

湍流化学反应的分形数值模拟

摘要

本文针对湍流化学反应的数值模拟,基于湍流涡串唯象概念和分形理论的物理基础,建立了化学反应速率的分形模拟模型(Fractal Model)。为实现模拟,对 ANSYS-CFX 软件进行了二次开发,利用该软件的用户子程序接口,编写了分形模拟的子程序并将其嵌入 ANSYS-CFX 软件。首先对大空间建筑地下通道进行模拟,探讨了烟气的运动规律;在此基础上,嵌入 FM 模型对燃烧罐内燃烧进行了模拟,定性验证 FM 燃烧模型;再次,利用国际公认的 Steckler 室内燃烧实验数据进一步验证了 FM 燃烧模型,亦对 FM 与 EBU、EDC 等多种燃烧模型进行了比较分析。主要工作和成果如下:

(1) 基于湍流涡旋串级分裂的分形理论,建立了能够表达湍流多尺度结构物理特性的分形湍流化学反应模型 FM。

(2) 利用 Visual Fortran 程序编辑器进行子程序的编译工作,调用 CFX 中的 cfx5mkext 命令使自行编制的子程序与软件连接。将 FM 模型嵌入 ANSYS-CFX 软件,进行 FM 燃烧模型的模拟计算。

(3) 在地下通道的烟气运动规律的模拟中,采用浮力修正的双方程 $k-\varepsilon$ 湍流模型、Rosseland 辐射模型、以高温热源、烟气组分源项来模拟火源,模拟了三维非稳态的燃烧烟气流动与传导、对流和辐射的复合传热过程。分析了燃烧条件下的流动、热及烟气的传递规律,并对燃烧条件下由

于密度变化引起的扼流效应、浮力效应进行了分析。为进一步模拟研究提供基础。

(4) 在燃烧罐燃烧的模拟中,采用浮力修正的双方程 $k-\epsilon$ 湍流模型、Rosseland 辐射模型、进行了 EBU、FM 两种燃烧模型的模拟。定性地对两种燃烧模型的模拟结果,从 EBU、FM 两种燃烧模型模拟的流场分布情况来看,FM 燃烧模型显示出更多的湍流小尺度涡团。

(5) 在 Steckler 室内燃烧的模拟中,进行了 EBU、FM 两种燃烧模型的模拟,并将模拟结果与文献中的其它燃烧模型的模拟结果进行了对比评价。

(6) 对 EBU、FM、EDC、PrePDF、VHS 五种燃烧模型的模拟分析表明 FM 湍流化学反应的分形模拟模型与 EDC 燃烧模型的计算结果与实验数据吻合的较好,FM 模型的物理描述要更为精细,能够更好地刻画湍流—反应的相互作用,是一种很有前途的湍流化学反应模型。

(7) 后期工作:综合考虑采用图像解析流速测量 PIV、PLIF 方法获得湍流化学反应的多尺度特征与涡团的结构特征,为进一步的应用提供理论和观测基础。

关键词: 湍流燃烧, 分形, 数值模拟, 辐射模型, 烟气运动规律

FRactal SIMULATION FOR TURBULENT CHEMICAL REACTION

ABSTRACT

The fractal model of turbulent chemical reaction (FM) is developed based on the phenomenological concept of vortex cascade and on fractal theory. In order to realize the simulation, user-level development of software-ANSYS CFX is conducted. Using the user FORTRAN subroutines, FM model is compiled into software-ANSYS CFX 10.0. First, transport phenomena of fluid flow and turbulent combustion process for a big space underground channel is simulated and is discussed. Based on this, the fractal model of turbulent chemical reaction (FM) is tested qualitatively by simulating combustion in a Can Combustor. Finally, in order to validate FM model, comparisons and analysis are carried for fire scenarios of Steckler. Comparisons are also made with the numerical simulations from other combustion models including the eddy dissipation model (EDC) and the eddy break-up model (EBU) for the same fire experiments. The main research works and results are summarized as follows:

(1) Based on the phenomenological concept of vortex cascade and on fractal theory, fractal model of turbulent chemical reaction (FM) is developed

which can describe the characteristics of fractal scales of turbulent chemical reaction.

(2) By using Visual Fortran compiler, FM model is compiled into ANSYS CFX10.0. User-level subroutine Cfx5mkext is developed and incorporated into CFX link. The numerical simulation is carried out using FM model on the platform of ANSYS CFX.

(3) In the study of smoke transport for underground channel, a three dimensional dynamic field simulation including smoke flow, the heat transfer of conduction, convection and radiation is accomplished, in which two equations $\kappa-\varepsilon$ turbulent model with buoyancy modification is used and Rosseland radiation model is applied to take radiation into consideration. The fire is set as a heat source with smoke components. The transport process of fluid flow, heat and smoke transfer and the throttle effect, floatation effect resulted from the change of air density are discussed in detail. The study of this work will provide theoretic base for further study.

(4) In the combustion simulation of Can Combustor, two equations $\kappa-\varepsilon$ turbulent model with buoyancy modification and Rosseland radiation model, FM model are applied. Meanwhile, EBU and FM models are compared and FM model is tested qualitatively. The results of numerical simulations show the structure of fractal vortexes by FM simulation.

(5) The combustion simulation of the Steckler's room fire is carried out with the fractal model of turbulent combustion chemical reaction (FM) and the

eddy-break-up model (EBU). The results from references are compared with the results of FM.

(6) The numerical simulation results shows FM and EDC simulation agree better with experimental data and FM can describe the interaction between turbulence and chemical reaction. FM is proved to be a promising mathematical model for turbulent chemical reaction.

(7) Future work should be focused on the structure of fractal and vortexes. PIV and PLIF method will be applied to obtain the characteristics of multiscale and vortexes structure, which will provide the bases for the further application and observation for turbulent chemical reaction processes.

KEY WORDS: turbulent combustion, fractal, numerical simulation, radiation model, smoke movement

符号说明

| | |
|--------------|--|
| A_f | Arrhenius 指数因子 |
| a | 吸收系数 |
| $C\tau$ | EDC 模型时间尺度常数 |
| C_ϵ | EDC 模型容积比率常数 |
| C_p | 气体的定压比热容, $J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$ |
| E_r | 反应活化能, $J \cdot kmol^{-1}$ |
| G_k | 剪力产生项 |
| G_b | 浮力产生项 |
| g | 重力加速度, $m \cdot s^{-2}$ |
| I | 辐射强度 |
| m_f | f 组分的质量分数 |
| N_c | 每个涡团生成的涡团数 |
| N_T | 涡团总数 |
| N_η | 每个单元中耗散尺度涡团数 |
| n | 折射系数 |
| P | 压力, Pa |
| P_Δ | 网格 Peclet 数 |
| R_f | 理查逊数 |
| R_{fi} | f 组分的化学反应速率 |
| Re_Δ | 网格尺度雷诺数 |
| Re_η | 耗散尺度雷诺数 |

| | |
|------------|--------------------------------|
| S_i | 源项 |
| T | 温度, K |
| t | 时间, s |
| u | x 方向上的速度分量, $m \cdot s^{-2}$ |
| v | y 方向上的速度分量, $m \cdot s^{-2}$ |
| w | z 方向上的速度分量, $m \cdot s^{-2}$ |
| x | 坐标系的 x 方向, m |
| y | 坐标系的 y 方向, m |
| z | 坐标系的 z 方向, m |
| Δ | 单元尺度, m |
| ΔV | 控制容积体的体积, m^3 |
| Δx | x 方向上的单元尺度, m |
| Δy | y 方向上的单元尺度, m |
| Δz | z 方向上的单元尺度, m |

希腊字母

| | |
|---------------|------------------------------|
| Γ | 广义扩散系数, $m \cdot s^{-2}$ |
| β | 体积膨胀系数 |
| β_r | Arrhenius 公式温度指数 |
| μ | 流体粘性系数, $Pa \cdot s$ |
| μ_l | 层流粘性系数, $Pa \cdot s$ |
| μ_t | 湍流粘性系数, $Pa \cdot s$ |
| κ | 湍流动能, $m^2 \cdot s^{-1}$ |
| ε | 湍流动能的耗散率, $m^2 \cdot s^{-3}$ |
| φ | 通用变量 |

符号说明

| | |
|---------------|--------------------------------------|
| σ | 斯蒂芬-玻耳兹曼常数 |
| σ_s | 散射系数 |
| ρ | 流体的密度, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ |
| η | 耗散尺度, m |
| γ^* | “微细结构”体积分数 |
| τ_Δ | 特征时间, s |
| τ_η | 耗散时间, s |

无因次量

| | |
|-------------|--------------------|
| Pr | 普朗特 (Prandtl) 数 |
| R_f | 理查逊 (Richardson) 数 |

北京化工大学学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

作者签名： 王艳飞 日期： 2007.6.1

关于论文使用授权的说明

学位论文作者完全了解北京化工大学有关保留和使用学位论文的规定，即：研究生在校攻读学位期间论文工作的知识产权单位属北京化工大学。学校有权保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和磁盘，允许学位论文被查阅和借阅；学校可以公布学位论文的全部或部分内容，可以允许采用影印、缩印或其它复制手段保存、汇编学位论文。

保密论文注释：本学位论文属于保密范围，在2年解密后适用本授权书。非保密论文注释：本学位论文不属于保密范围，适用本授权书。

作者签名： 王艳飞 日期： 2007.6.1
导师签名： 张孝波 日期： 2007.6.1

第一章 绪论

在能源、动力、航空和航天等工程领域，经常遇到的实际燃烧过程几乎都是湍流燃烧过程。在湍流燃烧中，湍流流动过程和化学反应过程有强烈的相互关联和相互影响。湍流过程强化混合而影响着时均化学反应速率。同时化学反应放热过程又影响着湍流，如何定量地来描述和确定这种相互作用是湍流燃烧研究的一个重要内容^[1]。

湍流对燃烧中的火焰传播速度和压力分布、温度分布等起着决定性的影响作用。化学反应中组分的生成（消耗）率或能量的释放速率是反应物浓度和反应流体温度的强非线性函数。由于湍流影响，化学反应中组分浓度和温度以及化学反应速率都是随时间而脉动的，因此在湍流燃烧的数值模拟中，不仅面临着湍流流动所具有的问题以及脉动标量的输运方程如何处理的问题，还面临着湍流燃烧所特有的，与脉动量呈现确定的强非线性函数关系的脉动标量即时平均化学反应速率的模拟。湍流燃烧模拟最基本的问题是反应速率的时均值不等于用时平均值表达的反应速率。

目前湍流燃烧模拟的方法有直接数值模拟（DNS）、大涡模拟（LES）、随机涡模拟、概率密度函数输运方程模拟、条件矩模型、简化概率密度函数模型、涡旋破碎模型 EBU、涡耗散概念 EDC 燃烧模型、湍流化学反应的分形模拟模型 FM (Fractal Model) 等。如何寻找一种即合理而又经济的模型，是尚待解决的问题。本文主要讨论涡旋破碎模型 EBU、湍流化学反应的分形模拟模型 FM 两种燃烧模型的模拟精度问题，并与其它模型模拟的结果作比较。模拟的工况有地下通道烟气模拟、燃烧罐内燃烧模拟、美国学者 Steckler, Quiniere 和 Rinkinen 在 1982 年进行的一系列燃烧实验的典型室内燃烧工况^[2]。

1.1 燃烧数值模拟

1.1.1 湍流燃烧模拟

在模拟湍流燃烧问题时燃烧模型的选择直接影响着模拟结果的精确度。但湍流流动中不同尺度的涡的特性有本质区别，大涡可以进行直接数值模拟（DNS），以目前的计算条件，小涡模拟就需要运用一些假设和经验性的结果，以便将湍流流动或湍流燃烧中的各物理量和通常所说的时均流场联系起来，封闭方程组并求解计算，这就出现不同的湍流燃烧模型^[3]。

1.1.1.1 湍流燃烧的直接数值模拟 (DNS)

DNS 方法^[4, 5]用于湍流燃烧, 可以仔细地考虑和了解湍流与燃烧的相互作用。但是与纯流动过程相比, 燃烧使得这一方法的应用更为困难, 一方面燃烧使得流场内流体的温度和组成有一个很大的变化, 以至于决定网格尺寸的相关湍流尺度难以确定; 另一方面燃烧本身可能在时空上引入一些足以与湍流尺度相比拟的尺度(如火焰厚度, 反应时间)。因此, 在湍流燃烧的直接数值模拟中, 除了简单几何形状和低 Reynolds 数外, 还有低 Damkohler 数的限制, 否则, 就要对火焰面进行跟踪和采用自适应加密网格。湍流燃烧过程的直接数值模拟为人们认识火焰面在温度的作用下的皱折过程、标量的逆梯度输运机理、预混燃烧的火焰结构以及扩散燃烧统观模型的检验上提供了一个重要的手段, 并已在这些方面取得很大的进展。当然, 由于 DNS 所需计算量很大, 只限于尺寸很小空间内低 Re 数情况, 因此目前尚难以用于工程问题。

1.1.1.2 湍流燃烧的大涡模拟 (LES)

LES^[4, 5, 6]是在湍流的大涡尺度和小涡尺度(Kolmogorov 尺度)之间选一滤波宽度对 N-S 方程进行滤波, 把所有流动变量分成大尺度和小尺度量, 对大尺度量进行直接模拟, 而对小尺度量采用亚网格尺度模型进行模拟。这样一来, LES 用于湍流燃烧时是否能够成功就取决于燃烧过程的尺度。在许多所感兴趣的燃烧系统中, 反应区具有和 Kolmogorov 尺度一样或还要小的量级, 而这些量级的尺度恰恰被 LES 滤掉了, 需要借助模型来模拟。这样, 湍流燃烧大涡模拟的精确度和有效性就值得怀疑, 因此亚网格尺度模型对湍流燃烧的大涡模拟至关重要, 这方面已经并将继续需要开展大量的研究^[7, 8]。LES 所需计算量虽比 DNS 小得多, 但是对复杂的工程流动仍然计算量很大, 因此目前主要用于检验统观模型。

1.1.1.3 湍流燃烧的 PDF 输运方程模拟

用 PDF 方法^[6, 9]研究湍流燃烧问题已有二十多年的历史。PDF 方法是把标量脉动关联矩、矢量脉动关联矩、标量矢量脉动关联矩以及非线性化学反应源项的封闭建立在确定标量和矢量的联合概率密度函数之上, 无需模拟, 但是 PDF 输运方程本身的分子混合项和随机速度项仍需通过模拟加以封闭。该方法在有限反应速率的燃烧过程和考虑详细反应动力学(如污染物生成问题)中具有很强的优势。依据概率和统计理论可以严格建立湍流燃烧系统中变量的联合概率密度函数的输运方程。就相空间的变量而言, 联合概率密度函数大致可分为 3 种类型, 它们分别是标量的联合概率密度函数、标量和矢量的联合概率密度函数及标量和矢量与耗散率的联合概率密度函数。在第一类联合概率密度函数中, 因其中不包含速度场的信息, 所以湍流速度场需用其它方法(如 $\kappa - \varepsilon$ 模型)来确定, 同时这类联合概率密度函数输运方程中的对流项也是不封闭

的,需引入模型。在第二类联合概率密度函数中,由于其中包含了速度,因此不仅联合概率密度函数输运方程中的对流项是封闭的,而且湍流流动的输运方程也是封闭的(即湍流模型也是不需要的)。但是在以上两类联合概率密度函数的输运方程中均包含有概率密度函数无法封闭的压力脉动梯度项及由分子粘性和分子扩散引起的 PDF 的分子输运项,这些都需要引入模型加以封闭。从这个意义上讲,PDF 方法又是一种需要模型的方法。在这些项的封闭模型中需要湍流尺度参数,显然前两类概率密度函数中并没有(或包含)这个量,正是基于这一点,出现了包含湍流耗散率的第三类联合概率密度函数,从而使这类概率密度函数所引入的模型是自封闭的,无需经验的尺度参数。联合概率密度函数的输运方程是难以用有限容积、有限差分和有限元等方法来数值求解的,目前比较可行的一种数值方法是 Monte-Carlo 法。在该方法中,动量和标量的输运方程被转化为 Lagrangian 方程。概率密度函数并不是被直接求解出来,而是由大量的具有速度和标量值以及满足上述 Lagrangian 方程的计算颗粒统计来获得。对复杂机理的有限反应速率的化学反应流来说,这种数值方法会引致巨大甚至无法实现的计算量。总之,最近十多年以来,PDF 方法在模型建立、封闭和数值方法方面均取得了很大进展和一些成功的应用^[10]。

1.1.1.4 湍流燃烧的条件矩封闭(Conditional Moment Closure)模型

湍流燃烧的条件矩封闭模型是由 Klimenko^[11]和 Bilger^[12]各自独立提出来的,并在近来得到了较多研究^[13-16]。它的关键是引入一个守恒标量作为条件变量,这样平均值和脉动矩就成为该守恒标量的条件矩。尽管引入条件变量增加了问题的维数,但是,对很多情况,条件矩在流动的某些方向上基本保持不变^[12, 15, 16],而对另外一些情况,沿着某些方向对设定的条件概率密度函数加权的守恒方程进行积分可以消去一些项^[12, 13],这就使问题得到了很大的简化。条件矩封闭方法最突出的优点就是能够有效地将反应动力学和流动的非均匀性解耦,同时保持了标量耗散即微尺度混合的影响,它可以模拟相当复杂的反应动力学。在扩散燃烧中,通常取混合分数为条件变量,而在预混燃烧中,通常取反应度为条件变量。条件平均得到的方程和传统的矩方程形式很相似,可以利用传统的数值计算方法和程序。目前条件矩封闭方法在湍流燃烧以及污染物预报等方面都得到了令人满意的进展。但是条件矩封闭方法也有其弱点:(1)数值积分过程中计算量相当大,(2)时均湍流反应率用级数展开的方法,不可避免会带来较大的误差,从而实际计算中得到的结果比 PDF 输运方程的模拟结果要差。总的说来,条件矩封闭方法是一种很有应用前景的湍流燃烧模拟方法,目前仍还处在发展阶段,有待改进和完善。

1.1.1.5 湍流燃烧的层流小火焰模型

层流小火焰模型^[6, 17, 18]把湍流火焰看成嵌入湍流流场内的局部具有一维结构的薄的层流火焰的一个系综。在该模型中, 化学反应的时间尺度与湍流流动的 Kolmogorov 时间尺度相比要小, 即燃烧是在湍流的最小涡团的一个脉动周期内完成。因此, 湍流燃烧的层流小火焰模型是一种基于快速反应假设的模型, 在火焰面内以分子扩散和输运过程为主。构成湍流火焰系综的层流火焰是用摄动法建立起来的, 即用摄动法建立一个以摄动量为参变量的层流燃烧的化学热力学状态参量与某一个标量之间的数据库, 当然, 除了摄动法以外, 也可以通过层流燃烧实验来确立这个数据库。在层流小火焰模型中, 这个标量必须是输运量, 且其输运方程中没有化学反应源项。摄动参量是可以由湍流状态参数所表征的变量。在湍流燃烧中, 以上述输运标量时均值及其脉动的均方值确定预先给定的概率密度函数中的待定参数, 然后利用上述数据库对输运标量进行概率积分来确定湍流燃烧时的化学热力学状态。层流小火焰模型在湍流预混燃烧和湍流扩散燃烧中的具体形式有很大的不同^[19-21]。在湍流扩散燃烧中, 输运方程中无化学反应源项, 可以唯一地确定燃烧状态的守恒标量是混合分数, 摄动参量是标量的耗散率。当化学反应速度无限大时, 反应面无限薄, 对于一步简单反应来说, 燃烧的化学热力学状态与混合分数的关系可以用简单的解析表达式来描述。以此作为数据库的湍流燃烧模型又称之为湍流燃烧的反应(火焰)面模型。实际燃烧系统很难满足反应速度无限大的限制, 因此, 这个模型的应用受到限制。在反应速度很大但不是无限大时, 标量的耗散率为零对应于化学热力学平衡状态, 此时的数据库可以化学热力学平衡计算来建立, 以此为数据库的湍流燃烧模型称之为湍流燃烧的局部瞬时平衡模型^[22, 26]。比较而言, 该模型就有较高的实用价值, 但是着火、灭火、烃类和 CO 燃烧及污染物生成等都不处于局部瞬时化学平衡^[23, 27]。与这两个模型相比, 以层流扩散燃烧时标量耗散率为摄动参变量所确立的层流燃烧状态与混合分数之间关系为数据库的湍流扩散燃烧的层流小火焰模型则有了很大的改进^[24, 28]。

1.1.1.6 湍流燃烧的关联矩模型

湍流燃烧的关联矩模型^[29-31]可以看成是类似于湍流流动的封闭模型。它对反应速率表达式中的非线性指数项进行级数展开, 从而该非线性指数项的脉动量可以表示成温度脉动量的无穷级数。该级数只有在 $E/RT < 1$ 和 $T'/\bar{T} \leq 1$ 时才是收敛的。然而在许多实际燃烧系统中 $E/RT \geq 1$, 同时 T' 也并非总是远远小于 \bar{T} 。因此这种级数展开的方法有严重的误差。在上述两个条件得到满足, 即级数收敛时, 对二级双组元的简单反应来说, 化学反应速率时平均封闭的问题就转化为 $\overline{Y_j Y_o}$, $\overline{Y_j T_o}$, $\overline{T' Y_o}$ 和 $\overline{T'^2}$ 等四个二阶标量脉动关联矩的封闭问题。通常建立它们的输运方程, 并应用梯度模拟对其中一些项

进行模拟, 以使这些输运方程封闭。因此, 在湍流燃烧的关联矩封闭模型中, 常常需要引入六个二阶标量脉动关联矩的微分方程, 把这种模型也叫做关联矩的输运方程模型。当然这些方程的引入会使计算机的储量和计算时间大为增加, 因此, 又提出了一种关联矩的代数模型, 即将相关二阶标量脉动关联矩的输运方程中的对流项和扩散项忽略, 并认为化学应对脉动关联的影响是次要的, 从而可以得到这些二阶标量脉动关联矩的代数表达式。Khali^[32]对无旋同轴的射流射入突扩燃烧室的湍流燃烧问题用 EBU-Arrhenius 模型、扩散控制的简化 PDF 模型及只有浓度脉动的关联矩输运方程封闭模型进行了对比研究。三种模型的预报结果相近, 并都和实验符合得比较好。不过, 只引入浓度脉动关联适合于等温或近似等温以及化学反应活化能较低的湍流燃烧问题, 从而限制了其发展和应用。综合考虑浓度和温度脉动的关联矩模型曾被用于预报 50 种组分和 300 个反应的甲烷-空气扩散燃烧, 包括 NO_x 生成^[33], 所预报的时均温度场和组分浓度场与实验值符合较好, 但预报的 NO_x 浓度比实验低, 原因就是上述的级数展开近似的误差。对关联矩模型而言, 最近提出了将二阶矩处理和概率密度封闭相结合的新二阶矩模型^[34], 用于预报甲烷空气湍流燃烧, 取得了较好的效果^[35]。

1.1.1.7 湍流燃烧的 EBU 模型

在 Spalding 提出的湍流预混燃烧的 EBU(Eddy-Break-Up)模型^[19, 36]中, 认为湍流燃烧区由未燃气和已燃气的微团组成, 它们的破碎导致这两种微团的迅速接触, 并在二者的交界面上发生化学反应。因此, 假定湍流燃烧时化学反应的速率取决于未燃气和已燃气微团在湍流作用下破碎成更小微团的速率, 即湍流燃烧过程由湍流混合过程来控制。因此湍流燃烧区化学反应过程的快慢取决于湍流混合过程的速率, 并认为这一混合过程不受释放热的影响。进一步假定微团破碎的速率与湍流脉动能的衰变速率成正比。从而, 可以给出化学反应速率决定于湍能及其耗散率和浓度脉动的均方根的一个简单表达式。浓度脉动的均方根既可以由微分方程来求解, 也可以取为燃料、氧化剂和燃烧产物浓度时均值的最小值^[37]。在该模型中, 显然过分突出了湍流混合对燃烧速率的决定作用, 而忽略了分子输运和化学反应动力学过程的作用。因此, 该模型只适用于高雷诺数的湍流燃烧过程。尽管如此, 流场中温度不高并没有燃烧的区域, 该模型仍可能给出错误的预报结果。为此引入用时均参数确定的化学反应速率。此时, 化学反应速率取为 EBU 湍流混合速率和平均参数的 Arrhenius 机理的反应速率的最小值。因此该模型又称之为 EBU-Arrhenius 模型。

1.1.1.8 涡耗散概念 EDC 模型

涡耗散概念 EDC 模型^[38]是涡耗散模型的扩展, 以在湍流流动中包括详细的化学

反应机理。它假定反应发生在小的湍流结构中，称为“微细尺度”。“微细尺度”的容积比率按下式模拟：

$$\varepsilon^* = C_\varepsilon \left[\frac{\nu \varepsilon}{k^2} \right]^{3/4} \dots\dots\dots (1-1)$$

其中： ε^* 表示“微细尺度”； C_ε 表示容积比率常数，等于2.1377； ν 为运动粘度。

此模型认为物质在“微细尺度”的结构中，经过一个时间尺度后开始反应。这个时间尺度表达式为：

$$\tau^* = C_\tau \left(\frac{\nu}{\varepsilon} \right)^{1/2} \dots\dots\dots (1-2)$$

其中： C_τ 表示时间尺度常数，等于0.4082。

进一步认为“微细尺度”中的燃烧视为发生在定压反应器中，初始条件取为特征单元中当前的物质和温度。反应经过时间尺度 τ^* 后开始进行，其反应速率受 Arrhenius 方程控制，反应的前后速率常数通过 Arrhenius 公式计算^[39]：

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} \exp(-E_r / RT) \dots\dots\dots (1-3)$$

其中： A_r 为指数因子； β_r 为温度指数； E_r 为反应活化能， $J/kmol$ ； R 为气体常数， $J/kmol K$ 。

EDC 燃烧模型可以修改容积比率常数和时问尺度常数，通常推荐采用缺省值。EDC 模型能在湍流反应流动中考虑详细的化学反应机理。但是，典型的机理具有不同的刚性，它们的数值积分计算开销很大^[40]。

1.1.1.9 湍流燃烧的拉切滑模型

Spalding 提出的拉切滑(stretch-cut-and-slide)模型^[19]可以看成是 EBU 模型的改进和发展。它基于由不同比例的未燃气和已燃气组成的流体微团在湍流作用下被反复进行拉伸、切割和滑动而使其不均匀程度不断减少以及在微团内部的已燃气和未燃气的交界面上存在着层流火焰这两个假设。它比 EBU 模型更合理，更准确。但其模型表达式很复杂，使用起来很困难，远没有 EBU-Arrhenius 模型应用得广泛。

1.1.1.10 湍流燃烧的 ESCIMO 模型

Spalding 提出的 ESCIMO 湍流燃烧理论是分析湍流扩散和预混燃烧的另一基于观察的唯象模型^[41,42]。ESCIMO 是卷吞(Engulfment)、拉伸(Stretching)、相干(Coherence)、

相互作用和化学反应(Inter-diffusion 和 Interaction)以及运动观察者(Moving observer)词头的缩写。该理论认为在湍流燃烧过程中,在大尺度湍流作用下,一种流体被另一种流体所卷吞,卷吞一旦发生之后,这两种流体相互粘附,互不分离。随后相互粘附的流体层不断受到拉伸,其长度增加,厚度减小。卷吞和粘附在一起的流体层在拉伸过程中,流体层内部及其交界面上同时发生着扩散和反应过程。ESCIMO 理论采用的是拉格朗日方法,包括经历和统计两个部分。但由于这一模型纯属物理概念上若干现象的叠加,计算量很大,很难用于回流和旋流流动的实际工程问题。

1.1.1.11 湍流燃烧的随机涡模拟

随机涡方法是求解 N-S 方程的一种数值方法。它是在拉格朗日体系中考察输运变量的空间梯度。其基本方程不是速度及标量的输运方程,而是涡量和标量空间梯度的输运方程。数值求解时,把输运变量(或其梯度)离散成载运输运变量及其输运特性的一系列流体单元的系综^[43]。因此,这种方法特别适用于那些在湍流燃烧中具有很大梯度的变量。同时,在欧拉体系中那些与网格尺度相关联的限制也就可以避免。这使它具有能够处理高 Reynolds 数和高 Peclet 数流动的优势。目前,随机涡方法用于湍流燃烧时有交界面方法(Interface methods)和直接拉格朗日法(Direct Lagrangian methods)。前一种方法只适用于极薄火焰面的湍流预混燃烧,无需标量梯度的输运方程,但需要火焰的传播方程来确定火焰面的位置;后一种方法对湍流燃烧的反应区结构没有限制,既适合于湍流预混燃烧,又适于湍流扩散燃烧,和前一种方法相比,它需要求解标量梯度的输运方程,实际上这种方法可以看成是一种直接数值模拟(DNS)方法^[43]。Chorin^[44]及严传俊和许成岗^[45]用前一种方法对湍流预混燃烧进行数值研究。Ghoniem 等人用后一种方法对扩散和预混燃烧进行了数值研究。

1.1.1.12 湍流化学反应的分形模拟模型 FM

(1) 分形理论的发展

几十年来,混沌(chaos)、分形(fractal)、耗散结构(dissipative structure)、协同学(synergetics)、负熵论(negentropics)、突变论(catastrophe theory)以及元胞自动学(cellular automata)、符号动力学等相继问世,从不同的角度来研究非线性不可逆问题,以探索现实世界在纷繁错综的外表下所蕴涵的简单与和谐,窥见各种复杂现象间的共性。

1919 年 Hausdorff 和 Besicovitch 研究了几何学中的“病态”结构,将维数定义从整数推广到分数维,但并未得到传统数学家的普遍关注。直到 1975 年,“分形”这个名词才被 Mandelbrot 首次提出,并揭示了它们与物理学的关系,从而得到科学界的公

认。“分形”这一词的原形引申于拉丁文 *fractus* (弄碎的), 分形的原意是“不规则的, 分数的, 支离破碎的”物体。1977 年他提出了第一本著作《*Fractal: Form, Chance and dimension*》, 标志着分形理论的诞生, 荣获了 1985 年的 *Barnerd* 奖。目前由于分形理论在许多学科中的迅速发展, 已成为一门描述自然界中不规则事物的规律性的学科^[46]。

分形理论在自然界中的应用使人们耳目一新。在化学工程系统中, 可以说过程无所不在, 非平衡状态无所不在。化学工业生产过程包含了动量传递、质量传递、热量传递和反应传递过程。它非常巧妙地利用了自然界各种物理化学过程, 将大自然的神奇造化控制于人工装置中, 从大海的蒸发、沙漠中的流化、旋风的分级、土壤的沥滤、闪电的撞击等这些宏观现象, 一直到细微颗粒中的扩散、流动的湍动、结晶、凝聚以及分子团与各种材料的微结构变化等, 可以说化工领域所展现的奇观是人们认识与征服自然的重大成果。然而, 由于这些事物的复杂多变, 直至今日人们仍未能摆脱凭经验设计的传统方法。化学工程学科的根本目的是要求探求过程中各单元中物质的变化和运动规律, 将来有一天人们能绕开繁琐的多层次逐级放大的经验办法, 可以从分子设计通过理论计算就可以获得制造产品的最佳途径。分形理论则对非线性过程与复杂体系的定量描述提供了一个有力工具。关于分形理论在化工领域中应用的研究正方兴未艾, 本文将介绍应用分形理论建立的湍流化学反应的分形模拟模型 FM。

综上所述, 湍流燃烧模型分为统观模型和细观模型, 统观模型如简化 PDF 模型、旋涡破碎模型 EBU、EBU-Arrhenius 模型、层流小火焰模型、条件矩封闭 CMC 模型和 EDC 燃烧模型、FM 燃烧模型等。细观模型如直接数值模拟 DNS, 概率密度输运方程 PDF 等。由于湍流脉动的变化极快, 因此细观模型计算量巨大, 仅用于模拟简单的燃烧环境或对统观模型的正确性进行检验。统观模型的求解各有特点, 比如旋涡破碎模型 EBU 建立在快速化学反应基础上, 湍流燃烧速率由混合率决定, 这就无法考虑多步反应。层流小火焰模型和条件矩封闭 CMC 模型尽管可以考虑化学反应动力学机理, 但模型复杂、计算量大。相比较而言, EBU 燃烧模型计算量小, 容易理解, 一直得到广泛的应用, 因此本文使用 EBU 燃烧模型和湍流化学反应的分形模拟模型 FM 进行燃烧数值模拟。

1.2 辐射传热方程与辐射模型

1.2.1 辐射传热

对于具有吸收、发射、散射性质的介质, 在位置 \vec{r} 、沿方向 \vec{s} 的辐射传播方程(RTE)为:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + (a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{\Omega'} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega' \dots\dots\dots (1-4)$$

其中： \vec{r} 为位置向量； \vec{s} 为方向向量； \vec{s}' 为散射方向； s 为沿程长度（行程长度）； a 为吸收系数； n 为折射系数； σ_s 为散射系数； σ 为斯蒂芬—玻耳兹曼常数（ $5.672 \times 10^{-8} W/m^2 - K^4$ ）； I 为辐射强度，依赖于位置（ \vec{r} ）与方向（ \vec{r} ）； T 为当地温度； Φ 为相位函数； Ω' 为空间立体角； $(a + \sigma_s)s$ 为介质的光学深度（光学模糊度）。

对于半透明介质的辐射，折射系数很重要。图 1-1 为辐射传热过程的示意图^[49]。

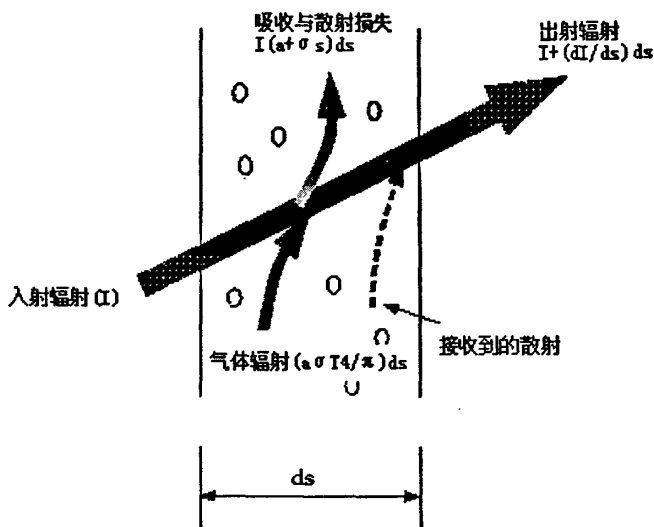


图 1-1 辐射传播

Fig.1-1 Radiation transmission

1.2.2 辐射模型

在大多数 CFD 商业软件中，提供的辐射模型主要有以下四种：离散传播辐射模型（DTRM）；P-1 辐射模型；Rosseland 辐射模型；离散坐标辐射（DO）模型。对于某些问题，某个辐射模型可能比其它模型更适用。在确定使用何种辐射模型时，需要考虑的因素如下：

(1) 光学深度：光学深度 αL 是确定选择辐射模型较好的指标。其中， L 为计算域大致的长度标尺。例如，对于燃烧室内的流动， L 为燃烧室的直径。P-1 模型一般都用于光学深度 >1 的情况。若光学深度 >3 ，Rosseland 模型计算量更小而且更加有效。DTRM 和 DO 对于任何的光学深度都适用，但是，它们计算量也更大。因此，在精度允许的情况下，应尽可能选择具有“光学深度限制”的 P-1 或 Rosseland 辐射模型。

对于光学深度较小的问题，只有 DTRM 和 DO 模型时适用的。

(2) 散射与发射：P-1、Rosseland 和 DO 模型考虑散射的影响，而 DTRM 忽略此项。由于 Rosseland 模型在壁面使用具有温度滑移的边界条件，所以，它对壁面的发射率（黑度）不敏感。

(3) 只有 P-1 和 DO 模型考虑气体与颗粒之间的辐射换热。

(4) 半透明介质与镜面边界：只有 DO 模型允许出现镜面反射（全反射，例如镜子）以及半透明介质（例如玻璃）内的辐射。

(5) 非灰体辐射：只有 DO 模型能够允许使用灰带模型计算非灰体辐射。

(6) 局部热源：对于具有局部热源的问题，P-1 模型可能会过高估计辐射热流。这种情况下，DO 模型可能会是最好的辐射计算方法，当然，如果具有足够多的射线数目，DTRM 模型的计算结果也可以接受。

1.3 本文研究的目的和意义

燃烧安全、化工、材料制造等领域的湍流反应模拟极大地依赖于反应模型的合适选择^[37, 38]。实际的燃烧过程几乎都是湍流燃烧过程，在湍流流动过程和化学反应过程之间表现出强烈的相互关联和相互影响。湍流通过强化混合而影响着时平均化学反应速率，同时化学反应放热过程又影响着湍流，如何定量地来描述和确定这种相互作用是湍流燃烧研究的一个重要内容^[1]。

本文通过对地下通道内烟气运动规律的模拟认识了烟气蔓延规律的一般特性，同时利用CFX软件进行了二次开发。在此基础上，针对燃烧及液相法制造纳米材料等过程的化学反应建立了湍流化学反应的分形模拟模型FM。本文作为第一步，主要针对所建立的FM燃烧模型对燃烧罐内燃烧及Steckler室内燃烧工况进行了详细的数值模拟研究，并与多个燃烧模型及文献结果等进行了对比评价。

第二章 基本理论与数学模型

有化学反应发生的燃烧、燃烧等过程是包括流动、传热传质和化学反应及其相互作用的复杂的物理化学过程。气体在高温的作用下密度发生变化，在重力场的作用下发生温度、浓度分层。在反应源附近各区域的温度不均导致了气体的密度也不均匀，各处浮升力的大小也就不相同。浮升力大小的不均，一方面驱动气体的上浮流动，另一方面还会增加上升羽流的湍流掺和。其形式是三维、多相、多尺度、非定常、非线性、非平衡态的动力学过程。涉及到的因素非常多，问题比较复杂。本文采用 ANSYS-CFX10.0 软件的通用流体计算程序作为模型的核心进行化学反应燃烧过程等的模拟。

2.1 基本理论

实际气体是由大量的、作无规则热运动的分子组成，气体分子之间是不连续的。为了研究气体的宏观运动，一般引入连续介质假设，认为气体所占有的空间连续而无空隙地充满了流体质点。这样，就可以把描述气体宏观特性的参量作为空间的时间坐标上的连续函数，以使用量化的数学方法来研究实际问题。

湍流流动是一种极其复杂的现象。流体瞬时变量虽然随时间变化很复杂，但它始终围绕其本身的“平均值”作上、下的随机变动，因此，按照湍流流体的一般方法，将上述控制方程中的变量进行时均处理。如图 2-1、2-2 任一瞬间流体中某一点的真实变量（瞬时变量）可以表达成时均值和脉动值的和。即：

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \dots\dots\dots (2-1)$$

其中： ϕ -通用变量瞬时值； $\bar{\phi}$ -时均值； ϕ' -脉动值

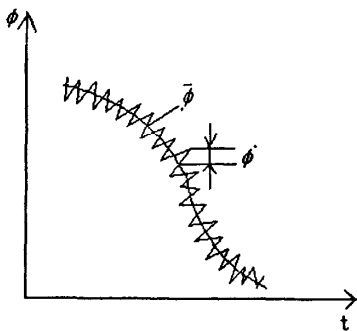


图 2-1 非稳态
Fig.2-1 unsteady

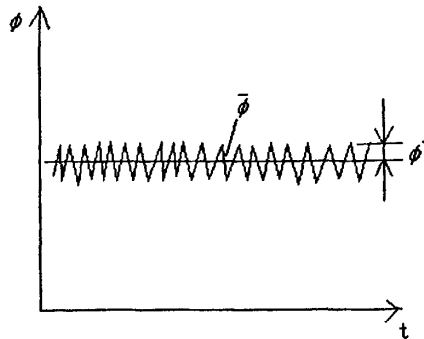


图 2-2 准稳态
Fig.2-2 steady

对按 Reynolds 时均方程模拟方法, 任意一个变量 ϕ 的时间平均值定义为:

$$\Delta\bar{\phi} = \frac{1}{\Delta t} \int_s^{s+\Delta t} \phi(t) dt \quad \dots\dots\dots (2-2)$$

其中, t -平均的起始时刻, s ;

Δt -平均的时段长, s ;

至今, 已采用的数值计算方法大致分为以下三类: 直接模拟方法 (DNS)、大涡模拟方法 (LES)、应用 Reynolds 时均方程模拟方法。由于直接模拟法与大涡模拟法对计算机内存及速度的要求比较高, 所以, 本文采用 Reynolds 时均方程模拟方法。

Reynolds 时均方程模拟方法是将非稳态控制方程进行时均处理后, 在所得出的关于时均物理量的控制方程中包含了脉动量乘积的值等未知量, 此时所得方程的个数就少于未知量的个数。这时, 要使方程组封闭, 必须做出假设, 即建立模型。这种模型把未知的高阶的时间平均值表示成由计算中所确定的量的较低阶函数, 这是目前工程湍流计算中所采用的基本方法。建立模型的方法又有 Reynolds 应力方程法及湍流粘性系数法两大类, 而后一种方法是目前工程流动与数值计算中应用最广的方法。该方法与 Reynolds 应力方程法相比, 比较简单。而且能够在较大范围内较好地求解。浮力同样作为自然对流的驱动力, 在考虑烟气运动等有浮力作用的流动时, 必须对 $\kappa-\varepsilon$ 模型进行浮力修正。在本文中也将用浮力修正的 $\kappa-\varepsilon$ 双方程湍流模型进行数值模拟分析。

2.2 数学模型

2.2.1 基本守恒方程

烟气的流动遵循质量和能量的守恒定律即: 连续性方程、动量方程、能量方程和组分方程^[50]。

(1) 连续性方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) = 0 \quad \dots\dots\dots (2-3)$$

这里的密度 ρ 表示的是计算空间内混合物的密度, u 、 v 、 w 分别表示 x 、 y 、 z 三个方向的速度分量, t 表示时间。质量守恒定律是物质宏观运动且线速度和光速不可比拟时普遍遵守的定律。连续性方程是它们的数学表达方式。

(2) 动量方程:

x-动量方程:

$$\rho\left(\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} + w\frac{\partial u}{\partial z}\right) = \mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right) - \frac{\partial P}{\partial x} + \mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2 w}{\partial x\partial z}\right) \dots (2-4)$$

其中: μ 为流体粘性系数。

$$\mu = \mu_l + \mu_t = \mu_l + \frac{C_\mu \rho \kappa^2}{\varepsilon} \dots \dots \dots (2-5)$$

μ_l 、 μ_t 分别表示层流和湍流粘性系数, C_μ 为经验常数, κ 、 ε 分别表示湍流动能和耗散热, P 表示压力。

y-动量方程:

$$\rho\left(\frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} + w\frac{\partial v}{\partial z}\right) = \mu\left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right) - \frac{\partial P}{\partial y} + \mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y\partial z}\right) \dots (2-6)$$

式中变量意义与上式相同。烟气在水平 x 、 y 方向流动没有机理性的差别, 动量方程在表达式上同样差别不大。

z-动量方程:

$$\begin{aligned} \rho\left(\frac{\partial w}{\partial t} + u\frac{\partial w}{\partial x} + v\frac{\partial w}{\partial y} + w\frac{\partial w}{\partial z}\right) &= \mu\left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}\right) - \frac{\partial P}{\partial z} \dots \dots \dots (2-7) \\ &+ \mu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial z} + \frac{\partial^2 v}{\partial y\partial z} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}\right) + (\rho_\infty - \rho)g \end{aligned}$$

本方程的源项考虑了浮力对控制单元的影响。浮力是自然对流的驱动力, 即影响均流场也影响各脉动场。浮力对均流场的影响主要体现在垂直 (z 轴) 方向的动量方程上。 $(\rho_\infty - \rho)g$ 项就体现了浮力的作用。

(3) 温度形式能量方程:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u\frac{\partial T}{\partial x} + v\frac{\partial T}{\partial y} + w\frac{\partial T}{\partial z}\right) = \Gamma_r \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right) + S_r \dots \dots \dots (2-8)$$

能量方程是能量守恒的数学表示, 能量方程有许多种表达形式, 包括欧拉形式的能量方程, 总焓形式的能量方程和温度形式的能量方程, 根据各自不同的应用场合和物理现象描述的需要, 可以选用相应的形式。式中 C_p 是气体的定压比热容; Γ_r 为扩散系数, 在物理意义上它表示导热过程因素, 它的具体表示是 λ , 是一个常数。

(4) 组分方程:

$$\rho\left(\frac{\partial m_f}{\partial t} + u\frac{\partial m_f}{\partial x} + v\frac{\partial m_f}{\partial y} + w\frac{\partial m_f}{\partial z}\right) = \frac{\mu}{\sigma_{f\mu}} \left(\frac{\partial^2 m_f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 m_f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 m_f}{\partial z^2}\right) - R_{f\mu} \dots \dots \dots (2-9)$$

其中: m_f 是 f 组分的质量分数; R_f 表示在燃烧过程中 f 组分的化学反应速率; σ_{κ} 为模型常数。

2.2.2 湍流模型

κ 方程:

$$\rho\left(\frac{\partial \kappa}{\partial t} + u \frac{\partial \kappa}{\partial x} + v \frac{\partial \kappa}{\partial y} + w \frac{\partial \kappa}{\partial z}\right) = \frac{\mu}{\sigma_{\kappa}} \left(\frac{\partial^2 \kappa}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \kappa}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \kappa}{\partial z^2}\right) + G + G_B - \rho \varepsilon \dots\dots\dots (2-10)$$

式中, κ 表示湍流流动的湍动能, ε 表示湍流流动的耗散率, σ_{κ} 是常数。

其中:

$$G = \mu_t \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 \right\} \dots\dots\dots (2-11)$$

$$G_B = -\rho \beta g_i \overline{u_i T'} = \beta g_i \frac{\mu_t}{\sigma_t} \left(\frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial T}{\partial z} \right) \dots\dots\dots (2-12)$$

式中 g_i 为 i 方向的重力加速度分量; μ_t 表示湍流粘性系数; β 为体积膨胀系数;

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right) \dots\dots\dots (2-13)$$

ε 方程:

$$\rho \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + u \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} + v \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} + w \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \right) = \frac{\mu}{\sigma_{\varepsilon}} \left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial z^2} \right) \dots\dots\dots (2-14)$$

$$+ \frac{\varepsilon}{\kappa} [C_1(G + G_B)(1 + C_3 R_f) - C_2 \rho \varepsilon]$$

式中 R_f 为 Richadson 数, C_1 、 C_3 均为模型常数, 具体值在后面给出。

Richadson 数 R_f 的取值如下:

$$R_f = \begin{cases} -\frac{G_B}{G + G_B} & \text{对水平剪切层} \\ 0 & \text{对竖直剪切层} \end{cases}$$

通过参阅文献^[50], 本文对它们的取值如表 2-1 所示:

表 2-1 模型中常数取值表
Table 2-1 Constant table in models

| 常数 | C_1 | C_2 | C_3 | C_p | σ_r | σ_s | σ_t |
|----|-------|-------|-------|-------|------------|------------|------------|
| 数值 | 1.44 | 1.92 | 0.8 | 0.09 | 1.0 | 1.22 | 0.6 |

在烟气流动过程中, 温度变化导致密度场的变化, 它们之间的关联可以用理想气体状态方程表示:

$$\rho = \frac{P}{RT} \dots\dots\dots (2-15)$$

式中: R 为气体常数。

对应于此式, 在 κ 偏微分方程中的体膨胀系数可以表示为:

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right) = \frac{1}{T} \dots\dots\dots (2-16)$$

2.3 燃烧模型

几乎所有的实际燃烧现象都是湍流燃烧过程^[1]。人们主要感兴趣的是平均量的分布和平均热流。通过对基本方程进行雷诺分解和平均而得到的平均量控制方程组是不封闭的, 不封闭性来源于非线性项的分解和平均。上一节介绍湍流模型解决了湍流运输的模拟问题, 下面介绍如何处理平均化学反应率。由于平均化学反应率同时受到湍流混合、分子输运和化学动力学三个方面的影响, 目前尚未见到普遍适用的湍流燃烧速率, 即湍流燃烧过程中的平均化学反应速率的模型公式-燃烧模型。由于旋涡破碎模型 EBU 已得到广泛的验证和应用, 许多文章中对其建模机理已有详细的描述, 在此不再赘述。下面主要介绍 Eugenio Giacomazzi^[48, 52]等学者提出的湍流化学反应的分形模拟模型 FM 的建模机理。

2.3.1 湍流化学反应的分形模拟模型 FM

2.3.1.1 物理过程的描述

湍流中存在涡旋串级分裂现象, 即大涡可以分裂成小涡, 并逐级分裂下去。理查逊提出了湍流的分级 (hierarchical) 模式: 驱动流体流动的力产生最大的涡团, 大涡团不稳定而产生较小尺度的涡团, 小涡团还可以再分裂下去。当雷诺数较高时这种大

涡逐步串级成小涡的过程可以进行好多级，直到分子粘度抑制这种进一步串级过程为止，即涡团尺度达到耗散尺度 η ，此时停止分裂。涡团逐级分裂后，涡团失去了大涡团的非各向同性性质，成为各向同性的小涡团。

假如把湍流大涡团看成是一个单元正方形，湍流串级过程可能有两种：一种是一个涡团分裂成四个边长为 $1/2$ 的小涡团，如图 (a)；另一种是一个大涡团分成三个（或两个，或一个）小涡团，也就是说涡团并不是充满空间，如图 (b)。这两种过程一直自相似地串级下去。一般把前者叫做均匀各向同性湍流的串级过程，后者叫间歇（intermittency）湍流串级过程^[53]。

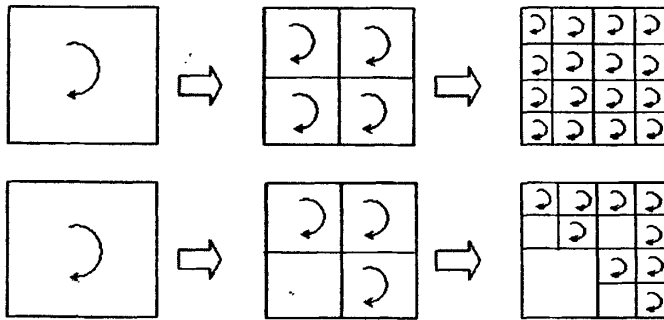


图 2-3 不同方式的涡团串级裂变现象

Fig.2-3 The vortex cascade phenomenon of different mode

在物理结构上，根据涡旋串级分裂现象，可以把湍流看成是由各种不同尺度的涡团叠合而成的流动，大尺度涡团破裂后形成小尺度涡团，较小尺度涡团破裂后形成更小尺度涡团。因而湍流区域内，湍流涡团的尺度可在一定范围内分布和变化。大尺度涡团不断地从主流获得能量，通过涡团间的相互作用，能量逐渐向小尺度涡团传递^[10]。湍流化学反应的分形模拟模型 FM 基于涡串唯象概念和分形理论，基于对小尺度湍流物理特性的描述，既适合于湍流预混燃烧，又适合于湍流扩散燃烧。基本思想是：在 FM 模型中，假设每个单元的特征尺度为 Δ 。 Δ 尺度的涡团在湍流的作用下被不断地拉伸、切割和滑动分裂成子涡团。 Δ 尺度的涡团经过 N_f 级分裂后，涡团尺度达到耗散尺度 η ，此时停止分裂，这样就形成了一个涡串。设在涡串分裂过程中，每个涡团分裂生成的子涡团数为 N_c ，由此生成的涡团的总量为 N_T 。

在 FM 模型中，把接近于耗散尺度 η 的涡团称作“微细结构”，且认为化学反应发生在这些“微细结构”内，把这些“微细结构”看作微型反应器。发生化学反应的“微细结构”的数量直接决定着化学反应速率，所以估算“微细结构”体积分数 γ^* 对 FM 化学反应模型估算化学反应速率至关重要，亦是给出组分和能量方程中源项的关键。

2.3.1.2 FM 模型参数的建立

根据 FM 模型的基本思想, 为了简化计算过程, 在每个涡串中, 假设涡团以均匀各向同性湍流串级过程裂变, 认为裂变后旧的大涡团与新生成的子涡团共存, 每个涡团以 N_c 分裂成下一级的子涡团。 $N_c=5$ 、 $N_f=2$ 时的涡团分裂过程示意图如图 2-4 所示。

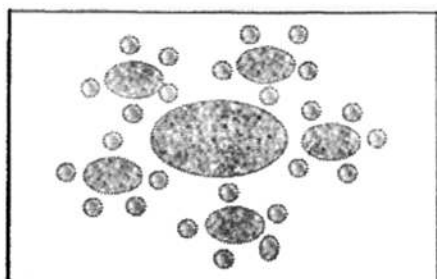


图 2-4 涡团分裂过程示意图 ($N_c=5$, $N_f=2$)
Fig.2-4 Sketch of fractal vortex generation($N_c=5, N_f=2$)

每个涡串生成的涡团总数 N_T 可表示为:

$$N_T = 1 + N_c + N_c N_c + \dots + N_c^{N_f} = \sum_{i=0}^{N_f} N_c^i \quad \dots \dots \dots (2-17)$$

式(2-17)可进一步转写为:

$$N_T = \begin{cases} \frac{N_c^{N_f+1} - 1}{N_c - 1} & N_c \neq 1 \\ N_f + 1 & N_c = 1 \end{cases} \quad \dots \dots \dots (2-18)$$

涡团分裂到耗散尺度 η 停止分裂, 这时耗散尺度 η 的涡团数为:

$$N_\eta = N_c^{N_f} \quad \dots \dots \dots (2-19)$$

Δ 尺度的涡团能量逐级传递给子涡团, 直至涡团达到耗散尺度 η 结束, 则有:

$$\frac{E_\Delta}{\tau_\Delta} \approx N_c^{N_f} \frac{E_\eta}{\tau_\eta} \rightarrow \frac{u_\Delta^3}{\Delta} \approx N_c^{N_f} v_\eta \frac{u_\eta^2}{\eta^2} \quad \dots \dots \dots (2-20)$$

其中: 特征时间 τ_Δ 和耗散时间 τ_η 分别为:

$$\begin{cases} \tau_{\Delta} = \frac{\Delta}{u_{\Delta}} \\ \tau_{\eta} = \frac{\eta^2}{\nu_{\eta}} \dots\dots\dots (2-21) \end{cases}$$

特征尺度时的雷诺数 Re_{Δ} 和耗散尺度时的雷诺数 Re_{η} 分别为:

$$\begin{cases} Re_{\Delta} = \rho_{\Delta} u_{\Delta} \Delta / \mu_{\Delta} \\ Re_{\eta} = \rho_{\eta} u_{\eta} \eta / \mu_{\eta} = 1 \dots\dots\dots (2-22) \end{cases}$$

从 (2-20) (2-21) (2-22) 可以得出:

$$\eta = N_c^{N_i/4} \left(\frac{\rho_{\Delta}}{\rho_{\eta}} \right)^{3/4} \left(\frac{\mu_{\eta}}{\mu_{\Delta}} \right)^{3/4} \frac{\Delta}{Re_{\Delta}^{3/4}} \dots\dots\dots (2-23)$$

又因为 μ_{Δ} 和 ν_{Δ} 、 μ_{η} 和 ν_{η} 粘度之间关系为:

$$\begin{cases} \nu_{\Delta} = \mu_{\Delta} / \rho_{\Delta} \\ \nu_{\eta} = \mu_{\eta} / \rho_{\eta} \dots\dots\dots (2-24) \end{cases}$$

从 (2-19) (2-23) (2-24) 可以把耗散尺度 η 表达式转写为:

$$\eta = N_{\eta}^{1/4} \left(\frac{\nu_{\eta}}{\nu_{\Delta}} \right)^{3/4} \frac{\Delta}{Re_{\Delta}^{3/4}} \dots\dots\dots (2-25)$$

特征尺度 Δ 依赖于所采用的网格的种类、尺寸大小决定。如对本文采用的六面体网格, Δ 的表达式可写为:

$$\Delta = (\Delta_x \Delta_y \Delta_z)^{1/3} \dots\dots\dots (2-26)$$

$$u_{\Delta} = (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)^{1/2} \dots\dots\dots (2-27)$$

根据分形理论^[46, 53, 54]中分形的自相似性, 基本特征参数—分形维数的定义为:

$$D_d = \frac{\log N}{\log R'} \dots\dots\dots (2-28)$$

其中: N 代表每级分裂的数; R' 代表一级分裂成下一级时, 两级尺度的比值。根据图 2-4 给出的二维涡团分裂串级现象有:

$$D_2 = \frac{\log N_c}{\log R_c} = \frac{\log N_c^i}{\log R_c^i} = \frac{\log N_c^{N_i}}{\log R_c^{N_i}} \dots\dots\dots (2-29)$$

根据分形物理学^[63]中对二维空间拓扑维数的描述,又因为小尺度涡团各向同性的性质^[64],三维空间的分形维数 D_3 表达式为:

$$D_3 = 1 + D_2 = 1 + \frac{\log N_c^{N_c}}{\log R_c^{N_c}} \dots\dots\dots (2-30)$$

根据图 2-4 及分形理论有:

$$\eta = \frac{\Delta}{R_c^{N_c}} \dots\dots\dots (2-31)$$

其中: R_c 代表一级涡团与下级涡团尺度的比值。

根据 (2-19) (2-31) D_3 表达式可转写为:

$$D_3 = 1 + \frac{\lg N_\eta}{\lg(\Delta/\eta)} \dots\dots\dots (2-32)$$

根据分形物理学^[65]中对三维空间体积的自相似性,推导出三维空间的分形维数 D_3 还可以表示为^[48]:

$$D_3 = 3 - \frac{\log \pi}{\log(\Delta/\eta)} \dots\dots\dots (2-33)$$

对比 (2-32) (2-33) 可以得到 N_η 表达式为:

$$N_\eta = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\Delta}{\eta}\right)^2 \dots\dots\dots (2-34)$$

将 (2-25) 代入 (2-34) 得到:

$$N_\eta = \pi^{-2/3} \text{Re}_\Delta \frac{\nu_\Delta}{\nu_\eta} \dots\dots\dots (2-35)$$

将 (2-25) (2-35) 代入 (2-32) 得到:

$$D_3 = 1 + \frac{\lg N_\eta}{\lg(\Delta/\eta)} = 1 + \frac{\lg(\pi^{-2/3} \text{Re}_\Delta \nu_\Delta / \nu_\eta)}{\lg[\pi^{1/6} \text{Re}_\Delta^{1/2} (\nu_\Delta / \nu_\eta)^{1/2}]} \dots\dots\dots (2-36)$$

其中: ν_Δ 代表每个单元特征尺度 Δ 处的分子粘度,即不发生化学反应时的分子粘度^[66];

ν_η 代表每个耗散尺度 η 处的分子粘度,即发生化学反应时的分子粘度。

根据分形理论,一个 Δ 特征尺度的涡团生成的所有涡团占一个特征尺度 Δ 涡团的体积分数 γ_{tot} ($N_c \neq 1$):

$$\gamma_{tot} = \frac{V_{tot}}{V_{cell}} \approx \frac{\eta^{3-D_3} \Delta^{D_3}}{\Delta^3} = \left(\frac{\Delta}{\eta}\right)^{D_3-3} \dots\dots\dots (2-37)$$

当 $N_c=1$ 时 $\Delta = \eta$, 这时 $\text{Re}_\Delta = \text{Re}_\eta = 1$, 不存在能量串级现象,相当于层流,这时的

FM 模型封闭。

耗散尺度 η 的涡团数 N_η 与涡团总数 N_T 的比值 γ_{N_η} :

$$\gamma_{N_\eta} = \frac{N_\eta}{N_T} = \frac{N_\eta(N_c - 1)}{N_\eta N_c - 1} \dots\dots\dots (2-38)$$

那么, “微细结构” 的体积分数 γ^* :

$$\gamma^* = \gamma_{N_\eta} \gamma_{tot} \dots\dots\dots (2-39)$$

将 (2-25) (2-35) (2-37) 代入 (2-39) 得到表达式 γ^* 为:

$$\gamma^* = \gamma_{N_\eta} \gamma_{tot} = \gamma_{N_\eta} [\pi^{1/6} Re_\Delta^{1/2} (\nu_\eta / \nu_\Delta)^{-1/2}]^{D_3-3} \dots\dots\dots (2-40)$$

为了估算 “微细结构” 的体积分数 γ^* , 则有:

$$\nu_\Delta = N_\eta \nu_\eta \dots\dots\dots (2-41)$$

根据火焰传播面与 Re_Δ 之间的关系^[57, 58], 得出当 $Re_\Delta > 7$ 时 N_c 与 Re_Δ 之间的函数关系式为:

$$N_c = 0.433 Re_\Delta^{1/2} \dots\dots\dots (2-42)$$

当 $Re_\Delta < 7$ 时 $\gamma^* = 1$, FM 模型得以封闭。

为使组分、能量方程封闭, 对应的源项如下:

$$\omega_i = \gamma^* \omega_i^* \dots\dots\dots (2-43)$$

$$\bar{Q} = \sum_{i=1}^N \gamma^* \omega_i^* \Delta h_{f,i}^o \dots\dots\dots (2-44)$$

其中: ω_i^* 代表 “微细结构” 内按 Arrhenius 机理^[59] 计算的化学组分 i 的反应速率; $\Delta h_{f,i}^o$ 代表组分 i 的生成焓。

根据上面的描述, N_c 和 Re 两者参数之间关系确定如下:

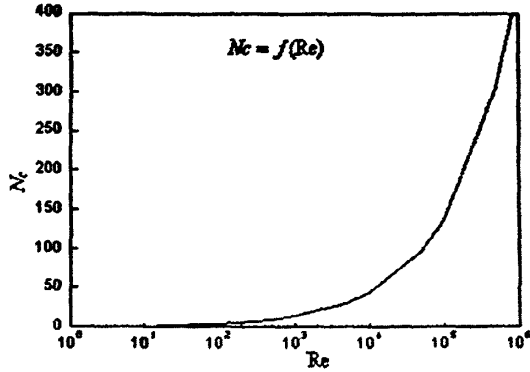


图 2-5 N_c 和 Re 之间关系

Fig.2-5 The function relation of N_c and Re

以上叙述了 FM 燃烧模型建立全过程，根据以上“耗散结构”体积分数 γ^* 的计算式，拟合得出如下图 2-6 所示 γ^* 与雷诺数 Re 之间关系：

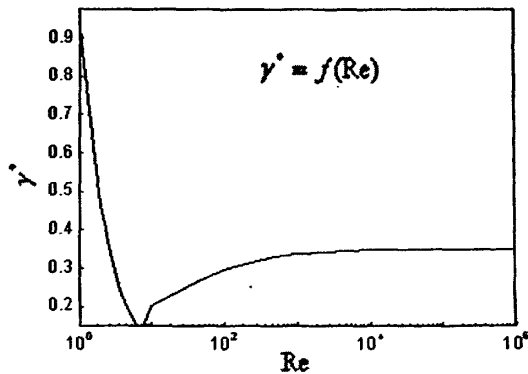


图 2-6 γ^* 和 Re 之间关系

Fig.2-6 The function relation of γ^* and Re

2.3.1.3 在 ANSYS CFX 中实现 FM 燃烧模型模拟

使用 ANSYS CFX 软件中的用户编程接口，对软件进行二次开发。首先，要进行的工作是保证 CFX 与 Visual Fortran 程序编辑器正确连接，确保调用 CFX 中的 cfx5mkext 命令进行用户自行编程并与软件连接，实现对 CFX 软件的二次开发；其次，在 CFX-Pre 里建立用户子程序 (User Routine)，确定 User Routine 和在 CEL 里要用到的函数关系式耗散尺度 η 涡团的体积分数 γ^* 的名字，以方便调用；再次，利用 ANSYS CFX10.0 的二次开发模型对多种燃烧过程进行模拟。运算过程如图 2-7 所示。

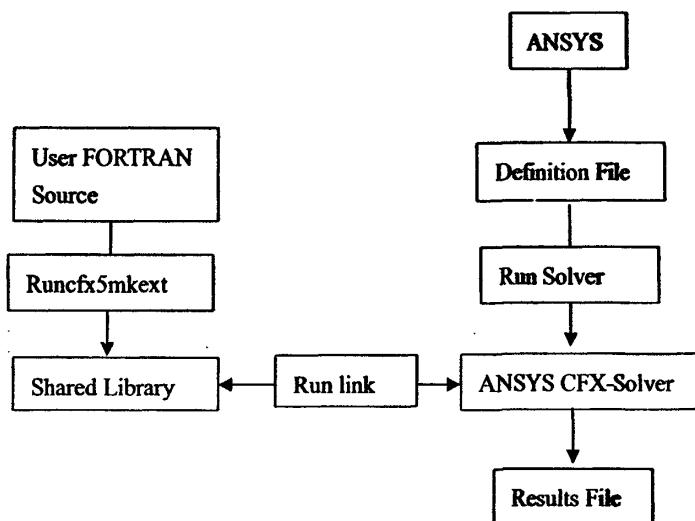


图 2-7 ANSYS CFX10.0 的计算流程

Fig.2-7 Simulation chart by ANSYS CFX10.0

组分方程中各个源项分别为：

$$\text{甲烷: } \omega_{CH_4} = \gamma \cdot \frac{d[CH_4]}{dt}$$

$$\text{氧气: } \omega_{O_2} = \gamma \cdot \frac{d[O_2]}{dt}$$

$$\text{二氧化碳: } \omega_{CO_2} = \gamma \cdot \frac{d[CO_2]}{dt}$$

$$\text{水: } \omega_{H_2O} = \gamma \cdot \frac{d[H_2O]}{dt}$$

反应速率用 Arrhenius 方程给出，反应速率常数通过 Arrhenius^[59]公式计算：

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} \exp(-E_r / RT) \dots\dots\dots (2-45)$$

其中： A_r 为指数因子； β_r 为温度指数； E_r 为反应活化能， $J/kmol$ ； R 为气体常数 $J/kmol K$ ；

能量方程源项为：

$$\bar{Q} = \gamma \cdot \frac{d[CH_4]}{dt} \Delta h \dots\dots\dots (2-46)$$

其中： Δh 为甲烷的燃烧热。

第三章 数值求解方法

3.1 概述

对于所得到的微分方程，通常有多种数值方法可得到相应的离散化方程组。在流动与传热问题计算中应用较广的数值方法如有限差分法、有限元法、控制容积积分法和有限分析法等。就实施的简易、发展的成熟及应用的广泛等方面综合来看，有限容积法无疑居优。故在本文中，选用控制容积法。

有限容积法是将所计算的区域划分成一系列的控制容积，每个控制容积都出一个节点作代表。通过将守恒型的控制方程在控制容积内积分来导出离散方程。在导出过程中，需要对界面上的被求函数本身及其一阶导数的构成做出假设，这种构成的方式就是有限容积法中的离散格式。用有限容积法导出的离散方程可以保证具有守恒特性，而且离散方程系数的物理意义明确，即使在较粗网格下，它的解也能满足控制容积内的积分平衡^[49]。

3.2 计算区域的离散化

计算区域离散化的方法有多种，可以采用先确定控制容积，再确定网格节点的方法（内节点法）。

用平行的分界面将计算区域划分成一系列矩形控制容积，取其几何中心为网格节点，所求的压力、速度和温度就是所有节点上的值。

网格的尺寸和分布对计算结果的影响是很大的。将网格划分得疏一些，计算所需的内存和所需时间会小一些，但在所求变量变化较大的区域，其求解精度要低些，针对不同的问题，需采用不同的处理方法。

3.3 离散化方程的建立

3.3.1 对流-扩散问题的通用方程

流动与传热问题中，求解主要变量（速度及温度等）的控制方程都可以表示成以下通用形式：

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \text{div}(\rho U\phi) = \text{div}(\Gamma_{\phi} \text{grad}\phi) + S_{\phi} \quad \dots\dots\dots (3-1)$$

式中： ϕ 为通用变量，可以代表 u, v, w, T 等求解变量； Γ_ϕ 为广义扩散系数； S_ϕ 为广义源项。

将上面方程 (3-1) 转化为：

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\phi - \Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v\phi - \Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w\phi - \Gamma_\phi \frac{\partial\phi}{\partial z}) = S_\phi, \dots\dots (3-2)$$

如图 3-1，引入 $x、y、z$ 方向上的对流-扩散的总通量密度 J ，则有：

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z} = S_\phi, \dots\dots\dots (3-3)$$

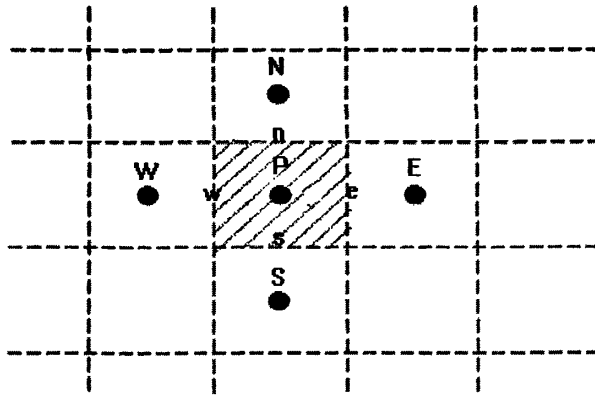


图 3-1 直接坐标的网格系统

Fig.3-1 The mesh system in Cartesian Coordinate

3.3.2 用控制容积法对通用方程进行离散

将方程 (3-3) 对控制容积做时间与容积的积分，首先假设：

(1) $\frac{(\rho\phi)_p - (\rho\phi)_p^0}{\Delta t}$ 近似地代替 $\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}$ ；

(2) 在 x 方向上的总通量密度 J_x 在界面 $e、w$ 上， y 方向上的总通量密度 j_y 在界面 $n、s$ 上， z 方向上的总通量密度 J_z 在 $h、l$ 界面上是均匀的。于是有：

$$\int_V \int_V \int_V \frac{\partial J_x}{\partial x} dx dy dz = \int_V \int_V (J_x^e - J_x^w) dy dz = J_e - J_w \dots\dots\dots (3-4)$$

$$\int \int \int \frac{\partial J}{\partial y} dx dy dz = \int \int [(J_y^n - J_y^s) dx dz = J_n - J_s, \dots \dots \dots (3-5)$$

$$\int \int \int \frac{\partial J}{\partial z} dx dy dz = \int \int [(J_z^h - J_z^l) dy dx = J_h - J_l, \dots \dots \dots (3-6)$$

其中, $J_x^e, J_x^w, J_y^n, J_y^s, J_z^h$ 及 J_z^l 分别代表 x, y 与 z 方向上的 e 界面及 w 界面、 n 界面及 s 界面、 h 界面及 l 界面处总通量密度, 而 J_e, J_w, J_n, J_s, J_h 及 J_l 则分别是 $\Delta y \Delta z, \Delta x \Delta z$ 及 $\Delta x \Delta y$ 的总通量。

(3) 源项局部线性化处理。即假定在未知量微小的变动范围内, 源项 S 可以表示成为该未知量的线性函数。于是在控制容积内, 源项可以表示成如下的形式: $S = S_c + S_p T_p$, 其中 S_c 为常数部分, S_p 是 S 随 T 变化的曲线在 P 点的斜率。综上所述, 方程 (3-3) 化为:

$$\frac{(\rho\phi)_p - (\rho\phi)_p^0}{\Delta t} + (J_e - J_w) + (J_n - J_s) + (J_h - J_l) = S_c + S_p T_p \dots \dots \dots (3-7)$$

由文献[49]对通量 J_x^* 的定义, 任一界面上的通量 J_x^* 由界面两侧两个节点上的值来表示。那么, 在 e 界面处的通量 J_e^* 可以表示为:

$$J_e^* = B(P_{\Delta e})\phi_p - A(P_{\Delta e})\phi_E \dots \dots \dots (3-8)$$

式中: 系数 A, B 与格式有关, 它们是网格 Peclet 数的函数, 网格 Peclet 数记为 P_{Δ} 。于是, 有:

$$\begin{aligned} J_e &= J_e^* D_e = [B(P_{\Delta e})\phi_p - A(P_{\Delta e})\phi_E] D_e \\ &= \{[A(P_{\Delta e}) + P_{\Delta e}]\phi_p - A(P_{\Delta e})\phi_E\} D_e \dots \dots \dots (3-9) \\ &= [D_e A(P_{\Delta e})\phi_p + (D_e P_{\Delta e})\phi_p - [D_e A(P_{\Delta e})]\phi_E \\ &= a_E \phi_p + F_e \phi_p - a_E \phi_E \end{aligned}$$

即: $J_e = (a_E + F_e)\phi_p - a_E \phi_E$

类似地可得:

$$\begin{cases} J_n = (a_N + F_n)\phi_p - a_N \phi_N \\ J_h = (a_H + F_h)\phi_p - a_H \phi_H \dots \dots \dots (3-10) \end{cases}$$

$$J_w = J_w^* D_w = [B(P_{\Delta w})\phi_w - A(P_{\Delta w})\phi_p] D_w$$

$$= \{B(P_{\Delta w})\phi_w - [B(P_{\Delta w}) - P_{\Delta w}]\phi_p\} D_w$$

对公式简化:

$$= D_w B(P_{\Delta w})\phi_w - D_w B(P_{\Delta w})\phi_p + (D_w P_{\Delta w})\phi_p$$

$$= a_w \phi_w - (a_w - F_w)\phi_p$$

即有: $J_w = a_w \phi_w - (a_w - F_w)\phi_p \dots\dots\dots (3-11)$

类似地, 可得:

$$\begin{cases} J_s = a_s \phi_s - (a_s - F_s)\phi_p \\ J_l = a_l \phi_l - (a_l - F_l)\phi_p \end{cases} \dots\dots\dots (3-12)$$

3.3.3 五种格式的通用离散方程

把以上 J_e^* 、 J_w^* 、 J_n^* 、 J_s^* 、 J_h^* 及 J_l^* 的表达式代入式 (3-4), 可得:

$$\frac{(\rho\phi)_p - (\rho\phi)_p^o}{\Delta t} + (J_e - J_w) + (J_n - J_s) + (J_n - J_s) = S_c + S_p T_p \dots\dots\dots (3-13)$$

归并同类项, 可得:

$$a_p \phi_p = a_e \phi_e + a_w \phi_w + a_n \phi_n + a_s \phi_s + a_h \phi_h + a_l \phi_l + b \dots\dots\dots (3-14)$$

其中, 可得:

$$a_e = D_e A(|P_e|) + [-F_e, 0] \dots\dots\dots (3-15)$$

$$a_w = D_w A(|P_w|) + [-F_w, 0] \dots\dots\dots (3-16)$$

$$a_n = D_n A(|P_n|) + [-F_n, 0] \dots\dots\dots (3-17)$$

$$a_s = D_s A(|P_s|) + [-F_s, 0] \dots\dots\dots (3-18)$$

$$a_h = D_h A(|P_h|) + [-F_h, 0] \dots\dots\dots (3-19)$$

$$a_l = D_l A(|P_l|) + [-F_l, 0] \dots\dots\dots (3-20)$$

$$a_p^o = \frac{\rho V}{\Delta t} \dots\dots\dots (3-21)$$

$$a_p = a_e + a_w + a_n + a_s + a_h + a_l + a_p^o - S_p V \dots\dots\dots (3-22)$$

$$b = S_p V + a_p^o \phi_p^o \dots\dots\dots (3-23)$$

其中:

$$\text{对流量} \quad F_e = (\rho u)_e \Delta y \Delta z \quad \text{扩散通量} \quad D_e = \frac{\Gamma_e \Delta y \Delta z}{(\delta x)_e} \dots\dots\dots (3-24)$$

$$F_w = (\rho u)_w \Delta y \Delta z \qquad D_w = \frac{\Gamma_w \Delta y \Delta z}{(\delta x)_w} \dots\dots\dots (3-25)$$

$$F_n = (\rho v)_n \Delta z \Delta x \qquad D_n = \frac{\Gamma_n \Delta z \Delta x}{(\delta y)_n} \dots\dots\dots (3-26)$$

$$F_s = (\rho v)_s \Delta z \Delta x \qquad D_s = \frac{\Gamma_s \Delta z \Delta x}{(\delta y)_s} \dots\dots\dots (3-27)$$

$$F_h = (\rho w)_h \Delta x \Delta y \qquad D_h = \frac{\Gamma_h \Delta x \Delta y}{(\delta z)_h} \dots\dots\dots (3-28)$$

$$F_l = (\rho w)_l \Delta x \Delta y \qquad D_l = \frac{\Gamma_l \Delta x \Delta y}{(\delta z)_l} \dots\dots\dots (3-29)$$

贝克列数 $P=F/D$

函数 $A(|P|)$ 选取幂函数方案, 则:

$$A(|P|) = [0, (1 - 0.1|P|^5)] \dots\dots\dots (3-30)$$

其中: 运算符 $[]$ 表示取括号中的最大者。各变量在任意网格内均匀分布, 即在控制容积内变量的值为常量, 函数在网格点的值代表它在网格内各处的值。

3.4 SIMPLE 算法的采用与微分方程组的求解

3.4.1 动量方程的源项

在通用方程中 S_p 是广义源项, 对动量方程 (即 Navier-Stokes) 而言, 它除了包括压力梯度以外, 还包括了所有其它无法纳入到通用方程右端扩散项中的有关的项。在进行流动过程的数值计算时, 正确写出不同坐标系下各个速度分量的源项并对它进行合适的数值处理, 常常是计算成败的关键问题之一。源项的表达式构成如下: 首先把原始的 Navier-Stokes 方程粘度性有关的项即进入 S_p ; 同时, 还需要将原始的 Navier-Stokes 方程左端对流项部分写成散度的形式, 未能进入散度的部分也归并到源项 S_p 中去。

3.4.2 交错网格

为了解决流场计算中的第一个关键问题, 即不合理的压力场的检测, 应当使相邻

两点间的压差，出现在动量离散方程中；同时为了保证计算的准确性及对压力的物理特性模拟，压差应当是压力梯度中心差分的表达式的组成部分。为此，可采用交错网格。

所谓的交错网格就是指把速度 u 、 v 、 w 及压力 P （包括其它所有标量场及物性参数）分别存储于不同的网格上的网格系统。其中速度 u 位于压力控制容积的东、西界面上，速度 v 位于压力控制容积的南、北界面上， u 、 v 各自的控制容积则是以速度所在位置为中心的。由下图可知， u 控制容积与主控制容积（即压力的控制容积）之间在 x 方向有半个网格步长的错位，而 v 控制容积与主控制容积之间则在 y 方向上有半个步长的错位。交错网格这一名称即由此而来。

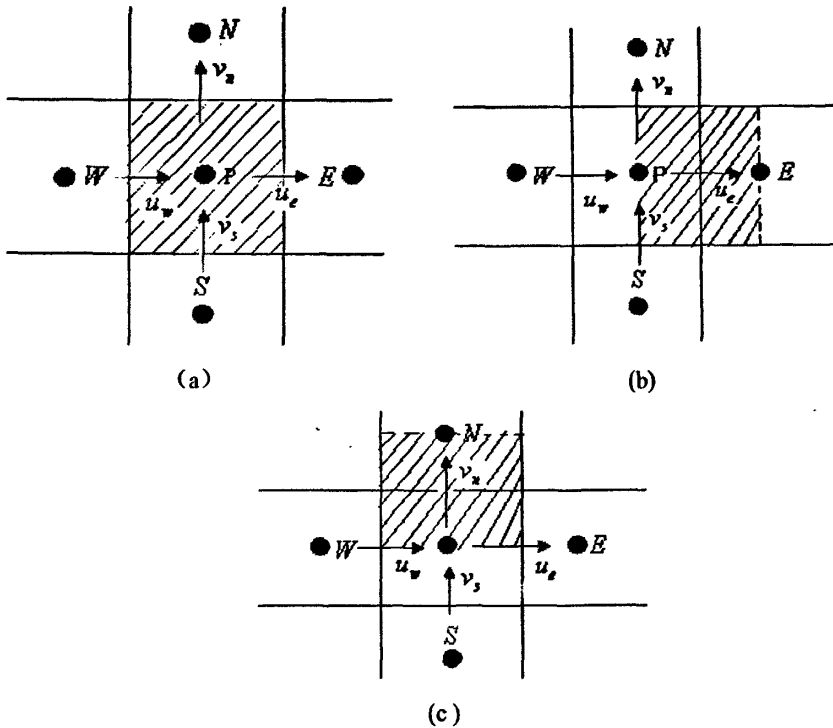


图 3-2 交错网格

(a) 主控制容积 (b) u 控制容积 (c) v 控制容积

Fig.3-2 Staggered grid

(a) Major control volume (b) Control volume on u direction (c) Control volume on v direction

在交错网格系统中，关于 u 、 v 的离散方程可以通过对各自的控制容积作积分而得出。这时压力梯度的离散形式对 u_e 为 $\frac{(P_E - P_P)}{(\delta X)_e}$ ，对 v_n 为 $\frac{(P_N - P_P)}{(\delta Y)_n}$ ，亦即相邻两点间的

压力差构成了 $\frac{\partial P}{\partial x}$, $\frac{\partial P}{\partial y}$, 这就从根本解决了采用一般网格系统时所遇到的困难, 也是交错网格成功的原因。

3.4.3 SIMPLE 算法的采用

第二章建立的流场方程组中没有直接求解流场中压力的微分方程, 而压力是以压力梯度的形式存在与动量方程之中并且是作为源项的一部分来处理的。虽然没有明显的求解压力的方程, 但正确的压力场代入动量方程时所求出的速度场需要满足连续方程, 即压力场是由连续方程间接确定的。用数值计算方法求解流场方程组时, 可以借鉴数值计算传热学、数值燃烧学和计算流体力学的方法, 首先假设压力场, 代入动量方程中求出速度场, 在不满足连续方程的情况下变换新的压力场, 得出正确的速度场为止。

此种方法称为 SIMPLE 算法, 它是由 Patankar 和 Spalding 于 1972 年提出的求解不可压缩粘性 N-S 方程的数值方法, 并在计算流体力学、计算传热和燃烧等方面得到广泛的应用, 现已成功地推广到可压缩流场的计算中。

采用 SIMPLE 算法求解对流-扩散方程具体的处理方法是: 在计算过程时采用交错网格, 即压力、粘性系数、湍流动能和湍流耗散等标量函数置于第一类网格节点(称主网格)上, 把速度分量的网格结点设在主网格界面中心处的位置上, 其平面关系如上图所示, 即速度分量的控制容积与各标量的控制容积相互交错, 构成交错网格。x、y 和 z 坐标方向上的速度分量所在的网格均与该方向上标量的网格有一个错位; 利用动量方程与连续方程构造一个校对方程, 从而求得空气压力场, 并通过迭代后同时满足动量方程和连续方程, 其物理概念清晰, 通用性强, 对时间差分采用全隐式格式, 且时间步长不受限制, 计算效率高。

对交错网格系统, 流场计算时有: (1) 积分用的控制容积是 u 、 v 、 w 各自的控制容积。(2) 压力梯度项从源项中分离出来, 即:

$$\int \int \int_V \left(-\frac{\partial P}{\partial x}\right) dx dy dz = - \int \int (P_E - P_P) dy dz \cong (P_P - P_E) \Delta y \Delta z \dots\dots\dots (3-31)$$

$$\int \int \int_V \left(-\frac{\partial P}{\partial y}\right) dx dy dz = - \int \int (P_N - P_P) dx dz \cong (P_P - P_N) \Delta x \Delta z \dots\dots\dots (3-32)$$

$$\int \int \int_V \left(-\frac{\partial P}{\partial z}\right) dx dy dz = - \int \int (P_H - P_P) dx dy \cong (P_P - P_H) \Delta x \Delta y \dots\dots\dots (3-33)$$

则在这里假设在 u_e 的控制容积的东、西界面, v_n 的控制容积的南、北界面, w_h 的控制容积的上、下界面上的压力是各自均匀的, 分别为 P_E 及 P_P 、 P_N 及 P_P 、 P_H 及 P_P 。

于是关于 u_e 、 v_n 、 w_h 的离散方程，便具有以下形式：

$$a_e u_e = \sum a_{nb} u_{nb} + b + (P_p - P_E) \Delta y \Delta z \dots\dots\dots (3-34)$$

$$a_n v_n = \sum a_{nb} v_{nb} + b + (P_p - P_N) \Delta x \Delta z \dots\dots\dots (3-35)$$

$$a_h w_h = \sum a_{nb} w_{nb} + b + (P_p - P_H) \Delta x \Delta y \dots\dots\dots (3-36)$$

由上方程知：动量方程只有在已知的压力场时才能求解，要使通过动量方程解出速度场满足连续方程，必需给出正确的压力场，故采用迭代的方法，首先给定假设压力场为 P^* ，可以求出速度场 u^* 、 v^* 、 w^* ，则有：

$$a_e u_e^* = \sum a_{nb} u_{nb}^* + b + (P_p^* - P_E^*) \Delta y \Delta z \dots\dots\dots (3-37)$$

$$a_n v_n^* = \sum a_{nb} v_{nb}^* + b + (P_p^* - P_N^*) \Delta x \Delta z \dots\dots\dots (3-38)$$

$$a_h w_h^* = \sum a_{nb} w_{nb}^* + b + (P_p^* - P_H^*) \Delta x \Delta y \dots\dots\dots (3-39)$$

假定正确的压力场是由假定压力与校正压力之和来计算，即：

$$p = p^* + p' \dots\dots\dots (3-40)$$

同理有：

$$u = u^* + u' \dots\dots\dots (3-41)$$

$$v = v^* + v' \dots\dots\dots (3-42)$$

$$w = w^* + w' \dots\dots\dots (3-43)$$

可见改进后的压力场与速度场也满足这一迭代层次上的动量离散方程，即线性化了的动量方程，于是有：

$$\begin{cases} a_e (u_e^* + u_e') = \sum a_{nb} (u_{nb}^* + u_{nb}') + b + [(P_p^* + P_p') - (P_E^* + P_E')] \Delta y \Delta z \\ a_n (v_n^* + v_n') = \sum a_{nb} (v_{nb}^* + v_{nb}') + b + [(P_p^* + P_p') - (P_N^* + P_N')] \Delta x \Delta z \dots\dots\dots (3-44) \\ a_h (w_h^* + w_h') = \sum a_{nb} (w_{nb}^* + w_{nb}') + b + [(P_p^* + P_p') - (P_H^* + P_H')] \Delta x \Delta y \end{cases}$$

这里，假定由源项构成的 b 的值保持不变，则 (3-38) 式，可得：

$$\begin{cases} a_e u_e' = \sum a_{nb} u_{nb}' + (P_p' - P_E') \Delta y \Delta z \\ a_n v_n' = \sum a_{nb} v_{nb}' + (P_p' - P_N') \Delta x \Delta z \dots\dots\dots (3-45) \\ a_h w_h' = \sum a_{nb} w_{nb}' + (P_p' - P_H') \Delta x \Delta y \end{cases}$$

由上式表明，任一点上的速度改进值由两部分组成：一部分是与该速度在同一方向上的相邻两节点间压力修正值之差，这是产生速度修正值的直接的动力；另一部分是由邻点速度的修正值所引起的，这又可以视为四周压力的修正值对所讨论位置上速度改进值的间接影响。这里，如果直接按(3-38)式来确定速度修正值将导致十分复杂的计算，这里，我们认为在上述的两个影响因素中压力修正值的直接影响是主要的，四周邻点速度修正值的影响可近似地不予考虑，这就相当于假设有 $\sum a_{nb}u'_{nb}$ 中的系数 $a_{nb} = 0$ ，于是速度修正方程为：

$$\begin{cases} a_e u'_e = (P'_P - P'_E) \Delta y \Delta z \\ a_n v'_n = (P'_P - P'_N) \Delta x \Delta z \dots\dots\dots (3-46) \\ a_h w'_h = (P'_P - P'_H) \Delta x \Delta y \end{cases}$$

令： $d_e = \frac{\Delta y \Delta z}{a_e}$, $d_n = \frac{\Delta x \Delta z}{a_n}$, $d_h = \frac{\Delta x \Delta y}{a_h}$, 即有：

$$\begin{cases} u'_e = d_e (P'_P - P'_E) \\ v'_n = d_n (P'_P - P'_N) \dots\dots\dots (3-47) \\ w'_h = d_h (P'_P - P'_H) \end{cases}$$

故改进后的速度为：

$$\begin{cases} u_e = u_e^* + d_e (P'_P - P'_E) \\ v_n = v_n^* + d_n (P'_P - P'_N) \dots\dots\dots (3-48) \\ w_h = w_h^* + d_h (P'_P - P'_H) \end{cases}$$

现连续性方程为：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \dots\dots\dots (3-49)$$

在时间间隔 Δt 内对主控体作积分，且以 $\frac{\rho_P - \rho_P^0}{\Delta t}$ 代 $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ ，采用全隐式格式，可得：

$$\frac{\rho_P - \rho_P^0}{\Delta t} \Delta x \Delta y \Delta z + [(\rho u)_e - (\rho u)_w] \Delta y \Delta z + [(\rho v)_n - (\rho v)_s] \Delta x \Delta z + [(\rho w)_h - (\rho w)_l] \Delta x \Delta y = 0$$

将(3-42)式代入上面方程中，并整理成的 P' 代数方程，可得：

$$a_p P_p' = a_E P_E' + a_W P_W' + a_S P_S' + a_N P_N' + a_H P_H' + a_L P_L' + b \dots \dots \dots (3-50)$$

式中, 有:

$$a_E = \rho_e d_e \Delta y \Delta z \dots \dots \dots (3-51)$$

$$a_W = \rho_w d_w \Delta y \Delta z \dots \dots \dots (3-52)$$

$$a_N = \rho_n d_n \Delta x \Delta z \dots \dots \dots (3-53)$$

$$a_S = \rho_s d_s \Delta x \Delta z \dots \dots \dots (3-54)$$

$$a_H = \rho_h d_h \Delta x \Delta y \dots \dots \dots (3-55)$$

$$a_L = \rho_l d_l \Delta x \Delta y \dots \dots \dots (3-56)$$

$$a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + a_H + a_L \dots \dots \dots (3-57)$$

$$b = \frac{\rho_p^0 - \rho_p}{\Delta t} \Delta x \Delta y \Delta z + [(\rho u^*)_e - (\rho u^*)_w] \Delta y \Delta z + [(\rho v^*)_n - (\rho v^*)_s] \Delta x \Delta z + [(\rho w^*)_h - (\rho w^*)_l] \Delta x \Delta y$$

3.4.4 SIMPLE 算法小结

SIMPLE 算法的具体计算步骤如下:

- (1) 输入边界条件;
- (2) 估计压力场, 并估计一个满足连续性要求的迭代初始速度场;
- (3) 求解动量方程, 得到 u^* 、 v^* 、 w^* ;
- (4) 求解 P^* 方程, 得到 P^* ;
- (5) 速度校正公式, 再由带*号的速度计算 u 、 v 、 w ;
- (6) 通过上面的计算式, 由 P^* 及 P^* 计算 P ;
- (7) 将新求得的 u 、 v 、 w 和源项代入动量方程, 把新得到的压力 P 当作新的试探值 P' ; 返回步骤 (3), 重复全部过程, 直到收敛为止;
- (8) 计算温度 T , 直至收敛;
- (9) 计算组分 C , 直至收敛;
- (10) 判断是否达到时间步收敛要求, 如果达到收敛要求则停止, 进行步骤 (11);
- (11) 时间步 $t+1$;
- (12) 返回步骤 (2) 直至完成计算。

第四章 数值模拟结果与分析

流动、传热传质和燃烧过程的计算机模拟是世界上近二十多年发展起来的一门应用学科。它以计算机为桥梁，把基本理论，模拟实验和装置设计三者有机地结合起来，开辟用理论指导实验和设计工作的途径，有助于对客观规律认识，而且使设计及其最优化在更大程度上依赖于合理的计算，从而减少实验工作的盲目性和工作量，因此说，计算机模拟技术是解决工程问题的一个有效方法。在本文中，所用的 CFD 软件是 ANSYS-CFX10.0 计算软件，图 4-1 基本描述出了 ANSYS-CFX10.0 软件计算流程。

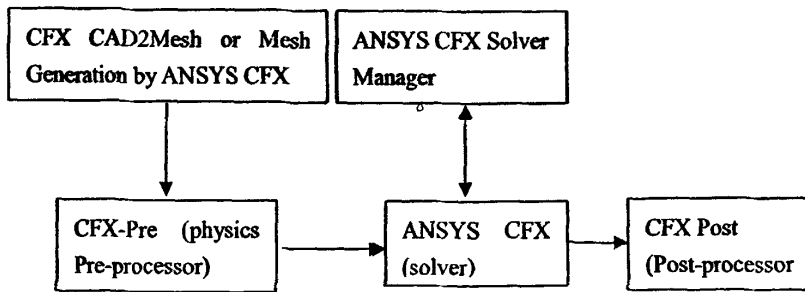


图 4-1 ANSYS-CFX10.0 软件程序流程示意图

Fig.4-1 The five modules of ANSYS-CFX10.0 software

在第二章中已建立了描述流体流动、传热、传质的完整数学模型，并在第三章中介绍了基本的计算方法。在实际数值模拟过程中需要的数学模型、计算方法、收敛因子等进行反复调试，才能得到比较好的模拟结果。本文主要对燃烧模型的模拟性能进行比较，首先对比较简单的地下通道工况进行了烟气运动规律数值模拟；进而对较复杂的工况—燃烧罐燃烧过程进行了燃烧数值模拟，并实现对 CFX 软件的二次开发，将湍流化学反应的分形模拟模型 FM 嵌入到 CFX 中进行了数值模拟，定性地分析了模拟结果；最后采用国际标准的室内燃烧数据（取自相关的文献资料）定量地验证并分析了湍流化学反应的分形模拟模型 FM 的模拟结果，并与其他燃烧模型模拟的结果进行了对比分析。

4.1 地下通道内烟气运动规律的数值模拟

4.1.1 模拟计算工况

选取某地下通道作为研究对象，该地下通道有效长度 107.5 米，宽度 12.5 米，通道高 4.4 米，通道两侧建有台阶直接与地面连接。为了考察高温烟气流动及其不同时

刻高温烟气流动和通道内冷空气的相互作用，在通道内的一侧中间位置 64.25 米处建立有方形房，方形房对着地下通道内部的一面开门，房内设置有圆形火源。火源强度根据国内外大量地铁地下通道燃烧火源强度给定，没有特别说明，均取为 10.5MW，发烟量为 $5.9\text{kg/s}^{[60-62]}$ 。燃烧发生前风流和温度均匀为一定值，燃烧发生后，模型空间内的空气和烟气的密度都随温度、时间等的变化而变化。在火源处，取火源直径的十分之一作为计算网格的尺度并在周围气流变化比较大的范围内取大约直径 15 米的圆形区域进行网格加密处理，其他部分网格尺寸大约是火源直径的五分之四。计算条件设定为：计算空间的初始相对压强为 0Pa，不考虑通道内空间人员走动对空气的扰动。地面、通道壁、顶棚等均为绝热材料。选用 Rosseland 辐射模型，该模型具有计算量较小且实用于大空间气体辐射的优点。气体的湍流流动采用浮力修正的双方程 $k-\varepsilon$ 湍流模型。在建立几何模型时，地下通道长、宽、高分别建在 x 、 y 、 z 方向上，火源中心所在的 x 轴截面的示意图 4-2 如下所示：

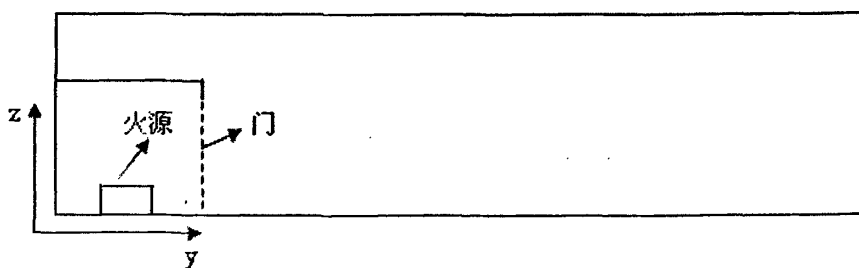


图 4-2 yz 截面示意图 ($x=64.25\text{m}$)

Fig.4-2 The sectional sketch on yz ($x=64.25\text{m}$)

4.1.2 模拟结果与分析

取地下通道长 64.25 米火源所在的方形房的门口位置，对从方形房溢出的高温烟气与通道内冷空气相互作用的分布情况、烟气流动的特征等进行分析。

燃烧发生 60s 时高温烟气与冷空气相互作用的分布情况、烟气流动的特征等如图 4-3、4-4 所示。图 4-3、4-4 表明，空气与高温烟气对流引起的时速度场分布受到火源的影响，在方形房内温度迅速升高，溢出的高温烟气所形成的火羽流密度小于周围冷空气密度。火羽流在浮升力的作用下，首先向上运动；而在门处，火羽流与冷空气接触进行热、质的传递。随着冷空气温度升高，密度变小，与火羽流接触处的空气有向上运动的趋势，空气向上运动后，此处的压力变小，相比之下，通道内其它地方的压力大，导致其它地方空气向火源处运动。当火羽流上升，撞击顶棚后反射，沿顶棚

壁转为水平和向下的运动, 烟气蔓延的面积逐渐增大, 与冷空气之间大范围进行热、质交换。当火羽流运动撞击到通道内另一侧墙壁, 受到壁面阻挡, 转而沿壁面向下运动。经过一段时间发展, 到 180s 时形成图 4-7 所示的速度场分布。在火羽流经过的地方, 气流之间相互作用比较明显, 局部温度升高, 形成涡团。

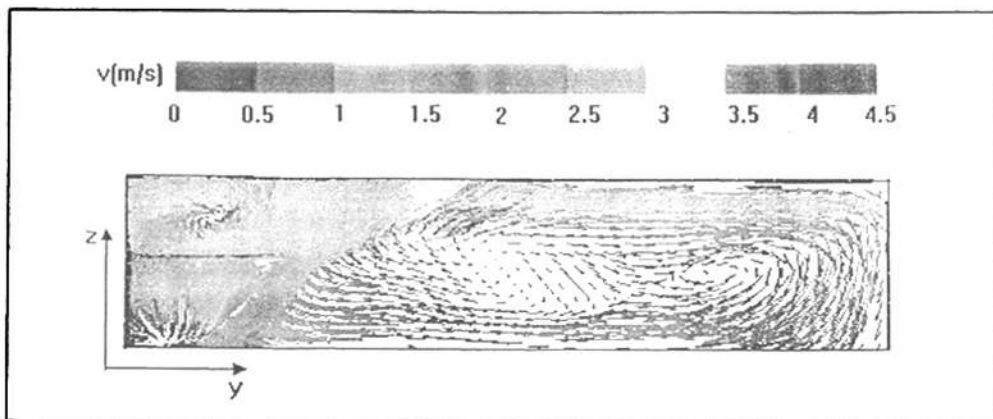


图 4-3 速度矢量图 (60s)

Fig.4-3 The velocity field at 60s

燃烧发生 60s 时的温度分布如图 4-4 所示。在房内, 温度很快上升, 达到危险值。门处高温烟气遇到通道内冷空气进行热、质传递, 冷空气对于高温烟气向通道内蔓延有阻碍作用。此外, 房内空气、烟气混合物受热密度变小而上升, 所以高温烟气大部分集中在房内, 使得房内聚集大量高温烟气, 热量越积越多, 使得最高温度出现在房的内侧。

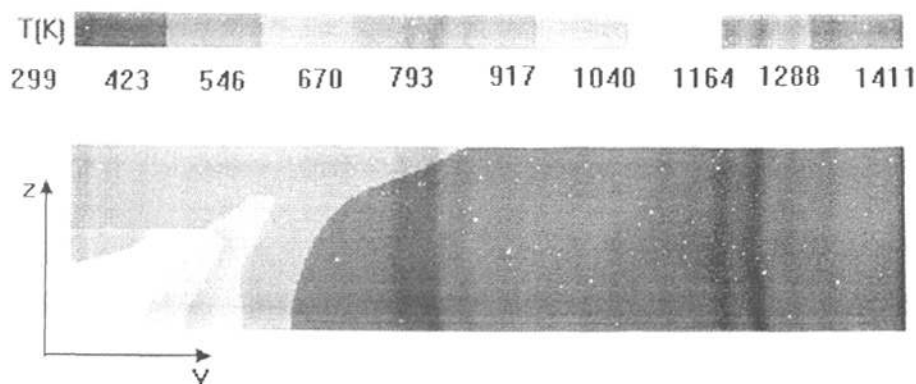


图 4-4 温度场分布图 (60s)

Fig.4-4 The temperature distribution at 60s

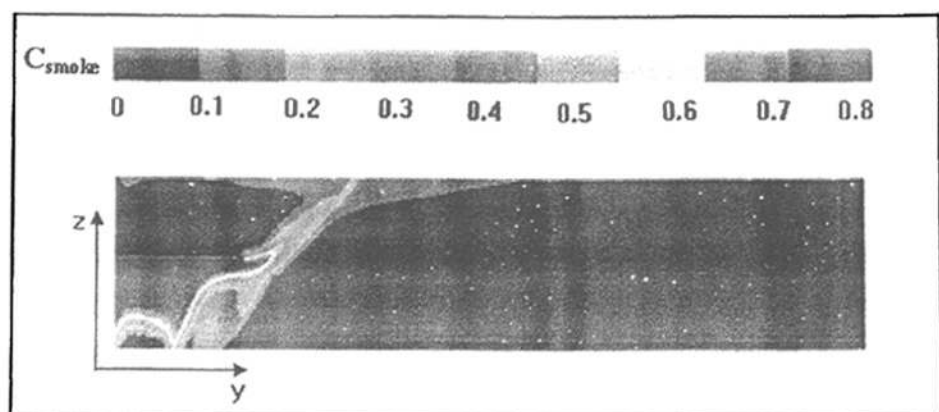


图 4-5 烟气场分布图 (60s)

Fig.4-5 The smoke distribution at 60s

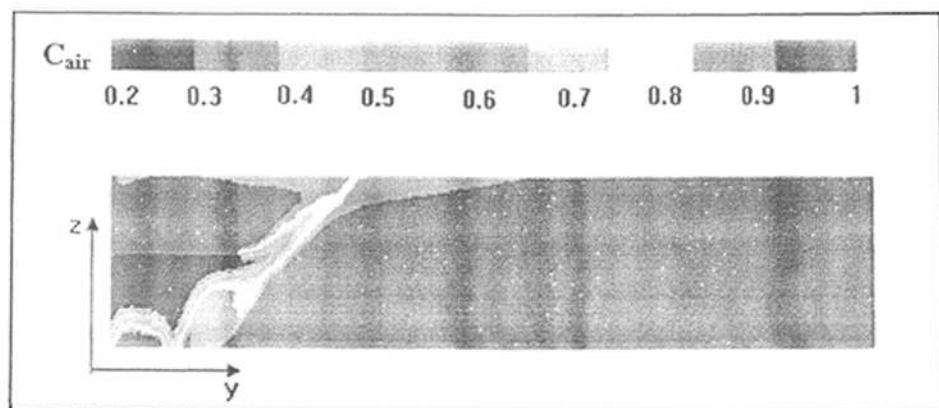


图 4-6 空气场分布图 (60s)

Fig.4-6 The air distribution at 60s

燃烧发生 60s 时的烟气场分布、空气场分布分别如图 4-5、4-6 所示。在门处，由于热烟气和冷空气的对流，空气得到少许补充，烟气质量分数下降。由于浮升力作用，热烟气运动到门处，形成的火羽流向上运动，向通道上方的空间聚集，形成高温和烟气环流区域。图 4-5、4-6 表明，烟气浓度分布与空气浓度分布情况相反，火源附近烟气浓度较大，空气稀薄。随着烟气的蔓延，空气质量变差。

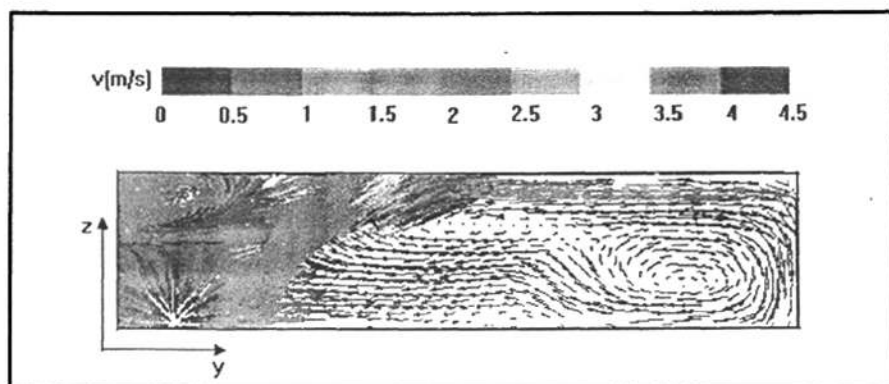


图 4-7 速度矢量图 (180s)

Fig.4-7 The velocity field at 180s

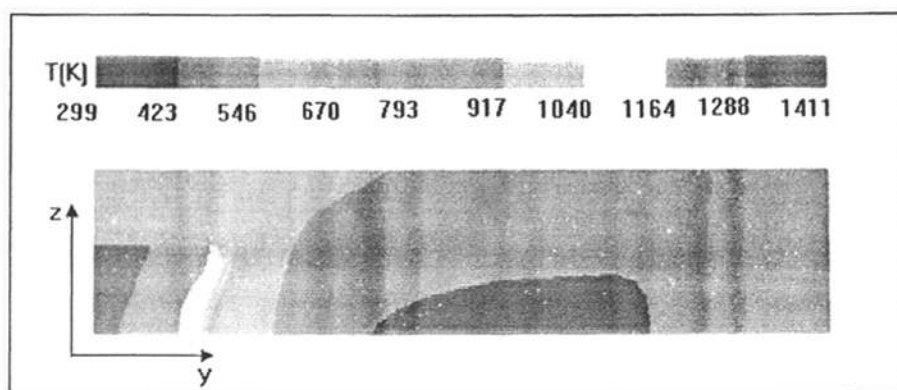


图 4-8 温度场分布图 (180s)

Fig.4-8 The temperature distribution at 180s

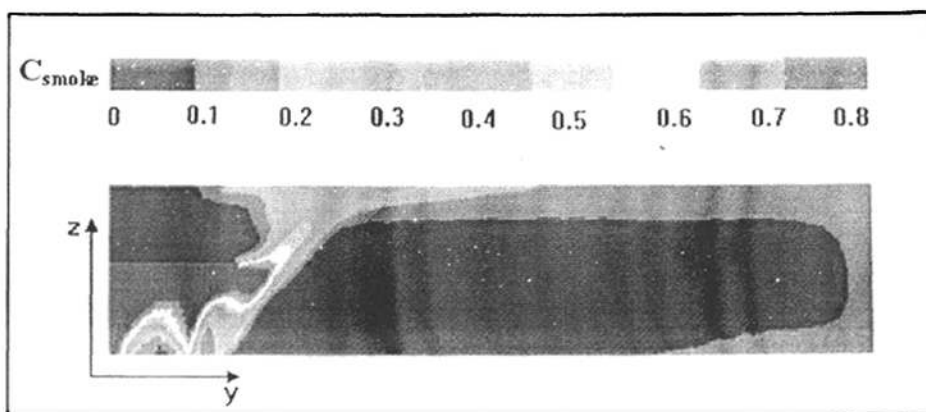


图 4-9 烟气场分布图 (180s)

Fig.4-9 The smoke distribution at 180s

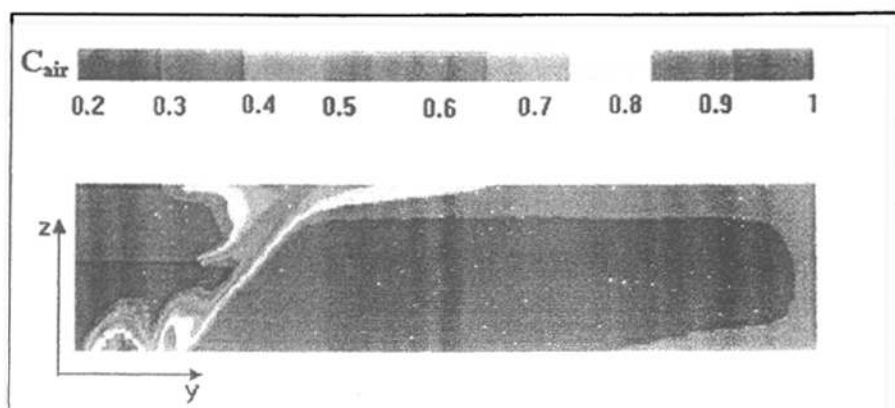


图 4-10 空气场分布图 (180s)

Fig.4-10 The air distribution at 180s

燃烧发生 180s 时的温度分布如图 4-8 所示, 高温烟气辐射出大量的热, 同时烟气与空气进行热, 质传递。对比图 4-4 和图 4-8 可以看出, 由于火羽流运动、烟气蔓延、热对流等作用, 随着燃烧的持续, 通道内温度逐渐升高。图 4-8 的温度分布特征与图 4-9 的烟气分布特征相似, 但传热影响的区域比烟气影响的区域大很多, 这一情况与传热过程快于传质过程相符合。如图 4-3、4-7 所示, 气流的流动形式发生显著变化。

烟气场的分布直接影响着空气场的分布, 如图 4-9、4-10 所示, 由于通道四周壁面的阻挡, 火羽流沿着四周壁面运动, 同时进行热, 质的传递。随着火羽流的运动, 烟气与空气的接触面积加大, 质量交换加剧, 空气质量变差。此时, 温度的上下分层现象基本稳定, 烟气与空气对流加剧, 烟气在通道内蔓延。

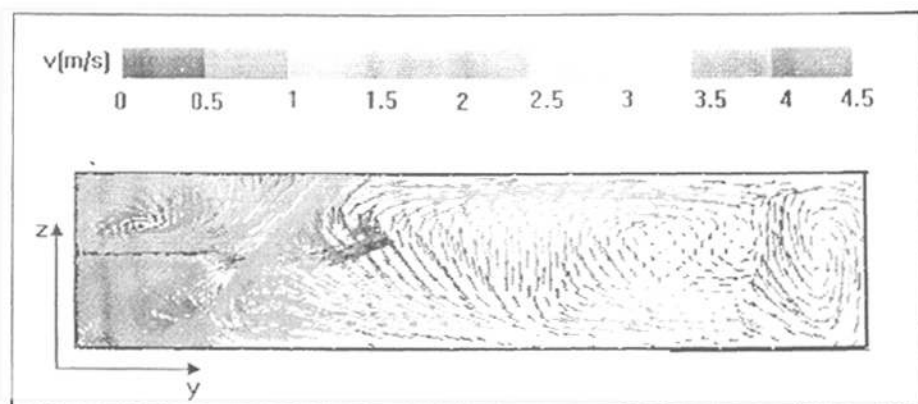


图 4-11 速度矢量图 (240s)

Fig.4-11 The velocity field at 240s

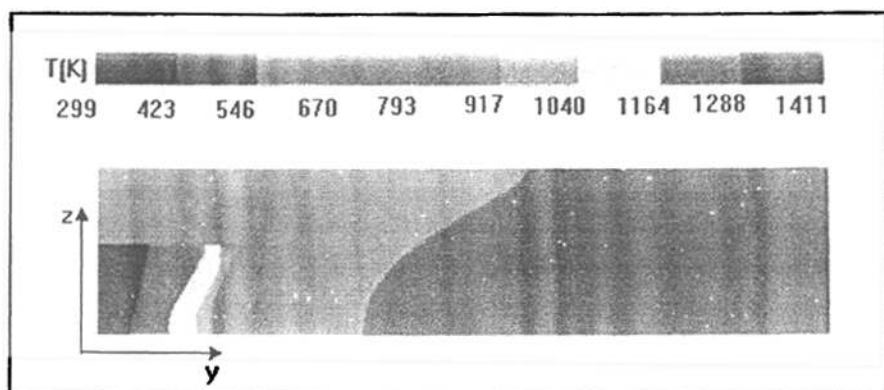


图 4-12 温度场分布图 (240s)

Fig.4-12 The temperature distribution at 240s

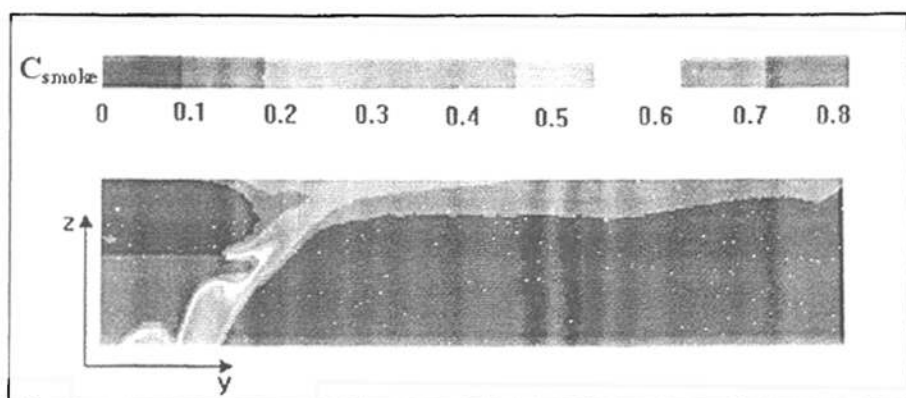


图 4-13 烟气场分布图 (240s)

Fig.4-13 The smoke distribution at 240s

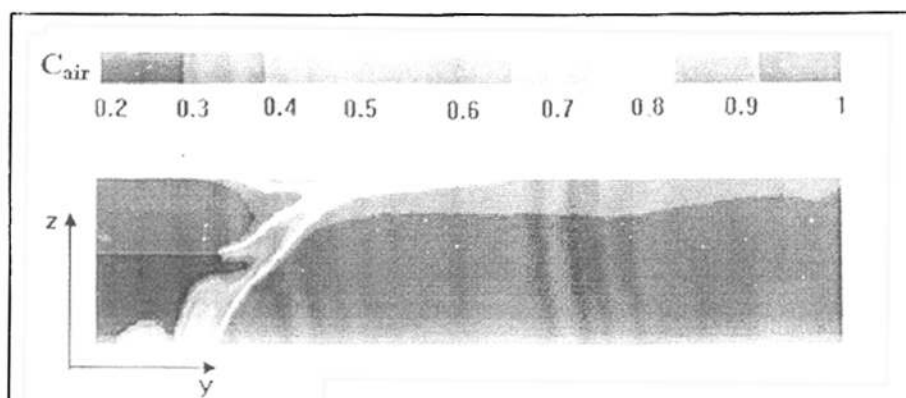


图 4-14 空气场分布图 (240s)

Fig.4-14 The air distribution at 240s

燃烧发生 240s 时的温度分布如图 4-12 所示, 此时地下通道内温度普遍升高, 图 4-13 的烟气分层与图 4-9 中的烟气分层又有不同。在图 4-9 可以看出, 由于通道底层冷空气还没有与烟气进行质量传递, 受冷空气的影响, 烟气分层现象明显, 但在图 4-13 燃烧发生 240s 时, 由于温度的普遍升高, 空气密度变小, 有向上运动趋势, 促进了与烟气的热、质量的传递, 使得烟气蔓延到整个空间。随着火源烟气的不断释放, 烟气以新的分层现象出现, 但此时底层处已有浓度相对比较小的烟气。如图 4-14 所示, 在此截面处的整个区域, 空气质量变差。

取距离火源为 1 米的地方纵向取截面得出以下系列烟气分布图, 如图 4-15 所示, 高温烟气从通道纵向中心截面位置即火源所在的截面处开始向四周蔓延, 高温烟气的密度小于冷空气的密度, 所以从图中可以看出, 高温的烟气首先在通道的顶部出现, 随着燃烧时间的持续, 温度烟气分布范围成伞状不断扩大, 通道顶部的烟气分布区域比通道底部分布区域要大, 且温度要高。这是因为随着顶部烟气的聚集, 高温烟气遇到冷空气, 两者进行热、质的传递的原因。

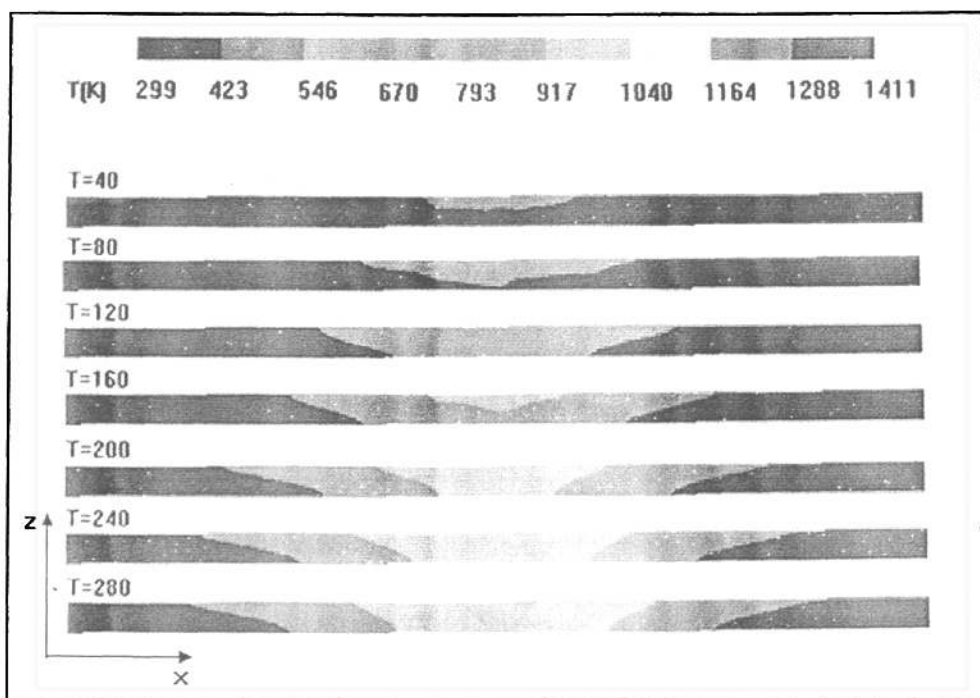


图 4-15 通道纵向温度场分布

Fig.4-15 The temperature distribution of different times

本小节通过地下通道燃烧烟气运动数值模拟, 针对 Ansys-CFX 系统, 设计物理模型和火源, 为 CFX 软件的二次开发打下基础, 熟悉烟气的运动情况及其燃烧模型的设置, 为后面的研究做准备。

4.2 燃烧罐内燃烧的数值模拟

4.2.1 模拟计算工况

图 4-16 是燃烧罐简图，图中给出了甲烷、空气的进口位置。在燃烧罐侧面有等弧长距离的六个半径为 1.5cm 圆形空气进口，每个圆形进口空气流速为 5m/s。在燃烧罐的底部有六个表面积为 0.01cm^2 (相当于半径为 0.18cm 的圆形) 的燃料进口，燃料甲烷流速为 40m/s。在燃料罐底部是主要的空气进口，流速为 10m/s。

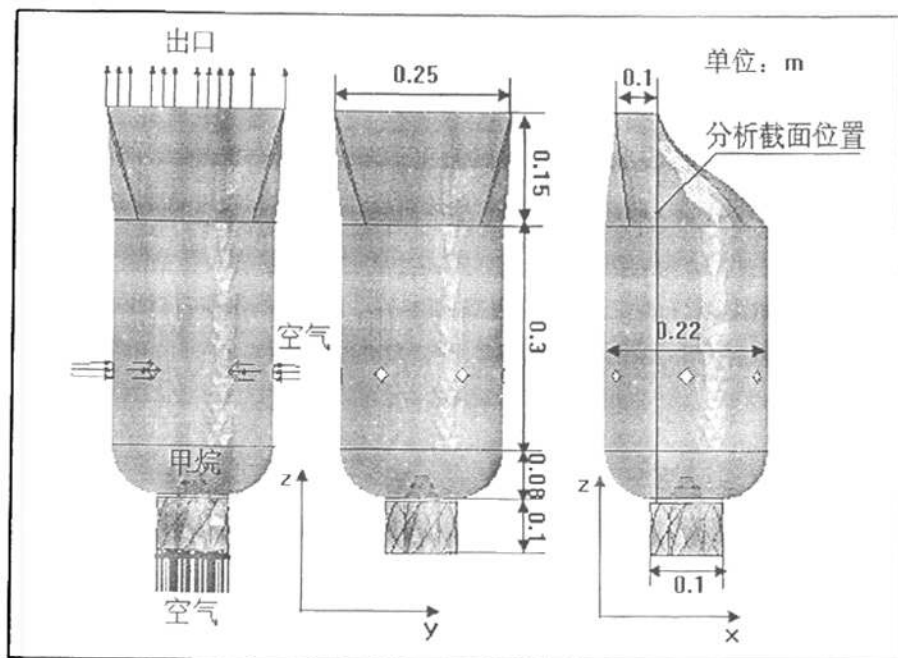


图 4-16 不同方向燃烧罐简图

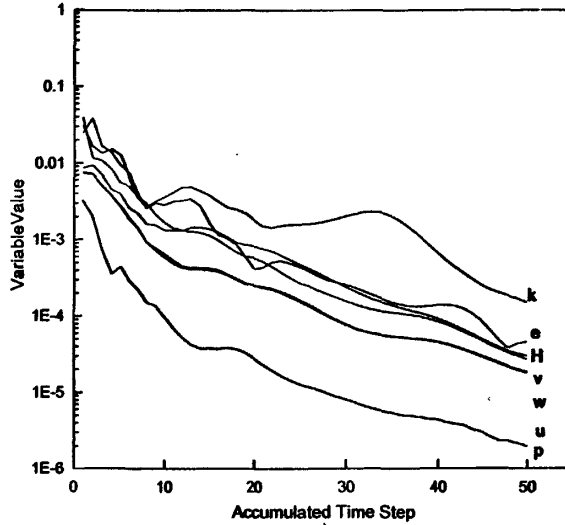
Fig.4-16 Sketch of the Can Combustor

对这一模拟工况，将湍流化学反应的分形模拟模型 FM 嵌入 CFX 软件里进行模拟。湍流模型选用浮力修正的双方程 $\kappa-\varepsilon$ 湍流模型，辐射模型选择 Rosseland 模型进行模拟。分别应用 FM、EBU 两种燃烧模型进行燃烧稳态数值模拟的研究。收敛标准设置为 $|u - u^*|/u^* \leq 10^{-4}$ 。

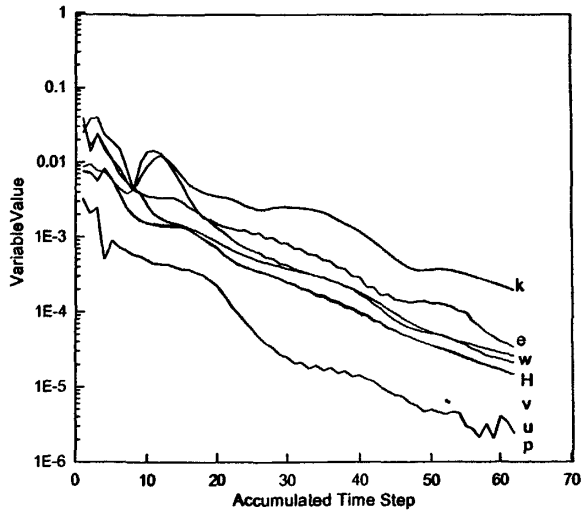
4.2.2 模拟结果与分析

在进行数值模拟计算时，计算收敛性的好坏直接影响着模拟结果的准确性。下面对 FM、EBU 两种燃烧模型模拟时收敛性进行比较分析。两种燃烧模型时的收敛标准

都设置为 $|u - u^*|/u^* \leq 10^{-4}$ ，收敛情况如图 4-16，图中给出具有代表性变量 x 、 y 、 z 三个方向上的速度分量 u 、 v 、 w ；压强 P ；能量 H ；湍流动能 k 和湍流动能耗散率 ϵ 的收敛情况。



(a)



(b)

图 4-17 不同燃烧模型模拟燃烧罐燃烧的数值收敛情况

(a) EBU 燃烧模型 (b) FM 燃烧模型

Fig.4-17 Convergence of numerical simulation by different combustion models for Can Combustor

(a) EBU (b) FM

EBU 燃烧模型适用于高雷诺数的湍流燃烧过程,而且用在此燃烧罐的模拟经过验证,故下面的模拟结果分析以 EBU 燃烧模型模拟得到的结果为基准对 FM 燃烧模型的模拟结果进行定性分析。在两次模拟过程中,用同样的几何模型、网格类型和尺寸大小;同样的边界条件、收敛标准、湍流模型参数设置等。使用不同的燃烧模型,计算的收敛情况如图 4-17 所示,EBU 燃烧模拟用的计算迭代收敛次数较少,这是因为 EBU 燃烧模型只考虑了湍流混合和燃烧速率的之间作用,而忽略了分子输运和化学反应动力学过程的作用,没有化学反应动力学上的计算。用 FM 燃烧模型模拟时用的计算收敛的迭代次数比与 EBU 燃烧模型模拟时多 12 次,这是因为湍流的拉伸、切割等作用把当地涡团分裂成众多的子涡团,甚至是耗散涡团,燃烧的放热影响着湍流场的湍动程度,使其计算难于收敛,而且考虑了分子输运和化学反应动力学过程的作用。由以上分析可以得出,FM 燃烧模型在收敛所用的时间上还是比较好的。下面给出两种燃烧模型模拟的模拟结果,图中分别以 EBU、FM 顺序给出两次模拟的结果并进行分析,截面取距离中心截面 0.04m 的地方,如图 4-16 标记的分析截面位置所示。

图 4-18 是 EBU、FM 模拟的速度等值线图。EBU、FM 模拟的速度等值线分布情况基本相似,在燃烧罐底部都存在回流区。图 4-19 是 EBU、FM 模拟的温度场分布图。由图中可以看出,EBU 和 FM 两种燃烧模型模拟得出的温度场分布情况相差不大。在截面中心处温度分布最高的区域面积 FM 燃烧模型要比 EBU 燃烧模型大,最高温度相差几摄氏度。

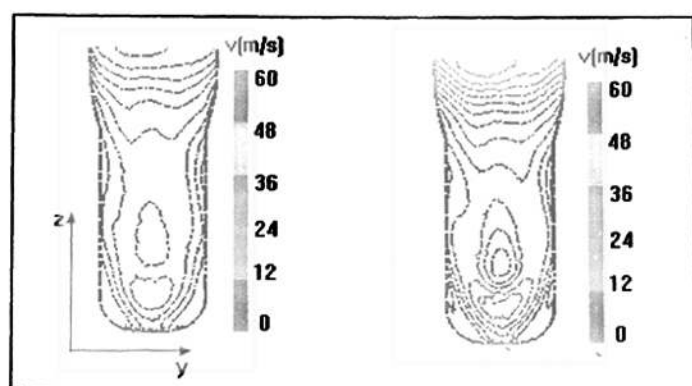


图 4-18 速度等值线图

Fig.4-18 The velocity contour distribution

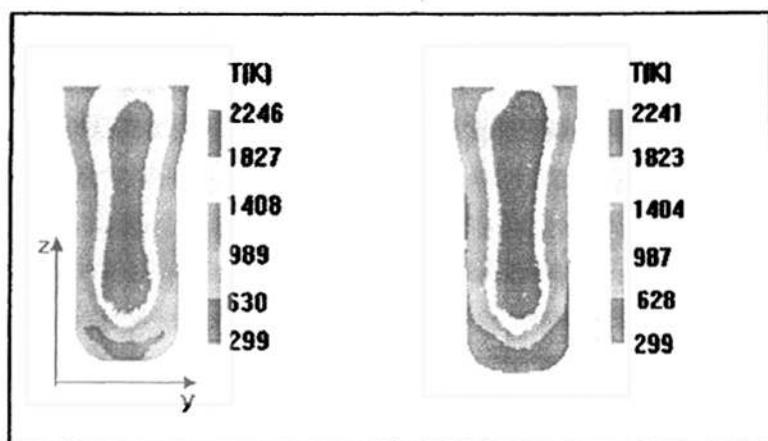
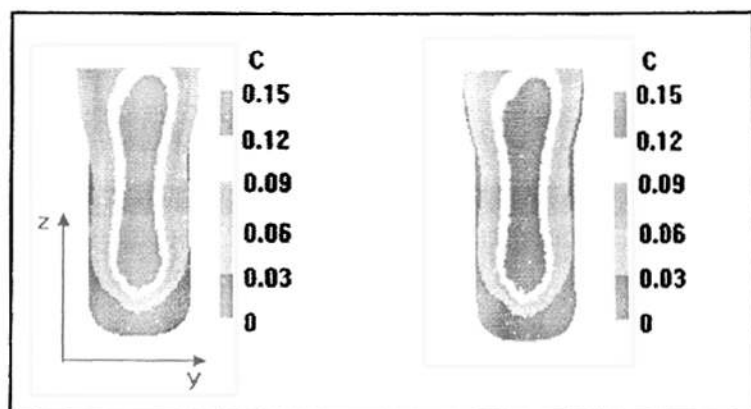
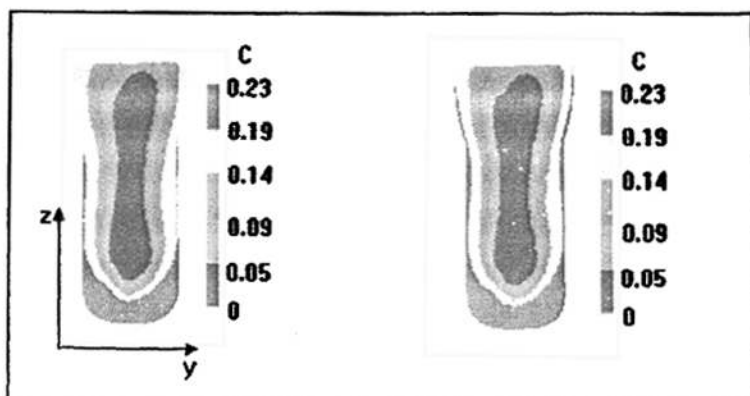


图 4-19 温度场分布图

Fig.4-19 The temperature distribution

图 4-20 和图 4-21 分别给出了二氧化碳、氧气浓度的分布情况，从截面中心位置到燃烧罐的壁面二氧化碳浓度逐渐变小，氧气浓度逐渐变大。从温度、二氧化碳、氧气浓度分布图可以看出，在燃烧区域，温度较高，在温度较高的区域二氧化碳浓度较大，氧气浓度较小。这些与化学反应放热、温度升高、燃烧消耗氧气、生成二氧化碳之间的关系都是相关联的。

图 4-20 CO₂ 浓度分布图Fig.4-20 The CO₂ concentration distribution

图 4-21 O_2 浓度分布图Fig.4-21 The O_2 concentration distribution

4.3 室内燃烧的数值模拟

4.3.1 模拟计算工况

在燃烧罐模拟的例子中，定性地分析了EBU和FM两种燃烧模型的模拟结果。下面将对湍流化学反应的分形模拟模型FM进行定量分析，并与实验数据（取自文献中的实验数据）及其他燃烧模型模拟得到的结果进行分析对比。

为验证FM燃烧模型，采用国际上公认的数据来进行。美国学者Steckler, Quiniere和Rinkinen^[2]在1982年开展了一系列室内燃烧实验来研究燃烧导致的流动，对温度、速度场分布进行测量实验，所得到的实验数据已被多种区域模型或场模型用于模型验证。本文也利用该实验数据来验证所建立的FM模型。湍流流动采用浮力修正的 $\kappa-\epsilon$ 双方程模型来模拟，辐射由Rosseland模型算得。如图4-22所示：房间各方向尺寸分别为长2.8m、宽2.8m、高2.18m，房门的宽0.74m、高1.83m。在门处安放二维58~144双向速度探针和裸线热电偶阵列来测量速度和温度，速度测量的误差约为10%。在房间的角落处安放了一排吸气式热电偶来测量气体的温度，角落处测试点距离近处两侧墙壁各0.305m。火源布置在室内的中间位置，面积为 $0.45 \times 0.45 m^2$ 、热释放率为62.9kW。Steckler房间燃烧模拟用到的网格节点数 $48 \times 48 \times 41$ 。在EBU燃烧模型和FM燃烧模型的两次模拟中都选用 CH_4 做燃料，采用 CH_4 单步化学反应模型。假设地板、顶棚和墙壁都是绝热的。

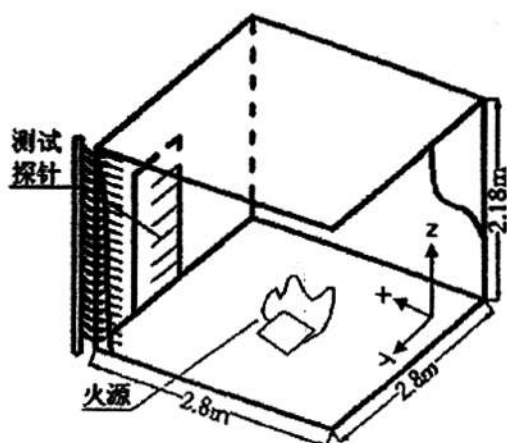


图 4-22 Steckler 燃烧房间的立体图

Fig.4-22 Sketch of the Steckler's room fire

4.3.2 模拟结果与分析

FM 和 EBU 两种燃烧模型模拟的风速矢量分布情况如图 4-23 和图 4-24 所示，在门口附近，FM 燃烧模型模拟的室内出现两个回流区，EBU 模型模拟的室内回流区不明显。在门附近，FM、EBU 两种燃烧模型模拟的速度矢量分布情况大致相同，在下方有向 x 轴负方向的速度，在上方速度转向 x 轴正方向。

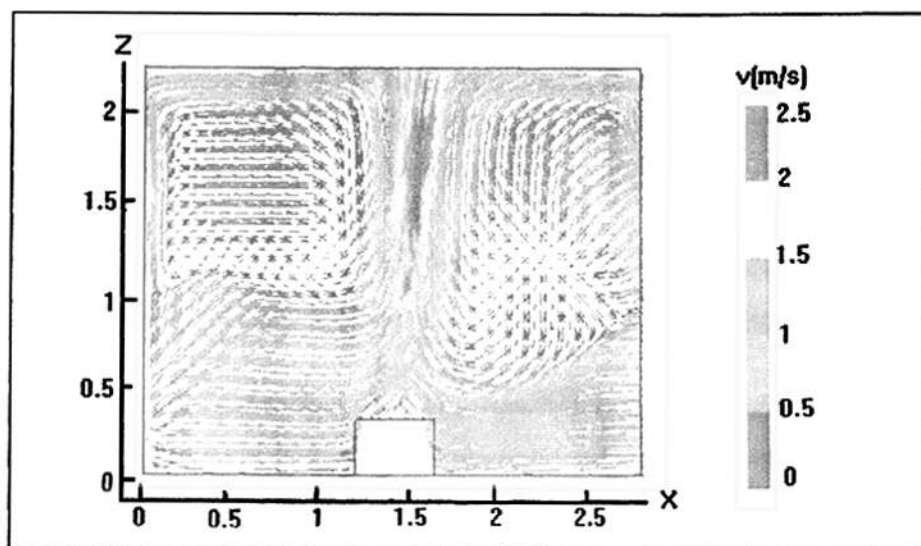


图 4-23 速度矢量图 (FM)

Fig.4-23 The velocity vector distribution (FM)

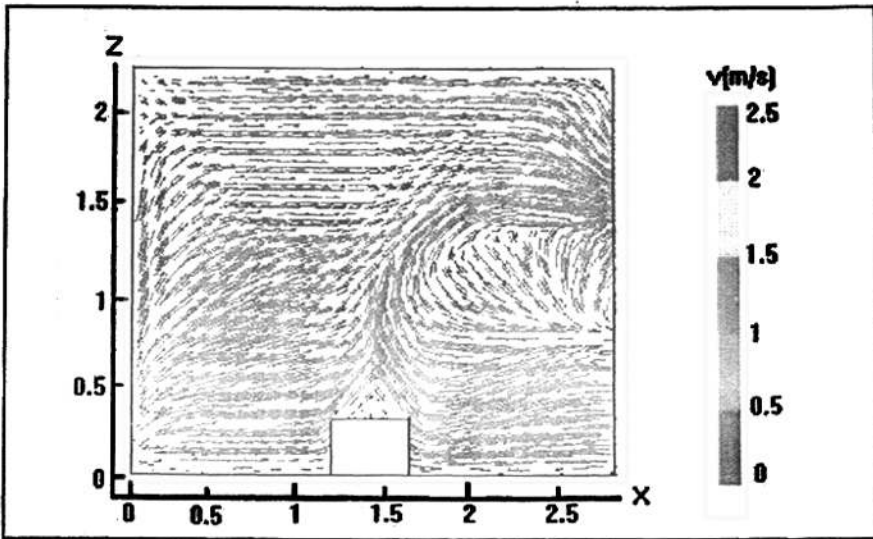


图 4-24 速度矢量图 (EBU)

Fig.4-24 The velocity vector distribution (EBU)

FM 燃烧模型模拟得出的温度场分布如图 4-25 所示，在屋顶附近出现温度分层，图 4-26 是 EBU 燃烧模型模拟得出的温度场分布情况，在屋顶附近没有出现明显的温度分层现象。

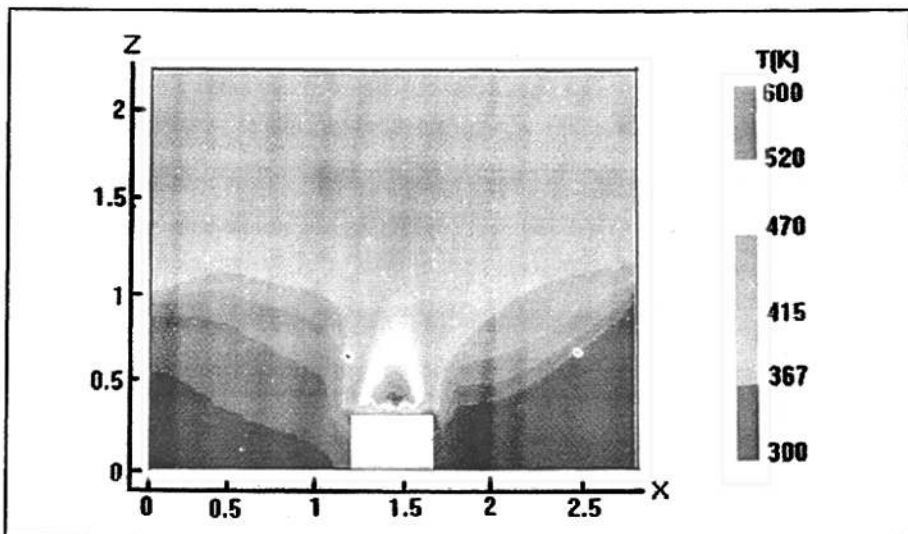


图 4-25 温度场分布图 (FM)

Fig.4-25 The temperature distribution (FM)

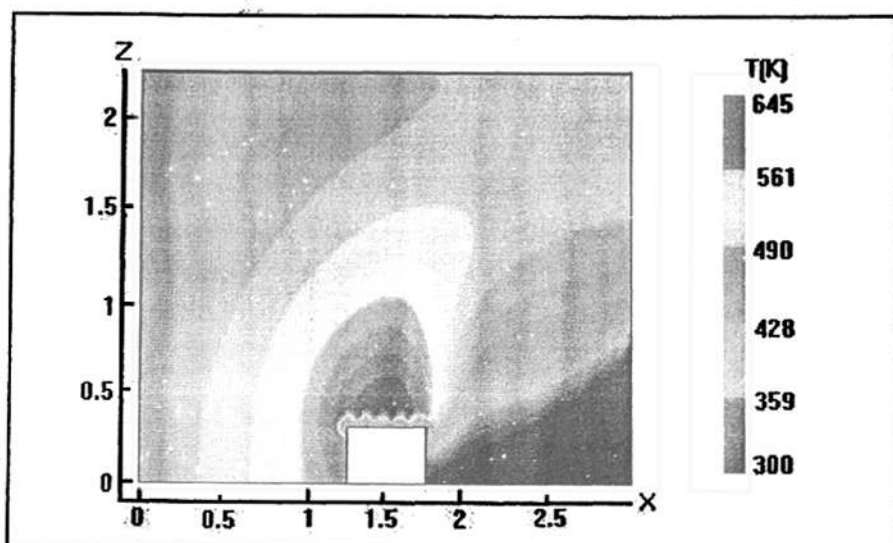
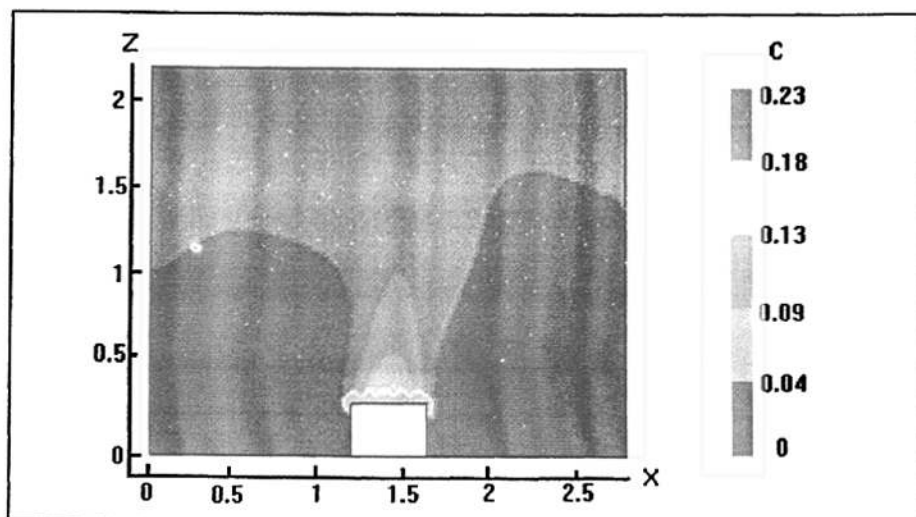
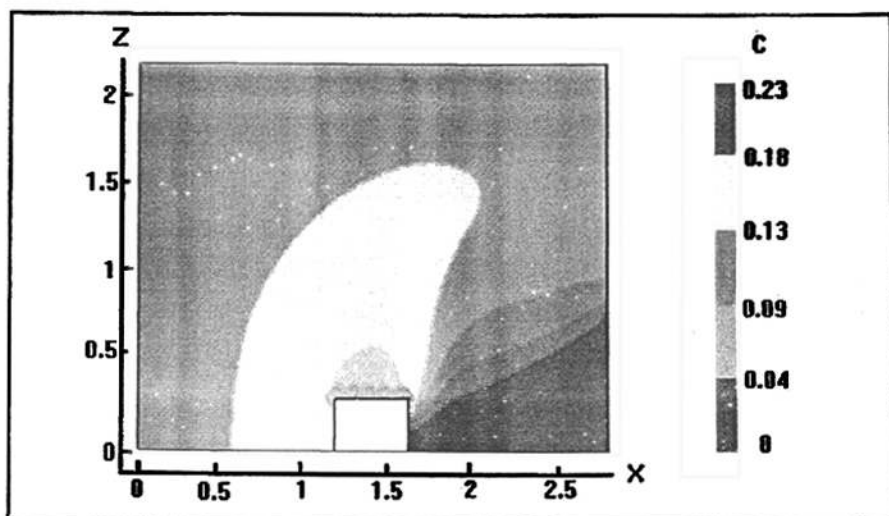


图 4-26 温度场分布图 (EBU)

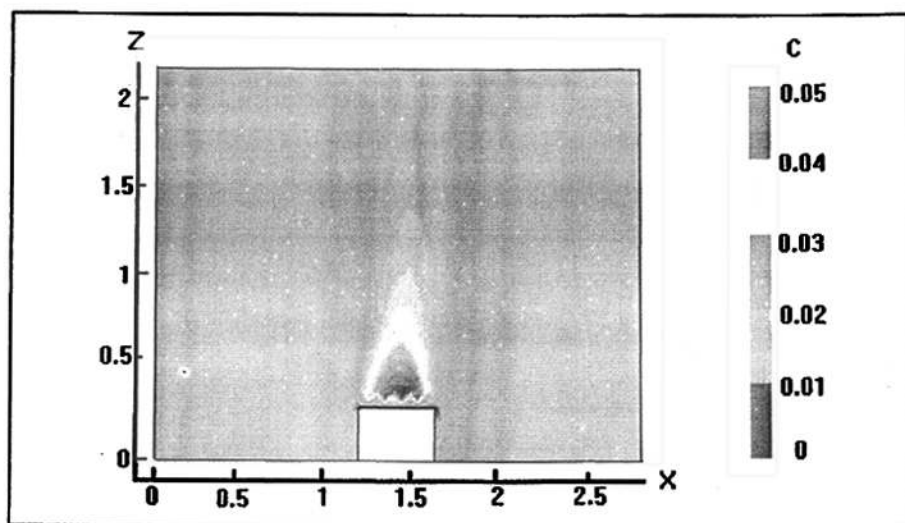
Fig.4-26 The temperature distribution (EBU)

FM 燃烧模型和 EBU 燃烧模型模拟的室内氧气浓度的变化情况分别如图 4-27 和图 4-28 所示, 从图中可以看出, FM 燃烧模型和 EBU 燃烧模型模拟的室内氧气浓度的分布情况的共同特征有: 在门附近, 氧气不断得到补充, 氧气浓度大些, 所以出现火源右侧氧气浓度比左侧氧气浓度要大, 在门附近靠近地面的区域, 氧气的浓度几乎不变。在火源上方区域, 出现氧气浓度最小值。从 FM、EBU 燃烧模型模拟的氧气分布情况可以明显看出, 氧气浓度的分布与温度的分布形状相似。

图 4-27 O₂ 浓度分布图 (FM)Fig.4-27 The O₂ concentration distribution (FM)

图 4-28 O_2 浓度分布图 (EBU)Fig.4-28 The O_2 concentration distribution (EBU)

FM 燃烧模型和 EBU 燃烧模型模拟的室内二氧化碳浓度的变化情况分别如图 4-29 和图 4-30 所示, 与图 4-27 和图 4-28 氧气浓度的分布情况相比, 由于二氧化碳的密度比氧气或空气的密度大的原因, 二氧化碳气体沉于氧气或空气的下方, 所以总体上来看, 在整个室内空间都有二氧化碳的分布。

图 4-29 CO_2 浓度分布图 (FM)Fig.4-29 The CO_2 concentration distribution (FM)

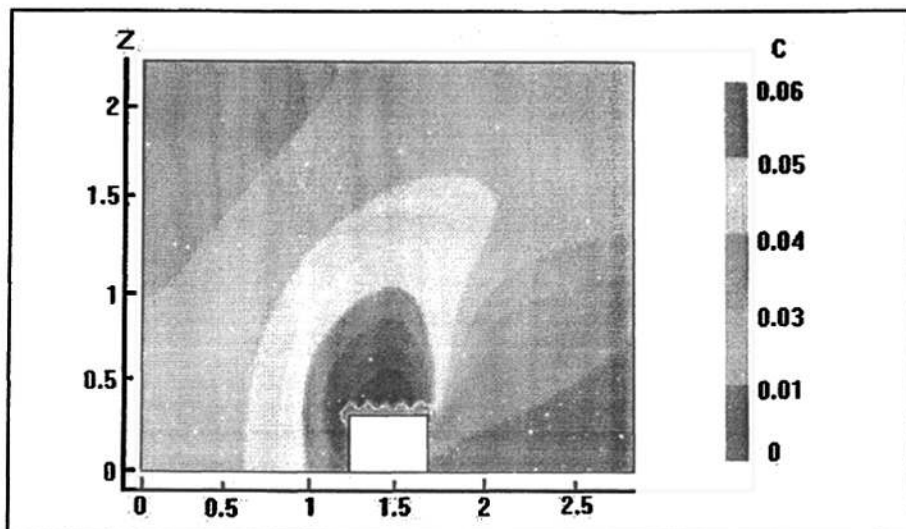
图 4-30 CO₂ 浓度分布图 (EBU)Fig.4-30 The CO₂ concentration distribution (EBU)

图 4-31 给出 Steckler 燃烧室门处实验数据^[2]、EBU 燃烧模型、FM 燃烧模型和文献中 EBU^[63]燃烧模型模拟数据的温度分布。从图中可以看出，文献中 EBU^[63]燃烧模型和本文中 EBU 燃烧模型模拟得出的数据几乎没有差别。在小于 0.6m 的区域两种模型的模拟结果之间差别不大。在大于 0.6m 的区域开始有烟气从门口溢出。烟气随温度的增加密度变小，烟气聚集在屋顶部位，随高度的增加，温度逐渐增加出现分层，在顶棚附近区域，温度分层现象消失。FM 燃烧模型的模拟温度分布情况大致趋势与实验数据一致，FM 燃烧模型和 EBU 燃烧模型在大于 0.6m 的区域温度随高度的增加而增加，但 EBU 燃烧模型模拟的数据在大于 0.6m 区域温度分布偏离实验数据比较远，这是因为 EBU 燃烧模型更适合于高雷诺数的湍流流动，故模拟的准确性降低。

图 4-32 给出 Steckler 燃烧室门处实验数据^[2]、EBU 燃烧模型、FM 燃烧模型和文献中 EBU^[63]燃烧模型模拟数据的速度分布。从图 4-32 中可以看出，文献中 EBU^[63]燃烧模型和本文中 EBU 燃烧模型模拟得出的数据吻合比较好。从图 4-32 的 FM 燃烧模型的模拟结果可以看出，在 1.1m 高处水平速度值为 0，即 FM 燃烧模型模拟时中性面所在的位置是 1.1m。从图 4-32 的 EBU 燃烧模型的模拟结果可以看出，在 0.6m 的位置速度值为 0，即 EBU 燃烧模型的模拟时中性面所在的位置是 0.6m。Steckler 燃烧室门处测得实验数据的中性面位置在 1.0m。通过对中性面位置的对比表明：FM 燃烧模型的模拟结果要优于 EBU 燃烧模型的模拟结果。从图 4-32 也可以看出，FM 燃烧模型模拟得出的速度场分布更接近实验结果。从图 4-33 和 4-34 可以看出，大约在 0.6m 处，FM 燃烧模型模拟得出的温度、速度都有增加的趋势，发生转折，这点

与实验结果符合比较好。

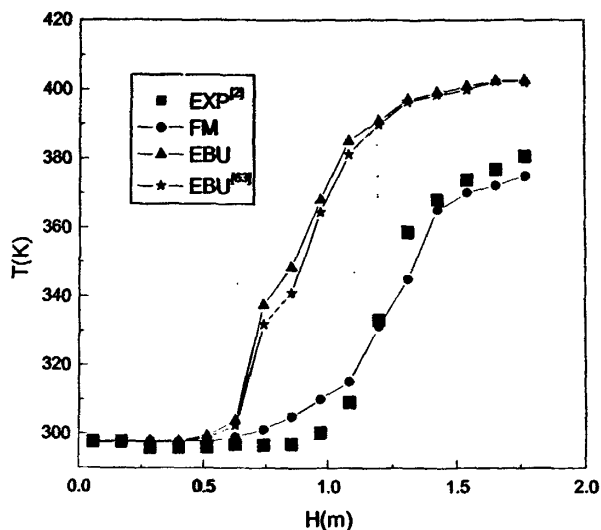


图 4-31 Steckler 燃烧室门处的温度分布

Fig.4-31 The doorway temperature distribution of the Steckler's room fire case.

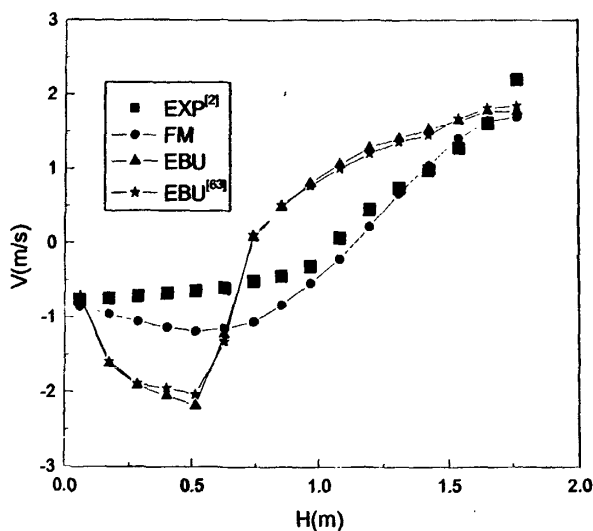


图 4-32 Steckler 燃烧室门处的速度分布

Fig.4-32 The doorway velocity distribution of the Steckler's room fire case.

图 4-33 给出 Steckler 燃烧室墙角处实验数据^[2]、EBU 燃烧模型和 FM 燃烧模型模拟数据的温度分布。在大约 0.7m 到 1.4m 之间区域，温度变化比较剧烈，但 EBU 燃

烧模型模拟的结果比实验值高出 30℃ 左右, 这样的误差很大。FM 燃烧模型的模拟结果更好些。这可能是由于燃烧模型不同, 燃烧放热与湍流之间的相互影响的体现程度不同造成的, EBU 燃烧模型不能体现分子输运与化学动力学之间的关系, 当计算区域温度不高、湍流湍动程度不强烈时, 就有可能得不到好的模拟结果, 而 FM 燃烧模型把湍流区域看成是无数的大小不同的涡团, 在耗散尺度涡团里有化学反应发生, 并且化学反应动力学由 Arrhenius 方程控制。

图 4-34 给出 Steckler 燃烧室门处实验数据^[2]、EBU、文献中 EBU^[63]、FM、涡耗散概念 EDC^[63]、概率密度函数 PrePDF^[63]、体积热源 VHS^[63] 五种燃烧模型模拟得出的温度分布, 在小于 0.6m 的区域五种模型的模拟结果之间差别不大。在大于 0.6m 的区域开始有烟气从门口溢出。烟气随温度的增加密度变小, 烟气聚集在屋顶部位, 随高度的增加, 温度逐渐增加出现分层, 在顶棚附近区域, 温度分层现象消失。EDC 燃烧模型和 FM 燃烧模型的模拟温度分布情况大致趋势与实验数据一致, 而概率密度函数 PrePDF、体积热源 VHS 两种燃烧模型模拟得出的结果在大约 0.8m 和 1.3m 区域与实验值有些偏差。EBU 燃烧模型模拟的数据在大于 0.6m 区域温度分布偏离实验数据比较远。从模拟的结果来看, FM 燃烧模型和 EDC 燃烧模型的模拟数据和实验数据相差不大。FM 燃烧模型预测最高温度点的能力与 EDC 燃烧模型的能力相当, 远比文献中的 PrePDF、VHS 等其它燃烧模型优越。

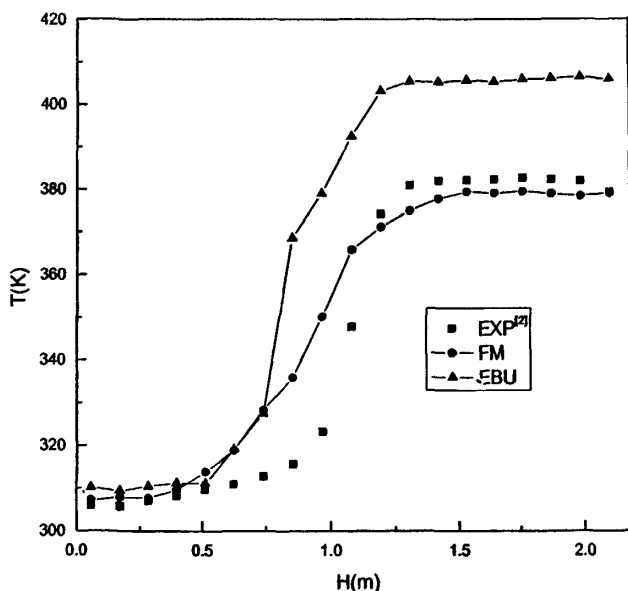


图 4-33 Steckler 燃烧室角落处的温度分布

Fig.4-33 The corner temperature distribution of the Steckler's room fire case.

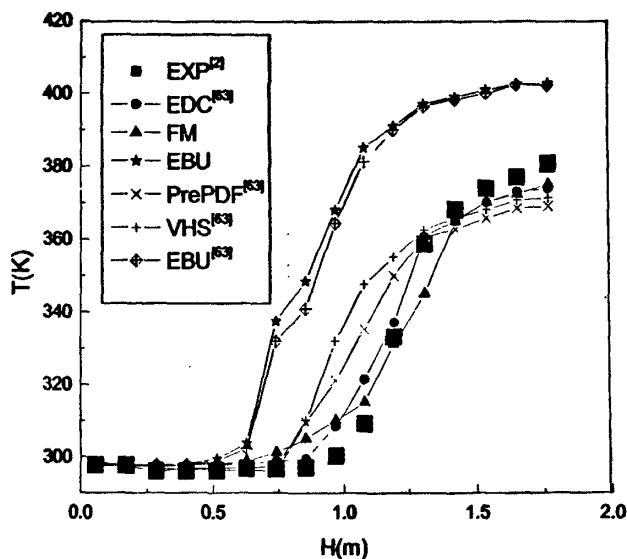


图 4-34 Steckler 燃烧室门处的温度分布(其他各模型结果取自文献^[63])

Fig.4-34 The doorway temperature distribution of the Steckler's room fire case (Results of other models from references^[63])

图 4-35 给出给出 Steckler 燃烧室门处实验数据^[2]、EBU、文献中 EBU^[63]、FM、涡耗散概念 EDC^[63]、概率密度函数 PrePDF^[63]、体积热源 VHS^[63] 五种燃烧模型模拟得出的速度场的分布,从图 4-35 可以看出,PrePDF 燃烧模型模拟时中性面位置在 0.7m, VHS 和 EBU 燃烧模型模拟时中性面位置在 0.6m, EDC 燃烧模型模拟时中性面位置在 1.0m, FM 燃烧模型模拟时中性面位置在 1.1m, 而 Steckler 燃烧室实验得到中性面位置在 1.0m。五种燃烧模型模拟得到的中性面位置与实验得到的中性面位置比较, EDC 和 FM 两种燃烧模型模拟得到的中性面位置更接近与实验值。在大于 0.7m 的区域, EBU、PrePDF、VHS 三种燃烧模型的模拟能力大致一样, 速度上升的趋势基本一样, 偏离实验值比较远。大约在 0.6m 处, EDC 和 FM 燃烧模型模拟得出的温度、速度都发生转折, 这点与实验结果符合比较好。图 4-36 给出给出 Steckler 燃烧房间门处实验数据^[2]、EBU、FM、涡耗散概念 EDC^[63] 三种燃烧模型模拟得出的温度场的分布, 在大约 0.7m 到 1.3m 之间区域, EDC 燃烧模型比 FM 燃烧模型的模拟结果更好些。在 1.3m 以上区域, 两种燃烧模型模拟的结果与实验数据吻合比较好。

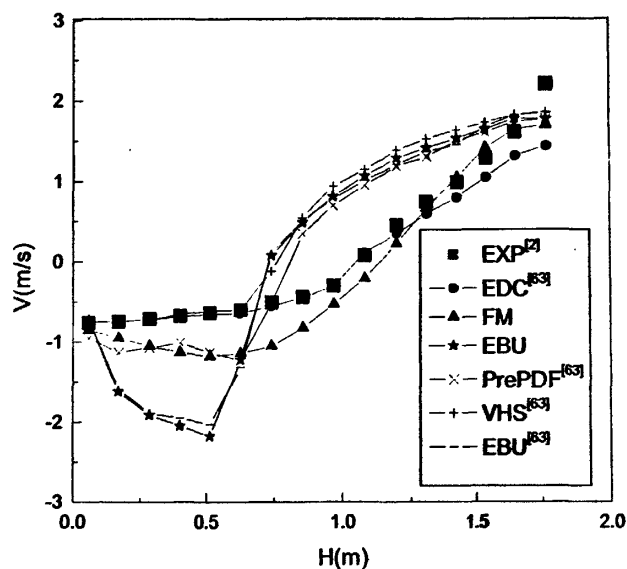


图 4-35 Steckler 燃烧室门处的速度分布 (其他各模型结果取自文献^[63])

Fig.4-35 The doorway velocity distribution of the Steckler's room fire case (Results of other models from reference^[63])

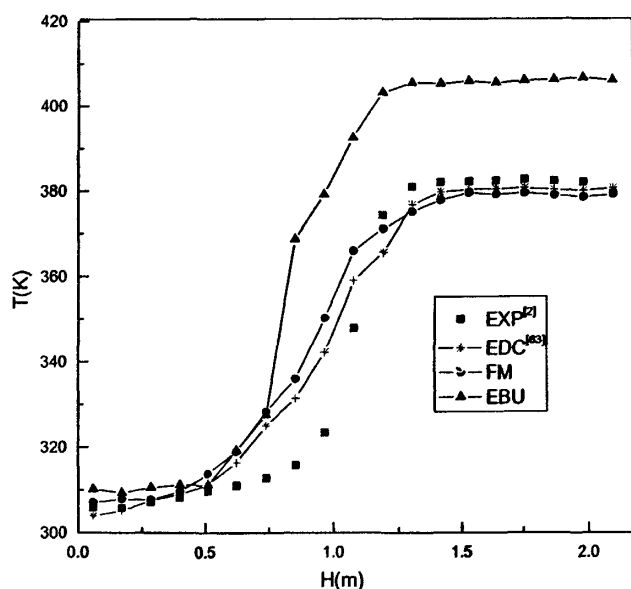


图 4-36 Steckler 燃烧室角落处的温度分布 (EDC 模型结果取自文献^[63])

Fig.4-36 The corner temperature distribution of the Steckler's room fire case (EDC model from reference^[63])

第五章 结论

本文为了更好地应用湍流燃烧化学反应的分形模拟模型 FM，将其加入 CFX 软件中，对 CFX 软件进行二次开发。首先对大空间建筑地下通道进行模拟，探讨了烟气的运动规律，对 CFX 软件的网格设置、松弛因子的调整、模型参数设置等积累了经验。其次，针对燃烧罐内燃烧的模拟定性验证 FM 燃烧模型。最后，利用国际上公认的室内燃烧的实验数据定量验证了 FM 燃烧模型，并对多种燃烧模型进行比较分析。

针对燃烧化学反应及液相法制造纳米材料的过程建立了湍流化学反应的分形模拟模型 FM。本文作为第一步，主要针对所建立的 FM 湍流化学燃模型，对燃烧罐内燃烧和某一房间燃烧进行模拟，对湍流模型、方程的离散格式、设置源项、边界条件及确定各方程的松弛因子时的反复尝试，获得满意的计算结果，使得 FM 燃烧模型得到验证。论文有关的结论如下：

(1) 基于涡串唯象概念和分形理论，建立了能较好地表达小尺度湍流物理特性的湍流化学反应模型，克服了现有一些燃烧模型表达式复杂、计算量大、应用局限性强的缺点。从网格特征尺度分裂到耗散尺度的“微细结构”体积分数 γ^* 是 FM 模型的核心，也是组分、能量方程中源项的关键。

(2) 湍流模型应用浮力修正的 $\kappa-\epsilon$ 双方程湍流模型而燃烧模型在分形理论基础上建立 FM 湍流化学反应的分形模拟模型进行模拟，是一种新的湍流模型和燃烧模型的组合方式。

(3) 通过对燃烧罐和房间燃烧工况的模拟可以看出，FM 湍流化学反应的分形模拟模型与 EBU 燃烧模型在燃烧罐中的模拟结果定性上分析差别不大，但在房间燃烧模拟中，FM 湍流化学反应的分形模拟模型要比 EBU 燃烧模型的模拟结果准确。这表明 FM 湍流化学反应的分形模拟模型应用范围要比 EBU 燃烧模型应用范围要广。FM 燃烧模型是一种很有发展潜力的模拟方法。

(4) 对 EBU、FM、EDC、PrePDF、VHS 五种燃烧模型的模拟分析表明 FM 湍流化学反应的分形模拟模型与 EDC 燃烧模型的计算结果与实验数据吻合的较好，FM 模型的物理描述要更为精细，能够更好地刻画湍流与化学反应的相互作用，是一种很有前途的湍流化学反应模型。

(5) 本文对 FM 燃烧模型的研究为其在以后的研究打下基础。FM 化学反应模型特点就是体现分形、多尺度性，体现湍流混乱、无序的特点。这种方法可以在很多领域得到研究，液相法制造纳米材料的研究，反应釜化学反应流体的研究等。

(6) 后期工作：综合考虑采用图像解析流速测量 PIV、PLIF 方法获得湍流化学反应的多尺度特征与涡团的结构特征，为进一步的应用提供理论和观测基础。

参考文献

- [1] F.A.威廉斯. 燃烧理论[M]. 北京: 科学出版社, 1976
- [2] Steckler KD, Quintiere JG, Rinkinen WJ. Flow induced by fire in a compartment[M]. National Bureau of Standards, Centre for Fire Research, NBSIR 82-2520, 1982
- [3] 范维澄, 陈义良, 洪茂玲. 计算燃烧学[M]. 安徽: 安徽科学技术出版社, 1985, 106-110
- [4] Libby P A, Williams F A. Fundamental aspects and review[M]. In: Libby P A, Williams F A, ed. Turbulent Reacting Flows. Academic Press, 1993. 1-62
- [5] Givi P. Model free simulations of turbulent reactive flows[J]. Progress in Energy and Combustion Science, 1989, 15: 1-107
- [6] Pope S B. Computation of turbulent combustion: progress and challenges[C]. In: 23rd Symposium (Int) on Combustion, 1990. 591-612
- [7] Jaber F A, James S. A dynamic similarity model for large eddy simulation of turbulent combustion[J]. Physics of Fluids, 1998, 10(7): 1175-1177
- [8] Colucci P J, Jaber F A, Givi P. Filtered density function for large eddy simulation of turbulent reacting flows[J]. Physics of Fluids, 1998, 10(2): 499-515
- [9] Dopazo C. Recent developments in PDF methods[M]. In: Libby P A, Williams F A, ed. Turbulent Reacting Flows Academic Press, 1993. 375-474
- [10] Pope S B. New developments in PDF modeling of non-reactive and reactive turbulent flows[J]. In: Proceedings of the Second International Symposium on Turbulent, Heat and Mass Transfer, Delft, The Netherlands, June, 1997. 35-45
- [11] Klimenko A Yu. Multi-component diffusion of various admixtures in turbulent flow[J]. Fluid Dyn, 1990, 25: 327-343
- [12] Bilger R W. Conditional moment closure for turbulent reacting flow[J]. Phys Fluids, 1993, A5(2): 436-473
- [13] Klimenko A Yu, Bilger R W. Conditional Moment Closure for Turbulent Combustion [M]. To be published in Progress in Energy and Combustion Science, 1999
- [14] Kronenburg A, Bilger R W, Kent J. H. Second-order conditional moment closure for turbulent jet diffusion flames[C]. In: 27th Symposium (International) on Combustion, 1998
- [15] Swaminathan N, Bilger R W. Assessment of combustion sub-models for turbulent non-premixed hydrocarbon flames[J]. Combustion and Flame, 1998, 116(4): 519-545
- [16] Swaminathan N, Dally B B. Cross stream dependence of conditional average in elliptic region, of flows behind a bluff body[J]. Physics of Fluids, 1998, 10(9): 2424-2426
- [17] Bray K N C, Peters N. Laminar flamelets in turbulent flames[J]. In: Libby P A, Williams F A, ed. Turbulent Reacting Flows. Academic Press, 1993. 63-114
- [18] Peters N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion[J]. Progress in Energy and Combustion Science. 1984. 10: 319-339
- [19] Spalding D B. Mathematical models of turbulent flames; a review[J]. Combustion Science and Technology, 1976, 13:3-25
- [20] Lockwood F C, Naguib A S. The prediction of the fluctuation in the properties of free,

- round-jet, turbulent diffusion flame[J]. *Combustion and Flame*, 1975, 24: 109-124
- [21] Richardson J M, Howard H C, Smith R W. The relation between sampling-tube measurements and concentration fluctuations in a turbulent gas jet[C]. In: 4th Symposium (Int) on Combustion, 1952. 814-817
- [22] Jones W P, Whitelaw J I. Calculation methods for reacting turbulent flows: a review[J]. *Combustion and Flame*, 1982, 48: 1-26
- [23] Chen Ching-Shun, Chang Keh-Chin, Chen Jyh-Yuan. Application of a robust β -PDF treatment to analysis of thermal NO formation in non-premixed hydrogen-air flame[J]. *Combustion and Flame*, 1994, 98: 37-390
- [24] Zhou L X, Zhang H Q, Lin W Y. A multi-B-PDF model of turbulent combustion[C]. In: Proc of the First Asian-Pacific Conference on Combustion, Osaka, Japan, 1997. 194-197
- [25] Bray K N C, Libby P A. Recent developments in the BML model of premixed turbulent combustion [J]. In: Libby P A, Williams F A, ed. *Turbulent Reacting Flows*. Academic Press, 1993, 115-152
- [26] Bray K N C, Moss J B. A Unified statistical model of the premixed turbulent flame[J]. *Acta Astronautica*, 1977, 4: 291-319
- [27] Bray K N C, Libby P A, Masuya G, Moss J B. Turbulent prediction in premixed turbulent flames [J]. *Combustion Science and Technology*, 1981, 25:127-140
- [28] Bray K N C, Libby P A, Moss J B. Unified modeling approach for premixed turbulent combustion [J]. Part I: general formulation. *Combustion and Flame*, 1985, 61: 87-102
- [29] Bray K N C, Libby P A. Passage times and flamelet crossing frequencies in premixed turbulent combustion[J]. *Combustion Science and Technology*, 1986, 47: 253-274
- [30] Maly R R; Bray K N C, Chew T C. An integral time scale of evolution for non-stationary turbulent premixed flames[J]. *Combustion Science and Technology*, 1989, 66: 139-147
- [31] Pratt D T. Mixing and chemical reaction in continuous combustion[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1976, 1: 73-86
- [32] Khalil E E. On the prediction of reaction rates in turbulent premixed confined flames[J]. *AIAA Paper*, 80-0015, 1980
- [33] Liao C, Liu Z, Liu C. Implicit Multigrid Method for Modeling Turbulent Diffusion Flames with Detailed Chemistry[C]. UCD.CCM, Rep No 16, 1994
- [34] 周力行. 湍流燃烧的新二阶矩模型[J]. *工程热物理学报*, 1996, 17(3): 353-356
- [35] Chen X L, Zhou L X, Zhang J. A new second-order moment model for simulating methane-air turbulent combustion[C], To be present at the Second Asian-Pacific Conference on Combustion, Tainan, Taiwan, China
- [36] Spalding D B. Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames[C]. In: 13th Symposium (Int) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1971: 649-657
- [37] Magnussen B F, Hjertager B H. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion[C]. In: 16th Symposium (International) on Combustion, 1976: 719-729
- [38] Jones W. P., Launder B. E.. The calculation of low-Reynolds-number phenomena with a two-equation model of turbulence [J]. *Transfer*, 1973, 16:1119-1130
- [39] 张顺利, 郑洪涛, 穆勇. EDC 模型在三维燃烧流场数值模拟的应用[J]. *应用科技*, 2005, 32 (4): 48-50

- [40] 张俊霞. 化学动力学机理耦合 EDC 燃烧模型对湍流扩散火焰的数值模拟[J]. 工业炉. 2007, 29 (1): 41-47
- [41] Spalding D B. A General theory of turbulent combustion[C]. AIAA Paper 77-141, AIAA 15th Aerospace Meeting, Los Angeles, January, 1977
- [42] Spalding D B. The influence of laminar transport and chemical kinetics on the time-mean reaction rate in a turbulent flow[C]. In: 17th Symposium (Int) on Combustion, 1978. 431-440
- [43] Givi P. Spectral and random vortex methods[M]. In: Libby P A, Williams F A. Turbulent reacting Flows. San Diego: Academic Press, 1993: 475-572
- [44] Chorin A J, Ghoniem A F, Oppenheim A K. Numerical modeling of turbulent flow in premixed combustion[C]. In: 18th Symposium (Int) on Combustion, 1981
- [45] 许成岗. 离散涡法及其在湍流反应流和二相流中的应用[D]. 西安: 西安工业大学
- [46] 杨展如. 分形物理学[M]. 上海: 上海科技教育出版社, 1996
- [47] 刘代俊. 分形理论在化学工程中的应用[M]. 化学工业出版社, 2006
- [48] Giacomazzi E, Bruno C and Favini B 2000 Fractal modelling of turbulent combustion[J] Combust.Theory Modelling 4391-412
- [49] 陶文铨. 数值传热学[M]. 西安: 西安交通大学, 2001
- [50] Patankar S. V.著, 张政译. 传热与流体流动的数值计算[M]. 北京: 科学出版社. 1989
- [51] 张廷芳. 计算流体力学[M]. 大连: 大连理工大学出版社, 1981
- [52] Giacomazzi E, Bruno C and Favini B 1999 Fractal modelling of turbulent mixing[J] Combust. Theory Modelling 3637-55
- [53] 辛厚文. 分形理论及其应用[M]. 中国科学技术大学出版社, 1993
- [54] Falconer K 1997 Fractal Geometry, Mathematical Foundations and Applications[M]. New York: Wiley
- [55] Sreenivasan K R and Meneveau C 1986 The fractal facets of turbulence[J]. Fluid Mech.173 357-86
- [56] Magnussen B F 1989 The eddy dissipation concept for turbulent combustion modelling[C]. Its physical and practical implications Report N-7034 Division of Thermodynamics, Norwegian Institute of Technology, Trondheim, Norway
- [57] 蒋勇, 邱榕, 等. 基于一维全尺度湍流模型的氢气射流扩散火焰结构数值模拟[J]. 燃烧科学与技术, 2006, 12 (5): 401-407
- [58] Jaber F A, James S.A dynamic similarity model for large eddy simulation of turbulent combustion[J]. Physics of Fluids, 1998, 10(7):1175-1177.
- [59] 臧雅如. 化学反应动力学[M]. 南京: 南开大学出版社, 1994
- [60] 成剑林, 邹声华. 地铁燃烧模拟研究[J]. 安全与环境工程, 2006, 13(1):96-99
- [61] 李兆文. 地铁通道燃烧烟气扩散及控制的研究[D]. 南京: 南京工业大学研究生学位论文. 2005
- [62] 王春. 地铁房通道通风与燃烧三维数值模拟研究[D]. 西南交通大学博士研究生学位论文. 2005
- [63] Xue H, Ho J C, C. Y M. Comparison of different combustion models in enclosure fire simulation [J]. Fire Safety Journal, 2001, 36:37-54

致 谢

本文是在导师张建文教授的悉心指导下完成的，从论文的选题、资料的收集到研究方法的确定及论文的定稿，无不渗透着恩师的心血。张老师在科学上高瞻远瞩的见解和开拓创新的精神给我留下了深刻的印象，他严谨的治学态度和活跃的科学思想让我受益匪浅。在生活中张老师待人宽厚热情，对学生无微不至的关怀，让我终生难忘，永远是学生做人的楷模，在此论文完成之际，谨向张老师表示我深深的敬意和由衷的感谢。

感谢实验室谢灼利老师为论文的完成提供了许多的建议和帮助。在此表示衷心的感谢。

感谢实验室安宇同学，在整个研究期间给予了很多生活和学习上的帮助，在此表示感谢。

感谢我的老师、同学、亲人、朋友以及所有关心我、支持我和帮助我的人。

研究成果及发表的学术论文

发表及已接受的论文

1. 张建文, 王艳飞. 湍流化学反应的分形数值模拟. 火炸药学报. (已接收)
2. ZHANG Jianwen, WANG Yanfei. 3-dimensional CFD simulation and analysis with different combustion models. *International Symposium on Test and Measurement. August, 2007, Beijing (To appear)*

作者和导师介绍

作者: 王艳飞, 女, 生于 1980 年 10 月 28 日, 汉族, 出生地: 内蒙古。2000 年 9 月~2004 年 6 月, 就读于北京化工大学化学工艺专业。学士学位论文题目为“聚氨酯弹性体材料的改性研究与应用”, 2004 年 6 月获得工学学士学位。2004 年 9 月至今, 就读于北京化工大学化学工艺专业, 研究方向为化学工程, 硕士学位论文题目为“湍流化学反应的分形数值模拟”。

联系方式: wangyanfei2000@eyou.com

导师: 张建文, 男, 生于 1969 年 11 月 05 日, 汉族, 出生地: 山西。工学博士, 教授。1988 年 9 月-1992 年 7 月在北京化工大学获工学硕士学位, 1992 年 9 月-1995 年 7 月在北京化工大学获工学硕士学位, 1995 年 9 月-1998 年 12 月在北京化工大学获工学博士学位。1998 年 12 月任讲师, 2001 年 7 月晋升副教授, 2005 年 12 月任教授。2002 年 06-2003 年 01 月在澳大利亚 Monash 大学物理与工程学院访问学者, 研究方向为喷雾冷却。2003 年 02 月-2003 年 11 月 英国 University of Greenwich 火灾安全与工程研究组博士后, 研究方向为氧敏感燃烧、毒性气体的扩散与传播、人员疏散与救生。2004 年 10 月-2006 年 10 月受中组部、共青团中央派遣任西藏大学副校长。已在《Heat Transfer-Asian Research》、《Chemical Engineering Journal》、《Industrial & Engineering Chemistry Research》、《ACTA PHYSICO-CHIMICA SINICA》等国内外核心期刊发表学术论文 40 余篇。其中 SCI 收录 5 篇, EI 收录 20 篇; ISTP 收录 3 篇。2006 年 3 月, 由化学工业出版社出版学术专著《化学工业园区应急响应系统指南》1 部(参编), 2006 年 8 月获中国发明专利: 一种高效、低成本制备固体天然气的方法和装置, 专利号: ZL 2004100408587.。从 2001 年起, 先后成为《Chemical Engineering Journal》、《Chinese Journal of Chemical Engineering》、《化工学报》等 12 种国内外核心期刊审稿人,《西藏大学学报》副主编(2004-2006)。美国化学工程师学会(AIChE)会员, 美国化学会环境科学部会员, 交通部中国海上搜救中心搜救咨询专家, 中国航海学会船舶防污染专业委员会委员; 通用计算流体力学软件 CFX 公司(中国)技术顾问。先后承担国家、省部级及国际合作项目 5 项。

联系方式: zhangjw@mail.buct.edu.cn