

OpenFOAM における i-ペンタンの熱物性データベースの実装

大嶋元啓^{1†} 中山勝之²¹富山県立大学 ²オープン CAE 勉強会@富山

Implementation of the thermophysical properties of i-pentane on OpenFOAM

Motohiro OSHIMA^{††} Katsuyuki NAKAYAMA^{††}^{*}Toyama Prefectural University ^{***}Open CAE Study Groupe @ TOYAMA

Abstract

The thermophysical properties of liquids are important for simulating thermal energy cases, such as combustion, heat transfer, and reactive flows. The thermophysical properties at a certain pressure or temperature are computed using a thermophysical model with a database of liquid properties in OpenFOAM. Approximately 30 liquid thermophysical property databases have been constructed in OpenFOAM. However, databases must be constructed to simulate the spray combustion of fuel, which is not available in OpenFOAM. In this study, a thermophysical properties database of i-pentane was constructed in OpenFOAMv7 by referring to the DIPPR and Lawrence Livermore National Laboratory databases. The i-pentane spray evaporation was calculated using the sprayFoam solver. Consequently, the spray numerical simulation with i-pentane was successfully executed. These results demonstrate the feasibility of adding new liquid fuels to OpenFOAM without modifying the existing estimation framework.

Keywords: OpenFOAM, Thermophysical properties, Liquid, CFD

1. はじめに

内燃機関の噴霧、燃焼過程におけるシミュレーションは燃料の微粒化および燃焼過程の理解や排ガス低減や燃焼改善の評価のために大変重要である。特に燃料の熱物性値はシミュレーションの精度に大きく影響を及ぼす。OpenFOAM はオープンソースの CFD シミュレーションソフトウェアとして広く使用されているが、OpenFOAM を用いて噴霧燃焼シミュレーションを実施するには対象となる燃料の熱物性値が必要となる。標準データベースには水、窒素、アルゴン、炭化水素の一部が登録されているが、n-ペンタンや C17 以上の直鎖や側鎖炭化水素などの軽油やガソリンを構成する成分の多くは未対応である。よって、現実的な燃料を用いた噴霧燃焼シミュレーションの実施には制約がある。これまでにガソリンの熱物性値を新たに OpenFOAM に導入した報告がある[1]が、ガソリンは多成分燃料であることから、新たに混合割合に対する推算式を導入する必要がある。また、ガソリンの大部分の熱物性値は不明であることから、ある単成分燃料を仮定して設定されている。本研究では単成分燃料の熱物性値を文献により参照して、既存の熱物性推算式を改変せずに熱物性値を導入する手法を示すことを目的とする。本報ではガソリンの一成分であり、標準データベースに登録されていない単成分燃料の i-ペンタンに注目し、熱物性データベースを構築、導入して、計算が破綻せずに噴霧燃焼シミュレーションを実行できるか確認した。

2. OpenFOAM における熱物性データベースと推算式の概要

OpenFOAM における標準のデータベースは 30 種類である (OpenFOAMv7 のデータベースのファイルの場所: /src/thermophysicalModels/thermophysicalProperties/liquidProperties)。データベース中に存在する燃料ファイル内には温度に依存しない燃料固有の熱物性および代表の熱物性値 (分子量, 臨界温度, 臨界圧力, 臨界体積, 臨界圧縮係数, 三重点温度, 三重点圧力, 標準沸点, 双極子モーメント, Pitzer's 偏心因子, 溶解パラメータ) が記述され, 温度によって変化する物性値は, 各熱物性に対して設定される定数 (以下, 物性定数) $a \sim f$ および必要に応じて燃料温度 T , 臨界温度 T_c を用いた式(1)~式(8)に

^{††} E-mail address of corresponding author: m-oshima@pu-toyama.ac.jp

(Received January 26, 2026; accepted June 5, 2026; published July 6, 2026)

示す多項式近似式で与えられる[2][3]. 各式には物理的な意味はなく, 各熱物性を正確に推算できるかが重要となる. OpenFOAM では温度によって変化する物性値は密度, 蒸気圧, 蒸発熱, 液体の熱容量, 液体のエンタルピー, 理想気体の熱容量, 第 2 ビリアル係数, 液体の動粘度, 気体の動粘度, 液体の熱伝導率, 気体の熱伝導率, 表面張力, 気体の拡散係数であり, 各燃料に対応した物性定数と推算式が用いられる.

$$NSRDSFunc0 = a + bT^2 + cT^3 + dT^4 + eT^5 + fT^6 \quad (1)$$

$$NSRDSFunc1 = \exp\left(a + \frac{b}{T} + c \log(T) + dT^e\right) \quad (2)$$

$$NSRDSFunc2 = \frac{aT^b}{1.0 + \frac{c}{T} + \frac{d}{T^2}} \quad (3)$$

$$NSRDSFunc4 = a + \frac{b}{T} + \frac{c}{T^3} + \frac{d}{T^8} + \frac{e}{T^9} \quad (4)$$

$$NSRDSFunc5 = \frac{a}{b^{1+\left(1-\frac{T}{c}\right)^d}} \quad (5)$$

$$NSRDSFunc6 = a * (1 - T_r)^{(b+cT_r+dT_r^2+eT_r^3)} \text{ 但し, } T_r = \frac{T}{T_c} \quad (6)$$

$$NSRDSFunc7 = a + b \left(\frac{\frac{c}{T}}{\sinh\left(\frac{c}{T}\right)} \right)^2 + d \left(\frac{\frac{e}{T}}{\cosh\left(\frac{e}{T}\right)} \right)^2 \quad (7)$$

$$NSRDSFunc14 = \frac{a^2}{t} + b - t \left(2ac + t \left(ad + t \left(\frac{c^2}{3} + t(0.5cd + 0.2d^2t) \right) \right) \right) \text{ 但し, } t = 1.0 - \frac{T'}{T_c}, \quad T' = \min(T, T_c) \quad (8)$$

気体の拡散係数は気体の温度 T , 圧力 p および物性定数 a , b , w_f , w_a を用いた式(9)で与えられる.

$$APIdiffCoeffFunc = 3.6059 \times 10^{-3} \left(\frac{1.8T^{1.75}\alpha}{p\beta} \right) \text{ 但し, } \alpha = \left(\frac{1}{w_f} + \frac{1}{w_a} \right)^2, \quad \beta = (a^3 + b^3)^2 \quad (9)$$

3. i-ペンタンの熱物性データベースの導入

i-ペンタンの熱物性値は文献[2][3]を参照し, 温度変化に対する各熱物性値を式(1)~式(9)により計算するように設定した. 表 1 は i-ペンタンの各熱物性値に対応する物性推算の方程式をまとめたものである. 表には物性値に対応する本論文での式番号と OpenFOAM でのクラスの名称を記載した. なお, エンタルピーは過去の測定結果と比較したところ, 実測値と大きく異なる結果となったことから, NASA の多項式を用いて推算した[4]. 式(10)に示す NASA の多項式は化学反応速度シミュレーションソフトウェアの CHEMKIN など熱物性値の推算のために使用されており, 燃料熱物性のデータベースが公開されている. 式(10)は気体定数 R および物性定数 $a \sim f$ を用いて表すことができるが, 式(11)の様に变形すると式(1)と同等となる. i-ペンタンの熱物性定数は Lawrence Livermore National Lab. で公開されている n-Heptane Detailed Mechanism Version 3 の Thermodynamic Parameters から参照した[5].

$$Enthalpy = R \times \left(aT + \frac{b}{2}T^2 + \frac{c}{3}T^3 + \frac{d}{4}T^4 + \frac{e}{4}T^4 + f \right) \quad (10)$$

$$= RaT + R\frac{b}{2}T^2 + R\frac{c}{3}T^3 + R\frac{d}{4}T^4 + R\frac{e}{4}T^4 + Rf \quad (11)$$

詳細な i-ペンタンの熱物性データベース (IC5H12.C のコンストラクターの一部で熱物性値, 物性推算のための定数を入力する必要のある部分) は付録 A に示した. このうち, 拡散係数はデータベースの欠落により n-ヘプタンと同じ値とした. なお, 他の燃料の拡散係数を参照したところ, n-ヘプタンのものを用いている.

Table 1 Equations of physical properties of i-pentane

Properties	Unit	Eqn. No.	Class name in OpenFOAM
Density	kg/m ³	(5)	NSRDSFunc5
Vapour pressure	Pa	(1)	NSRDSFunc1
Heat of vaporization	J/kg	(6)	NSRDSFunc6
Liquid heat capacity	J/(kg K)	(1)	NSRDSFunc0
Liquid enthalpy	J/kg	(1)	NSRDSFunc0
Ideal gas heat capacity	J/(kg K)	(7)	NSRDSFunc7
Second virial coefficient	m ³ /kg	(4)	NSRDSFunc4
Liquid dynamic viscosity	Pa s	(2)	NSRDSFunc1
Vapor dynamic viscosity	Pa s	(3)	NSRDSFunc2
Thermal conductivity	W/(m K)	(1)	NSRDSFunc0
Vapor thermal conductivity	W/(m K)	(3)	NSRDSFunc2
Surface tension	N/m	(6)	NSRDS Func6
Vapor diffusivity	m ² /s	(9)	APldiffCoefFunc*

* No data for iC5H12

4. i-ペンタンの噴霧シミュレーション

4.1. 計算条件および境界条件

表 2 に計算条件を、図 1 に計算対象空間の概略を示す。計算ソルバには OpenFOAMv7 の SprayFoam を用い、本研究ではチュートリアル の aachenBomb を基に計算条件などを設定した。溶液には溶液温度 290 K の i-ペンタン (i-C₅H₁₂) を噴孔径 190 μm のノズルから噴射期間 1.25 ms で 6.0 mg 噴射した。噴霧外縁角度 (噴射軸から噴霧外縁までの角度) は 20 deg. で、内縁角度は 0 deg. の中実とし、代表粒径 D_{mean} が 150 μm の溶液を Rosin-Rammler の粒径分布 (最小粒径 D_{min} : 1 μm , 最大粒径 D_{max} : 150 μm , 頻度分布 n : 3) で噴射させた。雰囲気温度は 400 K で、大気圧 (101.3 kPa) の空気である。計算対象領域は高さ 100 mm, 奥行き, 幅ともに 20 mm であり、高さ方向に 100 分割, 奥行き, 幅ともに 41 分割とした。噴射位置は高さ 99.5 mm である。6 面ともに壁面の境界条件とした。

4.2. シミュレーション結果と n-ヘプタンとの比較

新たに導入した i-ペンタンの熱物性値を用いてシミュレーションを実施したところ、計算は安定して進行したことを確認した。図 2 に噴射後 1.0 ms における噴霧シミュレーション結果を示す。蒸気濃度分布は噴射軸平面における縦断面である。また比較のために同条件でシミュレーションした n-ヘプタンの結果も示す。i-ペンタンの大気圧における沸点 T_{boil} は 300 K で、n-ヘプタンの沸点 T_{boil} は 371 K であることから、i-ペンタンの蒸発量は n-ヘプタンと比較して多くなり、液滴の粒径も小さくなることが予測される。液滴の空間的な粒径分布に注目してみると噴射弁近傍においては粒径に大きな違いはないが、噴霧の下流部においては i-ペンタンでは小さな粒径の液滴が形成されたことを確認できる。また、i-ペンタンの噴霧は蒸発量が n-ペンタンと比較して多いため、濃い蒸気濃度となることも確認できる。図 3, 図 4 は蒸気質量および液相長さの時系列変化を示したものであり、沸点の違いによる蒸気質量および液相長さは噴射開始から大きく異なり、予測どおり i-ペンタンの蒸気質量は n-ヘプタンと比較して多くなり、i-ペンタンの液相長さは n-ヘプタンより小さくなる。この結果からも沸点の低い i-ペンタンの熱物性の導入によるシミュレーション結果へ反映できていることを示している。ただし、本報では新たに熱物性値を導入したにすぎず、本シミュレーション結果の精度検証には噴霧外形、蒸気質量、液相長さなどの実験結果と比較する必要がある。また、実験結果を再現できるシミュレーション結果を得るにはソルバの改善および噴射条件などを検討する必要がある。

Table 2 Calculation conditions

Fuel	i-C ₅ H ₁₂
Fuel temperature	290 K
Injection quantity	6.0 mg
Nozzle diameter	190 μm
Injection duration	1.25 ms
Spray inner angle θ_{in}	0 deg.
Spray outer angle θ_{out}	20 deg.
SizeDistribution	Rosin-Rammler D_{mean} : 150 μm, D_{min} : 1 μm, D_{max} : 150 μm, n : 3
Ambient temperature	400 K
Ambient pressure	101.3 kPa
Ambient gas	Air

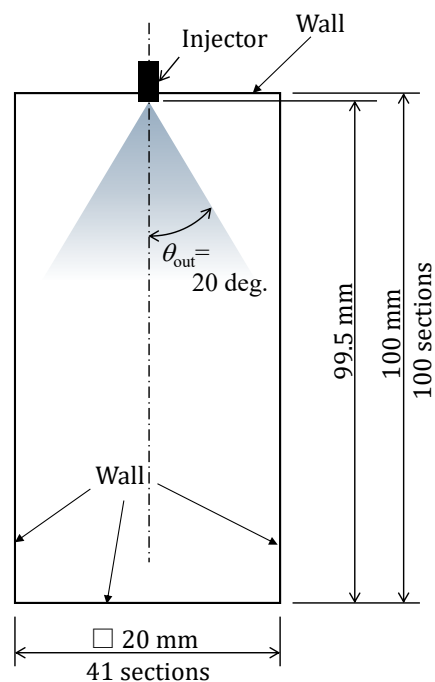


Fig.1 Computational mesh and boundary conditions
(Outer spray-cone angle, $\theta_{out} = 20$ deg.)

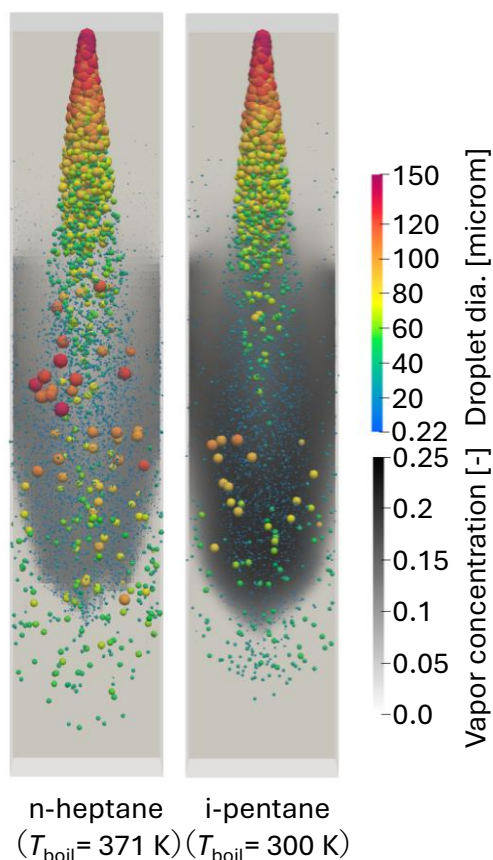


Fig.2 Droplet size distribution and vapor concentration on the vertical section at 1 ms from injection start

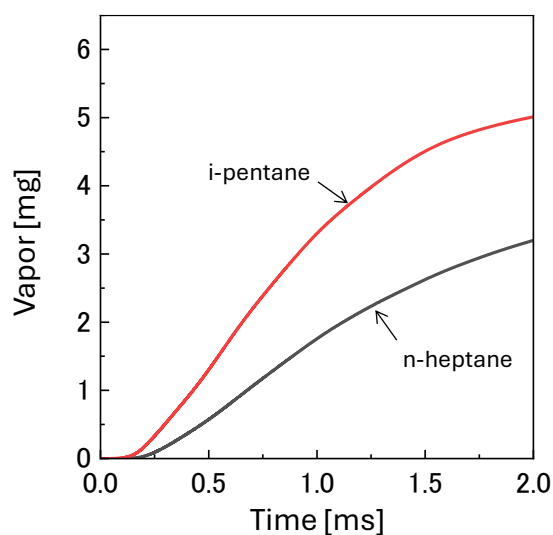


Fig.3 Temporal change of vapor mass for i-pentane and n-heptane

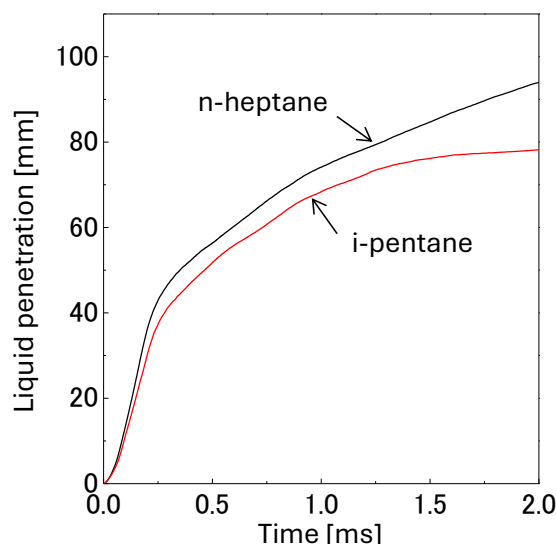


Fig. 4 Temporal change in liquid penetration for i-pentane and n-heptane

5. まとめ

本報では OpenFOAM にすでに実装されている物性推算モデルを改変せずに、既存データベースに登録されていない i-ペンタンの熱物性値を新たに導入して、`sprayFoam` ソルバを用いて噴霧蒸発をシミュレーションした。その結果、安定的に計算を実行することに成功し、チュートリアル of `n`-ヘプタンのケースの場合と比較して、短い液相長さ、小粒径、濃い蒸気濃度の表現が可能となった。これらの結果は DIPPR [2]などのデータベースを使用すれば、OpenFOAM に用意されていない溶液の熱物性値を導入することが可能であるという事を示している。しかし、本報の様に一部の熱物性値が不足することがあると思われ、その場合は類似する構造式の熱物性値を導入するなどの工夫が必要となる。ただし、本報の結果は単成分の溶液を追加する場合にのみ有効であり、ガソリンなどの多成分溶液を用いた場合では混合溶液に対する熱物性値の推算が必要となる。OpenFOAM にもモデルを用いた物性推算方法が用意されていることから、これらを用いる必要がある。

本報で使用した i-ペンタンの熱物性データベース、`sprayFoam` ソルバは GitHub にて公開している[6]。

参考文献

- [1] Chen Huang, OpenFOAM Tutorial Implementation of Gasoline Properties in OpenFOAM Library, https://www.tfd.chalmers.se/~hani/kurser/OS_CFD_2009/ChenHuang/OFProject1211.pdf, (accessed 2023-10-06)
- [2] Thomas E. Daubert, Ronald P. Danner, Design Institute for Physical Property Data, American Institute of Chemical Engineers, Data compilation tables of pure compounds, 1985, p.36.
- [3] Don W. Green, Marylee Southard, Perry's Chemical Engineer's Handbook 9th edition, McGraw-Hill, 2019, pp.2-1-2-362.
- [4] Robert J. Kee, Fran M. Rupley, James A. Miller, Chemkin-II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics, Sandia Report, SAND89-8009B, 1995, <https://www.osti.gov/servlets/purl/5681118>, (accessed 2023-10-23).
- [5] Lawrence Livermore National Laboratory, <https://combustion.llnl.gov/mechanisms>, (accessed 2023-10-02).
- [6] GitHub, https://github.com/Motohiro-Oshima/of7_sprayFoam_ic5h12, (accessed 2026-1-16).

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP23K03716 の助成を受けたものである。ここに謝意を示す。

付録 A i-ペンタン熱物性データベース (IC5H12.C)

本報で導入したコードの i-ペンタンの熱物性に関する部分を [Code 1](#) に示す。熱物性データベースの詳細は本シミュレーションで使った sprayFOAM ソルバとともに [GitHub](#) にて公開している[6]。

Code 1 A part of IC5H12.C.

```

1  Foam::IC5H12::IC5H12()
2  :
3      liquidProperties
4
5      (
6          72.150,      //Molecular Weight [kg/kmol]
7          460.43,      //Critical Temperature [K]
8          3.3812e+6,   //Critical Pressure [Pa]
9          0.306,       //Critical Volume [m3/kmol]
10         0.270,       //Critical Compress Factor [-]
11         113.25,      //Triple Point Temperature [K]
12         1.1569e-4,   //Triple Point Pressure [Pa]
13         300.99,      //Normal Boiling Point [K]
14         4.3363e-31,  //Dipole moment [-]
15         0.2275,      //Pitzer's Acentric Factor [-]
16         1.3857e+4    //Solubility Parameter [(J/m^3)^0.5]
17     ),
18
19     rho_(66.37038, 0.27815, 460.4, 0.28667), //Density calculates by using NSRDS Func5 [kg/m3]
20     pv_(71.308, -4976, -7.7169, 8.7271e-06, 2.0), //Vapor pressure calculates by using NSRDS Func1
21     [Pa]
22     hl_(460.43, 5.2253e+5, 3.9520e-1, 0.0, 0.0, 0.0), //Heat of Vaporization calculates by using
23     NSRDS Func6 [J/kg]
24     Cp_
25     (
26         1501.065,
27         2.02359624,
28         -0.00404719,
29         2.0929e-5,
30         0.0,
31         0.0
32     ), //Liquid heat capacity calculates by using NSRDS Func0 [J/kgK]
33     h_
34     (
35         -3124090,
36         1818.086819,
37         1.522861242,
38         -0.00034906,
39         4.07806e-8,
40         -1.89708e-12
41     ), //Liquid enthalpy calculates by using func0 [J/kg]
42     Cpg_(9.9182e+2, 5.4387e+3, 6.3720e+2, 1.0017), //Ideal gas heat capacity calculates by using
43     NSRDS Func7 [J/(kgK)]
44     B_
45     (
46         2.3937e-3,
47         -2.6016,
48         -231850.0,
49         3.9169e+16,
50         3.3126e+16
51     ), //Second virial coefficient calculates by using NSRDS Func4 [m3/kg]
52     mu_(-12.596, 889.11, 0.20469, 0.0, 0.0), //Liquid dynamic viscosity calculates by using NSRDS
53     Func1 [Pas]
54     mug_(2.4344e-08, 0.97376, -91.597, 18720.0), //Vapor dynamic viscosity calculates by using NSRDS
55     Func2 [Pas]
56     kappa_(0.21246, -0.00033581, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0), //Thermal conductivity calculates by using
57     NSRDS Func0 [W/(mK)]
58     kappag_(0.0008968, 0.7742, 456.0, 230640.0), //Vapor thermal conductivity calculates by using
59     NSRDS Func2 [W/mK]
60     sigma_(460.43, 0.050926, 1.2078, 0.0, 0.0, 0.0), //Surface tension calculates by using NSRDS
61     Func6 [N/m]
62     D_(147.18, 20.1, 72.150, 28) // Vapor diffusivity (APIdiffCoefFunc) [m2/s] ; temporarily set to n-

```

55 heptane values
 {}
