

DOI 10.11715/rskxjs. R201301006

甲烷高压富氧燃烧层流扩散火焰的数值研究

覃建果, 魏小林, 郭啸峰, 李 腾, 高佳佳

(中国科学院力学研究所高温气体动力学国家重点实验室, 北京 100190)

摘 要: 对 0.1 ~ 4.0 MPa 范围内 CH₄ 富氧燃烧层流同轴射流扩散火焰进行了数值研究, 研究对象包含 3 种工况: 工况 1 为 CH₄/空气, 工况 2 为 CH₄/70%N₂ 和 30%O₂, 工况 3 为 CH₄/70%CO₂ 和 30%O₂. 计算模型采用了基于 GRI 3.0 的骨干反应机理, 该机理包含 26 种组分和 163 个反应, 同时模型还考虑了 CH₄、H₂O、CO₂、CO 的辐射换热损失. 结果表明, 富氧燃烧使火焰温度升高、长度变短. 工况 2 中 NO 排放指数与工况 1 相比增加了 70%, 且随压力的提高而增大, 绝大部分 NO 是通过热力型 NO 途径形成. 基元反应 $H + CO_2 \rightleftharpoons OH + CO$ 使得工况 3 近燃烧器喷口处的 CO 浓度大大增加. 提高压力, 火焰温度先升高后降低, 火焰半径逐渐变小, 火焰长度几乎不变.

关键词: 甲烷; 富氧燃烧; 高压燃烧; NO_x

中图分类号: TK16

文献标志码: A

文章编号: 1006-8740(2013)05-0425-09

Numerical Study on Oxygen-Enhanced Axisymmetric Laminar Methane Diffusion Flames at High Pressures

Qin Jianguo, Wei Xiaolin, Guo Xiaofeng, Li Teng, Gao Jiajia

(State Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract: Numerical study of three axisymmetric laminar co-flow diffusion flames at pressures between 0.1 — 4.0 MPa was conducted. One flame is a methane/air flame (Flame 1), and the other two are methane/nitrogen-diluted oxygen flame (Flame 2) and methane/carbon dioxide -diluted oxygen flame (Flame 3), the mass fraction of oxygen in the oxidizer of Flame 2 and Flame 3 are both 30%. Numerical model includes a skeletal mechanism derived from GRI-Mech 3.0 with 163 reaction steps and 26 species. An optically thin radiation sub-model was employed in the simulations to consider the thermal radiation absorption by species such as CH₄, CO₂, CO and H₂O. As compared to Flame 1, the two oxygen-enhanced combustion flames are shorter and hotter. NO emission index in Flame 2 increases by 70% and increase monotonically with pressure. The majority of NO in Flame 2 is produced via the thermal route. The reaction step: $H + CO_2 \rightleftharpoons OH + CO$ accounts for the high mole fraction of CO in Flame 3 near the fuel tube exit. As the pressure increases, flame temperature increases firstly and then decreases, flame radius decreases monotonically, while flame height remains almost constant.

Keywords: methane; oxygen-enhanced combustion; high pressure combustion; NO_x

富氧燃烧减少了空气中惰性气体 N₂ 的含量从而使得火焰燃烧温度升高, 燃烧效率提高, 火焰稳定性增强, 烟气体积减少. 富氧燃烧的这些优势使得其在

工业上得到了较广泛的应用. 例如, 在玻璃制造业, 利用纯氧燃烧代替常规空气燃烧不仅提高了产品质量和产量, 还能使燃料消耗量减少 15% ~ 50%, NO_x

收稿日期: 2013-01-05.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51006115, 91130028, 50976122).

作者简介: 覃建果(1988—), 男, 硕士研究生, qjg19881112@126.com.

通讯作者: 魏小林, xlwei@imech.ac.cn.

网络出版时间: 2013-07-24. 网络出版地址: <http://www.cnki.net/kcms/detail/12.1240.TK.20130724.1005.001.html>.

放量减少 50%~90%^[1]. 富氧燃烧技术被广泛应用于煤、天然气以及生物质燃料的燃烧. 富氧燃烧技术还能够减小点火延迟以及预混燃烧周期, 因此在燃气轮机、内燃机等高压条件下的应用也开始受到人们的关注, 但其对烟尘颗粒、CO、NO_x 排放等可能有负面影响^[2].

以往对富氧燃烧的研究主要针对常压下的对冲扩散火焰, 数值计算采用的都是一维模型. Sung 和 Law^[3]对 CH₄/富氧空气对冲扩散火焰中 NO 生成机理进行了一维数值计算, 结果表明, 随着氧化剂中 O₂ 浓度(体积分数)的提高, 热力型 NO 成为主要的 NO 形成途径, 而快速型 NO 成为主要的 NO 还原途径. 赵黛青等^[4]以对冲扩散火焰为研究对象, 利用详细反应机理研究了燃料稀释对 CH₄/富氧空气扩散火焰中氮氧化物生成的影响, 稀释剂采用 N₂ 或 CO₂, 结果表明, 燃料稀释能够使 NO 排放指数显著降低.

对富氧燃烧进行多维数值模拟的研究非常少. 尽管此前已经有许多层流同轴射流扩散火焰的研究, 但这些研究所使用的氧化剂都是空气, 例如 Smooke 等^[5]以及 Ju 等^[6]都曾对层流同轴射流扩散火焰中 NO_x 特性进行过数值研究. Bennett 等^[7]可能是首次采用详细反应机理(GRI 2.11^[8]和 GRI 3.0^[9])对 CH₄/富氧空气同轴射流扩散火焰进行多维数值研究的人, 其数值计算结果与实验测量值十分吻合. Bhadraiah 等^[10]则采用骨干反应机理以及 2 步和 4 步总包反应机理进行 CH₄/富氧空气同轴射流扩散火焰的二维数值研究, 但是总包机理无法预测 NO 等污染物的排放. 对于高压条件下的富氧燃烧进行多维数值模拟的研究则更加少见. 因此, 进行高压富氧燃烧多维数值模拟, 研究高压富氧燃烧对火焰结构以及 NO、CO 等污染物排放特性的影响具有重要的意义.

1 数值计算模型

1.1 问题描述

数值计算的对象是一个同轴射流燃烧器, 燃烧器内套管的出口直径为 3 mm, 外套管内径为 25.4 mm,

内外套管中都放置了烧结金属以使气流出口速度达到均匀分布. 为了使火焰稳定, 外套管上还套了一个内径也是 25.4 mm 的石英玻璃管, 燃料内套管出口设计为扩张喷嘴的形式. 该同轴射流燃烧器放置在一个压力容器内, 可以在很大的压力范围内进行实验研究. 燃烧器示意如图 1 所示, 更详细的设备说明可以在 Charest^[11]和 Joo^[12]等的研究中找到.

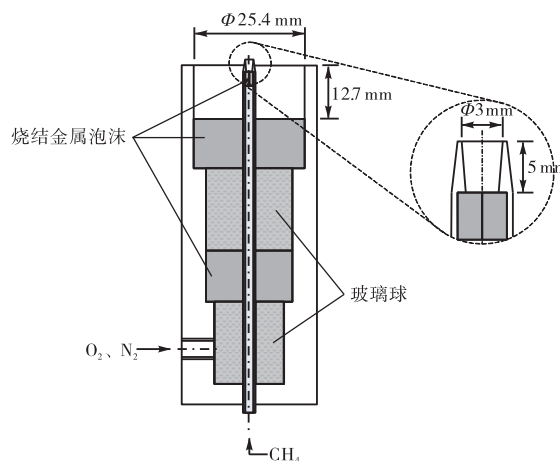


图 1 同轴射流燃烧器示意

在所研究的压力范围内, CH₄ 和氧化剂的进口质量流量分别保持在 0.5 mg/s 和 0.4 g/s, 温度为 300 K. 表 1 列出了常压下 3 种工况火焰的组成成分、质量流量、平均速度、雷诺数 Re 和弗劳德数 Fr . 3 种工况下, 火焰在所研究的压力范围内均处于层流状态. 常压时, 3 种工况下火焰中 CH₄ 的弗劳德数都小于 1, 氧化剂的弗劳德数也接近于 1, 由于 $Fr \propto p^{-2}$, 弗劳德数随着压力的提高而迅速降低至远小于 1, 因此, 高压时 3 种工况下火焰均为浮力控制型. 本文采用商用软件 Fluent 来进行燃烧的数值计算^[13], 研究高压富氧燃烧对火焰结构以及污染物排放的影响规律.

1.2 辐射模型

工况 3 的氧化剂中 CO₂ 含量非常高, 而 CO₂ 的辐射能力非常大, Amato 等^[14]指出较高的 CO₂ 含量会使燃料通过吸收燃烧产物的辐射能而使气流获得额外的预热, 从而提高火焰速度和燃料的可燃极限. 因此, 为了保证数值模拟的准确性, 需要考虑 CH₄、CO、CO₂ 和 H₂O 这些多原子以及结构不对称的双原

表 1 燃料与氧化剂在 $p = 0.1$ MPa、 $T = 300$ K 下的参数特性

计算工况		气体种类	质量流量/(g·s ⁻¹)	平均速度(cm·s ⁻¹)	雷诺数 Re	弗劳德数 Fr
燃料		CH ₄	0.000 55	11.93	20.99	0.49
氧化剂	工况 1	空气	0.4	68.22	962.66	4.30
	工况 2	30%O ₂ , 70%N ₂	0.4	67.30	922.69	4.20
	工况 3	30%O ₂ , 70%CO ₂	0.4	49.14	1 083.00	2.19

子气体组分的辐射损失. 本文采用 Barlow 等^[15]提出的基于光学薄假设的辐射模型来考虑气体辐射, 该方法中组分的辐射损失计算为

$$\dot{Q} = -4\sigma(T^4 - T_b^4) \sum_i p_i a_{pi} \quad (1)$$

式中: $\sigma = 5.669 \times 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$, 为斯忒藩-玻耳兹曼常数; T 为当地火焰温度; T_b 为环境温度; p_i 为组分 i 的分压, atm; a_{pi} 为组分 i 的普朗克平均吸收系数, 其值为温度的函数. 本文中 CH_4 、 CO 、 CO_2 和 H_2O 的普朗克平均吸收系数计算公式见文献[15]. 在 Fluent 中, 这些组分的辐射损失作为源项通过编写 UDF 添加到能量方程中.

1.3 化学反应机理

GRI 3.0 机理包含 53 种组分, 325 个基元反应, 采用如此庞大的详细化学反应机理进行燃烧数值模拟需要花费很长的计算时间. 在保证精度的前提下, 本文采用基于 GRI 3.0 的骨干机理. Lu 等^[16]通过对 GRI 3.0 机理的简化得出了在很大压力范围内都和详细反应机理吻合良好的骨干机理和简化机理, 其不包含 NO_x 机理的骨干机理包含 30 种组分, 184 个可逆基元反应. 当考虑 NO_x 的化学反应时, 加入了 N、NH、NNH、NO、HNO 和 HCN 这 6 种组分及其涉及的基元反应, 因此最终的骨干机理包含了 36 种组分, 222 个可逆基元反应. 本文采用的骨干机理在此基础上通过关联度法和主成分分析法对其进行进一步简化, 去掉其中的 C_2H_2 、 C_2H_3 、 C_2H_4 、 C_2H_5 、 C_2H_6 、 CH_2CHO 、 CH_2CO 、 HCCO 、C 和 CH_3OH 这 10 种组分, 最终得出包含 26 种组分和 163 个不可逆基元反应的骨干机理. 该骨干机理仍保持 Chemkin 化学反应的形式, 所用的热力学数据文件也来自 Chemkin, 在进行化学反应计算前需将简化得到的化学反应输入文件和热力学数据文件导入 Fluent.

1.4 计算区域、网格和边界条件

对于本文研究的同轴燃烧器, 其二维计算区域如图 2 所示, 图中同时还给出了相应的边界条件. 计算区域沿径向长度为 12.7 mm, 沿轴向长度为 25 mm. 与 Charest 等^[11]采用的方法相同, 本文的计算区域向燃料出口上游延伸 5 mm, 将内套管和外套管包含在计算区域内, 这样可以考虑到燃料的预热效应并且得出较合理的燃料出口速度分布. 燃烧器内套管用一个简化的几何形状来进行模拟, 其管壁厚度为 0.5 mm.

计算区域同时采用了结构化的均匀网格和非均匀网格. 在 $r=0$ 和 $r=1.5$ mm 之间的径向方向上均匀分布 40 个网格点; 0.5 mm 厚的管壁上均匀分布

10 个网格点; 在 $r=2$ 和 $r=12.7$ mm 之间的径向方向上网格逐渐变粗, 该区间上分布了 50 个网格点; 在 $z=-5$ 至 $z=0$ mm 的轴向方向上, 均匀分布了 50 个网格点; 燃烧器内套管出口 $z=0$ 至下游 $z=10$ mm 的轴向方向上, 均匀分布了 150 个网格点; 从 $z=10$ 到下游 $z=25$ mm 网格逐渐变粗, 该区间上分布了 150 个网格点; 总的网格数量大约为 3.5 万, 对网格进行进一步加密, 计算结果基本不变, 因此在所有的计算中都采用了此网格.

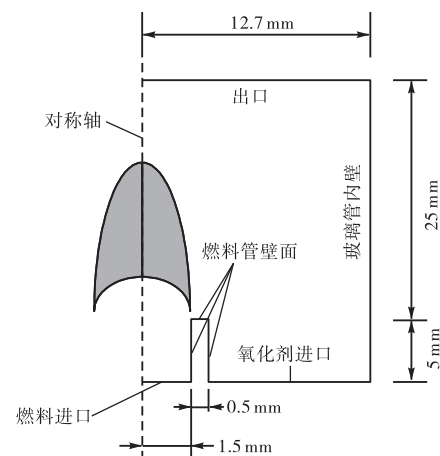


图 2 计算区域以及边界条件

由于内外套管中都放置了烧结金属, 因此燃料进口和氧化剂进口的边界条件设置为速度进口, 此时该速度为气流的平均速度. 燃烧器内套管设置为绝热壁面. 计算区域的右边界同样设置为壁面边界条件, 而左边界设为对称轴, 上边界设置为出流边界条件.

2 数值模拟模型验证

在进行高压富氧燃烧的数值模拟之前, 需要对计算模型中涉及到的辐射模型和骨干反应机理的准确性进行验证. 本文对 Bennett 等^[7]研究的工况也进行了计算, 该工况中燃烧器内套管中的燃料射流为 35% N_2 和 65% CH_4 的混合气体, 体积流量为 $6.04 \text{ cm}^3/\text{s}$, 外套管为 O_2 , 体积流量为 $975 \text{ cm}^3/\text{s}$. 详细的燃烧器尺寸参数、计算区域和网格划分参见文献[7], 计算出的火焰温度和主要组分沿径向的分布如图 3 所示. 图中, 实线为骨干机理的模拟计算结果, 实心符号为文献[7]的实验结果. 模拟结果与实验测量值在火焰高度 $H=0.243 \text{ cm}$ 处吻合良好, 此处大约为火焰 1/4 高度处, 火焰温度曲线呈双峰分布. 模拟结果与实验测量值在火焰高度 $H=1.052 \text{ cm}$ 处偏差有所增大, 从温度的单峰分布曲线可以看出, 此处为

火焰面附近,因此火焰温度最高,测量误差也最大,但从误差分布来看,还是可以认为该模型能够准确描述出火焰温度以及主要组分的分布.

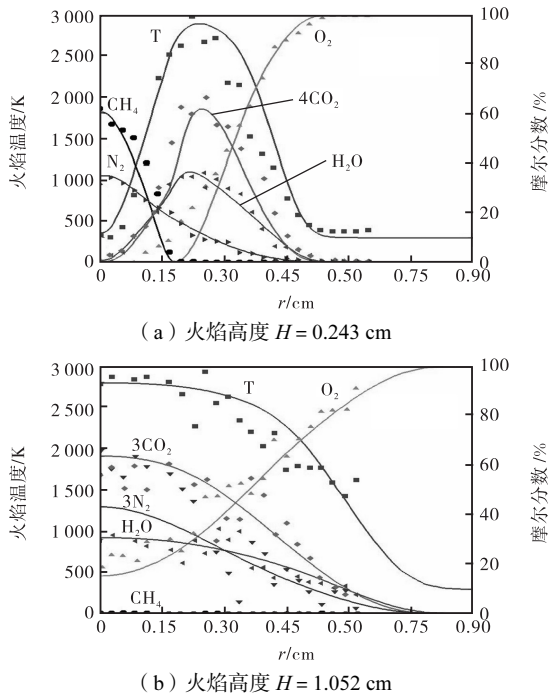


图 3 火焰温度和主要组分分布沿径向的分布

值得指出的是,NO 反应机理的加入对火焰温度和结构等的影响非常小,根据研究问题的不同,NO 反应机理的复杂程度可以不同,Sung 等^[3]的研究表明,热力型机理在富氧燃烧中起主要作用,该骨干机理添加的 NO 反应包含了热力型 NO 机理以及大部分快速型 NO 机理,对于本文研究高压富氧对 NO 排放的影响规律来说已经足够了.从数值模拟与实验测量结果的对比结果可以看出,本文采用的数值计算模型具有较高的准确性,可用于高压富氧燃烧的数值模拟.

3 结果与讨论

3.1 富氧燃烧对火焰的影响

为了研究 CH₄ 富氧燃烧的基本特征,将在常压下对 CH₄ 的富氧燃烧进行模拟.目的是研究不同的氧气含量对火焰形态、NO 及 CO 排放的影响规律.

3.1.1 火焰形态

图 4~图 6 分别给出了常压下工况 1、工况 2 和工况 3 条件下火焰的温度以及 CH₄、O₂、OH、CO 和 NO 的摩尔分数分布云图.由图可见,在工况 1、工况 2 和工况 3 都具有相似的火焰形态.CH₄ 在内套管出口不远处便被完全消耗,OH 峰值出现在高温区域的一小薄层内.氧化剂中 O₂ 含量增加使得工况 2 和工况 3 的火焰温度比工况 1 为高,但由于在 2 000 K 左右时,CO₂ 的比热容约是 N₂ 的 1.7 倍,造成工况 3 的火焰温度比工况 2 的低.由于 NO_x 生成反应属于慢反应,因此 NO 的摩尔分数在 OH 峰值外侧才开始达到峰值.

图 7 为工况 1~工况 3 中火焰沿轴线的温度以及速度分布.若定义火焰长度为轴线上的最高温度点所对应的纵坐标,则通过图 7 可知工况 2 和工况 3 的火焰长度都要比工况 1 的短,这说明富氧燃烧会使火焰长度变短.观察图 7 中 z = 0 mm 所对应的工况 1~工况 3 的火焰轴线温度,可以发现气流在流出内套管前便得到了预热,而且工况 3 中这种预热效应更加明显.此外,在离喷口较远的下游区域工况 3 火焰温度快速下降,其温度甚至比常规燃烧的工况 1 还低.这是因为燃烧产物中较高的 CO₂ 含量会使气流的辐射能大大增加,来流区域气流吸收较多的辐射能得到了充分预热,而下游气流向外界辐射过多能量使

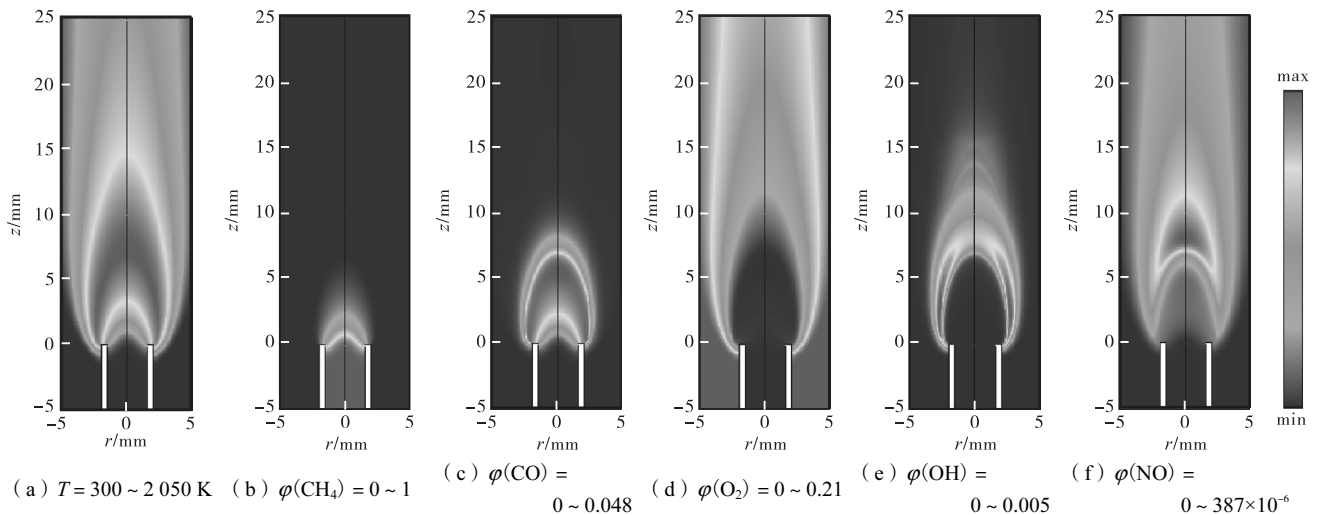


图 4 在常压下,工况 1 的火焰温度以及 CH₄、CO、O₂、OH 和 NO 的摩尔分数分布云图

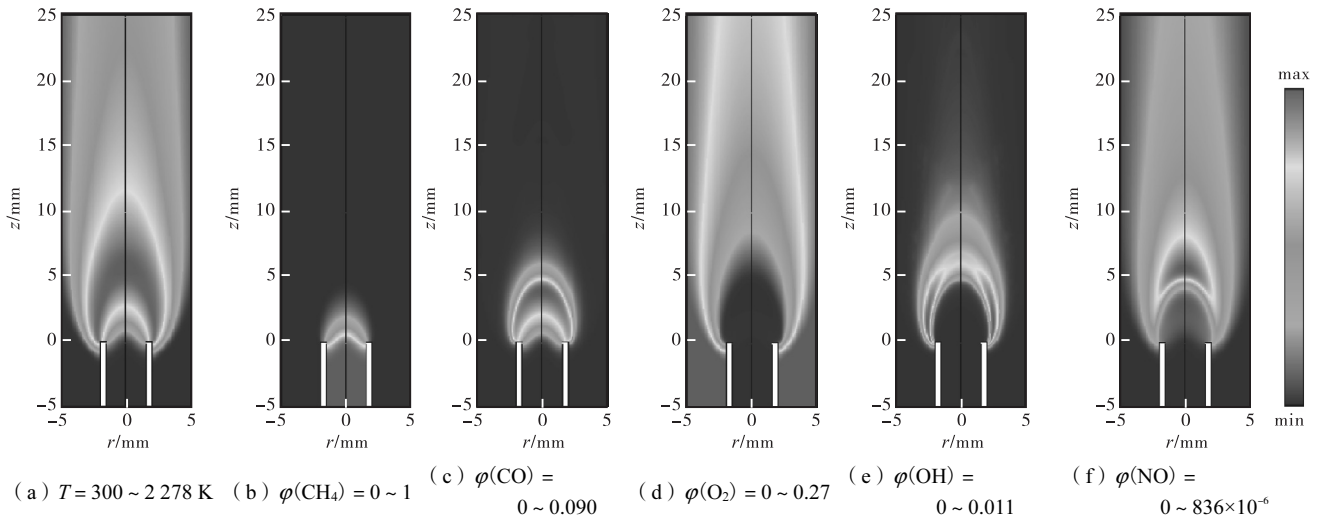


图 5 在常压下, 工况 2 的火焰温度以及 CH₄、CO、O₂、OH 和 NO 的摩尔分数分布云图

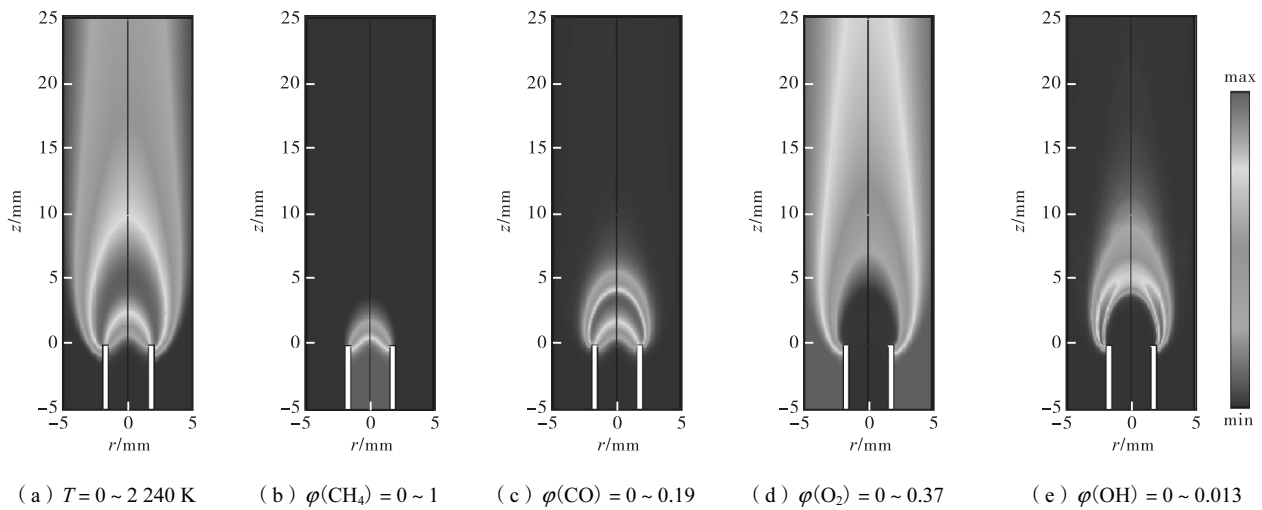


图 6 在常压下, 工况 3 的火焰温度以及 CH₄、CO、O₂、OH 的摩尔分数分布云图

得温度快速下降. 因此采用 O₂/CO₂ 富氧燃烧技术时燃烧器的喷口设计需要充分考虑燃料的预热因素, 而且要想在锅炉或者燃气轮机中得到与常规空气相同的温度分布, 至少要达到工况 3 的富氧程度.

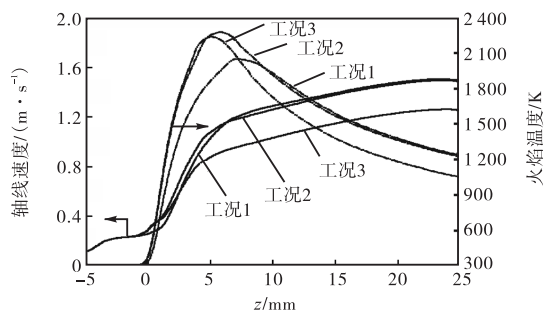


图 7 工况 1~ 工况 3 在常压下温度和速度沿轴线的分布

3.1.2 NO 生成特性

形成 NO 的机理通常可分为 4 种: 热力型、快速型、N₂O 中间型和 NNH 型. 富氧燃烧条件下 N₂O

中间型和 NNH 型所产生的 NO 含量非常小, 因此不予考虑, 下文所涉及到的 NO 皆为热力型 NO 或者快速型 NO.

图 8 给出了工况 1 和工况 2 的 NO 质量生成率分布云图, 工况 1 NO 质量生成率为 -0.053 ~ 0.110 kg/(m³·s), 工况 2 NO 质量生成率为 -0.31 ~ 0.46 kg/(m³·s). 两者的 NO 质量生成率具有相似分布规律, 存在明显的 NO 形成与消耗的峰值区域. 在外侧的高温区域, NO 的质量生成率为正, NO 在此处形成并向两边扩散. 在内套管出口不远处的富燃料区域中, NO 的质量生成率为负, 说明此处 NO 被还原. 通过对比可以发现, 增加氧化剂中的 O₂ 含量使得 NO 的质量生成率显著增大.

从云图上无法定量研究影响 NO 形成的关键因素, 为此, 采用 NO 排放指数来进行分析. NO 排放指数 E_{NO} (单位: g(NO)/kg(CH₄)) 的定义为

$$E_{NO} = 1000 \int \omega_{NO} dv / \int \omega_{CH_4} dv \quad (2)$$

式中： ω_{NO} 为 NO 单位时间内的质量生成率； ω_{CH_4} 为 CH₄ 单位时间内的质量消耗率。将热力型 NO 途径的 3 个基元反应速率相加得到 $\omega_{NO,Thermal}$ ，则此时 $\omega_{NO,Thermal}$ 代表的是单位时间内热力型 NO 的质量生成率，快速型 NO 的质量生成率定义为 $\omega_{NO,Prompt} = \omega_{NO} - \omega_{NO,Thermal}$ 。式中的积分区域为整个计算区域。

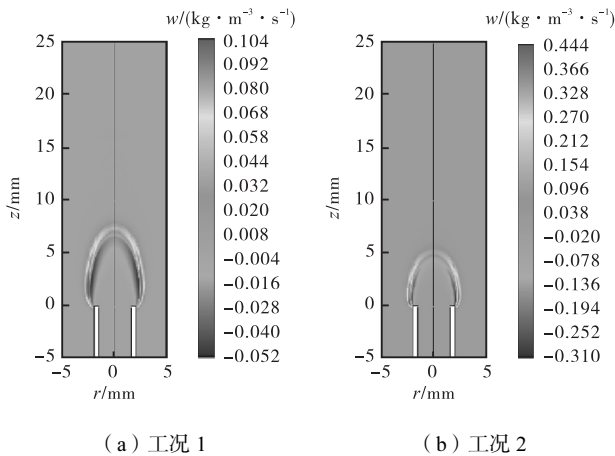
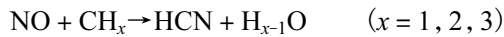


图 8 工况 1 和工况 2 在常压下的 NO 质量生成率云图

计算结果表明常压工况 1 和工况 2 的 NO 排放指数 E_{NO} 分别为 6.27、10.82。其中工况 1 的热力型 NO 和快速型 NO 排放指数分别为 5.22、1.05，而工况 2 的热力型 NO 和快速型 NO 排放指数分别为 10.95、-0.13，这说明富氧燃烧使得 NO 排放指数增大，并且此时热力型 NO 占主导地位，而快速型 NO 途径起到了还原的作用。工况 2 中快速型 NO 排放指数为负，原因是富燃料区存在大量碳氢自由基 CH_x ，造成快速型途径的还原净效应超过了生成效应，其中涉及到的主要的还原反应为



定义 $t_{res}(z) = \int_{z_0}^{z_1} [V_z(0, z')]^{-1} dz'$ ，为火焰停留时间，其中 $V_z(0, z')$ 为轴线上点 $(0, z')$ 处的轴向速度，其值可以从图 7 中得到， z_0 、 z_1 为积分上下限。研究轴线上温度 $T \geq 1850$ K 的区间，火焰在该区间的停留时间 t_{1850} 与热力型 NO 的生成量具有很大的关系。对于工况 1 和工况 2，其停留时间 t_{1850} 分别为 5.1 ms 和 6.9 ms。由此可见，工况 2 条件下，不仅火焰温度高，而且燃烧产物在高温区域的停留时间也 longer，由此造成了热力型 NO 生成量的大幅度增大。

3.1.3 CO 生成特性

图 4~图 6 给出了工况 1~工况 3 的 CO 摩尔分数分布云图，可以发现工况 3 的 CO 摩尔分数要比工

况 1 和工况 2 都要高很多。图 9 给出了工况 1~工况 3 的 CO 质量生成率分布云图。图中，工况 1 的 CO 质量生成率为 $-25.8 \sim 102.5 \text{ kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ ，工况 2 CO 质量生成率为 $-43.9 \sim 231.2 \text{ kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ ，工况 3 CO 质量生成率为 $-44.5 \sim 359.3 \text{ kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ 。从图中可以看出，工况 1 的 CO 质量生成率最小，富氧燃烧使得工况 2 火焰温度升高，CO 质量生成率也随之增大。工况 3 的火焰温度虽然比工况 2 低，但 CO 质量生成率最大值反而是工况 2 的 1.6 倍。这说明将工况 2 氧化剂中的 N_2 替换为 CO_2 后， CH_4 在高浓度的 CO_2 环境下的富氧燃烧使得 CO 生成特性发生了很大的改变。

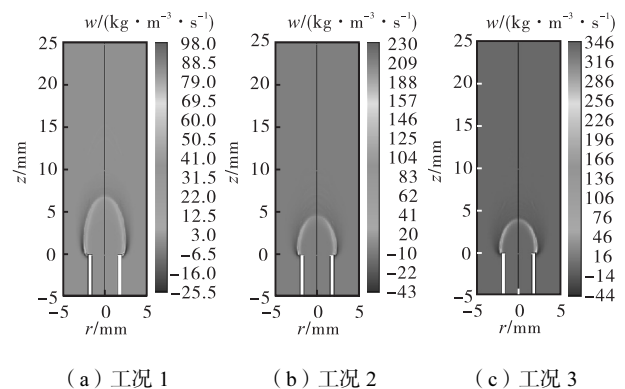


图 9 工况 1~工况 3 在常压时的 CO 质量生成率云图

事实上，Glarborg 等^[17]利用携带流反应器研究 CH_4 在 CO_2 环境下的富氧燃烧时同样发现了相同的现象。造成 CO 含量很高的原因是， CO_2 不像 N_2 那样仅作为一种惰性稀释组分，而是参与了反应，其中的主要反应为： $H + CO_2 \rightleftharpoons OH + CO$ 。Davis 等^[18]还指出 CO_2 的第 3 体效应比 N_2 的高 2.4 倍，这造成复合反应 $H + O_2 + M \rightleftharpoons HO_2 + M$ 更加强烈。因此， CH_4 在较高浓度的 CO_2 环境下燃烧时，会由于 CO_2 对 H 的消耗而使火焰速度和火焰稳定性降低，同时燃烧器出口处 CO 生成量增大，可能使燃烧器出口腐蚀和结渣的可能性增加。

3.2 高压燃烧对火焰的影响

为讨论高压条件下的富氧燃烧，需将环境压力提高，计算的环境压力分别为 0.1 MPa、0.5 MPa、1.0 MPa、2.0 MPa、3.0 MPa、4.0 MPa。

3.2.1 火焰形态

图 10 给出了工况 2 在不同压力下的温度分布云图，图中，0.1 MPa 时，火焰温度为 $300 \sim 2278$ K；0.5 MPa 时，温度为 $300 \sim 2451$ K；1.0 MPa 时，温度为 $300 \sim 2511$ K；2.0 MPa 时，温度为 $300 \sim 2551$ K；3.0 MPa 时，温度为 $300 \sim 2558$ K；4.0 MPa 时，温度

为 300 ~ 2 557 K. 从图中可以看出提高环境压力会使火焰半径逐渐变小, 火焰向中心线靠拢. 其原因是压力的提高使得火焰弗劳德数变小, 浮力作用增大, 在

浮力的作用下火焰向中心线靠拢. 从图 10 中还可以看出, 内套管中被预热的区域随着压力的提高而逐渐向上游移动,

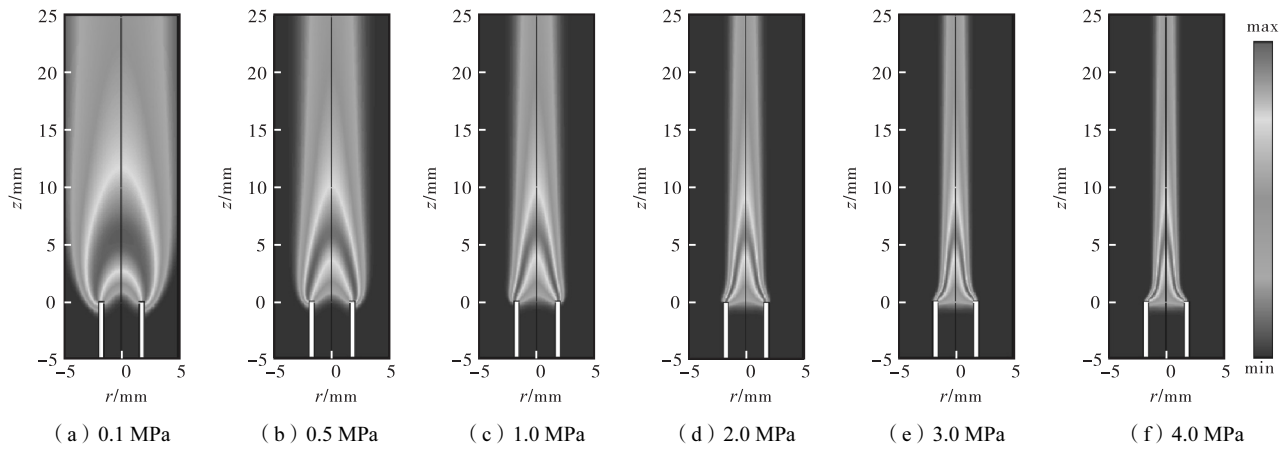


图 10 压力对工况 2 火焰温度分布的影响

这说明随着压力的提高, 燃料管内的 CH_4 的预热效果增强. 这是由于压力的提高使得火焰的辐射能力增大, 向上游传递的辐射能增大.

图 11 为燃料喷口上方 5 mm 处工况 1 火焰温度沿径向的分布图, 图中同时还给出了 Charest 等^[11]的数值模拟结果以及 Joo 等^[12]的实验测量结果. Joo 等通过火焰发射光谱的方法测量火焰温度与碳烟浓度, 该方法只能测量火焰中碳烟浓度较大区域处的温度, 因此图中只能给出一部分的火焰温度值, 从图中同样可以看出, 压力升高使得火焰最高温度向中心线靠拢. 由于本文关注的重点是高压富氧燃烧对 NO 的影响, 因此没有考虑碳烟的影响, 导致计算出的火焰温度偏高, 并且压力越高, 温度偏差越大. 这是因为碳烟的含量随着压力的升高而增大, 根据文献[12]的实验结果, 碳烟体积分数与压力成指数关系, 碳烟辐射损失的增多加剧了计算温度的偏差. Charest 等数值

模拟的关注对象是碳烟, 在考虑了碳烟辐射的影响后温度偏差要稍微小一点. 另外, 文献[12]等实验测量出的火焰温度随着压力的升高而逐渐降低, 文献[11]以及本文的数值模拟得出的火焰温度呈现出的是先升高而后降低的趋势, 这是由于实验过程中采用 N_2 对压力容器进行增压, 造成火焰能量损失较大, 而数值模拟时为了简化模型采用了光学薄假设, 因此, 即使考虑了碳烟的辐射损失也还稍显不足. 下一步工作将会考虑碳烟的影响, 并考虑其他优化计算模型的措施.

图 12 给出了工况 1 ~ 工况 3 的最高火焰温度随压力的变化规律. 富氧燃烧使得工况 2 和工况 3 的最高火焰温度都要比工况 1 高. 在 0.1 ~ 0.5 MPa 的范围内, 火焰最高温度随着压力的提高而迅速增大, 这是由于在此范围内化学反应速率随着压力的提高而迅速增大. 在 0.5 ~ 2.0 MPa 范围内, 压力的提高使

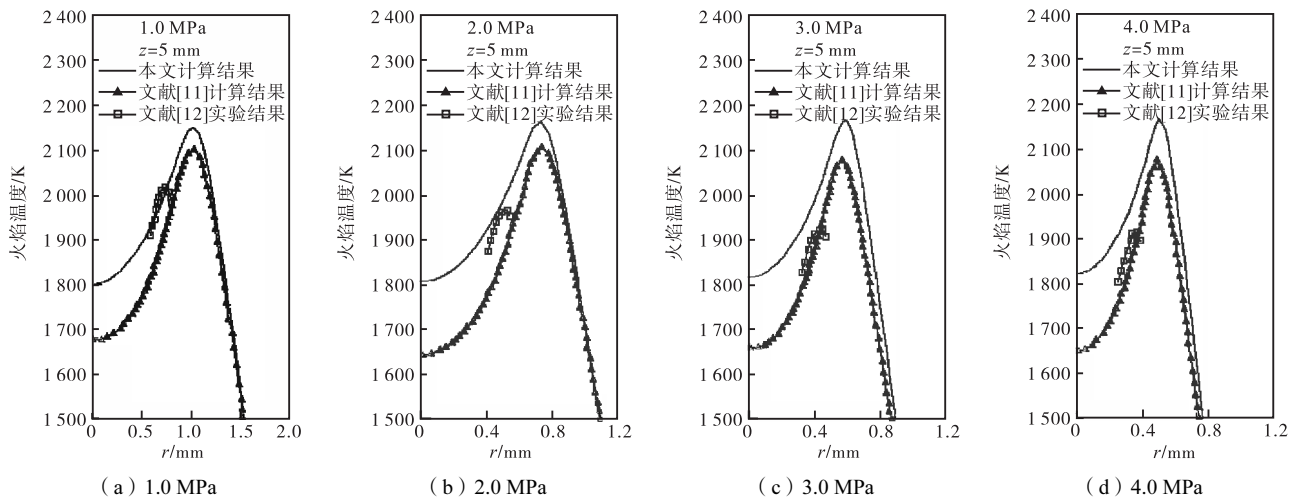


图 11 工况 1 火焰径向温度分布对比图

得复合反应增强、辐射损失有所增大,火焰最高温度的增大速率减慢.当压力大于 2.0 MPa 时,工况 3 的火焰最高温度开始快速降低,这是由于高浓度的 CO_2 以及压力的提高使火焰的辐射损失快速增大.由于工况 1 和工况 2 中的 CO_2 含量并不高,因此压力提高到 3.0 MPa 时二者的最高温度还在继续增大,但超过 3.0 MPa 后二者火焰温度开始降低.

从火焰温度分布云图中无法准确判断压力提高后火焰轮廓的变化.火焰面处的混合物分数等于化学当量混合物分数,根据这一点可以比较准确地判断火焰轮廓.混合物分数可以通过软件 Fluent 中的自定义场函数来获得.图 13 给出了工况 2 在不同压力下的化学当量混合物分数分布,通过观察可以发现:在 0.1 ~ 1.0 MPa 范围内,火焰长度随着压力的提高而有所增加,在 0.5 MPa 前火焰长度变化较大.压力大于 1.0 MPa 后火焰长度开始缓慢减小.尽管火焰长度的变化趋势与 Charest 等^[11]的数值模拟和 Joo 等^[12]的实验结果一致,但是由于计算所得的火焰长度变化幅值很小 (<0.5 mm),无法排除是否为数值计算误差的

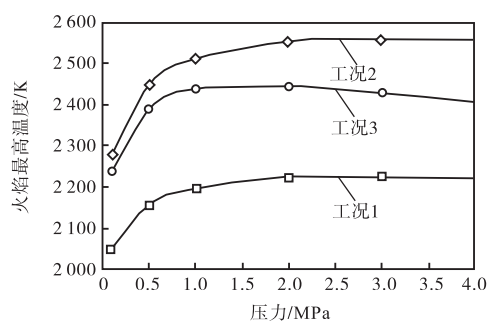


图 12 压力对工况 1、工况 2 和工况 3 火焰最高温度的影响

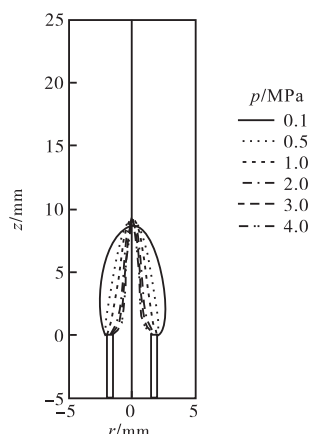
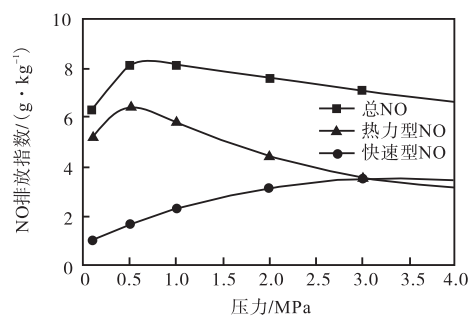


图 13 压力对工况 2 化学当量混合物分数分布的影响

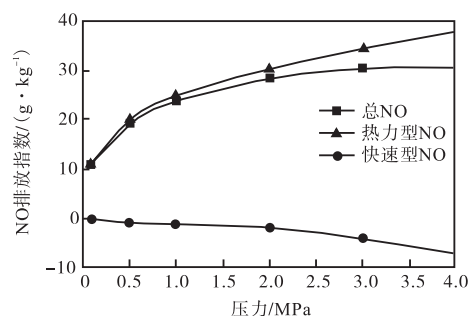
影响,因此,可以认为火焰高度基本不受压力的影响.不考虑碳烟的影响是造成火焰长度变化较小的原因之一,加上碳烟机理可能会使火焰长度产生较大的变化,这样与实验结果会更加相符.

3.2.2 NO 生成特性

图 14(a)、(b)分别给出了工况 1 和工况 2 的 NO 排放指数随着压力的变化情况.对于工况 1,NO 排放指数随着压力的提高先增大至最大值,该最大值对应的压力约为 0.8 MPa,继续提高压力,NO 排放指数开始线性减低,从其趋势推测在 0.5 MPa 时将降到与 0.1 MPa 时相等的水平.在 0.1 ~ 0.8 MPa 范围内,NO 排放指数主要取决于 NO 生成速率,提高压力促使 NO 生成率变大,NO 排放指数随之增大.但在更高压力下,NO 排放指数的变化规律出乎意料,Miller 等^[19]在进行 CH_4 /空气的高压同轴射流燃烧实验时得出了相同的变化规律.这是由于快速型 NO 排放指数随着压力的提高而单调增大,但热力型 NO 排放指数而先增大后减小,两者共同作用造成了 NO 排放指数出现了这种变化规律.对于工况 2,其 NO 排放指数比工况 1 高,且快速型 NO 的还原作用随着压力的提高而增强,但此时热力型 NO 的排放指数增加得更快,因此 NO 排放指数随着压力的提高而增大,这意味着这种程度的富氧燃烧会使 NO 排放量增大.



(a) 工况 1



(b) 工况 2

图 14 压力对 NO 排放指数的影响

4 结 论

对 0.1 ~ 0.4 MPa 压力范围内 CH_4 富氧燃烧层流同轴射流扩散火焰进行了数值研究,研究对象包含 3 种工况火焰,工况 1 采用 CH_4 /空气,工况 2 采用 $\text{CH}_4/70\%\text{N}_2$ 和 $30\%\text{O}_2$,工况 3 采用 $\text{CH}_4/70\%\text{CO}_2$ 和 $30\%\text{O}_2$. 计算模型采用了基于 GRI 3.0 的骨干反应机

理,该机理包含 26 种组分和 163 个反应,同时模型还考虑了 CH_4 、 H_2O 、 CO_2 和 CO 的辐射换热损失。

(1) 富氧燃烧引起火焰温度升高,长度变短,工况 2 中 NO 排放指数与工况 1 相比增加了 70%,绝大部分 NO 通过热力型 NO 途径形成。

(2) 提高压力,火焰半径变小,火焰长度基本保持不变,火焰温度先升高后降低。其中在 0.5 MPa 前温度升高速率最快。当压力大于 3.0 MPa 后,工况 1 和工况 2 的温度开始降低。而对于工况 3,温度降低所对应的压力约为 2.0 MPa。富氧燃烧使得工况 2 的 NO 排放指数随着压力的提高而增大。

(3) 采用 CO_2/O_2 富氧燃烧技术时,由于 CO_2 含量相对较高,在其富氧燃烧过程中基元反应 $\text{H} + \text{CO}_2 \rightleftharpoons \text{OH} + \text{CO}$ 使得近燃烧器喷口处的 CO 浓度大大增加,同时 CO_2 对 H 的消耗会使火焰速度和火焰稳定性降低。

参考文献:

- [1] Eleazer P B, Slavejkov A G. Clean firing of glass furnaces through the use of oxygen [J]. *Ceramic Engineering and Science Proceedings*, 1994, 15(2): 159-174.
- [2] Poola R B, Sekar R. Reduction of NO_x and particulate emissions by using oxygen-enriched combustion air in a locomotive diesel engine [J]. *Transactions of the ASME*, 2003, 125(2): 524-533.
- [3] Sung C J, Law C K. Dominant chemistry and physical factors affecting NO formation and control in oxy-fuel burning [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 1998, 27(1): 1411-1418.
- [4] 赵黛青, 冯耀勋, 刘庆才, 等. 燃料稀释对富氧空气/甲烷扩散火焰中氮氧化物生成的影响[J]. *热能动力工程*, 2004, 19(4): 367-371.
Zhao Daiqing, Feng Yaoyun, Liu Qingcai, et al. Impact of fuel dilution on the formation of NO_x in an oxygen-rich air/methane diffusion flame[J]. *Journal of Engineering for Thermal Energy & Power*, 2004, 19(4): 367-371 (in Chinese).
- [5] Smooke M D, Ern A, Tanoff M A, et al. Computational and experimental study of NO in an axisymmetric laminar diffusion flame [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 1996, 26(2): 2161-2170.
- [6] Ju Y, Niioka T. Computation of NO_x emission of a methane-air diffusion flame in a two dimensional laminar jet with detailed chemistry [J]. *Combustion Theory and Modelling*, 1997, 1(3): 243-258.
- [7] Bennett B A V, Cheng Z X, Pitz R W, et al. Computational and experimental study of oxygen-enhanced axisymmetric laminar methane flames [J]. *Combustion Theory and Modelling*, 2008, 12(3): 497-527.
- [8] Bowman C T, Hanson R K, Davidson D F, et al. GRI 2.11[EB/OL]. http://diesel.me.berkeley.edu/~gri_mech/new21/version21/text21.html, 1995-11-03.
- [9] Smith G P, Golden D M, Frenklach M, et al. GRI 3.0 [EB/OL]. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/version30/text30.html, 1999-07-30.
- [10] Bhadraiah K, Raghavan V. Numerical simulation of laminar co-flow methane-oxygen diffusion flames: Effect of chemical kinetic mechanisms [J]. *Combustion Theory and Modelling*, 2010, 15(1): 23-46.
- [11] Charest M R J, Joo H I, Gülder O L, et al. Effects of gravity and pressure on laminar co-flow methane-air diffusion flames at pressures from 1 to 60 atmospheres [J]. *Combustion and Flame*, 2011, 158: 860-875.
- [12] Joo H I, Gülder O L. Soot formation and temperature field structure in co-flow laminar methane-air diffusion flames at pressures from 10 to 60 atm[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2009, 32: 769-775.
- [13] Fluent Inc. *Fluent 6.3 User's Guide* [M]. Lebanon, NH, USA: FluentInc, 2007.
- [14] Amato A, Hudak B, D'Carlo P, et al. Methane oxy-combustion for low CO_2 cycles: Blow off measurements and analysis [J]. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2011, 133(6): 061503-1-060503-9.
- [15] Barlow R S, Karpetsis A N, Frank J H, et al. Scalar profiles and NO formation in laminar opposed-flow partially premixed methane/air flames [J]. *Combustion and Flame*, 2001, 127(3): 2102-2118.
- [16] Lu T F, Law C K. A criterion based on computational singular perturbation for the identification of quasi steady state species: A reduced mechanism for methane oxidation with NO chemistry [J]. *Combustion and Flame*, 2008, 154(4): 761-774.
- [17] Glarborg P, Bentzen L L B. Chemical effects of a high CO_2 concentration in oxy-fuel combustion of methane [J]. *Energy & Fuels*, 2008, 22(1): 291-296.
- [18] Davis S G, Joshi A V, Wang H, et al. An optimized kinetic model of H_2/CO combustion [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2005, 30(1): 1283-1292.
- [19] Miller I M, Maahs H G. High-Pressure Flame System for Pollution Studies with Results for Methane-Air Diffusion Flames [R]. NASA Technical Paper TND-8407, 1977.