



# (12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 115292882 B

(45) 授权公告日 2023. 04. 07

(21) 申请号 202210731735.6

(22) 申请日 2022.06.26

(65) 同一申请的已公布的文献号  
申请公布号 CN 115292882 A

(43) 申请公布日 2022.11.04

(73) 专利权人 哈尔滨工程大学  
地址 150001 黑龙江省哈尔滨市南岗区南通大街145号

(72) 发明人 赵宁波 孙继昊 杨洪磊 杨仁  
邓福泉 郑洪涛

(74) 专利代理机构 哈尔滨市航友知识产权代理  
事务所(普通合伙) 23216  
专利代理师 张赞

(51) Int. Cl.  
G06F 30/20 (2020.01)  
G06T 17/00 (2006.01)

G16C 20/10 (2019.01)

G06F 111/10 (2020.01)

G06F 119/08 (2020.01)

G06F 119/14 (2020.01)

## (56) 对比文件

CN 113779899 A, 2021.12.10

CN 110083861 A, 2019.08.02

CN 110765698 A, 2020.02.07

CN 113239493 A, 2021.08.10

US 2015019181 A1, 2015.01.15

shan jin 等.rotating detonation combustion with in-situ evaporating bi-disperse n-heptane sprays.https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/2109/2109.12820.pdf.2021,1-34.

审查员 林婉娟

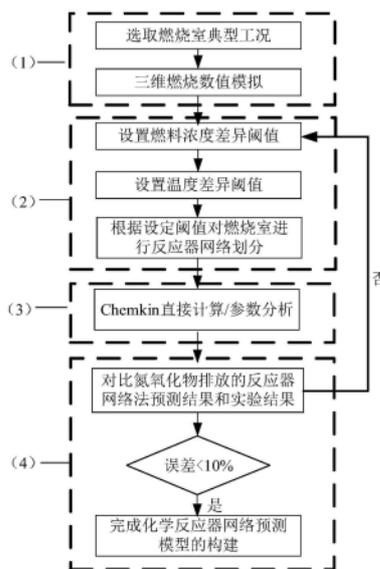
权利要求书2页 说明书7页 附图3页

## (54) 发明名称

一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法及系统

## (57) 摘要

本发明提出一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法及系统,涉及燃气轮机燃烧室领域,用以解决现有的燃烧室污染物排放预测精度不高的问题。本发明的技术要点包括:根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟,获得燃烧室物理空间区域内的温度、组分和燃料浓度分布;设置温度差异阈值和燃料浓度差异阈值,根据差异阈值对燃烧室物理空间区域进行离散化,以将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络;对划分生成的化学反应器网络进行计算,获得各个反应器的组分浓度预测值和温度预测值。本发明可获得更精准的化学反应器网络且计算精度不依赖于操作人员的主观认知。本发明可应用于燃烧室污染物排放量预测计算中。



1. 一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法,其特征在于,包括以下步骤:

步骤一、根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟,获得燃烧室物理空间区域内的温度分布、组分分布和燃料浓度分布;

步骤二、设置温度差异阈值和燃料浓度差异阈值,根据差异阈值对燃烧室物理空间区域进行离散化,以将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络;

步骤三、对划分生成的化学反应器网络进行计算,获得各个反应器的组分浓度预测值和温度预测值;

步骤四、利用实验数据验证划分生成的化学反应器网络对污染物排放的计算精度,设置误差阈值,若步骤三获得的各个反应器的组分浓度预测值与其对应的实验值的误差大于误差阈值,则减小温度差异阈值和燃料浓度差异阈值,重复步骤二至步骤四,直至组分浓度预测值与其对应的实验值的误差小于误差阈值,获得各个反应器的组分浓度作为最终的燃烧室污染物的排放预测值。

2. 根据权利要求1所述的一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法,其特征在于,步骤一中所述燃烧室运行参数包括压力、进口空气温度、进口空气流量、燃料流量、燃料温度和燃料组分。

3. 根据权利要求2所述的一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法,其特征在于,步骤一中所述三维燃烧数值模拟所用的模型包括湍流模型和燃烧模型;所述湍流模型为基于雷诺时均假设的湍流模型,所述燃烧模型包括有限速率/涡耗散模型、涡耗散概念模型或小火焰生成簇模型。

4. 根据权利要求1-3中任一项所述的一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法,其特征在于,步骤二中将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络的具体过程包括:当离散化后的物理空间区域的流动特征时间远大于化学反应特征时间,即Da数远大于1,则将该物理空间区域划分为PFR反应器;否则划分为PSR反应器;其中,流动特征时间等于燃烧室积分尺度与燃烧室内速度脉动的比值;化学反应特征时间等于层流火焰厚度与层流火焰速度的比值。

5. 根据权利要求1-3中任一项所述的一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法,其特征在于,步骤三中对划分生成的化学反应器网络进行计算时还需用到步骤一中根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟后获得的温度、压力、体积、停留时间及反应器之间的质量、能量交换信息。

6. 一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测系统,其特征在于,包括:

三维模拟模块,其配置成根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟,获得燃烧室物理空间区域内的温度分布、组分分布和燃料浓度分布;

反应器网络划分模块,其配置成设置温度差异阈值和燃料浓度差异阈值,根据差异阈值对燃烧室物理空间区域进行离散化,以将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络;

预测模块,其配置成对划分生成的化学反应器网络进行计算,获得各个反应器的组分浓度预测值和温度预测值;并利用实验数据验证划分生成的化学反应器网络对污染物排放的计算精度,设置误差阈值,若获得的各个反应器的组分浓度预测值与其对应的实验值的

误差大于误差阈值,则减小温度差异阈值和燃料浓度差异阈值,重复划分生成化学反应器网络,直至组分浓度预测值与其对应的实验值的误差小于误差阈值,获得各个反应器的组分浓度作为最终的燃烧室污染物的排放预测值。

7. 根据权利要求6所述的一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测系统,其特征在于,所述三维模拟模块中所述燃烧室运行参数包括压力、进口空气温度、进口空气流量、燃料流量、燃料温度和燃料组分。

8. 根据权利要求7所述的一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测系统,其特征在于,所述三维模拟模块中所述三维燃烧数值模拟所用的模型包括湍流模型和燃烧模型;所述湍流模型为基于雷诺时均假设的湍流模型,所述燃烧模型包括有限速率/涡耗散模型、涡耗散概念模型或小火焰生成簇模型。

9. 根据权利要求6-8中任一项所述的一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测系统,其特征在于,所述反应器网络划分模块中将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络的具体过程包括:当离散化后的物理空间区域的流动特征时间远大于化学反应特征时间,即Da数远大于1,则将该物理空间区域划分为PFR反应器;否则划分为PSR反应器;其中,流动特征时间等于燃烧室积分尺度与燃烧室内速度脉动的比值;化学反应特征时间等于层流火焰厚度与层流火焰速度的比值。

10. 根据权利要求6-8中任一项所述的一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测系统,其特征在于,所述预测模块中对划分生成的化学反应器网络进行计算时还需用到所述三维模拟模块中根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟后获得的温度、压力、体积、停留时间及反应器之间的质量、能量交换信息。

## 一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法及系统

### 技术领域

[0001] 本发明涉及燃烧室排放污染物浓度预测技术领域,具体涉及一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法及系统。

### 背景技术

[0002] 对燃烧室污染物排放进行快速、准确的预测有助于缩短燃烧室迭代优化设计周期。目前,获得燃烧室污染物生成特性的方法主要有实验研究、实验-半经验模型、计算流体力学模拟、化学反应器网络法四种方法。相较于其他三种方法,化学反应器网络法可快速、准确地获得燃烧室内在不同工况条件下不同特征区域的污染物生成机理和生成特性。该方法根据燃烧室内的温度场、流场、组分分布等信息将燃烧室离散为由若干个反应器组成的反应器网络。其中,温度场、流场、组分分布等信息可通过对燃烧室开展典型工况条件下的实验或计算流体力学模拟获取。

[0003] 国内近年来也有许多关于污染物排放预测方法的专利申请。其中,专利号201910976008.4公开了一种燃气轮机燃烧室变工况排放性能预测方法,该方法根据燃烧过程、温度分布及流场分析人为地将燃烧室划分成头部混合区、主燃区、壁面冷却区、回流区和掺混区五个特征区域,以CO作为参照物对燃烧室的特征区域的有效体积进行确定,并利用PSR反应器对头部混合区、壁面冷却区、回流区、主燃区进行模拟,利用PFR反应器对掺混区进行模拟;但是,采用该方法并不能准确地获得各个反应器之间的质量、能量交换信息,预测精度较为有限;专利号202110570553.0公开了一种燃气轮机启机过程NO<sub>x</sub>排放性能建模和软件开发设计方法,该方法根据燃烧室的二维温度分布云图和速度分布云图对燃烧室进行化学反应器网络划分,并采用Cantera软件对生成的化学反应器网络进行计算;但是,其化学反应网络的计算精度直接取决于操作人员对燃烧室的燃烧场及反应器网络的认知,预测精度不可控。

### 发明内容

[0004] 鉴于以上问题,本发明提出一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法及系统,用以解决现有的燃烧室污染物排放预测精度不高的问题。

[0005] 根据本发明的一方面,提供一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法,该方法包括以下步骤:

[0006] 步骤一、根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟,获得燃烧室物理空间区域内的温度分布、组分分布和燃料浓度分布;

[0007] 步骤二、设置温度差异阈值和燃料浓度差异阈值,根据差异阈值对燃烧室物理空间区域进行离散化,以将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络;

[0008] 步骤三、对划分生成的化学反应器网络进行计算,获得各个反应器的组分浓度预测值和温度预测值;

[0009] 步骤四、利用实验数据验证划分生成的化学反应器网络对污染物排放的计算精度,设置误差阈值,若步骤三获得的各个反应器的组分浓度预测值与其对应的实验值的误差大于误差阈值,则减小温度差异阈值和燃料浓度差异阈值,重复步骤二至步骤四,直至组分浓度预测值与其对应的实验值的误差小于误差阈值,获得各个反应器的组分浓度作为最终的燃烧室污染物的排放预测值。

[0010] 进一步地,步骤一中所述燃烧室运行参数包括压力、进口空气温度、进口空气流量、燃料流量、燃料温度和燃料组分。

[0011] 进一步地,步骤一中所述三维燃烧数值模拟所用的模型包括湍流模型和燃烧模型;所述湍流模型为基于雷诺时均假设的湍流模型,所述燃烧模型包括有限速率/涡耗散模型、涡耗散概念模型或小火焰生成簇模型。

[0012] 进一步地,步骤二中将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络的具体过程包括:当离散化后的物理空间区域的流动特征时间远大于化学反应特征时间,即Da数远大于1,则将该物理空间区域划分为PFR反应器;否则划分为PSR反应器;其中,流动特征时间等于燃烧室积分尺度与燃烧室内速度脉动的比值;化学反应特征时间等于层流火焰厚度与层流火焰速度的比值。

[0013] 进一步地,步骤三中对划分生成的化学反应器网络进行计算时还需用到步骤一中根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟后获得的温度、压力、体积、停留时间及反应器之间的质量、能量交换信息。

[0014] 根据本发明的另一方面,提供一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测系统,该系统包括:

[0015] 三维模拟模块,其配置成根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟,获得燃烧室物理空间区域内的温度分布、组分分布和燃料浓度分布;

[0016] 反应器网络划分模块,其配置成设置温度差异阈值和燃料浓度差异阈值,根据差异阈值对燃烧室物理空间区域进行离散化,以将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络;

[0017] 预测模块,其配置成对划分生成的化学反应器网络进行计算,获得各个反应器的组分浓度预测值和温度预测值;并利用实验数据验证划分生成的化学反应器网络对污染物排放的计算精度,设置误差阈值,若获得的各个反应器的组分浓度预测值与其对应的实验值的误差大于误差阈值,则减小温度差异阈值和燃料浓度差异阈值,重复划分生成化学反应器网络,直至组分浓度预测值与其对应的实验值的误差小于误差阈值,获得各个反应器的组分浓度作为最终的燃烧室污染物的排放预测值。

[0018] 进一步地,所述三维模拟模块中所述燃烧室运行参数包括压力、进口空气温度、进口空气流量、燃料流量、燃料温度和燃料组分。

[0019] 进一步地,所述三维模拟模块中所述三维燃烧数值模拟所用的模型包括湍流模型和燃烧模型;所述湍流模型为基于雷诺时均假设的湍流模型,所述燃烧模型包括有限速率/涡耗散模型、涡耗散概念模型或小火焰生成簇模型。

[0020] 进一步地,所述反应器网络划分模块中将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络的具体过程包括:当离散化后的物理空间区域的流动特征时间远大于化学反应特征时间,即Da数远大于1,则将该物理空间区域划分为PFR反应器;否则划分为

PSR反应器；其中，流动特征时间等于燃烧室积分尺度与燃烧室内速度脉动的比值；化学反应特征时间等于层流火焰厚度与层流火焰速度的比值。

[0021] 进一步地，所述预测模块中对划分生成的化学反应器网络进行计算时还需用到所述三维模拟模块中根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟后获得的温度、压力、体积、停留时间及反应器之间的质量、能量交换信息。

[0022] 本发明的有益技术效果是：

[0023] 本发明提出一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法及系统，与现有技术相比：传统的化学反应器网络建立往往根据燃烧室二维速度、温度等物理量云图来对燃烧室进行离散，而本发明根据燃烧室三维燃烧数值模拟结果对燃烧室进行化学反应器网络划分，可获得更精细、准确的化学反应器网络；所有反应器的参数和质量交换信息全部从三维燃烧数值模拟结果中获取，提高了每个反应器参数的准确性；提供了量化的化学反应器网络划分标准，可通过调整燃料浓度差异阈值、温度差异阈值来控制计算精度和化学反应器网络中的反应器数量，计算精度不再依赖于操作人员的主观认知。

## 附图说明

[0024] 通过参考附图阅读下文的详细描述，本发明示例性实施方式的上述以及其他目的、特征和优点将变得易于理解。在附图中，以示例性而非限制性的方式示出了本发明的若干实施方式，其中：

[0025] 图1为一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法的流程图。

[0026] 图2为本发明实施例中燃烧室燃料质量分数空间分布的三维渲染示例图。

[0027] 图3为本发明实施例中燃烧室温度分布的三维渲染示例图。

[0028] 图4为本发明实施例中Chemkin软件中燃烧室的化学反应器网络示例图。

[0029] 图5为本发明实施例中每个反应器所对应的空间区域的示意图。

## 具体实施方式

[0030] 下面将参考若干示例性实施方式来描述本发明的原理和精神。应当理解，给出这些实施方式仅仅是为了使本领域技术人员能够更好地理解进而实现本发明，而并非以任何方式限制本发明的范围。相反，提供这些实施方式是为了使本公开更加透彻和完整，并且能够将本公开的范围完整地传达给本领域的技术人员。

[0031] 本领域技术人员知道，本发明的实施方式可以实现为一种系统、装置、设备、方法或计算机程序产品。因此，本公开可以具体实现为以下形式，即：完全的硬件、完全的软件（包括固件、驻留软件、微代码等），或者硬件和软件结合的形式。在本文中，需要理解的是，附图中的任何元素数量均用于示例而非限制，以及任何命名都仅用于区分，而不具有任何限制含义。

[0032] 本发明实施例提供一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法，该方法包括以下步骤：

[0033] 步骤一、根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟，获得燃烧室物理空间区域内的温度分布、组分分布和燃料浓度分布；

[0034] 步骤二、设置温度差异阈值和燃料浓度差异阈值，根据差异阈值对燃烧室物理空

间区域进行离散化,以将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络;

[0035] 步骤三、对划分生成的化学反应器网络进行计算,获得各个反应器的组分浓度预测值和温度预测值;

[0036] 步骤四、利用实验数据验证划分生成的化学反应器网络对污染物排放的计算精度,设置误差阈值,若步骤三获得的各个反应器的组分浓度预测值与其对应的实验值的误差大于误差阈值,则减小温度差异阈值和燃料浓度差异阈值,重复步骤二至步骤四,直至组分浓度预测值与其对应的实验值的误差小于误差阈值,获得各个反应器的组分浓度作为最终的燃烧室污染物的排放预测值。

[0037] 本实施例中,优选地,步骤一中燃烧室运行参数包括压力、进口空气温度、进口空气流量、燃料流量、燃料温度和燃料组分。

[0038] 本实施例中,优选地,步骤一中三维燃烧数值模拟所用的模型包括湍流模型和燃烧模型;湍流模型为基于雷诺时均假设的湍流模型,燃烧模型包括有限速率/涡耗散模型、涡耗散概念模型或小火焰生成簇模型。

[0039] 本实施例中,优选地,步骤二中将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络的具体过程包括:当离散化后的物理空间区域的流动特征时间远大于化学反应特征时间,即Da数远大于1,则将该物理空间区域划分为PFR反应器;否则划分为PSR反应器;其中,流动特征时间等于燃烧室积分尺度与燃烧室内速度脉动的比值;化学反应特征时间等于层流火焰厚度与层流火焰速度的比值。

[0040] 本实施例中,优选地,步骤三中对划分生成的化学反应器网络进行计算时还需用到步骤一中根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟后获得的温度、压力、体积、停留时间及反应器之间的质量、能量交换信息。

[0041] 本发明另一实施例提出一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法,如图1所示,该方法包括如下步骤:

[0042] 步骤一、通过三维燃烧数值模拟获得燃烧室典型工况下的速度、温度、组分、燃料浓度分布;

[0043] 根据本发明实施例,燃烧室运行的重要参数包括:压力、进口(来流)空气温度、进口(来流)空气流量、燃料流量、燃料温度、燃料组分。在本实施例中,燃烧室的压力可为1MPa,来流空气温度可为600K,来流空气流量可为2.273kg/s,燃料流量可为0.065kg/s,燃料温度可为300K,燃料组分可为甲烷。燃烧室的典型工况可以包括:30%负载工况、50%负载工况、80%负载工况、100%负载工况。

[0044] 三维燃烧数值模拟所用的模型包括湍流模型和燃烧模型,其中湍流模型采用基于雷诺时均假设的湍流模型;采用单步机理或简化机理时,燃烧模型采用有限速率/涡耗散模型或EDC(eddy dissipation concept,涡耗散概念)模型,采用详细机理时,燃烧模型采用FGM(flamelet generated manifold,小火焰生成簇)模型。燃烧室三维燃烧数值模拟结果可以包括燃烧室内的速度分布、流线、温度分布、各种组分的浓度分布。

[0045] 步骤二、根据燃烧室三维温度、燃料浓度分布的数值模拟结果,按照特定物理量的空间分布差异阈值,将燃烧室划分为由若干个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络;

[0046] 根据本发明实施例,可利用Energico软件对燃烧室空间区域进行离散化,在进行化学反应器网络离散过程中,设置燃料浓度差异阈值和温度差异阈值,一旦某区域内燃料

浓度或温度差异超过上述阈值,则将该区域离散为若干PSR(perfectly stirred reactor, 良搅拌反应器)或PFR(plug flow reactor, 平推流反应器),直至每一个PSR或PFR所代表的区域满足上述阈值要求。本实施例中,燃料浓度差异阈值范围为0.1%~5%,温度差异阈值范围为10~200K。

[0047] 进一步地,在离散化后,若某一区域流动特征时间远大于化学反应特征时间,即Da数(即 Damköhler 数—丹姆克尔数)远大于1,则该区域划分为PFR,否则划分为PSR。每一个反应器都与燃烧室的一个特定物理空间相对应。这里,流动特征时间计算方法为:流动特征时间=燃烧室积分尺度/燃烧室内的速度脉动;化学反应特征时间计算方法为:化学反应特征时间=层流火焰厚度/层流火焰速度;Da数计算方法为:Da数=流动特征时间/化学反应特征时间。

[0048] 在PSR反应器中,所有反应物均匀混合,并在恒定的温度条件下发生化学反应,其中,PSR反应器中的反应温度由三维燃烧数值模拟结果获得,反应持续时间为该PSR反应器所对应燃烧室物理空间的流线长度与速度的比值;在PFR反应器中,所有反应物均匀混合,并以特定的速度匀速流动,其中,PFR反应器的流动速度为PFR反应器所对应燃烧室物理空间的平均速度,PFR反应器的长度为PFR反应器所对应燃烧室物理空间的长度。

[0049] 所有反应器参数(包括温度、压力、体积、停留时间等)和反应器之间的质量、能量交换信息全部从三维数值模拟结果中获取;各个反应器直接的质量流量交换信息均由三维燃烧数值模拟结果中的速度分布、组分浓度分布直接获取。

[0050] 步骤三、对所生成的化学反应器网络进行计算;

[0051] 根据本发明实施例,可利用Chemkin软件对所生成的化学反应器网络进行计算,并可针对压力、燃料组分和进口空气或燃料的温度、流量、分级比等参数进行参数化敏感性分析。

[0052] 步骤四、选取燃烧室的部分实验数据或基于EDC燃烧模型耦合详细反应机理的数值模拟结果作为验证参数,验证本发明对污染物排放的计算精度,若不满足计算精度要求则缩小特定物理量的空间分布差异阈值重新进行化学反应器网络离散;

[0053] 根据本发明实施例,预测值和实验值误差需小于10%。若误差大于10%,则缩小燃料浓度差异阈值和温度差异阈值,直至满足误差小于10%的要求。

[0054] 进一步通过实验验证本发明的技术效果。

[0055] 实验首先在三维燃烧数值模拟工作中对燃烧室的计算域进行网格划分,将生成的计算域网格输入到三维燃烧数值模拟求解程序;在三维燃烧数值模拟程序中,输入燃烧室运行的重要参数,选取湍流模型为Realizable  $k-\epsilon$  (可实现 $k-\epsilon$ )模型,燃烧模型为FGM(flamelet generated manifold,小火焰生成簇)燃烧模型,燃烧模型选取GRI-Mech 3.0机理,将燃烧室运行的重要参数作为数值模拟边界条件,进行数值计算,获得燃烧室三维燃烧数值模拟结果;然后,将燃烧室三维燃烧数值模拟结果输入至Energico软件;在Energico软件中,设定燃料误差阈值为5%,温度误差阈值为200K,对燃烧室进行化学反应器网络划分;然后,将所获得的反应器网络的所有信息作为输入参量输入至CHEMKIN软件,对反应器网络进行计算;判定预测值和实验值之间差异是否小于10%,若小于10%则完成化学反应器网络预测模型的构建,若大于10%则缩小上述燃料误差阈值和温度误差阈值,直至误差小于10%。

[0056] 按照上述步骤,该燃烧室可划分为由19个PSR反应器组成的化学反应器网络,反应器网络图见图4,各个反应器对应的燃烧室物理空间见图5,各个反应器之间的质量交换信息见表1,表中的数字单位为%;各个反应器的温度、压力、反应时间参数见表2。

[0057] 表1

从 至	PSR 1	PSR 2	PSR 3	PSR 4	PSR 5	PSR 6	PSR 7	PSR 8	PSR 9	PSR 10	PSR 11	PSR 12	PSR 13	PSR 14	PSR 15	PSR 16	PSR 17	PSR 18	PSR 19
PSR 1	--	36.8	--	--	--	49.5	--	--	--	--	--	100	--	--	--	--	--	--	4.5
PSR 2	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1.2
PSR 3	--	--	--	--	2.3	--	--	--	--	--	--	--	7.2	9.6	0.3	66.4	--	--	--
PSR 4	--	22.6	0.1	--	--	--	95.5	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--
PSR 5	--	--	--	37.1	--	--	--	18	--	14.5	--	--	--	0.4	--	10.4	--	--	--
PSR 6	--	0.6	--	--	--	--	--	--	89.7	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--
PSR 7	0.5	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	1.8
PSR 8	--	--	1.4	--	--	--	--	--	--	--	--	--	32.7	--	--	--	6.4	--	1.2
PSR 9	0.5	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	36.3	--	--	--	--	3
PSR 10	--	--	1.9	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	32	--	--	--	5.7	--
PSR 11	9	--	96.6	--	--	--	--	8	--	1.9	--	--	23.4	21.7	--	22.7	0.4	0.7	--
PSR 12	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	6.7	--	--	--	95.4	--	--	--	71.4
PSR 13	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0.2	--	0.1	2.9
PSR 14	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	0.3	93.2	93.5	1	--
PSR 15	20.3	--	--	--	8.9	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--
PSR 16	69.7	40	--	62.9	--	50.5	4.5	--	10.3	--	--	--	--	--	2	--	--	--	0.1
PSR 17	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	79.9	--	--	--	--	--	--	--	5.3
PSR 18	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	7.6
PSR 19	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	2.3	--	--	--	--

[0059] 表2

	反应时间 (ms)	压力 (MPa)	反应温度 (K)
PSR 1	0.551	0.956	786.8
PSR 2	4.000	0.959	723.5
PSR 3	0.163	0.962	1293.1
PSR 4	4.000	0.959	977.4
PSR 5	0.670	0.958	1720.1
PSR 6	4.000	0.959	967.3
PSR 7	3.000	0.960	803.3
PSR 8	0.160	0.958	1303.7
PSR 9	3.000	0.960	802.4
PSR 10	0.179	0.958	1302.2
PSR 11	0.439	0.959	1503.1
PSR 12	0.666	0.965	599.3
PSR 13	0.333	0.958	1057.0
PSR 14	0.545	0.958	1056.3
PSR 15	2.000	0.959	1888.9
PSR 16	3.000	0.960	1049.2
PSR 17	8.000	1.007	603.4
PSR 18	1.000	1.009	603.5
PSR 19	27.000	1.010	600.1

[0062] 采用所得反应器网络对燃烧室氮氧化物排放进行预测,预测值为4.1ppm,化学反应器网络的预测误差小于10%。

[0063] 本发明另一实施例还提出一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测系统,该系统包括:

[0064] 三维模拟模块,其配置成根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟,获得燃烧

室物理空间区域内的温度分布、组分分布和燃料浓度分布；

[0065] 反应器网络划分模块，其配置成设置温度差异阈值和燃料浓度差异阈值，根据差异阈值对燃烧室物理空间区域进行离散化，以将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络；

[0066] 预测模块，其配置成对划分生成的化学反应器网络进行计算，获得各个反应器的组分浓度预测值和温度预测值；并利用实验数据验证划分生成的化学反应器网络对污染物排放的计算精度，设置误差阈值，若获得的各个反应器的组分浓度预测值与其对应的实验值的误差大于误差阈值，则减小温度差异阈值和燃料浓度差异阈值，重复划分生成化学反应器网络，直至组分浓度预测值与其对应的实验值的误差小于误差阈值，获得各个反应器的组分浓度作为最终的燃烧室污染物的排放预测值。

[0067] 本实施例中，优选地，三维模拟模块中燃烧室运行参数包括压力、进口空气温度、进口空气流量、燃料流量、燃料温度和燃料组分。

[0068] 本实施例中，优选地，三维模拟模块中三维燃烧数值模拟所用的模型包括湍流模型和燃烧模型；湍流模型为基于雷诺时均假设的湍流模型，燃烧模型包括有限速率/涡耗散模型、涡耗散概念模型或小火焰生成簇模型。

[0069] 本实施例中，优选地，反应器网络划分模块中将燃烧室划分为由多个PSR或PFR反应器组成的化学反应器网络的具体过程包括：当离散化后的物理空间区域的流动特征时间远大于化学反应特征时间，即Da数远大于1，则将该物理空间区域划分为PFR反应器；否则划分为PSR反应器；其中，流动特征时间等于燃烧室积分尺度与燃烧室内速度脉动的比值；化学反应特征时间等于层流火焰厚度与层流火焰速度的比值。

[0070] 本实施例中，优选地，预测模块中对划分生成的化学反应器网络进行计算时还需用到三维模拟模块中根据燃烧室运行参数进行三维燃烧数值模拟后获得的温度、压力、体积、停留时间及反应器之间的质量、能量交换信息。

[0071] 本发明实施例所述一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测系统的功能可以由前述一种基于化学反应器网络法的燃烧室污染物排放预测方法说明，因此本实施例未详述部分，可参见以上方法实施例，在此不再赘述。

[0072] 应当注意，尽管在上文详细描述中提及了若干单元、模块或子模块，但是这种划分仅仅是示例性的并非强制性的。实际上，根据本发明的实施方式，上文描述的两个或更多模块的特征和功能可以在一个模块中具体化。反之，上文描述的一个模块的特征和功能可以进一步划分为由多个模块来具体化。

[0073] 此外，尽管在附图中以特定顺序描述了本发明方法的操作，但是，这并非要求或者暗示必须按照该特定顺序来执行这些操作，或是必须执行全部所示的操作才能实现期望的结果。附加地或备选地，可以省略某些步骤，将多个步骤合并为一个步骤执行，和/或将一个步骤分解为多个步骤执行。

[0074] 虽然已经参考若干具体实施方式描述了本发明的精神和原理，但是应该理解，本发明并不限于所公开的具体实施方式，对各方面的划分也不意味着这些方面中的特征不能组合以进行受益，这种划分仅是为了表述的方便。本发明旨在涵盖所附权利要求的精神和范围内所包括的各种修改和等同布置。

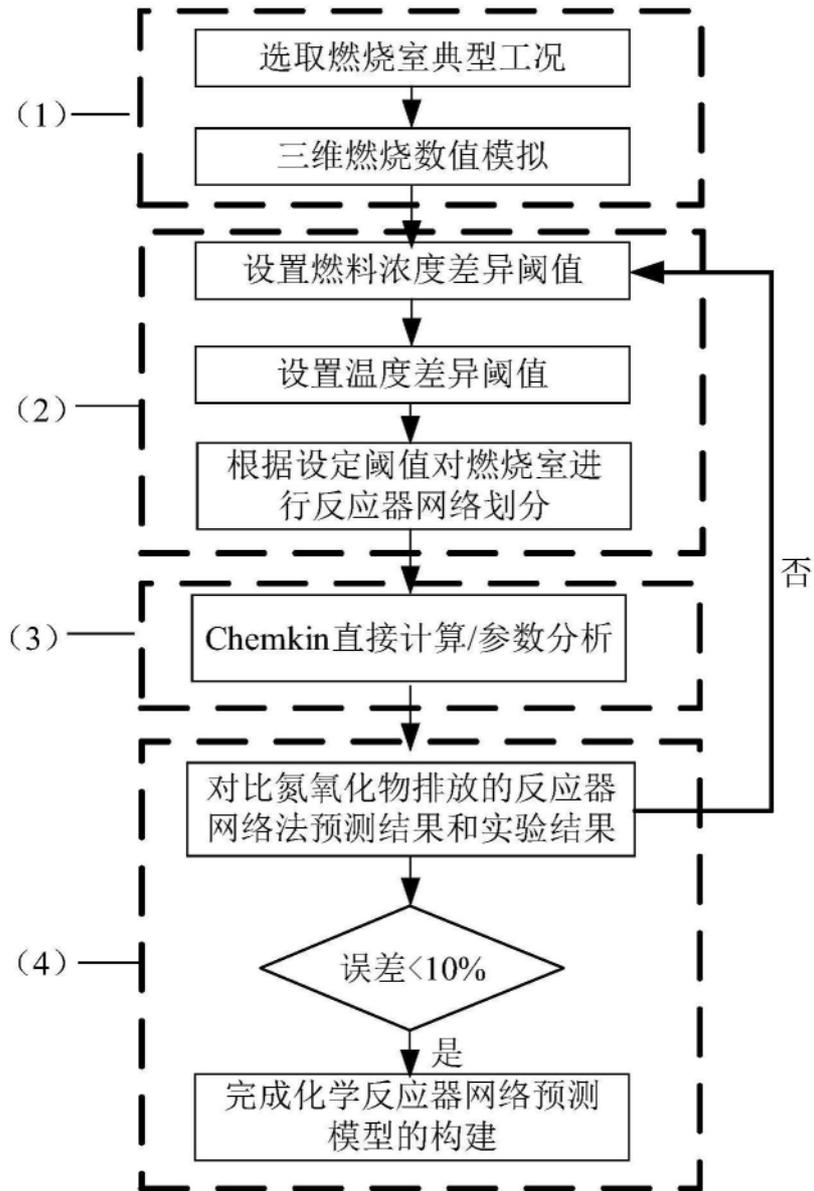


图1

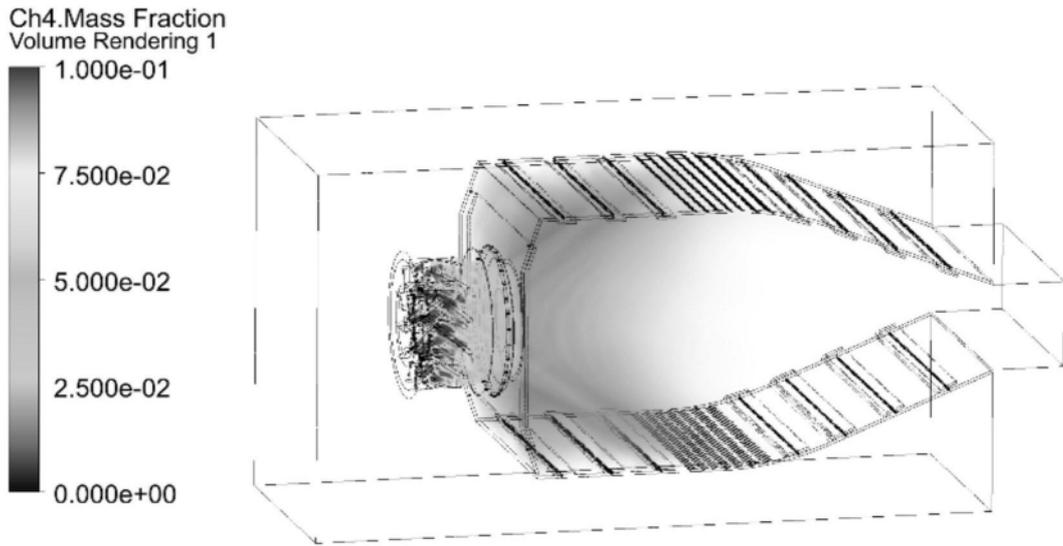


图2

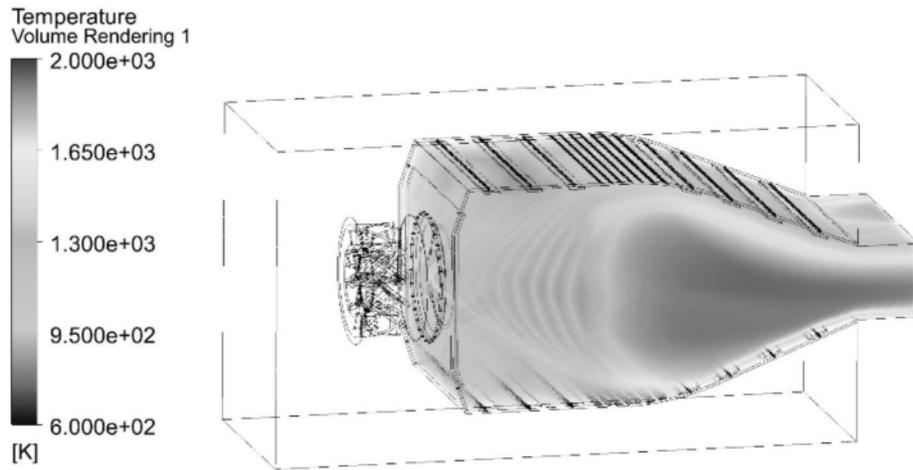


图3

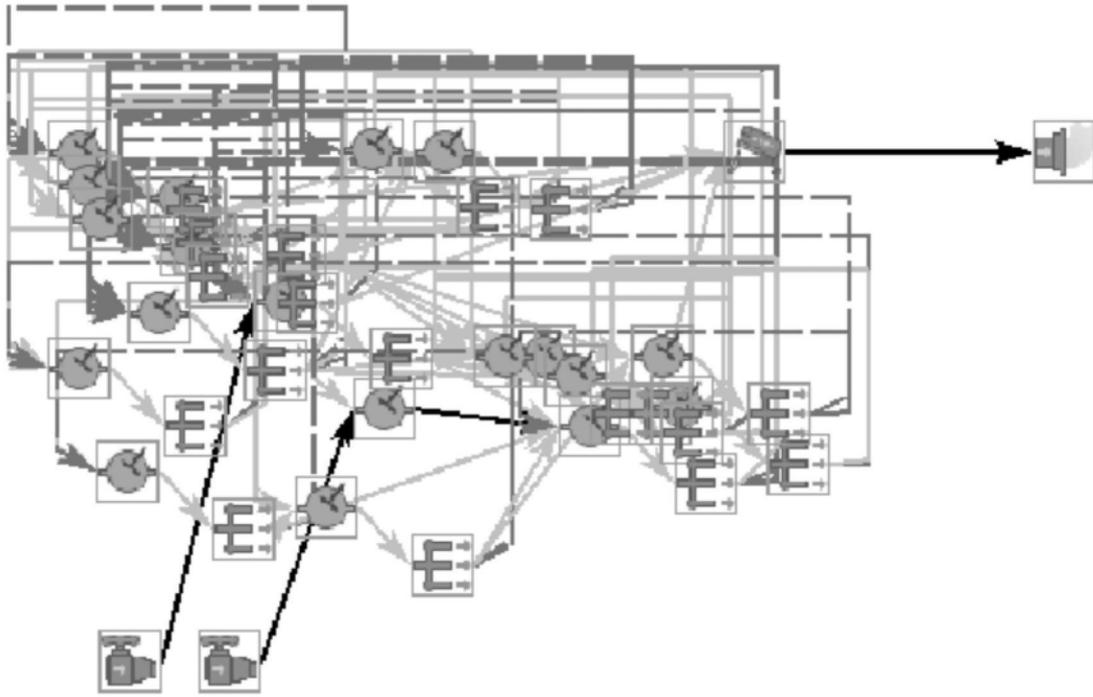


图4

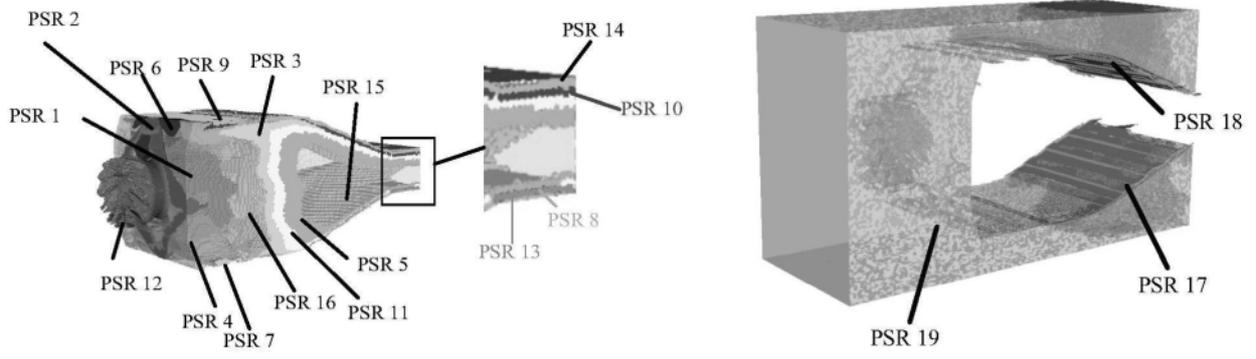


图5