

# ディーゼル噴霧における混合気形成および着火の LES 解析\*

小島 宏一<sup>\*1</sup>, 川那辺 洋<sup>\*1</sup>, 石山 拓二<sup>\*2</sup>

## LES Analysis of Mixture Formation and Ignition in a Diesel Spray

Hirokazu KOJIMA<sup>\*1</sup>, Hiroshi KAWANABE and Takuji ISHIYAMA

<sup>\*1</sup> Graduate School of Energy Science, Kyoto University  
Yoshida Honmachi, Sakyo-ku, Kyoto, 606-8501, Japan

Numerical calculation based on large eddy simulation was carried out to investigate mixture formation process in a spray formed by injecting n-heptane into a constant volume vessel under high-temperature and high-pressure conditions. Liquid phase of fuel was described by discrete droplet model. The results show that the shape of spray is similar to that of visualized image and spray tip penetration corresponds well to experimental results. In addition, distributions of fuel concentration and local non-homogeneous distribution were discussed by comparing the calculation results with the mixture distributions measured using planer laser induced fluorescence technique. The local distributions were well described except around downstream spray boundary. Calculations were also carried out for lower injection pressure condition and smaller nozzle orifice diameter condition. Although fuel concentration in a spray does not quantitatively reproduce the experimental results, the effects of the injection conditions qualitatively agreed with the experiments. Furthermore, ignition and combustion processes were investigated using Schreiber's model for calculating the progress of oxidation reactions.

**Key Words** : Diesel Engine, Large-Eddy Simulation, Mixing, Ignition, Fuel Spray, Non-Homogeneity

### 1. は じ め に

近年、ディーゼル機関では排気浄化、高出力化およびさらなる効率向上を目指して、燃焼の精密な制御が要求されている。環境影響物質の生成や熱発生過程は燃料噴霧内の平均濃度のみならず濃度の不均一度に大きく影響を受ける<sup>(1)</sup>。しかし、噴霧内における不均一混合気の分布状況および着火燃焼過程は十分に明らかではない。燃焼制御および排出物低減の観点から、燃料・空気の混合と着火・燃焼のメカニズムをこれまで以上に明らかにすることが重要である。

ディーゼル機関における着火・燃焼は混合と化学反応が同時に進行する複雑な現象であるため、実験による研究とともに、数値流体力学計算による解析が有効である。ディーゼル燃焼の計算には比較的計算機負荷が小さいレイノルズ平均 (RANS) に基づく方法が多く用いられている。しかし、RANS は時間平均型のモデルであるため、計算される濃度分布は瞬時分布に見られる局所的に濃い混合気や希薄な混合気の形成を再現できない<sup>(2)</sup>。一方、Large-eddy Simulation (LES) に基づいた数値解析では非定常な乱流挙動を捉えることが可能とされている。例えば、堀らは KIVA-LES コードを用いてディーゼル噴霧の発達過程を計算し、実際の噴霧に見られる噴霧外縁部の間欠性や噴霧先端到達距離等の実験値を再現できることを明らかにした<sup>(3)</sup>。このように、LES は不均一な混合気分布が形成される過程を詳細に調査する上で有用である。しかし、高温・高圧下における噴霧について混合気分布を実験と比較した研究例は少ない上、局所的な混合気の不均一分布について定量的に評価したものは見当たらず、この点についてより詳しい検討が必要である。また、LES において化学反応を考慮すれば、非定常噴霧内

\* 原稿受付 2011 年 11 月 17 日

<sup>\*1</sup> 正員, 京都大学大学院エネルギー科学研究科 (〒 606-8501 京都府京都市左京区吉田本町)

<sup>\*2</sup> 正員, フェロー, 京都大学大学院エネルギー科学研究科

E-mail: kojima.hirokazu.75s@st.kyoto-u.ac.jp

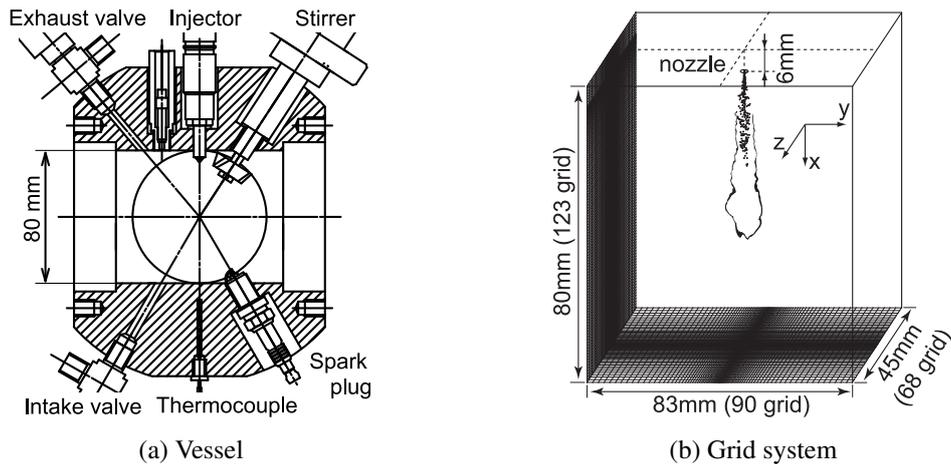


Fig. 1 Schematic diagram of the constant volume vessel and calculation grid system

で不均一に分布する混合気が着火・燃焼する過程を計算できるため、初期燃焼における熱発生率のピークや燃焼期間といった RANS では予測が困難な実験値を再現できると考えられる。しかし、着火燃焼過程については堀らによる LES を用いた解析<sup>(4)</sup>などが見られるものの数は少なく、混合気濃度分布の時間推移と、着火ならびにその後の発熱過程との関係が十分明らかにされているとは言えない。

そこで、本研究では高温高压の定容容器中に n-heptane を噴射して形成される噴霧内の燃料-空気の混合気形成過程を LES に基づいて計算し、混合気濃度分布および局所不均一分布を平面レーザ誘起蛍光法による実験結果と定量的に比較して数値計算結果を評価・検討する。さらに、Schreiber らのモデル<sup>(5)</sup>を用いて化学反応を考慮した計算を行い、非定常噴霧における着火燃焼過程、とりわけ、はじめに着火が起こる位置とその混合気濃度および着火後に高温領域が広がる様子について調べる。

## 2. 計 算 方 法

### 2.1 混合気形成過程の計算

本研究では、高温高压の定容容器中に n-heptane を噴射して形成される噴霧を対象として、その発達過程および着火・燃焼過程を LES に基づき数値計算する。計算結果はレーザ誘起蛍光 (LIF) 法を用いて計測された燃料質量分率の分布<sup>(2)</sup>と比較・検討する。図 1(a) は計算対象とした実験に用いた容器の概略図であり、容積 300 cc の概ね直方体の容器上部に取り付けたインジェクタから中心に向かって燃料を噴射する。計算ではこの容器内に形成される噴霧を対象とし、図 1(b) に示すように容器高さ、幅および容積が実験の容器と等しい 3 次元不等間隔直交格子<sup>(6)(7)</sup>を用い、格子点数は  $123 \times 90 \times 68$  点とする。なお、格子点間隔を半分にした格子系でも計算を行ったが、混合気分布に特筆すべき変化は見られなかった。座標原点は壁面から 6 mm 離れたノズル先端位置とし、燃料噴射方向に x 軸をとる。容器内雰囲気初期温度は  $T_i = 900$  K、圧力は  $p_i = 2$  MPa および 4 MPa とし、組成は非燃焼条件では窒素、燃焼条件では酸素モル分率 21%の空気とした。

燃料液相は Discrete Droplet Model (DDM) を用いて記述し、噴孔出口における燃料液滴の温度は 338 K とし、燃料質量流量は実験と等しく設定する。噴孔出口における燃料液滴の速度は、標準の噴射圧力  $p_{inj} = 120$  MPa および噴孔径  $d_n = 0.141$  mm の条件では噴霧先端到達距離  $x_{tip}$  が図 2 に示すシャドウグラフ法による実測値と一致するように調整を行い 530 m/s とした。他の噴射条件における液滴の速度は、標準噴射条件を基準として燃料質量流量に比例し噴孔面積に反比例するように与える。また、燃料液滴の方向は x 軸からの角度で与えるとともその角度は二次元正規乱数とし、標準偏差  $\sigma_\theta$  は上流 ( $x < 30$  mm) における噴霧の拡がりやシャドウグラフ法と LIF 法による可視化画像と比較して調整し、 $4.5^\circ$  とした。ノズル出口において、一つのパーセル中にはノズル径に等しい一つの液滴が含まれるものとし、燃料噴射期間 3.85 ms の間に合計約 25,000 のパーセルを噴射する。液滴が周囲流体から受ける力は液滴を剛体球であると仮定して球体の抗力として求める。液滴の分裂には Liu らの WAVE モデル<sup>(8)</sup>を用い、モデル定数  $B_0$  は Liu らの研究における値 0.61 とし、 $B_1$  は図 2 に示すミー散乱光撮影による液滴

到達距離  $x_{\text{drp}}$  の実測値と LIF 法による混合気分布の可視化画像に基づき調整して 15 とした。ここで、計算における  $x_{\text{drp}}$  は粒子径  $5\mu\text{m}$  以上の液滴のうち最も下流の位置である。液滴の蒸発に伴う粒子径の変化および周囲気体への熱伝達に伴う温度変化は強制対流下における分子および熱の拡散の式により計算した<sup>(9)</sup>。

気体の流れは密度加重平均に基づく連続の式、運動量、化学種  $m$  の質量分率およびエンタルピの輸送式を用いて計算した。また、液滴による排除体積を考慮するために、格子体積に対する流体の体積割合  $V_f$  を導入した。支配方程式は以下のとおりである。

$$\frac{\partial \bar{\rho} V_f}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = \bar{\rho}^s \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i V_f}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \tau_{ij}^{\text{SGS}})}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{F}_i^s \quad (2)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}_m V_f}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{f}_m \tilde{u}_j + j_{j,m}^{\text{SGS}})}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \bar{J}_{j,m} + \bar{\omega}_m + \bar{\rho}_m^s \quad (3)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h} V_f}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{h} \tilde{u}_j + q_j^{\text{SGS}})}{\partial x_j} = \frac{\partial p_0 V_f}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{q}_j + \bar{Q}^s \quad (4)$$

ただし、 $\bar{\cdot}$  は格子平均、 $\tilde{\cdot}$  は密度加重平均を表す。運動量保存式 (2) 中のサブグリッドスケール (SGS) レイノルズ応力  $\tau_{ij}^{\text{SGS}}$  には Smagorinsky モデルを用い、その定数  $C_s$  は 0.11 とした<sup>(10)</sup>。また、化学種  $m$  の輸送式 (3) およびエンタルピの輸送式 (4) 中の SGS 質量流束  $j_{j,m}^{\text{SGS}}$  および SGS 熱流束  $q_j^{\text{SGS}}$  は勾配拡散モデルにより与え、乱流シュミット数および乱流プラントル数はともに 1 とした。 $p_0$  は容器内平均圧力であり、 $\bar{\rho}^s, \bar{\rho}_m^s$  は燃料液滴の蒸発による生成項、 $\bar{F}_i^s$  および  $\bar{Q}^s$  は液滴との運動量交換および熱伝達による生成項、 $\bar{\omega}_m$  は化学反応による化学種  $m$  の生成速度である。ここで、SGS 乱流が  $\bar{\omega}_m$  に与える影響は考慮していない。圧力解法には SIMPLER を用いるとともにスタッガード格子配置とした<sup>(7)</sup>。運動量保存式は 4 次精度 Adams-Moulton 法で時間進行するとともに 4 次精度中心差分で離散化した。他の保存式の時間進行は Euler 陰解法で行った。化学種輸送式とエンタルピ輸送式の対流項には QUICK 法を用いたが、密度勾配が大きい領域ではアンダーシュートとオーバーシュートに伴う振動を避けるために 1 次精度風上法で離散化した<sup>(11)</sup>。他の空間離散化には 2 次精度中心差分を用いた。計算は燃料噴射開始  $t = 0 \text{ ms}$  から  $t = 6 \text{ ms}$  まで行い、タイムステップは  $50 \text{ ns}$  とした。このとき、クーラン数はノズル出口付近で最も大きく約 0.15 である。境界条件は全ての境界ですべり壁条件および断熱壁面条件を与えた。なお、SGS 乱流と燃料液滴の相互作用は考慮していない。

## 2.2 化学反応モデル

混合気中の化学反応には Schreiber らの 5 段階総括反応モデル<sup>(5)</sup>を用いた。n-heptane における反応スキームは以下のとおりである。



ここで、F は燃料、X は燃料の熱分解生成物、Y と I は低温酸化反応における中間生成物であり、P は  $\text{CO}_2$  と  $\text{H}_2\text{O}$  からなる最終生成物である。本研究で対象とする条件で Schreiber らの反応速度定数を用いた場合、詳細反応計算に比べて着火遅れを短く見積もるため、詳細反応計算と比較し調整をした速度定数を用いた。詳細は付録にて述べる。

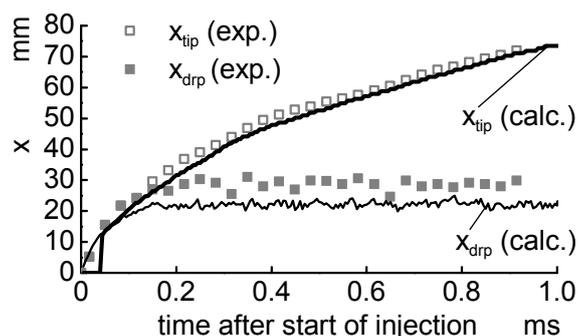


Fig. 2 Temporal change of spray tip penetration  $x_{tip}$  and liquid length  $x_{drp}$

### 3. 計算結果および考察

#### 3-1 混合気分布

まず、容器内初期条件を  $p_i = 2 \text{ MPa}$ ,  $T_i = 900 \text{ K}$  一様の非燃焼条件とし、噴射圧力  $p_{inj} = 120 \text{ MPa}$ , 噴孔径  $d_n = 0.141 \text{ mm}$  の条件において形成される噴霧を対象に、上記の方法により混合気形成過程の計算を行った。その結果得られた噴射開始からの時刻  $t = 0.2, 0.6$  および  $1.0 \text{ ms}$  における燃料蒸気の質量分率  $f$  の  $xy$  平面分布 (calc.) を平面レーザ誘起蛍光法により計測した結果<sup>(2)</sup> (exp.) とあわせて図 3 に示す。なお、計測の際の視野は  $x = 17 \text{ mm}$  から  $63 \text{ mm}$  に限られている。噴霧の拡がりや先端位置を比較すると、概して計算結果は実験結果と一致しており、また、計算結果は実験結果に見られる非定常な流動によって燃料-周囲流体境界に凹凸が生じる様子を捉えている。ただし、 $x < 30 \text{ mm}$  における実験による  $f$  の値は計算結果よりも高い。これは、計測では  $x < 30 \text{ mm}$  で液滴からの蛍光を捉えており、 $f$  を大きく見積もっているためと考えられる。計算の分布によれば、 $x = 15 \text{ mm}$  から下流にかけて、液滴の蒸発が盛んに起こり  $x = 30 \text{ mm}$  より下流には燃料液滴は分布しない。すなわち、 $x = 30 \text{ mm}$  付近までに燃料はほとんど蒸気になることがわかる。

噴霧内混合気の燃料濃度分布を比較するために図 3 における噴霧軸上 ( $y = 0 \text{ mm}$ ) および  $x = 50 \text{ mm}$  における  $f$  を図 4 に示す。ここで、実験結果はおよそ 10 回の計測の平均値を示す。前述のように計測結果では  $x < 30 \text{ mm}$  の領域で  $f$  を過大に見積もっていると考えられるため、ここでは  $x = 30 \text{ mm}$  よりも下流における  $f$  について検討する。 $y = 0 \text{ mm}$  における燃料蒸気の分布について、計算結果は比較的上流から噴霧先端まで実験とよく一致している。 $x = 50 \text{ mm}$  における分布では  $f$  の最大値が中心からやや離れた位置にあり、噴霧は非定常な流動により蛇行していることがわかる。その結果、 $t = 1.0 \text{ ms}$  における噴霧軸上の  $x = 50 \text{ mm}$  では計算により得られた  $f$  は実験による平均濃度よりも小さい。また、半径方向分布でも計算結果は実験と類似した分布を示し、現象の非定常性を考慮すればよく一致しているといえる。

さらに、局所的に不均一に分布する混合気の統計的性質を実験と比較する。ここでは、噴霧中のある小領域における燃料質量分率の確率密度分布 (PDF) を求め、領域の大きさを変更したときの PDF の変化を調べることで、混合気濃度の局所不均一性とそのスケールを検討する。そのために、図 5 に示す 4 点、すなわち、計算および実測による濃度分布について、液滴がほぼ全て蒸発して比較的濃い混合気分布する噴霧軸上の点 A(40, 0)、比較的下流に位置する噴霧軸上の点 B(57, 0)、着火や初期燃焼に対する影響が大きいと思われる噴霧外縁部の点 C(50, 6) およびより下流に位置する外縁部の点 D(57, 6) について、各点を中心とする半径  $r$  の円領域内における  $f$  の PDF を計算する。 $r = 1.5, 3$  および  $6 \text{ mm}$  について計算した結果を図 6 に示す。まず、全ての点について  $r$  の増加に伴って PDF の極大値は低下するとともに  $f$  は広く分布するようになる。点 A では、 $r$  の増加とともにピークの位置よりも小さい  $f$  の PDF が増加し、計算は実験結果とよく一致している。点 B では、計算結果は実験値よりも  $f$  の分布範囲は低濃度側にあるものの、PDF の最大値と分布の幅は概ね一致している。計算結果において  $f$  が低濃度側に分布するのは、濃度の高い領域が  $z$  軸方向に蛇行し、 $xy$  平面上には比較的濃度の低い混合気が分布するためである。点 C および点 D では、 $r$  の増大とともに濃度の低い混合気と高い混合気ともに増加し、PDF のピークは低下する。さらに、いくつかの PDF では二つの極大値をもつ分布が見られる。これら外縁部の点 C, D においても計算により得られた PDF の幅は実験結果とほぼ一致する。

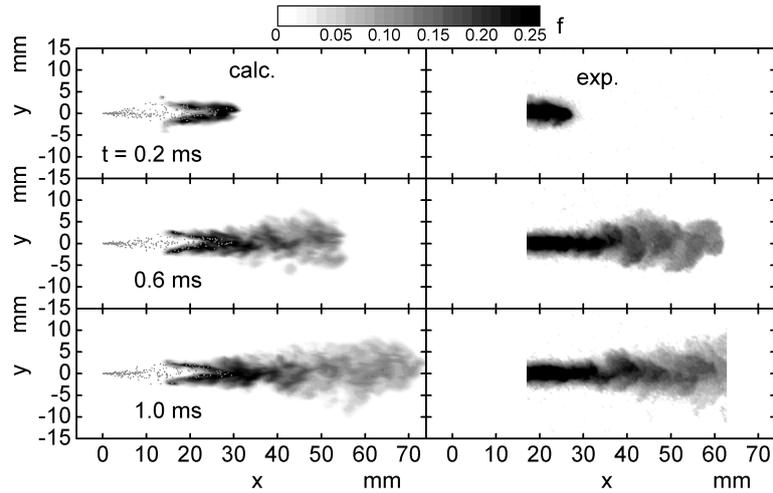


Fig. 3 Distributions of fuel mass fraction  $f$  ( $p_{inj} = 120$  MPa,  $d_n = 0.141$  mm)

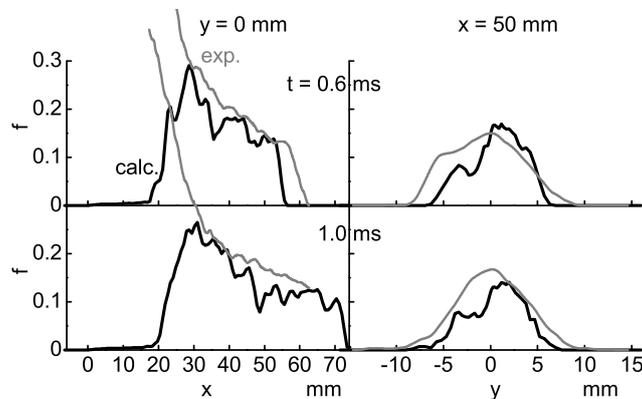


Fig. 4 Profiles of  $f$  at  $y = 0$  mm and  $x = 50$  mm

局所混合気分布における変動強度とスケールについて詳細に検討するために、図5に示す点A~Dの周囲半径  $r = 0.5 \sim 6$  mm の円領域内における混合気について、 $f$  の平均  $\bar{f}$  と標準偏差  $f'$  を求め、図7に示す。これによると、噴霧軸上の点Aおよび点Bでは  $r$  の増大に伴って  $\bar{f}$  が減少するとともに  $f'$  は増加する。すなわち、 $r$  が増加すると領域内で比較的低濃度の混合気が増加するために平均濃度は減少し、一方で領域内の  $f$  の分布範囲は拡がるために変動強度は増加する。点A, Bにおける  $\bar{f}$  の計算結果は実験結果よりもやや低いものの、 $f'$  はよく一致しており、特に点Aにおいては計算と実験の差は5%以下である。つぎに、噴霧外縁部の点Cおよび点Dでは  $r$  が増加しても  $\bar{f}$  はほとんど変化せず、一方  $f'$  は  $r$  の増大により単調に増加する。このことから、 $r$  の増加に伴って円領域内には比較的低濃度の混合気と高濃度の混合気が増加するために  $f$  の分布範囲が拡大して  $f'$  が増加し、また、低濃度な混合気と高濃度な混合気はほぼ同量ずつ増加することがわかる。点Cでは  $\bar{f}$ 、 $f'$  ともに実験よりやや小さいものの概ね一致する。点Dでは比較的小さい  $r$  に対して実験を再現するが、 $r$  が大きい場合には実験よりも小さい値を示している。この相違は、図6に示した  $r = 6$  mm のPDFによると、計算では  $f > 0.13$  の混合気が存在する様子を再現しないためである。下流外縁部に位置する点D周辺の混合気分布は噴射毎に大きく変化するため、一つの瞬時分布における一点の周辺だけを対象とする方法では十分な比較ができない可能性があり、比較的下流や噴霧外縁部の分布についてはより詳細な検討を要するものと考えられる。

以上、計算結果を実測値と比較した結果、噴霧の拡がり、先端到達距離といった巨視的な特性だけでなく微視的な混合気分布についても、下流の噴霧外縁部を除いて、実測の結果をよく再現することを確かめられた。

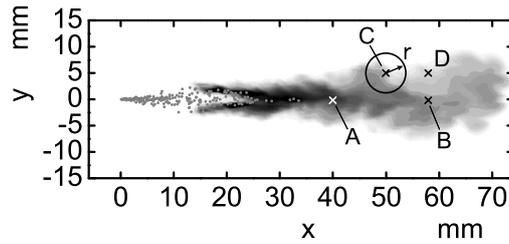


Fig. 5 PDF calculation areas

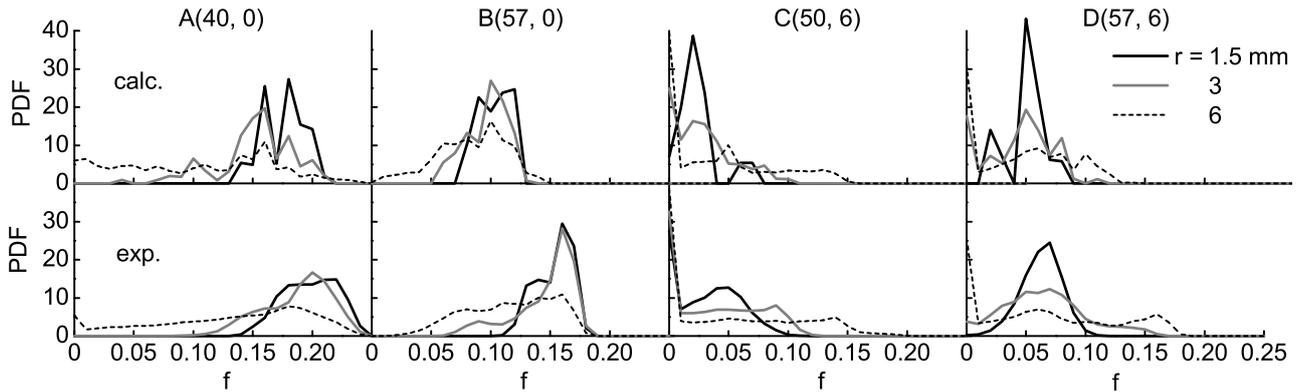


Fig. 6 PDF of  $f$  in areas around A, B, C and D

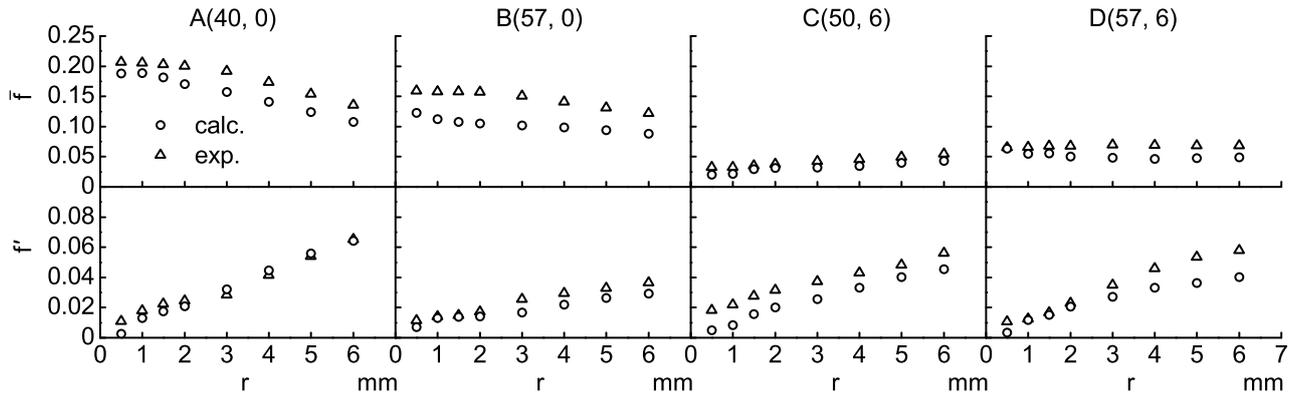


Fig. 7 Averages  $\bar{f}$  and standard deviations  $f'$  of  $f$  in areas around A, B, C and D

### 3.2 噴射条件の影響

つぎに、噴射圧力と噴孔径の変更が混合気分布に与える影響を調べた。まず、噴孔径を  $d_n = 0.141$  mm のまま噴射圧力を  $p_{inj} = 60$  MPa と低下させた条件について計算を行った。その結果得られた燃料質量分率  $f$  の  $xy$  平面上における分布を実験結果とあわせて図 8 に示す。ここで、実験と燃料質量流量を等しくするために、燃料噴射率を  $p_{inj} = 120$  MPa 条件の 73% に設定した。 $p_{inj} = 120$  MPa (図 3) の結果と比較して先端到達距離は短くなり、各時刻における先端位置はおおよそ実験結果に等しい。一方、液滴の到達距離と噴霧中心軸上の燃料濃度には  $p_{inj} = 120$  MPa と比べ大きな違いが見られない。これは実験により得られる傾向と一致する。

図 9 に噴射圧力を標準条件に等しく  $p_{inj} = 120$  MPa とし  $d_n = 0.1$  mm と噴孔径を小さくした条件における計算結果を実験結果とあわせて示す。燃料噴射率は実験と等しくなるように  $d_n = 0.141$  mm 条件の 61% とした。図 3 の結果に比べ先端到達距離は短く、先端位置は実験結果とほぼ一致する。また、液滴は  $d_n = 0.141$  mm の条件と比べてより上流で完全に蒸発し、下流では濃度の低い混合気が形成することがわかる。このように、噴孔径を小さくすることの影響について計算は実験結果を定性的に再現するが、 $f$  を過小評価しているなど、定量的な面で改善

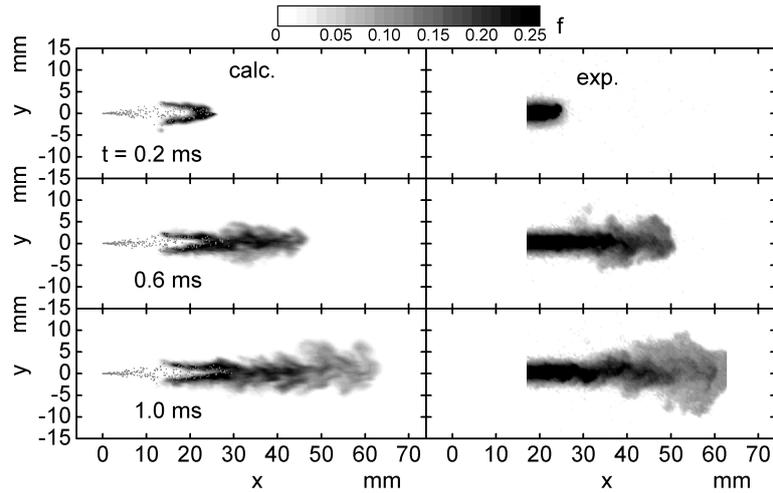


Fig. 8 Distributions of fuel mass fraction  $f$  ( $p_{inj} = 60$  MPa,  $d_n = 0.141$  mm)

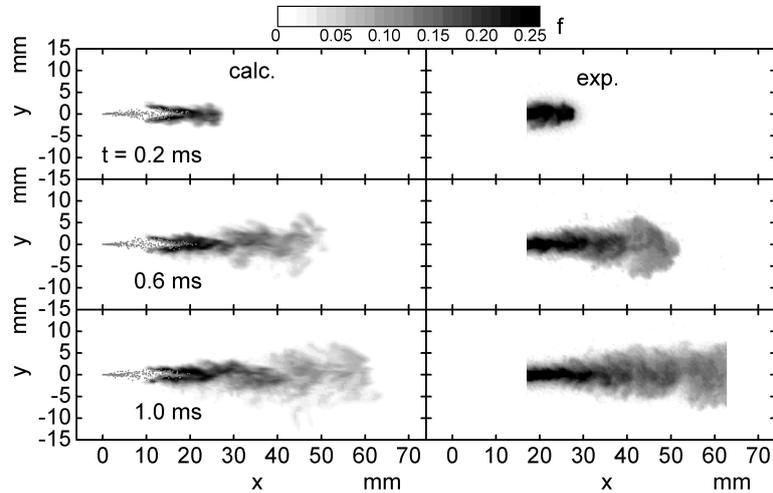


Fig. 9 Distributions of fuel mass fraction  $f$  ( $p_{inj} = 120$  MPa,  $d_n = 0.1$  mm)

が必要である。比較的上流から下流まで実験より濃度を低く見積もっていることから、液滴の分裂に関してモデルを検討することとあわせてモデル定数の調整のために実測においてより正確な液滴到達距離を求めることが必要であると考えられる。

以上、噴射条件を変更した条件における混合気分布は実験と異なる部分も見られ、実験結果の計測精度とあわせてさらなる検討を要するものの、噴霧の発達および混合気分布の定性的な変化は実験の傾向を捉えている。

### 3.3 自着火過程

噴霧における混合気の着火と燃焼について調べるため、酸素モル分率 21%、圧力  $p_i = 2$  および 4 MPa の雰囲気条件において各計算格子で化学反応を考慮して計算した。容器内の初期平均温度は  $T_i = 900$  K とし、温度分布については実験における手順を模擬し、予混合燃焼によって作成された高温・高圧雰囲気が冷却されて温度・圧力が規定値まで低下する過程を計算して決定した<sup>(12)</sup>。この場合、燃料噴射時における容器内の温度は平均温度に比べて容器中心付近で約 140 K 高く、壁面付近で約 100 K 低い。このようにして決定した温度分布を初期条件とし、簡単のため断熱壁面として燃料噴射開始から計算を行った。噴射条件は  $p_{inj} = 120$  MPa および  $d_n = 0.141$  mm である。 $p_i = 2$  MPa の条件について、容器内における正味圧力変化  $p = p_f - p_a$  および熱発生率とほぼ比例関係にある量として圧力上昇率  $dp/dt$  の時間履歴を実験結果とあわせて図 10 に示す。ここで、 $p_f$  は容器内圧力、 $p_a$  は燃料噴射を行わなかった場合の圧力である。計算では  $t = 1.7$  ms よりも早くから弱い熱発生が見られるが、急激な圧力

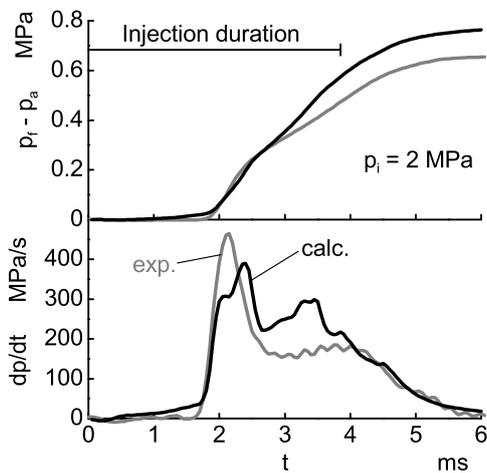


Fig. 10 Effective pressure  $p_t - p_a$  and pressure rise rate  $dp/dt$  in the vessel ( $p_i = 2$  MPa)

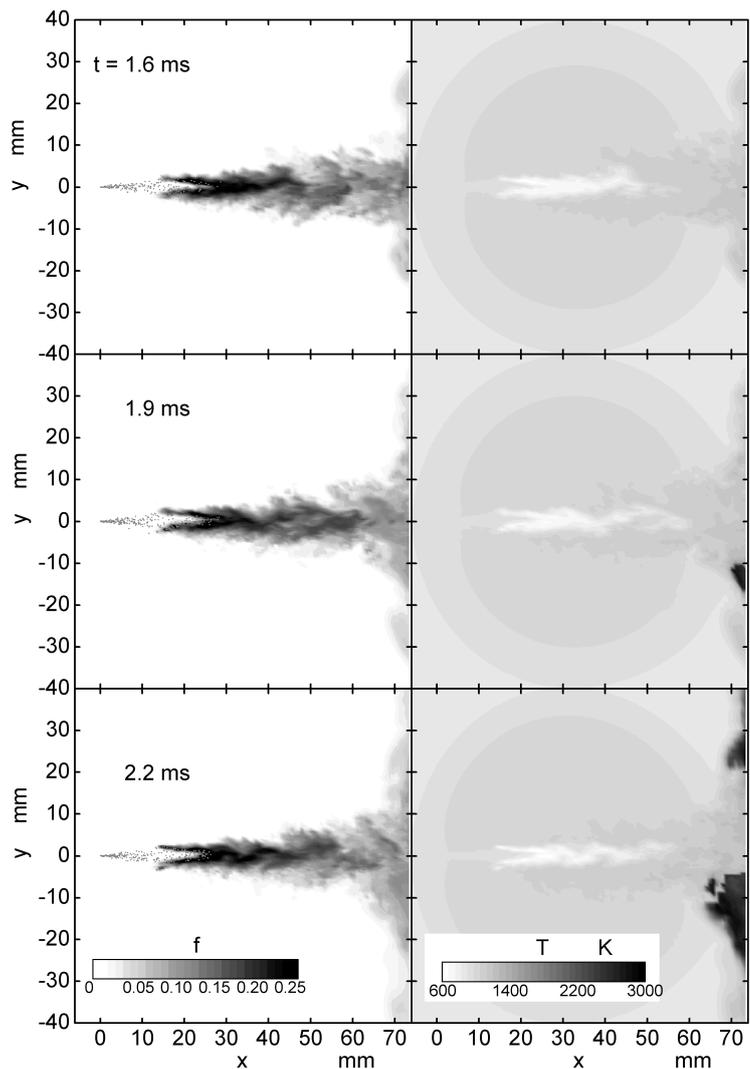


Fig. 11 Distributions of mixture fraction  $f$  and temperature  $T$  ( $p_i = 2$  MPa)

上昇が生じる時刻は実験結果を予測できている。加えて、着火直後の  $dp/dt$  の傾きについても実験とよく一致している。しかし、 $t = 2.0$  ms 以降の  $dp/dt$  の経過は実験とやや異なる。

つぎに、着火に至る時刻における混合気の形成状況、はじめに着火が起こる位置および着火直後の燃焼過程について検討するために、 $t = 1.6, 1.9$  および  $2.2$  ms における  $x$ - $y$  平面上の混合分率<sup>(13)</sup>  $f$  の分布および混合気温度  $T$  の分布を図 11 に示す。 $t = 1.6$  ms における分布によれば、噴霧は壁面へ衝突した後壁面に沿って発達し、 $x > 50$  mm ではわずかに温度が上昇している。 $t = 1.9$  ms で壁面付近の混合気が自着火して混合気は高温となる。このとき高温となっている領域で、 $f = 0.046 \sim 0.096$  (当量比  $\phi = 0.73 \sim 1.6$ ) である。さらに、 $t = 2.2$  ms の分布に見られるように、周辺の混合気も次々に着火して高温の領域は拡大する。このように燃焼は壁面付近で進行するため、高温の領域が生じた後の燃焼過程は壁面への熱伝達の影響を受ける。しかし、計算では断熱壁面としており、図 10 において急激な圧力上昇後の  $dp/dt$  経過に実験との差異が見られるのはこの影響が大きいと考えられる。したがって、壁面への熱伝達を考慮して計算を行うことにより着火後の燃焼過程の予測精度向上が期待できる。

さらに、容器内雰囲気圧力を  $p_i = 4$  MPa とした条件で計算して得られた  $p_t - p_a$  および  $dp/dt$  を実験結果とあわせて図 12 に示す。計算では実験に比べてわずかに着火時期を早く予測するとともに着火直後の  $dp/dt$  のピークを大きく見積もるものの、混合律速で燃焼が進行する期間では計算の  $dp/dt$  は実験結果とよく一致する。着火時期前後の  $t = 0.45, 0.55$  および  $0.65$  ms における  $f$  および  $T$  の分布を図 13 に示す。 $p_i = 2$  MPa の場合と比べて液滴の到達距離は短く、混合気はより上流から形成される。 $t = 0.55$  ms で噴霧先端付近に高温の領域が生じ、その領

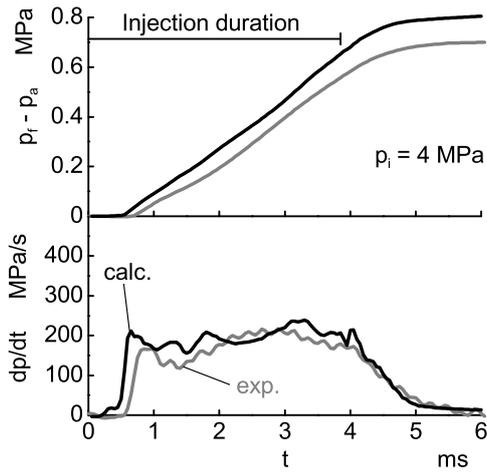


Fig. 12 Effective pressure  $p_t - p_a$  and pressure rise rate  $dp/dt$  in the vessel ( $p_i = 4$  MPa)

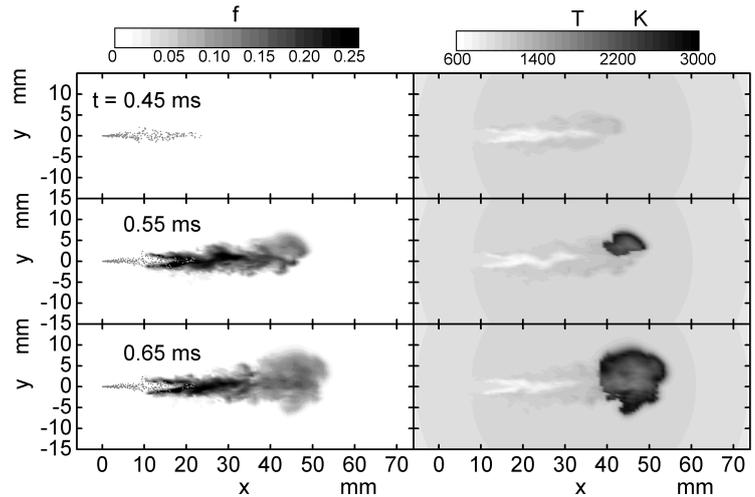


Fig. 13 Distributions of mixture fraction  $f$  and temperature  $T$  ( $p_i = 4$  MPa)

域で  $f = 0.032 \sim 0.15$  (当量比  $\phi = 0.5 \sim 2.6$ ) である。その後高温領域はすばやく拡大し、 $t = 0.65$  ms では噴霧先端全体に拡がることわかる。

#### 4. ま と め

以上、本研究では高温高压の定容容器中に n-heptane を噴射した際の混合気形成過程を LES に基づいて数値計算し、その結果を平面レーザー誘起蛍光法による計測結果と比較・検討した。さらに、混合気中における化学反応を考慮して計算を行い、非定常噴霧における着火・燃焼過程について調べた。得られた知見を以下にまとめる。

- (1) 計算により得られた燃料濃度分布は実測の噴霧に見られる非定常な流動に伴う噴霧外縁部の凹凸を再現できるとともに、噴霧内の燃料濃度は実験結果と同程度の値を示す。
- (2) 局所的な混合気分布における変動強度とスケールを計算した結果によると、下流では計算結果は実験とやや異なる部分も見られさらなる検討を要するものの、上流では平均濃度、変動強度ともに実験結果とよく一致する。
- (3) 噴射条件を変更した場合の噴霧発達、混合気濃度の変化は実験と同じ傾向を示す。ただし、定量的な予測についてはなお検討の必要がある。
- (4) 燃焼条件の計算によれば、雰囲気圧力 2 MPa の条件では壁面近傍の混合気から着火して高温領域は壁面に沿って拡がる。その着火時期と初期の圧力上昇は実験とよく一致する。雰囲気圧力 4 MPa では先端が壁面に到達するまでに先端付近の混合気から着火して先端周辺の領域全体がすばやく高温になる。

#### 付 録

本研究に関係する条件を対象にして、n-heptane における Schreiber らのモデルの反応速度定数を調整した。活性化エネルギー  $E_i$  は全ての反応で Schreiber らの値をそのまま使用し、頻度因子  $A_i$  を定圧条件下における均一混合気の着火遅れが詳細反応計算<sup>(14)</sup> (654 化学種, 2827 反応式) で得られる値に近づくように調整した。修正後の反応速度定数を表 1 に、圧力 (a)  $p_i = 2$  MPa と (b)  $p_i = 4$  MPa, 当量比  $\phi = 0.4 \sim 2.4$  における均一混合気の温度履歴を図 14 に示す。ここで、噴霧内における混合気の状態を模擬するために 900 K の空気と 338 K の燃料が断熱混合すると仮定して初期温度を決定した。修正後の速度定数を用いた場合 (Mod.) には元の速度定数を用いた場合 (Orig.) よりも着火遅れは長く、詳細反応計算 (Full kin.) と比べて低温酸化反応による温度上昇が高く見積られるものの着火遅れは広い範囲の当量比に対してよく一致する。

Table 1 Modified rate constants

Reaction number	Activation energy $E_i$ (kJ/mol)	Frequency factor $A_i$ (mol m <sup>3</sup> s)	
		original	modified
1	150.1	$5.0 \times 10^8$	←
2	59.9	$7.0 \times 10^6$	←
3+	162.1	$3.85 \times 10^{10}$	$7.7 \times 10^8$
3-	311.8	$6.0 \times 10^{27}$	$6.0 \times 10^{26}$
4	41.6	$2.0 \times 10^8$	$3.2 \times 10^9$
5	137.2	$1.0 \times 10^9$	$1.0 \times 10^{10}$

(Rate expression:  $k_i = A_i \exp[-E_i/(RT)]$ )

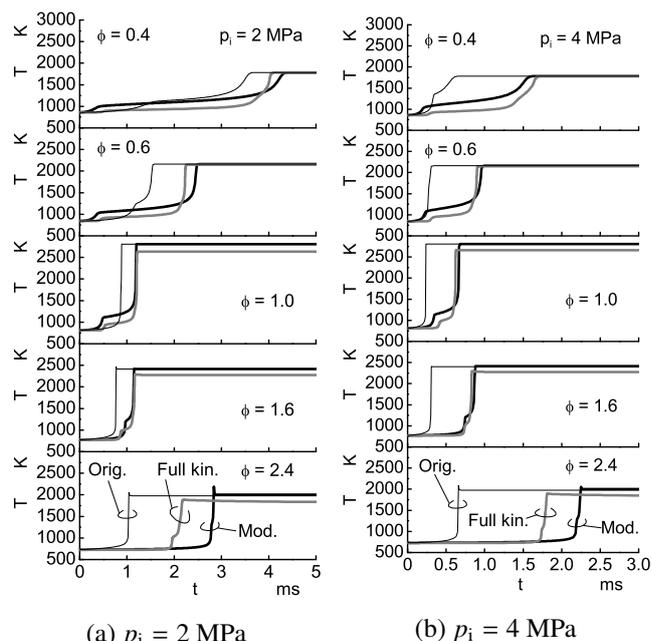


Fig. 14 Temperature histories for homogeneous mixture

## 文 献

- (1) 川那辺洋, 石山拓二, "不均一混合気における自着火過程の数値解析", 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 74, No. 745 (2008), pp. 2049-2054.
- (2) 小島宏一, 川那辺洋, 石山拓二, "ディーゼル噴霧における燃料濃度分布の PLIF 計測", 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 76, No. 768 (2010), pp. 1326-1333.
- (3) Hori, T., Senda, J., Kuge, T. and Fujimoto, H., "Large Eddy Simulation of Non-Evaporative and Evaporative Diesel Spray in Constant Volume Vessel by Use of KIVALES", SAE paper No. 2006-01-3334 (2006).
- (4) Hori, T., Kuge, T., Senda, J. and Fujimoto, H., "Large Eddy Simulation of Diesel Spray Combustion with Eddy-Dissipation Model and CIP Method by Use of KIVALES", SAE paper No. 2007-01-0247 (2007).
- (5) Schreiber, M., Sakak, A. S. and Lingens, A., A Reduced Thermokinetic Model for the Autoignition of Fuels with Variable Octane Ratings, *Proceedings of 25th international Symposium on Combustion*, (1994), pp. 933-940.
- (6) 近藤千尋, 川那辺洋, 塩路昌宏, "高速非定常水素噴流における混合気形成過程の LES 解析", 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 75, No. 754 (2009), pp. 1344-1350.
- (7) 大浦一馬, 近藤千尋, 川那辺洋, 塩路昌宏, "水素噴流における火花点火燃焼過程の LES 解析", 第 46 回燃焼シンポジウム講演論文集 (2008).
- (8) Liu, A. B., Mather, D. and Reitz, R. D., "Modeling the Effects of Drop Drag and Breakup on Fuel Sprays", SAE paper No. 930072 (1993).
- (9) Amsden, A.A., O'Rourke, P.J. and Butler, T.D., "KIVA-II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays", Los Alamos National Laboratory Report No. LA-11560-MS (1989).
- (10) 河崎澄, 塩路昌宏, 方方, "噴流内ガス流動の LES 予測における流入境界条件の影響", 日本機械学会論文集 B 編, Vol. 70, No. 691 (2004), pp. 723-728.
- (11) 村上周三, 加藤 信介, 須山 喜美, "移流項差分における一次精度風上, QUICK, 中心差分スキーム等の比較検討: 室内気流数値解析の診断システムに関する研究 (第 2 報)", 日本建築学会計画系論文報告集, Vol. 390 (1988), pp. 1-12.
- (12) Kawanabe, H., Kojima, H. and Ishiyama, T., "Modeling of the Auto-ignition Process of a Non-homogeneous Mixture in a Diesel Spray for CFD", SAE paper No. 2010-01-0357 (2010).

- (13) Williams, F.A., "Combustion Theory Second Edition" (1985), pp. 69-76, Addison-Wesley Publishing Company.
- (14) Mehl, M., Curran, H. J., Pitz, W. J. and Westbrook, C. K., "n-Heptane, Detailed Mechanism, Version 3", Lawrence Livermore National Laboratory, [https://www-pls.llnl.gov/?url=science\\_and\\_technology-chemistry-combustion-n\\_heptane\\_version\\_3](https://www-pls.llnl.gov/?url=science_and_technology-chemistry-combustion-n_heptane_version_3) (参照日 2011 年 1 月 30 日).