

钝体稳定射流火焰的火焰面模型数值研究

韩宗英, 何昌升, 李井华, 颜应文
(南京航空航天大学 能源与动力学院, 南京 210016)

摘 要: 基于稳态火焰面(SLFM)和交互式非稳态欧拉颗粒火焰面(EPFM)模型对 Sydney 大学 CH_4/H_2 钝体稳定湍流扩散火焰行了数值研究,采用修正的雷诺应力模型(RSM),同时对两种不同规模的甲烷详细化学反应动力学机理进行研究,比较了燃烧模型和反应机理对湍流火焰结构、活性自由基以及氮氧化物预测精度的影响,与实验数据对比结果表明:两种反应机理得到的温度场和主要组分分布基本相同;SLFM 模型能对速度场和标量场的分布进行较为准确预测,采用 EPFM 模型修正后,部分区域 OH 预测结果更加靠近实验结果;采用 EPFM 模型对 SLFM 模型耦合 GRI-Mech 2.11 的计算结果修正后,NO 量级降低近 2 倍,预测精度明显改善,与实验结果实现较好的符合,验证了化学反应动力学机理以及非稳态效应对氮氧化物预测精度的影响。

关 键 词: 湍流扩散火焰; 火焰面模型; 交互式非稳态; 氮氧化物; 化学反应动力学机理

中图分类号: V213.2 **文献标志码:** A

Investigation of flamelet modeling for bluff-body stabilized jet flame

HAN Zongying, HE Changsheng, LI Jinghua, YAN Yingwen
(College of Energy and Power Engineering,
Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: Based on the concept of flamelet, the Sydney University CH_4/H_2 bluff-body stabilized flame was studied using steady laminar flamelet model (SLFM) and Eulerian particle flamelet model (EPFM), respectively. The revised Reynolds stress model (RSM) was used and two different chemical reaction mechanisms were also considered. The numerical results of the turbulent flame structure, major species concentrations and nitrogen oxides predictions by using different models were compared with the experimental data. The comparison showed that the prediction of the temperature, and major species calculated with these two mechanisms were basically same, the SLFM can accurately predict the combustion field; the OH results of the EPFM in some regions were closer to the experiment. The result of the SLFM coupled with the GRI-Mesh 2.11 mechanism reduced by two times after being post-processed by the EPFM model can predict the NO concentration more accurately, testifying the importance of the chemical reaction mechanism and the unsteady effect on the prediction of nitrogen oxides.

Key words: turbulent diffusion flame; flamelet model; interaction unsteady; nitrogen oxides; kinetic mechanism of chemical reaction

收稿日期:2019-11-21
基金项目:国家自然科学基金(51676097)
作者简介:韩宗英(1993—),男,硕士生,主要从事燃气轮机燃烧数值计算工作。E-mail:honzongying205@163.com
通讯作者:颜应文(1978—),教授、博士生导师,博士,主要从事航空发动机燃烧技术研究工作。E-mail:yanyw@nuaa.edu.cn
引用格式:韩宗英,何昌升,李井华,等.钝体稳定射流火焰的火焰面模型数值研究[J].航空动力学报,2020,35(2):337-347. HAN Zongying, HE Changsheng, LI Jinghua, et al. Investigation of flamelet modeling for bluff-body stabilized jet flame[J]. Journal of Aerospace Power, 2020, 35(2): 337-347.

燃气轮机燃烧过程中生成的氮氧化物主要以 NO 为主^[1], 由于 NO 生成反应活化能较高, 反应数量庞大, 反应时间尺度存在量级差异^[2], 导致 NO 的慢反应生成特征以及计算中强非线性和强刚性问题, 给 NO 的精确预测带来了极大的困难。

Sydney 大学钝体稳定 CH_4/H_2 湍流扩散火焰是国际湍流扩散火焰测量与计算研讨会(International Workshop on Measurements and Computation of Turbulent Non-premixed Flame (TNF))^[3]的标准系列火焰之一, 广泛用于湍流火焰的数值研究。国内外众多学者都对该火焰进行了大量研究:Pitsch^[4]、Triantafyllidis 等^[5]以及 Kempf 等^[6]采用大涡模拟 (large eddy simulation, LES) 方法, 对 Sydney 火焰进行了研究; Li 等^[7]和 Liu 等^[8]通过采用修正系数的雷诺应力模型 (Reynold stress model, RSM) 较好地模拟了 Sydney 火焰速度场; 为了提高计算效率, Peters^[9]引入层流扩散火焰面模型方法; Ihme 等^[10]采用火焰面/反应过程变量的湍流燃烧 LES 方法进行了计算, 火焰面模型极大的降低了计算量, 但对 NO 的预测精度较差; 唐军等^[11]采用火焰面生成流形 (flamelet generated manifolds, FGM) 方法提高了 NO 的预测精度但改善有限。因此需要对火焰面模型进一步拓展, 发展能够准确预测 Sydney 火焰氮氧化物分布的优化火焰面模型。

基于低维流形方法 (low-dimensional manifold, LDM)^[12]的火焰面模型中稳态层流火焰面模型 (steady laminar flamelet model, SLFM) 的使用最为广泛, 该模型以混合分数 Z 以及标量耗散率 χ ^[13]为参数, 预先计算出火焰面数据库并通过查表获得火焰面状态。SLFM 最大程度的提高了数值模拟的效率以及工程实用性, 研究者们将其拓展应用于预混以及部分预混燃烧模式中, Claramunt 等^[14]采用 SLFM 对甲烷预混火焰进行了计算, 熊模友等^[15]分别采用基于 RANS (Reynolds-averaged Navier-Stoke) 以及基于 LES^[16]的 SLFM 对部分预混燃烧火焰进行了数值计算, 都准确预测到部分预混燃烧中的三叉火焰结构和火焰抬举现象。

但由于 SLFM 不包含非稳态项及其非交互式特点^[17], 导致对 NO 的预测精度较低, Kim 等^[18]、Peters^[19]以及 Lehtiniemi 等^[20]的研究表明, 对 χ 进行精确建模是提高火焰面模型中 NO 预测精度的关键, Claramunt 等^[21]据此提出交互式火焰面 (representative interactive flamelet,

RIF) 模型, 该模型将火焰面方程求解过程与 CFD 程序进行迭代计算, 实时更新火焰面数据和流场信息, 充分体现了湍流与燃烧之间的相互作用。Pitsch 等^[22]进一步发展出适用于抛物型流场的交互式非稳态拉格朗日火焰面模型, Barths 等^[23]又进一步提出适用于复杂流场非稳态欧拉颗粒火焰面模型 (Eulerian particle flamelet model, EPFM), 并成功利用此模型对燃气轮机和 DI-Diseld 发动机内混合燃料的 NO_x 和 Soot 分布进行了精确模拟, Pitsch 等^[24]基于 LES 方法采用该模型耦合火焰面进度变量方法对湍射流扩散火焰进行了计算, 证明当非稳态火焰面方程求解时间步长小于 CFD 求解步长时 EPFM 同样适用于非稳态计算过程; Coelho 等^[25]和 Seong-Ku 等^[26]基于 RANS 方法采用 EPFM 分别对甲烷值班射流火焰和 $\text{CO}/\text{H}_2/\text{N}_2$ 射流火焰进行了计算, Odedra 等^[27]利用该方法计算了甲烷射流火焰, 薛瑞等^[28]基于 RANS 方法采用该模型对 Rolls-Royce 公司的 Trent-1000 发动机进行了计算, 王慧汝等^[29]采用该方法对航空煤油燃烧室氮氧化物进行了计算, 结果都与实验符合很好。

EPFM 兼具 RIF 降维、交互计算以及考虑非稳态效应的优点, 能够在考虑详细化学反应动力学机理的条件下, 以较高的计算效率实现对氮氧化物较高精度的预测, 因此具有较高的工程研究意义。本文采用 SLFM 和 EPFM 模型, 分别采用美国 Sandia 国家实验室开发的两种不同规模的甲烷详细化学反应机理 GRI-Mech 2.11、GRI-Mech 3.0, 对 Sydney 大学钝体稳定 CH_4/H_2 湍射流火焰进行了计算, 为了节省计算资源, EPFM 模型以后处理的方式对 SLFM 计算结果进行校正并将计算结果与实验数据以及 Kempf 等^[6]计算结果进行对比, 对 SLFM 的甲烷射流火焰的预测精度以及 EPFM 对于 NO 等组分预测精度的改善效果进行了分析, 并对甲烷燃烧过程中氮氧化物等组分预测精度的影响因素进行了研究。

1 物理数学模型

1.1 湍流模型

本文湍流模型采用修正雷诺应力模型 RSM, 相关参数取值见表 1, 其中参数 C_1 、 C_2 、 $C_{\epsilon 1}$ 、 $C_{\epsilon 2}$ 为雷诺应力变量与雷诺数的函数, Pr_{ϵ} 、 Pr_k 为湍流普朗特数, C 为经验常数, 以上数值均由实验得到, 本文中将 $C_{\epsilon 1}$ 由 1.44 增大到 1.52, 实现了对

圆管射流的扩展率更好的预测。

表 1 修正的线性 RSM 模型参数

Table 1 Revised linear RSM model parameters

C_1	C_2	Pr_k	Pr_ϵ	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	C
1.8	0.6	0.82	1.0	1.52	1.92	0.09

1.2 稳态火焰面模型(SLFM)

SLFM 中混合分数 Z 及其方差 Z'' 通过输运方程求解

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u} \cdot \nabla \tilde{Z} = - \nabla \cdot (\bar{\rho} \widetilde{u''Z''}) \tag{1}$$

$$\bar{\rho} \frac{\partial \widetilde{Z''^2}}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u} \cdot \nabla \widetilde{Z''^2} = - \nabla \cdot (\bar{\rho} \widetilde{u''Z''^2}) + 2\bar{\rho} D_t (\nabla \tilde{Z})^2 - \bar{\rho} c_\chi \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \widetilde{Z''^2} \tag{2}$$

式中 D_t 为湍流扩散系数, c_χ 表示流动时间尺度与积分时间尺度之比, 通常取常数 2.0, $\tilde{\epsilon}$ 和 $\tilde{k}$ 分别为平均湍动能和平均耗散率; χ 为 Z 和等价特征参数 χ_{st} 的函数, χ_{st} 为化学当量标量耗散率。

稳态火焰面方程表示为

$$\phi = \phi(Z, \chi_{st}) \tag{3}$$

对层流火焰面进行概率密度积分, 最终得到以 Z 、 Z'' 以及 χ 为查表参数的湍流火焰面数据库。

$$\tilde{\phi} = \int_0^\infty \int_0^1 \phi(Z, \chi_{st}) \tilde{P}(Z, \chi_{st}) dZ d\chi_{st} \tag{4}$$

其中上标“~”表示 Favre 平均, $\tilde{P}(Z, \chi_{st})$ 是联合概率密度分布函数, 在湍流燃烧中, 可大致认为混合分数与标量耗散率是统计无关的, Z 和 χ_{st} 分别满足 β 分布和对数正态分布, 最后通过 CFD 程序计算得到的流场参数以及查表参数, 得到当前网格所对应数据库内化学热力学相关状态参数。

1.3 欧拉颗粒非稳态火焰面模型(EPFM)

EPFM^[26-27] 计算过程中不再对压力、速度等流场参数进行计算, 只对各组分重新计算。该模型利用标记颗粒代替非稳态火焰面, 追踪标量耗散率的变化, 在计算过程中通过欧拉方程求解各标记粒子在各个时空坐标中出先的概率 I , 其输运方程为

$$\frac{\partial \rho I_n}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} I_n u_j] = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu_t}{Sc} \cdot \frac{\partial I_n}{\partial x_j} \right] \tag{5}$$

其中 I_n 表示第 n 个标记粒子在时空坐标 (t, x_j) 处出现的概率, Sc 为施密特数, 标量耗散率采用各火焰面在化学当量条件下的面平均值 $\hat{\chi}_{st,n}$

$$\hat{\chi}_{st,n} = \frac{\int_V I_n \bar{\rho} \chi_{st}^{3/2} \tilde{P}(Z_{st}) dV}{\int_V I_n \bar{\rho} \chi_{st}^{1/2} \tilde{P}(Z_{st}) dV} \tag{6}$$

其中 V 为整个流体域的体积, $\tilde{P}(Z_{st})$ 为化学当量条件下概率密度函数。在 $t=t_0$ 时刻流场中点 x 处的第 i 个组分的平均质量分数通过下式计算:

$$\tilde{Y}_i(x, t) = \frac{\sum_n \int_0^{t_0} I_n(t') \tilde{Y}_{i,n}(x, t') dt'}{\sum_n \int_0^{t_0} I_n(t') dt'} \tag{7}$$

其中 $\tilde{Y}_{i,n}(x, t')$ 是在 t' 时刻 x 点处用第 n 个火焰面的平均标量耗散率 $\hat{\chi}_{st,n}$ 求解火焰面方程得到的第 i 个组分的 Favre 平均质量分数, 时间 t_0 应设置的足够长以保证标记粒子可以完全运动到出口以外, 此时流场中标记粒子出现的概率接近于 0, 此时 $I_n(t) \approx 0$ 。

根据 Odedra 等^[27]、Barths 等^[23] 以及 Peters 等^[19] 的研究, 当引入一个非稳态火焰面时就可得到较为准确的结果, 因此为了提高计算效率, 本文中标记粒子数目取 1, 且为了保证计算过程的准确性将所有组分质量分数均初始化为 0。

2 研究对象

2.1 实验对象

本文以 Sydney 大学钝体稳定湍流扩散火焰作为 CFD 模型, 详细信息可参考文献[30], 如图 1 所示, 圆柱形钝体稳定器直径 $D=50\text{ mm}$, 周围为伴流空气, 由 CH_4/H_2 等体积混合成的燃料由钝体中心处喷入, 喷口直径 $D_j=3.6\text{ mm}$, 化学当量比下的混合分数为 0.05, 燃料和空气进口温度为 300 K, 环境压力为 0.1 MPa, 实验工况如表 2, 其中 NRBB(non reacting bluff body)为未反应流

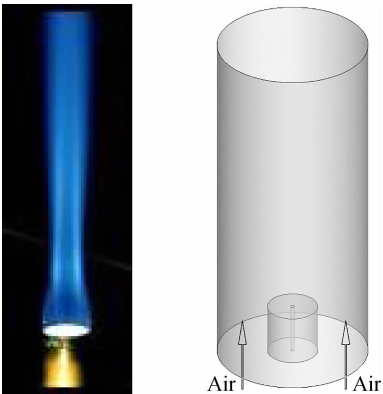


图 1 Sydney 大学钝体稳定器燃烧室模型

Fig.1 Bluff-body stabilized combustor model of Sydney University

场,火焰 HM1e 为有反应速度场,火焰 HM1 为燃烧流场标量场^[31]。

表 2 Sydney 钝体稳定湍流扩散火焰工况表
Table 2 Condition list of Sydney bulk-body turbulent diffusion flame

参数	工况		
	NRBB	HM1e	HM1
燃料射流速度/(m/s)	61	108	118
空气流速/(m/s)	20	35	40
燃料湍流度/%	2	2	2
空气湍流度/%	2	2	2

2.2 数值模拟设置

计算域以燃料喷口中心为原点,向下游延伸 6D 距离,为了保证燃料流动完全发展,向上游区域延伸 D 距离,沿径向延伸 2D 距离,经过网格无关性验证,最终网格数量约为 200 万。

空气和燃料进口速度、进口湍动能、湍动能耗散率以及各个方向的雷诺应力分量通过实验数据^[31]和经验公式^[8]以 UDF (user-defined functions)程序的形式给出,钝体壁面设为绝热无滑移壁面,空气外部边界设为绝热滑移壁面;出口采用充分发展边界条件。图 2 为 NRBB 工况下燃料和空气进口速度分布。

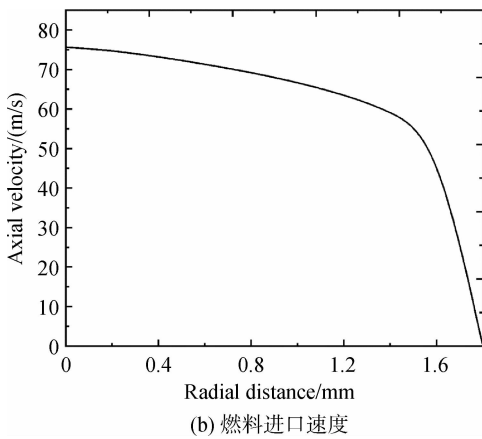
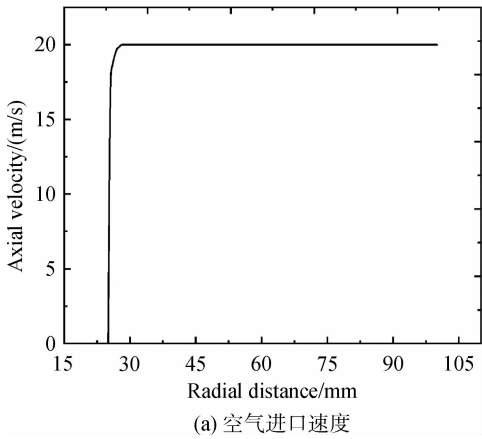


图 2 进口速度分布
Fig. 2 Inlet velocity distribution

3 计算结果及讨论

3.1 冷态数值计算结果及分析

本文取不同轴向位置: $X/D=0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.4, 2.4$ (其中 X/D 为距离燃料出口的轴向距离 X 与钝体直径 D 的比值)的统计结果,与实验数据以及 Kempf 等^[6]的计算结果进行了对比。图 3 为中心轴线上轴向速度对比结果,图 4 为不同位置上轴向速度的径向分布(其中横坐标 r/R 表示与中心轴线的距离 r 与钝体半径 R 的比值)。相比于 Kempf 等^[6]的计算结果,本文中燃料侧射流速度衰减明显变缓,与实验结果总体上吻合更好,较好的捕捉到了回流区的位置和尺寸,在截面 $X/D=0.4$ 轴线上速度较大,下游区域发展趋势则基本一致,这是因为采用修正 RSM 模型提高了圆管射流扩展率导致的。

3.2 燃烧流场计算结果及分析

图 5 为采用 SLFM 计算得到的 HM1e 火焰

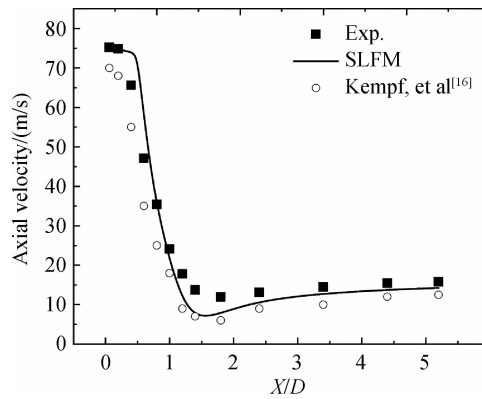


图 3 中心轴线速度分布
Fig. 3 Velocity distribution of the center line

轴向速度的径向分布。可以看到,机理 GRI-Mech 3.0 和 GRI-Mech 2.11 都对 HM1e 火焰的速度场实现了准确预测;在 $X/D=0.8$ 的下游区域,Kempf 等^[6]的燃料侧速度衰减过快,明显偏离实验值,SLFM 采用修正系数 RSM 后,燃料侧射流速度衰减明显变慢,对回流区长度实现较为

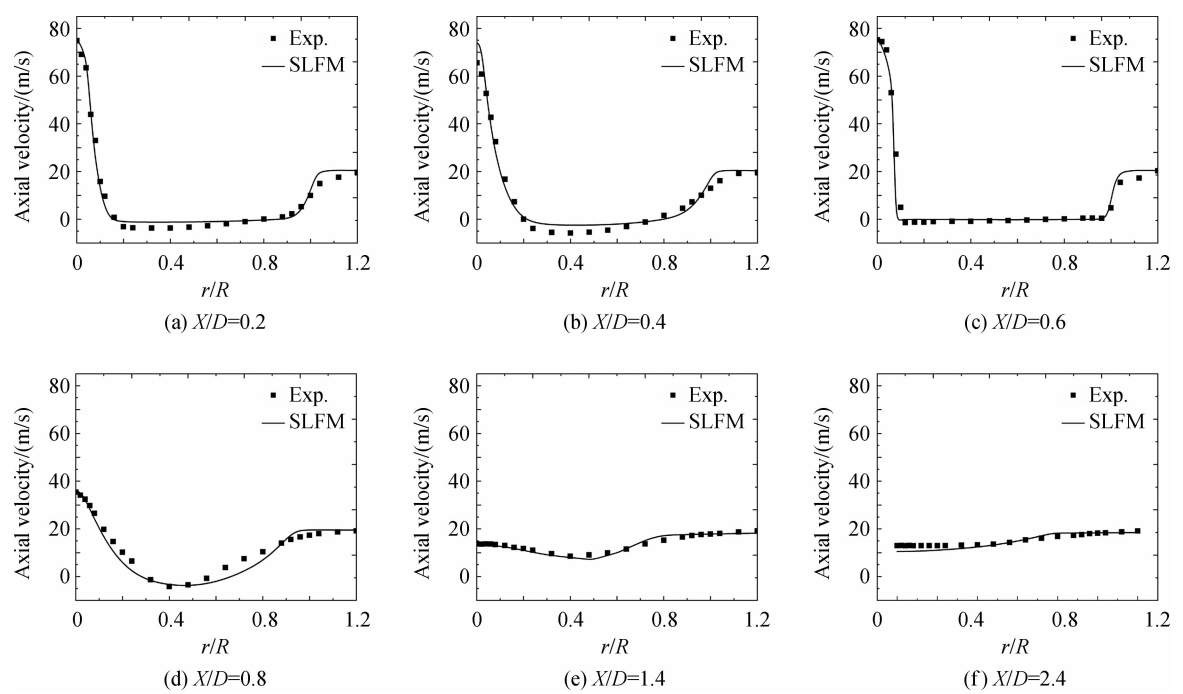


图 4 NRBB 场中,不同轴向位置处轴向速度的径向分布

Fig. 4 Radial distribution of the axial velocity at different axial locations in NRBB

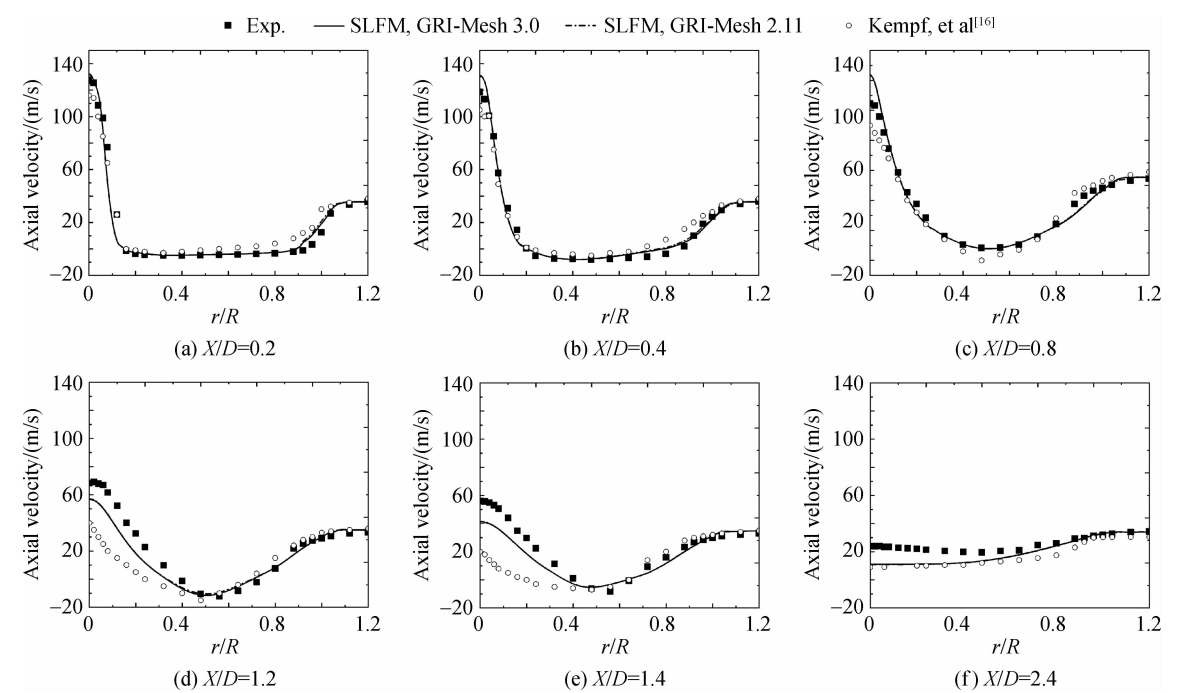


图 5 HM1e 场中,不同轴向位置处轴向速度径向分布

Fig. 5 Radial distribution of the axial velocity at different axial locations in HM1e

准确的预测,且在不同轴向位置处轴向速度变化趋势都与实验结果吻合较好。在上游 $X/D = 0.4, 0.6$ 处,由于射流速度衰减变缓,导致的燃料侧轴向速度较实验值稍偏大,但这保证了下游区域速度变化趋势与实验结果相符合;在 $X/D = 1.2$ 下游区域由于内剪切层的流动被低估,导致

燃料侧速度与实验结果出现较小偏差,但变化趋势仍与实验值保持一致。从整体上看,SLFM 采用修正系数 RSM 后,对 HM1e 速度场的预测精度明显得到改善。图 6 和图 7 分别为 HM1 火焰不同轴向位置处温度和混合分数沿径向的分布。可以看到,SLFM 耦合 GRI-Mech 3.0 和 GRI-

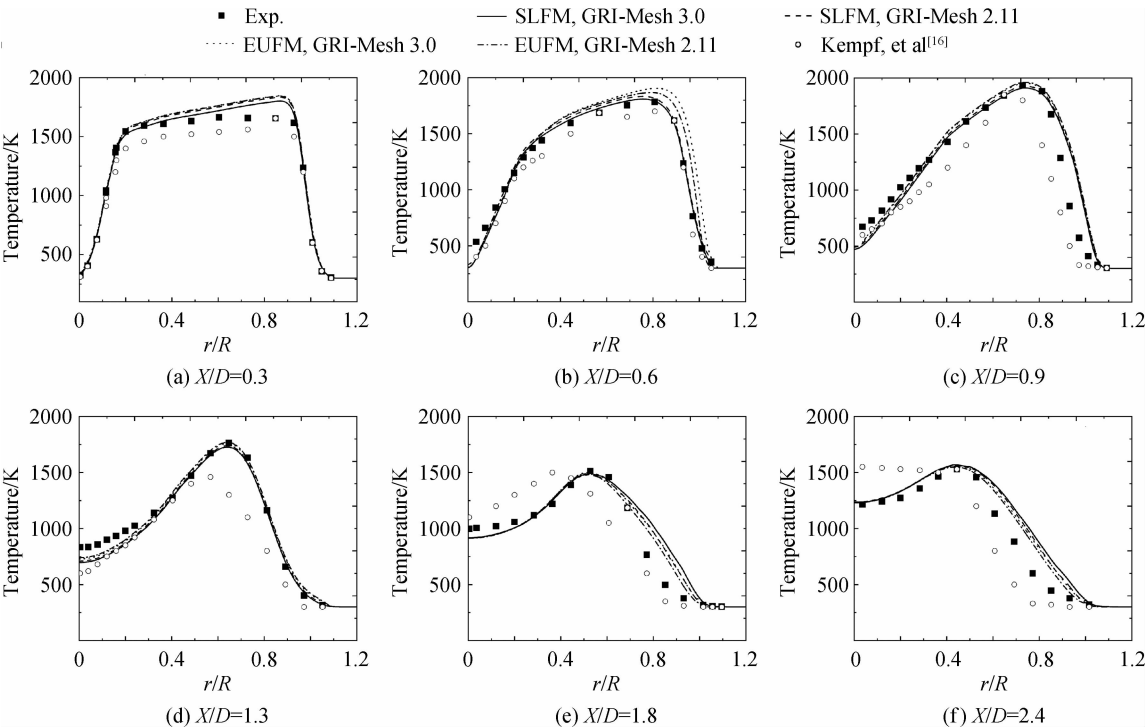


图 6 HM1 场中,不同轴向位置处温度径向分布
Fig. 6 Radial distribution of temperature at different axial locations in HM1

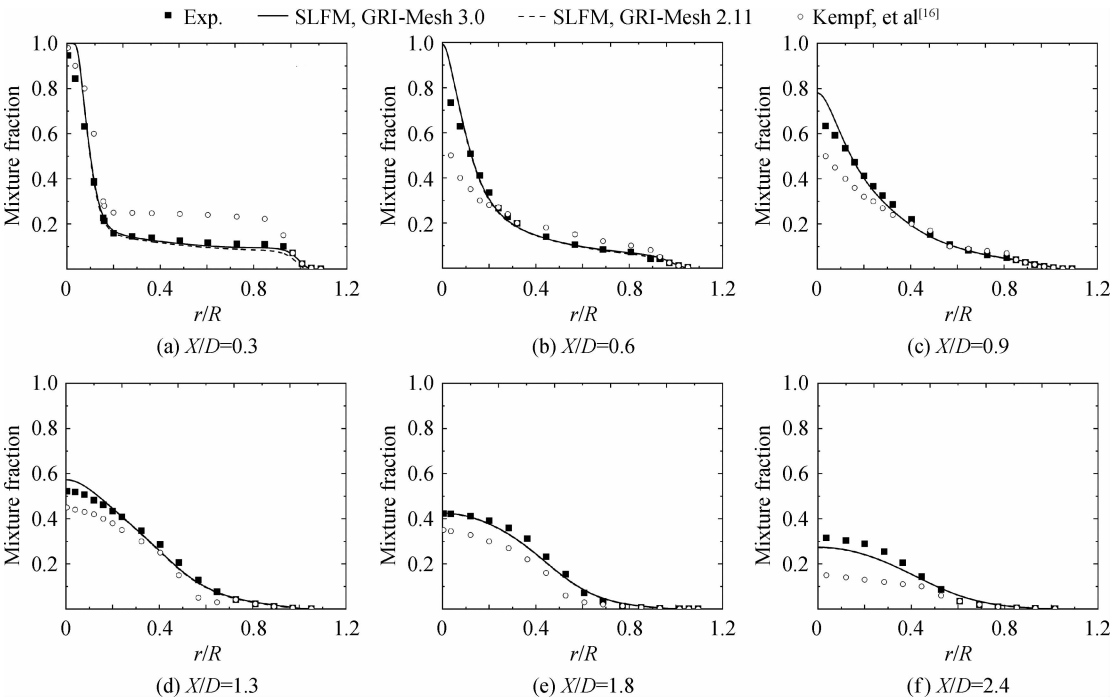


图 7 HM1 场中,不同轴向位置处混合分数径向分布
Fig. 7 Radial distribution of mixture fraction at different axial locations in HM1

Mech 2.11 机理的计算结果基本相同,且较 Kempf 等^[6]的计算结果与实验结果符合更好。SLFM 准确捕捉到了内外混合层,图 6 中高温区范围的变化显示了火焰宽度从回流区到颈部由宽变窄的过程。在靠近钝体的回流区内,温度与混

合分数的变化都较平稳且两者分布一致,这一平稳变化阶段的出现表明在钝体稳定器的作用下回流区一定范围内燃料和空气实现了均匀混合,且由于均匀值大于化学当量值,因此钝体回流区内混合物处于富燃状态,验证了回流区内混合分数

的均匀性对钝体火焰稳定燃烧的决定性作用^[27]。Kempf 等^[6]的计算结果在 $X/D=0.9$ 下游与实验相差较大,而 SLFM 的平均温度分布趋势与实验结果基本一致。在 $X/D=0.3$ 处靠近空气边界处温度与实验测量结果相比偏大,主要原因是钝体表面为温度在 700 K 左右的绝热陶瓷层^[31],因此钝体表面附近的温度分布更为均匀,而在钝体回流区靠近空气侧的外边缘处由于实验仪器的制约,导致温度峰值未被捕捉到^[21],整体上看,SLFM 准确捕捉到了温度场和混合分数场的变化趋势,基本准确描述了钝体非预混火焰的燃烧流场,为燃烧产物分布情况的分析提供了可靠基础。

图 8、图 9 和图 10 分别为 HM1 火焰不同位置上 OH、CO 和 H_2O 的径向分布,CO、 H_2O 的变化情况与温度一致。从图 8 的对比结果来看,SFLM 与 EPFM 对 OH 的预测结果略有差异但相差不大,精度明显高于 Kempf 等^[6]的计算结果,两种化学反应机理对 OH 预测结果基本相同,在 $X/D=0.9\sim 1.8$ 位置处,EPFM 计算得到的 OH 含量更接近实验数值。下游区域内,OH 峰值逐渐向钝体内侧移动,这与温度峰值的变化趋势一致;在 $X/D=0.3$ 截面上,两种模型计算得到的 OH 峰值与 Kempf 等^[6]的计算结果相同都高于实验值,Odedra 等^[27]认为这一位置处 OH 计算偏差主要是由于燃烧模型的不足^[9,25-26]以及

钝体火焰颈部区域内局部熄火引起的。Liu 等^[8]对熄火较为严重的 HM2、HM3 火焰的计算结果也与实验结果相差较大,说明该方法对于熄火现象的预测仍有一定不足,仍需进行进一步优化。

3.3 氮氧化物计算结果及分析

图 11 为不同轴向位置处 HM1 火焰中 NO 的径向分布。从对比结果可以看出,SFLM 和 EPFM 模型都较好地预测了各位置处 NO 的变化趋势,从 NO 量级上看,SLFM 预测结果要明显偏大,这主要是由于 SLFM 中预先假定标量耗散率变化平缓,忽略了非稳态项的影响,因此对 NO 的预测精度较差;而 EPFM 由于在火焰面方程中保留了非稳态项,因此充分考虑了标量耗散率的剧烈变化对火焰分布的影响,且在计算过程中,非稳态火焰面方程的求解与 CFD 流场计算进行迭代计算,实时更新数据库及流场信息,因此 EPFM 火焰面数据库更接近实际燃烧流场,而且由于该模型火焰面方程中的非稳态项耦合标记粒子分布概率函数,最大限度的将当地精确的标量耗散率数值用于火焰面方程求解,因此采用 EPFM 对 NO 预测精度有了明显改善,在量级上更加接近实验结果;整体上看,化学反应动力学机理对 NO 的预测精度影响较大,GRI-Mech 3.0 的计算结果要比 GRI-Mesh 2.11 的预测结果偏大 2 倍,与文献^[32]结果相同,这与瞬发型 NO 主要生

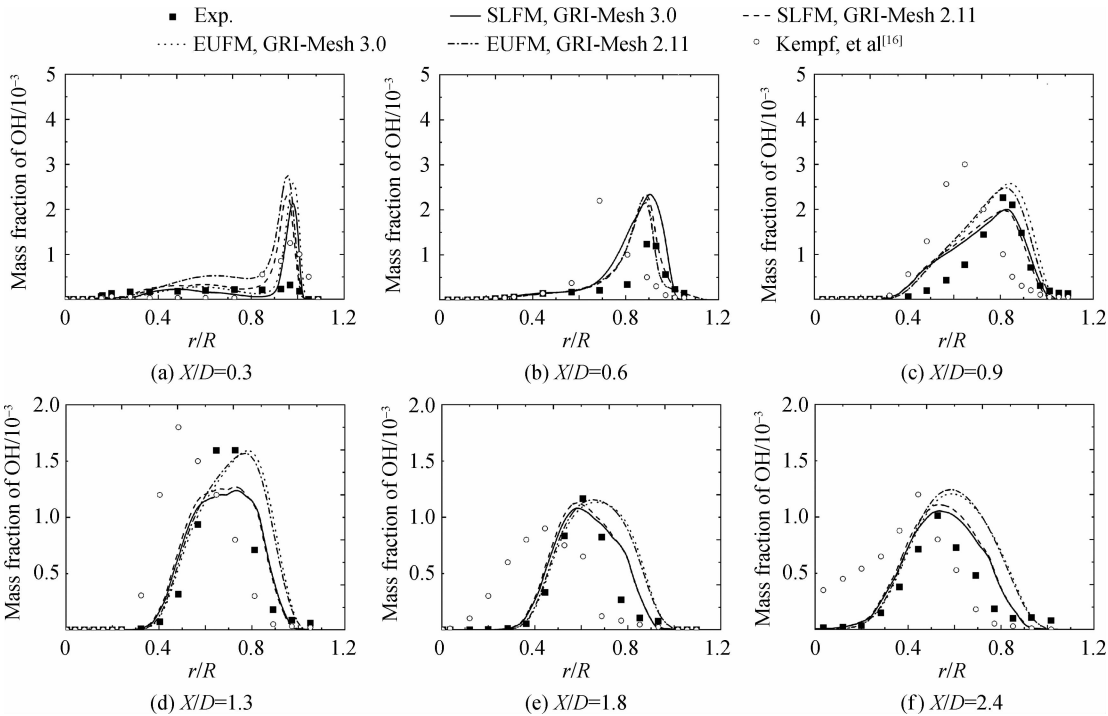


图 8 HM1 场中,不同轴向位置处 OH 质量分数径向分布

Fig. 8 Radial distribution of OH mass fraction at different axial locations in HM1

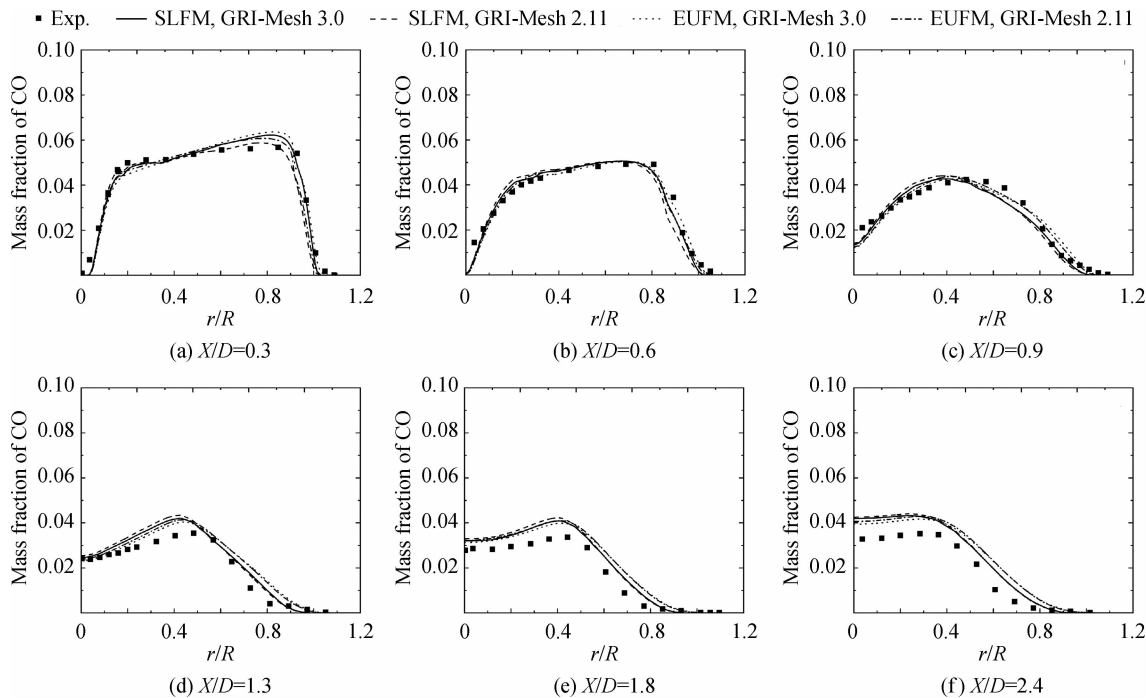


图 9 HM1 场中,不同轴向位置处 CO 质量分数径向分布

Fig. 9 Radial distribution of CO mass fraction at different axial locations in HM1

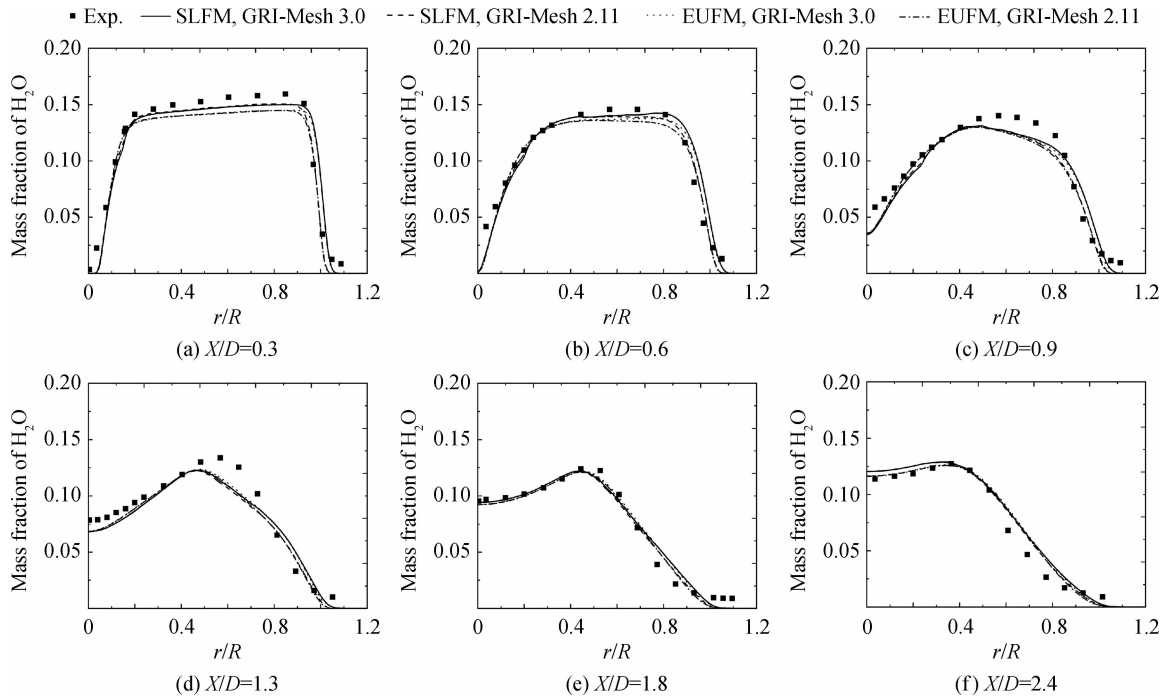


图 10 HM1 场中不同轴向位置处 H₂O 质量分数径向分布

Fig. 10 Radial distribution of H₂O mass fraction at different axial locations in HM1

成反应 $\text{CH} + \text{N}_2 = \text{HCN} + \text{N}$ 有较大关系,HCN 是瞬发型 NO 的主要生成来源,在 GRI-Mesh 3.0 机理中该反应速率常数远大于 GRI-Mesh 2.11 机理,Berg 等^[33]研究发现这一差异会导致 NO 预测量产生 30%~60% 的误差,且当适用于扩散燃烧时,这一误差会变大,Juchmann^[32]的研究结果

也证实了这一点;同时两个机理中次甲基 CH 的主要生成反应: $\text{CH}_2 + \text{H} = \text{CH} + \text{H}_2$ 的反应速率常数不同也是导致两者对 NO 预测结果出现差异的主要原因,在 GRI-Mesh 3.0 机理中这一数值为 $2.06 \times 10^{11} \text{ m}^3/(\text{kmol/s})$,而在 GRI-Mech 2.11 中这一常数为 $1.71 \times 10^{11} \text{ m}^3/(\text{kmol/s})$,

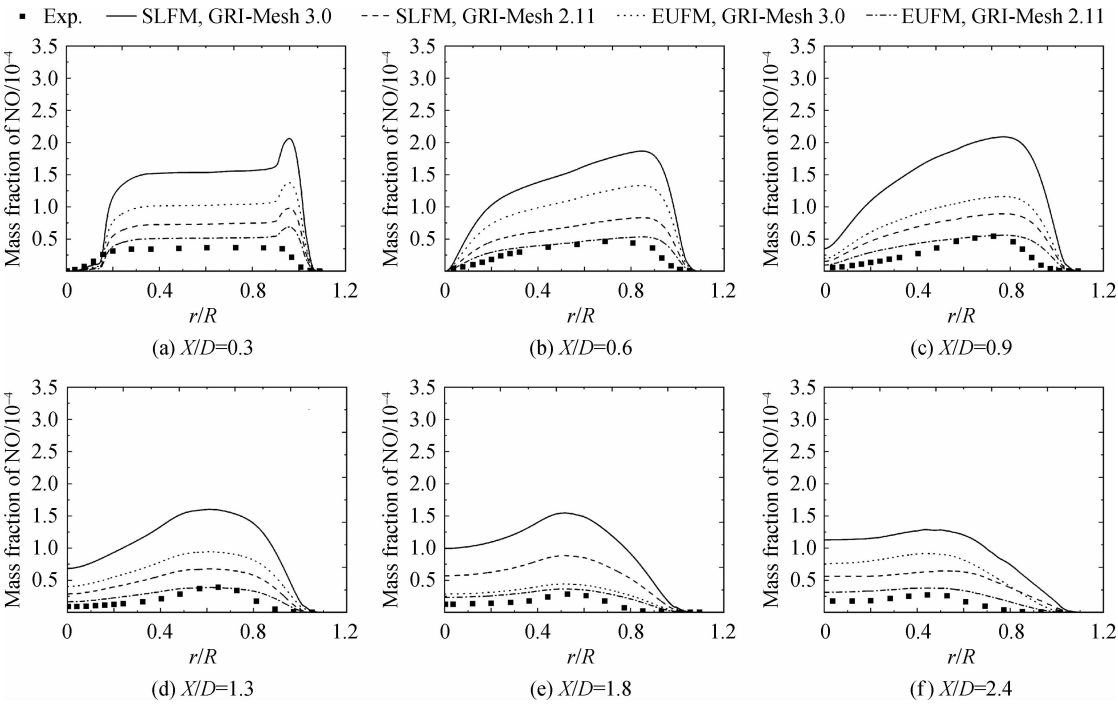


图 11 HM1 场中不同轴向位置处 NO 质量分数径向分布
Fig. 11 Radial distribution of NO mass fraction at different axial locations in HM1

Gibaud 等^[34]的研究表明在 2200~2600 K 温度范围内时这一数值处于 $2.3 \times 10^{11} \sim 3.2 \times 10^{11} \text{ m}^3/(\text{kmol/s})$ 范围内,且两者差值会变大,从而导致 GRI-Mech 3.0 机理计算结果偏大,GRI-Mech 2.11 机理计算结果更接近实验测量值。因此当采用 EPFM 对 SLFM 耦合 GRI-Mech 2.11 机理后的计算结果进行处理后,对 NO 的预测精度得到了极大改善,更加接近实验结果。

4 结 论

本文对钝体稳定湍流射流扩散火焰进行数值模拟,在考虑了两种甲烷详细化学反应动力学机理 GRI-Mech 2.11、GRI-Mech 3.0 基础上,分别比较了 SLFM 和 EPFM 两种模型对甲烷钝体射流火焰的预测精度,并将计算结果与实验数据以及 Kempf 等^[6]计算结果进行了对比和分析,得出如下结论:

- 1) 采用修正系数后的 RSM 模型能够有效减缓圆管射流的衰减速率,实现对 Sydney 火焰速度场的准确预测。
- 2) 采用 SLFM 对 HM1、HM1e 火焰的计算结果与实验符合较好,在温度、混合分数、CO、H₂O 这些主要组分的预测结果上,SLFM 模型耦合 GRI-Mech 2.11 和 GRI-Mech 3.0 机理得到的计算结果基本相同;采用 EPFM 进行重新计算

- 后,温度、混合分数、CO、H₂O 的结果略有差异但基本一致。
- 3) 采用两种化学反应机理计算得到的 OH 分布基本相同;采用 SLFM 对 OH 的预测精度要明显优于 Kempf 等^[6]的计算结果,SLFM 和 EPFM 两种模型都准确预测了各轴向位置上 OH 的变化趋势,采用 EPFM 对 OH 进行重新计算后,在部分截面上 OH 分布预测精度得到改善,数值上更加符合实验结果。
 - 4) 化学反应机理对 NO 的预测结果影响较大,从计算结果来看,GRI-Mech 2.11 较 GRI-Mech 3.0 对 NO 的预测精度更高,这与机理内氮氧化物相关基元反应的化学反应速率系数有关;对标量耗散率的准确建模是提高火焰面模型对 NO 预测精度的关键,EPFM 对 SLFM 耦合 GRI-Mech 2.11 的计算结果进行后处理后,对 NO 预测精度明显提高,且在数量级上与实验结果最为接近,表现出较好的 NO 预测潜力。
- 通过上述对 CH₄/H₂ 钝体稳定湍流扩散火焰数值计算方法和数学模型的研究,验证了 EPFM 和 GRI-Mech 2.11 机理对湍流射流甲烷扩散火焰的燃烧场以及氮氧化物较高精度预测能力,为进一步发展适用于工程实际应用的较高精度氮氧化物数值计算模型提供了理论和方法依据。

参考文献:

- [1] BIAGIOAL F, SCHIESSEL P, FISCHER L. Investigation of flame stability characteristics of the EV burner on the GT13E2 engine[R]. Berlin, Germany: ASME Turbo Expo: Power for Land, Sea and Air, 2008.
- [2] 颜应文, 赵坚行, 张靖周, 等. 大涡模拟模型环形燃烧室污染特性[J]. 航空动力学报, 2008, 23(7): 1161-1167.
YAN Yingwen, ZHAO Jianxing, ZHANG Jinzhou, et al. Large eddy simulation of pollution formation in model annular combustor[J]. Journal of Aerospace Power, 2008, 23(7): 1161-1167. (in Chinese)
- [3] RANKIN B A, MAGNOTTI G, BARLOW R S, et al. Radiation intensity imaging measurements of methane and dimethyl ether turbulent nonpremixed and partially premixed jet flames[J]. Combustion and Flame, 2014, 161(11): 2849-2859.
- [4] PITSCH H. LARGE-EDDY simulation of turbulent combustion[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2006, 38(1): 453-482.
- [5] TRIANTAFYLIDIS A, MASTORAKOS E, EGGELSE R L G M. Large eddy simulations of forced ignition of a non-premixed bluff-body methane flame with conditional moment closure [J]. Combustion and Flame, 2009, 156(12): 2328-2345.
- [6] KEMPF A, LINDSTEDT R P, JANICKA J. Large eddy simulation of a bluff-body stabilized nonpremixed flame [J]. Combustion and Flame, 2006, 144(1/2): 170-189.
- [7] LI G, NAUD B, ROEKAERTS D. Numerical investigation of a bluff-body stabilised nonpremixed flame with differential Reynolds-stress models [J]. Flow Turbulence and Combustion, 2003, 70(1/2/3/4): 211-240.
- [8] LIU K, POPE S B, CAUGHEY D A. Calculations of bluff-body stabilized flames using a joint probability density function model with detailed chemistry[J]. Combustion and Flame, 2005, 141(1/2): 89-117.
- [9] PETERS N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1984, 10(3): 319-339.
- [10] IHME M, PITSCH H. Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model: 2 application in LES of Sandia flames D and E[J]. Combustion and Flame, 2008, 155(1/2): 90-107.
- [11] 唐军, 宋文艳, 肖隐利. 采用 FGM 方法模拟钝体稳定火焰中 NO_x 的生成[J]. 推进技术, 2018, 39(6): 1301-1311.
TANG Jun, SONG Wenyang, XIAO Yinli. Modeling of formation NO_x in bluff-body stabilized flame using FGM [J]. Journal of Propulsion Technology, 2018, 39(6): 1301-1311. (in Chinese)
- [12] 孙明波, 白雪松, 王振国. 湍流燃烧火焰面模式理论及应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2014.
- [13] PPETERSA N, VERVISCHB P L. Turbulent combustion [J]. Combustion and Flame, 2000, 125(3): 1222-1223.
- [14] CLARAMUNT R, CONSUL R, CARBONELL D, et al. Analysis of the laminar flamelet concept for nonpremixed laminar flames[J]. Combustion and Flame, 2006, 145(4): 845-862.
- [15] 熊模友, 乐嘉陵, 黄渊, 等. 采用基于火焰面的燃烧模型研究部分预混燃烧[J]. 推进技术, 2017, 38(7): 25-33.
XIONG Moyou, LE Jialing, HUANG Yuan, et al. Study of partially-premixed combustion using combustion models based on flamelet concept[J]. Journal of Propulsion Technology, 2017, 38(7): 25-33. (in Chinese)
- [16] 熊模友, 乐嘉陵, 黄渊, 等. 基于 LES 的非稳态火焰面/反应进度变量方法模拟部分预混抬举火焰[J]. 推进技术, 2017, 38(1): 154-163
XIONG Moyou, LE Jialing, HUANG Yuan, et al. Simulation of partially premixed lifted flame based on unsteady flamelet/progress variable approach of LES[J]. Journal of Propulsion Technology, 2017, 38(1): 154-163. (in Chinese)
- [17] KIM S K, KANG S M, SEO B S, et al. Unsteady flamelet modeling of turbulent nonpremixed flames[J]. Journal of ILASS (Institute for Liquid Atomization and Spray System)-Korea, 2001, 6(3): 8-16.
- [18] KIM S K, KIM Y. Assessment of the Eulerian particle flamelet model for nonpremixed turbulent jet flames[J]. Combustion and Flame, 2008, 154(1/2): 232-247.
- [19] PETERS N. An asymptotic analysis of nitric oxide formation in turbulent diffusion flames[J]. Combustion Science and Technology, 1978, 19(1/2): 39-49.
- [20] LEHTINIEMI H, MAUSS F, BALTHASAR M, et al. Modeling diesel spray ignition using detailed chemistry with a progress variable approach[J]. Combustion Science and Technology, 2006, 178(10/11): 1977-1997.
- [21] CLARAMUNT R, CONSUL C D, PEREZ S, et al. Multi-dimensional mathematical modeling and numerical investigation of co-flow partially premixed methane/air laminar flames[J]. Combustion and Flame, 2004, 137(4): 444-457.
- [22] PITSCH H, CHEN M, PETERS N. Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames[J]. Symposium on Combustion, 1998, 27(1): 1057-1064.
- [23] BARTHS H, PETERS N, BREHM N, et al. Simulation of pollutant formation in a gas-turbine combustor using unsteady flamelets[J]. Symposium on Combustion, 1998, 27(2): 1841-1847.
- [24] PITSCH H, LHME M. An unsteady/flamelet progress variable method for LES of nonpremixed turbulent combustion[J]. AIAA-2005-0557, 2005.
- [25] COELHO P J, PETERS N. Unsteady modelling of a piloted methane/air jet flame based on the Eulerian particle flamelet model[J]. Combustion and Flame, 2001, 124(3): 444-465.
- [26] SEONG-KU K, SUNGMO K, YONGMO K. Eulerian particle flamelet modeling for combustion processes of bluff-

body stabilized methanol-air turbulent nonpremixed flames [J]. Journal of Mechanical Science and Technology, 2006, 20(9):1459-1474.

[27] ODEDRA A, MALALASEKERA W. Eulerian particle flamelet modeling of a bluff-body CH₄/H₂ flame[J]. Combustion and Flame, 2007, 151(3):512-531.

[28] 薛瑞,胡春波,石硕,等. 水蒸气对非预混燃烧室 NO_x 排放数值模拟研究[J]. 推进技术, 2015, 36(2):238-245.

XUE Rui, HU Chunbo, SHI Shuo, et al. Numerical investigation of steam diluent effect on flow field and NO_x emissions for diffusion combustors[J]. Journal of Propulsion Technology, 2015, 36(2):238-245. (in Chinese)

[29] 王慧汝,金捷,柳杨. 采用详细化学反应机理的火焰面模型模拟煤油两相燃烧流场[J]. 航空动力学报, 2011, 26(7):1471-1479.

WANG Huiru, JIN Jie, LIU Yang. Flamelet modeling of two-phase kerosene combustion flow fields using a detailed chemical reaction mechanism [J] Journal of Aerospace Power, 2011, 26(7):1471-1479. (in Chinese)

[30] MASRI A R, BILGER R W. Turbulent diffusion flames of hydrocarbon fuels stabilized on a bluff body[J]. Symposium on Combustion, 1985, 20(1):319-326.

[31] DIBBER R W, MASRI A R, BILGER R W. The spontaneous raman scattering technique applied to nonpremixed flames of methane[J]. Combustion and Flame, 1987, 67(3):189-206.

[32] JUCHMANN W. Absolute radical concentration measurements and modeling of low-pressure CH₄/O₂/NO flames [J]. Symposium (International) on Combustion, 1998, 27(1):469-476.

[33] BERG P A, SMITH G P, JEFFRIES J B, et al. Nitric oxide formation and reburn in low-pressure methane flames[J]. Symposium on Combustion, 1998, 27(1):1377-1384.

[34] GIBAUD C, SNYDER J A, SICK V, et al. Laser-induced fluorescence measurements and modeling of absolute CH concentrations in strained laminar methane/air diffusion flames[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2005, 30(1):455-463.

(编辑:王碧琚)