

特约稿件

文章编号:1001-2060(2023)05-0001-13

论燃烧学发展的几个里程碑

周力行

(清华大学 航天航空学院, 北京 100084)

摘要:从19世纪开始,燃烧学的发展先后经历了燃烧热力学,燃烧反应动力学,燃烧物理学和反应流体力学等阶段。原来的燃烧理论只能定性地用于工程设计中。从20世纪70年代左右开始,由于大型数字计算机的产生和计算流体力学的出现,燃烧学发展到燃烧的数值模拟,先后出现了雷诺平均模拟、大涡模拟和直接数值模拟,可以把燃烧理论定量地用于燃烧装置的设计中。本文对燃烧学发展的几个里程碑进行了回顾,希望能和燃烧界同行们进行交流。

关键词:燃烧理论;燃烧数值模拟;反应流体力学

中图分类号:TK16

文献标识码:A

DOI:10.16146/j.cnki.rndlge.2023.05.001

[引用本文格式]周力行.论燃烧学发展的几个里程碑[J].热能动力工程,2023,38(5):1-13. ZHOU Li-xing. On some milestones in the development of combustion theory[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power, 2023, 38(5): 1-13.

On Some Milestones in the Development of Combustion Theory

ZHOU Li-xing

(School of Aerospace Engineering, Tsinghua University, Beijing, China, Post Code: 100084)

Abstract: Since the beginning of 19th century, the combustion theory was developed through different stages, i. e., combustion thermodynamics, combustion reaction kinetics, combustion physics and reacting fluid dynamics, etc. Originally, the combustion theory was only qualitatively applied in engineering design. Starting from the 70's of 20th century due to the occurrence of large-size digital computers and the computational fluid dynamics, the combustion theory was developed to numerical simulation of combustion, which included Reynolds-averaged modeling, large-eddy simulation and direct numerical simulation, and may be quantitatively used in the design of combustion facilities. In this paper, a review is given for these milestones in the development of combustion theory, in order to exchange ideas with our colleagues in combustion community.

Key words: combustion theory, combustion numerical simulation, reacting fluid dynamics

引言

各种强烈放热和发光的反应,包括氧化,或者类氧化反应(氮化,氨化等),强烈放热分解反应(如联

氨分解)或者其他强烈放热反应,有基态和激发态的自由基、原子、电子及离子出现,伴有光辐射现象者,都可以称为“燃烧”。无论气体、液体还是固体燃料燃烧,都是流动、传热、传质和化学反应相互作用的综合现象。燃烧的应用及其发展有悠久的历史

收稿日期:2022-08-19; 修订日期:2022-10-26

基金项目:国家自然科学基金(51390493)

Fund-supported Project: National Natural Science Foundation of China; Multi-scale Coupling Mechanism of Gas-Solid Turbulent Combustion (51390493)

作者简介:周力行(1932-),男,清华大学教授,博士生导师。

史。人类祖先远在无文字可考的旧石器时代就已学会了用火,火是人类最早征服的自然力之一。我国传说,盘古时代燧人氏(原始部落的某个氏族)钻木取火。希腊传说,天神普罗米修斯把天火带给人间。我国古书“庄子”中有“木与木相摩则然(燃)”的说法。各种考古发现,包括周口店北京猿人遗迹的考古发现证明,人类至少 50 万年前已经学会了用火。火的使用使得人类学会熟食,在进化过程中大脑更加发达,使人类脱离了茹毛饮血的野蛮状态而进入文明时代。恩格斯在《自然辩证法》中指出:“只是人类学会了摩擦取火之后,人才第一次使某种无生命的自然力为自己服务”。但是,只有当火的使用由生活领域进入到生产领域,人们逐渐加深了对燃烧现象的定性和定量认识,才产生一门独立的科学—燃烧学,而且有了迅速的发展。近代从 17 世纪产业革命蒸汽机的出现和 18 世纪内燃机的出现开始,到 20 世纪 40 年代的航空航天技术的发展和 20 世纪 70 年代的能源危机,促进了燃烧技术的大发展,近代燃烧技术已有近 400 年的历史。

燃烧技术被广泛地用于能源、航天和航空、冶金、化工、机械等工业中,用来发电、产生动力、冶炼、制备化工产品、机械加工、制备煤气、钻探及破碎岩石、喷撒农药以及用于军事武器等。这些技术领域的不断革新,特别是能源、喷气及火箭技术的发展,以及环境保护的加强,对燃烧技术提出了越来越高的要求。首先是航天航空技术要求燃烧不断强化和趋于更高的能量水平,这就是高能或高温、高压(超临界)、高速(超音速)、强旋、强湍流和爆震等条件下的燃烧。近年来受到国际上很大重视的超音速燃烧和爆震燃烧就是这种趋势的反映。其次是能源利用问题要求解决高效率、节省燃料的燃烧过程,要求使用所谓的替代燃料。例如烧轻油的航空发动机和内燃机改成烧重质液体燃料或其他替代燃料,烧油的锅炉或工业炉改成烧煤或烧煤浆(水煤浆,油煤浆,水油煤浆等),研制能烧劣质煤的流化床等。在烧劣质煤中出现了低负荷燃烧稳定和不用油的直接点燃等问题。

另一方面,燃烧形成了对环境的污染,燃烧过程放出的硫化物(SO_x)、氮氧化物(NO_x)、 CO 、 CO_2 、残余烃类、烟炱、有毒物质和颗粒物等有害物质及燃烧

噪音,严重影响着人类的健康。必须研究清洁燃烧技术,控制燃烧过程,使之减少对环境的污染,成为燃烧技术研究的重大课题。这就要研究燃烧过程中减少污染物的排放以及燃烧产物中的脱硫、脱硝以及 CO_2 治理等技术。与此同时,为了保护环境,还要研究垃圾物的焚烧技术等。特殊条件下的燃烧是另外一类燃烧技术问题。一种制备材料的方法是固体和固体之间进行燃烧,可以节省能量,称为“自蔓延燃烧”,在近年来也受到国际上的重视。随着航天技术和信息技术的发展以及探讨基本上没有重力影响时的燃烧基本规律,近年来微重力条件下的燃烧成为燃烧技术研究的课题。而微尺度燃烧和电磁场下的燃烧也一直引起许多研究者的注意。21 世纪国际上的研究热点是 3 个“O”,即信息科学(IN-FO)、生物科学(BIO)和纳米科学(NANO)。因此,未来的燃烧技术的研究的发展有可能和这些科学结合起来。例如,生命燃烧学或者生物燃烧学就是用燃烧的规律研究生命现象,探讨生命的起源、疾病的起因和防治。再有纳米尺度下的燃烧现象,涉及到纳米材料制备、信息材料制备等。这些问题有待进一步的研究。

燃烧学的产生和发展正是受到燃烧技术发展的推动。虽然人类用火已有 50 万年以上的历史,而用电则只不过才有 300 多年的历史,但是人类发现和应用电磁现象之后不久就掌握了它的规律和本质,到 19 世纪已经建立了电磁场的基本数学理论。然而对燃烧的认识则要困难得多,这是由于燃烧是一个受多种物理和化学因素控制的复杂过程。18 世纪中叶以前,人们对燃烧现象的本质几乎仍然一无所知,把物质能否燃烧归结为是否含有一种特殊的“燃素”。到 18 世纪中叶,俄国 Lomonosov 和法国 Lavoisier 于 1756 年到 1777 年间分别通过各自的实验观测,提出燃烧是物质的氧化这一概念,可以看成是燃烧学的萌芽。近代燃烧学的发展至今已经有近 250 年的历史。到了 19 世纪,由于热化学和化学热力学的发展,出现了燃烧热力学,把燃烧装置作为热力学体系,考察其初态与终态间关系,阐明了燃烧热、产物平衡组分及绝热燃烧温度的规律性。这对了解燃烧系统的静特性是必要和有利的,不过当时曾把热力学的特点看成是燃烧的唯一特点。某些特

性,如着火温度,被错误地看成是燃料的固定不变的属性。从20世纪初到30年代开始建立了燃烧过程的动态理论,出现了燃烧反应动力学, Semonov 等提出了燃烧的链式反应机理。20世纪30年代到50年代间, Frank-Kamenetsky, Lewis, Von Elbe, Zeldovich 和 Williams 等人由反应动力学和传热传质相互作用的观点,建立了苏联学者所称为的“燃烧物理学”,即着火和灭火、层流火焰传播、油滴和碳粒燃烧以及湍流燃烧理论等。20世纪50年代到60年代间, Von Karman 和钱学森提出了用连续介质力学来研究燃烧,称之为“化学流体力学”或“反应流体力学”。把经典流体力学方法用于求解层流火焰传播速度,将边界层和射流理论以及摄动法等用于研究燃烧。此后在飞行器头部烧蚀问题中广泛开展了这类研究。

随着大型数字电子计算机的出现、以及计算流体力学和计算传热学的发展,从20世纪70年代初开始,建立了燃烧的数值模拟理论和方法,系统地把计算流体力学用于研究层流及湍流气体燃烧、液雾及煤粉燃烧,发展了一系列计算程序软件。在这方面,英国 Spalding 进行了开创性的研究。自20世纪80年代初至今的40多年来,学者们把多相流体力学和单相湍流模型理论结合起来,又把无反应湍流模型理论和反应流体力学结合起来,研究了多相湍流反应流动的规律,称之为“多相湍流反应流体力学”。系统地对多相湍流反应流动的理论、数值模拟、量测及其在燃烧中的应用进行了研究。目前,已经出现了一系列商业软件,在工程中取得了广泛的应用。与此同时,激光诊断技术的发展使人们有可能用非接触法直接测量燃烧条件下气体的速度、温度、组分浓度及湍流度和颗粒的速度、浓度、尺寸分布及湍流度等,可以检验数值模拟结果,从而使人们对燃烧机理的了解不断深入。近年来,出现了燃烧的细观大涡模拟和直接数值模拟,可以揭示湍流和燃烧的产生和发展的细观结构,有助于更深入地了解湍流和反应相互作用的本质,从而完善统观的数学模型。可以说,燃烧学已经由定性的科学发展成为能够严格地用数学描述的定量科学了。本文将按照燃烧学发展的几个里程碑,试论各时期的主要成就。

1 燃烧的热力学理论

18世纪法国拉瓦锡(Lavosier)和俄国罗蒙诺索夫(Lomonosov)分别指出燃烧是燃料的氧化反应,称为“燃烧的氧化论”。到了19世纪,对燃烧现象的研究出现了燃烧热力学理论。当时对燃烧现象的认识限于其最明显的外部标志,即热力学的特点,把燃烧过程看成是一种由初始状态变成最终状态,即由一种静态达到另一种静态的热过程,考察有多少物质损失、有多少物质产生、有多少热量放出。主要有经典的海斯(Heiss)定律和克希霍夫(Kirchoff)定律^[1]。例如,克希霍夫定律表达了反应热随温度的变化率等于定压下反应物和生成物的比热差:

$$\Delta H_R = \int_{298}^T \left(\sum_{s=p} M_s c_{ps} - \sum_{j=R} M_j c_{pj} \right) dT + \Delta H_{R298}^0 \quad (1)$$

然后根据初始的燃料和氧化剂的成分给出燃烧产物的浓度和温度。

2 燃烧的链式反应理论

到20世纪初,燃烧研究者认识到控制燃烧过程动态发展的是化学反应动力学,改善燃烧过程在于提高反应速率。这个时期很多人集中精力去研究燃烧反应动力学机理,于是便出现了链式反应理论。20世纪初叶,苏联的谢苗诺夫(Semenoff)^[2]、美国的刘易斯和埃尔伯(Lewis and Von Elbe)^[3]首先指出,气体燃料,例如氢和一氧化碳等燃料和氧的反应是“分支链式反应”。燃烧链式反应(Chain Reaction)是一种复杂化学反应,其中反应速率不仅仅取决于原有物和最终产物的浓度(遵循质量作用定律)和温度(遵循Arrhenius定律),而且受化学反应过程中自身产生的一些不稳定的中间产物(Intermediates),或称为活泼中心(Active Center)的影响。例如自由基(Free Radicals)的影响很大,这些活泼中心能够大大加快反应速率。链式反应通常有3个阶段:(1)链的产生:受热后有中间产物生成,例如原子、离子或中性分子碎片的产生;(2)链的传播:中间产物可能和原有物反应,产生稳定的产物或者其他的中间产物,可能是同种类型或其他类型的中间

产物,新的中间产物再继续反应下去;(3) 链的终止:所有的反应物被消耗掉。所谓“分支链式反应”是指链的携带者在传播过程中数量增加,反应加速很快,有时能在 1 μs 内完成,称为“化学爆炸”。例如,氢和氧的燃烧就是这种情况的反映。其特点之一是氢氧的“着火半岛”现象。氢和氧的总包反应(Global Reaction)的化学当量关系式(Stoichiometric Relationship)是:



事实上它的反应机理由以下的 12 个基元反应(Elementary Reactions)组成:

- (a) $\text{H}_2 + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{OH}$
- (b) $\text{H}_2 + \text{M} \rightarrow 2\text{H} + \text{M}$
- (c) $\text{O}_2 + \text{O}_2 \rightarrow \text{O}_3 + \text{O}$
- (d) $\text{H} + \text{O}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$
- (e) $\text{OH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$
- (f) $\text{O} + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{H}$
- (g) $\text{H} + \text{器壁} \rightarrow 1/2\text{H}_2$
- (h) $\text{OH} + \text{器壁} \rightarrow 1/2\text{H}_2\text{O}_2$
- (i) $\text{O} + \text{器壁} \rightarrow 1/2\text{O}_2$
- (j) $\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}$
- (k) $\text{O} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{O}_3 + \text{M}$
- (l) $\text{O} + \text{H}_2 + \text{M} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{M}$

反应(a)~(c)为链的产生,反应(d)~(f)为链的传播与分支,反应(g)~(i)为链的终止,反应(j)~(l)为气相终止。由反应(d)和(f)可知,这两个反应中每个自由原子进行反应后生成两个自由原子(或自由基)这种现象称为链的分支。

着火半岛现象如图 1 所示。如果是纯粹的放热反应和散热相互作用的热着火(也称为热爆炸),则着火的规律应当是图中的第三极限,即着火温度随压力的升高而下降。然而在链式反应的作用下,在低压区域出现了“着火半岛”,就是出现着火温度随压力的下降而下降的规律。链式反应理论的出现使人们对燃烧反应的特点有了新的认识,为后来直到今日的详细反应动力学的研究奠定了基础。复杂燃料的高温反应机理仍然是不断进行研究的课题。例如甲烷和氧的反应有 50 个组分和 300 个基元反应等。

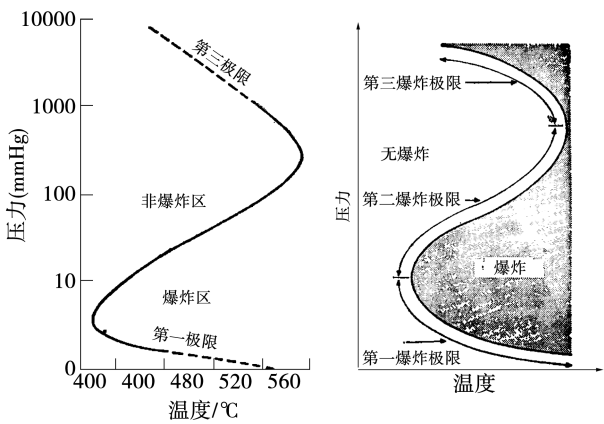


图 1 氢氧反应的着火半岛

Fig. 1 Ignition semi-island of hydrogen-oxygen reaction

3 燃烧物理学

以上的研究产生于 20 世纪的 20 年代。到了 20 世纪 30 年代,燃烧研究者发现,物理因素对燃烧有重大影响,链式反应的特点往往不是燃烧过程唯一的特点。燃烧过程不仅受化学反应动力学的支配,而且和流动及传热传质有很大关系。也就是说,燃烧过程的基本现象,如气体燃料的着火和灭火、火焰传播,以及液体和固体颗粒的燃烧,是流动、传热传质和化学反应相互作用的结果。于是形成了苏联学者所称呼的“燃烧物理学”(Combustion Physics)。代表性的就是苏联谢苗诺夫提出的“热着火理论”(Thermal Ignition Theory)和苏联弗兰克-卡门涅茨基(Frank-Kamenetsky)在其著作《化学动力学中的扩散和传热》(Diffusion and Heat Exchange in Chemical Kinetics)^[4]中对着火和火焰传播现象的理论分析。这些理论已经把传热传质过程引入燃烧现象的分析中。在热着火理论中指出,着火温度不是物质固定不变的特性,着火的临界条件是一个函数关系,与容器尺寸、可燃混合物组分、压力以及散热(导热或对流放热)有关。谢苗诺夫考察一个密闭容器中可燃混合物的化学反应放热和器壁对环境的散热(导热)的相互作用,给出着火的临界条件是反应放热和散热相等以及他们的梯度相等,即:

$$\begin{cases} q_1 = q_2 \\ \frac{\partial q_1}{\partial T} = \frac{\partial q_2}{\partial T} \end{cases}$$

(3)

最终给出的着火函数关系:

$$\frac{E}{RT_{\infty}^2} w_{\infty} Q_s = 12\lambda/d^2 \quad (4)$$

式中: E —活化能; T —温度; R —通用气体常数; w —化学反应率(单位体积和单位时间内消耗的质量,和反应动力学有关); Q —反应热; d —容器直径; λ —气体导热系数。

可见,着火的确是传热传质和反应相互作用的结果。对预混气体火焰传播,弗兰克-卡门涅茨基通过能量方程的分区近似解给出火焰传播速度的公式^[3]:

$$S_1 = \sqrt{\frac{2\lambda Q_1 \int_{T_{\infty}}^{T_m} w_1 dT}{\rho_{\infty}^2 c_p^2 (T_m - T_{\infty})^2}} \quad (5)$$

式中: S_1 —层流火焰传播速度; c_p —气体定压比热; ρ —气体密度; 下标 ∞ 和 m —进口(冷端)和绝热燃烧的出口(热端)情况; 下标 1 是指某种反应物。

可见火焰传播速度同样是物理因素(导热系数)和化学反应因素的综合函数。

在液体燃料燃烧机理研究方面,例如对单个油滴的燃烧,从 20 世纪 40 年代到 60 年代先后有苏联瓦尔沙夫斯基(Warshavsky)、英国斯波尔丁(Spalding)和中国周力行等人进行了研究^[5]。简化的球对称薄膜理论给出的无燃烧和有燃烧时的油滴蒸发率分别是:

$$G = \pi d_p Nu_* \frac{\lambda}{c_p} \ln[1 + B] \quad (6)$$

$$G = \pi d_p Nu_* \frac{\lambda}{c_p} \ln[1 + B_f]$$

其中, $B = c_p(T_m - T_w)/q_e$, $B_f = c_p(T_m - T_w)/q_e$ 。

该公式指出,油滴蒸发率正比于油滴直径 d_p (而不是表面积!)、环境气体的导热系数 λ 和对流换热系数 Nu_* ,通过对数函数和环境温度 T_g (或火焰温度 T_m)、沸点 T_w 和潜热 q_e 有关,与化学动力学因素无关。周力行的实验研究和厚交换层理论的解析解表明,环境温度对蒸发率的影响并非是 G 正比于 $\ln(1 + B)$ 而是正比于 B^2 ,也就是说,环境温度的影响比简化理论预示的要强得多。另一个重要现象是相对速度的影响。按照简化理论,相对速度的影响是通过 Nu_* 起作用,就是蒸发率差不多正比于雷诺数或者相对速度的 0.5 次方。周力行的实验研究

揭示出,随着相对速度的增大,油滴燃烧状态由全包火焰变成半包火焰和尾部火焰,因此相对速度对油滴蒸发率的影响是,起先在全包火焰状态下蒸发率随相对速度的增加而增大,进入半包火焰状态后由于速度的增加使火焰包围面积不断减小,因此蒸发率逐渐下降,到了尾部火焰状态后因为火焰已经脱离油滴蒸发率则陡降。

对煤颗粒燃烧机理的研究,20 世纪 30 年代到 50 年代有美国霍特(Hottel)、菲尔德(Field)^[6]和艾森亥(Essenhigh)^[7]、苏联普来德瓦吉切列夫(Predwajichelev)^[8]希特林(Khitrin)^[9]以及后来的波密兰采夫(Pomerantsev)^[10]等人,集中于研究碳颗粒的燃烧。到了 20 世纪 80 年代之后,则有美国斯穆特(Smoot)^[11]和中国周力行等人^[12]进行了煤颗粒燃烧的研究。煤颗粒的燃烧包括其中的水分蒸发、挥发分热解释放和燃烧以及焦炭氧化的异相燃烧等复杂过程。挥发分的释放和燃烧对煤颗粒的着火和焦炭的多孔性有重要影响,从而间接地影响焦炭燃烧特性。焦炭燃烧放热占据煤颗粒燃烧放热的主导地位。

煤颗粒的质量损失率由挥发分释放率、焦炭燃烧率和水分蒸发率组成,即:

$$\dot{m} = \dot{m}_v + \dot{m}_{hr} + \dot{m}_w \quad (7)$$

式中:挥发分热解释放规律有单方程模型、双方程模型和复杂的 Solomon 模型等^[11]。常用的双方程模型表达式是:

$$\dot{m}_v = m_c [\alpha_1 B_{v1} \exp(-E_{v1}/RT_w) + \alpha_2 B_{v2} \exp(-E_{v2}/RT_w)] \quad (8)$$

焦炭颗粒氧化燃烧规律有单燃烧面模型和双燃烧面模型等^[3]。前者假设只有碳加氧等于二氧化碳或者一氧化碳的单个反应,得到的碳燃烧率和氧燃烧率是:

$$G = G_c = \pi d_p Nu_* D \rho \ln[1 + \frac{Y_{O_{2\infty}} - Y_{O_{2w}}}{\beta + Y_{O_{2w}}}] =$$

$$\pi d_p Nu_* \frac{\lambda}{c_p} \ln[1 + \frac{c_p(T_g - T_p)}{q_w}]$$

$$G_{O_2} = -4\pi r_p^2 B_r Y_{O_{2w}} \rho \exp(-E_r/RT_p) \quad (9)$$

后者假设碳表面上有碳还原二氧化碳生成一氧化碳的反应,同时在驻膜内有一氧化碳和氧生成二氧化碳的气相反应,得到的碳的燃烧率是:

$$G = \pi d_p D \rho N u_* \ln \left[1 + \frac{Y_{O_2} - 4Y_{CO_2w}/11}{\frac{4}{3} + 4Y_{CO_2w}/11} \right] \quad (10)$$

$$G = \pi d_p \frac{\lambda}{c_p} N u_* \ln \left[1 + \frac{c_p (T_g - T_p)}{q_w} \right] \quad (11)$$

$$G = G_c = \pi d_p^2 B_{c3} \rho_w Y_{CO_2w} \exp(-E_3/RT_p) \quad (12)$$

文献[12]通过实验和数值模拟给出了煤颗粒的水分蒸发、热解挥发和焦炭燃烧全过程的质量损失率和温度上升规律。其中显示,约在前30 s(约占整个燃烧过程的1/4)内颗粒的失重和温升较快,主要是水分蒸发和挥发分释放及其燃烧过程,到达30 s后,失重率约为40%,高于工业分析的挥发份含量(23.4%)。此后失重和温升比较缓慢,但是时间较长。总之,挥发分的释放和燃烧对煤颗粒燃烧的作用不容忽视。

实际燃烧装置中都是湍流燃烧。早在20世纪30年代,德国 Damköhler 和苏联 Shelkin^[13]提出了湍流预混火焰的皱褶层流火焰模型,认为湍流火焰由微元层流火焰面构成,微元层流火焰仍以 S_1 传播。湍流火焰是皱褶了的层流火焰。湍流增大了火焰面积,从而增大了火焰传播速度或燃烧速率。量纲分析给出湍流预混火焰传播速度为:

$$\begin{aligned} S_T F &= S_1 F_1 \\ S_T &= S_1 F_1 / F \\ F_1 / F &= f(\tau_{comb} / \tau_T) \\ \tau_{comb} / \tau_T &= (l / S_1) / (l / u') = u' / S_1 \\ F_1 / F &= f(u' / S_1) = A (u' / S_1)^n \\ S_T &= A S_1^{1-n} u'^n \end{aligned} \quad (13)$$

式中: S_T , S_1 , F_1 , F 和 u' —湍流及层流火焰传播速度,皱褶火焰面积,管道断面积和脉动速度。

实验结果给出: $A = 5.3$; $n = 0.67$ 。可见,湍流燃烧速率受湍流(脉动速度 u')和反应动力学(层流火焰传播速度 S_1)二者的影响,湍流的影响更大。到后来,又有美国 Summerfield 和苏联 Shelkin^[13]提出了容积燃烧模型。他们对皱褶火焰面模型持有怀疑,认为强烈湍流混合下不存在微元层流火焰面。皱褶火焰面模型假设湍流微团中或者是新鲜混合物,或者是燃烧产物,无中间状态(图2a),湍流对燃烧的影响是运动学的方式。容积燃烧模型则认为湍流通过混合影响燃烧,反应和湍流混合同时发生。不同的湍流微团有不同的温度、浓度和反应率

(图2(b)),湍流通过强化混合提高燃烧率。

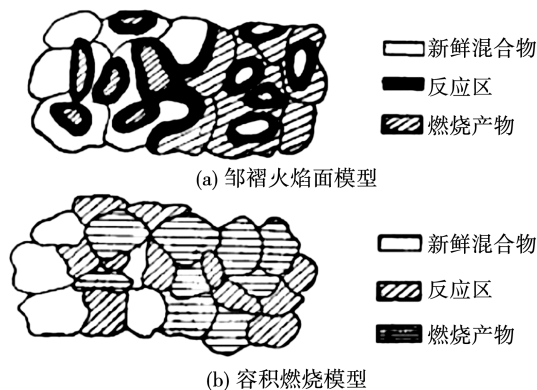


图2 两种湍流预混火焰的物理模型

Fig.2 Two physical models of turbulent premixed flame

时至今日,通过大涡模拟和直接数值模拟可以得到湍流火焰的不同细观结构,发现不同的 Damköhler 数和不同的流动结构下湍流火焰有多种火焰结构。不久前大涡模拟结果发现,湍流射流扩散火焰有皱褶火焰面,而旋流湍流扩散火焰则没有见到皱褶火焰面。

4 燃烧的流体力学

20世纪50年代到60年代,美国冯·卡门(Von Karman)^[14]和我国钱学森就提出用连续介质力学,也就是流体力学方法研究燃烧,称为“化学流体力学”或者“反应流体力学”(Reacting Fluid Dynamics),也叫作“空气热化学”(Aerothermochemistry)。同时,美国潘诺(Penner)^[15]和威廉斯(Williams)^[16]也沿着这个方向进行了研究。在苏联则有蓝道(Landau)^[17],泽尔多维奇(Zeldovich)和萨洛乌辛(Solowukhin)等人^[18]分别用连续介质力学和气体力学来研究燃烧和爆炸,称作“燃烧和爆炸的数学理论”(Mathematical Theory of Combustion and Explosion)。到了20世纪70年代到80年代之间,则分别有美国董道义^[19],中国林鸿荪和周力行^[5]用流体力学方法研究燃烧现象,从求解一维层流有反应流动的连续、动量、能量和组分方程出发,通过积分近似解卡门和钱学森得到预混层流火焰传播速度的一阶近似解,与弗兰克-卡门涅茨基的分区近似解的结果相同^[5]。用平板边界层的 Blasius 分析方法和可压缩边界层流动的 Howarth-Dorodnitzn 变换,研

究了有固体燃料表面反应的层流边界层、有液体表面蒸发和气相燃烧的层流边界层及热板点燃层流边界层等问题,得到了固体燃烧率、液面蒸发率沿板长的变化和热板着火距离等解析研究结果。所得到的碳板扩散燃烧率为:

$$g_{ox,w} = - D_w (\rho_w^2 / \rho_\infty) Y_{ox,\infty} \sqrt{\frac{u_\infty}{\nu_\infty x}} f''(0) \tag{14}$$

式中: f'' —Blasius 函数的二阶导数。

有表面蒸发和气相燃烧的层流边界层的液面蒸发率和剪切力之间的关系为:

$$g_w = \rho_w v_w = c_p (T_m - T_w) \tau_w / (q_e u_\infty) \tag{15}$$

5 湍流燃烧的 CFD 数值模拟

经典燃烧理论是基于简化条件下的分析解,只能和实验相结合,定性地用于工程问题中。自从 20 世纪 70 年代,由于大型数字计算机的出现和计算流体力学(CFD)方法的发展,有可能精确求解复杂的非线性联立偏微分方程组,就出现了燃烧的 CFD 数值模拟,得以求解实际燃烧装置中复杂流动的速度场、温度场、组分浓度场和湍流特性。于是把燃烧理论的分析解用于建立数学物理模型,通过 CFD 数值模拟定量地用于工程设计中,使燃烧学成为定量的科学。湍流燃烧是数值模拟的重要对象,湍流和化学反应的相互作用是核心问题。它的要害是湍流条件下的时平均的反应率不等于用时均值表达的反应率。湍流燃烧数学模型研究的前驱应当是英国 Spalding^[20],他首先提出了湍流燃烧的涡旋破碎(Eddy Break-Up, EBU)模型和湍流扩散燃烧的概率密度-快速反应($k-\epsilon-f-g$ -PDF)模型,分别模拟了钝体后方的湍流预混火焰和湍流射流扩散火焰。EBU 模型起先假设时平均反应率正比于湍流脉动频率,与化学反应动力学无关。后来发现,还要考虑有限反应动力学,可以称为 EBU-Arrhenius 模型。 $k-\epsilon-f-g$ -PDF 模型的内容,除了湍流动能及其耗散率的 k 方程和 ϵ 方程之外,则要求解混合物分数时均值 $\bar{f}$ 及其脉动均方值 $g = \bar{f}'^2$ 。瞬时温度组分浓度、混合物分数 f 及脉动均方值 g 之间存在线性关系。通过对设定概率密度函数的积分可以由 $\bar{f}$ 和 g 找到时平均温度和组分浓度。Swithenbank 等人^[21]用 $k-\epsilon$ 湍流模型、油滴确定轨道模型和 EBU-Arrhenius 气体燃烧模型,模拟了燃气轮机燃烧室内液雾燃烧。预

报的气体速度矢量和气体温度,如图 3 所示。可见高温区出现在头部和近壁区。

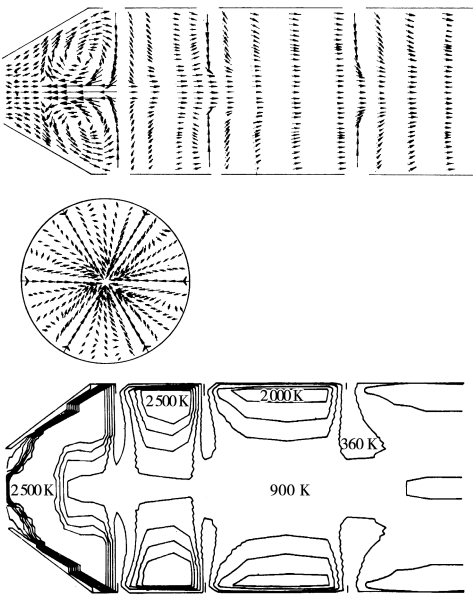


图 3 燃气轮机燃烧室内气体速度矢量(上)和气体温度(下)

Fig.3 Velocity vectors (above) and gas temperature (below) in a gas turbine combustor

上述早期的湍流燃烧模型对于模拟钝体后方高速湍流预混火焰和湍流射流扩散火焰取得了和实验符合的结果,已经固化到多种 CFD 商业软件中。其优点是简单和直观,但是不通用。数值模拟结果表明,很多情况下预报结果和实验不符合,原因是不能很好地考虑有限反应机理。后来先后出现了层流火焰面模型^[22],条件矩模型(Conditional Moment Closure, CMC)^[23]和概率密度分布函数(Probability Density Distribution Function, PDF)输运方程模型^[24]。PDF 方程模型的优点是方程中反应源项是精确项,无须封闭模型,可以考虑详细反应机理。缺点是小尺度混合仍然需要有封闭模型,而且 PDF 是空间、时间、温度、组分浓度等多维坐标的函数,需要用 Monte-Carlo 法求解,因此计算量往往比普通差分法高两个数量级,差不多接近于大涡模拟计算量水平。层流火焰面模型假设湍流扩散火焰由皱褶的层流火焰面构成。求解定常或非定常火焰面方程,其中有化学反应源项,得到瞬态混合物分数和瞬态温度以及组分浓度的关系。用表达反应程度的混合物分数和简化 PDF(或求解混合物分数的 PDF 方程)

求出温度和组分浓度的时间平均值。其优点也是把反应和湍流解耦。为了发展既合理而又经济的湍流燃烧模型,周力行等人提出了二阶矩(Second-Order Moment,SOM)湍流燃烧(反应)模型^[25-26]。对甲烷-空气旋流扩散火焰的模拟结果指出^[27](图4),SOM模型的模拟结果和实验符合很好,而 EBU-Arrhenius 模型的模拟结果普遍地高估了温度。原因是前者正确地考虑了湍流和有限反应动力学的相互作用,后者在流场的大部分高温区域由于 Arrhenius 反应速率很大,实际上起作用的因素只有湍流,有限反应动力学不能起作用。

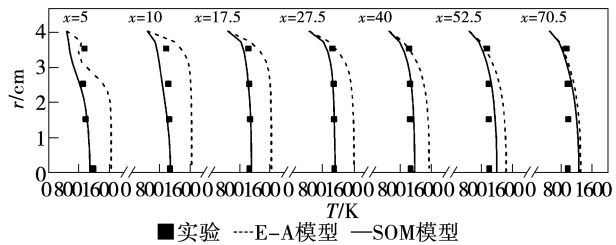


图4 甲烷-空气旋流扩散燃烧温度分布
Fig.4 Temperature distribution of methane-air diffusion combustion

6 湍流燃烧的大涡模拟

从20世纪末开始,出现了湍流燃烧的大涡模拟(Large-Eddy Simulation, LES)和直接数值模拟(Direct Numerical Simulation, DNS)。大涡模拟是直接求解滤波后的三维瞬时方程组。对不可解的耗散尺度用亚网格模型。大涡模拟的优点是可以观察到湍流和燃烧的非定常瞬态结构,可以得到比 RANS 模拟更准确的统计结果,是第二代 CFD 模拟工具。亚网格(SGS)应力模型主要有 Smagorinsky 涡粘模型、动力 Smagorinsky 模型(Germano 模型)和亚网格 k 方程模型。亚网格(SGS)燃烧模型有 PDF 方程模型、G 方程模型、线性涡模型、小火焰模型(LFM)、E-A 模型和二阶矩模型等。常常对非预混火焰用 LFM 模型,对预混火焰用线性涡和 G 方程模型,EBU 和 FDF 模型则用于二者。此外,还有所谓“加厚火焰模型”(Thickened Flame Model)。早在1991年 Menon 等人^[28]用基于涡粘亚网格应力模型和 G 方程模型的大涡模拟,研究了冲压发动机内不稳定燃烧,给出了瞬态火焰锋面(图5(a))和涡量等值线(图5(b)),

可以认为是燃烧大涡模拟的先驱研究。

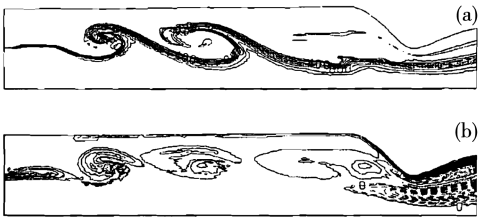


图5 冲压发动机内火焰锋面(a)和涡量等值线(b)
Fig.5 Flame front (a) and vorticity isolines (b) in a ramjet combustor

周力行等人^[29]对 LES 用二阶矩亚网格(SOM SGS)燃烧模型模拟了甲烷-空气旋流燃烧,其时间平均温度(图6(a))表明,二阶矩模型的结果比 EBU 模型的更合理。瞬态温度云图(图6(b))显示了旋流燃烧没有皱褶的火焰结构。

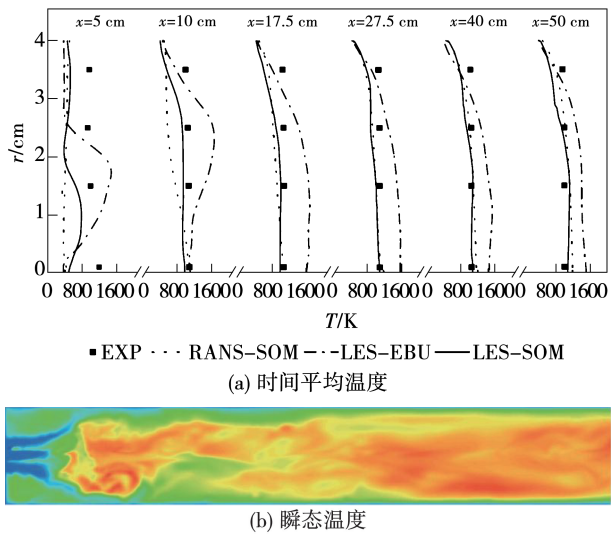


图6 甲烷-空气旋流扩散火焰的时间平均温度曲线和瞬态温度云图

Fig.6 Time-averaged temperature and instantaneous temperature maps of methane-air diffusion flame

对液雾两相燃烧,Moin 等人^[30]用亚网格动能方程应力模型和线性涡燃烧模型对燃气轮机燃烧室内液雾燃烧进行了大涡模拟,给出的统计平均冷态气体速度分布和实验结果符合。但是燃烧状态的模拟没有给出统计结果的实验检验。最近,对旋流液雾燃烧用二阶矩燃烧模型的大涡模拟^[31]给出的时间平均温度(图7)和瞬态温度(图8)都得到了直接数值模拟结果的验证。

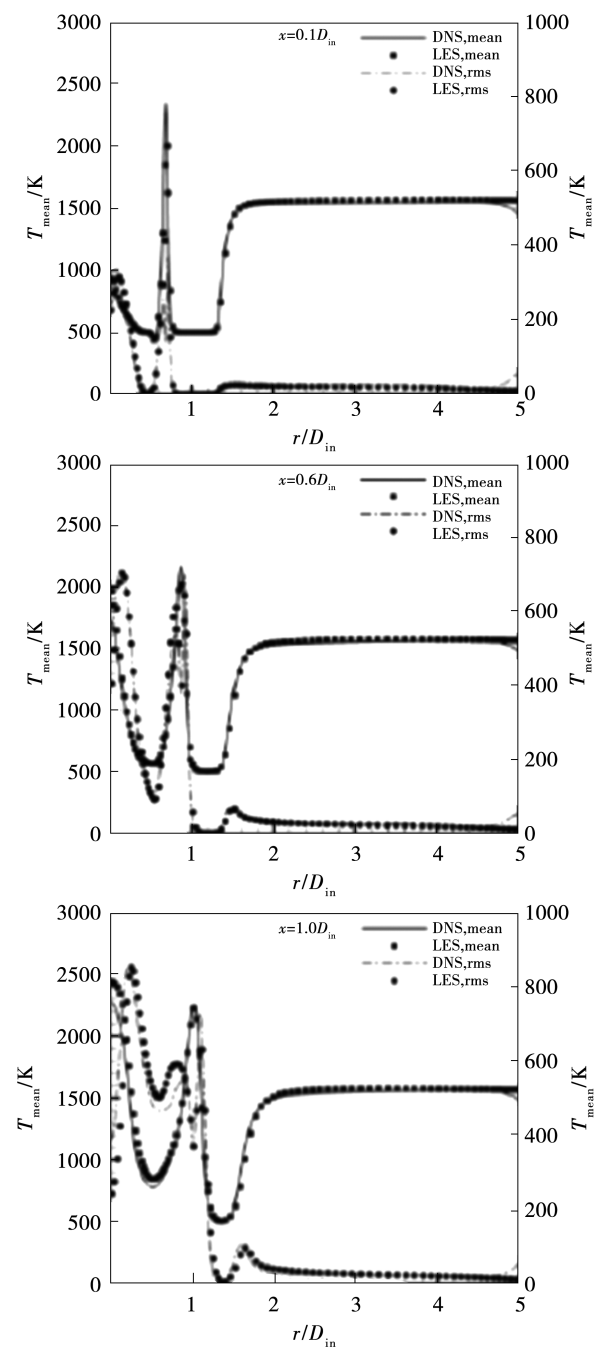


图 7 旋流液雾燃烧室内时间平均和脉动温度

Fig.7 Time-averaged and RMS fluctuating temperatures in a swirling spray combustor

在煤粉-空气两相燃烧的 LES 方面,Kurose 等人^[32]对煤粉-空气射流燃烧进行了大涡模拟,给出了瞬态颗粒浓度云图和气体温度云图(图 9),但是没有速度、温度和浓度统计结果的实验检验。

周力行等人^[33]对旋流煤粉燃烧进行了大涡模拟,模拟结果给出的统计平均的气体温度(图 10)和 CO₂ 浓度(图 11),在流场的大部分区域和实验结果符合。

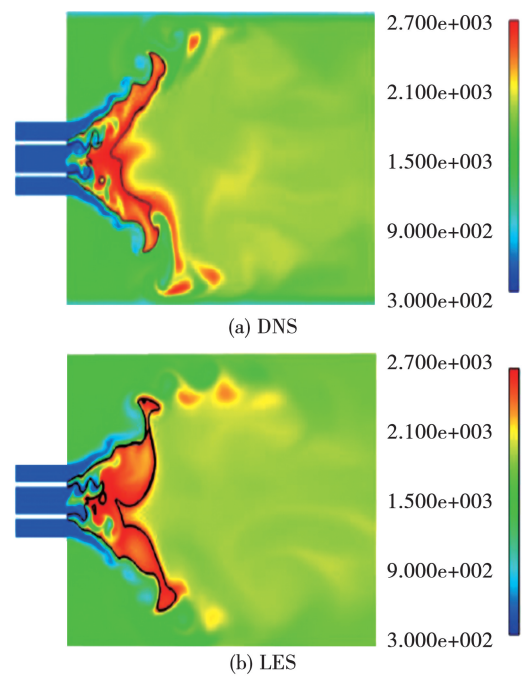


图 8 旋流液雾燃烧室内瞬态温度云图

Fig.8 Instantaneous temperature map in a swirling spray combustor

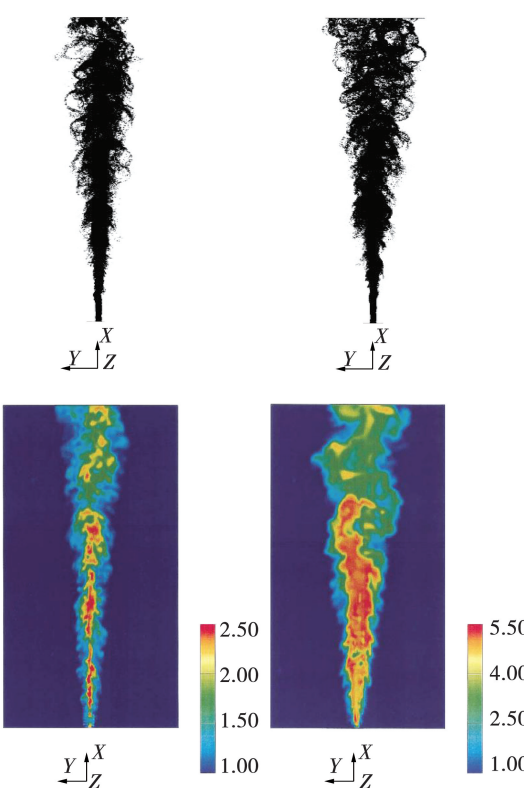


图 9 煤粉射流火焰的瞬态颗粒浓度云图(上)和瞬态气体温度云图(下)

Fig.9 Instantaneous particle concentration map (above) and gas temperature map (below) of a pulverized-coal jet flame

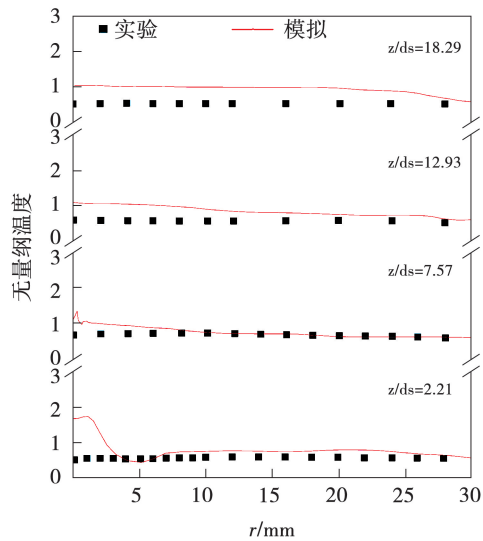


图 10 煤粉燃烧的气体温度

Fig. 10 Gas temperature of pulverized-coal combustion

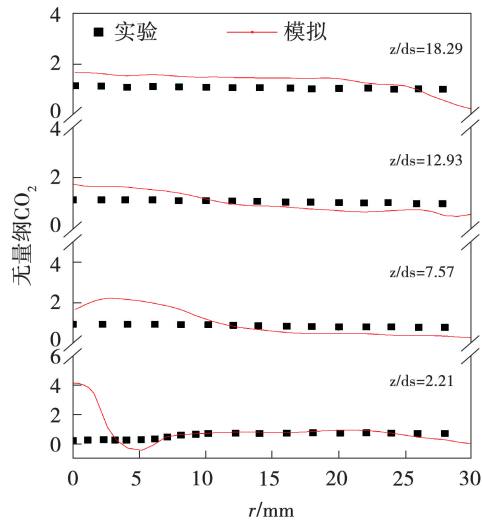


图 11 煤粉燃烧的 CO₂ 浓度

Fig. 11 CO₂ concentration of pulverized-coal combustion

图 12、图 13 和图 14 分别给出旋流煤粉燃烧的瞬态涡量云图,颗粒浓度云图和气体温度云图。可以看到,煤粉燃烧的气体拟序结构比纯气体燃烧以及无燃烧情况下出现的早,说明颗粒的存在对气体湍流的影响。高煤粉浓度处于高剪切区域,而高温则出现于高煤粉浓度区域,而且核颗粒高温的发展也比纯气体燃烧得快。这说明,挥发分的燃烧很快,焦炭颗粒燃烧的放热很强。

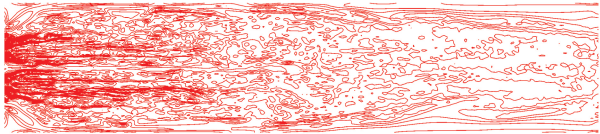


图 12 煤粉燃烧的涡量云图

Fig. 12 Vorticity map of pulverized-coal combustion

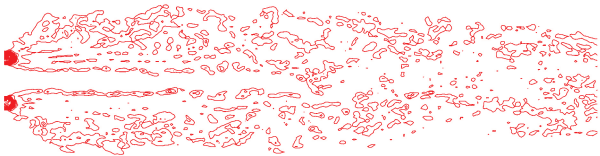


图 13 煤粉燃烧的瞬态颗粒浓度云图

Fig. 13 Instantaneous particle concentration map of pulverized-coal combustion

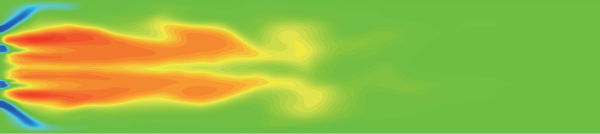


图 14 煤粉燃烧的瞬态气体温度云图

Fig. 14 Instantaneous gas temperature map of pulverized-coal combustion

7 湍流燃烧的直接数值模拟

湍流燃烧的直接数值模拟 (Direct Numerical Simulation, DNS) 是在耗散尺度内直接求解三维瞬态基本方程组,可以得到所有尺度的信息,无需任何模型。在数值方法上,对时间发展的过程多半用谱方法和伪谱方法,对空间发展的过程多半用紧致格式的高阶差分方法。DNS 可以观察到湍流火焰更细观的瞬态结构,被认为是燃烧学研究的历史性突破,例如,改变了过去的预混火焰和非预混火焰的理念,二者可以同时存在于同一个火焰中。另外,DNS 数据库可以检验湍流燃烧的 RANS 模型和 LES-SGS 模型。还在上个世纪 90 年代中期,Poinsot 等人^[34]就用 DNS 研究了湍流预混火焰的结构和小火焰模型。本世纪以来,Chen 等人^[35-36]进行了系统的研究,用 DNS 研究了二甲醚火焰结构和氢-空气抬举火焰结构^[36],后者的瞬态模拟结果如图 15 所示。

文献[37]给出了氢-空气旋流预混燃烧的涡量和温度等值面,以及温度和放热率云图(图 16),反映了涡和燃烧的相互作用。

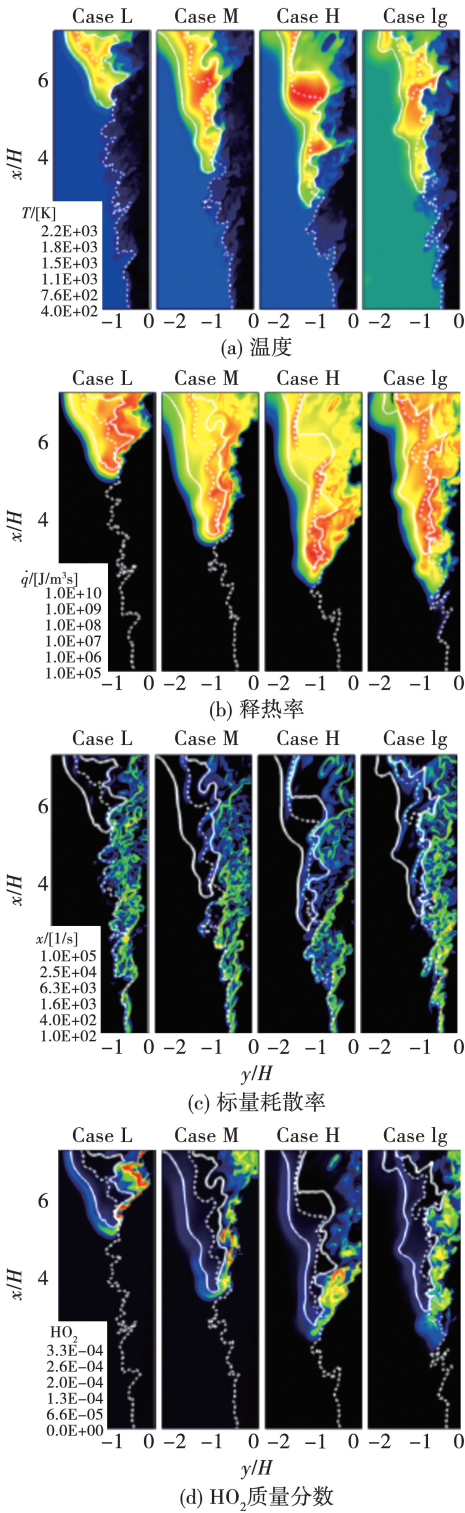


图 15 氢 – 空气抬举火焰的瞬态结构

Fig. 15 Instantaneous structure of a lifted hydrogen-air flame

罗坤等对庚烷液雾燃烧进行了直接数值模拟^[38]。所给出的混合物分数和温度等值面,以及温度和标量耗散率等值线,如图 17 所示。显然,直接数值模拟结果给出了细观的火焰结构。文献[39]用甲烷 – 空气射流火焰的 DNS 统计结果检验了二

阶矩燃烧模型,如图 18 所示。

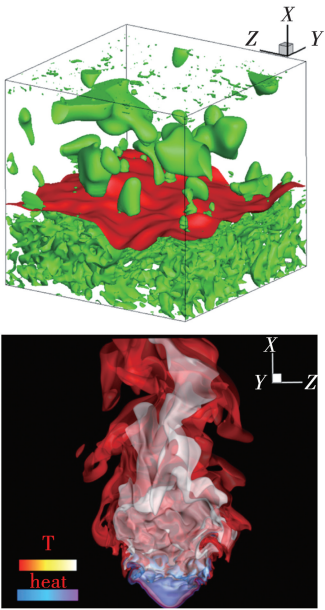


图 16 氢 – 空气旋流预混火焰的涡量和温度等值面 (上), 温度和放热率 (下) 云图

Fig. 16 Vorticity and temperature isolines (above) and temperature and heat release rate map (below) of a hydrogen-air swirling flame

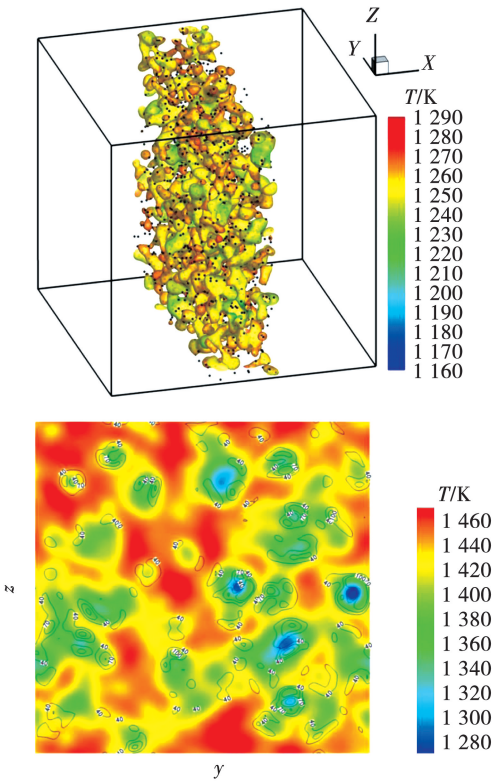


图 17 液雾火焰的混合物分数和温度以及标量耗散率等值面

Fig. 17 Mixture fraction, temperature and scalar dissipation rate isolines of a spray flame

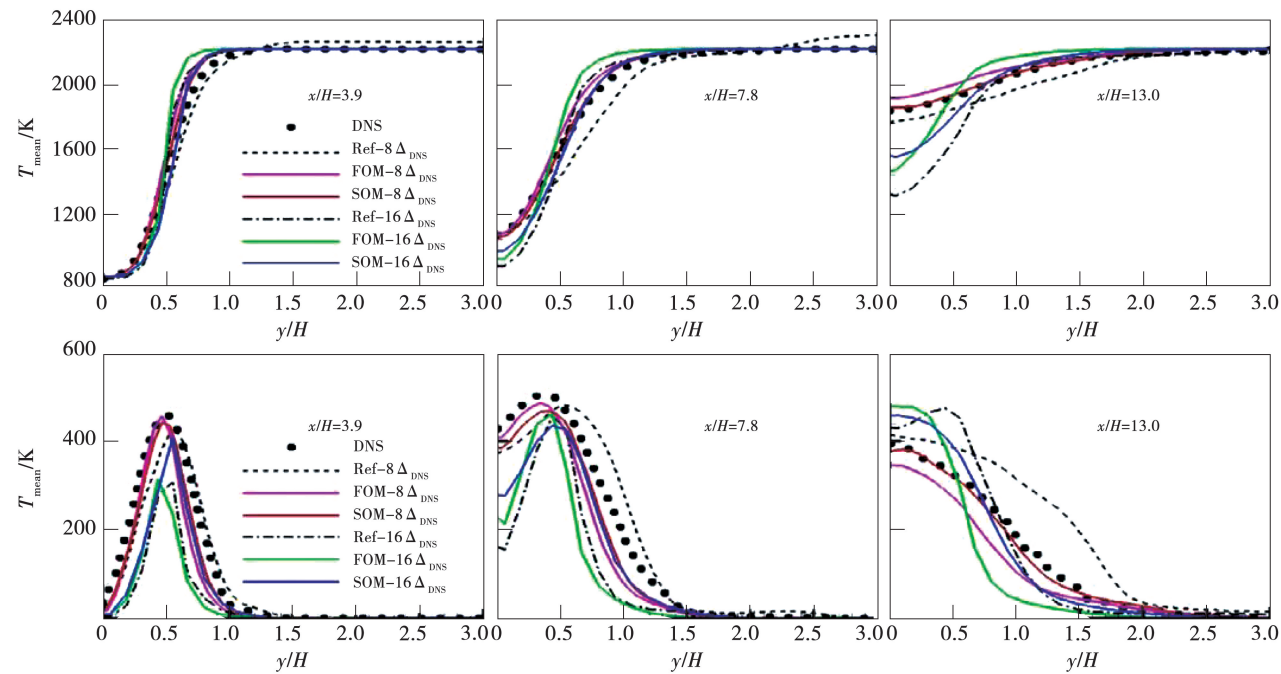


图 18 甲烷 – 空气火焰的时间平均和均方根脉动温度

Fig. 18 Time-averaged and RMS fluctuating temperatures of a methane-air flame

8 结束语

多年来,燃烧理论和数值模拟的研究已经获得巨大进展,在不同层次上将研究结果用于指导工程设计。但是应当指出,在用于解决工程问题中,核心问题仍然是湍流和有限反应率的相互作用模型,有许多重要问题尚待解决。此外,还必须研究求解三维两相有反应流动的可靠而经济的数值方法。值得注意的是湍流模型、燃烧模型和两相流动模型的验证,一方面要用直接数值模拟检验,另一方面要用 PDPA、PIV 等实验方法详尽地测量两相流场,用 CARS、PLIF 等先进测量手段积累浓度脉动、温度脉动和浓度 – 温度关联的数据。理论、数值模拟、激光测量和工程应用已成功地综合在一起,可以系统地获得丰富的研究成果。尽管面前还有许多困难,但是毫无疑问,燃烧学必将得到更大的发展,会更加充分地应用到工程中,产生巨大的经济效益和社会效益。燃烧学所涉及的现象十分复杂,殷切地希望国内更多的有志之士加入到研究和发展这门分支学科的行列中来,贡献出自己的力量。

参考文献:

[1] GLASSMAN I. Combustion[M]. New York: Academic Press, 1977.

[2] SEMENOFF N. Chemical kinetics and chain reactions[M]. London: Oxford University Press, 1935.

[3] LEWIS B, VON ELBE G. Combustion, flames and explosion of gases[M]. New York: Academic Press, 1957.

[4] FRANK-KAMENETSKY D A. Diffusion and heat exchange in chemical kinetics [M]. Princeton: Princeton University Press, 1955.

[5] 周力行, 燃烧理论和化学流体力学[M]. 北京: 科学出版社, 1986.

ZHOU Li-xing. Combustion theory and chemically reacting fluid dynamics[M]. Beijing: Science Press, 1986.

[6] FIELD M A, GILL D W, MORGAN B B, et al. Combustion of pulverized coal [M]. England: The British Coal Utilization Research Association, 1967.

[7] ESSENHIGH R H, MISRA M K, SHAW D W. Ignition of coal particles; a review [J]. Combustion and Flame, 1989, 77: 3 – 30.

[8] PREDWAJICHELEV A S, et al. Carbon combustion [M]. Moscow: Academy of Sciences Press, 1949.

[9] KHITRIN L N. Physics of combustion and explosion [M]. Jerusalem: National Science Foundation, 1962.

[10] POMERANTSEV V V. Fundamentals of applied combustion theory [M]. Leningrad: Energy-Atomic Press, 1986.

[11] SMOOT L D, SMITH P J. Coal combustion and gasification [M]. New York: Academic Press, 1985.

[12] 周力行, 张健. 淮南烟煤粒燃烧的初步研究[J]. 工程热物理学报, 1984(4): 396 – 401.

ZHOU Li-xing, ZHANG Jian. Preliminary study on combustion of bituminous coal particle in Huainan [J]. Journal of Engineering

- Thermophysics, 1984(4):396–401.
- [13] SHELKIN E S. Physics of gas combustion [M]. Moscow: Nauka, 1965.
- [14] VON KARMAN T. Selected combustion problems, II (AGARD) [M]. Oxford: Butterworth, 1956.
- [15] PENNER S S. Introduction to the study of chemical reactions in flow systems [M]. Oxford: Butterworth, 1955.
- [16] WILLIAMS F A. Combustion theory [M]. Massachusetts: Addison Wesley, 1965.
- [17] LANDAU L, LIFSHITS E. Continuum mechanics [M]. Moscow: Gostechizdat, 1944.
- [18] ZELDOVICH Y B. The mathematical theory of combustion and explosions [J]. Mississippi: McNeill, 1985.
- [19] TOONG T Y. Combustion dynamics; the dynamics of chemically reacting fluids [M]. New York: McGraw-Hill, 1983.
- [20] SPALDING D B. Mathematical models of turbulent combustion [J]. Combustion Science and Technology, 1976, 13: 1–6.
- [21] SWITENBANK J, BOYSAN F, AYERS W H, et al. Three-dimensional model of spray combustion in gas-turbine combustors [J]. Journal of Energy, 1982, 6: 368–375.
- [22] PETERS N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1984, 10: 319–339.
- [23] BILGER R W. Conditional moment closure for turbulent reacting flow [J]. Physics of Fluids, 1993, 5: 436–473.
- [24] POPE S B. PDF methods for turbulent reactive flows [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1985, 11: 119–124.
- [25] ZHOU L X, QIAO L, ZHANG J. A unified second-order moment turbulence-chemistry model for simulating turbulent combustion and NO_x formation [J]. Fuel, 2002, 81: 1703–1709.
- [26] ZHOU L X. Development of SOM combustion model for Reynolds-averaged and large-eddy simulation of turbulent combustion, and its validation by DNS [J]. Science in China, 2008, E51: 1073–1086.
- [27] ZHOU L X, WANG F, ZHANG J. Simulation of swirling combustion and NO formation using a USM turbulence-chemistry model [J]. Fuel, 2003, 82: 1579–1586.
- [28] MENON S, JOU W H. Large-eddy simulation of combustion instability in a ramjet combustor [J]. Combustion Science and Technology, 1991, 75: 53–72.
- [29] ZHOU L X, HU L Y, ZHANG J. Large-eddy simulation of a swirling diffusion flame using a SOM SGS combustion model [J]. Numerical Heat Transfer, 2006, B50: 41–58.
- [30] MOIN P, APTE S V. Large-eddy simulation of realistic gas turbine combustors [J]. AIAA Journal, 2006, 44: 698–708.
- [31] ZHOU L X, LUO K. Studies on a swirling heptane spray flame by large-eddy simulation [J]. Aerospace Science and Technology, 2022, 126: 107632.
- [32] KUROSE R, MAKINO H. Large eddy simulation of a solid-fuel jet flame [J]. Combustion and Flame, 2003, 135: 1–16.
- [33] ZHOU L X, HU L Y, et al. Measurements and simulation of coal combustion [J]. Particuology, 2013, 11: 189–197.
- [34] POINSOT T, CANDEL S, TROUVE A. Applications of direct numerical simulation to premixed turbulent combustion [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1995, 21: 531–576.
- [35] CHEN J H, MINAMOTO Y. DNS of a turbulent lifted DME jet flame [J]. Combustion and Flame, 2016, 169: 110–128.
- [36] JUNG K S, KIM S O, LU T, et al. On the flame stabilization of turbulent lifted hydrogen jet flames in heated co-flows near the auto-ignition limit; a comparative DNS study [J]. Combustion and Flame, 2021, 233: 111584.
- [37] WANG H, LUO K, QIU K, et al. A DNS study of hydrogen/air swirling premixed flames with different equivalence ratios [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2012, 37(6): 5246–5256.
- [38] WANG H, LUO K, FAN J. Direct numerical simulation and CMC (conditional moment closure) sub-model validation of spray combustion [J]. Energy, 2012, 46(1): 606–617.
- [39] LUO K, LIU R Z, et al. A priori and a posteriori studies of a direct moment closure approach for turbulent combustion using DNS data of a premixed flame [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2021, 38: 3003–3011.

(丛敏编辑)