

O_2/CO_2 气氛下 CH_4/H_2 /空气层流预混火焰传播特性

尚融雪, 孙浩英, 孙奇琪, 谭鑫悦

(东北大学 资源与土木工程学院, 辽宁 沈阳 110819)

摘 要: 利用本生灯-纹影实验系统及Premix模型,系统研究了 O_2/CO_2 气氛下不同掺氢比掺氢燃气层流预混火焰传播特性.研究发现,GRI3.0机理能较准确预测高含氧量及高掺氢比下掺氢燃气层流火焰传播速度;在 O_2/CO_2 气氛下,掺氢燃气的层流火焰传播速度随着掺氢比的增加显著加快,且速度峰值向富燃侧移动;同时,预混燃气的绝热火焰温度及层流火焰传播速度随含氧量增加而逐渐升高;随着含氧量增加,火焰中大量存在的H自由基能够促进氧化反应 $H+O_2=O+OH$ 的进程,进而提高了预混燃气层流火焰传播速度.

关键词: 层流火焰;富氧燃烧技术;含氧量;化学动力学;掺氢比

中图分类号: X 932 文献标志码: A 文章编号: 1005-3026(2025)06-0147-08

Flame Propagation Characteristics of CH_4/H_2 /Air Laminar Flow Premix Under O_2/CO_2 Atmosphere

SHANG Rong-xue, SUN Hao-ying, SUN Qi-qi, TAN Xin-yue

(School of Resources & Civil Engineering, Northeastern University, Shenyang 110819, China. Corresponding author: SHANG Rong-xue, E-mail: rongxue.shang@foxmail.com)

Abstract: The laminar premixed flame propagation characteristics of hydrogen-enriched gas with different hydrogen mixing ratios in an O_2/CO_2 atmosphere were systematically studied using a Bunsen burner-schlieren experimental system and the Premix model. The results show that GRI3.0 mechanism can provide accurate predictions of the laminar flame propagation velocity of mixtures under high hydrogen mixing ratios and high O_2 concentrations atmosphere. With the increase of hydrogen mixing ratios, the laminar flame propagation velocity of mixtures increase significantly at O_2/CO_2 atmosphere. The peak values of laminar flame propagation velocity slightly shift to the fuel-rich side. Meanwhile, the adiabatic flame temperature and laminar flame propagation velocity of mixtures gradually increase as the O_2 concentration increases. With the increase of O_2 concentrations, the large number of H radicals enhance the dominant promotion of $H+O_2=O+OH$, which contributes to the increase of the laminar flame propagation velocity of mixtures.

Key words: laminar flame; oxygen-rich combustion technology; O_2 concentration; chemical kinetics; hydrogen mixing ratios

作为一种新型清洁替代能源,掺氢天然气能有效改善传统天然气可燃极限范围窄、燃烧速度慢等问题,且利用风电、光电生产富余电力制氢,送入天然气管道供给使用是改善能源利用率的重要途径^[1].但由于氢气具有密度和点火能低、单位质量热值高等特征^[2],使得掺氢燃气(掺氢燃气是指以天然气为基气,掺入氢气的混合气)在生

产、运输及使用中的火灾爆炸危险性增大. O_2/CO_2 燃烧技术作为近年极具应用前景的碳减排技术,其应用逐渐从燃煤、电站、锅炉扩展到钢铁、电力等燃气设备,有利于实现掺氢天然气的安全输运及稳定燃烧^[3]. O_2/CO_2 燃烧技术利用纯氧作为氧化剂,循环烟气作为稀释气体,能够非常容易地从主要燃烧产物中分离出 CO_2 ,完成 CO_2 的捕集,

收稿日期: 2023-12-14

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51804065); 中国博士后科学基金资助项目(2018M631811).

作者简介: 尚融雪(1987—),女,辽宁沈阳人,东北大学副教授.

减少 CO₂ 等温室气体排放并降低碳捕集成本. 与空气助燃条件相比, O₂/CO₂ 燃烧过程中存在较高体积分数的 CO₂, 使燃料预混燃烧反应热力学、化学动力学以及质量输运过程等发生显著变化. 有研究发现, 在 O₂/CO₂ 气氛下, 氧气体积分数达到 30%~40% 时, 燃料燃烧效率较高^[4]. 为保障 O₂/CO₂ 燃烧技术下掺氢燃气能源大规模安全储运, 深入研究其预混燃烧特性具有重要意义, 而火焰传播特性是最重要的内容. 作为能够综合表征燃料热力学、扩散以及化学动力学特性的物化参数, 层流预混火焰传播速度不仅可以作为用来防止燃料不完全燃烧, 指导燃烧器安全高效设计的重要参数^[5], 还能够帮助研究、发展和校核燃料燃烧化学反应动力学机理. 因此, 开展掺氢燃气在 O₂/CO₂ 气氛下预混火焰传播特性的研究, 能为掺氢燃气能源燃烧利用及 O₂/CO₂ 燃烧技术发展提供实验基础及科学依据.

近年来, 学者们对空气条件下掺氢燃气预混燃烧特性进行了大量研究, Shang 等^[6]研究了含有 CO₂ 和 N₂ 稀释组分的 H₂/CH₄ 层流火焰速度, 发现在低掺氢比下, 掺氢燃气层流火焰速度随着掺氢比增加线性增长; Li 等^[7]采用平焰法结合粒子图像测速 (PIV) 系统测量掺氢燃气层流火焰特性, 研究了掺氢比对 CH₄, C₂H₆ 和丙烷层流预混火焰传播速度的影响, 发现随着掺氢比的增加, 其层流火焰传播速度近似线性增加; Duan 等^[2]利用 Chemkin 模拟软件研究稀释气体和氢气富集对预混 CH₄/空气的影响, 发现随着掺氢比的增加, CH₄/H₂ 的绝热火焰温度及层流火焰传播速度也都增加. 此外, 随着富氧燃烧技术的发展及应用, 学者们对 O₂/CO₂ 气氛下单组分燃气燃烧特性也开展了相关研究. Tan 等^[4]通过实验和数值模拟研究发现高含量的 CO₂ 降低了气体燃料的燃烧温度, 提高 CO₂ 气氛下燃烧的含氧量得到了与 N₂ 气氛下相同的燃烧温度; Wang 等^[8]使用热通量法测量高压下 CH₄/O₂/N₂ 和富氧下 CH₄/O₂/CO₂ 火焰的层流燃烧速度, 发现当 CO₂ 体积分数变化时, 绝热火焰温度对层流燃烧速度有主要影响, 当压力增加时, 绝热温度与层流燃烧速度之间的相关性减弱; Konnov 等^[9]选取了 C₂H₆ 和 CH₄ 在 O₂/CO₂ 气氛下进行燃烧实验, 发现含氧量与火焰传播速度呈正相关; Song 等^[10]对富氧条件 (CO₂ 体积分数为 50%~80%) 下的 CH₄ 层流火焰传播速度进行了实验, 认为 CH₄ 在氧气体积分数为

36% 条件下的绝热火焰温度与在空气氛围下的绝热火焰温度一致; Xie 等^[11]测试了 CH₄ 在 O₂/CO₂ 气氛下的层流火焰传播速度, 认为 O₂/CO₂ 气氛通过改变火焰温度改变了层流火焰传播速度; Liu 等^[12]通过 Chemkin 模拟计算了 CH₄ 在 O₂/CO₂ 气氛下的燃烧过程, 发现与 O₂/N₂ 气氛相比, 在 O₂/CO₂ 气氛下燃烧火焰传播速度显著变慢.

综上, 虽然对富氧燃烧技术下掺氢燃气火焰传播特性进行了大量研究, 但燃料掺氢范围较小, 且富氧条件下的研究多集中在单组分燃气燃烧特性上. 为此, 本文利用本生灯-纹影系统, 研究了常温常压下, O₂/CO₂ 气氛下不同掺氢比掺氢燃气层流预混火焰速度变化规律, 其中含氧量 (X_{O_2}) 为 0.21~0.5, 掺氢比 (X_{H_2}) 为 0~0.75, 当量比为 0.6~1.8; 并利用 Chemkin 模拟计算, 探究 O₂/CO₂ 气氛下含氧量对掺氢燃气层流火焰传播特性的影响机制.

1 实验及数值模拟方法

1.1 实验系统

本文利用本生灯-纹影系统研究不同条件下掺氢燃气层流预混火焰传播速度. 实验系统主要由纹影成像系统、配气系统及本生灯燃烧器等组成. 具体实验系统图见文献[6]. 其中, 配气系统主要由燃气瓶、混气罐、质量流量计和球阀组成. 实验中 CH₄, H₂, CO₂ 和 O₂ 的纯度均为 99.99%, 质量流量计控制器均为 D07 系列, 该系列流量计具有较高的精确度, 流量分别为 1, 2, 5 和 10 L/min. 与质量流量计控制器配套的 D08 系列流量显示仪控制气体流量, 该显示仪上设有调节旋钮、数字显示屏, 以及调零、关阀和开启 3 个功能控制开关. 实验前需保证整个配气系统的密闭性良好, 各气体计算公式如下.

掺氢比 X_{H_2} 计算式为

$$X_{H_2} = \frac{x_{H_2}}{x_{H_2} + x_{CH_4}}$$

式中: x_{H_2} 表示混合燃料中 H₂ 的摩尔分数; x_{CH_4} 表示混合燃料中 CH₄ 的摩尔分数.

含氧量 X_{O_2} 计算式为

$$X_{O_2} = \frac{x_{O_2}}{x_{O_2} + x_{CO_2}}$$

式中: x_{O_2} 表示混合气体中 O₂ 的摩尔分数; x_{CO_2} 表示混合气体中 CO₂ 的摩尔分数.

当量比 ϕ 表示为

$$\phi = r/r_{st}$$

式中: r 为燃空比, $r = m_F/m_A$, m_F 表示燃料的质量, m_A 表示氧化剂(通常是空气)的质量; r_{st} 表示标准状态下燃空比。

层流火焰传播速度为

$$v_u^0 = \frac{Q}{A_u}$$

式中: Q 为气体总流量,L/min; A_u 为未燃侧火焰表面积,m²。

未燃侧火焰表面积 A_u 由MATLAB计算得到.具体图像处理过程及详细的实验系统描述可参考文献[6,13].

为保证能在各工况下得到火焰高度合适且准确的锥形火焰,本文使用的本生灯管采用内径为6~8 mm,长度为800 mm的内外壁均光滑的不锈钢管.经计算,本生灯管的长度大于管径的50倍以上^[14],实验工况下预混燃气雷诺数(Re)均在800~1 400之间,可以保证管内气体的充分预混并能变为层流状态^[13].为保证实验的安全,预防回火等危险事故发生,特在本生灯管下端不同位置连接了3个单向阀.纹影成像系统主要由光源、凹面镜和摄像机构成,采用的凹面镜直径为200 mm,焦距为2 000 mm.纹影技术是将气流密度的变化转化为该流场中相对光强的变化,将流场中气流密度变化梯度较大的区域转变为可进一步观察测量的图片.测试系统将光源射出的平行光,通过凹面镜折射成“Z”字型光路,将本生灯火焰放置在“Z”字型光路中央,“Z”字型光路终端通过刀口将部分折射光遮蔽后,调整成像的明暗分布,使摄像机能拍摄出清晰的火焰纹影图片.火焰图像测量及详细处理过程见文献[13].

为了验证实验系统的可靠性,利用本实验方法,在初始温度为300 K、初始压力为1 MPa的条件下测量了纯CH₄在O₂/CO₂气氛下的层流火焰传播速度,并与文献[11,15]有效数据进行了对比.

图1给出了实验工况下,纯CH₄层流火焰传播速度实验测试结果以及先前文献报道的纯CH₄的层流火焰传播速度数据, ϕ 为0.6~1.4.从图中可以看出,先前文献中报道的纯CH₄层流预混火焰传播速度峰值在15.02~19.76 cm/s.在本实验中,测得纯CH₄的层流火焰传播速度在当量比为1.0的条件下达到峰值,为16.95 cm/s,在文献报道的范围内,说明本实验所测得的数据与已有文献数据具有良好的一致性.

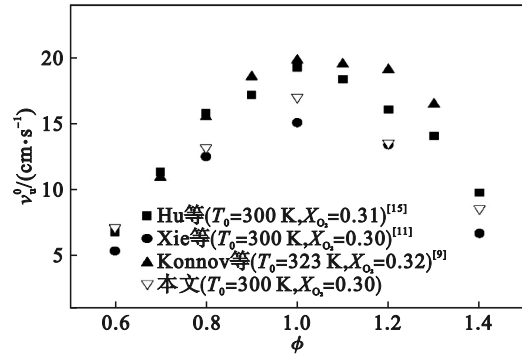


图1 纯CH₄层流火焰传播速度的比较

Fig. 1 Comparison of laminar flame propagation velocity of pure CH₄

1.2 数值模拟方法

本文采用Chemkin模拟软件的Premix模型^[13]模拟计算不同初始条件下掺氢燃气层流预混火焰传播特性.模型假设火焰传播过程是稳态、绝对、准一维的,其控制方程主要有一维自适应连续性方程、能量守恒方程、组分守恒方程以及理想气体状态方程.

由于掺氢燃气中的主要组分H₂扩散系数远大于其他碳氢燃料,为保证高掺氢比工况计算结果的准确性,扩散速度的计算使用完整的Multi-component模型,并选用Soret效应.为提高计算速度并使其收敛,数值模拟过程中的火焰反应区域内网格数设置为800~3 000,自适应网格计算区域范围为10 cm.GRI3.0和USC2.0是本文使用的两个重要机理,两者都可用于模拟C/H化合物的燃烧特性,但后者更适用于H₂/CO/C₁~C₄(C₁~C₄代表含1~4个碳原子的碳氢化合物)燃气研究,基于H₂/CO燃烧、GRI1.2/GRI3.0机理、C₂H₄/C₂H₂综合反应和C₃燃料燃烧等,对CO+OH,OH+HO₂,CO+HO₂的速率参数进行了更新,共包含112个组分、784个化学反应.GRI3.0机理被公认为是解决CH₄和合成气燃烧问题最权威的机理,其可捕捉混合气在974~1 160 K和0.11~0.26 MPa下的燃烧参数,包含35个组分和217个化学反应^[16].

2 结果与讨论

2.1 掺氢燃气在O₂/CO₂气氛下的层流预混火焰传播速度

利用实验系统研究了O₂/CO₂气氛下,不同掺氢比掺氢燃气的层流火焰传播速度.图2给出了常温常压下纯CH₄在当量比为0.6~1.8, X_{O_2} 为

0.21~0.5 的层流火焰传播速度,并选用 GRI3.0 和 USC2.0 机理模拟计算对应工况下的掺氢燃气层流预混火焰传播特性.从图 2 可以看出,纯 CH_4 在 X_{O_2} 为 0.3, 0.4 及 0.5 时层流火焰传播速度随着当量比的增大呈现先增大后减小的趋势,层流火焰传播速度的峰值分别为 16.99, 43.72, 76.24 cm/s .

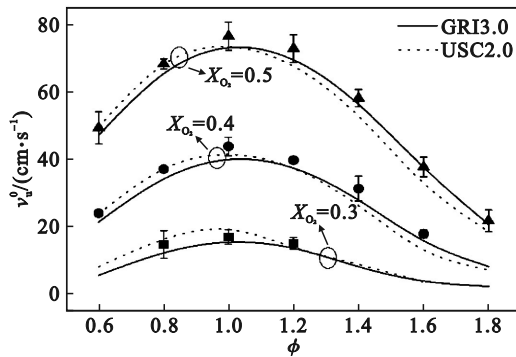


图 2 纯 CH_4 在不同 X_{O_2} 下的层流火焰传播速度

Fig. 2 Laminar flame propagation velocity of pure CH_4 under different X_{O_2}

图 3 测试了常温常压条件下 X_{O_2} 为 0.3 时,当量比为 0.6~1.8, X_{H_2} 在 0~0.75 的层流火焰传播速度.从图 3 中可以看出, X_{O_2} 为 0.3 时,在同一 X_{H_2} 下,预混燃气层流火焰传播速度随着当量比的增大而先增大后减小,且层流火焰传播速度峰值向当量比较大的方向偏移;当 X_{H_2} 分别为 0.25 和 0.75 时,预混燃气层流火焰传播速度分别在当量比为 1.0 和 1.2 时达到峰值,分别为 20.82 和 52.48 cm/s ;此外,预混燃气的层流火焰传播速度还随着 X_{H_2} 的增大而增大,当掺氢比较小 ($X_{\text{H}_2} < 0.5$) 时,在相同当量比条件下,预混燃气的层流火焰传播速度随 X_{H_2} 的变化不显著,如当量比为 1.0 时,当掺氢比从 0.25 升至 0.5 时,层流火焰传播速度由 20.82 cm/s 升至 29.12 cm/s ,增幅为 39.87%;而当掺氢比较大 ($X_{\text{H}_2} > 0.5$) 时,在当量比相同的条件下,随着 X_{H_2} 的变化预混燃气的层流火焰传播速度提高更显著,如当量比为 1.0 时,当 X_{H_2} 从 0.5 升至 0.75 时,层流火焰传播速度由 29.12 cm/s 升至 48.52 cm/s ,增幅为 66.62%.

通过将实验数据与 GRI3.0 机理和 USC2.0 机理模拟数据对比可以发现,当 X_{O_2} 为 0.3 时, GRI3.0 机理的误差为 0~13%, USC2.0 机理的误差为 3%~25%;当 X_{O_2} 为 0.4 时, GRI3.0 机理的误差为 1%~17%, USC2.0 机理的误差为 0~26%;当 X_{O_2} 为 0.5 时, GRI3.0 机理的误差为 1%~4%,

USC2.0 机理的误差为 0~15%.因此,实验数据与 GRI3.0 机理模拟所得到的数据吻合得更好.

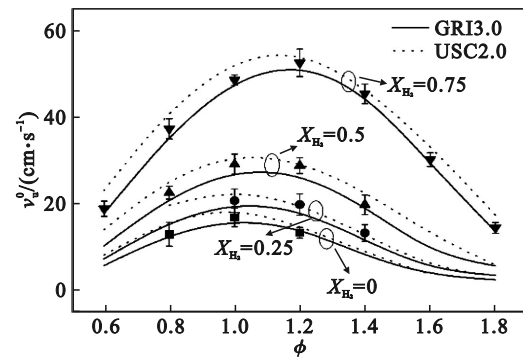


图 3 不同 X_{H_2} 条件下预混燃气的层流火焰传播速度

Fig. 3 Laminar flame propagation velocity of premixed gas under different X_{H_2}

绝热火焰温度 (T_f) 作为重要的热力学参数之一,可用来分析整体燃料的燃烧特征,也会影响层流火焰传播速度^[8].经计算,发现实验工况下掺氢天然气的绝热火焰温度随 X_{H_2} 的增加而增加,在相同 X_{O_2} 、不同 X_{H_2} 条件下 (0~0.75),绝热火焰温度均会随着当量比在 0.6~1.8 范围内增加而呈现先增加后减小的趋势,最大值出现在当量比 1.0~1.2 之间,与层流火焰传播速度变化趋势相同.此外, X_{H_2} 的变化也会显著影响掺氢燃气预混燃烧化学动力学过程.随着 X_{H_2} 的增加,体系中 H 自由基的摩尔分数逐渐增加,在富燃时 ($\phi > 1$) 燃料较多,氧化剂较少,在贫燃时 ($\phi < 1$) 燃料较少,氧化剂较多,主导氧化反应 $\text{H} + \text{O}_2 = \text{O} + \text{OH}$ 促进作用和 $\text{H} + \text{O}_2 + \text{H}_2\text{O} = \text{HO}_2 + \text{H}_2\text{O}$, $\text{H} + \text{HO}_2 = \text{O}_2 + \text{H}_2$ 反应的抑制作用与 X_{H_2} 分别呈正相关,体系内的 CH_3 自由基在贫燃时逐渐减少, $\text{H} + \text{CH}_3 (+\text{M}) = \text{CH}_4 (+\text{M})$ (反应式中 M 代表第三体,本身不直接参与化学反应的化学计量过程,但通过与反应物分子碰撞,起到传递能量的作用) 反应的反应速率会降低.因此,在当量比不变的情况下,预混燃气层流火焰传播速度随着 X_{H_2} 的增加呈现出上升的趋势.此外,体系中的含氧量也会显著影响预混燃气的绝热火焰温度和层流火焰传播速度.

2.2 O_2/CO_2 气氛下含氧量的影响

O_2/CO_2 气氛下燃烧与传统空气燃烧相比存在较大差异,这是因为空气主要由 O_2 和 N_2 组成,因此两者的主要区别是 CO_2 与 N_2 对预混燃气有着不同的稀释作用.在相同稀释比例条件下,与 N_2 相比, CO_2 稀释时,预混燃气绝热火焰温度下降得更显著. N_2 对预混燃气的稀释作用主要是受热

力学效应影响,而 CO_2 对预混燃气的稀释作用,不仅受热力学效应影响,还会受化学动力学效应的影响.火焰中重要的H自由基的摩尔分数随着 CO_2 体积分数的增加而减少,进而抑制了氧化反应 $H+O_2=O+OH$ 对燃烧的主要促进作用,使得预混燃料的层流火焰传播速度显著降低^[17].图4给出了常温常压条件下,当量比为1.0时 X_{H_2} 为0~0.5, X_{O_2} 为0.21~0.5条件下的层流火焰传播速度.

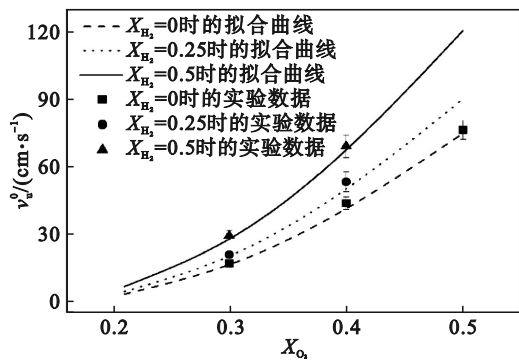


图4 预混燃气在不同掺氢比下随 X_{O_2} 变化的层流火焰传播速度

Fig. 4 Laminar flame propagation velocity of premixed gas with X_{O_2} under different hydrogen mixing ratios

由图4可以看出,在不同当量比和不同 X_{H_2} 的条件下,预混燃气层流火焰传播速度都随着 X_{O_2} 的增加而增加.在当量比为1.0, $X_{H_2}=0$ 的条件下,当 X_{O_2} 由0.3升至0.4时,层流火焰传播速度由16.99 cm/s升至43.72 cm/s;当 X_{O_2} 由0.4升至0.5时,层流火焰传播速度由43.72 cm/s升至76.24 cm/s;在 $X_{H_2}=0.5$ 的条件下,当 X_{O_2} 由0.3升至0.4时,层流火焰传播速度由29.19 cm/s升至68.96 cm/s.同一工况条件下,在当量比为1.0时,当 X_{H_2} 由0上升至0.25,在不同的含氧量条件(X_{O_2} 分别为0.3,0.4和0.5)下,层流火焰传播速度的增幅在20%附近;当 X_{H_2} 由0.25上升至0.5,在不同的 X_{O_2} 条件下,层流火焰传播速度的增幅在30%~40%.

观察实验数据可以发现,在不同 X_{H_2} 条件下预混燃气层流火焰传播速度随 X_{O_2} 变化符合二次函数变化规律,因此对数据进行了二次函数拟合.表1给出了当量比为1.0时,不同 X_{H_2} 条件下,层流火焰传播速度随 X_{O_2} 的二次函数拟合关系式及拟合优度 R^2 计算值.

表1 二次函数拟合关系式及拟合优度
Table 1 Fitting correlations and fitting option R^2 of quadratic function

X_{H_2}	拟合关系式	拟合优度 R^2
0	$y=481.55473x^2-95.04177x+2.05994$	0.99
0.25	$y=570.88953x^2-109.96695x+2.38474$	0.99
0.5	$y=749.95148x^2-139.82872x+2.92713$	0.99

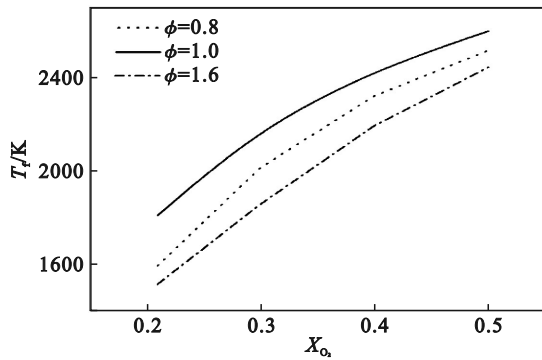
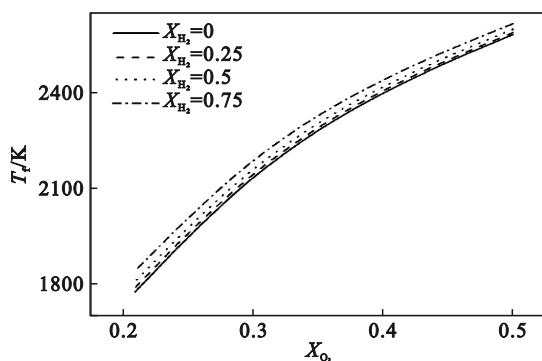
从表1中可以看出,实验工况的二次函数拟合 R^2 计算值均为0.99,说明层流火焰传播速度与 X_{O_2} 具有较高的二次函数相关性.由此可见各工况下的预混燃气层流火焰传播速度呈现二次函数上升趋势.

2.2.1 含氧量对预混燃气绝热火焰温度的影响

为研究 X_{O_2} 对预混燃气层流火焰的热力学效应影响,图5给出了常温常压下, $X_{H_2}=0.5$ 时预混燃气在不同 X_{O_2} 下的绝热火焰温度;图6给出了常温常压下在当量比为1.0时, X_{H_2} 在0~0.75条件下绝热火焰温度随 X_{O_2} 的变化.

从图5可以看出,不同当量比条件下预混燃气的绝热火焰温度均随着 X_{O_2} 的增加而增加:当 X_{O_2} 由0.21升至0.5,当量比为0.8时,预混燃气的绝热火焰温度由1594 K升至2513 K;在当量比为1.0时,预混燃气的绝热火焰温度由1809 K升至2596 K;在当量比为1.6时,预混燃气的绝热火焰温度由1515 K升至2441 K.由图6可知,不同 X_{H_2} 预混燃气绝热火焰温度随 X_{O_2} 的增加也呈现出上升的趋势:在当量比为1.0, $X_{H_2}=0$ 条件下, X_{O_2} 由0.21升至0.5时,预混燃气绝热火焰温度升高了45.27%;在 $X_{H_2}=0.5$ 时,预混燃气绝热火焰温度升高了43.50%;在 $X_{H_2}=0.75$ 时,预混燃气绝热火焰温度升高了41.91%.不同 X_{H_2} 条件下,绝热火焰温度均随着 X_{O_2} 的增加而增加,在 X_{O_2} 为0.21~0.35时,绝热火焰温度增长趋势较快,在0.35~0.5时其增长趋势减缓,且 X_{H_2} 越大,绝热火焰温度越高.

对比图4和图5可以发现,绝热火焰温度和层流预混火焰传播速度均随着 X_{O_2} 的增加而呈现出上升的趋势,但是其上升趋势却不尽相同.预混燃气的层流火焰传播速度随 X_{O_2} 变化呈现二次函数变化规律,而绝热火焰温度随 X_{O_2} 的变化则较缓.因此,除了热力学影响,还要考虑 O_2 对燃气层流预混火焰传播特性的化学动力学影响效应.

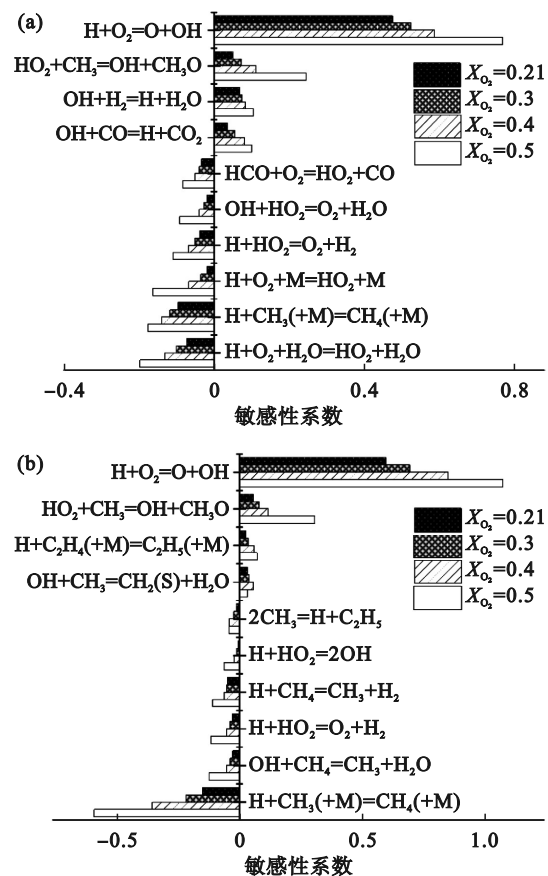
图5 预混燃气在不同 X_{O_2} 下的绝热火焰温度Fig. 5 Adiabatic flame temperature of premixed gas under different X_{O_2} 图6 预混燃气在不同 X_{H_2} 下随 X_{O_2} 变化的绝热火焰温度Fig. 6 Adiabatic flame temperature of premixed gas with X_{O_2} under different X_{H_2}

2.2.2 不同含氧量下化学动力学效应特征

为深入研究 O_2 对燃气层流预混火焰化学动力学效应的影响,对不同 X_{O_2} 的掺氢燃气预混燃烧的质量燃烧速率敏感性系数进行了模拟计算.图7为常温常压下当量比为0.8和1.2,掺氢比为0.5条件下, X_{O_2} 在0.21~0.5的预混燃气质量燃烧速率敏感性分析.敏感性系数的正负值与绝对值大小分别用来表示化学反应变化速率对整体燃烧的促进或抑制作用,以及作用效率的高低.

从图中可以看出,无论在贫燃还是在富燃时,反应 $H+O_2=O+OH$ 和 $HO_2+CH_3=OH+CH_3O$ 都起主要的促进作用,且当从贫燃变为富燃状态后,占前2位主导反应没有改变,而占第三位和第四位的反应则由贫燃时的 $OH+H_2=H+H_2O$ 和 $OH+CO=H+CO_2$ 变为富燃时的 $H+C_2H_4(+M)=C_2H_5(+M)$ 和 $OH+CH_3=CH_2(S)+H_2O$, S 表示单线态;在起抑制作用方面,贫燃时,反应对燃烧的抑制作用比较均衡,没有显著的差异;富燃时,

相较于其他几个反应, $H+CH_3(+M)=CH_4(+M)$ 对整体的抑制作用则变得更为突出,成为主要的抑制反应.随着 X_{O_2} 的增加,无论是贫燃还是富燃,反应 $H+O_2=O+OH$ 和 $HO_2+CH_3=OH+CH_3O$ 的促进作用都显著增强,其中 $H+O_2=O+OH$ 始终都起主导的促进作用;无论是贫燃还是富燃,起抑制作用的反应都随着 X_{O_2} 的增加,抑制作用有所增强,其中在富燃时,随着 X_{O_2} 的增加,反应 $H+CH_3(+M)=CH_4(+M)$ 的抑制作用增加得最为显著.

图7 不同 X_{O_2} 下的预混燃气质量燃烧速率敏感性分析
Fig. 7 Sensitivity analysis of mass combustion rate of premixed gas with different X_{O_2} (a)— $\phi=0.8$; (b)— $\phi=1.2$.

通过上述敏感性分析可以发现, H 自由基在整体反应中参与的次数最多,其对关键反应的重要程度也最大.因此,分析 H 自由基摩尔分数随 X_{O_2} 的变化显得尤为重要.图8为不同 X_{O_2} 下掺氢燃气预混火焰 H 自由基摩尔分数.图9给出了当量比为0.8和1.2,掺氢比为0.5时, $H+O_2=O+OH$ 反应速率随 X_{O_2} 在0.21~0.5范围内变化图.

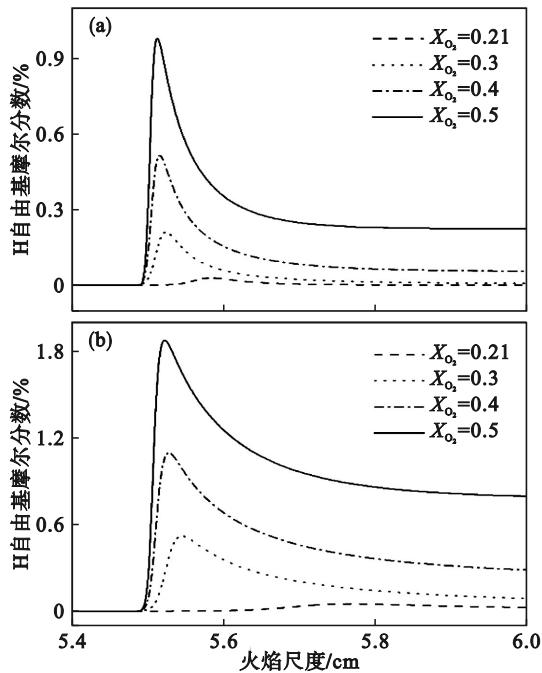


图8 不同 X_{O_2} 下掺氢燃气预混火焰H自由基摩尔分数
Fig. 8 Molar fraction of H radical in hydrogen-doped gas premixed flame with different X_{O_2}

(a)— $\phi=0.8$; (b)— $\phi=1.2$.

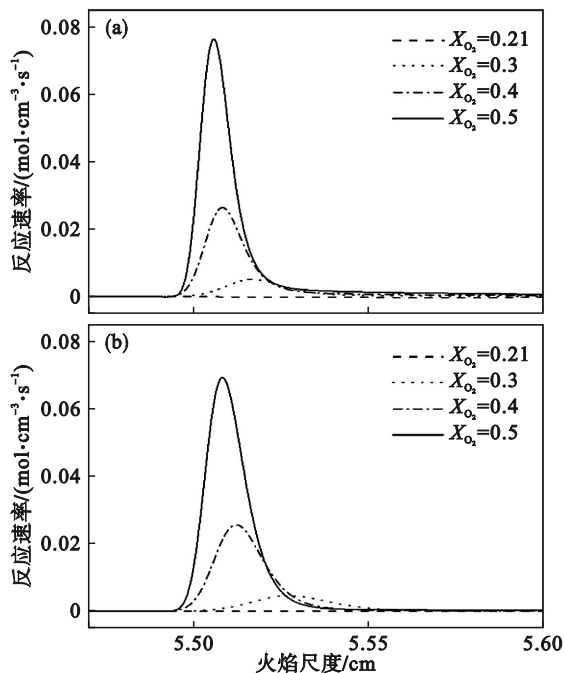


图9 不同 X_{O_2} 下掺氢燃气预混火焰中 $H+O_2=O+OH$ 的反应速率

Fig. 9 Reaction rate of $H+O_2=O+OH$ in premixed flame of hydrogen-doped gas with different X_{O_2}

(a)— $\phi=0.8$; (b)— $\phi=1.2$.

从图7可以看出,氧化反应 $H+O_2=O+OH$ 的敏感性系数随着 X_{O_2} 的增加而增大;另外,火焰中逐渐增加的H自由基摩尔分数促进了燃烧反应

的进程,从而提升了预混燃料的层流火焰传播速度.特别是当 $X_{O_2} \geq 0.3$ 时,火焰中H自由基摩尔分数增加得更为显著,此时随着 X_{O_2} 的增加,不仅起主导抑制作用的反应 $H+CH_3(+M)=CH_4(+M)$ 的敏感性系数逐渐增大,且氧化反应 $H+O_2=O+OH$ 的敏感性系数也在增大,即反应 $H+CH_3(+M)=CH_4(+M)$ 随着 X_{O_2} 的增加抑制了整体反应,此时火焰中会剩余大量H自由基,进而促进了反应 $H+O_2=O+OH$ 的进程.

此外,由图9可知,随着含氧量($X_{O_2} \geq 0.3$)的增加,反应 $H+O_2=O+OH$ 的反应速率不断增大,此时,火焰中还存在大量的H自由基(由图8可知),促进了起主导反应 $H+O_2=O+OH$ 的反应速率,显著地提高H自由基摩尔分数及 $H+O_2=O+OH$ 反应速率.使掺氢燃气层流预混火焰传播速度随着 X_{O_2} 的增加不断增大,并且比绝热火焰温度随 X_{O_2} 的变化更为显著.

3 结 论

1) 实验数据与模拟结果对比可知,在实验工况下,USC2.0机理计算获得的掺氢燃气火焰传播速度预测值与实验数据间误差较大;GRI3.0机理能较准确预测高含氧量及高掺氢比下掺氢燃气层流火焰传播速度.

2) 在 O_2/CO_2 气氛下,掺氢燃气的层流预混火焰传播速度及绝热火焰温度均随掺氢比的增加而逐渐增大,且其速度峰值对应当量比向富燃侧移动;在高掺氢比下,预混火焰中H自由基摩尔分数显著增加, CH_3 自由基减少, $H+CH_3(+M)=CH_4(+M)$ 的反应速率逐渐减小.

3) 实验工况下,掺氢燃气绝热火焰温度和层流预混火焰传播速度均随着含氧量的增加逐渐增加,且层流火焰传播速度与含氧量间存在较强的二次函数相关性;随着含氧量的增加,火焰中大量H自由基促进氧化反应 $H+O_2=O+OH$ 的进程,且反应 $HO_2+CH_3=OH+CH_3O$ 的促进作用显著增强,使得掺氢燃气层流预混火焰传播速度逐渐加快.

参考文献:

- [1] Ren F, Chu H Q, Xiang L K, et al. Effect of hydrogen addition on the laminar premixed combustion characteristics the main components of natural gas [J]. *Journal of the Energy Institute*, 2019, 92(4): 1178-1190.
- [2] Duan X B, Li Y Y, Liu Y Q, et al. Dilution gas and

