

文章编号: 1000-8055(2023)09-2142-11

doi: 10.13224/j.cnki.jasp.20210739

超声速支板燃烧室中氢气火焰的超大涡模拟

延 冲, 朴 英

(清华大学 航天航空学院, 北京 100084)

摘 要: 采用超大涡模拟(VLES)方法对德国宇航中心(DLR)支板燃烧室中的超声速火焰进行了数值模拟, 并使用基于守恒变量的爆炸模态分析方法(CCEMA)对火焰的稳定机理进行了分析。研究中采用了基于 $k-\omega$ 切应力输运(SST)模型的 VLES 湍流模型, 以及基于 Ingenito 超声速燃烧模型(ISCN)和部分搅拌反应器(PaSR)模型的混合湍流燃烧模型。数值模拟方法预测的时间平均温度和流向速度分布与实验数据的吻合度较高。离散方法方面, 提出了一种改进的低耗散激波捕捉格式, 拥有更好激波分辨能力。相比原始格式, 改进的格式进一步提高了燃烧室支板下游点火区内湍流/火焰结构的模拟保真度。火焰诊断结果表明: 在着火点前, 组分扩散、化学反应和激波压缩效应都对爆炸模态(CEM)起到正面促进作用。另外热爆炸效应相比自由基爆炸更为剧烈, 说明了 DLR 燃烧室内的火焰稳定模式为扩散和压缩效应协助点火模式。

关 键 词: 超大涡模拟方法; 超声速燃烧; 激波捕捉格式; 化学爆炸模态分析; 高保真度数值模拟
中图分类号: V411.3 **文献标志码:** A

Very-large eddy simulation of hydrogen flames in strut-based supersonic combustor

YAN Chong, PIAO Ying

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

Abstract: The very-large eddy simulation (VLES) method was used to simulate the supersonic flames in the strut-injection hydrogen combustor of Germany's Aerospace Centre (DLR), and the flame stabilization mechanism was analyzed by the conservative representation of chemical explosive mode analysis (CCEMA) method. The VLES turbulent model based on the $k-\omega$ shear stress transport (SST) model and the hybrid turbulent combustion model based on the Ingenito supersonic combustion model (ISCN) along with the partially stirred reactor (PaSR) model were adopted in this study. The time-averaged temperature and streamwise velocity profiles predicted by the numerical methods were in good agreement with the experiment. In terms of discretization method, a modified low dissipation shock-capturing scheme with better shock-capturing ability was proposed. Compared with the original scheme, the simulation fidelity of turbulence/flame structures in the ignition zone was further improved by the modified shock-capturing scheme. The flame diagnostic also showed that the component diffusion, chemical reaction and shock compression effects played positive roles in promoting the explosion mode before the flame onset location. In addition, the thermal explosion effect was more intensive than the radical explosion, indicating that the flame stability mode in the DLR combustor is a diffusion and compression effects assisted-ignition mode.

Keywords: very-large eddy simulation; supersonic combustion; shock-capturing scheme; chemical explosive mode analysis; high-fidelity simulation

收稿日期: 2021-12-30

作者简介: 延冲(1994—), 男, 博士生, 主要从事湍流燃烧数值模拟研究。

引用格式: 延冲, 朴英. 超声速支板燃烧室中氢气火焰的超大涡模拟[J]. 航空动力学报, 2023, 38(9): 2142-2152. YAN Chong, PIAO Ying. Very-large eddy simulation of hydrogen flames in strut-based supersonic combustor[J]. Journal of Aerospace Power, 2023, 38(9): 2142-2152.

超声速燃烧冲压发动机作为推进器已被广泛应用于各种超声速飞行器。然而目前对于超声速湍流燃烧中的火焰稳定机理, 以及湍流、火焰、激波之间的复杂相互作用仍缺乏系统深入的研究。近年来, 随着计算机性能的高速发展, 高保真度湍流燃烧数值模拟技术成为了一种有望揭示可压缩反应流中化学动力学和流动之间复杂物理化学耦合关系的可行方法。超声速燃烧室中, 包含间歇点火事件、涡动力学和激波/火焰相互作用等对火焰特征有较大影响的现象, 都需要使用非定常的模拟方法进行研究^[1]。然而, 在实际问题中, 使用壁面全解析的大涡模拟(LES)方法^[2]的计算开销往往过大。因此学者们提出了混合雷诺平均LES(Reynolds averaged Navier-Stokes/large eddy simulation, RANS/LES)方法作为一种兼顾非定常问题与计算量的模拟策略, 这其中包括非定常雷诺平均模拟方法(unsteady-RANS, URANS)^[3]、分离涡模拟方法(detached eddy simulation, DES)^[4]及其改进版本, 如延迟分离涡模拟方法(delayed DES, DDES)^[5]以及改进的延迟分离涡模拟方法(improved delayed DES, IDDES)^[6]等。这些模型均给出了一个与壁面距离相关的混合函数用以区分RANS和LES计算区域。近年来国内外的研究者^[7-9]发表了许多应用混合RANS/LES方法进行高保真度超声速湍流燃烧模拟的研究进展, 其结果表明, 混合RANS/LES方法对于超声速边界层以及高对流马赫数混合层都有较高的解析度。

然而, 混合RANS/LES模型也有其自身的局限。例如, 大多数DES类方法对于涉及复杂几何体的情况并不完全适用^[6], 这种方法对于LES区域的网格质量也很敏感。另一方面, Speziale提出了超大涡模拟方法(very-large eddy simulation, VLES)^[10], 通过对湍流能谱和当地长度尺度的分析, 对RANS模型预测的湍流黏性进行合理衰减, 使计算中湍流模型可以自适应地根据当地的流动信息和网格尺度在RANS、LES以及直接数值模拟(direct numerical simulation, DNS)之间连续转化。但是原始的VLES模型对雷诺应力的衰减过大, 除非网格过于粗糙, 否则几乎不可能转化为RANS模拟。为了提高VLES方法在壁面附近的性能, Han等在模型中引入了积分长度尺度, 提出了一种改进的分辨率控制函数形式^[11]。Xia等基于OpenFOAM平台, 将改进的VLES方法作用于传统的 $k-\varepsilon$ 和 $k-\omega$ 模型, 在亚声速流动问题中得到了与实验数据吻合较好的结果^[12], 并且说明了

VLES方法的模拟效果十分依赖于基础RANS模型。Menter提出的 $k-\omega$ 切应力输运(shear-stress transport, SST)模型^[13]能够较好地处理边界层以及高雷诺数区域的流动问题, 已被应用于许多超声速流动的RANS/LES模拟中^[7-8, 14-15]。

除湍流模型外, 离散格式是影响高保真数值模拟捕捉细小流动结构能力的另一个重要因素。在涉及激波等强间断问题的数值模拟中, 常采用总变差递减(total variation diminishing, TVD)的格式^[16]来避免数值振荡, 以提高模拟的鲁棒性。然而TVD格式的梯度限制器往往会在计算中产生附加的数值黏性; 而低耗散的高阶中心格式在捕捉小涡的流动结构方面效果更好, 但在激波附近收敛性较差。在这种情况下, 格式研究者们构造了如Pirozzoli函数^[17]、Ducros混合函数^[18]和Hill&Pullin感应函数^[19]等各种激波分辨器, 大量开展关于混合TVD、中心差分格式的研究。其中, Ducros混合函数被广泛应用于存在激波的超声速流动燃烧数值模拟中^[7, 14]。然而, 由于Ducros混合函数的构造基于无化学反应的纯流动问题, 在超声速燃烧问题中可能会导致高膨胀率放热区和激波区的混淆。本文在分析激波特性和反应对流场影响的基础上, 对Ducros混合函数进行了改进。改进后的混合函数, 在高热释放率的膨胀区域和普朗特-迈耶膨胀扇作用下的火焰前沿显著提高了模拟分辨率。

本文针对德国宇航中心(DLR)的超声速支板燃烧火焰^[20], 采用了VLES方法结合Ingenito超声速燃烧模型^[21](Ingenito supersonic combustion model, ISCM)与部分搅拌反应器^[22](partially stirred reactor, PaSR)模型开展数值模拟研究, 提出了一种改进的激波分辨函数, 降低了重构格式的数值耗散。数值模拟结果与实验结果对比, 较好地验证了基于SST模型的VLES方法以及PaSR-ISCM方法在超声速湍流燃烧中的适用性, 并且采用基于守恒变量的化学爆炸模态分析方法^[23]对DLR燃烧室中的火焰稳定机理进行了分析。

1 数值方法

1.1 控制方程

在VLES框架下多组分可压缩反应流的基本控制方程为

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} &= -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\tau}_{ij} + \bar{\tau}_{ij}^t) \\
\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{w}_m}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{w}_m \tilde{u}_j}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\bar{\rho} D_m + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{w}_m}{\partial x_j} \right] + \tilde{\alpha}_m \\
\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{H} \tilde{u}_j}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\kappa \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \sum_{m=1}^{n_s} \left(\bar{\rho} D_m \tilde{h}_m \frac{\partial \tilde{w}_m}{\partial x_j} \right) + \right. \\
&\quad \left. \tilde{u}_i (\bar{\tau}_{ij} + \bar{\tau}_{ij}^t) + \frac{\mu_t}{Pr_t} \cdot \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \right] + \tilde{Q} \quad (1)
\end{aligned}$$

其中 x_j 代表直角坐标系三个方向的坐标值; 上标 $-$ 和 $\sim$ 分别代表物理量的自条件系综平均和密度加权的物理量 Favre 自条件系综平均; 变量 ρ 、 $\mathbf{u}$ 、 p 、 T 分别为密度、速度矢量、压力和温度; E 和 H 为总能和总焓; n_s 为组分数; 变量 w_m 和 h_m 分别为 m 组分的质量分数和焓值; α_m 为组分 m 的反应生成速率; κ 为傅里叶热导率; D_m 为 m 组分对于混合物的质量扩散系数; Q 为化学反应释热率; Sc_t 和 Pr_t 分别为湍流施密特数和普朗特数, 计算中分别取常数 0.85 和 0.7。湍流和分子黏性应力张量分别定义为

$$\begin{aligned}
\bar{\tau}_{ij}^t &= 2\mu_t \tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3}\mu_t \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} - \frac{2}{3}\bar{\rho} k \delta_{ij} \\
\bar{\tau}_{ij} &= 2\mu \tilde{S}_{ij} - \frac{2}{3}\mu \tilde{S}_{kk} \delta_{ij} \quad (2)
\end{aligned}$$

式(2)中 S_{ij} 为切应变率; S_{kk} 为切应变率张量的对角线之和; δ_{ij} 为克罗内克算子; μ 和 μ_t 分别为分子黏度和湍流黏度, k 为湍动能。

1.2 湍流模型

基于 Menter 的 $k-\omega$ SST 模型建立了 VLES 湍流模型, 其建模方法参考了 Han 等基于标准 $k-\omega$ 模型的 VLES 模型^[24]。SST 模型相比标准 $k-\varepsilon$ 模型和 $k-\omega$ 具备一定优点。首先, 在 SST 模型中考虑了切应力在边界层中的传递, 对湍流黏性公式进行了修正。从而使其在具有逆压力梯度的湍流边界层中的模拟性能得到了改善。此外, 由于引入了 $k-\varepsilon$ 模型中的交叉扩散项, SST 模型在高雷诺数剪切流中的使用效果也优于传统的 $k-\omega$ 模型^[25]。针对超声速燃烧问题, 本文选用 SST 模型作为 VLES 方法基础 RANS 模型。其中湍流黏度 μ_t , 以及湍动能 k 和湍流频率 ω 的控制方程, 定义如下:

$$\begin{aligned}
\mu_t &= \frac{F_t a_1 \rho k}{\max(a_1 \omega, F_2 \tilde{S})} \\
\tilde{S} &= \sqrt{2 \tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} k \tilde{u}_j}{\partial x_j} &= \tilde{P}_k - \beta^* \bar{\rho} \omega k + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \\
\frac{\partial \bar{\rho} \omega}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \omega \tilde{u}_j}{\partial x_j} &= \frac{\gamma \bar{\rho} \tilde{P}_k}{\mu_t} - \beta \bar{\rho} \omega^2 + \\
\frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_\omega \mu_t) \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \right] &+ \frac{2 \bar{\rho} \sigma_{\omega 2}}{\omega} (1 - F_1) \frac{\partial k}{\partial x_j} \cdot \frac{\partial \omega}{\partial x_j} \quad (3)
\end{aligned}$$

式(3)中 P_k 为湍动能生成项; a_1 、 β^* 、 γ 、 β 、 σ_k 、 σ_ω 、 $\sigma_{\omega 2}$ 均为 SST 模型的常参数; F_1 、 F_2 为 SST 模型中与壁面距离相关的第一和第二混合函数, 它们的取值方法详见 Menter $k-\omega$ 切应力输运(SST)模型^[13]的原始文献。在 VLES 方法中分辨率控制函数 F_r 对 RANS 的湍流黏度进行了适当衰减, 实现了从 RANS 到 LES 再到 DNS 模拟之间的平滑过渡。 F_r 的具体形式如下:

$$\begin{aligned}
F_r &= \min \left\{ 1.0, \left[\frac{1.0 - \exp(-\beta_{VLES} L_c / L_K)}{1.0 - \exp(-\beta_{VLES} L_i / L_K)} \right]^n \right\} \\
L_c &= C_x (\Delta_x \Delta_y \Delta_z)^{1/3} \\
L_i &= k^{3/2} / (\beta^* k \omega) \\
L_K &= \nu^{3/4} / (\beta^* k \omega)^{1/4} \quad (4)
\end{aligned}$$

式(4)中 β_{VLES} 和 n 为模型常数, ν 为动力黏度系数, L_c 、 L_i 以及 L_K 则分别为网格截断尺度、积分长度尺度和 Kolmogorov 长度尺度, C_x 为截断长度尺度系数, Δ_x 、 Δ_y 、 Δ_z 为网格在 x 、 y 、 z 方向上的跨度^[26]。

1.3 燃烧模型

本文采用基于 ISCM 和 PaSR 模型的混合有限速率方法预测亚格子反应速率。PaSR 模型将 LES 的亚格子流动结构分为了精细结构和大尺度相干流动结构, 并将精细结构的体积分数和反应速率的乘积作为滤波后的反应源项^[27-28]。而 ISCM^[21,29] 则考虑了可压缩性在高速反应流中对亚格子平均反应速率的影响。在超声速流动中, 局部热力学平衡很难达到, 因此在强压缩效应下, 微观尺度的分子平均自由程有所减少, 分子碰撞频率增大。可以通过当地湍流马赫数的大小对阿伦尼乌斯公式系数进行修正。本文充分考虑超声速湍流燃烧中这两种不同的物理机制, 采用混合 PaSR-ISCM 燃烧模型, 得到滤波化学反应速率的估计式为

$$\begin{aligned}
\tau_k &= C_{\text{mix}} \sqrt{\frac{\nu + \nu_t}{\varepsilon}}, \quad \varepsilon = \beta^* k \omega \\
\Theta &= (1 + 2Ma_s^2) \frac{\tau_c}{\tau_c + \tau_k}
\end{aligned}$$

$$\tilde{\alpha}_m = \Theta \dot{\alpha}_m(\bar{\rho}, \tilde{w}_1, \tilde{w}_2, \dots, \tilde{w}_{n_s-1}, \tilde{T}) \quad (5)$$

式(5)中 C_{mix} 为 PaSR 的模型常数; τ_k 和 τ_c 分别为当地的湍流和化学反应时间尺度; Ma_s 为局部湍流马赫数, 其定义为湍流强度和当地马赫数的乘积。

研究中使用的氢气机理为 Conaire 等提出的 9 组分 21 反应的详细机理^[30]。

1.4 离散格式

本文使用有限体积方法求解可压缩反应流的控制方程组。其中无黏通量采用 HLLC (Harten Lax and van Leer Contact) 近似黎曼求解器^[31]进行求解, 黏性通量则采用二阶最小二乘法进行求解。时间推进采用了三阶 TVD 格式的显式龙格库塔法。在重构方面, 提出了一种基于改进的激波分辨函数的混合 TVD-中心差分格式来完成原始量从控制体中心到面心的插值。

TVD 格式通过梯度限制器能够有效减小压力间断附近的数值振荡, 具有较强的鲁棒性。然而, TVD 格式的数值耗散要高于中心差分格式, 在高保真度 LES 中, 会导致小尺度湍流涡非物理衰减, 对数值模拟结果的时空分辨率有很大影响。为了解决这些问题, Ducros 提出了一种激波分辨函数^[18]来混合中心差分格式和 TVD 格式:

$$f = \frac{(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}})^2}{(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}})^2 + |\tilde{\boldsymbol{\Omega}}|^2 + \theta^2} \quad (6)$$

其中 $\boldsymbol{\Omega}$ 为涡度矢量; θ 为 10^{-8} 倍来流速度和当地截断尺度的比。混合函数的取值范围在 0 到 1 之间, 当速度散度的绝对值远大于速度旋度时, 混合函数趋近于 1, 反之混合函数趋于零。速度散度可以表示为

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} = -\frac{1}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{\rho} \right) = -\frac{1}{\bar{\rho}} \cdot \frac{D\bar{\rho}}{Dt} \quad (7)$$

不难看出速度散度绝对值的大小由密度的物质导数决定, 在强压缩波或膨胀波主导的区域, 密度变化率较大的区域, 混合函数趋于 1; 而在由大尺度湍流相干结构主导的区域, 速度旋度较大, 混合函数趋于 0。在超声速流动中, 激波下游的大尺度湍流涡团可以通过 Ducros 混合函数判断使用中心差分格式进行求解, 从而得到很好的湍流结构解析度。

然而, 在可压缩反应流中, 稀疏波和化学热释放都涉及到很强的膨胀效应。考虑到速度散度在火焰起始位置附近有较大的量级, 在基于原始的

Ducros 函数的混合格式中, 会采用 TVD 格式求解部分火焰区域, 导致模拟结果的保真度下降。为使 TVD 格式只作用于激波间断附近, 而在激波下游的膨胀扇和膨胀率较高的火焰前锋区域使用中心差分格式, 将混合函数修改如下:

$$f = \frac{[\max(-\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}, 0)]^2}{(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}})^2 + |\tilde{\boldsymbol{\Omega}}|^2 + \theta^2} \quad (8)$$

在火焰前锋附近, 由于化学反应的热膨胀效应, 部分区域的流体微团密度显著下降, 速度散度为正, 因此改进的混合函数为 0, 这意味着采用低耗散的中心差分格式求解更大部分的燃烧区域, 以得到火焰解析度更高的模拟结果。

2 算例设置

在 DLR 的超声速冲压燃烧室^[20]中, 温度为 340 K 的含水空气以入口马赫数 2.0 流过楔形支板, 氢气则通过楔形支板底部均匀分布的 15 个孔以声速注入燃烧室。表 1 中给出了详细的入口条件信息。

表 1 自由来流及燃料入口条件

Table 1 Free stream and fuel inlet conditions

参数	空气	燃料
$U/(\text{m/s})$	730	1 200
T/K	340	250
p/Pa	101 325	101 325
w_{O_2}	0.232	0
w_{N_2}	0.736	0
w_{H_2}	0	1
$w_{\text{H}_2\text{O}}$	0.032	0

注: 表中 U 表示来流速度。

为了减少计算量, 计算中只考虑三个氢气喷口, 简化后的整体计算域的展向宽度为 7.2 mm。采用 850 万个六面体网格进行模拟, 并在喷口和壁面附近进行适当加密, 保证首层网格高度满足 $y^+ < 1$ 。两侧的界面均采用周期性边界条件, 所有固壁均采用绝热无滑移条件, 出口边界采用超声速出口条件, 所有物理量均由域内外插得到。

3 计算结果与分析

将数值模拟中各截面处的平均温度和平均轴向速度曲线与 Waidmann 等人^[20]的实验测量结果进行对比。

支板底部氢气喷口位置的 x 坐标为 0 mm, 图 1 中对比了 $x=8,55,163$ mm 处的时均温度曲线

以及 $x=8, 55, 137$ mm 三个截面的流向平均速度曲线与实验数据的差异, 图中 x 方向平行于来流方向, y 垂直于来流方向。由于经过时间统计平均后, 小尺度的脉动以及涡结构均被抹平, 另外考虑到模拟所采用的网格量较为充足, 改进前后的格式在时间平均结果上所体现出的差异甚微。图 1 中只对比了改进格式的模拟结果与实验数据。在首个截面位置 ($x=8$ mm), 由于支板两侧边界层的热效应, 模拟结果和实验中均出现了两个温度峰值。对于 y 坐标较低的峰值温度, 模拟值与实

验非常接近, 但对于另一个温度峰值估计偏低。另外 VLES 模型还预测出了支板后两侧边界层尾迹的强烈回流区, 但模拟的平均流向速度的两个反向峰值都远低于实测值。这可能是由于 RANS 模型对支板两侧的边界层解析度不够。在第二个截面 ($x=55$ mm), 模拟结果的温度分布与实验数据吻合较好, 但流向速度较实验偏高。而在接近出口的最后截面处 ($x=163, 137$ mm), 两种格式的模拟结果无论从温度还是速度分布上都和实验取得了较好的一致性。

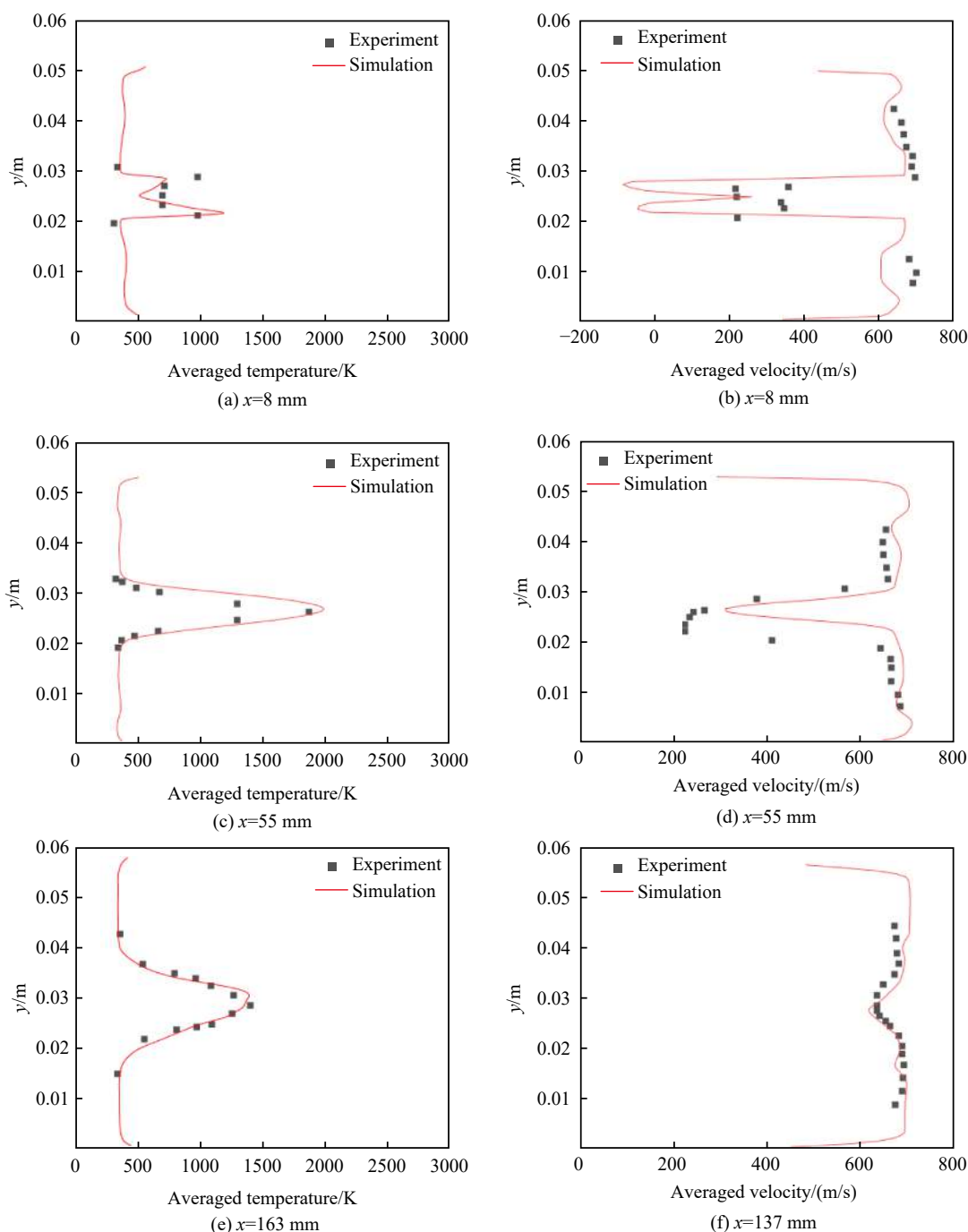


图 1 不同截面处的平均温度和流向速度分布曲线

Fig. 1 Averaged temperature and streamwise velocity profiles at different locations

下面通过对比改进的和原始的激波分辨混合合格格式模拟 DLR 燃烧室得到的湍流/火焰结构的差异, 分析格式改进对火焰中一些关键特征的影响。

图2为由温度着色的涡流强度等值面图, 很好地反映了支板下游的混合反应区中的涡流结构。其中涡流强度 λ_{ci} 的定义为局部速度梯度张量矩阵的复特征值的虚部, 该值表征了流体颗粒围绕涡旋转的特征频率。图2(a)和图2(b)分别为使用原始的和改进的激波分辨格式的数值模拟结果中同一时刻 $\lambda_{ci}=50\,000\text{ s}^{-1}$ 等值面。由于边界层的高剪切速率, 一些小涡首先在支板后面的湍流边界层的尾迹中产生, 随着流动发展, 在剪切层中发展为更强烈的湍流涡团, 迅速混合氢气和空气, 伴随着自由基的产生, 在支板后的混合层内形成了良好的着火条件。产生化学反应爆炸模态后燃烧区迅速扩大, 并发展出一系列火焰结构。对比图2中使用原始和改进的激波分辨格式的涡流强度等值面图可以看出, 使用改进的格式在着火区以及下游的火焰结构内部捕捉到了更精细的湍流结构。这是由于较高的剪切率会产生更小的湍流涡结构, 因此格式的差异在湍流长度尺度较小的剪切层内体现更为明显。而对于火焰驻点后的大尺度湍流结构区, 由于强剪切层内的小涡耗散速度较快, 两种格式在火焰前锋捕捉精度上的差异逐渐缩小。但从大涡内部的流动结构中, 仍然可以看出改进的格式具有一定优势。

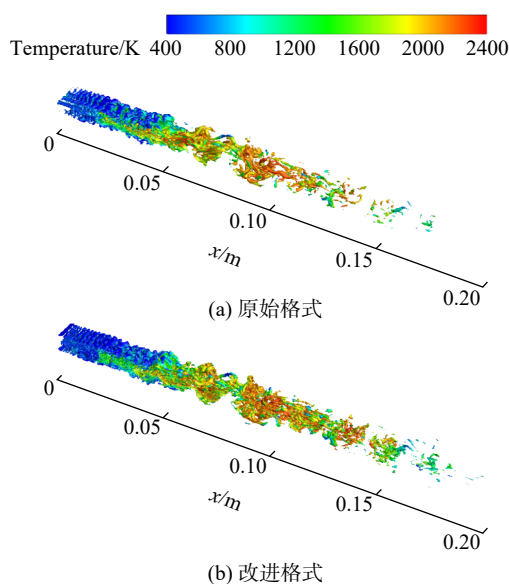


图2 涡流强度等值面

Fig. 2 Iso-surfaces of swirl-strength

图3显示了原始的和改进的混合函数在中心截面上的分布。其中混合函数的值表示 TVD 格式在原始量界面重构格式中的比例。图3(a)中, 原始混合函数在激波和普朗特-迈耶膨胀扇附近接近于1, 且在部分燃烧区中仍表现出相对较高的值, 尤其是在化学反应释热导致的显著热膨胀区域中。而图3(b)中所示改进的混合函数在膨胀扇和化学反应释热导致的显著热膨胀区域中, 均接近于0。这意味着改进后的激波分辨混合合格格式将在更多关键区域中采用高精度低耗散的中心差分格式进行插值。燃烧区的一些火焰前锋也有少部分包裹在膨胀扇区域中。

以上分析表明, 两种方法中非预混火焰前沿混合函数的差异是造成图2中涡流结构捕捉精度不同的关键因素。

图4展示了两种格式模拟结果展向中截面的温度分布图。从图中亦可以看出改进的激波捕捉格式在着火区附近捕捉到了更为精细的火焰结构。而对于下游的大尺度火焰结构, 两种格式的模拟结果体现出了较高的一致性。

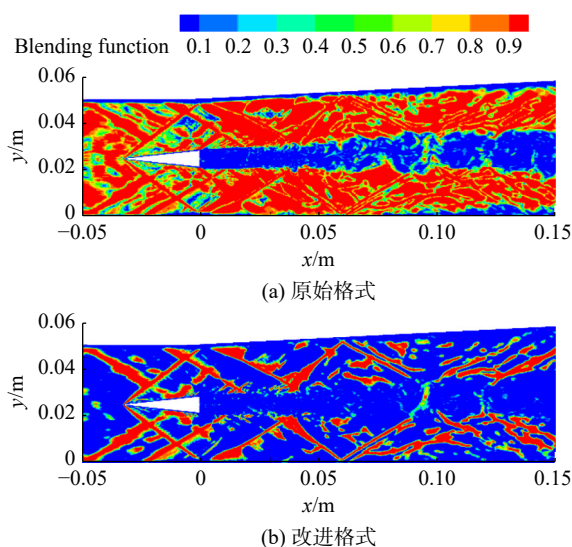
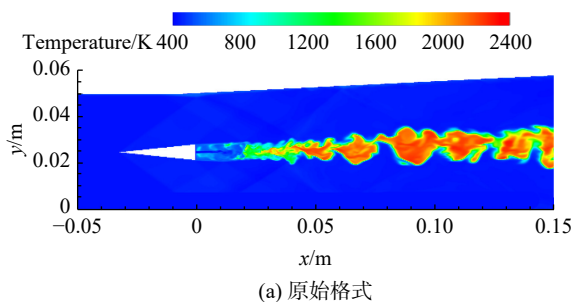


图3 激波捕捉函数分布图

Fig. 3 Shock-capturing function distributions



(a) 原始格式

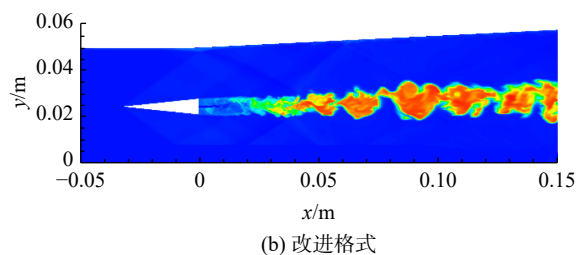


图 4 温度分布图

Fig. 4 Temperature distributions

使用激波混合格式的目的是通过判断激波位置,在没有激波的区域采用耗散更低精度更高的中心差分类格式来捕捉更加精细的流动结构。对于激波区域的计算,改进前后的方法均采用 TVD 格式来避免数值振荡。从图 5 使用原始格式和改进格式计算的压力分布图中可以看出,两次模拟中的激波位置基本一致。

由于点火区的剪切率较高,采用高精度的中心差分方法往往可以捕捉到更多小尺度湍流结构。此外,由于高释热率总是伴随着膨胀效应,通过释热率分布图可以判断出高膨胀率区域。图 6 展示了采用原始格式和改进格式模拟点火区($x=0\sim 0.05$ m)中心截面的温度分布(图 6(a)、图 6(b))和释热率分布(图 6(c)、图 6(d)),以说明两种格式在捕捉火焰精细结构方面的差异。低温氢气从支板后方被注入燃烧室,并流至两侧的混合层中。混合物在支板的湍流边界层尾迹的高温区中开始

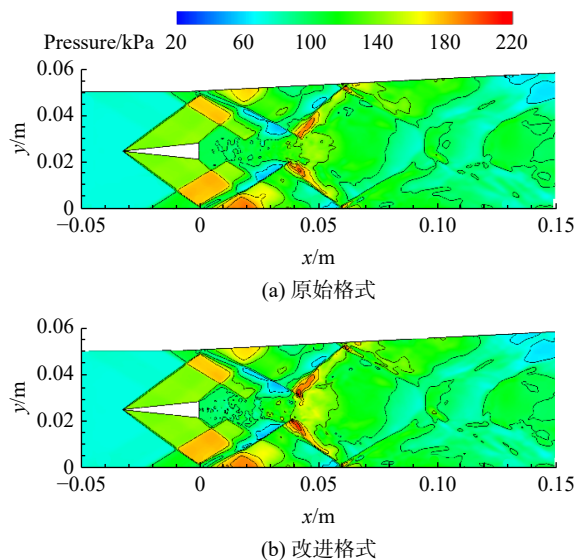


图 5 压力分布及等值线图

Fig. 5 Pressure distributions and contour lines

反应并生成自由基池,为随后的点火奠定了基础,接着在 $x=0.025$ m 附近形成了稳定的火焰核心区,向下游传播。从图 6(a)和图 6(b)的温度分布中可以观察到原始的和改进的混合格式模拟出的火焰锋面形状以及火焰核心区的内部结构有差异,而两个模拟结果中的火焰驻留位置和大涡结构的长度尺度基本一致。而在混合区初段,两种格式模拟的火焰前沿形状有显著差异。从图 6(c)和图 6(d)的反应释热率对比中可以看出,高释热率首先产生在支板后混合层两侧的剪切层内。在改

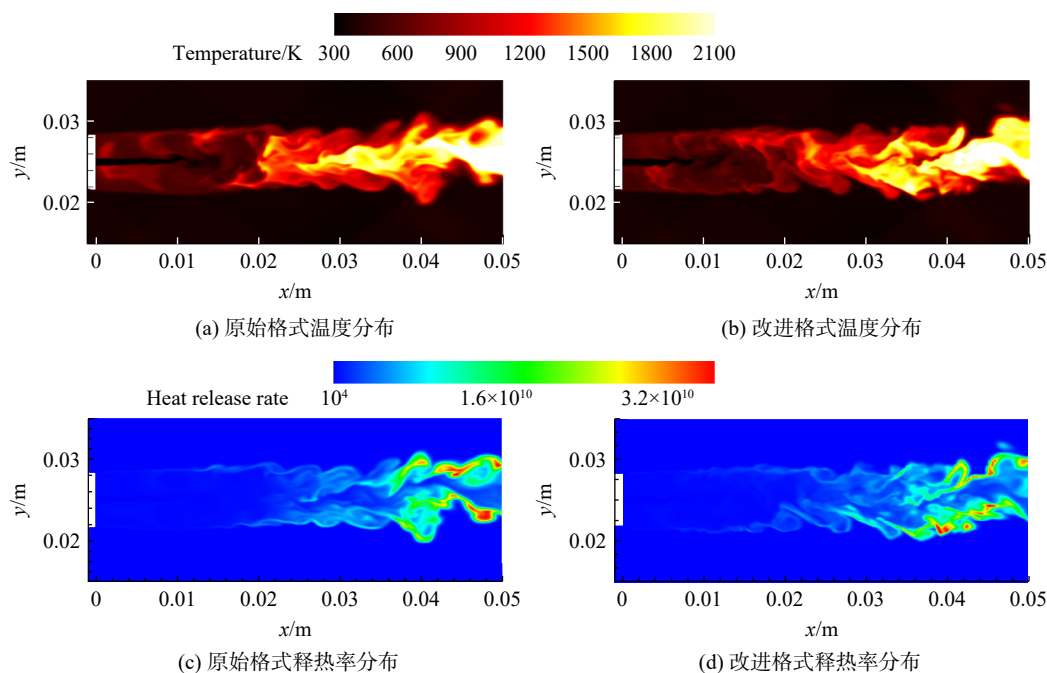


图 6 着火区温度和释热率分布图

Fig. 6 Distributions of temperature and heat release rate in the ignition region

进格式的模拟结果中可以观察到更薄和更密集的涡结构,说明改进的格式能够更好地捕捉混合区和点火区的流动结构。这是由于在原始的 Ducros 混合方法中,激波分辨器将火焰前沿附近的高膨胀率区域判断为 TVD 类格式计算区。而在改进后的混合函数中,对于速度散度大于零的区域,均采用中心差分格式,使得反应区数值耗散进一步减小,模拟的火焰结构更精细。

模拟中采用了 VLES-SST 湍流模型。该方法通过计算分辨率控制函数 F_r , 在壁面附近网格长宽比较大的边界层内使用 RANS 模式合理估计湍流黏性,而在远离壁面的区域,则根据局部流动特征,将 RANS 的湍流黏度衰减到适当的值,实现了全场自适应的跨尺度湍流模拟。图 7 展示了两种格式模拟结果中瞬时分辨率控制函数 F_r 的分布图。如图所示,在壁面附近, F_r 值接近于 1, 保证了 VLES 在壁面区域表现为 RANS 模式。而在燃烧区两侧的自由来流区域, F_r 值接近于零,表明最小涡的尺度较大,当地的网格尺度足以直接解析大多数涡结构,无需湍流黏度。而对于具有复杂流动结构的混合区和燃烧区, F_r 值介于两个极限 0 和 1 之间,以给出进行 VLES(多数湍动能未解析的 LES)或 LES 计算所需的局部湍流黏性。

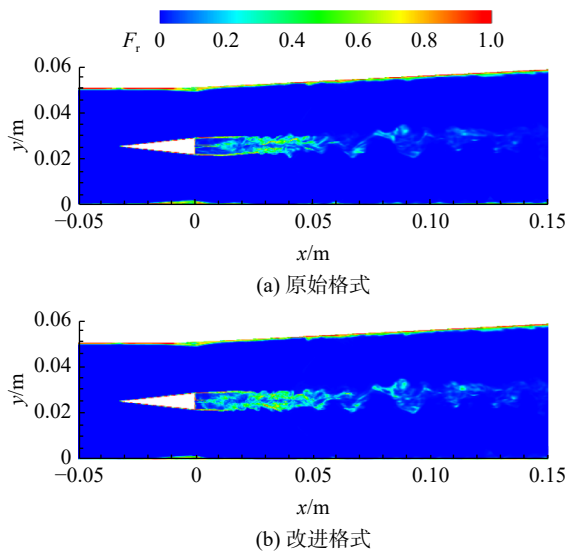


图 7 瞬时分辨率控制函数分布图

Fig. 7 Distributions of the instantaneous resolution control function

为了严格识别关键火焰特征,分析火焰稳定机理,研究中还采用了基于守恒变量的化学爆炸模式分析(conservative representation of chemical explosive mode analysis, CCEMA)方法对使用改进

激波分辨格式得到的高保真度结果进行了火焰诊断。对于可压缩反应流, CCEMA 采用守恒变量代替原始变量进行本征分析,使得拆解到模态的关键化学过程满足能量守恒律约束,保证了化学爆炸模态分析中计算单个化学/非化学反应投影项的准确性,对严格的火焰诊断至关重要。

在 CCEMA 方法中,首先对局部化学反应源项的雅可比矩阵进行本征分解

$$\begin{aligned} \frac{D\mathbf{g}_\alpha}{Dt} &= \mathbf{J} \frac{D\boldsymbol{\varphi}}{Dt} = \mathbf{J}(\mathbf{g}_\alpha + \mathbf{g}_f), \\ \mathbf{J} &= \frac{\partial \mathbf{g}_\alpha}{\partial \boldsymbol{\varphi}} \end{aligned} \quad (9)$$

其中 $\boldsymbol{\varphi} = [\rho w_1, \rho w_2, \dots, \rho w_n, \rho u_x, \rho u_y, \rho u_z, \rho E]$ 为局部守恒变量; $\mathbf{g}_\alpha$ 为反应源项; $\mathbf{J}$ 为化学雅可比矩阵; $\mathbf{g}_f$ 为非化学项。通过计算化学雅可比矩阵实部最大的特征值 λ_e , 以及其左右特征向量 $\mathbf{b}_e$ 和 $\mathbf{a}_e$, 可以计算出相应的爆炸指标(explusive indexes, 记为 I_e), 进而量化各组分对爆炸模态(chemical explosive mode, CEM)的贡献。根据特征分解很容易揭示局部混合物是否处于爆炸模式, 以及主导其爆炸模态的关键组分。将非化学项拆解为: $\mathbf{g}_d$ 表征扩散及黏性热作用, $\mathbf{g}_r$ 表征由流动可压缩效应对流体微团密度的作用, 以及 $\mathbf{g}_t$ 表征压力做功对流体微团温度的作用^[23,32]。则化学反应源项在主爆炸模态上的投影项随体演化规律如下:

$$\frac{D\phi_\alpha}{Dt} = \lambda_e \cdot (\phi_\alpha + \phi_d + \phi_c) \quad (10)$$

其中化学反应项、扩散项以及压缩膨胀效应项的投影分别定义为: $\phi_\alpha = \mathbf{b}_e \cdot \mathbf{g}_\alpha$, $\phi_d = \mathbf{b}_e \cdot \mathbf{g}_d$, $\phi_c = \mathbf{b}_e \cdot (\mathbf{g}_r + \mathbf{g}_t)$ 。通过量化这些项的贡献, 可以根据化学项和非化学项投影的大小关系, 确定主导爆炸模态的关键化学和非化学过程, 进而预测着火熄火, 分析火焰稳定机理。

图 8 为着火区中心截面的 I_e 和 λ_e 的瞬时分布图, 图中的绿色实线表示 $\text{Re}(\lambda_e) = 100$ 的等值线, 用以区分存在爆炸模态的区域。分析显示, 数值模拟很好地捕捉到了支板后边界层尾迹中的爆炸模态。图 8(a)中展示了化学反应爆炸模态的分布情况。在火焰初生阶段, 爆炸模态主要存在于混合层的外侧; 而在火焰起始位置的下游, 仅在火焰核心区外侧的少部分区域检测到了爆炸模态。如图 8(b)~图 8(d)所示, 羟基(OH)、氢自由基(H)以及水(H_2O)组分对爆炸模态的贡献主要通过它们对应的爆炸指标揭示。可以看出 H_2O

主导了火焰驻点前混合层中的爆炸模式,而 H 则在富燃侧对爆炸模式有次要贡献,说明了热爆炸在大部分爆炸模式中占主导。此外还可以通过量化化学项和非化学项对爆炸模式的贡献分析火焰稳定机理。从图 9 中各类物理化学过程投影项的分布情况可以得出主导或抑制爆炸模式的关键因素。图 9(a)为着火区的温度分布,用来确定火焰的起始位置和核心区。图 9(b)~图 9(d)则展示了着火区的化学反应投影项、扩散投影项以及压缩膨胀投影项的分布,图中黑色虚线为 $Re(\lambda_e)=100$ 等值线。

在爆炸区内侧,化学反应投影项的值相对较高,说明了化学反应对富燃侧的火焰稳定起着重要作用。同时,扩散投影项基本为正且最大值量级与化学反应投影项相当,表明了湍流扩散有效协助了着火过程。此外,压缩膨胀效应的投影项大小也与化学反应投影项具有相近量级,且在混合层的激波压缩的迎风面为正,膨胀扇的背风面为负值。表明了流动结构对迎风面的压缩在一定程度上对局部混合物的化学爆炸模式起正面作用,而背风面的稀疏波引起的局部密度降低则显著地抑制了化学爆炸模式。

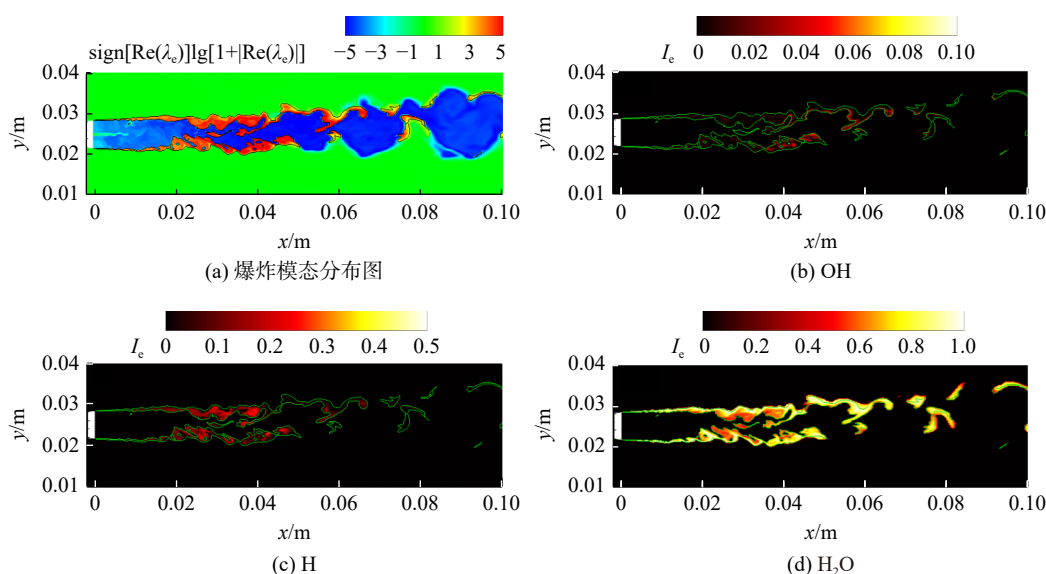


图 8 着火区爆炸模式分布图以及组分 OH、H、H₂O 的爆炸指标分布图

Fig. 8 Distributions of chemical explosive mode and explosive indexes of species OH, H, H₂O in the ignition region

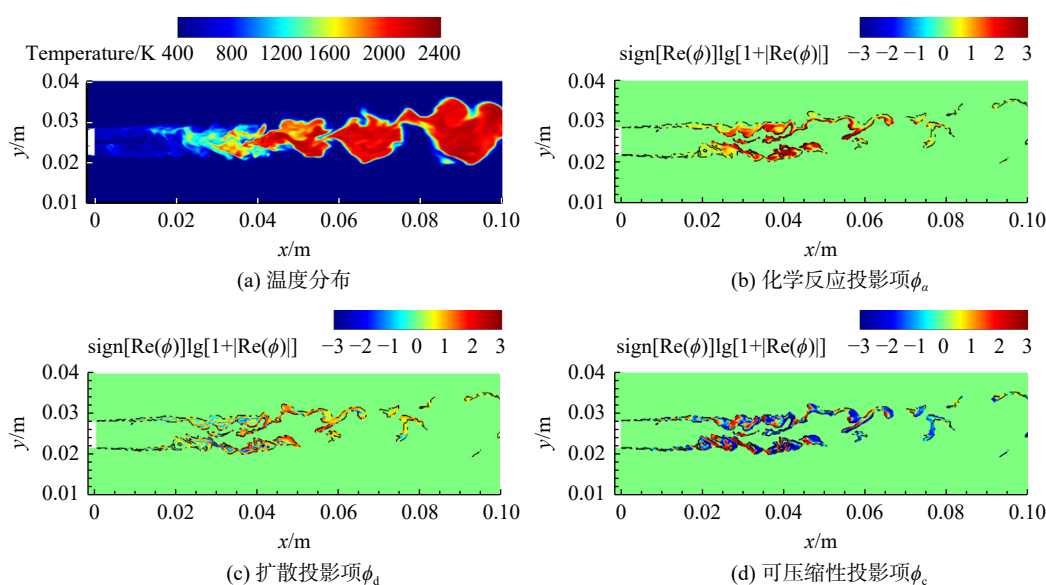


图 9 着火区温度分布图以及化学反应投影项、扩散投影项、可压缩性投影项分布图

Fig. 9 Distributions of temperature and projection terms of chemical reaction, diffusion, compressibility in the ignition region

各组分的爆炸指标分布情况显示, 火焰起始位置附近的爆炸模态主要由热爆炸主导。而关于化学与非化学投影项的分析则说明, 扩散作用和激波压缩效应均对化学爆炸模态有一定贡献。另外, 携带大量自由基的高温反应物输运对火焰的稳定以及传播都至关重要。

4 结 论

本文采用 VLES-SST 湍流模型和 PaSR-ISCM 燃烧模型对 DLR 模型燃烧室内的超声速火焰进行了数值研究, 并采用 CCEMA 方法对火焰的形成与稳定机理给出了分析。结论如下:

1) 对比实验数据说明, 本文所采用的模型和方法能够较好地预测燃烧室各截面的平均温度和流向速度曲线。

2) 在求解 LES 区域中的化学反应动力学问题时, 考虑到高马赫数可压缩效应和湍流部分搅拌效应对滤波反应速率的影响, 利用 ISCM 和 PaSR 模型建立的混合有限速率燃烧模型, 合理估计亚网格的平均组分反应速率, 实现了对着火点较为准确的预测。

3) 重构格式方面, 本文提出了一种改进的激波分辨捕捉格式, 并与原始方法进行了对比验证。改进后的格式使高释热率化学反应膨胀区域以及主流区两侧膨胀扇处的数值耗散进一步减小, 从而在着火区以及下游的火焰核心区内部模拟出更精细的湍流火焰结构。

4) 基于守恒变量的爆炸模态分析表明, 着火阶段主要由热爆炸主导。方程中各类物理化学机制相关的投影项则定量表征了扩散以及压缩膨胀效应对爆炸模态的具体贡献。本文由此判断出 DLR 燃烧室内的火焰稳定模式为扩散和压缩效应协助点火模式。

参考文献:

- [1] GONZALEZ-JUEZ E D, KERSTEIN A R, RANJAN R, et al. Advances and challenges in modeling high-speed turbulent combustion in propulsion systems[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2017, 60: 26-67.
- [2] PIOMELLI U. Large-eddy simulation: achievements and challenges[J]. *Progress in Aerospace Sciences*, 1999, 35(4): 335-362.
- [3] JOHANSEN S T, WU J, WEI S. Filter-based unsteady RANS computations[J]. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2004, 25(1): 10-21.
- [4] SPALART P R, JOU W H, STRELETS M, et al. Comments on the feasibility of LES for wings, and on hybrid RANS/LES approach[C]// *Proceedings of first AFOSR international conference on DNS/LES*. Columbus, US: Greyden Press, 1997: 4-8.
- [5] SPALART P R, DECK S, SHUR M L, et al. A new version of detached-eddy simulation, resistant to ambiguous grid densities[J]. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 2006, 20(3): 181-195.
- [6] SHUR M L, SPALART P R, STRELETS M K, et al. A hybrid RANS-LES approach with delayed-DES and wall-modelled LES capabilities[J]. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2008, 29(6): 1638-1649.
- [7] EDWARDS J R, BOLES J A, BAURLE R A. Large-eddy/Reynolds-averaged Navier-Stokes simulation of a supersonic reacting wall jet[J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(3): 1127-1138.
- [8] FULTON J A, EDWARDS J R, et al. Large-eddy/Reynolds-averaged Navier-Stokes simulations of reactive flow in dual-mode scramjet combustor[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2014, 30(3): 558-575.
- [9] 汪洪波, 孙明波, 吴海燕, 等. 超声速燃烧凹腔质量交换特性的混合RANS/LES模拟[J]. *航空动力学报*, 2010, 25(1): 41-46.
WANG Hongbo, SUN Mingbo, WU Haiyan, et al. Hybrid RANS/LES simulation of mass exchange characteristics of cavity for supersonic combustion[J]. *Journal of Aerospace Power*, 2010, 25(1): 41-46. (in Chinese)
- [10] SPEZIALE C G. Turbulence modeling for time-dependent RANS and VLES: a review[J]. *AIAA Journal*, 1998, 36(2): 173-184.
- [11] HAN X, KRAJNOVIC S. An efficient very large eddy simulation model for simulation of turbulent flow[J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 2013, 71(11): 1341-1360.
- [12] XIA Z, CHENG Z, HAN X, et al. VLES turbulence modelling for separated flow simulation with OpenFOAM[J]. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 2020, 198: 104077.1-104077.16.
- [13] MENTER F R. Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications[J]. *AIAA Journal*, 1994, 32(8): 1598-1605.
- [14] EDWARDS J R, CHOI J I, BOLES J A. Large-eddy/Reynolds-averaged Navier-Stokes simulation of a Mach 5 compression-corner interaction[J]. *AIAA Journal*, 2008, 46(4): 977-991.
- [15] WU J, WANG Z, BAI X, et al. The hybrid RANS/LES of partially premixed supersonic combustion using G/Z flamelet model[J]. *Acta Astronautica*, 2016, 127(10/11): 375-383.
- [16] 王慧, 侯凌云. 碳氢燃气超声速剪切流动燃烧数值模拟[J]. *航空动力学报*, 2007, 22(4): 559-564.
WANG Hui, HOU Lingyun. Numerical simulation of hydrocarbon gas combustion and supersonic shear flow[J]. *Journal of Aerospace Power*, 2007, 22(4): 559-564. (in Chinese)
- [17] PIROZZOLI S. Conservative hybrid compact-WENO schemes for shock-turbulence interaction[J]. *Journal of Computational Physics*, 2002, 178(1): 81-117.
- [18] DUCROS F, FERRAND V, NICOU D, et al. Large-eddy simulation of the shock turbulence interaction[J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, 152(2): 517-549.
- [19] HILL D J, PULLIN D I. Hybrid tuned center-difference-WENO method for large eddy simulations in the presence of strong shocks[J]. *Journal of Computational Physics*, 2004, 194(2): 435-450.
- [20] WAIDMANN W A, BÖHM M, BRUMMUND U, et al. Supersonic combustion of hydrogen/air in a scramjet combustion chamber[J]. *Space Technology*, 1994, 15(6): 421-429.
- [21] INGENITO A, BRUNO C. Physics and regimes of supersonic com-

- bustion[J]. *AIAA Journal*, 2010, 48(3): 515-525.
- [22] FUREBY C. A comparative study of subgrid models, reaction mechanisms and combustion models in LES of supersonic combustion[R]. AIAA 2019-4273, 2019.
- [23] WU W, PIAO Y, LIU H. Analysis of flame stabilization mechanism in a hydrogen-fueled reacting wall-jet flame[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019, 44(48): 26609-26623.
- [24] HAN X, KRAJNOVIĆ S. Very large-eddy simulation based on $k-\omega$ Model[J]. *AIAA Journal* 2015, 53(4): 1103-1108.
- [25] MENTER F R. Review of the shear-stress transport turbulence model experience from an industrial perspective[J]. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 2009, 23(4): 305-316.
- [26] POPE S B. *Turbulent flows*[M]. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2000.
- [27] BERGLUND M, FUREBY C. LES of supersonic combustion in a scramjet engine model[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2007, 31(2): 2497-2504.
- [28] FUREBY C, CHAPUIS M, FEDINA E, et al. CFD analysis of the HyShot II scramjet combustor[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33(2): 2399-2405.
- [29] INGENITO A, BRUNO C. Mixing and combustion in supersonic reactive flows[R]. AIAA 2008-4574, 2008.
- [30] CONAIRE M, CURRAN H J, SIMMIE J M, et al. A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation[J]. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2004, 36(11): 603-622.
- [31] TORO E F. The HLLC Riemann solver[J]. *Shock Waves*, 2019, 29(8): 1065-1082.
- [32] WU W, PIAO Y, XIE Q, et al. Flame diagnostics with a conservative representation of chemical explosive mode analysis[J]. *AIAA Journal*, 2019, 57(4): 1355-1363.

(编辑: 陈 越)