

甲烷/空气同轴射流火焰反应热与 OH* /CH* 定量表征特性研究

张浪, 谭建国*, 刘瑶

国防科技大学空天科学学院, 湖南长沙 410073

摘要 激发态粒子是化学反应过程的天然示踪剂, 当前激发态粒子研究主要都是在一维简单火焰下进行。为了考察复杂情况下激发态分布对化学反应热的定量表征规律, 进行了甲烷/空气同轴射流扩散火焰的试验, 开展了甲烷/空气详细燃烧机理与激发态燃烧机理的同轴射流预混火焰和扩散火焰的数值模拟, 分析了 OH* 和 CH* 的分布特性, 研究了激发态对反应热的表征关系。结果表明: 通过试验 ICCD 相机和相应滤光片获取的 OH* 和 CH* 的化学发光图像和数值模拟中 OH* 和 CH* 摩尔分数分布的模拟结果吻合, OH* 分布主要分为三个燃烧区域, CH* 分布主要为两个燃烧区域。扩散火焰中 OH* 和 CH* 分布呈现单峰, 反应热呈现双峰现象, 反应热与激发态变化趋势相似, 达到第一峰值后激发态逐渐减小为零, 而反应热达到第一峰值后先降低再缓慢上升到第二峰值, 最后减小至零。扩散火焰中沿轴向方向, 当 $C_2H + O = CH^* + CO$ (R12) 反应速率达到峰值时, 反应热达到第一波峰; $H + O + M = OH^* + M$ (R2) 反应速率达到峰值时, 反应热达到第二波峰。预混火焰中随着局部当量比的增加, OH* 和 CH* 的摩尔分数明显增大, 分布区域更广; 反应热和激发态粒子 OH* 和 CH* 的分布趋势一样, 在激发态粒子 OH* 和 CH* 质量分数增大时, 反应热也增大, 当激发态粒子 OH* 和 CH* 的质量分数达到峰值的时候, 反应热也达到峰值; 沿轴向方向, OH* 和 CH* 的四个生成反应速率的峰值都在同一位置, 反应热也达到最大值, $CH + O_2 = OH^* + CO$ (R1) 和 $C_2H + O = CH^* + CO$ (R12) 反应速率相比 $H + O + M = OH^* + M$ (R2) 和 $C_2H + O_2 = CH^* + CO_2$ (R11) 反应速率更快。

关键词 激发态粒子; 反应热; 扩散火焰; 预混火焰

中图分类号: O433.5 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2020)06-1703-07

引言

反应热是燃烧诊断中标识反应区和监控燃烧状态的重要参数之一, 直接测量火焰的反应热一直很困难, 因此燃烧中反应热的分布成为研究的热点。化学反应中激发态自由基的电子能级跃迁产生的离散光谱辐射, 即化学发光^[1]。OH*, CH* 和 C* 等激发态自由基产生的化学发光可用来描述火焰结构、标识燃烧反应位置、氧燃当量比以及热释放率等信息^[2-3], 被广泛应用于火焰燃烧状态的在线诊断。Haber 最早提出 OH* 和 CH* 与化学发光特性与放热率之间的关系, 结果表明 OH* 能很好的标识反应热。Panoutsos 等^[4]对比了 8 种不同的激发态反应模型, 分析了对冲火焰中激发态粒子 OH* 和 CH* 与燃烧特性之间的关系, 结果表明 OH* 可以很好地标识放热区。曾科等^[5]研究了一维模型负压下 CH₄/Air 层流预混火焰, 结果表明富燃和贫燃情况下都是 OH* 最先

达到峰值。胡悦^[6]等研究了 OH* 与放热率之间的关系, 分析了 OH* 浓度最大值与反应热最大值之间的关系。

之前对激发态粒子的研究多为一维, 无法反映局部当量比的影响, 无法直观观察激发态粒子的分布特征, 当前的热点是二维或三维激发态研究。Allison^[7]等对二维燃烧进行了研究, 分析了火焰结构特点。何磊^[8]等对甲烷/氧气层流同轴射流扩散火焰进行了研究, 结果表明 OH* 的分布形态可以表明是富氧燃烧还是贫氧燃烧。Kojina^[9]对二维层流预混火焰进行研究, 分析了激发态粒子的分布特性。He 等^[10]研究了扩散火焰中 OH* 化学发光与反应热的关系。

以上研究仅针对 H₂ 的火焰, 或者仅研究 OH* 分布, 实际上 CH* 分布也具有重要意义。本工作以甲烷/空气作为研究对象, 在自适应建表 (ISAT) 加速燃烧的前提下, 基于 GRI Mech 3.0 详细燃烧机理结合 OH* 和 CH* 生成与淬灭化学反应机理, 对火焰中 OH* 和 CH* 的二维分布以及反应热进行研究, 探讨其分布特性及激发态粒子与反应热之间的关

收稿日期: 2019-05-27, 修订日期: 2019-09-16

基金项目: 国家自然科学基金项目 (91441121) 资助

作者简介: 张浪, 女, 1989 年生, 国防科技大学空天科学学院工程师 e-mail: 383795240@qq.com

* 通讯联系人 e-mail: jianguantan@nudt.edu.cn

系。

1 数值计算方法和试验设置

1.1 数值计算方法

选用 Fluent 进行数值模拟计算, 燃烧模型选用有限速率/涡耗散模型, 化学反应及燃烧模型中守恒方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (1)$$

式(1)中, ρ 为密度, Y_i 是组分 i 的质量分数, \vec{v} 为速度, J_i 为物质 i 的扩散通量, R_i 是化学反应中组分 i 的净产生速率, S_i 为源项。

J_i 由浓度梯度产生, 可由式(2)计算得到

$$J_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i \quad (2)$$

式(2)中, $D_{i,m}$ 是混合物中物质 i 的扩散系数。多个化学反应的组分 i 的净生成速率由式(3)得到

$$R_i = M_{w,i} \sum_{r=1}^{N_R} \hat{R}_{i,r} \quad (3)$$

式(3)中, $M_{w,i}$ 是组分 i 的分子量, $\hat{R}_{i,r}$ 是组分 i 在反应 r 中产生/分解 Arrhenius 摩尔速度。

1.2 化学反应机理

以甲烷/空气同轴射流燃烧为研究对象, 为准确模拟甲烷的燃烧过程, 考察了包含激发态粒子反应在内的多组分甲烷燃烧机理。基态粒子化学反应模型采用 GRI-Mech3.0 机理, 共包含 53 个组分, 325 个基元反应, 完整地描述了基态粒子的产生与消耗。

表 1 OH^{*}/CH^{*} 自由基化学反应动力学参数

Table 1 Kinetics parameters of OH^{*} and CH^{*} radicals reaction

No.	Reaction	Ref.
R1	CH+O ₂ →CO+OH [*]	[11]
R2	H+O+M→OH [*] +M	[12]
R3	OH [*] →OH	[13]
R4	OH [*] +N ₂ →OH+N ₂	[13]
R5	OH [*] +O ₂ →OH+O ₂	[13]
R6	OH [*] +H ₂ O→OH+H ₂ O	[13]
R7	OH [*] +H ₂ →OH+H ₂	[13]
R8	OH [*] +CO ₂ →OH+CO ₂	[13]
R9	OH [*] +CO→OH+CO	[13]
R10	OH [*] +CH ₄ →OH+CH ₄	[13]
R11	C ₂ H+O ₂ →CO ₂ +CH [*]	[13]
R12	C ₂ H+O→CO+CH [*]	[13]
R13	CH [*] →CH	[13]
R14	CH [*] +N ₂ →CH+N ₂	[13]
R15	CH [*] +O ₂ →CH+O ₂	[13]
R16	CH [*] +H ₂ O→CH+H ₂ O	[13]
R17	CH [*] +H ₂ →CH+H ₂	[13]
R18	CH [*] +CO ₂ →CH+CO ₂	[13]
R19	CH [*] +CO→CH+CO	[13]
R20	CH [*] +CH ₄ →CH+CH ₄	[13]

探究 OH^{*} 和 CH^{*} 在燃烧中的分布特性以及与反应热的关系, 因此燃烧机理中还需考虑 OH^{*} 和 CH^{*} 的生成与淬灭, 详细机理如表 1 所示。综合基态与激发态的组分及反应, 最后得到 37 个组分, 237 个反应步的详细化学机理。

表 2 扩散火焰工况

Table 2 Diffusion flame conditions

工况	$v_{CH_4}/(m \cdot s^{-1})$	$v_{air}/(m \cdot s^{-1})$
1	1	1
2	1	0.4
3	1	0.12

表 3 预混火焰工况

Table 3 Premix flame conditions

工况	$v_{pre}/(m \cdot s^{-1})$	$v_{air}/(m \cdot s^{-1})$	局部当量比 ϕ
1	1	0.2	1.0
2	1	0.2	1.2
3	1	0.2	1.6

1.3 计算工况和边界条件

以实验室采用的同轴燃烧器作为数值计算的对象, 如图 1 所示, 火焰为对称性结构, 选取 1/2 截面进行数模计算, 计算区域沿轴向长度为 100 mm, 沿径向总长为 25 mm, 中心燃料出口为 1 mm, 空气出口 2 mm, 燃料和空气之间的壁厚 2 mm, 且向上延伸 5 mm, 具体二维计算区域如图 2 所示, 对表 2 和表 3 的工况进行数值模拟。

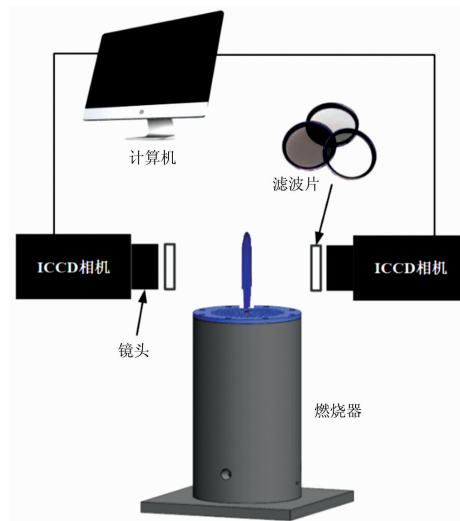


图 1 化学发光测量系统

Fig. 1 Chemiluminesces measurement system

燃料气体的进口边界条件为速度入口, 空气为压力入口, 底部右侧为壁面, 计算域的右边设置为壁面, 实验中采用玻璃罩, 左边界设置为对称轴, 上边界设置为压力出口边界条件, 操作压力为 101 325 Pa。为保证模拟的准确性, 所有网格均采用结构化网格, 网格质量均在 0.95 以上, 网格总数约为 62 万。

1.4 试验设置

同轴射流燃烧器是用于产生射流扩散火焰的一种典型燃烧器，结构简单，主要分为中心射流喷嘴和同轴射流喷嘴两

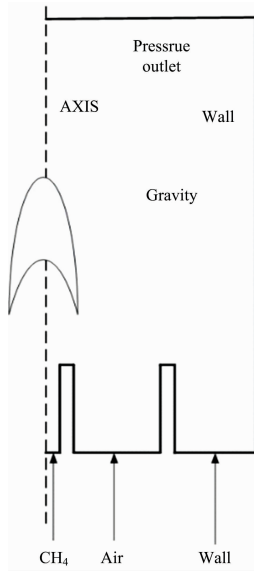


图 2 计算域示意图
Fig. 2 Calculate domain

部分，同样具有内外两个腔体，但由于内外分别通入燃料和氧化剂，不涉及混合，此处两个腔体只作为集气腔，保证喷嘴上游压力稳定。贴壁面安装隔网，在其中填充若干钢珠，防止回火，同时起到一定的整流作用，保证出口处的气流速度均匀分布。燃料由中心集气腔进入中心射流喷嘴，再从射流喷嘴出口流出，与同轴射流空气进行扩散燃烧。

由于化学发光十分微弱，因此必须使用 ICCD 相机采集发光信号；成像系统主要由 ICCD 相机、镜头、近摄镜、滤光片构成，相机可探测的波段为 190~1 080 nm，包含研究所需的 300~500 nm 波段，并且曝光时间、转换速率等参数均较好的满足试验需求。为拍摄不同激发态粒子化学发光的空

2 结果与讨论

2.1 与试验的对比

图 3 为扩散火焰工况 2 下 OH* 和 CH* 的二维分布实验

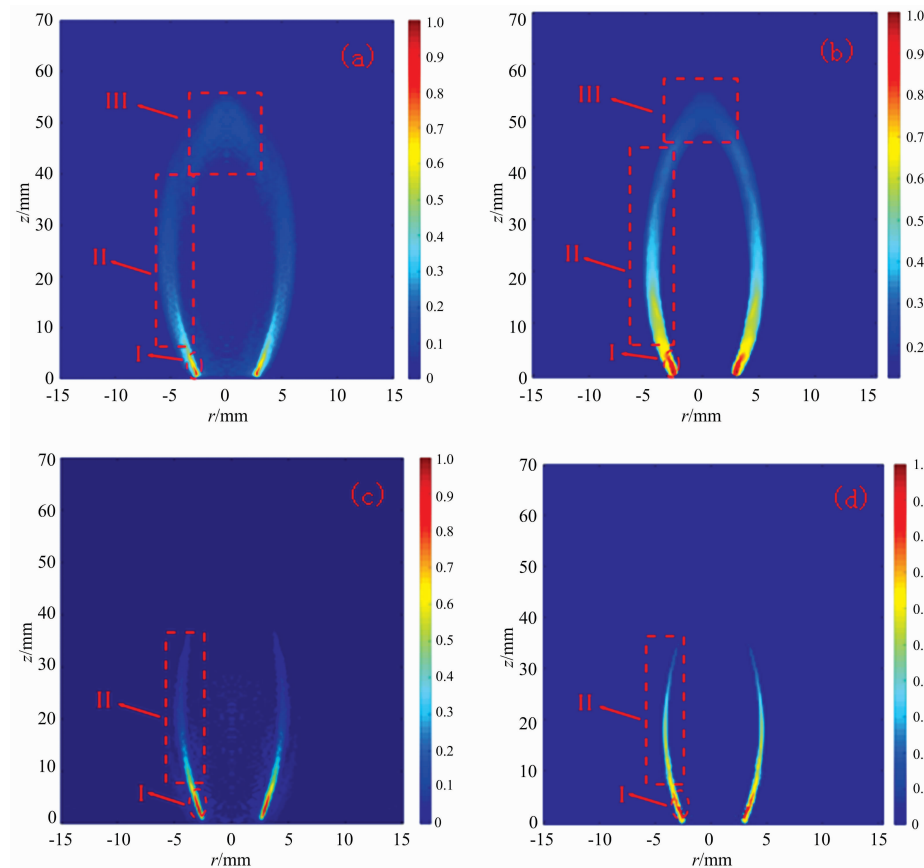


图 3 OH* 和 CH* 实验结果与模拟结果

(a): OH* 实验结果; (b): OH* 模拟结果; (c): CH* 实验结果; (d): CH* 模拟结果

Fig. 3 Distributions of OH* /CH* by measurement and computation

(a): Distribution of OH* by measurement; (b): Distribution of OH* by computation;

(c): Distribution of CH* by measurement; (d): Distribution of CH* by computation

结果和模拟结果的对比, (a)和(b)分别是 OH^* 摩尔质量分布的实验结果和模拟结果, (c)和(d)分别是 CH^* 摩尔质量分布的实验结果和模拟结果。从图中可以看出模拟结果与实验结果有相同的变化趋势以及很好的吻合性。 OH^* 分布主要分为三个燃烧区域, 离开喷嘴处摩尔质量最大的第一燃烧区, 然后向火焰下游延伸的第二燃烧区, 此区域范围较大, 第三燃烧区摩尔质量逐渐减小, 此区域范围较小。 CH^* 分布主要为两个燃烧区域, 离开喷嘴的第一燃烧区域摩尔质量最大, 然后向火焰下游扩散形成第二燃烧区。模拟结果得到摩尔分数稍大, 这是由于燃烧机理相对于实际燃烧有简化, OH^* 和 CH^* 的生成和淬灭略有偏差, 但该偏差对模拟结果影响较小, 可以认为本数值模拟能够准确地反映激发态粒子 OH^* 和 CH^* 的分布以及燃烧情况。

2.2 扩散火焰中激发态粒子对反应热表征

由图 4(a,b,c)中可以看出三种工况下中心 CH_4 速度不变, 逐渐增大空气流速时, 反应热和 OH^* 和 CH^* 的分布趋势一致, OH^* 和 CH^* 质量分数增大时, 反应热也增大, 当激发态粒子 OH^* 和 CH^* 的质量分数达到峰值的时候, 反应热也达到峰值。空气速度分别是 $0.12, 0.4$ 和 $1.0 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 时, 反应热的第一峰值和激发态粒子的峰值分别位于 $0.0031, 0.00275$ 和 0.0024 mm , 燃烧区域逐渐向中心轴移动, 由此可以看出 OH^* 和 CH^* 能标识反应热。

与激发态粒子分布特性不一样的是反应热呈现双峰现象。反应热第一峰值的变化与 OH^* 和 CH^* 相似, 随着燃烧反应的进行, 反应热迅速增加达到第一波峰, 随后迅速减小, 但减小到离开激发态粒子的反应区域后与 OH^* 和 CH^* 的分布不相同, OH^* 和 CH^* 是迅速减小到零, 但反应热产生拖尾现象, 释放热量逐渐增加到第二峰值后再缓慢减小。

反应热达到第一峰值后迅速减小, 然后出现第二个波峰后再逐渐减小为零, 为了解此现象将对化学反应速率进行分析。

图 5(a,b,c)为不同空气速度下反应热、 OH^* 、 CH^* 生成速率的轴向分布图, 从图中可知 CH_4 速度不变, 逐渐增大空气速度, 不同工况下反应热和激发态粒子 OH^* 和 CH^* 的生成速率分布趋势一样, 反应热存在第一峰值和第二峰值呈现双峰现象。

CH^* 的主要生成反应机理是 $\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 = \text{CH}^* + \text{CO}_2$ (R11) 和 $\text{C}_2\text{H} + \text{O} = \text{CH}^* + \text{CO}$ (R12)。离开喷嘴出口 CH_4 迅速反应生成 C_2H , 此时甲烷和空气接触区域内氧气含量高, 与 C_2H 反应生成 CH^* 。随着氧气参与反应后逐渐转变成游离氧, 在反应区域内游离氧的含量增加, 游离氧是 R12 的反应物, 因此反应速率增加, 此刻两者反应速率都达到最大, 释放的热最多, 反应热达到第一峰值。

OH^* 的主要生成反应机理是 $\text{CH} + \text{O}_2 = \text{OH}^* + \text{CO}$ (R1) 和 $\text{H} + \text{O} + \text{M} = \text{OH}^* + \text{M}$ (R2), 离开喷嘴后燃烧区域内氧气含量高, 但是 CH 含量很少, 因此 R1 反应速率很小。随着火焰不断向下游方向传播, 游离氢和游离氧的质量分数不断增加, 两者迅速结合反应生成 OH^* , 使 R2 的反应速率增加, 从而反应热增加, 达到第二波峰, 因此反应热呈现双峰现象。

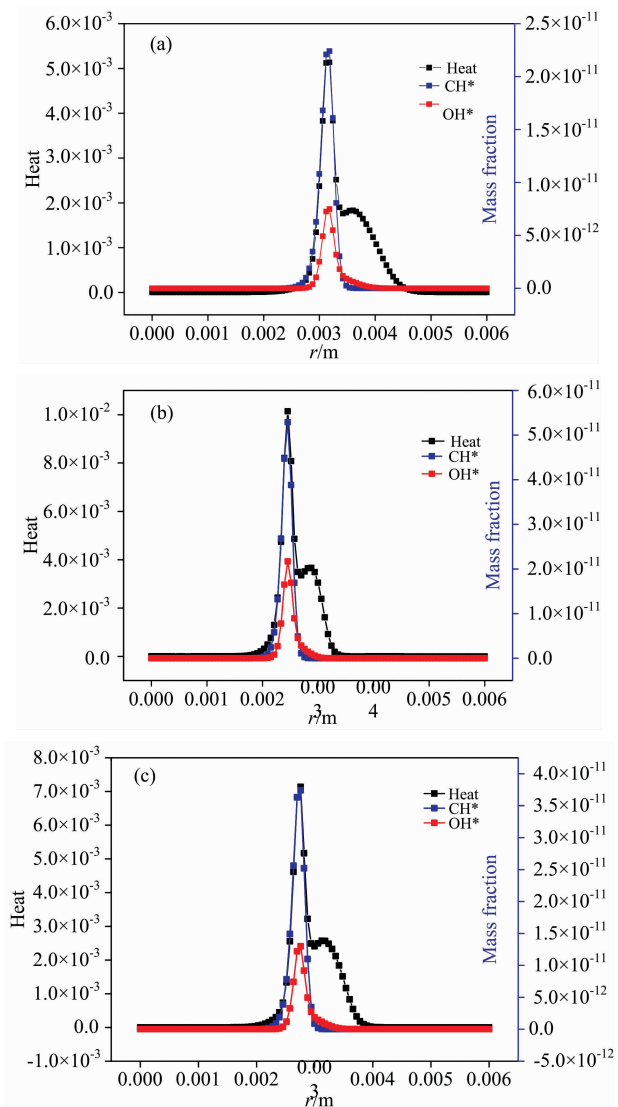


图 4 反应热与 OH^*/CH^* 质量分数径向分布图

(a): 空气速度 $0.12 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$; (b): 空气速度 $0.4 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$;
(c): 空气速度 $1.0 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

Fig. 4 Reaction heat and OH^*/CH^* mass fraction profiles along radius

(a): Air velocity $0.12 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$; (b): Air velocity $0.4 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$;
(c): Air velocity $1.0 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

2.3 预混火焰中激发态粒子对反应热的表征

从图 6(a,b,c)中可以看出, 在三种工况下中心预混气体和空气速度不变, 逐渐增大中心预混气体的当量比, 反应热和激发态粒子 OH^* 和 CH^* 的分布趋势一样, 在激发态粒子 OH^* 和 CH^* 质量分数增大时, 反应热也增大, 当激发态粒子 OH^* 和 CH^* 的质量分数达到峰值的时候, 反应热也达到峰值, 由此可以表明激发态粒子 OH^* 和 CH^* 能标识反应热。

图 7(a,b,c)为不同空气流速下反应热、 OH^*/CH^* 生成速率的轴向分布图, 从图中可见中心预混气体和空气速度不变, 逐渐增大中心预混气体的当量比, 反应热和激发态粒子

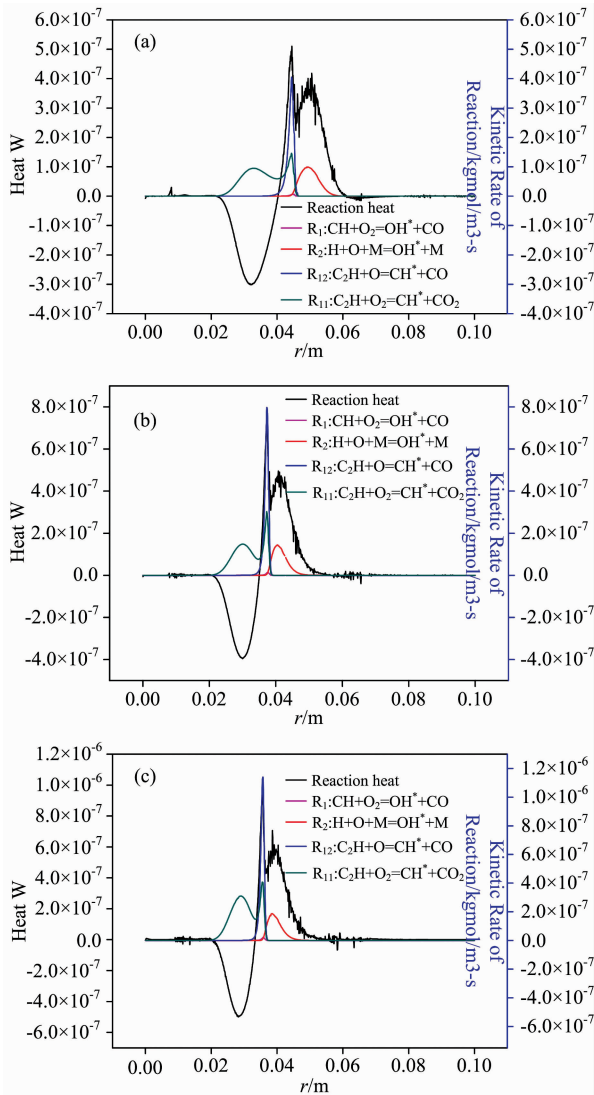


图 5 反应热与 OH⁺/CH⁺ 反应速率轴向分布图

(a): 空气速度 0.12 m · s⁻¹; (b): 空气速度 0.4 m · s⁻¹;
(c): 空气速度 1.0 m · s⁻¹

Fig. 5 Reaction heat and OH⁺/CH⁺ chemical reactionrateat profiles along axial

(a): Air velocity 0.12 m · s⁻¹; (b): Air velocity 0.4 m · s⁻¹;
(c): Air velocity 1.0 m · s⁻¹

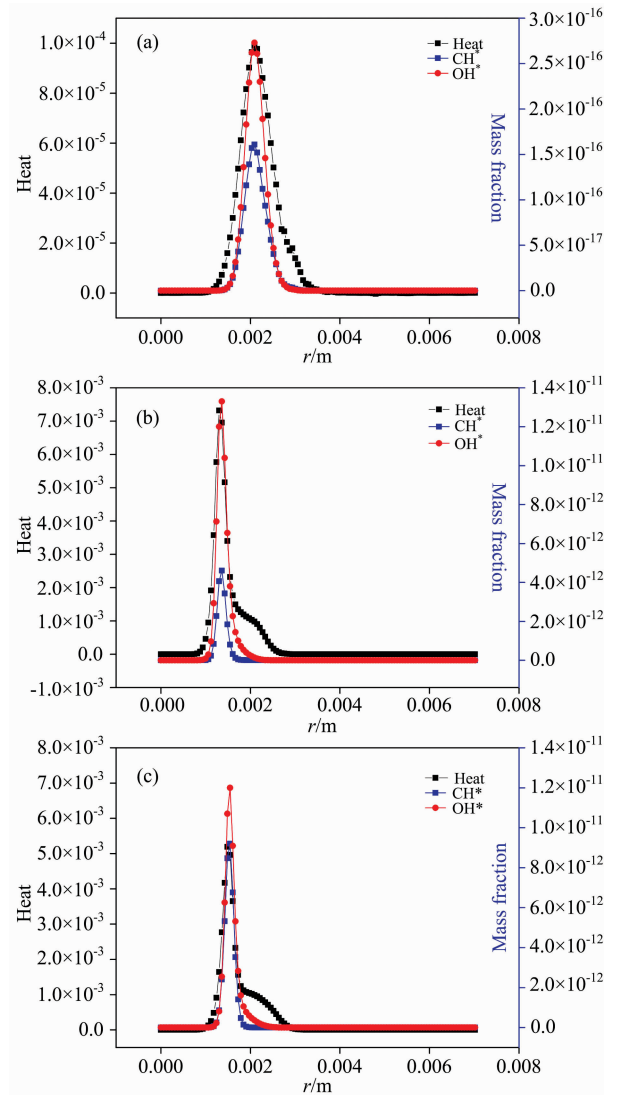
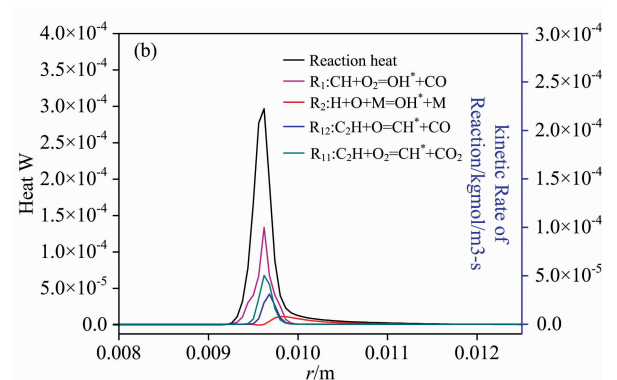
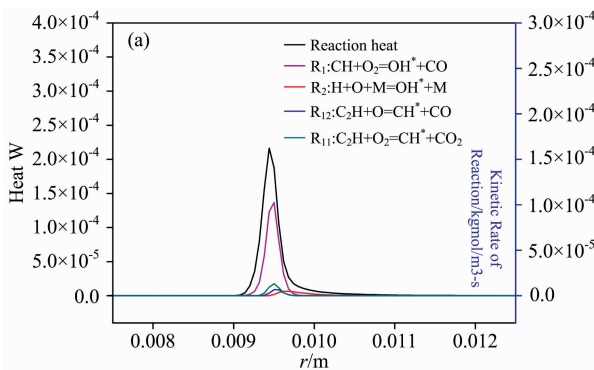


图 6 反应热与 OH⁺/CH⁺ 质量分数径向分布图

(a): 局部当量比 $\epsilon = 1.0$; (b): 局部当量比 $\epsilon = 1.2$;
(c): 局部当量比 $\epsilon = 1.4$

Fig. 6 Reaction heat and OH⁺/CH⁺ mass fraction profiles along radius

(a): Part equivalenc $\epsilon = 1.0$; (b): Part equivalenc $\epsilon = 1.2$;
(c): Part equivalenc $\epsilon = 1.4$



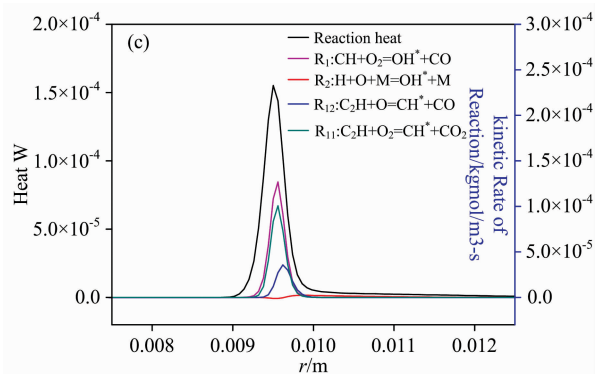


图 7 反应热与 OH^*/CH^* 反应速率径向分布图

(a): 空气速度 $0.12 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$; (b): 空气速度 $0.4 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$;
(c): 空气速度 $1.0 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

Fig. 7 Reaction heat and OH^*/CH^* chemical reaction rate profiles along radius

(a): Air velocity $0.12 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$; (b): Air velocity $0.4 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$;
(c): Air velocity $1.0 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$

OH^* 和 CH^* 的生成速率分布一样。当激发态粒子的反应速率达到最大值时，反应热也达到最大值。

本研究是模拟预混火焰燃烧，中心预混气体的当量比大于 1，因此 CH^* 的主要生成反应机理是 $\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 = \text{CH}^* + \text{CO}_2$ (R11)， OH^* 的主要生成反应机理是 $\text{CH} + \text{O}_2 = \text{OH}^* + \text{CO}$ (R1)。 $\text{H} + \text{O} + \text{M} = \text{OH}^* + \text{M}$ (R2) 和 $\text{C}_2\text{H} + \text{O} = \text{CH}^* + \text{CO}$ (R12) 的反应物为游离氧，反应速率较 R1 和 R11 的反应

速率小。激发态生成反应速率最大的位置也是在反应热最大的位置，由此可见在激发态粒子生成速率最大时，释放的热量最多， OH^* 和 CH^* 能标识反应热。

3 结 论

开展了包含激发态反应机理的甲烷/空气同轴射流预混火焰和扩散火焰的二维数值研究，结果表明：

(1) 在相同工况下激发态摩尔分数的数值模拟结果与试验结果吻合；

(2) 扩散火焰中 OH^* 和 CH^* 分布呈现单峰，反应热呈现双峰现象，反应热与激发态变化趋势相似，达到第一峰值后激发态逐渐减小为零，而反应热达到第一峰值后先减小再缓慢增加达到第二峰值，最后减小为零。

(3) 扩散火焰中，沿径向 OH^* 和 CH^* 的质量分数达到峰值时，反应热也达到第一峰值；沿轴向方向，当 $\text{C}_2\text{H} + \text{O} = \text{CH}^* + \text{CO}$ (R12) 反应速率达到峰值时，反应热达到第一波峰值， $\text{H} + \text{O} + \text{M} = \text{OH}^* + \text{M}$ (R2) 反应速率达到峰值时，反应热达到第二波峰；

(4) 预混火焰中，沿径向方向 OH^* 和 CH^* 的质量分数达到峰值时，反应热也达到峰值；沿轴向方向， OH^* 和 CH^* 的四个生成反应速率的峰值都在同一位置，反应热也达到最大值， $\text{CH} + \text{O}_2 = \text{OH}^* + \text{CO}$ (R1) 和 $\text{C}_2\text{H} + \text{O} = \text{CH}^* + \text{CO}$ (R12) 反应速率相比当 $\text{H} + \text{O} + \text{M} = \text{OH}^* + \text{M}$ (R2) 和 $\text{C}_2\text{H} + \text{O}_2 = \text{CH}^* + \text{CO}_2$ (R11) 反应速率更大。

References

- [1] Gaydon A G. The Spectroscopy of Flames. London: Chapman and Hall, 1974.
- [2] Luciano E, Ballester J. Combust. Flame, 2018, 194: 296.
- [3] Sung Y, Choi G. Fuel, 2016, 174: 76.
- [4] Panoutsos C S, Hardalupas Y. Combustion and Flame, 2009, 156(2): 273.
- [5] ZENG Ke, TAN Jian-guo, YUAN Jin-guo(曾科, 谭建国, 袁金国). Journal of Combustion Science and Technology(燃烧科学与技术), 2014, 20(1): 1.
- [6] HU Yue, TAN Jian-guo, LÜ Liang(胡悦, 谭建国, 吕良). Journal of Propulsion Technology(推进技术), 2018, 39(4): 835.
- [7] Allison P M, de Oliveira M, Giusti A, et al. Fuel, 2018, 230: 274.
- [8] HE Lei, GONG Yan, GUO Qing-hua, et al(何磊, 龚岩, 郭庆华, 等). Spectroscopy and Spectral Analysis(光谱学与光谱分析), 2018, 38(3): 685.
- [9] Kojima J, Yuji Ikeda. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2014, 140(1-2): 34.
- [10] HE Lei, GONG Yan, GUO Qing-hua, et al(何磊, 龚岩, 郭庆华, 等). Combustion and Flame, 2019, 201: 12.
- [11] Carl S A, Peeters J. The Journal of Physical Chemistry A, 2003, 107: 11001.
- [12] Smith G Park, Schneiderman J, Luque J. Combust. Flame, 2005, 141: 66.
- [13] Tamura M, Berg P A, Harrington J E. Harrington Combust. Flame, 1998, 114(3-4): 502.
- [14] HU Yue, TAN Jian-guo, LÜ Liang(胡悦, 谭建国, 吕良). Journal of Propulsion Technology(推进技术), 2019, 40(5): 1083.

Methane/Air Coaxial Jet Flame Reaction Heat and Quantitative Characterization of OH^{*}/CH^{*}

ZHANG Lang, TAN Jian-guo^{*}, LIU Yao

College of Aerospace Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China

Abstract Excited particle is a natural tracer of the chemical reaction process, but the research on the excited particle is mainly carried out under simple one-dimensional flame. In order to investigate the distributions excited state under complex conditions of chemical reaction heat quantitative characterization of rule, the methane/air coaxial jet diffusion flame test has carried out detailed ground state and excited of methane/air premixed flame burning mechanism of coaxial jet diffusion flamen and numerical simulation, analyzes the distribution characteristics of OH^{*} and CH^{*}, the excited state is studied on the relationship of the heat of reaction. The results showed that the chemiluminescence diagram of OH^{*} and CH^{*} obtained by ICCD camera and corresponding filter and the simulated results of the mole fraction distribution of OH^{*} and CH^{*} in the numerical were consistent. The OH^{*} distribution was mainly divided into three combustion regions, and the CH^{*} distribution was mainly divided into two combustion regions. The distribution of OH^{*} and CH^{*} in the diffusion flame presents a single peak, and the reaction heat presents a bimodal phenomenon. The changing trend of the reaction heat is similar to that of the excited state. After reaching the first peak, the exciter state gradually decreases to zero, while the reaction heat first decreases and then slowly increases to the second peak, and finally reduces to zero. In the diffusion flame, when the mass fraction of OH^{*} and CH^{*} in the radial direction reaches the peak, the heat of reaction also reaches the first peak. In the axial direction when the reaction rate of C₂H+O=CH^{*}+CO(R12) reaches the peak, the heat of reaction reaches the second peak. In premixed flames, with the increase of local equivalent ratio, the mass fraction of OH^{*} and CH^{*} increases obviously, and the distribution area is wide. When the mass fraction of OH^{*} and CH^{*} in the radial direction reaches the peak, the heat of reaction also reaches the peak. In the axial direction, the peaks of the four reactions rates of OH^{*} and CH^{*} are all in the same position, and the heat of reaction also reaches the maximum. The reaction rates of CH+O₂=OH^{*}+CO(R1) and C₂H+O=CH^{*}+CO(R12) are faster than that of H+O+M=OH^{*}+M(R2) and C₂H+O₂=CH^{*}+CO₂(R11).

Keywords Excited particle; Reaction heat; Diffusion flame; Premixed flame

(Received May 27, 2019; accepted Sep. 16, 2019)

* Corresponding author