst, S., Turner, J., Popplewell, A., Patelet, R., Octane Appetite: The Relevance of a Lower Limit to the MON Specification in a Downsized, Highly Boosted DISI Engine, SAE International Journal of Fuels and Lubricants, Vol. 7, No. 3 (2014), pp.743-755.
- Rowley, J. R., Wilding, W. V., Oscarson, J. L., and Rowley, R. L., Rapid Evaluation of Prediction Methods with DIPPR's Automated Property Prediction Package, International Journal of Thermophysics, Vol. 28, Issue 3 (2007), pp. 824-834.
- Sakai, Y., Ozawa, H., Ogura, T., Miyoshi, A., Koshi, M., Pitz, W. J., Effects of Toluene Addition to Primary Reference Fuel at

- High Temperature, SAE Technical Paper 2007-01-4104 (2007).
- Sakai, Y., Miyoshi, A., Koshi, M., Pitz, W. J., A kinetic modeling study on the oxidation of primary reference fuel-toluene mixtures including cross reactions between aromatics and aliphatics, Proceedings of the Combustion Institute Vol. 32, Issue 1 (2009), pp.411-418.
- Sarathy, S. M., Kukkadapu, G., Mehl, M., Wang, W., Javed, T., Park, S., Oehlschlaeger, M. A., Farooq, A., Pitz, W. J., Sung, C. J., Ignition of alkane-rich FACE gasoline fuels and their surrogate mixtures, Proceedings of the Combustion Institute Vol. 35 (2015), pp.249-257.
- Sasaki, N., Nakata, K., Kawatake, K., Sagawa, S., Watanabe, M., Sone, T., The Effect of Fuel Compounds on Pre-ignition under High Temperature and High Pressure Condition, SAE Technical Paper 2011-01-1984 (2011).
- Sasaki, N., Nakata, Effect of Fuel Components on Engine Abnormal Combustion, SAE Technical Paper 2012-01-1276 (2012).
- Sato, S., Iida, N., 素反応数値計算による Livengood-Wu 積分着火遅れモデルの検証 (A Verification of the Livengood-Wu Integral Model for Ignition Delay by Numerical Calculation with Elementary Reaction), JSAE Transaction vol.36, No.1 (2005), pp.65-71 (in Japanese).
- Simmie, J. M., Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbon fuels, Progress in Energy and Combustion Science 29 (2003), pp.599-634.
- SIP Innovative Combustion Technology, Gasoline Combustion Team, <http://sip.st.keio.ac.jp/topics/sipgl/> (参照日 2017年12月24日)
- Stork, K., Fuel-Engine Co-Optimization: A Not-So-New Idea for the Future, 2nd CRC Advanced Fuel and Engine Efficiency Workshop (2016).
- Takahashi, D., Nakata, K., Yoshihara, Y., Engine Thermal Control for Improving the Engine Thermal Efficiency and Anti-Knocking Quality, SAE Technical Paper 2012-01-0377 (2012).
- Takahashi, D., Nakata, K., Yoshihara, Y., Ohta, Y. and Nishiura, H., Combustion Development to Achieve Engine Thermal Efficiency of 40% for Hybrid Vehicles, SAE Technical Paper 2015-01-1254 (2015).
- Westbrook, C. K., Pitz, W. J., Lppard, W. R., The Autoignition Chemistry of Paraffinic Fuels and Pro-Knock and Anti-Knock Additives: A Detailed Chemical Kinetic Study, SAE Technical Paper 912314 (1991).
- Williams, J., Goodfellow, C., Lance, D., Ota, A., Nakata, K., Kawatake, K., Bunting, W., Impact of Butanol and Other Bio-Components on the Thermal Efficiency of Prototype and Conventional Engines, SAE Technical Paper 2009-01-1908 (2009).
- Williams, J., Yokoo, N., Nakata, K., Ali, R., Bunting, W., Ishiwa, K., The Impact of Fuel Composition on the Combustion and Emissions of a Prototype Lean-Boosted PFI Engine, SAE Technical Paper 2010-01-2094 (2010).
- Yamada, T., Adachi, S., Nakata, K., Kurauchi, T., Takagi, I., Economy with Superior Thermal Efficient Combustion (ESTEC), SAE Technical Paper 2014-01-1192 (2014).
- Yokomori, T., Matsuda, M., Iida, N., Yokoo, N., Nakata, K., Urata, Y., 高効率ガソリンエンジンのためのスーパーリーンバーン研究 (Research on Super Lean Burn Concept for Gasoline Engines with High Thermal Efficiency), 自動車技術会 2016年春季大会学術講演会予稿集, No.59-16, pp1413-1418, 20165267 (2016) (in Japanese).
- Zahdeh, A., Rothenberger, P., Nguyen, W., Anbarasu, M., Schmuck-Soldan, S., Schaefer, J., Goebel, T., Fundamental Approach to Investigate Pre-Ignition in Boosted SI Engines, SAE International Journal of Engines, Vol. 4, No. 1 (2011), pp.246-273.
- Zeldovich, YA. B., Regime classification of an exothermic reaction with nonuniform initial conditions, Combustion and flame, Vol. 39 (1980), pp.211-214.

謝 辞

本研究は、著者が慶應義塾大学大学院理工学研究科後期博士課程在学中に、飯田訓正特任教授、植田利久教授の御指導のもとに行ったものであり、ここにお礼を申し上げます。

飯田訓正特任教授には 2011 年の自動車技術会秋季学術講演会で「燃料性状がエンジンの異常燃焼に与える影響」について発表をした際に会場でご質問をいただいたことからお話を伺う機会を得るようになりました。その後しばらくの間を経て、内閣府が主導する戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) 革新的燃焼技術にガソリンエンジンの燃焼に関する産官学一丸となったプロジェクトが立ち上がり、その目的の一つである人材育成の一環として先生の研究室にお世話になることになりました。修士を化学工学で卒業しており、エンジンに関しての学術的な知識が欠如している私を、根気強くご指導いただいたことに心から感謝しております。

植田利久教授には、2015 年度に飯田訓正先生が理工学部の教授を御退官されたことに伴い、2016 年度から御指導をいただくことになりました。論文の書き方から予備審査、公聴会に至るまでの研究の進め方について、たくさんの時間を割いてご指導いただいたことに心から感謝しております。

審査にあたっては、主査の植田教授、副査の飯田特任教授に加えて、東京工業大学の小酒英範教授、慶應義塾大学の横森剛准教授に副査としてご指導いただきました。内燃機関及び燃焼を御専門とされる先生方に、研究内容について様々な角度からご指導いただけたことは本当に貴重な学びとなりました。心からお礼申し上げます。

在学期間と時期を同じくして、飯田訓正特任教授がチームリーダーを務められている SIP 革新的燃焼技術のガソリン燃焼チームに AICE (自動車用内燃機関研究組合) の一員として参加させていただく機会を得ることができました。ガソリン燃焼チームでの活動には、内燃機関から基礎燃焼に至る様々な専門分野の先生方が参加されており、会合に参加することで世界最先端の研究についてたくさんのことを学ばせていただきました。ありがとうございました。特に燃料ノック班の班長を務められている広島大学の三好明教授には、班会合での議論に加えていただいたり、当時試行版であった SIP ガソリンサロゲート詳細反応機構の使用を許可いただいたりと、本研究の根幹をなすノッキングの本質を理解するための様々な機会を御提供いただきました。心からお礼申し上げます。

AICE (自動車用内燃機関研究組合) のガソリン燃焼分科会では、他の OEM のエンジニアの皆様と親交を深めることができ、社会人ドクターを最後まで走りきるにあたって大変励みになりました。分科会の皆様に心からお礼申し上げます。

飯田研究室の職員の皆様、学生の皆様には大学のことや研究室のことについて教えていただいたり、研究を進めるに当たり切磋琢磨させていただいたりしたことに感謝しております。ありがとうございました。

2018 年 1 月 27 日に行なわれた公聴会においては、たくさんの研究者やエンジニアの皆様にお越しいただきました。この紙面を借りてお礼申し上げます。広島大学の三好明教授を始め、東北大学の丸田薫教授、上智大学の高橋和夫准教授、慶應義塾大学の中村直特任教授、本田技術研究所の松浦勝也博士から博士論文の本質を突いた御質問をいただき、議論を深めることができました。ありがとうございました。

本研究はトヨタ自動車株式会社の業務の一環として行なったものであり、関係部署、関係各位に心からお礼申し上げます。会社に席をおきながら博士課程に派遣する今回の試みを決断された杉山雅則エグゼクティブアドバイザー、当時の部長である鈴木徹志様、当時から上司であった中田浩一部長には心からお礼申し上げます。特に中田部長には研究全般から社内の業務に渡って最後まで配慮、応援いただくと同時に、良きメンターとしてたくさんの助言をいただきました。ありがとうございました。また、不在が多いチーフを支えてくれたチームメンバーの皆さん、同僚の皆様には、様々な面で大変お世話になりました。皆さまの支え無しには卒業できなかったと思います。ありがとうございました。

2007年に入社以来、仕事を通じて社内外様々なメーカーや研究機関、国、地域の方と出会う機会がありました。こうしたたくさんの出会いが今の自分を創っていると感じています。この場を借りてお礼申し上げます。

今後は、社会人ドクターとして過ごした3年間の経験を生かして、社会の為に少しでも役に立つことができるように努力していきたいと思えます。

最後に、いつも無鉄砲な私を陰ながら応援してくれている家族に心から感謝します。

2018年2月吉日

Appendix 1

A.1 燃焼重心 (CA50) の求め方

燃焼重心 (CA50) は、質量燃焼割合 50%の時期を示しており、次の式から求めている。
あるクランク角 (θ_m) における熱発生量は、式 (a-1) から求められる。

$$Q(\theta_m) = Q(\theta_{m-1}) + dQ \quad (\text{a-1})$$

クランク角毎の熱発生率 (dQ) は式 (a-2) で示すことができる。

$$dQ = dU + dW + a + b \quad (\text{a-2})$$

ここで、 dU は 1 クランク角あたりの内部エネルギーの変化、 dW は 1 クランク角あたりのピストンによる仕事、 a は燃焼室壁からの受熱、 b はピストンリング等から抜けたガスのエネルギーである。ただし、本研究内では a, b は dU, dW に対して小さいことから考慮していない。

内部エネルギーの変化 (dU) は式 (a-3), (a-4) より式 (a-5) で示される。

$$dU = mc_v dT \quad (\text{a-3})$$

状態方程式から

$$mdT = \frac{1}{R}(Vdp + pdV) \quad (\text{a-4})$$

$$dU = \frac{c_v}{R}(Vdp + pdV) \quad (\text{a-5})$$

一方、ピストンによる仕事は燃焼室容積の体積変化で示すことができるため、式 (a-6) で示される。

$$dW = pdV \quad (\text{a-6})$$

定容比熱は比熱比 ($\kappa = c_p/c_v$) を用いて式 (a-7) で示される。

$$\frac{c_v}{R} = \frac{1}{\kappa - 1} \quad (\text{a-7})$$

式 (a-5) (a-6) (a-7) から、(a-2) は次の式で求めることができる。

$$dQ = \frac{1}{\kappa - 1} VdP + \frac{\kappa}{\kappa - 1} PdV \quad (\text{a-8})$$

質量燃焼割合は式 (a-9) で示すことができる。

$$X(\theta_m) = \frac{Q(\theta_m)}{Q_{max}} \times 100 \quad (\text{a-9})$$

$X(\theta_m) = 50$ になるときのクランク角を燃焼重心 (CA50) と定義している。

Appendix 2

A. 2. PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta \tau$) p - T マップを用いたノッキング指標の応用 ～NA（自然吸気）エンジンと過給エンジンのブレイグニッション条件の検討～

A. 2.1 ブレイグニッション条件の計算方法

ここでは、4.4 節のノッキングでの実験結果を用いて、高圧縮比エンジンや過給エンジンで起こりやすくなるブレイグニッションの条件を推定し、PRF との着火遅れ時間差 ($\Delta \tau$) p - T マップを活用した燃料影響の検討を行う。

ブレイグニッションは、燃焼室筒内の高温部分が混合気に熱を与えることで、混合気の反応が進み、点火時期よりも手前に混合気が自己着火に至る現象である。この現象が発生すると、燃焼室内の温度が更に高くなることから、次のサイクルでの着火時期が早まり、連鎖的にブレイグニッションを誘発する傾向があることから、エンジンの破損に至る可能性のある現象として注意が必要である。また、圧力や温度が高くなる高圧縮比エンジンや高過給エンジンで課題となる現象である。

ブレイグニッションの検討には 4.4 節で使用したエンジン実験結果のうち点火時期までの圧力の履歴を使用している。これは、ブレイグニッションが点火時期よりも前に混合気が自己着火する現象であるためである。一方で温度の設定については、燃焼室内の高温部分から受熱をした混合気が自己着火の起点となると考えられるために、初期温度を高く設定することにした。具体的には 4.3 節でノッキングの検討時に計算から算出した $T_{i,chem,SS}$ と同様に、点火時期がブレイグニッションの発生時期 ($\theta_{pre-ig,exp}$) と仮定をして、計算による混合気の着火時期 ($\theta_{pre-ig,chem}$) が ($\theta_{pre-ig,exp}$) と同じになるときの温度 ($T_{i,chem,SS,pre-ig}$) を用いている。また、case2 (NA, CR5, 1200rpm)については、圧縮比が低く点火時期が-40ATDC まで進角していることと、エンジン回転速度が低くブレイグニッションの原因となる燃焼室内の高温部分が存在しにくいことから、検討条件から除くこととした。図 a-1 に設定に各条件における初期温度 ($T_{i,chem,SS,pre-ig}$) と状態方程式から求めている混合気の初期温度 ($T_{i,st}$) を比較する。

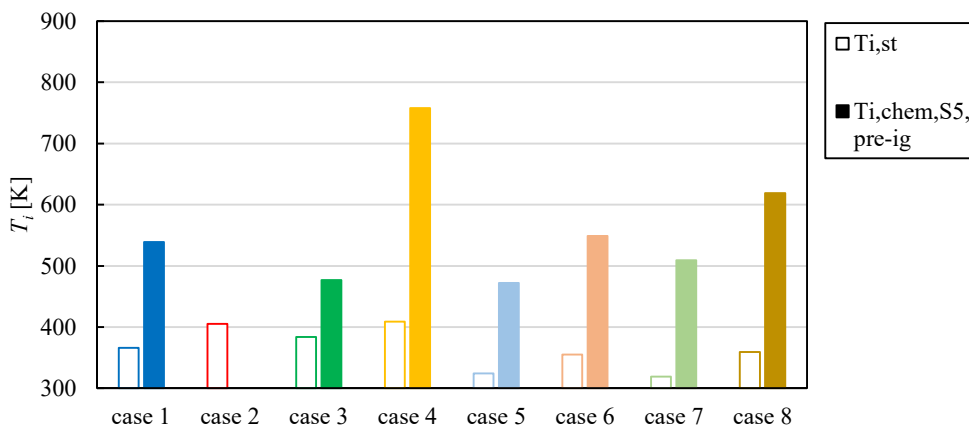


Fig.a-1 Initial temperature of each test condition. White bars are calculated by state equation ($T_{i,st}$) and colored bars are calculated by detail reaction calculation ($T_{i,chem,SS,pre-ig}$).

A. 2. 2 PRF とサロゲート燃料の着火時期についての考察

図 a-2 に 4.3 節で作成をした $\Delta\tau_{90RON}$ の p - T マップに case1~6 (Fuel 3 (91RON)) の燃焼室筒内圧力 (p_{exp}) と未燃ガス温度 ($T_{u,ad,pre-ig}$) の履歴を重ねて示している。初期温度には S5R の詳細反応計算により求めた $T_{i,chem,S5,pre-ig}$ を用いている。

同様に、図 a-3 には $\Delta\tau_{100RON}$ の p - T マップに case7,8 (Fuel 4 (100RON)) の燃焼室筒内圧力 (p_{exp}) と未燃ガス温度 ($T_{u,ad,pre-ig}$) の履歴を重ねて示している。初期温度には S5H の詳細反応計算により求めた $T_{i,chem,S5,pre-ig}$ を用いている。

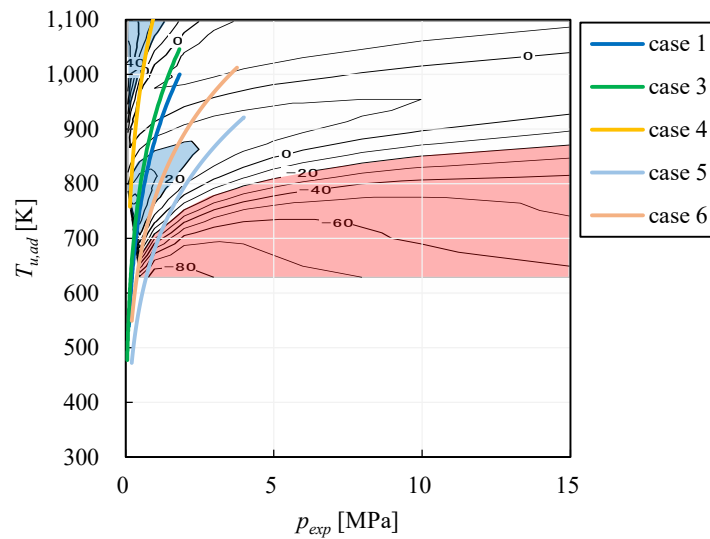


Fig.a-2 Cylinder pressure and unburned gas temperature for each test case (Fuel3) for pre-ignition estimation on $\Delta\tau_{90RON}$ p - T map.

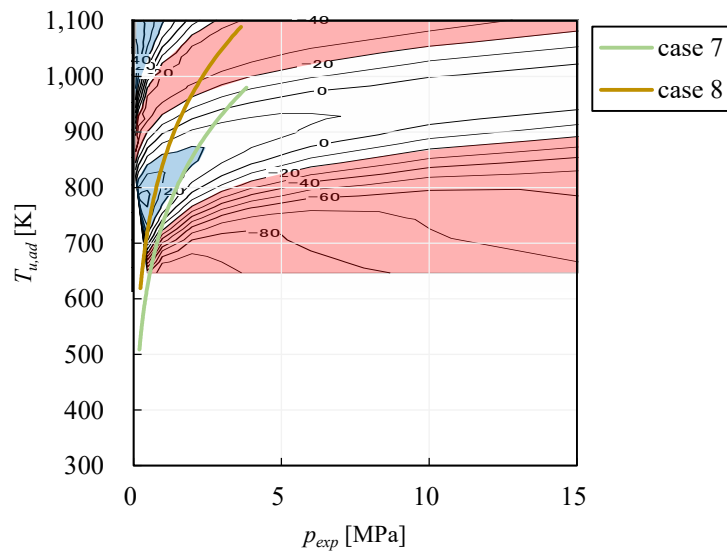


Fig.a-3 Cylinder pressure and unburned gas temperature for each test case (Fuel4) for pre-ignition estimation on $\Delta\tau_{100RON}$ p - T map.

続いて、各 case の筒内圧力履歴 (p_{exp}) と初期温度 ($T_{i,chem,S5,pre-ig}$) を用いて、PRF の混合気における着火時期 ($\theta_{ig,PRF}$) の算出を行った。図 a-4 にそれぞれの条件に対する S5R, S5H の詳細反応計算による着火時期 ($\theta_{pre-ig,S5}$) と PRF90, PRF100 の詳細反応計算による着火時期 ($\theta_{pre-ig,PRF}$) を比較している。同様に着火時期を IVC からの時間 ($t_{pre-ig,PRF}$, $t_{pre-ig,S5}$) で示した値を図 a-5 に示している。

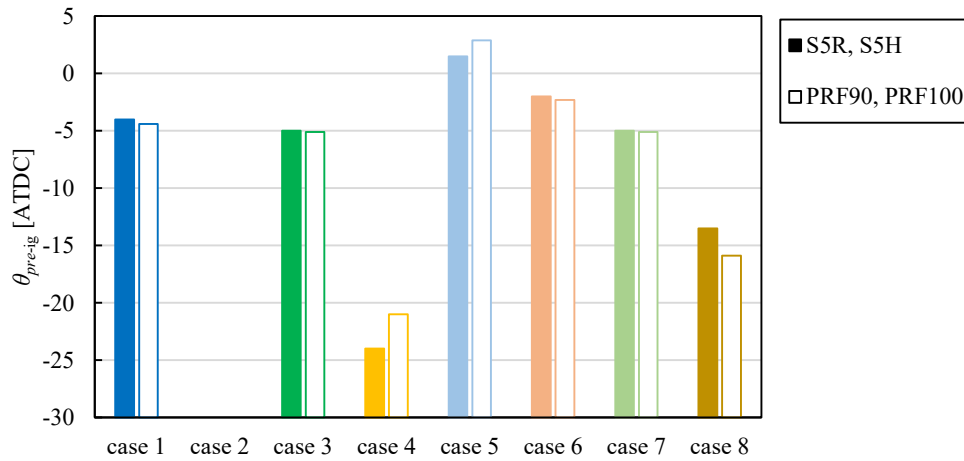


Fig.a-4 Estimated ignition timing (θ_{pre-ig}) of each estimated pre-ignition condition. Colored bars are estimated with surrogate fuels (S5R, S5H) and white bars are estimated with PRFs (PRF90, PRF100).

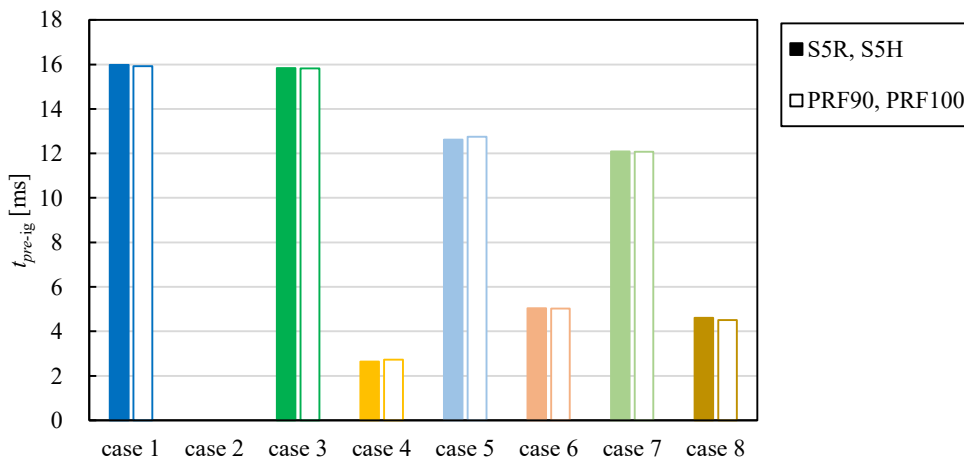


Fig.a-5 Estimated ignition timing (t_{pre-ig}) of each estimated pre-ignition condition. Colored bars are estimated with surrogate fuels (S5R, S5H) and white bars are estimated with PRFs (PRF90, PRF100).

それぞれの条件について PRF とサロゲート燃料 (S5) の着火時期の差 ($\theta_{pre-ig,PRF} - \theta_{pre-ig,S5}$) を図 a-6 に示している。同様に着火時期を IVC からの時間 ($t_{pre-ig,PRF}$, $t_{pre-ig,S5}$) については式 (4-4) により比較をして図 a-7 に示している。

$$\Delta t_{pre-ig} [\%] = \frac{t_{pre-ig,PRF} - t_{pre-ig,S5}}{t_{pre-ig,PRF}} \times 100 \quad (4-4)$$

図 4-19, 4-20 の比較と同様に、a-6, a-7 とともに値が 0 に近い場合は PRF で算出した着火時期とサロゲート燃料 (S5) で算出した着火時期が等しいことから、着火時期に対して燃料の RON の影響が大きく、MON の影響

が小さいと考えられる。Case4, 8を除いては、着火時期の差は2%以内であることから、ノッキングにはMONの影響が小さいと考えられる。

一方で、case4 (NA, CR10.4, 6000rpm, Fuel 3 (91RON)) は正の値であり PRF で算出した着火時期がサロゲート燃料 (S5) で算出した着火時期に対して遅くなっている。これは MON の値が高い PRF の方が着火しにくい状態であることを示しており、RONに加えて MON の値がプレイグニッションの起こりやすさに影響していることが推定される。また、case8 (過給, 4400rpm, Fuel 4 (100RON)) は負の値であり、PRF で算出した着火時期がサロゲート燃料 (S5) に対して早くなっている。これは MON の値が低いサロゲート燃料 (S5) の方が着火しにくい状態であることを示しており、RONに加えてセンシティブリティ S (=RON-MON) が大きい燃料ほどプレイグニッションが起こりにくくなる運転条件であることが推定される。

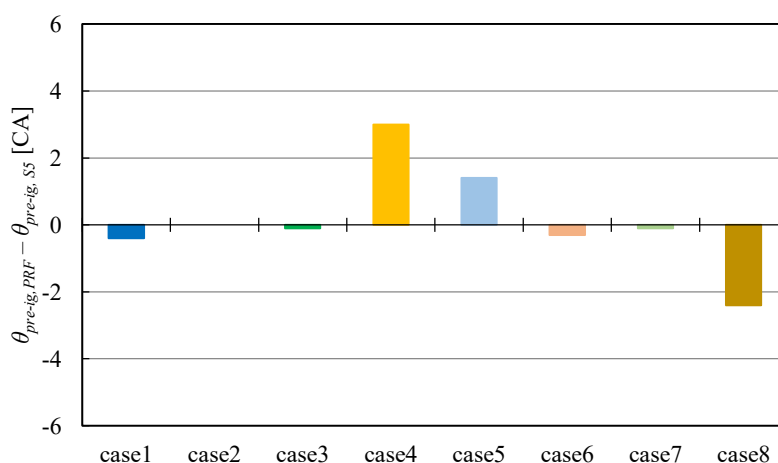


Fig.a-6 Comparison of the estimated ignition timing (θ_{pre-ig}) of each experimental condition between those estimated with PRF ($\theta_{pre-ig,PRF}$) and those estimated with surrogate fuels ($\theta_{ig,S5}$).

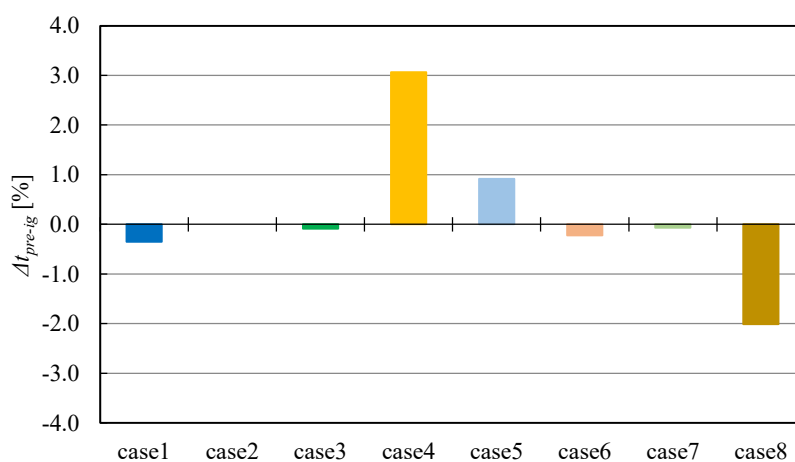


Fig.a-7 Comparison of different ratio of estimated ignition timing (Δt_{pre-ig}) calculated with equation 4-4.

Case1 (NA, CR10.4, 1200rpm, Fuel 3 (91RON)) の結果を図 a-8 に示す。プレイグニッションはピストン圧縮中の点火時期付近で発生するが、case1 の場合は点火時期が 16.0ms (=4ATDC) でありその時の圧力は 1.8MPa まで上昇している。このときの温度の変化と LTO で生成されるホルムアルデヒド (CH_2O) と冷炎及び熱着火中に

生成される OH ラジカルのもル分率を比較している。その結果 14ms (=18ATDC) 頃まで S5R は PRF90 に対して CH₂O の生成速度が速く、OH ラジカルも多く生成しているが、その後の着火準備期間は PRF90 に対して長いために熱着火による温度の上昇や着火時期については PRF90 での計算結果とほぼ同時期になっている。

次に、case4 (NA, CR10.4, 6000rpm, Fuel 3 (91RON)) の結果を図 a-9 に示す。case4 の場合は点火時期が 2.6ms (=24ATDC) であり、圧力は 1.4MPa まで上昇している。このときの温度の変化と LTO で生成されるホルムアルデヒド (CH₂O) と冷炎及び熱着火中に生成される OH ラジカルのもル分率を比較すると case1 のときと同様に S5R は PRF90 に対して CH₂O の生成速度が速く、OH ラジカルも多く生成している。また case4 では、その後の着火準備期間で反応速度が逆転することなく、着火時期については S5R が PRF90 に対して早い時期になっている。

最後に次に、case8 (過給, 4400rpm, Fuel 4 (100RON)) の結果を図 a-10 に示す。Case8 の場合は点火時期が 4.6ms (=13.5ATDC) であり、圧力は 3.6MPa まで上昇している。このときの温度の変化と LTO で生成されるホルムアルデヒド (CH₂O) と冷炎及び熱着火中に生成される OH ラジカルのもル分率を比較すると case1 のときと同様に 4ms (=30ATDC) 頃まで S5R は PRF90 に対して CH₂O の生成速度が速く、OH ラジカルも多く生成している。しかし、その後の着火準備期間で反応速度が逆転しており、着火時期については S5R が PRF90 に対して遅い時期になっている。LTO が大きく影響しているためと考えられる。

Case4 (NA, CR10.4, 6000rpm, Fuel 3 (91RON)) の解析により、温度の高い条件で着火するエンジン回転速度の高い運転条件においては、混合気は LTO の影響をあまり受けず、混合気は MON の計測条件に近い着火特性を示していることが考察された。これは、過去に筆者らが報告したエンジン回転数が高い領域のプレイグニッションの発生温度が MON の影響を受けるという結果と一致する。ただし、case8 (過給, 4400rpm, Fuel 4 (100RON)) の解析から示唆されたように、PRF100 (イソオクタン) には LTO よりも温度が高い領域で着火準備期間が短くなる領域があるために、センシティブティ S (=RON-MON) の大きい燃料の着火が起こりにくくなっている。この傾向については過去の研究事例がないが、今後エンジンでの実証により明らかにされることが期待される。

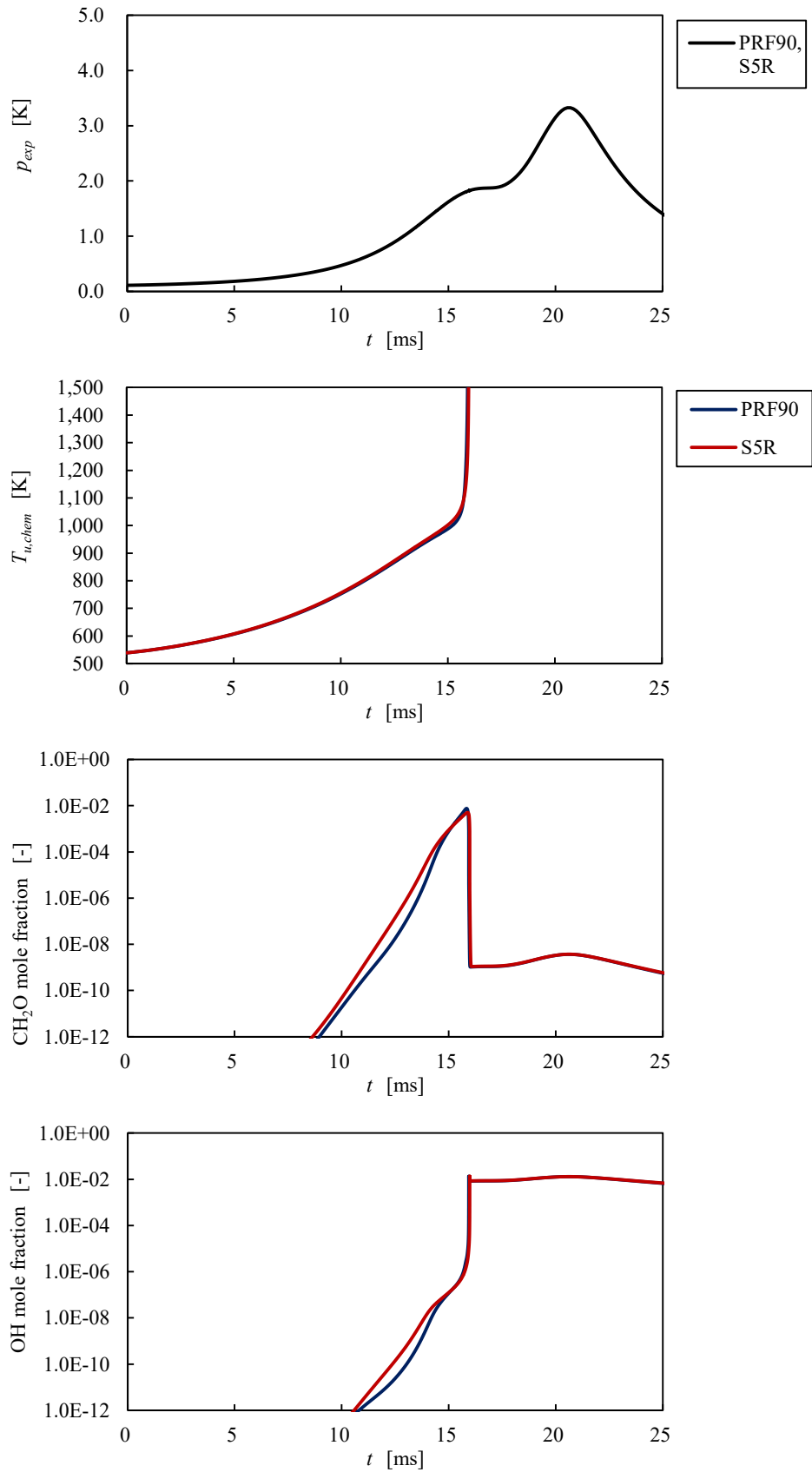


Fig.a-8 Cylinder pressure (p_{exp}), unburned gas temperature ($T_{u,chem}$), CH_2O and OH mole fraction calculated with PRF90 and S5R for case 1 (NA, CR10.4, 1200rpm, Fuel 3 (91RON)) pre-ignition condition.

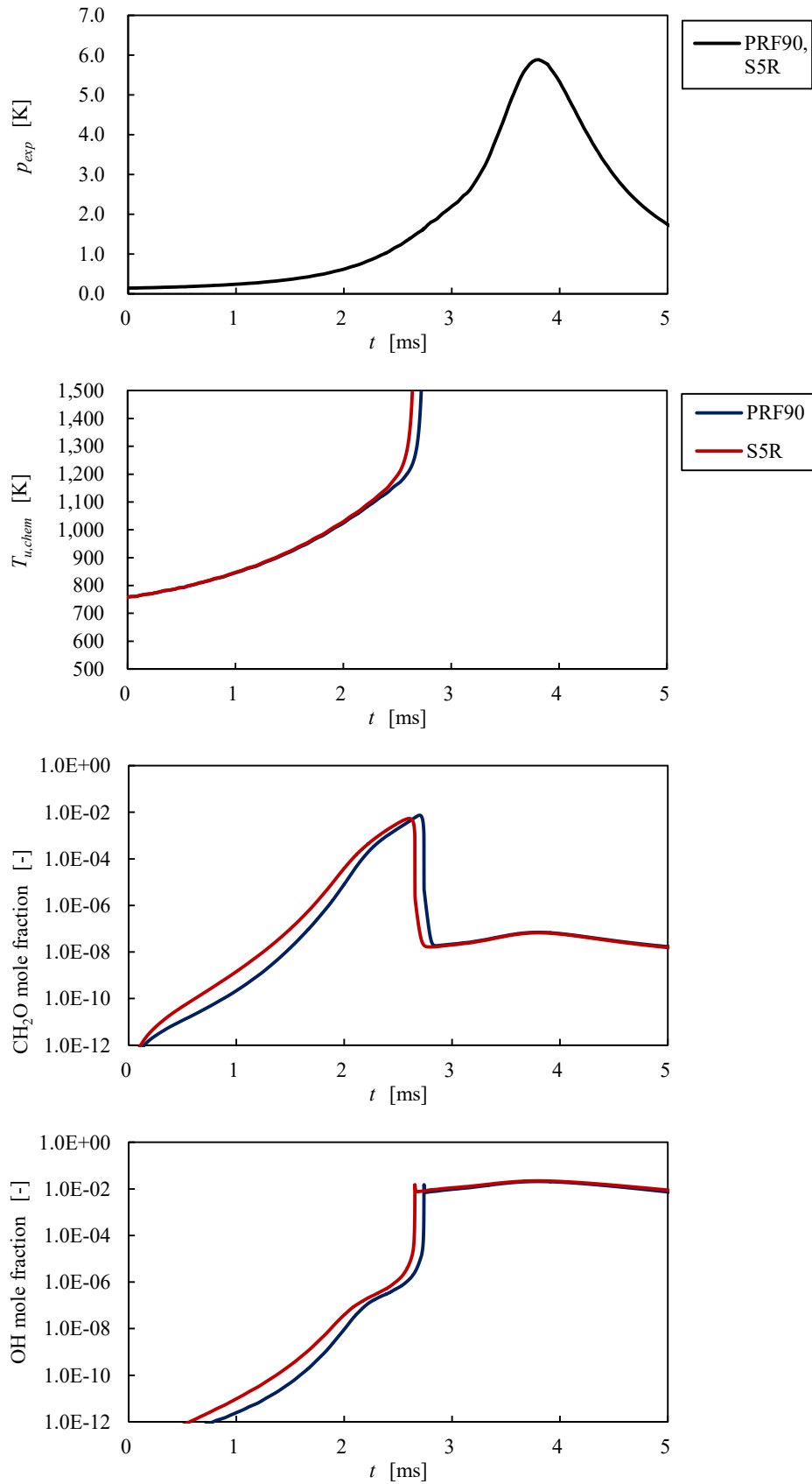


Fig.a-9 Cylinder pressure (p_{exp}), unburned gas temperature ($T_{u,chem}$), CH_2O and OH mole fraction calculated with PRF90 and S5R for case 4 (NA, CR10.4, 6000rpm, Fuel 3 (91RON)) pre-ignition condition.

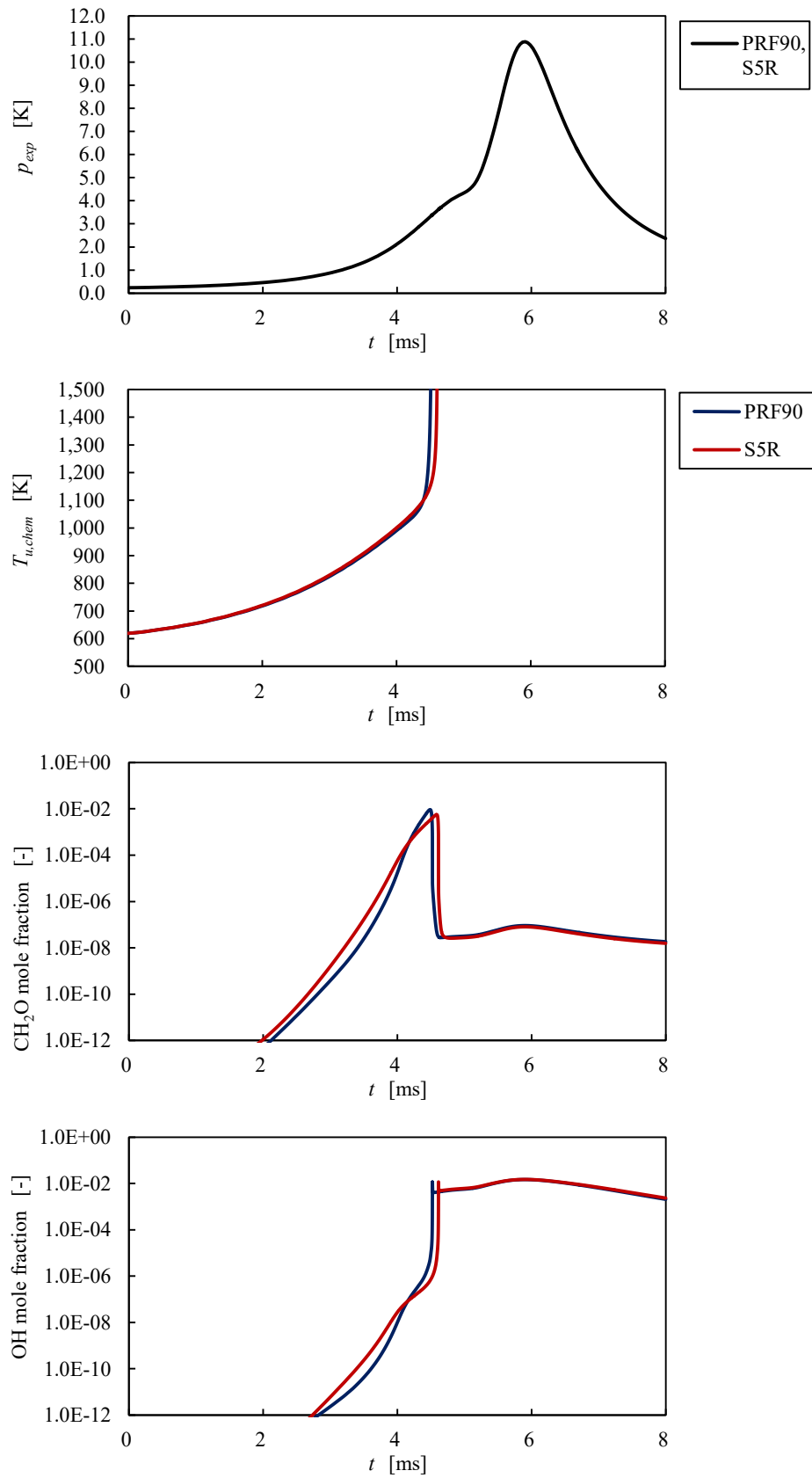


Fig.a-10 Cylinder pressure (p_{exp}), unburned gas temperature ($T_{u,chem}$), CH_2O and OH mole fraction calculated with PRF90 and S5R for case8 (Turbocharged, CR10, 4400rpm, Fuel 4 (100RON)) pre-ignition condition.