

急速圧縮膨張装置におけるアンモニア噴霧燃焼の数値シミュレーション

Numerical Simulation of Ammonia Spray Combustion in Rapid Compression Expansion Machine

阿部 優大^{1*}・須山 達夫¹・石橋 亮佑¹

ABE, Yudai^{1*}, SUYAMA, Tatsuo¹, ISHIBASHI, Ryosuke¹

¹ 株式会社三井E&S 〒706-8651 玉野市 玉3-1-1
MITSUI E&S, 3-1-1, Tama, Tamano, 706-8651, Japan

Abstract : Ammonia, which is easily liquefiable and has a relatively high volumetric energy density, is attracting attention as a marine fuel for reducing GHG emissions from international shipping. However, there are few analytical studies on the direct injection combustion of liquid ammonia in marine low-speed engines, and it is essential to establish the basic analytical technology for practical application. In this report, based on experimental results of liquid ammonia combustion using a rapid compression expansion machine, numerical simulations were conducted using CFD to investigate the combustion characteristics and exhaust characteristics of liquid ammonia. (92 words)

Keywords : Ammonia, Spray Combustion, CFD

1. 緒言

2050年カーボンニュートラルの実現に向けて、脱炭素化への技術開発が各産業界で加速している。海事分野では、2023年に採択された国際海事機関IMOのGHG削減戦略において、2050年頃までにGHG排出量をネットゼロとする目標を掲げており、従来の化石燃料から水素やアンモニアといった代替燃料への転換に向けた取り組みが行われている。

本稿で着目するアンモニアは、CO₂を排出しないだけでなく、他の代替燃料と比較して、容易に液化可能で体積エネルギー密度が比較的高いといった特徴を持つことから、外航船向けの船用大型2ストローク機関の燃料としても注目されている。アンモニアは難燃性であるとともに温暖化係数が非常に高いN₂Oの発生が懸念され、アンモニア焼きエンジンの開発では、その燃焼、排気特性への対応が課題の一つとなっているが、船用大型2ストローク機関におけるアンモニア直接噴霧燃焼の解析的研究例は少ない。本稿では、船用大型2ストローク機関を想定した急速圧縮膨張装置(RCEM)によるアンモニア直接噴霧燃焼の研究[1]の実験結果に基づき、3D-CFDによるアンモニア噴霧燃焼シミュレーションを実施し、燃焼、排気特性の検証を行った。

2. 計算対象

液化アンモニアの噴霧、燃焼挙動を再現するため、可視化定容器(VCVC)を用いた常温霧囲気下における噴霧シミュレーションにより、液滴分裂および蒸発の再現性を検証した。VCVCは、内径50mm、長さ350mmの円筒形状になっており、上部に噴孔が位置している。さらに、急速圧縮膨張装置(RCEM)を用いた噴霧燃焼シミュレーションにより、詳細化学反応によるアンモニアの燃焼、排気ガス特性について検証した。RCEMは、内径240mm、ストローク260mmであり、上部に直方体200×60×80mmの燃焼室を持っている。各計算領域を図1に示す。

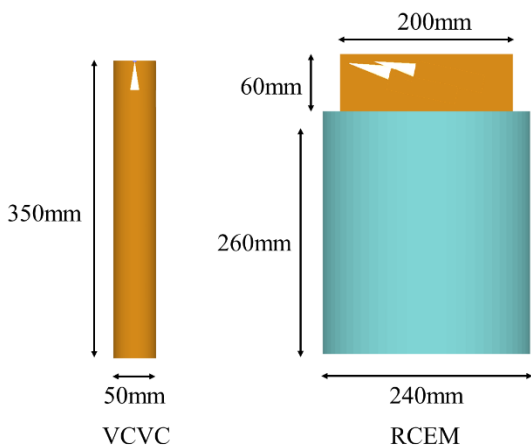


Fig. 1 Computational domain of VCVC and RCEM

3. 計算条件

本計算は、CONVERGEを用いて実施し、乱流モデルは ζ -fモデルを採用した。液滴分裂モデルには、軽油、アンモニアともに修正KH-RTモデルを用い、詳細化学反応機構にはアンモニアのCRECKモデルと軽油相当のC₇H₁₆のNordinモデルをマージしたメカニズムを使用した。

3.1 可視化定容器(VCVC)

表1にVCVCの計算条件を示す。常温霧囲気下で、霧囲気圧力、噴孔径による噴霧先端到達距離の比較検証を行った。また、軽油との比較も併せて行った。

Table 1 Calculation conditions of VCVC

Injection Pressure	60MPa
Incyylinder Pressure	1, 2, 3MPa
Incyylinder Temperature	300K
Ambient Gas	Nitrogen
Diameter of Nozzle Hole	φ0.12, 0.20mm
Fuels	Diesel, Ammonia

3.2 急速圧縮膨張装置(RCEM)

表2にRCEMの計算条件を示す。自己着火温度の高いアンモニアを着火させるため、軽油によるパイロット噴射を用いた。パイロットおよびアンモニアの噴射圧力と期間を図2に示す。

Table 2 Calculation conditions of RCEM

Speed	330rpm	
Pressure at TDC	8MPa	
Temperature at TDC	800K	
Ambient Gas	Air	
Fuels	Diesel	Ammonia
Diameter of Nozzle Hole	φ0.16mm	φ0.80mm
Injection Duration	2.5ms	16.2ms

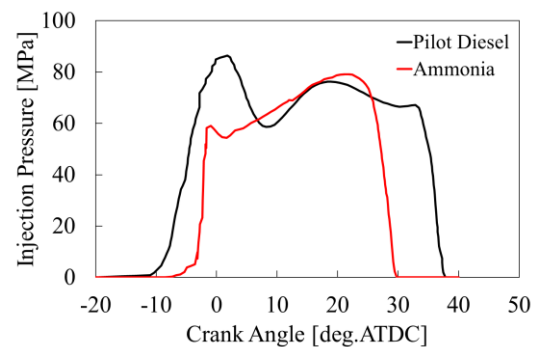


Fig. 2 Injection pressure and duration

4. 計算結果および考察

4.1 可視化定容容器 (VCVC)

雰囲気圧力、噴孔径の違いによる実験と計算の噴霧先端到達距離の比較を図3, 4に, 燃料種の違いによる計算結果の比較を図5に, それらのパーセルおよび蒸発ガスの分布を図6, 7, 8に示す. 雰囲気圧力と噴孔径に対する噴霧先端到達距離の傾向は実験値を良好に再現できている. 雰囲気圧力が低いと蒸発ガス量が増加しているが, これは噴射速度が増大することで液滴の分裂が促進されたためと考えている. 噴孔径が小さいと噴霧先端到達距離が短くなっているが, これは噴射圧力が同じであるため, 噴孔径が小さくなることによる運動量の低下が原因とみられる. アンモニアと軽油の噴霧先端到達距離を比較すると, 若干アンモニアが短くなっている. これは, 飽和蒸気圧が C_7H_{16} : 0MPa, NH_3 : 1.06MPa (300K) とアンモニアの方が高く, 蒸発が促進されたためと考えられる.

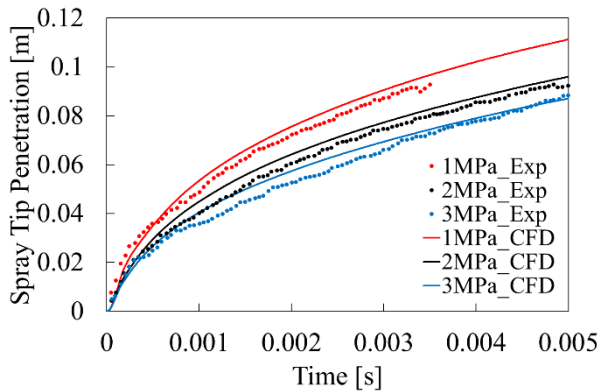


Fig. 3 Spray tip penetration for each ambient pressure (Ammonia, $\phi 0.2\text{mm}$)

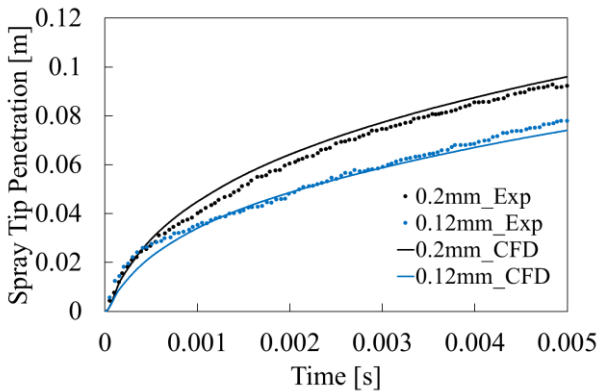


Fig. 4 Spray tip penetration for each diameter of nozzle hole (Ammonia, 0.2MPa)

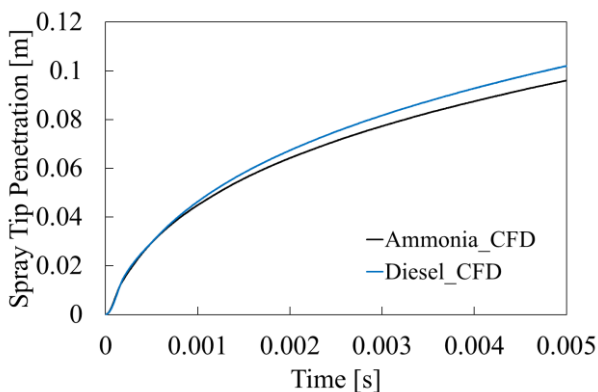


Fig. 5 Spray tip penetration for each fuel ($\phi 0.2\text{mm}$, 0.2MPa)

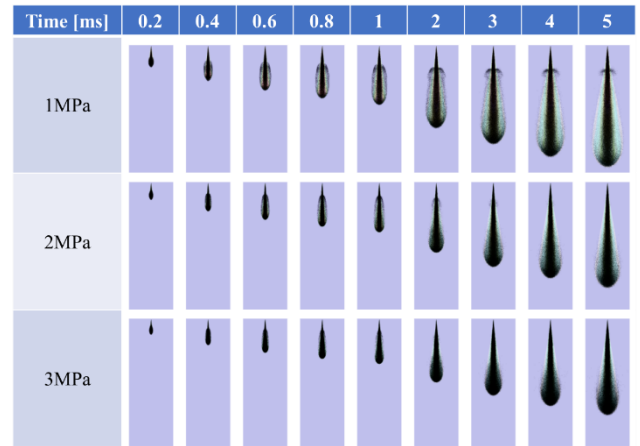


Fig. 6 Parcels distribution for each ambient pressure (Ammonia, $\phi 0.2\text{mm}$)

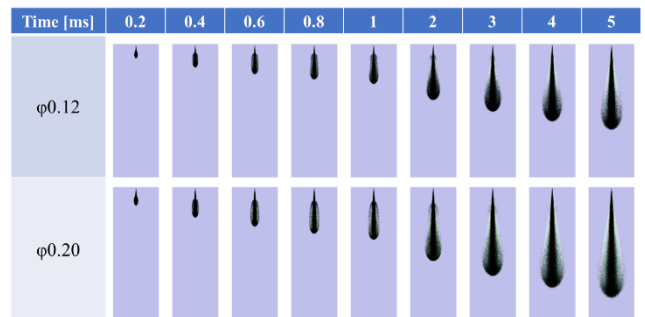


Fig. 7 Parcels distribution for each diameter of nozzle hole (Ammonia, 0.2MPa)

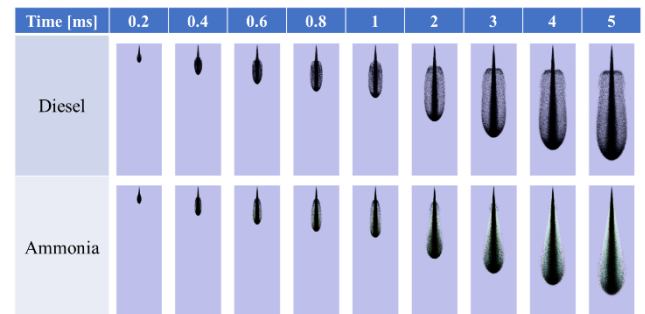


Fig. 8 Parcels distribution for each fuel ($\phi 0.2\text{mm}$, 0.2MPa)

4.2 急速圧縮膨張装置 (RCEM)

VCVC の噴霧シミュレーションで得られた液滴分裂モデルの設定値を用いて, RCEM における噴霧燃焼シミュレーションを実施した. 図9に筒内圧力を, 図10に熱発生率および総発熱量を示す. 着火時期や最大圧力等, 概ね実験値と一致しており, 燃料噴射期間における燃焼現象は一定の精度で再現できている.

図11に温度分布と C_7H_{16} および NH_3 の濃度分布の比較を示す. 最初に噴射されたパイロット軽油が高温場を形成し, その高温場に液体アンモニアが噴射されているが, アンモニアの噴霧領域のみ低温場になっており, 燃焼室中心部まで燃焼しないアンモニアも存在している. これは, 蒸発潜熱が C_7H_{16} : 0.33MJ/kg, NH_3 : 1.13MJ/kg (300K) とアンモニアの方が大きく, 蒸発時に燃焼場の温度を低下させていることが原因と考えている. 軽油による火炎がアンモニアを包みこむことで, 難燃性のアンモニアの燃焼を継続させており, 安定した燃焼を実現するためにはパイロット軽油による補助燃焼が必要と考えられる. 図12には温度分布と NO および N_2O の濃度分布の比較を示す. 図13には図12のクランク角度 10deg に示した破線部の高さ (z 軸) に

対する排気ガス濃度と温度のグラフを示す。NOは2500K程度の高温場で多く発生している一方で、N₂OはNOよりも低温側である1500K程度のアンモニア噴霧領域周辺で多く生じている。これはN₂Oがアンモニア燃料由来であることを示唆しており、NOとN₂Oを含む排気ガス低減には双方の生成温度領域を考慮した燃焼温度の最適化が有効であると考えられる。

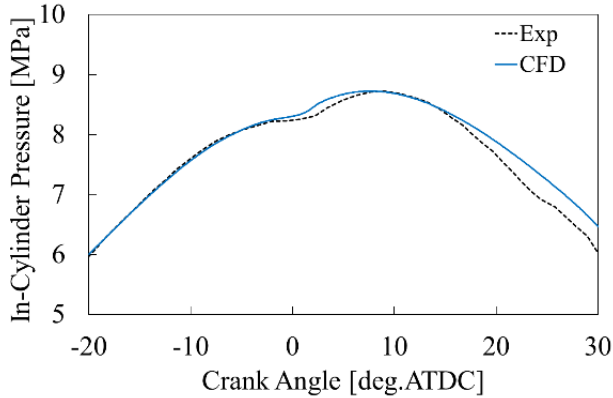


Fig. 9 In-cylinder pressure

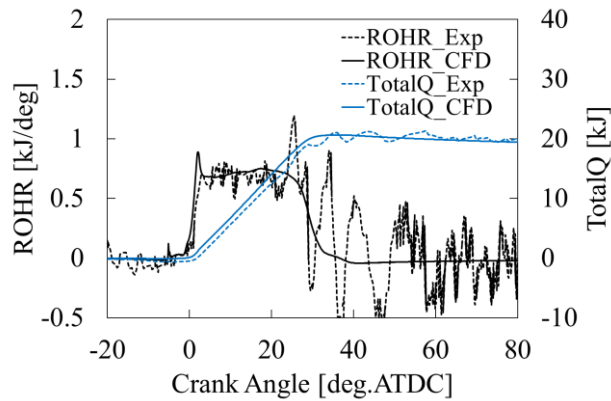


Fig. 10 ROHR and totalQ

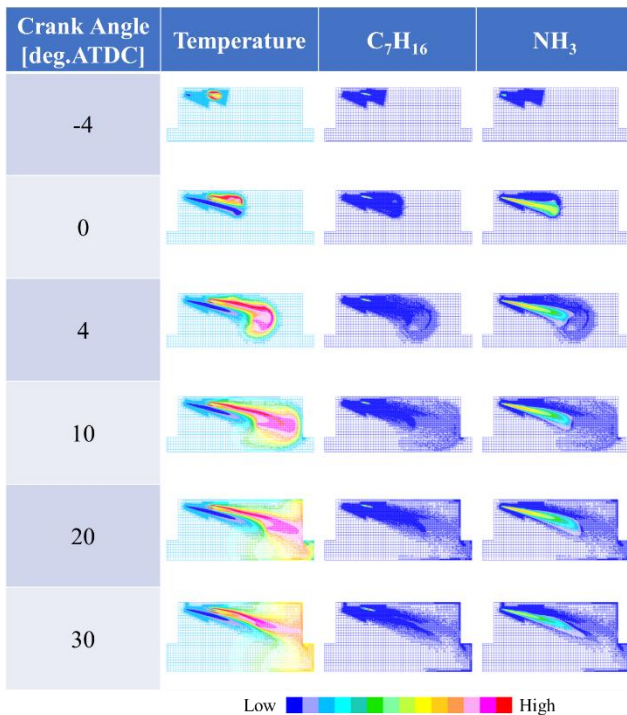


Fig. 11 Temperature, C₇H₁₆ and NH₃ distribution

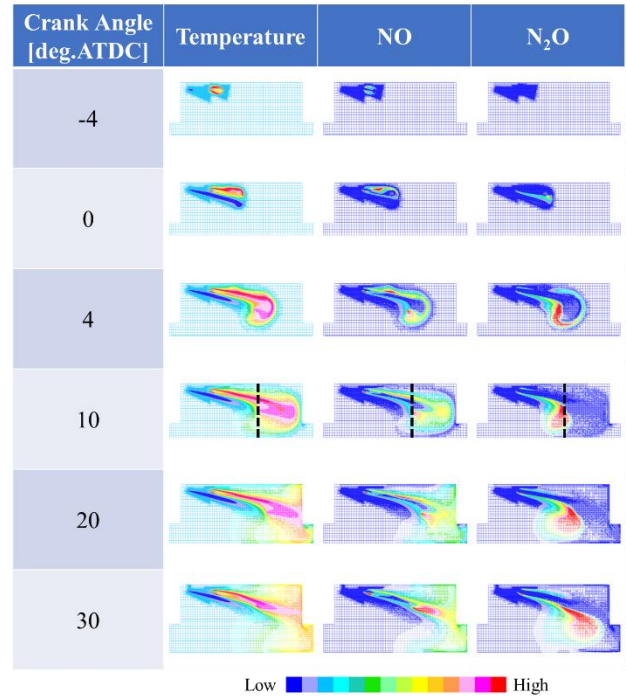


Fig. 12 Temperature, NO and N₂O distribution

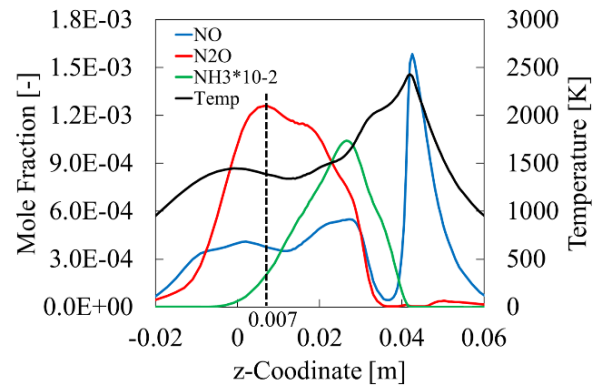


Fig. 13 Emissions and temperature

5. 詳細化学反応分析

温度、等量比に対する排気ガス濃度の関係を詳細に把握するため、CONVERGEによる0次元化学反応計算にて、NO及びN₂Oのφ-Tマップを求めた。前節で述べたRCEMの計算における最高筒内圧力8.65MPaの条件にて、定温定圧条件で計算を実施した。計算時間は0.1msとしており、これは前述のRCEMのクランク角度0.2degに相当する。計算条件を表3に示す。

図14、15にNO、N₂Oのφ-Tマップを示す。NOは高温になるにつれて増加していくことが確認された。低温側から見えていくと、NOは約1800Kを超えると生成され始め、約2700Kを超えると急激に増加することが分かる。一方、N₂Oは温度1400-1900Kの範囲で生成されており、1700Kがピークとなっている。したがって、NO、N₂Oの同時に低減するには、2000K前後の燃焼温度が最適であることが分かった。

Table 3 0D calculation conditions of detailed chemical reaction

Pressure	8.65MPa
Initial Temperature	1000~3000K
Initial Equivalence Ratio	0~2
Ambient Gas	Air
Fuel Gas	Ammonia
Calculation Time	0.1ms

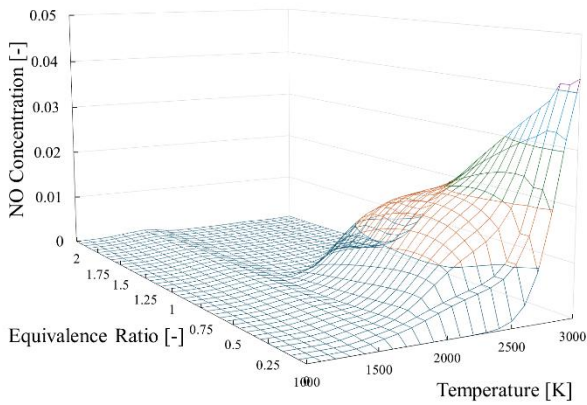


Fig. 14 ϕ -T map of NO concentration

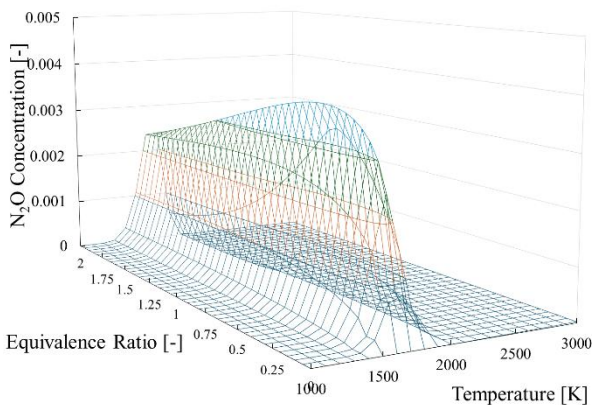


Fig. 15 ϕ -T map of N₂O concentration

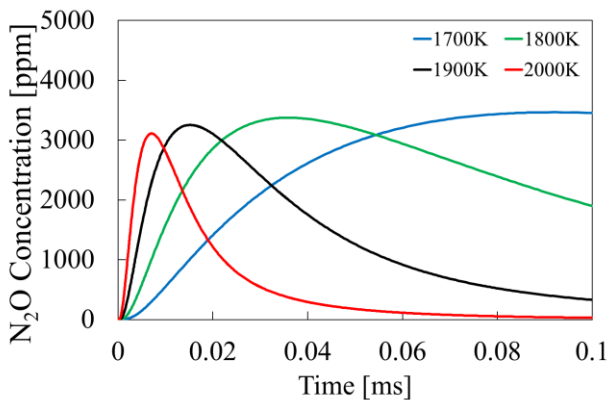


Fig. 16 N₂O concentration at ϕ 1.0

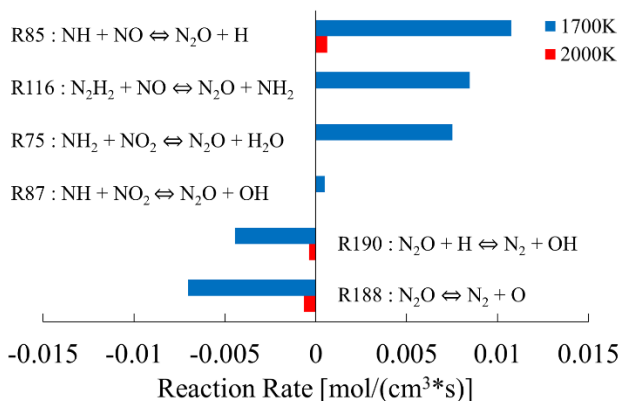


Fig. 17 Sensitivities of N₂O at 1700K and 2000K

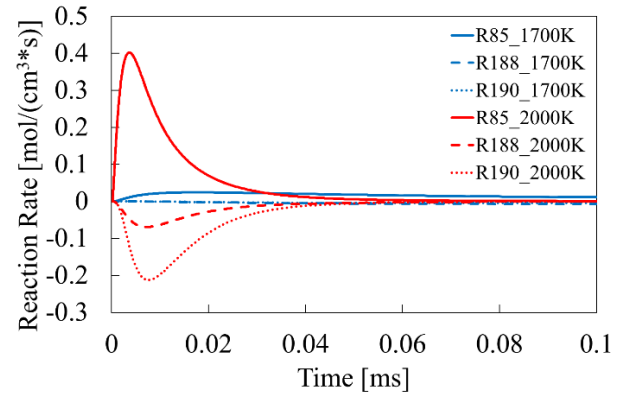


Fig. 18 Reaction rate of N₂O at 1700K and 2000K

さらに、N₂O の生成が最大となる 1700K と、生成が抑制される 2000K における N₂O の反応過程を調べた。当量比を 1 に固定し、N₂O 濃度の時間変化を温度 1700-2000K で比較したグラフを図 16 に示す。高温になるほど N₂O が急激に生成されるようになるが、0.1ms 時点での最終的な N₂O 濃度は低下する。この現象を解明するため、図 17, 18 を用いて考察した。図 17 に、0.1ms 時点における N₂O の素反応の寄与度を 1700K と 2000K で比較した結果を示す。双方とも生成側は R85、消費側は R188、R190 の寄与度が高くなっている。生成側の素反応は NH 等のアンモニア燃料由来の化学種の酸化によって N₂O が生じており、これは RCEM の計算にてアンモニア噴霧領域に N₂O が集中した裏付けとなる。図 18 には、図 17 と同様に当量比を 1 に固定した時の、主要な素反応 3 式による N₂O の反応速度の時間変化を温度 1700K と 2000K で比較した結果を示す。1700K の場合は、計算開始から緩やかに R85 による生成が進み、それが 0.1ms まで持続するが、R188、R190 による消費は計算期間を通して非常に少ない。一方 2000K の場合は、生成、消費ともに計算開始直後、急激な増加が見られるが、生成は 0.004ms、消費は 0.008ms で減少に転じ、0.1ms 時点では限りなくゼロとなる。また、図 17 の生成速度の総和と消費速度の総和を比較すると、2000K は消費の方が大きい。以上から、2000K では 0.1ms までの期間のトータルとして消費が生成を上回り、N₂O は最終的に減少することが分かった。

6. 結言

船用大型 2 ストローク機関を想定した急速圧縮膨張装置の実験結果に基づき、3D-CFD によるアンモニア噴霧燃焼シミュレーションを実施した。その結果、以下の内容が確認された。

- ・可視化定容容器による噴霧シミュレーションでは、霧囲気圧力、噴孔径に対する噴霧挙動について、実験結果を良好に再現でき、噴霧モデルの妥当性が確認された。
- ・急速圧縮膨張装置による噴霧燃焼シミュレーションでは、筒内圧力と熱発生率について、実験の最高圧力や着火時期が再現されており、噴霧および燃焼モデルの妥当性が確認された。
- ・アンモニアはその蒸発潜熱の大きさにより、燃焼場の温度を低下させる効果を持ち、パイロット軽油による補助燃焼が有効であることが示唆された。
- ・燃焼温度が高温になると、N₂O の生成が促進されるが、それ以上に消費も促進されるため、N₂O は最終的に減少する。また、NO と N₂O を同時に低減するには、2000K 前後の燃焼温度が最適であることが分かった。

7. 謝辞

RCEM を用いた直噴アンモニア噴霧燃焼試験については、九州大学 田島・鶴研究室との共同成果を活用しており、深く謝意を表す。

参考文献

1. 芝直行・鶴大輔・田島博士、第 59 回燃焼シンポジウム論文集 P221 (2021).