

様式 C - 19、F - 19、Z - 19（共通）

科学研究費助成事業 研究成果報告書



平成 28 年 6 月 28 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2013～2015

課題番号：25420173

研究課題名（和文）微粉炭粒子の着火プロセスの解明と混相乱流燃焼モデリング

研究課題名（英文）Analysis of Ignition Process of a Pulverized Coal Particle and Modeling of Multiphase Turbulent Combustion

研究代表者

渡邊 裕章 (Watanabe, Hiroaki)

九州大学・工学（系）研究科（研究院）・准教授

研究者番号：60371598

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,000,000 円

研究成果の概要（和文）：微粉炭の燃焼特性や環境影響物質排出性に大きな影響を及ぼす微粉炭粒子の着火プロセスについて、先端的レーザ技術による実験等により現象解明を図った。その結果、火炎中でタール成分の重合により生成されるすす粒子の生成・成長過程が明らかになった。これを数値解析で捉えるため、重要な素反応機構の抽出を行って数値解析コードに組み込んだ。LESによる解析結果は、実験結果と良好な一致を示し、本解析手法が妥当であることを確認した。

研究成果の概要（英文）：Ignition process of pulverized coal particle which affects combustion performance and emission characteristics was investigated by an advanced laser diagnostics. Results revealed the detailed behavior of the soot particle formed in the pulverized coal flame which was generated by the polymerization of the tar content in the volatile matter. In order to capture the behavior by a numerical simulation, the essential elementary reactions were investigated and extracted from the detailed chemical mechanism and they implemented into the LES code. The numerical procedure was validated by the comparison with the experiment.

研究分野：燃焼科学

キーワード：微粉炭燃焼 粒子乱流分散 非球形粒子運動 热分解 詳細化学反応 数値解析 レーザー計測

1. 研究開始当初の背景

微粉炭燃焼は、微粉炭燃焼ボイラ等多くの工業装置で用いられるため、その燃焼特性の数値予測は長年の研究の対象であり、多くの研究例があるが、そのほとんどはレイノルズ平均ナヴィエ・ストークス(RANS)法がベースである。この手法は、計算負荷が軽いものの、時間平均値のみ評価が可能であることに加え、使用されるモデルに調整が可能で物理的意味が曖昧なパラメータを対象毎にチューニングする必要があり汎用性に乏しい。特に、微粉炭の燃焼特性に決定的な役割を果たす着火プロセスは粒子の乱流分散から揮発分放出、そして着火に至る非定常な現象であり、RANS法の限界が指摘されている。ガス燃焼分野では、早くからレーザ計測や理論解析、直接数値計算(DNS)による現象解明やモデル化が進むとともに、こうした高精度モデルの large-eddy simulation(LES)法への適用により、非定常な現象を捉えることが可能で、モデルパラメータが少なく汎用性が高い、高精度な数値予測が可能となりつつある。一方、計算機性能の向上により、極めて複雑な混相燃焼流についても、主に噴霧燃焼場を対象に現象の解明やモデル化に関する研究例が増えてきている。例えば、筆者らは、噴霧火炎の実験と DNS を行い、噴霧の群燃焼、ラジカルや炭化水素およびすすの生成挙動を解明するとともに、そこで開発した乱流燃焼モデルを実規模燃焼場の LES に適用している。こうした研究は、混相燃焼場の数値解析において、乱流場と反応場の相互作用を考慮する精度の高い LES を実現するためのものであるが、その成果を直接微粉炭燃焼場へ適用することはできない。微粉炭燃焼場に対しては、筆者らの研究グループは、小型の微粉炭噴流火炎に対して、Mie 散乱による微粉炭粒子の分散、LIF による OH ラジカル分布、LII によるすす濃度分布をそれぞれ計測し、微粉炭火炎の構造を明らかにするとともに、新たな熱分解モデルの提案を行っている。これらの先端的レーザ計測技術を用いる火炎構造の解明とモデル化に関する研究は、端緒についたばかりであり、特にその乱流構造と火炎構造との関係は、微粒子の非定常挙動を含めてほとんど明らかになっていない。

2. 研究の目的

微粉炭燃焼は極めて複雑な現象であるため、その総括特性に関する研究例は豊富であるが、混相乱流燃焼流としての基礎特性は明らかではない。しかしながら、燃焼機器性能は、乱流中の燃料粒子の分散や昇温、熱分解、固気・気相反応等の様々な素過程に依存するため、これらの基礎特性をその相互作用とともに明らかにする必要がある。筆者らはこれまで、混相燃焼流のレーザ計測や数値解析により、混相燃焼現象の解明とモデル化を進めてきた。本研究ではこれらの知見を活かし、

基礎燃焼装置内の微粉炭火炎のレーザ計測や DNS によりその基礎特性を明らかにするとともに、高精度数値モデルの開発を行う。また、開発した数値モデルを LES 用数値解析コードに導入し、実用燃焼場に対する高精度非定常数値予測法の開発を行う。

3. 研究の方法

本研究では、大別して下記の 4 種の取り組みにより、微粉炭燃焼場の着火プロセスにおける現象解明とモデル化、数値解析を実施する。

(1) 微粉炭燃焼場のレーザ計測

① 0.5kg/h 小型噴流バーナ実験

0.5kg/h 規模の小型基礎燃焼試験装置を用い、微粉炭噴流火炎のレーザ計測（時間分解レーザ誘起赤熱法）および火炎内の微粒子サンプリング（熱泳動サンプリング）を実施する。特に、微粉炭粒子が加熱されて揮発分を放出し、着火に至る現象や、揮発分中の多環芳香族炭化水素（PAH）がすす化していく様子を観察し、微粉炭の着火プロセスを明らかにする。

② 3kg/h 乱流燃焼炉実験

3kg/h 規模の微粉炭専焼燃焼試験装置を用い、微粉炭火炎の 2 次元温度分布計測（CT 波長可変半導体レーザ吸収分光法）を実施し、微粉炭の乱流火炎構造を明らかにする。

(2) 直接数値計算(DNS)

① 非球形粒子 6 自由度計算

球形粒子と非球形粒子（微粉炭粒子そのものや微粉炭粒子を模擬する回転橍円体）の気流中の運動特性を Arbitrary Lagrangian and Eulerian 法を用いた DNS により詳細に調査し、粒子運動に及ぼす非球形の影響を定量的に明らかにするとともに、非球形粒子運動のモデル化を行う。

② 乱流分散・相間熱物質移動挙動解析

希薄固気二相流数値解析の大規模化において、計算負荷の低減が可能な代表粒子（パーセル）モデルの使用は必須である。そこで、乱流混合層中を運動する粒子を対象に DNS を実施し、分散挙動や相間の物質移動やスカラ拡散、乱流変調等に対するパーセルモデルの影響を明らかにする。

(3) 挥発分の気相反応の詳細化学反応解析

微粉炭の熱分解時に粒子から放出される揮発分にはタールや軽質ガス等、多様な化学種が含まれている。これらの気相における分解・縮重合反応を詳細化学反応解析により明らかにするとともに、大規模数値解析に適用するための簡略化を実施する。

(4) Large-eddy simulation(LES)

上述のモデルを導入した大規模数値解析用 LES コードを開発するとともに、小型基礎燃焼試験装置を対象とする LES を実施し、解析手法の妥当性を検証する。

4. 研究成果

(1) 微粉炭燃焼場のレーザ計測 ①0.5kg/h 小型噴流バーナ実験

0.5kg/h 規模の小型基礎燃焼試験装置上に形成される微粉炭噴流火炎に対して、火炎中のすす生成挙動を明らかにするため、時間分解レーザ誘起赤熱 (LII) 法によるすす濃度・粒径同時計測と、すす粒子の熱泳動サンプリングを行った(図1)。その結果、微粉炭火炎の上流部で生成されたすす粒子が、下流に行くに従い、大きく成長していく様子を定量的な粒径分布として捉えることに成功した(図2)。これらのデータは、今後、揮発分の分解・重合素反応を考慮したすす生成の数値解析を実施する際に重要な検証データとして活用する予定である。

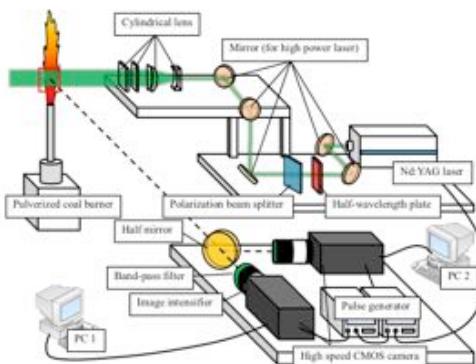


図1 時間分解 LII 法装置の概略

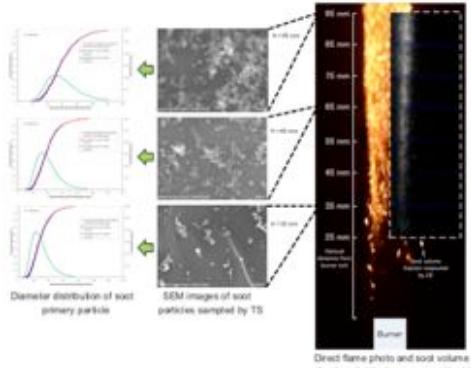


図2 微粉炭火炎中を成長するすす粒子のサンプル写真と粒径分布

②3kg/h 乱流燃焼炉実験

3kg/h 規模の微粉炭専焼燃焼試験装置上(図3)の微粉炭火炎を対象に、CT 波長可変半導体レーザ吸収分光 (CT-TDLAS) 法(図4)を適用した。その結果、微粉炭火炎内の2次元温度分布の取得に成功した(図5)。LES等の非定常数値解析と比較する上で、十分な時間分解能を有してデータが取得できることが確認された一方で、空間解像度の向上が今後の課題として確認された。これは、計測後の膨大なデータ処理法に改良を施すことにより、使用するパス数を増加させることで実現可能であると考えられる。

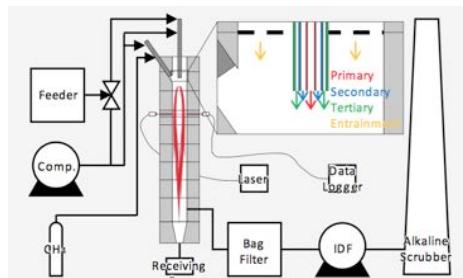


図3 燃焼試験装置と CT-TDLAS 計測位置

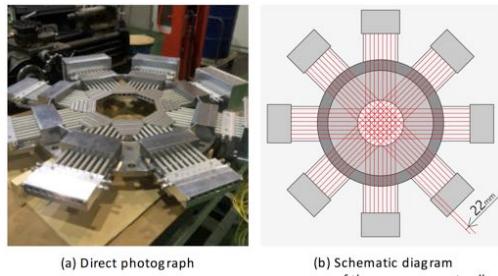


図4 CT-TDLAS 装置 (32 パス用)

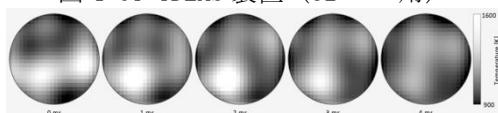


図5 2次元温度分布の時系列変化の様子

(2) 直接数値計算 (DNS)

①非球形粒子 6自由度計算

Arbitrary Lagrangian and Eulerian (ALE) 法を用いた DNS により、単一粒子の気流中の 6 自由度運動の計算が可能なコードを開発した。X 線 CT 装置で取得した微粉炭粒子の三次元形状から作成した微粉炭単一粒子と、等価体積球、等価体積楕円体、および等球形度楕円体等の種々のモデル粒子の気流中 6 自由度運動の DNS を実施した。その結果、微粉炭粒子は、等価体積楕円体の運動に最も近いこと、この等価体積楕円体は、図6 のように並進や回転、振動を伴う複雑な運動を示すが、微粉炭燃焼場に見られる粒子レイノルズ数範囲では、三角関数の確率密度関数により、回転・振動を表すことが可能であることを明らかにした(図7)。これを定式化し、固気二相流数値解析に導入可能な非球形粒子の影響を考慮した修正運動方程式の提案を行った。

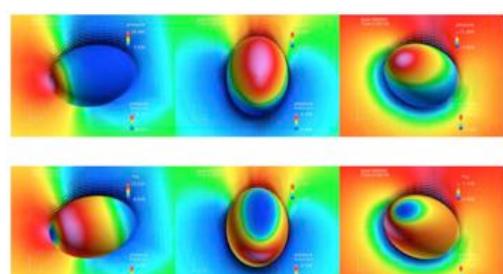


図6 等価楕円体表面のある瞬間の圧力分布(上段)と剪断応力分布(下段)

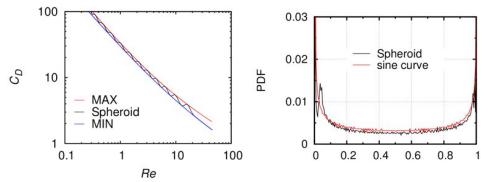


図 7 等価体積楕円体の効力係数-粒子レイノルズ数曲線（左図）とその確率密度関数（右図）

②乱流分散・相間熱物質移動挙動解析

乱流混合層中を分散していく希薄固気二相流の DNS を実施した（図 8）。乱流混合層の高速側から噴霧粒子を投入した。高速側と低速側の界面に発達する乱流渦により粒子が分散されるとともに、気流中における蒸発（相間質量輸送）、蒸発ガスの拡散、乱流変調、相間運動量輸送の各特性について、パーセルモデルの種類や代表粒子数の観点から、パーセルモデルの影響を詳細に分析した。パーセルモデルは、体積一定モデルと粒子数一定モデルを、パーセルモデルなしケースと比較した。その結果、パーセルモデルを使用すると、粒子の分散（図 9）や蒸発した燃料ガスの濃度分布（図 10）等に大きな影響を及ぼすこと、特に、体積一定モデルは粒子数一定モデルよりも大きな影響を与えることが明らかとなった。

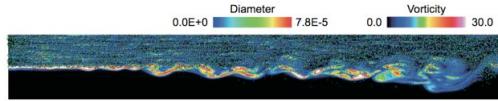


図 8 乱流混合層中の微粒子分散挙動（粒子の色は粒径、コンタの色は渦度）

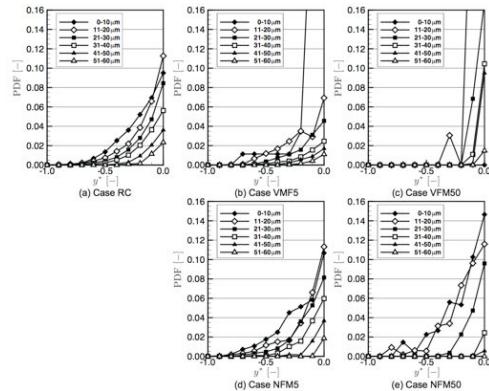


図 9 粒子分散挙動の比較 (RC: モデルなし, VMF5: 体積一定モデル (代表粒子数 5), VFM50: 同 (代表粒子数 50), NFM5: 粒子数一定モデル (代表粒子数 5), VFM50: 同 (代表粒子数 50) (横軸 0 が中心軸、負値は低速側))

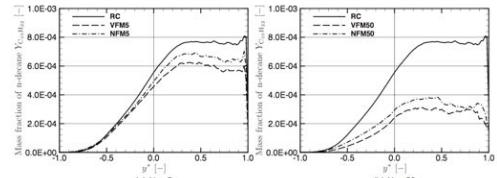


図 10 燃料ガス濃度分布の比較（横軸 0 が中心軸、負値は低速側、正值は高速側）

(3) 撥発分の気相反応の詳細化学反応解析

微粉炭の熱分解時に粒子から放出されるタールや軽質ガスを含む揮発分の気相反応挙動を正確に予測するため、C30までの多環芳香族炭化水素を含む 257 化学種 1107 素反応から構成される詳細化学反応機構を用いて、詳細化学反応計算を行った。得られた反応特性データに対して、Direct relation graph with error propagation (DRGEP) 法や Computational singular perturbation (CSP) 法を適用し、重要な反応の抽出を行い、反応機構の簡略化を行った（図 11）。その結果、揮発分の分解・重合反応に重要な反応経路や化学種を明らかにするとともに、64 化学種 150 素反応から構成される簡略化反応機構の作成に成功した。この簡略化反応機構は、実験、およびオリジナルの詳細化学反応機構との比較から妥当であることを確認した（図 12）。

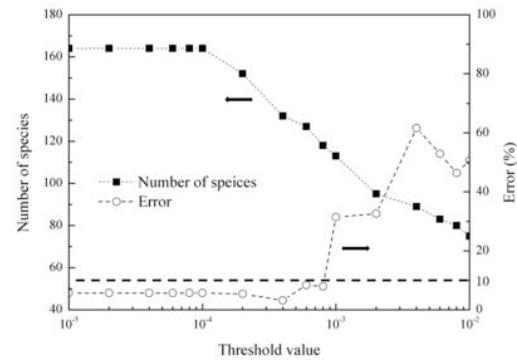


図 11 DRGEP 法により削減された化学種数と誤差の関係（着火遅れ時間で評価）

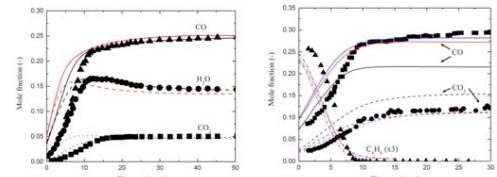


図 12 予混合燃焼実験と簡略化反応機構、およびオリジナル詳細反応機構との比較

(4) Large-eddy simulation (LES)

微粉炭の着火プロセスを正確に捉えるため、上述の簡略化反応機構を組み込んだ LES コードを開発した。これにより、微粉炭の着火時に熱分解により放出されるタールの分解・重合反応を考慮する解析が可能となった。

このLESコードを用いて、0.5kg/h規模の小型基礎燃焼試験装置を対象とするLESを実施した(図13)。その結果、報告者の一連の研究で取得されてきた、微粉炭火炎の粒子分散の様子や、すす粒子(LII強度)分布と前駆体であるPAH濃度分布の予測値などが定性的に一致することを確認した(図14)。本手法に基づくLESは、微粉炭着火プロセスにおける揮発分放出に伴う着火やすす化を良く捉えられることが明らかとなった。

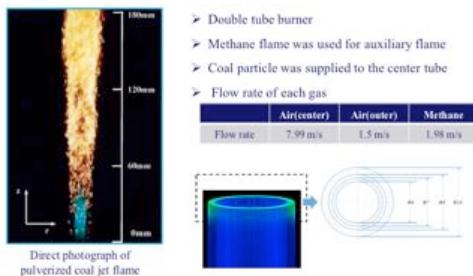


図13 解析対象の微粉炭火炎と微粉炭ノズル部の解析格子

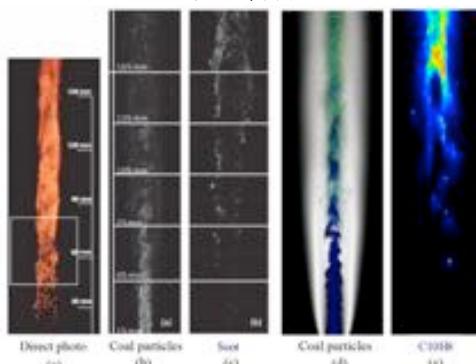


図14 実験で得られた(a)直接写真、(b)微粉炭粒子(Mie散乱)、(c)すす(LII信号)、(d)微粉炭粒子(解析結果)、(e)PAH(解析結果)

以上、微粉炭の着火プロセスを対象とした、現象解明、モデル化やモデル特性の評価、化学反応機構の簡略化を通じて得られた知見をLESによる数値解析へ導入し、数値解析技術の飛躍的な高度化を達成することができた。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計6件)

- ① 黒瀬良一, 渡邊裕章, 武藤昌也, 火力発電の高効率化・低環境負荷化に資する燃焼数値シミュレーション, ながれ, 査読無, Vol. 35, 2016, pp. 13-20.
- ② H. Watanabe, D. Uesugi, M. Muto, Effects of parcel modeling on particle dispersion and interphase transfers in a turbulent mixing layer, Advanced Powder Technology, 査読有, Vol. 26, 2015, pp. 1719-1728.
DOI:10.1016/j.apt.2015.10.018
- ③ チョウイ, 武藤昌也, 堀高太郎, 渡邊裕章, 北川敏明, 非球形粒子運動の数値解析(一様流中の粒子運動に対する湧き出しの影響), 日本機械学会論文集, 査読有, Vol. 81, No. 827, 2015, pp. 1-12.
DOI:10.1299/transjsme.15-00068
- ④ 林潤, 橋本望, 中塚記章, 辻博文, 渡邊裕章, 牧野尚夫, 赤松史光, 微粉炭火炎中におけるすす生成特性の光学計測, 微粒化, 査読無, Vol. 24, 2015, pp. 17-24.
- ⑤ 渡邊裕章, 上杉太亮, 武藤昌也, 乱流混合層中の粒子挙動に及ぼす代表粒子モデルの影響, 粉体工学会誌, 査読有, Vol. 51, 2014, pp. 846-855.
- ⑥ 武藤昌也, 上杉太亮, 渡邊裕章, 牧野尚夫, 分散二相乱流混合層における流れ場の乱れおよびスカラ輸送に及ぼす代表粒子モデルの影響, 粉体工学会誌, 査読有, Vol. 50, 2013, pp. 646-655.

〔学会発表〕(計15件)

- ① N. Hashimoto, J. Hayashi, N. Nakatsuka, K. Tainaka, S. Umemoto, H. Tsuji, H. Watanabe, H. Makino, Primary soot particle diameter distributions in a combustion field formed by 4kW pulverized coal jet burner measured by TIRE-LII, First Pacific Rim Thermal Engineering Conference, 2016年3月14日, Waikoloa(USA).
- ② 泰中一樹, 丹野賢二, 渡邊裕章, 神本崇博, 中川真人, 出口祥啓, 黒瀬良一, CT波長可変半導体レーザ吸収分光法による定格3kg/h微粉炭専焼燃焼場に対する2次元温度分布の時系列計測, 第53回燃焼シンポジウム, 2015年11月18日, つくば国際会議場(茨城県つくば市).
- ③ W. Zhang, H. Watanabe, M. Muto, K. Hori, T. Kitagawa, Investigation of the motion of a particle with irregular shapes in a uniform flow by direct numerical simulation, Fifth International Conference on the Characteristics and Control of Interfaces for High Quality Advanced Materials and Fifty-First Summer Symposium on Powder Technology, 2015年7月8日, 倉敷ロイヤルアートホテル(岡山県倉敷市).
- ④ S. Ahn, K. Tanno, H. Watanabe, Generation of a reduced chemical kinetic mechanisms for coal combustion, Fortieth International Technical Conference on Coal Utilization & Fuel Systems, 2015年7月2日, Clearwater(USA).
- ⑤ S. Ahn, H. Watanabe, K. Tanno, N. Hashimoto, Application of a skeletal mechanisms of LES of a pulverized coal jet flame, Fifteenth International Conference on Numerical Combustion, 2015年4月20日, Avignon(France).
- ⑥ S. Ahn, 丹野賢二, 橋本望, 渡邊裕章,

Large eddy simulation of a pulverized coal jet flame with a skeletal mechanism, 第 28 回数値流体力学シンポジウム, 2014 年 12 月 11 日, タワーホール船堀(東京都江戸川区).

- ⑦橋本望, 林潤, 中塚記章, 泰中一樹, 梅本賢, 辻博文, 赤松史光, 渡邊裕章, 牧野尚夫, 時間分解レーザ誘起赤熱法による小型微粉炭ジェットバーナ燃焼場のすす1次粒子径分布計測, 第 52 回燃焼シンポジウム, 2014 年 12 月 5 日, 岡山コンベンションセンター(岡山県岡山市).
- ⑧W. Zhang, 武藤昌也, 堀高太郎, 渡邊裕章, 気流中の单一非球形粒子運動の直接数値計算, 日本流体力学会年会 2014, 2014 年 9 月 15 日, 東北大大学(宮城県仙台市).
- ⑨渡邊裕章, 先端計測と数値実験による微粉炭燃焼モデリングと数値シミュレーション, 先端計測技術の応用展開に関するシンポジウム, 2013 年 12 月 20 日, 徳島大学(徳島県徳島市).
- ⑩S. Ahn, 庄司哲也, 丹野賢二, 橋本望, 渡邊裕章, Numerical analysis of chemical pathways and reactivity on a coal jet flame, 第 27 回数値流体力学シンポジウム, 2013 年 12 月 19 日, 名古屋大学(愛知県名古屋市).
- ⑪上杉太亮, 武藤昌也, 渡邊裕章, 直接数値計算による乱流混合層における粒子の挙動解析, 第 27 回数値流体力学シンポジウム, 2013 年 12 月 19 日, 名古屋大学(愛知県名古屋市).
- ⑫渡邊裕章, 梅本賢, 梅津宏紀, 橋本望, 石炭の燃焼・ガス化過程における粒子挙動のモデリング, 日本学術振興会石炭・炭素資源第 148 委員会, 2013 年 12 月 19 日, 東京大学(東京都目黒区).
- ⑬林潤, 橋本望, 中塚記章, 泰中一樹, 辻博文, 渡邊裕章, 牧野尚夫, 赤松史光, 微粉炭火炎中における多環芳香炭化水素(PAHs)およびすす存在領域の同時計測, 第 51 回燃焼シンポジウム, 2013 年 12 月 4 日, 大田区産業プラザ(東京都大田区).
- ⑭渡邊裕章, 橋本望, 丹野賢二, 数値解析による微粉炭の燃焼特性予測評価技術の開発, 粉体工学会 2013 年度秋期研究発表会, 2013 年 10 月 9 日, 大阪南港 ATC(大阪府大阪市).
- ⑮林潤, 橋本望, 中塚記章, 泰中一樹, 梅本賢, 辻博文, 渡邊裕章, 牧野尚夫, 赤松史光, 小型微粉炭ジェットバーナにおける二次元すす計測, 粉体工学会春期研究発表会, 2013 年 5 月 22 日, 連合会館(東京都千代田区).

[その他]

ホームページ等

<http://hyoka.ofc.kyushu-u.ac.jp/search/details/K005584/>
<http://www.mech.kyushu-u.ac.jp/~rgd/ind>

ex-j.html
<http://criepi.denken.or.jp/>

6. 研究組織

(1)研究代表者

渡邊 裕章 (WATANABE, Hiroaki)
九州大学・大学院工学研究院・准教授
研究者番号 : 60371598

(2)研究分担者

辻 博文 (TSUJI, Hiroyuki)
一般財団法人電力中央研究所・主任
研究者番号 : 40371611

橋本 望 (HASHIMOTO, Nozomu)
北海道大学・大学院工学研究院・准教授
研究者番号 : 70392751