

低排放燃烧室化学反应器网络模型的参数化

刘 闯,李鹏飞,刘 勇,朱冬清,金仁瀚

(南京航空航天大学 江苏省航空动力系统重点实验室,南京 210016)

摘要:为了掌握低排放燃烧室的污染物排放情况,对其化学反应网络器(CRN)模型的参数化进行研究。对爬升工况下燃烧室 CFD 数值模拟结果进行分析,划分燃烧室的结构,得到燃烧室的 CRN 模型。再利用自编程软件对燃烧室的结构参数和进口参数进行参数化定义,并把参数化的 CRN 模型在不同工况下的模拟结果与试验结果分别比较。结果表明:在慢车工况下二者相差不大,在爬升工况下二者差异也在允许误差范围之内。验证了该模型可行性较好,该参数化 CRN 模型可用于预测低排放燃烧室的污染物排放量和出口温度。

关键词: 化学反应器网络模型;低排放燃烧室;CFD 数值模拟;参数化;污染物排放;航空发动机

中图分类号: V231.2

文献标识码: A

doi:10.13477/j.cnki.aeroengine.2016.02.003

Parameterized Chemical Reactor Networks Molds of Low-Emission Combustor

LIU Chuang, LI Peng-fei, LIU Yong, ZHU Dong-qing, JIN Ren-han

(Jiangsu Province Key Laboratory of Aerospace Power System, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: In order to master the pollutant emission of a low-emission combustor, the parameters of the low-emission combustor Chemical Reactor Networks (CRN) models were studied. CFD numerical simulation on the combustor under climbing condition was carried out, the simulation results were analyzed, combustor structures were divided and the parameterized CRN models were obtained. Then the combustor structural parameters and inlet parameters were defined by self-programming software, and the simulation results and test results of the parameterized CRN models were compared under different conditions. The results under idle condition are similar, meanwhile, the comparison of results under climbing conditions are within the allowed error range, which verify the feasibility of the models. Therefore, the parameterized CRN models can be used to forecast the low-emission combustor pollutant emission and outlet temperature.

Key words: chemical reactor networks models; low-emission combustor; CFD numerical simulation; parameterized; pollutant; TAPS emission; aeroengine

0 引言

目前,化石燃料的燃烧过程已经成为非常可靠的能量来源。燃气轮机燃烧室内的燃烧情况直接影响到燃气轮机的性能和排放。化学反应网络(CRN)会定量地提供燃烧室中氮氧化物和一氧化碳的生成结果,对燃烧室的设计、优化环节以及燃烧系统污染物排放的减少非常有帮助。

在国外,Sturgess^[1]运用区域建模的思想研究了贫油预混燃烧室内的贫油熄火情况;Steele^[2]构建了

HP-JSR 反应器,应用 2 个 PSR 串联的简单网络模型对污染物排放进行预测,预测结果与试验数据吻合得很好;Nicol 等^[3]运用由 1 个 PSR 和一系列 PFR 组成的模型,研究了在甲烷和空气预混燃烧情况下,不同的反应机理对 NO_x 排放的影响;Sturgess 和 Shouse^[4]运用 CFD-CRN 方法对燃烧室内污染排放进行了研究,CRN 模型能够较好地满足流场以及化学反应计算的要求;Bengtsson^[5-6]采用单个 PSR 和单个 PFR 的简单网络模型对燃气轮机燃烧室内 NO_x 排放进行了模拟,计算结果与试验结果基本一致;Bhargava 等^[7]利用

收稿日期:2015-07-20

作者简介:刘闯(1989),男,在读硕士研究生,研究方向为航空发动机程序设计和编写;E-mail:liuchuangsnail@163.com

引用格式:刘闯,李鹏飞,刘勇,等.某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 molds of low-emission combustor[J]. Aeroengine, 2016, 42(2): 11-16.

PSR 和 PFR 构建了 CRN 模型,并研究了当量比以及压力对 NOx 和 CO 排放特性的影响;Rutar^[8-9]通过 PSR 模型,运用 GRI Mech 3.0 化学动力学反应机理,成功预测了高压射流反应器下 NOx 和 CO 的排放量;Falcitelli 等^[10]运用通用算法构建了 CRN 模型,研究了影响污染物生成的因素;Mohamed 和 Rizk 等^[11-14]构建 CRN 网络模型研究了当量比、停留时间以及温度对 CO 和 NOx 排放特性的影响;Novoselov^[15]等对某燃气轮机燃烧室污染物的形成机理进行了详细分析,构建了复杂的 CRN 网络模型,详细介绍了 CRN 网络模型的构建过程,计算结果与试验结果高度吻合;Mancini 等^[16]采用同样的步骤构建了化学反应网络模型 RNM,预测 NOx 的生成与测量结果误差在 5% 以内。

本文采用自编程软件实现了化学反应机理文件的解析、化学热力学平衡计算、化学反应动力学计算、CRN 网络组建以及参数化计算,利用该软件建立某低排放燃烧室的参数化反应器网络模型,对燃烧室的不同工况进行模拟,并把模拟结果与试验结果进行对比,确定模型的正确性。

1 燃烧室结构

本文研究的燃烧室为低排放燃烧室,为了研究方便,把该燃烧室简化为单管圆筒燃烧室,其结构如图 1 所示。

该低排放燃烧室装有双环预混旋流的燃烧室头部,由主混合器、值班旋流器以及喷嘴系统等部分组成,如图 2 所示。以双环预混旋流(TAPS)为基础,同时引入了多点燃油直接喷射

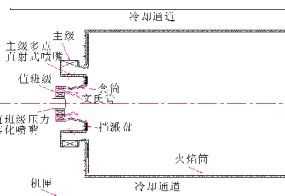


图 1 低排放燃烧室结构

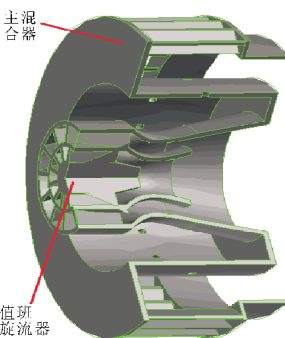


图 2 TAPS/MLDI 燃烧室头部

2 CFD 数值模拟结果分析

本文数值模拟的进口工况为试验工况(爬升),其参数见表 1。

利用 Gambit 软件对低排放燃烧室结构进行建模和网格划分,生成 3 维网格节点总数为 235 万,网格

单元总数为 855 万。

在低排放燃烧室燃烧流场计算过程中,燃烧室流场计算采用隐式的分离式求解器,近壁面采用标准的壁面函数处理,湍流模型为标准 k-ε 模型,燃料为航空煤油,分子式为 C₁₂H₂₃,氧化剂为空气。燃烧状态为稳态燃烧过程,燃烧过程为扩散燃烧或非预混燃烧,化学反应初始条件通过 PDF 文件生成。求解所用的算法为 SIMPLE 算法,压力方程采用 2 阶精度进行离散,动量、湍流动能及其耗散率、能量、混合分数、混合分数脉动均方值等方程的离散采用 QUICK 格式离散;把火焰筒壁面假设为固壁,按照 Fluent 软件的判断收敛准则,所得的计算结果的进出口流量相对误差小于 5%,全部残差小于 1.0 × 10⁻³。

低排放燃烧室中心截面温度分布如图 3 所示。从图中可见,在爬升状态下燃烧室的高温区可以分为 2 部分:值班级高温区域和主级高温区域。值班级的燃烧属于扩散燃烧,燃油浓度较高,形成了值班级高温区域。由于主混合器径向进气方向与喷嘴喷出的燃油喷射方向相反,有利于燃油的喷射、雾化与掺混,同时主混合器内大部分燃油沿圆周共 8 个单点直射式喷嘴进行喷射,周向供油比较均匀,导致主混合器出口油气掺混均匀,基本上属于预混和半预混燃烧。因此,主级燃烧温度非常均匀,主级高温区的面积较小。随着冷却空气的进入,在沿燃烧室气流的流动方向上,混合气的温度逐渐降低。

低排放燃烧室中心截面速度流线如图 4 所示。从图中可见,回流区域可以分为 2 部分:主回流区(PRZ)和角回流区(CRZ)。空气流经 2 级轴向值班旋流器后形成旋流并与从径向旋流器流出的旋转射流相互作用,形成 1 个稳定的中心回流区又称主回流区(PRZ),以提供点火源保

表 1 爬升状态的计算工况

参数	数值
压力 /kPa	2712
进口空气温度 /K	608
燃料总质量流量 /(kg/s)	0.060737
空气总质量流量 /(kg/s)	2.514
主级燃油分配 /%	87

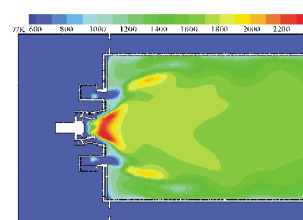


图 3 爬升状态燃烧室中心截面温度分布

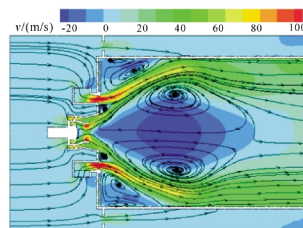


图 4 爬升状态燃烧室中心截面速度流线

证火焰稳定。在燃烧室头部壁面附近角落处还出现角回流区(CRZ),这是燃烧室头部突扩结构造成的。来自主混合器与值班旋流器的旋转射流之间的速度差形成了剪切层,其存在有助于燃烧过程中的油气掺混。由于低排放燃烧室头部设计采用弱旋流,并且火焰筒上不存在主燃孔对回流区长度的限制,因此低排放燃烧室头部主回流区比较长。

燃烧室中心截面 NO_x 质量分数分布图 5 所示,从图中可见,由于值班级的燃烧属于扩散燃烧,燃油浓度较高,燃烧温度超过 1900 K,因此形成了 NO_x 的主要生产区域;而在主级燃烧区域后面,氮氧化物的生成量很小,这是由于主级旋流器和值班级旋流器的共同作用使得主级油气掺混比较均匀,燃烧比较充分,另外,主级大量空气的进入降低了主级高温区后的反应区温度,使得温度高于 1900 K 的区域减小,造成 NO_x 的生成量迅速减少。随着轴向距离增加,大量冷却空气进入燃烧室,降低了燃气的温度,抑制了热力 NO_x 的生成,同时也稀释了来流燃气,降低了出口 NO_x 的质量分数。

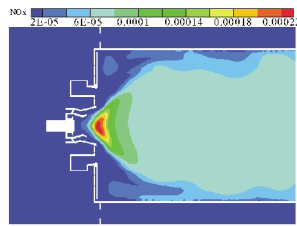


图 5 爬升状态燃烧室中心截面 NO_x 质量分数

燃烧室中心截面当量比分布如图 6 所示。从图中可见,主级和值班级进口处的当量比数值较大,其喷嘴喷出大小不同的油珠,形成 1 个油雾锥面,在油珠运动过程中不断吸热蒸发。值班级、主级的燃油油珠从喷出到完全蒸发时间约为毫秒级和微秒级,因此值班级喷入的燃油油珠的生命周期比主级的明显长,值班级火焰为扩散火焰,而主级油珠在径向旋流器空腔中就完全蒸发,进入燃烧室时已经接近预混燃烧或半预混燃烧过程。

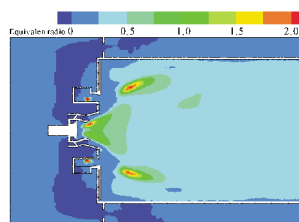


图 6 爬升状态下当量比分布

燃烧室 $Z=0$ 截面 D_a 分布如图 7 所示。针对燃气轮机燃烧室不同区域的模拟是用 PSR 还是用 PFR,是由燃烧室内不同区域的化学反应尺度以及湍流尺度来决定的,即用

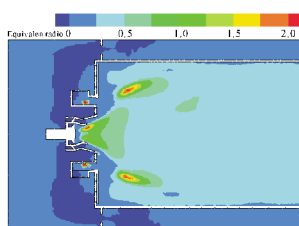


图 7 爬升状态下 $Z=0$ 截面 D_a 分布

D_a (D_a 为特征流动时间与化学反应时间的比值)来决定。一般而言,针对多组分化学系统,因为化学反应时间的变化跨度很大,所以 D_a 变化范围也较大。一般规定若 $D_a < 1$ 的区域,用 PSR 来模拟,而 $D_a > 1$ 的区域,则用 PFR 来模拟。从图中可见,燃烧室的前半部分 $D_a < 1$,因此,前半部分燃烧室的各部分区域大都可以用 PSR 来表示。燃烧室的后半部分 $D_a > 1$,因此,前半部分燃烧室的各部分区域大都可以用 PFR 来表示。

3 反应网络模型的设计及参数化

3.1 燃烧室区域划分

在进行燃烧室区域划分时,由于燃烧室已简化为单管圆筒燃烧室,并且各工况为稳态工况,中心线上任意 1 个截面的流态都相同,并且该截面关于中心线对称,因此可以使用截面的一半对燃烧室结构进行划分。

从图 7 中可见,燃烧室前面大部分区域 $D_a < 1$,所以可以用 PSR 来表示,而燃烧室尾部区域 $D_a > 1$,所以可以用 PFR 表示。从图 3 中可见,在燃烧室中部偏后的位置,温度变化不大,并且从图 7、8 中可知该部分的掺混比较均匀,大部分区域 $D_a < 1$ 。 $D_a > 1$ 的部分是由于大量的冷却气体进入并且不与混合物发生反应,为了简化计算,把该区域统一分为 PSR。考虑到燃烧室的进口位置和流动曲线,燃烧室前部可以划分为几个反应器。从图 4 中可见,进口的流动可以分为 2 种不同的气流,分别为值班级和主级。在主级旋流器作用下,主级气流沿着靠近壁面的位置向后流动,形成 1 个高温区,该高温区可以利用 1 个 PSR 表示。在主级高温区的后面,气流的温度迅速降低,这样造成了流动时间变长, $D_a > 1$,该区域可以用 1 个 PFR 表示。从图中可见,值班级的燃烧方式为扩散燃烧,燃烧区域内的当量比沿半径方向逐渐变小,需要把该区域分为 3 部分。在该区域中值班级入口附近, $D_a > 1$,这是由于燃料液滴的蒸发燃烧造成的,但该区域的混合比较均匀,反应比较剧烈,所以也可以用 PSR 反应器表示。混合气沿轴向流动时,燃油蒸汽和空气逐渐掺混均匀。此时,混合气的当量比趋于稳定,并且混合气均来自于值班级上游的 3 个不同的反应器。燃烧室划分的结果如图 8 所示。



图 8 低排放燃烧室结构划分

表 2 各反应器的体积公式	
反应器	体积公式
主级 PSR1	$V_1=\pi[(D/2)^2-(D/4)^2]L/5\Box a_1$
主级 PSR2	$V_2=\pi[(D/2)^2-(D/4)^2]L/10\Box a_2$
主级 PFR	$V_3=\pi[(D/2)^2-(D/4)^2]L/5\Box a_3$
值班级 PSR1	$V_4=\pi[(D/4)^2-(D/6)^2]L/4\Box a_6$
值班级 PSR2	$V_5=\pi[(D/6)^2-(D/12)^2]L/4\Box a_6$
值班级 PSR3	$V_6=\pi[(D/12)^2]L/4\Box a_6$
值班级 PSR4	$V_7=\pi[(D/4)^2]L/4\Box a_7$
中部 PSR	$V_8=\begin{cases} \pi(D/4)^2(0.75-0.25a_6-0.25a_7)L/4+ \\ \pi[(D/2)^2-(D/4)^2](0.75-0.2a_1+0.1a_2-0.2) \end{cases}$
末尾 PFR	$V_9=\pi(D/2)^2L/4$

表中:D为圆筒燃烧室的直径,m;L为圆筒燃烧室的长度,m;a为修正系数。



图 10 各工况的优化方案

度 T,燃油总量 o_1 ,空气总量 a 和主级燃油比例 o_m 。目标栏中设置了混合器。t 代表混合器出口温度和混合器,NO 代表混合器出口 NOx 排放量。在输入优化变量栏中,变量 a_1 、 a_2 、 a_3 分别表示主级 PSR1、PSR3 和 PFR 的修正系数。由于在设置变量时, a_4 和 a_5 已经用于表示其他变量,为了避免重复。用变量 a_6 表示值班级 PSR1、PSR2 和 PSR3 的修正系数,用变量 a_7 表示值班级 PSR4 的修正系数。

3.4 运行参数以及结果

首先,对燃烧室的结构进行定性划分,按比例计算出各反应器的体积。其次,对各反应器体积中的长度尺寸利用优化方案选项进行优化。最后,选择与试验值相近的优化方案作为该工况下的模拟方案。对比各工况的优化方案结果可得,当 $a_1=0.9$ 、 $a_2=0.8$ 、 $a_3=0.8$ 、 $a_6=1.1$ 、 $a_7=0.9$ 时,各工况下的模拟结果与试验结果相差较小。

采用该自编程软件对低排放燃烧室出口 NOx 排放特性进行模拟,模拟过程中所用燃料为航空煤油的替代燃料($C_{12}H_{23}$),反应机理采用 $C_{12}H_{23}$ 的骨干化学反应机理。本文在不同工况下对构建的化学反应器网

络模型进行验证。其中工况 5 为中国燃气涡轮研究院提供的试验工况,其余为在南京航空航天大学能源与动力学院燃烧试验室获取的另外 1 组试验数据。具体运行参数见表 3,模拟结果与试验结果对比见表 4。

表 3 燃料和空气的进口参数					
循环参数	工况 1	工况 2	工况 3	工况 4	工况 5
进口压力 /kPa	101.9	101.9	101.9	101.9	2712.0
进口温度 /K	423	423	423	423	608
值班级燃油分配 /%	100	100	100	100	13
油量 /(g/s)	2.075	2.476	3.103	3.380	60.737
空气量 /(g/s)	102.56	98.92	120.69	130.88	2514.00
油气比	0.0202	0.025	0.0257	0.0258	0.0242

表 4 模拟结果与试验结果对比					
	工况 1	工况 2	工况 3	工况 4	工况 5
NOx 试验值 /(mg/m ³)	38.4	38.8	33.5	42.9	112.5
NOx 模拟值 /(mg/m ³)	39.8	41.3	42.5	45.6	113.0
NOx 相对误差 /%	3.48	6.21	26.80	6.25	0.48
试验值 T/K	886	970	1024	1063	1516
模拟值 T/K	901.8	941.0	963.2	1031.6	1396.0
T 相对误差 %	1.78	2.99	5.94	2.95	7.91

工况 1~4 为慢车状态下的工况,进口压力、进口温度和值班级燃油分配都相同,所以可以将这 4 种工况的出口温度和出口 NOx 质量分数进行比较。出口 NOx 排放量的试验值与模拟值都随着油气比的增大而增大,各工况下的模拟值都略大于该工况下的试验值。但在工况 3 处,试验值的曲线中有 1 个拐点,这可能是由于试验误差所造成的。除工况 3 外,在其他 3 个工况下,试验值与模拟值的误差都在 6.3%以内。出口温度的试验值与模拟值都随着油气比的增大而升高,除工况 1 外,其他工况下的试验值均大于模拟值,且二者的误差都在 6%以内,符合模拟要求。从表 3 中数据可见,处于爬升状态工况 5 下的进口压力和进口温度都比较大,该工况增加了主级供油并且供油量占总油量的 87%,所以工况 5 应该与工况 1~4 分开单独比较。从表 4 中数据对比可知,工况 5 下 NOx 排放量的模拟结果与试验值非常接近,而温度的模拟结果与试验值有一定偏差,但其误差在允许范围内。

由于初始状态条件相同,比较了工况 1~4 的模拟值和试验值。出口 NOx 的变化曲线如图 11 所示。从图中可见,模拟值与试验值的误差相差不大,并且随着工况的变化,模拟值和试验值都会随着燃烧室的

各工况变化逐渐递增。出口温度随工况的变化曲线如图12所示,模拟值与试验值都随着工况的变化呈上升趋势。

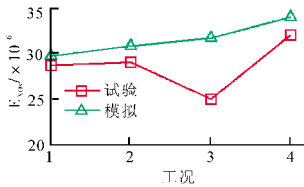


图11 出口NOx的排放量随工况变化曲线

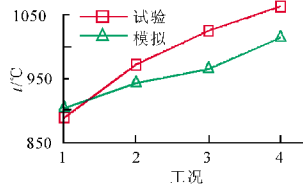


图12 出口温度随工况的变化曲线

从图11、12中的变化趋势可以归结出油气比对出口NOx排放量和出口温度的影响,油气比增大,即是燃油比例增加,这时反应区域的当量比增大,并向最佳当量比靠近,反应更加剧烈,反应产生的温度越来越高,NOx的生成与反应区的温度有很大关系,温度越高,NOx的生成量越大,即随着油气比的增大,出口的NOx排放量增加和出口温度升高。

4 结论

对某低排放燃烧室建立参数化反应网络模型,利用Gambit软件建立3维模型,并采用CFD方法对燃烧室进行数值模拟,再用模拟结果对燃烧室结构进行划分,得到低排放燃烧室的化学反应网络模型。对模型中各反应器的体积、进口空气流量和进口燃油流量进行参数化。建立各反应器的体积与燃烧室几何尺寸之间的关系,可以使得体积随燃烧室几何尺寸的变化而变化,建立1套完整的参数化化学反应器网络模型。

(1)参数化网络模型的计算结果与试验值相差不大,验证了参数化网络模型具有一定的实际意义和参考价值。

(2)利用验证过的参数化网络模型对慢车工况进行预测,预测结果可以用于指导燃烧室的优化设计。而在爬升工况下,需要较多的试验数据才能进行验证。

参考文献:

[1] Sturgess G J, Heneghan S P, Vangsness M D, et al. Lean blowout in a research combustor at simulated low pressures[J]. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 1996, 118(4): 773-781.

- [2] Steele R C. NOx and N₂O formation in lean-premixed jet-stirred reactors operated from 1 to 7 atm [D]. Washington: University of Washington, 1995.
- [3] Nicol D G, Steele R C, Marinov N M, et al. The importance of the nitrous oxide pathway to NOx in lean-premixed combustion[J]. Journal of Engineering for Gas Turbine and Power, 1995, 117:100-111.
- [4] Sturgess G, Shouse D T. A hybrid model for calculating lean blow-outs in practical combustors[R]. AIAA-96-3125.
- [5] Bengtsson K U M. Experimental and numerical study of the NOx formation in high-pressure lean an premixed combustion of methane [D]. Zürich: Swiss Federal Institute of Technology, 1998.
- [6] Bengtsson K U M, Benz P, Schaeren R, et al. NyOx formation in lean premixed combustion of methane in a high-pressure jet-stirred reactor [J]. Proc. Combust. Inst, 1998, 27:1393-1401.
- [7] Bhargava A, Kendrick DW, Colket MB, et al. Pressure effect on NOx and CO emissions in industrial gas turbines[R]. ASME 2000-GT-97.
- [8] Rutar T. NOx and CO formation for lean-premixed methane-air combustion in a jet-stirred reactor operated at elevated pressure [D]. Washington: University of Washington, 2000.
- [9] Rutar T, Malte P C, Kramlich J C. Investigation of NOx and CO formation in lean-premixed, methane-air, high-intensity, confined flames at elevated pressures [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2000, 28:2435-2441.
- [10] Falcitelli M, Pasini S, Rossi N, Tognotti L. CFD+ reactor network analysis: an integrated methodology for the modeling and optimisation of industrial systems for energy saving and pollution reduction [J]. Applied Thermal Engineering, 2002, 22(8):971-973.
- [11] Mohamed H, Ticha H, Hamed S. Simulation of pollutant emissions from a gas-turbine combustor[J]. Combustor Science and Technology, 2004, 176: 819-834.
- [12] Rizk NK, Mongia H C. NOx model for lean combustion concept [R]. AIAA-92-3341.
- [13] Rizk NK, Mongia H C. Semi-analytical correlations for NOx, CO, and UHC emissions[J]. Journal of Engineering for Gas Turbine and Power, 1993, 115: 612-619.
- [14] Rizk N K, Mongia H C. Emissions predictions of different gas turbine combustors[R]. AIAA-94-0118.
- [15] Novosselov I V, Malte P C, Yuan J, et al. Chemical reactor network application to emissions prediction for industrial DLE gas turbine[R]. ASME 2006-GT-90282.
- [16] Tullin C J, Sarofim A F, Beer J M. Formation of NO and N₂O in coal combustion: the relative importance of volatile and char nitrogen[J]. Journal of the Institute of Energy, 1993, 66: 207-215.

(编辑:张宝玲)