簡略化気相反応モデルとセクショナル法を

組み合わせたすす粒子生成モデルの検討

日大生産工(院) 〇門脇 直哉 日大生産工 今村 宰 日大生産工 山崎 博司 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で, 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)が新たに導入されたこと で、PM除去フィルターの装着により規制のクリ アが検討されている.しかし、PM除去フィルタ ーの装着は燃費を数パーセント悪化させる研究 結果が報告されている. 今後はPM除去フィルタ ーに頼らず、将来のPM規制に対応させるため、 直噴ガソリンエンジン筒内の燃焼改善でPMの 排出低減を行うことが課題である. そのため, エンジン設計における開発効率を高めるため, 計算ベースでの開発効率を目指し、三次元CFD を用いて直噴ガソリンエンジンの粒子排出特性 を予測する必要性がある. その際に重要となる すす粒子計算モデルの開発が急務となる.開発 期間の短縮面から考えて計算負荷が低く予測精 度の高いモデルが求められ、PN規制の観点から、 粒径分布予測のニーズも高くなっている.

本研究では、簡略化気相反応モデル及びセク ショナルモデルを組み合わせ、粒径分布も計算 可能であるすす粒子生成計算モデルの作成を試 みた.そして、すす生成量に関して、計算値と 実験値を比較することによりモデル評価を行っ た.計算では、衝撃波管を用いたすす生成実験(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)やを CHEMKIN-PROの0次元計算を用いることによ って再現計算を実施した.

2. 簡略化すす粒子生成セクショナルモデル

本研究では、図1に示すように2つのモデルを 組み合わせているため、順に説明する.気相反 応には、Anら¹⁾の簡略化気相反応モデルを使用し た(以降P.ANモデル).化学種数85、気相反応 数232である.P.ANモデルでは、Rajらの機構²⁾ に基づき化学種・素反応数の削減を試み、4環の ピレンまでのPAH成長反応が考慮されている.

一方粒子計算には、 Saggeseら³により提唱され たセクショナルモデル(以降CRECKモデル)中の 粒子化反応を使用した. CRECKモデルは化学種 297、素反応数16797である.化学種のうち、気 相化学種が197, BIN化学種は100である. ここで BINとは、粒子のサイズクラスを示しており、そ れぞれ階層ごとに炭素・水素原子数、粒径の大 きさや質量が割り当てられている. CRECKモデ ルでは20のBINの粒子サイズクラスとして離散 化され, BIN1~4は PAH(気相化学種), BIN5~12 はPrimary Particle(一次粒子), BIN13~BIN20は Aggregate(凝集後のすす粒子)までが割り当てら れている. CRECKモデルでは、セクショナル法 を使用し、粒径分布を算出することが可能であ るが、気相化学種が197と多く計算負荷が大きい. 一方でP.ANモデルは、100を下回る化学種であり 計算負荷は少ないが、以前の研究5において、ピ レンのみがすす前駆体であることに起因して、 すす生成の温度依存性(ベル特性)がダブルピー クになる問題が明らかになっており、核形成モ デルの改善が必要であることが判明した. そこ で本研究では、両モデルを組み合わせることで 上記の課題を解決することを試み、化学種数を 297から189に削減した簡略化モデルを構築し た.具体的には、気相反応メカニズムを化学種



図1. すす粒子生成モデルの構造図

Study on Soot Formation Model Combined with a Reduced Gas Phase Reaction Model and Sectional Method

Naoya KADOWAKI, Osamu IMAMURA and Hiroshi YAMASAKI, Kazuhiro AKIHAMA 85のP.ANモデルに置き換え,その後の粒子計算 においては,CRECKモデル中の核形成と粒子計 算に関わるBIN化学種を含んだ素反応群を用い た.さらに前記2つの素反応群の結合において CRECKモデルの粒子計算反応で考慮されてい るがP.ANモデルにて考慮されていない化学種 A_2R_5 ($C_{12}H_7$)を含む反応式をKAUSTモデル²⁾か ら追記した.以上のように化学種189,素反応 8127のすす粒子生成セクショナルモデル(図1) を作成した.検証が進んでいる既存モデルを活 用し,化学種数をできるだけ抑え,粒径分布を 算出することが可能となる.

図1のモデルで得られる BIN5~BIN20 までの すす体積分率から、すすに含まれる炭素原子数 を算出し、初期の燃料中に含まれる炭素原子数 で割ることで、すす生成量(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.

3. 実験方法および測定方法

本研究では、田中らの衝撃波管を用いた3成分混 合ガソリンサロゲート燃料のすす生成実験⁴⁾を CHEMKIN-PROの0次元計算によって再現した. 実験条件は表1の通りである.計算では、温度領 域を1500Kから2500Kまで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(235kPa)を使用し熱分解と酸化(φ=5)条 件にて再現計算を実施した.

Mole fraction (vol.% in fuel)					6	Reaction
i-C8H18	n-C7H16	C7H8	O2	Ar	Ψ	time
0.65	0.10	0.25	0.0	99.0	x	2.0ms
0.65	0.10	0.25	2.30	96.7	5	

表 1 各特性の組成条件

4. 計算結果

図2の実線,破線は今回のモデルにより得られた計算値を示している.縦軸はSoot yield,横軸は温度(K)を示す.実験値との比較結果より,計算値と実験値のベル形状が概ね一致する結果となり,すす生成量の予測では妥当な結果を示した.次に,粒径分布の算出を行った.算出方法についてはBIN5~BIN20までのモル分率を算出し,粒子数に変換した.図3は図2の2.0ms(φ=5)において,温度1700,2100,2200Kにおける粒径

分布を示している.縦軸は粒子数(個/mol),横軸 は粒径(nm)を示す.温度によって粒径2.03[nm] から193.32[nm]における粒子量が異なることが 判明した.例えば1700Kでは核生成のみで凝集反 応が起こっていない様子などが分かる.このよ うにセクショナル法を用いることにより粒径分 布の算出が可能である.

5. 結言

本研究において得られた知見を以下に示す. (1) 化学種189のすす粒子生成セクショナル モデルは熱分解,酸化条件においても実験値 と計算値が概ね一致した.

(2) 化学種と反応数を削減したセクショナル法 を用いても、粒径分布を算出可能であることを 判明した.

参考文献

- 1) An, Y., Pei, Y., Qin, J., Zhao, H., Teng, S. and Li, B., Energy 94, pp.367-379 (2016).
- Raj, A., Prada, I. D. C., Amer, A. A. and Chung, S. H., Combustion and Flame 159, pp.500–515, 2012.
- Saggese, C., Ferrario, S., Camacho, J., Cuoci, A., Frassoldati, A., Ranzi, E., Wang, H. and Faravellie, T., Combustion and Flame, Vol. 162, pp.3356-3369 (2015).
- 4) 田中ほか, 第 55 回燃焼シンポジウム講演論 文集, pp.48-49 (2017).
- 5) 門脇ほか, 第27回日本エネルギー学会講演 論文集, pp.184-185 (2018).





