

文章编号:1000-8055(2011)07-1471-09

采用详细化学反应机理的火焰面模型 模拟煤油两相燃烧流场

王慧汝, 金 捷, 柳 杨

(北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191)

摘 要: 基于可实现的 $k-\epsilon$ 湍流模型、颗粒随机轨道模型、火焰面模型和航空煤油详细化学反应机理对模型燃烧室内两相燃烧流场进行了数值模拟。其中详细反应机理由替代燃油(80%质量分数的正癸烷, 20%质量分数的 1, 2, 4-三甲基苯)的反应机理和 NO_x 的反应机理组合而成。通过与实验数据的比较, 考察采用该详细化学反应机理的火焰面模型模拟 RP-3 航空煤油燃烧流场的准确性, 特别是污染物排放计算的精度。结果表明: 稳态火焰面模型模拟的温度场和 CO_2 生成量与实验数据吻合较好, 而预测的 NO 排放量与实验值偏差较大; 非稳态火焰面模型显著提高了 NO 的预测精度, 在工况 1 (来流马赫数为 0.16, 进口温度为 537 K, 油气比为 0.0048, 常压) 条件下与实验数据吻合较好, 但在工况 2 (来流马赫数为 0.155, 进口温度为 523 K, 油气比为 0.010, 常压) 条件下仍过高估计了 NO 的排放量。

关 键 词: 航空煤油; 替代燃油; 详细化学反应机理; 火焰面模型; NO 排放

中图分类号: V231

文献标志码: A

Flamelet modeling of two-phase kerosene combustion flow fields using a detailed chemical reaction mechanism

WANG Hui-ru, JIN Jie, LIU Yang

(School of Jet Propulsion,

Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China)

Abstract: Two-phase combustion flow fields in a model combustor were numerically simulated using realizable $k-\epsilon$ turbulent model, particles stochastic trajectory model, flamelet models and the detailed chemical reaction mechanism of aviation kerosene. The detailed reaction mechanism was assembled using the combustion mechanism of surrogate fuel (80% decane and 20% 1, 2, 4-trimethylbenzene by mass fraction) and NO_x formation mechanism. The accuracy of flamelet modeling of RP-3 kerosene combustion flow fields (especially for NO emissions) employing the detailed reaction mechanism was investigated by comparison with the experimental data. The result shows that the temperature and CO_2 concentrations predicted using the steady flamelet model are in good agreement with the experimental data, but the NO emissions have a bigger deviation. The use of unsteady flamelet model significantly improves the prediction accuracy of NO concentrations and shows good agreement with the experimental data in condition 1 (inlet Mach number 0.16, inlet temperature 537 K, fuel-air ratio 0.0048, atmospheric pressure), but NO emissions are overpredicted in condition 2 (inlet Mach number 0.155, inlet temperature 523 K, fuel-air ratio 0.010, atmospheric pressure).

收稿日期:2010-07-03; 修订日期:2010-09-08

作者简介:王慧汝(1984—),男,山西长治人,博士生,主要从事航空发动机燃烧数值模拟方面研究。

Key words: aviation kerosene; surrogate fuel; detailed chemical reaction mechanism; flamelet model; NO emissions

低污染排放是下一代先进燃烧室的发展方向之一. 数值计算方法在辅助燃烧室设计时不仅能够准确地计算燃烧室内的两相湍流燃烧流场, 更要能准确地预测污染物的排放, 从而改进和优化燃烧室的相关设计, 最终降低污染物的排放.

而准确地模拟污染物的排放需要借助详细的化学反应机理(以下也简称反应机理). 由于航空煤油组成成分多, 直接获得其详细反应机理还有一定的困难, 因此研究者采用一种或者几种替代燃油来模拟航空煤油的燃烧特性, 发展了众多航空煤油替代燃油的详细反应机理. 这其中比较典型的有 Dagaut 的三组分反应机理^[1]和 Honnet 等人提出的两组分反应机理^[2]等. 考虑到 Honnet 等人的反应机理经过了多个实验数据的验证, 而且与 Hewson 和 Bollig 公布的较为详细的 NO_x 反应机理^[3]采用相同的中间组分及热力学数据库, 因此将两者的反应机理综合起来, 作为本文的航空煤油详细反应机理.

目前可以耦合详细化学反应机理的燃烧模型有概率密度函数输运方程^[4](PDF-transport equation)、条件矩封闭模型^[5](conditional moment closure model)和火焰面模型^[6](flamelet model)等. 其中火焰面模型的计算量是三者当中最小的, 且模型发展比较完善, 分为稳态火焰面模型和非稳态火焰面模型^[7], 在气体扩散燃烧^[8-14]、柴油机燃烧^[15]、燃气轮机预混燃烧中^[16]获得了广泛应用.

因此, 基于本文的航空煤油详细化学反应机理, 分别选用稳态和非稳态火焰面模型对模型燃烧室内两相湍流燃烧流场进行数值模拟. 通过与实验数据的比较, 考察采用本文航空煤油详细反应机理的火焰面模型模拟 RP-3 航空煤油燃烧流场的准确性, 重点是污染物排放计算的精度, 以期为进一步准确地模拟航空发动机燃烧室污染物的排放提供一定的参考.

1 研究对象

数值模拟的研究对象为带 V 型槽火焰稳定器的模型燃烧室, 具体的尺寸结构如图 1 所示. 燃烧室横截面为 170 mm(宽)×150 mm(高)的矩形, 在带 V 型槽火焰稳定器后方, 燃烧室的一个侧壁上开有一个石英玻璃的观察窗, 可以观察燃

烧时的火焰结构. 带 V 型槽火焰稳定器和喷油杆的展向长度均为 165 mm. 在喷油杆的中心位置(沿展向方向)以及距离中心点 55 mm 的两侧上, 共有三个直径为 0.6 mm 逆气流方向的喷射点. 采用耐高温环境的铂铑 30-铂铑 6 热电偶测量燃烧室对称截面上相应位置的温度分布, 采用 Testo 360 烟气分析仪测量燃烧室对称截面上出口位置的组分体积分数, 其中采样管的材料为可耐 1800 °C 的高温陶瓷. 温度靶和取样管在气流来流方向上相差 330 mm, 整个模型燃烧室计算网格采用非结构化网格, 单元网格总数为 150 万左右.

数值模拟中实际燃烧工况的参数选择如下: 工况 1, 来流马赫数为 0.16, 进口温度为 537 K, 油气比为 0.0048; 工况 2, 来流马赫数为 0.155, 进口温度为 523 K, 油气比为 0.010.

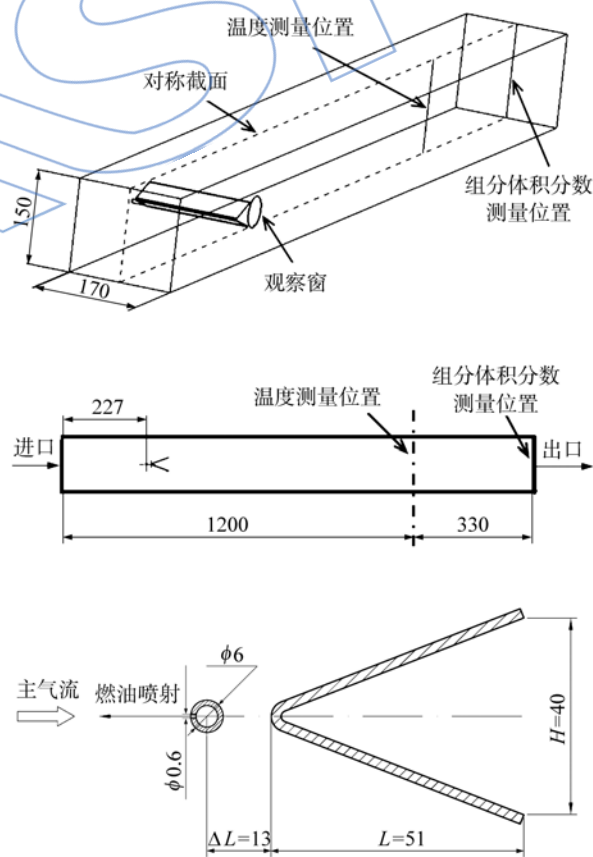


图1 带 V 型槽火焰稳定器的模型燃烧室示意图(单位:mm)

Fig. 1 Schematics of the model combustor with V-gutter flame stabilizer (unit:mm)

2 数学物理模型

数值计算采用 FLUENT 6.3 商用软件. 湍流模型选用能够较好模拟较大曲率和旋涡流动, 且比 RNG(renormalization group)模型更容易收敛的 realizable $k-\epsilon$ 双方程模型^[17], 近壁面区采用标准壁面函数处理. 离散相模型采用颗粒随机轨道模型, 在全流场中用拉格朗日方法跟踪离散液滴的运动和输运, 液滴的分布采用 Rosin-Rammler 分布^[18]. 燃烧模型分别采用稳态火焰面模型^[6]和非稳态火焰面模型^[10]. 计算过程中没有考虑辐射和燃油的二次雾化过程.

2.1 稳态火焰面模型

湍流扩散火焰可看作由一系列具有不同结构的层流火焰面组成, 将层流扩散火焰的组分和能量方程, 通过坐标变换, 得到混合分数空间下的火焰面方程^[6]

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\rho \chi}{2Le_i} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_i \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\rho \chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{c_p} \sum_{i=1}^N h_i \dot{\omega}_i + \frac{Q_r}{c_p} \quad (2)$$

其中 ρ 为密度, T 为温度, t 为时间, c_p 为气体的比定压热容, Y_i 表示第 i 个组分的质量分数, $\dot{\omega}_i$ 表示第 i 个组分的化学反应速率, h_i 表示第 i 个组分的焓值, Q_r 为辐射热损失, Le_i 表示第 i 个组分的路易斯数, χ 为标量耗散率, 单位为 s^{-1} , 定义为 $\chi = 2D_Z(\nabla Z \cdot \nabla Z)$, Z 为混合分数, 按元素定义为

$$Z = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,fuel} - Z_{i,ox}} \quad (3)$$

其中 Z_i 表示元素 i 的质量分数, $Z_{i,ox}$ 表示氧化剂流中元素 i 的质量分数, $Z_{i,fuel}$ 表示燃料流中元素 i 的质量分数.

将标量耗散率作为一个独立的参数引入火焰面方程中, 求解火焰面方程, 其中所有的标量都可以表示为 $\phi = \phi(Z, \chi)$ 的形式. 将标量 ϕ 与标量耗散率和混合分数的变化关系存入数据文件, 生成所谓的火焰面数据库.

湍流流场中的平均标量耗散率, 遵循 Jones 和 Whitelaw^[19]于 1982 年给出的模型

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Z}^{\prime 2} \quad (4)$$

其中 $C_\chi = 2.0$, $\tilde{\epsilon}$ 为湍动能耗散率, $\tilde{k}$ 为湍动能.

混合分数 Z 的 Favre 平均值 $\tilde{Z}$ 和脉动均方值 $\tilde{Z}^{\prime 2}$ 通过求解输运方程(5)和(6)来获得

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{Z}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu_t}{Sc_Z} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right] \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{Z}^{\prime 2}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}^{\prime 2}) = & -2\bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \tilde{Z}^{\prime 2} + \\ & \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu_t}{Sc_{\tilde{Z}^{\prime 2}}} \frac{\partial \tilde{Z}^{\prime 2}}{\partial x_j} \right] + 2 \frac{\mu_t}{Sc_{\tilde{Z}^{\prime 2}}} \left[\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right]^2 \end{aligned} \quad (6)$$

其中 x_j 为沿着 j 方向的坐标, $\tilde{u}_j$ 为 j 方向的速度分量, μ_t 为湍流黏度, $Sc_{\tilde{Z}}$ 和 $Sc_{\tilde{Z}^{\prime 2}}$ 为 $\tilde{Z}$ 和 $\tilde{Z}^{\prime 2}$ 的施密特数, $Sc_{\tilde{Z}} = 0.85$, $Sc_{\tilde{Z}^{\prime 2}} = 0.8$.

根据湍流流场中计算得到的混合分数 Z 的 Favre 平均值及其相应的平均标量耗散率, 在火焰面数据库中进行插值, 找出与其对应的组分质量分数和温度值, 通过统计平均的方法来计算湍流燃烧得到的组分平均质量分数和温度值

$$Y_i = \int_0^1 \int_0^1 Y_i(Z, \chi; \mathbf{x}, t) \tilde{P}(Z, \chi; \mathbf{x}, t) dZ d\chi \quad (7)$$

$$T = \int_0^1 \int_0^1 T(Z, \chi; \mathbf{x}, t) \tilde{P}(Z, \chi; \mathbf{x}, t) dZ d\chi \quad (8)$$

其中联合 PDF(概率密度函数) $\tilde{P}(Z, \chi; \mathbf{x}, t)$ 是空间和时间的函数, 为了简化计算, 假设 Z 和 χ 两者在统计上是互相独立的. 于是联合 PDF 可简化为

$$\tilde{P}(Z, \chi) = \tilde{P}(Z) \cdot \tilde{P}(\chi) \quad (9)$$

一般假设 $\tilde{P}(Z)$ 的分布形式为 β 函数. 由于标量耗散率的脉动相对较小, 工程计算中 $\tilde{P}(\chi)$ 常取为 δ 分布, 可令 $\tilde{P}(\chi) = 1$.

2.2 非稳态火焰面模型(欧拉粒子火焰面模型)

非稳态火焰面模型^[10,12](欧拉粒子火焰面模型)是以稳态计算结果为基础进行计算, 进行一定的后处理, 即非稳态计算时, 不再对流场参数(压力、速度等)进行计算, 而对组分的质量分数重新进行计算. 实施方法为在物理空间内引入若干虚拟的、但有一定质量的流体颗粒, 每个流体颗粒代表一道火焰, 用它们在湍流流场中的运动轨迹代表非稳态火焰面随时间的变化历程以及火焰面参数的瞬态影响. 该方法不直接追踪流体颗粒的运动轨迹和历程, 而是用欧拉方式求解流体颗粒在空间内各个方位出现的概率, 构造的输运方程如下:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{I}_n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{I}_n \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_n}{Sc} \frac{\partial \tilde{I}_n}{\partial x_j} \right) \quad (10)$$

该方程也被称为标记方程(marker equation).

其中 Sc 为施密特数, $\tilde{I}_n$ 表示第 n 个流体颗粒在 t 时刻 x_j 点位置出现的概率.

计算时对该方程采用下式进行初始化:

$$\tilde{I}_n = \begin{cases} 1 & \bar{f} \geq f_{\text{init}} \\ 0 & \bar{f} < f_{\text{init}} \end{cases} \quad (11)$$

其中 $\bar{f}$ 为平均混合分数, f_{init} 为一个常数,但必须大于化学恰当比条件下的混合分数. 在进出口边界处 $\tilde{I}_n$ 也初始化为 0.

考虑到标量耗散率在空间分布的不均匀性, 方程(10)跟火焰面方程进行耦合求解时, 方程(10)中的标量耗散率是每道火焰在化学恰当比条件下, 标量耗散率的面平均值 $\hat{\chi}_{\text{st}, n}$. Barths 等人^[10]提出用下式求解:

$$\hat{\chi}_{\text{st}, n} = \frac{\int_V \tilde{I}_n \bar{\rho} \tilde{\chi}_{\text{st}}^{\frac{3}{2}} \tilde{P}(Z_{\text{st}}) dV'}{\int_V \tilde{I}_n \bar{\rho} \tilde{\chi}_{\text{st}}^{\frac{1}{2}} \tilde{P}(Z_{\text{st}}) dV'} \quad (12)$$

其中 V 是整个计算域的体积, $\tilde{\chi}_{\text{st}}$ 为化学恰当比条件下的标量耗散率, $\tilde{P}(Z_{\text{st}})$ 为化学恰当比条件下的概率密度函数.

从初始时刻 $t=0$ 开始计算, 初始化后流体颗粒从不同的位置开始运动, 在 $t=t_0$ 时刻 $\mathbf{x}$ 点位置, 第 i 个组分 Favre 平均的质量分数按照下式计算:

$$\tilde{Y}_i(\mathbf{x}, t) = \frac{\sum_n \int_0^{t_0} \tilde{I}_n(t') \tilde{Y}_{i,n}(\mathbf{x}, t') dt'}{\sum_n \int_0^{t_0} \tilde{I}_n(t') dt'} \quad (13)$$

其中 $\tilde{Y}_{i,n}(\mathbf{x}, t')$ 是在 t' 时刻 $\mathbf{x}$ 点位置, 用第 n 道火焰面的平均标量耗散率 $\hat{\chi}_{\text{st}, n}$ 求解火焰面方程得到的第 i 个组分 Favre 平均的质量分数, 用下式计算:

$$\tilde{Y}_{i,n}(\mathbf{x}, t') = \int_0^1 \tilde{Y}_i(Z, \hat{\chi}_{\text{st}, n}) \tilde{P}(Z) dZ \quad (14)$$

为了保证流体颗粒能够完全运动到出口以外, 时间 t_0 应取得比较长, 此时流场中的流场颗粒出现的概率接近于 0, 即 $\tilde{I}_n(t) \approx 0$.

根据文献^[10, 12]的研究, 引入一道非稳态火焰面已经能够获得较为准确的解. 因此在本文的计算中, 流体颗粒即非稳态火焰面的个数 n 取

为 1. 非稳态火焰面模型计算时, 式(13)需要从初始时刻 $t=0$ 开始积分求组分的质量分数, 因此为了保证计算的准确性, 所有组分的质量分数均初始化为 0.

2.3 化学反应机理

本文采用的航空煤油详细化学反应机理是由德国亚琛大学 Honnet 等人研究的航空煤油替代燃油(80%质量分数的正癸烷, 20%质量分数的 1,2,4-三甲基苯组成)的反应机理^[2]和文献^[3]中 NO_x 的反应机理综合得到的, 总共包含 131 种组分 1020 步不可逆基元反应. 替代燃油的反应机理经过了激波管、充分搅拌反应器和预混燃烧等实验数据的验证. NO_x 的反应机理综合考虑了热力、瞬发、 N_2O 三个反应过程以及 NH_x 氧化为 NO_x 的反应过程.

3 计算结果与分析

图 2、图 3 分别给出了工况 1 和工况 2 条件下, 稳态火焰面模型计算得到的中心对称截面上的温度云图和实验中拍摄到的火焰结构. 从图中可以看出在工况 1 较低油气比的条件下, 火焰分为上下两支, 分布在稳定器的上下尾缘处; 在工况 2 较高油气比的条件下, 燃烧加剧, 整个回流区均处在高温环境下. 计算结果与实验结果从定性上来分析是比较吻合的, 图 4 给出的对称截面温度测量位置上的温度分布进一步从定量上验证了计算结果的正确性.

图 5、图 6 分别给出了工况 1 和工况 2 条件下, 稳态火焰面模型和非稳态火焰面模型计算得到的对称截面上出口位置的 CO_2 , NO 体积分数分布和相应的实验测量值.

1) 从图 5、图 6 中可以看出, 两种工况条件下稳态和非稳态火焰面模型计算的 CO_2 体积分数差别很小, 在 5% 的范围内, 但 NO 体积分数的计算结果相差很大. 这是因为稳态火焰面模型计算时, 是预先生成火焰面数据库, 没有考虑火焰面方程中的非稳态项, 这一假设存在的前提是化学反应速率足够快, 化学反应的时间尺度远小于湍流脉动的时间尺度, 即火焰面参数(标量耗散率、混合分数、压力、边界条件等)的变化引起解的变化是无限快的. 但对于反应速率相对较慢的污染物来说, 火焰面的解对其参数的响应就不是无限快的, 需要考虑火焰面参数变化的历史效应^[20]. 图 7、图 8 给出在标量耗散率 $\chi=24.98 \text{ s}^{-1}$ 时求解稳

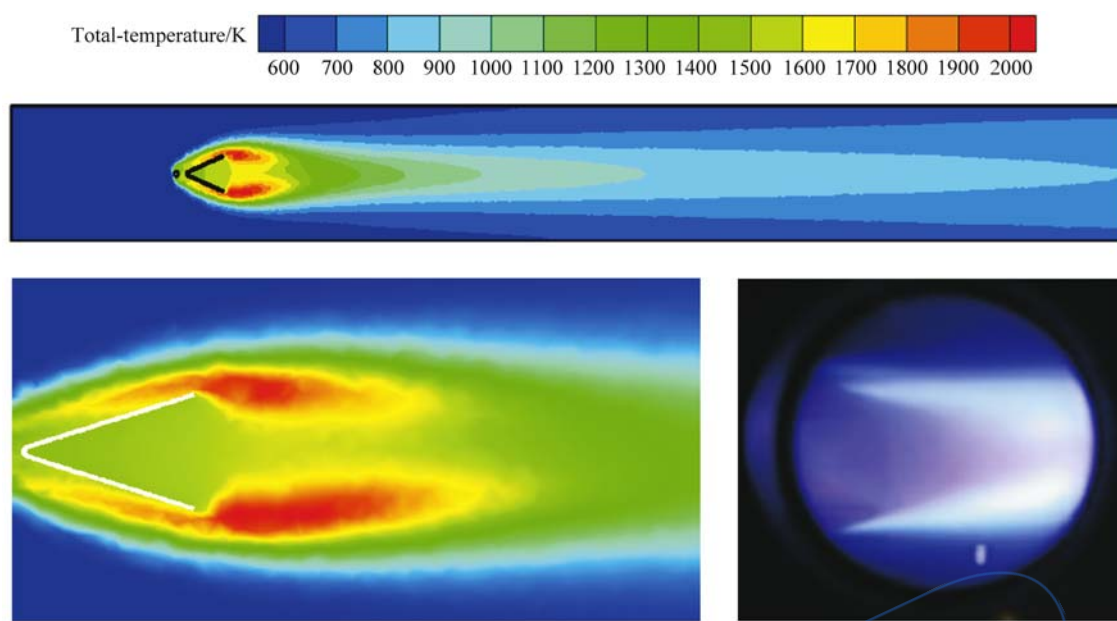


图2 对称截面上的温度云图和实验拍摄的火焰结构(工况1)

Fig. 2 Contours of temperature on the symmetry plane and the experiment photo (condition 1)

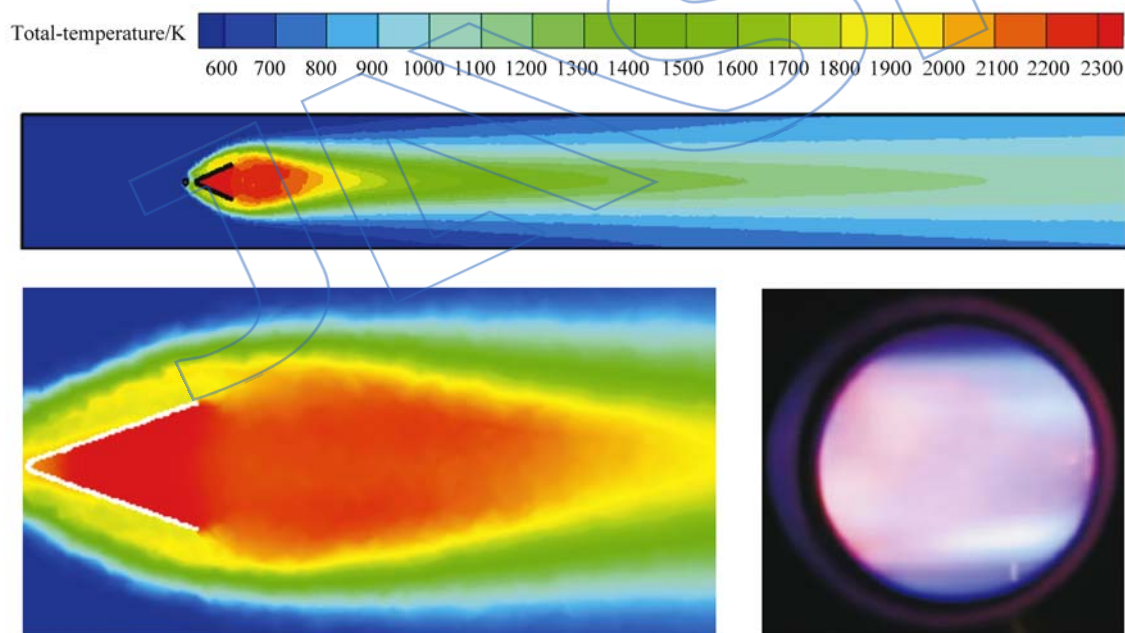


图3 对称截面上的温度云图和实验拍摄的火焰结构(工况2)

Fig. 3 Contours of temperature on the symmetry plane and the experiment photo (condition 2)

态火焰面方程和在 $t=3.056 \times 10^{-5}$ s 时刻求解非稳态火焰面方程得到的组分质量分数与混合分数的关系,进一步证实了上述观点.从图7、图8可以看出, CO_2 质量分数在 $t=3.056 \times 10^{-5}$ s 时刻已经与稳态计算结果相差不大,表明 CO_2 快速响应了火焰面参数的变化,而非稳态火焰面模型计

算的 NO 质量分数与稳态火焰面模型计算结果相差很大,表明反应速率较慢的 NO ,没有快速响应火焰面参数的变化.因此,对于 CO_2 这种反应速率很快的组分,计算时可以不考虑非稳态效应,而对反应速率较慢的污染物而言,计算时必须要考虑火焰面参数变化的非稳态效应.

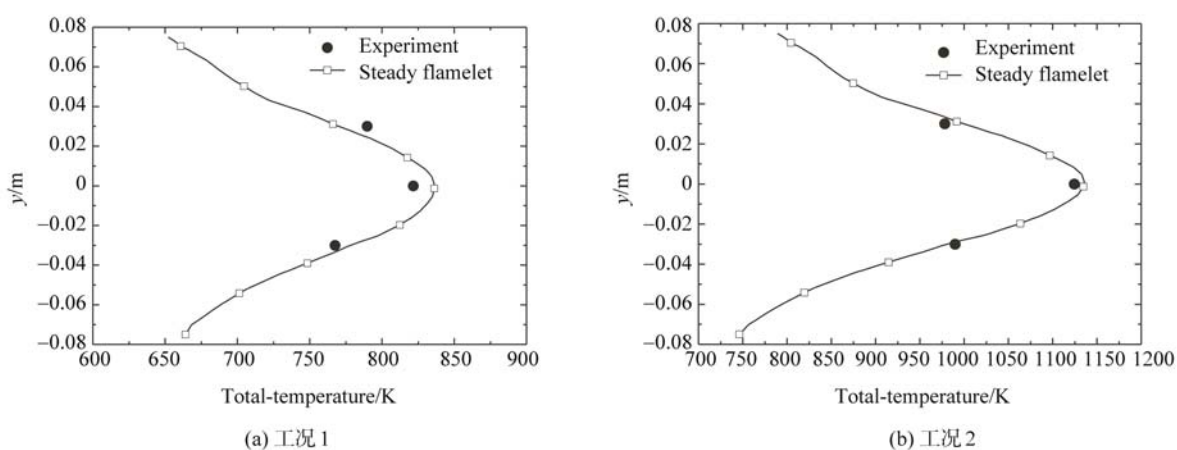
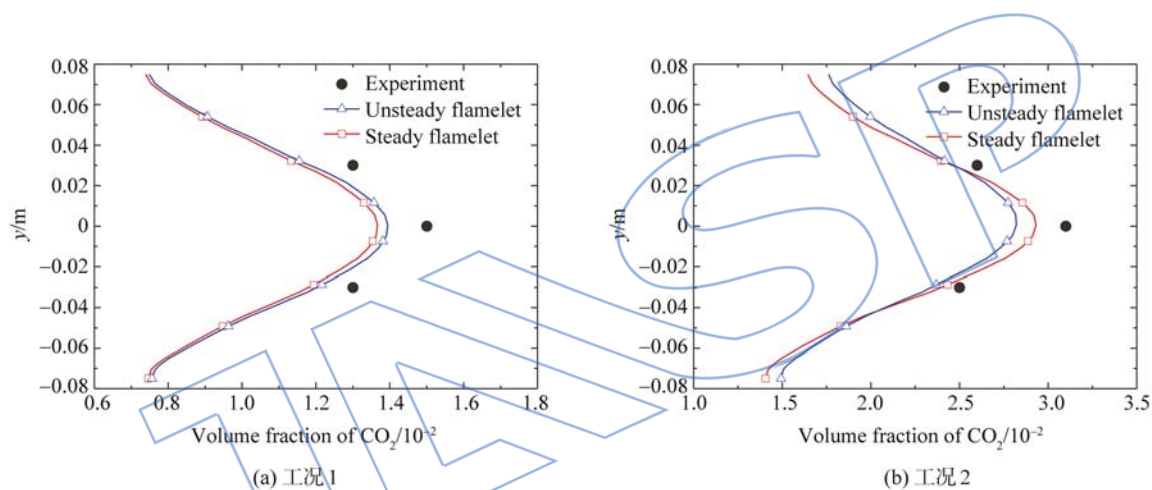
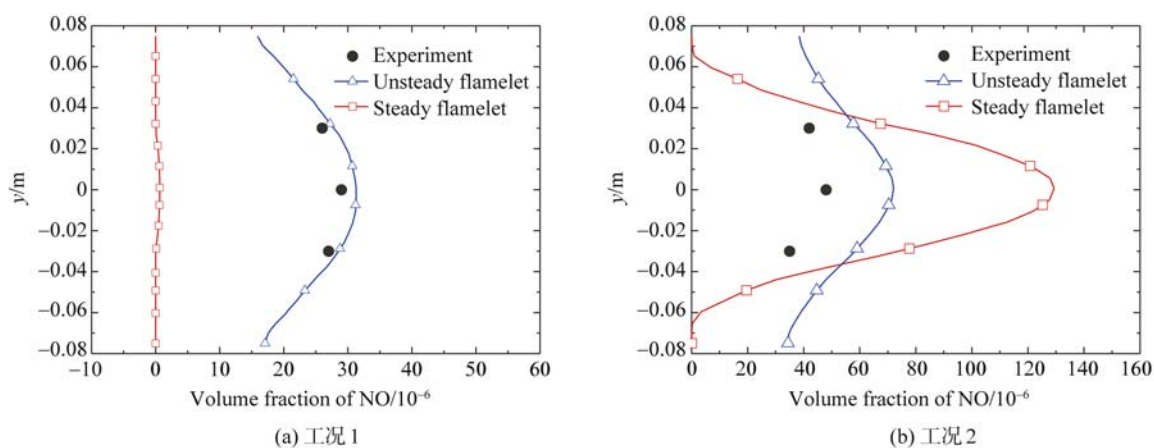


图 4 对称截面上的温度分布(工况 1 和工况 2)

Fig. 4 Temperature distribution on the symmetry plane (condition 1 and condition 2)

图 5 CO_2 体积分数(工况 1 和工况 2)Fig. 5 Volume fraction of CO_2 (condition 1 and condition 2)图 6 NO 体积分数(工况 1 和工况 2)Fig. 6 Volume fraction of NO (condition 1 and condition 2)

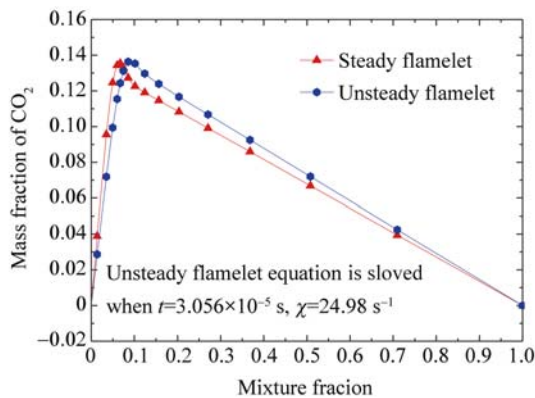
图7 CO₂ 质量分数随混合分数的变化关系

Fig. 7 Mass fraction of CO₂ versus mixture fraction

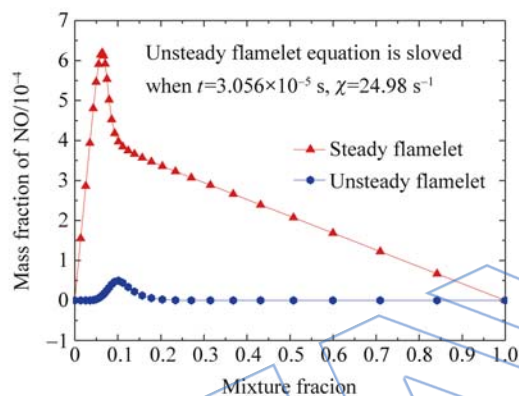


图8 NO 质量分数随混合分数的变化关系

Fig. 8 Mass fraction of NO versus mixture fraction

2) 从图6中可以发现,在油气比等于0.0048时稳态火焰面模型计算结果低估了NO的排放量,而在油气比等于0.010时又高估了NO的排

放量.为了解释这种现象,分别给出两种工况条件下稳态火焰面模型计算的中心对称截面上NO体积分数的等值线图,如图9、图10所示.对比图2、图3可以看出,在所给定工况条件下热力NO是NO生成的主要因素.又因为稳态火焰面模型认为NO能够快速响应火焰面参数的变化,所以NO的体积分数分布同温度分布有一定的相似性.在工况1条件下,燃烧不剧烈,沿气流流动方向温度下降得较快,因此图9(a)中NO的体积分数下降得比较快,最终计算得到的NO体积分数偏小.相比之下,在工况2条件下,油气比较高,燃烧比较剧烈,回流区内的NO生成量较多,火焰长度也较长,温度在流动方向上下降得较慢,因此NO的体积分数也保持在一个较高的水平,最终计算得到的NO体积分数比实验值偏高.对比图9和图10可以看出,考虑了火焰面变化的非稳态效应之后,计算的NO体积分数分布虽然与温度分布也有一定的相似性,但比稳态火焰面模型的计算值在空间上的分布更加合理.在工况1条件下与实验结果吻合较好,但在工况2条件下,还是过高预测了NO的体积分数,这主要是由于详细反应机理中的污染物反应机理与RP-3航空煤油燃烧的污染物特性之间还存在着一定的差距造成的.下一步的工作需要改进污染物模型以适应RP-3航空煤油燃烧时的污染物排放特性.

3) 图5中CO₂体积分数与实验值有一定的偏差,这主要是由于为了达到来流所需要的温度,燃烧室进口前的加温段燃烧加温产生了一定的CO₂,而最后测得的CO₂体积分数是加温段和模型燃烧室两者共同产生的.但由于加温段的温升

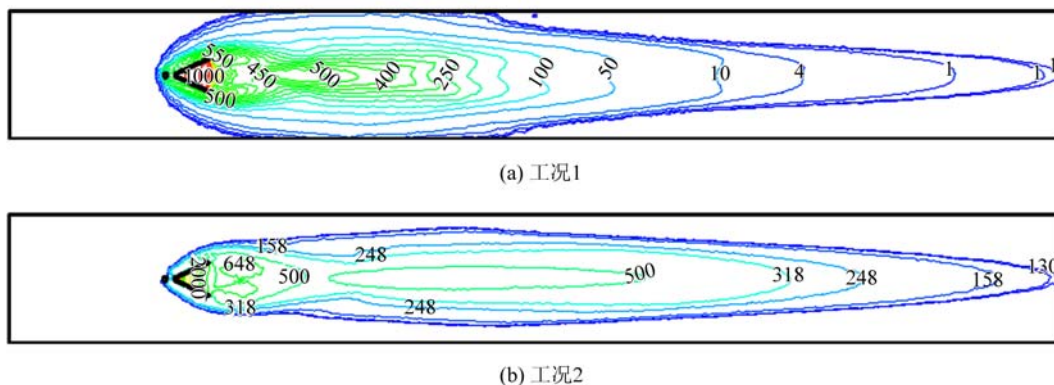
图9 稳态火焰面模型计算的对称截面上的NO体积分数(单位:10⁻⁶)

Fig. 9 Contours of volume fraction of NO on the symmetry plane simulated using steady flamelet model (unit:10⁻⁶)

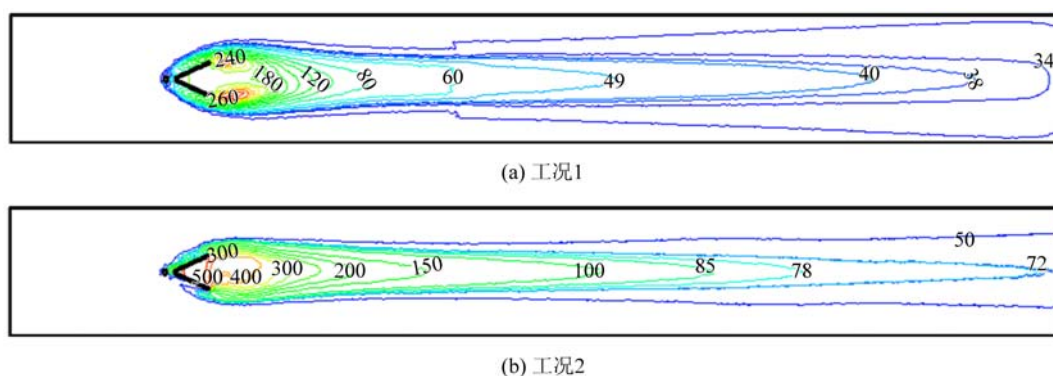


图 10 非稳态火焰面模型计算的对称截面上的 NO 体积分数(单位: 10^{-6})

Fig. 10 Contours of volume fraction of NO on the symmetry plane simulated using unsteady flamelet model (unit: 10^{-6})

只有 200 多 $^{\circ}\text{C}$, 产生的 CO_2 量并不多, 模型燃烧室产生的 CO_2 量占大多数. 因此在图 5 中实验测量值与计算值相差并不大, 在 7% 范围内.

4 结 论

以带 V 型槽火焰稳定器的模型燃烧室为对象, 基于 realizable $k-\epsilon$ 湍流模型和颗粒随机轨道模型, 考察了采用详细化学反应机理的火焰面模型描述 RP-3 航空煤油两相燃烧流场的准确性. 其中详细反应机理由替代燃油 (80% 质量分数的正癸烷, 20% 质量分数的 1, 2, 4-三甲基苯) 的反应机理和 NO_x 的反应机理组合而成. 通过与实验数据的比较, 结果表明:

1) 稳态火焰面模型能够正确地预测燃烧温度场和 CO_2 的生成量, 由于没有考虑火焰面变化的非稳态效应, 预测的 NO 体积分数与实验测量值相差较大.

2) 非稳态火焰面模型模拟的 CO_2 生成量在本文的计算工况条件下与稳态计算结果差别不大, 相差在 5% 以内; 模拟的 NO 排放量在工况 1 条件下与实验数据吻合较好, 在工况 2 条件下相比稳态火焰面模型的预测精度有所提高, 但模拟结果仍高于实验数据.

下一步的工作需要重点改进详细反应机理中 NO_x 的反应机理, 以适应 RP-3 航空煤油燃烧时的污染物排放特性.

参考文献:

- [1] Dagaut P. Kinetic of jet fuel combustion over extended conditions: experimental and modeling[J]. Journal of Engineering for Gas Turbine and Power, 2009, 129(2): 394-403.
- [2] Honnet S, Seshadri K, Niemann U, et al. A surrogate fuel for kerosene[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009, 32(1): 485-492.
- [3] Hewson J C, Bollig M. Reduced mechanisms for NO_x emission from hydrocarbon diffusion flames[J]. Symposium (International) on Combustion, 1996, 26(2): 2171-2179.
- [4] Pope S B. PDF methods for turbulent reactive flows[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1985, 11(2): 119-192.
- [5] Klimenko A Y, Bilger R W. Conditional moment closure for turbulent combustion[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1999, 25(6): 595-687.
- [6] Peters N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1984, 10(3): 319-359.
- [7] Peters N. Turbulent combustion[M]. London: Cambridge University Press, 2000.
- [8] Claramunt K, Consul R, Carbonell D, et al. Analysis of the laminar flamelet concept for nonpremixed laminar flames[J]. Combustion and Flame, 2006, 145(4): 845-862.
- [9] 董刚, 王海峰, 陈义良. 用火焰面模型模拟甲烷/空气湍流射流扩散火焰[J]. 力学学报, 2005, 37(1): 73-79.
DONG Gang, WANG Haifeng, CHEN Yiliang. Simulation of methane/air turbulent jet diffusion flame by flamelet models[J]. Acta Mechanica Sinica, 2005, 37(1): 73-79. (in Chinese)
- [10] Barths H, Peters N, Brehm N, et al. Simulation of pollutant formation in a gas turbine combustor using unsteady flamelets[J]. Symposium (International) on Combustion, 1998, 27(2): 1841-1847.
- [11] Odedra A, Malalasekera W. Eulerian particle flamelet modeling of a bluff-body CH_4/H_2 flame[J]. Combustion and Flame, 2007, 151(3): 512-531.
- [12] Coelho P J, Peters N. Unsteady modelling of a piloted methane/air jet flame based on the Eulerian particle flamelet model[J]. Combustion and Flame, 2001, 124(3): 444-

- 465.
- [13] Kim S K, Kim Y. Assessment of the Eulerian particle flamelet model for nonpremixed turbulent jet flames[J]. *Combustion and Flame*, 2008, 154(1-2): 232-247.
- [14] Wen Z, Yun S, Thomson M J, et al. Modeling soot formation in turbulent kerosene/air jet diffusion flames[J]. *Combustion and Flame*, 2003, 135(3): 323-340.
- [15] Bath H, Hasse C, Bikas G, et al. Simulation of combustion in direct injection diesel engines using a Eulerian particle flamelet model[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2000, 28(1): 1161-1168.
- [16] Riesmeier E, Honnet S, Peters N. Flamelet modeling of pollutant formation in a gas turbine combustion chamber using detailed chemistry for a kerosene model fuel[J]. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2004, 126(4): 899-905.
- [17] Yakhot V, Orszag S A, Thangam S, et al. Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique[J]. *Physics of Fluids A*, 1992, 4(7): 1510-1520.
- [18] FLUENT 公司. FLUENT 用户手册[M]. 刘奇, 译. 北京: 北京理工大学出版社, 2003.
- [19] Jones W P, Whitelaw J H. Calculation methods for reacting turbulent flows: a review [J]. *Combustion and Flame*, 1982, 48: 1-26.
- [20] 解茂昭. 内燃机计算燃烧学[M]. 2 版. 大连: 大连理工大学出版社, 2005.