

文章编号: 1000-8055(2005)06-0994-06

值班甲烷/空气射流火焰的小火焰模型模拟

侯凌云, 钟北京, 姜长青
(清华大学 航天航空学院 北京 100084)

摘要: 将小火焰模型和假定的 PDF 方法相结合, 模拟甲烷湍流射流扩散火焰, 稳态火焰面结构由层流小火焰数据库得到, 采用详细化学反应机理描述甲烷的氧化和 NO 以及碳烟的生成, 数值模拟结果和实验数据吻合较好, 说明小火焰模型可以较准确地计算出扩散湍流火焰中的燃烧过程。

关键词: 航空、航天推进系统; 小火焰模型; 湍流扩散火焰; 详细化学反应机理

中图分类号: V 231. 25

文献标识码: A

Flamelet Modeling of a Pilot Methane/Air Jet Flame

HOU Ling-yun, ZHONG Bei-jing, JIANG Chang-qing

(School of Aerospace, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: A methane turbulent non-premixed flame has been simulated numerically by the combination of laminar flamelet model and presumed probability density function (PDF). Steady flamelet structure was obtained from laminar flamelet library. Using the detailed chemical kinetics mechanism, the oxidation of methane and the generation of PAH and NO were described. Compared to the experimental data, it is shown that the numerical results agree well with the experiment and indicate that flamelet model approach is able to predict the major properties of the turbulent non-premixed flame.

Key words: aerospace propulsion system; flamelet model; turbulent non-premixed flame; detailed chemical kinetics mechanism

在能源、动力、航空和航天等工程领域, 经常遇到的实际燃烧过程几乎全部都是湍流燃烧过程。在湍流燃烧中, 湍流流动过程和化学反应过程有强烈的相互关联和相互影响。湍流通过强化混合而影响着时平均化学反应速率, 同时化学反应放热过程又影响着湍流, 如何定量地来描述和确定这种相互作用是湍流燃烧研究的一个重要内容。

目前的湍流计算方法主要采用以下3种方法: 直接数值模拟(DNS)、大涡模拟(LES)、雷诺平均

(RANS)。对于湍流燃烧, 由于反应区具有和 Kolmogorov 尺度一样小的量级, 因此无论 LES 还是 RANS, 均需要燃烧模型来封闭流动方程。现有的湍流燃烧模型基本分三类: 湍流控制模型、PDF 输运模型和小火焰模型, 前面两种方法当在求解详细化学反应动力学问题时, 每步基元反应都必须与流场耦合, 从而使得运算量非常巨大, 不容易使用在工程运算中。

Peters 在对层流扩散火焰研究的基础上提出了小火焰模型^[1]。这种模型把湍流反应区定义为

收稿日期: 2004-12-06; 修订日期: 2005-05-10

基金项目: 国家自然科学基金资助(50306011); 国家973专项经费资助(2002CB211600)

作者简介: 侯凌云(1972-), 女, 湖南岳阳人, 清华大学航天航空学院副教授, 主要从事航天航空推进燃烧、计算燃烧等的研究

小火焰焰心的集合, 湍流流动使其扩展, 而当地局部地保持它们的层流小火焰的结构, 从而可以建立微团内各个物理量间的瞬时关系式, 再用 PDF 对层流小火焰统计平均求得反应区的物理参数的时均值。这种模型的优点是可以当考虑详细化学反应动力学过程和分子输运过程时, 能够将流场计算和化学反应项分离开, 从而大大的减少了计算量, 并且很容易确定火焰面的位置, 能够解决在一定火焰拉伸率下的非平衡反应过程。本文将小火焰模型和假定的 PDF 方法相结合, 以美国 San-

dia 国家实验室的射流扩散火焰^[2]为算例进行了数值模拟, 与他们的实验数据进行对比, 以验证该模型。

1 物理和数学模型

1.1 基本方程

化学反应流动的基本控制方程由下列质量方程、动量方程、能量方程构成:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} u \mathbf{u}) = - \frac{1}{a^2} \nabla \bar{p} - A_0 \nabla \left(\frac{2}{3} \bar{\rho} k \right) + \nabla \cdot \tilde{\sigma} + \bar{\rho} g \quad (2)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} u h) = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{\bar{\rho} \mu}{Pr_t} \nabla h \right) \quad (3)$$

湍流模型采用如下标准的双方程 $k-\epsilon$ 模型:

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} u k) = - \frac{2}{3} \bar{p} k \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} + \tilde{\sigma} \cdot \nabla \tilde{\mathbf{u}} + \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Pr_k} \right) \nabla k \right] - \bar{\rho} \epsilon \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \epsilon}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} u \epsilon) = & - \left(\frac{2}{3} c_1 - c_3 \right) \bar{\rho} \epsilon \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} + \\ & \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu}{Pr_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + \frac{\tilde{\epsilon}}{k} (c_1 \tilde{\sigma} \cdot \nabla \tilde{\mathbf{u}} - c_2 \bar{\rho} \epsilon) \end{aligned} \quad (5)$$

扩散燃烧中的燃油和氧化剂的混合由如下的混合分数的时均值 $\bar{z}$ 和混合分数的脉动值 $\tilde{z}^2$ 方程来求解:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \bar{z})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} u \bar{z}) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Sc_Z} \nabla \bar{z} \right) \quad (6)$$

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{z}^2)}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} u \tilde{z}^2) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Sc_Z^2} \nabla \tilde{z}^2 \right) + \frac{2\mu_t}{Sc_Z^2} (\nabla \bar{z})^2 - \bar{\rho} X \quad (7)$$

其中:

Schmidt 数:

$$Sc_Z = Sc_{\tilde{z}^2} = 0.7$$

标量耗散率:

$$\bar{X} = c_X \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \tilde{z}^2, \quad c_X = 2.0$$

1.2 小火焰方程和数据库

小火焰结构一般通过一个一维扩散反应来描述, 即小火焰方程。假定 Lewis 数等于 1, 忽略压力随时间的变化和忽略辐射热损失的影响, 层流扩散火焰的组分和能量方程作 Crocco 坐标变换, 可以得到非稳态的层流扩散小火焰方程:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} = \rho \frac{X}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} + \dot{\omega} \quad (8)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = \rho \frac{X}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \sum_{i=1}^N \frac{h_i}{c_p} \dot{\omega} \quad (9)$$

其中 Y_i 是组分 i 的质量分数, $\dot{\omega}$ 是单位体积第 i 种组分的生成速率, Z 为混合物分数, X 是标量耗散率, 即:

$$X = f(Z) =$$

$$\frac{a_s}{\pi} \exp \{ - 2 [\operatorname{erf}^{-1}(2Z)]^2 \} \quad (10)$$

其中: a_s 是火焰拉伸率, erf^{-1} 为补余误差函数的反函数。

甲烷/空气燃烧和 NO 的反应机理主要取自 GRIMPECH 2.11, 多环芳烃的反应机理大多取自文献[3], 并参考文献[4]作了适当的修改, 计算中采用的详细化学反应机理包括 118 种化学组分, 648 个基元反应。

1.3 湍流平均参变量的求解

基于小火焰模型的核心思想,即湍流最小尺度涡不会进入火焰结构的内层,也就是局部保持层流小火焰结构,这样湍流参量在火焰中脉动性质一般是不知道的,是一个随机量,我们可以运用概率密度函数 $P(Z)$ 来描述这个脉动性质。由于任意一个湍流标量瞬时值 φ 是守恒标量瞬时值 Z 的单值函数: $\varphi = \varphi(Z)$ 。如果 $P(Z)$ 已知,则任意一个湍流标量的时均值都可以由下列定义求出:

$$\tilde{T}(x, t) = \int T(Z, t) \tilde{P}(Z, x, t) dZ \quad (11)$$

$$\tilde{\rho}(x, t) = \left\{ \int [\rho(Z)]^{-1} \tilde{P}(Z, x, t) dZ \right\}^{-1} \quad (12)$$

$$\tilde{Y}_i(x, t) = \int Y_i(Z) \tilde{P}(Z, x, t) dZ \quad (13)$$

这里我们选取的概率密度函数为Beta函数,由方程(6)和(7)求解的 $\tilde{Z}$, $\tilde{Z}''$ 和瞬态混合分数 Z 来确定:

$$\tilde{P}(Z, x, t) = \frac{Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1}}{\int Z^{\alpha-1} (1-Z)^{\beta-1} dZ}$$

其中:

$$\alpha = \tilde{Z} \left[\frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{\tilde{Z}''} - 1 \right]$$

$$\beta = (1-\tilde{Z}) \left[\frac{\tilde{Z}(1-\tilde{Z})}{\tilde{Z}''} - 1 \right]$$

1.4 数值求解方法

详细化学反应机理由 Chemkin 软件引入,模拟具有复杂化学反应的层流火焰,给出流动参数、温度、密度和各组分浓度的分布等,通过自编程序生成表列的层流小火焰数据库。然后采用 SM-PL E 算法求解质量、动量、混合分数时均值和脉动值方程、能量方程以及双方程湍流方程,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。

2 计算结果与分析

2.1 冷态丙烷湍流射流

以无反应丙烷湍流扩散射流^[5]的实验数据为依据,验证数值模拟的可靠性,其燃烧器的结构如图1所示,图中 $R_i = 2.6 \text{ mm}$, $R_o = 150 \text{ mm}$ 。其初始条件为:入口1的中心射流为燃气(C_3H_8)射流, $U_{in,1} = 53 \text{ m/s}$, $T_{in,1} = 294 \text{ K}$; 入口2的外围同轴射流为空气流, $U_{in,2} = 9.2 \text{ m/s}$, $T_{in,2} = 294 \text{ K}$ 。计算

域取为:从 $x/d = 0$ 到 $x/d = 384.6$, 从 $r/d = 0$ 到 $r/d = 28.8$, 其中 d 为燃气射流喷嘴的直径($d = 5.2 \text{ mm}$)。其网格采用 202×602 的均分网格。

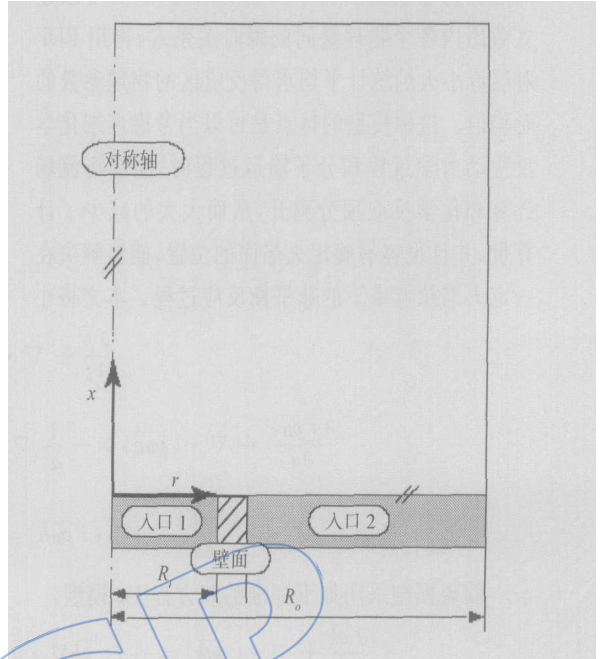


图1 丙烷冷态湍流扩散射流计算结构示意图

Fig 1 Geometry of nonpremixed and nonreacting propane-jet flow

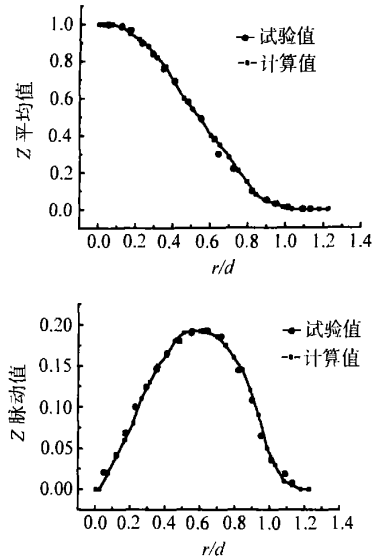


图2 平均混合分数和混合分数脉动的计算和试验值对比($x/d = 4$)

Fig 2 Predicted and measured radial profiles of mean and fluctuating mixture fraction at $x/d = 4$

图2为在轴向 $x/d = 4$ 处的平均混合分数 $\tilde{Z}$ 和

混合分数脉动 $\tilde{z}^2$ 的计算与试验数据对比, 其平均混合分数计算与试验值吻合较好, 从混合分数脉动值可知在 $r/d = 0.5$ 附近最大, 即此处混合最剧烈。

2.2 热态甲烷湍流扩散火焰

2.2.1 物理模型

以有反应值班甲烷湍流扩散火焰^[6]的实验数据为依据, 验证数值模拟的可靠性, 其燃烧器的结构如图3所示, 图中 $R1 = 3.6\text{ mm}$, $R2 = 9.1\text{ mm}$, $R3 = 150\text{ mm}$ 。其初始条件为: 入口1的中心射流为燃料射流, 由25%的甲烷和75%的空气组成, $Re = 22\,400$, $U_{in,1} = 49.6\text{ m/s}$, $T_{in,1} = 294\text{ K}$; 入口2的值班燃烧器由 C_2H_2 , H_2 , 空气, CO 和 N_2 组成, $U_{in,2} = 11.4\text{ m/s}$, $T_{in,2} = 1\,880\text{ K}$; 入口3的外围同轴射流为空气流, $U_{in,3} = 0.9\text{ m/s}$, $T_{in,3} = 291\text{ K}$ 。计算域取为: 从 $x/d = 0$ 到 $x/d = 100$, 从 $r/d = 0$ 到 $r/d = 20$, 其中 d 为燃气射流喷嘴的直径 ($d = 7.2\text{ mm}$)。其网格采用 94×67 的非均匀网格。

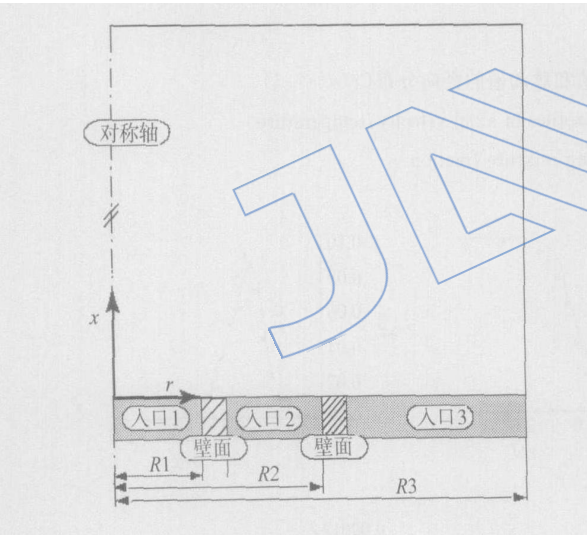


图3 甲烷热态湍流扩散火焰计算结果示意图

Fig 3 Geometry of piloted methane/air jet flames

2.2.2 层流小火焰数据库

为对热态甲烷湍流射流进行数值模拟, 首先需要生成一个层流扩散小火焰数据库。图4为生成该数据库所采用的对撞火焰示意图, 其入口条件采用上述物理模型的条件, 即燃料入口为25%的甲烷和75%的空气组成, 温度为294 K; 氧化剂入口为空气, 温度为291 K。图5给出了如图4所示甲烷对撞层流火焰中温度、主要组分的摩尔分数在混合分数空间中的分布曲线, 其中直线为计算值, 符号为实验值^[7], 计算与实验结果数据符合很好,

这说明由此建立的层流小火焰数据库是合理的。另外从图中可看出当量混合物分数 $z_{st} = 0.352$, 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, 即反应物甲烷几乎耗尽, 不完全燃烧产物 CO 的摩尔分数在略大于当量比附近也达到最大。

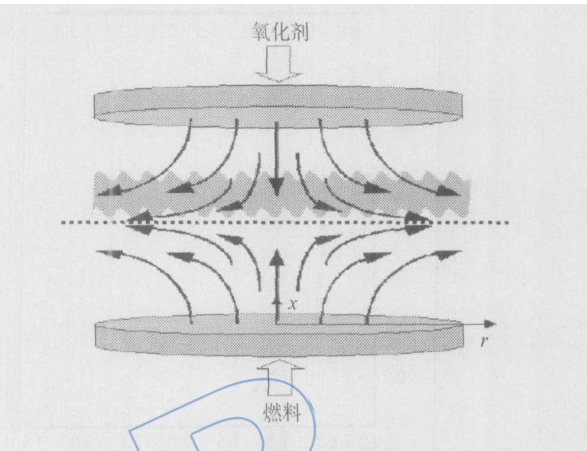


图4 对撞火焰示意图

Fig 4 Geometry of the opposed-flow diffuse flame

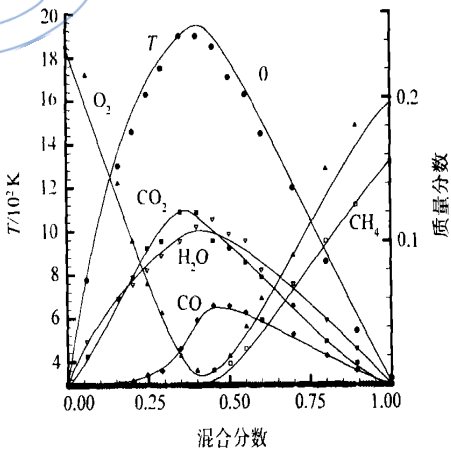


图5 层流扩散火焰温度和主要组分随混合分数变化曲线

Fig 5 Predicted and measured plot of temperature and species mass fractions for laminar diffusion flame

2.2.3 湍流平均参变量的计算结果

在湍流场计算中, 耦合各守恒方程, 求解出 Farve 平均和脉动的混合分数, 通过层流小火焰数据库, 采用假设 PDF 方法求解出温度和各组分质量分数的时均值。

图6为在轴向 $x/d = 7.5$ 位置时, 轴向速度、

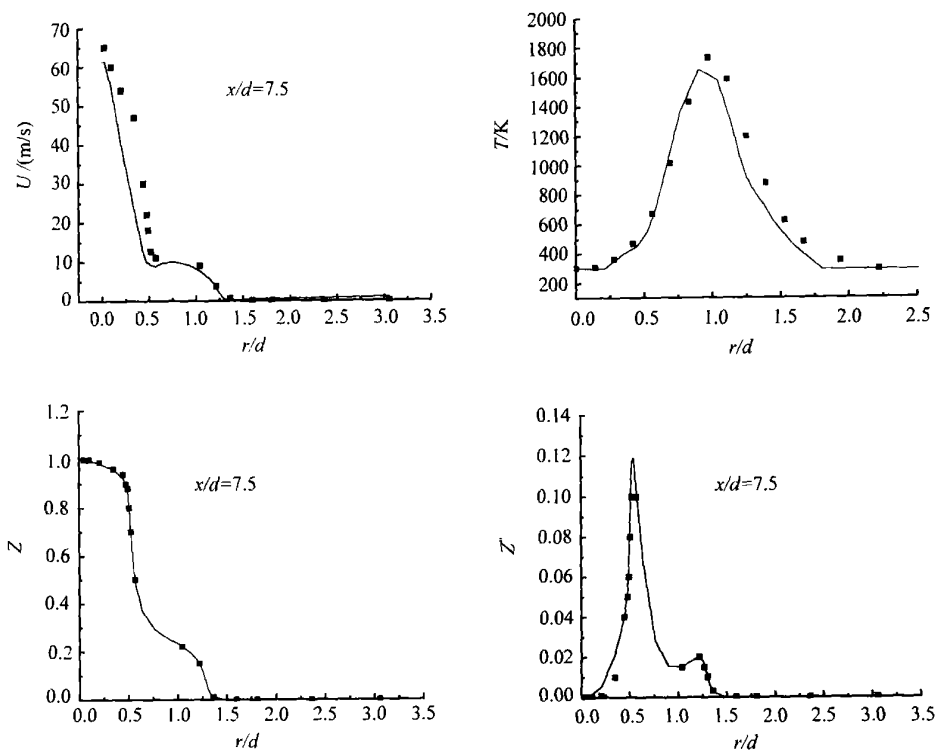


图6 轴向速度、温度、混合物分数均值和脉动值的径向分布 ($x/d = 7.5$)

Fig 6 Predicted and measured radial profiles of axial velocity, temperature and mean and fluctuating mixture fraction

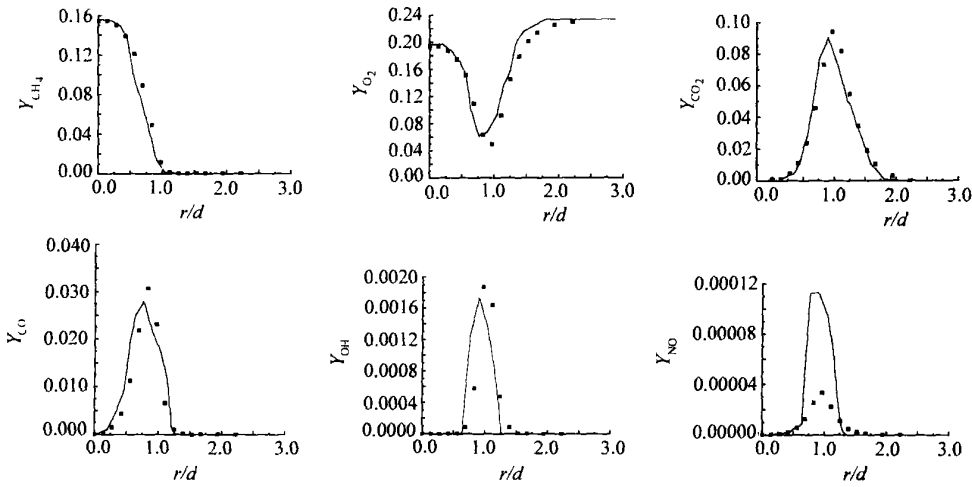


图7 各组分质量分数的径向分布 ($x/d = 7.5$)

Fig 7 Predicted and measured radial profiles of species mass fraction

温度、混合物分数均值和脉动值的径向分布。直线代表计算值,符号代表实验值^[5],计算结果和实验结果吻合较好。

图7为在轴向 $x/d = 7.5$ 位置时,各组分质量分数的径向分布。对于反应物 CH_4 、 O_2 , 生成物

CO_2 、中间产物 CO 和自由基 OH , 均给出了比较好的模拟结果,而对于 NO 排放的模拟偏大,这是因为 NO 是一种慢速反应的产物,生成速率很小,难以适应流场的快速变化以及温度的变化。

图8为多环芳烃(A1- A4)质量分数的径向分

布, 其中A 1为苯,A 2为萘,A 3为蒽,A 4为芘。

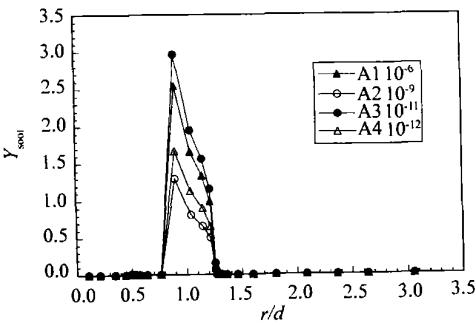


图8 多环芳烃质量分数的径向分布($x/d=7.5$)
Fig 8 Predicted radial profiles of polycyclic aromatic hydrocarbon mass fraction

各多环芳烃的绝对量的关系为: $A_1 > A_2 > A_3 > A_4$, 其峰值出现在 $r/d=1$ 附近, 即高温缺氧处。

3 结 论

采用层流小火焰模型和假定的 PDF 方法来模拟湍流扩散火焰, Farve 平均的 N-S 方程与标准的 $k-\epsilon$ 模型来模拟平均流场。以冷态丙烷湍流射流和热态甲烷湍流扩散火焰为例, 计算了燃料/空气射流扩散的平均混合分数和混合分数脉动、流场的分布和污染物的分布, 计算与实验结果

吻合较好。

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] Barlow R S, Frank J H. Effects of Turbulence on Species Mass Fractions in Methane/Air Jet Flames[A]. *Proceedings of the 27th International Symposium on Combustion* [C]. *The Combustion Institute*, 1998: 1087~1095

[3] Kazakov A, Frenklach M. Dynamic Modeling of Soot Particle Coagulation and Aggregation: Implementation with the Method of Moments and Application to High-Pressure Laminar Premixed Flames[J]. *Combustion and Flame*, 1998, 114: 484~501

[4] Wang H, Frenklach M. A Detailed Kinetic Modeling Study of Aromatic Formation in Laminar Premixed Acetylene and Ethylene Flames[J]. *Combustion and Flame*, 1997, 110: 173~221

[5] Robert W S. Data Base for a Turbulent, Nonpremixed, Nonreacting Propane-Jet Flow [OL]. <http://www.ca-sandia.gov/tmf>.

[6] Coelho P J, Peters N. Unsteady Modelling of a Pibted Methane/Air Jet Flame Based on the Eulerian Particle Flamelet Model[J]. *Combustion and Flame*, 2001, 124: 444~465

[7] Barlow R S, Frank J. Pibted CH4/air flames C, D, E and F-Release 2.0[OL]. <http://www.ca-sandia.gov/tmf>, 2003