

贫预混燃烧室化学反应器网络模型建模及不确定性分析

母 滨^{1,3}, 雷福林^{1,2,3}, 邵卫卫^{1,2,3}, 张哲巅^{1,2,3}, 肖云汉^{1,2,3}

- (1. 中国科学院 工程热物理研究所 先进能源动力重点实验室, 北京 100190;
2. 中国科学院 能源动力研究中心, 江苏 连云港 222069;
3. 中国科学院大学 工程科学学院, 北京 100049)

摘 要: 基于 CFD 三维数值模拟结果的化学反应器(CRN)网络模型方法具有快速预估燃烧室 NO_x 排放的特点。研究通过 CFD 数值模拟手段获得了贫预混燃烧室流场、温度场等特征分布,基于燃料空气掺混特性、速度场、温度场、OH 分布以及达姆科勒数,燃烧室被离散划分为预热区、火焰锋面区、火焰过渡区、后火焰区、中心回流区以及角回流区,建立了复杂的 CRN 模型表征燃烧室内部的流动特征和火焰结构。以贫预混燃烧器为对象,与实验结果进行了对比验证。通过敏感性和不确定性分析获得了反应区域停留时间和烟气回流比例等关键参数对 NO_x 排放的影响规律。结果表明:CFD-CRN 混合方法更适用于在高当量比条件下贫预混燃烧室 NO_x 排放的快速有效预测。在相同扰动强度的条件下,反应预热区域和火焰锋面区域的停留时间扰动对 CRN 模型预测 NO_x 的生成量和稳定性影响更显著。CFD-CRN 混合方法应明确在较高的绝热火焰温度条件下烟气回流比的准确性计算及其对 NO_x 生成的显著影响。

关 键 词: 贫预混燃烧室; 化学反应器网络模型; NO_x 排放; 不确定性分析; 敏感性分析

中图分类号: V231.2

文献标志码: A

Modeling and uncertainty analysis of chemical reactor network model in lean premixed combustion chamber

MU Bin^{1,3}, LEI Fulin^{1,2,3}, SHAO Weiwei^{1,2,3},
ZHANG Zhedien^{1,2,3}, XIAO Yunhan^{1,2,3}

- (1. Key Laboratory of Advanced Energy and Power,
Institute of Engineering Thermophysics,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;
2. Research Center for Clean Energy and Power,
Chinese Academy of Sciences, Lianyungang, Jiangsu 222069, China;
3. School of Engineering Sciences,
University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: The chemical reactor network (CRN) model based on three-dimensional nu-

收稿日期:2019-03-05

基金项目:国家自然科学基金(91541123); 中国科学院国际合作局对外合作重点项目(182211KYSB20160039);
中国科学院青年创新促进会项目(2017184)

作者简介:母滨(1996—),男,硕士生,主要从事燃气轮机燃烧室方面的研究工作。

通信作者:邵卫卫(1981—),男,副研究员,博士,主要从事燃气轮机燃烧室设计和先进燃烧技术研究。E-mail:shaoww@jet.cn

引用格式:母滨,雷福林,邵卫卫,等. 贫预混燃烧室化学反应器网络模型建模及不确定性分析[J]. 航空动力学报,2019,34(10): 2108-2119. MU Bin, LEI Fulin, SHAO Weiwei, et al. Modeling and uncertainty analysis of chemical reactor network model in lean premixed combustion chamber[J]. Journal of Aerospace Power, 2019, 34(10): 2108-2119.

merical simulation results of CFD has great advantage in fast and accurate prediction of NO_x emissions for combustor. In this work, the characteristic distributions of flow and temperature fields in a lean premixed combustor were simulated using CFD method. The combustor was separated in several regions, including preheating region, flame front region, flame transition region, post flame region, central recirculation region and corner recirculation region, based on the fuel-air blending characteristics, velocity field, temperature field, OH distribution, and Damkohler number. A complex CRN model was established to characterize the flow characteristics and flame structure inside the combustion chamber. The preliminary verification of CRN model was performed with experimental data of lean premixed burner. The effects of several crucial parameters, including the residence time and the flue gas recirculation ratio, on NO_x emission were analyzed through sensitivity and uncertainty analysis. The CFD-CRN hybrid method can quickly and effectively predict the NO_x production of the lean premixed combustor under high equivalence conditions. The residence time disturbances of preheating zone and the flame front zone have more significant effects on emissions and stability of NO_x prediction of CRN models under the same disturbance intensity. The flue gas recirculation ratio of CFD-CRN method should be accurately calculated under high adiabatic flame temperature, which has significant effect on NO_x formation.

Key words: lean premixed combustor chamber; chemical reactor network model; NO_x emissions; uncertainty analysis; sensitivity analysis

目前通用电气、西门子、三菱等各大燃气轮机公司的重型燃气轮机大多采用主流的贫预混燃烧技术,以实现在宽负荷条件下低 NO_x 污染物排放的稳定燃烧^[1-3]。随燃气轮机级别提高,燃烧室压力、出口温度逐渐增加,对 NO_x 抑制带来更大挑战。低排放尤其低 NO_x 一直是燃气轮机燃烧室设计的重要指标,实现对燃烧室在宽范围工况条件下的 NO_x 快速预测和分析是缩短燃烧室迭代优化设计周期的重要途径。

目前,获得燃烧室污染物排放特性的通用方法有四种:试验研究、经验-半经验模型、CFD 数值模拟和计算流体动力学-化学反应器网络模型(CFD-CRN)方法^[4]。试验研究和经验-半经验模型均存在经济性和适用性的局限性。运用简化机理的 CFD 方法不能够准确模拟燃烧过程中 NO_x 生成的关键基元反应,而耦合详细反应机理预测 NO_x 生成又需要巨大的计算资源^[5]。CFD-CRN 混合方法在预测燃烧室 NO_x 排放方面的优势主要体现在:①计算时间和资源远低于 CFD 方法;②运用详细化学反应机理能够模拟 NO_x 生成的基元反应过程,揭示 NO_x 生成的关键路径机制;③实现 NO_x 排放的准确预测并能够快速研究变参数因素对 NO_x 排放特性的影响。

国内外学者对于如何运用 CFD-CRN 方法划

分燃烧室区域方面开展了大量的研究^[4],而针对 CRN 模型流动入口边界、燃烧室主火焰和后火焰区域的划分标准以及 CRN 模型关键参数的计算方法等方面进行了重点分析。

燃料空气掺混恶化能够引起 NO_x 排放显著增加,如何处理 CRN 模型的流动入口边界是 CFD-CRN 方法中的关键因素。Novosselov 等^[6]对于干式低排放燃烧室运用 CFD-CRN 方法建立了包含 31 个反应器的复杂 CRN 模型,利用三股平行的不同当量比流动入口模拟喷嘴出口燃/空掺混不均匀性,运用 8 步简化反应机理预测了不同当量比条件下的 NO_x 排放。Park 等^[7]利用温度、速度和火焰表面密度将燃烧室划分为主火焰、值班火焰、回流区以及后火焰等区域,建立了 CRN 模型,比较了流动入口边界为燃/空掺混均匀和不均匀时 NO_x 排放的差异,结果表明:流动入口边界为燃/空掺混均匀时 NO_x 排放更低,与实验值之间的差异更大。Lee 等^[8]利用 CO 浓度分布、温度分布以及速度分布分别建立了适用于贫预混火焰和值班火焰的两种 CRN 模型,比较了模型之间的差异,但 CRN 模型的流动入口边界条件未考虑燃/空掺混不均匀性。

针对于燃烧室主火焰区域的划分,Novosselov 等^[6]和 Lee 等^[8]利用最大 CO 浓度的 20% 等

值线表征燃烧室上游的主要火焰区域;Park 等^[7]利用温度和火焰概率密度分布来确定主要火焰区域,但未给出量化的划分标准;刘富强等^[9]认为温度区间在 1900~2000 K 内的燃烧区域为主火焰区域。杨小龙和王翰林等^[10-11]定义温度超过 1800 K 的区域为燃烧室高温可燃区域,当温度超过 1800 K 时,温度升高对热力型 NO_x 的生成具有显著的影响。

在不同的空间和时间尺度上化学反应与湍流流动存在强烈的相互作用,决定了 NO_x 生成的化学反应速率是由化学时间尺度还是由湍流时间尺度控制,对 CFD-CRN 模型区域划分有重要的影响。Drennan 等^[12]运用 CFD-CRN 方法划分燃烧室区域时运用达姆科勒数 (Da) 小于 1 表征稳定火焰燃烧区域。刘闯和马存祥等^[13-14]运用 Da 小于 1 表征燃烧室上游主要火焰区域,运用 Da 大于 1 表征燃烧室下游后火焰区域,而 Novosselov 和 Park 等^[6-7]简单定义燃烧室下游高温分布均匀的区域为后火焰区域,未考虑到化学反应和湍流流动之间的相互作用。

为了研究压力对合成气扩散火焰 NO_x 污染物生成的影响机制,王翰林等^[11]对合成气扩散火焰进行了 CFD 数值模拟,根据燃烧室内的掺混以及燃烧状态建立了 CRN 模型,基于人工样本统计的方法确定反应器之间的流量分配和区域停留时间,关键参数的计算方式需要进一步完善。Innocenti 等^[15]利用湍动能、速度场和混合分数标量等划分燃烧室并实现了自动 CFD-CRN 模拟,通过示踪粒子方法自动获得了各个 CRN 区域的停留时间分布。

如何离散划分燃烧空间区域并建立各区域之间的关联是难点。首先需要确定普适的划分方法;其次,停留时间和烟气回流比等各区域模型参数的给定也决定了 CFD-CRN 模型预估的性能。目前,国内外众多 CFD-CRN 方法研究中,燃烧室区域划分存在显著的差异,且对各个区域的划分未给出量化的判断标准。其次,在对 CFD 数值模拟结果进行后处理时,CRN 区域划分的标准以及关键参数计算方式的合理性将直接导致 CRN 模型组织结构和关键参数的不确定性变化^[4],是产生 NO_x 排放预测误差的主要来源。国内外研究中,对于评价 CRN 模型输入关键参数影响 NO_x 排放预测的不确定性分析较少。如 Toni 等^[16]基于燃烧室内部的流场特征建立 CRN 模型预测了燃烧室的 NO_x 排放特性,进一步评估了流量分配

比例等 CRN 模型参数对 NO_x 生成的敏感性。因此,探究 CRN 模型参数的不确定性对 NO_x 排放预测的影响是评价 CFD-CRN 混合方法准确性和稳定性的重要依据。对 CFD-CRN 混合方法进行完善,深入地分析 CRN 区域划分标准、组织结构和关键参数对 CRN 模型预测 NO_x 生成的影响具有重要意义,可对燃气轮机燃烧室自主研发提供有效分析手段。

本文通过对燃烧室进行 CFD 数值模拟,对其流场和温度场等进行后处理,建立了具有复杂组织结构方式的 CRN 模型,进一步完善燃烧室空间区域离散划分的 CFD-CRN 方法标准和理论,基于贫预混旋流燃烧器 NO_x 排放的实验数据完成了初步验证。基于 CRN 模型,对烟气回流比和停留时间进行了敏感性分析和不确定性分析研究,获得 CRN 模型关键参数对 NO_x 排放预测的影响规律。

1 研究对象和方法

1.1 实验装置

为了验证 CRN 数值模拟方法的有效性,需要贫预混燃烧器在不同当量比条件下的 NO_x 排放实验数据。

本文搭建了如图 1 所示的燃烧实验平台,主要由燃料空气供应系统、贫预混旋流喷嘴、石英玻璃罩以及测量系统等组成。实验工况如表 1 所示,采用 CHEMKIN-Pro 中的化学相平衡模型计算不同当量比条件下的绝热火焰温度 (adiabatic flame temperature, 记为 T_{ad})。另外空气和燃料初始温度均为 288 K。标准状况下的空气质量流量和燃料质量流量由 Aalborg 质量流量计控制器反馈测量,流量计精度为满量程的 $\pm 1\%$ ^[17]。实验前对 Aalborg 质量流量计进行标定的示值误差为 -2.5% 。实验采用相位多普勒速度粒子分析仪 (phase Doppler particle analyzer, PDPA) 的激光束 (532/561/553 nm) 测量燃烧室内部三维流场特征结构以及速度分布,速度测量范围为 $-220 \sim 330$ m/s,测量精度为 $\pm 1\%$,冷态实验测量的示踪粒子为 $5 \mu\text{m}$ 粒径的玻璃微珠。燃烧室出口布置水冷烟气取样探针,利用 Testo 350 烟气分析仪的电化学传感器对烟气中 O₂、CO、NO 和 NO₂ 气体成分进行分析,O₂ 测量精度为 $\pm 0.2\%$,CO、NO 和 NO₂ 气体的测量精度为 $\pm 5\%$ 。实验测量前对 Testo 350 烟气分析仪进行标定,标准气体成分中 NO 为 2×10^{-5} ,NO₂ 为 10^{-5} ,CO 为 2×10^{-5} ,N₂ 作为平衡气。

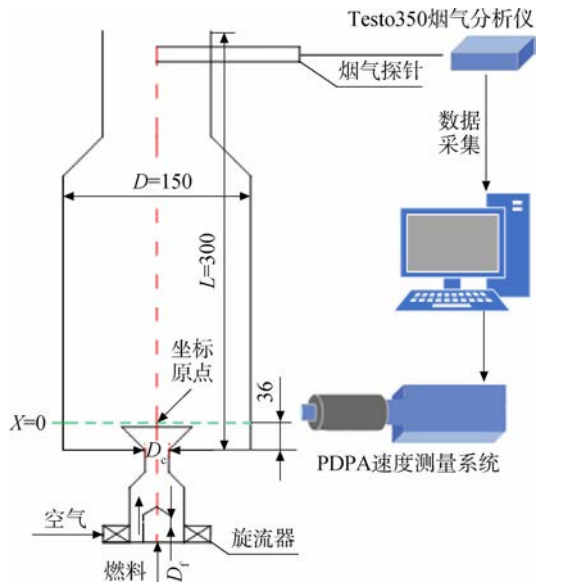


图 1 实验装置示意图(单位:mm)
Fig.1 Schematic of experimental device (unit:mm)

表 1 贫预混燃烧室污染物排放实验条件
Table 1 Experimental conditions for pollutant emission in lean premixed combustor

序 号	当量比 φ_g	绝热火焰 温度 T_{ad}/K	空气体积流量/ 燃料体积流量/ (m^3/h)	$10^{-3}(m^3/s)$
A	0.559	1582	60	1.054
B	0.593	1643	60	1.118
C	0.619	1691	60	1.168
D	0.677	1790	60	1.276
E	0.743	1904	60	1.402
F	0.795	1981	60	1.500

研究对象为滑块式空气旋流贫预混喷嘴^[18],如图 2 所示。旋流数为 0.57,燃料孔径 D_i 为 1.5 mm,燃料喷嘴采用径向多孔式喷射策略,燃料和旋流空气在预混通道内进行快速掺混并进入燃烧室。预混通道出口处安装锥碗扩张段起到促进高温烟气回流稳定火焰的作用,预混通道出口直径 $D_c=30$ mm。

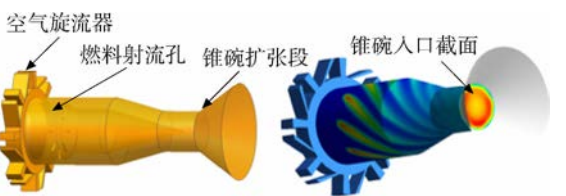


图 2 贫预混燃烧器结构图
Fig.2 Structure diagram of a lean premixed burner

1.2 计算网格和数值模型

采用 ANSYS ICEM 对贫预混燃烧器进行结构化网格划分,如图 3 所示。在空气旋流器、燃料射流孔、预混通道以及锥碗扩张段等关键区域进行网格加密。

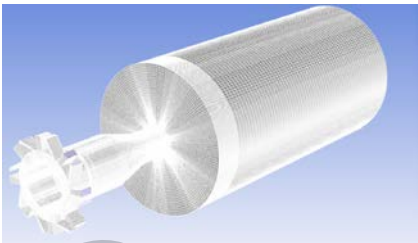


图 3 结构化网格示意图
Fig.3 Schematic diagram of structured grid

采用 ANSYS Fluent 进行 CFD 数值模拟。湍流模型选用适用于旋流流动的 Realizable $k-\epsilon$ 模型^[19],选用 GRI-Mech 2.11 骨干机理耦合涡耗散概念 EDC(eddy dissipation concept)模型^[20-22]模拟燃烧过程,EDC 模型的容积比率常数 $C_\epsilon=2.1377$,时间尺度常数 $C_\tau=0.4082$ 。壁面采用离散坐标(discrete ordinates,DO)辐射传热模型,气体辐射系数由 WSGGM 方法计算。求解算法方面,压力速度项耦合采用 SIMPLE 算法,离散格式均采用二阶迎风格式,计算残差收敛标准为 10^{-4} 。数值模拟边界条件如同表 1 实验工况所示,但所有的入口体积流量均换算为质量流量,并设置为质量流量入口边界条件。空气和燃料的温度均为 288 K,空气和燃料湍流强度为 5%,燃烧室出口设置为压力出口边界,压力为标准大气压。采用 CHEMKIN-Pro 19.0 建立 CRN 模型,激活气体能量求解方程,运用 GRI-Mech 3.0 详细机理模拟燃烧过程预测 NO_x 污染物生成。在燃烧室热态模拟基础上,采用离散相颗粒模型(discrete particle model,DPM)粒子追踪获得 CRN 区域的平均停留时间。

1.3 CFD 数值模型验证

采用 PDPA 系统测得 $\varphi_g=0.743$ 冷态条件下的速度分布,验证 realizable $k-\epsilon$ 湍流模型模拟流场速度分布的有效性,其数值模拟结果与实验数据如图 4 所示,其中 U 为轴向速度, r 为径向位置。经网格无关性验证,在保证计算资源和精度的前提下,选取网格数量为 240 万。

从图 4 中可以看出轴向速度分布特征主要表现为中心回流区以及径向两侧的外部剪切层速度

峰值区域。从总体上看数值模拟结果与实验结果吻合程度较好,能够捕捉到燃烧室内流场的关键特征结构,从而验证 realizable $k-\epsilon$ 湍流模型适用于模拟旋流流动的有效性。

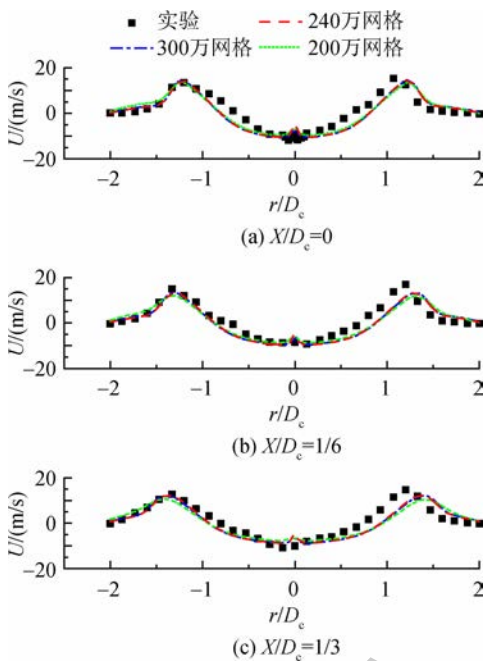


图 4 贫预混燃烧器不同位置轴向速度径向分布
Fig. 4 Radial distribution of axial velocity at different positions of lean premixed burners

2 CFD-CRN 混合模拟方法

2.1 CFD 模拟分析

燃气轮机燃烧室内的燃烧过程是由湍流流动、传热传质以及化学反应等共同耦合发生的复杂过程。CFD-CRN 方法的核心思想在于先运用简化反应机理对燃烧室进行 CFD 数值模拟,获得燃烧室内存在的回流区域、火焰形态以及高温反应区域等特征。对 CFD 数值结果进行后处理,以轴向速度、燃烧温度、组分浓度等作为基准参数,将整个燃烧室空间区域离散划分为若干个反应器区域,并组成化学反应器网络模型。耦合详细化学反应机理准确地模拟燃烧室内部的复杂反应过程,实现对燃气轮机燃烧室污染物排放特性的预测^[23]。图 5 为 CFD-CRN 混合方法的流程图^[15,24]。采用 EDC 燃烧模型对燃烧室进行热态数值模拟,获得 $\varphi_g = 0.743$ 条件下的热态流场特征分布和温度场分布。

图 6 显示当量比为 0.743 时燃烧室内轴向速度分布云图。从图 6 中可看出燃烧室内存在明显

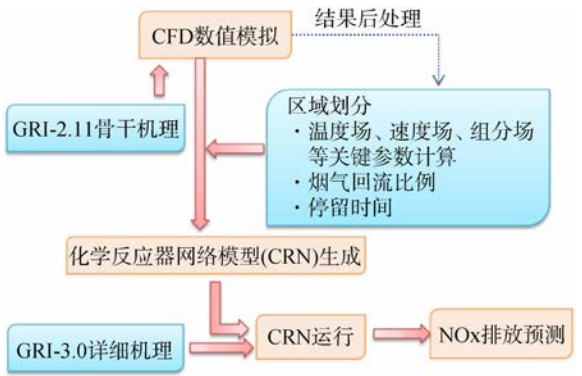


图 5 CFD-CRN 混合方法示意图
Fig. 5 Schematic diagram of CFD-CRN hybrid method

的中心回流区域以及角回流区域。 Da 表征了湍流流动时间与化学反应时间之间的相对大小,如式(1)所示,以此决定适宜于采用完全搅拌反应器(perfectly stirred reactor, PSR)还是平推流反应器(plug flow reactor, PFR)来模拟燃烧室局部空间区域的燃烧过程。

$$Da = \frac{\tau_{\text{flow}}}{\tau_{\text{chem}}} \tag{1}$$

式中 τ_{flow} 为湍流流动时间, τ_{chem} 为化学反应时间。由于回流区域的旋流较强且存在高强度的湍流流动,其 Da 远小于 1, 化学反应速率远小于湍流混合速率, 燃烧处于强湍流的慢速化学反应状态, 适宜用 PSR 反应器模拟中心回流区域和角回流区域的燃烧过程; 在燃烧室下游区域湍流流动程度较弱, 流场充分发展并且气体流线一致, 其 Da 数远大于 1, 化学反应速率远快于湍流混合速率, 燃烧处于弱湍流的快速化学反应状态, 因此适宜采用 PFR 反应器模拟后火焰区域^[14]。

图 7 显示当量比为 0.743 时燃烧室内温度分布云图。从图 7 中可以看出燃烧室上游存在明显的对称低温区域。采用 0.2% 的 OH 质量分数等值线表征火焰抬升的底部边缘^[25], 0.2% OH 质量分数等值线上游的内部低温区域用于表征燃料空气掺混混合的预热过程。众多研究表明燃/空掺混均匀性对于 NO_x 生成具有重要的影响^[18]。采用 realizable $k-\epsilon$ 湍流模型对表 1 的实验工况进行了冷态数值模拟, 获得如图 8 所示预混通道出口截面上的当量比径向分布。在预热低温区域头部设置三股平行的流动入口来模拟 CRN 模型的燃/空掺混不均匀性边界条件, 分别定义三股流动入口边界为外部火焰 F 、中心火焰 G 以及内部火焰区域 H 。基于 CFD 模拟结果, 获得外部火焰 F 、中心火焰 G 以及内部火焰区域 H 的入口平均

当量比和质量流量。采用并联的 PSR 反应器模拟预热低温区域的燃烧化学反应过程,从图 7 中看出预热低温区域沿轴向方向存在温度分布差异,沿轴线方向上适宜采用两个串联的 PSR 反应器来描述该区域的反应预热过程。

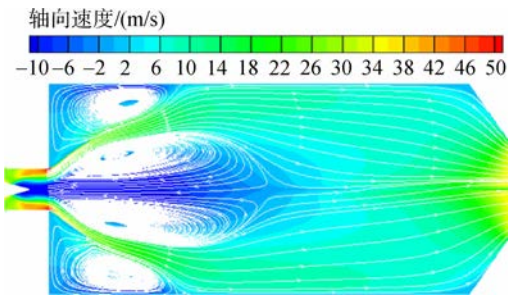


图 6 $\varphi_g=0.743$ 条件下燃烧室内轴向速度分布
Fig. 6 Distribution of axial velocity in combustion chamber with $\varphi_g=0.743$

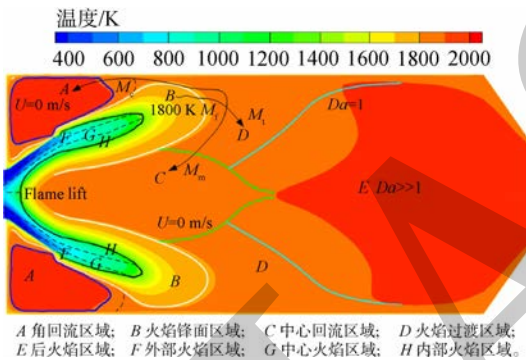


图 7 $\varphi_g=0.743$ 时燃烧室温度场和 CRN 区域划分示意图
Fig. 7 Schematic diagram of combustor temperature field and CRN regions division with $\varphi_g=0.743$

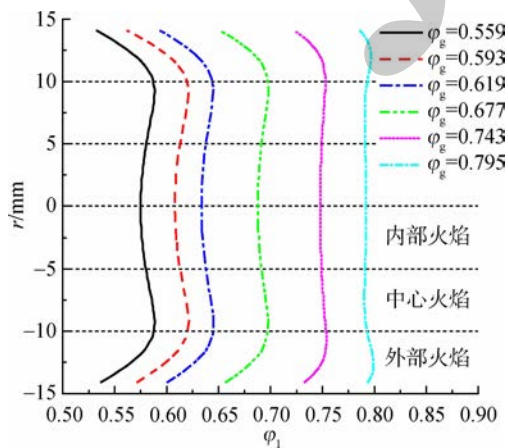


图 8 预混通道出口的局部当量比 φ_1 径向分布
Fig. 8 Radial distribution of local equivalent ratio φ_1 at premixed channel outlet

众多研究^[8,26]表明采用温度场分布划分燃烧室空间区域是建立 CRN 模型的合理途径。Nguyen^[26]定义在 934.9~1887 K 温度范围内为主要火焰区域,杨小龙和王翰林等^[10-11]定义温度超过 1800 K 的区域为燃烧室高温可燃区域,因此认为 1800 K 等温线附近的区域是火焰可燃区域,理想地假设温度小于 1800 K 的 B 区域为火焰锋面区域,表征湍流火焰的燃烧反应过程。采用零轴向速度分布确定中心回流区域 C 和角回流区域 A 的边界面,采用 PSR 反应器分别表示中心回流区域 C 和角回流区域 A 的强湍流燃烧过程。定义 $Da \gg 1$ 的高温区域为后火焰区域 E,采用 PFR 反应器模拟后火焰区域的燃烧过程。定义 1800 K 等温线和 $Da=1$ 等值线之间的轴向速度大于零的区域为火焰过渡区域 D,采用 PSR 反应器模拟 D 区域的燃烧过程。

明确 CRN 模型关键参数的计算方式对于 CFD-CRN 模型预测 NO_x 的生成具有重要的影响。通过 DPM 模型的粒子追踪获得各个区域的平均停留时间。由于中心回流区域 C 与角回流区 A 的存在,火焰锋面区域 B 的烟气产物通过回流与燃烧室上游的未燃空气燃料混合物进行掺混混合,统计相邻区域边界面上的质量流量速率,根据式(2)~式(6)确定高温烟气回流分配比例,在 CRN 模型中采用 Gas Spilt 分流器建立各个区域之间的烟气质量和热量交换。根据温度场分布统计各个区域的平均温度,作为 CRN 模型反应器的初始温度,激活 CHEMKIN-Pro 中反应器气体能量方程进行温度的迭代计算至收敛。

$$M_f = M_m + M_t + M_c \quad (2)$$

$$R_m = \frac{M_m}{M_f} \quad (3)$$

$$R_c = \frac{M_c}{M_f} \quad (4)$$

$$R_t = \frac{M_t}{M_f} \quad (5)$$

$$R = \frac{M_m}{M_m + M_c} \quad (6)$$

式中 M_f 为图 7 中火焰锋面区域 B 边界面上的质量流量; M_m 和 R_m 分别为中心回流区域 C 边界面上的烟气回流质量流量和回流比例; M_c 和 R_c 分别为角回流区域 A 边界面上的烟气回流质量流量和回流比例;而 M_t 和 R_t 分别为火焰过渡区域 D 边界面上的烟气质量流量和流动比例。 R 为中心回流区域和角回流区域之间的烟气回流分配比例。

2.2 CRN 模型的建立

2.2.1 简单模型

根据 Bragg^[27]提出的假设:利用一个理想的 PSR 反应器连接一个 PFR 反应器模拟燃烧室燃烧过程,建立了如图 9 所示的简单 CRN1 模型,利用 PSR01 反应器表征燃烧室上游的前火焰区域,利用 PFR03 反应器模拟燃烧室下游的后火焰区域。简单的 CRN1 模型理想认为空气燃料完全掺混均匀进入燃烧室燃烧,利用 PSR02 反应器表征燃烧室内部回流区域特征,烟气回流与上游的燃料空气未燃混合物发生强烈湍流混合后流入表征前火焰区域的 PSR01 反应器。该模型理想假设燃烧室上游空间区域发生完全湍流混合并处于均匀温度分布。

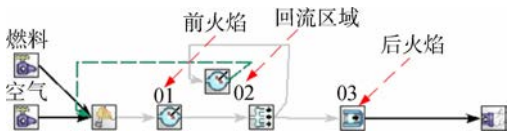


图 9 简单 CRN1 模型组织结构示意图

Fig.9 Schematic diagram of the organization structure of simple CRN1 models

2.2.2 详细模型

如文中第 2.1 节对 CFD 数值模拟的流场特征、温度分布以及 OH 自由基分布进行后处理,将整体燃烧室划分为火焰锋面区域 B、火焰过渡区域 D、后火焰区域 E、中心主要回流区域 C、角回流区域 A 以及反应预热区域。其中反应预热区域沿径向方向上由外部火焰区域 F、中心火焰区域 G 以及内部火焰区域 H 等组成,建立的复杂 CRN2 模型如图 10 所示。

与简单 CRN1 模型相比,复杂 CRN2 模型考虑燃烧室上游燃/空掺混不均匀性,同时考虑了火焰锋面区域 B 和火焰过渡区域 D 的温度分布梯度。CRN2 模型分别表征了中心回流区域 C 的烟气产物与内部火焰区域 H 和中心火焰区域 G 的燃料空气混合物之间的湍流混合,以及角回流区域 A 的烟气产物与外部火焰区域 F 的燃料空气混合物之间的掺混混合过程。CRN2 模型的组织结构方式具有如图 7 所示的中心对称分布特征,通过中心回流区域的强湍流实现各个区域之间物质流量和组分的快速交换,其组织结构方式更为复杂。CRN2 模型的后火焰区域 PFR20 反应器与 CRN1 模型的 PFR03 反应器停留时间相同,而

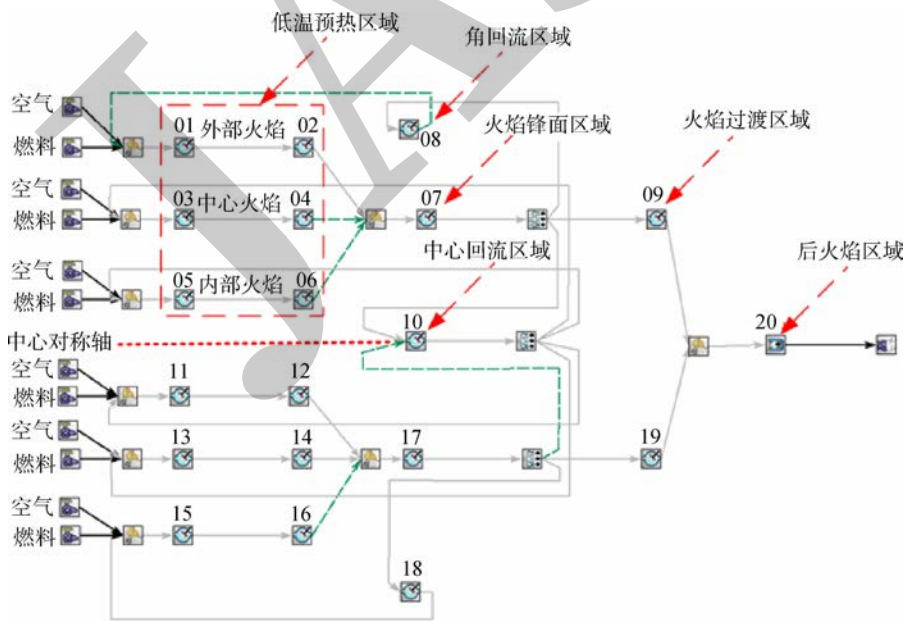


图 10 复杂 CRN2 模型组织结构示意图

Fig.10 Schematic diagram of the organization structure of complicated CRN2 model

CRN2 模型的反应预热区域、火焰锋面区域以及火焰过渡区域的总停留时间与 CRN1 模型的 PSR01 反应器停留时间一致。

3 结果与讨论

3.1 CRN 模型对 NOx 排放预测的影响

图 11 为绝热条件下 T_{ad} 升高对不同 CRN 模

型预测 NO_x 排放的影响曲线,其中 NO_x 排放数据均按照国标要求折算到干式氧摩尔分数 15% 的状态($x_{O_2}=15\%$)。从图 11 中可以看出当 T_{ad} 超过 1800 K 时,相对于简单的 CRN1 而言,复杂 CRN2 模型的 NO_x 排放预测值与实验值的偏差更小。简单的 CRN1 模型理想假设燃烧室上游空间区域发生完全湍流混合,导致整体区域处于均匀的高温分布,与实际的低温区域分布不一致,容易导致 CRN1 模型的热力型 NO_x 生成量更高。Colorado 等^[28] 的研究表明考虑散热损失条件的 CRN 模型更能准确的模拟燃烧室 NO_x 污染物排放特性。由于 T_{ad} 非常高时,实际石英玻璃壁面存在明显的散热损失,图 11 中 CRN2 模型在忽略壁面散热因素时,容易导致反应器温度要高于实际情况,热力型 NO_x 生成量比实际值偏高。图中 x_{NO_x} 为 NO_x 的摩尔分数。

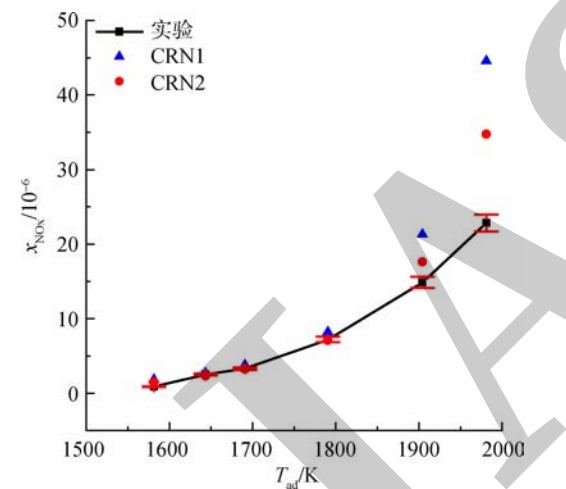


图 11 不同绝热火焰温度条件下 NO_x 排放($x_{O_2}=15\%$)

Fig. 11 NO_x emission under different adiabatic flame temperature conditions ($x_{O_2}=15\%$)

张环^[29] 研究表明 $\varphi_g=0.638\sim0.763$ 范围内甲烷火焰燃烧时,根据式(7)计算的石英玻璃壁面平均散热损失效率 $\eta\approx20.2\%$ 。由于目前实验手段未获得在不同当量比条件下石英玻璃壁面的准确散热损失量,根据式(8)计算了不同当量比条件下散热损失效率 $\eta=5\%,10\%$ 以及 20% 的散热损失量 Q_{loss} ,根据各区域温度和散热面积不同,考虑分区域散热效应,进一步研究 CRN 模型中散热损失参数对 NO_x 污染物预测趋势的影响规律,明确和表征简单 CRN1 模型与复杂 CRN2 模型特性之间的差异。

$$\eta = \frac{|T_{ad} - T_{out}|}{T_{ad}}$$

(7)

$$Q_{loss} = \eta Q$$

(8)

式中 T_{ad} 为绝热火焰温度, T_{out} 为烟气出口温度, η 为散热损失效率, Q_{loss} 为散热损失, Q 为热负荷。

图 12 为不同 CRN 模型数值模拟预测热损失量对 NO_x 排放的影响规律。从图中可以看出简单 CRN1 模型预测的散热损失对 NO_x 生成的敏感性更大,CRN1 模型理想假设单个 PSR02 反应器表征燃烧室回流区域,随着 PSR 反应器散热损失量的增加,整体回流区域的温度降低,导致热力型 NO_x 显著减少。Lee 等^[8] 的复杂 CRN 模型仅考虑了角回流区域以及后火焰区域等的壁面散热损失。

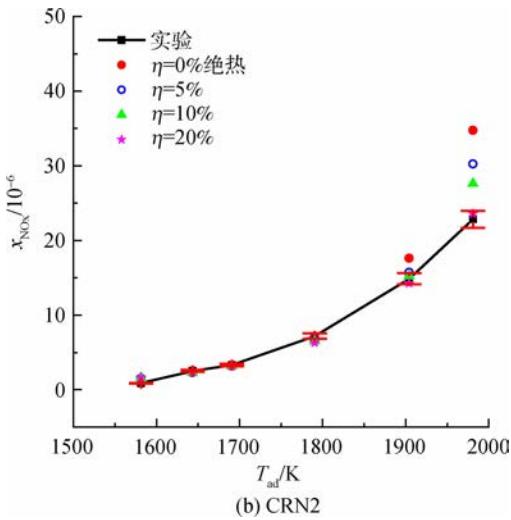
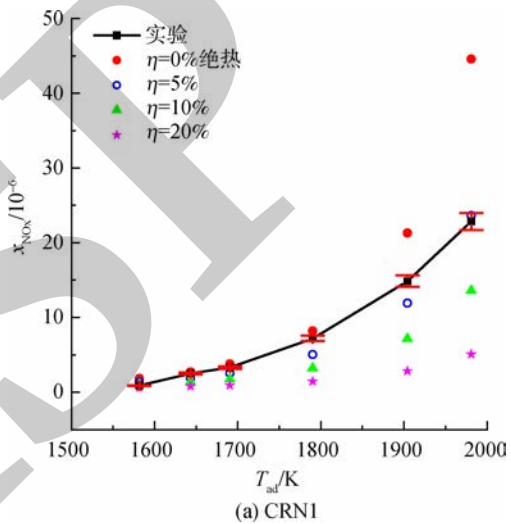


图 12 热损失对 NO_x 排放的影响($x_{O_2}=15\%$)

Fig. 12 Effect of heat loss on NO_x emissions ($x_{O_2}=15\%$)

实际的壁面散热损失主要发生在角回流区域 A、火焰过渡区域 D 以及后火焰区域 E,CRN2 模型理想假设中心回流区域和角回流区域位置相互

独立,随着热损失的增加,角回流区域的温度显著下降而中心回流区域的火焰温度受壁面散热损失影响较小,散热损失对热力型 NO_x 生成的敏感程度要小于简单 CRN1 模型。尽管数值模拟采用的散热损失量与实际情况存在差异,但是总体上 CRN2 模型预测的 NO_x 生成量与实验值之间的误差更小,考虑散热损失效应的 CRN2 模型适用于贫预混旋流火焰 NO_x 排放的预测。

3.2 CFD-CRN 模型关键参数影响

高温高压条件下的燃气轮机燃烧室中的流场特征和燃烧特性较为复杂,影响燃烧室内 NO_x 生成量的主要因素有燃烧室进气温度和压力、燃烧当量比、高温烟气回流比例和燃/空掺混不均匀度等,通过影响物理层面上的火焰温度和高温烟气停留时间以及化学层面上的 O/H/OH 等自由基浓度来控制 NO_x 生成反应速率。针对于 CRN2 模型的停留时间和烟气回流比进行了变参数计算分析,以获得停留时间和烟气回流比对 CRN2 模型预测 NO_x 排放特性的影响规律。

3.2.1 停留时间

对反应区域停留时间施加同一水平随机扰动,其停留时间服从正态概率密度分布,获得绝对误差随机变量 E_i 随停留时间扰动的变化规律。

$$P(\tau_i) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \times \exp\left[-0.5\left(\frac{\tau_{i,0} - \tau_i}{\sigma}\right)^2\right]$$

(9)

$$E_i = x_{\text{NO}_x,i} - x_{\text{NO}_x,0}$$

(10)

式中 τ_i 表示各个 CRN 区域的停留时间,下标“0”表示初始值, P 表示正态分布曲线的概率值,标准差 σ 为 0.5, $x_{\text{NO}_x,i}$ 为各个 CRN 区域停留时间扰动后燃烧室出口的 NO_x 摩尔分数变化值。

图 13 为各个区域停留时间在相同强度扰动条件下对 NO_x 生成的影响,其中反应预热区域 1 表征图 10 中 CRN2 模型的 PSR1、PSR3 和 PSR5 反应器的停留时间扰动,而反应预热区域 2 表征 PSR2、PSR4 和 PSR6 反应器的停留时间扰动。从图 13 中可以看出总体上 NO_x 生成量随着各个区域停留时间的增加而逐渐增加,在 $T_{\text{ad}}=1981\text{ K}$ 条件下,反应预热区域和火焰锋面区域的停留时间扰动对 NO_x 生成量的影响更显著。Novosselov 和 Park 等^[6-7] 研究也表明燃烧室上游的主火焰区域的 NO_x 生成速率更快,主要原因是高温烟气回流与未燃的燃料空气进行掺混导致混合物温度升高,诱导氧化还原反应速率加快,反应预热区

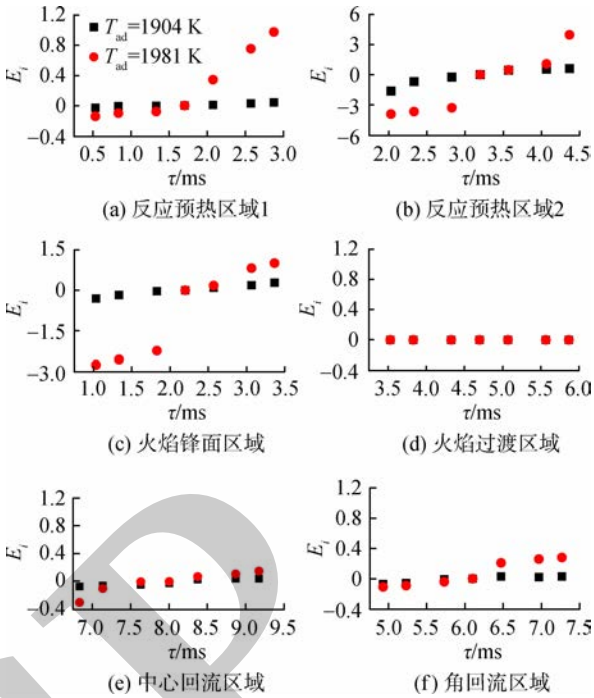


图 13 各个区域停留时间扰动对 NO_x 生成的影响
Fig. 13 Effects of residence time disturbance of each region on NO_x formation

域和火焰锋面区域的停留时间延长促进了热力型 NO_x 的生成。表 2 为 $T_{\text{ad}}=1981\text{ K}$ 条件下各个区域停留时间扰动引起的随机变量 E_i 的单样本统计量,从表中可以看出反应预热区域和火焰锋面区域的平均值和标准差更大,表明了在该区域停留时间扰动的条件下随机变量 E_i 的样本均值偏离程度和不稳定性更大。

3.2.2 烟气回流比

烟气回流通通过与未燃燃料空气混合物进行掺混预热以达到稳定贫预混火焰的目的。在实际的燃烧室设计过程中通过旋流或者高速射流的方式诱导中心涡区域的出现。烟气回流对 NO_x 生成影响机制应该是物理层面上火焰温度、停留时间和化学层面上 O/H/OH 影响 NO_x 生成的复杂过程。

图 14 为整体烟气回流比对 NO_x 污染物排放量的影响,从图中可以看出当 T_{ad} 超过 1904 K 时,随着整体烟气回流比的增加,NO_x 生成量呈现出显著增加的趋势,主要原因为烟气回流量的增加容易导致高温烟气的总反应停留时间延长。当 T_{ad} 较高时,烟气回流掺混导致反应预热区域和火焰锋面区域的温度升高,促进热力型 NO_x 急剧增加。

图 15 为在整体回流比不变的条件下,改变中心回流区和角回流区域之间的烟气回流分配比例对 NO_x 生成影响。从图中可以看出当 $T_{\text{ad}} =$

表 2 单样本统计量表

Table 2 Descriptive table of one-sample statistics

区域	平均值	标准差	标准偏差	最小值	最大值
反应预热区域 1	0.2486	0.45138	0.17061	−0.14	0.97
反应预热区域 2	−0.7700	2.94635	1.11361	−3.91	3.93
火焰锋面区域	−0.7900	1.65523	0.62562	−2.75	1.01
火焰过渡区域	−0.0001	0.00136	0.00052	0	0
中心回流区域	0.0400	0.07000	0.02646	−0.03	0.15
角回流区域	0.0729	0.17066	0.06450	−0.11	0.28

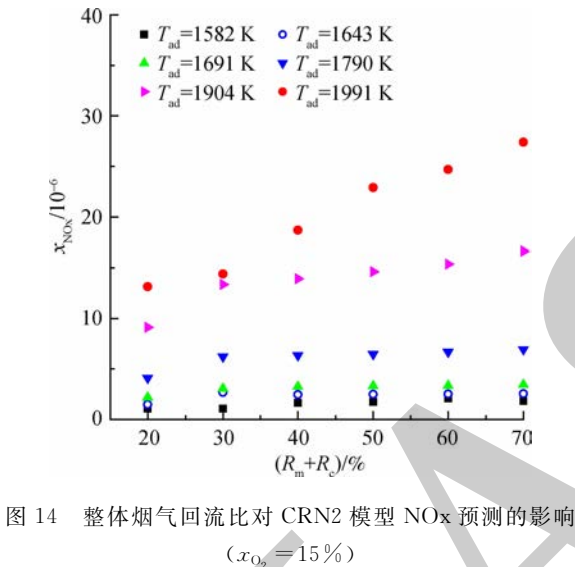


图 14 整体烟气回流比对 CRN2 模型 NOx 预测的影响 ($x_{O_2}=15\%$)

Fig. 14 Effect of overall flue gas reflux ratio on NOx formation in CRN2 model ($x_{O_2}=15\%$)

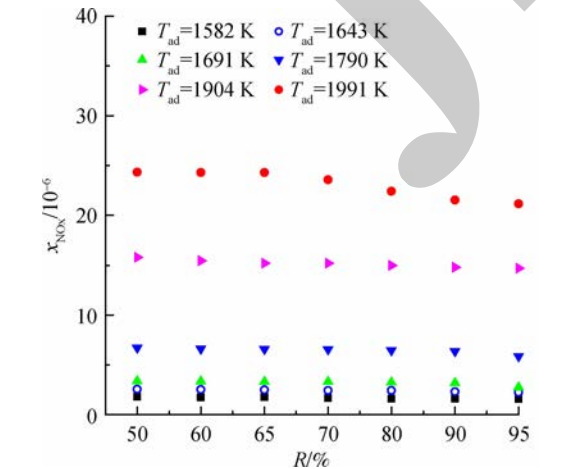


图 15 烟气回流分配比例对 CRN2 模型 NOx 预测的影响 ($x_{O_2}=15\%$)

Fig. 15 Effect of distribution ratio of flue gas recirculation on NOx prediction in CRN2 model ($x_{O_2}=15\%$)

1981 K 时,随着中心回流烟气的增加,NO_x 污染物呈现出逐渐降低的趋势。图 15 表明在整体回流比不变的条件下抑制角回流区域的烟气回流更有利于降低 NO_x 污染物的生成^[30]。

如图 16 所示,在整体回流比不变的条件下,随着中心回流烟气量的增加,角回流区域烟气产物比例减小,PSR8 和 PSR18 表征的角回流区域温度逐渐下降,诱导 PSR1、PSR2、PSR15 和 PSR16 代表的内部火焰区域的温度显著下降,导致热力型 NO_x 减少。而随着中心回流烟气量的增加,PSR10 表征的中心回流区域温度变化不明显,由于大量的未燃燃料空气混合物与中心回流烟气进行掺混形成高温低氧的环境,其 PSR3、PSR4、PSR13 和 PSR14 表征的中心火焰区域的平均温度显著升高。

如图 17 所示,在整体回流比不变的条件下,随着中心回流烟气量的增加,总体上各个反应器区域的 NO_x 分布呈现出逐渐下降的趋势,其中内

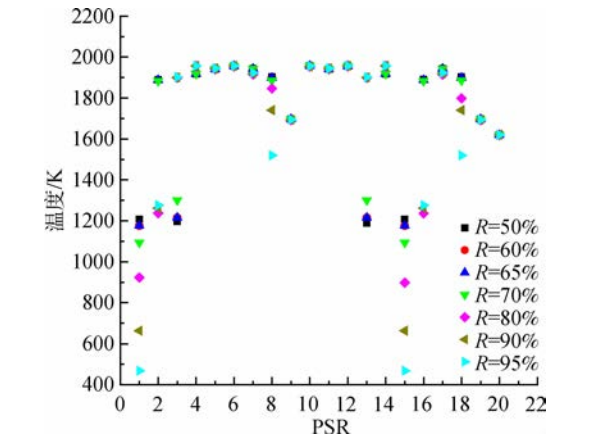


图 16 烟气回流分配比例对 CRN2 模型反应器温度的影响 ($T_{ad}=1981\text{ K}$)

Fig. 16 Effect of distribution ratio of flue gas recirculation on reactors temperature of CRN2 model ($T_{ad}=1981\text{ K}$)

部火焰区域的 PSR1、PSR2、PSR15 和 PSR16 反应器的 NO_x 分布变化更显著。

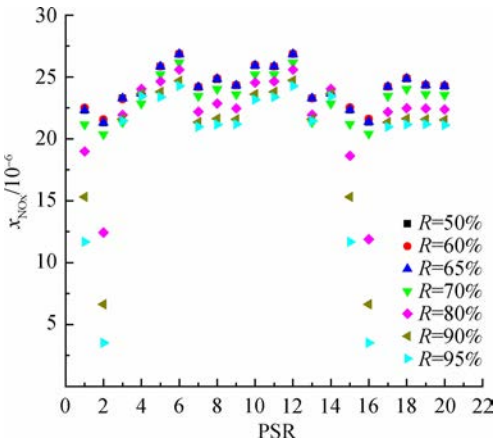


图 17 烟气回流分配比例对 CRN2 模型反应器 NO_x 分布的影响 ($T_{ad}=1981\text{ K}$)

Fig. 17 Effect of distribution ratio of flue gas recirculation on reactors NO_x distribution of CRN2 model ($T_{ad}=1981\text{ K}$)

4 结 论

本研究对贫预混旋流燃烧室进行了 CFD 三维数值模拟,获得了流场、温度场等特征分布。基于燃/空掺混不均匀性、零轴向速度、1800 K 等温线、OH 分布以及 $Da=1$ 等值线等标准,燃烧室被离散划分为低温预热区、火焰锋面区、火焰过渡区、后火焰区、中心回流区以及角回流区。建立了复杂的 CRN 模型对 NO_x 排放特性进行预测,通过敏感性分析和不确定性分析方法研究了烟气回流比例以及停留时间对 NO_x 排放预测的影响。归纳出以下结论:

1) 与简单的 CRN1 模型相比,CFD-CRN 方法建立的复杂 CRN2 模型考虑了燃/空掺混不均匀性、燃烧室中心回流/角回流区域特征、合理的烟气回流掺混方式以及火焰温度分布不均匀特性等因素。在较高的 T_{ad} 条件下,复杂的 CRN2 模型预测 NO_x 排放特性的优势比简单 CRN1 模型更明显;CFD-CRN 数值模拟方法更能够快速有效地预测在高当量比条件下燃烧室出口的 NO_x 排放特性。

2) 在相同停留时间扰动强度条件下,CRN 模型预测 NO_x 的生成量和排放稳定性受到反应预热区域和火焰锋面区域停留时间扰动的影响更显著,在 CFD-CRN 混合模拟方法中应重点关注该区域停留时间的准确性。

3) T_{ad} 越高,总烟气回流比的增加导致反应预热区域和火焰锋面区域的温度明显升高,促进 NO_x 生成的趋势更显著。然而在总烟气回流比不变的条件下,增加中心烟气回流分配比例导致 NO_x 生成量缓慢下降,但 NO_x 排放预测对总烟气回流比的敏感性要高于其分配比例,因而 CFD-CRN 方法应准确计算在较高的 T_{ad} 条件下烟气回流比等关键参数。

参考文献:

[1] VENKATARAMAN K, LEWIS S E, NATARAJAN J, et al. F-class DLN technology advancements: DLN2. 6+[R]. ASME Paper 2011-GT-45373, 2011.

[2] KUNDU A, KLINGMANN J, SUBASH A A, et al. Experimental and numerical investigation of a prototype low NO_x gas turbine burner[R]. ASME Paper 2016-GT-59592, 2016.

[3] TANIMURA S, NOSE M, ISHIZAKA K, et al. Advanced dry low NO_x combustor for mitsubishi g class gas turbines [R]. ASME Paper 2008-GT-50819, 2008.

[4] YOUSEFIAN S, BOURQUE G, MONAGHAN R F D, et al. Review of hybrid emissions prediction tools and uncertainty quantification methods for gas turbine combustion systems[R]. ASME Paper 2017-GT-64271, 2017.

[5] HIRANO K, NONAKA Y, KINOSHITA Y, et al. Large-eddy simulation in an industrial gasturbine combustor for NO_x prediction[R]. ASME Paper 2012-GT-68925, 2012.

[6] NOVOSELOV I V, MALTE P C, YUAN S, et al. Chemical reactor network application to emissions prediction for industrial gas turbine[R]. ASME Paper 2006-GT-90282, 2006.

[7] PARK J, NGUYEN T H, JOUNG D, et al. Prediction of NO_x and co emissions from an industrial lean-premixed gas turbine combustor using a chemical reactor network model [J]. Energy and Fuels, 2013, 27(3): 1643-1651.

[8] LEE D, PARK J, LEE M. A simulation for prediction of nitrogen oxide emissions in lean premixed combustor[J]. Journal of Mechanical Science and Technology, 2011, 25(7): 1871-1878.

[9] LIU F Q, ZHANG K Y, LIU C X, et al. Numerical and experimental investigation on emission performance of a fuel staged combustor[J]. Science China: Technological Sciences, 2014, 57(10): 1941-1949.

[10] 杨小龙, 崔玉峰, 徐纲, 等. 燃气轮机燃烧室化学反应器网络模型研究 [J]. 工程热物理学报, 2009, 30(9): 1585-1588.

[11] YANG Xiaolong, CUI Yufeng, XU Gang, et al. Chemical reactor network approach for a gas turbine combustor[J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2009, 30(9): 1585-1588. (in Chinese)

- mental and numerical studies of pressure effects on syngas combustor emissions[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2016, 102:318-328.
- [12] DRENNAN S A, SHELBURN A F, NAIK C V, et al. Flow field derived equivalent reactor networks for accurate chemistry simulation in gas turbine combustors[R]. ASME Paper 2009-GT-59861, 2009.
- [13] 刘闯, 李鹏飞, 刘勇, 等. 低排放燃烧室化学反应器网络模型的参数化[J]. *航空发动机*, 2016, 42(2):11-16.
LIU Chuang, LI Pengfei, LIU Yong, et al. Parameterized chemical reactor networks models of low-emission combustor[J]. *Aeroengine*, 2016, 42(2):11-16. (in Chinese)
- [14] 马存祥, 邢力, 徐华胜. 基于化学反应网络模型法的低排放燃烧室 NOx 模拟及预测[J]. *燃气涡轮试验与研究*, 2018, 133(2):37-40.
MA Cunxiang, XING Li, XU Huasheng. Simulation and prediction of NOx for a low emission combustor with chemical reaction networks model[J]. *Gas Turbine Experiment and Research*, 2018, 133(2):37-40. (in Chinese)
- [15] INNOCENTI A, ANDREINI A, BERTINI D, et al. Turbulent flow-field effects in a hybrid cfd-crm model for the prediction of NOx and co emissions in aero-engine combustors[J]. *Fuel*, 2018, 215:853-864.
- [16] TONI A D, HAYASHI T, SCHNEIDER P. A reactor network model for predicting NOx emissions in an industrial natural gas burner[J]. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 2013, 35(3):199-206.
- [17] 王子叶, 刘志坦, 邵卫卫, 等. 天然气燃料轴向分级预混燃烧特性研究[J]. *燃气轮机技术*, 2018, 31(4):32-39.
WANG Ziyue, LIU Zhitan, SHAO Weiwei, et al. Investigations of combustion characteristics of a natural gas axial fuel staging burner for gas turbine application[J]. *Gas Turbine Technology*, 2018, 31(4):32-39. (in Chinese)
- [18] 邵卫卫, 赵岩, 刘艳, 等. 燃气轮机燃烧室预混燃烧器天然气燃料/空气掺混均匀性研究[J]. *中国电机工程学报*, 2017, 37(3):795-802.
SHAO Weiwei, ZHAO Yan, LIU Yan, et al. Investigation of fuel/air mixing uniformity in a natural gas premixed burner for gas turbine combustor applications[J]. *Proceedings of the CSEE*, 2017, 37(3):795-802. (in Chinese)
- [19] 王翰林, 雷福林, 邵卫卫, 等. 合成气燃气轮机燃烧室 CFD 模拟的模型选择及优化[J]. *中国电机工程学报*, 2015, 35(6):1429-1435.
WANG Hanlin, LEI Fulin, SHAO Weiwei, et al. Screening and modification of CFD models for syngas turbine combustor[J]. *Proceedings of the CSEE*, 2015, 35(6):1429-1435. (in Chinese)
- [20] WANG Hanlin, SHAO Weiwei, LEI Fulin, et al. Experimental and numerical studies of pressure effects on syngas combustor liner temperature[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2015, 82:30-38.
- [21] CHOI M, SUNG Y, WON M, et al. Effect of fuel distribution on turbulence and combustion characteristics of a micro gas turbine combustor[J]. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2017, 48:24-35.
- [22] 康振亚, 郑洪涛, 贾翔羽, 等. 微型燃气轮机燃烧室预混结构性能研究及改进[J]. *燃气轮机技术*, 2013, 26(1):21-26.
KANG Zhenya, ZHENG Hongtao, JIA Xiangyu, et al. Research and improvement of performance of micro-turbine combustor premixing structure[J]. *Gas Turbine Technology*, 2013, 26(1):21-26. (in Chinese)
- [23] 王翰林. 压力对合成气燃气轮机燃烧室燃烧及排放特性的影响研究[D]. 北京:中国科学院, 2016.
WANG Hanlin. Investigation of pressure effects on combustion and emission characteristics of syngas turbine combustor[D]. Beijing: Chinese Academy of Sciences, 2016. (in Chinese)
- [24] HACKNEY R, SADASIVUNI S K, ROGERSON J W, et al. Predictive emissions monitoring system for small siemens dry low emissions combustors: validation and application[R]. ASME Paper 2016-GT-57656, 2016.
- [25] ZHOU B, BRACKMANN C, WANG Z K, et al. Thin reaction zone and distributed reaction zone regimes in turbulent premixed methane/air flames: scalar distributions and correlations[J]. *Combustion and Flame*, 2017, 175:220-236.
- [26] NGUYEN T H. Chemical reactor network application to predict the emission of nitrogen oxides in an industrial combustion chamber[J]. *Combustion Explosion and Shock Waves*, 2017, 53(4):406-410.
- [27] BRAGG S L. Application of reaction rate theory to combustion chamber analysis[C]// *Aeronautical Research Council. London: Ministry of Defense*, 1953:1629-1633.
- [28] COLORADO A, MCDONELL V. Emissions and stability performance of a low-swirl burner operated on simulated biogas fuels in a boiler environment[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2018, 130:1507-1519.
- [29] 张环. 平行射流柔和燃烧器燃烧特性研究[D]. 北京:中国科学院, 2018.
ZHANG Huan. Investigation of combustion characteristics of parallel jets mild burner[D]. Beijing: Chinese Academy of Sciences, 2018. (in Chinese)
- [30] MONDAL S, DATTA A, SARKAR A. Influence of side wall expansion angle and swirl generator on flow pattern in a model combustor calculated with $k-\epsilon$ model[J]. *International Journal of Thermal Sciences*, 2004, 43(9):901-914.

(编辑:李岩梅、张 雪)