

文章编号:1000-8055(2011)08-1750-06

超声速反应流火焰面/进度变量模型

范周琴, 孙明波, 刘卫东

(国防科学技术大学 航天与材料工程学院, 长沙 410073)

摘 要: 基于 Pierce 低马赫数条件下的火焰面/进度变量模型, 考虑可压缩性和激波的影响, 发展了用于超声速湍流反应流的火焰面/进度变量模型. 该模型通过求解混合分数和进度变量两个标量方程来描述化学反应, 且采用火焰面方程解的完整的三个分支: 稳态燃烧分支、具有局部熄火状态的非稳态分支和完全熄火分支. 利用该模型对德国宇航中心(DLR)的超燃冲压发动机进行模拟, 与稳态火焰面模型得到的附着火焰不同, 计算结果捕捉到了熄火和火焰抬举现象; 且数值阴影和平均温度分布与实验结果吻合较好.

关 键 词: 超声速湍流燃烧; 稳态火焰面模型; 火焰面/进度变量模型; 熄火; 抬举火焰

中图分类号: V231.3

文献标志码: A

Flamelet/progress variable model for supersonic reacting flows

FAN Zhou-qin, SUN Ming-bo, LIU Wei-dong

(College of Aerospace and Materials Engineering,

National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: The flamelet/progress variable model for supersonic turbulent reacting flows was developed based on Pierce's model for low Mach number flows, in consideration of the compressibility effects and shock waves. The present model solved the mixture fraction and progress variable transport equations, and employed three solution branches of flamelet equation: the steady burning branch, the unstable branch of partially extinguished states and the complete extinction state. The performance of the flame/progress variable model was compared to the steady flamelet model for predicting the product and temperature field of a hydrogen-air supersonic combustion ramjet engine in DLR (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt) for which experimental data are available. With capturing of extinction and lifted flame, the present model is good agreement with the experimental data, and outperforms the steady flamelet model which predicts an attached flame.

Key words: supersonic turbulent combustion; steady flamelet model; flamelet/progress variable model; extinction; lifted flame

湍流燃烧一直是燃烧学研究的重要领域, 随着计算机技术的飞速发展, 数值模拟逐渐成为研究湍流燃烧的重要手段. 超声速湍流燃烧数值模拟面临的最大困难是化学反应源项的封闭, 针对此人们提出了多种燃烧模型. 早期的快速反应模

型由于采用一步总包反应, 因此不能处理有限速率化学动力学问题. 条件矩模型^[1]由于数值积分过程计算量很大, 目前还处于进一步发展中. 概率密度函数模型^[2]是较合理的模型, 可以处理任何燃烧问题. 对于复杂的反应, 因其依赖于混合模型

收稿日期: 2010-07-21; 修订日期: 2010-10-13

基金项目: 国家自然科学基金(50906098); 高等学校博士点新教师专项科研基金(20094307120005)

作者简介: 范周琴(1983-), 女, 河南开封人, 博士生, 研究领域为高超声速推进技术.

以及采用 Monte Carlo 算法计算量巨大的特点而应用受限. Peters^[3] 提出的火焰面模型由于具有计算量小且可以处理有限速率化学动力学问题等诸多优点,近年来受到了广泛的关注.

经典的稳态火焰面模型认为湍流燃烧场由大量的火焰面和无反应湍流场组成,且火焰面厚度比 Kolmogorov 涡旋尺度小,所以可将火焰面内部结构和湍流对火焰面的作用分开处理,从而将湍流流动和化学反应解耦,大大减少了计算开支.但由于稳态火焰面模型采用的解空间有限,所以不能描述流场中的局部点火和熄火现象. Pitsch 等人^[4] 的研究认为:点火和熄火现象是绝大多数冲压发动机中普遍存在的问题,其预测的准确与否将直接关系到流场的描述和污染物的预测.为此,人们进行了多种尝试和修正,以期可以用火焰面模型来描述火焰的局部点火和熄火现象.如 Pitsch 等人^[5-6] 发展了非稳态火焰面模型,该模型在预测火焰局部熄火方面已取得了巨大成功,在预测火焰的重点火现象方面还有所欠缺,另外实时数据库的生成会造成巨大的计算量.另一种方法是基于 level-set^[7] 的 G 方程(G-equation)模型,但 G 方程中湍流火焰传播速度的计算一直是研究的难点.近年来 Pierce 等人^[8-9] 提出的火焰面/进度变量(flame/progress variable,简称 FPV)模型通过引入进度变量来量化火焰状态,已被证明可以处理局部熄火问题.该种模型由于避免了湍流火焰传播速度的计算,且计算量小,可能成为未来熄火现象研究的主流发展方向.但是该模型是基于低马赫数假设发展起来的,目前很少被用于超声速反应流的计算中^[10].

本文在低马赫数火焰面/进度变量模型基础上,考虑可压缩性和激波的影响,对火焰面/进度变量模型进行适当修正.将修正后的模型用于超声速湍流燃烧流场的计算,并与稳态火焰面模型和实验结果进行对比,测试其预测超声速湍流燃烧火焰局部熄火的能力,为其下一步发展提供参考.

1 火焰面/进度变量模型

火焰面方程的解是一典型的 S 曲线(S-shaped curve),表征最大火焰温度随标量耗散率 χ 的变化.图 1 给出了在 $p = 101\,325\text{ Pa}$, $T_{\text{air}} = 340\text{ K}$, $T_{\text{H}_2} = 250\text{ K}$ 条件下得到的 S 曲线.该曲线包含三个分支^[9]:稳态燃烧分支、具有部分熄火状态的非稳态分支和完全熄火分支.在稳态燃烧分支,最大

火焰温度随 χ 的增大减小;在非稳态分支,最大火焰温度随 χ 的增大而增大;在完全熄火分支,最大火焰温度与 χ 无关.在经典的稳态火焰面模型中,仅采用 S 曲线的稳态燃烧分支,当 χ 大于临界标量耗散率时认为完全熄火(即采用完全熄火分支).不难看出,稳态火焰面模型在临界标量耗散率附近的处理方法会导致解的不连续,进而可能引发非物理解和数值不稳定.另外稳态火焰面模型还不能准确描述稳态燃烧解和完全熄火之间的中间状态.

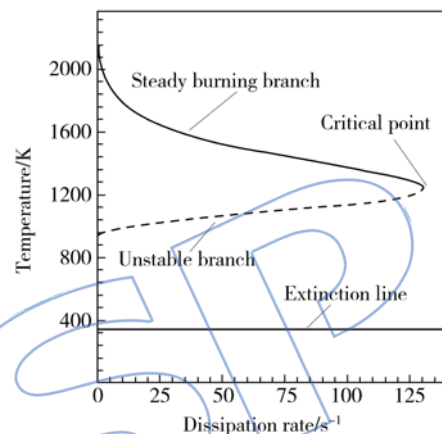


图 1 $p = 101\,325\text{ Pa}$, $T_{\text{air}} = 340\text{ K}$, $T_{\text{H}_2} = 250\text{ K}$ 条件下氢气/空气燃烧的 S 曲线
Fig. 1 S-shaped curve for hydrogen/air under $p = 101\,325\text{ Pa}$, $T_{\text{air}} = 340\text{ K}$, $T_{\text{H}_2} = 250\text{ K}$

为了弥补稳态火焰面模型的缺陷, Pierce^[9] 提出了 FPV 模型.在该模型中, S 曲线的三个分支均被采用,包括非稳态分支,因此可以描述火焰的点火和熄火现象.由图 1 可以看出包含非稳态分支的火焰状态沿 S 曲线随标量耗散率不单调变化,因此必须引入新的参数来区分不同分支上的火焰状态.这里选取进度变量 C 作为 S 曲线上不同火焰状态的量化指标.进度变量有多种定义方式,本文取生成物的质量分数作为进度变量.图 2 给出了下文实验条件下不同标量耗散率时 C 随混合分数 Z 的分布,虚线代表稳态燃烧分支解,其他代表非稳态燃烧分支解.可以看出对于给定的 C 和 Z ,存在唯一的火焰状态与之相对应,即可以用 C 来描述包含非稳态分支的 S 曲线上的化学反应程度.

FPV 模型是从不可压流发展起来的,其在超声速反应流中的应用困难主要体现为激波的作用和可压缩性的影响,传统 FPV 模型不能直接应用,必须对其进行修正. FPV 模型的核心是火焰

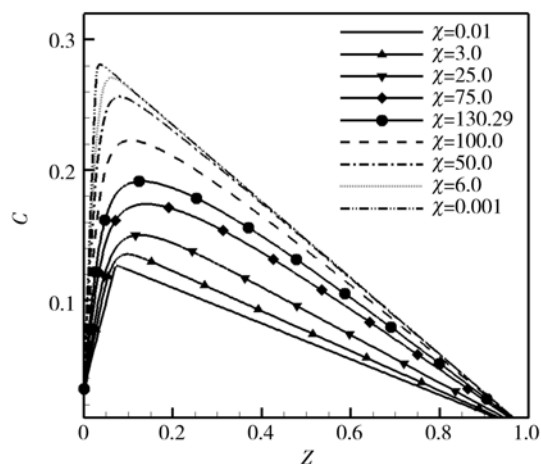


图2 不同标量耗散率下进度变量随混合分数的变化
Fig. 2 Progress variable as function of mixture fraction for different scalar dissipation rates

面模式,因此其修正主要体现为火焰面模式的修正.关于火焰面模式的修正,前人做了大量工作,如 Zheng 等^[11]扩展了不可压层流火焰面模型,将动能改变引起的温度变化修正进入温度计算中;Sabelnikov 等^[12]建立了多个压力状态的火焰数据库,以及 Oevermann^[13]的激波捕捉算法.由于文献[13]的处理方法简单易行,目前应用较多.本文也采取了文献[13]的解决办法:只有数据库中的组分质量分数被使用,当地的温度由能量方程隐式求解得到.

2 控制方程

在具体实施过程中,FPV 模型与稳态火焰面模型类似,也是通过求解火焰面方程得到数据库以表征化学热力学状态关系,通过概率密度函数表征亚格子脉动的影响.唯一的不同仅是多求解了 C 的方程及利用进度标量代替标量耗散率作为区分数据库的量化指标.因此,与稳态火焰面模型相比,FPV 模型计算量几乎没有增加.

稳态火焰面模型的控制方程及数值方法可参见文献[14],大涡过滤后 C 的控制方程为

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{C}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{C} - \bar{\rho} D \nabla \tilde{C} + C^{ss}) = \bar{\rho} \bar{\omega}_c$$

其中 $\bar{\omega}_c$ 为源项.化学热力学状态关系为: $Y_i = Y_i(Z, C)$, $T = T(Z, C)$, $\bar{\omega}_c = \bar{\omega}_c(Z, C)$.化学热力学参数的过滤值则由 Z 和 C 的联合概率密度函数 $P(Z, C)$ 计算得到,计算过程中假定 Z 和 C 分别服从 β 分布和 δ 分布,且统计上互相独立.

3 结果和讨论

数值模拟对象是德国宇航中心(DLR)^[15]的氢燃料超燃冲压发动机,其相关介绍及边界条件的处理可参见文献[14].为减小计算量,采用二维模拟,网格总量约 10 万,分 8 个区并行计算.共生成 61 个火焰面数据库,其中 40 个为稳态火焰面数据库,21 个为非稳态火焰面数据库.定义进度变量 C 为水的质量分数.

冷态流场计算结果可参见文献[14],此处仅给出燃烧流场计算结果.

图 3~图 7 给出了燃烧流场计算结果,它们是在完全发展的冷流流场基础上,耦合火焰面数据库得到.图 3 给出了两种模型计算得到的喷口附近瞬时混合分数分布和相应的速度场分布.

由于混合分数是守恒标量,其分布应与化学反应无关,所以在相同的计算条件下,不同燃烧模型计算得到的混合分数分布应该基本一致.但从图 3 可以看出,FPV 模型和稳态火焰面模型得到的混合分数分布差别较大,尤其在喷口附近.主要表现为:FPV 模型得到的混合分数分布呈现出明显的不对称性,且在喷口附近扩散较稳态火焰面模型迅速.这是由于 FPV 模型比稳态火焰面模型多采用了 S 曲线上的非稳态分支,使得局部地区化学反应释热相应减小,造成流场结构发生变化(表现为图 3 中的速度场分布差异),进而影响标量混合.

火焰面模型中,混合分数分布对反应区位置有重要影响,进而影响生成物分布和温度分布.图 4 给出了与图 3 相对应的瞬时生成物质量分数分布,用生成物质量分数的最大值标示火焰位置,即图中的白色区域.可以看出,与混合分数分布相对应,两种模型得到的火焰分布在喷口附近存在较大差异.主要表现为:稳态火焰面模型得到的火焰紧贴在喷口附近的壁面上(图 4(a),(c)),而 FPV 模型预测的火焰则发生了抬举现象.在 $t = t_1$ 时刻(图 4(b)),火焰在喷口下方附近发生抬举,而在 $t = t_2$ 时刻(图 4(d)),火焰在喷口上方附近发生抬举.这主要是由于在喷口附近发生了局部熄火,造成外部新鲜气流可以直接进入到火焰内部,使得局部生成物质量分数急剧降低,从而形成抬举火焰.图 4 说明 FPV 模型可以较好地捕捉流场中的熄火和火焰抬举现象.

图 5 给出了计算得到的时均温度分布.可以看出,稳态火焰面模型中,高温区主要集中在 $z =$

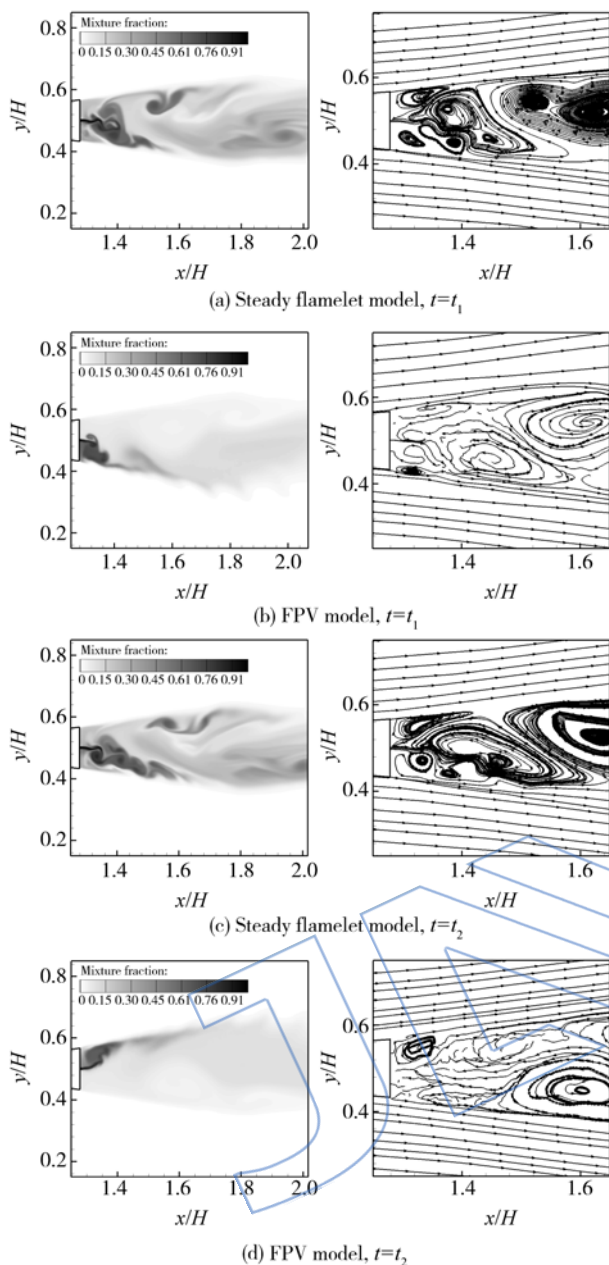


图 3 喷口附近瞬时混合分数和速度场分布

Fig. 3 Snapshot of mixture fraction and velocity vectors near injection

x_{st} 附近,并形成附着火焰,这是由于该模型中温度分布主要与混合分数相关.而 FPV 模型中,混合分数和生成物质量分数共同影响着温度分布,所以图 5(b)得到的高温区与图 5(a)存在差异,且在喷口附近火焰发生抬举.另外图 5(a)中火焰内部明显存在一处高温区,这是由于稳态火焰面模型自身缺陷所引发的数值不稳定造成的.

图 6 给出计算得到的燃烧流场时均数值阴影与实验阴影的对比.可以发现,两者基本一致,说明采用的燃烧模型可以较好地预测超声速燃烧过

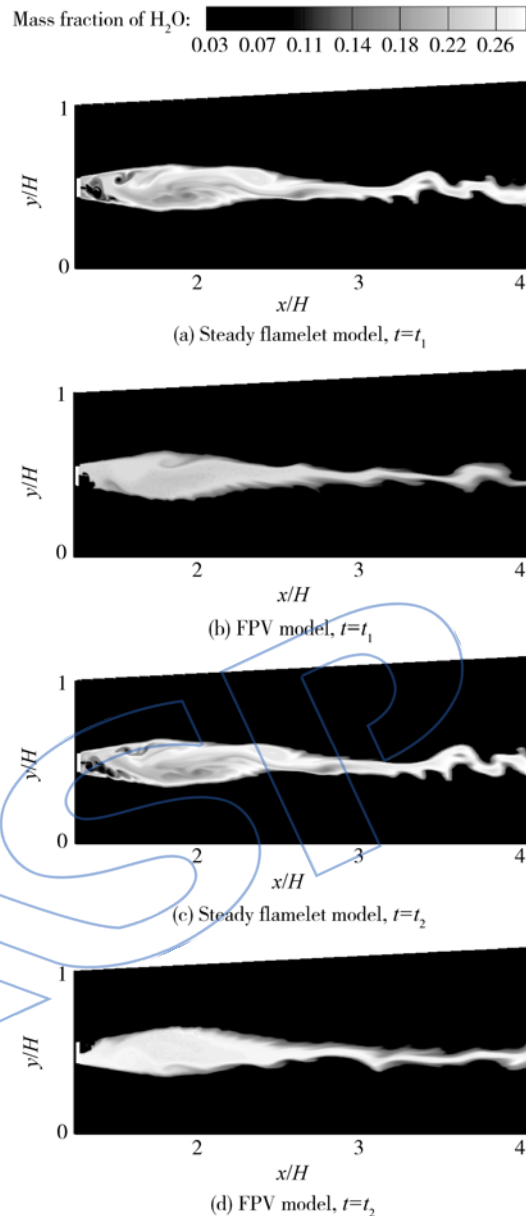


图 4 水的质量分数云图

Fig. 4 Snapshot of mass fraction of H_2O in reacting flow

程.主要包括:①整个反应区内没有激波,为亚声速区;②在喷口附近,化学反应使得基板尾部压力升高,剪切层向外扩展;③至流向距离 $x=80\text{ mm}$ 处,受流场中波系干扰和化学反应的影响,剪切层逐渐向射流中心靠拢;④至流向距离 $x=200\text{ mm}$ 处,上下两层剪切层平行于射流中心平面向下游发展;⑤当流向距离 $x<110\text{ mm}$ 时,两种模型得到的反应区宽度与实验相当,激波位置和形状与实验相似;⑥与稳态火焰面模型相比,FPV 模型计算的激波位置更接近于实验结果,激波的信息也更丰富;⑦当流向距离 $x>130\text{ mm}$ 时,两种模型得到的反应区宽度均比实验窄,但在反应区的

边缘 FPV 模型得到了与实验类似的对称性涡结构,而稳态火焰面模型得到的涡结构非常不规则,与实验差别较大。

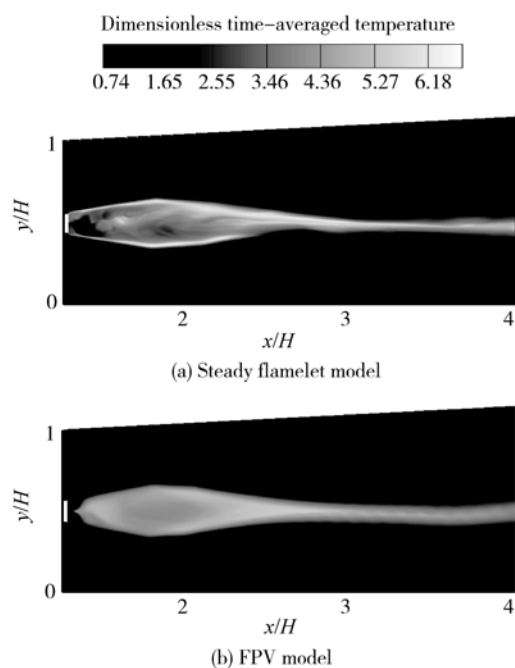


图5 燃烧流场时均温度分布
Fig. 5 Time-averaged temperature distribution in reacting flow

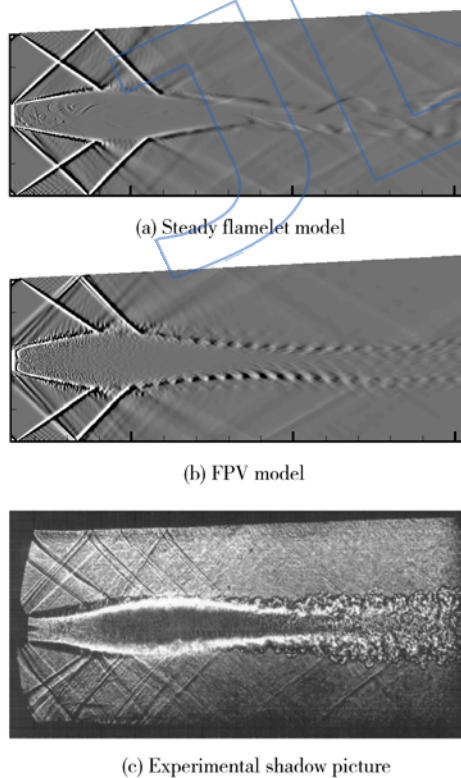


图6 燃烧流场数值阴影与实验阴影对比
Fig. 6 Comparison of numerical and experimental shadow pictures in reacting flow

图7给出了不同流向位置平均温度剖面分布.可以看出,在 $x=78\text{ mm}$ 处,由于低温氢的喷入,温度剖面呈现双峰分布;稳态模型较好地捕捉到了这一现象,而 FPV 模型预测结果较差;FPV

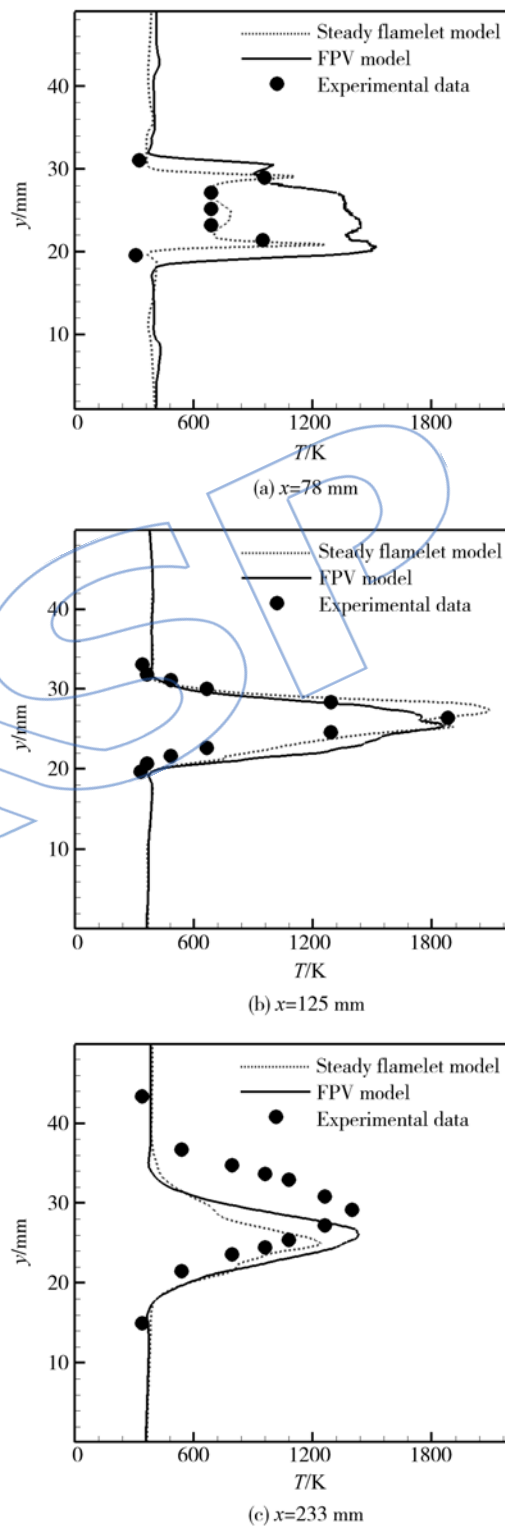


图7 不同流向位置温度剖面分布
Fig. 7 Cross-stream temperature profiles at different stream-wise locations

模型与实验之间的差异可能与反应进度变量的选取有关。本文计算发现生成物质量分数在混合分数极限值处不满足与火焰面数据库一一对应,因此文中对数据库采取截断处理,即将不满足一一对应的状态点移除,这可能会造成局部流场的错误描述。在 $x=125\text{ mm}$ 处,两种模型得到的反应区宽度与实验相当;FPV 模型得到的最大温度与实验接近,而稳态火焰面模型计算的最大温度比实验大。随着向下游发展,在 $x=233\text{ mm}$ 处,稳态模型得到的最大温度明显小于实验值,而 FPV 模型与实验相当;但两种模型计算的反应区中心位置与实验差别较大,计算得到的中心位置约在 $y=25\text{ mm}$,而实验测量值约在 $y=30\text{ mm}$ 附近。这可能是由于没有考虑无滑移壁面边界条件造成的,因为壁面附面层分离产生的诱导激波会对火焰结构及流场产生重要影响,这可以从图 6(c)中明显看出。另外,由于喷流及湍流具有明显的三维特性,而本文为二维模拟,这可能也会影响到流场预测的准确性。

4 结 论

将 Pierce 等人提出的火焰面/进度变量模型进行扩展修正,使之能够用于超声速反应流的数值模拟。利用修正后的火焰面/进度变量模型对德国宇航中心(DLR)超燃冲压发动机支板构型氢气/空气超声速扩散燃烧进行二维计算,得到以下结论:

1) 与稳态火焰面模型得到的附着火焰不同,火焰面/进度变量模型可以捕捉到局部熄火和火焰抬举现象。

2) 数值阴影表明反应区为亚声速区,与实验结果整体吻合较好;但靠近下游预测的反应区宽度略窄,这可能是由于忽略激波/附面层干扰造成的。

3) 预测的不同流向位置温度剖面分布与实验基本一致,但也存在一定差异。这可能是由于多种原因造成的,如模型自身缺陷、进度变量的不恰当选取、单位 Lewis 假设、忽略三维效应等。下一步工作可以尝试从模型修正、考虑激波附面层干扰、不同 Lewis 数和三维计算等方面入手进行深入研究。

参考文献:

[1] Klimelo A Y, Bilger R W. Conditional moment closure for

turbulent combustion[J]. Progress Energy Combustion Science, 1999, 25(6): 595-687.

[2] Pope S B. PDF methods for turbulent reactive flows[J]. Progress Energy Combustion Science, 1985, 11(2): 119-192.

[3] Peters N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion[J]. Progress Energy Combustion Science, 1984, 10(3): 319-339.

[4] Pitsch H, Trouillet P, Pierce C D, et al. A joint experimental/large eddy simulation study of a model gas turbine combustor[R]. San Diego: Meeting of the Western States Section of the Combustion Institute, WSSCI 02S-59, 2002.

[5] Pitsch H, Cha C M, Fedotov S. Flamelet modelling of non-premixed turbulent combustion with local extinction and re-ignition[J]. Combustion Theory and Modelling, 2003, 7(2): 317-322.

[6] Pitsch H, Fedotov S. Investigation of scalar dissipation rate fluctuations in non-premixed turbulent combustion using a stochastic approach[J]. Combustion Theory and Modelling, 2001, 5(1): 41-57.

[7] Peters N. Turbulent combustion[M]. Cambridge: Cambridge University, 2000.

[8] Pierce C D, Moin P. Progress variable approach for large eddy simulation of non-premixed turbulent combustion[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2004, 504: 73-97.

[9] Pierce C D. Progress variable approach for large eddy simulation of turbulent combustion[D]. Stanford, CA: Stanford University, 2001.

[10] Terrapon V E, Ham F, Pecnik R, et al. A flamelet-based model for supersonic combustion[R]. Stanford, CA: Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, 2009.

[11] Zheng L L, Bray K N C, Zhou L X, et al. The application of new combustion and turbulence models to H_2 -air non-premixed supersonic combustion[J]. Combustion and Flame, 1994, 99(2): 440-448.

[12] Sabelnikov V, Deshaies B, Figueira L S F, et al. Revisited flamelet model for non-premixed combustion in supersonic turbulent flows[J]. Combustion and Flame, 1998, 114(3-4): 577-584.

[13] Oevermann M. Numerical investigation of turbulent hydrogen combustion in a scramjet using flamelet modeling[J]. Aerospace Science and Technology, 2000, 4(7): 463-480.

[14] 范周琴, 孙明波, 刘卫东. 支板喷射超声速燃烧流场三维大涡模拟[J]. 国防科技大学学报, 2011, 33(1): 1-6.

FAN Zhouqin, SUN Mingbo, LIU Weidong. Three dimensional large eddy simulation of supersonic combustion flowfield with strut[J]. Journal of National University of Defense Technology, 2011, 33(1): 1-6. (in Chinese)

[15] Waidmann W, Alff F, Böhm M, et al. Supersonic combustion of hydrogen/air in a scramjet combustion chamber[J]. Space Technology, 1995, 15(6): 421-429.