

ガソリンサロゲート燃料のすす粒子生成モデルの簡略化

日大生産工(院) ○高梨 真衣 門脇 直哉
日大生産工 今村 幸 山崎 博司 秋濱 一弘

1. まえがき

近年,欧州や日本で急速に普及し始めた直噴ガソリン車は, 低燃費化が可能な一方で, 従来のポート噴射ガソリン車と比べて多くのすすを含む粒子状物質PM(Particulate matter)を排出する. 欧州では2017年以降, 直噴ガソリン車に対するPM排出個数(PN)の規制が強化されている. そのため, 開発初期段階から3次元CFDを用いてガソリンエンジン筒内のPM排出特性を予測する必要性は高い. しかし, 従来の詳細反応モデルを用いた3次元CFD計算では, 化学種の数が多く, 計算負荷が高いことから, 計算に時間を要してしまうといった問題点がある. 開発期間短縮の面から, 計算負荷が低く予測精度の高いモデルの開発が急務となっている.

そこで本研究では, 既報の詳細反応モデル(詳細GSFモデル)¹⁾を対象に, ANSYS社のReaction Workbenchを用い, 主となる反応に直接的な関わりのない反応を削除することによる, モデルの簡略化を実施した. また3成分混合TRFガソリンサロゲート燃料(トルエン, イソオクタン, ノルマルヘプタン)を用いたすす生成実験(熱分解・酸化条件)²⁾を対象に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り再現計算を行い, 簡略化モデルの妥当性を検討した.

2. 簡略化対象の詳細モデル概要

簡略化する気相反応・粒子計算モデルは, 橋本らが提案した6~7環のPAH分解反応を考慮したモデル³⁾に対し, 核生成速度, アセチレン表面付加反応速度を変更することによる, すす生成量の最適化を行ったモデル(詳細GSFモデル)である⁴⁾. このモデルは, ガソリンサロゲート燃料に対応し, 化学種数233, 気相反応数1375, 核化反応数36, 表面反応数19となっている. 本モデルの核化反応は, 4環のpyreneから7環のcoroneneまでの8種類のPAHをすすの前駆体とし, 同じもの同士を含む36通りの核化反応が考慮されている.

3. 簡略化方法

2章の詳細モデルの簡略化計算にはANSYS社のReaction Workbenchを用いた. 簡略化はDRG(Directed Relation Graph), DRGEP(Directed Relation Graph with Error Propagation), Sensitivity Analysis with DRG/DRGEP⁵⁾を組み合わせ, 4回行った. ここで紙面の関係で詳細は割愛するが, DRG, DRGEPは, 保持する化学種の生成に対し, ある化学種の持つ影響度の強さ r を算出, カップリングを考慮したグループを形成し, 影響度の弱いグループを選定, 削除する方法である. Sensitivity Analysis with DRG/DRGEPは, DRG, DRGEPが化学種のグループ単位でのリダクションのみに対応しているのに対し, さらに詳細にグループ内部のリダクションを行うことができる手法である. この手法は, 計算コストや簡略化の効果の観点から, DRG, DRGEPを用いたリダクションの後に用いることが推奨されている.

4. 実験結果および検討

簡略化のプロセス, 結果を表1に示す. 簡略化は, DRG, DRGEP, Sensitivity Analysis with DRG/DRGEPを組み合わせ, 試行錯誤の結果, 最終的には4回行った. 既報⁴⁾で対象とした代表条件(圧力0.235MPa及び1.2MPa, 当量比10)において, soot yieldの温度依存性(ベル特性)が設定誤差以内で再現するような条件を与えて簡略化した. なお設定誤差はいずれの段階においても100%とした. その結果, 化学種数は, 元の233種から約3分の1の72種まで削減することができた. また反応数は1375から409となった. ただしベル特性の再現性のみに

表 1 簡略化プロセスと結果

Number of Reductions	Reduction method	Number of remaining chemical species
1st	DRG	123
2nd	DRGEP	82
3rd	DRGEP	80
4th	Sensitivity Analysis with DRGEP	72

Reduction of Soot Formation Model for Gasoline Surrogate Fuel

Mai TAKAHASHI, Naoya KADOWAKI, Osamu IMAMURA, Hiroshi YAMASAKI,
Kazuhiro AKIHAMA

着目した簡略化であるため、着火遅れ特性や層流燃焼速度の妥当性は保証できない。

また、簡略化前のモデルにおいてすす前駆体として考慮されていた8種類のPAHは、A4（ピレン）のみの1種類となった。

次に、簡略化すす生成モデルを用い、3成分混合ガソリンサロゲート燃料のすす生成実験に対して、CHEMKIN-PROによる再現計算を行った。燃料組成は、表2の通りである。

表2 計算に用いた燃料組成

Fuel (vol.%)					ϕ
iC8 ^{*1}	nC7 ^{*2}	T ^{*3}	O ₂	Ar	
0.325	0.05	0.125	0.575	98.925	10

*1 iso-octane *2 n-heptane *3 toluene

実験条件に合わせ、反応気体はArによって希釈し、計算温度領域は、1500K-2500Kとし、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(1.2MPa)とした。

簡略化前後のすす生成計算結果の一例を図1に示す。簡略化前後（黒実線と破線）において概ねベル形状は一致しているが、簡略化後では計算値が実験値を上回る傾向がみられる。この結果を受け、詳細GSFモデルにおけるすす生成量の調整法⁴⁾と同様に簡略化4回目のモデル（図1破線）に対し、図2のすす粒子のアセチレン表面付加反応の頻度因子を調整することで最適化を行った。調整は、図の凡例に示す3ケースで行い、赤線で示される $A=2.0 \times 10^6$ [cm³mol⁻¹s⁻¹]においてベル形状、すす生成量ともに実験値と概ね一致するモデルを得ることができた。

今後は気相反応メカニズム自体の修正はせず、既報⁴⁾で実施した熱分解条件についても検討する予定である。

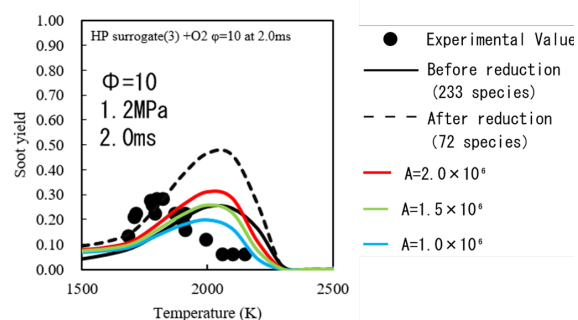


Fig.1 簡略化前後のすす生成計算結果例

5. まとめ

- 化学種233, 反応数1375の詳細すす生成モデルから、化学種数72, 反応数409の簡略化すす生成モデルを作成した。化学種を約3分の1まで削減することができた。
- 4段階の簡略化によってベル特性は維持されたが、すす生成量の計算値は増大し、衝撃波管で得られた実験値との差が大きくなった。
- 詳細モデルで用いたすす生成量の最適化方法は、簡略化モデルにおいても有効である。アセチレン表面付加反応の頻度因子を調整し $A=2.0 \times 10^6$ [cm³mol⁻¹s⁻¹]において、すす生成量については実験値と概ね一致した。

参考文献

- 1) 秋濱, 由井, 生井, 岩田, 今村, 石井, 橋本, ガソリンサロゲート燃料のすす粒子生成モデルの検討, 自動車技術会論文集, vol.49, No.6, pp.1132-1137 (2018).
- 2) 田中, 永田, 石井, 小橋, 反射衝撃波背後における3成分ガソリンサロゲート燃料の煤生成特性, 自動車技術会論文集, vol.50, No.5, pp.1224-1229 (2019).
- 3) 橋本, 足立, 伊東, 高橋, 田上, Toluene Reference Fuel 火炎における芳香族炭化水素の生成特性, 自動車技術会論文集, vol.48, No.6, pp.1201-1206 (2017).
- 4) 秋濱, 今村, 石井, 橋本, ガソリンサロゲート燃料のすす粒子生成モデルの検討(第2報)ーすす生成の時間特性改善ー, 自動車技術会論文集, vol.50, No.5, pp.1255-1260 (2019).
- 5) Perrine Pepiot and Heinz Pitsch: Systematic Reduction of Large Chemical Mechanisms, 4th Joint Meeting of the U.S. Sections of the Combustion Institute, Philadelphia, PA (2005) <https://web.stanford.edu/group/pitsch/publication/PepiotJMUSSCI2005.pdf>, (参照2019-09-15)

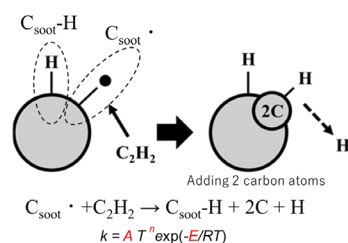


Fig.2 すず粒子のアセチレン表面付加反応