

燃焼に伴う二酸化炭素排出量の削減にむけて



研究ノート

堀 司*

Reduction of Carbon Dioxide Emissions Associated with Combustion

Key Words : Combustion, CFD, Detailed reaction mechanism, Carbon dioxide

はじめに

人類は50万年以上前から燃焼を利用してきたといわれており、燃焼のエネルギーは文明の発展に大きく寄与してきた。しかし、今現在、地球温暖化問題の関心の高まりとともに、燃焼に伴う二酸化炭素の排出が問題視されている。例えば、石炭火力発電は低品質の燃料である石炭を利用して、低価格の電力を供給しているが、二酸化炭素の排出量の多さから、その利用には社会から厳しい目を向けられることがある。自動車分野では、内燃機関の電動化が求められ、海外では政策によって将来的に電動化されていない内燃機関の販売を禁止する動きもある。一方で燃焼は体積あたりの出力(比出力)に優れるため、装置をコンパクトにできる。また、他の技術に比べても、燃焼はライフサイクルにおけるコストと二酸化炭素排出量では他技術に対して優位と考えられる。さらに、長年にわたり社会を支えてきた燃焼の信頼性は高い。

燃焼においても二酸化炭素排出量を削減する動きが高まっている。燃焼における二酸化炭素の削減は燃焼改善による機器の高効率化に加え、燃焼に伴って発生する二酸化炭素の分離・貯蔵、大気中や工場から排出された二酸化炭素と再生可能エネルギーによる余剰電力から燃料合成などがある。機器の高効率に関しては研究レベルであるが自動車用内燃機関

でエンジンの正味熱効率50%を達成した⁽¹⁾。また、酸素水素燃焼による高効率発電システム(発電効率68%)の検討も始まっている⁽²⁾。燃料合成に関しては二酸化炭素を再生可能エネルギーの余剰電力からアンモニアや液体燃料を合成し、燃焼炉や自動車用内燃機関で利用することも考えられている⁽³⁾。つまり、燃焼を高度に制御して、これらの技術を実用化すれば、再生可能エネルギーの電力貯蔵に関する問題を回避し、燃焼に伴う二酸化炭素排出量を大幅に削減できる。

著者や著者が所属する燃焼工学研究室(赤松研究室)では、燃焼による二酸化炭素やエミッションを低減すべく、レーザを用いた非接触計測による火炎診断、実機相当の条件での新燃焼コンセプト検証実験、三次元燃焼数値解析などを進めている。燃焼工学研究室では、戦略的イノベーション創造プログラムの「革新的燃焼技術」や「エネルギーキャリア」に参画し、実験や計算を実施してきた。本稿では燃焼の素反応を考慮した燃焼計算コードを開発し、実機へ適用した事例について述べる。

燃焼シミュレーションの現状

燃焼は極めて高速な現象であり、実験的にすべての状態を把握することは困難である。比較的小さな燃焼システムは試作と実験を繰り返すことができるが、比較的大規模な燃焼システムでは試作を繰り返すことが予算や時間の観点で困難である。燃焼シミュレーションによる設計支援は非常に重要な課題である。

燃焼の数値シミュレーションは圧縮性を考慮した連続の式、運動量保存式、化学種保存式、エネルギー保存式に加えて気体の状態方程式を連立させて計算する。計算の支配方程式に関しては1900年代後半ごろにはある程度確立し、それ以後、大きな変化



* Tsukasa HORI

1982年3月生まれ
同志社大学 工学研究科 機械工学専攻
博士後期課程修了(2006年)
現在、大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻 講師 工学博士
TEL : 06-6879-7608
FAX : 06-6879-7612
E-mail : thori@mech.eng.osaka-u.ac.jp

はない。一方で燃焼シミュレーションの予測精度は風洞実験に代わる精度が期待される非燃焼のシミュレーションに比べると十分でない。それは、燃焼シミュレーションは支配方程式に加えて、乱流、燃焼、反応機構、物性推算、固体や液体燃料に関する多くのモデルを用いるためである。モデルを用いない計算は直接数値計算とよばれるが、計算負荷が大きく、現状は最新のスパコンを用いても一辺数 mm 程度領域の三次元空間における気体の火炎を計算するのみにとどまる。将来の計算機能力の発展を見越しても、燃焼シミュレーションにおけるモデルの利用はなくならず、用いる計算機能力や予測のニーズに合わせて、モデルを選択、簡略化しなければ、実用時間で設計に資する結果が得られない。燃焼計算は計算時間と精度のトレードオフの関係の中で、計算者が適切なバランスを選択する必要がある。これには、燃焼工学、伝熱工学、流体力学、計算工学など様々な分野に関する深い知識と実験から対象の現象を計算するために重要な現象を見出す力が必要である。

近年では、燃焼システムにおける燃料多様化、燃料の反応機構に関する知見の深化によって反応機構を考慮した計算により、燃料種の違いを燃焼シミュレーションで再現することが求められている。

燃料の反応機構

燃料影響を考慮するためには、燃料の物性推算と燃料の反応機構の情報が必要となる。物性推算は分子構造がわかればある程度推算できる。問題は反応機構である。反応機構についても飽和炭化水素の一部の燃料は経験的な推算手法があり、反応機構を半自動的に生成できる場合もある。一方、多くの燃料の反応機構は研究発展途上で、第一原理計算やその結果を元に、反応を専門にする研究者が構築した反応機構（詳細反応機構）を利用する必要がある。詳細反応機構は比較的精度が高く、着火遅れや層流燃焼速度の燃焼計算の基本的な燃料性能を再現できる。

ただし、実用燃料の詳細反応機構は数千から数万の化学種とそれらからなる素反応式群から構成されると考えられる。仮に実用燃料の詳細素反応機構が開発されたとしても、詳細反応機構を用いて三次元計算で直接利用することは計算負荷の観点から現実的ではない。通常は、詳細素反応機構から経験的な手法やグラフ理論に基づく数理的な手法などで燃焼

計算に感度の低い化学種や反応式を除く、もしくは数段の反応機構を実際には存在しないモデルの素反応式で置き換えるなどで、化学種数や反応式数を削減した反応機構（簡略化反応機構）を作成し、簡略化反応機構を用いて三次元計算を行う。詳細反応機構や簡略化反応機構はホームページや論文の付録として公開されている。

著者らもディーゼル機関の燃焼解析のため、軽油の代表成分の一つである炭化水素（n-tridecane）の詳細反応機構から簡略化反応機構反応を作成した⁽⁴⁾。約 1493 化学種と 3641 反応式の詳細反応機構から、反応機構を解説し、49 化学種、85 反応式に簡略化した反応機構を作成した。着火遅れの予測精度は詳細素反応機構を用いた計算結果の 10% 以内の精度を確保し、ディーゼル機関の燃焼解析に利用している。

素反応を考慮した数値解析の高速化

素反応を考慮した数値解析の手法には大きく、素反応を含めた計算を事前に実施して参照表を作成し、三次元計算中には直接計算せず、参照表により燃焼を考慮する方法（Flamelet 系解法）と三次元計算で直接燃焼を考慮する方法（直接解法）がある。Flamelet 系解法は計算コストの面で有利であるが、精度が参照表や局所の燃焼状態を算出する物理量の計算に依存する問題がある。直接解法は計算コストを要するが精度は比較的良いことが考えられる。著者らは直接解法で燃焼を予測する方法を採用している。

まず、高速化の手法として、支配方程式の解法は非圧縮系でよく採用される SIMPLE 系解法を圧縮性に適用した手法（圧力ベース）を採用する。従来の燃焼計算で用いられる支配方程式を直接連立させて計算する手法（密度ベース）では、音速の波を解像する計算の時間刻みが必要となる。音速は温度への依存性があり、常温中では 340 m/s 程度であるが、燃焼中では 1000 m/s を超える。これを解像する計算刻みを採用すると、極めて時間進行に時間を要することから、計算時間の大幅な低減が期待できる。これにより、圧力波の計算精度が低下するが、圧力波の影響が顕著に現れる現象（ノッキング、振動燃焼）の予測が必要でない場合は圧力ベースで計算できる。

直接解法で燃焼器を計算する場合の計算コストの主要因は素反応の時間進行を計算する常微分方程式 (ODE) のソルバである。素反応計算の ODE はいわゆる硬い方程式である。このソルバは従来のソルバより計算コストが高い。そこで、様々な ODE ソルバーを検討し、疎行列ソルバーの LSODES (SpeedCHEM) が安定性、計算速度に優れることを見出した。

図 1 に反応の計算時間に及ぼす ODE ソルバの影響を示す⁽⁵⁾。従来、活用されている手法 (CVODE) は安定であるが、計算コストが大きい上、考慮する化学種数の 2.6 乗に比例して計算時間が増大した。半陰解法 (SIBS) は比較的少ない化学種数では良い結果を示すが、反応数が増加すると、計算時間が急増することが認められた。LSODES は計算が最も速く、化学種を増加させても計算時間は化学種の 1.1 乗に比例するのみであった。LSODES はカットヒルマキー法による行列並び替えによって、行列演算の際の疎行列性を維持し計算量を削減できたこと、陽解法や半陰解法でなく陰解法であることから、計算の安定性を確保できたことが要因として考えられる。

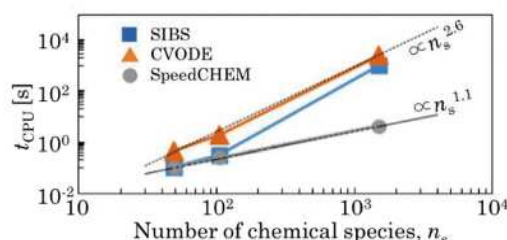


図 1 反応の計算時間に及ぼす ODE ソルバの影響

次に京や富岳に代表されるスパコンの利用を念頭に、並列計算機の有効利用を検討するため、スレッド並列とプロセス並列による計算時間低減効果の検証を実施した。図 2 は京都大学のスパコンを利用して並列計算の効果を調べた結果である⁽⁵⁾。通信の無駄を排除し、シリアル計算に比べてであるが、プロセス並列のみで最大 600 倍以上の高速化 (4096 並列) を達成した。並列性能は計算対象、計算機の仕組みなど依存するが、これは 1CPU で計算すると 2 年かかる計算が約 1 日で得られることを示している。素反応を考慮した燃焼シミュレーションにはスパコンの活用が有効であることを示唆している。

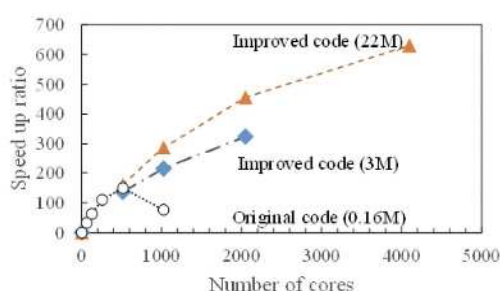


図 2 MPI による素反応を考慮した噴霧燃焼計算の高速化

著者らは階層構造でファイルを格納できるデータ形式 (HDF5)、CutCell 法、壁面熱伝達モデル、燃焼モデル、すすモデル、噴霧モデルなどの改良を実施し、オープンソースコードに導入した。これにより、基礎的な火炎に加えて、燃焼炉や内燃機関などの実用燃焼器の複雑な場に対しても、素反応を考慮した計算により燃焼特性やエミッションを予測するコードを完成させた。

計算事例 (アンモニア燃焼炉)

アンモニアを含む燃焼炉では温度上昇に伴う NO 生成 (拡大ゼルドビッチ機構) に加え、燃料中の窒素成分に由来する NO 生成 (Fuel NO) の予測技術が求められている。図 3 に示す 10kW のアンモニア/メタンの燃焼炉で実施した実験を対象に計算を行った。図 4 に炉の中心断面における温度分布を示す⁽⁶⁾。Case1 はメタン専焼、Case2 はアンモニアメタン混焼である。Case3 は Case1、Case4 は Case2 の二段燃焼である。二段燃焼は酸化剤供給を 2 段とし、NO 生成が活性化する両論混合気による燃焼を回避する手法である。図より二段燃焼で燃焼温度が低下していることが確認できる。図 5 に燃焼炉出口の NO 濃度を示す⁽⁶⁾。計算は実験の NO 濃度の傾向をよく示している。計算結果を詳細に分析し、素



図 3 アンモニア燃焼炉

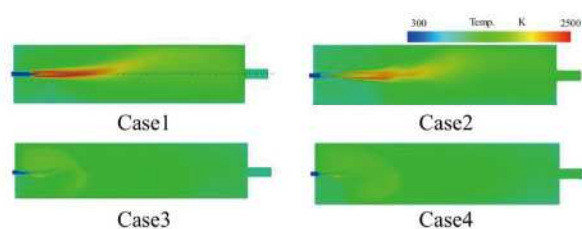
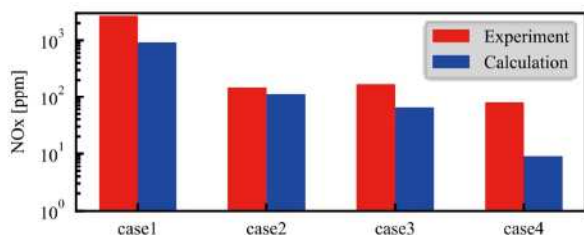


図4 アンモニア燃焼炉の数値解析 (中心断面温度)

図5 NO_xの実験値と計算値の比較

反応を考慮した計算はアンモニア燃焼でのNO予測に有効であることを確かめている。

計算事例 (ディーゼル機関)

内燃機関の燃焼例としてディーゼル機関に関する燃焼計算を紹介する。図6は容器内に軽油の成分の一つである炭化水素燃料 (n-dodecane) を噴射し、噴霧断面のすす濃度を可視化した実験を計算対象にすすを予測した結果である⁽⁷⁾。これは内燃機関の燃焼におけるすす予測のベンチマーク計算の条件となっている。紙面左側から右側に向かって、高温の雰囲気中に燃料液滴が噴射される。液体燃料は蒸発しノズルから一定の位置で着火し燃焼する。ノズルから燃焼反応が開始するまでの距離をset-off長さ (lift-off長さ) とよぶ。すすは燃焼領域で成長するが、下流に進行するにつれて、雰囲気中の酸素によって再酸化されて濃度が低下する。計算はset-off長さ、すす濃度分布の実験値をよく再現している。これも近年の簡略化反応機構の精度向上と計算速度向上によって実現できた結果である。

図7はディーゼル機関の燃焼の計算例である。近年の燃料噴射技術の向上によって、エンジン燃焼の圧縮と膨張行程で複数回の噴射を自在に制御できるようになった。これによって、燃焼開始時の急激な燃焼抑制による静音化、燃料噴霧の壁面衝突による冷却損失の低減、すすの再酸化の促進などの効果が期待されている。図は三段の燃料噴射の燃焼に対して、噴射圧力の影響を計算した結果を示している。

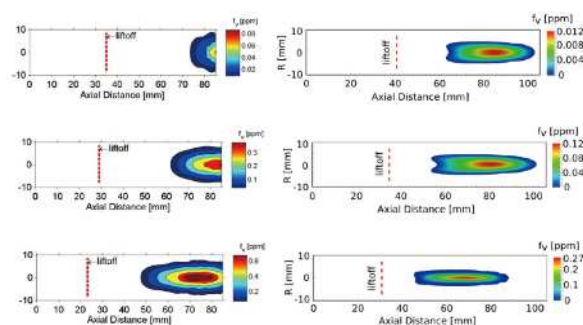


図6 燃料噴霧火炎中のすすの実測値と予測値 (左列: 実験, 右列: 計算, 上段から雰囲気酸素濃度 10, 12, 15 %)

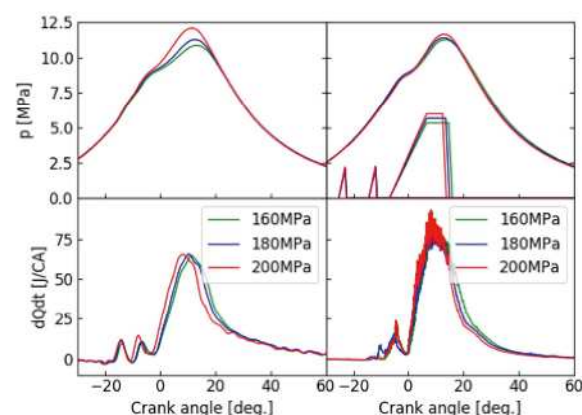


図7 三段噴射のディーゼルエンジン燃焼 (左列: 実験, 右列: 計算)

噴射圧力の増加によって、上死点付近の燃焼が活性化し、最大圧力が増加する様子が計算されている。着火時期や三段の噴霧火炎の干渉については素反応解析の導入で予測精度が改善し、実機を予測することが可能となった。

おわりに

本稿では、燃焼による二酸化炭素の削減技術の動向について述べた。また、今後、期待される燃料種の変更に対応できるよう、素反応機構を考慮した燃焼シミュレーションに関する計算コードの現状について述べた。ここで紹介した計算コードの開発により、これまで数週間から数ヶ月を要していた計算が1日以内や数日程度で実行できるようになった。現在、これを持ちいて燃焼現象の解明や燃焼コンセプトの検証に活用している。

燃焼に伴って排出される二酸化炭素の削減は喫緊の課題である。研究者として、燃焼に関する基礎知見を深化させるとともに予測技術を開発し、燃焼に

伴う二酸化炭素排出量を削減するために貢献していきたい。

参考文献

- 1) 革新的燃焼技術,
<https://www.jst.go.jp/sip/k01.html>.
- 2) 高効率な水素発電を支える基盤技術開発に着手, NEDO プレスリリース,
https://www.nedo.go.jp/news/press/AA5_101359.html
- 3) エネルギーキャリア,
<https://www.jst.go.jp/sip/k04.html>.
- 4) Kuwahara, K. Matsuo, T. Sakai, Y., Kobashi, Y., Hori, T., Matsumura, E., Senda, J., SAE paper, No. 2016-01-2238 (2016), pp.1-22.
- 5) Hori, T., Fujiwara, K., Tsubokura, M. Kuwahara, Matsumura, E., Senda, J., Proceedings of COMODIA 2017, B107.
- 6) 北野ら, 燃焼シンポジウム講演論文集 (2019), B332.
- 7) Tikader Pritom ら, 第 36 回卒業研究発表講演会, 30 (2020).

