

Figure 15 Impingement model for low Weber number(We≤300)

液滴壁面衝突による分裂・飛散現象,液滴同士の干渉効果,液膜の形成過程,液滴と液滴の干渉効果を考慮し, モデリングを行なった^[26-28]。その際,衝突液滴の持つエ ネルギー,すなわち $W = \rho_1 dv^2 / \sigma(\rho_1)$:液体密度,d:入 射液滴直径,v:入射液滴速度, σ :表面張力)で定義さ れるWeber数により評価し,それが低い場合($W e \leq 300$, Figure 15)と高い場合(W e > 300, Figure 16)に分類した。 衝突エネルギーが低い場合には,連続して液滴が衝突す る場合の液滴と液滴および液滴と液膜の相互干渉効果 を考慮してモデル化を行なった。また,衝突エネルギー が高い場合には液滴の壁面衝突によるSplash現象に着 目しモデル化した。さらに,各場合とも壁面衝突時における壁面上の液膜の有無により壁面衝突挙動が異なる。衝 突液滴の分裂形態は,壁面上に液膜が形成されている場 合,液膜の無次元膜厚と液滴のWeber数によって表すこ とができる^[29,30]。また,乾き壁面に対しては,衝突エネル ギーが低い場合に液滴と液滴の相互干渉を考慮し,逆に 衝突エネルギーが高い場合に臨界Weber数を用いて液 滴のSplash現象を考慮した。

このように壁面上に付着した液膜の厚さは、分裂・飛散 の形態を決定する上で重要である。そこで、著者らは液



Figure 16 Impingement model for high Weber number(We>300)

膜形成過程について、初期の液滴が 持っている運動エネルギーと表面張力 によるエネルギーの和が、液膜の最大 直径での表面張力によるエネルギーと 摩擦によるエネルギー損失の和に等し いとして、液膜の拡がりに関するモデリ ングを行なった。また、液滴の衝突によ り形成された液膜は、その初期において 液滴温度と等しく,その後壁面や雰囲 気気体より与えられた熱量を液膜の温 度上昇と蒸発に費やす。そこで、液膜に 供給される熱量と液膜が消費する熱量 を等しいとして、エネルギー保存則より 液膜の蒸発量を求めた。Figure 17に噴 射圧力99 MPa, 衝突距離30 mmの噴 射開始後1.4 msにおける燃料蒸気,液 滴パーセルの空間分布を, Exciplex蛍 光法により撮影された同時刻の蒸気相, 液相と比較する。図中の(a)はExciplex 蛍光の画像, (b)はKIVA-IIオリジナル コード. (c)はNaber-Reitzのモデル^[31]. (d)は著者らのモデルである。(b)は燃料 蒸気濃度が低く,壁面上方への拡がり も小さいこと, (c)は大粒径の液滴が噴 霧先端部の壁面上方に存在し, 蒸発が 遅いのに対し. (d)の著者らのモデルは 比較的実験に近い特性を表現している ことがわかる。



Figure 17 Comparison of spatial distribution of fuel vapor concentration and droplets between experiment and impingement models

液膜流動モデル

上記のモデルは,壁面に付着した液膜がセルごとに保存 され,その流動を考慮しておらず,膜厚に左右される衝 突液滴の分裂後の挙動を正しく記述することができな い。そこで,著者らは,Figure 18に示す液膜流動モデル を加え,入射液滴と反射液滴の持つ運動量,雰囲気気体 のせん断力,液膜と壁との摩擦力の三つの因子を考慮し た運動方程式を解くことによって液膜の移動速度を算出 した。これにより,離散化された液膜はその内部に流動を 持たない剛体であるものの,その移動により疑似的な液 膜流動をモデル化した^[28, 32]。

壁面の伝熱面過熱度を考慮したモデル

一般に流通する燃料の多くは多成分であり、低沸点から 高沸点まで様々な成分を含んでいる。このため、ある壁 面温度を想定しても燃料中の成分によって噴霧の壁面衝 突時の固液界面の沸騰形態は変化する。ある小型直噴式 ディーゼル機関の壁面温度範囲と軽油を対象とした場



Figure 18 Physical phenomenological model for film transportation process on the wall



Figure 19 Boiling curve of each composition in an engine condition

合, Figure 19に示すように,壁面過熱度△T_{sat}は-208~ 278 Kと非常に広く,非沸騰領域から膜沸騰領域まであらゆる沸騰形態をとる。ところで,竹内らの単一液滴の高 温壁面への衝突実験は,核沸騰領域では液膜が形成され,分裂した液滴は上方に吹き上げられるものの,遷移 沸騰, 膜沸騰においては液膜が形成されず,分裂後の液 滴が半径方法に飛散するとしている^[22]。したがて,これ



Figure 20 Spray impingement model available for transient boiling and film boiling conditions



Figure 21 Comparison of spatial distribution of fuel vapor concentration and droplet parcels between KIVA-II original model and developed impingement model

までに構築したモデルは核沸騰領域に対して適用できる ものの, 遷移沸騰, 膜沸騰に適用できない。そこで, 遷移 沸騰, 膜沸騰領域に適用可能なFigure 20のモデルを構 築した^[33, 34]。これは, 液滴分裂モデル, 液滴反射モデル, 熱伝達モデルからなる。その計算結果はFigure 21に示 すように, KIVA-IIのオリジナルコードでは計算できない 沸騰形態による差異, すなわち, 遷移沸騰や膜沸騰では 液膜を形成せずに液滴が飛散するため壁面上の蒸気濃 度が核沸騰条件に比べて低いことを表現している。

直噴ガソリン機関への拡張と 統合モデル

これまでのモデルは噴霧の衝突後の分 裂・飛散過程のデータベースとして水 滴の壁面衝突実験の結果を援用してき たが、水滴と軽油やガソリンではぬれ性 が異なる。そこで、ガソリンに近いぬれ 性とガソリンの50%留出温度の沸点を 有する1-プロパノール(C₃H₈O)を供試 液体として微小液滴の実験を行ない. データベースを作成した。加えて,軽油 と同様、ガソリンもまた多成分燃料であ るから、低温から高温までの広い壁面 温度範囲に対して液膜の形成と液滴の 分散・飛散を記述する必要がある。そ こで, 著者らはこれまで作成したモデル を参考に,全ての沸騰領域に適用可能 な統合モデルを構築した^[35]。そのフ ローチャートをFigure 22に示す。本モ



Figure 22 Flowchart of integrated model

デルは壁面の衝突する燃料液滴の飽和温度と壁面温度 から液滴の衝突時の沸騰領域を算出する。大別すると低 温領域と高温領域であり,高温領域では液膜が形成され ないため分裂後の液滴の飛散速度,飛散角度,液滴径, 液滴温度をエネルギー保存則と微小液滴の実験結果に よる実験式から求める。一方,液膜が形成される低温領 域では,液滴間干渉および液膜と液滴の干渉を考慮した モデルを作成し,分裂後の液滴の状態を算出する。すな わち,入射時の液滴の入射角,Weber数,壁面過熱度, 液膜厚さおよび液滴間間隔などの関数として求める。 (2)PAHからの凝縮核生成, 粒子同士の凝集, PAH の粒子表面への凝縮, 気相化学種による表面成

長・酸化反応を記述するスス粒子生成モデル から構成される。気相反応モデルでは、気相における燃 料分子の熱分解・酸化、重合、環化および多環化反応に よるPAHの生成を詳細な素反応モデルによって計算し、 後述の粒子核生成とそれに引き続く一次粒子成長の計 算に必要な気相化学種(PAH, C₂H₂, H₂, H, O₂, OH)濃 度が計算される。Wang and Frenklachのメカニズム^[36] の改良バージョンであるApple and Bockhorn,

スス粒子生成のモデリング

ディーゼル機関や昨今の直接噴射式ガ ソリン機関において、ススの低減は未だ 大きな課題である。そこで、著者らはス スの生成・酸化機構を考察するため反 応動力学解析モデルを構築した。この スス反応動力学モデルは、Figure 23に 示すように、

> (1)燃料の酸化反応・熱分解から 芳香族環の形成,そして七環ま での多環化芳香族炭化水素 (PAH)成長を記述する気相反 応モデル



Figure 23 Reaction model for soot particle formation



Figure 24 Comparison of representative diesel combustion methods on ϕ -Tmap(fuel: n-heptane, p=6MPa, reaction time: t=2ms)

Frenklachのメカニズム^[37]をコアモデルとし、これに燃料の酸化反応モデルを組み合わせる手法を採用した。ベンゼン(C₆H₆)からコロネン(六員環PAH:C₂₄H₁₂)までの 多環化反応は、芳香族環への水素引き抜き-アセチレン付加反応(HACAメカニズム)と芳香族環同士の結合反応 によるPAH成長を主体とし、これに五員環ラジカル同士 の結合による低級PAHの生成反応を融合した。

気相反応において計算されるPAHから凝縮核が形成し、 さらに一次スス粒子へ成長する一連の粒子化プロセスに は、

- 1) PAHから凝縮核ができる「核生成プロセス」
- 2) 粒子同士の衝突・合体による「凝集プロセス」

- 3) 粒子と気相化学種との表面反応および粒子表面 へのPAHの凝縮による「表面成長プロセス」を考 慮した。
- 以上のモデルの詳細は文献[38]を参照されたい。

構築したモデルを用いて定圧-定温燃料計算を行なっ た。Figure 24に計算したスス生成収率とNOの体積濃度 をKamimotoらの提唱する*d*-Tマップ^[39]上に示す(燃料: n-ヘプタン:n-C7H16, 圧力:6 MPa)。図には代表的な クリーンディーゼル燃焼法の燃焼条件を併記した。スス 生成収率は当量比によらず概ね1900 K付近でピークを 持つベル型の温度依存性を示し、当量比が高いほどスス 生成収率の最大値が増加することがわかる。また、この 図から、従来のスス低減燃焼法は、*φ-T*マップ上のスス 生成半島に対して,低温側を利用する「温度制御型」と燃 料希薄側を利用する「当量比制御型」に大別されることが 示された。Figure 25 は ϕ -Tマップ上におけるスス粒子 径,数密度およびスス前駆体としてのナフタレンである。 スス生成収率のベルピーク温度より低温側では小粒径・ 高数密度・高PAH濃度であり、高温側では大粒径・低 数密度・低PAH濃度となることが示された。

物理法則を適用したModel Based Calibration

本稿の最後に,著者らが最近取り組んでいるModel Based Calibration(MBC)^[40, 41]のモデル開発を紹介する。 昨今のエンジン開発の制御パラメータの増大とそれによ る適合実験工数の指数関数的増大に対して,最小限の実 機計測データの多変量解析から実験モデルを作成し,こ れを用いて最適設計値を得るMBCが注目されている。し かし,この方法では計測範囲外に外挿した際の精度が必



Figure 25 Distribution of particle diameter, particle number and naphthalene mole fraction on ϕ -T map(fuel: n-heptane, p=6MPa, reaction time: t=2ms)





ずしも高くない。そこで、最近著者らは実験モデルに物理 法則を適用して、Figure 26に示すように実験領域に対し て高精度に内・外挿できるモデルの確立を目指している。 モデルのフローチャートをFigure 27に示す。モデルは噴 霧、燃焼およびエミッションモデルから構成される。

(1)噴霧モデルは、筒内を噴霧と雰囲気の二領域に 分割し、その先端到達距離、噴霧角、分裂長さを 広安の式^[42]から算出する。なお、噴射終了後は空



Figure 27 Flowchart of phenomenological model for model based calibration(MBC)method



Figure 28 Distribution of fuel concentration divided into three zones in fuel spray

気抵抗により先端速度が減衰する効果を加味した。噴霧内への空気導入は分裂長さ以降に開始 されると仮定して、その算定に和栗の運動量理 論⁽⁴³⁾を用いた。また、Figure 28のように、噴霧内 の半径方向への燃料濃度分布はガス噴流理論で ある3/2乗則を仮定して、

$$c/c_m = 1 - 1/2 (r/r_b)^{3/2}$$
 (17)

 $(c: 半径方向の燃料濃度, <math>c_m$: 噴霧中心軸上の燃料 濃度, r: 半径方向距離, r_b : 半値幅= $2/3r_0$, ただし, r_0 は噴霧外周部)

さらに, 噴霧領域内を三分割し, 後の燃焼モデルにおい てこれを加味した。

(2)燃焼モデルは炭化水素の燃焼反応に加え,10種の化学種における化学平衡計算を考慮する。化学平衡計算時の断熱火炎温度はエンタルピバランス法による。

熱発生率のパターンは予混合的燃焼期間と拡散 的燃焼期間に分割した。予混合的燃焼期間では 噴霧内の当量比の異なる三領域の中で量論混合 比に近い一領域が燃焼し,拡散的燃焼期間では 当量比が0.5から3の範囲にあるすべての領域で 燃焼反応が進行する。

(3)エミッションモデルはNO_xとススを対象とした。 NO_xの生成はサーマルNOのみを考慮して,拡大



Figure 29 Example of evaluation results for NOx and soot models

Zeldovich機構を採用した。ただし、NOの生成速 度式は各定数を実験定数*a*, *β*で置き換えた次 式とした。

$$d [NO]/dt = a [O_2]^{1/2} \exp(-\beta/T) \cdots (18)$$

ここで, Tは最大筒内平均温度, [O₂]は筒内酸素濃度であり, これらが主要因子である。

ススモデルはHiroyasuモデル^[44]とし,ススの酸化反応速度はNagleらのスス酸化モデル^[45]で記述した。主要因子を最大筒内平均圧力,最大筒内平均温度,酸素分子のモル分率とし,実験定数を含むようにモデル化した。

NO_xとススに関する計算結果の一例を**Figure 29**に示す。 なお、図中のn-RMSE (normalized Root Mean Square Error)はモデルとそのモデル作成に使用した計測データ との二乗平均平方根誤差を、評価データの最大値と最小 値で正規化した指標である。また、n-V. RMSE (normalized Validation RMSE)はモデルと検証用デー タとの二乗平均平方根誤差を、評価データの最大値と最 小値で正規化した指標である。いずれも10%以下で妥当



Figure 30 Schematic diagram of spray model used for 1-D multicomponent spray model

な精度といわれる。構築したモデルはススのn-V. RMSE を除いて,未だ実験モデルより精度が低下しているもの の,モデルの改良次第で今後の改善が期待される。また, MBCへ適用可能な多成分燃料モデルの構築にも取り組 んでいる。Figure 30の概念図に基づきその内容を説明 する。噴霧先端到達距離は和栗の運動量理論^[43]に従い

$$x = \sqrt[4]{\frac{\rho_f}{\rho_a}} \cdot \sqrt{\frac{d_n u_0}{\tan \theta}} \cdot \sqrt{t} \quad \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots (19)$$

(ρ_f:燃料密度, ρ_a:雰囲気密度, d_n:ノズル直径, θ: 噴霧角の半値, t:噴射開始からの時間, u₀は噴射 速度)

噴霧全体への導入空気量は次式で表わされる。

$$M_E = \rho_a \cdot V_E = \frac{1}{3} \pi \cdot \rho_a \cdot \tan^2 \theta \cdot x^3 \cdots$$
(20)

(M_E:導入空気質量, V_E:導入空気体積)

Figure 30のように噴霧領域を区別する場合,各領域への累積導入空気量は次式となる。

$$M_{E,1} = \rho_a \cdot V_{E,1} = \frac{1}{3} \pi \cdot \rho_a \cdot \tan^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cdot x^3 \cdots$$
 (21)

$$M_{E,2} = M_E - M_{E,1} = \rho_a (V_E - V_{E,1})$$
 (22)

なお, 添え字の1, 2はそれぞれ噴霧中心部および外周部 を示す。したがって, 燃料噴射開始後の時刻n∆tにおけ る燃料への供給熱量は次式で表わされる。

$$\Delta Q_a = C_{p,a} \cdot \Delta M_{E,m,n} \cdot (T_a - T_e) \quad \dots \quad (23)$$

$$\Delta M_{E,m,n} = \frac{1}{3} \pi \cdot \rho_a \cdot \tan^2 \theta \cdot (x_n^3 - x_{n-1}^3) \cdots$$
 (24)

(C_{b,a}: 雰囲気気体の定圧比熱, T_a: 雰囲気温度, m: 噴霧の中心部あるいは外周部, Te: 平衡温度)

平衡温度T。は、供給熱量が全て燃料のエンタルピの増分 に消費されると仮定し、SUPERTRAPPコード^[17]で求め られる燃料温度と比較しながら陰的に求める。また、その 際の気液平衡組成と燃料物性値も同時に求めて,燃料組 成を更新する。

着火遅れ期間の算定にはLivengood-Wu積分を採用す る。

$$X = \int_{t=0}^{t=n\Delta t} (1/\tau_n) dt$$
 (25)

ここで、例えばn - Fデカン $(n - C_{12}H_{26})$ に対する τ_n は次の 式[46]で表される。

$$\tau_n = 0.845 \times p_{amb}^{-1.31} \times \phi_{HIF}^{-1.60} \times \exp(4350/T_e) \cdots$$
 (26)

 $(p_{amb}: 雰囲気圧力, \phi_{H.I.F}: 高自着火性燃料の当量$ 比)

Equation 25においてXが1を超えた時点を着火と判定す る。計算結果の一例をFigure 31に示す。これはn-C₅H₁₂ とn-C13H28の混合燃料に対するもので、横軸をn-C5H12の

• Calculation (p_{amb} = 3.4MPa) **\diamond** Experiment (p_{amb} = 1.0MPa) 1.2 1.0 0.8 \diamond 0.6 0.4 0.2 0.0 \diamond \diamond Ô \land 0.0 0.0 0.25 0.75 1.0 0.50

Figure 31 Normalized liquid length and ignition delay calculated by 1-D multi-component fuel model

モル分率としている。雰囲気圧力などの条件が異なるた め,縦軸は正規化して定性的傾向のみを比較しているが, 混合割合に対する液相長さの変化,着火遅れ期間が高着 火性成分(ここではn-C13H28)に強く依存する傾向などを 表現することができる。

おわりに

冒頭でも述べたように、昨今のエンジン開発においては、 モデルベース開発など計算機を多用する開発スキームが 発展しつつあり,噴霧燃焼に関連してはより簡便かつ高 精度な数値モデルの登場が望まれている。そこで、本稿 では, 著者らが噴霧燃焼諸過程のモデル化に際して着目 した重要な現象とその数値モデル化手法について解説し た。噴霧燃焼の数値モデルはまだまだ発展途上である。 ここに記した内容が、その発展の一助となり、お役に立て ば幸いである。



HORIBA Technical Reports

参考文献

- [1] 原田靖裕: SEC journal, 8-2, 79-84(2012)
- [2] 北田泰造、口田征人、林伸治: 日本マリンエンジニアリング学会誌、 48-5, 63-69(2013)
- [3] 於保茂, 青野俊宏, 鈴木邦彦, 勝康夫: 日立技報, 91-10, 54-57(2009)
- [4] W. Bergwerk: Proc. Instn. Mech. Engrs., 173-25, 655-660(1959)
- [5] 島章, 冨田幸雄: 速研報告, 34-334, 125-161(1974)
- [6] 和田好充,千田二郎:日本機械学会論文集(B編),72-724,3113-3120 (2006)
- [7] K. Y. Huh and A. D. Gosman: Proc. The International Conf. Multiphase Flows, '91-Tsukuba, 515-518(1991)
- [8] P. J. O'Rourke and A. A. Amsden: SAE Paper No.872089(1987)
- [9] J. Senda, T. Dan, S. Takagishi, T. Kanda and H. Fujimoto: Proc. ICLASS-97, 149-156(1997)
- [10] G. Stiesch: Modeling Engine Spray and Combustion Processes (Springer, 2003)
- [11] J. C. Beale and R. D. Reitz: Atomization and Sprays, 9(6), 623-650(1999)
- [12] R. D. Reitz: Atomization and Spray Technology, 3, 309-337(1987)
- [13] K. Kitaguchi, S. Hatori, T. Hori and J. Senda: Atomization and Sprays, 22(1), 57-77(2012)
- [14] 堀司, 久下喬弘, 千田二郎, 藤本元: 日本機械学会論文集(B編), 73-727, 879-886(2007)
- [15] 千田二郎,太田行紀,山本武広,藤本元:日本機械学会論文集(B編), 62-600, 3205-3212(1996)
- [16] A. A. Amsden: Los Alamos National Laboratory Report LA-13313-MS(1997)
- [17] National Institute for Standards and Technology, http://www. nist.gov/srd/nist4.cfm(参照日 January 21, 2014)
- [18] 川野大輔,千田二郎,和田好充,藤本元,石井泰,鈴木央一,後藤雄一: 日本機械学会論文集(B編), 70-696, 2213-2219(2004)
- [19] E. W. Curtis, A. Uludogan and R. D. Reitz: SAE Paper No.952431(1995)
- [20] 小橋好充, 藤森健太, 前川浩輝, 加藤聰, 川野大輔, 千田二郎: 自動 車技術会論文集, 43-1, 123-128(2012)
- [21] M. P. Halstead, L. J. Kirsch and C. P. Quinn: Combustion and Flame, 30, 45-60(1977)
- [22] 竹内貴一郎, 千田二郎, 佐藤嘉明: 内燃機関, 21-268, 9-18(1982)
- [23] 千田二郎,山田耕司,竹内貴一郎,三木英雄:日本機械学会論文集(B 編), 53-485, pp.176-182(1987)
- [24] 千田二郎,小林正明,岩下誠司,藤本元:日本機械学会論文集(B編), 60-578, 3563-3570(1994)
- [25] J. Senda, M. Kobayashi, S. Iwashita and H. Fujimoto: SAE Paper No.941894(1994)
- [26] J. Senda, T. Kanda, M. Al-Roub, P. V. Farrell, T. Fukami and H. Fujimoto: SAE Paper No.970047(1997)
- [27] 千田二郎,神田知幸,草野茂之,藤本元: 日本機械学会論文集(B編), 65-629, 389-396(1999)
- [28] 宇都宮敦司,大西昌紀,千田二郎,藤本元:日本機械学会論文集(B 編),65-629,397-402(1999)
- [29] M. A. Al-Roub, P. V. Farrell and J. Senda: SAE Paper No.960863(1996)
- [30] M. A. Al-Roub: Ph.D. Thesis at Univ. of Wisconsin-Madison(1995)
- [31] J. D. Naber and R. D. Reitz: *SAE Paper 880107*(1988)
- [32] J. Senda, M. Onishi, T. Takahashi, H. Fujimoto, A. Utsunomiya and M. Wakatabe: SAE Paper No. 1999-01-0798(1999)
- [33] 千田二郎, 高橋知宏, 田中智之, 李奇衡, 藤本元: 日本機械学会論文 集(B編), 66-642, 604-611(2000)
- [34] J. Senda and H. Fujimoto: SAE Paper No.2001-01-1071(2001)
- [35] 松田健, 千田二郎, 藤本元: 第11回微粒化シンポジウム, 26-31(2002)

- [36] H. Wang and M. Frenklach: Combustion and Flame, 110, 173-221(1997)
- [37] J. Appel, H. Bockhorn and M. Frenklach: Combustion and Flame, 121, 122-136(2000)
- [38] T. Kitamura, T. Ito, J. Senda and H. Fujimoto: International Journal of Engine Research, 3-4, 223-248(2002)
- [39] T. Kamimoto and M. H. Bae: SAE Paper No. 880423(1988)
- [40] 岡本真弥,田中悠也,清水勇貴,松本雅至,千田二郎,北村泰隆,湯 浅弘之,加藤彰:自動車技術会論文集,44-2,245-250(2013)
- [41] 秋久和裕, 岡本真弥, 松本雅至, 松村恵理子, 千田二郎, 北村泰隆, 佐藤正浩, 湯浅弘之, 加藤彰: 自動車技術会秋季学術講演会 No.72-20135683(2013)
- [42] 広安博之,新井雅隆: 自動車技術会論文集, 21, 5-11(1980)
- [43] 和栗雄太郎,藤井勝,網谷竜夫,恒屋礼二郎:日本機械学会論文集(第 2部), 25-156, 820-826(1959)
- [44] K. Nishida and H. Hiroyasu: SAE Paper No. 890269(1989)
- [45] J. Nagle and R. F. Strickland-Constable: Proc. 5th Carbon Conference, 154-164(1962)
- [46] 居倉伸次, ほか:日本機械学会論文集(第2部), 41-345, 1559-1568 (1975)