

ẢNH HƯỞNG CỦA NHIỆT ĐỘ, ÁP SUẤT VÀ TỶ LỆ PHA LOÃNG NITƠ ĐẾN TỐC ĐỘ CHÁY TẦNG CỦA HỖN HỢP NH₃/SYNGAS

THE INFLUENCE OF TEMPERATURE, PRESSURE, AND NITROGEN DILUTION RATIO ON THE LAMINAR BURNING VELOCITY OF NH₃/SYNGAS MIXTURES

LÊ NGỌC NGÂN^{1a}, NGUYỄN MINH TIẾN^{2b}, LƯƠNG VĂN VẠN^{3c}

¹Trường Cao đẳng nghề An Giang

²Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật, Đại học Đà Nẵng

³Trường Đại học Sư phạm Kỹ thuật Vĩnh Long

^aTác giả liên hệ: lengocngan@agvc.edu.vn

Nhận bài(Received): 28/3/2025; Phản biện (Reviewed):22/5/2025; Chấp nhận(Accepted):14/8/2025

TÓM TẮT

Sử dụng NH₃/Syngas làm nhiên liệu là giải pháp tiềm năng giúp giảm phát thải khí nhà kính, đồng thời cung cấp một nguồn năng lượng thay thế bền vững. Nghiên cứu này mô phỏng quá trình cháy hỗn hợp NH₃/Syngas bằng cách thay đổi các điều kiện nhiệt độ, áp suất, và tỷ lệ pha loãng Nitơ. Kết quả nghiên cứu cho thấy tốc độ cháy tầng tăng khi nhiệt độ tăng, nhưng lại giảm khi áp suất và tỷ lệ pha loãng nitơ tăng. Nghiên cứu đã cung cấp một cái nhìn sâu sắc về các yếu tố ảnh hưởng đến quá trình cháy của hỗn hợp NH₃/syngas và đề xuất các điều kiện tối ưu nhằm nâng cao hiệu suất và giảm phát thải. Kết quả đạt được góp phần vào việc phát triển công nghệ động cơ xanh và hỗ trợ các nỗ lực chuyển đổi năng lượng bền vững.

Từ khoá: NH₃, khí hỗn hợp, Năng lượng mới, Tốc độ cháy tầng, Tỷ lệ pha loãng nitơ

ABSTRACT

Blending NH₃ with Syngas as a fuel presents a promising approach to reducing greenhouse gas emissions while offering a sustainable energy alternative. This study numerically investigates the combustion process of NH₃/Syngas mixtures by varying temperature, pressure, and nitrogen dilution ratio. The results indicate that the laminar burning velocity increases with rising temperature but decreases with increasing pressure and nitrogen dilution ratio. The study offers valuable insights into the factors affecting the combustion process of NH₃/Syngas mixtures and suggests optimal conditions to improve efficiency and reduce emissions. These findings contribute to the advancement of green engine technologies and support efforts toward a sustainable energy transition.

Keywords: NH₃, syngas, new energy, laminar burning velocity, nitrogen dilution ratio.

1. GIỚI THIỆU

Trong bối cảnh nhu cầu tìm kiếm các nguồn nhiên liệu bền vững và giảm thiểu

tác động tiêu cực lên môi trường ngày càng gia tăng, theo đó việc sử dụng nhiên liệu không cacbon đã thu hút được sự quan tâm

của các nhà khoa học. Sự phát triển bền vững đòi hỏi các giải pháp năng lượng sạch và hiệu quả, trong đó ammoniac (NH_3) và khí tổng hợp (syngas) được xem là những ứng viên tiềm năng. NH_3 [1] không chứa carbon, giúp giảm phát thải CO_2 khi đốt cháy, có thể dễ dàng lưu trữ và vận chuyển. Tuy nhiên, NH_3 có tốc độ cháy chậm, khó cháy [2]. Trong khi đó, syngas có tốc độ cháy cao, giúp cải thiện hiệu suất đốt cháy [3]. Syngas được sản xuất từ nhiều nguồn khác nhau, bao gồm cả chất thải sinh học. Các nghiên cứu về hỗn hợp NH_3 /syngas đã được các nhà khoa học trên thế giới nghiên cứu và công bố. Nghiên cứu Mei [4] khi thay đổi tỷ lệ syngas trong hỗn hợp NH_3 /syngas ở các tỷ lệ hoà trộn tương đương khác nhau (0.8 – 1.6) sẽ làm thay đổi tốc độ cháy tầng. Nghiên cứu của Zhou [5] cho thấy khi thay đổi tỷ lệ NH_3 khác nhau ở các tỷ lệ hoà trộn tương đương khác nhau

(0.8 – 1.4) sẽ ảnh hưởng đến tốc độ cháy tầng. Tuy nhiên, nghiên cứu về tỷ lệ pha loãng nitơ chưa thấy hoặc rất ít được công bố. Tốc độ cháy tầng (S_L) là một thông số lý hóa quan trọng để thiết kế và tối ưu hóa các thiết bị đốt cháy vì nó ảnh hưởng đến tốc độ cháy, tốc độ giải phóng nhiệt, khí thải và hiệu suất nhiệt. Hơn nữa, các giá trị S_L cũng rất quan trọng để phát triển các mô hình đốt cháy và xác nhận các cơ chế động học phức tạp. Bài báo này sẽ trình bày nghiên cứu ảnh hưởng của nhiệt độ, áp suất và tỷ lệ pha loãng nitơ đến tốc độ cháy tầng của hỗn hợp NH_3 /syngas.

2. PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG

Tốc độ cháy tầng (S_L) của hỗn hợp NH_3 /syngas được mô phỏng tại các điều kiện khác nhau bằng phần mềm CHEMKIN Pro [6]. Bảng 1 trình bày chi tiết về thành phần nhiên liệu và các điều kiện mô phỏng tương ứng.

Bảng 1: Điều kiện mô phỏng các mô hình cháy

TT	Nhiên liệu	Tỷ lệ hoà trộn tương đương	Nhiệt độ ($^{\circ}\text{K}$)	Áp suất (atm)
1	50% NH_3 , 15% H_2 , 10% CO , 25% N_2	0,8 – 1,3	300 - 400	1 - 7
2	50% NH_3 , 15% H_2 , 35% CO , 0% N_2	0,8 – 1,3	300 - 400	1 - 7
3	50% NH_3 , 15% H_2 , 25% CO , 10% N_2	0,8 – 1,3	300 - 400	1 - 7
4	50% NH_3 , 15% H_2 , 15% CO , 20% N_2	0,8 – 1,3	300 - 400	1 - 7
5	50% NH_3 , 15% H_2 , 10% CO , 25% N_2	0,8 – 1,3	300 - 400	1 - 7

Để đảm bảo sự hội tụ trong dự đoán S_L số điểm lưới lên tới 250; giá trị CRUV và CRAD lần lượt là 0.1 và 0.1. Nhiều mô hình cháy khác nhau bao gồm Mei [4], Zhou [5], Okafor [7], Polimi [8]. Được sử dụng để so sánh sự sai khác giữa các mô hình mô phỏng. Kết quả phân tích độ nhạy và tốc độ phản ứng rỗng cũng được phân tích chi tiết nhằm

đánh giá chính xác sự tác động của điều kiện mô phỏng đến quá trình cháy của hỗn hợp NH_3 /syngas.

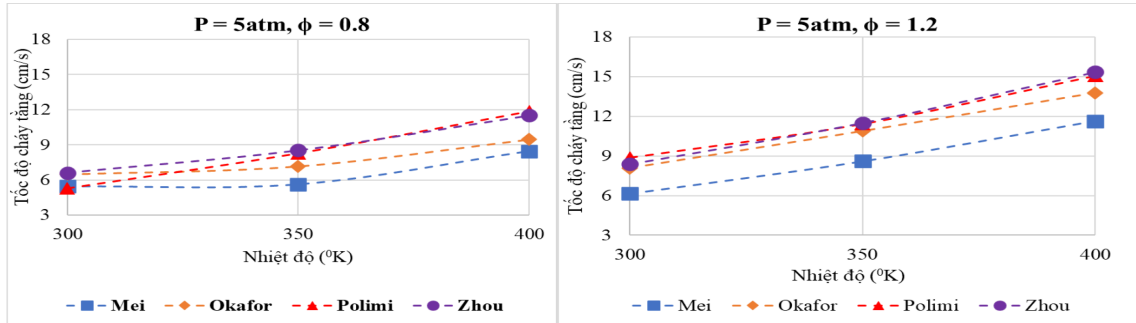
3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến tốc độ cháy tầng

Hình 1 trình bày thể hiện sự thay đổi của tốc độ cháy tầng theo nhiệt độ trong

hai điều kiện khác nhau $P = 5 \text{ atm}$, tỷ lệ hoà trộn thay đổi $\phi = 0,8, \phi = 1,2$. Qua biểu đồ nhận thấy rằng tốc độ cháy tăng dần khi nhiệt độ tăng từ 300°K đến 400°K cho

tất cả các mô hình. Mô hình Mei có tốc độ cháy thấp nhất ở tất cả các mức nhiệt độ, trong khi đó, mô hình cháy còn lại có tốc độ cháy tương tự nhau.

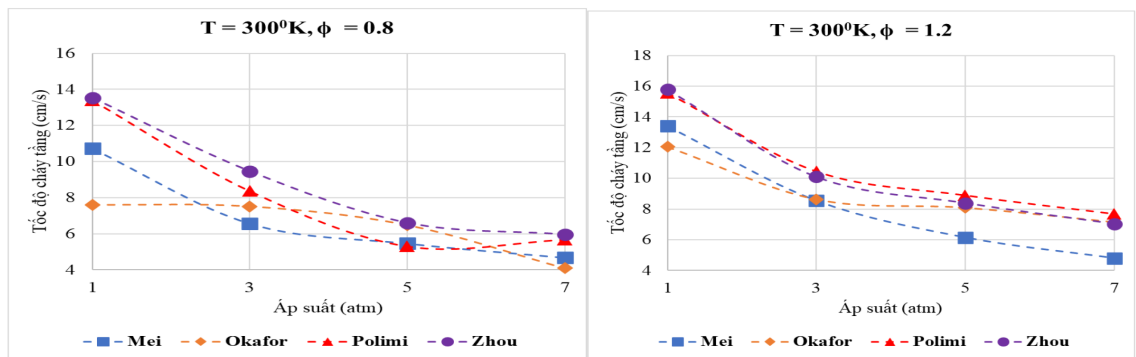


Hình 1: Biểu đồ so sánh tốc độ cháy tăng theo nhiệt độ

3.2. Ảnh hưởng của áp suất đến tốc độ cháy tăng

Hình 2 trình bày thể hiện sự thay đổi của tốc độ cháy tăng theo áp suất tại $T = 300^\circ\text{K}$, tỷ lệ hoà trộn thay đổi $\phi = 0,8, \phi = 1,2$. Qua biểu đồ cho thấy tốc

độ cháy tăng giảm dần khi áp suất tăng ở cả hai điều kiện $\phi = 0,8$ và $\phi = 1,2$. Áp suất càng tăng, tốc độ cháy càng giảm đối với tất cả các mô hình cháy. Mô hình Okafor dự báo có tốc độ cháy tăng thấp nhất khi $\phi = 0,8, p = 1 \text{ atm}$.

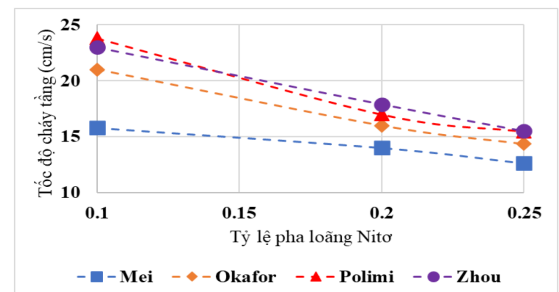


Hình 2: Biểu đồ so sánh tốc độ cháy tăng theo áp suất

3.3. Ảnh hưởng của tỷ lệ pha loãng nitơ

Tốc độ cháy tăng của hỗn hợp $\text{NH}_3/\text{syngas}/\text{air}$ với các tỷ lệ pha loãng nitơ khác nhau tại $\phi=1,0$ và tại $T = 400^\circ\text{K}$ được trình bày trong Hình 3. Tỷ lệ nitơ pha loãng càng cao thì tốc độ cháy tăng càng giảm. Mô hình Zhou và Polimi dự đoán tốc độ cháy cao nhất ở tất cả các tỷ lệ pha loãng, trong khi mô hình Mei có xu hướng đưa ra giá trị thấp nhất. Sự khác biệt về tốc độ cháy giữa các mô hình rõ rệt hơn ở các tỷ lệ pha

loãng nitơ thấp và dần thu hẹp khi tỷ lệ pha loãng tăng.



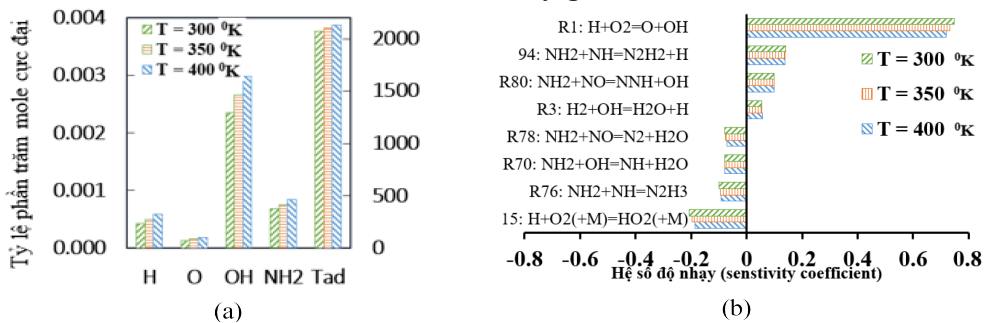
Hình 3: Biểu đồ so sánh tốc độ cháy tăng $P = 5 \text{ atm}, \phi = 1,0, T = 400^\circ\text{K}$

3.4. Phân tích độ nhạy và tốc độ phản ứng

3.4.1. Ảnh hưởng của nhiệt độ

Hình 4 trình bày ảnh hưởng của nhiệt độ đến nồng độ các nguyên tử chính H, O, OH, NH₂, nhiệt độ cháy đoạn nhiệt T_{ad} và độ nhạy các phản ứng của hỗn hợp 50%NH₃15%H₂10%CO25%N₂ tại φ = 1,0 và P = 5atm, nhiệt độ thay đổi lần lượt là 300°K, 350°K, 400°K. Qua biểu đồ cho thấy tỷ lệ phần trăm mol cực đại của H, O, OH, NH₂ tăng lên khi nhiệt độ tăng 300°K đến 400°K. Nhiệt độ cháy đoạn nhiệt T_{ad} không bị ảnh hưởng nhiều khi thay đổi

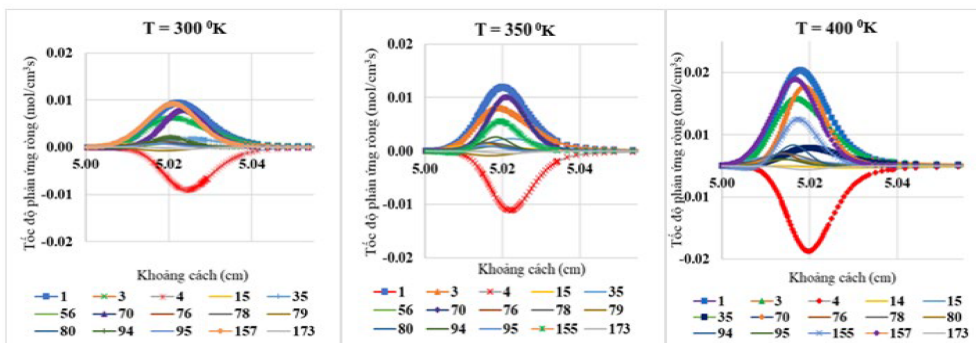
nhiệt độ đầu vào. Những kết quả cho thấy rằng phản ứng hoá học của syngas có ảnh hưởng nhiều đến quá trình đốt cháy. H chủ yếu được tạo ra thông qua R3 và R94, việc tiêu thụ H chủ yếu qua R1 và R15. Trong khi đó OH chủ yếu được tạo ra qua R1 và R80, việc tiêu thụ OH thông qua R3 và R70. O chủ yếu tạo ra từ R1, NH₂ tiêu thụ chủ yếu qua R94, R80, R78, R70, R76. Phản ứng R1: H + O₂ = O + OH là phản ứng có độ nhạy cao nhất trong quá trình đốt cháy. Phản ứng này là phản ứng quan trọng nhất trong quá trình đốt cháy. Khi nhiệt độ tăng từ 300°K đến 400°K, độ nhạy của phản ứng này giảm nhẹ.



Hình 4: Ảnh hưởng của nhiệt độ (a) đến tỷ lệ phần trăm mol cực đại H, O, OH, NH₂ và nhiệt độ cháy đoạn nhiệt Tad, (b) độ nhạy của hỗn hợp

Hình 5 biểu diễn tốc độ phản ứng ở φ = 1,0, P = 5 atm, nhiệt độ thay đổi 300 – 400°K. Tại T = 400°K, tốc độ phản ứng tăng đáng kể, thể hiện qua biên độ lớn của các đường cong. Đường cong xanh dương (phản ứng R1) và đường đỏ nổi bật nhất với giá trị rất lớn. Đường màu đỏ (phản ứng R4) có giá trị âm lớn nhất, cho thấy đây là phản ứng xảy ra theo chiều

ngược mạnh hơn so với chiều thuận. Phản ứng chủ đạo là phản ứng R1 đạt giá trị cực đại khoảng 0,021 mol/cm³s tại vị trí xấp xỉ 5,02 cm, phản ứng này thúc đẩy quá trình cháy. Phản ứng nghịch mạnh là phản ứng số 4 giá trị âm lớn nhất, đạt khoảng -0,020 mol/cm³s cũng tại vị trí xấp xỉ 5,02 cm. Khi tăng nhiệt độ, tốc độ phản ứng rỗng của các phản ứng chủ đạo tăng lên rõ rệt.

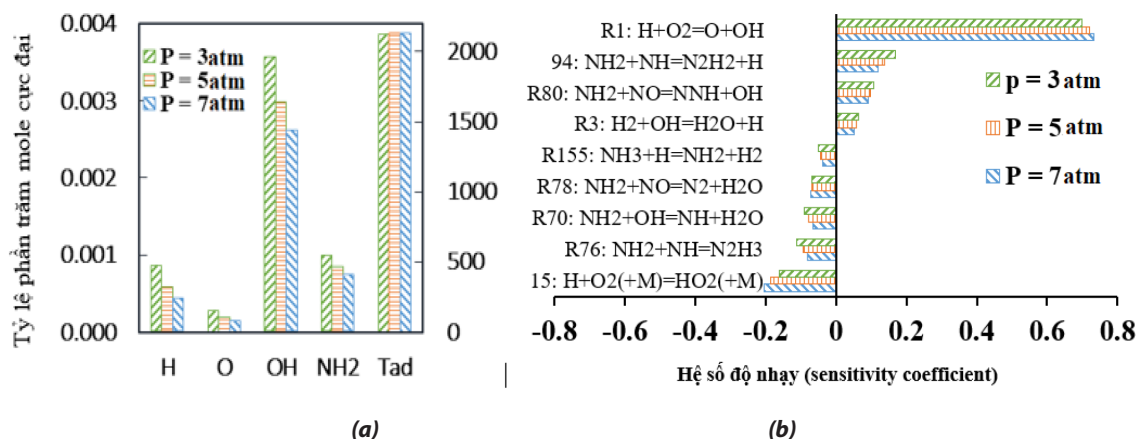


Hình 5: Tốc độ phản ứng rỗng ở các điều kiện nhiệt độ khác nhau

3.4.2. Ảnh hưởng của áp suất

Hình 6 trình bày ảnh hưởng của áp suất đến nồng độ các nguyên tử chính H, O, OH, NH₂, nhiệt độ cháy đoạn nhiệt T_{ad} và độ nhạy các phản ứng của hỗn hợp 50%NH₃15%H₂10%CO25%N₂ tại $\phi = 1,0$ và T = 400°K. Qua biểu đồ cho thấy các phân số mol H, O, OH, NH₂ giảm xuống khi áp suất tăng lên. Nhiệt độ cháy đoạn nhiệt T_{ad} không bị ảnh hưởng nhiều khi thay đổi áp suất. Khi áp suất tăng, nồng độ H có xu hướng giảm dần từ P = 3,0 atm đến P = 7,0 atm. Nồng độ của O rất thấp và không có sự thay đổi đáng kể khi áp suất tăng. OH có nồng độ cao nhất trong số các thành phần hóa học được so sánh, và nồng độ giảm mạnh khi áp suất tăng. Tương tự như các thành phần khác, nồng độ NH₂ giảm dần khi áp suất tăng từ

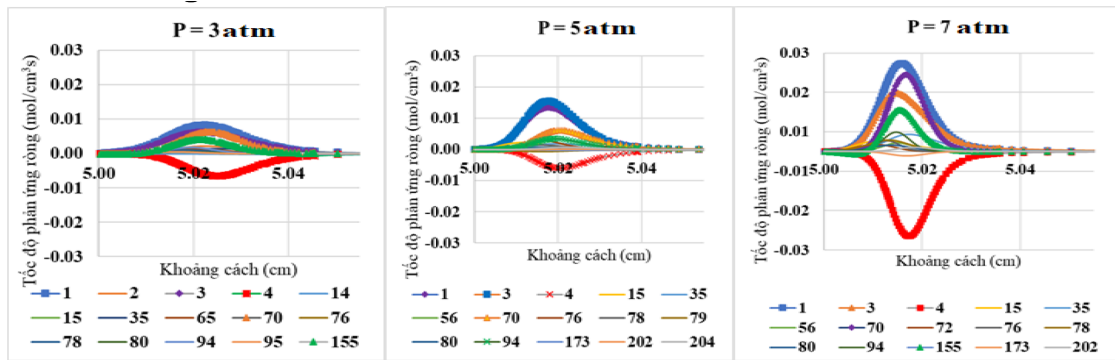
P = 3,0 atm đến P = 7,0 atm. Nhiệt độ cháy đoạn nhiệt T_{ad} chịu ảnh hưởng nhỏ khi thay đổi áp suất. Phản ứng R1: $H + O_2 \rightarrow O + OH$, đây là một trong những phản ứng quan trọng nhất trong quá trình đốt cháy, tạo OH từ H và O₂ là rất mạnh mẽ ở cả ba mức áp suất. Khi áp suất tăng từ P = 3.0 atm lên P = 7.0 atm, mức độ tham gia của phản ứng này có vẻ tăng lên nhẹ, điều này cho thấy rằng áp suất cao hơn có thể thúc đẩy quá trình hình thành OH, O. Phản ứng R80: $NH_2 + NO \rightarrow NNH + OH$, mức độ tham gia của phản ứng này có xu hướng tăng khi áp suất tăng từ P = 3.0 atm lên P = 7.0 atm. Phản ứng R15: $H + O_2 (+M) \rightarrow HO_2 (+M)$, phản ứng này có giá trị âm, có xu hướng cản trở mạnh đến quá trình cháy. Áp suất càng cao, độ nhạy của phản ứng R15 càng tăng.



Hình 6: Ảnh hưởng của áp suất (a) đến tỷ lệ phân trăm mol cực đại H, O, OH, NH₂ và nhiệt độ đoạn nhiệt T_{ad}, (b) độ nhạy của hỗn hợp

Hình 7 trình bày tốc độ phản ứng rỗng ở T = 400°K, $\phi = 1.0$ theo điều kiện áp suất khác nhau. Kết quả mô phỏng cho thấy tốc độ phản ứng tăng đáng kể khi áp suất tăng lên, thể hiện qua biên độ lớn của các đường cong. Đường cong xanh dương (phản ứng R1) và đường đỏ (phản ứng R4) nổi bật nhất với giá trị cực đại lớn nhất so với các phản ứng còn lại. Phản ứng chủ đạo là phản ứng R1 đạt giá trị cực đại khoảng

0,021 mol/cm³s tại vị trí xấp xỉ 5,02 cm. Phản ứng nghịch mạnh là phản ứng R4 giá trị âm lớn nhất, đạt khoảng -0,020 mol/cm³s cũng tại vị trí xấp xỉ 5,02 cm. Phản ứng này biểu thị quá trình nghịch, có xu hướng tái tạo lại chất phản ứng hoặc phân hủy sản phẩm. Khi áp suất tăng lên, biên độ của các đường cong của các phản ứng chủ đạo tăng theo.

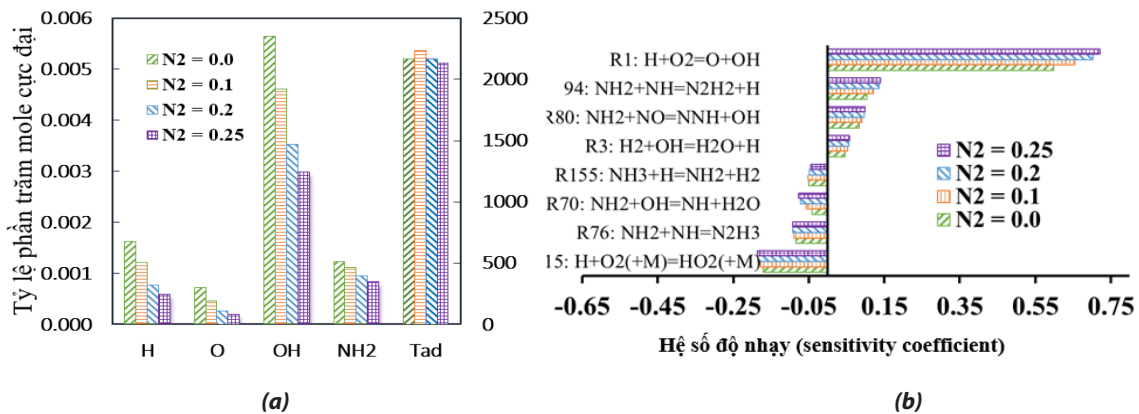


Hình 7: Tốc độ phản ứng rỗng ở $T = 400^{\circ}\text{K}$, $\phi = 1.0$ theo điều kiện áp suất khác nhau.

3.4.3. Ảnh hưởng của tỷ lệ pha loãng nitơ

Hình 8a cho thấy nồng độ H, O, OH, NH₂ đều giảm khi tỷ lệ N₂ tăng lên. Trong đó nồng độ O tương đối thấp, còn OH là thành phần có nồng độ cao nhất trong số các gốc tự do được biểu diễn và thay đổi nhiều nhất khi thay đổi tỷ lệ N₂ trong hỗn hợp. Điều này chỉ ra rằng sự hiện diện của N₂ có thể làm giảm tốc độ phản ứng tạo

ra OH, O, H và NH₂. Khi N₂ tăng từ 0,0 lên 0,25, T_{ad} thay đổi không đồng nhất, tăng nhẹ khi N₂ = 10% nhưng sau đó lại giảm nếu tiếp tục tăng tỷ lệ N₂ trong hỗn hợp. Tương tự các trường hợp trên, phản ứng R1 và R15 (hình 8b) là hai phản ứng chủ đạo trong quá trình cháy của hỗn hợp NH₃/syngas dưới ảnh hưởng của N₂. Chú ý rằng, phản ứng có độ nhạy dương có tác dụng hỗ trợ quá trình cháy, và ngược lại.



Hình 8: Ảnh hưởng của tỷ lệ pha loãng nitơ (a) đến lượng mol H, O, OH, NH₂ và nhiệt độ đoạn nhiệt Tad, (b) độ nhạy của hỗn hợp NH₃/syngas

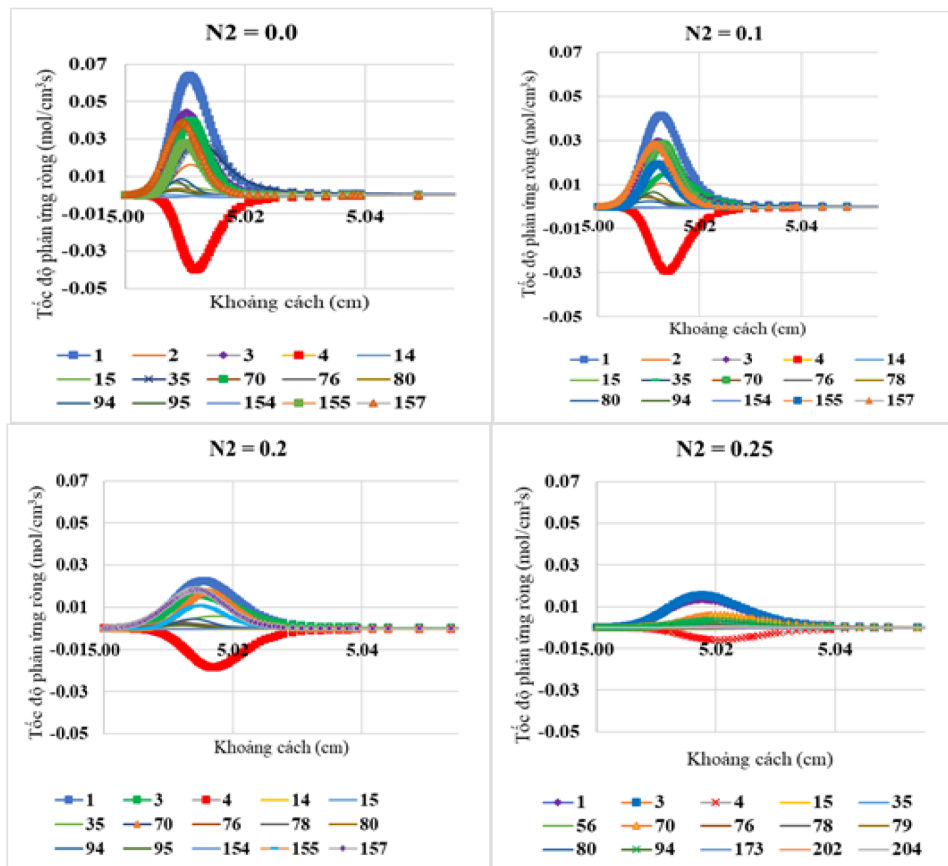
Hình 9 thể hiện tốc độ phản ứng rỗng ở $\phi = 1,0$, $P = 5 \text{ atm}$, $T = 400^{\circ}\text{K}$ giảm dần khi tăng tỷ lệ pha loãng N₂ 0.0 đến 0.25. Phản ứng chủ đạo R 1 đạt giá trị cực đại khoảng 0,063 mol/cm³s, đây là phản ứng chính, có tốc độ phản ứng cao nhất. Phản ứng nghịch R4 có giá trị âm lớn nhất, đạt khoảng -0,04 mol/cm³s cũng tại vị trí xấp

xi 5,02 cm. Hầu hết các đường cong đạt giá trị cực đại hoặc cực tiểu trong khoảng 5,00 cm đến 5,04 cm.

Khi bổ sung thêm 10%N₂ vào hỗn hợp, biên độ của các đường cong bắt đầu giảm. Mặc dù các phản ứng vẫn diễn ra mạnh mẽ, nhưng sự hình thành và tiêu thụ các chất không còn đạt đỉnh cao như khi không có

N_2 . Đường đỏ (phản ứng R4) tiếp tục thể hiện sự tiêu thụ của một chất quan trọng, nhưng mức tiêu thụ giảm hơn so với $N_2 = 0,0$. Phản ứng chủ đạo là vẫn là phản ứng số 1 đạt giá trị cực đại khoảng $0,043 \text{ mol/cm}^3\text{s}$, giá trị này giảm nhiều so với $N_2 = 0,0$, đây là phản ứng chính, có tốc độ phản

ứng cao nhất trong vùng này. Phản ứng nghịch là phản ứng số 4 có giá trị âm lớn nhất, đạt khoảng $-0,03 \text{ mol/cm}^3\text{s}$, biên độ cũng giảm so với $N_2 = 0,0$. Khi $N_2 = 0,25$, mức nitơ cao nhất, tốc độ phản ứng của tất cả các phản ứng đã giảm rất đáng kể so với $N_2 = 0$.



Hình 9: Tốc độ phản ứng rỗng ở các tỷ lệ pha loãng nitơ khác nhau

4. KẾT LUẬN

Qua phân tích về ảnh hưởng của nhiệt độ, áp suất và tỷ lệ pha loãng nitơ đối với quá trình cháy của hỗn hợp NH_3 /syngas trong điều kiện tương tự động cơ đánh lửa cưỡng bức, chúng ta có thể rút ra một số kết luận quan trọng như sau:

(1) Nhiệt độ cao thúc đẩy sự hình thành các gốc tự do như H, O, OH, giúp gia tăng tốc độ cháy. Tuy nhiên, sự gia tăng nhiệt độ cũng có thể dẫn đến phát sinh các hợp chất

NO_x , cần được kiểm soát để giảm thiểu phát thải.

(2) Khi áp suất tăng, nồng độ các gốc tự do có xu hướng giảm, làm giảm tốc độ cháy của hỗn hợp. Chú ý rằng nồng độ NH_3 giảm có thể góp phần giảm quá trình hình thành NO_x tại áp suất cao. Kết quả tương tự cũng tìm thấy khi tăng tỷ lệ pha loãng N_2 trong hỗn hợp.

(3) Thông qua phân tích độ nhạy và tốc độ phản ứng rỗng, phản ứng R1: $H + O_2 \rightarrow$

O + OH và phản ứng R15: $H + O_2 (+M) \rightarrow HO_2 (+M)$ là các phản ứng chủ đạo xảy ra trong quá trình cháy. R1 có độ nhạy phản ứng dương nên có tác dụng thúc đẩy quá trình cháy, trong khi đó R15 có tác dụng ngược lại.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] M. Faghieh, A. Valera-Medina, Z. Chen, A. Paykani, (2023), Effect of radiation on laminar flame speed determination in spherically propagating NH₃-air, NH₃/CH₄-air and NH₃/H₂-air flames at normal temperature and pressure, *Combust. Flame* 257, 113030.
- [2] K.D.K.A. Somarathne, H. Yamashita, S. Colson, K. Oku, K. Honda, E.C. Okafor, A. Hayakawa, T. Kudo, H. Kobayashi, (2023), Towards the development of liquid ammonia/air spray combustion in a gas turbine-like combustor at moderately high pressure, *Appl. Energy Combust. Sci* 16, 100215.
- [3] J. A. A. de Castro, A. A. Martins, M. Costa, (2021), Laminar flame speed of different syngas compositions: Experimental study and correlation, *Fuel*, 297, 120729.
- [4] B. Mei, S. Ma, Y. Zhang, X. Zhang, W. Li, Y. Li, (2020), Exploration on laminar flame propagation of ammonia and syngas mixtures up to 10 atm, *Combust. Flame* 220, 368-377.
- [5] S. Zhou, W. Yang, H. Tan, Q. An, J. Wang, H. Dai, X. Wang, X. Wang, S. Deng, (2021), Experimental and kinetic modeling study on NH₃/syngas/air and NH₃/bio-syngas/air premixed laminar flames at elevated temperature, *Combust. Flame* 233, 111594.
- [6] Ansys Chemkin-Pro 2022 R3 | Chemical Kinetics Simulation Software, 2023
- [7] E.C. Okafor, Y. Naito, S. Colson, A. Ichikawa, T. Kudo, A. Hayakawa, H. Kobayashi, (2019), Measurement and modelling of the laminar burning velocity of methane-ammonia-air flames at high pressures using a reduced reaction mechanism”, *Combust. Flame* 204, 162-175.
- [8] A. Stagni, C. Cavallotti, (2023). “H-abstractions by O₂, NO₂, NH₂, and HO₂ from H₂NO: Theoretical study and implications for ammonia low-temperature kinetics”, *Proc. Combust. Inst.* 39, 633-641.