

文章编号: 1000-8055 (2008) 04-0585-06

不可压湍流反应流直接模拟和 RANS 反应模型检验

王 方^{1,2}, 周力行², 许春晓², 黄 勇¹

(1. 北京航空航天大学 能源与动力工程学院 航空发动机气动热力重点实验室, 北京 100083;
2. 清华大学 航天航空学院, 北京 100084)

摘 要: 用谱方法对三维不可压槽道湍流反应流动进行了直接数值模拟, 得到了温度和质量分数耦合的瞬态数据库. 结果显示温度与质量分数脉动在近壁区都有条带结构. 推导了雷诺平均方法中湍流二阶矩反应模型中所求关联量的精确输运方程, 发现耗散项是化学反应率系数-质量分数关联量封闭的关键, 耗散项需要考虑化学反应影响. 基于数据库的统计结果, 对关联量模型方程中各项进行了先验研究, 发现产生项和耗散项的贡献最大, 扩散项和反应项的贡献较小, 化学反应对各项大小和分布形状有明显影响. 在算例中, 直接模拟统计得到的化学反应率系数-质量分数关联和用代数二阶矩模型的模拟值很接近, 说明 ASOM 模型具有一定的合理性.

关 键 词: 航空、航天推进系统; 直接模拟; 不可压湍流反应流动; 二阶矩湍流反应模型
中图分类号: V231.2 **文献标识码:** A

DNS of incompressible turbulent reacting flows and validation of the RANS turbulence chemistry model

WANG Fang^{1,2}, ZHOU Lixing², XU Chunxiao², HUANG Yong¹

(1. National Key Laboratory on Aero-engines, School of Jet Propulsion,
Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100083, China;
2. School of Aerospace, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: The direct numerical simulation (DNS) of well developed three dimensional incompressible turbulent reacting channel flows was carried out by using a spectral method. The instantaneous turbulence fluctuation database with the coupling of temperature and mass fraction was gained. The instantaneous results show that both the temperature fluctuation and the mass fraction fluctuation have strip structures in the near wall region. Exact transport equations of the correlations for the second order moment reaction model in the Reynolds averaged Navier-Stokes equations (RANS-SOM) are deducted. As for the correction of the reaction rate coefficient and mass fraction, the dissipation term is key to model closure, and consideration of reaction for the dissipation term of the model equation is necessary. Based on the statistical results of the DNS database, a priori study on the budget of each term in the RANS-SOM model correlations transport equations was carried out. It is found that the contributions from the production and dissipation terms are most important, whereas the contributions from the diffusion and reaction terms are rather small. The chemical reaction has obvious influence on the magnitude and distribution of all the terms. Moreover, in

收稿日期: 2007-04-18; 修订日期: 2007-07-04

作者简介: 王方(1972), 女(满族), 辽宁本溪人, 博士, 主要从事气液两相湍流燃烧研究.

the studied cases in this paper, the correlation of reaction rate coefficient and mass fraction which is obtained by DNS database statistical results is close to the value obtained by the algebra second order moment (A SOM) model prediction, affirming reasonableness of A SOM model.

Key words: aerospace propulsion system; direct numerical simulation (DNS); incompressible turbulent reacting flows; second order moment (SOM) turbulence chemistry model

近来湍流反应流动的直接模拟(DNS)取得了可观的进展^[1-2]. DNS 可以求解各种尺度的湍流, 不需要任何湍流模型和湍流反应模型, 可以对复杂化学反应及 NO 生成等情况给出湍流和化学反应相互作用的细观结构, 也可以用来检验 RANS 模拟的湍流燃烧模型和大涡模拟的亚网格(SGS)燃烧模型^[3-7]. 由于 DNS 的计算量很大, 湍流燃烧的 DNS 目前只能用于小尺寸, 较低 Re 数的简单流动的基础研究. 例如 Pope 等^[6-7] 用直接模拟研究混合对反应的影响, 检验 PDF 方程的混合模型, 并对条件矩模型和火焰面型进行了检验. 但是, 总的看来, 对有反应的流动, 用 DNS 检验 RANS 模拟封闭模型的研究尚嫌不足. 在已经用谱方法^[8] 对槽道内等温反应流动进行 DNS^[9] 的基础上, 本文对有温度变化和脉动的不可压反应流动进行直接模拟, 研究有反应的标量脉动结构, 由 DNS 的统计数据研究关联量输运方程中各项的贡献, 并且用 DNS 统计值检验二阶矩(SOM)湍流反应的封闭模型.

1 模拟方法和输运方程

1.1 控制方程

槽道内充分发展不可压缩反应流动的瞬态连续、动量、组分和能量方程为

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right] \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (Y_1) + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j Y_1) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[D \frac{\partial Y_1}{\partial x_j} \right] - w_1 / \rho \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (Y_2) + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j Y_2) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[D \frac{\partial Y_2}{\partial x_j} \right] - w_2 / \rho \tag{4}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (T) + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j T) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\lambda}{c_p \rho} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right] + w_1 Q_1 / (c_p \rho) \tag{5}$$

对瞬时化学反应率, 取一步总包反应的 Arrhenius 形式:

$$w_1 = w_2 / B = B \rho Y_1 Y_2 \exp \left[- \frac{E}{RT} \right],$$
 其中 w_1, w_2 是反应物 1 和 2 的瞬时化学反应率, β 是化学反应恰当比, B 是 Arrhenius 形式化学反应率表达式中的指数前因子, ρ 是密度, Y_1, Y_2 是反应物 1 和 2 的瞬时质量分数, E 是化学反应的活化能, R 是通用气体常数, T 是瞬时温度. 模拟中, 为了保持反应物 Y_1 和 Y_2 在上下壁面之间的梯度, 上壁面质量分数 Y_1 为 1.0, Y_2 为 0.0, 温度为 900 K, 下壁面质量分数 Y_1 为 0.0, Y_2 为 1.0, 温度为 900 K. 壁面速度为 0. 模拟中, 对化学反应率表达式中的动力学参数取两种情况: $B = 1 \times 10^8$, $E/R = 20\,000$ (Case1) 和 $B = 1 \times 10^8$, $E/R = 15\,000$ (Case2). 无量纲放热率 Q_1 取为 100. 为模拟充分发展流动, 槽道展向为周期边界条件, 法向为壁面边界条件, 槽道出口经整流再输入进口.

1.2 数值方法

直接模拟的数值方法采用谱方法, 见文献 [8]. 空间上采用 Galerkin Tau 谱展开方法, 在 x, z 方向采用 Fourier 变换, y 方向采用 Chebyshev 变换, 同时采用三阶精度的时间分裂格式. 计算域及坐标系如图 1 所示, 以槽道半宽 H , 平均速度 U_m 定义的雷诺数为 3 000. x, z 方向均匀布置 128 个节点, y 方向为 129 个, 网格数超过 10^6 . 时间步长为 H/U_m 的 0.01 倍.

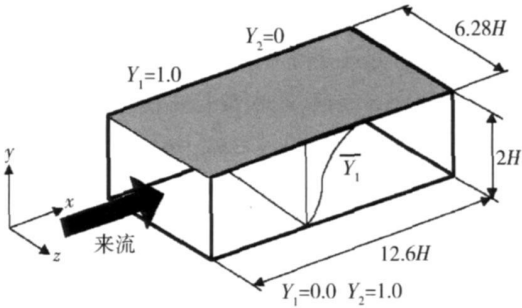


图 1 计算域示意图
Fig.1 Computational domain

1.3 反应率系数-质量分数脉动关联量和质量分数-质量分数脉动关联量运输方程

记 $K = B \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$, 则能量方程变为

$$\frac{\partial K}{\partial t} + u_j \frac{\partial K}{\partial x_j} = \frac{KE}{RT^2} \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{KE}{RT^2} \frac{w_1 Q_1}{\rho c_p} \quad (6)$$

取 $\frac{\lambda}{\rho c_p}$, c_p 和质量分数输运方程中的扩散系数 D

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{K' Y_1}}{\partial t} + \overline{u_j \frac{\partial K' Y_1}{\partial x_j}} = & - \overline{u_j K'_j} \frac{\partial \overline{Y_1}}{\partial x_j} - \overline{u_j Y_1} \frac{\partial \overline{K}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{u_j K' Y_1}}{\partial x_j} + D \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \overline{K' Y_1}}{\partial x_j} \right) - 2D \frac{\partial \overline{Y_1}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{K}}{\partial x_j} - \\ & \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{E}{R} \frac{\overline{Y_1}}{T^2} \frac{\partial \overline{K}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} - \frac{2\lambda}{\rho c_p} \frac{\overline{Y_1}}{T} \frac{\partial \overline{K}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho} \overline{K' w_1} + \frac{EQ_1}{\rho c_p R} \frac{\overline{Y_1} K w_1}{T^2} \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{Y_1 Y_2}}{\partial t} + \overline{u_j \frac{\partial Y_1 Y_2}{\partial x_j}} = & - \overline{u_j Y_2} \frac{\partial \overline{Y_1}}{\partial x_j} - \overline{u_j Y_1} \frac{\partial \overline{Y_2}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{u_j Y_1 Y_2}}{\partial x_j} + D \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \overline{Y_1 Y_2}}{\partial x_j} \right) - \\ & 2D \frac{\partial \overline{Y_1}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{Y_2}}{\partial x_j} - \overline{\rho Y_1 Y_1 Y_2 K} - \overline{\rho Y_2 Y_1 Y_2 K} \end{aligned} \quad (9)$$

将精确方程的右项分为产生项、扩散项、耗散项和反应源项, 和模型方程的对应项进行对比, 发现耗散项和反应源项是封闭的难点, 在二阶矩输运方程模型中考虑化学反应的影响是对的。

2 模拟结果和讨论

图 2 和图 3 分别给出 Case1 的温质量分数脉动的均方根值和温度脉动均方根值的瞬态结构。

都是常数, 则有

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{Y_1 T'}}{\partial t} + \overline{u_j \frac{\partial Y_1 T'}{\partial x_j}} = & - \overline{T' u_j} \frac{\partial \overline{Y_1}}{\partial x_j} - \overline{Y_1 u_j} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} - \\ & \frac{\partial \overline{u_j Y_1 T'}}{\partial x_j} + D \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \overline{Y_1 T'}}{\partial x_j} \right) - 2D \frac{\partial \overline{T'}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{Y_1}}{\partial x_j} + \\ & \overline{Y_1 \frac{w_1 Q_1}{\rho c_p}} - \overline{T' \frac{w_1}{\rho}} \end{aligned} \quad (7)$$

在近壁区, 标量脉动场也有类似于速度场的条带结构, 反映了该处标量与速度的相互作用. 随着 y^+ 增加, 湍流增强, 条带结构趋于破碎. 化学反应的加入增强了这种破碎的趋势, 不同 B 和 E/R 的时平均质量分数和时平均温度的分布见图 4 和图 5, Case2 的化学反应强于 Case1 的, 原因在于指数项中活化能的降低。

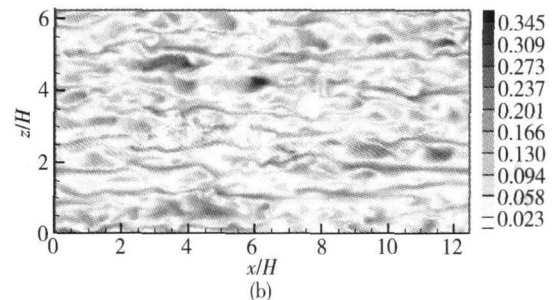
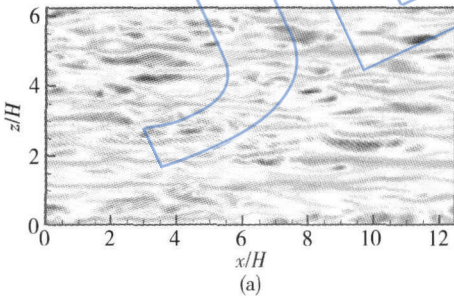


图 2 质量分数脉动的瞬时值 ($a-y^+=8.2$; $b-y^+=24.9$)

Fig. 2 Instantaneous map of mass fraction fluctuation ($a-y^+=8.2$; $b-y^+=24.9$)

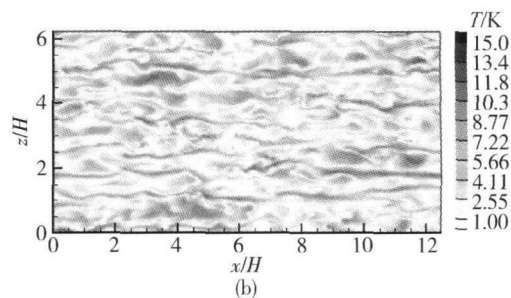
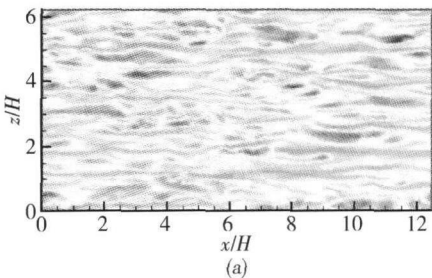


图 3 温度脉动的瞬时值 ($a-y^+=8.2$; $b-y^+=24.9$)

Fig. 3 Instantaneous map of temperature fluctuation ($a-y^+=8.2$; $b-y^+=24.9$)

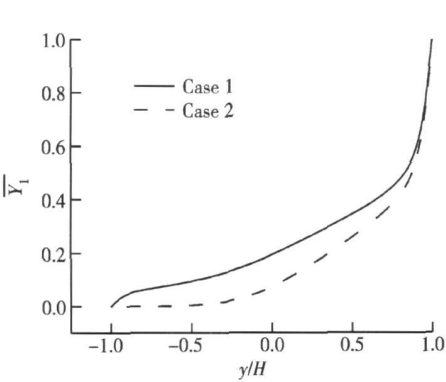


图 4 时平均质量分数

Fig. 4 Time averaged mass fraction

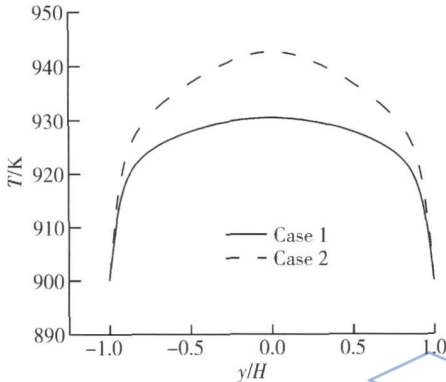


图 5 时平均温度

Fig. 5 Time averaged temperature

质量分数-质量分数关联, 温度-质量分数关联和反应率系数-质量分数关联分布见图 6~图 8. 在所研究的反应流动中, 反应率系数-质量分数关联和温度-质量分数关联的数值要远远大于质量分数-质量分数的关联, 因此, 无论在二阶矩运输方程模型中还是在其代数模型中, 反应率系数-质量分数关联的作用都是不能被忽略的. 另外, 反应率系数-质量分数关联和温度-质量分数关联的分布十分相似, 差不多呈正比关系. 因此二阶矩运输方程模型中假设反应率系数-质量分数关联的产生正比于反应率系数-质量分数关联的产生是合理的.

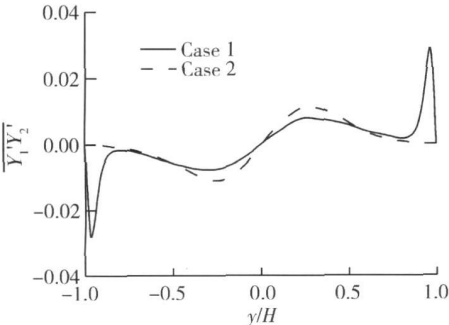


图 6 质量分数-质量分数关联

Fig. 6 Correlation of mass fraction and mass fraction

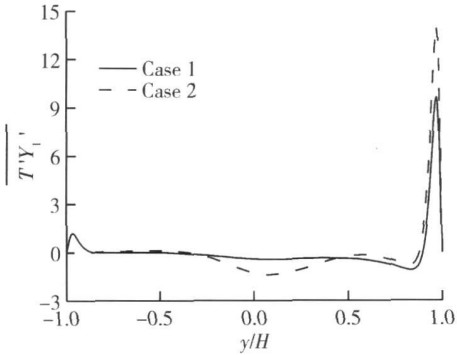


图 7 温度-质量分数关联

Fig. 7 Correlation of temperature and mass fraction

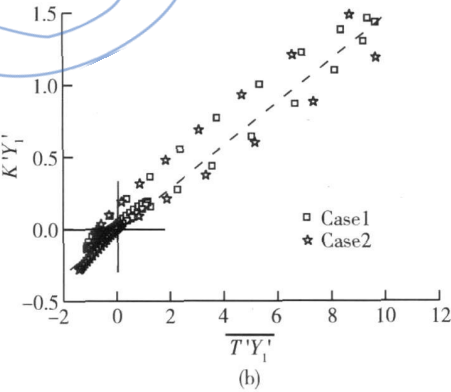
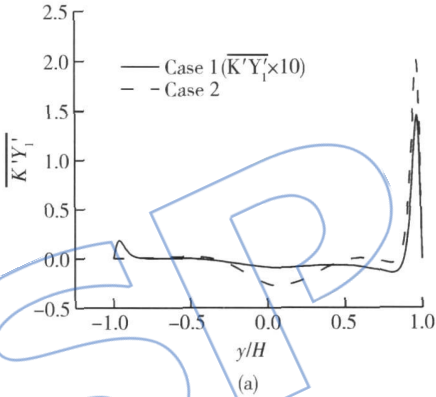


图 8 反应率系数-质量分数关联

Fig. 8 Correlation of reaction rate coefficient and mass fraction

用直接模拟得到的数据, 对质量分数-质量分数关联, 温度-质量分数关联和反应率系数-质量分数关联运输方程各项的贡献进行了先验性统计, 其结果见图 9~图 11. 在所有关联运输方程各项的贡献中, 显然产生项起到最大的作用, 耗散项其次, 当化学反应率系数比较大的时候, 化学反应项也起到相当大的作用, 这一点与二阶矩模型中认为关联量方程的耗散项中要考虑化学反应的影响相一致. 从数值上, 质量分数-质量分数关联运输方程各项的数值随着化学反应系数的增加而

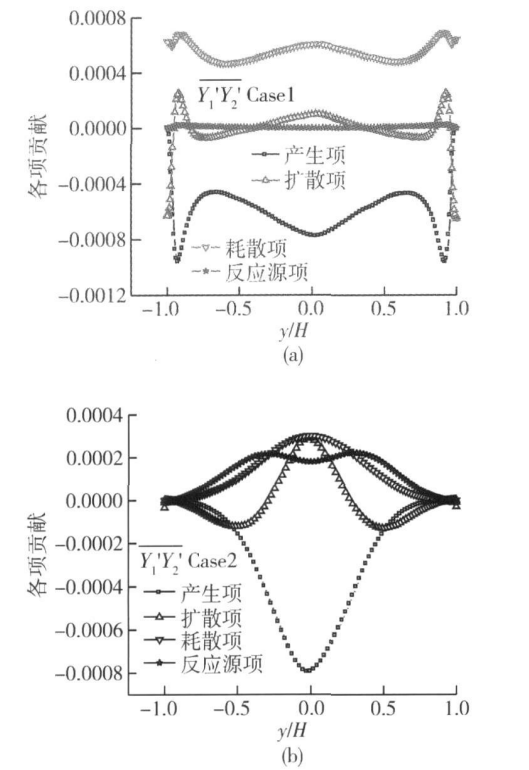


图 9 质量分数-质量分数关联运输方程中各项的贡献
Fig. 9 Budget of terms in the transport equation of the correlation of mass fraction and mass fraction

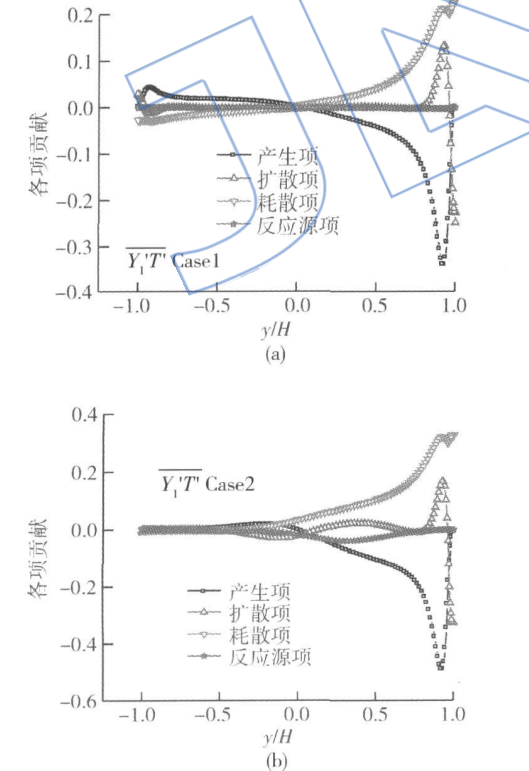


图 10 温度-质量分数关联运输方程各项的贡献
Fig. 10 Budget of terms in the transport equation of the correlation of temperature and mass fraction

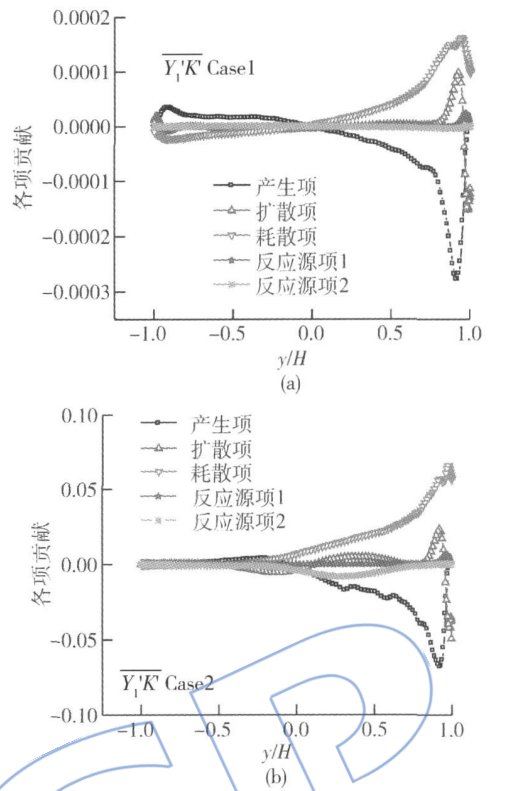


图 11 反应率系数-质量分数关联运输方程各项的贡献
Fig. 11 Budget of terms in the transport equation of the correlation of reaction rate coefficient and mass fraction

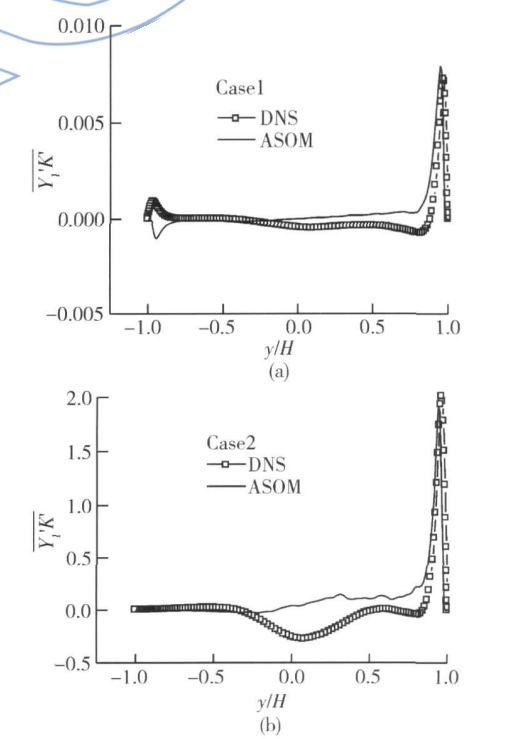


图 12 ASOM 模型的化学反应率系数-质量分数关联的模拟值和 DNS 统计值的比较
Fig. 12 Comparison between the DNS statistical result and ASOM model result in the correlation of reaction rate coefficient and mass fraction

减小,温度-质量分数关联和反应率系数-质量分数关联输运方程各项的数值随着化学反应系数的增加而增加,其中反应率系数-质量分数关联输运方程中的各项的数值随着化学反应系数的增加而增加了近 500 倍,显示反应率系数脉动的强非线性.另外,温度-质量分数关联和反应率系数-质量分数关联输运方程各项的分布十分相似,可见在一定条件下,温度-质量分数关联和反应率系数-质量分数关联输运方程相似.

从上文分析和实际计算可知, $\overline{K'Y_1}$ 的非线性很强.在雷诺平均的代数二阶矩(ASOM)模型中,用梯度的乘积模拟关联量:

$$\overline{K'Y_1} = C_{KY_1} \frac{k^3}{\epsilon^2} \frac{\partial K}{\partial x_j} \frac{\partial Y_1}{\partial x_j} \tag{10}$$

进一步用 DNS 统计的反应率系数-质量分数关联量精确数值与检验代数二阶矩(ASOM)模型的模拟值对比,结果如图 12 所示,模拟值和精确值十分接近.表明代数二阶矩模型在本文的计算工况中具有合理性.

3 结 论

(1) 推导了反应率系数-质量分数关联 $\overline{K'Y_1}$ 的精确输运方程,对二阶矩模型的研究、封闭有理论意义.

(2) 标量脉动存在近壁区的条带结构,湍流加速了条带结构的破碎.

(3) 在本文直接模拟的不可压湍流反应流动中,标量脉动关联量输运方程中的产生项和耗散项贡献最大,扩散项和反应项的贡献较小,化学反应对各项大小和分布形状有明显影响,同时二阶矩输运方程模型中耗散项考虑化学反应影响是对的.

(4) 在本文模拟的流动条件下,反应率系数-质量分数关联与温度-质量分数关联近似成正比,这说明二阶矩输运方程模型中假定反应率系数-质量分数关联的产生正比于温度-质量分数关联

的产生是合理的. DNS 统计的化学反应率系数-质量分数关联量和代数二阶矩模型的模拟值接近,说明该模型具有合理性.

参考文献:

[1] Shankar M, Jacqueline H C, Luc V. Finite rate chemistry and transient effects in direct numerical simulations of turbulent non premixed flames [J]. Combustion and Flames, 1995, 102: 285-297.

[2] Benoit B, Fokion N E, Thierry P. Direct numerical simulation of heat release and NOx formation in turbulent non premixed flames [J]. Combustion and Flame, 1999, 119: 69-83.

[3] Montgomery C J, Kosaly G, Riley J J. Direct numerical simulation of turbulent reacting flow using a reduced hydrogen oxygen mechanism [J]. Combustion and Flame, 1993, 95(3): 247-260.

[4] Wang Y, Trouvé A. Artificial acoustic stiffness reduction in fully compressible, direct numerical simulation of combustion [J]. Combustion Theory and Modelling, 2004, 8: 633-660.

[5] Bedat B, Egolfopoulos F N, Poinso T. Direct numerical simulation of heat release and NOx formation in turbulent non premixed flames [J]. Combustion and Flame, 1999, 119: 69-83.

[6] Overholt M R, Pope S B. Direct numerical simulation of a statistically stationary, turbulent reacting flow [J]. Combustion Theory and Modeling, 1999, 3: 371-408.

[7] Lee Y Y, Pope S B. Non premixed turbulent reacting flow near extinction [J]. Combustion and Flame, 1995, 101: 501-528.

[8] 许春晓. 槽道湍流的直接模拟 [D]. 北京: 清华大学工程力学系, 1995.

XU Chunxiao. Direct numerical simulation of channel flow [D]. Beijing: Department of Mechanics Engineering, Tsinghua University, 1995.

[9] 王方, 许春晓, 周力行. 等温反应湍流流动标量关联量输运的直接模拟 [J]. 化工学报, 2007, 58(3): 544-549.

WANG Fang, XU Chunxiao, ZHOU Lixing. DNS of scalar correlation moment transport in isothermal turbulent reacting flows [J]. Journal of Chemical Industry and Engineering (Chinese), 2007, 58(3): 544-549.