

湍流燃烧火焰面模式 理论及应用

孙明波 白雪松 王振国 著



科学出版社

湍流燃烧火焰面模式 理论及应用

孙明波 白雪松 王振国 著

国防科学技术大学学术专著出版资助专项经费资助

科学出版社

内 容 简 介

本书系统建立和介绍了湍流燃烧火焰面模式的模型和方法,包括湍流预混火焰面模型、湍流扩散火焰面模型、部分预混湍流火焰面模型以及超声速湍流燃烧火焰面模型;针对各类模型同时给出了验证算例和详细的应用实例。上述理论或模型反映了当前的最新研究成果。

本书可作为航天、航空、内燃机及一切从事湍流燃烧领域和专业的师生和科技人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

湍流燃烧火焰面模式理论及应用/孙明波,白雪松,王振国著. —北京:科学出版社,2014

ISBN 978-7-03-040606-4

I. ①湍… II. ①孙…②白…③王… III. ①航空发动机燃烧-湍流
IV. ①V231.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 097452 号

责任编辑:陈 婕 / 责任校对:胡小洁
责任印制:肖 兴 / 封面设计:蓝正设计

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号
邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京源海印刷有限责任公司 印刷
科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2014 年 7 月第 一 版 开本:720×1000 1/16
2014 年 7 月第一次印刷 印张:15 1/2
字数:310 000

定价:88.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

前 言

湍流燃烧火焰面模式最早由德国著名学者 Norbert Peters 在对层流扩散火焰的研究基础上提出,其蕴含的物理图像是一定条件下湍流燃烧的火焰由大量的火焰面组成,这些火焰面是很薄的反应扩散层,它的厚度比流动的最小涡尺度——Kolmogorov 尺度还要小,即湍流燃烧处于“皱褶”的层流火焰面燃烧模式下。火焰面模式是受特定燃烧条件限制的,但实际情况下,这种模式非常普遍,如往复式发动机、气体涡轮发动机等装置中的扩散、预混及部分预混燃烧都以这种模式为主。近年来,还有许多学者认为超燃冲压发动机中的燃烧也可能处于火焰面模式,并已经将低速火焰面模式推广应用于超声速湍流燃烧的计算。

在火焰面模式假设下,火焰内部结构不会受湍流涡旋的影响,而只是在湍流作用下发生火焰面的扭曲变形。在这种物理机制下,可将火焰面的内部结构和湍流的作用分开考虑。这样在某种程度上实现了流动和化学反应之间的解耦,能够以较小的计算代价预测多种燃烧现象,非常适合在工程中应用。目前,国际燃烧学界在火焰面模式的应用上已经取得了丰硕的成果,并且发展出了适合于各种复杂燃烧条件的火焰面模型。

作者从事火焰面模型研究多年,甚能体会其物理直观、计算效率高的特点,并坚信其生命力不会因为未来直接数值模拟的广泛应用而丧失;相反的,该模型的理论和方法在直接数值模拟海量数据的分析中会大有作为。2011 年年初,作者经过讨论达成共识,觉得有必要总结一本专著系统介绍和推广湍流燃烧火焰面模式。2012 年完成初稿,之后几易其稿,并不断添加学术界的最新成果,历经两年才最终定稿。

本书从湍流燃烧的基本特性出发,介绍了现有湍流燃烧数值模拟的常用模型,并引出火焰面模型;然后针对低速条件下不同燃烧形式,包括预混、扩散和部分预混火焰,分别介绍了基于不同守恒标量的火焰面模型;最后介绍了火焰面模型从低速流动拓展到超声速的应用困难、判别及修正方法。同时,本书附上了丰富的算例验证和分析,旨在让读者完整把握火焰面模式从理论到应用的脉络。

本书在撰写过程中,国防科学技术大学的汪洪波讲师、樊超讲师,研究生范周琴、吴锦水、洪燕、张林、刘朝阳、赵国炎等做了大量的资料收集整理工作,瑞典隆德大学喻日新副研究员,研究生于江飞、龚诚、王成龙等进行了大量的修改、校对工作,在此对他们表示感谢。同时感谢国防科学技术大学学术专著出版资助专项经

费的资助,感谢装备学院庄逢辰院士、中国空气动力研究与发展中心乐嘉陵院士对本书提出的宝贵意见。

由于湍流燃烧火焰面模式理论的复杂性及应用的广泛性,加之作者水平有限,书中难免出现不妥和疏漏之处,敬请读者批评指正。

目 录

前言

第 1 章 湍流燃烧及其数值模拟概述	1
1.1 湍流燃烧基本特性	1
1.1.1 湍流的基本特性	1
1.1.2 湍流燃烧的特点	2
1.2 化学反应流的数学描述	3
1.2.1 化学反应流控制方程	3
1.2.2 化学反应机理及反应速率	4
1.3 湍流燃烧模拟的一般方法	5
1.3.1 直接数值模拟	6
1.3.2 雷诺平均数值模拟	6
1.3.3 大涡模拟	8
1.3.4 混合 RANS/LES 方法	12
1.3.5 湍流燃烧模拟的封闭问题	14
1.4 常用湍流燃烧模型	15
1.4.1 涡破碎模型与涡耗散模型	16
1.4.2 条件矩封闭模型	17
1.4.3 线性涡模型	18
1.4.4 概率密度函数方法	21
1.4.5 湍流燃烧火焰面模型	24
1.5 本书的主要内容	26
参考文献	26
第 2 章 湍流预混燃烧	30
2.1 层流预混火焰	30
2.1.1 层流预混火焰结构	30
2.1.2 层流预混火焰温度	31
2.2 湍流预混火焰	33
2.2.1 湍流预混火焰的基本性质	33
2.2.2 湍流脉动与火焰的相互作用	34
2.2.3 湍流预混燃烧模式分区	37

2.3 火焰传播速度	39
2.3.1 常温条件下的火焰传播速度	39
2.3.2 高温条件下的火焰传播速度	44
2.4 湍流预混燃烧的火焰面模型	49
2.4.1 G 方程预混火焰面模型	49
2.4.2 预混火焰面数据库的生成	61
2.4.3 C 方程预混火焰面模型	63
2.4.4 G 方程和 C 方程比较	67
2.5 湍流预混燃烧算例验证	68
2.5.1 均匀各向同性湍流中的火焰核增长	68
2.5.2 三角棱柱火焰稳定器的燃烧模拟	70
2.5.3 低旋流燃烧器的火焰稳定	73
2.5.4 本生灯的火焰形状	78
2.6 带自点火特性的预混火焰传播模型	80
2.6.1 预混火焰自点火耦合模型	82
2.6.2 算例验证	84
参考文献	87
第3章 扩散燃烧	92
3.1 扩散燃烧的结构	92
3.1.1 层流扩散火焰结构	93
3.1.2 湍流扩散火焰结构	95
3.2 扩散火焰的数学描述	96
3.2.1 混合分数	96
3.2.2 Burke-Schumann 解和化学平衡解	99
3.2.3 详细化学反应机理对层流扩散火焰的影响	100
3.2.4 火焰面结构的渐近解	103
3.2.5 湍流扩散火焰的分区	107
3.3 湍流扩散燃烧火焰面模型	111
3.3.1 扩散火焰面模型合理性验证	112
3.3.2 火焰面模型方程	114
3.3.3 湍流扩散火焰面方程	116
3.3.4 湍流燃烧稳态火焰面数据库的生成	117
3.3.5 非稳态火焰面模型	121
3.3.6 有焓损失的火焰面模型	123
3.4 交互式火焰面模型	123

3.4.1 交互式稳态火焰面模型	124
3.4.2 交互式非稳态火焰面模型	124
3.5 火焰面/进度变量模型	128
3.5.1 火焰面/进度变量模型的理论基础	128
3.5.2 火焰面/进度变量模型的方程	130
3.5.3 湍流燃烧大涡模拟火焰面/进度变量模型	132
3.5.4 火焰面/进度变量模型的数据库曲线建表法	133
3.5.5 火焰面/进度变量模型算例验证	135
3.6 火焰面/进度变量模型的发展	137
3.6.1 β -PDF 的火焰面/进度变量模型	138
3.6.2 火焰面参数为统计最概然分布的火焰面/进度变量模型	141
3.6.3 非稳态火焰面/进度变量模型	144
参考文献	147
第4章 湍流部分预混燃烧	152
4.1 部分预混火焰结构	152
4.1.1 层流部分预混火焰	152
4.1.2 湍流部分预混火焰	156
4.2 基于 G 方程与 Z 方程的部分预混火焰面模型	160
4.2.1 模型描述	160
4.2.2 甲烷/空气湍流抬举火焰数值模拟	161
4.2.3 层流富燃预混射流火焰数值模拟	164
4.2.4 圆锥内部预混湍流火焰	166
4.3 基于 C 方程和 Z 方程的部分预混湍流燃烧火焰面模型	168
4.3.1 部分预混火焰中的进度变量	168
4.3.2 火焰索引函数	170
4.3.3 基于混合分数和进度变量的部分预混火焰面模型建模	172
4.3.4 应用举例	174
4.4 基于 G 方程、 Z 方程与 C 方程结合的部分预混湍流燃烧火焰面模型	176
4.4.1 G 方程与 C 方程的耦合模型	176
4.4.2 燃烧模式索引	177
4.4.3 算例验证	179
4.5 带自点火特性的部分预混火焰模型	180
4.5.1 部分预混火焰中的自点火与火焰传播	180
4.5.2 自点火、火焰传播以及扩散火焰的通用型火焰面方程	182

4.5.3 带自点火特性部分预混火焰的火焰面模型	185
参考文献	186
第5章 超声速燃烧的火焰面模式	190
5.1 超声速湍流燃烧火焰面模型应用综述	190
5.1.1 超声速湍流燃烧特点及模拟困难	190
5.1.2 超声速湍流燃烧中火焰面模型存在的问题	191
5.2 超声速燃烧火焰面模式判别	198
5.2.1 计算条件的给定	199
5.2.2 流场中特征尺度的计算	200
5.2.3 超声速湍流燃烧模式判别	201
5.2.4 算例分析	205
5.3 超声速湍流燃烧的火焰面/进度变量模型及应用	211
5.3.1 超声速湍流燃烧火焰面/进度变量模型的修正方法	212
5.3.2 算例验证	212
5.4 部分预混超声速湍流燃烧的 G/Z 方程模型及其应用	223
5.4.1 部分预混超声速湍流燃烧 G/Z 方程模型	223
5.4.2 部分预混超声速湍流燃烧 G/Z 方程模型验证	224
5.4.3 超声速来流稳焰凹腔部分预混燃烧模拟实例	229
参考文献	237

第 1 章 湍流燃烧及其数值模拟概述

湍流燃烧过程广泛存在于能源产生系统、交通运输系统及航空航天系统中,如电站锅炉、汽车发动机、航空航天推进系统的发动机等。因为湍流燃烧和人类的生产、生活息息相关,所以关于它的研究得到了全世界燃烧领域学者的广泛关注。要设计出高效、清洁的燃烧装置,首先要提高对湍流燃烧机理的认识。湍流燃烧是一个极其复杂的物理化学过程,该过程中湍流流动、传热、传质与化学反应同时发生且强烈地耦合在一起,大大增加了湍流燃烧问题的研究难度。

1.1 湍流燃烧基本特性

湍流燃烧将本已经很复杂的两个问题——湍流和化学反应,耦合在一起。就湍流本身而言,其根本机理尚未得到充分解释,是经典物理学中悬而未决的问题之一。在探讨湍流燃烧本质之前,首先对湍流的基本特性要有所认识。

1.1.1 湍流的基本特性

直观地来看,湍流是一种伴随着瞬时速度波动的不规则流动状态,但其物理的本质远远要比其直观表现复杂。一般认为,湍流具有以下几种特性:

(1) 随机性。通常认为湍流是在连续介质范畴内流体的不规则运动,这有别于分子的不规则运动。在极不规则的湍流中,流动的最小时间尺度和最小空间尺度仍远大于分子热运动的相应尺度,因此,其仍可用连续介质力学的方法来描述。当雷诺数较大时,流动状态对初始条件和边界条件变得极为敏感,任何微小的扰动都可能使原有的流动状态遭到破坏并发展为新的流动状态,其运动具有一定的随机性质,这种随机性造成流场中速度和其他状态参数都随空间位置和时间迅速脉动。当然,湍流也并非完全随机,其各个脉动分量仍然受到质量守恒、动量守恒和能量守恒定律的限制。

(2) 扩散性与耗散性。与分子的无规则运动引起流场中动量、化学组分和能量等的扩散输运类似,湍流中流体微团的不规则运动宏观上导致了这些物理量及湍流能量本身的输运,其输运能力通常比分子扩散高 2~3 个数量级。工程燃烧应用中利用湍流的强扩散特性来实现各种组分的充分混合,并可获得比层流燃烧大得多的燃烧速率和强度。与此同时,湍流还具有极强的耗散性,湍流涡团的运动必然伴随着克服黏性力做功,从而使湍流动能转变为流体的内能,因而需要不断地补

充能量来弥补其耗散才能使湍流得以维持。

(3) 多尺度性。湍流本质上是不同尺度上的拟序结构和随机脉动的相互作用。充分发展的湍流由各种尺度的涡团组成,其运动的物理过程可以用湍流能量“级串”(cascade)理论来描述。涡团的最大尺度与流动的空间有相同的量级,涡团的最小尺度则由需要其耗散的湍流能量确定。湍流的尺度分布是流场的不均匀性对涡团连续不断地拉伸的结果。这种拉伸作用使旋涡发生从大变小的级串过程,即大尺度涡团不断破裂为更小尺度涡团的过程,涡团所含有的湍动能也逐渐由大尺度向小尺度传递,直到涡团的尺度足够小、局部剪切作用足够强,黏性足以耗散掉它所得到的湍流动能。由于涡的拉伸过程只能在三维条件下进行,因而湍流运动只能是三维的,即使从宏观上看其时均流场是二维甚至是一维的,但其湍流脉动结构仍是三维的。通常认为,尺度相差很大的旋涡没有直接的相互作用,而只有尺度相近的旋涡才能传递能量。由于湍流只存在于高雷诺数,大旋涡之间的作用几乎不受黏性的影响;只在上述级串过程的最后阶段,即在最小尺度的涡附近,黏性的作用才变得明显和重要。

湍流的随机性和多尺度性给湍流的实验测量带来了困难。随着计算机技术的发展,计算流体力学(CFD)逐渐成为湍流研究中最有力的工具。

1.1.2 湍流燃烧的特点

燃烧是燃料与氧化剂(常见的如空气或氧气)之间伴随着发光与发热的快速化学反应过程。燃烧过程中,化学反应往往集中于反应流中的某一薄层区域,这样的反应薄层称为火焰。根据燃料与氧化剂混合方式的不同,燃烧又可分为预混模式、非预混模式和部分预混模式。在预混模式中,燃料与氧化剂的混合过程发生在燃烧过程之前。在非预混模式中,燃料与氧化剂的混合与燃烧过程同时发生,这种燃烧模式又称为扩散燃烧。部分预混模式是指介于预混与非预混之间,在整个燃烧火焰中,一部分处于预混模式,另一部分处于非预混模式。在工程中,大部分湍流火焰都处于部分预混模式。

自点火(auto-ignition, or self-ignition)是有别于火焰的另一种燃烧模式。燃料与氧化剂形成的可燃混合物在一定的条件下,通过缓慢的化学反应实现能量的聚集,达到自加速的反应状态,最终达到燃烧状态并可能在流场内形成火焰。自点火不仅可能发生于预混(或均质)混合物中,也可能出现于非预混流场,如柴油机内液体燃料的喷雾燃烧。与火焰燃烧模式中的化学反应主要集中于某一薄层区域不同,自点火燃烧中的化学反应分布于更广的空间范围。例如,最近广受关注的均质压燃点火发动机(homogeneous charge compression ignition, HCCI)中燃料与氧化剂在点火前充分混合,在活塞的压缩作用下,整个燃烧室内可燃气体的同时点火,燃烧主要以自点火的形式进行。

在工程应用中,燃烧一般发生于湍流流动中,这样的过程称为湍流燃烧。一般而言,燃烧中燃料与氧化剂的混合需要达到分子量级,这需要通过流体中浓度梯度造成的分子扩散来实现。在湍流流场中,不同尺度涡结构的生长、剪切与破碎以及小尺度涡的形成都会增强涡团表面的组分浓度梯度,从而起到增强混合的作用。涡团表面间的化学反应对燃料和氧化剂的消耗也会进一步影响不同化学组分间的扩散过程。然而这些描述都是理想化的,湍流对组分混合以及燃烧的作用机理还远不够清楚。

燃烧过程也会对湍流的特性造成强烈影响:燃烧火焰锋面前后的速度梯度以及燃烧释热形成的压力波都会促进湍流涡结构的形成;燃烧形成的高温燃气会造成流场中气体黏性系数的提高,从而造成湍流最小涡尺度的增大。湍流和燃烧之间的相互作用将会造成纯流动中的尺度规律不再适用,如在大雷诺数下自由剪切流中流动与雷诺数的无关性不再适用于带燃烧的湍流流场。另外,燃料的燃烧涉及大量基元反应,这些基元反应具有完全不同的时间尺度。当这些反应的时间尺度完全覆盖湍流理论中的惯性子区时,将不存在任何简化的尺度规律可用于燃烧流场的求解。

自20世纪70年代初计算流体力学被引入燃烧问题的求解以来,数值模拟逐渐成为研究湍流燃烧问题的重要方法。与常规的实验研究手段相比,数值模拟能够提供更精细、更全面的流场参数分布。随着计算机技术的发展,数值模拟被成功应用于机理研究和燃烧器设计等燃烧问题的多个领域。

1.2 化学反应流的数学描述

1.2.1 化学反应流控制方程

不同文献中的湍流反应流的控制方程可能具有不同的表现形式,但都是针对流体的质量、动量、能量以及其他标量建立的输运方程。质量、动量与能量之外的其他标量一般用于混合物热力学状态的时空重构。本节针对多组分反应流建立如下控制方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \tau_{ij})}{\partial x_j} = 0 \quad (1.2)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial [(\rho E + p)u_i + q_i - u_j \tau_{ji}]}{\partial x_i} = 0 \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} [\rho Y_m (u_i + V_{i,m})] = \dot{\omega}_m \quad (1.4)$$

式中, $m=1, 2, \dots, N-1$; N 是总的组分数目。此处黏性剪切应力为

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (1.5)$$

式中, μ 是分子黏性系数, 由 Sutherland 公式给出; Y_m 是组分质量分数; $V_{i,m}$ 是组分扩散速度, 定义为 $V_{i,m} = -\frac{D_m}{Y_m} \frac{\partial Y_m}{\partial x_i}$, D_m 是混合物平均分子扩散系数。显然

$$\sum_{m=1}^N Y_m V_{i,m} = 0. \text{ 质量生成率 } \dot{\omega}_m \text{ 在没有化学反应的情况下为 } \dot{\omega}_m = 0.$$

忽略热辐射以及交叉扩散效应后, 热通量矢量 q_i 为

$$q_i = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i} + \rho \sum_{m=1}^N h_m Y_m V_{i,m}$$

其中, κ 为混合物热传导系数; h_m 为组分焓值; $\kappa = c_p \mu / Pr$, Pr 为 Prandtl 数, $c_p =$

$\sum_{m=1}^N c_{p,m} Y_m$, $c_{p,m}$ 表示组分 m 的比定压热容, 各组分比定压热容采用多项式拟合:

$$c_{p,m} = a_{1,m} + a_{2,m} T + a_{3,m} T^2 + a_{4,m} T^3 + a_{5,m} T^4 \quad (1.6)$$

多组分气相混合物遵守理想气体状态方程, 满足局部热力学平衡假设, 则有

$$P = \rho T \sum_{m=1}^N \frac{Y_m R_u}{M_m} \quad (1.7)$$

式中, $R_u = 8.314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$, 为通用气体常数; M_m 是第 m 种组分的分子量。

多组分总能量为

$$\rho E = \rho \left(e + \frac{1}{2} u_k u_k \right)$$

其中

$$e = \sum_{m=1}^{N_m} Y_m h_m - \frac{p}{\rho}$$

组分 m 的焓值 h_m 包括热焓项 $\int_{T_0}^T c_{p,m} dT$ 和化学焓(或生成焓)项 h_m^0 :

$$h_m = \int_{T_0}^T c_{p,m} dT + h_m^0 \quad (1.8)$$

式中, T_0 为标准温度, 通常取 $T_0 = 298.16 \text{ K}$; 没有化学反应只考虑组分时 $h_m^0 = 0$ 。

1.2.2 化学反应机理及反应速率

对于具有 N 个化学组分, N_r 个基元反应的化学反应方程式的一般形式为

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{k,r} X_k \leftrightarrow \sum_{k=1}^N \nu''_{k,r} X_k \quad (1.9)$$

式中, $r=1, 2, \dots, N_r$; $\nu'_{k,r}$ 和 $\nu''_{k,r}$ 分别表示第 k 种组分在第 r 个基元反应中反应前后的化学计量系数; X_k 表示第 k 种组分。由质量作用定律可以得到第 k 种组分的生

成率,对应于方程(1.4)中的源项可以写作

$$\dot{\omega}_k = M_k \sum_{r=1}^{N_r} (\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r}) \text{RP}_r \quad (1.10)$$

其中, RP_r 表示第 r 个基元反应的反应进行率,对于二元反应有

$$\text{RP}_r = k_{\text{fr}} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho_k}{M_k} \right)^{\nu'_{k,r}} - k_{\text{br}} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho_k}{M_k} \right)^{\nu''_{k,r}} \quad (1.11)$$

式中, k_{fr} 、 k_{br} 分别为第 r 个基元反应的正反应速率常数和逆反应速率常数;第 k 个组分密度 $\rho_k = \rho Y_k$ 。对于含有第三体的基元反应,其反应进行率应加入第三体影响因子,可写为

$$\text{RP}_r = \left\{ \sum_{k=1}^N \left(\alpha_{kr} \frac{\rho_k}{M_k} \right) \right\} \left\{ k_{\text{fr}} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho_k}{M_k} \right)^{\nu'_{k,r}} - k_{\text{br}} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho_k}{M_k} \right)^{\nu''_{k,r}} \right\} \quad (1.12)$$

其中, α_{kr} 表示在第 r 个基元反应中,第 k 种组分对应的第三体影响因子。其中正反应速率常数可以写作

$$k_{\text{fr}} = A_r T^{B_r} \exp\left(-\frac{E_r^*}{R_u T}\right) \quad (1.13)$$

式中, E_r^* 为活化能; A_r 为频率因子; B_r 为经验常数。有些文献直接给出了化学反应的正反应速率常数和逆反应速率常数,而有些只给出了正反应速率常数,其对应的逆反应速率常数根据反应平衡常数得到

$$k_{\text{br}} = \frac{k_{\text{fr}}}{K_{\text{eq}}^r} \quad (1.14)$$

式中, K_{eq}^r 表示第 k 个基元反应的浓度平衡常数,可以表示为

$$K_{\text{eq}}^r = \left(\frac{1 \text{ atm}}{R_u T} \right)^{\sum_{k=1}^N (\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r})} \exp \left[\sum_{k=1}^N (\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r}) \left(\frac{S_k}{R_k} - \frac{H_k}{R_k T} \right) \right] \quad (1.15)$$

其中, H_k 、 S_k 分别代表第 k 种组分焓值和标准状态熵函数,且 $S_k = \int_T \frac{dH_k}{T} =$

$$\int_T \frac{c_{pk} dT}{T}.$$

1.3 湍流燃烧模拟的一般方法

燃烧的数值方法可以分为两大类:直接求解和建立模型求解。在湍流燃烧中,直接求解的方法称为直接数值模拟(direct numerical simulation, DNS)方法,建立模型的方法有大涡模拟(large eddy simulation, LES)方法和雷诺平均(Reynolds-averaged Navier-Stokes, RANS)方法两类。传统的数值模拟方法是采用建立于 RANS 上的燃烧模型,但是 RANS 对湍流多尺度结构的平均使其在特定流动(如有旋流动、弯曲槽道流动)以及非定常流动细节的计算上出现困难。在目前

的条件下,DNS还只能用于对层流及较低雷诺数湍流流动的求解,而在工程实际中,流动的雷诺数往往是非常高的。LES方法的计算量和精度介于RANS方法与DNS方法之间,较DNS方法更具有实用性。对于含壁面湍流流动问题,近年来,有学者还发展了RANS与LES结合的方法,也就是混合RANS/LES方法。本节将结合湍流流动问题介绍上述几种模拟方法,并简要说明反应源项封闭所遇到的困难。

1.3.1 直接数值模拟

直接数值模拟(DNS)方法直接从精确的N-S方程出发,对所有尺度的湍流运动进行模拟,理论上能够得到湍流场的全部信息,因此,DNS方法是求解湍流燃烧问题的最好方法。但是由于湍流是一个典型的多尺度非线性系统,包含有大大小小不同尺度的涡,从最大的湍流积分长度尺度 l_0 到最小的Kolmogorov尺度 l_K ,尺度范围跨度非常大, $l_0/l_K \approx Re_l^{3/4}$ (Re_l 是湍流雷诺数)。在燃烧条件下,反应层厚度有时比Kolmogorov尺度还小,要能够分辨湍流最小的涡旋甚至更薄的火焰面,需要将网格划分得非常密,这就必然会导致更为庞大的计算量。就目前的计算机能力而言,DNS方法的运用局限于湍流及湍流燃烧基础理论研究,一般只能考虑小雷诺数或者中等雷诺数下的问题。湍流燃烧流场DNS的另一个障碍在于流场中多种反应标量方程的时间积分问题。在湍流燃烧过程中最快的化学反应与最慢的化学反应相差数百万倍,化学反应时间尺度的多样性造成所求解的方程组具有很强的刚性,也一定程度上增大了求解的计算量。

尽管如此,由于不需要任何模型,DNS方法往往作为实验的补充来研究湍流流动及燃烧机理,并作为提供可靠原始数据用于改进湍流燃烧模型的重要手段受到重视。目前,DNS方法已经被应用于预混燃烧、非预混燃烧、部分预混燃烧、点火熄火等问题的研究中。

1.3.2 雷诺平均数值模拟

对大部分工程湍流及湍流燃烧问题,通常更为关心的只是平均速度场、平均标量场和平均作用力等流场平均参数,RANS方法将流场分解成平均量和脉动量两部分,将瞬时N-S方程转为时均化的雷诺平均方程,通过建立雷诺应力封闭模型来求解平均流场。

在推导平均量的方程时,需要对两个量的乘积求平均,如在动量方程中,需对两个速度分量的乘积求平均

$$\overline{uv} = \overline{(\bar{u} + u')(\bar{v} + v')} = \bar{u} \cdot \bar{v} + \bar{u} \cdot \overline{v'} + \bar{u'} \cdot \bar{v} + \overline{u'v'} = \bar{u} \cdot \bar{v} + \overline{u'v'} \quad (1.16)$$

这种平均称为雷诺平均。式(1.16)表明,对两个量的乘积求平均,得到两个量,一个是平均量的乘积,另一个是脉动量的二阶矩。雷诺平均模拟方法中的核心问题是对非线性项平均后得到的高阶矩进行建模,称为湍流模型。

对于密度脉动较大的流场,特别是燃烧流场中,引入密度加权平均的概念将会带来较大的方便,密度加权平均也称为 Favre 平均,具体就是将 $u(x, t)$ 作如下分解:

$$u(x, t) = \bar{u}(x, t) + u''(x, t) \quad (1.17)$$

$$\bar{u} = \frac{\overline{\rho u}}{\bar{\rho}} \quad (1.18)$$

Favre 平均在简化 N-S 方程方面,尤其是在可压缩流场的模拟中有着明显的优势。

RANS 方法的易实现性使其成为解决湍流及湍流燃烧工程问题最实际和最主要的方法。多年来,许多学者试图建立各种各样的模型来解决 RANS 方程的封闭问题,其基本思想是根据湍流的理论知识、实验数据或 DNS 结果,建立高阶统计量和低阶统计量之间的经验或半经验的关系式,这类方法目前主要分为一阶矩模型(如涡黏性模型)和二阶矩模型(如雷诺应力模型)。高阶矩模型在应用中需要求解的微分方程数量众多,计算量大,对数值方法的要求也比较苛刻,且计算容易发散,一般较少采用。一阶矩模型形式简单、易行,且具有一定的计算精度,受到工程技术人员的青睐。一阶矩模型根据其封闭中引入微分方程的数目又可分为代数模型、一方程模型和两方程模型,这些模型都建立在 Boussinesq 涡黏基本假设之上,即

$$\tau_{ij} = -\rho \overline{u'_i u'_j} = 2\mu_t \left(S_{ij} - \frac{1}{3} S_{kk} \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij} \quad (1.19)$$

式中, μ_t 为涡黏性系数,在不同的模型中形式略有区别; S_{ij} 为平均速率应变率张量,其表达式为 $S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$; k 是湍动能, $k = \frac{1}{2} (\overline{u'^2} + \overline{v'^2} + \overline{w'^2})$ 。

目前两方程模型在工程中使用最为广泛。最基本的两方程模型就是标准 $k-\epsilon$ 模型,即分别引入关于湍动能 k 和湍流耗散率 ϵ 的方程。此外,还有各种改进的 $k-\epsilon$ 模型,其中比较著名的是 RNG $k-\epsilon$ 模型(Yakhot and Orszag, 1986)、可实现的 (Realizable) $k-\epsilon$ 模型(Shih et al., 1995)和切应力输运 (shear stress transport, SST)型 $k-\omega$ 模型(Menter, 1994, 2009)。本节主要以工程上常用的 $k-\omega$ SST 模型(Menter, 1994, 2009)为例来介绍雷诺平均方法中的湍流封闭模型。

Wilcox(1998)在 Kolmogorov 等工作的基础上通过采用比耗散率 ω 给出湍流特征长度尺度的描述,通过比耗散率 ω 和湍动能 k 来对涡黏性系数进行建模,并在控制方程中相应的加入了 k 和 ω 的输运方程,从而发展出 $k-\omega$ 模型,并在此后进行了多次改进。为了克服 $k-\omega$ 模型对初值的依赖性,Menter(1994)提出了 BSL(Baseline)基准型和 $k-\omega$ SST 模型,该模型逐渐成为流行的工程湍流模型。

Menter 的 $k-\omega$ SST 模型采用分区思想,通过混合函数实现从近壁区的 Wilcox 的 $k-\omega$ 模型到边界层外部的高雷诺数的 $k-\epsilon$ 模型的逐渐转变。在近壁面区充

分利用 $k-\omega$ 模型对逆压梯度的敏感性,能够模拟存在较大分离的流动;在远离壁面的流场中利用 $k-\epsilon$ 模型克服了 $k-\omega$ 模型的对自由流条件敏感的缺陷,提高了模型的稳定性。该模型中 k 和 ω 的输运方程为

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\bar{k})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\bar{k}\bar{u}_j)}{\partial x_j} = \bar{P}_k - \beta^* \bar{\rho}\bar{\omega}\bar{k} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu_1 + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \right] \quad (1.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\omega})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\bar{\omega}\bar{u}_j)}{\partial x_j} = & P_\omega - \beta \bar{\rho}\bar{\omega}^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu_1 + \sigma_\omega \mu_t) \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial x_j} \right] \\ & + 2(1-F_1) \rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\bar{\omega}} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (1.21)$$

式中

$$\bar{P}_k = \min(P_k, 10\beta^* \bar{\rho}\bar{k}\bar{\omega}), \quad P_k = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} \bar{k} \delta_{ij} \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right), \quad P_\omega = \frac{r\rho}{\mu_t} P_k$$

μ_1 为层流黏性系数; μ_t 为湍流涡黏性系数, 定义为 $\mu_t = \frac{a_1 \bar{k}}{\max(a_1 \bar{\omega}, \Omega F_2)}$, $\Omega = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}$, $\sigma_k, \sigma_\omega, \beta, \beta^*$ 和 γ 分别为相关函数, 通过混合函数 F_1 求得。这里混合函数为

$$F_1 = \tanh \eta_1^4, \quad \eta_1 = \min \left[\max \left(\frac{\sqrt{\bar{k}}}{0.09 \bar{\omega} y}, \frac{500 v}{\bar{\omega} y^2} \right), \frac{4 \bar{\rho} \sigma_{\omega 2} \bar{k}}{\text{CD}_{k\omega} y^2} \right] \quad (1.22)$$

$$F_2 = \tanh \eta_2^2, \quad \eta_2 = \max \left(\frac{2 \sqrt{\bar{k}}}{0.09 \bar{\omega} y}, \frac{500 v}{\bar{\omega} y^2} \right) \quad (1.23)$$

$$\text{CD}_{k\omega} = \max \left(2 \bar{\rho} \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\bar{\omega}} \frac{\partial \bar{k}}{\partial x_j} \frac{\partial \bar{\omega}}{\partial x_j}, 10^{-10} \right) \quad (1.24)$$

设 θ_1, θ_2 分别为 $k-\omega$ 模型和 $k-\epsilon$ 模型的模型常数, 则相对应的 $k-\omega$ SST 模型中常数 θ 的表达式为

$$\theta = F_1 \theta_1 + (1-F_1) \theta_2 \quad (1.25)$$

对于湍流燃烧问题, 最初根本不可能直接求解燃烧场中的瞬时量, 采用 RANS 方法通过对瞬时的控制方程作雷诺或者 Favre 平均后所得的平均量方程进行求解得到燃烧物理量平均值的分布, 这种方法用相对较少的计算量就可以研究较为复杂的问题。但是, 平均量方程需要湍流模型和燃烧模型来封闭, 对于问题涉及的全部尺度都是由单一的模型来模拟的。如果燃烧室几何结构复杂, 大尺度拟序结构明显存在而且对混合过程影响很大时, RANS 方法的全尺度平均方法就值得质疑, 事实上, 很多燃烧问题的精细研究在 RANS 框架下很难进行。尽管如此, 因为其计算的实用性, RANS 方法在历史上对 CFD 在工业中的普及应用起到了巨大的推动作用。

1.3.3 大涡模拟

湍流流场中动量、质量、能量及其他标量的输运, 主要受大尺度湍流涡结构影