

早稲田大学大学院環境・エネルギー研究科

博士学位論文

ディーゼル機関における三次元非定常乱流場の
噴霧燃焼と微粒子生成過程に関する研究

A Study on Spray Combustion and Soot Formation
Processes in Three-dimensional Unsteady
Turbulent Flow Fields in Diesel Engines

2016年2月

周 蓓霓

Beini Zhou

早稲田大学大学院環境・エネルギー研究科

博士学位論文

ディーゼル機関における三次元非定常乱流場の
噴霧燃焼と微粒子生成過程に関する研究

A Study on Spray Combustion and Soot Formation
Processes in Three-dimensional Unsteady
Turbulent Flow Fields in Diesel Engines

2016年2月

早稲田大学大学院環境・エネルギー研究科

環境モビリティ研究

周 蓓霓

Beini Zhou

2015 年度 博士論文

ディーゼル機関における

三次元非定常乱流場の噴霧燃焼と微粒子生成過程に関する研究

A Study on Spray Combustion and Soot Formation Processes in Three-dimensional Unsteady Turbulent Flow Fields in Diesel Engines

目次

	ページ
第1章 序論	1
1.1 はじめに.....	1
1.2 従来研究.....	4
1.2.1 乱流の数値シミュレーション.....	4
1.2.2 レイノルズ平均モデル.....	6
1.2.3 直接数値シミュレーション.....	7
1.2.4 ラージエディシミュレーション.....	8
1.2.5 3D-CFD オープンソース KIVA シリーズ.....	10
1.2.6 KIVA コードによるエンジン内流れの LES 解析.....	11
1.2.7 本論文の構成.....	17
第2章 数値シミュレーション方法	19
2.1 まえがき.....	17
2.2 LES モデルの解析方法.....	22
2.3 SGS (Sub-Grid Stress tensor) モデル.....	25
2.3.1 K-equation モデル.....	25
2.3.2 Smagorinsky モデル.....	25
2.3.3 混合時間スケール SGS モデル.....	26
2.3.4 SGS モデル化学種拡散モデル.....	26
2.3.5 LES モデルの組み込み方法.....	28
2.3.6 離散化手法の検証.....	31
2.4 空間離散のスキームの改良.....	33

2.5	時間発展精度の向上	33
2.6	現象論的 Soot モデル	35
2.7	噴霧微粒化モデル化学反応の数値計算法.....	41
2.8	計算格子依存性低減モデル PaSR (Partially Stirred Reactor) モデル.....	46
2.9	化学反応の数値計算法.....	50
2.10	PaSR (Partially Stirred Reactor) モデル	51
2.11	壁関数の改良.....	53
2.12	まとめ	57
第3章 定容容器を用いたディーゼル噴霧の解析		58
3.1	まえがき.....	58
3.2	定容容器を用いてディーゼル噴霧解析.....	58
3.2.1	計算条件	58
3.2.2	計算格子の選定	60
3.2.3	計算結果および考察	60
3.3	ディーゼル噴霧燃焼解析.....	68
3.3.1	計算条件	68
3.3.2	計算結果および考察.....	70
3.4	まとめ	76
第4章 ディーゼル機関における噴霧燃焼の解析		77
4.1	まえがき.....	77
4.2	ディーゼル衝突噴霧の解析.....	78
4.2.1	計算条件	78
4.2.2	計算格子の選定	79
4.2.3	計算結果および考察	80
4.3	ディーゼルエンジンの燃焼解析.....	82
4.3.1	計算条件	82
4.3.2	計算格子の選定	83
4.3.3	計算結果および考察	84
4.4	まとめ	101
第5章 まとめと今後の展望		102

参考文献

謝 辞

第1章 序論

1.1 はじめに

自動車は現代社会の移動と輸送の手段として欠かせないものとなっている一方、温室効果ガスである CO₂ 排出や大気環境問題の原因となっている⁽¹⁾。2008 年度においては日本国内の CO₂ 排出源のおよそ二割を運輸部門が占めており、その内およそ 90%は自動車からの排出であることから、大気環境の対策とともに自動車の燃費基準と排出ガス規制の強化が進められている⁽²⁾。このような状況にあつて、先進国では 2008 年の北海道洞爺湖サミットにおいて、2050 年までに少なくとも温室効果ガス CO₂ の排出量を現状から半減する目標が挙げられた⁽³⁾。地球温暖化の抑制や燃料とエネルギーの多様化および大気汚染の克服に向けて、自動車の技術開発が加速している。

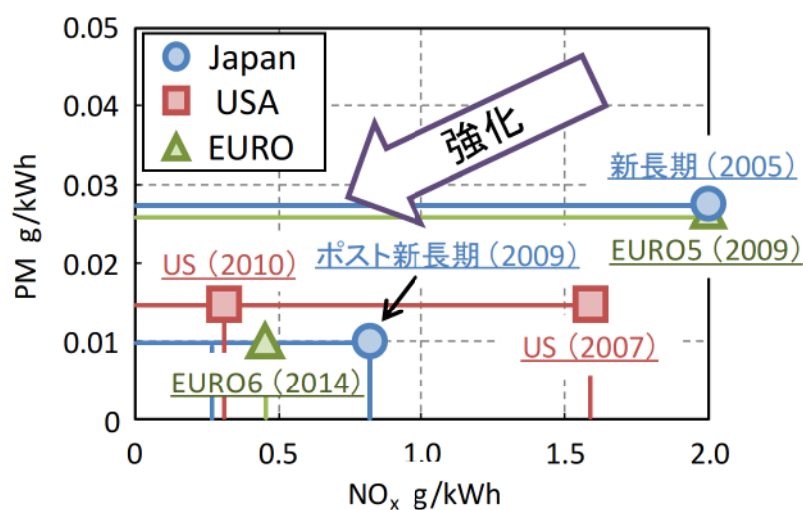


図 1.1 ディーゼル車の排出ガス規制値⁽⁴⁾

こうした中、ディーゼル機関は熱効率が高く、温室効果ガスの主要因である CO₂ の排出量が少なく温暖化の抑制手段として期待されている。一方で、NO_x や Soot に代表される有害排出ガス成分が多く排出されるという問題を有している⁽⁵⁾。特に、ディーゼル車は都市部において大気汚染の主要因とされており、世界的に排気規制の一層の強化が求められてい

る⁽⁶⁾。日本においても、2009年にポスト新長期規制が導入され、2005年に施行された新長期規制よりもNOx, Soot共に60%以上の低減という大幅な規制の強化が行われた⁽⁷⁾。加えて、2015年度から乗用車のみならず重量車に対しても燃費基準が適用され、排気の後処理の負担低減のためにも、一層の燃焼技術による改善が必要である⁽⁸⁾。さらにEUでは、2011年からディーゼル乗用車を始め、2014年からガソリン車も含めた乗用車を対象としてEuro6において粒子状物質の数密度(PN: Particle Number)の規制が導入され、開始されることから、排出された微粒子の評価に当たって、その予測精度の向上が自動車開発において急務であるといえる。

表 1.1 欧州における排出ガス規制の変遷⁽⁹⁾

Stage	Date	CO	HC	HC+NOx	NOx	PM	PN
		g/km					
Compression Ignition (Diesel)							
Euro 1†	1992.07	2.72 (3.16)	-	0.97 (1.13)	-	0.14 (0.18)	-
Euro 2, IDI	1996.01	1.0	-	0.7	-	0.08	-
Euro 2, DI	1996.01 ^a	1.0	-	0.9	-	0.10	-
Euro 3	2000.01	0.64	-	0.56	0.50	0.05	-
Euro 4	2005.01	0.50	-	0.30	0.25	0.025	-
Euro 5a	2009.09 ^b	0.50	-	0.23	0.18	0.005 ^f	-
Euro 5b	2011.09 ^c	0.50	-	0.23	0.18	0.005 ^f	6.0×10 ¹¹
Euro 6	2014.09	0.50	-	0.17	0.08	0.005 ^f	6.0×10 ¹¹
Positive Ignition (Gasoline)							
Euro 1†	1992.07	2.72 (3.16)	-	0.97 (1.13)	-	-	-
Euro 2	1996.01	2.2	-	0.5	-	-	-
Euro 3	2000.01	2.30	0.20	-	0.15	-	-
Euro 4	2005.01	1.0	0.10	-	0.08	-	-
Euro 5	2009.09 ^b	1.0	0.10 ^d	-	0.06	0.005 ^{e,f}	-
Euro 6	2014.09	1.0	0.10 ^d	-	0.06	0.005 ^{e,f}	6.0×10 ¹¹ e.g

最近では、直噴エンジンにおいて、燃焼室形状や燃料噴射システムの最適化などにより、エンジン筒内の流動分布と混合気形成を制御することを狙い、熱効率の向上と排出ガスの低減を両方考慮する技術開発が急速に進められている⁽¹⁰⁾。それに伴って、計測技術においても、PIV (Particle Image Velocimetry) や LIF (Laser Induced Fluorescence) などの先進的なレーザ可視化手法によって、エンジン筒内の流れ、温度分布、燃料の瞬間濃度分布、を直接観察することが可能になっている⁽¹¹⁾。このような状況にあつて、自動車の心臓部と言えるエンジンの開発において、数値解析ツール、あるいはCFD (Computational Fluid Dynamics) コードの利用が積極的に行われてきた。例えば、商業用 CFD コードである Converge, STAR-CD, FIRE などの代表的なエンジン熱流体解析ツールは、自動車用エン

ジンの設計の一助として一般的に使用されてきた。現状では、シリンダ、ピストン、バルブと吸排気ポートなど様々な設計因子を含む複雑な形状を再現した上で、空気流動に関わる要素解析が可能となっている⁽¹²⁾。また、噴霧、燃焼、排出ガスなどの解析サブモデルも導入が試みられつつあり⁽¹³⁾、革新的な技術開発の需要と高精度化された計測データの両面からサポートされていると考えられる。

これまで従来のCFD応用例としてRANS(Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations)モデルに基づく解析手法が主流になっており、アンサンブル平均された解が利用されている。これは計測データの信頼性の面ではサイクル平均値を予測対象として評価するもので、一般的なエンジン設計において妥当であるが、サイクル変動に起因する現象のメカニズムや、空間的な物理量の瞬時分布など、非定常流れの解析が行えないことが欠点とされている。図1.2に示すように、エンジンのサイクル変動によって、シリンダ内の流れが乱れて変動を生じるとともに、瞬時の速度分布がサイクルごとに変化する。そこで、工学分野における起こりうる様々な物理現象に対する本質を解明し、迅速な予測と対策がきわめて重要であると考えられる。このように、新しい評価基準の下で、先進的な解析手法を用いた技術開発が求められている。

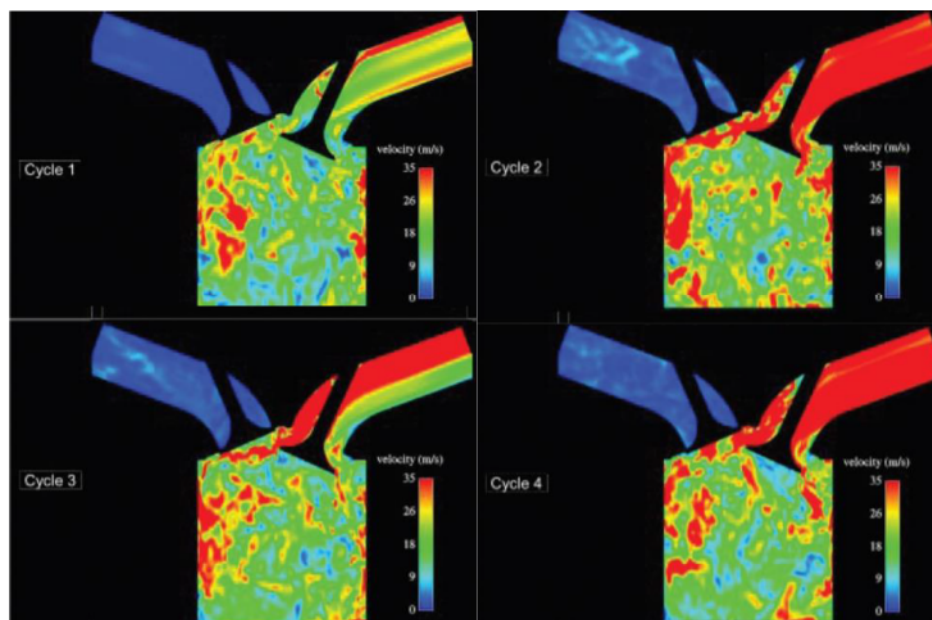


図1.2 LESを用いてサイクル変動による筒内流速分布の解析例⁽¹⁴⁾

1.2 従来研究

近年では、コンピュータの発達に伴い、CFDは非常に有用なツールとして、高効率と低排出特性を有するディーゼルエンジンの燃焼システムを開発するための手段となっている。ディーゼル噴霧燃焼では、シリンダ内の非定常流れを伴う高温高圧場における燃料の微粒化、蒸発、混合気形成をはじめとする物理的過程に加え、それと同時に燃焼反応が進行する化学的過程とが混在するため、それらの精緻なモデル化が求められる⁽¹⁵⁾。従って、現在のCFDの利用は、詳細な現象解明を行う上で不可欠な手段となっている。このため、エンジン筒内の現象を高精度に予測することがきわめて重要な課題とされている⁽¹⁶⁾。

1.2.1 乱流の数値シミュレーション

流動の数値解析は層流と乱流に区別される。図1.3に示すように、エンジン筒内では、それぞれの強度を持つ渦が存在し、その大小異なる渦が発生と消滅過程を繰り返して不規則な運動が行われ、非常に複雑な乱流構造になっている。現在、乱流解析の手法として1. RANS, 2. LES (Large Eddy Simulation), 3. DNS (Direct Numerical Simulation) が知られている。

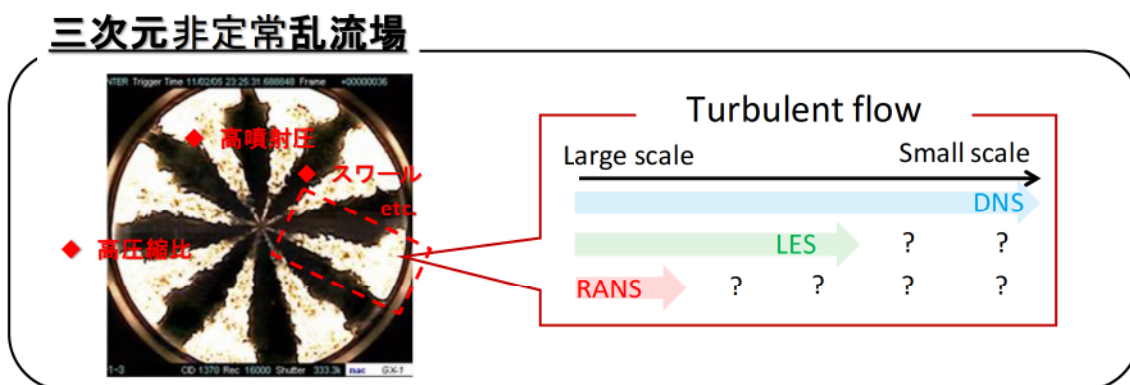


図1.3 乱流解析における各手法のイメージ図⁽¹⁷⁾

RANSモデルは古くから研究され、1970年前後に Imperial College の Bradshaw, Spalding, Launder らによりレイノルズ平均モデルとして紹介され、今日の汎用乱流モデルの骨格になっている⁽¹⁸⁾⁽¹⁹⁾⁽²⁰⁾。このモデルは、計算量が少ない利点があるため、工学分野でも最も一般的な乱流計算の方法として汎用ソフトに数多く採用され、現在でもモデルの改良が続けられている。しかしながら、このRANSモデルでは、平均化した支配方程式を

解くため、モデルへの依存度が高く、適用できる乱流が限られ、精度の高い予測が困難となっている。一方、DNS は基礎支配方程式にモデル的な操作を加えない前提として高精度離散化手法により数値計算を行うものである。1980 年代半端から Stanford 大学の Kim, Moin らや NASA Ames 研究所の Moser, Spalart らが中心となって発展を遂げてきた^{(21) (22)}。これは、流れ場において十分な計算格子で分割し、適切な初期条件と境界条件のもとに、全ての有意な渦に対して格子解像度まで解くことによって乱流の本質的な三次元現象を解析するものである。つまり、DNS における適切な格子設定と妥当な数値精度が確保されれば、有力なツールとして詳細な乱流現象を解明する手法として期待されている⁽²⁴⁾。しかしながら、全ての渦を考慮するには、必要な計算格子数はレイノルズ数に依存し、少なくとも $Re^{9/4}$ のオーダーとなる⁽²⁵⁾。また、工学上ではレイノルズ数が大きい乱流場や、複雑な境界形状を有する場合などが多いため、DNS 計算を行うには計算機の容量が膨大なものとなり、計算時間も計算格子数に比例して長くなる。従って、現時点では DNS が乱流現象の基礎データを得るための研究ツールに過ぎず、工学の対象になる自然科学分野に応用するには非現実的である。

これら二つ手法の中間に位置する計算方法として、LES が注目されている⁽²⁶⁾。当初は気象学の分野で Smagorinsky らによって開発されたが⁽²⁷⁾、工学の分野で Deardoff, Schumann, Moin, Kim らが中心になり 70 年代以後に発展してきた^{(28) (29) (30)}。LES は物理的な意味でも、計算量においても RANS と DNS の中間に位置し、工学において実用的な乱流解析ツールとなりつつある。その特徴として、計算格子で捉えられない乱流の小スケール成分のみをモデル化し、比較的粗い計算格子においてもより詳細な情報を取得することを可能とするものである。このため、この手法を適用することで、エンジン筒内の三次元非定常乱流場における噴霧燃焼や有害排出物などの予測精度の向上が期待される。

1.2.2 レイノルズ平均モデル

前節に述べたように、比較的短い時間内において、不十分な格子解像度を用いて有意性のある結果をもたらすのが RANS モデルの特徴である。そのため、RANS 手法が工学分野において普及してきており、多くの適用事例で成功していると言える。ここで RANS 手法を簡単に説明する。RANS モデルでは、速度とスカラー量において平均値及び変動値として二つの部分に分解され、時間平均を用いてナビエ・ストークス方程式を解く。つまり、数値解として時間平均化された解を得るものである。また、ナビエ・ストークス方程式における非線形性を持つため、離散化をするたびにいくつか未知な項において適切な仮定の下で平均化操作を行ってモデル化する必要がある。具体的な例として k-epsilon モデル⁽³¹⁾、k-omega モデル⁽³²⁾などが挙げられる。このうち、k-epsilon モデルが工学分野において最も広く使われている。

しかしながら、RANS 手法はアンサンブル平均された解を得ているものの、乱流モデルに非常に高い依存性があることが知られている⁽³³⁾。さらに、減衰乱流場において流動の瞬間的な成長や複雑な形状による乱流場の三次元分布などを解析することは極めて困難である。従って、複雑な形状を持つエンジン燃焼室において、RANS 手法のような時間平均を使用しモデル化することで、非定常の高い混合過程をシミュレートすることは適切ではないと言える。

1.2.3 直接数値シミュレーション

DNS 手法では基礎支配方程式にモデル的な操作を加えないことを前提として高精度離散化手法により数値計算を行い、ナビエ・ストークス方程式の解を得るものである⁽³⁴⁾。そのため、乱流流れの高精度モデルとして非常に正確な予測能力を持っている。状況によっては実験における測定値の誤差を予測することもできており、自然科学分野において最も相応しい方法と言える。エンジンの燃焼室内では、常に高レイノルズ数を持つ乱流場の中で化学反応に伴う複雑な物理現象が存在する。これらの現象を解析するために様々な乱流長さや時間スケールを解かなければならないため、通常ではスーパーコンピュータの助けを借りて直接支配方程式を計算する。その結果、大きな計算負荷を要している。近年、パソコンの性能や並列計算による最適化などの技術が進化したとはいえ、DNS 手法に関しては工学分野の適用が非常に限られており、実用化に向けてはまだ時間が必要である⁽³⁵⁾。その原因は DNS 手法が高い格子分解能を必要とし、計算格子数がレイノルズ数に依存して $Re^{9/4}$ のオーダーに比例するためであり、膨大な計算量が求められている。それゆえに、複雑な形状を持つエンジン内の流れ場において DNS を使用することがほぼ不可能なのが現状である。

1.2.4 ラージエディシミュレーション (LES)

そこで、本研究では、1.2.1 節に説明したような乱流解析手法の中で高精度の予測機能を持つ LES 手法を汎用数値計算コードに取り組みことにした。LES は、図 1.4 に示すように、非定常流れ場における渦の高周波成分のみをモデル化し、流れ場の形態変化に強く影響を及ぼす低周波成分をモデルに頼らずに直接解く手法である。そのため、図 1.5 に示すように、変動を含む全ての渦成分をモデル化して、統計的にアンサンブル平均で解く RANS と比較して、瞬時の乱流変動を再現し、解析可能なことが期待される。

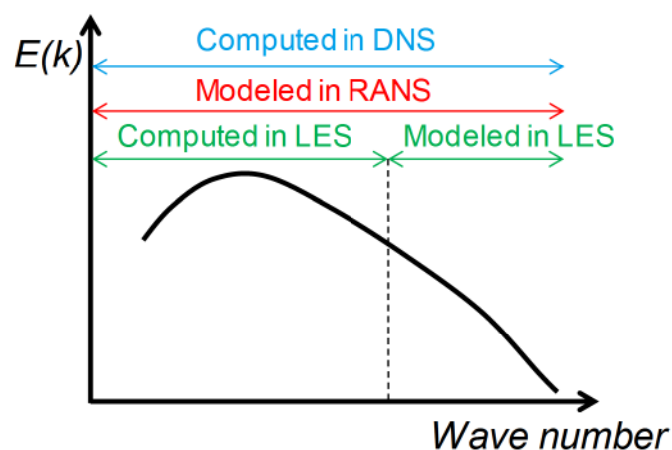


図 1.4 乱流のエネルギースペクトルにおける各解析手法

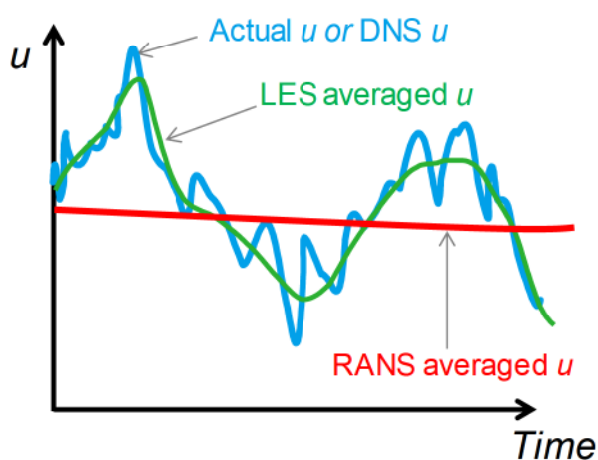


図 1.5 流れ場における解析できる瞬間速度の例

乱流場では大小様々なスケールの渦形態が形成され、非線形性により相互作用を及ぼし合って生成と崩壊を繰り返す過程である。LES ではフィルター操作で周波数が大きな渦変動をそのまま直接解析し、計算格子で解けない小さな周波数を持つ渦変動のみ SGS (Subgrid Scale) 応力項としてモデル化を行う。格子解像度に応じて DNS に漸近することから、解像可能な渦のスケールによって以下のような古典的な LES と工学的な LES を分類することができる。

古典的な LES は基礎方程式である NS 式 (Naver-Stokes equation) にフィルター操作を施したものであるが、フィルター幅が十分に細かく設定され、流れ場においておおよそ 80% の大スケール渦をモデルに頼らずに直接解くことになる⁽³⁶⁾。すなわち、乱流場の形態に強い影響を受ける大きな渦について格子幅を細かく切り、できる限り解像可能なスケールまで直接計算し、普遍性が期待できる小さい渦だけをモデル化することが望ましい。これによって計算コストの面では DNS の次ぎに計算負荷が大きい、比較的高いレイノルズ数の流れ場において、より現実的、かつ複雑な形状に対して適用できる利点がある。しかしながら、工学設計における課題として、比較的粗い格子を用いてより普遍的かつ汎用的な予測手法が求められている。特に自動車エンジン設計において、筒内流れに関する乱流拡散の効果と乱流内部構造に関わる効果を分離した上で、計算結果の普遍性と一貫性を得ることが期待されている。

一方、工学的な LES 解析では実用化に向けて比較的低い解像度で物理現象のモデリングを単純化するものである。LES モデルは、RANS モデルに比べて同じ計算格子、同じ離散手法を用いて燃料混合や非定常流れなどに関する詳しい情報を解析することを目的とする。工学分野の視点から、進化した乱流モデルとして、乱流をスケール分離し、複雑な実形状を再現した解析法として有望視されている。また、エンジン内の流れ解析においても、噴霧や燃焼に伴う複雑な連成現象をモデル化することによって、複雑な物理現象を解明できると考えられる。このように、LES モデルにおいて、すべての現象を簡易的にまとめて取り扱うことでは、予測精度と計算コスト両面の観点から合理的と言える。

1.2.5 3D-CFD オープンソース KIVA シリーズ

エンジン筒内の燃焼過程には、高温高圧場においてシリンダ内の乱れが成長すると共に、燃料の微粒化、蒸発、混合気形成などと相互作用を及ぼし合っている物理的過程に加え、同時に燃焼反応が進行する化学的過程が混在し、極めて複雑な現象を呈する。そのため、それらをより精緻にモデル化した上で、エンジン筒内の現象を高精度に予測することが極めて重要とされている。近年では、計算機の発達に伴い、3D-CFD は有効なツールとして、高効率と低排出特性を有するディーゼルエンジンの燃焼システムを開発するために活用されている。世界中において、商業用 CFD コードである CSI 社の Converge, CD-adapco 社の STAR-CD, AVL 社の FIRE などの代表的なエンジン熱流体解析ソフトは、各自動車メーカーにおけるエンジンの設計現場で一般的に使用されてきた。しかしながら、現象メカニズムを理解するために、ソースコードの解読など輸送方程式に関する離散化手法の解析が必要となっており、それらについて商用製品では柔軟性が欠けている。そこで、コードの中身が確認できるオープンソースである KIVA コードは、大学や研究機関において広く使用されている。

KIVA コードは、1985 年に第一版 KIVA プログラムの導入以来、これまで最も広く使用されている多次元 CFD 燃焼計算のプログラムとなっている。30 年間に於いて KIVA-II⁽³⁷⁾, KIVA3⁽³⁸⁾, KIVA3V⁽³⁹⁾, KIVA3V Release2⁽⁴⁰⁾を経て改良された数値ソリューションアルゴリズムとして KIVA4⁽⁴¹⁾へと成長した。オープンソースでありながら、任意形状のピストン形状でエンジンシリンダ内に二相流、乱流と壁面伝熱の影響を含めて乱流燃焼の計算を可能としている。ここで、この計算手法について簡単に説明する。KIVA コードは RANS をもとにした有限体積法による非定常方程式を離散化し、理想気体を仮定したうえ燃料液滴蒸発を考慮した乱流運動方程式と化学反応方程式を解くものである。液滴に関与する方程式についてラグランジュ法、気相に関わる方程式についてオイラー法、いわゆる ALE (Arbitrary Lagrangian -Eulerian method) 法⁽⁴²⁾を使用している。空間的離散方法について計算領域において六面体セルを用いて有限体積法に基づいて離散化する。六面体のセル頂点における時間関数を使用することによって頂点の位置がラグランジュ的、オイラー的、または混合的に任意に記述できることが ALE 法の特徴である。そのため、エンジンの複雑なピストン形状を合わせて、シリンダ内における流動、燃焼などの計算を可能としている。

1.2.6 KIVAコードによるエンジン内流れのLES解析

本研究では、米国 Los Alamos 国立研究所において開発されたエンジン数値熱流体コード KIVA を改良して用いることで、噴霧燃焼および有害排出物の予測精度向上を図ることとするが、まず、KIVA コードに LES 解析を適応した従来研究を紹介する。

Celik らは初めて LES 解析を使ってエンジン内の乱流分析を行ったグループの一つであり、彼らは SGS 渦粘性モデルを使用し、Smagorinsky モデルを KIVA コードに組み込み⁽⁴³⁾⁽⁴⁴⁾、図 1.6 に示すように、吸排気ポート付きの計算格子においてエンジン筒内の非定常流れ解析を行った。その結果、吸気ポートから渦が発生し、ピストン運動により大きいスケールの乱流構造が捉えられることを示した。しかしながら、彼らは噴霧や燃焼などのサブモデルを導入せず、実際のエンジン条件において解析精度は不明になっている。

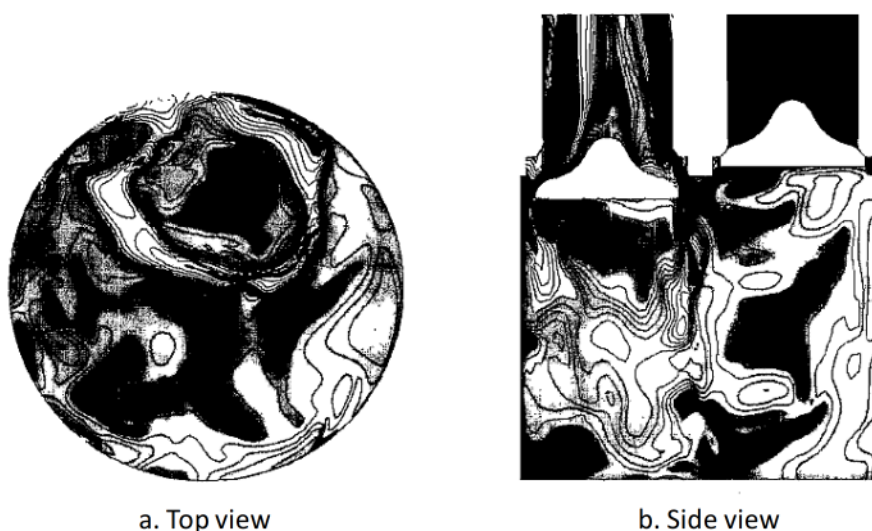


図 1.6 LES を用いたディーゼルエンジン筒内の非定常流れ解析⁽⁴³⁾

Menon らは SGS エネルギー局所平衡の仮定を外し、非平衡性の強い乱れを考慮して一方程式型モデルである K-equation LES モデルを提案し⁽⁴⁵⁾⁽⁴⁶⁾、小スケール運動エネルギーの輸送方程式を解くことによってモデルの普遍性を提唱した。後に彼のグループがこのような SGS モデルを KIVA コードに導入し、直噴ガソリンエンジンの筒内流動を計算し、結果として図 1.7 に LES 解析が高精度に予測可能なことを示した。エンジン流れ場において普遍性がある噴霧と燃焼のサブモデルを用いて物理現象を表すことができたが、NO_x や Soot などの有害排出ガスに関する生成予測モデルの導入が課題になっている。

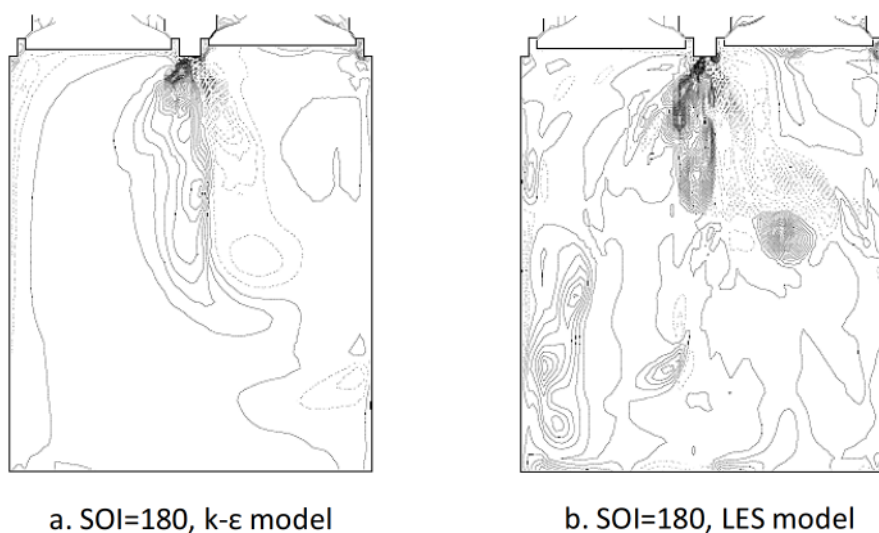


図 1.7 直噴ガソリンエンジンにおける RANS モデルと LES モデルによる筒内流動の解析
(45)

Hori らはこの KIVA-LES コードを用いて非蒸発噴霧、蒸発噴霧及び噴霧燃焼の解析を行った^{(47) (48) (49)}。噴霧モデルの最適化および計算格子の高密度化により、LES における計算精度が RANS モデルより向上する特性を有することを図 1.8 に示した。このため、ディーゼル噴霧燃焼の不均一性、非定常性について高精度の予測することが期待される。噴霧の微粒化の影響により、直噴エンジンの筒内流れとしてサイクルごとの変動が起因する物理現象の解明につながる。従来の RANS 手法に基づく方法に比べて、流動パターンに依存しない予測モデルとして比較的精度よく予測することが可能であるが、吸排気系や排出ガス成分との連成解析が問題になっており、エンジン流れに適用するまでには至っていない。

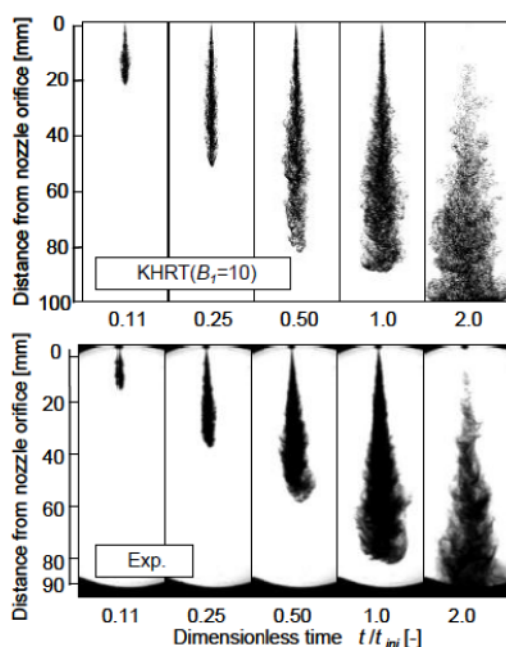


図 1.8 ディーゼル非蒸発噴霧の分裂モデルによる LES 解析⁽⁴⁷⁾

近年, University of Wisconsin–Madison の Rutland らによりエンジン内の流動解析において LES の応用が積極的に行われてきた^{(50) (51) (52) (53)}. 彼のグループは SGS モデルにおける渦粘性を使わず, テンソル係数を使用する DS (Dynamic Structure) モデルを開発した^{(54) (55)}. 具体的には, 輸送方程式から得られる乱流エネルギーと動的に決められるテンソル係数を乗算することでモデル化を行った. 特にディーゼルエンジンにおいて, このモデルと噴霧や燃焼モデルなどの組み合わせを KIVA コードに組み込み, 実験と RANS モデルを比較し, 図 1.9 に示すように, 良好な結果を得ている. また, 詳細化学反応を考慮することによって各化学種の瞬時濃度分布がより精度よく予測されている. しかしながら, Soot のような有害排出成分の生成予測に対しては, 簡易な予測モデルである Hiroyasu モデル (Two-step モデル)⁽⁵⁶⁾を使用しており, より高精度なエンジン性能設計に展開することが課題となっている.

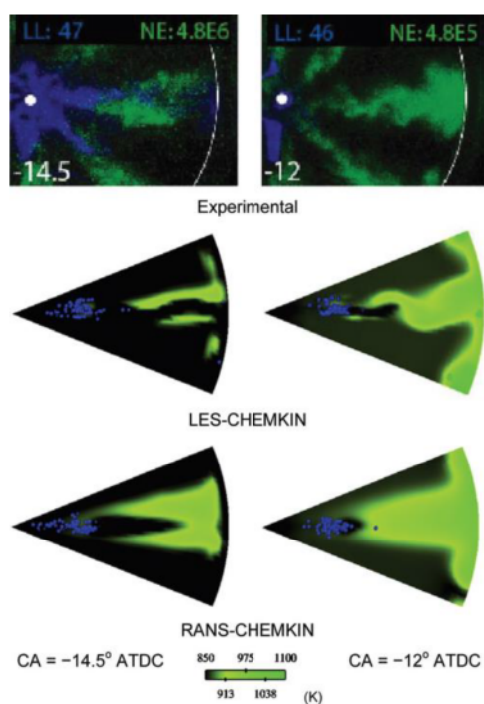


図 1.9 詳細な化学素反応を用いた RANS モデルと LES モデルによる燃焼解析の比較⁽⁵³⁾

最近では LII や LS などの計測手法の開発によって、噴霧火炎内部の微粒子の生成過程を直接観察することが可能となっている⁽⁵⁷⁾⁽⁵⁸⁾⁽⁵⁹⁾。図 1.10 に示すように、このような場において非定常流れ解析が可能なツールとして LES 手法が期待され、アンサンブル平均ではない非定常流れの解析から解を得られ、高精度な予測結果が取得でき、現象メカニズムの解明につながると言える。

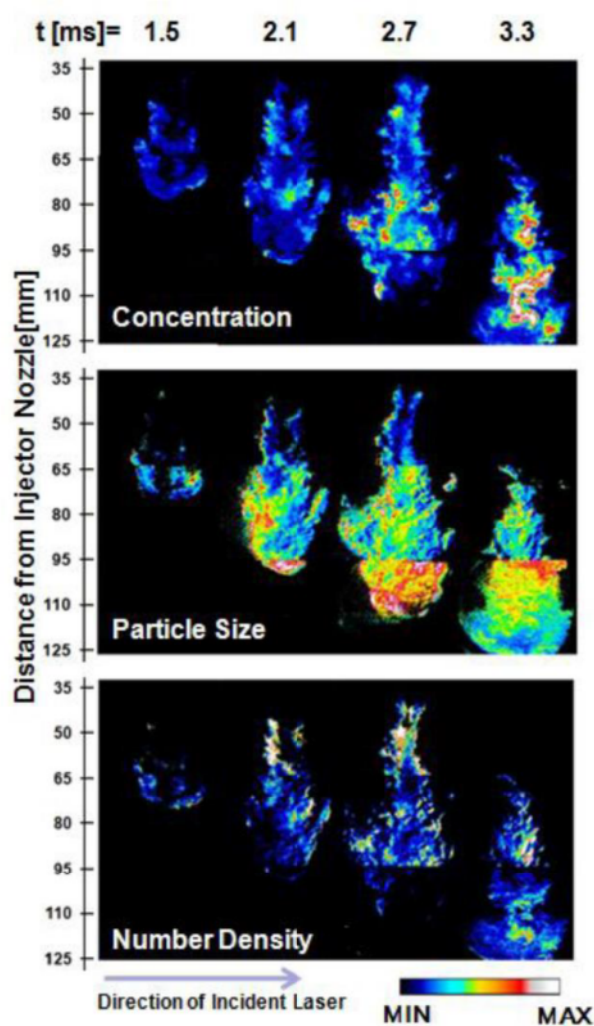


図 1.10 噴霧火炎内部の微粒子の生成過程⁽⁵⁹⁾

そこで、本研究では、エンジン筒内の乱流現象に着目し、乱流解析手法として期待される LES モデルを計算コードに導入する。そして、詳細な素反応過程を考慮することによって排出ガスの予測精度の向上を狙いとす。具体的には、微粒子モデルに関して気相反応

において微粒子の前駆物質 Acenaphthylene (A_2R_5) まで詳細な素反応を連立して解を求める。さらに、現象論に基づいて前駆体へ成長、核生成、低級不飽和炭化水素 (C_2H_2) による表面成長反応 (Hydrogen Abstraction C_2H_2 Addition), 活性種 (OH, O_2) による表面酸化反応, 衝突・凝集の一連の過程を連成したモデルを導入する。このような高度な数値計算により実際のエンジン設計や現象メカニズムの解明に資することを目的とした。

以上のように、工学分野において主要な課題に対して LES は現象解析ツールとして期待され、自動車用エンジンの設計においても LES の適用が積極的に行われてきたことは当然と言える。また、今まで主流である RANS モデルにおいても、移動変形、複雑な燃焼室形状による境界条件、燃焼に伴う複雑な現象メカニズムなどを解析するために相当な計算時間が必要である。LES では非定常計算を行うため、これらの複雑な現象を単純にモデル化することができる利点がある。さらに、エンジン内の流れ計算に適用する際に予測値の精度の向上が期待される。

1.2.6 本論文の構成

本研究では、エンジン筒内の乱流現象に着目し、乱流解析手法として期待される LES モデルを計算コードに導入した。それに伴って、運動量方程式の移流項に関して空間精度と時間制度の改善を行った。また、壁面熱流束の算出には LES モデルに適応する壁関数の改良を試みた。さらに、詳細な素反応過程を考慮することによって排出ガスの予測精度向上を狙いとした。

本論文は以下のように、5章から構成されている。

第1章は序論として、研究の背景及び目的について述べ、エンジン内流れの数値計算に関する従来の研究と現状について説明する。

第2章においては、数値解析を実施するにあたって多次元数値流体シミュレーションコードの構成について説明する。具体的には、まず、本研究で導入した LES モデルの概要について述べる。KIVA をベースコードとして、各支配方程式にはボックスフィルタを適用することによって、乱流における渦のスケールを分解する。その改善されたサブグリッドスケールの乱れに関する SGS 応力項のモデル化や、壁近傍のモデル化などについて詳細に説明する。また、ディーゼルエンジンにおける拡散燃焼過程に対して大きな影響を与える噴霧微粒化のモデルの概要と格子依存性を低減する手法についても説明する。さらに、詳細な素反応過程を考慮するため、CHEMKIN-II パッケージ⁽⁶⁰⁾内の各種サブルーチンを KIVA コードに連成した。本研究では高速な陽解法 ODE ソルバーである ERENA^{(61) (62)}を KIVA コードに適用し、詳細化学反応計算時間の短縮を図った。ここで用いた詳細な化学反応式を連立して解く時間積分法について述べる。最後に、微粒子の生成過程について、成長、核生成、低級不飽和炭化水素による表面成長反応、活性種による表面酸化反応、衝突・凝集の一連の過程を記述した現象論モデル^{(63) (64) (65)}の数値解析方法を示す。

第3章では、定容燃焼器における噴霧燃焼を対象に、第2章で述べた各モデルを連成した計算コードの精度検証を行う。円筒形の定容容器を想定し、底面の直径が 30mm、高さが 80mm の三次元領域とする。はじめに、格子依存度を調べるために、サイズの異なる 4 種類の計算格子を使用し、非燃焼で蒸発噴霧の解析を行う。次に、同じ条件で従来の乱流解析手法である RANS モデルと LES モデルの計算結果と実測結果をそれぞれ比較する。さらに、結果の比較により問題点を明らかにし、モデルの改良の提案を行い、改善したモデルを非定常燃焼に適応し、ディーゼル噴霧燃焼解析を検討する。最後に、モデルの最適化により、微粒子の空間的分布を解析し、RANS, LES, 実験で比較することによってモ

デルの妥当性を確認する。

第4章では、最初に第3章で高い精度が確認された計算コードを用いて、燃焼室形状を有する定容容器において、ディーゼル衝突噴霧の数値解析を行う。第3章と同様に、RANSモデルとLESモデルを用いて計算を行い、それぞれの結果を用いて計測結果との比較検討を行う。さらに、本章ではLESに適応する壁関数の構築する。壁関数の変更により、壁面と筒内ガスの熱伝達をそれぞれ計算し、異なる結果が得られることを述べる。これらの改良点を踏まえた上で、LES解析が一つの予測手段として有用であることを示す。最後に、上述のような定容容器と同様な断面を持つ計算格子を使用してエンジン内での噴霧燃焼計算を行う。計算で用いる燃料は $n\text{-C}_7\text{H}_{16}$ と C_7H_8 の混合燃料⁽⁶⁰⁾とし、EGR（排気再循環）率をパラメータとして変化した際に、排出ガス特性への影響を調査する。その妥当性の評価には、まず計算の結果から得られる指圧線図と熱発生率を実測値と比較し、十分に一致していることが分かるような基準を定義する。その後、排出ガス量の計算値を実測値と比較して定量的な予測精度、あるいは定性的な予測精度を有するかを確認する。これらのことを十分に確認した上で、解析結果について詳細な検討を行う。さらに、Soot濃度、粒子密度、粒子径などに関する時間的な生成履歴と空間的な分布について考察する。

第5章では、ここまで述べた各章の成果を総括し、今後求められる新たなディーゼル燃焼技術の進展の可能性について展望する。その実現に当たっては、本研究で確立した数値モデルをさらに改良し、発展させることで、一層の熱効率の向上や排出ガスの低減につながる高精度の予測手法と高度な計測技術に関わる研究開発を追究する必要があることを指摘する。

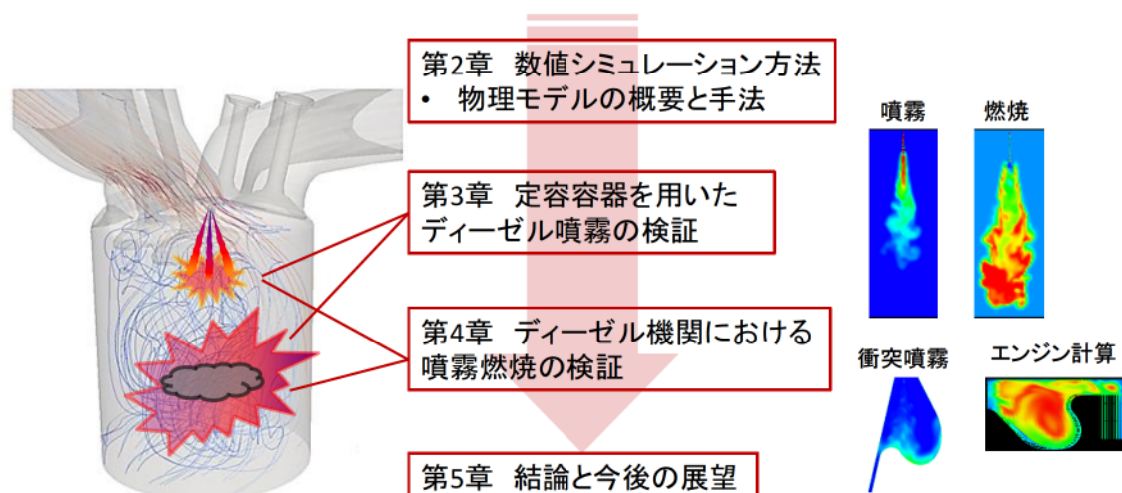


図 1.11 論文構成の概要

第2章 数値シミュレーション方法

2.1 まえがき

本研究では、エンジン内流れ場において噴霧や燃焼過程に伴う複雑な物理現象の解析を目的に数値計算を行う。まず、非燃焼の解析に向けては、定容容器を模擬した計算領域を設定した上で蒸発噴霧を対象に、非定常流れとして格子依存性、噴霧蒸発挙動を調査する。次に燃焼の解析では、詳細な化学反応動力学計算と流れ場計算を連成することによって瞬時の温度分布や局所の濃度分布に関する調査を実施する。

本計算では、ベースコードとして Los Alamos 国立研究所で開発された汎用数値流体計算コード KIVA4 を使用し、V. Golovitchev らが提案するディーゼルサロゲートモデルと詳細化学反応機構及び ODE ソルバーをリンクさせることにより、筒内の流動場、燃焼現象や生成物の酸化反応機構を考慮した計算を実施する。

KIVA4 は、RANS をもとにした有限体積法による離散化により、各種支配方程式を時間平均的に解くものである。従って、乱流による時間変動成分の考慮はできないものの、アンサンブル平均的な現象の解析に対しては広く用いられている。使用する物理モデル及び計算コードのフローチャートと概要を図 2.1、図 2.2 と表 2.1 に示す。また、本研究で組み込んだモデルを表 2.2 に示す。

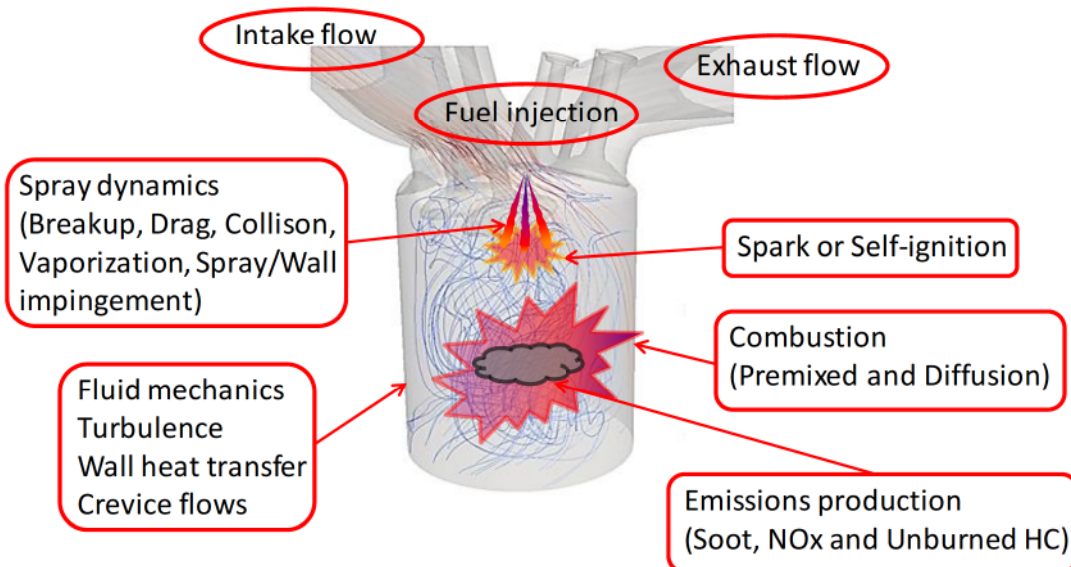


図 2.1 物理モデルの概要図

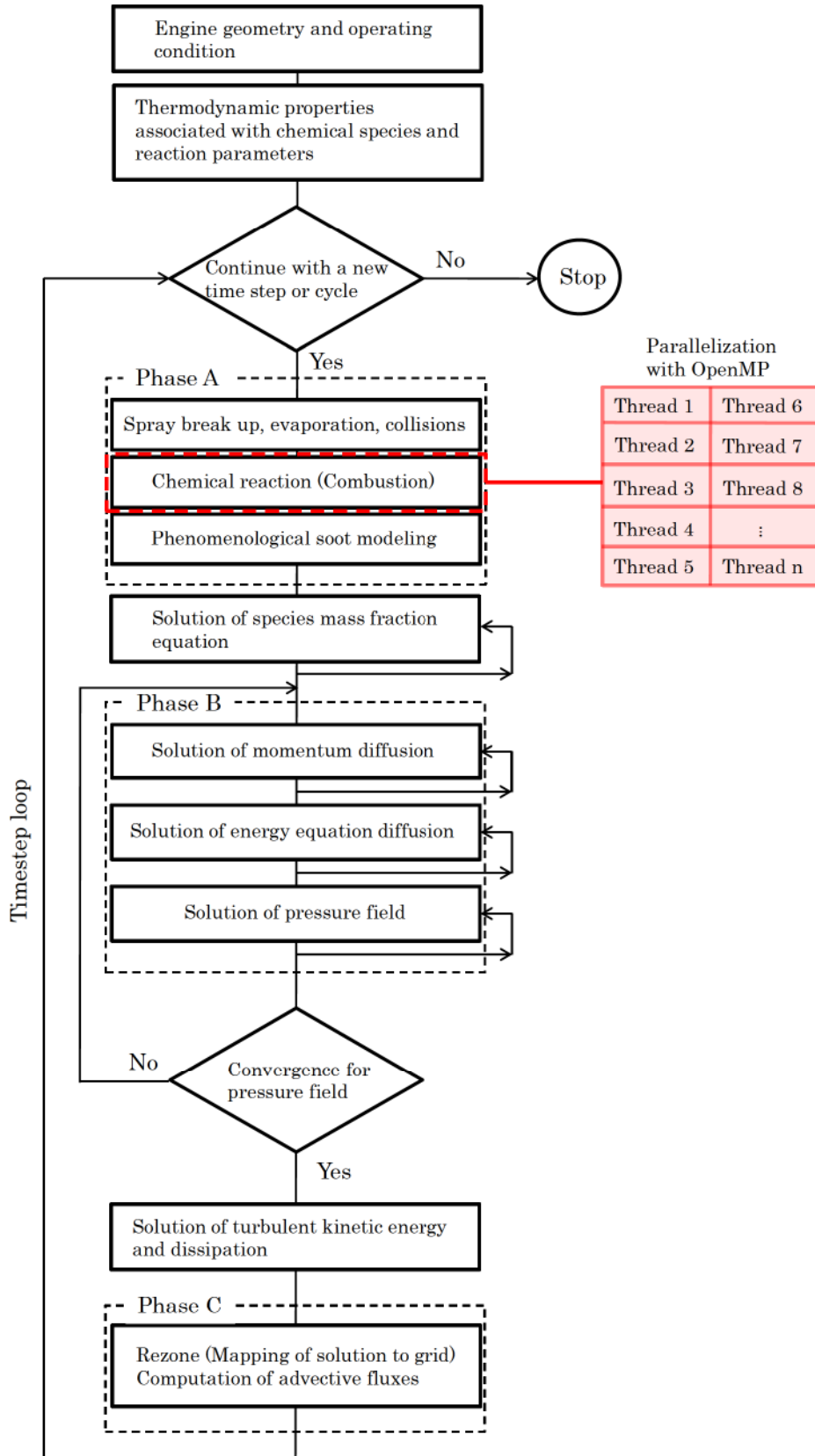


図 2.2 KIVA4 コードと各サブモデルの連成の概要

表 2.1 計算コードの概要

Phase	Solved equations	Specific features	
Phase A	<ul style="list-style-type: none"> • Droplet collision and oscillation / breakup terms • Mass and energy source terms due to chemistry and spray effects 	Lagrangian	explicit
Phase B	<ul style="list-style-type: none"> • Acoustic mode terms (pressure gradient in the momentum equation and velocity dilatation terms in mass and energy equations) • Spray momentum source terms • Terms due to diffusion of mass momentum, and energy 		Coupled Implicit solver, iterations SIMPLE*
Phase C	<ul style="list-style-type: none"> • Convective transport 	Eulerian	Sub-cycled explicit

*SIMPLE : Semi-Implicit Method for Pressure-linked Equations

表 2.2 本研究で主に使用したサブモデルの概要

Turbulence model	RNG k- ϵ , LES(Smagorinsky), LES(K-equation)
Spray model	Breakup: KH-RT Collision model: Nordin model Drag-law: Dynamic model
Time step	Variable based on spray, evaporation, combustion processes
Turbulence chemistry interactions model	Direct integration of detailed chemistry (Chemkin) ODE solver: ERENA PaSR concept
Soot model	Phenomenological soot formation model
Wall heat transfer	Law of the wall: Standard wall mode, Non-isothermal wall model, Two layer rough wall model

2.2 LES モデルの解析手法

乱流は大小様々なスケールの渦形態が形成され、非線形性により相互作用を及ぼし合って生成と崩壊を繰り返す過程であるため、詳細な生成過程の解析が期待される。本研究では、アメリカの Los Alamos 国立研究所にて開発された RANS に基づく CFD コードである KIVA4 をベースコードとして、改善されたサブグリッドスケールの乱れ、液滴噴霧、詳細化学反応、Soot モデル、壁関数モデルを導入した。ここで、KIVA4 コードで実装された支配方程式とモデリング方法の概要を示す。

2.2.1 フィルターの設定

LES モデルは、非定常流れ場における流動領域は二つに分解され、高周波数の小さい渦をモデル化し、流れ場の形態変化に強く影響を及ぼす低周波成分をモデルに頼らずに直接解く手法である。そのために、フィルター操作が必要である。いくつかのフィルターがあるが、標準に用いられる SGS モデルにおいて、フィルター関数の種類に関する問題がなく、フィルター幅だけが最も重要とされている⁽³³⁾。そのため、フィルター関数はモデルに関係

しないが、何がモデル化されるか、または何が計算されるかを定義することが重要である。本研究でフィルター関数として物理空間の箱型領域での平均であるボックスフィルターを使用した。

式 (2.1) に示すように、KIVA4 コードにおいて有限体積法を用いるため、フィルターされた成分が体積平均になっている。

$$\overline{f(x_i, t)} = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} f(x'_i, t) dx'_i \quad (2.1)$$

ここで、 ΔV は計算格子の体積である。フィルター関数 G を式 (2.2) に示す。

$$G = \begin{cases} 1/\Delta V, & x_i \in \Delta V \\ 0, & otherwise \end{cases} \quad (2.2)$$

通常、フィルター操作を行うことによって式 (2.3) のような時間微分を表すことができるが、本計算コードでは、式 (2.2) のようなボックスフィルターを使用して変動成分をカットするため、仮に計算格子が大幅に引き延ばされず、式 (2.4) のように空間微分を近似することができる。

$$\frac{\partial \overline{\varphi}}{\partial t} = \frac{\partial \overline{\varphi}}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \overline{\varphi}}{\partial x} \approx \frac{\partial \overline{\varphi}}{\partial x} \quad (2.4)$$

2.2.2 LES の支配方程式

フィルター操作を施す前にファールブル平均（密度加重平均）について簡単に説明する。Erlebacher, G.ら⁽⁶⁷⁾の理論によってファールブル平均を実施すると流動成分は式 (2.5) のように表される。

$$\tilde{f} = \frac{\rho \overline{f}}{\bar{\rho}} \quad (2.5)$$

ここで、Smits, A. J.ら⁽⁶⁸⁾の文献によって、フィルターで抽出されたスケールを解像可能な成分 \tilde{f} と SGS 成分 f'' に分解される。式 (2.6) に示す。

$$f = \tilde{f} + f'' \quad (2.6)$$

LES 支配方程式は圧縮性を考慮した連続の式，運動量方程式，内部エネルギー保存式及び化学種保存式であり，式 (2.7) (2.8) (2.9) (2.10) にそれぞれ示す．ここで Boussinesque 近似⁽⁶⁹⁾を適用するものとした．また，各支配方程式には前節で述べたトップハットフィルタを適用した．

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = \bar{\rho}^s \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j - \bar{\tau}_{ij} - \tau_{ij}^{sgs}) = \bar{F}_i^s \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{e})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{e})}{\partial x_j} + \bar{p} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial h_j^{sgs}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{q}_j}{\partial x_j} - \bar{\sigma}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \theta^{sgs} = \bar{Q}^s \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_m)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{Y}_m \tilde{u}_j - \bar{\rho} \tilde{D}_m \frac{\partial \tilde{Y}_m}{\partial x_j} + \varphi_{j,m}^{sgs}) = \bar{\rho}_m^s \quad (2.10)$$

ここで， ρ は密度， u は流体の速度ベクトル， τ_{ij} は応力テンソル， e は比内部エネルギー， p は圧力， σ_{ij} は粘性応力テンソル， q_j は熱流速， Y_m は化学種 m の質量分率， D_m は化学種 m の拡散係数である．

式 (2.8) と式 (2.9) において分解された粘性応力テンソル $\bar{\tau}_{ij}$ と熱流束 \bar{q}_j は式 (2.11) と (2.12) で表す．

$$\bar{\tau}_{ij} = -\bar{p} \delta_{ij} + 2\mu \tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3} \mu \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \quad (2.11)$$

$$\bar{q}_j = -\frac{\kappa \partial \tilde{T}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \sum_{M=1}^N \tilde{h}_M D_M \left(\frac{\partial \tilde{Y}_M}{\partial x_j} \right) \quad (2.12)$$

ここで， S_{ij} は歪速度テンソル， μ は粘性係数， T は温度， h_m は化学種 m のエンタルピー， κ は熱伝導率， δ_{ij} はクロネッカーのデルタである．

2.3. SGS (Sub-Grid Stress tensor) モデル

2.3.1 K-equation モデル

K-equation モデルでは SGS モデルの乱流運動エネルギー K^{sgs} と計算格子幅 Δ により渦粘性係数 ν_t を与える. ν_t は有効粘性係数の一部であり, $\mu_{eff} = \mu + \rho\nu_t$ として計算される⁽⁷⁰⁾.

$$K^{sgs} = \frac{1}{2}(u_i\tilde{u}_i - \tilde{u}_i\tilde{u}_i) \quad (2.13)$$

$$\nu_t = C_\nu K^{sgs1/2} \Delta \quad (2.14)$$

ここで, 計算格子幅 Δ は計算セルの体積の 1/3 乗で与える. K^{sgs} は Menon, S. らが提案した式 (2.15) より求められる⁽⁷¹⁾.

$$\frac{\partial(\bar{\rho}K^{sgs})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j K^{sgs})}{\partial x_j} = P^{sgs} - D^{sgs} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \frac{\nu_t}{Pr_t} \frac{\partial K^{sgs}}{\partial x_j} \right) + \overline{W^s} \quad (2.15)$$

P^{sgs} 項は $-\tau_{ij}^{sgs} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right)$ でモデル化することができ, 消散項 D^{sgs} が式 (2.16) より求められる. モデル係数として C_ν と C_ε にそれぞれ 0.067 と 0.916 を使用した. これは W. Calhoon らが DNS を用いた結果による提案したモデル定数である⁽⁷²⁾.

$$D^{sgs} = C_\varepsilon \bar{\rho} (K^{sgs})^{3/2} / \Delta \quad (2.16)$$

2.3.2 Smagorinsky モデル

Smagorinsky モデルでは SGS モデルのひずみ速度テンソル S_{ij} と計算格子幅 Δ により渦粘性係数 ν_t を与える.

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (2.17)$$

$$\nu_t = (C_s \Delta)^2 \tilde{S} \quad (2.18)$$

ここで、計算格子幅 Δ は前節と同様に計算セルの体積の 1/3 乗 ($\Delta = (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}$) で与える。ひずみ速度テンソルの大きさは式 (2.19) より求められる。 C_s は Smagorinsky モデル定数であり、通常に 0.065~0.23 の範囲で使用される⁽²⁸⁾⁽⁷³⁾⁽⁷⁴⁾⁽⁷⁵⁾。本研究では、 $C_s = 0.1$ と設定した⁽⁷⁶⁾。

$$\tilde{S} = 2(\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij})^{1/2} \quad (2.19)$$

局所平衡理論に基づく Smagorinsky モデルでは、小さな速度スケールにおいて部分平衡になっているため、エネルギーの生成と消散が常に釣り合うものと仮定されている。消散項 D^{sgs} については KIVA4 のオリジナル形式になっており、式 (2.20) より求められる。この K^{sgs} はサブグリットスケールの乱流エネルギーであり、 L_{sgs} がサブグリットスケールの乱流長さである。使用したモデル定数は KIVA II のマニュアルに記述した RNG k-epsilon⁽⁷⁷⁾ の通りになっており、それぞれ $C_\mu = 0.9$, $Pr_\epsilon = 1.3$, $C_{\epsilon_2} = 1.92$, $C_{\epsilon_1} = 1.44$ になっている。

$$D^{sgs} \geq \left[\frac{C_\mu}{Pr_\epsilon(C_{\epsilon_2} - C_{\epsilon_1})} \right]^{1/2} \frac{K^{sgs \frac{3}{2}}}{L_{sgs}} \quad (2.20)$$

2.3.3 混合時間スケール SGS モデル

壁面近傍において乱流スケールの計算精度を向上するために、本研究における稲垣らが提案した混合時間スケール SGS モデル⁽⁷⁸⁾を計算コードに組み込んだ。このモデルでは乱流成分に近い特性時間と大きなスケールを持つ乱流成分の特性時間の調和平均を用いて、さらに速度スケールとして SGS 乱流エネルギーを使用することによる渦粘性係数 ν_t をモデル化する。

$$\nu_t = C_m K^{sgs} T_s \quad (2.21)$$

$$T_s = \left(\frac{\Delta}{\sqrt{K^{sgs}}} \right)^{-1} + \left(\frac{C_t}{S} \right)^{-1} \quad (2.22)$$

ここで、 Δ は計算格子体積の 1/3 乗で与えられる。 C_m と C_t はモデル係数であり、それぞれ 0.05, 10 と設定した⁽⁷⁹⁾。また、ひずみ速度テンソルの大きさは前節に述べた

Smagorinsky モデルと同様に、式 (2.23) に従って計算される。

$$\tilde{S} = 2(\tilde{S}_{ij}\tilde{S}_{ij})^{1/2} \quad (2.23)$$

このモデルの特徴として、フィルターされた小さいスケールの乱流成分に近い特性時間 ($\Delta/\sqrt{K^{sgs}}$) と大きなスケールを持つ乱流成分の特性時間 ($1/\tilde{S}$) の調和平均を用いることによって、固体壁近傍において計算の安定性と乱流速度の予測精度向上を図る。

2.3.4 SGS 化学種拡散モデル

SGS 化学種拡散モデルでは式 (2.10) において、 $\varphi_{j,m}^{sgs}$ 項が対応するが、この場合 $\varphi_{j,m}^{sgs} = \bar{\rho}[u_i \widetilde{Y_m} - \tilde{u}_i \widetilde{Y_m}]$ となっており、項として閉じていないため、モデル化する必要がある。そこで、本研究では $\varphi_{j,m}^{sgs}$ 項を KIVA4 のオリジナルな勾配拡散モデルとして使用し、式 (2.24) より求められることができる。 ν_t は渦粘性係数であり、 Sc_t は乱流シュミット数である。

$$\Phi_{i,m}^{sgs} = -\bar{\rho} \frac{\nu_t}{Sc_t} \frac{\partial \widetilde{Y_m}}{\partial x_i} \quad (2.24)$$

2.3.5 LES モデルの組み込み方法

ここで、LES モデルの各支配方程式の離散化について簡単に説明する⁽⁸⁰⁾。式(2.8), (2.9), (2.10) に示した支配方程式について空間的な離散化を行った。その手法として、LDEF (Lagrangian Drop Eulerian Fluid) 法と SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-linked Equations) 法に基づく ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) 法で構成される。流れ場の解き方として時間発展法に関しては表 2.1 に示したように、Phase A, Phase B と Phase C 三段階に分けて解くことになる。まず、Phase A において Lagrangian 法によって液滴の微粒化や液滴間の衝突を追跡し、液滴に関する噴霧項 ($\dot{\rho}^s$) を計算する。それから噴霧の蒸発過程から気相の化学反応項 ($\dot{\rho}^c$) を計算し、酸化剤を混合した後に化学反応計算を行う。次に、Phase B では SIMPLE 法に基づいて圧力、温度と速度における非対流項を陰的に、または陽的に計算する。最後に Phase C でサブサイクルに入って全ての対流項に対して陽的に計算を行う。

2.3.5.1 化学種保存方程式

式 (2.10) から変形し、式 (2.25) のようなモデル式を得ることができる。

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_m)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_m)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}D_m \frac{\partial\tilde{Y}_m}{\partial x_j} + \varphi_{j,m}^{sgs} \right) + \bar{\rho}^c + \bar{\rho}^s \quad (2.25)$$

ここで、化学種成分 Y_m について離散化を行い、式 (2.26) になる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V \rho Y_m dV \right) + \int_S \rho Y_m (u_j - U_j) n_j dS = \int_S \left(\rho D_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} - \varphi_{j,m}^{sgs} \right) n_j dS + \int_V (\bar{\rho}^c + \bar{\rho}^s) n_j dV \quad (2.26)$$

U_j は計算セル面の速度になり、セル面は流体粒子と共に移動する際に、セル面の速度が u_j になる。そのため、Phase A と Phase B の計算において Lagrangian 法を用いる場合には左側の第二項がゼロになる。これらを積分すると式 (2.27) と式 (2.28) が得られる。 $\dot{\rho}^c$ と $\dot{\rho}^s$ はそれぞれ化学反応項と噴霧項になっており、 n は経時変化する。

$$\frac{(\rho Y_m)^A - (\rho Y_m)^n}{\Delta t} = (\bar{\rho}^c + \bar{\rho}^s) \Delta V \quad (2.27)$$

$$\frac{(\rho Y_m)^B - (\rho Y_m)^A}{\Delta t} = \sum_a \left(\rho D_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} - \varphi_{j,m}^{sgs} \right)_a A_{j,a} \quad (2.28)$$

ここで、 $A_{j,a}$ は計算セル面のベクトルとなる。詳細について KIVAII のマニュアルに参照されたい。ベースコードに組み込んだ変数とサブルーチンなどを表 2.3 に示す。

表 2.3 変数とサブルーチン

Term	Notation	Explicit / Implicit	Variable	subroutine
Diffusion	$\bar{\rho} \bar{D}_m \frac{\partial \tilde{Y}_m}{\partial x_j}$	explicit	spmtil	yit.f
		implicit	res	resy.f
Subgrid diffusion	$\varphi_{j,m}^{sgs}$	explicit	spmtil	yit.f
		implicit	res	resy.f

2.3.5.2 運動方程式

運動輸送方程式について LES モデルが従来の RANS モデルと同様な形になる. 式 (2.8) のような同じ形になっており, 下記のように示す. また, 離散化方法も RANS モデルと同様になり, ここで記述を省略することとする. ただし, RANS モデルと LES モデルによって τ_{ij}^{sgs} 項に関するモデル化の形式が変化する.

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j - \bar{\tau}_{ij} - \tau_{ij}^{sgs}) = \bar{F}_i^s \quad (2.29)$$

2.3.5.3 内部エネルギー保存式

フィルタされた内部エネルギーの方程式は式 (2.9) から変形し, 式 (2.25) となる.

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{e})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{e})}{\partial x_j} = -\bar{p}\frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{q}_j + h_j^{sgs}) + \bar{\sigma}_{ij}\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \theta^{sgs} + \bar{Q}^s \quad (2.30)$$

ここで, 内部エネルギー成分について離散化を行うと式 (2.31) になる.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V \rho e dV \right) + \int_S \rho e (u_j - U_j) n_j dS \\ &= - \int_V p \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j} dV - \int_S (\bar{q}_j + h_j^{sgs}) n_j dS + \int_V \rho D^{sgs} dV + \int_V \bar{\sigma}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} dV \end{aligned} \quad (2.31)$$

同様に、セル面は流体粒子に移動する時に、Phase A と Phase B の計算を行う場合では、左側の第二項がゼロになる。これらを積分にすると式 (2.32) が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{(M_e)^B - (M_e)^A}{\Delta t} = & -\frac{p^n - p^B}{2} \frac{V^B - V^n}{\Delta t} + (Heat\ Flux) + (Viscous\ Work) \\ & + (Subgrid\ Enthalpy\ Transport) + (M^B D^{sgs})^A \end{aligned} \quad (2.32)$$

ここで、圧力項がサブルーチン `tsolve.f` で陽的に解くことになり、phase B で計算した後にサブルーチン `psolve.f` にて更新される。サブグリット消散率がサブルーチン `ysolve.f` で陽的に解かれる。詳細について表 2.4 にまとめる。

表 2.4 変数とサブルーチン

Term	Notation	Explicit / Implicit	Variable	subroutine
Viscous work	$\frac{\sigma_{ij} \partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}$		dispeng	exdif.f
Heat flux	$-\bar{K} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} - h_j^{sgs}$	explicit	htetil	exdif.f
		implicit	htc	rest.f
Enthalpy transport	$-\bar{\rho} \sum h_m \bar{D}_m \frac{\partial \tilde{Y}_m}{\partial x_j}$	explicit	enthtil	yit.f
		implicit	enthdf	resy.f
Pressure work	$-\bar{p} \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_j}$		sietil	tsolve.f
Subgrid dissipation	θ^{sgs}		eps	ysolve.f

2.3.5.4 サブグリット動的エネルギー保存式

エネルギー保存式に関して Menon らが提案した式を使用した⁽⁷²⁾。式 (2.33) に示す。

$$\frac{\partial(\bar{\rho} K^{sgs})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j K^{sgs})}{\partial x_j} = P^{sgs} - D^{sgs} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\bar{\rho}}{\rho} \frac{v_t}{Pr_t} \frac{\partial K^{sgs}}{\partial x_j} \right) + \overline{W^s} \quad (2.33)$$

ここで、内部エネルギー成分の離散化を行い、式 (2.29) になる。

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_V \rho K^{sgs} dV \right) + \int_S \rho K^{sgs} (u_j - U_j) n_j dS = - \int_V \tau_{ij}^{sgs} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} dV + \int_S \left(\rho \frac{v_t}{Pr_t} \frac{\partial K^{sgs}}{\partial x_j} \right) n_j dS - \int_V D^{sgs} dV + \int_V \overline{W^s} dV \quad (2.34)$$

同じく、Phase A と Phase B の計算においては左側の第二項がゼロになる。これらを積分にすると式 (2.35) を得られる。

$$\frac{(\rho K^{sgsV})^B - (\rho K^{sgsV})^A}{\Delta t} = - \frac{2}{3} \rho^B \frac{v_t^B - v_t^A}{\Delta t} K^{sgs} + (Production_{im}^{sgs} + Production_{ex}^{sgs}) + (Transport_{im} + Transport_{ex}) - D^{sgs} \quad (2.35)$$

ここで、生成項の一部（右側の第一項）をサブルーチン `kesolve.f` で解くことになり、一部（右側の第二項）がサブルーチン `exdif.f` と `resuvw.f` にてそれぞれ陽的と陰的に更新される。詳細について表 2.5 にまとめる

表 2.5 変数とサブルーチン

Term	Notation	Explicit / Implicit	Variable	subroutine
Production	$-\tau_{ij}^{sgs} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}$	explicit	disptil	exdif.f
		implicit	dissip	resuvw.f
Dissipation	$D^{sgs} = C_\epsilon \bar{\rho} (K^{sgs})^{3/2} / \bar{\Delta}$			kesolv.f
Transport	$\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \frac{v_t}{Pr_t} \frac{\partial K^{sgs}}{\partial x_j} \right)$	explicit	tketil	exdif.f
		implicit	res	resk.f

2.3.6 離散化手法の検証

Sone ら上述のように離散化を行い、バックステップ流れ解析を用いて検証を実施した⁽⁸¹⁾。その計算領域および格子を図 2.3 に示す。格子サイズが流れ方面、壁垂直方面と奥行き方面に $96 \times 64 \times 32$ のように構成され、可視化は黒い線で囲まれる領域のみであった。また、壁面において入口と出口以外に No-slip の境界条件を設定している。入口の境界条件は流速 10000 cm/s で固定され、段の高さに対するレイノルズ数は 5100 であった。時間平均流れ場において 1 周期を $20h/U$ と定義し、5 周期分の平均値を出力するものとし、中心断面の

渦度の可視化結果を図 2.4 に示す。段の下の空間において、LES モデルによる計算された流動は RANS モデルに比較して、渦が強く形成されることが分かる。

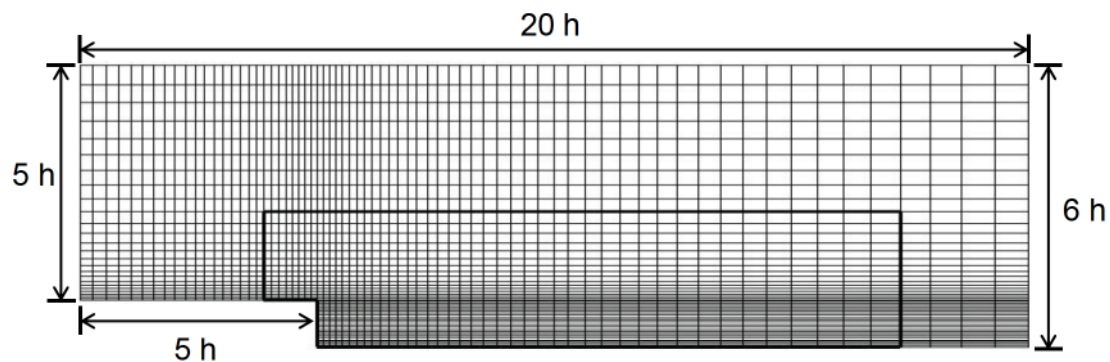


図 2.3 参考文献⁽⁸¹⁾によるバックステップ流れ解析で使った計算格子

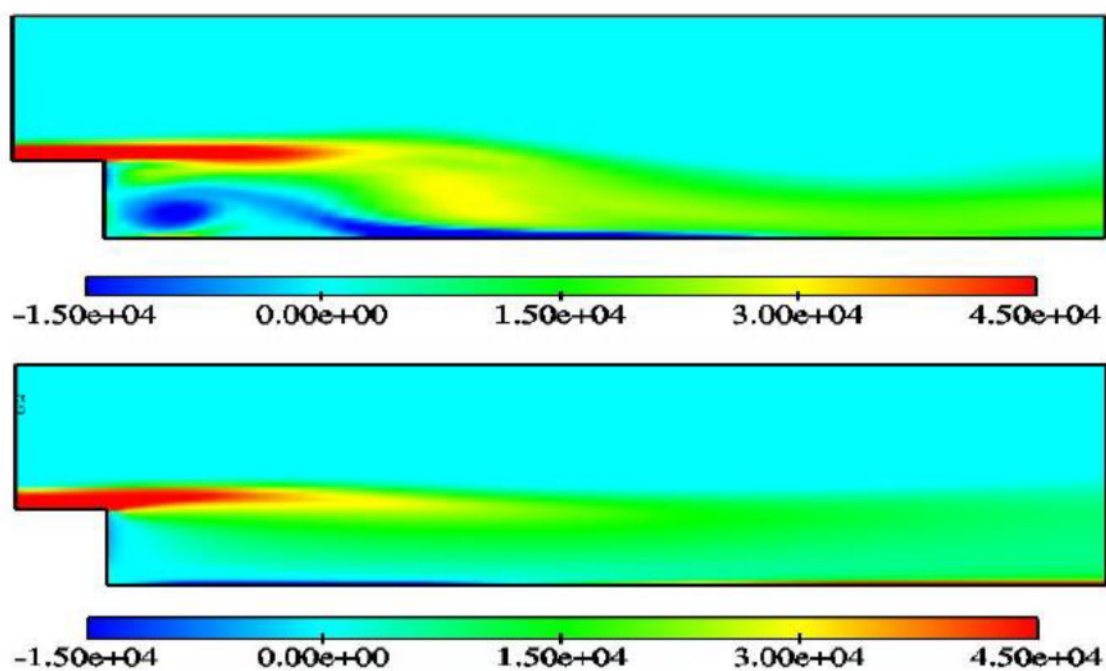


図 2.4 参考文献⁽⁸¹⁾によるバックステップ流れ解析を用いたスパン方面渦度 (s^{-1}) の比較 (上段 : LES, 下段 : RANS)

2.4 空間差分スキームの改良

2.3 節で示したように, KIVA4 コードに LES モデルの組み込みを行った. 本節において, 渦の生成, あるいは渦構造の形態変化に関連する運動方程式の対流項に関する空間離散法を改良するものとする. 具体的には, 二次精度を有する中心差分法 CD (Central Differencing) を用いる. 質量, 内部エネルギー, 乱流長さなどのほかのスカラー量の対流には KIVA 本来の手法である QSOU (Quasi-Second-Order upwind) を用いて離散化する⁽⁷⁷⁾. これは支配方程式において解の単調性と保存性を考慮したためである. RANS モデルと LES モデルにおいて用いた対流項の差分スキームが表 2.6 に示す.

表 2.6 空間離散スキーム

Convective transport scheme use for				
Model	Momentum	Density	Energy	Others
RANS	QSOU	QSOU	QSOU	QSOU
LES	CD	QSOU	QSOU	QSOU

2.5 時間発展精度の向上

KIVA4 コードにおいて対流項の時間発展は通常通り, 式 (2.36) に示される 1 次精度の前進オイラー法を用いて陽的に計算される. CFL 条件を満たすためにグローバルタイムステップに対してサブサイクルを設けて対流項計算を行う. しかしながら, 前節で述べたように, 中心差分法による数値振動が無視できないため, 時間刻み幅を非常に小さく設定しなければならない故に, 解析が極めて困難になる. この問題を回避するため, 本研究では, 運動方程式における対流項の時間発展に精度および安定性に優れている 2 段階 2 次精度の Runge-Kutta 法と Adams-Bashforth 法のハイブリッド手法⁽⁷⁷⁾を用いる. その他の対流項の時間発展には通常通りの前進オイラー法を用いる. ここで, M は各物理量を表す.

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \frac{M^{n+1} - M^n}{\Delta t} \quad (2.36)$$

Adams-Bashforth 法系の陽解法はより過去の情報を保存することによって高次精度のスキームを構成することから, 最初の 2 つステップは 2 段 2 次の Runge-Kutta 法を用い, 残りのステップは Adams-Bashforth 法を使用する. 以下に具体的な過程を示す.

(1) ステップ1のとき, 2段階の Runge-Kutta 法を用いる.

$$\text{Start} : M^0 = M^n \quad (2.37)$$

$$\text{Stage 1: } M^* = M^0 + \frac{\Delta t}{2} f(M^0) \quad (2.38)$$

$$\text{Stage 2: } M^{**} = M^0 + \Delta t f(M^*) \quad (2.39)$$

$$M^1 = M^{**} \quad (2.40)$$

(2) ステップ2のとき, 修正した Adams-Bashforth 法を用いる.

$$M^2 = M^1 + 2\Delta t f(M^1) - \Delta t f(M^*) \quad (2.41)$$

(3) 残りのステップのとき, Adams-Bashforth 法を用いる.

$$M^k = M^{k-1} + \frac{3}{2}\Delta t f(M^{k-1}) - \frac{1}{2}\Delta t f(M^{k-2}) \quad (2.42)$$

2.6 現象論的 Soot モデル

Soot 生成を予測するために、本学の草鹿研究室において長年にわたって開発してきた現象論に基づくモデルを導入した^{(64) (65) (66)}。主に、化学種 74、素反応数 320 で構成する反応スキームにより詳細的な素反応過程を考慮し、気相反応において気相化学種である前駆物質 Acenaphthylene (A_2R_5) をシミュレートした。それらの成長、核生成、低級不飽和炭化水素 (C_2H_2) による表面成長反応 (Hydrogen Abstraction C_2H_2 Additon)、活性種 (OH, O_2) による表面酸化反応、衝突・凝集の一連の過程をモデル化した。Soot 生成プロセスは式 (2.43) と (2.44) で表される。これらの反応モデルを表 2.7 に示す。

$$\frac{d[C_{(s)}]}{dt} = \omega_{nuc} + \omega_{sg} - \omega_{O_2} - \omega_{OH} \quad (2.43)$$

$$\frac{dN}{dt} = \frac{dN_{nuc}}{dt} - \frac{dN_{coag}}{dt} \quad (2.44)$$

また、式 (2.43), (2.44) より Soot 質量濃度と粒子数密度の変化率を算出すれば、粒子径は次式で求めることができる。

$$d_p = \left(\frac{6}{\pi} \frac{c_s}{\rho_{soot} N} \right)^{1/3} \quad (2.45)$$

ここで、 ω は質量変化速度、 N は微粒子数密度である。また、添字 *nuc* は核形成、*coag* は表面成長反応であり、OH, O_2 はそれぞれの化学種による Soot 微粒子の酸化を表す。

表 2.7 現象論に基づく各反応式

Step	Reaction	$k = A T^b \exp(-E/RT)$		
		A	b	E
		cm/(mol s)		kcal/mol
Nuc	$A_2R_5 \Rightarrow 12 C_{(s)} + 4 H$	2.15×10^4		5.0
Sg	$C_{(s)} + C_2H_2 \Rightarrow 3 C_{(s)} + H_2$	3.50×10^3	0.78	3.8
So	$C_{soot}H + O_2 \Rightarrow C_{soot-2}H + 2 CO$	Nagle and Strikland-Constable model		
So	$C_{soot}H + OH \Rightarrow C_{soot-1}H + CO + H$	Neoh et al. model, $\gamma = 0.13$		
Coag	$\kappa C_{soot} \Rightarrow C_{soot}$	Modified Smoluchowski		

2.6.1 Soot 微粒子形成過程

ディーゼルエンジンから排出される粒子状物質の形成過程は極めて複雑であり、未解明な部分も多い。一般的には、前述したように気相化学種から固相物質が形成される化学的、物理的因子が混在した相変化を経て生成されることが知られており、その経路は図 2.5 に示すようにいくつかの段階に分けて考えることができる⁽⁸²⁾。すなわち、前駆物質形成過程を経て、前駆物質からの凝縮核形成、粒子核同士の衝突・合体による凝集、粒子表面での表面反応による成長、及び酸化による減少、さらには成熟した粒子同士の凝集塊形成により進行するものと仮定される。

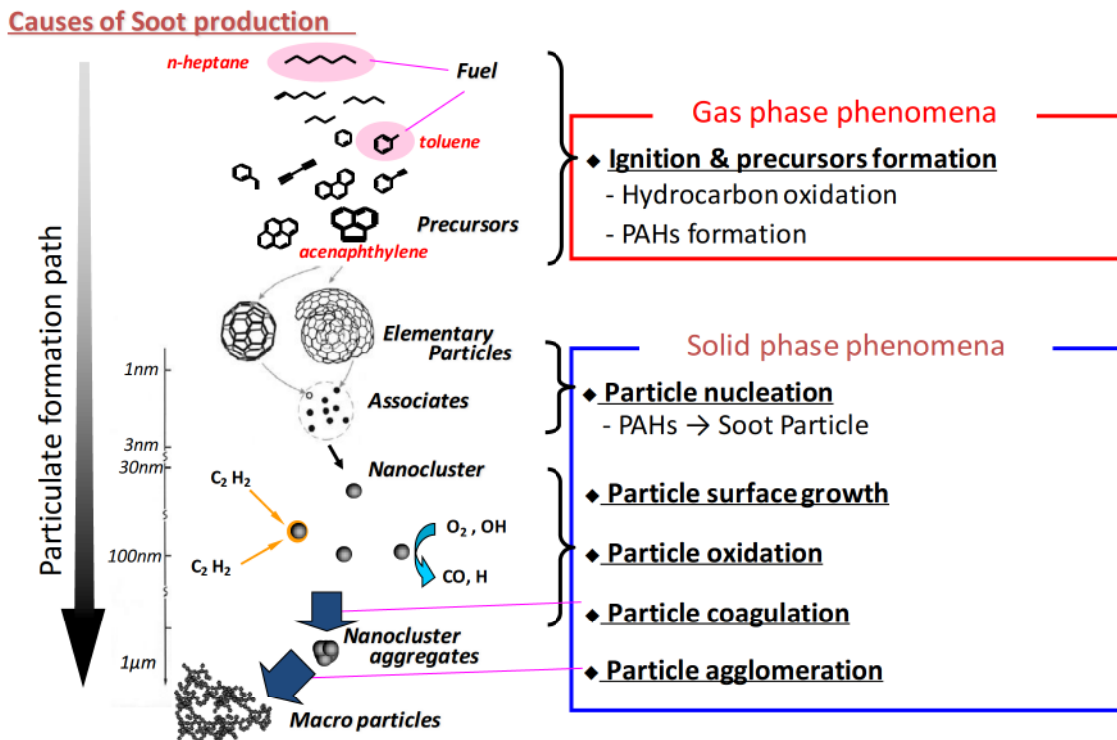


図 2.5 微粒子生成機構及びモデル化の概念図⁽⁸³⁾

2.6.2 Soot 微粒子生成過程モデリング手法

前節で述べた Soot 生成機構をもとに、本研究においても気相反応において前駆物質の形成を考慮し、続けて現象論的モデルにより各種 Soot 表面反応や衝突合体による物理的要因が関係するプロセスを考慮する。

ここでは、KIVA4 に追加した詳細な現象論的 Soot モデルについて述べる。気相反応で計算された PAH 濃度、アセチレン濃度、各種酸化剤の濃度等をもとに Soot 微粒子の核形成、

C₂H₂による表面成長、OH や O₂による表面酸化、固体粒子の凝集など一連の反応過程を計算することになる。なお、本研究では噴霧拡散燃焼を計算対象としていることから、セル内の化学種濃度不均一性を考慮した部分攪拌 (Partially Stirred Reactor) コンセプトを本 Soot 微粒子形成モデルにも導入することとした。乱流特性時間と化学反応特性時間の調和平均を用いることにより、他の物理モデルと同一のタイムステップで計算が可能となる。なおかつ、乱流効果を考慮した燃焼計算が可能になる。図 2.6 に、本 Soot 微粒子形成過程モデルの概念図を示す。

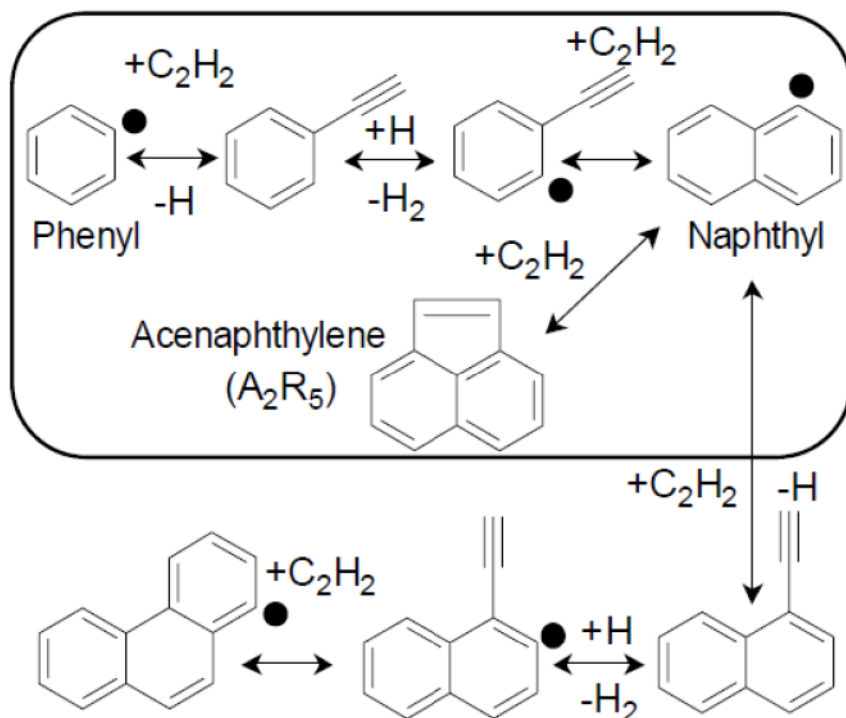


図 2.6 微粒子形成過程モデルの概念図⁽⁸⁴⁾

2.6.3 前駆体及び核形成

固体 Soot の核形成時において、前駆体として様々な物質が提案されているが、Frenklach らは、ある特定のサイズ以上に成長した PAHs 分子同士の衝突・合体により形成された多量体 (PAHs 分子の凝集塊) が最終的に相変化を生じて固相粒子核を形成すると提唱した⁽⁸⁵⁾ ⁽⁸⁶⁾ ⁽⁸⁷⁾。現在では、この見解が最も一般的なものとされており、また素反応レベルでの解析結果より、PAH の形成は 5 員環を介した共鳴安定化ラジカル反応や水素引き抜きア

セチレン付加 (HACA : Hydrogen Abstraction C₂H₂ Addition) 反応機構によって進行することが明らかとなっている。以上を踏まえ、本モデルではディーゼルサロゲート反応スキーム内で最も分子量の大きいアセナフチレンをそのまま前駆体生成機構として使用する。

核形成過程としては、気相化学種において最も分子量が大きく、また球形などの立体構造を形成しうる五員環構造を有したアセナフチレン (A₂R₅) を候補として採用した。核形成のプロセスは表 2.7 に一番目の反応式に対応され、それに伴う Soot 微粒子の質量増加は式 (2.46) に従うものとする。

$$\omega_{nuc} = 12k_{nuc} [A_2R_5] \quad (2.46)$$

また、計算上では Soot 粒子がドライかつ黒煙状粒子であるとみなされる。この仮定に基づいて、初期の固体 Soot 微粒子は約 100 個の一次粒子炭素数 (C_{min}) で構成され、初期粒子径が $d_{initial} = 12.5$ nm の直径を有すると仮定する。核形成による粒子数密度変化は式 (2.47) により記述される。なお、 N_A はアボガドロ定数である。

$$\frac{dN_{nuc}}{dt} = \omega_{nuc} \frac{d_{initial} N_A}{C_{min}} \quad (2.47)$$

2.6.4 表面成長反応

核形成を経た後、表面反応モデルに従い、Soot 微粒子の成長と酸化量を見積もる。Frenklach らの提案する C₂H₂ による脱水素反応に基づき表面反応モデルをモデリングした⁽⁸⁸⁾。Soot 微粒子の表面を C₂H₂ が反応可能な活性サイトと反応できない不活性サイトから成り立つと考え、表面成長速度は式 (2.48) のように表現することができる。

$$\omega_{sg} = 2k_{sg} P_{C_2H_2} \left(\alpha \frac{X}{N_A} A_s N \right) \quad (2.48)$$

ここで、 A_s は Soot の表面積であり、 $P_{C_2H_2}$ はアセチレンの分圧である。 k_{sg} は反応速度係数であり、表 2.7 に従うものとする。また、 α は粒子表面の表面反応温度依存性を表現したものであり、Kazakov らによって提案された式 (2.49) を用いて計算される⁽⁸⁹⁾。ここで、 T を絶対温度 (K) とすると、次のように書ける。

$$\alpha = \frac{1}{2} \left[\tanh \left(\frac{8186}{T} - 4.57 \right) + 1 \right] \quad (2.49)$$

2.6.5 表面酸化反応

本 Soot モデルでは、酸化剤として O₂ と OH による Soot 微粒子の表面酸化反応を考慮し

た. まず, O_2 による Soot 粒子酸化反応モデルとしては, Nagle Strickland-Constable モデル (NSC モデル) を採用した⁽⁹⁰⁾. 本酸化モデルでは, 表面成長反応と同様に Soot 微粒子の表面を不活性サイト, 活性サイトから成り立つと仮定した上で, 二つの異なる反応経路を考慮し, 酸化速度を見積もる. 酸化反応を表 2.6 に示し, NSC モデルに基づく酸化速度式を式 (2.50), (2.51) に示す.

$$\omega_{O_2} = A_{soot} f_n \left[\frac{k_A P_{O_2}}{1+k_Z P_{O_2}} x_A + k_B P_{O_2} (1-x_A) \right] \quad (2.50)$$

$$x_A = \left(1 + \frac{k_T}{k_B P_{O_2}} \right)^{-1} \quad (2.51)$$

ここで, P_{O_2} は酸素分子の分圧であり, x_A は活性サイト割合である. また k_A , k_B , k_T , k_Z はそれぞれアレニウス型の反応速度定数であり, 式 (2.52) (2.53) (2.54) (2.55) により見積もられる. 式中の R はモル気体定数 (J/(K mol)) であり, T は絶対温度 (K) である.

$$k_A = 20 \exp\left(\frac{-15100}{RT}\right) \quad (2.52)$$

$$k_B = 4.46 \times 10^{-3} \exp\left(\frac{-7640}{RT}\right) \quad (2.53)$$

$$k_T = 1.51 \times 10^5 \exp\left(\frac{-48800}{RT}\right) \quad (2.54)$$

$$k_Z = 21.3 \exp\left(\frac{2060}{RT}\right) \quad (2.55)$$

次に, OH による Soot 微粒子の酸化反応に関しては, 分子運動論に基づく酸化モデルを使用した. OH による酸化は Neoh らにより提唱されており⁽⁹¹⁾, OH 分子と Soot 表面の衝突のうちおよそ 10%は Soot 酸化を引き起こすものとされている.

$$\omega_{OH} = 3\gamma_{OH}[OH]A_{soot} f_n \left(\frac{RT}{2\pi M_{OH}}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.56)$$

ここで, γ_{OH} は活性衝突確率であり, M_{OH} は OH 分子の分子量である. Tao らによる衝突効率に 13%を用いたモデルが見受けられるため⁽⁹²⁾, 本モデルでも 13%と定めた.

2.6.6 粒子間衝突による合体 (Coagulation)

Soot 粒子はこれまでに記述した表面反応の進行とともに、粒子間で衝突を起こすことも知られている。本 Soot モデルにおいて衝突による Soot 粒子の挙動は衝突合体過程の Coagulation といった過程を経ることと仮定する。Coagulation とは微小粒子同士が衝突により合体し、密な衝突過程にて球状に近い衝突後の形態を取るものと理解される。本 Soot モデルでは、対象とした計算セルにおいて粒子は均一に分布し、衝突前後において粒子は球形を維持し、粒子サイズはセル代表値で取り扱うものとして Graham らの修正 Smoluchowski 方程式を用いた⁽⁹³⁾。その式 (2.57) を以下に示す。

$$\frac{dN_{coag}}{dt} = \frac{6}{5} \kappa f_v^{1/6} N^{11/6} \quad (2.57)$$

ここで、 f_v は Soot 微粒子体積割合であり、 κ は微粒子間の衝突による合体の速度である。微粒子間の衝突による合体の速度は式 (2.58) のように表現される。

$$\kappa = \frac{5}{12} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/6} \left(\frac{6k_B T}{\rho_p}\right)^{1/2} G C_a \quad (2.58)$$

ここで k_B はボルツマン定数であり、 T は雰囲気温度である。 ρ_p は微粒子の密度、 G は球状粒子率であり、定数として 0.0001 を使用した。また、 C_a はサイズ分布係数であり、6.55 を用いた。

2.7 噴霧微粒化モデル

ディーゼル噴霧等の液体噴流の微粒化過程は一般に分裂長さを境界として 1 次分裂と呼ばれる液柱分裂の段階と 2 次分裂と呼ばれる液滴分裂の段階に大別される。本研究で用いた KH-RT モデルは図 2.7 のように 1 次分裂の段階に Kelvin-Helmholtz の不安定性を、2 次分裂に Rayleigh-Taylor の不安定性をそれぞれ適用したモデルである。ここでは、まず Reitz らの理論⁽⁹⁴⁾⁽⁹⁵⁾⁽⁹⁶⁾について述べ、続いて N. Nordin のモデル⁽⁹⁷⁾に改良を加えた本モデル⁽¹⁵⁾について説明する。Kelvin-Helmholtz の不安定性とは、相対速度を有する不連続面に生じる不安定性のことである。これは高密度の雰囲気中に高速の初期速度で噴射された燃料が、空気とのせん断力により引きちぎられ分裂していく過程を表現するものである。また、Rayleigh-Taylor の不安定性とは、密度の異なる 2 種の流体がその境界線に対して垂直方向に加速度運動をする際、その境界線が不安定になる現象のことである。分裂長さについては、Levich の理論に基づき以下の定式化された値を用いる⁽⁹⁸⁾。

$$L_b = C_b d_0 \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (2.59)$$

ここで、 d_0 は噴孔径、 ρ_l 、 ρ_g はそれぞれ燃料と雰囲気ガスの密度、 C_b はノズルの形状等に依存する任意定数である。

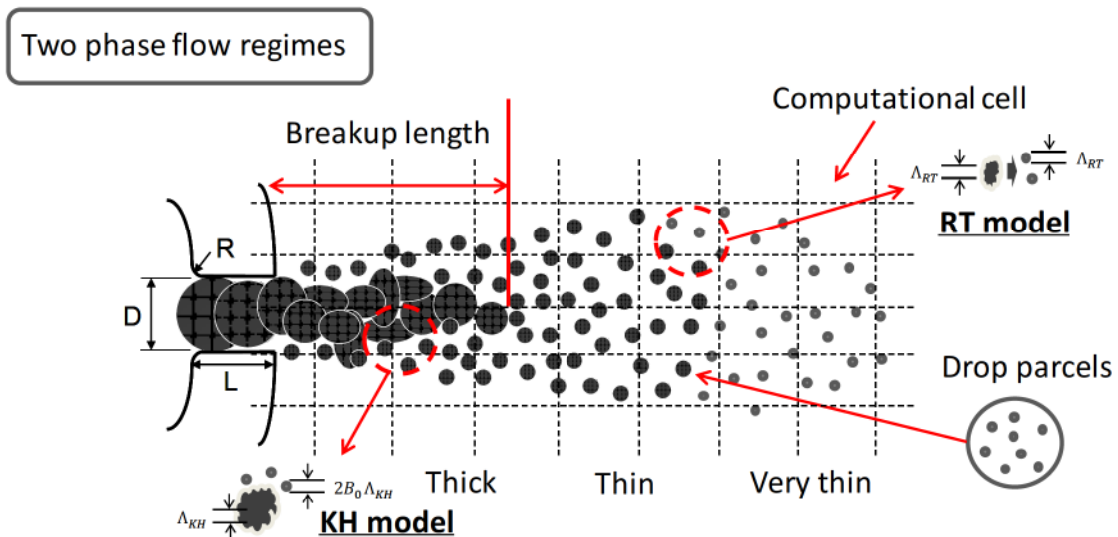


図 2.7 KH-RT モデルの概念図

2.7.1 Kelvin-Helmholtz モデルによる分裂

Reitz は円柱状液体（半径 r_p ）の表面において最も速く成長する液滴表面波（Kelvin-Helmholtz wave）の波長 Λ_{KH} と、その最大成長率 Ω_{KH} を次式で与えた。

$$\Lambda_{KH} = \frac{9.02 r_p (1 + 0.45\sqrt{Z})(1 + 0.4T_a^{0.7})}{(1 + 0.865We_g^{1.67})^{0.6}} \quad (2.60)$$

$$\Omega_{KH} = \frac{0.34 + 0.38We_g^{1.5}}{(1 + Z)(1 + 1.4T_a^{0.6})} \sqrt{\frac{\sigma_l}{\rho_l r_p^3}} \quad (2.61)$$

ここで、 ρ_l は液滴の密度、 σ_l は液滴の表面張力、 We_g は雰囲気ガスのウェーバー数であり、オーネソルゲ数 Z とテイラー数 T_a は以下のような無次元パラメータである。

$$Z = \frac{\sqrt{We_g}}{Re_g}, \quad T_a = Z\sqrt{We_g} \quad (2.62)$$

なお、ウェーバー数 We_l 、 We_g および液体の物理的性質に基づくレイノルズ数 Re_l は次のように定義される。

$$We_l = \frac{\rho_l V_{rel}^2 r_p}{\sigma_l}, \quad We_g = \frac{\rho_g V_{rel}^2 r_p}{\sigma_l}, \quad Re_l = \frac{2\rho_l V_{rel} r_p}{\mu_l} \quad (2.63)$$

ここで、 V_{rel} は液滴と雰囲気ガスとの相対速度、 σ_l は液滴の粘度である。この KH モデルにおいては、ノズル出口において噴孔径と同じ直径を持つ “blob” が与えられ、Kelvin-Helmholtz wave によって表現された表面波の増幅により、“blob” の分裂が始まる。つまり、液滴表面波の波長 Λ_{KH} により、親液滴（半径 r_p ）から次のような半径 r_{cKH} の新しい子液滴が形成されるとしている。

$$r_{cKH} = B_0 \Lambda_{KH} \quad (2.64)$$

また、分裂後の親液滴は新しい親液滴となる。液滴の分裂により、（親パーセル内の）親液滴の半径 r_p は次式に従って減少するものとしている。

$$\frac{dr_p}{dt} = -\frac{r_p - r_{cKH}}{t_{bKH}} \quad (2.65)$$

ここで、 t_{bKH} は液滴分裂時間であり、式 (2.66) になる。

$$t_{bKH} = \frac{3.726 B_1 r_p}{\Lambda_{KH} \Omega_{KH}} \quad (2.66)$$

式中の液滴径定数 B_0 ，分裂時間定数 B_1 は任意定数である．ここで，親のパーセルに含まれる液滴数は保存するものとし，質量保存則から子のパーセルに含まれる液滴数を求める．

2.7.2 Rayleigh-Taylor モデルによる分裂

燃料の粘度を無視し，表面張力のみを考慮すると，液滴表面で成長する Rayleigh-Taylor wave の最大成長率 Ω_{RT} と波数 K_{RT} は Bellman と Pennington⁽⁹⁹⁾によって以下のように表されている．

$$\Omega_{RT} = \sqrt{\frac{2}{3\sqrt{3}\sigma} \frac{[-g_t(\rho_l - \rho_g)]^{\frac{3}{2}}}{\rho_l + \rho_g}} \quad (2.67)$$

$$K_{RT} = \sqrt{\frac{-g_t(\rho_l - \rho_g)}{3\sigma}} \quad (2.68)$$

ここで， \vec{g} を重力， \vec{a} を液滴の加速度とし， \vec{j} を液滴進行方向の単位ベクトルとすると，その方向における加速度 g_t は，式 (2.69) となる．

$$g_t = \vec{g} \cdot \vec{j} + \vec{a} \cdot \vec{j} \quad (2.69)$$

Rayleigh-Taylor wave の波長 Λ_{RT} は $2\pi B_2 K_{RT}$ と表され，これが親液滴の直径よりも小さく，波が成長した積算時間が，式 (2.70) で表される液滴分裂時間 t_{bRT} よりも大きい場合に Rayleigh-Taylor の不安定性に基づいた分裂が起こる．

$$t_{bRT} = \frac{C_\tau}{\Omega_{RT}} \quad (2.70)$$

子液滴の半径 r_{cRT} は式 (2.71) で表される．ここで， C_{RT} は任意定数である．

$$r_{cRT} = \frac{\Lambda_{RT}}{2} = \frac{\pi C_{RT}}{K_{RT}} \quad (2.71)$$

親液滴の半径 r_p は KH モデルと同様に次式に従って減少する.

$$\frac{dr_p}{dt} = -\frac{r_p - r_{cRT}}{t_{bRT}} \quad (2.72)$$

液滴数に関しても KH モデル同様に、親のパーセルに含まれる液滴数は保存され、質量保存則から子のパーセルに含まれる液滴数を算出する.

2.7.3 本研究における KH-RT モデル

本研究では KIVA Jump Station で公開されている N.Nordin によるモデルに変更を加えて用いた⁽¹⁰⁰⁾. まず, N.Nordin は RT 分裂では新たなパーセルを作らず, 対象となるパーセル内の全液滴半径を式 (2.73) として求めているが, 本モデルでは Reitz らの理論に基づいて RT 分裂においても子パーセルを作るよう変更している. なお, 液滴半径は式 (2.71) と (2.72) を用いて求める.

$$r_{new} = \left(\frac{r_p^2}{\Lambda_{RT}} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.73)$$

また, 式 (2.59) を用いて分裂長さの概念を導入したが, Reitz らのモデルでは分裂長さを超える領域に存在する液滴についてのみ RT 不安定性を考慮するのに対して, 本モデルでは分裂長さを超えない位置の液滴であっても, KH 分裂によってコアの液柱から引きちぎられた液滴であれば, RT 分裂の対象とすることとした. これはつまり, 式 (2.74) を満たす液滴について, KH 不安定性の成長時間 TimeKH にタイムステップ dt を加算し, 式 (2.75) を満たす液滴について(分裂長さを超えない領域では 1 回以上の KH 分裂を起こしていることを判定条件に加える), RT 不安定性の成長時間 TimeRT にタイムステップ dt を加算し, TimeKH と TimeRT がそれぞれの分裂時間 t_{bKH} および t_{bRT} を超えた場合に分裂を起こすようにした.

$$We_g > \text{Weber number limit}, r_p > r_{cKH} \quad (2.74)$$

$$2 r_p > \Lambda_{RT} \quad (2.75)$$

分裂を起こしたパーセルについては、TimeKH、TimeRT と子パーセルのみ変形量 Y をリセットする。式 (2.59) より求めた分裂長さは、その前後で分裂時間判定の優先順序を KH 分裂から RT 分裂へと切り換えるために用いる。以上で述べた本研究における KH-RT モデルのフローチャートを図 2.8 に示す。

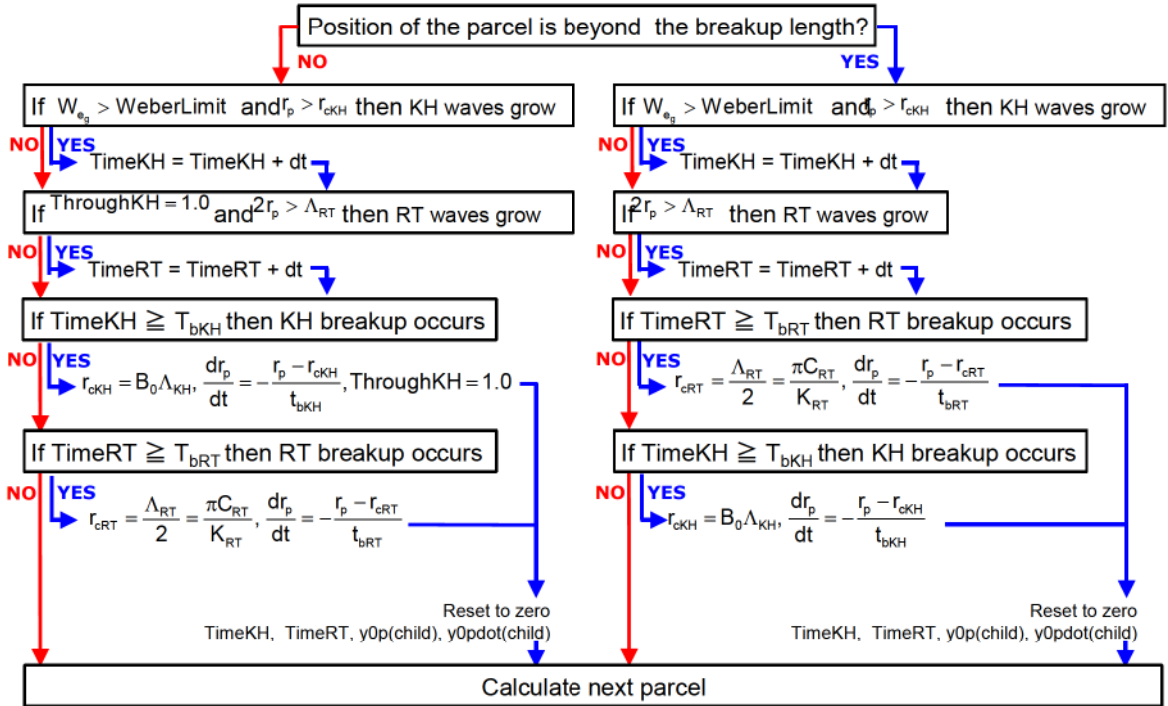


図 2.8 KH-RT モデルのフローチャート(101)

2.7.4 液滴変形抵抗モデル

液滴の変形による抵抗係数の増大を考慮するため、KIVA4 には O'Rourke らによる TAB モデル(102)を利用した液滴変形抵抗モデルが導入されており、抵抗係数 C_D は液滴の変形量 Y を用いて、式 (2.76) となる。

$$C_D = C_{D,sphere}(1 + 2.632 Y) \quad (2.76)$$

ここで、 $C_{D,sphere}$ は球の抵抗係数であり、Liu A.らの提案⁽¹⁰³⁾によって以下のように設定される。

$$C_{D,sphere} = \begin{cases} \frac{24}{Re} \left(1 + \frac{1}{6} Re^{\frac{2}{3}} \right) & (Re \leq 1000) \\ 0.424 & (Re > 1000) \end{cases} \quad (2.77)$$

本研究では液滴分裂モデルに KH-RT モデルを用いるが、TAB モデルにおける変形量 Y を算出する部分のみを利用することによって、液滴変形の影響を考慮している。なお、変形を考慮するのは分裂モデルにて RT 分裂を適用する条件(分裂長さを超える領域に存在する、もしくは既に KH 分裂を起こしている)を満たす液滴に対してのみとした。

2.8 計算格子依存性低減モデル

噴霧計算においては計算格子サイズが与える影響は大きい⁽¹⁰⁴⁾。そこで、噴霧計算における計算格子依存性を低減するため、N. Nordin らによって提案されている改良モデルを導入している⁽⁹⁷⁾。計算格子サイズが比較的粗くなりがちなスキッシュエリアに燃料が噴射される早期噴射型の燃焼コンセプトにおいてはこの改良は非常に重要になると考えられる。

2.8.1 衝突・合体モデル

燃料液滴の衝突合体モデルは、KIVA コードでは O'Rourke のモデル⁽¹⁰⁵⁾を用いているが、このモデルでは液滴同士の衝突の可能性 P_n を式 (2.78) より算出する。

$$P_n = \frac{N^n}{n!} e^{-N} \quad (2.78)$$

体積が vol_{cell} になる計算格子内に存在し、 n 個の液滴を含むパーセルが他のパーセルに対してタイムステップ dt の間に期待される衝突の回数 N を式 (2.79) としているため、衝突の確率に計算格子体積 vol_{cell} の影響が現れ、計算格子依存性が大きいと言われている。

$$N = \pi \frac{n}{vol_{cell}} (R_1 + R_2)^2 |u_1 - u_2| dt \quad (2.79)$$

これに対して、N. Nordin らは、図 2.9 のような幾何学的な関係 (簡易的に 2 次元場で示

す) から, (2.80) を満たす場合に衝突計算を行うことによって計算格子依存性を低減するモデルを提案しており, 本モデルもこれを採用した. なお, 2つのパーセルの相対速度を u_{12} , 液滴半径を R , 中心間距離を $|r_{12}|$ で表される.

$$u_{12}^n dt \leq R_1 + R_2, \quad u_{12}^t dt \geq |r_{12}| - (R_1 + R_2) \quad (2.80)$$

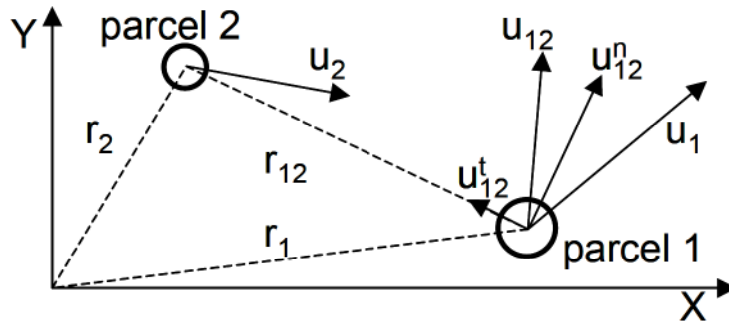


図 2.9 パーセル間の距離による液滴同士の衝突の可能性 (二次元) (101)

2.8.2 計算格子内流速補間

KIVA コードでは, 各計算格子に対して図 2.10 のように 1~8 の番号を振り, 頂点 4 の値をそのセルの状態量の代表値としている. 一様な流れ場においてはその影響は小さいが, エンジンシリンダ内のような複雑な流れ場では格子の配置によって流速が格子間で不連続になり, ガス流動と燃料液滴の相対速度等の値に大きな影響を及ぼすことになる. そこで, N.Nordin は着目する点から 8つの頂点への距離を用いて, 各頂点の値に重み付けをしてその点の流速を求めることによって隣接するセル間の流速の不連続性を抑制し, 噴霧挙動の計算格子依存性を低減する手法を用いている.

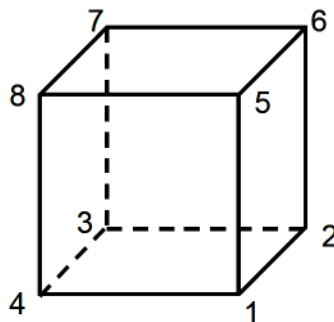


図 2.10 計算格子の頂点の番号

具体的には、まず着目するパーセルと1~8の各頂点の距離を下のように求める。

$$\begin{aligned} xdi(n_{indx}) &= xp(n) - x[ilp(n_{indx})] \\ ydi(n_{indx}) &= yp(n) - y[ilp(n_{indx})] \\ zdi(n_{indx}) &= zp(n) - z[ilp(n_{indx})] \end{aligned} \quad (2.81)$$

ここで、 n_{indx} は1~8の頂点、 $ilp(n_{indx})$ はその頂点のインデックスである。これらの値を用いて、式(2.82)を用いて各頂点の値の重み付けを行う。

$$rdi(n_{indx}) = \left(\frac{1}{\sqrt{xdi(n_{indx})^2 + ydi(n_{indx})^2 + zdi(n_{indx})^2}} \right)^{N_{in}} \quad (2.82)$$

N_{in} は経験的な正数であり、この値が小さいと格子内の流速は各頂点の速度の平均値に近くなり、大きいと最も近い頂点の速度の影響が支配的になることを意味する。以上より、補間後のxyz方向のガス流速 $uint$ 、 $vint$ 、 $wint$ はそれぞれ式(2.83)の形になる。

$$\begin{aligned} uint &= \frac{\sum_{n_{indx}=1}^8 rdi(n_{indx}) u[ilp(n_{indx})]}{\sum_{n_{indx}=1}^8 rdi(n_{indx})} \\ vint &= \frac{\sum_{n_{indx}=1}^8 rdi(n_{indx}) v[ilp(n_{indx})]}{\sum_{n_{indx}=1}^8 rdi(n_{indx})} \\ wint &= \frac{\sum_{n_{indx}=1}^8 rdi(n_{indx}) w[ilp(n_{indx})]}{\sum_{n_{indx}=1}^8 rdi(n_{indx})} \end{aligned} \quad (2.83)$$

図2.11にオリジナルコードにおける流速不連続性のイメージを簡易的に2次元場で示す。また、図2.12、2.13に N_{in} の影響を、それぞれ2次元場における1次元の流速と加重平均による計算格子の速度勾配で示す。この結果を踏まえ、本研究では $N_{in} = 2$ とした。

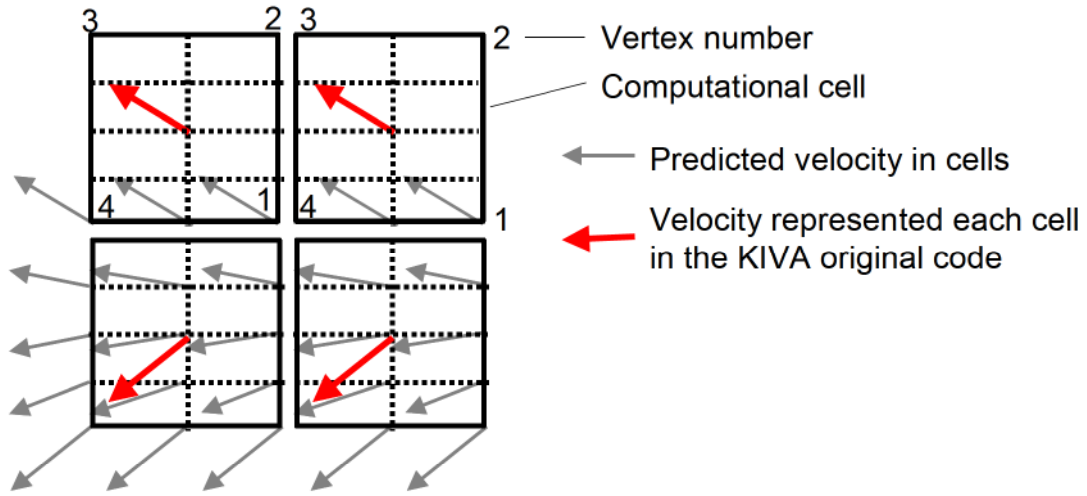


図 2.11 隣接セルにおける流速不連続性のイメージ⁽¹⁰¹⁾

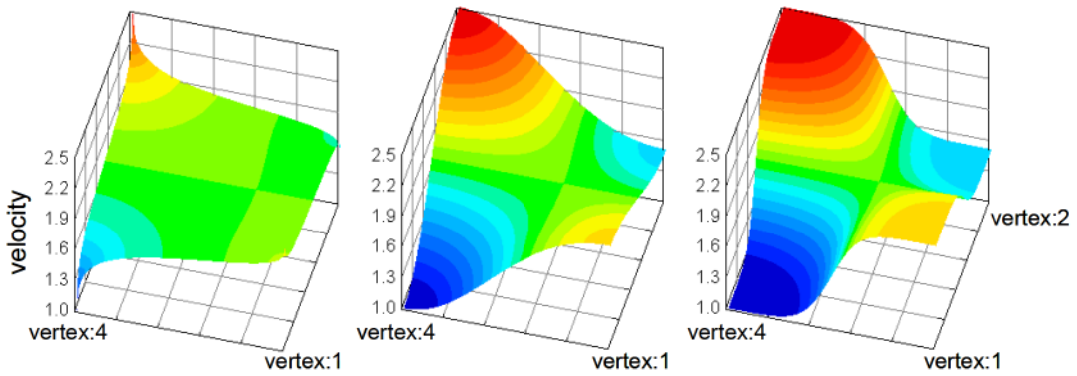


図 2.12 加重平均による計算格子内の速度補正効果⁽¹⁰¹⁾

Left: $N_{in} = 0.5$ Middle: $N_{in} = 2.0$ Right: $N_{in} = 4.0$

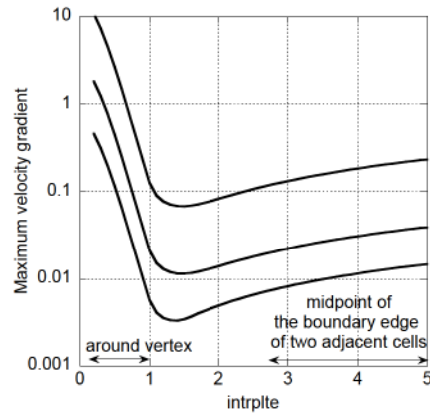


図 2.13 加重平均による計算格子の速度勾配の影響⁽¹⁰¹⁾

2.9 化学反応の数値計算法

詳細な素反応過程を考慮するために、CHEMKIN-II パッケージ内の各種サブルーチンを KIVA4 コードに連成した。化学反応方程式における解の硬直性を避けるため、通常は陰解法 ODE ソルバーである DVODE⁽¹⁰⁶⁾を使用する。しかしながら、行列演算は各セルに対して計算されているため、かなりの計算時間を化学反応の計算に費やされている。これに対して、本研究では高速な陽解法 ODE ソルバーである ERENA を KIVA4 コードに適用し、詳細化学反応の計算時間の短縮を図った。

森井らによって開発された ERENA は、Mott らが開発された CHEMEQ2⁽¹⁰⁷⁾の α -QSS 法をベースに提案したアルゴリズムで、一段階の陽的な時間積分法として知られている。陰解法ソルバーである DVODE に比べて初期化や行列演算を必要とせず、現段階のタイムステップに関連する情報のみを必要とする。このユニークな機能は、乱流燃焼解析における化学反応計算に関して非常に有効であり、近年様々な取り組みが盛んに行われている⁽¹⁰⁸⁾⁽¹⁰⁹⁾⁽¹¹⁰⁾⁽¹¹¹⁾⁽¹¹²⁾。ここでは、反応に伴う化学種の変化に関する手法、いわゆる改良した準定常法 (α -QSS 法) を次の 2 つの式で表す。

$$\frac{\omega_i^n}{\rho} = \frac{q_i^n - p_i^n y_i^n}{1 + \alpha_i^n p_i^n \Delta t^n} \quad (2.84)$$

$$\alpha_i^n (p_i^n \Delta t^n) = \frac{1 - (1 - e^{-p_i^n \Delta t^n}) / (p_i^n \Delta t^n)}{1 - e^{-p_i^n \Delta t^n}} \quad (2.85)$$

ここで、 ω_i は化学種 i の質量あたりの反応生成速度であり、 n はステップ番号である。 q_i と $p_i y_i$ はそれぞれ生成速度と減少速度、 α は式 (2.85) に示したように $p \Delta t$ の関数である。

また、計算時間をさらに短縮するため、詳細化学反応計算の計算格子に関する並列化を行った。本研究ではデスクトップパソコンを用いて計算することを想定し、共有メモリ型の並列アルゴリズムである OpenMP を使用した⁽¹¹³⁾。化学種の濃度変化の積分計算に関しては、計算格子毎に反応計算を各 CPU スレッドに割り振ることで行った。各 CPU スレッドのスケジューリングは動的に変化するように設定した。陽解法は反応計算の硬直性の違いによって計算時間が大きく変化するので各計算セルで要する計算時間が大きく異なるため、動的なスレッド指定は計算効率の向上に非常に有効であると言える。

図 2.14 に従来の陰解法ソルバー DVODE と陽解法ソルバー CHEMEQ2 を用いた計算時

間の比較を示す. これは, 1 スレッドの DVODE で 1 ヶ月半を要していた計算を, 8 スレッドの CHEMEQ2 を用いることで, 1 日以内で完了できることを示しており, デスクトップパソコンにおいても実用的な計算時間でパラメータスタディが可能になることが明らかである.

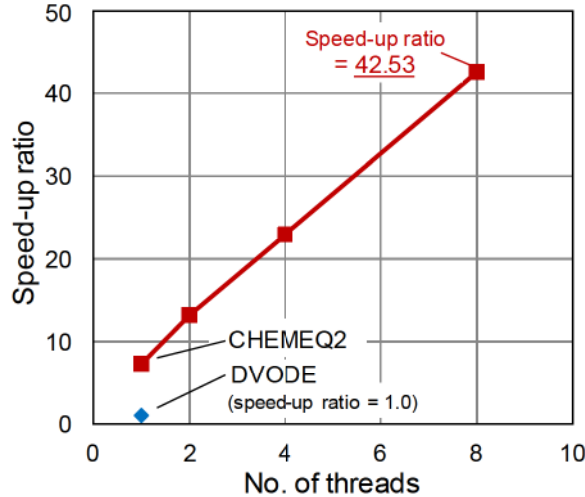


図 2.14 ODE ソルバーの違いによる計算時間の比較⁽¹¹²⁾

2.10 PaSR モデル

KIVA シリーズに代表される CFD コードでは有限体積法を用いて離散化を行っており, 各計算格子内は空間的に均一とみなされている. そのため, 化学反応は対象となる反応物質が原子レベルで衝突して進行するのにもかかわらず, 雰囲気場の温度・圧力・ガス組成によっては直ちに反応が進行してしまう. この問題に対して Golovitchev は反応物質の乱流混合の影響を考慮した PaSR モデルを提案している⁽¹¹⁴⁾. 本モデルは各計算格子を完全均一容器ではなく, 部分的に攪拌された容器とみなし, 反応に関わる各化学種の混合が十分に進行した反応領域と未反応領域に分離する.

PaSR モデルにおける混合特性時間 τ_{mix} は, 着目する計算格子の粘性係数 μ , 乱流エネルギー k とその消散率 ε , 及びモデル定数 C_{mix} によって決定され, 乱流エネルギーと消散率により見積もられる.

$$\tau_{mix} = C_{mix} \left(\frac{k}{\varepsilon}\right)^\alpha \left(\frac{\mu}{\varepsilon}\right)^{\frac{1-\alpha}{2}} \quad (2.86)$$

$$\alpha = 3 \frac{D-3}{1+D} \quad (2.87)$$

式 (2.86) 中の粘性係数 μ は KIVA コードでは Sutherland 型で表され、定数 μ_1 , μ_2 , 及び計算格子温度 T より計算される. α は式 (2.87) から求められ, D はフラクタルディメンジョンを表すモデル係数である. その粘性係数 μ は式 (2.88) に示す. 図 2.15 のように計算格子の温度上昇に従い, 粘性係数も上昇する. なお, 定数 μ_1, μ_2 はそれぞれ $1.457 \times 10^{-5} (\frac{g}{cm s \sqrt{K}})$, 110 (K) とした.

$$\mu = \frac{\mu_1 \times T^{\frac{3}{2}}}{T + \mu_2} \quad (2.88)$$

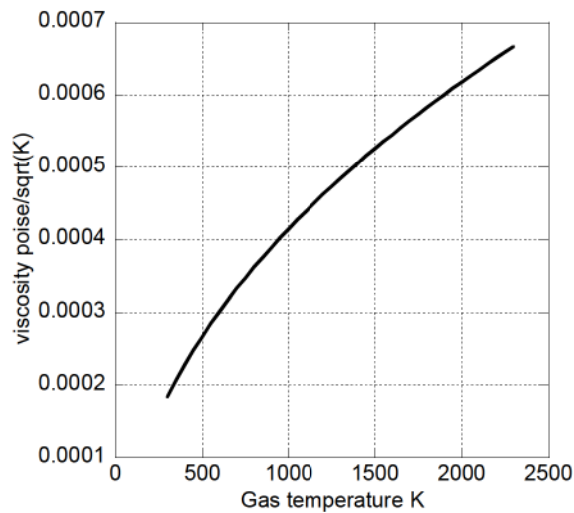


図 2.15 温度上昇と粘性係数の関係⁽¹⁰⁾

以上が本計算モデルの計算手法であるが, PaSR モデルの本質は濃度変化が乱流混合速度と化学反応速度の調和平均で表現されることにある. 任意の化学種 X_k について, タイムステップ τ の間に反応領域ではその濃度 $[X_k]_0$ が $\rightarrow [X_k]$, 一方の未反応領域では反応が進行しないため濃度は $[X_k]_0$ のままとなり, 両者が混合特性時間 τ_{mix} の間に混合して $[X_k]_1$ に至るという概念である. なお, τ_c は化学種が平衡濃度 $[X_k]_{eq}$ に達するまでの時間, 反応特性時間を表す.

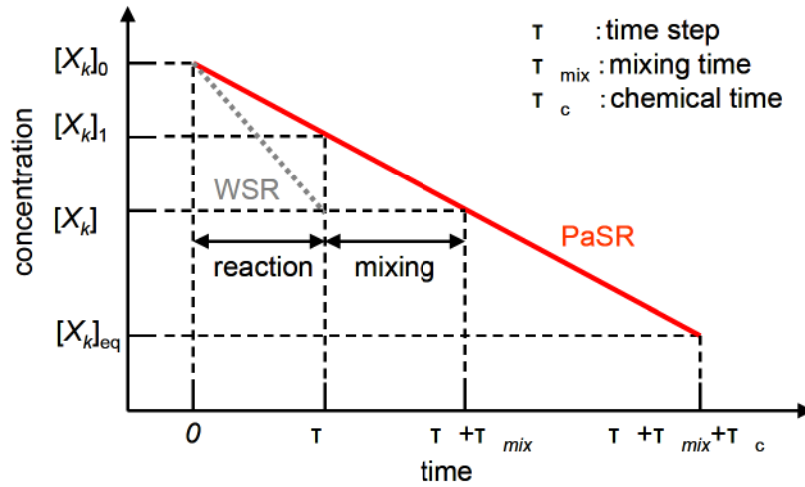


図 2.16 混合特性時間の概念図⁽¹⁰¹⁾

図 2.16 より化学種 X_k の濃度の変化速度は式 (2.89) と表すことができる.

$$\frac{d[X_k]}{dt} = \frac{[X_k]_1 - [X_k]_0}{\tau} = \frac{[X_k]_{eq} - [X_k]}{\tau_c} = \frac{[X_k]_{eq} - [X_k]_1}{\tau_c + \tau_{mix}} \quad (2.89)$$

平行濃度 $[X_k]_{eq}$ がゼロであるとする、式 (2.90) となり、濃度変化が乱流混合速度と化学反応速度の調和平均で表現される.

$$\frac{d[X_k]}{dt} = -\frac{[X_k]}{\tau_c} = -\frac{[X_k]_1}{\tau_c + \tau_{mix}} = \frac{1}{2} H\left(-\frac{[X_k]_1}{\tau_c}, -\frac{[X_k]_1}{\tau_{mix}}\right) \quad (2.90)$$

2.11 壁関数の改良

本研究では KIVA4 標準壁面せん断応力モデルのベースに Angelberger らにより提唱された壁面近傍の非等温性、及び非定常性を考慮した修正モデル⁽¹¹⁵⁾に着目し、さらに Pope が提案した表面粗さを考慮した壁面二層モデル⁽²⁵⁾を計算コードに導入した。まずは壁関数モデルの仮定を示す。

- 壁面と垂直方向における勾配 (gradients) は、壁面と平行なそれよりもはるかに大きいものみならず。
- 流速ベクトルは、平坦な壁面と平行である。

- ・ 圧力勾配は考慮しない。
- ・ 粘性散逸，濃度拡散に伴う熱移動，及びエネルギー流束に与えるエンタルピの拡散効果は考慮しない。
- ・ 熱放射による影響は無視する。
- ・ 気体は理想気体として扱う。

本研究における壁面熱流束の算出には，①KIVA4 標準壁面せん断応力モデル，② Angelberger らの非等温壁面モデル，③表面粗さを考慮した壁面二層モデルを組み込んで使用した。壁法則に関する距離と速度の方程式は以下のようにまとめられる。

2.11.1 KIVA4 標準壁面せん断応力モデル

$$F = \begin{cases} \frac{y^+ Pr_l / Pr_t}{\frac{\ln y^+}{\kappa} + B + 11.05(Pr_l / Pr_t - 1)} & (y^+ > 11.05) \\ 1.0 & (y^+ < 11.05) \end{cases} \quad (2.91)$$

y^+ は壁面からの無次元距離であり，通常に $y^+ = \frac{u_\tau}{\nu} y$ で定義される。その中に u_τ は壁摩擦速度であり， y と ν はそれぞれ壁面境界層において壁までの距離と流体側の動粘性になる。 Pr_l と Pr_t は層流のプラントル数と乱流のプラントル数であり，それぞれ0.74，0.9と設定した。ここで，滑らかな壁面とし，カルマンの定数 κ と B は0.43と5.5を使用した。壁面の熱流束に関する計算式は式(2.92)のように定義される。

$$q_w = \frac{\rho \nu C_p F (T_g - T_w)}{Pr_l y} \quad (2.92)$$

T_g ， T_w ， C_p ， ρ はそれぞれガス温度，壁温度，定圧比熱，ガス密度である。壁摩擦速度は式(2.93)を用いて計算される。

$$u_\tau = c_\mu^{1/4} K^{1/2} \quad (2.93)$$

ここで、乱流エネルギーは、LESモデルにおけるサブグリッドスケールの乱流エネルギーになるため、式(2.94)のように置き換えることができる。 c_μ は定数であり0.09を使用した。

$$u_\tau = c_\mu^{1/4} K^{sgs^{1/2}} \quad (2.94)$$

2.11.2 非等温壁面モデル

Angelbergerらは以下のように壁からの無次元距離 η^+ 、無次元速度 ψ^+ と無次元温度 θ^+ を定義した。 ν_w と ρ_w はそれぞれ壁近傍の動粘性と密度になる。

$$d\eta^+ = \frac{\nu_w}{\nu} dy^+, \quad d\psi^+ = \frac{\rho}{\rho_w} dy^+, \quad d\theta^+ = \frac{\rho}{\rho_w} dT^+ \quad (2.95)$$

また、壁法則に関する距離と速度の方程式は式(2.96)、(2.97)のように新しく定義されている。

$$\psi^+ = \begin{cases} \eta^+ & (\eta^+ \leq 10.8) \\ 2.44 \ln \eta^+ + 5.0 & (\eta^+ > 10.8) \end{cases} \quad (2.96)$$

$$\theta^+ = \begin{cases} Pr \eta^+ & (\eta^+ \leq 13.2) \\ 2.075 \ln \eta^+ + 3.9 & (\eta^+ > 13.2) \end{cases} \quad (2.97)$$

壁面の熱流束に関する計算式は式(2.98)のように計算される。

$$q_w = \frac{\rho_w c_p u_\tau T_w \ln(T_g/T_w)}{\theta^+} \quad (2.98)$$

ここで、 ρ_w は計算セルの圧力を一定と仮定し、 T_w より求める。壁摩擦速度 u_τ は式(2.94)を用いて計算される。

2.11.3 表面粗さを考慮した壁面二層モデル

さらに, S. Pope⁽²⁵⁾の粗い壁面に関する壁法則を実装した. 無次元化された速度 u^+ は次のように定義される.

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln\left(\frac{y}{s}\right) + \tilde{B}(s^+) \quad (2.99)$$

s^+ は粘性単位を持つ表面粗さの代表長さとし, $s^+ = \frac{u_\tau}{\nu} s$ で定義されており, ここの s が表面粗さである. パラメータ \tilde{B} は s^+ の関数であるが, 次のように計算される. ここで, B_c は表面粗さ限界であり, 8.5 に設定した. また, 本研究では壁面粗さの設定は工業用鋼鉄として 0.045mm を使用した.

$$\tilde{B} = \begin{cases} B + \left(\frac{1}{\kappa}\right) \ln s^+ & (s^+ < 5.83) \\ \tilde{B}_{max} & (5.83 \leq s^+ < 30.0) \\ B_c & (s^+ \geq 30.0) \end{cases} \quad (2.100)$$

上記二つ壁モデルと異なり壁摩擦速度 u_τ は式 (2.101) を用いて計算される.

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (2.101)$$

ここで, τ_w は壁面摩擦応力であり, まず壁面近傍のセルにおいて局所的層流状態として計算する. その後, 初期値として, 乱流状態の壁面摩擦応力の計算を行う.

2.12 まとめ

以上、数値解析を実施するにあたって用いる汎用 3D-CFD シミュレーションコードである KIVA4 の構成について説明した。まず、本研究で導入した LES モデルについて述べた。具体的には、各支配方程式にボックスフィルター操作を適用することによって、乱流における渦のスケールを分解する方法を記述した。そのうち、改善されたサブグリッドスケールの乱れに関する SGS 応力項のモデル化、対流項の差分スキームの改良、対流項の時間発展の改良、壁近傍のモデル化などについて詳細に説明した。

次に、ディーゼルエンジンにおける拡散燃焼過程に対して大きな影響を与える噴霧微粒化モデルの概要、格子依存性を低減する手法、混合気形成の制御方法について記述した。

また、本研究では高速な陽解法 ODE ソルバーである ERENA を KIVA4 コードに適用する方法を説明し、これにより詳細化学反応計算時間の大幅な短縮を図った。さらに、微粒子の生成過程について、成長、核生成、低級不飽和炭化水素 (C_2H_2) による表面成長反応、活性種 (OH , O_2) による表面酸化反応、衝突・凝集の一連の過程を記述する現象論モデルの数値解析方法を示した。

これらの手法については、第3章と第4章でそれぞれ説明する定容容器内とエンジン内での噴霧燃焼の数値シミュレーションにおいて適用する。

第 3 章 定容容器を用いたディーゼル噴霧の解析

3.1 まえがき

本章では定容燃焼器を用いた噴霧燃焼の高速度観察を行い，第 2 章で述べた各モデルを連成した計算コードによる計算結果との比較を通じて精度検証を実施する．はじめに，格子依存度を調べるために，それぞれサイズが違う 4 種類の計算格子を使用し，同じ条件で従来の乱流解析手法である RANS モデルと LES モデルの計算結果と実測結果をそれぞれ比較する．これらの結果の比較から，計算上の問題点を明らかにし，モデル改良して非定常燃焼に適応し，ディーゼル噴霧燃焼の解析方法を検討する．さらにモデルの最適化により，微粒子の空間的分布を解析し，RANS と LES による結果と実験結果を比較し，LES モデルの妥当性を確認する．

3.2 定容容器を用いてディーゼル噴霧解析

3.2.1 計算条件

まず，定容容器を用いてディーゼル噴霧解析を行う．計算条件は ECN (Sandia Engine Combustion Network) で公開された実験条件 SPRAY A を使用する⁽¹⁾．表 3.1 に示すように，燃料の物性値として $n\text{-C}_{12}\text{H}_{26}$ を用いる．容器内の雰囲気圧力を 6.05 MPa，雰囲気温度を 891.9 K，雰囲気場の密度を 23.01 kg/m^3 ，噴射圧力を 152.7 MPa と設定する．噴射率についてはトップハートの噴射率波形を使用する．噴霧パーセルは 3,000 個とし，雰囲気ガスとして CO_2 ， N_2 ， H_2O から組成した非燃焼場とする．また，用いる主なサブモデルを表 3.2 に示す．

表 3.1 計算条件

Ambient condition	891.9 K, 6.05 MPa, 23.01 kg/m ³
Ambient gas	N ₂ , CO ₂ , H ₂ O
Common-rail injector	Φ0.084×1 (0 deg.)
Injection pressure	152.7 MPa
Injection quantity	3.46 mg
Injection duration	1.54 ms
Fuel	n-C ₁₂ H ₂₆
Fuel temperature	373 K

表 3.2 各サブモデル

Turbulence model	RNG k-ε, LES-Smagorinsky, LES-k-equation
Spray model	Breakup: KH-RT Collision model: O'Rourke, Nordin model Drag-law: Dynamic model
Time step	Variable based on spray, evaporation, combustion processes
Turbulence chemistry interactions model	Direct integration of detailed chemistry (Chemkin), WSR or PaSR concept
Convective transport scheme use for momentum	QSOU, CD

3.2.2 計算格子の選定

本研究で用いた計算領域を図 3.1 に示す。円筒形の三次元領域を想定し、底面の直径が 30mm、高さが 80mm の定容容器とした。格子依存度を調べるために、表 3.3 のように 4 種類の格子サイズを使用した。

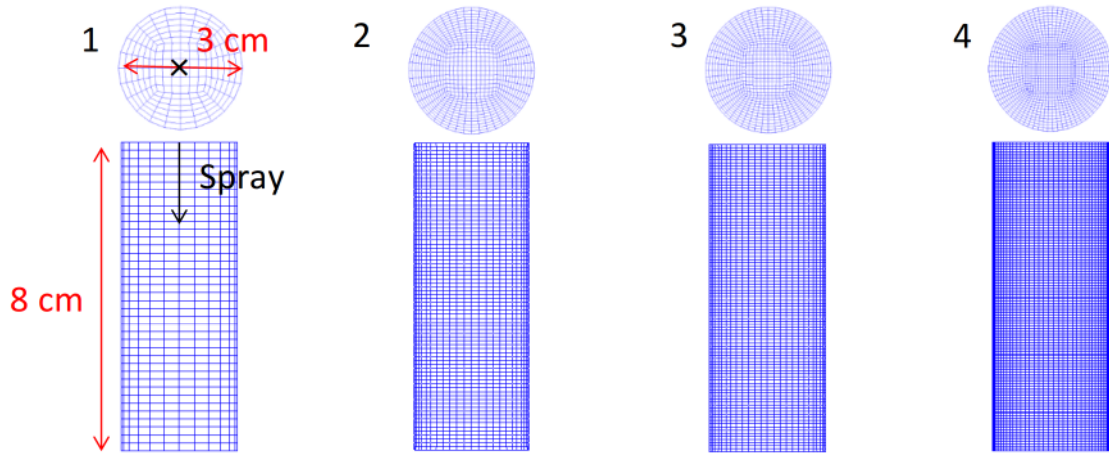


図 3.1 定容容器のメッシュ

表 3.3 計算格子の仕様

No.	dx mm	dy mm	dz mm	No. of grid
1	2.0	2.0	2.0	7,020
2	1.0	1.0	1.0	56,880
3	0.8	0.8	0.8	85,930
4	0.6	0.6	0.6	170,582

3.2.3 計算結果および考察

蒸発非燃焼場におけるディーゼル噴霧の計算結果を考察する。燃焼解析をより正確に行うためには、まず、蒸発非燃焼場において燃料の分配、つまり噴霧の微粒化や、蒸発特性を正しく記述することが非常に重要である。図 3.2 にそれぞれ、RANS と Smagorinsky-LES 乱流モデルの計算結果と実験データの比較を示す。燃料噴射開始後 $t = 0.25$ ms で噴霧の先端到達距離が一定値になり、それ以降はほぼ定常になることが分かる。この結果から第 2 章で述べた格子の頂点間の速度補間修正と KH-RT 分裂モデルが噴霧の微粒化を合理的に予測することが可能と考えられる。また、計算格子サ

イズの変化による予測結果に及ぼす影響が比較的に小さいことも認められた。液相噴霧に対して本研究で用いた計算手法によって、メッシュ依存性が低減されたことが分かる。

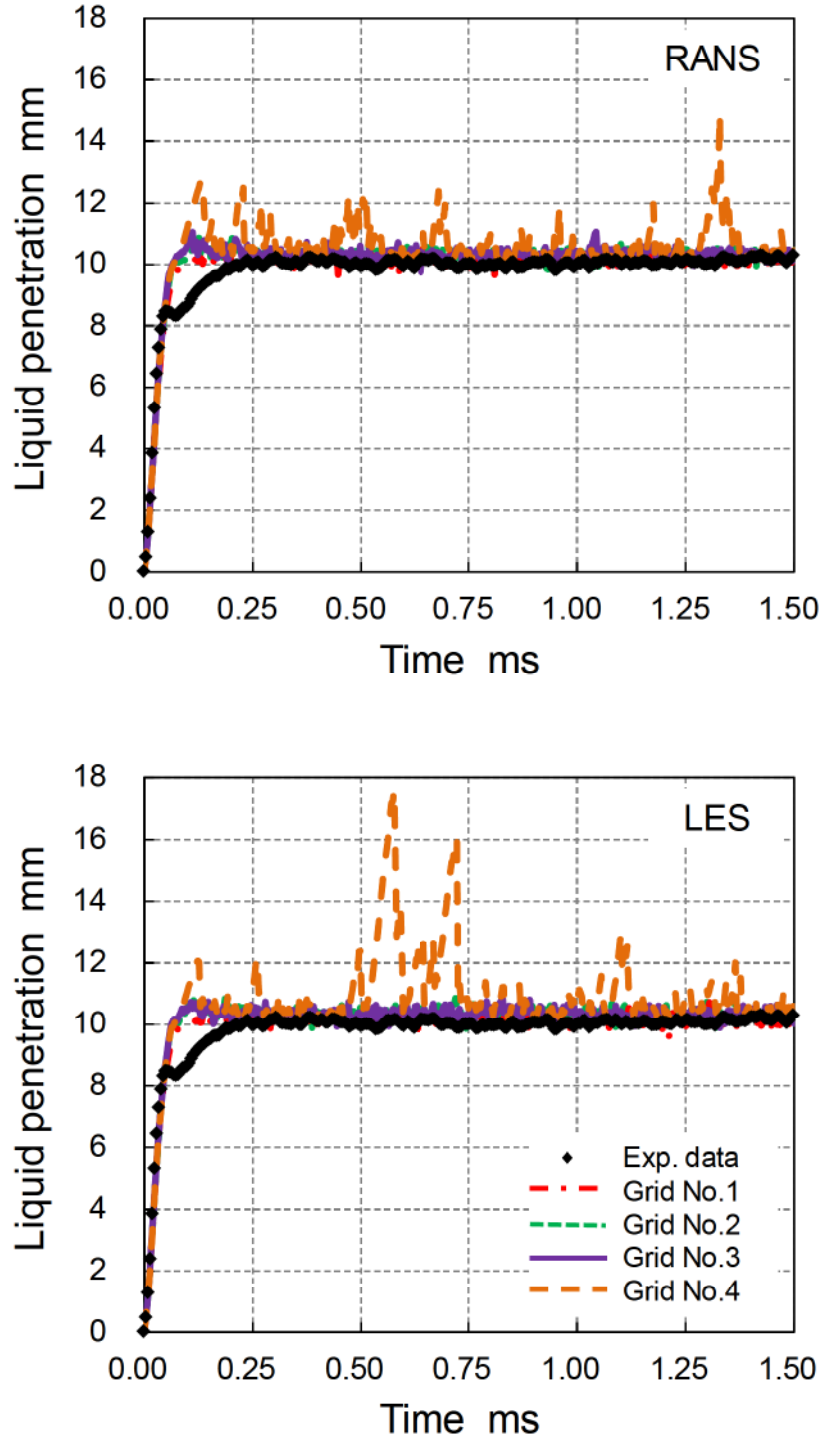


図 3.2 各メッシュによって蒸発非燃焼噴霧の液相先端到達距離の比較

次に、各噴射時 TASI=0.3, 0.6, 0.9, 1.2, 1.5 ms における瞬時の噴霧外形を図 3.3 に示す. RANS モデルでは, 使用する計算格子によって蒸気相外形に変化が見られず, 噴霧に及ぼす計算格子の影響が少ないことが確認できる. また, 計算された蒸気相外形は軸対称であり, 噴霧外縁における非定常的な挙動が解析されていないことが分かる.

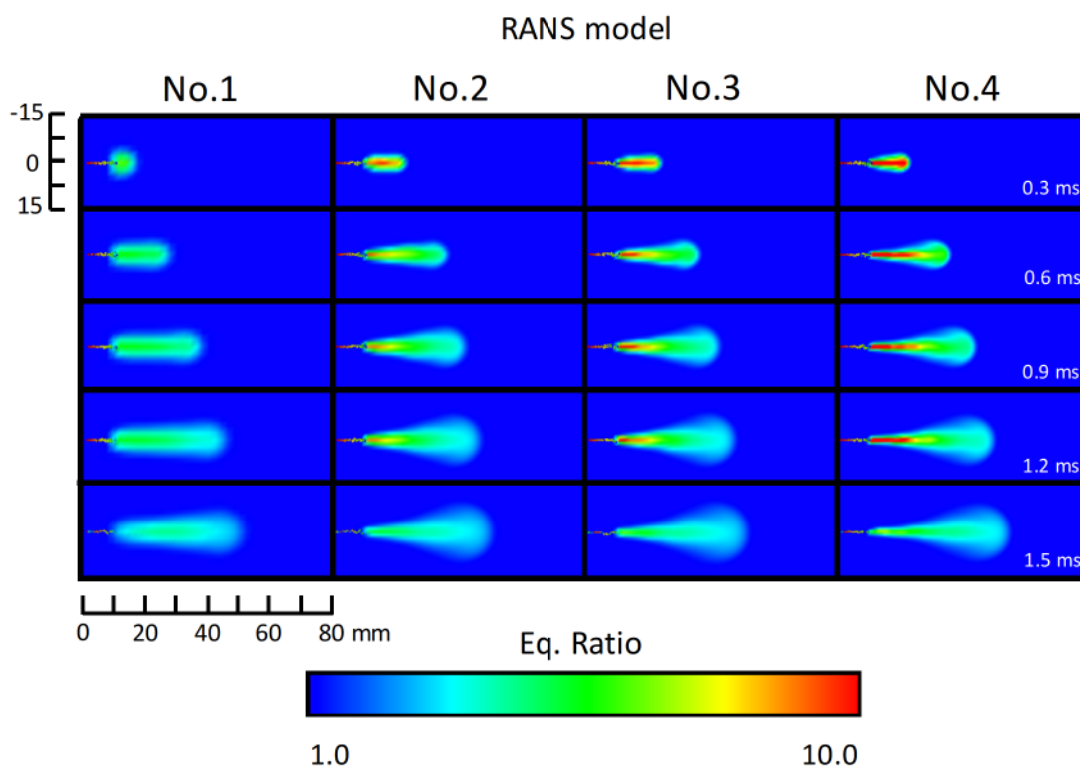


図 3.3 RANS モデルによる蒸発噴霧の外形

一方, 図 3.4 と 3.5 に示すように, LES モデルの計算結果では, 噴霧軸方向に比べ, 半径方向への発達もあり, 蒸気相形状や噴霧外縁部における非定常な挙動が解析されていることが分かる. さらに, 格子精度が上がるにつれ, 噴霧半径方向への発達が促進し, 蒸気相内部の乱流渦構造が計算格子で捉えられるようになり, 計算の精度が向上するものと考えられる.

次に, 渦の生成, あるいは渦構造の形態変化に関連する運動方程式の対流項に関する空間離散法において, 二次精度を有する中心差分法を用いて計算した結果を図 3.6 と 3.7 に示す. 中心差分法において, ディーゼル噴霧の中心軸に対して左右非対称な

分布および噴霧外縁部における不均一や非定常的な特徴を再現していることが分かる。一方、QSOUの結果では、ディーゼル噴霧が半径方向において気相の拡散が少なく、強い運動量を持ったまま計算領域の下流面に達したことが分かる。しかし、計算格子幅を小さくすることにより、QSOUでも、気相の渦構造により噴霧半径方向に拡散し、非対称、不均一な分布となっており、LES解析における強い格子依存性が分かる。

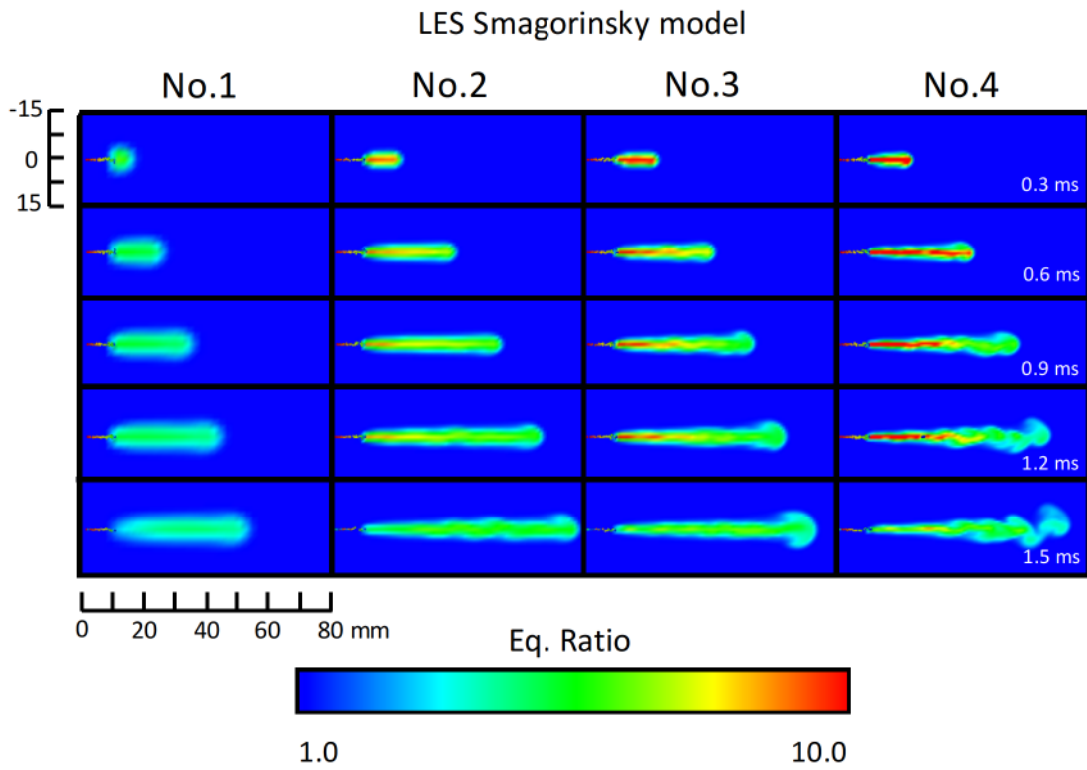


図 3.4 QSOU 法を用いた LES (Smagorinsky) モデルによる蒸発噴霧の外形

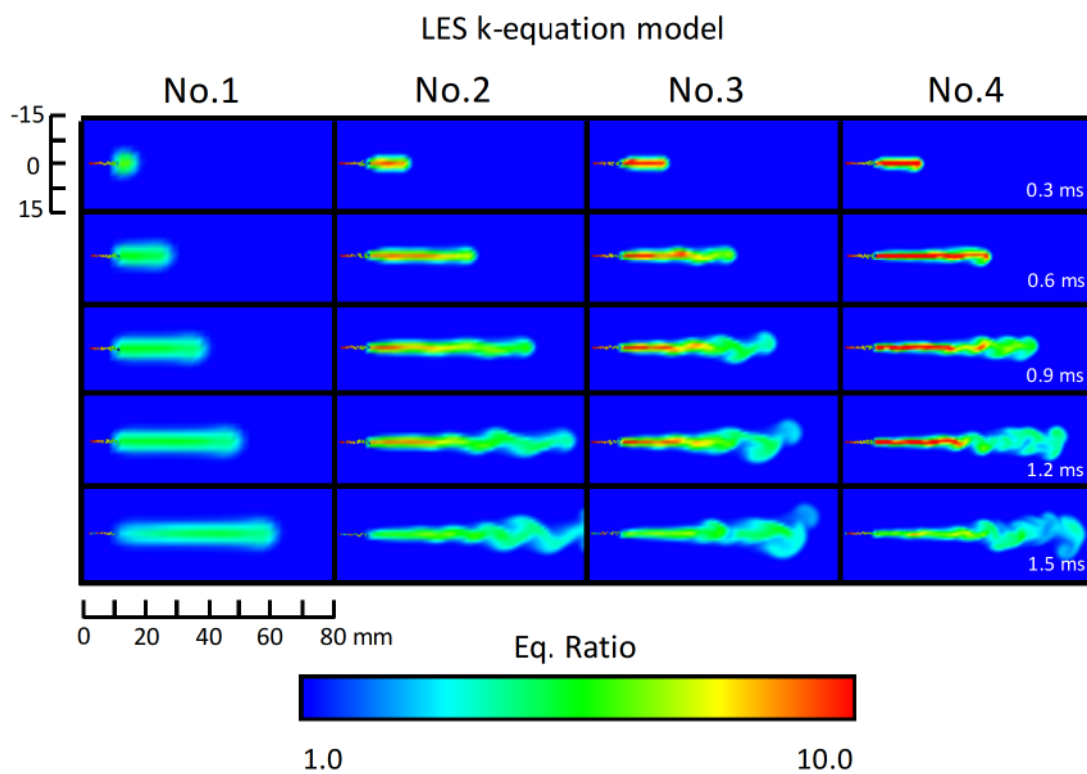


図 3.5 QSOU 法を用いた LES (k-equation) モデルによる蒸発噴霧の外形

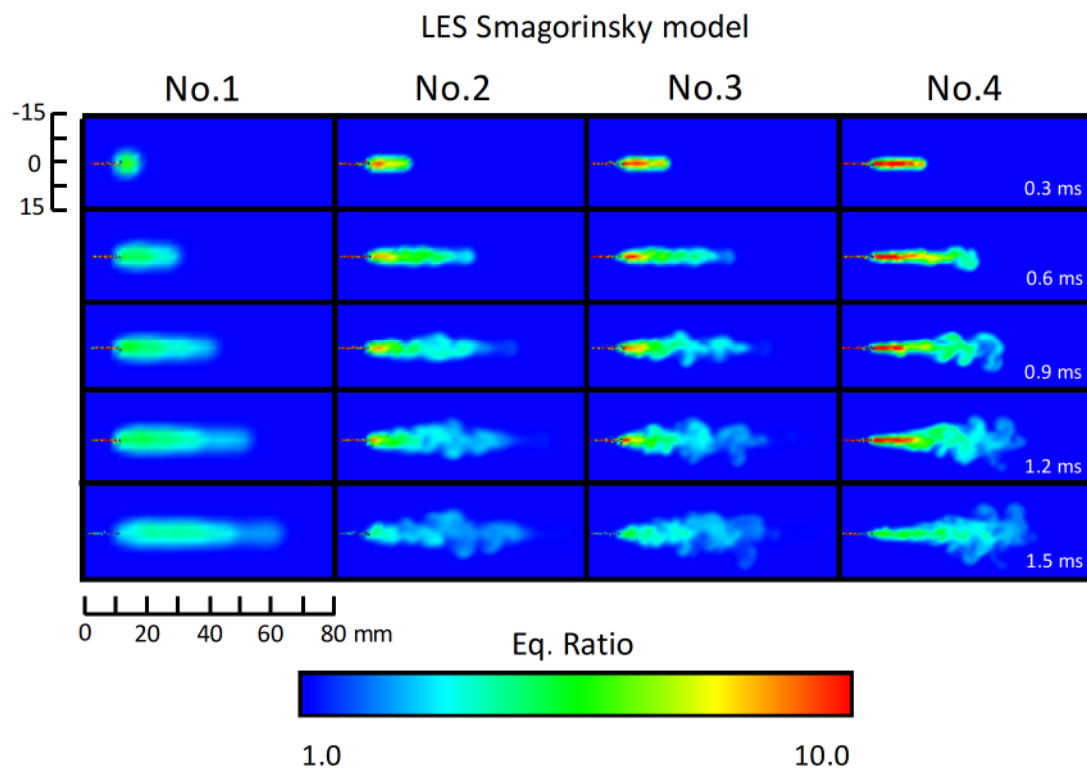


図 3.6 CD 法を用いた LES (Smagorinsky) モデルにおける蒸発噴霧の外形

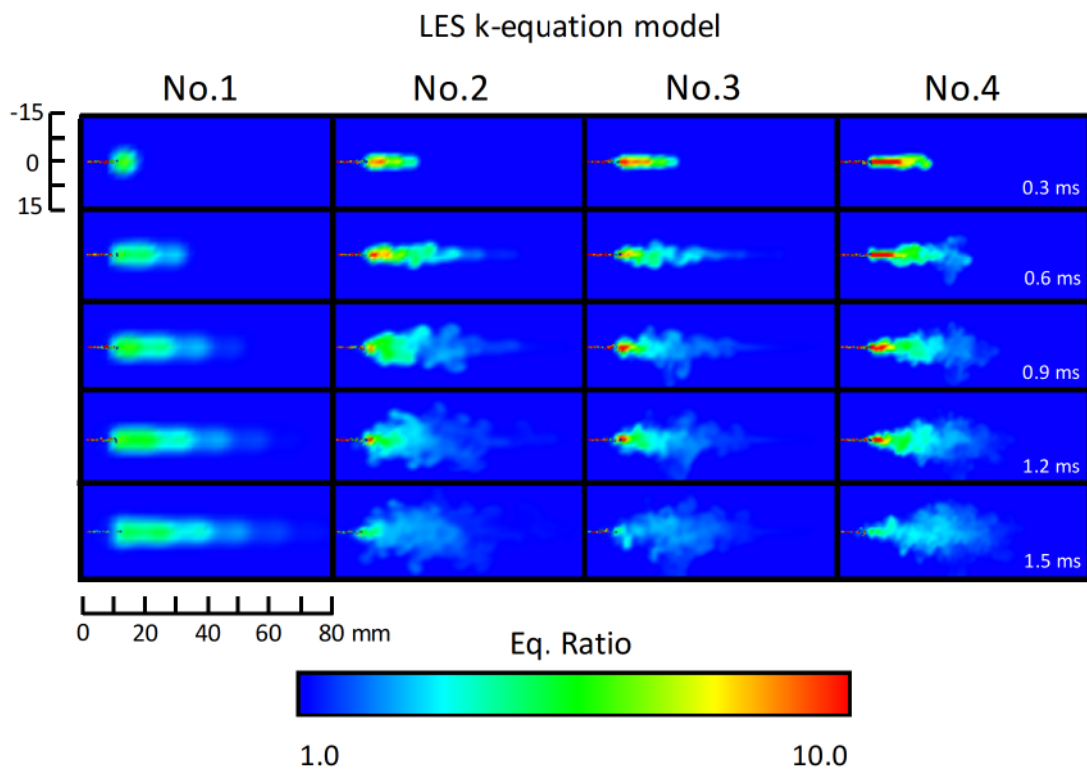


図 3.7 CD 法を用いた LES (k-equation) モデルにおける蒸発噴霧の外形

図 3.8 に、上述した RANS モデルと LES モデルにおける噴射開始から 4 ms までの計算時間の比較を示す。粗い計算格子を用いた場合には、両方の LES モデルは RANS モデルより計算時間がかかったことが分かる。これに対して、格子数を増やし、細かく分割する場合において計算時間が短縮されたことが見て取れる。

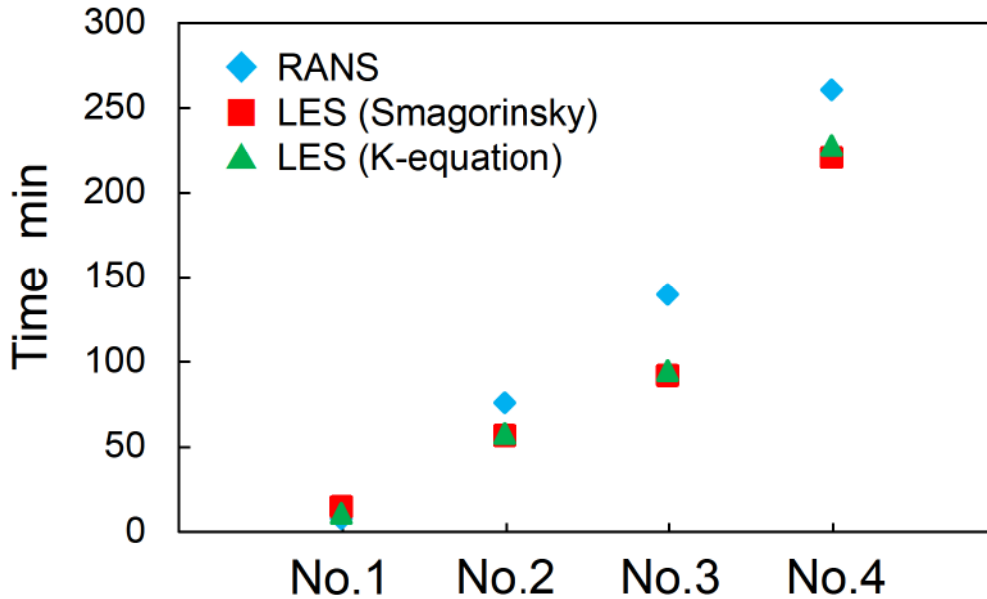


図 3.8 RANS モデルと LES モデルによる計算時間の比較

ここで、Sandia ECN の実験値を用いて、RANS モデルと LES-Smagorinsky モデルによる計算結果との比較を図 3.9 に示す。Pickett らは Schlieren 法を用いて、蒸発噴霧の成長過程を高速カメラによって連続的に観察された⁽²⁾。この結果と比べて、LES は外縁部において非定常性を再現していることが分かる。また、対流項において空間離散スキームの改良によって噴霧が半径方面に拡散する形が変化している。対流項の離散手法によって運動方程式の解として速度勾配に寄与することが分かる。このため、適正な空間離散手法を用いることで運動方程式を解く必要があると考えられる。ここで QSOU 法と CD 法を用いた計算結果について考察する。QSOU は人工粘性項が入ってしまうため、高い数値粘性を持つことによって計算安定性に関して優れるものの、その高い数値粘性が渦構造に影響を及ぼし、蒸発噴霧が半径方面への拡散を過小に評価する恐れがあった。逆に、CD では人工粘性項が入っていないため、渦の発生、そ

して渦構造を適切に発展させることができる。しかし、数値振動が生じやすいため、細かい時間刻みや、計算格子の高解像度を常に求められている。

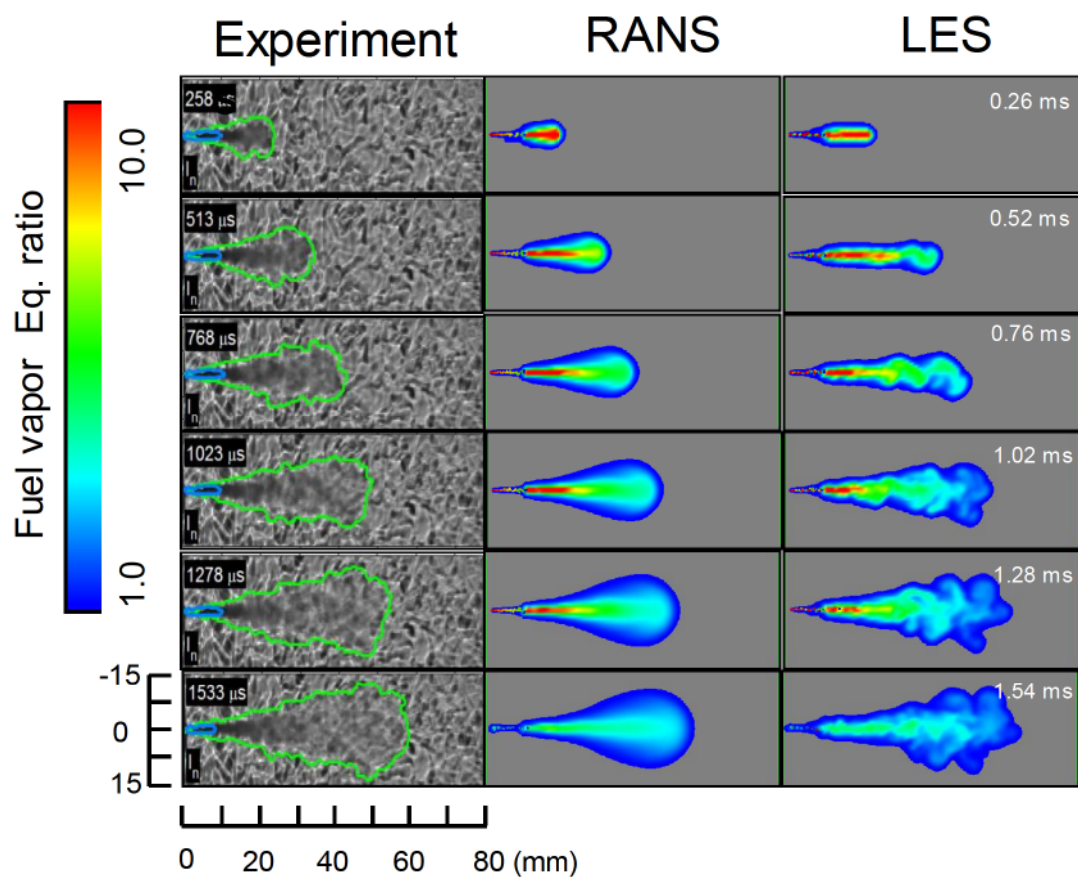


図 3.9 時間発展による噴霧外形の比較

左：実験データ⁽¹¹⁷⁾ 中：RANS モデル 右：CD 法を用いた LES (Smagorinsky) モデル

3.3 ディーゼル噴霧燃焼解析

ディーゼル噴霧内部において、噴霧と酸素は混合過程によって不均一な分布になりやすいため、Soot および NOx を多く生成される。エンジンの燃焼室内における乱流挙動が燃料分散の不均一分布を支配すると考えられ、そのような場での Soot と NOx の詳細な生成過程を把握することが重要である。そこで、エンジン内の流動を高精度で予測できる数値計算モデルが必要となる。LES 解析は従来手法である RANS に比べ、予測の高精度化が期待される。また、上述した定容容器内の蒸発噴霧を対象とした LES モデルの格子依存性の解析により、二次精度の中心差分法は計算安定性と高い計算精度の両方を有することが分かった。そこで、以後の燃焼計算では、計算格子サイズ 0.6 mm とし、運動量方程式の空間離散法に中心差分法を用いて計算を行った。

3.3.1 計算条件

ここでは、ディーゼル噴霧燃焼についてモデルの検証を行う。3.1.1 と同様に ECN で公開された実験条件 SPRAY H を計算条件として使用し、その条件を表 3.4 に示す。燃料の物性値を n-C₇H₁₆ として使用する。容器内において雰囲気圧力 4.21 MPa、温度 1000 K、密度 14.8 kg/m³ の雰囲気場として設定し、噴射圧力は 154.0 MPa とした。噴霧計算と違って噴射率の変動を考慮し、図 3.10 に示す実際の噴射率波形を用いる。また、噴霧パーセルは 3,000 個とし、O₂、CO₂、N₂、H₂O を含む初期ガスとし、組成割合を表 3.5 に示す。

表 3.4 計算条件

Ambient condition	1000 K, 4.21MPa, 14.8 kg/m ³
Ambient gas	O ₂ , N ₂ , CO ₂ , H ₂ O
Common-rail injector	Φ0.1×1 (0 deg.)
Injection pressure	154.0 MPa
Injection quantity	17.8 mg
Injection duration	6.8 ms
Fuel	n-C ₇ H ₁₆
Fuel temperature	373 K

表 3.5 雰囲気ガスの組成

Molar percentage of ambient gases			
O ₂	N ₂	CO ₂	H ₂ O
21.0	69.33	6.11	3.56

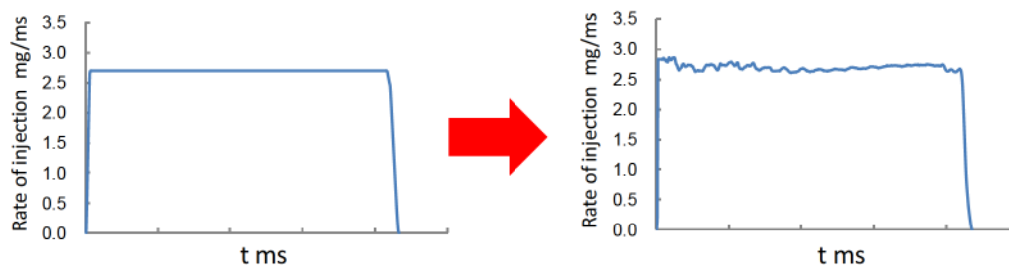


図 3.10 噴霧燃焼の計算に用いた噴射率の変更

3.3.2 計算結果および考察

3.3.2.1 噴霧火炎内部の温度分布

各噴射時 TASI=0.48, 0.74, 1.00, 1.26, 1.52 ms における瞬時の温度分布を図 3.11 に示す. RANS モデルでは, 計算された温度分布は軸対称であり, 時間平均化された噴霧火炎を示している. 一方, LES モデルの計算結果により, 噴霧軸方向に比べ, 半径方向への発達もあり, 非定常火炎の挙動が解析されている. 噴霧上流の中心軸付近では, 噴霧液滴の蒸発潜熱により熱が奪われるため, 雰囲気温度よりも温度が低いことが分かる. また, 温度が高い領域が, 噴霧外縁と噴霧下流域に存在する. これは噴霧外縁には拡散燃焼の反応帯が存在し, 下流域が予混合燃焼や拡散燃焼により生じた高温燃焼ガスが存在するため, 温度が高いものと考えられる. このように, 火炎内部の乱流渦構造が計算格子で捉えられるようになり, RANS モデルより計算の精度が向上している.

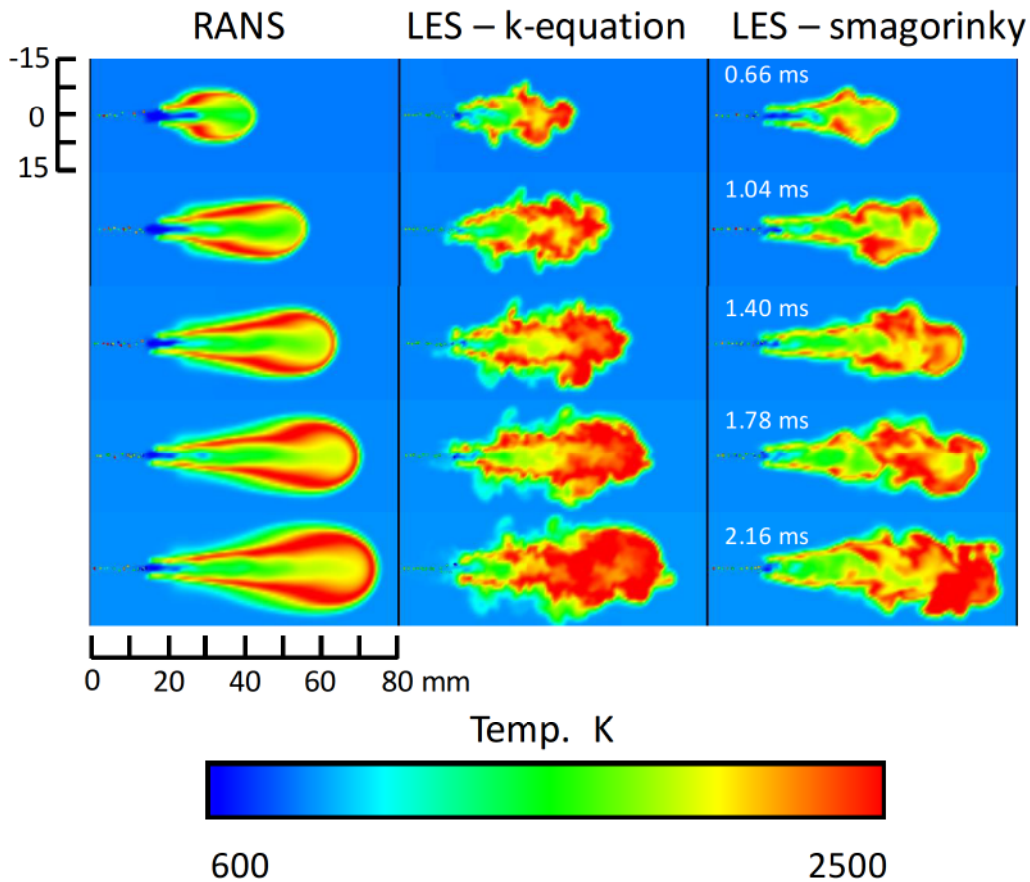


図 3.11 噴霧燃焼の瞬時的な温度分布

左 : RANS モデル 中 : LES (k-equation)モデル 右 : LES (smagorinsky)モデル

3.3.2.2 Soot 生成の実験値と予測結果の比較

Soot 生成の実験値と予測結果の可視化画像を図 3.12 に示す. Idicheria らの実験はレーザ誘起赤熱法 LII (Laser Induce Incandescence) を用いてディーゼル噴霧火炎内の Soot の 2 次元可視化を行った⁽³⁾. ディーゼル噴霧内部の混合気が不均一分布により, Soot の生成過程が示されている. この不均一分布は, 燃焼室内における乱流渦構造に起因すると考えられる. ここで, 計算された噴霧火炎内部における Soot 生成に関する空間分布を実験値と比較し, Soot 生成の傾向をおおむね再現されていることが分かる. また, LES モデルにおいて, 計算された乱流の渦構造により温度や燃焼生成物が噴霧軸に対して空間的に非対称分布になることが明らかである.

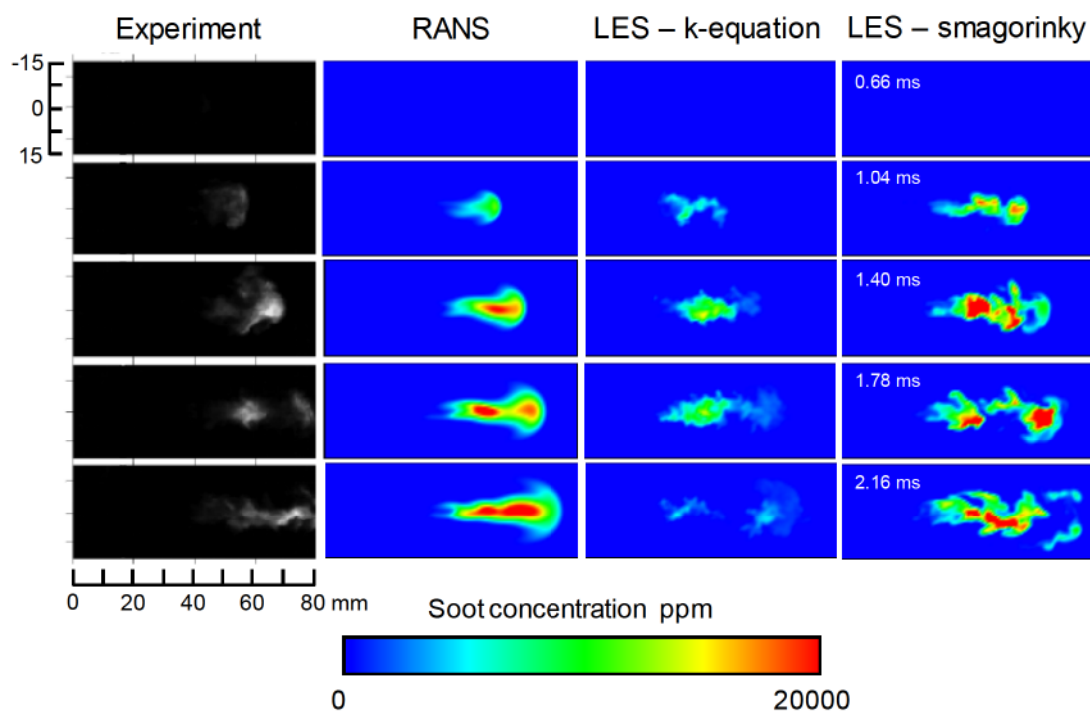


図 3.12 Soot 生成における実験値⁽¹¹⁸⁾と計算結果の比較

3.3.2.3 CD法を用いたLES (Smagorinsky) モデルによるSoot生成に関連する化学種の空間分布の予測

Soot生成過程を理解する上で、それに関連する化学種に関して考察することが重要である。本研究では、詳細な素反応メカニズムと現象論Sootモデルを連成することによって、Soot生成過程に関与する化学種の解明を可能にした。ここで、LESモデルを用いてSootの平均粒子径、数密度の分布、化学種の空間分布について考察する。図3.13に、 $t = 0.66, 1.04, 1.78, 2.16$ msにおけるSoot前駆体Acenaphthylene (A_2R_5)、表面成長に関与する化学種 C_2H_2 および表面酸化に関与するOHの空間分布を示す。

図3.13より、Sootの表面成長が C_2H_2 濃度の増加により顕著に増大し、その傾向が拡散燃焼領域にわたって支配的であることがわかる。一方、Sootの表面酸化反応が拡散燃焼の後期からOH濃度の増加に律速されて増大する傾向が見られる。また、前駆体 A_2R_5 は液相蒸発に伴って早い段階で生成する。火炎内部においては、固相炭素への成長が高濃度 C_2H_2 に囲まれている領域で主に起こることが分かる。それに対して、Sootの表面酸化はOHにより、主に噴霧火炎の外周部において高温領域内で生じている。

Soot平均粒子径の分布について考察すると、運動量に乗って下流に進むにつれ、Soot平均粒径が増加していき、噴霧火炎先端の周囲領域と外周領域で大きい値をとることがわかる。これはSoot粒子を下流に輸送される間に表面成長や凝集、そして衝突や合体により粒径が増大するためと考えられる。また、噴霧火炎先端部に輸送されたSoot粒子が先端部の渦流動に沿って噴霧火炎の外縁領域に押し出され、上流側に巻き上がることがわかる。次に、Sootの数密度分布について見ると、 $t = 2.0$ msの時点において噴霧火炎の先端領域と上流側の外周領域が高い値をとる。この領域においてSoot粒子が生成され始めるものと考えられる。その後、Soot粒子群が表面成長や粒子間の衝突、合体により数密度が低減し、さらに、周囲空気が噴霧火炎内に導入され、乱流混合により粒子群が希釈されたため、下流に行くに従い減少することになるものと推測される。

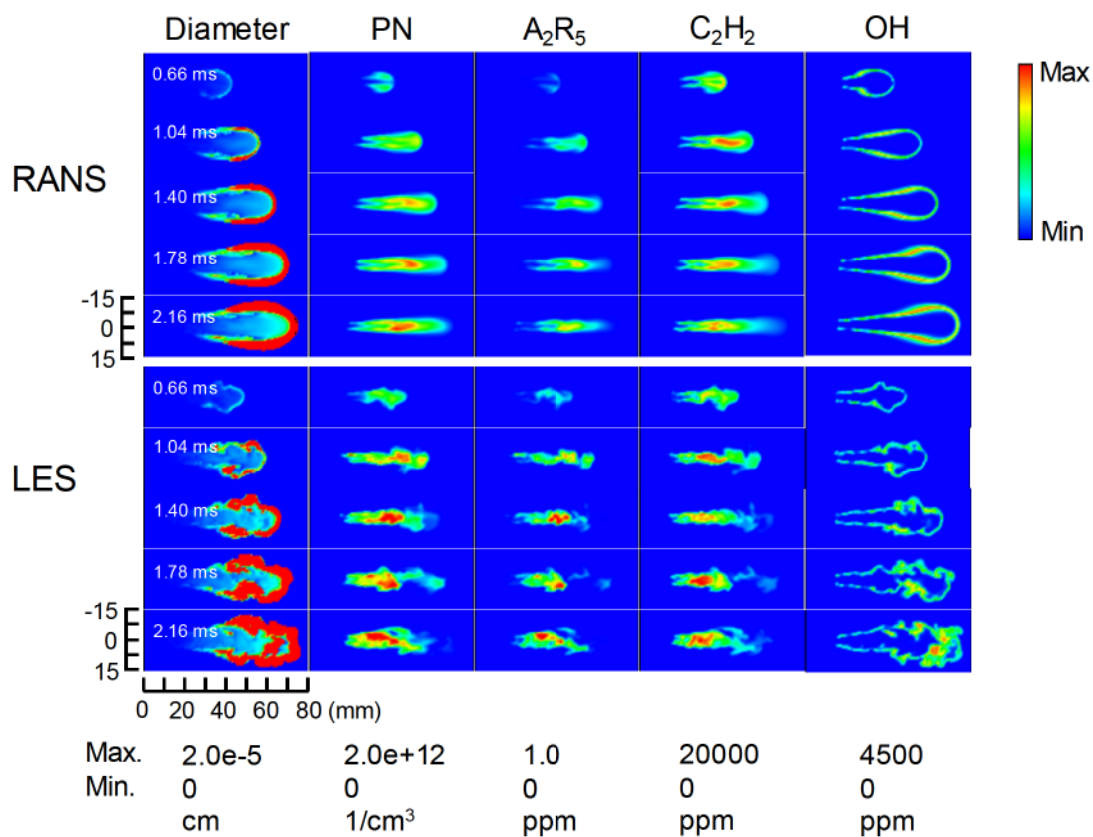


図 3.13 LES と RANS モデルによる化学種の空間分布の比較

3.3.2.4 LES (Smagorinsky) モデルによる Soot 生成及び酸化過程の検討

Soot の生成過程と表面成長、表面酸化反応における Soot の質量変化率、数密度の増加率、平均粒径成長率を図 3.14 に示す。これらの結果より、Soot の生成は燃料の過濃な領域の噴霧火炎の中心部に始まることがわかる。その後、 C_2H_2 の増加に伴い HACA 反応が活発になる。Soot の正味質量が噴霧火炎先端部と外縁部の表面酸化によって多少に低減するが、拡散燃焼領域において増加する傾向がある。Soot 粒子の発生に関しては、早期だけでなく全燃焼過程を通じて行われることがわかる。粒子数密度の増加率に関しては、LES モデルによって噴霧火炎の内部における瞬間的な不均一分布が捉えられている。噴霧軸近傍において高い値を取るが、下流に輸送されることや外側に拡散するのに従い、粒子群の数密度が増大と減少が同時に存在することがわかる。

また、Soot 粒子径は噴霧火炎の中心である燃料が過濃な領域において増加し、時間とともに大きい値になる傾向がある。それに対して、噴霧火炎の外周部ではマイナス成長、すなわち減少することがわかる。これは、前節で示した図 3.13 より見られた高濃度の OH ラジカルが噴霧火炎外周部において活発な表面酸化反応を起こしているためと考えられる。しかしながら、図 3.13 に示すように、火炎外周部において Soot 粒子径が高い値をとっている。これは、噴霧火炎の中央領域内に形成された Soot 粒子が表面成長および粒子間の衝突、凝集過程を経て粒子径が増大し、その後火炎先端部の強い渦運動に押し出され、さらに対流に乗って火炎外周部に搬送されるためと考えられる。この過程では、Soot 粒子の数密度が低下し、粒子径が大きくなる傾向がある。

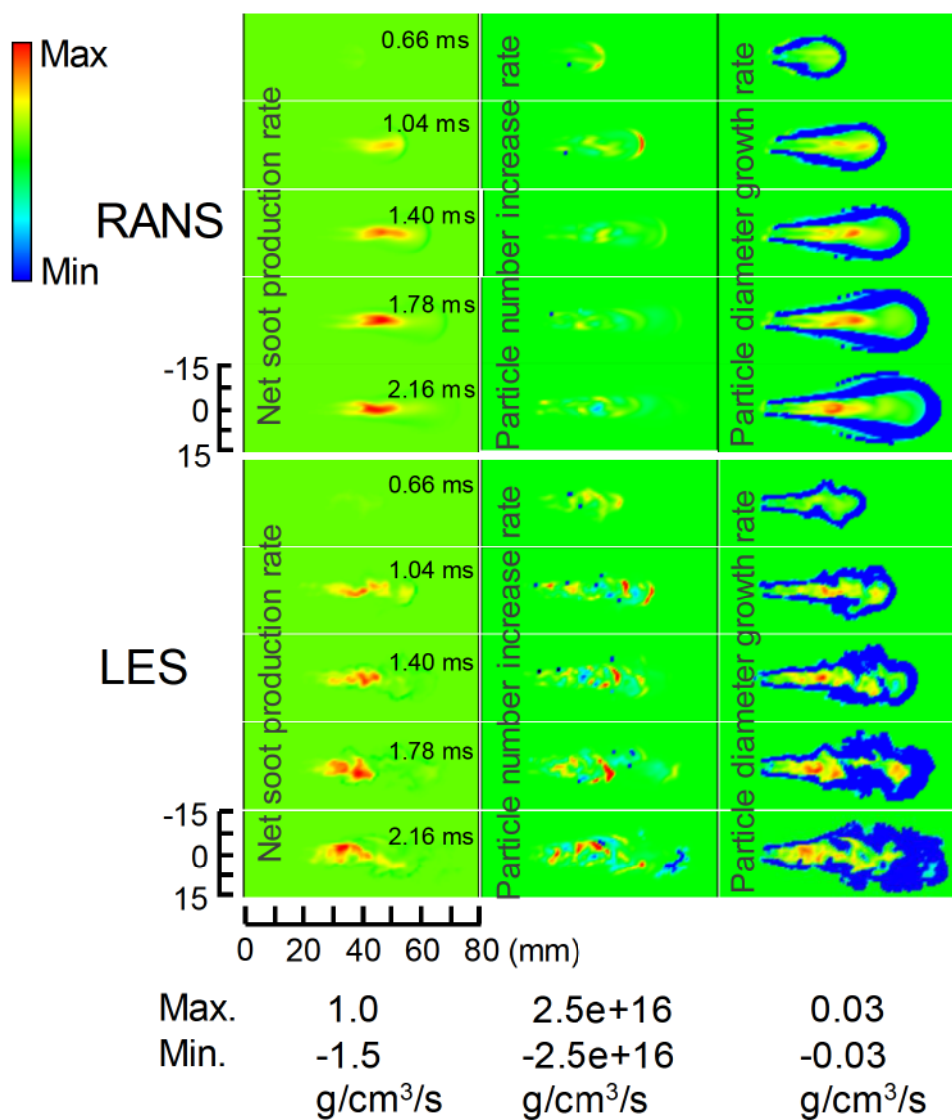


図 3.14 LES モデルによる Soot の質量変化率，数密度の増加率と平均粒径成長率の空間分布

3.4 まとめ

本章では円筒形の定容容器を想定し、底面の直径が 30 mm、高さが 80 mm の三次元計算領域とした。ここで、第 2 章で述べた各モデルを連成した計算コードによる計算結果との比較を通じて精度検証を実施した。

はじめに、乱流モデルによる格子依存性を調べるために、それぞれサイズが違う 4 種類の計算格子を使用し、酸素が存在しない高温場での非燃焼蒸発噴霧の解析を行った。次に、同じ条件で従来の乱流解析手法である RANS の下で計算を行い、本研究で組み込んだ LES コードによる計算結果と実測結果をそれぞれ比較した。その結果、RANS モデルでは、使用する計算格子によって蒸気相外形に変化が見られず、噴霧に及ぼす計算格子の影響が少ないことが確認された。また、計算された蒸気相外形は軸対称であり、噴霧外縁における非定常挙動が解析されないことが確認された。

一方、LES モデルの計算結果により、噴霧軸方向と半径方向の両方への発達が生じ、蒸気相形状や噴霧外縁部において渦の発生を伴う非定常挙動が解析されることが分かった。さらに、格子精度が上がるにつれ、噴霧半径方向への発達が促進される傾向が認められた。これらの結果の比較から、計算上の問題点を明らかにし、モデル改良して非定常燃焼に適応し、ディーゼル噴霧燃焼解析を検討した。その結果に基づいて微粒子の空間的分布を解析し、RANS, LES による結果と実験結果を比較し、LES モデルの妥当性を確認した。

第4章 ディーゼル機関における 噴霧燃焼の解析

4.1 まえがき

前章において定容容器を用いて計算コードの精度が確認された。そこで本章では、予測ツールとしての LES 乱流モデルの実用化に向けて、実機エンジン条件におけるディーゼル噴霧燃焼のシミュレーションを試みた。筒内流動を非定常流れとして評価するために、図 4.1 に示すように、噴霧流動を利用するたまご型燃焼室形状⁽¹¹⁹⁾を対象に計算を行う。まず、このような燃焼室形状を有する定容容器において、壁に衝突することを伴うディーゼル噴霧の数値解析を行う。ここでは前章と同様に、RANS モデルと LES モデルを用いて計算を行い、それぞれの計算結果と計測結果の比較、検討を実施する。さらに、LES に適応する壁関数の変更により、壁面と筒内ガスの熱伝達について、モデルの有意性を検討する。最後に、上述のようなキャビティを持つ定容燃焼器と同様の断面を持つ計算格子を使用してエンジン計算を行う。さらに、各 EGR 条件や異なる壁関数における Soot 生成の予測に当たって、その濃度、粒子密度、粒子径などに関する時間的な生成履歴や空間的な分布について詳しく調査する。

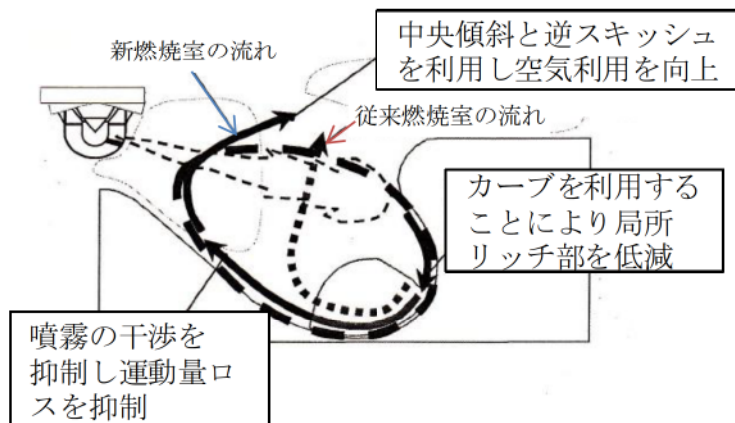


図 4.1 たまご型燃焼室のコンセプト⁽¹¹⁹⁾

4.2 ディーゼル衝突噴霧の解析

4.2.1 計算条件

Kim らの実験条件に基づき⁽¹²⁰⁾, 壁面衝突を伴うディーゼル噴霧の計算条件をまとめて表 4.1 に示す. 使用燃料は実験と異なり Dimethylnaphthalene の代わりに n-C₁₂H₂₆ を用いるが, その他の条件は実験と同様に設定した. また, 容器内の雰囲気圧力を 4.0 MPa, 雰囲気温度を 830.0 K, また, 噴射圧力を 152.7 MPa とした. この際, 図 4.2 に示すように, 噴射速度は実際の噴射率波形 (広島大学データにより) を用いた. また, 噴霧パーセルは 10,000 個とし, 固体壁面の温度を 830.0 K とした. 非燃焼の蒸発噴霧を対象とするため, 雰囲気ガスは CO₂ のみの組成とした. ここで用いる主なサブモデルを表 4.2 に示す.

表 4.1 計算条件

Ambient condition	830.0 K, 4.0 MPa
Ambient gas	CO ₂
Common-rail injector	Φ0.116×1 (0 deg.)
Injection pressure	140.0 MPa
Injection quantity	5.00 mg
Injection duration	1.35 ms
Fuel	n-C ₁₂ H ₂₆
Fuel temperature	293 K
Wall temperature	830.0 K

表 4.2 各サブモデル

Turbulence model	RNG k-ε, LES model
Spray model	Breakup: KH-RT Collision model: O'Rourke, Nordin model Drag-law: Dynamic model
Time step	Variable based on spray, evaporation, combustion processes

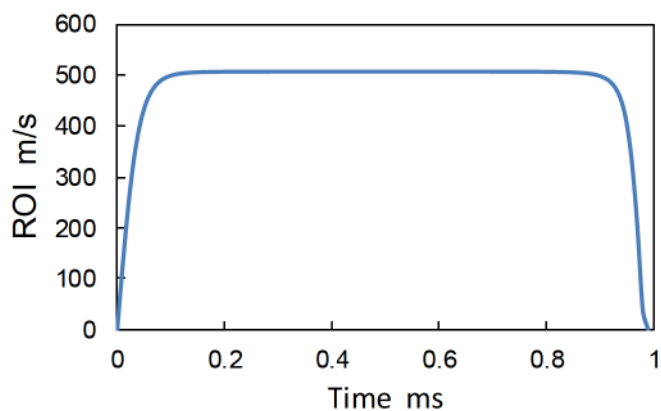


図 4.2 噴射率波形 (広大データにより)

4.2.2 計算格子の選定

本研究で用いた計算領域を図 4.3 に示す. エンジンと同様の形状を有する定容容器を想定し, セクターメッシュのように筒内を中心から断面で切ったものを奥行方向に伸ばした形状としている. また, 前章で格子依存性を調査した結果による格子依存度の影響を考慮するために, 計算メッシュの先端部分について約 0.6 mm となるように作成し, 全体的におおよそ 18 万セルを有することとした.

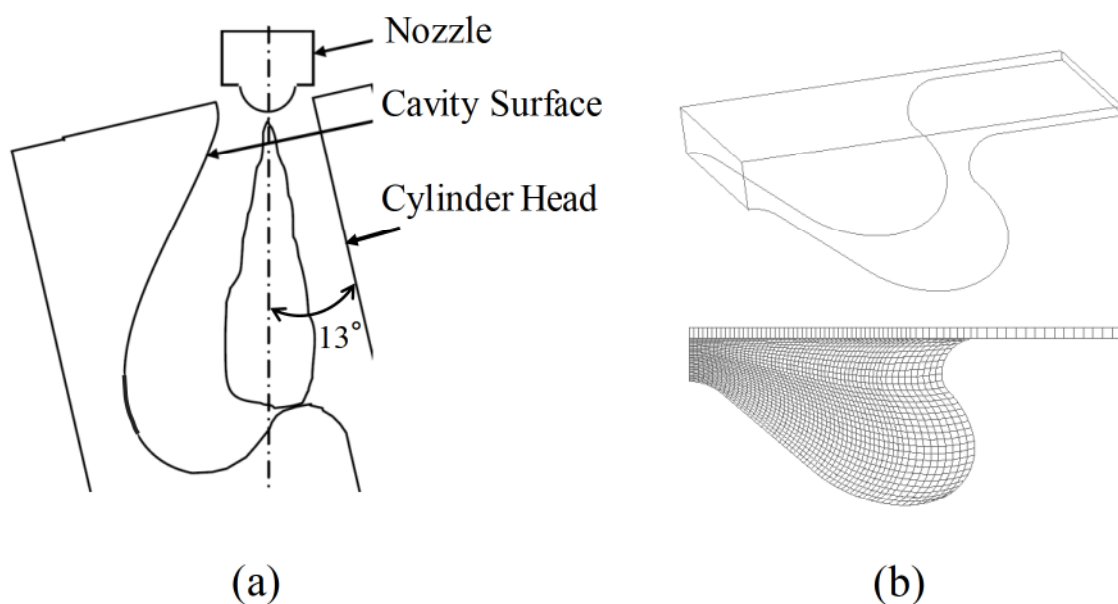


図 4.3 (a) 衝突噴霧の概要 (b) 2D キャビティ定容容器のメッシュ

4.2.3 計算結果および考察

ピストンキャビティ形状を有する計算格子を用いて、ディーゼル蒸発噴霧の壁面衝突における実験結果と計算結果を比較した。噴射開始から 0.3, 0.6, 1.0 ms の3つ経過時間における計算結果を図 4.4 に示す。左側に LAS 法による断面の可視化画像と濃度分布図になっており⁽¹²⁰⁾、右側にそれぞれ RANS モデルと LES モデルを用いた質量分布の比較を示す。図に示したように、蒸発噴霧が曲面に衝突し、最初に壁面に薄い蒸気相の層ができ、その後噴霧先端部における強力な渦運動により先端領域に大きな渦を形成することが分かる。RANS モデルでは、計算された蒸気相外形は軸対称であり、噴霧外縁における非定常挙動が解析されていないことが明らかである。一方、LES モデルでは半径方向に蒸発噴霧の分散が RANS モデルより正確に表現されている。蒸気相形状や噴霧外縁部における非定常挙動が解析されていることが分かる。RANS モデルと比較し、気相の渦構造により噴霧半径方向に拡散し、非対称、非定常な分布となっており、これらによって計算の精度が向上したものと考えられる。

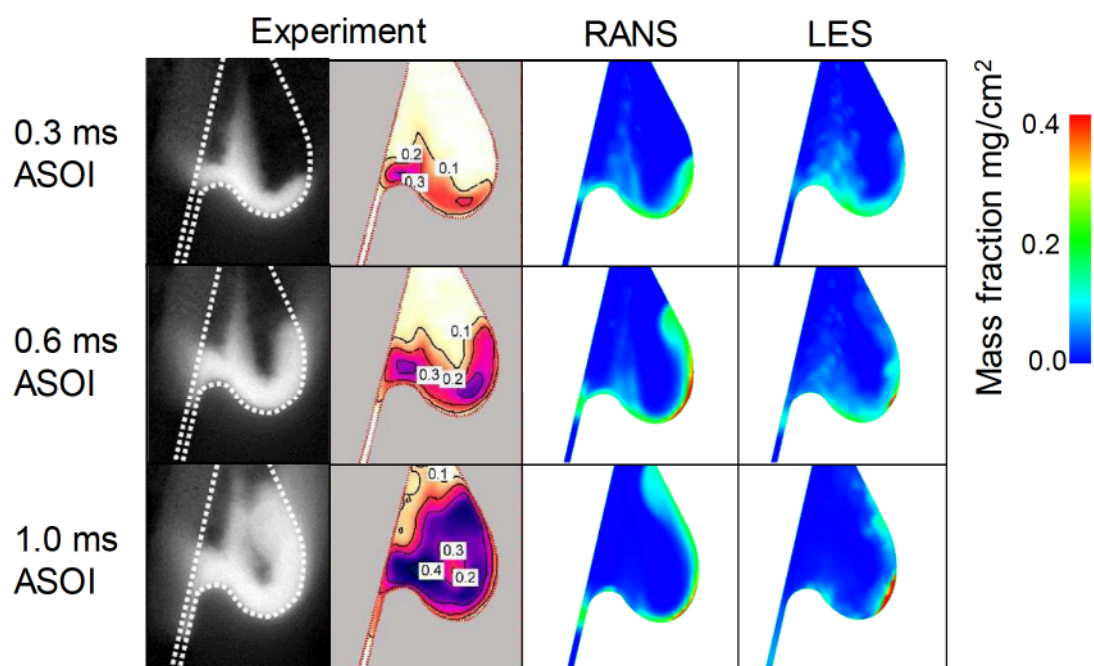


図 4.4 衝突噴霧の外形の比較

左：実験データ⁽¹²⁰⁾ 中：RANS モデル 右：LES モデル

さらに、第 2 章で述べた壁関数モデルを計算コードに組み込み、衝突噴霧に及ぼす影響の検討を行った。各壁関数モデルにおける噴射開始からそれぞれ 0.3, 0.6, 1.0 ms の経過時間における噴霧外形の比較を図 4.5 に示す。壁関数の変更により、壁面と筒内ガスの熱伝達はそれぞれ計算され、異なる結果が得られた。これは、衝突噴流によって壁面第一層のセルがそれぞれの熱流束が計算され、異なる温度分布になり、液相噴霧の蒸発や噴霧先端の運動量に影響を与えるためと考えられる。しかし、各壁関数モデルにおいても、現段階の可視化画像では大きな変化が見られないため、今後、実験や数値的な検証が必要である。

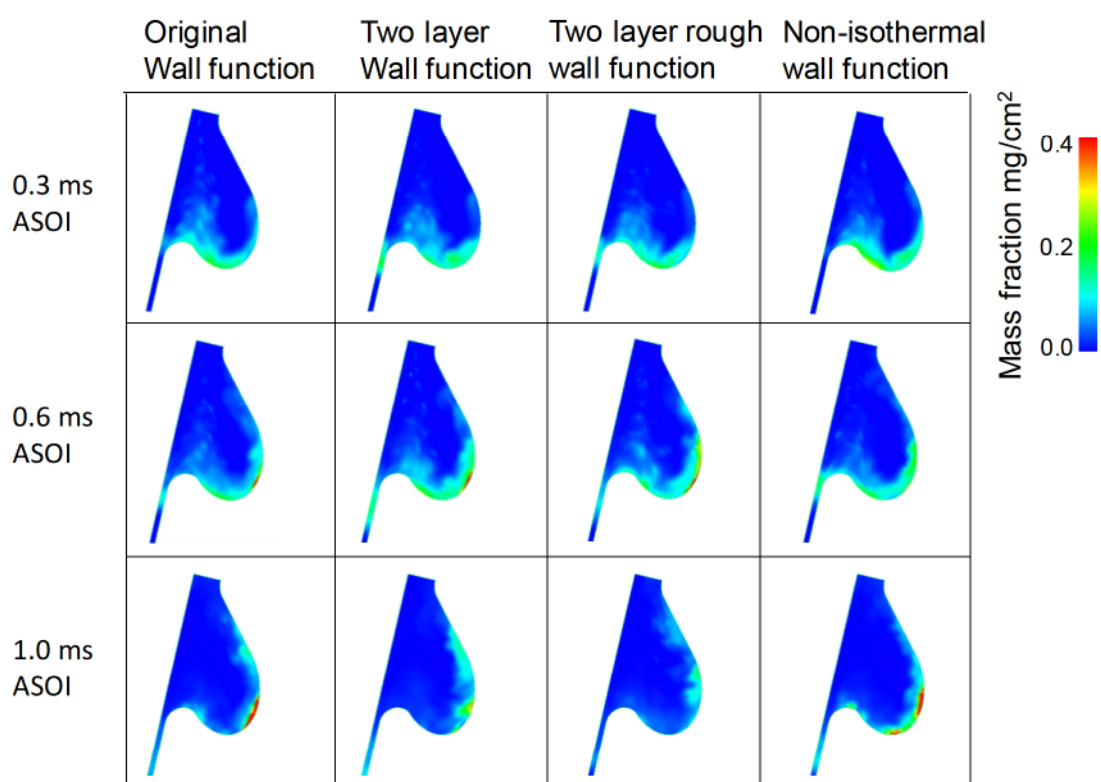


図 4.5 各壁関数モデルにおける LES モデルによる蒸発噴霧の外形

4.3 ディーゼルエンジンの燃焼解析

4.3.1 計算条件

エンジン計算における計算コードの精度検証には、乗用車向けの試験用単気筒ディーゼルエンジンの諸元とその実験結果を用いた。エンジンとインジェクタの諸元を表4.3に示す。排気量は 540.5 cm^3 、圧縮比は 14、噴孔数は 10 個であり、エンジン回転数は 2000 rpm 一定、筒内に噴射される軽油の総量はパイロット噴射の燃料噴射量 2.49 mg を含めて 34 mg とした。この噴射量は図示平均有効圧 (Indicate Mean Effective Pressure) で 1.3MPa に相当する。ここでは EGR 率の変化に伴うモデルの精度と汎用性を調査するため、それぞれ 0, 21, 32% に設定した。噴射時期は、着火時期が同時期になるように調節した。また、軽油の詳細な素反応過程を考慮するため、Golovitchev らによって提案された軽油サロゲート反応機構を用い、NO_x 生成に関して拡張 Zel'dovich 機構を使用した。燃料の初期組成は n-C₇H₁₆ (n ヘプタン) 80%, C₇H₈ (トルエン) 20% の割合で設定し、前者は軽油の化学的特性を、後者は物理的特性を表現するものとした。この際、実際の噴射率波形を用い、噴射率波形の変化を図4.6に示す。また、噴霧パーセルはパイロット噴射時で 3000 個とし、メイン噴射時で 15,000 個とした。

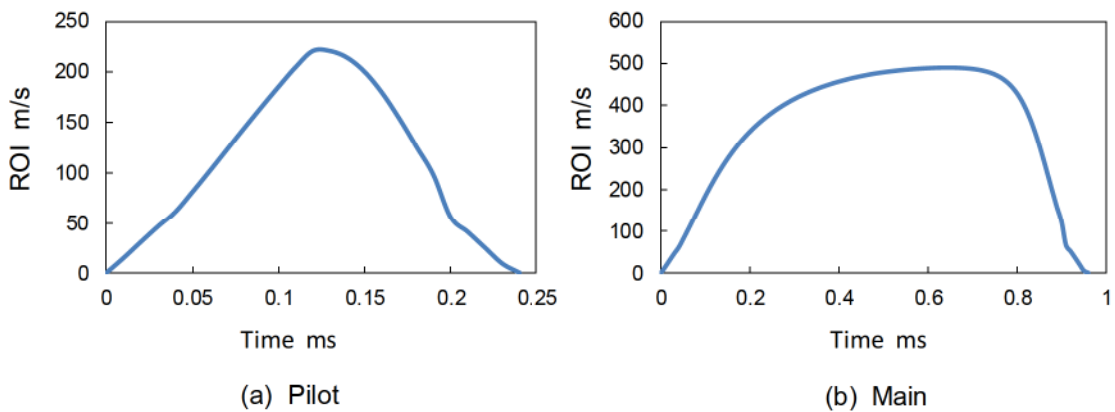


図 4.6 エンジン計算に用いる噴射率 : (a) パイロット噴射, (b)メイン噴射

表 4.3 エンジンとインジェクタの諸元と計算条件

Displaced volume	540.5 cm ³
Bore	85 mm
Stroke	90 mm
Connecting rod	14.8
Compression ratio	14.1
Common-rail injector	Φ0.119×10
Engine speed	2000 rpm
Injection pressure	140.0 MPa
EGR ratio	0, 22, 32%
Total injection quantity	31.4, 31.3, 31.5 mg
Pilot injection quantity	2.49 mg
Fuel	C ₇ H ₁₆ : 80%, C ₇ H ₈ : 20%
Fuel temperature	293 K

4.3.2 計算格子の選定

実験で用いたインジェクタが 10 噴口のものであり、本研究において計算負荷を減らすために、計算格子が図 4.7 に示すように 36° のセクターメッシュを用いた。なお、このセクターメッシュは周期境界を持つこととし、前節で説明した 2D キャビティ定容容器と同様な断面を持つこととする。また、乱流モデルや壁モデルの有効性を検討するため、基本計算格子であるメッシュ (a) よりさらに解像度が高いメッシュ (b) とメッシュ (c) を使用した。メッシュ (a) の 30,229 セル数に対して、それぞれ、

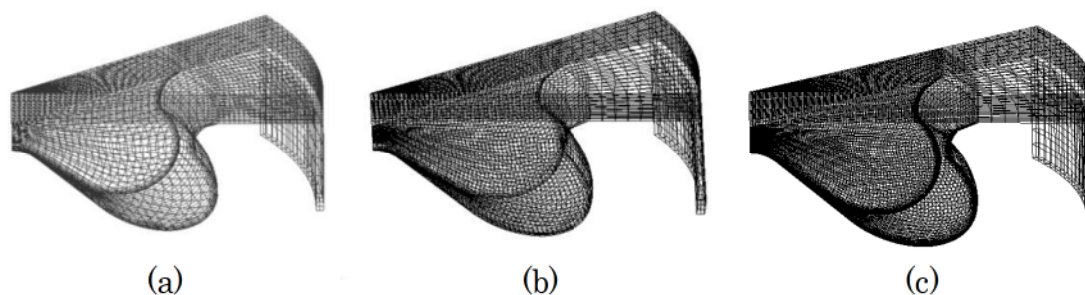


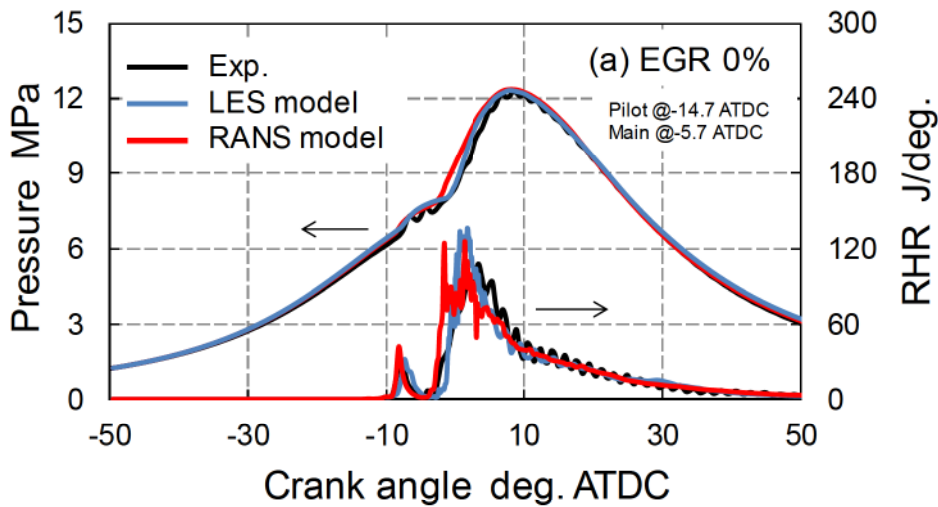
図 4.7 エンジン計算用セクターメッシュ

メッシュ (b) が 49,086, メッシュ (c) が 85,410 セルとなる.

4.3.3 計算結果および考察

4.3.3.1 RANS モデルと LES モデルにおけるエンジン計算の精度検証

筒内圧力と熱発生履歴の実験結果と計算結果を図 4.8 に示す. 図から, 各 EGR 率における熱発生率を概ねに再現することができ, 本計算コードによって実機の燃焼特性を再現することが可能であると考えられる. EGR 率が低い場合には, 軽油のパイロット噴射による明らかな熱発生が現れ, 主燃焼も拡散燃焼が大部分を占めることが分かる. 一方, EGR 率を増すと, パイロット軽油噴射の熱発生が弱まるとともに主燃焼も急速に進行する. これは, 高い EGR 率によって着火遅れ期間が長期化し, 噴霧の混合が促進されたことが原因である. また, 計算結果の比較から, LES モデルでは指圧線図と熱発生の予測において RANS モデルよりも計算精度が向上したと言える.



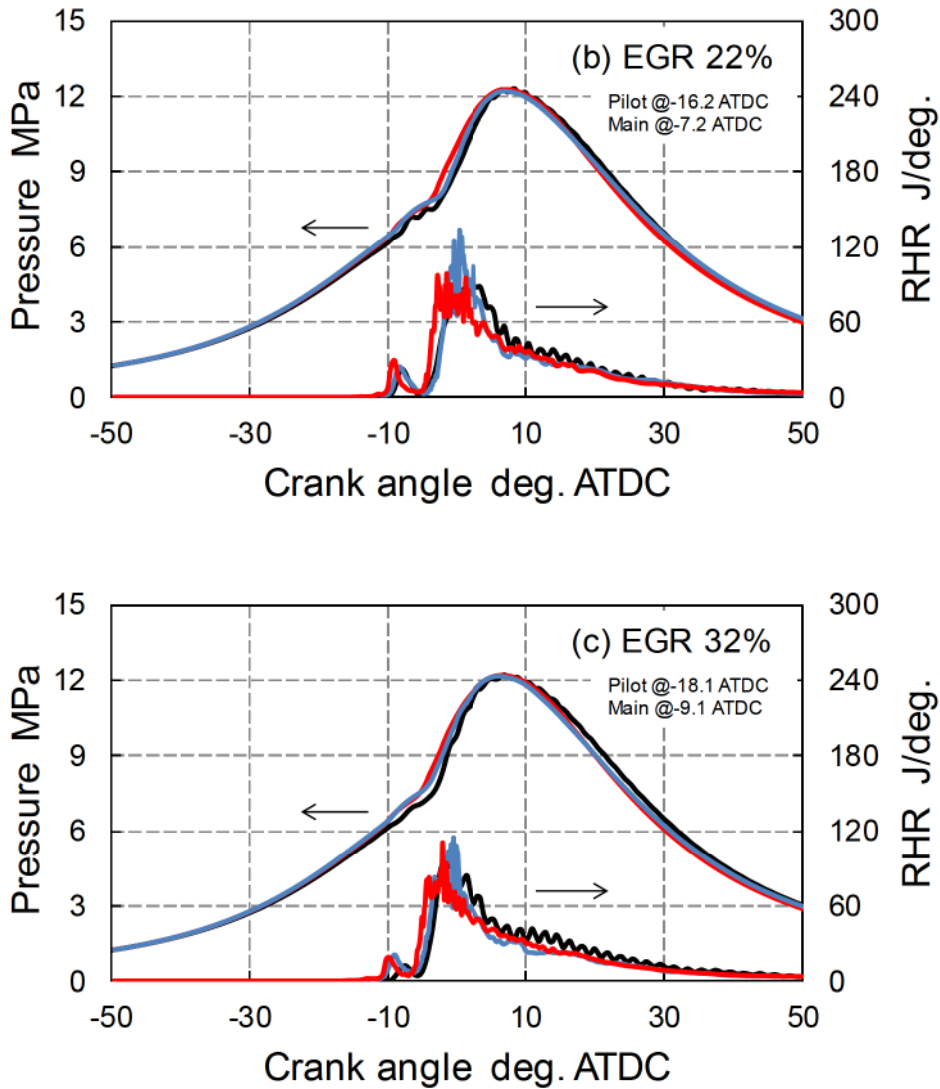


図 4.8 各 EGR 率における筒内圧力と熱発生履歴
 (a) EGR : 0% (b) EGR : 22% (c) EGR : 32%

NO_x と Soot の排出特性の実験結果と計算結果の比較を図 4.9 に示す. この図より, EGR 率の増加に伴って NO_x の排出量は低下し, NO_x の予測結果は実験結果を良好に再現していることがわかる. また, LES モデルは RANS モデルよりも Soot の予測値に関して EGR 率の増加に伴って急激に上昇することが確認された.

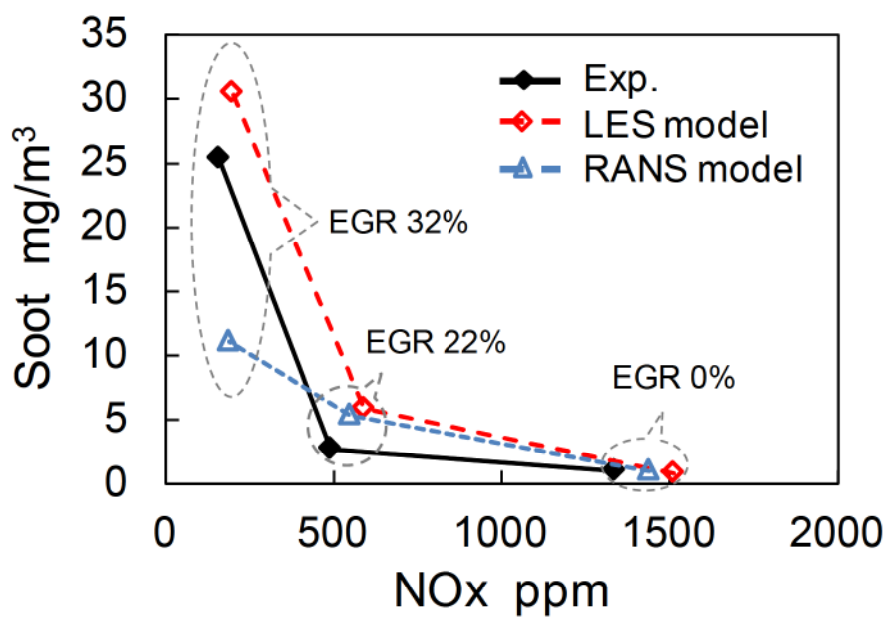


図 4.9 RANS モデルと LES モデルの排気ガス予測値の比較

4.3.3.2 EGR 率 0%における LES モデルと RANS モデルの比較

ここで、EGR 率 0%における条件を対象に、RANS モデルと LES モデルの計算結果を比較する。各クランク角度 ATDC=0, 5, 10, 15, 20 deg. における瞬時の断面温度分布を図 4.10 に示す。LES モデルでは、大きなスケールを持つ乱流成分を記述し、温度場においてその非定常性が再現できており、RANS モデルに比べて精度よく乱流の挙動を予測し、計算の精度が向上しているものと考えられる。

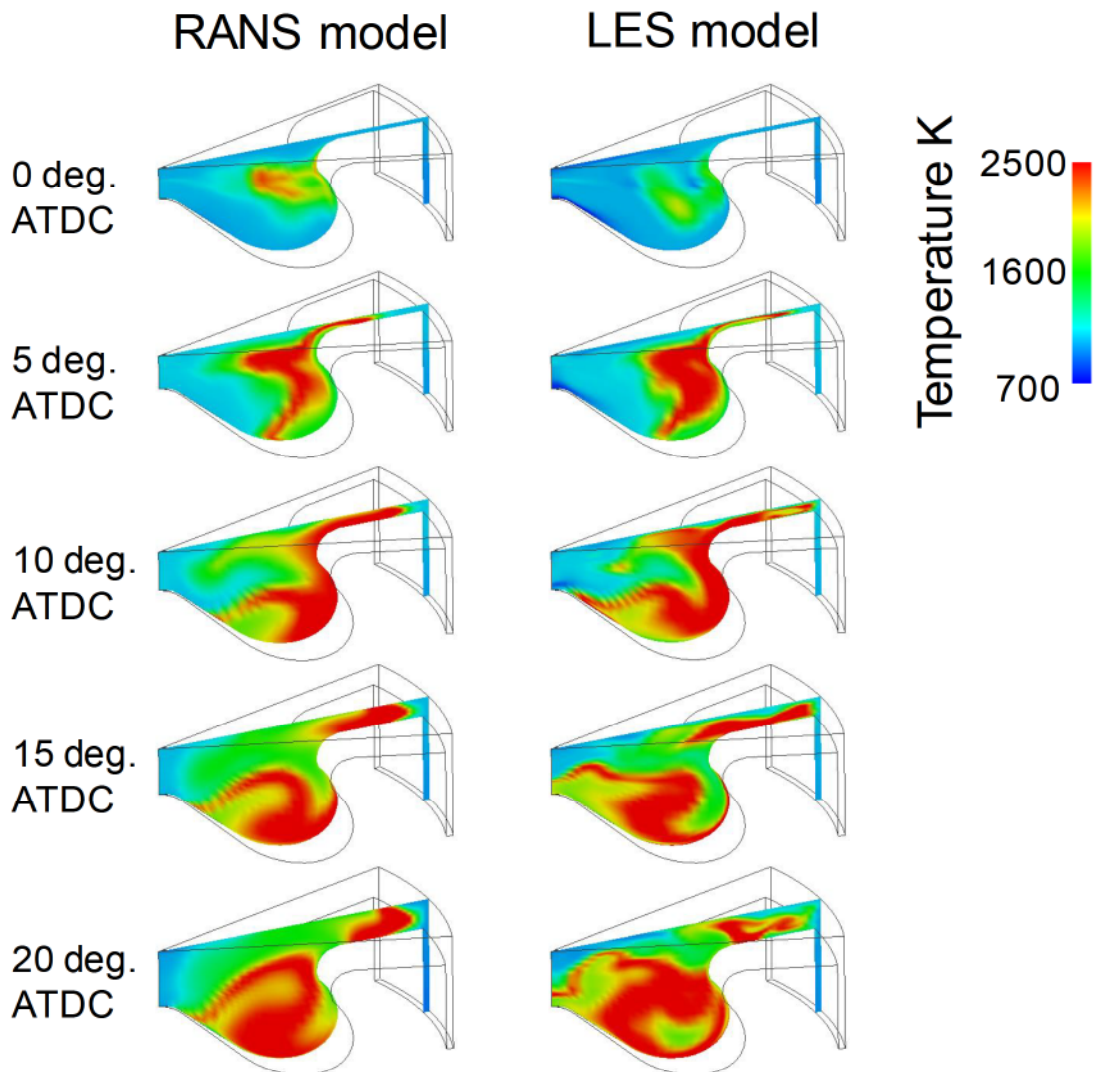


図 4.10 EGR 率 0%における RANS モデルと LES モデルの瞬時的な温度分布

次に、クランク角度 ATDC=0, 5, 10, 15, 20 deg. における Soot 生成の比較を図 4.11 に示す。LES モデルにおいて、燃焼室内の燃料濃度および温度場が不均一分布に

より、Sootの生成が非定常的な過程を示している。この非定常分布は、燃焼室内における乱流によって不均一な混合気を形成されることに起因しており、LES解析によって、乱流の予測精度が高くなることが分かる。

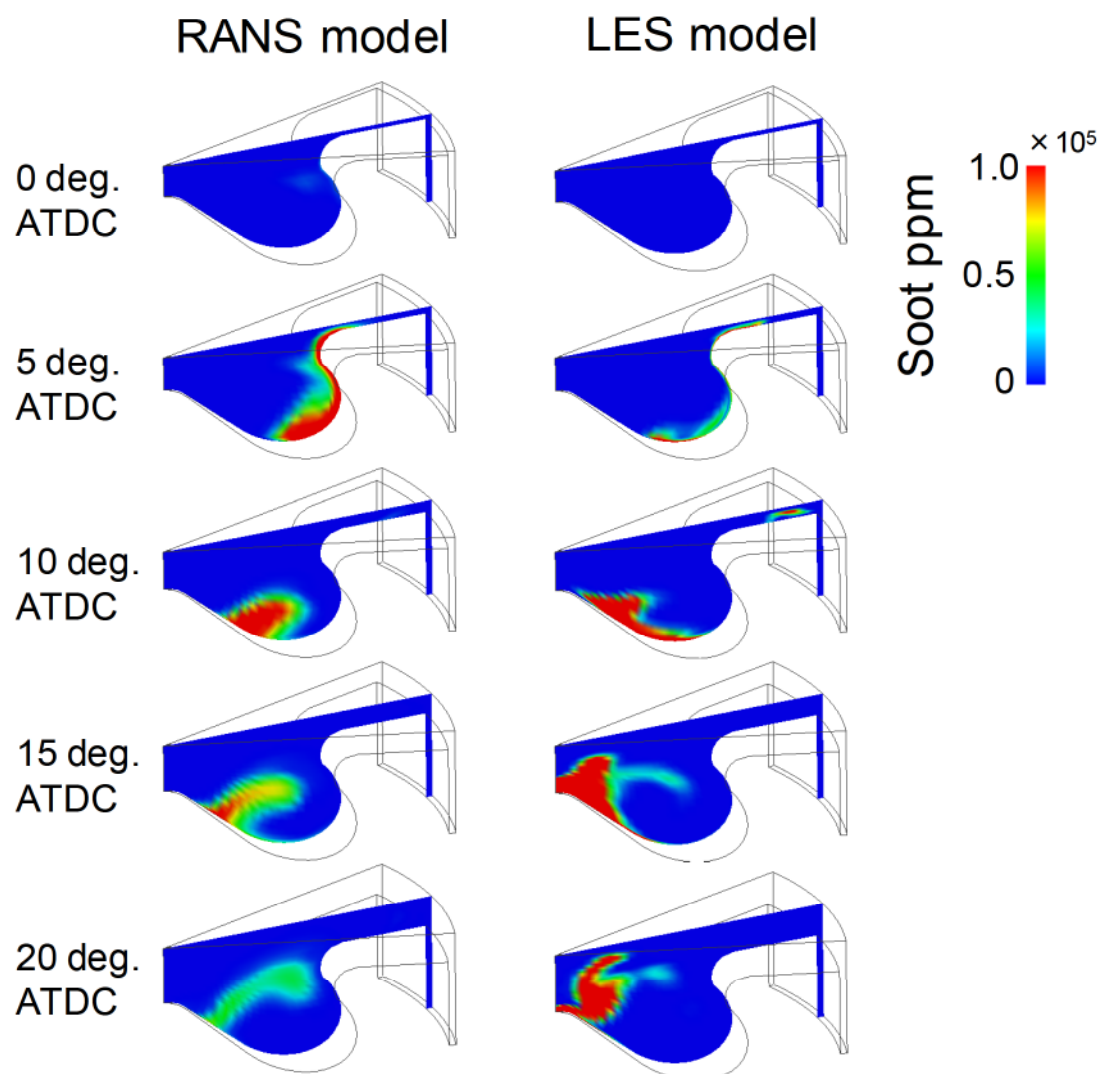
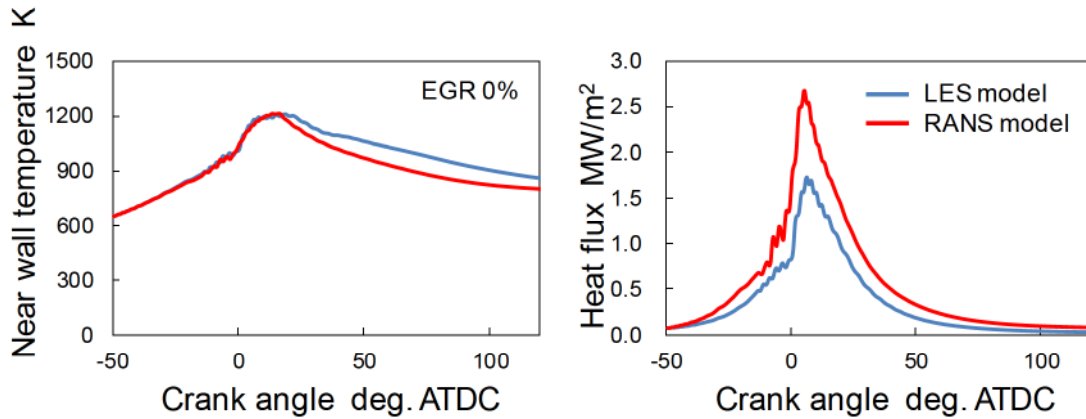


図 4.11 EGR 率 0%における RANS モデルと LES モデルの Soot 生成

また、計算された壁近傍第一層セルの平均温度と熱流束の比較を図 4.12 に示す。燃焼の後半から両モデルの温度差が現れており、熱流束を比べると RANS モデルの方が高いピーク値が認められる。



お

図 4.12 壁近傍第一層セルの平均温度と熱流束の比較

クランク角度 ATDC= 0, 5, 10, 15, 20 deg. における壁近傍第一層セルの瞬時温度を図 4.13 に、ピストンヘッド表面の第一層セルの熱流束を図 4.14 にそれぞれ示す。RANS モデルでは、計算された温度分布は軸対称であり、時間平均化された値を示している。一方、LES モデルでは、非定常挙動が解析されており、乱流の渦構造により温度や熱流束が局所的な不均一分布になる現象が表現されていることが分かる。

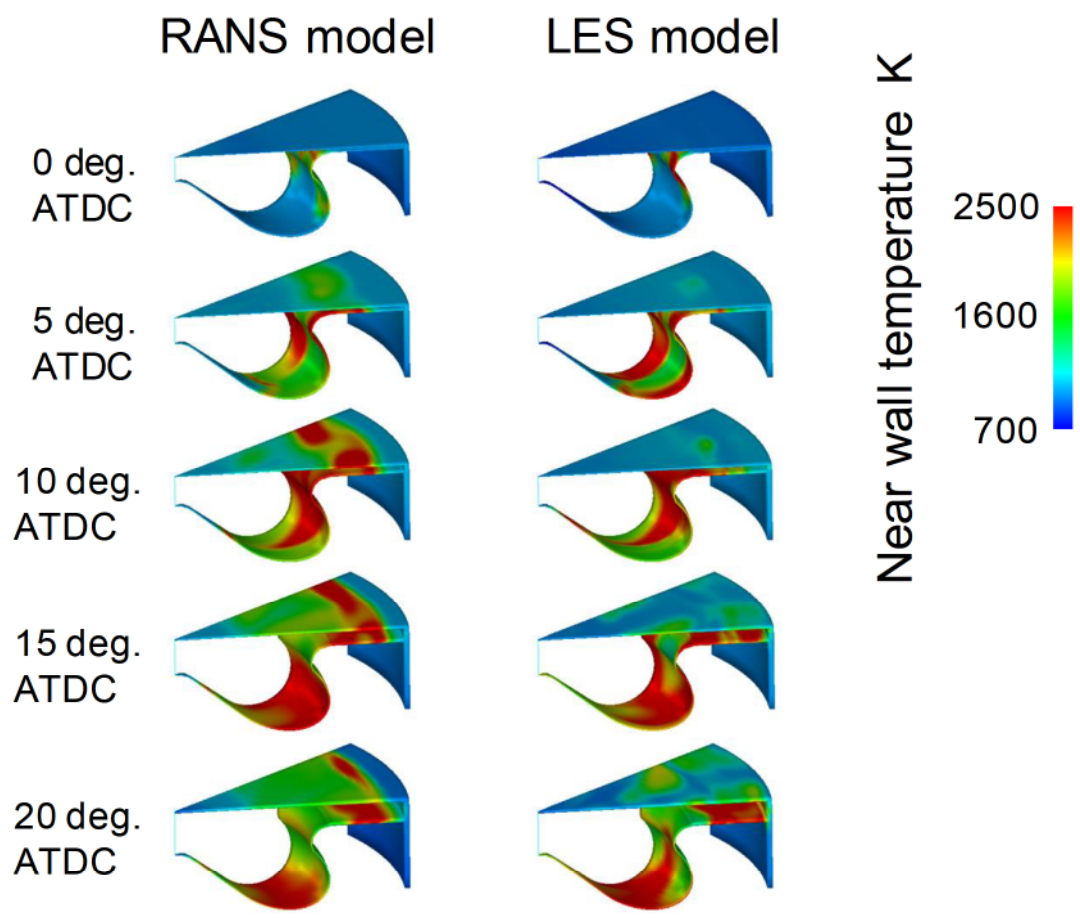


図 4.13 壁近傍第一層セルの瞬時温度

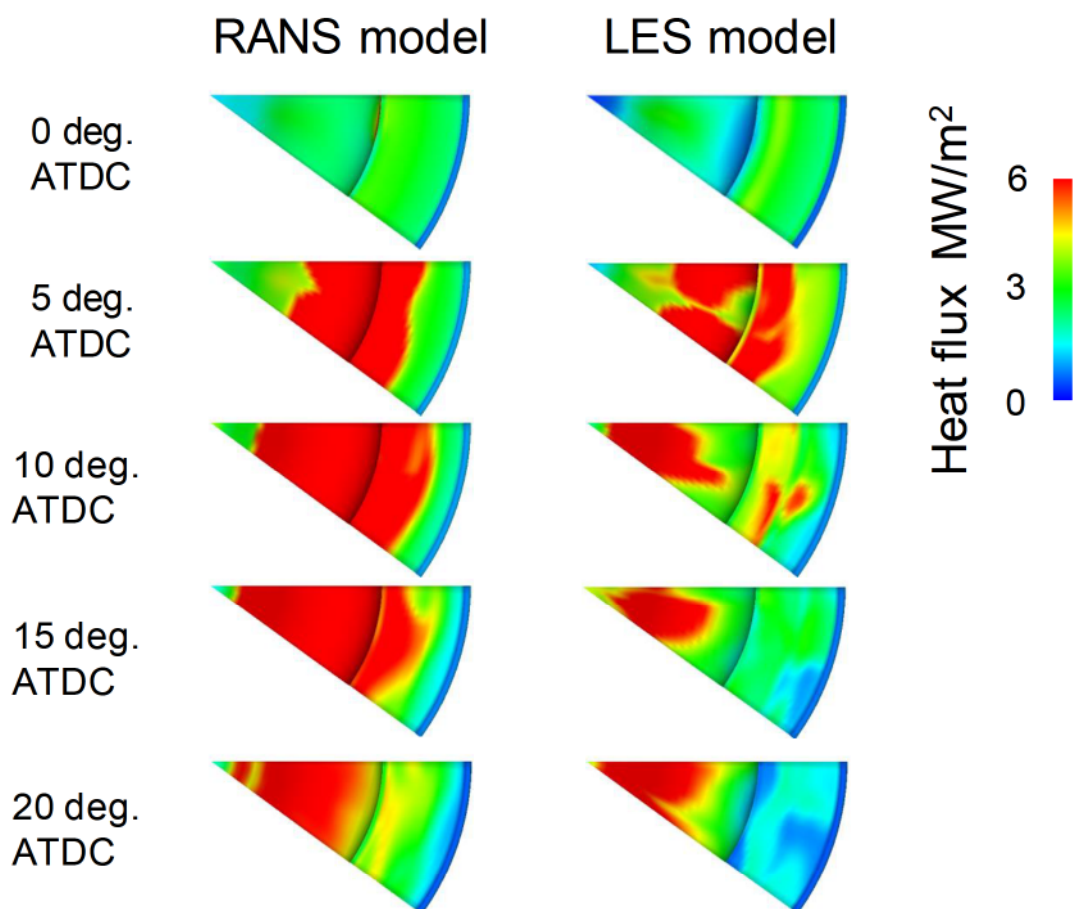


図 4.14 ピストンヘッド表面の第一層セルの熱流束 (bottom view)

4.3.3.3 LES モデルにおける異なる壁関数を用いてエンジン計算の検討

ここで、第2章で説明したように、LESモデルに適応する壁モデルを検討する。それぞれ、1. KIVA4 標準壁面せん断応力モデル 2. Angelberger らの非等温壁面モデル 3. 表面粗さを考慮した壁面二層モデルを用いて LES における各 EGR 率で計算した。

各 EGR 率における筒内圧力と熱発生率の実験結果および計算結果の比較を図 4.15 に示す。この結果より、本研究で実装した各壁関数を用いて計算することで、実験結果を良好に再現できることが確認された。

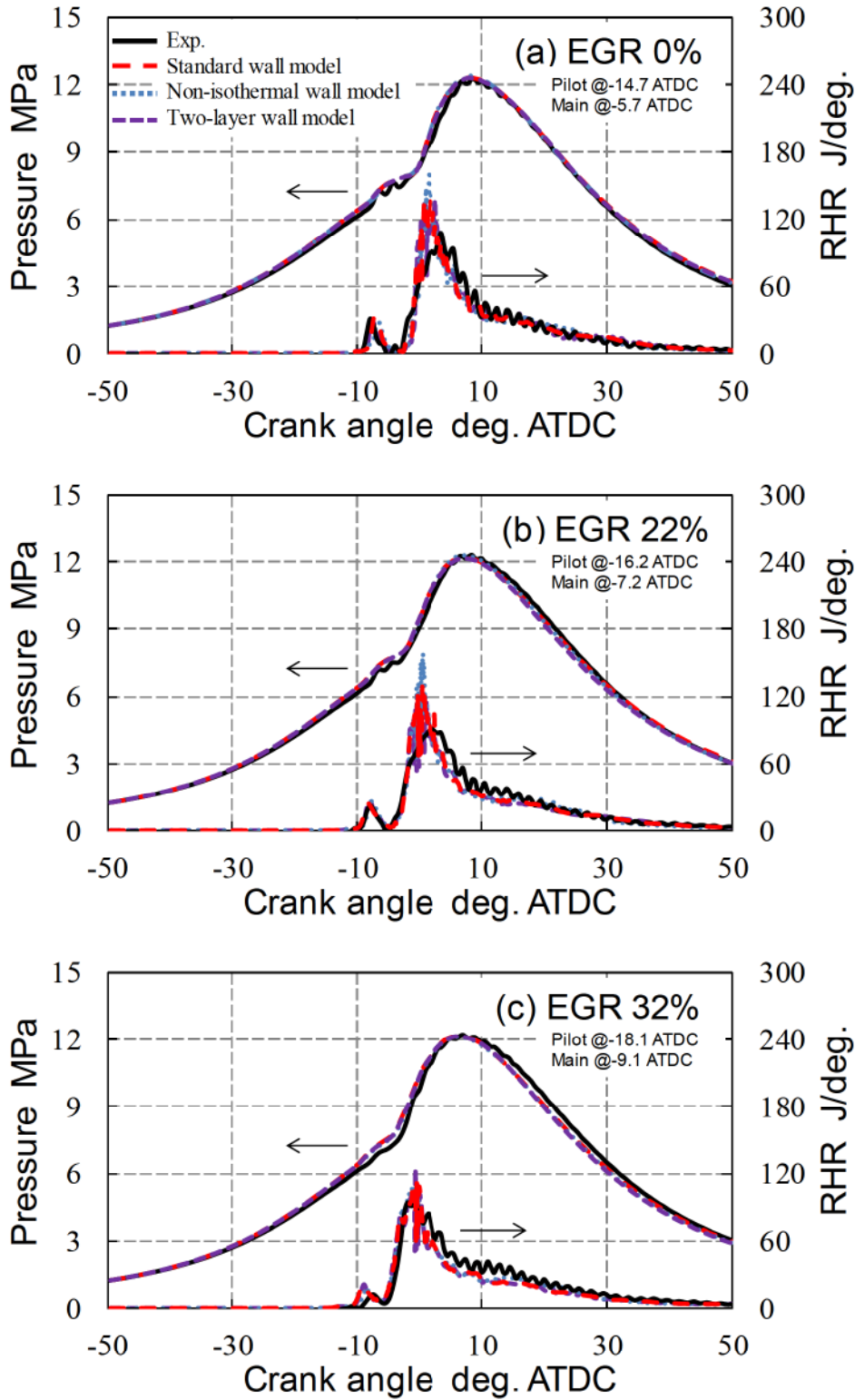


図 4.15 異なる壁関数を用いたエンジン計算の結果

(a) EGR : 0% (b) ERG : 22% (c) EGR : 32%

また、NO_x、Soot の排出特性の実験結果と計算結果の比較を図 4.16 に示す。この図より、各壁モデルにおいて、EGR 率の増加に伴って NO_x の排出量が低下する傾向が良好に再現されていることがわかる。また、Soot 生成量の予測値に関して EGR 率の増加に伴って急激の上昇する傾向を認められた。従って、本研究で用いる計算コードが排気ガスの予測について有効であると考えられる。

Soot の生成には、噴霧の壁面付着、壁面温度の変動など、様々な要因が影響するが、本研究では壁温度を一定値として扱い、温度スイングを考慮しないものとした。今後の重要な課題として、これらの要因を含めた精度検証が必要である。

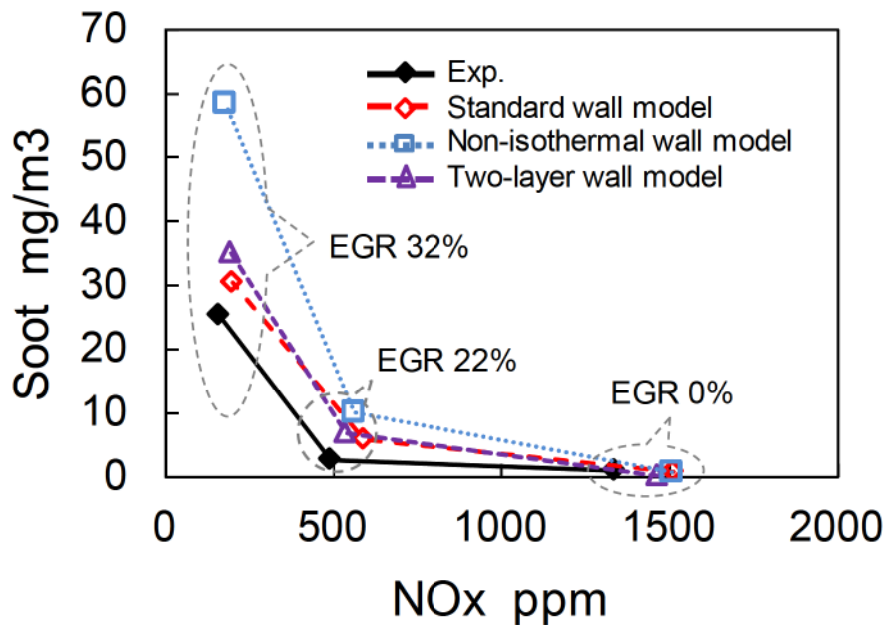


図 4.16 EGR 率の変化によって Soot と NO_x のトレードオフ関係

4.3.3.4 LES モデルによる EGR 率 0%における微粒子生成過程の検討

ここで、EGR 率が 0%の場合における Soot 生成過程の解析を行った。まず、壁面近傍の平均温度について説明する。図 4.17 に予測した壁近傍の平均温度履歴を示す。壁近傍の平均温度に関しては、固体境界層を持つ第一層セルの容積平均温度を取っている。3つの壁モデルにおいて、燃焼の初期段階に平均温度の履歴は非常に似ていることが分かる。しかし、クランク角度 10° から各壁モデルにより異なる平均温度が予測された。これは噴霧火炎が壁面に衝突し、運動量に乗って壁面沿いに発展したため、それぞれの壁法則における熱流束の算出に影響を与えると考えられる。

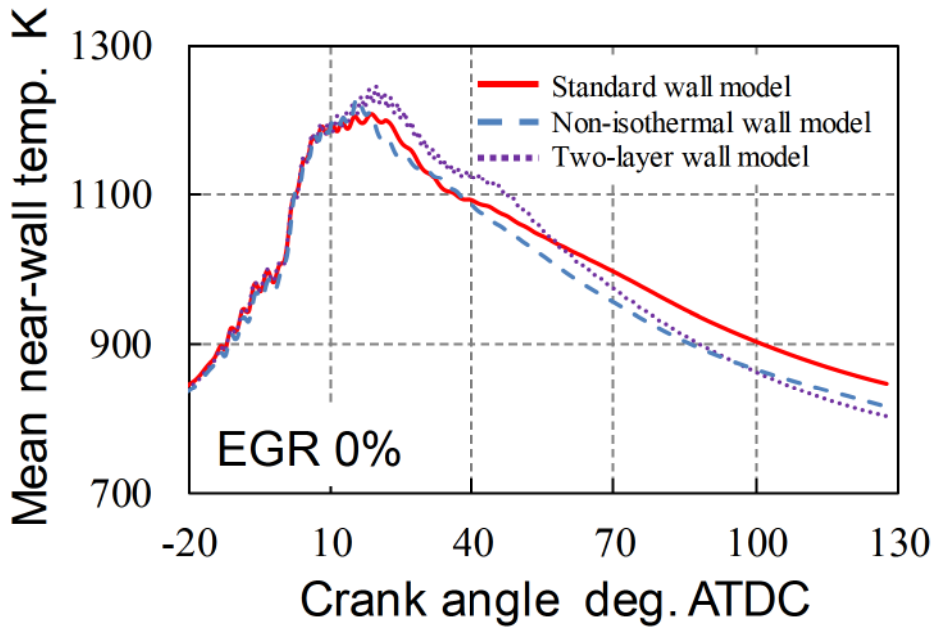


図 4.17 壁近傍の平均温度計算結果

次に、それぞれの壁モデルを用いて Soot の予測結果を比較する。図 4.18 の上段に Soot の質量、粒子密度と平均粒子径の履歴、下段に Soot の正味質量変化率、粒子数密度と平均粒子径の変化率を示す。燃焼初期において、クランク角度 12° 前後に Soot の生成量がピーク値に達している。標準せん断応力モデルと二層粗い壁面モデルでは同じ挙動が予測されるのに対し、非等温壁モデルでは Soot 生成質量がその後低下することが分かる。また、正味質量変化率はクランク角度 7° 前後でピークに向い、その後減少傾向に転じている。壁近傍の温度分布が周囲雰囲気温度に影響を与えるため、Soot 生成に一番寄与度が高い表面成長物質である C_2H_2 の濃度が変化すると推察され、Soot の表面成長反応の変動を引き起こしたと考えられる。また、3つの壁モデルにおいて、粒子密度の生成履歴ではほとんど変化しないものの、数密度の変化率の履歴がクランク角度 7° 後に違いが出ることが認められた。これは温度の影響を受けて Soot の核生成と衝突・凝集過程によって変化したものと推測される。

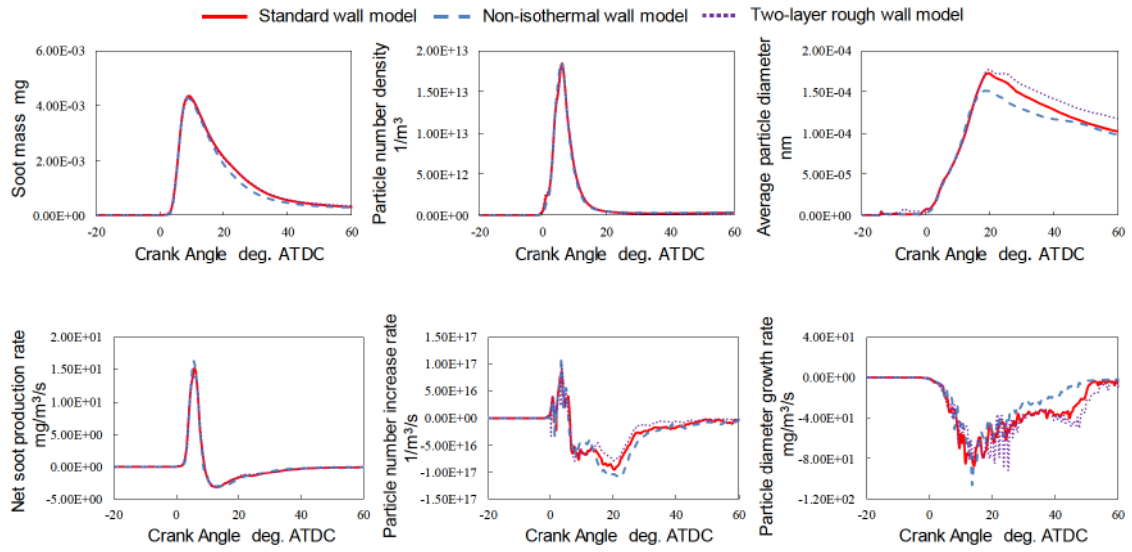


図 4.18 Soot の質量，粒子密度と平均粒子径の履歴（上段），Soot の正味質量変化率，粒子数密度と平均粒子径の変化率（下段）

また，固体壁近傍における第一層セルの温度分布を比較する．それぞれの壁モデルによる 0° ， 5° ， 10° ， 15° ， 20° ATDC での温度分布の可視化を行った結果を図 4.19 に示す．LES モデルを使用するため，微細な乱流構造が捉えられ，すべての壁モデルにおいて詳細な温度場が予測されていることが分かる．図のように，非等温壁面モデルと二層粗い壁面モデルでは，標準せん断応力モデルよりも壁面近傍温度分布の不均一性がよりよく捉えられ，予測精度が改善されるものと考えられる．

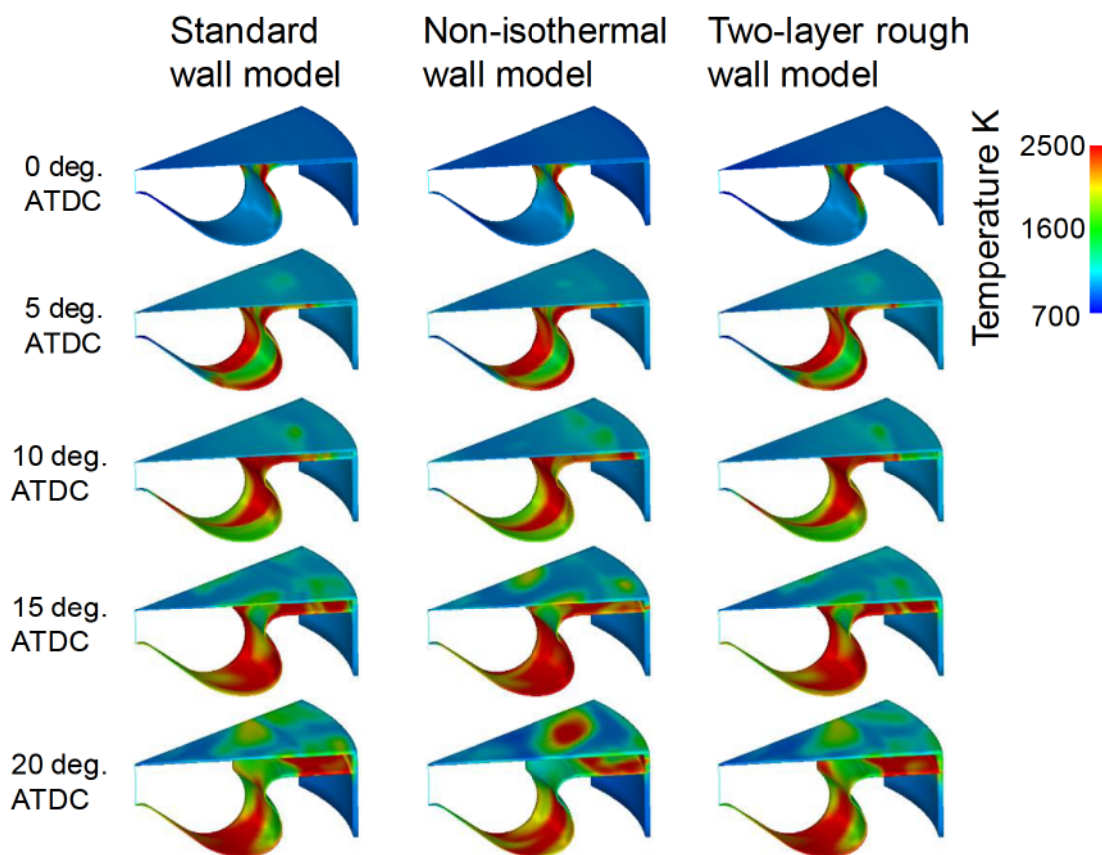


図 4.19 それぞれの壁モデルによる 0° , 5° , 10° , 15° , 20° ATDC での温度分布

図 4.20 にセクターメッシュの中央断面における Soot の濃度分布を示す。噴霧火炎が壁面に衝突し、貫徹力によってピストンボウルの中心部に向かう壁面近傍とスキッシュ領域に Soot が集中することが分かる。これらの結果により、縦渦流やスキッシュ流などを含めた筒内乱流構造が Soot の空間分布に影響を及ぼし、結果的に Soot の生成過程を左右するものと考えられる。従って、エンジン筒内での Soot の生成過程を検討する際に、壁面近傍において適切な壁モデルを使用することが重要である。そのため、LES モデルを用いて微粒子を予測する場合には、高精度な壁モデルが必要とされることが分かる。

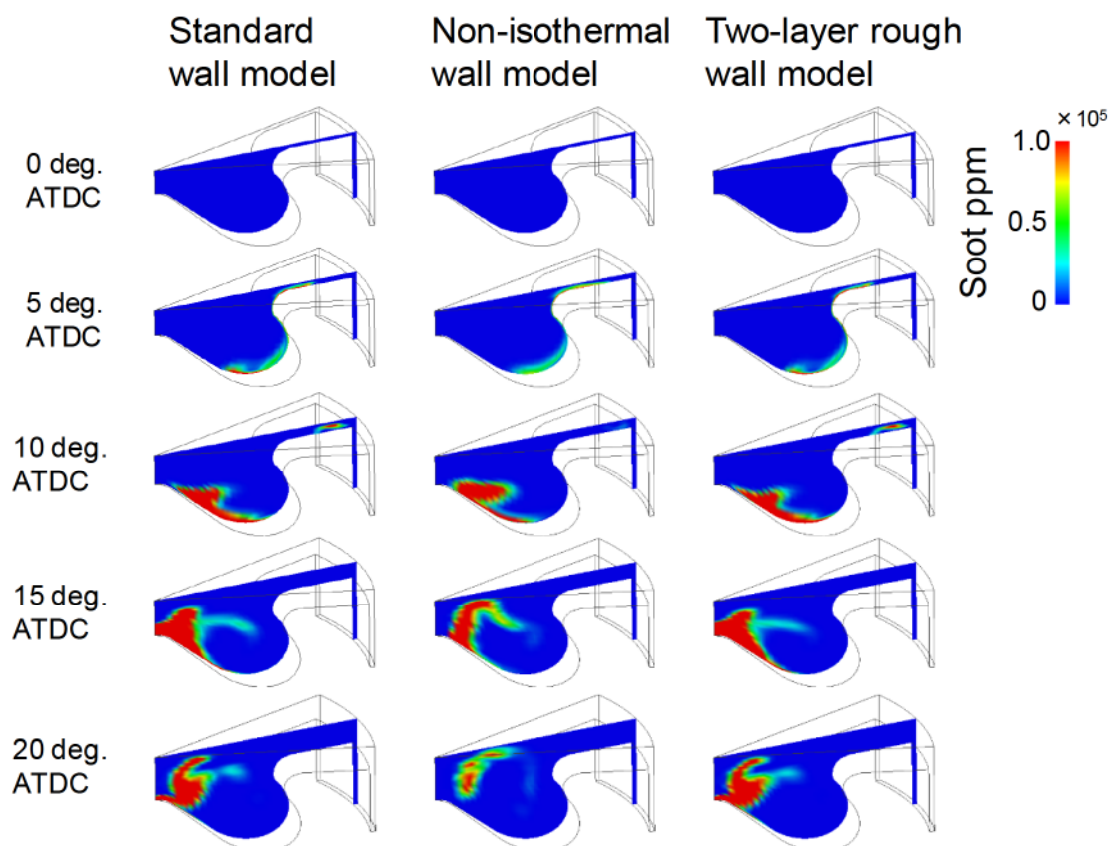


図 4.20 セクターメッシュの中央断面における Soot の濃度分布

4.3.3.5 高解像度格子を用いた壁モデルの検討

以上の検討により、異なる壁モデルにおける乱流燃焼や排出ガスなどの予測精度を明らかにすることができた。このように、高精度なモデル化が微粒子の生成過程の解明、さらには低減に向けて一層重要であると言える。しかし、各サブモデルにおいてさらなる精度検証が必要であることから、本節では 4.3.2 節で述べた高密度の計算格子を用いて流動による筒内の温度分布や Soot 生成の空間分布を検討した。

図 4.21 に同じ計算条件を用いた 36° セクターメッシュ (a)、メッシュ (b) とメッシュ (c) の中央断面の温度分布を示す。図 4.22 に、その断面における Soot の生成分布を示す。見て取れるように、格子解像度を高くするにつれ、噴霧自着火が改善され、内部において不均一な混合気を形成されることが分かる。また、火炎内部においても、より小さいスケールの渦を捉えられていることが分かる。Soot 生成が温度による影響を受けやすいため、高解像度格子を用いた場合には、火炎内の Soot 生成過程に関する情報をより正確に記述されることが期待される。

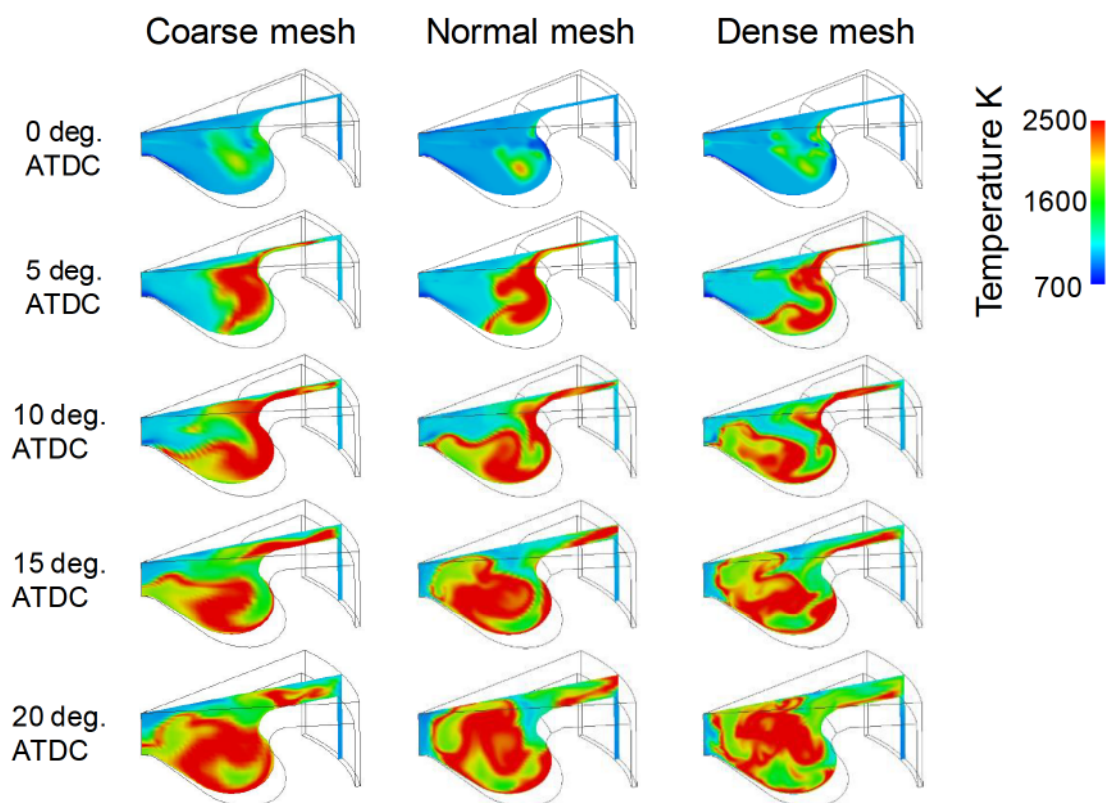


図 4.21 メッシュ解像度による中央断面の温度分布の違い

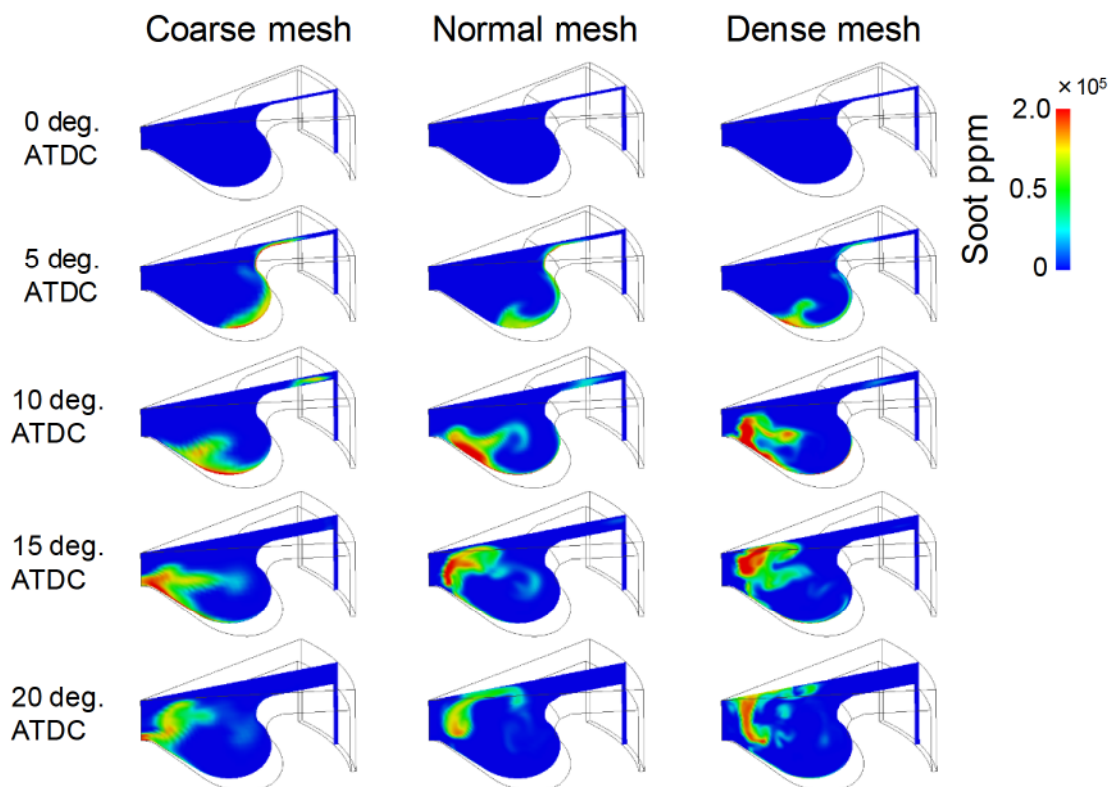


図 4.22 メッシュ解像度の違いによる中央断面の Soot 生成分布

さらに、このメッシュ (c) を用いて各壁モデルで計算を行い、LES モデルと壁モデルの連成に関する有意性の検討を実施した。図 4.23 に各壁モデルに用いて壁近傍における第一層セルの温度分布を、図 4.24 に予測した Soot の断面分布をそれぞれ示す。高解像度格子を使用することによって、壁近傍における温度分布がより非定常性を表すことができることが明らかである。火炎噴流が壁に衝突し、燃焼室中心部に移動する際に、この非定常、不均一性が微粒子前駆物質成分や Soot の成長過程に影響を及ぼすものと推察される。さらに格子解像度を高くすれば、乱流燃焼や微粒子の生成過程に関する詳しい情報が得られると考えられる。

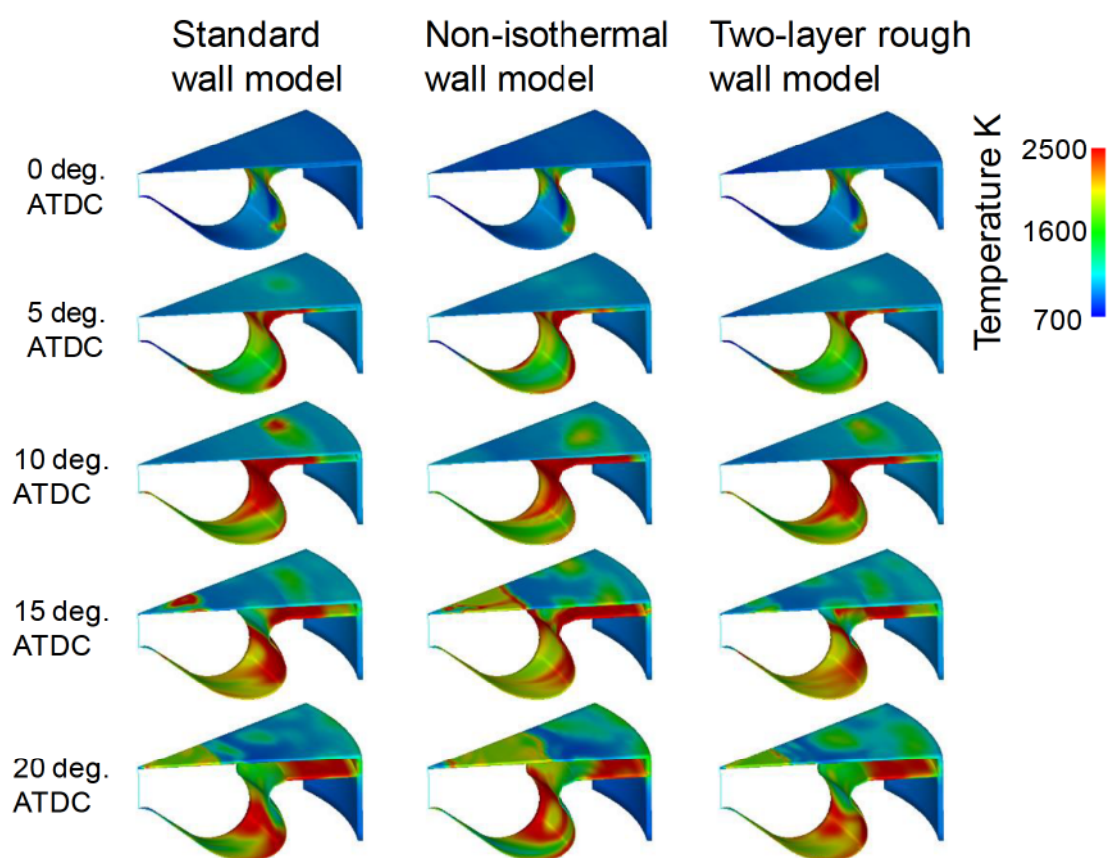


図 4.23 高解像度メッシュを用いて各壁モデルにおける壁近傍の温度分布

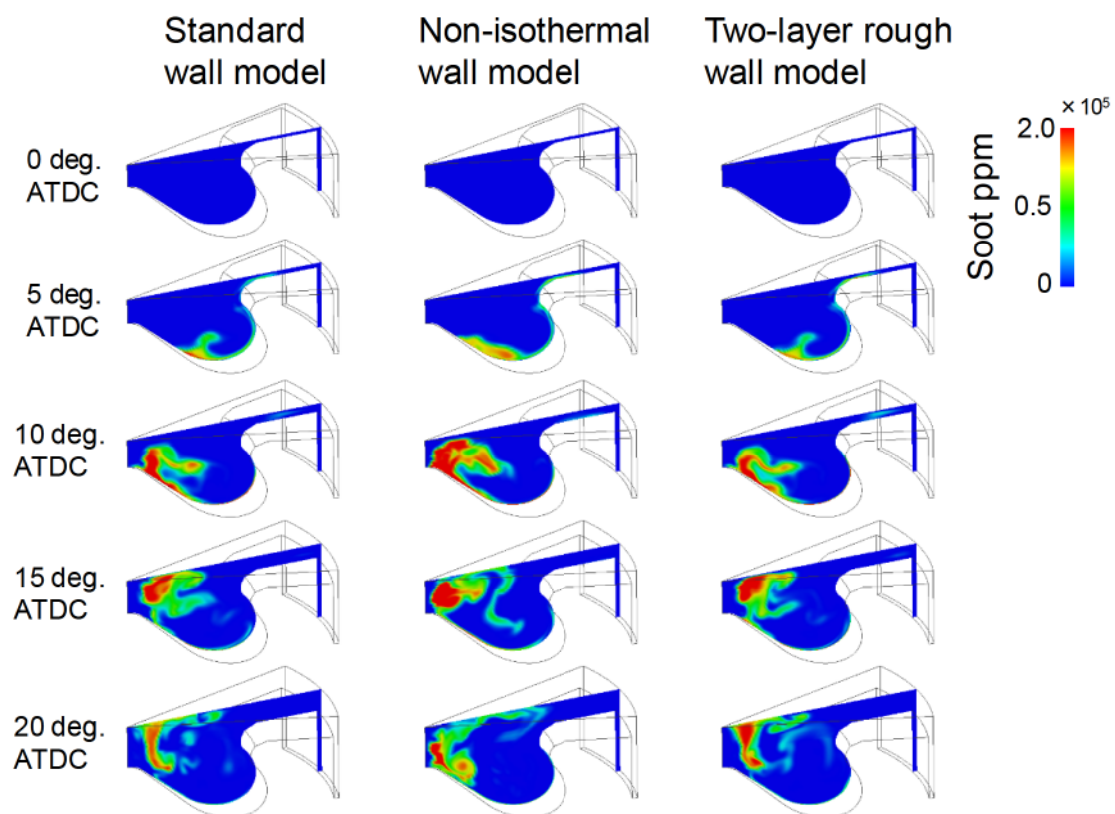


図 4.23 高解像度メッシュを用いて各壁モデルにおける Soot の空間分布

4.4 まとめ

燃焼室形状を有する定容容器において、衝突を伴うディーゼル噴霧の数値解析を行った。第3章と同様に、RANSモデルとLESモデルを用いて計算を行い、それぞれの計算結果と計測結果との比較、検討した。その結果、LESはRANSモデルに比べて、気相の渦構造により噴霧半径方向への拡散が増加し、非対称、不均一な分布を表すことができることが分かった。さらに、LESに適応する壁関数の変更により、壁面と筒内ガスの熱伝達については、変更前と異なる結果が得られ、予測結果の高精度化が可能なことが分かった。これらの改良点を踏まえた上で、LES解析法により予測精度の改善し得ることを示した。

また、上述の定容燃焼器と同様の断面を持つ計算格子を使用してエンジンを対象に計算を行った。計算では $n\text{-C}_7\text{H}_{16}$ と C_7H_8 の混合燃料とし、EGR率をパラメータとして変化させた際の排出ガスへの影響について調査した。その妥当性の評価には、計算で得られる指圧線図と熱発生率を実測値と比較し、排出ガス量が一定の予測精度を有することを確認した。特に、Soot生成の予測に当たっては、その濃度、粒子密度、粒子径などに関する時間的な生成履歴や空間的な分布について詳しく調査した。

さらに、高解像度メッシュを用いてLESモデル、Sootモデルと壁モデルの連成に関する計算コードの有効性を調査した。瞬間的な乱流構造が細かいメッシュによって捉えられるため、各壁モデルにおける予測結果が、粗いメッシュを用いた場合より非定常性を表すことが出来た。高解像度格子に適応すれば、乱流燃焼や微粒子の生成過程に関するさらなる詳しい情報が得られる可能性を示した。

第5章 まとめと今後の課題

5.1 まえがき

エンジン筒内の燃焼過程では、高温高圧場においてシリンダ内の乱れが成長すると共に、燃料の微粒化、蒸発、混合気形成などにより相互作用を及ぼし合っている物理的過程に加え、それと同時に燃焼反応が進行する化学的過程が混在するため、CFDの利用に当たっては、それらの過程の精緻なモデル化が求められる。最近、乱流計算の手法の一つとして、LESが実用的なエンジン燃焼解析ツールとなりつつある。LESは、計算格子で捉えられない乱流の小さなスケール成分のみをモデル化し、比較的粗い計算格子でも精度の高い計算結果を得ることを可能とする計算手法である。このため、これを適用することで、エンジン筒内の三次元非定常乱流場における噴霧燃焼や有害排出物の生成を高精度に予測することが期待されている。

そこで本研究では、アメリカ Los Alamos 国立研究所による開発されたエンジン数値熱流体コード KIVA を改良して用いることで、ディーゼル機関における噴霧燃焼と有害排出物の生成の予測精度を改善することを狙いとした。具体的には、エンジン筒内の乱流現象に着目し、乱流解析手法として LES モデルを計算コードに導入した。さらに、詳細な素反応過程を考慮することによって排出ガスの予測精度の向上を図った。これによって、従来の解析手法である RANS モデルに比べて同じ計算格子、同じ離散手法を用いて燃料混合や非定常流れなどに関するさらに詳しい情報を解析することを目的とした。

5.1 本論文のまとめ

第1章は序論として、研究背景と目的、意義について述べた。まず、エンジン内流れに関する従来研究の現状について詳しく説明した。これまで従来の CFD 応用例では RANS モデルに基づく解析手法が主流になっており、アンサンブル平均化された解が提供されている。このような手法は、エンジン内の現象のサイクル平均値を予測対象として評価し、サイクル平均化された計測データとの比較によってそれを検証することは、一般的なエンジン設計において妥当と考えられる。しかしながら、RANS モデルでは、噴霧燃焼におけるサイクル変動に起因する現象のメカニズムや、空間的に変化する物理量の瞬時分布など

の非定常現象を詳細に解析することは出来ない。これに対して、LESでは進化した乱流モデルとして、乱流をスケール分離し、複雑な実形状を再現する解析法として有用である。また、エンジン内の流動解析においても、噴霧や燃焼に伴う複雑な連成現象をモデル化することによって、複雑な物理現象を解明することができると考えられる。このように、すべての現象を一括して取り扱うことでは、予測精度からも、計算負荷の観点からも合理的なことを説明した。

第2章では、数値解析を実施するにあたって利用する多次元数値流体シミュレーションコードの構成について（トル：第2章で）説明した。まず、本研究で導入したLESモデルの詳細について述べた。具体的には、KIVAをベースコードとして、各支配方程式にトップハットフィルタを適用することによって、乱流における渦のスケールを分解する方法を採った。その改善されたサブグリッドスケールの乱れに関するSGS応力項のモデル化や、壁近傍のモデル化などについて詳細に説明した。次に、ディーゼルエンジンにおける拡散燃焼過程に対して大きな影響を与える噴霧微粒化モデルの概要と格子依存性を低減する手法についても述べた。

また、燃焼反応の詳細な記述に必要とされる素反応過程を考慮するために、CHEMKIN-IIパッケージ内の各種サブルーチンをKIVAコードに連成させた。また、高速な陽解法ODEソルバーであるERENAをKIVAコードに適用する方法を説明し、これにより詳細化学反応計算時間の大幅な短縮を図った。さらに、微粒子の生成過程について、成長、核生成、低級不飽和炭化水素(C₂H₂)による表面成長反応、活性種(OH, O₂)による表面酸化反応、衝突・凝集の一連の過程を記述する現象論モデルの数値解析方法を示した。

第3章では、Sandia ECNで公表されている定容燃焼器を用いた噴霧燃焼の高速度観察画像を参照し、第2章で述べた各モデルを連成した計算コードによる計算結果との比較を通じて精度を検証した結果について述べた。計算では、円筒形の定容容器を想定し、底面の直径が30mm、高さが80mmの三次元領域とした。はじめに、格子依存度を調べるために、それぞれサイズが違う4種類の計算格子を使用し、酸素が存在しない高温度場での非燃焼蒸発噴霧の解析を行った。次に、同じ条件で従来の乱流解析手法であるRANSによる計算を行い、LESによる計算結果と実測結果をそれぞれ比較した。その結果、RANSモデルでは、使用する計算格子によって蒸気相外形に変化が見られず、噴霧に及ぼす計算格子の影響が少ないことが確認された。また、計算された蒸気相外形は軸対称であり、噴霧外

縁における非定常挙動が記述されないことが確認された。

一方、LESモデルの計算結果により、噴霧軸方向と半径方向の両方への発達が生じ、蒸気相形状や噴霧外縁部において渦の発生を伴う非定常挙動が解析されることが分かった。さらに、格子精度が上がるにつれ、噴霧半径方向への発達が促進される傾向が認められた。これらの結果の比較から、計算上の問題点を明らかにし、モデルを改良して非定常燃焼に適応し、ディーゼル噴霧燃焼解析を検討した。次いで、モデルの最適化により、微粒子の空間的分布を解析し、RANSとLESによる結果と実験結果を比較し、LESモデルの妥当性を確認した。

第4章では、まず第3章で高精度を確認された計算コードを用いて、燃焼室形状を有する定容容器において、衝突を伴うディーゼル噴霧の数値解析を行った結果について述べた。第3章と同様に、RANSモデルとLESモデルを用いて計算を行い、それぞれの計算結果と計測結果との比較、検討を行った。その結果、LESはRANSモデルに比べて、気相の渦構造により噴霧半径方向への拡散が増加し、非対称、不均一な分布を示すことが分かった。さらに、LESに適応する壁関数の変更により、壁面と筒内ガスの熱伝達については、変更前と異なる結果が得られ、予測の高精度化が可能性なことが分かった。これらの改良点を踏まえた上で、本研究で導入したLES解析法、壁モデルと現象論Sootモデルの連成により燃焼の予測精度の改善し得ることを示した。また、高解像度計算格子を使用することによって、本計算コードがツールとして有害排気ガスの予測に有用であることを示した。

最後に、上述の定容燃焼器と同様の断面を持つ計算格子を使用してエンジン計算を行った。計算では $n\text{-C}_7\text{H}_{16}$ と C_7H_8 の混合燃料とし、EGR率をパラメータとして変化させた際の排出ガスへの影響について調査した。その妥当性の評価には、計算で得られる指圧線図と熱発生率を実測値と比較し、排出ガス量が一定の予測精度を有することを確認した。特に、Soot生成の予測に当たっては、その濃度、粒子密度、粒子径などに関する時間的な生成履歴や空間的な分布について詳しく調査し考察した。

5.2 本研究において得られた知見と課題

本研究ではLESモデルにおいてフィルタリング操作を適用することで、非定常拡散燃焼の内部現象を予測することができた。これにより、噴霧火炎内部における大規模なスケールの乱流構造を記述し、その瞬間的な空間分布を捉えることができた。また、その際に生成されるSootの生成過程について詳しく調査した結果、以下のことが理解された。すなわ

ち、前駆体 A_2R_5 (低級 PAHs にあたる) は液相蒸発に伴って早い段階で生成する。火炎内部において、固相炭素への成長が高濃度 C_2H_2 に囲まれている領域で発生する傾向がある。また、Soot 粒子の発生は全燃焼過程を通じて行われるが、Soot の表面酸化は OH ラジカルにより、主に高温領域でありかつ噴霧火炎の外周部において生じる。粒子数密度の増加率に関しては、噴霧軸近傍で高い値を取るが、下流に輸送されることや外側に拡散するのに従い、粒子群の数密度が増大と減少が同時に存在する。また、Soot の粒子径については噴霧火炎外周部において高い値をとり、火炎の中央領域内に形成された Soot 粒子は、表面成長および粒子間の衝突・凝集過程を経て粒子径が増大し、その後火炎先端部の強い渦運動に押し出される。さらに対流に乗って火炎外周部に搬送される。この過程では、Soot 粒子の数密度が低下し、粒子径が大きくなる。

LES モデルは、瞬間的な乱流構造を捉えることができるので、燃料蒸気の混合過程及び噴霧軸半径方面の分散が RANS モデルよりも優れている。このため、LES の計算結果から、実機の筒内圧力、熱発生履歴、排出ガス量を良好に再現できることが確認された。Soot については、固体壁面に沿ってピストンボウルの中心部とスキッシュ領域に流れて生成する。そのため、縦渦流やスキッシュ流などがエンジン筒内において Soot の空間分布を左右し、Soot の生成と排出に影響を与える。これによって、高精度な壁乱流モデルの適用が重要であることを示唆される。

5.2 今後の展望

これまで、各所で LES モデルが改良され、エンジン燃焼にも適用されてきたにもかかわらず、燃焼や噴霧モデルについては一層の改良の必要性が依然として存在する。また、LES モデルの改善と適応に当たっては、壁の熱伝達、噴霧の微粒化、噴射ノズル内流れなど多くのサブモデルの改善が求められる。LES をエンジン燃焼の計算に展開するには、複雑な格子形状、移動境界の設定などを克服すべき問題点が多く残っている。

さらに、各サブモデルにおいてより詳細な精度検証が必要になり、例えば、Soot の粒子数密度や直径の時間的かつ空間的な変化に関する計算結果と実験データと定量的に比較する必要がある。しかしながら、現段階では、ディーゼルエンジンにおいては、このような実験データの取得は機構の複雑さのため極めて困難であるため、これから、さらなる計測データの高度化と新技術開発のニーズの両面から支持されることによって、エンジン流れの解析手法として主流になることが期待される。

LES は、電算機の計算能力の制約もあり、当面はエンジン設計に直接利用することは困難であり、今後の一層の計算機能力の進展とコスト低減を待たなければならない。したがって現状では、非定常で複雑な物理化学的なエンジン内現象を記述し、実験による検証を踏まえてそれらの現象の理解を深めることや、新たなエンジン燃焼のコンセプトの案出、エンジンの概念設計の構築等に役立てられるものと考えられる。そのような研究開発の一助とすべく、本研究の進展を目指したい考えである。

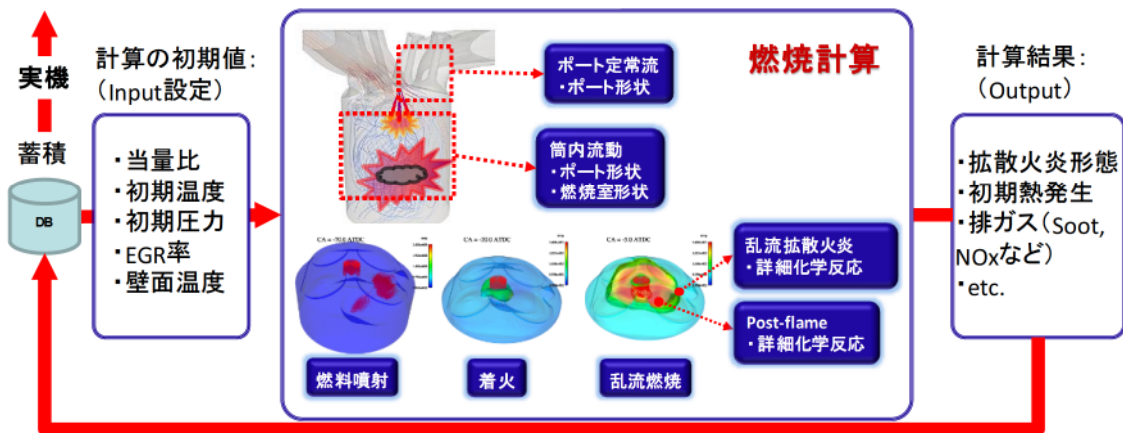


図 5.1 今後の展望 (ツールとしてエンジン設計への適応)

参考文献

- (1) 大聖泰弘, No.19-06 シンポジウム “ディーゼルクリーン化を目指す最新後処理・燃焼技術”, 自動車技術会(2007).
- (2) 「平成 20 年度エネルギーに関する年次報告」(エネルギー白書 2009) HTML 版
<http://www.enecho.meti.go.jp/about/whitepaper/2009html/>
- (3) 第四次環境基本計画における重点分野, 「地球温暖化に関する取り込み」報告書
<https://www.env.go.jp/council/02policy/y020-64/mat01.pdf>
- (4) 大聖泰弘, “自動車の環境・エネルギー技術に関わる将来展望”, 国際交通安全学会誌 Vol.33, No.3, (2008)
- (5) 大聖泰弘, “将来のディーゼル車の排出ガス低減技術”, フォーラムテキスト, ディーゼル・燃料潤滑油フォーラム, pp.36-41, (2004)
- (6) 大聖泰弘, “自動車の燃費改善と排出ガス対策に関する技術開発動向”, 自動車技術, Vol.59, No.2, pp.10-16, (2005)
- (7) 大聖泰弘, “ディーゼルエンジン技術に関する将来展望”, 自動車技術, Vol.59, No.4, pp.4-10, (2005)
- (8) 大聖泰弘, “クリーンディーゼル研究・開発・普及の課題”, GIA ダイアログテキスト, クリーンディーゼル車の普及を考えるーディーゼルは温暖化防止のキーテクノロジーになるかー, pp.1-13 (2006)
- (9) <http://www.dieselnet.com/standards/eu/ld.php> (2015)
- (10) 草鹿仁, “エンジン解析: 詳細な素反応過程を考慮したディーゼル燃焼の数値シミュレーション” 自動車技術特集, Vol. 59, No. 4, 2005
- (11) 自動車の計測解析技術(自動車技術シリーズ 7), (社)自動車技術会, 朝倉書店, 1998
- (12) 小林敏雄, 谷口伸行, 加藤千幸, “LES による流体解析ソフトウェアと自動車分野への応用-RR2002 プロジェクト戦略的基盤ソフトウェアの開発-”, 日本数値流体力学会誌, 第 10 巻, 第 2 号, 2002
- (13) C J Rutland, “Large-eddy simulations for internal combustion engines – a review,” International Journal of Engine Research October 2011 vol. 12 no. 5 421-451

- (14) Vermorel, O., Richard, S., Colin, O., Angelberger, C. et al., "Multi-Cycle LES Simulations of Flow and Combustion in a PFI SI 4-Valve Production Engine," SAE Technical Paper 2007-01-0151, 2007, doi:10.4271/2007-01-0151.
- (15) 村田豊, “可変バルブタイミング機構を用いたディーゼル燃焼の制御と排気浄化に関する研究”, 博士論文, 早稲田大学大学院理工学研究科, 2008
- (16) 堀司, 千田次郎, “エンジン燃焼の数値シミュレーション”, 日本マリンエンジニアリング学会誌, 第44巻, 第3号, 2009
- (17) <http://wwwlib.cc.it-chiba.ac.jp/mse/lab/sasaki.html>(2015)
- (18) P. Bradshaw and W. A. Woods, “An Introduction to Turbulence and its Measurement: Thermodynamics and Fluid Mechanics Series (C.I.L.),” Pergamon, 1st edition(1971)
- (19) Launder, B.E.; Spalding, D.B. “The numerical computation of turbulent flows,” *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 3 (2): 269–289. 1974
- (20) P. Bradshaw, “Turbulent Secondary Flows, *Annual Review of Fluid Mechanics*,” 1987
- (21) Kim J, Moin P, Moser RD. “Turbulence statistics in fully-developed channel flow at low Reynolds number,” *J. Fluid Mech.* 177:133–66, 1987
- (22) Moin, P. and Mahesh, K. “Direct Numerical Simulation: A Tool in Turbulence Research,” *Annu. Rev. Fluid Mech.* 1998. 30: 539–78
- (23) Moser, R., Kim, J. & Mansour, N. “Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_{\tau}=590$,” *Physics of Fluids* 11(4), 943-945. 1999
- (24) J. M. Wallace, “Twenty Years of Experimental and DNS Access to the Velocity Gradient Tensor: What Have We Learned About Turbulence?,” http://eng.umd.edu/~wallace/pdf/DFDInvited%20Lecture_.pdf
- (25) S. B. Pope., “Turbulent Flows,” Cambridge University Press (2000).
- (26) Germano, M., Piomelli, U., Moin, P. and Cabot, W. H., "A dynamic sub-grid scale eddy viscosity model", *Physics of Fluids, A* (3): pp 1760-1765, 1991.
- (27) Smagorinsky, J. "General circulation experiments with the primitive equations, i. the basic experiment. *Monthly Weather Review*", 91: pp 99-164, 1963.

- (28) Deardorff, J. "A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers". *Journal of Fluid Mechanics* 41 (2): 453–480. 1970
- (29) U. Schumann, "Subgrid length-scales for large-eddy simulation of stratified turbulence," *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, August 1991, Volume 2, Issue 5, pp 279-290
- (30) U Piomelli, J Ferziger, P Moin, J Kim, "New approximate boundary conditions for large eddy simulations of wall - bounded flows," *Phys. Fluids A* 1, 1061 (1989)
- (31) Launder, B.E.; Spalding, D.B. "Lectures in mathematical models of turbulence," Academic Press, 1972
- (32) Wilcox, D.C., "Re-assessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models", *AIAA Journal*, vol. 26, no. 11, pp. 1299-1310. (1988)
- (33) 梶島岳夫, "乱流の数値シミュレーション", 第2版, 養賢堂, 2003
- (34) 店橋護, 佐藤允, 宮内敏雄, "乱流熱物質輸送現象の超大規模直接数値計算", *スーパーコンピューティングニュース*, Vol. 8, Special Issue, 2006
- (35) 宮内敏雄, 店橋護, "乱流燃焼研究の現状と展望", *日本機械学会誌*, Vol.72, No.724, pp.2838-2844. 2006
- (36) 保原充, 大宮司久明, "数値流体力学 (基礎と応用)", 東京大学出版会, 1992
- (37) Amsden, A. A., O'Rourke, P. J. and Butler, T. D. "KIVA-II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays," Tech. Rep. LA-11560-MS. Los Alamos National Laboratory. (1989)
- (38) Amsden, A. A. "KIVA-3: A KIVA Program with Block-Structured Mesh for Complex Geometries," Tech. Rep. LA-12503-MS. Los Alamos National Laboratory. (1993)
- (39) Amsden, A. A. "KIVA-3V: A Block-Structured KIVA Program for Engines with Vertical or Canted Valves," Tech. Rep. LA-13313-MS. Los Alamos National Laboratory. (1997)
- (40) Amsden, A. A. "KIVA-3V, Release 2, Improvements to KIVA-3V," Tech. Rep. LA-113608-MS. Los Alamos National Laboratory. (1999)
- (41) D. J. Torres, M. F. Trujillo, "KIVA-4: An unstructured ALE code for compressible gas flow with sprays," *Journal of Computational Physics* 219, 2006, pp. 943-975.

- (42) Hirt, C. W., Amsden, A. A. and Cook, C. J. "An Arbitrary Lagrangian- Eulerian Computing Method for All Flow Speeds," *Journal of Computational Physics* 14, 227-253. (1974)
- (43) Celik, I., Yavuz, I., Smirnov, A., Smith, J., et al., "Prediction of in-cylinder turbulence for IC engines," *Combust. Sci. Technol.*, 2000, 153(1), 339–368.
- (44) I. Celik, I. Yavuz, A. Smirnov, "Large eddy simulations of in-cylinder turbulence for internal combustion engines: a review," *International Journal of Engine Research*, vol. 2, no. 2, 119-148, 2001
- (45) Sone, K. and Menon, S., "Effect of subgrid modeling on the in-cylinder unsteady mixing process in a direct injection engine," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power-Transactions of the Asme*, 2003, 125 (2), 435-443.
- (46) Menon, S., "Subgrid combustion modelling for large-eddy simulations," *Int. J. Engine Res.*, 2000, 1(2), 209–227.
- (47) 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 Technical Paper 2006-01-3334*, 2006.
- (48) 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 Technical Paper 2007-01-0247*, 2007
- (49) 堀司, 千田二郎, 藤本元, "Large Eddy Simulation を用いたディーゼル噴霧微細構造の数値解析" *自動車技術* Vol.62, No.5. 65-71 (2008)
- (50) Jhavar, R. and Rutland, C., "Using Large Eddy Simulations to Study Mixing Effects in Early Injection Diesel Engine Combustion," *SAE Technical Paper 2006-01-0871*, 2006, doi:10.4271/2006-01-0871.
- (51) Banerjee, S., Liang, T., Rutland, C. J., and Hu, B., "Validation of an LES multi mode combustion model for diesel combustion," *SAE Technical paper 2010-01-0361*, 2010, doi:10.4271/2010-01-0361
- (52) Hu, B. and Rutland, C., "Flamelet Modeling with LES for Diesel Engine Simulations," *SAE Technical Paper 2006-01-0058*, 2006, doi:10.4271/2006-01-0058.

- (53) Hu, B., Jhavar, R., Singh, S., Reitz, R. et al., "Combustion Modeling of Diesel Combustion with Partially Premixed Conditions," SAE Technical Paper 2007-01-0163, 2007, doi:10.4271/2007-01-0163.
- (54) Pomraning, E. and Rutland, C. J., "Dynamic one equation nonviscosity large-eddy simulation model," AIAA J., 2002, 40(4), 689–701.
- (55) Chumakov, S. G. and Rutland, C. J., "Dynamic structure subgrid-scale models for large eddy simulation," Int. J. Numer. Methods Fluids, 2005, 47(8–9), 911–923.
- (56) Hiroyasu, H., "Diesel engine combustion and its modeling," In Proceedings of International Symposium COMODIA 85, Tokyo, Japan, 1985, pp. 53-75
- (57) 小酒英範, "ディーゼル機関におけるすす生成過程のレーザー計測", 混相流, 18 巻, 2 号, 2004.
- (58) 小酒英範ほか, "レーザー誘起赤熱・散乱光法による非定常噴霧火炎内のすす生成と酸化に関する研究", 日本機械学会論文集 (B 編) 61 巻 590 号 28-33, 1995.
- (59) Kuribayashi, M., Ishizuka, Y., and Aizawa, T., "Sizing of Soot Particles in Diesel Spray Flame -A Qualitative Comparison between TEM Analysis and LII/Scattering Laser Measurements," SAE Int. J. Fuels Lubr. 6(3):641-650, 2013, doi:10.4271/2013-01-2576.
- (60) Kee, R. J., Rupley, F. M. and Miller, J. A., "Chemkin-II: A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics," Sandia Report, SAND89-8009B, 1995.
- (61) 森井雄飛ほか, "硬直性の強い化学反応方程式に対する高速時間積分法の評価", 日本燃焼学会誌, 第 56 巻 176 号, 156-165, 2014.
- (62) Y. Morii, H. Terashima, M. Koshi, T. Shimizu, E. Shima., "Fast and robust time integration method for stiff chemical kinetic ODEs," 50th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference 2014–3920, 2014.
- (63) 森島彰紀 草鹿仁 大聖泰弘, "ディーゼル燃焼における微粒子生成過程の解析 (過濃予混合燃焼場における検討)", 自動車技術会論文集 38(1), 151-156, 2007-01-25
- (64) T. Kaminaga, J. Kusaka and Y. Ishii, "A three-dimensional numerical study on exhaust gas emissions from a medium-duty diesel engine using phenomenological

- soot particle formation model combined with detailed chemistry,” *International Journal of Engine Research*, vol.9, 2008, pp.287-296
- (65) 足立隆幸, 兒玉貴義, 中山隆雄, 草鹿仁, 大聖泰弘, “ディーゼル燃焼における微粒子生成過程の数値解析”, *自動車技術会論文集* 44(4), 1001-1008, 2013-07
- (66) Golovitchev, V., Surrogate mechanism for diesel oil,
<http://www.tfd.chalmers.se/~valeri/>, (2004).
- (67) Erlebacher, G., Hussaini, M. Y., Speziale, C. G. and Zang, T. A. “Toward the Large-Eddy Simulation of Compressible Turbulent Flows,” *Journal of Fluid Mechanics* 238, 155-185. (1992)
- (68) Smits, A. J. and Dussauge, J. P. “Turbulent Shear Layers in Supersonic Flow,” Springer, 2nd edtion. 2006
- (69) Schmitt, F.G. "About Boussinesq's turbulent viscosity hypothesis: historical remarks and a direct evaluation of its validity", *Comptes Rendus Mécanique* 335 (9-10): 617-627, (2007)
- (70) Sone, K., Patel, N. V., and Menon, S. “KIVALES: Large-Eddy Simulations of Internal Combustion Engines. Part I: Theory and Formulation,” Technical Report CCL-00-008, Georgia Institute of Technology, 2000
- (71) Menon, S., Yeung, P.-K. and Kim, W.-W. “Effect of Subgrid Models on the Computed Interscale Energy Transfer in Isotropic Turbulence,” *Computers and Fluids* 25 (2), 165-180. (1996)
- (72) Calhoon, W. H. “On Subgrid Combustion Modeling for Large-Eddy Simulations,” Ph.D. thesis, Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA. (1996)
- (73) Lilly, D.K., “On the application of the eddy viscosity concept in the inertial subrange of turbulence,” NCAR MS 123, National Centre for Atmospheric Research, Boulder, Colorado. 1966
- (74) J. Bardina, J.H. Ferziger and W.C. Reynolds, "Improved turbulence models based on large-eddy simulation of homogeneous incompressible turbulent flows." Rept. No. TF-19, Stanford University, Stanford, 1983
- (75) P. Moin and J. Kim, “Numerical investigation of turbulent channel flow,” *J. Fluid Mech.* 118,341 (1982).

- (76) A. Gel, "A distributed-memory implementation of KIVA-3 with refinements for large eddy simulation," West Virginia University, 1999
- (77) Han, Z. and Reitz, R. D. "Turbulence Modeling of Internal Combustion Engines Using RNG $k-\epsilon$ Models," *Combustion Science and Technology* 106, 267-295. 1995
- (78) 稲垣昌英ほか, "実用的な LES のための混合時間スケール SGS モデル" 日本機械学会論文集. B 編 68(673), 2572-2579, 2002-09-25
- (79) Inagaki, M., Kondoh, T., and Nagano, Y., "A mixedtime-scale SGS model with fixed model-parameters for practical LES," *J. Fluids Eng.*, 127, 1-13. 2005
- (80) Sone, K., Patel, N. V., and Menon, S., "KIVALES: Large-Eddy Simulations of Internal Combustion Engines. Part II: KIVALES User's Manual," Technical Report CCL-00-009, Georgia Institute of Technology, 2000
- (81) Sone, K., Patel, N. V., and Menon, S., "Large-eddy simulation of fuel-air mixing in an internal combustion engine," 39th AIAA Aerospace Sciences Meeting January 8-11, 2001/Reno, NV. (2001).
- (82) Bockhorn, H. (Ed.) "Soot Formation in Combustion: Mechanisms and Models," Springer, Berlin, Germany, 1994
- (83) 草鹿仁, "詳細な素反応過程を考慮したディーゼル燃焼過程の数値解析", 発表資料, RC255 先進的な計測技術と解析手法による燃焼現象の解明と技術進展に関する国際協力研究分科会, 2012
- (84) M. Frenklach and H. Wang, "Detailed Mechanism and Modeling of Soot Particle Formation," *Soot formation in combustion*, pp. 165-189, 1994
- (85) M. Frenklach, H. Wang, *Proc. Combust. Inst.* 23, 1559-1566. (1990)
- (86) H. Wang and M. Frenklach, "A detailed kinetic modeling study of aromatics formation in laminar premixed acetylene and ethylene flames," *Combustion and Flame*, Vol. 110, Issues 1-2, pp.173-221, 1997
- (87) J. Appel, H. Bockhorn, and M. Frenklach. Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: Laminar premixed flames of C2 hydrocarbons. *Combust. Flame*, 121:122-136, 2000.

- (88) Kazakov, A., Wang, H., Frenklach, M. "Detailed modeling of soot formation in laminar premixed ethylene flames at a pressure of 10 bar," *Combustion and Flame* 100, pp. 111-120. (1995)
- (89) Kazakov, A. and Foster, D., "Modeling of Soot Formation During DI Diesel Combustion Using a Multi-Step Phenomenological Model," SAE Technical Paper 982463, 1998
- (90) Nagle, J. and Strickland-Constable, R. F. Oxidation of carbon between 1000–2000 deg. C. In *Proceedings of Fifth Carbon Conference*, 1, 571–164, Pergamon Press, Oxford. 1962
- (91) Neoh, K. G., Howard, J. B., and Sarofim, A. F., "Effect of oxidation on the physical structure of soot," In *Proceedings of Twentieth International Symposium on Combustion*, The Combustion Institute, pp. 951–957. 1984
- (92) Tao, F., Golovitchev, V., and Chomiak, J., "A phenomenological model for the prediction of soot formation in diesel spray combustion," *Combust. Flame*, 136, 270–282. 2004
- (93) Daniel D. Eads, N. Periasamy, Graham R. Fleming, "Diffusion influenced reactions at short times: Breakdown of the Debye-Smoluchowski description," *The Journal of Chemical Physics.*, 90(7):3876-3878, 1989
- (94) Reitz, R.D., "Modeling of Atomization Processes in High-Pressure Vaporizing Sprays, *Atomization and Spray Technology*," 3, pp. 309-337. 1987
- (95) J. C. Beale and R. D. Reitz. "Modeling Spray Atomization with the Kelvin-Helmholtz / Rayleigh-Taylor Hybrid Model". *Atomization and Sprays*. 9. 623–650. 1999.
- (96) M. A. Patterson and R. D. Reitz. "Modeling the Effects of Fuel Spray Characteristics on Diesel Engine Combustion and Emission". SAE Paper. SAE. 1998.
- (97) N. Nordin, "Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion," Ph.D. thesis, Chalmers University of Technology, 2000.
- (98) V. G. Levich. *Physicochemical Hydrodynamics*. Prentice Hall. 1962.
- (99) Bellman, R. and Pennington, R. H., "Effects of Surface Tension and Viscosity on Taylor Instability," *Quarterly of Applied Mechanics*, Vol. 12, pp. 151~162. 1954

- (100) Nordin, N., <http://files.nequam.se/thesis.pdf>, Patches, 2.3-2.6: Additional breakup models, 2.2-2.3: Velocity interpolated at parcel position, 2.0-2.7: Additional collision model. 2004
- (101) 松崎大顕, “ディーゼル機関の燃焼・排出ガス特性に及ぼす燃料性状と燃焼室形状の影響”, 修士論文, 早稲田大学大学院環境・エネルギー研究科, 2012
- (102) P. J. O'Rourke and A. A. Amsden. "The TAB Method for Numerical Calculation of Spray Droplet Breakup". SAE Technical Paper 872089. SAE. 1987.
- (103) Liu, A., Mather, D., and Reitz, R., "Modeling the Effects of Drop Drag and Breakup on Fuel Sprays," SAE Technical Paper 930072, 1993
- (104) David P. Schmidt, C. J. Rutland, “A new droplet collision algorithm,” Journal of Computational Physics, Volume 164 Issue 1, Pages 62 – 80, 2000
- (105) O'Rourke, P.J., “Collective Drop Effects in Vaporizing Liquid Spray,” Ph.D. thesis, 1532T, Princeton University, 1981.
- (106) P. N. Brown, G. D. Byrne, and A. C. Hindmarsh, “VODE, A Variable-Coefficient ODE Solver,” SIAM J. Sci. Stat. Comp., 10, pp.1038-1051. 1987
- (107) D. R. Mott, E. S. Oran and B. van Leer., “CHEMEQ2: A Solver for the Stiff Ordinary Differential Equations of Chemical Kinetics,” NRL Memorandum Report NRL/MR/6400-01-8553, Naval Research Laboratory, Washington, D.C., 2001.
- (108) S. R. Qureshi and R. Prosser, “Implementation of alpha-QSS Stiff Integration Methods for Solving the Detailed Combustion Chemistry,” in Proceedings of the World Congress on Engineering, vol. 2. 2007
- (109) Y. Shi, WH. Green Jr, HW. Wong, OO. Oluwole, “Accelerating multi-dimensional combustion simulations using GPU and hybrid explicit/implicit ODE integration” Combustion and Flame 158 (5), 836-847, 2012.
- (110) 寺島洋史ほか, “大規模詳細反応機構を考慮した圧縮性燃焼流シミュレーションを可能とする高速・高効率な数値解析手法の開発とその評価”, 日本燃焼学会誌, 第 55 巻 174 号, 411-421, 2013.
- (111) 佐藤圭峰, 藤本英史, 寺島(石原)洋史, 草鹿仁, 森井雄飛, “詳細な素反応過程を考慮したエンジン燃焼シミュレーション”, 第 51 回燃焼シンポジウム, 2013

- (112) Kikusato, A., Kogo, K., Zhou, B., Jin, K. et al., "Numerical Simulation on Soot Formation in Diesel Combustion by Using a CFD Code Combined with a Parallelized Explicit ODE Solver," SAE Technical Paper 2014-01-2567, 2014
- (113) 三又秀行ほか, “詳細な素反応過程を考慮した数値流体コードによるディーゼル燃焼の数値解析 — マルチコア対応による高速化 —”, JSAE Paper 20105689 (2010), pp. 9-12.
- (114) Golovitchev, V., Nordin, N., Jarnicki, R., and Chomiak, J., "3-D Diesel Spray Simulations Using a New Detailed Chemistry Turbulent Combustion Model," SAE Technical Paper 2000-01-1891, 2000
- (115) Angelberger, C., Poinso, T. and Delhay, B., “Improving Near-Wall Combustion and Wall Heat Transfer Modeling in SI Engine Computations,” SAE paper 972881, 1997
- (116) <http://www.sandia.gov/ecn/cvdata/dsearch/frameset.php?nam=1>, 2014
- (117) Pickett L.M., Genzale C.L., Bruneaux G., Malbec L.-M., Hermant L., Christiansen C., Schramm J. "Comparison of diesel spray combustion in different high-temperature, high-pressure facilities," SAE Int. J. Engines 3(2):156-181, 2010
- (118) Idicheria, C. and Pickett, L., “Ignition, soot formation, and end-of-combustion transients in diesel combustion under high-EGR conditions,” International Journal of Engine Research, 12(4), 376-392, 2011
- (119) 中井英二, “ガソリンエンジン限界への挑戦と新型ディーゼルエンジン SKYACTIV-D 2.2L の紹介”, 第31回 早大モビリティシンポジウム, 2011
- (120) S-K. Kim, D. Shimo, M. Kataoka and K. Nishida., “Development of Combustion Chamber Shape to Reduce NOx and CO2 Emissions by Enhancing In-cylinder Gas Mixing in a Diesel Engine,” In Proceedings of International Symposium COMODIA 2012, Fukuoka, Japan, pp. 218–225

謝 辞

本研究を実施するにあたり、終始多大なご指導及びご鞭撻を賜りました早稲田大学大聖泰弘教授に対して深く感謝の意を表します。大聖教授には、当時違う専攻だった筆者を博士後期課程学生として受け入れて頂き、研究において成否に関わらず常に暖かく励まして頂きました。これまでに大聖教授のご指導の下に、その成果をまとめることができました。

また、本論文をまとめるにあたりご校閲、ご指導賜りました早稲田大学宮川 和芳教授、草鹿 仁教授、滝沢 研二准教授に対して、謹んで感謝の意を表します。

本論文の大部分は、早稲田大学とマツダ株式会社の共同研究として行われたものです。貴重な研究機会を与えてくださいましたマツダ株式会社技術研究所の藤本 英史様と佐藤 圭峰様に深く感謝いたします。

また、本研究で行った反応性ガス数値流体解析に関して専門的視点から有益な助言、討論を頂いた当時東京大学の寺島（石原）洋史准教授とJAXAの森井 雄飛様に深く感謝いたします。

さらに、多くのご協力を頂きました早稲田大学大聖研究室の皆様、そして早稲田大学理工学部熱工学管理室の皆様に厚く御礼を申し上げます。

最後になりますが、本論文を執筆する期間に私を常に暖かく見守り続けて、そして激励して頂いた家族に、ここで感謝の意を表します。

2016年2月 周 蓓霓