

文章编号: 1001-2486(2011)04-0030-04

含水乙醇燃烧的对冲扩散火焰数值研究*

席文雄, 李清廉, 康忠涛, 钟 战, 王振国
(国防科技大学 航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073)

摘要:为加深对低浓度乙醇燃气发生器燃烧过程化学动力学过程的理解,分析水组分在燃烧过程中所起的作用,利用对冲扩散火焰模型对不同浓度下的火焰结构进行了数值分析,并虚拟了一种惰性水组分以区分物理机制和化学机制对燃烧过程产生的影响。研究结果显示,随着乙醇浓度的不断降低,火焰锋面呈现出向燃料侧的整体移动趋势;随着浓度向极限浓度的趋近,化学动力学特征表现为二次释热区的消失;水组分的化学机制将在低浓度极限下发挥作用,并表现出对反应过程的抑制作用。

关键词:航空、航天推进系统;含水乙醇;对冲火焰;燃烧;燃气发生器
中图分类号:V231.2 **文献标识码:**A

Numerical Study on a Counterflow Diffusion Flame for Hydrus Ethanol

XI Wen-xiong, LI Qing-lian, KANG Zhong-tao, ZHONG Zhan, WANG Zhen-guo

(College of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: The counterflow diffusion combustion of diluted ethanol in various containments was numerically analyzed in the purpose of getting a deep understanding of chemodynamics in a gas generator with low ethanol concentration. A virtual specie with the same thermodynamic and transport property as water but chemically inert was used to distinguish the interference between physical and chemical mechanism. Results reveal that as the concentration of ethanol decrease, the flame front, along with the disappearance of the second exothermic reaction region, tends towards the fuel side as a whole. The H_2O will exert an inhibitory effect when the concentration of ethanol is reduced to the ultimate low value.

Key words: aerospace propulsion system; hydrus ethanol; counterflow; combustion; gas generator

燃气发生器在航空航天领域应用广泛。它通过氧化剂和燃料的合理配比组织燃烧,获得一定压力、温度条件的燃气。在冲压发动机地面试验系统的高空引射设备中,燃气发生器有多种燃料方案。采用低浓度稀释酒精与氧气作为燃料组合的燃气发生器^[1],能够在保持燃气流量的情况下大大减少试验气体耗量,可降低对气源条件建设的需求,成本低廉。其中水组分作为燃料稀释剂,蒸发潜热大,通过浓度配比可对燃气温度进行大范围调节。水作为调温介质,可采取先燃烧后加水降温或先稀释后燃烧的方法进行。两种方法各有优劣,前者先燃烧后掺水,燃烧过程容易组织,但必须考虑燃烧室局部高温区域的热防护以及火焰的局部猝熄效应对燃烧效率的影响;后者酒精和水混合均匀,系统结构简单,燃烧温度降低,提高了材料的耐久性且出口气流温度分布均匀,但是掺水后将使点火更加困难。酒精掺水后,燃烧温度降低,使得燃料的点火延迟时间变长、火焰传

播速度降低,从而对燃烧室的可靠点火和火焰稳定造成影响,并影响燃烧的完全程度^[2-3]。

水的加入将对燃烧过程造成重要影响,其主要表现在物理机制和化学机制方面。采用水组分稀释的湿燃烧技术在节能减排领域倍受关注。张哲颠^[4]基于 Hat 循环的湿空气燃烧技术,对水组分在燃烧过程中火焰结构、CO 排放特性进行了研究。Zhao^[5]对有水蒸气稀释的甲烷扩散燃烧的对冲火焰进行了数值分析,研究表明由于水组分添加而带来的高浓度 OH 将使 NO_x 浓度上升,然而由于 CH 的降低而使 HCN、N 基团的浓度大大减少,从而在整体上抑制了 NO 的生成。

1 数学物理模型

1.1 基本假设与物理模型

如图 1 所示为含水乙醇扩散燃烧的对冲火焰物理模型。氧气和含水乙醇混合气自相互对称的

* 收稿日期:2010-09-17

基金项目:国家部委基金资助项目

作者简介:席文雄(1984—),男,博士生。

喷嘴喷出后,在碰撞位置形成滞止面。较高温度的火焰面在燃烧放热和组分扩散共同作用下,在滞止面一侧形成。对冲扩散火焰结构简单,有助于分析气流成分和进口条件对扩散火焰结构的影响,多用于不同边界条件下的火焰特征研究。

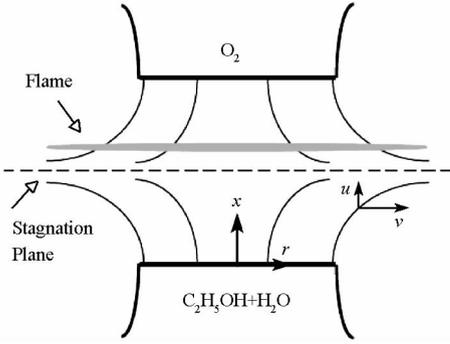


图1 对冲火焰扩散燃烧物理模型

Fig.1 Geometry of the counterflow diffusion flame

为简化模型的分析,假设对冲火焰的轴向和径向的速度随距离呈线性关系。其中,轴向上速度随距离的变化 du/dx , 定义为火焰拉伸率 a_0 。它的倒数值表征了气流的特征停留时间。

系统的全局拉伸率有两种方式定义。一种直接考虑相撞气流的速度变化,以 $a_0 = \frac{u_0 + u_F}{L}$ 表示全局拉伸率。另一种方法考虑了两侧气流密度的差异,以滞止点为基点,分别定义燃料侧和氧化剂侧的全局应变率^[6]。

$$\text{氧化剂侧的拉伸率: } a_0 = \frac{u_0}{L} \left(1 + \frac{u_F \sqrt{\rho_F}}{u_0 \sqrt{\rho_0}} \right),$$

燃料侧的拉伸率: $a_F = \frac{u_F}{L} \left(1 + \frac{u_0 \sqrt{\rho_0}}{u_F \sqrt{\rho_F}} \right)$ 。其中 u 表示气流速度, L 为喷嘴距离,由于燃料侧和氧化剂侧定义的全局拉伸率往往不同,通常以火焰面驻留的一侧计算。本文为了简单起见,采用第一种定义方式。

1.2 数学模型与计算方法

根据质量定律,可得质量守恒方程:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(\rho v r) = 0$$

根据 Von Kaman 的相似性假设,定义:

$$G(x) = -\frac{\rho v}{r}, \quad F(x) = \frac{\rho u}{2}$$

由此,质量守恒方程可简化为:

$$G(x) = \frac{dF(x)}{dx}$$

特征守恒量:

$$H = \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial r} = \text{constant}$$

动量方程:

$$H - 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{FG}{\rho} \right) + \frac{3G^2}{\rho} + \frac{d}{dx} \left[\mu \frac{d}{dx} \left(\frac{G}{\rho} \right) \right] = 0$$

能量守恒方程:

$$\rho u \frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p} \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) + \frac{\rho}{c_p} \sum_k c_{p_k} Y_k V_k \frac{dT}{dx} + \frac{1}{c_p} \sum_k h_k \dot{\omega}_k = 0$$

组分守恒方程:

$$\rho u \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho Y_k V_k) - \dot{\omega}_k W_k = 0 \quad k = 1, K$$

组分扩散速度按混合物平均公式计算:

$$V_k = -\frac{1}{X_k} D_{km} \frac{dX_k}{dx} - \frac{D_k^T}{\rho Y_k} \frac{1}{T} \frac{dT}{dx}$$

$$D_{km} = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / D_{jk}}$$

边界条件:

$$x = 0: F = \frac{\rho_F u_F}{2}, G = 0, T = T_F,$$

$$\rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_F$$

$$x = L: F = \frac{\rho_0 u_0}{2}, G = 0, T = T_0,$$

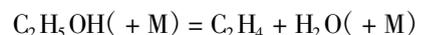
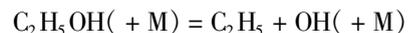
$$\rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_0$$

关于模型参数的详细说明见文献[7]。方程采用 chemkin 中的 oppdif 模块求解。对流项采用迎风格式离散,利用牛顿迭代法和时间积分的伪时间步法改善收敛。在较粗的网格节点上启动计算,根据计算结果,对网格自适应调节,在参数剧烈变化处增加网格节点。

1.3 化学反应机理

乙醇燃烧氧化过程非常复杂,本文采用美国 Lawrence Livermore 国家实验室公布的乙醇高温氧化复杂化学动力学机理和热力学数据^[8]。该乙醇高温化学反应氧化机理由 57 种组分、383 个基元反应组成,能在较大工况范围与试验数据符合良好。Saxena 曾在该机理的基础上添加了氮氧化物机理,对其扩散对冲火焰进行了试验和数值结果的对比研究^[9]。燃烧过程中主要包括消耗乙醇的裂解和脱氢反应以及 $C_1 - C_3$ 分子组分的氧化和裂解过程。

乙醇在高温高压下形成四种同分异构的过渡态,链引发下形成了四种反应通道:



乙醇分子通过三种途径与 OH、H、O、 CH_3 、 HO_2 自由基结合脱氢,每种脱氢途径的几率随温

度等工况条件的变化而变化,并且与化学键的强弱有关。

2 计算结果与分析

2.1 基本火焰特征

如图2所示为拉伸率 $a_0 = 30s^{-1}$ 时,纯酒精和纯氧对冲扩散火焰的温度分布和轴向速度分布图。左侧为燃料流,温度为 400K,右侧为氧气流,温度为 273K,初始气流速度都设为 30cm/s。从图中可以看出,两侧参数呈对称变化趋势。燃料流和氧化剂流从各自喷口喷出后,轴向速度大小沿轴向线性减小,当达到最低速度点时,局部拉伸率 $a_0 = du/dx = 0$,此点为全局拉伸率 $30s^{-1}$ 对应下的冷边界,速度值即为对应的特征速度。此后,随着燃烧放热的影响,速度开始回升,膨胀的气流在滞止点处碰撞,速度降为零。定义火焰温度最高点处为火焰峰面,为燃烧放热区的热边界。从图中可以看出,该条件下火焰峰面位于滞止面靠近氧化剂一侧,滞止面和火焰峰面位置分别约为 0.9cm、1.0 cm。燃料侧的特征速度为 20cm/s,氧化剂一侧的特征速度为 -20cm/s。

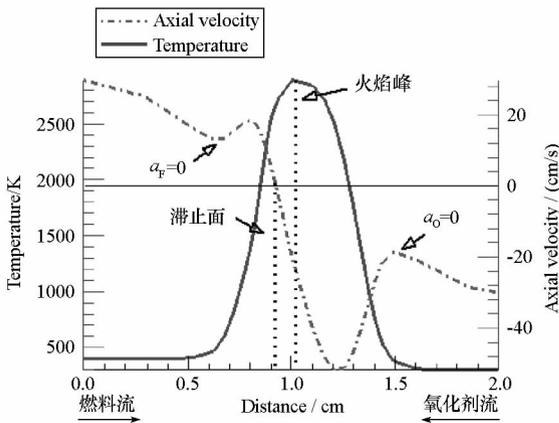


图2 轴向温度、速度分布图

Fig.2 Temperature and velocity along the axis concentration along the axis

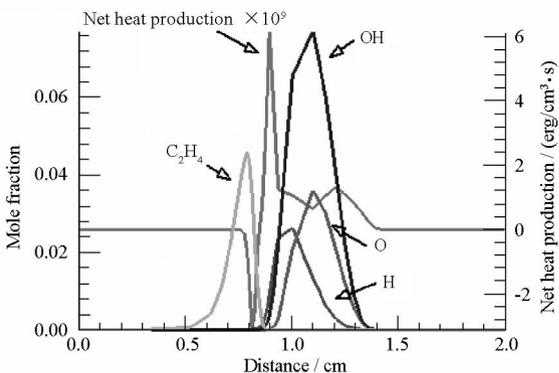


图3 轴向组分浓度分布图

Fig.3 Distribution of specie

如图3所示为活性基团、燃烧释热净生成量的浓度轴向分布图。从图中可以看出,从燃料侧来看乙醇起始反应处,乙醇裂解由反应通道 $C_2H_5OH + M = C_2H_4 + H_2O + M$ 链分支率占优,该反应起始于 0.5cm 处,裂解过程吸收大量的热,出现负的反应净生成热。在轴线位置 0.9 ~ 1.4cm 的火焰区域聚集了大量的活性基团,产生链分支反应,燃烧得以剧烈进行。

2.2 低浓度极限趋近时的火焰变化

水组分比热大,随着其含量的不断上升,势必会影响最高火焰温度,并影响燃烧化学动力学过程。当水含量大到一定程度时,燃烧无法进行,这一浓度极限为含水乙醇燃烧的浓度极限或一定火焰拉伸率下的猝熄浓度。计算过程中通过调整燃料侧乙醇中的水组分浓度,当水组分浓度达到一定程度,方程求解结果显示温度无上升的酒精浓度值即为浓度极限值。

如图4所示为乙醇体积含量分别为 100%、80%、30%、16.7%、12.5%、10% 时在拉伸率为 $30s^{-1}$ 时的温度沿轴线变化图。当乙醇体积浓度低至 10% 时,燃烧已无法建立。通过火焰结构图可以看出,当燃料流中乙醇浓度不断降低时,燃烧向其浓度极限的变化趋势。首先,随着水组分浓度的不断增大,火焰峰值不断降低、火焰面向燃料侧移动。乙醇体积浓度由 100% 向 12.5% 的变化过程中,火焰峰面由 1.0cm 处变化至 0.8cm。结合轴向速度分布图可以看出,在 12.5% 浓度时的滞止面位于 0.85cm 的位置处。因此,在乙醇向低浓度的转变过程中,火焰面的驻留位置跨越了滞止面。图5所示为不同浓度下的轴向速度分布,随着含水量的不断加大,燃料侧的冷边界处的特征速度呈增大趋势,而在氧化剂侧的特征速度呈相反趋势变化,这从另一个侧面表明,燃烧区域向燃料侧整体移动。

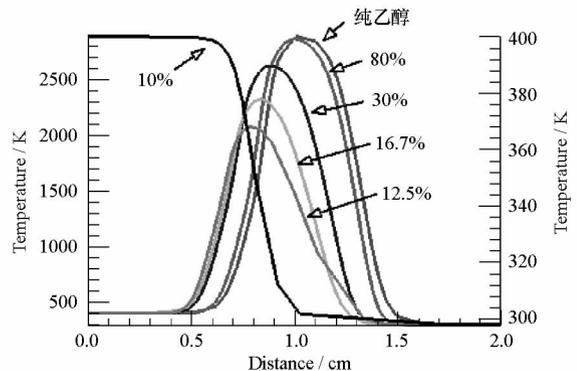


图4 乙醇在不同浓度下的温度分布图

Fig.4 Temperature distribution in various concentration of ethanol

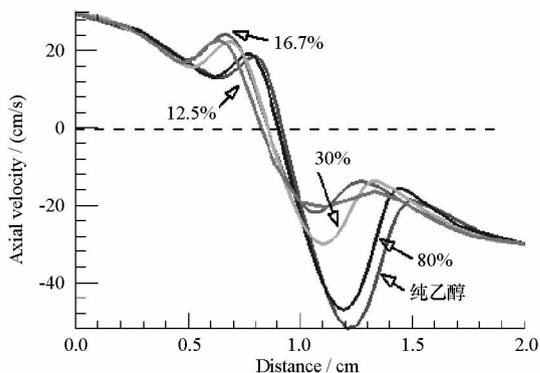


图5 不同乙醇浓度下的轴向速度分布图

Fig.5 Axial velocity distribution in various concentration of ethanol

图6所示为不同浓度下的净释热率。随着乙醇浓度的不断下降,热释放率的起始点不断向燃料流移动,且峰值降低。乙醇浓度较高的情况下,净释热率呈现双峰特征,这时由于未燃烧的小碳分子向氧气流扩散所致,在低浓度直至无法建立燃烧的极限浓度情况下,将伴随这二次释热区的消失。

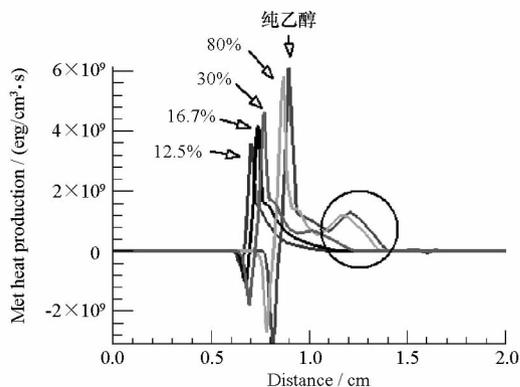


图6 不同浓度下乙醇浓度下的净热释放率沿随轴分布

Fig.6 Distribution of net heat production in various concentration of ethanol

2.3 水组分的物理和化学作用机制

随着水分子含量的不同,除了通过物理机制使反应系统温度降低而影响化学反应通道外,水组分的浓度也会通过化学平衡作用对化学反应途径施加影响。为了隔离水组分参与燃烧过程中的化学机制和物理机制的影响,可通过在反应系统中加入一种化学惰性的虚拟水分子,该分子具有和水组分相同的热力学性质和输运特性,所不同的是该虚拟组分不参与化学系统中的任何基元反应。通过此方法能够单独考察水组分分子的物理输运性质对扩散燃烧产生的影响。

如图7所示为惰性水组分参与燃烧扩散过程中,乙醇浓度分别为100%、80%、30%、16.7%、11.1%、10%、6.25%时在拉伸率 30s^{-1} 条件下的温度沿轴向分布。在乙醇由高浓度向低浓度的变

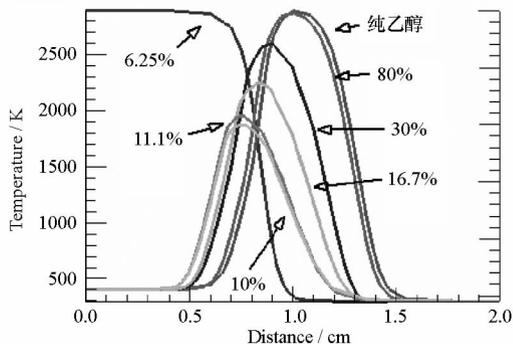


图7 惰性水组分稀释下的温度沿轴向分布

Fig.7 Axial temperature distribution with inert H_2O as diluent

化过程中,轴向上温度分布的变化趋势与真实水组分的算例相同,可见水组分在这一变化过程中物理机制起主要作用。所不同的是,在乙醇浓度为10%的情况下仍可以建立燃烧。对比图4可以推断,在乙醇的极限浓度附近,水组分对化学反应将起抑制作用,使乙醇的浓度极限变窄。

3 结论

(1)在本文研究的条件下,乙醇初始裂解反应主要以吸热通道反应 $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH} + \text{M} = \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2\text{O} + \text{M}$ 为主;

(2)随着乙醇体积浓度的不断降低,火焰锋面呈现出向燃料侧的整体移动,位置相对于滞止面发生了跨越,化学动力学特征主要表现为二次放热区的消失;

(3)水组分的化学机制在较高浓度下,特征不明显,但是在极限浓度附近却对反应的进行起着抑制作用。

参考文献:

- [1] 田章福.低浓度酒精/过氧化氢燃气发生器喷雾燃烧过程研究[D].长沙:国防科技大学,2007.
- [2] 周伟勇.低浓度酒精燃气发生器燃烧性能试验与仿真研究[D].长沙:国防科技大学,2007.
- [3] 钟战.燃气发生器点火与燃烧性能研究[D].长沙:国防科技大学,2008.
- [4] 张哲颠,王岳,聂超群,等.甲烷-湿空气对冲扩散火焰中CO的生成特性[J].工程热物理学报,2006,27(2):203-205.
- [5] Zhao D, Amashita H, Kiyagawa K. Behavior and Effect on Nox Radical Diffusion Flame with Steam Addition[J]. Combustion and Flame, 2002, 130: 352-360.
- [6] Law C K. Combustion Physics[M]. Cambridge University press 2006.
- [7] Kee R J, Dixon-Lewis G, Warnatz J, et al. A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multicomponent Transport Properties[R]. Sandia National Laboratories Report SAND86-8246, (1986).
- [8] Marinov N M. A Detailed Chemical Kinetic Model for High Temperature Ethanol Oxidation[J]. J. Chem. Kinet. 31:183-220 (1999).
- [9] Saxena P, Williams F A. Numerical and Experimental Studies of Ethanol Flames[C]//Proceedings of the Combustion Institute, 2007, 31: 1149-1156.