DOI: 10.19666/j.rlfd.202602019

基于混合分数空间的高压氨氢对冲扩散火焰 NO 生成特性分析

李智聪[1]，符起壮[1]，王浩帆[2]，赵 凯[1]，张仲侬[3]
（1. 郑州大学机械与动力工程学院，河南 郑州 450001；
2. 西安热工研究院有限公司，陕西 西安 710054；
3. 东北电力大学能源与动力工程学院，吉林 吉林 132012）

［摘 要］【目的】氨作为经济可行的零碳燃料，与氢掺混可有效拓宽可燃极限，改善排放特性。鉴于高压燃烧装置中，氨氢火焰的一氧化氮（NO）生成特性与常压存在显著差异，需对高压氨氢扩散火焰 NO 生成特性进行分析。【方法】利用 ANSYS Chemkin 软件，对高压氨氢对冲扩散火焰开展数值模拟研究，基于混合分数空间探究压力（0.1、1.0 MPa）和掺氨比（0~60%）对火焰结构和 NO 生成特性的影响。【结果】混合分数能够有效表征氨氢火焰的结构和燃烧特性。随着掺氨比的增加，火焰峰值温度单调下降，而压力升高显著提升峰值温度并压缩反应区；氨掺混改变了 NO 的主要生成区域，使其由纯氢火焰中以热力型 NO 为主转变为高掺氨比（大于 20%）火焰中以燃料型 NO 为主；压力为 0.1 MPa 时，NO 峰值随着掺氨比单调增加，R39（N+OH=NO+H）和 R179（HNO+H=NO+H_2）对 NO 生成起主导作用，压力升高至 1.0 MPa 时，NO 峰值呈现先降低后增加的非单调变化，R180（HNO+OH=NO+H_2O）对 NO 生成的贡献增强，氨热解产物对 NO 的还原作用显著提升；NO_x 物种之间的相互转化过程对于 NO 生成的影响相对有限。【结论】本研究明确了压力和掺氨比对高压氨氢火焰 NO 生成特性的影响及关键反应，可为氨氢燃料在高压燃烧装置中的应用及排放控制提供理论指导。

［关 键 词］氨氢燃料；高压；混合分数；氮氧化物；对冲扩散火焰

［引用本文格式］李智聪，符起壮，王浩帆，等. 基于混合分数空间的高压氨氢对冲扩散火焰 NO 生成特性分析[J]. 热力发电，2026，55(10)：58. Li Z C, Fu Q Z, Wang H F, et al. Study on NO formation characteristics of high-pressure ammonia-hydrogen counterflow diffusion flames based on mixture fraction space[J]. Thermal Power Generation, 2026, 55(10): 58.

Study on NO formation characteristics of high-pressure ammonia-hydrogen counterflow diffusion flames based on mixture fraction space

Li Zhicong[1], Fu Qizhuang[1], Wang Haofan[2], Zhao Kai[1], Zhang Zhongnong[3]
(1. School of Mechanical and Power Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China;
2. Xi'an Thermal Power Research Institute Co., Ltd., Xi'an 710054, China;
3. School of Energy and Power Engineering, Northeast Electric Power University, Jilin 132012, China)

Abstract: [Objective] Ammonia (NH_3), as an economically viable zero-carbon fuel and an attractive hydrogen carrier, can effectively broaden the flammability limits and improve emission characteristics when blended with hydrogen (H_2). However, in practical high-pressure combustion devices such as gas turbines, the nitric oxide (NO) formation characteristics of NH_3-H_2 flames exhibit significant differences compared with those under atmospheric

收 稿 日 期：2026-02-08 修 回 日 期：2026-06-02 接 受 日 期：2026-06-17
基 金 项 目：国家自然科学基金项目（52506127）；国家资助博士后研究人员计划（GZC20250404）；河南省科技攻关项目（252102241009）；郑州大学 2025 年大学生创新训练计划项目（202510459062）
Supported by: National Natural Science Foundation of China (52506127); Postdoctoral Fellowship Program of CPSF (GZC20250404); Key Scientific and Technological Project of Henan Province (252102241009); College Students' Innovative Entrepreneurial Training Plan Program of Zhengzhou University in 2025 (202510459062)
第一作者简介：李智聪（1997），男，博士，讲师，主要研究方向为燃烧污染物生成调控，zcli@zzu.edu.cn。
通信作者简介：张仲侬（1996），男，博士，副教授，主要研究方向为燃烧过程的热力学分析，zhangzn@neepu.edu.cn。

pressure conditions. In particular, the compression of the reaction zone at elevated pressure makes it difficult to directly compare combustion characteristics in physical space. [Methods] To address this issue, this study employs ANSYS Chemkin to conduct numerical simulations of high-pressure NH_3-H_2 counterflow diffusion flames. Based on mixture fraction space, the effects of pressure (0.1 and 1.0 MPa) and the NH_3 blending ratio (0 to 60%) on flame structure, NO mole fraction, and NO formation characteristics are investigated. The adopted flame model and kinetic mechanism were first validated against available experimental data, and the key reactions controlling NO formation were further identified based on the rate of production (ROP) analysis. [Results] The results indicate that mixture fraction can effectively characterize the structure and combustion characteristics of NH_3-H_2 diffusion flames. Compared with physical space, the temperature distributions of NH_3-H_2 flames under different pressure conditions exhibit good consistency in mixture fraction space. As the NH_3 blending ratio increases, the peak temperature exhibits a monotonically decreasing trend, whereas increasing pressure significantly raises the peak temperature and compresses the reaction zone. NH_3 blending alters the primary NO formation region, shifting it from thermal-NO dominance in pure H_2 flames to fuel-NO dominance in flames with NH_3 blending ratios larger than 20%. At 0.1 MPa, the NO peak increases monotonically with the NH_3 blending ratio, and reactions R39 (N+OH=NO+H) and R179 (HNO+H=NO+H_2) dominate NO formation. At 1.0 MPa, the NO peak exhibits a non-monotonic trend, first decreasing and then increasing. The contribution of reaction R180 (HNO+ OH=NO+H_2O) to NO formation is enhanced. The reduction effect of NH_3 pyrolysis products on NO is significantly promoted, whereas the mutual conversion processes among NO_x species have a relatively limited impact on NO formation. [Conclusion] This study reveals the effects of pressure and NH_3 blending ratio on the structure and NO formation characteristics of high-pressure NH_3-H_2 counterflow diffusion flames, and identifies the dominant pathways and key reactions involved in NO formation. These findings can provide theoretical guidance for the application and emission control of NH_3-H_2 fuels in high-pressure combustion devices.

Key words: ammonia-hydrogen fuel; high-pressure; mixture fraction; nitrogen oxides; counterflow diffusion flames

随着我国经济社会的持续发展和社会主义现代化的不断推进，能源需求量日益增长。国家统计局发布的《2025 中国统计年鉴》显示[1]，2024 年我国化石燃料消费量占能源消费总量的 80.2%。当前，燃烧依然是化石燃料的主要利用方式，由此产生的大量二氧化碳（CO_2）排放使大气中温室气体浓度逐年攀升。在我国“碳达峰、碳中和”目标背景下，亟需开发零碳燃料的高效低排放燃烧技术。

氨（NH_3）作为一种经济可行的零碳替代燃料和优良的储氢载体，近年受到燃烧领域的广泛关注。相较于氢（H_2），氨具有更高的体积能量密度和辛烷值[2]，且其微量泄漏易于检测，生产、储存和输运技术相对成熟。上述优势使氨在发电系统和动力装置中展现出良好的应用潜力。然而，纯氨燃烧仍面临点火能量高，火焰传播速度低，以及氮氧化物（NO_x）排放问题突出等关键挑战。为此，当前普遍采用氢掺混策略，通过引入氢燃料有效拓宽可燃极限并改善排放特性。现有研究主要聚焦于掺氨比、当量比、旋流数等工况参数对燃烧稳定性、NO_x 生成特性的影响[3]，并致力于构建适用于宽工况条件的氨氢燃料反应机理[4-5]。

在燃气轮机、内燃机等工程燃烧装置中，氨氢火焰处于高压环境，其燃烧特性与常压条件存在显著差异。针对高压的影响，Cai 等人[6]基于简化氨氢反应机理，对高压条件（151 590、1 013 250 Pa）下氨氢燃料的点火特性开展了数值模拟研究，结果表明压力升高可显著缩短点火延迟时间，且纯氨自燃对压力变化的敏感性明显弱于氨氢混合燃料。Kim 等人[7]在 2 026 500 Pa 压力下对燃气轮机典型工况进行了数值模拟，系统分析了氢气添加对氨−空气预混火焰中一氧化氮（NO）生成的影响，发现贫燃条件下 NO 生成量随氢添加量增加而上升，而在富燃条件下 NO 浓度变化较小。类似地，张嘉瑞[8]利用层流一维火焰模型开展了燃气轮机燃烧室条件下氨氢燃料的燃烧和排放特性研究，结果表明初始压力对层流火焰速度具有一定抑制作用，而 NO 排放对初始压力的依赖性相对较弱。

上述研究主要基于 ANSYS Chemkin 软件中的零维恒容反应器模型和一维火焰模型开展，重点关注整体燃烧和排放特性，尚未充分考虑压力变化对火焰化学结构的影响。相比之下，Osipova 等人[9]通过实验手段对高压（405 300、607 950 Pa）氨氢火焰的结构及关键化学组分浓度进行了测量，发现随着压力升高，火焰反应区明显变窄，这一现象与碳氢燃料火焰一致。在高压条件下，火焰反应区的尺寸压缩导致实际物理空间中温度和组分浓度梯度显著增强，从而增加对火焰结构和化学组成定量描述和分析的难度。采用混合分数作为守恒标量来描

述扩散火焰结构[10-11]，可在一定程度上规避由空间尺寸压缩引起的梯度增大问题。

综上，本文针对高压层流氨氢扩散火焰开展数值模拟研究，在混合分数空间内分析掺氨比和压力对火焰结构、一氧化氮 NO 摩尔分数及其生成特性的影响。所考虑的掺氨比 X_{NH_3} 范围为 0~60%，压力 p 为 0.1、1.0 MPa。本文将为氨氢燃料在高压燃烧装置中的应用和排放控制提供理论指导。

1 模型设置

1.1 火焰工况与模型

高压层流氨氢对冲扩散火焰燃烧器示意如图 1 所示。燃料喷嘴与氧化剂喷嘴对向放置，二者直径均为 10 mm，间距为 10 mm。燃料喷嘴通入 NH_3-H_2 混合气体，其中掺氨比 X_{NH_3} 分别设置为 0、10%、20%、30%、40%、50%和 60%，定义为：

$$X_{NH_3}=\frac{N_{NH_3}}{N_{NH_3}+N_{H_2}}\times 100\% \tag{1}$$

式中：N_{NH_3} 和 N_{H_2} 分别为 NH_3-H_2 混合气体中 NH_3 和 H_2 物质的量。氧化剂喷嘴通入空气（21%O_2+79%N_2）。气体流速 U 设置为 50 cm/s 以确保全局应变率 α 为 100 s^{-1}[12]：

$$\alpha=\frac{2U}{L} \tag{2}$$

式中：U 为燃料流速；L 为燃料喷嘴与氧化剂喷嘴的间距。考虑反应机理的压力适用范围，环境压力 p 设置为 0.1、1.0 MPa，气体温度设置为 300 K。

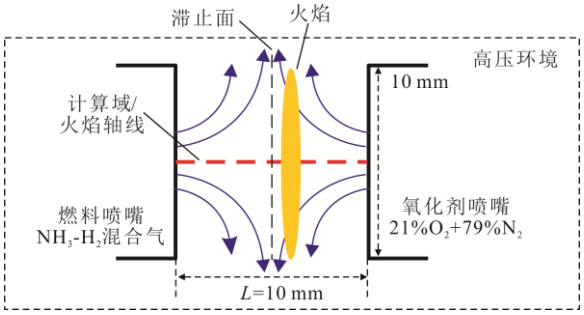


图 1 高压层流氨氢对冲扩散火焰燃烧器示意

Fig.1 Schematic diagram of the high-pressure laminar ammonia-hydrogen counterflow diffusion flame burner

ANSYS Chemkin 17.0 软件中的 Opposed-flow reactor 模型被用于模拟目标火焰，采用混合物平均输运模型并考虑 Soret 效应。Zhang 等人[13]构建的气相反应机理被采用，该反应机理包括 38 个组分、263 个基元反应，已被证实可用于预测 NH_3 热解与氧化、NO_x 生成、N_0/N_1/N_2 组分相互作用等过程。

1.2 混合分数计算

混合分数 Z 是表征扩散火焰结构和局部化学组成的重要参数[14]，定义为火焰中任意位置来自燃料的元素质量分数：

$$Z=\frac{\beta_x-\beta_O}{\beta_F-\beta_O} \tag{3}$$

式中：下角标 x、O 和 F 分别代表轴向坐标、氧化剂和燃料；β为守恒标量的线性组合。对于 NH_3-H_2 燃料β定义为：

$$\beta_x=\sum_{i=1}^{S}\left(\frac{n_N Y_i M_N}{M_i}+\frac{n_H Y_i M_H}{M_i}\right) \tag{4}$$

式中：n_N 和 n_H 分别为第 i 种组分中 N 和 H 原子的数量；Y 为质量分数；M 为摩尔质量；下角标 N 和 H 分别代表氮和氢原子。

2 分析与讨论

2.1 对比验证

为验证所采用气相反应机理与对冲扩散火焰模型在高压条件下对氨氢火焰的适用性，将数值模拟结果与实验测量结果进行对比，结果如图 2 所示。实验数据来源于 Tang 等人[15]利用一维拉曼/瑞利成像系统获得的测量结果，其研究对象为层流氨氢对冲扩散火焰，燃烧器喷嘴直径为 5 mm，间距为 5 mm。实验气体压力为 500 000 Pa，氧化剂为空气，燃料组成为 80% NH_3 和 20% H_2，全局应变率为 87 s^{-1}。由图 2 可知，数值模拟预测的火焰温度分布以及 NH_3、H_2 和 H_2O 等主要组分的摩尔分数与实验测量结果整体吻合良好，表明所采用的火焰模型和反应机理能够较好地描述高压氨氢扩散火焰的燃烧特性。

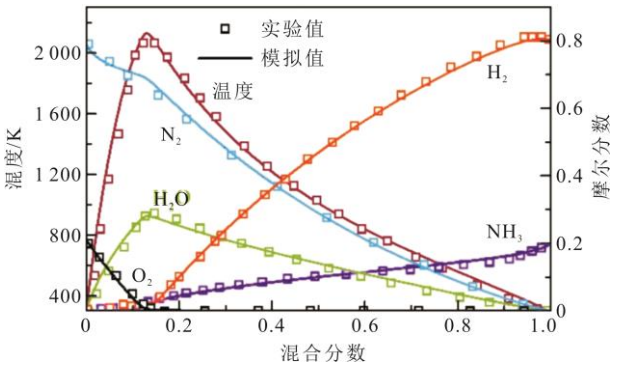


图 2 500 000 Pa 下层流氨氢对冲扩散火焰温度与组分摩尔分数

Fig.2 Temperature and mole fractions of species in laminar NH_3-H_2 counterflow flame at 500 000 Pa

图 3 进一步对比验证了所采用火焰模型和反应机理对氨氢火焰中 NO 摩尔分数的预测能力。需要指出的是，现有文献中尚缺乏高压氨氢对冲火焰 NO 摩尔分数的实验数据，因此本文选取 Tang 等人[16]测量的常压（101 325 Pa）氨氢对冲扩散火焰的温度和 NO 摩尔分数结果作为对比参考。实验燃烧器喷嘴直径和间距均为 10 mm，气体压力为 101 325 Pa，氧化剂为空气，燃料组成为 40% NH_3 和 60% H_2，全局应变率为 100 s^{-1}。图 3 以燃料侧峰值温度的中值位置作为 X 坐标轴原点。尽管模拟结果在局部区域略高于实验测量值，但整体分布趋势与实验结果保持一致，表明所采用的火焰模型和反应机理能够合理预测氨氢火焰中 NO 摩尔分数的空间分布。

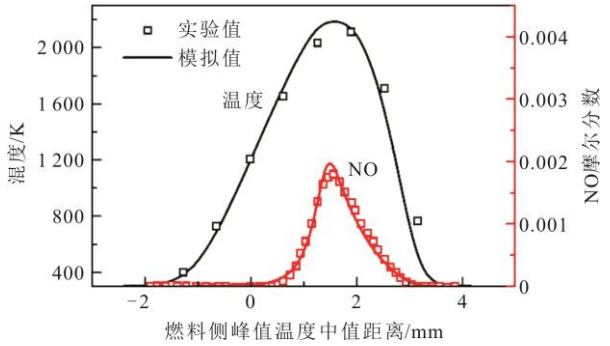


图 3 常压层流氨氢对冲扩散火焰温度与 NO 摩尔分数
Fig.3 Temperature and NO mole fraction in atmospheric pressure laminar NH_3-H_2 counterflow flame

2.2 火焰结构与温度分布

图 4 为目标氨氢火焰混合分数在实际物理空间中的分布情况，箭头方向表示掺氨比 X_{NH_3} 的增大。所有工况下，混合分数沿远离燃料喷嘴的方向单调下降。混合分数为 1 表示纯燃料，为 0 表示纯氧化剂。当压力 p 为 0.1 MPa 时，随着掺氨比 X_{NH_3} 的增加，混合分数为 1 所对应区域逐渐向远离燃料喷嘴的方向移动，表明氨的加入推迟了着火的发生。当压力升高至 1.0 MPa 时，上述趋势仍然存在。在相同掺氨比 X_{NH_3} 条件下，压力为 1.0 MPa 工况中混合分数为 1 的区域宽于压力为 0.1 MPa 工况，表明压力升高并未使着火提前发生。并且高压条件下混合分数在 0~1 之间的分布区域明显变窄，说明压力升高对着火后的燃烧进程有促进作用。

图 5 分别以燃料喷嘴距离和混合分数为横坐标，绘制了目标氨氢火焰在实际物理空间和混合分数空间中的温度分布情况。

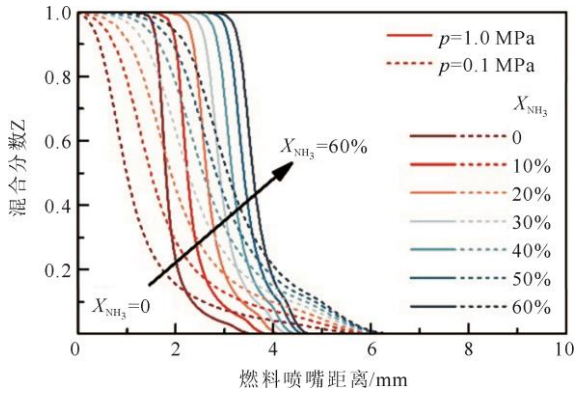


图 4 混合分数分布
Fig.4 Profiles of mixture fraction

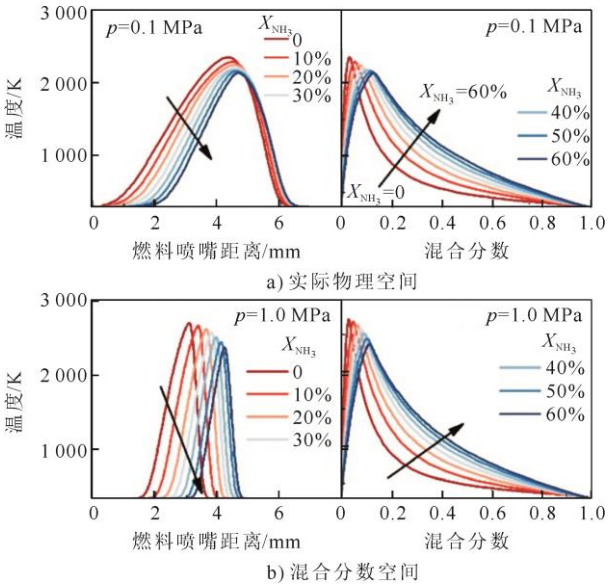


图 5 目标氨氢火焰在实际物理空间和混合分数空间的温度分布
Fig.5 Profiles of temperature of the target NH_3-H_2 flames in physical space and mixture fraction space

图 5a)和图 5c)的物理空间中，不同压力 p 和掺氨比 X_{NH_3} 工况下的温度分布存在明显差异。相比之下，图 5b)和图 5d)所示的混合分数空间中，相同掺氨比条件下，不同压力工况的峰值温度均出现在相近的混合分数范围内。以掺氨比 30%为例，当压力分别为 0.1、1.0 MPa 时，峰值温度分别为 2 197、2 570 K，且均出现在混合分数为 0.08~0.09 范围内。此外，当混合分数大于 0.2 时，不同压力条件下的温度分布曲线基本重合。物理空间与混合分数空间结果的对比表明，不同压力条件下氨氢火焰的温度分布在混合分数空间中呈现出良好的一致性，说明混合分数空间能够有效表征高压条件下氨氢火焰的结构。相较于直接基于物理空间进行分析，混合分数空间能够有效避免高压条件下火焰结

构压缩导致的物理尺度差异，为不同压力条件下火焰结构与燃烧特性的对比分析提供有效工具。

对于温度结果而言，在相同压力条件下，随着掺氨比 X_{NH_3} 的增加，峰值温度呈现下降趋势，该结果与已有研究结论一致[17]。与此同时，在相同掺氨比条件下，提高压力促使峰值温度显著升高。这主要归因于压力升高强化燃烧反应速率并压缩火焰反应区，从而使燃料释放的热量集中于更有限的气体体积内，导致温度水平整体升高。

2.3 NO 摩尔分数分布

目标氨氢火焰在混合分数空间中的 NO 摩尔分数分布如图 6 所示。由图 6 可以看出，NO 主要集中分布于混合分数为 0~0.2 的范围内。对于掺氨比大于 0 的工况，NO 摩尔分数峰值相较于图 5 峰值温度位置更靠近燃料侧喷嘴。以掺氨比 30%为例，当压力分别为 0.1、1.0 MPa 时，峰值 NO 摩尔分数均出现在混合分数为 0.09~0.10 范围内。相比之下，对于未掺氨的纯氢火焰（X_{NH_3}=0），峰值 NO 摩尔分数位于峰值温度的氧化剂侧，说明该工况下的 NO 生成主要受 Zeldovich 机理主导，即以高温驱动的热力型 NO 为主。上述差异表明，氨掺混显著改变了 NO 的生成区域；并且氨燃烧过程中会引入 NH_2、NH、HNO 等含氮自由基，从而促进燃料型 NO 的生成。

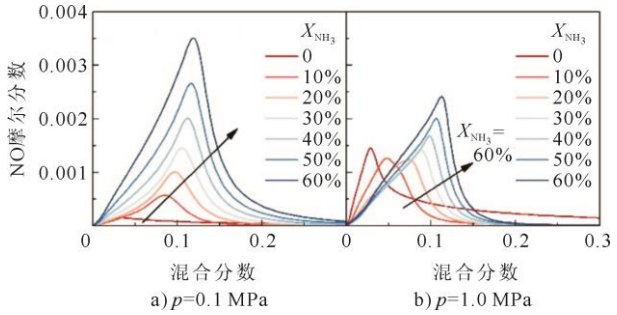


图 6 NO 摩尔分数分布
Fig.6 Profiles of NO mole fraction

基于上述分析，当压力为 0.1 MPa 时，随着掺氨比 X_{NH_3} 的增加，NO 的分布区域和峰值摩尔分数均呈现上升趋势。当压力升高至 1.0 MPa 时，纯氢火焰的峰值 NO 摩尔分数显著高于低压情况，说明压力升高促进了热力型 NO 的生成。然而，随着掺氨比 X_{NH_3} 的增加，高压条件下氨及其热解产物在火焰中部分表现出还原作用，与已生成的 NO 发生反应生成 N_2，其作用机理与锅炉烟气处理中选择性非催化还原（SNCR）过程类似。直至掺氨比增大至约 30%，燃料型 NO 的生成逐渐增强并抵消了氨的还原作用，NO 摩尔分数再次随着掺氨比的增加而上升。值得注意的是，在高压情况下，掺氨比大于 30%时的峰值 NO 摩尔分数仍明显低于对应的低压情况；且在混合分数大于 0.1 的区域，高压氨氢火焰的 NO 摩尔分数甚至低于相同压力条件下的纯氢火焰。上述结果表明，对于高压工程燃烧装置而言，通过合理控制掺氨比有望实现 NO 排放的有效抑制。

2.4 NO 生成特性

图 7 为基于产率（rate of production，ROP）分析识别出的对 NO 生成起主导作用的 10 个关键反应，并标注了相应的反应方程式及其在整个火焰轴线上对 NO 的峰值产率。峰值产率的正负代表该反应生成或消耗 NO。当压力从 0.1 MPa 升至 1.0 MPa 后，所有关键反应对 NO 的峰值产率绝对值均显著提升。由反应动力学理论可知，压力升高会提升反应物浓度，增加分子碰撞频率，从而强化 NO 生成以及消耗的相关基元反应。具体而言，反应 R39（N+OH=NO+H）和 R40（N+NO=N_2+O）属于 Zeldovich 机理；反应 R42（NH+O=NO+H）、R52（NH+NO=N_2+OH）和 R69（NH_2+NO=N_2+H_2O）与氨热解产物密切相关；反应 R177（HNO=H+NO）、R179（HNO+H=NO+H_2）和 R180（HNO+OH=NO+H_2O）则为 HNO 相关反应。上述反应对 NO 的峰值产率均随着掺氨比增加呈单调变化趋势。相比之下，反应 R198（NO_2+H=NO+OH）和 R200（NO+O(+M)=NO_2(+M)）描述 NO_x 物种之间的相互转化。当压力为 1.0 MPa 时，其对 NO 的峰值产率随掺氨比呈现先降低后增加的趋势。

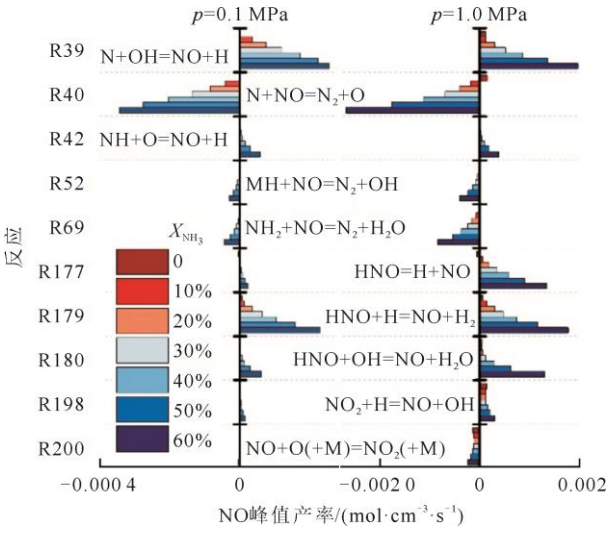


图 7 关键反应对 NO 的峰值产率
Fig.7 Peak rate of production of NO in key reactions

图 8—图 11 给出上述 10 个关键反应在火焰轴线上的净反应速率分布。对于所有反应，随着掺氨比的增加，压力为 0.1 MPa 工况的反应速率呈现上升趋势；压力为 1.0 MPa 工况，除反应 R198 和 R200 外，其余反应速率也均增加。此外，相较于压力为 0.1 MPa 工况，压力为 1.0 MPa 工况的各反应速率提高约 1 个数量级。

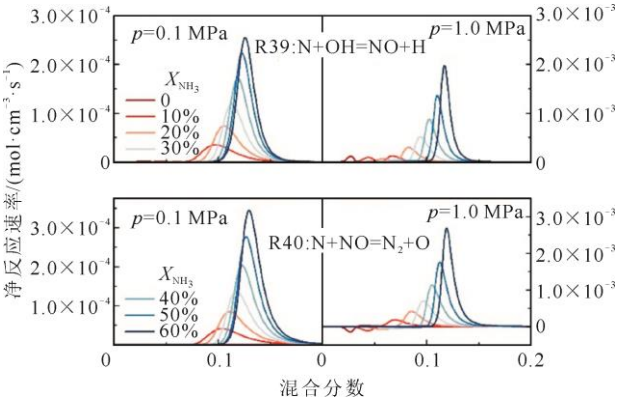


图 8 反应 R39 和 R40 的净反应速率分布
Fig.8 Profiles of net reaction rate of reactions R39 and R40

图 8 为反应 R39 和 R40 的净反应速率分布。图 8 中反应 R39 主要参与 NO 的生成过程。纯氢条件（X_{NH_3}=0）下 R39 的峰值速率位于峰值温度的氧化剂侧。其中 N 自由基主要通过空气中 N_2 分子断开 N≡N 键生成，表现为典型的热力型 NO 生成途径。在压力为 1.0 MPa 且掺氨比为 10%的工况下，R39 的反应速率呈现双峰分布，其中靠近氧化剂侧（混合分数为 0）的反应速率峰值略高于燃料侧（混合分数为 1）。燃料侧的 N 自由基来源于 NH_3 分子的热解产物，表明该反应对热力型 NO（氧化剂侧）和燃料型 NO（燃料侧）的生成均有贡献。随着掺氨比提升至 20%以上，靠近氧化剂侧的反应速率峰逐渐减弱直至消失，燃料侧的反应速率峰显著增强。类似的变化趋势在图 9b)R42、图 10d)R179 以及图 10f)R180 等 NO 生成反应中同样存在。这表明在高掺氨比条件下 NH、NH_2、HNO 等含氮中间产物参与的燃料型 NO 生成路径逐渐占据主导地位，从而导致图 6b)中高压条件的峰值 NO 摩尔分数位置逐渐向燃料侧移动。反应 R40 主要表现为 NO 的消耗过程，在压力为 1.0 MPa 的工况下也呈现双峰分布，但靠近氧化剂侧的反应速率峰为负。在相同工况下，反应 R39 和 R40 的燃料侧峰位置基本重合，且峰值反应速率接近。不同之处在于，反应 R40 在靠近氧化剂侧表现为生成 NO，此时对应于 Zeldovich 机理中表述的 NO 生成反应。

图 9 为反应 R42、R52 和 R69 的净反应速率分布。反应 R42 描述 NH 自由基被氧化生成 NO 的过程，而反应 R52 和 R69 中 NH 自由基则参与将 NO 还原成 N_2。高压条件以及氨掺混条件均使得 NH、NH_2 等含氮中间产物的浓度提高，从而显著提升上述反应速率。反应 R52 和 R69 的峰值位置基本重合，而反应 R42 更靠近氧化剂侧。当压力为 0.1 MPa 时，反应 R42 的速率高于反应 R52 和 R69 的速率之和；当压力升高至 1.0 MPa 时，三者的反应速率相当。因此，在高压条件下，氨掺混对于 NO 的还原作用显著增强。反应 R52 和 R69 对 NO 的消耗是图 6b)中高压、低掺氨比条件下 NO 摩尔分数下降的重要原因。

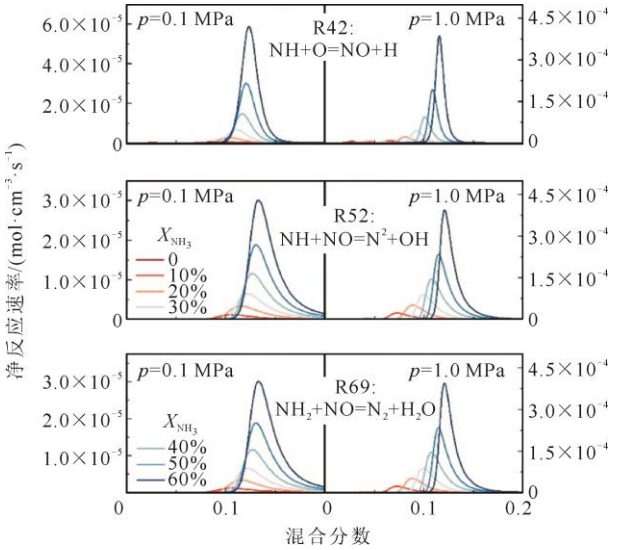


图 9 反应 R42、R52 和 R69 的净反应速率分布
Fig.9 Profiles of net reaction rate of reactions R42, R52, and R69

图 10 为反应 R177、R179 和 R180 的净反应速率分布。反应 R177、R179 和 R180 均通过 HNO 的分解或脱氢过程生成 NO。然而，在纯氢条件（$X_{NH_3}=0$）以及氨掺混条件（$X_{NH_3}>0$）靠近氧化剂侧，反应 R177 表现为消耗 NO，上述 3 个反应的峰值位置基本重合。当压力为 0.1 MPa 时，反应 R179 的速率显著高于 R177 和 R180，说明此时 H 自由基诱导的 HNO 脱氢路径更强；当压力升高至 1.0 MPa 时，三者的反应速率趋于一致，说明压力升高显著提升了反应 R177 和 R180 对于 NO 生成的相对贡献，即高压环境下 OH 自由基参与 HNO 氧化路径

的重要性得到增强。

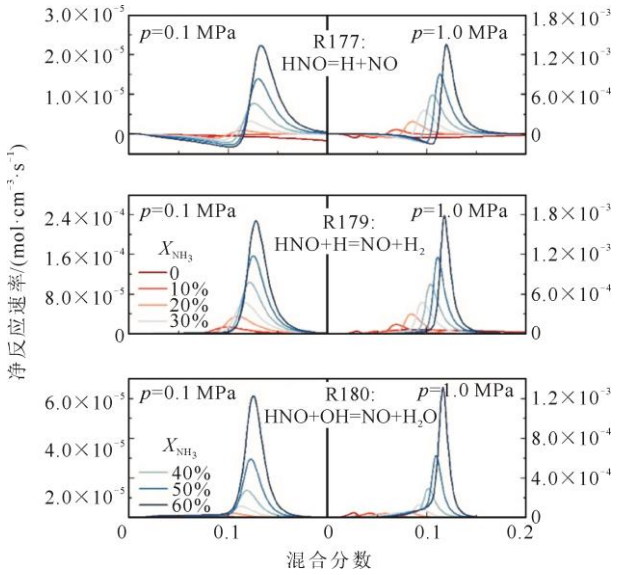


图 10 反应 R177、R179 和 R180 的净反应速率分布
Fig.10 Profiles of net reaction rate of reactions R177, R179, and R180

图 11 为反应 R198 和 R200 的净反应速率分布。反应 R198 将 NO_2 转化为 NO，而反应 R200 则通过消耗 NO 生成 NO_2。与前述反应相比，反应 R198 和 R200 并不直接生成新的 NO_x 组分，且峰值位置均更靠近氧化剂侧。当压力为 1.0 MPa 时，随着掺氨比的增加，二者的峰值速率均呈现先增加后降低的变化趋势，与图 6b)中 NO 摩尔分数一致。然而，二者的峰值速率大小接近，且明显低于 R39、R177、R179 等主要的 NO 生成反应，因此高压情况下 NO_x 相互转化过程对于 NO 摩尔分数的影响相对有限，并非决定高压条件下 NO 生成的主要路径。

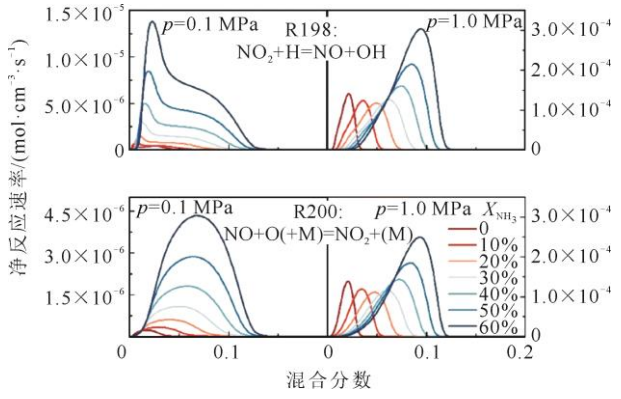


图 11 反应 R198 和 R200 的净反应速率分布
Fig.11 Profiles of net reaction rate of reactions R198 and R200

3 结 论

本文利用 ANSYS Chemkin 软件，对高压层流氨氢对冲扩散火焰开展数值模拟研究，在混合分数空间内探究压力 p 和掺氨比 X_{NH_3} 对火焰结构及 NO 生成特性的影响，主要结论如下。

1）在不同压力条件下，温度在混合分数空间中的分布呈现良好的一致性，表明混合分数能够有效表征氨氢火焰的结构和燃烧特性。

2）随着掺氨比的增加，火焰峰值温度呈单调下降趋势，而压力升高显著提升了峰值温度并压缩了反应区。

3）氨掺混改变了 NO 的生成区域，使其由纯氢火焰中以热力型 NO 为主转变为高掺氨比（>20%）火焰中以燃料型 NO 为主。压力为 0.1 MPa 时，NO 峰值随着掺氨比单调增加，压力升高至 1.0 MPa 时呈现先降低后增加的非单调变化。

4）在高压条件下，Zeldovich 机理相关反应 R39 及 HNO 相关反应 R179 和 R180 对 NO 生成起主导作用，氨热解产物 NH、NH_2 等对 NO 的还原作用显著增强，而 NO_x 物种之间的相互转化过程对于 NO 生成的影响相对有限。

[参 考 文 献]

[1] 国家统计局. 2025 中国统计年鉴[M]. 北京: 中国统计出版社, 2025: 5.
National Bureau of Statistics. China statistical yearbook 2025[M]. Beijing: China Statistics Press, 2025: 5.

[2] Cheng Q, Muhammad A, Kaario O, et al. Ammonia as a sustainable fuel: Review and novel strategies[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2025, 207: 114995.

[3] Zhang M, Wei X T, An Z H, et al. Flame stabilization and emission characteristics of ammonia combustion in lab-scale gas turbine combustors: Recent progress and prospects[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 2025, 106: 101193.

[4] 张亚迪. 基于算法的氨氢混合燃烧反应动力学机理优化研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工程大学, 2025: 8.
Zhang Y D. Study on the optimization of the ammonia-hydrogen mixture combustion reaction kinetics mechanism based on algorithms[D]. Harbin: Harbin Engineering University, 2025: 8.

[5] Xing J K, An Z H, Liang X Y, et al. A comprehensive assessment of reaction mechanisms for NO formation in ammonia/hydrogen/air flames[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2025, 180: 151598.

[6] Cai T, Chen K, Tang A K. Insights into ignition, flame propagation, and emission characteristics of ammonia/hydrogen combustion under intermediate-to-high temperatures and high pressures[J]. Chemical Engineering Journal, 2025, 526: 171040.

［7］ Kim J Y, Kim D H, Park S W. Numerical investigation of the hydrogen addition effect on NO formation in ammonia/air premixed flames at elevated pressure using an improved reaction mechanism[J]. Energy, 2025, 327: 136393.

［8］ 张嘉瑞. 燃气轮机燃烧室中 NH_3/H_2 燃烧和排放特性研究[D]. 济南: 齐鲁工业大学, 2024: 20.
Zhang J R. Numerical study on NH_3/H_2 combustion and emission characteristics in gas turbine combustion chambers[D]. Jinan: Qilu University of Technology, 2024: 20.

［9］ Osipova K N, Sarathy S M, Korobeinichev O P, et al. Chemical structure of premixed ammonia/hydrogen flames at elevated pressures[J]. Combustion and Flame, 2022, 246: 112419.

［10］ Angelilli L, Raman V, Im H G. A generalized mixture fraction formulation for nonpremixed ammonia–hydrogen flames[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2024, 40(1/4): 105465.

［11］ Shioyoke A, Kai R, Watanabe H. Flame structure and NO production on laminar non-premixed flames of ammonia with highly preheated air[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2025, 171: 151062.

［12］ Liu S J, Wang S S, Li Z C. Numerical study on chemiluminescence characteristics in ammonia-hydrogen-air counterflow diffusion flames[J/OL]. Combustion Science and Technology, 2026-06-01. https://doi.org/10.1080/00102202.2025.2551663.

［13］ Zhang X Y, Moosakutt S P, Rajan R P, et al. Combustion chemistry of ammonia/hydrogen mixtures: Jet-stirred reactor measurements and comprehensive kinetic modeling[J]. Combustion and Flame, 2021, 234: 111653.

［14］ Li Z C, Lou C, Zou C, et al. Investigation of soot inception limits and chemiluminescence characteristics of laminar coflow diffusion flames in C/O ratio space[J]. Fuel, 2022, 327: 125140.

［15］ Tang H, Yang C B, Wang G Q, et al. Raman spectroscopy for quantitative measurements of temperature and major species in high-pressure non-premixed $NH_3/H_2/N_2$ counterflow flames[J]. Combustion and Flame, 2022, 237: 111840.

［16］ Tang H, Hadi Z A, Guibert T F, et al. Experimental study of nitric oxide distributions in non-premixed and premixed ammonia/hydrogen-air counterflow flames[J]. Combustion and Flame, 2024, 267: 113556.

［17］ Zhou W X, Kang Y H, Zhang J Y, et al. Numerical study on stretch extinction mechanism of NH_3/H_2/air laminar counterflow premixed flames[J]. Fuel Processing Technology, 2025, 277: 108319.

（责任编辑　杨嘉蕾）