



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	質量およびエンタルピーを保存する液滴内部分布を考慮した多成分燃料用液滴蒸発モデルの開発と精度検証
Author(s)	内藤, 雄心
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第14874号
Issue Date	2022-03-24
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k14874
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/94571
Type	doctoral thesis
File Information	Yushin_Naito.pdf



博士論文

質量およびエンタルピーを保存する液滴内部
分布を考慮した多成分燃料用液滴蒸発モデル
の開発と精度検証

(Development and validation of droplet
evaporation model for multi-component fuel
considering internal distributions conserving mass
and enthalpy)

令和4年2月

北海道大学大学院工学院機械宇宙工学専攻
宇宙環境応用工学研究室

内藤 雄心

記号表

A, B	未定定数(式(2-25, 30, 83))	P	圧力, Pa
C_p	比熱, J/kg/K	$\dot{q}$	熱エネルギー, W
D	質量拡散係数, m ² /s	R	液滴中心からの距離, m
D_0	初期液滴直径, mm	R_d	液滴半径, m
D_{eff}	有効質量拡散係数, m ² /s	Δt	タイムステップ, s
h_0	定数 (式(2-15))	T	温度, K
H	感エンタルピー, J/kg	u	速度, m/s
I_A	液滴画像における背景の 平均輝度	u^c	修正ステファン速度, m/s
I_B	液滴画像における液滴の 平均輝度	v	拡散速度, m/s
H_{latent}	蒸発潜熱, J/kg	x	モル分率
k	熱伝導率, W/(m K)	y	質量分率
k_{eff}	有効熱伝導率, W/(m K)	上/下付け文字:	
m	質量, kg	a	平均
MW	分子量, g/mol	amb	雰囲気
$\dot{m}$	質量蒸発速度, kg/s	b	沸点
n	固有値の数	c	臨界
N	化学種の数	$conduct$	熱伝導(達)による効果
P	圧力, Pa	$enthalpy$	エンタルピー拡散による効果
$\dot{q}$	熱エネルギー, W	g	気相
Q_n	フーリエ係数	i	化学種
R	液滴中心からの距離, m	l	液相
R_d	液滴半径, m	$latent$	潜熱
x	液滴表面からの熱もしくは 物質拡散距離, m		

Δt	タイムステップ, s	m	多成分系
T	温度, K	$radiation$	輻射による効果
u	速度, m/s	ref	代表値
u^c	修正ステファン速度, m/s	s	液滴表面
v	拡散速度, m/s	v	蒸気
x	モル分率		
$y (Y)$	質量分率	ギリシャ文字:	
C_p	比熱, J/kg/K	γ	活量係数
D	質量拡散係数, m ² /s	Γ	グループ活量係数
D_{eff}	有効質量拡散係数, m ² /s	ε	正規化質量分率
H	感エンタルピー, J/kg	η	粘度, kg/m/s
H_{latent}	蒸発潜熱, J/kg	λ	固有値
K	熱伝導率, W/(m K)	ρ	密度, kg/m ³
k_{eff}	有効熱伝導率, W/(m K)	σ	ステファンボルツマン定数 (5.67×10^{-9}), W/m ² /K ⁴
m	質量, kg	τ_{95}/D_0^2	液滴直径履歴における時間, s/m ²
MW	分子量, g/mol	τ_{end}	液滴蒸発終了時刻, s
$\dot{m}$	質量蒸発速度, kg/s	v	固有関数
N	化学種数	τ_{95}/D_0^2	95 vol%液滴寿命,
		φ	一様分布
		ψ	勾配をもつ分布
		Ω	無次元温度

目次

1	緒論	1
1.1	本研究の背景	1
1.2	液滴蒸発モデルに関する従来の研究	6
1.3	本研究の目的	8
2	多成分燃料用液滴蒸発モデルの構築	9
2.1	多成分燃料用液滴蒸発モデルの概要と仮定	9
2.2	液相モデル	10
2.3	気液平衡モデル	28
2.4	気相モデル	29
2.5	沸騰モデル	34
2.6	過熱モデル	35
2.7	計算アルゴリズム	36
3	炭化水素燃料による精度検証	38
3.1	実験装置および解析方法	38
3.2	液滴寿命に関する定義	39
3.3	分解軽油サロゲート燃料	40
3.4	液滴内部の濃度分布	42
3.5	液滴内部の温度分布	45
3.6	様々な雰囲気温度における実験値と予測値の比較	46
3.7	均一分布モデルとの比較	50
4	アルコール混合燃料による精度検証	57
4.1	実験装置の改良とシャドウグラフ法による液滴蒸発特性の計測	57
4.2	イソオクタン-エタノール混合燃料	61
4.3	様々な雰囲気温度における実験値と予測値の比較	62

4.4 活量係数を考慮したモデルによる予測精度の検討と考察.....	64
5 結論	73
APPENDIX A 異なる質量蒸発速度モデルの予測精度の比較	74
APPENDIX B 液相および気相の取り扱いによる予測値の差異 ..	77
APPENDIX C 無次元数.....	81
APPENDIX D 温度および濃度分布に対する無次元量による検討	83
APPENDIX E 構築したモデルと均一分布モデルの計算コスト ..	88
APPENDIX F 導出した分布式と解析解の差異	89
APPENDIX G 物性値表	96
参考文献	98
謝辞	103

1 緒論

1.1 本研究の背景

2021 年ノーベル物理学賞受賞者でもある真鍋淑郎博士が 1989 年に世界初となる地球温暖化の予測に関する論文を発表してから 30 年以上経過した現在も、全世界レベルで地球温暖化は深刻な問題として警鐘を鳴らされている。2015 年 9 月の国連サミットで採択された「持続可能な開発のための 2030 アジェンダ」に記載されている国際目標である持続可能な開発目標(SDGs: Sustainable Development Goals)にも、エネルギーのクリーン化と気候変動に対する対策立案が盛り込まれるなど地球温暖化対策は人類の喫緊の課題として広く認識されている。同時に、石油などの化石燃料の燃焼などによって排出される二酸化炭素が地球温暖化の主たる原因であるということも広く認識されている。そこで、燃焼技術に対しては様々な分野で規制強化が顕著である。特に、自動車業界の世界的な規制強化は自動車大国である我が国のこれからの指針に大きな打撃を与えている。例えば、高い二酸化炭素排出削減目標を掲げている欧州連合(EU: European Union)は、2035 年までにガソリン・ディーゼル車の新車販売を禁止する項目が含まれる政策を 2021 年 7 月に発表している。すなわち、ガソリンエンジンとモーターを動力源とするハイブリッド車も規制対象と

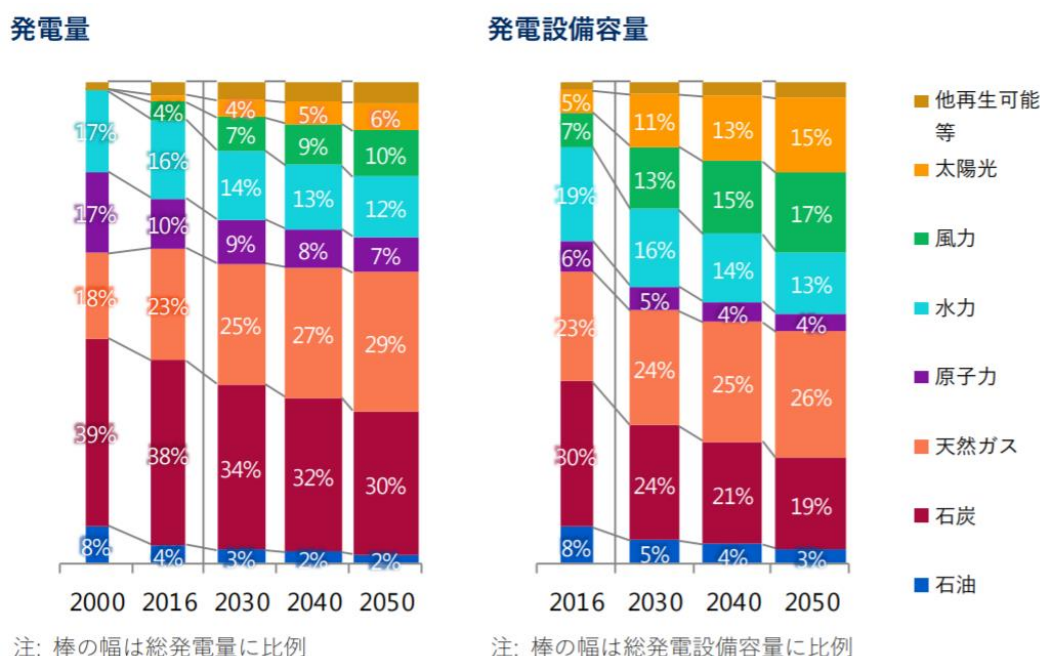


Fig. 1-1 World power generation constitution [1]

なり、完全に電気自動車へシフトしようとするものである。このように 2021 年は今後の燃焼技術のありかたを再認識させる年でもある。

燃焼技術が地球環境に与える影響が大きい一方で、人類が燃焼技術によって得られるエネルギーに依存していることも事実である。Fig.1-1 に世界の発電量および発電設備容量の過去の変遷と予測を表す図[1]を示す。Fig.1-1 より、風力や太陽光のような再生可能エネルギーによる発電量が徐々に増加していく一方で、2050 年においても化石燃料が世界のエネルギー需要の 50%以上を支えるエネルギー源であると予測されている。このように、我が国や欧米諸国の先進国は化石燃料をエネルギー源とする発電を抑制しようとする動きは多いが、巨視的にエネルギー動向を見ると化石燃料の需要は高まっていくことが予測されている。したがって、クリーンな燃焼技術の開発と実用化が様々な産業で要求されている。

本研究では噴霧燃焼技術に着目している。噴霧燃焼は制御の応答性が良く、高負荷燃焼が可能であることから様々な産業機器に適用されている。航空機ガスタービンエンジン、ロケットエンジン、自動車用エンジンなどが噴霧燃焼技術の実用例である。しかし、噴霧燃焼は複雑な現象であるため、詳細な火炎構造や燃焼メカニズムは未だ不明な点が多いことが現状である。Fig. 1-2 に噴霧燃焼構造の概要[2]を示す。噴霧燃焼では、まず燃料がインジェクターから噴射されると燃料と気体の相対速度等によって液滴として分散される微粒化過程を経る。微粒化によって気体(気流)へ分散した液滴は、液滴周囲の気体(気流)からの熱流入を受けて蒸発する。蒸発によって気体(気流)に拡散した燃料成分が化学反応を起こして燃焼する。これら以外にも、実用的な燃焼器での噴霧燃焼場では、燃料液滴同士の衝突によって誘発される二次微粒化や乱流による混合、燃焼器壁面における熱損失などが同時に進行している。したがって、噴霧燃焼は複数の物理的または化学的現象が同時かつ相互に影響を及ぼし合う極めて複雑な現象と一般的に認識されている。

近年は噴霧燃焼シミュレーション技術が注目されている。噴霧燃焼の複雑性から噴霧燃焼器の設計や運転条件の選定は経験的な評価に頼っていることが多い。より実現象に近い噴霧燃焼シミュレーション技術を利用することで、複雑な火炎構造を高精度で予測することができる。さらに、燃焼機関の熱効率と窒素酸化物などの大気汚染物質の排出量のバランスも経験的ではなく思索的かつスピーディーに明らかにすることができる。このように、噴霧燃焼シミュレーション技術を活用して燃焼器設計プロセスを支援することで、よりクリーンな革新的燃焼技術を実現できることが期待されている。これらことから、高精度な噴霧燃焼シミュレーション技術を実機開発プロセスに導入しようとする動きは既に活発に

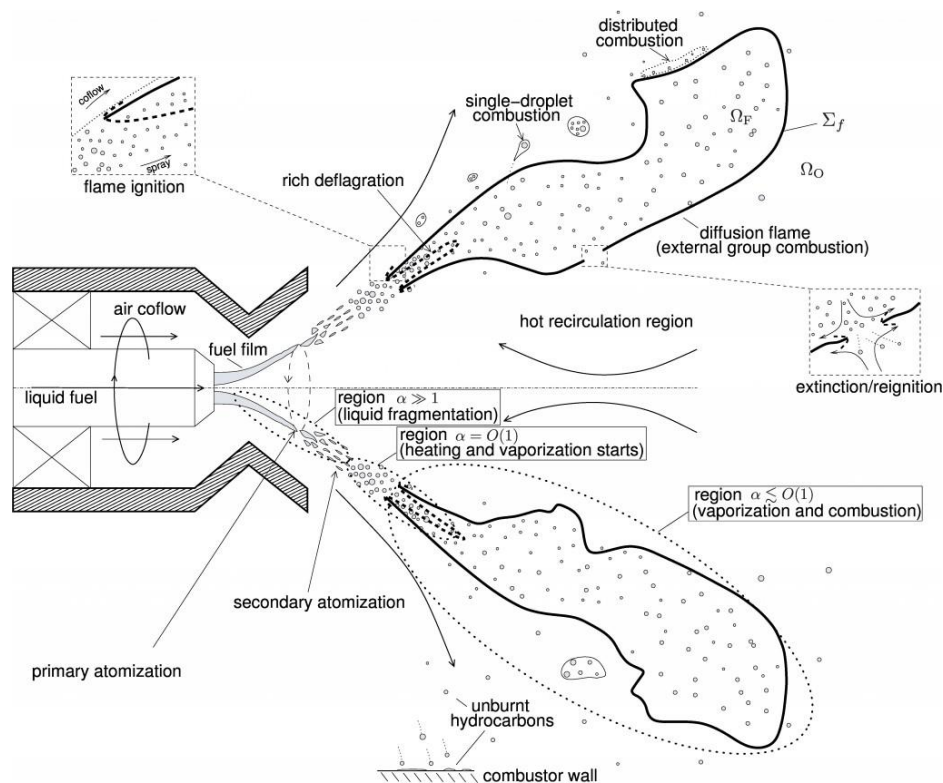


Fig. 1-2 Schematic of fundamental spray-combustion process [2]

行われている。過去に行われたプロジェクトの例を示す。

(1) 設計プロセスの高度化を目指した燃焼解析のプラットフォーム開発と検証 [3-5]

一般社団法人日本燃焼学会が主導した 2016~2017 年に実施された産学連帯事業である。本プロジェクトでは精度保証および動作保証された燃焼解析のための基盤コード(燃焼解析プラットフォーム)が開発された。燃焼解析プラットフォームはベースコード部分と本プロジェクトで開発された燃焼モデルルーチンから構成されている。なお、ベースコードは株式会社数値フローデザインが手掛ける NuFD/FrontFlowRed である。燃焼モデルルーチンは、大きく分けて 4 つの燃焼形態、すなわち、ガス燃焼／予混合燃焼、ガス燃焼／拡散燃焼、液体燃焼／噴霧燃焼、および固体燃焼／微粉炭燃焼に対して、開発および検証を実施した。また、精度検証のためのターゲット火炎データの整備も実施し、本プロジェクト参加企業への情報提供を行われた。著者は液体燃焼／噴霧燃焼のワーキンググループにおいて、多成分燃料用液滴蒸発モデル[6]のコーディングを担当した。なお、ターゲット火炎は対向流層流燃焼(大阪大学対向流バーナ[7])である。本プロジェクトでコーディン

グした多成分燃料用液滴蒸発モデルの単一液滴実験を対象とした精度検証[8]および対向流層流燃焼を対象とした精度検証[9]も実施した。

(2) 内閣府戦略的イノベーション創造プログラム(SIP)「革新的燃焼技術」

SIP 革新的燃焼技術は、様々な専門分野を持つ大学・公的研究機関の研究者が集結し、「ガソリン燃焼チーム」、「ディーゼル燃焼チーム」、「制御チーム」、「損失低減チーム」の4チームから構成された、2015～2019年に実施された産学官連帯事業である。本プロジェクトの研究成果として、自動車用内燃機関の熱効率を、ガソリンエンジンでは51.5%、ディーゼルエンジンでは50.1%の正味最大熱効率を達成している。本プロジェクトの成果物として、先進的な流動および燃焼場を高精度に解析できる内燃機関用燃焼解析ソフトウェア「HINOCA(火神)」の開発である[10]。HINOCAは宇宙航空研究開発機構(JAXA)の圧縮性流体解析技術がベースとなっており、噴霧や液膜、点火、ノックといった燃焼過程における様々な現象ごとのサブモデルが実装されている(Fig. 1-3)。さらに、SIPの終了後も日本の自動車メーカー9社と2団体で構成される自動車用内燃機関技術研究組合(AICE)によって、HINOCAの改良および精度検証が2019～2020年度においてAICE研究プロジェクト(経済産業省補助事業「次世代自動車等の開発加速化に係るシミュレーション基盤構築」)として実施された。著者はAICEプロジェクトのCAE要素研究ワーキンググループにおいて、HINOCAに実装する燃料液滴蒸発モデルの精度検証用実験データの取得を行っ

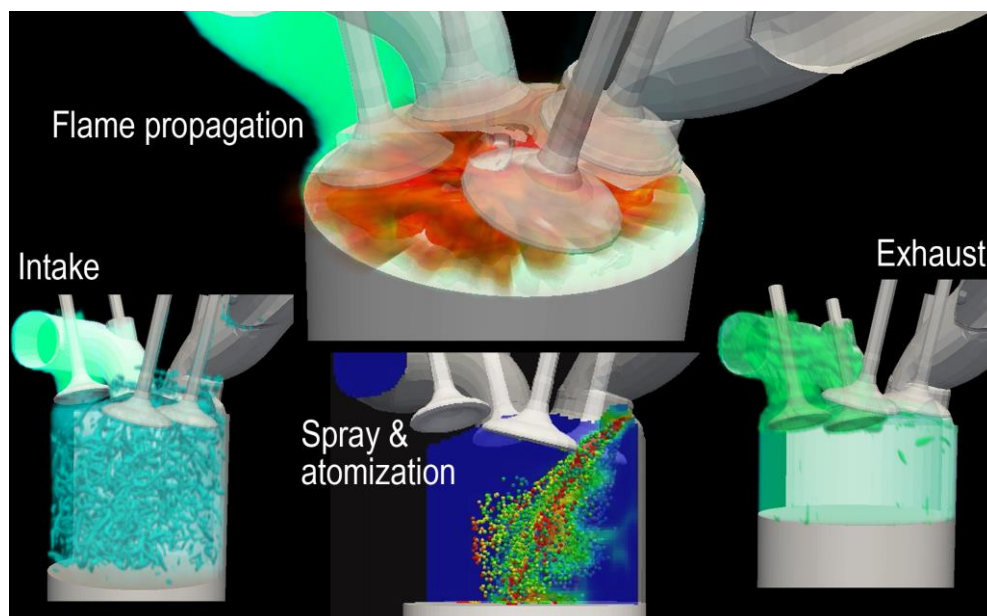


Fig. 1-3 Spray combustion simulation technology by HINOCA [10]

た. 本プロジェクトで取得した実験データの一部と研究成果を第 4 章に示す.

以上のように燃焼器設計プロセスを高効率化するとともに革新的燃焼技術の創出に向けて噴霧燃焼シミュレーション技術の社会実装が我が国においても進んでいる. しかし, 噴霧燃焼シミュレーション技術において, 液滴蒸発モデルの選定によっては噴霧火炎構造の予測に差異が生じることが報告されている. Moriai らは, 航空機ジェットエンジン用サブスケール燃焼器において液滴直径の計測値と予測値の差異を明らかにした[11]. Fig. 1-4 に当量比(ϕ)が 1.09 の場合の様々なインジェクターからの高さにおける半径方向のザウター平均粒径 (D_{32})の分布の実験値と予測値を示す. Fig. 1-4 より, D_{32} 分布の実験値と予測値には差異があることが明らかにされている. このことから, 液滴蒸発モデルの選定によっ

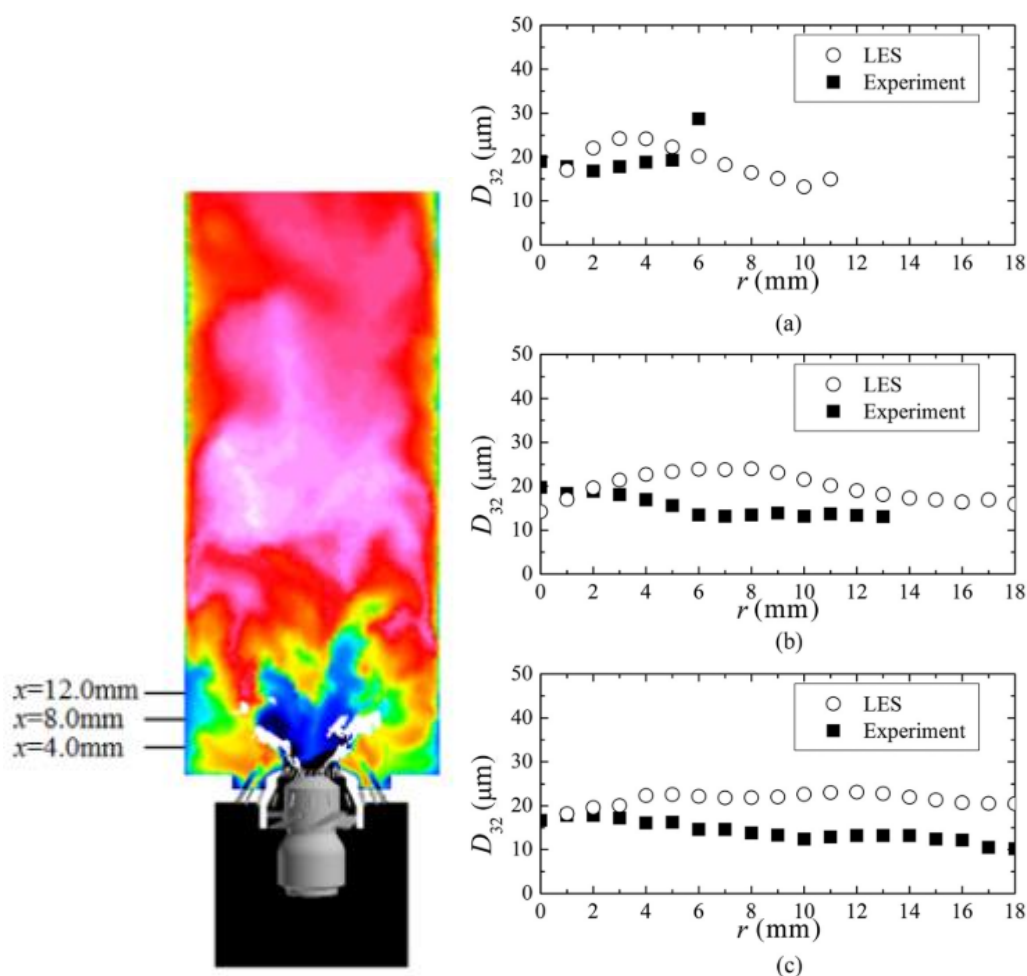


Fig. 1-4 Comparisons of radial profiles of predicted and measured Sauter mean diameters D_{32} at three streamwise locations in case of $\phi = 1.09$; (a) $x=4.0\text{ mm}$, (b) $x=8.0\text{ mm}$, (c) $x=12.0\text{ mm}$ [11]

ては噴霧燃焼シミュレーションにおける平均粒径分布の予測値と測定値の差異に影響を及ぼす可能性が考えられる。また, Noh らは, Large eddy simulation において多用されている液滴蒸発モデルの乱流噴霧火炎の予測値に対する影響を調べている[12]. Fig. 1-5 に様々な液滴蒸発モデルによる噴霧火炎構造の予測結果を示す. Fig. 1-5 より, 異なる液滴蒸発モデルでは火炎の吹上高さの位置および火炎内部の液滴分布の予測値に差異が生じていることがわかる. 以上のことから, 噴霧燃焼シミュレーション技術において液滴蒸発モデルの予測精度が噴霧火炎構造の予測精度に影響を及ぼすことが示唆されていることがわかる. そこで, 高精度な液滴蒸発モデルを有する噴霧燃焼シミュレーション技術が燃焼器の最適設計を促進させることが期待されている。

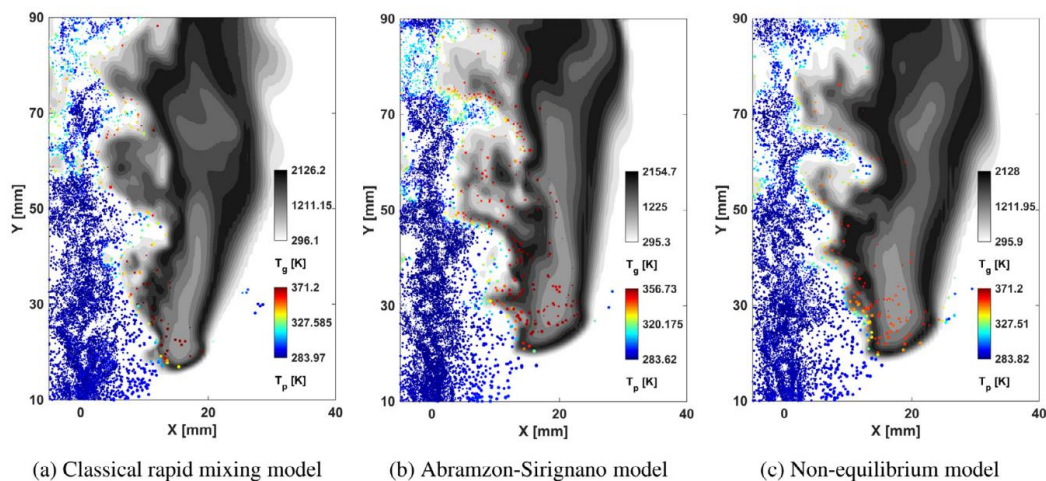


Fig. 1-5 Contour plots of the simulated gas-phase temperature together with the corresponding instantaneous droplet motions. Colour maps represent the gas-phase temperature (T_g) and the droplet temperature (T_p). [12]

1.2 液滴蒸発モデルに関する従来の研究

単一液滴蒸発モデルに関する研究は噴霧燃焼研究の基礎的研究として数多く行われている。単一液滴蒸発モデルに関する理論モデルに関しては Abramzon や Sirignano らの研究が代表される[13-15]. いずれの液滴蒸発モデルも単成分燃料をベースとして液滴蒸発過程における液滴内部および蒸発挙動の解析を行っている。しかし, 実機で使用されている燃料の多くは化石燃料である。すなわち, 複数の化学種から構成される多成分燃料である。そこで, 多成分燃料用液滴蒸発モデルが構築されている。Watanabe ら[15]や Kitano ら[16]

は噴霧燃焼シミュレーションでよく使用されている液滴蒸発モデルのひとつである非平衡 Langmuir-Knudsen モデル[17]をベースとした多成分燃料用液滴蒸発モデルを構築している。非平衡 Langmuir-Knudsen モデルは単一成分液滴用に構築された数値計算モデルであり、液滴内部の濃度および温度分布は一様分布として仮定されている。しかし、多成分燃料には複数の化学種が含まれているため時々刻々の揮発性が異なる。そのため、液滴内部に濃度および温度分布が形成されることが予想される。そこで、液滴内部分布を考慮した多成分燃料用液滴蒸発モデルも構築されている。Stagni ら[18]は多成分燃料液滴の着火性と液滴蒸発の関係を解析するために、液滴内部の質量およびエネルギー保存則を有限差分法で解析する液滴蒸発モデルを構築している。Torres ら[19]は、液滴内部を離散化した多成分燃料用液滴蒸発モデルを提案しており、これは内燃機関用熱流体解析ソフトウェア (KIVA-3V) で使用されている。液滴内部を離散化した一次元モデルでは詳細な物理現象を模擬することができる。しかし、多数の化学種から構成する燃料液滴の液滴内部を離散化する手法は極めて高い計算負荷を要する可能性がある。そこで、計算コストを削減するために、多成分燃料の沸点または分子量を連続関数として定義することで多成分燃料の液滴蒸発を解析する連続熱力学モデル(Continuous Thermodynamic Model)が開発されている[21,22]。しかし、計算コストの向上を図った液滴蒸発モデルであるが、このモデルでは各燃料種の蒸発速度を計算することができないなどの特徴ももつ。

液滴内部の質量分率および温度の分布を考慮し、かつ計算格子を用いずに多成分燃料の液滴蒸発モデルも開発されている。Yi ら[6]は、液滴内部の質量および温度の分布を二次多項式で考慮した液滴蒸発モデルを提案している。一方、多成分の液滴蒸発の理論モデルとして、Sazhin らは離散化多成分 (Discrete Multi-Component) アプローチに基づいて様々なモデルを提案している。Sazhin らの液滴蒸発モデルでは、液滴内部の質量分率および温度分布を液滴中心からの長さと同時間の二変数関数として導入している。内部分布式は静止した球対称の多成分液滴の熱拡散方程式および物質拡散方程式の解析解で与えられる[23,24]。さらに、Sazhin らはディーゼル燃料用液滴蒸発モデルも構築している。ディーゼル燃料に含まれる様々な炭素数のグループごとの影響が考慮されており、各々のグループ内で仮想燃料(quasi-component)が形成される[24]。また、バイオディーゼル、ディーゼル、ガソリンの液滴蒸発に関して、多成分燃料用液滴蒸発モデルと単一成分用液滴蒸発モデルとで液滴寿命の予測値の差異も調査している[25]。さらに、水が混合して乳化した燃料液滴におけるパフィンングと微少爆発を考慮した新しい液滴蒸発モデルも提案されている[26]。

しかし、これらの液滴蒸発モデルでは各ステップステップでの液滴内部の質量およびエネルギー保存を満たしているが、液滴蒸発過程全体では液滴内の質量とエンタルピーの保存を満たしていないと考えられる。Sazhin らの液滴蒸発モデルにおいて、気相では質量およびエンタルピーの準定常状態における拡散を仮定している一方で、液相では質量およびエンタルピーの非定常状態における拡散を仮定している。従って、非定常状態と準定常状態では液滴からの質量の拡散量に大きな差異があると考えられる。液相と気相における計算仮定の違いによって液滴内の質量とエンタルピーが厳密には保存されていないと考えられる。

1.3 本研究の目的

本研究では、液滴内部の濃度および温度分布を考慮した多成分燃料用液滴蒸発モデルを開発した。また、液滴内部の質量とエンタルピーの保存を満たし、かつ噴霧燃焼シミュレーション技術での使用を想定した液滴蒸発モデルを構築した。本研究では、液滴蒸発過程における液滴内部の質量およびエンタルピー保存を模擬する濃度および温度の内部分布を導出した。質量とエンタルピーの保存を満たすために、

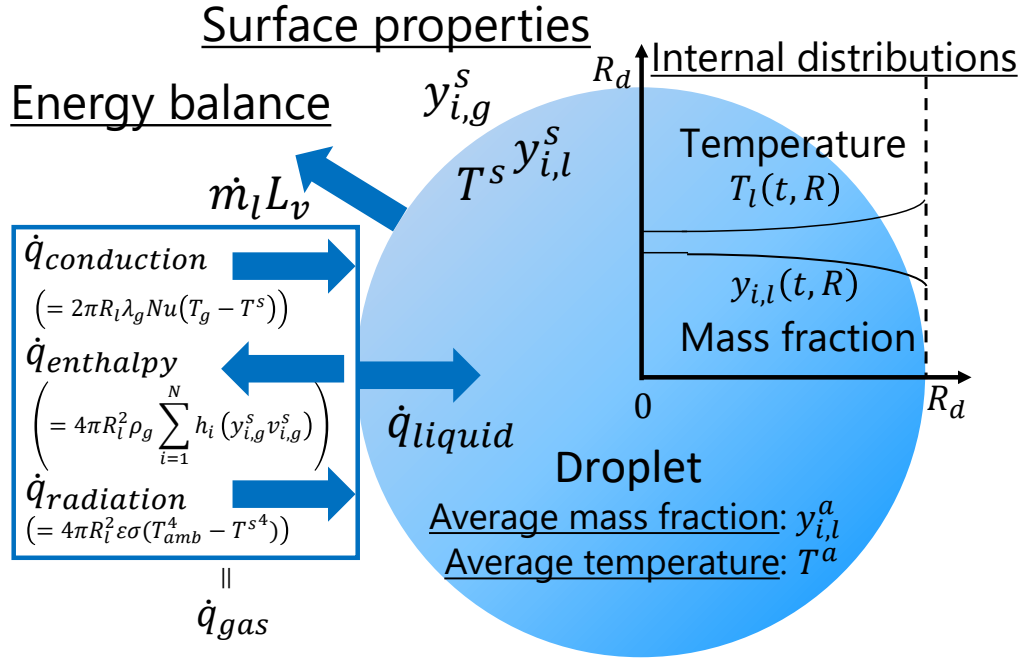
$$y_{i,l}^a \int_0^{R_d} 4\pi R^2 dR = \int_0^{R_d} y_{i,l}(t, R) 4\pi R^2 dR \quad \text{および}$$

$$T^a \int_0^{R_d} 4\pi C_{p,l} R^2 dR = \int_0^{R_d} T(R, t) 4\pi C_{p,l} R^2 dR \quad \text{をそれぞれ濃度および温度の分布式に適用}$$

した。また、液滴内部において非定常状態と準定常状態が同時に存在すると仮定し、勾配分布と一様分布の境界をもつ濃度分布および温度分布を導出した。さらに、本モデルでは雰囲気ガスからの液滴に対する影響を考慮しており、気相におけるエネルギー輸送と各化学種の物質輸送のカップリングを考慮することなく、エネルギー輸送と各化学種の物質輸送は各々独立に解いている。また、構築したモデルの予測精度を検証するために、単一液滴蒸発実験で取得した実験データと構築したモデルによる予測値を様々な雰囲気温度において比較した。

2 多成分燃料用液滴蒸発モデルの構築

2.1 多成分燃料用液滴蒸発モデルの概要と仮定



Mass vaporization rate (kg/s):

$$\dot{m}_l = \sum_{i=1}^{N_l} \dot{m}_{i,l} = \sum_{i=1}^{N_l} 4\pi R_l^2 \rho_g y_{i,l}^s (v_{i,g}^s + \sum_{i=1}^N y_{i,g}^s v_{i,g}^s)$$

Fig. 2-1 Schematic of the droplet evaporation model for multi-component fuel.

Fig. 2-1 に本研究で構築した多成分燃料用液滴蒸発モデルの概要図を示す。液相において、球座標系の物質拡散方程式および熱拡散方程式を解くことで与えられる濃度分布 ($y_{i,l}(t, R)$) および温度分布 ($T_l(t, R)$) を考慮している。各化学種の液滴平均質量分率 ($y_{i,l}^a$) は全体の質量に対する各化学種の質量の割合で決定され、 $y_{i,l}^a$ はタイムステップ毎に更新される。液滴平均温度 (T^a) はエネルギー保存則により与えられ、 $y_{i,l}^a$ と同様にタイムステップ毎に更新される。また、本モデルでは熱輸送と各主化学種の物質輸送はそれぞれ独立して解いている。一方、気相に関して、気相から液相への流入エンタルピーは ($\dot{q}_{gas}$) において、気相から液相に対する熱伝導項 ($\dot{q}_{conduction}$)、液相から気相に対するエンタルピー拡散項 ($\dot{q}_{enthalpy}$)、および気相から液相に対する輻射項 ($\dot{q}_{radiation}$) の 3 項を考慮している。各化学種の質量蒸発速度 ($\dot{m}_{i,l}$) は多成分系における質量拡散の仮定のもと導出される。気液界面においては、気相からの流入エンタルピーと気相への流出エンタルピー (蒸

発潜熱) によるエネルギーバランス ($\dot{q}_{liquid} = \dot{q}_{gas} - \sum_{i=1}^{N_l} \dot{m}_{i,l} H_{i,latent}$) から液滴内部に流入するエンタルピーを考慮している。

本モデルにおいては以下の仮定を適用している。

- ① 燃料液滴は球対称である。
- ② 燃料液滴は理想溶液とする。
- ③ 混合燃料において、ソレー効果およびデフォー効果は無視する。
- ④ 気液界面は熱力学的平衡状態である。
- ⑤ 気相は準定常状態であると仮定する。

次節より、構築したモデルの詳細な内容と導出方法を示す。

2.2 液相モデル

2.2.1 液滴内部の濃度分布

物質拡散のモデリング精度を向上するために、一様分布を部分的に考慮した濃度分布を仮定している。短いタイムステップで定常状態を仮定している準定常仮定において、実際には液滴表面からの濃度拡散が完了しないという可能性を考慮するためである。特に、実際の噴霧燃焼場のような初期粒径が極めて小さく、雰囲気温度が高温の場合に準定常仮定でのモデリングでは実際の現象を高精度にモデリングするには不十分である可能性がある。Fig. 2-2 に本研究で考慮した液滴内部の濃度分布の概要を示す。 x は一様分布 ($\phi_{i,l}(t)$) と勾配をもつ分布 ($\psi_{i,l}(t, R)$) の境界を表す。なお、境界 x の位置は液滴表面から物質が拡散する距離によって決定できる。本研究では、液滴表面から質量が拡散する距離は有効質量拡散係数 ($D_{eff,i}$) と液滴半径の減衰速度 ($\dot{R}_d$) の比率によって定義した。すなわち、境界 x は次式で与えた。

$$x = R_d - \max \{D_{eff,i} | i \in N_l\} / \dot{R}_d \quad (2-1)$$

次に、本研究で構築した濃度分布の導出過程を示す。まず、物質拡散方程式の解析解を導出した。Fig. 2-2 に示す分布を表す球座標系の質量拡散方程式と境界条件は次のように表される。

物質拡散方程式:

$$\frac{\partial y_{i,l}}{\partial t} = D_{eff,i} \left(\frac{\partial^2 y_{i,l}}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} \right) \quad (2-2)$$

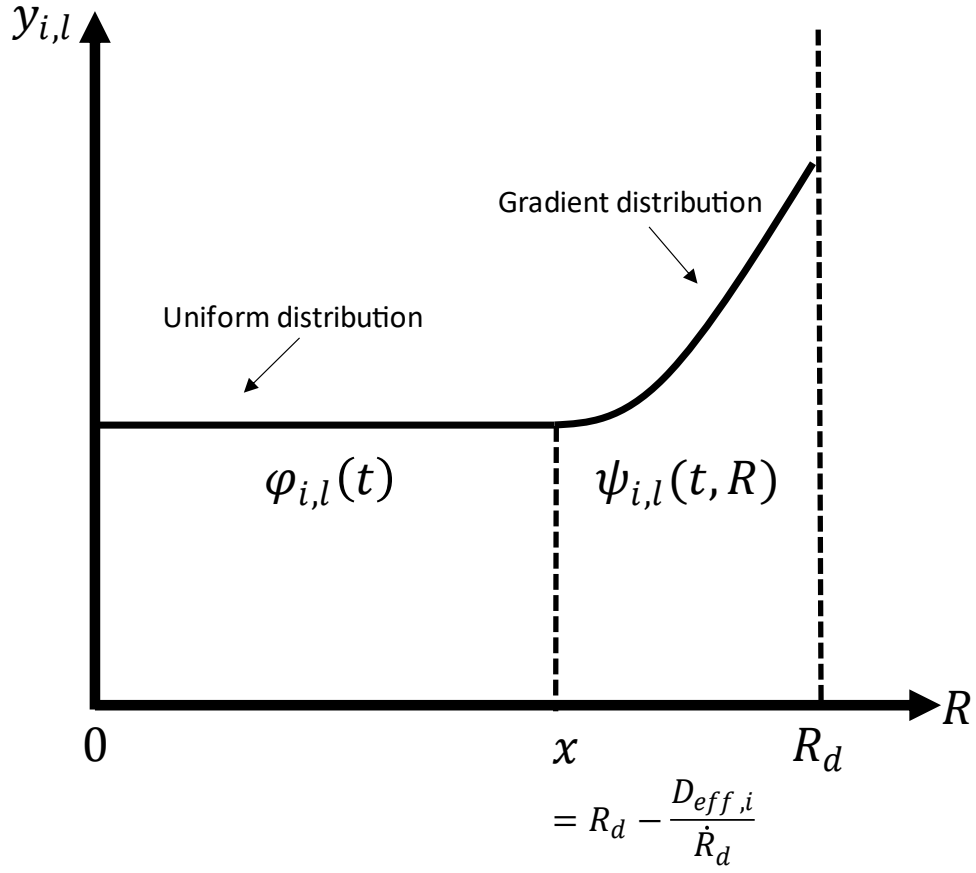


Fig. 2-2 Diagram showing the boundary x between the uniform distribution ($\varphi_{i,l}(t)$) and the gradient distribution ($\psi_{i,l}(t, R)$).

境界条件:

$$\frac{\dot{m}_l}{4\pi\rho_l R_d^2}(\varepsilon_i - y_{i,l}^s) = -D_{eff,i} \frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} \quad (R = R_d) \quad (2-3)$$

$$y_{i,l}(t, x^-) = y_{i,l}(t, x^+) \quad (2-4)$$

$$\frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} \Big|_{R=x^+} = \frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} \Big|_{R=x^-} = 0 \quad (2-5)$$

$$\frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} = 0 \quad (R = 0) \quad (2-6)$$

液滴表面 ($R = R_d$) での境界条件を次のように式変形する.

$$\left(\frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} - \frac{\dot{m}_l}{4\pi\rho_l R_d^2 D_{eff,i}} y_{i,l} \right)_{R=R_d} = -\frac{\dot{m}_l}{4\pi\rho_l R_d^2 D_{eff,i}} \varepsilon_i(t) \quad (2-7)$$

ここで、式(2-2)の解を次のように仮定する。

$$y_{i,l}(t, R) = Y_{i,l}(t, R) + \varepsilon_i(t) \quad (2-8)$$

式(2-8)を式(2-2)と式(2-7)に代入すると、物質拡散方程式、境界条件および初期条件を次のように書き換えることが出来る。

物質拡散方程式:

$$\frac{\partial Y_{i,l}}{\partial t} = D_{eff,i} \left(\frac{\partial^2 Y_{i,l}}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial Y_{i,l}}{\partial R} \right) - \frac{d\varepsilon_i}{dt} \quad (2-9)$$

境界条件:

$$\left(\frac{\partial Y_{i,l}}{\partial R} - \frac{\alpha_{m,i}}{D_{eff,i}} Y_{i,l} \right)_{R=R_d} = 0 \quad (\because \alpha_{m,i} = \frac{\dot{m}_l}{4\pi\rho_l R_d^2 D_{eff,i}}) \quad (2-10)$$

$$\left. \frac{\partial Y_{i,l}}{\partial R} \right|_{R=x^+} = \left. \frac{\partial Y_{i,l}}{\partial R} \right|_{R=x^-} = 0 \quad (2-11)$$

初期条件:

$$Y_{i,l}(0, R) = \begin{cases} \varphi_{i,l}(t) - \varepsilon_i(0) & (0 < R < x) \\ \psi_{i,l}(0, R) - \varepsilon_i(0) & (x < R < R_d) \end{cases} \quad (2-12)$$

次に、新しい変数 $u(t, R)$ を次のように定義する。

$$u_{i,l}(t, R) = R Y_{i,l}(t, R) = \begin{cases} R (\varphi_{i,l}(t) - \varepsilon_i(t)) & (0 < R < x) \\ R (\psi_{i,l}(t, R) - \varepsilon_i(t)) & (x < R < R_d) \end{cases} \quad (2-13)$$

$u_{i,l}(t, R)$ を用いて式(2-9)、式(2-10)、および式(2-12)を単純化する。

$$\begin{aligned} Y_{i,l}(t, R) &= \frac{u_{i,l}(t, R)}{R} \\ \frac{\partial Y_{i,l}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{u_{i,l}(t, R)}{R} \right) = \frac{1}{R} \frac{\partial u_{i,l}}{\partial t} \\ \frac{\partial Y_{i,l}}{\partial R} &= \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{u_{i,l}(t, R)}{R} \right) = -\frac{1}{R^2} u_{i,l} + \frac{1}{R} \frac{\partial u_{i,l}}{\partial R} \\ \frac{\partial^2 Y_{i,l}}{\partial R^2} &= \frac{\partial}{\partial R} \left(-\frac{1}{R^2} u_{i,l} + \frac{1}{R} \frac{\partial u_{i,l}}{\partial R} \right) \\ &= \frac{2}{R^3} u_{i,l} - \frac{1}{R^2} \frac{\partial u_{i,l}}{\partial R} - \frac{1}{R^2} \frac{\partial u_{i,l}}{\partial R} + \frac{1}{R} \frac{\partial^2 u_{i,l}}{\partial R^2} \\ &= \frac{2}{R^3} u_{i,l} - \frac{2}{R^2} \frac{\partial u_{i,l}}{\partial R} + \frac{1}{R} \frac{\partial^2 u_{i,l}}{\partial R^2} \end{aligned}$$

これらを式(2-9)に代入する。

$$\begin{aligned}\frac{1}{R} \frac{\partial u_{i,l}}{\partial t} &= D_{eff,i} \left(\frac{2}{R^3} u_{i,l} - \frac{2}{R^2} \frac{\partial u_{i,l}}{\partial R} + \frac{1}{R} \frac{\partial^2 u_{i,l}}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \left(-\frac{1}{R^2} u_{i,l} + \frac{1}{R} \frac{\partial u_{i,l}}{\partial R} \right) \right) - \frac{d\varepsilon_i}{dt} \\ &= D_{eff,i} \frac{1}{R} \frac{\partial^2 u_{i,l}}{\partial R^2} - \frac{d\varepsilon_i}{dt}\end{aligned}$$

すなわち、物質拡散方程式(式(2-9))は次のように示される。

$$\frac{\partial u_{i,l}}{\partial t} = D_{eff,i} \frac{\partial^2 u_{i,l}}{\partial R^2} - R \frac{d\varepsilon_i}{dt} \quad (2-14)$$

境界条件(式(2-10))は $u(t, R)$ を用いて次のように変形できる

$$\begin{aligned}\left(-\frac{1}{R^2} u_{i,l} + \frac{1}{R} \frac{\partial u_{i,l}}{\partial R} - \frac{\alpha_{m,i}}{D_{eff,i}} \frac{u_{i,l}}{R} \right)_{R=R_d} &= 0 \\ \left(\frac{\partial u_{i,l}}{\partial R} + \frac{h_{0,i}}{R_d} u_{i,l} \right)_{R=R_d} &= 0 \left(\because h_{0,i} = -\left(1 + \frac{\alpha_{m,i} R_d}{D_{eff,i}} \right) \right)\end{aligned} \quad (2-15)$$

$$\left. \frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} \right|_{R=x^+} = \left. \frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} \right|_{R=x^-} = 0 \quad (2-16)$$

$$D_{eff,i} \left[x \frac{\partial u_{i,l}}{\partial R} - u_{i,l} \right]_{R=x^+} = 0 \quad (2-17)$$

また、 $Y_{i,l}(t, R) (= y_{i,l}(t, R) - \varepsilon_i(t))$ は $R = 0$ において有限値をとることから、 $u_{i,l}(t, 0) = 0$ となる。

初期条件(式(2-13))は $u(t, R)$ を用いて次のように変形できる

$$u_{i,l}(0, R) = R Y_{i,l}(0, R) = \begin{cases} R (\varphi_{i,l} - \varepsilon_i(0)) & (0 < R < x) \\ R (\psi_{i,l0}(0, R) - \varepsilon_i(0)) & (x < R < R_d) \end{cases} \quad (2-18)$$

ここで、式(2-14)で表される質量拡散方程式の解を次のように仮定する。

$$u_{i,l} = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_{i,n}(t) v_{i,n}(R) \quad (2-19)$$

式(2-19)を式(2-14)、式(2-15)および式(2-17)に代入すると、 $v_n(R)$ は次のような固有値問題の非自明解として理解できる。

$$\frac{d^2 v_i}{dR^2} + p_i v_i = 0 \quad (2-20)$$

境界条件:

$$v_i|_{R=0} = \left(\frac{\partial v_i}{\partial R} + \frac{h_{0,i}}{R_d} v_i \right)_{R=R_d} = 0 \quad (2-21)$$

$$v_i|_{R=x^-} = v_i|_{R=x^+} \quad (2-22)$$

$$D_{eff,i} \left[x \frac{\partial v_i}{\partial R} - v_i \right] \Big|_{R=x^+} = 0 \quad (2-23)$$

式(2-21)および式(2-22)のような境界条件が与えられる式(2-20)は Sturm–Liouville 問題として良く知られている．そこで，固有値 p を求めるために $p_i = 0$, $p_i < 0$, $p_i > 0$ の3通りの場合分けを行う．

(i) $p_i = 0$ の場合

式(1-20)の一般解は $v_i = A_i + B_i R$ (A および B は任意定数) と表すことができる．ここで， $v_i|_{R=0}$ の条件より， $A_i = 0$ である．さらに，液滴表面 ($R = R_d$) における境界条件より $B_i(1 + h_{0,i}) = 0$ である． $h_{0,i} \in (-\infty, -1)$ であることから $B_i(1 + h_{0,i}) = 0$ を満たすためには $B_i = 0$ が必要である．したがって， $p_i = 0$ の場合の一般解は $v_i = 0$ となる．

(ii) $p_i < 0$ の場合

$p_i = -\lambda_i^2 < 0$ を仮定すると，式(2-20)の一般解は次のように表すことができる．

$$v_i(R) = A_i \cosh\left(\lambda_i \frac{R}{R_d}\right) + B_i \sinh\left(\lambda_i \frac{R}{R_d}\right) \quad (2-24)$$

ただし， A_i および B_i は任意定数である．

このとき，境界条件は次のように表すことができる．

$$v_i(0) = A_i \cosh\left(\lambda_i \frac{0}{R_d}\right) + B_i \sinh\left(\lambda_i \frac{0}{R_d}\right) = A_i = 0 \quad (2-25)$$

$$\left(\frac{\partial v_i}{\partial R} + \frac{h_{0,i}}{R_d} v_i \right) \Big|_{R=R_d} = \frac{B_i}{R_d} (\lambda_i \cosh(\lambda_i) + h_{0,i} \sinh(\lambda_i)) = 0 \quad (2-26)$$

$$\begin{aligned} D_{eff,i} \left[x \frac{\partial v_i}{\partial R} - v_i \right] \Big|_{R=x^+} &= x \left(B_i \frac{\lambda_i}{R_d} \cosh\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) \right) - B_i \sinh\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) \\ &= B_i \left(\frac{\lambda_i}{R_d} x \cosh\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) - \sinh\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) \right) = 0 \end{aligned} \quad (2-27)$$

式(2-26)と式(2-27)より次の関係式が成立する．

$$\frac{B_i}{R_d} (\lambda_i \cosh(\lambda_i) + h_{0,i} \sinh(\lambda_i)) = B_i \left(\frac{\lambda_i}{R_d} x \cosh\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) - \sinh\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) \right)$$

$$B_i \left(\frac{\lambda_i}{R_d} \cosh(\lambda_i) + \frac{h_{0,i}}{R_d} \sinh(\lambda_i) - \frac{\lambda_i}{R_d} x \cosh\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) + \sinh\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) \right) = 0$$

したがって、固有関数は $v_{0,i}(R) = \sinh\left(\lambda_{0,i} \frac{R}{R_d}\right)$ となり、固有値 λ_0 は次の方程式を満たす。

$$\lambda_{0,i} \cosh(\lambda_{0,i}) + h_{0,i} \sinh(\lambda_{0,i}) - \lambda_{0,i} x \cosh\left(\lambda_{0,i} \frac{x}{R_d}\right) + R_d \sinh\left(\lambda_{0,i} \frac{x}{R_d}\right) = 0 \quad (2-28)$$

また、固有関数のノルムは次のように表される。

$$\begin{aligned} \|v_{0,i}\|^2 &= \int_0^{R_d} v_{0,i}^2(R) dR \\ &= \int_0^{R_d} \sinh^2\left(\lambda_{0,i} \frac{R}{R_d}\right) dR \\ &= \frac{R_d}{\lambda_{0,i}} \int_0^{\lambda_{0,i}} \sinh^2 \xi d\xi \quad (\because \lambda_{0,i} \frac{R}{R_d} \rightarrow \xi) \\ &= \frac{R_d}{4\lambda_{0,i}} (\sinh(2\lambda_{0,i}) - 2\lambda_{0,i}) \end{aligned} \quad (2-29)$$

(ii) $p_i > 0$ の場合

$p_i = \lambda_i^2 > 0$ を仮定すると、式(1-13)の一般解は次のように表すことができる。

$$v_i(R) = A_i \cos\left(\lambda_i \frac{R}{R_d}\right) + B_i \sin\left(\lambda_i \frac{R}{R_d}\right) \quad (2-30)$$

ただし、 A_i および B_i は任意定数である。

このとき、境界条件は次のように表すことができる。

$$v_i(0) = A_i \cos\left(\lambda_i \frac{0}{R_d}\right) + B_i \sin\left(\lambda_i \frac{0}{R_d}\right) = A_i = 0 \quad (2-31)$$

$$v_i(R_d) = \frac{B_i}{R_d} (\lambda_i \cos(\lambda_i) + h_{0,i} \sin(\lambda_i)) = 0 \quad (2-32)$$

$$\begin{aligned} D_{eff,i} \left[x \frac{\partial v_i}{\partial R} - v_i \right] \Big|_{R=x^+} &= x \left(B_i \frac{\lambda_i}{R_d} \cos\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) \right) - B_i \sin\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) \\ &= B \left(\frac{\lambda_i}{R_d} x \cos\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) - \sin\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) \right) = 0 \end{aligned} \quad (2-33)$$

式(2-32)と式(2-33)より次の関係式が成立する。

$$B_i \left(\frac{\lambda_i}{R_d} \cosh(\lambda_i) + \frac{h_{0,i}}{R_d} \sinh(\lambda_i) \right) = B_i \left(\frac{\lambda_i}{R_d} x \cos\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) - \sin\left(\lambda_i \frac{x}{R_d}\right) \right)$$

$$B_i \left(\frac{\lambda_i}{R_d} \cosh(\lambda_i) + \frac{h_{0,i}}{R_d} \sinh(\lambda_i) - \frac{\lambda_i}{R_d} x \cos \left(\lambda_i \frac{x}{R_d} \right) + \sin \left(\lambda_i \frac{x}{R_d} \right) \right) = 0$$

したがって、固有関数は $v_{i,n}(R) = \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right)$ となり、固有値 $\lambda_{i,n}$ は次の方程式を満たす。

$$\lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n}) + h_{0,i} \sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} x \cos \left(\lambda_{i,n} \frac{x}{R_d} \right) + R_d \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{x}{R_d} \right) = 0 \quad (2-34)$$

また、固有関数のノルムは次のように表される。

$$\begin{aligned} \|v_{i,n}\|^2 &= \int_0^{R_d} v_{i,n}^2(R) dR \\ &= \int_0^{R_d} \sin^2 \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) dR \\ &= \frac{R_d}{\lambda_{i,n}} \int_0^{\lambda_{i,n}} \sin^2 \zeta d\zeta \quad (\because \lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \rightarrow \zeta) \\ &= \frac{R_d}{\lambda_{i,n}} \left\{ \frac{\lambda_{i,n}}{2} - \frac{1}{4} \sin(2\lambda_{i,n}) \right\} \end{aligned} \quad (2-35)$$

一方、 R に関して関数 v_n のフーリエ級数として求める。関数 v_n のフーリエ級数は、

$$R = \sum_{n=0}^{\infty} Q_{i,n} v_{i,n}(R) \quad (2-36)$$

ただし、

$$\begin{aligned} Q_{i,n} &= \frac{1}{\|v_{i,n}(R)\|^2} \int_0^{R_d} R v_{i,n}(R) dR. \\ &= \begin{cases} \frac{1}{\|v_{i,0}(R)\|^2} \int_0^{R_d} R \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) dR & (n=0) \\ \frac{1}{\|v_{i,n}(R)\|^2} \int_0^{R_d} R \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) dR & (n \geq 1) \end{cases} \\ &= \begin{cases} \frac{1}{\|v_{i,0}(R)\|^2} \left(\frac{R_d}{\lambda_0} \right)^2 \{ \lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0}) \} & (n=0) \\ \frac{1}{\|v_{i,n}(R)\|^2} \left(\frac{R_d}{\lambda_{i,n}} \right)^2 \{ \sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n}) \} & (n \geq 1) \end{cases} \end{aligned} \quad (2-37)$$

式(2-14)に式(2-19)と式(2-36)に代入すると次の式のように表すことができる。

$$\sum_{n=0}^{\infty} \Theta_{i,n}'(t) v_{i,n}(R) = D_{eff,i} \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_{i,n}(t) v_{i,n}''(R) - \varepsilon_i'(t) \sum_{n=0}^{\infty} Q_{i,n} v_{i,n}(R) \quad (2-38)$$

ただし, $\Theta_{i,n}'(t) = \frac{d\Theta_{i,n}}{dt}$, $\varepsilon_i'(t) = \frac{d\varepsilon_i}{dt} v_{i,n}$, および $v_{i,n}''(R) = \begin{cases} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d}\right)^2 v_{i,0} & (n=0) \\ -\left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d}\right)^2 v_{i,n} & (n \geq 1) \end{cases}$ である.

式(2-38)を解くと,

$$\begin{aligned} (\text{右辺}) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d\Theta_{i,n}(t)}{dt} v_{i,n}(R) \\ &= \frac{d\Theta_{i,0}(t)}{dt} v_{i,0}(R) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{d\Theta_{i,n}(t)}{dt} v_{i,n}(R) \end{aligned} \quad (2-39)$$

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= D_{eff,i} \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_{i,n}(t) \frac{d^2 v_{i,n}(R)}{dR^2} - \frac{d\varepsilon_i(t)}{dt} \sum_{n=0}^{\infty} Q_{i,n} v_{i,n}(R) \\ &= D_{eff,i} \left(\Theta_{i,0}(t) \frac{d^2 v_{i,0}(R)}{dR^2} + \sum_{n=1}^{\infty} \Theta_{i,n}(t) \frac{d^2 v_{i,n}(R)}{dR^2} \right) \\ &\quad - \frac{d\varepsilon_i(t)}{dt} \left(Q_{i,0} v_{i,0}(R) + \sum_{n=1}^{\infty} Q_{i,n} v_{i,n}(R) \right) \end{aligned} \quad (2-40)$$

これらより次の関係式が導き出すことができる.

$$\begin{cases} \frac{d\Theta_{i,0}(t)}{dt} = D_{eff,i} \Theta_{i,0}(t) \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d}\right)^2 - \frac{d\varepsilon_i(t)}{dt} Q_{i,0} & (n=0) \\ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{d\Theta_{i,n}(t)}{dt} = \sum_{n=1}^{\infty} -D_{eff,i} \Theta_{i,n}(t) \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d}\right)^2 - \frac{d\varepsilon_i(t)}{dt} Q_{i,n} & (n \geq 1) \end{cases} \quad (2-41)$$

ここで式(2-41)の初期条件を考える. $u(t, R) = R y(t, R)$ より

$$u_{i,l}(0, R) = R Y_{i,l}(0, R) = \begin{cases} R (\varphi_{i,l}(0) - \varepsilon_i(0)) & (0 < R < x) \\ R (\psi_{i,l}(0, R) - \varepsilon_i(0)) & (x < R < R_d) \end{cases} \quad (2-42)$$

したがって, $u_{i,l}(0, R) = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_{i,n}(0) v_{i,n}(R)$ の左辺に代入すると,

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_{i,n}(0) v_{i,n}(R) &= R Y_{i,l}(0, R) \\ &= \begin{cases} R (\varphi_{i,l}(0) - \varepsilon_i(0)) & (0 < R < x) \\ R (\psi_{i,l}(0, R) - \varepsilon_i(0)) & (x < R < R_d) \end{cases} \end{aligned} \quad (2-43)$$

ここで, $f_i(R) = \begin{cases} R (\varphi_{i,l}(0) - \varepsilon_i(0)) & (0 < R < x) \\ R (\psi_{i,l}(0, R) - \varepsilon_i(0)) & (x < R < R_d) \end{cases}$ として

$f_i(R) = \sum_{n=0}^{\infty} \Theta_{i,n}(0) v_{i,n}(R)$ の正規直交座標系のフーリエ展開を考える. $f_i(R)$ を正規化する

と,

$$\frac{f_i(R)}{\|v_{i,n}(R)\|} = \sum_{n=0}^{\infty} \theta_{i,n}(0) \frac{v_{i,n}(R)}{\|v_{i,n}(R)\|} \quad (2-44)$$

$f_i(R)$ のフーリエ係数は次のように表すことができる.

$$\begin{aligned} \theta_{i,n}(0) &= \int_0^{R_d} f_i(R) \frac{v_{i,n}(R)}{\|v_{i,n}(R)\|^2} dR \\ &= \begin{cases} \int_0^x R (\varphi_{i,l}(0) - \varepsilon_i(0)) \frac{v_{i,n}(R)}{\|v_{i,n}(R)\|^2} dR & (0 < R < x) \\ \int_x^{R_d} R (\psi_{i,l}(0, R) - \varepsilon_i(0)) \frac{v_{i,n}(R)}{\|v_{i,n}(R)\|^2} dR & (x < R < R_d) \end{cases} \\ &= \begin{cases} \frac{1}{\|v_{i,n}(R)\|^2} \int_0^x R \varphi_{i,l}(0) v_{i,n}(R) dR - \frac{\varepsilon_i(0)}{\|v_{i,n}(R)\|^2} \int_0^{R_d} R v_{i,n}(R) dR & (0 < R < x) \\ \frac{1}{\|v_{i,n}(R)\|^2} \int_x^{R_d} R \psi_{i,l}(0, R) v_{i,n}(R) dR - \frac{\varepsilon_i(0)}{\|v_{i,n}(R)\|^2} \int_0^{R_d} R v_{i,n}(R) dR & (x < R < R_d) \end{cases} \\ &= q_{in} - \varepsilon_i(0) Q_{i,n} \end{aligned} \quad (2-45)$$

ただし,

$$q_{in} = \begin{cases} \frac{1}{\|v_{i,0}(R)\|^2} \begin{cases} \int_0^x R \varphi_{i,l}(0) v_{i,0}(R) dR & (\text{when } 0 < R < x) \\ \int_x^{R_d} R \psi_{i,l}(0, R) v_{i,0}(R) dR & (\text{when } x < R < R_d) \end{cases} & (n = 0) \\ \frac{1}{\|v_{i,n}(R)\|^2} \begin{cases} \int_0^x R \varphi_{i,l} v_{i,n}(R) dR & (\text{when } 0 < R < x) \\ \int_x^{R_d} R \psi_{i,l}(0, R) v_{i,n}(R) dR & (\text{when } x < R < R_d) \end{cases} & (n \geq 1) \end{cases} \quad (2-46)$$

以上より, 式(2-8)に式(2-9)の一般解を代入すると次の解析解が得られる.

$$\begin{aligned} y_{i,l}(t, R) &= Y_{i,l}(t, R) + \varepsilon_i(t) \\ &= \varepsilon_i(t) + \frac{1}{R} u_{i,l}(t, R) \\ &= \varepsilon_i(t) + \frac{1}{R} \left\{ \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_i(0) Q_{i,0}] \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_i(0) Q_{i,n}] \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) \right\} \end{aligned} \quad (2-47)$$

以上のように液滴内部の濃度分布は解析解(式(2-47))によって数学的に一意に与えるこ

とができる．しかし，解析解を数値計算シミュレーションに用いるためには収束計算が必要となる．収束計算はモデルの計算コストを増加させる可能性がある．そこで，解析解を用いる数値計算シミュレーションでは，短いタイムステップでは変数は定数として取り扱う手法がしばしば適用されている [22]．

本研究では短いタイムステップでは ε_i は定数とし， $\varphi_{i,l}(t)$ と $\psi_{i,l}(t, R)$ は前タイムステップの値を使用する． ε_i ， $\varphi_{i,l}(t)$ および $\psi_{i,l}(t, R)$ を定数と仮定することで，式(2-47)を次の質量保存則を満たすように式変形することができる．

$$y_{i,l}^a \int_0^{R_d} 4\pi R^2 dR = \int_0^{R_d} y_{i,l}(t, R) 4\pi R^2 dR \quad (2-48)$$

ただし，平均質量分率($y_{i,l}^a$)に関しては 2.2.3 に記述する．式(2-48)に式(2-47)を代入する．

$$(\text{左辺}) = \frac{1}{3} y_{i,l}^a R_d^3 \quad (2-49)$$

$$\begin{aligned} (\text{右辺}) &= \int_0^{R_d} \varepsilon_{i,l} R^2 dR \\ &+ \int_0^{R_d} R \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) dR \\ &+ \int_0^{R_d} R \sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_n}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) dR \end{aligned} \quad (2-50)$$

ここで，右辺に関して次のように分けて式変形を行う

$$\textcircled{1} = \int_0^{R_d} \varepsilon_{i,l} R^2 dR \quad (2-51)$$

$$\textcircled{2} = \int_0^{R_d} A_0 R \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) dR \quad (2-52)$$

$$\textcircled{3} = \int_0^{R_d} R \sum_{n=1}^{\infty} A_{i,n} \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) dR \quad (2-53)$$

ただし， $A_{i,0} = \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}]$ ，

$A_{i,n} = \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}]$ である．これらを解くと，

$$\textcircled{1} = \frac{1}{3} \varepsilon_{i,l} R_d^3 \quad (2-54)$$

$$\begin{aligned}
② &= \int_0^{R_d} A_{i,0} R \sinh\left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d}\right) dR \\
&= A_{i,0} \left\{ \left[R \frac{R_d}{\lambda_{i,0}} \cosh\left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d}\right) \right]_0^{R_d} - \frac{R_d}{\lambda_{i,0}} \int_0^{R_d} \cosh\left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d}\right) dR \right\} \\
&= A_{i,0} \left\{ \frac{R_d^2}{\lambda_{i,0}} \cosh(\lambda_{i,0}) - \left(\frac{R_d}{\lambda_{i,0}}\right)^2 \sinh(\lambda_{i,0}) \right\} \tag{2-55}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
③ &= \sum_{n=1}^{\infty} A_{i,n} \int_0^{R_d} R \sin\left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d}\right) dR \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} A_{i,n} \left\{ \left[-R \frac{R_d}{\lambda_{i,n}} \cos\left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d}\right) \right]_0^{R_d} + \frac{R_d}{\lambda_{i,n}} \int_0^{R_d} \cos\left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d}\right) dR \right\} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} A_{i,n} \left\{ -\frac{R_d^2}{\lambda_{i,n}} \cos(\lambda_{i,n}) + \left(\frac{R_d}{\lambda_{i,n}}\right)^2 \sin(\lambda_{i,n}) \right\} \tag{2-56}
\end{aligned}$$

以上より、式(2-48)は次のように整理できる。

$$\begin{aligned}
\frac{1}{3} y_{i,l}^a R_d^3 &= \frac{1}{3} \varepsilon_{i,l} R_d^3 + A_{i,0} \left\{ \frac{R_d^2}{\lambda_{i,0}} \cosh(\lambda_{i,0}) - \left(\frac{R_d}{\lambda_{i,0}}\right)^2 \sinh(\lambda_{i,0}) \right\} \\
&\quad + \sum_{n=1}^{\infty} A_{i,n} \left\{ -\frac{R_d^2}{\lambda_{i,n}} \cos(\lambda_{i,n}) + \left(\frac{R_d}{\lambda_{i,n}}\right)^2 \sin(\lambda_{i,n}) \right\} \tag{2-57}
\end{aligned}$$

さらに、これを $\varepsilon_{i,l}$ について整理する次のようになる。

$$\varepsilon_{i,l} = y_{i,l}^a - \frac{3A_{i,0}}{R_d \lambda_{i,0}^2} \{ \lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0}) \} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{3A_{i,n}}{R_d \lambda_{i,n}^2} \{ \sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n}) \} \tag{2-58}$$

$\varepsilon_{i,l}$ は短いタイムステップでは定数として扱っているため、式(2-58)には変数は含まれない。

式(2-58)を式(2-47)に代入すると質量保存則式(2-48)を満たすような分布式が導出できる。

$$\begin{aligned}
y_{i,l}(t, R) &= y_{i,l}^a - \frac{3A_{i,0}}{R_d \lambda_{i,0}^2} \{ \lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0}) \} \\
&\quad - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{3A_{i,n}}{R_d \lambda_{i,n}^2} \{ \sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n}) \} \\
&\quad + \frac{1}{R} \left\{ A_{i,0} \sinh\left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d}\right) + \sum_{n=1}^{\infty} A_{i,n} \sin\left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d}\right) \right\}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= y_{i,l}^a - \frac{3A_{i,0}}{R_d \lambda_{i,0}^2} \{ \lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0}) \} + \frac{A_{i,0}}{R} \sinh\left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d}\right) \\
&\quad + \frac{1}{R} \left[\sum_{n=1}^{\infty} A_{i,n} \sin\left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d}\right) - \frac{3RA_{i,n}}{R_d \lambda_{i,n}^2} \{ \sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n}) \} \right] \\
&= y_{i,l}^a + \frac{1}{R} \exp\left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d}\right)^2 t\right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0)Q_{i,0}] \left\{ \sinh\left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d}\right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
&\quad + \frac{1}{R} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp\left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d}\right)^2 t\right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0)Q_{i,n}] \left\{ \sin\left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d}\right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \quad (2-59)
\end{aligned}$$

2.2.2 液滴内部の温度分布

前節に示した液滴内部の濃度分布と同様に、液滴内部の熱拡散のモデリングの精度を向上するために、一様分布を部分的に考慮した温度分布を仮定している。

滴内部の濃度分布と同様に温度分布に関しても、 x は一様分布 ($\varphi_{i,l}(t)$) と勾配をもつ分布 ($\psi_{i,l}(t, R)$) の境界を表す。本研究では、液滴表面から質量が拡散する距離は熱拡散係数 ($\frac{k_{eff}}{C_{p,l}\rho_l}$) と液滴半径の減衰速度 ($\dot{R}_d$) の比率によって定義した。すなわち、境界 x は次式で与えた。

$$x = R_d - \frac{k_{eff}}{C_{p,l}\rho_l} / \dot{R}_d \quad (2-60)$$

次に、本研究で構築した温度分布の導出過程を示す。まず、熱拡散方程式の解析解を導出した。球座標系の熱拡散方程式と境界条件は次のように表される。

熱拡散方程式:

$$C_{p,l}\rho_l \frac{\partial T_l}{\partial t} = k_{eff} \left(\frac{\partial^2 T_l}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial T_l}{\partial R} \right) \quad (2-61)$$

境界条件:

$$2\pi R_d \lambda_g Nu(T_{amb} - T^s) - \dot{q}_{enthalpy} + \dot{q}_{radiation} - \dot{m}_l H_{latent} = k_{eff} \left. \frac{\partial T_l}{\partial R} \right|_{R=R_d} \quad (R = R_d) \quad (2-62)$$

$$\frac{\partial T_l}{\partial R} = 0 \quad (R = 0) \quad (2-63)$$

$$T_l(t, x^-) = T_l(t, x^+) \quad (2-64)$$

$$\frac{\partial T_l}{\partial R} \Big|_{R=x^+} = \frac{\partial T_l}{\partial R} \Big|_{R=x^-} = 0 \quad (2-65)$$

液滴表面($R = R_d$)における境界条件は次のように式変形できる.

$$T_{eff} - T^s = \frac{k_{eff}}{2\pi R_d \lambda_g Nu} \frac{\partial T_l}{\partial R} \Big|_{R=R_d} \quad (2-66)$$

ただし, $T_{eff} = T_{amb} + \frac{1}{2\pi R_d \lambda_g Nu} (-\dot{q}_{enthalpy} + \dot{q}_{radiation} - \dot{m}_l H_{latent})$ である.

次に, 新しい変数 $u(t, R)$ を次のように定義する.

$$u(t, R) = RT_l(t, R) = \begin{cases} R\varphi(t) & (0 < R < x) \\ R\psi_l(t, R) & (x < R < 1) \end{cases} \quad (2-67)$$

$u(t, R)$ を用いることで式(2-61)は次のように式変形できる.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial R^2} \quad (2-68)$$

ただし, $\kappa = \frac{k_{eff}}{c_{p,l}\rho_l}$ である. 境界条件も同様に $u(t, R)$ を用いて整理する.

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial R} &= \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{1}{R} u \right) = -\frac{u}{R} + \frac{1}{R} \frac{\partial u}{\partial R} \\ &= -\frac{u}{R_d} + \frac{1}{R_d} \frac{\partial u}{\partial R} \quad (\because R = R_d) \end{aligned} \quad (2-69)$$

式(2-69)を式(2-66)に代入する.

$$\begin{aligned} T_{eff} - T^s &= \frac{k_{eff}}{2\pi R_d \lambda_g Nu} \frac{\partial T}{\partial R} \Big|_{R=R_d} \\ &= \frac{k_{eff}}{2\pi R_d \lambda_g Nu} \left(-\frac{u}{R_d} + \frac{1}{R_d} \frac{\partial u}{\partial R} \right) \\ \frac{\partial u}{\partial R} - u &= \frac{2\pi R_d^2 \lambda_g Nu}{k_{eff}} (T_{eff} - T^s) \\ \frac{\partial u}{\partial R} + \left(\frac{2\pi R_d^2 \lambda_g Nu}{k_{eff}} - 1 \right) u &= \frac{2\pi R_d^2 \lambda_g Nu}{k_{eff}} T_{eff} \quad (\because u|_{R=R_d} = T^s) \end{aligned} \quad (2-70)$$

これらより境界条件は次のように式変形できる.

$$\frac{\partial u}{\partial R} + Hu = M \quad (R = R_d) \quad (2-71)$$

$$R \frac{\partial u}{\partial R} - u = 0 \quad (R = x) \quad (2-72)$$

ただし, $H = \frac{2\pi R_d^2 \lambda_g Nu}{k_{eff}} - 1$, $M = \frac{2\pi R_d^2 \lambda_g Nu}{k_{eff}} T_{eff}$ である.

ここで, $H > -1$ であることを考慮すると, 式(2-68)の解を次のように仮定する.

$$u(t, R) = \frac{M}{1+H} R + W(t, R) \quad (2-73)$$

式(2-73)を式(2-68)に代入すると次のように式変形できる.

$$(\text{左辺}) = \frac{\partial W}{\partial t}$$

$$(\text{右辺}) = \kappa \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{M}{1+H} + \frac{\partial W}{\partial R} \right) = \kappa \frac{\partial^2 W}{\partial R^2}$$

したがって, 式(2-68)は次のようになる.

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 W}{\partial R^2} \quad (2-74)$$

また境界条件は

$$\frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{M}{1+H} R + W(t, R) \right) + H \left(\frac{M}{1+H} R + W(t, R) \right) = M \quad (R = R_d)$$

$$\frac{M}{1+H} + \frac{\partial W}{\partial R} + \frac{HM}{1+H} + HW(t, R) = M \quad (R = R_d)$$

$$\frac{\partial W}{\partial R} + HW(t, R) = 0 \quad (R = R_d) \quad (2-75)$$

$$R \frac{\partial W}{\partial R} - W(t, R) = 0 \quad (R = x) \quad (2-76)$$

一方, 初期条件は次のように表される.

$$W(0, R) = RT_l(0, R) - \frac{M}{1+H} R \quad (t = 0) \quad (2-77)$$

次に式(2-74)の解を次のように仮定する.

$$W(R, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) v_n(R) \quad (2-78)$$

ここで、式(2-78)は次のような固有値問題の非自明解として理解できる.

$$\frac{d^2 v}{dR^2} + \lambda^2 v_n(R) = 0 \quad (2-79)$$

また式(2-78)を境界条件(式(2-75))に代入すると,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial R} \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) v_n(R) \right) + H \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) v_n(R) &= 0 \\ \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \frac{\partial v}{\partial R} + H \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) v_n(R) &= 0 \\ \sum_{n=1}^{\infty} c_n(t) \left(\frac{\partial v}{\partial R} + H v_n(R) \right) &= 0 \end{aligned} \quad (2-80)$$

したがって,

$$\frac{\partial v}{\partial R} + H v_n(R) = 0 \quad (R = R_d) \quad (2-81)$$

同様に境界条件(式(2-76))に代入すると次のように表される.

$$R \frac{\partial v}{\partial R} - v_n(R) = 0 \quad (R = x) \quad (2-82)$$

このとき式(2-81)の解を $v_n(R) = A \cos(\lambda R/R_d) + B \sin(\lambda R/R_d)$ と仮定する. ただし, A と B は任意の定数である. $u(t, 0) = 0$, $T_l(t, 0) = 0$ なので $A = 0$ が必要である. また, 式(2-81)と式(2-82)に $v_n(R) = B \sin(\lambda R/R_d)$ を代入する.

$$\begin{cases} B\{\lambda \cos(\lambda) + H \sin(\lambda)\} = 0 & (R = R_d) \\ B\{x\lambda/R_d \cos(\lambda x/R_d) - \sin(\lambda x/R_d)\} = 0 & (R = x) \end{cases} \quad (2-83)$$

これらより次の関係式が得られる.

$$\lambda \cos(\lambda) - H R_d \sin(\lambda) - x \lambda \cos(\lambda x/R_d) + R_d \sin(\lambda x/R_d) = 0 \quad (2-84)$$

式(2-81)の解は式(2-82)を満たす正の固有値 λ_n ($n = 1, 2, \dots$) である.

次に, 式(2-78)を式(2-74)に代入すると下の式が得られる.

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial c_n(t)}{\partial t} v_n(R) = \kappa \sum_{n=1}^{\infty} (-\lambda_n^2) c_n(t) v_n(R) \quad (2-85)$$

式(2-85)の両辺は関数 $v_n(R)$ のフーリエ級数である. このとき, 両辺のフーリエ級数が等し

いとき、そのフーリエ係数も等しいことを示す。すなわち、以下の関係式が成り立つ。

$$\frac{\partial c_n(t)}{\partial t} = -\kappa \lambda_n^2 c_n(t) \quad (2-86)$$

式(2-86)の解は次のように表される。

$$c_n(t) = q_n \exp(-\kappa \lambda_n^2 t) \quad (2-87)$$

ただし、 q_n は未定定数である。式(2-87)を式(2-78)に代入すると次の式が得られる。

$$W(t, R) = \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp(-\kappa \lambda_n^2 t) v_n(R) \quad (2-88)$$

また、式(2-78)の初期条件について解くと、

$$W(0, R) = \sum_{n=1}^{\infty} q_n v_n(R) = RT_l(R, 0) - \frac{M}{1+H} R \quad (2-89)$$

$\sum_{n=1}^{\infty} q_n v_n(R) = RT_l(0, R) - \frac{M}{1+H} R$ の正規直交座標系のフーリエ展開を考える。 q_n をフーリエ級数として解くと次の関係式が得られる。

$$q_n = \frac{1}{\|v_n\|^2} \int_0^{R_d} \left(RT(0, R) - \frac{M}{1+H} R \right) v_n(R) dR \quad (2-90)$$

以上より、式(2-73)は次のように表される。

$$u(t, R) = \frac{M}{1+H} R + \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \sin(\lambda_n R / R_d) \quad (2-91)$$

$u(t, R) = RT_l(t, R)$ を式(2-87)に代入して整理すると、熱拡散方程式の解析解が得られる。

$$T(t, R) = \frac{1}{R} \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \sin(\lambda_n R / R_d) + T_{amb} \quad (2-92)$$

$$+ \frac{1}{2\pi R_d \lambda_g Nu} (-\dot{q}_{enthalpy} + \dot{q}_{radiation} - \dot{m}_l H_{latent})$$

濃度分布と同様に、短いタイムステップでは変数は定数とし、 $\varphi_{i,l}(t)$ と $\psi_{i,l}(t, R)$ は前タイムステップの値を使用する。 $\varphi_{i,l}(t)$ および $\psi_{i,l}(t, R)$ を定数と仮定することで、式(2-92)を次のエネルギー保存則を満たすように式変形することができる。

$$T^a \int_0^{R_d} 4\pi C_{p,l} R^2 dR = \int_0^{R_d} T_l(R, t) 4\pi C_{p,l} R dR \quad (2-93)$$

ただし、液滴平均温度(T^a)に関しては2.2.3に記述する。式(2-89)に式(2-87)を代入する。

$$(\text{左辺}) = \frac{4}{3}\pi C_{p,l} T^a \quad (2-94)$$

$$\begin{aligned} (\text{右辺}) &= 4\pi \int_0^{R_d} \left\{ R \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \sin(\lambda_n R/R_d) + R^2 C \right\} dR \\ &= 4\pi C_{p,l} \int_0^{R_d} R \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \sin(\lambda_n R/R_d) dR + 4\pi C C_{p,l} \int_0^{R_d} R^2 dR \\ &= 4\pi C_{p,l} \left\{ - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t]}{\lambda_n} \cos(\lambda_n) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t]}{\lambda_n^2} \sin(\lambda_n) \right\} + \frac{4}{3}\pi C C_{p,l} \end{aligned} \quad (2-95)$$

ただし, $C = T_{amb} + \frac{1}{2\pi R_l \lambda_g Nu} (-\dot{q}_{enthalpy} + \dot{q}_{radiation} - \dot{m}_l H_{latent})$ である.

これらより, 次の関係式を得る.

$$\begin{aligned} \frac{4}{3}\pi T^a &= 4\pi \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t]}{\lambda_n^2} \sin(\lambda_n) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t]}{\lambda_n} \cos(\lambda_n) \right\} \\ &\quad + \frac{4}{3}\pi \left\{ T_{amb} + \frac{1}{2\pi R_l \lambda_g Nu} (-\dot{q}_{enthalpy} + \dot{q}_{radiation} - \dot{m}_l H_{latent}) \right\} \end{aligned} \quad (2-96)$$

なお, 本研究では $C_{p,l}$ は定数とする. 式(2-96)をさらに整理すると次のようになる.

$$\begin{aligned} &T_{amb} + \frac{1}{2\pi R_d \lambda_g Nu} (-\dot{q}_{enthalpy} + \dot{q}_{radiation} - \dot{m}_l H_{latent}) \\ &= T^a - 3 \left\{ - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t]}{\lambda_n} \cos(\lambda_n) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t]}{\lambda_n^2} \sin(\lambda_n) \right\} \\ &= T^a - 3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t]}{\lambda_n^2} \left\{ 1 - \frac{\lambda_n}{\tan(\lambda_n)} \right\} \sin(\lambda_n) \end{aligned} \quad (2-97)$$

これを式(2-92)に代入すると最終的に次の式を得る.

$$T(t, R) = T^a + \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \left\{ \frac{R_d}{R} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - 3 \frac{(1+H) \sin(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \right\} \quad (2-98)$$

2.2.3 質量およびエネルギー保存則

各タイムステップの液滴平均温度(T^a)は液相のエネルギー保存則によって与えられる.

$$C_{p,l}m_l \frac{dT^a}{dt} = \dot{q}_{liquid} \Leftrightarrow T_{n+1}^a = T_n^a + \frac{\dot{q}_{liquid}}{C_{p,l}m_l} \Delta t \quad (2-99)$$

また、各タイムステップの液滴直径は各タイムステップの質量から与えられる。

$$R_d = \left(\frac{m_l - \dot{m}_l \Delta t}{\frac{4}{3} \pi \rho_l} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2-100)$$

各化学種の平均質量分率($y_{i,l}^a$) [-] は各タイムステップの液滴質量と各化学種の質量のバランスから計算される。

$$y_{i,l}^a = \frac{m_{i,l} - \dot{m}_{i,l} \Delta t}{m_l - \dot{m}_l \Delta t} \quad (2-101)$$

2.2.4 熱力学的物性値

本研究では質量拡散係数と熱拡散係数として有効質量拡散係数および有効熱拡散係数を考慮した。有効質量拡散係数および有効熱拡散係数は液滴内部の渦による循環の影響を考慮した係数である。有効質量拡散係数および有効熱拡散係数は次のように表される。

$$D_{eff,i} = \left\{ 1.86 + 0.86 \tanh \left[2.225 \log_{10} \left(\frac{Re_l Sc_l}{30} \right) \right] \right\} D_{i,l} \quad (2-102)$$

$$k_{eff,i} = \left\{ 1.86 + 0.86 \tanh \left[2.225 \log_{10} \left(\frac{Pe_l}{30} \right) \right] \right\} k_{i,l} \quad (2-103)$$

なお、質量拡散係数($D_{i,l}$) [m²/s] は下記のような Perkins と Geankoplis らの混合則 (文献[27]の式(11-12.2))を用いて二成分系質量拡散係数を多成分系質量拡散係数に変換すること与えられる。

$$D_{i,l} \eta_m^{0.8} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_l} x_{j,l}^a D_{ij,b} \eta_j^{0.8} \quad (2-104)$$

なお、二成分系質量拡散係数($D_{ij,b}$) [m²/s] は Tyn と Calus らの方法 (文献[27]の式(11-9.5))で下記のように推算した。

$$D_{ij,b} = 8.93 \times 10^{-8} \frac{V_j^{0.267}}{V_i^{0.435}} \left(\frac{T^a}{\eta_{j,l}} \right) \quad (2-105)$$

各化学種の粘度(η_m) [kg/m/s] は下記のように Orrick と Erbar らの方法 (文献[27]の式(9-11.1))で推算する。

$$\ln \left(\frac{\eta_{i,l}}{\rho_{i,l} MW_i} \right) = A_i + \frac{B_i}{T^a} \quad (2-106)$$

ただし, A_i と B_i は分子構造の特徴によって与えられる係数である. 各化学種の粘度は下記のように Grunberg と Nissan の方法 (文献[27]の式(9-13.1))によって多成分系での粘度(η_m)に変換する.

$$\ln \eta_m = \sum x_{i,l}^a \ln (\eta_{i,l}) \quad (2-107)$$

一方, 各化学種の熱伝導率($k_{i,l}$)は下記のように推算した.

$$k_{i,l} = 10^{(A_i + B_i \left(1.0 - \frac{T^a}{T_{i,c}}\right)^{\frac{2}{7}})} \quad (2-108)$$

ただし, $\begin{cases} A_i = 0.002911 \times n_i^2 - 0.07139 \times n_i - 1.319595 \\ B_i = -0.002498 \times n_i^2 + 0.05872 \times n_i + 0.710698 \end{cases}$ であり, この推算方法は炭素数

(n_i)が $5 \leq n_i \leq 25$ の炭化水素燃料に対して有効な推算方法である. また, 多成分系の熱伝導率(k_{eff})は下記の Power Law の方法(文献[27]の式(10-12.19))によって推算する.

$$k_{eff} = \left(\sum_{i=1}^{N_l} \frac{y_{i,l}^a}{k_{i,l}^2} \right)^{-0.5} \quad (2-109)$$

各化学種の液体密度($\rho_{i,l}$)は次の式で推算する.

$$\rho_{i,l} = a_i b_i \left(-\left(1 - \frac{T^a}{T_{i,c}}\right) \right)^{n_i} \quad (2-110)$$

各化学種の比熱($C_{i,pl}$) [J/kg/K]は下記のように Ruzika と Domalski らの方法(文献[27]の式(6-6.2))によって推算する.

$$C_{i,pl} = R \left[\sum_{i=1}^k n_i a_i + \sum_{i=1}^k n_i b_i \frac{T^a}{100} + \sum_{i=1}^k n_i d_i \left(\frac{T^a}{100} \right)^2 \right] \quad (2-111)$$

ただし, $n_i a_i, n_i b_i$, および $n_i d_i$ は分子構造の特徴によって与えられる係数である. なお, 液滴の平均比熱($C_{p,l}$)は各燃料種の比熱と質量分率の積の和($C_{p,l} = \sum y_{i,l}^a C_{i,pl}$)によって与えられる.

2.3 気液平衡モデル

2.3.1 熱力学的平衡モデル

液滴表面における気相のモル分率($x_{i,g}^s$) [-]は次のように計算できる.

$$x_{i,g}^s = \frac{P_{i,v}}{P_{amb}} x_{i,l}^s \quad (2-112)$$

ただし, $x_{i,l}^s$ は液滴表面における液相のモル分率 [-], P_{amb} は雰囲気圧力 [Pa] である. なお, 各燃料種の蒸気圧は下記の Antoine 式(文献[27]の式(7-3.1))によって推算する.

$$\log_{10} P_{i,v} = A_{i,p} - \frac{B_{i,p}}{C_{i,p} + T^s} \quad (2-113)$$

ただし, $A_{i,p}$, $B_{i,p}$, および $C_{i,p}$ は Antoine 係数である.

2.3.2 エネルギー収支

液滴界面におけるエネルギーバランスは以下の関係式のように与える.

$$\dot{q}_{gas} - \dot{q}_{liquid} = \sum_{i=1}^{N_l} \dot{m}_{i,l} H_{i,latent} \quad (2-114)$$

気相からの流入エンタルピー ($\dot{q}_{gas}$) と気相への流出エンタルピー (蒸発潜熱: $\sum_{i=1}^{N_l} \dot{m}_{i,l} H_{i,latent}$) によるエネルギーバランスから液滴表面から液滴内部に与えられるエンタルピー ($\dot{q}_{liquid}$) を考慮している.

沸点における各化学種の蒸発潜熱 $H_{i,latent}^b$ は Joback の方法(文献[27]の APPENDIX C)によって推算した. 推算式は以下のように表される.

$$H_{i,latent}^b = 15.30 + \sum_k N_k (hvk) \times 0.004184 \quad (2-115)$$

ただし, k は分子構造のグループ, N は分子を構成する k グループの数, hvk は k グループの寄与の値 [cal/mol] である. このとき, Watson の関係(文献[27]の式(7-11.1))によって液滴温度における蒸発潜熱を推算した.

$$H_{i,latent} = H_{i,latent}^b \left(\frac{T_i^c - T^a}{T_i^c - T^b} \right)^{0.38} \quad (2-116)$$

2.4 気相モデル

2.4.1 物質輸送モデル

本研究では各化学種の質量蒸発速度 ($\dot{m}_{i,l}$) は液滴表面における多成分系の輸送方程式を解くことで得られる. 気相における多成分系の連続の式は次のように表される.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v} = 0 \quad (2-117)$$

このとき、各化学種の連続の式は次のように表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho y_{i,g}^s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho y_{i,g}^s \mathbf{v} &= 0 \\ \frac{\partial \rho y_{i,g}^s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho y_{i,g}^s (u^c + v_{i,g}^s) &= 0 \end{aligned} \quad (2-118)$$

ただし、 u^c は修正ステファン速度 [m/s], $v_{i,g}^s$ は各化学種の拡散速度[m/s]である。

Hirschfelder 則を式(2-118)に適用すると次のように式変形できる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho y_{i,g}^s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_g \left(y_{i,g}^s u^c - D_{i,g} \left(1 - x_{i,g}^s + y_{i,g}^s \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{x_{j,g}^s}{y_{j,g}^s} \right) \nabla y_{i,g}^s \right) &= 0 \\ \frac{\partial \rho y_{i,g}^s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_g u^c y_{i,g}^s &= \nabla \cdot [\rho_g \{ D_{i,g} \left(1 - x_{i,g}^s + y_{i,g}^s \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{x_{j,g}^s}{y_{j,g}^s} \right) \nabla y_{i,g}^s \}] \end{aligned} \quad (2-119)$$

ここで、シャーウッド数は次のように定義できる。

$$Sh_{i,g} = -\frac{2r_d \nabla y_{i,g}^s}{y_{i,g}^s - y_{i,g}^\infty} \quad (2-120)$$

このとき、 $\nabla y_{i,g}^s = -\frac{Sh_{i,g}(y_{i,g}^s - y_{i,g}^\infty)}{2r_d}$ を式(2-120)に代入すると、

$$\frac{\partial \rho y_{i,g}^s}{\partial t} + \nabla \cdot \rho_g u^c y_{i,g}^s = \nabla \cdot \left[\rho_g \left\{ D_{i,g} \left(1 - x_{i,g}^s + y_{i,g}^s \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{x_{j,g}^s}{y_{j,g}^s} \right) \frac{Sh_{i,g}(y_{i,g}^\infty - y_{i,g}^s)}{2r_d} \right\} \right] \quad (2-121)$$

以上より、式(2-117)は次のように式変形できる。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\rho_g \sum_{i=1}^N D_{i,g} \left(1 - x_{i,g}^s + y_{i,g}^s \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{x_{j,g}^s}{y_{j,g}^s} \right) \frac{Sh_{i,g}(y_{i,g}^\infty - y_{i,g}^s)}{2r_d} - \rho_g u^c \right] \quad (2-122)$$

本研究では非圧縮性流体($\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$)の仮定を適用し、 u^c に関して式(2-122)を整理すると

$$\begin{aligned}
u^c &= \sum_{i=1}^N D_{i,g} \left(1 - x_{i,g}^s + y_{i,g}^s \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{x_{i,g}^s}{y_{i,g}^s} \right) \frac{Sh_{i,g}(y_{i,g}^\infty - y_{i,g}^s)}{2r_d} \\
&= - \sum_{i=1}^N y_{i,g}^s v_{i,g}^s
\end{aligned} \tag{2-123}$$

一方、液滴質量蒸発速度($\dot{m}_l$)は次のように表される。

$$\dot{m}_l = \sum_{i=1}^{N_l} \dot{m}_{i,l} = 4\pi R_d^2 \rho_g \mathbb{V} \tag{2-124}$$

各化学種の質量蒸発速度($\dot{m}_{i,l}$)は次のように表される。

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{i,l} &= 4\pi R_d^2 \rho_g y_{i,g}^s (v_{i,g}^s + u^c) \\
&= 4\pi R_d^2 \rho_g y_{i,g}^s \left(v_{i,g}^s - \sum_{i=1}^N y_{i,g}^s v_{i,g}^s \right) (\because \text{式(2-123)})
\end{aligned} \tag{2-125}$$

以上より、液滴質量蒸発速度($\dot{m}_l$)および各化学種の質量蒸発速度($\dot{m}_{i,l}$)は次のように表される。

$$\dot{m}_l = \sum_{i=1}^{N_l} \dot{m}_{i,l} = 4\pi R_d^2 \rho_g \sum_{i=1}^N y_{i,g}^s (v_{i,g}^s + \sum_{i=1}^N y_{i,g}^s v_{i,g}^s) \tag{2-126}$$

2.4.2 熱輸送モデル

気相の熱流束として、気相から液相への熱伝導(伝達)による熱流束($\dot{q}_{conduction}$)、液相から気相へのエンタルピー拡散による熱流束($\dot{q}_{enthalpy}$)、気相から液相への熱放射による熱流束($\dot{q}_{radiation}$)の3つの異なる項を考慮した。

気相から液相への熱伝導(伝達)による熱流束($\dot{q}_{conduction}$)はニュートンの冷却則より次のように表される。

$$\dot{q}_{conduction} = Ah(T_{amb} - T^s) \tag{2-127}$$

ただし、 A は液滴表面積[m²]、 h は熱伝達係数[W/m² K]である。このとき、液滴周りの対流による熱伝達と流体の熱伝導の比を示す無次元数であるヌッセルト数(Nu)は次のように表される。

$$Nu = 2R_d h / k_g \tag{2-128}$$

式(2-128)を熱伝達係数で整理すると、

$$h = k_g Nu / 2R_d \tag{2-129}$$

したがって、式(2-129)を式(2-127)に代入すると本研究で考慮した熱流束($\dot{q}_{conduction}$)が導出できる。

$$\begin{aligned}\dot{q}_{conduction} &= 4\pi R_d^2 k_g Nu (T_{amb} - T^s) / 2R_d \\ &= 2\pi R_d k_g Nu (T_{amb} - T^s)\end{aligned}\quad (2-130)$$

気相へのエンタルピー拡散による熱流束 ($\dot{q}_{enthalpy}$) は、物質拡散による気相の燃料組成の変化に伴うエネルギー変化による影響を考慮している。また、多成分系のエネルギーバランスにおけるエンタルピー拡散による熱流束 ($\dot{q}_{enthalpy}$) はよく知られているが、無視されることが多い [28]。しかし、二次多項式関数で近似した内部分布式を液滴内部の温度および濃度分布として考慮した液滴蒸発モデルに関する著者らの先行研究 [21]では、エンタルピー拡散項を考慮することで、蒸発速度が著しく遅くなることを明らかにした。さらに、エンタルピー拡散項を考慮した場合、液滴蒸発モデルの計算結果は実験結果とよく一致した [21]。エネルギー流束(q_k)は次のように一般化される。

$$q_k = -k \frac{\partial T}{\partial x_k} + \rho \sum_{i=1}^N h_i Y_i V_{i,k} \quad (2-131)$$

式(2-131)で記述されるエネルギー流束はフーリエの法則によって表される熱拡散項(右辺第一項)と、エンタルピー拡散項(右辺第2項)である。式(2-131)のエンタルピー拡散項を液滴表面におけるエンタルピー拡散とすると、本研究で考慮するエンタルピー拡散による熱流束は次のように表される。

$$\dot{q}_{enthalpy} = A \left(\rho_g \sum_{i=1}^N h_{i,g} (y_{i,g}^s v_{i,g}^s) \right) = 4\pi R_d^2 \rho_g \sum_{i=1}^N h_{i,g} (y_{i,g}^s v_{i,g}^s) \quad (2-132)$$

ただし、 $y_{i,g}^s v_{i,g}^s$ は式(2-123)によって与えられる。

気相から液相への熱放射による熱流束 ($\dot{q}_{radiation}$) は、灰色体近似の放射伝熱によって与えられる。

$$\dot{q}_{radiation} = A (\varepsilon \sigma (T_{amb}^4 - T^{s4})) = 4\pi R_d^2 \varepsilon \sigma (T_{amb}^4 - T^{s4}) \quad (2-133)$$

ただし、放射率 ε は本研究では 0.9 としている。

以上より、気相からの全熱流束は次のように表す。

$$\begin{aligned}\dot{q}_{gas} &= \dot{q}_{conduction} - \dot{q}_{enthalpy} + \dot{q}_{radiation} \\ &= 2\pi R_d k_g Nu (T_{amb} - T^s) - 4\pi R_d^2 \rho_g \sum_{i=1}^N h_{i,g} (y_{i,g}^s v_{i,g}^s) + 4\pi R_d^2 \varepsilon \sigma (T_{amb}^4 - T^{s4})\end{aligned}\quad (2-134)$$

2.4.3 熱力学的物性値

本研究では雰囲気ガスを窒素とする．そこで、窒素の熱伝導率 k_g [W/m/K] は下記の式 [29] で推算する．

$$k_g = \frac{252 \times 10^{-5} \times T_{ref}^{1.5}}{T_{ref} + 200} \quad (2-135)$$

ただし、 T_{ref} は気相の代表温度である．

気相の質量拡散係数 ($D_{i,g}$) [m²/s] は下記のような混合則 (文献[30]の式(7.34)) を用いて二成分系質量拡散係数を多成分系質量拡散係数に変換することで与えられる．

$$D_{i,g} = \frac{1 - x_{i,g}^s}{\sum_{j=1, j \neq i}^N \frac{x_{j,g}^s}{D_{ij,g}}} \quad (2-136)$$

ただし、二成分系質量拡散係数 $D_{ij,g}$ [m²/s] は Reid らの方法 [30] によって推算する．

$$D_{ij,g} = \frac{0.0266 T_{ref}^{1.5}}{P_{amb} MW_{ij} \sigma_{ij}^2 \Omega_D} \quad (2-137)$$

ここで、 $MW_{i,j} = 2 \left[\left(\frac{1}{MW_i} \right) + \left(\frac{1}{MW_j} \right) \right]^{-1}$ 、 $\sigma_{i,j} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}$

$$\Omega_D = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(DT^*)} + \frac{E}{\exp(FT^*)} + \frac{G}{\exp(HT^*)}$$

$$\left(\begin{array}{l} T^* = \frac{k_B T_{ref}}{\sqrt{\varepsilon_A \varepsilon_B}} \\ A = 1.06036, \quad B = 0.15610 \\ C = 0.19300, \quad D = 0.48635 \\ E = 1.03587, \quad F = 1.52996 \\ G = 1.76474, \quad H = 3.89411 \end{array} \right)$$

液滴表面近傍の燃料蒸気と雰囲気ガスの混合ガスの密度は理想気体の状態方程式から逆算する．

$$\rho_g = \frac{\sum_{i=1}^N x_{i,ref} MW_i}{\sum_{i=1}^N x_{i,ref}} \left(\frac{P_{amb}}{RT_{ref}} \right) \quad (2-138)$$

気相の比熱は代表温度の関数 $C_{ip,g}$ [J/mol/K] として以下のように計算する．

$$C_{ip,g}(T_{ref}) = R(a_{i,1} + a_{i,2} T_{ref} + a_{i,3} T_{ref}^2 + a_{i,4} T_{ref}^3 + a_{i,5} T_{ref}^4) \quad (2-139)$$

ただし、 R は一般気体定数、 $a_{i,1}, a_{i,2}, a_{i,3}, a_{i,4}, a_{i,5}$ および $a_{i,6}$ は多項式フィッティングの係

数である．さらに，顕エンタルピー $h_{i,g}$ [J/mol]は以下のように比熱の積分値として与える．

$$h_{i,g}(T_{ref}) = \int_0^{T_{ref}} C_{ip,g}(T) dT \quad (2-140)$$

$$= R(a_{i,1}T_{ref} + \frac{a_{i,2}T_{ref}^2}{2} + \frac{a_{i,3}T_{ref}^3}{3} + \frac{a_{i,4}T_{ref}^4}{4} + \frac{a_{i,5}T_{ref}^5}{5} + a_{i,6})$$

液滴表面近傍における雰囲気ガスと燃料蒸気の混合ガスの熱力学的物性値は上記に示したように温度の関数である．しかし，混合ガスの代表温度および濃度を明確に定義することは難しい．そこで，液滴表面と無限遠方(雰囲気)の濃度および温度を 2 : 1 に内分した値を代表値とする，“1/3 法則”がしばしば用いられる．本モデルにおいても以下のように代表値を与える．

$$\begin{cases} T_{ref} = T^s + \frac{1}{3}(T_{amb} - T^s) \\ y_{i,ref} = y_{i,g}^s + \frac{1}{3}(y_{i,g}^{amb} - y_{i,g}^s) \end{cases} \quad (2-141)$$

2.5 沸騰モデル

沸騰を模擬するモデルについて説明する．本研究では，液滴表面の蒸気圧が雰囲気圧力より高くなった場合に沸騰モデルが適用される．

多成分燃料の沸点を明確に定義することは極めて困難である．なぜなら，燃料を構成する化学種の分率が時々刻々と変化するからである．そこで，本モデルでは，ニュートン法によって得られる近似解を多成分燃料の沸点として定義する．

まず，計算過程において燃料液滴が沸騰すると，液滴表面の蒸気圧は雰囲気圧力と同じになる．

$$\sum_{i=1}^{N_l} p_{i,v} x_{i,l}^s = P_{amb} \quad (2-142)$$

式(2-135)に式(2-112)を代入すると，燃料蒸気圧は沸点(T_b)の関数として与えられる．

$$\sum_{i=1}^{N_l} x_{i,l}^s 10^{(A_{i,p} - \frac{B_{i,p}}{C_{i,p} + T_b - 273.15})} = P_{amb} \quad (2-143)$$

ニュートン法を適用するために次の関数 $g(T_b)$ を定義する．

$$g(T_b) = \sum_{i=1}^{N_l} x_{i,l}^s 10^{(A_{i,p} - \frac{B_{i,p}}{C_{i,p} + T_b - 273.15})} - P_{amb} \quad (2-144)$$

したがって、以下の収束計算によって多成分燃料の沸点を求める。

$$T_b^{n+1} = T_b^n - \frac{g(T_b)}{g'(T_b)} \quad (2-145)$$

$$\text{収束判定: } \left| \frac{g(T_b)}{g'(T_b)} \right| < 10^{-3}$$

また、沸騰モデルを使用した時は、液滴表面温度を沸点として置き換える。さらに、液滴表面の気相は燃料蒸気のみで構成されとする ($\sum_{i=1}^{N_l} y_{i,g}^s = 1$)。

2.6 過熱モデル

液滴平均温度が液滴表面温度よりも液滴表面温度の方が高くなった場合を過熱状態とする。本モデルでは過熱状態のとき、Adachi ら[31]によって提案された補正係数を液滴表面から液滴内部へ与えられるエンタルピーにおいて考慮する。以下に計算過程を示す。

1. 液滴表面と液滴平均温度の差異 ($\Delta T = T^a - T^s$) を計算する
2. $\Delta T > 0$ のとき、液滴表面から液滴内部へ与えられるエンタルピー ($\dot{q}_{liquid}$) は以下の式で計算する。

$$\dot{q}_{liquid} = 4\pi R_l^2 (h_{liquid} + \alpha_{sh}) \Delta T = 4\pi R_d^2 \left(-\frac{k_{eff} \frac{\partial T(R)}{\partial R} \Big|_{R=R_d}}{T^s - T_{amb}} + \alpha_{sh} \right) \Delta T \quad (2-146)$$

ただし、Adachi らによって提案された補正係数 α_{sh} は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \alpha_{sh} &= 0.76 \Delta T^{0.26} & (0 \leq \Delta T < 5) \\ &= 0.027 \Delta T^{2.33} & (5 \leq \Delta T < 25) \\ &= 13.8 \Delta T^{0.39} & (25 < \Delta T) \end{aligned} \quad (2-147)$$

3. 各燃料種の質量蒸発速度は、以下のように質量分率に応じた比例配分で決まる。

$$\dot{m}_l = \frac{\dot{q}_{gas} - \dot{q}_{liquid}}{H_{latent}} \quad (2-148)$$

$$\dot{m}_{i,l} = y_{i,g}^s \dot{m}_l \quad (2-149)$$

2.7 計算アルゴリズム

本研究では Fortran90 を使用して計算コードを構築した. Fig. 2-3 に本研究で構築した液滴蒸発モデルのアルゴリズムを示す.

1. 初期値を入力する ($P_{amb}, T_{amb}, R_d, T^a, T^s, y_{i,l}^a$).
2. 最初のタイムステップでは液滴内部の温度および濃度分布は均一分布として仮定する. 次タイムステップ以降は初期分布として前タイムステップの温度および濃度分布を使用する.
3. ラウールの法則に基づいて, 液滴表面のモル分率を計算する(式(2-112)).
4. 液相の熱力学的物性値(式(2-102)-(2-111))および気相の熱力学的物性値(式(2-135)-(2-141))を計算する.
5. 質量蒸発速度を計算する(式(2-126)).
6. 液滴界面におけるエネルギー収支を計算する(式(2-114)).
7. 液滴内部の温度分布を計算する(式(2-98)).
8. 液滴内部の濃度分布を計算する(式(2-59)).
9. 液滴平均温度(式(2-99)), 液滴直径(式(2-100)), 各燃料種の質量分率(式(2-101))を更新する. 手順 2-9 を液滴の質量が無くなるまで繰り返す.

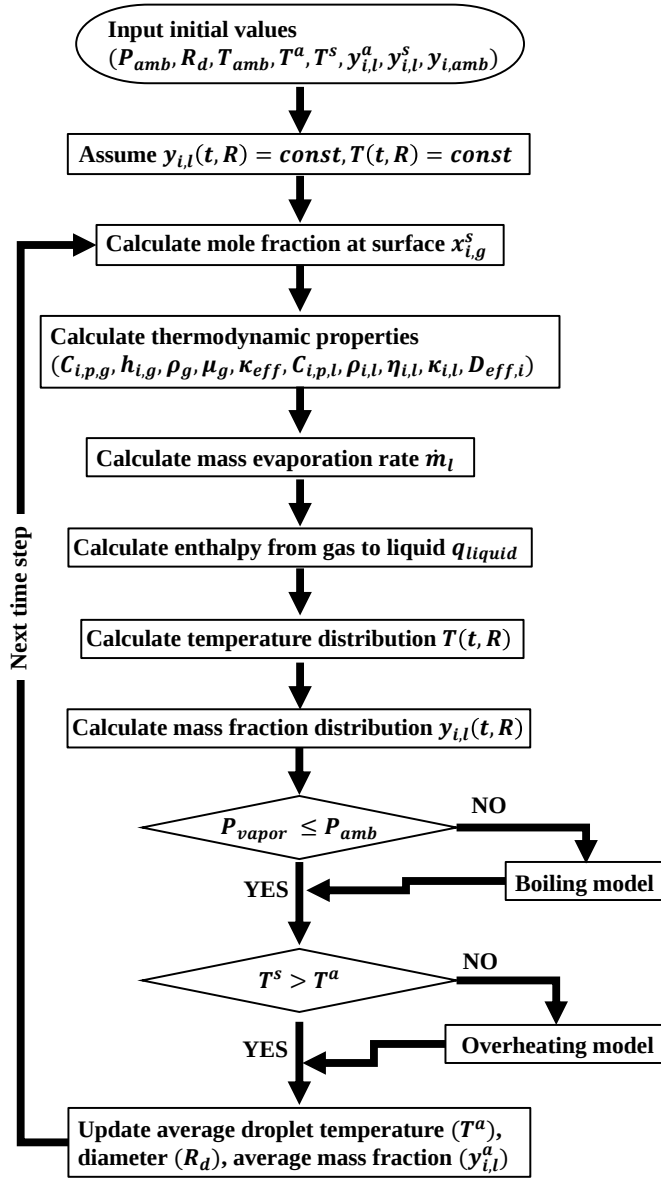


Fig. 2-3 Numerical algorithm of present model

3 炭化水素燃料による精度検証

3.1 実験装置および解析方法

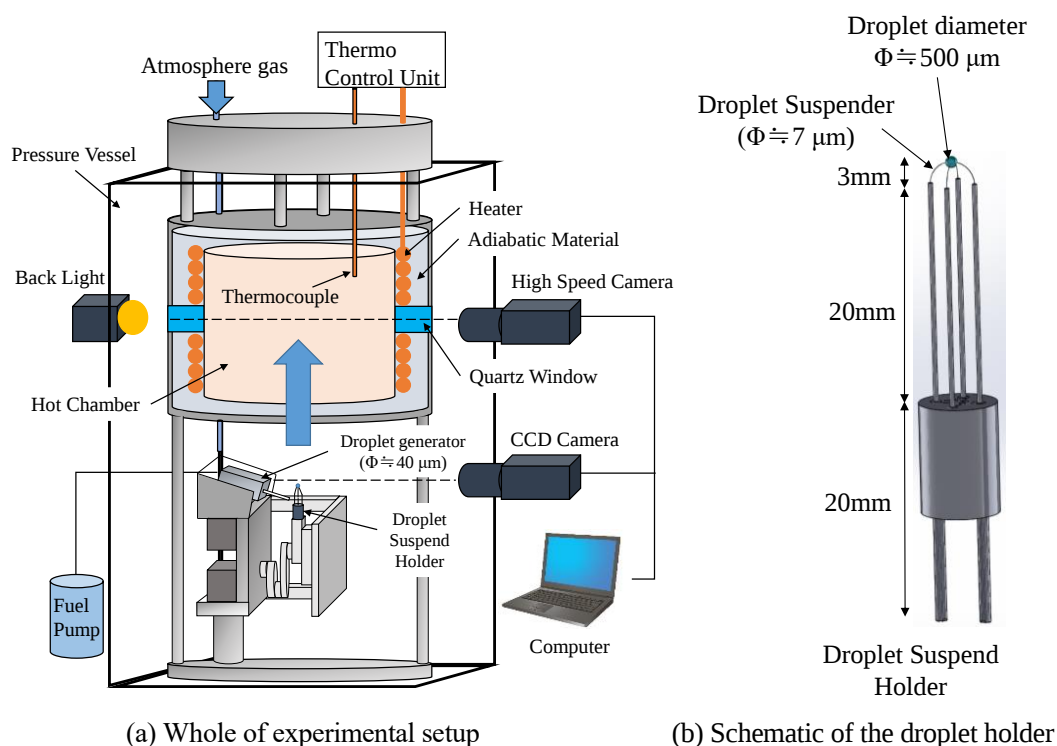


Fig. 3-1 Schematic of the experimental setup for the droplet evaporation experiment

構築した多成分燃料用液滴蒸発モデルによる予測値の予測精度を検証するために、単一液滴蒸発実験により様々な雰囲気温度において液滴蒸発特性に関する実験データを取得した。本節では単一液滴蒸発実験に使用した実験装置および画像解析について示す。Fig. 3-1に、本研究で使用した実験装置の概要および液滴を保持する懸垂ホルダーを示す。本実験装置は高压容器に内部モジュールが挿入されている二重構造となっている。高压容器（内径 100 mm，高さ 229 mm）は、超々ジュラルミン製（JIS：A7075）である。燃焼を含む化学反応を伴わない純粋な蒸発現象を観察するため、高压容器内は窒素で充填されている。高压容器の内部を観察するために、CCD カメラと高速度カメラ（DITECT 社製，HAS-X）を用いた。CCD カメラでは、液滴の生成過程を観察した。直径 $7\ \mu\text{m}$ の 2 本の $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$ 製の液滴懸垂用ファイバーの交点に、初期直径(D_0) $0.5 \pm 15\% \text{ mm}$ の燃料液滴を懸垂させた。燃料は、マイクロフローポンプを用いて液滴生成装置のガラス針（外径： $40\ \mu\text{m}$ ）の先端に供給した。燃料液滴を液滴懸垂用ファイバーの交点に懸垂させた後、ガラス針を後退さ

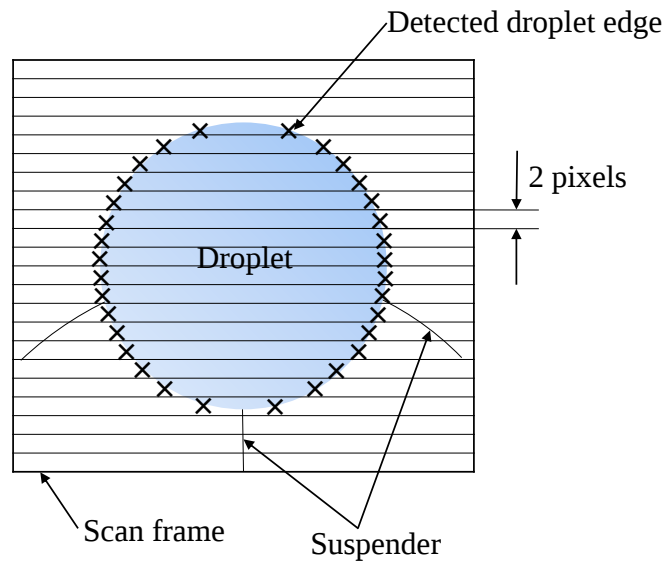


Fig. 3-2 Schematic of the image analysis used to measure the droplet diameter

せて、高温容器への液滴を挿入した。懸垂ホルダーの昇降装置には、液滴挿入時に懸垂された液滴への衝撃を軽減するため、リニアスライダークランク機構を適用した。液滴生成部から高温容器までの液滴の移動時間は 0.26 秒、移動距離は 6 mm である。また、蒸発特性に対するリニアスライダークランク機構の影響を明らかにするために、液滴挿入前後の液滴径の測定値を比較した。その結果、直径差の平均誤差は 5% 以下であることがわかった。なお、高温容器内の雰囲気温度 (T_{amb}) は、熱制御ユニットにより 473~873 K の範囲で任意に制御した。液滴蒸発過程は、高速度カメラを用いて Back light 法を用いて撮影した。記録した液滴蒸発過程の画像は、自作の画像解析プログラムを用いて解析した。Fig. 3-2 に、本研究における画像解析の詳細を示す。燃料液滴の画像を、垂直方向 2 ピクセル毎に分割した。分割した幅において、水平方向の平均輝度分布を計算した。液滴のエッジは、 $(I_A + 2I_B)/3$ と仮定した。ただし、 I_A は背景の平均輝度、 I_B は液滴の平均輝度である。液滴の体積は、決定されたエッジを用いて楕円体近似により算出した。液滴の直径は同じ体積を持つ球体の直径として定義した。画像解析での液滴径の測定限界は 0.078 mm 以下であり、 D^2/D_0^2 が 0.025 に相当する。

3.2 液滴寿命に関する定義

次に、本研究で議論する液滴寿命に関して定義する。Fig. 3-3 に液滴寿命の定義を示す。初期液滴径の変動は液滴寿命に大きく影響するため、縦軸は液滴直径の二乗を初期液滴直

径の二乗で正規化している．なお，本研究では燃料液滴を高温容器に挿入したときの液滴直径を初期液滴径とした．液滴寿命の指標として，燃料液滴を高温部に挿入した時点から初期体積の5%($D^2/D_0^2 = 0.136$)に減少するまでの期間を95 vol%液滴寿命(τ_{95}/D_0^2)とした．一方，Fig. 3-3 より液滴蒸発過程初期に初期直径より液滴直径の方が大きくなる期間がある．液滴温度が瞬間的に上昇することによって液滴が熱膨張する．したがって，液滴直径が増加する．これを本研究では初期加熱期間と定義する．初期加熱期間では，雰囲気ガスから液滴に流入するエンタルピーのほとんどが液滴の昇温に消費される．そのため，液滴蒸発速度が熱膨張率と等しくなるまで，液滴の密度が下がることで液滴の直径が大きくなる．液直径が最大になった後，液滴直径は単調に減少する．

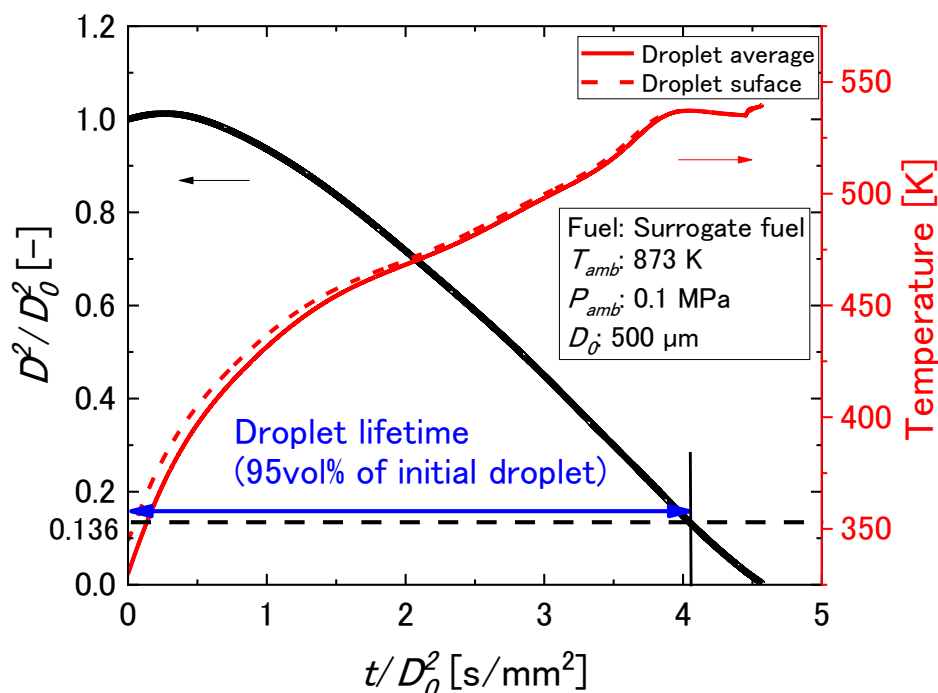


Fig. 3-3 Predicted droplet diameter and temperature.

3.3 分解軽油サロゲート燃料

実燃料のような無数の化学種が混合している燃料の燃焼シミュレーションでは，サロゲート燃料を用いる計算手法が良く知られている．サロゲート燃料とは，シミュレーションにおいて物理現象のある特性を模擬することを目的とし，明確な化学種から構成される燃

Table 3-1 Compositions and properties of L1 surrogate fuel

Molecular Formula		C ₁₀ H ₁₄	C ₁₁ H ₁₀	C ₁₆ H ₃₄	C ₂₀ H ₄₂
Molecular Weight	g/mol	134	142	226	282
Mass Fraction	-	0.3116	0.4402	0.1753	0.0729
Boiling Point	°C	169.1	244.6	286.9	344.1
Density (15°C)	g/cm ³	0.8708	1.027	0.7773	0.7908

Table 3-2 Properties of L1 surrogate fuel

Fuel		LCO	Surrogate Fuel
Density (15°C)	g/cm ³	0.9323	0.9173
Cetane Index [JIS K 2280]		19.8	19.7
Sulfur	wt%	0.14	0
Nitrogen	wt%	0.011	0
Carbon	wt%	90.3	89.9
Hydrogen	wt%	9.6	10.1
C/H ratio	-	9.4	8.9
Saturated molecule	vol%	14.3	16
Olefin	vol%	1.5	0
Aromatics	vol%	84.2	84
1ring aromatics	vol%	36.6	36
2ring aromatics	vol%	43.6	48
over 2 ring aromatics	vol%	4	0

料のことである。サロゲート燃料を用いることで、詳細な化学反応経路を構築することが可能になるなど、詳細な解析が可能となる。本研究では著者らが過去の研究[32]において開発した分解軽油(LCO)サロゲート燃料を使用した。

Table 3-1 に本研究で使用した LCO サロゲート燃料を構成する化学種、質量分率、および物性値を示す。本研究で使用した LCO サロゲート燃料は、分解軽油の蒸留特性を模擬するために沸点の幅が同等になるようにサロゲート燃料の化学種を選定するとともに質量分率を決定した。使用した LCO サロゲート燃料は tert-butylbenzene (C₁₀H₁₄), 1-methylnaphthalene (C₁₁H₁₀), n-hexadecane (C₁₆H₃₄) および n-eicosane (C₂₀H₄₂) の 4 成分である。Table 3-2 に LCO および LCO サロゲート燃料の様々な燃料物性を比較した。Table

3-2 より，サロゲート燃料の物性値や分子構造のタイプが LCO とよく一致していることがわかる．さらに，サロゲート燃料の液滴蒸発特性の模擬精度を検証するために，サロゲート燃料の単一液滴蒸発実験を実施するとともに液滴蒸発特性を LCO の液滴蒸発特性と比較した．Fig. 3-4 に様々な雰囲気温度においてサロゲート燃料および LCO の液滴寿命の実験結果の比較を示す．Fig. 3-4 より，様々な雰囲気温度においてサロゲート燃料の液滴寿命は LCO の液滴寿命とよく一致していることがわかる．特に，サロゲート燃料と LCO の液滴寿命の差異は高い雰囲気温度においては 5%以下となることがわかった．以上のことから，本研究で用いるサロゲート燃料は LCO の蒸発特性をよく模擬できているということがいえる．

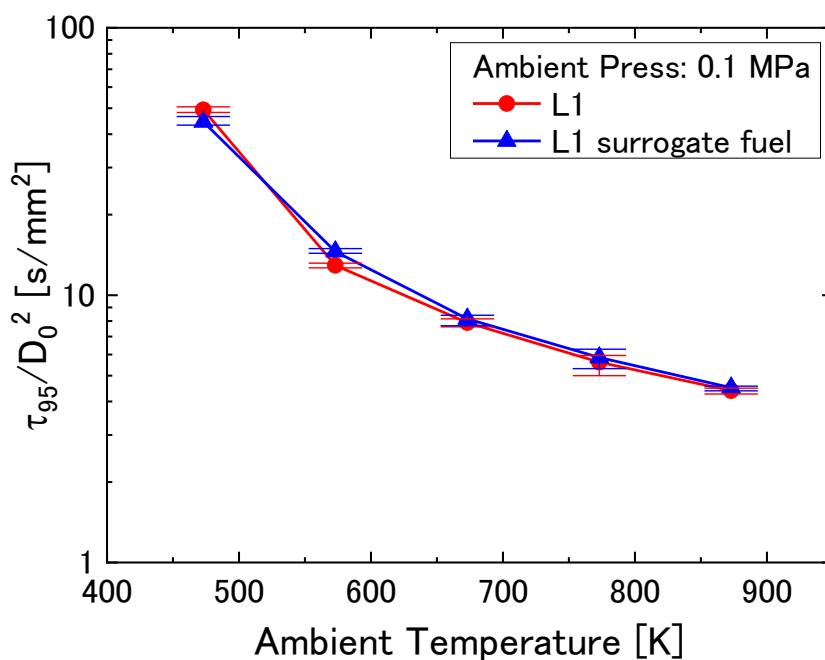


Fig. 3-4 Validation of LCO surrogate fuel at various ambient temperature [32]

3.4 液滴内部の濃度分布

雰囲気温度(T_{amb})が各化学種の濃度分布に対してどのような影響を与えるのかを調べた．本章では，過去の実験条件を再現するため，初期液滴径(D_0)は 0.5 mm，雰囲気ガスは窒素，雰囲気圧力は 0.1 MPa とした．Fig. 3-5 に， $T_{amb} = 473$ K における各燃料種の液滴内部濃度分布の時間履歴を示す．なお，縦軸は液滴中心から液滴表面までの無次元長さである．

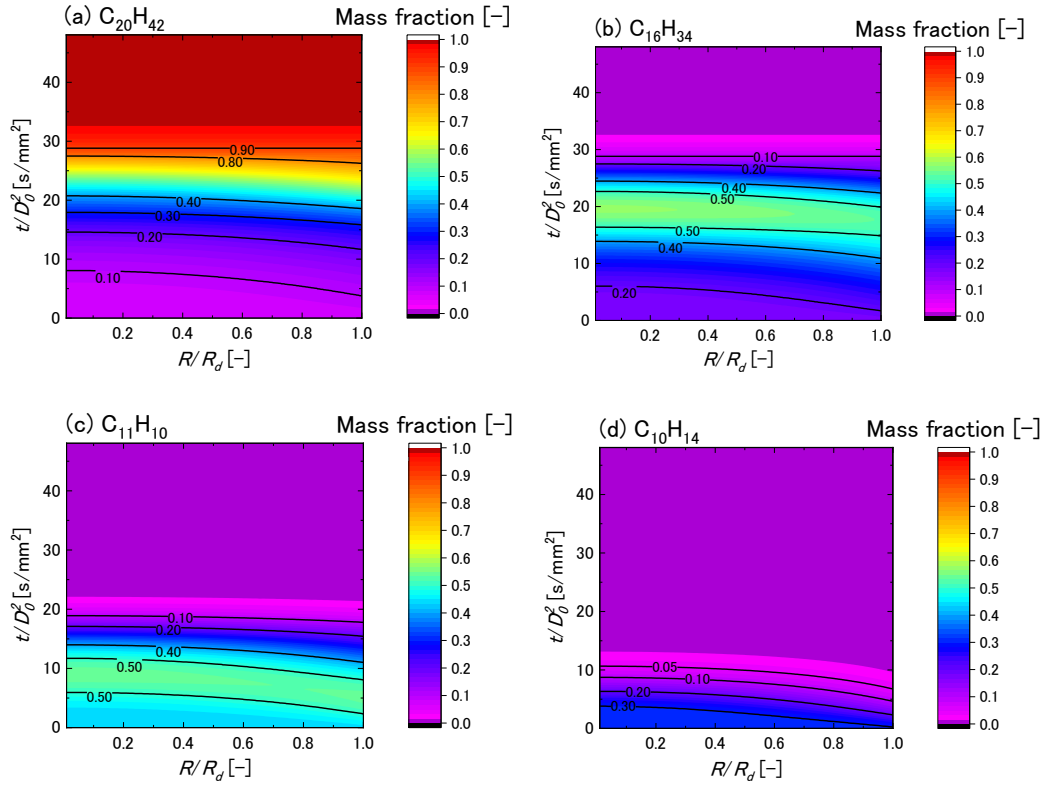


Fig. 3-5. History of internal mass distributions of each fuel species as a function of the nondimensional length from the droplet center to the surface during evaporation at $T_{amb} = 473$ K.

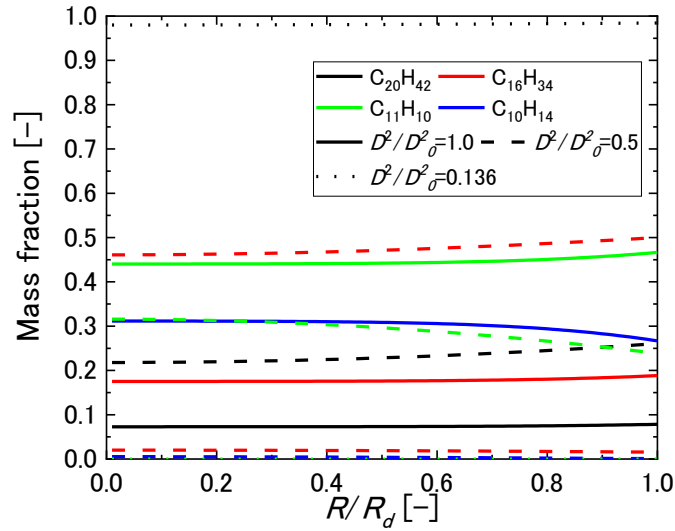


Fig. 3-6 Internal mass fraction distribution of each fuel species as a function of normalized length from the droplet center to the surface at early ($D^2/D_0^2 = 1.0$), middle ($D^2/D_0^2 = 0.5$), and late evaporation terms ($D^2/D_0^2 = 0.136$) at $T_{amb} = 473$ K

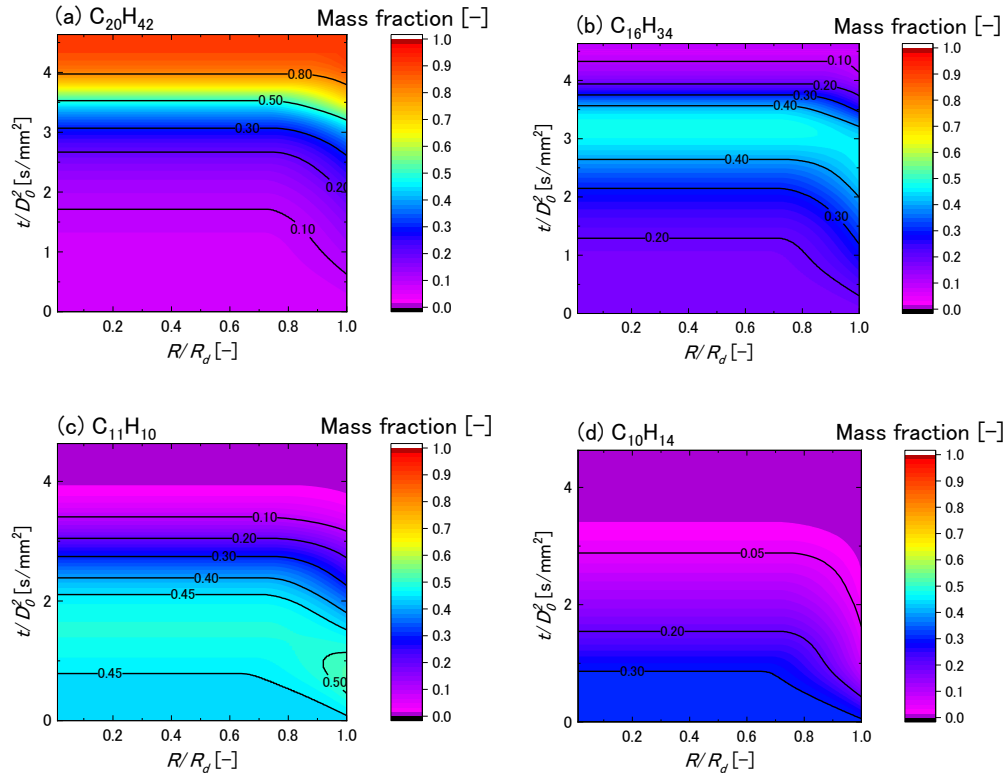


Fig. 3-7 History of internal mass distributions of each fuel species as a function of the nondimensional length from the droplet center to the surface during evaporation at $T_{amb} = 873$ K

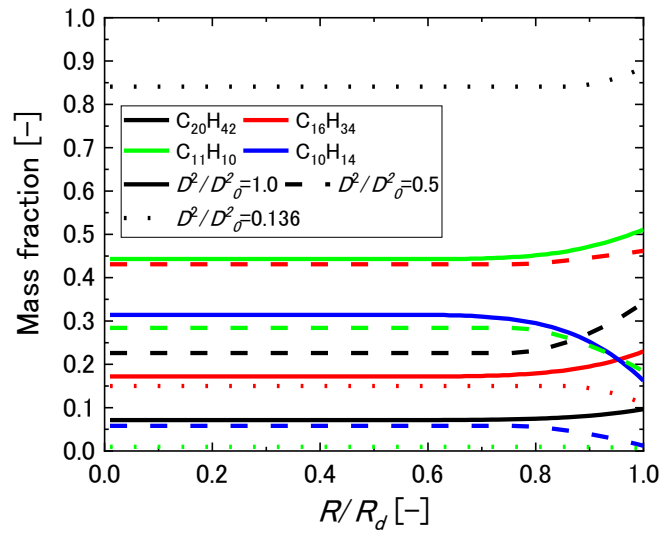


Fig. 3-8 Internal mass fraction distributions of each fuel species as a function of normalized length from the droplet center to the surface at early ($D^2/D_0^2 = 1.0$), middle ($D^2/D_0^2 = 0.5$), and late evaporation term ($D^2/D_0^2 = 0.136$) at $T_{amb} = 873$ K

図中の色は濃度を示し、水平の分布が各時刻における濃度分布を表している。Fig. 3-6 は、 $T_{amb} = 473 \text{ K}$ における、蒸発過程初期 ($D^2/D_0^2 = 1.0$)、蒸発過程中期 ($D^2/D_0^2 = 0.5$)、蒸発過程後期 ($D^2/D_0^2 = 0.136$) の濃度分布を液滴中心から液滴表面までの無次元長さの関数として示したものである。蒸発過程初期では、高揮発成分である $C_{11}H_{10}$ と $C_{10}H_{14}$ の濃度分布の勾配は液滴表面に向かって減少し、低揮発成分である $C_{16}H_{34}$ と $C_{20}H_{42}$ の濃度分布の勾配は液滴表面に向かって増加している。しかし、蒸発過程後期には、 $C_{16}H_{34}$ と $C_{20}H_{42}$ の濃度分布がほぼ一様となり、 $C_{20}H_{42}$ が液滴内部で支配的な成分となることがわかる。

一方、 $T_{amb} = 873 \text{ K}$ の場合、Fig. 3-7 は Fig. 3-5 ($T_{amb} = 473 \text{ K}$) と比較すると、全ての蒸発期間において、顕著な勾配をもつ濃度分布を示していることがわかる。さらに、 $T_{amb} = 473 \text{ K}$ の場合と同様に、Fig. 3-8 は $T_{amb} = 873 \text{ K}$ における液滴中心から液滴表面までの無次元長さの関数としての内部濃度分布を示している。Fig. 3-8 より、液滴表面付近において、すべての化学種の濃度分布の勾配は Fig. 3-6 の濃度分布の勾配よりも急峻であることがわかる。また、 $T_{amb} = 873 \text{ K}$ における濃度勾配も時間の経過とともに一様分布となることがわかる。

3.5 液滴内部の温度分布

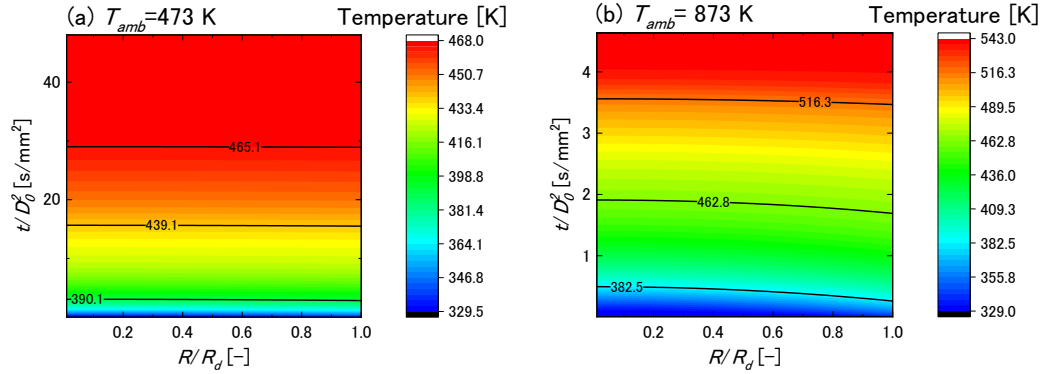


Fig. 3-9 Temperature distributions inside the droplet at (a) $T_{amb} = 473$ and (b) 873 K .

Fig. 3-9 は、(a) $T_{amb} = 473$ および (b) 873 K における、液滴中心から表面までの無次元長さの関数としての内部温度分布を示している。Fig. 3-9(a) より、液滴内部温度分布は蒸発過程においてほぼ一様分布を示すことがわかる。しかし、Fig. 3-9(b) と Fig. 3-9(a) と比較すると、雰囲気温度が高いほど内部の温度勾配が急峻になることがわかる。以上のことから、濃度分布と同様に、液滴内部の温度分布を考慮することも液滴蒸発特性の予測に対して与える

効果は、雰囲気温度の上昇とともに大きくなることがいえる。

3.6 様々な雰囲気温度における実験値と予測値の比較

本モデルの予測精度を検証するために、 $T_{amb} = 473$ から 873 K までの 10 K 毎の液滴寿命の予測値と、様々な雰囲気温度での実験結果を Fig. 3-10 に示す。なお、実験結果のプロットは 3 回以上の反復実験の平均液滴寿命を示し、エラーバーの最大値と最小値はそれぞれ 3 回以上の反復実験の最大値と最小値を示している。予測値と実験値の比較に関する詳細な結果を説明する前に、Fig. 3-10 に示した予蒸発期間に関して以下に示す。Fig. 3-11 に、実験過程における予蒸発期間を図示した。まず、液滴生成装置を用いて燃料液滴を生成した(Fig. 3-11(a))。同時に、直径 $500\text{ }\mu\text{m} \pm 15\%$ の燃料液滴を 2 本のファイバーの交点に懸垂させた(Fig. 3-11 (b))。液滴蒸発は液滴が懸垂された瞬間から始まる。この時、雰囲気ガスは $323 \sim 333$ K に保たれている(Fig. 3-11(c))。本研究では、Fig. 3-11(c)に示すプロセスを予蒸発期間として定義した。最後に、懸垂した液滴を雰囲気温度が $473 \sim 873$ K の高温容器に挿入し、高速度カメラを用いて液滴蒸発挙動を記録した(Fig. 3-11(d))。Fig. 3-10 に様々な雰囲気温度温度における、予測値と実験値の比較を示す。Fig. 3-10 より、予蒸発を考慮しない場合と実験値に大きな差異があることがわかる。特に、 $T_{amb} = 473$ K では、予測値と実験値の差異が顕著に大きくなっていることがわかる。このような予測値と実験値

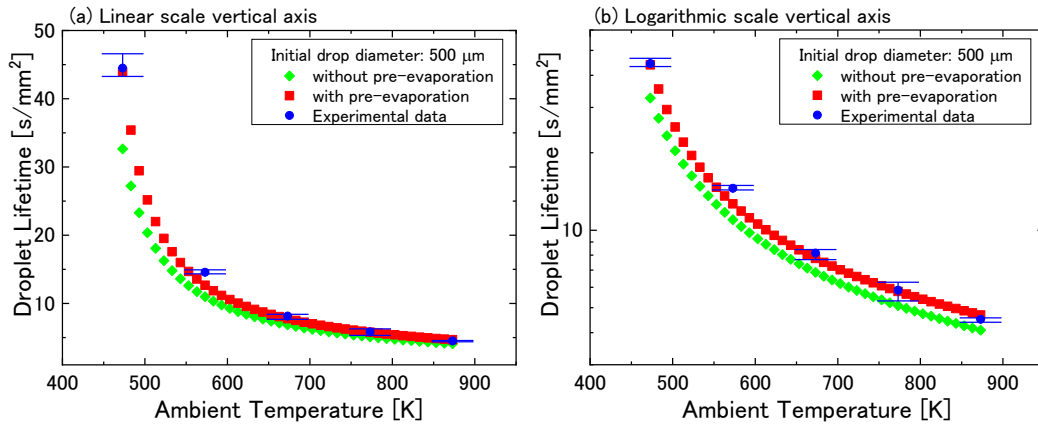


Fig. 3-10 Comparison between measured and calculated droplet lifetimes at various ambient temperatures given by (a) linear scale in vertical axis and (b) logarithmic scale in vertical axis.

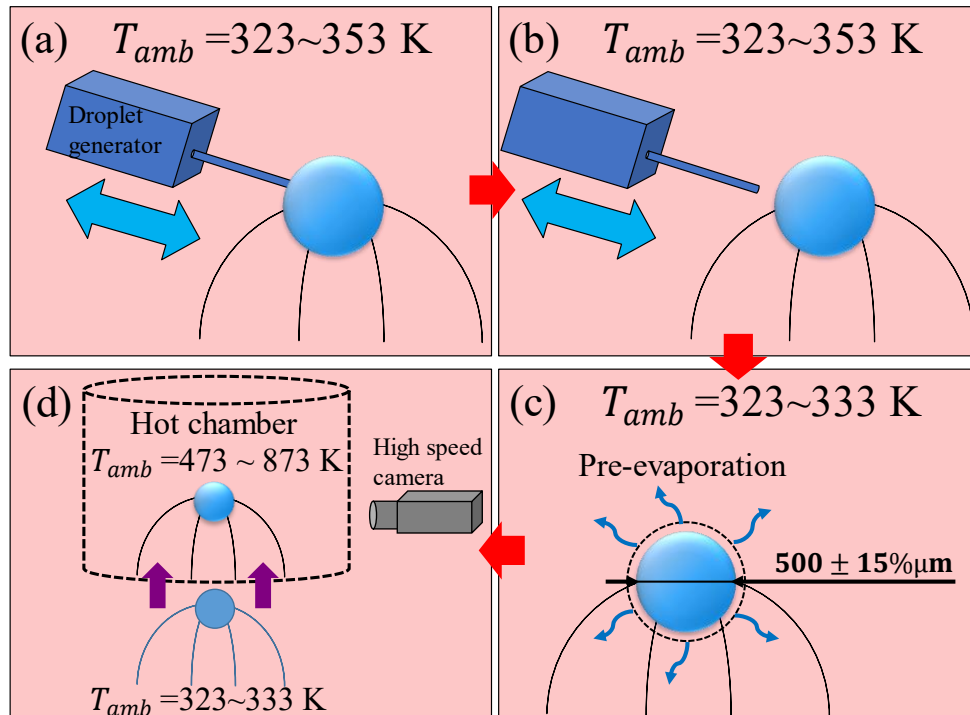


Fig. 3-11 Schematic of pre-evaporation process in experiments.

の差異は、実験過程における予蒸発によってサロゲート燃料の初期質量分率が変化したことに起因すると考えられる。Fig. 3-10(a)より、 $T_{amb} = 473 \text{ K}$ において、予蒸発期間を考慮しない場合の液滴寿命の実験値と予測値には明らかな差異があることがわかる。

本研究では、構築した液滴蒸発モデルの精度を向上するために、予蒸発期間のシミュレーションも実施した。Table 3-3 に予蒸発期間と主蒸発期間の初期値を示す。数値計算では、燃料液滴は雰囲気温度 330 K において 60 秒間保持する。その後、高温容器に挿入されると仮定した。なお、実験では予蒸発前の初期直径が高温容器での測定直径よりも大きいことが予想されたため、予蒸発期間を考慮した数値計算では初期液滴径を $515 \mu\text{m}$ とした。Fig. 3-10 に、様々な雰囲気温度における予蒸発期間を考慮した液滴寿命の実験値と予測値の比較を示す。Fig. 3-10(a)より、予蒸発期間を考慮した場合の液滴寿命の予測値は、雰囲気温度が低い場合に予蒸発期間を考慮しない場合の液滴寿命予測値よりも実験結果とよく一致していることがわかる。さらに、Fig. 3-10(b)に示すように、予蒸発期間を考慮した場合の液滴寿命は、予蒸発期間を考慮しない場合の液滴寿命よりも、雰囲気温度が高い場合に実験結果とよく一致していることがわかった。Fig. 3-12(a)は、 $T_{amb} = 473 \text{ K}$ における液滴直径の正規化二乗の履歴を正規化時間の関数として示したものである。Fig. 3-12(a)より、

Table 3-3 Initial values for pre-evaporation term and main-evaporation term

		Pre-evaporation term	Main-evaporation term
Ambient temperature	[K]	330	473 ~ 873
Ambient pressure	[MPa]	0.1	0.1
Droplet radius	[μm]	515	Value at end of pre-evaporation term
Droplet temperature	[K]	330	Value at end of pre-evaporation term
Ambient gas	[-]	N ₂	N ₂

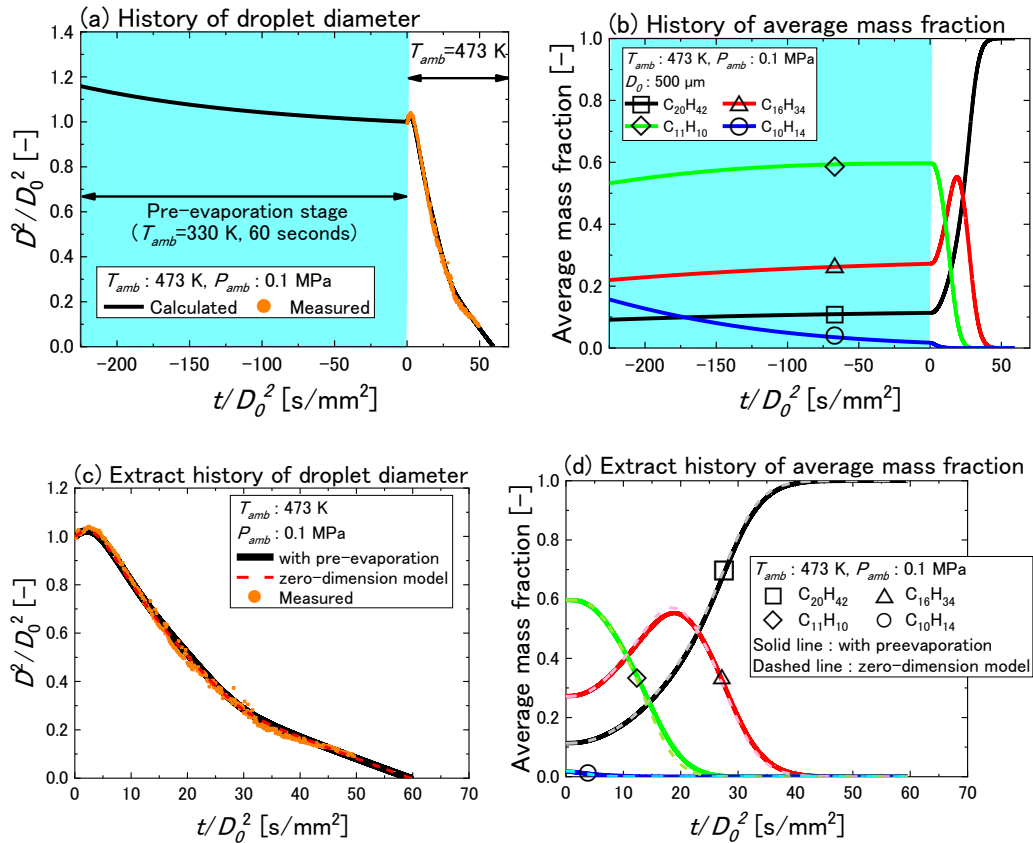


Fig. 3-12 Comparison between the experimental results and the simulated results considering the pre-evaporation process for (a) the history of the normalized squared droplet diameter, (b) the history of the average mass fraction of each species inside droplet, (c) extracted history of the normalized squared droplet diameter, and (d) extracted history of the average mass fraction of each species inside droplet at $T_{amb} = 473 \text{ K}$.

予蒸発期間では液滴直径の正規化二乗は緩やかに減少していることがわかる。また、液滴直径の正規化二乗の履歴の予測結果は実験結果とよく一致していることがわかる。Fig. 3-12(b)は、液滴内部の平均質量分率を正規化した時間の関数として示したものである。Fig. 3-12(b)より、最も揮発性の高い化学種である $C_{10}H_{14}$ は、燃料液滴が高温容器に挿入される前にほぼほとんどの質量が蒸発していることがわかる。本モデルによる予測結果と実験において高温容器内部でのみ得られている計測結果の液滴直径の正規化二乗の履歴の比較を見やすくするため、Fig. 3-12(a)のうち液滴が高温容器に移動した後のみを表示したグラフをFig. 3-12(c)に示す。さらに、本研究では構築したモデルで予測した液滴径の正規化二乗の履歴を、0次元モデルで予測したものと比較する。なお、本研究では液滴内部の温度および質量分率の分布が一様となるモデルを0次元モデルと定義している。また、Fig. 3-12(b)のプロットを抽出したグラフをFig. 3-12(d)に示す。Fig. 3-12(d)では、本モデルで予測した平均質量分率の時間履歴を0次元モデルで予測したものと比較する。Fig. 3-12(c)とFig. 3-12(d)より、構築したモデルと0次元モデルの予測結果の履歴には差異が極めて小さいことがわかる。しかし、実際の噴霧燃焼条件においては、構築したモデルと0次元モデルとの間に明確な差異があることがわかった。詳細な説明は次節で行う。Table 3-4に、様々な雰囲気温度での液滴寿命の実験値と予測値の具体的な値、および実験値と予測値の差異を示す。すべての雰囲気温度において、予蒸発を考慮すると、予蒸発期間を考慮しない場合に比べて差が小さくなることがわかった。

Table 3-4 Differences in droplet lifetime between measurements and predictions at various ambient temperature

Ambient temperature [K]	Measurement [s/m ²]	Prediction ignoring pre-evaporation term [s/m ²]	Difference [%]	Prediction considering pre-evaporation term [s/m ²]	Difference [%]
473	44.480	32.652	36.225	43.977	1.145
573	14.561	10.992	32.472	12.661	15.010
673	8.151	6.860	18.816	7.768	4.929
773	5.843	5.092	14.745	5.783	1.043
873	4.503	4.088	10.156	4.681	-3.806

3.7 均一分布モデルとの比較

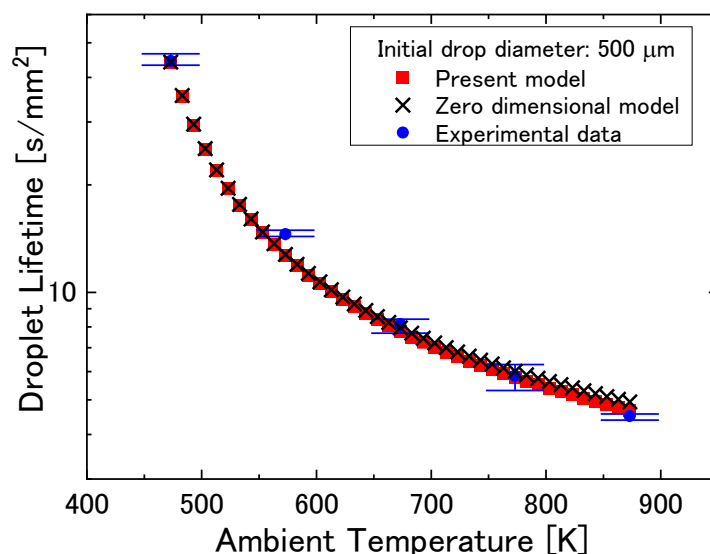


Fig. 3-13 Comparison between experimental results and predictions given by present model and zero-dimensional model at various ambient temperatures.

3.6 節において、液滴内部の温度分布および濃度分布を考慮することが液滴蒸発特性を予測することに与える効果を明らかにするため、0 次元モデルと本モデルによる予測値を比較した。0 次元モデルでは、液滴内部の温度および濃度分布が一様と仮定している。Fig. 3-13 に 3.6 節に示した実験条件における 0 次元モデルと本モデルによる液滴寿命の予測値と実験値の比較を示す。なお、Fig. 3-13 における液滴寿命の予測値は 3.6 節に示した予蒸発期間を考慮した予測値である。Fig. 3-13 より、0 次元モデルと本モデルによる液滴寿命の予測値の差異は様々な雰囲気温度において小さいことがわかる。このことから、本研究で示した単一液滴蒸発実験における初期液滴直径および雰囲気温度の範囲では内部分布を考慮することが液滴蒸発特性の予測値に与える影響は小さいことがわかる。しかし、実際の噴霧燃焼場においては、本研究で示した実験条件よりも小さい初期直径、かつ高い雰囲気温度で燃料液滴が蒸発する場合が考えられる。そこで、本節では実際の噴霧燃焼場をシミュレーションする場合に液滴内部の温度分布および濃度分布を考慮することが液滴蒸発特性を予測することに与える効果を明らかにする。

将来的に本モデルを実用的な噴霧燃焼シミュレーションに使用するために、より小さな初期液滴直径を考慮した。過去の実験[33-35]およびシミュレーション研究[11]に基づいて、初期液滴直径として 60 および 20 μm を選択した。液滴内部の温度分布および濃度分布を考慮することが液滴蒸発特性を予測することに与える効果を定量的に評価するた

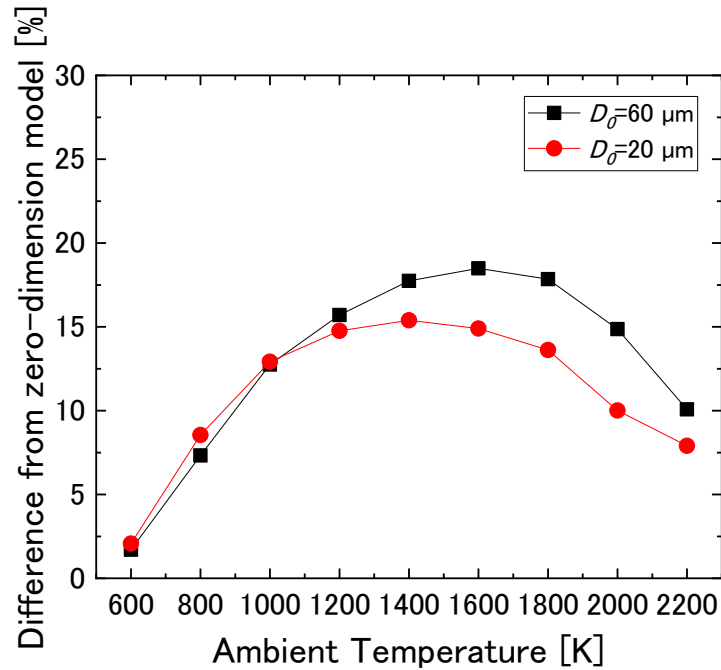
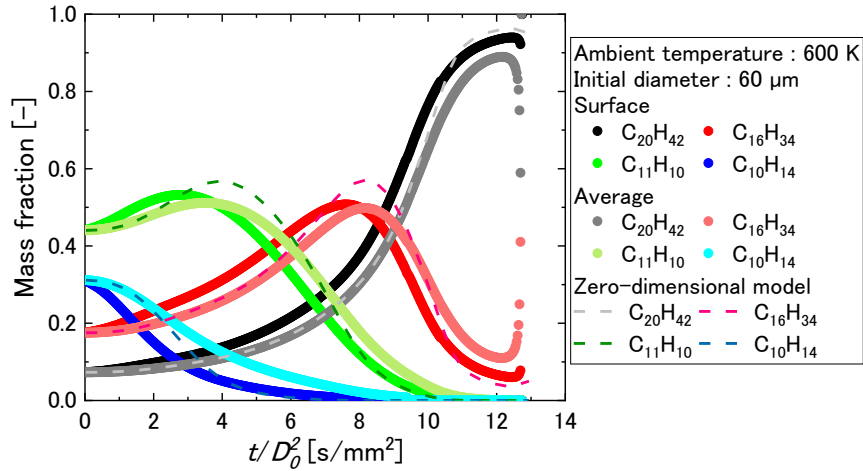


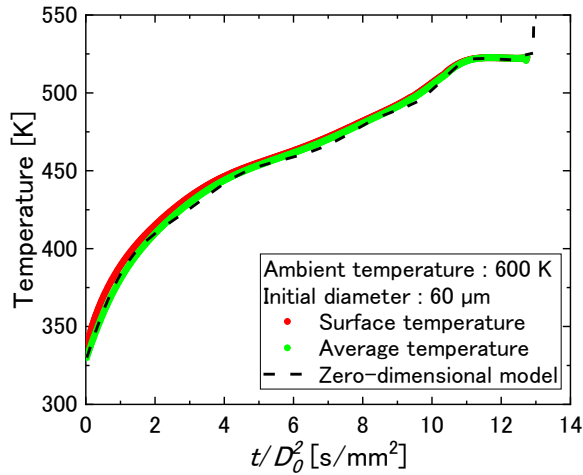
Fig. 3-14 Droplet lifetime differences between present model and zero-dimension model under various ambient temperature

めに、構築したモデルと、液滴内部の温度および濃度分布の両方が一様であると仮定したモデルとの間で、液滴寿命の差異を調べた。Fig. 3-14 に、単一液滴蒸発実験における雰囲気温度および実際の噴霧燃焼場を想定した雰囲気温度を含む様々な雰囲気温度において、構築したモデルと 0 次元モデルによって予測された液滴寿命の差異を比較した。いずれの初期液滴径においても、雰囲気温度が高くなるとともに 0 次元モデルとの差異は増加し、極大点をとった後に減少傾向に転じていることがわかる。Fig. 3-15 に $D_0 = 0.06 \text{ mm}$ ($60 \mu\text{m}$), $T_{amb} = 600 \text{ K}$ における液滴内部の各化学種の質量分率 (Fig. 3-15(a)) と液滴温度 (Fig. 3-15(b)) の時間履歴に関して、本モデルとゼロ次元モデルの予測結果の比較を示す。Fig. 3-15 より、液滴表面の質量分率の時間履歴と全ての化学種の平均質量分率の時間履歴の差異は極めて小さい。さらに、本モデルと 0 次元モデルを用いて得られた質量分率の時間履歴についても同様に、差異は極めて小さい。さらに、Fig. 3-15(b) より、液滴表面温度と液滴平均温度の差異も極めて小さいことがわかる。また、本モデルと 0 次元モデルの液滴温度の時間履歴の差異も極めて小さい。したがって、液滴内部の温度および濃度分布を考慮することによる液滴寿命への影響は、雰囲気温度が低いとき小さくなることがわかる。

一方、 $D_0 = 0.06 \text{ mm}$ ($60 \mu\text{m}$), $T_{amb} = 1600 \text{ K}$ のときの液滴内部の質量分率 (Fig. 3-16



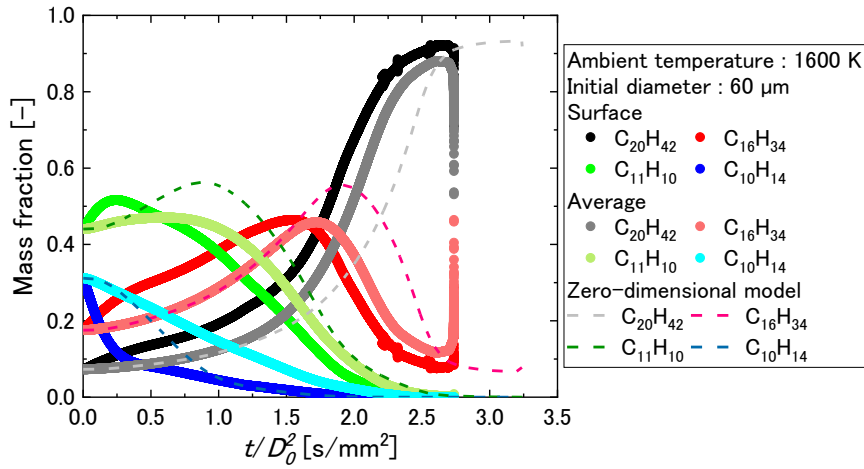
(a) History of liquid mass fraction



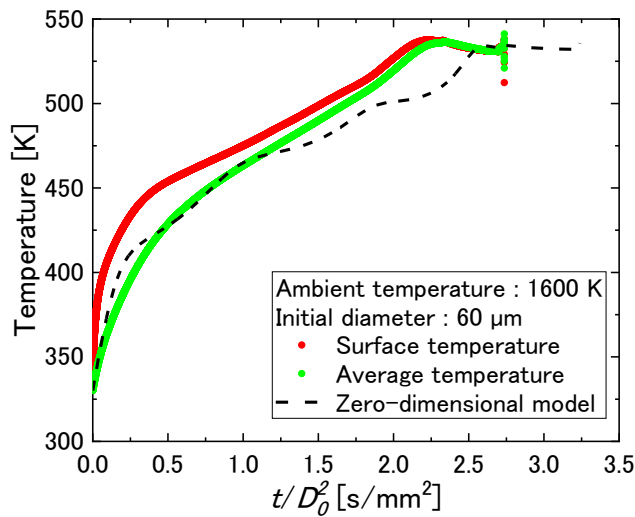
(b) History of droplet temperature

Fig. 3-15 Comparison of the predicted results between the present model and the zero-dimensional model for (a) mass fraction and (b) temperature inside droplet at $T_{amb}=600$ K in $D_0=60$ μm .

(a) と温度 (Fig. 3-16(b)) の履歴について、本モデルと 0 次元モデルの予測結果を Fig. 3-16 に比較した。Fig. 3-16(a) より、 $T_{amb} = 1600$ K における液滴表面の質量分率と液滴平均質量分率の時刻歴の差異は、Fig. 3-15(a) に示した $T_{amb} = 600$ K における時間歴の差異よりも大きくなっていることがわかる。さらに、 $T_{amb} = 1600$ K における構築したモデルと 0 次元モデルの質量分率の時間履歴の差異も、 $T_{amb} = 1600$ K の場合よりも大きくなっていることがわかる。Fig. 3-15(b) より、特に蒸発過程初期から蒸発過过程中期にかけて、液滴表面温度と液滴平均温度の差異が大きくなっていることがわかる。さらに、構築したモ



(a) History of liquid mass fraction



(b) History of droplet temperature

Fig. 3-16 Comparison of the predicted results between the present model and the zero-dimensional model for (a) mass fraction and (b) temperature inside droplet at $T_{amb}=1600$ K in $D_0=60\ \mu\text{m}$.

デルで予測した平均液滴温度と 0 次元モデルで予測した液滴温度との差異が大きいことがわかる。これらより、雰囲気温度が高くなるにつれて液滴寿命の差異が大きくなるといえる。なお、Fig. 3-15(a)および Fig. 3-16(a)より、 $\text{C}_{20}\text{H}_{42}$ の平均質量分率が蒸発過程の後期で急激に減少、もしくは $\text{C}_{16}\text{H}_{34}$ の平均質量分率が急激に増加していることがわかる。これは、 Re_l の減少に伴って式(2-102)で与えられる有効質量拡散係数($D_{eff,i}$)が減少することで、液滴内部の濃度勾配が急峻になるためである。しかし、この傾向は蒸発完了直前でのみ現わ

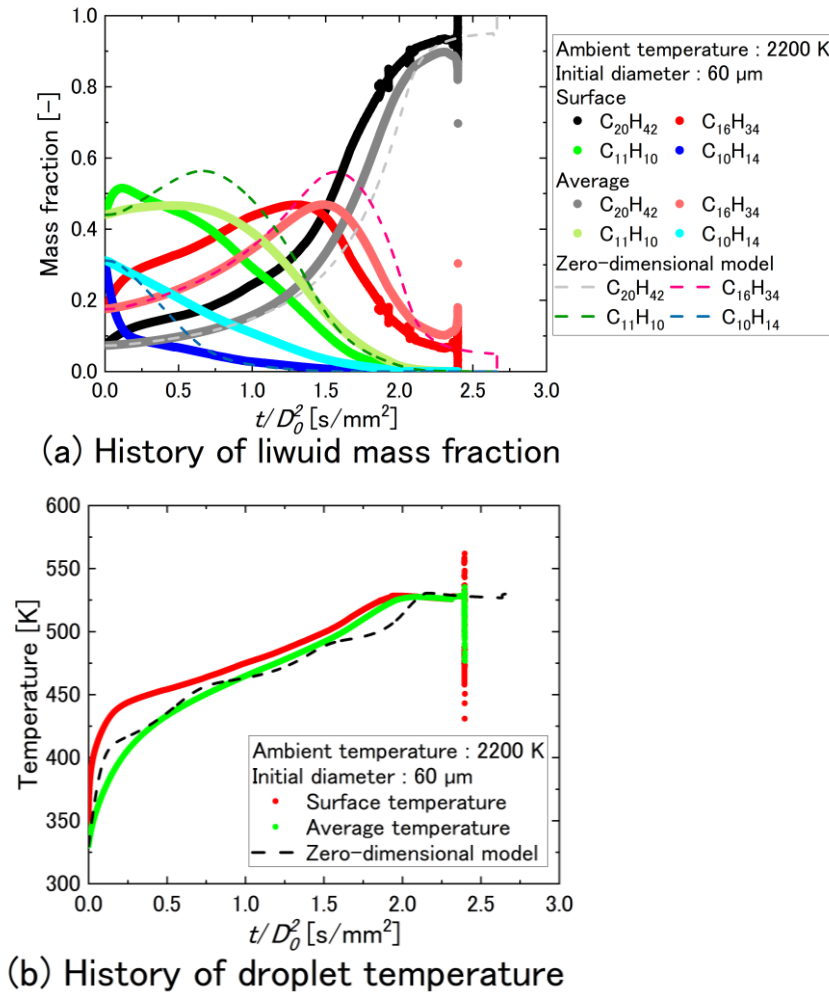


Fig. 3-17 Comparison of the predicted results between the present model and the zero-dimensional model regarding (a) mass fraction and (b) temperature inside droplet at $T_{amb} = 2200$ K in $D_0 = 60$ μm .

れるため、液滴蒸発過程の予測に対する影響は極めて小さい。

$D_0 = 0.06$ mm (60 μm)の場合、 $T_{amb} = 1600$ K から 2200 K にかけて、構築したモデルと 0 次元モデルによる液滴寿命の予測値の差異は減少していることがわかる。Fig. 3-17 に $D_0 = 0.06$ mm (60 μm) および $T_{amb} = 2200$ K における、構築したモデルと 0 次元モデルの予測値の差異を示す。Fig. 3-17 (a)より、構築したモデルと 0 次元モデルの液滴表面の質量分率の差異は、液滴蒸発過程の後半の C₂₀H₄₂ と C₁₆H₃₄ で特に小さくなることがわかる。また、Fig. 3-17 (b)は、構築したモデルによって予測された液滴平均温度と 0 次元モデルによって予測された液滴温度の差異が小さいことを示唆している。

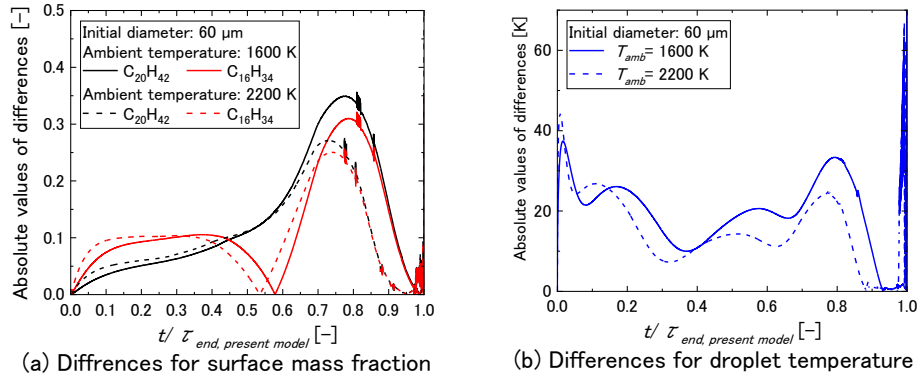


Fig. 3-18 Comparison of the predicted results between the present model and the zero-dimensional model regarding (a) mass fraction and (b) temperature at the droplet surface

$T_{amb} = 1600$ から 2200 K にかけて、構築したモデルと 0 次元モデルの液滴寿命の予測値の差異が減少する原因を説明するために、Fig. 3-18 に構築したモデルと 0 次元モデルの $C_{20}H_{42}$ と $C_{16}H_{34}$ の液滴表面での質量分率の差異の時間履歴を示す。なお、縦軸は、Fig. 3-16(a)に示した液滴表面表面の質量分率と Fig. 3-17(a)に示した液滴表面表面の質量分率との差異の絶対値を示している。横軸は、本研究で構築したモデルで予測された液滴蒸発終了時刻($\tau_{end, present model}$)で正規化した時刻を示している。Fig. 3-18(a)より、 $C_{20}H_{42}$ と $C_{16}H_{34}$ ともに、 $T_{amb} = 1600$ K での差異の絶対値と $T_{amb} = 2200$ K での差異の絶対値との差異は、 $t/\tau_{end, present model} = 0-0.7$ においては小さいことがわかる。しかし、 $T_{amb} = 2200$ K における差異の絶対値は、 $t/\tau_{end, present model} = 0.7-1.0$ において $T_{amb} = 1600$ K における差異の絶対値よりも小さくなることがわかる。さらに、液滴表面温度の場合(Fig. 3-17(b))は、 $t/\tau_{end, present model} = 0.15-1.0$ において、 $T_{amb} = 1600$ K における構築したモデルと 0 次元モデルの表面温度の差異は、 $T_{amb} = 2200$ K における差異よりも大きくなることがわかる。その結果、Fig. 3-14 に示すように、 $T_{amb} = 1600$ から 2200 K にかけて、構築したモデルと 0 次元モデルの液滴寿命の差は小さくなるといえる。

Fig. 3-19 に、濃度分布の境界 x の時間履歴を液滴蒸発終了時刻 (τ_{end}) で正規化した無次元時間の関数として示す。一様分布と勾配をもつ分布の間の境界 x は、液滴表面からの質量拡散が距離 x によって定義される。質量が拡散する距離は、有効質量拡散係数 $D_{eff,i}$ と液滴半径減衰率 $\dot{R}_d$ の割合で決定される。つまり、 $x = R_d - \max \{D_{eff,i} | i \in N_l\} / \dot{R}_d$ で与えられる。ただし、温度分布の境界 x は本研究で示した計算条件では全て液滴中心に位置することがわかった。すなわち、液滴内部において短いタイムステップにおいても熱は液滴表面から十分拡散していることを示唆している。Fig. 3-19 より、全ての雰囲気温度において、

境界 x は時間の経過とともに 1 に近づくことがわかる．すなわち，境界 x が時間とともに液滴表面に移動することを意味する．さらに，雰囲気温度の上昇に伴い境界 x は急速に上昇し、1 に近い値をとる．前段落で述べたように，境界 x が液滴表面に近づくことによって液滴蒸発特性に 2 つの異なる効果を与えることが予想される．一つは，勾配をもつ分布を形成する領域が狭くなるため，液滴内部の分布の勾配が急峻になる． $T_{amb}=600$ から 1600 K にかけて構築したモデルと 0 次元モデルの液滴寿命の差異が大きくなるのはこのためである．また，勾配をもつ分布を形成する領域が狭くなるため，液滴内部の分布が全体的に一様分布に近づく．そのため，構築したモデルと 0 次元モデルの液滴寿命の差異は， $T_{amb}=1600$ から 2200 K にかけて減少する．

一方, Fig. 3-14 より, $D_0 = 0.02$ mm (20 μ m) の場合は $D_0 = 0.06$ mm (60 μ m) の場合に比べて，雰囲気温度が高くなるにつれて，構築したモデルと 0 次元モデルとの液滴寿命の差異が小さくなることがわかる．また, Fig. 3-19 より, $D_0 = 0.02$ mm (20 μ m) の場合の境界 x/R_d の時間履歴は全ての雰囲気温度において, $D_0 = 0.02$ mm (20 μ m) の場合の境界 x/R_d の時間履歴よりも早く 1 に近づくことがわかる．従って，構築したモデルと 0 次元モデルの液滴寿命の差異は $D_0 = 0.06$ mm (60 μ m) の場合よりも早く減少し始めることがいえる．

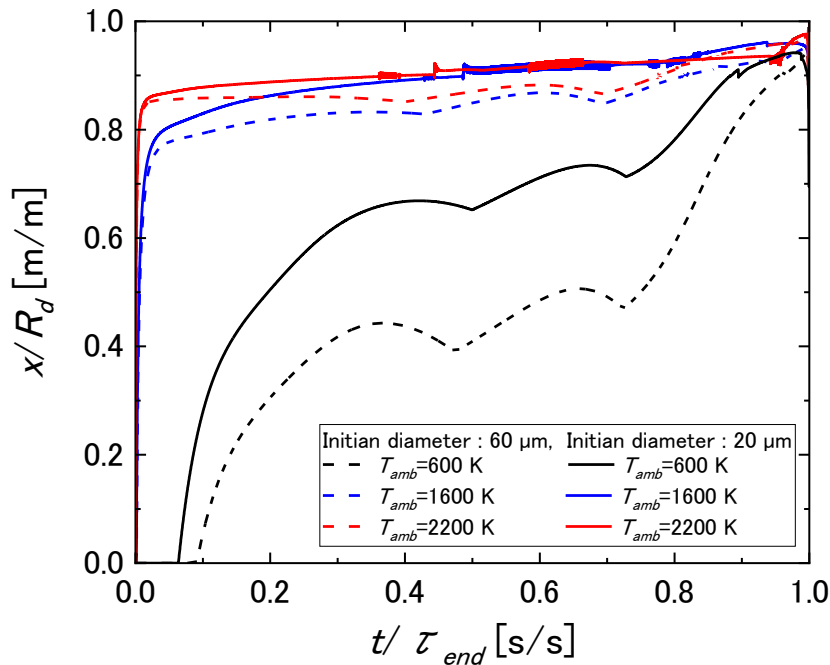


Fig. 3-19 Behavior of the boundary between uniform and gradient distributions under various conditions

4 アルコール混合燃料による精度検証

4.1 実験装置の改良とシャドウグラフ法による液滴蒸発特性の計測

第3章に示したように、過去の研究において予蒸発期間で構成する燃料成分の初期質量分率が変化することを示唆した。また、前章において初期質量分率が変化するとともに予蒸発期間では液滴直径が緩やかに減少することを数値計算で示した。そこで、予蒸発期間において液滴直径が減衰する様子を高温部と同様に高速度カメラで計測できるように実験装置を改良した。さらに、懸垂した燃料液滴が蒸発過程において懸垂線上を移動した場合、バックライト法では測定物(燃料液滴)に拡散光を照射するため光源に対して測定物(燃料液滴)が前後に移動すると像の大きさが変化する。そこで、単一液滴蒸発実験で適用する光学的可視化方法をバックライト法からシャドウグラフ法に変更した。

Fig. 4-1 に改良した単一液滴蒸発実験装置を示す。液滴生成部および高温部に同様の光学系可視化システムとしてシャドウグラフ法を適用した。シャドウグラフ法とは、測定部に垂直に平行光線を照射して測定部を通過する光を測定する方法である。本研究では、光源から放射された光はピンホール（シグマ光機社製、直径 400 μm ）を使用して点光源とし、球面アクロマティックレンズ（シグマ光機社製、焦点距離 60.3 mm）を使用して平行精度

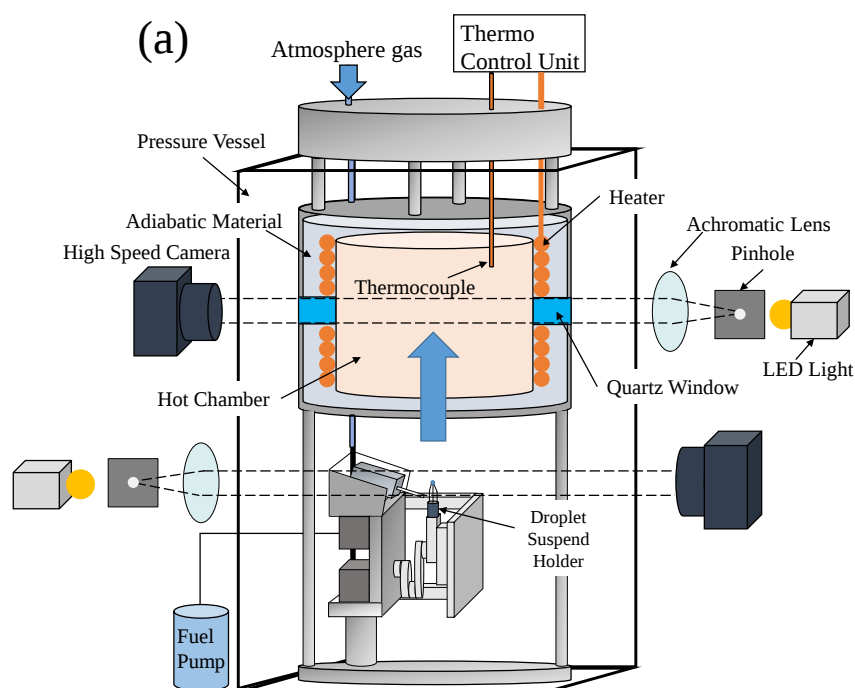


Fig. 4-1 Schematic of experimental set-up applying shadowgraph method

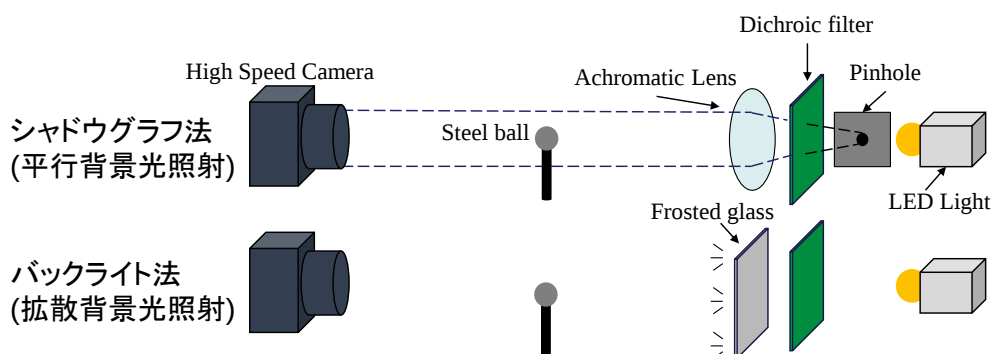


Fig. 4-2 Overview of stainless-steel rigid sphere diameter measurement experiments using shadowgraph and backlight methods

を高めるとともに液滴に平行光を照射した。なお、液滴が生成する過程から蒸発完了までの全ての行程を記録および計測するために、2 台のハイスピードカメラ（ディテクト社製、HAS-EF）を使用して液滴生成部および高温容器での液滴径履歴を同じ光学系構成で計測した。さらに、著者らは単一液滴蒸発実験におけるバックライト法とシャドウグラフ法で実験結果に与える影響も検討した。

バックライト法とシャドウグラフ法で実験結果に与える影響も検討するために、バックライト法とシャドウグラフ法による測定画像の比較および検討をおこなった。Fig. 4-2 に比較実験の概要を示す。比較実験では燃料液滴の代わりにステンレス鋼球を使用した。本研究では、ステンレス鋼球に垂直に平行光を当ててステンレス鋼球を通過した影を撮影するシャドウグラフ法と、ステンレス鋼球に拡散光を当ててステンレス鋼球を通過した影を撮影するバックライト法による計測結果を比較した。さらに、波長の選定が及ぼす計測結果への影響を明らかにするために、可視域ダイクロイックフィルター（シグマ光機社製、透過帯域波長 515～560 nm）の有無を変えた鋼球径計測をシャドウグラフ法とバックライト法において実施した。比較実験の方法として、初期液滴想定直径である 0.5 mm と、蒸発後期想定直径である 0.3 mm のステンレス鋼球の直径計測結果の差異を比較する。

Fig. 4-3 に各計測方法における剛体球直径計測結果の比率を示す。ただし、Fig. 4-3 に示す直径計測結果はスライダークランク機構の位置決め誤差を考慮するために 10 回反復計測した平均値である。なお、比率 0.6 ($=0.3/0.5$) が正確な値を示している。Fig. 4-3 より、液滴生成部および高温部においてバックライト法よりもシャドウグラフ法の方が 0.6 に近い値を示していることがわかる。Fig. 4-4 にバックライト法およびシャドウグラフ法によって

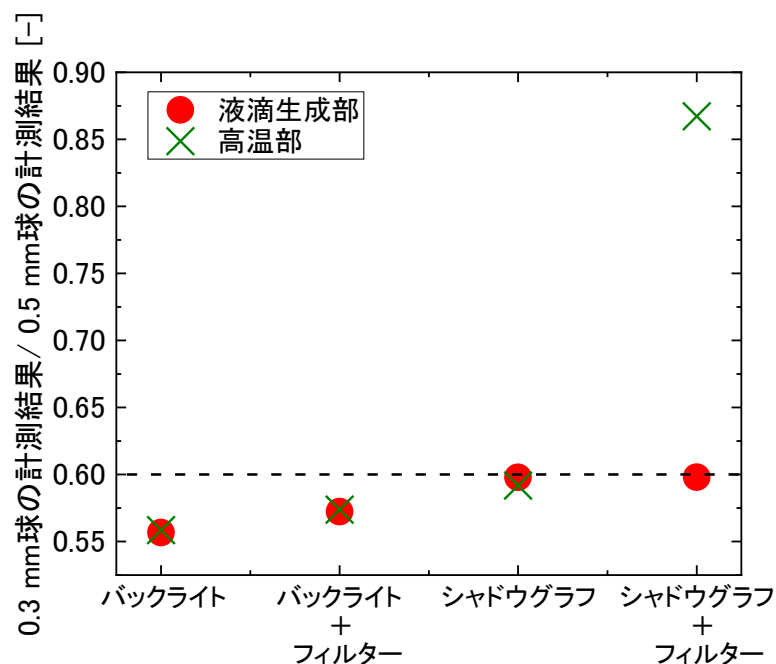


Fig. 4-3 Ratio of stainless-steel rigid ball diameter measurement results for each measurement method



Fig. 4-4 Comparison of rigid sphere images using backlight method (right figure) and shadowgraph method without filter (left figure).

撮影した剛体球画像を示す。Fig. 4-4 より、シャドウグラフ法の方が剛体球の輪郭が明瞭に投影されていることがわかる。これはシャドウグラフ法の方が回折光の発生を抑制できるためであると考えられる。一方、シャドウグラフ法においてフィルターの有無を検討した比較実験では、高温部のフィルター有りの計測結果が極めて誤差の大きい値を示していることがわかる。誤差の大きい値は、剛体球の周りの干渉縞を誤検出していることが原因であることがわかった。従って、シャドウグラフ法では、フィルターによって干渉縞が強調されやすく、エッジ検出の際に大きな計測誤差が生じる可能性があることが分かった。以

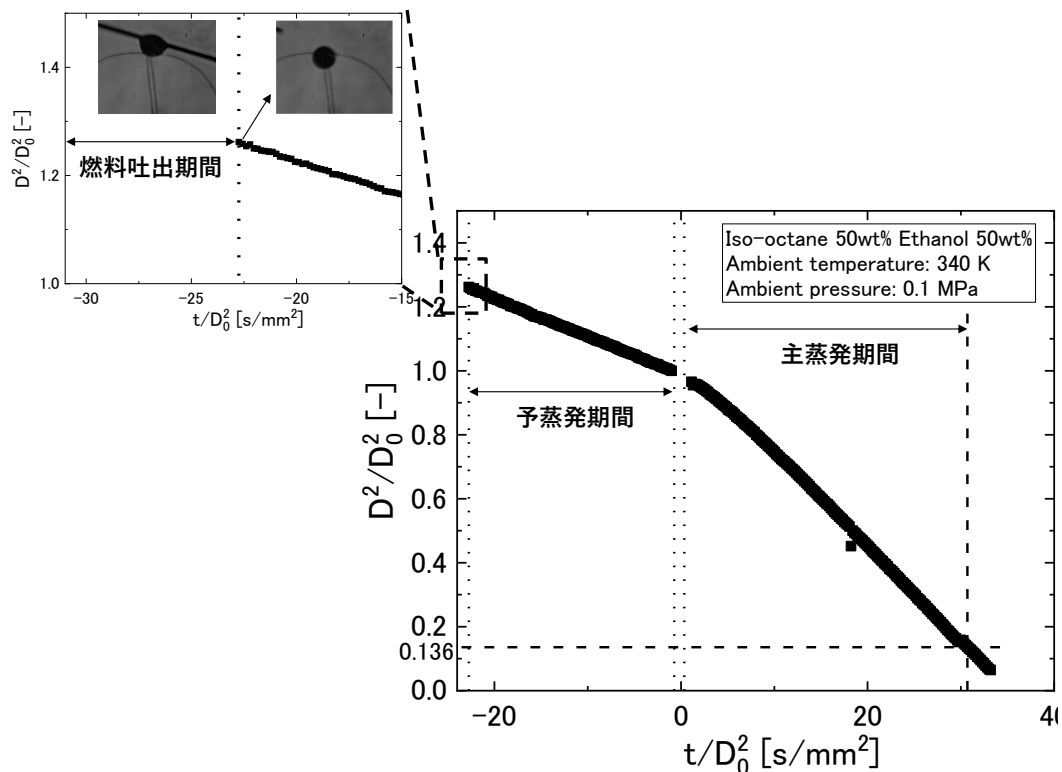


Fig. 4-5 Example of the squared droplet diameter history of a mixed fuel

上より、フィルターなしのシャドウグラフ法が最も正確な液滴計測を行えることを明らかにした。

本章で議論する液滴蒸発特性を再定義する。Fig. 4-5 に計測した液滴直径履歴の一例として吸気行程想定条件における E50 の液滴直径 2 乗履歴を示す。2.2 節に記述したように、本研究では 2 台の高速カメラを使用して液滴が懸垂された直後から液滴直径を計測した。なお、ガラス針上の液滴直径が懸垂された直後の液滴直径と同じなる時刻から液滴が懸垂された時刻までを燃料吐出期間とし、予蒸発によって初期混合割合から変化した混合割合を推定する際に燃料吐出期間を考慮した。また、液滴が懸垂された直後から高温容器に挿入されるまでの、液滴生成部における蒸発期間を予蒸発期間として定義した。本研究では予蒸発期間の最後の液滴直径を本研究における初期液滴直径(D_0)として定義した。予蒸発期間終了時刻から高温部での蒸発期間開始時刻は液滴直径履歴の計測は不可能なため空白となっている。なお、空白期間において、液滴が高温部に入る瞬間の時刻を 0 とした。高温容器内の蒸発期間において、燃料液滴が初期体積の 95% が蒸発した正規化時間 ($D^2/D_0^2 = 0.136$) を液滴寿命と定義した。また、高温容器内での液滴直径計測開始時刻から

液滴寿命までの期間を主蒸発期間と定義した。

4.2 イソオクタン-エタノール混合燃料

Table 4-1 Characteristics of iso-octane and ethanol

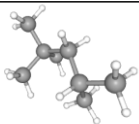
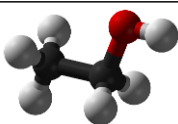
	イソオクタン	エタノール
分子構造		
化学式	C_8H_{18}	C_2H_6O
沸点 [K]	373	351
蒸発潜熱(55°C) [kJ/kg]	293.0	878.3
比熱(49-50°C) [J/kg K]	2165	2698
臨界温度 [K]	544	514
臨界圧力 [MPa]	2.5	6.1

Table 4-2 Mixing ration of each fuel

燃料名	E0	E25	E50	E75	E100
イソオクタン[wt%]	100	75	50	25	0
エタノール[wt%]	0	25	50	75	100

ガソリンの最も代表的な成分としてイソオクタンを選定した。また、燃料種の違いの影響を検討するため、イソオクタンと蒸気圧が十分異なり、ガソリンに含まれる沸点範囲のものとしてノナンを選定した。さらに、将来的にガソリンに混合される可能性が考えられるバイオマス由来燃料として、エタノールを選定した。各燃料成分の物性を Table 4-1 に示す。ノナンはイソオクタンに比べて沸点が高く、エタノールは低い。一方、蒸発潜熱はノナン、エタノール、共にイソオクタンに比べて大きい。エタノールの蒸発潜熱はイソオクタンに比べて 3 倍近い値を示しており、非常に蒸発潜熱が大きいという特徴を有している。さらに、各燃料成分の混合割合が液滴蒸発特性にどのような影響を与えるのかを明らかにするために、イソオクタンをベースとした混合燃料を作成した。Table 4-2 に示すよう

に、ノナン及びエタノールを 25wt%毎に混合比を増加させた混合燃料を 6 種類作成し、液滴蒸発特性を比較した。本研究では、内燃機関における吸気行程噴射を想定した条件(吸気行程想定条件)として雰囲気温度 340 K および雰囲気圧力 0.1 MPa, また液滴蒸発特性の温度依存性を調べるために雰囲気温度 480 K および雰囲気圧力 0.1 MPa の 2 条件を実験条件および計算条件とした。 雰囲気ガスには化学反応を防ぐために不活性ガスである窒素を用いた。

4.3 様々な雰囲気温度における実験値と予測値の比較

本章における数値計算では実験結果を基に予蒸発期間を考慮する。なお、考慮する予蒸発期間は複数の反復実験の中から抽出した 1 条件を模擬した。Fig. 4-6 に液滴直径履歴の予測値と実験値を比較した一例を示す。Fig. 4-6 に示すように 数値計算においては液滴が懸垂された直後(燃料吐出期間)から液滴直径履歴を予測している。さらに、このときの各化学種の質量分率の時間履歴を Fig. 4-7 に示す。Fig. 4-7 より、エタノールの質量分率が時間と共に減少していることがわかる。また、高温部に挿入する時点ではエタノールの質量分率は初期質量分率と比較すると 5%程度減少していることがわかる。

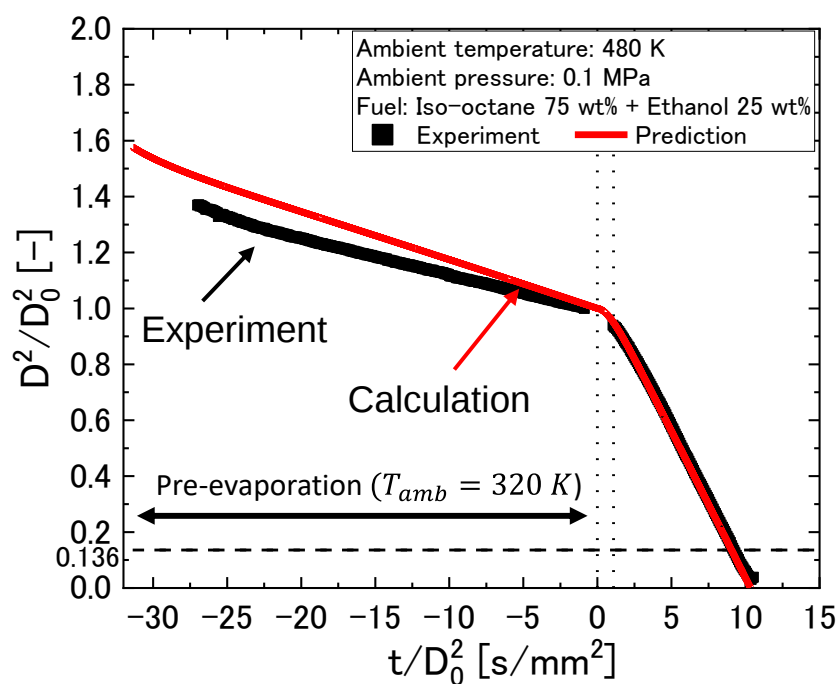


Fig. 4-6 Example of history of droplet diameter for prediction and measurement

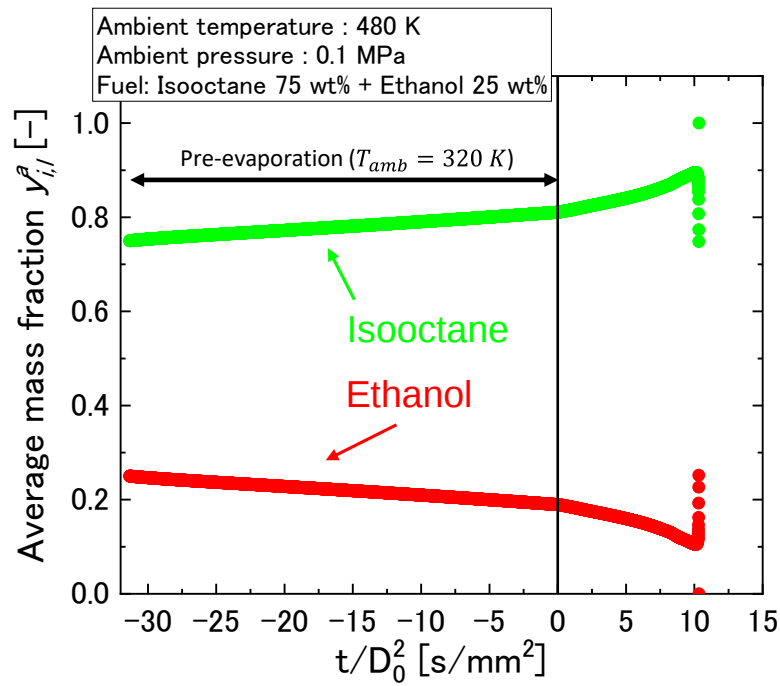


Fig. 4-7 Example of predicted history of average mass fraction inside droplet

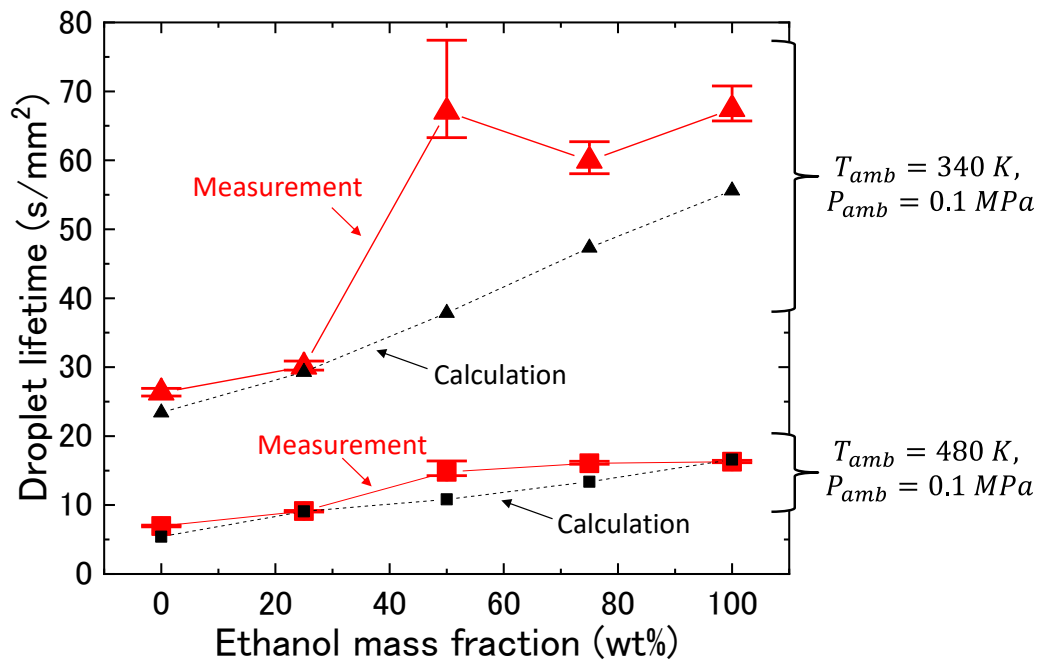


Fig. 4-8 Droplet lifetime given by the experiments and predictions as a function of ethanol mass fraction at $T_{amb} = 340 K$ and $480 K$

Fig. 4-8 に雰囲気温度 340 K および 480 K における液滴寿命の予測値と実験値の比較を示す。横軸はイソオクタンに対するエタノールの混合質量分率である。なお、各条件において複数の反復実験の中から抽出した 1 条件の予蒸発期間を模擬した。Fig. 4-8 より、雰囲気温度 340 K および 480 K において、エタノールの混合質量分率が小さい場合は予測値と実験値がよく一致していることがわかる。一方、雰囲気温度 340 K において、エタノールの混合質量分率が大きい場合に、実験値と予測値の差異が大きいくことがわかる。特に、質量分率が 50wt% 付近において、実験値と予測値の差異が大きいくことがわかる。この実験値と予測値の差異にどのような現象が影響を及ぼしているのかを次節以降に検討した。

4.4 活量係数を考慮したモデルによる予測精度の検討と考察

4.4.1 活量係数を考慮した気液平衡モデル

本節までに示したモデルでは理想溶液の仮定の下で数値解析を実施してきた。つまり、二成分混合溶液の場合は、沸点の高い成分の混合割合が増加するとともに蒸気圧は線形的に減少する。しかし、エタノールのような極性分子を含む混合溶液の蒸気圧の挙動は従来の炭化水素燃料とは異なる挙動を示すことが知られている。そこで、活量係数という概念を用いることが良く知られている。活量係数は理想系と実在系に存在する誤差を修正するために導入された物理量で、気液界面において次の関係式が成り立つ。

$$x_{i,g}^s = \gamma_i \frac{P_{i,v}}{P_{amb}} x_{i,l}^s \quad (4-1)$$

Raoult の法則では活量係数は 1 に等しく、UNIFAC 法では多成分系の活量係数である。Fig. 4-9 に Raoult の法則および UNIFAC 法 (Universal Functional Group Activity Coefficient 式) によって予測した様々な混合割合のエタノール/ガソリン燃料の蒸気圧[35]を示す。Fig. 4-9 より、多成分系の活量係数はエタノール/ガソリン燃料の蒸気圧の予測に対して顕著な影響を与えることがわかる。エタノールの混合割合が低い場合は、水素結合が断裂することで分子間力が低下することが示唆されている[36]。したがって、蒸気圧全体が上昇する。しかし、エタノールの混合割合が高い場合は、水素結合の寄与が大きくなり、蒸気圧全体が低下する。この予測は実験結果から推測される結果とも一致していることがわかっていて (e.g. 文献[37])。

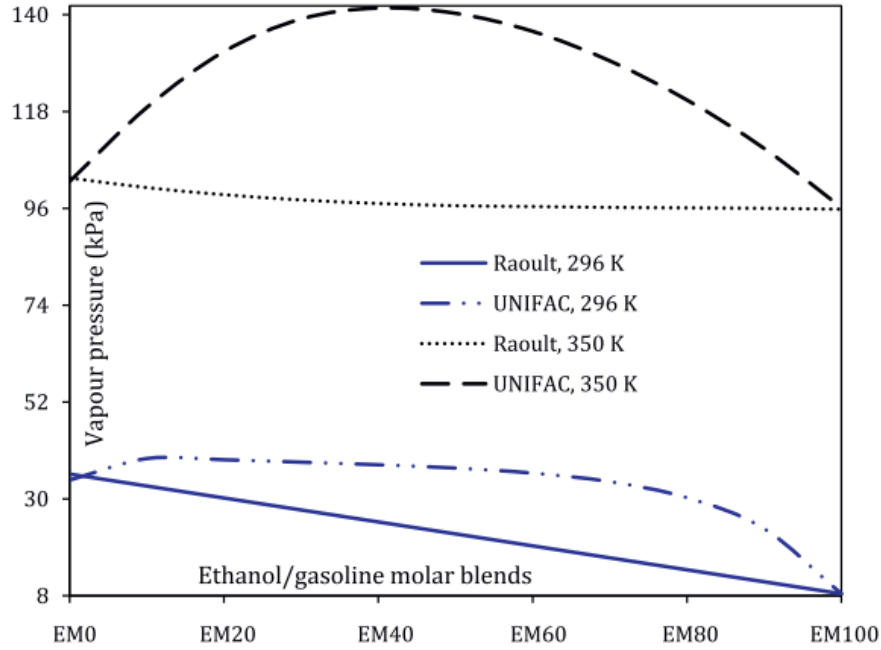


Fig. 4-9 Total vapor pressure of various ethanol/gasoline molar blends predicted by Raoult's law and UNIFAC model at $T_{amb} = 269 \text{ K}$ and 350 K [36]

上記の既存研究結果より，本研究で構築した液滴蒸発モデルにおいて活量係数を考慮することが及ぼす予測値への影響を調査した．本研究では，混合溶液中の活量係数は，“グループ溶液モデル”として知られている ASOG (Analytical Solutions of Groups)法に基づく UNIFAC 法によって与える．なお，グループ溶液モデルとは溶液を溶解する分子を構成するグループ(原子団)に分割し，溶液の物性はそのグループ同士の相互作用の総和で推算できるモデルのことである．ASOG (Analytical Solutions of Groups)法に基づく UNIFAC 法は次の式(文献[27]の式(8-10.59))によって与えられる．

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^c + \ln \gamma_i^R \quad (4-2)$$

ただし， $\ln \gamma_i^c$ は構成成分の大きさや形状の差異による効果， $\ln \gamma_i^R$ は分子間の相互作用による効果を表す． $\ln \gamma_i^c$ は以下のように与えられる．

$$\ln \gamma_i^c = \ln \frac{\Phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\Phi_i} + l_i - \frac{\Phi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \quad (4-3)$$

$$l_i = \frac{z}{2}(r_i - q_i) - (r_i - 1) \quad (z = 10) \quad (4-4)$$

$$\theta_i = \frac{q_i x_i}{\sum_j q_j x_j}, \phi_i = \frac{r_i x_i}{\sum_j r_j x_j}, \tau_{j,i} = \exp\left(-\frac{a_{ji}}{T}\right) \quad (4-5)$$

このとき、 r_i と q_i は次式のように分子を構成する構造グループの総和として計算される。

$$r_i = \sum_k v_k^{(i)} R_k, \quad q_i = \sum_j v_j^{(i)} Q_j \quad (4-6)$$

ただし、 $v_k^{(i)}$ は i 成分における構造タイプ(k)の数であり整数として与えられる。 R_k および Q_k は構造タイプ(k)のパラメータであり、一般にデータベース化されている(文献[27]のTable8-23)。

一方、 $\ln \gamma_i^R$ は以下のように与えられる。

$$\ln \gamma_i^R = \sum_{\substack{k \\ \text{all groups}}} v_k^{(i)} (\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^{(i)}) \quad (4-7)$$

ただし、 Γ_k はグループ活量係数と呼ばれ、次の式より与えられる。

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \left(\sum_m \theta_m \Psi_{mk} \right) - \sum_m \frac{\theta_m \Psi_{km}}{\sum_n \theta_n \Psi_{nm}} \right] \quad (4-8)$$

このとき、 θ_m は分子構造タイプ(m)の面積率であり、次の式で表される。

$$\theta_m = \frac{Q_m X_m}{\sum_n Q_n X_n} \quad (4-9)$$

X_m は分子構造タイプ(m)のモル分率である。また、 Ψ_{mn} は分子構造タイプ間の相互作用も効果を考慮する係数であり、次の式で表される。

$$\Psi_{mn} = \exp\left(-\frac{a_{mn}}{T}\right) \quad (4-10)$$

ただし, a_{mn} は温度の関数であり,実験結果に基づくデータベース(文献[27]の Table8-24)より与えられる. なお, 式(4-4)は $\Gamma_k^{(i)}$ に対しても同様の導出手順によって与えられる. しかし, Γ_k は混合燃料内の各分子構造タイプに対して計算される係数であり, $\Gamma_k^{(i)}$ は*i*成分における混合燃料内の各分子構造タイプに対して計算される係数であることに留意しなければならない.

Fig. 4-10 に式 (4-2) より計算される活量係数を考慮したモデルを用いて予測した液滴寿命と実験値の比較を示す. 雰囲気温度 480 K における予測値と実験値に着目すると, 活量係数を考慮した予測値の方が実験値に近づいていることがわかる. 一方, 雰囲気温度 340 K における予測値と実験値に着目すると, エタノールの混合割合が小さい場合は活量係数を考慮したモデルによって予測された液滴寿命よりも, 活量係数を考慮しないモデル

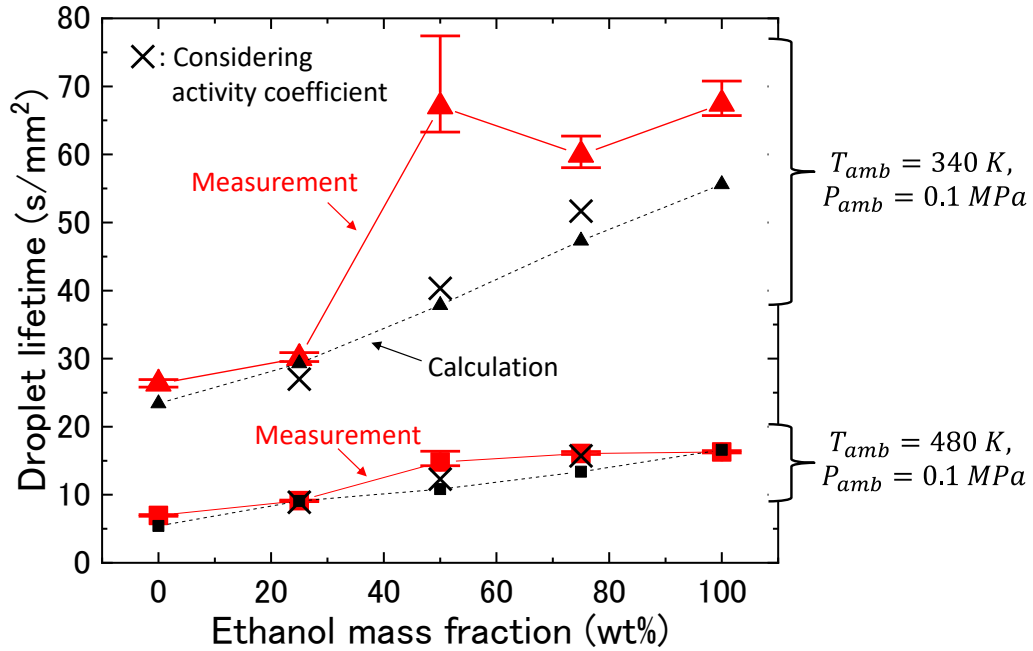


Fig. 4-10-Droplet lifetime given by the experiments and predictions as a function of ethanol mass fraction with considering activity coefficient at $T_{amb} = 340 \text{ K}$ and 480 K

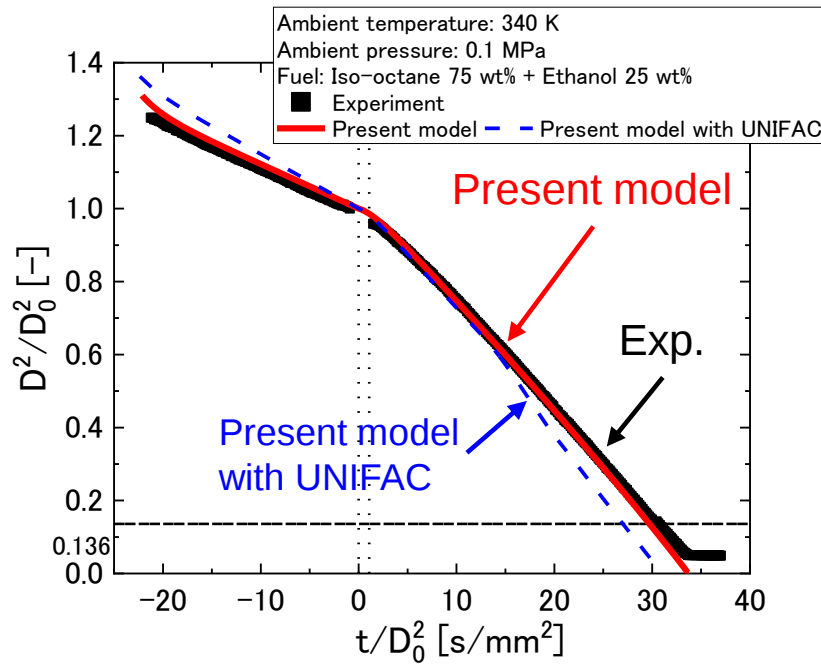


Fig. 4-11 Comparison of history of droplet diameter given by present model and that considering activity coefficient with experiments in E25 at $T_{amb} = 340\text{ K}$

によって予測された液滴寿命の方が長くなっていることがわかる。しかし、エタノール 50wt%以上混合割合の混合燃料の場合は活量係数を考慮したモデルによって予測された液滴寿命よりも、活量係数を考慮しないモデルによって予測された液滴寿命の方が短くなっていることがわかる。Fig. 4-11 に雰囲気温度 340 K における E25 に関する液滴直径履歴の予測値と実験値の比較を示す。液滴直径履歴の予測値は、UNIFAC 法による活量係数を考慮したモデルによる結果と考慮していないモデルによる結果を示している。Fig. 4-11 より、活量係数を考慮していないモデルによる予測値の方が実験値とよく一致していることがわかる。一方、活量係数を考慮したモデルによる予測の方が主蒸発期間における蒸発速度が実験結果より速くなっていることがわかる。また、予蒸発期間においても活量係数を考慮したモデルによる予測の方が主蒸発期間における蒸発速度が実験結果より速くなっていることがわかる。Fig. 4-12 に雰囲気温度 340 K における E25 に関するエタノールおよびイソオクタン の質量分率履歴の活量係数を考慮していないモデルによる予測値と活量係数を考慮したモデルによる比較を示す。予蒸発期間において、活量係数を考慮していないモデルより活量係数を考慮したモデルの方がわずかに速いエタノールの蒸発速度を示して

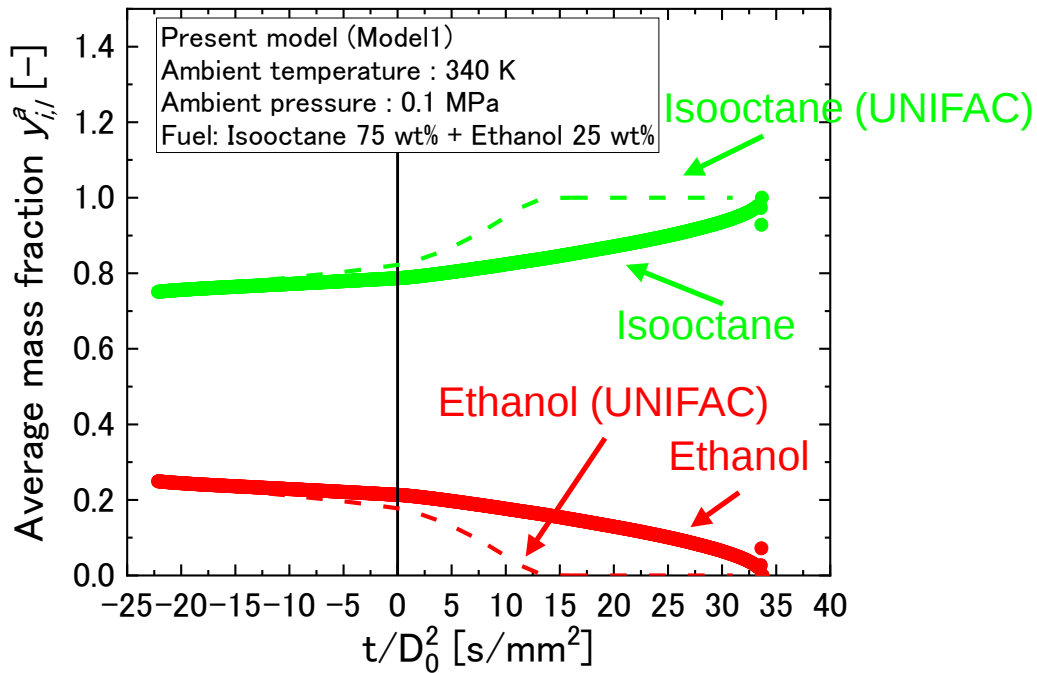


Fig. 4-12 Comparison of history of average mass fraction given by present model and that considering activity coefficient with experiments in E25 at $T_{amb} = 340\text{ K}$

いることがわかる。さらに、主蒸発期間においては、活量係数を考慮していないモデルより活量係数を考慮したモデルの方が顕著に速いエタノールの蒸発速度を示していることがわかる。活量係数を考慮したモデルでは、エタノールの質量分率は主蒸発期間中期に全ての質量が蒸発し、主蒸発期間後期はイソオクタンだけの単一成分が蒸発している。一方、活量係数を考慮しないモデルでは、蒸発完了するまで二成分燃料が同時に蒸発していることがわかる。

次に、Fig. 4-13 に雰囲気温度 340 K における E75 に関する液滴直径履歴の予測値と実験値の比較を示す。液滴直径履歴の予測値は、UNIFAC 法による活量係数を考慮したモデルによる結果と考慮していないモデルによる結果を示している。Fig. 4-13 より、予蒸発期間において、活量係数を考慮していないモデルと活量係数を考慮したモデルによる予測値が実験値とよく一致していることがわかる。しかし、主蒸発期間において、蒸発過程中期から後期にかけて予測値と実験値の差異が時間と共に大きくなっていることがわかる。特に、蒸発過程終盤に活量係数を考慮していないモデルより活量係数を考慮したモデルの蒸発速度の方が遅くなっている。活量係数を考慮していないモデルと活量係数を考慮したモデルによる予測値を比較すると、活量係数を考慮していないモデルによる液滴寿命の予測

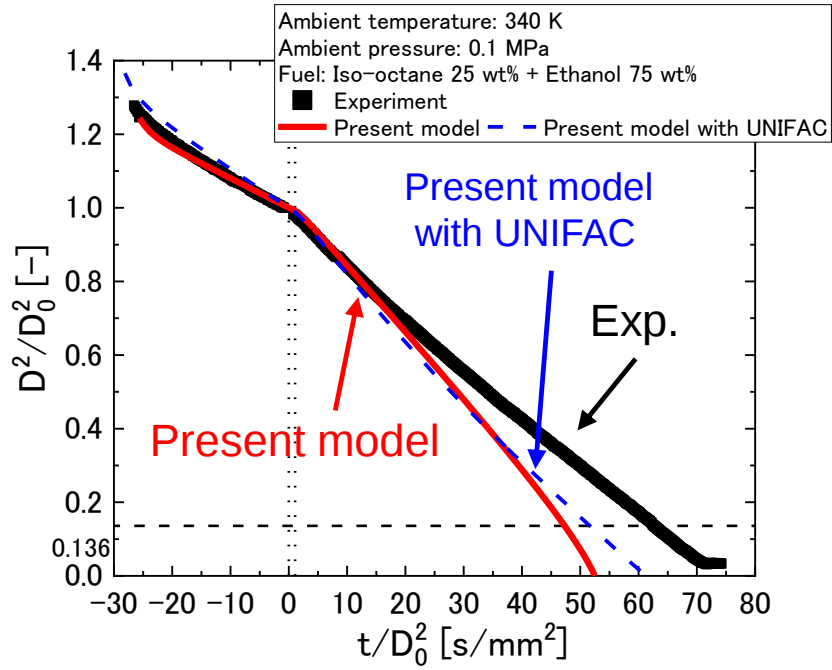


Fig. 4-13 Comparison of history of droplet diameter given by present model and that considering activity coefficient with experiments in E75 at $T_{amb} = 340\text{ K}$

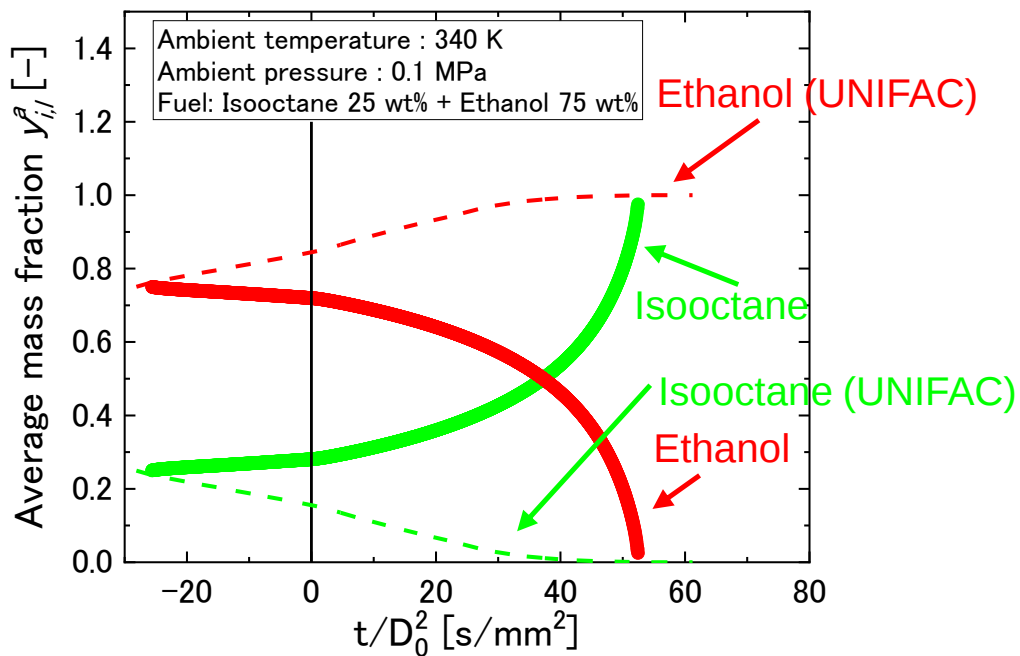


Fig. 4-14 Comparison of history of average mass fraction given by present model and that considering activity coefficient with experiments in E75 at $T_{amb} = 340\text{ K}$

値の方が活量係数を考慮しているモデルの液滴寿命の予測値よりも速い値を示していることがわかる。これは、Fig. 4-12 に示した雰囲気温度 340 K における E25 に関する予測結果とは逆の傾向である。Fig. 4-14 にエタノールおよびイソオクタンの質量分率履歴の予測値と実験値の比較を示す。予蒸発期間において、活量係数を考慮していないモデルではイソオクタンよりもエタノールの蒸発速度が速くなっていることがわかる。しかし、活量係数を考慮したモデルではイソオクタンよりもエタノールの蒸発速度が遅くなっていることがわかる。また、主蒸発期間において、活量係数を考慮したモデルでは、時間の経過とともにイソオクタンの質量が減少してエタノールの質量分率が支配的になっていることがわかる。一方、活量係数を考慮しないモデルでは、時間の経過とともにエタノールの質量が減少して蒸発過程中期において各成分の質量分率の大小関係が逆転していることがわかる。蒸発過程後期には、イソオクタンの質量分率がエタノールの質量分率よりも高くなることがわかる。

活量係数を構築した多成分燃料用液滴蒸発モデルに考慮することで、エタノールの混合分率が高い場合に液滴寿命が活量係数を考慮しない場合に比べて実験値に近づいた。しかし、雰囲気温度 340 K のエタノールの混合割合が高い場合において、実験値と予測値に未だ大きな差異が見られる。実験値と予測値の見られる大きな差異に関して実験結果から考察した。

4.4.2 実験的考察

Fig. 4-10 に関して、実験値の傾向に着目する。Fig. 4-10 より、雰囲気温度 340 K において、エタノールの混合分率が増加するとともに液滴寿命が非線形的に増加していることがわかる。特に、エタノールの混合分率が 50wt% 程度で液滴寿命が急激に増加していることがわかる。さらに、エタノールの混合分率 50wt% の液滴寿命はエタノール 100wt% の液滴寿命と同程度となっていることがわかる。エタノール混合燃料の液滴燃焼に関する過去の研究において、同様の現象が報告されている。

Walyo らはエタノール-イソオクタン混合燃料の単一液滴燃焼実験を行った [38]。エタノール-イソオクタン混合燃料の単一液滴燃焼実験において、エタノールの混合分率の増加とともに燃焼速度が指数関数的に遅くなることが明らかにされている。エタノール混合分率の増加に対する燃焼速度が指数関数的な現象は、分子クラスターの形成が原因であると考察している。エタノールとイソオクタンの混合燃料では、エタノールのヒドロキシ基

が持つ極性によってイソオクタン分子が分極し、Fig. 4-15 に示すような分子クラスターが形成されることが報告されている。エタノール混合分率 50wt%の混合燃料である E50 はイソオクタンとエタノールのモル比が 1:2 に近く、分子クラスターが形成されやすい混合分率であることを示唆している。一般に、液滴蒸発速度と液滴燃焼速度に概ね相関性がある。従って、液滴蒸発過程において E50 の液滴寿命が E100 の液滴寿命とほぼ同じになった理由として、液滴燃焼と同様に分子クラスターの形成が原因であると考えられる。

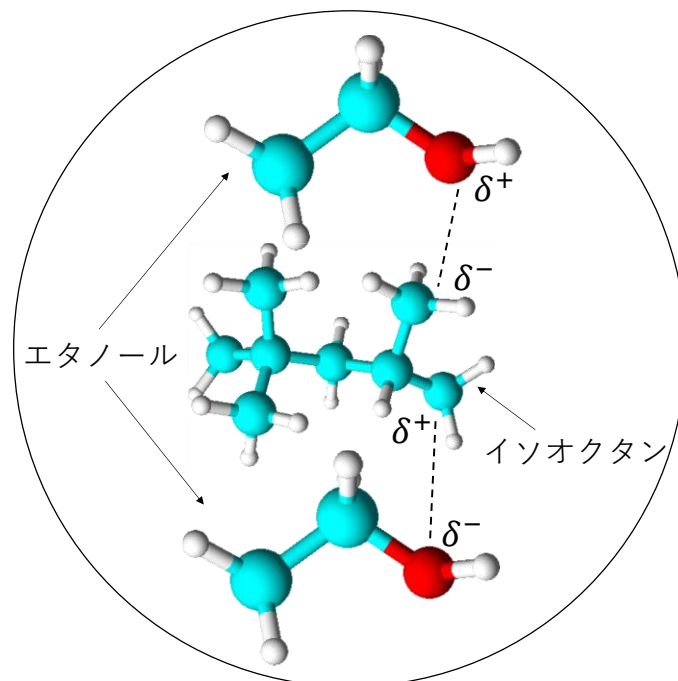


Fig. 4-15 Molecular cluster (Ethanol : iso-octane = 2 mol: 1 mol)

5 結論

本研究では液滴内部の濃度および温度分布を考慮した多成分燃料用液滴蒸発モデルを構築した。さらに、単一液滴蒸発実験を実施することで、様々な雰囲気温度における予測精度を明らかにした。以下に本研究における代表的な結果を示す。

- (1) 液滴内部の質量およびエンタルピーの保存を満たすように熱拡散および物質拡散方程式の解析解に対して拘束条件を与えて内部分布式を導出した。構築した分布式は準定常状態の限界を示す境界を考慮している。さらに、気相においては、エネルギー輸送と各化学種の物質輸送のカップリングを考慮することなく、エネルギー輸送と各化学種の物質輸送は各々独立に解いている。
- (2) 分解軽油サロゲート燃料を対象とした精度検証を行った。実験過程で起こり得る予蒸発過程を考慮することで、構築したモデルによる予測値と実験値は様々な雰囲気温度においてよく一致することがわかった。さらに、実際の噴霧燃焼場を想定した計算条件において、構築したモデルによる予測値と内部分布を一様分布と仮定したモデルによる予測値の差異を比較した。本モデルで考慮した境界が液滴表面に近づくことによって液滴蒸発特性に 2 つの異なる効果を与えることを明らかにした。まずは、勾配をもつ分布を形成する領域が狭くなるため、液滴内部の分布の勾配が急峻になるということである。一方で、勾配をもつ分布を形成する領域が狭くなるため、液滴内部の分布が全体的に一様分布に近づくということである。
- (3) イソオクタンに様々な割合でエタノールを混合した燃料を対象とした精度検証を行った。雰囲気温度 340 K と 480 K において、様々な混合割合で実験値と予測値を比較した。いずれの雰囲気温度においてもエタノールの混合割合が小さい場合は、予測値と実験値はよく一致した。一方で、雰囲気温度 340 K において、エタノールの混合割合が大きい場合は実験値と予測値の差異は大きくなった。そこで、実在溶液の蒸気圧の効果を考慮するために活量係数を気液界面において考慮した。エタノールの混合割合が大きい場合、活量係数を考慮したモデルによる予測値は活量係数を考慮しない予測値よりも液滴寿命が長くなった。しかし、エタノールの混合割合が大きい場合、活量係数を考慮しても予測値と実験値には大きな差異があることがわかった。これは、分子クラスターによる液滴蒸発特性への影響が本モデルでは考慮できていないことが原因であると考えられる。

APPENDIX A 異なる質量蒸発速度モデルの予測精度の比較

本章では質量蒸発速度($\dot{m}_l$)のモデルの選定が液滴蒸発特性の予測に与える影響を示す。本研究で構築した多成分燃料用液滴蒸発モデルで考慮している質量蒸発速度の導出は2.4.1に示した。本研究で取り扱った質量蒸発速度は多成分系の輸送方程式を解析的に解くことで導出したモデルである。一方、従来の液滴蒸発モデルでは1次元球状座標系のShvab-Zeldovich エネルギー方程式(文献[30]の式(7.65))に基づく質量蒸発速度モデルが多用されている。これは液滴表面での濃度勾配のみで拡散するモデルである。単一液滴蒸発モデルにおける簡易的な質量蒸発速度モデルとして良く知られており、ルイス数を用いて熱輸送と物質輸送のカップリングを考慮している。ルイス数 Le を1と仮定したモデルは古典的な質量蒸発速度モデルとして良く知られている(文献[30]の式(10.13))。また、Sazhin らの多成分燃料用液滴蒸発モデルでは拡散による蒸発だけでなく、液滴表面からの燃料蒸気対流(Stefan 流)の影響を考慮した質量蒸発速度モデルを適用している[39]。Sazhin らのモデルで適用されている質量蒸発速度モデルは、2.4.1に示したモデルとは異なり、輸送方程式を解析的に解いたモデルではない。そこで、本章ではSazhin らの多成分燃料用液滴蒸発モデルで提案された質量蒸発モデルと、2.4.1に示した輸送方程式を解いた質量蒸発速度モデルによる予測結果を比較した。

Sazhin らの多成分燃料用液滴蒸発モデルで提案された Shvab-Zeldovich エネルギー方程式に基づく質量蒸発モデルは次の式で表される[39,40]。

$$\dot{m}_l = -2\pi R_d D_g (\rho_g + \rho_{vapor}) B_M Sh_{iso} \quad (A-1)$$

ただし、 $B_M = \frac{\sum_{i=1}^{N_l} y_{i,g}^s - y_{amb}}{1 - \sum_{i=1}^{N_l} y_{i,g}^s}$ は Spalding 数(物質輸送係数)である。また、 Sh_{iso} は単一液滴の

シャーウッド数であり次の式で表される。

$$Sh_{iso} = \frac{\ln(1+B_M)}{B_M} Sh^*, \quad Sh^* = 2 \left(1 + \frac{(1+Re_d Sc_d)^{\frac{1}{3}} \max(1, Re_d^{0.077}) - 1}{2F(B_M)} \right)$$

このとき、 $F(B_M) = \frac{(1+B_M)^{0.7} \ln(1+B_M)}{B_M}$ である。

一方、物質輸送係数 B_M と熱輸送係数 B_T のカップリングは次の式で表される。

$$B_T = (1 + B_M)^\phi - 1 \quad (\text{A-2})$$

ただし, $\phi = \left(\frac{c_{pv}}{c_{pa}} \right) \left(\frac{Sh^*}{Nu^*} \right) \frac{1}{Le}$ である. このとき, ルイス数 Le は $Le = \frac{k_g}{c_{pa} \rho_{total} D_v}$, ヌッセルト数

$$Nu^* \text{ は } Nu^* = 2 \left(1 + \frac{(1 + Re_d Pr_d)^{\frac{1}{3}} \max(1, Re_d^{0.077}) - 1}{2F(B_T)} \right), \text{ 燃料蒸気の平均比熱 } c_{pv} \text{ は } c_{pv} = \sum_{i=1}^{N_l} c_{p,i},$$

気相の平均比熱 c_{pa} は $c_{pa} = \sum_{i=N_l}^N c_{p,i}$ である. 式(A-1)で与えられる質量蒸発速度($\dot{m}_l$)は液滴全体の質量蒸発速度であり, 各化学種の質量蒸発速度($\dot{m}_{i,l}$)は燃料蒸気の質量分率で正

規化した気相の質量分率($\varepsilon_i = \frac{y_{i,g}^s}{\sum_{i=1}^{N_l} y_{i,g}^s}$)と液滴全体の質量蒸発速度の積によって与えられる.

すなわち, 次の式で表される.

$$\dot{m}_{i,l} = \varepsilon_i \dot{m}_l \quad (\text{A-3})$$

また, 式(A-1)で与えられる質量蒸発速度($\dot{m}_l$)は B_T に関する収束計算によって導出した. 収束計算における収束誤差範囲は $|B_T - B_T^{old}| < 10^{-6}$ とした.

本章では分解軽油サロゲート燃料を対象とした液滴蒸発履歴に関して, 第2章で示したモデルと式(1-126)を式(A-1)に置き換えたモデル(以下, Spalding モデル)による予測値と実験値を比較する. なお, 本章での比較において, 質量蒸発モデル以外のモデル, すなわち液滴内部の温度および濃度分の取り扱い等は同じとしている. また, いずれの計算結果に対しても 3.5 に示した予蒸発期間を考慮している. 図 A-1 に雰囲気温度 473 K における液滴蒸発履歴の予測値と実験値を示す. 図 A-1 より, 本研究で構築したモデルによる液滴蒸発履歴の予測値と実験値はよく一致していることがわかる. Spalding モデルによる予測値は本研究で構築したモデルによる予測値および実験値よりもやや遅い蒸発速度を示していることがわかる. 一方, 図 A-2 に雰囲気温度 873 K における液滴蒸発履歴の予測値と実験値を示す. 図 A-2 より, 本研究で構築したモデルによる液滴蒸発履歴の予測値と実験値はよく一致していることがわかる. しかし, Spalding モデルと実験値による液滴蒸発履歴を比較すると大きな差異があることがわかる. Spalding モデルによって予測された蒸発速度は実験値と比較すると極めて遅い蒸発速度を示している.

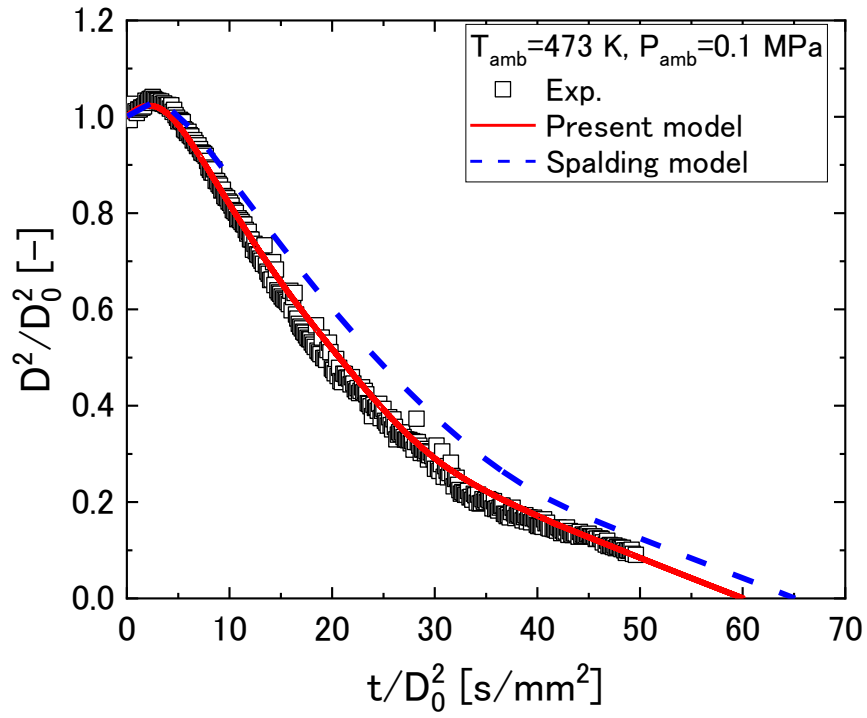


Fig. A-1 Comparison of squared droplet diameter between Spalding model and Present model $T_{amb} = 473$ K

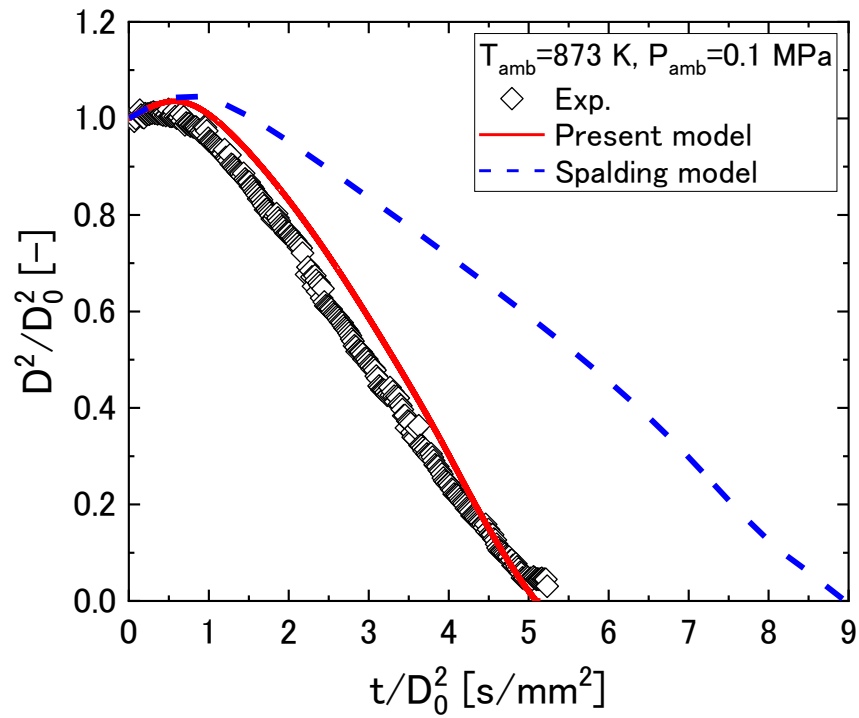


Fig. A-2 Comparison of squared droplet diameter between Spalding model and Present model $T_{amb} = 873$ K

APPENDIX B 液相および気相の取り扱いによる予測値の差異

Table B-1 Characteristics of four types of models

	Internal distributions for mass and temperature	Mass evaporation model
Model 1 (present model)	Gradient	Multi-component system
Model 2	Gradient	Spalding model
Model 3	Uniform	Multi-component system
Model 4	Uniform	Spalding model

本章では第 4 章に示したイソオクタン-エタノール混合燃料を対象として、様々なモデルによる液滴蒸発特性の予測値の差異を調査する。本章では液相および気相の取り扱いが異なる 4 パターンのモデルを比較した。表 B-1 に本章で比較するモデルの特徴を示す。表 B-1 において、2.2 節に示した多成分燃料用液滴蒸発モデルを Model 1 とする。Model 2 では液相の取り扱いは 2.2 節に示したモデルで、質量蒸発速度は APPENDIX A に示した Spalding モデルである。Model 3 では液相の取り扱いは 3.6 節に示した一様分布モデルで、質量蒸発速度は式(1-126)を適用したモデルである。Model 4 では液相の取り扱いは 3.6 節に示した一様分布モデルで、質量蒸発速度は APPENDIX A に示した Spalding モデルを適用した。

Fig.B-2 および Fig.B-3 に様々なモデルによる液滴寿命の予測値と実験値の比較本を示す。ただし、Fig.B-2 および Fig.B-3 の横軸のエタノール混合割合は高温容器に液滴が入る直前、すなわち予蒸発期間終了後の混合率を示している。実験結果において、液滴生成部における予蒸発によって変化した混合割合を推定するために、次の計算手順により混合割合の推定を行った。

1. 単一燃料の蒸発速度係数と体積分率の積を混合燃料の蒸発速度((B-1)式)とした

$$K_n = X_{ethanol,n}K_{ethanol} + X_{iso-octane,n}K_{iso-octane} \quad (B-1)$$

なお、 $K_{ethanol}$ および $K_{iso-octane}$ は実験結果によって与えられる。

2. D^2 則に基づいて次ステップの液滴直径((B-2)式)を予測する。

$$D_{n+1} = \sqrt{D_n^2 - K_n \Delta t} \quad (B-2)$$

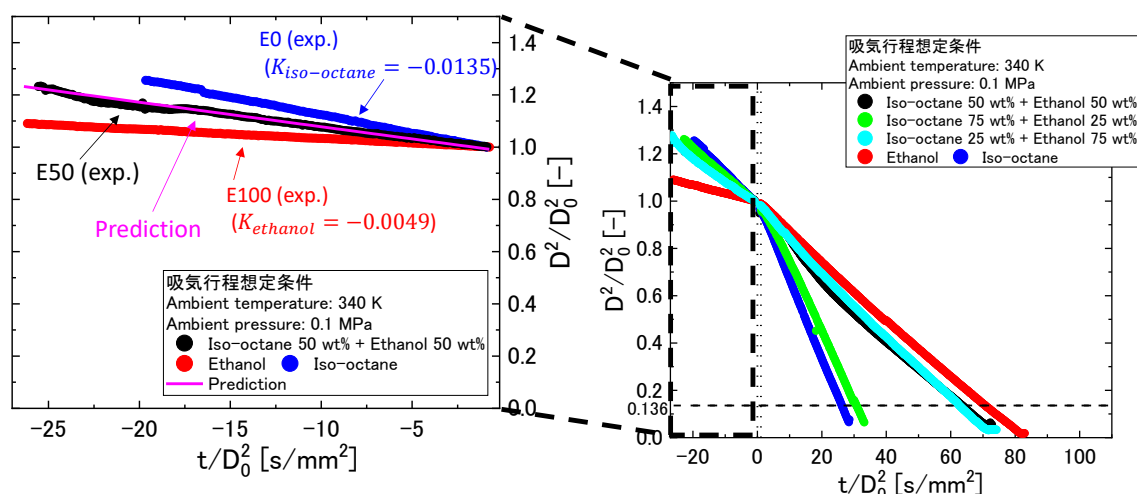


Fig.B-1 Predicted and measured results for history of normalized droplet diameter
at $T_{amb} = 340 \text{ K}$, $P_{amb} = 0.1 \text{ MPa}$

3. 各燃料種の体積分率((B-3)式)を導出する

$$\begin{cases} X_{ethanol,n} = \frac{V_{ethanol,n}}{V_{total,n}} \\ X_{iso-octane,n} = \frac{V_{iso-octane,n}}{V_{total,n}} \end{cases} \quad (V_{total,n} = V_{ethanol,n} + V_{iso-octane,n}) \quad (B-3)$$

ただし, K は蒸発速度係数 (m^2/s), X は体積分率 [-], D は液滴直径 [mm], V は液滴体積 [m^3], n はステップ数 [-] を表す. Fig.B-1 に示した燃料吐出期間と予蒸発期間を含めた時間だけ 1 ~ 3 を繰り返すことで, 予蒸発期間終了時(燃料液滴が高温容器に挿入される直前)の混合割合を推定した. なお, 体積の推算に用いた密度の温度は 30°C とした. Fig.B-1 に計測した E50 の予蒸発期間における液滴直径履歴と, その予測値を比較した一例を示す. Fig.B-1 の場合では, 予測値と実験値はよく一致していることがわかる. ただし, 上記の方法は実験結果から液滴直径履歴および混合割合を推定するための簡易的な方法であるため, 予測値と実験値があまり一致しない条件もあることを留意されたい.

Fig.B-2 に雰囲気温度 340 K における様々なモデルによる液滴寿命の予測値と実験値を比較した. Fig.B-2 より, Model 2 と Model 4 による予測値の差異は極めて小さいことがわかる. また, Model 1 と Model 3 による予測値の差異も小さいことがわかる. これらのことから, 雰囲気温度 340 K においては内部分布の取り扱いの違いが液滴蒸発寿命の予測値へ与える影響は小さいことがわかる. また, Model 1 と Model 2 による液滴寿命の予測値の差異はエタノール単体(E100)よりもイソオクタン単体(E0)の方が小さいことがわかる. 従って, エタノール単体(E100)における質量蒸発速度の取り扱いによる予測値の差異が大き

い

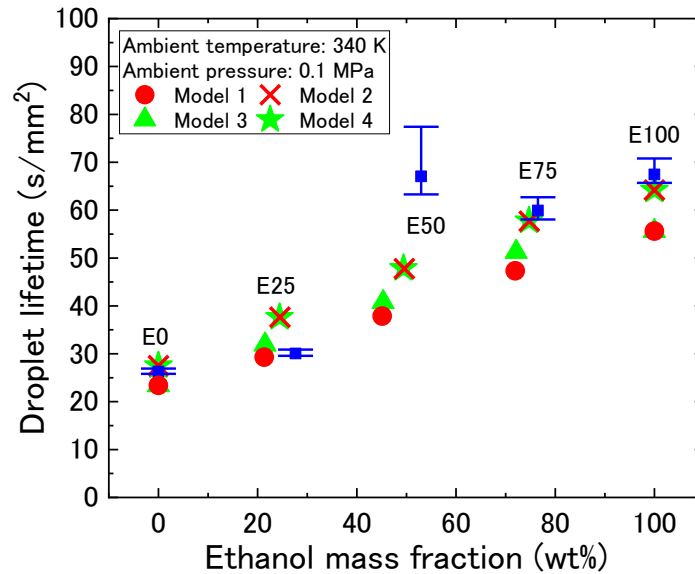


Fig. B-2 Droplet lifetime given by experiments and predictions as a function of ethanol fraction at $T_{amb} = 340\text{ K}$, $P_{amb} = 0.1\text{ MPa}$

ことによって混合燃料における質量蒸発速度の取り扱いによる予測値の差異が大きくなっていることがわかる。さらに、E75 および E100 に関して、質量蒸発速度として Spalding モデルを適用したモデルよりも 2.2 節に示した質量蒸発速度を適用したモデルの方が液滴寿命の予測値と実験値の差異が小さいことがわかる。一方、E25 および E0 に関して、質量蒸発速度として 2.2 節に示した質量蒸発速度を適用したモデルよりも Spalding モデルを適用したモデルの方が液滴寿命の予測値と実験値の差異が小さいことがわかる。

Fig.B-3 に雰囲気温度 480 K における様々なモデルによる液滴寿命の予測値と実験値を比較した。Fig.B-3 より、Model 2 と Model 4 による予測値の差異は極めて小さいことがわかる。さらに、雰囲気温度 340K(Fig.B-1)の場合と比較すると雰囲気温度 480 K の場合の方が Model 1 と Model 3 による予測値の差異も小さくなっていることがわかる。これらのことから、雰囲気温度 480 K においては内部分布の取り扱いの違いが液滴蒸発寿命の予測値へ与える影響は雰囲気温度 340 K の場合よりも小さいことがわかる。また、Model 1 と Model 2 による液滴寿命の予測値の差異はイソオクタン単体(E0)よりもエタノール単体(E100)の方が小さいことがわかる。この傾向は雰囲気温度 340 K の場合とは逆の傾向を示している。従って、雰囲気温度 480 K の場合は、イソオクタン単体(E0)における質量蒸発速度の取り扱いによる予測値の差異が大きいため混合燃料における質量蒸発速度

の取り扱いによる予測値の差異が大きくなっていることがわかる。さらに, E50 および E75 に関して, 2.2 節に示した質量蒸発速度を適用したモデル(Model 1 および Model 3)よりも質量蒸発速度として Spalding モデルを適用したモデル(Model 2 および Model 4)の方が液滴寿命の予測値と実験値の差異が小さいことがわかる。一方, E25 および E100 に関して, Spalding モデルを適用したモデル(Model 2 および Model 4)よりも質量蒸発速度として 2.2 節に示した質量蒸発速度を適用したモデル(Model 1 および Model 3)の方が液滴寿命の予測値と実験値の差異が小さいことがわかる。

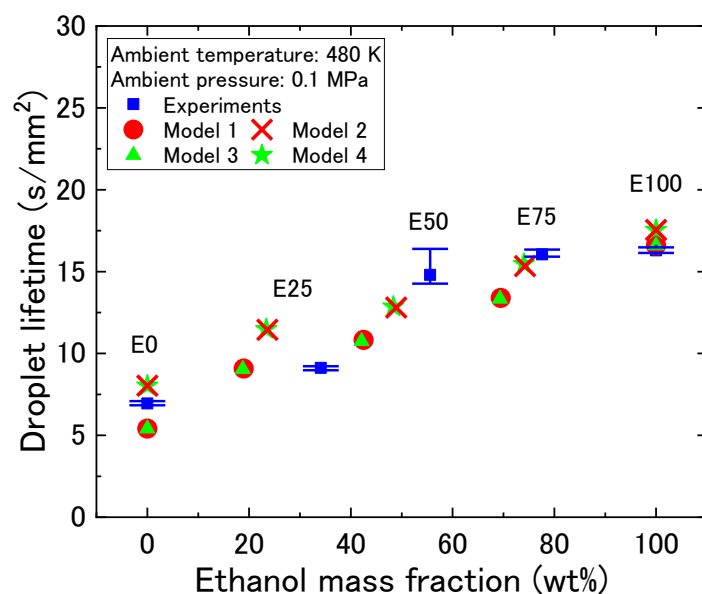


Fig. B-2 Droplet lifetime given by experiments and predictions as a function of ethanol fraction at $T_{amb} = 480\text{ K}$, $P_{amb} = 0.1\text{ MPa}$

APPENDIX C 無次元数

液相:

$$\text{レイノルズ数: } Re_{i,l} = \frac{\rho_l^a u_d D_d}{\eta_{i,l}}$$

$$\text{ペクレ数: } Pe_{i,l} = \frac{\rho_l^a u_d D_d C_{i,pl}}{\lambda_{i,l}}$$

気相:

$$\text{レイノルズ数: } Re_g = \max\left(\frac{\rho_g u_d D_d}{\mu_g}, \sqrt{Gr_g}\right)$$

$$\text{グラスホフ数: } Gr_g = \frac{8g_0 R_d^3 (T_{anb} - T^a)}{\left(\frac{\mu_g}{\rho_g}\right)^2 T_{anb}}$$

$$\text{シュミット数: } Sc_{i,g} = \frac{\mu_g}{\rho_g D_{i,g}}$$

$$\text{プラントル数: } Pr_{i,g} = \frac{\mu_g C_{i,p,g}}{k_g}$$

シャーウッド数 [41]:

$$Sh_{i,g} = 2.0009 + 0.514 \left(\max\left(Re_g, \max(Gr_g, 0)^{\frac{1}{2}}\right) \right)^{\frac{1}{2}} Sc_{i,g}^{\frac{1}{2}}$$

ヌッセルト数 [41]:

$$Nu_{i,g} = 2.0009 + 0.514 \left(\max\left(Re_g, \max(Gr_g, 0)^{\frac{1}{2}}\right) \right)^{\frac{1}{2}} Pr_{i,g}^{\frac{1}{2}}$$

ただし, D_d は液滴直径[m]である. また, 代表速度 u_d [m/s] は次の手順でグラスホフ数から導出した.

浮力項を考慮した境界層方程式は以下で与えられる.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{C-1})$$

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + g\beta(T_{anb} - T^a) \quad (\text{C-2})$$

$$u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{k_g}{\rho_g C_{p,g}} \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \quad (\text{C-3})$$

このとき式(C-2)の浮力項(右辺第 2 項)と式(C-2)の慣性項(左辺)の釣り合いより速度の大きさを見積もると,

$$g\beta(T_{anb} - T^a) \approx \frac{u^2}{x} \quad (\text{C-4})$$

したがって,

$$u \approx \sqrt{g\beta(T_{anb} - T^a)x} \quad (\text{C-5})$$

式(C-5)で表される速度を代表速度とするレイノルズ数は $x\sqrt{g\beta(T_{anb} - T^a)x}/\nu$ となる. グラスホフ数はレイノルズ数を二乗した無次元数であることから次のように式変形できる.

$$Gr_g = \frac{g\beta(T_{anb} - T^a)x^3}{\nu^2} \quad (\text{C-6})$$

$$\sqrt{Gr_g} = \frac{x}{\nu} \sqrt{g\beta(T_{anb} - T^a)x} \quad (\text{C-7})$$

$$\frac{\nu}{x} \sqrt{Gr_g} = \sqrt{g\beta(T_{anb} - T^a)x} \quad (\text{C-8})$$

$$\frac{\nu}{x} \sqrt{Gr_g} \approx u \quad (\text{C-9})$$

このとき, 式(C-9)によって与えられる速度 u を代表速度 u_d [m/s] とした.

APPENDIX D 温度および濃度分布に対する無次元量による検討

本章では液滴内部の温度勾配および濃度勾配を考慮することの妥当性を検討するために、気相から液相への伝熱および物質輸送の無次元数を定義した。

まず伝熱に関する無次元数としてビオ数(Bi)を定義した。一般的に、ビオ数は固体内部の熱伝導と固体表面からの熱伝達の割合を示す。本研究では液滴内部の熱伝導と液滴表面からの熱伝達の割合としてビオ数を定義した。すなわち、

$$Bi = \frac{\text{液滴表面からの熱伝達}}{\text{液滴内部への熱伝導}} = \frac{h(2R_d)}{k_{eff}} \quad (D-1)$$

このとき、式(2-129)を熱伝達係数 h に代入すると、

$$Bi = \frac{Nu k_g}{k_l} \quad (D-2)$$

ただし、 $Nu = \sum_{i=1}^N y_{i,g}^s Nu_{i,g}$ 、 k_g は式(2-135)、 k_{eff} は式(2-109)によって与えられる。

物質輸送に対してビオ数と同様の無次元数を定義した。熱と物質のアナロジーから以下のように定義する。

$$\frac{\text{液滴表面からの物質輸送}}{\text{液滴内部への物質輸送}} = \frac{Sh D_g}{D_{eff}} \quad (D-3)$$

ただし、 $Sh = \sum_{i=1}^N y_{i,g}^s Nu_{i,g}$ 、 $D_{eff} = \sum_{i=1}^{N_l} x_{i,l}^a D_{eff,i}$ 、 D_g は式(2-136)で与えられる $D_{i,g}$ に式(2-109)を適用することで平均化した拡散速度係数である。

本章では初期状態における無次元数を示す。また、初期液滴温度は全て 330 K とし、対象燃料は分解軽油サロゲート燃料である。Fig.D-1 に様々な雰囲気温度におけるビオ数(式(D-2))を示す。Fig.D-1 における単一液滴蒸発実験条件(Experimental conditions)のビオ数とは3.6節に示した計算条件におけるビオ数であり、噴霧燃焼条件(Practical conditions)のビオ数とは3.7節に示した計算条件におけるビオ数である。Fig.D-1 より、いずれの条件においても雰囲気温度の増加とともにビオ数も増加していることがわかる。また、いずれの条件においてもビオ数は1よりも小さいことがわかる。すなわち、液滴内部の熱伝導が気相からの熱伝達よりも速いことを示している。これは、3.7節に示した、液滴内部において短いタイムステップにおいても熱は液滴表面から十分拡散していることを示唆している。

Fig.D-2 に様々な雰囲気温度における物質輸送に対してビオ数と同様の無次元数を示す。Fig.D-1 に示したビオ数と同様に、いずれの条件においても雰囲気温度の増加とともに無

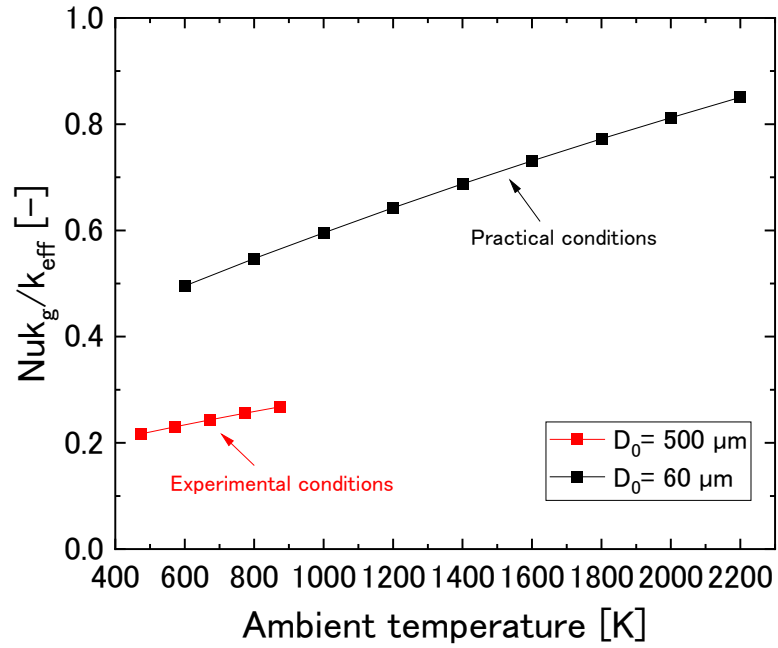


Fig. D-1 Biot number for experimental and practical conditions at various ambient temperature

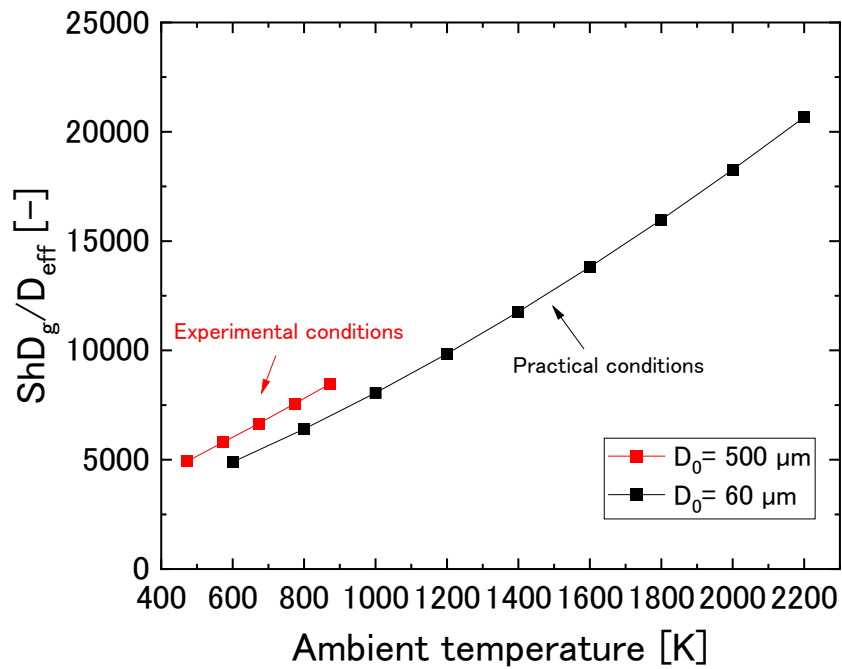


Fig. D-2 Dimensionless number of mass transfer for experimental and practical conditions at various ambient temperature

次元数も増加していることがわかる。しかし, Fig.D-2 に示した無次元数の絶対値は 1 よりも十分大きい値を示している。このことは, 気相からの物質伝達の方が液滴内部の物質拡散よりも十分速いことを示している。従って, 液滴内部の濃度勾配は無視することができず, さらに液滴内部の物質拡散が遅いことから液滴表面か物質が十分に拡散してない可能性が考えられる。このことから, 本研究において液滴表面からの物質拡散距離(境界 x)を定義することの妥当性が明らかとなった。

様々な雰囲気温度におけるビオ数を初期液滴直径によって整理したものを Fig.D-3 に示す。Fig.D-3 より, 初期直径が大きくなるとともにビオ数は小さくなることがわかる。また, 初期直径が大きい場合に, 様々な雰囲気温度においてビオ数は初期直径に関わらずほぼ一定値をとることがわかる。一方, Fig.D-4 に様々な雰囲気温度における物質輸送に対してビオ数と同様の無次元数を初期液滴直径によって整理したものを示す。Fig.D-4 より, 初期直径が大きくなるとともに無次元数はやや大きくなることがわかる。しかし, 初期直径の増加に対する無次元数の増加率は, 様々な雰囲気温度において極めて小さいことがわかる。

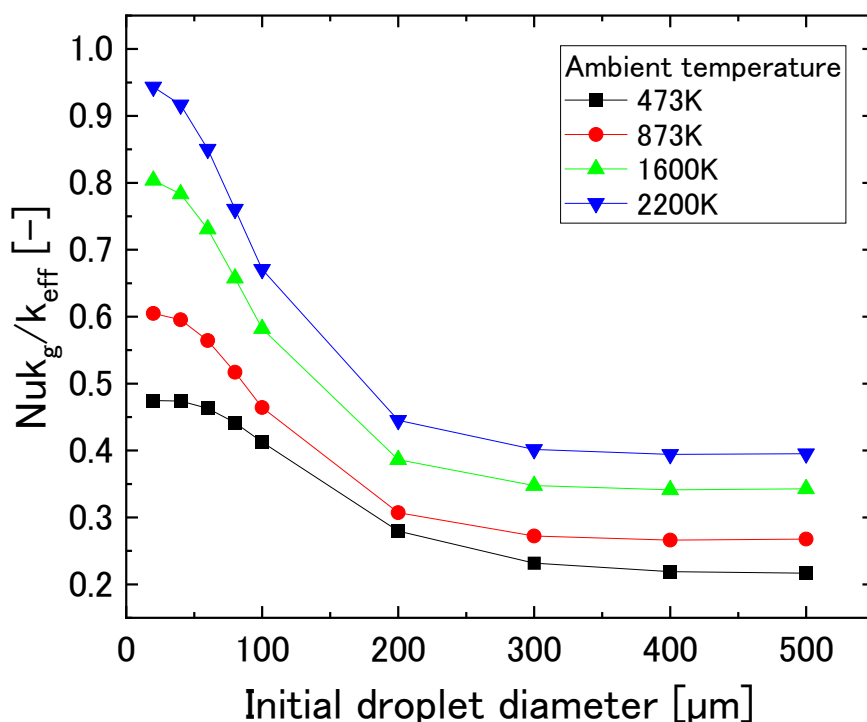


Fig. D-3 Biot number as a function of initial droplet diameter at various ambient temperature

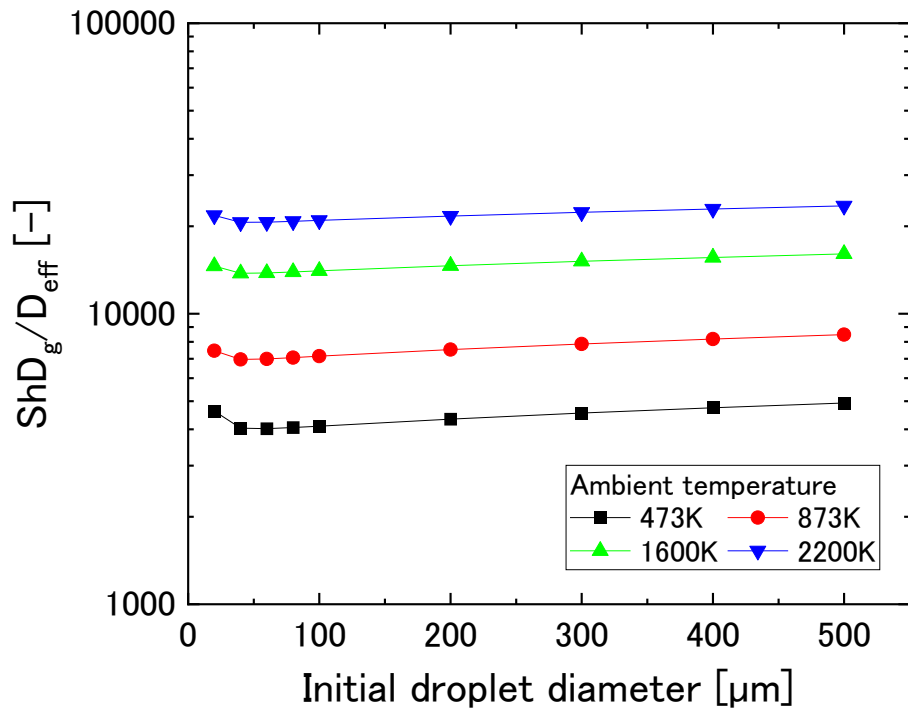


Fig. D-4 Dimensionless number of mass transfer as a function of initial droplet diameter at various ambient temperature

Fig.D-5 に Fig.3-14 に示した本研究で構築したモデルによる液滴寿命の予測値と内部分布を一様分布と仮定した 0 次元モデルによる液滴寿命の予測値の差異と、ビオ数の関係を示す。Fig.D-5 より、初期直径が 60 μm の場合はビオ数が 0.73 付近で 0 次元モデルとの差異が最大値を示していることがわかる。また、初期直径が 20 μm の場合はビオ数が 0.75 付近で 0 次元モデルとの差異が最大値を示していることがわかる。これらのことは、ビオ数が 0.75 付近の条件では温度分布を考慮することが液滴蒸発特性の予測値に与える影響が大きくなることを示唆している。

Fig.D-6 に Fig.3-14 に示した本研究で構築したモデルによる液滴寿命の予測値と内部分布を一様分布と仮定した 0 次元モデルによる液滴寿命の予測値の差異と、物質輸送に対してビオ数と同様の無次元数の関係を示す。Fig.D-5 より、初期直径が 60 μm の場合は無次元数が 13800 付近で 0 次元モデルとの差異が最大値を示していることがわかる。また、初期直径が 20 μm の場合は無次元数が 12400 付近で 0 次元モデルとの差異が最大値を示していることがわかる。これらのことは、無次元数が 12400 から付近の条件では濃度分布を考慮することが液滴蒸発特性の予測値に与える影響が大きくなることを示唆している。

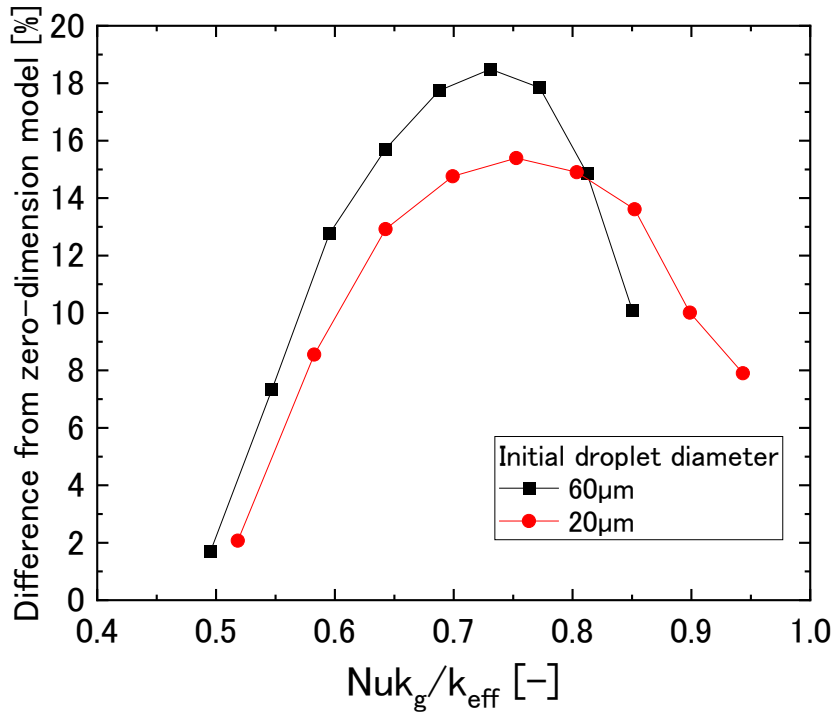


Fig. D-5 Difference from zero-dimension model as a function of Biot number in $D_0 = 60 \mu m$ and $20 \mu m$

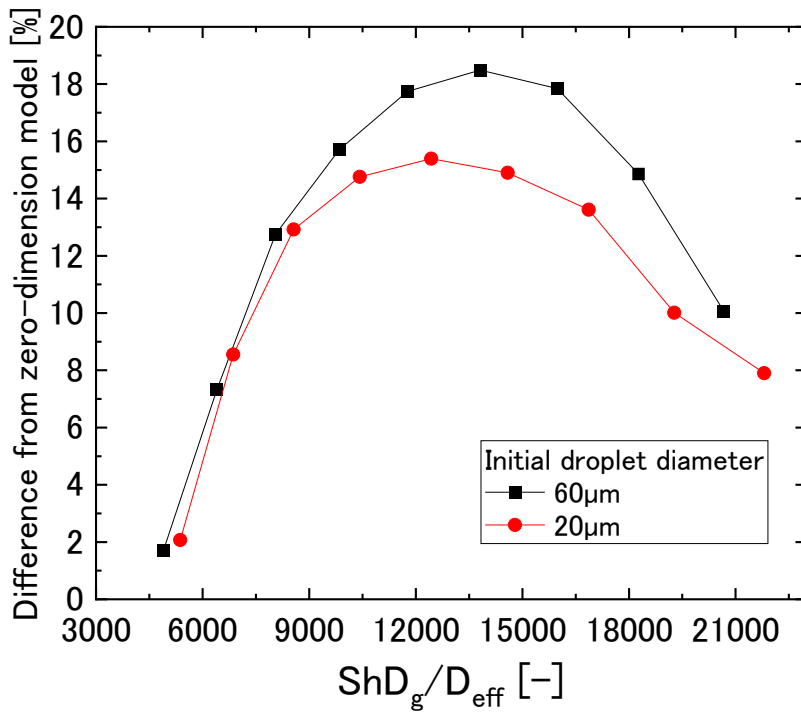
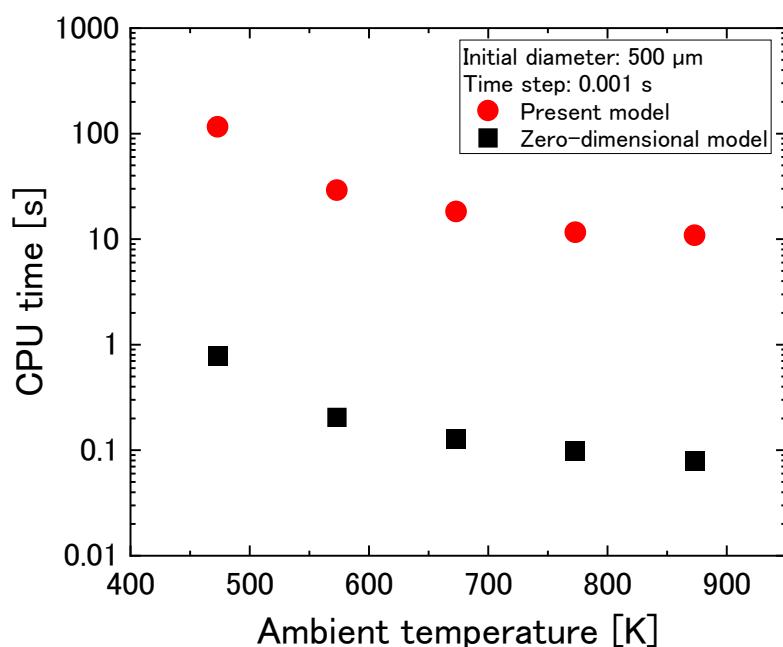


Fig. D-6 Difference from zero-dimension model as a function of dimensionless number of mass transfer in $D_0 = 60 \mu m$ and $20 \mu m$

APPENDIX E 構築したモデルと均一分布モデルの計算コスト

本章では本研究で構築した液滴蒸発モデルと 3.7 節に示した均一分布の温度および濃度分布を仮定した均一分布モデル(zero-dimensional model)の計算時間の差異を明らかにする。また、本章では対象燃料として 3.3 節に示した分解軽油サロゲート燃料を使用し、計算条件は 3.3 節に示した初期直径($500\text{ }\mu\text{m}$)と雰囲気温度を適用した。Fig.E-1 に様々な雰囲気温度における構築したモデルと均一分布モデルの計算時間を示す。なお、全ての計算におけるタイムステップを 1×10^{-3} とした。Fig.E-1 より、構築した液滴蒸発モデルの計算コストは均一分布モデルの計算コストのおおよそ 100 倍であることがわかる。ただし、本研究では濃度分布式(式(2-59))および温度分布式(式(2-98))の無限級数和の最大値は $n=88$ とし、また式(2-46)と式(2-90)の積分計算における液滴内部の分割幅を 300 としている。これらは様々な計算条件においても計算が実行できるように予め十分大きい値を設定している。したがって、Fig.E-1 は構築した液滴蒸発モデルの計算コストは均一分布モデルの計算コストの最大 100 倍程度であることがいえる。



E-1 Comparison computational cost between present model and zero-dimensional model at various ambient temperature.

APPENDIX F 導出した分布式と解析解の差異

本章では本研究で導出した分布式を元の偏微分方程式に代入することで、本研究で導出した分布式と解析解の差異を明らかにする。

物質拡散方程式 $\frac{\partial y_{i,l}}{\partial t} = D_{eff,i} \left(\frac{\partial^2 y_{i,l}}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} \right)$ に本研究で導出した以下の濃度分布式(式(2-59))を代入する。

$$y_{i,l}(t, R)$$

$$\begin{aligned} &= y_{i,l}^a + \frac{1}{R} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\ &\quad + \frac{1}{R} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \end{aligned}$$

物質拡散方程式の左辺に分布式を代入すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_{i,l}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left(y_{i,l}^a + \frac{1}{R} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{R} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \right) \\ &= \frac{1}{R} D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\ &\quad - \frac{1}{R} \left[\sum_{n=1}^{\infty} D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \end{aligned}$$

次に右辺を計算する。まず、濃度分布式 $y_{i,l}$ の R での一次微分は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} &= \frac{\partial}{\partial R} \left(y_{i,l}^a + \frac{1}{R} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{R} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{1}{R} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{R} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \right) \end{aligned}$$

ここで、右辺第一項を解くと、

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{1}{R} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \right) \\
&= -\frac{1}{R^2} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
&\quad + \frac{1}{R} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] 0 \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
&\quad + \frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \cosh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0}))
\end{aligned}$$

右辺第二項も同様に解くと, $\frac{\partial y_{i,l}}{\partial R}$ は以下のようになる.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} &= -\frac{1}{R^2} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
&\quad + \frac{1}{R} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \cosh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
&\quad - \frac{1}{R^2} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \\
&\quad + \frac{1}{R} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \cos \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n}) - \sin(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \\
\frac{2}{R} \frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} &= -\frac{2}{R^3} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
&\quad + \frac{2}{R^2} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \cosh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
&\quad - \frac{2}{R^3} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \\
&\quad + \frac{2}{R^2} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \cos \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n}) - \sin(\lambda_{i,n})) \right\} \right]
\end{aligned}$$

また, 濃度分布式 $y_{i,l}$ の R での二次微分は,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 y_{i,l}}{\partial R^2} = & \frac{2}{R^3} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
& + \frac{1}{R} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) \\
& + \frac{2}{R^3} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \\
& + \frac{1}{R} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ - \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) \right\} \right]
\end{aligned}$$

以上から、物質拡散方程式の右辺は以下のようになる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 y_{i,l}}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial y_{i,l}}{\partial R} = & \frac{2}{R^3} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
& + \frac{1}{R} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) \\
& + \frac{2}{R^3} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \\
& + \frac{1}{R} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ - \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) \right\} \right] \\
& - \frac{2}{R^3} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ \sinh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
& + \frac{2}{R^2} \exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \cosh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right) \\
& - \frac{2}{R^3} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \sin \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \\
& + \frac{2}{R^2} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \cos \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n}) - \sin(\lambda_{i,n})) \right\} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2}{R} \left(\exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \cosh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3}{R_d \lambda_{i,0}^2} (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right) \right. \\
&\quad \left. + \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \cos \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{3}{R_d \lambda_{i,n}^2} (\lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n}) - \sin(\lambda_{i,n})) \right\} \right] \right) \\
&\exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ -\frac{2\lambda_{i,0}}{R_d R} \cosh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) + \left(\frac{6}{R_d \lambda_{i,0}^2 R} - \frac{3R}{R_d^3 \lambda_{i,0}^2} \right) (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \frac{2\lambda_{i,n}}{R_d R} \cos \left(\lambda_{i,n} \frac{R}{R_d} \right) - \frac{6}{R_d \lambda_{i,n}^2 R} (\lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n}) - \sin(\lambda_{i,n})) \right. \\
&\quad \left. - \frac{3R}{R_d \lambda_{i,n}^2} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 (\sin(\lambda_{i,n}) - \lambda_{i,n} \cos(\lambda_{i,n})) \right\} \\
&\exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ -\frac{2\lambda_{i,0}}{R} \cosh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) + \left(\frac{6}{\lambda_{i,0}^2 R} - \frac{3R}{R_d^3 \lambda_{i,0}^2} \right) (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \left(\frac{3R}{\lambda_{i,n}} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 - \frac{6}{\lambda_{i,n} R} \right) \cos(\lambda_{i,n}) + \left(\frac{6}{\lambda_{i,n}^2 R} - \frac{3R}{\lambda_{i,n}^2} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 \right) \sin(\lambda_{i,n}) \right\}
\end{aligned}$$

以上から解析解と本研究で構築した濃度分布式の差異は

$$\begin{aligned}
&\exp \left[D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,0}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{i0} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,0}] \left\{ -\frac{2\lambda_{i,0}}{R} \cosh \left(\lambda_{i,0} \frac{R}{R_d} \right) + \left(\frac{6}{\lambda_{i,0}^2 R} - \frac{3R}{R_d^3 \lambda_{i,0}^2} \right) (\lambda_{i,0} \cosh(\lambda_{i,0}) - \sinh(\lambda_{i,0})) \right\} \\
&- \sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[-D_{eff,i} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 t \right] [q_{in} - \varepsilon_{i,l}(0) Q_{i,n}] \left\{ \left(\frac{3R}{\lambda_{i,n}} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 - \frac{6}{\lambda_{i,n} R} \right) \cos(\lambda_{i,n}) + \left(\frac{6}{\lambda_{i,n}^2 R} - \frac{3R}{\lambda_{i,n}^2} \left(\frac{\lambda_{i,n}}{R_d} \right)^2 \right) \sin(\lambda_{i,n}) \right\}
\end{aligned}$$

だけあるといえる。

熱拡散方程式 $\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k_{eff}}{c_{pl} \rho_l} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial T}{\partial R} \right)$ に本研究で導出した以下の温度分布式(式(2-98))を

代入する。

$$T(t, R) = T^a + \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \left\{ \frac{R_d}{R} \sin \left(\lambda_n \frac{R}{R_d} \right) - 3 \frac{(1+H) \sin(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \right\}$$

まず左辺に代入すると,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left(T^a + \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \left\{ \frac{R_d}{R} \sin \left(\lambda_n \frac{R}{R_d} \right) - 3 \frac{(1+H) \sin(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \right\} \right) \\
&= -\kappa \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \lambda_n^2 \left\{ \frac{R_d}{R} \sin \left(\lambda_n \frac{R}{R_d} \right) - 3 \frac{(1+H) \sin(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \right\}
\end{aligned}$$

次に右辺を計算する。まず, 温度分布式 T の R での一階微分は

$$\frac{\partial T}{\partial R} = \frac{\partial}{\partial R} \left(T^a + \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \left\{ \frac{R_d}{R} \sin \left(\lambda_n \frac{R}{R_d} \right) - 3 \frac{(1+H) \sin(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \right\} \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\partial}{\partial R} \left(\sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \left\{ \frac{R_d}{R} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - 3 \frac{(1+H) \sin(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \right\} \right) \\
&= \frac{\partial}{\partial R} \left(\sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \frac{R_d}{R} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) \right) \\
&= - \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \frac{R_d}{R^2} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) + \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \frac{R_d}{R} \frac{\lambda_n}{R_d} \cos\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \left(\frac{\lambda_n}{R} \cos\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - \frac{R_d}{R^2} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) \right)
\end{aligned}$$

また、温度分布式 T の R での二階微分は

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 T}{\partial R^2} &= \frac{\partial}{\partial R} \left(\sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \left(\frac{\lambda_n}{R} \cos\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - \frac{R_d}{R^2} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) \right) \right) \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \frac{\partial}{\partial R} \left(\frac{\lambda_n}{R} \cos\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - \frac{R_d}{R^2} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) \right) \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \left(-\frac{\lambda_n}{R^2} \cos\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - \frac{\lambda_n^2}{R_d R} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) + \frac{2R_d}{R^3} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - \frac{\lambda_n}{R^2} \cos\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) \right)
\end{aligned}$$

従って、熱拡散方程式 $\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k_{eff}}{C_{pl} \rho_l} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial T}{\partial R} \right)$ は以下のように整理できる。

$$\begin{aligned}
& -\kappa \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \lambda_n^2 \left\{ \frac{R_d}{R} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - 3 \frac{(1+H) \sin(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \right\} \\
&= \frac{k_{eff}}{C_{pl} \rho_l} \left(\sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \left(-\frac{\lambda_n}{R^2} \cos\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - \frac{\lambda_n^2}{R_d R} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) + \frac{2R_d}{R^3} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - \frac{\lambda_n}{R^2} \cos\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{2}{R} \sum_{n=1}^{\infty} q_n \exp[-\kappa \lambda_n^2 t] \left(\frac{\lambda_n}{R} \cos\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - \frac{R_d}{R^2} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) \right) \right) \\
&\quad - \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \left\{ \frac{R_d}{R} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - 3 \frac{(1+H) \sin(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \right\} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{2\lambda_n}{R^2} \cos\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) + \left(\frac{2R_d}{R^3} - \frac{\lambda_n^2}{R_d R} \right) \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) \right) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2\lambda_n}{R^2} \cos\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - \frac{2R_d}{R^3} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) \right) \quad (\because \kappa = \frac{k_{eff}}{C_{pl} \rho_l}) \\
&\quad - \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 \left\{ \frac{R_d}{R} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) - 3 \frac{(1+H) \sin(\lambda_n)}{\lambda_n^2} \right\} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{\lambda_n^2}{R_d R} \sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) \right) \\
&\quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n^2}{R} \left(R_d - \frac{1}{R_d} \right) \left(\sin\left(\lambda_n \frac{R}{R_d}\right) \right) - 3(1+H) \sin(\lambda_n) = 0
\end{aligned}$$

以上から解析解と本研究で構築した温度分布式の差異は

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda_n^2}{R} \left(R_d - \frac{1}{R_d} \right) \left(\sin \left(\lambda_n \frac{R}{R_d} \right) \right) - 3(1+H) \sin(\lambda_n)$$

だけあるといえる。

APPENDIX G 物性値表

1. 分解軽油サロゲート燃料

以下に第3章で示した分解軽油サロゲート燃料の物性推算に代入した値を示す。

・液相の物性推算

		C ₁₀ H ₁₄	C ₁₁ H ₁₀	C ₁₆ H ₃₄	C ₂₀ H ₄₂
Eq.(1-106)	A_i	-11.150	-10.310	-7.1600	-8.7800
	B_i	2255.0	1859.0	414.00	992.00
Eq.(1-108)	n_i	20.000	16.000	11.000	10.000
	a_i	0.23759	0.24348	0.27189	0.27832
Eq.(1-110)	b_i	0.24934	0.25442	0.22408	0.26103
	n_i	0.30880	0.32380	0.25709	0.28570
	$n_i a_i$	58.040	46.851	14.064	21.412
Eq.(1-111)	$n_i b_i$	-1.6693	-1.4495	3.4380	-0.9781
	$n_i d_i$	2.3120	1.8848	0.3056	1.1408
	$A_{i,p}$	7.1522	7.02867	7.03592	7.000979847
Eq. (1 - 113)*	$B_{i,p}$	2032.7	1830.51	1826.948	1560.368329
	$C_{i,p}$	132.1	154.45	195.002	209.6212366
Eq.(1-115)	$\sum_k N_k(h\nu k)$	10710	8582	7016	5624

*蒸気圧の単位は mmHg

・気相の物性推算

		C ₁₀ H ₁₄	C ₁₁ H ₁₀	C ₁₆ H ₃₄	C ₂₀ H ₄₂	N ₂
Eq.(1-139)	$a_{i,1}$	-1.8392E+00	-1.4019E+00	-6.9950E+00	-7.7671E+00	3.2987E+00
	$a_{i,2}$	2.2898E-01	1.8328E-01	1.0905E-01	1.2036E-01	1.4082E-03
	$a_{i,3}$	-1.2799E-04	-1.0182E-04	-8.1241E-05	-8.6981E-05	-3.9632E-06
	$a_{i,4}$	2.7278E-08	2.1553E-08	2.4223E-08	2.4680E-08	5.6415E-09
	$a_{i,5}$	5.6826E-24	1.2795E-24	1.0332E-24	1.7691E-24	-2.4449E-12
	$a_{i,6}$	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	-1.0209E+03

2. イソオクタン-エタノール混合燃料

以下に第4章で示したイソオクタンおよびエタノールの物性推算に代入した値を示す.

・液相の物性推算

		C ₈ H ₁₈	C ₂ H ₆ O
Eq.(1-106)	A_i	-8.57	-10.58
	B_i	1003	2172
Eq.(1-108)	n_i	8	2
	a_i	0.24563	0.2657
Eq.(1-110)	b_i	0.27373	0.26395
	n_i	0.2846	0.2367
	$n_i a_i$	18.65923	8.8633
Eq.(1-111)	$n_i b_i$	0.608733	-1.829937
	$n_i d_i$	0.9989188	0.99676
	$A_{i,p}$	3.93646	5.33675
Eq. (1 - 113)**	$B_{i,p}$	1257.85	1648.22
	$C_{i,p}$	220.767	230.918
Eq.(1-115)	$\sum_k N_k(hvk)$	3923	5652

**蒸気圧の単位は bar

・気相の物性推算

エタノール-イソオクタン混合燃料では Eq.(1-139) を以下の式に置き換えた.

$$C_{i,p} = a_{i,1} + a_{i,2}T + a_{i,3}T^2 + a_{i,4}T^3 + a_{i,5}T^4 \text{ [J/mol K]} \quad (\text{G-1})$$

		C ₈ H ₁₈	C ₂ H ₆ O	N ₂
Eq.(G-1)	$a_{i,1}$	-2.1703 E+01	2.7091 E+01	2.9342 E+01
	$a_{i,2}$	8.5849 E-01	1.11 E-01	-3.5395 E-03
	$a_{i,3}$	-5.5323 E-04	1.0957 E-04	1.0076 E-05
	$a_{i,4}$	2.0892E-07	-1.5046E-07	-4.3116E-09
	$a_{i,5}$	-3.7285E-11	4.6601E-11	2.5935E-13

参考文献

- [1] 一般社団法人 日本原子力産業協会ウェブサイト
(URL:<https://www.jaif.or.jp/181017-1>)
- [2] A.L. Sánchez, J. Urzay, A. Liñán, The role of separation of scales in the description of spray combustion, *Proceedings of the Combustion Institute*. 35 (2015) 1549–1577.
<https://doi.org/10.1016/j.proci.2014.08.018>.
- [3] 産学連携事業：「設計プロセスの高度化を目指した燃焼解析のプラットフォーム開発と検証」について, *Journal of the Combustion Society of Japan*. 58 (2016) 189–190. https://doi.org/10.20619/jcombsj.58.186_189.
- [4] 設計プロセスの高度化を目指した燃焼解析のプラットフォーム開発と検証：進捗報告（第1報）, *Journal of the Combustion Society of Japan*. 59 (2017) 61–63.
- [5] 設計プロセスの高度化を目指した燃焼解析のプラットフォーム開発と検証：進捗報告（第2報）, *Journal of the Combustion Society of Japan*. 60 (2018) 49–52.
- [6] P. Yi, W. Long, M. Jia, J. Tian, B. Li, Development of a quasi-dimensional vaporization model for multi-component fuels focusing on forced convection and high temperature conditions, *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 97 (2016) 130–145. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.01.075>.
- [7] J. Hayashi, A. Fumiteru, N. Hashimoto, N. Hiroyuki, EFFECTS OF FUEL SPECIES ON SOOT FORMATION IN LAMINAR COUNTERFLOW COMPARISON BETWEEN DIESEL FUEL AND PALM METHYL ESTER AS AN ALTERNATIVE FUEL, in: *Proceedings of the ASME/JSME 2011 8th Thermal Engineering Joint Conference*, 2011: p. 44413.
- [8] Y. Naito, K. Ueda, L. Alexis, N. Hashimoto, Y. Suganuma, H. Nomura, O. FUJITA, Verification of Multicomponent Fuel Droplet Evaporation model for Kerosene under Various Ambient Temperature, in: *The Fifty-Sixth Symposium (Japanese) on Combustion*, 2018.
- [9] N. Hashimoto, Y. Naito, K. Saito, J. Hayashi, N. Nakatsuka, F. Akamatsu, O. Fujita, Validation of the multi-component fuel droplet evaporation model in a laminar counterflow kerosene surrogate combustion field, *12th Asia-Pacific Conference on*

- Combustion, ASPACC 2019. (2019) 2–5.
- [10] JAXAスーパーコンピュータシステム利用成果報告(2017年4月～2018年3月(URL: <https://www.jss.jaxa.jp/ar/j2017/4252/>)
- [11] H. Moriai, R. Kurose, H. Watanabe, Y. Yano, F. Akamatsu, S. Komori, Large-Eddy Simulation of Turbulent Spray Combustion in a Subscale Aircraft Jet Engine Combustor—Predictions of NO and Soot Concentrations, *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*. 135 (2013) 091503. <https://doi.org/10.1115/1.4024868>.
- [12] D. Noh, S. Gallot-Lavallée, W.P. Jones, S. Navarro-Martinez, Comparison of droplet evaporation models for a turbulent, non-swirling jet flame with a polydisperse droplet distribution, *Combustion and Flame*. 194 (2018) 135–151. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2018.04.018>.
- [13] B. Abramzon, W.A. Sirignano, Droplet vaporization model for spray combustion calculations, *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 32 (1989) 1605–1618. [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(89\)90043-4](https://doi.org/10.1016/0017-9310(89)90043-4).
- [14] W.A. Sirignano, Advances in droplet array combustion theory and modeling, *Progress in Energy and Combustion Science*. 42 (2014) 54–86. <https://doi.org/10.1016/j.peccs.2014.01.002>.
- [15] H. Watanabe, R. Kurose, M. Hayashi, T. Kitano, S. Komori, Effects of ambient pressure and precursors on soot formation in spray flames, *Advanced Powder Technology*. 25 (2014) 1376–1387. <https://doi.org/10.1016/J.APT.2014.03.022>.
- [16] T. Kitano, J. Nishio, R. Kurose, S. Komori, Evaporation and combustion of multicomponent fuel droplets, *Combustion and Flame*. 136 (2014) 551–564. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2014.07.045>.
- [17] R.S. Miller, K. Harstad, J. Bellan, Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations, *International Journal of Multiphase Flow*. 24 (1998) 1025–1055. [https://doi.org/10.1016/S0301-9322\(98\)00028-7](https://doi.org/10.1016/S0301-9322(98)00028-7).
- [18] A. Stagni, L. Esclapez, P. Govindaraju, A. Cuoci, T. Faravelli, M. Ihme, The role of preferential evaporation on the ignition of multicomponent fuels in a homogeneous spray/air mixture, *Proceedings of the Combustion Institute*. 36 (2017) 2483–2491.

- <https://doi.org/10.1016/j.proci.2016.06.052>.
- [19] D.J. Torres, P.J. O'Rourke, A.A. Amsden, Efficient multicomponent fuel algorithm, *Combustion Theory and Modelling*. 7 (2003) 67–86. <https://doi.org/10.1088/1364-7830/7/1/304>.
 - [20] K. Harstad, J. Bellan, Modeling evaporation of Jet A, JP-7, and RP-1 drops at 1 to 15 bars, *Combustion and Flame*. 137 (2004) 163–177.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2004.01.012>.
 - [21] S.L. Singer, Direct Quadrature Method of Moments with delumping for modeling multicomponent droplet vaporization, *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 103 (2016) 940–954.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2016.07.067>.
 - [22] S.S. Sazhin, A. Elwardany, P.A. Krutitskii, G. Castanet, F. Lemoine, E.M. Sazhina, M.R. Heikal, A simplified model for bi-component droplet heating and evaporation, *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 53 (2010) 4495–4505.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.06.044>.
 - [23] S.S. Sazhin, A.E. Elwardany, P.A. Krutitskii, V. Deprédurand, G. Castanet, F. Lemoine, E.M. Sazhina, M.R. Heikal, Multi-component droplet heating and evaporation: Numerical simulation versus experimental data, *International Journal of Thermal Sciences*. 50 (2011) 1164–1180.
<https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2011.02.020>.
 - [24] S.S. Sazhin, M. Al Qubeissi, R. Nasiri, V.M. Gun'Ko, A.E. Elwardany, F. Lemoine, F. Grisch, M.R. Heikal, A multi-dimensional quasi-discrete model for the analysis of Diesel fuel droplet heating and evaporation, *Fuel*. 129 (2014) 238–266.
<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2014.03.028>.
 - [25] S.S. Sazhin, M. Al Qubeissi, R. Kolodnytska, A.E. Elwardany, R. Nasiri, M.R. Heikal, Modelling of Biodiesel and Diesel Fuel Droplet Heating and Evaporation, *Fuel*. 115 (2014) 559–572. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.07.031>.
 - [26] S.S. Sazhin, O. Rybdylova, C. Crua, M. Heikal, M.A. Ismael, Z. Nissar, A.R.B.A. Aziz, A simple model for puffing/micro-explosions in water-fuel emulsion droplets, *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 131 (2019) 815–821.

- <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.11.065>.
- [27] B.E. Poling, M. Prausnitz, John P. O'Connell, *The Properties of Gases and Liquids*, Fifth Edition,
 - [28] A.W. Cook, Enthalpy diffusion in multicomponent flows, *Physics of Fluids*. 21 (2009).
<https://doi.org/10.1063/1.3139305>.
 - [29] V. Ebrahimian, C. Habchi, Towards a predictive evaporation model for multi-component hydrocarbon droplets at all pressure conditions, *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 54 (2011) 3552–3565.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.03.031>.
 - [30] Stephen R. Turns, *An Introduction to Combustion_ Concepts and Applications-* McGraw-Hill (2000)
 - [31] M. Adachi, V.G. McDonell, D. Tanaka, J. Senda, H. Fujimoto, Characterization of Fuel Vapor Concentration Inside a Flash Boiling Spray, *Sae*. (1997) 9.
<https://doi.org/10.4271/970871>.
 - [32] Y. Naito, K. Ueda, N. Hashimoto, M. Takagi, S. Kawauchi, Y. Imai, M. Watanabe, T. Hasegawa, T. Hayashi, Y. Suganuma, H. Nomura, O. Fujita, Experimental Study on Evaporation Characteristics of Light Cycle Oil Droplet under Various Ambient Conditions, *Energy and Fuels*. 35 (2021) 6219–6230.
<https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c04406>.
 - [33] Y. Fan, N. Hashimoto, H. Nishida, Y. Ozawa, Spray characterization of an air-assist pressure-swirl atomizer injecting high-viscosity Jatropha oils, *Fuel*. 121 (2014) 271–283. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.12.036>.
 - [34] J. Hayashi, N. Hashimoto, H. Nishida, F. Akamatsu, Soot formation characteristics of palm methyl ester spray flames in counterflow sustained by methane/air premixed flame, *Atomization and Sprays*. 27 (2017) 1077–1087.
<https://doi.org/10.1615/AtomizSpr.2018021075>.
 - [35] N. Al-Esawi, M. Al Qubeissi, S.S. Sazhin, R. Whitaker, The impacts of the activity coefficient on heating and evaporation of ethanol/gasoline fuel blends, *International Communications in Heat and Mass Transfer*. 98 (2018) 177–182.
<https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2018.08.018>.

- [36] R. Banerjee, R. Gopinath, CFD ANALYSIS TO STUDY EVAPORATION OF A SINGLE ETHANOL/ISO-OCTANE BINARY MIXTURE DROPLET, in: Proceedings of the ASME-JSME-KSME 2011 Joint Fluids Engineering Conference, Hamamatsu, Shizuoka, JAPAN, 2011.
- [37] R. Oktavian, V. Amidelsi, A. Rasmito, G. Wibawa, Vapor pressure measurements of ethanol-isooctane and 1-butanol-isooctane systems using a new ebulliometer, *Fuel*. 107 (2013) 47–51. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2013.02.005>.
- [38] B. Waluyo, I.N.G. Wardana, L. Yulianti, M.N. Sasongko, M. Setiyo, The role of polar ethanol induction in various iso-octane ethanol fuel blend during single droplet combustion, *Fuel Processing Technology*. 199 (2020) 106275. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2019.106275>.
- [39] S.S. Sazhin, Advanced models of fuel droplet heating and evaporation, *Progress in Energy and Combustion Science*. 32 (2006) 162–214. <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2005.11.001>.
- [40] S.S. Sazhin, A.E. Elwardany, P.A. Krutitskii, V. Deprédurand, G. Castanet, F. Lemoine, E.M. Sazhina, M.R. Heikal, Multi-component droplet heating and evaporation: Numerical simulation versus experimental data, *International Journal of Thermal Sciences*. 50 (2011) 1164–1180. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2011.02.020>.
- [41] M. Kulmala, T. Vesala, J. Schwarz, J. Smolik, Mass transfer from a drop-II. Theoretical analysis of temperature dependent mass flux correlation, *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 38 (1995) 1705–1708. [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(94\)00302-C](https://doi.org/10.1016/0017-9310(94)00302-C).

Reprinted with permission from [Y. Naito, K. Ueda, N. Hashimoto, M. Takagi, S. Kawauchi, Y. Imai, M. Watanabe, T. Hasegawa, T. Hayashi, Y. Suganuma, H. Nomura, O. Fujita, Experimental Study on Evaporation Characteristics of Light Cycle Oil Droplet under Various Ambient Conditions, *Energy and Fuels*. 35 (2021) 6219–6230. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c04406>.]

Copyright 2021 American Chemical Society.

謝辞

著者が研究活動を開始した 2016 年から 6 年間所属した宇宙環境応用工学研究室の藤田修教授, 橋本望准教授, 金野佑亮助教には, 研究に必要な基礎的な知識をはじめ, 日々のご指導およびご助言, 産学連帯事業や共同研究への参加など多くの貴重な機会を頂いたことを謹んで感謝申し上げます.

宇宙環境応用工学研究室の多賀未保秘書には著者の研究を遂行するにあたり, 事務的手続き並びに研究生活全般にわたって数多くのサポート, ご協力を頂きました. ここに深く感謝の意を表します.

2017 年度日本燃焼学会産学連帯事業「設計プロセスの高度化を目指した燃焼解析のプラットフォーム開発と検証」において, 九州大学総合理工学研究院環境理工学部門 渡邊裕章教授, 大阪大学工学研究科機械工学専攻 赤松史光教授, 中塚記章特任研究員, 京都大学大学院エネルギー科学研究科 林潤准教授には数値計算モデルの精度検証用実験データのご提供および学会原稿執筆にあたり多大なご協力をいただきました. また, 株式会社数値フローデザイン 齋藤欣也博士には汎用熱流体解析ソフトウェア NuFD/FrontFlowRed へのモデルの統合に際して多大なご協力をいただきました. 本研究のここに深く感謝の意を表します.

2019-2020 年度に実施された自動車用内燃機関技術研究組合(AICE)研究プロジェクト(経済産業省補助事業「次世代自動車等の開発加速化に係るシミュレーション基盤構築」)において, 国立研究開発法人 海上・港湾・航空技術研究所海上技術安全研究所の高木正英博士には燃料の選定および研究の実施にあたり多大なご協力をいただきました. ここに深く感謝の意を表します.

著者が研究活動を行う上で, 2017 年度には北海道大学フロンティア基金 新渡戸スクール奨学金, 2018 年度には公益社団法人 日揮・実吉奨学会, 2019-2021 年度には文部科学省 データ関連人材育成プログラム北海道大学事業 (D-DRIVE-HU), 2020-2021 年度には北海道大学 f³ (エフキューブ)工学教育研究センターによる支援を受けました. また, 公益財団

法人 旭硝子財団には 2019-2021 年度の 3 年間に渡り多大な経済支援を受けました。ここに深く感謝の意を表します。

宇宙環境応用工学研究室液滴蒸発研究グループにおいて、佐藤佑衣子氏(2016 年度修了)には実験遂行にあたり実験装置概要と実験方法をご教示いただきました。上田健五氏(2017 年度卒業), Alexis Lefevre 氏(2017 年度留学生) には第 3 章に示した単一液滴蒸発実験に関する研究を実施していただきました。また、塩見葵氏(2019 年度卒業), Tolstoy Debbarma 氏(2020 年度修了), 富樫和悠氏(2020 年度修了), 近藤匠氏(2022 年度修了予定)には第 4 章に示した単一液滴蒸発実験に関する研究を実施していただきました。ここに深く感謝の意を表します。

学術研究員の Guo Feng 博士, Xia Yu 博士をはじめとする宇宙環境応用工学研究室の皆様には本稿作成にあたり激励並びに有意義なご助言を頂きました。ここに感謝の意を表すとともに今後のご活躍をお祈りいたします。

最後にこれまでの研究活動を理解し、学生生活を温かく見守り支えてくださった両親と祖母に心より御礼申し上げます。

2022 年 2 月

内藤雄心