

LES による微粉炭燃焼解析

山本 研二[†] 岡崎 輝幸[†] 室田 知也[†] 谷口 正行[†]

Large Eddy Simulation of Pulverized Coal Combustion

Kenji YAMAMOTO[†], Teruyuki OKAZAKI[†], Tomoya MUROTA[†] and Masayuki TANIGUCHI[†]

Abstract

A numerical simulation program for pulverized coal combustion based on LES (Large eddy simulation) has been developed. It was validated by comparing with experimental data of a pulverized coal jet flame ignited by a high temperature (1420 K) flue gas jet. The difference between predicted and measured coal burnout on the centerline of the jets was less than 5 percent, which corresponds to experimental error. The predicted ignition position was in good agreement with the experimental data. Clustering of coal particles was observed significantly when the Stokes number of the particles is nearly equal to unity.

Key Words: Coal combustion, LES, Turbulent jet, Pulverized coal

記号

C_c	: 粒子の比熱	[J/kgK]	St	: ストークス数	[-]
C_D	: 抗力係数	[-]	S_ϕ	: 生成項	
$CoalH_L$: 熱分解の潜熱	[J/kg]	T	: 温度	[K]
C_s	: スマゴリンスキー定数	[-]	u	: ガス流速	[m/s]
d_p	: 粒子径	[m]	U	: 粒子流速	[m/s]
E	: 吸収効率因子		x, y, z	: 座標	[m]
f	: 体積分率	[m ³ /m ³]	X	: 粒子の座標	[m]
g	: 重力	[m/s ²]	β	: 面積と体積の比率	[1/m]
I	: ふく射強度	[W/m ²]	δy	: 混合層の幅	[m]
I_c	: クラスタ指数	[1/m]	δu_z	: 軸方向流速差	[m/s]
m	: 質量	[kg]	ε	: 微少量 (=0.1 mm)	[m]
n	: 粒子の数		ϕ	: 一般化した保存量	
Nu	: ヌッセルト数	[-]	Γ	: 拡散係数	
Pr	: プラントル数	[-]	η	: 累積重量分率	[%]
q	: 伝熱量	[W]	μ	: 粘性係数	[Pa s]
Ra	: 吸収係数	[1/m]	ρ	: ガス密度	[kg/m ³]
Re	: レイノルズ数	[-]	ρ_p	: 粒子密度	[kg/m ³]
s	: ふく射における長さ	[m]	σ	: ステファンボルツマン定数	[W/m ² K ⁴]

受付日: 2007年3月14日, 第44回日本伝熱シンポジウムより受付, 担当エディター: 花村 克悟
[†] 株式会社日立製作所 電力・電機開発研究所 (〒312-8507 茨城県ひたちなか市堀口 832 番地の2)

τ	: 粒子の緩和時間	[s]
τ_i	: 乱流の特性時間	[s]
添え字		
b	: 黒体の値	
c	: 対流	
i	: $i=1,2,3 = x, y, z$	
p	: 粒子の値	
r	: ふく射	
rel	: 相対値	
t	: 乱流	
vol	: ボラタイルの値	
$char$: チャーの値	

1 緒言

微粉炭燃焼ボイラの設計にあたっては、(1)燃料の燃焼が十分に進むこと、(2)NOx や CO 等の環境汚染物質の排出が少ないことが要求される。定格負荷から部分負荷にわたってこの要求を満足し、かつ経済性を考慮した運転を実現するためには、火炉内の流動・燃焼・伝熱挙動を解析する技術が必要となる。

これまでに我々は、 $k-\varepsilon$ 乱流モデルを使用した数値解析技術を開発した[1]。さらに性能の高い新型ボイラの設計には、乱流モデルの解析精度を高める必要がある。しかし、LES (ラーゼ・エディ・シミュレーション) 法などの高精度な乱流モデルを用いた微粉炭燃焼解析はほとんど報告されていない[2]。本研究の目的は、LES 乱流モデルを用いた微粉炭燃焼解析プログラムを開発し、石炭を高温のガスで加熱して燃焼させる実験を対象に燃焼率と着火位置の計算精度を検証することである。

2 数値計算方法

2.1 数値計算方法

本研究の解析で考慮する気相の支配方程式は、質量、運動量、エンタルピ、質量分率($N_2, O_2, CO_2, CO, H_2O, H_2, CH_4$)の保存式である。また、粒子の運動はラグランジ座標系で DPM (Discrete Particle Method) により計算した。気相と固相間の質量、運動量、エンタルピの移動を考慮した。

気相での Favre 平均した保存量 ϕ の一般化した保存式は、次の式で表される[3,4]。

$$\frac{\partial \rho \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \phi u_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} (\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i}) + S_\phi \quad (1)$$

この方程式を有限体積法で離散化して計算する[4]。運動量と圧力の定義点異なるスタッガード格子を用いた。運動量の保存式において対流項の離散化には 2 次精度中心差分法を用い、その他の保存式の対流項には、ハイブリッド法[4]を用いた。時間積分には、完全陰解法を用いた。時間積分の精度低下を防ぐために、時間刻みを小さくした (クーラン数: 約 0.1)。乱流シュミット数と乱流プラントル数を 1.0 と仮定した。

2.2 流動モデル

LES 乱流モデルを用いて運動方程式を解いた。サブグリッドスケール応力の評価に Smagorinsky モデル[5]を用いた。Smagorinsky 定数 C_s を 0.1 に設定した。圧力と流速の補正に、SIMPLE 法[4]を用いた。

2.3 粒子モデル

ラグランジ座標系で重力と抗力を考慮して粒子の速度と座標を計算した[6]。この方法は、DPM と呼ばれる。

$$\frac{dU_{i,j}}{dt} = \frac{3C_D \rho}{4d_p \rho_p} (u_i - U_{i,j}) U_{rel,j} + g_i \quad (2)$$

$$\frac{dX_{i,j}}{dt} = U_{i,j} \quad (3)$$

ここで、 $U_{i,j}$ と $X_{i,j}$ は、 j 番目の粒子の i 方向速度、粒子位置である。また、 $C_D, U_{rel,j}$ は、抗力係数と粒子とガスとの相対速度であり、以下の式で計算した。

$$C_D = 24(1 + 0.15 Re_p^{0.687}) / Re_p \quad (4)$$

$$U_{rel,j} = \left(\sum_i (u_i - U_{i,j})^2 \right)^{1/2} \quad (5)$$

また、式(2)、(3)の時間積分に 2 次精度ルンゲクッタ法を用いて、高精度化を図った。

2.4 伝熱モデル

本研究では、粒子とガスのふく射、対流伝熱を計算した。

ふく射伝熱については、散乱を無視したふく射輸送方程式(式(6), (7))を、DT法(Discrete Transfer Method) [7]により計算した。

$$\frac{dI}{ds} = -RaI + RaI_b \quad (6)$$

$$I_b = \frac{\sigma T_g^4}{\pi} \quad (7)$$

1つの面から出すレイの数を36本に設定した。計算時間の短縮のため、10タイムステップに1回ふく射の計算をした。ふく射の計算をしない場合は、エンタルピのソース項を前回と同じ値に設定した。

吸収係数(Ra)は、ガス分子(CO_2 , H_2O)や固体粒子(チャーや飛灰等)の濃度により決まると仮定した。初めにガスの吸収係数(Ra_g)の計算方法について説明する。燃焼ガスは、 N_2 , O_2 , CO_2 , H_2O 等のガス組成を含んでいる。この中で2種類以上の原子を含むものは、輻射エネルギーを吸収または放射するが、単原子分子はほとんど輻射に影響しない。また、ある特定の波長だけで輻射エネルギーの吸収や放射が生じることも良く知られている。原理に忠実にガスの輻射エネルギーの伝達を求めるためには、波長毎にエネルギーの移動を計算しなければならず、膨大な計算を必要とする。簡便な計算方法として、波長依存性を考慮してガスの吸収係数を決めるWSGG(Weighted Sum of Gray Gasses)[8]モデルがあり、このモデルを使用した。本研究ではふく射に影響するガスとして CO_2 と H_2O のみを考慮した。

次にチャーの吸収係数の計算方法について説明する。微粉炭燃焼においては、チャーの平均粒径は40 μm 程度である。ガス温度を1500 $^\circ\text{C}$ と仮定すれば、輻射能の最大となる波長は1.63 μm となり、粒径パラメータ($=\pi d/\lambda$)は70以上になる。この条件では、幾何光学が適用できる[9]。チャーの吸収係数を式(8)で計算する。 f_{char} はチャーの体積分率である。 β_{char} は体積を投影面積に変換する係数で、式(9)で表される。最後に、 E_{char} は、吸収効率因子であり、文献(8)の方法で計算した。

$$Ra_{char} = f_{char} \times \beta_{char} \times E_{char} \quad (8)$$

$$\beta_{char} = \frac{\pi r^2}{\frac{4}{3}\pi r^3} \quad (9)$$

対流伝熱については、粒子が球形と仮定してヌセルト数 Nu を計算した[10]。

$$10^{-3} < Re_p < 1$$

$$Nu = 2 + 0.52Re_p^{1/3}Pr^{1/3} \quad (10)$$

$$1 < Re_p < 10^3$$

$$Nu = 2 + 0.57Re_p^{1/2}Pr^{1/3} \quad (11)$$

ふく射、対流伝熱、熱分解による潜熱を考慮して固体粒子の温度を式(12)で計算した。

$$\frac{dm_p C_c T_p}{dt} = q_c + q_r + \frac{dm_{vol}}{dt} CoalH_L \quad (12)$$

2.5 燃焼モデル

ガスの燃焼はEddy Dissipation Model[11]により評価した。また、粒子の熱分解反応は、2反応競合モデル[12]により評価した。反応速度は、レーザによる微粉炭粒子の着火実験[13]により測定した。チャーの酸化・ガス化反応は、別途実験で測定したデータを用いて開発したモデル[14]により評価した。

3 解析対象

微粉炭の燃焼実験で測定した燃焼率とガス温度[15]を用いて計算精度を検証する。図1に実験装置の形状を示す。また、図2に解析の境界条件を示す。中心に設置した直径7 mmの1次ノズルから室温(300 K)の空気と石炭を噴出する(図2 ①)。流速は10 m/sである。石炭と空気の質量比率であるC/Aは0.5である。

1次ノズルの外側に設置した正方形ノズルから1420 Kの高温ガスを噴出する(図2 ②)。出口の流

速は 4.8 m/s である。この高温ガスにより、石炭を加熱し着火させる。

本実験装置では、ダクト出口にガスを吸引するブロアが設置されており、一定の流量のガスを吸引する。このため、ノズル出口からフードまでの開放空間で室内の空気を吸引する(図 2 ③)。数値計算では、ここに流速の境界条件を設定する必要がある。本研究では、ブロア出口の流量から、ノズル入口の流量を引いたものが、開放空間で吸引した空気量と考えた。この部分の吸引の流速が同じと仮定し、開放空間における流入流速を 0.16 m/s と決めた。

実験に使用した石炭は、燃料比 1.74 の瀝青炭である。石炭の性状を表 1 に示す。

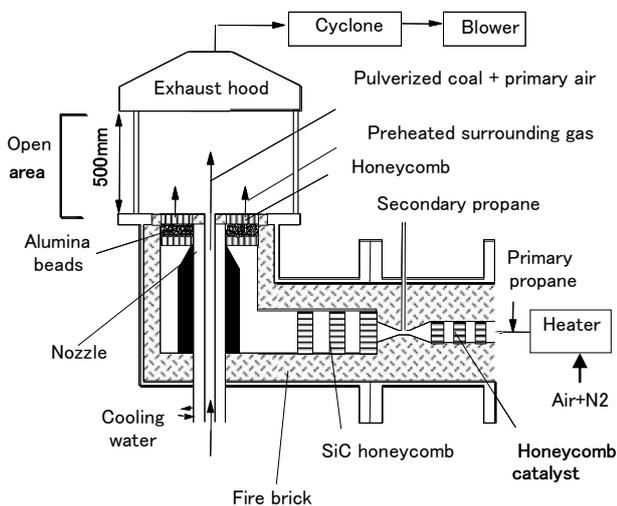


Fig. 1 Experimental apparatus.

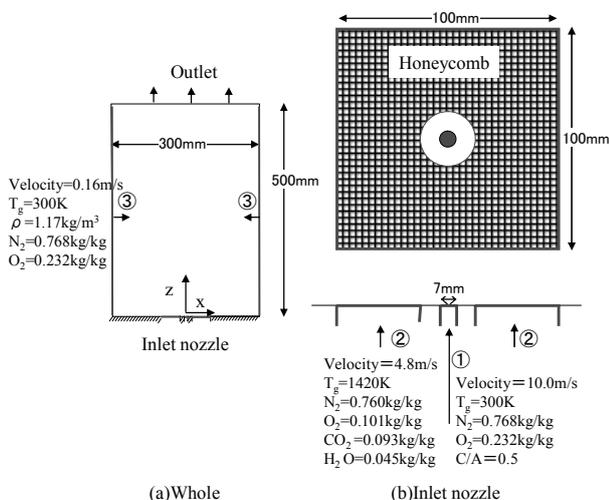


Fig. 2 Boundary conditions.

Table 1 Coal analysis.

Proximate analysis (wt%, dry basis)	
Volatile matter (VM)	31.1
Fixed carbon (FC)	54.0
Ash	14.9
Fuel ratio (FC/VM)	1.74

Ultimate analysis (wt%, dry ash-free basis)	
C	83.1
H	4.6
O	9.9
N	1.9
S	0.5

石炭の粒径分布を図 3 に示す。初めに、実験で測定した粒径分布に近くなる Rosin-Rammler の近似式を決めた。この累積質量分率(η)の近似式は以下の式で表される。

$$\eta = 100 \times \left[1 - \exp \left(- \left(\frac{d_p}{50} \right)^{1.3} \right) \right] \quad (6)$$

Rosin-Rammler の式を使って、粒径を 30 μm 以下、30-50 μm 、50-75 μm 、75-150 μm 、150 μm 以上の質量割合を計算した(表 2)。150 μm 以下の代表粒径は、範囲の最小と最大の間とした。すなわち、15、40、62.5、113 μm を代表粒径とした。150 μm 以上の粒子の代表径は、体面積平均により計算した(165 μm)。

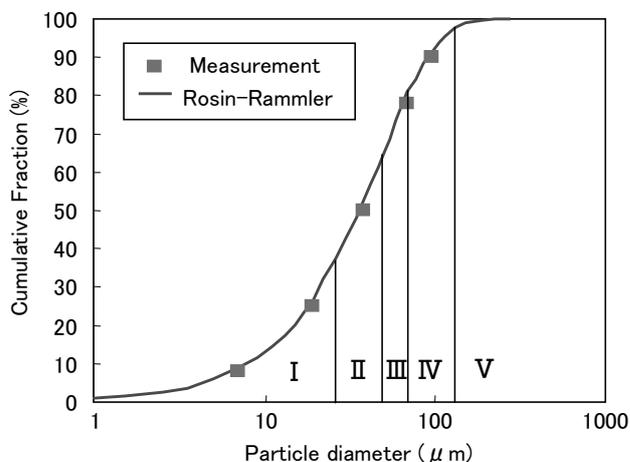


Fig. 3 Particle diameter distribution.

Table 2 Coal particle diameter.

Particle name	I	II	III	IV	V
Particle diameter(μm)	15	40	62.5	113	165
Mass fraction (wt%)	37.5	27.6	16	16.7	2.2

本研究で使用したメッシュを図4に示す。メッシュ数は約100万である。特に1次ノズル付近のガスと粒子の混合が重要であるので、ここにメッシュを多く配置し、最小メッシュ間隔を1 mmに設定した。また、噴流の噴出方向を z 方向と定義する。

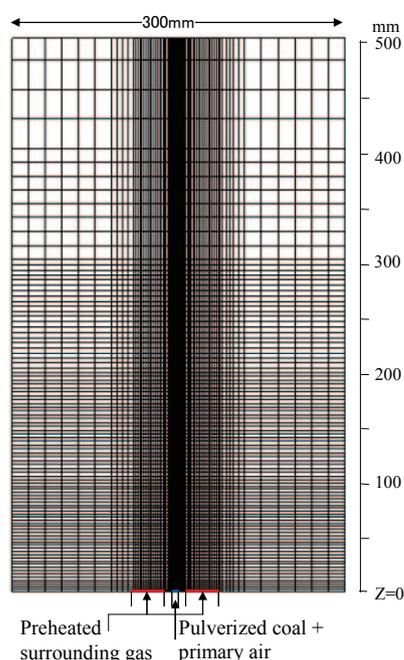


Fig. 4 Numerical mesh.

4 解析結果と考察

計算によるガス温度の瞬時値を図5に示す。石炭と空気を供給する1次空気の温度は300 Kであり、石炭はノズルの出口近くではすぐに着火しない。 $z=0$ から150 mmまでに、1次空気の温度は、外側の高温ガスと混合することで上昇する。しかし、この場所では混合するだけなので、中心軸上のガス温度は、外側の高温ガスよりも低くなる。

次に表示のカラーレンジを変えた計算のガス温度と、実験で測定した燃焼火炎の高速カメラ画像

を図6に示す。点A(入り口)の温度は1420 Kで、点B($z=100$ mm)の温度は1390 Kであった。高温ガスの温度が低下するのは、ふく射による放熱の影響である。

$z=150$ から200 mmまでの間で、1次空気噴流近傍に外側の高温ガスよりも温度の高い場所(C, D, E)が形成された。これは、熱分解により発生した可燃ガスに着火して温度が上昇したことを示す。この位置を着火位置IP(Ignition Position)と定義する。計算のIPは約140 mmであった。その下流では、さらにガス温度の高い場所がある(F, G, H)。温度の上昇する過程を調べるために、計算結果のアニメーションを作成した。これを分析すると、C, D, Eなどの火種が生じた後、この火種が下流に流されるにつれて温度が上昇し、最終的に連続的な火炎へと変化する。これらの計算で確認される現象は実験[15]と一致した。実験の着火位置を高速カメラ画像の輝度の高くなった場所と定義すると、着火位置は $130 \text{ mm} \pm 20\%$ であった。計算と実験の着火位置は、実験のばらつきの範囲内で一致した。

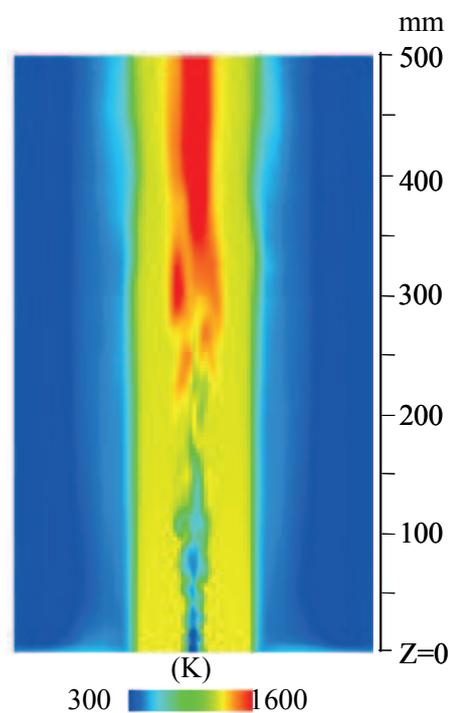


Fig. 5 Calculated gas temperature.

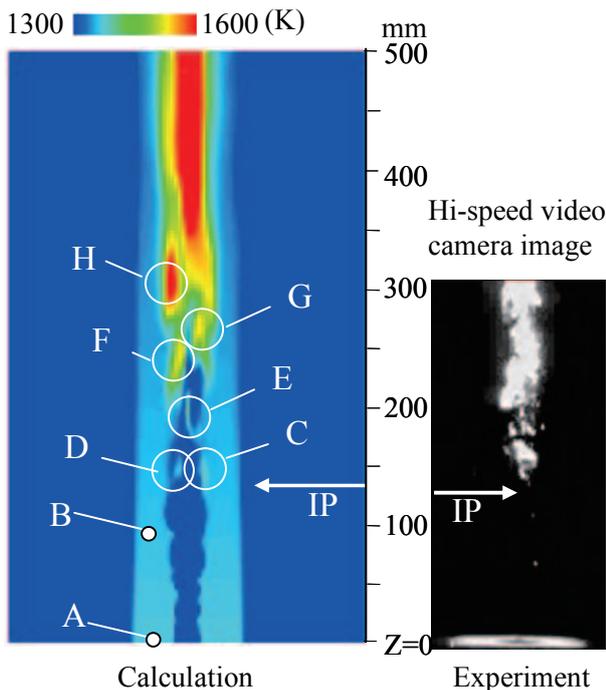


Fig. 6 Flame structure.

次に、数値計算のガス濃度を調べた(図7)。 O_2 濃度は、1次空気のノズル近傍で高い。その後、周囲の高温ガスとの混合のために低下する。着火位置よりも下流では、高温ガスの酸素濃度(0.1 kg/kg)よりも低い場所が生じる。熱分解により発生した可燃ガスが、酸素と反応したためである。

CO 濃度の高い場所は、1次空気の噴流の外側に点在している。 CO の高い場所は、熱分解反応の生じている場所である。 $z=0\sim 150$ mmの範囲で CO 濃度が高い位置は、半径5~10 mmであった。ノズル出口の半径が3.5 mmであるので1次空気噴流の外側に拡散した石炭粒子が加熱され、熱分解反応により CO が発生したと考えられる。また、1次ノズル出口から $z=150$ mmまでは、 CO 濃度の最大値は変化しない。これは、 CO の生成速度と消滅速度がつりあっていることを示す。しかし、着火の開始した点(図7 C, D, E)から CO 濃度が高くなった。ガスの着火によりガス温度が上昇し、熱分解とチャーの酸化反応が加速されたためと考えられる。

図8は粒子の熱分解率の瞬時値を示す。点は計算で追跡した粒子の位置を示す。径の小さい粒子は加熱されやすいので熱分解率は高い。逆に径の大きな粒子は加熱に時間がかかるので、熱分解率が低い。これらの傾向は、実験結果[15]と一致する。

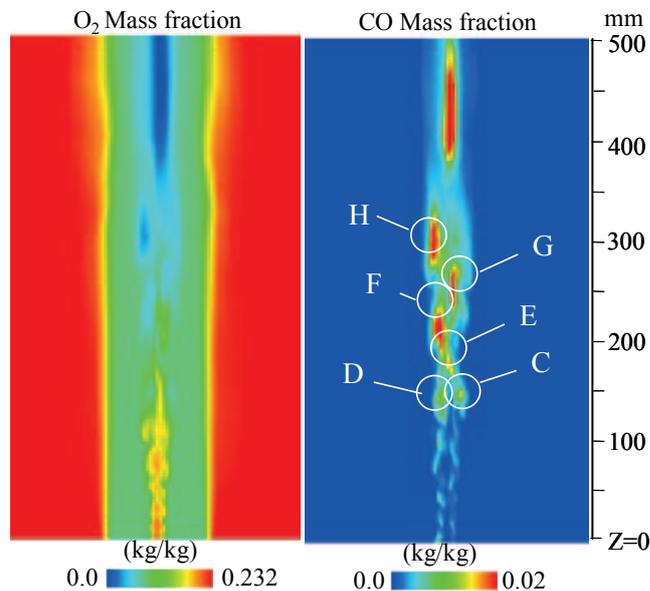


Fig. 7 Mass fraction of oxygen and carbon monoxide.

さらに図8は、粒子径により粒子の分散に差があることも示している。例えば、粒子径165 μm の場合、粒子は分散し、局所的に粒子が集合している場所はない。しかし、40, 63, 112.5 μm の粒子の場合、A, B, C, Dのような粒子の集合している場所がある。本研究では、粒子の集合をクラスタリングと呼ぶ。クラスタリングを定量的に評価するために、以下のクラスタ指数(I_C)を考えた。

$$I_C = \frac{1}{n^2} \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{1}{\left(\sum_{i=1}^3 (X_{i,j} - X_{i,k})^2 \right)^{1/2} + \epsilon} \quad (7)$$

粒子が1点に集まっていると I_C の値が大きくなる。 ϵ は0割防止の微量であり、本研究では0.1 mmとした。クラスタ評価式の計算結果を図9に示す。図8の見た目と同様、粒径63 μm の粒子で最もクラスタリングが発生していることが分かった。

クラスタリングは、非定常的に粒子、ガスの動きを計算するLESを用いたために計算できた。時間平均化したRANS(Reynolds Averaged Navier-Stokes)方程式を解いた場合には粒子のクラスタリング(図

8), 局所的に発生する火種 (図 6) を予測できない。すなわち, 着火位置の予測には, LES による非定常場の計算が有効である。

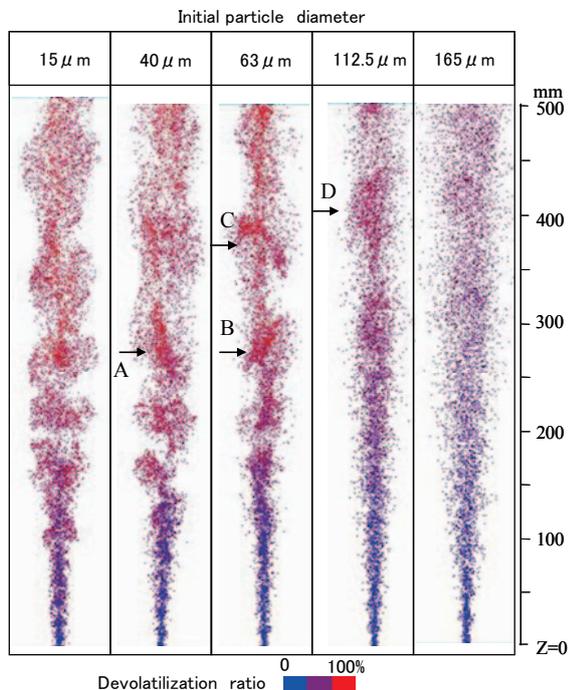


Fig. 8 Devolatilization ratio.

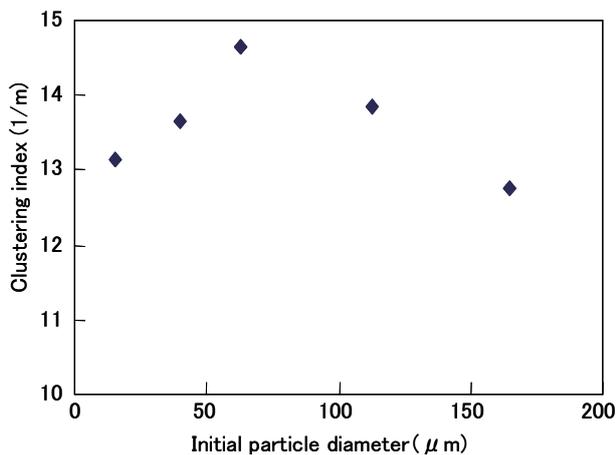


Fig. 9 Dependence of clustering index on particle diameter for.

さらに, 乱流中の粒子の挙動が, ストークス数 St (粒子の緩和時間 (τ) と乱流の特性時間 (τ_t) の比) で整理できるか調べた (図 10). 乱流の特性時間は, 速度勾配の逆数であり, ガスの混合時間に関する。

ストークス数が大きいときには粒子はガスの動きに追従しないが, ストークス数が小さい場合は, ガスの動きに追従する。また, ストークス数が 1 に近い場合, 粒子濃度が高くなることが報告されている [16]. 本研究では以下の式でストークス数を定義した。

$$\tau = \frac{d_p^2 \rho_p}{18\mu} \tag{8}$$

$$St = \frac{\tau}{\tau_t} \tag{9}$$

$$\tau_t = \frac{\delta y}{\delta u_z} \tag{10}$$

ここで, δy は混合層の幅, δu_z は軸方向流速の速度差である。 $z=100$ mm における値 ($\delta y = 20$ mm, $\delta u_z = 2.5$ m/s) から, 乱流の特性時間を $\tau_t = 8$ ms とした。また, 粒子の密度を 1400 kg/m³, 周囲のガスは, 500 °C の空気を仮定した。 ストークス数が 1 に近い場合に, クラスタ指数が高く, 従来の研究と同じ結論を得た。

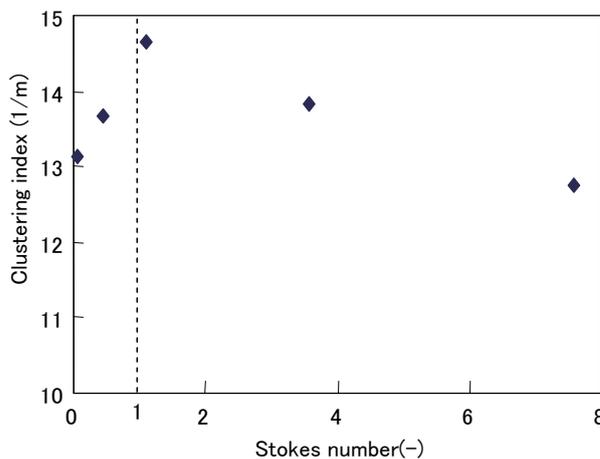


Fig. 10 Dependence of clustering index on Stokes number.

図 11 に, 中心軸上の燃焼率の検証結果を示す。実験の粒子サンプリングに使用したプローブは, 内径が 10 mm であるので, 計算でも直径 10 mm の領域の平均値を使用した。計算結果は, 実験の誤差 ($\pm 5\%$) 内で実験値と一致した。

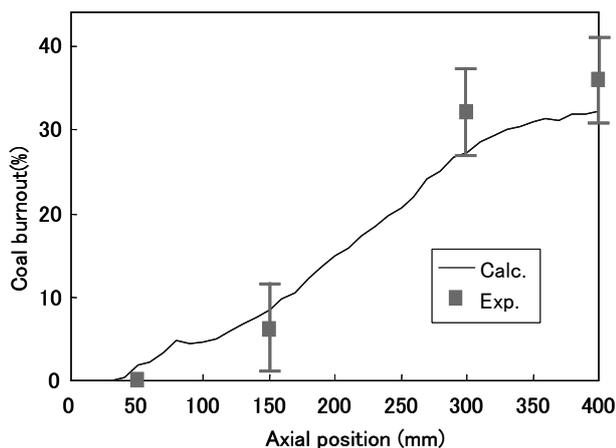


Fig. 11 Validation of coal burnout.

5 結論

LES (ラージ・エディ・シミュレーション) 法を用いた微粉炭燃焼解析プログラムを開発し、石炭を高温のガスで加熱して燃焼させる実験を対象に燃焼率と着火位置について計算精度を検証した。

- 1) ガス温度から判断した計算の着火位置と、高速カメラ画像の着火位置は実験のばらつきの範囲内 ($\pm 20\%$) で一致した。
- 2) 計算した中心軸上の燃焼率は、実験値と実験の誤差範囲 ($\pm 5\%$) 内で一致した。
- 3) ストークス数 (=粒子の緩和時間/乱流の時定数) が 1 に近い場合に、クラスタ (粒子の濃度むら) を確認した。これは、従来の研究結果と一致する。また、クラスタを評価するクラスタ評価式を提案し、クラスタ指数が大きいほどクラスタが発生することを確認した。
- 4) CO 濃度の最大値は、着火するまでは変化しないが、着火後に熱分解反応が加速されたことで高くなった。CO 濃度が最大となる位置は中心軸から半径 5~10 mm であり、1 次空気ノズルの半径 3.5 mm よりも外側であった。外側に拡散した石炭粒子が加熱され、熱分解反応により CO が発生した。
- 5) 径の大きな粒子ほど、出口における熱分解率が低いことは、実験結果と一致した。

参考文献

- [1] 山本 研二他, "微粉炭燃焼ボイラの燃焼解析技術", *日立評論*, **82-2** (2000), 27-30.
- [2] R. Kurose and H. Makino, "Large-eddy simulation of a solid-fuel jet flame", *Combustion and Flame*, **135** (2003), 1-16.
- [3] 日本機械学会編, 燃焼の数値解析 (2001), 丸善.
- [4] S. V. Patanker 原著, コンピュータによる熱移動と流れの数値解析 (1985), 森北出版.
- [5] S.B. Pope, *Turbulent Flows* (2000), 587-604, Cambridge university press.
- [6] E.E. Michaelides, "On the drag coefficient and the correct integration of the equation of motion of particles in gases", *Journal of Fluids Engineering*, **110** (1988), 339-341.
- [7] F.C. Lockwood et al., "A New Radiation Solution Method for Incorporation in General Combustion Prediction Procedures", *Eighteenth Symposium (Int.) on Combustion* (1981), 1405 - 1414.
- [8] T.F. Smith et al., "Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model", *ASME Journal of Heat Transfer*, **104** (1982), 602-608.
- [9] C. Kim and N. Lior, "Easily computable good approximations for spectral radiative properties of the particulate-gas components and mixture in pulverized coal combustors", *Fuel*, **74** (1995), 1891-1902.
- [10] 一色 尚次, 北山 直方, 伝熱工学 (1984), 85, 森北出版.
- [11] B.F. Magnussen et al., "On Mathematical Modelling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion", *Sixteenth Symposium (Int.) on Combustion* (1976), 719-729.
- [12] H. Kobayashi et al., "Coal Debolatilization at High Temperatures", *Sixteenth Symposium (Int.) on Combustion* (1976), 411-425.
- [13] 岡崎 洋文他, "レーザ加熱による石炭粒子の熱分解過程のモデル化", *日本機械学会論文集* **62-598, B** (1996), 374-379.
- [14] 山本 研二他, "微粉炭燃焼場におけるチャーの表面反応モデル", *日本機械学会論文集* **65-637, B** (1999), 260-266.
- [15] M. Taniguchi et al., "Pyrolysis and Ignition Characteristics of Pulverized Coal Particle", *Journal of Energy Resources Tec.*, **123** (2001), 32-38.
- [16] 雷 康斌他, "固気混相乱流における固体粒子の密度分布", *ながれ*, **23** (2004), 385-393.