

doi: 10.11835/j.issn.1000-582X.2025.07.008

引用格式:李天喜,陈朝阳,康琦,等.二甲醚掺混对氨/空气预混燃烧特性的影响[J].重庆大学学报,2025,48(7): 85-93.



二甲醚掺混对氨/空气预混燃烧特性的影响

李天喜,陈朝阳,康琦,张达

(长安大学能源与电气工程学院,西安 710064)

摘要:为了改善氨在内燃机中的着火燃烧性能,将其与反应活性高的二甲醚(DME)燃料掺混不失为一种有效措施。文中采用数值模拟方法研究了 $\text{NH}_3/\text{DME}/\text{空气}$ 预混层流火焰的燃烧过程,分析了DME掺混对氨层流燃烧速度、化学反应路径及一氧化氮(NO)生成特性的影响规律。仿真结果表明,随着DME掺混比的增大, $\text{NH}_3/\text{DME}/\text{空气}$ 预混合气的层流燃烧速度和绝热火焰温度显著提升,DME掺混引起的自由基浓度的增大是导致混合燃料层流燃烧速度增大的主要因素;随着DME掺混比的增大,火焰中 NO 归一化浓度显著增大,当掺混80% DME时, NO 的归一化浓度达到了50%,路径分析表明,DME掺混不利于氨中氮元素向 N_2 的转化,会引起 NO 排放增加;与DME掺混燃烧时,氮族基元反应的敏感性明显降低,燃烧过程以氢族和碳族基元反应为主导。

关键词:氨;反应动力学;二甲醚掺混;层流燃烧速度;反应路径

中图分类号:TK411.2

文献标志码:A

文章编号:1000-582X(2025)07-085-09

Effect of dimethyl ether addition on NH_3/air premixed flames

LI Tianxi, CHEN Zhaoyang, KANG Qi, ZHANG Da

(School of Energy and Electrical Engineering, Chang'an University, Xi'an 710064, P. R. China)

Abstract: To improve the ignition and combustion performance of NH_3 in engines, blending it with the high-reactivity-fuel dimethyl ether (DME) is an effective strategy. This study conducts simulations of $\text{NH}_3/\text{DME}/\text{air}$ premixed laminar flames to investigate the effects of DME addition on key combustion characteristics, including laminar flame speed, reaction pathways, and NO formation. The results show that both the adiabatic flame temperature and the laminar flame speed increase significantly with higher DME blending ratios. A strong correlation is observed between laminar flame speed and the concentration of reactive free radicals, suggesting that the increased radical concentration due to DME is the main contributor to the enhanced flame speed. Furthermore, the normalized NO concentration in the flame rises significantly with increasing DME content, reaching approximately 50% when the DME blending ratio reaches 80%. Reaction pathway analysis indicates that DME addition inhibits the conversion of nitrogen species to N_2 , thereby leading to increased NO emissions. Sensitivity analysis shows that DME significantly alters the dominant elementary reactions. As the DME ratio

收稿日期:2024-12-30

基金项目:国家自然科学基金资助项目(51506010);陕西省自然科学基金资助项目(2020JM-243)。

Supported by National Natural Science Foundation of China (52506010), and Natural Science Foundation of Shaanxi Province (2020JM-243).

作者简介:李天喜(1999—),男,硕士研究生,主要从事零碳低碳燃料燃烧研究。

通信作者:陈朝阳,女,副教授,硕士生导师,(E-mail) zhychen@chd.edu.cn。

increases, the sensitivity of nitrogen-group reactions considerably declines, while hydrogen- and carbon-group reactions increasingly govern the combustion process of the blended fuel.

Keywords: ammonia; reaction kinetics; dimethyl ether blending; laminar flame speed; reaction pathways

随着化石能源的开采和利用,温室气体排放引起的全球气候问题成了世界性的重要议题。中国明确提出CO₂排放力争于2030年前达到峰值,争取2060年前实现碳中和。减少交通领域碳排放能有效应对气候变化、助力实现碳达峰碳中和目标具有重要意义^[1]。氨(NH₃)是一种无碳储氢燃料^[2],含氢质量分数为17.6%,易于液化,便于储存和运输,被认为是一种有前途的碳中和燃料^[3-4]。与氢能相比,氨燃料还具有单位储能成本低、体积能量密度高、安全可靠等优点^[5-6];但氨反应活性低,点火温度高且燃烧速度慢,直接燃烧利用存在一定困难^[7],通常采用与其他活性物质掺烧的方法来改善其燃烧性能^[8-10]。二甲醚(DME,分子式CH₃OCH₃)是一种低碳含氧燃料,十六烷值高,着火性能好且来源广泛,是良好的洁净替代燃料和燃料活性添加剂^[11-12]。近年来,有学者将氨/二甲醚混合燃料应用在压燃式发动机上,探索氨作为发动机替代燃料的可行性^[13-15]。研究发现,二甲醚掺混能够改善氨燃料的着火燃烧性能,拓宽氨燃料在发动机上的运行范围,但氮氧化物(NO_x)的排放较传统燃料有所升高。

层流火焰速度是混合气体的基本特性参数之一,是构建和验证燃料化学反应机理的重要依据^[16]。近年来,学者对氨及其混合燃料的层流燃烧特性进行了研究。Yin等^[17]在定容燃烧弹中测量了高温高压下NH₃/DME混合燃料层流燃烧速度,发现氨基自由基(NH₂)的氧化主要以含碳物质为主导,50%的NH₂通过NH₂+CH₂O=NH₃+CHO和NH₂+CH₃=CH₃NH₂反应被消耗;Dai等^[18]利用快速压缩机装置测量了NH₃/DME混合燃料的着火延迟时间,发现掺混2%~5%DME的混合燃料,在当量比 $\phi=1.0$ 和 $\phi=2.0$ 时,均出现了两阶段着火现象,DME的低温氧化放热在NH₃/DME混合燃料自着火过程中有着重要的作用。还有研究致力于NH₃/DME混合燃料化学反应机理的构建与优化^[19-22]。

全面提升氨燃料的燃烧与排放性能,了解二甲醚添加对氨燃料燃烧的影响规律及作用机理,对宽广初始条件下的NH₃/DME混合燃料开展系统的基础燃烧研究非常必要。文中利用化学反应动力学模拟方法,对初始温度为298 K,初始压力为0.1 MPa时,宽掺混比(0~100%)和当量比(0.7~1.5)条件下的NH₃/DME/空气预混合气的层流燃烧特性进行研究,系统分析了二甲醚掺混对氨燃料燃烧过程的影响规律和动力学机制,重点考虑二甲醚掺混对氨燃料燃烧反应路径及NO_x生成规律的影响。

1 化学反应机理的选择与验证

近年来,不少学者对NH₃/DME混合燃料的化学反应机理开展了研究。Glarborg等^[23]构建了考虑碳族与氮族元素交叉反应的NH₃/DME化学反应机理,优化了NO相关反应的速率常数与热化学参数,该机理经过着火延迟期和物质浓度的验证,但在常温常压条件下对层流燃烧速度的预测能力欠佳。Meng等^[19]在Glarborg研究的基础上,结合Burke等^[24]开发的二甲醚低温氧化机理,同时耦合Dai等^[18]提出的机理中NH₃和DME的相关反应,构建了适用于宽温度范围的NH₃/DME混合燃料机理(221组分,1 597反应)。Xiao等^[20]提出了详细的NH₃/DME混合机理(102组分,594反应),并基于层流燃烧速度和着火延迟期实验结果对机理的可靠性进行了验证。Issayev等^[21]在Shrestha等^[25]所提出机理的基础上,对NH₃/DME混合燃料化学反应机理进行了改进,并对改进后的机理开展了广泛的实验数据验证。

文中采用化学反应动力学模拟软件Chemkin II中的PREMIX模块,对初始温度 $T_0=298$ K、初始压力 $p_0=0.1$ MPa时的NH₃/DME/空气混合气的层流燃烧速度进行了模拟计算。将基于Meng机理^[19]、Issayev机理^[21]和Xiao机理^[20]的模拟预测结果与Xiao等^[20]的实验值进行了对比,如图1所示。对比后发现,Issayev机理的预测结果高于其他2种机理的预测值和实验值,且在二甲醚掺混比增大时误差增大;Xiao机理的预测结果与实验值一致性较好,但过度预测了贫燃料侧混合物的层流燃烧速度。Meng机理的预测结果在多个掺混比下均能与实验值高度吻合,表现出了更好的预测能力。因此,文中选用Meng机理对NH₃/DME/空气预混层流燃烧

特性进行动力学分析。为了方便表述,定义 DME 掺混比 X_{DME} 为二甲醚在混合燃料中的体积分数。

2 结果与分析

2.1 层流燃烧速度和绝热火焰温度

层流燃烧速度是混合气体重要宏观燃烧特性参数。图 1 所示为 $T_0=298\text{ K}$ 、 $p_0=0.1\text{ MPa}$ 时,不同二甲醚掺混比下, $\text{NH}_3/\text{DME}/\text{空气}$ 混合气的层流燃烧速度模拟值随当量比 ϕ 的变化关系。由图可知,纯 NH_3 燃烧时,层流燃烧速度较小,随着二甲醚掺混比的增大,混合燃料的层流燃烧速度明显增大,且在 $\phi=1.1$ 附近达到最大。图 2 给出了不同当量比下,混合燃料层流燃烧速度随掺混比变化的拟合关系,可以看出,3 个当量比条件下,混合燃料的层流燃烧速度随 DME 掺混比的增加呈线性增加的趋势。在当量比为 0.8 时的稀混合气条件下,拟合直线的斜率较小;随着当量比逐渐增大,拟合线斜率也随之增大,说明二甲醚掺混对较浓混合气燃烧过程的促进效果更加明显。

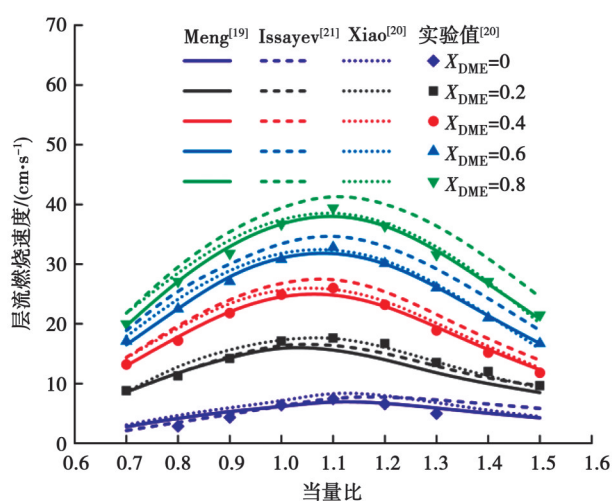


图 1 不同 DME 掺混比下层流燃烧速度预测结果与实验值对比($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$)

Fig. 1 Comparison of flame speed by simulations and experiments at different DME mixing ratios ($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$)

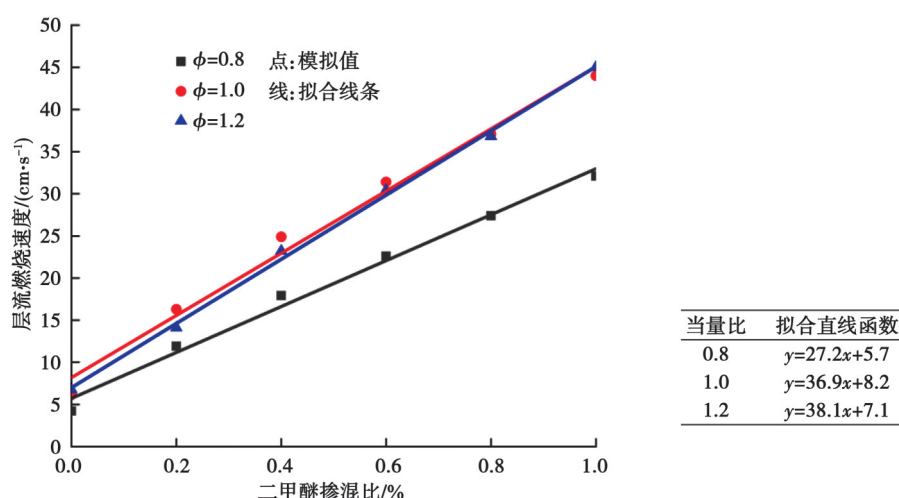


图 2 不同当量比条件下层流燃烧速度随掺混比的变化规律($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$)

Fig. 2 Variation of flame speed with DME mixing ratio at different equivalence ratios($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$)

燃烧速度受燃烧温度的影响很大。图 3 所示为不同 DME 掺混比时, $\text{NH}_3/\text{DME}/\text{空气}$ 混合气绝热火焰温度随当量比的变化关系。可以看出,绝热火焰温度随当量比和掺混比的变化规律与层流燃烧速度一致,纯氨

燃烧时绝热火焰温度较低,对应于较小的层流燃烧速度;随着DME掺混比的增大,绝热火焰温度逐渐升高,层流燃烧速度也随之增大,表明在较浓混合气条件下,DME掺混对绝热火焰温度及层流燃烧速度的影响更为显著;另一方面,温度的升高也可能引起 NO_x 生成量的增加,火焰面中NO的浓度随DME掺混比的变化规律将在后续内容中重点讨论。

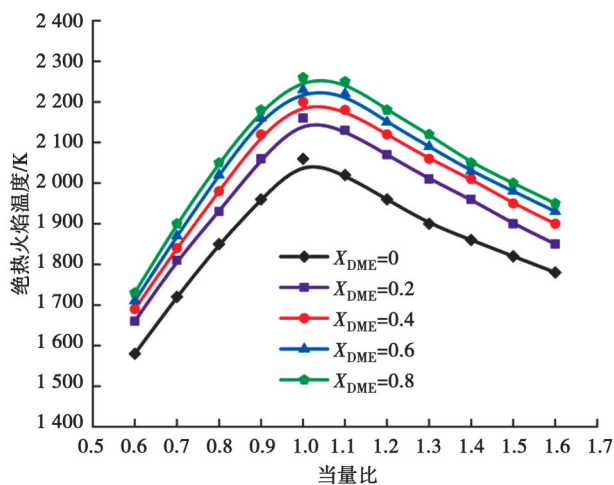


图3 不同DME掺混比下绝热火焰温度模拟值随当量比的变化规律($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$)

Fig. 3 Variation of predicted adiabatic flame temperature with equivalence ratio at different DME mixing ratios ($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$)

2.2 主要自由基浓度分布

链式反应理论认为,燃料燃烧过程和层流燃烧速度强烈依赖于混合气中活性自由基的浓度。H、O、OH自由基是最为活跃的活性自由基,对火焰发展的影响也最大。图4为模拟得到的 $T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$, $\phi=0.8$ 时, $\text{NH}_3/\text{DME}/\text{空气}$ 火焰中H、O、OH自由基摩尔分数随火焰距离的变化关系。可以看出,3种掺混比条件下,火焰中OH自由基的摩尔分数均最大,H自由基次之,O浓度最小,随着DME掺混比的增加,3种自由基的摩尔分数均呈现增大趋势,导致氨的层流燃烧速度加快。图5给出了火焰面上自由基浓度峰值随DME掺混比的变化关系,可以看出随着掺混比的增大,3种自由基浓度峰值均逐渐增大,3种自由基摩尔分数峰值之和随DME掺混比的变化趋势与层流燃烧速度的变化趋势相同,二甲醚掺混引起了混合燃料火焰中自由基浓度增大,从而导致层流燃烧速度增大,进一步说明了火焰中自由基浓度对 $\text{NH}_3/\text{DME}/\text{空气}$ 混合气层流燃烧速度及燃烧过程的影响显著。

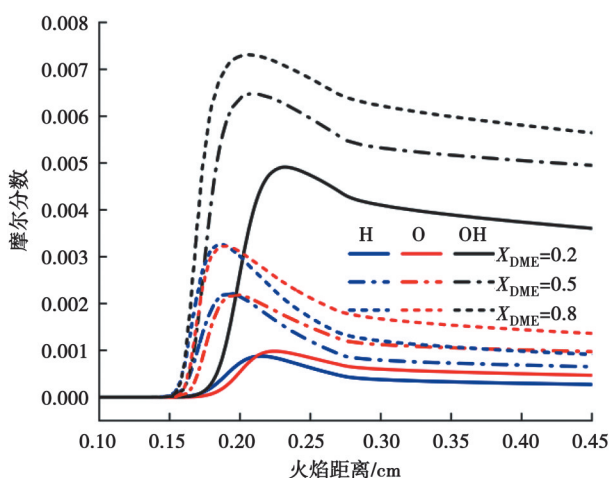


图4 不同DME掺混比下H、O、OH自由基摩尔分数模拟值随火焰距离的变化规律($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$, $\phi=0.8$)

Fig. 4 Predictions of H, O and OH mole fraction at different DME mixing ratios($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$, $\phi=0.8$)

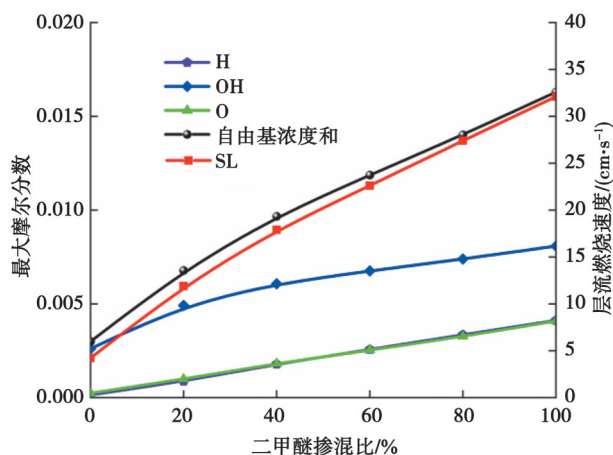
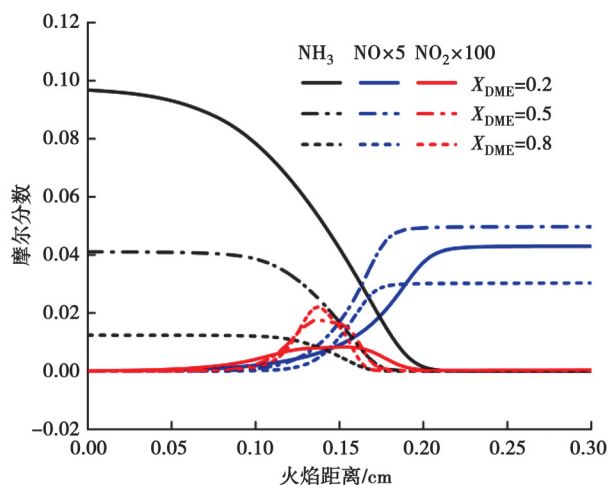


图5 层流燃烧速度与自由基摩尔分数峰值随DME掺混比的变化规律($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$, $\phi=0.8$)

Fig. 5 Variation of flame speed and peak values of radical mole fraction with DME mixing ratios
($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$, $\phi=0.8$)

2.3 氮氧化物浓度分布

含氮燃料燃烧过程中,不可避免地会产生 NO_x 排放,探究不同掺混比下 NO_x 的浓度分布具有重要意义。图6给出了模拟得到的 $T_0=298\text{ K}$ 、 $p_0=0.1\text{ MPa}$ 、 $\phi=0.8$ 时,不同DME掺混比下 NH_3 、 NO 和 NO_2 的摩尔分数随火焰距离的变化关系。由图可知,在 NH_3/DME 火焰中,相比于 NO 、 NO_2 浓度很小;随火焰距离的增大, NO_2 的摩尔分数呈现先增大后减小的趋势, NO 的摩尔分数从一定火焰位置开始逐渐增大,在 NH_3 浓度减小为0的火焰位置时,达到最大值后保持稳定,表明 NO_2 为燃烧过程的中间物种且浓度较小, NH_3/DME 燃烧生成的氮氧化物主要是 NO 。随着二甲醚掺混比的增大, NO 的摩尔分数先增大,但当掺混比由50%增加到80%时, NO 的摩尔分数又减小,这主要是由于 NH_3 在混合燃料中占比下降,导致氮原子浓度减小。

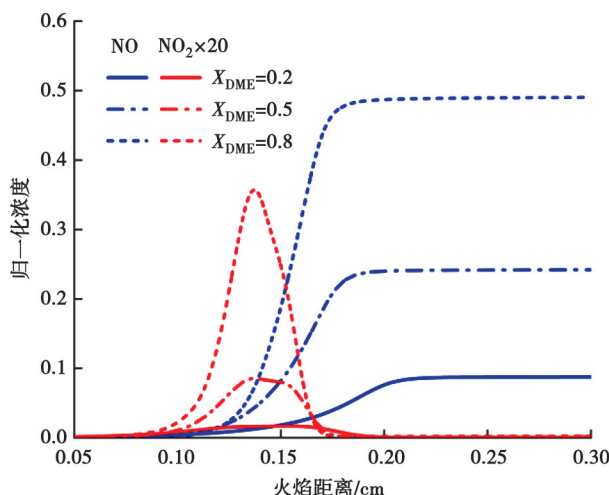


注: 图中 NO 和 NO_2 曲线分别为放大5倍和100的结果

图6 不同DME掺混比下 NH_3 、 NO 和 NO_2 摩尔分数随火焰距离的变化规律($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$, $\phi=0.8$)

Fig. 6 Variation of mole fraction of NH_3 , NO and NO_2 with flame distance under different DME mixing ratios
($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$, $\phi=0.8$)

为了排除不同掺混比下氨燃料总含量的不同对 NO_x 浓度的影响,定义 NO 、 NO_2 的归一化浓度为 NO 、 NO_2 的摩尔分数与 NH_3 的初始摩尔分数之比。不同二甲醚掺混比下, NO 和 NO_2 的归一化浓度随火焰距离的变化如图7所示,可以看出,随着二甲醚掺混比的增大, NO 和 NO_2 的归一化浓度增加,且掺混比越大,增加幅度越大。当DME掺混比为80%时, NO 的归一化浓度达到了50%,这是因为随着二甲醚的加入,自由基池中 H 、 OH 、 O 自由基增多,加速了含氮基团氧化为 NO 的进程,导致 NO 浓度升高。



注：图中NO₂曲线为放大20倍的结果

图7 不同DME掺混比下NO、NO₂归一化浓度随火焰距离的变化规律($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$, $\phi=0.8$)

Fig. 7 Variation of normalized concentration of NO and NO₂ with flame distance under different DME mixing ratios ($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$, $\phi=0.8$)

2.4 反应路径分析

为了明确二甲醚掺混对氨燃料燃烧过程及NO生成的影响规律,文中对不同掺混比预混火焰中燃料的化学反应路径进行了对比分析。图8给出了 $T_0=298\text{ K}$ 、 $p_0=0.1\text{ MPa}$ 、 $\phi=0.8$ 时,不同DME掺混比(0%、20%、50%、80%、100%)条件下的NH₃/DME/空气预混火焰中NH₃和DME的主要消耗路径。可以看出,二甲醚主要通过脱氢与直接裂解反应消耗,其中脱氢反应路线占主导地位。

脱氢: $\text{CH}_3\text{OCH}_3 + (\text{H}/\text{OH}/\text{O}) \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2 + (\text{H}_2/\text{H}_2\text{O}/\text{OH})$

裂解: $\text{CH}_3\text{OCH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{CH}_3$

二甲醚脱氢产物 CH_3OCH_2 经 β 裂解生成甲醛(CH_2O)和甲基, CH_2O 经过2次脱氢生成CO,CO最终被OH氧化为CO₂。

混合燃料中二甲醚的反应路径与纯二甲醚燃烧时基本相同,掺混比的不同仅会导致其起始脱氢与裂解反应所占比重发生变化。掺混燃烧时,受氨的脱氢反应竞争,DME脱氢反应比重下降,裂解反应比重增加;纯DME燃烧时,其脱氢和裂解反应占比分别为97.4%和2.6%,添加20%DME混合气时,二甲醚脱氢反应占比下降为85.4%,裂解反应占比上升至14.6%。二甲醚脱氢产物的后续反应路径几乎不受燃料掺混比变化的影响,但由于氨燃料的引入增加了含氮基团参与的反应(如HNO和NO₂与CH₃的反应,NO与HCO的反应),导致NO₂与CH₃反应生成NO的占比在DME掺混比为20%~80%时都超过了10%。由此可知,碳族和氮族的交叉反应对整个燃烧过程以及NO的排放具有重要的影响。

氨的消耗起始于燃料分子与活性自由基(H、OH、O)的脱氢反应。随后,其脱氢产物NH₂通过相继脱氢(路径1)、氧化(路径2)或与NO反应(路径3)消耗,最终生成N₂。氨的氧化过程可以为3个主要通道,其中路径1和2为主要反应通道,2条路径在不同掺混比下的占比均在30%以上。

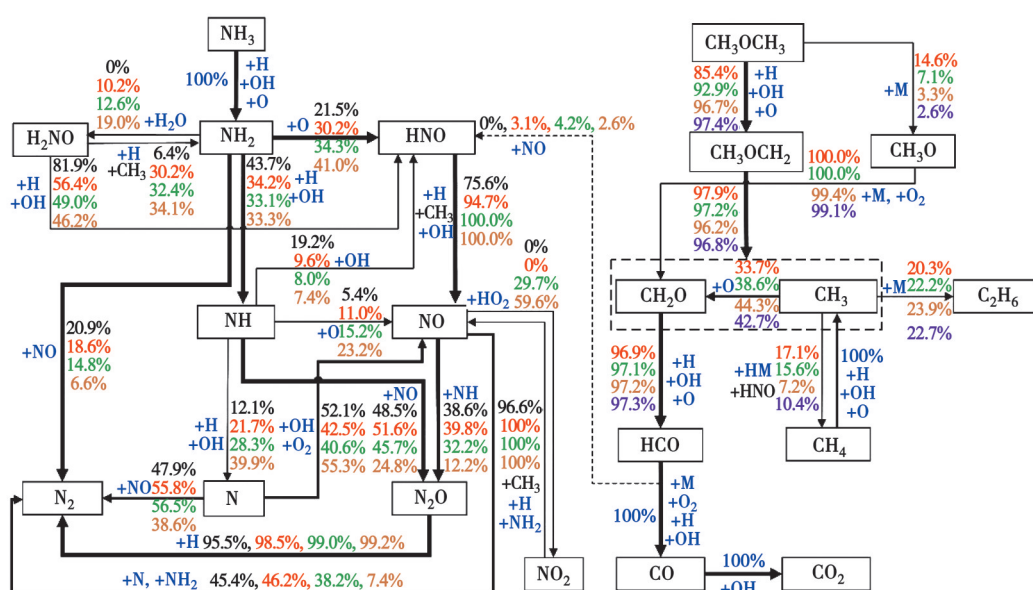
路径1: $\text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2 \rightarrow \text{NH} \rightarrow (\text{N}/\text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{N}_2)/[\text{NO} \rightarrow (\text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{N}_2)/\text{N}_2]$

路径2: $\text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2 \rightarrow (\text{H}_2\text{NO} \rightarrow \text{HNO})/\text{HNO} \rightarrow \text{NO} \rightarrow (\text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{N}_2)/\text{N}_2$

路径3: $\text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2 \rightarrow \text{N}_2$

由自由基摩尔分数的分析可知,随着二甲醚掺混比的增大,火焰中自由基浓度显著增大,这会促进氨的起始脱氢反应发生,提高氨的消耗反应速率,使层流火焰速度增大。DME掺混后,路径1中NH₃的次级脱氢反应($\text{NH}_2 \rightarrow \text{NH}$)占比有所下降,但掺混比进一步增加时变化不大;次级脱氢产物NH的后续反应占比随DME掺混变化较大,其中生成NO的反应链($\text{NH} \rightarrow \text{NO}$ 、 $\text{NH} \rightarrow \text{N} \rightarrow \text{NO}$)占比增大,生成N₂的反应链($\text{NH} \rightarrow \text{N} \rightarrow \text{N}_2$ 、 $\text{NH} \rightarrow \text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{N}_2$)占比在掺混20%DME时有所增大,而当掺混比进一步增加时,又逐渐减小,表明20%

DME 掺混,有利于 NH_3 经路径 1 通道向 N_2 转化,进一步增大掺混比则可能引起 NO 生成量的增加;路径 2 中的关键反应步骤 $\text{NH}_2 \rightarrow \text{HNO}$ 和 $\text{NH}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{NO}$ 的占比均随 DME 掺混比的增大而增大,分别从纯氨时的 21.5% 和 0 提升至 DME 掺混比为 80% 时的 41.0% 和 19.0%,该路径的主要中间物种 HNO 几乎全部转化为 NO , NO 进一步与含氮基团反应最终转化为 N_2 或被 HO_2 氧化生成 NO_2 。当 DME 掺混比为 20% 时, NO 的各反应通道占比与纯氨燃烧时差别不大,但当 DME 掺混比进一步增加时, NO 向 N_2 转化的反应链($\text{NO} \rightarrow \text{N}_2$ 、 $\text{NO} \rightarrow \text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{N}_2$)占比显著下降,而 NO 氧化生成 NO_2 的反应占比却显著增加,原因在于随着 DME 掺混比的增加,自由基池中含氮基团的比例下降, HO_2 自由基浓度上升,表明 DME 掺混比大于 20% 后,混合燃料的 NO 排放可能显著增加,必须考虑一定的净化措施;路径 3 在氨的反应过程中占比较小,随着 DME 掺混比由 0 增大到 80%,路径 3 中 $\text{NH}_2 \rightarrow \text{N}_2$ 的反应占比由 20.9% 降低至 6.6%。



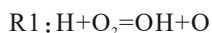
注:黑色—DME掺混比0%;红色—DME掺混比20%;绿色—DME掺混比50%;橙色—DME掺混比80%;紫色—DME掺混比100%

图 8 不同 DME 掺混比下 $\text{NH}_3/\text{DME}/\text{空气}$ 预混火焰中 NH_3 和 DME 的燃烧反应路径

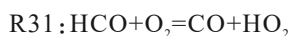
Fig. 8 Reaction pathways of NH_3 and DME in premixed $\text{NH}_3/\text{DME}/\text{air}$ flames under different DME mixing ratio

2.5 敏感性分析

图 9 所示为 $T_0=298\text{ K}$ 、 $p_0=0.1\text{ MPa}$ 、 $\phi=0.8$ 时,不同 DME 掺混比(0%、20%、50%、80%)条件下混合气的质量流量敏感性系数。敏感性系数为正值表示,当该基元反应速率增大时,火焰传播速度增大,表明该反应对混合燃料的燃烧起促进作用;相反,敏感性系数为负值表明起抑制作用。对混合燃料的燃烧过程起促进作用的反应主要有



其中,R1 反应在所有掺混比混合气燃烧过程中均具有最高的敏感度,且敏感性系数随 DME 掺混比的增大而降低;R27 和 R30 反应的敏感性系数随 DME 掺混比的增大而增大,这是因为随着 DME 掺混比的增大,火焰中含碳组分浓度增加,含碳组分的氧化反应对整个燃烧过程的影响越来越显著。另外,DME 掺混引起火焰中总自由基浓度增加,使得链分支反应 R1 的敏感性系数减小,且掺混 20% DME 时,降低幅度最大。对混合燃料的燃烧过程起抑制作用的基元反应主要有:



R9 和 R31 反应消耗了 H 和 HCO,生成了相对稳定的 HO_2 ,属于链终止反应,抑制了反应的进行。当 DME

掺混比为20%时,含氮物质的相关基元反应R737和R803的敏感性系数显著减小。值得注意的是,在DME掺混比为80%时,基元反应R803对燃烧的促进作用转变为抑制作用,说明含氮基团对反应过程的影响相对减弱,表明了碳族基团对活性自由基的争夺能力强于氮族,随着DME掺混比的增大,燃烧反应越来越受碳族反应主导。这一发现与Issayev等^[21]的观点相一致,即随着DME掺混比的增大,大多数氮族基元反应的敏感性均存在降低的趋势。

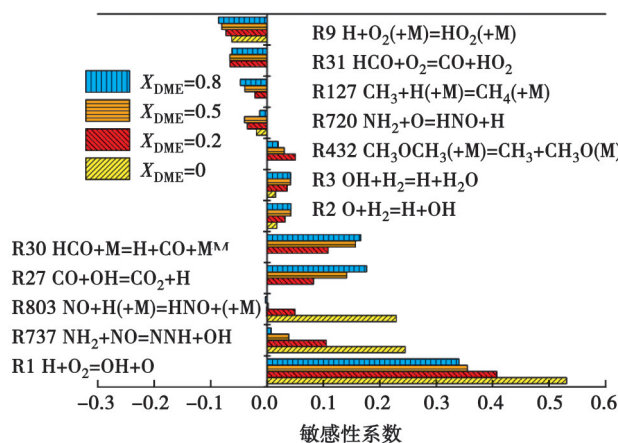


图9 不同DME掺混比下质量流量敏感性分析($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$, $\phi=0.8$)

Fig. 9 Sensitivity analysis of mass flow rate under different DME mixing ratios($T_0=298\text{ K}$, $p_0=0.1\text{ MPa}$, $\phi=0.8$)

3 结 论

文中使用化学反应动力学模拟软件Chemkin II,对初始温度为298 K、初始压力为0.1 MPa、当量比为0.7~1.5条件下的 $\text{NH}_3/\text{DME}/\text{空气}$ 混合层流火焰进行了数值模拟,分析了二甲醚掺混对混合物层流燃烧速度、火焰结构、NO生成路径等的影响规律,主要结论如下。

- 1)混合物的层流燃烧速度随着二甲醚掺混比的增大而增大,且在较浓混合气时增大的幅度更大。
- 2)随着二甲醚掺混比的增大,火焰中H、O、OH自由基摩尔分数增大,混合物层流燃烧速度与摩尔分数浓度密切相关,二甲醚掺混引起的自由基池浓度的增大是层流燃烧速度增大的主要原因。
- 3)随着二甲醚掺混比的增大,火焰中NO的归一化浓度显著增大,当DME掺混比为80%时,NO的归一化浓度达到了50%。路径分析也表明,高比例二甲醚掺混不利于氨燃料燃烧中氮元素向 N_2 的转化,会导致NO排放增加。
- 4)二甲醚掺混显著影响了主要基元反应的敏感性系数,当DME掺混比为20%时,氮族基元反应的敏感性明显降低,混合物燃烧过程中碳族基元主导着燃烧过程的进行。

参考文献

- [1] 马冬, 窦广玉, 彭岷. 我国机动车碳减排潜力分析及建议[J]. 世界环境, 2023(3): 56-59.
- [2] Ma D, Dou G Y, Peng D. Analysis of carbon emission reduction potential of motor vehicles in China and the related recommendations[J]. World Environment, 2023(3): 56-59. (in Chinese)
- [3] Alturaiifi S A, Mathieu O, Petersen E L. An experimental and modeling study of ammonia pyrolysis[J]. Combustion and Flame, 2022, 235: 111694.
- [4] Lesmana H, Zhang Z Z, Li X M, et al. NH_3 as a transport fuel in internal combustion engines: a technical review[J]. Journal of Energy Resources Technology, 2019, 141(7): 070703.
- [5] Cardoso J S, Silva V, Rocha R C, et al. Ammonia as an energy vector: current and future prospects for low-carbon fuel applications in internal combustion engines[J]. Journal of Cleaner Production, 2021, 296: 126562.
- [6] Kang L W, Pan W G, Zhang J K, et al. A review on ammonia blends combustion for industrial applications[J]. Fuel, 2023, 332: 126150.

- [6] 高虎, 刘凡, 李海. 碳中和目标下氨燃料的机遇、挑战及应用前景[J]. 发电技术, 2022, 43(3): 462-467.
Gao H, Liu F, Li H. Opportunities, challenges and application prospects of ammonia fuel under the target of carbon neutrality[J]. Power Generation Technology, 2022, 43(3): 462-467. (in Chinese)
- [7] Lhuillier C, Brequigny P, Lamoureux N, et al. Experimental investigation on laminar burning velocities of ammonia/hydrogen/air mixtures at elevated temperatures[J]. Fuel, 2020, 263: 116653.
- [8] 许焕焕, 葛一, 李强, 等. 氨燃料及应用技术研究进展[J]. 东北电力大学学报, 2022, 42(2): 1-13.
Xu H H, Ge Y, Li Q, et al. Research progress of ammonia fuel and application technology[J]. Journal of Northeast Electric Power University, 2022, 42(2): 1-13. (in Chinese)
- [9] Okafor E C, Naito Y, Colson S, et al. Experimental and numerical study of the laminar burning velocity of CH_4 - NH_3 -air premixed flames[J]. Combustion and Flame, 2018, 187: 185-198.
- [10] Jin B Z, Deng Y F, Li G X, et al. Experimental and numerical study of the laminar burning velocity of NH_3/H_2 /air premixed flames at elevated pressure and temperature[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2022, 47(85): 36046-36057.
- [11] 陈朝阳, 耿莉敏, 巩静, 等. 掺氢对二甲醚预混层流燃烧特性的影响[J]. 西安交通大学学报, 2014, 48(6): 122-126.
Chen Z Y, Geng L M, Gong J, et al. Influence of hydrogen addition on combustion characteristics of premixed laminar dimethyl ether flames[J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2014, 48(6): 122-126. (in Chinese)
- [12] 李东昌, 汪映, 孟庆斌, 等. 二甲醚预混比对预混压燃发动机性能影响的试验研究[J]. 西安交通大学学报, 2013, 47(3): 48-52.
Li D C, Wang Y, Meng Q B, et al. Experimental study on effects of DME premixed ratio on performance of a PCCI engine[J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2013, 47(3): 48-52. (in Chinese)
- [13] Gross C W, Kong S C. Performance characteristics of a compression-ignition engine using direct-injection ammonia-DME mixtures[J]. Fuel, 2013, 103: 1069-1079.
- [14] Ryu K H, Zacharakis-Jutz G, Kong S C. Effects of fuel compositions on diesel engine performance using ammonia-DME mixtures[C]//SAE Technical Paper Series. SAE International, 2013: 1-6.
- [15] 丁梦豪, 胡以怀, 高雨颀, 等. 氨燃料在发动机中的应用研究[J]. 能源与节能, 2021(12): 163-165.
Ding M H, Hu Y H, Gao Y Q, et al. Application of ammonia fuel in engines[J]. Energy and Energy Conservation, 2021(12): 163-165. (in Chinese)
- [16] 胡二江, 黄佐华, 姜雪, 等. C1-C4烷烃预混层流燃烧与着火特性研究[J]. 工程热物理学报, 2013, 34(3): 558-562.
Hu E J, Huang Z H, Jiang X, et al. Kinetic study on laminar burning velocities and ignition delay times of C1-C4 alkanes[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2013, 34(3): 558-562. (in Chinese)
- [17] Yin G Y, Li J L, Zhou M, et al. Experimental and kinetic study on laminar flame speeds of ammonia/dimethyl ether/air under high temperature and elevated pressure[J]. Combustion and Flame, 2022, 238: 111915.
- [18] Dai L M, Hashemi H, Glarborg P, et al. Ignition delay times of NH_3 /DME blends at high pressure and low DME fraction: RCM experiments and simulations[J]. Combustion and Flame, 2021, 227: 120-134.
- [19] Meng X Y, Zhang M K, Zhao C H, et al. Study of combustion and NO chemical reaction mechanism in ammonia blended with DME[J]. Fuel, 2022, 319: 123832.
- [20] Xiao H H, Li H Z. Experimental and kinetic modeling study of the laminar burning velocity of NH_3 /DME/air premixed flames[J]. Combustion and Flame, 2022, 245: 112372.
- [21] Issayev G, Giri B R, Elbaz A M, et al. Ignition delay time and laminar flame speed measurements of ammonia blended with dimethyl ether: a promising low carbon fuel blend[J]. Renewable Energy, 2022, 181: 1353-1370.
- [22] Cai T, Zhao D. Enhancing and assessing ammonia-air combustion performance by blending with dimethyl ether[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2022, 156: 112003.
- [23] Glarborg P, Miller J A, Ruscic B, et al. Modeling nitrogen chemistry in combustion[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2018, 67: 31-68.
- [24] Burke U, Somers K P, O'Toole P, et al. An ignition delay and kinetic modeling study of methane, dimethyl ether, and their mixtures at high pressures[J]. Combustion and Flame, 2015, 162(2): 315-330.
- [25] Shrestha K P, Seidel L, Zeuch T, et al. Detailed kinetic mechanism for the oxidation of ammonia including the formation and reduction of nitrogen oxides[J]. Energy & Fuels, 2018, 32(10): 10202-10217.