すす粒子計算に関する研究

-詳細反応モデルおよび簡略化反応モデルによるすす粒子生成の比較-

日大生産工	(院)	〇生井	裕樹	日大生産工	(院)	生井	裕樹
日大生産工		岩田	和也	日大生産工		今村	宰
				日大生産工		秋濱	一弘

1 まえがき

近年,欧州や日本において急速に普及が進む直噴ガ ソリン車は,従来のポート噴射ガソリン車と比べて, 低燃費化が可能である一方ですすを含むPM粒子状物 質を多く排出する。欧州では2017年以降にPM排出個数 (PN)を6×10⁴¹[個/km]に制限する等,大幅な規制強化を 行う。そこで,GPF(Gasoline Particulate Filter)等の PM除去フィルターの装着が検討されているが,燃費 を数%悪化させてしまうという問題がある。そのため、 PM除去フィルターの装着なしに今後の排出規制に対 応することが望まれている。燃費向上だけでなく開発 コストや開発期間短縮の面から考えても,計算負荷が 低く予測精度の高いモデルの開発が求められていると 考えらえる。

本研究では、詳細反応モデル^{2,3)}および簡略化反応モ デル⁴⁾を用いて、従来検討が十分行われていないガソリ ンサロゲート燃料に関するすす計算を実施し、実験値 と比較する事で両モデルの特徴を明らかにした。計算 では、衝撃波管を用いて新規取得されたすす生成実験(ト ルエン・イソオクタン・ノルマルヘプタンからなる3成分 混合ガソリンサロゲート燃料の熱分解条件)を CHEMKIN-PROの0次元計算および粒子計算にモーメン ト法を用いることによって再現計算を実施した。



図1 8種のすす粒子前駆体

2 計算方法

詳細反応モデルには KAUST の Raj ら²⁰の気相反応モデ ルを使用した。このモデルでは、7環の PAH であるコロ ネンまでの PAH 成長反応が詳細に記述されている。核 化・表面反応には Wang ら³⁾によるモデルを使用した。図 1 に示すピレンからコロネンまでの PAH をすす粒子前駆 体として扱い,8種の PAH 同士による36通りの核化反 応が考慮されている。詳細反応モデルは,化学種231, 気相反応1350,核化・表面反応55が考慮されたものとな る。

簡略化反応モデルにはAnら⁴の気相反応モデルを使用 した(以降 P.AN モデル)Anらのモデルでは,Rajらの 機構に基づいてモデルの簡略化と反応の修正が行われて おり4環のピレンまでのPAH成長反応が考慮されてい る。そのため,Wangらのモデルをベースに,ピレン同士 による核化反応1通りを考慮した。簡略化反応モデルは, 化学種85,気相反応232,核化・表面反応11が考慮され たものとなる。

以下の式は、すす粒子計算で用いられる基礎方程式で ある。なお、式(1)の核形成項は、36 通りの核化反応が考 慮された場合を示しており、簡略化反応モデルでピレン 同士の核化反応のみが考慮された計算では、核形成項は $\frac{1}{2} \alpha_{PAH} [PAH]^2$ となる。

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{8} \sum_{l=1}^{8-(k-1)} \alpha_{PAH} [PAH_k] [PAH_l] - N_1 \sum_{j=1}^{\infty} \beta_{1,j} N_j - k_s N_1 S_1 \quad (1)$$

$$\frac{dN_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{l-1} \beta_{j,l-j} N_j N_{l-j} - N_l \sum_{j=1}^{\infty} \beta_{l,j} N_j + k_s (N_{l-1} S_{l-1} - N_l S_l) \quad (2)$$

 $(i = 2 \sim \infty)$

 N_i は粒子の数密度, α_{PAH} は PAH 同士の衝突頻度, [PAH_{k,l}]は PAH 濃度, $\beta_{i,j}$ は粒子同士の衝突頻度, k_s は表 面成長速度, Sは粒子の表面積をrr表す。上記の基礎方 程式は無限個の微分方程式であるため、本研究では式(3) のモーメントを定義することによって、無限個の微分方 程式を数学的に有限個のモーメント方程式に変換して粒 子計算を行うモーメント法を使用した。

$$M_r = \sum_{i=1}^{r} (m_i)^r N_i \tag{3}$$

モーメント法より得られる0次モーメント(r=0)では 全てのサイズを含んだ粒子の数密度,1次モーメント(r= 1)では単位体積中における粒子全体の炭素原子数が表さ れる。本研究では5次モーメントまでを考慮し計算を行っ た。1次モーメントの値と初期の燃料中に含まれる炭素原 子数の割合により,すす生成量を表すsoot yieldを算出し た。ここで, soot yieldは計算値と実験値を比較する際の1 つの指標となる。

Study on the Soot Formation Calculations

Comparison of Soot Particle Generation Calculated by Detailed Reaction Model and Reduced Reaction Model

Yuki NAMAI, Hirohisa YUI, Kazuya IWATA, Osamu IMAMURA and Kazuhiro AKIHAMA

3 計算結果

衝撃波管を用いた3成分混合ガソリンサロゲート燃料 のすす生成実験 ⁹を CHEMKIN-PRO によって再現した。 実験条件は表1の通りである。表1の組成は,SIP 制御 チーム PM グループで提案された5成分実験用 PM 模擬 燃料(イソペンタン 45%・ノルマルヘプタン10%・イソ オクタン 20%・トルエン 10%・1,2,4・トリメチルベンゼン 15%)を仮想的に CFD 用の燃料とするために、イソペン タンを低沸点のイソオクタンとして、1,2,4・トリメチルベ ンゼンを高沸点のトルエンとして扱ったものである。。 試験気体はガソリンサロゲート燃料をアルゴンガスで 1%に希釈している。計算では、温度領域を1500Kから 2500Kとし、100Kごとに定圧・定温計算を実施した。圧 力は、実験条件における平均圧力を使用した。

表1 実験に使用されたガソリンサロゲート燃料の組成

Compon	ent (vol.% in	Pressure	Reaction	
iso-octane	n-heptane	toluene	(kPa)	Time
65	10	25	210-260	1ms
65	10	25	210-260	2ms

表1の組成にて、両モデルを用いて再現計算を実施した。図2の実線はKAUSTモデルより得られる計算値を示しており、図3の実線はP.ANモデルより得られる計算値を示している。実験値との比較結果より、KAUSTモデルでは、計算値が実験値を上回る結果となるが、実験値に対してピーク位置は概ね一致する。対して、P.ANモデルでは、計算値が実験値を下回る結果となり、計算値のピーク位置が実験値よりも100K高温側に現れていることが分かった。

次に、これらの反応モデルが燃料組成の変化に対応可 能か否かついて調べるために、5成分燃料におけるイソペ ンタンを低沸点の「ノルマルヘプタン」として置き換え ることによって計算を実施した。1,2,4-トリメチルベンゼ ンは同様に高沸点のトルエンとして扱っている。計算に 用いた組成はノルマルヘプタン 55%・イソオクタン 20%・ トルエン 25%となる. 図 2 および図 3 の破線が組成変化 後の計算値を示している。

KAUSTモデルでの組成変化後の結果(図2破線)を見 ると,組成の変化前後で計算値は殆ど変化せず,燃料組 成の変化にも対応している事が分かった。対して,PAN モデルでの組成変化後の結果(図3破線)を見ると,低温 側と高温側に2つのピークを持つ計算結果となり,燃料組 成の変化には十分対応出来ていないことが分かった。こ の結果は、両モデルの1msの条件でも同様な傾向がみられ た。PANモデルについては、Anら[4]によってガソリン/空 気およびTRF/空気の条件で着火遅れと層流燃焼速度の検 証、ノルマルヘプタン/空気およびイソオクタン/空気の条 件で複数の化学種のモル分率についての検証が行われて いる。しかしながら、本研究のように直接すす粒子の生 成量に関する検証が行われていないことから、引き続き PANモデルの検証とすす粒子生成モデルの簡略化を進 めていくことが必要であると考えられる。

4 結言

KAUST モデルでは実験値に対して計算値が上回る 傾向が見られた。一方で, P.AN モデルでは実験値に対 して計算値が下回る結果が得られた。 3成分混合ガソリンサロゲート燃料の組成を変化させると、KAUSTモデルでは燃料組成の変化に対応できているが、P.AN モデルではダブルピークとなり燃料組の変化に十分対応出来ていないことが分かった。



図2 実験値と計算値の比較(KAUST model, 2ms)



図3 実験値と計算値の比較(P.AN Model, 2ms)

参考文献

- Lee, K., DOE Annual Merit Review & Peer Evaluation Meeting, 2013, (online) available from http://energy.gov/sites/prod/files/2014/03/f13/ace024_lee _2013_o.pdf>, (accessed on 18 August, 2017).
- Raj, A., Prada, I. D. C., Amer, A. A. and Chung, S. H., Combustion and Flame 159, pp.500–515, 2012.
- Wang, Y., Raj. A. and Chung, S. H., Combustion and Flame 162, pp.586–596, 2015.
- An, Y., Pei, Y., Qin, J., Zhao, H., Teng, S. and Li, B., Energy 94, pp.367-379, 2016.
- 5) 田中ほか, 第55回燃焼シンポジウム講演論文集,2017.
- 秋濱, SIP「革新的燃焼技術」第3回公開シンポジウムポスター発表資料, 2017, (online) available from <http://www.jst.go.jp/sip/dl/k01/sympo3rd/03c_14.pdf>