文章编号:1674-7607(2026)02-0001-09 DOI:10.19805/j.cnki.jcspe.2026.240723

简化化学反应条件下火焰碳烟生成与辐射特性的仿真和实验验证

张辰飏[1], 陈 玮[1], 李洪绪[1], 王 良[2],
曾 琦[2], 曹 俊[2], 任 涛[1]
(1. 上海交通大学 中英国际低碳学院, 上海 201306;
2. 中国航发湖南动力机械研究所, 湖南株洲 412002)

摘 要: 碳烟是燃烧中关键的辐射产物,对能效和污染物排放具有显著影响。然而,碳烟生成过程的复杂性使得现有模型大多依赖复杂化学反应机理,导致计算成本较高,限制了其在工程应用中的推广。为此,利用ANSYS-Fluent软件中的用户自定义函数,嵌入了层流烟点模型和全光谱k分布辐射模型,以高效模拟乙烯层流扩散火焰中的碳烟生成和辐射特性。使用互补式金属氧化物半导体(complementary metal oxide semiconductor,CMOS)相机和傅里叶红外光谱仪对不同掺混比条件下的碳烟浓度场和光谱辐射强度进行了测量,用于验证模型的有效性。结果表明,提出的模型通过一步化学反应和一个额外的物质输运方程,就能够准确捕捉火焰中碳烟分布的形态特征,在不同高度下的碳烟径向平均体积分数分布与实验数据具有良好的一致性。同时,不同高度下的光谱辐射强度模拟结果与测量值匹配良好,验证了该模型的高效性和准确性,为火焰碳烟生成与辐射特性工程计算提供了一种可靠的工具。

关键词: 火焰碳烟; 辐射特性; 简化化学反应
中图分类号:TK124 **文献标志码:**A **学科分类号:**470.1020

Simulation and Experimental Verification for Formation and Radiation Characteristics of Flames Soot with Simplified Chemical Reaction

ZHANG Chenyang[1], *CHEN Wei*[1], *LI Hongxu*[1], *WANG Liang*[2],
ZENG Qi[2], *CAO Jun*[2], *REN Tao*[1]
(1. China-UK Low Carbon College, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 201306, China;
2. AECC Hunan Aviation Powerplant Research Institute, Zhuzhou 412002, Hunan Province, China)

Abstract: Soot is a crucial radiative product in combustion processes, exerting a significant influence on energy efficiency and pollutant emissions. However, the complexity of the soot formation process has led most existing models to rely on complex chemical reaction mechanisms, resulting in high computational costs and limiting corresponding widespread adoption in engineering applications. To address this issue, a laminar smoke point model and a full-spectrum k-distribution radiation model were embedded using user-defined functions in ANSYS-Fluent software to efficiently simulate soot formation and radiation character-

收稿日期:2024-11-19 **修订日期:**2024-12-10
基金项目:国家自然科学基金资助项目(52276077)
作者简介:张辰飏(2000—),男,云南昆明人,硕士研究生,研究方向为大气与燃烧监测。
任 涛(通信作者),男,副教授,博士,E-mail: tao.ren@sjtu.edu.cn。

istics in ethylene laminar diffusion flames. The soot concentration fields and spectral radiative intensities under different blending ratios were measured by using a complementary metal oxide semiconductor (CMOS) camera and a Fourier-transform infrared spectrometer, so as to validate the effectiveness of the overall model. Results demonstrate that, through a single-step chemical reaction and an additional species transport equation, the proposed model can accurately capture the morphological characteristics of soot distribution within the flame. The radial average volume fraction distributions of soot at different heights exhibit good agreement with experimental data. Meanwhile, the simulated spectral radiative intensities at different heights match well with the measured values, validating the efficiency and accuracy of the overall model. This provides a reliable tool for engineering calculations of soot formation and radiation characteristics in flames.

Key words: flame soot; radiation characteristic; simplified chemical reaction

碳烟是由碳氢燃料不完全燃烧产生的非纯净碳颗粒,其粒径范围为 5～80 nm,具有复杂的化学和物理特性[1]。碳烟颗粒上附着的多环芳香烃等有机成分,不仅对环境和人体健康造成严重威胁,还是影响柴油机、发动机、锅炉等动力装置寿命和效率的主要污染物[2]。因此,深入研究碳烟的生成机制对于严格控制其排放具有重要意义。碳烟颗粒密度高、比表面积大,具有较强的辐射能力。在燃烧过程中,与燃烧产物中的 CO_2、H_2O 等气体组分相比,碳烟具有极高的光谱吸收系数,在流场中会发射和吸收大量的辐射能量,对燃烧的温度场及辐射强度产生显著影响。因此,准确计算燃烧场中碳烟的生成和辐射传热过程,是燃烧研究的关键内容之一,也是精确预测燃烧场温度分布和排放特性的必要条件。

近年来,碳烟生成模型在燃烧领域得到了广泛研究与应用。作为主流碳烟生成模型之一,Moss-Brookes 模型[3]通过求解碳烟质量和数量密度的 2 个传输方程,表现出较好的预测能力。Snegirev 等[4]在模拟浮力湍流扩散火焰时发现,经过适当的参数调整,Moss-Brookes 模型能够较准确地预测碳烟分布,但在某些复杂条件下,其默认参数未能与实验数据吻合。Leung 等[5]提出的半经验模型与 Moss-Brookes 模型类似,计算效率较高且适用于多种火焰场景。然而,研究表明该模型在预测碳烟数量密度时存在高估问题。虽然该模型仅引入了 2 个额外的物质输运方程,计算成本相对较低,但是这 2 个方程的源项计算过程依赖于碳烟前驱物(如乙炔、苯等),需要复杂的化学反应机理来提供可信的计算结果。这种复杂的化学反应计算,通常带来较高的计算成本,限制了该模型在工程应用中的推广。相比之下,层流烟点模型[6-7]不依赖于复杂的化学反应,能够仅通过 1 个物质输运方程实现对碳烟浓度分布的模拟。模型名称中的"层流"是指使用燃料层流下的烟点作为评估燃料生成碳烟能力的尺度,但是该模型并非仅适用于层流条件。通过对源项的适当修正,模型可以扩展应用于湍流情况,为工程中碳烟浓度的计算提供了一种简化方法。

在高温火焰或燃烧室中,辐射已成为燃烧过程中不可忽视的重要传热方式。然而,由于气体辐射的高度非灰特性,准确计算燃烧系统中气体混合物及气体与碳烟混合物的辐射传热过程仍面临极大挑战。研究人员曾提出了多种辐射光谱模型,主要分为逐线模型、窄谱带模型、宽谱带模型和全局模型[8]。其中,全局模型因其充分考虑了全光谱辐射特性并显著减少光谱计算量,以较高的计算精度和效率在辐射传热计算中广受欢迎。在全局模型中,灰气体加权和(weighted-sum-of-gray-gases, WSGG)模型由于其在商用计算流体力学软件中实现简单[9],通常作为模拟工程应用的首要气体辐射模型。近年来,研究者持续更新 WSGG 模型参数,使其在富氧燃料等广泛应用条件下也能表现出良好的预测性能[10-11]。然而,WSGG 模型的参数通过对发射率的拟合而来,没有实际的物理意义。此外,虽然该模型被广泛应用于非均质辐射传热的计算,但是它最初是为均匀辐射介质而开发的,在非均质条件下缺乏坚实的理论支持[12]。

相比之下,全光谱 k 分布(full-spectrum correlated k distribution, FSCK)模型通过引入相关假设,而被应用于非均质辐射传热的计算[8]。Mazumder 等[13]在计算流体动力学-先进计算工程(computational fluid dynamics-advanced computational engineering, CFD-ACE)软件中开发了一种 FSCK 模型,但其辐射介质仅考虑了 CO_2 和 H_2O,温度上限为 2 000 K。Clements 等[14]在 ANSYS-

Fluent 软件中开发了一种 FSCK 模型，该模型可用于对 CO_2、H_2O 和 CO 混合气体全光谱 k 分布的计算，但是该模型对气体体积分数数据点的取值相对较少，计算精度不高。Yang 等[15]通过将开发的 FSCK 模型与传统的 WSGG 模型和粒子辐射特性的常数值方法进行比较，发现 FSCK 模型在小型和大型富氧燃烧炉中的辐射特性预测结果与实测数据之间的一致性更好。王龙等[16]基于查值表法和机器学习法对 FSCK 模型进行了二次开发，并且将其嵌入 ANSYS-Fluent 软件中，用于常见燃烧气体和碳烟混合物的辐射传热计算。

本文基于层流烟点模型和 FSCK 模型，在计算流体力学软件 ANSYS-Fluent 中利用其用户自定义函数(user defined function，UDF)开发了一种不依赖复杂的化学反应机理就能够准确预测碳烟分布及辐射特性的仿真模型。利用所开发的模型，对不同氮气掺混比例下的乙烯层流扩散火焰进行了仿真计算，并且利用互补式金属氧化物半导体(complementary metal oxide semiconductor，CMOS)相机和傅里叶变换红外光谱仪(Fourier-transform infrared spectrometer，FTIR)在相应工况下分别测量了碳烟体积分数和辐射强度。通过对实验得到不同高度下的碳烟径向平均浓度和平均光谱辐射强度，并且与模拟结果进行对比，同时展示了其在多种工况下的准确性。这为工程计算中碳烟生成与辐射特性的研究提供了一种可靠的模拟工具。

1　理论模型

1.1　碳烟粒子生成模型

层流烟点模型[6]是一种无需依赖复杂化学反应且能够适用于层流和湍流不同流动状态的经验模型。该模型假设碳烟的生成率与燃料浓度及其烟点等特性相关，并且将燃烧区域按混合物分数划分为碳烟生成区和氧化区，分别计算各区域的源项。该模型仅使用 1 个物质输运方程，便可实现对碳烟生成过程的建模。该模型的控制方程为

$$\frac{\partial(\rho Y_s)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho u_i Y_s)}{\partial x_i}=\omega_s+\nabla\cdot\left(0.556Y_s\frac{\mu}{T}\nabla T\right) \tag{1}$$

式中：Y_s 为碳烟的质量分数；ρ 为流体的密度，kg/m^3；t 为时间，s；i 为方向；u_i 为流体的速度，m/s；x_i 为空间坐标，m；ω_s 为碳烟源项，kg/(m^3·s)；μ 为动力黏度，kg/(m·s)；T 为流体温度，K。

针对式(1)中的源项 ω_s，根据场内混合物体积分数 ξ 的不同，可以分为 2 种情况：ξ_{so} 表示纯氧化区边界的较低临界混合物体积分数；ξ_c 表示碳烟生成区上限的临界混合物体积分数。其中：当混合物体积分数相对较大($\xi\in(\xi_{so},\xi_c]$)时，该区域为碳烟生成区；而当混合物体积分数较小($\xi\in(0,\xi_{so}]$)时，该区域为纯氧化区。

2 个区域内 ω_s 具体表达式为

$$\omega_s=\begin{cases}\omega_{sf}-\omega''_{so}\rho Y_s A_s, & \xi\in(\xi_{so},\xi_c]\\ -\omega''_{so}\rho Y_s A_s, & \xi\in(0,\xi_{so}]\end{cases} \tag{2}$$

式中：ω_{sf} 为碳烟体积生成率，kg/(m^3·s)；ω''_{so} 为碳烟表面氧化率，kg/(m^3·s)；A_s 为碳烟表面积，m^2/g。

碳烟体积生成率表达式为

$$\omega_{sf}=A_f\rho^2\left(Y_{Fu,0}\frac{\xi-\xi_{st}}{1-\xi_{st}}\right)T^{\gamma}e^{-T_a/T} \tag{3}$$

式中：$Y_{Fu,0}$ 为燃料入口的质量分数；A_f 为用来考虑特定燃料产生碳黑倾向的预指数因子，m^6/(kg^2·s)；γ 为温度指数，取 2.25；T_a 为激活温度，取 2 000 K；ξ_{st} 为化学计量比的混合分数。

在式(2)中，碳烟生成极限 ξ_c 和 ξ_{so} 起到了关键的作用，它们直接决定了不同的碳烟生成区域的划分。这些极限值与燃料的化学当量混合物分数相关。当碳氢燃料的化学式为 C_xH_y 时，其对应的极限值为

$$\xi_c=\Psi_c\xi_{st} \tag{4}$$

$$\xi_{so}=\frac{\xi_{critical}}{\xi_{critical}\left(\frac{1}{\xi_{st}}-1\right)/\left(2+\frac{1}{2}\frac{y}{x}\right)} \tag{5}$$

式中：Ψ_c 为与燃料无关的经验常数，取 2.5；$\xi_{critical}$ 为临界碳氧比，针对乙烯燃料，为经验定值(0.60)[17]；x 为 C_xH_y 燃料中碳原子的数量；y 为 C_xH_y 燃料中氢原子的数量。

联立式(1)～式(4)，可以得到不同碳烟的质量分数。在关于辐射传输的求解计算中，采用碳烟体积分数 f_v 进行求解。碳烟体积分数为

$$f_v=\frac{\rho Y_s}{\rho_s} \tag{6}$$

式中：f_v 为碳烟体积分数；ρ_s 为碳烟颗粒密度，通常取 1 800 kg/m^3[6]。

1.2　全光谱 k 分布模型

在辐射计算中，采用了 FSCK 模型[8,18]，该模型通过引入“相关性”假设，使其能够用于非均质辐射传热的计算，从而实现碳烟辐射模型的高精度和高效率计算。具体而言，在 FSCK 模型中，通过将整个光谱的吸收系数按数值重新排列，将原本杂乱的光谱转换为单调递增且相对平滑的 k 分布曲线。此过程的目的是避免在相同吸收系数下重复计算辐射传输方程(radiative transfer equation，RTE)，从而显著减少计算量。本文采用本课题组已经开发的 FSCK 模型[16]，通过有效耦合辐射气体介质与

碳烟颗粒的辐射特性参数，进而高效求解辐射传输方程。

2 实验设置

2.1 实验测量设备

实验主要分为 2 个部分：(1)利用 CMOS 相机通过比色法[19]对乙烯层流扩散火焰的碳烟浓度场进行重建；(2)使用 FTIR 对火焰中心轴线的光谱辐射强度进行测量，获取对应的平均光谱辐射强度。所用实验系统见图 1，其主要由 CMOS 相机图像测量重建系统、FTIR 辐射测量系统、气源及其流量控制系统、层流火焰燃烧器系统组成。

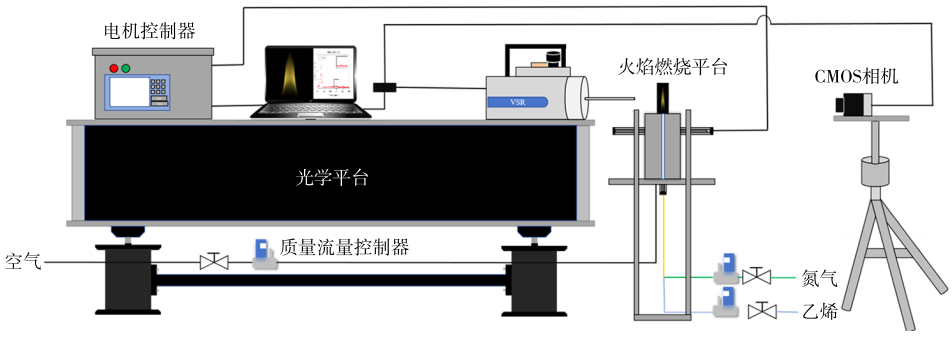


图 1 碳烟浓度和火焰辐射测量实验台

Fig. 1 Experimental platform for soot concentration and flame radiation measurements

实验采用的同轴射流火焰燃烧器为 Santoro 燃烧器，由内径 10.5 mm 的中心燃料管和内径 97.7 mm 的外共流管组成。燃料管通入乙烯和氮气的混合气体，而外共流管则通入助燃空气。外共流管的作用是提供均匀的流动空气，使其与燃料气体混合，从而形成稳定的轴对称火焰。为实现对火焰不同空间位置的测量，燃烧器系统安装在步进电机控制的台架上，步进电机可以使燃烧器在水平和垂直方向进行移动，方便测量装置在不同位置获取数据。

在 CMOS 相机图像检测系统中，采用了高分辨率工业相机 Alvium 1800 U。该相机分辨率为 728×544，能以每秒 289 帧的速度捕捉高精度图像，同时该相机具备优异的图像质量和灵敏度，即使在复杂光照条件下也能提供稳定的成像效果，从而确保碳烟浓度场的准确重建。

在 FTIR 辐射测量系统中，实验选用了多功能光谱辐射计作为红外光谱测量设备。为实现对外部光源的高效测量，采用了光学导入装置(无漫射光管)将红外辐射汇聚为平行光束。平行光束经干涉仪进行调制后，再通过聚焦进入红外探测器。通过对探测器采集的电信号进行数据处理，可以获得包含火焰发射信息的光谱数据。引入光管后的测量系统能够有效减少外部环境光的干扰，提升测量精度，确保对火焰特定位置光谱辐射强度的准确测量。

2.2 数据标定

在实验过程中，由于光谱系统和图像测量系统需要经过光电转换、数模转换等一系列过程，获得的辐射强度仅为仪器的响应值，并不能直接反映火焰辐射的真实值。为确保其准确性，需通过黑体炉进行绝对辐射强度的标定，以建立仪器响应值与绝对辐射强度之间的函数关系。实验中采用了 OMEGA-BB4A 型黑体炉作为温度可调的黑体辐射参考源，其温度调节范围为 100～982 ℃，精度为±1 K，相对误差为±0.25%。

CMOS 相机的标定主要通过建立相机响应值与绝对辐射强度之间的函数关系来实现。由于 CMOS 相机在不同曝光时间下的响应值与曝光时间呈线性关系，因此可以消除曝光时间的影响。在实验中，对相机的红色通道(610 nm)和绿色通道(530 nm)对应的波长进行了标定。相机的快门速度设置为 1/100、1/200、1/400、1/800 s，黑体炉温度则设定为 800、900、1 000、1 100 K。通过线性拟合，获得了该相机在这 2 个波段的响应曲线。响应曲线描述了拍摄亮度与绝对辐射强度之间的对应关系。

FTIR 的标定采用了与 CMOS 相机类似的方法。通过在不同温度下测量黑体炉的辐射，并且在每个波数范围内对黑体辐射进行拟合。在标定前，首先使用 FTIR 测量背景信号，并且在黑体炉和火焰的光谱数据中去除该背景信号。因为 FTIR 信号与温度的响应关系呈非线性，所以使用二次函数对黑体辐射进行拟合，并且在不同温度下验证了标定精度，以确保标定结果的可靠性。

2.3 实验工况

设计了 5 种工况，选择乙烯掺混氮气的混合气作为燃料，并且将燃料体积流量固定为 259 mL/min。通过调整氮气的掺混比例，测量了氮气体积分数分别

为 0%、10%、20%、30%和 40%时的碳烟体积分数分布。由于实验中空气流量计的量程限制，伴流空气的体积流量固定在 30 L/min。通过改变氮气的掺混比例，可以有效调节燃料的局部氧含量，从而产生不同的火焰结构和不同的碳烟浓度分布，为碳烟生成模型和辐射模型的验证提供了重要的数据支持。

3　实验结果与分析

3.1　火焰图像预处理

在火焰图像测量过程中，CMOS 相机与燃烧器中心轴线的距离保持在 140 mm，既能保证高空间分辨率的图像采集，又可以防止图像失真。然而，由于高分辨率镜头的视场较小，单次拍摄无法覆盖整个火焰图像，因此需通过不同高度的火焰图像进行拼接。在火焰图像拍摄过程中，保持相机水平的前提下，使用步进电机调整燃烧器平台的高度，在若干高度下进行火焰图像的拍摄。考虑火焰自身容易受到环境因素的影响而产生抖动，实验中在同一高度拍摄了多张火焰图像，并且确保不同高度下的图像之间存在一定的重叠，以便后续火焰整体图像重建工作的开展。

假设在 n 个不同高度下对火焰进行了测量，每个高度获得了 m 张图像。由于火焰并不总能稳定地保持在图像中心，因此首先沿着垂直方向计算每个高度测量点相对峰值的偏移量作为调整基准。计算方法为

$$x_{cg}=\frac{\int_a^b xP(x)\mathrm{d}x}{\int_a^b P(x)\mathrm{d}x} \tag{7}$$

式中：x_{cg}为火焰在水平位置上的由亮度加权平均后的坐标；$P(x)$为位于 x 轴的亮度分布值；a 对应火焰图像在 x 轴上的起始位置；b 对应火焰图像 x 轴上的终止位置。

x_{cg}的确定有助于将不同高度的图像对齐，确保图像拼接后的火焰完整性和准确性。

根据每一行的中心，对单幅图像的左右两侧进行对称平均，并且将同一高度下的 m 张图像进一步平均，获得该高度下火焰的图像测量结果。

在完成了水平方向的重建后，已将 $n\times m$ 张图像合并成为了 n 张不同高度下的火焰测量图像。随后，对每张图像沿着垂直方向，计算每一行水平测量结果相机响应值的平均值，并且将其作为当前特定高度下火焰水平平均强度。再利用二分法将每张照片对应的火焰水平平均强度进行匹配，确保其重合部分的差值最小，从而实现垂直方向的拼接。最终，通过该方法可以获得 $n\times m$ 张不同高度下火焰测量图像的整体拼接结果，如图 2 所示，其中 P_m 为第 m 张图片。

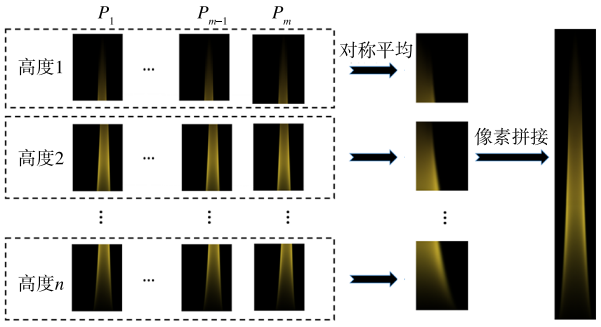


图 2　火焰图像拼接流程图

Fig. 2　Flowchart of flame image reconstruction

通过这种拼接方式，CMOS 相机测量结果得到了充分利用，同时有效减弱了环境干扰对火焰测量的影响。图 3 展示了在不同氮气体积分数的工况下，通过上述拼接方法获得的火焰图像。可以明显观察到，随着燃料中氮气掺混比例的增加，火焰高度逐渐降低，从无氮气掺混的最高高度(108 mm)降至 40%氮气掺混的最低高度(57 mm)。

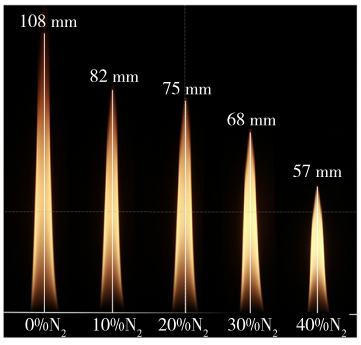


图 3　不同掺混比例的火焰高度

Fig. 3　Flame height at different blending ratios

3.2　碳烟生成模型验证对比结果

在本研究中，通过对比分析，验证二次开发的层流烟点碳烟模型耦合 FSCK 光谱辐射模型(新模型)在层流扩散火焰碳烟场预测方面的优越性。在具体仿真设置上，基于实验条件在 ANSYS-Fluent 软件中分别建立了 2 组模型：(1)采用二次开发的层流烟点碳烟模型耦合 FSCK 光谱辐射模型(新模型)；(2)采用 ANSYS-Fluent 软件自带的 Moss-Brookes 碳烟模型耦合 WSGG 模型(原模型)。2 组模型均使用层流模式，并且启用化学物质输运模型和 11 步总包反应机理[20]，以模拟乙烯-氮气混合燃料的燃烧过程。在边界条件方面，依据实验测量条件将燃料入口体积流量固定为 259 mL/min，燃料为乙烯-氮气混合气，并且通过调整氮气掺混比例使其体积分数分别为 0%、

10%、20%、30%和 40%。伴流空气体积流量固定为 30 L/min,环境压力设定为 10^5 Pa,重力加速度(方向垂直向下)取 9.8 m/s^2。

碳烟体积分数的测量通过双色法实现[19,21]。双色法通过测量火焰沿视线方向的积分辐射强度,即 CMOS 相机红色通道(610 nm)和绿色通道(530 nm)对应的辐射强度,可以同时获得碳烟的温度和体积分数。该方法基于火焰中碳烟颗粒的热辐射特性,通过 2 个波长下的辐射强度比值,有效去除路径长度和碳烟浓度的影响,从而先得到碳烟温度的分布。在温度确定后,利用反演技术将视线方向上的辐射强度转换为径向分布,以重建碳烟的径向体积分数分布。本文中碳烟浓度场的重建方法与文献[19]一致,具体细节可参考文献[19]。

在完成各工况下的模拟计算和碳烟体积分数的实验测量后,将其与实验测量数据进行了比较,对比了 2 种模型在碳烟体积分布预测方面的表现。图 4 为实验测量结果(左半火焰)与新模型预测结果(右半火焰)的对比,图 5 为实验测量结果(左半火焰)与原模型预测结果(右半火焰)的对比,其中:r 为径向坐标,z 为火焰高度坐标,f_v 为碳烟体积分数。

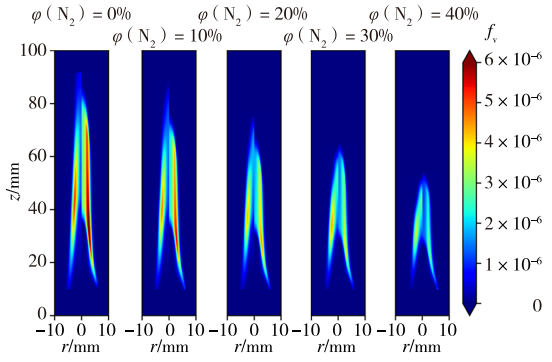


图 4 实验与新模型预测结果的碳烟体积分数分布对比

Fig. 4 Comparison of soot volume fraction distributions between experiment and new model prediction results

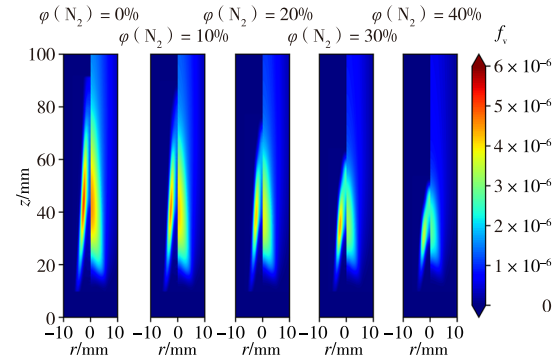


图 5 实验与原模型预测结果的碳烟体积分数分布对比

Fig. 5 Comparison of soot volume fraction distributions between experiment and original model prediction results

与原模型相比,实验与新模型预测结果在趋势和幅值上均表现出较高的一致性。新模型能够较准确地描述碳烟体积分数在火焰中的分布规律,尤其是在火焰高温区域,新模型的预测结果更接近实验测量数据。图 6 展示了体积分数为 20%的氮气掺混工况下 4 个高度(20、30、40、50 mm)碳烟体积分数的径向分布。可以看出,尽管 2 种模型预测的碳烟体积分数都与实验测量值存在一定的差异,而新模型则能相对准确地反映层流扩散火焰的碳烟峰值分布。尽管与实验测量值仍存在一定差距,但是该新模型的开发目标是提供一种简化的碳烟生成计算方法,确保碳烟分布具备合理的定性特征,同时在碳烟生成总量上达到良好的预测效果。

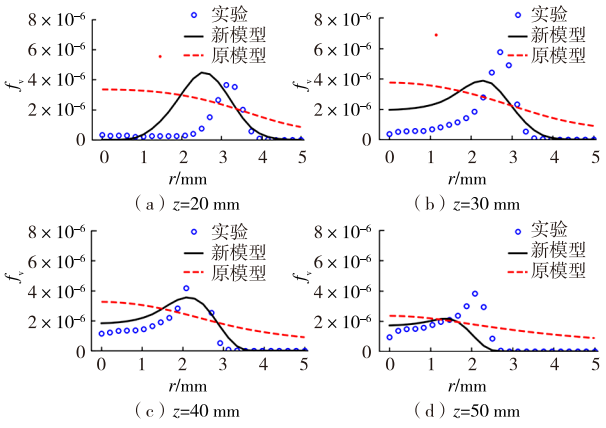


图 6 20%氮气掺混工况下不同高度碳烟体积分数的径向分布

Fig. 6 Radial distribution of soot volume fraction at different heights under 20% N_2 mixing condition

图 7 展示了不同工况下碳烟体积分数在不同高度上的径向平均值随高度的变化情况,这实际上是对不同高度上碳烟生成总量的描述。可以看出,无论是实验数据还是新模型预测结果,碳烟体积分数均随高度的增加先增大后减小,并且在不同工况下火焰的碳烟体积分数均在约 40 mm 高度处达到最大值。这种分布特性可以归因于火焰底部局部温度较高,燃料的热解及碳烟粒子的表面生长、团聚得到显著促进,使得碳烟生成速率在底部区域占主导地位,从而导致碳烟体积分数随高度的增加逐渐升高。然而,随着高度的增加,火焰边界层的扩展和氧气的补充增强了碳烟粒子的氧化和烧蚀作用,当氧化速率超过生成速率时,碳烟体积分数开始逐渐降低。在约 40 mm 高度处,燃料热解和碳烟生成速率达到峰值,而氧化作用相对较弱,因此碳烟体积分数在该高度处达到最大值。而通过对比两者结果可以发现,在不同的氮气掺混比例下,新模型的预测值与实验数据在各高度上呈现出较高的一致性。

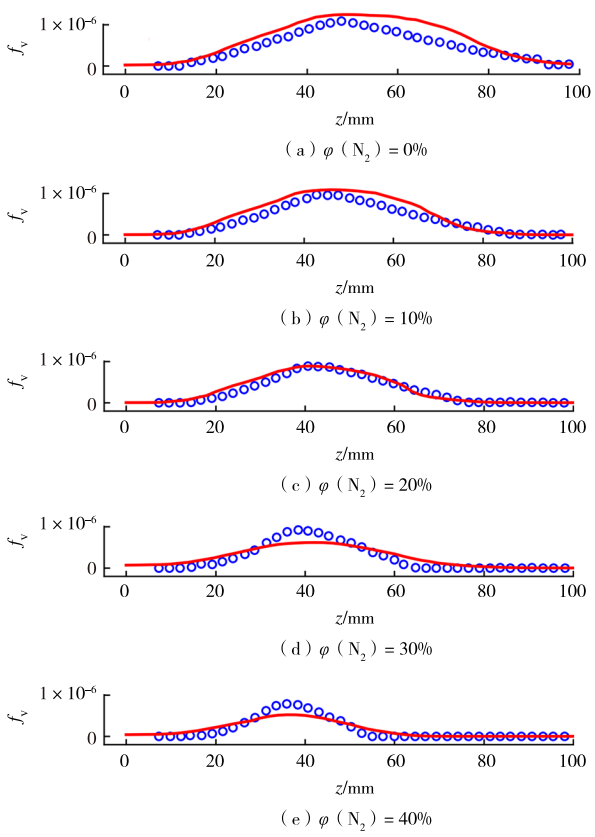


图 7　不同工况下碳烟体积分数在不同高度上的径向平均值

Fig. 7　Radial mean value of soot volume fraction at different heights under various experimental conditions

3.3　碳烟辐射模型结果验证对比结果

通过测量火焰在不同高度中心轴线上的视线光谱辐射强度，并且将其与对应的模拟计算结果进行对比，以验证碳烟辐射模型的准确性。实验中使用步进电机调节火焰的高度位置，利用傅里叶红外光谱仪对不同高度下火焰中心轴线的视线光谱辐射强度进行测量。模拟计算的光谱辐射强度则基于 ANSYS-Fluent 软件中 2 组模型生成的燃烧场，通过辐射传输计算得出。

假设某一高度火焰中心视线方向火焰的半径为 R，则光谱仪测量到的光谱辐射强度 $I(\eta)$ 可以描述为

$$I(\eta)=\int_0^{\infty}\left(\int_{-R}^{R}\kappa_\eta I_{b\eta}\mathrm{e}^{-\int_r^R\kappa_\eta \mathrm{d}y'}\mathrm{d}r\right)\tau_{a,\eta}\Gamma(\eta-\eta')\mathrm{d}\eta' \tag{8}$$

$$\tau_{a,\eta}=\exp(-\kappa_{a,\eta}L_a)$$

式中：η、η' 为波数，cm^{-1}；κ_η 为在光谱位置 η 处计算的光谱吸收系数；$I_{b\eta}$ 为介质的局部黑体辐射强度，$\mathrm{W/(m\cdot sr)}$；$\tau_{a,\eta}$ 为火焰边缘和探测器之间大气的透射率；$\kappa_{a,\eta}$ 为空气的吸收系数；$\mathrm{d}y'$ 为光在介质中传播的微小距离；L_a 为吸收大气的总气体路径长度，m；$\Gamma(\eta-\eta')$ 为 FTIR 的仪器线形函数，用于描述仪器对不同波数值 η 和 η' 之间差异的响应特性。

对于光谱吸收系数的计算，考虑了 CO_2、H_2O、CO 这 3 种气体和碳烟的辐射。气体的光谱吸收系数基于 HITEMP-2010 光谱数据库[22]，通过逐线法进行精确计算。碳烟的光谱吸收系数则采用 Dalzell 和 Sarofim 提出的经验公式[23]进行计算，以反映碳烟颗粒在不同光谱下的吸收特性。

图 8(a)展示了通过模型计算得到的 40%氮气混合气体火焰的温度分布图，计算范围为 2 000～4 500 cm^{-1}的光谱区域，图 8(b)展示了火焰高度为 38 mm、波数范围为 2 000～4 500 cm^{-1}内的实验光谱与新模型计算的模拟光谱的对比，其中：I 为光谱辐射强度，$\mathrm{W/(m\cdot sr)}$。由于碳烟的辐射为宽光谱辐射，因此在整个光谱范围内都存在碳烟的辐射贡献。可以清晰地看到，各组分气体和碳烟在不同光谱位置处的发射带特征。其中，光谱范围①包含了 3 种气体(CO_2、H_2O 和 CO)及碳烟的辐射光谱，特别是 CO_2 和 H_2O 的强发射带。此区域的信噪比较高，实验光谱与模拟光谱在峰值位置和辐射强度上的匹配度较好。光谱范围②是气体的光学窗口区域，主要显示碳烟的宽光谱辐射。由于此区域只有碳烟的辐射贡献，实验和模拟结果在此处具有较好的匹配，验证了新模型在碳烟辐射特性方面的准确性。光谱范围③包含了 CO_2 和 H_2O 的弱发射带，辐射强度相对较低，导致信噪比较差，实验光谱与模拟光谱在该区域的匹配度不高，存在一定的偏差。

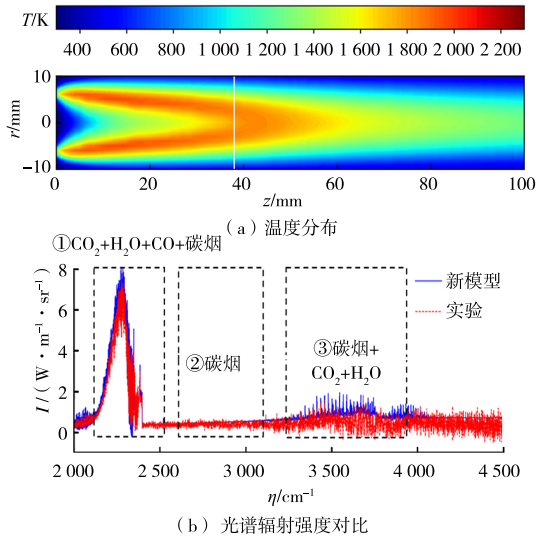


图 8　实验和新模型计算的光谱辐射强度对比

Fig. 8　Comparison of spectral radiation intensity between experiment and new model calculated results

为了便于直观比较新模型计算的火焰总体辐射与实验测量的总体辐射强度，选择了实验数据中信噪比较高、数据质量较好的波数范围(2 000～2 800

cm^{-1})的光谱作为实验火焰的有效发射光谱。在此范围内,计算了不同火焰高度的辐射强度平均值,并且将该实验与模拟计算结果进行了对比。图 9 展示了 5 种氮气掺混比例条件下的平均光谱辐射强度分布,其中:I_{ave}为平均光谱辐射强度,W/(m·sr)。可以看出,新模型在不同高度和不同工况下的平均光谱辐射强度与实验测量结果匹配良好,展现了新模型在总体辐射能量计算方面的适用性和准确性。

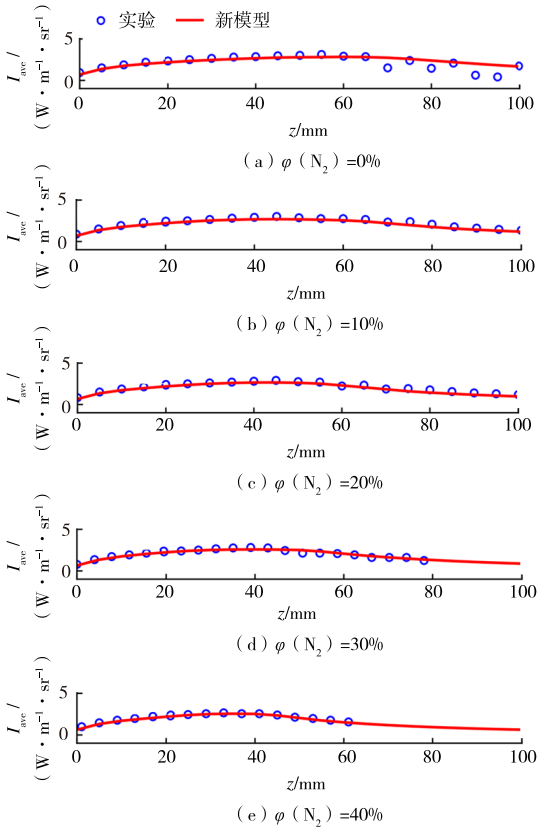


图 9 不同工况下实验和新模型计算的平均光谱辐射强度对比

Fig. 9 Comparison of mean spectral radiation intensity between experiment and new model calculated results

4 结论

(1) 将层流烟点模型成功植入 ANSYS-Fluent 软件中,使模型摆脱了在碳烟生成模拟中对复杂化学反应的依赖。在仅需引入 1 个物质输运方程的情况下,实现了对碳烟生成浓度的高效建模,为工程应用提供了一种可靠且高效的计算工具。

(2) 使用 CMOS 相机测量乙烯扩散火焰碳烟体积分数分布,并且将实验测量结果与层流烟点模型结合 FSCK 模型(新模型)的模拟结果进行对比。新模型在碳烟体积分数的分布趋势、幅值及碳烟体积分数的总量特性上,与实验结果表现出较高的一致性。

(3) 使用傅里叶变换红外光谱仪测量乙烯扩散火焰在不同高度中心轴线的光谱辐射强度,并且将实验测量结果与基于新模型生成的燃烧场所计算出的模拟光谱辐射强度进行了对比。新模型在不同高度和工况下的平均光谱辐射强度与实验测量值高度匹配,展现了新模型在总体辐射能量计算方面的准确性和适用性。

参考文献:

[1] GLASSMAN I, YETTER R A, GLUMAC N G. Combustion[M]. 5th ed. [S. l.]: Academic Press (Elsevier), 2014.

[2] LIU Fengshan, CONSALVI J L, NMIRA F. The importance of accurately modelling soot and radiation coupling in laminar and laboratory-scale turbulent diffusion flames[J]. Combustion and Flame, 2023, 258: 112573.

[3] BROOKES S, MOSS J. Predictions of soot and thermal radiation properties in confined turbulent jet diffusion flames[J]. Combustion and Flame, 1999, 116(4): 486-503.

[4] SNEGIREV A, MARKUS E, KUZNETSOV E, et al. On soot and radiation modeling in buoyant turbulent diffusion flames[J]. Heat and Mass Transfer, 2018, 54(8): 2275-2293.

[5] LEUNG K M, LINDSTEDT R P, JONES W P. A simplified reaction mechanism for soot formation in nonpremixed flames[J]. Combustion and Flame, 1991, 87(3/4): 289-305.

[6] YAO Wei, ZHANG Jianping, NADJAI A, et al. A global soot model developed for fires: validation in laminar flames and application in turbulent pool fires [J]. Fire Safety Journal, 2011, 46(7): 371-387.

[7] MOTAGHIAN S, BEJI T. Soot modeling in large eddy simulation of turbulent buoyant flames using the laminar smoke point and the eddy dissipation concept [J]. Combustion Science and Technology, 2025, 197(7): 1362-1383.

[8] MODEST M F. MAZUMDER S. Radiative heat transfer[M]. 4th ed. London: Academic Press, 2021.

[9] RAJHI M A, BEN-MANSOUR R, HABIB M A, et al. Evaluation of gas radiation models in CFD modeling of oxy-combustion[J]. Energy Conversion and Management, 2014, 81: 83-97.

[10] AL-ABBAS A H, NASER J, DODDS D. CFD modelling of air-fired and oxy-fuel combustion of lignite in a 100 KW furnace [J]. Fuel, 2011, 90(5): 1778-1795.

[11] ZHANG Juwei, ITO T, ITO S, et al. Numerical investigation of oxy-coal combustion in a large-scale furnace: non-gray effect of gas and role of particle radiation[J]. Fuel, 2015, 139: 87-93.

[12] DA SILVA R M, FRAGA G C, RAMOS FRANÇA F H. Improvement of the efficiency of the superposition method applied to the WSGG model to compute radiative transfer in gaseous mixtures[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2021, 179: 121662.

[13] MAZUMDER *k* distribution approach to modeling non-gray radiation in combustion gases[J]. Combustion and Flame, 2002, 129(4): 416-438.

[14] CLEMENTS A G, BLACK S, SZUHÁNSZKI J, et al. LES and RANS of air and oxy-coal combustion in a pilot-scale facility: predictions of radiative heat transfer[J]. Fuel, 2015, 151: 146-155.

[15] YANG Xin, CLEMENTS A, SZUHÁNSZKI J, et al. Prediction of the radiative heat transfer in small and large scale oxy-coal furnaces[J]. Applied Energy, 2018, 211: 523-537.

[16] 王龙，王良，曾琦，等. 针对 CO_2-H_2O-CO-碳烟混合介质的全光谱相关 k 分布辐射模型在 ANSYS-Fluent 中的开发与验证[J]. 动力工程学报，2024，44(12)：1819-1827.
WANG Long, WANG Liang, ZENG Qi, et al. Development and validation of full-spectrum correlated-k distribution model in ANSYS-Fluent for CO_2-H_2O-CO-soot mixtures[J]. Journal of Chinese Society of Power Engineering, 2024, 44(12): 1819-1827.

[17] BEJI T, ZHANG J P, DELICHATSIOS M. Determination of soot formation rate from laminar smoke point measurements[J]. Combustion Science and Technology, 2008, 180(5): 927-940.

[18] WANG Chaojun, HE Boshu, MODEST M F, et al. Efficient full-spectrum correlated-*k*-distribution look-up table[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2018, 219: 108-116.

[19] YAN Weijie, ZHENG Shu, ZHOU Huaichun. Experiments investigation on 2D distribution of soot temperature and volume fraction by image processing of visible radiation[J]. Applied Thermal Engineering, 2017, 124: 1014-1022.

[20] LØVÅS T, MALIK N, MAUSS F. Global reaction mechanism for ethylene flames with preferential diffusion[J]. Combustion Science and Technology, 2010, 182(11/12): 1945-1960.

[21] BOIARCIUC A, FOUCHER F, MOUNAÏM-ROUSSELLE C. Soot volume fractions and primary particle size estimate by means of the simultaneous two-color-time-resolved and 2D laser-induced incandescence[J]. Applied Physics B, 2006, 83(3): 413-421.

[22] ROTHMAN L S, GORDON I E, BARBER R J, et al. HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database[J]. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 2010, 111(15): 2139-2150.

[23] DALZELL W H, SAROFIM A F. Optical constants of soot and their application to heat-flux calculations[J]. Journal of Heat Transfer, 1969, 91(1): 100-104.