

基于 LES-FGM 方法的部分预混湍流 燃烧中间组分模拟*

张玮杰, 王金华, 胡光亚, 李德立, 王子淇, 黄佐华

(西安交通大学 能源与动力工程学院, 西安 710049)

摘要: 基于 FGM 建表燃烧模型对德国达姆施塔特工业大学的 MRB 部分预混湍流火焰开展大涡模拟, 并对比研究了预混和部分预混 FGM 建表方法对模拟的影响。结果表明, 不同建表方法对 MRB 火焰结构、速度分布和主要组分分布等影响较小, 但部分预混建表能显著提升中间组分 CO 和 H₂ 的模拟可靠性。其根本原因是部分预混建表使用了对冲火焰模型, 能够充分引入燃空混合过程对中间组分的影响。通过添加额外的组分输运方程可提升预混火焰建表对中间组分模拟的可靠性, 且前人提出的拉伸作用在该火焰中影响较小。该研究为基于建表方法的部分预混湍流燃烧准确模拟提供了重要参考。

关键词: 湍流燃烧; 部分预混; LES-FGM; 燃烧中间组分; 燃空混合

中图分类号: O357 **文献标志码:** A **DOI:** 10.21656/1000-0887.440068

Modelling Intermediate Species in Partially Premixed Turbulent Combustion Based on the LES-FGM Method

ZHANG Weijie, WANG Jinhua, HU Guangya,

LI Deli, WANG Ziqi, HUANG Zuohua

(School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, P.R.China)

Abstract: The LES of partially premixed turbulent flame MRB in TU Darmstadt was conducted based on the flamelet-tabulated combustion model FGM, and effects of premixed and partially premixed tabulations on the modelling results were studied. The results show that, different methods of tabulation exhibit limited influences on the predictions of the flame structure, velocity, and major species, but using a partially premixed tabulation largely improves the reliability of modelling intermediate minor species CO and H₂. The underlying reason lies in a better inclusion of the fuel-air mixing effects through the partially premixed tabulation, which is built based on laminar counter-flow flames. Adding extra transport equations for the intermediate species improves the predictions of intermediate species, especially given a premixed tabulation adopted; meanwhile, the stretch effects in this turbulent flame are ignorable. The results are significant to guide the high-fidelity simulation of partially premixed turbulent flames based on the flamelet-tabulated combustion model.

Key words: turbulent combustion; partially premixed; LES-FGM; combustion intermediate species; fuel-air mixing

* 收稿日期: 2023-03-16; 修订日期: 2023-05-04

基金项目: 国家自然科学基金项目(52206169)

作者简介: 张玮杰(1991—),男,助理教授,博士(通讯作者. E-mail: wjzhang@xjtu.edu.cn).

引用格式: 张玮杰, 王金华, 胡光亚, 李德立, 王子淇, 黄佐华. 基于 LES-FGM 方法的部分预混湍流燃烧中间组分模拟[J]. 应用数学和力学, 2023, 44(9): 1031-1041.

0 引言

湍流燃烧是燃气轮机、航空发动机、内燃机和工业燃烧炉中最广泛的能源转化方式,燃烧室是其能量转化的核心部件.在实际燃烧室中,燃料和空气混合往往极度不均,使得除典型的预混、扩散燃烧之外,部分预混燃烧普遍存在^[1-3].悉尼大学 Masri 教授定义部分预混 (partially premixed) 为“包含可燃和不可燃状态的燃空不均匀混合”,表明部分预混燃烧本身的复杂性^[1].数值仿真是降低设计成本和实现燃机预测设计的重要手段,而高效可靠的燃机燃烧室仿真必须首先解决部分预混燃烧的快速、准确模拟问题.实际上,有限速率化学反应 (finite-rate chemistry, FRC) 燃烧模型因求解多组分、多步化学反应,对部分燃烧组分模拟可靠性较高,但即使采用化学反应机理简化,有限速率模型依然存在着计算速度慢、成本高、求解系统刚性等致命缺陷,在工业实际中难以应用^[4-5].相比之下,建表燃烧模型如 FGM (flamelet-generated manifold)^[4,6]、FPI (flamelet prolongation of ILDM)^[7] 和 FPV (flamelet/progress variable)^[8] 等基于层流火焰面对燃烧化学反应体系进行降维处理,以若干控制变量 (如混合分数、焓和进展变量) 方程代替大量组分方程,同时在计算中避免了有限速率化学反应的求解,因而大幅降低了计算成本,显示出独特的工业应用优势.

部分预混燃烧在建表模拟存在问题主要是,燃料和空气混合程度是介于纯预混 (premixed) 和纯扩散 (non-premixed) 之间,但建表燃烧模型一般基于单模态的预混或扩散火焰面来构建.在传统建表燃烧模型中,对于预混燃烧以预混层流火焰面建表,对于非预混燃烧以扩散火焰面建表,而对于部分预混燃烧,只能根据燃空混合程度采用预混或扩散火焰建表来近似模拟.Masri^[1] 和 Lipatnikov^[2] 近期在部分预混燃烧综述研究中指出,燃烧模型中引入燃空部分预混特性十分关键.Wen 等^[9] 研究表明,对于部分预混燃烧,单独采用预混火焰建表不能很好捕捉燃空混合作用,单独采用扩散火焰建表则不能准确模拟火焰传播特性.基于此,前人将预混和扩散火焰建表相结合来开发部分预混燃烧模型,如基于局部燃烧模态识别因子的自适应双模态模型^[10-11],基于部分预混火焰建表的 PPFT (partially premixed flamelet tabulation) 模型^[9] 和基于 Pareto 分析的 PEC (Pareto-efficient combustion) 模型^[12-13] 等.

对于相对简单的当量比分层火焰或复杂的部分预混湍流火焰,前人研究表明,不管采用何种建表模型和建表方式,火焰结构、流场和温度场等均能被较好地模拟^[14-17].对于实验室常用的甲烷 (CH_4) 湍流火焰来说,其燃料、氧化剂和主要产物如 CH_4 、 O_2 、 CO_2 和 H_2O 等也能得到可靠预测,但多个研究表明燃烧中间产物模拟可靠性严重不足,特别是排放物 CO .如近期 Proch 等^[14]、Nambully 等^[15]、Donini 等^[16]、Popp 等^[18] 和 Zhang 等^[17] 均观察到 CO 或 H_2 两种中间组分模拟严重失真.对于 CO ,其误差被解释为 CO 慢氧化作用无法被建表方法捕捉^[16], CO 过氧化作用提前转化为 CO_2 ^[15],或模拟中采用了不真实的绝热壁面导致^[14,19].此外,湍流拉伸作用对中间组分 CO 模拟的影响也被揭示^[20].不同的是,Zhang 等^[17] 揭示了分层火焰中差异扩散作用模拟不准会导致局部当量比模拟误差,而当量比误差进而又间接导致了 CO 和 H_2 误差的现象.这表明,准确模拟燃空混合过程对中间组分可靠预测也十分关键,然而针对典型的部分预混火焰,系统性揭示这一关键影响因素亟待开展.

本文主要基于德国达姆施塔特工业大学的 MRB (multi-regime burner) 部分预混标准火焰,结合 FGM 建表方法和大涡模拟 (large-eddy simulation, LES) 开展部分预混湍流燃烧中间组分模拟研究.该 MRB 部分预混湍流火焰近期由 Butz 等^[21-22] 开展了流场、温度场和多组分场定量测量,对燃烧模型验证优化研究提供了极大支持.本研究主要对比预混火焰和部分预混火焰建表两种方法,探究两种方法模拟的差异性,揭示燃空混合过程对中间组分模拟的关键影响作用.

1 MRB 部分预混湍流火焰简介

该 MRB 燃烧器采用多通道燃空入口来实现部分预混燃烧,如图 1 所示.图 1(a) 为燃烧器头部结构图及各个通道主要尺寸,它主要由中心喷管 jet、环形通道 slot 1 和 slot 2 组成,同时两个环形通道之间有与水平面呈 26° 的斜壁面,有助于形成回流区进而稳定火焰.实验在常温常压的开放空间进行,燃烧器周围供给流速为

$1.0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的伴随流空气,反应物为 $\text{CH}_4/\text{空气}$ 混合气,该燃烧器头部采用 $80 \text{ }^\circ\text{C}$ 温水循环进行过热保护.部分预混燃烧主要在中心喷管附近形成,主要方法为在中心喷管通入高当量比 $\phi_0 = 2.6$ (不可燃) 的 $\text{CH}_4/\text{空气}$ 预混气,在 slot 1 中通入纯空气 ($\phi_1 = 0$),两者在下游混合、燃烧,从而形成区别于典型扩散火焰或预混火焰的部分预混燃烧模式.同时,在 slot 2 中通入当量比 $\phi_2 = 0.8$ 的 $\text{CH}_4/\text{空气}$ 预混气,该预混气处于可燃范围,主要用于稳定整个火焰.通入 jet、slot 1 和 slot 2 的混合气或空气平均速度分别为 $105 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, $15 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 和 $20 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$.实际上,该工况的 MRB 火焰被标识为 MRB26b,同时本文也针对另一工况 MRB18b 进行了模拟,其区别仅仅是将中心喷管当量比改为 $\phi_0 = 1.8$.针对 MRB26b 和 MRB18b 火焰,如前所述,Butz 等已开展了速度场、温度场和多种组分场的定量测量,其中组分场包括燃料 CH_4 、氧化剂 O_2 、主要产物 CO_2 和 H_2O 及燃烧中间组分 CO 和 H_2 .

图 1(b) 为燃烧器头部壁面边界和湍流入口速度云图,其中 U_x 为轴向速度.与文献[18]一致,因为 Reynolds 数相对较大,湍流入口主要应用于中心喷管 jet ($Re = 18\ 380$) 和环形通道 slot 2 ($Re = 23\ 960$),而环形通道 slot 1 由于 Reynolds 数较低只需给定充分发展的层流管道流即可.与 slot 1 的层流充分发展管道流类似,中心喷管 jet 和 slot 2 的湍流入口也采用充分发展管道计算形成,入口湍流先存储然后在 LES 计算中读取.

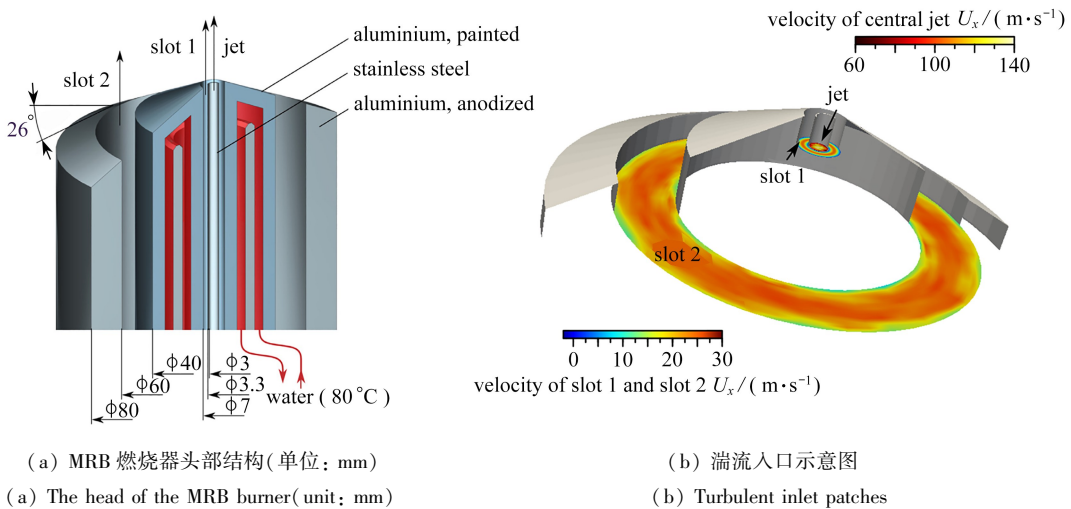


图 1 MRB 燃烧器示意图及其湍流入口设置

Fig. 1 Schematic of the MRB burner and its turbulent inlets

注 为了解释图中的颜色,读者可以参考本文的电子网页版本,后同。

2 LES-FGM 方法介绍

2.1 建表过程

对于图 1 的 MRB 火焰,所关注的部分预混湍流燃烧基本处于下游,与燃烧器头部壁面有一定距离,因此壁面热损失可以忽略,从而简化建表和计算过程.针对该火焰重点需要关注燃空混合及湍流燃烧,因此描述燃空混合过程的混合分数 (mixture fraction, Z) 和描述化学反应的进展变量 (progress variable, y) 必须引入作为控制变量,其中混合分数基于单原子 j ($\text{C}/\text{H}/\text{O}$) 的质量分数 Y_j 定义:

$$Z = \frac{0.5M_{\text{H}}^{-1}(Y_{\text{H}} - Y_{\text{H},2}) + 2M_{\text{C}}^{-1}(Y_{\text{C}} - Y_{\text{C},2}) - M_{\text{O}}^{-1}(Y_{\text{O}} - Y_{\text{O},2})}{0.5M_{\text{H}}^{-1}(Y_{\text{H},1} - Y_{\text{H},2}) + 2M_{\text{C}}^{-1}(Y_{\text{C},1} - Y_{\text{C},2}) - M_{\text{O}}^{-1}(Y_{\text{O},1} - Y_{\text{O},2})} \quad (1)$$

式中 M 为 Molar 质量,下标 1 和 2 分别表示纯燃料和纯氧化剂.进展变量基于 CO_2 和 H_2O 质量分数定义:

$$y = Y_{\text{CO}_2} + Y_{\text{H}_2\text{O}} \quad (2)$$

基于混合分数和进展变量构建 FGM 表格需得到一系列层流火焰面.本文层流火焰面基于 Chem1D 求解,并采用 GRI 3.0 机理,该机理包含 53 个组分和 325 个基元反应.层流火焰求解初始温度为 300 K ,压力为 0.1 MPa ,并假设所有组分 Lewis 数为 1.0,从而忽略组分差异扩散的影响.实际上,由于采用了 CH_4 燃料 (其 Lewis 数约为 1.0),差异扩散作用对 MRB 火焰模拟影响甚微.

建表方法采用两种不同方式,即基于单模态自由传播预混层流火焰面建表(标识为FP,即 free-propagating)和基于对冲火焰模型的部分预混火焰面建表(标识为CF,即 counter-flow).对于前者,为了模拟燃空混合过程中 Z 的变化,在 $\phi = 0.4$ (层流火焰熄火极限)到 $\phi_0 = 2.6$ (同时覆盖MRB26b和MRB18b的最高当量比)范围内,以步长为 $\Delta\phi = 0.02$ 计算大量预混层流火焰面.图2(a)给出了基于这些预混层流火焰面构建的二维FGM表格,单个火焰面在化学反应表格中的控制变量分布如图中虚线所示.由进展变量源项分布可见,化学反应主要发生在 $Z = 0.055$ (即当量比燃烧 $\phi \approx 1.0$)附近.注意,为了模拟slot 1通入的纯空气,需要将表格 $\phi = 0.4$ 插值到 $\phi_1 = 0$ 处.

图2(b)所示为基于对冲部分预混火焰面构建的FGM表格,其构建需要计算不同拉伸率下的对冲层流火焰面,且须同时纳入稳态拉伸火焰面和近熄火的非稳态拉伸火焰面,具体构建方法见文献[23-24].图中实线为 η 的最大值,虚线为火焰面中的 $Z-\eta$ 分布.本文为了与MRB中部分预混燃烧组织方式对应,将对冲火焰一侧设置为纯空气条件,另一侧设置为 $\phi_0 = 2.6$ 的 $\text{CH}_4/\text{空气}$ 预混气,从而实现基于部分预混层流火焰面的建表.如图2(b)所示,此时单个火焰面分布方式与图2(a)完全不同,其火焰面内部混合分数 Z 并非定值.与FP表格相比,CF表格中不仅具有部分预混特性,也加入了拉伸作用.

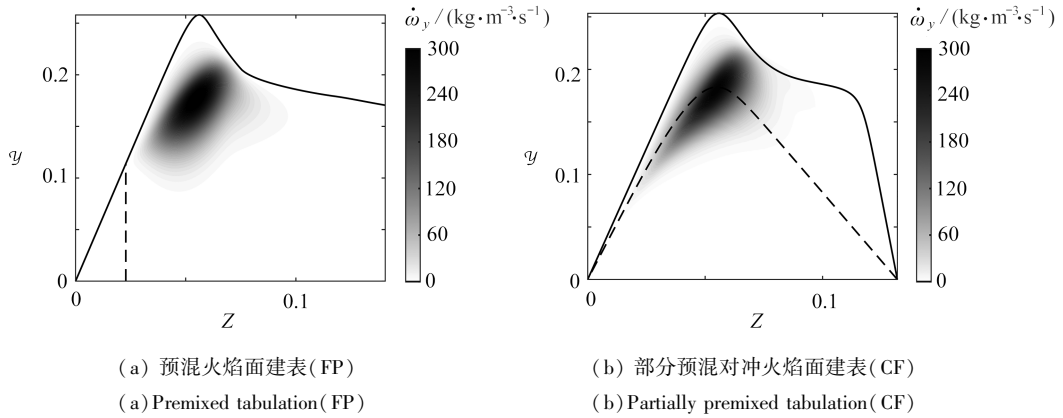


图2 不同建表方法的 η 源项云图和火焰面分布示意

Fig. 2 The source term of η and distribution of flamelets based on different methods of tabulation

2.2 控制方程

本文采用LES-FGM方法的主要方程为质量、动量守恒方程及控制变量方程.LES滤波的质量、动量守恒方程如下所示:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}) = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\mathbf{u}}) = -\nabla p + \nabla \cdot \left\{ (\mu + \mu_{\text{sgs}}) \left[\nabla \tilde{\mathbf{u}} + (\nabla \tilde{\mathbf{u}})^T - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}) \mathbf{I} \right] \right\}, \quad (4)$$

其中LES亚格子黏性系数 μ_{sgs} 采用动态Smagorinsky模型计算.

FGM控制变量方程为

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Z}) - \nabla \cdot \left\{ \left[\frac{\lambda}{c_p} + \frac{\mu_{\text{sgs}}}{Sc_t} \right] \nabla \tilde{Z} \right\} = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\eta}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{\eta}) - \nabla \cdot \left\{ \left[\frac{\lambda}{c_p} + \frac{\mu_{\text{sgs}}}{Sc_t} \right] \nabla \tilde{\eta} \right\} = \bar{\omega}_{\eta}, \quad (6)$$

式中 Sc_t 为亚格子湍流Schmidt数,可假设为一常数0.7^[16], ρ 为密度, λ 为导热系数, c_p 为定压比热容.上式中右侧源项仅对描述化学反应的进展变量方程非零,对守恒标量 Z 为零.对于进展变量,式(6)中的化学反应源项可根据控制变量定义得出^[4],即 $\bar{\omega}_{\eta} = \bar{\omega}_{\text{CO}_2} + \bar{\omega}_{\text{H}_2\text{O}}$.FGM的各项热物理参数在LES求解中也会被局部耗散和平均,需要用相应亚格子模型模拟.预设概率密度分布(PDF)的亚格子模型被广泛采用,特别是 β -PDF模型^[4,16];然而,其缺点是需要增加FGM库表维度,从而加大了对计算内存资源的占用.相比之下,Floyd

等^[25]提出的 top-hat 模型,因不需额外增加维度更具有优势.为了降低计算成本,本文对混合分数采用 β -PDF,对进展变量采用 top-hat 分布模型,并假设两控制变量相互独立.预设 PDF 中所需要的亚格子波动基于局部平衡假设(local equilibrium assumption)估计^[16,26].

2.3 计算设置

图 1 的计算模型采用六面体网格划分,总网格数量约为 268 万,计算域及网格示意图如图 3 所示.为提升模拟可靠性,根据火焰厚度、火焰位置预估进行局部网格加密,核心区域网格最大尺寸约为 0.7 mm,与当量比 CH_4 预混火焰厚度(约 0.5 mm)相当;同时,网格可靠性也可由实验结果进行充分验证.湍流火焰模拟基于开源的 OpenFOAM 平台,并采用自主开发的 LES-FGM 求解器开展.方程离散采用 OpenFOAM 内置二阶格式,压力-速度循环采用 PISO 方法.计算过程中 Courant 数固定为 0.4,首先获得冷态流场计算结果和混合分数结果,然后点火进行热态湍流火焰计算,并持续运行 20 个对流时间以保证火焰达到稳定状态,最后再计算 20 个对流时间并做平均,从而获得基于 LES 方法的平均场与实验进行对比验证.如前所述,本文针对 MRB18b 和 MRB26b 两个火焰,分别采用 FP、CF 两种表格(见图 2)进行计算,因此共完成 4 个算例,单算例完成时间约为 73 h.

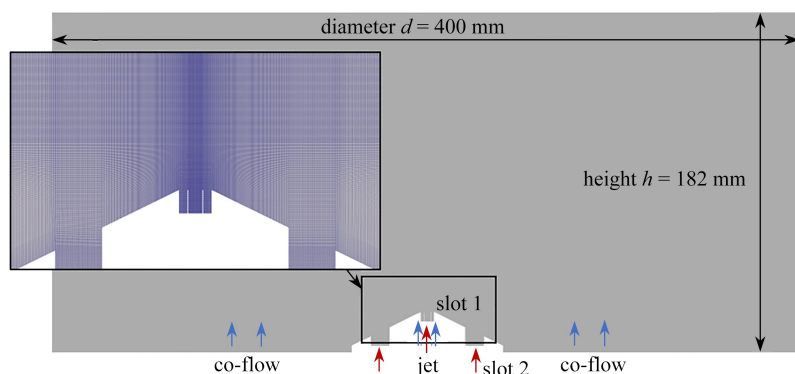


图 3 计算域和网格

Fig. 3 The computation domain and mesh

3 结果与讨论

3.1 速度、温度和主要组分模拟结果

基于 MRB26b 获得的控制变量分布,如图 4 所示,其中化学反应(热释放率)区域用进展变量源项为 $20 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ 的等值线标识出(实线).图 4(a)的混合分数分布给出了局部燃料空气混合情况,图 4(b)进展变量分布代表着未燃和已燃区域,同时进展变量大小也代表着局部温度的高低.从该图可以看出,MRB 火焰结构较为复杂,从 slot 2 供入的预混燃料燃烧形成外围的预混反应区,而内部反应区形成于部分预混燃烧.内部反应区在中心喷管上方有所抬升,这是因为从中心喷管 jet 供入的高当量比燃料需要与环形通道 slot 1 的空气进一步混合才能充分燃烧.从图 4(b)可以看出,内外反应区之间形成高温气体驻留,有助于稳定整个火焰.

模拟结果与实验结果可以进一步定量对比,图 5 为 MRB 火焰在中心喷管上方不同高度处的轴向速度、温度和主要组分验证结果.图中浅灰色实线标识出了中心喷管 jet 和环形通道 slot 1 和 slot 2 的相对位置,图中对应轴向高度 $x = 15 \text{ mm}$, 30 mm , 60 mm 均在图 4 中标识出,注意 $x = 0$ 和径向坐标 $r = 0$ 定义在中心喷管出口圆心处.图中 $\langle \rangle$ 符号代表对 LES 中各项变量进行时间平均, U_x 为轴向速度, T 为温度.

由图 5 可明显看出,LES 与实验测量的速度、温度和组分(燃料 CH_4 、氧化剂 O_2 及主要产物 CO_2 和 H_2O) 均非常准确,两者几乎重合.注意 MRB 火焰中心喷管出口速度达到了 $105 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$,虽然该 MRB 火焰实验测量相关工作并未直接给出湍流强度大小或其湍流火焰理论分区图中的位置^[21-22],但与其他高速射流火焰类似,在相似的出口管径和出口速度(或 Reynolds 数)下会形成强湍流^[27-29].理论上,强湍流可大幅度褶皱、破碎火焰面(如图 4 中反应区所示),因此基于一维稳态层流火焰面建表的方法受到挑战.然而,从图 5 的模拟结果可以看出,在高强度湍流下建表燃烧模型依然具有适用性.与 Chen 等^[29]结果类似,虽然强湍流带来湍

流拉伸作用,但采用无拉伸的FP自由传播层流火焰面建表,其模拟结果与CF表格十分接近,而后者通过对冲火焰模型引入了拉伸作用.实际上,建表模型中涉及燃烧化学反应求解的大量组分方程,都降维到了若干个控制变量方程.这表明,湍流拉伸造成的火焰面褶皱、破碎甚至局部熄火等过程对速度、温度和组分分布的影响,可以在一定程度上被控制变量输运求解捕捉到.

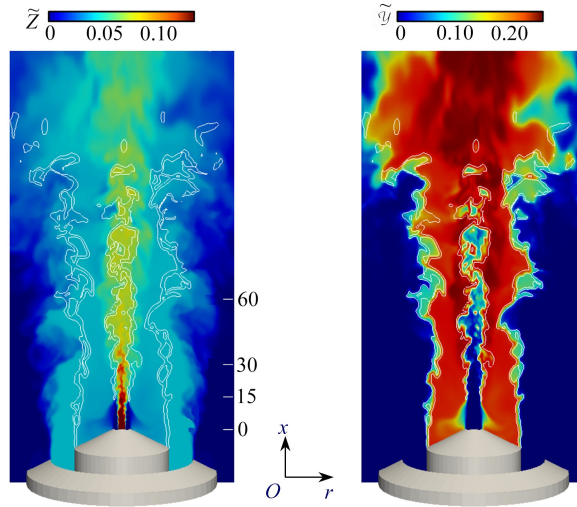
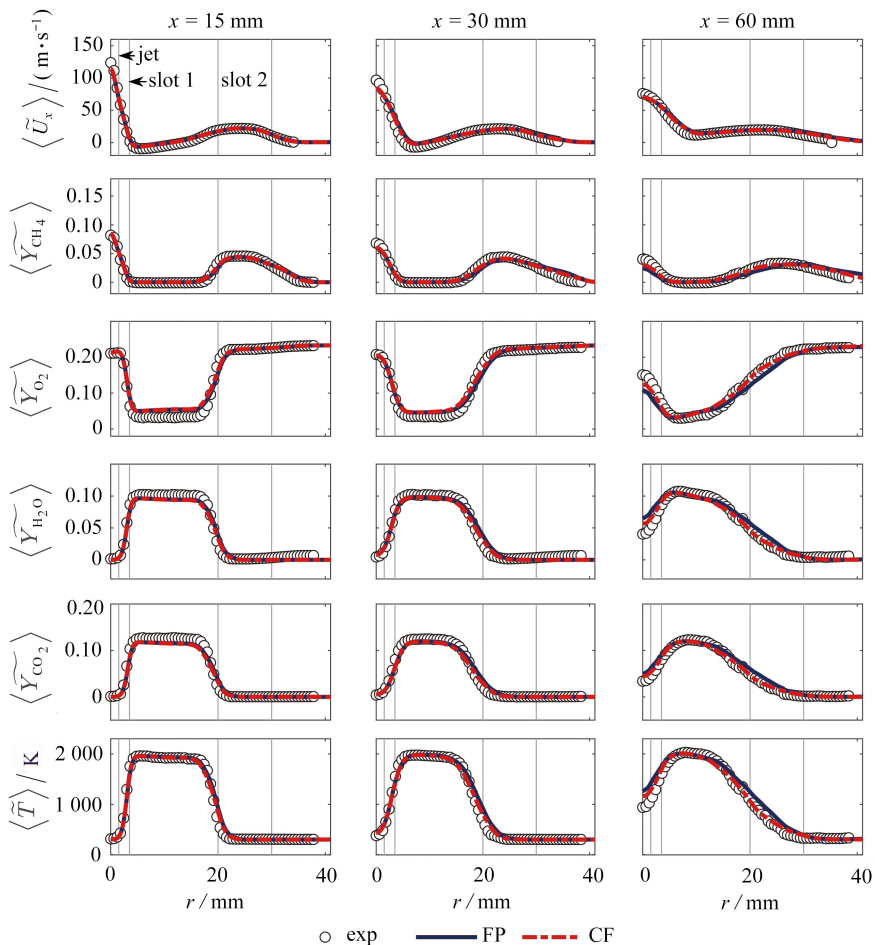


图4 MRB26b 模拟结果的控制变量分布

Fig. 4 Simulated control variable distributions of MRB26b



(a) MRB18b

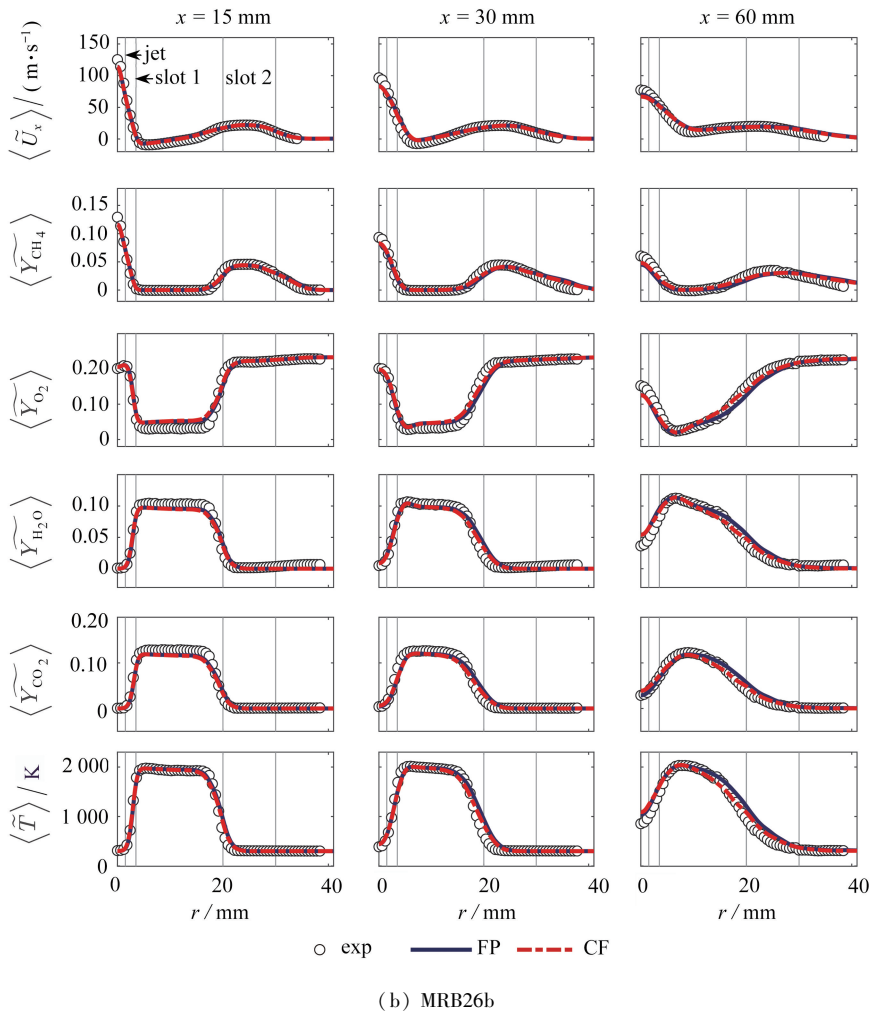


图 5 速度、温度和主要组分 LES 与实验结果对比

Fig. 5 Comparisons of LES and experiment results in terms of velocity, temperature and major species

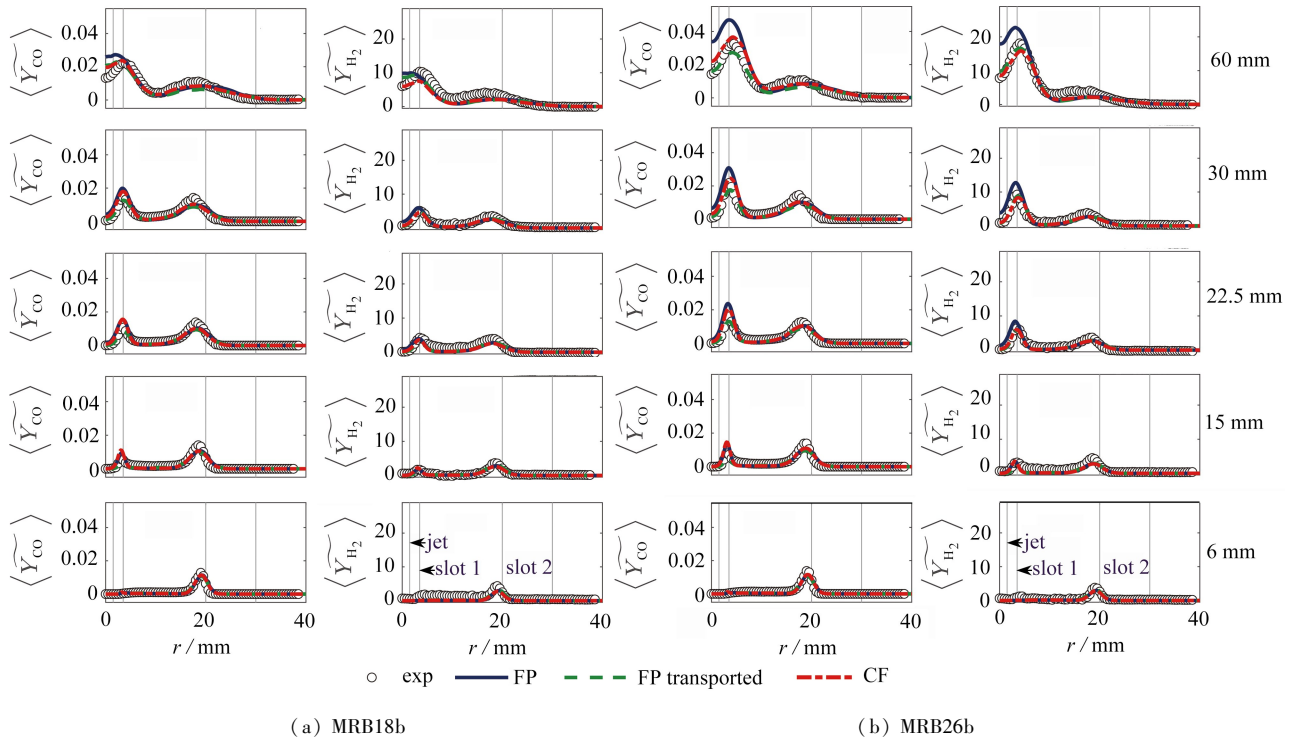
从图 5 可以清晰看出,基于两种建表方法 FP、CF 的 LES 结果几乎无差别,说明在对冲火焰面中引入燃空混合过程也对速度、温度和主要组分影响甚微.综合前述内容,可见 FGM 中基于不同当量比预混火焰面构建的 FP 表格,不仅仅可一定程度模拟强湍流拉伸作用和火焰褶皱、破碎过程,也可以一定程度捕捉到燃料分层和部分预混燃烧特性.

3.2 中间组分模拟结果

MRB CH_4 燃烧中间组分 CO 和 H_2 的模拟结果与实验对比如图 6 所示.首先,不论对于 MRB18b 还是 MRB26b, slot 2 形成的外围预混火焰中,两种组分模拟结果都较为可靠.但是,内部由 jet 和 slot 1 形成的部分预混燃烧中,CO 和 H_2 结果差别较为明显.特别是在 MRB26b 下游,基于 FP 表格计算的结果明显高于 CF 表格,而基于 CF 表格的计算结果与实验结果更为吻合.这说明利用对冲火焰建表引入燃空混合过程对中间组分模拟十分关键.注意:中间组分偏差主要出现在中下游,这主要是因为 jet 中心射流的高当量比混合物在上游刚开始与 slot 1 中的空气进行混合,燃烧当量比高,燃烧强度弱;在中下游部分,混合进一步加强,燃烧强度提高,中间组分生成较为明显,而在燃料分层影响下,中间组分偏差也更明显.

实际上, Han 等^[20]也观察到了拉伸作用对中间组分模拟的影响,并认为在高强度湍流下对建表引入拉伸作用十分关键.然而,从图 5 和图 6 可以看出,不仅仅对于速度、温度和主要组分,中间组分受拉伸作用影响也较小.一方面,特别是在 slot 2 形成的预混火焰中,基于 FP 和 CF 表格得到的 CO 和 H_2 结果几乎相同,拉伸作用影响不显著.不过,这也可能是因为该 MRB 火焰中 slot 2 流速、Reynolds 数相对较低,湍流强度相对较弱.另一方面,通过对比图 6 中 MRB18b 和 MRB26b 结果可知,MRB18b 中降低了中心喷管当量比,部分预混

燃烧特性得到弱化,随即基于 FP 和 CF 表格的中间组分计算结果也更加接近.因此,对于该 MRB 火焰的部分预混燃烧,燃空混合过程对中间组分模拟影响应该起着主导作用,该过程甚至可能掩盖了湍流拉伸对模拟结果的影响.



(a) MRB18b

(b) MRB26b

图6 中间组分 CO 和 H₂ LES 与实验结果对比Fig. 6 Comparisons of LES and experiment results in terms of intermediate species CO and H₂

一部分研究认为相对于由进展变量描述的燃烧化学反应时间尺度,CO 具有慢氧化特性,因此可在建表模型中对此类组分添加单独的输运方程从而提高模拟可靠性^[16-17].本文也对 CO 和 H₂ 分别添加额外的输运方程,此处以 CO 质量分数方程示例:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_{\text{CO}}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{Y}_{\text{CO}}) - \nabla \cdot \left\{ \left[\left(\frac{\lambda}{c_p} \right) + \frac{\mu_{\text{sgs}}}{Sc_t} \right] \nabla \tilde{Y}_{\text{CO}} \right\} = \bar{\omega}_{\text{CO}}^{\text{P}} + \left(\frac{\bar{\omega}_{\text{CO}}^{\text{C}}}{Y_{\text{CO}}^{\text{tab}}} \right) \tilde{Y}_{\text{CO}}, \quad (7)$$

其中 CO 源项基于其纯生成量 $\bar{\omega}_{\text{CO}}^{\text{P}}$ 、纯消耗量 $\bar{\omega}_{\text{CO}}^{\text{C}}$ 、表格预存 CO 质量分数 $Y_{\text{CO}}^{\text{tab}}$ 和输运质量分数 \tilde{Y}_{CO} 进行动态自适应计算.式(7)中间组分源项的线性化处理,主要是因为建表时是根据层流火焰面中局部 CO 或 H₂ 浓度(或质量分数)计算了它们的源项大小,但实际上局部湍流会影响其在 LES 模拟时的真正浓度,而根据化学反应原理,组分源项所代表的组分生成、消耗都是和组分浓度高度相关的,因此有必要在 LES 计算中根据实际 LES 局部组分浓度对其查表所得源项进行修正,从而获得可靠得输运求解结果.式(7)中的线性修正方法常被采用,见文献[17,30-31].基于额外输运方程计算结果如图6中虚线所示,可见 CO 模拟结果此时得到了提升,与实验结果更加吻合.特别是, H₂ 模拟结果也同时得到了优化,但氢反应活性高慢氧化作用本身不明显,这说明添加额外的中间组分输运方程不一定仅仅解决部分组分慢氧化作用,也可以弥补 FP 表格中相对于 CF 所缺失的燃空混合过程影响.

图7进一步给出了 MRB26b 的中间组分 CO 和 H₂ 质量分数的控制变量条件分布,该结果通过在一个对流时间取 20 个瞬时计算结果进行统计获得.与图6趋势相同,图7中基于 FP 表格的 CO 和 H₂ 模拟结果明显高于 CF,特别是在高当量比条件下(对应较高的 Z).同时,通过添加额外的输运方程,基于 FP 表格的中间组分质量分数降低并且与 CF 表格结果更接近.

以上结果表明,对于中间组分模拟需要重点注意建表方法,特别是对于 MRB 部分预混火焰,通过对冲部分预混火焰引入燃空混合过程的影响十分必要.

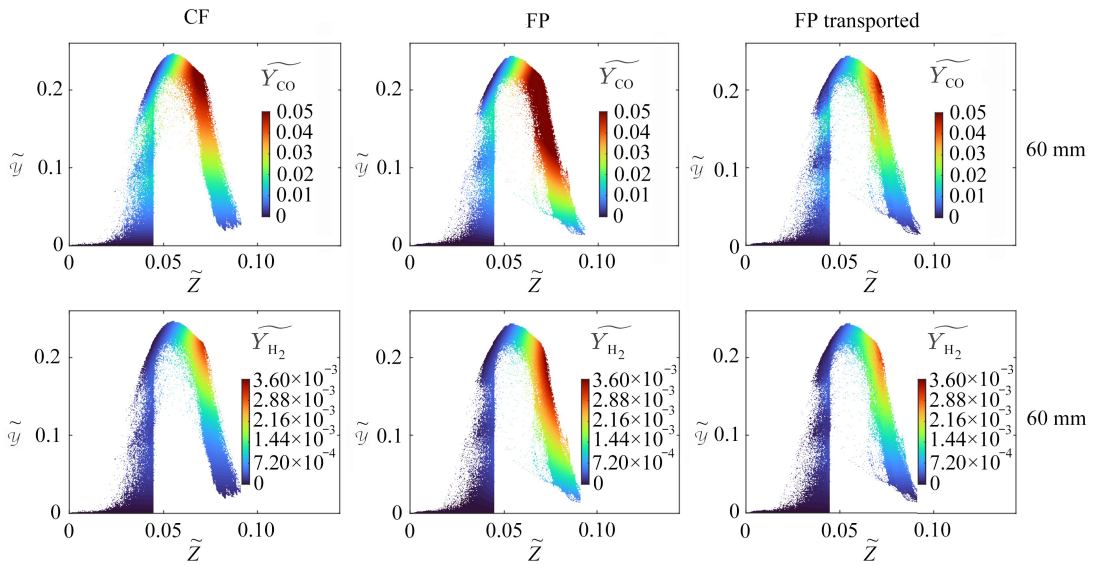


图 7 中间组分 CO 和 H₂ 质量分数的控制变量条件分布

Fig. 7 Control variable conditioned mass fraction distributions of intermediate species CO and H₂

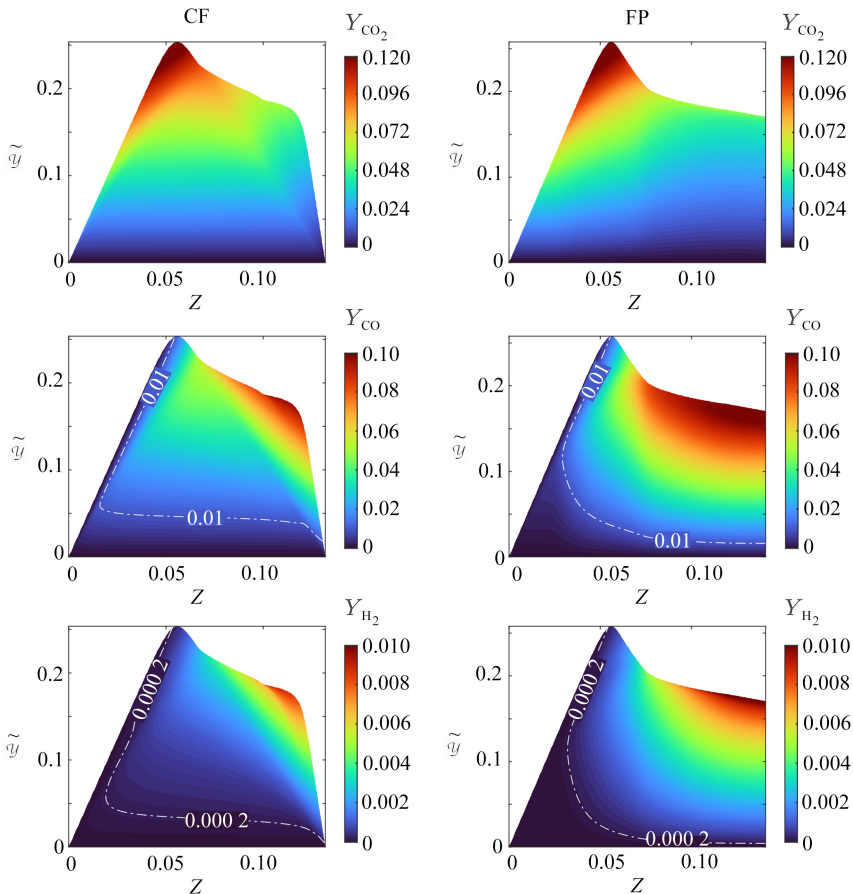


图 8 FP 和 CF 表格中 CO₂、CO 和 H₂ 质量分数分布

Fig. 8 Mass fraction distributions of CO₂, CO and H₂ in FP and CF tabulations

图 8 给出了不同表格中的燃烧中间组分 CO 和 H₂ 分布和作为主要燃烧产物之一的 CO₂ 分布,其中点画线代表质量分数等值线.可见 FP 与 CF 表格对中间组分的模拟差别十分明显,特别是在高当量比下,FP 表格中 CO 和 H₂ 组分明显偏高,这与图 7 中的 LES 统计结果十分吻合.图 8 中的组分质量分数等值线表明,相比

于 FP 表格,基于对冲部分预混燃烧建立的 CF 表格由于引入了燃空混合过程,高当量比处的 CO 可以向低当量比方向扩散。相比之下,两个表格的 CO₂分布更为接近,而即使存在部分误差,在 LES 计算中其差别足以忽略,如图 5 所示。

4 结 论

本文研究了不同建表方法对 MRB 部分预混湍流火焰 LES-FGM 模拟的影响作用,特别是对燃烧中间组分 CO 和 H₂的影响规律。本文主要采用了两种建表方法,即 FP 表格和 CF 表格。研究表明,对于 LES 的速度场、温度场及燃料 CH₄、氧化剂 O₂和主要燃烧产物 CO₂、H₂O 的质量分数分布,不同建表方法带来的影响可以忽略,而对于中间组分 CO 和 H₂模拟,采用 CF 表格十分关键,采用 FP 表格则会高估其质量分数。分析发现,主要原因是相比于 FP 表格,CF 表格中引入了更准确的燃空混合过程,其对中间组分分布影响较大。在使用 FP 表格时,对中间组分添加额外的组分输运方程有助于提高其模拟可靠性。也观察到拉伸作用对本文模拟对象影响甚微,可能原因是一方面湍流强度相对较弱,另一方面该 MRB 部分预混燃烧的燃空混合过程影响较大,掩盖了拉伸作用。

致谢 本文作者衷心感谢荷兰埃因霍芬理工大学 Van Oijen Jeroen 教授在 FGM 模型方面的支持,同时特别感谢北京航空航天大学宇航学院韩旺教授对本文 MRB 火焰实验数据的支持。

参考文献(References):

- [1] MASRI A R. Partial premixing and stratification in turbulent flames[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2015, **35**(2): 1115-1136.
- [2] LIPATNIKOV A N. Stratified turbulent flames: recent advances in understanding the influence of mixture inhomogeneities on premixed combustion and modeling challenges[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2017, **62**: 87-132.
- [3] 李文栋, 张文普. 预混燃烧边界层回火的数理模型及研究进展[J]. *应用数学和力学*, 2023, **44**(1): 36-51. (LI Wendong, ZHANG Wenpu. The mathematical model and research progress of the boundary layer flashback in premixed combustion[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2023, **44**(1): 36-51. (in Chinese))
- [4] VAN OIJEN J A, DONINI A, BASTIAANS R J M, et al. State-of-the-art in premixed combustion modeling using flamelet generated manifolds[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2016, **57**: 30-74.
- [5] 俞森彬, 刘潇, 周波. 掺氢比对高 Ka 数射流预混湍流火焰的影响[J]. *燃烧科学与技术*, 2021, **27**(1): 52-59. (YU Senbin, LIU Xiao, ZHOU Bo. Effects of hydrogen blending ratio on turbulent premixed pilot jet flame at high Karlovitz number[J]. *Journal of Combustion Science and Technology*, 2021, **27**(1): 52-59. (in Chinese))
- [6] VAN OIJEN J A, DE GOEY L P H. Modelling of premixed counterflow flames using the flamelet-generated manifold method[J]. *Combustion Theory and Modelling*, 2002, **6**(3): 463-478.
- [7] GICQUEL O, DARABIHA N, THÉVENIN D. Liminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2000, **28**(2): 1901-1908.
- [8] PIERCE C D, MOIN P. Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2004, **504**: 73-97.
- [9] WEN X, BAI X-S, LUO K, et al. A generalized flamelet tabulation method for partially premixed combustion[J]. *Combustion and Flame*, 2018, **198**: 54-68.
- [10] KNUDSEN E, SHASHANK, PITSCH H. Modeling partially premixed combustion behavior in multiphase LES[J]. *Combustion and Flame*, 2015, **162**(1): 159-180.
- [11] WEN X, LUO Y, LUO K, et al. LES of pulverized coal combustion with a multi-regime flamelet model[J]. *Fuel*, 2017, **188**: 661-671.
- [12] WU H, SEE Y C, WANG Q, et al. A Pareto-efficient combustion framework with submodel assignment for predicting complex flame configurations[J]. *Combustion and Flame*, 2015, **162**(11): 4208-4230.

- [13] WU H, MA P C, JARAVEL T, et al. Pareto-efficient combustion modeling for improved CO-emission prediction in LES of a piloted turbulent dimethyl ether jet flame[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2019, **37**(2): 2267-2276.
- [14] PROCH F, KEMPF A M. Numerical analysis of the Cambridge stratified flame series using artificial thickened flame LES with tabulated premixed flame chemistry[J]. *Combustion and Flame*, 2014, **161**(10): 2627-2646.
- [15] NAMBULLY S, DOMINGO P, MOUREAU V, et al. A filtered-laminar-flame PDF sub-grid scale closure for LES of premixed turbulent flames, part I: formalism and application to a bluff-body burner with differential diffusion[J]. *Combustion and Flame*, 2014, **161**(7): 1756-1774.
- [16] DONINI A, RJ M B, VAN OIJEN J A, et al. A 5-D implementation of FGM for the large eddy simulation of a stratified swirled flame with heat loss in a gas turbine combustor[J]. *Flow, Turbulence and Combustion*, 2017, **98**(3): 887-922.
- [17] ZHANG W, KARACA S, WANG J, et al. Large eddy simulation of the Cambridge/Sandia stratified flame with flamelet-generated manifolds: effects of non-unity lewis numbers and stretch[J]. *Combustion and Flame*, 2021, **227**: 106-119.
- [18] POPP S, HARTL S, BUTZ D, et al. Assessing multi-regime combustion in a novel burner configuration with large eddy simulations using tabulated chemistry[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2021, **38**(2): 2551-2558.
- [19] TURKERI H, ZHAO X, POPE S B, et al. Large eddy simulation/probability density function simulations of the Cambridge turbulent stratified flame series[J]. *Combustion and Flame*, 2019, **199**: 24-45.
- [20] HAN W, WANG H, KUENNE G, et al. Large eddy simulation/dynamic thickened flame modeling of a high Karlovitz number turbulent premixed jet flame[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2019, **37**(2): 2555-2563.
- [21] BUTZ D, HARTL S, POPP S, et al. Local flame structure analysis in turbulent CH₄/air flames with multi-regime characteristics[J]. *Combustion and Flame*, 2019, **210**: 426-438.
- [22] BUTZ D, BREICHER A, BARLOW R S, et al. Turbulent multi-regime methane-air flames analysed by Raman/Rayleigh spectroscopy and conditional velocity field measurements[J]. *Combustion and Flame*, 2022, **243**: 111941.
- [23] DELHAYE S, SOMERS L M T, VAN OIJEN J A, et al. Incorporating unsteady flow-effects in flamelet-generated manifolds[J]. *Combustion and Flame*, 2008, **155**(1/2): 133-144.
- [24] MA L, HUANG X, ROEKAERTS D. Large eddy simulation of CO₂ diluted oxy-fuel spray flames[J]. *Fuel*, 2017, **201**: 165-175.
- [25] FLOYD J, KEMPF A M, KRONENBURG A, et al. A simple model for the filtered density function for passive scalar combustion LES[J]. *Combustion Theory and Modelling*, 2009, **13**(4): 559-588.
- [26] VENTOSA-MOLINA J, LEHMKUHL O, PÉREZ-SEGARRA C D, et al. Large eddy simulation of aturbulent diffusion flame: some aspects of subgrid modelling consistency[J]. *Flow, Turbulence and Combustion*, 2017, **99**(1): 209-238.
- [27] ZHOU B, BRACKMANN C, LI Z, et al. Simultaneous multi-species and temperature visualization of premixed flames in the distributed reaction zone regime[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2015, **35**(2): 1409-1416.
- [28] WANG H, HAWKES E R, SAVARD B, et al. Direct numerical simulation of a high *Ka* CH₄/air stratified premixed jet flame[J]. *Combustion and Flame*, 2018, **193**: 229-245.
- [29] CHEN Z X, LANGELLA I, BARLOW R S, et al. Prediction of local extinctions in piloted jet flames with inhomogeneous inlets using unstrained flamelets[J]. *Combustion and Flame*, 2020, **212**: 415-432.
- [30] EFIMOV D V, DE GOEY P, VAN OIJEN J A. FGM with REDx: chemically reactive dimensionality extension [J]. *Combustion Theory and Modelling*, 2018, **22**(6): 1103-1133.
- [31] KETELHEUN A, OLBRIGHT C, HAHN F, et al. NO prediction in turbulent flames using LES/FGM with additional transport equations[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011, **33**(2): 2975-2982.