

水素添加炭化水素予混合気の燃焼解析

城戸 秀樹*

Numerical Analysis of Combustion of Hydrocarbon Premixed Mixture added Hydrogen

Hideki KIDO*

Abstract: Numerical analysis of laminar flame was carried out in one-dimension. Hydrocarbon (methane, ethane and propane) - air mixture was used for calculation of premixed laminar combustion. As a result, it is concluded that the further lean combustion is attained by carrying out little addition of hydrogen at lean hydrocarbon - air mixture and the environmental problem are solvable.

Key Words: Hydrogen addition, Lean combustion, Flammability limit, Carbon dioxide, Nitrogen oxide

1. 背 景

人類がエネルギーを取り出すために燃焼という方法をとってから、化石燃料の枯渇というエネルギー供給問題、窒素酸化物などの公害物質による大気汚染、酸性雨などが問題とされ続けてきた。近年、さらに二酸化炭素増加による地球規模の温暖化が問題視されている。この二酸化炭素を生成する原因の一つとして、ガソリンなどの炭化水素系燃料の燃焼が挙げられる。このような公害問題や地球温暖化現象を解決するためには、燃焼によって生成される二酸化炭素や窒素酸化物などを減らす必要がある。これらの課題を解決できる方法として、希薄燃焼がある。希薄燃焼とは、空気に対し燃料を少なめに供給し燃焼させる方法で、二酸化炭素の生成を抑えることができる。また、希薄燃焼は燃焼温度が低下するため、窒素酸化物の生成量も少なくなる。しかし、希薄燃焼には燃料が少ないため失火などを起こし、安定した燃焼ができないという欠点がある。この

欠点を補うために、炭化水素系燃料に希薄側の可燃限界が広い水素を少量添加するとよいと考えられる。その結果、燃料をより希薄にして燃焼させることができ、二酸化炭素や窒素酸化物の生成量をさらに減少させることができると考え、燃焼反応を実際実験で解析することは困難であるので、数値計算により解析を行った。

本研究では、一次元予混合火炎の計算コードである「PREMIX¹⁾」を使用し、炭化水素系燃料-空気予混合気少量の水素を添加し、可燃限界、二酸化炭素及び窒素酸化物の生成量がどのように変化するかを調べた。

2. 計 算 方 法

一次元予混合火炎を解析するために用いたコードは、「CHEMKIN¹⁾」「PREMIX」である。「CHEMKIN」とは、未燃混合気の温度や組成、与えた反応機構に基づいた火炎の計算を行う数値計算コードのことである。「CHEMKIN」に与えた反応機構は、詳細化学反応機構の GRI-MECH 3.0²⁾である。GRI-MECH 3.0には、化学種が53、素反応が325含まれている。素反応により生成する様々な化学種に

(2004年11月30日 受理)

* 宇部工業高等専門学校機械工学科

ついて解析できるため、二酸化炭素や窒素酸化物の生成過程を知ることができる。「PREMIX」とは、「CHEMKIN」で解析した反応機構に従って、一次元予混合伝ば火炎の化学種濃度や温度などを計算するコードのことである。

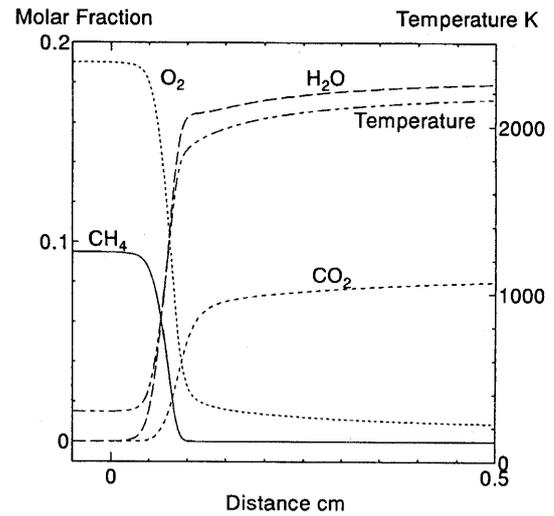
炭化水素系燃料としてメタン、エタン、プロパンを使用し、当量比を変化させ水素を少量添加し数値計算を行い、可燃限界、二酸化炭素や窒素酸化物の生成量について解析した。数値計算に使用した混合気の組成（メタン混合気の場合）を表 1 に示す。表中の各化学種の値はモル分率を示している。また、当量比とは一定量の空気に対して量論比の何倍の燃料が供給されたかを表す量で、水素添加割合とは燃料中において水素が占める体積割合である。

表 1 混合気の組成

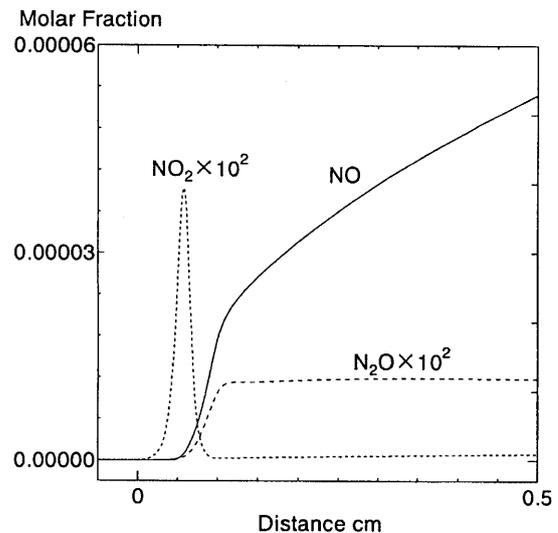
当量比	水素添加割合	CH ₄	H ₂	O ₂	N ₂
1.0	0.0	0.0951	0.0000	0.1901	0.7148
1.0	0.1	0.0918	0.0102	0.1887	0.7094
1.0	0.2	0.0880	0.0220	0.1870	0.7030
1.0	0.3	0.0836	0.0358	0.1850	0.6956
0.9	0.0	0.0864	0.0000	0.1919	0.7217
0.9	0.1	0.0835	0.0093	0.1906	0.7167
0.9	0.2	0.0801	0.0200	0.1891	0.7109
0.9	0.3	0.0761	0.0326	0.1872	0.7040
0.8	0.0	0.0775	0.0000	0.1938	0.7287
0.8	0.1	0.0750	0.0083	0.1926	0.7241
0.8	0.2	0.0720	0.0180	0.1912	0.7188
0.8	0.3	0.0685	0.0293	0.1895	0.7126
0.7	0.0	0.0685	0.0000	0.1957	0.7358
0.7	0.1	0.0663	0.0074	0.1946	0.7317
0.7	0.2	0.0637	0.0159	0.1934	0.7270
0.7	0.3	0.0607	0.0260	0.1919	0.7215
0.6	0.0	0.0593	0.0000	0.1976	0.7431
0.6	0.1	0.0574	0.0064	0.1967	0.7395
0.6	0.2	0.0552	0.0138	0.1956	0.7354
0.6	0.3	0.0526	0.0226	0.1943	0.7305
0.5	0.0	0.0499	0.0000	0.1996	0.7505
0.5	0.1	0.0484	0.0054	0.1988	0.7475
0.5	0.2	0.0466	0.0116	0.1979	0.7439
0.5	0.3	0.0444	0.0190	0.1968	0.7398

3. 計算結果

図 1 は、燃料がメタン、当量比 ϕ が 1.0、水素添加割合が 0.0 の場合の一次元予混合火炎の計算結果である。横軸は反応開始からの距離である。図 1 (a) は、主要成分のモル分率と温度の分布を示している。この場合、主要成分は CH₄、O₂、H₂O、CO₂ となる。この図から、反応開始から温度が上昇し始め、CH₄、O₂ の反応によって、H₂O、CO₂ が生成されることが分かる。図 1 (b) は、窒素酸化物 (NO_x)



(a) 主成分のモル分率と温度分布



(b) NO_x のモル分率分布

図 1 メタン混合気、当量比 1.0、水素添加割合 0.0 の場合の計算結果

のモル分率の分布を示している。これより、NO は反応開始後から徐々に増加していることが分かる。NO₂ は反応開始直後に急激に増加するが、その後ほぼ 0 になっている。また、N₂O は徐々に増加するが、すぐに最大値に達し、その後ほぼ変化しない。このような数値解析を、メタン、エタン、プロパン混合気に対して行った。

まず、希薄側の可燃限界について計算結果から考察する。図 2 はメタン混合気において当量比を変えて数値計算を行った温度分布の結果を示している。図 2 (a) は水素添加を行わない場合、図 2 (b)、(c)、(d) はそれぞれ水素添加割合が 0.1、0.2、0.3 の場合の温度分布である。図 2 (a) より、

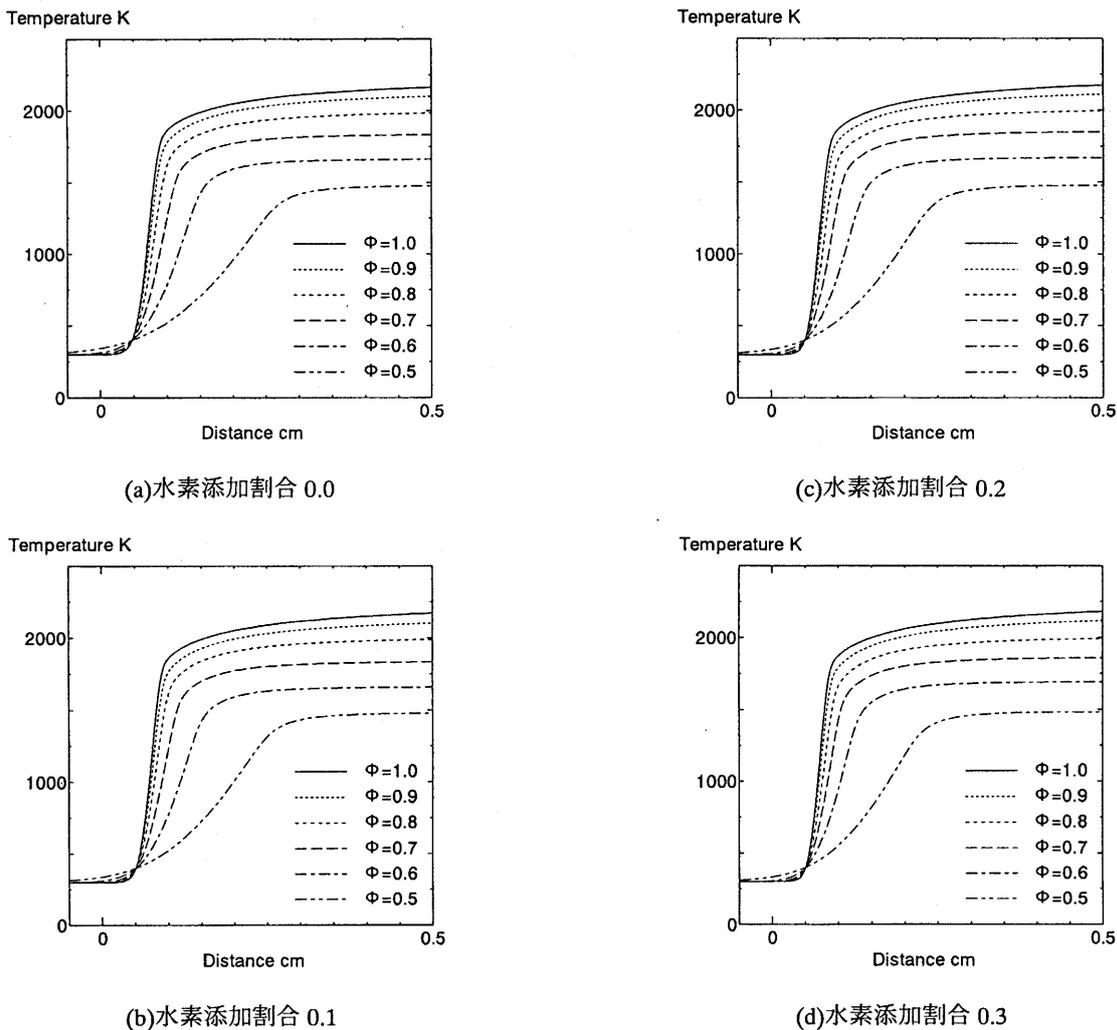


図2 メタン混合気の温度分布

燃料をどんどん希薄にすればするほど、燃焼温度が低下していくことが分かる。さらに当量比を小さくして当量比が0.5になった場合に、温度上昇がかなり緩やかになっていることが分かる。このことから、この当量比付近にメタンの希薄側の可燃限界があると考えられる。次に、図2(b)、(c)、(d)から、水素添加した場合も水素を添加しない場合と同様に燃料が希薄になればなるほど、燃焼温度は低下している。さらに詳細に比較するために、メタン混合気の希薄側の可燃限界付近である当量比0.5の温度分布を図3に示す。この図から、水素添加した場合は、水素添加しない場合に比べて、最高温度はほとんど変化しないが、早く最高温度に達することが分かる。燃料がエタン、プロパンの場合も同じ傾向であった。次に、各混合気の層流燃焼速度の計算結果を図4に示す。この図より、水素を添加することで、燃焼速度が速くなることが分かる。これらのことか

ら、燃焼しにくい希薄な燃料に水素を少量添加することで、燃焼しやすくなる、つまり希薄側の可燃限界を拡大できることが分かる。

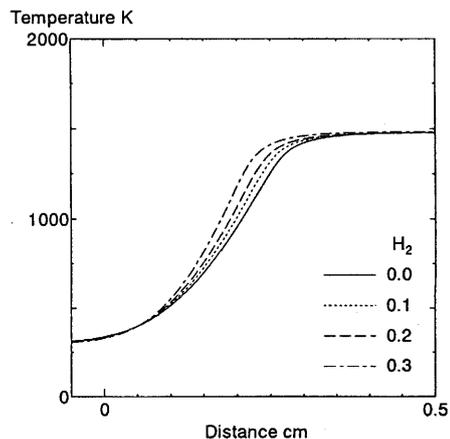
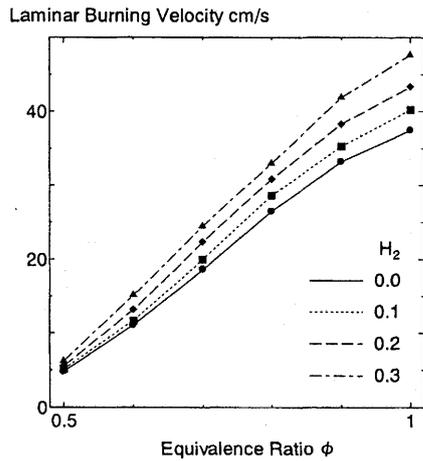
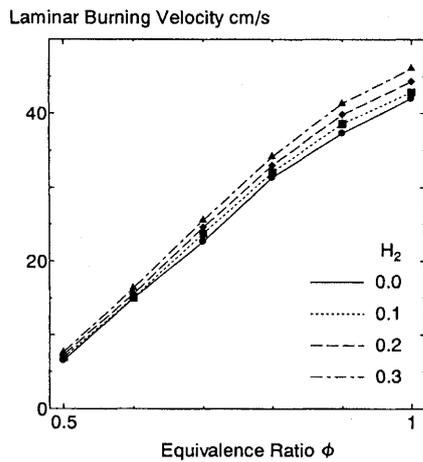


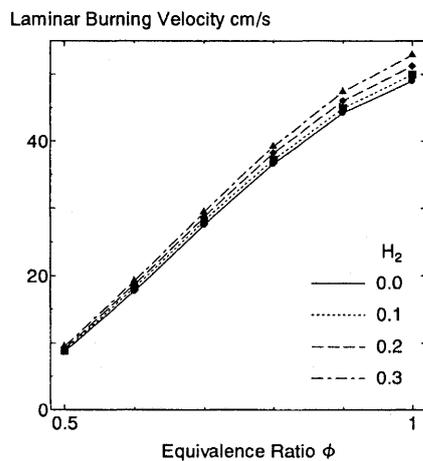
図3 当量比0.5のメタン混合気の温度分布



(a)CH₄



(b)C₂H₆



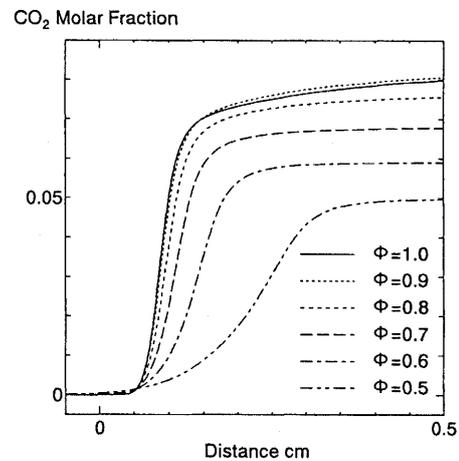
(c)C₃H₈

図 4 層流燃焼速度

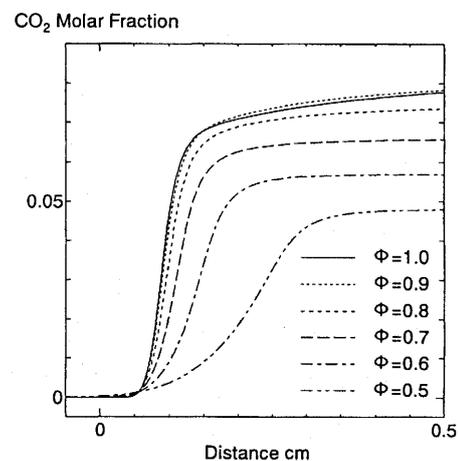
次に、CO₂の生成量について考える。図5にメタン混合気におけるCO₂のモル分率分布の計算結果を示す。水素添加割合がどの条件においてもCO₂の生成量はほぼ燃料

が薄くなるにつれて減少している。この生成量の減少は、燃料の量を減少させたことによって、混合気中の炭素分が減少したことに起因している。図6にメタン混合気の当量比が0.5の場合のCO₂の生成量を示す。この図から、水素を添加した場合は添加しない場合に比べ、CO₂の生成量が減少している。これらのことから、水素を少量燃料に添加することでCO₂の生成量を減らすことができることが分かる。燃料がエタン、プロパンの場合についても同じ傾向を示した。

最後に、NO_xの生成量について考える。図7にメタン混合気におけるNOのモル分率分布の計算結果を示す。NOの生成量もCO₂の生成量と同様に、水素添加割合がどの場合も当量比が小さくなるに従って減少している。NOは燃焼温度が高ければ高いほど、多く生成するという生成

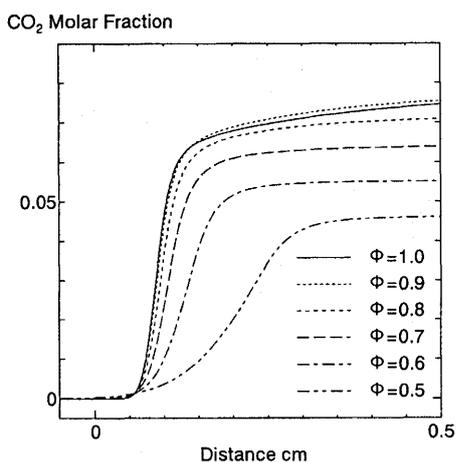


(a)水素添加割合 0.0

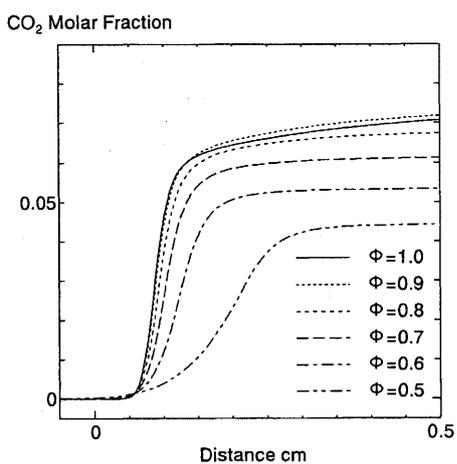


(b)水素添加割合 0.1

図 5 メタン混合気のCO₂のモル分率分布



(c)水素添加割合 0.2



(d)水素添加割合 0.3

図5 メタン混合気の CO₂ のモル分率分布

機構を持つため、当量比が小さくなるに従い燃焼温度が低

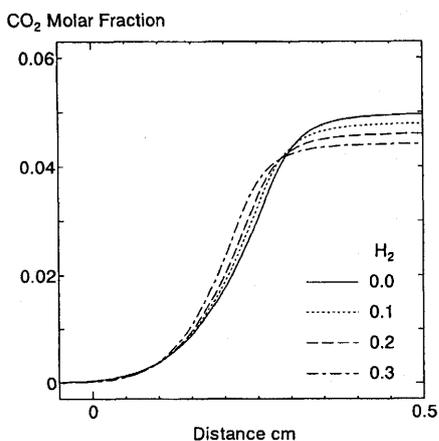
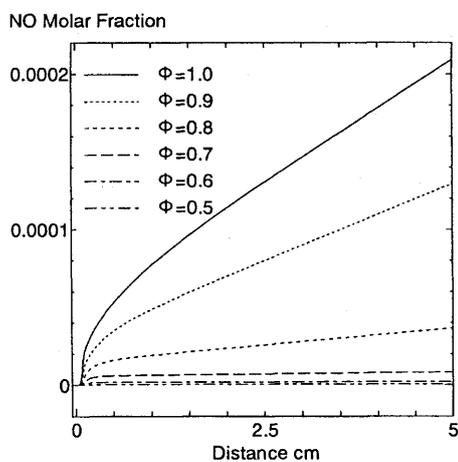


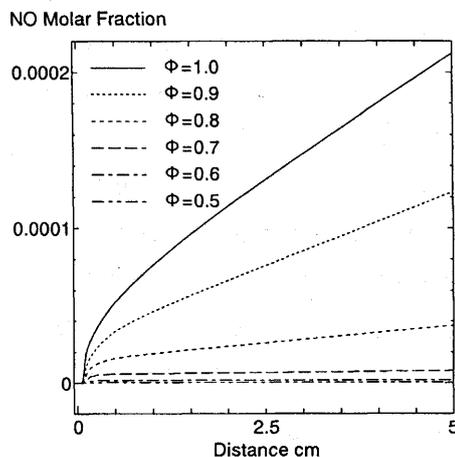
図6 当量比 0.5 のメタン混合気の CO₂ のモル分率分布

下するので、NO の生成量は減少する。しかし、CO₂ の場合とは異なり、水素添加した場合と添加しない場合の差があまり表れていない。そこで、ほぼ同じ層流燃焼速度を持つ条件で、NO の生成量を比較したものを図8に示す。すべての燃料において、水素添加しない場合より水素添加して当量比を小さくした場合のほうが、NO の生成量が小さくなっている。このことから、水素添加することにより燃料がより希薄な状態で燃焼し、NO の生成量を減少できることが分かる。

以上の結果から、少量の水素を添加することによって、水素添加しない場合の希薄側の可燃限界よりさらに燃料が希薄な状態で燃焼を行えることが分かった。希薄燃焼に水素を少量添加する方法は、CO₂ や NO を減らすことで環境問題の解決を行える手法の一つであると考えられる。

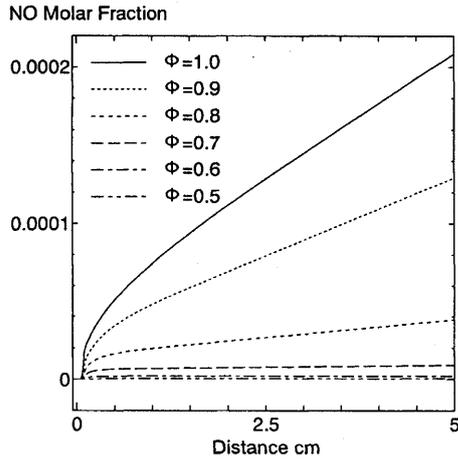


(a)水素添加割合 0.0

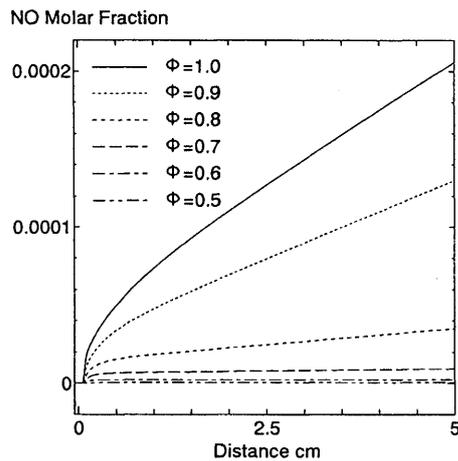


(b)水素添加割合 0.1

図7-1 メタン混合気の NO のモル分率分布



(c)水素添加割合 0.2



(d)水素添加割合 0.3

図 7-2 メタン混合気の NO のモル分率分布

4. 結 論

炭化水素-空気予混合気少量の水素を添加して一次元予混合火炎の数値解析を行い、以下の結論が得られた。

1. 燃焼できない希薄な混合気に水素を少量添加することで、希薄側の可燃限界を拡大できる。
2. 炭化水素-空気予混合気少量の水素を添加することで、 CO_2 や NO の生成量を減らすことができる。
3. 希薄な混合気に水素を少量添加することで、更なる希薄燃焼が可能になり、既燃ガス中の公害物質を減らすことができるので、環境問題を解決できる。

参考文献

- 1) KEE, R. J. et al., Reaction Design, Inc., San Diego, CA,

2003.

- 2) Bowman, C. T. et al., Gas Research Institute,
<http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/>, 2000.

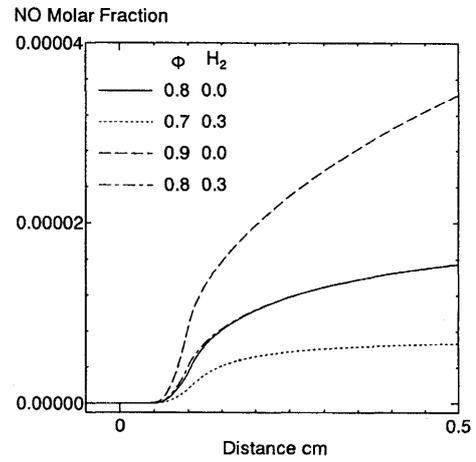
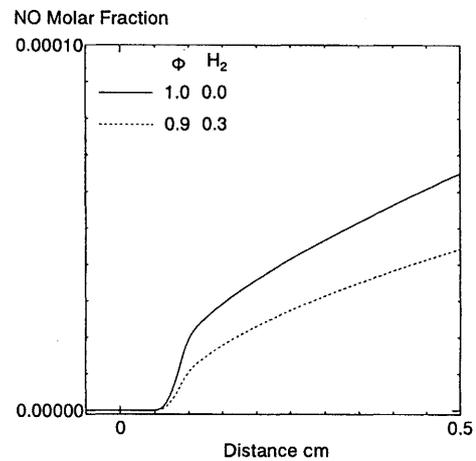
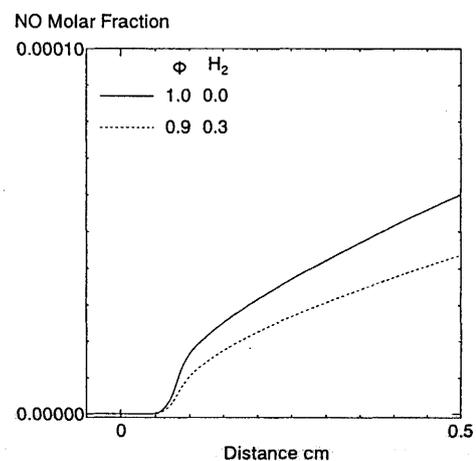
(a)CH₄(b)C₂H₆(c)C₃H₈

図 8 NO のモル分率分布