

## 原文（日本語）

BMW、Ford、Changanなどの自動車メーカーは水素を燃料とした内燃機関（HICE）を開発し、自社の自動車に使用してきた。実証運転で得られたデータからは、HICEが優れた動力性能と信頼性を発揮し、二酸化炭素排出量もほぼゼロであることが示されている [1-5]。

HICEから排出される主な有害汚染物質は窒素酸化物（NOx）である。過去の研究では、HICEが高負荷時には通常大量のNOx排出量を生成することが示されているが、これはシリンダー内の温度上昇に起因するいささか不可避な現象である [6-9]。リーンバーン、点火時期遅角、排気再循環などの様々な技術がNOx排出量の削減に有効であることが明らかになっている。しかし、これらの研究では様々なIC機関制御パラメータに対するNOx排出量を実験的に得ているものの、NOxの生成メカニズムに関する洞察はこれまでに十分報告されていない。

従来の内燃（IC）機関は大量の温室効果ガスや有害汚染物質を排出し、環境に悪影響を与える。これは、炭素排出量の少ないIC機関用代替燃料の模索を我々に促した [10-11]。水素はクリーンで再生可能な資源であり、多くの研究者が有望な燃料候補と考えている [12-14]。

高温下での窒素の酸化には複雑な反応が伴い、その効果的な分析には化学反応速度論の利用が必要となることが多い。本論文では、様々なエンジン負荷における物理的な機構を解明することを目的とし、既存のHICEプロトタイプに基づき化学と組み合わせた3D CFDモデルを構築することでシリンダー内における燃焼および汚染物質の生成過程を検証する。

### 1 方法とモデル

#### 1.1 HICE

本数値モデルの基となっているHICEは4シリンダー、4ストローク、自然吸気方式、火花点火エンジンであり、シリンダー排気量は0.50 Lである。エンジンの主なパラメータを表1に示す。

エンジンの3DモデルはPro Eで作成した。計算を簡素化するため、シリンダー間の吸気の差は無視した。図1に示す通り、構築したモデルは単一シリンダー、吸気流路、排気流路、水素噴射装置、バルブのみを含むものとした。その次に、モデルをSTLファイルとしてCONVERGE CFDソフトウェアにインポートし、様々なゾーンの境界、ベースメッシュサイズ、メッシュ精緻化基準を設定した。

CONVERGEはシミュレーション中に計算を自動生成する。ベース要素サイズは8 mmとした。シリンダーの境界メッシュ、内部ゾーン、バルブは2–4レベルの精緻化を採用する一方で、スパークや火炎面周りの温度と圧力が急激に変化する領域ではレベル5の精緻化を用いる。火炎帯の要素サイズは0.5 mmとした。燃焼シミュレーションの要素数は480,000以上とした。

#### 1.2 燃焼モデル

化学ソルバーSAGEを用いた。化学ソルバーSAGEでは化学反応メカニズムは初期値によって導かれる。Chemkinフォーマットのビルトイン化学メカニズムは、ワーキングディレクトリに保存し、燃焼シミュレーション中に呼び出すことができる。69個ものH-O-N素反応を含むGRI 3.0メカニズムは研究者によって広く用いられており、高い精度を持つことが証明されている [15]。本研究で使用した簡素化したメカニズムは、詳細なGRI 3.0メカニズムの感度分析をもとに導出されたもので、テキストファイルとして保存され、可逆的な素反応を22個含有している。特に、N-Oメカニズムには一般的に用いられるNO、NNH-NO、N2O-NO経路が含まれ、NO生成の詳細を明らかにすることができる。反応メカニズムの開始温度は858 Kとする。着火モデルはエネルギー放出モードに設定する。初期の0.5 °CA内では、着火エネルギーの60% (20 mJとして設定) が点火プラグ付近の小さな領域の中で放出される。この残りのエネルギーはその後の2 °CA内で放出される。そのため、その結果として得られる局所温度の上昇が反応メカニズムを引き起こす。その後、ソフトウェアは組み込まれている反応物、中間体、生成物の熱力学特性を用いて化学反応を計算する。

#### 1.3 流速、熱伝達、噴射モデルとシミュレーションにおけるパラメータ設定

流れ場は火炎伝播速度に影響する。シリンダー内の乱流は、瞬間速度が平均部分と変動部分に分解されるRANS k-εモデルを用いて再現する。水素の噴射は単位質量流量として設定する。初期条件は筆者らの経験に基づいて設定する。主な温度境界条件はピストン=550 K、シリンダー壁=450 K、シリンダーヘッド=420 Kとする。シミュレーションで用いるステップは0.01 °CAである。シミュレーションではスロットルバルブを完全に開放する。熱力学的パラメータの変動やクランク角の素反応速度は、燃空当量比0.6–1.0, 3000 r/min、TDC (上死点) 前-14–4度として計算した。

#### 1.4 モデルの検証

図2に示している通り、シミュレーションから得られたNOx排出量の結果は過去の実験データ [16]と比較的良く一致していた。計算値は対応する実験値より僅かに低く、最大誤差は11.06%であった。これは主に、計算した火炎伝播速度が実験における実測値よりも高いことに起因しており、先行研究と一致している。

### 2 結果と考察

構築したモデルを用いて、異なる燃空当量比での燃焼および排出特性をシミュレーションによって検証した。

#### 2.1 シリンダー圧と温度の変動

図3と4は異なる当量比下でのそれぞれシリンダー圧と平均温度の曲線を表している。当量比が0.6の場合、最大圧力は5.08 MPaであり、最大平均温度は2264 Kとなる一方で、当量比が1.0の場合はこれらの値はそれぞれ6.32 MPaと2916 Kとなる。

当量比が上昇するにつれて、シリンダー圧と平均温度曲線のピークが高くなり、低いクランク角で到達できるようになる。これは、水素濃度が高くなると着火遅れが短くなり燃焼も速くなることを示唆する。そのような圧力上昇の定積過程はHICE効率の上昇に貢献する。一方で、急速燃焼による高温は多量のNOx排出量にもつながる。

## 翻訳+英文校正済み原稿

Automobile manufacturers such as BMW, Ford, and Changan have developed hydrogen- fueled internal combustion engines (HICEs) and used them in their cars. Data obtained from demonstration operation vehicles have shown that HICEs have good power performance and reliability, with almost zero carbon emissions [1–5].

However, NOx is one of the primary harmful major pollutants emitted by from HICEs. Previous studies have shown that HICEs usually generate large amounts of NOx emissions under high loads, which is an rather inevitable phenomenon and is attributed to the temperature rise within in the cylinder [6–9]. Various tTechnologies, such as lean burn, retarded ignition, and exhaust gas recirculation, have been found to be effective in reducing NOx emissions. However, although these studies have investigated response the variation inof NOx emissions to the variation of with changes in the control parameters of IC engines, using experimental methodscontrol parameters were experimentally obtained in these studies, insight on the mechanism of formation mechanism of NOx formation was insufficiently reportedhas not been discussed in sufficient detail.

Conventional internal combustion (IC) engines emit large quantities of greenhouse gases and other harmful pollutants, negatively which have an adverse impacting on the environment. This urges us tonecessitates the search for alternative fuels with low carbon emissions for IC engines [10–11]. Hydrogen, a clean and renewable resource, is considered a promising candidate by many researchers [12–14].

Oxidation of nitrogen under high temperature involves complex reactions;, the effective analysis of which these reactions often requires the useemployment of chemical kinetics. In tThis studypaper, aims to elucidate the underlying physical mechanisms at various engine loads. To this end, by we creating developed a chemistry-coupled 3-D CFD model based on an existing HICE prototype, we to investigate the combustion and pollutant- formation processes occurring inside the cylinder., with the aim of elucidating the underlying physical mechanisms at various engine loads.

### 1 Method and model

#### 1.1 HICE

The HICE that tThe numerical model wasis based on is a 4four-cylinder, 4four-stroke, normally naturally aspirated, spark ignition HICEEngine, with a cylinder displacement of 0.50 L. Table 1 presents Tthe main parameters specifications of the engine are shown in Table 1.

A 3-D model of the engine wasis created using Pro E. In order tTo simplify the computation, the differences of in air intake amongbetween the cylinders wereare neglected; the constructed model only containeds a single cylinder, intake and exhaust channels, a hydrogen injectorion, and a valve, as shown in Fig. 1. The model wasis then imported into the CONVERGE CFD software as an STL file, where the boundaries for different zones, base mesh size, and mesh refinement criteria wereare set. CONVERGE automatically generateds a computational grid during simulation. The base element size wasis set to 8 mm. Meshes of the cylinder boundary, internal zone, and valve employed 2–4 levels of refinement , whereas the regions with sharp temperature and pressure changes around the spark and flame front used a level-5 refinement. The element size of the flame zone wasis set to 0.5 mm. The number of elements for combustion simulation wasis over 480,000 .

#### 1.2 Combustion model

The SAGE detailed chemistry solver SAGE wasis used, where the chemical reaction mechanism wasis led by initial values . The built-in chemical mechanism, in the Chemkin format, wasis saved in the working directory and couldan be called during the combustion simulation. Containing 69 H--O--N elementary reactions, the GRI–Mech 3.0 mechanism has been widely used by researchers and proven to have high accuracy [15]. In this study, our The simplified mechanism proposed in this study, derived based on the sensitivity analysis of the detailed GRI–Mech 3.0 mechanism, contains 22 reversible elementary reactions, which are, saved inas a text file . In particularParticularly, the N--O mechanism includes the commonly used NO, NNH--NO, and N2O--NO paths, capable of revealing the details of NO formation. The initiation temperature of the reaction mechanism wasis set to 858 K. The ignition model wasis set to the energy release mode. Within the initial 0.5 °CA, 60% of the ignition energy (set ats 20 mJ) wasis released within a small area near the spark plug. The rest of this energy wasis released within the subsequent 2 °CA. The resultant rise in local temperature rise therefore initiateds the reaction mechanism. The software then computeds the chemistry using the built–in thermodynamic properties of the reactants, intermediates, and products.

### 1.3 Flow, heat transfer, and injection models and simulation parameter settings

The flow field affects the flame propagation speed. The turbulence inside the cylinder wasis simulated using a RANS k-ε model, where the instantaneous velocity wasis decomposed into a mean part and a fluctuating part. The hydrogen injection wasis set as to a unit mass flow. The initial conditions wereare set based on our experience. The main temperature boundary conditions included piston temperature = (550 K), cylinder wall temperature = (450 K), and cylinder head temperature = (420 K). The simulation step wasis set to 0.01 °CA. The throttle valve wasis set to fully open in the simulation. The variations of thermodynamic parameters and elementary reaction rates with the crank angle are were calculated at a fuel--air equivalence ratio of 0.6–1.0, 3000 r/min, and --14 to –4 degrees before TDC (top dead center (TDC)).

#### 1.4 Model verification

The NOx emissions results obtained from the simulation show are in rather good agreement with the previous experimental data [16], as shown in Fig. 2. The computed values are slightly lower than the corresponding experimental ones, with a maximum error of 11.06%. This is mostly because the calculated flame propagation speeds are higher than the actual ones in the experiment, which is consistent with the findings from other studies in the literature.

### 2 Results and discussions

Using the constructed model, the combustion and emissions characteristics under different fuel--air equivalence ratios wereare examined in the simulation.

#### 2.1 Cylinder pressure and temperature variations

Figures 3 and 4 show the cylinder pressure and mean temperature curves under different equivalence ratios, respectively. When the equivalence ratio wasis 0.6, the maximum cylinder pressure wasis 5.08 MPa and the maximum mean temperature wasis 2264 K, whereas these two numbers wereare 6.32 MPa and 2916 K, respectively, when the equivalence ratio wasis 1.0.

As the equivalence ratio increases, the cylinder pressure and mean temperature curves exhibit higher peaks, which are reached at a lower crank angle. This suggests shorter ignition delay and faster burning combustion at a higher hydrogen concentration. Such Thisa more isochoric process of pressure rise is more isochoric and helps improve the efficiency of the HICE. In the meantime, the However, high temperatures as a result of fast combustion burning will also lead to considerable NOx emissions.