



Title	高負荷燃焼とNOx低減の同時機能実現に向けたCO ₂ フリー燃焼器の開発
Author(s)	奥村, 幸彦
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2021, 10, p. 57-60
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/83291
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

高負荷燃焼と NOx 低減の同時機能実現に向けた CO₂ フリー燃焼器の開発

奥村 幸彦

香川大学 創造工学部 機械システム工学領域

1. はじめに

近年、水素を効率よく運搬・貯留するために水素キャリアとしてアンモニアが注目されている (図 1) [1]-[2]。工場では余ったアンモニアを水素用途のみではなく、直接的に CO₂ フリー燃料として熱利用することが実用的観点から望まれる [2]。アンモニア (NH₃) は、H₂ と比較してカロリーベースの高い燃料 (383 kJ/mol-NH₃) でありながら、その火炎伝搬速度が低い [2]-[4] ため、即ち難燃性を示すために燃料としての利用度は低い、かつ強制的に燃焼させると大量の NOx (有害排ガス) を生成する。直接燃焼の実現のためには、NH₃ の最適な燃焼方法の設計と燃焼メカニズムの解明が必要である。一般的に、乱流燃焼の場合に高負荷 (単位体積当たりの発熱量の増大) が可能となり、ボイラ設計において装置の小型化が可能となる。そこで本研究では、アンモニアを水素保炎により安定燃焼させ、先ずアンモニアの火炎構造を数値計算で明らかにする。火炎構造と新燃料であるアンモニアの燃焼反応を詳細にふまえた上で、高負荷燃焼および低 NOx 化を可能とする狙いがある。

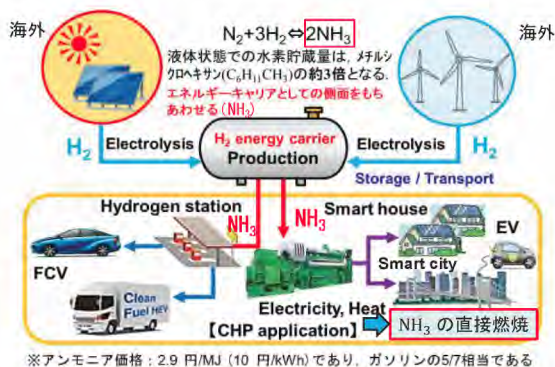


図 1: NH₃ キャリアによるサプライチェーンの構想

2. 反応性熱流体計算

2.1 バーナーコンセプトおよび解析手法

図 2 (写真) に示すように、重管の内側よりそれぞ

れアンモニア、水素、空気を流すことで保炎されたアンモニア火炎が発生する。重管の内側よりアンモニア、水素を別々に 3m/s で流し、高速空気流 U_H 、周囲流をそれぞれ 3m/s として生成した火炎を「同軸噴流拡散火炎」と定義する。「3 重噴流拡散火炎」は、バーナー中心から燃料流 (NH₃ 及び H₂) を 3m/s で、高速空気流 U_H を 3.0~11.0 m/s で、周囲空気流を 3m/s でそれぞれ噴出した場合と定義するが、特に高速空気流 U_H が 8m/s の条件を代表的な 3 重噴流拡散火炎と位置づける。図 2 右図に示すように、中心軸対称の流れ場を設定した。支配方程式 (1)~(9) を解く。

・質量保存方程式 (連続の式)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = \rho_0 \quad (1)$$

・化学種の質量保存方程式

$$\frac{\partial \rho Y_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Y_s u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \right) + \omega_s \quad (2)$$

・エネルギー方程式

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho h u_j) = \frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} - \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + Q \quad (3)$$

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \rho D_s \frac{\partial Y_s}{\partial x_j} \quad (4) \quad D_s = D = \frac{\mu}{\rho Sc} \quad (5)$$

・気体の状態方程式

$$p = \rho R_0 T \sum_{s=1}^N \frac{Y_s}{M_s} \quad (6)$$

・運動量保存方程式 (NS 方程式 → RANS)

$$\frac{D U_i}{D t} = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (-R_{ij}) + \nu \Delta U_i \quad (7)$$

$$R_{ij} = \frac{2}{3} k \delta_{ij} - \frac{\mu_T}{\rho} \left(\frac{\partial U_j}{\partial x_i} + \frac{\partial U_i}{\partial x_j} \right) \quad (8) \quad \mu_T = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (9)$$

ρ : 密度 [kg/m ³]	Y_s : 化学種 s の質量分率 [-]
u_j : 流速ベクトルの x_j 方向成分 [m/s]	ρ_0 : 生成消滅項
Sc_s : 化学種 s のシュミット数 [m/s]	μ : 粘性係数 [Pa·s]
ω_s : 化学反応による Y_s の生成や消滅を示す項	p : 圧力 [Pa]
h : エンタルピー [kJ]	Q : ソース項
λ : 熱伝導率 [W/m·K]	R_0 : 一般ガス定数
M_s : 化学種 s の分子量	U_i : 平均流速 [m/s]
R_{ij} : レイノルズ応力 [m ² /s]	ν : 動粘度 [m ² /s]
k : 乱流エネルギー [m ² /s ²]	ε : 乱流エネルギー散逸率 [m ² /s ³]
δ_{ij} : クロネッカーのデルタ	

以下、同軸噴流拡散火炎（層流燃焼）と 3 重噴流拡散火炎（乱流燃焼）を比較し、火炎構造を調査する。

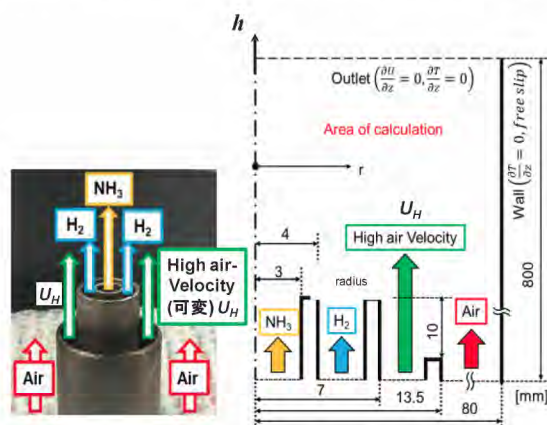


図 2：解析モデルの概要図

2.2 計算領域と計算格子

図 3 に示すように、計算領域は 1 重管流入部を原点とし、噴流方向を h 軸に設定した。中心角は、計算負荷を軽減する目的から 5° にし、軸対象設定とした。計算格子点間隔は不等間隔であり、乱流発生領域と考えられるリム付近等では計算格子が細くなっている。下流域または中心軸から半径方向に大きく離れた場合には計算格子が粗くなる。計算領域のサイズは流れ方向に 800 mm、半径方向に 80 mm、それぞれのリム厚さは 1 mm、総格子点数は 87963 点である。本研究では素反応機構（GRI Mech 3.0 + Okafor モデル: 66 式）を用いて解析を行った[5]-[6]。

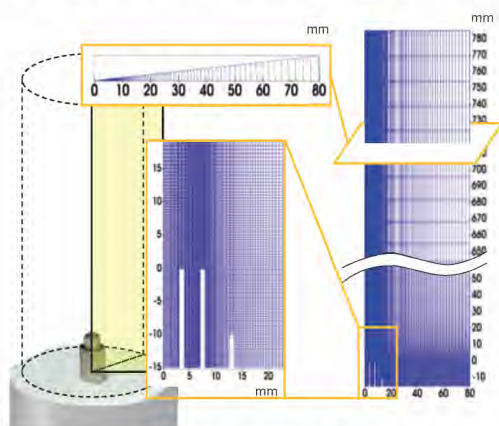


図 3：計算領域と計算格子

3. 大規模数値解析の結果と考察

3.1 温度分布に及ぼす高速空気流の影響

3 重噴流拡散火炎における半径方向の温度分布（計算値、実験値）をそれぞれ図 4、図 5 に示す。3

重噴流（乱流混合）では中心軸上の高さ方向 h に対して燃焼反応が急速に進む。上流における中心軸上の温度分布は、燃料のみであるため温度が低く、燃料と空気の共存域(Flame zone)において最高温度に達する。実験値、計算値のどちらも上流火炎基部付近では 2 ピークを有する鞍型分布となり、下流に移行するに伴い正規分布型の温度分布に変化する。

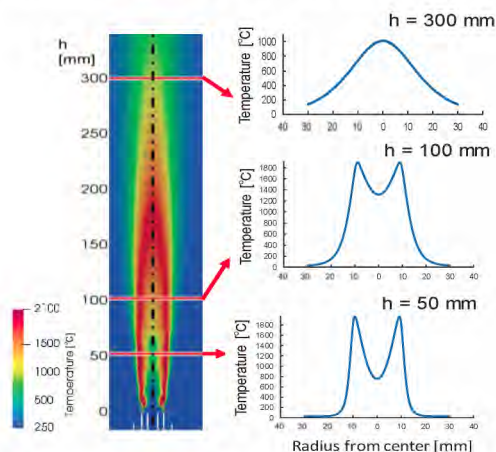
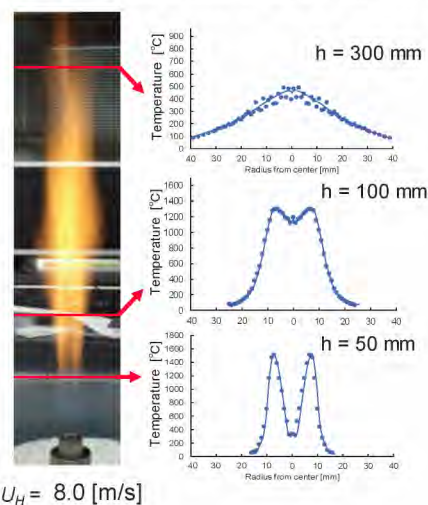


図 4：半径方向の温度分布(計算結果： $U_H = 8.0$ m/s)



$U_H = 8.0$ [m/s]

図 5：半径方向の温度分布(実験結果： $U_H = 8.0$ m/s)

ここで、同軸噴流拡散火炎（層流火炎）における温度分布（計算値）を図 6 に示す。反応が緩慢で半径外側への燃料の拡散時間が増加するので、層流での火炎帯の半径が乱流火炎のそれと比較して外側に広がり、火炎長さも 3 重噴流拡散火炎と比較して長い。（図には示さないが、半径方向温度分布および中心軸上温度分布の双方が実験と一致する。）図 7 に、3 重噴流拡散火炎における高さ $h = 14$ mm、28 mm、111.5 mm の高さでの半径方向のせん断層域 ($|dU/dr|$)

を示す。中央流と高速空気流の間で大きな速度差が生じ、強いせん断が生じている。同軸噴流拡散火炎において中心燃料噴流と周囲空気流の間にもう一つの高速空気流が付加され、これにより火炎周辺部に乱れを与えることができ（即ち、強い乱流混合が実現でき）、水素火炎から中心部への高速な熱移動が起こる（図8）。外側から中心部へ高濃度のOH, Hの供給により難燃性NH₃の燃焼が維持される。数値計算においても、乱流混合と反応促進された短い火炎が観測され、安定な高負荷燃焼が実現化できている。

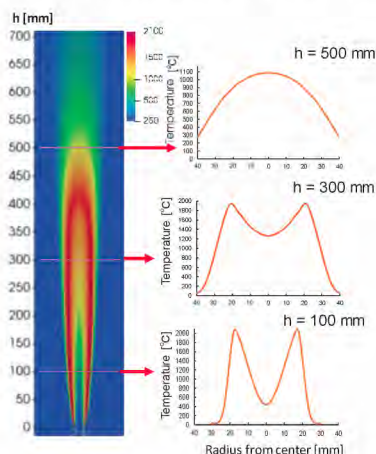


図6：半径方向の温度分布(計算結果： $U_H = 3.0\text{m/s}$)

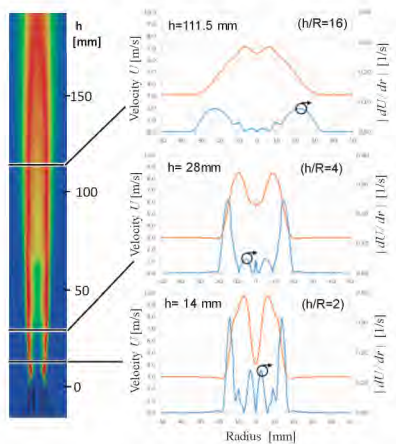


図7：上流から後流に至る半径方向速度とせん断領域分布 ($U_H = 8.0\text{m/s}$)

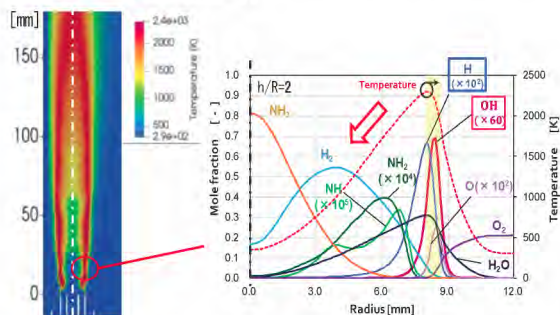
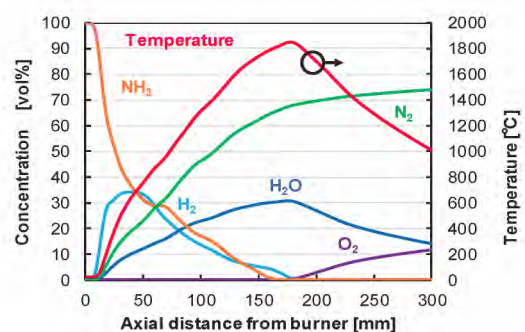


図8：半径方向のラジカル及び温度分布($U_H = 8.0\text{m/s}$)

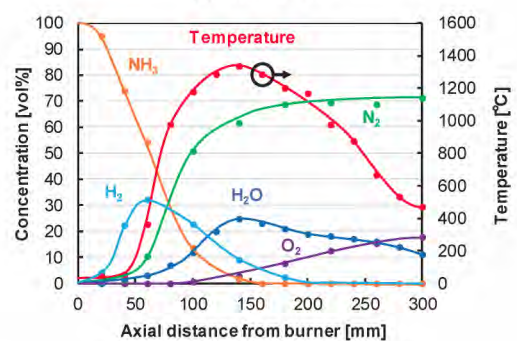
3.2 火炎構造に及ぼす高速空気流の影響

3重噴流拡散火炎の燃焼構造を図9に示す。計算値の中心軸上温度は、バーナー高さ178mmで、実験値では140mm付近で最高値に至る。燃料であるNH₃、H₂は、計算値においては高さ160mm, 180mmで、実験値ではそれぞれの高さ150mm, 200mm付近で消費される。拡散火炎における最高温度は中心軸上NH₃が完全に消費される位置（高さ）と一致する。シミュレーション結果の中心軸上温度分布および化学種分布は実験結果とほぼ一致し、その精度が検証できた。3重噴流拡散火炎（乱流火炎）での中心軸上のH₂濃度は同軸噴流拡散火炎（層流火炎）でのそれと比較して低い。これは、乱流混合により補助水素が乱流燃焼に初期に消費され、軸中心へのH₂の拡散量が低く抑えられるためであった。加えて、3重噴流では乱流拡散係数が大きいため、NH₃火炎の中央に至る燃焼速度が速く、火炎長が短くなる。（難燃性NH₃の高負荷燃焼が実現化できている。）

図には示さないが、層流火炎では強い渦（混合）が発生しないため、乱流火炎と比較して燃料と空気の混合が緩やかに進み、温度も緩やかに上昇する。層流における中心軸上温度、化学種分布及び火炎長においても実験結果と一致することを確認している。



(a) 数値計算



(b) 実験

図9：中心軸上での化学種濃度分布 ($U_H = 8.0\text{m/s}$)

3.3 火炎安定性に及ぼす高速空気流の影響

図 10 上の写真に示すように、 NH_3 -air 火炎の発光スペクトルは、黄色～オレンジ色の化学発光を示す。 NH_3 -air 火炎では 543.6 nm から 650 nm にかけて特徴的な発光スペクトルが観察され、その主たる発光は NH_2 スペクトルであることが知られている[2]。

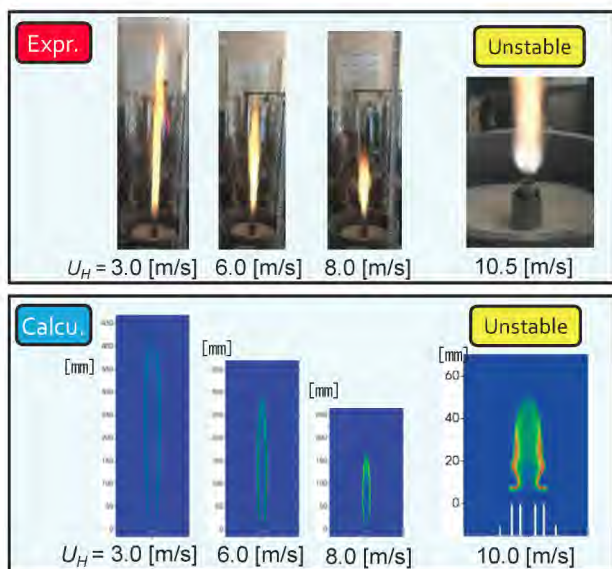


図 10：火炎長に及ぼす可変空気流 U_H の影響

このため、本計算ではバーナーのリムを原点として、 h 軸方向に NH_2 化学種濃度を抽出することで火炎長が整理された（図 10 下）。可変空気流速を 3 m/s から 10 m/s で変化させたとき、実験では流速の増加とともに火炎長は短くなり、火炎半径も同様に小さくなる。 U_H が 10.5 m/s で不安定となり火炎の浮き上がりが生じた。同様に、計算においても、上記の現象が、即ち流速増加に伴う乱流混合の促進度合がよく一致した。計算では、難燃性のアンモニアが 8～9 m/s 近くの高速気流中でも安定に燃焼維持できること、10.5 m/s で火炎の不安定化が生じる。即ち、安定性の限界がシミュレートできた。不安定性はバーナー基部における火炎振動に起因する。

3.4 NO_x 生成に及ぼす流れ場（層流・乱流）の影響

数値計算より、（図には示さないが、） NH_3 単体燃焼では NO_x の最大発生位置で 10000 ppm 超の NO_x が発生するのに対し、水素火炎で包含する手法では 2000～3000 ppm まで抑制できることが示された。こ

れにより本バーナーの設計コンセプトの妥当性が示された。加えて、空気中の N_2 を起源とする Thermal NO_x 生成と燃料中の N 成分を起源とする Fuel NO_x の生成を分離することで NO_x の生成機構を明らかにした。Thermal NO_x は、リム近傍の水素炎付近でのみ発生し、Fuel NO_x 値に比べて小さい。図 12 に、 N 系の主要なパス（ NO_x の生成・消滅反応速度）を示す。乱流火炎では水素-空気の激しい混合により NH 系ラジカルと O ラジカル、 OH ラジカルの反応が増大することで、層流火炎に比べて NO 生成が促進されることがわかった。今後、さらに数値シミュレーションを駆使し、バーナー開発を進めていく。

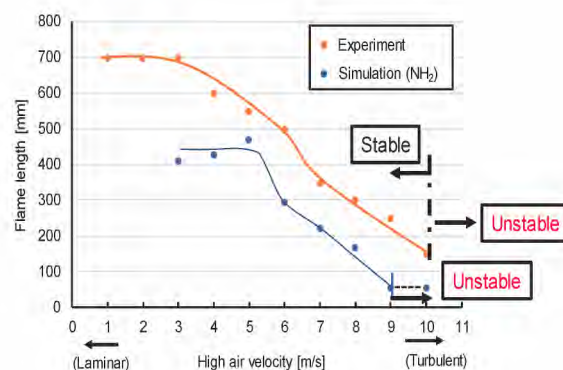


図 11：乱流強さを変数とした安定燃焼の範囲

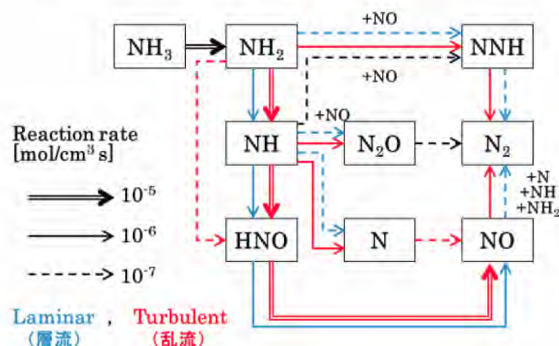


図 12： NO の生成機構（最大発生位置での反応）

参考文献

- [1] Y. Kojima, J. Surface Sci. Soc. Japan 36, 583-588, (2015).
- [2] H. Kobayashi, et al., J. Comb. Soc. of Japan 58-, 41-48, (2016).
- [3] A. Hayakawa, et al., Mech. Eng. J. 2, No.14-00402, (2015).
- [4] U.J. Pfahl, et al., Comb. Flame 123, 140-158, (2000).
- [5] Berkeley, GRI-Mech, [http:// combustion.berkeley.edu/gri-mech/](http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/), (2020-02-13 confirmed)
- [6] E.C. Okafor, et al, Comb. Flame 187, 185-198, (2018).