

燃料燃烧反应机理-甲烷

一、机理说明：

以点火延迟时间为目标，使用 6 种 DRG 相关方法[1]，对 AramoMech-3.0[2]中 CH₄ 机理(42s-273r)进行简化，得到适合宽温度范围使用的机理(26s-151r)。

简化条件：P=1 atm T= 900-1600 K。

通过对比点火延迟时间以及层流火焰速度，简化机理有着良好的动力学模拟效果，并应用于 Sandia FlameD[3]的燃烧数值模拟。

二、动力学验证：

1、点火延迟时间对比：

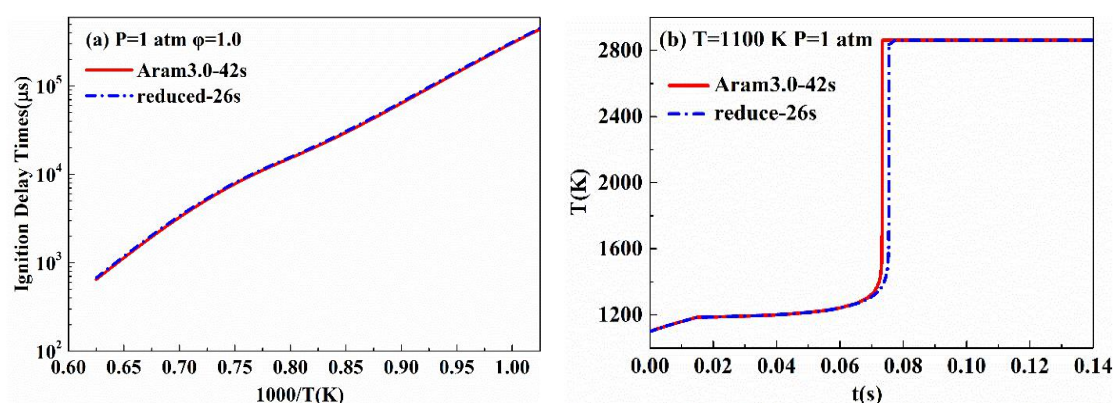


图 1. CH₄/Air 的点火延迟时间对比(a)P=1 atm φ=1.0 T=900-1600 K; 以及温度随时间的变化(b) P=1 atm φ=1.0 T=1100 K。

2、层流火焰速度对比：

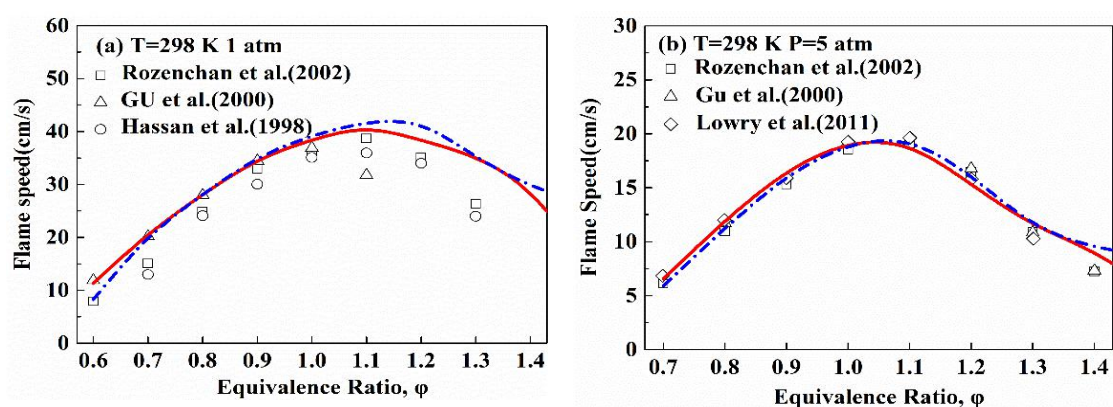


图 2. CH₄/Air 的层流火焰速度对比(a) T=298 K, P=1 atm; (b) T=298 K, P=5 atm

三、燃烧数值模拟验证：

1、条件和设置：

(1) Fuel: 中央燃料射流为甲烷-空气混合物(含 25%体积的 CH₄, 当量比为 3.174), 入口流速 49.6 m/s, 入口温度 294 K;

(2) Pilot: 先导火焰燃烧 C₂H₂、H₂、空气、CO₂ 和 N₂ 的混合物, 入口流速 11.4 m/s,

入口温度 1880 K;

(3) co-flow: 同流气体为常温空气, 入口流速 0.9 m/s, 入口温度 291 K;

(4) 使用机理: Aramomech-3.0 机理根据点火误差简化得到 42s-273r、26s-151r 机理;

(5) 使用程序: 商用软件, RANS 稳态模拟, 雷诺应力模型, EDC 燃烧模型, couple 算法。

2、数值模拟结果:

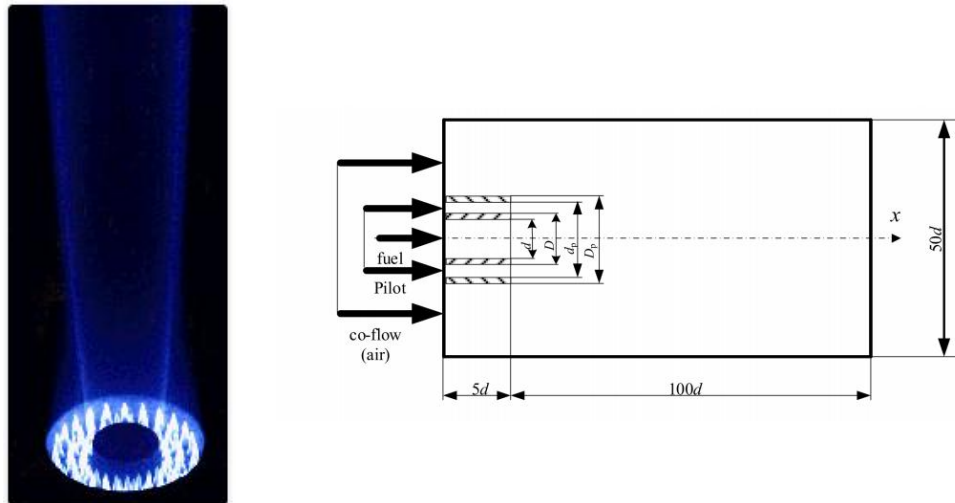


图 3. 桑迪亚实验室的 FlameD 火焰

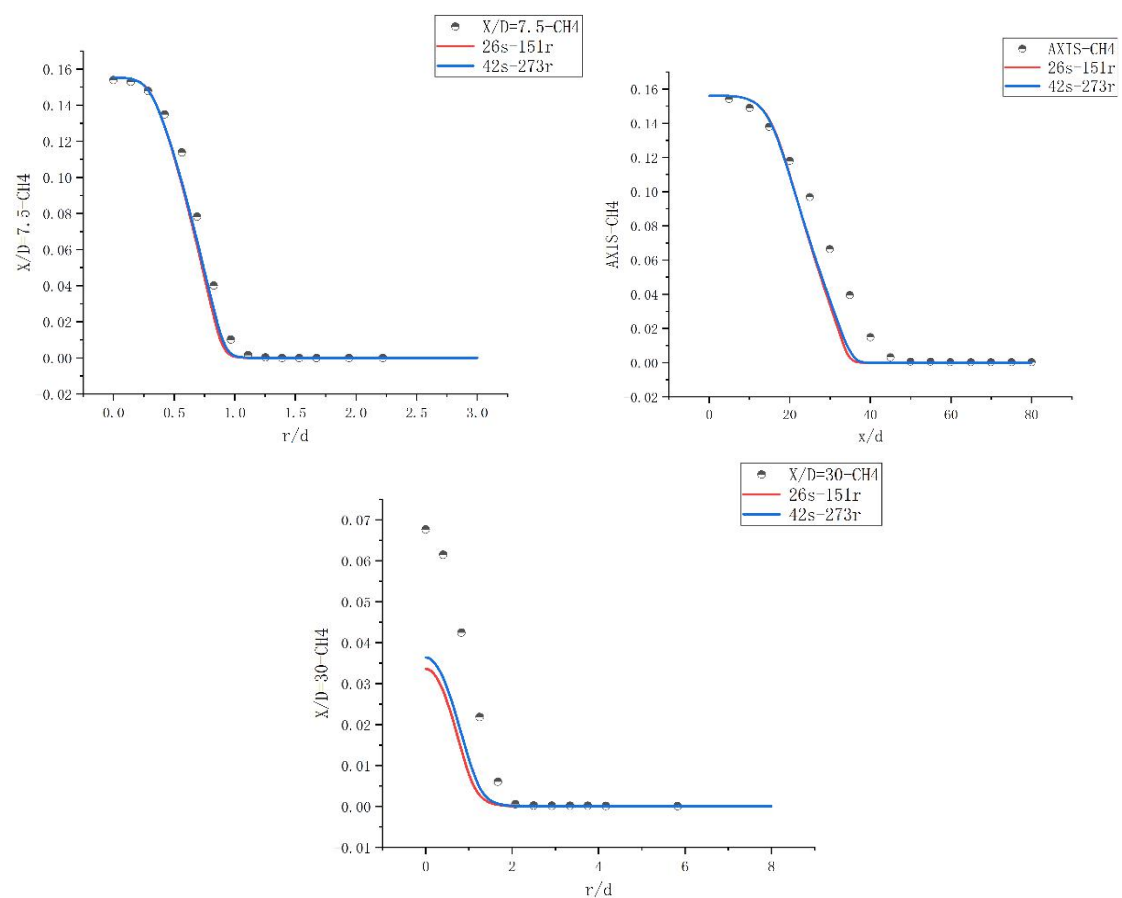


图 4. 沿轴线 CH₄ 质量分数、 $x/d=7.5$ 、 $x/d=30$ 处沿径向 CH₄ 质量分数的对比

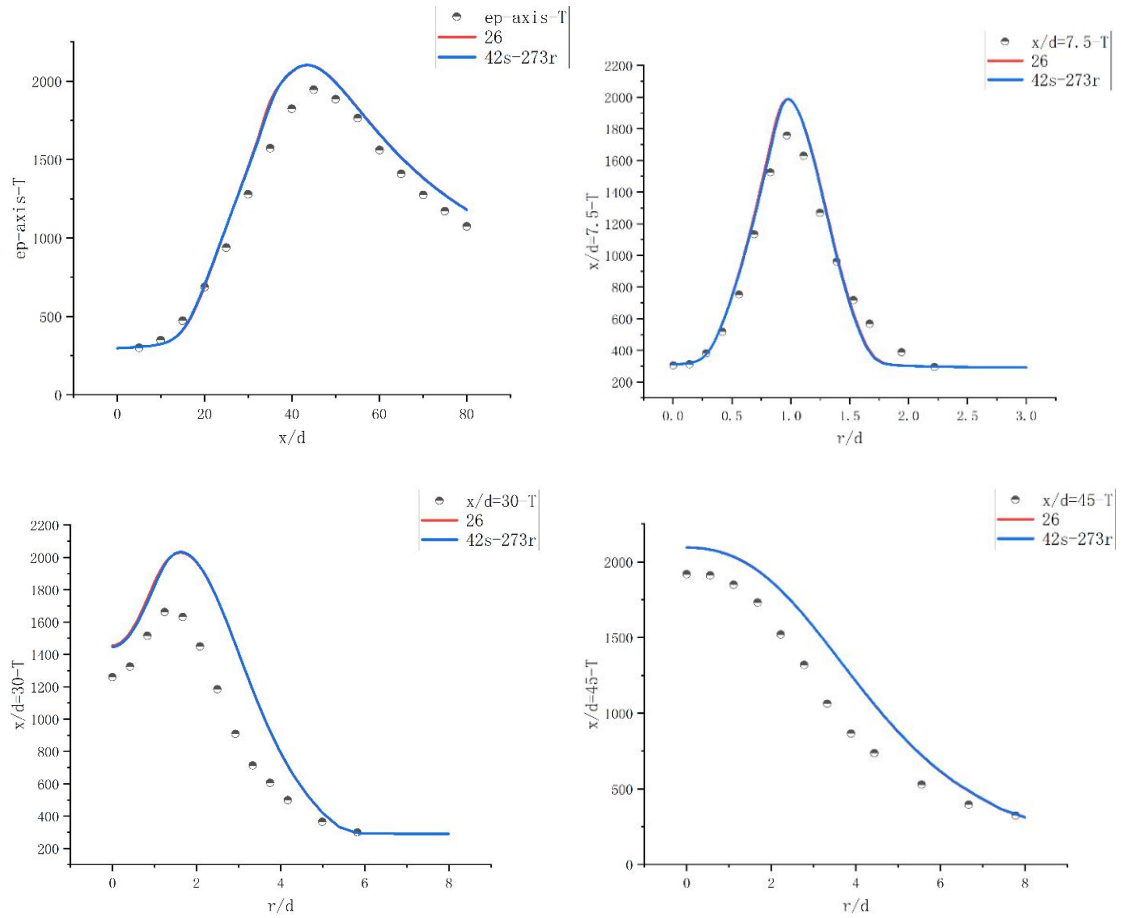


图 5. 沿轴线温度、 $x/d=7.5$ 、 $x/d=30$ 、 $x/d=45$ 处沿径向温度的温度对比

参考文献

- [1] J. Xue, S. Xi, F. Wang, An extensive study on skeletal mechanism reduction for the oxidation of C0–C4 fuels, *Combustion and Flame* 214 (2020) 184–198.
- [2] C.-W. Zhou, Y. Li, U. Burke, C. Banyon, K.P. Somers, S. Ding, S. Khan, J.W. Hargis, T. Sikes, O. Mathieu, E.L. Petersen, M. AlAbbad, A. Farooq, Y. Pan, Y. Zhang, Z. Huang, J. Lopez, Z. Loparo, S.S. Vasu, H.J. Curran, An experimental and chemical kinetic modeling study of 1,3-butadiene combustion: Ignition delay time and laminar flame speed measurements, *Combustion and Flame* 197 (2018) 423–438.
- [3] R.S. Barlow, J.H. Frank, A.N. Karpetis, J.-Y. Chen, Piloted methane/air jet flames: Transport effects and aspects of scalar structure, *Combustion and Flame* 143 (2005) 433–449.