

燃料噴霧のモデル解析

Modeling Analysis of Fuel Sprays



千田 二郎

Jiro SENDA

同志社大学 理工学部 教授
工学博士



小橋 好充

Yoshimitsu KOBASHI

金沢工業大学 工学部 講師
博士 (工学)

モデルベース開発など計算機を多用する昨今のエンジン開発においては、噴霧燃焼の各種の現象を的確かつ簡便に記述する数値モデルが求められている。著者らはこれまで、ノズル内キャビテーション気泡群の影響から、液滴の微粒化形態、液滴蒸発過程における燃料の多成分性の影響、噴霧一壁面干渉、スス生成過程など、噴霧燃焼に関わる広範囲かつ重要な現象に着目し、それらの数値モデル化に取り組んできた。そこで、本稿では著者らが着目した現象とそのモデル化に際しての考え方を解説する。また、最近取り組んでいるModel Based Calibrationのモデル開発についても紹介する。

Current engine development processes in which computations play an important role have sought for numerical models which can accurately represent phenomena in spray combustion. The authors have developed original sub-models taking into account the effects of extensive spray combustion phenomena including nozzle cavitation, droplet breakup behavior, multi-component evaporation process, spray-wall interaction, soot formation and so on. This paper describes authors' models while accompanied by phenomenological descriptions and focusing on how to model the phenomena. In addition, the authors' current work on model development for a model based calibration method is also introduced.

はじめに

近年のエンジン開発における電子制御技術の発展には目覚ましいものがあり、各種電子デバイスが持つ多数の制御変数を最適に組み合わせながらクリーンで高効率な燃焼を実現している。しかし、一層厳格化する燃費規制と排出ガス規制への適合のため、制御変数は増加の一途にある。中でも、噴射圧力と噴射回数・時期など自由度の高

いコモンレール式燃料噴射装置に加え、EGR (Exhaust Gas Recirculation) や過給器を備えたディーゼル機関においては多大な開発工数が必要であり、エンジンメーカー各社の限られた時間とリソースの中で、制御変数の最適解すべてを実験的に求めることは困難になりつつある。

一方、最近ではモデルベース開発を利用したエンジン開発が盛んであり、ますます複雑化、大規模化するエンジン

Table 1 History of the authors' models

1981	Wall-impingement analysis based on SMAC method
1983	Analysis of cavitation bubbles behavior under oscillation pressure
1990	Diesel fuel injection system analysis with taking into account cavitation effects
1993-	Spray-wall interaction model
1993	Modeling of sprays accompanied by flash boiling (0-dimensional)
1993-	Vapor-liquid equilibrium model for multi-component fuels (0-dimensional)
1996	Modified TAB droplet breakup model
2000-	Multi-component fuel evaporation model (multi-dimensional)
2001	Spray-wall interaction model available for multi-component fuel
2002	Integrated version of spray-wall interaction model
2002-	Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry
2003-	KIVA simulation coupled with CHEMKIN and soot model
2004-	Modeling of sprays accompanied by flash boiling (multi-dimensional)
2005-	Large eddy simulation of diesel sprays
2006-	Cavitation-induced droplet breakup model
2006-	Phenomenological 1-D multi-component spray model

開発の効率化を目指して、各社様々な取り組みを展開している^[1-3]。しかし、非定常噴霧燃焼を動力の根幹とするエンジン(例えば、自動車用ディーゼルエンジン)燃焼室内においては、500 m/sを超える液体あるいは気液混相流が孔径0.1 mm程度のノズルを通過し、やがて噴出された後、高々数msの間に微粒化、空気との混合、蒸発、壁境界との干渉を経ながら着火・燃焼する。このような小

スケールで高速かつ物理的にも化学的にも複雑な現象の数値モデル化はまだ発展途上であり、現象を的確にとらえたモデルの構築と計算精度の向上が望まれている。このような状況にあつて、著者らはこれまで噴霧燃焼における諸過程の比較的詳細な数値モデル化に取り組んできた。**Table 1**にモデルの一覧を示す。その内容はノズル内に生じるキャビテーション気泡群の影響から、液滴の微粒化形態、液滴蒸発過程における燃料の多成分性、噴霧-壁面の干渉、詳細化学反応に基づくスス生成など多岐にわたる。そこで、本稿では各モデルの現象論的背景を述べながら、その要点を解説する。また、最後には、著者らが最近取り組んでいるModel Based Calibration (MBC)のモデル開発について述べる。

燃料噴霧の微粒化に関するモデリング

エンジンスプレーにおける液滴の微粒化は、ノズル内部に生じる乱流やキャビテーションに影響を受けるほか、一般に計算格子より小さなスケールの現象であるため、そのモデル化にはノズル内流れとのリンクや微粒化機構の適切な記述が求められる。そこで、本章ではこれらを考慮して構築したいくつかの液滴分裂モデルについて述べる。

ノズル内キャビテーションを考慮した液滴分裂モデル

燃料噴射ノズルのオリフィス部に高速で流れ込む燃料液体はその縮流に際して低圧場を形成し、キャビテーション気泡を発生する。この気泡群が噴霧の微粒化に影響を及ぼすことは知られている^[4]が、多数の気泡群を含むうえ、微細かつ超高速なこの現象の全容解明は容易でない。そこで、著者らは、生成されたキャビテーション気泡がノズル下流の高圧にさらされるときの現象として、時に音速を超えるほど速い収縮速度と圧壊する際に発する金属材料の壊食を引き起こすほどの衝撃波^[5]に着目し、これらの過程で生じるエネルギーを噴霧液滴の分裂とリンクするモデル^[6]を構築した。**Figure 1**にその概要を示す。キャビテーション気泡の成長・収縮履歴はRayleigh-Plesset式で解き、気泡が急速に収縮する際に誘起された周囲流体の運動エネルギー E_{shrink} は次式から、

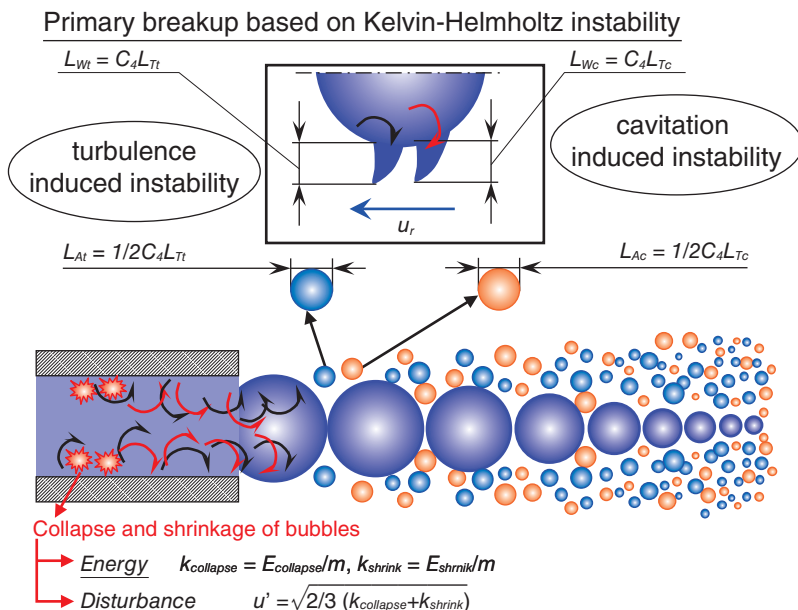


Figure 1 Conceptual diagram of cavitation-induced breakup model

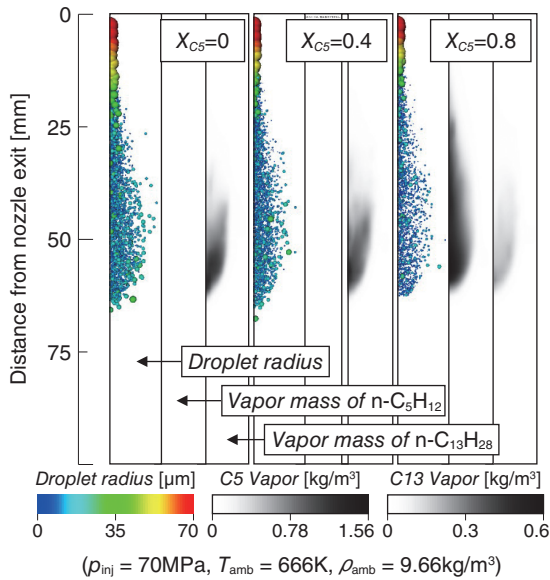


Figure 2 Spray images of binary fuel blends consisting of n-C5H12 and n-C13H28, predicted by cavitation-induced breakup model

$$E_{shrink} = 1/2 \rho_l \sum_{R_0} N(R_0) \int_{r=R_{i+1}}^{r=R_i} \dot{R}^2 \cdot 4\pi r^2 dr \dots (1)$$

(ρ_l : 液体密度, R : 気泡半径, N : 初期半径 R_0 の気泡数)

また, 気泡圧壊時の最大衝撃波圧力^[5] p_{max} は,

$$p_{max} = p_{gRmax} (R_{max} / R_{brk})^{3n} - 2\sigma / R_{brk} \dots (2)$$

(p_{gRmax} , R_{max} : 気泡が最大径に達したときの気泡内圧力と気泡半径, R_{brk} : 圧壊時の気泡半径, σ : 表面張力)

であり, そのエネルギー $E_{collapse}$ は次式で表される。

$$E_{collapse} = 4\pi/3 \sum_{R_0} N(R_0) \cdot p_{max}(R_0) \cdot R_{brk}^3 \dots (3)$$

これらをタイムステップあたりの噴射量 m で除して, それ

ぞれ動的エネルギー k_{shrink} と $k_{collapse}$ に変換すると, 等方性乱流の仮定からノズル出口の乱れ変動成分 u' が定まる。

$$u' = \sqrt{2/3(k_{collapse} + k_{shrink})} \dots (4)$$

ノズル出口の乱流変動 u' は, Huh and Gosmanのモデル^[7]と同様, 噴流表面のKelvin-Helmholtzの不安定性を助長すると仮定する。この噴流の表面波の大きさから派生した微粒化の長さスケールを L_A とし, 乱流変動 u' に起因する乱流の時間スケールと表面波の時間スケールの和を微粒化の時間スケール τ とすると, 液滴半径 r_d の変化速度は次式で表される。

$$dr_d/dt = -CL_A/\tau \quad C: \text{定数} \dots (5)$$

計算結果の一例として, n-トリデカン(n-C13H28)にn-ペンタン(n-C5H12)を混合し, その割合 X_{C5} を変えたディーゼル噴霧をFigure 2に示す。飽和蒸気圧の高いn-C5H12の混合量を増すほど噴孔内部のキャビテーション気泡が大きくなり, Equation 1, Equation 3式のエネルギーが増大することで, 噴孔近傍から迅速に微粒化し, 拡大することがわかる。

TABモデルの改良とハイブリッド液滴分裂モデル

上記のモデル以外にも, これまでに多くの液滴分裂モデルが提案されている。エンジン燃焼の数値計算に用いられるKIVAコードではそのバージョンII以降の液滴分裂モデルにO'RourkeらのTAB(Taylor Analogy Breakup)モデル^[8]を用いる。TABモデルは液滴を楕円振動体とし, その変形にバネ-質点系のモデルを適用するものであり, 分裂後の液滴半径は次式に示すザウター平均粒径 r_{32} の χ^2 分布で与える。

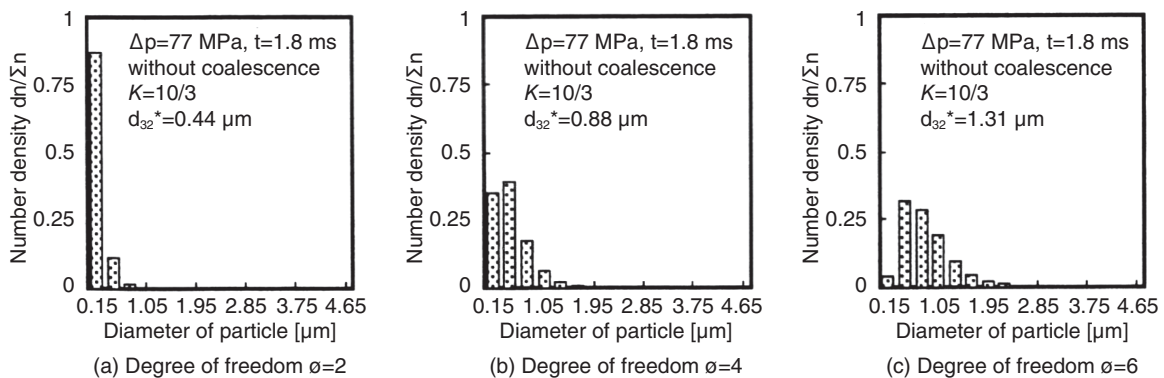


Figure 3 Comparison of particle size distribution between the degrees of freedom

$$r_{32} = r \left/ \left(1 + \frac{8K}{20} + \frac{6K-5}{120} \frac{\rho_l r^3}{\sigma} \dot{\gamma}^2 \right) \right. \dots\dots\dots (6)$$

ただし、原著ではモデル定数 $K=10/3$, χ^2 分布の自由度 $\phi=2$ である。ここで、Figure 3に自由度 ϕ に対する粒径費分布を示す。自由度 $\phi=2$ の χ^2 分布では粒径分布が小粒径側に偏りすぎる。これに対し著者らは自由度 $\phi=6$, モデル定数 $K=0.89$ の修正TABモデルがディーゼル噴霧の粒径分布を良好に再現することを提案した^[9]。

一方、TABモデルの分裂形態は低Weber数($We = \rho_g r_d v_{rel}^2 / \sigma$, ρ_g : 気体密度, r_d : 液滴半径, v_{rel} : 相対速度, σ : 表面張力)における分裂の特徴^[10]と類似する。一般にこのような分裂形態は圧力噴射弁の噴孔から離れた位置で観察されるが、噴孔近傍の高Weber数領域では表面波の不安定性などが支配的に微粒化に寄与すると考えられる。すなわち、様々な微粒化機構を包含する燃料噴霧においては、その数値解析に複数の液滴分裂モデルを組み合わせる必要がある。このような観点から著者らは、Kelvin-Helmholtz不安定性(一次分裂)とRayleigh-Taylor不安定性(二次分裂)を組み合わせたKH-RTモデル^[11], 上の修正TAB (MTAB)モデル, Kelvin-Helmholtz不安定性(WAVEモデル^[12], 一次分裂)とMTAB(二次分裂)を組み合わせたモデルを用い、ディーゼル噴霧のLarge Eddy Simulation(LES)において液滴分裂モデルの妥当性を検証したことがある^[13]。ここで、

LESの概念をFigure 4に示す。LESは、平均化された支配方程式を解くRANS(Reynolds Averaged Navier-Stokes)とは異なり、乱流の高周波成分のみをモデル化し、非等方的で流れ場への依存度が高い低周波数成分を直接的に解く方法である。すべての渦成分をモデル化して解くRANSと比較して乱流挙動を高精度に解くことが期待される解法である。

その数値計算と実験結果の噴霧画像をFigure 5において比較する。LESによる計算はRANSでは表現し得ない比

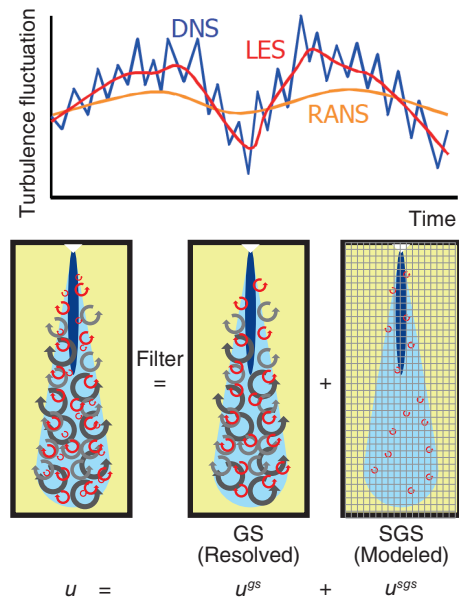
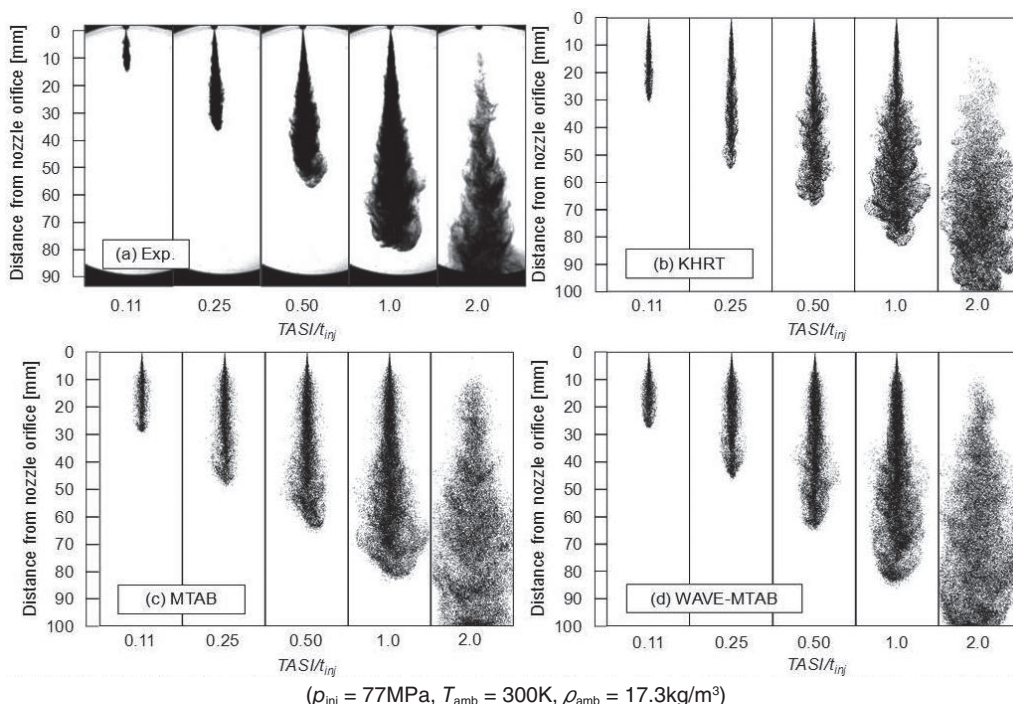


Figure 4 Schematic images of LES of diesel spray



($\rho_{inj} = 77\text{MPa}$, $T_{amb} = 300\text{K}$, $\rho_{amb} = 17.3\text{kg/m}^3$)

Figure 5 Change in spray structure calculated by large eddy simulation with breakup models

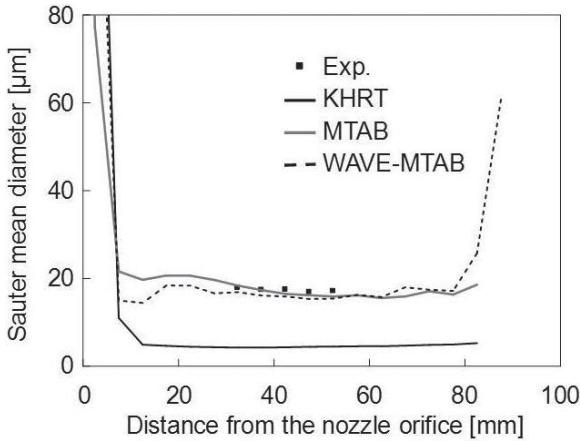


Figure 6 Effect of droplet breakup model on Sauter mean diameter distribution using LES

較的大きな渦構造を計算する^[14]から、実験に見られるような枝状構造を持つ噴霧が計算される。ここで、Figure 6 にザウター平均粒径の分布を示す。KH-RTは分裂後の液滴径を過小評価するため、結果的に、分裂後の液滴が周囲気体の渦運動に過剰に追従する。一方、MTABモデルとWAVE-MTABモデルのザウター平均粒径は実験値と概ね一致している。特にWAVE-MTABモデルはMTABモデルよりも実験で得られた噴霧の拡がりを中実に再現することがわかった。

減圧沸騰噴霧のモデリング

先に述べたノズル内キャビテーションは生成された気泡が下流の圧力によって圧壊する現象であるのに対し、燃料液体の飽和蒸気圧が高く、エンジンの吸気管のように圧力が低い場に燃料が噴射される場合、急速な蒸気化を伴わないながら気泡が成長を続ける減圧沸騰を生じる。

Figure 7は、n-C₅H₁₂を異なる雰囲気圧力 p_b へ噴射したと

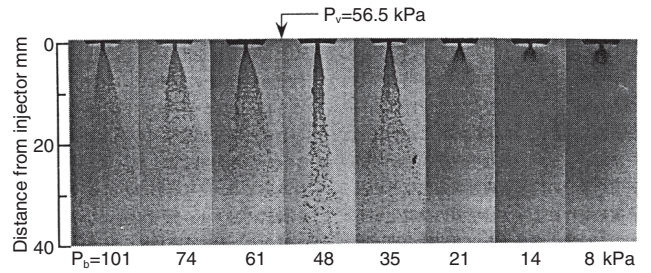


Figure 7 Change in shape of n-pentane spray as a function of ambient pressure

きの噴霧画像である。n-C₅H₁₂の飽和蒸気圧は56.5 kPaである。 p_b をそれ以下にすると一旦噴霧は幅を狭くするものの、その後急激に拡がり、微細な液滴を形成する減圧沸騰を生じる。著者らはこのような減圧沸騰の特性を記述するモデル作成に取り組んできた。Figure 8は、ピントル型ノズルから噴出される液膜を対象に構築した減圧沸騰噴霧モデル^[15]の概要である。ノズルのオリフィス部で生じる半径 R の気泡核数 N は次の核生成理論で与える。

$$N = C \cdot \exp\left(\frac{-\Delta A}{k\Delta\theta}\right), \Delta A = \frac{4}{3} \pi R^2 \cdot \sigma \dots (7)$$

(C : 定数, k : ボルツマン定数, $\Delta\theta$: 液体の過熱度) 先のキャビテーションモデルと同様、発泡した気泡は図中に示すRayleigh-Plesset式(ただし、表面粘性の項を追加している)にしたがい成長すると仮定して、その半径の時系列的变化を求める。液膜の分裂は、気泡の相体積 V_{bubble} と液体体積 V_{liquid} の比で定義されるボイド率

$$\varepsilon = V_{bubble} / (V_{bubble} + V_{liquid}) \dots (8)$$

をクライテリアとして、これがある臨界ボイド率 ε_{crit} を超

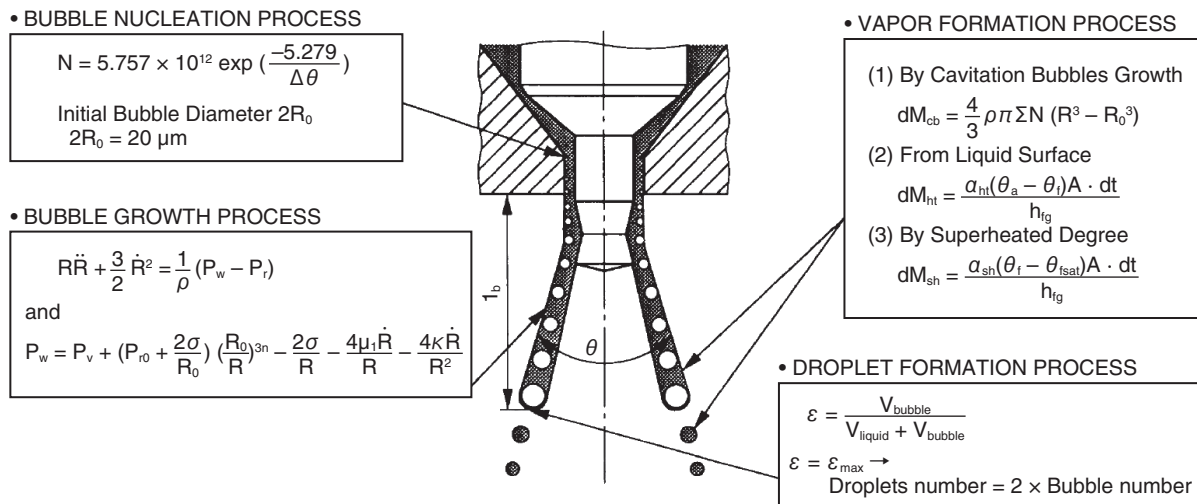


Figure 8 Conceptual diagram of flashing spray model, applied to pintle-type nozzle

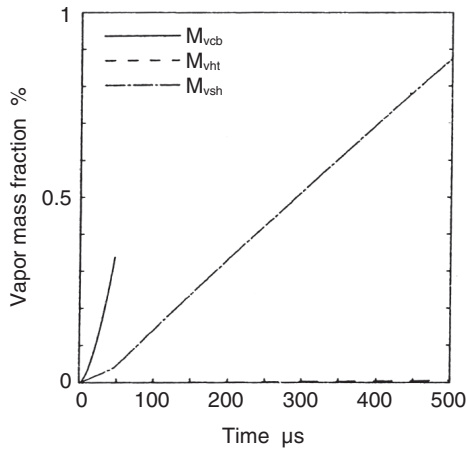


Figure 9 Comparison of n-pentane vapor mass fractions due to bubble growth, M_{vcb} , heat transfer, M_{vht} , and degree of superheat, M_{vsh} , at ambient pressure of 14 kPa

えた時点で、分裂後の液滴数 n_d を気泡数 n_{bub} とリンクした次式によりモデル化する。

$$n_d = 2 \times n_{bub} \dots\dots\dots (9)$$

ところで、減圧沸騰は飽和蒸気圧以下の減圧下にさらされた過熱液体の瞬間的な相変化現象であり、その形態は伝熱による加熱沸騰とは異なる。減圧沸騰時の相変化はキャビテーション気泡の成長に伴う蒸発 M_{vcb} 、液滴表面からの熱伝達に起因する蒸発 M_{vht} 、過熱度に起因する蒸発 M_{vsh} に分類され、各々の速度式はFigure 8に示される。

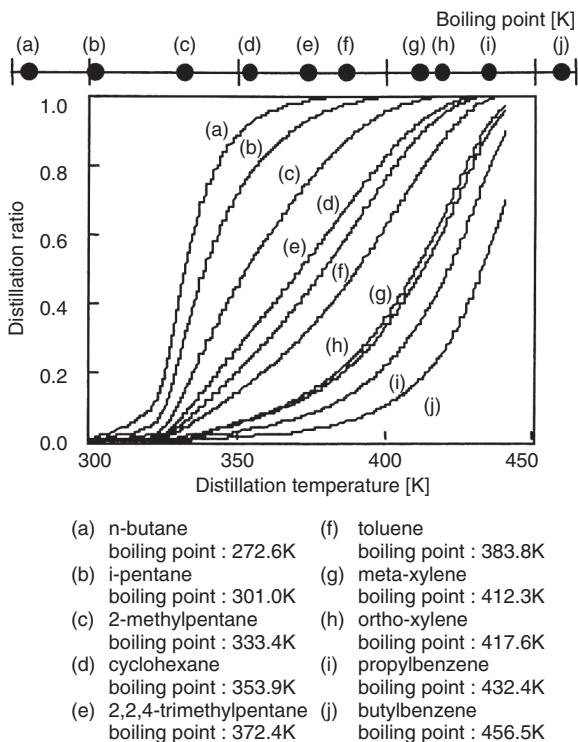


Figure 10 Distillation characteristic of multi-component blend

Figure 9は、背圧14 kPaにおけるn-C₅H₁₂の噴霧に対し、それぞれの蒸発過程に起因する蒸気質量割合を比較する。キャビテーション気泡群による蒸発 M_{vcb} は他の蒸発に比べて大きいことがわかる。過熱度に起因する蒸発 M_{vsh} は熱伝達に起因するそれ M_{vht} に比べて十分に大きいものの、 M_{vcb} ほど蒸発量が多くなく、減圧沸騰噴霧においては気泡成長による蒸気形成が支配的であることが示された。

多成分燃料噴霧の蒸発に関するモデリング

軽油やガソリンなど流通する市販燃料のほとんどは多成分の混合物であり、その噴霧燃焼数値解析では、対象とする燃料を性質の似た疑似単成分として扱うことが多い。しかし、最近のエンジン燃焼制御技術の緻密化・高度化やバイオマス燃料の混合利用など、燃料多様化の進展により燃料の多成分性は無視し得なくなりつつある。ここでは多成分性の考慮が重要な蒸発特性について述べることにし、その典型例を示す。Figure 10は、10成分からなる混合物の蒸留曲線であり、その上には個々の単成分の沸点を示す。混合物中の各成分は単成分と異なり、明確な沸点を持たず、蒸留温度に対しある勾配を持って蒸発する。また、低沸点成分の蒸留温度は相対的に上がり、高沸点成分のそれは低下して、蒸留温度範囲が個々の成分の沸点範囲に比べ狭くなる。Figure 11は、i-C₈H₁₈

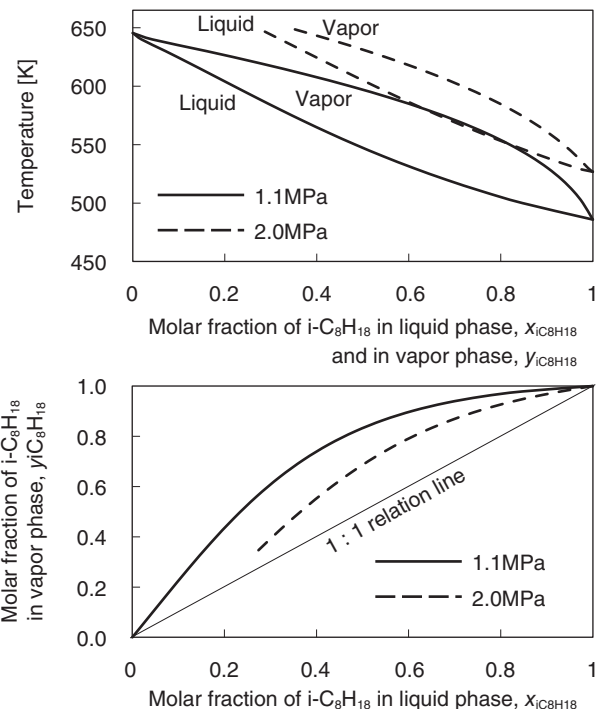


Figure 11 T-xy and x-y diagrams of i-C₈H₁₈/n-C₁₃H₂₈ blends at constant pressure

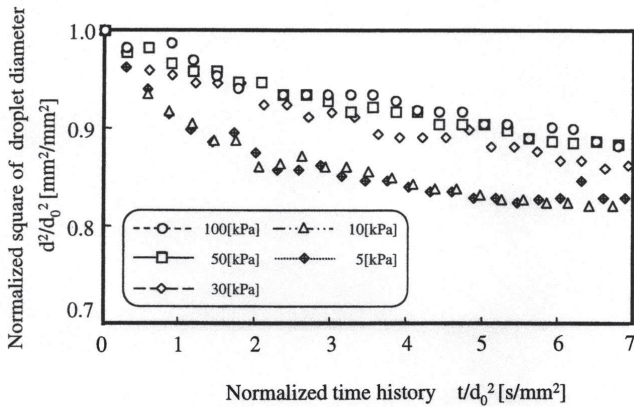


Figure 12 Temporal change in square of single droplet diameter of n-C₆H₁₄/n-C₁₃H₂₈ blend

とn-C₁₃H₂₈の定圧気液平衡関係(*T*-*x**y*, *x*-*y*線図)である。*x*-*y*線図に着目すると、液相組成に比べて気相組成に占めるi-C₈H₁₈の割合が高い。これは、液滴の蒸発過程においても低沸点成分であるi-C₈H₁₈がより多くの蒸気を形成する可能性を示唆する。Figure 12にn-C₆H₁₄とn-C₁₃H₂₈からなる混合燃料(モル分率5:5)の単一液滴の急減圧場における蒸発過程を示す。一般に単一液滴の蒸発は、時間に対して液滴直径の二乗値が比例的に小さくなる、いわゆるd²則にしたがう。しかし、低圧で顕著なように、混合燃料のd²値は初期に著しく低下した後、緩やかに減少を続ける。これは低沸点成分のn-C₆H₁₄が初期に多量に蒸発し、液滴内に残ったn-C₁₃H₂₈が比較的遅く蒸発するためである。

多成分燃料のこのような蒸発特性はその後の着火・燃焼特性に影響を及ぼすと考えられるから、著者らはそのモデル化に取り組んでいる。具体的には、KIVA3V^[16]に米国NISTの商用オープンソースコードSUPERTRAPP^[17]を組み込んで詳細な気液平衡計算を用いる方法を採用した^[18]。分子の大きさが異なるような非理想性の高い溶液では、気液平衡条件は以下の式で表される。

$$\phi_i^V y_i p = \phi_i^L x_i p \quad \dots\dots\dots (10)$$

(ϕ_i : フガシテイ係数, *V*: 気相, *L*: 液相, *x_i*: 成分*i*の液相モル分率, *y_i*: 成分*i*の気相モル分率, *p*: 全圧)

そのため、気液両相に適用可能な混合物の状態方程式(著者らのモデルではPeng-Robinson状態方程式)を用いてフガシテイ係数を求めれば、気相と液相の平衡濃度を算出できる。液滴蒸発モデルにはSpaldingの修正モデ

ル^[19]を用いる。液滴への熱伝達速度 \dot{Q} と液滴からの質量輸送速度 \dot{m} は次式で表される。

$$\dot{Q} = 2\pi r \lambda_s (T_\infty - T_d) Nu \quad \dots\dots\dots (11)$$

$$\dot{m} = 2\pi r \rho D_{air} B_M Sh \quad \dots\dots\dots (12)$$

(*r*: 液滴半径, λ_s : 熱伝達率, *T_∞*: 周囲温度, *T_d*: 液滴温度, ρ : 液体密度, *D_{air}*: 空気中の燃料の拡散係数)

また、Spaldingの質量輸送数*B_M*は

$$B_M = (\sum y_{i,s} - \sum y_{i,\infty}) / (1 - \sum y_{i,s}) \quad \dots\dots\dots (13)$$

(*y_i*: 成分*i*の質量分率, *s*: 液滴表面, ∞ : 無限遠)
上記の気液平衡推算はここに用いる。燃料成分と窒素(雰囲気気体)の混合物に対して、気相の平衡組成を求め、*y_{i,s}*を算出する。また、Equation 11とEquation 12は次式によって求められる。

$$Nu = [2.0 + 0.6Re^{1/2}Pr^{1/3}] / (1 + B_T)^{0.7} \quad \dots\dots (14)$$

$$Sh = [2.0 + 0.6Re^{1/2}Sc^{1/3}] / (1 + B_M)^{0.7} \quad \dots\dots (15)$$

$$B_T = C_p (T_\infty - T_s) / Q \quad \dots\dots\dots (16)$$

(*Re*: レイノルズ数, *Pr*: プラントル数, *Sc*: シュミット数, *B_T*: Spaldingの熱輸送数, *C_p*: 熱容量, *Q*は単位質量あたりの蒸気を生成するまでに液滴に到達する熱量)

Figure 13は、i-C₈H₁₈(iC8, 沸点372 K, セタン価12)とi-C₁₆H₃₄(iC16, 沸点520 K, セタン価15)をn-C₁₃H₂₈(C13, 沸点510 K, セタン価88)にそれぞれ質量分率0.69で混合した燃料の噴霧内蒸気濃度分布と火炎温度^[20]である。着火燃焼過程はShell model^[21]と一段総括反応を組み合わせたモデルとした。i-C₈H₁₈やi-C₁₆H₃₄を混合すると着火が遅れること、そのときの噴霧先端到達距離や燃焼領域など計算は実験結果をよく表現している。また、i-C₈H₁₈は噴霧のより上流から蒸発を開始すること、i-C₁₆H₃₄を混合するとn-C₁₃H₂₈の蒸発量が低下することなど、混合燃料の蒸発特性を表現可能な解析が可能となった。

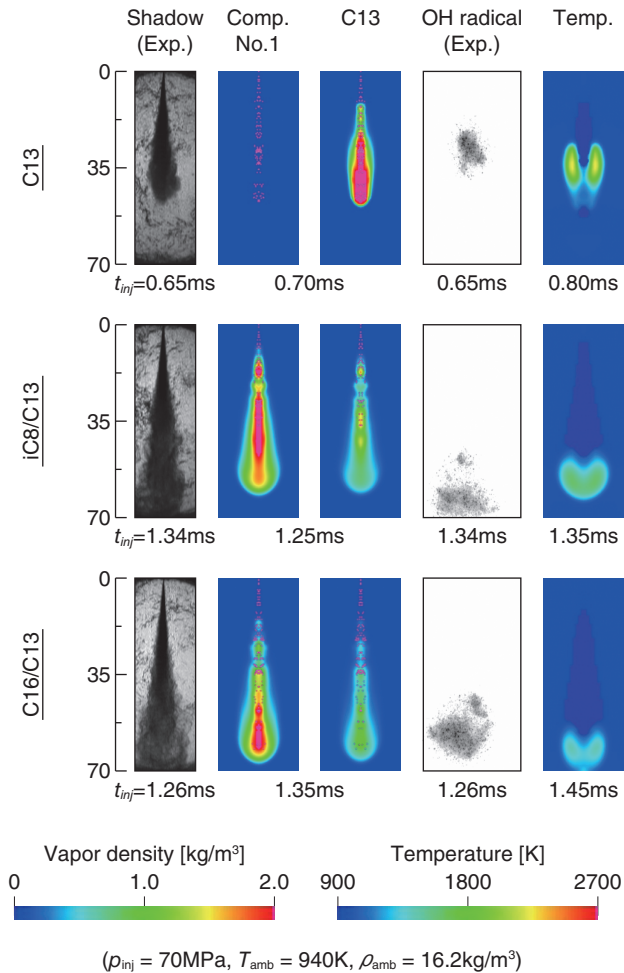


Figure 13 Distributions of fuel vapor and temperature, calculated by multi-component fuel model

噴霧-壁面衝突のモデリング

エンジン内の有限の空間において進行する噴霧燃焼にとって、燃料噴霧の壁面衝突時による液滴や液膜の挙動ならびにその後の燃料の分散過程は重要である。著者らはこれまで噴霧液滴の壁面衝突から液膜形成、スプラッシュ分裂、液膜流動、蒸発など広範な現象を網羅した体系的モデルを構築してきた。そのすべてを記すことは紙面の都合上できないので、詳細は文献に委ねながら、ここでは各モデルの概要を記述する。

低温壁面モデルと高温壁面モデル

冷間始動時に相当する非蒸発の衝突噴霧から、高負荷運転時に相当する蒸発場の高温壁面に衝突する噴霧の双方に適応するモデルを構築するために、まず、壁面の表面温度を T_w 、燃料液滴の飽和温度を T_{sat} として、両者の関係を $T_w < T_{sat}$ と $T_w \geq T_{sat}$ に区別してモデリングした。Figure 14にその概要を示す。低温壁面($T_w < T_{sat}$)では液滴が壁面に付着・滞留するため液膜形成過程をモデル化し、プール状の液膜形成以降の液滴衝突に伴う液膜スプラッシュ状分裂をモデル化した。高温壁面($T_w \geq T_{sat}$)では、液滴と壁面間の熱伝達および衝突液滴と高温壁面間の沸騰現象を考慮した分裂過程^[22, 23]を記述した。以上のモデルの詳細は文献[24], [25]を参照されたい。

液膜形成モデル

著者らはさらに燃料噴霧の壁面衝突現象に重点を置き、

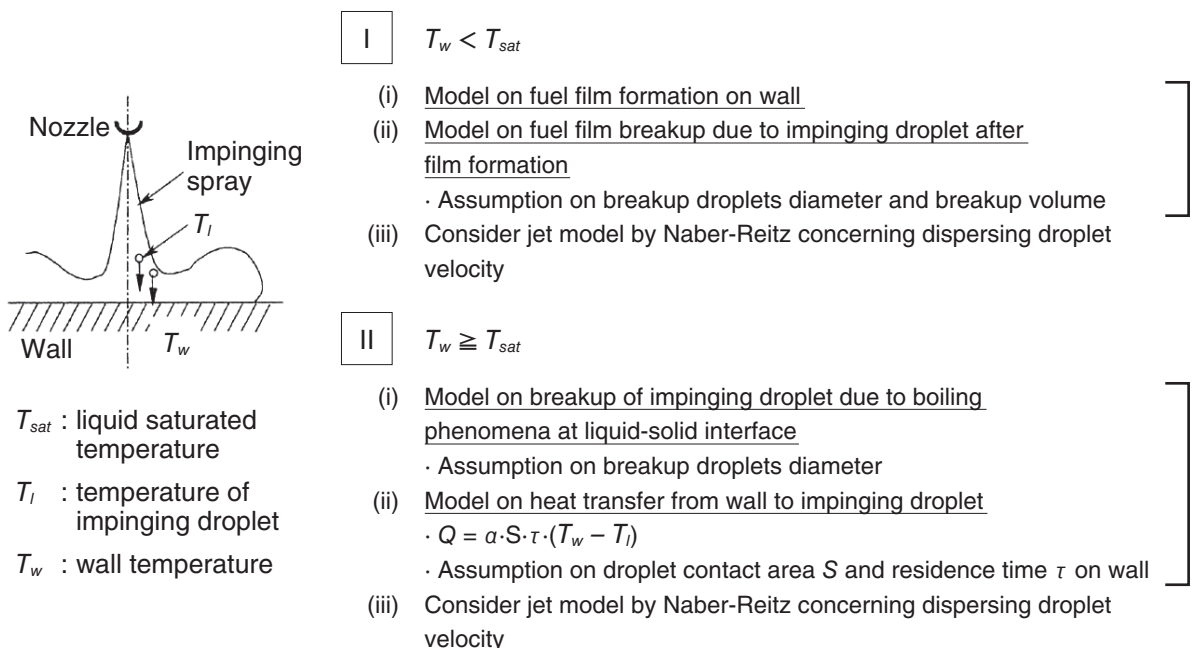


Figure 14 Overview of low/high temperature model