基于不同 PDF 的超声速扩散燃烧火焰面模型对比^{*}

赵国焱,孙明波,吴锦水

(国防科技大学 高超声速冲压发动机技术重点实验室,湖南长沙 410073)

摘 要:为了研究混合分数概率密度函数对湍流扩散燃烧的影响,采用稳态火焰面模型描述超声速 扩散燃烧过程,分别采用β-PDF和δ-PDF方法对层流火焰面数据库积分得到两种湍流火焰面数据库, 并对比分析了湍流火焰面数据库。结合混合RANS/LES程序,利用DLR氢燃料超燃燃烧室算例进一步对 比验证采用不同PDF方法生成的湍流火焰面数据库。研究结果表明,混合分数β分布数据库中间组分 随混合分数方差变化大,采用混合分数β分布的算例计算结果脉动速度较大,与实验结果符合得更好。

关键词:超声速扩散燃烧;概率密度函数;湍流火焰面数据库 中图分类号:V435.12 文献标识码:A 文章编号:1001-4055(2015)02-0232-06 DOI: 10.13675/j. cnki. tjjs. 2015. 02. 010

Comparison of Supersonic Diffusion Combustion Flamelet Model Based on Different PDF

ZHAO Guo-yan, SUN Ming-bo, WU Jin-shui

(Science and Technology on Scramjet Lab, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: In order to study the effects of mixing fraction probability density function on the turbulent combustion, supersonic diffusion combustion was investigated based on steady flamelet model. Two turbulence flamelet databases obtained from ensemble averaging laminar flamelet database using β -PDF and δ -PDF, respectively, were compared. Furthermore, based on RANS/LES method, DLR (German Aerospace Center) hydrogen fueled scramjet combustor was intruduced to verify two different flamelet databases. It is found that intermediate component of the former database varies greater with variance of the mixture fraction. Compared with the δ – PDF, the fluctuating velocity of β –PDF is greater and it is in agreement with experimental results closely.

Key words: Supersonic diffusion combustion; PDF; Turbulence flamelet database

1 引 言

对超声速燃烧的研究是高超声速飞行的技术的 重要方面,依托飞速发展的计算机技术,数值模拟^[1] 成为研究超声速燃烧的重要方面,燃烧模型得到了 较好的发展。

在目前所发展的众多燃烧模型中^[2~4],火焰面模型^[5]受到广泛应用。在"火焰面模型假设"条件下,火焰面模型一定程度上实现了流体流动和化学反应之间的解耦,在计算量较少的情况下较好地预测各燃

烧现象。火焰面模型是从亚声速流动中发展而来, 如何才能适用于超声速燃烧,该问题得到了许多研 究。Zheng等^[6]首先扩展了不可压火焰面模型,将动 能改变引起的温度变化修正到温度计算中。Secundov等^[7]在Zheng等^[6]修正模型的基础上,建立了多个 压力状态的火焰面数据库,且进一步考虑了混合分 数脉动的速度条件矩修正。高振勋等^[8]通过分析火 焰面模型应用于超声速流动的物理基础,根据标量 能谱与湍动能能谱的相似原理在湍流能谱中引入膨 胀耗散率。范周琴等^[9,10]使用Oevermann^[11]等的方

 ^{*} 收稿日期: 2013-08-27;修订日期: 2014-01-11。
 基金项目: 霍英东教育基金; 全国优秀博士学位论文基金(91116001)。
 作者简介: 赵国焱(1990—), 男,硕士生,研究领域为高超声速推进技术。E-mail: 15574968697@163.com

233

法,直接舍弃了火焰面数据库中的温度,通过能量方 程隐式求解得到当地温度的方法解决火焰面模型应 用于超声速燃烧的问题。众多研究表明火焰面模型 可以较好地描述和预测超声速流动燃烧过程。

湍流火焰面数据库是对层流火焰面数据库做系 综平均得到,而该过程可以直接求解输运方程也可 以使用设定型概率密度函数。与许多文献[8,10, 12,13]相同,本文采用设定型概率密度函数方法。 常用的概率密度函数形式有:双δ函数分布^[14]和 β 函数分布^[5]。δ函数分布具有形式简单待定参数容 易确定,引入计算量小等性质,应用广泛。Pierce^[15,16] 等在设定型概率密度函数的火焰面模型研究中使用 了δ-PDF方法; Jimenez^[17], Wall和Moin^[18]使用 β -PDF方法对湍流扩散燃烧进行研究,证实了 β 函数 分布的良好性能。文献[8,10,13]使用 β -PDF方法 的火焰面模型开展了超声速湍流燃烧流动数值模拟 研究工作。总之,使用不同分布的预先假定PDF模 型得到的结果差异较大^[19]。

虽然火焰面模型中有许多 PDF 分布的研究,但 是对不同分布的概率密度函数比较研究还不多。更 没有将不同分布的 PDF 函数数据库应用到超声速湍 流燃烧算例中的研究。因此本文分别采用混合分数 β分布和混合分数δ分布的设定型概率密度函数模 型,对层流火焰面数据库进行系综平均得到用于 CFD 流场计算的湍流火焰面数据库,对比分析了不 同湍流火焰面数据库。并采用本课题组开发的二维 混合 RANS/LES 程序利用 DLR 氢燃料超燃燃烧室算 例对比验证采用不同 PDF 方法生成的湍流火焰面数 据库。

2 计算物理模型

采用 FlameMaster V3.9软件^[20]求解稳态火焰面 方程,然后编制成层流火焰面数据库。根据 Peters^[21] 的分析,火焰面方程中的非稳态项只有在某些情况 下才会比较大,故一般可忽略,这样火焰面数据库可 以表示为

$$\phi = \phi^{\text{steady}}(Z, \chi_{\text{st}}) \tag{1}$$

火焰面数据库以标量耗散率 χ_{st} 、混合分数Z和 混合分数方差 \widetilde{Z}^2 为索引参量。根据火焰面模型的 基本思想,将湍流流动和化学反应过程解耦分别计 算,湍流扩散火焰面数据库是由层流火焰面系综平 均得到的^[22],即

$$\tilde{\phi}(x_i) = \int_0^1 \int_0^\infty \phi(Z, \chi_{st}) \tilde{P}(Z, \chi_{st}; x_i) dZ d\chi_{st}$$
(2)

"~"代表密度加权平均。湍流火焰中的平均标 量值 $\hat{\phi}$,混合分数 Z 和标量耗散率 χ_{st} 的联合概率密 度函数 $P(Z,\chi_{st})$, $\phi(Z,\chi_{st})$ 是计算得到的层流火焰面 数据库中对应的标量值。本文采用 Oevernmann^[11]的 修正方法,即仅使用数据库中的组分质量分数,流场 中的温度由能量方程隐式求解得到。

假设混合分数与标量耗散率互相独立,则可以 用两个边缘概率密度函数的乘积来表示联合概率密 度函数 *P*(*Z*,χ_s)

$$P(Z,\chi_{\rm st}) = P(Z)P(\chi_{\rm st}) \tag{3}$$

采用简化 PDF 模型,即假定混合分数 PDF 为某 种确定的函数形式,来获得混合分数和标量耗散率 的 PDF,在实际应用中我们忽略标量耗散率 χ_{st}的脉 动,认为标量耗散率 χ_s 服从δ分布。

混合分数Z满足的 δ 函数分布

$$P(Z) = \delta(Z - \tilde{Z}) \tag{4}$$

混合分数 Ζ 满足的 β 函数分布

$$P(Z) = \frac{Z^{a^{-1}} (1-Z)^{b^{-1}}}{\int_0^1 Z^{a^{-1}} (1-Z)^{b^{-1}} dZ}$$
(5)

式中参数 a, b 分别为

$$a = \tilde{Z} \left[\frac{\tilde{Z} \left(1 - \tilde{Z} \right)}{\tilde{Z}^{2}} - 1 \right]$$
(6)

$$b = \left(1 - \tilde{Z}\right) \left[\frac{\tilde{Z}\left(1 - \tilde{Z}\right)}{\tilde{Z}^{2}} - 1\right]$$
(7)

$$\widetilde{Z}^{2} = C_{z} \Delta^{2} \nabla \widetilde{Z} \cdot \nabla \widetilde{Z}$$
(8)

式中 \widetilde{Z}^2 为混合分数方差, C_z 为模型参数且取 0.2, Δ 为网格过滤尺度。

标量耗散率 χ 满足的 δ 分布

$$P(\chi_{\rm st}) = \delta(\chi - \tilde{\chi}) \tag{9}$$

选取不同混合分数分布的形式,可得到湍流燃烧火焰中的化学热力学状态值 $\hat{\phi}$ 。按照一定准则将 $\hat{\phi}做成数据表,即可得到混合分数满足<math>\delta$ 和 β 分布 的湍流燃烧火焰面数据库。

3 数值比较

3.1 数据库比较

3.1.1 不同分布函数对数据库中间组分的影响混合 分数 β 分布是以标量耗散率、混合分数、混合分数方 差为索引参量的的三维数据库,混合分数δ分布是 以标量耗散率、混合分数为索引参量的二维数据 库。为了便于对比,选取特定的混合分数方差,横坐 标采用对数坐标。混合分数方差在混合分数 β 分布的数据库中等分成100份,图中 χ 代表标量耗散率, \widetilde{Z}^{2} 代表所取方差的份数。

参见式(6),式(7)混合分数方差 \widetilde{Z}^2 在分母上, 当其取值较大时 P(Z) 值较小,积分后曲线较为平 滑。从图1中可以明显看出,由于考虑了混合分数的 影响,在混合分数方差取较小值时 β 分布比 δ 分布 的 OH 基含量要多。随着 β 分布数据库中混合分数 方差取值增大,OH 基含量减少,但是在较大的混合 分数范围内都有 OH 基存在。



Fig. 1 The middle component comparison of β and δ database

3.1.2 不同分布函数对数据库主要组分和温度的 影响

图 2 分别是温度、摩尔质量、H₂O 质量分数随混 合分数的分布。从图 2 可以看出:

(1)混合分数 β 分布计算结果和混合分数 δ 分布计算结果的摩尔质量、温度及水几乎相同。对比图 1 和图 2 可以看出中间组分 OH 基含量较主要组分量级差别较大,因此不同 PDF 分布对主要组分和 温度没有太大影响。

(2)标量耗散率对温度有较大的影响。这是由 于湍流流动引起的标量耗散会使得火焰面发生扭 曲、变形,而这种扭曲和变形会消耗化学反应产生的 能量,由此导致火焰面温度降低。





Fig. 2 The staple component comparison of β and δ database

3.2 算例比较

基于课题组开发的二维混合 RANS/LES 程序^[23], 采用 DLR(德国宇航研究中心)支板算例^[11,24],对比验 证采用不同 PDF 方法生成的湍流火焰面数据库。采 用二维计算网格数约为 20 万,相关文献[11,24]中有 二维算例计算模型及来流条件的介绍。

图 3 给出了燃烧流场瞬时的数值阴影图和实验 阴影图,混合分数 β 分布计算结果相比混合分数 δ 分布计算结果更好地捕捉到了与实验一致的流场特 征,比如描述了激波的波动现象,尾部反应区厚度也 更加接近实验情况。

图 4 是算例燃烧流场瞬时 H₂O 分布图与混合分 数方差比较。从中可以看出,混合分数 β 分布计算 结果较混合分数 δ 分布计算结果有较大的差异,反 应区内可以看到较为细腻的湍流漩涡,尾部脉动因 素更加突出,能够看出偏离中心线的摆动趋势。对 照图 4(c)可以看出,在喷口附近混合分数方差数值 较大,对应于图 1 混合分数 β 分布数据库中 OH 基比 混合分数 δ 分布数据库 OH 质量分数少;但是在尾部 区域,混合分数方差数值较小,OH 基含量较多,所以 在图(a)中充分展现出了脉动特性。对比图 4(a),4 (b)采用混合分数 β 分布数据库算例中生成的 H₂O 含量多,证实在流场区域中混合分数方差都比较 小。以上验证了文献[13]得出的结论,OH 基质量分 数反映了化学反应进行的剧烈程度。因此,由于考虑了混合分数方差,使得流场的脉动现象凸显,并且预测生成H₂O含量也有所不同。



(a) The mixture fraction β distribution numerical shadow



(b) The mixture fraction δ distribution numerical shadow



(c) Experimental shadow

Fig. 3 DLR example pictures of combustion flow field in shadow





图 5 是算例经过了 16 个通流时间的燃烧流场时 均分布图。可以看出混合分数 β 分布计算结果由于 尾部区域的脉动影响,时均分布的反应区更厚。



Fig. 5 DLR example mass fraction pictures of time average distribution of H₂O cases

图 6~图 8给出了燃烧流场不同位置的各个量的 时均分布,第一条曲线代表混合分数 β分布,第二条 曲线代表混合分数 δ分布,间断点代表实验值。

图 6 给出了时均速度在燃烧流场不同位置分布, 在两侧未反应区,时均速度值 u 与实验测量值符合较 好,两种数据库应用在冷流区域中不考虑化学反应 的影响仅考虑流体流动,因此模拟结果较好;在中间 反应区,将化学反应与流体流动解耦,两种方法预测 的时均速度值与实验值存在偏差,并且两种数据库 模拟结果差别也较大。在喷口附近(x=78mm处),两 种数据库计算结果均产生了回流且均未能较好地捕 捉到速度剖面的双峰分布;在x=125mm处,混合分数 β 分布计算结果数值上与实验测量值符合较好,而混 合分数 δ 分布计算结果低估了反应区速度;在x=207mm处,混合分数 β 分布计算结果和混合分数 δ 分布计算结果的反应区速度剖面都与实验相反,文 献[11]也得到了类似的结果。以上验证了混合分数 β 分布数据库在时均速度模拟中的良好性能。

图 7给出了燃烧流场不同位置的 u,v 方向时均脉 动速度分布。可以看出靠近中间的脉动速度大,而 且流向脉动速度比横向脉动速度大。在喷口附近, 混合分数 β 分布较混合分数 δ 分布计算结果的时均 脉动因素更加突出。对于流向脉动速度,两种 PDF 方法都捕捉到了双峰分布。在冷流区域,应用两种 数据库模拟结果均比实验值小,可能是由于数据库 容量较小,大量插值淹没了其中脉动的因素。而在 反应流区域中由于混合分数β分布数据库中考虑了 反应脉动性质的混合分数方差,混合分数β分布模 拟结果更加接近实验值。

图 8 给出了燃烧流场不同位置的时均温度分布。从图中可以看出,在 x=78mm处,由于燃料刚离 开喷口,燃料与空气之间在中心区域的混合不充分 导致燃烧不充分,流场温度呈现中心低,两侧高的分 布形态;向下游,燃料与空气之间的混合加快,混合 层增厚,燃烧区也从上下混合层逐渐向流场的整个 中心区域移动。在 *x*=125mm处混合分数β分布计算 结果错误地预测出了温度的双峰分布,原因可能是 考虑混合分数方差后产生的脉动因素的影响。可能 由于高估了化学反应速度,两种方法火焰面的温度 都被高估。采用不同概率密度分布的计算结果预测 的反应区宽度没有明显变化。总体上,混合分数β 分布计算结果较好。











Fig. 8 DLR example combustion flow field mean temperature distribution in different location

4 结 论

本文研究了基于不同 PDF 的湍流扩散火焰面模型,并且生成了用于 RANS/LES 计算的数据库。最后采用 DLR 支板算例对模型进行了计算验证,最后对比计算结果,得到如下结论:

(1)对比混合分数满足 β 分布的数据库和混合 分数满足 δ 分布的数据库, β 分布的数据库中 OH 基 含量多,并随混合分数方差有较大变化,并且由于中 间组分 OH 基含量较主要组分量级差别较大,因此不 同混合分数分布对主要组分和温度影响不大;

(2)混合分数 β 分布的流场时均速度计算结果 在某些地方与实验符合得好。混合分数 β 分布的计 算结果比混合分数 δ 分布的计算结果脉动速度大, 与实验结果符合得好。两种方法预测的时均温度分 布都高于实际温度。由于混合分数 β 分布相比混合 分数 δ 分布考虑了脉动影响,总体上混合分数 β 分 布计算结果更好。

参考文献:

- [1] 邢建文. 化学平衡假设和火焰面模型在超燃冲压发动机数值模拟中的应用 [D]. 绵阳:中国空气动力研究与发展中心, 2007.
- [2] 刘 奕,郭印诚,张会强,等.大涡模拟及其在湍流 燃烧中的应用[J].力学进展,2001,31(2):215-226.
- [3] 张会强,陈兴隆,周力行,等. 湍流燃烧数值模拟研究的综述[J]. 力学进展, 1999, 29 (4): 567-576.
- [4] Poinsot T, Veynante D. Theoretical and Nummerical Combustion[M]. USA: Edwards, 2005.
- [5] Peters N. Turbulent Combustion[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [6] Zheng L L, Bray K N C. The Application of New Combustion and Turbulence Models to H₂-Air Nonpremixed Supersonic Combustion [J]. Combustion and Flame, 1994, 99: 440-448.
- [7] Secundov A. Flamelet Model Application for Non-Premixed Turbulent Combustion [R]. NASA NONCCW-75, 1996.
- [8] 高振勋,李椿萱.适用于超声速湍流扩散燃烧流动的 火焰面模型[J].中国科学,2011,41(5):611-620.
- [9] Fan Z Q, Liu W D, Sun M B, et al. A Theoretical Analysis of Flamelet Model in Supersonic Turbulent Combustion [J]. Science China Technological Sciences, 2012: 193-200.
- [10] 范周琴, 孙明波, 刘卫东. 基于火焰面模型的超声速 燃烧混合 LES/RANS 模拟[J]. 推进技术 2011, 32

(2): 191-196 (FAN Zhou-qin, SUN Ming-bo, LIU Wei-dong. Hybrid LES /RANS Simulation of Supersonic Combustion Using Flamelet Model[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2011, 32 (2): 191-196.)

- [11] Oevermann M. Numerical Investigation of Turbulent Hydrogen Combustion in a Scramjet Using Flamelet Modeling[J]. Aerospace of Science and Technology, 2000, 4.
- [12] 杨金虎. 基于层流小火焰和 Beta-PDF 的预混燃烧模型[J]. 航空动力学报, 2012, 27: 1005-1014.
- [13] 陈 兵,张 岩,徐 旭. 基于火焰面模型的超声速 湍流燃烧数值模拟研究[J]. 推进技术, 2013, 34 (12): 1650-1658. (CHEN Bing, ZHANG Yan, XU Xu. Numerical Simulation of Supersonic Turbulent Combustion Flows Based on Flamelet Model[J]. Journal of Propulsion Technology, 2013, 34(12): 1650-1658.)
- [14] D B Spalding. Mathematical Models of Turbulent Flames; a Review[J]. Combustion Science and Technology, 1976, 13: 3-25.
- [15] Pierce C D, Moin P. Progress-Variable Approach for Large Eddy Simulation of Non-Premixed Turbulent Combustion [J]. Journal of Fluid Mechanics, 2004, 504: 73-97.
- [16] Pierce C D. Progress-Variable Approach for Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion [D]. Stanford: Stanford University, 2001.
- [17] Jimenez J, Linan A, Rogers M, et al. A Prior Testing of Subgrid Models for Chemically Reacting Non-Premixed Turbulent Shear Flows[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1997, (349): 149-171.
- Wall C, Boersma B J, Moin P. An Evaluation of the Assumed Beta Probability Density Function Subgrid-Scale Model for Large Eddy Simulation of Non-Premixed Turbulent Combustion with Heat Release [J]. *Physics of Fluids*, 2000, (12): 2522-2529.
- [19] Riechwlmann. D, Kato S, Fujimori T. Effect of Presumed PDF Selection on the Numerical Result for Turbulent Diffusion Flame[J]. JSME, 2002, 45(1): 108–111.
- [20] H P. Enteicklung Eines Programmpaketes zur Berechnung Eindimensionaler Flammen am Beispiel Einer Gegenstromdiffusions Flame [D]. Aachen: RWTH Aachen, 1993.
- [21] Peters N. Laminar Diffusion Flamelet Models in Nonpremixed Turbulent Combustion [J]. Energy and Combustion Science, 1984, 10.
- [22] 陆 阳. 燃烧计算中火焰面模型的研究[D]. 合肥:中 国科学技术大学, 2009.
- [23] 范周琴. 超声速湍流燃烧火焰面模型判别建模及应 用研究[D]. 长沙:国防科技大学, 2011.
- [24] 邢建文,乐嘉陵.火焰面模型在超燃冲压发动机数值 模拟中的应用[J].实验流体力学,2008,22(2):40-45. (编辑:朱立影)