

データ駆動的アプローチを用いた水素燃焼現象の予測

大 平 和 季

東京大学大学院 工学系研究科機械工学専攻 アズィツ研究室

1. 序論

燃焼器は火力発電、工業炉などへの熱源、エンジン等の動力など広く使われており、将来にわたって使われ続けると考えられている。そのため将来のカーボンニュートラル社会に向けて脱炭素化が求められている。有力な方法として化石燃料からカーボンフリー燃料への代替が考えられている。水素、アンモニアはカーボンフリー燃料の代表であり、実用化に向けて高精度かつ低負荷な燃焼予測の必要性がある。これを踏まえて本研究では水素、アンモニア混焼の燃焼予測に取り組む。解析対象は基礎研究の位置づけを取り、バーナーからの乱流非予混合燃焼とする。解析結果を検証するため、境界条件は Hao Tang らの混焼実験¹を再現した。

燃焼解析の手法として Large Eddy Simulation (LES) を用いる。LES はメッシュを切って、時間推移に合わせて変化を計算する解析手法であり、非定常な現象を解析できる。時間的に平均化する Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS) に比して計算負荷が高いが、実際の運用で問題となりうる振動や失火などを解析できる。

2. 手法

2. 1. シミュレーション条件

境界条件は Hao Tang らの混焼実験と同様にした。シミュレーション条件は以下の通り。

Aspect	Specifications
flame	Non-premixed turbulence flame
fuel	Ammonia/hydrogen
resource	OBCX
Simulation software	openFOAM-8
Turbulence model	Dynamic-k
Mesh number	0.6M [~]
Chemical mechanism	GRI3.0, Modified GRI ² , Detailed NH ₃ ³
library	DLBfoam

表 1 シミュレーション条件

¹ Hao Tang et al. “Scalar structure in turbulent non-premixed NH₃/H₂/N₂ jet flames at elevated pressure using Raman spectroscopy” (Combustion and Flame, 2022)

² Ekenechukwu Chijioke Okafor “Measurement and modelling of the laminar burning velocity of methane-ammonia-air flames at high pressures using a reduced reaction mechanism” (Combustion and Flame, 2019)

³ Krishna P. Shrestha “Detailed Kinetic Mechanism for the Oxidation of Ammonia Including the Formation and Reduction of Nitrogen Oxides” (Energy Fuels, 2018)

2. 2. 支配方程式

流れと燃焼の支配方程式は以下の4式で表される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j)}{\partial x_j} &= 0 \\ \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[-\bar{p}\delta_{ij} + \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j - \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j + \bar{\rho}\nu \left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \right] \\ \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_k)}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_k - \bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Y}_k + \bar{\rho}D \frac{\partial\tilde{Y}_k}{\partial x_j} \right] + \bar{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, N \\ \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{h})}{\partial x_j} &= \frac{D\bar{p}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{h} - \bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{h} + \bar{\rho}\alpha \frac{\partial\tilde{h}}{\partial x_j} \right] + \bar{\omega}_h \end{aligned}$$

それぞれ、質量保存、運動量保存、化学種保存、そして輸送方程式である。ただし、 $\bar{\rho}$, \tilde{u}_i , \bar{p} , \tilde{Y}_k , \tilde{h} , ν , α はそれぞれ密度、速度、圧力、質量分率、エンタルピー、動粘性係数、熱拡散率を表す。

3. 結果

Hao Tang らの混焼実験シミュレーションでは、着火が確認できなかった。以下に結果の一例を示す。

01_OT_NH3_CAJF14

Time: 0.020000

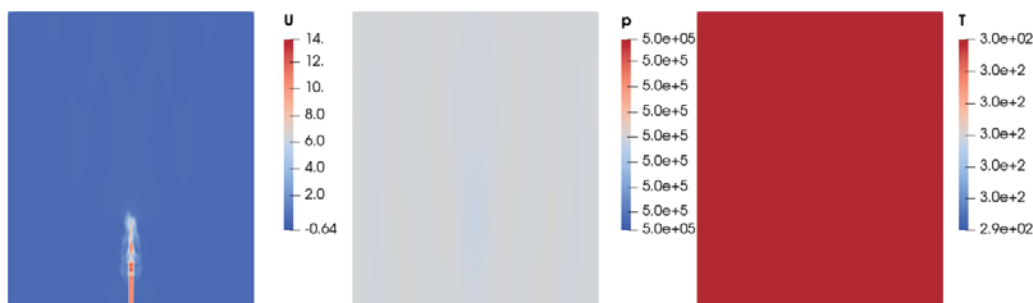


図1 0.02 sにおける燃焼時の速度、圧力、温度
左から順に、速度、圧力、温度のコンター図

着火している場合はガスが噴出する中心部分の温度が高くなるが、ほぼ一様な温度分布となっており着火していないことが分かる。

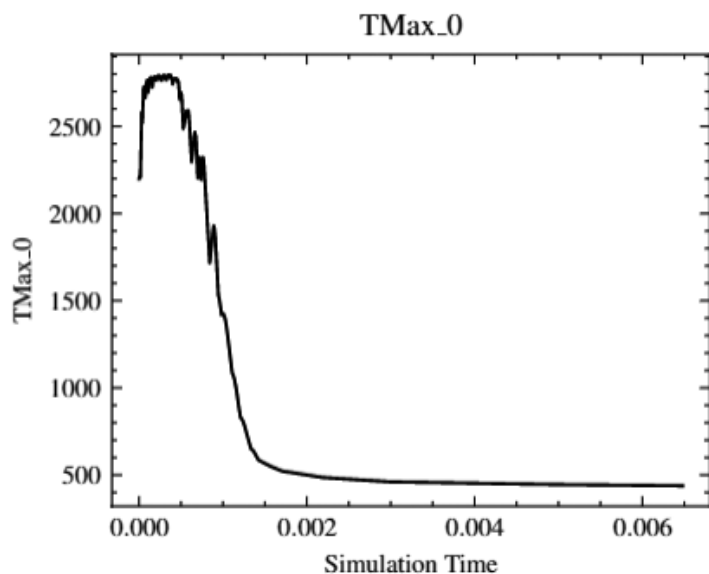


図2 最高温度の変化

また温度変化に関しても最大温度が急速に下がっており，着火していないことが分かる．初期の温度は高いのは，着火の条件としてシミュレーション開始時のバーナーの噴出口の温度を高く設定したためである．

原因を探るために，定常状態に達した水素専焼にアンモニアを加えるシミュレーションを行った．燃焼が安定していること，水素の燃焼で高温になり燃焼しやすい環境が作られることでアンモニアが燃焼しやすいと考えた．水素専焼で0.15秒後の安定した火炎にアンモニアを加えた．

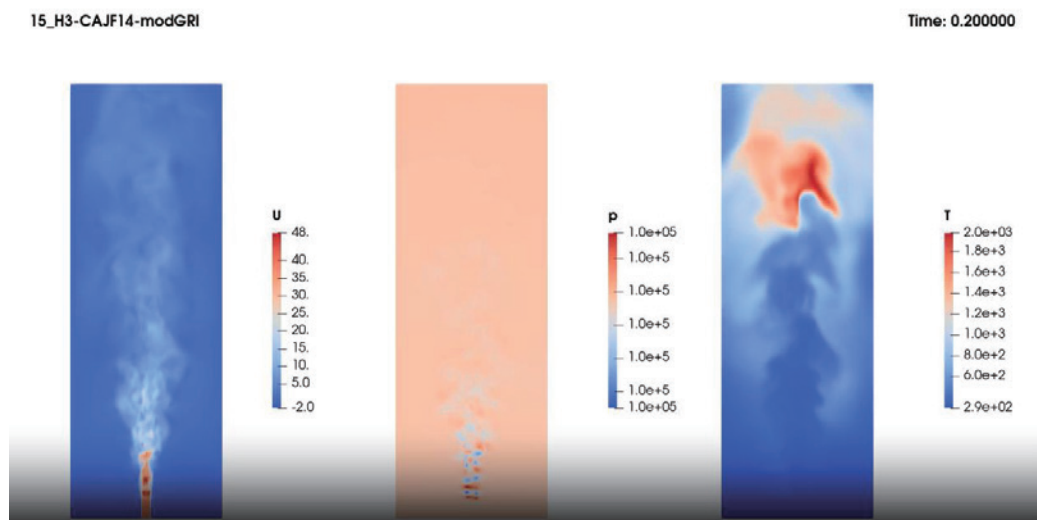


図3 アンモニアを加えて0.05sにおける速度，圧力，温度

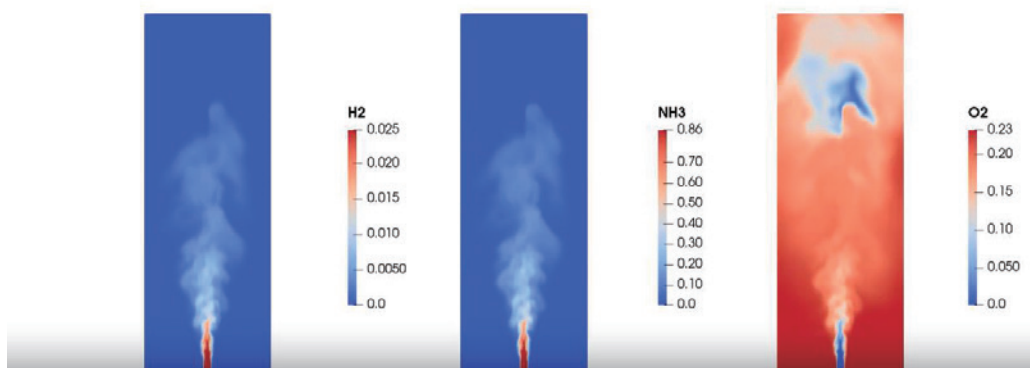


図3 アンモニアを加えて 0.05s における水素, アンモニア, 酸素量

0.05s のシミュレーションであるため定常火炎には達していないが, アンモニアが消費されていることからアンモニアが燃焼したといえる. この結果により本シミュレーションで使用した化学反応機構などのメカニズムはシミュレーションに使用ができる見通しが立った,

4. 結論

水素, アンモニアの混焼に関して実験データを参照に条件を設定してシミュレーションを行ったが着火しなかった. 水素専焼の安定火炎にアンモニアを射出したところ燃焼がシミュレーションできた. 今後もシミュレーションが可能になる条件を精査していく必要がある.

謝辞

本研究は東京大学情報基盤センター若手・女性利用者推薦制度の助成を受けて実施された.

参考文献

- [1]Hao Tang et al. “Scalar structure in turbulent non-premixed NH₃/H₂/N₂ jet flames at elevated pressure using Raman spectroscopy” (Combustion and Flame, 2022)
- [2]Ekenechukwu Chijioke Okafor “Measurement and modelling of the laminar burning velocity of methane-ammonia-air flames at high pressures using a reduced reaction mechanism” (Combustion and Flame, 2019)
- [3]Krishna P.Shrestha “Detailed Kinetic Mechanism for the Oxidation of Ammonia Including the Formation and Reduction of Nitrogen Oxides” (Energy Fuels, 2018)