

文章编号: 1000-8055(2003)06-0761-07

椭圆型条件矩封闭模型在湍流 扩散火焰中的应用

刘 涛, 张 堪, 孟 鹏, 方 韧

(北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100083)

摘要: 使用考虑分子扩散与湍流扩散的椭圆型CMC模型对钝体绕流扩散火焰进行了数值模拟计算, 计算的工况包括 CH_4/H_2 、 CO/H_2 和 CH_3OH 等燃料在空气中的燃烧。在数值计算中使用了 $k-\epsilon$ 双方程湍流模型和SMPL E算法, 并将计算结果与实验数据进行了对比, 讨论了计算结果与实验数据之间偏差产生的原因, 还分析了条件平均变量的空间变化。结果表明, 条件平均温度、OH、CO和NO等组分的质量分数的计算结果与实验数据有着很好的一致性, 说明椭圆型CMC模型是一种能有效地预测湍流非预混火焰中组分浓度和温度的计算方法。

关键词: 航空、航天推进系统; 湍流扩散火焰; 燃烧模型; 条件矩封闭模型; 数值模拟

中图分类号: V 231. 26; O 357. 5

文献标识码: A

Application of the Elliptic-Type Conditional Moment Closure Method to Turbulent Diffusion Bluff-Body Flames

LIU Tao, ZHANG Kan, MENG Kun, FANG Ren

(Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100083, China)

Abstract: The elliptic-type conditional moment closure model is implemented to simulate nonpremixed turbulent bluff-body burner flames. The fuels are CH_4/H_2 , CO/H_2 and CH_3OH . The $k-\epsilon$ turbulent model and SMPL E method are employed in the computation. Results of average flow characteristics, conditional averaged temperature, OH, CO and NO concentrations are obtained. Reasonable agreement between experiments and predictions shows that the CMC model is capable of predicting the species concentration and temperature in turbulent nonpremixed combustion. Discrepancy on the rich side may partly be due to the singly conditional moment closure, or lack of adequate chemical kinetics on the rich side.

Key words: aerospace propulsion system; turbulent diffusion flame; combustion model; conditional moment closure; numerical simulation

在湍流燃烧中存在着复杂的化学反应, 由于所涉及到的反应速率与温度和组分浓度的脉动值具有着高度的非线性的函数关系, 使得问题变得很难处理。气流中的脉动使不同温度且不均匀的组分发生混合, 而且这种混合的速率与化学反应

速率相当。由于标量场中产生大量的时间和空间上的脉动(例如成分、温度和焓), 无法用标量的平均值来模化化学反应平均速率。同时, 反应速率的非线性增加了与脉动相关联的源项, 而且它们往往和仅与平均项相关联的源项有相当的量级。正

收稿日期: 2003- 01- 10; 修订日期: 2003- 04- 20

作者简介: 刘涛(1958-), 男, 河南濮阳人, 北京航空航天大学能源与动力工程学院, 主要从事燃烧与传热研究

是由于湍流反应流动中标量的脉动与非线性的 Arrhenius 反应速率公式之间存在的这种强烈的耦合作用,使得广泛使用于无反应湍流流动的传统平均方式难以准确地预测湍流反应系统。

条件矩封闭模型(Conditional Moment Closure)利用湍流燃烧系统中标量与某物理量的相关性,如非预混火焰中的混合分数 ξ ,将化学反应作用从强烈的非均匀湍流中有效地分离出来,使湍流燃烧系统中难以封闭的化学反应速率项得到很好的模化,从而在计算中可以使用多步、多组分、有限速率的化学反应机理^[1~4]。这种方法虽然增加了问题的维数,但由于相关于混合分数 ξ 的条件平均大大压缩了脉动量,显著减小了由于封闭组分方程中化学反应项时引起的主要非线性来源,因而能够有效地将化学反应作用从强烈的非均匀湍流中分离出来,又不改变标量耗散的特性。这样,CMC 模型就可以利用任意复杂的化学反应机理进行计算,从而获得流动与反应的详细情况,其计算结果也可以与直接数值模拟(DNS)以及实验结果很好地相符^[4]。自 CMC 模型提出以来,已有相当数量有关于其应用的报道^[5~11],结果表明,CMC 模型能够有效地将湍流和化学反应效应分离开来。只要适当模化相关于混合分数的条件平均标量耗散,CMC 模型不仅能够很好地预测湍流扩散火焰的主要反应、生成物,还能够准确计算燃烧中间产物。同时,由于 CMC 模型不象层流火焰面模型那样要受到火焰厚度必须小于 Kolmogorov 尺度的限制,可望适用于更多的燃烧工况,所以 CMC 模型有希望成为一种预测较为准确且适用于工程应用的燃烧模拟方法。

本文利用椭圆型 CMC 模型^[12,13],对不同燃料在空气中燃烧的钝体绕流火焰(CH_3OH , CO/H_2 和 CH_4/H_2)进行了数值模拟。计算中采用了较为合理的条件平均速度和条件平均标量耗散率的模化方法。将计算结果与已有实验数据^[14]进行了比较,并对产生的误差进行了初步的分析。

1 数学模型及数值模拟

在变密度情况下,定义湍流燃烧场中的标量参数,如第 i 个组分的质量分数 Y_i 在混合分数 $\xi(X, t)$ 取某一特定值 η 的条件下的平均值为:

$$Q_i(\eta, X, t) = \frac{\langle \rho(X, t) \cdot Y_i(X, t) | \xi(X, t) = \eta \rangle}{\langle \rho(X, t) | \xi(X, t) = \eta \rangle} = \frac{\langle \rho Y_i | \eta \rangle}{\langle \rho | \eta \rangle} \quad (1)$$

其中: X 为空间座标, t 为时间座标; η 为混合分数样本空间内某一定值; 竖线右端为平均的条件; 左端为表示进行平均的标量参数; 角括号表示在条件基础之上的平均。并将 Y_i 分解为:

$$Y_i(X, t) = Q_i(\xi(X, t), X, t) + y_i(X, t) \quad (2)$$

将式(1)、(2)代入质量分数 Y_i 的控制方程,可以得到条件平均的组分平衡方程:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} Q_i) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \langle \vec{u} | \eta \rangle \cdot Q_i) = \\ \nabla \cdot [\bar{D} \nabla Q_i] - \nabla \cdot [\langle \rho \vec{u} y_i | \eta \rangle] + \\ \frac{\partial}{\partial \eta} [\bar{D} \langle \nabla \xi \cdot \nabla \xi | \eta \rangle \frac{\partial Q_i}{\partial \eta}] + \langle \omega | \eta \rangle \end{aligned} \quad (3)$$

其中: $\bar{\rho} = \langle \rho | \xi \rangle$ 为条件平均密度, D 为分子扩散系数, $\langle \vec{u} | \eta \rangle$ 为条件平均速度, $\langle X | \eta \rangle = \langle \nabla \xi \cdot \nabla \xi | \eta \rangle$ 为条件平均标量耗散率, $\langle \omega | \eta \rangle$ 为条件平均化学反应速率。在条件矩封闭模型中,采用条件平均后,标量参数的脉动值很小,因此可以直接封闭 $\langle \omega | \eta \rangle$ ^[17]。如果考虑温度随混合分数的变化,可以采用相似的过程建立条件平均的焓方程。关于条件平均速度的模化,根据 Bilger 等人的计算分析,对于大多数的流动情况,条件平均速度可以采用如下的线性模型^[15]进行模化:

$$u \eta = \tilde{u} + \frac{\tilde{u} \xi^n}{\xi^2} (\eta - \xi) \quad (4)$$

对于 $\langle X | \eta \rangle$ 或 X_0 的模化,已有方法认为当混合分数为 0.5 时,混合分数的散度最大,即 $\langle X | \eta \rangle$ 的峰值出现在 $\eta = 0.5$ 处,其具体形式为:

$$X_0 = C \exp\{-2[\text{erf}^{-1}(2\eta - 1)]^2\} \quad (5)$$

其中:

$$C = \frac{\bar{X}}{\int \exp\{-2[\text{erf}^{-1}(2\eta - 1)]^2\} \tilde{P}(\eta) d\eta}$$

$$\bar{X} = 2g(\epsilon/k)$$

式中 erf^{-1} 表示误差函数的反函数。由实验结果和理论分析可知,在火焰锋面处存在着强烈的化学反应和湍流脉动,那么该处的混合分数存在着很大的变化,所以 $\langle X | \eta \rangle$ 的峰值应出现在 $\eta \approx \xi_{\text{stoic}}$ 附近^[16]。在本论文算例中 ξ_{stoic} 分别为 0.295, 0.0283 和 0.0417,都大大小于 0.5,故将式(5)修正为:

$$X_0 = C \exp\{-2[\text{erf}^{-1}(\eta/\xi_{\text{stoic}})]^2\} \quad (6)$$

其中:

$$C = \frac{2g(\epsilon/k)}{\int \exp\{-2[\text{erf}^{-1}(\eta/\xi_{\text{stoic}})]^2\} \tilde{P}(\eta) d\eta} \quad (7)$$

及

$$P(\eta) = \begin{cases} \frac{\eta - \xi_{stoc}}{\xi_{stoc}} & 0 \leq \eta \leq \xi_{stoc} \\ \frac{\eta - \xi_{stoc}}{1 - \xi_{stoc}} & \xi_{stoc} < \eta \leq 1 \end{cases} \quad (8)$$

如图1所示。方程的求解是通过SMPL E 算法进行的,在计算中使用了CHEMKN 软件来计算多步、多组分、有限的化学反应速率以及所需的物性参数^[17]。首先使用k-ε 双方程湍流模型计算平均流场以及混合分数概率密度函数 $P(\eta)$,然后使用CMC 方程来计算条件平均的组分浓度和温度,利用 $P(\eta)$ 对条件平均值进行加权平均就可以得到对应的无条件平均值:

$$\overline{\Phi(X)} = \int \langle \Phi | \eta \rangle \cdot P(\eta) \cdot d\eta \quad (9)$$

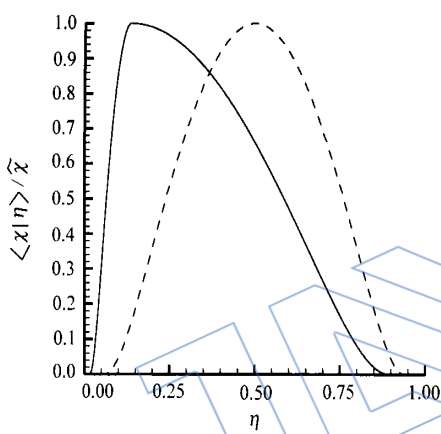


图1 CO/OH 算例中条件平均标量耗散率 χ_0 修正前后的比较

Fig 1 Comparison of corrected conditional averaged scalar dissipation rate with that in the mixture fraction of 0.5 for the case of fuel CO/OH

在本文计算中采用了函数形式的混合分数概

率密度函数:
$$P(\eta) = \eta^{-1}(1 - \eta)^{b-1}/\beta(a,b) \quad (10)$$

其中:

$$\beta(a,b) = \int f^{a-1}(1-f)^{b-1}df$$

$$a = f[f(1-f)/g-1]$$

$$b = (1-f)[f(1-f)/g-1]$$

式中: $f = \xi$ 为混合分数, $g = \xi^2$ 为混合分数的脉动均方值。

本文计算了钝体绕流火焰。钝体燃烧器的燃料喷嘴内径为3.6 mm,钝体外径为50 mm,伴流空气的进口速度为40 m/s。燃料分别为CO/H₂(1∶2, $\xi_{stoc} = 0.135$),CH₃OH($\xi_{stoc} = 0.135$)及CH₄/H₂(1∶1, $\xi_{stoc} = 0.04997$)。CO/H₂工况对应的两种燃料射流速度分别为134 m/s和321 m/s,计算中使用了15种组分、39步反应的化学反应机理。CH₃OH算例也有两种工况,燃气射流速度分别为80 m/s和121 m/s,计算中使用了17种组分、47步反应的化学反应机理。CH₄/H₂算例中,燃气出口速度为118 m/s,计算中使用了22种组分、80步反应的化学反应机理。

2 结果与分析

在不同工况下,回流区长度和火焰长度的计算值与实验值的比较见表1,可以看出火焰长度和回流区长度的计算结果与实验结果符合得比较好。图2为典型工况下回流区内速度矢量图和流线图,可以看出回流区由钝体表面开始向下游延伸,长度大约为一个钝体直径。在回流区内存在着两个旋涡,靠近空气流的(外旋涡)较宽大,靠近燃气流的(内旋涡)较窄小,并且随着燃气出口速度的增大,外旋涡变短变小,内旋涡消失。在钝体的几

表1 流场特征参数的计算值与实验值的比较 (D = 3.6 mm)

Table 1 Comparison of calculations with experiments for flow fields

工况 序号	算例	燃料	出口速 度/(m/s)	回流区长度		火焰长度	
				计算值	实验值	计算值	实验值
1	B4f3a	CH ₄ /H ₂	118	2.2D	无	20.15D	20.0D
2	B4f2a	CO/H ₂	134	1.4D	1.2D	9.2D	9.0D
3	B4f2b	CO/H ₂	321	1.2D	1.2D	9.1D	9.0D
4	B4f1a	CH ₃ OH	80	1.06D	1.0D	9.68D	无
5	B4f1b	CH ₃ OH	121	1.0D	1.0D	9.7D	无

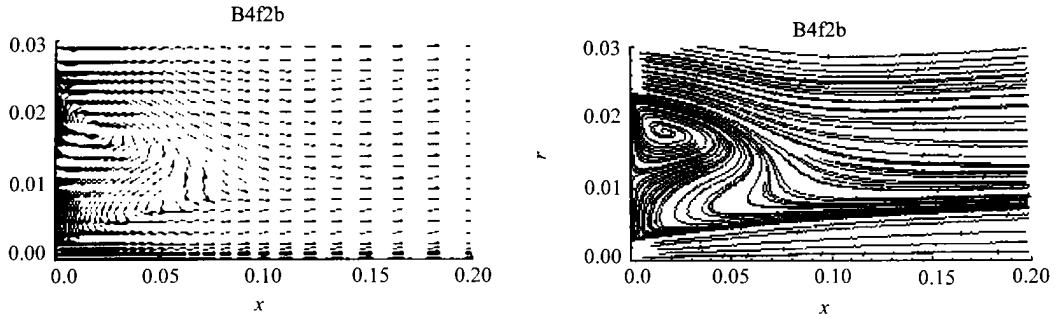


图2 典型工况的速度矢量图和流线图

Fig 2 Typical velocity vectors and flow stream lines

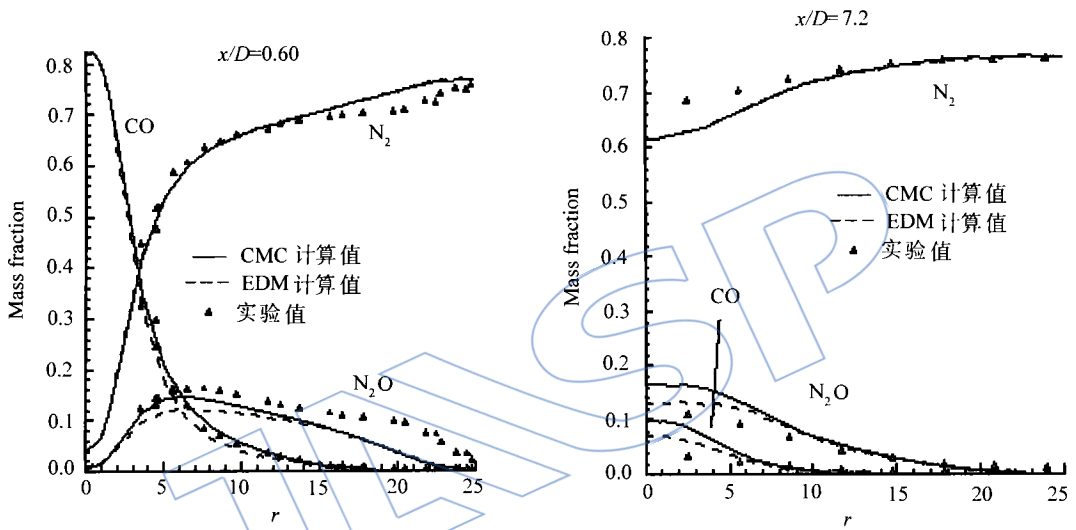


图3 算例B4f2a: 燃料 $\text{CO}/\text{H}_2(1:2)$, 燃气出口速度 134 m/s , CO , N_2 , H_2O 沿 r 变化

Fig 3 Variations of CO , N_2 and H_2O with the radial distance r for the case B4f2a with the jet velocity of 134 m/s and the fuel $\text{CO}/\text{H}_2(1:2)$

何尺寸和同流空气条件相同的情况下, 这两个旋涡的大小和中心位置主要取决于燃料的种类及其射流速度。

图3为工况2中典型组分的质量分数在不同轴向位置处的径向的分布图(实线为CMC计算值, 虚线为旋涡扩散模型EDM计算值, Δ 为实验值)。可见燃气流中的 CO 的质量分数随着 r 的增大而减小, 空气流中的 N_2 随着 r 的增大而增大, 这是由于湍流掺混、分子扩散和化学反应的消耗而造成的。主要反应生成物 CO_2 和 H_2O 则为钟形分布, 在燃气流和空气流中均为0, 其峰值位置与温度的峰值位置基本一致, 即化学反应主要发生在高温区, 这与实验结果的变化趋势相符。

图4为该工况下的 NO 的质量分数在不同轴向位置沿径向 r 的分布图(实线为CMC计算值,

Δ 为实验值), 可以看出 NO 的分布范围较宽。另外, 从已有结果可知, OH 的计算与试验符合得较好, 其峰值位置与温度基本一致, 并且主要集中在高温区内, 说明自由基 OH 主要出现在反应剧烈的区域内。

图5为工况2的温度和各组分质量分数在不同轴向位置处的条件平均值沿混合分数 η 方向上的分布图。可以看出, 条件平均温度和条件平均组分质量分数的计算值与实验值一致性较好, 这表明条件矩封闭模型是一种合理而有效湍流燃烧计算模型。从条件平均值的分布图可以看出, 温度和反应生成物(包括最终产物和中间产物)条件平均质量分数的峰值以及反应物条件平均质量分数的谷值出现在 ξ_{stoic} 附近, 说明燃烧反应在化学恰当比时最为剧烈。另外也可以发现, OH 主要出现在

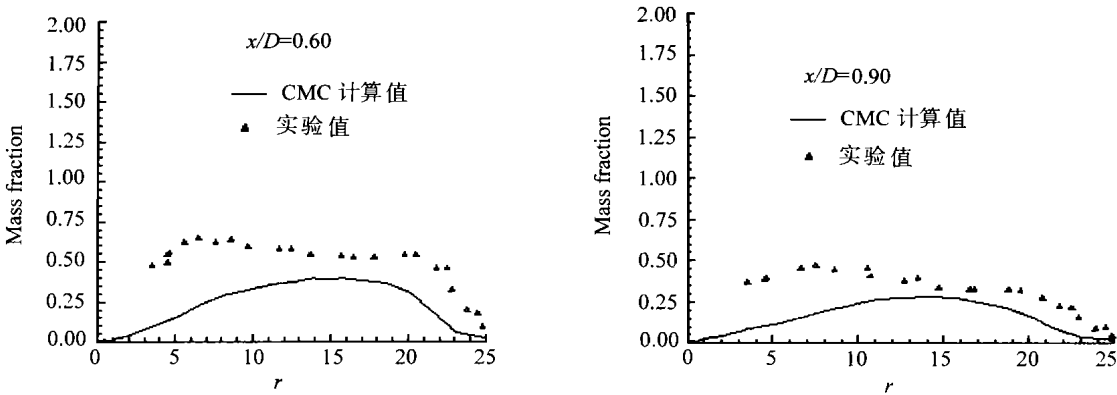


图4 算例B4f2a: 燃料CO/H₂(1·2), 出口速度134 m/s,NO 沿径向 r 分布

Fig 4 Profile of NO in r direction for the case B4f2a with the jet velocity of 134 m/s and the fuel CO/H₂(1·2)

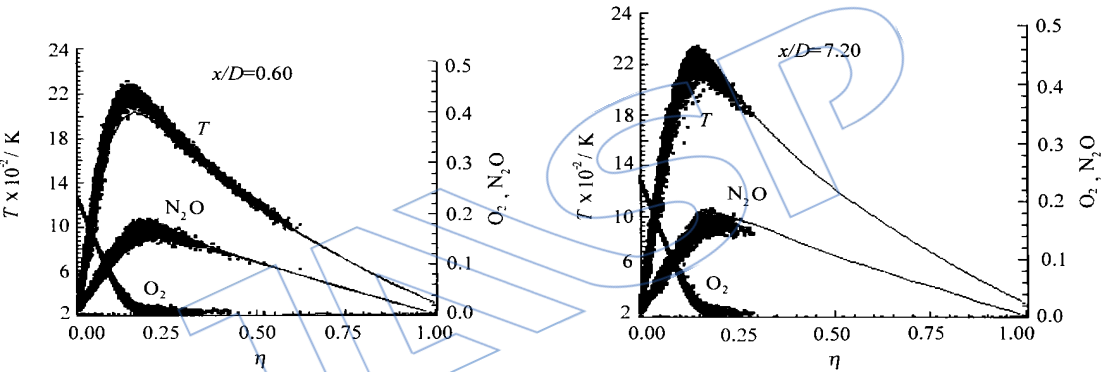


图5 算例B4f2a: 燃料CO/H₂(1·2), 出口速度134 m/s, 温度、O₂及H₂O 沿 r 分布

Fig 5 Profiles of temperature, O₂ and H₂O in r direction for the case B4f2a with 134 m/s and CO/H₂(1·2)

ξ_{stoc} 附近, 而CO,NO 的质量分数沿 η 方向的存在范围与OH 相比更广。

在 $\eta = \xi_{\text{stoc}}$ 附近, 即反应区附近, 不同径向位置处的条件平均值之间存在着较大的偏差, 以OH 尤为明显。图6给出了同一轴向位置的不同径向位置处的OH 的条件平均值分布曲线。这种偏差是由于有限的 Damkohler 数的影响造成的。Damkohler 数 (Da) 为流体的流动时间尺度 τ_{flow} 与化学反应时间尺度 τ_{chem} 的比值^[18]。当 Da 很大时, 化学反应的时间尺度很小, 即可以认为是“快速化学反应”, 当地流场达到化学反应的局部平衡状态。当 Da 为有限值时, 则化学反应偏离局部平衡状态, 在这种情况下必须要考虑化学反应的速率对反应生成物的影响。由于在回流区内随着 Da 的值沿半径方向逐渐增大, 因此条件平均值的峰

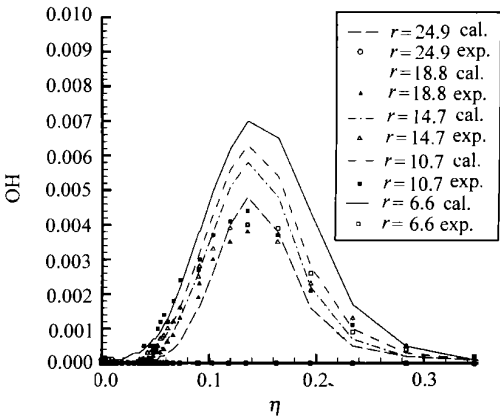


图6 不同径向位置处的OH 条件平均值沿 η 方向分布

Fig 6 Conditional averaged mass fraction of OH at different radial distance r with the change of η

值逐渐趋向平衡状态。

比较工况2和工况3的结果可以发现,在任意空间位置上,前者与平衡状态的偏差都较后者为大,这是因为在工况2中,燃气射流速度较大,流动时间尺度 τ_{flow} 较小,因而 Da 也较小,使得条件平均值更大地偏离化学反应的平衡状态。另外,还可以发现在射流颈区 ($x/D = 1.80$ 附近)内,这种偏差最为显著,说明在颈区内 Da 的值沿半径方向的变化梯度也较大。

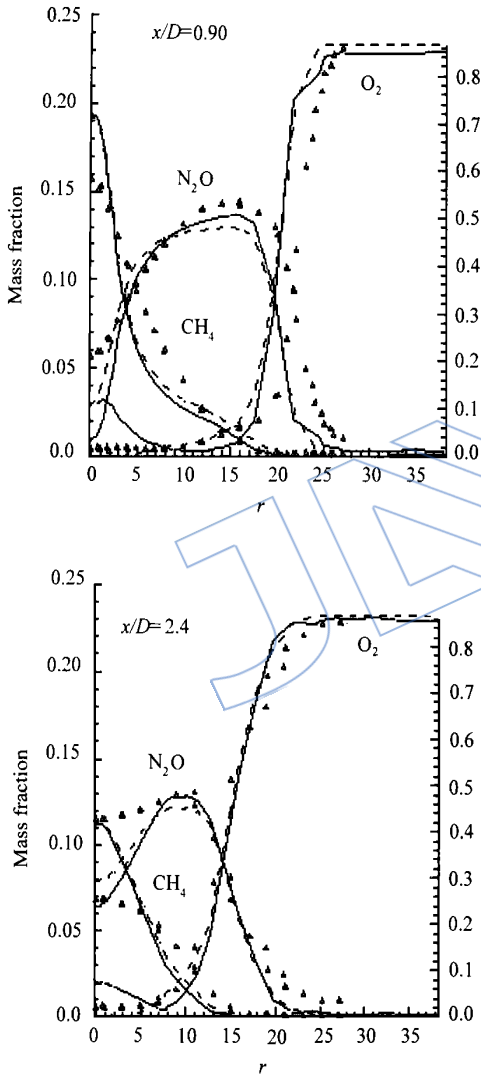


图7 算例B4f3a: 燃料 $CH_4/H_2(1\cdot1)$, 出口速度 118 m/s , CH_4 , O_2 及 H_2O 沿径向 r 分布
Fig 7 Variations of CH_4 , O_2 and H_2O with the radial distance r for the case B4f3a with the jet velocity of 118 m/s and the fuel $CH_4/H_2(1\cdot1)$

图7和图8为工况1中主要反应组分的质量分

数在不同轴向位置处的径向的分布图,其中实线为CMC计算值,虚线为EDM计算值,△为实验值。可以发现在富油区内,计算值与实验值的偏差比较大,这可能是由于在简化化学反应机理时忽略了一些在富油条件下特有的基元反应的原因所造成的。例如 CH_4 在富油状态下会出现较多的 C_2H_6 , 该反应也应是一个重要的过程,但在本文为了减少计算量,忽略了有关 C_2H_6 的反应。另外,

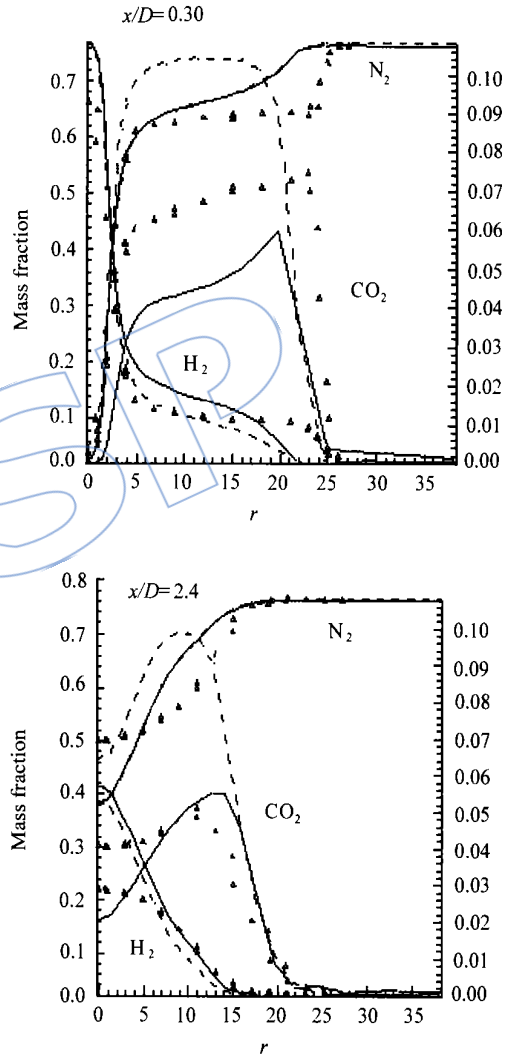


图8 算例B4f3a: 燃料 $CH_4/H_2(1\cdot1)$, 出口速度 118 m/s , H_2 , CO_2 及 N_2 沿径向 r 分布
Fig 8 Variations of H_2 , CO_2 and N_2 with the radial distance r for the case B4f3a with the jet velocity of 118 m/s and the fuel $CH_4/H_2(1\cdot1)$

在富油区内,使用EDM模型计算的混合分数及其脉动值存在着一定的偏差,尤其是在钝体壁面附近和远离喷嘴出口的下游区域,这些偏差造成

了混合分数概率密度函数以及温度的计算误差。

3 结束语

(1) 本文利用椭圆型条件矩封闭模型对五种湍流燃烧工况进行了数值模拟, 对控制方程中的关键项进行了适当的模化, 计算值与实验值有着较好的一致性, 说明条件矩封闭模型是一种合理而有效湍流燃烧计算模型, 并且对关键项的模化处理也是恰当的。

(2) 反应生成物的条件平均质量分数的峰值出现在 ξ_{stoic} 附近, 说明燃烧反应在化学恰当比时最为剧烈。在反应区附近, 组分质量分数沿 η 方向有较大的梯度, 条件平均的标量耗散率的模化对计算结果有着很大的影响。

(3) 由于有限的 Damkohler 数的影响, 在 ξ_{stoic} 附近条件平均值随径向位置的不同存在着很大的区别, 这表明减少维数的处理将带来一定的偏差, 因而在一般的椭圆型反应流动中, 应该考虑湍流扩散和分子扩散作用, 使用椭圆型的 CM C 方程。

(4) 在富油区的计算结果与实验数据存在着一定的偏差, 这一方面是由于使用的是单变量的条件矩封闭模型, 另一方面是由于缺少在富油条件下更为详细的化学反应机理。

致谢 本文曾得到澳大利亚悉尼大学 Bilger R W 教授和韩国浦项工科大学许康烈教授的指导和帮助, 特此表示感谢。

参考文献

- [1] Klimenko A Yu. Multicomponent Diffusion of Various Admixtures in Turbulent Flow [J]. Fluid Dynamics, 1990, 25: 327.
- [2] Bilger Robert W. Conditional Moment Methods for Turbulent Reacting Flow Using Crocco Variable Conditions [R]. Report TNF-99 Dept of Mechanical Engineering, The University of Sydney, 1991.
- [3] Bilger Robert W. Conditional Moment Closure for Turbulent Reacting Flow [J]. Phys Fluids A 5, 1993: 436.
- [4] Klimenko A Yu, Bilger R W. Conditional Moment Closure for Turbulent Combustion [J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1999, 25: 595- 687.
- [5] William E Mell, Vebjorn Nilsen, George Kosaly, et al Direct Numerical Simulation Investigation of the Conditional Moment Closure Model for Nonpremixed Turbulent Reacting Flow [J]. Combustion Sci and Tech, 1993, 91: 179- 186.
- [6] Mell W E, Nilsen V, Riley J J. Investigation of Closure Models for Nonpremixed Turbulent Reacting Flows [J]. Phys Fluids 1994, 6(3): 1331- 1356.
- [7] Swaminathan N, Mahalingam S. Assessment of Conditional Moment Closure for Single and Multistep Chemistry [J]. Combustion Sci and Tech, 1993, 112: 301- 326.
- [8] Smith N S A, Bilger R W, et al. A Comparison of CM C and PDF Modeling Predictions with Experimental Nitric Oxide LIF/Raman Measurements in a Turbulent H_2 Jet Flame [J]. Combust Sci Tech, 1995, 105: 357- 375.
- [9] Bushe W K. Conditional Moment Closure Methods for Autoignition Problems [D]. Ph.D. thesis, The Oxford University, 1995.
- [10] Smith N S A, Bilger R W. Modeling of Nonpremixed Hydrogen Jet Flames Using a Conditional Moment Closure Method [A]. 24th Symposium (International) on Combustion/the Combustion Institute [C]. 1992: 263- 269.
- [11] Roomina M R, Bilger R W. Conditional Moment Closure Modeling of Turbulent Methanol Jet Flames [J]. Combust Theory Modeling, 1999, 3: 689- 708.
- [12] Liu T, Huh K Y. Application of the Elliptic-Type Conditional Moment Closure Model to Two-Dimensional Nonpremixed Turbulent Reacting Flow [A]. The First Asia-Pacific Conference on Combustion [C]. Osaka, Japan, 1997.
- [13] Kim S H, Huh K Y, Liu T. Application of the Elliptic Conditional Moment Closure Model to a Two-Dimensional Nonpremixed Methanol Bluff-Body Flame [J]. Combustion and Flame, 2000, 120: 75- 90.
- [14] Masri A R, Barlow R S, et al. Turbulent Diffusion Flame Data Base [Z]. Available on the Web at <http://www.ca-sandia.gov/tdf/Lab.html> or <ftp://flame.mech.eng.usyd.edu.au/pub/>.
- [15] Bilger R W. Conditional Moment Closure for Turbulent Combustion: Status and Prospects, Invited Lecture [R]. Greek Section of the Combustion Institute, Athens, Nov. 1997.
- [16] Kronenburg A, Bilger R W, Kent J H. Computation of Conditional Average Scalar Dissipation in Turbulent Jet Diffusion Flames [J]. Flow, Turbulence and Combustion, 2000, 64: 145- 159.
- [17] Kee R J, Ruply F M, Miller J A. Chemkin II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics [R]. Sandia National Laboratories Report No. SAND89- 8009B, 1996.
- [18] Barlow R S, Dibble R W, Chen J Y, et al. Lucht, Effect of Damkohler Number on Superequilibrium OH Concentration in Turbulent Nonpremixed Jet Flames [J]. Combustion and Flame, 1990, 82: 235- 251.