

湍流燃烧二阶矩模型 DNS 检验研究进展的回顾

王方¹, 周力行²

(1. 北京航空航天大学能源与动力工程学院, 北京 100191; 2. 清华大学工程力学系, 北京 100084)

摘要: 现有的湍流燃烧模型中, 有的缺乏普适性, 也有的用于大涡模拟的计算量太大. 一种基于湍流流动模拟思路的统计矩方法被提出来, 称为二阶矩(second-order moment, SOM)燃烧模型, 用于非预混射流火焰和旋流火焰的雷诺平均模拟(Reynolds-averaged Navier-Stokes modeling, RANS)和大涡模拟(large-eddy simulation, LES), 以及钝体后方预混火焰的大涡模拟, 已经得到实验结果的良好检验. 进一步的研究是该模型的直接数值模拟(direct numerical simulation, DNS)检验. 本文对作者以及文献中报导的 SOM 模型 DNS 检验的研究进展进行了回顾.

关键词: 湍流燃烧; 二阶矩燃烧模型; 直接数值模拟检验

中图分类号: TK122

文献标志码: A

文章编号: 1006-8740(2024)06-0570-05

A Review of Advances in Validation of SOM Combustion Model by DNS

Wang Fang¹, Zhou Lixing²

(1. School of Energy and Power Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China;

2. Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: The existing turbulent combustion models either lack generality or are too computationally expensive for large-eddy simulation (LES). The paper proposed a statistical moment method based on the idea of turbulence modeling, called second-order moment (SOM) combustion model. It has been applied to both the Reynolds-averaged Navier-Stokes modeling (RANS modeling) and LES of non-premixed jet flame and swirling non-premixed flame and the LES of premixed bluff-body flame, and verified experimentally. Further studies should be conducted to validate the SOM model by direct numerical simulation (DNS). This paper gives a review of the advances in DNS validation of the SOM model proposed in this paper and that reported in literature.

Keywords: turbulent combustion; second-order moment combustion model; DNS validation

目前, 湍流燃烧的雷诺平均模拟(Reynolds-averaged Navier-Stokes simulation, RANS)和大涡模拟(large-eddy simulation, LES)使用了不同的燃烧模型. 商业软件中应用的简单模型, 如 EBU(EDM)和预设-PDF 模型, 常常不能很好地模拟有限反应动力

学. 通用的湍流燃烧模型, 如层流小火焰模型和条件矩模型只对一定的火焰类型和火焰结构的效果较好. PDF 方程模型虽然通用, 但计算量太大, 用于大涡模拟更是如此. 一种经济而合理的模型仍然有待研究. 本文作者们提出的二阶矩(second-order mo-

收稿日期: 2024-02-29.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51390493, 20232ACB204026, 12172345, 91741125).

作者简介: 王方(1972—), 女, 博士, 副教授, fwang@buaa.edu.cn.

通信作者: 周力行, 男, 博士, 教授, zhoulx@mail.tsinghua.edu.cn.

ment, SOM) 湍流燃烧模型^[1-2], 已经成功地用于非预混射流火焰和旋流火焰、钝体后方预混火焰, 以及液雾射流火焰的 RANS 模拟和 LES^[3-5], 得到了实验结果的良好检验. 为了进一步夯实该模型的理论基础, 本文作者以及文献中进行了不同火焰的直接数值模拟 (direct numerical simulation, DNS), 用于检验 SOM 模型. 本文回顾了 SOM 模型 DNS 检验的研究进展.

1 湍流燃烧二阶矩模型

湍流燃烧二阶矩模型, 是基于湍流流动模型思路的统计矩模型. 一个双组份二级反应 (统观反应或基元反应), 其时平均反应率可以表达为

$$\overline{w_s} = B\rho^2[(\overline{Y_1 Y_2} + \overline{Y_1' Y_2'})\overline{K} + \overline{Y_1 K' Y_2'} + \overline{Y_1' K Y_2}] \quad (1)$$

$$K = \exp(-E/RT)$$

$$\overline{K} = \int \exp(-E/RT)p(T)dT$$

式中: K 是反应率系数; \overline{K} 是 K 的时均值; $p(T)$ 是温度的概率密度分布函数. 各个二阶关联量用以下通用形式的输运方程封闭.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\overline{\phi'\phi'}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho v_j\overline{\phi'\phi'}) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_c}{\sigma_g} \frac{\partial \overline{\phi'\phi'}}{\partial x_j} \right) + \\ c_{g1}\mu_T \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \right) - c_{g2}\rho \left(\frac{a}{\tau_c} + \frac{b}{\tau_T} \right) \overline{\phi'\phi'} \end{aligned} \quad (2)$$

式中: ϕ 和 ϕ' 代表质量分数 Y_1 、 Y_2 或反应率系数 K . c_{g1} 和 c_{g2} 是经验常数. τ_c 和 τ_T 分别代表反应时间尺度和湍流时间尺度.

$$\tau_T = K/\varepsilon$$

$$\tau_c = \left[B\rho(\overline{Y_2} + \beta\overline{Y_1}) \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \right]^{-1} \quad (3)$$

方程(2)中的经验系数可以动态地确定为^[5]

$$\overline{\phi'\phi'} = (\overline{\phi\phi} - \overline{\phi}\overline{\phi}) = -C_{\phi\phi}\Delta^2 \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x_j} \frac{\partial \overline{\phi}}{\partial x_j}$$

$$C_{\phi\phi} = \frac{\langle LM \rangle}{\langle MM \rangle}$$

$$L = \widehat{\phi\phi} - \widehat{\phi}\widehat{\phi}$$

$$M = \Delta^2 \frac{\partial \widehat{\phi}}{\partial x_j} \frac{\partial \widehat{\phi}}{\partial x_j} - \Delta^2 \widehat{\frac{\partial \phi}{\partial x_j} \frac{\partial \phi}{\partial x_j}}$$

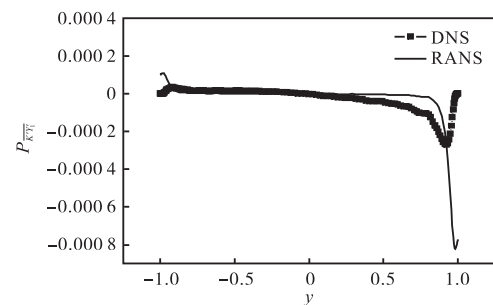
2 用 DNS 检验 SOM 燃烧模型

2.1 用湍流反应槽道流动 DNS 检验 SOM 燃烧模型

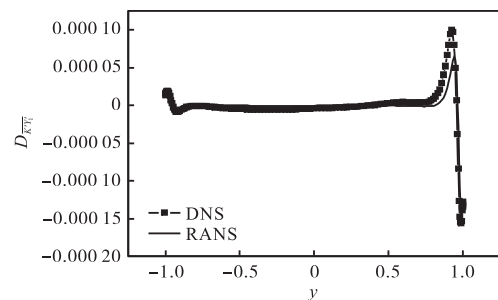
文献[6]用湍流等温反应槽道流动的 DNS 检验了 SOM 模型. 该流动半宽度定义的雷诺数为

3 000. 采用 Galerkin-Tau 谱展开方法, Fourier 和 Chebyshev 变换求解, 详见文献[7]. 图 1 给出 K - Y 关联矩方程各项的模拟值和 DNS 精确值. 图 1 中, P 代表产生项, D 代表扩散项, ε 代表耗散项, S 代表反应源项. 可见, 除近壁区之外, 大多数区域处产生项与扩散项的模拟值和精确值符合良好. 耗散项与反应项的模拟有待改进. 模拟值与精确值的差异, 一方面是由于近壁区层流底层的存在, 失去了充分发展湍流的特征, 另一方面是谱方法引起的数值误差.

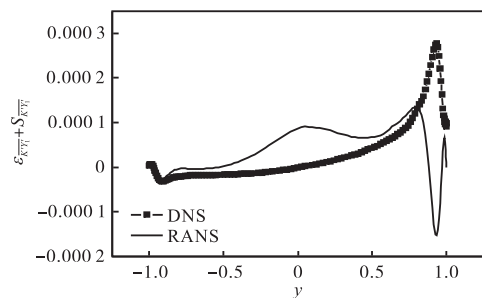
从图 2 看出, 代数二阶矩模型中 $\overline{K'Y_1'}$ 的模拟值和精确值符合很好, 图中 E 为活化能, R 为气体常数.



(a) $P_{K'Y_1'}$



(b) $D_{K'Y_1'}$



(c) $\varepsilon_{K'Y_1'} + S_{K'Y_1'}$

图 1 $\overline{K'Y_1'}$ 关联矩方程各项的精确值和模拟值

Fig.1 Exact and modeled values of terms in the K - Y equation

2.2 用均匀各向同性湍流庚烷燃烧 DNS 检验 SOM 燃烧模型

文献[8]进行了均匀各向同性湍流场中庚烷燃烧的 DNS. 用高阶紧致格式的差分法求解. 图 3 给出

$\overline{K'Y'}$ ($\overline{K'Y'}$ 表示 K 和 Y 的二阶关联矩) 的精确值和模拟值. 可见 SOM 的封闭模型很好.

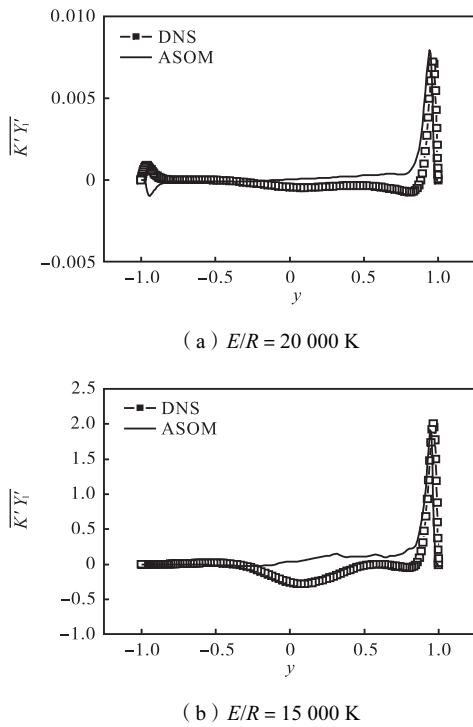


图2 代数二阶矩模型中的 $\overline{K'Y'}$ 的精确值和模拟值

Fig.2 Exact and modeled values of $\overline{K'Y'}$ for the algebraic SOM model

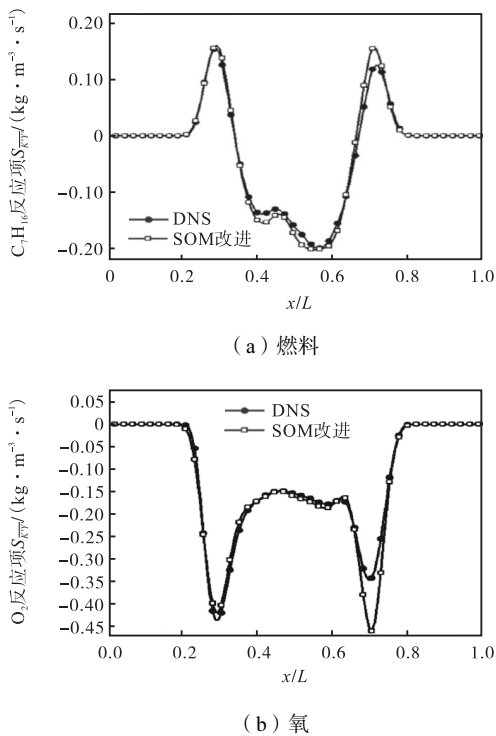


图3 $\overline{K'Y'}$ 方程中反应项的检验

Fig.3 Validation of the modified reaction term for $\overline{K'Y'}$ equation

2.3 用旋流液雾火焰 DNS 检验 SOM 燃烧模型

文献[9]用 SOM 燃烧模型对旋流庚烷液雾燃烧

进行了大涡模拟,并用 DNS 数据库检验了大涡模拟结果. 图4显示了 LES 预报的和 DNS 得到的时间平均和 RMS 脉动气体温度. 图中, D_{in} 为旋流燃烧室内旋流器的内径,为 3.75 mm, x 为轴向距离, r 为径向距离. 可见, DNS 数据库验证了 SOM 燃烧模型.

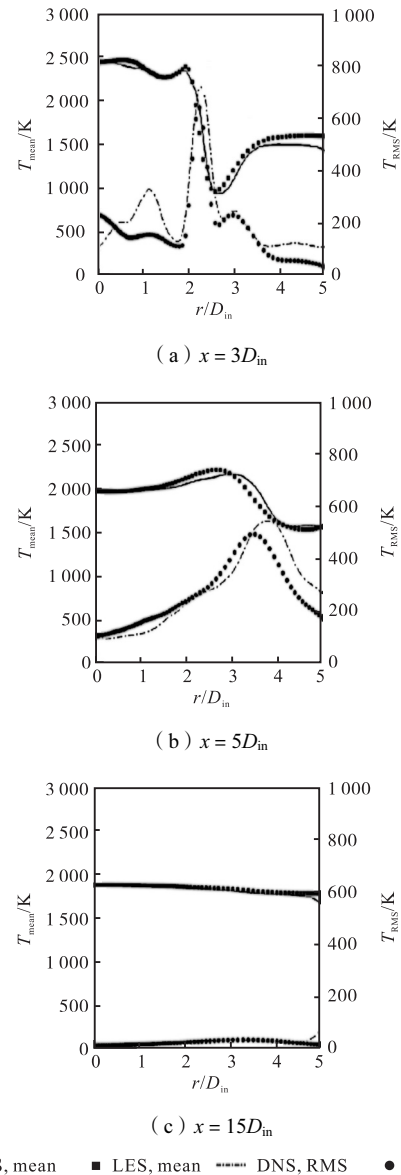


图4 庚烷液雾旋流火焰的时间平均和均方根脉动气体温度
Fig.4 Time-averaged and RMS gas temperature for a heptane swirling spray flame

2.4 用甲烷-空气射流火焰 DNS 检验 SOM 燃烧模型

文献[10]报导了甲烷-空气射流火焰的 DNS. 基于射流隙缝宽度的雷诺数为 11 200. 反应机理为 16 种组分和 72 个基元反应. 图5是不同模型和不同网格尺寸得到的时间平均温度和均方根温度脉动值的 DNS 精确值和模拟值, 图中, H 为射流缝宽度, 2.4 mm; y 代表展向距离. 图中 Ref 表示层流反应率

(laminar chemistry closure, LCC)的封闭模型,也就是忽略所有的关联量;FOM代表一阶矩封闭,也就是只计入反应率系数的时间平均值 $\bar{\kappa}$,忽略其他二阶关联量。 Δ_{DNS} 为DNS的网格尺度。可以看到,SOM模型显然优于FOM和LCC模拟值,尤其是在下游

处。SOM、FOM和LCC模型的误差分别是:在时间平均温度上为0.032、0.052和0.060;在均方根温度脉动值上为0.249、0.469和0.481。当然,这些模型的差别随着网格尺寸的减小而减小,最后都趋于DNS方法模拟值。

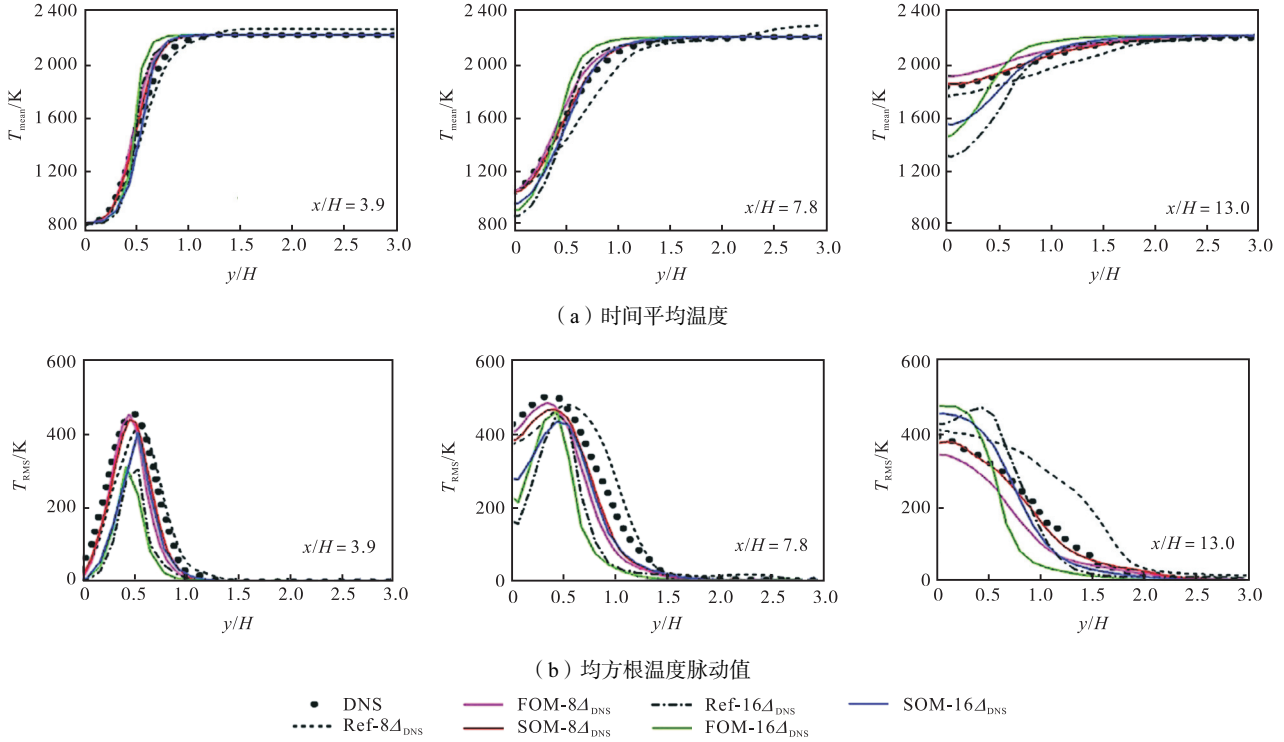


图5 时间平均温度和均方根温度脉动值

Fig.5 Time-averaged temperature and RMS temperature fluctuation

2.5 用氢射流火焰 DNS 检验 SOM 燃烧模型

文献[11]对超临界氢射流火焰进行了DNS。计算域尺寸为 $16H \times 11H \times 2H$ 。图6显示了不同模型和DNS得到的温度和 H_2O 质量分数的时间平均值和均

方根温度脉动值,其中DMC代表直接矩(direct moment closure)模型,是改进的SOM模型,计入了三阶矩关联量。DMC模型得到了DNS的验证,当然优于LCC模拟值。

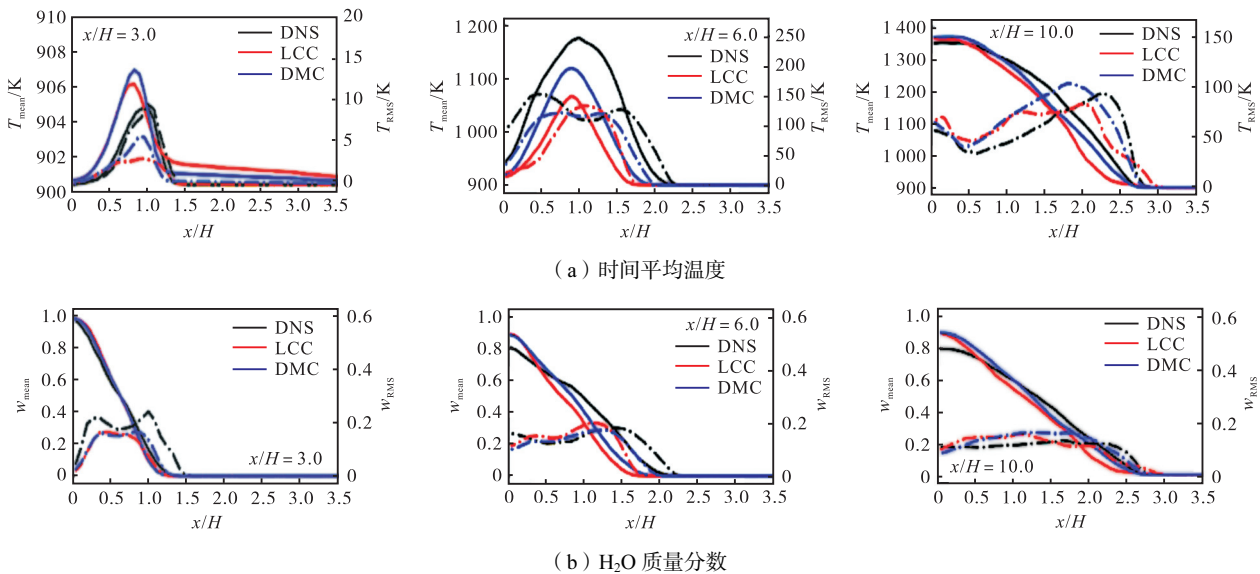


图6 DNS、LES-DMC和LES-LCC得到的时间平均温度和 H_2O 浓度(实线为时均值;虚线为脉动均方根值)

Fig.6 The time-averaged results from filtered DNS, LES-DMC, and LES-LCC for temperature and H_2O concentration (solid line: mean value, dash-dotted line: RMS value)

3 结 论

本文所综述的研究进展,包括等温反应槽道流动、各向同性均匀湍流庚烷燃烧、旋流庚烷燃烧、甲烷-空气射流燃烧以及氢射流燃烧的直接数值模拟,给出了不同类型火焰结构特征,湍流燃烧二阶矩模型在不同情况下精确值和模拟值的对比,以及和其他模型的对比.表明 SOM 模型的模拟结果和 DNS 精确结果符合得很好,说明 SOM 模型有可靠的理论基础.同时考虑到此模型的计算量接近于现有的简单模型,比现有的更复杂的模型计算量小得多.因此可以扩大其应用,例如用于炉内煤粉燃烧、内燃机、燃气轮机和火箭发动机中的液雾燃烧等,尤其是可以用于多步反应机理,有利于阐明污染物和稀有组分生成规律等研究.

参考文献:

- [1] Zhou L X, Qiao L, Chen X L, et al. A USM turbulence-chemistry model for simulating NO formation in turbulent combustion[J]. *Fuel*, 2002, 81(13): 1703-1709.
- [2] 王 方. 湍流反应二阶矩模型的 RANS 模拟、LES 和 DNS 研究[D]. 北京: 清华大学, 2006.
- Wang Fang. Studies on the Second Order Moment Turbulent Reaction Model by RANS、LES and DNS[D]. Beijing: Tsinghua University, 2006.
- [3] Zhou Lixing. Development of SOM combustion model for Reynolds-averaged and large-eddy simulation of turbulent combustion and its validation by DNS[J]. *Science in China*, 2008, 51(8): 1073-1086.
- [4] Zhou L X, Wang F, Hu L Y, et al. A review on studies of a SOM combustion model for single-and-two-phase combustion[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2016, 96: 154-163.
- [5] Luo K, Yang J S, Bai Y, et al. Large eddy simulation of turbulent combustion by a dynamic second-order moment closure model[J]. *Fuel*, 2017, 187: 457-467.
- [6] Wang F, Xu C X, Zhou L X, et al. DNS-LES validation of an algebraic second-order-moment combustion model[J]. *Numerical Heat Transfer*, 2009, 55: 523-532.
- [7] 许春晓. 槽道湍流的直接数值模拟[D]. 北京: 清华大学, 1995.
- Xu Chunxiao. Direct Numerical Simulation of Turbulent Channel Flows[D]. Beijing: Tsinghua University, 1995.
- [8] Luo K, Bai Y, Yang J S, et al. A-priori validation of a second-order moment combustion model via DNS database[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2015, 86: 415-425.
- [9] Zhou L X, Luo K. Studies on a swirling heptane spray flame by large-eddy simulation[J]. *Aerospace Science and Technology*, 2022, 126: 107632.
- [10] Luo K, Liu R Z, Bai Y, et al. A-priori and a-posteriori studies of a direct moment closure approach for turbulent combustion using DNS data of a premixed flame[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2021, 38(2): 3003-3011.
- [11] Liu R Z, Luo K, Song C C, et al. Large eddy simulation of a turbulent supercritical hydrothermal flame with a novel direct moment closure model [J]. *Fuel*, 2023, 332: 126037.