特集記事

ラージ・エディ・シミュレーションによる 微粉炭燃焼場の NO_x 生成予測* —複数スケールの燃焼場への適用—

渡邊 裕章**

Prediction of NO_x formation in pulverized coal combustion fields using large-eddy simulation —Application to multi-scale combustion fields—

Hiroaki WATANABE

1. 緒 論

昨今の火力発電用の燃料コスト上昇に伴う電気料金の引き上げ等、電力需給の逼迫に鑑み、世界に広く分布し、かつ埋蔵量も豊富なため、他の化石燃料に比べて価格が低い石炭の利用促進は、わが国のエネルギー安全保障にとって極めて重要である。また、今後爆発的に再生可能エネルギーの導入が進むことが予想される中、FIT 政策により火力発電の経済性が相対的に低下する状況下で、電力系統安定化への寄与が可能な石炭火力発電技術の開発が、電気の価格競争力確保の面からも急務となる。

石炭火力発電における基幹設備である石炭燃焼ボイラの内部は、石炭の微粒子（微粉炭）が気流中に分散するとともに、水分の蒸発、熱分解による揮発分放出、固定炭素の固気反応、および気相反応等が同時に進行する極めて複雑な混相乱流反応場である。特に、これまでの燃料種や運転条件から外れた条件で、着火性や燃焼性の向上を図るためには、従来の経験則をそのまま適用するだけでは、その解決は難しい。そこで、数値解析技術、その中でも、従来この分野で使用されてきた Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) シミュレーション法に替わり、より高精度な解析が可能な large-eddy simulation (LES) 法への期待が高まってきている。燃焼 LES は、モデル化の容易な単相燃焼流に対して多くの研究が為されてきたが^{1,2)}、より複雑な混相燃焼場でも、噴霧燃焼については、幅広い適用先をもつことから先行研究が多い^{3,4)}。一方、微粉炭燃焼分野では、現在においても RANS 法が主流である^{5~10)}。これは、微粉炭燃焼場が上述のように極めて複雑であることに加えて、対象とする反応容器が大型であることによる。Kurose らは、小型の石炭燃焼炉内の燃焼場の数

値解析を実施し、炉内の強い旋回流内に滞留する粒子挙動を検討するとともに、NO_x 生成量の予測を行った⁵⁾。また、Hashimoto らは、多段バーナ燃焼試験炉を対象に、バーナ毎の燃焼率について検討を行った⁶⁾。さらに近年では、より大型の事業用ボイラを対象とする検討により、温度分布や NO_x 生成量の予測を行った研究が報告されている^{7,8)}。しかし、ごく最近、京コンピュータに代表される超並列計算機の導入が進められるに従い、微粉炭燃焼へ LES 法を適用する試みが見られるようになってきた^{11~16)}。これにより、微粉炭燃焼場特有のフューエル NO_x 生成、低負荷時の安定的な着火・保炎性、および複数バーナ間の相互干渉等、本質的に非定常な現象を正確に捉え、機器設計・運用に活かされることが期待される。

本稿では、著者らが取り組んできた小型バーナ¹⁷⁾と大型燃焼試験炉⁶⁾を対象とする微粉炭燃焼 LES^{14,15)}について報告する。

2. 計算方法

2.1 支配方程式

本稿で対象とする微粉炭燃焼場は、平均粒径 45 ミクロン程度に粉碎された微粉炭が気流中で燃焼する、いわゆる希薄分散固気二相燃焼流である。これを Eulerian-Lagrangian 法により計算する。流れ場の支配方程式は、フィルタ操作の施された連続の式、運動量保存式、エネルギー保存式および化学種保存式を解く。乱流モデルには、dynamic Smagorinsky モデル¹⁸⁾を用いる。輻射伝熱については、ガス吸収係数の算出に灰色モデルを用い、輻射強度輸送式を Discrete ordinate 法¹⁹⁾によって解く。一方、粒子の運動方程式は、Basset-Boussinesq-Oseen 方程式を解く。粒子と気相との熱、物質および運動量の交換には、PSI-Cell モデル²⁰⁾を使用する。なお、粒子濃度は十分希薄であると考えられることから、粒子同士の衝突は無視した。

* 原稿受付 2015 年 1 月 15 日

** 九州大学大学院 工学研究院 機械工学部門
(〒 819-0395 福岡県福岡市西区元岡 744,
E-mail: whiroaki@mech.kyushu-u.ac.jp)

2.2 微粉炭燃焼モデル

Fig. 1 に微粉炭燃焼場の化学反応系の概略を示す。炉内に投入された微粉炭は、急速加熱され熱分解による揮発分 ($C_n H_m O_l$) 放出を起こす。放出速度は、次の1段反応を仮定し、Flashchain モデル²¹⁾により速度パラメータを決定する。

$$\frac{dm_v}{dt} = k_v (V_0 - V) \quad (2)$$

熱分解後の粒子（チャー）内の固定炭素は、気相の酸素により固気（燃焼）反応を起こす。チャーの燃焼速度は、次の Field モデル²²⁾により計算する。

$$\frac{dm_c}{dt} = - \left(\frac{k_c k_d}{k_c + k_d} \right) P_g \pi d_p^2 \quad (4)$$

気相に放出された揮発分や固気反応により生成される CO は、次式に従いガス燃焼反応を起こす。これらの反応速度の算出に必要な乱流燃焼モデルには、SSFRM²³⁾を採用する。

$$\omega_f = \omega(\bar{\rho}, \bar{Y}_k, \bar{T}) + K_1 \left(\omega(\bar{\rho}, \bar{Y}_k, \bar{T}) - \omega(\bar{\rho}, \bar{Y}_k, \bar{T}) \right) \quad (7)$$

NO_x 生成モデルとしては、空气中窒素に由来するサーマルおよびプロンプト NO の生成に Bedat らのモデル²⁴⁾、石炭中窒素に由来するフューエル NO のうち、チャー燃焼に由来するものを de Soete のモデル^{25,26)}、揮発ガスに由来するものを Mitchell らのモデル²⁷⁾、およびチャー表面における NO 還元反応に Levy らのモデル²⁸⁾をそれぞれ用いる。なお、本研究では、NO_x として NO のみを扱うこととした。

なお、本稿の数値解析には、非構造格子系の有限体積分法コード FrontFlowRed/Comb を用いた。解析方法、ならびに解析コードの詳細については、文献^{4,12,14)}を参照されたい。

3. 小型旋回噴流バーナ火炎の数値解析

Fig. 2 に、解析対象の小型旋回噴流バーナ装置を示す。バーナは、二次系にスワラを有する三重管構造をしており、一次系からは微粉炭とその搬送ガスが、二次系からは空気と助燃剤であるメタンが、三次系からは空気が導入される。本研究では、搬送ガスとして、同一の当量比において、O₂濃度を CO₂で希釈することにより調整した3条件を検討した。解析条件を Table 1 に示す。供試炭には、Table 2 に示すセレホン炭を用いた。解析格子は、約 700 万要素である。計算は、SGI ICE X の 256 コア並列により行い、1 ケースあたり約 170 時間掛

かった。

Fig. 3 に、Case 1 における軸方向流速、ガス温度、および揮発ガス濃度の瞬間分布を示す。図より、計算領

Fig. 1 Coal combustion model.

Fig. 2 Schematics of computational domain of swirl jet burner¹⁴⁾.

Table 1 Cases performed¹⁴⁾.

Cases	Carrier gas (O ₂ /CO ₂) (%)	Coal feeding rate (kg/s)	Equivalence ratio
1	21/76	3.1 × 10 ⁻⁴	1.73
2	30/67	4.5 × 10 ⁻⁴	
3	40/57	6.0 × 10 ⁻⁴	

Table 2 Coal property examined^{14,15)}.

Type of coal	Cerrejon	Newlans
Density	640 kg/m ³	1,000 kg/m ³
Proximate analysis	(wt%)	(wt%)
Moisture	5.8	1.9
Volatile matter	34.8	28.5
Fixed carbon	50.8	57.2
Ash	8.6	14.3
Ultimate analysis	(wt%)	(wt%)
Carbon	69.2	73.3
Hydrogen	4.4	4.4
Oxygen	9.98	6.2
Nitrogen	1.42	1.54
Combustible sulfur	0.58	0.29

域中心部を上昇する噴流の周囲に、メタンの燃焼ガスにより加熱された微粉炭が周囲に揮発ガスを放出するとともに、この揮発ガスが燃焼することにより微粉炭火炎が形成される様子がわかる。

Fig. 4 に、コールド流れ時の軸方向流速の時間平均値と変動強度の半径方向分布の比較を示す。図より、本 LES は、微粉炭の固気混相旋回噴流の流れ場を極めて良い精度で捉えられることが確認できる。

Fig. 5 に、Case 1～3 における NO 濃度の瞬間分布、および NO 還元反応速度の時間平均分布を示す。Case 1 を見ると、NO の生成は Fig. 3 で見られたようなガス温度が上昇する箇所から始まり、高温の領域とほぼ一致することがわかる。一方、Case 2 と 3 では、中心軸上に白い矢印で示したような低 NO 濃度領域が見られる。また、この領域は O_2 濃度が上昇するとともに、上流へ移動する。この挙動は、NO 還元反応速度から理解することができる。すなわち、燃焼速度が速く、 O_2 が速やかに消費される O_2 高濃度条件ほど、上流に高い NO 還元領域が形成されることによると考えられる。

より定量的にこの挙動を観察するため、Fig. 6 に、Case 1～3 における中心軸上のガス温度、 O_2 濃度、揮発ガス濃度、および NO 濃度の時間平均分布を示す。図より、 O_2 濃度が高くなるに従い、速やかにガス温度が上昇するとともに、 O_2 が消費されることがわかる。なお、各条件とも、ガス温度のピーク値が現れた箇所から下流に掛けてのガス温度はほとんど差異がない。このガス温度の上昇に対応するように、微粉炭粒子からの揮発ガス放出が始まり、ガス温度のピーク値が現れる箇所に対応するように、揮発ガス濃度のピーク値が現れる。NO は、揮発ガス中の窒素分に由来するものが主と考えられるため、NO 濃度は、このガス温度と揮発ガス濃度の挙動に大きく依存しており、ガス温度のピーク値が現れる箇所においてピーク値をもつ。その後、NO 濃度はすぐ下流において急激に低下する。これは、Fig. 5 で見

Fig. 3 Instantaneous distributions of (a) axial velocity, (b) gas temperature and (c) mole fraction of volatile matter for Case 1¹⁴⁾.

Fig. 4 Comparison of radial distributions of time-averaged and RMS velocities in axial direction for non-reacting flow¹⁴⁾.

Fig. 5 Instantaneous and time-averaged distributions of NO mole fraction and NO reduction rate respectively for Cases 1 to 3¹⁴⁾.

Fig. 6 Time-averaged axial distributions of (a) gas temperature, mole fractions of (b) O₂ and (c) volatile matter, and (d) NO concentration for Cases 1 to 3¹⁴⁾.

られたように、NO の還元反応、いわゆる再燃焼とチャー粒子表面の還元反応が顕著になるためである。図からもわかるように、O₂濃度が高くなるに従い、これらの還元反応の進行に伴う NO 濃度急減の勾配もきつ

くなる。

4. 大型燃焼試験炉の数値解析

数値解析によって実機微粉炭ボイラの燃焼特性を評価するには、前節において対象としたような基本的な物理現象を観察可能な小型の基礎実験を対象とする解析に加えて、より実用的な規模の燃焼場に近しい試験炉を対象とした解析を行い、数値モデルや解析手法のスケラビリティを検証する必要がある。そこで本節では、実機同様の複雑な構造をもつ微粉炭バーナを3基もつ、投入熱量 2.4MWth の大型燃焼試験炉を対象とする解析例を示す。

Fig. 7 に、解析対象の大型燃焼試験炉を示す。この試験炉には、バーナ近傍で速やかな NO_x 還元炎を形成する強旋回流型の超低 NO_x バーナが3基設置されている²⁹⁾。また、その2 m 下流には、還元炎を通過した未燃炭素分の燃焼率向上を図るための二段燃焼用空気流入ポートが設置されている。この燃焼試験炉を使い、石炭投入量 300kg/h (バーナ1本当たり 100kg/h) で行った実験を対象に解析を行った。解析条件を Table 3 に示す。供試炭には、Table 2 に示すニューランズ炭を用いた。解析格子は、約1億要素である。計算は、京コンピュータの9,216コア並列により行い、1ケースあたり約230時間掛かった。

Fig. 8 に、ガス温度、O₂濃度、および NO 濃度の瞬間分布を示す。また比較のため、それぞれの物理量に対する実測データ(時間平均値)を示す。より実機に近い構造をもつ燃焼試験炉では、水平方向に流入するバーナ噴

Table 3 Case performed¹⁵⁾.

Items		
Coal feeding rate	kg/h	300
Excess air ratio	%	4
Staged combustion ratio	%	30
Mean particle size	μm	38

Fig. 7 Schematics of computational domain of large-scale combustion test furnace¹⁵⁾.

Fig. 8 Comparisons of gas temperature, O_2 and NO concentrations between instantaneous computational and time-averaged experimental results¹⁵⁾.

流は流路に沿って直ぐに上昇流へと転じる。ガス温度の実測データを見ると、バーナ噴流を取り囲むように形成される高温領域は、上段のバーナからさらに下流方向へと広がっていることがわかる。この高温のガス流れは、二段燃焼用空気が流入することにより一旦温度が低下するものの、そのさらに下流においても、チャー燃焼に起因すると思われる高温領域を一部で形成する。こうした特徴を本研究の LES は良く捉えている。二段燃焼空気流入ポートよりも上流では、30%の二段燃焼率を設定していることから、 O_2 はほとんど消費されており、強い還元炎が形成されていることが推察される。これにより、バーナ近傍で生成された NO は急速に還元されるため、二段燃焼空気流入ポート直前の NO 濃度は、 O_2 濃度同様に低い値を示す。しかしながら、一旦低下した NO

濃度は、二段燃焼用空気流入ポートの下流において、僅かながら増加する。これは、熱分解後にチャー粒子中に留まってる窒素分がチャー燃焼に伴って NO に転換されたものと考えられる。このことから、バーナ近傍で熱分解に伴って揮発ガスとともに粒子から放出された窒素分に由来する NO は、二段燃焼用空気流入ポート上流の強い還元炎によってほとんどが還元されていると推察される。

5. 結 論

本稿では、京コンピュータ等の超大型並列計算機の導入によって、実用的な規模の解析が可能となりつつある LES について、著者らが進めている微粉炭燃焼場への適用例として、特に NO_x 生成特性の予測を中心に紹介した。微粉炭燃焼解析に LES 法を適用することで、緒論で述べたように、低品位燃焼の着火性や燃焼安定性等、これまで困難であった燃焼場の非定常な挙動を正確に予測することが可能となる。本稿が、本分野の研究の進展の一助となれば幸いである。

謝 辞

本研究は、京都大学黒瀬良一准教授、ならびに武藤昌也特定助教との共同研究により実施した。また、本研究の一部は、文部科学省「HPCI 戦略プログラム、分野 4、ものづくり：次世代燃焼・ガス化装置設計システムの開発」(<http://www.fluid.me.kyoto-u.ac.jp/members/kurose/hpci.html>)の補助を受けて実施された。ここに記して謝意を表す。

参 考 文 献

- 1) Moin, P., Apte, S. V. : Large-eddy simulation of realistic gas turbine combustors, AIAA J., Vol.44, No.4 (2006) pp.698-708.
- 2) Selle, L., Lartigue, G., Poinot, T., Koch, R., Schildmacher, K.-U., Krebs, W., Prade, B., Kaufmann, P., Veynante, D. : Compressible large eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes, Combust. Flame, Vol.137 (2004) pp.489-505.
- 3) Ihme, M., Pitsch, H. : Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flame using a flamelet/progress variable formulation, Phys. Fluid, Vol.20 (2008) pp.055110.
- 4) Moriai, H., Kurose, R., Watanabe, H., Yano, Y., Akamatsu, F., Komori, S. : Large-eddy simulation of turbulent spray combustion in a subscale aircraft jet engine combustor - Predictions of NO and soot concentrations, J. Eng. Gas Turbines Power, Vol.135 (2013) pp.091305.
- 5) Kurose, R., Makino, H., Suzuki, A. : Numerical analysis of pulverized coal combustion characteristics using advanced low- NO_x burner, Fuel, Vol.83 (2004) pp.693-703.
- 6) Hashimoto, N., Kurose, R., Tsuji, H., Shirai, H. : A numerical analysis of pulverized coal combustion in a multiburner furnace, Energy Fuels, Vol.21, No.4 (2007) pp.1950-1958.

- 7) Belosevic, S., Beljanski, V., Tomanovic, I., Crnomarkovic, N., Tucakovic, D., Zivanovic, T. : Numerical analysis of NO_x control by combustion modifications in pulverized coal utility boiler, *Energy Fuels*, Vol.26 (2012) pp.425-442.
- 8) Fang, Q., Musa, A. A. B., Wei, Y., Luo, Z., Zhou, H. : Numerical simulation of multifuel combustion in a 200MW tangentially fired utility boiler, *Energy Fuels*, Vol.26 (2012) pp.313-323.
- 9) Hashimoto, N., Kurose, R., Shirai, H. : Numerical simulation of pulverized coal jet flame employing the TDP model, *Fuel*, Vol.97 (2012) pp.277-287.
- 10) Hashimoto, N., Kurose, R., Hwang, S.-M., Tsuji, H., Shirai, H. : A numerical simulation of pulverized coal combustion employing a tabulated-devolatilization-process model (TDP model), *Combust. Flame*, Vol.159 (2012) pp.353-366.
- 11) Watanabe, H., Kurose, R., Komori, S. : Large-eddy simulation of swirling flows in a pulverized coal combustion furnace with a complex burner, *J. Env. Eng.*, Vol.4, No.1 (2009), pp.1-11.
- 12) Kurose, R., Watanabe, H., Makino, H. : Numerical simulations of pulverized coal combustion, *KONA Pow. Parti. J.*, Vol.27 (2009) pp.144-156.
- 13) Watanabe, H., Tanno, K., Baba, Y., Kurose, R., Komori, S. : Large-eddy simulation of coal combustion in a pulverized coal combustion furnace with a complex burner, *Turbu. Heat Mass Trans.*, Vol.6 (2009) pp.1027-1030.
- 14) Muto, M., Watanabe, H., Kurose, R., Komori, S., Balusamy, S., Hochgreb, S. : Large-eddy simulation of pulverized coal jet flame-Effect of oxygen concentration on NO_x formation, *Fuel*, Vol.142 (2015) pp.152-163.
- 15) Muto, M., Watanabe, H., Kurose, R., Komori, S. : Large-eddy simulation of a pulverized coal multi-burner system, *Proc. 11th World Cong. Compu. Mech. (WCCM XI)*, Barcelona, Spain, (2014).
- 16) Yamamoto, K., Murota, T., Okazaki, T., Taniguchi, M. : Large eddy simulation of a pulverized coal jet flame ignited by a preheated gas flow, *Proc. Combust. Inst.*, Vol.33 (2011) pp.1771-1778.
- 17) Balusamy, S., Schmidt, A., Hochgreb, S. : Flow field measurements of pulverized coal combustion using optical diagnostic techniques, *Exp. Fluids*, Vol.54 (2013) pp.1534-1548.
- 18) Moin, P., Squires, K., Cabot, W., Lee, S. : A dynamic sub-grid-scale model for compressible turbulence and scalar transport, *Phys. Fluids*, Vol.3, No.11 (1991) pp.2746-2757.
- 19) Fiveland, W. A. : Three-dimensional radiative heat-transfer solutions by the discrete-ordinates method, *J. Thermophys.*, Vol.2, No.4 (1988) pp.309-316.
- 20) Crowe, C. T., Sharma, M. P., Stock, D. E. : The Particle-Source-In Cell (PSI-CELL) model for gas-droplet flows, *J. Fluids Eng.*, Vol.99 (1977) pp.325-332.
- 21) Niksa, S. : Predicting the devolatilization behavior of any coal form its ultimate analysis, *Combust. Flame*, Vol.100 (1995) pp.384-394.
- 22) Field, M. : Rate of combustion of size-graded fractions of char from a low-rank coal between 1200K and 2000K, *Combust. Flame*, Vol.13 (1969) pp.237-252.
- 23) Desjardin, P., Frankel, S. : Large eddy simulation of a nonpremixed reacting jet : Application and assessment of subgrid-scale combustion models, Vol.10, No.9 (1998) pp.2298-2314.
- 24) Bedat, B., Egolfopoulos, Poinso, T. : Direct numerical simulation of heat release and NO_x formation in turbulent nonpremixed flames, *Combust. Flame*, Vol.119 (1999), pp.69-83.
- 25) de Soete, G. G. : Overall reaction rates of NO and N₂ formation from fuel nitrogen, *Symp. (Intl.) Combust.*, Vol.15 (1975) pp.1093-1102.
- 26) de Soete, G. G. : Heterogeneous N₂O and NO formation from bound nitrogen atoms during coal char combustion, *Symp. (Intl.) Combust.*, Vol.23 (1990) pp.1257-1264.
- 27) Mitchell, J. W., Tarbell, J. M. : A kinetic model of nitric oxide formation during pulverized coal combustion, *AIChE J.*, Vol.28 (1982) pp.302-311.
- 28) Levy, J. M., Chan, L. K., Sarofim, A. F., Beer, J. M. : NO/Char reactions at pulverized coal flame conditions, *Symp. (Intl.) Combust.*, Vol.18 (1981) pp.111-120.
- 29) Makino, H., Kimoto, H., Tsuji, H., Kiga, H. : Development of low-NO_x and low-ignition loss combustion technology on pulverized coal combustion, *Proc. EPRI-DOE-EPA combined Utility Air Pollution Control Symp. : The MEGA Symp.*, Vol.2 (1999) pp.11-17.