

## بررسی عددی اثر استفاده از محیط متخلخل کاتالیزوری بر انتشار آلاینده‌های سوخت آمونیاک در محفظه احتراق با مقیاس مزو

علی طلوعی<sup>۱</sup>، آیت قره‌قانی<sup>۲\*</sup>

۱- دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، toloie\_ali@mecheng.iust.ac.ir

۲- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ayat\_ghareghani@iust.ac.ir

\* نویسنده مخاطب

(تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۰۴/۳۰، دریافت آخرین اصلاحات: ۱۴۰۴/۰۵/۲۴، پذیرش: ۱۴۰۴/۰۵/۲۸)

**چکیده:** در این مطالعه، احتراق پیش‌آمیخته آمونیاک به‌صورت عددی و سه‌بعدی در دو پیکربندی متفاوت محفظه احتراق مورد بررسی قرار گرفته است که یکی محفظه معمولی (یعنی محفظه‌ای بدون محیط متخلخل کاتالیزوری و با دیواره‌های ساده فلزی) و دیگری محفظه‌ای با محیط متخلخل کاتالیزوری از جنس پلاتین است. هدف اصلی این تحقیق، ارزیابی تأثیر حضور محیط متخلخل کاتالیزوری بر میزان انتشار آلاینده‌های  $\text{NO}_x$  و  $\text{N}_2\text{O}$  در شرایط مختلف نسبت هم‌ارزی است. نتایج نشان می‌دهد که استفاده از محیط کاتالیزوری موجب کاهش بیش از ۸۰ درصدی  $\text{NO}$  و  $\text{NO}_2$  در شرایط رقیق می‌شود. همچنین در شرایط غنی، غلظت آمونیاک نسوخته از ۵۰۰۰ به ۱۳۷۱ ppm و مقدار  $\text{N}_2\text{O}$  از ۱۲۷۴ به ۳۸۷ ppm کاهش یافته است. حضور محیط متخلخل کاتالیزوری با بهبود احتراق آمونیاک، نقش بسزایی در کاهش هم‌زمان آلاینده‌های سوخت ایفا می‌کند و می‌تواند گامی مؤثر در توسعه سامانه‌های احتراقی پاک و بدون کربن باشد. نوآوری اصلی این تحقیق در بررسی هم‌زمان تأثیر محیط متخلخل کاتالیزوری پلاتین بر کاهش آلاینده‌های  $\text{NO}_x$  و  $\text{N}_2\text{O}$  در مقیاس مزو و در شرایط مختلف نسبت هم‌ارزی است؛ موضوعی که تاکنون به‌طور جامع گزارش نشده است.

**کلیدواژه‌گان:** آمونیاک، احتراق کاتالیزوری، احتراق پیش‌آمیخته، کاهش انتشار اکسیدهای نیتروژن، سوخت بدون کربن

### مقدمه

احتراق سوخت‌های فسیلی به‌عنوان منبع اصلی انتشار گازهای گلخانه‌ای شناخته می‌شود و نقش قابل‌توجهی در تشدید گرمایش جهانی دارد [۱، ۲]. از این رو، یافتن جایگزین‌های پاک و بدون کربن برای سامانه‌های احتراقی به یکی از اولویت‌های مهم پژوهشی و صنعتی تبدیل شده است [۳]. در این میان، سوخت‌های بدون کربن، به‌ویژه آمونیاک، به‌عنوان گزینه‌ای بالقوه برای جایگزینی سوخت‌های فسیلی مورد توجه قرار گرفته‌اند. آمونیاک به‌عنوان حامل انرژی بدون کربن، می‌تواند نقش مؤثری در کاهش انتشار گازهای گلخانه‌ای ایفا کرده و به تحقق سامانه‌های انرژی پایدار کمک کند [۴].

آمونیاک به دلیل توانایی تولید انرژی بدون انتشار دی‌اکسیدکربن، به یکی از محورهای اصلی تحقیقات امروزی تبدیل شده است [۵]. این ویژگی موجب شده تا توجه گسترده‌ای از سوی پژوهشگران، صنایع و دولت‌ها جلب شود و سرمایه‌گذاری‌های قابل‌توجهی برای توسعه راهکارهای جامع به منظور استفاده از آمونیاک به‌عنوان سوختی مناسب در سامانه‌های انرژی احتراقی صورت گیرد [۶]. چندین مطالعه مروری به بررسی جنبه‌های مختلف استفاده از آمونیاک به‌عنوان سوخت پرداخته‌اند. یکی از این مطالعات [۷] چالش‌های اصلی احتراق آمونیاک، از جمله تأخیر طولانی در احتراق، سرعت پایین انتشار شعله و تولید بالای

اکسیدهای نیتروژن را بررسی کرده و راهکارهایی مانند ترکیب آمونیاک با سایر سوخت‌ها (مانند متان) و استفاده از محیط‌های متخلخل را پیشنهاد داده است. مطالعه مروری دیگری [۸] به بررسی پیشرفت‌های اخیر در احتراق آمونیاک پرداخته و مکانیسم‌های واکنش، تشکیل اکسید نیتروژن، راهبردهای کاهش آن و تأثیر افزودن آمونیاک بر تشکیل دوده را مورد بررسی قرار داده است. این مطالعه با تحلیل سینتیک‌های بنیادی آغاز شده و راهکارهای کاهش آلاینده‌گی و مسیرهای پژوهشی آینده را پیشنهاد می‌کند. همچنین، مطالعه مروری جامع دیگری [۹] جنبه‌های زیرساختی مانند تولید، حمل‌ونقل و ذخیره‌سازی آمونیاک را بررسی کرده است. آمونیاک می‌تواند از سوخت‌های هیدروکربنی تولید شود، به طوری که دی‌اکسیدکربن حاصل از این فرایند قابل جذب و جداسازی است [۱۰]. افزون بر این، امکان تولید آمونیاک از منابع تجدیدپذیر بدون انتشار دی‌اکسیدکربن نیز وجود دارد [۱۱]. با وجود مزایای متعدد آمونیاک به‌عنوان سوخت بدون کربن، چالش‌هایی نظیر سرعت پایین شعله و تولید بالای اکسید نیتروژن همچنان از معایب اصلی آن به شمار می‌روند [۱۲]. سرعت کم شعله آمونیاک باعث کاهش راندمان احتراق می‌شود و تولید بالای اکسید نیتروژن نیز نگرانی‌های زیست‌محیطی ایجاد می‌کند. برای رفع این مشکلات، تحقیقات مختلفی به افزودن سوخت‌های دیگر به آمونیاک پرداخته‌اند تا سرعت شعله افزایش یافته و اثرات زیست‌محیطی کاهش یابد، اما استفاده بهینه از آمونیاک در سیستم‌های انرژی احتراقی هنوز محدود است [۱۳]. در تحقیق دیگری [۱۴]، مشخص شده که آمونیاک سرعت احتراق بسیار پایین‌تر از متان، محدوده اشتعال‌پذیری باریک و انرژی اشتعال بالایی دارد که منجر به ویژگی‌های ضعیف احتراق و انتشار بالای اکسید نیتروژن می‌شود. با این حال، کاربرد موفق آمونیاک در تولید برق با استفاده از نیروگاه میکروتوربین گازی نیز گزارش شده است [۱۵]. مطالعات دیگری [۱۶] روش‌هایی مانند احتراق غنی شده با اکسیژن و ترکیب آمونیاک با سوخت‌های دیگر را برای بهبود ویژگی‌های احتراق بررسی کرده‌اند. همچنین استفاده از مشعل‌های متخلخل برای تثبیت شعله آمونیاک بسیار مؤثر است و پارامترهای فیزیکی محیط متخلخل نقش مهمی در عملکرد احتراق دارند. در مطالعه‌ای [۱۶]، احتراق تثبیت شده در فوم سرامیکی متخلخل که گرما را به‌صورت هدایت و تابش منتقل می‌کند، موجب افزایش سرعت شعله و پایداری احتراق شده است. تحقیقات دیگر [۱۷-۱۹] به بررسی پیشرفت‌ها، کاربردها و اصول توسعه احتراق در محیط‌های متخلخل پرداخته‌اند و تثبیت شعله را به عنوان کلید موفقیت در این فناوری معرفی کرده‌اند. با توجه به نیاز به توسعه سیستم‌های احتراق محیط متخلخل در مقیاس کوچک، چالش‌هایی مانند محدودیت‌های اشتعال‌پذیری و تثبیت شعله در فضای محدود مطرح است. بسیاری از محققان [۲۰] موفق به تثبیت شعله در نسبت‌های هم‌ارزی زیر ۰/۵ شده‌اند. همچنین آزمایش‌های متنوعی با ماتریس‌های متخلخل همگن و چندلایه انجام شده که کاهش رسانایی حرارتی محیط متخلخل به محدود کردن حرکت شعله و افزایش دمای شعله کمک می‌کند [۲۱]. یکی از پیشرفت‌های مهم همبستگی بین ناحیه پیش‌گرمایش و ناحیه احتراق است [۲۲]. مطالعات اخیر نیز به بررسی عوامل دیگری مانند ضخامت محیط متخلخل [۲۳] و استفاده از هوای پیش‌گرم شده [۲۴] برای بهینه‌سازی هندسه سیستم‌های احتراق متمرکز پرداخته‌اند.

احتراق محیط متخلخل کاتالیزوری می‌تواند یک روش مؤثر برای افزایش کارایی احتراق و کاهش انتشار اکسیدهای نیتروژن باشد، زیرا با کاهش انرژی فعال‌سازی و کوتاه‌تر کردن زمان واکنش، واکنش‌های کارآمد سوخت را تسهیل می‌کند [۲۵، ۲۶]. پژوهشگران تأکید کرده‌اند که احتراق کاتالیزوری، همراه با ساختارهای بازچرخانی حرارت، شرایط شیمیایی و حرارتی را بهبود می‌بخشد [۲۷]. مطالعات آزمایشگاهی و عددی روی راکتورهای کاتالیزوری لوله‌ای پلاتین (Pt) انجام شد که نشان داد احتراق کاتالیتیکی پایدار را ممکن می‌سازد [۲۸]. به طور مشابه، احتراق کاتالیتیکی پیش‌مخلوط در محفظه‌های احتراقی میکرو بررسی شد و مشخص شد که بهینه‌سازی شرایط احتراق و کاهش مصرف لایه پلاتین به طور قابل توجهی عمر مفید احتراق‌کننده‌های کاتالیتیکی را نسبت به نوع معمولی افزایش می‌دهد [۲۹]. علاوه بر این، تحقیقات نشان داده‌اند که تعامل بین کاتالیز و شیمی فاز گاز، از اشتعال همگن جلوگیری می‌کند، که این به دلیل جذب رادیکال OH نزدیک به دیواره کاتالیتیکی است [۳۰]. همچنین، احتراق کاتالیتیکی شامل جذب واکنش‌دهنده‌های فاز گازی بر سطح کاتالیزور است که به طور مستقیم بر دینامیک احتراق و

کارایی کلی تأثیر می‌گذارد [۳۱]. در کل مرور منابع نشان می‌دهد استفاده از محیط‌های متخلخل کاتالیزوری درون محفظه احتراق باعث افزایش کارایی احتراق و کاهش تولید آلاینده‌ها می‌شود.

مطالعات پیشین نشان داده‌اند که سرعت شعله آمونیاک در فشار اتمسفری حدود ۷ تا ۸ برابر کمتر از متان است [۱۴] و انتشار اکسیدهای نیتروژن آن می‌تواند در شرایط استوکیومتری به بیش از ۲۰۰۰ ppm برسد [۱۵، ۱۲]. همچنین تحقیقات روی مشعل‌های متخلخل گزارش کرده‌اند که استفاده از محیط متخلخل می‌تواند انتشار NO را تا ۷۰٪ کاهش دهد [۲۱، ۱۷]. با این وجود، اغلب مطالعات یا بر احتراق غیرکاتالیزوری تمرکز داشته‌اند یا تنها آلاینده‌های محدودی (مانند NO یا NO<sub>2</sub>) را بررسی کرده‌اند. تاکنون پژوهش جامعی که به بررسی همزمان اثر محیط متخلخل کاتالیزوری پلاتین بر آلاینده‌های NO، NO<sub>2</sub> و N<sub>2</sub>O در مقیاس مزو بپردازد، گزارش نشده است. این خلأ پژوهشی انگیزه اصلی تحقیق حاضر را تشکیل می‌دهد.

با توجه به مرور منابع انجام شده، مطالعه حاضر به بررسی سه‌بعدی عددی احتراق پیش‌آمیخته ترکیب آمونیاک در محیط متخلخل کاتالیزوری و مقایسه آن با محفظه احتراق معمولی، یعنی محفظه‌ای که فاقد هرگونه محیط متخلخل یا کاتالیزور بوده و صرفاً از دیواره‌های فلزی ساده تشکیل شده است، می‌پردازد. در این مطالعه هدف اصلی بررسی اثر افزودن محیط متخلخل کاتالیزوری بر احتراق آمونیاک است. بدین منظور یک محیط متخلخل از جنس پلاتین بررسی می‌شود. پارامترهایی نظیر میانگین دمای دیواره و انتشار اکسید نیتروژن بررسی می‌شود و نتایج با احتراق بدون محیط متخلخل آمونیاک در شرایط مرزی و جریانی یکسان با یکدیگر مقایسه می‌شود؛ لذا هدف اصلی این مطالعه استفاده از محیط متخلخل کاتالیزوری در احتراق ترکیب آمونیاک به منظور کاهش انتشار اکسیدهای نیتروژن و حفظ یا افزایش دمای دیواره محفظه است. این هدف باعث کاهش استفاده از سوخت‌های هیدروکربنی و استفاده بیشتر از سوخت‌های بدون کربن همچون آمونیاک می‌شود.

## روش حل عددی

مدل عددی مدل‌های عددی نقش بسزایی در بهبود همگرایی دینامیک سیالات محاسباتی، افزایش دقت نتایج و کاهش هزینه‌های محاسباتی دارند. در فرایند احتراق، کیفیت مش‌بندی باید بسیار بالا باشد. برای شبیه‌سازی صحیح احتراق، لازم است معادلات حاکم بر جریان سیال و انتقال گونه‌های شیمیایی به دقت مورد بررسی قرار گیرند؛ بنابراین، به‌کارگیری روش عددی مناسب همراه با شبکه‌ای قابل تطبیق و کارآمد اهمیت زیادی دارد.

در تحقیق حاضر، برای تحلیل احتراق از نرم‌افزار انسیس فلونت استفاده شده است. جریان پیش‌آمیخته آمونیاک/هوا با کسر مولی مختلف به‌صورت پیش‌آمیخته و با سرعت جریان ۰/۴۵ متر بر ثانیه وارد محفظه احتراق می‌شود. همچنین مدل‌سازی در حالت پایا اجرا می‌شود و از الگوریتم سیمپل برای حل کردن فشار و سرعت استفاده می‌شود. با توجه به تأثیر چشمگیر آشفتگی در محیط‌های متخلخل، به‌ویژه در اعداد رینولدز بالاتر از ۸۰، جریان در این مطالعه با استفاده از مدل آشفتگی استاندارد  $k - \epsilon$  شبیه‌سازی شده است. برای مدل‌سازی احتراق، از مدل انتقال گونه‌ها در نرم‌افزار استفاده شده است. این ترکیب امکان در نظر گرفتن همزمان سینتیک شیمیایی و اختلاط ناشی از آشفتگی را فراهم می‌آورد. در مقیاس منافذ، آشفتگی موجب افزایش انتقال همرفتی و انتشاری گونه‌های رادیکالی شده و پایداری جبهه شعله حتی در شرایط رقیق را بهبود می‌دهد. معادلات حاکم در دامنه محاسباتی با استفاده از یک طرح مرتبه دوم گسسته می‌شود. همگرایی زمانی حاصل می‌شود که باقی‌مانده معادلات انرژی و معادلات حاکم دیگر به ترتیب به زیر  $10^{-6}$  و  $10^{-3}$  کاهش یابد تا از دقت نتایج اطمینان حاصل شود. مدل دقیق مکانسیم سینتیک آمونیاک که شامل ۴۲ گونه و ۱۳۰ واکنش است، استفاده شده است [۳۲]. این مکانسیم به‌طور کامل مسیرهای مختلف

تولید NO شامل مکانیسم حرارتی<sup>۱</sup>، مکانیسم زلدویچ<sup>۲</sup>، و مکانیسم پرامپت<sup>۳</sup> را دربرمی‌گیرد. به این ترتیب، تمامی مسیرهای غالب تشکیل اکسیدهای نیتروژن در شبیه‌سازی لحاظ شده‌اند.

علاوه بر واکنش‌های حجمی، برای واکنش‌های ناهمگن سطحی ناشی از تماس سوخت و رادیکال‌ها با سطح محیط متخلخل کاتالیزوری پلاتین در نظر گرفته شده است. این مکانیسم شامل فرآیندهای اصلی جذب<sup>۴</sup>، واجذب<sup>۵</sup>، اکسیداسیون و تجزیه آمونیاک بر سطح پلاتین را مدل می‌کند. بنابراین، در این تحقیق هر دو مسیر واکنش حجمی (گاز-فاز) و واکنش‌های سطحی (کاتالیزتی) به صورت همزمان در نظر گرفته شده‌اند تا رفتار ترکیبی محیط متخلخل کاتالیزوری به‌درستی شبیه‌سازی شود. همچنین جریان سیال پیش آمیخته در این تحقیق به طور تراکم‌پذیر و گاز ایده‌آل فرض می‌شود. شرایط مرزی در ۰ به تفصیل شرح داده شده است.

جدول ۱- پارامترهای استفاده شده در شرایط مرزی

Table 1- Parameters used in boundary conditions

Description	Equivalence ratio ( $\phi$ )	Molar fraction $\text{NH}_3$	Molar $\text{O}_2$ fraction	Molar $\text{N}_2$ fraction	Inlet Velocity (m/s)	Inlet Temperature (K)	Pressure (kPa)
Case 1	0.85	0.06	0.21	0.73	0.45	300	101
Case 2	1.00	0.07	0.19	0.74	0.45	300	101
Case 3	1.20	0.09	0.16	0.75	0.45	300	101

• مدل فیزیکی سه بعدی محفظه احتراق در مقیاس مزو را نشان می‌دهد که در این تحقیق مورد مطالعه قرار گرفته است. اصطلاح احتراق در مقیاس مزو نیز برای مواردی استفاده می‌شود که مقیاس‌های طول مشخصه بزرگ‌تر از ۱ میلی‌متر هستند؛ اما با ویژگی‌های احتراق در مقیاس میکرو سنجیده می‌شوند. دیواره احتراق دارای ضخامت ۰/۵ میلی‌متر است و طول و قطر محفظه احتراق ۶۰ میلی‌متر و ۶ میلی‌متر است. ابعاد محفظه احتراق بر اساس مطالعات پیشین در حوزه احتراق مقیاس مزو و همچنین محدودیت‌های محاسباتی انتخاب شده است. طول ۶۰ میلی‌متر برای اطمینان از تکامل کامل شعله و گازهای خروجی در ناحیه محاسباتی در نظر گرفته شد [۲۹]. قطر داخلی ۶ میلی‌متر متناسب با دامنه کاربردهای میکروتوربین و راکتورهای مقیاس کوچک گزارش شده در ادبیات انتخاب شد [۲۸، ۱۵]. ضخامت دیواره ۰/۵ میلی‌متر نیز با هدف ایجاد رسانش حرارتی کافی بین دیواره و محیط متخلخل و همزمان کاهش هزینه محاسباتی استفاده شده است. در مجموع، این ابعاد ضمن انطباق با مقیاس مزو، امکان مقایسه مستقیم نتایج با پژوهش‌های تجربی و عددی موجود را فراهم می‌کنند. همچنین محفظه احتراق با پلاتین پر شده است که به عنوان محیط متخلخل وارد محفظه احتراق می‌شود.

<sup>1</sup> Thermal NO  
<sup>2</sup> Extended Zeldovich  
<sup>3</sup> Prompt NO  
<sup>4</sup> adsorption  
<sup>5</sup> desorption

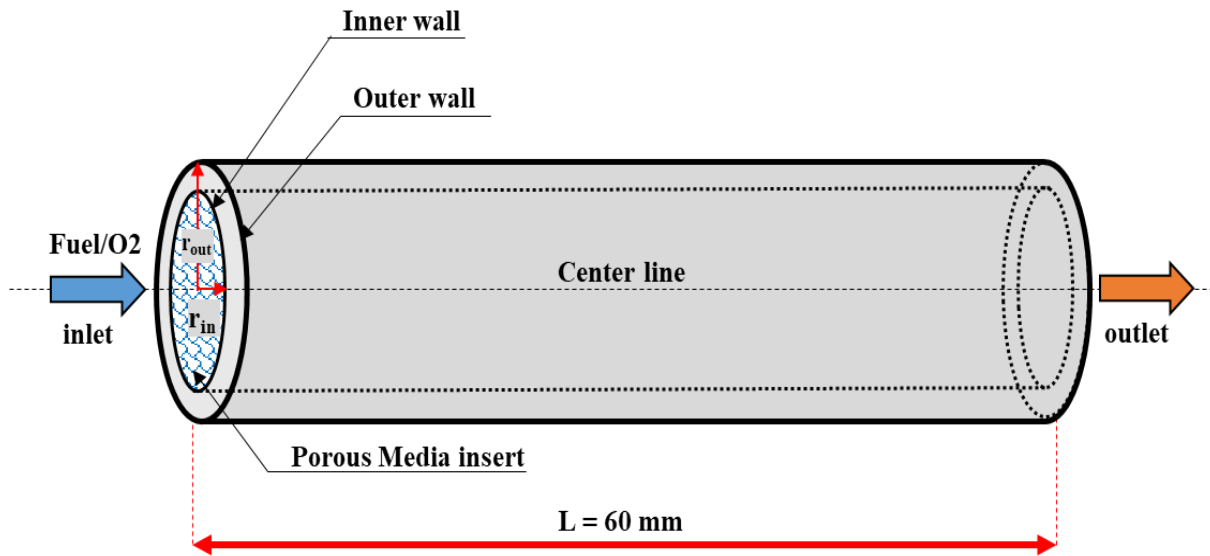


Figure 1- 3D physical model of the combustion chamber

شکل ۱- مدل فیزیکی سه بعدی محفظه احتراق

در مطالعه فعلی، پلاتین به عنوان محیط متخلخل کاتالیزوری استفاده شده است و خواص آن در ۰ به تفصیل آمده است.

جدول ۲- خواص پلاتین

Table 2- Properties of Platinum

Description	Value
Pore density $\omega$ [PPI]	10
Pore diameter $D_p$ [mm]	1.34
Hydraulic diameter $d_h$ [mm]	3.4
Cell size $d_c$ [mm]	3.1
Specific surface area $s$ [1/m]	978
Thermal conductivity [W/mK]	71.6
Specific heat [J/KgK]	133
Density [gr/cm <sup>3</sup> ]	21.45

## استقلال از شبکه

استفاده از شبکه‌های دکارتی ساختار یافته برای مش‌بندی حوزه محاسباتی، نمایشی دقیق از هندسه را تضمین می‌کند. برای اطمینان از اعتبار تحلیل‌های عددی در اندازه‌های مختلف سلول شبکه، مطالعه استقلال مش انجام شده است. شبکه‌های مختلفی برای حوزه محاسباتی محفظه احتراق به کار گرفته شدند که یکی با ۳۲۶۴۰ گره، دیگری با ۴۸۹۶۰ گره و سومین با ۷۳۴۴۰ گره است. ۰ پروفیل‌های انتشار NO برحسب نسبت هم ارزی مختلف و دما بر حسب موقعیت محفظه احتراق برای این سه شبکه را نشان می‌دهد که بیانگر آن است شبکه با ۴۸۹۶۰ گره دقت کافی برای مطالعه حاضر را فراهم می‌کند. همچنین کیفیت عمود بودن و اعوجاج برای شبکه اول به ترتیب برابر با ۰/۹۸۱ و  $۸.۲۱ \times 10^{-3}$ ، برای شبکه دوم ۰/۹۹۱ و  $۱۰^{-4}$  × ۳/۰۴ و برای شبکه سوم ۰/۹۹۹ و  $۱۰^{-4}$  × ۱/۲۱ است؛ بنابراین، شبکه‌ای با اندازه سلول یکنواخت ۰/۵ میلی‌متر در تمامی جهات که شامل ۴۸۹۶۰ گره است، برای شبیه‌سازی‌های بعدی انتخاب شد.

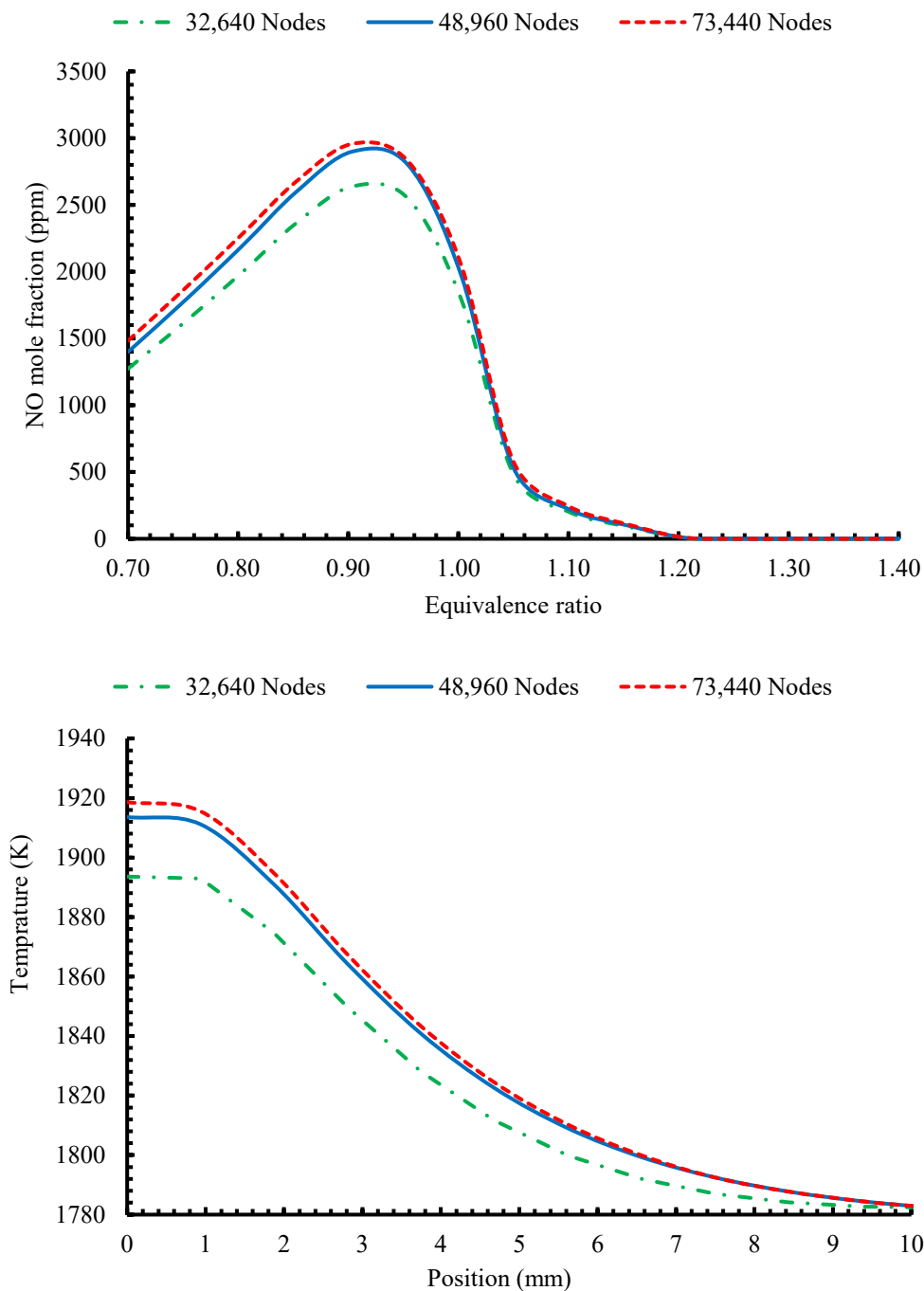


Figure 2- Checking network independence

شکل ۲- بررسی استقلال از شبکه

### معادلات حاکم

پیچیدگی احتراق در محیط متخلخل ناشی از نیاز به معادلات یکپارچه‌ای است که هم انتقال حرارت و هم سینتیک شیمیایی را در بر بگیرد. به‌طور کلی، احتراق در محیط متخلخل، بر خلاف احتراق غیر متخلخل، مزایای مختلفی مانند دامنه گسترده پایداری شعله، کاهش ناپایداری‌های حرارتی-آکوستیک [۳۳]، و افزایش انتقال حرارت [۳۵،۳۴] را ارائه می‌دهد. استفاده از محیط

متخلخل در احتراق بر پایداری شعله با مکانسیم چرخش گرما تأثیر می‌گذارد [۳۶، ۳۷]. به طور کلی، مرور منابع نشان می‌دهد که عملکرد احتراق با استفاده از محیط متخلخل بهبود یافته است [۳۸]. علاوه بر این، بررسی فاز سیال و جامد نیاز به توجه در معادلات حاکم برای اثر دقیق هر فاز دارد [۳۹]. با توجه به اینکه عدد نادسن زیر ۰/۰۰۱ تأیید شده است که کل رژیم جریان طبق اصول پیوستگی می‌تواند محاسبه شود. در نتیجه، این مطالعه از معادلات ناویر-استوکس استفاده می‌کند. شرایط به کار گرفته شده در این تحقیق به شرح زیر است:

۱. محیط متخلخل همسانگرد، همگن در نظر گرفته می‌شود.
  ۲. تخلخل یکنواخت در همه مناطق حفظ می‌شود و هیچ‌گونه نوسانی در مجاورت دیوارها ندارد.
  ۳. احتراق در حالت پایا باقی می‌ماند.
  ۴. شرایط مرزی برای دیوارها، بدون لغزش در نظر گرفته می‌شود.
  ۵. جریان تحت تأثیر نیروهای گرانشی قرار نمی‌گیرد.
  ۶. مطالعه حاضر تمام واکنش‌های سطحی بین سوخت و محیط متخلخل، از جمله جذب، دفع و تجزیه سوخت را در نظر می‌گیرد.
  ۷. اثرات کاتالیزوری جامد با دمای بالا در نظر گرفته می‌شود.
- در این مطالعه، توصیف تخلخل ( $\phi$ ) شامل نسبت حجم منافذ به حجم کل داخل محفظه احتراق است. با فرض شرایط مذکور، معادلات حاکم بر معادلات بقای سیال و جامد در محیط متخلخل را می‌توان با معادله داری توسعه یافته برینک-فورچهایمر [۴۰] به صورت زیر مدل کرد:

معادله پیوستگی:

$$\frac{\partial(\phi\rho_f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_f \vec{v}) = 0 \quad (1)$$

معادله پایستگی تکانه:

$$\frac{1}{\phi} \frac{\partial}{\partial t} (\rho_f \vec{v}) + \frac{1}{\phi} \nabla \cdot \left( \frac{\rho_f \vec{v} \vec{v}}{\phi} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \left( \frac{\bar{\tau}}{\phi} \right) - \frac{\mu_f}{a} \vec{v} - \frac{C_2}{\sqrt{a}} \rho_f |\vec{v}| \vec{v} \quad (2)$$

معادله پایستگی انرژی فاز سیال:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_f c_f T_f) + \nabla \cdot [\vec{v} \rho_f c_f T_f] = \nabla \cdot (k_{fe} \nabla T_f) + h_{sf} A_{sf} (T_s - T_f) \quad (3)$$

معادله پایستگی انرژی فاز جامد:

$$\frac{\partial}{\partial t} ((1 - \phi) \rho_s c_s T_s) = \nabla \cdot (k_{se} \nabla T_s) - h_{sf} A_{sf} (T_s - T_f) \quad (4)$$

معادله گونه‌ها:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_f Y_i) + \nabla \cdot (\rho_f \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i \quad (5)$$

محاسبه گرمای اتلاف شده از دیواره‌های محفظه احتراق به محیط به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$q_w = h_w (T_w - T_\infty) + \varepsilon_r \sigma (T_w^4 - T_\infty^4) \quad (6)$$

که در آن،  $T_\infty$  دمای محیط را نشان می‌دهد. انتقال حرارت تشعشعی و انتقال حرارت جابجایی در اتلاف حرارت دیواره لحاظ شده است. این معادله مد نظر با کار محققین پیشین [۴۱] همخوانی دارد. در تحقیق حاضر، برای تحلیل احتراق از نرم‌افزار انسیس فلونت استفاده شده است. جریان مخلوط آمونیاک با کسر مولی برابر بصورت پیش آمیخته و با سرعت جریان ۰/۴۵ متر بر ثانیه وارد محفظه احتراق می‌شود. همچنین مدل‌سازی در حالت پایا اجرا می‌شود و از الگوریتم سیمپل برای حل کردن فشار و سرعت استفاده می‌شود. معادلات حاکم در دامنه محاسباتی با استفاده از یک طرح مرتبه دوم گسسته می‌شود. همگرایی زمانی حاصل می‌شود که باقی‌مانده معادلات انرژی و معادله گونه‌ها به ترتیب به زیر  $10^{-6}$  و  $10^{-3}$  کاهش یابد تا از دقت نتایج اطمینان حاصل شود. مدل دقیق مکانسیم سینتیک احتراق آمونیاک که شامل ۴۲ گونه و ۱۳۰ واکنش است، استفاده شده است [۳۲]. جریان

سیال پیش آمیخته در این تحقیق به‌طور کامل تراکم‌ناپذیر فرض می‌شود. شرایط مرزی در ۰ به تفصیل شرح داده شده است و چگالی سیال با استفاده از قانون گاز ایده‌آل محاسبه می‌شود:

$$p = \rho_f RT_f \quad (7)$$

در مدل‌سازی محیط متخلخل به کار رفته در این مطالعه، ناحیه تعیین‌شده به‌عنوان محیط متخلخل به‌عنوان سیال مشخص می‌شود. در عین حال، نفوذپذیری میزان آسانی حرکت مخلوط سیال در محیط متخلخل را اندازه‌گیری می‌کند. برای این همبستگی از طریق معادله کلاسیک اقتباس شده کوزنی-کارمن ارائه شده در زیر استفاده شده است [۴۲]:

$$a = C \frac{\phi^{2+m}}{(1-\phi)^2} \quad (8)$$

در نتیجه، تعیین ضرایب نفوذپذیری و مقاومت اینرسی با استفاده از معادلات نرم‌افزار انسیس فلونت [۴۳] انجام می‌شود که در زیر فرموله شده است:

$$a = \frac{D_p^2}{150} \frac{\phi^3}{(1-\phi)^2} \quad (9)$$

$$C_2 = \frac{3.5(1-\phi)}{D_p \phi^3} \quad (10)$$

سطح انتقال حرارت بین محیط متخلخل و سیال در معادلات انرژی توسط فرمول زیر [۴۴] نشان داده شده است:

$$A_{sf} = \frac{6(1-\phi)}{D_p} \quad (11)$$

که در آن قطر منافذ را می‌توان بر اساس همبستگی زیر به دست آورد [۴۵]:

$$D_p = \frac{\sqrt{\frac{4\phi}{\pi}}}{20 \times 2.54\omega} \quad (12)$$

جایی که  $\omega$  چگالی منافذی از فوم محیط متخلخل است که در ۰ به ارائه شده است و  $h_{sf}$  ضریب انتقال حرارت جابه‌جایی میان محیط متخلخل و سیال است و به صورت زیر بیان می‌شود [۴۰]:

$$h_{sf} = \left(2 + 1.1 Re_d^{0.6} Pr^{\frac{1}{3}}\right) \frac{k_f}{D_p} \quad (13)$$

که در آن  $Pr$  عدد پراوندتل سیال و  $Re = \frac{\rho_f u D_p}{\mu_f}$  عدد رینولدز است و ضریب موثر انتقال حرارت هدایتی به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\begin{aligned} k_{fe} &= \phi k_f \\ k_{se} &= (1-\phi)k_s \end{aligned} \quad (14)$$

با توجه به ترکیب سوخت و اکسیدکننده، نمایش کسر مولی نسبت هم ارزی نشان دهنده نسبت سوخت مصرف شده در فرایند احتراق است. این تحقیق نسبت هم ارزی را بر حسب کسرهای مولی بیان می‌کند که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\varphi = \frac{\left(\frac{n_{fuel}}{n_{oxidizer}}\right)_{actual}}{\left(\frac{n_{fuel}}{n_{oxidizer}}\right)_{stoichiometric}} \quad (15)$$

که در اینجا،  $n$  مول‌ها را در شرایط واقعی و استوکیومتری نشان می‌دهد.

## صحت‌سنجی مدل‌سازی

برای اعتبارسنجی دقت و سازگاری مدل عددی مورد استفاده در مطالعه حاضر، نتایج شبیه‌سازی برای انتشار NO با تحقیقی آزمایشگاهی [۴۶] مقایسه می‌شود. همان‌طور که در ۰ نشان داده شده است، تطابق قابل توجهی در انتشار NO بین دو مجموعه

نتیجه مشهود است. حداکثر خطا مشاهده شده در محدوده نسبت هم ارزی استوکیومتری، ۶/۵٪ است. به طور کلی، هم از نظر کمیت و هم از نظر کیفیت، شبیه‌سازی با یافته‌های داده‌های مرجع مطابقت نزدیکی دارد.

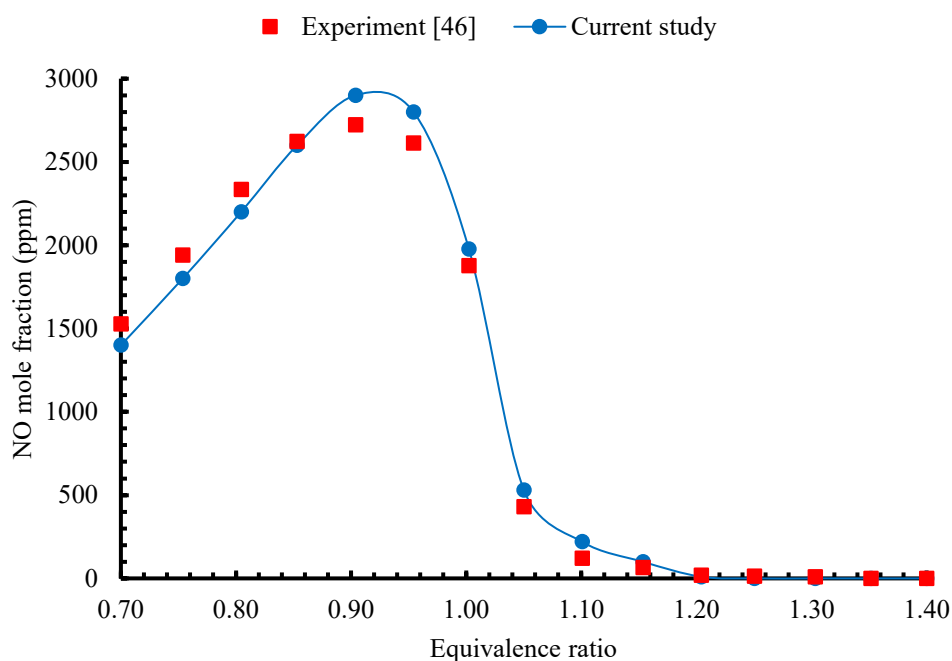
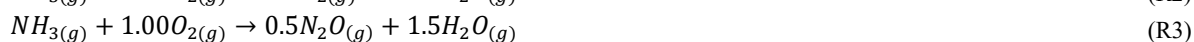


Figure 3- Modeling validation with reference article [46] (none porous media ammonia combustion)  
 شکل ۳- صحت سنجی مدل‌سازی با مقاله مرجع [۴۶] (احتراق بدون محیط متخلخل آمونیاک)

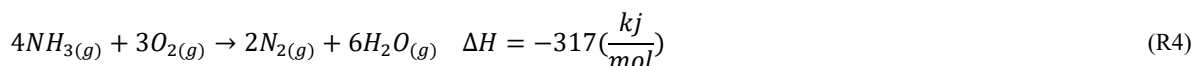
## نتایج

احتراق آمونیاک در محیط متخلخل کاتالیزوری، همان‌طور که در ۰ نشان داده شده است، به دلیل اهمیت آن در جایگزینی با سوخت‌های هیدروکربنی در کاربردهای صنعتی به تازگی مورد مطالعه قرار گرفته است. این واکنش ممکن است از طریق سه مسیر اصلی ادامه یابد:



با این حال، در کاتالیزورها تحت شرایط خاص، تنها یکی از سه فرایند غالب است. واکنش احتراق  $NH_3$  گرمازا است، در حالی که واکنش تجزیه  $NH_3$  گرماگیر است، همان‌طور که در زیر توضیح داده شده است:

احتراق  $NH_3$ :



تجزیه  $NH_3$ :



جذب آمونیاک بر روی سطوح پلاتین انجام می‌شود و توسط محققین برای پلاتین پلی کریستالی و پلاتین تک کریستالی مورد بررسی قرار گرفته است. رفتار جذب در تمام سطوح تک کریستالی پلاتین، غیرفعال و مولکولی است و آمونیاک از طریق اتم نیتروژن متصل می‌شود. مطالعات تنوع قابل توجهی را در انرژی فعال سازی دفع نشان داده‌اند [۴۷]:

جذب  $\text{NH}_3$ :



دفع  $\text{NH}_3$ :



پارامترهای جذب و دفع اکسیژن از داده‌های تجربی موجود در ادبیات به دست آمد. از آنجایی که فاصله بین اتم‌های جذب شده حداقل است، اکسیژن در نزدیک‌ترین مکان‌های همسایه جذب نمی‌شود. در نتیجه، حداکثر پوشش اکسیژن اتمی در بین صفحات مختلف پلاتین متفاوت است:

جذب  $\text{O}_2$ :



دفع  $\text{O}_2$ :



همچنین مولکول‌های هیدروژن می‌توانند روی سطوح پلاتین جذب شوند، جایی که به هیدروژن اتمی تجزیه می‌شوند و مرحله‌ای حیاتی در واکنش‌های کاتالیزوری مانند هیدروژناسیون است. علاوه بر این، دفع هیدروژن از پلاتین حیاتی است، زیرا بر کارایی کلی فرایندهای کاتالیزوری تأثیر می‌گذارد [۴۸]:

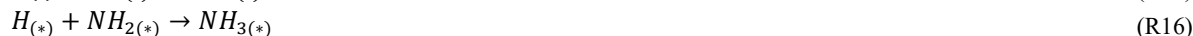
جذب  $\text{H}_2$ :



دفع  $\text{H}_2$ :



در محیط متخلخل کاتالیزوری پلاتین، مولکول‌های هیدروژن به اتم‌های هیدروژن و مولکول‌های نیتروژن به اتم‌های نیتروژن تفکیک می‌شوند. برخی از اتم‌های نیتروژن با اتم‌های هیدروژن ترکیب می‌شوند و مولکول‌های  $\text{NH}$  را تشکیل می‌دهند. متعاقباً، مولکول‌های  $\text{NH}$  با اتم‌های هیدروژن واکنش داده و مولکول‌های  $\text{NH}_2$  را تشکیل می‌دهند. در مرحله بعد، مولکول‌های  $\text{NH}_2$  با اتم‌های هیدروژن واکنش داده و آمونیاک تولید می‌کنند.



این اثر توانایی کاتالیزورهای پلاتین را نه تنها در تقویت احتراق بلکه در تسریع واکنش‌های ثانویه تحت شرایط خاص و افزایش پیچیدگی ترکیب شیمیایی سوخت برجسته می‌کند. درک این واکنش‌های ثانویه برای بهینه‌سازی فرایندهای احتراق بسیار مهم است، زیرا ممکن است بر پایداری شعله و تشکیل اکسیدهای نیتروژن و انتشار کلی تأثیر بگذارند.

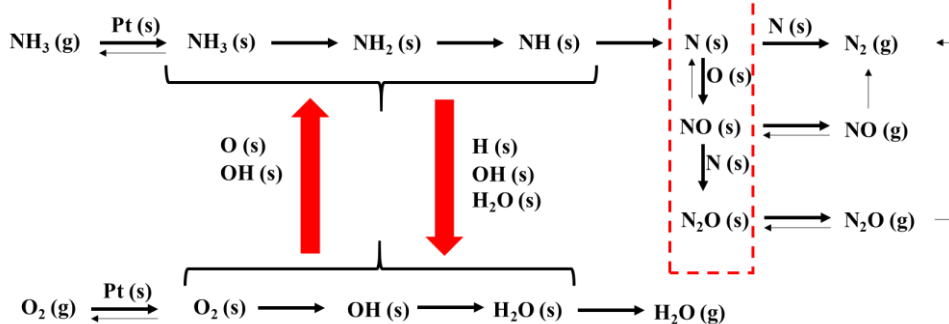
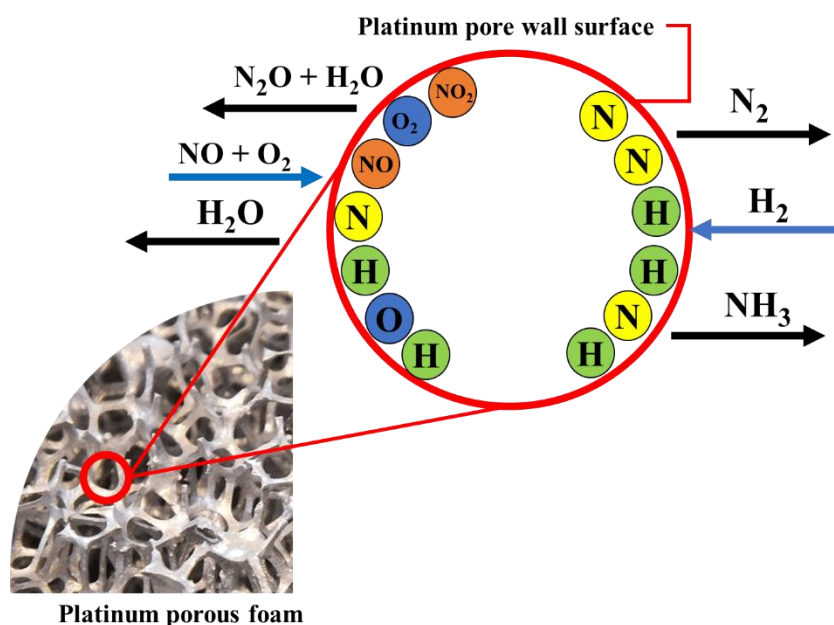


Figure 4- Schematic of catalytic combustion of ammonia on the surface of a porous platinum medium

شکل ۴- طرحواره احتراق کاتالیزوری آمونیاک روی سطح محیط متخلخل پلاتین

در طی فرایند احتراق، اکسیدهای نیتروژن می‌توانند از طریق چندین مکانیسم تشکیل شوند که تحت تأثیر ترکیب سوخت، دما، و شرایط احتراق قرار دارند. یکی از مسیرهای مهم تشکیل اکسیدهای نیتروژن، مکانیسم حرارتی است که زمانی رخ می‌دهد که نیتروژن اتمسفری ( $\text{N}_2$ ) در دماهای بالا، معمولاً بالاتر از ۱۸۰۰ کلوین، با اکسیژن ( $\text{O}_2$ ) واکنش داده و  $\text{NO}$  تولید می‌کند. این مکانیسم به‌ویژه در احتراق سوخت‌هایی با دمای احتراق بالا اهمیت دارد و معمولاً با استفاده از مکانیسم توسعه‌یافته زلدویچ توصیف می‌شود. این واکنش‌ها که وابستگی زیادی به دما دارند، نقش حیاتی در تولید اکسیدهای نیتروژن ایفا می‌کنند و درک آن‌ها برای کنترل مؤثر آلاینده‌ها ضروری است.

مسیر دیگر، مکانیسم تشکیل سریع یا فوری است. در این حالت، گونه‌های واسطه‌ای که در حین احتراق ایجاد می‌شوند، با نیتروژن اتمسفری واکنش داده و ترکیباتی تولید می‌کنند که در نهایت منجر به تشکیل اکسیدهای نیتروژن می‌شوند. این فرایند در نواحی با دمای احتراق نسبتاً پایین، مانند فاز شروع سرد موتورهای درون‌سوز، بارزتر است.

در مقابل، مکانیسم غالب در احتراق آمونیاک، تشکیل اکسیدهای نیتروژن از نیتروژن موجود در سوخت است. از آنجا که آمونیاک حاوی غلظت بالایی از نیتروژن است، اتم‌های نیتروژن موجود در خود سوخت در هنگام احتراق با اکسیژن واکنش داده و  $\text{NO}$  و  $\text{NO}_2$  تولید می‌کنند. این مسیر در دماهای بالا که نیتروژن پیوند خورده به سوخت نقش فعالی در تولید اکسیدهای نیتروژن ایفا می‌کند، اهمیت بیشتری می‌یابد.

افزایش سهم آمونیاک در سوخت منجر به افزایش انتشار اکسیدهای نیتروژن می‌شود که علت آن وجود نیتروژن در ترکیب سوخت است.  $\bullet$  نمای کلی از مسیر احتراق در محیط غیر متخلخل برای آمونیاک ارائه می‌دهد که شامل مسیرهای تشکیل  $\text{NO}_x$  و  $\text{N}_2\text{O}$  می‌باشد. مسیرهای واکنش غالب که از طریق محاسبات با استفاده از نرم‌افزار کمکین پرو<sup>۱</sup> و مکانیسم واکنشی مذکور شناسایی شده‌اند، با پیکان‌های پررنگ نمایش داده شده‌اند.

در بخش شیمی نیتروژن، احتراق آمونیاک با جدا شدن آن توسط رادیکال‌های OH و H آغاز شده و رادیکال‌های آمین  $(\text{NH}_2)$  را تشکیل می‌دهد. این رادیکال‌ها می‌توانند به NH (ایمیدوژن) و نیتروژن اتمی (N) تبدیل شده یا با گونه‌های دارای اکسیژن واکنش داده و ترکیبات واسطی مانند HNO ایجاد کنند که پلی میان زنجیره اکسایش آمونیاک و مسیرهای تشکیل  $\text{NO}_x$  است. تبدیل HNO به NO به دما و تراکم رادیکال‌ها حساس است. NO می‌تواند از طریق مکانیسم NNH به نیتروژن مولکولی ( $\text{N}_2$ ) کاهش یابد یا به طور جزئی اکسید شده و  $\text{N}_2\text{O}$  تشکیل دهد که این فرایند به نسبت هم‌ارزی و زمان ماند بستگی دارد.

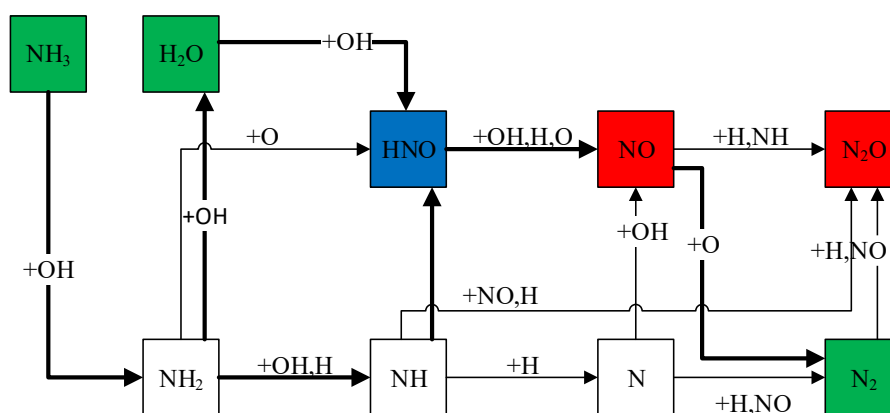


Figure 5- Detailed reaction pathway for ammonia combustion  
شکل ۵- مسیر واکنش دقیق احتراق آمونیاک

$\bullet\bullet$  مسیر واکنش احتراق آمونیاک روی سطح محیط متخلخل کاتالیزوری پلاتین را نشان می‌دهد. سطوح پلاتین (Pt) نقش حیاتی در احتراق کاتالیستی آمونیاک ایفا می‌کنند. جذب آمونیاک از طریق اتم نیتروژن آن انجام می‌شود و حضور اکسیژن یا نوع ساختار بلوری پلاتین تأثیر چندانی بر آن ندارد، هرچند با افزایش دما، جذب به دلیل واکنش‌های بعدی کاهش می‌یابد. اکسیژن در دماهای بالا به صورت اتمی جذب می‌شود و با افزایش پوشش سطحی، به دلیل نیروهای دافعه، انرژی پیوند آن کاهش می‌یابد. آب به صورت مولکولی و از طریق برهم‌کنش‌های ضعیف جذب می‌شود، در حالی که هیدروژن به صورت تفکیک یافته جذب شده و به دلیل تحرک سطحی بالا، موجب تسریع در پیشرفت واکنش‌ها می‌شود.

گاز NO بر اساس پوشش سطحی و دما در مکان‌های مختلفی روی پلاتین جذب می‌شود و نقش مهمی در راندمان احتراق و کنترل آلاینده‌ها ایفا می‌کند. گاز  $\text{N}_2$  از ترکیب دو اتم نیتروژن سطحی تشکیل می‌شود و واکنش آن غیر قابل برگشت است. رفتار گاز  $\text{N}_2\text{O}$  بر روی پلاتین کمتر شناخته شده و به دلیل پیوند ضعیف، به راحتی واکنش می‌شود که آن را به گونه‌ای واسط و ناپایدار تبدیل می‌کند.

فعال‌سازی آمونیاک روی پلاتین شامل حذف گام‌به‌گام هیدروژن و تولید گونه‌هایی مانند  $\text{NH}$ ،  $\text{NH}_2$  و N است که به میزان دسترسی اکسیژن بستگی دارد. یون هیدروکسید (OH) از ترکیب اکسیژن سطحی و هیدروژن تشکیل می‌شود و در تجزیه آمونیاک و مسیرهای تولید  $\text{NO}_x$  نقش دارد. NO از واکنش نیتروژن و اکسیژن جذب شده روی سطح پلاتین به وجود می‌آید و

<sup>۱</sup> CHEMKIN-PRO

پیش از واکنش بعدی، به صورت سطحی باقی می‌ماند.  $N_2O$  از واکنش گونه‌های  $NH_x$  با رادیکال‌های اکسیژن به‌ویژه در شرایط سوخت غنی و دمای پایین تشکیل شده و به  $N_2$  و  $O$  تجزیه می‌شود.

تجزیه  $N_2O$  در دماهای بالای ۷۰۰ تا ۸۰۰ کلوین مؤثر است، اما در فشارهای بالا به دلیل اشباع سطح با اکسیژن و مسدود شدن محل‌های فعال روی پلاتین، مهار می‌شود. این وابستگی به فشار باعث می‌شود که تولید  $N_2O$  به‌صورت غیرخطی باشد و با توجه به پتانسیل گرمایش جهانی بالای آن، اهمیت زیست‌محیطی قابل توجهی پیدا کند. مدل‌سازی پیش‌بینی‌کننده در چنین سامانه‌هایی باید سینتیک سطحی و دینامیک سیال در مقیاس ماکرو را با هم ترکیب کند. استفاده از پلاتین به‌عنوان محیط متخلخل کاتالیستی موجب تجزیه زودهنگام آمونیاک، کاهش دمای شعله و کاهش چشمگیر  $NO_x$  ناشی از مسیرهای حرارتی و نیتروژن سوخت می‌شود [۵۰، ۴۹].

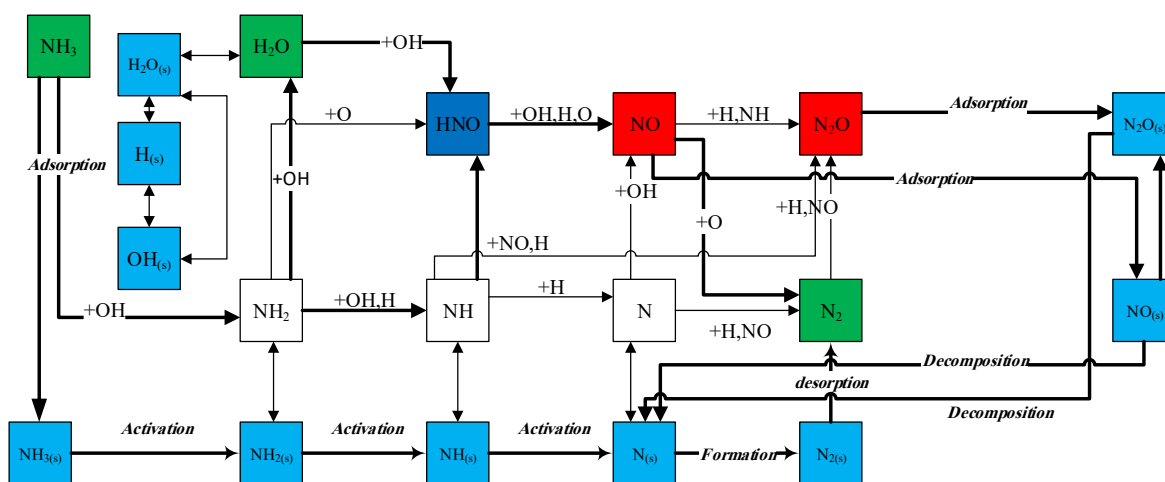


Figure 6- Detailed reaction pathway of ammonia combustion on the surface of a porous platinum catalytic medium  
 شکل ۶- مسیر واکنش دقیق احتراق آمونیاک روی سطح محیط متخلخل کاتالیزوری پلاتین

میزان تولید آلاینده‌های همان‌طور که گفته شد، استفاده از آمونیاک به‌عنوان سوخت، چالشی مهم در زمینه‌ی انتشار آلاینده‌ها به‌ویژه اکسیدهای نیتروژن ( $NO_x$ ) به همراه دارد که در ۰ به‌خوبی قابل مشاهده است. نیتروژن موجود در ساختار مولکولی آمونیاک در هنگام احتراق می‌تواند با اکسیژن ترکیب شده و منجر به تولید گونه‌هایی نظیر  $NO$ ،  $NO_2$  و  $N_2O$  شود. این ترکیبات از جمله آلاینده‌های شناخته‌شده‌ای هستند که به شدت برای سلامت انسان و محیط‌زیست مضرند، زیرا در ایجاد باران اسیدی، تخریب لایه اوزون، و افزایش پتانسیل گرمایش جهانی نقش دارند [۵۱].

با وجود اینکه آمونیاک مزیت بزرگ خود را در حذف کامل کربن از چرخه‌ی سوخت دارد و بنابراین هیچ  $CO_2$  مستقیمی در فرایند احتراق آن تولید نمی‌شود، اما افزایش تولید  $NO_x$  می‌تواند این مزیت را زیر سؤال ببرد. از این رو، یافتن تعادلی مناسب بین مزایای کاهش دی‌اکسیدکربن و معایب بالقوه‌ی ناشی از تولید  $NO_x$  برای بهره‌برداری پایدار از آمونیاک ضروری است. تحقق این تعادل نه‌تنها از منظر کارایی احتراق بلکه از دیدگاه سیاست‌گذاری‌های محیط‌زیستی و سلامت عمومی نیز حیاتی است. در ۰، انتشار گونه‌های مختلف اکسید نیتروژن در احتراق آمونیاک در نسبت‌های هم‌ارزی گوناگون مورد بررسی قرار گرفته است. مشاهده می‌شود که با افزایش نسبت هم‌ارزی از ۰/۷ تا حدود مقدار استوکیومتری (نسبت هم‌ارزی  $\approx 1$ )، کسر مولی  $NO$  ابتدا افزایش می‌یابد که می‌تواند به دلیل دمای بالاتر و شرایط غنی از اکسیژن در این محدوده باشد که تشکیل  $NO$  را تسهیل می‌کند. پس از نقطه استوکیومتری، با کاهش مقدار اکسیژن موجود، نرخ تشکیل  $NO$  کاهش یافته و بنابراین کسر مولی آن نیز کاهش می‌یابد.

در مقابل، کسر مولی NO<sub>2</sub> در کل روندی کاهشی دارد. این می‌تواند ناشی از تبدیل NO<sub>2</sub> به سایر گونه‌ها مانند NO یا واکنش با رادیکال‌های هیدروژن باشد. همچنین، مقدار N<sub>2</sub>O تا نسبت هم‌ارزی حدود ۱/۱ تقریباً ثابت یا کم است، اما پس از آن افزایش می‌یابد. این رفتار ممکن است ناشی از شرایط غنی از سوخت (Fuel-Rich) باشد که باعث پایداری بیشتر N<sub>2</sub>O به عنوان یک گونه‌ی میانی می‌شود، چراکه در این شرایط اکسیژن محدود شده و اکسایش کامل N<sub>2</sub>O به NO یا N<sub>2</sub> کمتر رخ می‌دهد.

افزایش N<sub>2</sub>O، به‌ویژه در شرایط غنی از سوخت، بسیار نگران‌کننده است، زیرا N<sub>2</sub>O دارای پتانسیل گرمایش جهانی حدود ۳۰۰ برابر بیشتر از CO<sub>2</sub> است و در صورتی که کنترل نشود، می‌تواند تأثیرات منفی شدیدی بر اقلیم داشته باشد. از این رو، تحلیل دقیق این رفتارها در شرایط مختلف احتراق و توسعه‌ی راهکارهایی برای به حداقل رساندن انتشار این آلاینده‌ها، مانند استفاده از کاتالیزورهای مناسب (مانند پلاتین) یا طراحی سامانه‌های احتراقی پیشرفته، بسیار حیاتی است.

افزایش محسوس غلظت آمونیاکِ نسوخته در نسبت‌های هم‌ارزی بالا را می‌توان عمدتاً به غنی شدن مخلوط و محدودیت اکسیدکننده نسبت داد. در این رژیم، مصرف آمونیاک به‌طور غالب از مسیرهای وابسته به اکسیدکننده و رادیکال‌های اکسیدکننده به‌ویژه O و OH انجام می‌شود؛ در حالی که با افزایش  $\phi$ ، کسری اکسیژن و نیز تراکم رادیکال‌های O/OH کاهش می‌یابد و بنابراین واکنش‌های کلیدی کند می‌شوند. از سوی دیگر، حضور گونه‌های احیاکننده باعث رقابت برای رادیکال‌های O/OH و تقویت مسیرهای بازکاهشی می‌شود؛ به‌گونه‌ای که NO تولیدی موضعی نیز از طریق زنجیره‌های  $NH_i + NO \rightarrow N_2 + \dots$  به N<sub>2</sub> تبدیل شده و در نتیجه ضمن کاهش اکسیدهای نیتروژن، غلظت آمونیاک افزایش می‌یابد. همزمان، کاهش ملایم دمای شعله پس از استوکیومتری، هرچند فاقد افت ناگهانی و نشانه خاموشی، ثابت‌های سرعت مسیرهای اکسیداسیون آمونیاک را بیشتر محدود می‌کند.

همچنین بررسی تغییرات دمای محصولات برحسب نسبت هم‌ارزی نشان می‌دهد که با افزایش  $\phi$  از ۰/۷۰ تا ۱/۰۰، دما از ۱۷۳۲ کلوین به ۲۰۶۴ کلوین افزایش یافته و به مقدار بیشینه خود می‌رسد. پس از نقطه استوکیومتری، با ورود به ناحیه غنی، دما به‌صورت تدریجی کاهش یافته و در  $\phi=1.40$  به حدود ۱۸۷۳ کلوین می‌رسد. روند تغییرات دما پیوسته بوده و فاقد افت ناگهانی است؛ بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که در بازه مورد مطالعه، خاموشی شعله رخ نداده است که با نتایج کار قبلی [۵۲] نیز هم‌راستا است. بر این اساس، کاهش محسوس در غلظت آلاینده‌های NO و اکسیدهای نیتروژن در ناحیه غنی عمدتاً ناشی از دو عامل است: نخست، کاهش تدریجی دمای شعله پس از شرایط استوکیومتری که منجر به افت کارایی مسیر حرارتی زلدویچ می‌شود، و دوم، محدودیت اکسیژن که سبب کاهش تشکیل و پایداری رادیکال‌های فعال O و OH می‌شود. این شرایط مسیرهای غالب تولید اکسیدهای نیتروژن را سرکوب کرده و منجر به کاهش چشمگیر آن‌ها می‌شود.

با این حال، نتایج نشان می‌دهد که در نسبت‌های هم‌ارزی بالاتر از ۱/۱، در حالی که مقادیر NO و اکسیدهای نیتروژن کاهش یافته‌اند، غلظت N<sub>2</sub>O به‌طور قابل توجهی افزایش می‌یابد. این موضوع از منظر زیست‌محیطی حائز اهمیت است؛ زیرا N<sub>2</sub>O یکی از گازهای گلخانه‌ای بسیار قوی محسوب می‌شود و همان‌طور که قبلاً گفته شد اثر گرمایش جهانی آن حدود ۳۰۰ برابر بیشتر از CO<sub>2</sub> گزارش شده است. بنابراین، هرچند در ناحیه غنی تشکیل اکسیدهای نیتروژن کاهش می‌یابد، افزایش تولید N<sub>2</sub>O می‌تواند تهدیدی جدی برای اثرات زیست‌محیطی احتراق در این شرایط باشد. در عین حال، تداوم دماهای بالاتر از ۱۸۵۰ کلوین در کل بازه غنی نشان می‌دهد که احتراق پایدار باقی می‌ماند و پدیده خاموشی شعله رخ نداده است. به‌طور کلی، افت آلاینده‌ها در شرایط غنی بیش از آن که ناشی از خاموشی باشد، نتیجه افت دما و محدودیت اکسیژن است، اما افزایش N<sub>2</sub>O لزوم توجه به موازنه انتشار آلاینده‌ها در شرایط غنی را برجسته می‌سازد. در نهایت، توجه به تأثیر نسبت هم‌ارزی بر تولید گونه‌های مختلف NO<sub>x</sub> می‌تواند به بهینه‌سازی عملکرد سامانه‌های احتراقی مبتنی بر آمونیاک کمک کرده و گامی مؤثر در راستای استفاده از این سوخت کم‌کربن به‌عنوان گزینه‌ای پایدار و پاک برداشته شود.

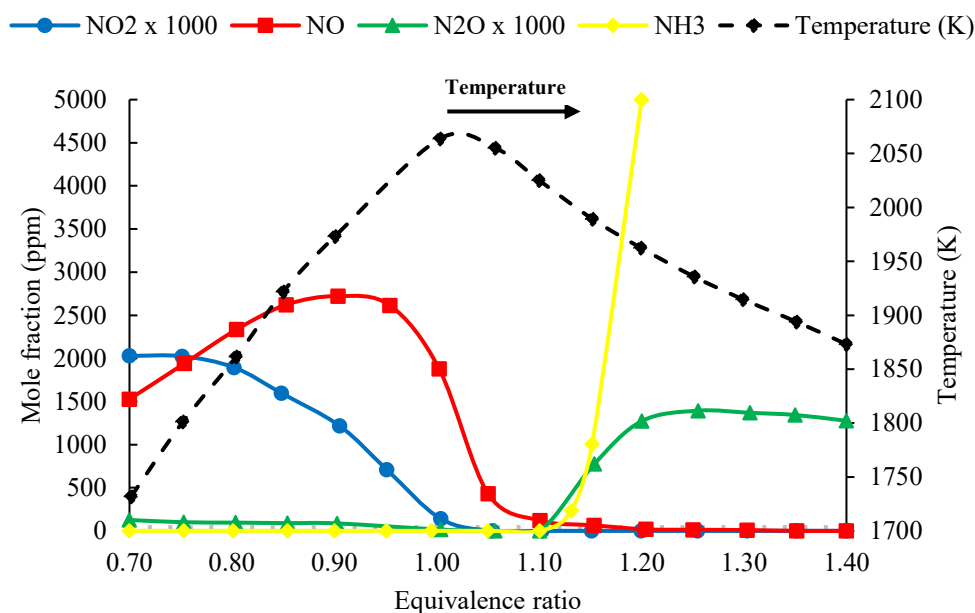


Figure 7- Emission rates of nitrogen oxides in none porous media ammonia combustion with different equivalence ratios  
 شکل ۷- میزان انتشار اکسیدهای نیتروژن در احتراق بدون محیط متخلخل آمونیاک با نسبت هم ارزی مختلف

بررسی اثر استفاده از محیط متخلخل کاتالیزوری پلاتین بر انتشار اکسید نیتروژن در احتراق آمونیاک در ۰ نشان داده شده است که بینش‌های ارزشمندی را در مورد پارامترهای احتراق نشان می‌دهد. ۰، نمودار میله‌ای ارائه‌شده، مقایسه‌ای از میزان انتشار آلاینده‌های مختلف شامل NO، NO<sub>2</sub> و N<sub>2</sub>O و آمونیاک را در دو حالت بدون محیط متخلخل (non-PM) و با محیط متخلخل کاتالیزوری (Catalytic-PM) و در دو نسبت هم‌ارزی متفاوت  $\phi = 1.20$  و  $\phi = 0.85$  نشان می‌دهد.

در حالت non-PM با نسبت هم‌ارزی ۰.۸۵، میزان انتشار NO بسیار بالا و برابر با ۲۶۲۳ ppm، و NO<sub>2</sub> برابر با ۱۵۹۸ ppm است. مقدار N<sub>2</sub>O در این حالت ۹۰ ppm بوده و آمونیاک باقیمانده عملاً صفر است. این مقادیر نشان‌دهنده دمای بالای احتراق و عدم تبدیل مؤثر NO به سایر گونه‌ها است. در مقابل، در حالت non-PM با نسبت هم‌ارزی ۱.۲۰، انتشار NO و NO<sub>2</sub> تقریباً صفر است، اما مقدار بسیار زیادی از N<sub>2</sub>O (۱۲۷۴ ppm) و آمونیاک نسوخته (۵۰۰۰ ppm) مشاهده می‌شود. این امر نشان می‌دهد که در شرایط غنی از سوخت، به دلیل محدودیت اکسیژن، NO تولید نمی‌شود ولی مقادیر زیادی N<sub>2</sub>O به عنوان گونه‌ی میانی پایدار تشکیل شده و مقدار زیادی آمونیاک نیز نسوخته باقی می‌ماند.

در حالت Catalytic-PM با نسبت هم‌ارزی ۰/۸۵، انتشار NO و NO<sub>2</sub> به‌طور قابل توجهی کاهش یافته و به ترتیب به ۲۸۴ و ۱۳۱ ppm رسیده است. N<sub>2</sub>O نیز ۲۲۶ ppm اندازه‌گیری شده و آمونیاک باقیمانده صفر است. این کاهش چشمگیر در انتشار اکسیدهای نیتروژن نشان می‌دهد که استفاده از محیط متخلخل کاتالیزوری منجر به تجزیه مؤثرتر آمونیاک و کنترل بهتر آلاینده‌ها شده است. در حالت Catalytic-PM با نسبت هم‌ارزی ۱/۲۰، نیز، انتشار NO و NO<sub>2</sub> صفر است، مقدار N<sub>2</sub>O به ۳۸۷ ppm کاهش یافته و آمونیاک باقیمانده نیز به ۱۳۷۱ ppm رسیده که در مقایسه با حالت non-PM بسیار کمتر است. این نتایج نشان می‌دهد که استفاده از کاتالیزور پلاتینی موجب شکست زودتر آمونیاک، افزایش یکنواختی واکنش، و کاهش آلاینده‌های زیان‌آور در شرایط غنی از سوخت شده است.

در مجموع، استفاده از محیط متخلخل کاتالیزوری (Catalytic-PM) نقش مؤثری در کاهش آلاینده‌های اکسید نیتروژن دارد. در شرایط رقیق، باعث کاهش هم‌زمان NO، NO<sub>2</sub> و آمونیاک می‌شود و در شرایط غنی، انتشار N<sub>2</sub>O و آمونیاک را به طور

قابل توجهی کاهش می‌دهد. این امر نشان‌دهنده عملکرد مؤثر کاتالیزور پلاتینی در کاهش آلاینده‌گی و بهبود کیفیت احتراق در سامانه‌های سوخت آمونیاکی است.

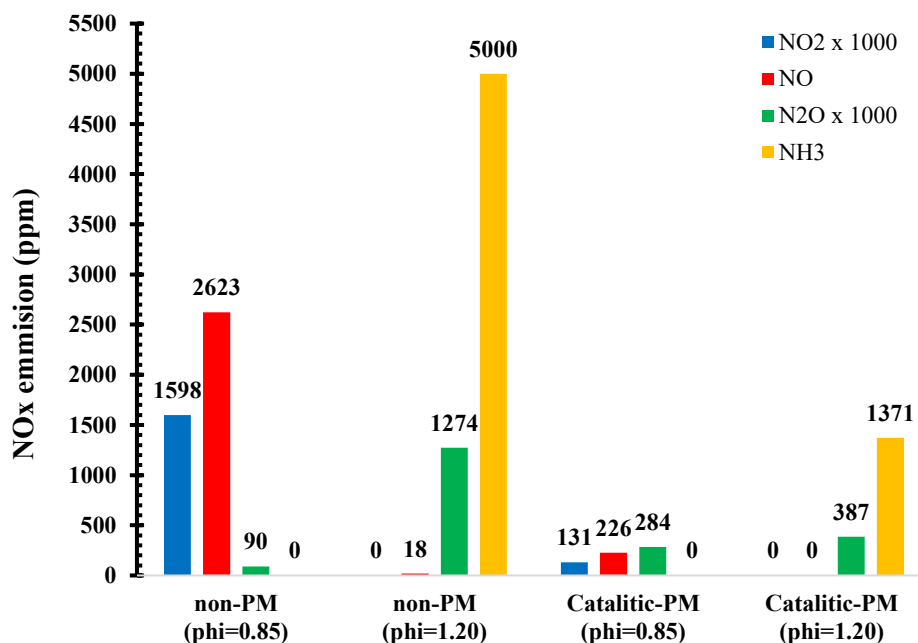


Figure 8- Investigation of the effect of equivalence ratio on nitrogen oxide emissions for purification with and without a porous catalytic medium.

شکل ۸- بررسی اثر نسبت هم ارزی در انتشار اکسیدهای نیتروژن برای احتراق با و بدون محیط متخلخل کاتالیزوری

### نتیجه‌گیری

در این مطالعه، بر اساس نتایج به‌دست‌آمده از بررسی چهار سناریوی احتراقی مختلف در دو نسبت هم‌ارزی  $\phi = 0.85$  و  $\phi = 1.20$  و در حضور و عدم حضور محیط متخلخل کاتالیزوری، می‌توان به این نتیجه رسید که استفاده از محیط متخلخل کاتالیزوری (Catalytic-PM) تأثیر قابل توجهی در کاهش آلاینده‌های اکسید نیتروژن و افزایش کارایی احتراق سوخت آمونیاک دارد. در شرایط بدون محیط متخلخل (non-PM)، مقدار NO و NO<sub>2</sub> در حالت رقیق بسیار بالا بوده و در حالت غنی، اگرچه این دو آلاینده حذف می‌شوند، اما میزان آمونیاک نسوخته و N<sub>2</sub>O به شدت افزایش می‌یابد که از نظر زیست‌محیطی بسیار خطرناک است. این وضعیت نشان می‌دهد که احتراق بدون محیط کنترل‌شده می‌تواند منجر به تشکیل قابل توجه آلاینده‌ها شود. در مقابل، استفاده از محیط متخلخل کاتالیزوری باعث کاهش چشمگیر NO و NO<sub>2</sub> (بیش از ۸۰-۹۰ درصد) در حالت رقیق شده و در حالت غنی نیز موجب کاهش بسیار زیاد آمونیاک باقی‌مانده و N<sub>2</sub>O نسبت به حالت non-PM شده است. این نتایج نشان می‌دهد که کاتالیزور پلاتینی با فراهم کردن سطح فعال برای تجزیه زود هنگام آمونیاک و توزیع یکنواخت‌تر حرارت، به بهبود کیفیت احتراق، کاهش دمای شعله و مهار تولید آلاینده‌ها کمک می‌کند.

جنبه نوآوری این پژوهش در مقایسه عددی دو پیکربندی متفاوت محفظه احتراق در مقیاس مزره، شامل حالت بدون محیط متخلخل و حالت دارای محیط متخلخل کاتالیزوری پلاتین، و بررسی جامع همزمان آلاینده‌های NO، NO<sub>2</sub>، N<sub>2</sub>O و آمونیاک است. این ترکیب از شرایط و پارامترها در تحقیقات پیشین به‌طور کامل مطالعه نشده و می‌تواند دید تازه‌ای برای طراحی سامانه‌های احتراقی بدون کربن فراهم آورد. در نهایت، می‌توان نتیجه گرفت که ترکیب آمونیاک به‌عنوان سوخت بدون کربن همراه با محیط

- متخلخل کاتالیزوری، مسیر مؤثری برای دستیابی به احتراقی پاک، پایدار و کم آلاینده است. این روش می‌تواند در توسعه فناوری‌های نوین احتراقی برای سوخت‌های فاقد کربن و کاهش آلاینده‌های  $\text{NO}_x$  در مقیاس صنعتی بسیار مؤثر واقع شود.
- استفاده از محیط متخلخل کاتالیزوری باعث کاهش بیش از ۸۰٪ در انتشار  $\text{NO}$  و  $\text{NO}_2$  در شرایط رقیق می‌شود.
  - در شرایط غنی، مقدار آمونیاک نسوخته با کاتالیزور از ۵۰۰۰ به ۱۳۷۱ ppm کاهش یافته است.
  - انتشار  $\text{N}_2\text{O}$  در حضور کاتالیزور به‌طور قابل توجهی کاهش می‌یابد، به‌ویژه در حالت غنی که از ۱۲۷۴ ppm به ۳۸۷ ppm می‌رسد.
  - محیط متخلخل کاتالیزوری موجب احتراق کامل‌تر آمونیاک و کاهش هم‌زمان آلاینده‌های حاصل از سوخت و دما می‌شود.

## فهرست علائم

$A$	مساحت [ $\text{m}^2$ ]
$A_{sf}$	سطح ویژه [ $\text{m}^2$ ]
$a$	نفوذپذیری [ $\text{m}^2$ ]
$C$	عامل تشکیل
$c$	گرمای ویژه [ $\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$ ]
$C_2$	مقاومت اینرسی [ $\text{m}^{-1}$ ]
$D_p$	قطر منافذ [ $\text{m}$ ]
$h$	ضریب انتقال حرارت [ $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$ ]
$k$	رسانایی گرمایی [ $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ ]
$m$	عامل پیچ خوردگی
$p$	فشار [ $\text{Pa}$ ]
$Pr$	عدد پراوندل
$q$	شار حرارتی [ $\text{W m}^{-2}$ ]
$r$	شعاع لوله [ $\text{m}$ ]
$Re$	عدد رینولدز
$T$	دما [ $\text{K}$ ]
$t$	زمان [ $\text{s}$ ]
$\vec{v}$	ویسکوزیته [ $\text{m s}^{-1}$ ]
$\vec{J}_i$	شار انتشار گونه‌ها
$R_i$	نرخ خالص تولید گونه
$Y_i$	کسر جرمی گونه‌ها
نمادهای یونانی	
$\phi$	تخلخل
$\bar{\tau}$	تانسور تنش
$\varepsilon_r$	انتشار
$\mu$	ویسکوزیته دینامیکی [ $\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$ ]
$\rho$	چگالی [ $\text{kg m}^{-3}$ ]
$\sigma$	ثابت استفان - بولتزمن
$\varphi$	نسبت هم‌ارزی
$\omega$	تراکم منافذ
زیرنویس‌ها	

e	موثر
f	سیال
in	ورودی
s	جامد
w	دیواره

## منابع

- [1] J. Chen, Y. Fei, and Z. Wan, "The relationship between the development of global maritime fleets and GHG emission from shipping," *J Environ Manage*, vol. 242, pp. 31–39, Jul. 2019, doi: 10.1016/j.jenvman.2019.03.136.
- [2] P. Van de Vuurst and L. E. Escobar, "Corrigendum: Perspective: Climate Change and the Relocation of Indonesia's Capital to Borneo (Frontiers in Earth Science, (2020), 8, 10.3389/feart.2020.00005)," *Front Earth Sci (Lausanne)*, vol. 8, p. 5, Jan. 2020, doi: 10.3389/feart.2020.00071.
- [3] S. Teleke, M. E. Baran, A. Q. Huang, S. Bhattacharya, and L. Anderson, "Control strategies for battery energy storage for wind farm dispatching," *IEEE Transactions on Energy Conversion*, vol. 24, no. 3, pp. 725–732, 2009, doi: 10.1109/TEC.2009.2016000.
- [4] Y. Kojima, "Hydrogen storage materials for hydrogen and energy carriers," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 44, no. 33, pp. 18179–18192, Jul. 2019, doi: 10.1016/j.ijhydene.2019.05.119.
- [5] W. Chai, Y. Bao, P. Jin, G. Tang, L. Z.-R. and Sustainable, and undefined 2021, "A review on ammonia, ammonia-hydrogen and ammonia-methane fuels," doi: 10.1016/j.rser.2021.111254
- [6] A Valera-Medina, F Amer-Hatem, AK Azad, IC Dedoussi, M De Joannon, RX Fernandes , "Review on ammonia as a potential fuel: From synthesis to economics," *Energy and Fuels*, vol. 35, no. 9, pp. 6964–7029, May 2021, doi: 10.1021/acs.energyfuels.0c03685.
- [7] T. Li, Y. Duan, Y. Wang, M. Zhou, and L. Duan, "Research progress of ammonia combustion toward low carbon energy," *Fuel Processing Technology*, vol. 248, p. 107821, Sep. 2023, doi: 10.1016/j.fuproc.2023.107821.
- [8] T. Cai, D. Zhao, and E. Gutmark, "Overview of fundamental kinetic mechanisms and emission mitigation in ammonia combustion," *Chemical Engineering Journal*, vol. 458, p. 141391, Feb. 2023, doi: 10.1016/j.ccej.2023.141391.
- [9] P. Berwal, S. Kumar, and B. Khandelwal, "A comprehensive review on synthesis, chemical kinetics, and practical application of ammonia as future fuel for combustion," *Journal of the Energy Institute*, vol. 99, pp. 273–298, Dec. 2021, doi: 10.1016/j.joei.2021.10.001.
- [10] C. Zamfirescu and I. Dincer, "Ammonia as a green fuel and hydrogen source for vehicular applications," *Fuel Processing Technology*, vol. 90, no. 5, pp. 729–737, May 2009, doi: 10.1016/j.fuproc.2009.02.004.
- [11] R. Michalsky, B. J. Parman, V. Amanor-Boadu, and P. H. Pfromm, "Solar thermochemical production of ammonia from water, air and sunlight: Thermodynamic and economic analyses," *Energy*, vol. 42, no. 1, pp. 251–260, Jun. 2012, doi: 10.1016/j.energy.2012.03.062.
- [12] H. Kobayashi, A. Hayakawa, K. D. K. A. Somarathne, and E. C. Okafor, "Science and technology of ammonia combustion," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 37, no. 1, pp. 109–133, Jan. 2019, doi: 10.1016/j.proci.2018.09.029.
- [13] L Yu, W Zhou, Y Feng, W Wang, J Zhu, Y Qian, X Lu, "The effect of ammonia addition on the low-temperature autoignition of n-heptane: An experimental and modeling study," *Combust Flame*, vol. 217, pp. 4–11, Jul. 2020, doi: 10.1016/j.combustflame.2020.03.019.
- [14] A. Hayakawa, T. Goto, R. Mimoto, Y. Arakawa, T. Kudo, and H. Kobayashi, "Laminar burning velocity and Markstein length of ammonia/air premixed flames at various pressures," *Fuel*, vol. 159, pp. 98–106, Nov. 2015, doi: 10.1016/j.fuel.2015.06.070.
- [15] O Kurata, N Iki, T Matsunuma, T Inoue, T Tsujimura, H Furutani, H Kobayashi, A Hayakawa, "Performances and emission characteristics of NH3-air and NH3-CH4-air combustion gas-turbine power generations," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 36, no. 3, pp. 3351–3359, Jan. 2017, doi: 10.1016/j.proci.2016.07.088.

- [16] L. Kang, W. Pan, J. Zhang, W. Wang, and C. Tang, "A review on ammonia blends combustion for industrial applications," *Fuel*, vol. 332, p. 126150, Jan. 2023, doi: 10.1016/j.fuel.2022.126150.
- [17] G Vignat, T Zirwes, ER Toro, K Younes, E Boigné, P Muhunthan, L Simitz, D Trimis, M Ihme, "Experimental and numerical investigation of flame stabilization and pollutant formation in matrix stabilized ammonia-hydrogen combustion," *Combust Flame*, vol. 250, p. 112642, Apr. 2023, doi: 10.1016/j.combustflame.2023.112642.
- [18] V. Bubnovich, M. Toledo, L. Henríquez, C. Rosas, and J. Romero, "Flame stabilization between two beds of alumina balls in a porous burner," *Appl Therm Eng*, vol. 30, no. 2–3, pp. 92–95, 2010, doi: 10.1016/j.applthermaleng.2009.04.001.
- [19] A. Tolouei and A. Gharehghani, "Impact of Dimensionless Parameters on the Combustion of the Carbon-Free Fuel of Ammonia/Methane blend in Porous Media," *Fuel and Combustion*, vol. 18, no. 1, pp. 1–28, Mar. 2025, doi: 10.22034/JFNC.2025.499984.1421.
- [20] L. A. Kennedy, J. P. Bingue, A. V. Saveliev, A. A. Fridman, and S. I. Foutko, "Chemical structures of methane-air filtration combustion waves for fuel-lean and fuel-rich conditions," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 28, no. 1, pp. 1431–1438, 2000, doi: 10.1016/S0082-0784(00)80359-8.
- [21] A. Banerjee and A. V. Saveliev, "High temperature heat extraction from counterflow porous burner," *Int J Heat Mass Transf*, vol. 127, pp. 436–443, 2018, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.08.027.
- [22] S. M. Hashemi and S. A. Hashemi, "Flame stability analysis of the premixed methane-air combustion in a two-layer porous media burner by numerical simulation," *Fuel*, vol. 202, pp. 56–65, 2017, doi: 10.1016/j.fuel.2017.04.008.
- [23] S. N. Hoda, S. A. Gandjalikhan Nassab, and J. J. Ebrahim, "Three dimensional numerical simulation of combustion and heat transfer in porous radiant burners," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 145, 2019, doi: 10.1016/j.ijthermalsci.2019.106024.
- [24] G. Wang, P. Tang, Y. Li, J. Xu, and F. Durst, "Flame front stability of low calorific fuel gas combustion with preheated air in a porous burner," *Energy*, vol. 170, pp. 1279–1288, 2019, doi: 10.1016/j.energy.2018.12.128.
- [25] S. Kumaresh, G. W. Lee, and M. Y. Kim, "On the catalytic combustion behavior of lean methane-air mixture over platinum catalyst with the navier-stokes and plug-flow models," *Journal of Mechanical Science and Technology*, vol. 37, no. 5, pp. 2699–2707, May 2023, doi: 10.1007/s12206-023-0443-4.
- [26] E. Jiaqiang, L. Cai, J. Li, J. Ding, J. Chen, and B. Luo, "Effects analysis on the catalytic combustion and heat transfer performance enhancement of a non-premixed hydrogen/air micro combustor," *Fuel*, vol. 309, p. 122125, Feb. 2022, doi: 10.1016/j.fuel.2021.122125.
- [27] J. Chen and Z. Pang, "Catalytically stabilized combustion characteristics of methane-air mixtures in micro-scale heat-recirculating systems," *Fuel*, vol. 306, p. 121693, Dec. 2021, doi: 10.1016/j.fuel.2021.121693.
- [28] L. Li, G. Yang, and A. Fan, "Non-premixed combustion characteristics and thermal performance of a catalytic combustor for micro-thermophotovoltaic systems," *Energy*, vol. 214, p. 118893, Jan. 2021, doi: 10.1016/j.energy.2020.118893.
- [29] P Qian, X Yuan, Z Chen, C Luo, Z Huang, X Zhu, M Liu, "Experimental study on a high efficient and ultra-lean burn meso-scale thermoelectric system based on porous media combustion," *Energy Convers Manag*, vol. 234, p. 113966, Apr. 2021, doi: 10.1016/j.enconman.2021.113966.
- [30] D. Zhao, C. Zhang, F. E. Hernández Pérez, H. G. Im, and L. Wang, "Turbulent premixed hydrogen/air flame-wall interaction with heterogeneous surface reactions," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 39, no. 2, pp. 2189–2197, Jan. 2023, doi: 10.1016/j.proci.2022.09.018.
- [31] Q Lu, J Gou, Y Wang, B Fan, Y Zhang, Y Wang, EK Quaye, J Pan, "Thermal and chemical analysis on the hetero-/homogeneous combustion characteristics of H<sub>2</sub>/Air mixture in a micro channel with catalyst segmentation," *Fuel*, vol. 320, p. 123883, Jul. 2022, doi: 10.1016/J.FUEL.2022.123883.
- [32] EC Okafor, Y Naito, S Colson, A Ichikawa, T Kudo, A Hayakawa, H Kobayashi, "Measurement and modelling of the laminar burning velocity of methane-ammonia-air flames at high pressures using a reduced reaction mechanism," *Combust Flame*, vol. 204, pp. 162–175, Jun. 2019, doi: 10.1016/j.combustflame.2019.03.008.
- [33] C. S. Dowd and J. W. Meadows, "Thermoacoustic instability model with porous media: linear stability analysis and the impact of porous media," *J Eng Gas Turbine Power*, vol. 141, no. 4, 2019, doi: 10.1115/1.4041025.
- [34] R. Fursenko, S. Minaev, K. Maruta, H. Nakamura, and H. Yang, "Characteristic regimes of premixed gas combustion in high-porosity micro-fibrous porous media," *Combustion Theory and Modelling*, vol. 14, no. 4, pp. 571–581, 2010, doi: 10.1080/13647830.2010.502249.

- [35] H. Yang, S. Minaev, E. Geynce, H. Nakamura, and K. Maruta, "Filtration combustion of methane in high-porosity micro-fibrous media," *Combustion Science and Technology*, vol. 181, no. 4, pp. 654–669, Apr. 2009, doi: 10.1080/00102200802646748.
- [36] Y. Liu, A. Fan, H. Yao, and W. Liu, "Numerical investigation of filtration gas combustion in a mesoscale combustor filled with inert fibrous porous medium," *Int J Heat Mass Transf*, vol. 91, pp. 18–26, 2015, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.07.100.
- [37] A. J. Barra and J. L. Ellzey, "Heat recirculation and heat transfer in porous burners," *Combust Flame*, vol. 137, no. 1–2, pp. 230–241, 2004, doi: 10.1016/j.combustflame.2004.02.007.
- [38] Q Peng, E Jiaqiang, J Chen, W Zuo, X Zhao, Z Zhang, "Investigation on the effects of wall thickness and porous media on the thermal performance of a non-premixed hydrogen fueled cylindrical micro combustor," doi: 10.1016/j.enconman.2017.10.095
- [39] M. A. Mujeebu, M. Z. Abdullah, A. A. Mohamad, and M. Z. A. Bakar, "Trends in modeling of porous media combustion," *Prog Energy Combust Sci*, vol. 36, no. 6, pp. 627–650, Dec. 2010, doi: 10.1016/J.PECS.2010.02.002.
- [40] B. Straughan, *Convection in porous media*, vol. 165. 2008. doi: 10.1007/978-0-387-76543-3\_4.
- [41] F. Kuwahara, T. Yamane, and A. Nakayama, "Large eddy simulation of turbulent flow in porous media," *International Communications in Heat and Mass Transfer*, vol. 33, no. 4, pp. 411–418, Apr. 2006, doi: 10.1016/j.icheatmasstransfer.2005.12.011.
- [42] A. Costa, "Permeability-porosity relationship: A reexamination of the Kozeny-Carman equation based on a fractal pore-space geometry assumption," *Geophys Res Lett*, vol. 33, no. 2, Jan. 2006, doi: 10.1029/2005GL025134.
- [43] Manual, User, "ANSYS FLUENT 12.0. ", Theory Guide 67, 2009.
- [44] B. Alazmi and K. Vafai, "Constant wall heat flux boundary conditions in porous media under local thermal non-equilibrium conditions," *Int J Heat Mass Transf*, vol. 45, no. 15, pp. 3071–3087, Jul. 2002, doi: 10.1016/S0017-9310(02)00044-3.
- [45] X. Fu, R. Viskanta, and J. P. Gore, "Measurement and correlation of volumetric heat transfer coefficients of cellular ceramics," *Exp Therm Fluid Sci*, vol. 17, no. 4, pp. 285–293, 1998, doi: 10.1016/S0894-1777(98)10002-X.
- [46] H. Kobayashi, A. Hayakawa, K. D. K. A. Somarathne, and E. C. Okafor, "Science and technology of ammonia combustion," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 37, no. 1, pp. 109–133, Jan. 2019, doi: 10.1016/J.PROCI.2018.09.029.
- [47] E. V. Rebrov, M. H. J. M. De Croon, and J. C. Schouten, "Development of the kinetic model of platinum catalyzed ammonia oxidation in a microreactor," *Chemical Engineering Journal*, vol. 90, no. 1–2, pp. 61–76, Nov. 2002, doi: 10.1016/S1385-8947(02)00068-2.
- [48] Z. Liu, J. Li, and S. I. Woo, "Recent advances in the selective catalytic reduction of NO<sub>x</sub> by hydrogen in the presence of oxygen," *Energy Environ Sci*, vol. 5, no. 10, pp. 8799–8814, Sep. 2012, doi: 10.1039/c2ee22190j.
- [49] A. Tolouei and A. Gharehghani, "Effect of hydrogen enrichment and catalytic porous media on the combustion characteristics of methane/ammonia," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 146, p. 149986, Jul. 2025, doi: 10.1016/J.IJHYDENE.2025.06.176.
- [50] A. Tolouei and A. Gharehghani, "Numerical investigation of catalytic effect of platinum porous media on the combustion characteristics of hydrogen/ammonia blend," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 98, pp. 1155–1173, Jan. 2025, doi: 10.1016/j.ijhydene.2024.12.177.
- [51] J. A. Lasek and R. Lajnert, "On the Issues of NO<sub>x</sub> as Greenhouse Gases: An Ongoing Discussion," *Applied Sciences (Switzerland)*, vol. 12, no. 20, p. 10429, Oct. 2022, doi: 10.3390/app122010429.
- [52] A. Tolouei and A. Gharehghani, "Numerical investigation of premixed methane-ammonia combustion in a mesoscale porous combustor," *Fuel*, vol. 366, p. 131427, Jun. 2024, doi: 10.1016/j.fuel.2024.131427.

## English Abstract

# Numerical investigation of the effect of using porous catalytic media on the emission of ammonia fuel in the mesoscale combustor

Ali Tolouei<sup>1</sup>, Ayat Gharehghani<sup>2\*</sup>

1- School of Mechanical Engineering, Iran university of science and technology, Tehran, Iran, toloei\_ali@mecheng.iust.ac.ir

2- School of Mechanical Engineering, Iran university of science and technology, Tehran, Iran, ayat\_gharehghani@iust.ac.ir

\*Corresponding author

(Received: 2025/07/21, Received in revised form: 2025/08/15, Accepted: 2025/08/19)

In this study, the premixed combustion of ammonia has been numerically and 3D investigated in two different combustion chamber configurations, one is a none porous medium chamber and the other is a chamber with a porous catalytic medium made of platinum. The main objective of this research is to evaluate the effect of the presence of a porous catalytic medium on the emission of  $\text{NO}_x$  and  $\text{N}_2\text{O}$  pollutants under different equivalence ratio conditions. The results show that the use of a catalytic medium reduces  $\text{NO}$  and  $\text{NO}_2$  by more than 80% under lean conditions. Also, under rich conditions, the concentration of unburned ammonia has decreased from 5000 to 1371 ppm and the amount of  $\text{N}_2\text{O}$  has decreased from 1274 to 387 ppm. The presence of a porous catalytic medium, by improving ammonia combustion, plays a significant role in simultaneously reducing thermal and fuel-based pollutants and can be an effective step in the development of clean and carbon-free combustion systems. The main novelty of this study lies in the simultaneous investigation of platinum porous catalytic media on the reduction of  $\text{NO}_x$  and  $\text{N}_2\text{O}$  emissions in a mesoscale combustor under different equivalence ratios, which has not been comprehensively reported in previous literatures.

**Keywords:** Ammonia, catalytic combustion, premixed combustion, reduction of nitrogen oxide emissions, carbon-free fuel