

不同反应机理的火焰面模型模拟射流火焰

王 方^{1, 2, 3}, 蔡江涛¹, 张 健⁴, 金 捷^{1, 2, 3}

(1. 北京航空航天大学 能源与动力工程学院 航空发动机数值仿真研究中心, 北京 100191;

2. 北京航空航天大学 江西研究院, 南昌 330096;

3. 北京航空航天大学 成都航空动力创新研究院, 成都 611930;

4. 清华大学 航空发动机研究院, 北京 100084)

摘 要: 用一维火焰分析并构建火焰面数据库, 基于稳态层流火焰面(SLFM)模型分析不同化学反应机理对火焰面数据库及模拟结果的影响。基于大涡模拟(LES)程序 AECSC(aero engine combustor simulation code)软件, SLFM 模型结合 DRG(direct relation graph)方法简化机理、Smooke 机理、GRI 3.0 详细机理模拟高雷诺数甲烷射流 Flame D、E、F 火焰, 其中 GRI 3.0 机理的温度平均值和脉动值与实验数据最接近。相比 LES-概率密度函数输运方程湍流燃烧(TPDF)模型, LES-SLFM 方法计算速度快, 整体精度接近 TPDF 计算结果。对化学机理影响火焰面数据库, 从而影响模拟时间和精度的原因进行了系统分析。LES-SLFM 模型结合详细机理速度快、精度合适, 未来可以进一步用燃烧室算例检验, 具有应用的潜力和发展价值。

关 键 词: 高雷诺数湍流火焰; 层流稳态火焰面模型; 大涡模拟; 湍流射流火焰; AECSC 软件

中图分类号: V231.2

文献标志码: A

Different reaction mechanism on simulations of jet flames using flamelet model

WANG Fang^{1, 2, 3}, CAI Jiangtao¹, ZHANG Jian⁴, JIN Jie^{1, 2, 3}

(1. Aeroengine Numerical Simulation Research Center, School of Energy and Power Engineering,

Beihang University, Beijing 100191, China;

2. Jiangxi Research Institute of Beihang University, Nanchang 330096, China;

3. Chengdu Innovation Research Institute on Aircraft Power,

Beihang University, Chengdu 611930, China;

4. Institute for Aero Engine, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: The effects of different chemical reaction mechanisms on the flame surface database and simulation results based on the steady laminar flamelet model (SLFM) were analyzed by using one-dimensional flame analysis and constructing a flamelet database. Based on the large eddy simulation (LES) program AECSC (aero engine combustor simulation code) software, the SLFM model was combined with DRG (direct relation graph) method simplified mechanism, Smooke mechanism, and GRI 3.0 detailed mechanism to simulate Flame D, E, and F jet flames, among which the average temperature and pulsation values of GRI 3.0 mechanism were the closest to the experimental data. The LES-SLFM model was faster and had comparable overall accuracy compared with the LES and probability density functional transport equation turbulent combustion (TPDF) models. The chemical mechanism affected the flamelet database

收稿日期: 2022-04-12

基金项目: 国家自然科学基金(91741125); 国家科技重大专项(2017-I-0004-0005)

作者简介: 王方(1973—), 女, 副教授、硕士生导师, 博士, 主要从事两相湍流流动及燃烧的研究。

引用格式: 王方, 蔡江涛, 张健, 等. 不同反应机理的火焰面模型模拟射流火焰[J]. 航空动力学报, 2022, 37(11): 2465-2478. WANG Fang, CAI Jiangtao, ZHANG Jian, et al. Different reaction mechanism on simulations of jet flames using flamelet model[J]. Journal of Aerospace Power, 2022, 37(11): 2465-2478.

and thus the time and accuracy of the simulation. The LES-SLFM model combined with the detailed mechanism was fast and had suitable accuracy, which should be further tested in the combustor simulation, presenting potential and value for future applications.

Keywords: high Reynolds number turbulent flames; steady laminar flamelet model; large eddy simulations; turbulent jet flames; AECSC software

航空发动机燃烧室的设计参数越来越高,数值模拟是有效的研发手段之一。燃烧室内高雷诺数湍流火焰形态复杂,存在强烈非线性的湍流和化学反应相互作用,需要精度高、计算快的模型描述和程序预测湍流燃烧过程。相比雷诺平均方法(RANS)和直接数值模拟(DNS),大涡模拟(LES)更适于对精度有要求的工程计算。通过滤波处理,LES方法直接求解大尺度的湍流运动,对滤波尺度之下的小尺度湍流运动进行模化处理。在高雷诺数湍流火焰中,部分化学反应发生在亚网格空间尺度和湍流脉动时间尺度之内,准确快速对存在在化学反应的亚网格进行建模至关重要。

能够耦合详细化学反应机理的主流湍流燃烧模型有概率密度函数类模型^[1]和火焰面类模型等。概率密度函数类模型有预设概率密度函数模型和求解输运方程的概率密度函数模型(TPDF)。一般而言,TPDF模型计算精度高但计算速度慢,火焰面模型计算精度合理而计算速度快。火焰面模型的主要理论由Peters^[2]提出,其中的基础模型稳态层流火焰面模型(steady laminar flamelet model, SLFM)认为在湍流燃烧中化学反应的特征时间尺度远小于湍流脉动的特征时间尺度,反应在一维薄层的火焰面中进行。流动不影响火焰面的内部结构,通过对火焰面拉伸和变形来造成影响。此时湍流火焰被看作是一维层流火焰面的系综^[3]。

火焰面模型对比TPDF模型计算量小的主要原因在于对燃烧过程的简化。对于TPDF燃烧模型,在湍流燃烧过程中需要计算每个组分的输运方程,此外还要计算概率密度函数,这个过程非常复杂,往往需要Monte Carlo等处理方法^[4]。对于SLFM模型而言,有关网格中组分和温度的信息均简化为混合物分数和恰当比下标量耗散率来表示。此外,稳态层流火焰面模型在计算之前会先行建立火焰面数据库,化学反应的计算与流动方程计算解耦,解决了湍流燃烧的刚性问题。因此火焰面模型在湍流燃烧模拟中应用广泛,而且有许多改进模型。例如适用于计算预混火焰的FGM(flamelet generated manifold)模型和Pierce和Moin提出的火焰面/反应进度变量模型^[5](flame-

let/progress variable method, FPV)。国内也对火焰面模型从理论分析^[6]到工程应用^[7]开展了多角度的研究,近年来更有与机器学习结合的探索^[8]。

目前,尚无统一普适的化学反应机理,不同的化学反应机理包含不同的组分和反应步,会对模拟结果产生直接影响。不同反应机理结合相同的湍流燃烧模型也能具有不同的计算精度和速度,不同反应机理对于火焰面模型的影响的研究较少。Prieler等^[9]在采用SLFM结合17组分25步反应以及17组分46步反应,对不同氧气浓度的天然气燃烧室进行了模拟,计算结果表明在氧化剂为空气时两个机理计算结果相似而氧化剂为纯氧气时则有较大差别。稳态层流火焰面模型基于由一维扩散火焰生成的数据库,因此,有必要对不同反应机理的一维火焰的计算、生成的数据库以及LES-SLFM模拟结果进行系统研究,对比结合不同化学反应机理的火焰面模型的表现。

本文使用的AECSC(aero engine combustor simulation code)程序,可以采用LES耦合TPDF模型预测特定工况下钝体火焰的燃烧场^[10-11]和模型燃烧室内两相湍流燃烧场的部分特征。因此本文基于AECSC平台,采用大涡模拟方法耦合稳态层流火焰面模型开发了LES-SLFM方法,对Sandia实验室的经典湍流射流火焰进行模拟。首先分析一维火焰及数据库的特征;其次对比结合不同复杂程度化学反应机理火焰面模型的计算精度与效率,并与TPDF模拟结果对比;然后将不同机理的射流火焰的计算结果与一维火焰的计算结果进行联立对比,分析两者间的异同,为湍流燃烧理论、模型和程序的发展提供参考和基础。

1 程序与模型

1.1 程序简介

AECSC程序源于帝国理工Jones教授及其团队^[12],由北京航空航天大学航空发动机数值仿真研究中心发展,是三维亚声速湍流燃烧数值模拟程序,采用Fortran语言模块性编程,有良好的拓展性。

本文采用自研程序 Auto Flamelet 根据边界条件,生成 SLFM 模型计算前要预先生成的火焰面数据库。此程序采用 Python 编写,用经典开源化学反应计算模块 Cantera^[13] 计算一维扩散火焰,从而生成火焰面数据库。

1.2 数值模型

1.2.1 大涡模拟方法

大涡模拟对 N-S (Navier-Stokes) 方程进行空间滤波,若 $\psi(x, t)$ 是一瞬态流动变量,其滤波变量定义为

$$\tilde{\psi}(x, t) = \iint_{-\infty}^{+\infty} G(x - x') \psi(x', t) dx' \quad (1)$$

AECSC 中采用的滤波方法为箱式滤波^[14],引入了密度加权函数定义 Favre 平均为

$$\tilde{\psi} = \frac{\overline{\rho\psi}}{\bar{\rho}} \quad (2)$$

Favre 平均后的方程

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial x_j} \quad (4)$$

式中 $\bar{\sigma}_{ij}$ 为分子黏性项, $\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$ 未知。大尺度流动直接求解,用动态 Smagorinsky-Lilly 模型模化亚网格应力项 $\tau_{ij} = \bar{\rho}(\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$ 。

1.2.2 稳态层流火焰面模型

稳态层流火焰面模型采用了火焰面假设,将湍流扩散火焰看作一系列不同的层流火焰面构成。程序中采用一维非预混对撞火焰来生成火焰面数据,一维火焰中一端为燃料入口,一端为氧化剂入口,如图 1 所示。

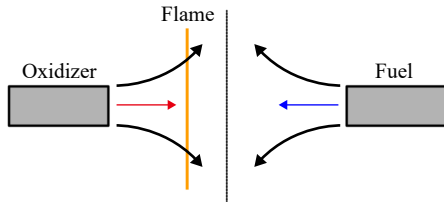


图 1 一维对撞火焰示意图

Fig. 1 Sketch of one-dimensional counterflow flame

通过坐标变换^[1],可以将火焰面方程由物理坐标转换为混合物分数空间的坐标

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} - \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} - \dot{\omega}_k = 0 \quad (5)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{1}{2} \rho \chi \left(\frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \frac{1}{c_p} \cdot \frac{\partial c_p}{\partial Z} \cdot \frac{\partial T}{\partial Z} \right) + \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^n h_k \dot{\omega}_k = 0 \quad (6)$$

式中 ρ 为密度, Y_k 是组分 k 的质量分数, T 为温度, c_p 为组分 k 的比定压热容, h_k 为组分 k 的焓值。 Z 为混合物分数,采用 Bilger 等^[15] 对碳氢燃料给出的定义

$$Z = \frac{\frac{2Z_C}{W_C} + \frac{0.5Z_H}{W_H} + \frac{(Z_{O,2} - Z_O)}{W_O}}{\frac{2Z_{C,1}}{W_C} + \frac{0.5Z_{H,1}}{W_H} + \frac{Z_{O,2}}{W_O}} \quad (7)$$

其中 Z_i 为元素 i 的质量分数, W_i 为元素 i 的摩尔质量, $Z_{i,1}$ 为燃料的 Z_i , $Z_{i,2}$ 为氧化剂的 Z_i 。

式(5)和式(6)中的 χ 为标量耗散率,代表扩散时间尺度的倒数,单位为 $1/s$,定义为

$$\chi = 2D \left(\frac{\partial Z}{\partial y} \right)^2 \quad (8)$$

Peters 指出 χ 可由恰当比下的标量耗散率 χ_{st} 作为参量来表述。所以 χ_{st} 可以作为对进行火焰面拉伸和结构影响的外部变量。

在火焰面数据库生成程序 Auto Flamelet 中,一维对撞火焰采用开源化学模块 Cantera 计算,标量耗散率由燃料和氧化剂入口流量决定。两个入口的流量由低到高直至熄火,对于特定流量下恰当比下的标量耗散率 χ_{st} 表示为

$$\chi_{st} = \frac{a_s}{\pi} \exp \left(-2 \left[\text{erf}^{-1}(1 - 2Z_{st}) \right]^2 \right) \quad (9)$$

其中 a_s 为流场拉伸率, erf^{-1} 为误差函数的反函数, Z_{st} 为化学恰当比下的混合物分数。

在多组不同流量下的一维火焰计算完毕后,包括温度和组分质量分数在内的标量均可由混合物分数和恰当比下的标量耗散率来表示。对于温度有 $T(Z, \chi_{st})$ 。

通过选取预设概率密度函数 (presumed probability density function) 来对各个火焰面标量进行积分处理,将 $T(Z, \chi_{st})$ 转换为 $\tilde{T}(\tilde{Z}, \tilde{Z}^{n^2}, \tilde{\chi}_{st})$,进而得到最终的火焰面数据库。对于火焰面数据库内的某一标量 ϕ :

$$\tilde{\phi} = \int_0^\infty \int_0^1 \phi(Z, \chi_{st}) P(Z, \chi_{st}) dZ d\chi_{st} \quad (10)$$

对于上式中的概率密度函数 $P(Z, \chi_{st})$,假设 Z 与 χ_{st} 统计无关,有

$$P(Z, \chi_{st}) = P(Z) P(\chi_{st}) \quad (11)$$

通常假设 χ_{st} 为 Delta 分布, Z 为 β -PDF 分布, 对于 $P(Z)$:

$$P(Z) = Z^{\alpha-1} \bar{Z}^{\beta-1} \frac{\Gamma(\alpha+\beta)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)} \quad (12)$$

$$\alpha = \bar{Z} \left[\frac{\bar{Z}(1-\bar{Z})}{\bar{Z}''^2} - 1 \right] \quad (13)$$

$$\beta = (1-\bar{Z}) \left[\frac{\bar{Z}(1-\bar{Z})}{\bar{Z}''^2} - 1 \right] \quad (14)$$

其中 $\bar{Z}$ 和 $\bar{Z}''^2$ 为积分过程中指定的参量, 对于特定的 $\bar{Z}$, $\bar{Z}''^2$ 的取值范围为 $[0, \bar{Z}(1-\bar{Z})]$ 。直接采用 $\bar{Z}$ 和 $\bar{Z}''^2$ 进行数据库的生成会造成数据的浪费, 因此对 $\bar{Z}''^2$ 进行归一化处理, 令 $\xi = \frac{\bar{Z}(1-\bar{Z})}{\bar{Z}''^2}$, 此时 ξ 的取值范围为 $[0, 1]$ 。火焰面数据库存储为 $\tilde{\phi}(\bar{Z}, \xi, \chi_{st})$ 的格式, 在实际计算过程中再转换为 $\tilde{\phi}(\bar{Z}, \bar{Z}''^2, \chi_{st})$ 。

实际流场计算中, 对于混合物分数 Z 有输运方程

$$\frac{\partial \bar{p} \bar{Z}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{p} \tilde{u}_i \bar{Z}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_i} \right] \quad (15)$$

式中 μ 为流体黏度, Pr 为普朗特数; μ_t 为湍流黏度, Pr_t 为湍流普朗特数。在大涡模拟中, 基于亚网格模型, 对于 $\bar{Z}''^2$ 有

$$\bar{Z}''^2 = C_Z \Delta^2 \left| \frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_i} \right|^2 \quad (16)$$

式中 Δ 为滤波宽度, C_Z 为模型常量, 本文采用 Branley 等^[16] 给出的 0.1。对于 $\tilde{\chi}$ 有

$$\tilde{\chi} = C_\chi \frac{\mu_t + \mu}{\bar{\rho}} \left| \frac{\partial \bar{Z}}{\partial x_i} \right|^2 \quad (17)$$

式中 C_χ 为模型常数, 本文取 2.0。

2 程序验证与算例计算

2.1 火焰面数据库验证

2.1.1 一维火焰算例验证

对于大部分基于火焰面理论的湍流燃烧模型, 火焰面数据库是决定计算精度的关键。由于在 Auto Flamelet 中采用 Cantera 计算一维火焰来生成数据库, 因此有必要先行检验 Cantera 计算一维火焰的精度。

一维验证算例选择了 Smooke 等进行的非预

混甲烷-空气扩散火焰实验^[17], 实验构造如图 2 所示, 温度采用热电偶测量, 通过气相色谱法分析组分构成, 具体实验设备及方法见文献^[17]。表 1 给出了计算的边界条件。

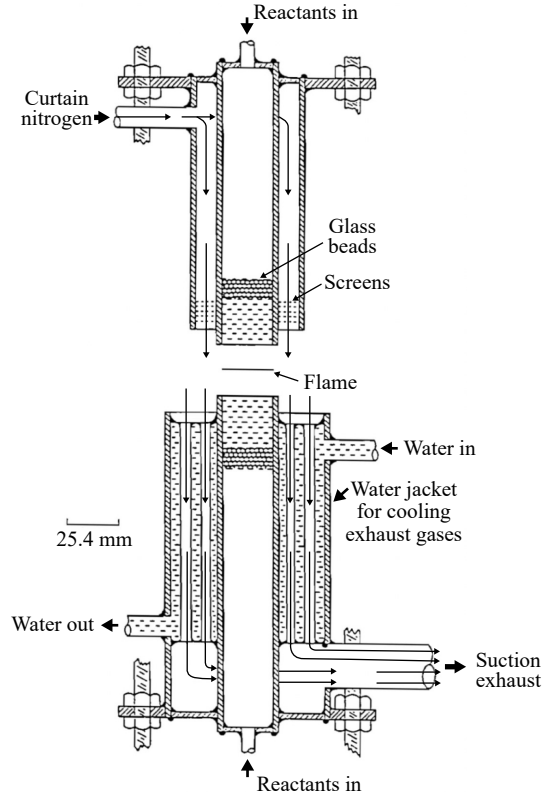


图 2 甲烷-空气扩散火焰实验简图^[17]

Fig. 2 Sketch of the methane-air diffusion flame experiment^[17]

表 1 甲烷-空气扩散火焰边界条件

Table 1 Boundary condition of methane-air diffusion flame

入口类型	单位面积流量/ ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)	组分构成 (体积分数)	温度/K
燃料	0.550 1	100% CH_4	300
氧化剂	0.946 7	79% N_2 , 21% O_2	300

计算域长度为 0.014 876 m, 初始网格为 100, 开启网格自动优化, 分别采用包含了 53 组分 325 步的详细化学机理 GRI 3.0^[18]、16 组分 35 步的 Smooke 机理^[19] 和 26 组分 151 步基于 AramoMech-3.0^[20] 机理采用 6 种 DRG 相关方法简化的甲烷机理^[21], 简记为 DRG 机理, 此机理在常压和 900~1 600 K 范围内简化。三种机理均能对甲烷燃烧进行模拟, 但是包含的组分和反应步数区别较大, 分别代表了常用的详细机理、骨架机理以及基于详细机理的简化机理。当流场达到收敛条件时 Cantera 停止计算, 结果如图 3 所示, 不同机理的模拟结果简记为各自的机理名称。

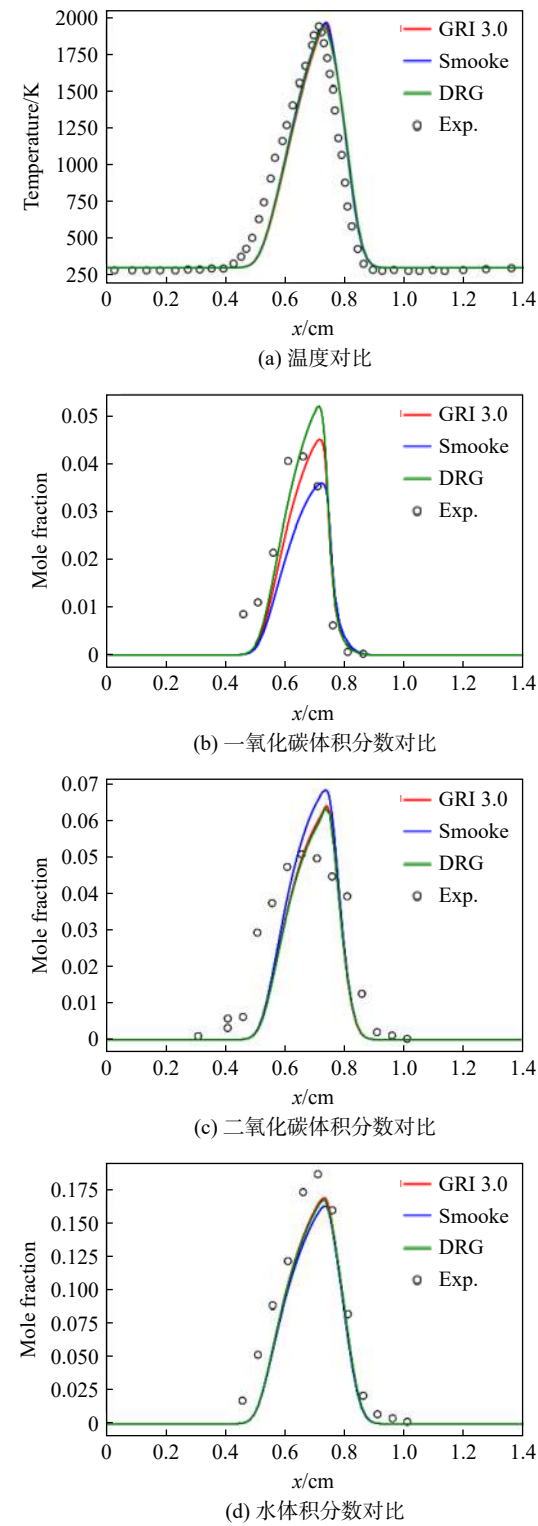


图 3 一维流场不同机理计算结果对比

Fig. 3 Comparison of one-dimensional flow field computation result among different reaction mechanisms

从图 3 计算结果中可以看出在温度分布方面三种机理几乎完全一致, 且与实验值较为接近。三种机理的主要区别体现在组分的分布上, 例如典型中间产物一氧化碳, 最符合实验分布的是 GRI 3.0 详细机理, Smooke 机理偏低而 DRG 机理

偏高。同时三种组分在终产物分布上的区别不大。总而言之, 三种机理计算一维扩散火焰的结果与实验较为吻合。

在后续的火焰面数据库的计算中将采用上述三种机理进行计算, 分析之间的异同。

2.1.2 火焰面数据库分析

火焰面数据库的生成依赖于特定算例的边界条件, 因此在数据库生成时采用了 Sandia 实验室的部分预混甲烷射流火焰的边界条件^[22], 具体条件位于表 2。

表 2 火焰面数据库边界条件			
Table 2 Boundary condition of the flamelet library			
入口类型	初始流量/ (kg·m ⁻² ·s ⁻¹)	组分构成 (体积分数)	温度/K
燃料	0.1	25% CH ₄ , 59.25%N ₂ 15.75% O ₂	291
氧化剂	0.1	79% N ₂ , 21% O ₂	291

在 Auto Flamelet 中, 程序先将初始流量对一维扩散火焰进行计算, 并尽可能降低流量来获得标量耗散率接近零的流场, 随后增大流量直到熄火。对 GRI 3.0 机理、Smooke 机理和 DRG 机理分别生成对应的数据库。其中各个机理生成的数据库中标量耗散率与最高温度关系如图 4 所示。

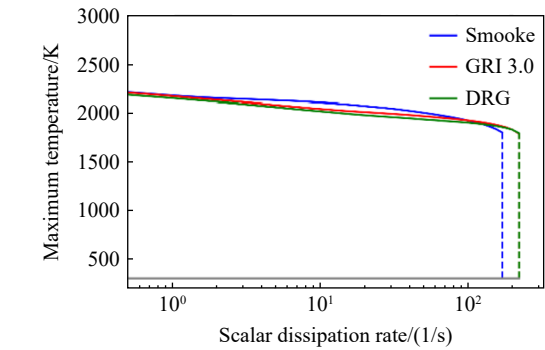


图 4 各机理标量耗散率与最高温度关系

Fig. 4 Relationship between scalar dissipation rate and maximum temperature of different mechanisms

图 4 底部的灰色直线代表熄火状态。对于各个机理来说, 当标量耗散率超过临界值时, 将会发生熄火, 每个虚线代表了各自的熄火临界点。从图 4 中可以看出 GRI 3.0 机理和 DRG 机理的标量耗散率与最高温度的关系几乎完全一致, 熄火临界点也保持一致。Smooke 机理的熄火临界点较为靠前, 且最高温度也下降稍慢。DRG 机理与 GRI 3.0 机理非常相似的原因可能是因为 DRG 机

理是复杂机理的简化机理,在释热方面较为类似。

2.2 Sandia Flame 系列算例计算

2.2.1 算例简介

Sandia Flames 是 Sandia 实验室非常成熟的部分预混射流火焰^[22],具有非预混燃烧的特征,历年来有许多学者对其进行了深入的研究,燃烧器几何结构和实验图片如图 5 所示。因此采用此系列算例来进行火焰面模型不同机理的检验。本文选择的是流速较高的 Flame D、E 和 F。

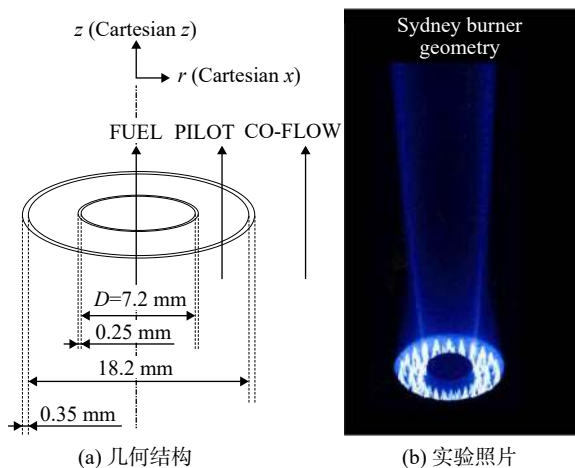


图 5 Sandia Flames 的实验图示^[22]

Fig. 5 Sketch of Sandia Flames experiments^[22]

该系列火焰边界条件基本相同,主喷口直径 $D = 7.2 \text{ mm}$,主要的区别在于中心燃料的射流速度,进而造成了雷诺数的不同:Flame D 的雷诺数约为 22 400,Flame E 则为 33 600,Flame F 达到 44 800。主要边界条件如表 3 所示。

表 3 Sandia Flames 边界条件

Table 3 Boundary condition of Sandia Flames

入口类型	速度/(m/s)	混合物分数	温度/K
中心射流	49.9 (Flame D) 74.4 (Flame E) 99.2 (Flame F)	1	291
值班入口	11.4	0.271	1 888
空气伴流	0.9	0	291

2.2.2 计算设置

计算域为 $25D \times 25D \times 125D$,即 $0.09 \text{ m} \times 0.09 \text{ m} \times 0.9 \text{ m}$ 。网格个数为 $72 \times 72 \times 420$,中心加密,图 6 为网格沿流向的示意图。

计算 Flame D 时分别采用 GRI 3.0、Smooke 简化机理和 DRG 机理的稳态层流火焰面模型配合大涡模拟来进行,作为对比还加入了 Pope 采

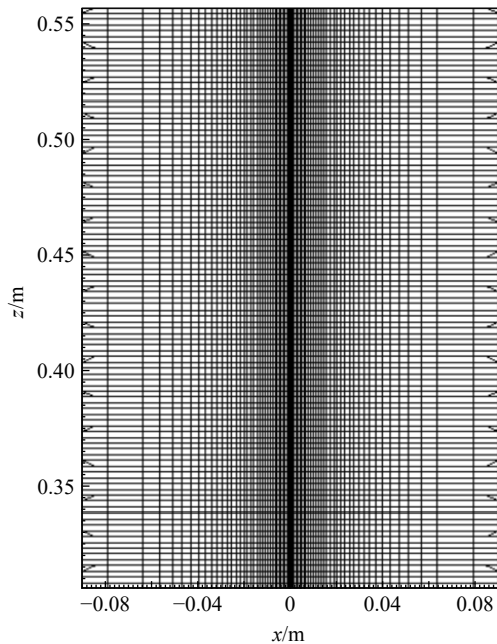


图 6 网格示意图

Fig. 6 Sketch of the mesh

用 LES-TPDF 方法计算的 Flame D 的温度分布结果。Flame E 和 Flame F 采用 SLFM 的 GRI 3.0、Smooke 简化机理和 DRG 机理来进行计算。所有算例均采用同一 64 核心工作站进行计算。对于 Flame D,物理推进时间约为 0.2 s(约为 11 个全程流动时间),随后开始统计平均量。

2.2.3 Flame D 计算结果

图 7 为不同机理 SLFM 模型计算的瞬态温度

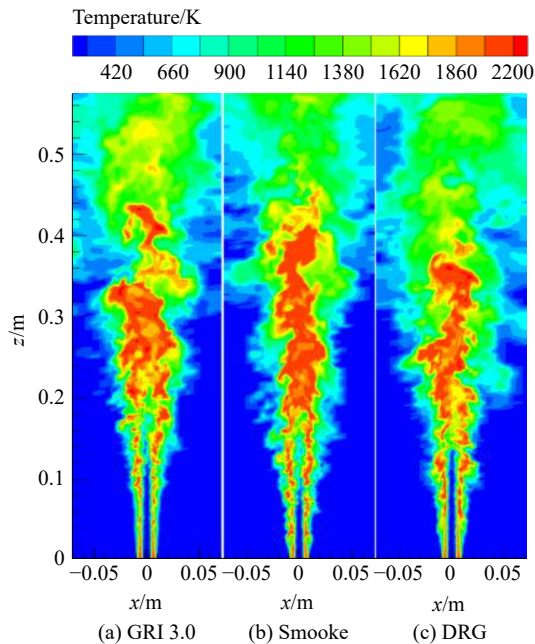


图 7 Flame D 瞬态温度对比

Fig. 7 Comparison of transient temperature distribution of Flame D

对比。图中显示每个结果都具有湍流火焰特征, 由于 Flame D 的雷诺数较低, 各机理结果的局部熄火现象不明显, 主要区别体现在射流入口沿轴线的低温区长度以及火焰高温区的位置。

图 8 分别为各个机理不同轴向高度 z 下截面径向位置 x 平均温度与实验值的对比, 图中实线代表平均值, 虚线代表脉动值, “PDF” 代表 Pope 采用 LES-TPDF 方法的计算结果。

图 8 中各机理下的计算结果与 LES-TPDF 参考结果相似, 准确反应了不同截面下温度随径向位置的变化趋势, 但是精度略低于参考结果。图 9 分别为不同轴向高度 z 下主要组分在径向位置 x 的平均质量分数的对比。

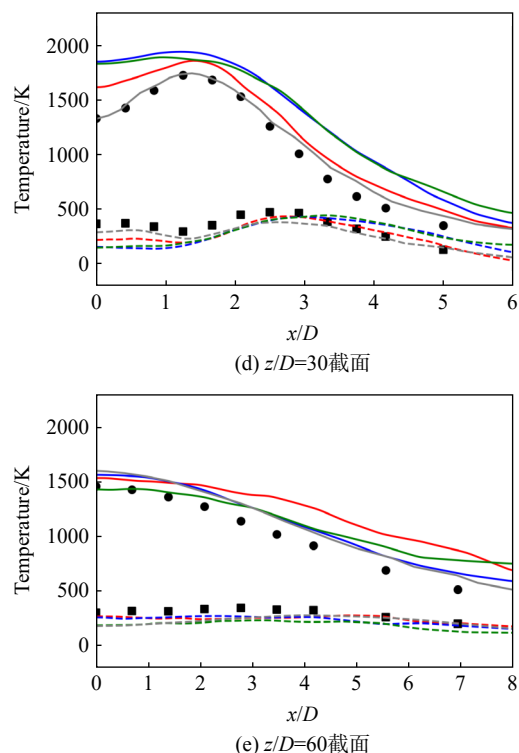
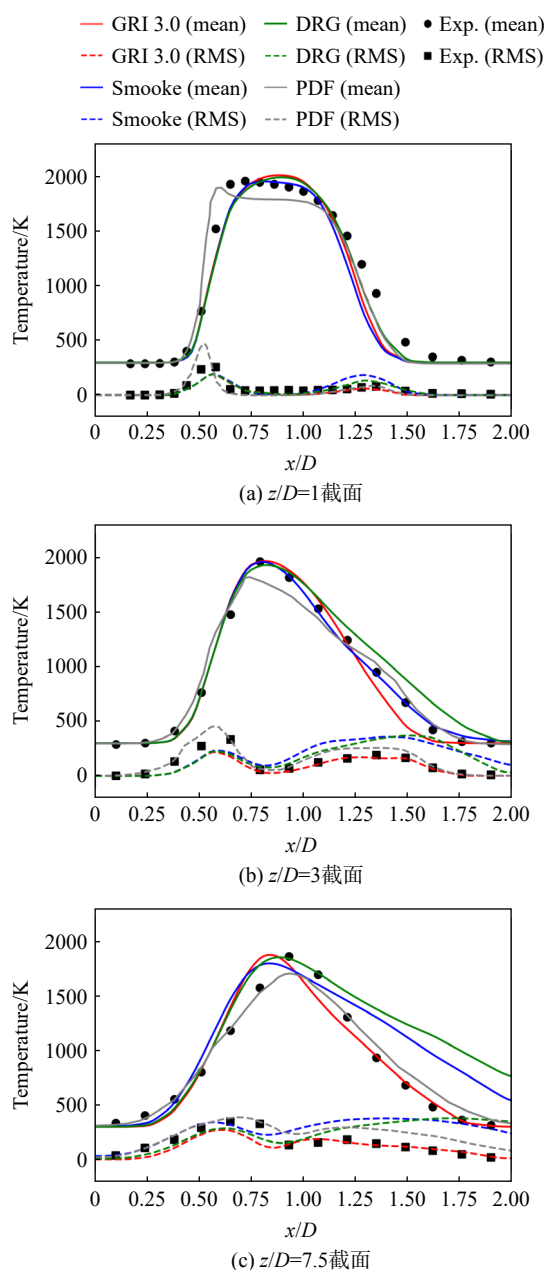


图 8 Flame D 各截面平均温度及温度脉动对比

Fig. 8 Comparisons of mean and RMS temperature profile of Flame D on different sections

组分分布的计算结果与温度分布类似, 各个机理计算的不同截面的组分分布趋势与实验测量相同, 说明在 Flame D 的计算中 SLFM 配合各机理均能得出合理的模拟结果。

2.2.4 Flame E 计算结果

图 10 为 SLFM 不同机理计算 Flame E 的瞬时温度分布。图 11 分别为不同轴向高度 z 下截面径向位置 x 的平均温度与实验值的对比, 实线代表平均值, 虚线代表脉动值。

在 Flame E 的计算结果中, SLFM 的精度不如 Flame D; 主要的误差来自于较低的高度截面上, 不过温度变化趋势能与实验吻合, 不同机理之间的计算结果存在着一定的区别, 但是差异比 Flame D 计算结果要小。

2.2.5 Flame F 计算结果

图 12 分别为 SLFM 不同机理计算 Flame F 的瞬时温度分布。图 13 分别为不同轴向高度 z 下截面径向位置 x 的平均温度与实验值的对比, 图中实线代表平均值, 虚线代表脉动值。

Flame F 的计算结果与 Flame E 相似, 但是 Flame F 的计算结果与实验的误差更大, 特别是

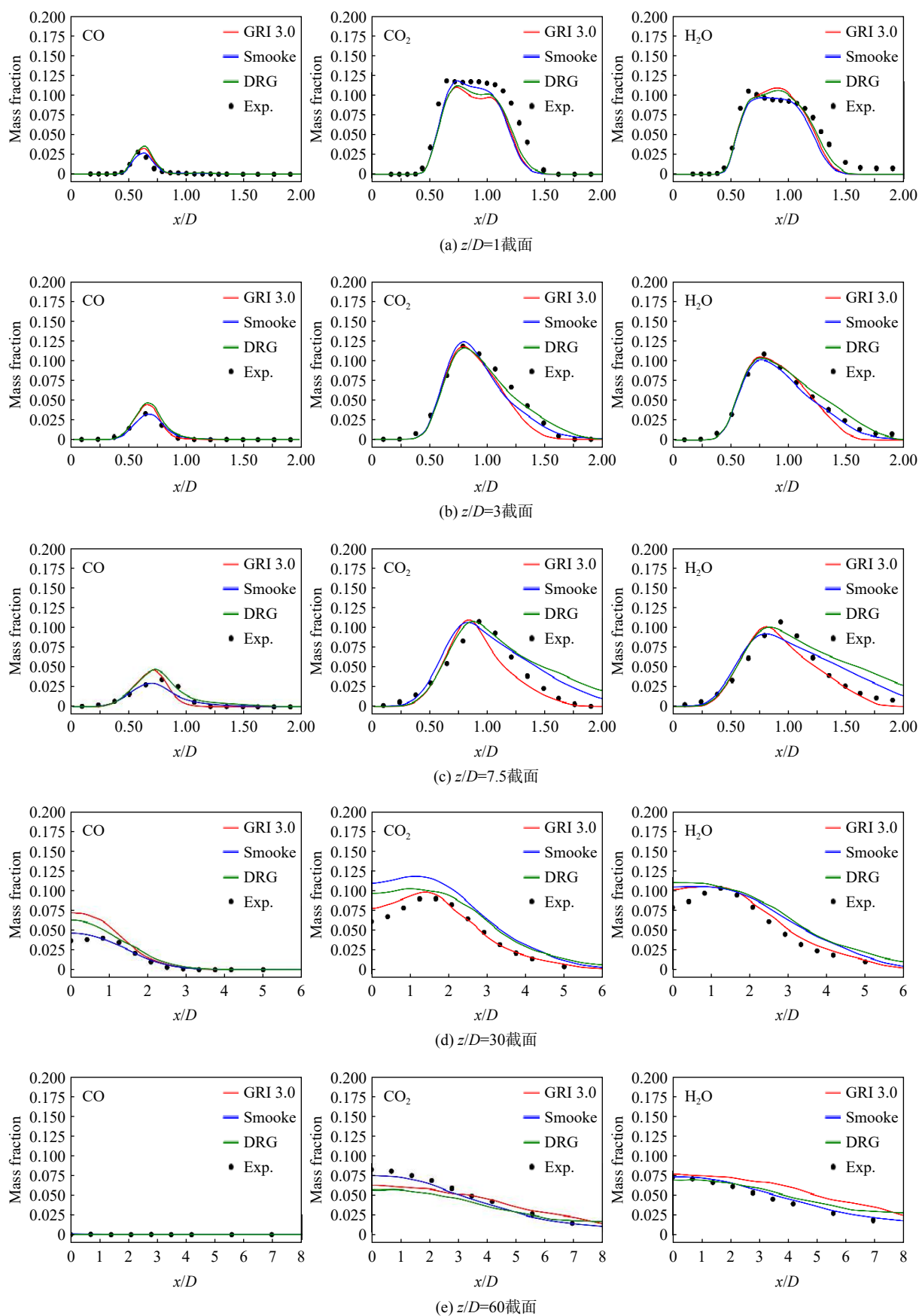


图9 Flame D 各截面主要组分质量分数对比

Fig. 9 Comparisons of main species' mass fraction profile of Flame D on different sections

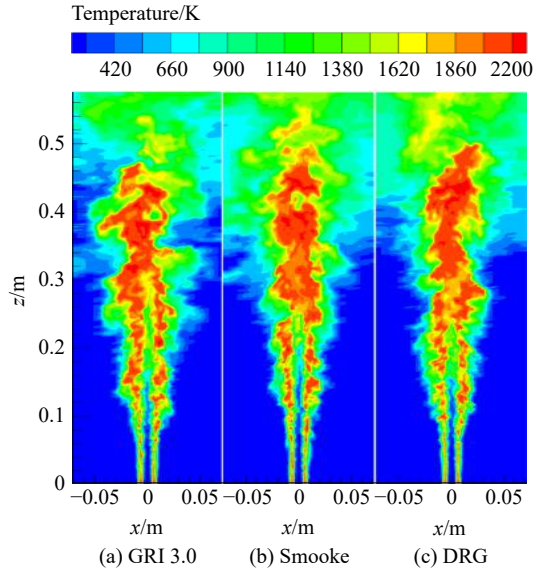


图 10 Flame E 瞬态温度对比

Fig. 10 Comparison of transient temperature distribution of Flame E

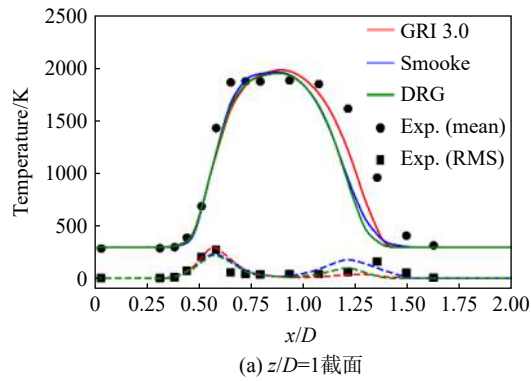
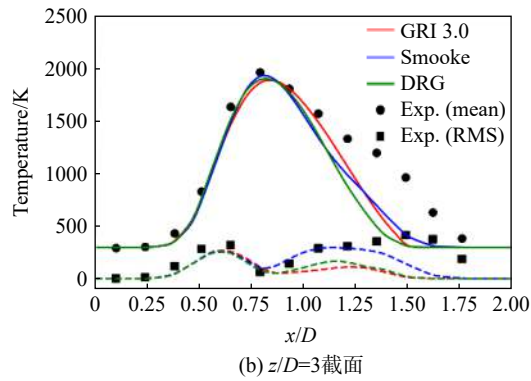
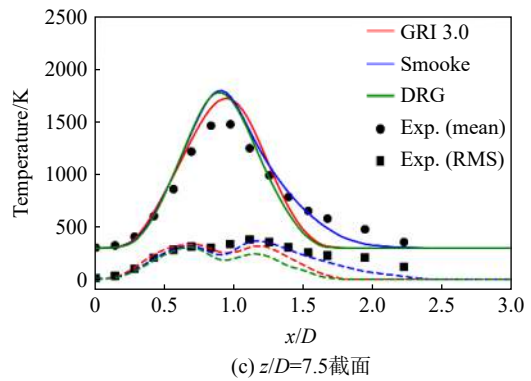
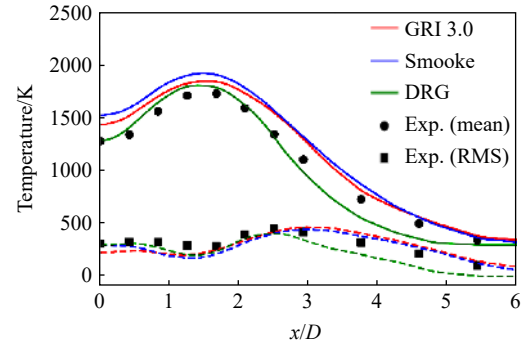
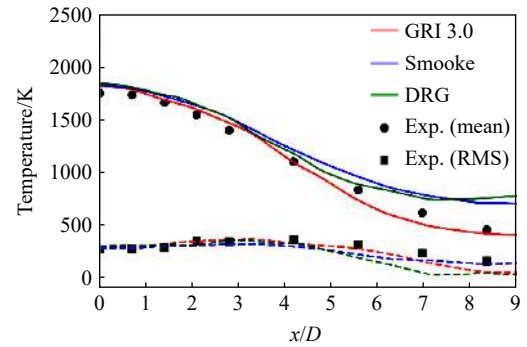
(a) $z/D=1$ 截面(b) $z/D=3$ 截面(c) $z/D=7.5$ 截面(d) $z/D=30$ 截面(e) $z/D=60$ 截面

图 11 Flame E 各截面平均温度及温度脉动对比

Fig. 11 Comparisons of mean and RMS temperature profile of Flame E on different sections

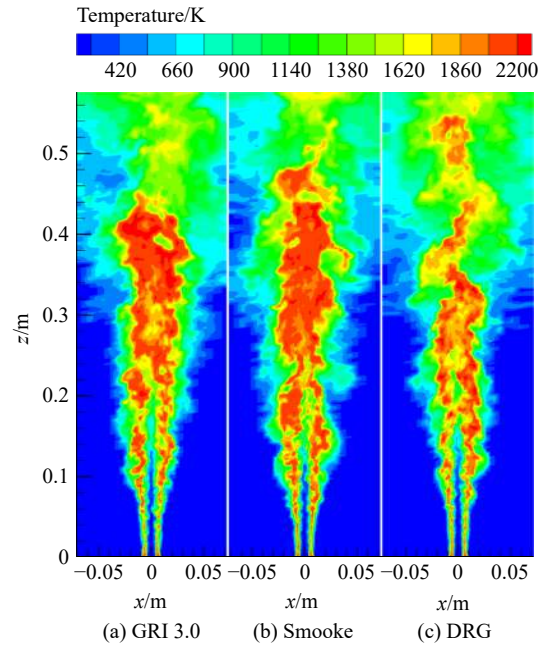


图 12 Flame F 瞬态温度对比

Fig. 12 Comparison of transient temperature distribution of Flame F

$z/D=3$ 截面上, 不过在其他的截面上仍能较好地反应温度变化趋势, 同时各个机理间的计算结果的差异更加缩小。

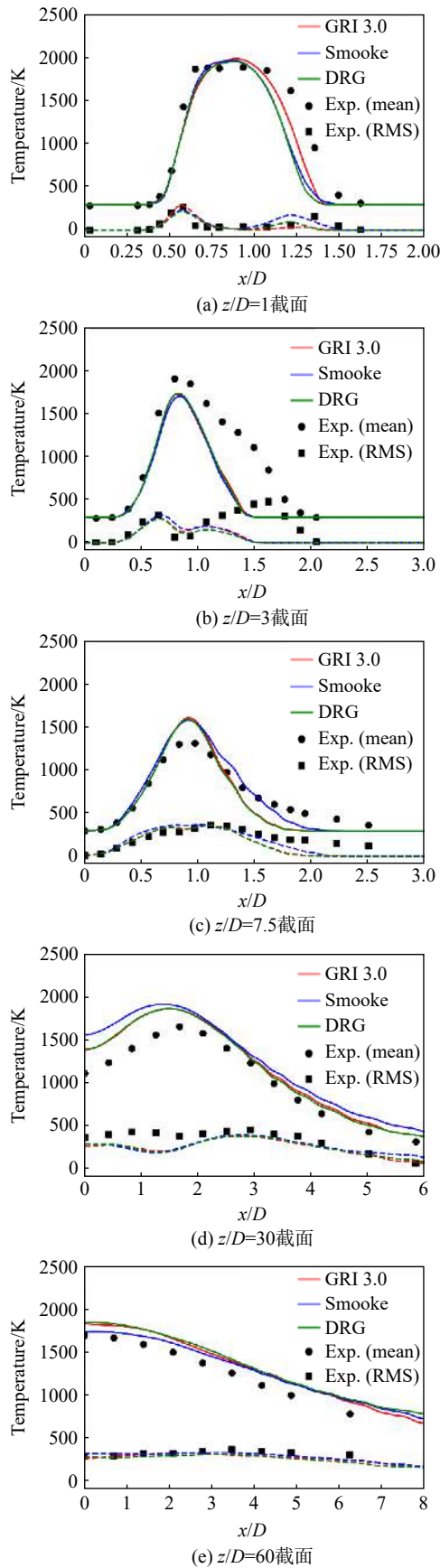


图 13 Flame F 各截面平均温度及温度脉动对比

Fig. 13 Comparisons of mean and RMS temperature profiles of Flame F on different sections

3 结果与讨论

3.1 Sandia Flame D 温度场分析

从图 7 瞬态温度分布中可以看出, 化学机理的改变对于各个算例的火焰长度影响不大, 高温区域分布和大小都较为一致, 这与图 3 中一维对冲火焰的温度分布结果类似。不同机理下温度分布的差异主要在于温度稍低的区域, 例如在 z/D 为 3~7.5 截面上 DRG 机理和 Smooke 机理的火焰扩散更加明显, 同时两种简化机理对比 GRI 3.0 详细机理的温度分布都有偏高的情况。定量来说, SLFM 三种机理的计算结果均体现了 Flame D 湍流火焰局部熄火不明显、具有非预混火焰的特性和火焰面模型的高温区域集中的特点。

靠近入口的截面所有模型与实验结果对比均吻合较好, 这是由于靠近入口的截面主要由来流的边界条件控制, 反应机理的影响有限。主要截面计算结果与实验值的平均误差如表 4 所示。

表 4 各模型计算 Flame D 的平均温度误差

Table 4 Mean error of mean temperature of different models simulating Flame D

模型	$z/D=1$	$z/D=3$	$z/D=7.5$	$z/D=30$	$z/D=60$	总平均误差 %
SLFM (GRI 3.0)	9.98	8.82	9.65	19.1	27.1	17.2
SLFM (Smooke)	10.7	5.57	38.5	38.9	14.5	25.3
SLFM (DRG)	9.00	16.0	51.0	39.0	22.0	26.2
TPDF	10.0	6.00	10.0	8.00	15.0	9.80

从平均误差来看, 表现最好的是 TPDF 参考结果, 其次是采用 GRI 3.0 机理的 SLFM 模型, 而余下几个模型似乎表现相当, 平均误差都在 25% 左右。在对比了径向上的温度分布后, 还需要对轴向上的温度分布做进一步研究, 轴向上的温度分布对应了火焰长度, 各模型的不同轴向高度 z 下中心平均温度对比如图 14 所示。

从图 14 不难看出, 最符合实验结果的是 TPDF 参考结果, 其次是 GRI 3.0 机理的 SLFM。SLFM 轴向上的高温区分布对比 TPDF 参考结果均要偏下, 同时温度随轴向上升较快。这也是由 SLFM 模型将燃烧过程与掺混强烈关联的特点决定的。

综合径向温度分布与轴向温度的分布, 对于本文中采用的各个模型而言, TPDF 参考结果的综合表现最好, 与实验值误差最小, 其次是 GRI

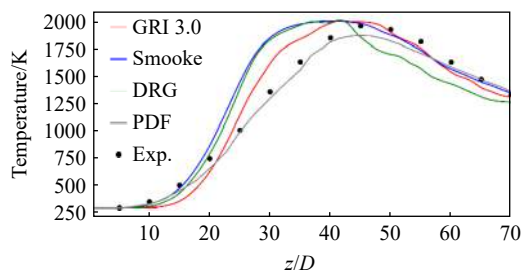


图 14 各模型 Flame D 轴向平均温度对比

Fig. 14 Comparison of mean temperature profile of Flame D alongside the axis among different models

3.0 详细机理的 SLFM, 余下 Smooke 机理和 DRG 机理的 SLFM 表现相似, 精度一般。

3.2 Sandia Flame D 组分分布分析

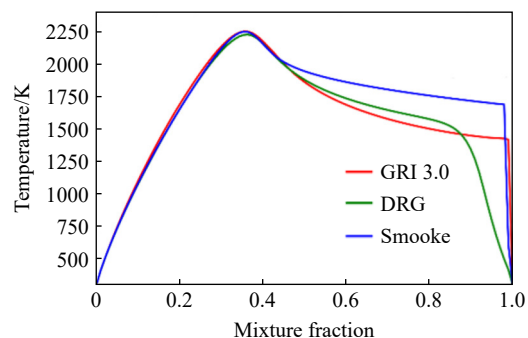
从主要组分在各个截面上的分布来看, 表现最优的仍然是 GRI 3.0 详细机理的 SLFM 模型, 同时 Smooke 机理和 DRG 机理也对主要产物的分布做了较好的预测。对比图 3 三种机理一维火焰计算结果, 发现 GRI 3.0 机理和 DRG 下 CO 质量分数略高, 而 CO₂ 质量分数略低。由于 SLFM 的数据库基于一维火焰的计算结果, 因此一维火焰的组分质量分数计算结果在 Flame D 的计算中均有体现, 而且射流火焰中还有湍流脉动的影响。例如 $z/D=30$ 截面上 CO 的分布, 即使 DRG 机理在一维火焰中的 CO 峰值高于 GRI 3.0 机理, 但是在此截面上 DRG 机理的 CO 质量分数却低于 GRI 3.0 机理, 原因在于此截面已经远离进口, 流动比化学反应产生了更强的影响。

各机理对主要产物质量分数的预测均与实验吻合较好。从一维火焰和全部射流火焰的计算结果分析, 化学反应机理对湍流火焰的预测有明显影响。一般, 化学反应机理对低速的射流火焰模拟结果影响大一些, 详细机理的计算结果会好些。接下来会详细分析这种影响。

3.3 Flame D 计算结果与一维火焰计算结果的异同

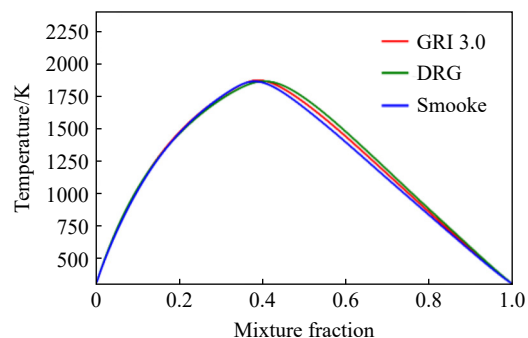
从前面两节的分析中可以看出在 SLFM 模型的计算结果与先前各机理一维火焰计算结果存在一定的相似, 但是图 3 (a) 中各机理一维火焰温度分布差异非常小, 而在图 8 中 Flame D 温度分布则差异较大。对于这个现象, 需要对火焰面数据库进行进一步的研究, 图 15 为 $\chi_{st} = 0.15$ 时各机理混合物分数与温度之间的关系。

在混合物分数高于恰当比时, 三种机理的温度出现了较大的差异, 此处的差异对 Flame D 中的温度分布产生了相应的影响。同时注意到三种

图 15 $\chi_{st} = 0.15$ 时各机理温度-混合物分数分布Fig. 15 Temperature-mixture fraction profiles of different mechanisms when $\chi_{st} = 0.15$

机理的最高温度以及对应的混合物分数相似, 这也说明了在 Flame D 计算中三种机理在不同截面上的最高温度的值和出现位置, 都很接近的情况。

与量耗散率较低时各机理之间出现较大差异不同, 图 16 为当接近熄火, $\chi_{st} = 150$ 时各机理混合物分数与温度之间的关系。此时三种机理之间的差异较小。

图 16 $\chi_{st} = 150$ 时各机理温度-混合物分数分布Fig. 16 Temperature-mixture fraction profiles of different mechanisms when $\chi_{st} = 150$

此外, 考虑到 Flame 系列算例的火焰面数据库是由体积分数分别为 25% 甲烷 75% 空气(燃料)-空气(氧化剂)的部分预混火焰生成的, 与边界条件为纯甲烷-空气非预混一维火焰存在差异。因此根据纯甲烷-空气作为边界条件生成了火焰面数据库, 图 17 为此数据库 $\chi_{st} = 0.15$ 时各机理混合物分数与温度之间的关系, 图 18 为接近熄火, $\chi_{st} = 12$ 时各机理混合物分数与温度之间的关系。

图 17、图 18 中三种机理上的差异要低于图 15、图 16, 说明在不同的边界条件下, 此三种机理之间的差别也会有变化。对于本次一维非预混火焰算例而言三种机理的计算结果相似, 而对于 Flame 系列中的部分预混火焰则存在着一定的差别。图 19 分别为 GRI 3.0 机理下 Flame D 和

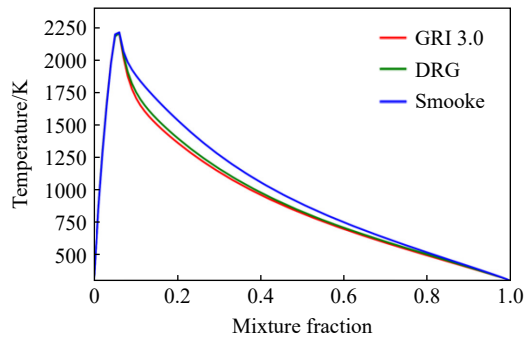


图 17 $\chi_{st} = 0.15$ 时纯甲烷-空气边界条件下各机理温度-混合物分数分布

Fig. 17 Temperature-mixture fraction profiles under pure methane-air boundary condition of different mechanisms when $\chi_{st} = 0.15$

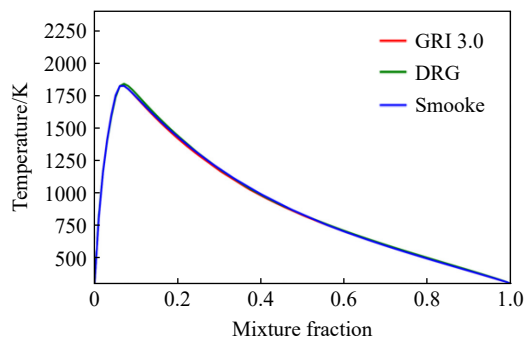


图 18 $\chi_{st} = 0.12$ 时纯甲烷-空气边界条件下各机理温度-混合物分数分布

Fig. 18 Temperature-mixture fraction profiles under pure methane-air boundary condition of different mechanisms when $\chi_{st} = 0.12$

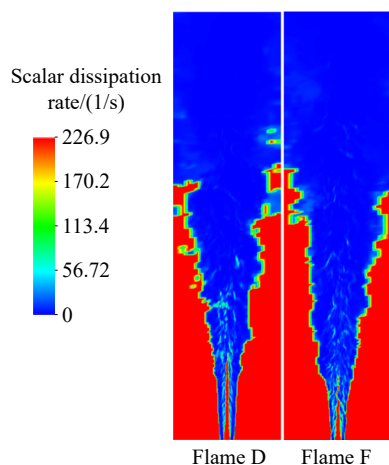


图 19 Flame D 与 Flame F 瞬态标量耗散率分布

Fig. 19 Transient distribution of scalar dissipation rate in Flame D and Flame F

Flame F 瞬时标量耗散率的分布, 可见大部分燃烧区域耗散率较低, 对应的火焰面数据库分布更加

接近图 15。另外, AECSC 计算 Flame 系列算例时采用大涡模拟方法, 其中存在着强烈的非定常湍流, 与 Cantera 定常求解一维火焰存在着相当大的差别。AECSC 计算中湍流和化学反应存在着强烈的非线性关系, SLFM 模型依赖的火焰面数据库若存在着微小的差异, 在实际计算中就有可能产生非常的差别。因此即使 SLFM 模型的数据库完全依赖于二维火焰的计算结果, 在湍流火焰计算中不同机理在一维火焰计算结果中的差异也有可能被放大。

3.4 计算效率分析

在讨论分析计算精度之外, 本文还对各个模型的计算速度进行研究。图 20 中统计了各个模型的计算相对速度, 以 GRI 3.0 机理的 SLFM 速度为基准, 其中 TPDF 模型采用的是 15 步简化机理^[23], 复杂程度和 Smooke 机理类似。

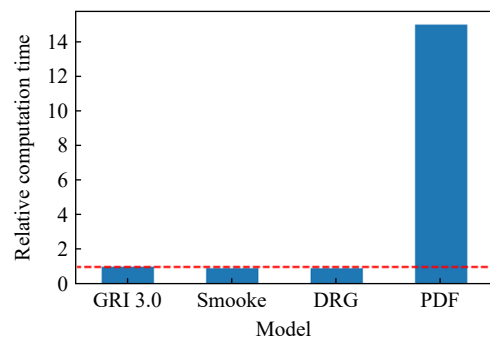


图 20 各模型计算相对时间

Fig. 20 Relative computation time of different models

从速度对比中可以发现, 在 SLFM 模型下即使是包含 53 组分 325 步反应的 GRI 3.0 详细机理计算速度并未显著落后于组分和反应更少的 DRG 机理和 Smooke 机理。这是由于在 SLFM 方法下复杂的化学反应过程并未在实际的流场过程中进行, 无论采用何种机理, 流场只需求解混合物分数 Z 的输运方程即可, 对于不同机理之间的速度差异, 主要体现在详细机理需要对更多的组分进行插值计算。对于 TPDF 模型而言, 由于计算中需要求解包含所有组分信息的输运方程, 对于组分个数十分敏感。并且在求解化学反应时需要求解概率密度函数, 因此也对机理的复杂程度敏感。而且 TPDF 模型还存在随着反应区域的增加, 计算速度越来越慢的情况, 而在 SLFM 方法下计算速度则保持相对恒定。

在 SLFM 模型中, 各机理的计算速度方面的差异主要体现在生成火焰面数据库时一维扩散火

焰的计算。图 21 为三种机理在生成火焰面数据库时计算消耗的相对时间。可以看出,采用详细机理在生成火焰面数据库时计算速度远低于简化机理,但是在计算生成数据库消耗的额外的时间(采用 Smooke 机理生成数据库约 3 min, GRI 3.0 机理约为 50 min)远短于在实际 CFD 计算所消耗的时间(SLFM 模型计算 Flame D 约消耗 1.2 d)。因此在对于 SLFM 模型计算此系列算例而言,采用详细机理更加合适。

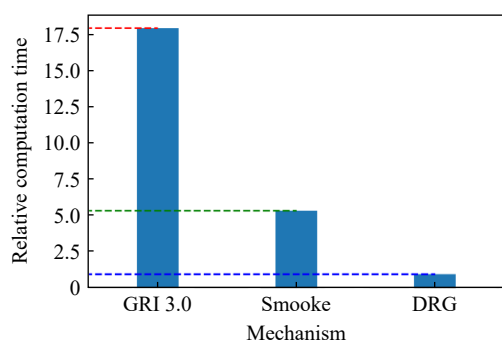


图 21 各机理计算一维火焰的相对时间

Fig. 21 Relative computation time of one-dimensional flame of different mechanisms

3.5 Flame D、E、F 模拟结果对比

Sandia Flame D、E、F 之间的主要区别在于中心射流的速度不同,随着中心速度的上升,局部熄火的现象会越来越明显。对比图 22 中采用 GRI 3.0 机理的 SLFM,可以发现 Flame E 和 Flame F 在火焰根部处的局部熄火均不如实验中的强烈和明显,这是由于 SLFM 对于局部熄火和复燃这类现象无法做到很好的模拟。

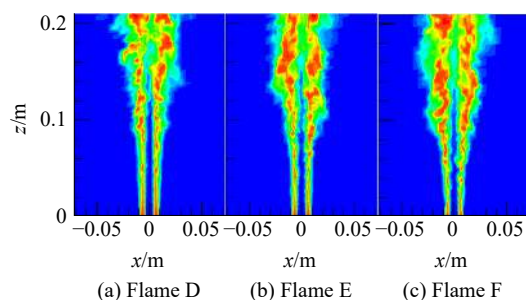


图 22 进口附近瞬时温度分布放大图

Fig. 22 Zoom photos of transient temperature distribution near inflow

对比 Flame D、E、F 在同一轴向截面上的径向平均温度可以发现,以 $z/D=3$ 截面为例,随着射流雷诺数的上升,实验数据中火焰逐渐变宽。而在 SLFM 模拟结果中没有得到很好的体现,这是

由于 SLFM 自身的局限导致反应过于完全所导致的。对比图 23 中 Jones 等采用原版 BOFFIN 程序中 TPDF^[24] 模型计算的计算结果,SLFM 出现了较大的偏差,温度偏高,因此在模拟 Flame E 和 Flame F 时精度有所下降。

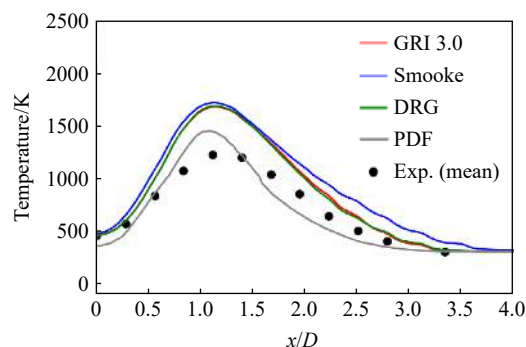


图 23 Flame F 中 $z/D=15$ 截面平均温度分布

Fig. 23 Comparison of mean temperature profile of Flame F on $z/D=15$ section

4 结 论

本文基于 AECSC 程序和自研的数据库生成程序 Auto Flamelet,研发 LES-SLFM 模型程序,结合多种化学反应机理,对三种高雷诺数湍流火焰模拟,研究化学机理对火焰面数据库及射流火焰模拟的影响。

通过对不同化学反应机理一维火焰的计算,表明了反应机理对稳态层流火焰面模型计算精度具有明显的影响,而对计算速度的影响较小。同时通过对组分分布的分析发现一维火焰的计算结果可以对 SLFM 计算结果进行一定程度的预测,从而挑选更加合适的化学反应机理。此外从一维扩散火焰中提取数据将物理空间上的各个标量(温度、组分等)分布转换为混合物分数空间上的方法也得到了验证,说明了自研程序 Auto Flamelet 生成的 SLFM 数据库适用于湍流射流火焰的计算。

就本文算例中的甲烷-空气燃烧算例来看, GRI 3.0 详细机理表现最优,同时计算速度不受太大影响。GRI 3.0 机理的 SLFM 模型对比 TPDF 燃烧模型的计算结果,虽然精度稍差,但是计算时间却可以大大缩短。不过当 SLFM 模型采用 Smooke 机理和 DRG 机理这类简化机理时,精度损失较为明显,但是计算时间没有明显减少,同时组分方面的分布总体来说也是 GRI 3.0 详细机理更加精准,因此在大涡模拟下采用详细机理的

SLFM 模型来计算湍流燃烧更为合理。对比不同的反应机理在一维火焰中的计算与实际三维湍流火焰的计算结果,证明在采用 SLFM 模拟射流火焰环境下,不同机理的一维火焰计算结果和数据库之间微小差异可能会在模拟中对三维计算结果产生明显的差异。

此外,在本文 Flame E 和 Flame F 的模拟结果说明 SLFM 模型的计算精度还有进一步提高的空间。基于前人研究基础,可以改进 SLFM 模型,例如火焰面/反应进度变量等模型,再耦合合适的详细化学反应机理,进行进一步的研究与测试,为燃烧室研制等服务。

参考文献:

- [1] POPE S B. The probability approach to the modelling of turbulent reacting flows[J]. *Combustion and Flame*, 1976, 27: 299-312.
- [2] PETERS N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1984, 10(3): 319-339.
- [3] PETERS N. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion[J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1988, 21(1): 1231-1250.
- [4] MÖBUS H, GERLINGER P, BRÜGGEMANN D. Scalar and joint scalar-velocity-frequency Monte Carlo PDF simulation of supersonic combustion[J]. *Combustion and Flame*, 2003, 132(1/2): 3-24.
- [5] 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.
- [6] 陆阳. 燃烧计算中火焰面模型的研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2009.
LU Yang. A study on flamelet model in combustion simulation[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2009. (in Chinese)
- [7] 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. (in Chinese)
- [8] NIKOLAOU Z M, CHRYSOSTOMOU C, VERVISCH L, et al. Progress variable variance and filtered rate modelling using convolutional neural networks and flamelet methods[J]. *Flow, Turbulence and Combustion*, 2019, 103(2): 485-501.
- [9] PRIELER R, DEMUTH M, SPOLJARIC D, et al. Numerical investigation of the steady flamelet approach under different combustion environments[J]. *Fuel*, 2015, 140: 731-743.
- [10] 王方, 窦力, 魏观溢, 等. 基于 PDF-LES 模型的凹腔支板火焰稳定器模拟[J]. *工程热物理学报*, 2021, 42(3): 758-767.
- WANG Fang, DOU Li, WEI Guanyi, et al. The simulation of cavity flameholder by PDF-LES method[J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2021, 42(3): 758-767. (in Chinese)
- [11] 邢竞文, 金捷, 王方. 基于释热率分析的钝体贫油熄火过程分析[J]. *北京航空航天大学学报*, 2022, 48(3): 473-484.
XING Jingwen, JIN Jie, WANG Fang. Lean blowoff process of bluff body based on heat release rate analysis[J]. *Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics*, 2022, 48(3): 473-484. (in Chinese)
- [12] JONES W P, LYRA S, NAVARRO-MARTINEZ S. Large eddy simulation of a swirl stabilized spray flame[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, 33(2): 2153-2160.
- [13] GOODWIN D G, MOFFAT H K, SPETH R L. Cantera: an object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes[EB/OL]. [2022-12-22]. <https://www.cantera.org/>.
- [14] DI MARE F, JONES W P, MENZIES K R. Large eddy simulation of a model gas turbine combustor[J]. *Combustion and Flame*, 2004, 137(3): 278-294.
- [15] BILGER R W, STÅRNER S H, KEE R J. On reduced mechanisms for methane-air combustion in nonpremixed flames[J]. *Combustion and Flame*, 1990, 80(2): 135-149.
- [16] BRANLEY N, JONES W P. Large eddy simulation of a turbulent non-premixed flame[J]. *Combustion and flame*, 2001, 127(1/2): 1914-1934.
- [17] SMOOKE M D, PURI I K, SESHADRI K. A comparison between numerical calculations and experimental measurements of the structure of a counterflow diffusion flame burning diluted methane in diluted air[J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1988, 21(1): 1783-1792.
- [18] SMITH G P, GOLDEN D M, FRENKLACH M, et al. GRI-MECH 3.0[EB/OL]. [2021-12-22]http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- [19] SMOOKE S D. Reduced kinetic mechanisms and asymptotic approximations for methane-air flames: a topical volume[M]. Berlin: Springer-Verlag, 1991.
- [20] ZHOU C W, LI Y, BURKE U, et al. An experimental and chemical kinetic modeling study of 1, 3-butadiene combustion: ignition delay time and laminar flame speed measurements[J]. *Combustion and Flame*, 2018, 197: 423-438.
- [21] XUE J, XI S, WANG F. An extensive study on skeletal mechanism reduction for the oxidation of C₀-C₄ fuels[J]. *Combustion and Flame*, 2020, 214: 184-198.
- [22] BARLOW R S, FRANK J H. Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames[J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1998, 27(1): 1087-1095.
- [23] SUNG C J, LAW C K, CHEN J Y. Augmented reduced mechanisms for NO emission in methane oxidation[J]. *Combustion and Flame*, 2001, 125(1/2): 906-919.
- [24] JONES W P, PRASAD V N. Large eddy simulation of the sandia flame series (D-F) using the Eulerian stochastic field method[J]. *Combustion and Flame*, 2010, 157(9): 1621-1636.

(编辑: 张 雪)