

航空模型燃料与氢气掺混微尺度燃烧数值模拟

陈星赫^{1,2}, 苏 晟^{1,2}, 王 娟^{1,2}

(1. 北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191;

2. 北京航空航天大学 航空发动机气动热力国家级重点实验室, 北京 100191)

摘 要: 对二维三级后台阶微燃烧器中以 3 种碳氢化合物 (69% $C_{10}H_{22}$ 、11% C_9H_{18} 、20% C_9H_{12}) 混合的 Jet A-1 模型燃料与氢气的掺混在纯氧中的燃烧进行了数值模拟, 分析了燃料掺氢比、进气流速对微燃烧器内燃烧特性的影响。结果表明, 所有火焰均可以稳定在微燃烧器第一后台阶 (距离微燃烧器入口 3 mm 处) 之前。随着掺氢比增加, 火焰位置逐渐前移, 火焰长度缩短, 且微燃烧器内部的高温区面积减少, 最高温度降低, 上游燃烧强度更高但下游更低, CO 和 CH_4 质量分数减小, 裂解反应的发生位置前移且裂解产物的质量分数降低。随着入口进气流速增加, 燃烧反应的高温区扩大, 火焰中心位置和火焰前沿向微燃烧器出口移动和拉伸, 掺氢比对壁面温度的影响减小, 微燃烧器中心线 OH 质量分数整体增加, CO_2 质量分数减小, CH_4 质量分数增加, 且裂解反应的发生位置后移且产物质量分数增加。结果表明: 低速下可以掺混少量氢气得到更高的壁温从而获取更多能量。低速可能影响燃烧区燃料燃烧时的化学反应, 从而造成上游的 OH 生成量减小。掺氢比的增加以及流速的降低会使 CO 质量分数波动更加明显。 CO_2 的质量分数最高时的掺氢比为 25%。在高掺氢比和低进气流速下, 乙炔大部分是靠燃料直接裂解生成, 只有少量是通过丙烯的二次裂解生成。

关 键 词: 微尺度燃烧; 掺氢比; 燃烧特性; 火焰位置; 裂解

中图分类号: V219

文献标志码: A

Numerical simulation of micro-scale combustion characteristics of jet fuel surrogate/hydrogen mixtures

CHEN Xinghe^{1,2}, SU Sheng^{1,2}, WANG Juan^{1,2}

(1. School of Energy and Power Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China;

2. National Key Laboratory of Science and Technology on Aero-Engine Aero-thermodynamics, Beihang University, Beijing 100191, China)

Abstract: The combustion of a Jet A-1 surrogate (69% $C_{10}H_{22}$, 11% C_9H_{18} and 20% C_9H_{12}) and hydrogen in pure oxygen was simulated in a two-dimensional three-step back stage micro-scale combustor. The effects of hydrogen mixing ratio and inlet gas flow rate on the combustion characteristics in the combustor were analyzed. The results showed that all the flames can be stabilized before the first stage of the micro burner (3 mm away from the micro burner inlet). With the increase of hydrogen mixing ratio, the flame position gradually moved towards the micro burner inlet, the flame length was shortened, and the high-temperature area inside the micro burner reduced, the maximum temperature decreased, the upstream combustion intensity was higher but the downstream combustion intensity was lower, the mass fractions of CO and CH_4 decreased, the fuel cracking occurred closer to the micro burner inlet and the

收稿日期: 2022-10-06

基金项目: 国家自然科学基金(U2032119)

作者简介: 陈星赫(1998—), 男, 硕士生, 主要从事微尺度燃烧研究。

通信作者: 王娟(1976—), 教授, 博士, 研究方向为催化燃烧、微尺度燃烧与生物质转化。E-mail: juanwang@buaa.edu.cn

引用格式: 陈星赫, 苏晟, 王娟. 航空模型燃料与氢气掺混微尺度燃烧数值模拟[J]. 航空动力学报, 2024, 39(10): 20220769. CHEN Xinghe, SU Sheng, WANG Juan. Numerical simulation of micro-scale combustion characteristics of jet fuel surrogate/hydrogen mixtures[J]. Journal of Aerospace Power, 2024, 39(10): 20220769.

mass fractions of the cracking products decreased. With the increase of inlet gas flow rate, the high temperature zone of combustion reaction expanded, the flame center position and flame front moved and stretched towards the micro burner outlet, the influence of hydrogen mixing ratio on the wall temperature decreased, the OH mass fraction along the micro burner centerline increased, the CO_2 mass fraction decreased, the CH_4 mass fraction increased, and the cracking reactions occurred closer to the micro burner outlet and the mass fractions of the products increased. These results indicated that at low inlet gas flow rate, mixing a small amount of hydrogen can obtain high wall temperature and high energy. Low inlet gas flow rate may affect the chemical reaction in the combustion zone and reduce the amount of OH generated upstream. The increase of hydrogen mixing ratio and the decrease of flow rate can cause more obvious fluctuation of CO mass fraction. The hydrogen mixing ratio was 25% when the CO_2 mass fraction reached the highest amount. At high hydrogen mixing ratio and low inlet gas flow rate, acetylene was mostly generated by direct cracking of the fuel, and only a small amount was generated by secondary cracking of propylene.

Keywords: micro-scale combustion; hydrogen mixing ratio; combustion characteristics; flame position; cracking

便携式动力装置、微型无人驾驶飞行器、微型卫星推进器以及微型化学反应器和传感器等设备对人类发展起着关键作用^[1],需要结构紧凑、寿命长、可立即充电的电源,能够提供从几毫瓦到数百瓦的电力。但是,目前为各类微型电力系统供电的化学电池体积能量密度较低,导致其在小型化方面存在较大的障碍。而以碳氢燃料的微小尺度燃烧为微型电力系统供能从理论上具有高能量比和可快速充能等显著优势^[2-4]。于是,微尺度燃烧得到了广泛的研究和发展。然而与常规尺度燃烧不同,减小尺度会使得微燃烧器的面体比增大,导致火焰与壁面间出现不同的相互作用,如壁面热效应、壁面化学效应以及燃烧与流动之间的耦合效应,这些效应会导致燃烧效率偏低、火焰失稳甚至熄灭。因此,对微小尺度下火焰稳定性以及强化进行研究对其在微型电力系统中的安全和高效应用至关重要。

近年来,研究人员对微小尺度燃烧进行了大量研究,主要关注点在于催化燃烧^[5-7]、利用特殊结构提高微尺度燃烧火焰稳定性^[8-12]、液体燃料燃烧^[13]以及过焓燃烧^[14-15]。同时,为了使结构简单的微燃烧器中的火焰稳定,一些学者也会尝试微尺度掺混燃烧模式,其中不乏甲烷、丙烷以及氨气与氢气的混合燃烧。Tang 等人^[16]指出,加氢方法可以克服丙烷火焰在微尺度条件下不稳定的缺点。当添加少量氢气时,由于 OH 等重要自由基的增加,火焰位置可以固定,从而明显增加混合物的可燃范围。富氢燃料可进一步降低丙烷的最小易燃通道高度。Peng 等人^[17]对预混 $\text{H}_2/\text{C}_3\text{H}_8/$

空气在带嵌件的微型平面燃烧器中的燃烧特性和热性能进行了实验和数值测试。结果表明,添加氢气有利于微燃烧室的燃烧稳定性,并通过实验研究得到了预混 $\text{H}_2/\text{C}_3\text{H}_8/$ 空气稳定火焰的最低掺氢摩尔分数。任慧敏等人^[18]通过研究甲烷/氢气/氧气预混合在石英玻璃管内的火焰传播,提出随着管径增加,稳定火焰出现在更高当量比情况下,火焰位置更靠近燃烧室入口;掺氢比越高,形成稳定火焰对应的当量比越高,火焰位置更接近出口;低流速下,稳定火焰的位置随当量比的变化更为敏感,随着入口流速的增加,稳定火焰的位置逐渐向出口移动。周明月等人^[19]在石英玻璃管和陶瓷管组成的圆管微燃烧器内进行氢气/甲烷/空气的催化燃烧实验,得出了维持稳定燃烧的入口流速下限随混合比的增大而减小,但随当量比的增大而先减小后增大的结论。苏航等人^[20]设计了一个特征间距仅为 0.45 mm 的微尺度定容燃烧室,研究了丙烷/氢气/空气预混火焰在该燃烧室内的传播以及加速过程。提出掺氢比例以及初始压力的提升均能使得微尺度火焰传播进气流速提升。Yan 等人^[21]研究了氢辅助催化甲烷燃烧,结果显示,当燃料的氢含量以固定的等值比值增加时,点火温度会显著降低,同时点火温度的时刻加快,甲烷转化率也相应上升。这些研究结果对优化微尺度燃烧的燃料有重要意义。Wierzbicki 等人^[22]利用实验的方法在微尺度热再循环燃烧室中对比了两种合成航空燃料($\text{C}_{11.9}\text{H}_{25.4}$ 和 $\text{C}_{10.9}\text{H}_{23.4}$)与传统石油基航空燃料 JP-8($\text{C}_{11.9}\text{H}_{23.3}$)的混合燃烧特性(50% 合成燃料和 50% JP-8)。结

果表明, 燃料的组成在火焰稳定性和热性能中起着突出的作用。

综上所述, 微尺度条件下的混合燃料燃烧主要是一些简单的烷烃燃料掺混燃烧, 而大分子碳氢化合物能量密度远高于小分子烷烃, 可以在热光伏应用中释放出更多能量。且 Wierzbicki 等人侧面证明了大分子液态燃料在微尺度燃烧中的可行性, 因此, 有必要对其进行进一步的研究。另外, 文献中掺混燃烧的微燃烧器结构也较为简单, 以圆管类微燃烧器为主, 研究的方法主要是实验和模拟两类。

与普通的圆柱形微燃烧器相比, 增加了三级后台阶的微燃烧器更有利于复杂碳氢化合物燃烧的火焰稳定^[23]。且基于计算流体动力学(CFD)的数值模拟已被证明是分析各种条件下燃烧性能的有效方法。因此, 本文采用 CFD 模拟的方法, 分析航空煤油模型燃料(由 3 种碳氢化合物组成)掺混氢气与纯氧在三级后台阶微燃烧器中的燃烧, 通过改变掺氢比和进口进气流速, 系统地研究两者对于航空煤油模型燃料在微燃烧器中的燃烧特性的影响, 希望能为其他微尺度燃烧相关研究作参考。相关的实验结果将会在以后的成果中进行发表。

1 数值模型与验证

1.1 物理模型

本文采用了一种三级后台阶微型燃烧器, 如图 1 所示。微燃烧器的长度 L 为 10 mm, 高度 H 为 2 mm, 通道高度 h 为 1 mm, 设置三级后台阶的位置位于距离微燃烧器入口 3、5、7 mm 处, 每一级凸台高度 d 为 0.1 mm, 由此形成了三级突扩微燃烧器。将微燃烧器内部某处与入口间的横向距离定义为 X , 进气流速定义为 v , 燃料掺氢比(体积分数)定义为 φ 。由于流体区域的宽高比为 10, 根据参考文献 [8], 使用 2D 模型能够满足数值计算的精度要求。

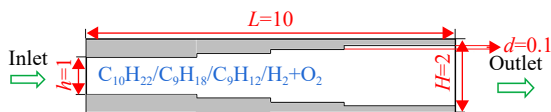


图 1 微燃烧器物理模型(单位: mm)

Fig. 1 Physical model of micro burner (unit: mm)

1.2 数值模型

由于大分子燃料的燃烧容易出现火焰失稳甚

至熄火, 本文即选择氧气为助燃剂而非空气, 同时当量比设定为 1。借助流体力学仿真软件 Fluent 对 Jet A-1 模型燃料掺混氢气与氧气预混燃烧过程进行了二维数值模拟, 采用 SIMPLE(semi-implicit method for pressure linked equations)方法实现了压力和进气流速的耦合。在本研究中, 由于雷诺数(微燃烧室入口处的 Re)小于 500, 因此采用层流模型和稳态模型。Saffaripour 等人^[24]通过 DRGEP(directed relation graph with error propagation)方法对 Dagaut 等人^[25]提出的 2 185 个反应物与 8 217 个反应的详细的煤油反应动力学机理进行了简化, 得到了以 3 种碳氢化合物(包括 69% $C_{10}H_{22}$ 、11% C_9H_{18} 和 20% C_9H_{12} 的混合物)来模拟 Jet A-1 的 224 个反应物与 1975 个反应的反应动力学机理, 并且增加了由 Slavinskaya 等人^[26]提出的多环芳香烃的反应机制, 最终得到了 248 个反应物和 2 089 个反应的 Jet A-1 模型燃料的反应动力学机理, 并用实验和数值模拟证明了此机理可靠。因此, 本文采用此反应动力学机理。混合物的密度由不可压缩理想气体定律计算。边界条件如下: 入口边界条件为入口进气流速和组分质量分数, 由 Jet A-1 + H_2 与 O_2 的当量比为 1 确定。进气温度取为 300 K。出口边界条件为自由流出口。流固界面处于热耦合状态, 在流固界面处采用无滑移和零扩散通量物种边界条件。燃烧室壁面材料采用不锈钢, 比定压热容为 502.48 J/(kg·K), 导热系数为 16.27 W/(m·K)。在微燃烧室外壁, 考虑了对流换热和辐射换热。表面传热系数和壁面发射率分别设定为 15 W/(m²·K)和 0.92。为了使火焰更容易稳定, 点火温度设置为 3 000 K, 且采用整管加热的方式。反应压力设置为 1 atm (1 atm=101 325 Pa)。忽略壁面效应。根据预混合气体的掺氢比、进气流速两个参数, 分别设置了 15 个工况, 如表 1 所示。

表 1 各工况下的掺氢比及进气流速

Table 1 Hydrogen mixing ratio and inlet gas flow rate under various working conditions

工况	$\varphi/\%$	$v/(\text{m/s})$
Case 1	0	5
Case 2	0	7
Case 3	0	10
Case 4	25	5
Case 5	25	7
Case 6	25	10

续表		
工况	$\phi/\%$	$v/(\text{m/s})$
Case 7	50	5
Case 8	50	7
Case 9	50	10
Case 10	75	5
Case 11	75	7
Case 12	75	10
Case 13	100	5
Case 14	100	7
Case 15	100	10

1.3 网格无关性及实验验证

由于网格的尺寸和数量对计算精度和时间均有影响,因此进行了网格无关性验证。选取常规燃料氢气为代表,划分了4种不同数量的网格,分别为4 100、8 000、12 500、50 000。将4种网格获得微燃烧器中心线温度分布进行对比,如图2所示。可以看出,虽然4种网格的温度曲线均较为接近,但在微燃烧器的尾部,网格数12 500(红线)获得的计算结果更加接近网格数50 000(蓝线)。因此,选择网格数12 500进行计算,由于存在后台阶,流道部分在横向与一些固体域高度一样,且壁面厚度仅为0.2 mm,因此流道与固体域同时加密,且网格尺寸为 $\Delta x = \Delta y = 0.04 \text{ mm}$ 。

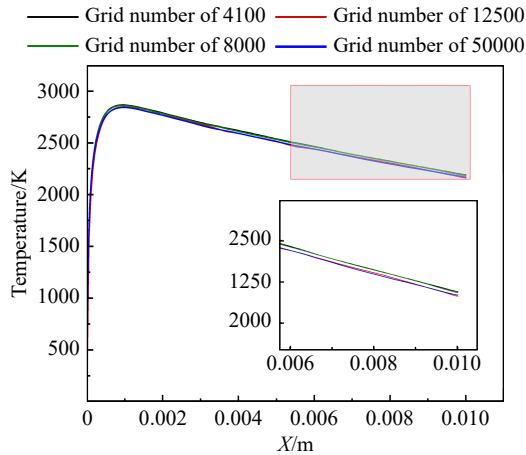


图2 不同网格数微燃烧器中心线温度分布
Fig. 2 Temperature distribution at micro burner centerline with different grid numbers

2 结果与讨论

2.1 掺氢比和进气流速对温度的影响

2.1.1 掺氢比和进气流速对微燃烧器内温度场的影响

为了考查燃料掺氢比、进气流速对微燃烧器

温度场及火焰位置的影响,将 Case 1 ~ Case 15 模拟后的温度云图排列如图3所示(图中Y为燃烧室纵向的距离)。其中,为了对比,可以将3列图分为3组,即 Case 1、Case 4、Case 7、Case 10、Case 13 为一组,Case 2、Case 5、Case 8、Case 11、Case 14 为一组,Case 3、Case 6、Case 9、Case 12、Case 15 为一组,3组分别对应进气流速为5、7、10 m/s 下的温度场。对比每一组内不同掺氢比的5个工况,可以得出同一进气流速下不同掺氢比对燃烧带来的影响。即随着燃料中掺氢比逐渐增加,火焰位置逐渐前移,火焰长度缩短,且微燃烧器内部的高温区面积逐渐减少,最高温度逐渐降低。这是由于氢气相比于 Jet A-1 模型燃料更加容易燃烧,当燃料氢气含量高时,由于点火温度一定,且氢气更容易被点燃,导致燃料的燃烧位置距离微燃烧器入口更近,使得火焰位置前移。同时,由于纯 Jet A-1 模型燃料的燃烧温度远高于纯氢燃烧温度,在燃料掺氢比逐渐增大时,火焰温度的降低以及火焰位置的前移会导致微燃烧器上游向下游传递的热量减少,出现高温面积减少的现象。另外,图3中每一行分别对应同一掺氢比下不同进气流速的温度场,对比每一行内的3个工况,可以得出同一掺氢比下不同进气流速对燃烧带来的影响。进气流速影响反应物和燃烧产物的扩散,因此燃料的进气流速也是影响微燃烧器内温度场的变化的重要因素。从图3可以看出,随着入口进气流速的增加,燃烧反应的高温区逐渐扩大,火焰中心位置和火焰前沿向微燃烧器出口移动和拉伸。

2.1.2 掺氢比和进气流速对壁面温度的影响

外壁面温度是微尺度燃烧在热光伏应用中的重要参数,为此,对比了所有工况下微燃烧器的壁面温度,如图4和图5所示。图4展示了在同一进气流速不同掺氢比下微燃烧器的壁面温度,在进气流速为5 m/s 时,壁面温度从高到低工况掺氢比依次为25%、0%、50%、75%、100%。25%掺氢与50%掺氢的工况在 $X/L=0.8$ 之后接近,此工况下掺混25%氢气可以大幅度提高微燃烧器上中游壁面温度。在进气流速为7 m/s 时,微燃烧器中 X/L 为0.2~0.5处,掺氢比为0%~50%时的3种工况的壁面温度几乎相同,其他位置处的壁面温度从大到小掺氢比依次为0%、25%、50%、75%、100%。在进气流速为10 m/s 时,微燃烧器中 X/L 为2.5~6范围内的壁温在掺氢比为0%~

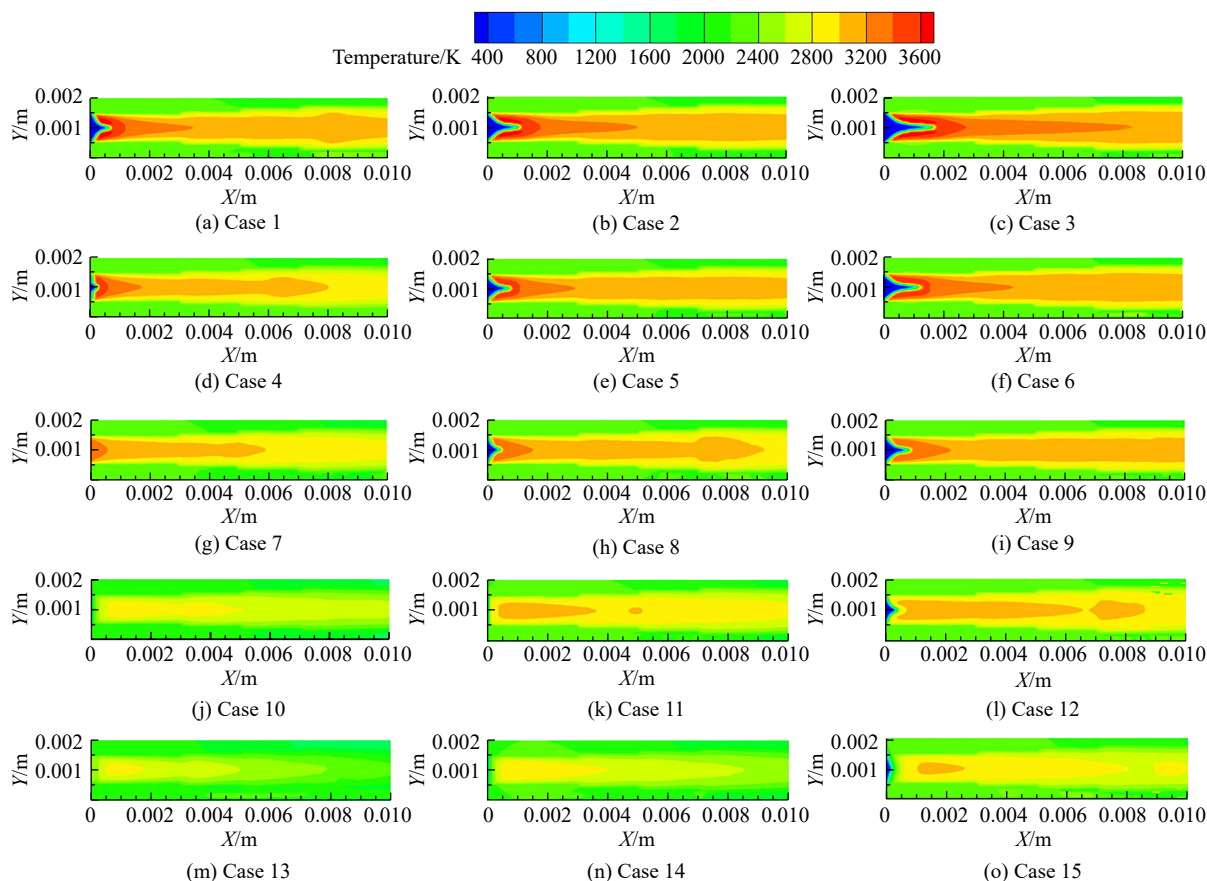


图 3 不同工况下微燃烧器温度分布图

Fig. 3 Micro burner temperature distribution under different working conditions

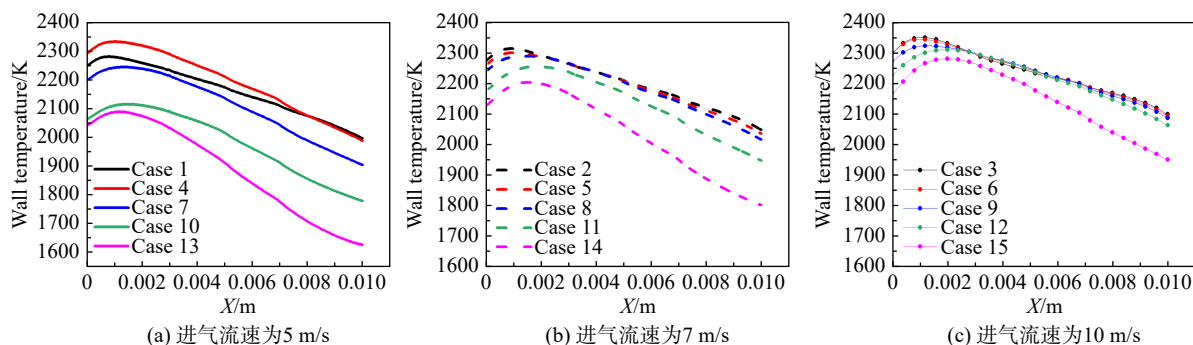


图 4 同一进气流速不同掺氢比下微燃烧器外壁面温度

Fig. 4 Outer wall temperature of micro burner at the same inlet gas flow rate and different hydrogen mixing ratios

75% 下几乎相同, 在这个范围之外, 则是从大到小掺氢比依次为 0%、25%、50%、75% 以及 100%。不难看出, 进气流速增加, 不同掺氢比微燃烧器壁面温度的差距在逐渐减小, 这是因为进气流速对上游向下游传热的影响效果大于掺氢比, 进气流速增加, 上游向下游的传热增加, 内部高温反应区加大, 从而影响壁面温度。所以, 在进气流速较小时可以掺混少量氢气来得到更多的能量, 同时在进气流速较大的工况下, 由于壁温相差不大, 但为了减少碳排放, 可以采用掺氢比较高的

燃料, 这样既能保证能量供应, 又可以减少排放。图 5 为在同一掺氢比不同进气流速下微燃烧器的壁面温度, 除掺氢比为 25% 下的 3 个工况外, 由于进气流速增大可以增加微燃烧器内部的高温反应区, 其他无一例外都是进气流速越高, 微燃烧器外壁面温度越高, 在掺氢比为 25% 的 3 个工况下, 进气流速为 5 m/s 时微燃烧器上游的温度要高于进气流速为 7 m/s 的工况, 在下游又反过来, 这是因为在低速下, 少量的氢气可以大幅度提高上游微燃烧器外壁面温度, 而又由于进气流速较

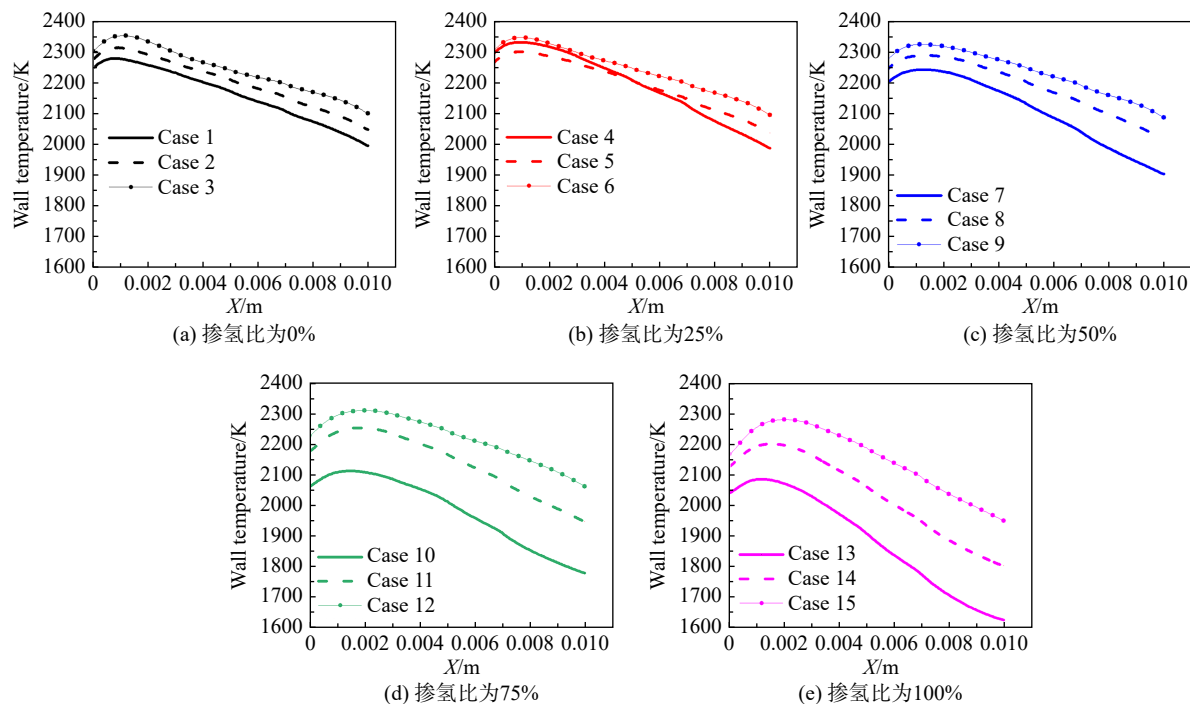


图 5 同一掺氢比不同进气流速下微燃烧器外壁面温度

Fig. 5 Outer wall temperature of micro burner under the same hydrogen mixing ratio and different inlet gas flow rates

小, 导致下游高温反应区减小, 所以会出现上游壁面温度高, 下游壁面温度小的情况。

2.2 掺氢比和进气流速对 OH 质量分数的影响

OH 质量分数是表征微燃烧器内部燃烧强度的重要参数, 将全工况下微燃烧器中心线 OH 质量分数的分布按照同一掺氢比分成 5 组如图 6 所

示。随着掺氢比增加, OH 质量分数的最高点更加靠近微燃烧器入口处, 同时上游 OH 质量分数增加且下游 OH 质量分数降低, 分布曲线变得更加陡峭。燃料中氢气的增加使得上游有更高的燃烧强度, 同时下游高温反应区减少。这是因为相同点火温度下氢气反应更快且相比 Jet A-1 模型

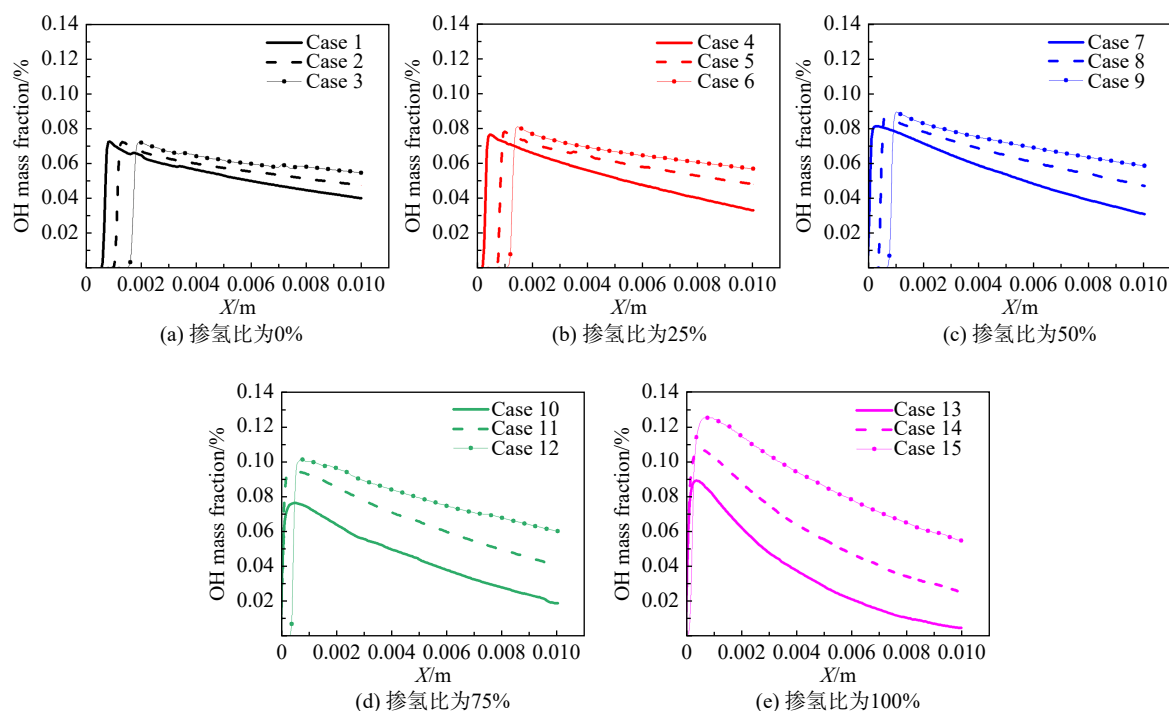


图 6 同一掺氢比不同进气流速下微燃烧器中心线 OH 质量分数分布

Fig. 6 OH mass fraction distribution of micro burner centerline under the same hydrogen mixing ratio and different inlet flow rates

燃料更容易燃烧。进气流速的增加会使 OH 质量分数的最高点更靠近微燃烧器出口, 同时不同掺氢比时, 下游 OH 质量分数的差距减小, 高掺氢比 OH 质量分数的分布受进气流速影响更大。在不同掺氢比下, 进气流速的增加总能使微燃烧器中心线 OH 质量分数整体增加, 因为进气流速的增加有利于微燃烧器上游通过各种途径向下游的传热。需要特别注意的是, 当进气流速为 5 m/s 时, Case 7(掺氢比为 50%)的上游 OH 质量分数大于 Case 10(掺氢比为 75%), 这个规律与进气流速分别为 7 m/s 以及 10 m/s 时呈现的规律相反。在低速下, 由于微燃烧器入口附近温度较低且 Case 10 中 H 含量较高, 使得一些化学反应向着正反应或是逆反应方向移动, 从而使上游的 OH 生成量增加。但在进气流速为 7 m/s 时却呈现出了与进气流速为 10 m/s 一样的规律, 由此推断在进气流速为 5~7 m/s 之间存在一个进气流速使得掺氢比为 50% 与 75% 的工况最大 OH 质量分数相等, 此推断后续还有待研究。

2.3 掺氢比和进气流速对 CO 质量分数的影响

CO 作为研究碳排放与环境污染的评估, 其质量分数也是一个重要参数。为此, 将 Case 1~Case 12 工况下微燃烧器中心线处的 CO 质量分数分布按照同一燃料掺氢比绘制成曲线如图 7 所

示。由于纯氢燃烧没有 CO 生成, 故图中并未展示 Case 13~Case 15 工况。在图中可以明显看出, 掺氢比对于微燃烧器中心线 CO 质量分数分布有着较大影响, 随着燃料中掺氢比例增加, 燃烧位置越来越靠近入口处, 这是由于相同温度下, 燃料氢含量增加导致混合物更容易燃烧, CO 的生成也越快。相同进气流速下 CO 的质量分数减少, 这是因为掺氢比增加使得反应区的温度降低, 从而使主要影响这一现象的反应 $\text{CO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2$ 向着正向反应移动。进气流速也是影响 CO 生成的重要因素。同一掺氢比下, 随着进气流速的增加, 燃烧位置越来越靠近微燃烧器出口, 进气流速的增加会使刚进入微燃烧器的燃料来不及燃烧, 导致反应区后移, CO 的生成也会随之后移。图中可以明显地看出, 中心线上 CO 的质量分数曲线有不同程度的波动, 并会产生 CO 回升的拐点, 随着掺氢比的增加以及流速的降低, 反应区温度也随之降低, 使得波动更加明显, 同时拐点逐渐向入口处移动。拐点的产生主要与以下两个反应相关: $\text{CO} + \text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2$; $\text{OH} + \text{CO} \rightleftharpoons \text{H} + \text{CO}_2$ 。随着温度降低, 反应向正反应方向移动, 反应向着逆反应方向移动。在拐点处, 反应的逆反应速率大于反应的正反应速率。分析进气流速为 5 m/s 下的 4 个工况, Case 1 和 Case 10 中拐点处对应的温

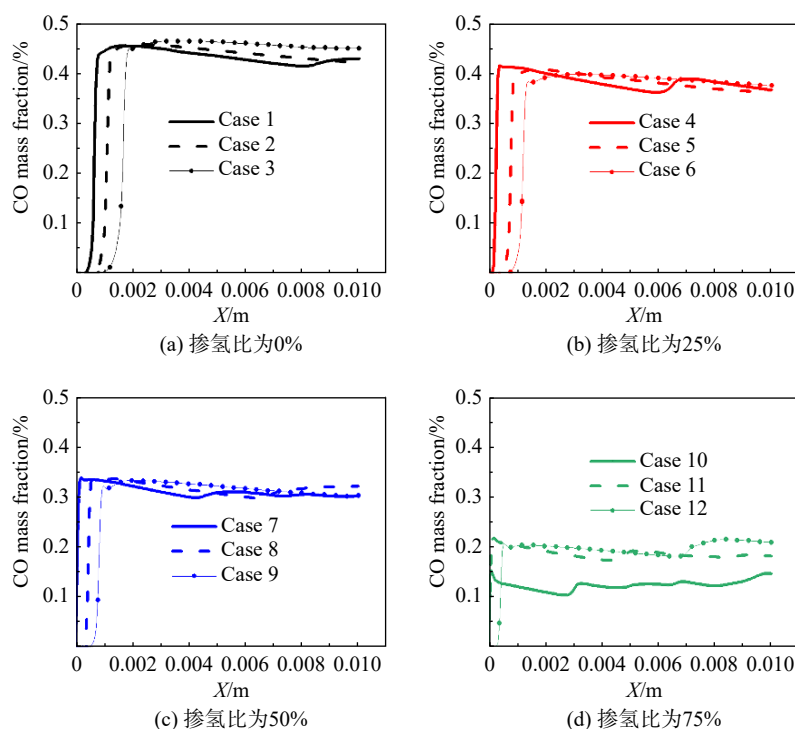


图 7 同一掺氢比不同进气流速下微燃烧器中心线 CO 质量分数分布

Fig. 7 CO mass fraction distribution at micro burner centerline under the same hydrogen mixing ratio and different inlet gas flow rates

度约为 2 100 K, Case 4 和 Case 7 对应的温度大致在 2 150 K, 由于 Case 1 并未掺混氢气, 而 Case 4 和 Case 7 中分别掺混了 25% 与 50% 氢气, 使得同温度下反应中的逆反应速率增加, 所以拐点处的温度高于 Case 1。而在 Case 10 中, 由于掺混了过多的氢使得反应区温度较低, H_2 分解成 H 的量减小, 故需要更低的温度产生拐点。

2.4 掺氢比和进气流速对 CO_2 质量分数的影响

CO_2 质量分数是衡量微燃烧器碳排放的关键参数, 为此将微燃烧器中心线 CO_2 的分布绘制成曲线, 如图 8 与图 9 所示。由于 Case 13~Case 15 为纯氢燃烧, 没有 CO_2 生成, 因此图中并没有显示这 3 个工况的曲线。进气流速是影响 CO_2 质量分数的重要参数, 进气流速越高, 微燃烧器中心线上 CO_2 的质量分数就越低, 这是因为在进气流速较低时, 混合物燃料可以与氧气有充足的接触时间, 并且有充分的反应, 开始燃烧时生成的 CO 和 CH_4 等都可以燃烧生成 CO_2 , 使 CO_2 的质量分数增加。燃料中的掺氢比同样

会影响 CO_2 的质量分数, 在同一进气流速下掺氢比越高的工况 CO_2 的生成位置越靠近微燃烧器入口处, 这与 CO 的生成原因相同, 进气流速的增加会使刚进入微燃烧器的燃料来不及燃烧导致反应区后移, CO_2 的生成也会随之后移。同时, 图 9 表明在不同的进气流速下, 掺氢比达到 25% 时 CO_2 的生成的量最高, 掺氢比为 50% 与 0% 的工况则在不同进气流速下没有差太多, 而 CO_2 的质量分数则是在掺氢比为 75% 的工况最少, 且随着进气流速的增加, 掺氢比为 75% 的工况与其他 3 个工况下 CO_2 质量分数的差距愈发增大。这是因为温度较低以及接触时间较短, 导致燃料并没有非常充分地燃烧。通过图 8 可以大致推断出掺氢比对于微燃烧器 CO_2 生成的规律: 在掺氢比为 0%~50% 之间, 存在一个掺氢比使得微燃烧器的 CO_2 生成达到最大值, 此时为燃料燃烧最充分的最佳掺氢比, 随后逐渐减小, 直至掺氢比达到 100% 时 CO_2 质量分数为 0%, 绘制曲线大致是抛物线形状。

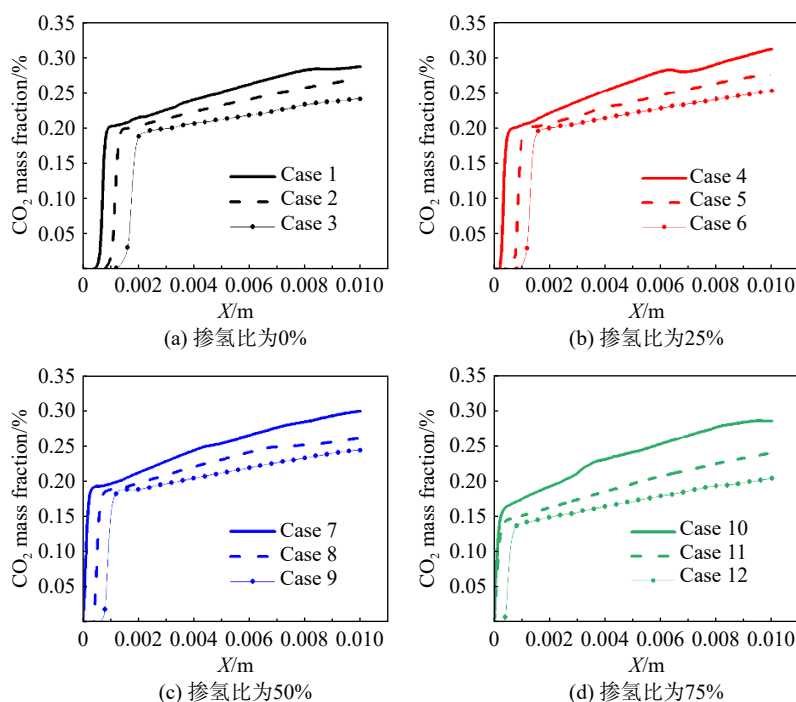


图 8 同一掺氢比不同进气流速下微燃烧器中心线 CO_2 质量分数分布

Fig. 8 CO_2 mass fraction distribution at micro burner centerline under the same hydrogen mixing ratio and different inlet gas flow rates

2.5 掺氢比和进气流速对微燃烧器内燃料裂解及氧化反应的影响

微燃烧器内燃料的裂解反应是影响燃烧特性的重要因素之一, 由图 3 可知, 在所有工况中, 除微燃烧器进口处的进气区域由于未燃烧, 温度较

低, 其他区域的温度都大于 1 600 K, 远高于煤油裂解的温度。温度较高、速度较大且燃料在微燃烧器内停留时间较短的情况下, 燃料更容易裂解而不易形成焦炭。由于混合物燃料最高为碳十, 将中心线上裂解后碳五以下的产物质量分数绘制

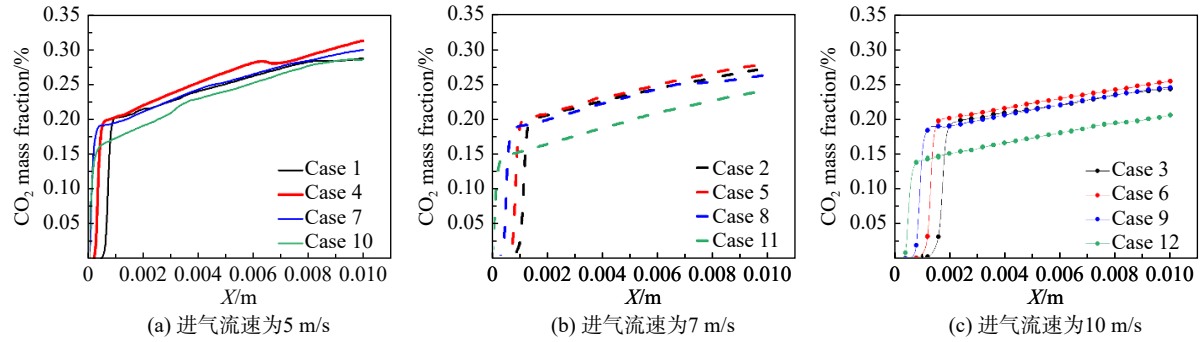
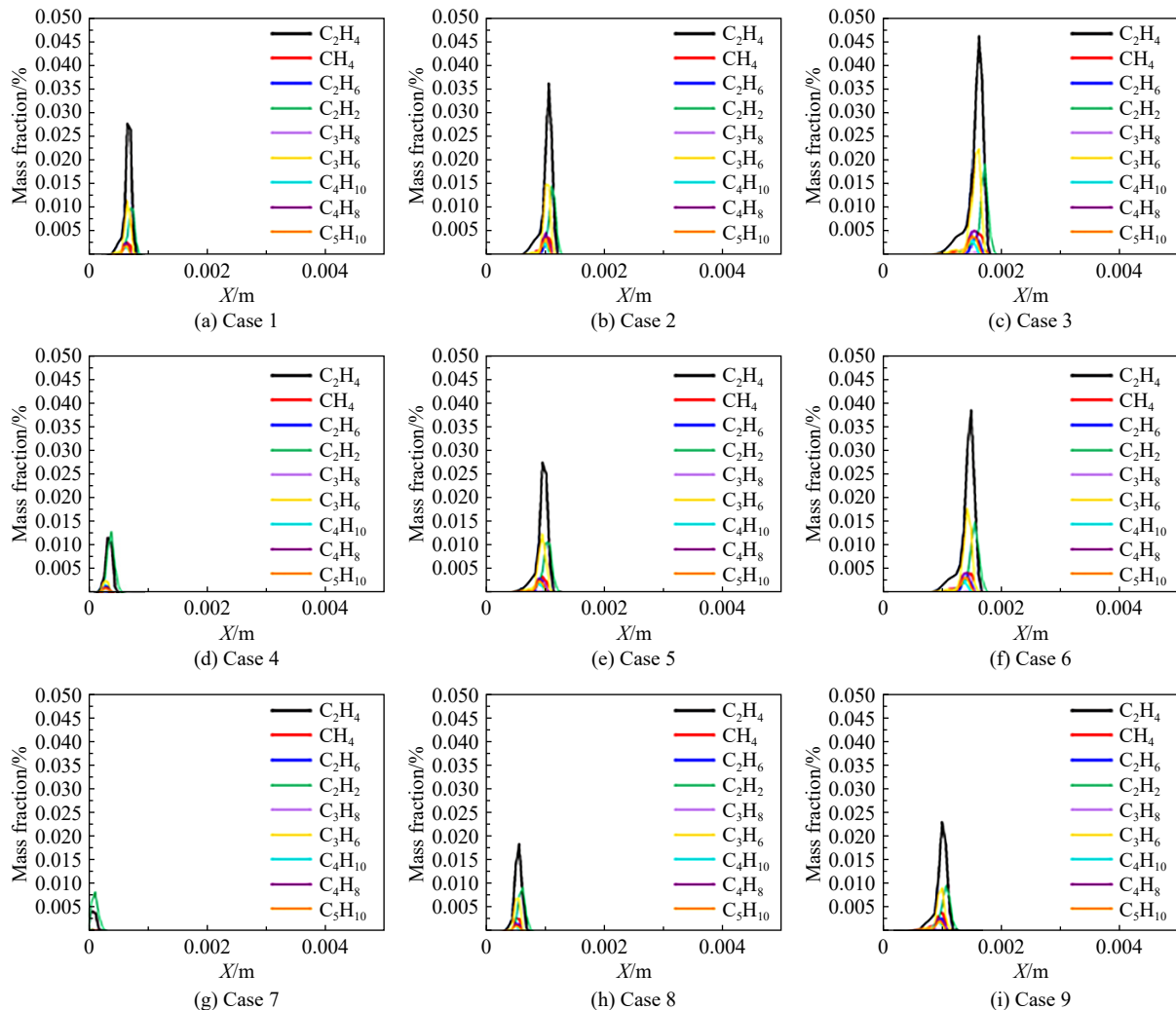
图 9 同一进气流速不同掺氢比下微燃烧器中心线 CO_2 质量分数分布

Fig. 9 CO_2 mass fraction distribution at micro burner centerline at the same inlet gas flow rate and different hydrogen mixing ratios

成曲线如图 10 所示。图 10(a)~图 10(i) 分别为 Case 1~Case 12 工况下裂解产物曲线, 可以看出, 裂解产物主要以烯烃和炔烃为主, 并生成少量烷烃, 乙烯、丙烯以及乙炔的质量分数较大, 烷烃以及高碳烯的质量分数较小, 裂解位置与火焰位置相近。乙炔和甲烷相比其他产物的曲线峰值略有滞后, 这是因为燃料裂解生成丙烯后, 丙烯继续进行裂解反应: $\text{C}_3\text{H}_6 = \text{C}_2\text{H}_2 + \text{CH}_4$, 生成乙炔和

甲烷。

由于燃料中的 H 与 O_2 反应生成 OH 基, 裂解产物继续与 OH 基进行氧化反应, C_2H_4 通过反应 $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{OH} = \text{C}_2\text{H}_3 + \text{H}_2\text{O}$ 生成乙烯基, 再由 C_2H_3 与 O_2 进行反应最终生成 CO 与 CO_2 。同理 C_2H_2 也是通过反应 $\text{C}_2\text{H}_2 + \text{OH} = \text{C}_2\text{H} + \text{H}_2\text{O}$ 生成乙炔基, 再由其跟 O_2 的反应最终生成 CO 与 CO_2 。在不同掺氢比和进气流速下, 微燃烧器内的温度场



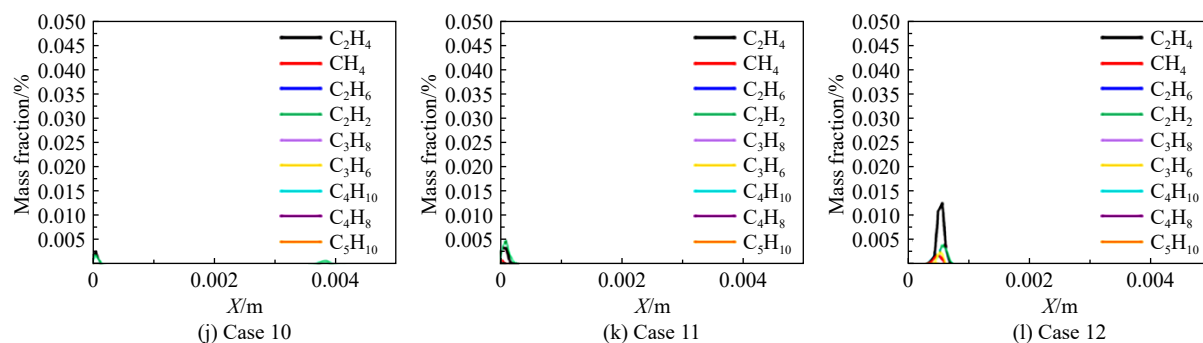


图 10 不同工况下微燃烧器中心线裂解产物质量分数分布

Fig. 10 Mass fraction distribution of pyrolysis products on centerline of micro burner under different working conditions

不同, 因而引起某些化学反应正向或逆向移动, CO 与 CO_2 的质量分数也随其改变, 如文中第 2.3 节和第 2.4 节所讨论的。随着掺氢比的增加, 裂解与氧化反应的发生位置前移, 更加靠近微燃烧器出口, 且裂解产物的质量分数降低。随着进气流速的增加, 裂解反应的发生位置后移, 且产物质量分数增加。在高掺氢比和低速下, 丙烯的生成量将大幅度降低, 且乙炔的质量分数曲线峰值慢慢接近乙烯质量分数曲线, 由于高掺氢比和低进气流速下, 微燃烧器内温度较低, 此时乙炔大部分是靠燃料直接裂解生成, 只有少量是通过丙烯的二次裂解生成。

3 结 论

本文通过数值模拟研究了由 C_9H_{18} 、 C_9H_{12} 、 $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$ 组成的 Jet A-1 模型燃料在二维三级后台阶微燃烧器中掺混氢气的燃烧特性, 并深入探讨了掺氢比与进气流速对于微燃烧器内火焰位置、面温度以及微燃烧器中心线上 CO 、 CO_2 和 CH_4 的质量分数分布的影响, 得到的结论如下:

- 1) 所有火焰均可以稳定在微燃烧器内部, 且都位于第一后台阶(距离微燃烧器入口 3 mm 处)之前。随着燃料中掺氢比逐渐增加, 火焰位置逐渐前移, 火焰长度缩短, 且微燃烧器内部的高温区面积逐渐减少, 最高温度降低。随着入口进气流速的增加, 燃烧反应的高温区逐渐扩大, 火焰中心位置和火焰前沿向微燃烧器出口移动和拉伸。
- 2) 低速下可以掺混少量氢气得到更高的壁温从而获取更多能量。随着进气流速增加, 掺氢比对壁面温度的影响减小。

3) 掺氢比增加使得燃烧强度更高下游更低。速度增加, OH 质量分数增加, 不同掺氢比工况下游的 OH 质量分数差距减小。高掺氢比 OH 质量

分数的分布受进气流速影响更大。低进气流速可能影响燃烧区燃料燃烧时的化学反应, 从而使上游的 OH 生成量减小。推断在进气流速为 5~7 m/s 之间存在一个进气流速使得掺氢比为 50% 与 75% 的工况最大 OH 质量分数相等, 此推断后续还有待研究。

4) 随着掺氢比增加, CO 的质量分数减小, 且 CO 最高的点越靠近入口处。当进气流速增加, CO 生成越来越靠近微燃烧器出口。由于化学反应, CO 的质量分数会在温度下降到一定值时出现回升。

5) 进气流速越高, CO_2 的生成越低。掺氢比越高, CO_2 的生成位置越靠近微燃烧器入口处。掺氢比达到 25% 时 CO_2 的质量分数最高, 掺氢比为 50% 与 0% 的工况下 CO_2 质量分数接近, 掺氢比为 75% 的工况 CO_2 的质量分数最低。进气流速越大, CO_2 质量分数在掺氢比为 75% 的工况与其他工况差距越大。推断掺氢比为 0%~50% 之间, 存在一个最佳掺氢比使得微燃烧器内燃料燃烧最为充分。

6) 裂解产物主要以乙烯和丙烯为主, 其中丙烯又会裂解, 主要生成乙炔。裂解位置与火焰位置相近且生成的产物马上与氧气进行了反应。随着掺氢比的增加, 裂解反应的发生位置前移且裂解产物的质量分数降低。随着进气流速的增加, 裂解反应的发生位置后移且产物质量分数增加。在高掺氢比和低速下, 乙炔大部分是靠燃料直接裂解生成, 只有少量是通过丙烯的二次裂解生成。

参考文献:

- [1] CHIA L C, FENG Bo. The development of a micropower (microthermophotovoltaic) device[J]. *Journal of Power Sources*, 2007, 165(1): 455-480.
- [2] MILCAREK R J, NAKAMURA H, TEZUKA T, et al. Microcom-

- bustion for micro-tubular flame-assisted fuel cell power and heat cogeneration[J]. *Journal of Power Sources*, 2019, 413: 191-197.
- [3] BIEBERLE-HÜTTER A, BECKEL D, INFORTUNA A, et al. A micro-solid oxide fuel cell system as battery replacement[J]. *Journal of Power Sources*, 2008, 177(1): 123-130.
- [4] KAISARE N S, VLACHOS D G. A review on microcombustion: Fundamentals, devices and applications[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2012, 38(3): 321-359.
- [5] MARUTA K, TAKEDA K, AHN J, et al. Extinction limits of catalytic combustion in microchannels[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2002, 29(1): 957-963.
- [6] KAISARE N S, DESHMUKH S R, VLACHOS D G. Stability and performance of catalytic microreactors: Simulations of propane catalytic combustion on Pt[J]. *Chemical Engineering Science*, 2008, 63(4): 1098-1116.
- [7] PAN Jianfeng, ZHANG Rui, LU Qingbo, et al. Experimental study on premixed methane-air catalytic combustion in rectangular micro channel[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2017, 117: 1-7.
- [8] NORTON D G, VLACHOS D G. Combustion characteristics and flame stability at the microscale: a CFD study of premixed methane/air mixtures[J]. *Chemical Engineering Science*, 2003, 58(21): 4871-4882.
- [9] KANG Xin, VEERARAGAVAN A. Experimental investigation of flame stability limits of a mesoscale combustor with thermally orthotropic walls[J]. *Applied Thermal Engineering*, 2015, 85: 234-242.
- [10] ZUO Wei, JIAQIANG E, HAN Dandan, et al. Numerical investigations on thermal performance of double-layer four-channel micro combustors for micro-thermophotovoltaic system[J]. *Energy Conversion and Management*, 2017, 150: 343-355.
- [11] SU Yang, CHENG Qiang, SONG Jinlin, et al. Numerical study on a multiple-channel micro combustor for a micro-thermophotovoltaic system[J]. *Energy Conversion and Management*, 2016, 120: 197-205.
- [12] KIM N, KATO S, KATAOKA T, et al. Flame stabilization and emission of small Swiss-roll combustors as heaters[J]. *Combustion and Flame*, 2005, 141(3): 229-240.
- [13] WIERZBICKI T A, LEE I C, GUPTA A K. Combustion of propane with Pt and Rh catalysts in a meso-scale heat recirculating combustor[J]. *Applied Energy*, 2014, 130: 350-356.
- [14] VIJAYAN V, GUPTA A K. Combustion and heat transfer at meso-scale with thermal recuperation[J]. *Applied Energy*, 2010, 87(8): 2628-2639.
- [15] FEDERICI J A, VLACHOS D G. A computational fluid dynamics study of propane/air microflame stability in a heat recirculation reactor[J]. *Combustion and Flame*, 2008, 153(1/2): 258-269.
- [16] TANG Aikun, DENG Jiang, CAI Tao, et al. Combustion characteristics of premixed propane/hydrogen/air in the micro-planar combustor with different channel-heights[J]. *Applied Energy*, 2017, 203: 635-642.
- [17] PENG Qingguo, WEI Jia, YANG Wenming, et al. Study on combustion characteristic of premixed H_2/C_3H_8 /air and working performance in the micro combustor with block[J]. *Fuel*, 2022, 318: 123676.
- [18] 任慧敏, 潘剑锋, 卢青波, 等. 微通道内甲烷/氢气/氧气预混合火焰传播特性[J]. *燃烧科学与技术*, 2019, 25(3): 213-219.
- REN Huimin, PAN Jianfeng, LU Qingbo, et al. Characteristics of premixed methane/hydrogen/oxygen flame propagation in microchannel[J]. *Journal of Combustion Science and Technology*, 2019, 25(3): 213-219. (in Chinese)
- [19] 周明月, 杨卫娟, 邓尘, 等. 微型圆管内氢气/甲烷/空气催化燃烧实验[J]. *浙江大学学报(工学版)*, 2015(12): 2276-2281.
- ZHOU Mingyue, YANG Weijuan, DENG Chen, et al. Experiments on hydrogen/methane/air catalytic combustion in micro tube [J]. *Journal of Zhejiang University (Engineering Science)*, 2015(12): 2276-2281. (in Chinese)
- [20] 苏航, 霍杰鹏, 汪小慈, 等. 掺氢对微尺度空间内预混层流火焰转捩爆燃特性的影响[J]. *燃烧科学与技术*, 2021, 27(1): 23-28.
- SU Hang, HUO Jiepeng, WANG Xiaohan, et al. Effects of hydrogen blending ratio on the characteristics of deflagration transition for laminar premixed flame in a micro-scale space[J]. *Journal of Combustion Science and Technology*, 2021, 27(1): 23-28. (in Chinese)
- [21] YAN Yunfei, PAN Wenli, ZHANG Li, et al. Numerical study on combustion characteristics of hydrogen addition into methane-air mixture[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2013, 38(30): 13463-13470.
- [22] WIERZBICKI T A, LEE I C, GUPTA A K. Performance of synthetic jet fuels in a meso-scale heat recirculating combustor[J]. *Applied Energy*, 2014, 118: 41-47.
- [23] TAN Yan, JIAQIANG E, CHEN Jingwei, et al. Investigation on combustion characteristics and thermal performance of a three rearward-step structure micro combustor fueled by premixed hydrogen/air[J]. *Renewable Energy*, 2022, 186: 486-504.
- [24] SAFFARIPOUR M, VESHKINI A, KHOLGHY M, et al. Experimental investigation and detailed modeling of soot aggregate formation and size distribution in laminar coflow diffusion flames of Jet A-1, a synthetic kerosene, and n-decane[J]. *Combustion and Flame*, 2014, 161(3): 848-863.
- [25] DAGAUT P, KARSENTY F, DAYMA G, et al. Experimental and detailed kinetic model for the oxidation of a Gas to Liquid (GtL) jet fuel[J]. *Combustion and Flame*, 2014, 161(3): 835-847.
- [26] SLAVINSKAYA N A, Riedel U, Dworkin S B, et al. Detailed numerical modeling of PAH formation and growth in non-premixed ethylene and ethane flames[J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(3): 979-995.

(编辑: 秦理曼)