

高强度湍流预混火焰 NO 生成特性的研究

金台^{1,2}, 王旭江², 罗开红², 罗坤^{1*}, 樊建人¹

1. 浙江大学能源清洁利用国家重点实验室, 杭州, 310027

2. 伦敦大学学院机械工程系, 伦敦, WC1E7JE

摘要: 本文采用直接数值模拟方法对不同湍流强度下预混 CH₄/H₂/air 平面火焰进行了计算, 并对湍流火焰中 NO 的生成规律进行了研究。采用了 28 组分 268 步反应的详细化学反应机理。研究表明高 Karlovitz 数下, 湍流微团能穿透火焰面并存在于内反应区中。在强拉伸作用下, 局部燃烧热释率达到层流火焰峰值的 1.8 倍。湍流作用下湍流燃烧速率显著提高, 而 NO 的总生成速率增加不明显。高湍流强度下由于快速型 NO 的生成率的显著减小, 湍流火焰中 NO 的总生成速率降低。

关键词: 预混燃烧; 湍流强度; NO 生成路径; 直接数值模拟

中图分类号: TK123

文献标识码: A

Effects of Intense Turbulence on NO Formation in Propagating Planar Premixed Flame

Tai Jin^{1,2}, Xujiang Wang², Kai Hong Luo², Kun Luo¹, Jianren Fan¹

1. State Key laboratory of clean energy utilization, Zhejiang University, Hangzhou, 310027

2. Department of Mechanical Engineering, University College London, London, WC1E7JE

Abstract: Effects of different turbulence intensity on NO formation propagating planar premixed CH₄/H₂/air flame are investigated via direct numerical simulation. A detailed chemistry mechanism including 28 species and 268 steps is adopted. It is found that turbulent vortex would penetrate the flame front and sustain in the flame inner zone under the condition of high Karlovitz number. Local heat release rate increase to 1.8 times of that found in laminar flame, due to the strong stretch. The turbulent flame velocity based on the consumption rate increase significantly, however the total production rate of NO varies a little. Under intense turbulence, the total production rate of NO in the flame decrease, which is due to the significant decrease of the production rate of prompt NO.

Key words: Premixed combustion; turbulence intensity; NO formation pathway; direct numerical simulation

0 前言

燃烧过程中生成的 NO 是主要的一种大气污染物, 对环境和人体健康有较大的危害。湍流燃烧中的化学反应与流动相互耦合, 湍流对火焰的结构、火焰传播速度都有较大的影响。根据湍流脉动和层流火焰的特征时间和空间尺度的比值, 湍流燃烧模式被区分成为不同的区域^[1], 如层流褶皱火焰区、层流小火焰区、薄反应区、破碎火焰区等。同时, 由于湍流涡团的输运作用, 燃烧中化学反应路径也呈现出和层流火焰不同的特征, NO 的生成同样受到湍流的影响。先进燃气轮机燃烧室中湍流脉动速

度可达层流火焰速度的 150 倍^[2], 因此对高湍流强度下的湍流燃烧进行研究具有重要意义。

近年来, 国内外学者逐渐对高湍流强度下的湍流火焰展开了实验和数值分析。Zhou 等^[3]对不同湍流强度下的预混射流火焰进行了实验测量, 并对破碎区火焰进行了详细分析。Carlsson 等^[4]对高 Ka 数下湍流 H₂/air 和 CH₄/air 火焰进行了比较研究。Aspden 等^[5-7]对湍流氢气、甲烷预混火焰进行了数值模拟, 对比了不同 Ka 数下火焰的特征结构, 并探究了路易斯数、热扩散率对于火焰特性的影响。Lapointe 等^[8,9]比较研究了甲烷、庚烷、辛烷、甲苯等复杂燃料在高 Ka 数湍流下的燃烧情况。Wang 等

收稿日期: 2017 年 12 月 15 日

基金项目: 国家自然科学基金项目(Nos.51576176; 91541202), NSFC-广东联合基金(第二期)超级计算科学应用研究专项资助

作者简介: 金台(1988-), 男, 博士后, 博士, 主要从事湍流燃烧的数值模拟研究。**通信作者:** 罗坤, 教授, zjulc@zju.edu.cn

[10]对实验尺度的高 Ka 数预混射流火焰进行了直接数值模拟研究, 对火焰结构、稳燃机理等进行了讨论。

目前, 对高强度湍流作用下 NO 的生成特性的研究还不多见。Trisjono 等^[11]对时间发展的 CH_4/air 射流火焰进行了模拟研究, 火焰处在薄反应区, 研究表明湍流影响了 NO 的生成路径, 其中 NNH 路径比较重要, 且受到湍流强度的影响。Karimkashi 等^[12]对不同湍流强度下预混 CH_4/air 火焰中 NO 的生成进行了模拟研究, 发现在高端流脉动情况下, 快速型 $NO(prompt)$ 路径由生成 NO 变成了消耗 NO 。氢气是一种清洁可再生燃料, 燃烧速率快, 通过向天然气中掺混少量氢气可以提高燃烧速率, 同时提高天然气稀燃稳定性。本文采用直接数值模拟方法对不同湍流强度下 $CH_4/H_2/air$ 预混火焰进行研究, 研究湍流对火焰结构、湍流燃烧速率及对 NO 的生成率、反应路径的影响。

1 数值方法与模型

模拟基于完全可压缩 N-S 方程, 具体形式如下:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho Y_k u_i)}{\partial x_i} = - \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho Y_k V_{k,i}) + \dot{\omega}_k, \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\rho e_t)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i e_t)}{\partial x_i} = - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \dot{Q} + \frac{\partial \sigma_{ij} u_i}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,i} (u_i + V_{k,i}), \quad (4)$$

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

其中, R 、 W 、 q_i 、 σ_{ij} 、 \dot{Q} 、 h 、 λ 、 μ 分别代表着摩尔气体常量、混合气体摩尔分子量、 i 方向的热流、应力张量、外加热源、混合组分的焓值、导热系数、和动力粘性系数, Y_k 、 h_k 、 h_k^0 、 $c_{p,k}$ 、

$\dot{\omega}_k$ 、 W_k 、 $f_{k,i}$ 、 $V_{k,i}$ 分别代表气体组分 k 的质量分数、焓值、生成焓值、等压质量热容、反应生成速

率、摩尔分子量、 i 受到的方向体积力、 i 方向的组分扩散速度。

控制方程采用直接数值模拟程序求解。空间上采用八阶中心差分格式进行离散, 并采用十阶过滤来消除高频振荡。时间推进采用四阶龙格-库塔方法。化学反应计算采用 Lu 等^[10,12,13]发展的包含 NO 生成的 28 组分 268 步反应的详细机理。CHEMKIN 软件包^[14]耦合用于热力学参数和输运参数的计算。

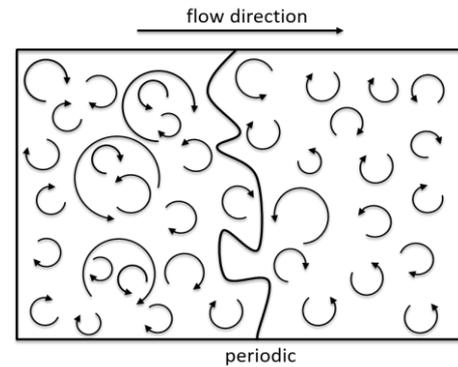


图 1. 计算模型示意图

Fig.1 Computation configuration

本文基于各向同性湍流中平面预混火焰, 研究湍流脉动强度对火焰结构及 NO 生成规律的影响。选取当量比为 0.7 的贫燃工况条件, 燃料中甲烷和氢气的体积比为 0.8: 0.2, 温度为 600 K。直接数值模拟的初始场通过各向同性湍流叠加一维层流预混火焰获得: 各向同性湍流由伪谱方法计算得到, 一维层流预混火焰通过 CHEMKIN^[14]计算得到。沿火焰传播方向采用了改进的无反射特征边界条件, 其他方向采用周期性边界条件。计算区域示意如图 1, 计算区域为 $6.28 \text{ mm} \times 6.28 \text{ mm}$, 采用计算网格为 1024×1024 , 网格大小为 $6.13 \mu\text{m}$ 。

表 1 计算工况的关键参数

Table 1 Computational parameters						
Case	u'/S_L	S_L/ms^{-1}	δ_f/mm	lt/δ_f	Re_t	Ka
1	10	1.03	0.368	1	10	31.62
2	50	1.03	0.368	1	50	353.55
3	100	1.03	0.368	1	100	1000

计算工况的具体参数如表 1 所示, 其中 u' 为湍流脉动速度, S_L 为层流火焰传播速度, δ_f 层流火焰厚度, lt 是湍流积分尺度。湍流脉动雷诺数 $Re_t = u'lt/(S_L * \delta_f)$, Karlovitz 数 $Ka^2 = (u'/S_L)^3/(lt/\delta_f)$ 。根据 Peters^[1]预混湍流火焰分区理论, Case 1 位于薄反应

区 (Thin reaction zone), Case 2,3 位于破碎区 (Distributed reaction zone)。

2 结果与讨论

2.1 湍流火焰结构和燃烧速率

火焰面在湍流作用下发生弯曲和褶皱。 $t=2.0\tau$ ($\tau=lt/u'$, 大涡翻转时间)时, 热量释放率(HRR) (以层流火焰最大的热释率(HRR_max)无量纲)分布如图 2 所示。反应进程变量 c 定义为 $c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u}$, 下标

b 和 u 分别代表燃尽气体和未燃气体。反应区定义为 $c=0.05\sim 0.95$ 的区域, 图中红色线包围区域。内反应区 (inner reaction zone) 定义为热释率大于 35% 的最大热释率的区域^[15], 图中黑色线包围区域。白色线为涡量等值线。

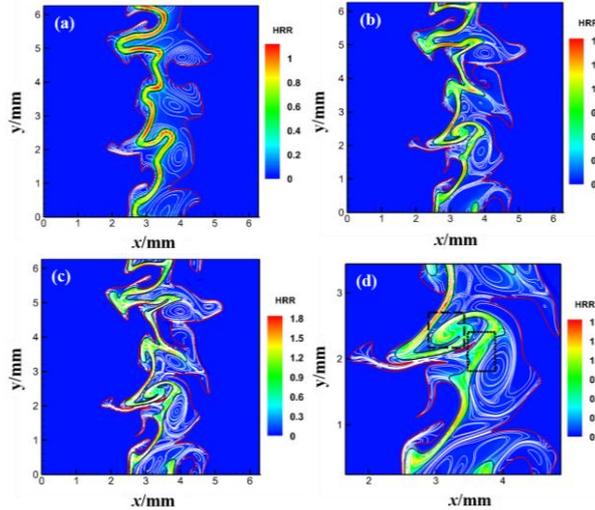


图 2 $t=2\tau$ 热释率 (Heat Release Rate, HRR) 分布, 红线分别为 $c=0.05, 0.95$ 等值线, 黑线为 35% HRR_max 等值线, 白线为涡量等值线: (a) Case 1; (b) Case 2; (c) Case 3; (d) Case 3 局部放大图

Fig.2 Contours of heat release rate, red lines are isolines of $c=0.05, 0.95$, black line is isoline of 35% HRR_max, while lines are isolines of vorticity: (a) Case 1; (b) Case 2; (c) Case 3; (d)

Case 3 zoomed-in view

从图中可以看出, 火焰面在不同强度湍流作用下呈现出不同的特征。在湍流较弱时 (Case 1), 火焰面保持连续结构, 火焰面附近涡结构尺度大于内反应区厚度, 因此内反应区的厚度基本保持不变。火焰面凸向生成物部分热释率更高, 凸向反应物时热释率较低。随着湍流的增强, Ka 数的增大, 内反应区厚度呈现出局部增大和减小的不规则分布。在

湍流涡的强拉伸作用下局部减小, 在其他区域由于小涡结构进入内反应区内部而增厚。在 Case 2&3 中, 可以清楚的看到小涡结构存在于内反应区里面, 如图 2 (d)所示。在强拉伸作用下, 局部燃烧强度增大, 热释率 (HRR) 达到层流火焰的 1.8 倍。

基于反应物消耗/生成速率的湍流燃烧速率定义为:

$$S_{c,CH_4} = \frac{1}{\rho_u (Y_{CH_4,b} - Y_{CH_4,u})} \int_0^{L_y} \overline{\dot{m}_{CH_4}} dy, \quad (6)$$

该速率可以反映火焰的反应速率和火焰面积的综合结果。图 3 为分别基于 CH_4 、 O_2 、 NO 的湍流燃烧速率 (以层流火焰传播速度无量纲化) 随时间的演化。从图中可以看出, 湍流燃烧速率在高湍流强度条件下 (Case 3) 增加的更快。对于 NO 的生成速率可以看到, 在较弱湍流强度下 (Case 1) 中, 只有较小的增加, 而在 Case 3 中, 甚至有一定的降低。因此, 有必要对 NO 的生成进一步的研究。

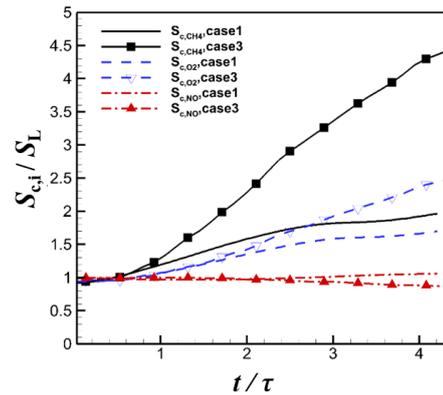


图 3 湍流燃烧速率时间演化

Fig.3 Temporal evolution of turbulent flame velocity

2.2 NO 的生成路径

根据燃烧中 NO 的生成途径可以将 NO 分为以下四类: 热力型 (thermal)、快速型 (prompt)、 NO_2 中间体 (NO_2 path)、 N_2O 中间体 (N_2O path)。一维层流火焰中 NO 生成路径如图 4 所示, 其中 δ_f 为层流火焰厚度。从图中看到, 热力型和快速型 NO 是主要的生成路径。热力型 NO 在反应区达到峰值, 并在高温生成物中继续反应产生。快速型 NO 在反应区的峰值最大。 NO_2 中间体可以扩散到火焰预热区而消耗 NO , 在反应区生成 NO 。 N_2O 中间体在反应区生成一定的 NO 。一维层流火焰中 NO 的生成将用来和湍流火焰进行对比。

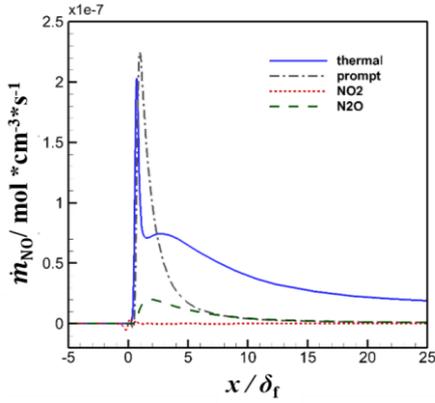


图4 一维层流火焰中 NO 生成路径

Fig.4 NO formation pathway in 1D laminar flame

湍流火焰中 NO 的总生成率和四种路径的生成率随时间演化如图 5、6 所示。在 Case 1 中，总的 NO 生成速率先减小后增大，其中热力型 NO 的生成速率单调递增，快速型 NO 的生成速率先减小后增大，而 N2O 中间体 NO 则单调递减。四种路径生成 NO 占比(ω)如图 5(b)所示，热力型 NO 占比最大，先增加后略微减小，而 N2O 占比都很小。

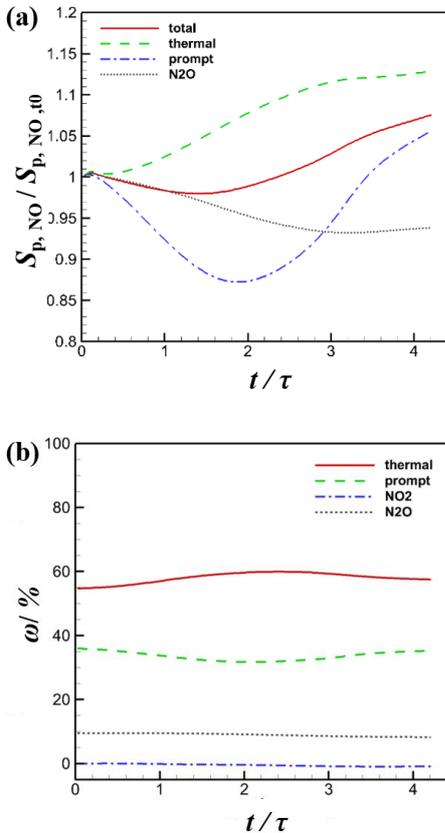


图 5 Case 1 湍流火焰中 NO 生成演化: (a)生成速率, (b) 四种生成路径占比

Fig. 5 Evolution of NO formation in Case 1: (a) production rate,

(b) contribution from the four formation pathways

在高强度湍流影响下，NO 的总生成速率则呈现出单调递减的趋势(图 6(a))。从图中可以看到，热力型 NO 生成速度仍然成递增趋势，且增速相较于 Case 1 更大。而快速型 NO 的生成速率则单调递减，且递减的速度比热力型递增的速度更大，同时 N2O 中间体生成的 NO 速率也逐渐减小。因此，在 Case 3 中，总的 NO 的生成率是降低的。在 $t > 4\tau$ 时，热力型 NO 的占比超过 80%。

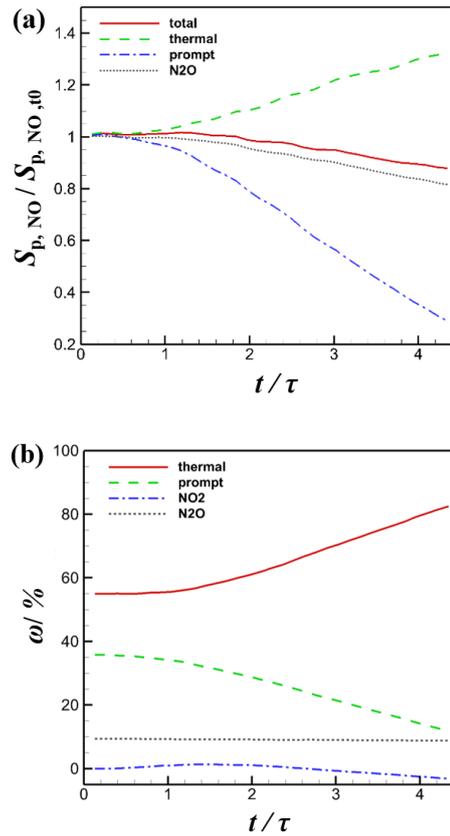


图 6 Case 3 湍流火焰中 NO 生成演化: (a)生成速率, (b) 四种生成路径占比

Fig. 6 Evolution of NO formation in Case 3: (a) production rate, (b) contribution from the four formation pathways

湍流火焰中 NO 的四种生成路径和一维层流火焰对比如图 7、8 所示。湍流脉动作用下，NO 的生成率在层流附近波动，在 Case 3 中幅度更大。在较低湍流强度下(Case 1)，NO 的生成率仍然保持和层流相一致的趋势，热力型 NO 在高温区域生成率有较大的提高，最大值约为层流情况下的 1.75 倍。而快速型 NO 则在反应区中出现了一定程度的 NO 的消耗，这是导致快速型 NO 的平均生成率降低(图 5(a))的原因。N2O 中间体受湍流的影响较小。

compared with 1D laminar flame

3 结论

本文对不同湍流强度下预混 $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{air}$ 平面火焰进行了直接数值模拟, 对平面火焰机构及湍流火焰中 NO 的生成规律进行了研究。研究表明 Karlovitz 数较小时, 火焰面保持连续结构, 火焰面附近涡结构尺度大于内反应区厚度, 内反应区的厚度基本保持不变。火焰面凸向生成物部分热释率更高, 凸向反应物时热释率较低。Karlovitz 数较大时, 湍流微团能穿透火焰面并存在于内反应区中。在强拉伸作用下, 局部燃烧热释率达到层流火焰的 1.8 倍。湍流作用下湍流燃烧速率显著提高, Karlovitz 数更大时, 速率越大。而 NO 的总生成速率增加不明显。分析发现热力型 NO 生成率在湍流作用下增大, N_2O 中间体生成 NO 随湍流作用变化不明显。较低湍流强度下快速型 NO 的生成率先减小后增大。而在高湍流强度下由于快速型 NO 的生成率的显著减小, 湍流火焰中 NO 的总生成速率降低。

参考文献

- [1] Peters N. The Turbulent Burning Velocity for Large Scale and Small Scale Turbulence [J]. Journal of Fluid Mechanics, 1999, 384:107-132
- [2] Strakey P, Sidwell T, Ontko J. Investigation of the Effects of Hydrogen Addition on Lean Extinction in a Swirl Stabilized Combustor [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2007, 31:3173-3180
- [3] Zhou B, Brackmann C, Li Q, et al. Distributed Reactions in Highly Turbulent Premixed Methane/Air Flames [J]. Combustion and Flame, 2015, 162:2937-53
- [4] Carlsson H, Yu R, Bai X S. Flame Structure Analysis for Categorization of Lean Premixed CH_4/Air and H_2/Air Flames at High Karlovitz Numbers: Direct Numerical Simulation Studies. [J] Proceedings of the Combustion Institute, 2015, 35(2):1425-1432.
- [5] Aspden A J, Day M S, Bell J B. Turbulence-Flame Interactions in Lean Premixed Hydrogen: Transition to the Distributed Burning Regime [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2011, 680:287-320
- [6] Aspden A J, Day M S, Bell J B. Three-Dimensional Direct Numerical Simulation of Turbulent Lean Premixed Methane Combustion with Detailed Kinetics [J].

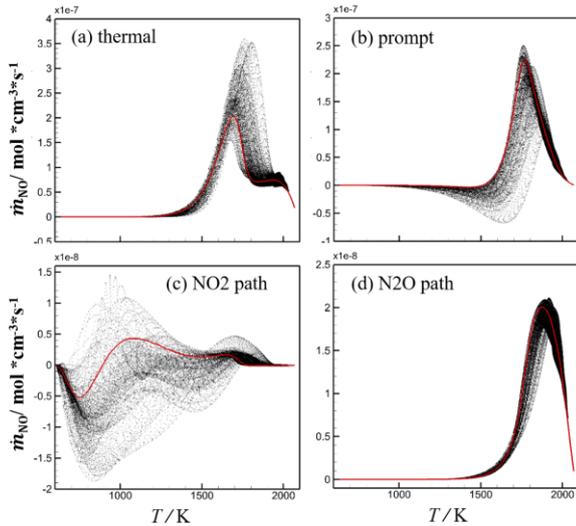


图 7 $t=2\tau$ 湍流火焰中 NO 生成速率与一维层流火焰比较:

Case 1

Fig. 7 Production rate of NO in turbulent flame Case 1 at $t=2\tau$, compared with 1D laminar flame

在高湍流强度下(Case 3), 热力型 NO 在高温区域生成率最大值约为层流情况下的 2.5 倍。而快速型 NO 则在从低温到高温的整个火焰区域都有一定的 NO 的消耗, 较大的降低了快速型 NO 的生成。 NO_2 中间体在低温预热区域, 同时存在着 NO 的消耗和生成, 而在高温区域, 则消耗一定的 NO , 因此 NO_2 中间体生成的 NO 呈现出单调递减的趋势(图 5、6(a))。 N_2O 中间体受湍流的影响同样较小。

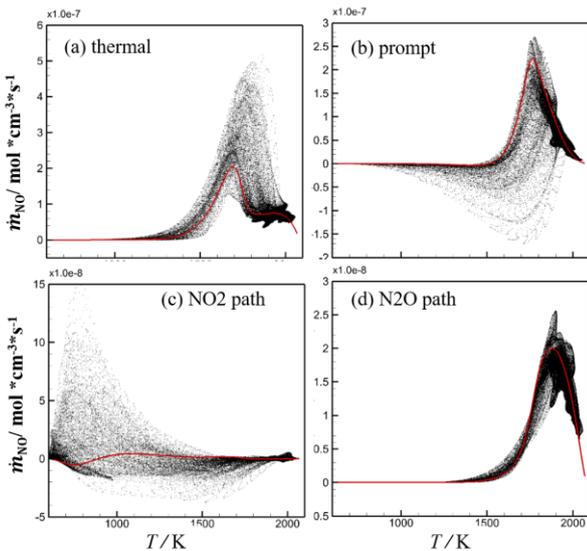


图 8 $t=2\tau$ 湍流火焰中 NO 生成速率与一维层流火焰比较:

Case 3

Fig. 8 Production rate of NO in turbulent flame Case 3 at $t=2\tau$,

Combustion and Flame, 2016, 166:266-83

- [7] Aspden A J. A Numerical Study of Diffusive Effects in Turbulent Lean Premixed Hydrogen Flames [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2017, 36: 1997-2004
- [8] Lapointe S, Savard B, Blanquart G. Differential Diffusion Effects, Distributed Burning, and Local Extinctions in High Karlovitz Premixed Flames [J]. Combustion and Flame, 2015, 162:3341-55
- [9] Lapointe S, Blanquart G. Fuel and Chemistry Effects in High Karlovitz Premixed Turbulent Flames [J]. Combustion and Flame, 2016, 167:294-307
- [10] Wang H, Hawkes ER, Zhou B, et al. A Comparison between Direct Numerical Simulation and Experiment of the Turbulent Burning Velocity-Related Statistics in a Turbulent Methane-Air Premixed Jet Flame at High Karlovitz Number [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2017, 36:2045-53
- [11] Trisjono P, Pitsch H. A Direct Numerical Simulation Study on NO Formation in Lean Premixed Flames [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2017, 36:2033-2043
- [12] Karimkashi S, Bolla M, Wang H O, et al. A Direct Numerical Simulation Study of Turbulence Intensity Effects on NO_x Formation in Freely Propagating Premixed Flames [C]. 20th Australasian Fluid Mechanics Conference, Perth, Australia, 2016.
- [13] 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, 154:761-74
- [14] Kee R J, Lewis G D, Warnatz J, et al. A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multicomponent Transport Properties [R]. Report No. SAND86-8246, Sandia National Laboratories, 1986
- [15] Wang H, Hawkes E R, Zhou B, et al. Direct Numerical Simulations of a High Karlovitz Number Laboratory Premixed Jet Flame – an Analysis of Flame Stretch and Flame Thickening [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2017, 815:511-36