

72.55
330

计 算 燃 烧 学

范维澄

陈义良 洪茂玲

安 徽 科 学 技 术 出 版 社

102363

责任编辑：刘海山

封面设计：赵素萍

计算燃烧学

范维澄 陈义良 洪茂玲

*

安徽科学技术出版社出版

(合肥市跃进路1号)

新华书店经销 安徽新华印刷厂印刷

*

开本：850×1168 1/32 印张：9.75 字数：250,000

1987年3月第1版 1987年3月第1次印刷

印数：00,001—3,100

统一书号：15200·64 定价：2.55元

ISBN7-5337-0086-4/T·11

2720800

前 言

计算燃烧学是一门密切联系实际的新兴的应用科学。它的中心内容是论述对燃烧的基本现象和实际过程进行计算机模拟的思想、理论和方法。计算燃烧学的科学价值和实际意义，在于为深入认识燃烧过程和燃烧装置的设计及研制提供了新的手段，把燃烧学提高到系统理论的高度，有助于邻近学科的发展和新领域的开拓。

近年来，我和陈义良、洪茂玲同志在中国科学技术大学分别编写了《计算燃烧学简程》、《湍流燃烧模型和计算》和《化学反应边界层》的讲义，并在工程热物理学会举办的第一次计算燃烧学学习讨论班、研究生和高年级大学生课程中作了讲授，这些工作作为本书的编著作了准备。

在准备科学基金课题的前后，我们综合分析国外大量文献和专著，并结合自己的科研工作，归纳提出了计算燃烧学的理论体系。本书以斯波尔丁 (Spalding) 学派的思想为主线，兼顾其它学派，系统阐述计算燃烧学的学术思想、理论体系、基本概念和数值方法。包括湍流流动模型、燃烧模型、火焰辐射模型以及多相流动和燃烧模型；有比较地介绍燃烧过程控制微分方程组的离散化及其求解方法；通过燃烧问题的实际算例演示如何运用数学模拟方法分析典型的燃烧现象和实际燃烧过程。其中包括本人在八十年代初期与斯波尔丁教授共同工作两年多的研究成果和亲身体会。本书的叙述力求深入浅出，简洁明了，以使读者能较快地进入本学科的前沿。

本书素材的积累和正文的编写得到了英国帝国理工学院斯波尔丁教授(英国皇家学会会员)和马世琦教授的指导、帮助;也得到了中国科学技术大学钱临照教授(学部委员)和葛新石教授的关心、鼓励和推荐;得到了科学基金会、国内同行及中国科学技术大学燃烧教研室各位同志的支持;张灵芸同志精心绘制了全部插图,我们在此一并表示衷心的感谢。

本书由范维澄同志写第一、三、五、六、七、十章,陈义良同志写第二、四、八章,洪茂玲同志写第九章。最后,全书由范维澄同志审定。

由于我们水平有限,加上时间仓促,错漏之处难免,请有关专家和读者批评指正。

范维澄

1985年5月

内 容 简 介

计算燃烧学是近20年发展起来的一门新兴的应用科学。本书作为一本专著，系统阐述计算燃烧学的学术思想、基本概念、理论体系和处理方法，并结合基本燃烧现象和实际燃烧过程的数值计算，阐述用计算燃烧学分析和处理问题的思想、方法和技巧。本书的读者对象是在工程热物理、能源、航空、航天、化工、冶金等领域中从事燃烧、流动和传热方面的研究、教学和工程设计的人员，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。

2706/05

目 录

第一章 绪论	1
1-1 计算燃烧学发展简史.....	1
1-2 计算燃烧学的科学价值和实际意义.....	2
1-3 计算燃烧学的内容概要.....	4
第二章 化学流体力学基本方程	7
2-1 运动定理.....	7
2-2 化学组分平衡和质量连续方程.....	9
2-3 动量平衡.....	11
2-4 能量平衡.....	12
2-5 输运定律和输运系数.....	15
2-6 化学反应速率.....	20
2-7 化学流体力学基本方程.....	21
第三章 层流燃烧现象	23
3-1 非定常层流燃烧.....	23
3-2 定常层流燃烧现象.....	29
3-3 复杂化学反应系统的数学模型.....	34
第四章 湍流流动模型	51
4-1 湍流均流的描述.....	51

4-2 零方程模型	60
4-3 单方程模型	65
4-4 双方程模型	71
4-5 湍流应力输运方程模型	83
4-6 标量的湍流输运模型	94
4-7 亚网格尺度模型	99
第五章 湍流燃烧模型	106
5-1 引言	106
5-2 湍流扩散火焰的 k - ϵ - g 模型	112
5-3 湍流预混火焰模型	119
5-4 ESCIMO 湍流燃烧理论	128
第六章 辐射换热的数学模型	149
6-1 双通量辐射模型	150
6-2 四通量和六通量辐射模型	153
6-3 其它辐射模型	156
第七章 多相流动的数学模型	159
7-1 概念和特点	159
7-2 多相流动的数学描述	161
7-3 含沙射流的数值计算	168
7-4 多相流的数值解法	174
7-5 现状和发展	176
第八章 基本方程组的数值求解	181
8-1 离散化	182
8-2 差分格式	190
8-3 单变量方程的求解	200

8-4 压力和速度之间的耦合	205
8-5 边界条件	212
8-6 影响收敛和精度的因素	223
第九章 实际工程问题的数值分析	233
9-1 往复式发动机气缸内流体的流动	233
9-2 蒸气发生器中稳定的三维二相流动 和热输运计算	246
9-3 燃气轮机燃烧室内的二相流动和燃烧	262
9-4 建筑物火灾的预言	276
第十章 计算程序的分类、选择和编制	297
10-1 影响的形式	297
10-2 问题的类型	298
10-3 计算机程序的编制	300
10-4 通用程序的选择和使用	301

第一章 绪 论

1-1 计算燃烧学发展简史

人类发现燃烧现象，用燃烧的方式取得热能已经有了几千年的历史。但是直到本世纪的四十和五十年代，在发展喷气推进技术的过程中，才逐渐形成了燃烧学。燃烧是一种带有剧烈放热化学反应的流动现象，它包含着流动、传热、传质和化学反应以及它们之间的相互作用。以解析方法为手段的经典燃烧理论，只是在做了大量理想化的简化之后，才能得到某些定性关系。当时人们认识燃烧过程的途径是实验研究，燃烧装置的设计主要靠模型试验和全尺寸试验，可见，燃烧学基本上是一门实验科学。

后来，随着喷气动力装置的燃烧效率逐渐达到符合要求的水平，燃烧学出现了停滞不前的状况。本世纪六十年代，电子计算机和激光技术给燃烧学展示出新的出路。燃烧场的激光诊断技术大大提高了测量燃烧参数的时间和空间的分辨率和准确性，使各种脉动量和多种燃烧中间成分的测量成为可能，这为深入认识燃烧过程，为建立和发展理论模型提供了实验基础。

计算机的问世促进了燃烧学与数值分析方法的结合。斯波尔德 (Spalding) 首先得到了层流边界层燃烧过程控制微分方程组的数值解^[1]。但在人们试图用数值方法分析实际燃烧过程时，却遇到了描述湍流流动以及湍流和燃烧的相互作用等不可回避的困难问题。斯波尔德^[2]和哈洛 (Harlow)^[3]继承和发展了普朗特 (Prandtl)、柯尔莫果洛夫 (Kolmogorov)^[4]和周培源^[5]等人

的工作，创立了“湍流模型方法”，提出了一系列的湍流流动和燃烧模型，在一定条件下完成了湍流燃烧微分方程组的封闭。他们在对描述湍流燃烧的定解问题进行离散化和求解的过程中，发展了各具特色的数值方法和计算机程序体系（例如以压力校正为核心的 SIMPLE 方法^[6]），成功地得到一大批描述基本燃烧现象和实际燃烧过程的数值解。

实际的需要和计算均相燃烧过程所取得的可喜进展激励着燃烧科学工作者勇敢地进入“多相流动和燃烧”的领域。在1974年国际传热会议期间举行的圆桌会议上，吉德斯波(Gidspow)^[7]提出描述一维两相流动的微分方程，引起了关于两相流数学问题适定性的争论。接着哈洛(1975)^[8]和斯波尔丁(1976)^[9]引入各相物质相互穿透的概念 (Interpenetration)，得到了有相间滑移的两相流的数值解。斯波尔丁进一步开拓关于“相”的概念^[10]，大胆提出多相共存的假设，建立了多相化学流体力学基本方程组和一套多相流的数值解法(IPSA: Interphase Slip Algorithm)^[11]，成功地对一系列多相流动和燃烧问题进行了数值分析。

近二十年来，英、美、法、德、苏、波、日等国相继开展对燃烧过程进行计算机模拟的研究工作。目前已发展到有可能对大型煤粉锅炉、燃气轮机燃烧室、内燃机、火箭发动机、弹膛等装置中的三维、非定常、多相、湍流、有化学反应的实际燃烧过程进行数值计算，给出热物理参数(速度、温度、组分浓度等)的分布及其变化，预测装置的传热和燃烧性能以及污染物排放的水平。这一新领域的出现，极大地丰富了燃烧学科的内容，逐渐形成了一个独具风格的学科分支——计算燃烧学。

1-2 计算燃烧学的科学价值和实际意义

(1) 计算燃烧学把燃烧学科提高到系统理论的高度。几十年前，人们虽已构成了化学流体力学基本方程组，但由于方程的非

线性及其各方程之间的耦合,除极个别的情况外,都无法求到方程的解,这使得燃烧学长期以来停留在分类综合实验现象和孤立进行分析的阶段。计算燃烧学提供了求解基本方程的思想和方法,把分散的理论和现象统一起来,形成了燃烧学的理论体系,并进一步揭示燃烧规律,使燃烧科学上升到系统理论的高度。

(2) 计算燃烧学与邻近学科相互促进,有助于学科的发展和开拓新的研究领域。在研究实际燃烧过程时,为得到封闭的控制方程组,必须找到描述湍流输运以及湍流和燃烧相互作用的方法,为此需要提出新的概念和新的理论模型。燃烧过程控制微分方程组是否可以和如何通过数值方法得到与实际符合的收敛解,是一个正在研究中的课题,它需要计算燃烧学与计算数学工作者一起探索方法,寻求结论。许多实例表明,通过把采用不同理论模型和计算方法得到的数值解与实验数据比较分析,可以检验和发展理论模型及计算方法,这不仅对燃烧学,而且对临近的流体力学、化学动力学、输运科学、计算数学的发展都有促进作用。

(3) 计算燃烧学成为深入认识燃烧过程、改进燃烧器设计的有效手段。计算燃烧学的出现使人们有可能以计算机为桥梁,把燃烧理论、燃烧实验和燃烧器设计三者有机地联系起来(图1-1),

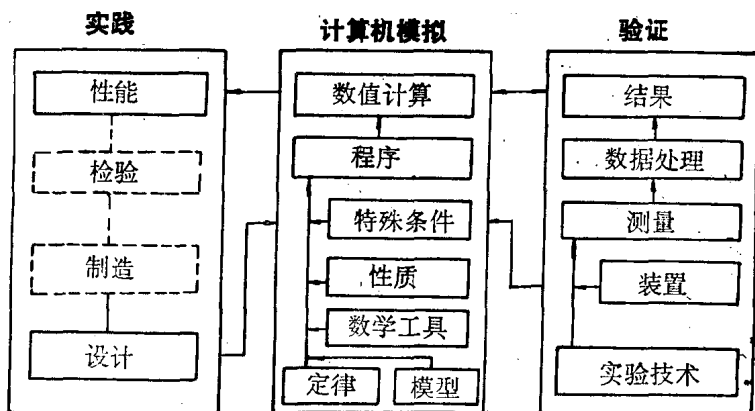


图1-1 计算机模拟与实验和设计的关系

开辟用燃烧理论直接指导实验和设计工作的途径。这不但有助于深化对基本燃烧现象和实际燃烧过程的认识，而且使燃烧装置设计的最佳化在更大程度上依靠合理的计算，从而减少实验工作的盲目性和工作量，节约实验过程中的能源、材料和人力。因此它具有实际的经济效益。

1-3 计算燃烧学的内容概要^[12]

计算燃烧学的中心内容是研究对燃烧的基本现象和实际过程进行计算机模拟的思想、理论和方法。它的构成和各部分之间的关系示于图1-2。

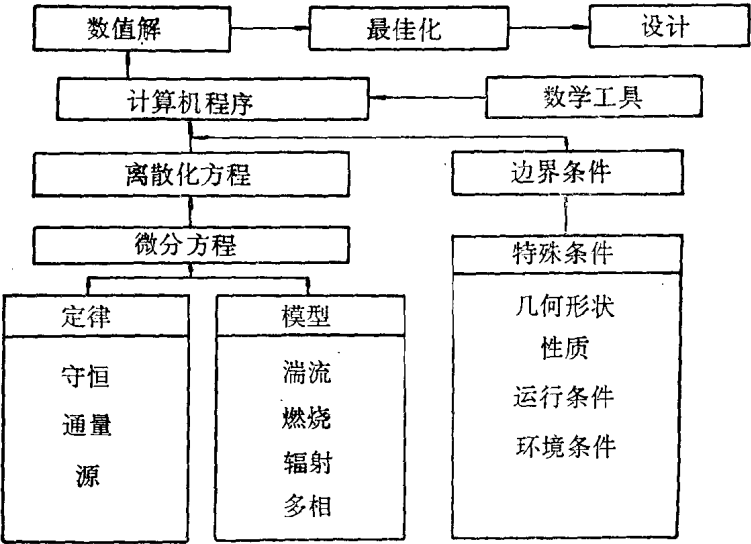


图1-2 计算燃烧学的构成

总的来看，计算燃烧学包括三个大的方面：

(1) 根据质量守恒定律、牛顿第二定律、热力学第一定律和化学反应的规律，选择适当的理论模型，建立描述所研究过程的

控制微分方程组。其重点是构造方程和理论模型。本书第二章阐述的化学流体力学的基本方程，第四、五、六、七章分别介绍的湍流流动模型、湍流燃烧模型、火焰辐射模型和多相反应流模型都属于这个范围。

(2) 把控制微分方程组离散化，建立与微分方程具有一致性的代数方程组，其重点是研究离散化方法、格式和方案。这可能涉及到有限元、有限差分或有限分析等各种方法，也可能涉及到中心差分、上风差分、混合差分和指数差分等不同格式，还可能涉及显式、半隐式和全隐式等不同方案。

(3) 对离散化得到的代数方程组进行计算机求解。其重点是摸索计算方法，以求编制出具有可靠性、通用性、经济性和灵活性的计算机程序。

上述后两个方面的内容将在第八章和第十章中介绍。除此之外，第三章和第九章通过对基本层流燃烧现象及实际燃烧过程的数值计算，演示如何用计算燃烧学的理论和方法分析问题。在分析过程中，有意识地引入了一些新概念、新方法和处理问题的技巧，以开阅读者的眼界。

参 考 文 献

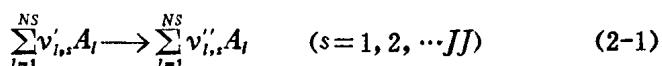
- [1] Patankar, S. V. and Spalding, D. B., A Finite-Difference Procedure for Solving the Equations of the Two-Dimensional Boundary Layer, *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, Vol.10, pp.1389—1411, 1967.
- [2] Launder, B. E. and Spalding, D. B., *Mathematical Models of Turbulence*, Academic Press, London & New York, 1972.
- [3] Harlow, F. H. & Nakayama, P. I., *Turbulence Transport Equations*, *Physics of Fluids*, Vol.10, No.11, pp.2323—2332, 1967.
- [4] Kolmogorov, A. N., *Equations of Turbulent Motion of an Incompressible Fluid*, *Izv. Akad. Nauk. SSSR Ser. Phys.*, Vol.6, No. 1/2, pp.56—58, 1942.

- [5] Chou, P. Y., Pressure Flow of a Turbulent Fluid Between Two Infinite Parallel Planes, *Quart. Appl. Math.*, Vol.3, No.3, p. 198, 1945.
- [6] Patankar, S. V. and Spalding, D. B., A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows, *Int.J.of Heat and Mass Transfer*, Vol.15, pp. 1787—1806, Pergamon Press, 1972.
- [7] Gidspow, D., Modeling of Two-Phase Flow, Round Table Discussion, *Proc.5th. Int. Heat Transfer Conf*, Vol.VII, p.163, 1974.
- [8] Harlow, F. H & Amsden, A. A., Numerical Calculation of Multi-Phase Fluid Flow. *J. Comp. Phys.*, Vol. 17, No.1, pp.19—52, 1975.
- [9] Spalding, D.B., The Calculation of Free-Convection Phenomenon in Gas-Liquid Mixtures, ICHMT Seminar, Dubrovnik, (1976), Pub. in "Turbulent Buoyant Convection" by Hemisphere Washington, Ed. Afgan, N. and Spalding, D.B., pp. 569—586, 1977.
- [10] Spalding, D.B., Numerical Computation of Multi-Phase Fluid Flow and Heat Transfer, Pub. in "Recent Advances in Numerical Mechanics" Ed. Taylor, C. by Pineridge Press, 1980.
- [11] Spalding, D.B., Numerical Computation of Multi-Phase Flows, Imperial College Report HTS/81/8, London, 1981.

第二章 化学流体力学基本方程

2-1 运动定理

设可反应气体混合物中有 NS 种组分，进行着 JJ 个化学反应。化学反应可用下面通式表示：



其中 A_l 代表第 l 种化学组分的分子式； $\nu'_{l,s}$ 和 $\nu''_{l,s}$ 称为化学组分 A_l 在第 s 个反应中的化学计量系数。如果第 l 种组分在第 s 个反应中是反应物，则 $\nu''_{l,s}=0$ ；若是产物，则 $\nu'_{l,s}=0$ 。

表征可反应气体混合物状态的量有动量 $\mathbf{V}$ ，能量 $e+V^2/2$ ，组分的质量分数 m_l ($l=1, 2, \dots, NS$) 和压力 p ，温度 T ，密度 ρ 等。

我们通常把可反应气体混合物的运动看作是连续介质的运动。只要过程的宏观特征长度（例如气流通道的特征长度）比气体分子的平均自由程大很多，或流动参数在气体分子运动自由程同一数量级的距离内没有显著变化（激波是一个例外，可以作为连续介质中的一个突跃面来处理），都可以用连续介质的方法来处理。用欧拉方法描述连续介质的运动，就是讨论每一瞬时各流动参数和化学热力学参数在连续介质占据的空间内各点上的分布情况。为了把质量守恒、能量守恒等基本原理由连续介质的运动，我们必须建立一个关联物质参数和空间参数的定理，即运动定理。

在连续介质内，取一个由控制面 S 包围的控制体 τ 。某参数在

τ 内的值为

$$\Phi \equiv \iiint_V \rho \varphi d\tau \quad (2-2)$$

其中 φ 为变量在单位质量混合物中的值。当控制体 τ 以及表面 S 随连续介质运动时， Φ 随时间的变化率为

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{\Delta t} \left[\iiint_{\tau(t+\Delta t)} \rho(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, t + \Delta t) \varphi(\mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, t + \Delta t) d\tau \right. \right. \\ \left. \left. - \iiint_{\tau(t)} \rho(\mathbf{x}, t) \varphi(\mathbf{x}, t) d\tau \right] \right\} \end{aligned} \quad (2-3)$$

控制体的体积 τ ，以及参数 ρ ， φ 都随时间变化。当时间 Δt 很小时， Φ 随时间的变化率可以认为是两个独立变化的线性迭加，一个是控制体不变时，由于控制体内各点的参数随时间变化引起的；另一个是由于控制面随流体运动，而带出原控制体的量^[1]，于是有

$$\frac{d\Phi}{dt} = \iiint_V \frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} d\tau + \iint_S \rho\varphi \mathbf{V} \cdot d\mathbf{s} \quad (2-4)$$

其中 $d\mathbf{s}$ 为面元向量，外法线方向为正。因此流出体系的量定义为正。

利用奥-高定理，上式还可写为

$$\frac{d\Phi}{dt} = \iiint_V \left[\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\varphi \mathbf{V}) \right] d\tau \quad (2-5)$$

式(2-5)即为运动定理的数学表达式。若参数 φ 是向量，亦有类似的关系式。比如动量随时间的变化率为

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \iiint_V \rho \mathbf{V} d\tau &= \iiint_V \frac{\partial(\rho \mathbf{V})}{\partial t} d\tau + \iint_S \rho \mathbf{V} \mathbf{V} \cdot d\mathbf{s} \\ &= \iiint_V \left[\frac{\partial(\rho \mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \mathbf{V}) \right] d\tau \end{aligned} \quad (2-6)$$

其中并矢 $\mathbf{V}\mathbf{V}$ 是一个对称的二阶张量^[2]，用矩阵形式表示为