



湍流反应流的 PDF 模拟

PDF Model of Turbulent
Reactive Flows

郑楚光 周向阳 著

华中理工大学出版社



035.5
239

400064

湍流反应流的 PDF 模拟

郑楚光 周向阳 著



华中理工大学出版社

122 92 / 50
(鄂)新登字第 10 号

图书在版编目(CIP)数据

湍流反应流的 PDF 模拟/郑楚光 周向阳 著

武汉:华中理工大学出版社, 1996 年 11 月

ISBN 7-5609-1412-8

I. 湍...

II. ①郑... ②周...

III. 流体力学-湍流-模型研究

IV. O357.5

湍流反应流的 PDF 模拟

郑楚光 周向阳 著

责任编辑: 易秋明

华中理工大学出版社出版发行

(武昌喻家山 邮编:430074)

新华书店湖北发行所经销

华中理工大学出版社照排室排版

华中理工大学出版社沔阳印刷厂印刷

(邮编:433000)

*

开本:850×1168 1/32 印张:6.5 字数:156 000

1996 年 11 月第 1 版 1996 年 11 月第 1 次印刷

印数:1-1 000

ISBN 7-5609-1412-8/O · 159

定价:9.50 元

(本书若有印装质量问题,请向承印厂调换)

内 容 简 介

PDF 模型是用于对湍流反应流进行数值模拟的一种极富潜力的模型。本书详细阐述了 PDF 模型的基本理论,包括输运方程的推导、模型的建立、求解方法以及化学反应机理的简化等,并结合实际燃烧过程,介绍了模型的应用方法和计算结果,目的是为 PDF 模型的理论基础和实际应用提供一个比较全面和易于理解的描述。本书的读者对象是在工程热物理、能源、航空、航天、化工和冶金等领域从事燃烧、流动和传热方面的研究、教学和工程设计人员,也可作为大专院校有关专业的研究生、高年级大学生的教材或参考用书。

前 言

湍流反应流是自然界和工程实践中广泛存在的一种基本现象和过程,早已成为许多学科必须研究和发展的主要内容,而湍流反应流过程的本身又涉及到力学、流体力学、传热传质学、化学反应动力学甚至控制理论等诸多学科领域的交叉。早期描述和分析这些现象和过程的方法和手段都极大地依赖于传递过程中的复杂流动和化学反应的经验知识。近些年来,无论是测量技术还是计算水平都得到了快速的发展,与此同时,有关湍流、多相流及化学反应流等的基础理论都有了长足的进步。这些都为更详细、更系统、更科学地描述和模拟复杂的湍流反应流动过程提供了新的可能。

随着对湍流反应流动过程认识的逐步深入,人们发现对于大量存在的实际现象,是难以采用传统的放大准则法或守恒方程模拟法来准确描述的,如湍流燃烧过程、湍流脉动与化学反应间的相互关联、气固多相流中的颗粒团聚和流态转变、反应物的表面物理特性和结构特性等。这些现象都是造成目前合理设计相关装置和正确描述相关现象困难的主要原因。所以,要想在学科和应用上出现较大的突破,必须对研究对象、研究方法和所依据的基础理论从新的角度进行新的审视和探索,应用相关基础和前沿学科的最新理论和方法,建立更符合实际情况的数学物理模型,为其过程的计算机模拟、仿真及优化设计计算提供理论依据和有效手段。同时,这些问题的解决也会对数学、力学和物理等基础学科的发展产生重要影响。

湍流反应是一种非常复杂的现象,表现在其中的速度、密度、温度、压力和组分浓度都是随机脉动的,而很难以用确定的方法进行描述。因此,就其本质而言,采用概率统计的方法来描述和研究具有随机性质的湍流反应流,应当说是十分自然、也是极为合适的。采用联合概率函数(PDF)方法,尤其是采用所谓的联合概率函

数输运方程的方法,更能科学地反映湍流反应流的历史效应和空间输运关系;对湍流流动中的化学反应过程的详细机理进行精确的描述和计算是湍流反应流的另一困难,寻找能有效简化复杂化学反应机理的方法,已经成为国际学术界的一个相当活跃的领域,它不断能使联合概率函数输运方程模型进一步走向实用,而且对其它方面的研究也有着积极意义。有关这样一个极具应用价值和发展前景的前沿领域,目前在我国的应用和发展还很不普遍和深入。本书正是围绕以上有关湍流反应流的 PDF 模型和化学简化方法,对发展和应用 PDF 方法的重大问题进行了较为系统的阐述,并溶入了我们自己的研究心得和工作成果,以期推动该领域的发展。

无论是在本书的撰写过程中,还是在该领域所开展的研究过程中,我们都得到了中国科技大学的陈义良教授热情的帮助和指教,他在此领域的学术造诣和重要影响是广为公认的。陈义良教授在认真地审阅书稿的同时,还为本书撰写了序言。对于陈义良教授为我们所作的一切和所表达的友情,将永留在我们的心中,并致由衷的谢意。

作者学识浅薄,书中的疏陋与不足在所难免,敬望读者指正。

郑楚光

于华中理工大学

1996 年 8 月

序

迄今为止,燃烧过程仍然是人类有效利用自然能源的一个重要途径。燃烧现象是一个受多种物理和化学因素控制的复杂过程,涉及到诸多学科领域的交叉。无论是对基本燃烧现象的科学描述,还是对实际燃烧过程的准确预报,都是学科发展和工程实际的迫切需要。燃料的燃烧过程涉及到众多的化学组分和一系列的基元反应机理,加之湍流流动与燃烧化学反应之间的密切而又复杂的相互作用关系,致使整个过程极为复杂。为满足工程设计的需要,自 60 年代后期开始,国内外有许多学者致力于发展湍流燃烧的数值模拟技术,并取得了相当大的进展。

目前,对带化学反应的湍流流动过程,应用较为普遍的数值模拟技术有统计矩方法和概率密度函数方法两类。

统计矩方法较为简单,但在描述平均组分浓度的方程中,会出现一个平均的化学反应速率项需要模拟。由于瞬时化学反应速率与组分浓度和温度有着很强的非线性关系,致使平均化学反应速率的求解遇到了很大的困难。目前在预混燃烧中采用的涡旋破碎模型(EBU),扩散燃烧中的 $k-\epsilon-g$ 模型都只在化学反应速率无限大,处处达到化学平衡的假定条件下才适用。这类方法在估算湍流燃烧中速度和温度的特征,具有一定的效果。但在研究诸如点火,熄火和污染物排放等现象时,由于其中有限化学反应速率起了主要作用,这类方法就显得无能为力了。当湍流扩散燃烧偏离化学平衡不大时,Bilger 提出用混合分数和混合分数耗散率两个参数来表征平均化学反应速率。很显然,这种方法的应用范围也很有局限。如果给定成分和温度的联合概率密度函数,便可利用求解数学期望值的方法来确定平均化学反应速率。如预混燃烧中的 Bray-

Libby-Moss 模型, 扩散燃烧中有关混合分数概率密度函数, 或混合分数和耗散率联合概率密度函数的假定, 就是根据这个设想提出的模型。但由于概率密度函数的形式是假定的, 很难保证它的通用性, 尤其当化学反应机理涉及多种化学组分时, 联合概率密度函数的确定就显得十分困难。

在概率密度函数(PDF)方法中, 化学热力学参数联合 PDF 是通过对其输运方程进行求解给出的。在联合 PDF 方程中, 化学反应速率项是封闭的, 原则上说, 任意复杂的化学反应机理都可以精确计算, 无须模拟, 这就为湍流燃烧中各种现象的研究提供了必要的手段。在 PDF 输运方程中, 分子输运的条件平均项需要模拟, 目前用得比较多的有颗粒相互作用模型, 如平均值松弛模型等。这类模型在预示惰性气体之间的混合问题时, 较为成功。在处理湍流燃烧问题时, 对分子输运项模型有两个基本要求: 一是能给出比较精确的统计特性; 二是能适用于各种不同类型的燃烧机制(如预混合扩散燃烧, 分布型和火焰面燃烧机制等)。根据 Klimov-Williams 准则, 当湍流的 Kolmogorov 时间尺度($\tau_\eta = (V/\epsilon)^{1/2}$)比化学反应时间尺度(用 $\tau_c = \delta/S_L$ 表征, 其中 S_L 和 δ 分别是层流预混火焰的传播速度和厚度)小很多时, 湍流燃烧满足分布型燃烧机制, 化学反应和分子混合之间相对比较独立, 颗粒相互作用模型等应用效果比较好。但与此相反, 当 $\tau_\eta \gg \tau_c$ 时, 湍流燃烧呈火焰面机制, 在化学反应和分子混合之间存在很强的耦合关系。由于现有的分子混合模型没有考虑化学反应对分子混合的影响, 因此对呈火焰燃烧机制的情况不适用。更加复杂的是, 燃烧反应中各基元反应的速率差别很大, 与它们对应的时间尺度可以相差几个数量级, 湍流本身也有很大范围的时间尺度, 因此在湍流燃烧的分子混合和化学反应之间存在很错综复杂的相互作用。如何构造能反映这类作用的分子输运模型, 还有大量工作有待我们去探索、去研究。

总之, PDF 方法有着很好的发展前景, 也富有挑战性。本书详细地讨论了 PDF 输运方程的推导和有关的模型; Euler 形式的

PDF 方程和 Lagrangian 形式随机微分方程之间的对应关系,以及由此给出的 Monte Carlo 求解方法,简化化学反应机理的数学方法等。这些都是发展和应用 PDF 方法的重大问题。书中还介绍了有关基础知识和应用实例。因此,也是一本有关湍流燃烧理论和数值模拟技术、很具特色的专著。本书作者在两相流和湍流燃烧的数值模拟方面做过很多很好的工作,造诣很深。我希望本书的出版将有助于我国湍流燃烧理论和数值模拟研究向更加深入和更加广阔的方向发展。

陈义良
于中国科技大学
1996 年 7 月

目 录

第一章 导论	(1)
1.1 湍流与湍流反应流	(1)
1.2 数值模拟的意义和作用	(2)
1.3 湍流反应流的数值模拟	(3)
1.4 PDF 输运方程模型的研究和发展	(6)
1.5 内容梗概	(10)
第二章 概率论的基本知识	(11)
2.1 湍流混合实验	(11)
2.2 概率分布函数	(12)
2.3 概率密度函数(PDF)	(14)
2.4 数学期望	(18)
2.5 联合 PDF	(23)
2.6 条件概率	(27)
第三章 速度和标量的联合 PDF	(30)
3.1 速度和标量的守恒方程	(30)
3.2 速度和标量的联合 PDF	(32)
3.3 PDF 的离散表达式	(36)
3.4 速度和标量联合 PDF 的输运方程	(40)
第四章 PDF 方程的 Lagrangian 描述	(44)
4.1 概率相似体系	(44)
4.2 Lagrangian 形式的方程	(46)
4.3 Lagrangian 形式的 PDF	(49)
4.4 确定性体系	(51)
4.5 随机体系	(58)

4.6	本章小结	(67)
第五章	PDF 方程中条件期望的模化	(69)
5.1	标量耗散	(70)
5.2	通用 Langevin 模型	(82)
5.3	联合 PDF 的模型	(85)
5.4	一般条件下的流动	(89)
第六章	PDF 方程的 Monte Carlo 解法	(95)
6.1	PDF 的离散表达	(95)
6.2	PDF 方程的分步运算	(96)
6.3	第一个分步骤 P_1	(99)
6.4	第二个分步骤 P_2 : 随机混合模型	(100)
6.5	第三个分步骤 P_3 : 对流和平均压力梯度	(101)
6.6	PDF 方程的 Monte Carlo 算法	(103)
6.7	平均值的确定	(105)
第七章	标量联合 PDF 输运方程模型及算法	(111)
7.1	标量联合 PDF 的输运方程和模型	(111)
7.2	有限差分和 Monte Carlo 相结合的求解方法	(114)
7.3	计算效率	(120)
7.4	本章小结	(122)
第八章	化学反应机理的数学简化方法	(123)
8.1	前言	(123)
8.2	化学反应体系的矢量表达	(126)
8.3	简化方法的数学模型	(133)
8.4	$H_2/O_2/N_2$ 反应机理的数学简化及验证	(141)
8.5	本章小结	(149)
第九章	湍流速度和耗散率的联合 PDF 模型	(151)
9.1	湍动能耗散率的随机模型	(152)
9.2	对速度 Langevin 随机模型的修正	(154)

9.3	速度和耗散率联合 PDF 的输运方程	(157)
9.4	速度和耗散率联合 PDF 模型在均匀湍流中的应用	(158)
9.5	本章小结	(163)
第十章	PDF 输运方程模型的实际应用	(164)
10.1	湍流自由剪切流的模拟	(164)
10.2	复杂反应流的模拟	(167)
10.3	湍流预混火焰的模拟	(177)
10.4	湍流扩散火焰的模拟	(185)
参考文献		(189)

第一章 导 论

1.1 湍流与湍流反应流

湍流现象广泛地存在于自然环境(大气、江河湖海)和工程实践中,它与人类生存、国民经济、国防建设以及基础学科中的许多领域都有十分密切的关系。就重要性而言,如果没有湍流扩散,在地球表面生成的有害物质,就无法扩散开去,而会使地球表面到处充满有害物质,使人类无法继续生存。又如湍流边界层、大气湍流、湍流的传热传质、等离子体湍流等问题,都是航空、气象、水利、水运、化工、冶金以及受控热核反应等有关学科的重要研究内容。对于湍流的研究虽然已有百年历史,但至今对其规律的认识还远未能达到清晰的程度,致使湍流理论大大落后于迅速发展的工程技术的需要。湍流本身是一个极其复杂的非线性的随机过程,也是流体力学上的难点,如果湍流中再伴有化学反应过程和传热传质过程,加之各物理量与湍流脉动的耦合和关联,则问题就更为复杂了。

上述问题都迫切需要湍流理论有不断的进展和突破,以便提供一些可靠处理和解决实际问题的方法,使相关设计的现代化成为可能。

由上述对自然环境和工业装置中湍流反应流的分析不难看出,要得到理论解和严格的设计计算方法,靠经典的分析解方法是很困难的或几乎是不可能的。只有用以近代计算流体力学的和以大型计算机为基础的数值模拟理论及方法,即建立各种复杂条件下的基本守恒方程组,加以封闭,用数值计算方法求解这些非线性

联立偏微分方程组,才能实现。

1.2 数值模拟的意义和作用

虽然以往已经研究过许多理想的湍流反应流问题,并且能以简化的数学形式求解,但至今仍有大量的实际过程还得不到精确描述和求解。如湍流燃烧就是这样一种极其复杂的带有剧烈放热化学反应的流动现象,它包含有流动、传热、传质和化学反应过程以及它们之间的相互作用。

在流体力学、反应动力学和数理方程的基础上, Von Karman^[1]在几十年前就提出了化学流体力学的基本方程组。但由于方程的数目多、相互耦合和非线性,当时的数学既无能力论证这组方程解的存在性,也无法给出一般条件下这组方程的解析解。仅对于极特殊的个别情况,在作了许多假设大大简化了方程之后,才有可能求出方程的解析解。这就使得人们无法在一般条件下通过把体现规律的那些基本方程的解与实验数据对比去检验和发展理论。长期以来,人们认识湍流反应流的主要途径是实验研究,而在实验中研究各种几何、物理和化学因素的变化对现象乃至整个过程的影响,其工作量是巨大的,不仅如此,有时实验工作十分困难甚至无法进行。

计算机的出现和发展,促进了流体力学、传热学、化学反应动力学和数值计算方法的结合,从而提供了一般条件下求解化学流体力学基本方程的理论和方法,即数值模拟。

通过数值模拟,一方面可以求出体现各种理论模型的数值解,进而将该解和相应的实验数据对比,检验、发展和优化理论模型;另一方面又可以通过求解方程在不同边值条件和不同物性参数之下的数值解,深入认识现有湍流反应流的特征和预示新的现象,进一步揭示湍流反应流的规律。这样,就把科学的理论和错综复杂的实际现象有机地联系起来,同时,开辟了用理论直接指导实验和设

计工作的途径。把工业装置的几何形状、结构尺寸、进出口状态、有关的介质和燃料的物理化学性质代入经过检验的计算机程序,便可预示出装置内部介质的速度、温度和组分浓度等参数的分布及其变化,计算出该装置的气动、传热和反应性能以及污染物的排放水平等,在计算机上进行设计方案的初步论证和装置性能的初步调试。显然,这不但有助于深化对基本现象和实际过程的认识,而且使工业装置的设计和优化建立在更合理的基础上,减少实验和设计工作的盲目性和工作量,节省时间、人力和物力。

由此可以看出,数值模拟在发展理论模型,改进设计、科研和教学方法,以及推动学科发展等方面具有积极的和重要的作用。不过,由于实际湍流反应流的复杂性,因而对许多实际问题的研究工作,还只是刚刚开始。尽管已经建立起了湍流流动、传热传质、化学反应、多相流动、污染物的生成等过程的物理和数学模型,以及相关的数值计算方法及计算技术,但这些模型都是从不同角度对真实过程所作的近似和简化,还远未达到系统和完善的程度。因此,鉴于数值模拟的重要性,使我们有必要进一步发展相关理论模型和计算方法,更好地推动学科的发展和为工程实践服务。

1.3 湍流反应流的数值模拟

前已指出,自然环境和工程装置中的流体流动、传热传质和化学反应过程几乎都是湍流过程。湍流的随机脉动极大地影响着流场的特征、输运过程及化学反应的速率等。要想对有实际意义的湍流反应流(包括流体流动、传热传质及化学反应)进行数值模拟,首先就要正视湍流问题,找出能为工程实践所接受的、定量描述湍流过程的模型和方法。

对湍流流动最根本的模拟方法是在湍流尺度的网格尺寸内求解瞬态三维 Navier-Stokes(缩写为 N-S)方程的全模拟,这时无需引入任何模型。然而由于湍流中最大和最小涡旋尺度之比与雷诺

数 $Re^{3/4}$ 成比例,每个方向上布置的网格数至少也是 $Re^{3/4}$,可工程上的流动,雷诺数都比较大(如 $Re > 10^4$),因此,直接求解 N-S 方程需要有大量的网格节点和计算机容量,这往往超过目前计算机的能力。另一种要求稍低的办法是亚网格尺度模拟即大涡模拟(LES),也是从 N-S 方程出发,其网格尺寸比湍流尺度大,可以模拟湍流发展过程的一些细节,但由于计算量仍很大,只能模拟一些简单情况,如弯道等,目前也不能直接用于工程实际。因而常用的模拟方法还是由 Reynolds 时均方程出发的模拟方法,也就是常说的“湍流模型”。其基本点是利用数学模型,将 Reynolds 时均方程或者湍流特征量输运方程中高阶的未知关联项用低阶关联项或时均量来表达,从而使 Reynolds 时均方程封闭。模化的方式就是模型。湍流流动过程的复杂性及工程计算中的多层次性又决定了湍流流动模型的多样性,不同的湍流模型有不同的适用范围。

目前,针对封闭湍流输运项而提出的模型基本上有两种:湍流粘性系数模型和雷诺应力模型。对粘性系数模型而言,人们应用时间最长、积累经验最丰富的是混合长度模型^[2]和 $k-\epsilon$ 模型^[3]。至今,混合长度模型在空气动力学计算中仍得到广泛的应用,尤其在简单自由湍流,如射流、尾流和混合层计算中,在二维乃至三维固壁边界层的计算中,都能给出相当满意的计算结果,但不适用于带回流的复杂流动。标准的 $k-\epsilon$ 模型有相当大的适用性,对有回流的流动, $k-\epsilon$ 模型是应用范围最广的湍流模型,尤其在处理实际工程问题时。而雷诺应力模型^[4]则在一定程度上考虑了浮力、流线弯曲及旋转等因素带来的湍流输运各向异性的影响,优于标准的 $k-\epsilon$ 模型,从而拓宽了它的适用范围。不过,由于其模型本身的复杂性和收敛方面的困难,限制了它在实际燃烧设备上的应用。

对于有化学反应的湍流流动,如何模拟反应与湍流间的相互作用,并不比湍流模拟本身容易。实验指出,湍流与反应之间有着强烈的相互作用。例如反应可通过放热引起密度变化而影响湍流,而湍流又有可能通过浓度及温度脉动而强化组分的混合与传热,

从而显著地影响反应速率。

湍流模型的任务是封闭湍流输运项,同样,湍流反应模型的任务是模拟平均化学反应速率项。由于该项同时受湍流混合、分子输运和化学反应动力学的影响,因而难以得到普遍适用的平均反应速率的模型。最简单的湍流反应模型是 Spalding 提出的涡旋破碎模型或 EBU 模型^[5](Eddy-Break-Up Model)。它是直接由物理上的设想出发,对湍流反应机理所作的一种假设。此外,如 $k-\epsilon-g$ 模型^[6],拉切滑模型^[7]等。这些模型的应用比较成熟,能够定量描述湍流混合在高雷诺数湍流燃烧中的控制作用,但因为这些模型是建立在简单化学反应系统或快速反应等假设基础上的,因此没有恰当而全面地考虑分子输运和化学动力学等因素的作用,无法解决有关复杂化学反应问题的计算。

值得一提的是,上述湍流流动模型和湍流反应模型都存在一个封闭问题,即必须对湍流输运项和化学反应速率做出某种形式的模化,使得控制方程组封闭。而且,对于某些“慢反应”问题,与化学反应的详细机理有关的问题,如湍流燃烧过程中污染物(NO_x 、 SO_x 和碳黑等)的生成,以及点火、熄火等复杂的多组分、多步化学反应系统,这些模型都难以精确计算。

本书所介绍的概率密度函数(PDF——Probability Density Function)输运方程模型,则在克服以上这些困难方面有其独特的优势。PDF 输运方程模型求解的是速度和化学热力学参数的联合概率密度函数的输运方程。在这个方程中,与湍流输运和化学反应速率有关的项都以封闭的形式出现,可以精确计算,从而避免了对一些重要过程的模拟。同时,PDF 输运方程模型还可以提供比通常的湍流模型更多的信息。因为知道了速度和化学热力学参数的联合概率密度函数以后,它们的平均量及任意阶的统计矩都可以求出。因此,PDF 输运方程模型很适合于模拟那些必须考虑湍流流动、复杂化学反应机理及其相互耦合的湍流反应流问题,如点火、熄火、湍流燃烧及污染物的生成过程。