

アンモニア高温空気燃焼におけるFlamelet法の高精度化に関する研究

樋口, 亮太

九州大学大学院総合理工学府総合理工学専攻機械・システム理工学メジャー

<https://hdl.handle.net/2324/7358387>

出版情報：九州大学, 2024, 修士, 修士
バージョン：
権利関係：



アンモニア高温空気燃焼における Flamelet 法の高精度化に関する研究

エネルギー熱物理科学研究室 樋口 亮太

1. 緒言

2050 年までのカーボンニュートラルの実現に向け、CO₂排出量の削減は重要な課題となっている[1]. そのためには、化石燃料依存の低減に伴うエネルギー需給構造の転換が必要であり、水素やアンモニアといった脱炭素燃料の利用技術の確立が必要不可欠である. 2020 年 12 月に発表された「グリーン成長戦略」では、燃料アンモニア産業の分野において、その利用技術に対して目標が掲げられ、2021 年度から「燃料アンモニアの工業炉利用」の取り組みが開始されている[2].

アンモニアは、肥料原料や汎用化学品原料として大量に使用され、その製造法は Haber-Bosch 法として確立されている. また、大気圧下での液化温度が -33°C と水素と比較して液化が容易である. 製造・輸送・貯蔵の既存技術が存在し、燃焼時に CO₂ を排出しないことから、次世代のエネルギーキャリアとしての可能性を十分に有している. また、工業炉から排出される CO₂ は約 1.5 億トンであり、日本の排出量全体の 13.5% [3] を占めることから、工業炉における燃料アンモニアの利用による CO₂ 排出量削減のインパクトは大きい. 一方で、アンモニアは層流燃焼速度が遅く、火炎温度が低いなど燃焼しにくい燃料であり、さらに、燃焼時には燃料中の窒素に起因した Fuel NO_x を生成する. そのため、アンモニアを燃料として幅広く使用するには、その燃焼特性を明らかにし、対処策を講じる必要がある.

高精度な燃焼数値解析を行う際には、詳細化学反応機構を用い、各素反応について Arrhenius 式を解く必要があるが、この手法の計算負荷は非常に高い. そのため、実燃焼器を対象とするような大規模な数値解析を行う際は、計算コストの観点から、乱流燃焼モデルの適用が避けられない. そこで、詳細化学反応機構を用いながらも計算負荷の低い乱流燃焼モデルである Flamelet 法 [4] が広く用いられてきた. しかし、Flamelet 法のアンモニア高温空気燃焼への適用例は限られており [5]、予測精度の十分な検証はされていない.

そこで本研究では、アンモニア高温空気燃焼の噴流火炎を対象に Flamelet 法を用いた 2 次元燃焼数値解析を実施し、燃焼モデルを用いず、詳細化学反応機構を直接考慮する詳細計算との比較を行うことで、その予測精度について検証を行う.

2. 解析手法

2.1 Flamelet 法

Flamelet 法では、2 次元燃焼数値解析に先立ち、あらかじめ層流の対向流拡散火炎や予混合火炎などの単純な火炎を対象に詳細化学反応機構を用いた燃焼数値解析を実施し、Flamelet table を作成する. Flamelet table は、燃料と酸化剤の混合割合を示す混合分率 Z や反応の進行度を表す反応進行変数 C と呼ばれるパラメータに対して、任意の物理量 φ (温度、化学種の質量分率など) を並び替え、下記のよ

うにテーブル化する.

$$\varphi = \varphi(Z, C) \quad (1)$$

2 次元燃焼数値解析においては、この Z や C の輸送方程式を解き、あらかじめ作成した Flamelet table を参照することで、燃焼反応を考慮する. 本研究では、Table 1 に示す 3 種類の Flamelet table を作成し比較を行う. なお、いずれの Flamelet 法においても、Lewis 数 $Le = 1$ を仮定する.

Table 1 Flamelet table

Cases	Calculated flame for tabulation	Calculation code
FPV	Steady counter-flow diffusion flame	FlameMaster[6]
UFPV	Unsteady counter-flow diffusion flame	FlameMaster
0D	0D autoignition flame	FK ³ [7]

2.2. 支配方程式

本研究では、33 化学種 228 素反応からなる Tamaoki ら[8]の詳細化学反応機構によりアンモニア燃焼反応を考慮する. 詳細計算、Flamelet 法の支配方程式は以下の通りである.

2.2.1 詳細計算

支配方程式は、質量、運動量、化学種の質量、およびエネルギーの保存式であり、理想気体の状態方程式とともに解く. また、拡散速度を Maxwell-Stefan 拡散により評価する場合 ($Le \neq 1$) と、 $Le = 1$ を仮定する場合の計算を行う.

2.2.2 Flamelet 法

支配方程式として、質量、および運動量の保存式に加え、化学種の質量、およびエネルギーの保存式に代わり、混合分率 Z 、および反応進行変数 C の輸送方程式を解く. 本研究では、 $C = Y_{H_2O} + Y_{H_2}$ により定義する. ここで、 Y は化学種の質量分率を示す.

2.3. 解析領域および解析条件

2 次元噴流拡散火炎を解析対象とする. 解析領域の概念図を Fig.1 に示す. 解析領域は主流方向に 100 mm、縦方向に 100 mm である. 1,473 K の酸化剤 (N₂/O₂: 94 vol%/6 vol%) で満たされた解放空間に対して、流入面中心の幅 1 mm の領域から、燃料である 300 K のアンモニアを平均流速 50 m/s で、その外側から 1,473 K の酸化剤を一樣流速 1 m/s で流入させる. 流入燃料の速度分布は 1/7 乗則に従い、最大の変動が 7.5% の白色雑音により、速度変動を与える. また、雰囲気圧力は 1 atm である. 計算格子数は主流方向、縦方向にそれぞれ 2,000 × 1,100 である. なお、本解析にはインハウスコードである FK³ を用い、理化学研究所のスーパーコンピューター富岳 (84 node, 1,000 並列) を使用する. なお、10,000 step あたりの計算時間は、FPV と 0D はおよそ 1 時間、UFPV は 1.5 時間、 $Le = 1$ の詳細計算は 2 時間、 $Le \neq 1$ の詳細計算は 11 時間である.

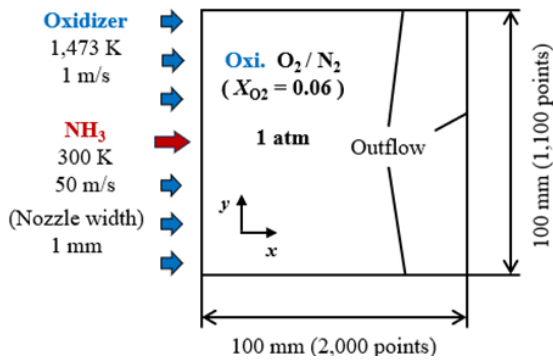


Fig.1 Computational domain and conditions

3. 結果及び考察

Fig.2 に、FPV、UFPV、0D の Flamelet 法および $Le = 1$ 、 $Le \neq 1$ の詳細計算から得られた最高温度の時間変化を示す。まず、それぞれの Flamelet 法と $Le = 1$ の詳細計算の比較を行う。いずれの Flamelet 法においても、定常状態での最高温度は、詳細計算と非常に近い値となる。また、最高温度に達するまでの時間について、FPV は 15 ms ほど過大評価するものの、UFPV と 0D は詳細計算と類似し、着火のタイミングを良好に捉えられるといえる。FPV では、定常火炎片から Flamelet table を作成するため、高温の燃料と空気の混合気における自発着火を捉えられないと考えられる。次に、 $Le = 1$ と $Le \neq 1$ の詳細計算の比較では、 $Le \neq 1$ の方が着火のタイミングが 20 ms ほど早く、最終的な最高温度は 33 K 高い。このことから、アンモニア高温空気燃焼における選択拡散効果、 Le 効果は大きいとわかる。

Fig.3 に、FPV、UFPV、0D の Flamelet 法および $Le = 1$ の詳細計算から得られた時刻 50 ms における NO 分布図を示す。なお、いずれのケースにおいても、時刻 50 ms では、火炎基部はほぼ動かず統計的に定常状態に達している。Fig.3 より、詳細計算と比較して、FPV では全体的に過小評価、UFPV と 0D では下流部にかけて過大評価するとわかる。これは、FPV では定常状態のみを考慮するため、UFPV では多少の非定常性を考慮するものの、NO のような反応速度の遅い化学種に対しては定常状態に達するまでの反応全体を捉えられないためであると考えられる。さらに、0D では拡散の影響が考慮されておらず、燃料の混合具合により過大評価につながったと考察される。

4. 結言

本研究では、アンモニア高温空気燃焼を対象に 2 次元燃焼数値解析を行い、3 種類の Flamelet 法による予測精度の比較、並びに詳細計算において $Le = 1$ を仮定する影響について検証を行った。

その結果、Flamelet 法では、非定常性を考慮することにより、着火のタイミングを良好に予測できるものの、NO など反応速度の遅い化学種については、下流部にて大幅に過大評価するとわかった。また、 $Le \neq 1$ では、 $Le = 1$ より着火のタイミングが早く、最高温度が高いことから、アンモニア高温空気燃焼における選択拡散効果は大きいといえる。

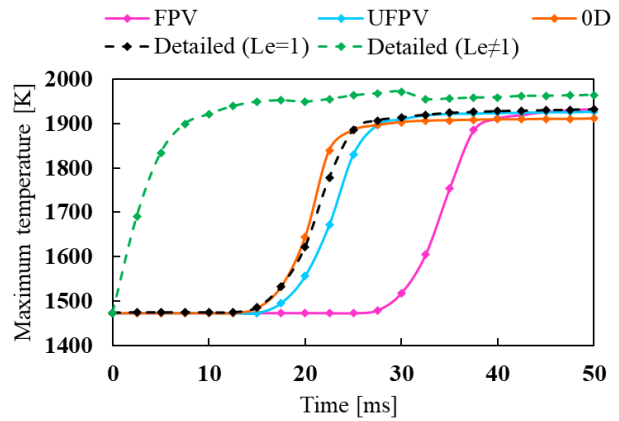


Fig.2 Time variation of maximum temperature

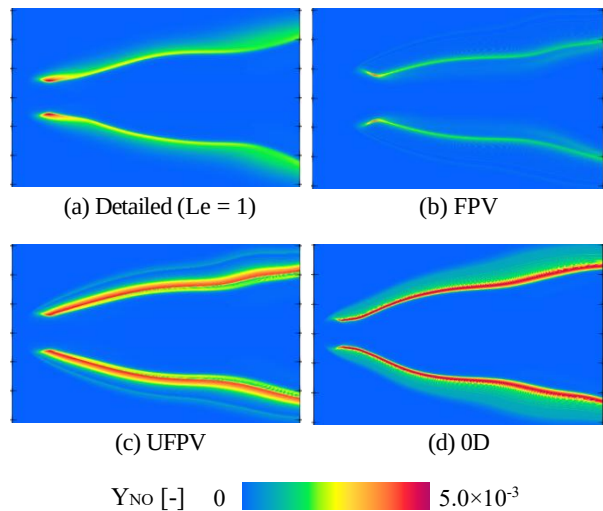


Fig.3 Comparison of Y_{NO} distribution
(a) Detailed calculation ($Le = 1$), (b) FPV, (c) UFPV, (d) 0D

参考文献

- [1] 2050 年カーボンニュートラルの実現に向けて、環境省
https://www.env.go.jp/earth/2050carbon_neutral.html
- [2] 2050 年カーボンニュートラルに伴うグリーン成長戦略、経済産業省
https://www.meti.go.jp/policy/energy_environment/global_warming/ggs/02_suisoanmonia.html
- [3] 村井 隆一, 赤松 史光, 大幅な CO2 削減可能なアンモニアを用いた工業炉燃焼技術及び表面改質, TECHNO NET, No.587 (2020).
- [4] Peters, N, Prog. Energy Combust. Sci. 10: 310-339 (1984).
- [5] Giuntini, L. et al., Combust. Sci. Techno. 195: 3513-3528 (2023).
- [6] Pitsch, H., FlameMasterv3.3.10, (1998).
<http://www.stanford.edu/~hpitsch/>
- [7] Kurose, R., FK³
http://www.tse.me.kyoto-u.ac.jp/study/link_e.php
- [8] Tamaoki, K. et al., Combust. Flame 259: 113-177 (2024).