



Title	Numerical investigation on combustion and emission characteristics in an ammonia co-combustion furnace using detailed chemistry and conjugate heat transfer methods
Author(s)	楊, 軒楠
Citation	大阪大学, 2025, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/101643">https://doi.org/10.18910/101643</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

## Abstract of Thesis

Name ( YANG YINAN )	
Title	Numerical investigation on combustion and emission characteristics in an ammonia co-combustion furnace using detailed chemistry and conjugate heat transfer methods (詳細反応機構と共に伝熱法を用いたアンモニア燃焼炉の燃焼特性および排気特性の数値解析)
<b>Abstract of Thesis</b> <p>Ammonia co-firing is increasingly recognized as a promising strategy for achieving carbon neutrality, as it not only mitigates carbon emissions but also enhances the stability of ammonia combustion. However, controlling NO emissions during ammonia co-combustion remains a significant challenge. In response to this issue, this study presents a systematic numerical investigation of a 10-kW ammonia co-combustion furnace. A customized solver was developed within the OpenFOAM framework to facilitate fast and accurate numerical analysis. Specifically, this solver integrates a sparse analytical Jacobian approach using the SpeedCHEM library to enhance the efficiency of the ordinary differential equation solver. Dynamic load balancing code was employed to evenly distribute computational workloads across multiple processes, while further optimization was achieved through the open multi-processing method and the local time-stepping scheme to maximize computational efficiency.</p> <p>The effectiveness and robustness of the customized solver were first validated using Sandia flames D-F as benchmarks. Results demonstrated that following the introduction of the integrated acceleration strategy, the solver demonstrated improved strong scaling characteristics and achieved a speedup of up to 30 times in two-dimensional simulations of Sandia flame D. The numerical predictions for temperature and species distribution closely matched the experimental trends, confirming the prediction accuracy of the solver. Furthermore, the two-dimensional validation results indicated that the application of the integrated acceleration strategy significantly enhanced computational efficiency with minimal impact on predictive accuracy, laying the foundation for subsequent three-dimensional numerical analysis.</p> <p>A subsequent three-dimensional numerical study examined combustion characteristics in the 10-kW ammonia co-combustion furnace under various secondary injection configurations and ammonia co-firing ratios. The conjugate heat transfer model, accounting for solid and reacting flow regions, was employed to accurately represent thermal boundary conditions at the furnace walls. Regarding the computational acceleration achieved through the integrated acceleration strategy, while the computational acceleration was reduced due to increased communication overhead, a speed-up of 7.06 times was still observed. However, as the size of the reaction mechanism increased, the introduction of the SpeedCHEM chemistry solver facilitated more effective computational acceleration. Additionally, the numerical predictions closely replicated experimental trends, effectively capturing NO emission characteristics within the ammonia co-combustion furnace.</p> <p>Regarding the influence of different parameters in the secondary injection system, results indicate that at lower ammonia co-firing ratios, with a constant total air ratio of 1.2, simply reducing the primary air ratio to enhance fuel-rich combustion in the primary air zone does not result in a linear decrease in NO emissions. Instead, NO emissions exhibit a V-shaped trend, reaching a minimum when the primary air ratio equals 0.6. Regarding the influence of the air nozzle distance and the secondary nozzle diameter, results found that increasing their values effectively promotes NO reduction reactions within the furnace, thereby reducing NO emissions.</p> <p>Under different ammonia co-firing ratios, as the co-firing ratio increased from 0% to 100%, NO emissions at the furnace outlet first increased and then decreased, peaking at a co-firing ratio of 50%. Fuel NO began to dominate NO formation upon the introduction of ammonia for co-firing, while thermal NO became negligible at co-firing ratios higher than 40%. Further analysis of the rate of production of NO revealed that at higher ammonia co-firing ratios, ammonia acts both as a reducing agent and as a fuel for heat release. These findings provide valuable insights for the development and industrial application of ammonia-based combustion systems.</p>	

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 ( YANG YINAN )	
	(職)
論文審査担当者	主査 教授
	副査 教授
	副査 教授
	副査 講師
	氏 名
	赤松 史光
	芝原 正彦
	津島 将司
	堀 司

## 論文審査の結果の要旨

近年、化石燃料の燃焼により排出される二酸化炭素の削減のため、アンモニアの直接燃焼利用が注目されている。アンモニアの直接燃焼利用の普及のためには、燃焼時にアンモニア中の窒素から生成される一酸化窒素 (Fuel NO) の抑制が不可欠となる。Fuel NO の低減には、酸化剤を 2 段に分けて供給して燃焼させる手法 (2 段燃焼) が有効である。ノズル形状や燃料の供給条件など、幅広い実験パラメータの最適値を決定するために数値計算が有効であるが、燃焼炉を対象とした高精度の計算手法は未だ開発されていない。本博士論文において、申請者はアンモニア燃焼の現象把握および予測のため、アンモニア燃焼炉の解析に適した数値解析手法を提案している。

第 1 章では、アンモニア燃焼が注目される背景やアンモニア燃焼における低 NO<sub>x</sub> 化手法、従来の数値計算手法についてまとめ、アンモニア燃焼炉における 2 段燃焼の数値予測手法の確立に関する意義を述べている。

第 2 章では、支配方程式、モデル (乱流、燃焼、輻射など)、固体流体熱連成、反応機構、計算高速化手法など、数値計算手法についてまとめている。アンモニア燃焼炉における排気 NO の予測には、Fuel NO の予測に重要となるアンモニアの反応機構に加えて、燃焼炉内の温度分布を予測するために輻射と固体流体熱連成の考慮が必要であることを指摘している。これらの計算は一般的に計算負荷が高く、燃焼炉の定常状態を予測するためには計算時間の低減手法が必要である。そこで、本博士論文では、計算の時間刻みに LTS (Local Time Step) を適用した定常計算、反応計算のための常微分方程式 (ODE) ソルバの高速化による計算速度の高速化手法を提案している。

第 3 章では、ベンチマーク火炎 (Sandia Flame) を対象として、提案した計算手法の精度と計算速度について検討している。乱流強度の異なる三種類の火炎に対して計算を実施し、温度や化学種の空間分布を概ね予測できることを示している。また、今回提案した ODE ソルバ、並列計算の負荷を平準化するダイナミックロード・バランシング、OpenMP の併用により、計算精度を維持したまま従来手法に比べて約 30 倍の計算速度の高速化を実現している。

第 4 章では、提案した計算手法を用いて 10kW のアンモニア燃焼炉を対象に 3 次元数値解析を実施している。計算は流体領域に加えて、バーナ、耐熱材、耐火材周りの鋼鉄部などの固体部も考慮した計算格子を作成し、流体と固体間の熱移動について考慮している。まず、同一の計算資源において従来手法と比べて、計算速度が 10 倍程度に高速化されることを示している。アンモニア混焼率 10%、空気比 1.2 の条件において、一次空気と二次空気の割合、二次空気のノズル位置とノズル直径をパラメータとした計算を実施し、排気 NO 濃度の実験結果を定性的に再現できることを示している。さらに、計算結果を基に反応経路の解析を行い、Fuel NO の生成領域と還元領域、Fuel NO の生成と消滅の反応経路などについて明らかにしている。

第 5 章では、10kW のアンモニア燃焼炉を対象にアンモニアの混焼率の影響について考察している。排気 NO 濃度の計算値は実験値よりも高くなる一方で、基準値で正規化した排気 NO 濃度は実験値とよく一致し、本計算手法の有用性を示している。さらに、窒素タグ付きのアンモニア反応機構を用いた計算を実施して、空気中の窒素を起源とするサマル NO と燃料中の N を起源とする Fuel NO を分離して計算し、混焼率が 10 % の場合はメタンの燃焼によって高温部が形

成されサーマル NO が排出されるが、混焼率が 50%を超えると排出される NO はほとんど Fuel NO であることを明らかにしている。

第 6 章では本論文の結論として、反応機構、輻射、固体流体熱連成の考慮および計算高速化を実施した本博士論文での提案手法が、アンモニア燃焼炉における排気 NO 濃度の予測に有用であることを示している。さらに将来的には、100kW 以上の実機スケールの燃焼炉への適用が期待されることにも言及している。

以上のように、本博士論文は反応機構、輻射、固体流体熱連成を含む計算手法を提案し、当該計算手法がアンモニア燃焼炉での一次空気と二次空気の割合、二次空気ノズル位置、混焼率を変更した幅広い条件での排気 NO 濃度の予測に有用であることを示している。さらに、流体領域に加えて固体領域も考慮して燃焼計算を実現する本計算手法は様々な燃焼器の火炎や排気エミッションの予測に適用可能であることから、燃焼工学の発展に大きく貢献することが期待できる。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。