

文章编号: 1000-8055(2007)01-0150-06

燃烧室污染物生成大涡 模拟模型的研究

颜应文, 赵坚行, 张靖周

(南京航空航天大学 能源与动力学院, 南京 210016)

摘 要: 采用亚网格动力学模型和联合概率密度函数(PDF)亚网格模型对污染物 NO 的生成进行大涡模拟. 计算中采用的数学模型有: k 方程亚网格尺度模型来估算亚网格湍流粘性; 亚网格 EBU 燃烧模型估算化学反应速率; 在交错网格体系下, 采用 SIMPLE 算法和混合差分格式来求解差分方程. 数值分析两种不同亚网格污染物生成模型和两种进口气流温度对 NO 排放的影响, 计算结果与实验数据比较表明: 两种亚网格污染物生成模型都能较好的预估燃烧室污染物 NO 的生成, 但亚网格动力学模型的计算工作量要比联合概率密度函数亚网格模型少得多, 更适合工程应用.

关 键 词: 航空、航天推进系统; k 方程亚网格尺度模型; 大涡模拟; 亚网格 EBU 燃烧模型; 联合概率密度函数亚网格模型

中图分类号: V 231.2

文献标识码: A

Study of sub-grid pollutant formation model in combustor

YAN Ying-wen, ZHAO Jian-xing, ZHANG Jing-zhou

(College of Energy and Power Engineering, Nanjing University of Aeronautics and
Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: The NO subgrid scale formation model and the beta PDF subgrid scale NO formation model were used for Large Eddy Simulation (LES) of NO emission in model afterburner with V-gutter flame stabilizer. The k -equation sub-grid scale model was used to simulate the sub-grid eddy viscosity, and the EBU combustion sub-grid scale model was employed to determine the chemical reaction rate. Discrete equations were solved with SIMPLE algorithm and hybrid scheme in staggered grid system. The effects of two different subgrid scale NO formation models and inlet temperatures on NO formation were calculated. The reasonable agreement of simulation results in comparison with experimental data shows two different subgrid scale pollutant formation models may predict the NO formation in the combustor. The NO subgrid scale formation model spends much less calculation time than the Beta PDF subgrid scale NO formation model, and it was more appropriate for engineering application.

Key words: aerospace propulsion system; the k -equation sub-grid scale model; large eddy simulation; the EBU combustion sub-grid scale model; the Beta PDF subgrid scale NO formation model

收稿日期: 2005-12-12; 修订日期: 2006-04-10

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(编号 50176017).

作者简介: 颜应文(1978), 男, 湖南省衡阳市人, 南京航空航天大学能源与动力学院博士生, 主要从事航空发动机燃烧研究.

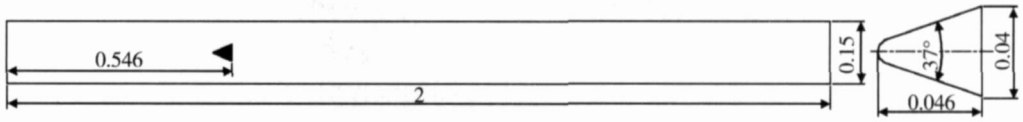


图 1 燃烧室及 V 型稳定器示意图

Fig. 1 Schematics of afterburner with V-gutter flame stabilizer

近年来,世界上几个航空工业大国及其所属的几个大航空发动机公司,针对高推比发动机的发展,燃烧室的工作压力、温度的大幅提高,污染物的排放日益增多,特别是危害性最大的 NO 的排放问题更为突出,因此在对航空发动机进行研究中把 NO 的控制作为重点进行了广泛研究,在实现低 NO 排放的新低污染燃烧技术方面取得一系列有实用价值的成果。

为了更好了解燃烧室中 NO 的生成机理,本文采用大涡模拟方法^[1-6]数值研究燃烧过程中污染物氧化氮的排放。并把概率密度函数(PDF)引入到大涡模拟中,提出了联合概率密度亚网格污染物生成模型,来数值分析污染物 NO 的浓度;同时,还数值研究不同亚网格污染物生成模型及进口气流温度对 NO 排放的影响,并通过实验来验证计算方法可靠性以及污染物生成模型的合理性。计算结果与实验数据比较表明,所采用的亚

网格污染物生成模型可以用于实际燃烧室污染物排放的预估。

1 研究对象

本文研究对象为带 V 形槽稳定器的模型加力燃烧室(如图 1 所示)。所研究的气流为油气比为 0.0585 的煤油与空气的预混混气,进口温度分别为 463K 和 700K,在加力燃烧室出口通过取样管和温度靶分别测量燃气成分和温度分布,为数值模拟提供有用的验证数据。

2 基本控制方程

在直角坐标系下,经过滤波函数滤波,采用 k 方程亚网格尺度模型来模化亚网格尺度应力,通过梯度-扩散来模化大涡模拟控制方程中非封闭项后,得到大涡模拟连续方程、动量方程、能量方程、组分方程和 k 方程^[25]为:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0 \quad (1)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho \tilde{u}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \tilde{u} \tilde{u})}{\partial x} + \frac{\partial (\rho \tilde{u} \tilde{v})}{\partial y} = - \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu_t \frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{2}{3} \rho k^{sgs} \right) \\ \frac{\partial \rho \tilde{v}}{\partial t} + \frac{\partial (\rho \tilde{v} \tilde{u})}{\partial x} + \frac{\partial (\rho \tilde{v} \tilde{v})}{\partial y} = - \frac{\partial \tilde{P}}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[2\mu_t \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{2}{3} \rho k^{sgs} \right) \end{cases} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho \tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \tilde{u} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho \tilde{v} \tilde{h}) &= \frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial y} \right) + K \left(\frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{T}}{\partial y^2} \right) + \\ &\quad \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right) \right] \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho \tilde{y}_m)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \tilde{u} \tilde{y}_m) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho \tilde{v} \tilde{y}_m) &= \frac{\partial}{\partial x} (\rho D_m \frac{\partial \tilde{y}_m}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho D_m \frac{\partial \tilde{y}_m}{\partial y}) + \\ &\quad \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{y}_m}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{y}_m}{\partial y} \right) + \bar{w}_m \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho k^{sgs}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\rho \tilde{u} k^{sgs}) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho \tilde{v} k^{sgs}) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial k^{sgs}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial k^{sgs}}{\partial y} \right) + \\ &\quad 2\mu_t \left[\left(\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \right)^2 \right] + \mu_t \left[\frac{\partial \tilde{u}}{\partial y} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial x} \right]^2 - \frac{2}{3} \rho k^{sgs} \left[\frac{\partial \tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{v}}{\partial y} \right] - \epsilon^{sgs} \end{aligned} \quad (5)$$

其中:有效粘性 $\mu_t = \mu + \mu_t$, 亚网格湍流粘性 $\mu_t = \rho C_v (k^{sgs})^{1/2} \Delta$, μ 为层流粘性, 亚网格尺度动能耗散率 $\epsilon^{sgs} = C_\epsilon \rho (k^{sgs})^{3/2} / \Delta$, K 为导热系数, D_m 为组分 m 的分子扩散系数, Δ 为特征网格尺寸。

3 数学模型

3.1 亚网格 EBU 燃烧模型

式(4)中的 $\bar{w}_m$ 为组分的化学反应速率, 需要用亚网格燃烧模型来模化, 本文采用亚网格燃烧

模型中常用的亚网格 EBU 模型. 该模型认为分子混合时间与亚网格湍流动能及它的耗散率之比成正比^[2,5], 而化学反应速率与混合速率成反比, 因此可以认为混合尺度反应速率为:

$$\dot{w}_{mix} = \frac{\min([O_2]/2, [燃料])}{k^{sgs}/\epsilon^{sgs}} = \frac{\sqrt{2k^{sgs}}}{C_{EBU} \Delta} \min([O_2]/2, [燃料]) \quad (6)$$

有效化学反应速率可定义为:

$$\dot{w}_m = \min(\dot{w}_{mix}, \dot{w}_{kin}) \quad (7)$$

这里, C_{EBU} 为模型系数, $\dot{w}_{kin}$ 为 Arrhenius 反应速率.

3.2 亚网格污染物 NO 生成模型^[1,7]

燃烧过程中 NO 因生成机理不同又可分为“热力”、“瞬发”和“燃料”NO 三种. 对于加力燃烧室, 所用的燃料为煤油, 燃气温度又较高, 因此燃烧生成的 NO 主要是“热力”NO; 实际燃烧室内都是湍流燃烧过程, NO 的生成与湍流燃烧有关, 其生成机理比较复杂, 特别是在大涡模拟情况下 NO 亚网格生成模型还很不成熟^[1,5].

根据该模型的要求, NO 组分可根据下列 NO 的输运方程来求解:

$$\frac{\partial \tilde{m}_{NO}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \tilde{m}_{NO}) = \frac{\partial}{\partial x_i}(\frac{\mu}{\sigma_{NO}} \frac{\partial \tilde{m}_{NO}}{\partial x_i}) + \bar{R}_{NO} \quad (8)$$

式中 NO 的质量相对浓度 $\tilde{m}_{NO}$ 的源项 $\bar{R}_{NO}$ 确定时, 一方面需考虑化学动力学因素 $\bar{R}_{NO,1}$ 的影响, 另一方面还需考虑湍流脉动 $\bar{R}_{NO,2}$ 的作用, 然后在两者中取小值:

$$\bar{R}_{NO} = \min(|\bar{R}_{NO,1}|, |\bar{R}_{NO,2}|) \quad (9)$$

上式中 $\bar{R}_{NO,2}$ 可用下式来模化:

$$\bar{R}_{NO,2} = C_{NO} \rho \tilde{m}_{NO} \epsilon^{sgs} / k^{sgs} \quad (10)$$

式中: C_{NO} 为模型系数; $\bar{T}$ 为气流温度, k^{sgs} 为亚网格尺度动能.

对于式(9)中的 $\bar{R}_{NO,1}$, 可以采用两种模型来模化:

3.2.1 亚网格动力学模型(模型 1)

研究表明: 温度对“热力”NO 生成速率有决定性影响^[8]. 根据 Zeldovich 机理, 可表示为^[5]:

$$\bar{R}_{NO,1} = 1.58 \times 10^{14} \frac{1}{\sqrt{T}} \exp(-\frac{67535}{T}) \sqrt{\rho} \sqrt{\tilde{m}_{O_2} \tilde{m}_{N_2}} \quad (11)$$

式中 $\tilde{m}_{O_2}$ 和 $\tilde{m}_{N_2}$ 分别为氧和氮的质量相对浓度, ρ 为气流密度; $\bar{T}$ 为气流温度.

3.2.2 联合概率密度函数(PDF)亚网格模型(模型 2)

式(11)只考虑平均温度与成分的影响, 但没有考虑在湍流作用下脉动温度与成分的对化学反应速率的作用, 为此本文把文献[7]中简化 PDF-有限反应率模型发展应用到大涡模拟中, 采用联合概率密度函数亚网格模型来估算 NO 的浓度, 按该模型先对式(9)中的 $\bar{R}_{NO,1}$, 采用无量纲温度脉动和氧浓度脉动的 PDF 来模化 $\bar{R}_{NO,1}$, 采用联合概率密度之后的 NO 反应速率可写为

$$\bar{R}_{NO,1} = 1.58 \times 10^{14} \times (\frac{P}{R})^{0.5} m_{N_2} \times \int_0^1 \int_0^1 [f_s(m_{O_2,max} - m_{O_2,min}) + m_{O_2,min}]^{0.5} \cdot \frac{1}{T_{min} + \theta(T_{max} - T_{min})} \exp(\frac{67535}{T_{min} + \theta(T_{max} - T_{min})}) P_1(\theta) P_2(f_s) d\theta df_s \quad (12)$$

式(12)中 PDF 都采用 β 函数形式表示, 取:

$$P_1(\theta) = \frac{\theta^{\beta_1-1} (1-\theta)^{\beta_1-1}}{\int_0^1 \theta^{\beta_1-1} (1-\theta)^{\beta_1-1} d\theta}$$
$$P_2(f_s) = \frac{f_s^{\beta_2-1} (1-f_s)^{\beta_2-1}}{\int_0^1 f_s^{\beta_2-1} (1-f_s)^{\beta_2-1} df_s}$$

其中温度无量纲量 $\theta = \frac{T - T_{min}}{T_{max} - T_{min}}$, T_{max} 和 T_{min} 分别为流场中的最高温度和最低温度, 氧浓度无量纲量 $f_s = \frac{m_{O_2} - m_{O_2,min}}{m_{O_2,max} - m_{O_2,min}}$, $m_{O_2,max}$ 和 $m_{O_2,min}$ 分别为流场中最高和最低氧浓度.

$$\alpha = \tilde{\phi} [\frac{\phi(1-\phi)}{\tilde{\phi}^2} - 1], \beta = \alpha(1 - \tilde{\phi})/\tilde{\phi}$$

$\tilde{\phi}$ 的无量纲脉动均方值 $\tilde{\phi}^2$ 可通过求解二阶矩输运方程得到:

$$\frac{\partial \rho \tilde{\phi}^2}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i \tilde{\phi}^2}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\frac{\mu}{\sigma_\phi} \frac{\partial \tilde{\phi}^2}{\partial x_i}) + c_1 \mu (\frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_i})^2 - c_2 \rho \epsilon^{sgs} \tilde{\phi}^2 / k^{sgs} \quad (13)$$

式中 $\tilde{\phi}$ 分别为温度无量纲量 θ 和氧浓度无量纲量 f_s .

4 数值模拟方法

4.1 控制方程的离散

由于本文的研究对象所示的区域截面对称性, 本文取一个剖面进行二维热态流场计算. 网格数为 2000×150 , 网格尺寸为 $\Delta x = \Delta y = 1.0 \times 10^{-3} \text{ m}$. 在交错网格系统下, 采用控制容积法和混合差分格式对控制方程进行离散, 时间步长 $\Delta t =$

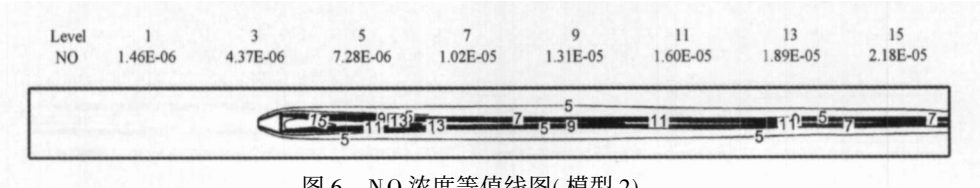


图 6 NO 浓度等值线图(模型 2)

Fig. 6 Contour of NO concentration(Model 2)

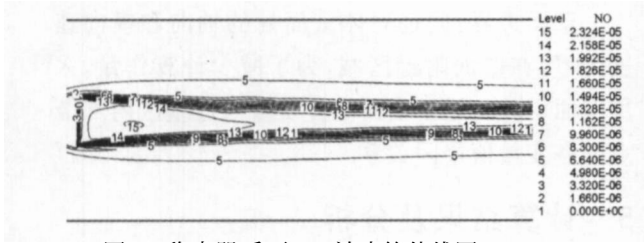


图 7 稳定器后面 NO 浓度等值线图
(模型 2)

Fig. 7 Contour of NO concentration after
V-gutter flame stabilizer (Model 2)

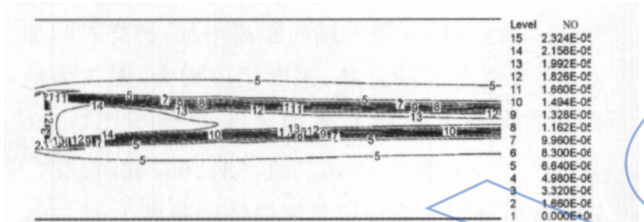


图 8 稳定器后面 NO 浓度等值线图
(模型 1)

Fig. 8 Contour of NO concentration after
V-gutter flame stabilizer (Model 1)

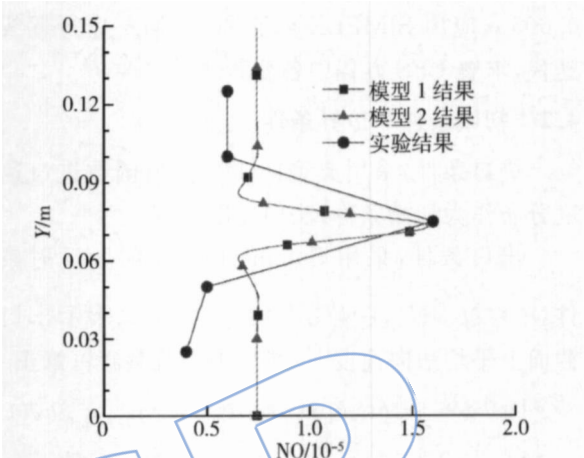


图 10 出口截面 NO 浓度分布图

Fig. 10 Profiles of NO concentration at
the outlet

表 1 不同加力室进口温度对污染物生成的影响

Table1 Influence of different inlet temperature on
NO concentration

	T_{in}/K	T_{max}/K	出口截面 $NO_{max}/10^{-6}$	出口截面 $\Delta NO_{max}/10^{-6}$
状态 1	463	1433	16	0.03
状态 2	700	1624	78	0.004

计算时间大约为 4 个小时,而采用模型 2 则计算大约 12 天.图 9 为出口截面温度分布图,由图可见,进口气流温度提高出口温度也相应增加,在状态 1 条件下,出口截面上计算所得的温度分布与实验所得的温度分布基本相吻合.图 10 为出口截面 NO 浓度分布,在出口截面上计算所得的 NO 浓度分布与实验所得的 NO 浓度分布趋势基本一致,而模型 2 的结果相对模型 1 来说与实验吻合稍好些,但两种模型所得的 NO 浓度最大值只相差 0.03×10^{-6} ,与模型 2 的巨大耗时来比较,采用模型 1 较适用于大涡模拟工程问题.表 1 为不同加力室进口温度对污染物 NO 生成的影响,由表可知,在相同油气比状况下,不同进口温度所得的燃气最高温度也不一样,当进口初温由 463 K 提高到 700K 时,燃气最高温度由 1433 K 升高到 1 624K,因燃气温度增加,出口截面上最高的 NO 浓

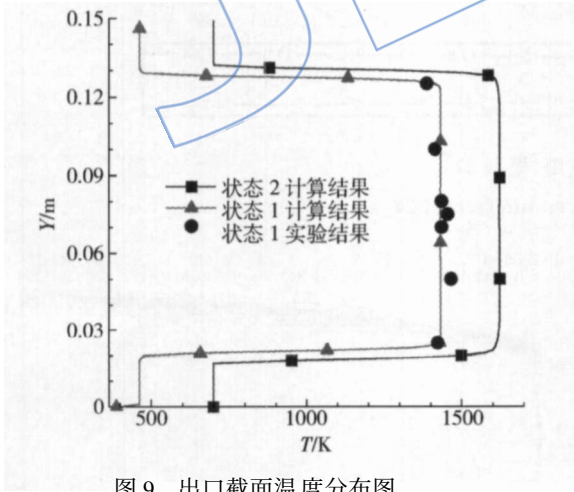


图 9 出口截面温度分布图

Fig. 9 Profiles of temperature at the outlet

计算值除了稳定器高温区域内 NO 最大浓度等值线稍有差别外,其他差别不大.图 7 中最高的 NO 浓度为 23.3×10^{-6} ,图 8 中最高的 NO 浓度为 23.24×10^{-6} ,两者的最大值相差小于 0.1×10^{-6} ,但所需的计算时间恰相差很大,采用模型 1

度也相应地由 16×10^{-6} 升高到 78×10^{-6} , 但两个不同的模型在不同的状态下对出口 NO 排放的影响都很少. 可见进口温度对 NO 排放的影响要比模型大得多.

6 结束语

本文采用大涡模拟方法对预混混气进行数值模拟, 采用 k 方程亚网格尺度模型来估算湍流亚网格尺度粘性, 亚网格 EBU 燃烧模型来估算化学反应速率, 分别采用亚网格动力学模型和概率密度函数(PDF) 来模化污染物 NO 的生成源项. 数值研究两种不同 NO 亚网格尺度模型及进口温度对 NO 排放的影响, 计算表明进口温度对 NO 排放的影响要比模型大得多. 通过数值模拟结果与实验值的比较可知, 本文采用的方法可较好地模拟污染物 NO 的生成, 但与概率密度函数(PDF) 亚网格模型相比, 亚网格动力学模型模化污染物 NO 的生成, 所需的计算时间少, 更适合工程应用.

参考文献:

[1] 赵坚行. 燃烧的数值模拟 [M]. 北京: 科学出版社, 2002.

[2] Stone C, Menon S. Simulation of fuel air mixing and combustion in a trapped vortex combustor[R]. AIAA 2000-0478.

[3] Fureby C, Moller S I. Large eddy simulation of reacting flows applied to bluff body stabilized flames[J]. AIAA Journal, 1995, 28(12): 2339-2347.

[4] 颜应文, 赵坚行. 模型燃烧室紊流燃烧的大涡模拟[J]. 航空动力学报, 2005, 20(1): 86-91.
YAN Yingwen, ZHAO Jianxing. Large eddy simulation of turbulent combustion in a model combustor[J]. Journal of Aerospace Power, 2005, 20(1): 86-91.

[5] 颜应文, 赵坚行. 加力燃烧室污染特性的大涡模拟[J]. 燃烧科学与技术, 2005, 11(1): 68-72
YAN Yingwen, ZHAO Jianxing. Large eddy simulation of pollutant performance in an afterburner [J]. Journal of combustion science and technology, 2005, 11(1): 68-72.

[6] Ravikanth V R A, Richard H P. Large Eddy Simulation of the turbulent flow past a backward facing step[R]. AIAA 2000-0542, 2000.

[7] 周力行. 多相湍流反应流体力学[M]. 北京: 国防工业出版社, 2002.

[8] 赵坚行. 热动力装置的排气污染与噪声[M]. 北京: 科学出版社, 1995.