

湍流射流扩散火焰的层流火焰面模拟^{*}

王海峰, 陈义良, 蔡晓丹, 李 艺

(中国科学技术大学 热科学和能源工程系, 安徽 合肥 230027)

摘 要: 采用双尺度 $k-\varepsilon$ 湍流模型, 标量联合的概率密度函数 (PDF) 输运方程和层流火焰面模型相结合, 模拟湍流射流扩散火焰。比较了几种不同 $k-\varepsilon$ 湍流模型对轴对称湍流射流速度场模拟的结果, 建立了混合物分数和湍流频率的联合 PDF 输运方程, 并假定湍流频率和标量频率的线性关系, 得到标量耗散率的概率分布, 化学组分的浓度和温度由层流火焰面系综的平均得到。计算结果与直接用化学反应动力学计算的结果及实验数据做了比较。

关键词: 湍流射流; 扩散火焰; 湍流燃烧; 概率密度函数; 层流火焰面模型

中图分类号: V231.2

文献标识码: A

文章编号: 1001-4055 (2003) 01-0058-05

Flamelet modeling of turbulent jet non-premixed flame

WANG Hai-feng, CHEN Yi-liang, CAI Xiao-dan, LI Yi

(Dept. of Thermal Science and Energy Engineering, Univ. of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

Abstract: A turbulent jet non-premixed flame was numerically simulated by the combination of a two-scale $k-\varepsilon$ turbulence model, the scalar joint PDF transport equation and the laminar flamelet model. The velocity field results calculated by several different $k-\varepsilon$ turbulence models were compared. The joint PDF equation of mixture fraction and turbulence frequency was derived. And with the assumption of linear relation between turbulence frequency and scalar frequency, the probability distribution of scalar dissipation rate was obtained. Consequently, the species concentration and temperature were computed according to the ensemble average of the laminar flamelets. The numerical results were compared with results from direct chemical reaction calculations and the experimental data.

Key words: Turbulence meter; Diffusion flame; Turbulence combustion; Probability density function; Laminar flamelet model

1 引 言

湍流燃烧模型应考虑实际化学反应动力学的影响。概率密度函数 (PDF) 输运方程的模型^[1,2] 因能精确模拟湍流输运和化学反应而成为国内外研究的一个重要方向。但该模型自变量数目很多, 计算时间比较长。传统的层流火焰面模型往往和统计矩方法相结合^[3], 假定混合物分数和标量耗散率的分布独立, 分别服从 β 分布和对数正态分布。这种方法需要作复杂的积分运算, 计算量仍然比较大。Haworth^[4] 求解了速度和混合物分数的联合 PDF 输运方程, 但标量耗散率的概率分布是假定的。本文首次利用 PDF 输运方程求解混合物分数和标量耗散率的联合概率分

布, 既可避免复杂的积分, 也可摒弃两者概率分布独立的假定, 使物理模型具有更强的理论依据。

为了使物理问题简单, 速度场的求解采用 $k-\varepsilon$ 湍流模型。将一个可以考虑湍流非平衡影响的双时间尺度 $k-\varepsilon$ 湍流模型^[6] 应用到有化学反应的湍流射流问题中, 并与标准 $k-\varepsilon$ 模型及其修正模型作了比较。

2 数学物理模型

2.1 双时间尺度 $k-\varepsilon$ 湍流模型

湍流模型多达百余种, 但没有一个能够同时很好的适用于不同的流动问题, 标准 $k-\varepsilon$ 湍流模型仅适用于平衡湍流中, 即湍流动能产生率 P_t , 湍流能量在湍流能谱空间的传递速率 ε_p 和湍流动能耗散率 ε 相

^{*} 收稿日期: 2002-01-14; 修订日期: 2002-03-21。基金项目: 973 课题 (G1999022207) 子课题和国家自然科学基金 (5006043)。

作者简介: 王海峰 (1977—), 男, 硕士生, 研究领域为湍流流动和燃烧的数值模拟。

等。Kim 双时间尺度 k - ε 湍流模型^[6]能考虑湍流非平衡的影响,将湍动能谱分成两区,小波数区湍流能为 k_p ,大波数区的湍流能为 k_t ,总的湍流能为 $k = k_p + k_t$,建立 k_p , k_t , ε_p , ε 的控制方程

$$\langle \rho \rangle \frac{Dk_p}{Dt} = \Delta \cdot \left[\frac{\mu_t}{\alpha_{k_p}} \Delta k_p \right] + \langle \rho \rangle \cdot (P_r - \varepsilon_p) \quad (1)$$

$$\langle \rho \rangle \frac{Dk_t}{Dt} = \Delta \cdot \left[\frac{\mu_t}{\alpha_{k_t}} \Delta k_t \right] + \langle \rho \rangle \cdot (\varepsilon_p - \varepsilon) \quad (2)$$

$$\langle \rho \rangle \frac{D\varepsilon_p}{Dt} = \Delta \cdot \left[\frac{\mu_t}{\alpha_{\varepsilon_p}} \Delta \varepsilon_p \right] + \langle \rho \rangle \cdot \left[\left| c_{p1} \frac{P_r}{\varepsilon_p} + c_{p2} \right| \cdot P_r - c_{p3} \cdot \varepsilon_p \right] \cdot \frac{\varepsilon_p}{k_p} \quad (3)$$

$$\langle \rho \rangle \frac{D\varepsilon}{Dt} = \Delta \cdot \left[\frac{\mu_t}{\alpha_{\varepsilon}} \Delta \varepsilon \right] + \langle \rho \rangle \cdot \left[\left| c_{t1} \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon} + c_{t2} \right| \cdot \varepsilon_p - c_{t3} \cdot \varepsilon \right] \cdot \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon} \quad (4)$$

湍流粘性系数 $\mu_t = c_\mu \langle \rho \rangle k^2 / \varepsilon_p$, 各种常数的取值为: $c_\mu = 0.09$, $\alpha_{k_p} = \alpha_{k_t} = 0.75$, $\alpha_{\varepsilon_p} = \alpha_{\varepsilon} = 1.15$, $c_{p1} = 0.21$, $c_{p2} = 1.24$, $c_{p3} = 1.84$, $c_{t1} = 0.29$, $c_{t2} = 1.28$, $c_{t3} = 1.66$ 。

2.2 层流火焰面方程和火焰面数据库

层流扩散火焰的组分和能量方程作 Crocco 坐标变换^[7],可以得到非稳态的层流扩散火焰面方程

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} = \rho \frac{x}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \omega_i \quad (5)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = \rho \frac{x}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \sum_{i=1}^n \frac{h_i}{C_p} \omega_i + \frac{1}{C_p} \frac{\partial p}{\partial \tau} \quad (6)$$

其中 Y_i 是组分 i 的质量分数, ω_i 是单位体积第 i 种组分的生成速率, Z 是称为混合物分数的独立变量

$$Z = \frac{\frac{2(Y_C - Y_{C,2})}{W_C} + \frac{(Y_H - Y_{H,2})}{2W_H} - \frac{(Y_O - Y_{O,2})}{W_O}}{\frac{2(Y_{C,1} - Y_{C,2})}{W_C} + \frac{(Y_{H,1} - Y_{H,2})}{2W_H} - \frac{(Y_{O,1} - Y_{O,2})}{W_O}} \quad (7)$$

其中 Y_C , Y_H , Y_O 分别是混合物中碳、氢和氧元素的质量分数,下标 1,2 分别代表燃料流和氧化剂流进口参数, W 是相对原子质量。 Z 始终位于 $[0, 1]$ 之间。

式(5), (6)中出现的参变量 x 是标量耗散率

$$x = 2D(\Delta Z)^2 \quad (8)$$

在 Z 空间中,火焰面方程不含对流项,垂直火焰面方向的扩散通过 x 描述。 x 表征了标量梯度,即湍流应变率对火焰面的影响。对稳态流动,一般采用层流对撞射流扩散火焰作为层流火焰面的模型,推出标量耗散率在其中的分布^[8]

$$x = f(Z) = \frac{a_s}{\pi} \exp[-2|\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)|^2] \quad (9)$$

其中 a_s 是火焰拉伸率, erfc^{-1} 是补余误差函数的反函数。当量条件下的标量耗散率 $x_{st} = f(Z_{st})$, 由此

$$x = x_{st} = f(Z)/f(Z_{st}) \quad (10)$$

这样 x_{st} 就可以作为一个独立参数引入到火焰面方程中,所有的标量 ϕ 都可以表示为

$$\phi = \phi(Z, x_{st}) \quad (11)$$

给定一系列标量耗散率,求解火焰面的方程(5), (6), 并将结果保存即可建立层流火焰面数据库。

2.3 混合物分数和湍流频率的联合 PDF 输运方程

湍流燃烧的层流火焰面模型的实质是将化学反应动力学和湍流运动之间强烈的耦合关系解耦。由式(11)可知,层流扩散火焰面仅依赖 Z 和 x_{st} 两个变量,在湍流火焰中, Z 和 x_{st} 是具有一定联合概率分布的随机变量,设联合概率密度函数为 $f(\xi, \theta)$, ξ 和 θ 分别是与随机变量 Z 和 x_{st} 对应的相空间坐标。湍流扩散火焰中的平均参数可由层流火焰面作统计得到

$$\phi = \iint \phi(\xi, \theta) f(\xi, \theta) d\xi d\theta \quad (12)$$

式中上标“~”表示密度加权平均。

在传统的作法中往往假定 Z 和 x_{st} 的分布独立,且分别服从 β 分布和对数正态分布^[3]。本文利用求解 PDF 输运方程的方法给出 $f(\xi, \theta)$ 。Pope 和 Chen^[9]假定流场中湍流动能耗散率 ε 满足对数正态分布,利用 Uhlenbeck-Ornstein 过程模拟均匀湍流中湍流耗散率的随机变化过程,得到了速度-耗散率的联合 PDF 输运方程。利用这一模型并根据 Pope 建立 PDF 输运方程的标准方法^[1],可以得到混合物分数 Z ——湍流频率 ω^* 的联合 PDF $g(\xi, \omega)$ 的输运方程

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle \frac{\partial g}{\partial t} + \langle \rho \rangle a_j \frac{\partial g}{\partial x_j} = & - \frac{\partial}{\partial x_j} (\langle \rho \rangle g \langle u_j'' | \xi, \theta \rangle) + \\ & \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\langle \rho \rangle g \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_q}{\partial x_j} \right| \xi, \omega \right] + \\ \langle \rho \rangle \omega^* \frac{\partial}{\partial \omega} \left[g \left(S_\omega + c_x \left| \ln \left| \frac{\omega}{\omega^*} \right| \right| - \frac{1}{2} \sigma^2 \right) \right] + \\ & c_x \omega^* \sigma^2 \frac{\partial^2 (g \omega)}{\partial \omega^2} \end{aligned} \quad (13)$$

其中右边第一项表示脉动速度引起的 $g(\xi, \omega)$ 在物理空间的输运,一般用梯度输运模型模拟^[12];第二项表示分子运动引起的 $g(\xi, \omega)$ 在相空间的输运,一般用 Curl 随机混合模型或 IEM 模型模拟^[11];第三项是平移项;第四项对应于 Weiner 过程。

在剪切湍流中,一般假定湍流脉动时间尺度和标量时间尺度呈线性关系,即

$$x_{st} = 2 \omega^* \cdot Z''^2 \quad (14)$$

将这一假定推广至瞬时量

$$x_{st} = 2 \omega^* \cdot Z''^2 \quad (15)$$

由方程(13)和(15)可以得到混合物分数和条件标量耗散率 x_{st} 的联合概率分布,从而由式(12)可以得到湍流扩散火焰中各种标量的统计平均值,所求解的问题到此得以封闭。

3 计算结果和分析

3.1 速度场的计算结果

以 Masri 等^[11] 的值班甲烷湍流射流扩散火焰 (Flame L) 的实验数据作为依据,验证数值模拟的可靠性,燃烧器的结构如图 1。

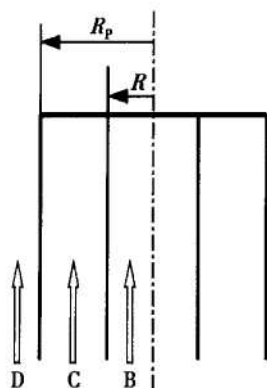


Fig. 1 Structure of the burner

Inlet stream are: (B) CH_4 at 298K, $Re = 2.0 \times 10^4$, $U_{in} = 41\text{m/s}$;

(C) Burnt products from stoichiometric mixture of C_2H_2 , H_2 and air,

2600K, $Re = 604$, $U_{in} = 24\text{m/s}$; (D) Coflowing air at 298K,

$Re = 10^6$, $U_{in} = 15\text{m/s}$

标准 $k-\epsilon$ 湍流模型计算轴对称射流时,射流的扩展角往往比实验值大 30% 左右^[5]。选择四种不同的模型: 标准的 $k-\epsilon$ 湍流模型^[2]; ④Chen 的双尺度 $k-\epsilon$ 湍流模型^[5]; ④Shih 的线性 $k-\epsilon$ 湍流模型^[12]; Kim 双时间尺度 $k-\epsilon$ 湍流模型^[6], 分别标记为 Model iv, Model ⑤, Model ④和 Model ⑥比较其预测结果。

图 2 为不同轴向位置平均速度和湍流动能沿径向的分布,小圆圈表示实验值,实线为 Model iv,虚线为 Model ⑤,点线为 Model ④点划线为 Model ⑥表示方法下同)。Chen 的双尺度模型(Model ⑤)模拟的湍流动能在不同 x 位置都过小,径向的湍流输运太弱,速度的径向梯度沿着轴向变化很小,射流的扩展

角偏小;标准 $k-\epsilon$ 模型(Model iv)和 Shih 的 $k-\epsilon$ 模型(Model ④)模拟的结果比较接近,湍流动能在 $x/D = 20, 30$ 的位置上比实验值稍微偏大,模拟的径向湍流输运偏强,射流的扩展角偏大;Kim 的双尺度模型介于两者之间,模拟的速度和湍流动能都和实验符合的较成功,射流的扩展角也非常接近实验值。

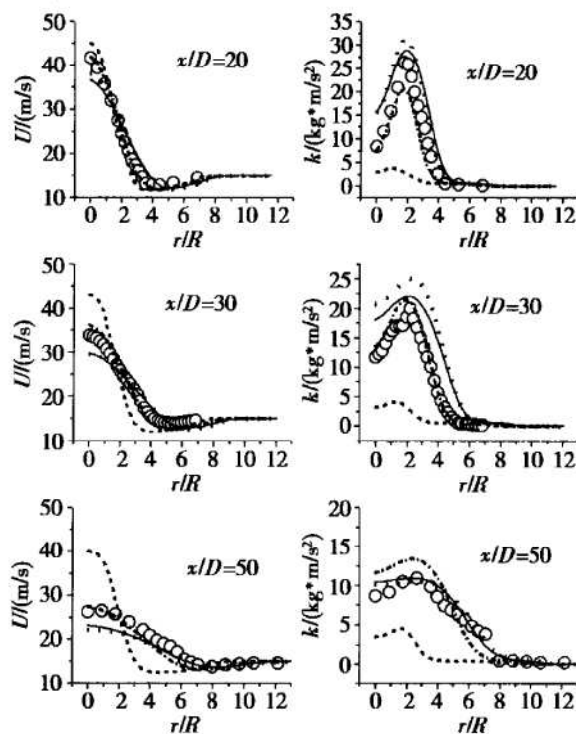


Fig. 2 Radial profiles of axial velocity and turbulent kinetic energy at different x positions

图 3 给出不同轴向位置上平均密度沿径向的分布曲线, Kim 双时间尺度模型模拟的密度值和实验值符合很好,优于其它三种湍流模型。

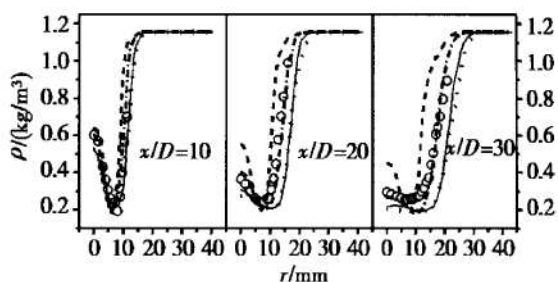


Fig. 3 Radial profiles of density at different x positions

图 4 给出了不同轴向位置平均混合物分数和混合物分数均方根沿径向的分布, Model ⑤模拟的混合物分数沿轴向的衰减过小,混合物分数均方根明显小于实验值; Model iv 和 Model ④模拟的结果相当,混合物分数在靠近轴线的位置与实验值符合的较好,但向外则比实验值偏大,模拟的混合物分数均方根和实验

比较接近; Kim 的双尺度模型在偏离轴线的位置, 和实验值吻合的非常好, 但在轴线附近明显大于实验值, 混合物分数均方根和实验符合较好。由于当量混合物分数 Z_{st} 是层流火焰面模型中一个非常重要的量, 它模拟的好坏直接影响标量场的结果, 在 Masri 等的湍流扩散火焰中, 当量混合物分数 $Z_{st} = 5.5 \times 10^{-2}$, 对应于射流的接近边缘处, Kim 双尺度湍流模型对 Z_{st} 相应的径向位置模拟得相当准确, 其它模型则偏离的比较远。基于上述分析, Kim 双时间尺度 $k-\epsilon$ 湍流模型对流场的模拟较其它三种模型有较明显的改善, 所得的结果也表明 Kim 模型用于有化学反应的湍流轴对称射流问题是令人满意的。

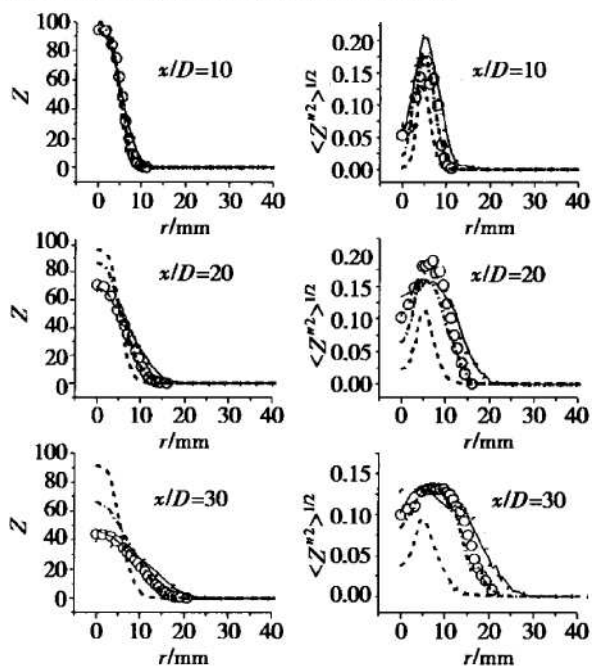


Fig. 4 Radial profiles of mean mixture fraction and its rms at different x positions

3.2 层流扩散火焰面的结构

通过一个层流扩散火焰面的计算说明火焰面的结构, 图 5 给出了甲烷层流扩散火焰中温度、主要组分的摩尔分数在混合物分数空间中的分布曲线, 直线表示计算值, 符号表示实验值^[10]。其中燃料流为 CH_4 和 N_2 的混合气, 体积比为 23: 77, 氧化剂为 O_2 和 N_2 的混合气, 体积比为 23: 77, 火焰面拉伸率 $a_s = 42\text{s}^{-1}$, 化学反应采用 Peters 的四步化学反应机理^[21]。当量混合物分数 $Z_{st} = 0.3$ 。由图 1, 在 $Z = Z_{st}$ 位置附近, 温度和产物的摩尔分数均达到最大值, 说明层流扩散火焰面的位置位于当量混合比附近。 $Z < Z_{st}$ 的区域 CH_4 摩尔分数为 0, 而 $Z > Z_{st}$ 的区域存在少量的 O_2 ,

说明 O_2 可以穿越火焰面进入燃料一侧, 而 CH_4 则不能。计算结果和实验数据符合得很好, 这一方面帮助我们正确地理解扩散火焰面的结构及其在混合物分数空间的分布, 另一方面也可以说明由此法建立的层流火焰面的数据库是合理的。

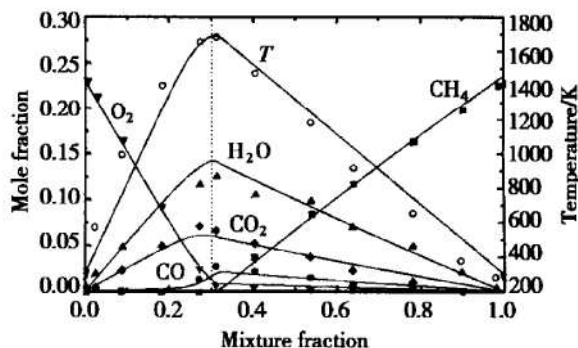


Fig. 5 Comparison between experimental and computed temperature and major species profiles in the mixture fraction coordinate

3.3 标量场的计算结果

采用 Peters 的甲烷四步氧化机理^[2] 建立层流火焰面数据库, 火焰面拉伸率 a_s 的范围取为 $1\text{s}^{-1} \sim 600\text{s}^{-1}$ (对应的条件标量耗散率 χ_{st} 为 $0.024\text{7s}^{-1} \sim 14.764\text{s}^{-1}$), 湍流模型选择 Kim 双时间尺度 $k-\epsilon$ 湍流模型。采用有限差分法和 Monte Carlo 相结合的方法^[1] 数值求解混合物分数和湍流频率的联合 PDF 输运方程, 首先对方程 (13) 中的空间导数项作显式差分离散, 然后将概率密度函数离散为一定数量颗粒的系综, 利用颗粒的交换、混合模拟混合物分数和标量耗散率联合 PDF 的输运过程, 组分浓度和温度由层流火焰面数据库查询得到, 这些标量的各阶统计矩由颗粒的系综平均得到, 每个节点上的颗粒数取为 1000。

为检验上述模型的效果, 直接用化学反应动力学计算组分和温度的方法模拟了同一物理问题, 建立所有待求标量 (组分 CH_4 , O_2 , CO_2 , H_2O , CO , H_2 , H 的质量分数和混合物焓) 的联合 PDF 输运方程, 利用化学反应动力学计算代替层流火焰面数据库的查询。

层流火焰面模型的计算时间为 37min 53s, 标量联合的 PDF 模型为 5h 3min 14s, 计算时间只有直接计算化学反应动力学的十分之一, 这一效果非常可观。

图 6 给出三个不同轴向位置组分 CH_4 , O_2 , CO , H_2O 的质量分数沿径向的分布, 图 7 给出了温度径向分布, 圆圈表示实验值, 实线表示火焰面模型的计算结果, 点线表示化学反应动力学的计算结果。两种方

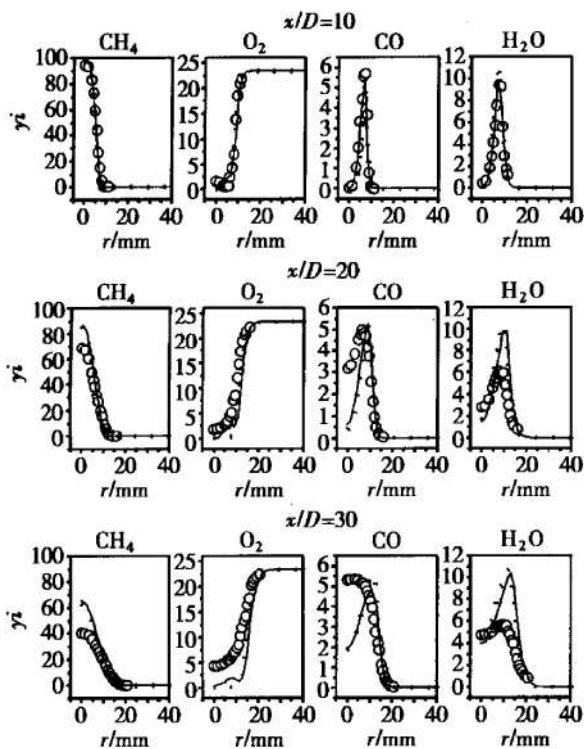


Fig. 6 Radial profiles of different compositions at different x positions

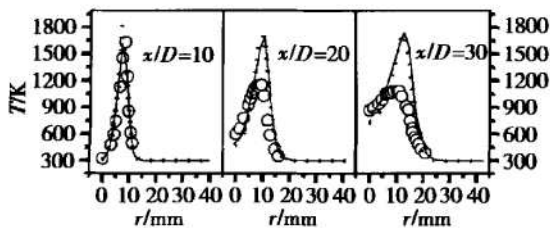


Fig. 7 Radial profiles of temperature at different x positions

法模拟的结果基本重合,说明层流火焰面模型在预计主要组分、中间产物和温度时几乎和标量联合的 PDF 模型具有相同的模拟精度,但是所用的计算时间却大大减少;在 $x/D=10$ 的位置处,数值模拟的结果都和实验相当吻合;在 $x/D=20, 30$ 的位置上,火焰面外侧模拟的结果和实验符合的较好,但在火焰面内侧靠近轴线附近模拟结果都和实验有一定偏离, H_2O 质量分数和温度模拟的最大值位置和实验一致,但幅值比实验偏大。这些偏差主要来源于模型误差,由于 PDF 输运方程仍存在模型的封闭问题,模型的引入必然会带来不可预知的误差,另外,计算中忽略了火焰辐射的影响,也会导致温度计算偏大。

4 结 论

本文通过一个层流扩散火焰面的计算,验证了火

焰面数据库的合理性;通过比较不同 $k-\epsilon$ 湍流模型对流动问题的预测结果,显示出 Kim 双时间 $k-\epsilon$ 湍流模型的优越性;通过层流火焰面模型和标量联合的 PDF 输运方程模型对同一个湍流射流扩散火焰的数值模拟结果,进一步表明层流火焰面模型在模拟湍流燃烧问题中的合理性,并可以较大幅度的节省计算时间,为在复杂湍流燃烧问题中推广应用提供了先决条件。

参考文献:

- [1] Pope S B. PDF methods for turbulent reactive flows[J]. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 1985, 11: 199~ 192.
- [2] 王海峰,陈义良,李 艺. 受限湍流射流扩散火焰的 PDF 模拟[J]. *计算物理*, 2002, (5).
- [3] Peters N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion[J]. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 1984, 10: 319~ 339.
- [4] Haworth D C, Drake M C, Blint R J. Stretched laminar flamelet modeling of a turbulent jet diffusion flame[J]. *Combust. Sci. & Tech.*, 1988, 60: 287~ 318.
- [5] 李 炜,槐文信. 浮力射流的理论及应用[M]. 北京: 科学出版社, 1997.
- [6] 蔡晓丹,陈义良. 双时间尺度湍流模型的应用[J]. *工程热物理学报*, 1994, 15(4): 387~ 390.
- [7] Peters N. Local quenching due to flame stretch and non-premixed turbulent combustion [J]. *Combust. Sci. & Tech.*, 1983, 30: 1~ 17.
- [8] Ladeinde F, Cai X D, Sekar B. Flamelet studies of reduced and detailed kinetics mechanisms for methane/air diffusion flames[A]. *Proceedings of IGTI ASME TURBO EXPRO 2000* [C]. May 8~ 11, 2000, Munich, Germany.
- [9] Pope S B, Chen Y L. The velocity-dissipation probability density function model for turbulent flows[J]. *Phys. Fluids A*, 1990, 2(8): 1437~ 1449.
- [10] Sung C J, Liu J B, Law C K. Structural response of counter-flow diffusion flames to strain rate variations[J]. *Combustion and Flame*, 1995, 102: 481~ 492.
- [11] Masri A R, Bilger R W. Turbulent nonpremixed flames of methane near extinction: mean structure from Raman measurement[J]. *Combustion and Flame*, 1988, 71: 245~ 266.
- [12] Tsarr Hsing Shih, Liou W W, Shabbir A, et al. A new $k-\epsilon$ eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows[J]. *Computers Fluids*, 1995, 24(3): 227~ 238.

(编辑:王居信)