

预混湍流燃烧 的 level-set 小火焰库方法研究

杨成仁, 侯凌云 傅维标
(清华大学工程力学系, 北京 100084)

摘要: 针对燃气涡轮发动机中贫燃预混预蒸发燃烧室, 考虑详细化学反应机理, 结合 Level-set 方法与小火焰模型模拟预混火焰, 计算了甲烷/空气贫燃预混燃烧的火焰面的位置, 并比较了在贫燃条件下各当量比的 NO 排放值, 计算与实验结果吻合较好。

关键词: 航空、航天推进系统; level-set; 小火焰库; 贫燃预混燃烧; 预混预蒸发燃烧室

中图分类号: V231.2

文献标识码: A

Level-Set Flamelet Modeling for Premixed Turbulent Combustion

YANG Cheng-ren, HOU Ling-yun, FU Wei-biao

(Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Modeling for a lean premixed pre-evaporating combustor is presented. A detailed chemical reaction is considered. Mean location of lean premixed methane/air turbulent flame is modeled by Level-set approach and flamelet model. Comparison of calculations with experimental data indicates that the level-set flamelet approach is able to predict the major properties of the mean turbulent flame.

Key words: aerospace propulsion system; Level-set; flamelet library;

Lean fuel premixed combustion; premixed pre-evaporating combustor

1 前言

目前工程上对于湍流燃烧的计算一般分为两大类: 大涡模拟 (LES) 和雷诺平均模拟 (RANS)。大涡模拟的大尺度涡直接计算, 小尺度涡建模, LES 优于 RANS 就在于大尺度涡直接计算, 但无论是这两种方法中的哪一类, 都无法直接模拟化学反应过程。因化学反应都发生在分子量级上, 这些尺度在 RANS 和 LES 中都未求解。故均需采用湍流燃烧模型来封闭流动方程。

对于湍流燃烧的模拟最多的是基于快速化学

反应模型, 假定化学反应速率大大超过物理扩散过程速率, 但在湍流中, 局部扩散时间尺度变化相当大, 当平均扩散时间尺度达到化学反应时间尺度, 将造成局部熄火, 此时快速化学反应模型已不能模拟此类的非平衡效果。因此, 快速化学反应模型不适用于慢速化学反应过程, 如污染物形成及着火熄火过程。为此, Peter 在对层流扩散火焰研究的基础上提出了湍流小火焰模型^[1], 此模型的主要思想是认为在湍流燃烧的反应区内, 有许多相互独立的反应微团 (小火焰), 尽管湍流会通过火焰的拉伸和卷曲影响小火焰的内部结构, 但这

些微团内部仍然保持层流火焰的结构,因此可建立微团内各物理量间的瞬时关系式。反应区的物理参量的时均值可以引入 PDF 由层流小火焰的统计平均求得。层流小火焰模型具有预报着火、灭火的能力,同时可以考虑详细化学反应动力学过程和分子输运过程。

在过去,小火焰模型主要成功应用在扩散燃烧^[2,3]和部分预混燃烧^[4],但较少应用在预混燃烧中,这是因为在预混燃烧中缺少象混合分数这样的守恒标量来描述平均火焰位置。Peters^[5]提出 level-set 方法,采用 G 方程来描述平均火焰位置。

本文将 level-set 方法与小火焰模型结合形成 level-set 小火焰方法,此方法无需对平均化学反应率建模,也不用求解组分输运方程,反应区的物理参量的时均值可以引入 PDF 由层流小火焰的统计平均求得,在小火焰库的计算中,引入详细化学反应机理。最后采用上述方法来计算贫燃预混预蒸发燃烧室中预混湍流燃烧火焰面及 NO_x 的生成。

2 数学模型

2.1 小火焰库生成

层流小火焰库由 CHEMKIN-III 软件包和 Sandia 与预混火焰程序 PREMIX 生成。PREMIX 可以对系统质量守恒、能量守恒以及组分守恒方程联立求解,模拟具有复杂化学反应的层流火焰,给出流动参数和组分浓度的分布。CHEMKIN-III 则提供了 PREMIX 计算所需的反应动力学,热力学和输运参数的输入文件。计算中采用自适应网格,求解方程组采用阻尼牛顿法,迭代过程的相对和绝对误差均不超过 10^{-6} 。

甲烷/空气燃烧的反应机理主要取自 GRI-MECH2.11,包括 49 种化学组分,279 个基元反应。

2.2 Level-set 方程

为了描述预混燃烧的火焰面,引入基于 G 方程的 level-set 方法。 G 是距离函数,代表流场中一点与层流小火焰的距离。 $G=0$ 定义为瞬态预混火焰前锋面的位置,它将整个流场划分为两个区域,其中 $G>0$ 代表已燃区域, $G<0$ 代表未燃区域。

采用 Farve 平均方法,将 G 分解为 $\tilde{G}$ 和 $\tilde{G}''$,分别代表离火焰面的平均距离以及火焰面厚度。湍流火焰前锋面的平均位置 $\tilde{G}$ 方程如下:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{G})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{v}\tilde{G}) =$$

$$\bar{\rho}S_T|\nabla\tilde{G}| - \bar{\rho}D_t\bar{\kappa}|\nabla\tilde{G}|$$

其中 $\bar{\kappa}$ 平均火焰面的曲率, D_t 是湍流扩散系数。

S_T 是湍流火焰速度,由下列关系式^[6]确定:

$$\frac{S_T}{S_L} = 1 + \tilde{\sigma}$$

其中:

$$\tilde{\sigma} = -\frac{0.39}{2} \frac{l_t}{l_F} + \sqrt{\left(\frac{0.39}{2} \frac{l_t}{l_F}\right)^2 + 4\left(\frac{0.39}{2} \frac{l_t}{l_F}\right) \frac{\nu'}{S_L}}$$

$$l_t = 0.37 \frac{\nu'^3}{\epsilon}$$

$$\nu' = \sqrt{\frac{2}{3} k}$$

式中: l_F 和 S_L 分别是层流火焰厚度和层流火焰速度, l_t 是湍流积分长度尺度, k 和 ϵ 分别是湍动能和湍能耗散率。

G 的脉动由下列经验关系式确定:

$$\sqrt{\tilde{G}''^2} = 1.78 l_t$$

当求解 $\tilde{G}$ 方程时, $\tilde{G}=0$ 会以一定速度移动,此时 $\tilde{G}$ 可能不再是一个距离函数(即 $|\nabla\tilde{G}| \neq 1$),在一些时间步长后, $\tilde{G}$ 会变得不规则,两条 $\tilde{G}$ 线会合并,其梯度变陡峭,从而易使程序发散或结果出现较大误差,因此为避免数值扩散,需要在每个时间步长后对 $\tilde{G}$ 重新初始化^[7],也就是数值求解方程 $\partial\tilde{G}/\partial t = 1 - |\nabla\tilde{G}|$,直至获得稳态解 $\partial\tilde{G}/\partial t = 0$ 。在重新初始化步骤中,平均火焰位置 $\tilde{G}=0$ 作为计算边界来处理,因此不会改变平均火焰位置。

2.3 简化 PDF 方法

为了描述预混火焰中的湍流平均参数,采用简化 PDF 方法。只要我们知道在位置 x 和时间 t 的 G 值,就可以构建 Farve 平均的高斯概率密度函数。

$$\tilde{P}(G, x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tilde{G}''^2}} \exp\left[-\frac{(G - \tilde{G})^2}{2\tilde{G}''^2}\right]$$

从已生成的小火焰库中,可得到瞬态的温度 T 、密度 ρ 、化学组分浓度 Y_i 。采用上述简化的 PDF 形式,可以得到它们的 Farve 平均值。

$$\tilde{T}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} T(G, t) \tilde{P}(G, x, t) dG$$

$$\bar{\rho}(x, t) = \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} [\rho(G, t)]^{-1} \tilde{P}(G, x, t) dG \right\}^{-1}$$

$$\tilde{Y}_i(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} Y_i(G, t) \tilde{P}(G, x, t) dG$$

3 数值方法

为求解 G 平均和脉动值守恒方程, 还需首先求解质量、动量、能量方程以及建立湍流模型。在 KIVA-3 程序中求解这些基本方程, 然后与 level-set 方法的 G 方程耦合, 调用预先生成好的层流小火焰数据库, 采用简化 PDF 方法求解平均参变量。

4 结果和讨论

4.1 结构与网格

以某燃气轮机上燃烧室的实验模型为算例, 采用图 1 所示的轴对称几何尺寸。整个计算区域分为四个部分, 第一部分为 LPP 管, 即贫燃燃料预混预蒸发管, 网格为 10×20 , 第二部分和第三部分为燃烧室, 网格分别为 10×35 和 10×20 , 第

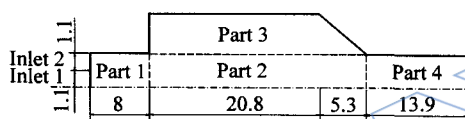


图 1 算例结构和尺寸(单位:cm)

Fig. 1 Computational domain and size (Unit:cm)

四部分为出口管, 网格为 25×35 。总的网格图如图 2 所示。

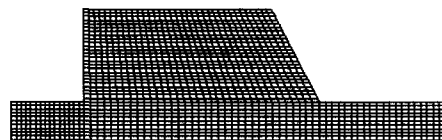


图 2 网格

Fig. 2 Grid

对于高压下有旋流的甲烷/空气贫燃预混燃烧入口条件为: $P=3$ MPa; $T=823$ K; $\Phi=0.5$, 速度入口条件为, 在入口 1 部分 $V_x=75$ m/s, $V_z=-1.6 \cdot z$ m/s, $V_r=0$ m/s, 在入口 2 部分 $V_x=75$ m/s, $V_z=-39.9$ m/s, $V_r=75$ m/s。固壁边界采用无速度滑移边界以及绝热条件。 G 场的初始化为 $\tilde{G}=G_0 \pm |x-x_0|$, 当 $x=x_0$ 时, $G=G_0=0$, 即假定某一截面为火焰前峰面。

采用上述燃烧条件, 可得到包括温度、密度、焓和 49 种化学组分浓度的层流小火焰库, 图 3 所示为温度随火焰距离 G 的平均值和脉动值变化的三维图。

4.2 结果与讨论

图 4 所示为速度矢量图, 由于在入口 2 处 $V_z=-39.9$ m/s, 速度方向斜指向轴。回流区出现在燃烧室的边壁以及火焰下流区域, 边壁处的回流是由于突扩结构导致, 另外由于火焰前锋面的出现, 热流导致气体膨胀使气流向 Z 方向流动, 在

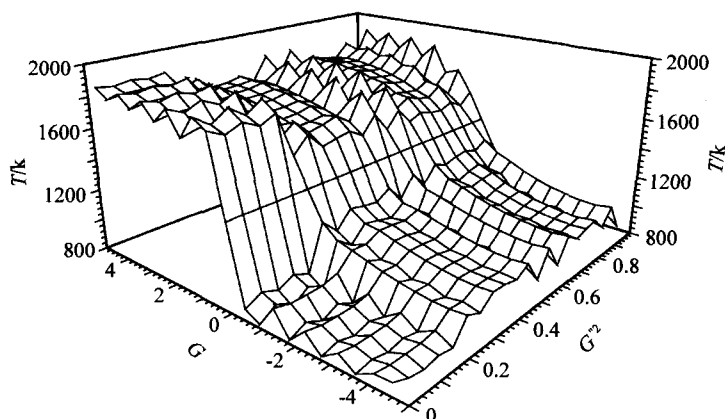


图 3 温度随 G 的平均和脉动值的变化 ($\Phi=0.5$)

Fig. 3 3D-plot of temperature as function of mean and variance of flame distance ($\Phi=0.5$)

火焰前锋面后出现回流使火焰稳定。在出口段由于结构上的收敛作用,速度加大。

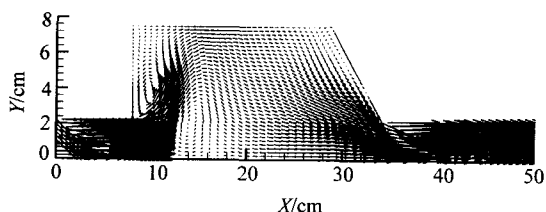


图 4 速度矢量图 ($\Phi=0.5$)

Fig. 4 Velocity vector ($\Phi=0.5$)

图 5 所示为 $\Phi=0.5$ 时离火焰面平均距离的 $\bar{G}$ 的等值线图, $\bar{G}=0$ 的位置,即火焰面位置在燃烧室入口段, $\bar{G}$ 为负值时表示为未燃区, $\bar{G}$ 为正值时表示为已燃区。图 6 所示为 $\Phi=0.6$ 时离火焰面平均距离的等值线图,其火焰面位置比 $\Phi=0.5$ 时要更位于燃烧室下游一些,并且径向距离也略大一些,这是由于当量比升高,燃料浓度相应有所增加,故火焰范围相应增大。图 7 为温度场,由于是贫燃燃料燃烧,甲烷在燃烧室入口着火并迅速燃烧,故在 $\bar{G}=0$ 近火焰面区域,温度梯度变化大,燃烧后温度为 1810 K。

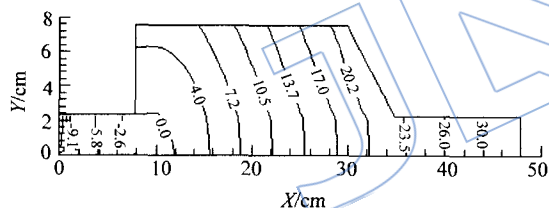


图 5 $\bar{G}$ 等值线 ($\Phi=0.5$)

Fig. 5 The contour of mean of flame distance

($\Phi=0.5$)

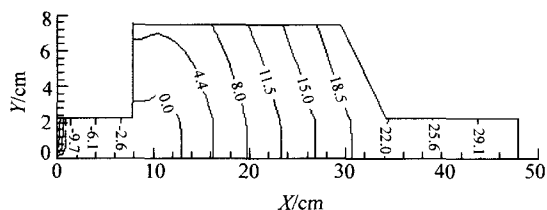


图 6 $\bar{G}$ 等值线 ($\Phi=0.6$)

Fig. 6 The contour of mean of flame distance

($\Phi=0.6$)

图 8 和图 9 所示为燃料 CH_4 和氧气的质量分数等值线,由于贫燃燃烧,在已燃区燃料接近为 0,而剩余氧气大大超过燃料。图 10 所示为 NO 的密度等值线,在燃烧室入口处 NO 较低,火焰后由

于高温 NO 增大,在出口段再次降低。

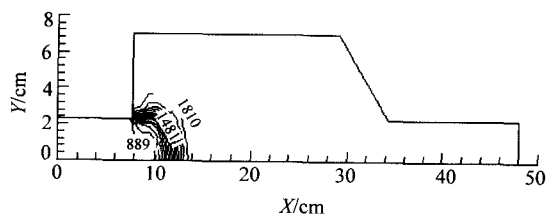


图 7 温度等值线 ($\Phi=0.5$)

Fig. 7 The contour of temperature ($\Phi=0.5$)

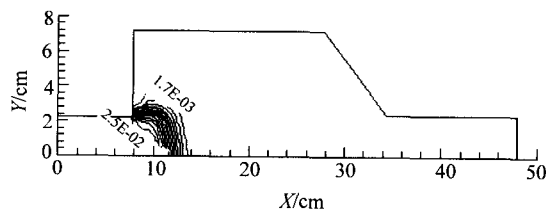


图 8 燃料质量分数等值线 ($\Phi=0.5$)

Fig. 8 The contour of fuel mass fraction

($\Phi=0.5$)

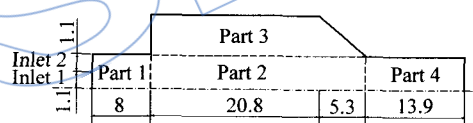


图 9 氧气质量分数等值线 ($\Phi=0.5$)

Fig. 9 The contour of oxygen mass fraction

($\Phi=0.5$)

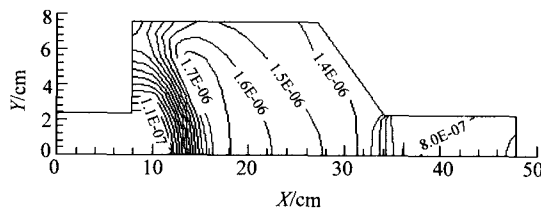


图 10 NO 密度等值线 ($\Phi=0.5$)

Fig. 10 The contour of NO density ($\Phi=0.5$)

图 11 所示为 NO 指数随当量比的变化,计算结果与课题来源的模型实验数据对比曲线(该实验条件与计算条件完全一致),NO 的形成在很大程度上取决于局部温度和当量比,贫燃燃烧可降低燃烧温度,在燃烧室上游区实现预混,可减少局部高温区,缩短停留时间,从而抑制 NO 的生成。并且当量比越小,由于燃烧温度低,NO 排放

越小。计算与实验值基本一致。

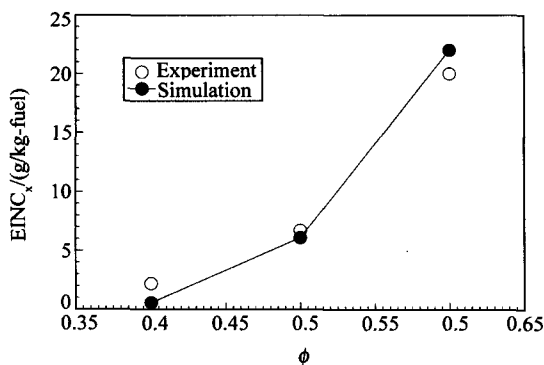


图 11 NO_x 指数随当量比的变化

Fig. 11 The variation of NO emission index with equivalence ration

5 结 论

以贫燃预混预蒸发燃烧室为算例,采用 Level-set 方程与小火焰模型结合的方法模拟预混火焰,Farve 平均的 N-S 方程与标准的模型来模拟平均流场。计算了各当量比下甲烷/空气贫燃预混燃烧的火焰面的位置,并比较了在不同当量比下的 NO 排放值,计算与实验结果吻合较好,这表明

此方法能够较好计算出平均湍流火焰的主要特征。

参考文献:

- [1] Peters N. laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1984, 10: 319—339.
- [2] Pitsch H, Chen M, Peters N. Unsteady Flamelet Modeling of Turbulent Hydrogen—air Diffusion Flames[A]. Proceedings of the 27th International Symposium on Combustion[C]. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998: 1057—1064.
- [3] Bai X S, Balthasar M, Mauss F, Fuchs L. Detailed Soot Modeling in Turbulent Jet Diffusion Flames[A]. Proceedings of the 27th International Symposium on Combustion[C]. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998: 1623—1630.
- [4] Muller C M, Breitbach H, Peters N. Partially Premixed Turbulent Flame Propagation in Jet Flames[A]. Proceedings of 25th International Symposium on Combustion[C]. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1994: 1099—1106.
- [5] Williams F A. The Mathematics of Combustion[J]. J. Buckmaster, SIAM, 1985: 99—131.
- [6] Peters N. Four Lectures on Turbulent Combustion[R]. ERCOFTAC Summer School, Aachen, Germany, 1997.
- [7] Sussman I, Smereka P, Osher S. A Level Set Approach for Computing Solutions to Incompressible Two-Phase Flow[J]. J. Comput. Phys., 1994, 114: 146—159.