

NH₃/Air 混合层自点火直接数值模拟研究

杨文豪^{1,2}, 罗开红¹

(1. 清华大学能源与动力工程系燃烧能源中心, 北京 100084;

2. 中联新能源科技开发公司氢能产品部, 长沙 410013)

摘要: 采用直接数值模拟方法研究非预混状态的 NH₃/Air 混合层在层流和湍流条件下的自点火、火焰传播和生成 NO 过程。添加氢气、压力增加和湍流混合都会加快氨气的自点火过程。NH₂、HNO 和 OH 3 个自由基可以分别表征点火的诱导和热释放阶段。层流和湍流条件下, 释热率都会在火焰传播末期产生两个峰值, 即分层现象: 小峰值区主要与 OH 的基元反应有关, 大峰值区主要与 NH₂ 和 HNO 的基元反应有关。添加氢气和湍流都会提高 NO 的生成量。最大 NO 数值曲线随时间会先增大后减小, 两个阶段由 NO 的反应项和扩散项分别主导。

关键词: 氨气混合层; 自点火; 一氧化氮生成; 直接数值模拟

中图分类号: TK11

文献标志码: A

文章编号: 1006-8740(2024)05-0447-10

Direct Numerical Simulations of Auto-Ignition for NH₃/Air Mixing Layer

Yang Wenhao^{1,2}, K. H. Luo¹

(1. Center for Combustion Energy, Department of Energy and Power Engineering,

Tsinghua University, Beijing 100084, China;

2. Hydrogen Energy Division, Zoomlion New Energy Technology Development Company, Changsha 410013, China)

Abstract: Direct numerical simulation was applied to study the auto-ignition, flame propagation and NO formation for non-premixed NH₃/Air mixing layer under laminar and turbulent conditions. The auto-ignition was accelerated by hydrogen addition to the initial fuel of ammonia, elevated pressure and turbulent mixing. Two stages of auto-ignition, induction and thermal runaway, were clearly characterized by three radicals, NH₂, HNO and OH. Two peaks occurred for heat release at the end of flame propagation in both laminar and turbulent cases, which was known as the stratification phenomenon. The region of small peak was mainly formed by the elementary reactions of OH, and that of large peak was mainly formed by those of NH₂ and HNO. NO formation was enhanced by hydrogen addition and turbulence. The maximum concentration of NO varied with time, increasing first and then decreasing. The two stages were primarily governed by the reaction and diffusion terms of NO, respectively.

Keywords: ammonia mixing layer; auto-ignition; NO formation; direct numerical simulations

在“3060 双碳目标”背景下, 人类如何高效地使用清洁能源成为当前燃烧领域研究的热点之一。作为不含碳元素的燃料之一, 氢气(H₂)一直是燃烧科

学研究的重点。然而, 由于其难存储和运输, 大规模使用氢气存在一定的风险。作为一种易液化、氢元素含量很高^[1]的零碳燃料, 氨气(NH₃)近年来得到了国

收稿日期: 2024-04-11.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52250710681).

作者简介: 杨文豪(1995—), 男, 博士, 工程师.

通信作者: 杨文豪, yangwh17@tsinghua.org.cn.

际燃烧领域的大规模关注. 在氨气的燃烧反应动力学方面, 许多详细的化学反应机理被提出^[2-4]. 实验中测量的不同压力、当量比条件下的零维均相点火延迟时间和层流火焰速度被当作验证不同机理适用性的标准. 杨斌等^[5]很好地总结了不同人提出的化学反应机理的适用性. 另外, 为提高氨气的燃烧强度, 燃料掺混和富氧条件都是行之有效的方法.

作为燃烧的另外一种重要模式, 非预混火焰也是基础研究所不可忽视的. 剑桥大学 Mastorakos^[6]针对非预混火焰的自点火研究进行了非常细致的阐述. 他指出非预混火焰中的自点火是以低温燃料和高温氧化剂之间的温差导致的化学反应为开始, 进而从点火向火焰形成并传播的转换过程. 非预混燃烧的产生方式主要是对冲火焰和射流火焰两种. Liñán^[7]揭示了温度和 Damköhler 数之间的 S 型曲线关系, 展示出对冲火焰点火, 即从冷态到燃烧状态的转换过程. 目前为止, 此项研究的燃料集中在氢气^[8]、甲烷^[9]、合成气^[10]和二甲醚^[11]等. 射流火焰, 包括实验与数值模拟, 也被广泛应用于不同燃料的自点火特性研究, 不同压力、温度、湍流强度等初始条件都对火焰的自点火与熄灭、火焰形成与传播、火焰高度等重要参数有显著影响. 另外, 尽管实验中很难实现, 燃料与氧化剂混合层的燃烧数值模拟也是研究非预混火焰自点火的一个重要方法. Bilger^[12]提出基于元素计算出的混合分数作为表征非预混火焰的一个重要参数. Mastorakos 等^[13]发现混合层燃烧中, 自点火产生于最大反应活性混合分数 Z_{mr} (most reactive mixture fraction) 的位置. 该混合分数远小于燃料和氧化剂当量比为 1.0 时的混合分数. 此参数可以通过不同燃料和氧化剂的配比, 在零维均相和一维层流混合层的燃烧模拟中计算得到, 能够很好地预测湍流混合层点火产生位置的混合分数. 然而, 在湍流条件下, 只有混合分数等于 Z_{mr} 且标量耗散率 χ (scalar dissipation rate, SDR) 较低的位置才会产生点火核心. 有些学者通过采用直接数值模拟方法, 研究湍流条件下不同燃料(氢气^[14-21], 二甲醚^[22-27], 正庚烷^[28-31])的混合层自点火特性被研究, 揭示了高压和高湍流强度对不同燃料自点火的影响.

到目前为止, 针对氨气的自点火研究更多的集中在处于不同压力、当量比等条件下的预混火焰中^[32-37]. 氨气在非预混火焰模式中的自点火研究较为缺乏. 直接数值模拟作为一种可以详细求解 Navier-Stokes 方程的一种方法, 目前被广泛利用在燃烧领域的研究当中. 本文采用直接数值模拟方法, 研究高压下 NH_3 /空气混合层在层流和湍流条件下的自点火、火焰形成

和传播以及一氧化氮(NO)生成的 3 个问题, 揭示了非预混火焰中氨气燃烧的部分重要特征.

1 数值模拟方法和计算条件

1.1 求解方程和边界条件

本研究采用直接数值模拟代码 PARCOMB^[38]求解 Navier-Stokes 方程组, 包括连续性方程(1)、动量方程(2)、组分方程(3)、能量方程(4)、理想气体状态方程(5), 忽略体积力、Soret 效应、热辐射作用. 完整的求解方程组如下:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j Y_k)}{\partial x_j} = -\frac{\partial(\rho Y_k V_{kj})}{\partial x_i} + \omega_k \quad (3)$$

$$\frac{\partial(\rho e_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j e_i + p u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \frac{\partial(\tau_{ij} u_i)}{\partial x_j} \quad (4)$$

$$\frac{p}{\rho} = \frac{R}{W} T \quad (5)$$

式中: ρ 为混合物密度; u_j 为速度分量; p 为压力; $k = 1, 2, 3, \dots, N_s$; N_s 为组分总数; V_{kj} 为组分在方向上的扩散速度分量; ω_k 为组分的化学反应生成速率; q_j 为热通量, τ_{ij} 为应力张量. PARCOMB 在空间求解上采用六阶中心差分格式, 时间求解上采用四阶 Runge-Kutta 格式, 边界条件采用 Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions (NSCBC) 格式. 有关此代码的更多介绍和相关验证及研究结果可以参考相关文献[36, 39-41].

1.2 初始条件

图 1 为温度、燃料、氧化剂的初始分布. 左侧为低温燃料, 右侧为高温氧化剂. 本研究分别计算了两种燃料, 第 1 种是 NH_3/H_2 以体积比 9:1 混合的掺混燃料 ($Y_{\text{NH}_3} = 98.7\%$, $Y_{\text{H}_2} = 1.3\%$), 第 2 种是纯 NH_3 的燃料 ($Y_{\text{NH}_3} = 100\%$). 中间混合层的各组分质量分数分布遵循双曲正切方程:

$$\varphi = \varphi_0 + \frac{\Delta \varphi}{2} [1 - \tanh(s \cdot (x - x_m))] \quad (6)$$

式中: $\Delta \varphi$ 为左右两侧相关参数(温度和各个组分质量分数)的差值; x_m 为 x 轴计算域中点位置; 刚性参数 s 表示混合层厚度, 本研究选取数值 2000. 压力和湍流相关参数见表 1. 本研究也计算了相对应的一维层流混合层. 4 个湍流算例的湍流雷诺数 Re_t 均等于

148, Kolmogorov 尺度 η 在网格尺度 Δx 的 2~3 倍之间. 化学反应采用 Rocha 简化机理^[42], 包括 22 个组分和 66 个基元反应. 混合分数 Z 、标量耗散率 χ 、点火延迟时间 t_{ign} 计算采用如下方程:

$$Z = \frac{0.25 \frac{Y_H - Y_{H,ox}}{W_H} + 0.75 \frac{Y_N - Y_{N,ox}}{W_N} - \frac{Y_O - Y_{O,ox}}{W_O}}{0.25 \frac{Y_{H,fu} - Y_{H,ox}}{W_H} + 0.75 \frac{Y_{N,fu} - Y_{N,ox}}{W_N} - \frac{Y_{O,fu} - Y_{O,ox}}{W_O}} \quad (7)$$

$$\chi = 2D(|\nabla Z|)^2 \quad (8)$$

$$\frac{\partial^2 H_{max}}{\partial t^2} \Big|_{t=t_{ign}} = 0 \quad (9)$$

式中: Y_H 、 Y_O 、 W_H 和 W_O 分别是元素 H 和 O 的质量分数和摩尔质量; 下标 ox 和 fu 分别代表氧化剂和燃料

一侧; D 为热扩散系数; H_{max} 为燃烧过程中的最大释热率.

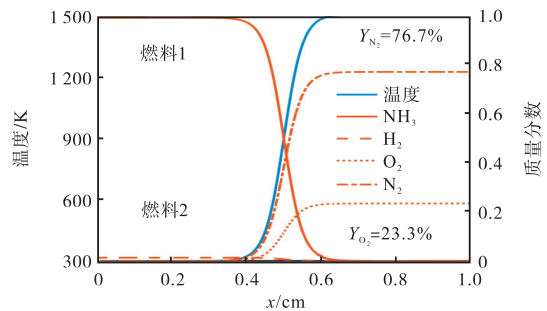


图 1 温度、燃料和氧化剂初始分布

Fig.1 Initial distribution of temperature, fuel and oxidizer

表 1 湍流初始条件

Tab.1 Initial conditions of turbulence

燃料	p/MPa	$u'/(m \cdot s^{-1})$	l/mm	Re_t	$\Delta x/\mu\text{m}$	$\eta/\mu\text{m}$
100% NH ₃	1	0.443 8	0.50	148	5.0	11.8
100% NH ₃	2	0.443 8	0.25	148	2.5	5.9
90% NH ₃ /10% H ₂	1	0.479 8	0.50	148	5.0	11.8
90% NH ₃ /10% H ₂	2	0.479 8	0.25	148	2.5	5.9

2 层流结果

2.1 零维均相结果

通过计算混合分数, 可以将温度、燃料、氧化剂 3 个参数关于 x 轴位置的双曲正切分布转换为关于混合分数 Z 的线性分布, 而后使用 Cantera 计算不同混合分数时 (即燃料和氧化剂不同的混合状态) 零维均相自点火延迟时间, 相关计算可见文献^[13, 17]. 当 $Z=0$ 时, 代表高温氧化剂一侧, 当 $Z=1$ 时, 代表低温燃料一侧.

2.1.1 点火延迟时间和最大反应活性混合分数

混合分数 Z 较小时, 燃料较少, 混合物初始温度较高. 混合分数 Z 较大时, 燃料较多, 混合物初始温度较低. 因此, 混合物的点火延迟时间应当是关于变量混合分数 Z 的一条开口向上的类二次函数曲线, 即存在某一混合分数对应最小点火延迟时间. 此混合分数即可定义为最大反应活性混合分数 Z_{mr} . 图 2 展示了两种燃料在 1 MPa 和 2 MPa 时点火延迟时间与混合分数的关系. (N100 表示 100%NH₃, N9H1 表示 90% NH₃/10% H₂). 从图中可以确定 4 种情况下 Z_{mr} 的分别为 0.032 3、0.031 1、0.061 8 和 0.053 1. 相同燃料下, 压力变大, 降低, 所需点火的初始温度越高. 在氨气中加入氢气, Z_{mr} 会增大, 所需初始温度相较纯氨气点火更低, 表明氢气会明显增加混合物反应活性, 显著降低点火延迟时间.

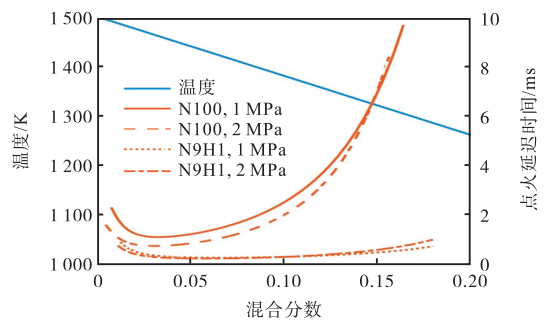


图 2 自点火延迟时间关于混合分数的关系曲线

Fig.2 Auto-ignition delay time along mixture fraction

2.1.2 温度、释热率和 3 个自由基

图 3 展示出 100% NH₃ 算例在 1 MPa 下, $Z = Z_{mr}$ 时温度、释热率、自由基 NH₂、OH、HNO 的时间变化曲线 ($Z = 0.032 3$, $t_{ign} = 1.018 \text{ ms}$, $T_0 = 1461 \text{ K}$, $p = 1 \text{ MPa}$). 4 个算例的 5 种曲线趋势大致相同. 氢气的加入和压力的升高都会显著降低点火延迟时间. 初始阶段, 化学反应不断进行, 产生多种自由基, 释热率逐渐增加, 即为诱导阶段. 混合物的温度会逐步升高并最终维持在一个稳定的数值, 此时释热率会迅速下降并趋近于零, 即为热释放阶段. 本文选取了 3 种自由基来表征整个点火过程. 从图 3 中可以看出, NH₂ 和 HNO 只存在于升温期, 即诱导阶段, 在热释放阶段会迅速降低到零. HNO 的峰值处于诱导阶段初期并且会维持一段时间, 而 NH₂ 的峰值处于诱导阶段末期, 其增长趋势与释热率增长曲线较为相

似. 这与 NH_3 的球形预混火焰中的发现一致^[36], 表明 NH_2 在预混和非预混燃烧中都可以作为释热率的一

个标记物.

2.2 一维层流结果

2.2.1 温度、释热率、自由基分布

图 4 和图 5 为 100% NH_3 的一维层流混合层计算结果, 使用混合分数为横坐标, 选取了具有明显不同特征的 4 个时刻. 点火初期, $t = 1.278 \text{ ms}$ 时刻, 温度和释热率的峰值产生于最大反应活性混合分数 Z_{mr} 位置, 距离当量比为 1.0 的混合分数 Z_{st} (Z_{st} , stoichiometric mixture fraction) 较远. 此时由于出现低温点火区域, 图 5(a) 中基本只能观察到的 NH_2 和 HNO 生成, 且 NH_2 的峰值位置处于 Z_{mr} 位置. 随时间推移, $t = 1.510 \text{ ms}$ 时刻, 释热率迅速变大并朝 Z_{st} 方向移动, 进而促使 Z_{mr} 和 Z_{st} 之间产生高温区, 与之对应的自由基 OH 开始大量生成, 明显高于 NH_2 和 HNO 的数值. 此时标量耗散率分布不在平滑, 而是出现一个低谷区, 表明点火在释热率从左向右传播过程中不断产生. 3 种自由基分布以此低谷区为界, 左侧为 OH , 右侧为 NH_2 和 HNO . 此现象表明左侧已越过点火的诱导阶段, 现处于热释放阶段, 右侧现处于诱导阶段. $t = 1.736 \text{ ms}$ 时刻, 温度不断升高并最终稳定在 Z_{st} 位置, OH 亦是如此. 释热率出现了分层现象, 即产生了一大一小两个峰值, 小峰值处于 Z_{st} 位置, 大峰值继续向右侧传播, 且对应相同时刻下标量耗散率的两个低谷区. 由于混合分数较大的位置

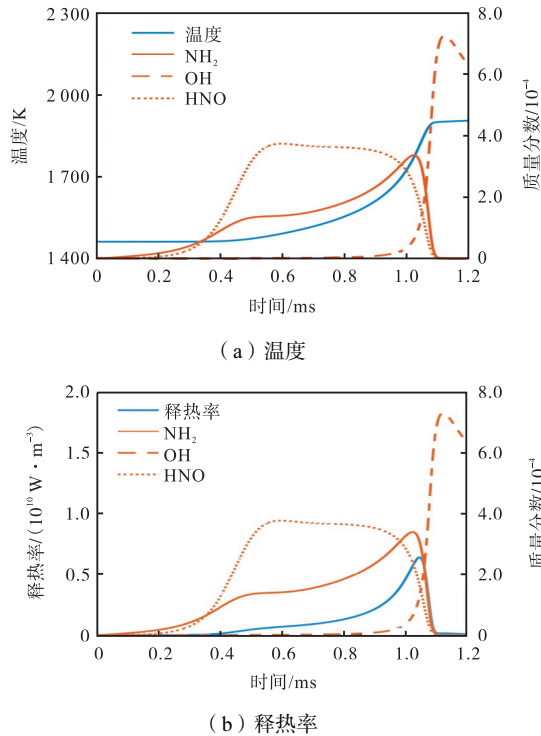


图 3 100% NH_3 在 $Z = Z_{\text{mr}}$ 时温度、释热率、自由基 NH_2 、 OH 、 HNO 的时间变化曲线

Fig.3 Auto-ignition process of temperature, heat release rate, free radicals (NH_2 , OH , HNO) at $Z = Z_{\text{mr}}$ for 100% NH_3

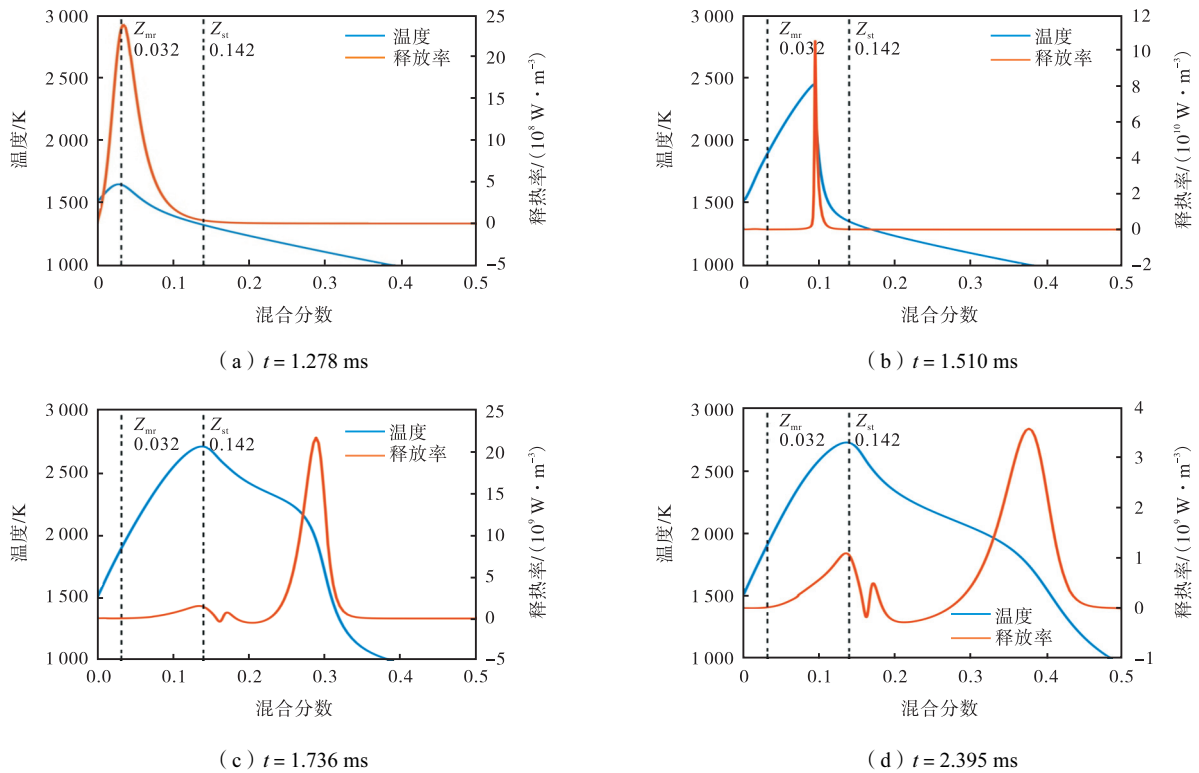


图 4 一维层流 100% NH_3 , 1 MPa 混合层算例温度、释热率随时间的分布曲线

Fig.4 Auto-ignition process of temperature and heat release rate for one-dimensional laminar 100% NH_3 , $p = 1 \text{ MPa}$

燃料较多、氧化剂较少,所以释热率数值相较前一时刻大幅降低. NH₂ 分布与大峰值释热率分布基本一致,而 HNO 数量稀少且只出现在了更靠近燃料侧的低温区域. 在 $t=2.395$ ms 时刻,温度和 OH 分布与前一时刻基本一致,释热率两个峰值的现象更加明显, NH₂ 的数值降低且分布范围变广,这是由于对应位置燃料较多,氧化剂缺少,无法进一步产生较多的化学反应,导致释热率不断下降,温度无法继续升

高. 图 6 选取了两个释热率峰值位置上,主要基元反应的释热率对总释热率的贡献,其中图 6(a)对应小峰值,图 6(b)对应大峰值. 可以明显看出,小峰值的释热率主要由与 OH 的生成与消耗有关,此现象与 OH 的分布对应. 大峰值的释热率主要与 NH₂ 和 HNO 生成与消耗有关. 基元反应的占比从化学角度证明了两个峰值放热的不同.

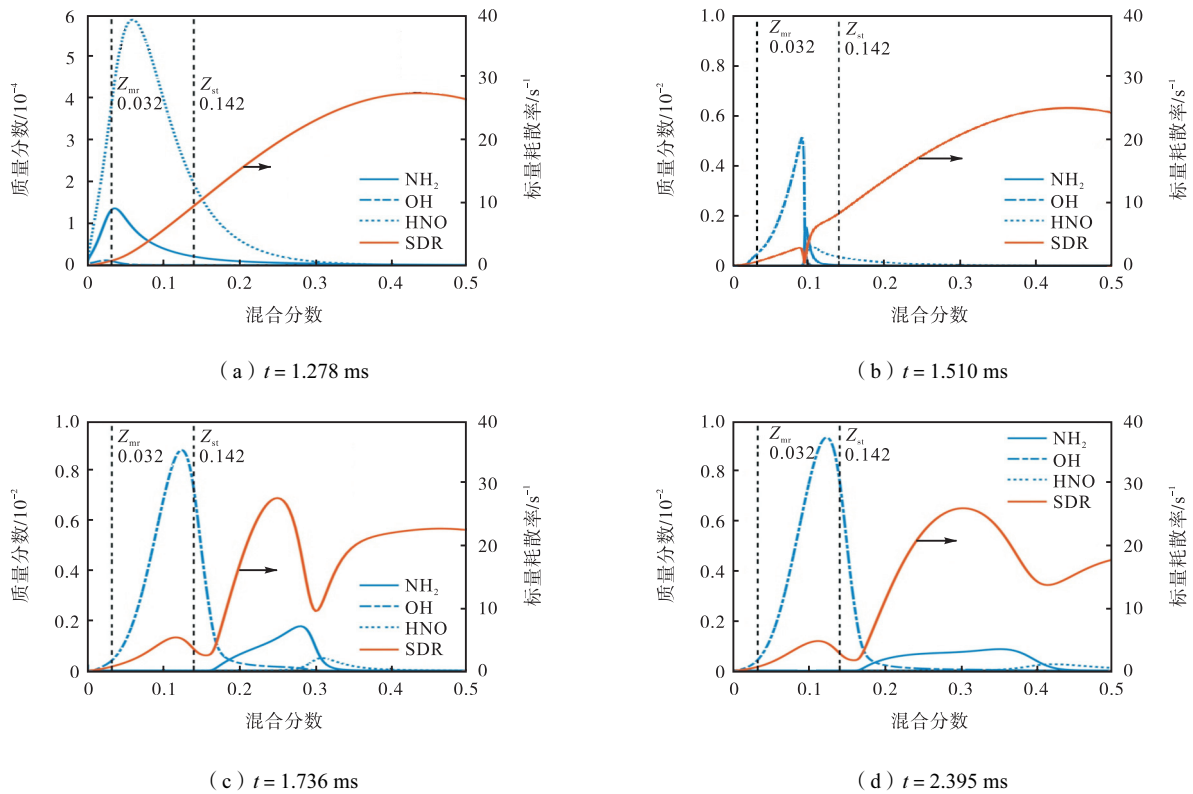


图 5 一维层流 100% NH₃, 1 MPa 混合层算例的标量耗散率、3 个自由基随时间变化的分布曲线

Fig.5 Auto-ignition process of scalar dissipation rate and three radicals for one-dimensional laminar 100% NH₃, $p = 1$ MPa

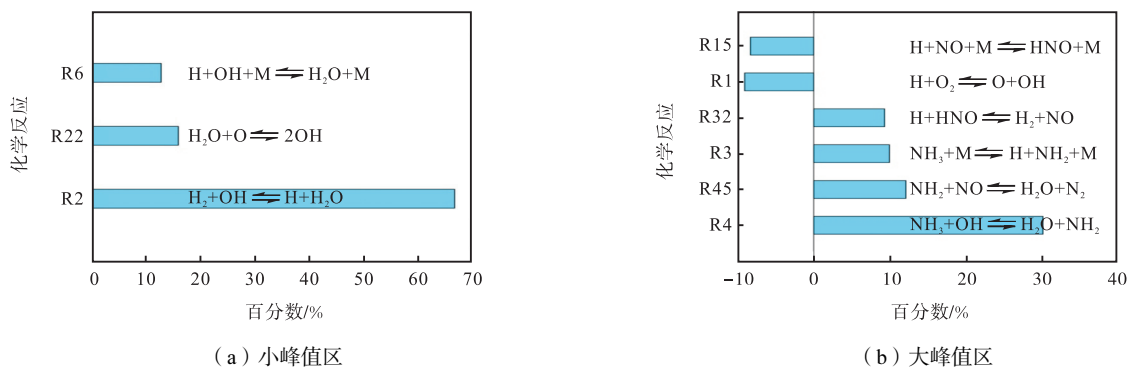


图 6 一维层流 100% NH₃, 1 MPa 混合层算例在 $t = 2.395$ ms 时刻, 两个峰值区的主要基元反应

Fig.6 Main elementary reactions for one-dimensional laminar 100% NH₃, $p = 1$ MPa at $t = 2.395$ ms under two regions

2.2.2 一氧化氮的生成与分布

NH₃ 燃烧会产生一个重要的污染物一氧化氮(NO). 图 7 展示了 4 个时刻的 NO 和标量耗散率沿混合分数的分布. 初期 NO 的生成类似于释热率, 只有一个位于 Z_{mr} 位置的峰. 在 $t = 1.510$ ms 时刻, NO

在 Z_{mr} 和 Z_{st} 之间达到最大值, 同时产生第 2 个生成区域并逐步向燃料一侧传播. 对应图 8 中 NO budget 分析的前两个时刻, NO 的生成与消耗主要与反应项有关, 对流项和扩散项数值较小且两者之间相互平衡. 从 $t = 1.736$ ms 和 $t = 2.395$ ms 两个时刻可以看

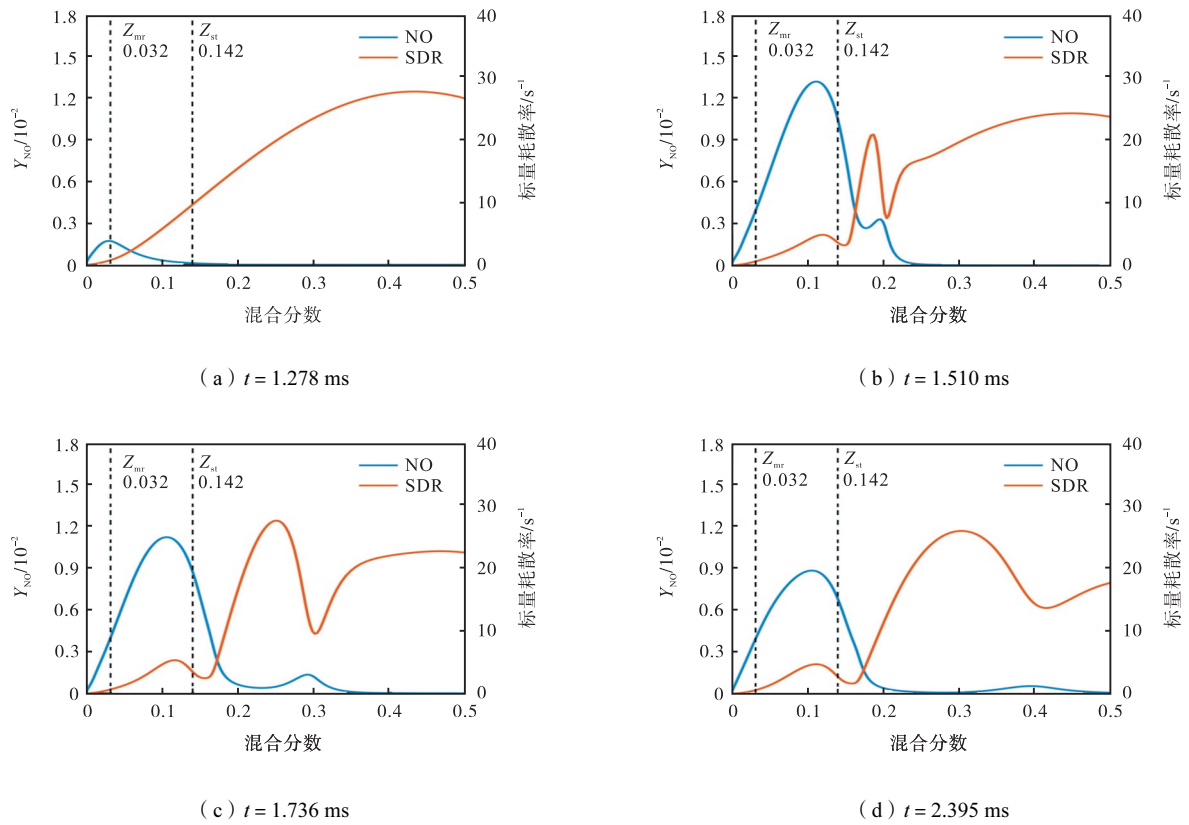


图7 一维层流 100% NH₃, 1 MPa 混合层算例的 NO 和标量耗散率随时间变化的分布曲线

Fig.7 Auto-ignition process of NO and scalar dissipation rate for one-dimensional laminar 100% NH₃, $p = 1$ MPa

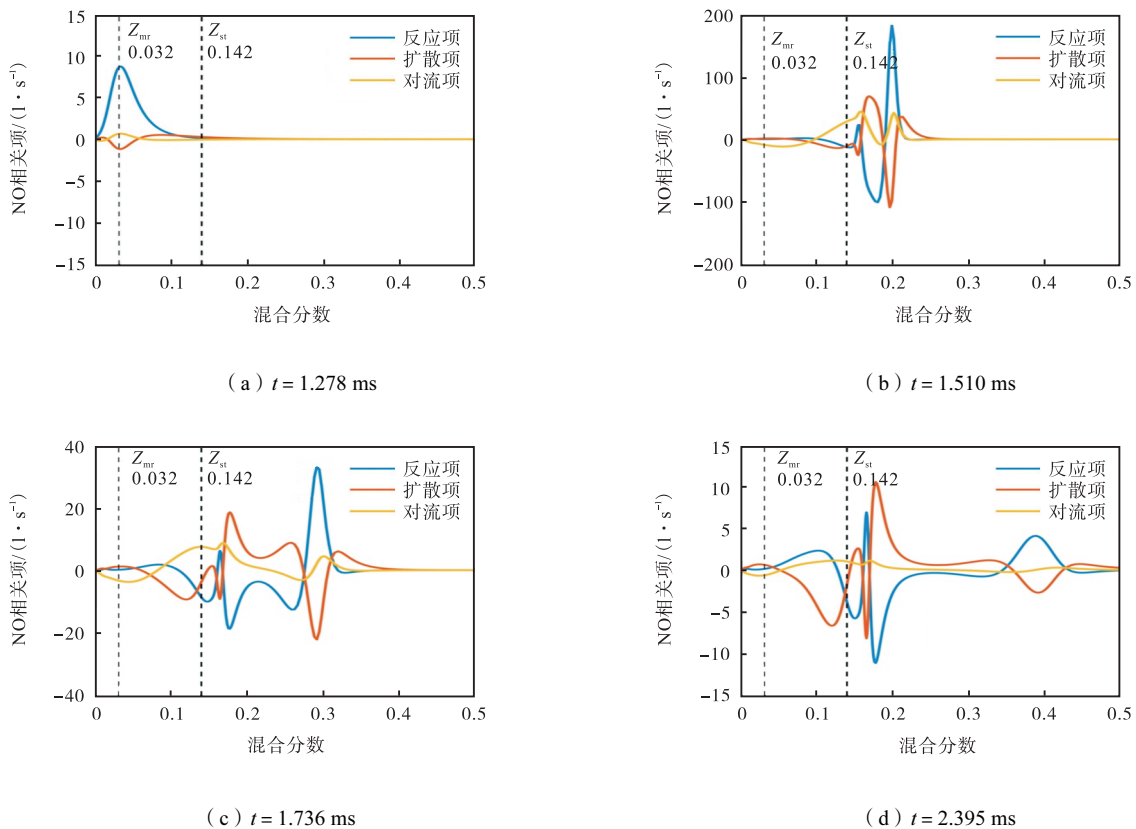


图8 一维层流 100% NH₃, 1 MPa 混合层算例的 NO 反应项、扩散项、对流项随时间变化的分布曲线

Fig.8 Auto-ignition process of NO reaction, diffusion, convection terms for one-dimensional laminar 100% NH₃, $p = 1$ MPa

出, NO 的主峰仍旧处于 Z_{mr} 和 Z_{st} 之间, 次峰继续向右侧传播, 而数值上却不断减小. 这是因为 NO 的反应项逐渐降低, 扩散项占据了主导地位, 导致了 NO 向低浓度区域的传播.

3 湍流结果

3.1 湍流对点火延迟时间的影响

图 9 是 4 种算例在层流和湍流条件下的最大释热率和最大 NO 生成随时间的变化曲线, 可以看出, 点火延迟时间会随着压力的增大和氢气的添加显著降低, 这是因为两种因素都能大幅提高氨气的反应活动. 同时, 湍流亦会影响释热率的曲线. 所不同的是, 湍流对于纯氨气混合层点火的影响, 在释热率的诱导和热释放阶段都会显现. 湍流对氢气和氨气的掺混燃料的混合层点火作用, 基本只出现于后一个阶段. 这与纯氢气湍流混和层点火的发现是一致的^[36-37], 表明尽管掺混燃料中氢气的摩尔分数只有 10%, 其作用却是不可忽视的.

3.2 湍流对 NO 生成与分布的影响

从图 9 中可以看出, 湍流会对 NO 生成有一定的

促进作用, 且对纯氨气算例的影响更大. 同样条件下, 有氢气添加的氨气算例, 其 NO 生成的数值更高, 这与已有的结论是一致的. 不论是层流还是湍流条件, NO 都会经历一个先增大后减小的过程. 此现象与氨气的预混燃烧是不同的. 在预混火焰中, NO 会先增大并最终维持在一个稳定数值, 其位置始终与局部高释热率的分布有高度重合^[36-37]. 在非预混的混合层燃烧中, 以最大释热率达到峰值为界, 达到峰值以前, NO 的峰值与释热率的峰值有着较好的重叠, 从 100% NH₃ 混合层算例在层流(图 4 和图 7 的前两个时刻)和湍流(图 10 的前两个时刻)两个条件下的结果都能证明. 最大释热率越过峰值以后, NO 的分布主要集中在 Z_{mr} 和 Z_{st} 两个等值线之间, 且数值相较之前时刻有所降低. 图 10 是湍流混合层的释热率和 NO 分布云图. 点火核心是随机并分散产生于 Z_{mr} 等值线. 释热率的峰值会逐步向燃料一侧传播, 最终形成释热率分层现象: 即在 $t = 1.705$ ms 时刻, 沿着 Z_{st} 等值线会产生一个高释热率区域; 在 Z_{st} 左侧, 即燃料一侧依旧有另外一个高释热率区域. NO 的分布同样是离散的, 其局部数值随时间的变化与层流状态下 NO 的变化基本一致.

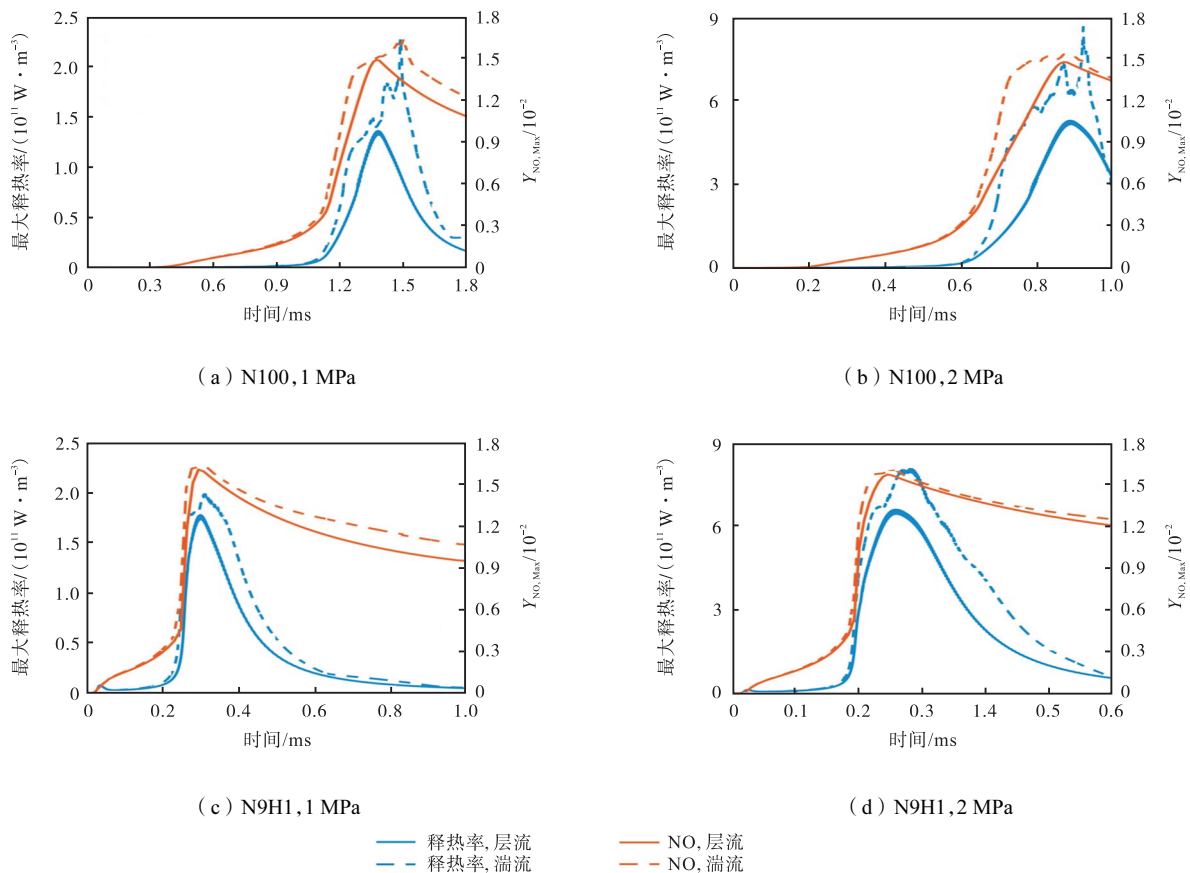
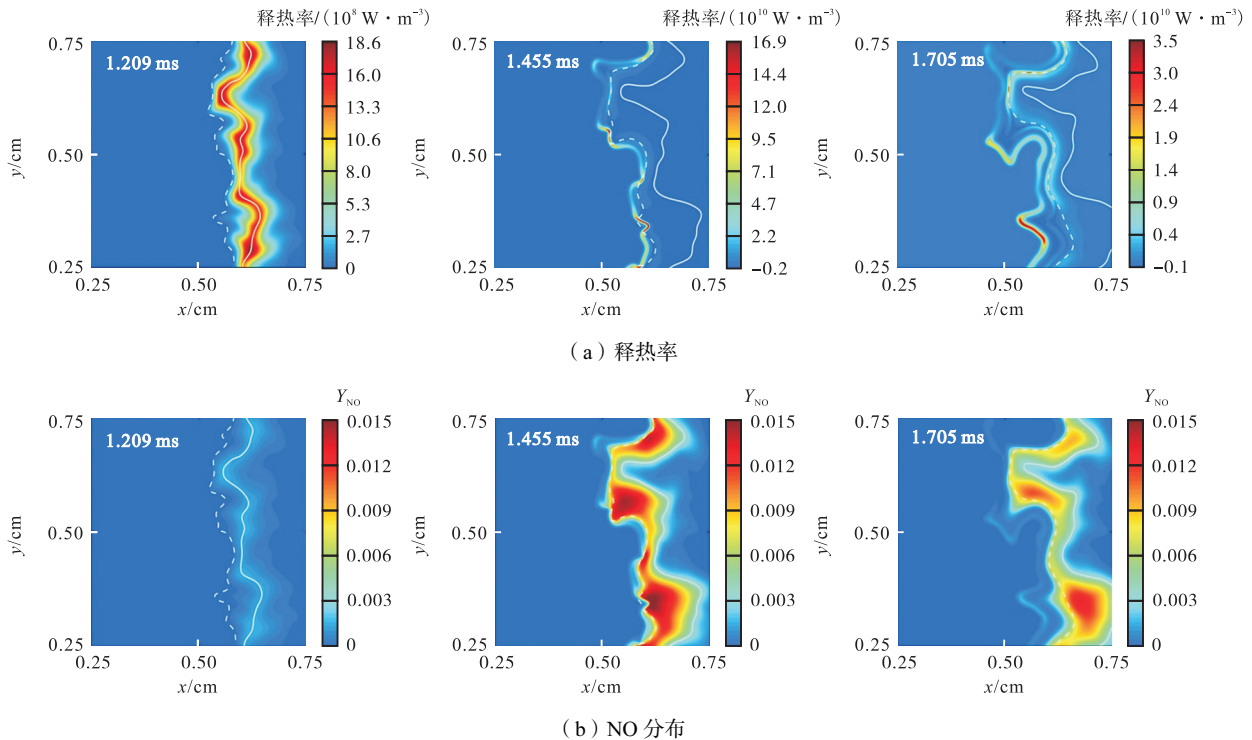


图 9 层流和湍流条件下 4 个算例的最大释热率、NO 生成数值随时间变化曲线

Fig.9 Maximum heat release rate and NO generation for all cases under laminar and turbulent conditions

图10 100% NH₃湍流混合层算例的释热率和NO随时间变化的云图Fig.10 Heat release rate and NO contour for two-dimensional turbulent 100% NH₃

4 结论

本研究通过直接数值模拟计算并分析了100% NH₃和90% NH₃/10% H₂两种燃料在低温条件下与高温氧化剂混合后的自点火现象,讨论了初始压力变化、氨气中添加氢气、层流和湍流,共计3种不同条件的影响,结论如下:

(1) 压力的升高和添加氢气都会显著加快氨气的点火过程. 3个自由基可以很好地表征自点火的诱导和热释放两个阶段. NH₂和HNO只会出现在温升阶段,而OH只会出现在温度达到最大且稳定的区域. 同时, NH₂的变化趋势与最大释热率的变化基本一致,可以作为释热率的一个标记物.

(2) 层流和湍流的混合层燃烧都会产生释热率分层现象. 在点火初期,释热率产生于Z_{mr}位置,且只有一个峰值区. 随时间推移,释热率不断向燃料一侧传播,使当地温度不断升高. 当释热率传播越过Z_{st}等值线时,由于氧化剂的逐步减少,其数值会不断降低. 同时在Z_{st}位置,会有另外一个释热率的峰值区出现,与稳定的高温区所对应,即释热率分层现象. 产生两个峰值的化学反应是不同的,小峰值区主要与OH相关,大峰值区主要与NH₂和HNO相关.

(3) 氢气和湍流的添加会促进NO的生成. NO的分布最终会稳定在Z_{mr}和Z_{st}两条等值线之间. 最

大NO数值会经历先增大后减小的两个阶段. NO相关项分析表明,增大阶段主要由反应项控制,对流项和扩散项相互平衡;减小阶段扩散项占主导地位,使NO向低浓度两侧扩散,反应项影响小于扩散项,进而导致NO的峰值降低.

参考文献:

- [1] Kobayashi H, Hayakawa A, Somarathne KDKA, et al. Science and technology of ammonia combustion[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2019, 37: 109-133.
- [2] Mathieu O, Petersen E L. Experimental and modeling study on the high-temperature oxidation of ammonia and related NO_x chemistry[J]. *Combustion and Flame*, 2015, 162: 554-570.
- [3] Okafor E C, Naito Y, Colson S, et al. Experimental and numerical study of the laminar burning velocity of CH₄-NH₃-air premixed flames[J]. *Combustion and Flame*, 2018, 187: 185-198.
- [4] Otomo J, Koshi M, Mitsumori T, et al. Chemical kinetic modeling of ammonia oxidation with improved reaction mechanism for ammonia/air and ammonia/hydrogen/air combustion[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2018, 43: 3004-3014.
- [5] 杨斌, 张英佳, 李玉阳, 等. 面向碳中和的燃烧反

- 应动力学研究进展与展望[J]. 工程热物理学报, 2022, 43(8): 1993-2008.
- Yang Bin, Zhang Yingjia, Li Yuyang, et al. Research progress and prospect of combustion reaction kinetics for carbon neutrality[J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2022, 43(8): 1993-2008 (in Chinese).
- [6] Mastorakos E. Ignition of turbulent non-premixed flames[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2009, 35(1): 57-97.
- [7] Liñán A. The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies[J]. *Acta Astronautica*, 1974, 1: 1007-1039.
- [8] Fotache C G, Kreutz T G, Zhu D L, et al. An experimental study of ignition in nonpremixed counterflowing hydrogen versus heated air[J]. *Combustion Science and Technology*, 1995, 109: 373-393.
- [9] Fotache C G, Kreutz T G, Law C K. Ignition of counterflowing methane versus heated air under reduced and elevated pressures[J]. *Combustion and Flame*, 1997, 108: 442-470.
- [10] Trujillo J Y D, Kreutz T G, Law C K. Ignition in a counterflowing non-premixed CO/H_2 -air system[J]. *Combustion Science and Technology*, 1997, 127: 1-27.
- [11] Zheng X L, Lu T F, Law C K, et al. Experimental and computational study of nonpremixed ignition of dimethyl ether in counterflow[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2005, 30: 1101-1109.
- [12] Bilger R W. The structure of turbulent nonpremixed flames[J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1989, 22: 475-488.
- [13] Mastorakos M, Baritaud T A, Poinso T J. Numerical simulations of autoignition in turbulent mixing flows[J]. *Combustion and Flame*, 1997, 109: 198-223.
- [14] Im H G, Chen J H, Law C K. Ignition of hydrogen-air mixing layer in turbulent flows[J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1998, 27: 1047-1056.
- [15] Echekeki T, Chen J H. High-temperature combustion in autoigniting non-homogeneous hydrogen/air mixtures[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2002, 29: 2061-2068.
- [16] Echekeki T, Chen J H. Direct numerical simulation of autoignition in non-homogeneous hydrogen-air mixtures[J]. *Combustion and Flame*, 2003, 134: 169-191.
- [17] Hilbert R, Thévenin D. Autoignition of turbulent non-premixed flames investigated using direct numerical simulations[J]. *Combustion and Flame*, 2002, 128: 22-37.
- [18] Yao T, Yang W H, Luo K H. Direct numerical simulation study of hydrogen/air auto-ignition in turbulent mixing layer at elevated pressures[J]. *Computers and Fluids*, 2018, 173: 59-72.
- [19] Yao T, Wang Q, Luo K H. Formation and evolution of flame kernels in autoignition of a turbulent hydrogen/air mixing layer at 50 atm[J]. *Fuel*, 2019, 255: 115735.
- [20] Song C, Luo K, Jin T, et al. Direct numerical simulation on auto-ignition characteristics of turbulent supercritical hydrothermal flames[J]. *Combustion and Flames*, 2019, 200: 354-364.
- [21] Jin T, Song C, Wang H, et al. Direct numerical simulation of a supercritical hydrothermal flame in a turbulent jet[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2021, 922: A8.
- [22] Krisman A, Hawkes E R, Chen J H. Two-stage autoignition and edge flames in a high pressure turbulent jet[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2017, 824: 5-41.
- [23] Zhang H, Hawkes E R, Chen J H, et al. A numerical study of the autoignition of dimethyl ether with temperature inhomogeneities[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2013, 34: 803-812.
- [24] Bansal G, Mascarenhas A, Chen J H. Direct numerical simulations of autoignition in stratified dimethyl-ether(DME)/air turbulent mixtures[J]. *Combustion and Flame*, 2015, 162: 688-702.
- [25] Krisman A, Hawkes E R, Talei M et al. Characterisation of two-stage ignition in diesel engine-relevant thermochemical conditions using direct numerical simulation[J]. *Combustion and Flame*, 2016, 172: 326-341.
- [26] Krisman A, Hawkes E R, Talei M, et al. A direct numerical simulation of cool-flame affected autoignition in diesel engine-relevant conditions[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2017, 36: 3567-3575.
- [27] Jin T, Wu Y, Wang X, et al. Ignition dynamics of DME/methane-air reactive mixing layer under reactivity controlled compression ignition conditions: Effects of cool flames[J]. *Applied Energy*, 2019, 249: 343-354.
- [28] Markides C N, Mastorakos M. Flame propagation following the autoignition of axisymmetric hydrogen, acetylene, and normal-heptane plumes in turbulent coflows of hot air[J]. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2008, 130: 011502.
- [29] Gopalakrishnan V, Abraham J. Effects of multicomponent diffusion on predicted ignition characteristics of an n-heptane diffusion flame[J]. *Combustion and Flame*,

- 2004, 136: 557-566.
- [30] Mukhopadhyay S, Abraham J. Influence of compositional stratification on auto-ignition in n-heptane/air mixtures[J]. *Combustion and Flame*, 2011, 158: 1064-1075.
- [31] Mukhopadhyay S, Abraham J. Influence of heat release and turbulence on scalar dissipation rate in autoigniting n-heptane/air mixtures[J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159: 2883-2895.
- [32] Mei B, Zhang X, Ma S, 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.
- [33] Pochet M, Dias V, Moreau B, et al. Experimental and numerical study, under LTC conditions, of ammonia ignition delay with and without hydrogen addition[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2019, 37: 621-629.
- [34] Okafor E C, Naito Y, Colson S, et al. Measurement and modelling of the laminar burning velocity of methane-ammonia-air flames at high pressures using a reduced reaction mechanism[J]. *Combustion and Flame*, 2019, 204: 162-175.
- [35] 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.
- [36] Yang W, Ranga Dinesh K K J, Luo K H, et al. Direct numerical simulation of turbulent premixed ammonia and ammonia-hydrogen combustion under engine-relevant conditions[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2022, 47: 11083-11100.
- [37] Netzer C, Ahmed A, Gruber A, et al. Curvature effects on NO formation in wrinkled laminar ammonia/hydrogen/nitrogen-air premixed flames[J]. *Combustion and Flame*, 2021, 232: 111520.
- [38] Thévenin D, Behrendt F, Maas U, et al. Development of a parallel direct simulation code to investigate reactive flows[J]. *Computers and Fluids*, 1996, 25: 485-496.
- [39] Fru G, Thévenin D, Janiga G. Direct numerical simulations of the impact of high turbulence intensities and volume viscosity on premixed methane flames[J]. *Journal of Combustion*, 2011, Article ID: 746719.
- [40] Fru G, Thévenin D, Janiga G. Impact of turbulence intensity and equivalence ratio on the burning rate of premixed methane-air flames[J]. *Energies*, 2011, 4: 878-893.
- [41] Ranga Dinesh KKJ, Shalaby H, Luo K H, et al. High hydrogen content syngas fuel burning in lean premixed spherical flames at elevated pressures: effects of preferential diffusion[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2016, 41: 18231-18249.
- [42] Rocha R C, Costa M, Bai X S. Chemical kinetic modelling of ammonia/hydrogen/air ignition, premixed flame propagation and NO emission[J]. *Fuel*, 2019, 246: 24-33.