

低炭素社会の実現に向けた
技術および経済・社会の定量的シナリオに基づく
イノベーション政策立案のための提案書

アンモニア直接燃焼によるガスタービン システムの提言 (Vol.2)

令和 2 年 1 月

Turbine System driven by Direct Combustion of Rich Ammonia
(Vol.2):

Proposal Paper for Policy Making and Governmental Action
toward Low Carbon Societies

国立研究開発法人科学技術振興機構
低炭素社会戦略センター

LCS-FY2019-PP-02

概要

燃焼排ガスとして CO_2 を出さない水素やアンモニアは、炭化水素に比して空気に対する燃料の比率が大きい。したがって、水素やアンモニアは通常の作動流体として空気を仮定するタービン熱効率評価法が適用できない。この問題を解決するために、ガスタービンシステムの新しい解析法を開発した。この方法では、化学変化を伴う多成分流体に対して自由エネルギー最小化法による化学平衡計算を行い、圧縮過程、燃焼過程、およびタービンにおける膨張過程のエンタルピー変化に基づいて出力と熱効率を評価する。

この新しい方法を用いて、2018年12月に提案したアンモニア過剰燃焼タービンによるコンバインドサイクルの出力と熱効率を評価した。アンモニア過剰燃焼タービンにより低 NO 燃焼が可能であり、燃焼排ガス中の水素を再燃焼させるコンバインドサイクルにより高燃焼効率のシステムが構築可能であることが再確認された。ただし、今回開発した方法と比べて、昨年度用いた簡便法による出力の計算値は過小評価されていることが分かった。アンモニアを燃料とした場合、タービンの耐熱温度を 2,000 K、圧力比の上限を 25 とすると、排ガス再循環率 0.6、当量比 1.1 の時にコンバインドサイクルの熱効率 60% を達成できることが分かった。

比較のために、水素の燃料過剰燃焼タービンシステムについても検討した。水素の場合も燃料過剰燃焼により低 NO を実現できるが、水を含んだ排ガスによる極めて多量な排ガス再循環 (Exhaust gas recirculation, EGR) が必要であること、および燃焼効率が低くなることから、アンモニア専焼タービンに対する優位性は認められなかった。

Summary

The conventional method for evaluating the power and thermal efficiency of a gas turbine system often assumes that the working fluid is air. This is due to the very low fuel to air ratio of hydrocarbon fuels. However, the fuel to air ratios of H_2 and NH_3 are larger than those of conventional hydrocarbon fuels. Therefore, the applicability of the assumption of air as the working fluid for H_2 or NH_3 is questionable. We developed a new scheme based on the Gibbs free energy minimization for all the processes involved in the gas turbine system. The output power and thermal efficiency are evaluated based on the enthalpy changes of the multi-component working fluid using chemical reactions.

The new scheme was applied to validate the concept proposed in our previous LCS report (LCS-FY2018-PP-03) in which we proposed the concept of a fuel-rich NH_3 combined cycle turbine system. In this study, it was confirmed that a very low NO emission and highly efficient gas turbine system could be developed by the fuel-rich combustion of NH_3 . Moreover, it was identified that exhaust gas recirculation (EGR) was essential to reduce the turbine inlet temperature below the heat-resistant temperature of the system. Furthermore, the output power of the system was largely underestimated by the conventional method used in our previous report. With a value of 2000 K for the heat-resistant temperature of the turbine and the upper limit of the pressure ratio 25 of the compressor and turbine, the thermal efficiency of the combined cycle was identified to be 0.6 with equivalence and EGR ratios of 1.1 and 0.6, respectively.

H_2 combined cycle gas turbine processes that operated in fuel-rich conditions were also studied. The fuel-rich H_2 combustion resulted in very low NO emission. Very high EGR ratios for H_2 combustion with high equivalence ratios were required to maintain the turbine inlet temperature below 2000 K. Because of these high EGR ratios and high equivalence ratios, the conclusion was reached that the thermal efficiency of the H_2 combined cycle was lower than that of the NH_3 fuel-rich combined cycle.

目次

概要

1. はじめに.....	1
2. アンモニア過剰燃焼コンバインドサイクルシステムと計算方法	2
2.1 コンバインドサイクルシステムの構成.....	2
2.2 化学平衡計算	5
2.3 タービン出力と熱効率の計算	7
3. 結果および考察	8
3.1 コンバインドサイクルの各過程の状態量と化学組成の計算例.....	8
3.2 従来法によるガスタービンの出力評価法との比較	10
3.3 圧力比=25 としたときのコンバインドサイクルの出力と熱効率	11
3.4 出力と熱効率の最適化と水素コンバインドサイクルとの比較.....	15
4. 結論.....	17
5. 政策立案のための提案.....	18
参考文献.....	18

1. はじめに

近年、アンモニアはエネルギーキャリアとしてのみならず、発電用大型ガスタービン燃料としても大きな注目を集めている[1]。アンモニアは水素に比してエネルギー密度が高く、また液化しやすいのでエネルギーキャリアとして優れているが、一方で着火しにくく、燃焼速度が遅い、など燃料として利用しにくい面がある。また、通常ガスタービン燃焼のような酸素過剰燃焼では極めて多量のNOが生成される。こうしたアンモニア燃焼の問題点が解決でき、発電用大型ガスタービンをカーボンフリーアンモニア専焼で運転できればCO₂ゼロエミッション社会実現に向けた重要なブレークスルー技術となりうる。このような観点から、低炭素社会戦略センター(LCS)ではアンモニア専焼ガスタービンの実現可能性の検討を進めており、アンモニア燃焼の化学反応論的な考察[2]に基づいて、昨年度の政策提案書[3]で「アンモニア過剰燃焼によるガスタービン」という新しいコンセプトを提案した。

アンモニア過剰の(すなわち当量比¹⁾が1以上の)燃焼においては、生成するNOはNHおよびNH₂ラジカルとの反応によりN₂に還元され、燃焼排ガス中にはNOはほとんど含まれない。また、燃料が過剰であるために酸化されずに残ったアンモニアは熱分解してN₂とH₂となる[2]。この燃焼排ガス中のH₂をコンバインドサイクルのsteamタービン駆動用燃料として利用することにより、さらに高効率な発電システムが構築できる。ただし、当量比が大きくなるとタービン入口温度(=燃焼器出口温度)がタービンブレードの耐熱温度以上になってしまう。2018年12月にLCSが提案したシステムでは、この問題を排ガス再循環(Exhaust Gas Recirculation, EGR)により解決した。すなわち、アンモニア過剰燃焼コンバインドシステムの最終的な排ガスはN₂とH₂Oのみとなるため、酸素を含まない排ガス(N₂)を用いたEGRにより、当量比を変えることなく燃焼温度をタービンブレードの耐熱温度以下とすることが可能となる[3]。

炭化水素を燃料とするガスタービンは通常酸素過剰条件で運転されている。炭化水素燃焼では、燃料/空気比が小さい。例えば化学量論燃焼の場合、酸素に対してメタンは0.5倍で、プロパンでは0.2倍である。酸素過剰下では空気に対する燃料量はさらに少ない。このために、ガスタービンの出力や熱効率の評価においては、作動流体を空気とみなす方法が一般的であった。しかしながら、H₂やNH₃を燃料とする場合には事情が異なる。H₂の場合、化学量論燃焼では酸素に対して2倍、NH₃では1.5倍の燃料が必要で、燃料量は空気に対して無視できない。このような燃料、あるいは当量比が大きい(空燃比が小さい)場合に対しては、作動流体を空気とする簡便な方法の妥当性は必ずしも明らかでない。さらに、炭化水素燃料では、燃料過剰のガスタービンはこれまでに検討されていない。これは燃料過剰下では煤が生成するためである。一方で、H₂やNH₃を燃料とする場合には煤生成の問題はないが、これまで燃料過剰条件でのガスタービンが検討された例はない。これは、一般的には燃料過剰条件では熱効率が低下し、燃費が悪くなるからである。しかしながら、燃料過剰条件では酸化剤が不足するので、空気中のN₂も酸化されにくく、Thermal NOの生成が少なくなると予想される。現在検討されているH₂、NH₃ガスタービンは酸素過剰条件での運転が想定されていて、多量のNO生成が問題となっている。H₂、NH₃を燃料とするガスタービンについては、燃料過剰燃焼条件について定量的な検討が必要である。

¹⁾ 当量比 = (完全燃焼に必要な酸素のモル数) / (実際の混合気を含む酸素のモル数) = (完全燃焼に必要な燃料のモル数) / (実際の混合気を含む燃料のモル数)

タービンの熱効率は、作動流体を（比熱一定の）空気とし、燃焼器における発熱は低位発熱量（LHV）²⁾に基づいて評価するのが一般的である[4,5]。

この方法は、通常の酸素過剰燃焼タービンの場合には大きな誤差は生まないが、燃料過剰条件では反応熱が過大評価される。実際の燃焼では H₂O、N₂、（炭化水素燃料では CO₂）以外のラジカルや NO などの燃焼生成物が生成するので、発熱量は LHV より小さくなる。特にここでの検討のように作動流体中の燃料比率が大きい場合には LHV に基づき燃焼温度を評価すると温度が高くなりすぎる。これを避けるために、昨年度の政策提案書では燃焼器における発熱は化学平衡計算により求めた。これにより燃料過剰条件でも発熱量はより正確に求められるが、作動流体は空気であると仮定していた。

今年度はこの方法をさらに発展させて、タービンサイクル（Brayton Cycle）の全ての過程（コンプレッサー、燃焼器、タービン）に対してギブス自由エネルギーを最小化することにより化学組成とエンタルピーなどの状態量を求める方法を用いた。この方法では作動流体を空気と仮定する必要はなく、燃料と空気の多成分流体の熱力学状態量が全ての過程で厳密な熱力学に基づいて評価されるため、より正確な熱効率が評価できる。この方法を用いたコンバインドサイクルの新規解析プログラムを開発した。これを用いて昨年度提案したシステムの出力と熱効率を再評価し、通常の方法[5,6]の H₂ および NH₃ 過剰条件への適用の妥当性を検証した。さらにこれまでに検討されていない水素の燃料過剰領域でのガスタービンシステムによるコンバインドサイクルについても検討し、アンモニア過剰燃焼コンバインドサイクルとの比較を行った。

2. アンモニア過剰燃焼コンバインドサイクルシステムと計算方法

2.1 コンバインドサイクルシステムの構成

検討するコンバインドサイクルの概要を図1に示す。コンバインドサイクルはガスタービンシステム（Brayton Cycle）で構成される Upper Cycle と超臨界蒸気タービンシステム（Rankin Cycle）で構成される Bottom Cycle の二つに分けられる。

²⁾ 低位発熱量（LHV, Lower Heating Value）= 標準状態（298 K, 1 bar）における量論反応式の発熱量で、生成する水が気体の場合を低位発熱量という。アンモニアの場合は、反応 $\text{NH}_3 + 0.75\text{O}_2 = 0.5\text{N}_2 + 1.5\text{H}_2\text{O}$ の反応熱で、382 kJ/mol である。

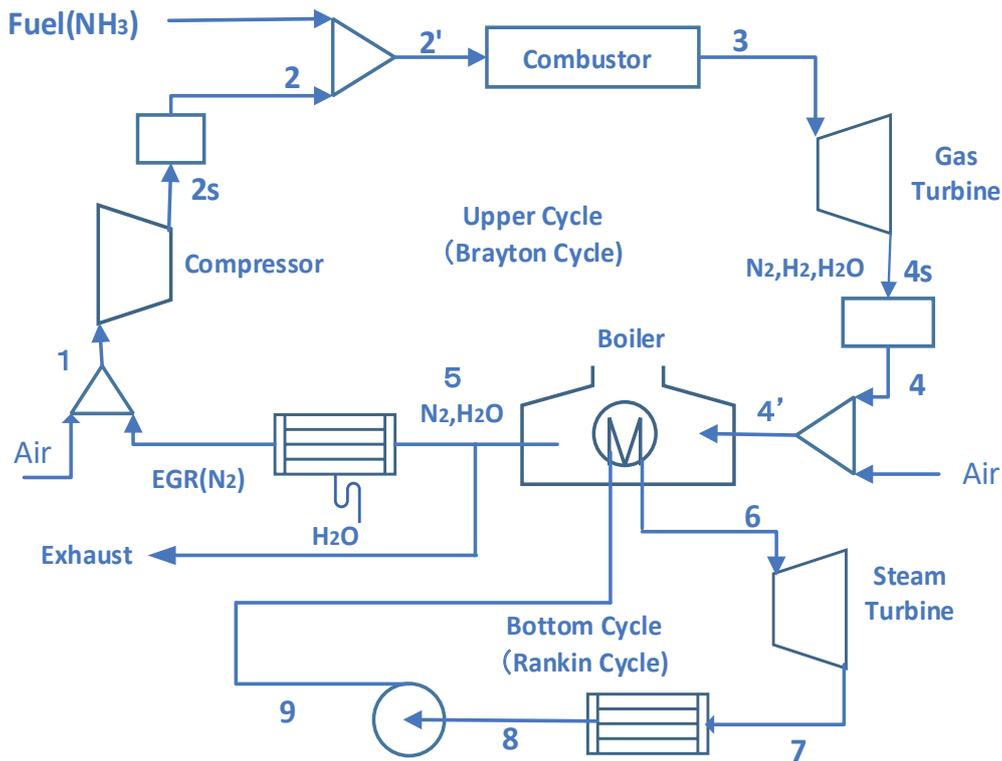


図1 アンモニア過剰燃焼コンバインドサイクルシステムの概要

(1) Upper Cycle

大気圧 ($P_1=1$ bar) の空気と、EGR ガスを混合器 1 により混合する。今回の解析では、ボイラー排ガス (N_2 と H_2O) の一部をコンデンサーを通して H_2O を除去し、 N_2 のみで EGR をかけた。 (H_2O を含んだ排ガスにより EGR をかけることも可能である。 H_2O を含んだ排ガスの方が N_2 のみより比熱が大きいので温度を低下させる効果は大きい、腐食が問題となる可能性がある。) EGR 率 ε は、状態 1 のガス中の EGR ガスのモル分率で定義した。状態 1 の圧力は 1 bar である。この混合ガスをコンプレッサーにより圧縮する。この圧縮過程は断熱圧縮過程 (等エントロピー圧縮) $1 \Rightarrow 2s$ とコンプレッサーの摩擦などの損失過程を考慮するための圧力一定の非断熱過程 $2s \Rightarrow 2$ とに分けて考えることができる。断熱圧縮後の温度、エンタルピーなどの状態量は、圧縮後の圧力が指定されればエントロピー S と圧力 P を指定した化学平衡計算により求めることができる。ただし、コンプレッサーの作動流体が酸素と窒素のみであるため、コンプレッサー内のガス組成は一定であるとした。コンプレッサーの圧力比を P_{21} とすると、 $P_{2s} = P_{21} \times P_1$ であり、また $P_2 = P_{2s}$ である。状態 2 の温度 T_2 は、コンプレッサーの非断熱効率を η_c として次式から求められる。非断熱効率は代表的な値として 0.85 とした。

$$\eta_c = \frac{T_{2s} - T_1}{T_2 - T_1} \quad (1)$$

非断熱圧縮後の状態 2 のエンタルピー、エントロピーなどの熱力学状態量は、温度 T_2 と圧力 P_2 を指定した化学平衡計算により求められる。

コンプレッサーにより圧縮されたガスは、混合器で燃料 (NH_3) と混合され、状態 2' になる。混合される燃料はすでに温度 T_2 と圧力 P_2 の状態に加熱、圧縮されていると仮定した。

状態 2' の燃料は定圧・断熱で燃焼する。燃焼後の状態 3 のガス組成および温度、エントロピーなどの状態量は圧力 P およびエンタルピー h が指定された化学平衡計算により求めることができ

る。断熱・定圧の燃焼であるので等エンタルピー燃焼となり、燃焼器入口と燃焼器出口のエンタルピーは等しい ($h_2 = h_3$)。空気を動作流体と仮定した簡便なタービン効率計算においては、作動流体の組成は変化しないので、顕熱 (sensible enthalpy) の変化のみから燃焼温度と熱効率を計算するが、本方法は chemical enthalpy と sensible enthalpy の両方を考慮してエンタルピー差を計算するより厳密な定式化となっており、通常の方法とはこの点で異なる。

状態3の燃焼ガスによりタービンを駆動する。タービンもコンプレッサーと同様に、等エントロピー (断熱) 膨張と、摩擦損失などによる等圧の非断熱過程に分けて考える。3⇒4s の過程は等エントロピー膨張であり、状態4sの化学組成および、温度、エンタルピーなどの状態量は圧力 $P_{4s}=1\text{ bar}$ とエントロピーを指定した化学平衡計算により求めることができる。コンプレッサーの場合とは異なり、タービン入口温度 (T_3) が高く OH などのラジカルや NO などの燃焼生成物がタービンに流入するために、タービン内部での化学組成変化も考慮する必要がある。非断熱過程による温度 T_4 はタービンの非断熱効率 η_t から求められる。

$$\eta_t = \frac{T_3 - T_4}{T_3 - T_{4s}} \quad (2)$$

タービン断熱効率の値は0.8とした。また $P_4 = P_{4s} = 1\text{ bar}$ である。

タービンからの高温の排ガスは Bottom Cycle の蒸気タービンシステムの作動流体 (超臨界水) と熱交換を行う。ガスタービンの燃料の当量比が1より大きい場合には、タービン排ガスに H_2 が含まれている。この排ガス中の H_2 のモル分率が0.01より大きい場合には、この排ガスと水素との当量比が1になる量の室温の空気を混合する。混合器出口4'では混合気体のエンタルピーが既知であるので (空気と排ガスは各々理想気体であると仮定しているので無熱混合)、このエンタルピーの値から混合後の温度を求めることができる。

このモル分率1%以上の水素を含んだ混合ガスはボイラーで定圧断熱燃焼するが、燃焼温度とガス組成、状態量は平衡計算により評価する。熱交換後のボイラー出口温度 T_5 は400 K とする。

一般に、熱力学状態量 (温度 T、体積 V、圧力 P、内部エネルギー U、エンタルピー H、エントロピー S) のうちの任意の二つを指定すれば系の状態 (化学組成や他の状態量) は定まる。図1の Upper Cycle について、各過程の条件と状態を決めるために必要な束縛条件を表1にまとめた。

表1 Upper Cycle (Brayton Cycle)

	過程	条件	指定状態量
1⇒2s	compressor	$P_1=1\text{bar}, P_{2s}=rP_1$	P,S
2s⇒2	non-isentropic	$T_2=T_1+(T_{2s}-T_1)/\eta_c$	P,T
2⇒2'	mixer	ideal mixing	
2'⇒3	combustor	$P_2=P_3$	P,H
3⇒4s	gas turbine	$P_{4s}=1\text{bar}$	P,S
4s⇒4	non-isentropic	$T_4=T_3+(T_{4s}-T_3) \times \eta_t$	P,T
4⇒4'	mixer	ideal mixing	
4'⇒5	boiler	$P_4=P_5$	P,H

(2) Bottom Cycle

コンバインドサイクルのボトムサイクルとして、超臨界水を作動流体とするスチームタービンを考える。ここでは、600°C級25 MPaのUSC (Ultra Supercritical) スチームタービンを想定した。ボイラーにおける Upper Cycle との熱交換により、作動流体は図1の6の状態に加熱される。この流体をスチームタービンで等エントロピー (断熱) 膨張させて仕事を取り出す。タービン出口では圧力は250 bar から0.05 bar まで低下した蒸気 (状態7) となるが、この蒸気はコンデンサー

で等温・等圧凝集して液化する（状態 8）。ポンプにより 250 bar の超臨界状態まで圧縮（状態 9）された水はボイラーでの熱交換で状態 6 に戻る。各過程の熱損失を無視し、 $P_6=250$ bar、 $T_6=600^\circ\text{C}=873.15$ K、 $P_7=0.05$ bar とすると、各状態の温度、圧力、エンタルピー、エントロピーは NIST スチームテーブル[6]に基づいて計算できる。各状態における状態量を表 2 に示す。

表 2 Bottom Cycle (USC Steam Cycle)

state	T [K]	P [bar]	h [kJ/kg]	s [kJ/kg K]
6	873.15	250	3,493.5	6.364
7	306.03	0.05	1,938	6.364
8	306.03	0.05	137.8	0.476
9	306.79	250	163.3	0.476

2.2 化学平衡計算

前節で述べたように、新規に提案する方法ではガスタービンサイクルの化学平衡計算が必要となる。化学平衡状態は系の二つの状態量を指定すれば決まる。表 1 に示すようにガスタービンサイクルでは圧力 P と、もうひとつの状態量としてエンタルピー h 、エントロピー s 、あるいは温度 T のうちの一つを指定した平衡計算が必要である。平衡状態の化学組成と状態量はギブス自由エネルギーの極値（極小値）を求めることによって決定することができる。Gordon と McBride[7]によって提案された方法にしたがって平衡計算を実施し、図 1 のコンバインドサイクルの熱効率とタービン出力を計算するプログラムを作成した。ここでは用いた平衡計算の方法[7]の概略を述べる。

ガスタービンサイクルの作動流体が N 種類の化学種から構成されるとし、各化学種の単位重量当たりのモル数を n_j 、全モル数を n [kmol/kg] とする。

$$n = \sum_{j=1}^N n_j \quad (j = 1, \dots, N) \quad (3)$$

また、系に含まれる元素の数を L とし、化学種 j 中の元素 i ($i=1, \dots, L$) の数を a_{ij} とする。系に含まれる i 番目の元素のモル数を b_i 、またその初期値を b_i^0 とすると、化学反応によって元素の数は変わらないので、次式の元素の保存式が成り立つ。

$$b_i^0 = b_i = \sum_{j=1}^N a_{ij} n_j \quad (i = 1, \dots, L) \quad (4)$$

混合気体のギブスエネルギー g [kJ/kg] は化学種 j の化学ポテンシャルを μ_j とすると

$$g = \sum_{j=1}^N \mu_j n_j \quad (5)$$

である。ここで化学ポテンシャルは次式で与えられる。

$$\mu_j = \left(\frac{\partial g}{\partial n_j} \right)_{T, P, n_{i \neq j}} = \mu_j^0 + RT \ln \left(\frac{n_j}{n} \right) + RT \ln P \quad (6)$$

(5)式のギブスエネルギーが最小になる状態を束縛条件(4)のもとで求めるために、Lagrange の未定乗数法を用いる。すなわち未定乗数を λ_i ($i=1, \dots, L$) とし、Lagrange 関数 G の極値を求める。

$$G \equiv G(n_j, \lambda_i) = g + \sum_{i=1}^L \lambda_i (b_i - b_i^0) \quad (7)$$

(7)式的全微分が極値ではゼロになるから

$$dG = \left(\mu_j + \sum_{i=1}^L a_{ij} \lambda_i \right) dn_j + (b_i - b_i^0) d\lambda_i = 0 \quad (8)$$

(8)式より

$$\frac{\mu_j^0}{RT} + \ln \left(\frac{n_j}{n} \right) + \ln P + \sum_{i=1}^L a_{ij} \frac{\lambda_i}{RT} = 0 \quad (j = 1, \dots, N) \quad (9)$$

$$b_i - b_i^0 = 0 \quad (i = 1, \dots, L) \quad (10)$$

を得る。(9)および(10)式は n_j と未定乗数 λ_i を変数とする非線形方程式系であるが、これらを指定された条件のもとで解けば平衡状態の化学種の組成 n_j が得られる。温度 T_0 および圧力 P_0 が指定されたときの条件は

$$T = T_0, \quad P = P_0 \quad (11)$$

圧力とエンタルピーが指定された場合の束縛条件は

$$h = \sum_{j=1}^N n_j H_j^0 = h_0, \quad P = P_0 \quad (12)$$

H_j^0 は化学種 j のモル標準エンタルピーである。圧力とエントロピーが指定された場合は

$$s = \sum_{j=1}^N n_j S_j = s_0, \quad P = P_0 \quad (13)$$

$$S_j = S_j^0 - R \ln \frac{n_j}{n} - R \ln P \quad (14)$$

が束縛条件となる。 S_j^0 は化学種 j のモル標準エントロピーである。

(11)、(12)、(13)式のいずれかの条件の下で、非線形方程式(9)、(10)を Newton-Rapson 法により解くが、非線形性が強いため、 Δn_j ($j = 1, \dots, N$), $\Delta \ln n$, $\pi_i = \lambda_i / RT$, $\Delta \ln T$ を繰り返し計算の変数として用いる。導出過程は省略するが、以下の Newton-Rapson 法のための式が得られる[7]。

$$\sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^N a_{kj} a_{ij} n_j \pi_i + \left(\sum_{j=1}^N a_{kj} n_j \right) \Delta \ln n + \left(\sum_{j=1}^N \frac{a_{kj} n_j H_j^0}{RT} \right) \Delta \ln T = b_k^0 - b_k + \sum_{j=1}^N \frac{a_{kj} n_j \mu_j}{RT} \quad (k = 1, \dots, L) \quad (15)$$

$$\sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^N a_{ij} n_j \pi_i + \left(\sum_{j=1}^N n_j - n \right) \Delta \ln n + \left(\sum_{j=1}^N \frac{n_j H_j^0}{RT} \right) \Delta \ln T = n - \sum_{j=1}^N n_j + \sum_{j=1}^N \frac{n_j \mu_j}{RT} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^L \left(\sum_{j=1}^N \frac{a_{ij} n_j H_j^0}{RT} \right) \pi_i + \left(\sum_{j=1}^N \frac{n_j H_j^0}{RT} \right) \Delta \ln n + \left[\sum_{j=1}^N \frac{n_j C_{p,j}^0}{R} + \sum_{j=1}^N \frac{n_j (H_j^0)^2}{R^2 T^2} \right] \Delta \ln T \\ = \frac{h_0 - h}{RT} + \sum_{j=1}^N \frac{n_j H_j^0 \mu_j}{R^2 T^2} \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^L \left(\sum_{j=1}^N \frac{a_{ij} n_j S_j}{R} \right) \pi_i + \left(\sum_{j=1}^N \frac{n_j S_j}{R} \right) \Delta \ln n + \left(\sum_{j=1}^N \frac{n_j H_j^0 S_j}{R^2 T} \right) \Delta \ln T \\ = \frac{s_0 - s}{R} + n - \sum_{j=1}^N n_j + \sum_{j=1}^N \frac{n_j S_j \mu_j}{R^2 T} \end{aligned} \quad (18)$$

温度と圧力が指定された場合(条件(11))は式(15)と(16)を用いて収束計算を行い、圧力とエンタルピーが指定された場合(条件(12))は(15)、(16)、(17)式を用い、圧力とエントロピーが与えられた場合は(15)、(16)、(18)式を用いて適当な初期値を与えて繰り返し計算を行う。

これらの計算を行う場合に必要な、化学種 j のモル標準比熱、モル標準エンタルピー、モル標準エントロピーは温度の多項式として次のように与えられている (NASA の標準形式) [7,8]。

$$\frac{C_{p,j}^0}{R} = a_{1,j} + a_{2,j} T + a_{3,j} T^2 + a_{4,j} T^3 + a_{5,j} T^5 \quad (19)$$

$$\frac{H_j^0}{RT} = a_{1,j} + \frac{a_{2,j}}{2} T + \frac{a_{3,j}}{3} T^2 + \frac{a_{4,j}}{4} T^3 + \frac{a_{5,j}}{5} T^4 + \frac{a_{6,j}}{T} \quad (20)$$

$$\frac{S_j^0}{R} = a_{1,j} \ln T + a_{2,j} T + \frac{a_{3,j}}{2} T^2 + \frac{a_{4,j}}{3} T^3 + \frac{a_{5,j}}{4} T^4 + a_{7,j} \quad (21)$$

a_1 - a_7 の各化学種についての温度係数の値は ANSYS Chemkin のデータベースの値[8]を用いた。

2.3 タービン出力と熱効率の計算

(1) ガスタービン (Brayton Cycle) の出力と熱効率[9]

図1の各状態 k における作動流体の単位重量当たりのエンタルピー h_k [kJ/kg] は顕熱 (sensible enthalpy) と化学エンタルピー (chemical enthalpy) の和として以下の式で表される。

$$h_k = h_{sens,k} + h_{chem,k} = \frac{1}{WM_k} \sum_{j=1,N}^N \int_{T^0}^{T_k} x_{k,j} C_{p,j}^0(T) dT + \frac{1}{WM_k} \sum_{j=1}^N x_{k,j} \Delta H_{f,j}^0 \quad (22)$$

$x_{k,j}$ は状態 k における化学種 j のモル分率、 WM_k は平均分子量 ($WM_k[\text{kmol/kg}] = 1/n$) である。また、化学種 j の標準生成エンタルピー $\Delta H_{f,j}^0$ は、NASA の標準形式 (式(20)) では標準温度 $T^0 = 273.15 \text{ K}$ におけるエンタルピーと定義上等しい。したがって

$$\Delta H_{f,j}^0 = H_j^0(293.15 \text{ K}) \quad (23)$$

である。燃焼器の燃焼によってガスタービンサイクルに入力される熱量 q_{in} [kJ/kg] は状態3と2の顕熱の差であるから

$$q_{in} = h_{sens,3} - h_{sens,2} \quad (24)$$

コンプレッサーに対してなされた仕事は (摩擦損失も含めて)

$$w_c = (1 - Y_{fuel}) \times (h_2 - h_1) \quad (25)$$

である。 Y_{fuel} は状態2における燃料の質量分率 ($=Y_{NH_3}$) である。タービンがなした仕事は

$$w_t = h_3 - h_4 \quad (26)$$

であるから、正味のガスタービンの仕事は

$$w_{gt} = w_t - w_c \quad (27)$$

である。ガスタービンの熱効率はしたがって

$$\eta_{gt} = \frac{w_{gt}}{q_{in}} \quad (28)$$

となる。

(2) スチームタービン (Rankin Cycle) の出力と熱効率

スチームタービンの各状態のエンタルピーは表2にまとめられている。この表からスチームタービンがなした仕事は

$$W_{st} = h_6 - h_7 = 1555.5 \quad [\text{kJ/kg-water}] \quad (29)$$

ポンプでの仕事は

$$W_p = h_9 - h_8 = 25.52 \quad [\text{kJ/kg-water}] \quad (30)$$

ボイラーでの熱交換によってこのサイクルに入力された熱量は

$$q_{in,st} = h_6 - h_9 = 3330.2 \quad [\text{kJ/kg-water}] \quad (31)$$

したがって、熱効率は

$$\eta_{st} = \frac{W_{st} - W_p}{q_{in,st}} = 0.459 \quad (32)$$

である。

(3) コンバインドサイクル全体の出力と熱効率

ガスタービン質量流量を m_{gt} 、スチームタービンの質量流量を m_{st} [kg/s] とする。またボイラーでの熱交換の効率を η_h とする。ここでは η_h の典型的な値として 0.75 を用いた。ボイラーでの熱バ

ランスから

$$\eta_h m_{gt} (h_{4'} - h_5) = m_{st} (h_6 - h_9) \quad (33)$$

ガスタービンシステムとスチームタービンシステムでは作動流体が異なるため、コンバインドサイクル全体の熱効率は質量当たりの出力では定義できず、単位時間当たりの出力を考えなければならない。ガスタービンシステムの単位時間当たりの出力は

$$P_{st} = m_{gt} W_{gt} \quad [\text{kJ/s}] \quad (34)$$

スチームタービンの単位時間当たりの出力は

$$P_{st} = m_{st} W_{st} \quad [\text{kJ/s}] \quad (35)$$

である。コンバインドシステムに対する単位時間の熱入力、燃焼器における熱入力とボイラーでの熱入力の和になる。燃焼器における単位時間当たりの熱入力は

$$Q_{in,comb} = m_{gt} q_{in} = m_{gt} (h_{sens,3} - h_{sens,2'}) \quad [\text{kJ/s}] \quad (36)$$

ボイラーでのシステムに対する熱入力は

$$Q_{in,boiler} = m_{4'} (h_{sens,4'} - h_{sens,4''}) \quad [\text{kJ/s}] \quad (37)$$

である。ここで $m_{4'}$ は状態 4' における質量流量で、 m_{gt} と排ガス中の H_2 を当量比で断熱燃焼させるために加えた空気の質量流量の和である。 $h_{sens,4'}$ はボイラーで H_2 を熱交換なしに燃焼させたときの顕熱である。(排ガス中の H_2 が 1% 以下であるときはボイラーでの燃焼はないので $h_{sens,4''} = h_{sens,4'}$ である。) コンバインドサイクル全体の熱効率は

$$\eta_{CC} = \frac{P_{gt} + P_{st}}{Q_{in,comb} + Q_{in,boiler}} \quad (38)$$

で与えられる。

以下の計算では全て $m_{gt} = 300$ [kg/s] とした。

3. 結果および考察

3.1 コンバインドサイクルの各過程の状態量と化学組成の計算例

前節に述べた方法により、図 1 のコンバインドサイクルの出力と熱効率を計算するプログラムを作成した。このプログラムにより計算した、ガスタービンサイクル (Upper Cycle) の各状態 (図 1 の状態 1 から状態 5) の状態量の一例を表 3 に示す。

表 3 は圧力比 25 で、EGR 率を 0.4、当量比 1.2 とした場合の計算例である。圧力以外の束縛変数 (表 2 参照) を赤字で示してある。1. の初期状態からはじめて、1⇒2s はコンプレッサーでの等エントロピー圧縮 (断熱圧縮) 過程である。状態 2 は式(1)のコンプレッサーの比断熱効率により決まる温度および圧力を指定した平衡計算によりエンタルピーとエントロピーが決まる。状態 2' では燃料 (NH_3) とコンプレッサーからの圧縮された気体の混合によりエンタルピー、エントロピーが変化する。2'⇒3 は圧力一定、等エンタルピー (断熱) 燃焼過程である。全エンタルピーは一定であるが、sensible enthalpy hs は大きく異なっている。この hs の変化は、燃焼による chemical enthalpy 変化と釣り合っている。燃焼平衡温度 (=タービン入口温度) はこの場合、2,052 K である。3⇒4s はタービンにおける等エントロピー (断熱) 膨張過程で、圧力は 1 bar まで低下する。

表3 各状態の状態量 (圧力比=25、当量比=1.2、EGR=0.4)

state	T (K)	P (bar)	h (kJ/kg)	hs (kJ/kg)	s (kJ/kg-K)
1 Inlet	298.15	1	0.04	0	6.89
2s Isentropic Compression	730.6	25	453.6	453.6	6.89
2 Non-isentropic	806.9	25	537.7	537.6	7
2' Fuel Mixing	806.9	25	296.4	633.5	7.8
3 Adiabatic Combustion	2,052.3	25	296.4	2,514.24	9.44
4s Isentropic Expansion	998.2	1	-1,308.7	910.7	9.44
4 Non-isentropic	1,209.4	1	-1,006.3	1,213.2	9.72
4' Air Mixing	1,119.8	1	-908.7	1,062.4	9.48
4'' Adiabatic Combustion	1,402.1	1	-908.7	1,456.2	9.64
5 Boiler outlet	400	1	-2,243.97	121.26	8.01

4s=>4 は式(2)のタービンの非断熱効率による温度変化の過程で、温度と圧力を指定した平衡計算により状態変数が計算される。状態4'は、未燃の水素を燃焼させるための追加の空気の混合過程である。タービンからの排ガス中の水素分率が1%以下の時にはボイラーで燃焼は無しで、排熱とボトムサイクルのスチームとの熱交換のみが行われる。4'=>4''は追加の空気と排ガス中の水素(水素濃度が1%以上の場合)との等エンタルピー(断熱)燃焼である。状態4''の計算はBottom cycleとの熱交換量を評価するために必要である。熱交換後、状態5の温度(400 K)、圧力(1 bar)のガスが排出される。

燃焼器での燃焼平衡組成(タービン入口のガス組成)を当量比に対してプロットした結果を図2に示す。この時の燃焼器温度(=タービン入口温度)は後出の図3に示されている。

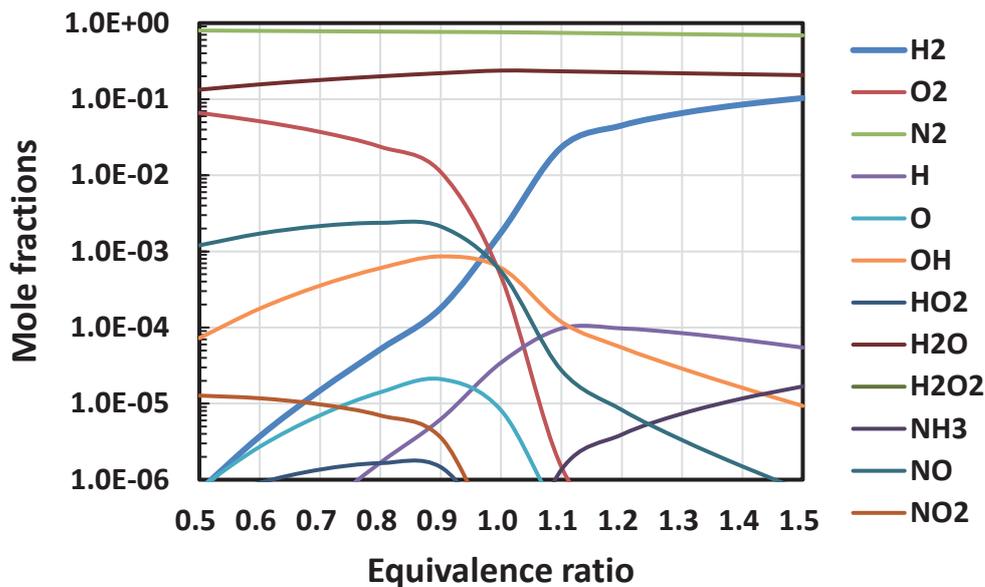


図2 燃焼器出口におけるガス組成の計算例 (圧力比 25、EGR 率 0.0、 $P_3=25$ bar)

当量比 1 を境に平衡化学種組成は大きく異なる。当量比 1 以下（酸素過剰）では、未燃の O_2 とともに NO の生成量が多い（1,000 ppm 以上）が、当量比 1 以上では NO の生成量は大幅に減少する。また、燃焼温度が高いことから OH ラジカルや H 原子濃度も高い。当量比 1 以上（燃料過剰）になると、 H_2 の生成量が多くなる。当量比 1.1~1.5 の範囲では 3~10% 程度の未燃の H_2 が生成する。未燃の NH_3 も当量比 1 以上では増加するが、その量は平衡値としては多くはなく 10 ppm 以下程度である。ただし、平衡計算ではなく、反応速度論的な検討によると、層流燃焼火炎中では当量比 1 以上では未燃の NH_3 の量は平衡値に比べてはるかに多い[2]。

3.2 従来法によるガスタービンの出力評価法との比較

簡便なガスタービンサイクル（Brayton Cycle）の出力評価法[4,5]では、作動流体を比熱一定の空気と仮定し、燃料の燃焼熱によって作動流体が過熱されてタービン入口温度が上昇する、としてタービン出力および熱効率が評価される。昨年度の LCS の提案書[3]においても、燃焼による温度上昇は化学平衡計算に基づいて評価したものの、コンプレッサーおよびタービンの仕事（エンタルピー変化）は比熱一定の作動流体（空気）に基づいて評価した。この方法では、作動流体の組成は一定であり、エンタルピー変化は全て *sensible enthalpy* の変化とみなせる。すなわち

$$\Delta h_{chem} = 0, \quad \Delta h = \Delta h_{sens} = C_p \Delta T \quad (38)$$

である。したがって、ある過程（例えばコンプレッサーやタービンにおける等エントロピー圧縮・膨張過程）の仕事は比熱と温度変化の積で与えられる。この簡便法とここで提案する全ての過程について平衡計算を行う方法では、タービン出力の値が大幅に異なる場合がある。この違いについて考察する。

表 4 に Brayton Cycle の各状態における温度とエンタルピーおよびガスタービン出力を簡便法と本提案の方法とで計算した例を示す。

表4 従来法と本方法の比較 (圧力比=25、当量比=1、EGR=0の場合)

state	従来法の簡便法			本提案書の方法			
	T K	C_p kJ/kg-K	h kJ/kg	T K	C_p kJ/kg-K	h kJ/kg	h_{sens} kJ/kg
1	300	1.0048	301.4	298.15	1.01	0.03	0
2	865.7	1.0048	869.8	804.97	1.09	532.77	532.74
2"				804.97	1.38	258.89	641.36
3	2,472.8	1.0048	2,484.6	2,436.03	1.68	258.89	3,189.17
4	1,208.8	1.0048	1,214.6	1,508.81	1.55	-1,342.92	1,678.01
Wc (kJ/kg)	$C_p(T_2-T_1) = 568.5$			457.15 (eq.25)			
Wt (kJ/kg)	$C_p(T_3-T_4) = 1,270$			1,601.81 (eq.26)			
Wgt (kJ/kg)	$Wc+Wt = 701.6$			1,144.66 (eq.27)			

表4の Wc 、 Wt 、および Wgt は作動流体 1 kg 当たりのコンプレッサー、タービン、および Brayton Cycle 全体の仕事である。簡便法のエンタルピーは、比熱と温度の積で定義されるエンタルピーであるが、本方法では NASA のデータベース[7,8]に従った定義（理化学での一般的な定義）のエンタルピーであり、標準状態での N_2 、 O_2 のエンタルピーは標準生成エンタルピーに等しく（式(23)）したがって定義からゼロとなる。簡便法の比熱一定の仮定での圧縮、膨張過程の温度と、本方法の平衡計算の結果（自由エネルギー最小状態の温度）とが異なる原因としては、本方法で比熱の温度依存性を考慮していることの効果が大きい。本方法では化学反応による作動流体の組成変化を考慮しており、化学エンタルピーと顕熱（sensible enthalpy）は異なる。全エンタルピーの値も簡便法の値とは大きく異なっている。その結果として、簡便法で得られる仕事量は大幅に過小評価となっている。炭化水素の燃料過小状態での燃焼では簡便法と本方法の違いは小さいが、水素やアンモニアのような化学量論の燃料が空気（酸素）に対して相対的に多い燃料の場合には、簡便法で評価した仕事はここで示したように大幅な過小評価となることがあるので注意が必要である。

3.3 圧力比=25 としたときのコンバインドサイクルの出力と熱効率

図3に圧力比が25でEGR率を変えたときのタービン入口温度 T_3 を当量比の関数としてプロットした図を示す。

タービン入口温度はタービンブレードの耐熱温度以下である必要がある。タービンの熱効率は温度が高いほど高くなるが、現在 1,700°C 級ガスタービンの開発が進められていて、タービンの耐熱温度を上昇させる試みが続いている。ここではタービン入口温度の上限を 2,000 K と仮定した。排ガス再循環を行わず（EGR=0）コンプレッサーの圧力比を 25 とした場合は当量比 0.6 以上の全ての領域で燃焼温度は 2,000 K 以上になる（図3）。したがって、タービン入口温度をタービンブレードの耐熱温度以下とするためには、圧力比を下げるか、又は EGR により燃焼温度を制御する必要がある。ここでは圧力比を 25 とし、EGR により温度低下を図る方法を検討する。当量比が 1 以下（酸素過剰）では図2に示されるように燃焼排ガス中に未燃の O_2 が多量に含まれる。当量比を変えずに EGR をかけるためには燃焼排ガス中の酸素を分離しなければならないので現実的ではない。一方で当量比が 1 より大きい場合（燃料過剰条件）は燃焼排ガス中の未燃の酸素は 1% 以下であり、特に当量比 1.1 以上では 0.01% 以下となる。したがって当量比 1 以上の場合にはコンデンサーにより排ガス中の H_2O を除去することによって N_2 のみで EGR をかけることがで

き、当量比を変えることなく燃焼温度を低下させることができる。また EGR=0.6 の場合には当量比 1.1 以上でタービン入口温度を 2,000 K 以下とすることができる。EGR=0.4 では当量比 1.3 以上である。

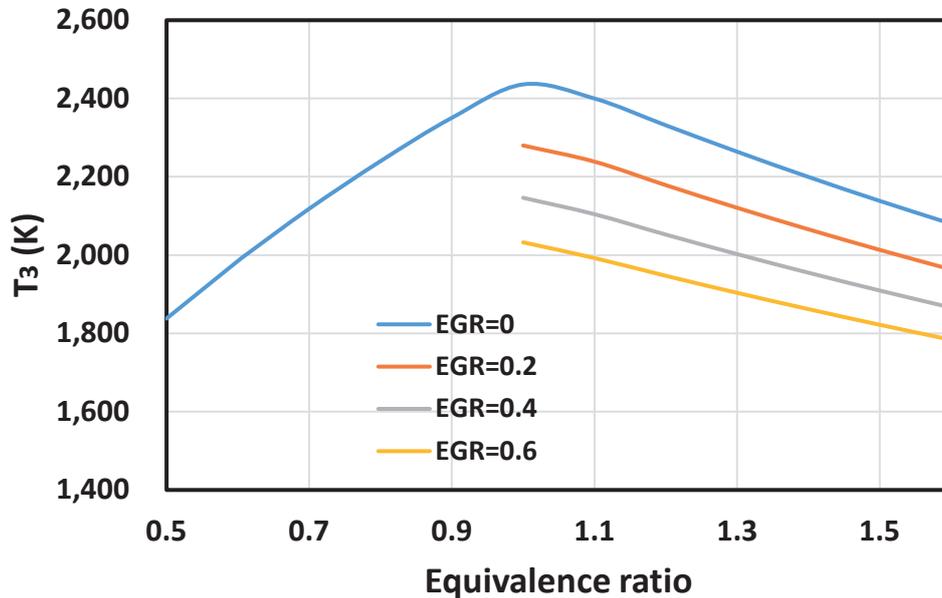


図3 燃焼器出口（タービン入口）温度（圧力比 25、ガス流量 300 kg/s）

図1の状態2'（燃焼器入口）における作動流体の流量を 300 kg/s としたときのガスタービン出力を図4示す。当量比1ではEGRなしで最大の出力となる（343 MW）が燃焼温度はタービンの耐熱温度をはるかに超えている。当量比が1より大きな領域では出力の当量比依存性は小さい。タービン入口温度が2,000 K以下という制約の下では、EGR=0.2、当量比1.53で280 MW、EGR=0.4、当量比1.31で248 MW、EGR=0.6、当量比1.08で222 MWである。

EGRをかけることにより、燃焼温度が下がるのでガスタービン出力は低下する。図4にはタービン入口温度が2,000 Kとなる点も示してある。（EGR=0の場合は2,000 Kとなる当量比は1.6以上となり図4には示してない。）タービン入口温度が同じでも、EGR量が多いほどガスタービン出力が低下しているのが分かる。

図5にコンバインドサイクルの全出力（ガスタービンとスチームタービンの出力の和）を示す。当量比1以上で当量比とともにガスタービン出力は低下する（図4）のに対し、全出力が増加している（図5）のはガスタービン排ガス中の未燃の水素をボイラーで燃焼することによりスチームタービン出力が増加するためである。（未燃の水素量は当量比の増加とともに増加する。）図5でもタービン入口温度が2,000 Kとなる点の出力値をプロットしてある。燃焼温度（タービン入口温度）が同じ2,000 Kであっても、EGR率の増加に伴い全出力は大幅に低下している（ガスタービン出力の低下（図4）よりも大きい）。これはEGR率の増加に伴うスチームタービン出力の低下が大きいからである。

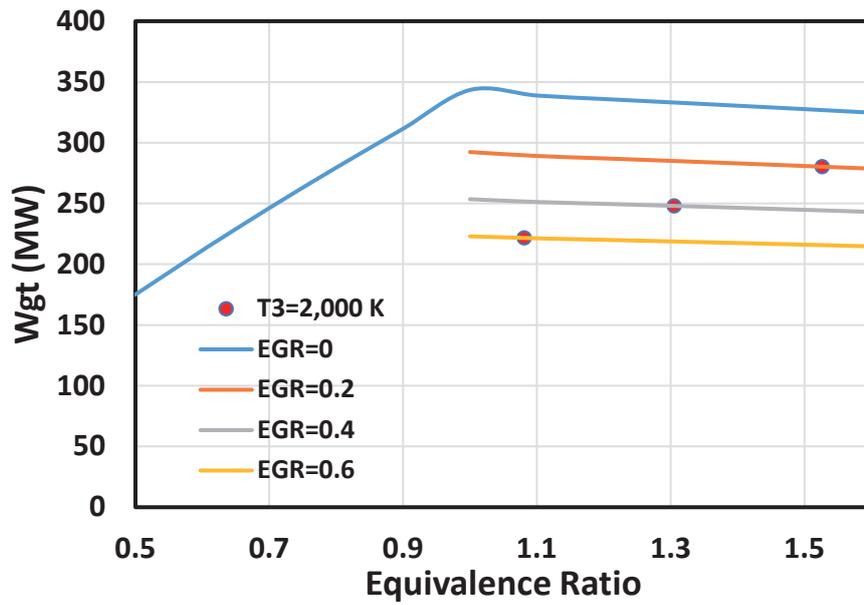


図4 ガスタービン出力 (圧力比 25、ガス流量 300 kg/s)

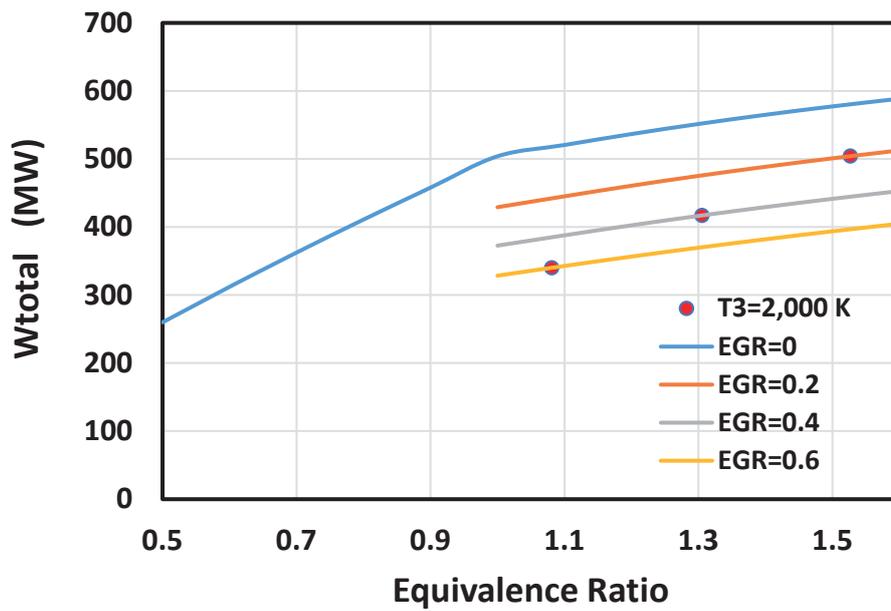


図5 コンバインドサイクルの出力 (圧力比 25、ガス流量 300 kg/s)

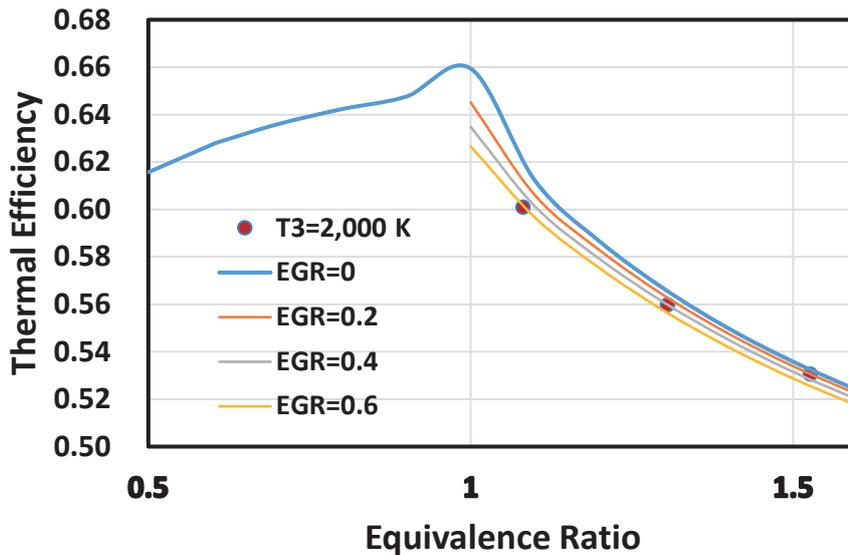


図6 コンバインドサイクルの熱効率 (圧力比 25、ガス流量 300 kg/s)

図6に式(37)により算出したコンバインドサイクル全体の熱効率を示す。出力はEGR率の増加とともに減少するが、熱効率のEGR率に対する依存性は小さい。タービン入口温度が2,000 Kとなる点における熱効率を比較すると、EGR率の増加に伴い全出力は低下する(図5)ものの、熱効率は増加する。これはEGR率の増加とともに燃料量が低下するため、単位燃料量当たりの出力はEGR率が高い方が高くなるためである。ただし、EGR率を0.6以上にすると2,000 Kとなる当量比が1以下となり、未燃のH₂を利用できなくなる。

図7にNO濃度の平衡値を当量比の関数としてプロットした図を示す。NOは燃焼器において生成するが、いったん生成した温度が室温付近まで低下してもその温度の平衡値まで減少するまでには一般に非常に長い時間を必要とする。さらに、当量比1.1以上でEGRをかけた場合には図1のボイラー中での水素の当量比燃焼によってもNOが生成する。これらの一旦生成したNOは、5の状態(T=400 K)でも平衡値までは減少しないと考えられる。したがって、排ガス中のNO濃度はここでは燃焼器出口におけるNO平衡濃度、もしくはボイラーにおけるNO平衡濃度の大きい方(すなわちコンバインドサイクル中でのNOの平衡濃度の最大値)を燃焼排ガス中のNO濃度と仮定した。図7では当量比1以下で(仮想的に)排ガス中の酸素を分離してN₂のみでEGRをかけたとしたときのNO濃度も参考のために示してある(破線)。図に示されるように酸素過剰側ではNO濃度は1,000 ppm以上であるが、当量比が1以上では当量比の増加とともに大幅に減少する。当量比1.2以上でNOが増加しているのはボイラーにおける水素燃焼によりThermal NOが増加するためであるが、ボイラー温度は燃焼器温度に比するとそれほど高くないのでその増加は緩やかである。

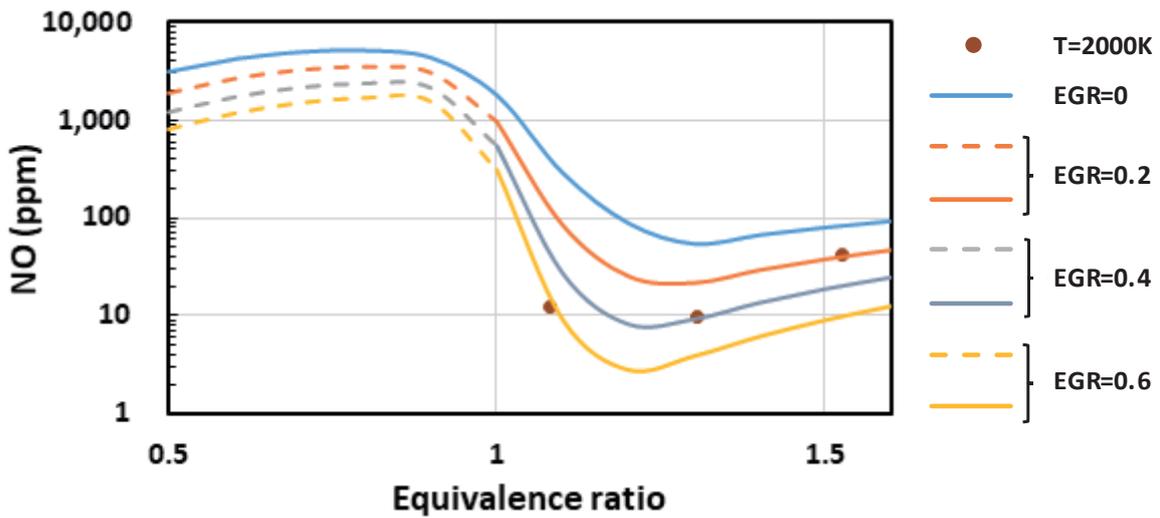


図 7 コンバインドサイクルにおける NO 平衡濃度の最大値 (圧力比 25)

3.4 出力と熱効率の最適化と水素コンバインドサイクルとの比較

図 7 から明らかなように、アンモニア専焼タービンで低 NO 排出を実現するためには当量比 1 以上の燃焼条件が必要である。当量比 1 以上では発生する H_2 のボイラーでの再燃焼により効率的なコンバインドサイクルを実現でき、また N_2 のみによる EGR を利用して燃焼温度制御が可能となるなどの利点がある。熱効率およびコンバインドサイクル出力は、当量比、EGR 率、圧力比の関数となるので、これらのパラメータを変化させたとき、出力と熱効率がどのように変わるのかを調べる必要がある。

表 5 にガスタービン入口温度を 2,000 K としたときの出力と熱効率を EGR 率と圧力比を変数として計算した例を示す。当量比は EGR 率、圧力比を指定すると燃焼温度を固定しているので一意的に決まる。圧力比を 25 とした場合、図 5 と 6 から分かるように、当量比 1 以上で出力は当量比が高い方が大きくなるのに対して熱効率は高当量比では低下する。タービンの温度制約 ($T_3 < 2,000$ K) を満たすためには EGR が必要であるが、EGR 率を上げると $T_3 = 2,000$ K となる当量比は大きくなる。EGR=0.2 では当量比は 1.52 と大きく燃料の量が多いので 504MW の出力が得られるが、熱効率は 0.53 である。EGR=0.6 では当量比 1.08 で出力は (燃料量が少ないので低下し) 340MW になるが、熱効率は高く 0.6 である。すなわち、熱効率あるいは燃費は EGR 量が多い方が有利である。

表5 タービン入口温度を2,000 Kとしたときの出力と熱効率

燃料	圧力比	当量比	EGR 率	出力 ^{b)} (MW)	熱効率	NO (ppm)
NH ₃	25	0.61	0	318	0.63	4,324
NH ₃	25	1.52	0.2	504	0.53	41
NH ₃	25	1.31	0.4	417	0.56	9.6
NH ₃	25	1.08	0.6	340	0.60	13
NH ₃	20	0.641	0	324	0.61	4,135
NH ₃	20	1.67	0	581	0.50	109
NH ₃	20	1.45	0.2	482	0.53	38
NH ₃	20	1.22	0.4	395	0.56	7.6
H ₂	25	0.47	0	296	0.61	5,314
H ₂	25	1.74	0.8 ^{a)}	506	0.50	48.8
H ₂	25	1.46	0.9 ^{a)}	434	0.53	52.4
H ₂	20	0.49	0	303	0.60	5,189
H ₂	20	1.79	0.7 ^{a)}	530	0.49	80
H ₂	20	1.51	0.8 ^{a)}	457	0.51	29.1

a)EGR ガス組成:N₂/H₂=0.75/0.25、 b)Upper Cycle の流量 300 kg/s

圧力比を変えた場合について調べるために、表5には圧力比を20とした場合の結果も示してある。圧力比20の場合にはEGRをかけなくても当量比を1.67まで上げるとタービン出口温度を2,000 Kとすることができて、この場合は580 MWと大きな出力が得られるが、熱効率は0.5と低くなる（燃料量が多くなり燃費が悪くなる）。同じ燃焼温度で比較するとEGR率を大きくした方が出力は小さくなるが熱効率は上がる（表5）結果となっていて、これは圧力比25の場合と同じである。

参考のために、酸素過剰条件下での出力と熱効率も表5に示した。酸素過剰条件ではEGRによる温度制御はできないが、当量比0.61でタービン入口温度を2,000 Kとすることができる。しかしこの場合にはNO平衡値は4,324 ppmと極めて高くなる。

ガスタービンサイクルの圧力比の上限を25、タービン耐熱温度を2,000 Kと仮定すると、この制約条件の下でアンモニア過剰燃焼タービンの熱効率はEGR率0.6の時最も高くなる。この時のNO排出量（平衡値）は13 ppm程度と低い。

全く同じ計算方法により燃料をH₂としたときの計算例も表5に示した。EGRをかけない場合、燃焼温度を2,000 Kとするためには当量比を低くする必要がある。圧力比25ではこの当量比は0.47でこの時の出力は296 MWであるが、NO排出量は5,341 ppmである。

H₂を燃料とした場合でも、高当量比であれば燃焼温度を2,000 K程度まで上げて排出NOを減少させることが可能である。例えば圧力比25の場合、N₂のみでEGR率0.9で運転できれば当量比1.7程度で排出NOを50 ppm（バーナーでの余剰H₂燃焼により生成）程度にすることが可能である。しかし当量比1.7としてバーナーで量論比燃焼すると、排出ガス組成中のH₂Oの比率が高くなり（例えばN₂/H₂O=0.7/0.3程度）、EGR率を0.9とすることはできない。そこで、排ガス中のH₂Oを分離せずそのままEGRガスとして利用することを考える。高当量比の水素燃焼での典型的な排ガス組成としてN₂/H₂O=0.75/0.25を仮定し、この排気ガスを用いてEGRを実施したとして計算を行った結果を表5に示した。水素を燃料として排出NOを抑えるために高当量比でガスタービンを運転するためには、圧力比25の場合にはEGR率を0.8以上、圧力比20の場合でも0.7以上とする必要がある。例えば圧力比20の場合、EGR率0.7で当量比を1.79とすれば、コン

バインドサイクル出力として 530 MW が得られるが、熱効率は 0.49 と低く燃費が悪くなる。なお、表 5 の当量比 1 以上の水素燃焼の NO 排出量は、全てバーナーでの余剰水素燃焼により生成される NO である。

4. 結論

LCS では昨年度に燃料過剰燃焼 NH₃ 専焼タービンの提案を行ったが、そこで用いられた出力と熱効率評価法は作動流体を空気と仮定する従来からの簡便法であった。本年度は、この過程を用いずに物理化学的により厳密な方法を開発した。すなわち、昨年度提案したコンバインドサイクルをより詳細に検討し、コンプレッサー、燃焼器、タービン全ての過程について多成分化学種の化学平衡計算を行う新規のガスタービン解析法を提案した。この方法を用いたコンバインドサイクルの解析プログラムを開発し、昨年度提案したシステムの出力と熱効率を再評価した。また、水素を燃料としたコンバインドサイクルについて、初めて燃料過剰条件でのガスタービンサイクルを検討し、アンモニアとの比較を行った。その結果、以下の結論が得られた。

(1) 昨年度提案した燃料過剰アンモニア専焼コンバインドサイクルの概念は、新規の方法を用いても成立することが確かめられた。ただし、昨年度の簡便な方法は、タービン出力を大幅に (30% 程度) 過小評価しており、今回提案したより厳密な方法の方が大きな出力を与える。

(2) ガスタービンの耐熱温度を 2,000 K、圧力比の条件を 25 とした場合、酸素過剰アンモニアタービンコンバインドサイクルでは熱効率 0.63 であるが NO の平衡濃度は 4,300 ppm 程度である。一方、EGR による燃料過剰アンモニアタービンコンバインドサイクルでは当量比 1.1 程度で熱効率 0.60 が得られ、その時の NO 排出量は 13 ppm と酸素過剰条件に比べて 2 桁程度少ない。

(3) 比較のために行った水素専焼タービンコンバインドサイクルでは、通常酸素過剰タービンの場合は当量比 0.47 で熱効率 0.61 が得られたが、NO 平衡濃度は 5,300 ppm と非常に高い。

(4) 水素タービンの場合でも、アンモニア同様に燃料過剰専焼タービンコンバインドサイクルが可能であることを初めて示した。水素の場合でも、燃料過剰にすれば Thermal NO の生成は数十 ppm 程度に抑えることができる。この場合は、燃焼温度をタービン耐熱温度以下とするために水と窒素からなる燃焼排ガスの EGR が必要である。例えば、圧力比 25 の場合、当量比 1.74、EGR 率 0.8 で熱効率 0.5 が得られ、この時の NO 排出量は 49 ppm 程度である。

(5) 燃料過剰の低 NO コンバインドサイクルは、NH₃ および H₂ の両方の場合に可能である。

(6) H₂ の場合には、H₂O を含んだ排ガスの多量の EGR (EGR 率 0.7~0.9 程度) が必要となること、および低 NO 燃焼を可能とした場合の熱効率が 50%程度と低いことから、NH₃ に対して優位性は認められない。

今回開発した方法とプログラムにより、水素およびアンモニアの燃料過剰ガスタービンシステムを用いたコンバインドサイクルの熱効率と単位燃料重量当たりの出力 (MJ/kg) は評価可能となった。今後、これを用いてアンモニア過剰燃焼コンバインドサイクルのコスト評価を実施する予定である。

5. 政策立案のための提案

燃料過剰アンモニア専焼タービンによるコンバインドサイクルはCO₂フリーな大出力発電システムとして重要であり、実現できればCO₂ゼロエミッション技術の大きなブレークスルーになる。本提案では、物理化学的により厳密な評価方法によって、さらに大きな出力が得られる可能性が示された。アンモニアの燃焼速度が他の燃料に比して遅いことに起因する新規燃焼器の設計が必要であることなど、開発には多大な費用と時間がかかる。したがって、国家プロジェクトとして開発を進める必要があり、引き続いて以下の2点を提案する。

<政策提案1>

燃焼工学、数値流体力学、タービン工学、化学工学の専門家からなるチームによりアンモニア過剰燃焼コンバインドサイクルの実現可能性検証を1年程度の時間をかけて実施すべきである。特にタービン用燃焼器のシミュレーションによる設計・検証が必要である。

<政策提案2>

政策提案1の結果を受けて、実現可能性検討に加わった専門家に加え、タービン発電システム開発に実績のある複数の企業の参画を得て、国家プロジェクトとしてアンモニア専焼発電システムの開発を実施すべきである。

参考文献

- [1] A. Valera-Medina, H. Xiao, M. Owen-Jones, W.I.F. David and P.J. Bowen, "Ammonia for power", *Progress in Energy and Combustion Science*, 69, p. 63-102, 2018.
- [2] J. Otomo, M. Koshi, T. Mitsumori, H. Iwasaki and K. Yamada, "Chemical kinetic modeling of ammonia oxidation with improved reaction mechanism for ammonia/air and ammonia/hydrogen/air combustion", *Int. J. Hydrogen Energy*, 43, p. 3004-3014, 2018.
- [3] イノベーション政策立案のための提案書 (技術開発編) "アンモニア直接燃焼によるガスタービンシステムの提言", 平成30年12月, LCS-FY2018-PP-03.
- [4] H. Cogen and P.V. Straznicky, 藤原仁志訳 「ガスタービンの基礎と応用」, 東海大学出版, 2017.
- [5] 日本ガスタービン学会編, 「ガスタービン工学」, 2017.
- [6] National Institute of Standards and Technology. NIST Chemistry WebBook, SRD 69 - Thermophysical Properties of Fluid Systems 2018. <https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>.
- [7] S. Gordpn and B.J. McBride "Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications." NASA Reference Publication 1311, 1994.
- [8] Ansys Inc. ANSYS CHEMKIN PRO version 18.1 2019.
- [9] M. Keller, M. Koshi, J. Otomo, T. Mitsumori, H. Iwasaki, and K. Yamada. "Thermodynamic evaluation of open cycle gas turbines with carbon-free fuels H₂ and NH₃ at high temperatures.", *J. Therm. Sci. Technol.*, 14(2), Paper No.19-00167, 2019. DOI:10.1299/jtst.2019jtst0015.

低炭素社会の実現に向けた
技術および経済・社会の定量的シナリオに基づく
イノベーション政策立案のための提案書

アンモニア直接燃焼によるガスタービン システムの提言 (Vol.2)

令和2年1月

Turbine System driven by Direct Combustion of Rich Ammonia (Vol.2):

Proposal Paper for Policy Making and Governmental Action
toward Low Carbon Societies,
Center for Low Carbon Society Strategy,
Japan Science and Technology Agency,
2020.1

国立研究開発法人科学技術振興機構 低炭素社会戦略センター

本提案書に関するお問い合わせ先

- 提案内容について・・・低炭素社会戦略センター 副センター長 越 光男 (KOSHI Mitsuo)
- 低炭素社会戦略センターの取り組みについて・・・低炭素社会戦略センター 企画運営室

〒102-8666 東京都千代田区四番町5-3 サイエンスプラザ4階
TEL : 03-6272-9270 FAX : 03-6272-9273 E-mail : lcs@jst.go.jp
<https://www.jst.go.jp/lcs/>

© 2020 JST/LCS

許可無く複写・複製することを禁じます。
引用を行う際は、必ず出典を記述願います。
