ГОРЕНИЕ И ВЗРЫВ, 2026. Том 19. №2. С. 23–34

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПЛАМЕНИ В ПРЕДВАРИТЕЛЬНО ПЕРЕМЕШАННОЙ СМЕСИ NH_3/CH_4/ВОЗДУХ И ОБРАЗОВАНИЯ NOx С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДЕТАЛЬНЫХ ХИМИКО-КИНЕТИЧЕСКИХ МЕХАНИЗМОВ*

Д. А. Сластная[1], М. Ю. Хребтов[2], В. М. Дулин[3]

Аннотация: Представлены результаты прямого численного моделирования ламинарного пламени в предварительно перемешенной стехиометрической смеси NH_3/CH_4/воздух при мольной доле аммиака в топливе 0,2 с использованием трех детальных химико-кинетических механизмов: Okafor с соавт., Zhu с соавт. и GRI-Mech 3.0. Показано, что все рассматриваемые химико-кинетические механизмы демонстрируют согласованное описание поля температуры в пламени. Сравнение с экспериментальными данными, полученными методом PLIF (Planar Laser-Induced Fluorescence), показало, что пространственная структура распределений радикала NH, предсказанная механизмами Okafor с соавт. и GRI-Mech 3.0, удовлетворительно согласуется с измерениями, тогда как механизм Zhu с соавт. занижает массовую долю NH. При этом все механизмы систематически завышают массовую долю оксида азота NO по сравнению с экспериментом. Для детального сопоставления химико-кинетических механизмов проанализированы распределения температуры и состава смеси вдоль линии тока, проходящей через фронт пламени. Показано, что положение фронта пламени вдоль линии тока зависит от выбора химико-кинетического механизма, что обусловлено различиями в эффективном индукционном участке воспламенения. При этом с учетом смещения фронта пламени распределения основных компонентов смеси и продуктов реакции оказываются сходными для всех механизмов. В то же время различия в распределениях ключевых радикалов и промежуточных азотсодержащих соединений приводят к заметным расхождениям в величинах образования оксидов азота NO и NO_2. В частности, механизм GRI-Mech 3.0 предсказывает наиболее высокие уровни NOx, тогда как механизм Okafor с соавт. приводит к минимальным значениям NO, а механизм Zhu с соавт. — к минимальным значениям NO_2. Полученные результаты указывают на различия и ограниченность рассмотренных детальных химико-кинетических механизмов в описании путей радикальной азотной и сопряженной азотно-углеродной химии, определяющих структуру пламени и образование оксидов азота. Это подчеркивает необходимость дальнейшего совершенствования химико-кинетических моделей для корректного численного моделирования пламени смесей NH_3/CH_4/воздух и надежного прогнозирования выбросов NOx.

Ключевые слова: ламинарное пламя; предварительно перемешанная смесь NH_3/CH_4/воздух; прямое численное моделирование; детальный химико-кинетический механизм

DOI: 10.30826/CE26190203 **EDN:** MWAYXB

Литература

1. *Valera-Medina A., Xiao H., Owen-Jones M., David W. I., Bowen P. J.* Ammonia for power // Prog. Energ. Combust., 2018. Vol. 69. P. 63–102.
2. *Cardoso J. S., Silva V., Rocha R. C., Hall M. J., Costa M., Eusébio D.* Ammonia as an energy vector: Current and future prospects for low-carbon fuel applications in internal combustion engines // J. Clean. Prod., 2021. Vol. 296. P. 126562.
3. *Jin T., Dong W., Qiu B., Xu C., Liu Y., Chu H.* Effect of ammonia on laminar combustion characteristics of methane–air flames at elevated pressures // ACS Omega, 2022. Vol. 7. № 18. P. 15326–15337.
4. *Zhu X., Guiberti T. F., Li R., Roberts W. L.* Numerical study of heat release rate markers in laminar premixed ammonia–methane–air flames // Fuel, 2022. Vol. 318. P. 123599.
5. *Herbinet O., Bartocci P., Dana A. G.* On the use of ammonia as a fuel — a perspective // Fuel Communications, 2022. Vol. 11. P. 100064.
6. *Ku J. W., Ahn Y. J., Kim H. K., Kim Y. H., Kwon O. C.* Propagation and emissions of premixed methane–ammonia/air flames // Energy, 2020. Vol. 201. P. 117632.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-49-00233, https://rscf.ru/project/25-49-00233/. Вычислительные мощности предоставлены в рамках государственного задания ИТ СО РАН «Организованные структуры и нелинейные волновые процессы в турбулентных многофазных и реагирующих потоках», рег. № 126021217059-6.

[1]Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, da.slastnaya@gmail.com
[2]Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, weexov@yandex.ru
[3]Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук, vmd@itp.nsc.ru

7. *Han X., Wang Z., Costa M., Sun Z., He Y., Cen K.* Experimental and kinetic modeling study of laminar burning velocities of NH_3/air, NH_3/H_2/air, NH_3/CO/air and NH_3/CH_4/air premixed flames // Combust. Flame, 2019. Vol. 206. P. 214–226.
8. *Okafor E. C., Naito Y., Colson S., Ichikawa A., Kudo T., Hayakawa A., Kobayashi H.* Experimental and numerical study of the laminar burning velocity of CH_4–NH_3–air premixed flames // Combust. Flame, 2018. Vol. 187. P. 185–198.
9. Chemical-kinetic mechanisms for combustion applications. — San Diego, CA, USA: University of California San Diego. http://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html.
10. The GRI-Mech 3.0 Mechanism. http://combustion.berkeley.edu/gri_mech/.
11. *Shu T., Xue Y., Zhou Z., Ren Z.* An experimental study of laminar ammonia/methane/air premixed flames using expanding spherical flames // Fuel, 2021. Vol. 290. P. 120003.
12. *Tian Z., Li Y., Zhang L., Glarborg P., Qi F.* An experimental and kinetic modeling study of premixed $NH_3/CH_4/O_2$/Ar flames at low pressure // Combust. Flame, 2009. Vol. 156. No. 7. P. 1413–1426.
13. *Konnov A. A.* Implementation of the NCN pathway of prompt-NO formation in the detailed reaction mechanism // Combust. Flame, 2009. Vol. 156. № 11. P. 2093–2105.
14. *Ramos C. F., Rocha R. C., Oliveira P. M., Costa M., Bai X. S.* Experimental and kinetic modelling investigation on NO, CO and NH_3 emissions from NH_3/CH_4/air premixed flames // Fuel, 2019. Vol. 254. P. 115693.
15. *Dagaut P., Glarborg P., Alzueta M. U.* The oxidation of hydrogen cyanide and related chemistry // Prog. Energ. Combust., 2008. Vol. 34. № 1. P. 1–46.
16. *Rocha R. C., Ramos C. F., Costa M., Bai X. S.* Combustion of NH_3/CH_4/air and NH_3/H_2/air mixtures in a porous burner: Experiments and kinetic modeling // Energ. Fuel., 2019. Vol. 33. № 12. P. 12767–12780.
17. *Rocha R. C., Zhong S., Xu L., Bai X. S., Costa M., Cai X., Kim H., Brackmann C., Alden M.* Structure and laminar flame speed of an ammonia/methane/air premixed flame under varying pressure and equivalence ratio // Energ. Fuel., 2021. Vol. 35. № 9. P. 7179–7192.
18. *Richter M., Lill J., Barlow R. S., Dreizler A., Dawson J. R., Geyer D.* Measurements of NO in the post-flame region of laminar premixed ammonia/methane–air flames using laser-induced fluorescence // Combust. Flame, 2025. Vol. 282. P. 114450.
19. *Wang Z., Han X., He Y., Zhu R., Zhu Y., Zhou Z., Cen K.* Experimental and kinetic study on the laminar burning velocities of NH_3 mixing with CH_3OH and C_2H_5OH in premixed flames // Combust. Flame, 2021. Vol. 229. P. 111392.
20. *Arunthanayothin S., Stagni A., Song Y., Herbinet O., Faravelli T., Battin-Leclerc F.* Ammonia–methane interaction in jet-stirred and flow reactors: An experimental and kinetic modeling study // P. Combust. Inst., 2021. Vol. 38. № 1. P. 345–353.
21. *Zhu W., Zhang M., Zhang X., Meng X., Long W., Bi M.* A comprehensive kinetic modeling study on NH_3/H_2, NH_3/CO and NH_3/CH_4 blended fuels // Int. J. Hydrogen Energ., 2024. Vol. 85. P. 228–241.
22. *Kovaleva M., Hayakawa A., Colson S., Okafor E. C., Kudo T., Valera-Medina A., Kobayashi H.* Numerical and experimental study of product gas characteristics in premixed ammonia/methane/air laminar flames stabilised in a stagnation flow // Fuel Communications, 2022. Vol. 10. P. 100054.
23. *Poinsot T., Veynante D.* Theoretical and numerical combustion. — 2nd ed. — RT Edwards, Inc., 2005. 544 p.
24. *Wu C., Chen Y. R., Schießl R., Shy S. S., Yu C., Maas U.* Experimental and numerical investigation of the induced ignition process in ammonia/air and ammonia/hydrogen/air mixtures // P. Combust. Inst., 2024. Vol. 40. No. 1-4. P. 105466.
25. *Faghih M., Valera-Medina A., Chen Z., Paykani A.* Effect of radiation on laminar flame speed determination in spherically propagating NH_3–air, NH_3/CH_4–air and NH_3/H_2–air flames at normal temperature and pressure // Combust. Flame, 2023. Vol. 257. P. 113030.
26. *Nakamura H., Shindo M.* Effects of radiation heat loss on laminar premixed ammonia/air flames // P. Combust. Inst., 2019. Vol. 37. No. 2. P. 1741–1748.
27. *Cuoci A., Frassoldati A., Faravelli T., Ranzi E.* Numerical modeling of laminar flames with detailed kinetics based on the operator-splitting method // Energ. Fuel., 2013. Vol. 27. No. 12. P. 7730–7753.
28. *Cuoci A., Frassoldati A., Faravelli T. Ranzi E.* A computational tool for the detailed kinetic modeling of laminar flames: Application to C_2H_4/CH_4 coflow flames // Combust. Flame, 2013. Vol. 160. No. 5. P. 870–886.

Поступила в редакцию 13.01.2026
После доработки 26.01.2026
Принята к публикации 02.02.2026