

# 詳細反応及び簡略化反応モデルによる

## すす粒子生成計算の比較

日大生産工(院) ○門脇 直哉 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 緒言

近年, 急速に普及が進む直噴ガソリン車は低燃費化が可能である一方, すすを含む粒子状物質 (PM) を多く排出する. 欧州では, 粒子排出個数での規制 (PN 規制) が新たに導入されることで, 今後は直噴ガソリンエンジン筒内の燃焼自体で PM の排出低減を行うことが課題となる. そのため, エンジン設計における開発効率を高めるために計算ベースの開発手法を目指し, 3 次元 CFD を用いて直噴ガソリンエンジンからのすす粒子排出特性を予測する必要がある. さらに, 開発期間の短縮面から考え, 計算負荷が低く予測精度の高いモデルが求められる.

本研究では, 詳細反応モデル<sup>1,2)</sup>及び 3 次元 CFD で計算時間が短縮できる簡略化反応モデル<sup>3)</sup>より得られたすす生成特性の計算値を実験値<sup>4)</sup>と比較することで両モデルの特徴を明らかにした. 計算では, 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・酸化条件)<sup>4)</sup>を CHEMKIN-PRO の 0 次元計算及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<sup>5)</sup>.

### 2 計算比較モデル

詳細反応モデルには KAUST の Raj ら<sup>1)</sup>の気相反応モデルを使用した (以降 KAUST モデル). 核化・表面反応には Wang ら<sup>2)</sup>によるモデルを使用した. 化学種数 231, 気相反応数 1350, 核化・表面反応数 55 である. 図 1 に示すピレンからコロネンまでの PAH をすす前駆体として 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.

一方で, 簡略化反応モデルには An ら<sup>3)</sup>の気相反応モデルを使用した (以降 P.A.N モデル).

化学種数 85, 気相反応数 232, 核化・表面反応数 11 である. An らのモデルでは, Raj らの機構に基づきモデルの簡略化と反応の修正が行われている. そのため, 4 環のピレンまでの PAH 成長反応が考慮されている.

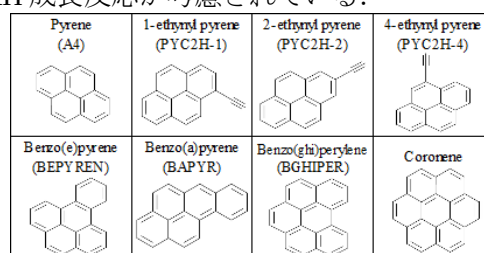


図1.詳細反応モデルで扱うすす粒子前駆体

### 3 計算方法

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. 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, 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.

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

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

$N_i$ は粒子の数密度,  $\alpha_{PAH}$ 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,  $S$ は粒子の表面積を表す.

すす粒子計算で用いられる基礎方程式は, 無限個の微分方程式であり, 本研究では式(3)のモーメントを定義し, 無限個の微分方程式を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.

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

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燃料中に

## Soot Particle Generation Comparison of Detailed Reaction Model and Reduced Reaction Model

Naoya KADOWAKI, Kazuya IWATA, Osamu IMAMURA, and Kazuhiro AKIHAMA

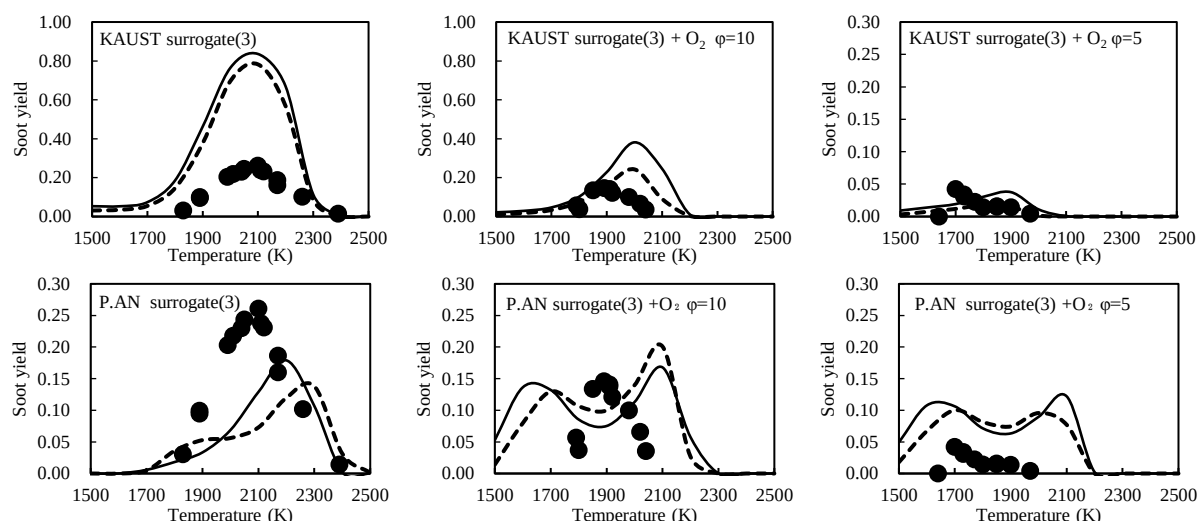


図2 実験値と計算値の比較  
(KAUST and P.AN model at reaction time of 2ms)

● Experimental value — PM3 - - - PM3B

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指標の 1 つとなる。

#### 4 計算条件

3 成分混合ガソリンサロゲート燃料のすす生成実験<sup>4)</sup>に対して CHEMKIN-PRO の 0 次元計算によって再現した。計算条件は表 1 に示す。実験<sup>4)</sup>で使用された燃料 PM3 と組成変化による影響を調べるための仮想燃料 PM3B(イソオクタンとノルマルヘプタンの割合を変更)を用いた。実験条件に合わせて反応気体は Ar によって大希釈した。計算の温度領域は 1500K-2500K とし、100K ごとに定圧・定温計算を実施した。反応時間は 2.0ms、圧力は、実験条件における平均圧力(235kPa)を使用した。

表1 各特性の比較

| Fuel | (vol.%)    |           |         |      |      | $\phi$   |
|------|------------|-----------|---------|------|------|----------|
|      | iso-octane | n-heptane | toluene | O2   | Ar   |          |
| PM3  | 0.65       | 0.10      | 0.25    | 0.00 | 0.99 | $\infty$ |
|      | 0.65       | 0.10      | 0.25    | 1.10 | 97.9 | 10       |
|      | 0.65       | 0.10      | 0.25    | 2.30 | 96.7 | 5        |
| PM3B | 0.20       | 0.55      | 0.25    | 0.00 | 0.99 | $\infty$ |
|      | 0.20       | 0.55      | 0.25    | 1.10 | 97.9 | 10       |
|      | 0.20       | 0.55      | 0.25    | 2.30 | 96.7 | 5        |

#### 5 計算結果

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の上下3図はそれぞれ KAUST モデル、P.AN モデルより PM3、PM3B の条件で得られる計算値を実験値と比較した。

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、低温側と高温側に 2 つのピークを持つ計算結果となり、燃料組成の変化に十分対応できていないことが分かった。P.AN モデルがダブルピークになる理由として、すす粒子前駆体をピレン 1 種類のみ考慮している。そのため、低温側では、PAH 成長によるピレンの核生成反応が、高温側ではアセチレン表面付加反応がすす生成を支配していると推測される。

#### 6 結言

本研究において得られた知見を以下に示す。

1. 燃料の組成及び酸素量を変化させると、KAUST モデルでは燃料組成の変化に対応できている。しかし、P.AN モデルではダブルピークの状態となり燃料組成の変化に十分対応されていないことが判明した。
2. ダブルピークになる原因として、低温側にピレン、高温側にアセチレンの生成反応が支配されているからである。

#### 「参考文献」

- 1) Raj,A.,et.al.,Combustion and Flame 159, pp.500-515,2012.
- 2)Wang,Y.,et.al.,Combustion and Flame 162, pp.586-596,2015.
- 3)An,Y.,et.al.,Energy,94,pp.367-379,2016.
- 4) 田中ほか, 第55回燃焼シンポジウム講演概要集,B132,2017.
- 5) 由井ほか,第55回燃焼シンポジウム講演概要集,P212,2017.