

# 大涡模拟燃烧模型对氨气旋流火焰适应性研究

安振华, 张猛\*, 卫旭涛, 赵雨欣, 毛润泽, 王金华, 黄佐华

(西安交通大学 动力工程多相流国家重点实验室, 陕西 西安 710049)

(Tel: 17782506760, Email: [mengz8851@xjtu.edu.cn](mailto:mengz8851@xjtu.edu.cn))

**摘要** 推广无碳燃料是实现“碳达峰、碳中和”的有效举措, 氨气具有基础设施完善、安全性高等优势。数值模拟在燃机设计、开发中承担重要作用, 燃烧模型对计算对象的适应性非常重要, 影响计算精度和效率。本文针对氨气旋流火焰, 基于 OpenFOAM 开展了氨气旋流火焰标准化实验及模拟工作, 对比了 FGM 燃烧模型和 DTF 燃烧模型在氨气旋流火焰燃烧室流场、火焰结构及污染物预测等方面的性能。通过综合分析, 本文给出了模型选用建议, 以供将来燃烧室计算参考。

**关键词** 氨气旋流火焰; 大涡模拟; 模型对比; FGM 燃烧模型; DTF 燃烧模型

## 0 前言

全球变暖是全人类共同的挑战,《巴黎协定》[1]提出“将全球平均气温较前工业化时期上升幅度控制在 2°C 以内, 并努力将温度上升幅度限制在 1.5°C 以内”。习近平总书记在第七十五届联合国大会上宣布, “二氧化碳排放力争 2030 年前达到峰值, 努力争取 2060 年前实现碳中和”[2]。全球范围内, 化石燃料燃烧为主要的 CO<sub>2</sub> 排放源, 因此, 要实现大幅 CO<sub>2</sub> 减排, 迫切需要构建低碳/无碳、可持续的新型现代能源体系。在国际组织低碳倡议下, 氨作为无碳、清洁“氢”燃料得到了世界各国广泛关注和认可, 并且许多国家已经开始实施了氨燃料利用的计划[3-5]。氨气应用挑战主要是如何降低 NO<sub>x</sub> 排放以及如何稳定燃烧, 针对这两个挑战, 多个研究组开展了相关研究。其中, 针对排放研究, 数值模拟具有十分重要的意义, 高精度的模拟有助于理解燃烧过程中复杂的湍流和化学反应相互作用、研究燃烧机理、尤其在化学反应路径、燃烧瞬态过程中具有不可比拟的优势。

清华大学 Li 等人[6]使用 chemical reactor networks (CRN) 在燃气轮机条件下的氨气/甲烷燃烧排放做了系统研究, 指出了 NH<sub>3</sub> 生成 NO<sub>x</sub> 的关键反应路径, 此外研究了多阶段空气稀释对降低氮氧化物排放的作用, 分析了驻留时间等参数对排放的影响。日本东北大学流体研究所 Somaratne 等人[7]针对氨气在燃气轮机中的应用, 使用 PaSR 燃烧模型进行了全面的数值模拟研究, 包括高压条件下壁面影响[8], OH 与温度对 NO 排放的影响[9]等。东京燃气有限公司的 Honzawa 等人[10]采用非绝热 FGM 方法对氨气/甲烷混合气旋流火焰的 CO 和 NO 排放进行了 LES 模拟研究, 指出了冷壁面和辐射对排放预测的影响。西安交通大学 Wei[11]等人使用动态增厚的方法对比了氨气和甲烷旋流火焰的稳定性, 分析了两种火焰在吹熄过程中的差异, 指出了氨气稳定性相对较低的原因。

燃烧模型的选用对模拟结果有着重大的影响, 但是目前在氨气燃烧模拟研究中, 还没有相关对比不同燃烧模型对氨气燃烧排放以及稳定性的研究, 为了阐明模型选用对模拟结果的影响, 为氨气旋流燃烧模拟提供模型选用参考, 本文结合课题组现有的模拟技术, 对比了 FGM 和 DTF 两种燃烧模型, 这两种燃烧模型分别代表了快速化学反应和有限化学反应速率模型, 对氨气模拟具有典型的参考意义。本文针对纯氨旋流火焰在同一条件下分别开展了 FGM 和 DTF 数值模拟研究, 两种模型均采用同样的网格、边界条件、初始值以及计算设置等, 保证只有燃烧模型选用的不同, 对比了两模型预测的流场、火焰结构等数据, 重点分析了两模型对于氨气燃烧排放的模拟预测, 最终针对两模型对氨气旋流火焰模拟的异同做了总

结，提出了在氨气旋流火焰模拟中模型选用的建议。

## 1 目标火焰及实验配置

通过旋流叶片产生旋流流场是常用稳定火焰的手段之一，其原理在于旋流叶片将在燃烧室内组织形成回流区域，回流区将高温的燃气输运至火焰根部，使得火焰稳定在旋流叶片上方[12]。本文通过图 1(a)所示的燃烧器产生稳定燃烧的氨气旋流火焰，氨气由液氨储气瓶供应，为了防止氨气在管道供应的过程中出现冷凝现象，管道采用了加热保温装置，氨气出口温度维持在 25°C 状态。氨气旋流燃烧器分预混段和燃烧器头部两个组成部分，氨气与空气在燃烧器预混段进行充分预混，通过文丘里结构和整流孔板使来流流场稳定并消除压力波动的影响，氨气/空气预混气体通过旋流叶片之后进入燃烧室，旋流叶片由 12 个 45°的小叶片组成，叶片的旋流数通过下式计算：

$$S = \frac{2}{3} \cdot \frac{1 - (D_i/D_o)^3}{1 - (D_i/D_o)^2} \tan \alpha$$

本文研究中，旋流数为 0.71。燃烧室为长宽各 70mm、高度 180mm 的石英玻璃光学腔，石英玻璃壁面可以为激光诊断提供光学通路并能直观的观测到燃烧室内部的火焰。燃烧室尾端与大气相通，所有实验在 101kPa 的大气压下进行。目标火焰的光学照片如图 1(b)所示，燃烧室入口平均速度 U 为 3m/s，当量比为 0.8。下文中使用 FGM (Flamelet Generated Manifold) 燃烧模型计算的算例简称 FGM，DTF (Dynamic Thickened Flame) 计算的算例简称 DTF。

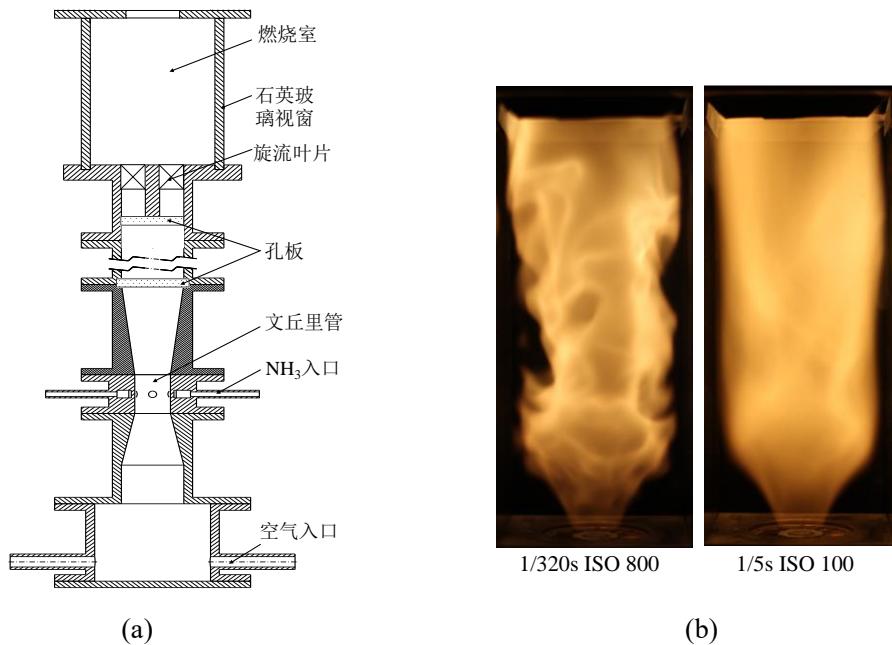


图 1 (a)燃烧器示意图, (b)目标火焰光学照片

本文采用了多项实验测量技术为对比 FGM 和 DTF 燃烧模型在预测氨气旋流火焰提供数据。测量设备如图 2 所示，其中燃烧室的速度场通过 PIV 测量，火焰 OH 组分通过 OH-PLIF 测量，排放数据通过 Gasmet DX4000 烟气分析仪测量，相关实验设备的介绍可以参见我们之前的研究[13, 14]。

基金项目：国家自然科学基金资助项目(No. 51706172, 51776164, 91441203)

作者简介：安振华，男，硕士生；张猛（通信作者），男，教授，博士生导师。

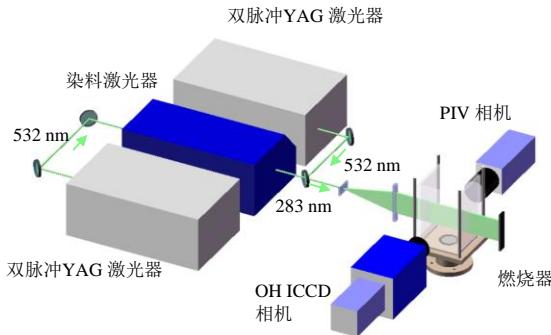


图 2 PIV&OH-PLIF 激光诊断系统

## 2 燃烧模型及数值方法

### 2.1 FGM 模型

火焰面生成流型模型 (flamelet generated manifold, FGM) 是典型的小火焰模型，小火焰类模型最初由 N. Peters 提出，随后拓展到湍流非预混、预混和部分预混火焰的研究中[15]。小火焰面燃烧是基于“小尺度的涡不能进入火焰面内反应层”假设建立的，也就是说这个假设规定了湍流作用只会对火焰产生弯曲、拉伸等作用，并不会进入反应区影响化学反应。基于这样的假设，就可以将湍流作用和化学反应解耦。在本文中，目标火焰为预混氨气火焰，所以没有组分的分层，因此火焰面通过二维建表的方法计算，控制变量为：进展变量  $\gamma$  和焓  $h$ 。进展变量表征从新鲜混合到已燃产物的变化，焓表征了热损失。使用预先建表的方法，先行使用 Chem 1D[16]求解好化学反应速率等燃烧参数，将这些参数映射到进展变量  $\gamma$  和焓  $h$  中，将火焰面内高维度空间的组分浓度分布于某个低纬度流形附近。图 3 展示了以温度为例的建表结果。在燃烧求解过程中，火焰面内的组分浓度以及温度可以用进展变量  $\gamma$  和焓  $h$  表征。这将大大降低计算量，FGM 燃烧模型的最大优点是计算速度快，因为它并不对组分方程进行求解，而是通过查找预建表获取化学反应信息，模型详细的介绍详见我们之前的工作[17]。

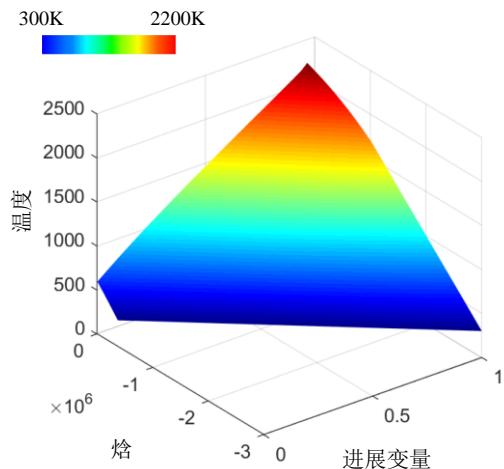


图 3 温度为例的建表结果

### 2.2 增厚火焰模型

增厚火焰按照分类属于有限化学反应速率燃烧模型，该燃烧模型将求解所有的组分和所有的反应。对层流预混火焰来说，火焰厚度一般在 0.1mm-1mm 之间，实际使用的 LES 网格为 0.5mm，而要准确表述化学反应，需要在火焰面内有 5-10 个网格[18]，所以化学反应在这种网格中是无法被直接解析的。增厚火焰模型是将火焰面经过数学处理后，其厚度被增加到足够厚，以至于一般大涡模拟网格可以直接解析火焰面内部结构。同时，它又保证局部的层

流火焰速度保持不变。人为地增加火焰面厚度会使小尺度的火焰面褶皱消失，即减小了局部火焰面面积，从而减小了当地燃料消耗速度。因此，由于增加火焰面厚度而损失的火焰表面积在湍流燃烧计算中需要被模化修正，本文使用定值褶皱因子弥补丢失的火焰面，在以往的研究当中，褶皱因子取 0.5 会得到满意的结果。在增厚区域的选择上，本文通过进展变量来判断火焰面的位置，进行动态增厚，模型详细的介绍详见我们之前的工作[19]。

### 2.3 模拟设置

模拟的计算域及边界条件如图 4(a)所示，计算域与实验保持一致，在模拟中两模型的算例均使用同样的边界条件进行计算，无滑移的速度边界条件应用于燃烧室壁面和叶片壁面，出口采用非反射壁面以减少回流影响；通过设置等温壁面来考虑热损失，实验测量在本文研究工况下壁面的平均温度为 480K，其他壁面设置为绝热。计算网格使用结构化六面体网格，网格数为 500 万，在火焰根部区域进行了网格加密，火焰区域网格尺寸小于 0.4mm，氨气火焰在目标火焰工况下的火焰厚度为 1mm 左右，该尺寸网格能达到计算要求，同时在我们之前研究中也证明了该网格的合理性[20]，图 4(b)为网格细节。实验中采用整流孔板和管流剪切产生湍流，模拟中为达到一致的效果，本文入口湍流通过 LEMOS 湍流入口[21, 22]发生器给定，该湍流发生所需的输出参数：平均流速、积分长度和湍流强度均由实验测量给定，其中湍流强度进行了各项同性假设，在湍流入口下游预留了 10mm 的发展段，使得入口流场适应管路外壁面从而更贴合实际，随后旋流由叶片组织。

本文对比研究的 FGM 和 DTF 燃烧模型均基于开源平台 OpenFOAM 2.3.x 开发。采用 PISO 算法求解压力速度耦合，梯度项和拉普拉斯项采用二阶精度的 TVD 格式离散，瞬态项使用隐式 Euler 格式离散，时间步长设置为 1e-6，使得库朗数小于 0.4。FGM 和 DTF 均先计算冷态流场，待冷态流场计算稳定后进行点火，FGM 采用在叶片上方设置  $20 \times 20\text{mm}$  区域的进展变量  $\gamma = 0.5$  进行点火，DTF 采用在叶片上方设置  $70 \times 35\text{mm}$  区域温度  $T = 1500\text{K}$  进行点火。因为使用不同模型算例采用的点火方式不同，所以后续分析是基于计算完全稳定后进行的。在点火后计算了 10 个流通时间（flow-through times, FTT）进行了数据统计。所有计算在实验室高性能计算集群，浪潮 NF5280M5（Intel Xeon-E5, 360 核心）上完成，FGM 使用 4000 核时，DTF 使用约 26000 核时，可见 FGM 模型计算效率比 TDF 模型高很多。两模型均使用了 31 组分，243 反应的氨气简化机理[23]，该机理在氨气模拟中的准确性已在我们之前的研究中得到验证[11]。

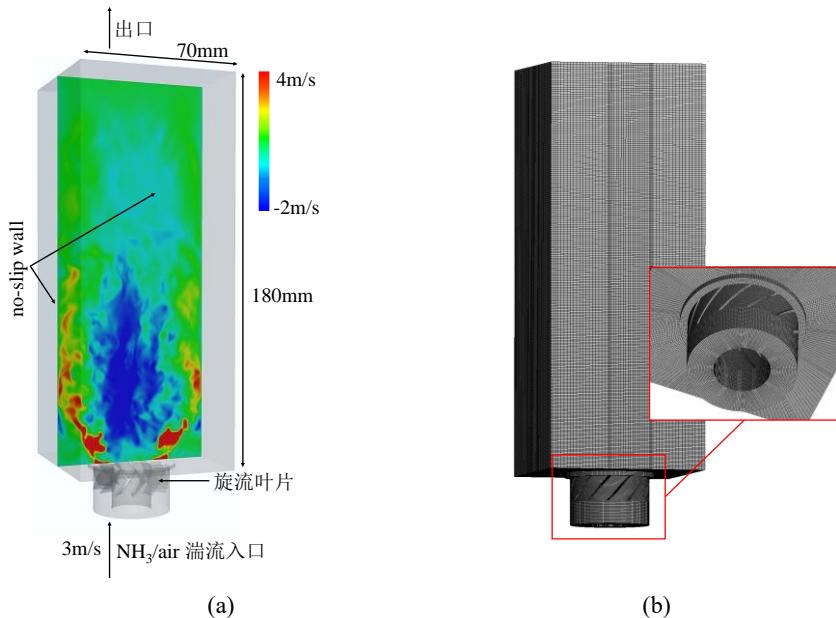
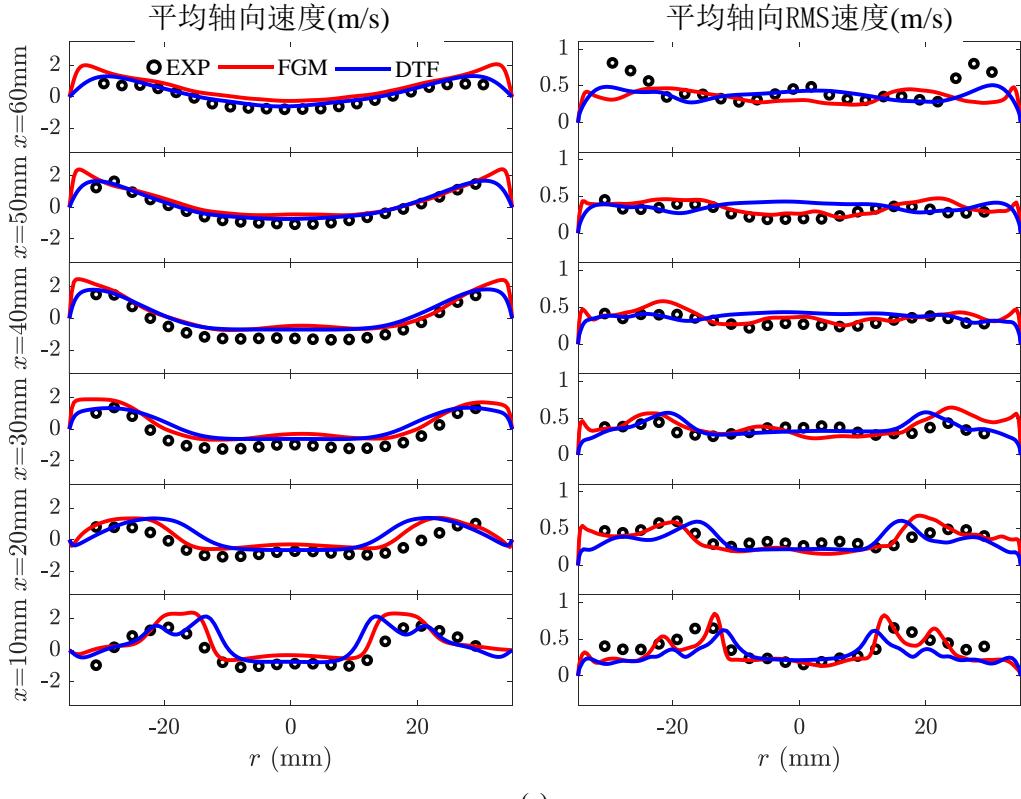


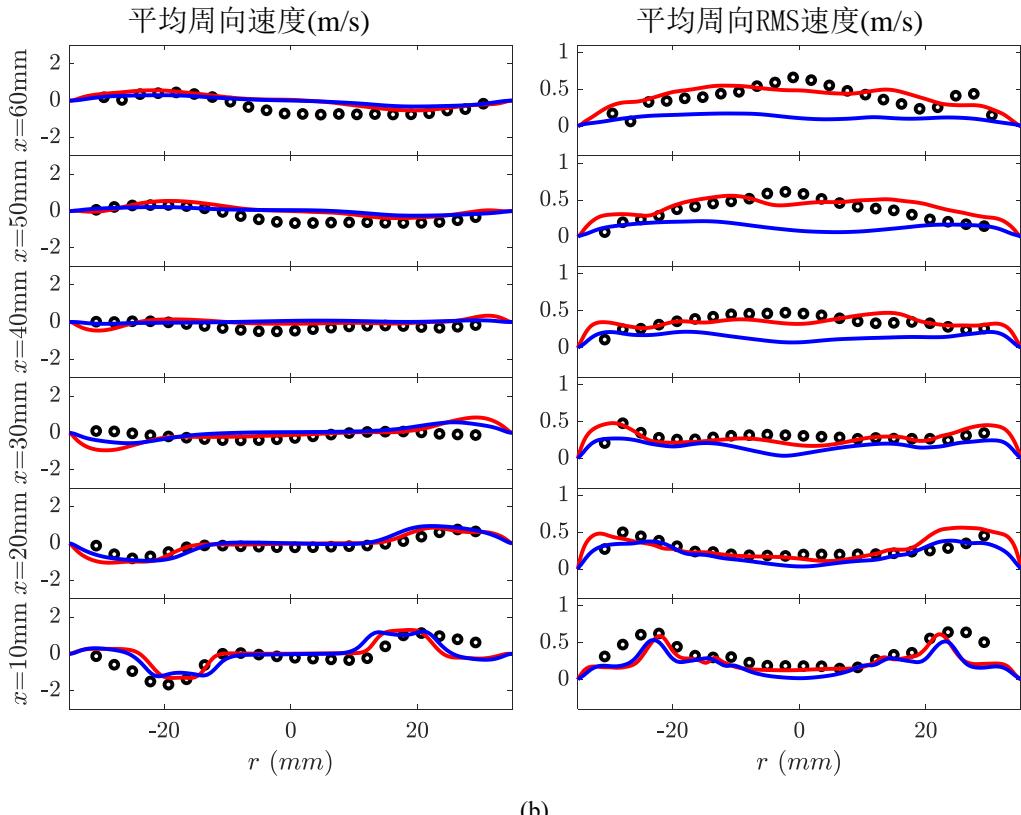
图 4 (a) 模拟区域示意图和边界条件，截面中心面瞬态速度场；(b) 计算网格细节

### 3 结果与讨论

#### 3.1 速度场对比

在旋流火焰数值模拟中，速度场的模拟实验结果对比是最为基础且重要的环节，准确的预测火焰流场是进行各项分析的首要任务，图 5 对比了 FGM 和 DTF 两种燃烧模型计算的氨气旋流火焰速度场，图 5(a)为轴向平均速度和 RMS 速度，图 4(b)为周向平均速度和 RMS 速度，黑色点为 PIV 实验测量数据，红色和蓝色线分别为 FGM 及 DTF 预测结果。对于轴向平均速度，出口位置处两模型预测结果于实验测量结果有较大的偏差，一方面是由于出口位置处旋流流场较为复杂，动态 Smagorinsky 对该流场的预测有一定的不足，另一方面由于出口位置附近的下壁面在实验中对 PIV 入射片光存在一定的反射，使得实验结果也存在有一定的误差，两方面原因造成出口处模拟与实验偏差较大。在下游处，两模型预测的轴向速度与实验较为吻合，FGM 整体略高于 DTF，同时在壁面附近比 DTF 高。两模型预测的轴向湍流脉动速度与实验吻合程度基本一致。对于周向平均速度，两模型均捕捉到了流畅特征，但是下游处旋流的程度捕捉不足，周向脉动速度在上游处两模型结果较为一致，FGM 与实验相对更加吻合一些，但是下游处，DTF 与实验出现较大偏差，低估了周向湍流脉动速度，造成这种现象的原因在于 DTF 在上游过大的选择了反应区域的增厚处理，从而影响了下游的流场脉动。图 6 计算了两模型轴向和周向速度与实验测量的平均误差，可以看出在平均速度场上，DTF 预测相对更加准确一些，而在湍流脉动场上 FGM 更贴合实际，而 DTF 出现较大误差，尤其是周向脉动，相对误差大于 30%。





(b)

图 5 DTF 和 FGM 两不同燃烧模型在不同高度处的速度对比, (a)轴向平均速度和 r.m.s 速度, (b)周向平均速度和 r.m.s 速度

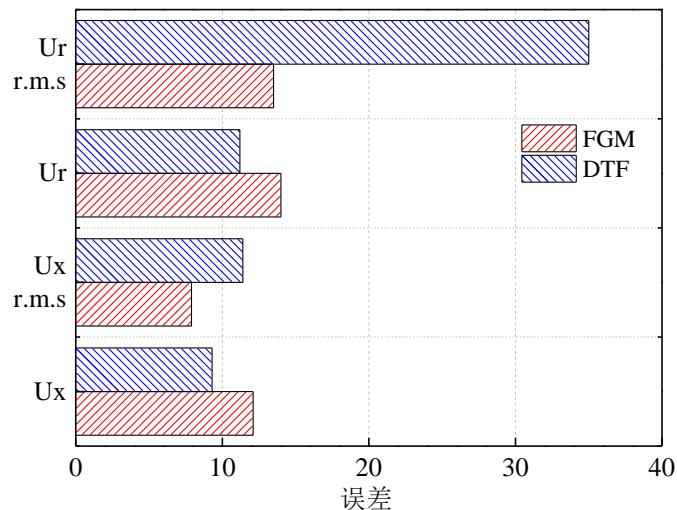


图 6 DTF 和 FGM 两不同模型计算结果与实验的平均误差

### 3.2 火焰结构对比

为对比两燃烧模型预测火焰结构的差异, 图 7(a)进行了瞬时温度场的对比, 从图中可以看出 FGM 计算的温度场整体上比 DTF 计算的高, FGM 模型的温度场中有大量的高温气体 ( $>1800\text{K}$ ) 聚集在中心回流区中, 而 TF 模型的温度场中仅有少量存在于火焰的根部, 由于缺乏温度场的实验数据, 目前还无法判断哪个模型预测温度场更准确。图 7(b)对比了 OH-PLIF 信号与两模型预测的 OH 组分场, 两燃烧模型均能够很好的捕捉 OH 在场内分布的相对强度, 即反应区域 OH 信号强度最高, 内回流区信号较弱, 外回流区基本没有 OH 信号。但是可以看出 FGM 计算结果展示的火焰面褶皱明显多于 DTF 计算的火焰面褶皱, FGM 结

果与实验更为接近，尤其是 FGM 捕捉到了火焰面上小尺度的褶皱，而 DTF 只有较大的火焰褶皱，这和 DTF 增厚反应区域的操作以及定值褶皱因子修正丢失火焰面信息能力的不足有关。此外可以看出，FGM 预测到了 OH 的孤岛，该瞬态特征与实验高度一致，所以在火焰结构瞬态特征捕捉上 FGM 比 DTF 更具有优势。图 7(c)对比了 OH 平均场，两模型 OH 平均结果存在有较小的差异，差异体现在，其一、FGM 计算平均火焰面较直，而 DTF 计算平均火焰面有向内凹的形态，但两模型计算平均结果表示的火焰张角基本一致并与实验吻合较好；其二、实验上外回流区没有 OH 信号，但 FGM 平均计算结果在外回流区捕捉到部分 OH 信号，DTF 的外回流区基本不存在 OH 信号。

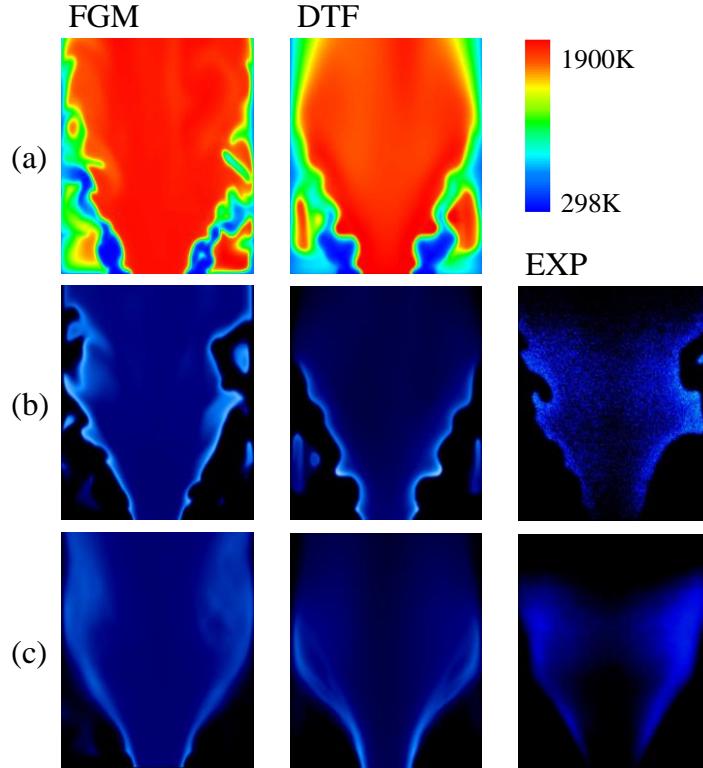


图 7 DTF 和 FGM 两不同燃烧模型计算的 (a) 瞬态温度场对比, (b) 瞬态 OH 场对比和 (c) 平均 OH 场对比

图 8 分别为由 FGM 模型和 DTF 模型计算得到的瞬时温度等值面 ( $T = 1700\text{K}$ ) 代表的火焰锋面以及同时刻的横截面速度绝对值。可以看出两模型预测的 1700 温度等值面有较大的差异，主要体现在两点，其一、FGM 计算火焰面褶皱明显多于 DTF 计算结果，FGM 在 3-5 个网格单元求解火焰锋面，而 DTF 增厚系数为 2，火焰锋面在 8-10 个网格内求解。由于 FGM 不用求解火焰面内的化学反应，所以只用保证火焰面内有一个以上的网格即可，DTF 一般要求火焰面的网格取值为 5-10[18]，本文满足要求，所以造成 DTF 褶皱较少的原因是本文 DTF 计算采用了定值褶皱因子，定值褶皱因子弥补丢失火焰面的能力不足。另一点差异体现在下游火焰结构上，DTF 有明显的向内凹陷，引起下游火焰面差异主要原因是火焰面与流场的相互作用，从截面流场可以看出，DTF 计算的内回流区下游速度较低，较低的速度使得火焰面只能稳定在更上游的地方，从而 DTF 计算的火焰面在下游向内凹陷。而造成流场出现这种差异的原因是由于组分输送和反应的不同导致热释放的不一致，从而影响流场和温度分布。由于光学照片一定程度体现了温度的分布，而光学照片并没有发现明显的下游火焰向内凹陷，所以在火焰锋面预测上 FGM 更具优势。

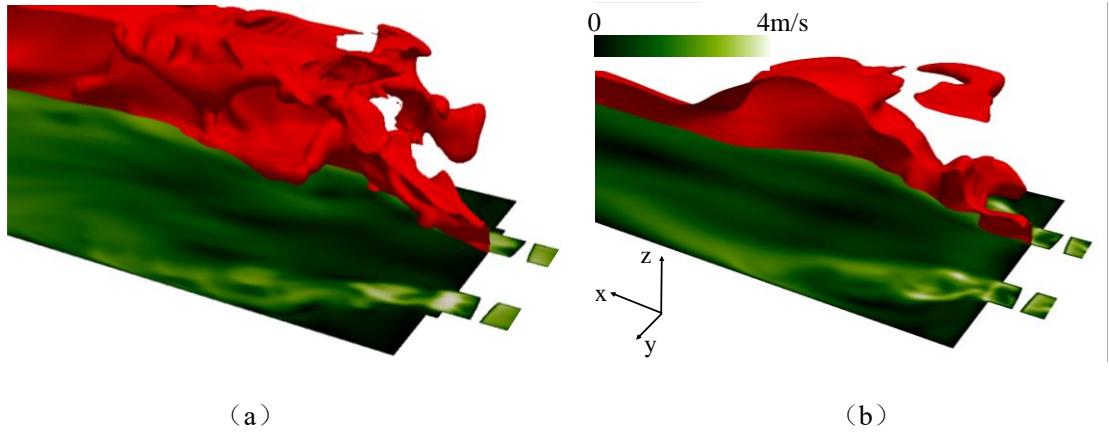


图 8 两种燃烧模型计算的瞬态火焰面（以 1700K 等温面表示，红色）和速度场

### 3.3 排放预测结果的对比

氨气燃烧应用所面临的重要挑战之一是由于燃料含 N 所引起的高 NOx 排放，准确的预测氨气火焰氮氧化物的排放是氨气旋流火焰数值模拟的不同于其他燃料模拟的一大要求。多项研究已经表明 NOx 中 NO 为主要成分，占到总量的 90%以上，其次为 N<sub>2</sub>O 和 NO<sub>2</sub>。为了对比验证数值模拟的准确性，本文采用 FTIR 测量了燃烧器出口的氮氧化物以及未燃 NH<sub>3</sub> 的含量，取样针放置在燃烧器出口上方 150mm 处，如图 9 所示。取样时，先预热主机和采样器，当仪器达到工作温度后进行仪器零点标定，每次测量时保证测量数据随时间达到平稳状态后保存数据，所测污染物值在 40s 后维持稳定，待稳定后统计 20s 的数据求平均后作为实验测量值进行模拟比对的参照。

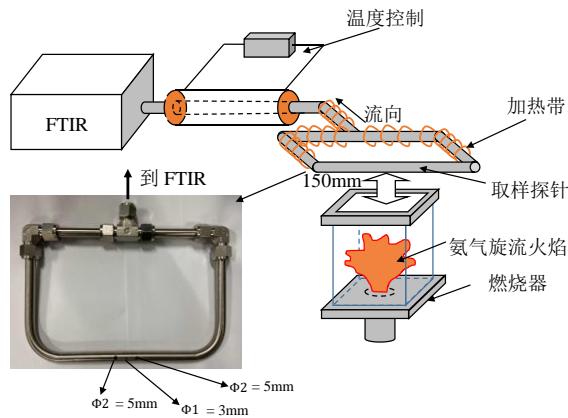


图 9 实验测量污染区示意图

在模拟中，采用靠近燃烧器出口横界面处的空间时间平均污染物(STAE)值[24]来表示，单位为 ppm，与实验一致。图 10 为 NH<sub>3</sub>，NO，N<sub>2</sub>O 和 NO<sub>2</sub> 的模拟实验对比，黑色为实验结果以及实验不确定度，红色为 FGM 结果，蓝色为 DTF 结果。在氨气火焰中，未燃 NH<sub>3</sub> 也是需要考虑的排放物之一，因为目标火焰工况处于稀燃状态，所以 NH<sub>3</sub> 的排放较低，两模型均捕捉到了这个特征，相比之下，DTF 与实验结果更为接近且比 FGM 预测结果低，这表明 DTF 计算的燃料消耗率大于 FGM。NO 为氮氧化物排放的主要组成成分，两模型预测 NO 出现了不同的表现，DTF 低估了 NO 数值而 FGM 高估了 NO 数值，后文将分析出现这种差异的原因。N<sub>2</sub>O 预测与实验出现了较大的偏差，产生这种较大偏差的原因在于模拟所使用的机理为 konnov 氨气详细机理的简化机理，对 N<sub>2</sub>O 的预测不够准确。NO<sub>2</sub> 是氮氧化物排放中占比最少的组分，两模型预测结果接近实验测量值。同时两模型均预测了氮氧化物中三组分的相对大小，总体而言，两模型预测结果与实验结果较为吻合，由于 DTF 求解了所有组分

方程，所以对组分预测的精度略高于 FGM 模型。

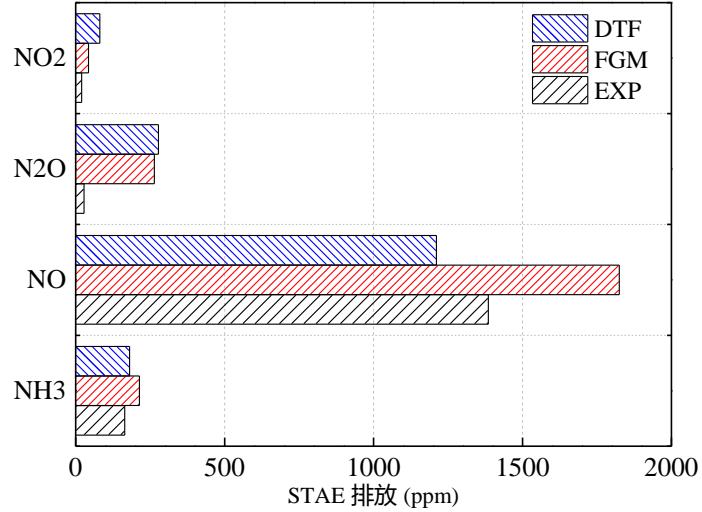


图 10 不同模型预测排放的 STAE 值

为了进一步分析两模型预测结果差异的原因，图 11 展示了截面上两模型计算以上四种组分的云图，各图左半边是 FGM 结果，右半边是 DTF 结果。图 11(a)为 NH<sub>3</sub>，可以看出 FGM 在下游壁面处还存在部分未燃 NH<sub>3</sub>，这表明 DTF 的燃料消耗率大于 FGM，从上文结果可以推断，DTF 的 NH<sub>3</sub>结果更符合实际，除此之外两模型均捕捉到了外回流区的 NH<sub>3</sub>聚集，这是由于外回流区组分输运的作用，使得有部分未燃混合气进入外回流区，外回流区出现的反应也是由该部分未燃气体提供燃料进行的。图 11(b)为 NO 组分分布对比，总体上 NO 的分布具有一致性，即外回流区存在一定 NO，火焰面位置处 NO 浓度较高而内回流区 NO 组分较低。同时可以看出两模型预测结果有一定的差异，差异主要体现在两点，其一、根部组分浓度的不同，可以看出 FGM 计算结果 NO 在根部的浓度与下游差别不大，而 DTF 在根部以及火焰面区域有较高的组分浓度；其二、DTF 内回流区的 NO 浓度相较于 FGM 小很多。以上两点差异导致了 FGM 比 DTF 预测 NO 结果更高，FGM 高估 NO 排放数值而 DTF 低估 NO 排放数值。造成 DTF 内回流区 NO 较低的原因将在下文中分析，由于 O<sub>2</sub>的运输，使得 DTF 内回流区有相对较高的氧含量，局部更加贫燃的状态导致了 NO 浓度降低。图 11(c)为 N<sub>2</sub>O 组分浓度场，可以看出 N<sub>2</sub>O 主要产生于反应区，在已燃区基本没有 N<sub>2</sub>O 分布，未燃区的 N<sub>2</sub>O 为反应区扩散，通过未燃区无 N<sub>2</sub>O 分布表明 N<sub>2</sub>O 是一种燃料依赖型排放物，NH<sub>3</sub>的含量对其产生具有十分重要的影响。对比两模型预测 N<sub>2</sub>O 的结果，可以看出两模型在 N<sub>2</sub>O 总量和分布上较为相近，DTF 在外回流区预测的浓度较高，这与 DTF 计算的 NH<sub>3</sub>燃料消耗率较高也是一致的。图 11(d)展示了 NO<sub>2</sub>的组分分布，FGM 与 DTF 有较大的差异，上文预测总量体现了差异，DTF 预测值比 FGM 高，从云图中也能更直观的看到差异，FGM 只有在反应区和未燃区有 NO<sub>2</sub>分布，而 DTF 在整场都有 NO<sub>2</sub>分布，这和两模型的方法不同有很大的关系，本文 FGM 中通过进展变量和焰来表征火焰的发展，两个控制变量计算结果通过一维火焰面映射出其余的场数据，在一维计算中，已燃区是不存在 NO<sub>2</sub>的，所以三维 LES 计算中，FGM 在中部内回流区也是没有 NO<sub>2</sub>分布，而 DTF 将求解所有的组分方程，自然也不存在过多的假设，所以内回流区有 NO<sub>2</sub>组分的出现，使得总量大于 FGM 计算结果，更接近实际测量值。

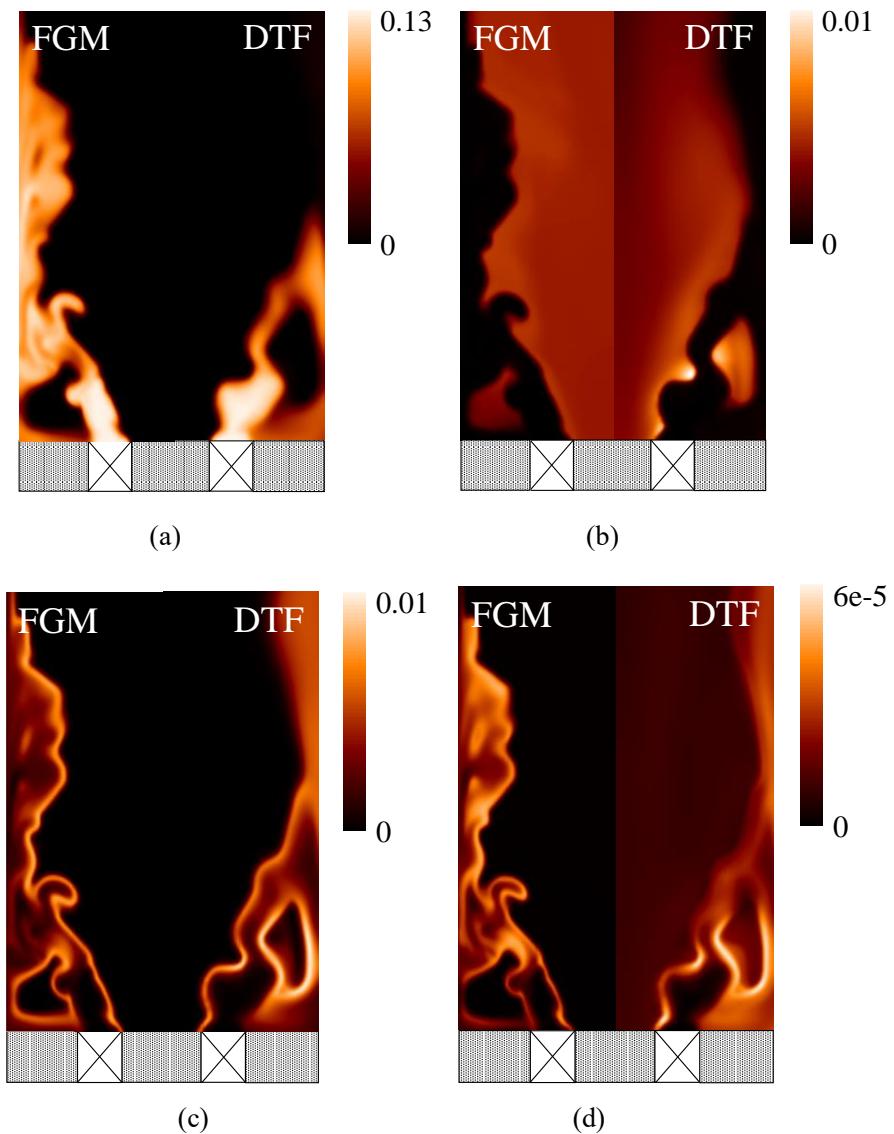


图 11 不同燃烧模型预测排放对比(a)NH<sub>3</sub> (b)NO (c)N<sub>2</sub>O (d)NO<sub>2</sub>

### 3.4 反应路径分析

氨气火焰主要污染物 NO 的生成具有一定的反应路径, 从 NH<sub>3</sub> 到生成 NO 遵循一定的规律, 为进一步分析两模型模拟氨气火焰 NO 排放效果, 论证两模型预测污染物的可靠性, 下文进行了反应路径的分析。可靠性从基元反应和基元组分角度考虑, 需要两模型准确预测出关键组分的分布, 只有生成 NO 的关键组分预测是准确的, 才能有力的说明两模型预测的排放数值有据可依。为研究两模型模拟氨气火焰中的主要反应路径和关键组分, 首先进行零维化学反应路径计算, 该计算基于 Cantera 开发的零维定压反应容器计算器[25], 设置初始条件为绝热条件, 初始反应温度为 1700K, 该反应温度设置参考了 LES 计算中火焰面的温度数值。图 12 为零维计算结果, 结果展示了 NO 最主要的生成路径, NH<sub>3</sub> 会进行连续脱氢反应, 即 NH<sub>3</sub>→NH<sub>2</sub>→NH, NH 将被氧化为 HNO, HNO 进一步氧化生成 NO, 同时, 在 NH<sub>3</sub> 生成 NO 的过程中, OH、O 和 H 也承担了重要的角色。此外 NH<sub>3</sub> 主要通过 NH<sub>2</sub>→N<sub>2</sub>H<sub>2</sub>→NNH 路径生成 N<sub>2</sub>, 在后续研究中, 主要考察 NH<sub>3</sub>、NH<sub>2</sub>、NH、HNO 以及 NO 在三维模拟中, 是否也具有顺序的转化路径。

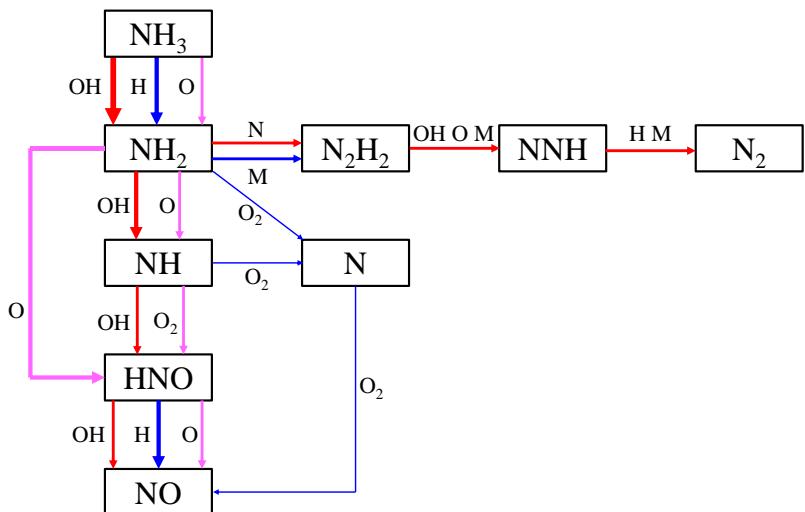


图 12  $\text{NH}_3$  反应路径的 0D 层流分析

图 13(a)表示了  $\text{NH}_3$ 、 $\text{NH}_2$ 、 $\text{NH}$  以及  $\text{NO}$  组分的同步模拟结果，左侧为 FGM 模型计算结果，右侧为 DTF 计算结果，其中  $\text{HNO}$  组分由于几乎完全与  $\text{NH}$  重合，因此没有在图中表示，黑白色为  $\text{NH}_3$  的分布，黄色为  $\text{NH}_2$  分布，紫色为  $\text{NH}$  分布，棕色为  $\text{NO}$  分布。从图中可以看出两模型计算结果存在明显的次序，即  $\text{NH}_3 \rightarrow \text{NH}_2 \rightarrow \text{NH}$ ，这表明两模型均能很好的捕捉不同组分之间的转变过程。对比两模型，可以看出在  $\text{NH}_2$  组分场上有较为明显的区别，FGM 计算结果  $\text{NH}_2$  的分布较广。图 13(b)为 CHEMKIN 计算的 1D 层流火焰面中，从未燃  $\text{NH}_3$  到完全燃烧过程中各组分的变化情况，可以看出  $\text{NH}_2$  首先增大，随后  $\text{NH}$  含量增大，在  $\text{NH}$  开始增大后， $\text{NO}$  组分含量增大，上述次序和上文 Cantera 零维计算结果吻合， $\text{NO}$  达峰之后，保持不变，表明  $\text{NO}$  的相关反应达到平衡，生成速率和消耗速率相等。此外  $\text{OH}$  浓度在  $\text{NH}$  达峰之后也开始急剧增大，随后逐渐减小，这与 LES 计算的  $\text{OH}$  浓度在火焰面处相对较高现象一致。

为探究 FGM 和 DTF 模型在预测氨气旋流火焰时，火焰面是否也存在和一维火焰类似的结果，提取了图 13(a)中白色箭头所示火焰面处的数据，提取顺序从 B 到 A，共计 8mm 长。总体上来说，FGM 和 DTF 结果与一维计算在量级和组分增减次序上保持了高度一致，但是两模型计算结果与一维计算结果保持一致的原因是有差异的，FGM 通过控制变量查一维层流火焰面表的到相应的组分浓度数据，所以从 A 到 B 提取组分数据所得到的结果必然与一维计算结果类似，差异性主要体现在湍流-火焰作用上，湍流作用使得 FGM 两个控制变量的分布具有不规律的特性，这种不规律体现在映射场上就反应了湍流对组分的影响。DTF 计算的结果与一维计算保持一致主要是因为目标火焰的湍流强度低，工况处于湍流火焰分区中的薄反应区，该区域满足火焰面假设，即火焰可以看作完整的面，湍流不会影响火焰面的内部，这种工况下，湍流火焰面与层流火焰面类似，从未燃气到已燃穿过火焰面时，组分浓度的变化是类似的。但如果目标模拟火焰的湍流强度过高时，FGM 模型的火焰面假设将不再成立，但 DTF 模型仍然具有模拟该火焰的能力。对比图 13(c)和图(d)，可以看出除了上述的一致性外，还存在的差异性。两模型模拟结果最明显的差别在于对于  $\text{O}_2$  组分的模拟结果，可以看出 FGM 的  $\text{O}_2$  模拟结果与一维结果趋势一致，在火焰面靠近已燃区位置处  $\text{O}_2$  的浓度降到很低，而 DTF 预测的  $\text{O}_2$  浓度在靠近已燃区位置处反而有上升，这种变化趋势是由于 DTF 模拟种，由于内回流区的速度很低，存在大量的回流，使得未燃新鲜气进入回流区，导致了  $\text{O}_2$  含量不降反增的情况，从而也导致了 DTF 预测内回流区  $\text{NO}$  浓度较低。此外，两模型预测的火焰面厚度几乎一致，参照  $\text{NH}$  表征反应区，FGM 火焰厚度为 1.9mm，DTF 火焰厚度为 1.8mm，均比一维计算结果火焰面厚度 (4mm) 薄，这表明了湍流对火焰面厚度的影

响。

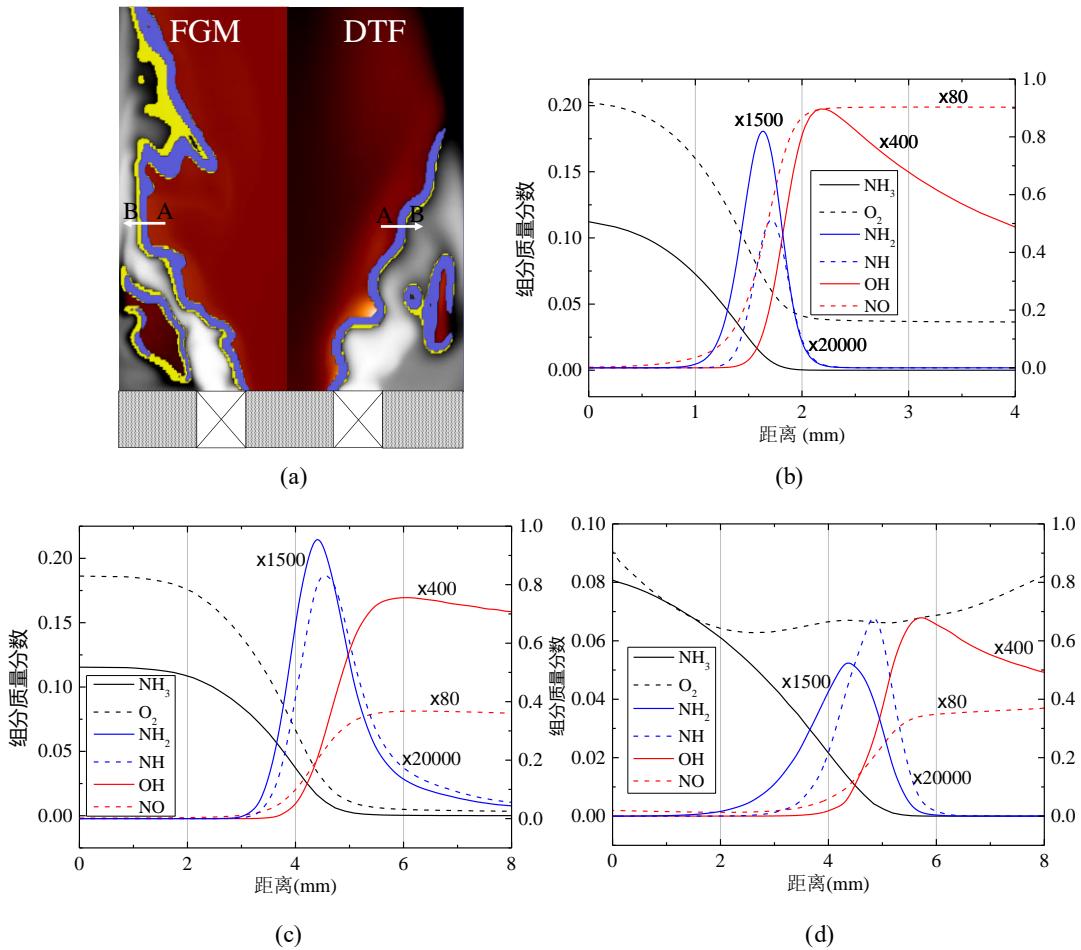


图 13 (a)两模型组分同步对比, (b)1D 火焰面组分变化, (c) FGM(A-B)组分变化, (d) DTF(A-B)组分变化

#### 4 结论

本文采用 FGM 燃烧模型和 DTF 燃烧模型对氨气旋流火焰开展了大涡模拟对比研究。在相同网格、边界条件以及初始条件等设置下, 对同一个目标火焰的燃烧室流场、火焰结构以及排放特性的数值模拟结果进行了比对, 对比研究表明:

1. 在使用 31 组分, 243 反应的氨气简化机理时, FGM 计算效率比 DTF 计算效率高 5 倍多, 因为 FGM 只用求解速度方程和两个控制变量方程, 而 DTF 则需要求解速度方程以及所有的 31 个组分方程, 在工业应用中更高效率的 FGM 模型更具有优势
2. 两模型在流场预测上均有较高的准确性, 平均速度场上, DTF 预测相对更加准确一些, 而在湍流脉动场上 FGM 更贴合实际, DTF 在周向脉动出现较大误差;
3. 火焰结构预测上在火焰根部两模型模拟结果与实验吻合程度较高, 尤其是 OH 信号和实验有较高的吻合程度, 但是火焰面下游的预测两模型出现了不一致的现象, DTF 在下游有明显的向内凹陷, 实际上不存在这种凹陷结构, 所以在火焰锋面预测上 FGM 更具优势;
4. 污染物预测方面 DTF 结果相对更接近实验测量值, FGM 较高预测了 NO 的排放, 这与 FGM 存在假设而 DTF 是求解所有组分方程有关。

综合讨论, 两模型均有较高的模拟精度, 满足氨气旋流火焰模拟需求, DTF 因为考虑了所有的组分输运, 是一种完全还原物理过程的方法, 所以在组分模拟更具优势, 而 FGM 采用了预先建表的方法, 只用求解有限的控制变量方程, 所以在计算效率上具有绝对的优势。在模拟结果不需要十分精确的组分信息以及各基元反应的反应速率时, 优先推荐使用效率更高的 FGM 模型, 当 FGM 模型计算不满足需求时, 可以使用 DTF 模型。

## 参考文献

- [1] Leal-Arcas R, Morelli A. The resilience of the Paris Agreement: negotiating and implementing the climate regime[C]. *Geo Envtl L Rev* 2018;31:1.
- [2] Han P, Zeng N, Zhang W, Cai Q, Yang R, Yao B, et al. Decreasing emissions and increasing sink capacity to support China in achieving carbon neutrality before 2060[C]. arXiv preprint arXiv:210210871 2021.
- [3] Ayvali T, Tsang S, Van Vrijaldenhoven T. The Position Of Ammonia In Decarbonising Maritime Industry: An Overview And Perspectives: Part I. *Johnson Matthey Technology Review* 2021[C].
- [4] Ryu K, Zacharakis-Jutz GE, Kong S-C. Effects of gaseous ammonia direct injection on performance characteristics of a spark-ignition engine[J]. *Applied energy* 2014;116:206-15.
- [5] Van Blarigan P. Advanced internal combustion engine research[J]. *DOE Hydrogen Program Review NREL-CP-570-28890* 2000;1-19.
- [6] Li S, Zhang S, Zhou H, Ren Z. Analysis of air-staged combustion of NH<sub>3</sub>/CH<sub>4</sub> mixture with low NO<sub>x</sub> emission at gas turbine conditions in model combustors[J]. *Fuel* 2019;237:50-9.
- [7] Somaratne KDKA, Colson S, Hayakawa A, Kobayashi H. Modelling of ammonia/air non-premixed turbulent swirling flames in a gas turbine-like combustor at various pressures[J]. *Combustion Theory and Modelling* 2018;22(5):973-97.
- [8] Somaratne KDKA, Okafor EC, Hayakawa A, Kudo T, Kurata O, Iki N, et al. Emission characteristics of turbulent non-premixed ammonia/air and methane/air swirl flames through a rich-lean combustor under various wall thermal boundary conditions at high pressure[J]. *Combustion and flame* 2019;210:247-61.
- [9] Somaratne KDKA, Okafor EC, Sugawara D, Hayakawa A, Kobayashi H. Effects of OH concentration and temperature on NO emission characteristics of turbulent non-premixed CH<sub>4</sub>/NH<sub>3</sub>/air flames in a two-stage gas turbine like combustor at high pressure[J]. *Proceedings of the Combustion Institute* 2021;38(4):5163-70.
- [10] Honzawa T, Kai R, Okada A, Valera-Medina A, Bowen PJ, Kurose R. Predictions of NO and CO emissions in ammonia/methane/air combustion by LES using a non-adiabatic flamelet generated manifold[J]. *Energy* 2019;186:115771.
- [11] Wei X, Zhang M, An Z, Wang J, Huang Z, Tan H. Large eddy simulation on flame topologies and the blow-off characteristics of ammonia/air flame in a model gas turbine combustor[J]. *Fuel* 2021;298:120846.
- [12] Huang Y, Yang V. Effect of swirl on combustion dynamics in a lean-premixed swirl-stabilized combustor[J]. *Proceedings of the Combustion Institute* 2005;30(2):1775-82.
- [13] Zhang W, Wang J, Mao R, Lin W, Lin B, Wu Y, et al. Experimental study of compact swirl flames with lean premixed CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>/air mixtures at stable and near blow-off conditions[J]. *Experimental Thermal and Fluid Science* 2021;122:110294.
- [14] Zhang M, An Z, Wei X, Wang J, Huang Z, Tan H. Emission analysis of the CH<sub>4</sub>/NH<sub>3</sub>/air co-firing fuels in a model combustor[J]. *Fuel* 2021;291:120135.
- [15] Peters N. *Turbulent combustion*[M]. IOP Publishing; 2001.
- [16] Chem1D A. one-dimensional laminar flame code, Eindhoven University of Technology[M]. 2016.
- [17] Zhang W, Karaca S, Wang J, Huang Z, van Oijen J. Large eddy simulation of the Cambridge/Sandia stratified flame with flamelet-generated manifolds: Effects of non-unity Lewis numbers and stretch[J]. *Combustion and Flame* 2021;227:106-19.

- [18] Martin CE, Benoit L, Sommerer Y, Nicoud F, Poinsot T. Large-eddy simulation and acoustic analysis of a swirled staged turbulent combustor[J]. AIAA journal 2006;44(4):741-50.
- [19] Guo S, Wang J, Wei X, Yu S, Zhang M, Huang Z. Numerical simulation of premixed combustion using the modified dynamic thickened flame model coupled with multi-step reaction mechanism[J]. Fuel 2018;233:346-53.
- [20] Zhang M, Wei X, Wang J, Huang Z, Tan H. The blow-off and transient characteristics of co-firing ammonia/methane fuels in a swirl combustor[J]. Proceedings of the Combustion Institute 2021;38(4):5181-90.
- [21] Kornev N, Hassel E. Method of random spots for generation of synthetic inhomogeneous turbulent fields with prescribed autocorrelation functions[J]. Communications in numerical methods in engineering 2007;23(1):35-43.
- [22] Kornev N, Kröger H, Turnow J, Hassel E. Synthesis of artificial turbulent fields with prescribed second-order statistics using the random-spot method[J]. PAMM: Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics. 7. Wiley Online Library; 2007:2100047-8.
- [23] Xiao H, Howard M, Valera-Medina A, Dooley S, Bowen PJ. Study on reduced chemical mechanisms of ammonia/methane combustion under gas turbine conditions[J]. Energy & Fuels 2016;30(10):8701-10.
- [24] Somarathne KDKA, Hatakeyama S, Hayakawa A, Kobayashi H. Numerical study of a low emission gas turbine like combustor for turbulent ammonia/air premixed swirl flames with a secondary air injection at high pressure[J]. International Journal of Hydrogen Energy 2017;42(44):27388-99.
- [25] Goodwin DG, Moffat HK, Speth RL. Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes[M]. Pasadena, CA; 2009.