



中国工程热物理学会

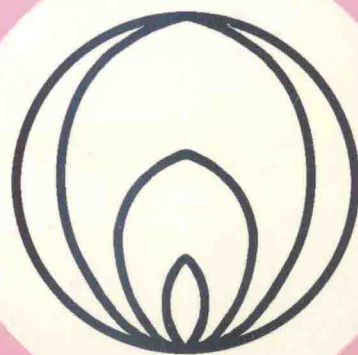
第十一届年会论文集

燃烧学（上册）

二〇〇五

北京

中国工程热物理学会编



燃烧学学术会议论文集(上册) 目录

一. 燃料及可燃物的燃烧特性

- 054020 基于敏感性分析的甲烷反应机理最优简化.....
.....乔 瑜 徐明厚 William H. Green (1)
- 054043 基于多种控制机理的湍流爆炸燃烧模型研究.....
.....杜 扬 蒋新生 高建丰 沈光新 扬 双(9)
- 054060 甲烷/富氧扩散火焰燃烧区域的分层特性研究.....
.....赵黛青 杨浩林 鲁冠军 冯耀勋 杨卫斌(15)
- 054078 浸没在不同材料的多孔介质中的不同液体燃料燃烧特性研究.....
.....孔文俊 王宝瑞 张孝谦(21)
- 054093 H_2/O_2 系统爆炸电离特性研究.....王心亮 叶 丹 顾 璠(28)
- 054105 城市污泥及其与煤混合物的热解特性.....
.....陈小平 顾利锋 韩晓强 赵长遂 吴 新(33)
- 054106 固体废物拟稳态连续式热解研究—反应器设计和平衡计算.....
.....李水清 姚 强 陈 超 乐国明 E. Pruckner (41)
- 054119 化学链燃烧技术中新型氧载体的特性研究.....
.....郑 瑛 王保文 宋 侃 郑楚光(48)
- 054126 多孔介质燃烧技术在燃气热水器上应用实验研究.....
.....刘 闯 何 鑫 傅维钺(52)
- 054139 生物质在闪速加热条件下的挥发特性研究.....
.....易维明 柏雪源 修双宁 李志合 王丽红(56)
- 054171 贫燃料预混燃烧的回火特性研究.....
.....田 颖 徐 纲 崔玉峰 房爱兵 聂超群(65)
- 054175 半焦在内循环流化床中燃烧特性研究.....
.....刘典福 张静伟 王 阳 李要建 魏小林 盛宏至(81)
- 054179 火烧油层燃烧前缘传播分析...蒋海岩 张 琪 赵东伟 袁士宝 杨 红(87)

二. 煤的燃烧技术

- 054005 基于绝热氧化的煤自燃倾向性鉴定研究.....
.....陆 伟 王德明 仲晓星 周福宝(92)
- 054009 基于声波理论的锅炉燃烧监测方法及其技术关键.....
.....沈国清 安连锁 张 波 李 颖(100)
- 054036 煤中矿物质对其半焦反应活性的影响.....
.....张守玉 朱廷钰 张建胜 吕俊复 张建民 岳光溪(106)
- 054037 超细煤粉分级燃烧中 NO_x 还原规律的研究.....
.....金 晶 张忠孝 樊俊杰 代纪邦(112)
- 054038 超细煤粉热解时轻质烃的析出规律.....
.....樊俊杰 金 晶 代纪邦(117)

054049	天然气预混及再燃条件下煤粉着火特性研究	乌晓江 张忠孝 朱基木 邱莉莉 魏华彦 陶晓华	(122)
054052	煤中氮的迁移对氮氧化物生成影响的实验研究	魏华彦 张忠孝 乌晓江 陶晓华	(128)
054057	煤颗粒表面碳、氮官能团演化行为的 XPS 研究	向 军 胡 松 赵清森 陈 伟 石金明 毛金波 高 鹏	(132)
054058	煤热重信号的两步法去噪研究	向 军 胡 松 李培生 孙路石 刘雪峰 孙学信	(138)
054068	煤粉火焰燃烧状态化及煤粉粒径对火焰光谱的影响	程智海 蔡小舒 岳 俊 欧阳新 李俊峰 赵志军	(144)
054069	煤粉在不同气体再燃条件下的低 NO _x 排放研究	陶晓华 张忠孝 乌晓江 魏华彦 朱基木	(150)
054071	燃煤含铁矿物的迁移转化及磁珠的结构演化机制研究	赵永椿 张军营 高 全 李 扬 郑楚光	(154)
054072	燃煤超细颗粒物团聚促进实验研究	张军营 陈 俊 魏 凤 赵永椿 郑楚光	(161)
054080	煤燃尽特性的试验研究	傅培肪 方庆艳 周怀春	(169)
054081	煤低温氧化的微区组分分析与反应性研究	傅培肪 姚 海 周怀春	(178)
054087	煤矸石燃烧特性及动力学热重法研究	牛 奔 冉景煜 张 力 蒲 舸 唐 强	(187)
054103	燃煤增钙灰渣的物相表征及活化条件分析	刘 豪 邱建荣 张小平 熊全军 吴 辉 温 存 肖教芳	(194)
054115	原料煤与成型水分对型煤冷态强度的影响	邓加耀 吴梦柏 王希麟	(200)
054140	K ₂ O 对焦炭—CO ₂ 气化反应的影响	庞克亮 奚 白 向文国 梁 财 赵长遂	(205)

三. 燃烧过程数值计算

054014	CNG 发动机火核形成和发展的三维数值模拟研究	虞育松 李国岫 姚宝峰	(210)
054015	天然气发动机燃烧过程的三维数值模拟研究	虞育松 李国岫 徐宇工	(218)
054022	生物质气再燃还原 NO _x 的数值模拟	范志林 张 军 林晓芬 徐益谦	(226)
054026	CrOH+H→CrO+H ₂ 反应机理的量子化学研究	吕雪峰 杨小勇 胡 娟 于溯源 吴国是	(232)
054029	铬焚烧中 CrO ₃ +H ₂ ↔CrO ₂ +H ₂ O 反应机理研究	胡 娟 杨小勇 吕雪峰 齐炜炜 于溯源 吴国是 徐景明	(237)
054030	多孔介质内预混燃烧的数值研究	赵平辉 陈义良 刘明侯 张根烜 丁 敏 姜 海	(243)
054031	超细粉再燃锅炉低 NO _x 排放的数值模拟	张志刚 刘 彤 许言武 冯兆兴 王 阳 庞开宇	(252)
054032	水泥回转窑内 NO _x 生成及其分布规律研究	任合斌 陆继东 胡芝娟 王世杰 李卫杰 狄东仁 肖贤云	(257)

054035	孤立碳颗粒聚团燃烧过程的研究	尹丽洁 何玉荣 陆慧林 李 响 刘文铁(263)
054045	高温空气煤粉直燃技术的数值模拟	康志忠 张 伟 郭永红 孙保民 刘 岩(268)
054046	双通道燃烧器稳燃齿对两相流动的影响	孙保民 郭永红 董永胜 康志忠(272)
054054	考虑弥散效应的多孔介质中超绝热燃烧的数值模拟	史俊瑞 解茂昭(278)
054059	稠密气固两相流中颗粒团运动的 DEM 模型研究	刘向军 赵 燕 徐旭常 宋邵峰(285)
054064	抛煤机锅炉炉内增拱烟气流动特性的研究	潘金荣 张忠孝 许建豪 乌晓江 周 托(293)
054065	湍流燃烧大涡模拟的最近研究进展	周力行 胡珥元 王 方(298)
054066	环缝燃料进口的丙烷-空气旋流扩散燃烧的数值模拟	王文丽 周力行 李荣先(308)
054067	湍流燃烧关联量的大涡模拟和二阶矩燃烧封闭模型的验证	王 方 周力行 许春晓(314)
054083	二维轴对称层流乙烯-空气扩散火焰中烟黑形成的数值模拟与实验测量比较	艾育华 周怀春 Fengshan Liu(321)
054084	地下狭长受限空间火灾实验及大涡数值模拟研究	杜 扬 杨小凤 郭 春 周琳莉 孙秀平(327)
054089	基于三混合分数方法的混煤模拟研究	李卫杰 陆继尔 黄 来 任合斌 王世杰 李 捷(336)
054090	催化燃烧对天然气发动机排放特性影响的数值研究	冷锁林 张 力 冉景煜 蒲 舸(343)
054096	惰性多孔介质内过滤燃烧特性分析	张根烜 陈义良 刘明侯 赵平辉 林博颖(349)
054108	地下车库火灾过程及消防措施的研究	张晓鸽 郭印诚(356)
054109	空间发展平面混合层甲烷/空气湍流燃烧的大涡模拟	杨武兵 张会强 王希麟 郭印诚 林文漪(364)
054111	矩形射流扩散火焰近区拟序结构的周期性研究	蒋 平 郭印诚 张会强 王希麟 林文漪(369)
054112	浮力对矩形射流扩散火焰影响的大涡模拟	蒋 平 郭印诚 张会强 王希麟 林文漪(376)
054113	单跑楼梯井内火灾过程的数值模拟	秦挺鑫 郭印诚 林文漪(383)
054117	可吸入颗粒物近壁面附近碰撞规律的研究	李光辉 由长福 祁海鹰 徐旭常(390)
054118	内二次风流强度对结渣过程的影响	周 勇 由长福 黄 宾 祁海鹰 徐旭常(395)
054125	涡量对标量小尺度结构各向异性的影响	刘亚明 柳朝晖 贺 铸 郑楚光(400)

054131	煤油在超临界压力下冷却性能的数值研究·····	候凌云	国晓慧	钟北京(405)
054134	自激燃烧振荡的 GFD 模拟·····	季俊杰	罗永浩	胡珅元(411)
054138	层流预混庚烷火焰中 PAHs 的形成与机理的简化·····	钟北京	候凌云(417)	
054148	正庚烷化学动力学简化模型的构建及优化·····	黄豪中	苏万华(422)	
054149	旋流燃烧室内煤粉燃烧的数值模拟·····	尚庆	张健	周力行(429)
054160	重型燃机 DLN 燃烧室环形区的优化研究·····			
	·····	雷俊勇	李宇红	由长福 祁海鹰(436)
054162	环形燃烧室内气相燃烧及两相流动计算·····	蔡文祥	赵坚行(442)	
054163	纵向隔热屏加力燃烧室热态流场计算·····	黄海明	赵坚行(448)	
054164	双级涡流器环形燃烧室流场数值模拟·····	李井华	赵坚行(454)	
054165	环形燃烧室油雾燃烧大涡模拟的并行计算·····	颜应文	刘勇	赵坚行(460)
054170	压力对燃气轮机燃烧室性能影响的数值模拟·····			
	·····	崔玉峰	徐纲	聂超群 黄伟光(467)
054172	P 型发动机燃烧室三维壁温计算·····			
	·····	王成军	张宝诚	左渝玉 刘凯 马洪安(475)
054174	三相交流等离子体裂解电弧炉内温度分布的数值研究·····			
	·····	张宇	魏小林	盛宏至(480)
054177	模型加力燃烧室燃烧流场的并行计算·····	邵茂敏	颜应文	刘勇 赵坚行(487)
054180	燃烧室沿程流路参数计算研究·····	张征	杨阳	樊未军 杨茂林(492)
054183	燃烧室偏置对直喷汽油机 NO _x 生成影响的数值研究·····			
	·····	刘金武	龚金科	高为国 谭理刚 钟志华(498)

四. 燃烧污染控制

054010	染料残渣焚烧过程中的氯行为·····			
	·····	谭中欣	严建华	蒋旭光 田文斌 薛浩栋 池涌(507)
054011	CNG 发动机理论空燃比与稀燃对比研究·····			
	·····	李国岫	张欣	姚宝峰 张艳(515)
054012	CNG 发动机稀燃极限的试验研究·····	李国岫	李彩芬	姚宝峰(521)
054016	燃烧过程中焦炭的孔隙结构演变与颗粒物的形成·····			
	·····	俞云	徐明厚	于敦喜 刘小伟 隋建才 曹倩(527)
054017	生物质与煤混烧时 PM ₁₀ 及 PM ₁₀ 中 Cr 和 Zn 的排放研究·····			
	·····	夏永俊	徐明厚	王泉斌 隋建才 高翔鹏(534)
054018	燃煤锅炉颗粒物形成与排放特性的实验研究·····			
	·····	隋建才	徐明厚	丘纪华 郭欣 高翔鹏 刘小伟(541)
054019	燃煤过程中元素钾、硅和铝在可吸入颗粒物中的形态与分布研究·····			
	·····	刘小伟	徐明厚	于敦喜 郝炜 隋建才 俞云(548)
054021	生物质气再燃还原 NO _x 的实验研究·····	范志林	张军	林晓芬 徐益谦(555)
054023	压汞法分析生物质焦孔隙结构·····			
	·····	林晓芬	尹艳山	李振全 张国妮 张军 徐益谦(561)

基于敏感性分析的甲烷反应机理 最优简化

乔瑜¹, 徐明厚¹, William H. Green²

(1.华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 湖北武汉 430074;

2.麻省理工学院化学工程系, 77 麻萨诸塞州 Ave.坎布里奇 MA 02139, 美国)

联系电话: 027-87545526, Email: yuqiao_hust@163.com

摘要: 已有的反应流计算方法通常采用简单的化学反应机理。由于火焰中不同区域的化学特性变化较大, 有时简单反应机理不能精确描述燃烧过程的化学特性; 而计算包含详细反应机理的复杂反应流问题仍然是十分费时的。最优简化法可根据设定的化学精度要求实现详细反应机理的最优简化。通过对包含 53 种组分、325 个可逆基元反应的甲烷燃烧 GRI-Mech 3.0 机理的简化结果与原机理计算结果的比较, 取得了良好的效果。同时, 结合敏感性分析法深入揭示了甲烷燃烧的化学过程。

关键词: 最优简化法; 机理简化; 敏感性分析; GRI-Mech 3.0

1 引言

燃烧过程是人类利用自然资源的一个重要途径。近几十年来, 实际燃烧装置内的流动、燃烧过程的数值计算取得了长足的发展。简单的化学反应机理往往不能全面、精确描述火焰的某些特征, 尤其在污染物排放的预报方面。有鉴于此, 利用详细化学反应动力学机理, 对燃烧过程进行更为全面深入的研究显得越来越重要。研究表明: 化学反应机理越复杂, 计算机求取反应化学项的时间占系统总计算时间的比例越大。受计算机储存功能和运算速度的限制, 以往的数值模拟研究都采用了简单的化学反应机理模型。随着计算机技术的进一步发展, 在简单系统数值模拟过程中采用较为复杂的详细化学反应模型已经成为可能。然而求解大型燃烧装置中包含详细反应机理的反应流动守恒方程, 仍然是十分困难和费时的。在过去的 20 年中, 人们一直在探索复杂化学反应动力学机理的简化方法, 希望通过对反应过程的简化节省计算资源和时间, 国内外学者一直在寻求针对复杂反应流动问题的精确而经济的求解方法。

保证精确描述燃烧特性的同时, 对化学反应机理的简化可以大大节省计算耗时, 因此极具价值。传统的简化方法大都基于特定反应条件(温度、压力)下, 通过判断某一物质组分或基元反应对整个系统计算结果影响的大小, 尽量删除不重要的物质组分和基元反应, 以达到简化的目的。如主量组分分析法(Principal components analysis, PCA)^[1], 这种方法通过除去次要成分和相关基元反应来达到简化机理的目的, 然而随反应条件的改变, 精度往往较差; 近年来, 又陆续出现了利用数学手段简化反应机理的方法, 如计算奇异摄动理论(computational singular perturbation, CSP)^[2-3]、低维流形技术(intrinsic low-dimensional manifolds, ILDM)^[4-5]和自适应

基金项目: 国家自然科学基金项目 (50276018, 50325621)

列表法 (in situ adaptive tabulation method, ISAT) [6] 等等, 这些方法充分利用数学手段, 使简化过程不依赖于经验知识, 具有较好的通用性, 能够精确再现详细反应机理预测的主要特性。但是, 这些理论从理论到应用上都还未成熟, 仍然存在随反应条件变化, 简化结果不稳定等诸多问题。正是在这样的背景下, 美国麻省理工学院 MIT 化工系的 Green 教授等人提出了基于自适应化学理论 (Adaptive Chemistry, AdapChem) 的反应机理最优简化法, 并在发展中逐步显示出其优越性。使用者无需对反应机理本身做深入研究, 只需提供控制化学精度的几个参数, 就能得到对应的简化结果。相关内容将在下文中详细介绍。

敏感性分析 (sensitivity analysis) [7-8] 方法能够深入直观地分析组分、基元反应、反应条件等因素对系统反应参数变化的敏感程度, 近年来应用渐广。本文结合反应机理最优简化法和敏感性分析各自的优点, 简化并深入分析了包含 53 种组分、325 个可逆基元反应的甲烷燃烧化学反应机理 [9], 取得了良好的效果。

2 反应机理的最优简化法

所谓的最优简化法是在保证简化模型具有全面化学反应模型的计算精度的前提下, 简化模型中基元反应的数目 [10-11]。根据约束条件 (G) 最小化, 即

$$\min \sum_{k=1}^{N_R} z_k \quad G[x(t, z), x_{ref}(t)] \leq 0 \quad (1)$$

其中 $z_k \in \{0, 1\}$, x_{ref} 和 x 分别是采用全面模型和简化模型计算得到的状态变量。二进制变量 z 是控制基元反应是否包含于简化模型的“开关”。当 $z_k = 1$ 时, 简化机理包含该基元反应; 当 $z_k = 0$ 时, 简化机理不包含该基元反应。通过对 z 不同的赋值, 对全面机理中的基元反应数进行控制, 以简化模型。全面模型时 $z_k = 1, \forall k = 1 \dots N_R$, N_R 为全面模型中的基元反应个数。

对绝热反应体系, 状态轨迹 $x = (T, y)$ (T 为温度, y 为物质的质量分数) 可以用下列方程体系描述:

$$\Gamma_1 = \frac{\sum_{j=1}^{N_S} h_j(T) M_j \sum_{k=1}^{N_R} v_{j,k} z_k r_k(y, T)}{\rho(y, T) C_p(y, T)}, \quad \Gamma_{j+1} = \frac{M_j \sum_{k=1}^{N_R} v_{j,k} z_k r_k(y, T)}{\rho(y, T)}, \quad j = 1 \dots N_S \quad (2)$$

采用公式 (1) 简化该体系, 约束条件 G 可以由简化模型和全面模型的化学特性表示:

$$G = \sum_{j=1}^{N_{S+1}} \alpha_j \left(\int_0^t \frac{x_j(t, z) - x_{j,ref}(t)}{x_{j,ref}(t)} dt \right)^2 - \delta_1 \leq 0 \quad (3)$$

式中: α_j ——状态变量 j 的修正系数, δ_1 ——误差等级。

为保证简化模型最优性, 引入一个线性的转化, 消去嵌入式模块 (ODE) 和公式 (1) 中非线性项, 同时用点的约束代替公式 (3) 的等周期约束。改进后得到如下方程:

$$G_{j,i} = |\Gamma_j(x_{ref}(t_i), z) - \Gamma_{ref,j}(x_{ref}(t_i))| - (atol_j + rtol_j |\Gamma_{ref,j}|) \leq 0 \quad \forall j = 1 \dots N_S + 1, i = 1 \dots N_t \quad (4)$$

N_t 是约束中点的个数。公式 (4) 的误差与 ODE 模型算法 VODE [12] 的误差相当。最理想

的积分简化模型, 约束点是根据全面模型的轨迹来选定的。全面模型的状态轨迹是预先计算出来的, 储存为文件 $(y_{ref}(t), T_{ref}(t)), t_0 \leq t \leq t_f$ 。改进后最优模型简化公式如下:

$$\min \sum_{k=1}^{N_R} z_k$$

$$\Gamma_{j,i,ref} - \Gamma_{j,i} \leq atol_j + rtol_j |\Gamma_{j,i,ref}|, \quad \Gamma_{j,i} - \Gamma_{j,i,ref} \leq atol_j + rtol_j |\Gamma_{j,i,ref}|$$

$$\forall j = 1 \dots (N_S + 1)$$
(5)

式中 $\Gamma_{j,i} = \Gamma_j(x_{ref}(t_i), z)$ 和 $\Gamma_{j,i,ref} = \Gamma_j(x_{ref}(t_i))$ 。这个线性的积分公式, 可以保证模型全局最优。这意味着在公式 (4) 的精度要求下没有反应子集比 $\sum_{k=1}^{N_R} z_k$ 更小, 简化后得到的模型即为最优的简化动力学模型。简化模型在保证准确有效的前提下得到最大的简化, 而建立模块要求却是简单的, 仅仅需要对背景很少的了解 (仅需输入 $atol_j, rtol_j$ 和 t_i)。

3 敏感性分析法

该方法研究反应机理中反应参数变化对整体计算结果的影响, 即计算结果对反应参数变化的敏感程度。通过敏感性分析, 考察哪些基元反应对计算结果影响较大, 哪些基元反应影响较小, 从而将影响较小的基元反应去除以达到简化的目的^[9]。其中, 总体敏感性分析用于机理简化, 局部敏感性分析用于研究详细机理的动力学特性。局部敏感性分析正交表达式如下:

$$\tilde{S} = \frac{k_j}{c_i} \frac{\partial c_i}{\partial k_j} = \frac{\partial \ln c_i}{\partial \ln k_j}$$
(6)

式中, $\tilde{S}$ 代表正交敏感性系数; k_j 代表详细机理中第 j 个基元反应的参数, 如反应速率常数; c_i 代表详细机理中第 i 种物质的浓度。上式的 $\tilde{S}$ 表达了某一物质的浓度对某个基元反应速率常数的敏感性。若考虑某种物质的生成速率对基元反应速率常数的敏感性, 则上式可以写为:

$$\tilde{F} = \frac{k_j}{f_i} \frac{\partial f_i}{\partial k_j} = \frac{\partial \ln f_i}{\partial \ln k_j}$$
(7)

式中: $\tilde{F}$ 代表正交速率敏感性系数; f_i 代表第 i 种物质的生成速率。有时, 人们同时对几种物质的浓度或生成速率感兴趣, 而这几种物质彼此又有联系, 用局部敏感性分析的方法不能正确反映这一情况, 因此可以用总体敏感性分析 (Overall sensitivity analysis) 的办法进行处理:

$$B_j^c = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \ln c_i}{\partial \ln k_j} \right)^2, \quad B_j^f = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \ln f_i}{\partial \ln k_j} \right)^2$$
(8)

式中: B_j^c 和 B_j^f 分别代表第 j 个反应对 N 种物质浓度和生成速率的总体正交敏感性系数, 其中 N 代表所感兴趣的物质总数。

敏感性分析直接用于反应机理的简化存在以下缺点: “机理简化只能在某一计算点 (时间点或空间点) 上孤立进行, 用这种方法得到的简化机理只是详细机理的一个子集, 无法得到最大形式的简化, 且在复杂燃烧问题中的应用有一定的限制”^[13], 但前面提到的优点又同样显著, 对我们深入、直观地认识化学反应机理是十分有益的。本文采用最

优简化法简化反应机理，敏感性分析则用于研究反应机理的途径。

4 应用

甲烷燃烧的初始条件如表1所示，涉及化学反应的计算采用应用较广的GRI-Mech 3.0甲烷燃烧机理^[7-9]，热力学数据取自通用的CHEMKIN4.0^[14]。当量比 ϕ 定义为实际提供的氧气量与甲烷完全燃烧所需的氧气量的比值。

表 1 甲烷燃烧的初始条件

	当量比 ϕ	CH ₄ /mol	O ₂ /mol	N ₂ /mol	温度/K	压力/atm
算例 1	0.25	0.42	0.21	0.78	1500	1.0
算例 2	0.5	0.21	0.21	0.78		
算例 3	1.0	0.105	0.21	0.78		
算例 4	2.0	0.0525	0.21	0.78		

4.1 最优简化法

算例 2 ($\phi=0.5$) 的计算结果如图 1、图 2 所示。图 1 为不同约束条件下，最优简化法的反应机理简化的效果。图中，横坐标为反应时间 t ，纵坐标为未简化机理与简化机理包含基元反应个数的比值。比值越大，说明简化机理中包含的反应个数越少。对于标准的约束条件： $\varepsilon=0.0001, rtol_j=0.005$ ，不同时刻下简化模型中反应的个数比原机理中的减少了 2-6 倍；点燃区 (1.0×10^{-3} s 附近) 的简化机理最复杂，包含的基元反应最多 (135 个)；燃尽区的简化机理最简单，包含的基元反应最少 (51 个)。从图中可以看出：约束条件的选择对简化结果的影响较大。较宽松的精度要求得到的简化机理较为简单，但相对降低了简化机理的化学精度。为了验证简化机理的精度，分别采用未简化机理和简化机理对算例 2 进行数值模拟。在标准约束条件 $\varepsilon=0.0001, rtol_j=0.005$ 下，两者的计算结果基本一致，表明简化结果十分合理。图 2 所示为温度、OH 浓度的结果比较。

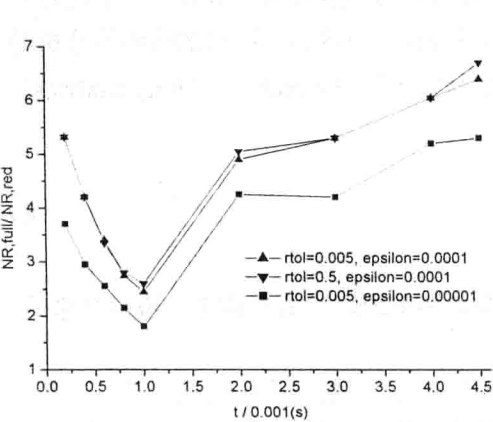


图 1 不同约束条件下反应机理的简化效果

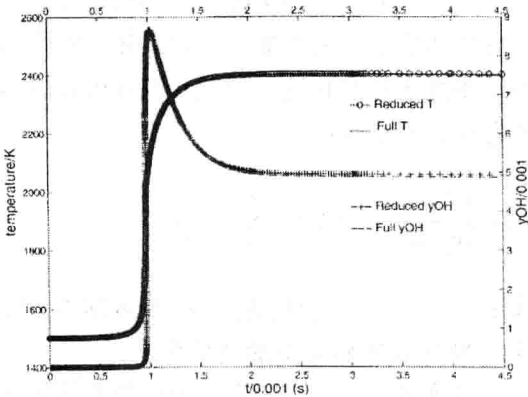


图 2 采用未简化机理和简化机理
计算温度、OH 浓度的结果

4.2 敏感性分析

表 1 中不同算例的主量成分 (CH_4 、 H_2O 、 O_2) 敏感性分析如下图 3-12 所示。图中横坐标对应反应时间 (单位 s)，纵坐标对应无量纲的敏感性分析数值。当 $\phi = 0.25$ 时，属富甲烷燃烧，反应过程中 O_2 不足。主量成分 CH_4 、 H_2O 、 O_2 对基元反应的敏感性分析结果一致，如图 3 所示。反应 107 ($\text{OH} + \text{C}_2\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{H} + \text{CH}_2\text{CO}$) 决定了系统的反应速率。此时，系统中的重要反应基本为炭氢反应。当 $\phi = 0.5$ 时，仍属富甲烷燃烧， CH_4 、 H_2O 、 O_2 对基元反应的敏感性分析结果分别如图 4-6 所示。反应 224 ($\text{NCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H} + \text{CO}$) 基本决定了系统的反应速率。此时，系统中的重要反应既有炭氢反应，也有涉及氮的氧化反应。图中某些反应的敏感性参数为负数，如图 5 中所示，这表明该反应消耗了 OH ，从而使 H_2O 的生成速度降低。即：该反应对 H_2O 的生成起抑制作用。

当 $\phi = 1.0$ 时，反应过程中 O_2 理论上正好满足甲烷的充分燃烧。 CH_4 、 H_2O 、 O_2 对基元反应的敏感性分析结果分别如图 7-9 所示。反应 224 ($\text{NCO} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NO} + \text{H} + \text{CO}$) 和 218 ($\text{CN} + \text{OH} \rightleftharpoons \text{NCO} + \text{H}$) 决定了系统的反应速率；反应 100 ($\text{OH} + \text{HCO} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{CO}$) 为生成 H_2O 的主要反应；氮氧化的主要通道是通过 $\text{CN} \rightarrow \text{NCO} \rightarrow \text{NO}$ 实现的。

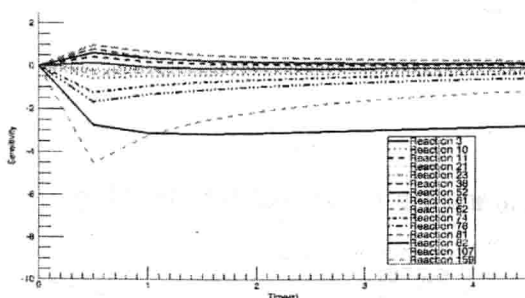


图 3 算例 1 中 CH_4 、 O_2 、 H_2O 对基元反应的敏感性

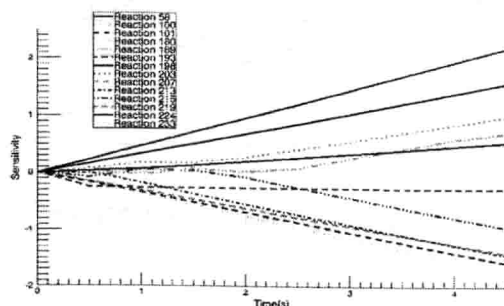


图 4 算例 2 中 CH_4 对基元反应的敏感性分析

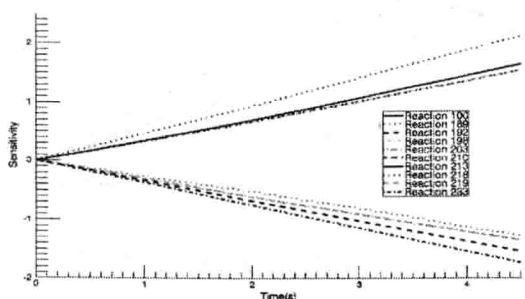


图 5 算例 2 中 H_2O 对基元反应的敏感性分析

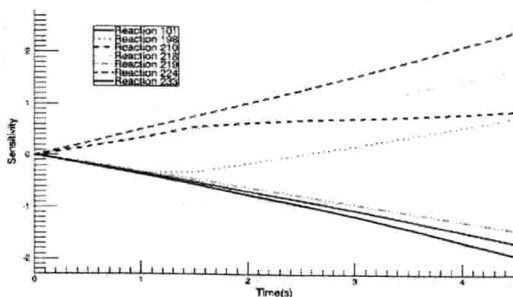


图 6 算例 2 中 O_2 对基元反应的敏感性分析

当 $\phi = 2.0$ 时，属富氧燃烧。反应 100 ($\text{OH} + \text{HCO} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{CO}$) 既决定了系统的反应速率，又为生成 H_2O 和 HCO 转化为 CO 的主要反应通道。在此条件下， $\text{HNCO} \rightarrow \text{NCO} \rightarrow \text{NH} \rightarrow \text{HNO}$ 为氮氧化的另一重要的反应通道。

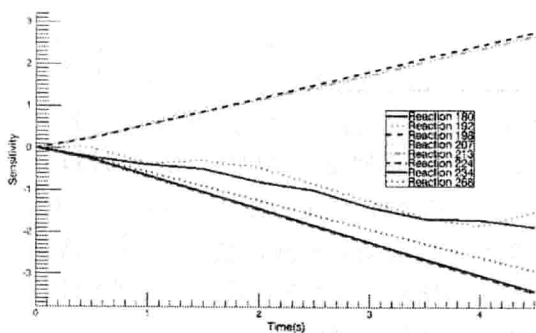


图 7 算例 3 中 CH_4 对基元反应的敏感性分析

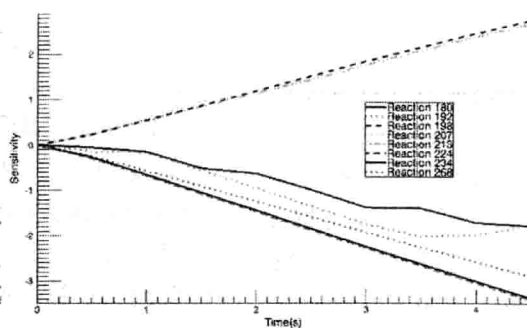


图 8 算例 3 中 H_2O 对基元反应的敏感性分析

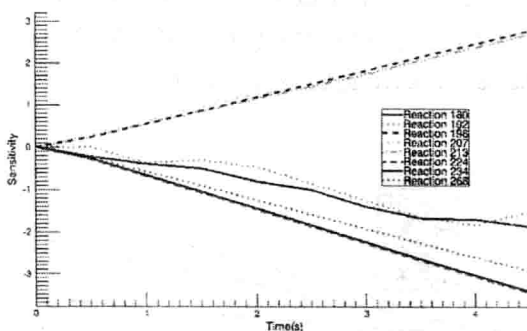


图 9 算例 3 中 O_2 对基元反应的敏感性分析

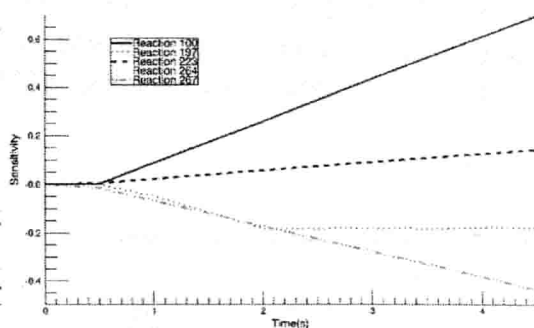


图 10 算例 4 中 CH_4 对基元反应的敏感性分析

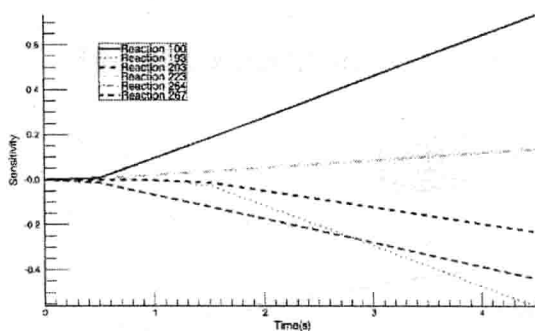


图 11 算例 4 中 H_2O 对基元反应的敏感性分析

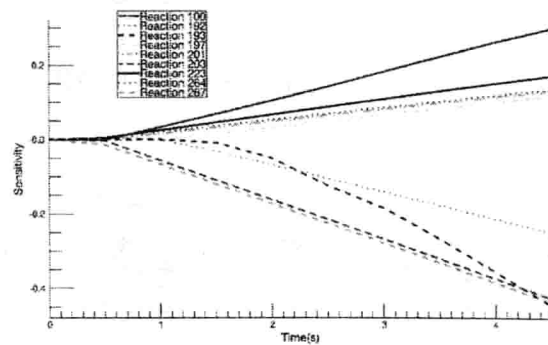


图 12 算例 4 中 O_2 对基元反应的敏感性分析

综合以上的敏感性分析结果，我们分析得到了适用不同反应条件下，甲烷和氮氧化的主要反应途径，如图 13-14 所示。当氧气充足时，反应 100($\text{OH} + \text{HCO} \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O} + \text{CO}$)为 HCO 转化为 CO 同时生成 H_2O 的主要途径；氧气不足时，甲烷氧化的途径相对复杂。氮的氧化途径如图 14 所示， $\text{CN} \rightarrow \text{NCO} \rightarrow \text{NO}$ 和 $\text{HNCO} \rightarrow \text{NCO} \rightarrow \text{NH} \rightarrow \text{HNO}$ 分别为两条重要的反应通道。

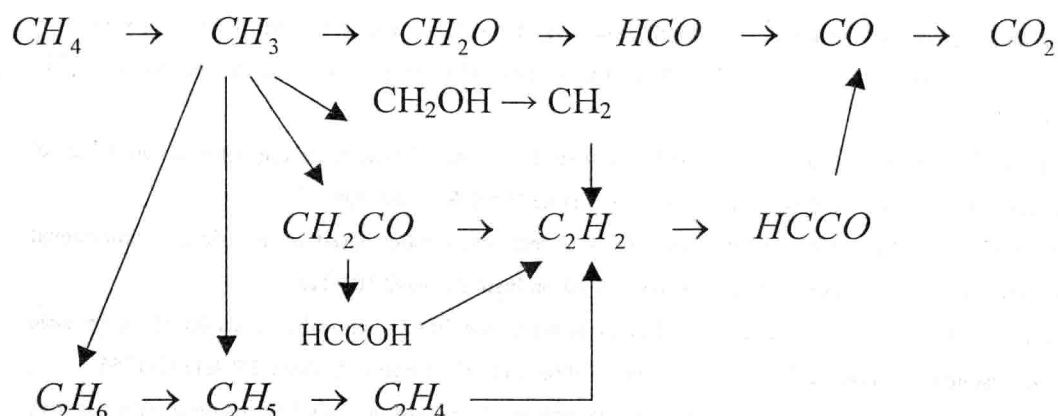


图 13 甲烷氧化的主要反应途径

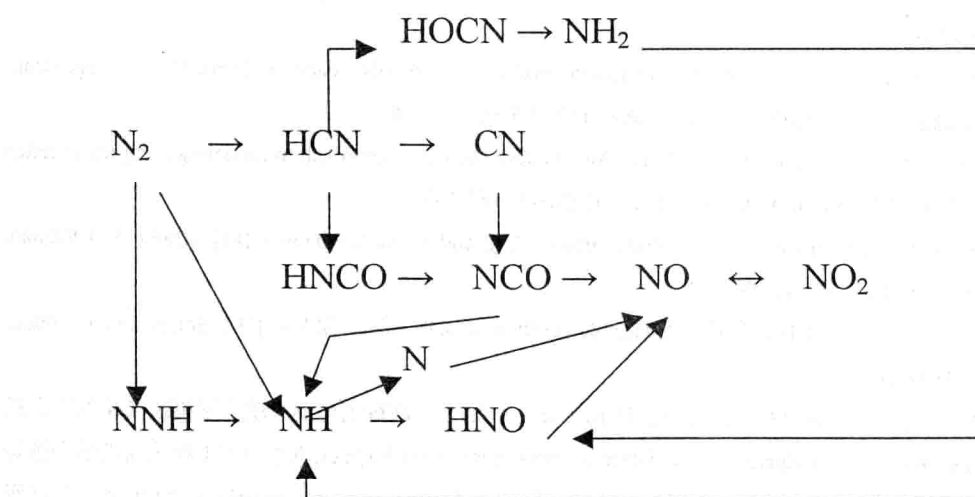


图 14 氮氧化的主要反应途径

5 结论

通过与敏感性分析的结果比较，最优简化法是一种精确而又简单的机理简化方法，它为化学知识背景较弱的使用者带来了方便；两种方法结合起来，在实现反应机理简化的同时，可以深入研究反应发生的途径。针对包含 53 种组分、325 个可逆反应的 GRI-Mech3.0 甲烷燃烧机理的简化，取得了良好的效果。

参考文献

- [1] Turányi T, Reaction rate analysis of complex kinetic systems. [J] Int. J. Chem. Kinet, 1989, 21:83-99
- [2] Lam S. H., Goussis D. A., The CSP method for simplifying kinetics. [J]. Inter. J. Chem. Kinet., 26 (1994) : 461-468
- [3] Massias A., Diamantis D., Mastorakos E., Goussis D. A., An algorithm for the construction of global reduced mechanisms with CSP data. [J]. Combust. Flame, 117(1999): 685-708
- [4] Mass U., Pope S.B., Implementation of simplified chemical kinetics based in intrinsic low-dimensional manifolds. 24th Symp (Int.) on Combust., The Combustion Institute, 1992:103-112
- [5] Mass U, Pope SB. Laminar flame calculations using simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds. 25th Symp. (Int.) on Combust., The Combustion Institute, 1994:1349-1356
- [6] Pope S. B., Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. [J]. Combust. Theory and Modeling, 1(1997): 41-63.
- [7] Turányi T, Applications of sensitivity analysis to combustion chemistry, [J]. Reliability Engineering and System Safety, 57 (1997): 41-48.
- [8] Turányi T, Sensitivity analysis of complex kinetic systems: tools and applications, [J]. J. Math. Chem, 5 (1990): 203-248.
- [9] Bhattacharjee B., Schwer D. A., Optimally-reduced kinetic models: reaction elimination in large-scale kinetic mechanisms, [J]. Combustion and Flame, 135 (2003): 191-208
- [10] Schwer D. A., Lu P. S., and Green W. H., An adaptive chemistry approach to modeling complex kinetics in reacting flows. [J]. Combustion and Flame. 133 (2003):451-465.
- [11] Green W. H. and Schwer D. A., Computational Fluid and Solid Mechanics, [M]. (Bathe K J Editor). Elsevier Science Ltd., 2001:1209-1212.
- [12] Brown P. N., Byrne G. D., VODE: A variable coefficient ODE solver, SIAM. [J]. J. Sci. Statist. Comput., 10 (1989) : 1038-1051
- [13] 陈义良, 董刚, 李艺 (Chen Yiliang, Dong Gang, Li Yi), 燃料氧化反应动力学机理简化的研究进展 (Research progress on reduction of oxidation kinetics mechanism for fuel) [C]. 中国工程热物理学会燃烧学学术会议论文集 (Chinese Engineering Thermophysics Academy on Combustion) 2000: 47-52, 武汉 (Wuhan)
- [14] R. J. Kee, F. M. Rupley and M. E. Coltrin, et al. Chemkin collection, Release 4.0. [M] Reaction Design, Inc., San Diego, 2004

基于多种控制机理的湍流爆炸 燃烧模型研究*

杜扬¹ 蒋新生¹ 高建丰¹ 沈光新² 扬双¹

1、解放军后勤工程学院 重庆 400016, 2、解放军 92740 部队

杜扬 023-68756474, duyang58@163.com 蒋新生, 023-68575574, jxs_dy@163.com

摘要: 本文针对狭长受限空间油气爆炸燃烧发生、发展过程特点, 建立不同控制机理制约不同反应步的分步反应湍流燃烧模型。该燃烧模型的基本思想在于将化学反应分为两步进行, 各步的控制机理不同, 各步释放的能量也不同。采用分解、混合、反应的分步方式来模拟油气爆炸燃烧过程, 通过实验和数值计算结果表明, 该模型能较好解决湍流爆炸燃烧过程的数值模拟问题, 其结果与实验吻合很好。
关键词: 油气; 燃烧; 爆炸; 湍流;

Turbulence Explosion Combustion Model Study Based Multi Control Mechanisms

Du Yang¹, Jiang Xinsheng¹, Gao jianfeng¹, Shen Guangxin², Yang shuang¹

1. Logistic Engineering University of PLA, Zhongqing 400016, 2. 92740 Troop of PLA

Du Yang 023-68756474 duyang58@163.com, Jiang Xinsheng 023-68575574 jxs_dy@163.com

Abstract: In this paper, the turbulence explosion combustion model based multi control mechanisms for the fuel-air mixture explosion in the narrow-long confined spaces is established. The chemical reaction of explosion combustion process is divided into two steps, the first is the activation reaction with the characteristic of the gestation; the second is the reaction of turning active intermediate product into the final product. They are controlled respectively by the different mechanisms. The model is efficient for the fuel-air mixture explosion in the narrow-long confined spaces, which is demonstrated by the numerical simulation and experiment data.

Key words: explosion, turbulence, combustion, numerical simulation

1、前言

燃烧的模拟模型研究是世界公认的难题, 湍流燃烧模拟模型的研究更是难中之难。目前所用的湍流燃烧模型大致可以总结为 6 大类, 分别为^[1]: 基于湍流流场高级模拟的燃烧直接模拟 (DNS) 模型; 湍流燃烧大涡模拟模型 (LES); 基于概率的 PDF 模型; 条件矩封闭模型; 基于流场时均参数的 Arrhenius 燃烧模型; 工程计算中常用的湍流燃烧模型, 该类模型主要包括涡破碎模型 (EBU), 拉切滑模型, ESCIMO 模型, 卷吸混合反应

* 国家自然科学基金资助项目, 项目批准号: 50276069。

重庆市自然科学基金项目, 合同编号: 8507。

杜扬, 1958- , 男, 教授。研究方向: 油气储运工程安全科学与技术。

模型等等,最具有代表性的是 EBU 模型,该模型为修正计算中对湍流脉动作用的夸大,引入流场时均值的 Arrhenius 燃烧反应速率,并取脉动反应速率和时均值的 Arrhenius 反应速率的较小值为最终反应速率^[2]。

油气爆炸燃烧过程有其特殊性,但仍是一种湍流燃烧过程。目前湍流爆炸燃烧模拟中大都采用的是基于 $k-\varepsilon$ 湍流方程的一般 EBU-Arrhenius 燃烧模型,并以传统的 SIMPLE 算法求解控制方程组。尽管该模型与 Arrhenius 燃烧模型相比考虑了湍流对燃烧的影响,然而燃烧反应模型还不够细致,最主要的缺陷是对化学反应本身的分子反应动力学考虑不足,在反应触发区域甚至忽略了反应动力学的影响,进而对化学动力学控制机理得不到正确的反映。这显然会给爆炸发展过程的计算带来较大的误差。大多数的研究说明了尽管计算结果与实验结果是定性或定量一致的,但相比之下仍有相当的差别。

在已有的研究中表明^[3-4],在狭长受限空间中,油气爆炸由弱到强的发展过程明显,火焰速度在不断变化,而且相对一般湍流燃烧而言较大,爆炸发展过程中燃烧的时均速率与油气物化性质以及在狭长受限空间中的流动状态都有直接的关系,忽略任何一个方面,燃烧理论模型都不全面。以上各种湍流燃烧模型各有优点,但仍然不能同时满足合理性以及精度、可操作性的要求,对爆炸过程中的燃烧而言更没有一种能同时描述各种因素影响机理的湍流燃烧模型。本文建立的燃烧模型采用分解、混合、反应的分步反应方式,使理论燃烧模型更接近实际的油气爆炸湍流燃烧过程。由于整体化学反应的时均速率由化学动力学和流场结构耦合控制,该模型能模拟不同控制机理对燃烧的影响,进而能充分描述爆炸发展过程中火焰和压力波之间的相互作用;同时化学反应的能量分步加入流场,一定程度上缓解了控制方程求解时的“刚性”,利于数值求解。

2、多种机理控制的湍流爆炸燃烧模型

2.1 基本假设

根据油气爆炸湍流燃烧的特点,本文提出如下假设:

(1) 爆炸燃烧过程分步进行。可燃混合气体首先进行的是带有“孕育特征的活化反应”,然后是活性中间产物生成最终产物的反应。

(2) 活化反应释放能量较少,其瞬时反应速率相对较小,并取决于流场的组分、温度和可燃混合气体的化学性质。对爆炸这种预混燃烧,该步反应的时均速率主要由化学动力学控制,对湍流及涡结构的变化并不敏感。

(3) 活性中间产物生成最终产物的反应瞬时化学动力学反应速度无限大,该步的时均化学反应速率由湍流流场结构控制。

(4) 对于化学反应本身来讲,经典的 Arrhenius 公式仍是较能反映化学动力学对燃烧速率控制的理论,尽管湍流燃烧中时均化的 Arrhenius 公式远不能反映燃烧控制机理的全部,但对于化学动力学主控的燃烧反应,以湍流模型时均参数计算的 Arrhenius 化学反应速率仍是良好的近似。

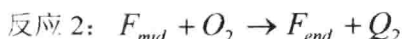
(5) 湍流对爆炸燃烧的影响可分为:1) 湍流强化了组分的输运,尤其加快了活性组分的输运,促进了化学反应的进行;2) 湍流强化了未燃气与已燃气的热传递,加速反应的进行;3) 火焰面因大扰动引起变形;4) 湍流脉动使火焰面发生脉动,进一步增大燃烧面积,同时湍流旋涡的破碎加大了燃烧反应速率。此处 1)、2) 和 3) 对化学反应的影响往往可以通过计算湍流强化热传递和组分输运的时均效果加以仿真;对于 4) 中的机理可以用湍流流场的湍流强度来衡量,认为脉动的程度可以用类似于 EBU 模型中

的湍流动能和湍流动能耗散率决定的涡破碎率 ($\frac{k}{\varepsilon}$) 为特征量来定量计算。

2.2 油气爆炸燃烧的分步反应模型

狭长受限空间油气爆炸过程中, 油气混合物具有组分复杂、能量特性高的特点, 化学反应本身的特性在爆炸的模拟中必须考虑; 受限空间边界复杂、湍流作用明显, 湍流对反应速率的影响也必须考虑。已有的燃烧模型中, 往往都只是强调某一种机理而忽略了另一种机理。因此, 结合狭长受限空间的油气爆炸特点建立不同控制机理制约不同反应步的分步反应湍流燃烧模型。该燃烧模型的基本思想在于将化学反应分为两步进行, 各步的控制机理不同, 各步释放的能量也不同。

与实验相对应, 油料蒸气的能量特性按 90#汽油蒸气设置^[5]。其他次要物性(粘度、扩散特性)以庚烷(C_7H_{16})的物性代替; 参考烃类燃烧模型的研究^[6]将组分化学反应过程、能量释放过程分为以下步骤:



其中: 反应 1 释放的能量较少; 反应 2 所释放的能量较大。为便于数值计算中的处理, 以气体组分的质量分数 Y 计量各物质的浓度, 上面各反应方程的层流反应速率服从流场平均参数的 Arrhenius 定律:

$$\omega_{1,A} = A_1 \rho^2 Y_1^{\alpha_1} Y_2^{\beta_1} \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right)$$

$$\omega_{2,A} = A_2 \rho^2 Y_2^{\alpha_2} Y_3^{\beta_2} \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right)$$

但在湍流燃烧中, 反应 1 和反应 2 将受不同机理控制。

2.3 不同控制机理在湍流燃烧中的作用形式

反应 1 和反应 2 在流场处于层流状态时具有相同的控制机理和计算反应速率的形式, 总体的时均反应速率由 $\omega_{1,A}$ 和 $\omega_{2,A}$ 共同决定。但在流场处于湍流状态时, 反应 1 和反应 2 将由不同的控制机理决定; 同时, 整体的时均反应速率通过两步反应的组分条件和能量条件耦合决定。

油气湍流爆炸燃烧过程中, 反应 1 的时均速率主要由分子反应动力学控制, 具体到流场参数则要由流场的时均温度和燃料以及氧化剂浓度控制, 而且释放的能量较小, 但生成化学活性较大的不稳定中间产物。如果流场温度不是足够高, 则该步反应不会触发。反应 2 的反应物质为具有较大化学活性的物质, 按 EBU 模型的思想, 时均反应速率主要由涡破碎率, 也就是湍流流场的湍流强度控制。该步反应释放的能量高, 可以使流场的温度有较大的升高, 但如果无反应 1 提供的活性物质, 反应也不会自持进行。反应 1 和反应 2 将通过如图 1 所示的机制相互耦合, 进而动态地决定整个燃烧反应的时均反应速率, 而不是 EBU-Arrhenius 燃烧模型那样作简单的对比。该湍流爆炸燃烧模型计算的

燃烧平均反应速率不单纯由反应 1 或反应 2 某一步化学反应决定。由于两步化学反应通过组分条件和温度条件相互制约，整体的时均反应速率必然是两步反应共同决定，这也就保证了湍流爆炸燃烧反应是由分子反应动力学和流场的流动状况共同控制。因此，多控制机理的分步反应湍流爆炸燃烧模型能全面体现爆炸燃烧过程的控制机理，进而正确地描述火焰和压力波之间的耦合机制。

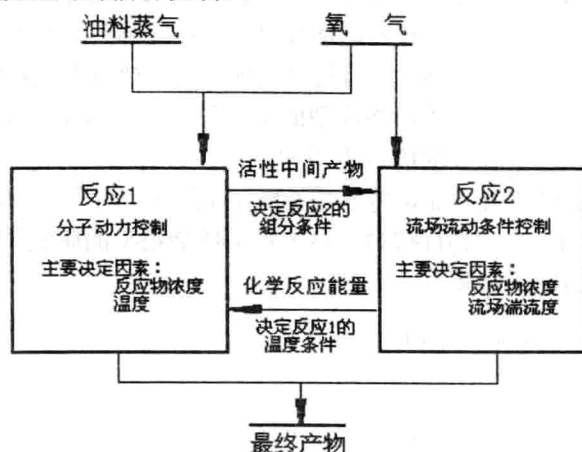


图 1 多机理控制反应湍流燃烧模型

两步反应模型在计算湍流燃烧时，反应 1 用下式计算平均反应速率：

$$\omega_{1t} \approx \omega_{1A} = A_1 \rho^2 Y_1^{\alpha_1} Y_2^{\beta_1} \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right)$$

参考 EBU 模型中的理论，反应 2 的湍流时均反应速率可以写为：

$$\omega_{2t} = C_{EBU} \rho \frac{\varepsilon}{k} g^{1/2}$$

式中： $g \sim \min(\overline{Y_1}, \overline{Y_2})$

由此，湍流燃烧过程中，总的燃烧反应时均反应速率可由以下两式计算。

$$\omega_1 \approx \omega_{1A} \approx A_1 \rho^2 \overline{Y_1^{\alpha_1}} \overline{Y_2^{\beta_1}} \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right)$$

$$\omega_2 \approx \omega_{2t} = C \rho \frac{k}{\varepsilon} g^{1/2} = C \rho \frac{k}{\varepsilon} \min(\overline{Y_2}, \overline{Y_3})$$

3 模型验证

对于狭长受限空间油气爆炸过程中复杂的燃烧化学反应过程采用本文建立的多种反应机理控制的分步反应模型来进行描述，在数值模拟计算方法上采用基于总能方程的 RNG 湍流模型模拟爆炸燃烧过程中的湍流流动；针对湍流爆炸燃烧过程中存在复杂压力波并且容易形成冲击波的事实，在数值计算中主要采用对激波有较好捕捉能力的 TVD 有限体积法求解控制方程。主要的控制方程如（1）式，分别为连续方程、动量方程、能量方程、组分输运方程、k 方程、ε 方程。并采用有限体积法求解该爆炸流场控制方程