

中国电机工程学报
Proceedings of the CSEE
ISSN 0258-8013, CN 11-2107/TM

《中国电机工程学报》网络首发论文

题目: $\text{NH}_3/\text{CH}_4/\text{CH}_3\text{OH}$ 多孔介质燃烧特性模拟研究
作者: 李亮, 张瑞方, 张扬, 张海
DOI: 10.13334/j.0258-8013.pcsee.222290
网络首发日期: 2023-08-29
引用格式: 李亮, 张瑞方, 张扬, 张海. $\text{NH}_3/\text{CH}_4/\text{CH}_3\text{OH}$ 多孔介质燃烧特性模拟研究 [J/OL]. 中国电机工程学报. <https://doi.org/10.13334/j.0258-8013.pcsee.222290>



网络首发: 在编辑部工作流程中, 稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶段。录用定稿指内容已经确定, 且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期刊特定版式(包括网络呈现版式)排版后的稿件, 可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定; 学术研究成果具有创新性、科学性和先进性, 符合编辑部对刊文的录用要求, 不存在学术不端行为及其他侵权行为; 稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、出版的技术标准, 正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字母、法定计量单位及地图标注等。为确保录用定稿网络首发的严肃性, 录用定稿一经发布, 不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容, 只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

出版确认: 纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊(光盘版)》电子杂志社有限公司签约, 在《中国学术期刊(网络版)》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版, 以单篇或整期出版形式, 在印刷出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊(网络版)》是国家新闻出版广电总局批准的网络连续型出版物(ISSN 2096-4188, CN 11-6037/Z), 所以签约期刊的网络版上网络首发论文视为正式出版。

DOI:10.13334/j.0258-8013.pcsee.222290

NH₃/CH₄/CH₃OH 多孔介质燃烧特性模拟研究

李亮, 张瑞方, 张扬, 张海

(清华大学能源与动力工程系, 教育部热科学与动力工程重点实验室, 北京 100084)

Simulation on NH₃/CH₄/CH₃OH Porous Media Combustion

LI Liang, ZHANG Ruifang, ZHANG Yang, ZHANG Hai

(State Key Laboratory for Thermal Science and Power Engineering (Tsinghua University), Department of Energy and Power Engineering, Tsinghua University, Beijing)

ABSTRACT: As a carbon-free fuel, ammonia (NH₃) is considered as an alternative fuel for thermal power generation to reduce carbon emission. Previous experimental studies showed that porous media combustion, a technology that has been proved to be effective to enhance the combustion intensity and stability for low caloric fuels, can be applied to NH₃ co-firing with more reactive fuel. However, the modelling study with careful consideration of heat transfer and chemical reaction is lacked. Based on the characteristic of high thermal conductivity of porous media, a one-dimensional model was established to simulate the combustion characteristics of NH₃ blended with methane (CH₄) and methanol (CH₃OH) in porous media. The results showed that the porous media had different effects on the two co-fired fuels. For CH₄/NH₃ fuel, the porous media significantly increased the burning rate and reduce the NH₃ residue in the fuel-rich condition. For CH₃OH/NH₃ fuel, however, the effect of increasing burning rate and reducing NH₃ residue was insignificant. For both co-fired fuels, the porous media combustion increased NO_x emission in a similar extent, while using air stage combustion significantly reduced NO_x emission.

KEY WORDS : Porous media; Ammonia combustion; Numerical simulation; Burning rate; NO_x emission

摘要: 氨(NH₃)是一种无碳燃料, 有望作为热能发电的替代燃料降低碳排放。多孔介质燃烧是一种可提高燃烧速率和稳定性的燃烧技术, 实验表明其用于氨与反应性更强的燃料进行混燃可以同时提高燃烧强度和燃烧稳定性, 但缺乏相应的模型研究。本文基于多孔介质导热强度高的特性, 其内部燃烧满足一维假设, 建立了一维多孔介质燃烧模型, 对 NH₃ 分别与甲烷(CH₄)、甲醇(CH₃OH)掺混时的燃烧特性进行模型计算。计算结果显示多孔介质对两种混合燃料的作用不同, 对于 CH₄/NH₃ 燃料, 多孔介质可以明显提高燃烧速率并降

低富燃状态的 NH₃ 残留; 对于 CH₃OH/NH₃ 燃料, 提高燃烧速率和降低 NH₃ 残留的效果较差; 对两种混合燃料, 可燃气体预混后直接送入多孔介质燃烧都增加一定的 NO_x 排放, 增加效果相同, 而分级燃烧可以显著降低 NO_x 排放。

关键词: 多孔介质; 氨燃烧; 模拟研究; 燃烧速率; NO_x;

1 引言

随着气候变化问题日益严重,“碳中和”成为全球可持续发展的共识。具有零碳排放特性的无碳燃料中受到越来越多的关注。氨(NH₃)是一种无碳的富氢化合物, 与氢气(H₂)相比, NH₃ 因为其易液化的特点可以具有更高的体积能量密度, 以及更低的储存和运输成本^[1]。虽然 NH₃ 可以视为 H₂ 的载体, 可以先将 NH₃ 分解为 H₂ 和氮气(N₂)再燃烧, 但这种方法比将 NH₃ 作为燃料直接燃烧方法的效率低^[2]。

NH₃ 直接燃烧时, 需要克服其燃烧特性的限制。一方面, NH₃ 在空气中的层流火焰速度 S_L 的峰值仅在 7cm/s^[3]左右, 加之较低的能量密度, 存在燃烧速率低、燃烧稳定性差的问题。另一方面, NH₃ 作为含氮燃料, 在燃烧中会产生大量的燃料型 NO_x, 使其 NO_x 排放远高于其他气体燃料^{[4][5]}。为了提高 NH₃ 燃烧强度, 一些学者提出将 NH₃ 与反应活性更强的燃料, 诸如甲烷(CH₄)^[6]、H₂^{[7][8]}等掺混燃烧, 提高其燃烧稳定性和强度, 而燃料型 NO_x 的控制可以通过分级燃烧等方式加以实现。

除了掺烧高活性燃料外, 另外一个可提高燃烧强度、改善燃烧稳定性的重要途径是改进燃烧装置和燃烧方式。多孔介质燃烧作为一种应用广泛的辅助燃烧技术受到关注。惰性多孔介质能够强化燃烧

区的导热和辐射,既能够将燃烧反应所产生的热量传递给未燃气体,也能一定程度上回收烟气余热^[9],从而有效促进燃烧区域的传热。目前,多孔介质燃烧被应用于低热值和超低热值的气体燃料的燃烧。因此,也有研究者提出了将多孔介质燃烧方法应用于氨掺混燃料,有助于燃烧速率的进一步提升,也可以提高燃料中 NH_3 的掺混比例,提高 NH_3 的利用效率。近期实验研究表明^[10],多孔介质可以拓展 NH_3/H_2 掺混燃烧的稳定燃烧功率上限。

在多孔介质燃烧实验研究的基础上,一些学者^[11-15]构建了数值模型对多孔介质中的燃烧过程进行计算与预测。多孔介质复杂的孔隙结构中发生着多种路径的气相化学反应与气固热交换过程,受限于模型规模和算力需求,多孔介质模型难以在模拟孔隙中具体物理过程的同时,对详细气相化学反应机理加以考虑。一些研究关注多孔介质对流场和温度场的影响,侧重于描述孔隙结构和三维流场,对化学反应的模拟相对简化^[14];一些研究关注气固相互作用影响的化学反应过程,对气固热交换过程进行了更简化的考虑^[15]。为了准确预测掺氨燃料在多孔介质中的燃烧速率与污染物,需要在关注化学反应的同时,尽可能准确的描述不同多孔介质条件下的气固热交换过程。

为此,本文基于多孔介质高强度横向导热具有的一维温度分布特性,充分考虑气相对流和固相辐射传热条件,建立一维多孔介质燃烧模型,进而模拟 NH_3 混合燃烧时燃烧特性,包括燃烧速率、氨燃尽率、以及 NO_x 排放等。模拟使用的掺混燃料包括 CH_4 和甲醇(CH_3OH),目前掺混 CH_4 的研究较多,而 CH_3OH 是一种具有代表性的醇类生物质燃料,被视为一类“碳中和”燃料。醇类物质与汽油甚至 NH_3 的掺混燃烧也已经得到一定研究^[16,17],但多孔介质燃烧 $\text{NH}_3/\text{CH}_3\text{OH}$ 尚未见到报道。

2 数值模拟方法

2.1 物理模型

模型的研究对象是火焰在固相多孔介质中的燃烧过程,又称浸没燃烧,如图 1 所示。燃烧器上游填充孔隙率较低的蜂窝陶瓷板,防止较低功率下发生回火,燃烧器下游采用泡沫陶瓷材料,燃烧在泡沫陶瓷中进行。

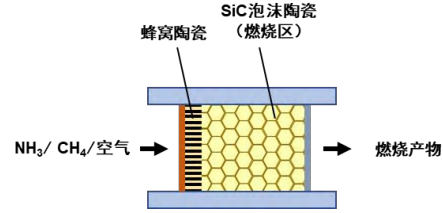


图 1 多孔介质燃烧过程

针对多孔介质气固热交换特点,考虑固体导热和气固两相间的对流换热与辐射过程,在一维层流预混火焰传播模型的基础上,将体积平均模型用于多孔介质内气体燃烧的模拟。体积平均模型一般基于以下三个假定:1) 多孔介质孔隙远小于流场宏观尺度;2) 孔内燃烧参数(如密度、温度等)的变化要远小于参数在系统中的特征变化;3) 气相与固相界面处于稳态流动,并达到瞬态热平衡。基于体积平均建立一维气固双温度反应模型,如图 2 所示。

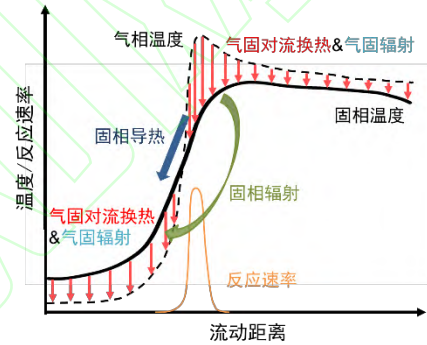


图 2 一维气固双温度多孔介质燃烧模型

2.2 数学模型

一维多孔介质气固双温度燃烧反应模型中,控制方程组如式(1)~(4)所示:

质量守恒方程,

$$\frac{dM}{dx} = 0 \quad (1)$$

组分守恒方程,

$$\dot{M} \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx}(\rho A \phi Y_k V_k) - A \phi \dot{\omega}_k W_k = 0 \quad (2)$$

气相能量方程,

$$\begin{aligned} & \dot{M} \frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_{p,g}} \frac{d}{dx} \left(\lambda A \phi \frac{dT}{dx} \right) + \\ & \frac{A \phi}{c_p} \sum_{k=1}^K \rho Y_k V_k c_{p,k} \frac{dT}{dx} + \frac{A \phi}{c_p} \sum_{k=1}^K \dot{\omega}_k h_k W_k + \\ & \phi \frac{dq_{rg}}{dx} + q_{s2g} = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

固相能量方程,

$$-\frac{1}{c_{p,s}} \frac{d}{dx} \left(\lambda_s A (1 - \phi) \frac{dT_s}{dx} \right) + (1 - \phi) \frac{dq_{rs}}{dx} + q_{g2s} + \phi \frac{dq_{rg}}{dx} + q_{rloss} = 0 \quad (4)$$

其中, ρ 、 c_p 、 T 分别是密度、比热和温度; 下标 g 、 s 和 k 分别表示气相、固相和特定气体组分。 W_k 是气体组分 k 的摩尔质量分数, $\dot{\omega}_k$ 是气体组分 k 的化学反应摩尔生成速率。 Y_k 是气体组分 k 的质量分数, V_k 是气体组分 k 的扩散速度。计算中不考虑多孔介质或者燃烧器壁面带来的流动阻力。

在多孔介质模型中, ϕ 为多孔介质的孔隙率, 固相导热系数 λ_s 确定方式如式(5)所示:

$$\lambda_s(T) = \lambda_s(T_0) * \frac{T_0}{T} \quad (5)$$

$\lambda_s(T_0)$ 是该种多孔介质在基准温度 T_0 下的导热系数。

气固对流换热项 q_{s2g} 可由式(6)~(9)^[18]计算:

$$q_{s2g} = h_v(T_s - T_g) \quad (6)$$

$$Nu_v = h_v d_m^2 / \lambda_g \quad (7)$$

$$d_m = \sqrt{4\phi/\pi/PPC} \text{ (cm)} \quad (8)$$

$$Nu_v = [37.2/(L/d_m) - 0.59][\phi(1 - \phi)^3]^{0.5} RePr \quad (9)$$

其中, d_m 是多孔介质特征孔径, PPC 指多孔介质的孔密度, 其单位为 (孔数/厘米)。 L 是多孔介质的特征厚度。

辐射热流密度 q_r 由式(10)~(13)确定:

$$q_r = q_{rs}^+ - q_{rg} - q_{rs}^- - q_{rloss} \quad (10)$$

$$q_{rloss} = \frac{a_{wall}}{a_v} (\sigma_{es} \sigma T_s^4 - \sigma_{es} \sigma T_{wall}^4) \quad (11)$$

$$q_{rg} = \phi \frac{a_v - a_{wall}}{a_v} \left(\frac{E_s - E_g}{k_r} \right) \quad (12)$$

$$\frac{dq_{rs}^+}{dx} = \left(\frac{1-\phi}{2} \right) \frac{a_v - a_{wall}}{a_v} (-2\sigma_{es} q_{rs}^+ + 2\sigma_{es} \sigma T_s^4) \quad (13)$$

其中, q_{rloss} 代表多孔介质向壁面的辐射散热, q_{rg} 代表代表气固辐射换热, q_{rs} 代表固相辐射。 a_v 和 a_{wall} 分别是多孔介质比表面积和多孔介质比壁面

面积, 计算公式如下:

$$a_v = \frac{A_{surf}}{V} \quad (14)$$

$$a_{wall} = \frac{A_{surf,wall}}{V} \quad (15)$$

$A_{surf,wall}$ 为圆柱多孔介质周向壁面面积。采用 a_v 和 a_{wall} 计算辐射散热在整体辐射强度中的占比。对于固相辐射, 采用双通量模型^[19]划分固体内辐射向正负两个方向的通量 q_{rs}^+ 和 q_{rs}^- 。

相比一维自由传播火焰模型, 多孔介质燃烧模型的固相需要考虑出口辐射散热损失, 其边界条件由式(16)确定:

$$q^-|_{x=xend} = \sigma T_e^4 - \sigma T_a^4 \quad (16)$$

2.3 计算边界条件

基于不同的火焰边界条件设置, 模型可以基于自由传播火焰模型的边界条件, 如式(17), 求解多孔介质中的燃烧速率, 也可以基于稳定火焰模型, 将入口设定为定质量流量边界条件, 求解特定工况下多孔介质中的燃烧温度场与组分场。

$$x = -\infty: \frac{d\dot{M}}{dx} = 0, T = T_u, Y_k = Y_{k,u}, \frac{dT_s}{dx} = 0$$

$$x = \infty: \frac{d\dot{M}}{dx} = 0, \frac{dT}{dx} = 0, \frac{dY_k}{dx} = 0, q^-|_{x=xend}$$

$$= \sigma T_e^4 - \sigma T_a^4$$

(17)

2.4 化学反应动力学机理

模型计算选取 CEU-NH₃ 机理^[17], 该机理包括 91 个组分和 444 个基元反应。使用该机理在宽压力范围和温度范围下能够较为准确地预测 CH₃OH/NH₃ 和 CH₄/NH₃ 的层流火焰传播速度和点火延迟时间。

2.5 计算内容及参数选取

模型的气相化学反应求解基于美国 Sandia 实验室开发的用于不同反应器模型中复杂化学反应过程求解的化学反应动力学代码 CHEMKIN。

基于多孔介质燃烧模型, 对 CH₄/NH₃ 和 CH₃OH/NH₃ 两种氨掺混燃料在氨掺混比 0~0.75 区间, 燃烧当量比 0.7~1.4 区间, 分别进行了自由火焰燃烧(无多孔介质)与多孔介质燃烧计算。其中,

根据混合物种类的不同,本文定义氨掺混比 x_{NH_3} 为燃料中 NH_3 的体积分数:

$$x_{\text{NH}_3} = \frac{X_{[\text{NH}_3]}}{X_{[\text{NH}_3]} + X_{[\text{CH}_4]}} \quad (18)$$

或

$$x_{\text{NH}_3} = \frac{X_{[\text{NH}_3]}}{X_{[\text{NH}_3]} + X_{[\text{CH}_3\text{OH}]}} \quad (19)$$

计算中,为了比较多孔介质对燃烧速率的提高效果,用 η_b 衡量多孔介质对燃烧速率的提升:

$$\eta_b = \frac{v_b - S_L}{S_L} \quad (20)$$

式中, v_b 为多孔介质燃烧速率, S_L 为自由火焰的火焰传播速度。

为了比较多孔介质对燃烧污染物 NO 的影响,用 $\Delta_{\text{NO},p}$ 表示多孔介质加入对 NO 生成量的增加程度:

$$\Delta_{\text{NO},p} = X_{[\text{NO}]_{\text{porous}}} - X_{[\text{NO}]_{\text{free}}} \quad (21)$$

其中 $X_{[\text{NO}]_{\text{porous}}}$ 和 $X_{[\text{NO}]_{\text{free}}}$ 分别为多孔介质和自由火焰工况下反应器出口处 NO 摩尔分数。

为了比较多孔介质对燃料中 NH_3 燃尽程度的影响,用 NH_3 残留率 $\alpha_{\text{NH}_3,p}$ 表示多孔介质加入对 NH_3 燃尽的促进效果:

$$\alpha_{\text{NH}_3,p} = \frac{X_{[\text{NH}_3]_{\text{porous}}}}{X_{[\text{NH}_3]_{\text{free}}}} \quad (22)$$

其中 $X_{[\text{NH}_3]_{\text{porous}}}$ 和 $X_{[\text{NH}_3]_{\text{free}}}$ 分别表示多孔介质燃烧和自由火焰工况下反应器出口处 NH_3 的摩尔分数, NH_3 残留率 $\alpha_{\text{NH}_3,p}$ 越低,说明多孔介质燃烧对燃料中 NH_3 向 N_2 的转化相比自由火焰更充分。

在数值计算的同时,本文搭建了多孔介质燃烧实验台,并基于多孔介质燃烧器的实际参数构建计算模型。多孔介质燃烧器对应的物理参数见表1,其中多孔介质材料与孔密度等参数参考自过去的多孔介质燃烧实验研究^[20]。多孔介质燃烧器的实验结果汇总与讨论会在在其他文章进行报道。

表1 多孔介质燃烧器与材料物理参数

物理参数	单位	数值
多孔介质材料直径, D	mm	50
多孔介质特征厚度, L	mm	15

材料	-	SiC
孔密度	ppi	10
孔隙率, ϕ_s	-	0.73
导热系数(1000°C), λ_s	W/(m·K)	24
比热容, $c_{p,s}$	J/(g·K)	0.7
材料发射率, ϵ_s	-	0.7

3 计算结果与分析

3.1 多孔介质燃烧特性

多孔介质燃烧相比自由火焰的显著特点,是燃烧后的高温烟气通过对流与辐射加热多孔固相,热量在固相中通过导热传递至上游,最后预热未燃预混气体,从而提高燃烧速率。图3以 CH_4/NH_3 燃料为例,对比了多孔介质燃烧和自由火焰的燃烧温度分布特点。模拟结果表明,相比自由火焰,多孔介质燃烧通过固相导热,实现了气相燃烧温度的提高,自由火焰的最高燃烧温度约为2015K,多孔介质燃烧中气相最高温度约为2111K,提高了约5%。另一方面,多孔介质固相的辐射散热效果也导致燃烧烟气温度的快速下降,在不考虑壁面导热和对流热损失的情况下,多孔介质的散热相比自由火焰更加显著。

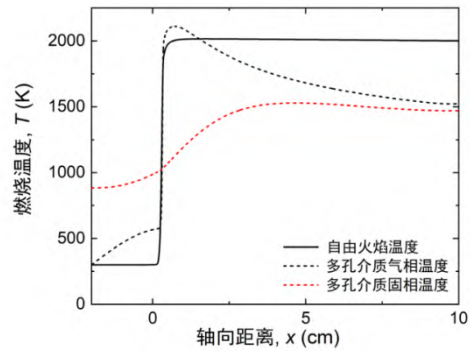


图3 多孔介质模型与自由火焰模型计算结果对比 (燃料 CH_4/NH_3 , $x_{\text{NH}_3}=0.7$, 燃烧当量比 $\phi=0.9$)

3.2 多孔介质对燃烧速率的影响

图4给出了 CH_4/NH_3 和 $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ 在不同氨掺混比和当量比下燃烧速率的计算结果。计算结果表明,相比 CH_4 掺混, CH_3OH 具有更高的燃烧速率,同时火焰速度受当量比改变的影响更小。 CH_3OH 相比 CH_4 ,燃烧过程的摩尔需氧量更低,因此当量比改变对火焰速度的影响更小。

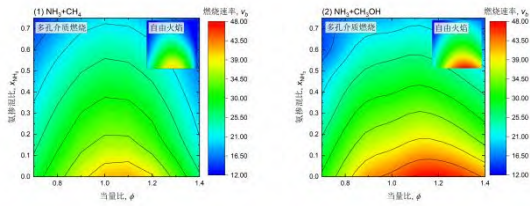


图4 不同氨掺混比和当量比下的燃烧速率：
(1) CH_4/NH_3 (左图) (2) $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ (右图)

对比多孔介质燃烧和自由火焰的燃烧速率计算结果，多孔介质固相的加入没有改变火焰速度随当量比或掺混比的变化趋势。图5更直观的对比了不同燃烧情况下多孔介质的加入对燃烧速率的改变。

对比多孔介质对 CH_4/NH_3 和 $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ 燃烧速率的提升效果。对于 CH_4/NH_3 而言，在任何当量比和氨掺混比的条件下，多孔介质都可以实现燃烧速率的提升。这种提升效果随着掺氨比的增加略有提升，受当量比的影响更加显著。在当量比 0.7 或 1.4 的贫燃/富燃条件下，多孔介质燃烧相比自由火焰可以提高 50% 的燃烧速率。将 $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ 与 CH_4/NH_3 的燃烧速率提升效果进行对比，多孔介质燃烧速率提升效果在火焰速度峰值的区间表现较差，在偏离火焰速度峰值的贫燃/富燃区域表现显著。多孔介质对 $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ 的燃烧速率提升效果在贫燃侧比较显著，而在高氨掺混比的富燃区域和火焰速度峰值区域，多孔介质反而降低了燃烧速率，这说明多孔介质固相导热对火焰速度的提升效果在这些范围内较弱，小于多孔介质固相对通流能力的阻碍，导致燃烧速率的降低。

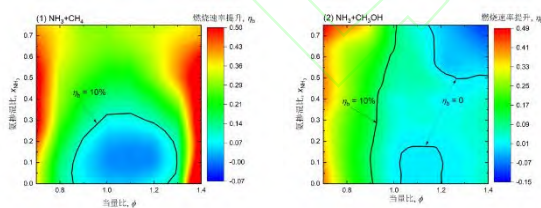


图5 不同氨掺混比和当量比下多孔介质的燃烧速率提升效果：
(1) CH_4/NH_3 (左图) (2) $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ (右图)

计算结果表明，多孔介质可以显著提高 CH_4/NH_3 的燃烧速率，但对于 $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ ，提升燃烧速率的效果只在贫燃侧显著，在一些条件下，多孔介质燃烧甚至会降低燃烧速率。

3.3 多孔介质对 NO_x 生成的影响

NO_x 是氨燃烧的主要污染物，通常分为 NO 、 NO_2 和 N_2O ，我们的模拟工况下 NO 是主要的 NO_x

组分。图6给出了 CH_4/NH_3 和 $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ 在不同氨掺混比和当量比下多孔介质燃烧与自由火焰燃烧中 NO 生成情况的计算对比结果。

计算结果表明，两种氨掺混燃料在高氨掺混比的贫燃条件下，即相图的左上角，会产生较高的 NO ，这说明氨掺混燃料难以适用于单级贫燃预混燃烧。相比 CH_4/NH_3 ， $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ 具有更高的 NO 生成和更宽的高 NO 生成当量比范围，这与 CH_3OH 的燃料源氧有关。比较多孔介质加入带来的影响，两种燃料的 $\Delta_{\text{NO},p}$ 具有相似的量级和分布趋势。

多孔介质的加入会使 CH_4/NH_3 和 $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ 燃烧产物中 NO 浓度增加，增加量在贫燃状态下受氨掺混比影响显著，而在富燃状态下主要受当量比影响。这说明氨掺混燃料燃烧中 NO 的生成在贫燃状态下主要受到氨掺混比和燃烧温度的影响，而在富燃状态下受预混气体氧浓度的控制。计算中，两种掺混燃料在氨掺混比 0.2~0.3 的条件下出现了 $\Delta_{\text{NO},p}$ 的低点，这可能是由于 NO 在不同 NH_3 浓度下出现了反应路径的改变，还需要未来进一步的反应过程分析。

总的来说，对于两种掺混燃料，多孔介质的预热效果带来程度与趋势相近的 NO 增加。

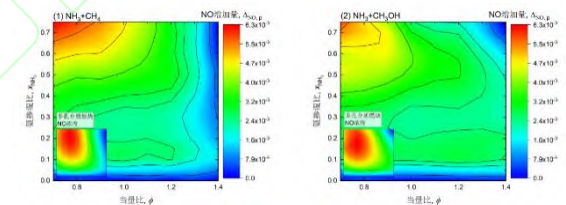


图6 不同氨掺混比和当量比下多孔介质燃烧的 NO 浓度与相比自由火焰的增加量：
(1) CH_4/NH_3 (左图) (2) $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ (右图)

3.4 多孔介质对 NH_3 燃尽率的影响

为了解决氨掺混燃烧在贫燃状态下 NO 生成过高的问题，可以采用分级燃烧方式。Li 等^[8]的计算结果表明，分级燃烧的 NO_x 排放与首级富燃级的 NH_3 燃尽程度相关。一方面，富燃级的 NH_3 剩余减少是因为 NH_3 向 N_2 的反应选择性增强，导致更多的 NH_3 参与化学反应；另一方面，富燃级的 NH_3 剩余在下游的贫燃燃烧段会继续反应形成 NO_x ，因此增加富燃状态下的 NH_3 燃尽程度，可以降低分级燃烧的整体 NO_x 排放。

图7展示了 CH_4/NH_3 和 $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ 在不同氨掺混比和当量比下多孔介质燃烧与自由火焰燃烧中 NH_3 浓度的计算结果。结果表明， CH_4/NH_3 和

CH₃OH/NH₃ 燃烧产物中 NH₃ 浓度存在显著差异。

对于 CH₄/NH₃ 而言,在模拟涉及的当量比和氨掺混比范围内,NH₃ 的 α_{NH_3} 均远小于 1,最高为 0.05,这说明多孔介质显著提高了 CH₄ 掺混燃烧中 NH₃ 的燃尽程度。结合模拟结果综合分析,这是因为多孔介质燃烧提高了反应温度,强化了 NH₃ 反应速率,提高了 NH₃ 的反应选择性。

而在 CH₃OH 掺混情况下, α_{NH_3} 普遍处于较高水平,在较高当量比和氨掺混比处接近 1,多孔介质的加入对 NH₃ 的燃尽率的提升作用不大。针对 CH₃OH 掺混情况,增加了计算的富燃当量比范围,结果显示,当量比大于 1.4 的富燃条件下,多孔介质对 NH₃ 的燃尽率的促进效果进一步减弱。CH₃OH 作为 NH₃ 掺混燃料时,多孔介质对 NH₃ 燃尽率的提升效果较弱,这可能是由于 CH₃OH 相比 CH₄ 热值更低,因此燃烧温度的提升效果不够显著导致的,这需要后续进一步的反应机理分析。

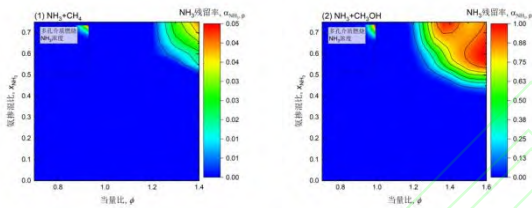


图 7 不同氨掺混比和当量比下多孔介质燃烧的 NH₃ 浓度与相比自由火焰的生成率:(1) CH₄/NH₃ (左图) (2) CH₃OH/NH₃ (右图)

3.5 预测燃烧速率和温度分布的实验对比

对多孔介质燃烧速率和温度分布的实验与模拟结果进行了对比。图 8 展示了采用 CH₄/NH₃ 燃料的多孔介质燃烧速率的实验与模拟结果。用模型计算与实验进行印证,结果表明,在掺氨比 50% 以下,模型准确的预测了多孔介质对燃烧速率的促进效果。图 9 展示了多孔介质中气相温度的测量与数值模拟结果,图中计算的气相温度曲线与测量点在趋势上具有良好的相关性,但有所偏差。一方面因为温度的测量存在误差,另一方面,我们的模型没用通过实验结果进一步考虑燃烧器的对流换热损失,因此低估了燃烧过程的散热。

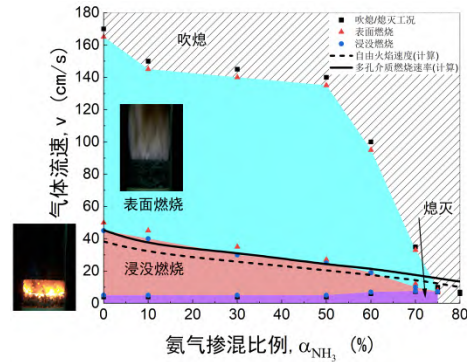


图 8 SiC 泡沫陶瓷中燃烧速率随掺氨比的变化 (燃料 CH₄/NH₃, 燃烧当量比 $\phi = 1.0$)

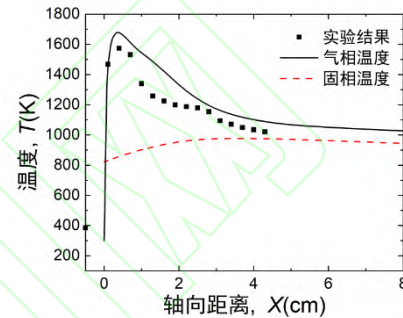


图 9 SiC 泡沫陶瓷中燃烧温度的模拟与实验结果 (燃料 CH₄, 入口流速 $V_a = 20.1$ cm/s, 燃烧当量比 $\phi = 0.6$)

上述结果表明,一维气固双温度多孔介质燃烧模型可以较为准确地预测多孔介质内燃烧温度分布和燃烧速率。

4 结论

本文对 NH₃/CH₄/CH₃OH 掺混燃料在多孔介质中的预混燃烧过程进行了模型计算研究。采用一维体积平均的多孔介质气固双温度燃烧模型和 NH₃/CH₄/CH₃OH 详细化学反应机理,对多孔介质稳态燃烧过程的燃烧速率和反应产物进行了计算模拟,并基于实验结果验证了数值模型的有效性。

通过计算结果得到了以下结论

1、多孔介质燃烧可以提高氨掺混燃烧的燃烧速率。多孔介质有效提高了 CH₄/NH₃ 的燃烧速率,在当量比 0.7 或 1.4 的贫燃/富燃条件下,燃烧速率的提升效果可以达到 50%。多孔介质对 CH₃OH/NH₃ 的燃烧速率提升效果较差,在贫燃状态下可以实现燃烧速率约 50%的提升,但在高氨掺混比富燃等状态下会降低燃烧速率。

2、多孔介质燃烧会提高氨掺混燃烧的 NO_x 排放,对于 CH₄/NH₃ 和 CH₃OH/NH₃ 两种燃料燃烧的 NO 生成具有相同程度的影响。多孔介质带来的 NO 增加量在贫燃状态下主要受氨掺混比影响,在富燃

状态下主要受当量比影响。

3、多孔介质燃烧可以增强氨掺混燃烧的 NH_3 转化率,降低富燃状态下的 NH_3 残留。对于 CH_4/NH_3 燃料,多孔介质可以将反应后的 NH_3 降低到 5% 水平。对于 $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NH}_3$ 燃料,多孔介质的 NH_3 转化增强效果较差,在当量比 1.6 状态下对 NH_3 转化几乎没有影响。

综上所述,采用多孔介质燃烧方法可以提高氨掺混燃料的燃烧速率,会提高贫燃状态 NO 生成的同时,可降低富燃状态下的 NH_3 残留。相比 CH_3OH ,多孔介质对于 CH_4/NH_3 掺混燃烧的促进效果更明显,在 CH_4/NH_3 分级燃烧的应用中更具有潜力。

参考文献

- [1] Elbaz A M, Wang S, Guiberti T F, et al. Review on the recent advances on ammonia combustion from the fundamentals to the applications[J]. Fuel Communications, 10.
- [2] Kobayashi H, Hayakawa A, Somarathne K, et al. Science and technology of ammonia combustion[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2019, 37(1):109-133.
- [3] Chong C.T., Hochgreb S. Measurements of laminar flame speeds of liquid fuels: Jet-A1, diesel, palm methyl esters and blends using particle imaging velocimetry (PIV) [J]. Proc. Combust. Inst., 2011, 33 (1):979-986.
- [4] Nozari H, Karaca G, Tuncer O, et al. Porous medium based burner for efficient and clean combustion of ammonia-hydrogen-air systems[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2017, 42(21):14775-14785.
- [5] Ni S, Zhao D, NO_x emission reduction in ammonia-powered micro-combustors by partially inserting porous medium under fuel-rich condition, Chemical Engineering Journal[J], 2022, 434, 134680,
- [6] Ramos C F, Rocha R C, Oliveira P M R, et al. Experimental and kinetic modelling investigation on NO , CO and NH_3 emissions from $\text{NH}_3/\text{CH}_4/\text{air}$ premixed flames[J]. Fuel, 2019, 254, 115693.
- [7] Ichikawa A, Hayakawa A, Kitagawa Y, et al. Laminar burning velocity and Markstein length of ammonia/hydrogen/air premixed flames at elevated pressures[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2015, 40(30):9570-9578.
- [8] Li J, Huang H, Kobayashi N, et al. Study on using hydrogen and ammonia as fuels: Combustion characteristics and NO_x formation[J]. International Journal of Energy Research, 2014, 38(9):1214-1223.
- [9] 石祥, 李卫杰, 高阳. 多孔介质燃烧技术应用[J]. 节能, 2020, 39(03):110-114.
- [10] Nozari H, Karaca G, Tuncer O, et al. Porous medium based burner for efficient and clean combustion of ammonia-hydrogen-air systems[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2017, 42(21):14775-14785.
- [11] P-F. Hsu, J. R. Howell, R. D. Matthews, A Numerical Investigation of Premixed Combustion Within Porous Inert Media, J. Heat Transf., 1993, 115(3):744-750.
- [12] R. W. Francisco, M. Costa, R. C. Catapan, A. A. M. Oliveira, Combustion of hydrogen rich gaseous fuels with low calorific value in a porous burner placed in a confined heated environment, Exp. Therm. Fluid Sci., 2013, 45:102-109.
- [13] Bubnovich V, L. Henríquez, Gnesdilov N. Numerical Study of the Effect of the Diameter of Alumina Balls on Flame Stabilization in a Porous-Medium Burner[J]. Numerical Heat Transfer, 2007, 52(3):275-295.
- [14] Shi J, Mao M, Li H, et al. A pore level study of syngas production in two-layer burner formed by staggered arrangement of particles[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2020, 45(3):2331-2340.
- [15] Hsu P F, Howell J R, Matthews R D. A Numerical Investigation of Premixed Combustion Within Porous Inert Media[J]. Journal of Heat Transfer, 1993, 115(3):744-750.
- [16] Dirrenberger P, Glaude P A, Bounaceur R, et al. Laminar burning velocity of gasolines with addition of ethanol, Fuel[J], 2014, 115:162-169,
- [17] Wang Z, Han X, He Y, et al. Experimental and kinetic study on the laminar burning velocities of NH_3 mixing with CH_3OH and $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ in premixed flames, Combustion and Flame[J], 2021, 229, 111392.
- [18] Fr X Viskanta, Gore J P. Measurement and correlation of volumetric heat transfer coefficients of cellular ceramics[J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 1998, 17(4):285-293.
- [19] Rumminger M D, Dibble R W, Heberle N H, et al. Gas temperature above a porous radiant burner: Comparison of measurements and model predictions[J]. Symposium (International) on Combustion, 1996, 26(1):1755-1762.
- [20] Gharehghani A, Ghasemi K, Siavashi M, Mehranfar S. Applications of porous materials in combustion systems: A comprehensive and state-of-the-art review, Fuel, 2021, 304:121411.



###

李亮 (1997), 男, 博士研究生, 主要从事火焰与气体燃烧方面的研究工作,
ll20@mails.tsinghua.edu.cn;

基金项目: 国家重点研发计划项目“近极限层流燃烧特性与液体燃料燃烧研究”(2021YFA0716201)。

National Key R&D Program of China "Study of near-limit laminar flow combustion characteristics and liquid fuel combustion"(2021 YFA0716201).

中国知网

Simulation on NH₃/CH₄/CH₃OH Porous Media Combustion

LI Liang, ZHANG Ruifang, ZHANG Yang, ZHANG Hai

(Key Laboratory for Thermal Science and Power Engineering of Ministry of Education, Department of Energy and Power Engineering, Tsinghua University, Beijing)

KEY WORDS: Porous media Combustion; Ammonia Combustion; Numerical Simulation; Flame speed; NO_x emissions

As a carbon-free fuel, ammonia is considered as an alternative fuel for thermal power generation to reduce carbon emissions. Porous media combustion is proved as a technology that can improve the burning rate and stability for low caloric fuels. Previous experimental results also showed that it can improve the combustion intensity and stability for ammonia co-firing with more reactive fuel, but the modelling study with careful consideration of heat transfer and chemical kinetics is lacked.

Based on the characteristic of high thermal conductivity of porous media, a one-dimensional model was established to simulate the combustion characteristics of NH₃ blended with methane (CH₄) and methanol (CH₃OH) in porous media. In

order to improve the accuracy of the gas-phase chemical reaction calculation, the model used the volumetric averaging simplification method to simplify the gas-solid two-phase heat exchange process from three-dimension into one dimension. The gas-solid two-phase heat exchange process was divided into solid thermal conduction, gas-solid convection, solid radiation, gas-solid radiation and wall radiation heat dissipation, calculated based on appropriate physical models and parameters. This proposed model was able to predict the combustion states and evaluate the combustion performance for a variety of fuels burning in porous media. The schematic diagram is shown in Fig. 1.

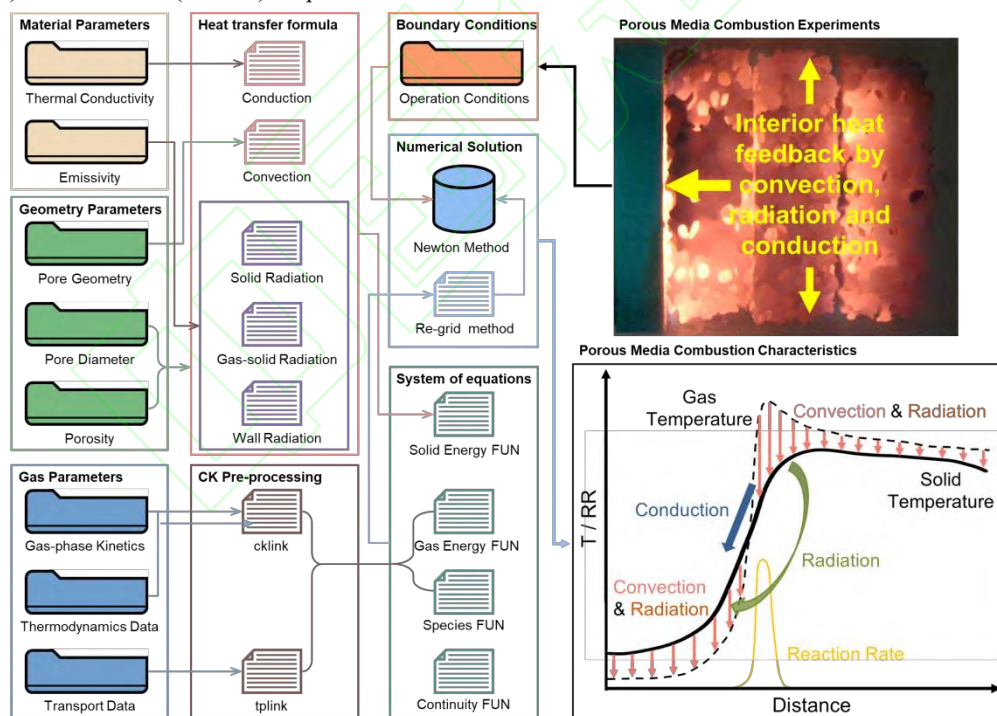


Fig. 1 Computational model systems for combustion in porous media

The combustion characteristics of NH₃ blended with CH₄ and CH₃OH were calculated by the model. The results showed that the porous media had different effects on the two co-fired fuels. For CH₄/NH₃ fuel, the porous media significantly increased the burning rate and reduce the NH₃ residue in the fuel-rich condition. For CH₃OH/NH₃ fuel, the effect of increasing burning rate and

reducing NH₃ residue was insignificant. For both kinds of mixed fuels, the porous media combustion increased NO_x emission in a similar extent, while using air stage combustion significantly reduced NO_x emission.