

## 研究成果報告書

所属機関	職名	氏名
九州大学 大学院工学研究院機械工学部門	助教	安藤 詩音

## 研究テーマ

ベイズ的手法による次世代航空バイオ燃料のすす生成予測技術の開発

## 研究報告

## 1. 研究の背景と目的

内燃機関や焼却炉からの環境負荷物質の低減を目指すためにも、すすの生成メカニズムを明らかにし、モデリングによって生成挙動を予測することは重要である。すすは主に炭化水素燃料の不完全燃焼により生じ、その数密度関数はポピュレーションバランス方程式 (PBE) によって支配される。すなわち、すすの数密度や粒径分布を把握するためには、反応性流体に対する CFD に加えて、すす粒子生成・成長を考慮した PBE を適切に解いていく必要がある。

これまで PBE の解法として多くの手法が提案されてきた。PBE の解法は MC (モンテカルロ) 法・セクショナル法・モーメント法の 3 つに大別される。そのうちモーメント法は MC 法やセクショナル法に比べて計算負荷が比較的小さいことから、拡散火炎や乱流火炎など複雑な燃焼場においても適用が試みられている。モーメント法においては数密度関数の統計量 (非負整数次モーメント) に関する輸送方程式 (モーメント方程式) をいくつか解く。しかし、詳細は後述するが、輸送方程式のソース項に未知数 (分数次モーメント、負整数次モーメント) が含まれるため、何かしらの手法によってこの方程式を閉じる必要がある。その手法の違いによって、モーメント法はさらに 2 つに大別されて、求積法ベースの QMOM (Quadrature Method of Moments) と補間過程ベースの MOMIC (Method of Moments with Interpolative Closure) と一般的に呼ばれる。本研究ではより計算効率の高い MOMIC を対象とした。

先ほど述べたように、MOMIC では分数次・負整数次モーメントを求める際に、非負整数次モーメントから補間計算を実施する。補間手法については Freanklahn らが提案したように、Lagrange 補間が一般的に用いられている。これは Lagrange 補間が、補間値同士の差が大きいときに有効であるためであるが、一方でルンゲ現象と呼ばれるような非物理的な数値振動も引き起こしやすいことが指摘されている。さらに、これも後に詳しく述べるが、MOMIC では補間計算を計算ステップごとに 2 回実施することから、それによる誤差が毎回蓄積される。しかし、この補間によって蓄積された誤差について検討された先行研究は限定されている。

そこで、本研究では回帰予測手法としてのガウス過程を用いて分数次・負整数次モーメントを計算することで、MOMIC の改善を試みた。ガウス過程はノンパラメトリックな回帰手法であるため、Lagrange 補間等に比べてよりロバストであり、ルンゲ現象の回避が期待される。また、予測値の分散 (不確かさ) も同時に取得できるため、回帰中における誤差の評価も可能となる。本研究では 0 次元でのこの新たな計算手法によるすす生成計算を実施した。なお、本研究ではすすの一次粒子の成長までを考慮し、その後の一次粒子同士の凝集等による成長プロセスについては考慮していない。

## 2. 研究成果および考察

0 次元での定温定圧条件における計算を実施し、Alexiou らの衝撃波管実験と比較した。初期圧力は 258 kPa で固定し、初期温度を 1800 から 2200 K まで 100 K ごとに変化させた。燃料はトルエンであり、初期モル分率はアルゴン 99%、トルエン 1% とした。気相反応モデルとして KM1 (231 種、1350 素反応) を用いた。反応計算は Chemkin-Pro を使用した。

ここで、ガウス過程の計算に必要な共分散行列はハイパーパラメータ  $\theta$  を 3 つ含んでおり、これらのパラメータは予めユーザーによって指定されなければならない。しかしながら、本研究は非定常計算であるから、適切なハイパーパラメータは時々刻々と変化することが考えられる。そこで、まずガウス過程を含めない MOMIC での計算を実施し、定常になる時刻を算出した。

図 1 にガウス過程を含めない MOMIC を用いた、初期温度 2000 K でのピレンのモル分率と  $M_0$  (すす粒径分布の 0 次元モーメント、すす粒子個数に比例) の時間履歴を示す。なお、本研究ではすす核生成はピレンの重合のみによって生じると仮定しているため、ピレンに着目した。図 1 に示されるように、計算開始時すぐにピレンが生成され、その直後に消費に転じた。 $M_0$  は初め急増して以降、徐々に増大しており、これはすす一次粒子が初期に形成されて以降、徐々に成長していったことを示している。2 msec においても定常状態とはなっていないものの、初期の変化に比べると変化率は十分小さい。そこで、本研究では 1 msec までガウス過程無しでの MOMIC を適用し、1 msec 以降は 1 msec で適切と思われるハイパーパラメータを固定してガウス過程有りでの MOMIC によるすす生成計算を実施した。

図 2 に 1 msec における 0 から 5 次モーメント  $M_0 \sim M_5$  とそれらを基に Lagrange 補間およびガウス過程で

算出したすす粒径分布の分数次モーメント（凝集項計算で必要になるのは $M_{-1}, M_{-5/6}, \dots, M_{31/6}$ の27個）を示す。ハイパーパラメーターはそれぞれ $\theta_1 = 1.0, \theta_2 = 0.4, \theta_3 = 0.1$ としたが、最適化は実施しておらず、これについては今後の課題である。図2に示されるように、ガウス過程を適用した場合でもLagrange補間の場合とそれほど大きな差が見られなかった。また、ガウス過程では不確かさが得られたが、モーメントの値そのものに比べて十分小さかった。

すす収率は燃料中に含まれる炭素原子のすすに転化した割合を示しており、 $M_1$ から算出される。また、実験的にも計測可能であるため、すすモデリングにおける検証値として度々用いられる。図3に1.0, 1.5, 2.0 msecにおけるすす収率の値を示す。図3にはAlexiouらの実験結果も示している。図3に示されているように、温度1900 K付近をピークに凸状の傾向を示した。これはすす生成に特徴的なベル特性と呼ばれ、本研究においてもその特性を捉えることができている。また、実験値と比較してすす収率は小さい値を示したが、これはすす核生成種としてピレンのみを考慮したためと考えられる。今後の検討が必要である。また、ガウス過程で評価したすす収率の不確かさは、すす収率自体の値に比べて小さく、プロットの大きさ以下であった。これは図2で見たように、分数次モーメントを求める過程で、不確かさが値自身に比べて小さかったためと考えられる。

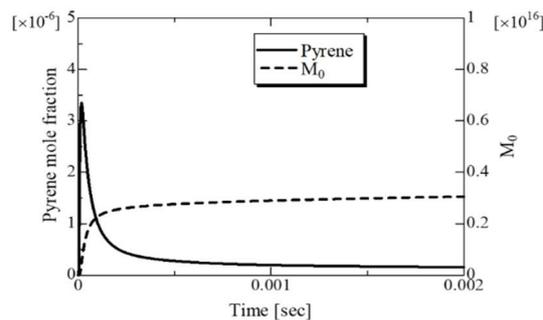


Fig. 1 Histories of mole fraction of pyrene and  $M_0$  derived with MOMIC.

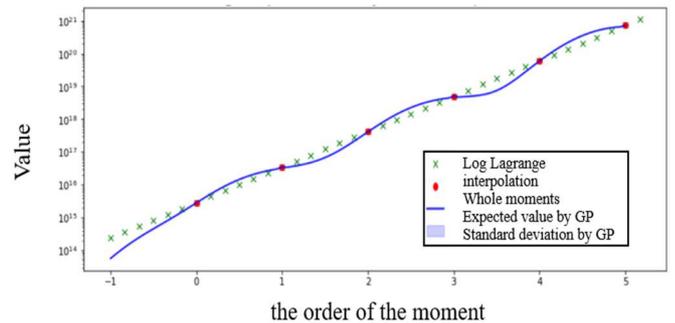


Fig. 2 Fractional moments at 1.0 msec at 2000 K, 258 kPa. They are derived with Lagrange interpolation or Gaussian Process (GP).

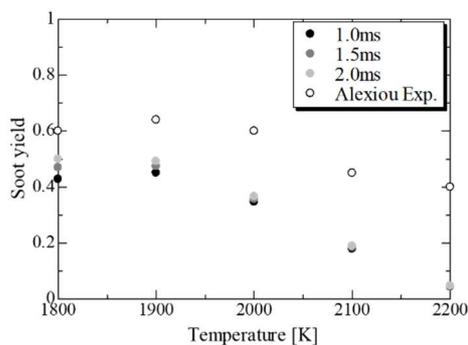


Fig. 3 Soot yields at various temperature derived with MOMIC with GP. The experimental data reported by Alexiou et al. was also plotted.

### 3. 将来展望

本研究は0次元におけるMOMICへのガウス過程の適用を検証した。今後はこれを3次元計算へと展開し、実燃焼器における適合性と有効性を明らかにしていく。また、精度検証段階においてはMOMICよりも高精度な手法（セクショナル法など）との比較が必要であり、そのために、MOMICのみならずこのような手法もコードに実装していく予定である。

### 4. 研究発表

「乱流非予混合火炎におけるすす生成計算のモデル精度におよぼす反応メカニズムの影響」、第60回燃焼シンポジウム、2022年11月、口頭発表

また、年内への日本機械学会誌への投稿を予定している。