不均一混合気の自着火過程を考慮したディーゼル燃焼モデル*

川那辺 洋^{*1}, 山本 亮^{*1}, 石山 拓二^{*1}Diesel Combustion Model with Auto-Ignition Process
of Non-Homogeneous MixtureHiroshi KAWANABE^{*2}, Ryo YAMAMOTO and Takuji ISHIYAMA^{*2} School of Energy Science, Kyoto University,
Yoshida Hon'machi, Sakyo-ku, Kyoto-shi, Kyoto, 606-8501 Japan

Diesel combustion model for CFD simulation is established taking account of an auto-ignition process of non-homogeneous mixture. Authors revealed in their previous paper that the non-homogeneity of fuel-air mixture affected more on auto-ignition process such as its ignition delay or combustion duration than the turbulent mixing rate. Based on these results, novel diesel combustion model is proposed in this study. The transport calculation for local variation of fuel-air PDF is introduced and the chemical reaction rate is provided by the local non-homogeneity. Furthermore, this model is applied the RANS based CFD simulation of the spray combustion in a Diesel engine condition. The results show that the combustion process is well described for several engine operations.

Key Words: Diesel Engine, Numerical Simulation Spray Combustion, Modeling, Non-Homogeneity

1. ま え が き

近年、ディーゼル機関では比較的低負荷、低回転数域における、熱効率向上、窒素酸化物および粒子状物質の排出低減を目指して、予混合圧縮自着火 (PCCI) の原理を取り入れた燃焼を実現することが試みられている⁽¹⁾。この燃焼方式では、燃料は比較的早い時期に噴射されて、長い着火遅れの後燃焼する。このような燃焼形態では、燃料の噴射の後、蒸発、空気との混合および化学反応が同時に進行するが、混合気の温度・圧力が比較的低いために、着火および燃焼の過程は化学反応速度に大きく依存する。この場合、混合気の均一度が高いと、低い当量比条件においては燃焼が不安定になり、一方、高い当量比条件では燃焼が急激に進行するためにノックのような急激な圧力上昇を引き起こす。

そこで、燃焼を制御することを目指して燃料濃度にある程度の分布を与えることが試みられているが、その燃焼過程の詳細については未だ十分に明らかではない。すなわち、乱流混合と着火に至る化学反応の特性時間がほぼ同等であり、これらの過程が同時に進行するために、着火時期、圧力上昇率に及ぼす混合気不均一の影響あるいは混合速度の影響について不明な点が多い。

燃料濃度の不均一な場における自着火燃焼過程を明らかにするために、これまで多くの数値解析手法が提案されてきた。たとえば、Kongらはディーゼル燃焼のために開発された、化学反応が乱流混合により影響を受けるという燃焼モデルをPCCI燃焼に適用し、実験結果によく一致することを示した⁽²⁾⁽³⁾。また、今岡らは予混合燃焼用に開発されたUCFMモデルに特性時間スケールモデルを組み合わせてディーゼル燃焼に適用している⁽⁴⁾。このようにディーゼル燃焼過程をCFDを用いて数値解析する際には、自着火過程を含めて燃焼が主に乱流混合に律速されたとしたモデルが用いられることが多かった。一方筆者らは、このような燃焼過程

* 原稿受付 2009年10月29日。

^{*1} 正員、京都大学エネルギー科学研究科(〒606-8501 京都市左京区吉田本町)。

E-mail: kawanabe@energy.kyoto-u.ac.jp

Fig. 1 Schematic diagram of mixture distribution in a Diesel spray

Fig. 2 Schematic of temperature change in homogeneous mixture

において燃料濃度の不均一が初期燃焼に大きく影響を与えることを示した。まず、乱流混合過程を確率過程論モデルを用いて記述するとともに、簡略化燃焼反応モデルを組み合わせた計算を行った。ここでは、ディーゼルおよび予混合圧縮自着火の燃焼過程を対象として、主に噴射圧力およびノズル径を変更した際の乱流混合速度の変化が着火過程に及ぼす影響について、定容容器内噴霧燃焼を対象として検討した⁽⁵⁾⁽⁶⁾。さらに、不均一混合気が乱流混合により均一化すると同時に着火反応が進行する過程を基礎的に明らかにするために、確率過程論モデルに詳細化学反応計算を組み合わせ、解析を行った。その結果、熱炎における温度上昇時間はその時の混合気の均一化速度にはあまり依存せず、主に温度上昇中の濃度不均一度が大きいほど長くなることなどが明らかになった⁽⁷⁾。すなわち、混合気中存在する不均一が着火遅れおよび温度上昇時間に及ぼす作用を記述することによって、ディーゼル燃焼の初期燃焼あるいは着火遅れが比較的長いPCCIの燃焼を表現できる可能性がある。

そこで本研究では、不均一混合気が乱流混合するとともに自着火に至る過程を考慮した不均一自着火モデルを提案する。さらに、このモデルをレイノルズ平均型の乱流モデル(RANS)を用いたCFDに適用するとともにディーゼルエンジン内の燃焼解析を行う。また、種々の噴射条件について計算を行い、本モデルの妥当性を検討する。

Fig. 3 Schematic of temperature change in non-homogeneous mixture

2. 不均一混合気の自着火燃焼モデル

一般にディーゼル噴霧燃焼では蒸発した燃料が乱流によって空気と混合する。図1(a)はこの様子について、RANSによって計算される混合気の分布を模式的に示したものである。この結果は実際の現象のアンサンブル平均とみなすことができ、一実現は図1(b)に示すようにランダムに生じた乱流によって混合気が分布すると考えられる。本研究ではRANSベースのCFDにCHEMKIN-ODEソルバを用いて各計算格子における化学反応を計算することによりディーゼル燃焼を解析することを試みる。ただし、このままでは(a)のようなアンサンブル平均に対する化学反応が計算されるために、実際の(b)の分布に対する反応の進行と異なる可能性がある。そこで、燃料濃度の局所分布に応じてみかけの反応速度を算出する。そのために(b)のような混合気分布を(a)の結果を用いて模擬する必要があり、ここではアンサンブル平均に加えて、局所分布を考慮する⁽⁷⁾。すなわち、乱流混合によって生じた混合気の不均一分布を混合分率⁽⁸⁾の密度加重平均 f_a とその分散値 v_f によって規定し、これらの値をそれぞれ以下の輸送式によって計算して求める⁽⁹⁾。

$$\frac{D(\rho f_a)}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_i \frac{\partial f_a}{\partial x_j} \right) + S_f \quad (1)$$

$$\frac{D(\rho v_f)}{Dt} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_i \frac{\partial v_f}{\partial x_j} \right) + C_{s1} \rho D_i \left(\frac{\partial f_a}{\partial x_j} \right)^2 - C_{s2} \rho v_f \frac{\epsilon}{k} \quad (2)$$

ただし、 C_{s1} 、 C_{s2} は定数であり、混合層ではそれぞれ2.8および1.92⁽⁹⁾が用いられるが、噴霧については十分に明らかではない。そこで、ここでは定容容器における噴霧の可視化結果を計算結果と比較していずれも2と仮定した。これらの値については更な

Fig. 4 Distributions of F_s and F_i against f

る検討が必要である。また、 S_f は噴霧液滴の蒸発に伴う生成項である。

局所的に不均一な混合気が自着火する過程について、既報⁽⁷⁾によると着火遅れの比較的短い混合気から順次自着火に至るとみなすことができる。その過程をモデル化するために、まず均一予混合気の自着火過程について考える。一般に炭化水素燃料の混合気が高温かつ高圧の条件にさらされると図2の模式図に示すように、 τ_s^h の時間遅れの後、 τ_i^h の期間で急激に温度 T が上昇する。これに対して、不均一混合気については図3に示すように、均一予混合気の自着火過程に比べて温度上昇開始時期 τ_s^{nh} は混合気における着火遅れの最も短いものによって決まり、温度上昇の期間 τ_i^{nh} は分布のばらつきによって扱うことができる。これに基づくと、 f_a 、局所分布の標準偏差 $\sigma_f (=v_f^{1/2})$ の混合気における τ_s^{nh} および τ_i^{nh} は、 f_a に対する値 τ_s^a 、 τ_i^a を用いて以下のように記述することができる。

$$\tau_s^{nh} = \left\{ 1 - C_1 \left(\frac{1}{\tau_s^h} \frac{d\tau_s^h}{df} \right) \right\} \sigma_f \tau_s^a \quad (3)$$

$$\tau_i^{nh} = \left\{ 1 + 2C_2 \left(\frac{1}{\tau_i^h} \frac{d\tau_i^h}{df} \right) \right\} \sigma_f \tau_i^a \quad (4)$$

ここで、 C_1 、 C_2 は定数であり、ここでは定容容器中のディーゼル噴霧について自着火燃焼過程の計算を行い、実験結果と比較してそれぞれ1および0.3とした。また、 $F_s = (1/\tau_s^h)(d\tau_s^h/df)$ および $F_i = (1/\tau_i^h)(d\tau_i^h/df)$ は燃料種および初期温度・圧力によって定まる関数であり、あらかじめ種々の条件について求めた値に基づいてライブラリーを作成し、計算を実行する際にはそれを用いることが望ましい。ただし、ここでは簡便に計算するために、燃料にn-ヘプタンを仮定するとともに図4の線に示すように定めた。なお、プロット点はn-ヘプタンの簡

Table 1 Engine specification and calculation condition

Engine type	Direct-injection diesel engine, Naturally aspirated, Single-cylinder
Bore × Stroke	102 × 105 mm
Displacement	857 cc
Compression ratio	15.5
Swirl ratio	2.6
Injection pressure	120 MPa
Engine speed	1800 rpm
Combustion chamber	Toroidal type with a $\phi 56$ mm bowl
Injection nozzle	0.18 mm × 6 holes 150°
Fuel	n-heptane
Injection timing	50°, 40°, 30°, 20°, 10° BTDC
Injection duration	7°CA
Equivalence ratio	0.32

Fig. 5 Grid system at $\theta = -20^\circ\text{CA}$

Fig. 6 Profiles of incylinder pressure p and heat release rate $dq/d\theta$ ($\theta_i = 20^\circ \text{BTDC}$)

略動力学計算により圧力は2MPaから4MPa、初期温度は800Kから1000Kまで変化させて求めた値であり、条件によらずおおよそ図中の線で記述できると扱う。また、反応機構としてTsurushimaのガソリン Primary Reference Fuel (n-ヘプタンとi-オクタンの

Fig. 7 Profiles of in-cylinder pressure p and heat release rate $dq/d\theta$

混合燃料) を対象としたモデル⁽¹⁰⁾の低温酸化機構に Patel らのモデル⁽¹¹⁾の高温酸化機構を組み合わせ用いた。

以上、式 (3) および式 (4) により求めた均一と不均一混合気の反応時間の比を用いて、各計算格子における化学種の変化を定める。すなわち、化学種 k のモル濃度 C_k の変化率 dC_k/dt は、計算格子内の平均値に基づいて CHEMKIN-ODE ソルバによって得られる値 $(dC_k/dt)_a$ に反応時間の比を乗じた値で以下のように規定する。

$$\frac{dC_k}{dt} = \frac{\tau_s^a}{\tau_s^{nh}} \left(\frac{dC_k}{dt} \right)_a \quad (5)$$

$$\frac{dC_k}{dt} = \frac{\tau_i^a}{\tau_i^{nh}} \left(\frac{dC_k}{dt} \right)_a \quad (6)$$

ここで、式 (5) は熱炎による温度上昇開始まで適用し、その後は式 (6) を用いる。なお、ここでは境界値として $T = 1200\text{K}$ を仮定し、その温度で 2 式を切り替える。

3. 計算結果

上述の燃焼モデルを用いて、ディーゼルエンジンにおける燃焼過程を計算した。表 1 は対象としたエンジンの諸元と条件であり、噴射開始時期を 50°BTDC から 10°BTDC まで 10°CA 毎に変更して計算するとともに、実験結果と比較した。また、計算格子は図 5 に示すような 6 噴孔の 1 本分の 60° セクターメッシュとし、格子点数は -20°CA の時に 42,240 である。また、噴霧は DDM モデルで記述するとともに、分裂には Liu らの WAVE モデル⁽¹²⁾を

用いた。モデル定数 B_0 および B_1 は高温高压の定容容器中に形成された噴霧の可視化実験と比較して、それぞれ 0.61 および 20 とした。なお、液滴蒸発過程には Ducovicz のモデル⁽¹³⁾を適用するとともに、計算には汎用 CFD コード FIRE Ver. 2008 (AVL 社製) を用いた。

はじめに、噴射時期 $\theta_i = 20^\circ\text{BTDC}$ について計算をおこない、本研究で提案する不均一自着火モデルの効果を、本モデルを用いない場合あるいは実験結果と比較して検討する。図 6 はその結果であり、筒内圧力 p および熱発生率 $dq/d\theta$ のクランク角 θ 経過を示す。なお、この条件の実験では、噴射終了直後に自着火に伴う熱発生が生じる。また、ここでは化学反応を計算する際に燃料として n -ヘプタンを仮定しているのに対して、実験では JIS2 号軽油を用いており、計算における熱発生総量を実験に合わせるために、両者の間で当量比は若干異なる。計算結果によると不均一自着火モデルを用いない、すなわち、計算セル内を均一と扱って化学反応を計算すると (w/o)、実験結果に比べて大幅に燃焼期間が短くなるとともに、熱発生率のピークが高くなる。しかし、本モデルを用いることによって、実験に近い燃焼期間になり、合理的に燃焼過程が記述できることが分かる。また、熱炎発生時期が、w/o に比べてやや早くなる。

つぎに、噴射時期の影響を調べるために $\theta_i = 50^\circ\text{BTDC}$ から 10°BTDC まで変化させた際の筒内圧力および熱発生率の変化を図 7 に示す。なお、(a) に $\theta_i = 10^\circ\text{BTDC}$, 20°BTDC および 30°BTDC , (b) に $\theta_i =$

Fig. 8 Distributions of mixture fraction f_a , variance of mixture fraction v_f and temperature T ($\theta_j = 20^\circ\text{BTDC}$)

40° および 50°BTDC の結果を実験と併せて示す。これによると $\theta_j = 10^\circ\text{BTDC}$ および 20°BTDC の条件においては、本モデルを用いれば実験結果をおおよそ記述できることが分かる。一方、30°BTDC 噴射の条件では、熱発生が着火直後において実験結果に比べて高くなる。さらに、 $\theta_j = 40^\circ\text{BTDC}$ および 50°BTDC の条件においては着火時期が 40°BTDC の方が早いという傾向は実験と同様である。これは 50°BTDC では比較的低い温度で混合が進行するために希薄化し、かえって着火遅れ期間が長くなったためである。また、この条件の計算における燃焼期間は実験に比べて短くなる。これは、燃焼が主にスキッシュエリアにおいて生じるためであり、壁近傍における燃焼過程が十分に予測できていない可能性がある。すなわち、壁面における冷却によって、温度の不均一が生じるために燃焼が緩慢になる作用が考えられ、これについてはさらなる検討が必要である。

つぎに、着火および燃焼過程の詳細を明らかにするために $\theta_j = 20^\circ\text{BTDC}$ における混合分率 f_a およびその分散 v_f および温度 T の筒内分布のクランク角経過

を図 8 (a) に示す。なお、(b) には比較のために不均一燃焼モデルを用いなかった場合の f_a および T の筒内分布を併せて示す。また、これらの分布は図 5 の A で示した位置であり、噴霧の噴射方向軸を含む断面である。(a) の $\theta = -15^\circ\text{CA}$ では噴霧先端付近に比較的濃い混合気形成されると同時に、その領域では v_f の値も大きい。さらに、噴射終了後は噴霧内の f_a の値は概して時間とともに小さくなっていくが、 v_f の値は $\theta = -2^\circ\text{CA}$ においても比較的高い値を保ち、噴霧内の不均一は長時間にわたって残ることが分かる。 $\theta = -8^\circ\text{CA}$ あたりからボウル壁近傍の濃い混合気から温度上昇が始まり、点火開始後、 v_f の高い領域に向かって高温部が広がっていく。一方、本モデルを用いない場合 (b) では f_a の分布は (a) と同様となるが、 $\theta = -8^\circ\text{CA}$ においてすでに当量比の高い領域が高温領域に一致する。この場合、噴霧によって形成された可燃混合気において自着火がほぼ同時に生じたためであり、図 6 における熱発生率のピークが大きくなったことに対応している。(a) における v_f の分布によると、噴霧内では乱流によって燃料濃度の

(a) With non-homogeneous ignition model (b) Without non-homogeneous ignition model

Fig. 9 Histogram of mixture fraction f_a ($\theta_j = 20^\circ \text{BTDC}$)

不均一が生じており、このことから不均一自着火モデルを用いない場合に比べて自着火の時期がやや早くなるとともに、熱発生率のピークが抑制されていることが分かる。すなわち、着火遅れならびに初期の熱発生に燃料濃度不均一が重要な役割をもつ。

最後に、混合気形成と自着火過程との関係を明らかにするために、図9に混合分率 f_a のヒストグラムを不均一自着火モデルを用いた場合 (a) と用いない場合 (b) について示す。なお、図は f_a となる混合気質量 m_{mix} を総混合気質量 m_{mixT} で除した値で表す。また、混合気温度が 1200K 以下の混合気を白く、それ以上の高温部の混合気についてはグレーで示す。(a), (b) いずれの場合も $\theta = -9.0^\circ \text{CA}$ から -6.0°CA におけるヒストグラムの形状はほとんど同様である。(a) では $\theta = -9.0^\circ \text{CA}$ における当量比がおもに 1 から 2 の間で高温の既燃領域が生じ、 $\theta = -8.0^\circ \text{CA}$ まで徐々に高温領域が広がっていくのに対して、(b) では $\theta = -8.5^\circ \text{CA}$ において当量比 0.5 から 2.5 の広い範囲において、急激に既燃領域が広がり、 $\theta = -8.0^\circ \text{CA}$ では可

燃範囲の混合気のほとんどが既燃領域に含まれる。このことから、ディーゼル燃焼の初期燃焼あるいは着火遅れが比較的長い PCCI 的燃焼では、自着火過程において、当量比が 1 から 2 における混合気の不均一状態が重要であることが分かる。

4. まとめ

以上、不均一混合気が乱流混合するとともに自着火に至る過程を考慮した不均一自着火モデルを提案し、このモデルをレイノルズ平均型の乱流モデル (RANS) を用いた CFD に適用した。さらに、ディーゼルエンジン内の燃焼解析を行った結果、以下のことが明らかとなった。

- (1) 燃料濃度の不均一を考慮することによって、着火遅れはやや短くなり、熱発生率のピークは大幅に小さくなるとともに燃焼期間が延び、実験に類似した熱発生率経過になる。
- (2) ボウル内部において自着火が生じるような条件においては、本不均一燃焼モデルは実験をよく予測することができるのに対して、スキッシュエリアで生じる場合においては実験に比べて、熱発生率のピークが過大に予測される。これは壁面近傍の温度不均一が重要である可能性があり、そのモデリングが必要である。
- (3) 噴霧内に生じた乱流によって、強い不均一を伴った混合気が形成され、これによって自着火の際の熱発生が抑制される。
- (4) ディーゼル燃焼の初期燃焼あるいは着火遅れが比較的長い PCCI 的燃焼における自着火過程は、当量比 1 から 2 程度の混合気の不均一度に大きく影響を受ける。

参考文献

- (1) Shimazaki, N., Tsurushima, T. and Nishimura, T., Dual-Mode Combustion Concept with Premixed Diesel combustion by Direct Injection near Top Dead Center, SAE Paper, 2003-01-0742 (2003).
- (2) Kong, S. -C., Reitz, R. D., Modeling HCCI Engine Combustion Using Detailed Chemical Kinetics with Combustion of Turbulent Mixing Effects, ASME Paper 2000-ICE-306, (2000).
- (3) Kong, S. -C., Marriott, C. D., Reitz, R. D. and Christensen, M., Modeling and Experiments of HCCI Engine Combustion Using Detailed Chemical Kinetics with Multidimensional CFD, SAE Paper 2001-01-1026, (2001).
- (4) Imaoka, Y., Teraji, T., Tsuda, T., Noda, T., Kubo, M. and Kimura, S., Development of a Three-Dimensional Combustion Model Considering Time-scale Interaction and

- Its Application to Diesel Combustion, Proc. of COMODIA 2008, MS 1-1 (2008), pp.633-640.
- (5) Ishiyama, T., Shioji, M. and Ihara, T., Analysis of Ignition Processes in a Fuel Spray Using an Ignition Model Including Turbulent Mixing and Reduced Chemical Kinetics, *Int. J. of Engine Research*, Vol. 4, No. 3 (2003), pp.155-162.
- (6) Ishiyama, T., Ihara, T., Shioji, M. and Katsuura, A., Modeling and Experiments on Ignition of Fuel Sprays Considering the Interaction between Fuel-air Mixing and Chemical Reactions, *Trans. SAE (J. Engines)*, Vol 112-3, Paper No. 2003-01-1071 (2003), pp.1459-1469.
- (7) Kawanabe, H. and Ishiyama, T., Numerical Analysis of Autoignition Process in a Non-Homogeneous Mixture, SAE Paper 2007-01-1864, (2007).
- (8) Williams, F. A., *Combustion Theory Second Edition*, (1985), pp.69-76, Addison-Wesley Publishing Company.
- (9) Spalding, D. B., Concentration fluctuations in a round turbulent free jet, *Chem. Engrg. Sci.*, 26, (1971), 95-107.
- (10) Tsurushima, T., A new skeletal PRF kinetic model for HCCI combustion, Proc. of the Combustion Institute, Vol.32, PartII (2009), pp.2835-2841.
- (11) Patel, A., Kong, S. -C. and Reitz, R. D., Development and Validation of a Reduced Reaction Mechanism for HCCI Engine Simulations, SAE Paper, 2004-01-0558 (2004).
- (12) Liu, A. B., Mather, D. and Reitz, R. D., Modeling the Effects of Drop Drag and Breakup on Fuel Sprays, SAE Paper 930072, (1993).
- (13) AVL FIRE Manual, v8.4 Spray Model (2005), pp.2-3 - 2-7.