



单位代码 10006

学 号 16041122

分 类 号 V231.2

北京航空航天大學

B E I H A N G U N I V E R S I T Y

毕业设计(论文)

基于 LES-TPDF 方法
化学反应机理对湍流燃烧影响研究

院（系）名称 能源与动力工程学院

专业名称 飞行器动力工程

学生姓名 王煜栋

指导教师 王方

2020 年 5 月

北京航空航天大学

本科生毕业设计(论文)任务书

I、毕业设计（论文）题目：

基于 LES-TPDF 方法化学反应机理对湍流燃烧影响研究

II、毕业设计（论文）使用的原始资料（数据）及设计技术要求：

(1) 原始资料包含：课题组自研 AECSC-Jasmin 两相湍流燃烧软件；射流火焰算例、支板算例实验数据及旧版本 AECSC 2.0 模拟数据；凹腔支板火焰稳定器设计参数、真实主燃烧室三维模型；真实主燃烧室一亿网格冷态流场数据。

(2) 技术要求：对结合 Jasmin 并行框架后的 AECSC 程序进行化学反应机理修改和验证，并计算和研究真实燃烧室及加力燃烧室支板模型两相湍流燃烧及熄火。

III、毕业设计（论文）工作内容：

(1) 源文件层面上解析 AECSC-Jasmin 软件，提出针对该软件的煤油反应机理修改方案，修改并编译形成两种煤油反应机理软件版本。

(2) 模拟射流火焰算例验证软件在湍流燃烧模拟方面的准确性。

(3) 对加力燃烧室的支板火焰稳定器模型分别采用 RP3 煤油燃料的四步简化机理和准稳态机理进行两相湍流燃烧模拟，并与计算得到的稳定燃烧温度场将实验值对比。

(4) 对 (3) 中的支板算例采用两种机理进行贫油近熄火状态燃烧计算和研究。

(5) 选取煤油四步简化机理计算结构复杂的真实燃烧室两相湍流燃烧。

IV、主要参考资料:

(1) 王方, 窦力, 金捷. 化学机理对钝体预混火焰熄火模拟影响[C]. 中国工程热物理学会燃烧学分会, 2019.10.

(2) 王方, 窦力, 魏观溢, 刘邓欢, 金捷. 基于 PDF-LES 模型的凹腔支板火焰稳定器模拟[J]. 工程热物理学报, 2019

(3) Lutz A. E., Kee R. J., Grcar J. F., et al. OPPDIF: A FORTRAN Program for Computing Opposed Flow Diffusion Flames[R]. Sandia Report, No.SAND 96-8243, Sandia National Lab, 1996.

能源与动力工程 学院(系) 飞行器动力工程(吴大观英才班)专业类
160441 班学生 王煜栋

毕业设计(论文)时间: 2019 年 12 月 23 日至 2020 年 6 月 8 日

答辩时间: 2020 年 6 月 8 日

成 绩: 优秀

指导教师: 王方

兼职教师或答疑教师(并指出所负责部分):

_____系(教研室)主任(签字): _____

注: 任务书应该附在已完成的毕业设计(论文)的首页

本人声明

我声明，本论文及其研究工作是由本人在导师指导下独立完成的，在完成论文时所利用的一切资料均已在参考文献中列出。

作者：王煜栋

签字：王煜栋

时间：2020 年 5 月



基于 LES-TPDF 方法

化学反应机理对湍流燃烧影响研究

学 生：王煜栋

指导老师：王方

摘要

燃烧室数值模拟是航空发动机数值模拟中难度最大、费时最多的关键问题。本文围绕燃烧室高精度数值模拟的技术瓶颈与行业需求，基于新版自研软件 AECSC-Jasmin，修改化学反应机理，形成不同机理版本，并在此基础上进行两相湍流燃烧模拟。

在软件修改部分中，本文分析并总结出 AECSC-Jasmin 软件各子文件功能，并与旧版软件对比。基于对子文件的解析，本文提出针对 AECSC-Jasmin 软件的化学反应机理修改方法，并依此修改了煤油反应机理，形成采用烷烃四步机理与准稳态 118 步机理两种煤油反应机理的软件版本。

本文采用以上软件对 Sandia 射流火焰进行模拟，与实验结果及 AECSC 2.0 模拟结果多工况、多截面的时均温度、温度脉动对比，证明了本软件模拟湍流燃烧的准确性。

本文改进了凹腔支板火焰稳定器的喷雾设置，并分别采用四步机理、准稳态机理模拟该算例稳定燃烧状态，将出口温度场与前人模拟结果以及实验结果对比。对四步机理模拟结果的误差分析证明喷雾参数改进的有效性和正确性。之后，分析凹腔支板火焰稳定器流场，并指出了凹腔支板结构稳焰原理。对两种机理模拟结果的对比表明准稳态机理对温度峰值的模拟更为准确，而四步机理对出口温度变化趋势模拟与实验值更贴近。之后，本文分析了模拟结果中间产物浓度、释热率分布。提出四步机理反应步骤少，释热快，易形成与实验相悖的脱体火焰，指出应综合考虑反应区及放热率分布，调整化学机理简化方法。本文还采用两机理模拟了支板算例贫油燃烧状态，分析其温度、浓度、释热率分布变化。

最后，本文选用烷烃四步机理版本的 AECSC-Jasmin 软件模拟了某真实燃烧室两相



湍流燃烧。首先，分析冷态流场和网格分辨率，确定了合适的网格密度。在此基础上进行喷雾模拟及电火花点火，模拟了点火至稳定燃烧工况，并从温度场和释热率分布角度分析了点火过程高温区变化规律。本文还对单头部燃烧室进行升高和降低油气比的模拟，并分别分析高温变化规律。

本文首次提出并实施对 AECSC-Jasmin 软件的化学反应机理修改方案，为软件的进一步发展提供了思路。在支板算例中，本文基于反应机理分析了温度、反应区及释热率分布，讨论了化学反应机理对数值模拟湍流燃烧的影响，也为机理的简化选择提供了参考。本文所模拟的单头部燃烧室算例表明本软件在复杂结构的两相湍流燃烧模拟中应用价值高，为燃烧室数值模拟问题提供了解决方案。

关键词：燃烧室，大涡模拟，输运概率密度函数，化学反应机理



Research on the Influence of Chemical Reaction Mechanism

on Turbulent Combustion Based on LES-TPDF Method

Author: Wang Yudong

Tutor: Wang Fang

Abstract

Combustion chamber numerical simulation is the most difficult and time-consuming key issue in aeroengine numerical simulation. In this paper, based on the technical bottleneck of the high-precision numerical simulation of the combustion chamber and the industry needs, based on the new version of the self-developed software AECSC-Jasmin, the chemical reaction mechanism is modified to form different mechanism versions, and two-phase turbulent combustion simulation is carried out on this basis.

In the software modification section, this article analyzes and summarizes the functions of each sub-file of the AECSC-Jasmin software, and compares it with the old software. Based on the analysis of the sub-files, this paper proposes a modification method for the chemical reaction mechanism of the AECSC-Jasmin software, and accordingly modifies the kerosene reaction mechanism, forming a software that uses two kerosene reaction mechanisms of alkane four-step mechanism and quasi-steady state 118-step mechanism version.

In this paper, the above software is used to simulate Sandia jet flame. Compared with the experimental results and AECSC 2.0 simulation results, the time-average temperature and temperature fluctuation of multiple working conditions and multiple sections are verified.

In this paper, the spray setting of the flame stabilizer of the cavity support plate is improved, and the four-step mechanism and the quasi-steady state mechanism are used to simulate the steady combustion state of this example. The exit temperature field is compared with the previous simulation results and experimental results. The error analysis of the four-step mechanism simulation results proves the effectiveness and correctness of the improvement of



spray parameters. After that, the flow field of the flame stabilizer of the cavity support plate is analyzed, and the principle of flame stabilization of the cavity support plate structure is pointed out. The comparison of the simulation results of the two mechanisms shows that the quasi-steady-state mechanism simulates the temperature peak more accurately, while the four-step mechanism simulates the temperature change trend of the outlet closer to the experimental value. After that, this paper analyzes the simulation results of intermediate product concentration and heat release rate distribution. It is proposed that the four-step mechanism has few reaction steps and fast heat release, and it is easy to form an off-body flame contrary to the experiment. It is pointed out that the reaction zone and the heat release rate distribution should be considered comprehensively, and the simplified method of the chemical mechanism should be adjusted. This paper also uses two mechanisms to simulate the lean oil combustion state of the branch plate calculation example, and analyzes the temperature, concentration, and heat release rate distribution changes.

Finally, the AECSC-Jasmin software, a four-step mechanism version of alkanes, is selected in this paper to simulate two-phase turbulent combustion in a real combustion chamber. First, the cold flow field and grid resolution are analyzed to determine the appropriate grid density. On this basis, spray simulation and electric spark ignition were carried out to simulate the conditions of ignition to stable combustion, and the change law of the high temperature region of the ignition process was analyzed from the perspective of temperature field and heat release rate distribution. This paper also simulates the increase and decrease of the oil-gas ratio of the single-head combustion chamber, and analyzes the high-temperature change law separately.

This article first proposes and implements a chemical reaction mechanism modification scheme for the AECSC-Jasmin software, which provides ideas for the further development of the software. In the support plate calculation example, this paper analyzes the temperature, reaction zone and heat release rate distribution based on the reaction mechanism, discusses the effect of the chemical reaction mechanism on the numerical simulation of turbulent combustion, and also provides a reference for the simplification and selection of the mechanism. The example of a single-headed combustion chamber simulated in this paper shows that the software has high application value in the two-phase turbulent combustion simulation of complex



structures, and provides a solution to the numerical simulation of the combustion chamber.

Key words: combustor, large eddy simulation, transport probability distribution function, chemical reaction mechanism



目 录

1 绪论	1
1.1 选题背景及意义	1
1.2 RP3 煤油替代组分及简化机理研究	2
1.3 航空发动机燃烧室数值模拟进展	3
1.4 熄火数值模拟进展	4
1.5 本文研究内容	5
2 软件简介	6
2.1 软件组成	6
2.2 串行部分算法介绍	7
2.2.1 Smagorinsky-Lilly 亚网格模型	9
2.2.2 湍流燃烧模型	10
2.2.3 反应速率求解	11
2.3 燃烧室网格生成与计算方法	12
2.3.1 结构网格自动生成	12
2.3.2 浸没边界法	13
2.3 软件修改所涉及反应机理	13
2.3.1 四步机理	13
2.3.2 准稳态机理	14
3 软件分析及修改	15
3.1 AECSC-Jasmin 软件结构	15
3.2 软件子文件介绍	16
3.3 化学反应机理修改方法	21
3.4 修改前后源代码对比	22
4 程序检验	25
4.1 算例介绍	25
4.2 温度场对比验证	27
4.3 温度脉动对比验证	29
4.4 本章结论	30
5 凹腔支板火焰稳定器模拟	32
5.1 算例简介	32
5.2 稳定燃烧工况	36
5.2.1 参数修改验证	37
5.2.2 支板稳焰原理分析	39
5.2.3 不同机理模拟温度场对比	41
5.2.4 烷烃四步机理模拟浓度场分析	44
5.2.5 烷烃四步机理化学反应与释热率分析	49
5.2.6 准稳态机理化学反应与释热率分析	50
5.3 贫油燃烧工况	54
5.3.1 烷烃四步机理支板算例贫油状态模拟	54
5.3.2 准稳态机理支板算例贫油状态模拟	60



5.4 本章小结.....	63
6 真实主燃烧室模拟.....	65
6.1 算例简介.....	65
6.2 冷态流动模拟.....	68
6.2.1 网格无关性分析.....	68
6.2.2 单头部燃烧室算例速度场.....	70
6.3 点火模拟.....	73
6.4 高油气比工况.....	78
6.5 低油气比工况.....	80
6.6 本章小结.....	82
结论与展望	84
参考文献	87
毕设期间取得的学术成果	91
致谢	92



第一章 绪论

1.1 选题背景及意义

燃烧室数值模拟是发动机数值模拟过程中难度最大、费时最多的瓶颈问题。燃烧稳定性计算目的为求得熄火边界并保障燃烧室安全及稳定工作，对于避免出现空中熄火等重大事故极其重要，是燃烧室数值模拟的重要目的之一。真实航空发动机燃烧室结构极为复杂且化学反应及湍流流动相耦合，对网格的质量以及分辨率，湍流流场计算和化学反应计算精确性提出极高的要求。

航空发动机的空中熄火易在降低工况时出现，降低工况时通过减少燃油流量减少涡轮功，从而引起转速的降低和空气流量的降低。由于航空发动机转子转动惯量较大，空气流量的变化将略滞后于燃油流量的变化。当燃油流量降低过快时，会造成贫油熄火，从而造成安全问题或事故。主燃烧室和加力燃烧室结构复杂且工作于高温高压的环境中，其空中熄火的熄火边界难以通过实验直接测定，因此需要通过高精度数值模拟确定燃烧室熄火边界。

RP3 航空煤油广泛应用于各型号航空发动机燃烧室中，对于 RP3 燃料的化学反应研究应用是航空发动机燃烧室湍流燃烧计算的基础，也是燃烧室结构优化及性能预测的关键。构建和简化 RP-3 航空煤油反应机理是航空煤油实际应用于高性能数值模拟的必要条件。近年来，许多研究人员提出过 RP-3 替代组分模型并构建了其高温燃烧反应机理，本文通过对比烷烃四步通用机理和用正十烷 (74.24%)、1,3,5-三甲基环己烷 (14.11%)、正丙基苯 (11.65%) 作为替代组分的 35 个物种、118 步反应机理（下文简称为准稳态机理），探究煤油燃烧机理对于航空发动机真实燃烧室两相湍流燃烧仿真的影响。

真实航空燃烧室结构复杂，存在大量小尺度气流通道，对高质量、高分辨率网格的快速构建要求高。本文详述在开发应用于真实航空发动机大规模并行仿真的软件算法及算例验证，对于复杂结构中湍流燃烧高精度仿真计算以及 AECSC 软件的发展具有指导意义。

本文围绕航空发动机燃烧室高精度数值模拟的重大行业需求，依托我国优势超算平台，开发及验证针对于航空发动机燃烧室的大规模并行湍流燃烧数值模拟软件。并在该软件的基础上开展 RP3 燃料简化化学反应机理对于加力燃烧室简化模型（支板火焰稳定器）以及真实主燃烧室模型中湍流燃烧模拟影响的研究，以及不同机理对于 RP3 燃料



燃烧稳定性计算的可靠性研究。对于指导航空发动机主燃烧室和加力燃烧室设计及实际燃烧室的变工况应用意义重大。

1.2 RP3 煤油替代组分及简化机理研究

RP3 煤油是航空发动机燃烧室普遍采用的燃料。RP3 燃料的组成非常复杂，难以直接对混合物中的所有组分进行化学反应机理研究，因此需要通过提出燃烧场与 RP3 相近的替代燃料，并对研究替代燃料的机理，从而间接对 RP3 的燃烧场进行模拟。描述航空煤油 RP3 替代燃料的详细化学反应机理通常包含上百种组分和上千步基元反应，将如此多的组分和反应过程在三维流场中存储或计算对计算能力要求过高，就目前超级计算机计算能力而言是不现实的，因此需要大幅度简化 RP3 替代燃料的化学反应机理，从而大幅度削减燃烧数值模拟的计算量。

21 世纪初，国外大量学者开展了对其替代组分以及燃烧过程简化化学动力学模型的研究。Vovelle C 等^[1]提出采用以正癸烷为主要组分的双组分 RP-3 煤油替代燃料。Kundu K P 等^[2]采用 $C_{12}H_{23}$ 替代航空煤油，并提出含有 16 组分和 23 步基元反应的简化化学反应机理。Wang T S^[3] 在 $C_{12}H_{23}$ 单组分替代燃料的基础上提出含有 11 种组分及 17 步基元反应的简化机理。在之后的研究中，三至四种组分的航空煤油替代燃料被广泛采用。如 Dagaut P 等^[4]采用 74% 的正癸烷、11% 的 1, 3, 5-三甲基环己烷、15% 的正丙基苯三种组分作为 Jet-A-1 航空煤油的替代燃料，并提出 209 种组分和 1673 步反应的燃烧机理。Montgomery C J 等^[5]采用 32.6% 正十烷、34.7% 正十二烷、16.7% 甲基环己烷、16% 丁基苯四种组分作为 JP-8 航空煤油的替代燃料，并提出 164 种组分和 1162 步反应的化学动力学模型。

近年来，国内学者也对航空煤油替代组分研究及其化学动力学模型简化做出了重大贡献。肖保国等^[6]采用 71% 正癸烷、13% 三甲基环己烷和 16% 乙基苯替代航空煤油，并提出 109 种组分及 946 步化学反应机理。于维铭^[7]采用摩尔比为 40% 正癸烷、42% 正十二烷、13% 乙基环己烷、5% 对二甲苯四种组分替代 RP3 燃料，并提出 168 种组分、1089 步反应的详细化学动力学模型。陈登炳等^[8]对 73% 正十二烷、14.7% 1, 3, 5-三甲基环己烷、12.3% 正丙基苯三组分 RP3 替代燃料化学动力学模型进行验证和简化，构建 59 组分，158 步基元反应的简化机理。徐佳琪等^[9]采用 73% 正十二烷、14.7% 的 1, 3, 5-三甲基环己烷、12.3% 的正丙基苯的 RP3 航空煤油的替代燃料，并提出了 138 种组分，530 步基元反应的简化化学动力学模型。总结以上中外学者对航空煤油替代组分的研究如表 1。



表 1. 航空煤油替代组分研究总结

研究学者	型号	替代组分
Vovelle C 等 ^[1]	RP-3	正癸烷
Kundu K P 等 ^[2]		$C_{12}H_{23}$
Westbrook 等 ^[36]		$C_{12}H_{23}$
Dagaut P 等 ^[4]	Jet-A-1	74%正癸烷、11%1, 3, 5-三甲基环己烷、15%正丙基苯
Dagaut P 等 ^[34]	Jet-A-1	19. 6%正癸烷、79. 9%异辛烷、0. 5%正丙基苯
Montgomery C J 等 ^[5]	JP-8	32. 6%正十烷、34. 7%正十二烷、16. 7%甲基环己烷、16%丁基苯
Voili 等 ^[37,38]	JP-8	38. 44%正十二烷、24. 91%甲苯、14. 24%异十六烷、31. 88%十氢萘
Brezinsky 等 ^[39]	Jet-A	40. 4%正十二烷、28. 7%异辛烷、23. 5%正丙基苯、7. 4%1, 3, 5-三甲基苯
Peters 等 ^[40]	Jet-A	80%正癸烷、20%1, 2, 4-三甲基苯
Dean 等 ^[41]	Jet A-1	18. 2%苯、9. 1%正己烷、72. 7%正癸烷
肖保国 等 ^[6]		71%正癸烷、13%三甲基环己烷、16%乙基苯
于维铭 ^[7]	RP-3	40%正癸烷、42%正十二烷、13%乙基环己烷、5%对二甲苯
徐佳琪 等 ^[9]	RP-3	73%正十二烷、14. 7%1, 3, 5-三甲基环己烷、12. 3%正丙基苯
李象远 等 ^[9]	RP-3	66%正十二烷、18%1, 3, 5-三甲基环己烷、6%正丙基苯
钟北京 等 ^[42]	RP-3	40%正癸烷、42%正十二烷、13%对二甲苯、5%乙基环己烷

1.3 航空发动机燃烧室数值模拟进展

燃烧室是航空发动机中实现能量转换，影响整机性能的核心部件。燃烧室设计的具有难度大，耗时长，风险高的特点，依赖大量实验验证及数值模拟。具有先进发动机制造技术的国家在燃烧室数值模拟软件的开发中都投入了大量资金与科研力量，开发了如美国国家燃烧仿真代码（NCC）等可用于航空发动机燃烧室设计的数值模拟软件。近年来，我国也逐渐重视发展航空发动机数值模拟软件，开发了流场仿真软件如 AXX 和 APXX 等。但国内对于航空发动机燃烧室的仿真和设计多采用商用软件，如 PHOENICS, ANSYS-Fluent 等，受到了严重的技术封锁。

对于燃气轮机燃烧室的数值模拟，大多局限于简化后的燃烧室模型或是结构简单的小型燃烧室。如对仅有一级旋流器的燃烧室简化模型进行计算^[10-13]等。对此，Yee Chee See^[14]指出，在真实燃气轮机燃烧室中充分应用 LES 的关键难点在于几何复杂度和与几何相关的网格划分的复杂度。

高分辨率，高精度的燃烧室数值模拟是燃烧仿真的热点之一。莫姐等^[15]采用 ANSYS-ICEM 划分 423 万网格对三旋流燃烧室进行计算，得出出口温度分布与实验值符合较好的计算结果。丁勇能等^[16]采用 ANSYS-ICEM-CFD 19.0 绘制 1.7 亿网格对重型燃气轮机的单筒燃烧室进行数值模拟，得出分辨率较高，准确性较好的燃烧场模拟结果。



采用 ICEM 等软件划分大规模网格难度较高，耗费大量时间，且网格质量难以保证。大规模网格的划分是燃烧室高分辨率仿真的难点之一。

近年来，在燃烧室数值模拟中，湍流流动计算方法的呈现以大涡模拟(LES)为主的态势。周瑜等^[17]采用动态亚网格模型和大涡模拟对两级反向旋流燃烧室单头部构型进行数值模拟，得出高分辨率，高精度的计算结果。并证明了大涡模拟能显著提高仿真精度。

1.4 熄火数值模拟进展

对于航空发动机燃烧室而言，空中熄火属于重大事故，熄火边界是燃烧室的重要性能参数。因此对燃烧室进行建立熄火预测模型并进行熄火模拟是保障发动机工作安全与稳定的重要环节。

湍流流动以及燃烧反应的耦合是熄火的预测的关键。20 世纪中旬，Longwell^[18]与 Zukoski^[19]分别提出用于熄火预测的均匀搅拌器模型和特征时间模型。其中，Longwell 的均匀搅拌反应器模型认为钝体火焰稳定器下游的回流区是搅拌均匀的，并提出熄火边界与特征尺寸及压强成正比。而在 Zukoski 的特征时间模型中，回流区并非反应器，而是恒定高温的点火源。Zukoski 也通过实验证明了燃烧反应并非主要在回流区内进行。因此，特征时间模型认为当回流区的高温燃气在混合时间内能够点燃油气混合物，则燃烧稳定，反之则出现熄火现象。20 世纪末，Glassman 等[Glassman, I., Combustion. 3rd ed. 1996, San Diego, California: Academic Press.]将之前的熄火预测模型总结为 Da(Damkohler) 数判据(1.1)，其中 τ_{resi} 为流动与混合的特征时间， τ_{chem} 为化学反应特征时间。Glassman 认为，当流动与混合的特征时间小于化学反应特征时间，即 Da 数小于 1 时，火焰能够稳定存在，燃烧持续进行。反之，当 Da 数大于 1 时，则发生熄火现象。

$$Da = \frac{\tau_{resi}}{\tau_{chem}} \quad (1.1)$$

之后，S. Nair^[20]提出 Da 数仅能预测局部熄火，而难以直接通过 Da 数判断是否整体熄火。Shanbhogue S J 等^[21]认为，局部熄火产生的原因为火焰稳定器后流动分离导致火焰拉伸率升高。

2019 年，Morales AJ 等^[22]提出火焰拉伸率 Ka(Karlovitz)数判据(1.2)，其中， u' 为湍流脉动速度， λ 为泰勒微尺度，二者之比表示火焰拉伸率， δ_L 为火焰厚度， S_L 为燃烧反应的速度。局部熄火导致低温油气混合物进入回流区，造成火焰不稳定现象，流动与混合的特征时间大于燃烧反应的特征时间。回流区边缘温度梯度降低，流场接近于冷态的卡



门涡街流动状态。卡门涡街的产生加剧了低温油气与回流区内高温燃气的混合，从而使火焰不稳定性提高，最终火焰缩入回流区直至熄火。

$$Ka = \left(\frac{u'}{\lambda}\right) \left(\frac{\delta_L}{S_L}\right) \quad (1.2)$$

在本课题组的研究中，窦力[23]应用 AECSC 2.0 研究了三角钝体火焰稳定器下气相煤油燃料的燃烧和熄火现象，并得出对于气相燃料而言，钝体火焰熄灭过程为：火焰局部拉伸及断裂导致火焰面不完整，火焰断裂之后缩入回流区，钝体火焰稳定器周围出现卡门涡街形式的流动，由于其不稳定性，火焰随卡门涡街的波动逐渐熄灭。

1.5 本文研究内容

本文对采用浸没边界方法处理的 AECSC-Jasmin 大规模并行两相湍流燃烧数值模拟软件进行算法介绍，并通过计算射流火焰算例并与 Sandia 湍流研究中心的实验结果比较，验证 AECSC-Jasmin 软件应用于湍流燃烧计算的可靠性。

之后，本文简要介绍 AECSC-Jasmin 软件结构以及其源代码。并提出对 AECSC-Jasmin 软件修改化学机理的方法。在本文的研究中，分别采用烷烃四步通用机理和 118 步准稳态机理编译该软件，形成两种煤油机理的版本。

本文应用以上两种煤油化学反应机理不同的版本分别对凹腔支板火焰稳定器两相湍流燃烧进行模拟。考虑到浸没边界方法中流固耦合边界呈锯齿状而难以模拟液滴的反弹，本文首先采用 ANSYS-Fluent 模拟支板喷雾燃烧算例中喷雾粒子的运动轨迹，之后通过修改 AECSC-Jasmin 喷雾模块参数，模拟出与正常反弹粒子相似的液滴分布，并以此应用于湍流燃烧模拟中。

按照修正过喷雾后的两种机理的软件，本文模拟了进口马赫数 0.2，温度 1173K 下的高温高速凹腔支板火焰稳定器稳定燃烧状态，将四步机理和准稳态机理的计算结果进行对比与分析。本文将两种机理稳定燃烧的计算结果分别与同工况下的实验结果对比，分析两种机理在稳定燃烧模拟的优劣。

在凹腔支板火焰稳定器稳定燃烧模拟的基础上，本文继续采用两种不同机理模拟了凹腔支板火焰稳定器贫油熄火过程，并进行熄火原理研究以及不同机理熄火现象的对比。

最后，本文对采用四步机理的版本对结构复杂的某型单头部燃烧室进行两相湍流燃烧试算。

第二章 软件简介

本次毕业设计采用自研软件 AECSC-Jasmin，是以 AECSC 2.0 串行算法为基础，加入浸没边界方法以及 Jasmin 大规模并行框架后形成的具有实际工程应用价值的两相湍流燃烧仿真软件，如图 1 所示。

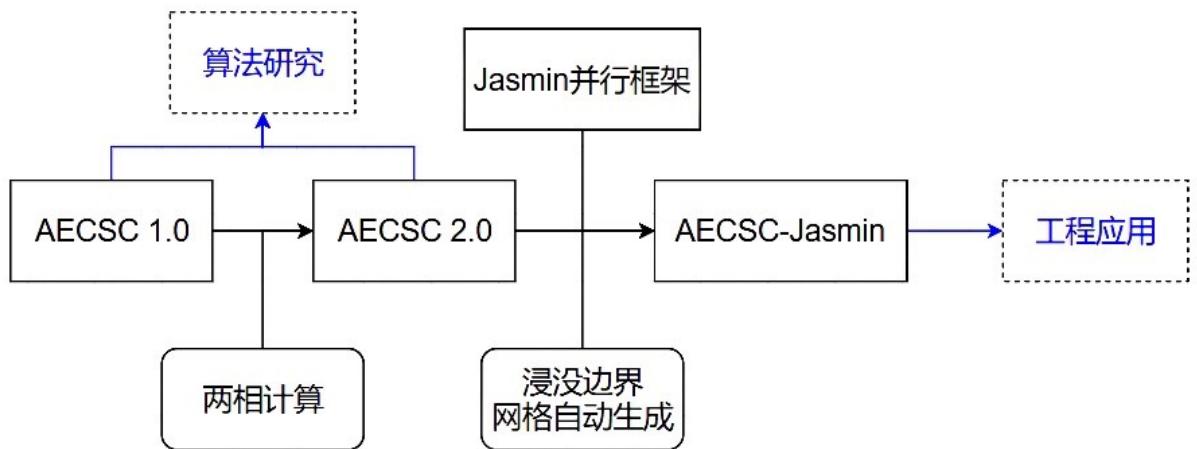


图 1. AECSC 软件发展示意图

2.1 软件组成

在本文模拟中采用的 AECSC-Jasmin 为本课题组原软件 AECSC 在大规模并行框架 Jasmin 结合后的重构版本，由北京航空航天大学航空发动机仿真中心与北京应用物理与计算数学研究所联合开发，软件架构如图 2。软件架构图左侧串行部分流程与 AECSC 2.0 一致，且使用 fortran 编写。右侧为并行模块修改加入的外部构件，使用 C++编写。软件采用分层架构，将数值计算工程(左)和并行方法(右)分离，采用构件模型，将数值计算子软件规范化，定制并行构件，耦合串行计算部分和并行构件形成总体计算流程，实现串行软件的自动大规模并行。

新版软件 AECSC-Jasmin 以航空发动机研发中的实际工程需求为牵引，针对航空发动机机构型复杂，小尺寸孔、缝数量大的特点，添加了大规模网格生成算法及浸没边界处理方法，并通过消息传递、共享存储两级混合并行扩展了并行计算规模，提高了计算效率。

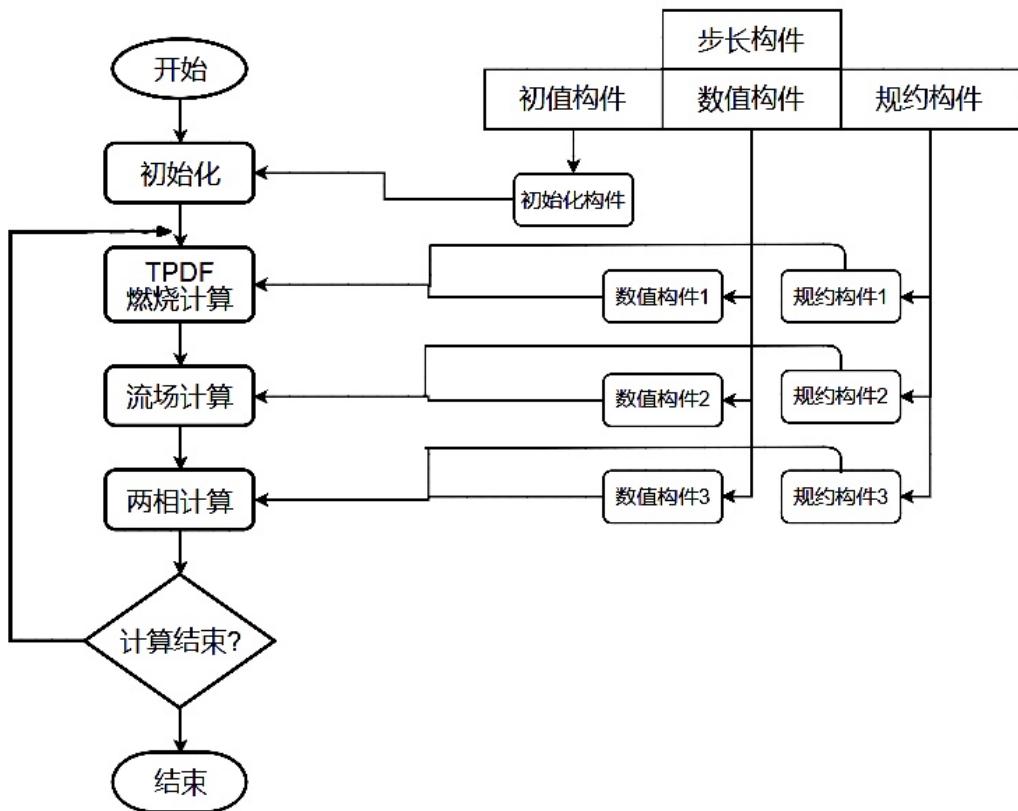


图 2. Jasmin 框架下的 AECSC 架构

2.2 串行部分算法介绍

AECSC-Jasmin 的串行部分由 AECSC 2.0 发展而来，二者湍流燃烧模拟算法一致。AECSC 2.0(Aero Engine Combustor Simulation Code 2.0)为北京航空航天大学航空发动机仿真中心开发的基于 LES-TPDF 方法的两相湍流燃烧数值模拟软件，已被应用于多种场合的两相湍流燃烧计算并验证其准确性。AECSC 2.0 相比原 AECSC 软件增加了喷雾、液滴粒子运动及液滴蒸发模拟，可应用于两相的计算，代码规模约 5.4 万行。原 AECSC 软件基于帝国理工大学 W.P. Jones 教授提供的 boffin 软件发展而来。

软件中采用动态 Smagorinsky-Lilly 亚网格应力模型构建大涡模拟(LES)算法进行湍流流场计算，并耦合输运随机场概率密度函数(TPDF)计算燃烧化学反应，采用能量沉积的点火模型。喷雾燃烧两相模拟中，采用欧拉-拉格朗日方法处理气液两相，喷雾液滴采用 Claudio's 雾化破碎模型和 Abramzon Sirignano 蒸发模型。AECSC 软件采用了二阶中心差分的空间离散格式和 Crank-Nicholson 的时间离散格式。原版软件的并行框架由 openmpi 库实现，按照网格的分块分配负载，将网格划分的块对应为计算域，分配到处理器中。为保证负载均衡，需保证各计算域（即网格分块）网格量基本一致，且计算域

数目需与计算分配的总处理器数一致。该负载均衡方式对网格划分提出了极高的要求，难以保证并行效率。因此需要结合 Jasmin 并行框架以提高大规模并行计算能力。

软件中所含的模块如图 3 所示。主求解流程的执行由初始化模块，输入模块，输运随机场方程模块，化学反应模块，大涡模拟模块，喷雾模块及输出模块构成。

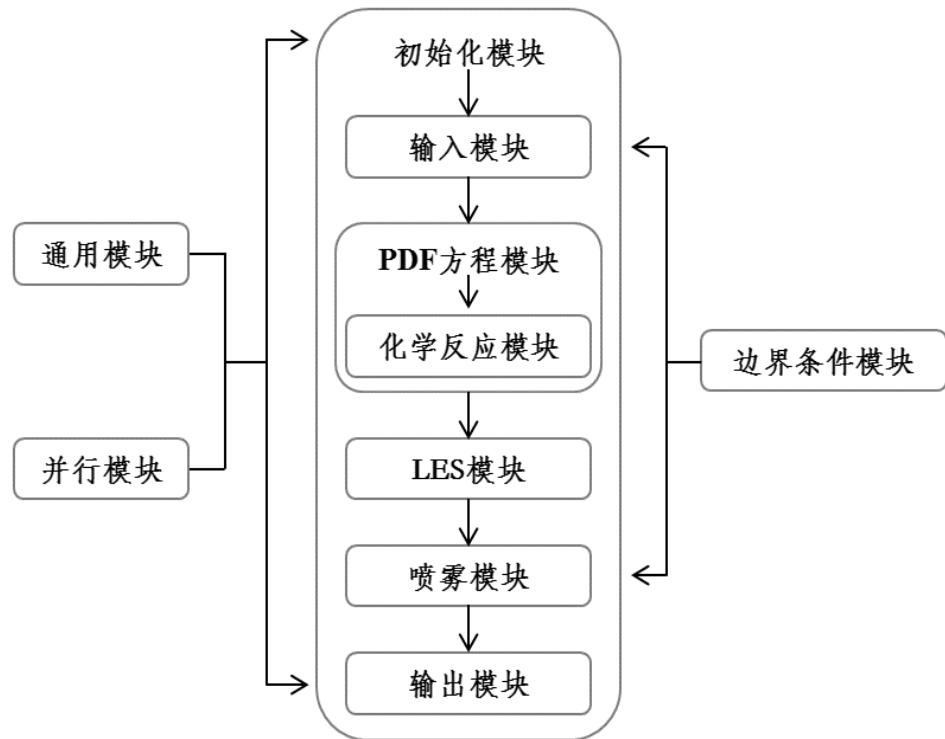


图 3. AECSC 2.0 软件模块

AECSC 2.0 的算例结构如下图 4 所示。其中 SRC 为源代码文件夹，ICEM_converter 用于将 ICEM 划分的贴体结构网格 PERCISE(SI)格式转换为 AECSC 可读取的 grid_vv 格式。velocity.d, spark.d, inject_def.d, input.d 分别为入口边界速度分布，点火设置，喷雾设置，基本输入参数设置的输入文件。Spray 和 Mpiboffin 分别为主程序可执行文件和计算控制文件。

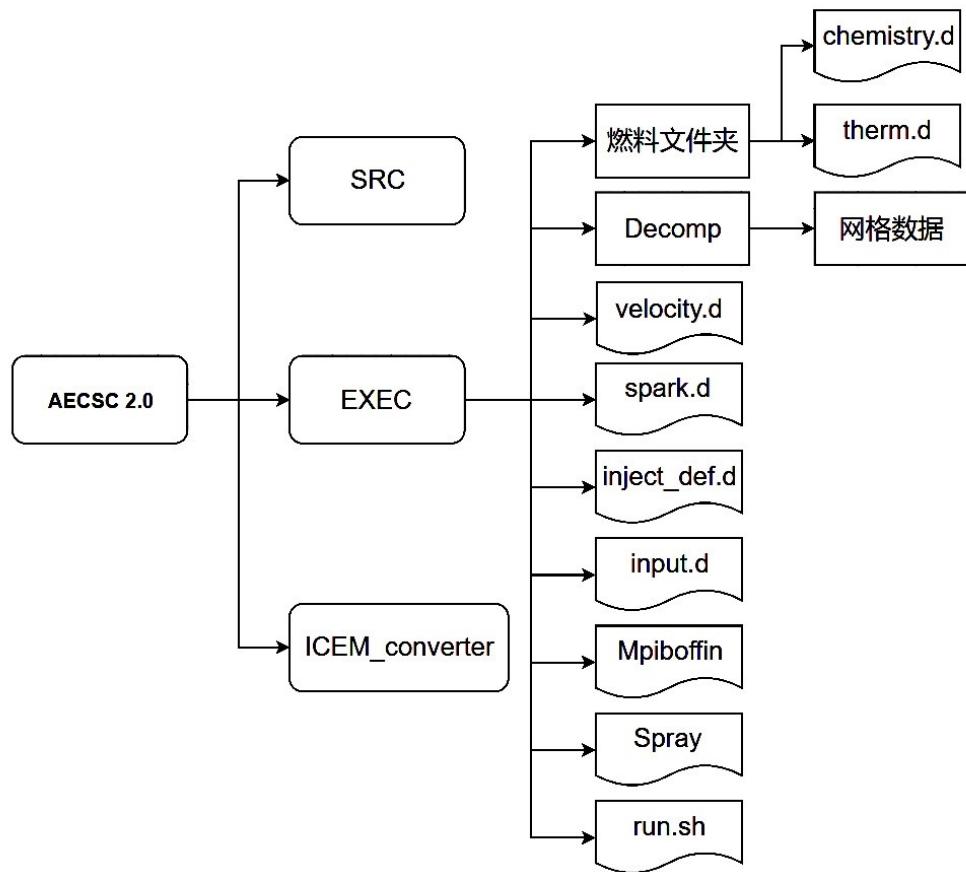


图 4. AECSC 2.0 算例结构

2.2.1 Smagorinsky-Lilly 亚网格模型

本次毕设采用的 AECSC-Jasmin 软件在流场仿真中采用大涡模拟。亚网格应力代表模化后的小尺度脉动与大尺度湍流脉动间的动量输运。为了计算亚网格黏性系数，求解亚网格涡，使用了动态 Smagorinsky-Lilly 亚网格模型。

软件中大涡模拟采用盒式滤波函数在空间上进行网格尺度滤波。盒式滤波函数与变量 ϕ 在位置 x 处，时间 t 时的卷积可以表示为：

$$\bar{\phi}(t, \mathbf{x}) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \phi(t, \mathbf{x}') d\mathbf{x}' \quad (2.1)$$

$$G(\mathbf{x} - \mathbf{x}', \Delta) = \begin{cases} 1/\Delta^3 & x'_i \in [x_i - \Delta/2, x_i + \Delta/2], \forall i \in 1,2,3 \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (2.2)$$

其中， $\phi(t, \mathbf{x})$ 为瞬态流场中的流动通用变量， $\bar{\phi}(t, \mathbf{x})$ 为盒式滤波后相应变量， Δ 为网格尺度。将 N-S 方程作盒式滤波并加入粘性应力假设，得到：



$$\frac{\overline{\partial \rho}}{\partial t} + \frac{\overline{\partial \rho u_i}}{\partial x_i} = 0 \quad (2.3)$$

$$\frac{\overline{\partial \rho u_i}}{\partial t} + \frac{\overline{\partial \rho u_i u_j}}{\partial x_i} = - \frac{\overline{\partial p}}{\partial x_i} + \frac{\overline{\partial \sigma_{ij}}}{\partial x_i} \quad (2.4)$$

对以上方程组进行密度加权函数的 Favre 平均, 得到:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j}{\partial x_i} = - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}}{\partial x_i} \quad (2.6)$$

为封闭动量方程中的 $\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j$, 亚网格应力模化为:

$$\tau_{ij} = \bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \bar{u}_i \bar{u}_j) \quad (2.7)$$

使用动态 Smagorinsky-Lilly 模型封闭方程:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} = 2 \rho C_s \|\widetilde{S}_{ij}\| \|\widetilde{S}_{ij}\| \quad (2.8)$$

其中, C_s 为 Smagorinsky 常数, $\|\widetilde{S}_{ij}\|$ 为应变张量 F 范数, δ_{ij} 为 Kronecker 符号。通过二次过滤方程组构造动态 Smagorinsky-Lilly 模型。

2.2.2 湍流燃烧模型

概率密度函数输运方程(TPDF)用于在不假设组分空间低维流形时封闭平均化学反应速率, 能够准确地模拟湍流流动与燃烧化学反应相互作用强烈时的湍流燃烧, 并且对化学反应机理的刚性要求较其他燃烧模型更低。

Jaberi F A 等^[30]在大涡模拟中应用等扩散系数假设, 将 Favre 滤波后的随机场输运方程表示为:

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \frac{\partial \tilde{P}_{sgs}(\psi)}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{P}_{sgs}(\psi)}{\partial x_j} &+ \sum_{\alpha=1}^{N_S} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\bar{\rho} \dot{\omega}_\alpha(\psi) \tilde{P}_{sgs}(\psi)] \\ &= - \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{\rho(\psi) F(\psi) u_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{P}_{sgs}] - \sum_{\alpha=1}^{N_S} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left(\overline{\frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} F(\psi)} \right) \end{aligned} \quad (2.9)$$

其中, $\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{P}_{sgs}(\psi)}{\partial t}$ 为非定常项, $\bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{P}_{sgs}(\psi)}{\partial x_j}$ 为对流项, $\sum_{\alpha=1}^{N_S} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\bar{\rho} \dot{\omega}_\alpha(\psi) \tilde{P}_{sgs}(\psi)]$ 为化学反应源项。式中 $\overline{\rho(\psi) F(\psi) u_j} - \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{P}_{sgs}$ 可简化为 $-\frac{\mu_{sgs}}{\sigma_{sgs}} \frac{\partial \tilde{P}_{sgs}}{\partial x_j}$, $\sum_{\alpha=1}^{N_S} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left(\overline{\frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} F(\psi)} \right)$ 为单点随机场条件扩散项, 可分解为扩散项和单点小尺度混合项:



$$\begin{aligned}
& - \sum_{\alpha=1}^{N_S} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} \left(\overline{\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} F(\psi)} \right) \\
& = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu}{\sigma} \frac{\partial \tilde{P}_{sgs}(\psi)}{\partial x_i} \right] - \sum_{\alpha=1}^{N_S} \sum_{\beta=1}^{N_S} \frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha \partial \psi_\beta} \left[\overline{\frac{\mu}{\sigma} \left(\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \phi_\beta}{\partial x_i} | \phi = \psi \right)} \tilde{P}_{sgs}(\psi) \right]
\end{aligned} \quad (2.10)$$

分解后，需要对上式中的小尺度扩散项进行 IEM 封闭：

$$\begin{aligned}
& - \sum_{\alpha=1}^{N_S} \sum_{\beta=1}^{N_S} \frac{\partial^2}{\partial \psi_\alpha \partial \psi_\beta} \left[\overline{\frac{\mu}{\sigma} \left(\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\partial \phi_\beta}{\partial x_i} | \phi = \psi \right)} \tilde{P}_{sgs}(\psi) \right] \\
& = - \frac{\bar{\rho}}{2\tau_{sgs}} \sum_{\alpha=1}^{N_S} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [(\psi_\alpha - \tilde{\phi}_\alpha(x, t)) \tilde{P}_{sgs}(\psi)]
\end{aligned} \quad (2.11)$$

其中， τ_{sgs} 表示亚网格混合尺度：

$$\frac{1}{\tau_{sgs}} = C_D \frac{\mu + \mu_{sgs}}{\bar{\rho} \Delta^2} \quad (2.12)$$

上式中， C_D 为混合常数，这里取 $C_D = 2$ 。

IEM 封闭后得到输运概率密度函数方程：

$$\begin{aligned}
& \bar{\rho} \frac{\partial \tilde{P}_{sgs}(\psi)}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{P}_{sgs}(\psi)}{\partial x_j} + \sum_{\alpha=1}^{N_S} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [\bar{\rho} \dot{\omega}_\alpha(\psi) \tilde{P}_{sgs}(\psi)] \\
& = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\frac{\mu}{\sigma} + \frac{\mu_{sgs}}{\sigma_{sgs}} \right) \frac{\partial \tilde{P}_{sgs}}{\partial x_j} \right] - \frac{\bar{\rho}}{2\tau_{sgs}} \sum_{\alpha=1}^{N_S} \frac{\partial}{\partial \psi_\alpha} [(\psi_\alpha - \tilde{\phi}_\alpha(x, t)) \tilde{P}_{sgs}(\psi)]
\end{aligned} \quad (2.13)$$

输运概率密度函数方程 (TPDF) 中的随机场 (PDF) 方法为随机微分方程 (SDEs) 方法中的一种，SDEs 还包括 Monte Carlo 法等。窦力^[30]详细推导了 AECSC 1.0 使用的随机场方法，得到大涡滤波后的 SDEs：

$$\begin{aligned}
\bar{\rho} d\zeta_\alpha^m &= -\bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \zeta_\alpha^m}{\partial x_i} dt + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\Gamma' \frac{\partial \zeta_\alpha^m}{\partial x_i} \right] dt - \frac{\bar{\rho}}{2\tau_{sgs}} (\zeta_\alpha^m - \tilde{\phi}_\alpha) dt \\
&\quad + \bar{\rho} \dot{\omega}^m(\zeta^m) dt + \bar{\rho} \sqrt{\frac{2\Gamma'}{\bar{\rho}}} \frac{\partial \zeta_\alpha^m}{\partial x_i} dW_i^m
\end{aligned} \quad (2.14)$$

2.2.3 反应速率求解

本文主要研究加力燃烧室支板火焰稳定器以及单头部主燃烧室相关算例，液态燃料蒸发为气态后与空气掺混并与氧化剂发生反应。对于输运概率密度函数方程 (TPDF) 而言，软件中需要模拟多种组分的掺混和多步反应从而模拟整个反应过程。化学反应机理将整个燃烧反应详细描述为多步基元反应的组合。对于机理中的每一步基元反应，软件



中热力学数据库提供基元反应中每种组分的热力学参数，并依此正逆计算反应速率以及平衡常数。

$$\sum_{k=1}^K v'_{ki} \chi_k \Leftrightarrow \sum_{k=1}^K v''_{ki} \chi_k \quad (i = 1, 2, \dots, I) \quad (2.15)$$

对于形如上式的机理化学方程式，可看作由共含 K 种组分的 I 个反应构成。

其中， χ_k 为序号为 k 的组分名， v'_{ki} 与 v''_{ki} 分别表示了正反应与逆反应中反应物的化学计量数 χ_k 的反应速率可由质量作用定律和反应速率常数表示为：

$$\omega_k = \sum_{i=1}^I (v''_{ki} - v'_{ki}) q_i, \quad \text{其中 } q_i = k_{fi} \prod_{k=1}^K [X_k]^{v'_{ki}} - k_{ri} \prod_{k=1}^K [X_k]^{v''_{ki}} \quad (2.16)$$

上式中 k_{fi} 为正反应速率常数， k_{ri} 为逆反应速率常数，可由 Arrhenius 公式和平衡常数求得：

$$k_{fi} = A_i T^{\beta_i} \exp\left(\frac{-E_i}{RT}\right) \quad (2.17)$$

$$k_{ri} = \frac{k_{fi}}{K_{ci}} \quad (2.18)$$

其中， A_i 为指前因子， β_i 为温度指数， E_i 为反应活化能， K_{ci} 为反应浓度平衡常数，可由压力平衡常数和 Van 't Hoff 方程求得：

$$K_{ci} = K_{pi} \left(-\frac{P_{atm}}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^K v_{ki}}, \quad \text{其中 } K_{pi} = \exp\left(-\frac{\Delta G_i}{RT}\right) \quad (2.19)$$

上式中 $\left(-\frac{\Delta G_i}{RT}\right)$ 的值由 chemkin 热力学七参数格式拟合得到，由此可封闭正逆反应速率的求解。

2.3 燃烧室网格生成与计算方法

2.3.1 结构网格自动生成

AECSC-Jasmin 加入了正交结构网格的自动生成算法。

本软件中，通过指定计算域以及输入几何模型，自动构建正交结构网格。软件自动构建的网格充满整个计算域，网格构建时不区分固体区域和流体区域，整体为均匀的立方体。因此计算域相同时，无论模型形状如何，生成的网格都是与计算域一致的立方体形状。生成网格后，根据输入的几何模型，用变量“tflag”标记固壁区域与流体区域，



固壁区域“tflag”变量值为 1，流体区域该变量值为 0。

因此，输出时无法直接通过后处理软件显示的网格形状判断模型形状以及网格合理性，对后处理软件生成的网格图的研究缺乏实际意义。因此在下文计算的算例中，将不研究后处理的流固区域网格图，仅对立方体网格尺寸及分辨率作分析。

2.3.2 浸没边界法

浸没边界方法（IBM）由 Peskin C S^[31, 32, 33]最早提出，用于计算流固耦合边界与网格边界不一致时的流固耦合问题。采用正交结构网格，极大程度上减少了网格划分和加密的工作量。

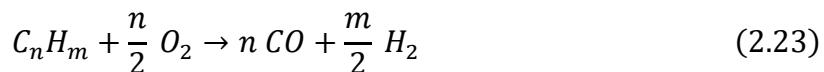
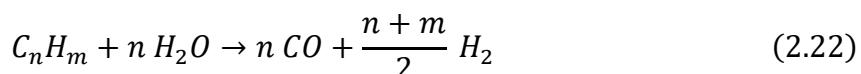
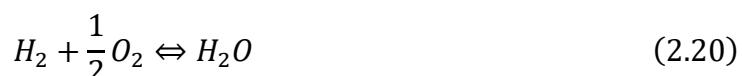
浸没边界方法在流体网格的边界处添加强迫外力源项实现无滑移边界条件，外加强迫力项为 δ 函数。

2.3 软件修改所涉及反应机理

航空发动机常用燃料为液态 RP3 燃料。由 1.2 中对煤油机理研究的综述可以看出 RP3 燃料具有组分多，分子量高的特点，因此需要选取适当的 f 代组分燃料，并提出相应的反应机理。本文将分别采用以 $C_{12}H_{23}$ 为替代组分的烷烃四步通用机理和以 $C_{10}H_{22}$ 为替代组分的准稳态机理开展支板稳定燃烧与熄火过程的模拟与研究。

2.3.1 四步机理

烷烃四步机理适用于所有烷烃燃烧的数值模拟。使用烷烃四步机理模拟煤油燃料燃烧反应时，采用 $C_{12}H_{23}$ 为 RP3 煤油的替代组分。机理中含 H_2 、 H_2O 、 CO 、 CO_2 、 O_2 、 N_2 、 $C_{12}H_{23}$ 共六种组分，反应包括以下四步^[2]：



烷烃四步机理极为简单，用于湍流燃烧数值模拟计算量较小，且模拟结果与实验相符。但由于反应过快，放热过快，热量堆积导致反应区局部温度相比实验值较高。且由于低空气流速下，反应区最高温度较高，导致熄火油气比低于实际值。



2.3.2 准稳态机理

准稳态机理简化方法基本思想为，假设在反应中某种组分达到了动态平衡（其生成率与消耗率相同），得到 $\frac{d[X_k]}{dt} = 0$ ，并据此对反应方程进行代数简化。在燃烧过程中，大多自由基满足该假设。在刚性常微分方程组中引入准稳态假设可大幅减少机理文件外部需要模拟的组分数，大量减少组分掺混以及反应的随机场计算量。

本文所述的 RP3 准稳态机理由川大机理生成程序 ReaxGen 构建。首先根据物种数为 1499，反应步数为 5712 的正十烷中高温燃烧详细机理按照敏感度分析简化方法得到物种数为 709，反应步数为 2793 的正十烷骨架机理。在骨架机理的基础上再结合 PFA 方法^[29]和 DRG 方法^[28]，简化得到物种数为 161，反应步数为 683 的机理。采用敏感度分析方法进一步简化为物种数为 35，反应步数为 118 的准稳态机理^[9]，如下图 5 所示。准稳态简化机理中可进一步将 RP-3 煤油替代组分简化为单组分 $C_{10}H_{22}$ ，从而将随机场需模拟的总组分数降为 27。

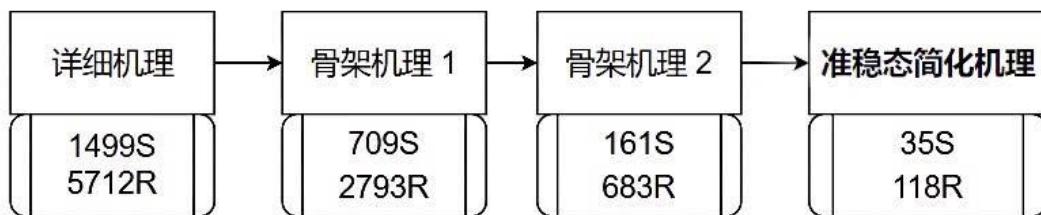


图 5. 准稳态机理简化过程

本文将该机理加入 AECSC-Jasmin 软件，并将其应用于支板算例的两相湍流燃烧模拟。值得注意的是，在支板算例的模拟中，同等算例条件下，采用 196 核心计算时，准稳态机理算例计算耗时约为四步机理的 8 倍。



第三章 软件分析及修改

3.1 AECSC-Jasmin 软件结构

AECSC-Jasmin 软件架构上文 2.1 中的图 2 所示。软件编译得到可执行文件 boffin，通过./boffin input>out 执行。计算启动后，由外部 Jasmin 框架读入特定格式的输入文件(如 input)。与原 AECSC 2.0 不同的是，信息的输入集成为单个输入文件。输入文件(如 input)需包含但不限于以下几部分提供信息：1.GridGeometry，几何模型信息；2.Turbulence，流场信息；3.Main，输出参数、重启动控制、是否冷态、是否喷雾等；4.HierarchyTimeIntegrator，模拟时间控制；5.PDF，燃烧场计算参数；6，Spray，喷雾控制参数；7. LinearSolver，迭代控制参数。

AECSC-Jasmin 的串行部分（图 2 左侧）采用的算法与 2.2 中介绍的 AECSC 2.0 算法基本一致，仅针对航空发动机燃烧室的复杂机构在网格划分和边界处理部分添加了结构网格自动生成以及浸没边界处理方法。

修改后的模块化软件仍含按照原有算法稍作修改的初始化模块，输运随机场方程模块，化学反应模块，大涡模拟模块，喷雾模块。以上模块主要将贴体结构网格的差分过程改为矩形网格的相应计算过程，并添加了少量与外部 jasmin 框架的接口函数。原输入，输出，并行模块及初始化模块的数据读入过程删减并集成到外部框架中。浸没边界方法的主要改动位于边界条件模块的 bndry2dp.F, boundary2.F, boundary3.F 以及输入模块中 weight.F 中的 weightflag 函数，通过识别固壁附近的锯齿形流体网格，并将该部分网格的输运方程的源项系数矩阵对角项置 1，非对角项置 0，来实现简化的浸没边界方法处理。

网格生成部分，原 AECSC 所使用的网格为 ICEM 绘制的贴体结构网格，在 ICEM 中划分并行 block，且需要使用 ICEM_Converter 程序转换为 AECSC 程序相应网格格式。新 AECSC-Jasmin 软件则仅需输入“.sat”格式的几何模型，并在输入文件中定义计算域及 X、Y、Z 三轴方向网格数。软件将自动生成立方体网格，识别并标记固壁区域。并行计算域的划分以及负载平衡也由软件根据执行脚本和输入文件完成。

在可视化文件输出部分，外部框架删减原有的”.vtk”格式和”.okc”输出，替换为”.jasmin”格式，可通过 teravap 软件进行后处理。teravap 软件也可对可视化文件进行格式转换，再通过商业软件（如 Visit）作后处理。

AECSC-Jasmin 算例结构如图 6 所示。总体分为源程序，算例，Jasmin4 框架三大部分。源代码位于 source 文件夹，编译后，在 build 文件夹中得到可执行文件 boffin。算例部分必须包括以燃料名命名的燃料数据文件夹（如 kerosene），输入文件（如 input），几何模型（如 model.sat），根据执行的具体需求增加执行脚本（如 run.sh）。

程序运行时，会根据输入文件的设定，在算例文件夹中输出可视化文件夹（如 Javis），重启动场文件夹（如 Restart），基本参数输出文件（如 out），运行日志（如 Test.log）以及 slurm 作业管理系统输出文件（如 slurm-任务号.out）。

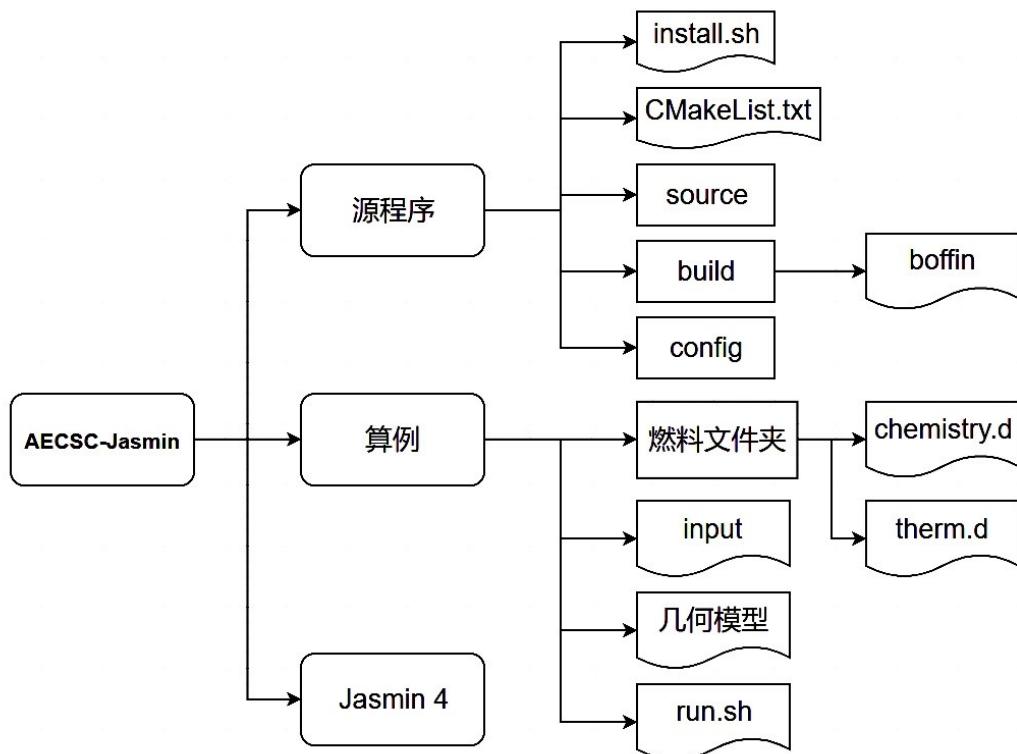


图 6. AECSC-Jasmin 算例结构

3.2 软件子文件介绍

为明确 AECSC-Jasmin 软件串行部分的结构以及各源文件功能，从而形成化学机理修改思路，需要明确各子文件在湍流燃烧模拟中的调用顺序、关联性及其包含函数的作用。本文研究了 AECSC-Jasmin 软件中所有子文件，研究了各文件的功能，所属模块。并且从源文件的层面上，描述了 AECSC-Jasmin 相对于 AECSC 2.0 的改动，如下表 2 所示。



表 2. AECSC-Jasmin 源文件分析

模块	文件名	子函数说明	类型	修改内容
LES	cgsol.F	共轭梯度法求解器	子程序	增加计算过程，并修改和增加输出 subroutine
LES	cgstab.F	稳定双共轭梯度法求解器	子程序	修改网格部分，并增加一些 subroutine
LES	cmod.F	时间离散的中心差分格式	子程序	修改网格部分
LES	courant.F	Courant 和扩散数计算	子程序	增加部分计算
LES	courant_d.F90	喷雾条件下 Courant 和扩散数计算	子程序	新增变量声明
LES	d2pds.F	单方向压力平滑	子程序	新增 d2pdsm()
LES	densty.F	计算密度	子程序	新增 densty2()
LES	ewt.F	计算变量的范数	子程序	全部删减
LES	gama.F	计算涡流粘度	子程序	删除设定壁面速度和重置壁面边界条件
LES	gamma_dyn.F	根据动态过程计算涡流粘度	子程序	改写
LES	gamma_phi.F	根据动态过程计算湍流 Pr 数	子程序	0
LES	gvctr.F	计算速度分量并且实现压力平滑	子程序	0
LES	gvctr2.F	实现三个方向压力平滑	子程序	新增 psmooth()
LES	press.F	压力校正公式的系数矩阵获取	子程序	新增部分变量和计算过程
LES	source.F	计算标量输运方程的源项	子程序	新增部分变量声明
LES	souru.F	计算压力梯度改变后的速度分量	子程序	新增 sourum1(), sourum2()
LES	step.F	推进时间步长	子程序	增加 subroutine 内容
LES	update.F	压力方程求解后速度场的更新	子程序	新增 updatem()
LES	viscos.F90	根据温度和组分计算反应流中的分子粘度	子程序	增加部分计算
PDF 方程	condif.F	计算变量集合系数矩阵	子程序	修改网格部分以及其他计算
PDF 方程	denmod.F	检查组分改变量是否合理	子程序	改写
PDF 方程	ewt_pdf.F	计算 PDF 方程变量的范数	子程序	全部删减
PDF 方程	fieldpdf.F90	PDF 的随机场求解主程序	子程序	删减了很多计算过程?
PDF 方程	gradient.F90	计算梯度	子程序	改成结构网格计算方法
PDF 方程	mixer.F90	线性最小方差 (LMSE) 混合模型	子程序	新增部分变量
PDF 方程	moment.F	计算统计矩	子程序	新增部分变量
PDF 方程	source_pdf.F90	计算 PDF 方程的源项	子程序	新增部分变量声明
PDF 方程	stochastic.F90	随机过程计算速度、压力和焓值	子程序	新定义了一些变量名
PDF 方程	vls.F	对于标量运输方程的对流项使用 TVD 离散	子程序	增加内容
PDF 方程	module_sgs_pdf.F	亚格子 PDF 相关数组的 module	module	0
PDF 方程	module_spark.F	点火相关数组的 module	module	改写点火程序，点火部分后移
边界条件	bndry1.F	设置边界条件标量场	子程序	全部删减



边界条件	bndry2.F	六个方向的 boundary2 设置	子程序	全部删减
边界条件	bndry2dp.F	在对称边界上重设质量流量并校正连续性	子程序	增加 BNDRYDPM(), 部分删除
边界条件	bndry3.F	六个方向的 boundary3 设置	子程序	全部删减
边界条件	bndry3crn.F	六个方向的 boundary_edge 设置	子程序	全部删减
边界条件	boundary_edge.F	角落边界计算	子程序	全部删减
边界条件	boundary2.F	修正边界条件的常数矩阵	子程序	增加了变量声明和计算步骤
边界条件	boundary3.F	更新进出口、对称面、壁面等边界类型设置	子程序	增加了大量变量声明和计算步骤
边界条件	openinflow.F	读取虚拟湍流配置文件	子程序	0
边界条件	read_prof.F	将虚拟湍流赋予边界	子程序	0
边界条件	wall.F	用对数法计算壁面应力 (Newton Raphson 法)	子程序	0
边界条件	module_digital_turbulence.F	虚拟湍流相关数组的 module	module	0
并行	pbconf.F	初始化并行配置	子程序	全部删减
并行	pblead.F	分配计算 CPU	子程序	全部删减
并行	pbmax1.F90	获取所有 domain 中变量的最大值	子程序	全部删减
并行	pbmin1.F90	获取所有 domain 中变量的最小值	子程序	全部删减
并行	pbrdcf.F	临时数组的分配和交换	子程序	0
并行	pbsrhl.F	domin 并行数据交换	子程序	全部删减
并行	module_exchange.F	并行交互相关数组的 module	module	0
初始化	boffin.F	主程序	子程序	大量删减具体的计算过程, 新增 daverage()
初始化	config_boffin.F90	主程序配置文件	子程序	删减读入过程和部分变量声明
初始化	start_dtim.F	初始化时间步长	子程序	全部删减
初始化	start_init.F	初始化粘度、标量场	子程序	全部删减
初始化	start_pdf.F	初始化概率密度函数方程	子程序	删减续算的读入过程
初始化	start_pdf_plots.F	开始针对 TIMECOP-AE 的探针测量	子程序	0
初始化	start_read.F	读取已有算例数据	子程序	全部删减
初始化	start_spray.F	初始化喷雾过程	子程序	删减读入过程
初始化	uround.F	设置计算为单精度舍入	子程序	0
初始化	zero.F	初始化所有的变量为零	子程序	注释掉部分变量的初始化
化学反应	dlubksb.F90	计算组分改变量	子程序	0
化学反应	dludcmp.F90	计算组分改变量	子程序	0
化学反应	fdjac.F90	反应机理初始化	子程序	0
化学反应	funcv_4.F90	烷烃 7 组分 4 步通用机理	子程序	0
化学反应	funcv_c2h4.F	乙烯 22 组分反应机理	子程序	0
化学反应	funcv_c2h5oh.F	乙醇 28 组分反应机理	子程序	0
化学反应	funcv_c7h16.F	庚烷 22 组分反应机理	子程序	0
化学反应	funcv_ch3oh.F	甲醇 18 组分反应机理	子程序	0



化学反应	funcv_ch4.F	甲烷 19 组分 15 步反应机理	子程序	0
化学反应	mnewt.F	反应过程释放热	子程序	0
化学反应	react_hc.F90	反应过程主循环	子程序	0
化学反应	reactor.F	化学反应主程序	子程序	改写
化学反应	usrfun.F90	根据燃料匹配反应机理	子程序	0
化学反应	module_chemistry.F90	化学反应相关数组的 module	module	0
喷雾	add_fragment.F	液滴(粒子)破碎并赋予粒子属性	子程序	修改网格部分, 引用函数改为'd'后缀的函数
喷雾	bc_move_i.F	沿 I 方向移动边界条件	子程序	修改网格部分
喷雾	bc_move_j.F	沿 J 方向移动边界条件	子程序	修改网格部分
喷雾	bc_move_k.F	沿 K 方向移动边界条件	子程序	修改网格部分
喷雾	break_up.F	粒子的破碎(粒数衡算方程模型)	子程序	0
喷雾	cdf_spray.F	计算新粒子的累积分布函数	子程序	0
喷雾	check_rate.F	检查质量流率	子程序	增加部分变量声明
喷雾	config_spray.F90	喷雾配置文件	子程序	删减部分变量声明
喷雾	diamgambling.F	根据分布随机生成粒子直径	子程序	0
喷雾	find.F	粒子数量校验(是否有挥发等数目变化)	子程序	修改了输出和?
喷雾	inj_def.F	读取喷雾配置文件	子程序	删减输入输出
喷雾	inj_droplet.F	喷射粒子并赋予粒子属性	子程序	0
喷雾	interpolate.F	变量在单元格内通量计算	子程序	改写成 interpolatey()
喷雾	locate.F	网格点数据转化为计算点数据(中点)	子程序	改成结构网格计算方法
喷雾	moments_spray.F	计算喷雾相关变量统计矩	子程序	0
喷雾	move_position.F	计算出粒子的位置	子程序	0
喷雾	pbsrsp.F	粒子在各个 domain 之间的交换	子程序	全部删减
喷雾	remove.F	移除粒子	子程序	全部删减
喷雾	shuffle.F	打乱液滴顺序	子程序	全部删减
喷雾	sort.F	将存储在虚拟单元中的粒子排序	子程序	0
喷雾	source_spray_pdf.F	喷雾过程以及产生的源项计算	子程序	0
喷雾	spray_pdf.F	喷雾主程序	子程序	删减其中的计算过程
喷雾	vaporization.F	粒子的蒸发过程(Abramzon Sirignano 模型)	子程序	0
喷雾	module_spray.F	喷雾相关数组的 module	module	0
输出	finish.F	保存现有算例数据, 例如瞬时解和统计平均	子程序	全部删减
输出	out_moments_spray.F	输出喷雾变量统计矩文件	子程序	全部删减
输出	outij.F	输出变量 ij 面的监视信息	子程序	0
输出	output.F	输出变量监视信息	子程序	全部删减
输出	pdf_plot.F	计算探针位置并输出变量	子程序	0
输出	snapshot_spray.F	输出喷雾的图像信息	子程序	0
输出	statistics.F	计算各个变量的统计量	子程序	新增 fchemstat()
输出	vtk.F	vtk 格式文件输出变量	子程序	删减部分物理量的计算
输出	write_moments.F	输出 PDF 统计矩文件	子程序	0



输出	<code>write_pdf_file.F</code>	输出 PDF 的 Restart 文件	子程序	0
输出	<code>module_vtk_plots.F</code>	数据输出相关数组的 module	module	0
输入	<code>centre.F</code>	在屏幕上居中显示信息	子程序	0
输入	<code>geom.F</code>	读取网格文件	子程序	改成结构网格计算方法
输入	<code>grid_quality.F</code>	检查网格质量, 输出质量参数	子程序	全部删减
输入	<code>inprofile.F</code>	边界条件配置文件	子程序	大部分删减
输入	<code>input.F90</code>	读取输入文件	子程序	全部删减
输入	<code>janaf_input.F90</code>	读取热力学文件	子程序	新增化学表达式
输入	<code>locate_probe.F</code>	读取测点分布文件	子程序	0
输入	<code>weight.F</code>	三个矢量方向的 wt 计算	子程序	新增 weightflag(), setdpgamm()
输入	<code>wt.F</code>	计算单个方向的加权值	子程序	新增 wtt() 函数定义
通用	<code>gammln.F90</code>	计算 gamma 函数的值的自然对数	子程序	0
通用	<code>gasdev.F90</code>	生成高斯分布随机数	子程序	0
通用	<code>poidev.F90</code>	生成泊松分布随机数	子程序	0
通用	<code>ran.F90</code>	生成均匀分布随机数	子程序	0
通用	<code>ran1.F90</code>	产生随机数	子程序	0
通用	<code>random_diatomc.F</code>	使用随机数	子程序	0
通用	<code>nrutil.F90</code>	分布参数计算的 module	module	0
通用	<code>ran_state.F90</code>	随机数生成的 module	module	0
通用	<code>boffin_stop.F</code>	终止程序, 报错信息	子程序	0
通用	<code>enthalpy.F</code>	计算焓值	子程序	0
通用	<code>minmax.F</code>	获取变量的最大值与最小值	子程序	全部删减
通用	<code>normal.F</code>	计算网格面法向量	子程序	删减单元表面法向量计算
通用	<code>temperature.F</code>	计算温度和密度	子程序	0
通用	<code>module_arrays.F</code>	基本计算数组的 module	module	0
通用	<code>module_global.F</code>	全局数组的 module	module	0
通用	<code>nrtype.F90</code>	储存常数的 module	module	0
通用	<code>nr.F90</code>	常用函数的 module	module	0
未启用	<code>equilb.F</code>	计算气体混合物焓、压力和浓度的平衡组成	子程序	0
未启用	<code>jac.F</code>	空	子程序	全部删减
未启用	<code>pdf_plots.F</code>	计算探针位置各变量 PDF 方程	子程序	0
未启用	<code>ydot.F90</code>	(old)根据燃料匹配反应机理	子程序	新增 t_temp 变量



3.3 化学反应机理修改方法

本文的软件改动工作目的为在新版 AECSC-Jasmin 软件中将原有烷烃四步机理修改为川大 ReaxGen 程序生成的正十烷准稳态机理, 提出针对于本软件的通用化学反应机理修改方法, 并作验证。

AECSC-Jasmin 软件的机理修改或替换过程包含对 fortran 编写的串行程序机理修改, 对外部燃料参数文件夹“kerosene”的修改以及对 C++编写的外部框架的组分数组修改。

首先, 本文将介绍串行部分的改动。对串行部分程序的修改步骤和思路可以相似地应用于 AECSC 2.0 两相版本以及 AECSC 1.0 气相版本。修改内容如下:

1. 修改主程序配置文件 config_boffin.F90 中初始物种名。将 179 行的 “elseif(trim(names(isp)).eq.'C12H23') then” 修改为 “elseif(trim(names(isp)).eq.'s0C10H22') then”。
2. 修改热力学参数读入文件 janaf_input.F90 中物种名。分别将 152 行 “elseif(trim(ctmp).eq.'C12H23') then” (AECSC 前版本中无此项, 不需修改), 221 行 “hed == 'C2H5OH(L)' .or. hed == 'C12H23') then”, 272 行 “hed == 'C2H5OH(L)' .or. hed == 'C12H23') then” 中的 “C12H23” 改为 “s0C10H22”。
3. 修改大涡模拟模块中反应流分子粘度求解文件 viscos.F90。分别将 137 行 “trim(names(isp)).eq.'C12H23') then”, 173 行“trim(names(isp)).eq.'C12H23') then”, 201 行“if(trim(names(isp)).eq.'C12H23') then” 中的 “C12H23” 改为 “s0C10H22”。
4. 修改化学反应机理初始化文件 fdajc.F90。将 20 行对 “funcv_4” 函数的调用改为 “funcv_RP3” 函数。
5. 修改根据燃料匹配机理文件 usrfun.F90。将 11 行对 “funcv_4” 函数的调用改为 “funcv_RP3” 函数。
6. 添加采用准稳态方法简化的机理文件“funcv_RP3”, 该文件由 ReaxGen 程序生成。

另外, 需要对燃料参数文件夹 kerosene 中的物种文件 chemistry.d 的 SPECIES 部分作修改, 如图 11。并相应地对热力学参数文件 therm.d 文件作补充。therm.d 文件需包括 chemistry.d 中提到的所有化学组分, 但可不局限此。与原 AECSC 相同地, 软件仅可应用于 O, C, H, N 四种元素的反应计算。

最后, 针对于 Jasmin 框架, 还需要对外部 C++编写的数组初始化文件 Fort.h 中 18 行 species 数组作补充。可改为:



```
enum species {AIR=0, CO=1, CO2=2, H=3, HCN=4, H2=5, HO2=6, H2O2=7, NO=8,
N2=9, NH3=10, OH=11, O2=12, H2O=13, CH2O=14, CH3=15, CH4=16, C2H2=17, C2H4=18,
C2H6=19, C3H8=20, s0C10H22=21, CH3OH=22, C7H16=23, C2H5OH=24, C12H23=25,
s4C10H21=26, s24C10H20=27, s25C5H10=28, s29C6H12=29, s118C10H19=30,
s380C10H18=31, C4H6=32, O=33, C2H3=34, CH2CHO=35, CH2CO=36, C3H6=37};
```

上述 species 数组中必须包含 chemistry.d 中的所有组分，否则计算时将出现段错误（Segmentation fault）。

按以上步骤改动后，更新 source 文件夹并重新编译即可。对于 AECSC-Jasmin 而言，编译环境除需要 cmake，gfortran 和 mpich2 外，还需安装 jasmin4 框架。编译时，可采用下图 7 所示的脚本，脚本中的并行框架 jasmin 路径应修改为当前 jasmin4 安装路径。

```
bpath=$(cd `dirname $0`;pwd)
rm -rf $bpath/build
mkdir -p $bpath/build
cd $bpath/build
cmake -DCMAKE_BUILD_TYPE=Debug \
      .. -DJASMIN_ROOT=jasmin4 路径 \
      -DJASMIN_CREL=opt \
      -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$bpath/build \
      -DJAUMESH=jasmin4 路径 \
make -j 4
```

图 7. 编译脚本

成功编译后将生成 build 文件夹，该文件夹中的 boffin 文件即为程序入口。除可执行文件的修改外，如图 6 算例结构所示，应将算例部分中的燃料文件夹（kerosene）替换，并修改执行脚本中可执行文件路径。

3.4 修改前后源代码对比

以下图 8 至图 14 中，按源文件对比了 AECSC-Jasmin 中由烷烃四步机理修改为准稳态机理修改前后代码差别。

```
179 | .....elseif(trim(names(isp)).eq.'C12H23') then 179 | .....elseif(trim(names(isp)).eq.'s0C10H22') then
180 | .....jc12H23=isp 180 | .....jc12H23=isp
```

图 8. 四步机理（左）与准稳态机理（右） config_boffin.F90 文件

图 9. 四步机理（左）与准稳态机理（右）janaf_input.F90 文件

```
133     elseif(trim(names(isp)).eq.'C2H4' .or. & 133     elseif(trim(names(isp)).eq.'C2H4' .or. &
134     trim(names(isp)).eq.'CH3OH' .or. & 134     trim(names(isp)).eq.'CH3OH' .or. &
135     trim(names(isp)).eq.'C7H16' .or. & 135     trim(names(isp)).eq.'C7H16' .or. &
136     trim(names(isp)).eq.'C2H5OH' .or. & 136     trim(names(isp)).eq.'C2H5OH' .or. &
137     trim(names(isp)).eq.'C12H23') then & 137     trim(names(isp)).eq.'C12H23') then &
138       major_species(isp) = .true. & 138       major_species(isp) = .true. &

168     do isp=1,np & 168     do isp=1,np &
169       if(trim(names(isp)).eq.'C2H4' .or. & 169       if(trim(names(isp)).eq.'C2H4' .or. &
170       trim(names(isp)).eq.'CH3OH' .or. & 170       trim(names(isp)).eq.'CH3OH' .or. &
171       trim(names(isp)).eq.'C7H16' .or. & 171       trim(names(isp)).eq.'C7H16' .or. &
172       trim(names(isp)).eq.'C2H5OH' .or. & 172       trim(names(isp)).eq.'C2H5OH' .or. &
173       trim(names(isp)).eq.'C12H23') then & 173       trim(names(isp)).eq.'C12H23') then &
174         major_species(isp) = .false. & 174         major_species(isp) = .false. &
175       endif & 175       endif &
176     enddo & 176   enddo
```

图 10. 四步机理(左)与准稳态机理(右) viscos.F90 文件

```

13      if(n.eq.7)·then
14          do j=1,n
15              temp=x(j)
16              h=EPS*abs(temp)
17              if(h.le.0.0d+00)·h=EPS
18              x(j)=temp+h
19              h=x(j)-temp
20              call funcv_4(n,x,f,den,theta,press,1)
21              x(j)=temp
22              do i=1,n
23                  df(i,j)=(f(i)-fvec(i))/h
24              end do
25          end do
26      else

```

图 11. 四步机理（左）与准稳态机理（右） fda.jc.F90 文件

```
10      if(n.eq.7).then 21      else.if(trim(fuel) .eq. 'kerosene').then  
11      call:funcy_4(n,y,fvec,den,theta,press,iswitch) 22      call:funcy_kerosene(n,y,fvec,den,theta,press,iswitch)
```

图 12. 四步机理(左)与准稳态机理(右) usrfun.F90 文件

```
18 enum species {AIR=0, CO=1, CO2=2, H=3, HCN=4, H2=5, HO2=6, H2O2=7, NO=8,  
19 ..... N2=9, NH3=10, OH=11, O2=12, H2O=13, CH20=14, CH3=15, CH4=16,  
20 ..... C2H2=17, C2H4=18, C2H6=19, C3H8=20, C12H23=21, CH3OH=22,  
21 ..... C7H16=23, C2H5OH=24};  
18 enum species {AIR=0, CO=1, CO2=2, H=3, HCN=4, H2=5, HO2=6, H2O2=7, NO=8,  
19 ..... N2=9, NH3=10, OH=11, O2=12, H2O=13, CH20=14, CH3=15, CH4=16,  
20 ..... C2H2=17, C2H4=18, C2H6=19, C3H8=20, s8C10H22=21, CH3OH=22,  
21 ..... C7H16=23, C2H5OH=24, C12H23=25, s4C10H21=26, s24C10H20=27, s25C5H10=28,  
22 ..... s29C6H12=29, s11C10H19=30, s38C10H18=31, C4H6=32, O=33, C2H3=34, CH2CHO=35,  
23 ..... CH2CO=36, C3H6=37};
```

图 13. 四步机理(左)与准稳态机理(右) fort.h 文件

```

kerosene
ELEMENTS
O H C N
END
SPECIES
H2 H2O CO CO2 O2 N2 C12H23
END
REACTIONS
END
kerosene
ELEMENTS
O H C N
END
SPECIES
H H2 O O2 H2O N2
HO2 H2O2 CO CO2 CH4 CH3
C2H5 C2H4 C2H3 CH2CHO CH2CO HCCO
C3H6 C4H6 s0C10H22 s4C10H21 s24C10H20 s25C5H10
s29C6H12 s380C10H18
END
REACTIONS
END

```

图 14. 四步机理（左）与准稳态机理（右）chemistry.d 文件

需要注意的是，考虑到机理文件与热力学文件修改前后差异较大，本文在源代码对比部分并未给出 funcv_4.F90 (funcv_RP3.F90) 以及 therm.d 文件修改前后的对比。



funcv_RP3 文件长度为 1032 行，由化学反应机理生成程序直接生成，而 therm.d 为根据机理所含物种内容而调整的热力学参数文件，至少增加准稳态简化机理中包含的物种热力学参数（27 种，81 行），本文采用的 therm.d 中包含了用准稳态方法简化前的最初骨架机理中的所有组分参数，共 6741 行。

第四章 程序检验

4.1 算例介绍

为验证 AECSC-Jasmin 版本软件对于湍流燃烧计算的准确性,本文选取 Sandia 实验室的湍流射流火焰实验^[24]Flame-D, Flame-E, Flame-F 作为简易的检验算例,并将计算温度场于 R.S. Barlow 等^[25]的实验温度测量结果以及沈硕^[26]使用 AECSC 2.0 的模拟结果作对比。

按照 Sandia 实验室的实验数据,本算例喷口结构如下图 15 所示,内喷口喷射温度为 293K,比例为 1: 3 的甲烷燃料与空气的混合气,外喷口喷射温度为 1880K (Flame-D, Flame-E) 或 1860K(Flame-F) 的空气,高温空气将直接引燃内喷口喷射的燃料。Flame-D, Flame-E, Flame-F 的雷诺数分别为 22400, 33600 和 44800。射流速度分布如下图 16 所示。

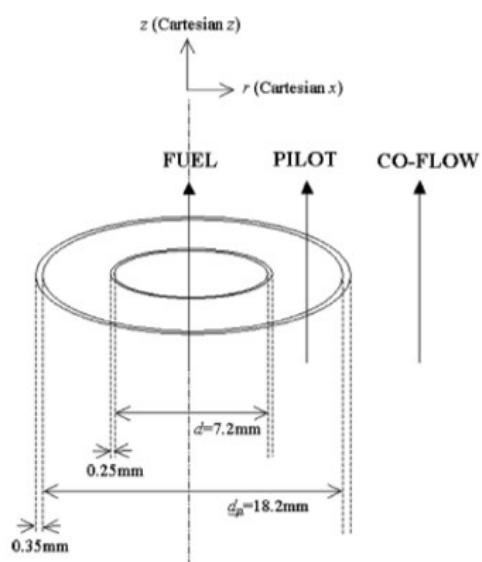


图 15. 喷口结构图^[24]

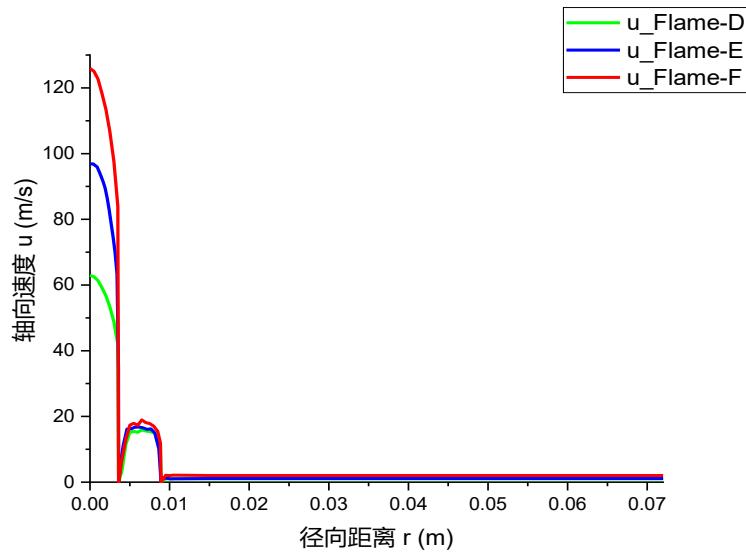


图 16. Flame-D, Flame-E, Flame-F 的速度分布

本次程序检验中，射流火焰三个算例计算所用网格皆为 630 万正方体网格。采用 2 个随机场计算燃烧反应。每个算例使用 192 个核心计算至 2 万时间步，时间步长按 CFL 数为 0.2 至 0.3 修正。模拟所用网格共 630 万，如下图 17 所示。

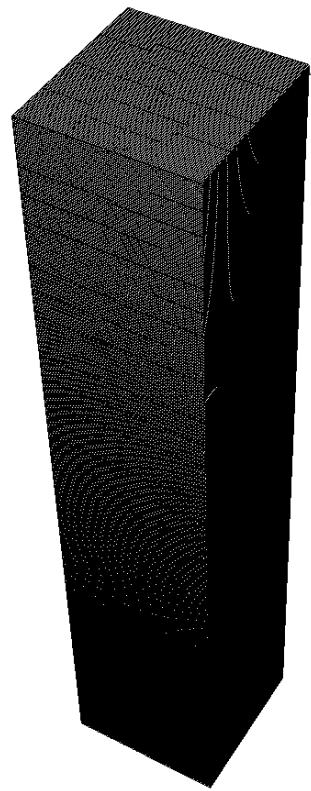


图 17. 射流火焰算例网格

4.2 温度场对比验证

本文应用修改后的 AECSC-Jasmin 软件对以上所述的射流火焰算例进行湍流燃烧模拟，提取多个截面的温度分布，将火焰左右部分温度曲线、原 AECSC 2.0 的模拟结构以及实验值对比，以验证修改后 AECSC-Jasmin 软件对温度场模拟的准确性。

本文对 2 万时间步时的平均温度场按实验数据分别取三种火焰中部的四个截面，并作平均温度分布曲线，并与实验值及 AECSC 的计算值对比，如下图 18 至图 20 所示。取样的四个截面分别为 $Z/D = 7.5, 15, 30, 45$ 。其中 Z 为射流方向坐标， D 为内喷口直径。

首先取以上四截面并对比模拟结果中的温度场。

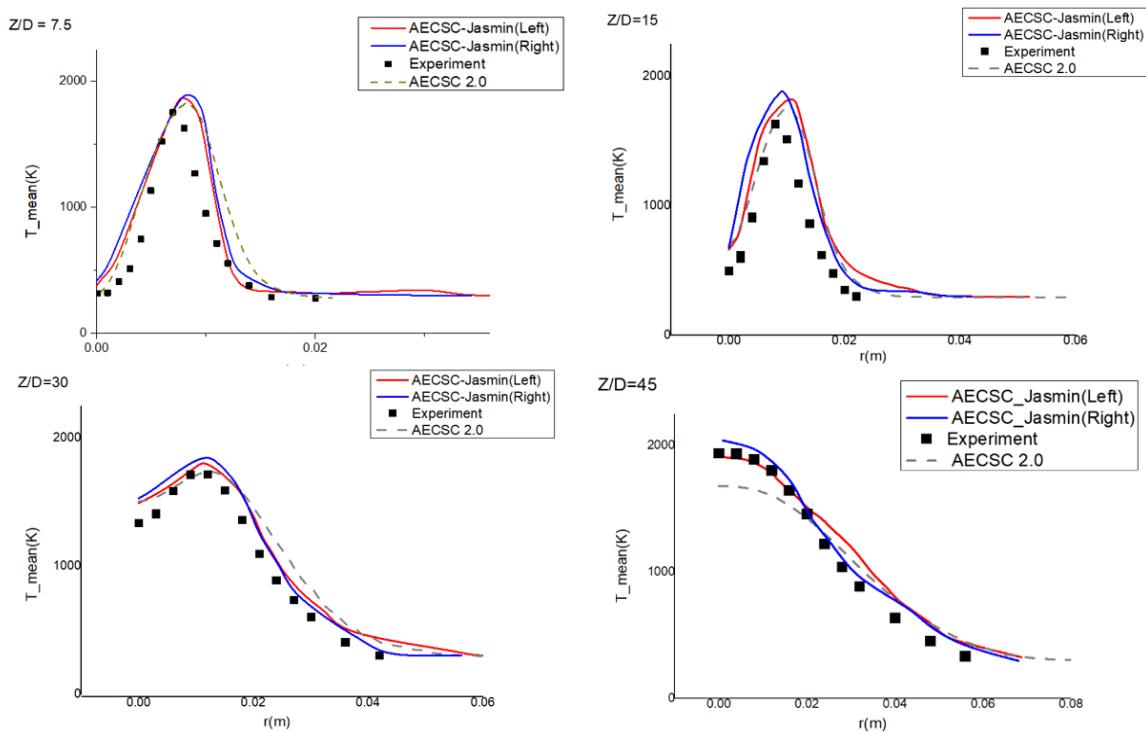


图 18. Flame-D 的 AECSC-Jasmin 计算值，AECSC 2.0 计算值，实验值对比

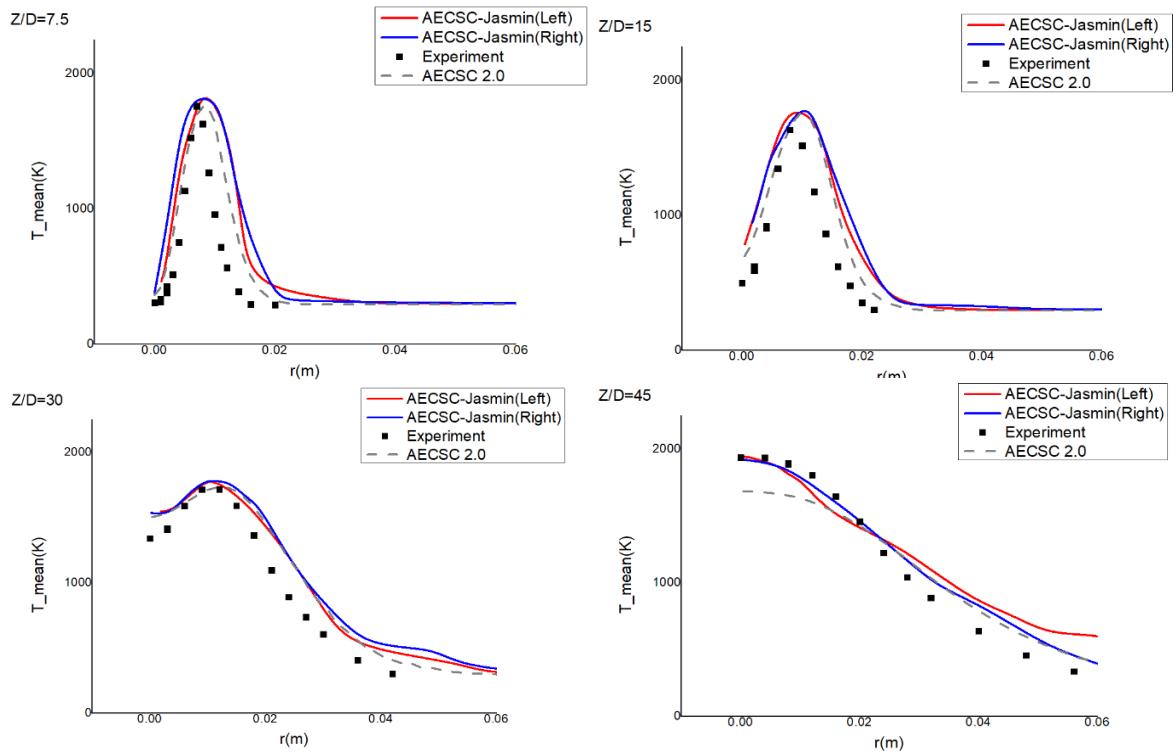


图 19. Flame-E 的 AECSC-Jasmin 计算值, AECSC 2.0 计算值, 实验值对比

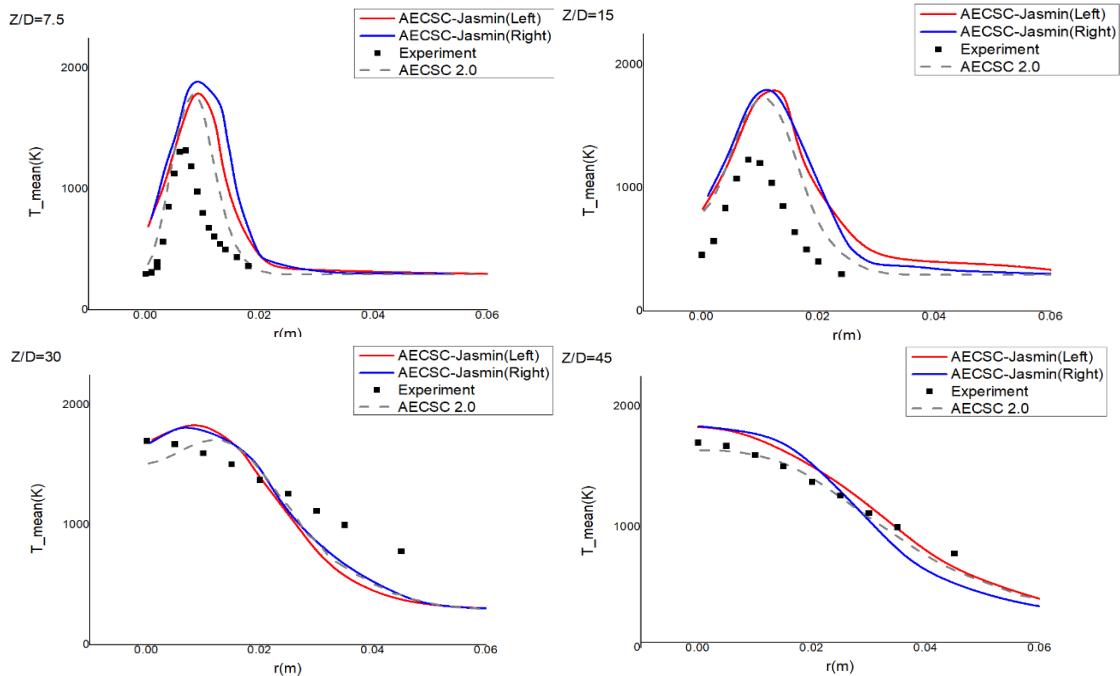


图 20. Flame-F 的 AECSC-Jasmin 计算值, AECSC 2.0 计算值, 实验值对比

从图 18, 图 19 和图 20 可以看出, AECSC-Jasmin 计算得到的时均温度场分布与实验值及 AECSC 2.0 计算值基本相符。因此 AECSC-Jasmin 软件可正确地模拟射流高雷诺数湍流燃烧, 本软件可以准确模拟湍流燃烧中温度场。

4.3 温度脉动对比验证

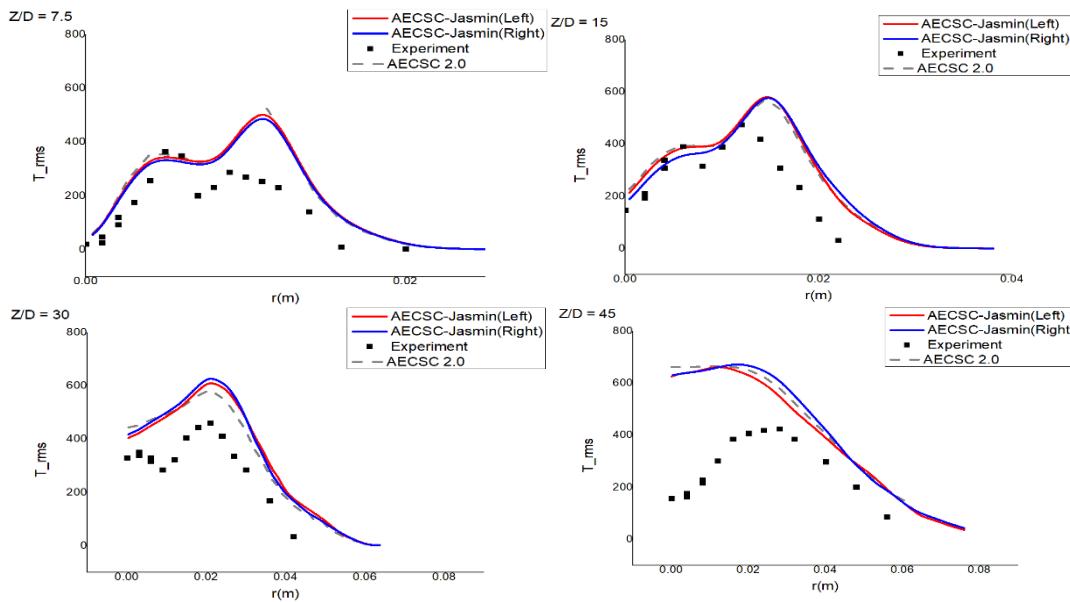


图 21. Flame-D 的 AECSC-Jasmin 计算值, AECSC 2.0 计算值, 实验值对比

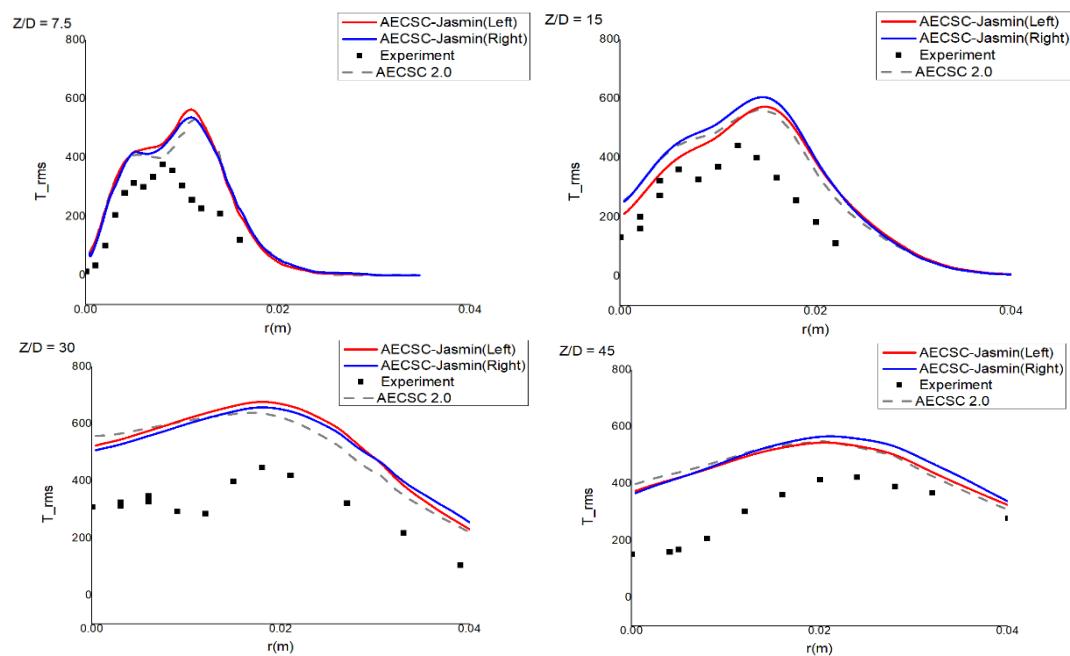


图 22. Flame-E 的 AECSC-Jasmin 计算值, AECSC 2.0 计算值, 实验值对比

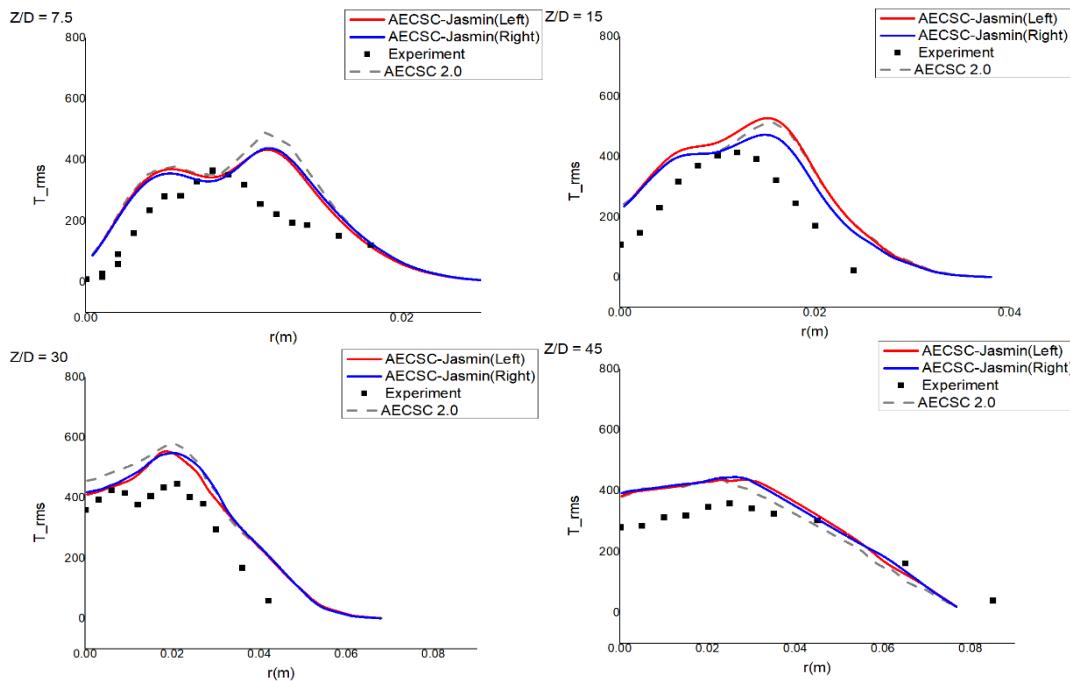


图 23. Flame-F 的 AECSC-Jasmin 计算值, AECSC 2.0 计算值, 实验值对比

由上图 21, 图 22 和图 23 可得, 本软件模拟结果中的温度脉动与实验值及 AECSC 2.0 计算值基本相符。表明 AECSC-Jasmin 能够准确地模拟湍流流动与化学反应的相互作用。因此, 本软件可以应用于下文中支板算例以及单头部燃烧室算例的湍流燃烧模拟。

4.4 本章结论

AECSC-Jasmin 与 AECSC 2.0 计算结果和实验值都非常接近, 证明本软件对湍流燃烧温度场的模拟及湍流与化学反应的相互作用具有较好的准确性和较高的精度。

AECSC-Jasmin 的计算结果相比 AECSC 2.0 及实验值存在一定的误差。原因有两点: 一为本算例仅做简单验证, 因此只计算到 20000 时间步 (约 0.05~0.09 秒), 稳定燃烧的采样时间较短; 二为本算例采用全场相同的正方体网格, 虽然总网格数为 630 万多于所选取 AECSC 2.0 算例的 217 万网格, 但由于无法局部加密, 网格宽度全部为 1.33 毫米, 大于原版本局部加密网格的网格最小宽度 1 毫米, 网格分辨率略低。

AECSC-Jasmin 所采用立方体网格自动生成算法及浸没边界算法更适合应用于常规结构网格难以构建的复杂结构, 如航空发动机燃烧室中。对于结构极其简单的算例, 如射流火焰, 使用 AECSC-Jasmin 若要达到原程序的同等精度, 则总网格量比原算例应增大约 7 倍。但新版软件可快速划分高质量网格且能应用于大规模高效并行计算, 因此对



于工程实际应用以及较复杂的算例的计算中仍优于 AECSC 2.0。

在本章射流火焰算例模拟中，得出以下结论：经验证，修改后的 AECSC-Jasmin 对湍流燃烧模拟较为准确，可用于进一步的支板火焰稳定器以及真实单头部燃烧室的两相湍流燃烧模拟。

第五章 凹腔支板火焰稳定器模拟

支板火焰稳定器为加力燃烧室中常用的稳焰结构。本文采用凹腔支板火焰稳定器作为加力燃烧室的简化模型，并在该模型的基础上进行两相湍流燃烧的模拟。

5.1 算例简介

本课题组在之前的工作中对凹腔支板火焰稳定器开展了大量研究，试验了不同位置、角度、宽度的凹腔以及不同厚度的支板对湍流燃烧火焰的稳定效果，并得出下图 24 中稳焰性能较好的支板设计参数。

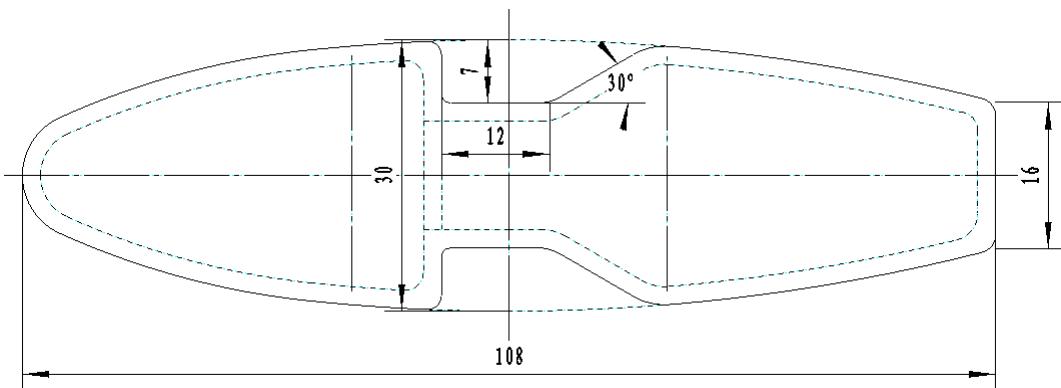


图 24. 凹腔支板火焰稳定器结构（单位为毫米）

凹腔支板火焰稳定器采用流线型翼面设计，由三段圆弧构成外缘轮廓，整体长度 108 毫米，最大宽度 30 毫米，尾缘宽度 16 毫米。在支板弧度最大位置开深度为 7 毫米，宽度为 12 毫米的凹腔。凹腔后端面与中轴线夹角 30 度。

支板两相湍流燃烧算例使用 RP3 航空煤油燃料，计算工况为设计工况，油气比为 0.007。入口为马赫数 0.2，温度 1173K，压强 1atm 的高速热空气，初始全场压强为 1atm。本算例无电火花点火过程，而是通过入口高温空气进行热射流点火。

实验时，喷油流道尺寸为 700x150x150 毫米，由三个供油点同时供油。

数值模拟时，将支板展向流道尺寸缩小为原尺寸的三分之一，并只使用单个供油点，以减少计算量。计算时，支板展向边界采用对称边界条件。支板上下两侧为固壁，前部边界为入口，后部边界为出口。

在使用原 AECSC 2.0 软件模拟支板稳焰算例时，通过 ICEM 划分网格及分块，使用的网格为贴体结构网格。以下图 25 左侧魏观溢^[27]划分的网格为例，对于凹腔支板算例，采用 86 万总网格数，最小尺寸为 0.2 毫米，最大尺寸为 7.2 毫米的网格可得到与实验值

较为符合的温度场。图一左侧为网格划分情况，右侧为并行分块情况。

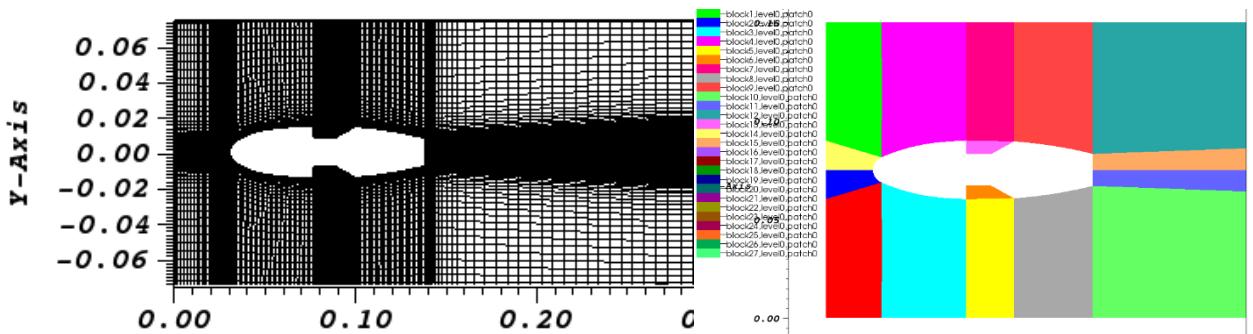


图 25. AECSC 2.0 上支板算例网格 (左) 及分块情况 (右) [27]

对于 AECSC-Jasmin，由于采用了自动划分的浸没边界网格，网格为全场完全相同的立方体，无法对局部进行加密。在网格总数相同时，最高分辨率将远低于 AECSC 2.0 采用的局部加密贴体网格。而如果保证最大分辨率与局部加密的贴体网格相同，总网格数则要增大至原算例的 18 倍，计算量过大。因此本算例网格总数增加到 270 万，全场网格尺寸为 1.25 毫米。软件生成的网格锯齿形边界及其并行分块情况如下图 26 所示，其中不同颜色代表分配给不同处理器的并行块。并行计算的负载均衡由外部 Jasmin 框架实现，无需对网格手动分块。

在本文 4.2 对射流火焰算例的计算中，可以看出在雷诺数 22400 至 44800 的射流火焰算例中，采用全场尺寸为 1.33 毫米的网格，得到的温度场计算结果与实验值基本相符。因此在本算例中，采用全场尺寸为 1.25 毫米的网格是合理的。

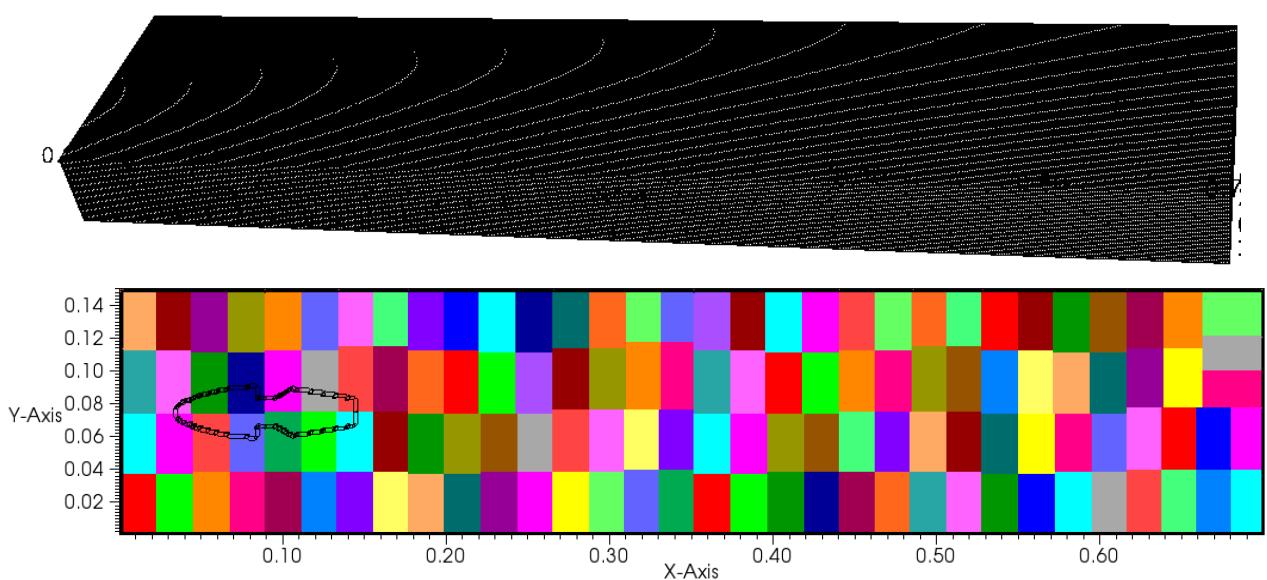


图 26. AECSC-Jasmin 网格及并行分块

采用浸没边界方法、立方体网格自动生成以及自动负载均衡减少了网格划分以及并行分块工作量，保证了全场网格质量为 1 并且提高了并行效率。对于支板火焰稳定器算例，由于其结构非常简单，减少网格划分与分块工作量等优势并不突出，但全场网格尺寸一致带来了计算量较高和最高分辨率较低的缺陷。并且，对于两相喷雾燃烧的计算而言，由于网格将壁面表现为锯齿形，曲线型壁面的法向量无法直接求解，因此，粒子在壁面上反弹方向便难以求解。本软件也因此暂时不具备粒子反弹的壁面边界条件，液滴粒子碰撞壁面时将被壁面吸收。两相支板算例中，喷口喷出的几乎全部液滴都会快速撞到支板前缘，因此按原喷雾条件计算会造成液滴粒子几乎全部被壁面吸收的情况，如下图 27 所示。

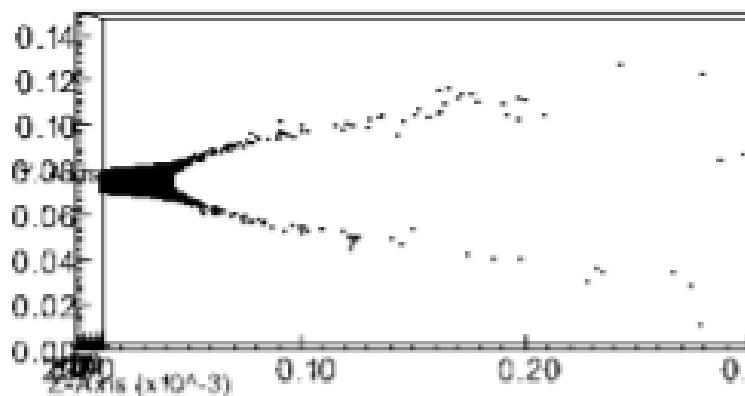


图 27. 喷雾部分修改前两相支板算例喷雾粒子分布

由于支板火焰稳定器的实验数据为喷雾燃烧实验测得，因此本算例需要模拟粒子遇到壁面反弹后的分布情况。实验中，液滴从直径为 0.3 毫米的喷口以 29 米每秒的速度喷出，喷雾锥角 10 度，smd 设置为尺寸分布指数为 3.8 的 Rosin-Rammler 分布中的特征直径 \bar{d} ，为 50 微米。下式 5.1 中， R 为直径小于 d 的液滴的质量分数， \bar{d} 为液滴粒子特征直径，在本算例中为 50， n 为液滴尺寸分布指数，在本算例中为 3.8。

$$R = 1 - e^{-\left(\frac{d}{\bar{d}}\right)^n} \quad (5.1)$$

如下图 28 所示，粒子从喷口按蓝色粗体箭头方向喷出，碰撞到支板前缘（图中白色曲线）后反弹。红色线为无流场影响时粒子的轨迹。为模拟粒子反弹后的分布，AECSC-Jasmin 算例中，将改变喷口位置约至黑线位置，喷雾方向约为蓝色细箭头所示。喷雾条件的具体设置方案为，首先计算出正常反弹时的粒子分布，在反弹后的粒子轨迹上取一喷点位置（例如下图中的黑线位置），求出该位置上的粒子温度，粒子运动方向以及平均

直径等数据。再根据以上数据，将喷点改至粒子反弹后的轨迹上，从而规避反弹过程的壁面法向量计算。

由于修改前后的喷口距离支板前缘都极近，且实验中支板前缘几乎燃烧反应的发生。因此，液滴粒子从原喷口位置喷出至运动到新喷口位置过程中地液滴蒸发及燃烧可忽略。以上可证明对于中央截面而言，修改喷口位置和喷雾方向至反弹轨迹上，并相应地修改粒子 smd 、温度、速度可模拟原喷雾条件及粒子反弹。

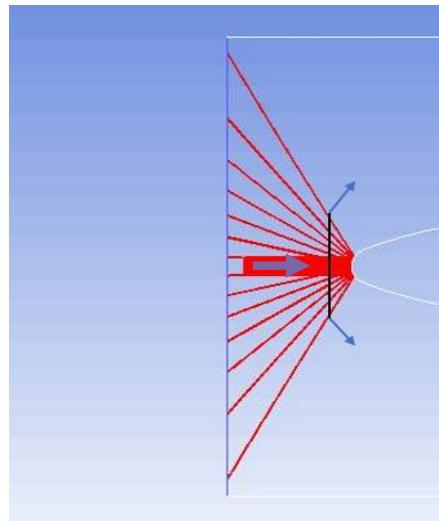


图 28. 去流场耦合中央截面粒子反弹轨迹图

首先，使用 AENSYS-Fluent 对喷口位置、喷雾角度等参数与实验值一致的支板算例进行喷雾燃烧模拟，目的为求得中央截面的液滴粒子分布状况。上图 28 中为不受流场耦合影响的粒子运动情况，下图 29 中为 Fluent 计算得到的粒子运动轨迹以及用 smd 色标表示的粒子蒸发过程。从图 29 中进一步证明了喷雾粒子由喷口喷出至在壁面反弹过程中， smd 基本不变，此区间内的蒸发和燃烧反应可以忽略。因而再次证明了在反弹后壁面的粒子轨迹上设置新喷点是可行的。

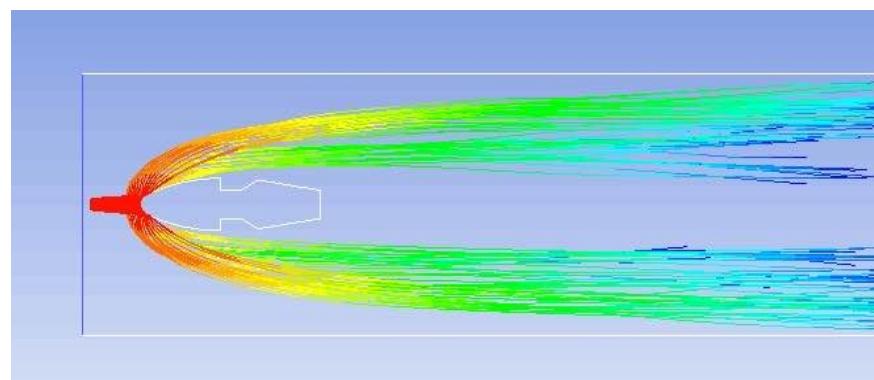


图 29. ANSYS-Fluent 喷雾粒子轨迹计算结果

根据 ANSYS-Fluent 对本算例喷雾的计算结果, 选取新的喷口中心位置为 (0.02 m, 0.075 m, 0.0 m), 圆环形喷口半径为 12 毫米。对 Fluent 计算结果中该圆环位置的粒子速度取平均得, 喷雾速度约为 40 米每秒。粒子平均直径约为 50 微米, 与原喷口一致。平均温度约 350K。在新喷口圆环的位置上, 粒子运动方向与流向夹角约为 30 度, 因此, 新的喷雾锥角应设定为约 60 度。

在以上算例确定喷口位置和喷雾粒子参数的基础上, 使用本 AECSC-Jasmin 软件计算凹腔支板两相湍流燃烧算例, 如图 30, 验证修改后喷雾粒子的分布是否合理。

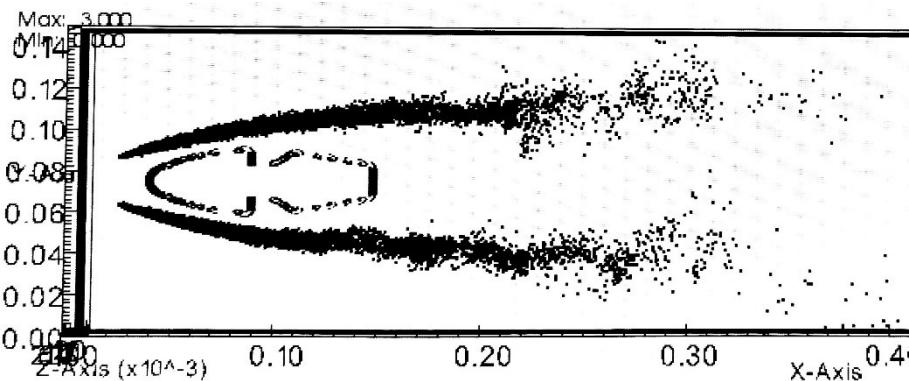


图 30. 喷雾部分修改后两相支板算例喷雾粒子分布

上图为修改喷雾条件后, 用 AECSC-Jasmin 软件计算得到的某时刻瞬态粒子分布图, 可以看出, 按表 3 参数修改后的算例喷雾粒子分布与 Fluent 计算得到的粒子轨迹图一致。以下全部支板算例喷雾参数全部与表 3 中修改后喷雾条件一致, 仅在反应机理或油气比上作调整。按照修改后喷雾参数条件计算的支板火焰稳定器稳定燃烧工况, 将四步机理的计算结果与原喷雾条件对比即可验证喷雾条件修改的正确性。

表 3. 修改喷雾条件前后参数对比

参数\算例	原喷雾条件	修改后喷雾条件
喷雾中心坐标	0.005, 0.075, 0.0	0.02, 0.075, 0.0
喷雾锥角	10	60
喷口半径	0.003	0.012
粒子 smd	50	50
粒子温度	301	350
粒子初速度	29	40

5.2 稳定燃烧工况

本文使用烷烃四步机理及准稳态 118 步机理模拟了支板算例的稳定燃烧工况, 并与实验测得的出口温度及 ANSYS-Fluent, AECSC 2.0 模拟得到的出口温度进行对比, 验

证。并且对凹腔支板结构的稳焰性能做出分析。

空气进口为长 125 毫米，宽 25 毫米的矩形，位于支板前端计算域边界的中央，进口温度 1173K，速度 137 米每秒 ($Ma=0.2$)。根据 0.007 的油气比计算得喷油量为 0.0036 千克每秒。

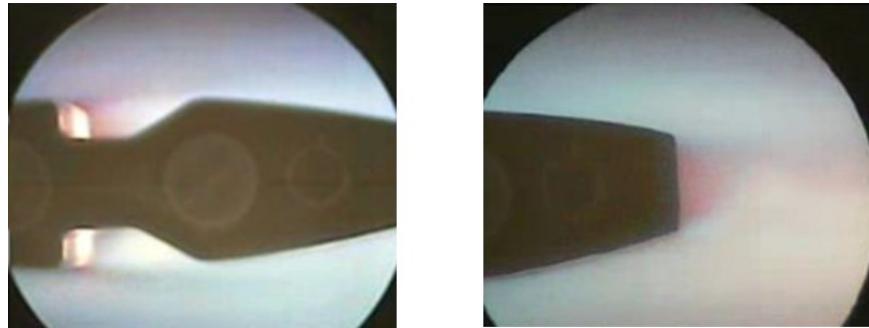


图 31 凹腔支板两相湍流燃烧实验照片^[27]

本课题组按以上边界条件及油气比的凹腔支板稳定燃烧实验照片如上图 31 所示。实验证明，在该工况下 1173K 的热空气可直接引燃 RP3 煤油，无需电火花点火。并且该工况下支板对两相煤油燃烧有明显的火焰稳定作用。

燃烧反应过程中的高温会引起有价电子跃迁，形成发光基团，发出可见光，并且在可见光范围内，高温引起的热发光与燃烧反应的剧烈程度正相关。如图 31 所示，燃烧反应从凹腔结构的前缘开始发生，凹腔前部热发光现象明显，存在白色高亮区，温度较高。在支板后缘也有明显的燃烧反应，但弱于凹腔部分。支板尾部整体位于白色高亮区，因此整个支板尾部都发生剧烈的燃烧反应，该工况下支板后缘对湍流燃烧有稳定作用。

5.2.1 参数修改验证

首先分析 AECSC-Jasmin 采用烷烃四步机理作为煤油燃烧机理的模拟结果。本算例采用改进后的喷雾条件，因此将此算例的时均温度场与喷雾参数未修改时，采用 AECSC 2.0 计算得到的温度场对比即可验证之前对喷雾参数的修改是否合理。

湍流燃烧过程可以最直观地用瞬态温度场反应，为增强温度场直观性，并区别显示温度场和其他参数场，本文在之后的算例中将采用“orange hot”色标处理温度场，采用“hot”色标处理其他参数场。

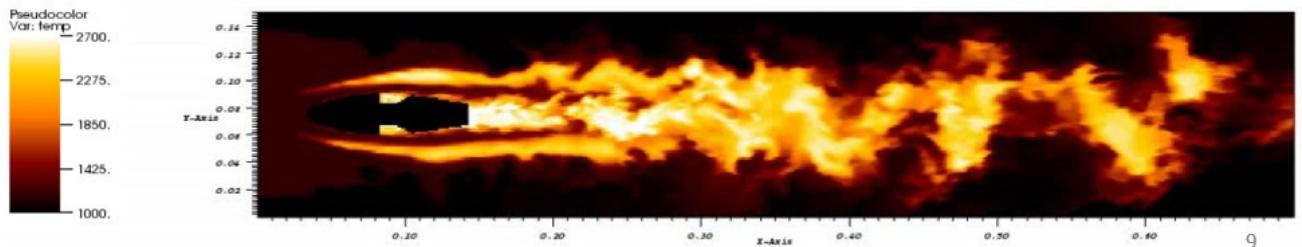


图 32. 四步机理稳定燃烧状态瞬时温度云图 (orange hot)

上图 32 为四步机理模拟支板火焰稳定器某稳定燃烧工况得到的瞬态温度分布云图。可以看到，四步机理模拟凹腔支板火焰稳定器两相湍流燃烧时，蒸发后的煤油在支板前缘有燃烧现象。支板的凹腔部分有明显的高温区，存在驻定火焰，尾缘部分火焰温度最高。这证明支板火焰稳定器的凹腔和尾缘都对湍流火焰有稳定作用，在该工况下，煤油燃烧放热过程主要在支板尾缘进行。

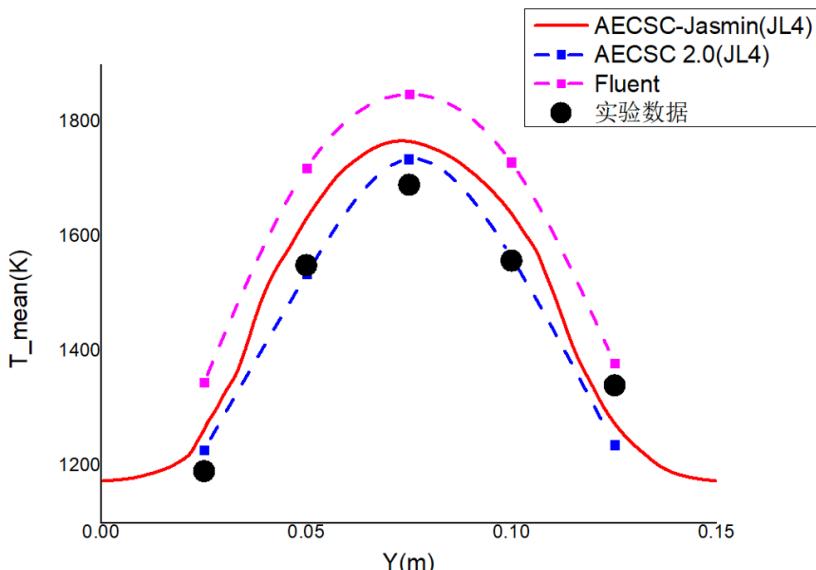


图 33. 不同软件计算得到的出口温度分布及实验数据

上图 33 中，将 AECSC-Jasmin 采用烷烃四步机理计算得到的出口温度分布分别与 AECSC 2.0 烷烃四步机理的计算结果、Fluent 扩散小火焰面的计算结果以及实验数据对比。

其中，AECSC 2.0 采用贴体结构网格，采用粒子反弹的壁面条件，其他参数以及反应机理与 AECSC-Jasmin 算例一致，且并未修改过喷雾参数，喷口条件与实验一致。从图中红色实线（AECSC-Jasmin）与蓝色虚线（AECSC 2.0）对比中可以发现修改过喷雾参数的 AECSC-Jasmin 算例结果与未修改喷雾参数的 AECSC 2.0 计算结果基本一致。

表 4. 不同软件计算得到的出口温度分布与实验数据的相对误差

位置(mm)	实验	Fluent		AECSC 2.0 (JL4)		AECSC-Jasmin (JL4)	
		温度(K)	温度(K)	相对误差	温度(K)	相对误差	温度(K)
25	1191	1346	13.01%	1228	3.11%	1267	6.38%
50	1550	1720	10.97%	1634	-1.03%	1624	4.77%
75	1690	1849	9.41%	1735	2.66%	1775	5.30%
100	1559	1730	10.97%	1563	0.26%	1644	5.45%
125	1340	1379	2.91%	1236	-7.76%	1264	-5.67%

结合上图 34 以及上表 4, AECSC-Jasmin 软件修改喷雾参数后的出口温度分布计算结果与贴体网格未修改喷雾参数结果一致并且与实验值相符。这证明前文中对该算例的喷雾参数修改是正确的。

表 4 中, AECSC-Jasmin 平均相对误差为 5.514%, 最大相对误差为 6.38%。AECSC 2.0 平均相对误差为 2.964%, 最大相对误差为 7.76%。AECSC-Jasmin 平均误差相比 AECSC 2.0 更大, 出软件算法本身精度外, 主要有两点原因。第一, 修改喷雾参数的依据为 Fluent 计算得到的粒子反弹数据并取平均, 用修改喷雾参数的方法并不能准确模拟粒子在新喷口附近的参数以及运动情况。第二, AECSC-Jasmin 软件所计算的算例网格全场尺寸一致, 无局部加密算法, 网格尺寸为 1.25 毫米, 而 AECSC 2.0 算例的网格进行过局部加密, 最小尺寸为 0.2 毫米, 网格分辨率更高, 在支板附近的计算精度高于 AECSC-Jasmin。

在表 4 中对比 Fluent 计算结果以及 AECSC-Jasmin 计算结果。Fluent 火焰面模型模拟得到的出口温度分布与实验值相比, 平均相对误差为 9.454%, 最大相对误差为 13.01%。Fluent 计算结果的平均相对误差与最大相对误差都远大于本文中 AECSC-Jasmin 的计算结果的相对误差, 由于 Fluent 采用了扩散小火焰面模型, 而 AECSC-Jasmin 采用了 LES-TPDF 方法, 所以误差对比结果证明了输运概率密度函数 (TPDF) 与大涡模拟 (LES) 算法结合在湍流燃烧数值模拟上的优越性。

5.2.2 支板稳焰原理分析

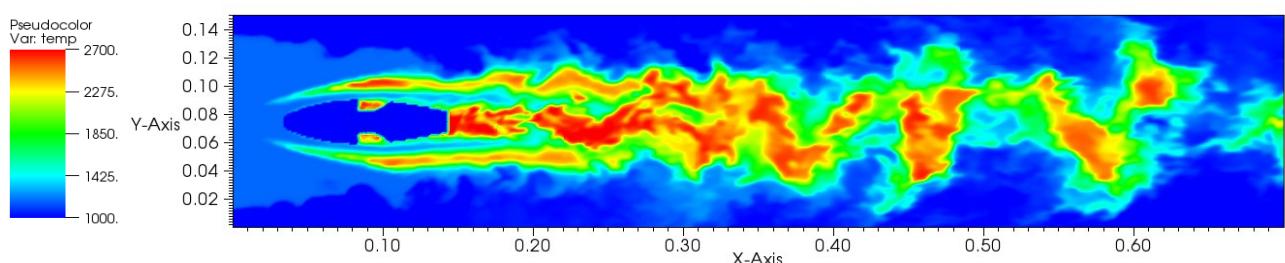


图 34. 四步机理稳定燃烧状态瞬态温度云图 (hot)

在流动方面,如上图 34 的瞬态温度场所示,湍流对温度场的作用明显,能观察到卡门涡街现象。证明由于进口速度大($Ma = 0.2$),支板尾部火焰的流动时间尺度 τ_{resi} 大于化学反应时间尺度 τ_{chem} ,因此尾部火焰的 Damköhler 数大于 1,根据 Damköhler 数判断可以认为支板尾部存在局部熄火。

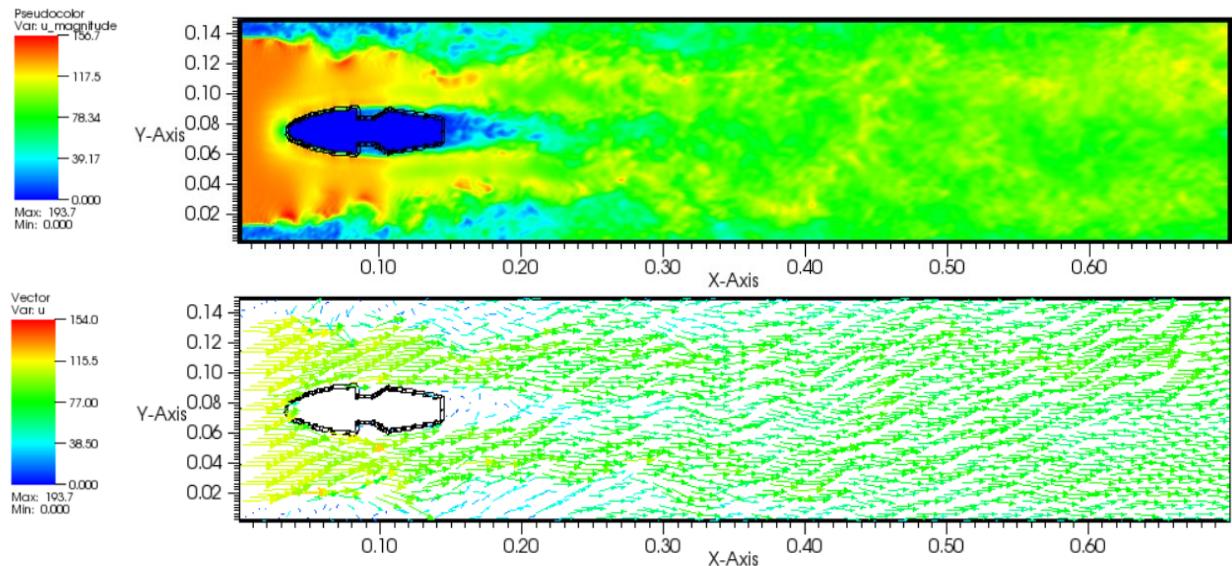


图 35 四步机理稳定燃烧状态瞬态速度云图(上)及矢量图(下)

通过上图 35 可以看出,高速空气从进口突扩结构流入后迅速减速,脉动速度明显增加,湍流度增大。支板前空气流经支板前缘部分时,流道变窄,速度增大。而空气流过支板后缘部分时,流道扩张,流速减慢,并且在支板后缘形成明显的低速回流区。与之相同地,在支板的上下凹腔处也分别存在两个低速回流区。

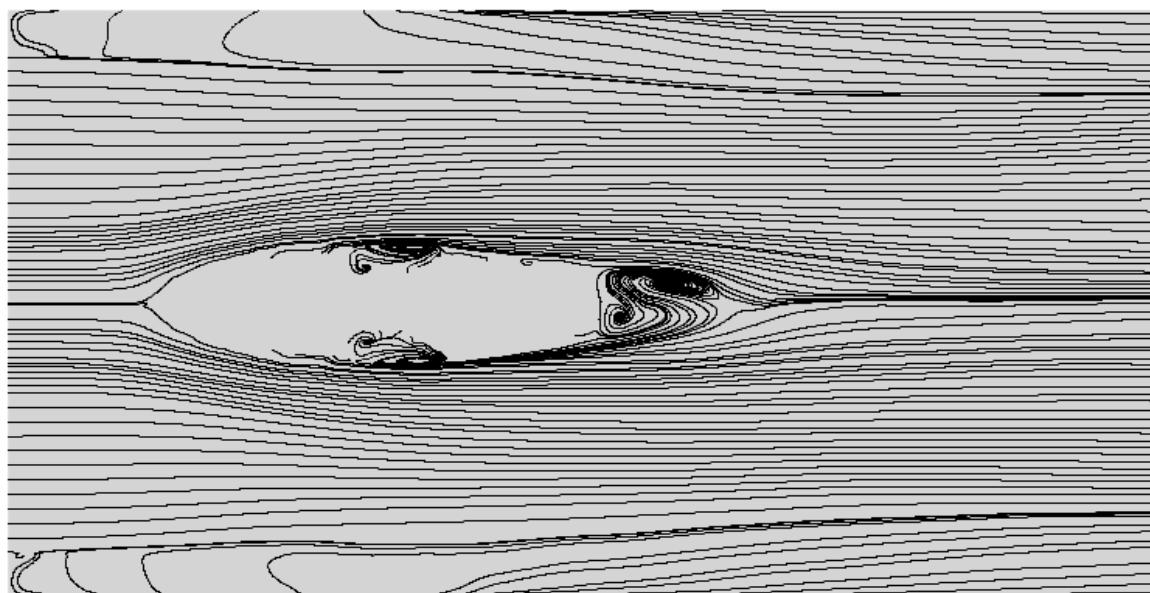


图 36 四步机理稳定燃烧状态流场流线图

图 36 中显示了流场中央截面的流线。从流线图中可知, 存在 5 个流体流动剪切作用较强的区域, 分别为靠近进口的上下壁面附近, 支板结构的上下凹腔, 以及支板后缘。其中, 支板凹腔处与支板后缘存在较强的驻涡。由于空气进口相比流场前部更窄, 进口壁面附近为台阶流形式, 因此高速来流与进口壁面附近的静止流体产生强剪切作用, 形成较弱的涡结构。上下壁面进口附近的涡量方向分别为向上和向下, 形成两个回流区。支板结构上下凹腔涡量方向分别为向下和向上, 形成两个回流区。支板尾缘上半部分和下半部分涡量方向分别为向下和向上, 因此支板尾缘也形成一个回流区。

由于喷油点在支板前缘附近, 油滴主要沿支板边缘运动, 因此流场中的五个回流区中, 仅支板上下凹腔部分以及支板尾缘存在稳焰效果, 而入口壁面附近无燃烧现象, 入口回流区为突扩结构形成, 主要作用为降低流速。

参考图 32 和图 34 可得, 高温区主要稳定存在于支板上下凹腔以及支板后缘处, 与回流区的位置基本相同。在本文 1.4 节中提到的火焰拉伸率 Karlovitz 数判据认为, 局部熄火导致低温油气混合物进入回流区, 造成火焰不稳定现象, 流动与混合的特征时间大于燃烧反应的特征时间。回流区边缘温度梯度降低, 流场接近于冷态的卡门涡街流动状态。卡门涡街的产生加剧了低温油气与回流区内高温燃气的混合, 从而使得火焰不稳定性提高, 最终火焰缩入回流区直至熄火。

在本算例中, 由于热射流点火的来流温度较高, 因此低温油气与高温燃气混合后, 混合物温度仍能保证燃烧反应稳定发生, 因此本算例虽流场中存在卡门涡街现象, 高温回流区仍能稳定存在。根据以上速度场和温度场的分析可知, 支板凹腔及支板后缘的高温回流区为支板达成稳焰效果的关键结构。

5.2.3 不同机理模拟温度场对比

本文修改 AECSC-Jasmin 中化学反应机理部分, 添加 118 步准稳态煤油反应机理后, 采用该准稳态机理作与上文烷烃四步算例同工况下的湍流燃烧模拟。

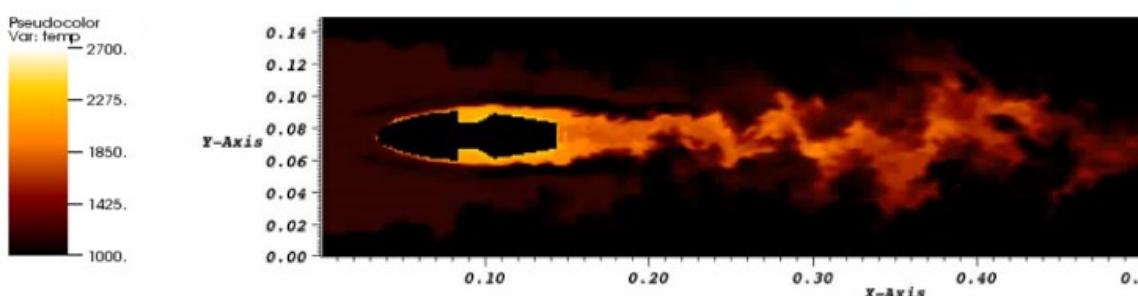


图 37. 准稳态机理稳定燃烧状态瞬时温度云图 (orange hot)

上图 37 为 118 步准稳态机理模拟得到的支板算例稳定燃烧工况瞬态温度场。可以

看到高温区存在于支板上下凹腔处及支板尾缘，且上下凹腔处的高温区温度略高于支板尾缘部分。支板尾部流场存在明显的卡门涡街，因此湍流的影响大于温度梯度对流场的影响，即流动时间尺度 τ_{resi} 大于化学反应时间尺度 τ_{chem} ，与烷烃四步机理模拟得到的流场特征相似。

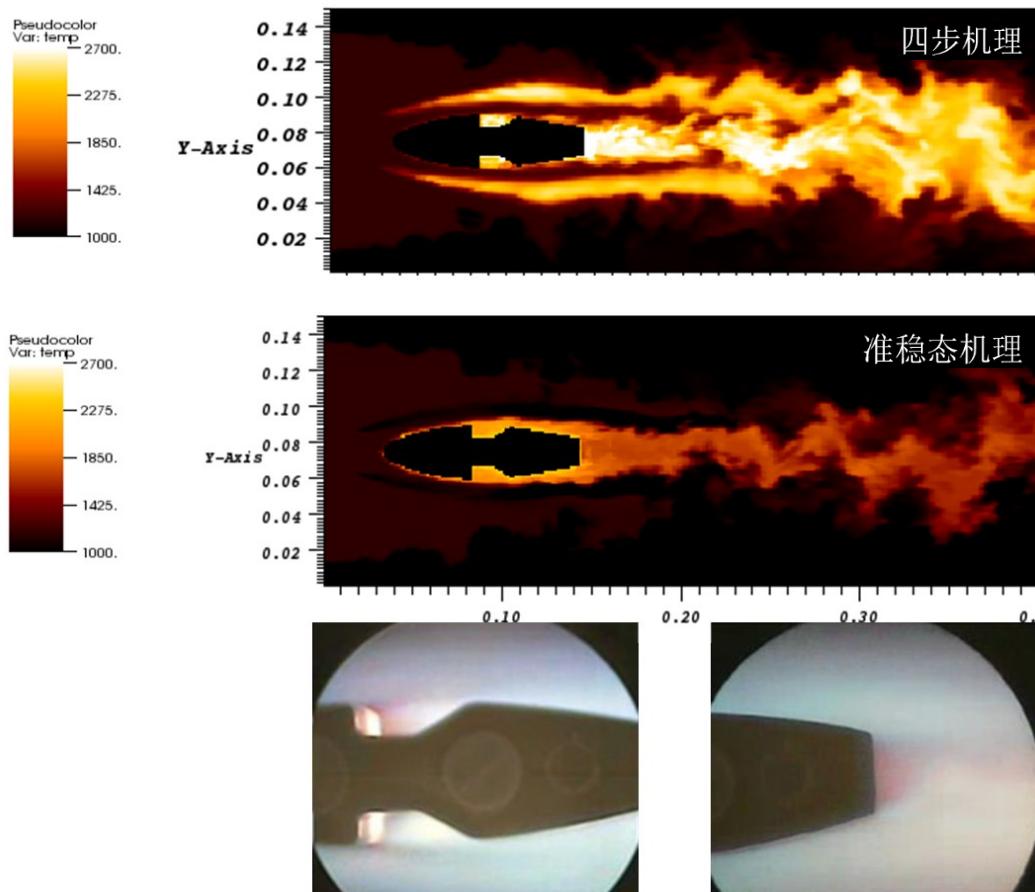


图 38. 两种机理支板瞬态温度云图（上）及实验照片（下）对比

上图 38 中，给出了四步机理和准稳态机理模拟得到的瞬态温度云图以及实验照片的对比。其中，四步机理模拟的结果相比准稳态机理高温区温度更高，并且尾部高温区更宽。四步机理的模拟结果中，在支板上下存在脱体的高温区，与实验结果不符。而准稳态机理模拟结果中不存在脱体的高温区，与实验照片贴合情况较好。

显然，从高温区分布的角度上，准稳态机理的准确性更好，且与四步机理相比，准稳态机理的准确性体现在瞬态温度云图不存在与实际不符的脱体高温区。除了高温区的分布外，两种反应机理模拟得到的高温区温度也存在一定差异。在图 38 中，可明显看出四步机理模拟得到的温度区温度高于准稳态机理的模拟值。

在下图 39 中对比了支板算例稳定燃烧工况四步机理、准稳态机理、实验数据的出口温度分布。与以上分析相同地，准稳态机理模拟结果的高温区比四步机理模拟结果的

高温区宽度更窄并且高温区温度较低。而与实验值相比，烷烃四步机理的模拟结果温度分布趋势相同，但整体偏高。准稳态机理模拟结果的出口最高温度与实验值更为贴近，但总体温度偏低，并且高温区相比实验数据更窄。

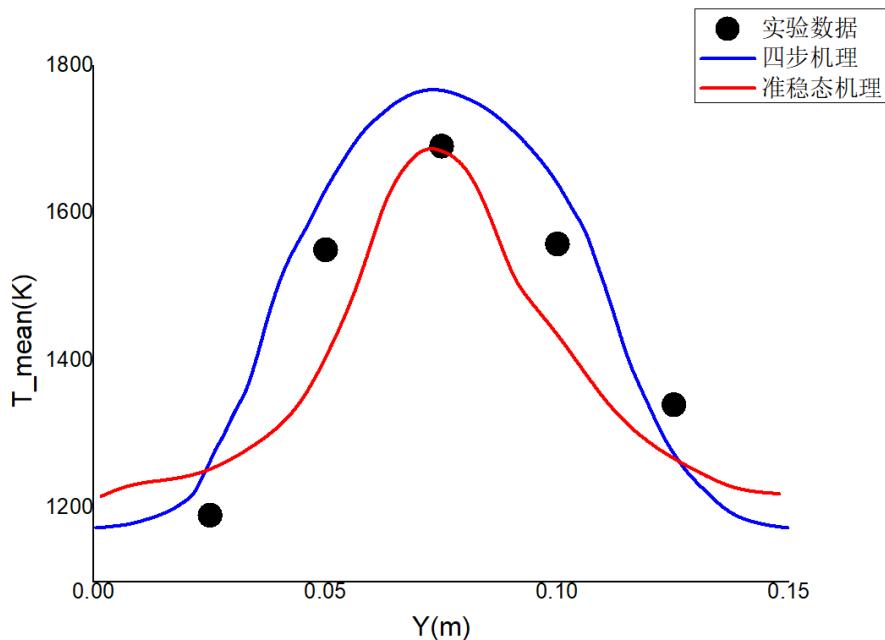


图 39. 不同机理计算得到的出口温度分布模拟结果及实验数据

在下表 5 中，统计了出口中央平面上沿 Y 方向五个位置上的温度烷烃四步机理、准稳态机理模拟数值以及实验数值，并且将两种反应机理的模拟结果分别于实验数据对比并求得了相对误差。从表中可得，烷烃四步机理的模拟结果除 Y=125mm 位置外，其它统计点上比实验值高 5%~6% 左右，与实验温度数据偏差的分布比较均匀，相对误差绝对值的总体标准差的方差为 0.27554%，因此四步机理模拟得到的高温区形状及趋势与实验数据更贴近。而准稳态机理中央最高温度点与实验值相比的相对误差仅为-0.24%，最高温度相比四步机理模拟结果更为准确，但在 Y=50mm 及 Y=100mm 处误差较高，且总体误差分布不均匀，相对误差绝对值的总体标准差的方差为 11.98406%，高于烷烃四步机理模拟结果的该数值。



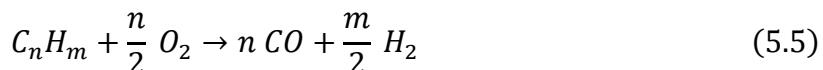
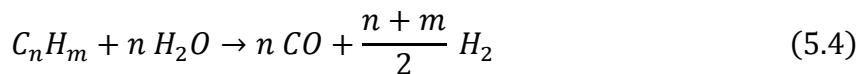
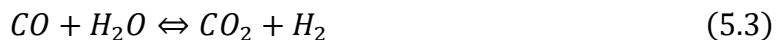
表 5. 不同机理计算得到的出口温度分布与实验数据的相对误差

	实验	AECSC-Jasmin (JL4)	AECSC-Jasmin(RP3)		
位置(mm)	温度(K)	温度(K)	相对误差	温度(K)	相对误差
25	1191	1267	6.38%	1249	4.87%
50	1550	1624	4.77%	1403	-9.48%
75	1690	1775	5.30%	1686	-0.24%
100	1559	1644	5.45%	1434	8.02%
125	1340	1264	-5.67%	1311	2.16%

总体上, 烷烃四步机理模拟结果的平均相对误差为 5.514%, 准稳态机理模拟结果的平均相对误差为 4.954%。因此, 准稳态机理的模拟结果总体上比烷烃四步机理更为精准, 但二者精度差距不大。准稳态机理模拟得到的出口最高温度值准确性更好, 而烷烃四步机理模拟得到的出口温度变化趋势更为准确。两种机理模拟的准确性分别在不同方面存在一定的优势。

5.2.4 烷烃四步机理模拟浓度场分析

为探究湍流燃烧化学反应机理中影响火焰形态及温度分布的基元反应, 本文选取主要的放热过程, 研究相关组分浓度。



以如上式 5.2 至式 5.5 所示的烷烃四步机理为例, 可以将碳氢化合物的氧化过程描述为: 1. 碳氢化合物分解及初步氧化得到碳元素初步氧化物 (CO) 和氢气 (H_2); 2. 碳元素完全氧化为 CO_2 ; 3. 氢元素氧化为 H_2O 。其中, H_2 氧化生成 H_2O 的过程为反应的主要释热过程。碳元素氧化放热最终也转化为 H_2 氧化放热的形式。因此, 下文分别从 C 元素完全氧化生成 CO_2 以及氢元素完全氧化生成 H_2O 的角度讨论温度场浓度场间的关系。

由 5.2.2 中对支板火焰稳定器的速度场分析可知, 在本算例中火焰的流动时间尺度 τ_{resi} 大于化学反应时间尺度 τ_{chem} , 湍流流动占主导作用, 因此温度与化学反应组分的浓度都可作为被输运的标量, 且输运系数相同。因此可以认为支板模型湍流燃烧中传热主要为对流形式, 导热和辐射传热可忽略, 因此对于任意的流体微元, 热量输运和流体质点输运比例相同, 即传热和传质是同步的。而质量输运与组分浓度变化同步, 因此化学反应的进行与温度分布存在关联。

首先讨论碳元素的氧化过程中 CO_2 浓度场与温度场之间的关系。对于航空煤油等碳氢燃料, H_2 氧化为 H_2O 以及 CO 氧化为 CO_2 的反应为燃烧过程中放热极高的过程。下图 40 中从上至下依次列出了 H_2O , CO_2 的浓度场和同时刻的温度场作为对照。 H_2O 的浓度分布与高温区的分布相似, 但高浓度区集中在支板尾缘回流区, 支板尾缘部分的浓度与凹腔部分、脱体高温区部分差距较大, 不同于对于温度场, 三个高温区的最高温度则较为接近。 H_2 氧化成 H_2O 虽对温度场有一定影响, 但由于 H_2O 作为反应物参加燃烧反应, 在反应较强的区域 H_2O 浓度会降低, 因此云图中出现了 H_2O 浓度较低且温度较高的区域。

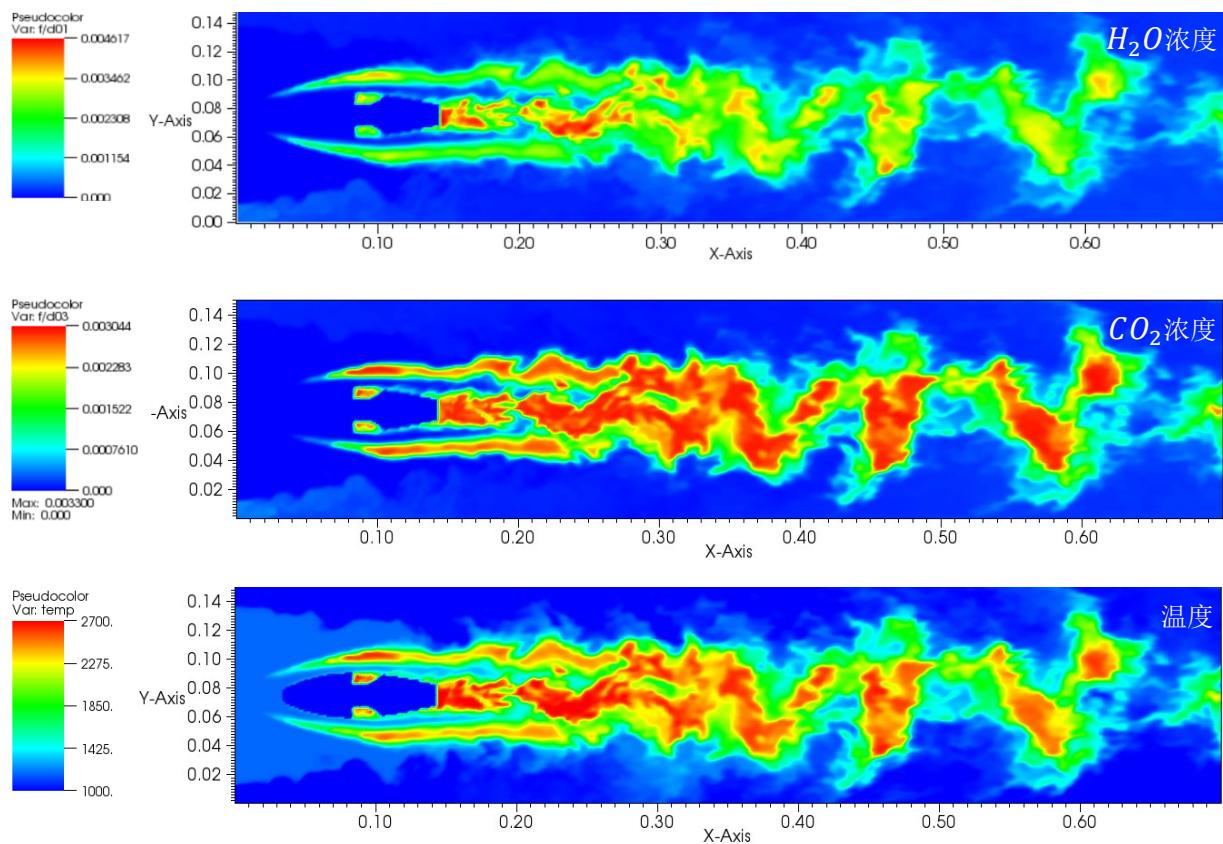
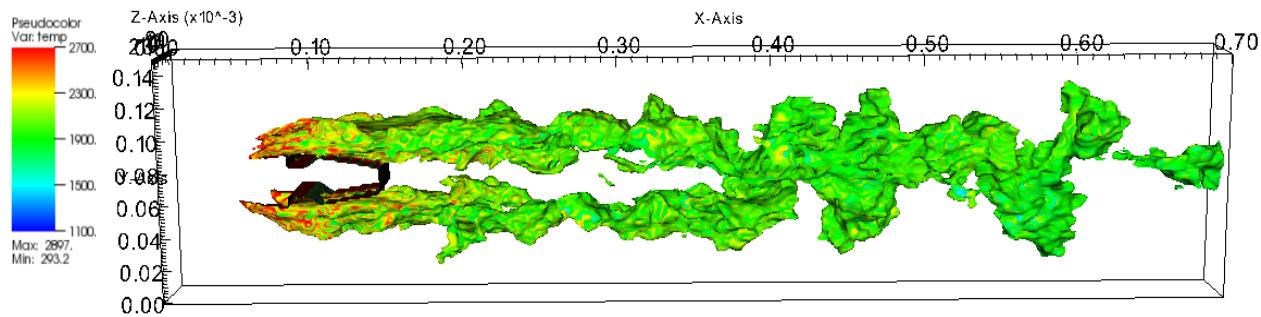


图 40. H_2O 浓度云图、 CO_2 浓度云图及温度云图

图 40 中 CO_2 浓度云图与温度场具有非常高的一致性, 但上图为支板算例垂直于 Z 轴中央截面上的温度与浓度分布, 仅对该截面进行研究无法证明整个三维空间 CO_2 浓度与温度的对应关系。为进一步探究 CO_2 分布与温度分布的关系, 分别在等温面上作 CO_2 浓度云图以及在等 CO_2 浓度面上作温度云图, 若等值面上的云图中显示量保持在同一数值附近 (云图中等值面颜色相同), 即可证明二者的分布在整个三维空间内具有高的一致性。

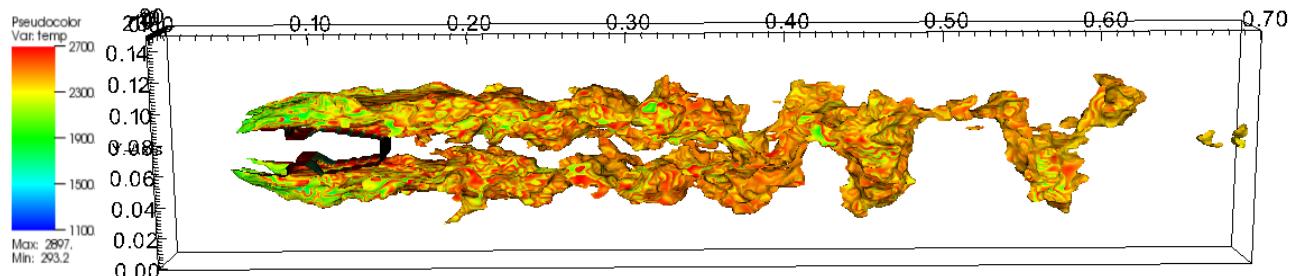
图 41. CO_2 浓度等值面上的温度云图

如上图 41 所示，在浓度为 CO_2 浓度等值面（0.001）上，温度云图颜色除支板前缘至凹腔的固壁附近外的流场中基本一致，证明支板模型后步 CO_2 浓度等值面上的温度基本一致，在约 1900K 附近。上图证明了在支板模型的后部空间中， CO_2 浓度与温度存在一定的对应关系，但在支板模型附近，仅采用 CO_2 浓度作为温度场分析的依据是不合理的。

上图中， CO_2 等值面的前部（X=0.08~0.10 m）位置存在小部分区域温度偏高，这是因为 H_2 氧化成 H_2O 时也会放热，如下文 5.2.5 中所示，支板前部 H_2 浓度较低而 CO 浓度却较高，证明此处 H_2 的氧化反应快于 CO 的氧化反应，此时 CO 氧化生成的 CO_2 相对较少， H_2 氧化放热对温度场的影响明显，因此在 CO_2 浓度等值面上该位置温度较高。

与之相应地，在下图 42 中，由于在支板前部 CO 的氧化过程相比 H_2 氧化生成 H_2O 更慢，因此该位置缺少了 CO 的氧化放热，因此 H_2O 浓度面前部温度偏低。

对于 X=0.1 之后的位置， CO 被快速氧化，放出大量的热。并且 $C_{12}H_{23}$ 分解过程以及 CO 氧化过程消耗部分 H_2O ，因此在前图 30 中，反应区位置的 H_2O 浓度偏低。

图 42. H_2O 浓度等值面上的温度云图

相比图 40 中的温度云图，图 42 中温度变化范围更大，尤其在支板前缘部分差异明显。对于氢元素最终氧化物 H_2O 而言，由于 H_2O 又作为反应物参加多个基元反应， H_2O 的浓度分布并不能准确映射反应放热分布。

综上可知，单独从最终产物 CO_2 或 H_2O 的浓度的角度分析温度场并不合理，因为氢元素氧化反应和碳元素氧化反应是不同步的。烷烃四步机理在支板算例湍流燃烧仿真中体现出了碳氢氧化过程的差异性，因此图 41、图 42 中温度云图体现了出反应产物与温度

分布的差异性。事实上，不仅最终产物的浓度分布于温度场有关联性，燃料的分解以及其他中间反应过程也对温度分布起到了一定作用。

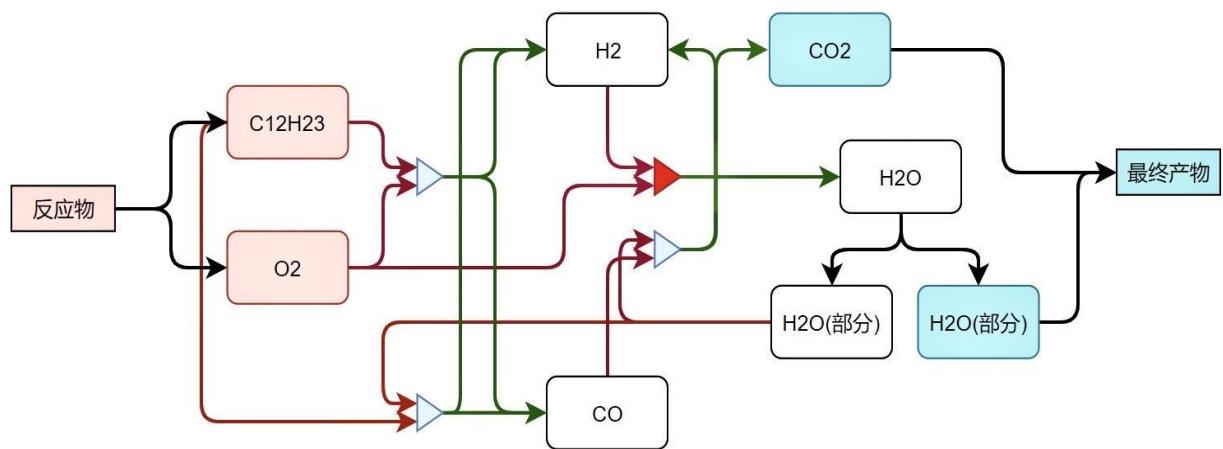


图 43. 烷烃四步机理反应过程

上图 43 中描述了烷烃四步机理中各组分的反应过程。图中，红色箭头表示作为反应物被消耗，绿色箭头表示反应的生成物。红色框体表示最初反应物，蓝色框体表示最终产物，白色框体表示反应中的中间组分。初始反应物为煤油替代组分 $C_{12}H_{23}$ 与 O_2 ，完全反应的最终生成物为 CO_2 和 H_2O ，中间组分为 H_2 、 CO 和 H_2O 。在忽略 $C_{12}H_{23}$ 蒸发吸热时，考虑所有反应过程后的放热 Q 与组分浓度的关系可写为：

$$Q \propto \Delta H_{fCO_2} C_{CO_2} + \Delta H_{fH_2O} C_{H_2O} + \Delta H_{fCO} C_{CO} - \Delta H_{fC_{12}H_{23}} C_{C_{12}H_{23}}$$

上式中所有物质为气态。其中 ΔH_{fX} 为该位置的某物质 X 的摩尔生成焓， C_X 为该位置某物质 X 的摩尔浓度。考虑到计算域内温度与压强分布不均，为方便统计，采用初场的温度与压强估算各组分的摩尔生成焓。

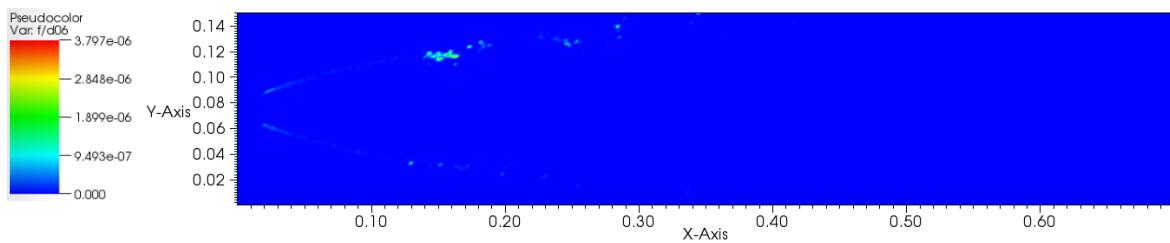


图 44. $C_{12}H_{23}$ 浓度云图

再由反应方程式和图 44 可知， $C_{12}H_{23}$ 浓度与 CO 、 CO_2 、 H_2 、 H_2O 相比极低，因此忽略 $\Delta H_{fC_{12}H_{23}} C_{C_{12}H_{23}}$ 项的吸热。再加上之前对传热仅包含对流的假设、生成焓按初场计算的假设，可将某点上的温度 T 近似表达为下式：

$$T \approx K(393.5C_{CO_2} + 286C_{H_2O} + 111.5C_{CO})$$

式中 K 为比例系数。上式仅适用于烷烃四步机理的模拟结果，对于其他更复杂的机理，需要考虑除 CO 之外的中间产物生成焓。并且上式中采取的多种假设可能对温度的估算造成误差。

令 $Y = 393.5C_{CO_2} + 286C_{H_2O} + 111.5C_{CO}$ ，为验证上式中对温度估算的合理性，并定性分析温度估算误差，在浓度 Y 的等值面上作温度云图。分别取 $Y = 20\%Y_{max}$ 、 $Y = 40\%Y_{max}$ 、 $Y = 60\%Y_{max}$ 、 $Y = 80\%Y_{max}$ 的等值面。

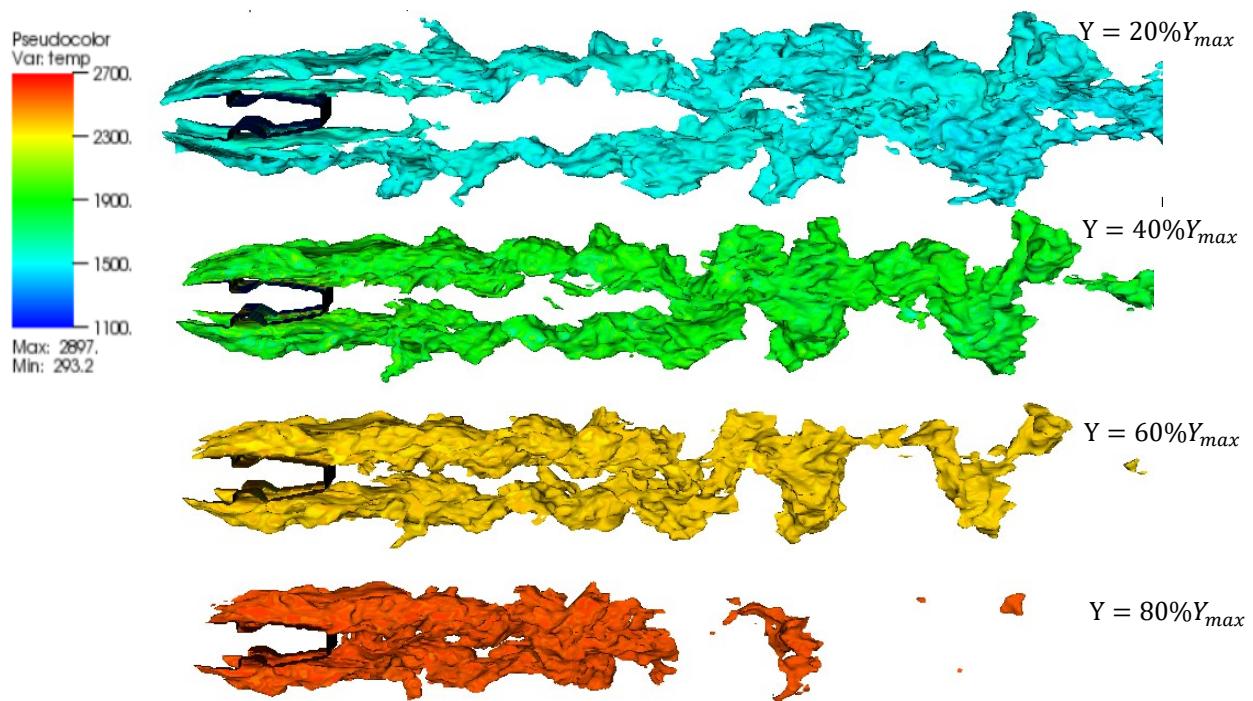


图 45. 浓度等值面上的温度云图

如图 45 所示，温度在任一所取的浓度的等值面上保持一致，即等值面为单色。因此，以上基于假设得到的温度估算方法在本算例中是合理的。

由上可知，强湍流燃烧算例中，通过结合所用反应机理，分析机理中的高释热过程，可通过组合相关组分及其生成焓，得到形如 $T \approx K\Sigma\Delta H_f C$ 的温度拟合式。在第六章单头部燃烧室算例的模拟中，对该式通过更换算例进行进一步检验。

需要注意的是，以上提到用组分浓度分布拟合温度场的前提为：1. 湍流流动占主导作用，相比对流传热而言，导热与辐射可忽略；2. 来流温度和初场温度均匀，蒸发吸热可忽略，造成温度分布不均的因素仅为燃烧反应。在满足以上前提下，温度拟合公式是根



据模拟所选用化学反应机理而变的，针对烷烃四步机理提出的拟合公式不可用于其他如准稳态等机理。拟合时必须考虑机理中所有基元反应，但可针对于吸热或放热极小的反应作简化。并且，以上的拟合与分析在其他机理以及真实反应中的准确性还需后期进行更多的研究与验证。

5.2.5 烷烃四步机理化学反应与释热率分析

烷烃四步机理中， H_2 和 CO 为碳氢化合物分解得到的主要中间产物，研究其浓度分布可现出燃烧反应区的位置和燃烧反应的剧烈程度。下图 46 中由上至下分别列出了垂直 Z 轴的中央截面上 H_2 浓度云图、 CO 浓度云图以及反应时均释热率云图。

从 H_2 浓度云图中可得， H_2 主要分布于支板尾部回流区，在尾部强湍流流动作用下与回流区外部空气掺混并反应，在流动过程中浓度逐渐降低。在支板凹腔驻涡的前端也有 H_2 的分布，在支板上下侧的脱体高温区存在浓度极低的 H_2 分布。在 CO 浓度云图中，凹腔驻涡区、支板尾部回流区以及卡门涡街部分的 CO 浓度分布与 H_2 一致。而与 H_2 分布不同的是，在支板上下的脱体高温区附近，存在浓度较高的 CO 分布。

从时均释热率角度分析，高释热率区域为支板上下的脱体高温区，因此对于四步机理，反应放热区域主要存在于脱体高温区，支板凹腔也存在一部分高释热率区。这意味着，燃料从喷口喷出后，迅速蒸发并燃烧，支板火焰稳定器仅凹腔驻涡区起到一部分的稳焰作用。支板尾缘高温区是由于燃料在脱体高温区燃烧放热后，热量在后缘回流区的堆积产生的。支板尾缘回流区的 CO 和 H_2 高浓度现象是由流场前部的燃烧反应未完成造成的，尾缘回流区反应较弱，放热较少。

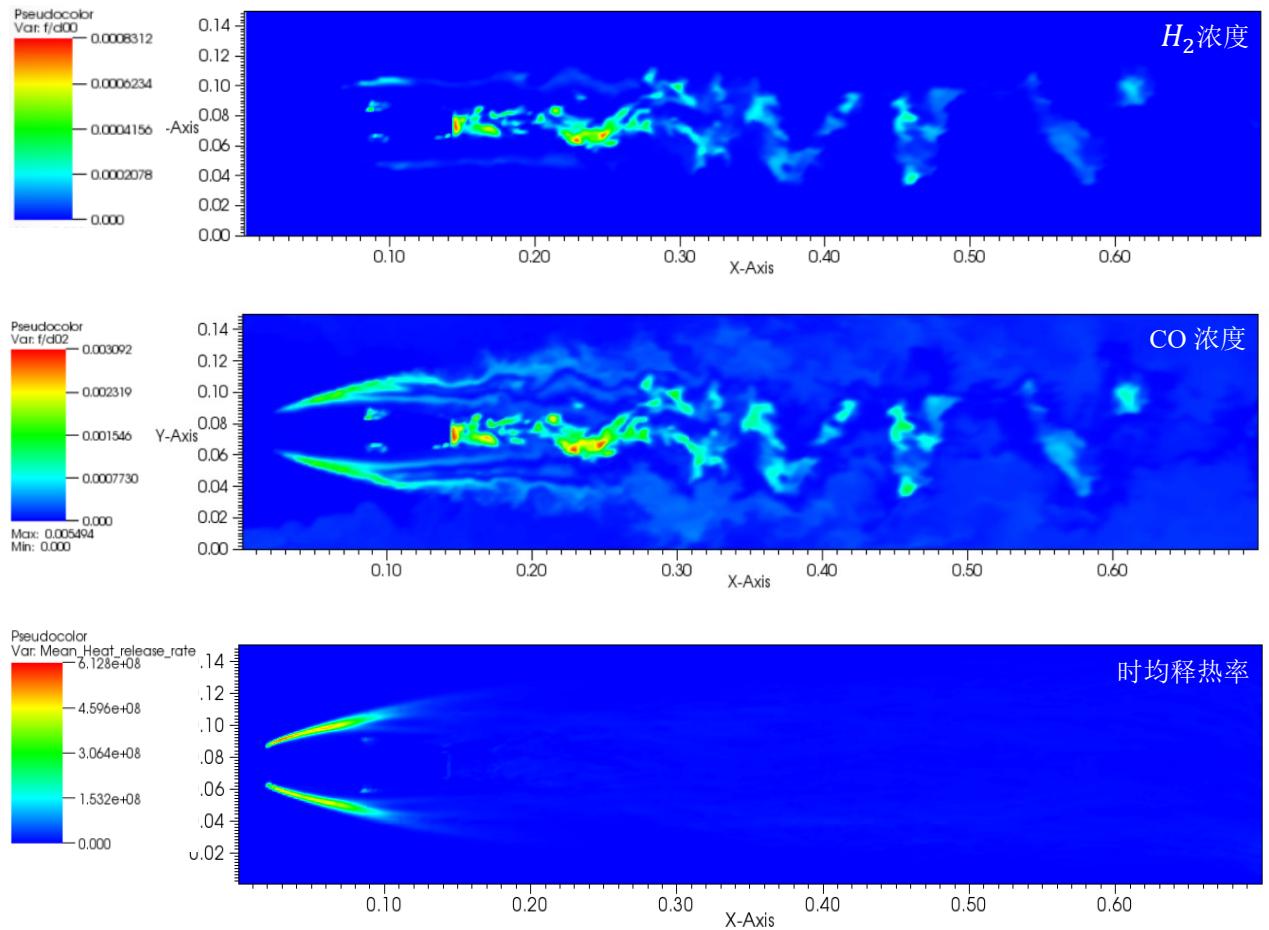


图 46. H_2 浓度云图、 CO 浓度云图、时均释热率云图（由上至下）

以上对时均释热率的分析证明支板实际起到的稳焰效果并不明显，火焰及燃烧反应能够在支板上下脱体高温区稳定存在。显然，这是与前文中图 31 和图 38 的实验结果相悖的。

对于支板火焰稳定器两相湍流燃烧算例，烷烃四步机理对反应区的模拟存在较大缺陷。由于机理中包含的基元反应过于简单，反应步骤少，反应放热过快，因此火焰稳定存在的条件过低，在高速湍流中火焰难以被吹熄，因此在本不应存在高温区和燃烧反应的位置模拟出了脱体高温区和反应释热区。

因此，在进口高流速的火焰稳定器类型算例中，应当适当增加机理的复杂度从而控制燃烧反应放热速度以及调整反应发生的难易程度。下文中，将采用 118 步准稳态机理对支板算例作相同的分析，并与烷烃四步机理作对比。

5.2.6 准稳态机理化学反应与释热率分析

与 5.3.3 中对烷烃四步机理的分析相同，首先讨论反应最终氧化产物 H_2O 浓度分布、 CO_2 浓度分布与温度分布的关系，如下图 47 所示。

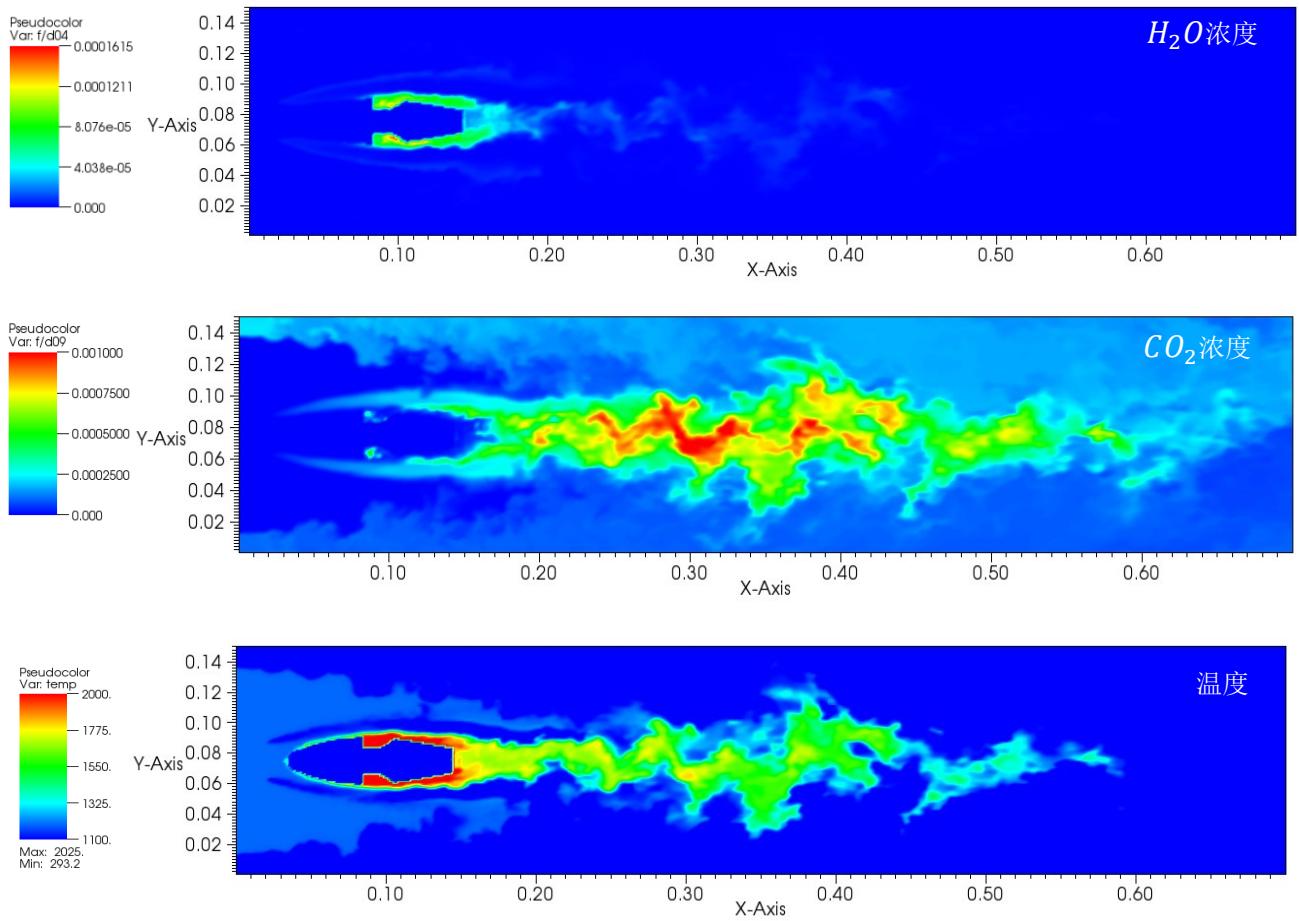


图 47. H_2O 浓度云图、 CO_2 浓度云图及温度云图

从图 47 中可发现，准稳态机理计算结果中 H_2O 浓度、 CO_2 浓度与温度间关系并不明显，最终产物浓度场与温度场间对应关系较弱。这是由于准稳态机理具有 118 步基元反应，碳元素和氢元素的氧化反应产物参加多步基元反应，且高放热过程分散到多步基元反应中，因此无法通过最终产物的生成反映出放热过程，最终氧化产物分布便也无法描述反应温度场。

对于准稳态机理，需要充分考虑中间反应过程的吸热与放热，考虑中间组分的浓度分布。由于准稳态机理中反应中间反应过程产物组分种类多（去除氮气、反应物正十烷与氧气以及生成物二氧化碳和水外，共 21 种组分）因此通过浓度场描述温度场所需拟合式过于复杂，在本文准稳态机理模拟算例中，不进一步推导可用于准稳态机理的浓度拟合温度表达式。

通过研究中间产物的浓度分布，可直观地表现机理中相应基元反应的进行先后顺序以及相应基元反应的反应区域位置。考虑到准稳态机理中中间产物较多，本文选取 CO 和 H_2 两种组分，与四步机理模拟结果中图 45 的 CO 浓度、 H_2 浓度分布作对比，研究两种机

理模拟结果中相关反应区域分布的差异。

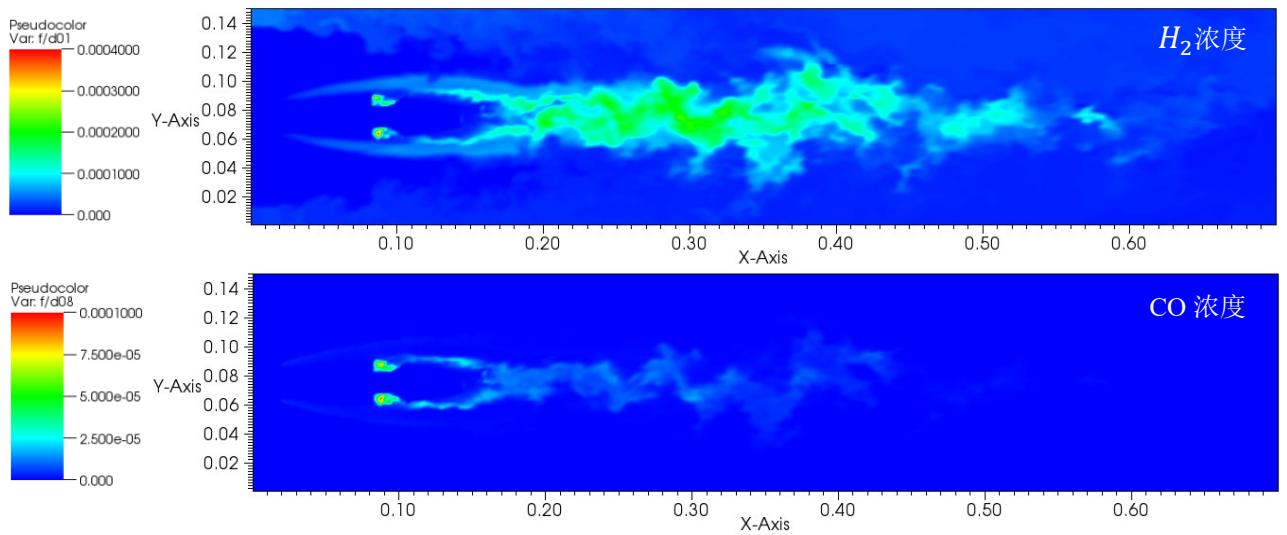


图 48. H_2O 浓度云图、 CO_2 浓度云图及温度云图

如上图 48 所示, 准稳态机理中的中间产物 CO 及 H_2 在支板凹腔处以及支板后缘浓度较高, 并且不存在支板前缘的高浓度区域。对比图 37 中烷烃四步机理相应中间产物的浓度分布可知, 准稳态机理模拟结果的反应区与烷烃四步机理模拟得到的反应区差异明显。准稳态机理所模拟 CO 与 H_2 的相关反应在支板凹腔驻涡以及尾缘回流区发生, 更好地体现了凹腔支板火焰稳定器的稳焰作用。

在 5.2.4 中基元反应产物浓度与温度场之间关系的探究中证明, 高放热的基元反应是影响整个燃烧反应温度场分布的重要因素。反应放热率的高低以及位置分布也是判断燃烧反应的是否顺利进行的重要依据。在忽略吸热反应以及低放热反应后, 反应区的位置可以由放热率的分布判定。

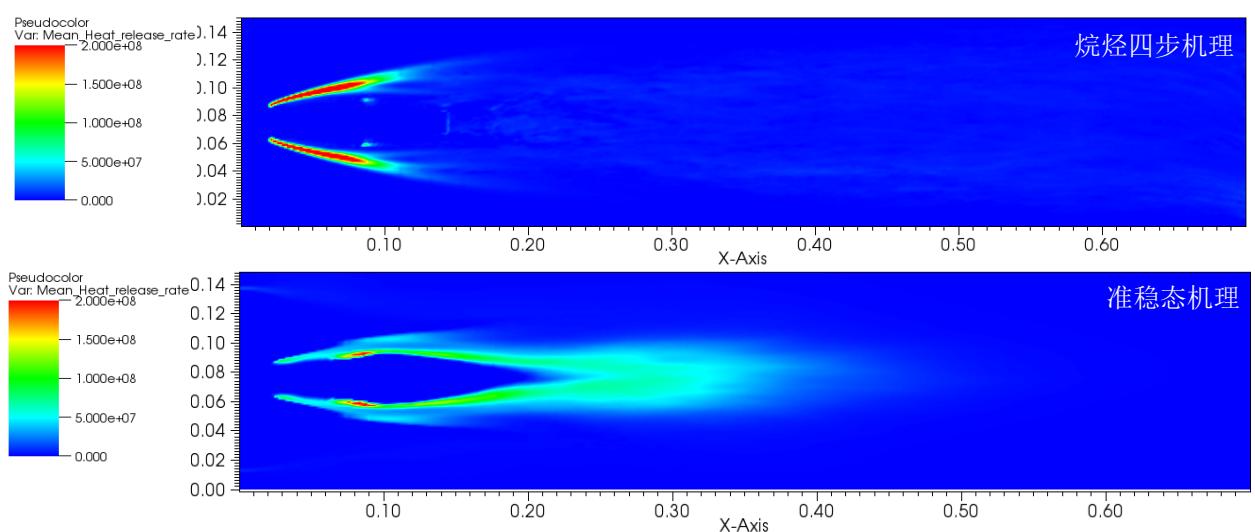


图 49. 烷烃四步机理与准稳态机理时均释热率云图



时均释热率表现了反应放热情况，因此从时均释热率云图上可观察到反应主要放热过程在空间中的位置分布。如图 49 所示，烷烃四步机理与准稳态机理模拟结果中释热率差异较大，烷烃四步机理放热区集中于支板前缘，而准稳态机理放热区集中于支板凹腔处，在支板尾部回流去边缘也有较高放热率的分布。对于放热率峰值，烷烃四步机理放热率最大值高于准稳态机理模拟结果，而准稳态机理放热区域体积显然大于烷烃四步机理。因此，准稳态机理放热过程更满，放热率分布更均匀。

结合图 31 与图 38 中的实验照片，准稳态机理所模拟的放热率分布更符合实际情况。采用烷烃四步机理模拟本算例时，火焰可存在于支板前缘高流速区域，火焰的稳定燃烧并不需要支板的稳焰作用。在图 31 或图 38 的实验照片中，火焰仅存在于支板凹腔处以及支板后缘回流区，在支板凹腔处温度峰值较高，而在支板后缘高温区面积较大。因此，从时均释热率云图中可突出显示准稳态机理相对于烷烃四步机理在反应区释热率分布模拟上的优越性。

由于烷烃四步机理 H_2 与 CO 氧化过程仅由一步基元反应完成，放热过快，导致反应释热集中，容易产生高释热率区域。并且反应释热过快可导致火焰更容易稳定存在，因此模拟结果中在高流速区域 ($Ma \approx 0.2$) 四步机理模拟的火焰仍能稳定燃烧。在采用四步机理模拟支板算例时，不能较好地体现支板火焰稳定器的稳焰效果，燃烧情况与支板结构以及回流区设计关系不大。在高流速环境的火焰稳定器设计中，采用四步机理模拟的参考意义不大。

准稳态机理共包含 118 步基元反应，放热较慢，火焰更难以在高流速环境下稳定存在。因此高释热率的反应区主要存在于支板凹腔驻涡区和支板尾缘回流区，与实际情况更相符。因此，对于高速流动下的火焰稳定器设计，采用准稳态机理能更准确地反映出火焰稳定器的稳焰效果。

通过准稳态机理与烷烃四步机理模拟结果的释热率对比可知，考虑更多的基元反应，提高机理的复杂性，能够减慢燃烧反应的放热过程，使模拟结果更贴合实际情况。在湍流燃烧数值模拟中，应当适当选取化学反应机理，避免因机理过于复杂导致计算缓慢，或因为机理过于简单而导致放热过快，使火焰温度过高且过于稳定。

由上可知，对于湍流燃烧模拟的化学反应机理选择，可以按实际释热率的分布调整机理的复杂度以及简化方法，从而得到更准确的模拟方法。即从实际释热率情况倒推出反应机理的选择。

5.3 贫油燃烧工况

本文分别采用烷烃四步机理和 118 步准稳态机理模拟了支板火焰稳定器算例的贫油燃烧状态。

5.3.1 烷烃四步机理支板算例贫油状态模拟

首先，本次毕设在上文所述的烷烃四步机理对支板算例湍流燃烧稳定燃烧工况模拟基础上，仅改变该算例的油气比，进行多工况贫油状态的湍流燃烧模拟。

本次毕设中，采用烷烃四步机理时共模拟三种贫油燃烧工况。分别为：1.燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0021kg/s (当量比由 1 降至 0.58)；2.燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0018kg/s (当量比由 1 降至 0.5)；3.燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0015kg/s (当量比由 1 降至 0.42)。对于支板火焰稳定器算例而言，由于采用了进口热射流点火，进口热空气可视为持续、稳定的点火源，因此低燃油流量工况中不会出现全场熄火的现象，但燃油流量的降低会引起燃烧状态以及温度、浓度场的变化，本节重点研究燃油流量降低时，瞬态温度、浓度场的变化规律。

首先分析燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0021kg/s (当量比由 1 降至 0.58)的工况。如下图 50 中温度云图所示，在降低燃油量时，全场的高温区温度明显降低，火焰长度缩短。但火焰仍能稳定存在，支板模型高温区位置仍为凹腔驻涡处、支板后缘回流区以及支板前缘上下的脱体高温区。

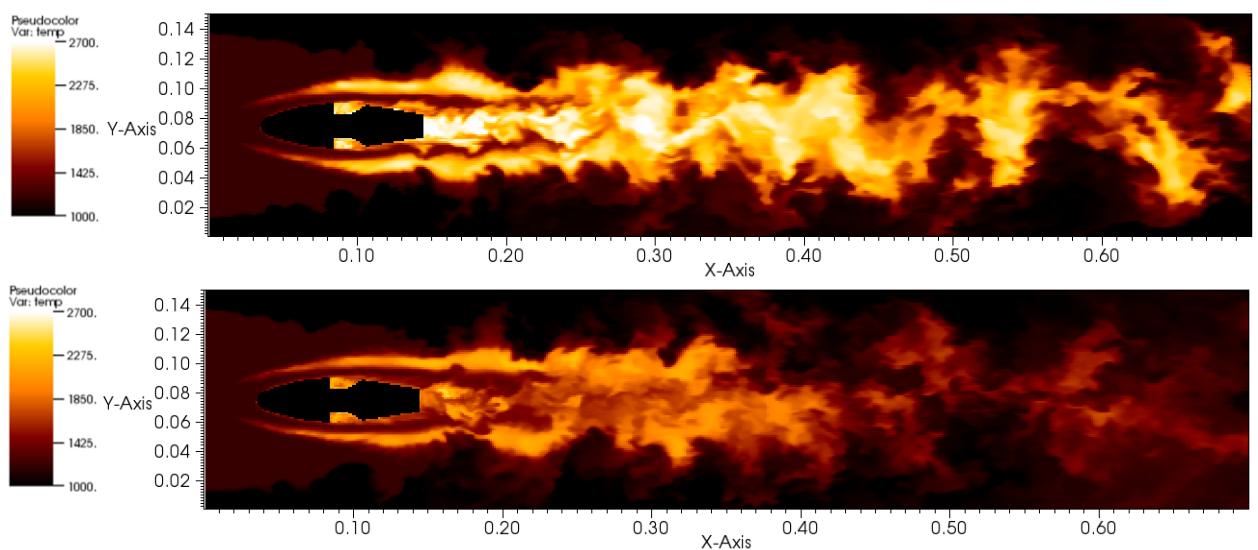


图 50. 燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0021kg/s (从上到下) 温度云图

如图 50 所示，燃油流量降至 0.0021kg/s 后，全场温度略微下降，分布规律不变，高

温区的温度峰值由 2824K 降至 2641K。

与温度场相对应的，降低燃油流量后，组分浓度分布与释热率分布也发生相应的变化。对于支板火焰稳定器算例，当量比降至 0.67 后并无明显的温度分布变化，由 5.2.4 中的分析可知，温度分布与组合浓度存在一阶关联。因此，该工况下浓度分布变化规律应当与温度分布的变化规律一致，即除数值上略微降低外，总体分布规律不变。

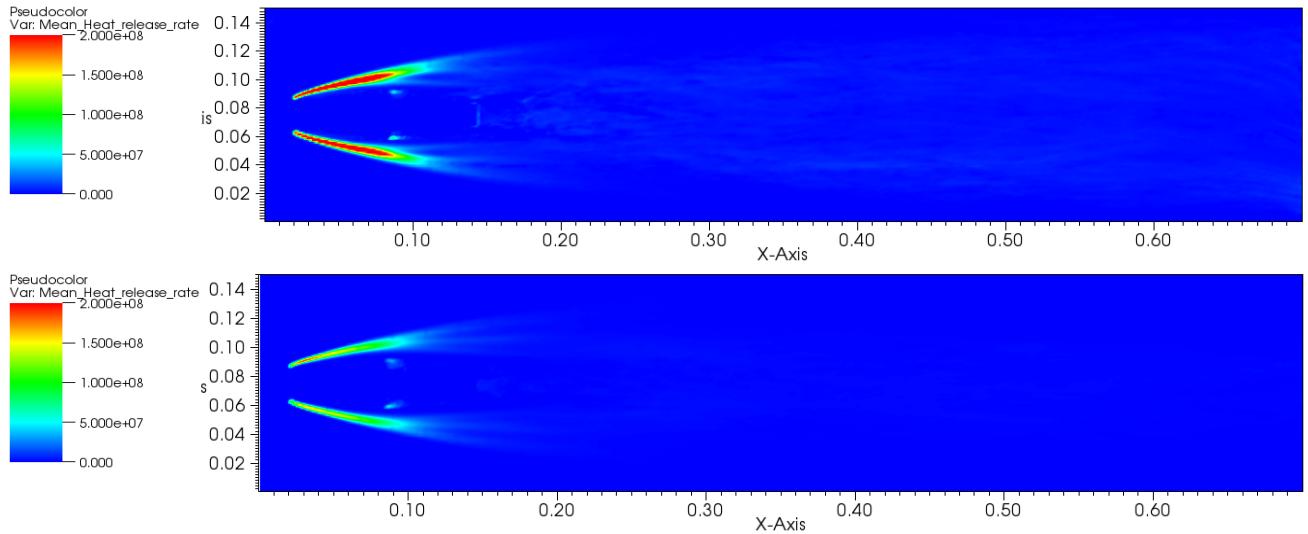


图 51. 燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0021kg/s (从上到下) 时均释热率云图

如上图 51 所示，降低燃油流量至 0.0021kg/s 后释热率相应下降，时均释热率峰值由 $4.11 \times 10^8 \text{W/m}^3$ 降低至 $2.313 \times 10^8 \text{W/m}^3$ 。

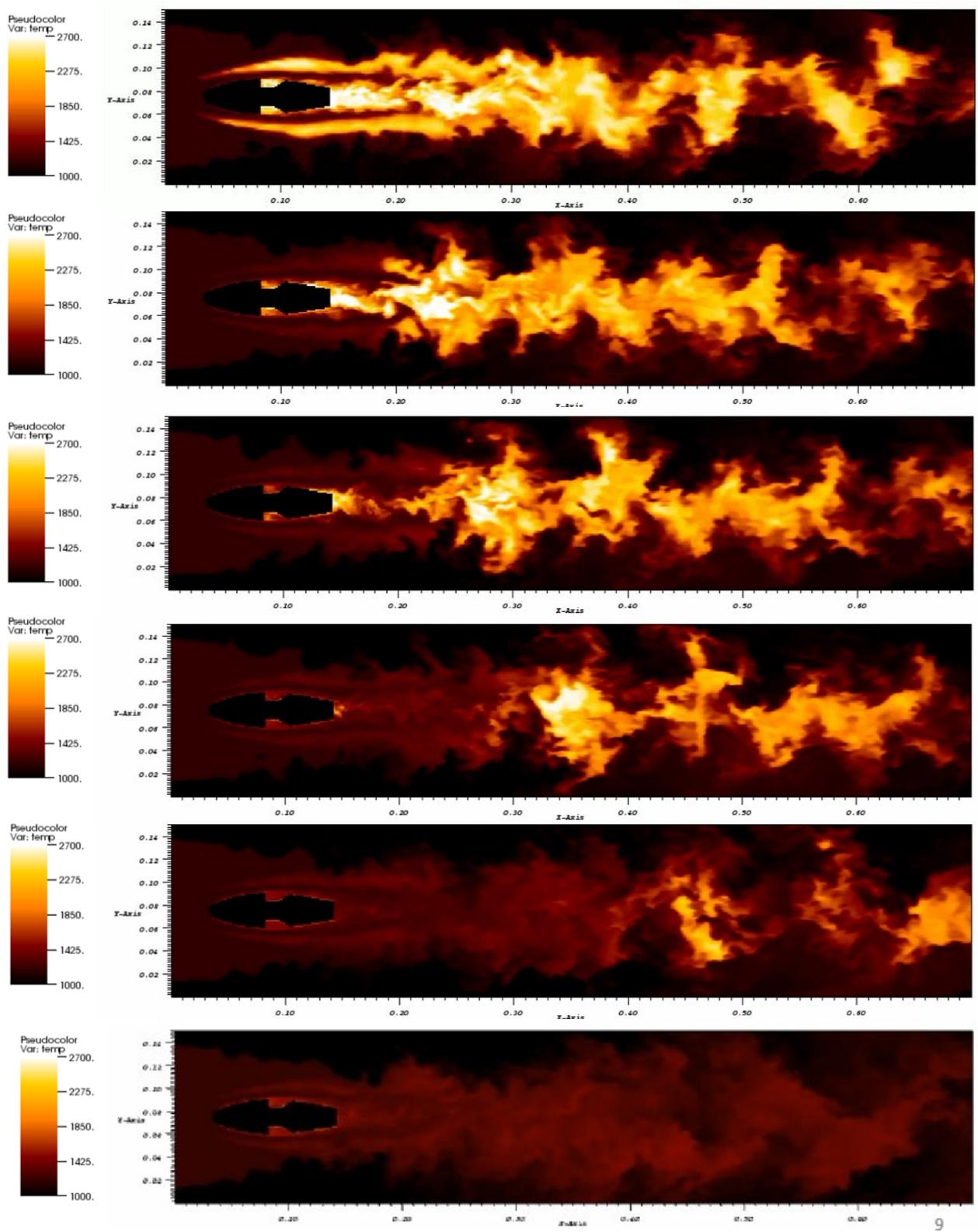


图 52. 燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0015kg/s (从上到下) 瞬态温度云图

当燃油流量降至 0.0018kg/s (当量比 0.5) 或以下时, 全场温度场变化更为明显。例如图 52 所示, 为燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0015kg/s (当量比由 1 降至 0.42) 时温度云

图的变化，高温区温度峰值由 2824K 降至 1736K。图中，由上至下为按时间顺序的降低燃油流量后的瞬态温度场。可以看到高温区逐渐从支板上脱落，向后运动，最终全场温度显著降低。

综合图 50 与图 52 中燃油流量降低对温度场的影响可知，油气比对燃烧场温度分布以及温度峰值的影响是非线性的。降低油气比时，化学反应与流动的耦合较为复杂。在支板算例降低燃油流量至 $0.0021\sim0.0018\text{kg/s}$ (当量比降至 0.58~0.5)时，温度分布规律发生大幅度改变，全场温度下降明显，且高温区分布改变，脱体高温区温度大幅下降。

在高温区脱落的过程中，首先，支板上下的脱体高温区消失，说明该脱体高温区是最不稳定的。该高温区的存在是因为烷烃四步机理反应步骤过于简单，反应快，释热快导致的，当燃油流量减少导致反应释热率降低时，化学反应不能为该脱体高温区的存在提供足够的热量。而由前文的流场分析可知，由于该高温区脱离支板几何体，其位置附近流速较高，且该位置涡量值较小，输运速度较快，因此高油气比时积攒的热能难以保留。

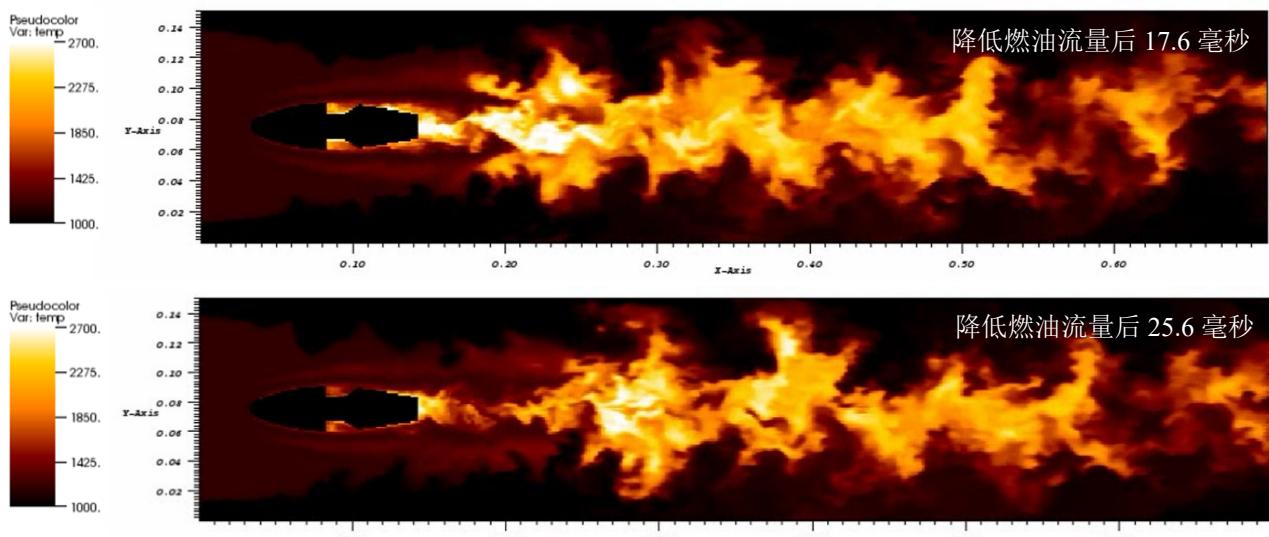


图 53. 燃油流量降至 0.0015kg/s 后 17.6 毫秒及 25.6 毫秒瞬态温度云图

如上图 53 所示，在脱体高温区脱落后的短时间内，支板凹腔驻涡处以及尾缘回流区处的高温区仍能在一定时间内保持温度基本不变。在降低燃油流量后的 25.6 毫秒时，短时间内较稳定高温区位于凹腔前部及支板后缘处。

由以上分析可知，支板对火焰的稳定效果体现在高涡量区域对高温气体的保留作用。当燃油流量或进口流速出现波动时，高涡量区域的高温气体能在较长的时间内保持稳定，因此在一定时间内可作为稳定的点火源。

在航空发动机实际工况中,来流气体并不能持续保持稳定的高温,点火源并不稳定。且由于转子的惯性作用,航空发动机降低工况时燃油流量的变化与进口流速的变化不同步,且燃油流量降低在前,因此降低工况便容易导致熄火。对于支板火焰稳定器,其凹腔驻涡前部及尾缘回流区内部涡量高,流速小,能在一定时间内作为点火源,当转子转速逐渐降低,加力燃烧室进口空气流速下降,油气比提高到一定程度时,火焰便可恢复到稳定燃烧状态。

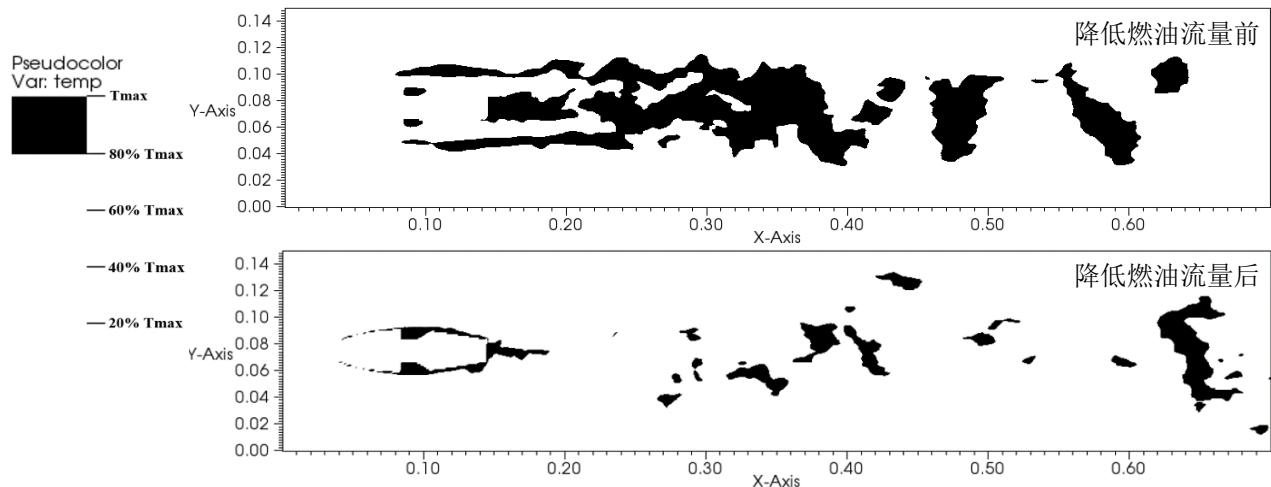


图 54. 燃油流量降低前后高温区(以 80% 最高温度为界)对比

在图 52 中可以观察到,降低燃油流量时,不仅有全场温度降低的现象,并且支板附近高温区的分布也发生了变化。为更明显地表现燃油流量变化前后的高温区变化,本文对温度场作如图 53 所示的后处理,图中黑色区域为温度大于或等于最高温度的 80%,白色区域温度则低于最高温度的 80%。

图 54 明显地表现出降低油气比后脱体高温区消失,高温区集中于支板凹腔处和支板后缘附近。此现象与 17.6 毫秒及 25.6 毫秒瞬态温度云图中脱体高温区消失现象不完全一致。图 54 中所示的温度场为降低燃油流量前后的稳定状态,而图 53 中所示的温度场为降低燃油流量过程中正处于变化中的不稳定状态。因此图 54 中,支板凹腔处及支板尾缘高涡量区域虽为温度高于 80% 最高温度的高温区,但其温度远低于图 52 中的相应区域。

贫油燃烧时,湍流流动对温度场的影响进一步增强,原脱体高温区温度明显降低,更加体现出了支板火焰稳定器凹腔驻涡以及尾部回流区对高温气体分布的影响,更能体现出支板火焰稳定器高涡量区域的稳焰性能。

前文中指出,在烷烃四步机理中,燃烧反应的中间产物为 CO 、 H_2 和 H_2O 。其中, H_2 与 H_2O 参与多步基元反应,作为反应物或产物,其浓度分析较为复杂。但对于 CO 而言,

其产生仅来自于 $C_{12}H_{23}$ 的分解，且其产生速率与 $C_{12}H_{23}$ 分解速率的比例为 12:1，另一方面， CO 的消耗为 CO 氧化为 CO_2 的单步基元反应，其消耗速率等于 CO_2 生成速率。因此 CO 的浓度高低可显示反应进行的剧烈程度，且其分布与反应区分布关联较强。

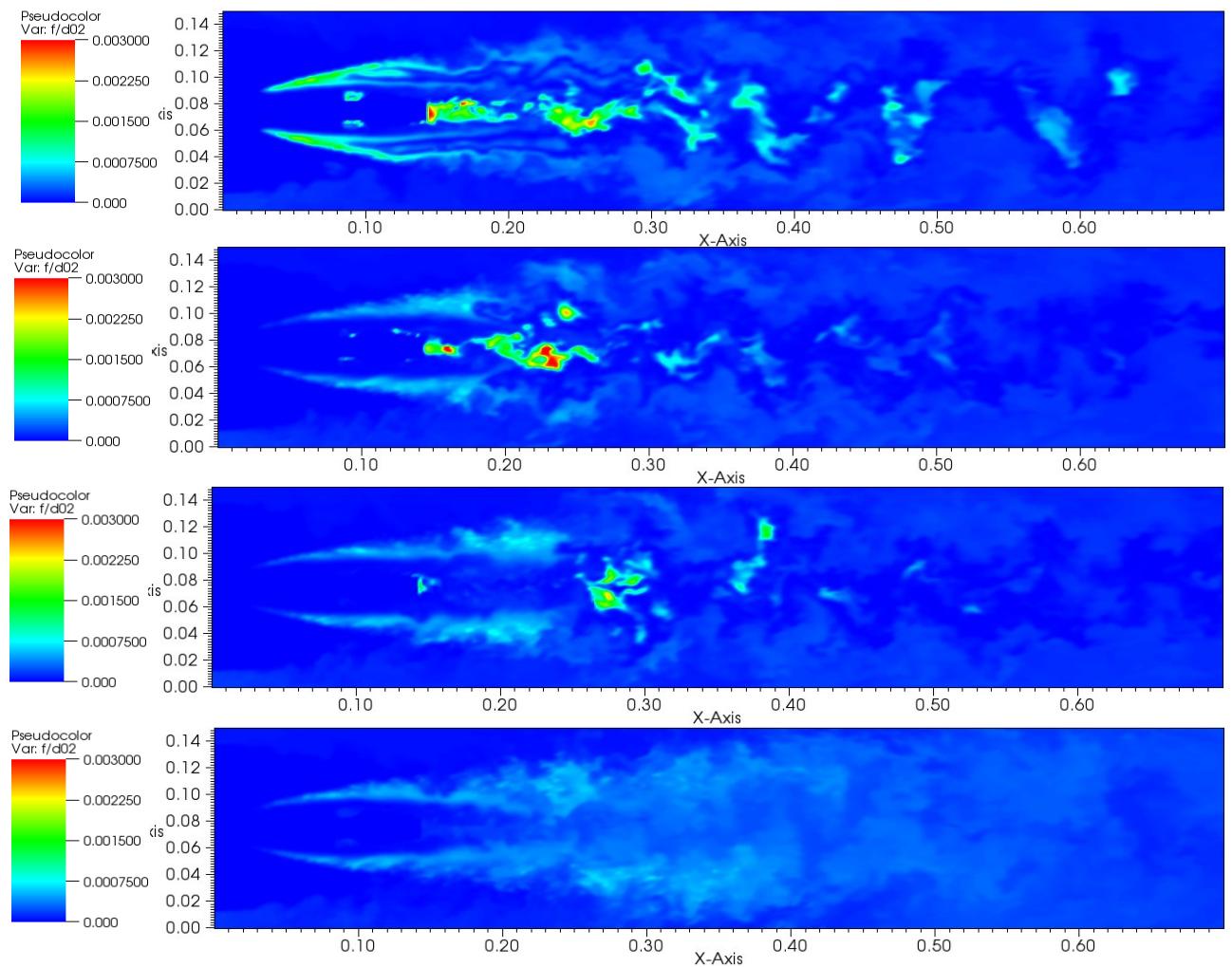


图 55. 燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0015kg/s (从上到下) 瞬态 CO 浓度云图

如图 55 所示，在降低燃油流量过程中，原支板上下脱体高温区瞬态 CO 浓度降低明显，而该位置中间产物 CO 的浓度明显降低表明参与反应的 $C_{12}H_{23}$ 减少，反应减弱。与图 52 中温度变化相比，支板上下的中间产物 CO 的位置不变可以表现出相关基元反应反应区位置不变，结合烷烃四步机理内容可知， $C_{12}H_{23}$ 分解反应与 CO 氧化反应的分布位置不变。

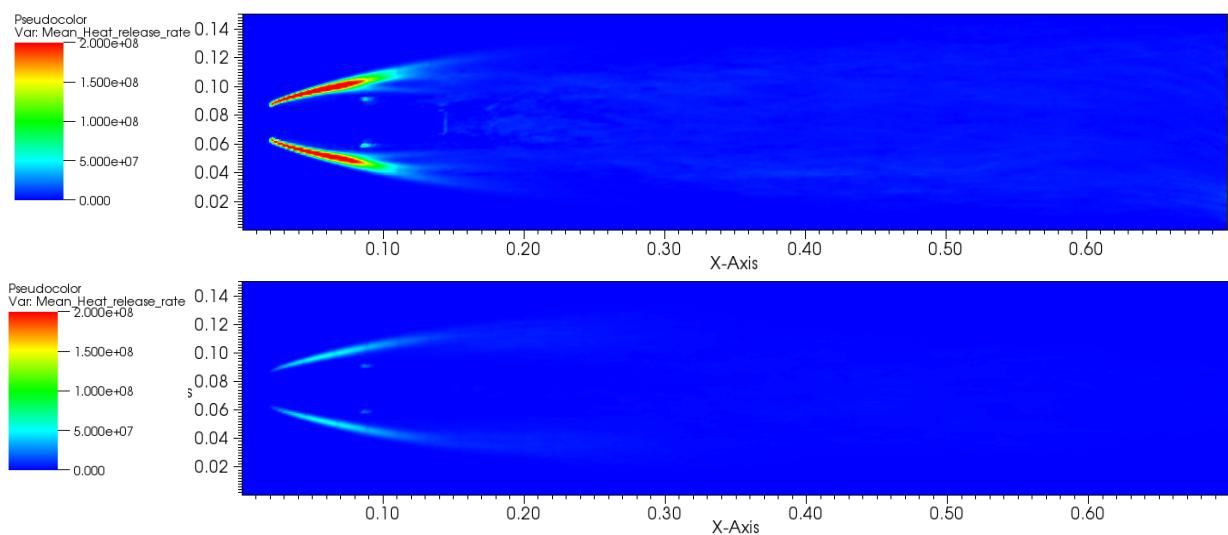


图 56. 燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0015kg/s (从上到下) 时均释热率云图

与中间产物 CO 的分布相比, 图 56 中的时均释热率分布与更能体现出燃烧反应的放热相关基元反应的位置与反应强度。值得一提的是, 对于烷烃四步反应机理, 碳元素与氢元素的放热过程最终体现于氢气氧化的基元反应 ($H_2 + \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow H_2O$), 因此释热率分布主要由该反应的进行决定。

降低当量比至 0.42 后, 时均释热率明显下降, 其峰值由 $4.11 \times 10^8 W/m^3$ 降低至 $5.53 \times 10^7 W/m^3$, 证明燃烧反应明显减弱。但释热率分布位置基本不变, 说明降低燃油流量后氢气氧化放热的基元反应分布位置不变。

综上所述, 在燃油流量降低时, 温度场变化较为明显, 在燃油流量降低至 $0.0021\sim0.0018\text{kg/s}$ (当量比降至 0.58~0.5)时, 全场温度下降明显, 且高温区分布改变, 脱体高温区温度大幅下降。从化学反应的角度而言, 降低燃油流量能明显减弱各步基元反应, 降低组分浓度, 但对各基元反应的位置分布影响不大。

5.3.2 准稳态机理支板算例贫油状态模拟

与上文的贫油燃烧模拟相似, 本次毕设在前文所述的准稳态机理对支板算例湍流燃烧稳定燃烧工况模拟基础上, 仅改变该算例的油气比, 进行多工况贫油状态的湍流燃烧模拟。

本文采用准稳态机理时共模拟三种贫油燃烧工况。分别为: 1. 燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0021kg/s (当量比由 1 降至 0.58); 2. 燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0015kg/s (当量比由 1 降至 0.42); 3. 燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0012kg/s (当量比由 1 降至 0.33)。其中, 燃油流量降至 0.0021kg/s (当量比降至 0.58)时, 瞬态温度场中火焰形态与长度并未

发生明显变化，如下图 57 所示。

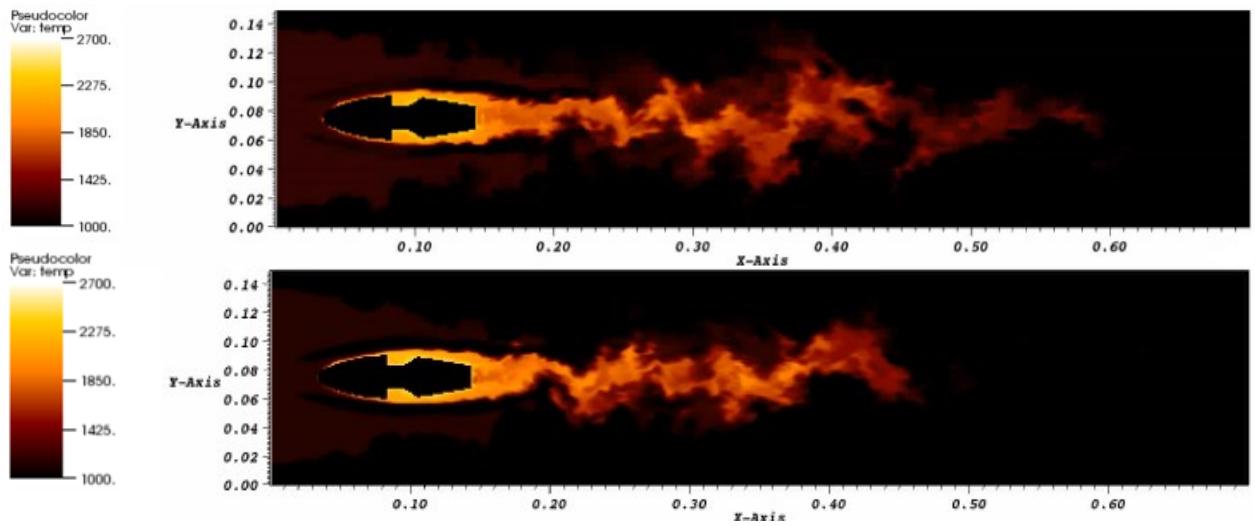


图 57. 燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0021kg/s (从上到下) 瞬态温度云图

当进一步降低燃油流量时，火焰长度则会明显缩短。下图 58 中展示了燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0015kg/s (当量比由 1 降至 0.42)和燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0012kg/s (当量比由 1 降至 0.33)两种工况变化下的瞬态温度场变化。

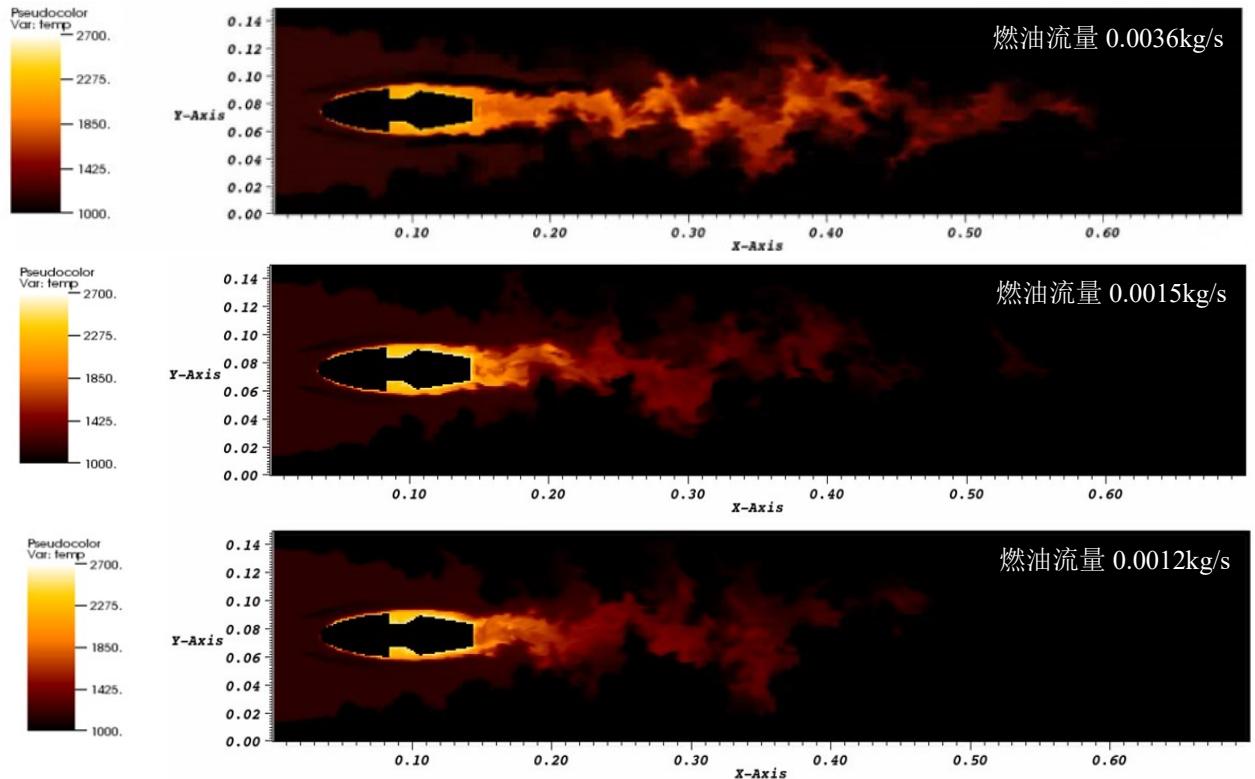


图 58. 燃油流量 0.0036kg/s 、 0.0015kg/s 及 0.0012kg/s 瞬态温度云图

为更明显地表现燃油流量降低后高温区分布的变化，选取燃油流量由 0.0036kg/s 降低到 0.0012kg/s 前后的瞬态温度场，并以最高温度的 80% 为界，划分高温区。得到瞬态

高温区分布变化如下图 59 所示。

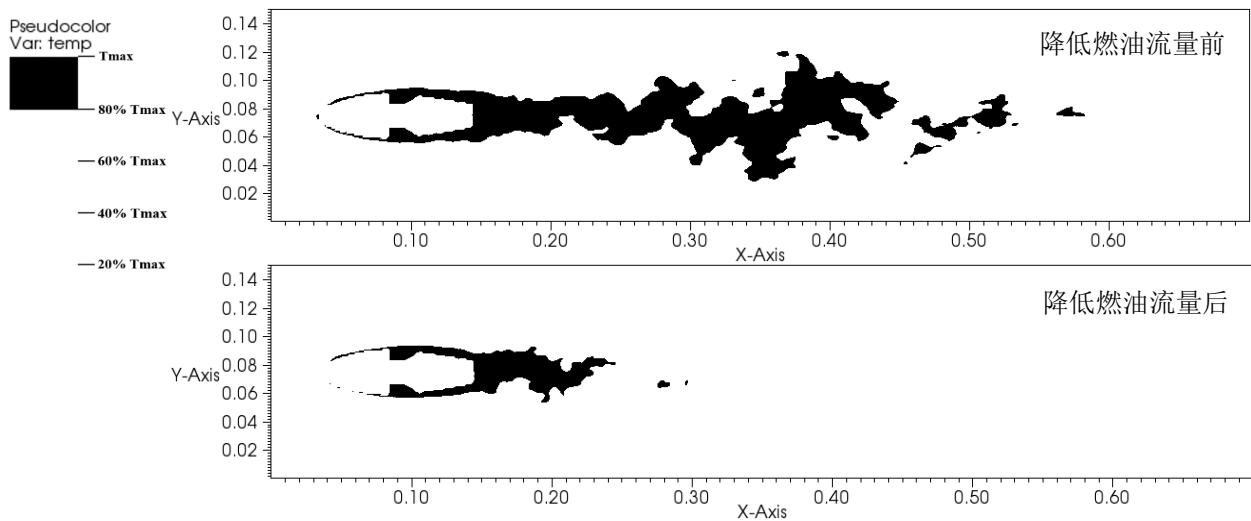


图 59. 燃油流量降低前后高温区（以 80% 最高温度为界）对比

与四步机理的模拟结果不同的是，准稳态机理所模拟的高温区的分布位置并未发生变化。在前文四步机理的贫油燃烧模拟中图 54 明显地表现了降低当量比到 0.5 或以下后，高温区分布位置减少为凹腔与支板后缘两部分，原有的脱体高温区温度明显降低。但对于准稳态机理而言，原当量比为 1 的工况中不存在脱体高温区，降低油气比后，高温区的分布自然也不发生变化。

两种机理模拟的相同之处在于，燃油流量变化导致高温区温度峰值降低与尾缘高温区长度缩短，高温区的温度变化与长度变化与燃油流量的变化关系是非线性的。当量比降低到一定程度时，高温区的分布发生位置与长度上的突变。

另外，降低当量比至一定程度（如 0.42）时，准稳态机理模拟结果中支板凹腔高温区处的温度几乎无变化，但烷烃四步机理模拟结果该高温区温度明显降低。这是因为两种机理反应步骤不同，释热率分布差异较大的原因。下文将就降低当量比至 0.42 后准稳态机理模拟结果的释热率分布对凹腔处温度变化小的问题作分析。

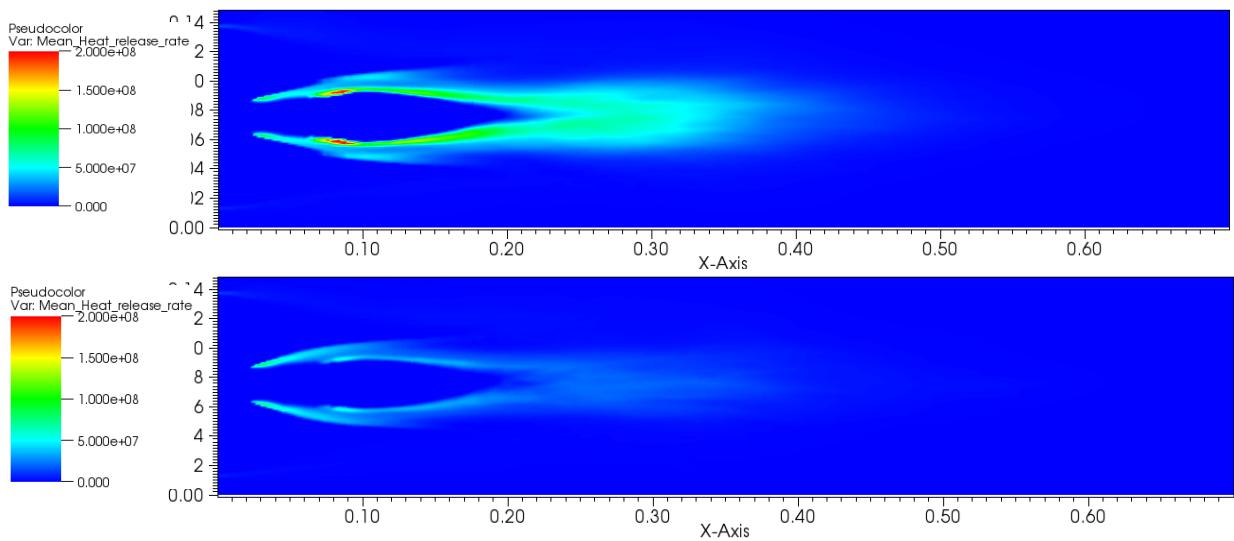


图 60. 燃油流量由 0.0036kg/s 降至 0.0015kg/s （从上到下）时均释热率云图

如上图 60 所示，燃油流量为 0.0036kg/s 时，准稳态机理的反应放热量较高的区域主要为支板凹腔的后部及支板尾缘回流区的边缘附近，但值得讨论的是，该工况下支板前缘也有相对较弱的反应放热。

当燃油流量降低至 0.0015kg/s 时，凹腔后部和回流区边缘的反应放热明显减弱，但支板前缘的反应放热基本不变。这是因为燃油流量较高时，由于支板前缘流速快，而准稳态机理反应较慢，因此在支板前缘只有少部分燃料参与反应并氧化放热，支板前缘位置处于局部富油的状态，大部分燃料在值班前部未反应或未完全氧化，随高速气流运动经过凹腔驻涡处或回流区附近才得以反应完毕。当燃油流量降低后，若燃油流量的降幅不足够大，燃料在支板前缘位置仍不能完全反应，支板前部仍处于富油状态，因此燃料在支板前部的反应放热基本不变，支板前部及凹腔处温度基本不变。

如图 56 所示，烷烃四步机理模拟得到的放热率与准稳态机理的模拟结果完全不同。在燃油流量较高，当量比为 1 时，烷烃四步机理模拟结果中反应的放热过程便集中于支板前缘，这说明高燃油流量时四步机理的放热过程在支板前部几乎全部完成。当燃油流量降低时，支板前部的放热相应也会降低，因此支板附近几乎整个流场的温度都会受到较大的影响，因此支板中部温度降低幅度较大。

5.4 本章小结

本文第五章中针对凹腔支板火焰稳定器算例，在 AECSC-Jasmin 软件基础上分别采用烷烃四步机理与准稳态机理两种煤油反应机理对当量比为 1 的稳定燃烧工况和多种当量比的贫油燃烧工况作模拟，并分析了模拟结果，得出以下结论：



1. 本章第一节中针对软件中浸没边界方法产生固壁锯齿边界的问题修改了喷雾参数，在第二节的验证中表明修改参数方法正确，新喷雾条件与采用贴体网格时的原喷雾条件相比，出口温度场平均误差由 5.514% 增大为 7.76%，二者皆与实验值贴合较好。
2. 本章第二节中通过分析凹腔支板火焰稳定器附近流场与瞬态温度场指出凹腔支板结构稳焰原理。凹腔驻涡以及支板尾部回流区温度高、流速低，作为稳定的高温区，是决定支板稳焰效果的关键结构。
3. 本章第二节中定量分析了烷烃四步机理与准稳态机理模拟结果的温度场数据。分析表明，准稳态机理模拟所得出口温度峰值更准确（相对误差-0.24%）且平均相对误差更低(4.954%)。烷烃四步机理模拟所得温度场分布趋势与实验值更贴近，相对误差绝对值的总体标准差的方差更低（2.17554%）。
4. 本章第二节第 5、6 条中通过中间产物浓度场分布以及释热率分布分析了两种机理的反应区以及反应特点的差异。烷烃四步机理放热过程集中于支板前部且峰值较高，说明四步机理反应步骤少，反应放热快，易产生与实验相悖的脱体高温区。准稳态机理放热过程主要分布于凹腔驻涡处及支板尾部回流区边缘，其反应放热步骤多，较分散，与实际较为贴合。采用准稳态机理能更准确地反应支板等结构的稳焰作用。湍流燃烧模拟中应综合考虑实际反应区及放热率分布，调整化学反应机理的复杂度及简化方法。
5. 本章第三节中分别采用两种反应机理模拟了支板算例贫油燃烧状态，两种机理各三种低燃油流量工况。并结合变工况条件下的温度场、浓度场以及释热率分布的变化分析两种反应机理在贫油燃烧模拟的相似与差异之处。两种机理模拟结果高温区温度与燃油流量正相关，但非线性。降低燃油流量时，两种机理模拟结果的高温区长度缩短且峰值温度降低。烷烃四步机理模拟结果中，当量比降至 0.5 或以下时，高温区分布变化，脱体高温区基本消失，全场温度明显降低。准稳态机理降低油气比时高温区分布不变，且凹腔处温度变化较小。这两点差异由两种机理反应区分布造成，根本上源于反应速率差异。燃油流量稍低时，准稳态机理模拟结果中支板前缘局部富油，而烷烃四步机理模拟结果中支板前缘局部贫油。

第六章 真实主燃烧室模拟

6.1 算例简介

AECSC-Jasmin 软件的主要优势在于对真实燃烧室模型等结构极其复杂的结构进行湍流燃烧模拟时自动高效构建。本文对如下图 61 所示的某型真实主燃烧室在某标准工况下进行电火花点火以及湍流燃烧试算。

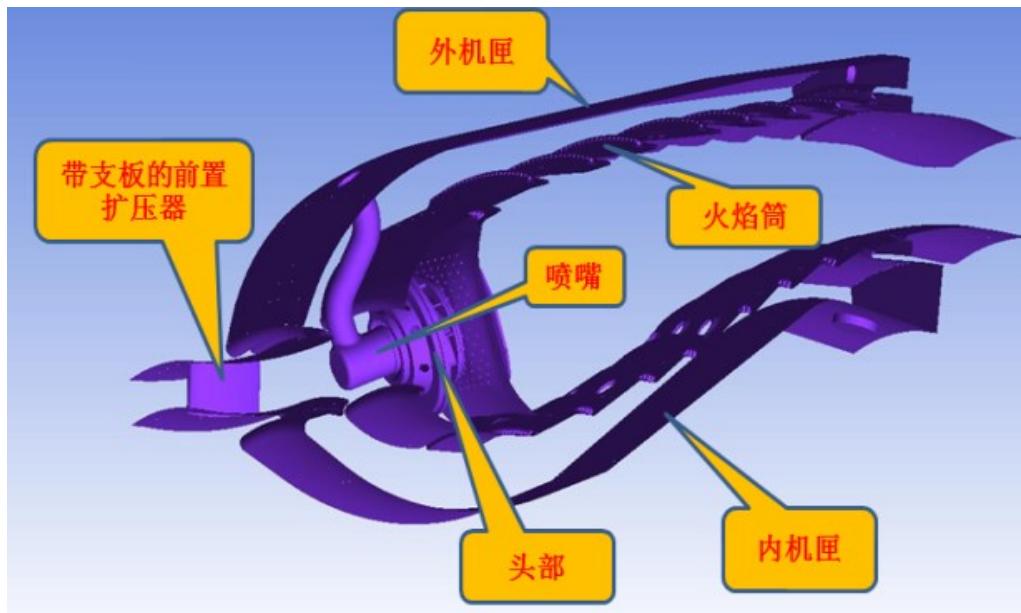


图 61. 所模拟的真实主燃烧室结构

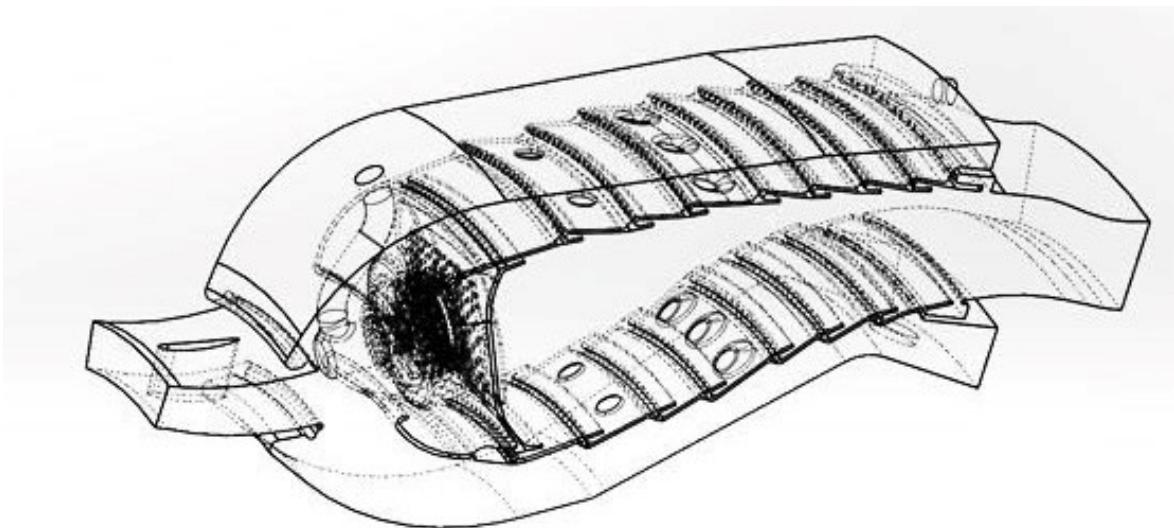


图 62. 主燃烧室透视图

如图 62 中所示，主燃烧室旋流器及火焰筒等部分设计有大量小尺度孔，整体结构也极为复杂。因此本算例中人工构建高质量的贴体网格并划分并行块是不现实的，由于

AECSC-Jasmin 在计算该算例时, 能够快速构建高质量正交结构网格, 结合浸没边界方法后使真实主燃室湍流燃烧高分辨率模拟具有可行性。Jasmin 并行框架的加入使万核级的大规模并行成为可能, 利用我国超算资源可对单头部燃烧室等复杂结构整体进行亿级网格量的高分辨率模拟。

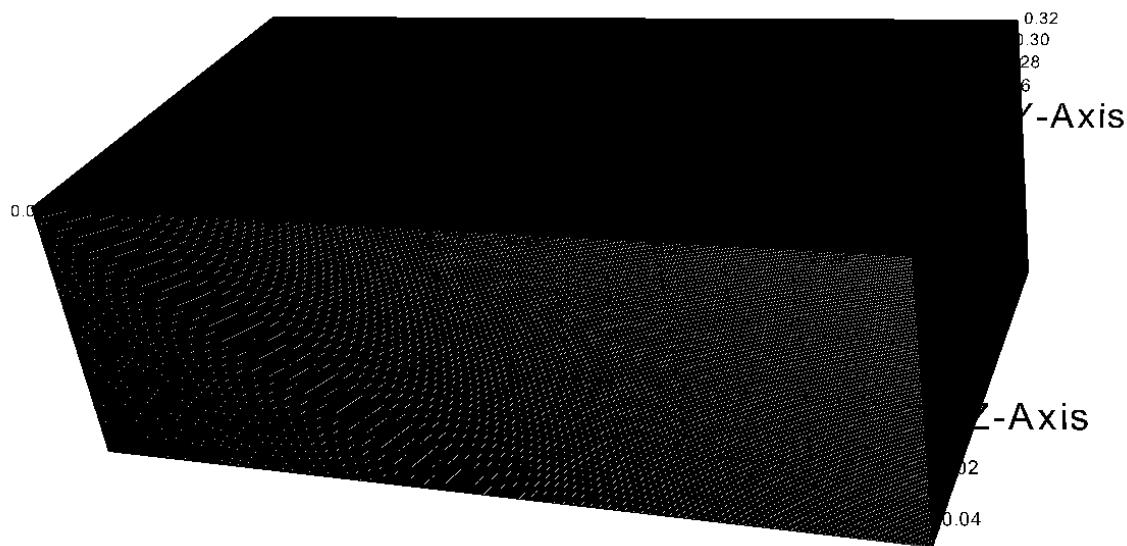


图 63. 主燃烧室中央截面并行分块图

上图 63 中展示了整个计算域网格划分情况 (4700 万网格), 全场一致的正方体网格充满整个空间。通过网格上记录的变量 “tflag” 的值 (0 或 1) 来标识和区分固壁区域与流场区域。

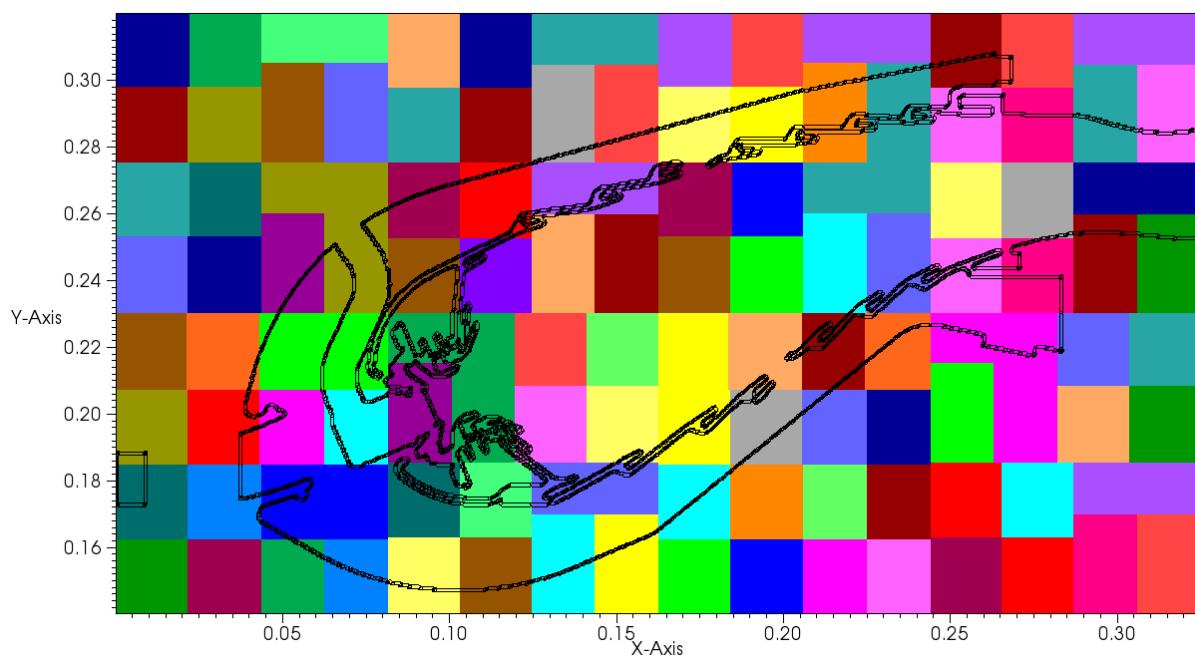


图 64. 主燃烧室中央截面并行分块图

图 64 中以中央截面为例展示了计算域中并行分块的情况，每种颜色的区域分配一个 CPU，4700 万网格算例中共调用了 480 个 CPU，因此计算域被划分成了 480 个并行块。

本算例中模拟的单头部燃烧室为某型号全环形燃烧室的一部分，整个全环形燃烧室由 18 个结构相同的单头部燃烧室构成。需要注意的是，该型号燃烧室的每个单部的扩压器部分中央存在支板结构，因此在下文讨论单头部燃烧室模拟结果时，中央截面的扩压器呈断开的形式，这是中央支板结构造成的。

本算例中，进口位于扩压器前部 $X = 0$ 的平面，经压气机压缩过的空气密度为 3.955 kg/m^3 ，压强为 790216.58 Pa ，温度为 696.01 K ，以 121.07 m/s 的速度流入扩压器。

本文以实际双油路工况为参考，结合 AECSC-Jasmin 浸没边界粒子反弹模拟的要求，调整喷雾参数。燃油液滴由位置为 $(0.101912, 0.205510, 0)$ ，半径为 3 mm 的喷咀雾化后以与喷头轴线夹角 60° 的方向呈锥形喷出，燃油流量为 0.0077 kg/s ，雾化 smd 取 39.5 。按以上流动入口参数与喷雾参数模拟得到煤油液滴分布如下图 65 所示。

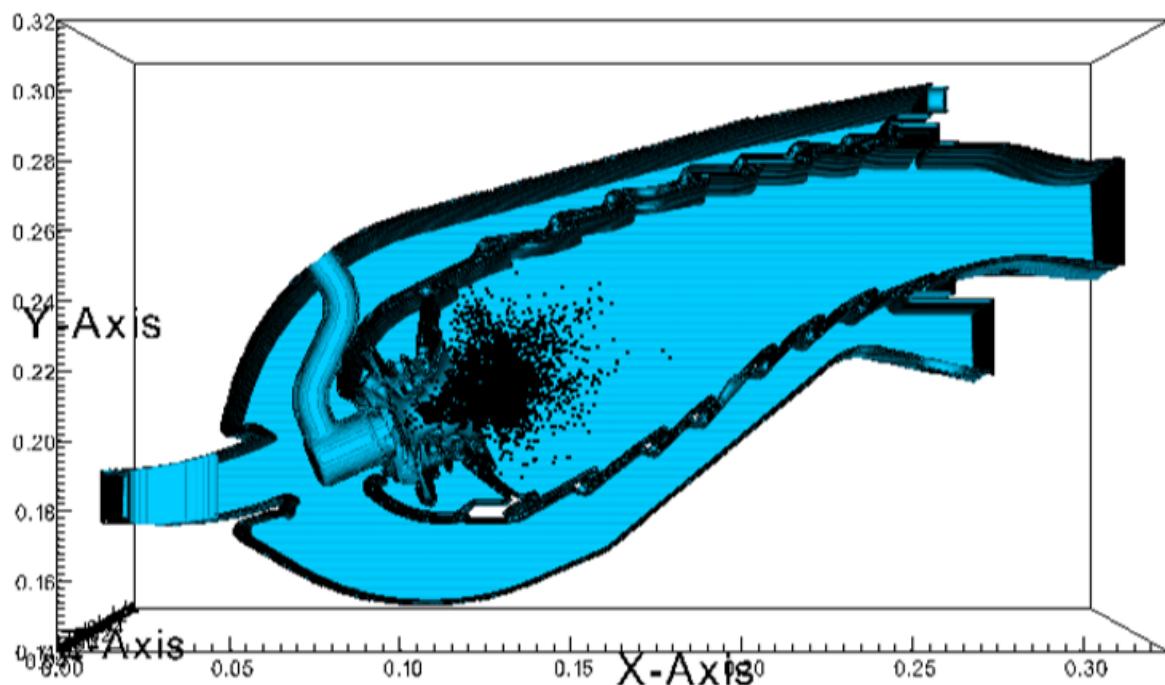


图 65. 主燃烧室喷雾模拟煤油粒子分布图

电火花点火参数的设置是单头部两相湍流燃烧模拟过程中的难点之一，由于燃烧室入口流速高，燃烧室内部流场复杂，若点火点位置设置不当、点火能量不足或点火时间不够，极容易造成点火失败，大量浪费计算资源。实际工况中，点火相关设置也是保证



航空发动机燃烧室功能实现的重要因素。在本文对单头部的模拟中，采用的烷烃四步机理反应放热较快，点火相对容易，火焰也容易稳定存在，在本文的模拟中并未出现点火后一段时间内又熄火的点火失败算例。

本文也通过多次点火试算中得出对于烷烃四步机理模拟的单头部燃烧室算例稳定可行的点火参数。在中心截面位置为 $(0.116, 0.228, 0)$ 及 $(0.125, 0.203, 0)$ 的喷雾轨迹上各设置一个点火点，在 5 毫秒时开始点火，点火持续 3 毫秒，火花峰值温度取 2000K。

本文中，为尽可能减少计算量，通过与一亿网格冷态模拟得到的流场进行对比分析，一定程度上降低模拟所用的网格量及核心数。在下文 6.2 中介绍了冷态流场的分析，并在保证细微流道结构流量正常的前提下，将单头部燃烧室算例高分辨率模拟的最低网格数降低至 4700 万。考虑到处理器资源限制，每算例采用 480 个处理器运算。值得一提的是，计算资源充足时，通常每核心（以 Xeon E5-2692 为例）分配 3~5 万网格可保证较高的并行效率。

6.2 冷态流动模拟

6.2.1 网格无关性分析

首先对单头部算例进行冷态流动的分析。本文中冷态流场模拟主要用于证明将一亿网格降至四千七百万网格后，降低后的分辨率仍然足以模拟旋流器等结构复杂部位的流动情况。对比一亿网格算例与四千七百万网格的火焰筒内外流动情况以及流量分配，探究四千七百万网格的分辨率是否能准确地模拟旋流器等结构中的小尺度流道流量分配。

一亿网格算例与四千七百万网格的对比思路为，选取如图 66 中红色实线所示的中央截面掺混孔前部 X 坐标为 0.15~0.20 m 的斜线位置，求得该线段上所有网格点的平行于中央截面而垂直于该线的速度（即图 66 中箭头方向的速度）与燃烧室入口来流速度的比值，将该值的分布规律作为任意工况下该位置流量分配的估算依据。

按以上方法计算不同网格分辨率模拟得到的掺混孔前部流量分布，作为判定网格分辨率是否足够的依据。本文中，认为一亿网格的分辨率（0.23 毫米）足够。并以一亿网格的冷态流场模拟结果为基准，按以上比较方法研究四千七百万网格的分辨率（0.5 毫米）是否足够。

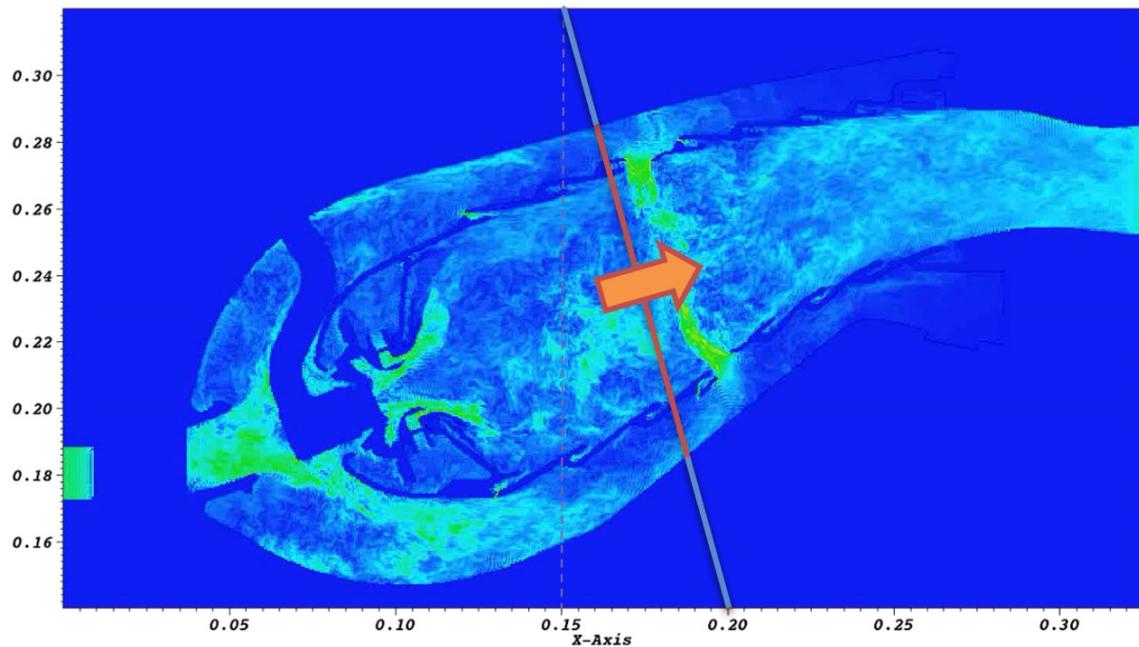


图 66. 速度统计位置示意图

通过式 $\frac{0.99V_x + 0.14V_y}{V_{inflow}}$ 求得无量纲轴向速度，分别统计一亿网格算例与四千七百万网格算例中掺混孔前的轴向时均流速分布，得到如下图 67 所示的时均无量纲轴向速度分布。

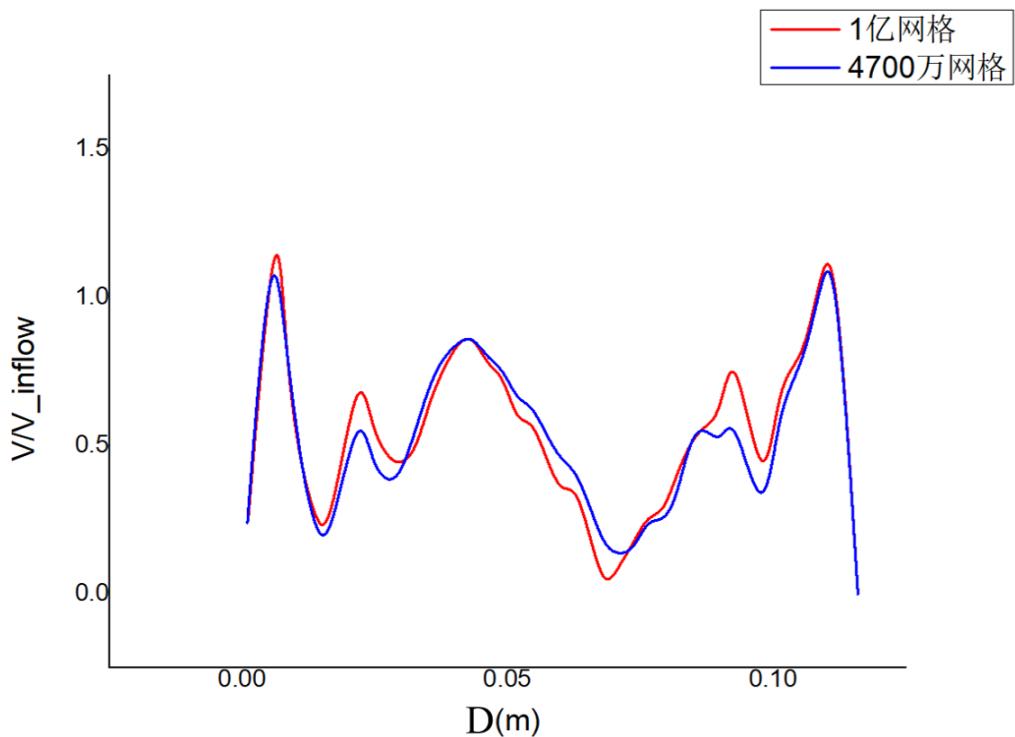


图 67. 无量纲轴向速度分布图

由上图 67 可知，采用四千七百万网格模拟得到的流场速度分布与一亿网格的模拟值贴合较好。在速度场中分别求得火焰筒内外速度积分值，并依此估算火焰筒内外流量比，得到四千七百万网格算例中掺混孔前的内外流道流量比为 1.560677，而一亿网格掺

混孔前的内外流道流量比为 1.498388。

因此,以一亿网格流场模拟结果为基准时,四千七百万网格模拟结果中掺混孔前内外流量比相对误差仅为 4.6%。因此四千七百万网格的分辨率足够显示旋流器等结构中的小尺度气流通道,并正确模拟细小气流通道的流量分配。因此,采用四千七百万网格模拟单头部燃烧室算例是可行的。下文将采用四千七百万网格进行湍流燃烧模拟,以简化计算,节省计算资源。

6.2.2 单头部燃烧室算例速度场

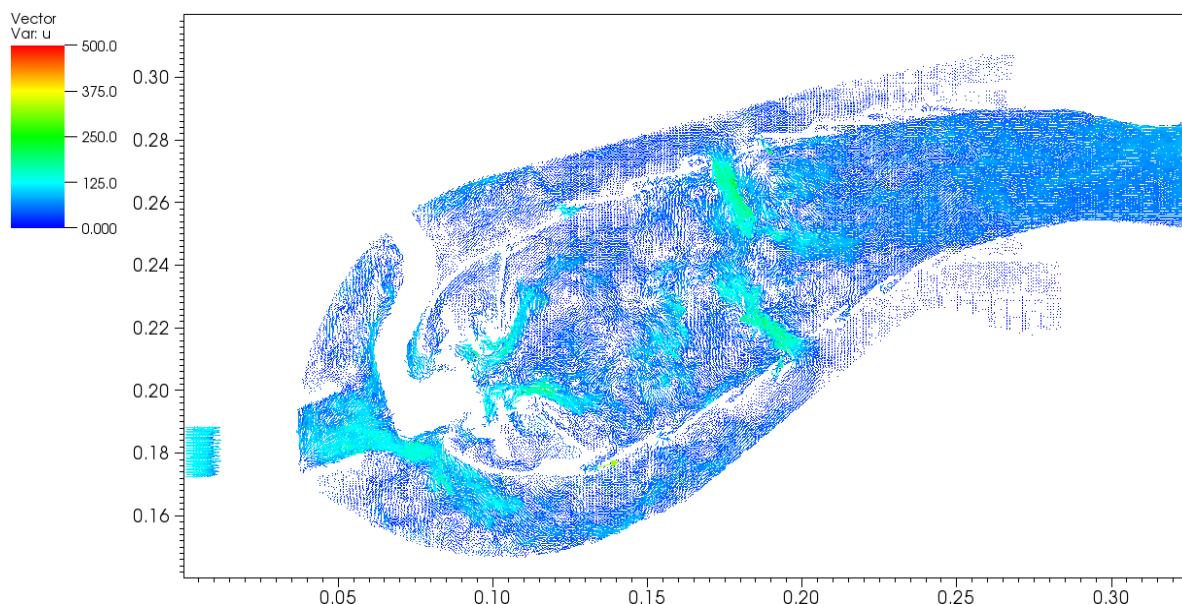


图 68. 单头部燃烧室中央截面时均速度矢量图

如上图 68 所示,单头部燃烧室内流动较为复杂,中央截面的高流速区域位于进口附近、旋流器内以及掺混孔附近。喷咀轴线上旋流器后方形成低速回流区,湍流燃烧工况下具有稳焰效果。

从图 68 中可发现,掺混孔前 $X = 0.17 \text{ m}$ 附近也有速度较高的区域,该区域是火焰筒外部流道的气流经主燃孔进入火焰筒形成的。如前图 62 所示,每个单头部燃烧室模型上有两个主燃孔和三个掺混孔。中央截面位于两个主燃孔中间,若选取中央截面进行讨论,恰好不能直接地显示主燃孔,但在中央截面速度场中仍能看到主燃孔来流的影响。

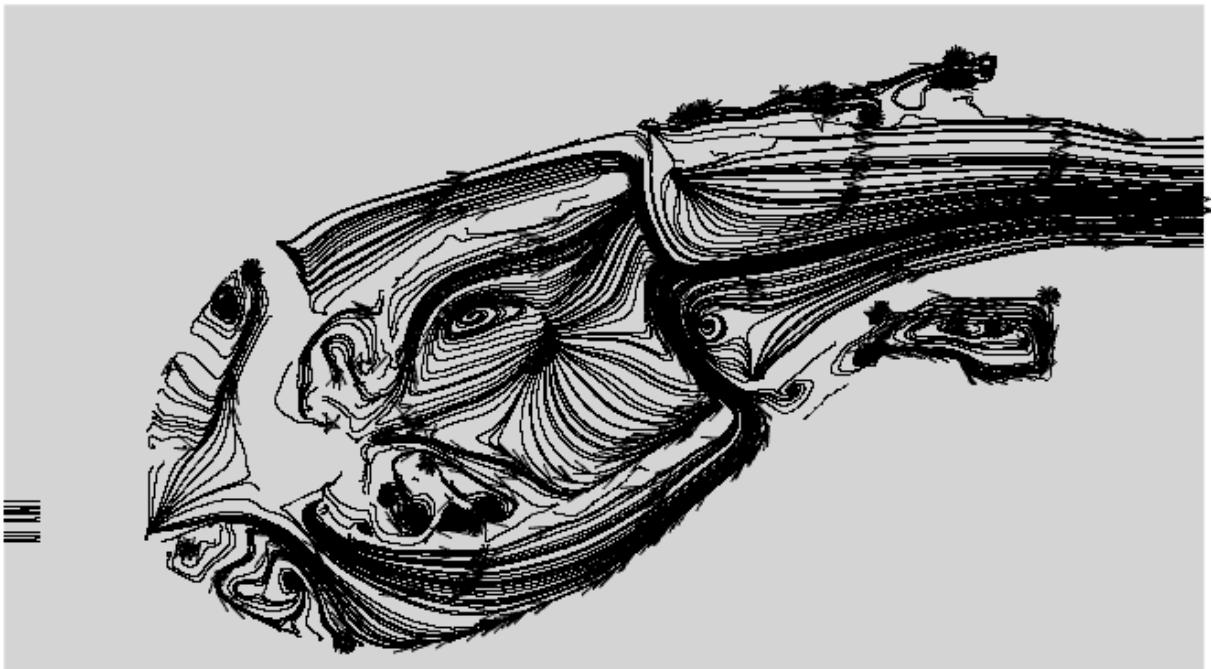


图 69. 单头部燃烧室中央截面（垂直于 Z 轴方向）流线图

从图 69 中地流线可知，单头部燃烧室中流动复杂，旋流器附近的流场中含大量涡结构。在火焰筒内部的旋流器后方，靠近火焰筒的流体轴向速度向后，而流场中央存在由主燃孔流向喷咀的气流，即中央回流区。

这是因为旋流器出口高速气流在火焰筒内形成高速旋转的涡流场，在离心惯性力的作用下，靠近火焰筒壁面的空气被压缩形成高压区，而旋流器后方火焰筒中央区域的空气膨胀形成低压区，从主燃孔流入的空气和靠近壁面附近的高压空气向火焰筒中央的低压区流动形成回流区。

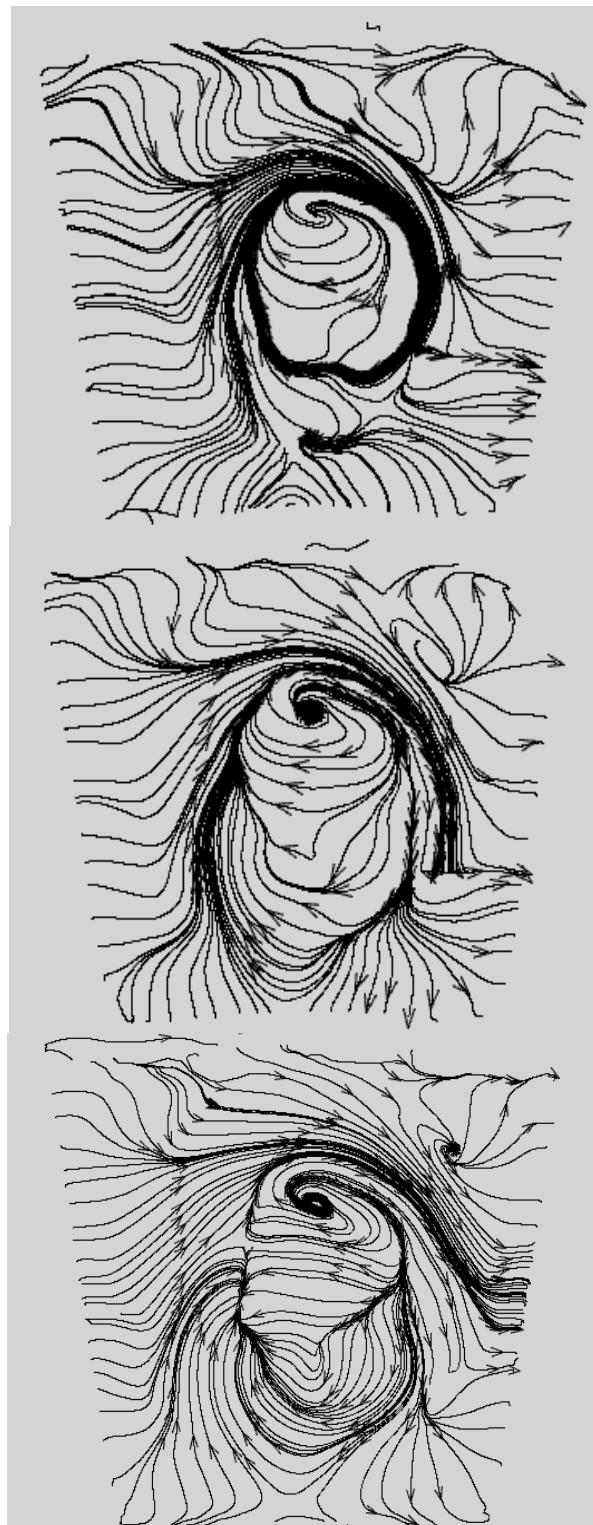


图 70. 单头部燃烧室旋流器后部截面（垂直于喷咀轴线方向）流线图

上图 70 中由上至下列出了垂直喷咀轴线方向总长度的 47%、48%、49%位置的截面，喷咀口约位于总长度的 46%位置。图中明显反映出旋流器产生的进动涡结构。

6.3 点火模拟

本文按 6.1 中所述的点火条件对单头部燃烧室进行点火试算。

点火模拟基于冷态 4700 万网格算例，从 1 万步开始续算。点火时间位于开始计算流场后的第 5 毫秒，持续至第 8 毫秒。从时间步角度上看，点火约从第 10176 个时间步持续进行至第 16281 步。

下文中选取点火过程中的代表性现象进行分析。

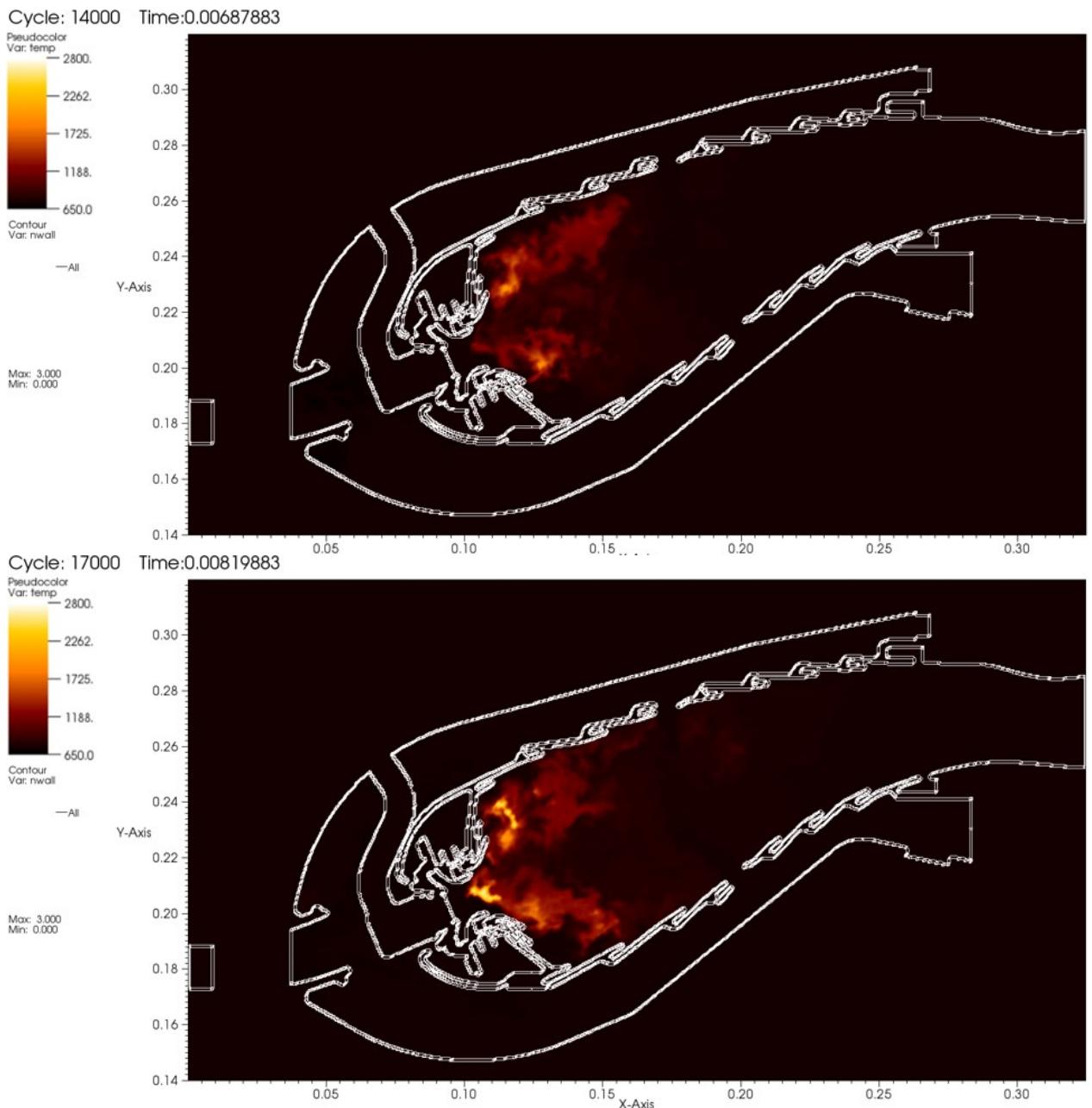


图 71. 点火过程瞬态温度云图 (14000 时间步与 17000 时间步)

上图 71 中显示了点火过程中最开始的现象。在第 14000 个时间步中，点火刚刚开

始 1.88 毫秒，高温电火花加热并引燃了距离点火点较近的油气混合物，高温区位于两个点火点处，以点火点为中心。

当点火持续 3 毫秒后刚刚停止时，如图 71 下半部分时间步为 17000 的状态，高温区沿喷雾轨迹向前传导，引燃了喷口位置附近的燃油。此时高温区分布于两个点火点处以及喷口附近。

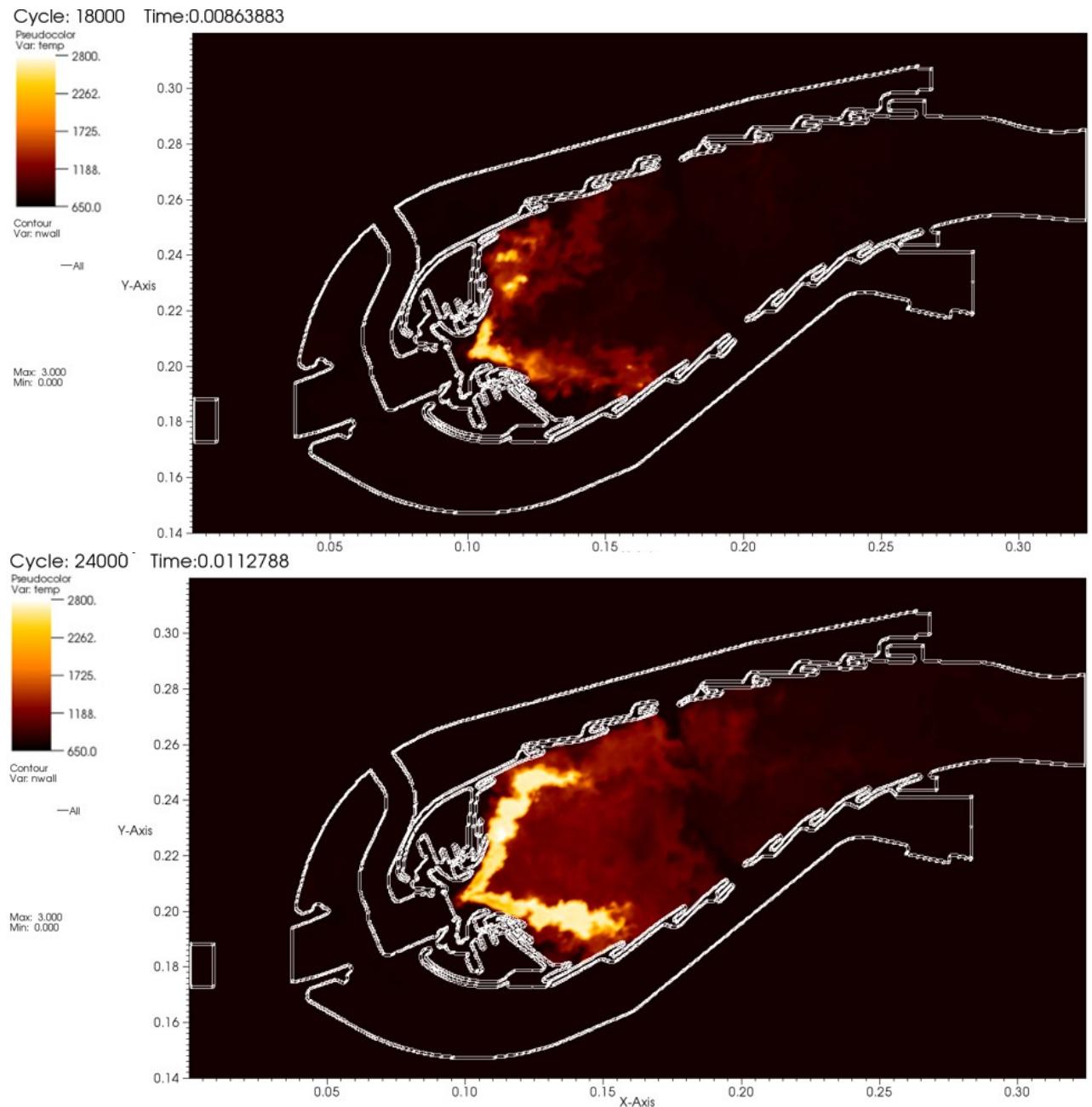


图 72. 点火过程瞬态温度云图 (18000 时间步与 24000 时间步)

在上文所述的高温区运动至喷口后，喷口附近的燃油被引燃。在 8 毫秒至 11 毫秒（点火结束后的 3 毫秒）时间中，喷口高温区将喷出的燃料引燃，高温区随煤油液滴的

喷出而运动，形成如图 72 中下半图的锥形火焰。

在第 11 毫秒附近，高温区分布与喷雾轨迹相似，整个锥形喷雾面发生剧烈的燃烧反应成为高温区。高温区受液滴分布及气流运动的影响，不断向后扩展。

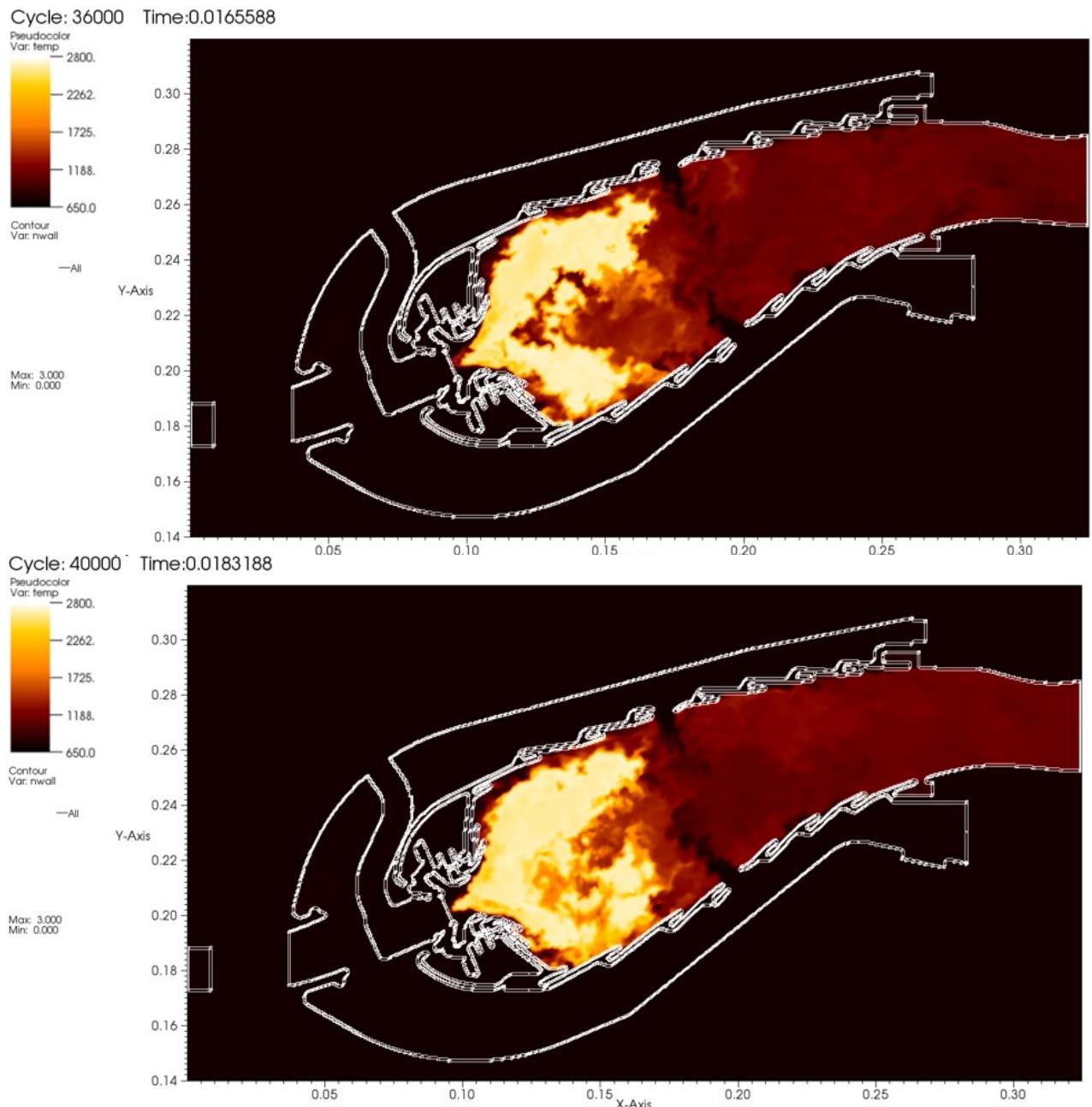


图 73. 点火过程瞬态温度云图 (36000 时间步与 40000 时间步)

在高温区沿喷雾锥面扩展至掺混孔附近后，受到主燃孔与掺混孔流入高速气流的影响，以及旋流器后方形成的回流区的影响，高温区不再向后传导，而是在回流区边缘大涡的作用下内卷，逐渐加热回流区的内部，如图 73 所示。

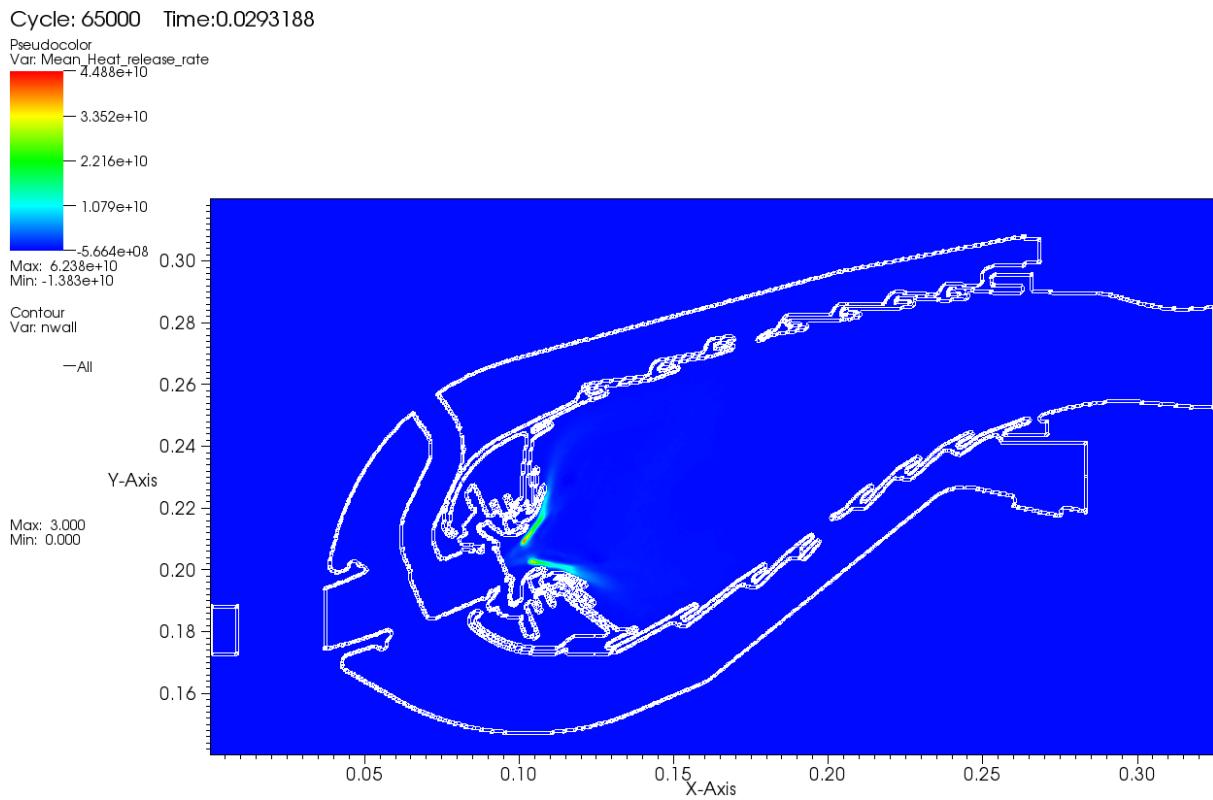


图 74. 时均释热率云图

由于喷雾呈锥形，回流区内部几乎无燃料的分布，因此回流区内部基本不发生燃烧反应。如图 74 所示，高释热率区域与喷雾形成的锥面一致，而在回流区的内部无燃烧放热。

因为回流区内部本身放热率为 0，所以在图 73 上半部分中，回流区中部温度较低。但锥形反应区产生高温燃气后，温度作为标量被回流区的湍流流动逐渐向回流区内部输运，使得回流区内部温度缓慢升高，即图 73 中 16 毫秒至 18 毫秒过程中，回流区内部温度逐渐升高，出现高温区。

当反应时间达到 29 毫秒时，温度场已达到稳定一段时间，如下图 75 所示。此时，回流区内部以达到较高的温度，且该部分的温度分布较为均匀。综上，回流区内部温度是随着湍流输运以及锥面反应区温度升高而被动升高的，因此回流区内部的温度变化对燃烧反应响应较慢。

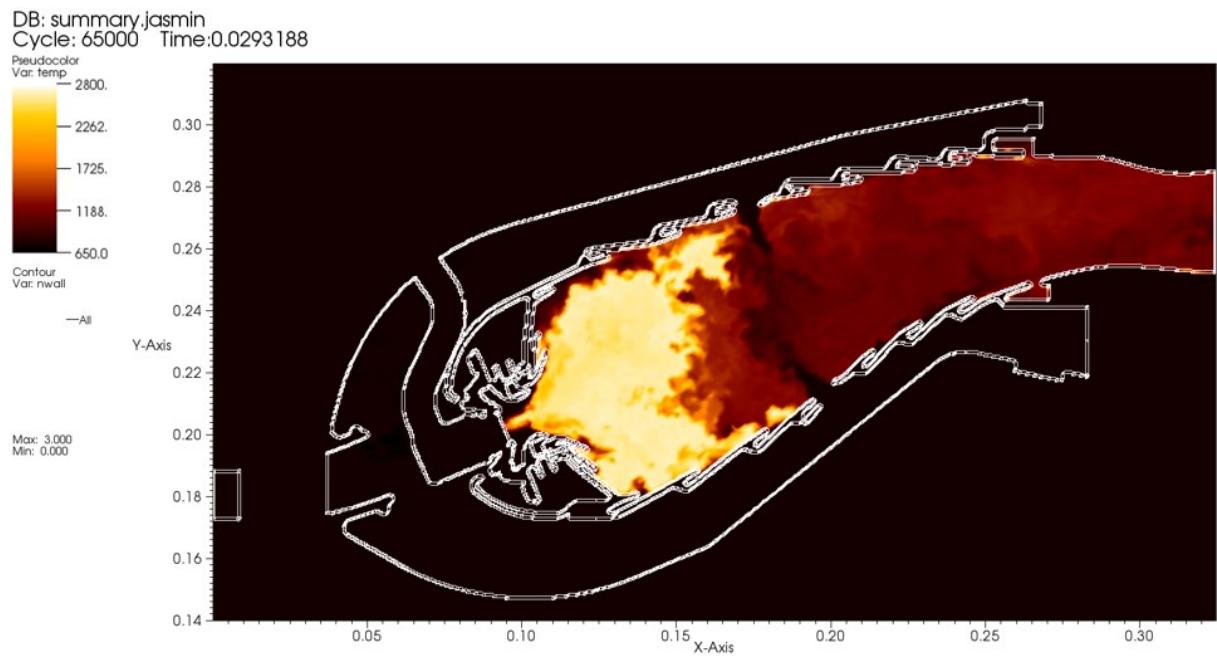


图 75. 点火完成后稳定燃烧的瞬态温度云图

如图 75 所示, 该型燃烧室的单头部模型在以 0.0077 kg/s 的燃油流量稳定燃烧时, 火焰高温区集中于喷嘴至主燃孔附近的区域内, 且由于旋流器产生的回流区对温度场的影响, 高温区中温度分布较为均匀, 回流区内无放热反应但温度较高。

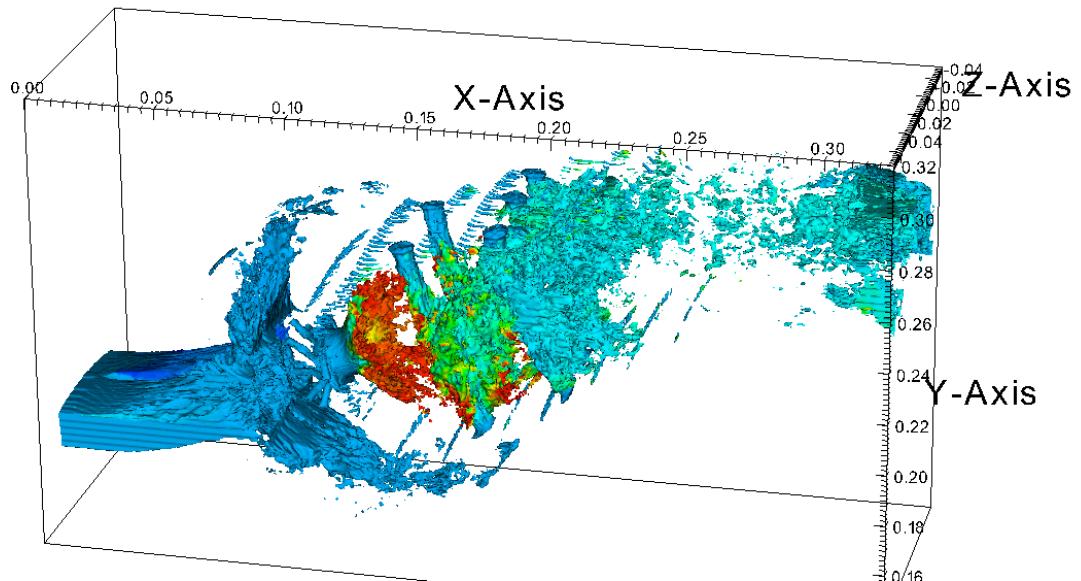


图 76. 速度等值面 (80 m/s) 上的瞬态温度云图

如上图 76 所示, 低温空气从旋流器以及主燃孔流入并与蒸发后的气态煤油掺混后, 在回流区高温的作用下被引燃, 燃气流经掺混孔时, 燃烧后的高温气体与新流入的低温空气掺混换热, 最终根据燃烧室设计的出口温度流出。在图 76 可明显地观察到旋流器中的流道结构以及火焰筒壁的气膜冷却小孔形成的气流通道, 进一步证明本文湍流燃烧

模拟采用的四千七百万网格对于单头部燃烧室算例细小气流通道的显示是足够的。

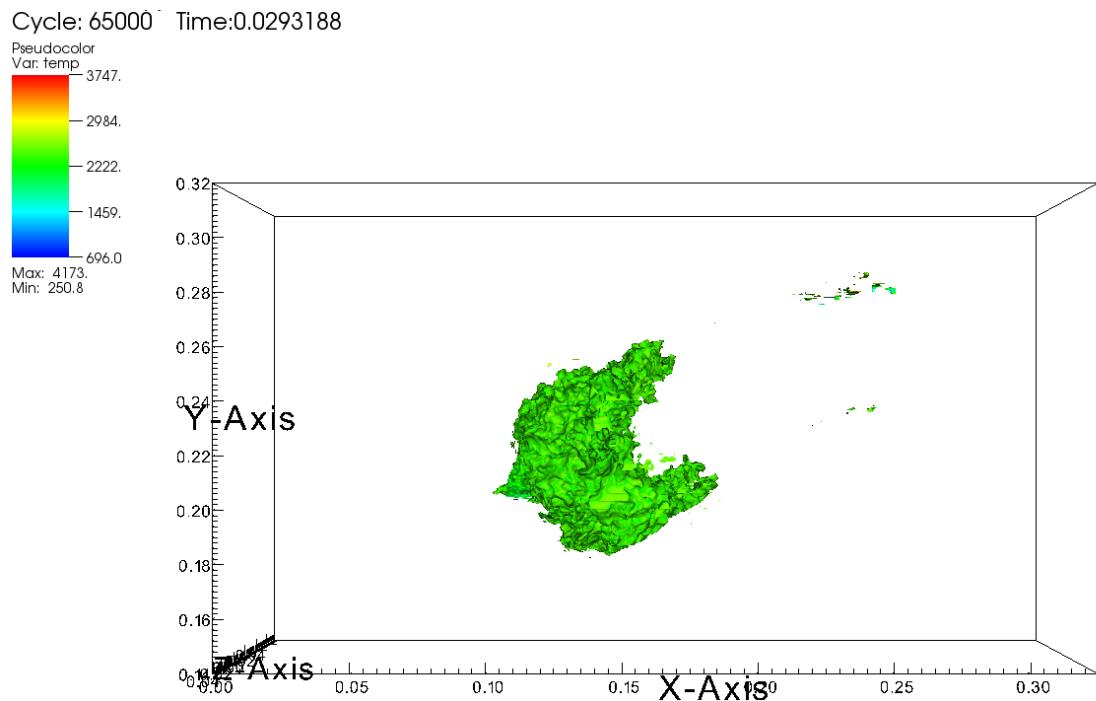


图 77. 组合浓度等值面 ($Y = 40\%Y_{max}$) 上的温度云图

本文在 5.2.4 中提到了在烷烃四步机理的支板算例两相湍流燃烧模拟中，按基元反应的放热得出组合浓度后，组合浓度场与温度场有线性相关的关系。有趣的是，尽管单头部燃烧室算例较为复杂，在四步机理模拟得到的结果中，原组合浓度与温度场关系的规律仍成立。如上图 77 所示，在组合浓度三维等值面上，温度全场基本一致。

需要注意的是，目前并未证明强湍流作用下浓度场与温度场关系的普适性，也并无严格证明该关系的正确性。本文仅抛砖引玉地针对四步机理模拟的支板及单头部燃烧室算例作一定程度上的探讨，用浓度场拟合温度场的方法仍需要进一步的模拟与实验验证。采用更复杂机理对该问题进行探讨可作为下一步研究的方向之一。

6.4 高油气比工况

点火所采用的喷油量为 0.0077 kg/s ，油气比为 0.015 ，此时高温区位于掺混孔前。当增高油气比时，高温区体积则会增大，向火焰筒后部延伸。本文中，为更明显地观察提高油气比时的高温区变化，将喷油量大幅增大至 0.07 kg/s ，并在之前点火至稳定的算例的基础上作高燃油流量的湍流燃烧模拟。

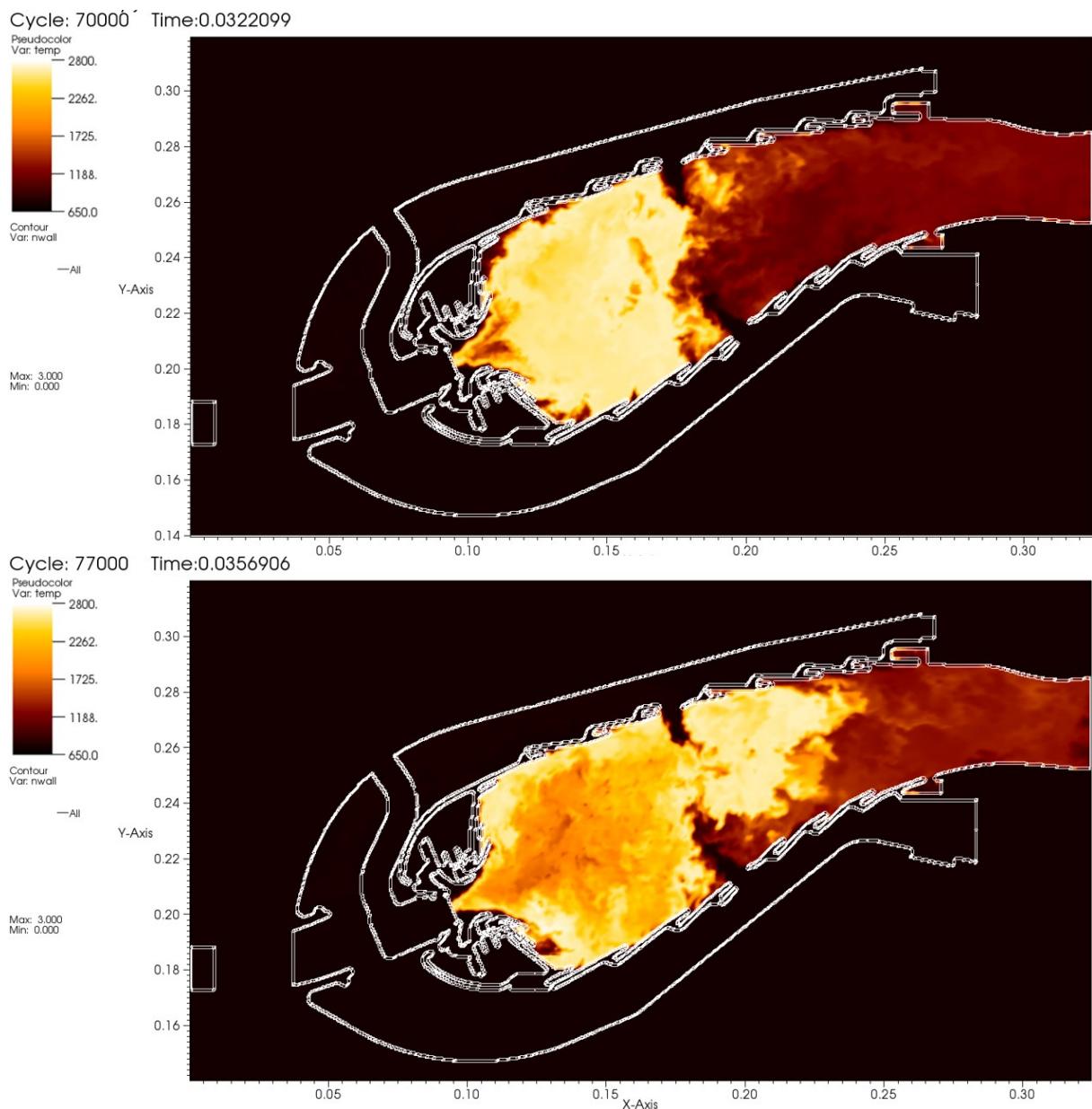


图 78. 提高燃油流量后瞬态温度云图的变化

上图 78 中显示了从第 65001 个时间步开始提高燃油流量后的第 5000 时间步（约为第 2.9 毫秒）和第 12000 个时间步（约为第 6.4 毫秒）温度云图的变化。提高燃油流量后，原工况中燃烧反应的高释热区域增大，总反应放热提高，高温区域扩张。在提高燃油流量后的第 2.9 毫秒，高温区首先充满了掺混孔前部的圆柱形空间，而掺混孔之后几乎无高温区。这表明掺混孔冷气流量较高，高温区发展到掺混孔之后较为缓慢。当提高燃油流量 6.4 毫秒之后，高温火焰发展到掺混孔后方。

综上，提高燃油流量时，高温区先充满掺混孔前的柱状区域，之后再穿过掺混孔冷气发展到火焰筒后半部分。

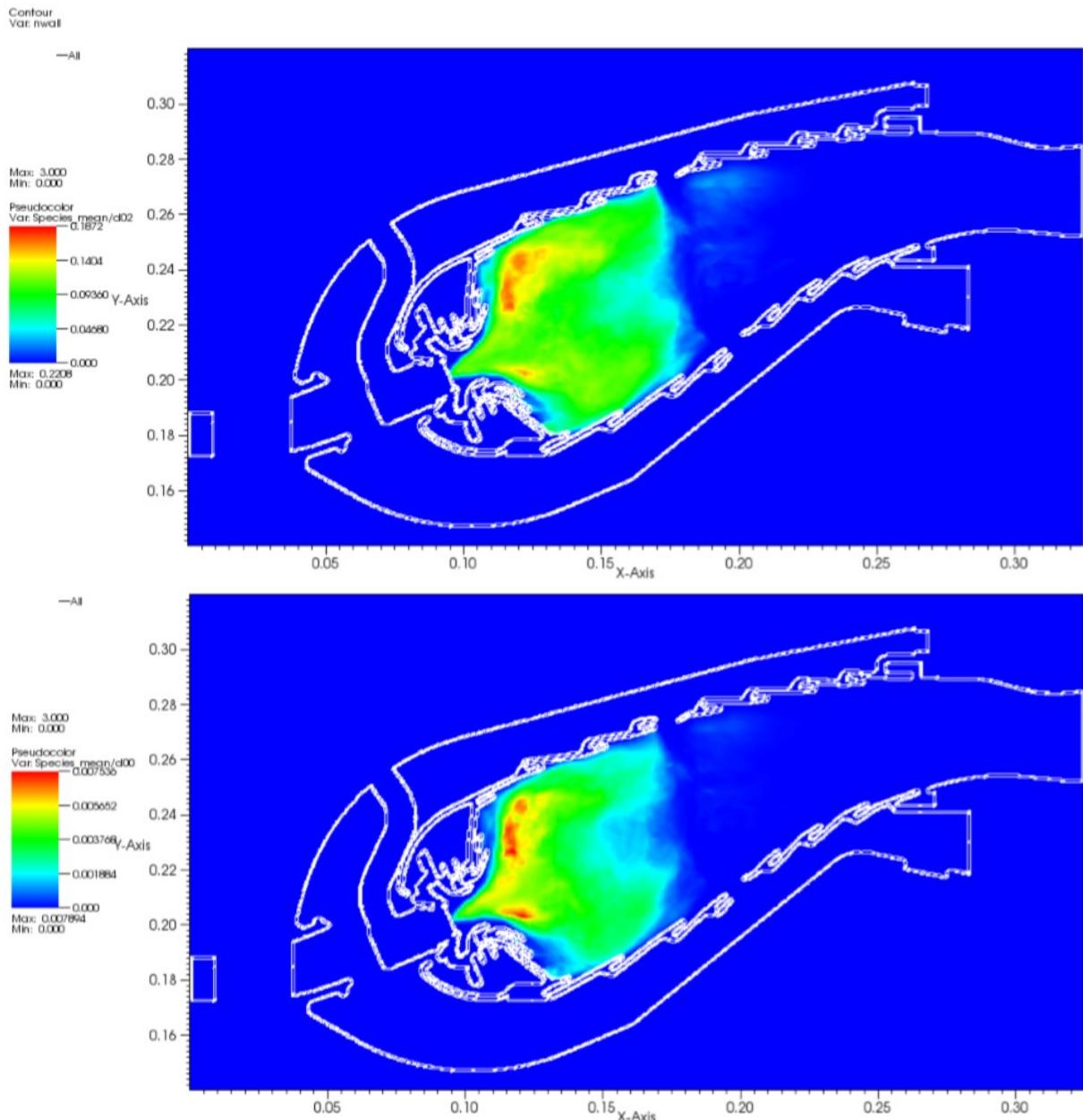


图 79. 高燃油流量工况时均 CO (上)、 H_2 (下) 浓度场

由上图 79 中的烷烃四步机理中间产物分布可知，提高燃油流量后，反应区并未发生变化，燃烧反应仍在火焰筒前半部分进行，碳氢的最终氧化反应在掺混孔前早就已基本结束。这说明该工况下从掺混孔流入的空气仍主要用于与高温燃气掺混，降低燃气的温度，与主燃孔流入的主要参与氧化反应的空气作用不同。

6.5 低油气比工况

与第 6.4 节相似地，本文在点火后稳定燃烧状态（第 65000 时间步）的基础上，降低燃油流量至原燃油流量的四分之一（即 0.002 kg/s ），从而探究单头部燃烧室由原稳定

燃烧工况转变为贫油近熄火工况的特点。

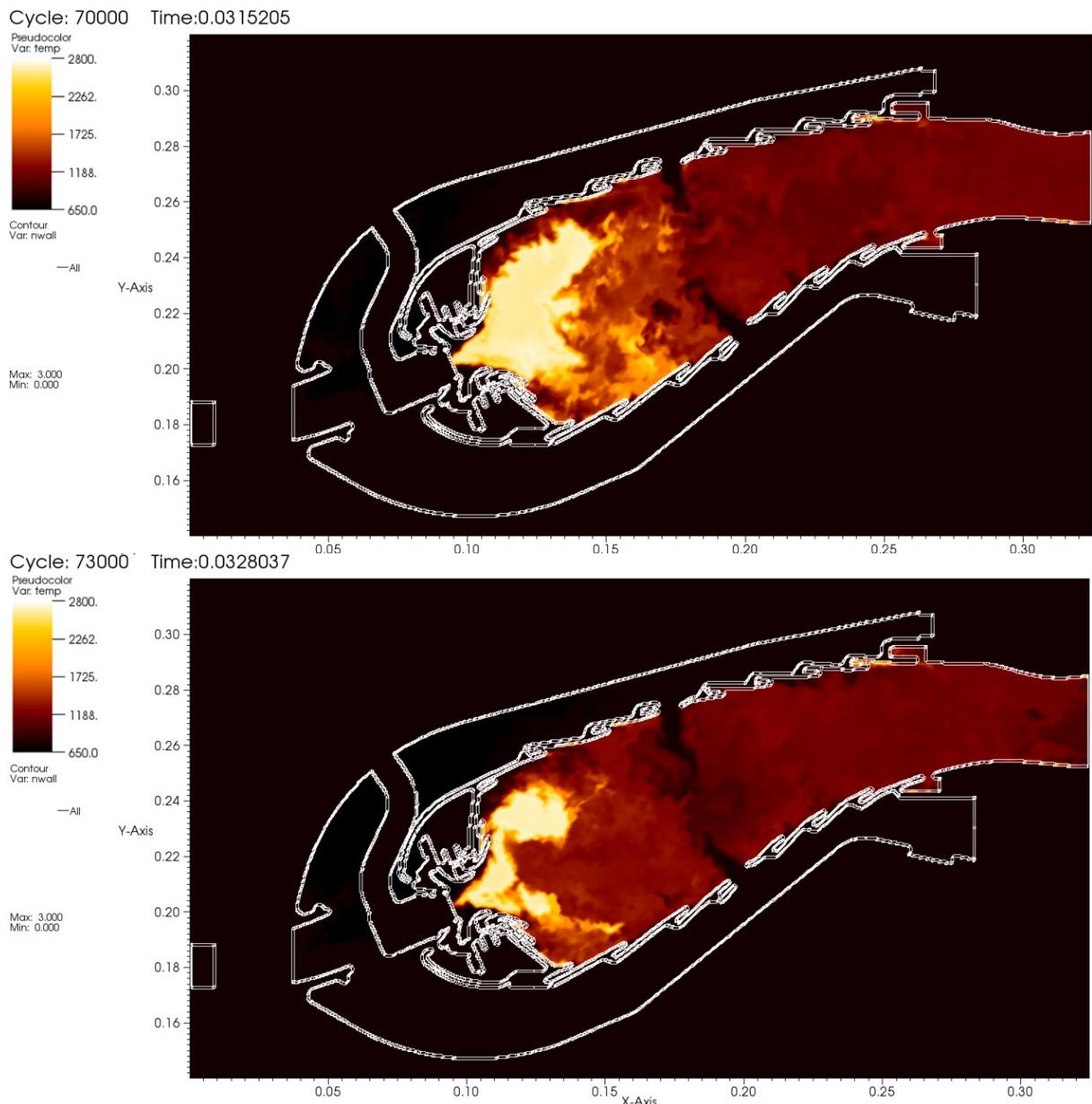


图 80. 降低燃油流量后瞬态温度云图的变化

上图 80 中展示了降低燃油流量后 5000 个时间步 (约为第 2.2 毫秒) 及第 8000 个时间步 (约为第 3.5 毫秒) 时的瞬态温度场。在降低燃油流量第 2.2 毫秒时, 能观察到高温区面积明显减少, 旋流器后部中央回流区的边缘及外部温度首先降低, 此时回流区内部的温度仍保持较高, 当时间步进一步增大时, 外部温度下降的气体流入回流区中央, 冷气与回流区内部高温气体掺混, 导致喷咀后部区域温度逐渐降低。

如图 80 下半部分所示, 降低燃油流量第 3.5 毫秒时, 能够明显观察到湍流流场对高温区的作用, 上部高温区随回流区的气体沿回流区的大涡运动。与原 65000 时间步时稳定燃烧工况相比, 大幅降低燃油流量后, 湍流对温度场的影响明显增强。



近熄火状态湍流的作用较强，在中央截面高温区面积占比基本相同时，温度分布与刚点火时差异较大，近熄火状态瞬态温度场明显地表现了回流区气流的强涡旋运动。

6.6 本章小结

本文第六章采用本软件的烷烃四步煤油燃烧机理版本模拟了结构复杂的真实燃烧室的单头部模型两相湍流燃烧。首先分析了冷态流场和网格分辨率，确定合适的网格密度后在冷态算例的基础上就某标准工况进行点火至稳定燃烧的模拟。在燃烧瞬态温度场稳定一段时间后（时间步为 65000），再以该算例为基础，分别进行高燃油流量工况和低燃油流量近熄火工况的模拟。分析以上模拟结果，得出了以下结论：

1. 第二节冷态流动模拟中无量纲速度的统计表明一亿网格流场模拟结果与四千七百万网格的流场模拟结果贴合较好，且四千七百万网格模拟得到的流场中火焰内外流量比与一亿网格模拟结果差距很小（4.6%），因此四千七百万网格的分辨率对于本算例足够高，可用于进一步模拟。
2. 第二节中分析了单头部燃烧室的速度矢量场与中央截面流线图，表明旋流器结构能在火焰筒前部形成回流区，并分析了回流区形成的原理。速度场分析表明掺混孔流量较大，全场流动复杂，含大量涡结构。
3. 本章第三节中进行两相燃烧中的点火模拟。该节详细描述了点火至稳定燃烧这一过程的高温区火焰变化规律，高温区首先在点火点附近产生，再向前部运动并引燃喷咀口附近的燃料，之后，以喷咀附近为起点，沿燃油液滴运动轨迹向后运动，形成锥面，高温火焰再锥面附近逐渐扩张，最后随回流区的气流向喷雾锥面的内部运动，使回流区内部温度升高，最终使整个回流区变为高温区，其内部温度较高且较为均匀。
4. 第三节中对释热率分布的分析表明回流区内部温度随湍流输运及外部反应区的温度变化而被动升高的。
5. 第四节对高油气比工况的模拟中，详述提高燃油流量后高温区的发展规律，高温区首先扩张并完全充满掺混孔之前的火焰筒前部柱状空间，再经掺混孔向后延伸。
6. 第五节对低油气比工况的模拟中，详述了单头部燃烧室中湍流火焰由稳定燃烧至近熄火状态的变化规律，高温火焰区域首先从四周向回流区内部缩小，再缩小到一定程度后高温区受湍流作用明显，沿回流区涡结构运动。
7. 综上，AECSC-Jasmin 软件在结构复杂的真实燃烧室两相湍流燃烧数值模拟中有



极高的应用价值，在工程应用上有进一步发展和改进的价值。



结论与展望

本文首先介绍了原版 AECSC 2.0 与新版软件 AECSC-Jasmin 的软件结构及算法，介绍了大涡模拟 Smagorinsky-Lilly 亚网格模型、TPDF 湍流燃烧模型及化学反应速率求解方法。

第三章中，本文详细分析了 AECSC-Jasmin 软件架构与算例构成。采用该软件模拟射流火焰 Flame-D、Flame-E、Flame-F 检验其湍流燃烧模拟的准确性并得到与实验数据相符的模拟结果。之后，修改了该软件的煤油化学反应机理，指出 AECSC-Jasmin 反应机理修改与 AECSC 2.0 中的机理修改步骤的相似处与差异，并提出针对 AECSC-Jasmin 软件的化学反应机理通用修改步骤。

修改煤油反应机理后，本文采用烷烃四步机理与准稳态机理对支板火焰稳定器算例进行两相湍流燃烧的稳定燃烧和贫油燃烧的多工况模拟，并得出以下结论：

1. 本文就浸没边界方法的锯齿边界网格粒子反弹问题提出的喷雾参数修改方法合理，出口温度场对实验数据的平均相对误差（7.76%）与原算例（5.514%）相比差距小。
2. 凹腔值班稳定器通过凹腔驻涡及尾部回流区的高温低速环境提供稳定的高温点火源，实现稳焰功能。
3. 准稳态机理模拟所得出口温度峰值更准确（相对误差-0.24%）且平均相对误差更低（4.954%）。烷烃四步机理模拟所得温度场分布趋势与实验值更贴近，相对误差绝对值的总体标准差的方差更低（2.17554%）。
4. 准稳态机理模拟得到的反应区更符合实际，能更准确地反应支板等结构的稳焰作用。湍流燃烧模拟中应综合考虑实际反应区及放热率分布，调整化学反应机理的复杂度及简化方法。
5. 高温区温度与燃油流量正相关，但非线性。烷烃四步机理模拟结果中，当量比降至 0.5 或以下时，高温区分布变化，脱体高温区基本消失，全场温度明显降低。准稳态机理降低油气比时高温区分布不变，且凹腔处温度变化小。这两点差异由两种机理反应区分布造成，根本上源于反应速率差异。

最后，本文采用 AECSC-Jasmin 的烷烃四步煤油反应机理版本，模拟了复杂结构的单头部燃烧室冷态流动、电火花点火至稳定燃烧、富油燃烧及贫油燃烧四种工况，得出以下结论：



1. 一亿网格流场模拟结果与四千七百万网格的流场模拟结果贴合较好，二者火焰内外流量比差距很小（4.6%），四千七百万网格的分辨率对于单头部燃烧室算例足够高。
2. 旋流器结构使气流旋转离心形成内外层压强差，在火焰筒前部形成回流区。单头部燃烧室内部流动复杂，涡结构多。
3. 单头部燃烧室点火时，高温区首先在点火点附近产生，再向前部运动并引燃喷咀口附近的燃料，之后，以喷咀附近为起点，沿燃油液滴运动轨迹向后运动，形成锥面，高温火焰再锥面附近逐渐扩张，最后随回流区的气流向喷雾锥面的内部运动，使回流区内部温度升高，最终使整个回流区变为高温区，其内部温度较高且较为均匀。
4. 单头部燃烧室提高高燃油流量的燃烧模拟中，高温区首先扩张并完全充满掺混孔之前的火焰筒前部柱状空间，再经掺混孔向后延伸。
5. 本算例降低高燃油流量的燃烧模拟中，高温火焰区域首先从四周向回流区内部缩小，再缩小到一定程度后高温区受湍流作用明显，沿回流区涡结构运动。
6. AECSC-Jasmin 软件在主燃烧室等复杂结构的两相湍流燃烧数值模拟中有较高应用价值。

AECSC-Jasmin 软件是由 AECSC 2.0 修改及发展而来的应用于复杂结构算例的大规模并行运算的新一代高性能燃烧模拟软件，在 2019 年 12 月发展得到能够准确模拟两相湍流燃烧的最初版本，未来仍有较大的发展空间。本文修改了该软件的煤油化学反应机理，并在此基础上模拟支板火焰稳定器与单头部燃烧室算例，对模拟结果进行分析。其中，化学反应机理的修改与结合算例的研究也有很多的不足和有待解决或验证的问题。

综上提出以下展望：

1. 软件发展方面，现版本 AECSC-Jasmin 软件采用的是尺寸全场相同的立方体网格，导致全场分辨率一致，在保证分辨率的前提下，网格量大，计算量大。可采用局部加密的正交结构网格，从而减少计算量并提高流场关键位置的网格分辨率。
2. 反应机理方面，本文在煤油燃烧反应模拟中仅采用了准稳态机理与烷烃四步机理进行对比，并认为机理简化过程应考虑反应区分布及释热率分布的合理性，若增加对机理简化方法及其过程的研究以及更多煤油反应机理的优缺点对比，得到在 LES-TPDF 燃烧模拟中表现较好的反应机理，则会使本文研究内容更全面且更有应用价值。



3. 算例部分, 单头部燃烧室未进行实验数据的对比分析, 对单头部燃烧室算例的分析有进一步研究的空间。
4. 在模拟结果的分析方法上, 本文探讨了强湍流作用下, 基于烷烃四步机理模拟支板算例及单头部燃烧室算例时, 通过分析机理中基元反应构成得到的组合浓度场与温度场的线性关系规律。该规律还需在多种机理模拟的多个算例上进一步研究, 并确定该规律的原理及适用条件。
5. 在面向真实航空发动机燃烧室湍流燃烧模拟方面, 浸没边界方法能较好地解决复杂空间网格构建及并行块划分的问题, 有较高的研究和应用价值。目前 AECSC-Jasmin 仍有较多的缺点与局限性, 应当进一步发展基于浸没边界法的湍流燃烧模拟软件。



参考文献

- [1] Vovelle C, Delfau J L, Reuillon M. Formation of Aromatic Hydrocarbons in Decane and Kerosene Flames at Reduced Pressure[M]. Berlin: Springer Series in Chemical Physics, 1994.
- [2] Kundu K P, Deur J M. A Simplified Reaction Mechanism for Calculation of Emissions in Hydrocarbon (Jet-A) Combustion[R]. AIAA 93-2341.
- [3] Wang T S. Thermophysics Characterization of Kerosene Combustion[J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2001,15(2): 140-147.
- [4] Dagaut P, Ristori A, Bakali A E, et al. Experimental and Kinetic Modeling Study of the Oxidation of n-Propyl-benzene[J]. Fuel, 2002, 81(2): 173-184.
- [5] Montgomery C J, Cannon S M, Mawid M A, et al. Reduced Chemical Kinetic Mechanisms for JP-8 Combustion[R]. AIAA 2002-0336.
- [6] 肖保国, 杨顺华, 赵慧勇, 等. RP-3 航空煤油燃烧的详细和简化化学动力学模型[J]. 航空动力学报, 2010, 25(9): 1949-1955
- [7] 于维铭. 航空煤油替代燃料火焰传播速度与反应动力学机理研究[D]. 北京. 清华大学, 2014.
- [8] 陈登炳, 刘云鹏, 方文, 等. 一种 RP-3 航空煤油的三组分替代燃料简化机理构建与验证[J], 推进技术, 2019, 40(03): 691-698.
- [9] 徐佳琪, 郭俊江, 刘爱科, 等. RP-3 替代燃料自点火燃烧机理构建及动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2015, 31(4): 643-652
- [10] Kim S, Menon S. Large-Eddy Simulation of a High Pressure Single-Element Lean Direct-Injected Gas-Turbine Combustor[R]. AIAA, 2014-0131.
- [11] Bulat G, Jones W P, Navarro-Martinez S. Large Eddy Simulations of Isothermal Confined Swirling Flow in an Industrial Gas-Turbine[J]. International Journal of Heat and Fluid Flow, 2015, 51:50-64.
- [12] Filosa A, Noll B E, Di Domenico M, et al. Numerical Investigations of a Low Emission Gas Turbine Combustor Using Detailed Chemistry[R]. AIAA, 2014-3916.
- [13] Ilie M. Numerical Computations of Turbulent Swirling Reacting Flows Using URANS and LES[R]. AIAA, 2009-5407.
- [14] See Y C, Ihme M. Large Eddy Simulation of a Gas Turbine Model Combustor[R]. AIAA,



2013-0172.

- [15]莫姐, 程明, 万斌, 等. 三旋流燃烧室的数值模拟与实验[J], 航空动力学报, 2017, 32(11): 2568-2575
- [16]丁勇能, 田勇, 王波, 等. 某重型燃气轮机 DLN 燃烧室数值模拟-热态分析[J], 燃气轮机技术, 2019, 32(2): 40-43
- [17]ZHOU Yu, Le Jia-ling, HUANG Yuan. LES of Combustion Flow Field in a Practical Aeroengine Combustor with Two-Stage Counter-Rotating Swirler[J]. 推进技术, 2018, 39(7): 1576-1589
- [18]Longwell J P, Frost E E, Weiss M A. Flame Stability in Bluff Body Recirculation Zones[J]. Industrial and Engineering Chemistry, 1953, 45(8): 1629-1633.
- [19]Zukowski E E. Flame Stabilization on Bluff Bodies at Low and Intermediate Reynolds Numbers[D]. California: California Institute of Technology, 1954.
- [20]S. Nair, T. Lieuwen. Near-blowoff dynamics of a bluff-body stabilized flame, J.Propuls. Power, 2007, 23: 421–427.
- [21]Shanbhogue S J, Husain S, Lieuwen T. Lean blowoff of bluff body stabilized flames: Scaling and dynamics[J]. Progress in Energy & Combustion Science, 2009, 35(1):98-120.
- [22]Morales A J, Lasky I M, Geikie M K, et al. Mechanisms of flame extinction and lean blowout of bluff body stabilized flames[J]. Combustion and Flame, 2019, 203:31-45.
- [23]窦力. 基于 PDF-LES 对钝体熄火现象的模拟研究[D]. 北京. 北京航空航天大学. 2019.
- [24]Lutz A. E., Kee R. J., Grcar J. F., et al. OPPDIF: A FORTRAN Program for Computing Opposed Flow Diffusion Flames[R]. Sandia Report, No.SAND 96-8243, Sandia National Lab, 1996.
- [25]R.S. Barlow, J.H. Frank, Effects of turbulence on species mass fractions in methane/air jet flames[J], Combust. Inst. 27 (1998) 1087–1095.
- [26]沈硕. 基于 les-pdf 方法分析高雷诺数非预混射流火焰中湍流反应关联关系[D]. 北京. 北京航空航天大学. 2019.
- [27]魏观溢. 基于 PDF-LES 的加力燃烧室火焰稳定器计算[D]. 北京. 北京航空航天大学. 2017.
- [28]Tianfeng Lu, Chung K. Law. A directed relation graph method for mechanism reduction,



- Proceedings of the Combustion Institute, 2005, 30(1): 1333-1341.
- [29] Wenting Sun, Zheng Chen, Xiaolong Gou, Yiguang Ju. A path flux analysis method for the reduction of detailed chemical kinetic mechanisms, Combustion and Flame, Volume 157, 2010, 7: 1298-1307.
- [30] Jaber F A, Colucci P J, James S, et al. Filtered Mass Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent Reacting Flows[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1999, 401(2):85-121.
- [31] Peskin C S. Flow patterns around heart valves: a numerical method[J]. J Comput Phys, 1972, 10 (2): 252-271.
- [32] Peskin C S. Numerical analysis of blood flow in the heart[J]. J Comput Phys, 1977, 25(3): 220- 252.
- [33] Peskin C S. The immersed boundary method[J]. Acta Numerica, 2002, 11: 479-517.
- [34] P. Dagaut. Kinetics of jet fuel combustion over extended conditions: Experimental and modeling. J Eng[J]. Gas Turb. Power, 2007, 129: 394-403.
- [35] S. Dooley, S. H. Won, J. Heyne, T. I. Farouk, Y. Ju, F. L. Dryer, K. Kumar, X. Hui, C.-J. Sung, H. Wang M. A. Oehlschlaeger, V. Iyer, S. Iyer, T. A. Litzinger, R. J. Santoro, T. Malewicki, K. Brezinsky. The experimental evaluation of a methodology for surrogate fuel formulation to emulate gas phase combustion kinetic phenomena[J]. Combustion and Flame, 2012, 159: 1444-1466.
- [36] C. K. Westbrook, F. L. Dryer. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1984, 10(1): 1-57
- [37] D. Kim, J. Mart Z, A. Violi. A surrogate for emulating the physical and chemical properties of conventional jet fuel[J]. Combustion and Flame, 2014, 161(6): 1489-1498.
- [38] A. Violi, S. Yan, E. G Eddings, A. Sarofim, S. Granata, T. Faravelli, E. Ranzi. Experimental formulation and kinetic model for JP-8 surrogate mixtures[J]. Combustion Science and Technology, 2002, 174 (11-12): 399-417.
- [39] T. Malewicki, S. Gudiyella, K. Brezinsky, Experimental and modeling study on the oxidation of Jet A and the n-dodecane/iso-octane/n-propylbenzene/1, 3, 5-trimethylbenzene surrogate fuel[J]. Combustion and Flame, 2013, 160: 17-30.
- [40] S. Honnet, K. Seshadri, U. Niemann, N. Peters. A surrogate fuel for kerosene[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2009, 32(1): 485-492.



-
- [41] A. J. Dean, O. G. Penyazkov, K. L. Sevruk, B. Varatharajan. Autoignition of surrogate fuels at elevated temperatures and pressures[J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2007, 31(2): 2481-2488.
- [42] 郑东, 于维铭, 钟北京. RP-3 航空煤油替代燃料及其化学反应动力学模型[J]. 物理化学学报, 2015, 31(3): 636-642.



毕设期间取得的学术成果

- [1] Fang Wang, Yudong Wang, Shengli Jiang, Jun Chen, Jun Tang, Jie Jin, Huasheng Xu, Algorithm of Aeroengine Combustor Simulation Software AECSC-Jasmin and its application, Turbulence, Heat and Mass Transfer 10. (已录用)
- [2] 王方, 王煜栋, 金捷, 姜胜利, 陈军, 唐军, 徐华胜, 基于 LES-TPDF 方法的 AECSC-Jasmin 数值模拟软件及其测试, 中国化学会第 32 届学术年会. (已投稿)



致谢

感谢王方老师对本文研究方向与研究方法的指导，对研究结果的讨论以及对本文内容的斧正。王方老师在科研工作与学生培养方面极其努力，兢兢业业。王方老师在本文模拟结果的讨论中对本次毕设有关键作用，对本人的培养方面也付出了很多。如前人所言，“岂知灌顶有醍醐，能使清凉头不热”。

感谢金捷老师对本文研究过程的指导，对研究方法与结论的意见与建议以及对本文结构的指导。

感谢本课题组高东硕师姐、邢竞文师姐对本人软件使用上的关键性指导，她们在本人学习 AECSC-Jasmin 软件及其配套的 Teravap 后处理软件过程中提供了大量帮助。

感谢本课题组研究生窦力，窦力修改了 AECSC 2.0 的化学反应机理，为本文修改 AECSC-Jasmin 中的煤油燃烧机理提供了思路。

感谢北京九所姜胜利老师等在 AECSC-Jasmin 软件发展工作中做出的贡献。

最后，非常感谢各位老师在疫情期间负责与指导本科生毕业设计的所付出努力，感谢各位评审老师垂阅本文并予以指教。