

NH₃/H₂/DME 三元燃料层流预混火焰特性的 化学动力学研究

于长友¹, 郭亮¹, 孙万臣^{1,*}, 张浩¹, 程鹏¹, 林少典¹, 曾文鹏¹, 朱格男¹, 朱一默¹,
郭延安¹

(1. 吉林大学汽车仿真与控制国家重点实验室, 长春 130025)

Chemical kinetics study of laminar premixed flame characteristics for NH₃/H₂/DME ternary blends

YU Changyou¹, GUO Liang¹, SUN Wangchen^{1,*}, ZHANG Hao¹, CHENG Peng¹, LIN Shaodin¹,
ZENG Wenpeng¹, ZHU Genan¹, ZHU Yimo¹, GUO Yanan¹

(1. State Key Laboratory of Automotive Simulation and Control, Changchun 130025, China)

Abstract: As a new type of energy carrier and clean zero-carbon fuel, the application of ammonia is strategic significance for achieving carbon neutrality in power plants. However, ammonia combustion has the disadvantages of low flame stability, low reactivity, high auto-ignition temperature and high NO_x emission. For the above problems, a relevant study is carried out to characterize the combustion of ternary fuel laminar premixed flame basis for H₂/DME fueled ammonia combustion based on chemical kinetics. The chemical reaction mechanism of NH₃/H₂/DME ternary fuel was constructed and verified, and the mechanism of the influence of H₂/DME blending on the laminar flame characteristics of ammonia-fueled composite combustion at ambient temperature and pressure was investigated. The results show that H₂ focuses on increasing the OH concentration at the flame front of the composite combustion, while DME focuses on increasing the CH₂O concentration at the inner flame front, both can improve the flame stability. H₂ can shorten the ignition delay time of the composite combustion process and DME can reduce the autoignition temperature of the composite combustion, so the ternary fuel of NH₃/H₂/DME can realize the comprehensive improvement of the laminar flame stability, ignition delay time (IDT) and auto-ignition temperature of the composite combustion of ammonia. In addition, the key to suppressing NO_x generation during ammonia composite combustion is found to be the regulation of the concentration and reaction direction of NH and HNO in combination with reaction flow analysis.

摘要: 氨作为一种新型能源载体和清洁零碳燃料, 其应用对动力装置实现碳中和具有重要战略意义。但氨燃烧存在火焰稳定性低、反应活性低、自燃着火温度高及 NO_x 排放高等缺点。针对以上问题, 基于化学动力学对 H₂/DME 助燃氨燃烧的三元燃料层流预混火焰基础燃烧特性开展相关研究。构建并验证了 NH₃/H₂/DME 三元燃料化学反应机理, 探究了常温常压下 H₂/DME 掺混对氨燃料复合燃烧层流火焰特性的影响机制。研究结果表明 H₂ 侧重提高复合燃烧层流火焰锋面 OH 浓度, 而 DME 侧重提高内火焰面 CH₂O 浓度, 进而提高火焰稳定性。H₂ 可缩短复合燃烧过程的滞燃期而 DME 可降低复合燃烧的自燃着火温度, NH₃/H₂/DME 三元燃料可实现氨复合燃烧层流火焰稳定性、滞燃期及自燃着火温度的综合改善。此外, 结合反应流分析发现抑制氨复合燃烧过程中 NO_x 生成的关键是调控 NH 和 HNO 的浓度与反应方向。

关键词: NH₃/H₂/DME; 层流火焰速度; 滞燃期; 自燃着火温度; NO_x; 化学动力学

基金项目: 国家自然科学基金项目 (52202470), 吉林省自然科学基金项目 (20220101205JC)

作者简介: 于长友 (出生于 1998 年), 男, 博士生, 主要研究方向为燃料与燃烧优化控制,

E-mail: 1607918291@qq.com

孙万臣 (联系人), E-mail: sunwc@jlu.edu.cn

Key words: $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{DME}$; laminar flame speed; ignition delay time; autoignition temperature; NO_x ; chemical kinetics

中图分类号: TK91

文献标识码: A

0 概述

“双碳”目标进一步提高了对能源高效清洁利用的要求,碳中性及零碳燃料的使用是实现“双碳”目标的重要技术途径。氢作为一种高效清洁的零碳燃料在未来能源体系中将占据重要份额,但氢能源储存运输的技术和成本较高。氨含氢量 17.8% (by weight), 能量密度达 18.6 MJ/kg^[1]且分子中不含 C, 是一种理想的氢能源载体^[2], 氨易液化 (常温下-33℃或常温 1 MPa), 储存运输方便。氨作为燃料使用可追溯到上世纪 50 年代, 由于技术瓶颈等问题未得到大面积推广。随着对清洁能源研究的深入氨作为氢的能源载体重新被社会所重视。氨可通过成熟的 Haber-Bosch 工艺大量制取, 基础设施建设完善且生产成本较低^[3]。面向未来低碳及零碳目标, 电解水和 pressure swing adsorption (PSA) 制氨工艺涌现^[4], 近来基于可再生能源实现绿氨制取的生产工艺也逐渐得到发展^[5]。氨作为一种新型能源载体和清洁零碳燃料, 在未来具有广阔应用前景^[6,7]。然而, 氨在实际应用中存在火焰传播速度低^[8-10]、反应活性低^[11]、自燃着火温度高^[12]、火焰稳定性差^[13]及 NO_x 排放高^[14]等问题, 限制了氨燃料的推广, 改善氨燃料燃烧特性以寻求实现快速稳定清洁燃烧的途径仍需进一步研究。

层流火焰速度是衡量燃料燃烧特性并决定燃烧系统性能的重要参数之一^[15]。氨的层流火焰速度在大气环境中只有 7~8 cm/s^[10,16], 相比于已被广泛应用的 CH_4 和汽油表征燃料异辛烷 35 cm/s 较慢^[17,18]。而氢和二甲醚 (DME) 由于其反应活性高及燃料活性高的特性可被用来改善氨燃料的基础燃烧特性。此外, H_2 可从 NH_3 中分解获取,

DME 是一种可从生物质、废水等可再生能源中制取的含氧碳中性燃料, 因自燃着火温度低且十六烷值高 (50-60) 被视为一种理想代用燃料^[19], 且 DME 与 NH_3 互溶特性使其在实际应用中可与氨氢使用同一燃料储存供给装置^[20]。研究人分别开展了利用 H_2 和 DME 提升氨层流火焰速度的基础燃烧特性研究, 以期在实现碳中性及零碳排放的基础上探究提高氨燃烧速度的途径。Andreas Goldmann 等^[17]在温度 300~1100 K, 压力 0.1~25 MPa 下对 $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{N}_2/\text{air}$ 层流火焰燃烧特性开展了研究, 研究结果表明当掺氢比达氨的 0.8 倍时, 层流火焰速度可达到 CH_4/air 的水平, 该研究指明了提高氨层流火焰速度的方向。Ksenia N. Osipova 等^[21]在大气压力环境下探究了 H_2 对 NH_3 层流火焰速度的影响, 指出 NH_3/H_2 比为 55/45 时的层流火焰速度可以达到 46.52 cm/s, 该研究进一步指明了 H_2 对氨层流火焰速度提高的巨大潜力。DME 对氨层流火焰速度的改良效果也为研究人员所重视, Geyuan Yin 等^[22]在定容燃烧弹中探究了高温高压下 $\text{NH}_3/\text{DME}/\text{air}$ 层流火焰速度的变化, 研究结果表明在起始温度 298 K, 起始压力 1 atm, 50% DME 掺混可大幅提高氨层流火焰速度。Gani Issayev 等^[1]进一步研究了 17.9%、36.8% 和 46.7% DME 掺混对氨层流火焰速度的影响, 并指出压力 1 bar、温度 300 K 时 17.9% DME 掺混即可将氨层流火焰速度提高到 27.5 cm/s 左右。Shibo Liu 等^[23]基于对冲火焰指出在富燃工况下对层流火焰速度影响较大的基元反应为 $\text{N}+\text{NO}=\text{N}_2+\text{O}$ 和 $\text{N}+\text{OH}=\text{NO}+\text{H}$ 。以上研究表明 H_2 和 DME 对氨层流火焰的提高都具有一定贡献且 H_2 对氨层流火焰速度的提升潜力要大于 DME,

为综合利用 H_2 高反应活性及 DME 高燃料活性,开展未来氨燃烧系统 H_2 -DME 改善氨层流火焰速度的研究仍需进行。

对于氨燃烧系统,除层流火焰速度外,缩短 IDT,降低自燃着火温度并提高火焰稳定性是其可靠着火、稳定运行的前提。研究人员提出可利用 H_2 和 DME 对氨火焰以上关键点进行改良^[16]。氢因其引入 H 和 OH 自由基对氨反应体系活性的影响不容忽视,研究人员分别基于对冲火焰及数值计算表明 H_2 可以提高氨燃烧的反应活性及着火特性^[21-22]。Liming Dai 等^[24]基于 rapid compression machine 在压力 20~75 bar,温度 1040~1210 K 下研究了 H_2 对氨着火性能的影响,并指出 H_2 可降低氨燃料的自燃着火温度。此外,DME 对氨火焰燃烧特性的提升也不容忽视。Gani Issayev 探究了 DME 对氨自燃着火的影响,并指出在 $\phi=0.5$,压力 60 bar 时 2%DME 可将氨自燃着火温度从 1080K 降到 930K,降低了氨自然着火的难度,但该研究也指出 DME 对 IDT 的降低只有 5%^[1],说明 DME 对氨自燃着火特性作用小于 H_2 。IDT 和自燃着火温度的改良可以实现氨可靠着火,而氨燃烧系统的稳定运行还需氨火焰的高稳定性。针对氨火焰稳定性研究人员指出可利用 H_2 对其进行提高^[25,26]。Akihiro Hayakawa 等^[3]基于 Swirling flow flame 探究了当量比 0.8、1.0 和 1.2 下氨火焰的稳定性,并指出氨火焰可在特定供气速度和当量比下维持稳定,但没有探究宽广当量比范围氨火焰的稳定性。A. Valera-Medina 等^[27]基于 Swirling flow flame 进一步探究了当量比 0.43~0.52 稀燃下氨火焰的稳定性,并指出 50% H_2 掺混可实现氨火焰的稳定燃烧。Kyunghyun Ryu 等^[20]基于压燃式发动机探究了与火焰稳定性密切相关的 NH_3 -DME 的循环变动特性,研究指出相比于 40%DME-60% NH_3 ,60%DME-40% NH_3 掺混燃料的循环变动明显降低,说明了 DME 对提高 NH_3

火焰稳定性的潜力。以上研究表明 H_2 掺混对氨燃烧 IDT 缩短具有重要作用,DME 对降低氨自燃着火温度的效果优于 H_2 ,且 H_2 和 DME 掺混对氨的 IDT、自燃着火温度和火焰稳定性的化学动力学机制的影响仍需要进一步研究。

氨作为一种 N 基燃料,燃烧过程中 NO_x 排放是其主要污染物。在利用 H_2 和 DME 改善氨燃烧特性同时对 NO_x 生成也有显著影响,仍需探究 H_2 和 DME 对 NO_x 的生成特征以寻求有效手段调控 NO_x 实现清洁燃烧。Jun Li 等^[28]研究了 H_2 对氨燃烧 NO_x 反应路径的影响并提出可通过调控基元反应 $\text{N}+\text{NO}=\text{N}_2+\text{O}$ 的反应强度控制 NO_x 的排放。Mino Woo^[29]指出基元反应 $\text{HNO}+\text{H}=\text{H}_2+\text{NO}$ 和 $\text{HNO}+\text{M}=\text{H}+\text{NO}+\text{M}$ 对氨燃烧 NO 生成的化学动力学作用较大。Siliang Ni 等^[30]基于 micro-combustor 探究了氨富燃 NO_x 的生成情况,研究指出 HNO 对 NO 生成具有促进作用,同时也提出 NH 和 NH_2 基团对降低 NO 的潜力,提出了基于反应路径调控 NO_x 生成的方向。Xiangyu Meng 等^[31]进一步指出 DME 可提高反应体系中 NH 和 NH_2 的浓度进而促进 NO 消耗反应的进行。以上研究通过化学动力学分析指出掺混 H_2 和 DME 可实现氨燃烧 NO_x 反应体系及反应路径的调控,但是对 H_2 和 DME 综合作用及 N 基/C 基燃料的相互作用的化学动力学机制研究较为缺乏。

综上所述,在过去,研究人员分别基于 H_2 和 DME 实现了氨层流火焰燃烧特性的调控,但仍存在掺混 H_2 时 NO_x 排放高、掺混 DME 时层流火焰速度和着火特性提高不显著及对基础燃烧中 H_2 和 DME 带入氨反应体系的化学动力学机理研究尚不完善的问题。本研究构建并验证了 $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{DME}$ 化学反应机理,利用 H_2 反应活性高及 DME 燃料活性高的特性改善氨火焰基础燃烧特性,通过调整 $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{DME}$ 三元燃料比例实现层流

火焰速度、着火特性、自燃着火温度、火焰稳定性的改善及 NO_x 生成路径的调控，同时基于敏感性分析、ROP 分析和反应流分析揭示其内在化学反应动力学机制，探究实现氨燃料快速稳定清洁燃烧的途径。

1 数值计算模型

1.1 数值计算模型

本文基于机理构建 Reaction workbench 软件、化学动力学分析 CHEMKIN 软件开展 $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{DME}$ 三元燃料层流预混火焰的数值计算研究。首先构建含目标组分及基元反应的化学动力学机理，然后对目标组分燃烧特征参数 IDT、层流火焰速度和燃烧中间组分与已发表的激波管、定容燃烧弹和 Flow Reactor 等试验数据进行对比验证。最后基于构建并验证的化学反应机理，利用 PREMIXED 层流预混火焰模块对氨燃料掺混不同比例 H_2 -DME 复合燃烧的基础燃烧特性开展对比分析，并基于层流火焰速度达 35 cm/s 的 8 种掺混方案开展反应活性、自燃着火温度、火焰稳定性和 NO_x 生成特性的研究，同时基于敏感性、ROP 和反应流分析探究 $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{DME}$ 复合燃烧基础燃烧特性的化学动力学机制。

1.2 机理构建

构建对 NH_3 、 H_2 和 DME 三者 IDT、层流火焰速度、燃烧中间产物具有准确预测性的化学反应机理是开展 $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{DME}$ 层流火焰燃烧特性研究的前提。本文选取 Alessandro Stagni 等^[32]基于 jet-stirred reactor 和 flow reactor 构建，在 500~2000 K 范围内准确预测 NH_3 分解、脱氢和 HNO 分解等化学动力学行为且融合 NO_x 和 H_2 机理的具有 31 种组分、203 步基元反应的机理作为本文 NH_3/H_2 机理（N 机理）。选取 Lawrence Livermore National Laboratory 基于 burner-

stabilized flame, flow reactors, stirred reactors 和激波管构建，在压力 1~18 atm，温度 550~1600 K，当量比 0.2~1.49 工况内验证的具有 79 种组分、651 步基元反应的机理作为本文 DME 机理（D 机理）。以 N 机理为主机理，D 机理为贡献机理耦合得到具有 101 种组分、533 步基元反应的 $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{DME}$ 机理（ND 机理）。

1.3 机理验证

以 Oliver Mathieu 等^[33]、Xingjia Man 等^[34]和 Chenglong Tang 等^[35]基于激波管试验的 NH_3 、 H_2 和 DME 的 IDT 数据验证 ND 机理对复合燃烧 IDT 的预测精度（图 1a~c）。以 Qingming Liu 等^[36]、Bowen Mei 等^[37]、Paul D. Ronney^[38]、Akihiro Hayakawa 等^[39]及 Charles Lhuillier 等^[40]和 Won Sik Song 等^[41]基于定容燃烧弹的 NH_3 、DME 及 N. Bouvet 等^[42]基于 Bunsen 火焰 H_2 的层流火焰速度数据验证 ND 机理对复合燃烧层流火焰速度的预测精度（图 2a~c）。以 Alessandro Stagni 等^[32]和 S. L. FISCHER 等^[43]基于 Flow Reactor 的 NH_3 、DME 及 Tanh Le Cong 等^[44]基于 jet-stirred reactor 的 H_2 燃烧中间组分试验数据验证 ND 机理对复合燃烧中间产物生成历程的预测精度（图 3a~e）。从图 3 中可以看出 ND 机理对目标组分 NH_3 、 H_2 和 DME 的 IDT、层流火焰速度和燃烧中间组分具有准确的预测性，可基于 ND 机理开展后续研究。

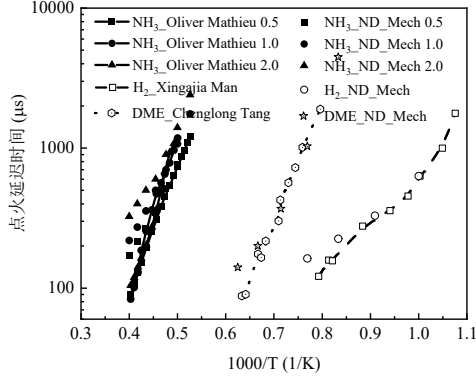
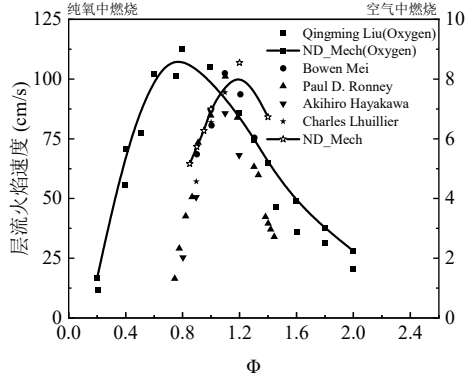
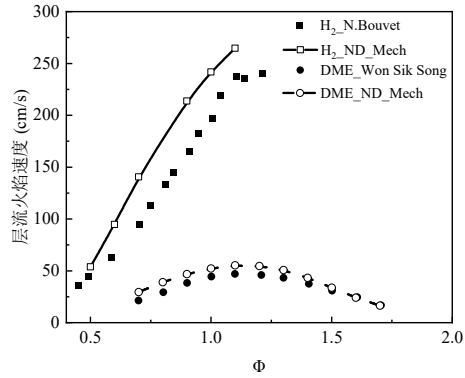


图 1 NH_3 , H_2 , DME 的 IDT 验证, NH_3 验证工况为 $P=1.4 \text{ atm}$, $T=1900\sim 2500 \text{ K}$, $\phi=0.5, 1.0, 2.0$; H_2 验证工况为 $P=1.2 \text{ atm}$, $T=900\sim 1300 \text{ K}$, $\phi=0.5$; DME 验证工况为 $P=0.987 \text{ atm}$, $T=1265\sim 1600 \text{ K}$, $\phi=1.0$

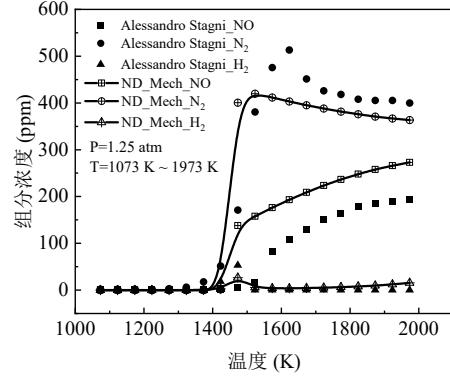


(a) Ammonia

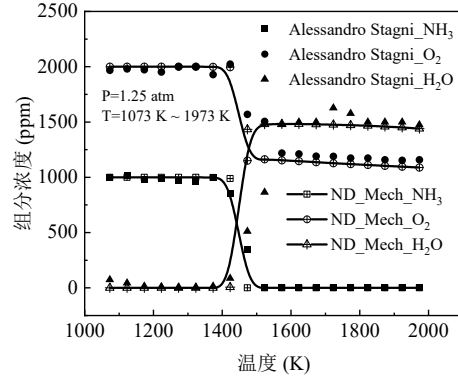


(b) H_2 , DME

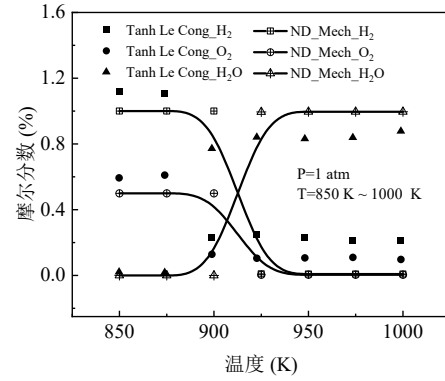
图 2 NH_3 , DME, H_2 的层流火焰速度验证, NH_3 速度的验证工况为 $P=1 \text{ atm}$, $T=298 \text{ K}$; H_2 速度的验证工况为 $P=1 \text{ atm}$, $T=298 \text{ K}$; DME 速度的验证工况为 $P=0.987 \text{ atm}$, $T=298 \text{ K}$



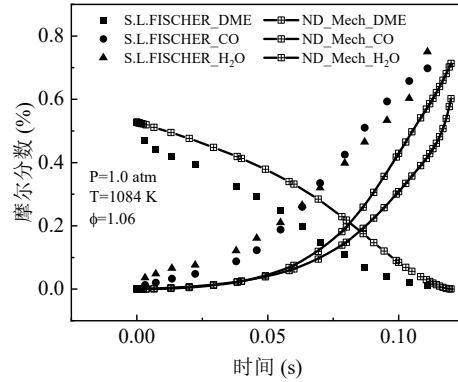
(a) NH_3_1



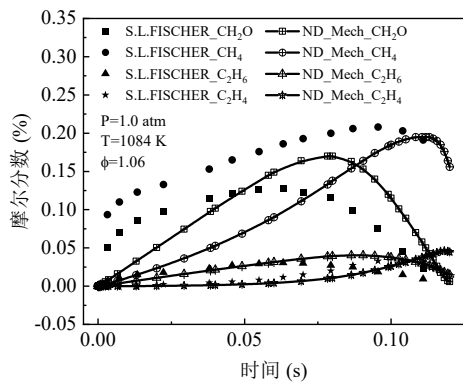
(b) NH_3_2



(c) H_2



(d) DME_1



(e) DME_2

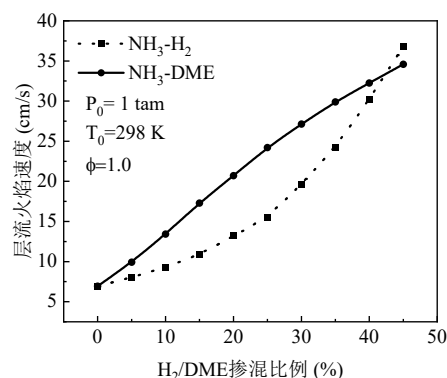
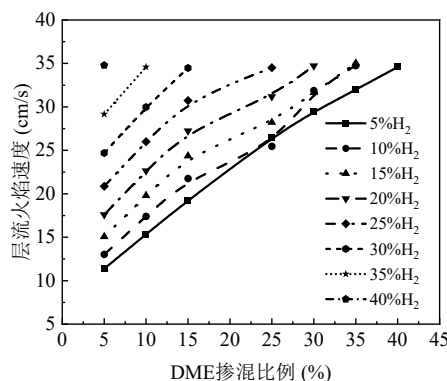
图 3 NH₃, DME, H₂ 的燃烧中间组分验证

2 结果与讨论

2.1 层流火焰速度

图4为不同H₂及DME掺混比例下NH₃-H₂、NH₃-DME层流火焰速度的变化,从图中可以看出随着H₂和DME掺混比例(by mole)的增大,NH₃-H₂和NH₃-DME层流火焰速度均呈上升趋势且前者在掺混比例超过40%后有明显加快趋势,说明NH₃替代率大于60%时,DME对层流火焰速度的提升效果优于H₂,进一步研究发现在55%NH₃替代率时,NH₃-H₂、NH₃-DME复合燃烧的层流火焰速度都达35cm/s,已与相同条件下CH₄和IC₈H₁₈的层流火焰速度相近。通过调控NH₃/H₂/DME三元燃料(图5)发现在NH₃替代率为55%时,有8种NH₃/H₂/DME燃料掺混方案的层流火焰速度达到35 cm/s左右,

且此比例下可综合利用H₂高反应活性及DME高燃料活性,更利于NH₃-H₂-DME三元燃料在实际燃烧系统中的应用。

图 4 H₂ 及 DME 掺混比例对氨层流火焰速度的影响图 5 H₂-DME 掺混比例对氨层流火焰速度的影响

2.2 IDT 及自然着火温度

本节基于上文层流火焰速度达35 cm/s的燃料体系(表1)探究H₂-DME对氨复合燃烧IDT和自然着火温度的影响并揭示其化学动力学机制。

表 1 层流火焰速度 35m/s 的 NH₃/H₂/DME 三元燃料体系

Blending Ratio	a	b	c	d	e	f	g	h
NH ₃	0.55	0.55	0.55	0.55	0.55	0.55	0.55	0.55
H ₂	0.05	0.1	0.15	0.2	0.25	0.3	0.35	0.4
DME	0.4	0.35	0.3	0.25	0.2	0.15	0.1	0.05

图 6a 为 a~h 8 种复合燃烧的 IDT 变化,从图中可以看出复合燃烧过程较纯 NH₃ 燃烧的 IDT 大幅度缩短,说明 H₂-DME 增强

了燃烧时自由基池的准备过程而缩短了 IDT。H₂-DME 提高了反应体系 OH 的浓度(图 6c),并且随 H₂ 比例的增加 OH 浓度呈

上升趋势,说明 H_2 的增加增强了对 OH 自由基敏感的基元反应强度。结合 OH 敏感性分析(图 6d)可以看出对 OH 自由基最为敏感的基元反应为 $R5 O_2+H=O+OH$, H_2 的加入通过 $R1 H_2+M=2H+M$ 、 $R2 H_2+O=H+OH$ 和 $R3 H_2+OH=H+H_2O$ 等生成自由基 H, 进而促进 R5 的进行, 最终带来 OH 浓度的增加。

针对氨自燃着火困难的问题, 除需考虑初始燃烧阶段反应活性外, 还需考虑自燃着火温度的影响。从图 6d 可以看出 H_2 -DME 带来 1298~2498 K 全工况起始温度下自燃着火温度 150 K 的降低进而使氨燃烧系统易于着火。通过对比研究发现掺混相同比例 H_2 、DME 时, DME 对氨反应体系自燃着火温度的降低效果优于 H_2 。结合温度敏感性变化(图 6d~e)可以看出, 纯氨和 40% H_2 -5%DME-55% NH_3 的温度负敏感反应为 $R26 NH_3+H=H_2+NH_2$, 而 5% H_2 -40%DME-55% NH_3 为 $R235 HCO+CH_3=CH_4+CO$, 说明 H_2 主要通过增加反应体系中 H 浓度促进 R26 进行进而降低自燃着火温度, 而 DME 掺混通过引入 CH_3 基团促进 R235 进行进而使自燃着火温度降低。

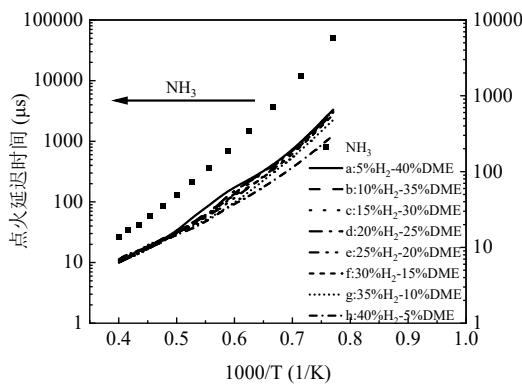


图 6a H_2 -DME 比例对 IDT 的影响

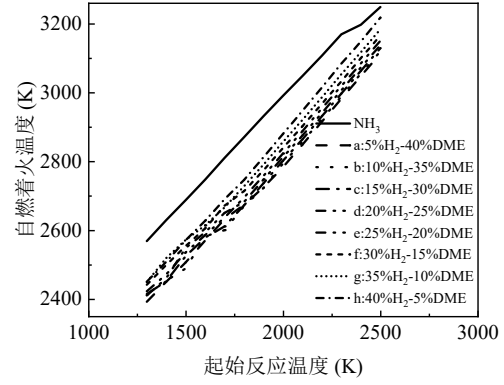


图 6b H_2 -DME 比例对自燃着火温度的影响

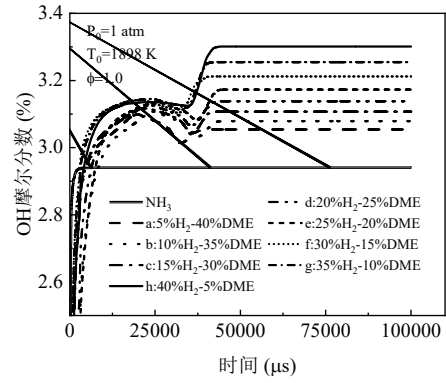


图 6c H_2 -DME 比例对 OH 生成历程的影响

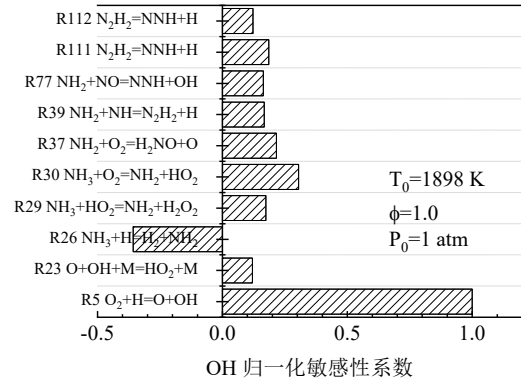


图 6d 纯氨燃烧 OH 自由基的敏感性

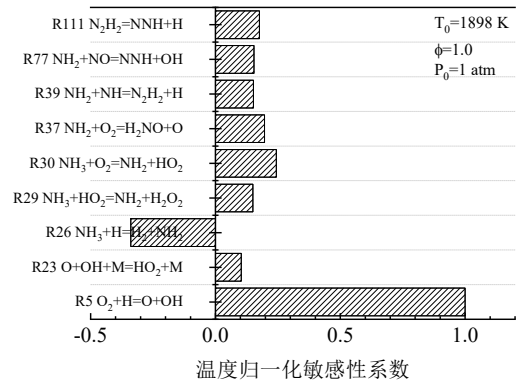


图 6d 氨自燃着火温度的敏感性分析

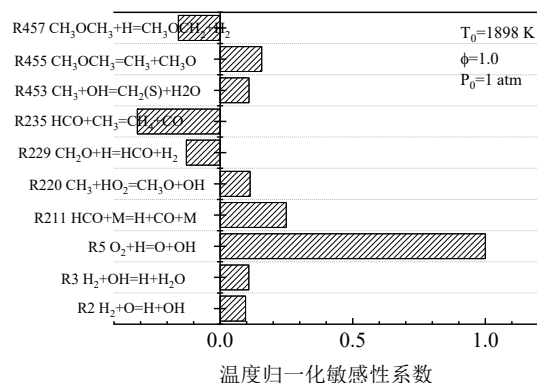


图 6e 5% H_2 -40%DME-45% NH_3 自燃燃烧温度的敏感性分析

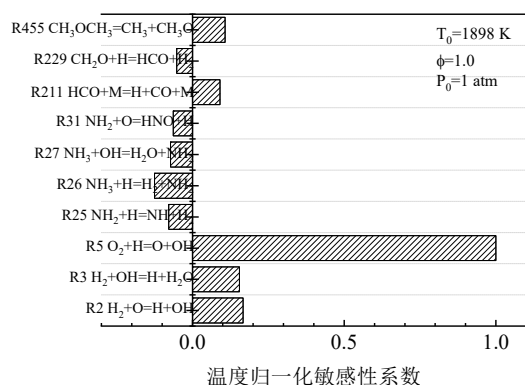


图 6f 40% H_2 -5%DME-45% NH_3 自燃燃烧温度的敏感性分析

2.3 火焰稳定性

图 7 为 a~f 及纯氨燃烧时层流火焰中 OH 的空间分布特征, 从图中可以看出纯氨火焰的 OH 区域及火焰前锋面较薄, H_2 -DME 掺混增厚了 OH 区域及火焰前锋面, 使火焰前锋面受其它自由基及热扩散效应的影响减小同时降低了火焰前锋面上 OH 对温度的敏感性, 减弱了受周围温度梯度变化的影响, 促进了火焰前锋面的持续维持及稳定燃烧。对比 c~f 可以看出掺混 30% H_2 -15%DME 时 OH 浓度最大, 15% H_2 -30%DME 次之。 H_2 -DME 带来了 OH 浓度的增加, 增强了 OH 参与主要放热反应的剧烈程度从而维持火焰前峰面燃烧过程中化学反应速率和强度。

图 7 所示为火焰中 CH_2O 的空间分布情况, 从图中可以看出 H_2 -DME 掺混使不具备

C 基的氨火焰在整个反应体系中生成了大量 CH_2O (图 7), 使复合燃烧的内火焰面化学反应进行充分, 促进火焰前锋面活化热氛围准备阶段的进行, 使火焰趋于稳定。对比 c~f CH_2O 生成历程可以看出 15% H_2 -30%DME 掺混对 CH_2O 的生成促进作用最大, 而对 OH 浓度促进作用最大的 f 却最小。以上分析表明 H_2 主要通过促进火焰前锋面的反应强度促进氨火焰稳定性而 DME 则侧重于增强内火焰面低温反应阶段强度进而为火焰维持稳定提供所需的热力学及化学动力学条件。

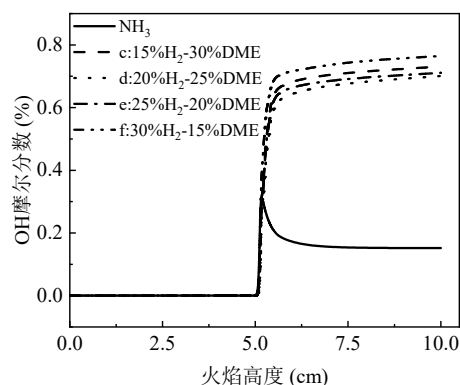


图 7a H_2 -DME 比例对 OH 分布的影响

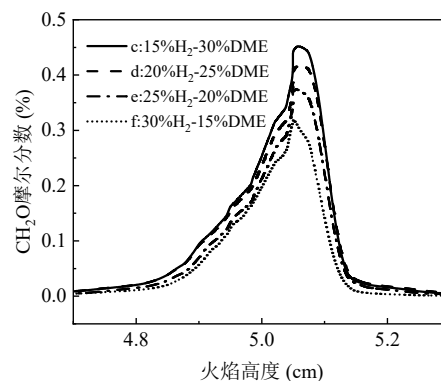


图 7b H_2 -DME 比例对 CH_2O 分布的影响

本节进一步对 OH 和 CH_2O 的敏感性和 ROP 进行分析以揭示 H_2 -DME 掺混对火焰稳定性影响的化学动力学机制。 H_2 -DME 提高了 R5 $\text{O}_2 + \text{H} = \text{O} + \text{OH}$ 对 OH 的敏感性且 H_2 比例越大敏感性越大 (图 8a、b)。 H_2 通过 R1 $\text{H}_2 + \text{M} = 2\text{H} + \text{M}$ 、R2 $\text{H}_2 + \text{O} = \text{H} + \text{OH}$ 、R3 $\text{H}_2 + \text{OH} = \text{H} + \text{H}_2\text{O}$ 等生成 H, 使 R5 敏感性增

加的同时伴随着 H 浓度的提高。而 R456 $\text{CH}_3\text{OCH}_3+\text{OH}=\text{CH}_3\text{OCH}_2+\text{H}_2\text{O}$ 随 H_2 比例增加敏感性系数减小, 最终造成 OH 自由基随 H_2 掺混量的增加而增加。R232 $\text{CH}_3+\text{O}=\text{CH}_2\text{O}+\text{H}$ 在四种掺混方案中的敏感性没有显著变化, 但 DME 比例的增加减小了 R229 $\text{CH}_2\text{O}+\text{H}=\text{HCO}+\text{H}_2$ 的敏感性, 从而降低了对 CH_2O 的抑制作用而增加了 CH_2O 的浓度。

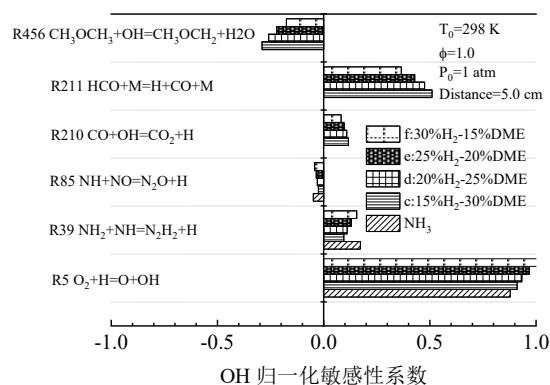


图 8a H_2 -DME 比例对 NH_3 燃烧 OH 敏感性的影响

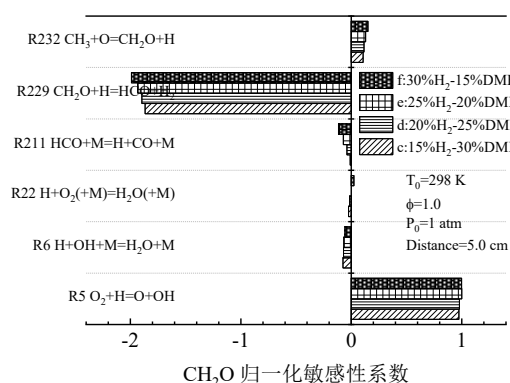
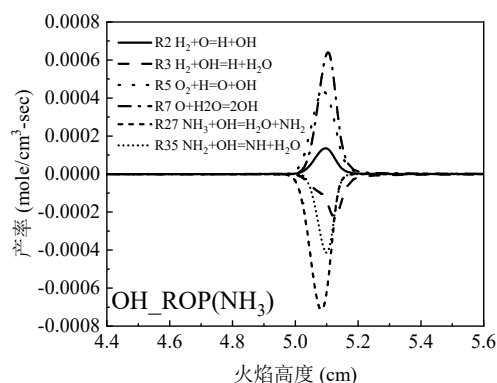


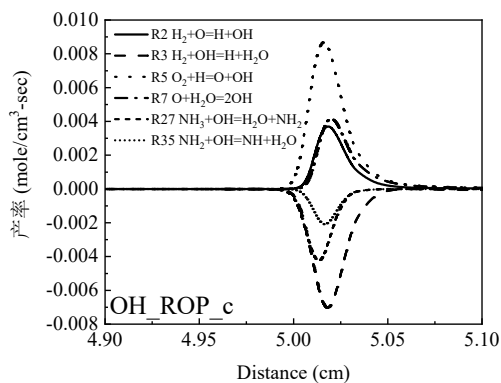
图 8b H_2 -DME 比例对 NH_3 燃烧 CH_2O 敏感性的影响

为揭示 H_2 -DME 对氨火焰前锋面影响的化学动力学机制, 本节继续探究 H_2 -DME 掺混比例对 OH 生成速率敏感的基元反应。从图 9a~e OH 的 ROP 分析中可以看出 H_2 -DME 掺混促进了 R2 $\text{H}_2+\text{O}=\text{H}+\text{OH}$ 、R5 $\text{O}_2+\text{H}=\text{O}+\text{OH}$ 和 R7 $\text{O}+\text{H}_2\text{O}=2\text{OH}$ 的化学反应速率, 同时显著降低了 R27 $\text{NH}_3+\text{OH}=\text{H}_2\text{O}+\text{NH}_2$ 和 R35 $\text{NH}_2+\text{OH}=\text{NH}+\text{H}_2\text{O}_2$ 对 OH 消耗的化学反应

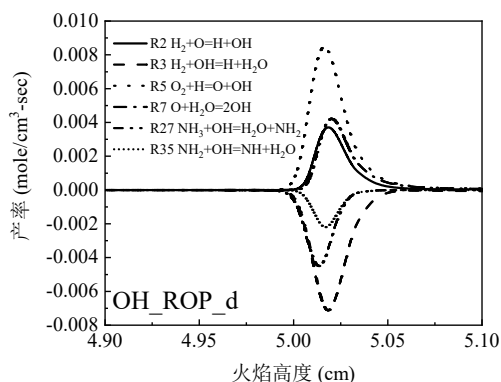
速率。R3 的化学反应速率受温度影响小, 而 OH 生成的同时伴随着火焰温度的急剧升高。R27 和 R35 反应速率的降低除受浓度影响外也受温度影响, R3 化学反应速率的降低受浓度影响占主要比重并因 H_2 掺混带入 H 的增加使化学反应产生逆向进行趋势而降低。总体上, 随 H_2 -DME 掺混量的增加, 生成 OH 的化学反应速率升高而消耗 OH 的基元反应速率降低, 最终带来 OH 浓度的升高。



(a) NH_3



(b) c: 15% H_2 -30%DME-55% NH_3



(c) d: 20% H_2 -25%DME-55% NH_3

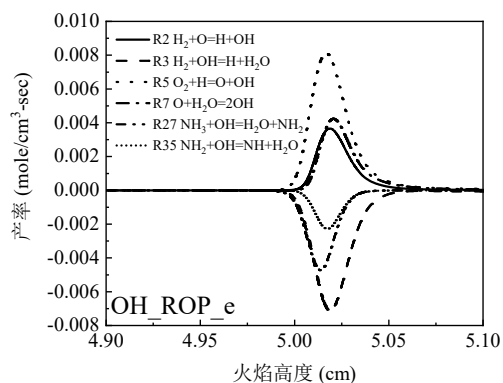
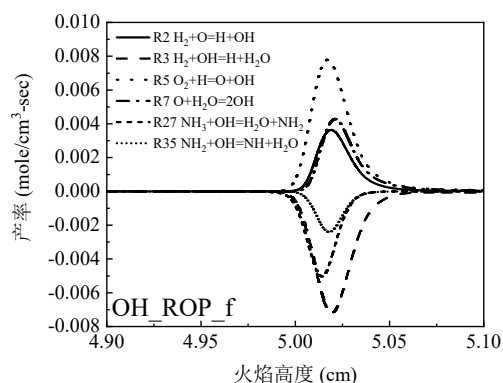
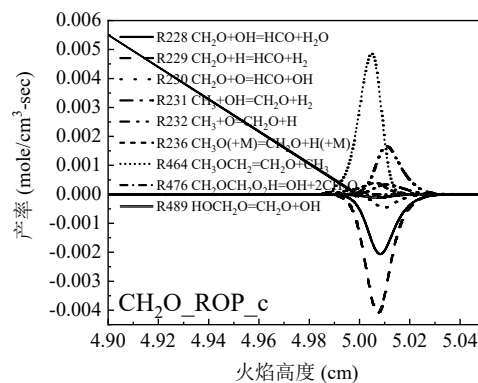
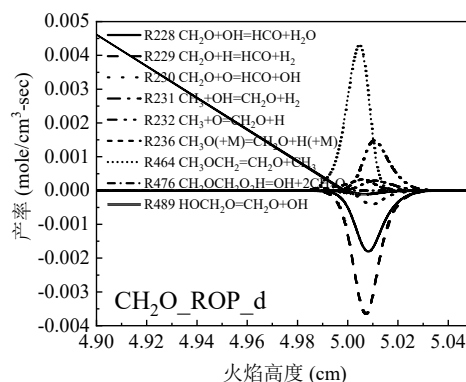
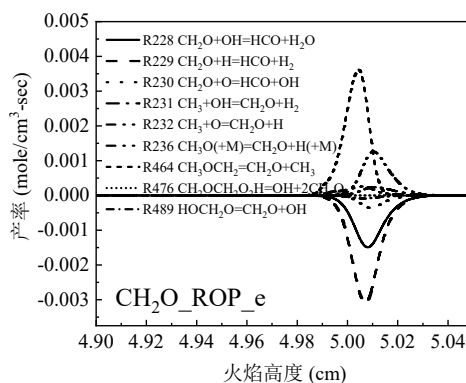
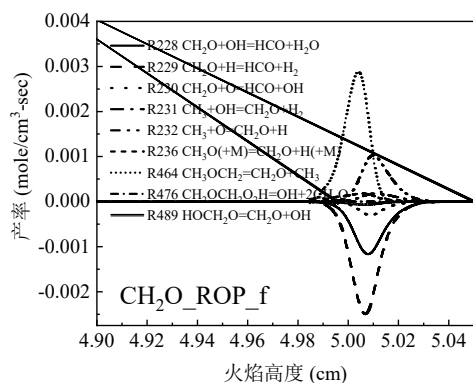
(d) e:25% H_2 -20%DME-55% NH_3 (e) f:30% H_2 -15%DME-55% NH_3

图9 燃料体系间 OH 的 ROP 变化

本节对 H_2 -DME 带入反应体系中 CH_2O 的 ROP 进行分析,以明晰内火焰区域对火焰稳定性作用的化学动力学机制。从图 10a~d CH_2O 的 ROP 变化可以看出随 DME 比例的增加,促进 CH_2O 生成的 R464 $\text{CH}_3\text{OCH}_2=\text{CH}_2\text{O}+\text{CH}_3$ 的化学反应速率增大, H_2 和 DME 对 CH_2O 有消耗作用的 R229 $\text{CH}_2\text{O}+\text{H}=\text{HCO}+\text{H}_2$ 的化学反应速率的作用趋势相反(图 10a~d)。对于 R464,反应物浓度占其化学反应速率变化的比重较大。DME 通过 R456 $\text{CH}_3\text{OCH}_3+\text{OH}=\text{CH}_3\text{OCH}_2+\text{H}_2\text{O}$ 、R457 $\text{CH}_3\text{OCH}_3+\text{H}=\text{CH}_3\text{OCH}_2+\text{H}_2\text{O}$ 、R458 $\text{CH}_3\text{OCH}_3+\text{O}=\text{CH}_3\text{OCH}_2+\text{OH}$ 等促进了 CH_3OCH_2 的生成使 R464 化学反应速率增大,进而促进 CH_2O 的生成。对于 R229,温度和反应物浓度同时对其化学反应速率作用, H_2 使 R229 的化学反应有逆向进行倾向,降

低了 R229 的化学反应速率。而 R464 的化学反应速率大于 R229,同时 R232 $\text{CH}_3+\text{O}=\text{CH}_2\text{O}+\text{H}$ 的化学反应速率随 DME 掺混量的增加而增加,最终 CH_2O 浓度随 DME 掺混而大幅度增加,促进了内火焰的持续稳定反应进而提高了火焰的稳定性。

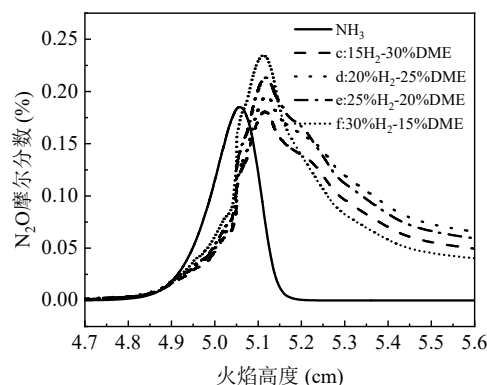
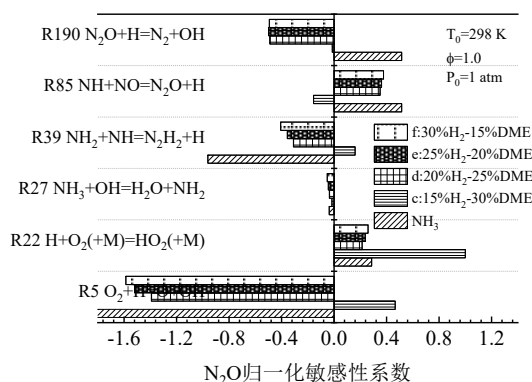
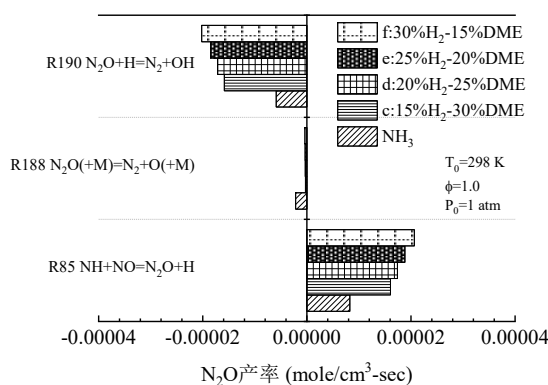
(a) c: 15% H_2 -30%DME-55% NH_3 (b) d:20% H_2 -25%DME-55% NH_3 (c) e:25% H_2 -20%DME-55% NH_3

(d) f:30% H_2 -15%DME-55% NH_3 图 10 燃料体系间 CH_2O 的 ROP 变化

2.4 NO_x 生成特性

如图 11a 所示为复合燃烧火焰 N_2O 的空间分布特征,从图中可以看出, H_2 -DME 使 N_2O 在火焰峰面处大量生成且随 H_2 增加而增加,结合反应流分析(图 12)可知这是因为 H_2 增加增强了 $\text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2 \rightarrow \text{NH} \rightarrow \text{N}_2\text{O}$ 反应路径的强度而促进了 N_2O 的生成。 H_2 -DME 增大了对 N_2O 生成有促进作用的 R85 $\text{NH}+\text{NO}=\text{N}_2\text{O}+\text{H}$ 的敏感性同时提高了其化学反应速率(图 11b, c)。虽然对 N_2O 有消耗作用的基元反应敏感性和化学反应速率都有所上升,但 R190 较 R85 对温度的响应系数小, R190 主要受自由基池中分子浓度的影响。 H_2 加入一方面增加了自由基池中 H 的浓度同时 H_2 -DME 协同作用造成了自由基池中 OH 浓度的增加,使 R190 逆向进行趋势增大,最终造成 N_2O 的浓度增加。从全局化学反应路径分析可以看出有效抑制 N_2O 生成的途径是降低反应体系中 $\text{NH}_2 \rightarrow \text{NH} \rightarrow \text{N}_2\text{O}$ 反应路径的反应强度或降低参与

该反应流 O、NH 等关键分子基团的浓度。

图 11a H_2 -DME 比例对 N_2O 分布的影响图 11b H_2 -DME 比例对 N_2O 敏感性的影响图 11c H_2 -DME 比例对 N_2O ROP 的影响

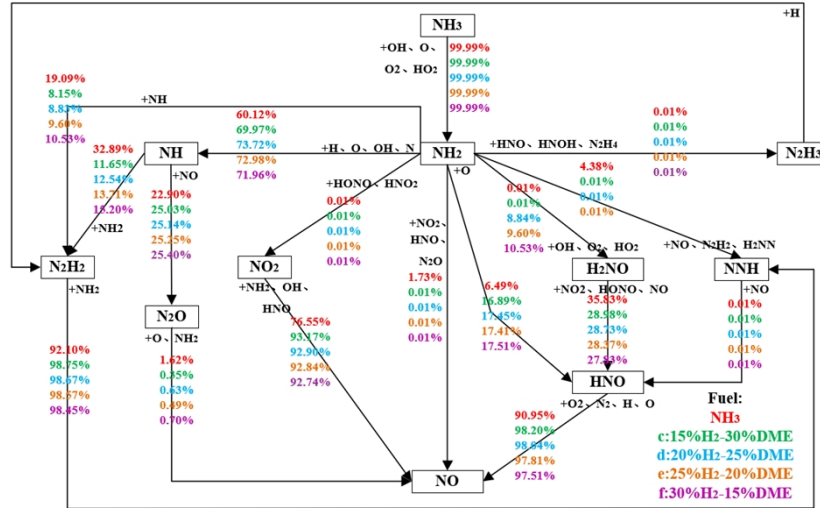


图 12 燃料体系污染物反应流分析

除 N_2O 外,另一氨燃烧 NO_x 污染物 NO 生成特征也不容忽视。图 13 为复合燃烧火焰 NO 的空间分布特征,从图中可以看出 H_2 -DME 使火焰末端 NO 生成量大量增加。结合 NO 敏感性分析(图 14a)可以看出 H_2 -DME 增加了 NO 对 R31 $NH_2+O=HNO+H$ 的敏感性,而 R31 中 HNO 可通过 R143 $HNO=H+NO$ 、R144 $HNO+H=NO+H_2$ 、R145 $HNO+O=NO+OH$ 、R148 $HNO+O_2=NO+HO_2$ 等来促进 NO 的生成。 H_2 -DME 使 R76 $NH_2+O=HNO+H$ 和 R77 $NH_2+NO=N_2+H_2O$ 对 NO 的敏感性降低,这在一定程度上造成 NO 的生成量增加。 H_2 -DME 使 R144 $HNO+H=NO+H_2$ 、R90 $N+O_2=NO+H$ 和 R89 $N+OH=NO+H$ 的化学反应速率大幅度增加(图 14b),进而造成 NO 生成速率提高和生成量增加的倾向。对于 NO 具有消耗作用的基元反应 R85 $NH+OH=N_2O+H$ 和 R91 $N+NO=O+N_2$,在 H_2 -DME 掺混下其化学反应速率增加,但 R85、R91 两个基元反应主要受反应物浓度的影响, H_2 和 DME 的掺混促进了燃料体系中 H 和 O 的含量使得 R85 和 R91 有逆向进行趋势,最终造成 NO 生成量的增加。

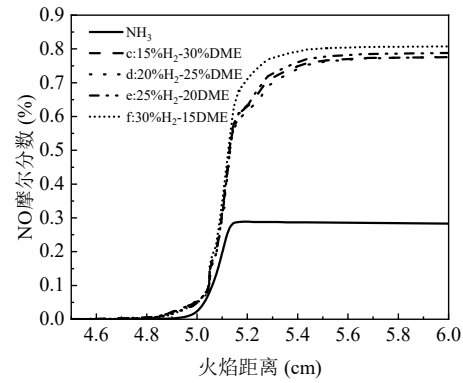


图 13 H_2 -DME 比例对 NO 的影响

反应流分析可以从整个燃烧历程揭示关键自由基和基元反应对 NO 生成的影响,本文对 NO 的全局生成历程开展相应研究(图 12)。 H_2 -DME 掺混增强了 $NH_2 \rightarrow NH \rightarrow N_2O$ 反应强度,虽然 $N_2O \rightarrow NO$ 有轻微减弱但此作用较小不足以抵消燃料掺混带来的增强作用,最终 $NH_3 \rightarrow NH_2 \rightarrow NH \rightarrow N_2O \rightarrow NO$ 反应强度的增大造成 NO 浓度的增加。同时当 H_2 掺混量从 15% 提高到 30% 时, $NO_2 \rightarrow NO$ 分别提高了 16.62%、16.35%、16.69%、16.19%,这是因为 H_2 比例的提高增加了自由基池中 NH_2 、 OH 和 HNO 等浓度造成的。对于 $NH_3 \rightarrow NH_2 \rightarrow H_2NO \rightarrow HNO \rightarrow NO$ 以及 $NH_3 \rightarrow NH_2 \rightarrow HNO \rightarrow NO$, H_2 -DME 除了使 $H_2NO \rightarrow HNO$ 有下降外,该反应路径的强度都有所加强。 HNO 对 NO 的贡献率是关键

分子基团中最大的,所以抑制 NO 生成对 HNO 的控制至关重要。HNO 主要来源于 NH_2 和 H_2NO 的氧化,所以在实际应用过程中可通过反应路径微观调控配合相应宏观手段来降低自由基池中 HNO 的浓度,实现氨在实际应用中的快速稳定清洁燃烧。

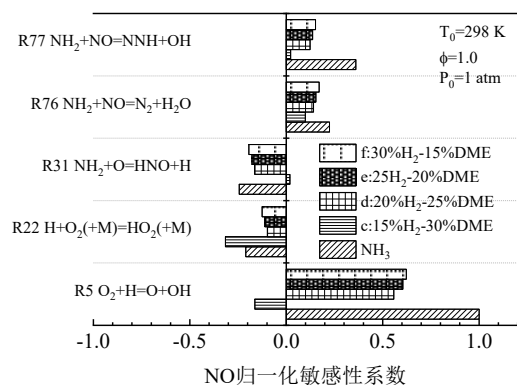


图 14a H_2 -DME 比例对 NO 的敏感性影响

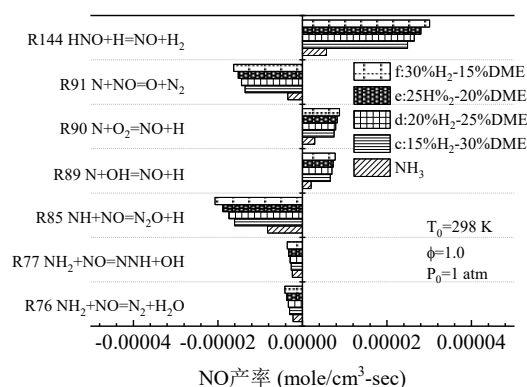


图 14b H_2 -DME 比例对 NO 的 ROP 影响

3 结论

本文基于自行构建并验证的 $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{DME}$ 化学反应机理,通过调控 H_2 -DME 比例对氨复合燃烧层流火焰燃烧特性开展研究,揭示了 H_2 -DME 对氨层流火焰速度、IDT、自燃着火温度、火焰稳定性的影响及化学动力学作用机制,并提出控制 NO_x 排放的反应路径调控策略,促进了氨的快速稳定清洁燃烧。本文研究结论如下:

(1) 构建了 $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{DME}$ 具有 101 种组分、533 步基元反应的三元燃料化学反应

机理,并进行了 IDT、层流火焰速度和燃烧中间组分的验证,能够对 $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{DME}$ 在大气环境和压力的全工况温度范围内 NH_3 、 H_2 和 DME 的化学动力学行为准确预测。

(2) 通过 H_2 -DME 掺混调控 55% 高 NH_3 替代率下的层流火焰速度,得到 8 种可实现氨复合燃烧层流火焰速度达 35 cm/s 的 $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{DME}$ 三元燃料调控体系,达到与 CH_4 和 IC_8H_{18} 相同的水平,具有实际应用的潜力。

(3) H_2 -DME 掺混可以同时降低氨燃烧的 IDT 和自燃着火温度,并基于敏感性和 ROP 分析指出 H_2 通过增加反应体系中 H 和 OH 的浓度缩短氨的 IDT, DME 主要通过引入 CH_3 自由基降低自燃着火温度。

(4) H_2 -DME 掺混可有效提高氨火焰稳定性,并基于敏感性和 ROP 分析指出 H_2 主要通过增加反应体系中 H 和 OH 浓度促进层流火焰峰面持续稳定反应,而 DME 主要通过提高内火焰面活性前驱物 CH_2O 的浓度增强火焰稳定性。

(5) H_2 -DME 掺混对氨燃烧 NO_x 排放的 N_2O 和 NO 影响显著,并基于反应流分析指出调控氨燃烧污染物 N_2O 和 NO 的关键分别是降低 NH 与 O、OH 等活性自由基的反应强度和控制对 NO 贡献率较大的 HNO 在反应池中的浓度。

参考文献:

- [1] Gani Issayev, Binod Raj Giri, Ayman M. Elbaz, 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.
<https://doi.org/10.1016/j.renene.2021.09.117>
- [2] Joshua W. Makepeace, Teng He, Claudia Weidenthaler, et al. Reversible ammonia-based and liquid organic hydrogen carriers for high-density hydrogen storage: Recent progress[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2019,44:7746-7767.
<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.01.144>
- [3] Akihiro Hayakawa, Yoshiyuki Arakawa, Rentaro Mimoto, et al. Experimental investigation of stabilization and emission characteristics of ammonia/air premixed flames in a swirl combustor[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2017,(42):14010-14018.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.01.046>
- [4] Fuhrmann, J,Hulsebrock, M,Krewer, U. Energy Storage Based on Electrochemical Conversion of Ammonia[J]. Transition To Renewable Energy Systems, 2013,691-706.
- [5] Hans Aksel Haugen, Nils Henrik Eldrup, Anne Marie Fatnes, et al. Commercial capture and transport of CO₂ from production of ammonia[J]. Energy Procedia, 2017,(114):6133-6140.
<https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.03.1750>
- [6] Daisuke Miura, Tetsuo Tezuka. A comparative study of ammonia energy systems as a future energy carrier, with particular reference to vehicle use in Japan[J]. Energy,2014,68:428-436.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.energy.2014.02.108>
- [7] Joao Sousa Cardoso, Valter Silva, Rodolfo C. Rocha, et al. Ammonia as an energy vector: Current and future prospects for lowcarbon fuel applications in internal combustion engines[J]. Journal of Cleaner Production, 2021, 296:126562.
<https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.126562>
- [8] J.W. Ku , Y.J. Ahn , H.K. Kim, et al. Propagation and emissions of premixed methane-ammonia/air flames[J]. Energy, 2020, 201:117632.
<https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.117632>
- [9] Hua Xiao, Agustin Valera-Medina, Philip J Bowen. Study on premixed combustion characteristics of co-firing ammonia/methane fuels[J]. Energy, 2017, 140:125-135.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.energy.2017.08.077>
- [10] Akihiro Hayakawa, Takashi Goto, Rentaro Mimoto, et al. Laminar burning velocity and Markstein length of ammonia/air premixed flames at various pressures[J]. FUEL, 2015, 98-106.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2015.06.070>
- [11] Jundie Chen , Xue Jiang, Xiaokang Qin, et al. Effect of hydrogen blending on the high temperature auto-ignition of ammonia at elevated pressure[J]. FUEL,2021, (287):119563.
<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119563>
- [12] Yuan Feng, Jizhen Zhu, Yebing Mao, et al. Low-temperature auto-ignition characteristics of NH₃/diesel binary fuel: Ignition delay time measurement and kinetic analysis[J]. FUEL, 2020, (281):118761.

- <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118761>
- [13] Longjuan Ji, Jinhua Wang, Guangya Hu, et al. Experimental study on structure and blow-off characteristics of NH₃/CH₄ co-firing flames in a swirl combustor[J]. FUEL, 2022, (314):123027. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2021.123027>
- [14] Benjamín Pla, Pau Bares, Enrique José Sanchis, et al. Ammonia injection failure diagnostic and correction in engine after-treatment system by NO_x and NH₃ emissions observation[J]. FUEL, 2022, (322):123936. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.123936>
- [15] Zuohua Huang, Qian Wang, Jinrong Yu, et al. Measurement of laminar burning velocity of dimethyl ether–air premixed mixtures[J]. FUEL, 2007, (86):2360-2366. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2007.01.021>
- [16] Abdulrahman A. Khateeb, Thibault F. Guiberti, Xuren Zhu, et al. Stability limits and NO emissions of technically premixed ammonia-hydrogen-nitrogen-air swirl flames[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2020, (45):22008-22018. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.05.236>
- [17] Andreas Goldmann, Friedrich Dinkelacker. Approximation of laminar flame characteristics on premixed ammonia/hydrogen/nitrogen/air mixtures at elevated temperatures and pressures[J]. FUEL, 2018, 224:366-378. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.03.030>
- [18] Xinlu Han, Zhihua Wang, Yong He, et al. Temperature dependence of the laminar burning velocity for n-heptane and iso-octane/air flames[J]. FUEL, 2020, (276):118007. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.118007>
- [19] Constantine Arcoumanis, Choongsik Bae, Roy Crookes, et al. The potential of dimethyl ether (DME) as an alternative fuel for compression-ignition engines: A review[J]. FUEL, 2008, (87):1014-1030. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2007.06.007>
- [20] Kyunghyun Ryu, George E. Zacharakis-Jutz, Song-Chang Kong, et al. Performance characteristics of compression-ignition engine using high concentration of ammonia mixed with dimethyl ether[J]. Applied Energy, 2014, (113):488-499. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apenergy.2013.07.065>
- [21] Ksenia N. Osipova, Oleg P. Korobeinichev, Andrey G. Shmakov. Chemical structure and laminar burning velocity of atmospheric pressure premixed ammonia/hydrogen flames[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2021, 46:39942-39954. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.09.188>
- [22] Geyuan Yin, Jinglun Li, Meng Zhou, 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. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2021.111915>
- [23] Shibo Liu, Chun Zou, Yu Song, et al. Experimental and numerical study of laminar flame speeds of CH₄/NH₃ mixtures under oxy-fuel combustion[J]. Energy, 2019, 175:250-258. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.03.040>

-
- [24] Liming Dai, Sander Gersen, Peter Glarborg, et al. Experimental and numerical analysis of the autoignition behavior of NH₃ and NH₃/H₂ mixtures at high pressure[J]. *Combustion and Flame*, 2020, (215):134-144. <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2020.01.023>
- [25] Hadi Nozari, Onur Tuncer, Arif Karabeyoglu. Evaluation of ammonia-hydrogen-air combustion in SiC porous medium based burner[J]. *Energy Procedia*, 2017, (142):674-679. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2017.12.111>
- [26] Miguel C. Franco, Rodolfo C. Rocha, Mário Costa, et al. Characteristics of NH₃/H₂/air flames in a combustor fired by a swirl and bluff-body stabilized burner[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2021, 38:5129-5138. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.06.141>
- [27] A. Valera-Medina, D.G. Pugh, P. Marsh, et al. Preliminary study on lean premixed combustion of ammonia-hydrogen for swirling gas turbine combustors[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, (42):24495-24503. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.08.028>
- [28] Jun Li, Hongyu Huang, Lisheng Deng, et al. Effect of hydrogen addition on combustion and heat release characteristics of ammonia flame[J]. *Energy*, 2019, 175:604-617. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.03.075>
- [29] Mino Woo, Byung Chul Choi. Numerical study on fuel-NO formation characteristics of ammonia-added methane fuel in laminar non-premixed flames with oxygen/carbon dioxide oxidizer[J]. *Energy*, 2021, 226:120365. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.120365>
- [30] Siliang Ni, Dan Zhao, Yancheng You, et al. NO_x emission and energy conversion efficiency studies on ammonia-powered micro-combustor with ring-shaped ribs in fuel-rich combustion[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2021, 320:128901. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.128901>
- [31] Xiangyu Meng, Mingkun Zhang, Chenhan Zhao, et al. Study of combustion and NO chemical reaction mechanism in ammonia blended with DME[J]. *FUEL*, 2022, (319):123832. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2022.123832>
- [32] Alessandro Stagni, Carlo Cavallotti, Suphaporn Arunthanayothin, et al. An experimental, theoretical and kinetic-modeling study of the gas-phase oxidation of ammonia[J]. *Reaction Chemistry & Engineering*, 2020, (5):696. <https://doi.org/10.1039/C9RE00429G>
- [33] Olivier Mathieu, Eric L. Petersen. Experimental and modeling study on the high-temperature oxidation of Ammonia and related NO_x chemistry[J]. *Combustion and Flame*, 2015, (162):554-570. <http://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2014.08.022>
- [34] Xingjia Man, Chenglong Tang, Liangjie Wei, et al. Measurements and kinetic study on ignition delay times of propane/hydrogen in argon diluted oxygen[J]. *Hydrogen Energy*, 2013, (38):2523-2530. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhy>
- [35] Chenglong Tang, Liangjie Wei, Jiaxiang Zhang, et al. Shock Tube Measurements and Kinetic Investigation on the Ignition Delay Times of Methane/Dimethyl Ether Mixtures[J]. *energy&fuels*, 2012, (26):2523-2530. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2012.05.022>

- (26):6720-6728.
<https://doi.org/10.1021/ef301339m>
- [36] Qingming Liu, Xu Chen, Jinxiang Huang, et al. The characteristics of flame propagation in ammonia/oxygen mixtures[J]. Journal of Hazardous Materials, 2019, (363):187-196.
<https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2018.09.073>
- [37] Bowen Mei, Xiaoyuan Zhang, Siyuan Ma, et al. Experimental and kinetic modeling investigation on the laminar flame propagation of ammonia under oxygen enrichment and elevated pressure conditions[J]. Combustion and Flame, 2019, (210):236-246.
<https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2019.08.033>
- [38] Paul D. Ronney. Effect of Chemistry and Transport Properties on Near-Limit Flames at Microgravity[J]. Combustion Science And Technology, 1988, (59):123-141.
<https://doi.org/10.1080/00102208808947092>
- [39] Akihiro Hayakawa, Takashi Goto, Rentaro Mimoto, et al. Laminar burning velocity and Markstein length of ammonia/air premixed flames at various pressures[J]. FUEL, 2015, (159):98-106.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2015.06.070>
- [40] Charles Lhuillier, Pierre Brequigny, Nathalie Lamoureux, et al. Experimental investigation on laminar burning velocities of ammonia/hydrogen/air mixtures at elevated temperatures[J]. FUEL, 2020(263):116653.
<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116653>
- [41] Won Sik Song, Seong Wook Jung, Jeong Park, et al. Effects of syngas addition on flame propagation and stability in outwardly propagating spherical dimethyl ether-air premixed flames[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2013, (38):14102-14114.
<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.08.037>
- [42] N. Bouvet, C. Chauveau, I. Gökalp, et al. Characterization of syngas laminar flames using the Bunsen burner configuration[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2011, (36):992-1005.
[Doi:10.1016/j.ijhydene.2010.08.147](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.08.147)
- [43] Tanh Le Cong, Philippe Dagaut. Oxidation of H₂/CO₂ mixtures and effect of hydrogen initial concentration on the combustion of CH₄ and CH₄/CO₂ mixtures: Experiments and modeling[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009, (32): 427-435.
<https://doi.org/10.1016/j.proci.2008.05.079>
- [44] S. L. FISCHER, F. L. DRYER, H. J. CURRAN, et al. The Reaction Kinetics of Dimethyl Ether. I: High Temperature Pyrolysis and Oxidation in Flow Reactors[J]. Int J Chem Kinet, 2000, (32):713-740.
[https://doi.org/10.1002/1097-4601\(2000\)32:12<713::AID-KIN1>3.0.CO;2-9](https://doi.org/10.1002/1097-4601(2000)32:12<713::AID-KIN1>3.0.CO;2-9)