

ガソリンサロゲート燃料の簡略すす粒子生成モデルに関する研究

－モデルの改良とエンジン計算への応用－

日大生産工(院) ○中村 真菜 日大生産工 山崎 博司
日大生産工 今村 宰 日大生産工 秋濱 一弘

1. まえがき

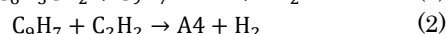
近年、欧州や日本で急速に普及し始めた直噴ガソリン車は、低燃費化が可能な一方で、すすを含む粒子状物質PM(Particulate matter)の排出が懸念されており、PM排出の厳格化を受けPM除去フィルターの装着による規制クリアが検討されている。しかし、PM除去フィルターの装着は燃費の悪化やコスト増加の要因となるため燃焼自体の技術開発を進めることで、フィルターに頼らないPM排出低減法の確立が求められる。そこでPM排出特性の予測精度が高く計算負荷の低い「すす粒子生成モデル」の開発が急務である。従来のKAUSTモデル¹⁾²⁾をベースに核生成速度とアセチレン表面付加反応速度を調整し、すす生成量と時間特性が改善された既報の詳細反応モデル(詳細GSFモデル)³⁾は化学種数が233と3次元流体計算(3D-CFD)における計算負荷が大きい。そこで既報の詳細GSFモデルを対象に、ANSYS社のReaction Workbenchを用い、主となる反応に直接的な関わりがない反応を削除しモデルを簡略化した。その結果化学種は約1/3となりすす生成の温度依存性(バル特性形状)は維持されたがすす生成量の計算値が増大する課題があった。そこでアセチレン表面付加反応の頻度因子を調整して、すす生成量は実験値と概ね一致する結果が得られたが反応初期の時間特性に問題があった⁴⁾。

そこで本研究では、3成分混合ガソリンサロゲート燃料で実施された衝撃波管を用いたすす生成実験を対象に、Chemkin-Proの0次元計算を用いて再現計算を行い、核形成反応速度を改善することですす生成量と時間特性などについて簡略モデルを総合的に評価した。さらに直噴ガソリンエンジン筒内を模擬した急速圧縮膨張装置を対象に3次元流体計算を実施し、モデルの妥当性を検討した。

2. 簡略すす粒子生成モデルの概要

詳細GSFモデルをANSYS社のReaction Workbenchを用いて、DRG(Directed Relation Graph)、DRGEP(Directed Relation Graph with Error Propagation)、Sensitivity Analysis with DRG/DRGEの3つの手法で簡略化したことにより、本研究で用いるモデルは化学種数72、気相反応数409となっている。また、既報のGSFモデル³⁾では8種のPAHをすすの前駆体として考慮していたが、本研究ではモデルを簡略化したことによりA4(Pyrene)のみ

となっている。式(1),(2)は残ったピレンの2つの生成経路を示しており、それぞれbenzyl radical(C₆H₅CH₂), indenyl radical(C₉H₇)の反応である。



式(3),(4)はすす粒子計算における基礎方程式である。すす前駆体がピレン(A4)一種類であることを反映した式である。 N は粒子の数密度を表しており、 α_{A4} はピレン同士の衝突頻度、 $[A4]$ はピレン濃度、 $\beta_{i,j}$ は粒子同士の衝突頻度、 k_s は表面成長速度、 S_i は粒子表面積である。

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{1}{2}\alpha_{A4}[A4][A4] - N_1 \sum_{j=1}^{\infty} \beta_{1,j} N_j - k_s N_1 S_1 \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt} = & \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{j,i-j} N_j N_{i-j} - N_i \sum_{j=1}^{\infty} \beta_{i,j} N_j \\ & + k_s (N_{i-1} S_{i-1} - N_i S_i) \quad (4) \\ & (i = 2 \sim \infty) \end{aligned}$$

上記の基礎方程式は無数個の微分方程式であるため、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ている。また、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、すす生成収率を表すSoot yieldが算出でき、計算値と実験値のすす生成量を比較する際の指標の1つとなる。

3. モデルの改善

3.1. 核形成反応速度の検討

前報⁴⁾において簡略化された化学種数72、気相反応数409のモデルをアセチレン表面付加反応の頻度因子の調整によりすす生成量を実験値と概ね一致させたことで反応初期に問題がみられた。よって、反応初期のすす生成は核形成反応が支配しているため、核形成反応速度を検討することによりモデルの改善を図る。

Study on Reduced Soot Formation Model for Gasoline Surrogate Fuel

－ Model improvement and application to engine calculation －

Mana NAKAMURA, Hiroshi YAMASAKI, Osamu IMAMURA and Kazuhiro AKIHAMA

すす粒子の核生成速度はA4同士の衝突頻度 α_{A4} によって与えられ、A4の平均速度とA4が衝突する際の断面積の積によって求められている。

$$\alpha_{A4} = \gamma \times C_E \times E_F \times \sqrt{\frac{\pi k_B T}{m_{A4}}} \times (D_{A4} + D_{A4})^2 \quad (5)$$

式(5)において、 E_F はファンデルワールス増大係数(2.2)、 k_B はボルツマン定数、 T は温度、 m_{A4} はA4の質量、 D_{A4} は衝突直径である。なお、 $\gamma \times C_E$ は衝突確率係数である。 C_E はPAH同士の衝突効率であり、 γ は補正係数(フィッティングパラメータ)である。補正係数についてWangら²⁾はバーナーを用いたエチレン火炎のすす濃度実験値に合うように $\gamma=0.0578$ を与えている。また本研究の対象である詳細反応モデル(詳細GSFモデル)を簡略化してアセチレン表面付加反応を調整したモデルは $\gamma=1.0$ が設定されている⁴⁾。モデルの簡略化において時間履歴については核生成速度の調整により補正していく必要がある。

3.2. アセチレン表面付加反応速度の検討

すす生成量の計算値を実験値に近づけるための方法としてアセチレン表面付加反応速度の調整が有効である。そこで反応速度定数を検討する。

$$k = \theta A T^n \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (6)$$

上式において詳細GSFモデルでは $\theta=0.05$ 、 $A=8.0 \times 10^7$ 、 $n=1.56$ 、 $E=3800[\text{cal/mol}]$ という値が与えられている。本研究では、不確さが残るアセチレン表面付加反応の反応速度定数の値を調整することで、すす生成量の計算値を改善する。前報で示したように、アセチレンの衝突頻度に関わる頻度因子Aに着目し、簡略モデルにおいても頻度因子Aを変化させる調整係数 θ を式(6)に導入し、 θ の値を検討した。

4. 計算方法

4.1. モデルの改善

本研究では、田中ら⁵⁾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熱分解および酸素添加条件におけるすす生成実験をChemkin-Proの0次元計算によって再現した。田中らの実験条件に沿った計算条件を表1に示す。計算では、温度1500Kから2500Kまで100Kごとに定圧・定温計算を実施した。平均圧力0.235MPaおよび1.2MPaを使用し、熱分解($\phi=\infty$)、および当量比 $\phi=10$ と5の条件で計算を実施した。

表1 田中らによる実験条件

	Mole fraction(%)					
	Φ	i-C ₈ H ₁₈	n-C ₇ H ₁₆	C ₇ H ₈	O ₂	Argon
0.235MPa	10	0.65	0.10	0.25	1.15	97.850
1.2MPa	10	0.325	0.050	0.125	0.575	98.925

4.2. エンジン計算への応用

3次元流体計算にANSYS社のForteを用いた。計算対象は急速圧縮膨張装置(RCEM)とし、圧縮・膨張

行程に対して行った。RCEMの主要諸元を表2に装置全体を図1に示す⁶⁾。

表2 RCEM諸元と運転条件

Displacement [cc]	320
Bore [mm]	78
Stroke [mm]	67
Compression ratio [-]	9
Intake air temperature [K]	363
Intake pressure [MPa]	0.1
Injection pressure [Mpa]	5
Engine speed [rpm]	600
Ignition timing	5° BTDC

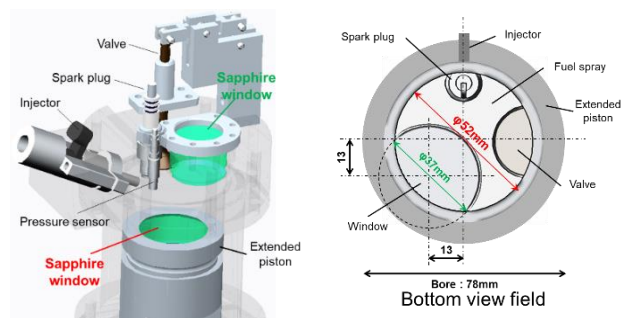


図1 RCEM概略図

5. 結果

5.1. すす生成時間特性

アセチレン表面付加反応速度の調整係数 θ と核形成速度の調整係数 γ を変化させて時間特性を改善した。結果を図2に示す。図はベルピークにおけるSoot yieldを2msで規格化した時間履歴を表すグラフである。比較のため、詳細GSFモデルの結果も載せている。

既報で報告した $\gamma=1.0$ および $\theta=0.025$ では不十分であり、試行錯誤の結果、 $\gamma=0.1$ および $\theta=0.025$ とすることにより実験値と概ね一致した結果が得られた。ただし高圧(1.2MPa)条件で、 $\gamma=1.0$ でも反応初期においてすす生成量の計算値が実験値を上回っていることも分かる。この原因としては、簡略化によって前駆体が8種から1種(ピレンのみ)へと変化し、前駆体生成の時間履歴も変化したためであると考えられる。複雑なすす生成現象を簡略モデルで表現するというモデル自体の精度を考慮すると、これ以上の合わせ込みは不要であると判断している。従って本簡略モデルに対しては、 $\gamma=0.1$ および $\theta=0.025$ に設定することが適していると考えられる。

5.2. 衝撃波管によるすす生成実験値との比較

衝撃波管の実験データとの比較によって、モデルの総合的評価を行った。図3は表1の全ての実験条件に対する計算結果である。図では、前節に得られた時間特性を改善した簡略モデル($\gamma=0.1$ 、 $\theta=0.025$)、詳細GSFモデル($\gamma=1.0$ 、 $\theta=0.05$)ならびにKAUSTモデ

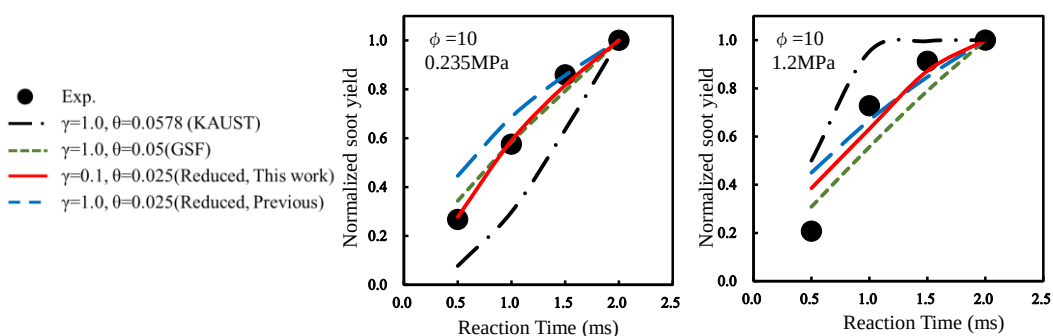


図2 ベルピークにおける soot yield の時間履歴

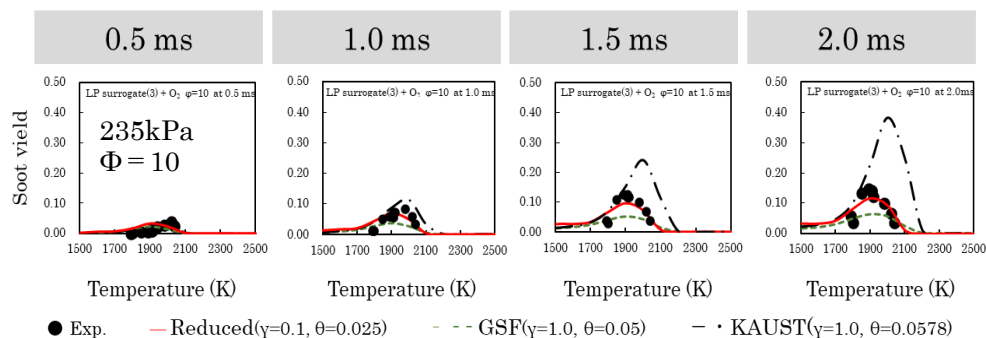


図3 実験値と計算値の比較

ル ($\gamma=0.0578$, $\theta=1.0$) を比較している。 γ と θ を調整した簡略モデルの計算結果はベル形状, すず生成量ともに実験値と概ね一致することが分かる。また, 詳細 GSF モデルとほぼ同じ結果が得られており, 簡略化が妥当であることも分かる。したがって, $\gamma=0.1$ および $\theta=0.025$ のパラメータ値を設定したモデルを, ガソリンサロゲート燃料用の簡略すず粒子生成モデル (簡略 GSF モデル) として提案する。表 3 に各モデルそれぞれの化学種数と反応数, すず粒子核生成速度の補正係数 γ とアセチレン表面付加反応速度の調整係数 θ のパラメータの組み合わせを示す。

表 3 各モデルの化学種数, 反応数, γ と θ

Comments	chemical species	reactions	γ	θ
Original KAUST model (2012)	231	1350	1.0	0.0578
GSF model (2019)	233	1375	1.0	0.05
Reduced GSF (this work)	72	409	0.1	0.025

5.3. 3次元反応流体 (3D-CFD) 計算結果

3成分混合ガソリンサロゲート燃料 (TRF燃料) を使用したRCEM実験をANSYS社のForteによって再現し, 計算結果の可視化ソフトには同じくANSYS社のEnSightを使用した。実験条件は表4の通りである。実験におけるスパーク放電時期 (5° BTDC) の計算では, その後の混合気への点火が実験より遅くなった。このことによって実験値と計算値で筒内圧力の立ち上がりに差が生じた。Forte内の点火モデルのパラメータ調整では圧力の立ち上がりを一致させることが

できなかった。このため点火時期 (圧力の立ち上がり時期) の合わせ込みを, スパーク時期を実際より早めることで実施し, 1.3° のわずかな進角によって点火時期が一致した。上記のように表4の3条件ではスパーク時期と使用したすず粒子生成モデルが異なる。

表 4 計算条件および燃料組成

Component (Mass Fraction[-])				Ignition Spark	Model
iso-octane		n-heptane	toluene		
A	0.61166	0.092738	0.295602	5°BTDC	GSF
B	0.61166	0.092738	0.295602	6.7°BTDC	GSF
C	0.61166	0.092738	0.295602	6.7°BTDC	This work

図4は, 各条件における圧力波形をRCEMによる実験値と再現計算値で比較したものである。点火時期の合わせ込みを実施した条件B,Cは, 実験値と比較して, 点火以降の圧力の立ち上がりとピーク位置が概ね一致する結果が得られている。

5.4. 3D-CFD計算時間の比較

図4の詳細GSF (Calculation B) とReduced GSF (Calculation C) それぞれの計算時間を表5に示す。使用したワークステーションはHPC-5000 (CPU: Xenon E5-2699v4, 2.2GHz 22コア×2, Memory: 512G) であり, 8コア並列にて計算した。表より簡略化により化学種数を約1/3にできたことから, 計算時間は約1/2になった。このことから目的である計算時間の大幅短縮が実現できていることがわかった。

表 5 計算時間比較

Model	Calculation time
GSF	~135h
Reduced GSF (This work)	~77h

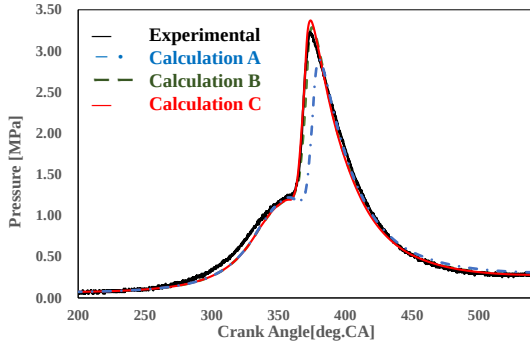


図 4 各条件における圧力波形比較

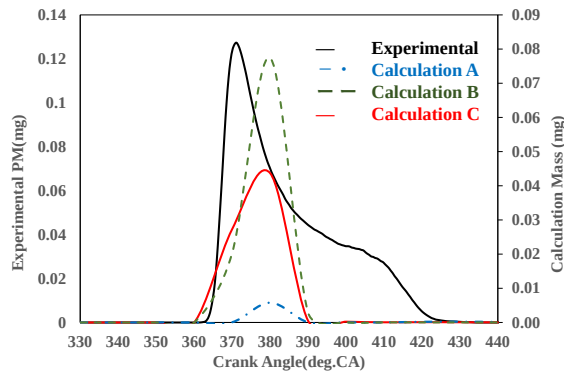


図 5 計測領域内におけるすす生成量比較

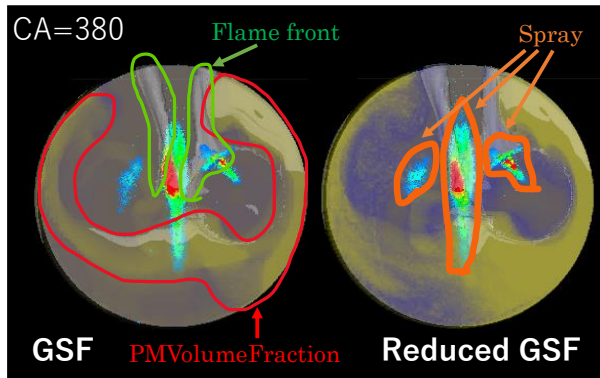


図 6 エンジン筒内の可視化

5.5. 筒内現象の計算結果の比較

図5は、RCEM筒内の可視化領域内のPM質量を光学計測によって測定した値⁶⁾と、Forteによる計算値との比較を各条件において実施したものである。観察視野内におけるすす生成量比較では、時間経過に伴ってすすが生成し減少する様子を定性的に再現することができた。また、生成タイミングについても条件B,Cでは概ね一致する結果が得られた。

図6は、EnSightでForteの計算結果を可視化した画像で、ピストン下面からシリンダヘッドに向かって

見上げた時のすす生成とピストン上の燃料付着の様子である。左側が詳細GSF (Calculation B)，右側が簡略GSF (Calculation C) で比較している。簡略GSFは詳細GSFと比較して燃料噴霧，火炎面，PM生成の様子を概ね再現することができている。

6. まとめ

詳細反応モデル(詳細GSFモデル)を簡略化し、すす生成量と時間特性を調整したガソリンサロゲート燃料の簡略すす粒子生成モデル(簡略GSFモデル)を提示した。さらに、直噴ガソリンエンジン筒内を模擬した急速圧縮膨張装置を対象に3次元反応流体計算を実施し、モデルの妥当性と有効性を実証した。モデルの改良点とエンジン計算の結果を以下にまとめる。

- (1) 簡略モデルの改善：核形成速度の調整係数 γ を検討した。 $\gamma=0.1$ および $\theta=0.025$ とした簡略モデルの計算結果は、低圧および高圧条件において、衝撃波管のすす生成温度特性(ベル特性)とすす生成時間特性の実験値と概ね一致した。
- (2) 3D-CFD計算：図4の圧力履歴の結果から、実験値と計算値における圧力立ち上がりの差はスパーク時期を 6.7° BTDCとした条件で改善された。
- (3) 簡略モデルの妥当性検討：実験と計算の圧力履歴が一致した条件にて、すす生成量を詳細モデルと比較した。その結果、簡略モデルのすす生成時間履歴は定性的に詳細モデルと一致した。また筒内すす生成挙動も概ね一致し簡略GSFはモデルが妥当なことが分かった。
- (4) 計算時間の短縮：簡略GSFモデルによって計算時間は約1/2となり、計算時間を大幅に短縮することができた。

本研究で提示した簡略すす粒子生成モデル(簡略GSFモデル)を用いてエンジン筒内を対象とした3D-CFD計算を実施した結果、簡略化により計算負荷を低減することができ、モデルの妥当性と有効性を確認した。今後は簡略モデルを活用して、計算を用いて燃料噴射時期がすす生成に及ぼす影響などを検討していく予定である。

参考文献

- 1) Abhijeet Raj, et al. : Combustion and Flame, Vol.159, Issue 2, p.500-515 (2012)
- 2) Yu Wang et al. : Combustion and Flame, Vol.162, Issue 3, p.586-596 (2015)
- 3) 秋濱一弘 ほか：自動車技術会論文集, Vol.50, No.5, p.1255-1260 (2019)
- 4) 高梨真衣 ほか：第57回燃焼シンポジウム講演論文集 (2019)
- 5) 田中万里子 ほか：自動車技術会2018春季大会学術講演会講演予稿集(2018)
- 6) 生井裕樹 ほか：第56回燃焼シンポジウム講演論文集 (2018)