



基于过程变量-火焰面模型的湍流燃烧大涡模拟

张健*, 刘桎钰, 杨涛

中国科学院力学研究所, 非线性力学国家重点实验室, 北京 100190

*联系人, E-mail: zhangjian@lnm.imech.ac.cn

收稿日期: 2016-09-30; 接受日期: 2016-10-08; 网络出版日期: 2017-05-08

国家自然科学基金(编号: 51376190, 11572330, 51306013)资助

摘要 湍流燃烧常伴随着复杂的流动过程和燃烧现象. 先进的燃烧模型与大涡模拟结合为模拟湍流燃烧提供了有利的工具. 过程变量-火焰面模型是在火焰面模型的基础上发展起来的. 由于引入了过程变量, 过程变量-火焰面模型可以描述诸如局部熄火和再燃等复杂的燃烧现象. 为了验证基于过程变量-火焰面模型的大涡模拟方法, 近年来开展了一系列的数值模拟工作. 在非预混火焰、部分预混火焰、抬升火焰、旋流火焰等火焰的模拟中, 基于过程变量-火焰面模型的大涡模拟方法都得到了很好的验证. 在此基础之上, 基于过程变量-火焰面模型的大涡模拟也被用于燃气轮机燃烧室的模拟, 并开始用于预测一些基本的燃烧现象. 随着过程变量-火焰面模型不断发展, 基于过程变量-火焰面模型的大涡模拟方法将在湍流燃烧模拟中发挥更重要的作用.

关键词 湍流燃烧, 大涡模拟, 火焰面模型, 过程变量方法

PACS: 47.70.-n, 47.27.te, 47.27.E-

与湍流模型相比, 大涡模拟在预测复杂流动时表现出了明显的优势. 大涡模拟中可辨识的、大的含能尺度运动, 通常控制着湍流的行为和统计特性, 可以直接求解; 不可辨识的、小的亚格子尺度运动以及大小尺度之间的相互作用可以进一步模化. 由于小尺度运动具有普适性, 相比湍流模型更容易模化. 但是在处理湍流反应流动时, 由于化学反应是在反应物达到分子混合之后发生, 绝大部分的化学反应都发生在亚格子尺度之内, 化学反应流动的小尺度运动可能不具有普适性, 化学反应流动的亚格子模型建模并不比湍流模型更容易.

但是相反的观点认为, 化学反应的存在并不会影

响小尺度运动具有普适性的假设. 在反应流动的最小尺度上仍然存在普适性的特征. 例如, 在化学反应流动的小尺度上存在普适性的火焰结构, 即火焰面结构. 这是一种非常薄的反应扩散层, 嵌入在周围的无反应湍流场中. 当化学反应非常快时, 化学反应主要在这个薄层中发生. 如果薄层的尺度与流动的Kolmogorov尺度相仿, 就可以认为这个薄层的周围是准层流的流场, 这时的火焰面就被称为层流火焰面^[1].

湍流扩散火焰可以看作是由拉伸的层流火焰面的系综组成^[2]. 结合层流火焰面的薄层结构特点, Peters^[3]和Kuznetsov^[4]分别导出了以混合分数为独立变量、用标量耗散率表征混合过程的火焰面方程, 即式(1), 提

引用格式: 张健, 刘桎钰, 杨涛. 基于过程变量-火焰面模型的湍流燃烧大涡模拟. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2017, 47: 070007
Zhang J, Liu C Y, Yang T. Large-eddy simulation of turbulent combustion based on steady flamelet/progress variable approach (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2017, 47: 070007, doi: 10.1360/SSPMA2016-00410

出了湍流燃烧的火焰面模型^[5].

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} - \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} = \omega_i, \quad (1)$$

其中, ρ 为反应流的密度, Y_i 为反应组分的质量分数, τ 为化学反应的Lagrangian时间, Z 为混合分数, χ 表示混合分数的耗散率, ω_i 为第*i*个组分的化学反应速率.

火焰面模型的主要贡献之一是提供了一种简化模拟燃烧过程的办法. 燃烧是一个包含*N*种反应组分 Y_i 和温度*T*的*N*+1元复杂系统. 理论上燃烧过程的各种组分和温度要由式(2)计算. 其中*N*+1个变量的联合概率密度分布函数(Joint Probability Density Function, JPDP) $P(Y_1, Y_2, \dots, Y_N, T)$ 的求解非常复杂和困难.

$$\langle Y_i \rangle = \int Y_i(Y_1, Y_2, \dots, Y_N, T) P(Y_1, Y_2, \dots, Y_N, T) dY_1 dY_2 \dots dY_N dT. \quad (2)$$

火焰面模型将*N*+1元的复杂系统成功简化为由混合分数*Z*和混合分数耗散率 χ_{st} 表达的二元参数系统. 在二元系统中, 燃烧过程的各种组分和温度可以由式(3)计算, 大大简化了燃烧过程的预测, 并且满足化学反应速率无限快单步不可逆反应的Burke-Schumann解.

$$\langle Y_i \rangle = \iint Y_i(Z, \chi_{st}) P(Z) P(\chi_{st}) dZ d\chi_{st}. \quad (3)$$

另外, 火焰面模型把流动求解与化学反应计算解耦. 化学反应数据库在流动求解之前建立, 不与流动方程一同迭代求解, 回避了数值计算中的刚性问题.

Cook等人^[6]把稳态火焰面模型引入大涡模拟中, 模型中所需的滤波量均来自于均匀各向同性湍流反应流的直接数值模拟结果. 尽管只是一个二元一步简单化学反应, 稳态火焰面模型与大涡模拟的结合仍表现出良好的预测性能, 得到了比平衡态化学反应模型更加准确的结果. Pitsch和Steiner^[7]将非稳态火焰面模型与大涡模拟结合, 采用49种组分、279步反应的详细化学反应机理GRI-Mech 2.11, 针对实验室中的真实火焰Sandia D火焰, 完成了首个真正意义上的湍流燃烧大涡模拟. 大涡模拟结果与实验测量结果进行了全面的对比, 混合分数的均值和方差、温度的均值和方差、主要组分 H_2O , CO_2 , O_2 , CH_4 以及次要组分 CO , NO , OH 的条件平均值都得到了很好的预测. 这项工作既

展现出湍流燃烧大涡模拟出色的应用前景, 也验证了火焰面模型在大涡模拟框架下的有效性.

稳态火焰面模型由于使用简便, 在大涡模拟中得到了更加广泛的应用. 稳态火焰面模型与大涡模拟的结合可以简单概括为以下步骤:

求解稳态火焰面方程. 在式(1)中, 当化学反应比较快时, 化学反应与流动相比可以近似看作稳态过程. 忽略时间导数项, 式(1)简化为稳态火焰面方程. 通过求解稳态火焰面方程, 把化学反应组分表示为混合分数和当量混合分数耗散率的函数, 即 $Y_i = Y_i(Z, \chi_{st})$.

适当选取概率密度函数(PDF), 把 $Y_i = Y_i(Z, \chi_{st})$ 转化为 $Y_i = Y_i(\tilde{Z}, \tilde{Z}'^2, \tilde{\chi}_{st})$, 得到火焰面数据库. 通常假设混合分数的PDF为Beta函数, 当量混合分数耗散率的PDF为对数正态分布. 上标~表示Farve滤波值.

在流动方程组中增加 \tilde{Z} 和 \tilde{Z}'^2 的输运方程, 并对 $\tilde{\chi}_{st}$ 建模, 联合流动方程迭代求解, 解出 $(\tilde{Z}, \tilde{Z}'^2, \tilde{\chi}_{st})$ 后, 查询火焰面数据库, 得到相应的化学反应变量 $Y_i = Y_i(\tilde{Z}, \tilde{Z}'^2, \tilde{\chi}_{st})$.

稳态火焰面方程的解可以用S曲线表示. 图1所示为甲烷/氢气在低氧高温条件下燃烧时, 稳态火焰面方程解的S曲线. 燃料中甲烷/氢气的体积比为1:1, 温度为305 K; 氧化剂流动中包含 O_2 (9%, 体积比率, 下同), CO_2 (3%), H_2O (10%) and N_2 (78%), 温度为1100 K.

S曲线包含两个独立的物理过程: 熄火和点火过程. 熄火路径如图1中蓝色箭头所示, 随着耗散率增加, 化学反应逐渐远离绝热状态, 到达熄火点(Extinction Point)后, 化学反应马上停止, 火焰熄灭; 点火路径如图1红色箭头所示, 随着耗散率降低, 化学反应缓慢加速, 到达点火点(Ignition Point)后, 反应突然加速, 进入稳定燃烧状态. 随着耗散率继续降低, 反应接近平衡状态. 由于燃烧的迟滞特性, 点火点与熄火点是分离的, 点火路径和熄火路径并不重合(只有在特定的条件下, 点火点和熄火点才会重合). 使用稳态火焰面模型模拟燃烧过程时, 若燃烧过程以熄火为主, 则选择熄火路径生成火焰面数据库; 若燃烧过程以自点火为主, 则选择点火路径生成火焰面数据库.

但是在高*Re*数的湍流燃烧中, 常会出现明显的局部熄火和再燃. 这种情况下, 只用熄火路径生成的火焰面数据库或只用点火路径生成的火焰面数据库, 很难反映出局部熄火和再燃的物理特性.

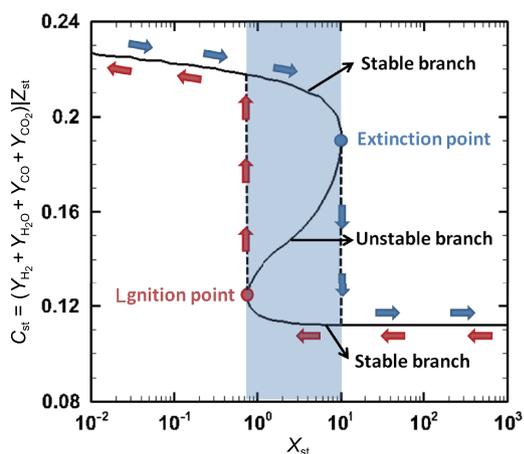


图1 (网络版彩图)甲烷/氢气在低氧、高温条件下燃烧时,稳态火焰面方程的解. 燃料中甲烷/氢气的体积比为1:1,温度为305 K;氧化剂流动中包含O₂ (9%, 体积比率,下同),CO₂ (3%),H₂O (10%)和N₂ (78%),温度为1100 K. 横坐标为当量混合分数的耗散率,纵坐标为4种组分(H₂, H₂O, CO和CO₂)当量质量分数之和

Figure 1 (Color online) Solution of steady flamelet equation. Fuel consists of CH₄/H₂ with volumetric ratio 1:1 at temperature of 305 K; oxidizer flow includes O₂ (9%, volumetric fraction), CO₂ (3%), H₂O (10%) and N₂ (78%) at temperature of 1100 K.

过程变量方法是基于完整的S曲线生成火焰面数据库的方法^[8]. 在完整的S曲线中,包含了点火和熄火的所有燃烧状态,更有利于描述局部熄火和再燃的物理特性. 过程变量是化学反应中的进度标量,通常定义为几种反应物组分的质量分数之和,如 $C = Y_{H_2} + Y_{H_2O} + Y_{CO} + Y_{CO_2}$,用于描述化学反应的进程. 通过引入过程变量C,把火焰面方程的解 $Y_i = Y_i(Z, \chi_{st})$ 转化为 $Y_i = Y_i(Z, C_{st})$,解决了同一个标量耗散率对应火焰面方程的3个不同的解的问题(如图1中阴影部分所示). 此外,过程变量方法的优势还在于过程变量的输运方程与流动方程一起迭代求解,化学反应与流动的耦合更加直接.

本文将基于过程变量-火焰面模型的大涡模拟在多种湍流火焰和模型燃烧器中的验证和应用以及对基础燃烧现象的模拟做简要的回顾,概述相关研究的主要进展. 具体安排如下,第一部分介绍基于过程变量-火焰面模型的大涡模拟在多种湍流火焰中的验证和应用;第二部分介绍该方法在燃烧器模拟中的应用进展;第三部分介绍该方法对一些基础燃烧现象的模拟,最后总结.

1 基于过程变量-火焰面模型的大涡模拟在湍流火焰中的验证和应用

1.1 Sandia系列火焰

Sandia系列火焰是TNF (Turbulent Non-premixed Flames) Workshop的标准火焰之一^[9,10],是由值班火焰(Piloted Flame)稳定的自由射流火焰. 燃料流是甲烷和空气(体积比1:3)的混合气. 与空气的部分混合明显降低了炭烟的荧光干扰,增加了测量的精度,同时也减小了火焰长度并且火焰更加稳定,即使在比较高的雷诺数($Re=22400$)下,也不会出现明显的局部熄火. 从火焰结构上看,Sandia系列火焰更接近扩散火焰,在富燃侧并未观察到明显的预混反应.

Sandia系列火焰包含C\D\E\F 4组火焰. 燃料射流 Re 数依次增加,局部熄火的程度随 Re 数的增加而增加. Sandia D火焰局部熄火程度较低,而Sandia E火焰则有比较明显的局部熄火,这两组火焰常分别用于验证不考虑局部熄火和考虑局部熄火的湍流燃烧模型.

Ihme和Pitsch^[11]扩展了基于过程变量-火焰面模型的大涡模拟(LES-FPV)方法,用SMLD (Statistically Most Likely Distribution)代替了Delta函数作为过程变量的假设PDF,混合分数的PDF采用Beta函数,生成了新的火焰面数据库^[10]. 结合详细化学反应机理GRI-Mech 2.11,模拟了Sandia D和Sandia E火焰^[12]. 图2所示为Sandia D和Sandia E火焰的瞬时温度场. 从图中可以看出,Sandia E在靠近喷口处有更加明显的局部熄火, Sandia D则几乎没有明显的局部熄火出现,与实验观察相符.

图3中给出了混合分数和温度沿中心轴线的分布. 数值模拟的结果准确地再现了这些物理量的分布,从温度图中也反映出LES-FPV方法准确预测了火焰的长度.

1.2 悉尼钝体火焰

以钝体为原型的燃烧器被广泛应用于燃气轮机、锅炉等许多工业设备的燃烧室中. 由于其相对简单的几何以及确定的边界条件,钝体燃烧器也是湍流燃烧基础研究的典型对象之一. 钝体燃烧器多采用非预混燃烧方式,即高速燃料由钝体中心射出,低速同向空气从钝体外围射出. 当燃料和空气流过钝体时,两股流动在钝体下游产生一对反向漩涡的回流区,在回流区

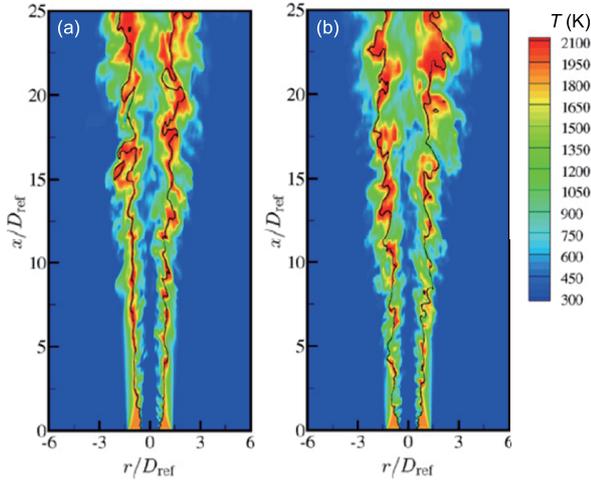


图2 (网络版彩图) Sandia D\E火焰的LES-FPV模拟结果^[12]. (a) Sandia D; (b) Sandia E
Figure 2 (Color online) LES-FPV of Sandia D\E flames [12]. (a) Sandia D; (b) Sandia E.

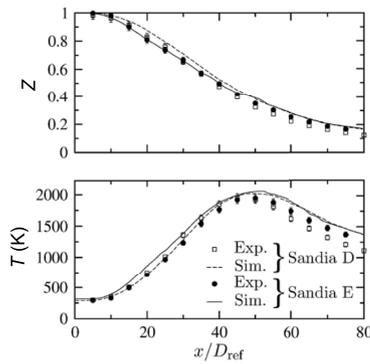


图3 Sandia D\E火焰中混合分数和温度沿中心轴线的分布^[12]
Figure 3 Distribution of mixture fraction and temperature at centerline in Sandia D\E flames [12].

内高温燃烧产物和未燃气体充分混合并进行热量的交换, 从而形成一个稳定的点火热源, 使火焰稳定. 同时, 通过控制回流区内的流动结构, 可以使燃料充分反应, 避免局部高温的出现, 减少 NO_x 的生成. 当燃料速度足够高时, 中心射流穿越回流区并在下游产生类似于射流的火焰, 在湍流充分发展和化学反应有限的区域, 射流火焰有可能局部熄火; 而在更下游的区域, 随着湍流掺混作用的减弱, 有可能发生熄火再燃的现象.

Dally等人^[13,14]对钝体火焰进行了详细的实验研究, 包括无反应的流场的测量以及甲烷/氢气火焰的测量等, 为验证燃烧模型提供了详细的实验数据. 杨涛

等人^[15]使用LES-FPV方法完成了对无反应的钝体射流和甲烷/氢气钝体火焰的模拟, 并与Kempf等人^[16]使用稳态火焰面模型的大涡模拟结果进行了对比.

图4是无反应流场大涡模拟与实验结果的对比. 在无反应流动中, 杨涛等人的模拟结果与Kempf等人的结果非常接近, 与实验测量吻合. 大涡模拟的结果准确预测到复杂的钝体尾流, 特别是回流区内存在的反向涡对, 以及空气伴流和钝体尾流之间的剪切流动等主要物理现象^[15].

图5中对比了甲烷/氢气钝体射流火焰的大涡模拟结果. 在无反应流动中, 杨涛等人的结果与Kempf等人的结果十分接近. 因此, 在有反应的情况下, 二者出现差别的主要原因是燃烧模型的不同. 可以看到, 相比于稳态火焰面模型, 过程变量-火焰面模型更加准确地预测了温度和OH峰值的位置. 燃烧场中速度和混合分数的模拟结果, 也均与实验测量结果吻合, 并改进了使用稳态火焰面模型预测的结果^[15].

1.3 JVC火焰

工业设备中常使用废气循环稀释反应物, 降低燃烧温度, 阻止 NO_x 的生成. 但是在这种条件下, 火焰的稳定性和火焰特征会对燃料组分和操作条件的变化非常敏感. 详细研究废气循环稀释条件下的火焰特性对提升燃料效率, 降低污染物排放具有重要的意义.

Cabra等人^[17,18]设计了JVC (Jet in Vitiated Coflow) 燃烧器, 一种带有热伴流的射流实验装置. 燃料射流喷入由燃烧产物组成的含氧伴流中, 热伴流的组分与实际的产物循环流中的组分一致. 这种实验装置可以用来模拟废气循环稀释的燃烧环境, 并且能够提供相对广泛的流动、温度、组分变化范围, 利于实验观测, 为研究废气循环稀释条件下的火焰特性提供了很好的实验平台, 同时JVC火焰也常被用于验证和发展燃烧模型.

为了模拟JVC火焰的火焰抬升现象, Ihme和See^[19]对过程变量-火焰面模型进行了改进, 基于非稳态火焰面方程的解建立火焰面数据库, 化学反应量表示为 $Y_i = Y_i(\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2, \tilde{C}, \tilde{C}''^2, \tilde{\chi}_{st})$. 其中, 标量耗散率的倒数用来表示火焰面的时间尺度.

Ihme和See比较了非稳态过程变量方法, 稳态过程变量方法和非稳态过程变量方法(取 $\tilde{C}''^2 = 0$)对抬升火焰的预测(图6). 非稳态过程变量方法预测的抬升高

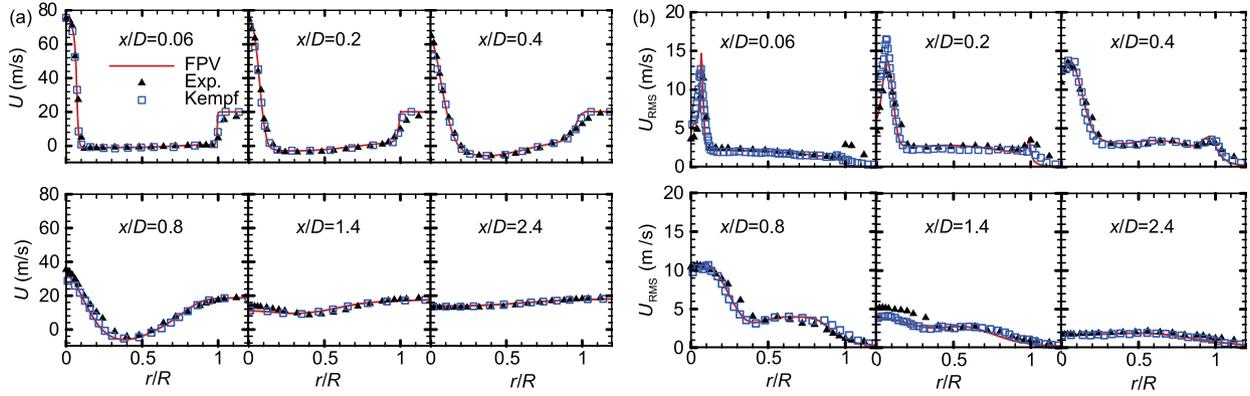


图4 (网络版彩图) (a) 无反应流动中轴向平均速度在各剖面上的径向分布^[15]; (b) 无反应流动中轴向速度的均方根在各剖面上的分布^[15]

Figure 4 (Color online) (a) Radial distribution of the mean axial velocity in non-reacting flow [15]; (b) radial distribution of the RMS of axial velocity in non-reacting flow [15].

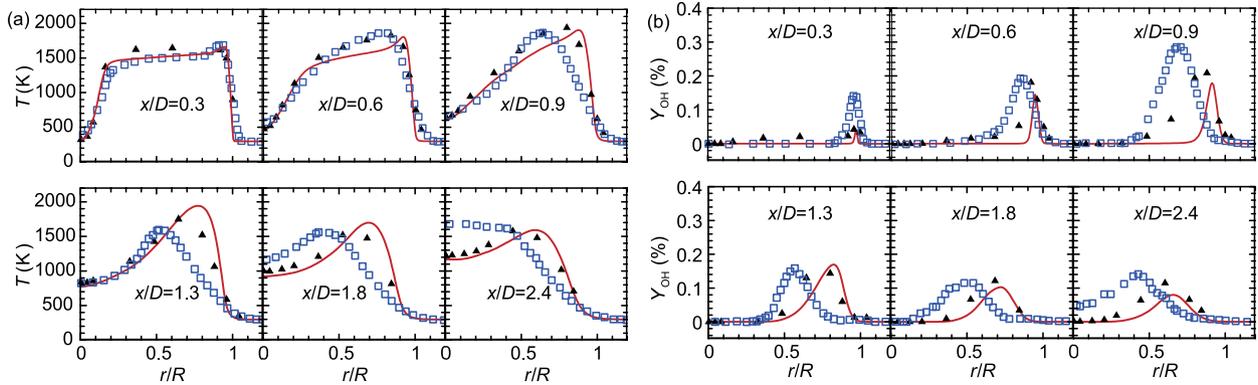


图5 (网络版彩图) (a) CH₄/H₂火焰中平均温度在各剖面上的径向分布; (b) CH₄/H₂火焰中OH在各剖面上的径向分布^[15]

Figure 5 (Color online) (a) Radial distribution of the mean temperature in CH₄/H₂ flame; (b) radial distribution of mean OH mass fraction in CH₄/H₂ flame [15].

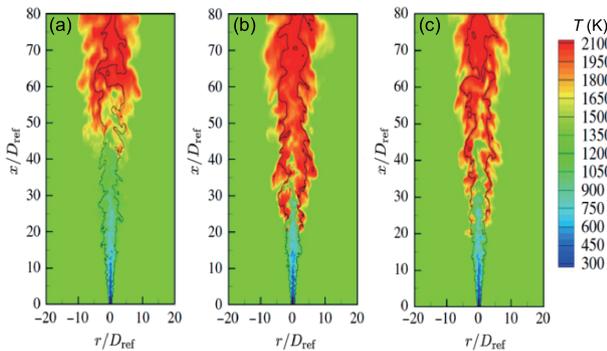


图6 (网络版彩图) 非稳态过程变量方法(UFPV) (a), 稳态过程变量方法(SFPV) (b)与非稳态过程变量方法(取 $\widetilde{C}^{n2} = 0$) (c)对抬升火焰的预测^[19]

Figure 6 (Color online) Instantaneous temperature field obtained from UFPV (a), SFPV (b), and UFPV with $\widetilde{C}^{n2} = 0$ (c) [19].

度与实验测量最接近, 明显改进了稳态过程变量方法预测的火焰抬升高度过低的问题。

1.4 JHC火焰

Dally等人^[20-23]设计了JHC (Jet in Hot Coflow)燃烧器, 可以独立调节热协流的氧含量和温度. 这种燃烧器可以对低氧条件下的燃烧特性进行详细的实验研究.

JHC燃烧系统可以表示为图7所示的三股射流系统, 包括两股氧化剂流(热协流和外部空气流)和一股燃料流. 该系统的火焰与两股射流系统的火焰完全不同. 它包含近喷口区域的火焰和下游火焰. 其中, 近喷口区域的火焰由中心燃料射流与热协流的反应形成, 用红色表示; 下游火焰由中心燃料射流与外部空气流

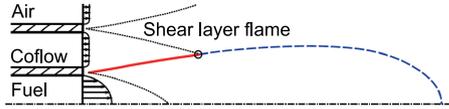


图7 (网络版彩图) 3股射流燃烧系统示意图
Figure 7 (Color online) Schematic of the JHC burner configuration.

的反应形成,用蓝色表示. 在具有较大变化范围的流动、温度、组分条件下,观察到的抬升火焰既可能是近喷口区域火焰,也可能是下游火焰,也可能是二者的组合.

为了数值模拟JHC燃烧器内丰富的燃烧现象,加深对三股射流燃烧系统的理解, Ihme和See^[24]扩展了LES-FPV方法,使其可以模拟三股射流燃烧系统.

三股射流反应系统包含两个独立的守恒标量(Z_{FA} , Z_{FC}), 其中 Z_{FC} 表示燃料流与热协流的混合分数, Z_{FA} 表示燃料流与外部空气流的混合分数. 三股射流的反应过程既依赖于 Z_{FC} , 又依赖于 Z_{FA} , 是“二元混合分数空间”(以下简称“二元”)的物理过程. 在单个混合分数概念基础上发展出的一元燃烧模型, 如火焰面模型、条件矩模型等, 尽管在许多燃烧问题的数值模拟中均得到了很好的验证, 但是都很难模拟上述二元问题. Ihme和See^[24]定义了一个新的守恒标量 W , 即氧原子的质量分数. 由于空气和热伴流之间是纯扩散过程, 在给定 W 时, 根据 Z_{FA} 和 Z_{FC} 可以重新定义一个混合分数 Z , 原状态空间(Z_{FA} , Z_{FC})转化为(Z , W)(见图8).

在二元(Z , W)空间构建过程变量-火焰面数据库, 假设(Z , W)服从Dirichlet分布, 将化学反应变量表示为 $Y_i = Y_i(\tilde{Z}, \tilde{Z}'^2, \tilde{W}, \tilde{W}'^2, \tilde{C})$. Ihme等人^[25]用这种扩展的LES-FPV方法模拟了JHC燃烧器中的HM3, HM2和HM1火焰, 对应的热伴流中的氧气浓度分别为9%, 6%和3%. 图9给出了在不同的轴向位置, 大涡模拟结果与实验测量结果的对比. 大涡模拟结果准确描述了氧气浓度降低所带来的火焰结构和组分的改变, 并且上游火焰和下游火焰都得到了较好的模拟.

1.5 PPJB火焰

在燃气轮机中实现预混以及部分预混火焰有助于降低污染物的排放同时提高性能. 悉尼值班预混射流火焰(Piloted Premixed Jet Burner, PPJB)是一种三股射流的复合火焰^[26-28]. 因为排除了旋流、回流及复杂边界的影响, PPJB燃烧器有利于研究这类预混火焰中的

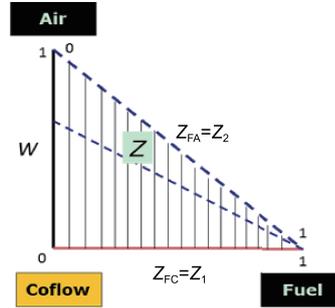


图8 (网络版彩图)二元混合分数状态空间
Figure 8 (Color online) State space of two-dimensional mixture fraction.

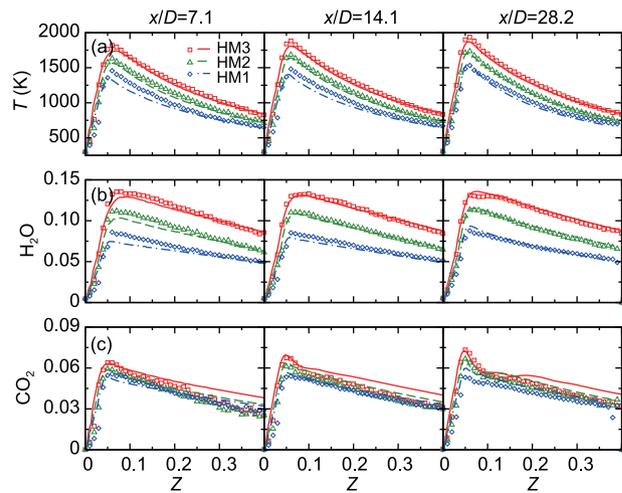


图9 (网络版彩图) JHC火焰的温度(测量结果和模拟结果对比) (a), H₂O (b)和CO₂ (c)在不同轴向位置的分布^[25]
Figure 9 (Color online) Comparison of measurements (symbols) and computations (lines) for mean profiles of temperature (a) and species mass fraction of H₂O (b) and CO₂ (c) at three axial locations [25].

更多基础的物理现象, 并因此成为了TNF的目标火焰, 成为诸多数值模拟方法的研究对象.

Chen和Ihme^[29]利用LES-FPV方法对PPJB燃烧器进行了数值模拟. PPJB燃烧器由当量比分别为0.5, 1和0.43的中心射流、导流和热伴流组成. 为了表征3股流动的混合程度, 需要采用两个独立的混合分数, 此时状态空间的参数关系式改写为 $\tilde{\psi} = \tilde{\psi}(\tilde{Z}_1, \tilde{Z}_1', \tilde{Z}_2, \tilde{C})$. 同时, Dirichlet分布取代Beta分布来实现两个混合分数的PDF封闭. 模拟了PM1-50, PM1-100, PM1-150和PM1-200 4个算例(见图10), 对应中心射流速度分别为50, 100, 150, 200 m/s, 并维持导流火焰及伴流条件不变.

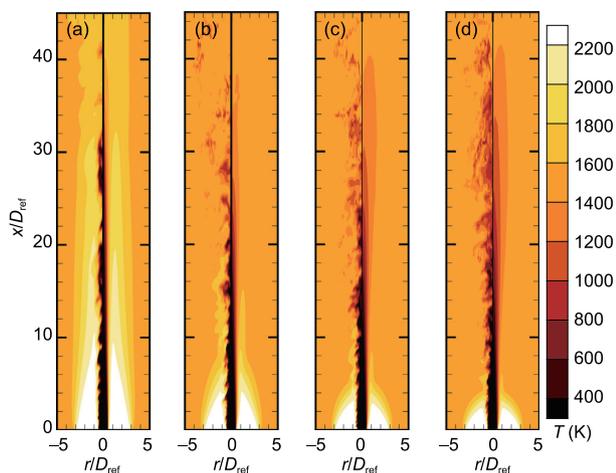


图 10 (网络版彩图)瞬时(左)与平均(右)温度场(K). (a) PM1-50; (b) PM1-100; (c) PM1-150; (d) PM1-200^[29]

Figure 10 (Color online) Comparison of the instantaneous (left) and mean (right) temperature filed for PM1-50 (a), PM1-100 (b), PM1-150 (c), and PM1-200 (d) [29].

通过与实验结果的比较, Chen和Ihme^[29]发现在PM1-50和PM1-200中模拟结果中的温度、主要物质如二氧化碳、氧气和羟基分布与实验结果基本一致,但喷口附近的一氧化碳浓度相比实验较低. 结果表明,在导流火焰和中心射流发生相互作用的区域温度和主要组分的预测非常准确,而在下游位置,FPV模型高估了火焰中的反应率,即火焰的局部熄火与再燃的程度. 从组分浓度与温度的关联数据看,FPV模型低估了一氧化碳的峰值浓度,但捕捉到了中心射流速度变化对羟基浓度的影响.

1.6 二甲醚火焰

二甲醚(Dimethyl Ether, DME)是一种低排放环保的替代燃料. 对于压缩点火的引擎而言,二甲醚有望取代柴油作为新能源. 尽管现阶段的二甲醚主要由化石燃料作为原料进行制备,但在可见的未来很可能实现工业规模的生物质制备二甲醚. 为研究以二甲醚为代表的复杂燃料(相对甲烷)在燃烧过程中湍流-化学反应的相互作用,许多研究选择湍流射流火焰这一相对简单燃烧模式^[30,31].

Popp等人^[32]利用LES-FPV方法对二甲醚的值班部分预混火焰进行了模拟. 除了常见的速度、温度及主要组分如二氧化碳、一氧化碳外,通过建模,模拟实

验中观察到的羟基和甲醛的荧光信号以及瑞利信号强度,并和实验结果进行对比.

模拟结果中,流场、温度场以及主要组分与实验吻合较好,但在喷口附近有较小差异. 从基于混合分数的条件统计结果可以看出,过程变量-火焰面模型准确地捕捉到了二甲醚火焰的主要结构. 实验结果中,下游位置混合分数接近1处模拟结果中未能给出与实验相似的反应进度,这很有可能是由于在火焰面计算过程中将Lewis数预设为1所导致的. 羟基信号与实验差别不大. 实验中观测到的喷口附近的甲醛荧光信号要大于模拟结果,这是因为过程变量-火焰面模型没有准确捕捉到二甲醚的热解过程. 与实验结果相同的是,沿流向随着标量耗散率的降低,羟基与甲醛的分布出现了更明显的分离(见图11). 通过与实验结果的比对,总体来说,LES-FPV方法复现了二甲醚火焰中的主要结构和燃烧现象.

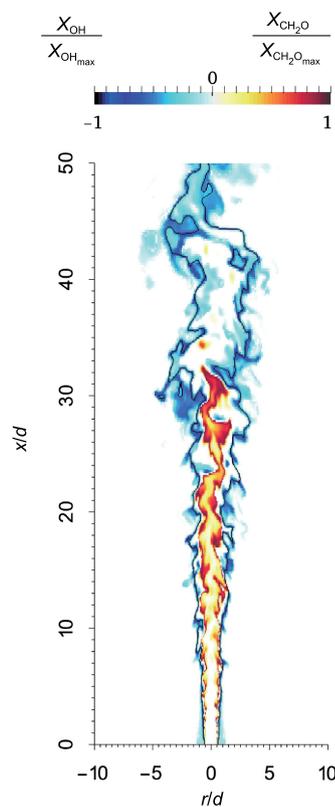


图 11 (网络版彩图)二甲醚火焰中归一化的羟基与甲醛的瞬时分布,可以看出在流动下游,二者出现了明显的分离^[32]
Figure 11 (Color online) Snapshot of the instantaneous and normalized CH_2O and OH mole fractions, showing the gap between the species distributions [32].

2 基于过程变量-火焰面模型的大涡模拟在部分预混燃气涡轮燃烧室中的应用

由于旋流燃烧器能够有效强化高温燃烧产物与未燃烧燃料在回流区的混合过程, 并形成稳定的点火源和活化中心, 因而得到了广泛应用. 基于多种燃烧器的预混及非预混的旋流火焰均有过许多的实验及数值模拟, 而对于部分预混的旋流火焰则依然存在许多未知的内容有待研究.

See和Ihme^[33]利用大涡模拟对DLR-GTMC燃烧器中部分预混的双旋流火焰^[34,35]进行了模拟, 并分别利用基于非预混火焰的过程变量-火焰面模型以及基于预混火焰的TACLES方法作为燃烧模型. See和Ihme首先对两种燃烧模型进行了先验分析, 结果表明这两种模型均可以有效复现燃烧器中的热化学状态. 在普通的FPV方法中, 反应状态空间取决于3个参数 Z , \tilde{Z}' 和 C , 过程变量的亚格子脉动 \tilde{C}' 并没有计入其中, 但其通常对于火焰的局部熄火和再燃以及火焰的卷曲有不可忽视的影响. See和Ihme对FPV模型进行拓展, 将状态空间的参数关系式改写为 $\tilde{\psi} = \tilde{\psi}(\tilde{Z}_1, \tilde{Z}_1', \tilde{C}, \tilde{C}')$, 即FPV-Cvar方法.

针对Meier等人^[35]实验中的A类火焰, See和Ihme^[33]的大涡模拟结果与实验结果进行了详细的对比, 如图12所示, 大体上与实验结果吻合, 但在内侧回流区的上游, 即旋流器附近出现了一定的偏差. 同时结果中温度、速度以及二氧化碳和氢气的浓度几乎不受火焰的拓扑结构影响. 由于旋流火焰中存在剧烈的火焰皱褶, 湍流-化学反应的相互作用极易对结果造成影响. 模拟过程当中, 这一作用主要通过燃烧模型中的亚格子项实现, 因此FPV-Cvar方法对于内侧回流区的结果与实验结果的吻合效果更好. 模拟结果的温度场显示出外侧回流区的温度相比实验结果低150 K左右, 这部分误差可能是由于忽略了火焰与壁面的热交换所导致.

3 基于过程变量-火焰面模型的大涡模拟对基础燃烧现象的模拟

3.1 高温低氧条件下射流过渡火焰的模拟

高温低氧条件下的燃烧过程及火焰特性的研究对工业设备的改造升级具有重要作用. Gordon等人^[36]

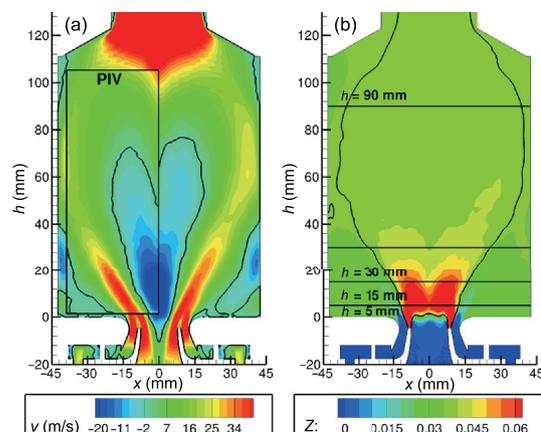


图12 (网络版彩图)利用FPV-Cvar方法得到的平均轴向速度(a) (方框内为实验观察结果)与平均混合分数(b), 实线分别为轴向速度为零和全局当量比等值线^[33]

Figure 12 (Color online) Mean flow-field results at burner midplane obtained with the FPV-Cvar combustion model: (a) mean axial velocity is overlaid with PIV-measurements in the boxed region; (b) mean mixture fraction with isocontour of global equivalence ratio [33].

依据实验对高温低氧条件下的抬升火焰进行观测, 推测这是一种自点火稳定的火焰, 并给出了3步自点火过程的猜测. 在降低伴流的温度以及伴流中的氧气(即趋向于MILD燃烧)时, Medwell等人^[22,37,38]发现了火焰中存在过渡点, 过渡点上游存在连续的甲醛分布和相对较低的羟基分布. 这与普通的抬升火焰的火焰结构存在明显不同, Medwell等人称之为过渡火焰. 深入研究这类过渡火焰的燃烧特性有助于理解MILD燃烧的燃烧特性和稳定机制有着重要作用.

刘程钰和张健^[39]以JHC燃烧器为对象, 利用LES-FPV方法, 对相同伴流组分条件下两种伴流温度的火焰进行数值模拟. 通过对比实验观察到的火焰结构, 确定了两种火焰分别为自点火稳定的抬升火焰以及过渡火焰, 分别对应于Gordon等人^[36]和Medwell等人^[38]实验中的火焰. 在抬升火焰中, 发现了稳定火焰上游时间解析的3步自点火过程(图13), 即前体(主要为甲醛)富集、点火核生成(甲醛浓度达到最大, 羟基出现)以及稳定火焰的形成(甲醛浓度下降, 羟基保持高浓度). 这与Gordon等人^[36]对自点火过程的推测是一致的, 进而证明了抬升火焰中自点火过程起到了稳定火焰的作用. 而在过渡火焰中, 前体富集过程并不明显, 说明自点火过程在过渡火焰中并不一定是稳定火焰的主要因素. 对比了时间平均的氧气与羟基浓度分布、瞬时火焰结构, 发现了火焰抬升段的部分预混反应在稳定

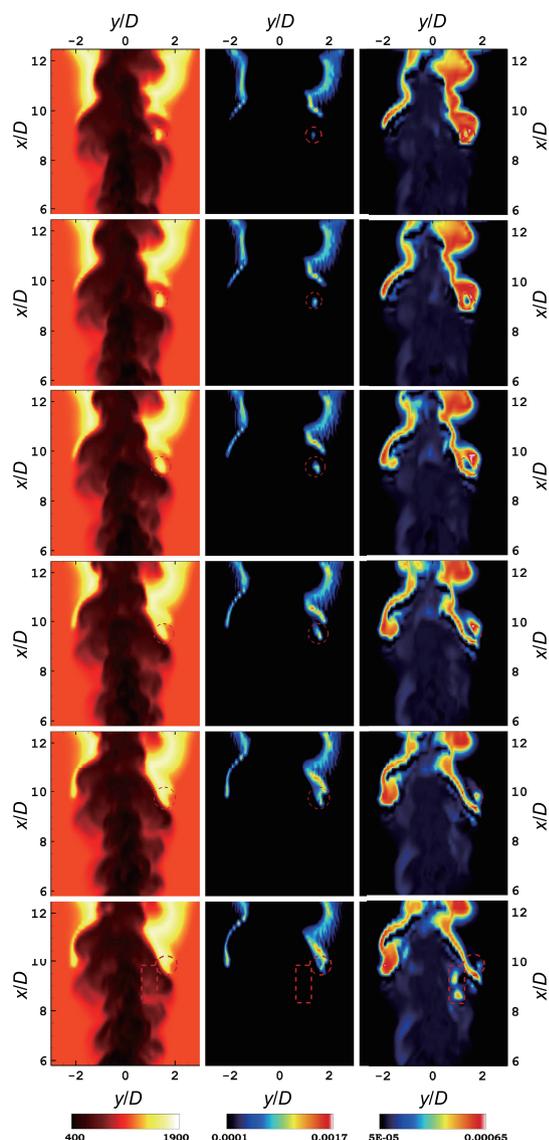


图 13 (网络版彩图) 抬升火焰的自点火过程(从左向右分别为温度、羟基和甲醛浓度)

Figure 13 (Color online) Time sequence of autoignition in lifted flames. Temperature, OH, and CH_2O mass fraction shown in column from left to right.

过渡火焰中起到了重要作用。

3.2 强制点火瞬态过程的模拟

现代飞机, 无论是民机还是军机, 飞行中都很可能发生空中熄火。对民机而言, 为降低 NO_x 生成量, 先进的燃烧室, 如贫燃直接喷射(Lean Direct Injection, LDI)燃烧室, 其工作条件已经接近贫燃边界, 当飞行途中遭遇气流变化引起燃烧室入口流动突变时, 就很容易

导致燃烧室整体熄火; 对军机而言, 为躲避攻击, 在采取过失速机动等复杂动作时, 发动机燃烧室的进口气流会受到严重干扰, 也极有可能造成空中熄火。2010年, 加拿大现役大黄蜂战机在做低空俯冲时就发生了双发熄火而坠毁。空中熄火严重危害飞行安全, 有效的处理空中熄火问题的办法是实现空中熄火后的再点火, 即高空二次点火。但是在高空无动力维持、气流条件不利的恶劣状况下欲实现成功的二次点火, 燃烧控制技术的精准调控和点火执行机构的精密配合缺一不可, 这些技术的设计和实施完全建立在对点火的瞬态物理过程的深入认识的基础之上。

面向航空发动机的点火瞬态物理过程的模拟, 需要进一步结合航空发动机燃烧室内的点火特点。以GE公司最新型的GENx发动机为例(2016年8月, 捷星航空旗下一架装载GENx发动机的波音787飞机, 就发生了空中停车事件), 其采用的是TAPS (Twin Annular Premixing Swirler)低污染燃烧室^[40-42]。在稳定工作时, 由于非预混燃烧更加稳定, 在TAPS燃烧室中使用一枝非预混值班火焰来稳定预混主火焰, 以实现燃烧室内的稳定燃烧。一旦发动机空中熄火, 需要高空二次点火时, 首先需要考虑对非预混值班火焰进行二次点火。另一方面, 在高空二次点火时, 空气流速可能处于一个比较宽的变化范围。为了在这种流动条件下保持非预混值班火焰的稳定燃烧, 在燃烧室头部会采用一种类似钝体的几何外形, 在头部下游形成回流区, 不同空气来流条件下都可以稳定火焰^[13,14]。结合燃烧室二次点火时的上述典型特征, 杨涛等人^[15]采用非预混钝体射流燃烧器作为研究对象, 使用LES-FPV方法模拟了其中的强制点火瞬态物理过程(图14为点火过程中的瞬态温度分布)。在合理简化几何条件的基础上, 探索燃烧室二次点火的主要物理特性。

杨涛等人根据点火后火焰温度、OH和 CH_2O 的质量分数的最大值随时间的演变特性, 将点火过程进一步表征为4个阶段: 点火源衰减、点火触发、点火核生成和点火成功, 为进一步详细分析不同点火条件下点火瞬态过程的物理特性奠定了基础。

4 总结

湍流燃烧的模拟是流动模拟中最具挑战性的任务之一。大涡模拟在其中正发挥着越来越重要的作用。

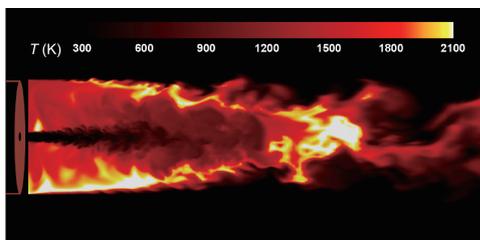


图 14 (网络版彩图)非预混钝体射流燃烧器中的强制点火过程中火焰发展的瞬间状态

Figure 14 (Color online) Flame snapshot of forced ignition in non-premixed bluff-body flame.

近年来, 基于过程变量-火焰面模型的大涡模拟(LES-FPV)方法得到了深入的发展并在非预混射流火焰、钝体火焰、部分预混火焰、抬升火焰、旋流火焰等多

种复杂燃烧过程中得到了全面的验证, 并成功用于燃气涡轮燃烧室的模拟, 为LES-FPV方法获得更加广泛的应用奠定了基础. 此外, LES-FPV方法也被用于基础燃烧现象的预测. 作为实验手段的重要补充, LES-FPV的结果提供了更加精细和全面的火焰结构的描述, 帮助人们深入地认识燃烧现象、理解燃烧特性.

严格来说, LES-FPV方法仍然是基于非预混火焰面模型衍生的方法, 更适合处理非预混燃烧问题. 虽然在一些部分预混火焰的模拟中也表现出了不错的效果, 但是要注意到, 这些部分预混火焰中混合率都足够高, 主要的火焰结构更接近于非预混火焰. 对于典型的部分预混火焰的模拟, LES-FPV方法仍然有进一步改进的空间.

参考文献

- Peters N. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. *Symp (Int) Combust*, 1988, 21: 1231–1250
- Williams F A. Recent advances in theoretical description of turbulent diffusion flames. In: Murthy S N B, ed. *Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows*. New York: Plenum Press, 1975. 189–208
- Peters N. Local quenching of diffusion flamelets and non-premixed turbulent combustion. In: *Western States Section of the Combustion Institute*. Irvine: Spring Meeting, 1980. WSS 80–84
- Kuznetsov V R. Effect of turbulence on the formation of large superequilibrium concentration of atoms and free radicals in diffusion flames. *Mehan Zhidkosti Gasa*, 1982, 6: 3–9
- Peters N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Prog Energy Combust Sci*, 1984, 10: 319–339
- Cook A W, Riley J J, Kosály G. A laminar flamelet approach to subgrid-scale chemistry in turbulent flows. *Combust Flame*, 1997, 109: 332–341
- Pitsch H, Steiner H. Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia flame D). *Phys Fluids*, 2000, 12: 2541–2554
- Pierce C D, Moin P. Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *J Fluid Mech*, 1999, 504: 73–97
- Barlow R S. The 1st Turbulent nonpremixed flames workshop. In: *Proceedings of the International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames*. Naples, 1996
- Barlow R S, Frank J H. Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames. *Symp (Int) Combust*, 1998, 27: 1087–1095
- Ihme M, Pitsch H. Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model. *Combust Flame*, 2008, 155: 70–89
- Ihme M, Pitsch H. Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model. *Combust Flame*, 2008, 155: 90–107
- Dally B B, Masri A R, Barlow R S, et al. Instantaneous and mean compositional structure of bluff-body stabilized nonpremixed flames. *Combust Flame*, 1998, 114: 119–148
- Dally B B, Fletcher D F, Masri A R. Flow and mixing fields of turbulent bluff-body jets and flames. *Combust Theor Model*, 1998, 2: 193–219
- Yang T, Zhang J, Lü J M, et al. Large-eddy simulation of a bluff-body flame and the forced ignition process (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2016, 48: 1290–1300 [杨涛, 张健, 吕金明, 等. 钝体射流火焰及其点火过程的大涡模拟. *力学学报*, 2016, 48: 1290–1300]
- Kempf A, Lindstedt R P, Janicka J. Large-eddy simulation of a bluff-body stabilized nonpremixed flame. *Combust Flame*, 2006, 144: 170–189
- Cabra R, Myhrvold T, Chen J Y, et al. Simultaneous laser raman-rayleigh-lif measurements and numerical modeling results of a lifted turbulent H_2/N_2 jet flame in a vitiated coflow. *Proc Combust Inst*, 2002, 29: 1881–1888
- Cabra R, Chen J, Dibble R, et al. Lifted methane-air jet flames in a vitiated coflow. *Combust Flame*, 2005, 143: 491–506
- Ihme M, See Y C. Prediction of autoignition in a lifted methane/air flame using an unsteady flamelet/progress variable model. *Combust Flame*,

- 2010, 157: 1850–1862
- 20 Dally B B, Karpets A N, Barlow R S. Structure of turbulent non-premixed jet flames in a diluted hot coflow. *Proc Combust Inst*, 2002, 29: 1147–1154
- 21 Medwell P R, Kalt P A M, Dally B B. Simultaneous imaging of OH, formaldehyde, and temperature of turbulent nonpremixed jet flames in a heated and diluted coflow. *Combust Flame*, 2007, 148: 48–61
- 22 Medwell P R, Kalt P A M, Dally B B. Imaging of diluted turbulent ethylene flames stabilized on a jet in hot coflow (JHC) burner. *Combust Flame*, 2008, 152: 100–113
- 23 Medwell P R, Kalt P A M, Dally B B. Reaction zone weakening effects under hot and diluted oxidant stream conditions. *Combust Sci Tech*, 2009, 181: 937–953
- 24 Ihme M, See Y C. LES flamelet modeling of a three-stream MILD combustor: Analysis of flame sensitivity to scalar inflow conditions. *Proc Combust Institute*, 2011, 33: 1309–1317
- 25 Ihme M, Zhang J, He G, et al. Large-eddy simulation of a jet-in-hot-coflow burner operating in the oxygen-diluted combustion regime. *Flow Turbul Combust*, 2012, 89: 449–464
- 26 Dunn M J, Masri A R, Bilger R W. A new piloted premixed jet burner to study strong finite-rate chemistry effects. *Combust Flame*, 2007, 151: 46–60
- 27 Dunn M J, Masri A R, Bilger R W, et al. The compositional structure of highly turbulent piloted premixed flames issuing into a hot coflow. *Proc Combust Inst*, 2009, 32: 1779–1786
- 28 Dunn M J, Masri A R, Bilger R W, et al. Finite rate chemistry effects in highly sheared turbulent premixed flames. *Flow Turbul Combust*, 2010, 85: 621–648
- 29 Chen Y, Ihme M. Large-eddy simulation of a piloted premixed jet burner. *Combust Flame*, 2013, 160: 2896–2910
- 30 Coriton B, Zendehehl M, Ukai S, et al. Imaging measurements and LES-CMC modeling of a partially-premixed turbulent dimethyl ether/air jet flame. *Proc Combust Inst*, 2015, 35: 1251–1258
- 31 Fuest F, Magnotti G, Barlow R S, et al. Scalar structure of turbulent partially-premixed dimethyl ether/air jet flames. *Proc Combust Inst*, 2015, 35: 1235–1242
- 32 Popp S, Hunger F, Hartl S, et al. LES flamelet-progress variable modeling and measurements of a turbulent partially-premixed dimethyl ether jet flame. *Combust Flame*, 2015, 162: 3016–3029
- 33 See Y C, Ihme M. Large eddy simulation of a partially-premixed gas turbine model combustor. *Proc Combust Inst*, 2015, 35: 1225–1234
- 34 Weigand P, Meier W, Duan X R, et al. Investigations of swirl flames in a gas turbine model combustor. *Combust Flame*, 2006, 144: 205–224
- 35 Meier W, Duan X R, Weigand P. Investigations of swirl flames in a gas turbine model combustor. *Combust Flame*, 2006, 144: 225–236
- 36 Gordon R L, Masri A R, Mastorakos E. Simultaneous Rayleigh temperature, OH- and CH₂O-LIF imaging of methane jets in a vitiated coflow. *Combust Flame*, 2008, 155: 181–195
- 37 Medwell P R, Dally B B. Experimental observation of lifted flames in a heated and diluted coflow. *Energ Fuels*, 2012, 26: 5519–5527
- 38 Medwell P R, Blunck D L, Dally B B. The role of precursors on the stabilisation of jet flames issuing into a hot environment. *Combust Flame*, 2014, 161: 465–474
- 39 Liu C Y, Zhang J. LES of transitional jet flame in hot and diluted environment (in Chinese). In: *Proceedings of 9th China National Meeting on Fluid Mechanics*. Nanjing, 2016 [刘桎钰, 张健. 高温低氧条件下射流过渡火焰的大涡模拟. 见: 第九届全国流体力学学术会议. 南京, 2016]
- 40 Dhanuka S K, Temme J E, Driscoll J F, et al. Vortex-shedding and mixing layer effects on periodic flashback in a lean premixed prevaporized gas turbine combustor. *Proc Combust Inst*, 2009, 32: 2901–2908
- 41 Dhanuka S K, Temme J E, Driscoll J F. Lean-limit combustion instabilities of a lean premixed prevaporized gas turbine combustor. *Proc Combust Inst*, 2011, 33: 2961–2966
- 42 Temme J E, Allison P M, Driscoll J F. Combustion instability of a lean premixed prevaporized gas turbine combustor studied using phase-averaged PIV. *Combust Flame*, 2014, 161: 958–970

Large-eddy simulation of turbulent combustion based on steady flamelet/progress variable approach

ZHANG Jian*, LIU ChengYu & YANG Tao

State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

Turbulent combustion is often accompanied by complex phenomena of flow and combustion. Combining with advanced combustion model, LES provides a powerful tool to simulate turbulent combustion. Based on flamelet model, with a progress variable introduced, the flamelet/progress variable approach is enabled to describe complex phenomena in turbulent combustion such as local extinction and re-ignition. Recently, in order to validate the LES based flamelet/progress variable (LES-FPV) approach, a series of numerical simulations were carried out. In the simulations of non-premixed flame, partially premixed flame, lifted flame and swirl flame, the approach showed good performance and was then used to simulate gas turbine combustor, and to predict some basic combustion phenomena. With continuous development, LES-FPV approach will play an increasingly important role in simulating turbulent combustion.

turbulent combustion, large-eddy simulation, flamelet model, progress variable approach

PACS: 47.70.-n, 47.27.te, 47.27.E-

doi: 10.1360/SSPMA2016-00410