

CO、CH₄ 混合燃料的熄火极限特性数值研究

王景甫, 仇齐齐, 石 伟, 刘自涛

(北京工业大学 环境与能源工程学院, 传热强化与过程节能教育部重点实验室及
传热与能源利用北京市重点实验室, 北京 100124)

摘 要: 针对 CO、CH₄ 混合燃料, 以层流对冲扩散火焰为对象, 利用详细反应机理 (GRI-Mech 3.0) 模拟计算 CO、CH₄ 混合火焰的熄火极限特性, 解明了最高火焰温度 (也称峰值火焰温度) 随拉伸率和 CO 摩尔分数 (α_{CO}) 的变化规律, 分析了拉伸率和燃料成分的变化对火焰熄火极限的影响, 进而着重讨论了造成这种影响的各种因素, 以及这些因素在燃烧过程中各自产生的对温度的影响. 研究发现: 火焰温度随着拉伸率的增长而明显下降; 随着 α_{CO} 的增大, OH 的生成速率降低, 火焰温度降低, 燃烧强度也随之减小.

关键词: 熄火极限; 最高火焰温度; 详细化学反应机理

中图分类号: TF 055

文献标志码: A

文章编号: 0254-0037(2013)05-0749-05

Numerical Study on Flammability Limit of CO , CH₄ Mixed Fuel

WANG Jing-fu , QIU Qi-qi , SHI Wei , LIU Zi-tao

(Key Laboratory of Enhanced Heat Transfer and Energy Conservation , Ministry of Education and Key Laboratory of Heat Transfer and Energy Conversion , College of Environmental and Energy Engineering , Beijing University of Technology , Beijing 100124 , China)

Abstract: In this paper , numerical investigations on flammability limit of axisymmetric count-flow laminar diffusion flames of CO , CH₄ mixed fuel were conducted by using the detailed kinetic mechanism (GRI-Mech 3.0) . The peak flame temperatures of the flames with different mole fractions of CO and strain rates were obtained , and the influence of the variation of α_{CO} and strain rates on flammability limit was understood . Then the effects of main factors on flame characteristics were studied . It is found that the flame temperature decreases obviously with increasing strain rate . The formation rate of OH is reducing along with the increasing α_{CO} , which leads to the decrease of the flame temperature , as well as the combustion intensity .

Key words: limit of flammability; variation of peak flame temperature; detailed kinetic mechanism

目前我国及全球近 90% 的能量供应来自于化石燃料的燃烧, 可见燃料燃烧仍然是动力生产的主要来源^[1-2]. 这种形势在很长时间内不会有大的改变. 实际能源利用中, CO 是高炉煤气及各种煤气的主要成分; 垃圾焚烧及其热分解生成的主要成分是由 CO、H₂ 和 CH₄ 等气体所组成的混合燃料; 煤炭、

重油等固体液体燃料在其热解、挥发、燃烧反应过程中都会产生大量的 CO 燃气; 甚至火灾中也会产生大量的 CO 气体. 因此研究以 CO 为主及含 CO 的混合燃料火焰的燃烧特性对实现低热值气体燃料的利用、提高能源利用率和低品质能源的再利用、节能减排、火灾的防治有重要的理论价值和实际应用意义.

收稿日期: 2011-11-18.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (50876002) .

作者简介: 王景甫 (1963—), 男, 教授, 主要从事燃烧基础理论与污染控制机理以及气体辐射换热与解析方面的研究, E-mail: jfwang@bjut.edu.cn.

相对于 CH_4 燃烧基本特性的研究, CO 以及含 CO 和以 CO 为主燃料的混合气体燃料的燃烧特性研究较少, 一般是将 CO 作为辅助气体、添加剂, 加入到其他燃料中, 如 Guo 等^[3] 在燃料侧加入 CO 气体, 研究其对甲烷/空气扩散火焰温度和 NO_x 生成的影响. 前人对甲烷及以甲烷为主的混合燃料的火焰结构、燃烧特性及污染物 NO_x 等进行了大量的实验和数值模拟研究, 尤其是在层流领域^[4-9].

本文针对 CO 、 CH_4 混合燃料, 以层流对冲扩散火焰为对象, 采用 CHEMKIN 4.0 软件, 模拟计算了 CO 、 CH_4 混合火焰的熄火极限特性, 进行了详细化学反应机理分析, 探讨和总结了层流对冲扩散火焰的最高火焰温度的变化规律及影响其变化规律的因素.

1 模型及原理

1.1 物理模型和数学模型

1.1.1 物理模型

物理模型采用轴对称、同轴心的 2 喷嘴, 相隔一定距离且处于对置状态, 如图 1 所示. 燃料和氧化剂分别从不同的喷嘴喷入, 在 2 个燃烧器之间形成稳定的轴对称扩散火焰. 喷嘴间距离取 20 mm, 喷嘴直径为 20 mm. 燃料和氧化剂的流速相同且为变量. 图中虚线代表了停滞面, 阴影部分代表形成的扩散火焰.

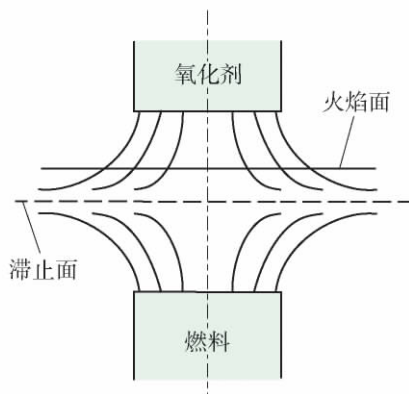


图1 对冲扩散火焰的几何示意图

Fig. 1 Geometry of the axisymmetric opposed-flow diffusion flame

1.1.2 数学模型

稳定状态下, 层流对冲扩散火焰的控制方程(圆柱坐标)为

1) 连续性方程

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

式中: u 、 v 分别为轴向和径向速度分量 (cm/s); ρ 为

质量密度 (g/cm^3).

根据 Von Karman 的验算 ρ/γ 和其他变量只是 x 的函数. 定义

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

则质量守恒简化为

$$G(x) = \frac{dF(x)}{dx} \quad (3)$$

2) 垂直方向上的动量守恒方程

$$H - 2 \frac{d}{dx} \left(\frac{FG}{\rho} \right) + \frac{3G^2}{\rho} + \frac{d}{dx} \left[\mu \frac{d}{dx} \left(\frac{G}{\rho} \right) \right] = 0 \quad (4)$$

式中: 设定特征值 $H = \frac{1}{\gamma} \frac{\partial p}{\partial \gamma}$ 为定值; μ 为动力黏性系数 ($\text{g/(cm} \cdot \text{s)}$).

3) 能量守恒方程

$$\rho u \frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p} \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) + \frac{\rho}{c_p} \sum_k c_p Y_k V_k \frac{dT}{dx} + \frac{1}{c_p} \sum_k h_k \omega_k = 0 \quad (5)$$

式中: c_p 为定压比热容 ($\text{J/(g} \cdot \text{K)}$); Y_k 为物质 k 的摩尔分数; ω_k 为单位体积第 k 种组分的摩尔生成速率 ($\text{mol/(cm}^3 \cdot \text{s)}$); h_k 为第 k 种组分比焓.

4) 组分守恒方程

$$\rho u \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (Y_k V_k) - \omega_k V_k = 0, k = 1, 2, \dots, K \quad (6)$$

式中: V_k 为第 k 种组分扩散速度 (cm/s); K 是反应系统总组分数.

组分的扩散速度按混合物平均速度计算:

$$V_k = -\frac{1}{x_k} D_{km} \frac{dx_k}{dx} - \frac{D_{kT}}{\rho Y_k} \frac{1}{T} \frac{dT}{dx} \quad (7)$$

$$D_{km} = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j=k}^K X/D_{jk}} \quad (8)$$

式中: D_{kj} 为多组分扩散系数; D_{km} 为混合物平均扩散系数; D_{jk} 为双组分扩散系数; D_k^T 为热扩散系数.

燃料和氧化剂在喷嘴处的边界条件为

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

$$\rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_F \quad (9)$$

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

$$\rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_0 \quad (10)$$

对于满足以上边界条件的数学模型进行求解, 可以得到 F 、 G 、 H 、 Y 和 Y_k 等变量的值.

1.2 化学反应机理及计算工况

计算甲烷化学反应过程最佳详细化学反应机理

的软件是 GRI-Mech 软件,其最新的版本是 GRI 3.0^[10]. GRI 3.0 机理可在较大的当量比范围和不同 CO 摩尔分数的情况下被用来模拟计算纯甲烷和 CH₄/CO 混合燃料的燃烧过程.

本文采用 CHEMKIN 软件的 opposed-flow 对流模型和 GRI-Mech 3.0 详细化学反应机理来模拟计算在常温常压下化学当量配比 CH₄/CO-空气对冲扩散火焰. 计算时,燃料侧取 CO 和 CH₄ 五个基础摩尔分数比例分别为: 纯甲烷、80% CH₄-20% CO、60% CH₄-40% CO、30% CH₄-70% CO、10% CH₄-90% CO.

2 计算结果与分析讨论

图 2 所示为当 CO 和 CH₄ 的比例为 0.2:0.8 时模拟计算所得的最高火焰温度随拉伸率的变化曲线图.

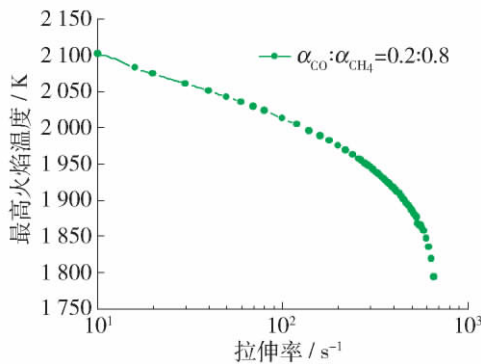
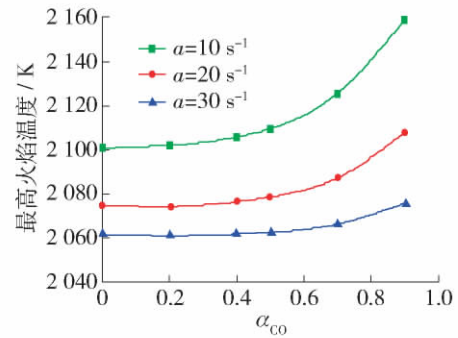


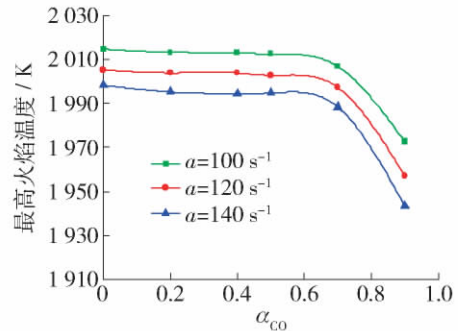
图 2 最高火焰温度随拉伸率的变化曲线
Fig.2 Variation of peak flame temperature

从图中可以看出,火焰温度随拉伸率的增加呈指数降低趋势. 在低拉伸率的情况下,停留时间足够长,燃料能完全燃烧,火焰宽度和燃烧区域都比较大,在忽略辐射散热损失的情况下,燃烧产生的热量最多,火焰温度最高. 随着拉伸率的增大,火焰宽度和燃烧区域变窄,燃料由完全燃烧变为不完全燃烧,单位质量产热量降低,对流散热损失增大,火焰温度随之降低.

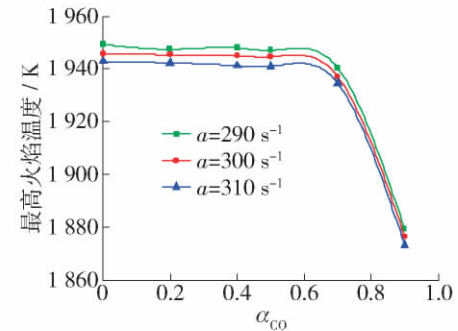
为了进一步分析研究拉伸率与峰值火焰温度之间的关联,在 CO 摩尔分数 α_{CO} 取值为 0~0.9 时,分别计算了在低拉伸率、中等拉伸率和高拉伸率下峰值火焰温度. 结果如图 3 所示. 从图中可以看出,在低拉伸率下,当 α_{CO} 从 0 增加到 0.4 时,最高火焰温度值呈轻微的增长趋势,但随着 α_{CO} 的继续增大,最高火焰温度则迅速增大;在中等拉伸率下,当 α_{CO} 从 0 增加到 0.6 时,最高火焰温度值几乎是不变的,随



(c) 低拉伸率



(b) 中拉伸率



(c) 高拉伸率

图 3 在低、中等和高拉伸率下的最高火焰温度随 CO 摩尔分数的变化曲线

Fig.3 Variation of peak flame temperature with α_{CO} at low, moderate, high strain rates

着 α_{CO} 的继续增大而迅速减小;在高拉伸率下,最高火焰温度的变化趋势和中等拉伸率下的温度变化趋势相似.

这种现象是燃料的绝热平衡温度、停滞时间、化学反应和 Lewis number^[9] 的综合作用的结果. 下面将从各个因素的影响进行分析说明.

1) CO 的绝热平衡温度比 CH₄ 的绝热平衡温度高,在当量比为 1 的情况下,绝热平衡火焰温度随 α_{CO} 值的变化曲线如图 4 所示:绝热平衡火焰温度与 α_{CO} 值成正比,且 α_{CO} 值越大,绝热平衡温度的增幅也越大,即 α_{CO} 值的增大会大幅度提高混合燃料的

绝热平衡火焰温度和最高火焰温度. 绝热平衡温度是导致最高火焰温度随 α_{CO} 的增大而上升的主要原因.

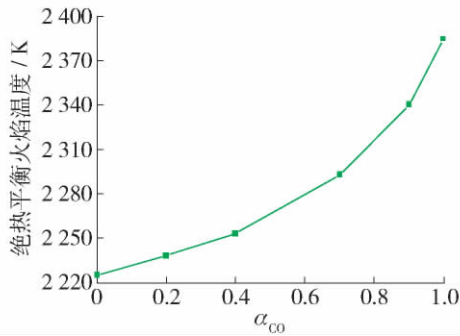


图4 绝热平衡火焰温度随 α_{CO} 值的变化

Fig. 4 Variation of adiabatic temperature with α_{CO}

2) 定义 Lewis 数为热扩散速率与质扩散率之比, 当 Lewis 数大于 1 时, 扩散火焰的最高温度将会降低; 当 Lewis 数小于 1 时, 扩散火焰的最高温度会升高^[5]. 纯甲烷的 Lewis 数略小于 1 而 CO 的 Lewis 数略大于 1, 混合燃料的 Lewis 数应大于纯甲烷的 Lewis 数. Lewis 数随 α_{CO} 的增大而增长, 导致了最高火焰温度的降低.

3) CO 主要的氧化反应有 $\text{OH} + \text{CO} = \text{H} + \text{CO}_2$ (R99) 和 $\text{O} + \text{CO} + (\text{M}) = \text{CO}_2 + (\text{M})$ (R12), 而化学过程反应中主要的支链反应为 $\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$. 其中氧化反应 $\text{OH} + \text{CO} = \text{H} + \text{CO}_2$ (R99) 是整个机理中最为关键的反应. 可以看出, α_{CO} 的增大强化了氧化反应, 增大了氧化反应速率, 同时也需要更多的 OH 和 O 自由基来完成氧化反应, 因此, 支链反应 $\text{H} + \text{O}_2 = \text{OH} + \text{O}$ 也得到了强化. 故 α_{CO} 的增长对化学反应过程以及燃烧强度的净影响取决于氧化反应和支链反应之间的平衡.

从图 5 可以看出: 随着 α_{CO} 的增大, OH 的生成速率降低, $\text{OH} + \text{CO} = \text{H} + \text{CO}_2$ 的反应速率减小. 由于 $\text{OH} + \text{CO} = \text{H} + \text{CO}_2$ 的速率系数与温度成正比^[10], 因此火焰温度降低, 燃烧强度随之减小. 另外, 拉伸率越大, OH 的生成速率越大, 而且 CO 的摩尔分数的增大引起的 OH 生成速率的降低幅度越大, 这说明随着拉伸率的增大, 化学作用成为影响最高火焰温度值的主要因素. 这也是在中等及高拉伸率下 α_{CO} 较大时最高火焰温度随 α_{CO} 的增大而迅速降低, 且拉伸率越大温度降低的幅度和速度越大的原因.

4) 在低拉伸率下, 停留时间足够长, 燃料能完

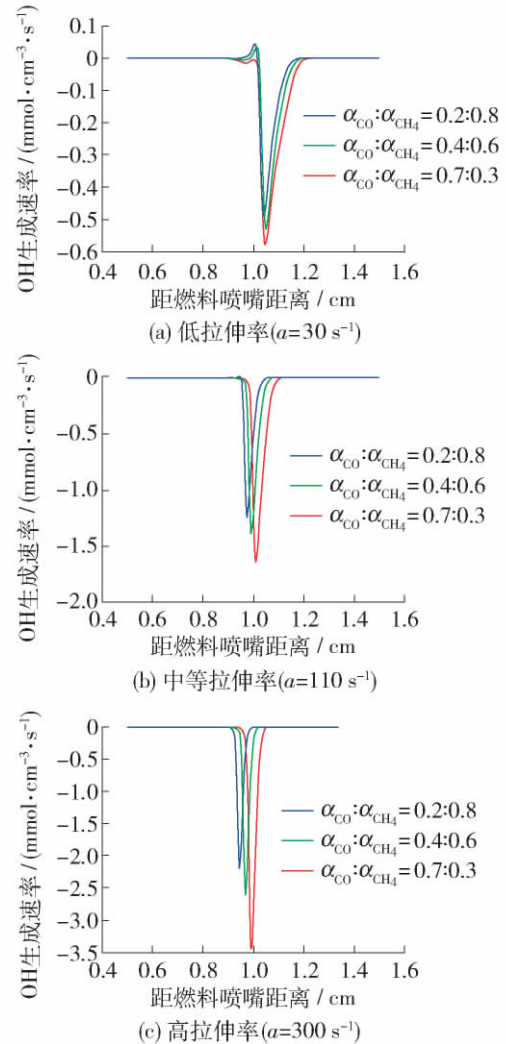


图5 在低、中等和高拉伸率下, 氧化反应 R99: $\text{OH} + \text{CO} = \text{H} + \text{CO}_2$ 的 OH 生成速率

Fig. 5 Formation rate of OH in oxidation reaction R99: $\text{OH} + \text{CO} = \text{H} + \text{CO}_2$ at low, moderate and high strain rates

全燃烧, 燃烧产热量大, 对流散热损失小, 相对于燃料的 Lewis 数和绝热温度, 化学反应作用对最高火焰温度的影响较小, 属于次要因素. 此时, 在 Lewis 数和绝热平衡温度的综合作用下, 最高火焰温度值的变化范围较小.

在中等拉伸率或高拉伸率下, 停留时间减小, 燃烧过程变为不完全燃烧, 燃烧产热量减小. 产热量的减少和对流散热损失的增大成为火焰温度降低的主要原因之一. 另外, 化学作用影响逐渐增强, 尤其当 α_{CO} 较大时, 成为导致温度降低的主要原因. 故在中等或高拉伸率下, 当 α_{CO} 的值较大时, 温度随拉伸率的增大迅速下降.

3 结论

1) 火焰温度随着拉伸率的增长而明显下降,这主要是由于停留时间的缩短造成燃料不完全燃烧以及对流散热损失的增大.

2) α_{CO} 越大,混合燃料的绝热平衡火焰温度的值和增幅也越大.绝热平衡火焰温度的增大是导致最高火焰温度随 α_{CO} 的增大而上升的主要因素.

3) 随着 α_{CO} 的增大,OH 的生成速率降低,火焰温度因此降低,燃烧强度也随之减小.

4) 在不同拉伸率下,最高火焰温度随 α_{CO} 的变化则是绝热平衡温度、燃料 Lewis 数、化学反应和停留时间的综合作用.

参考文献:

- [1] 王海建. 近年来我国能源生产和消费若干现状分析[J]. 新能源, 1999, 21(11): 42-46.
WANG Hai-jian. Some analysis about the current situations of our country's energy production and consumption[J]. New Energy, 1999, 21(11): 42-46. (in Chinese)
- [2] 严传俊. 燃烧学[M]. 西安: 西北工业大学出版社, 2005: 4-7.
- [3] GUO H S, STUART N W. A numerical study on the effect of CO addition on flame temperature and NO formation in counterflow CH₄/air diffusion flame [J]. Journal of Engineering for Gas, 2008, 130(5): 054501.

- [4] WANG J H, HUANG Z H, CHENG L T, et al. Numerical study of the effect of hydrogen addition on methane-air mixtures combustion [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2009, 34: 1084-1096.
- [5] YU G, LAW C K, WU C K. Laminar flame speeds of hydrocarbon-air mixtures with hydrogen addition [J]. Combust. Flame, 1986, 63(3): 339-347.
- [6] WANG J F, TAKASHI N. The effect of radiation reabsorption on NO formation in CH₄/Air counterflow diffusion flames [J]. Combustion Theory and Modeling, 2001, 5(3): 385-398.
- [7] WANG J F, TAKASHI N. Numerical study of radiation reabsorption effect on NO_x formation in CH₄/air counterflow premixed flames [J]. Proceedings of Combustion Institute, 2002, 29(2): 2211-2217.
- [8] WANG J F, TAKASHI N. Radiation reabsorption effects on NO emission from high-temperature air/CH₄ diffusion flames [C]//Proceedings of the 6th ASME-JSME Thermal Engineering Conference. Hawaii: Combustion Theory and Modelling, 2003: 235-239.
- [9] GUO H S, STUART N W. A numerical study on the effect of hydrogen/reformate gas addition on flame temperature and NO formation in strained methane/air diffusion flame [J]. Combust Flame, 2009, 156: 477-483.
- [10] GARDINER W C. Combustion chemistry [M]. New York: Springer-Verlag New York Inc. 1984: 167.

(责任编辑 张 蕾)