

文章编号: 1000-6893(1999)05-0385-04

# 时间发展可压化学反应混合层直接数值模拟

王 强, 傅德薰, 马延文

(中国科学院力学研究所 非线性连续介质力学开放研究实验室, 北京 100080)

## DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF TEMPORALLY DEVELOPING MIXING LAYER WITH CHEMICAL REACTION

WANG Qiang, FU De-xun, MA Yan-wen

(LNM, Institute of Mechanics, Academia Sinica, Beijing 100080, China)

**摘要:** 基于一个简化的单步不可逆燃烧动力学模型, 对时间发展二维可压化学反应平面混合流场, 实现了高精度迎风紧致有限差分直接数值模拟。研究了化学反应放热与流体混合运动间的耦合作用, 分析了前者对可压混合层厚度、拟序结构及产物生成率等方面的影响。

**关键词:** 混合层; 有限差分; 数值模拟

**中图分类号:** V211.3 **文献标识码:** A

**Abstract** A direct numerical simulation of two-dimensional temporally developing compressible mixing layer with chemical reaction has been presented. A high-order upwind compact scheme developed by the second and the third authors is implemented. The chemistry dynamics is introduced with a simplified global, single-step, irreversible combustion model. The interaction of heat release and fluid dynamics is studied. The effects of the latter on the mixing growth, the coherent structure and the rate of product formed in the mixing layer are analyzed.

**Key words:** mixing layer; finite difference; simulation

可压化学反应混合流动研究一直为人们所关注<sup>[1]</sup>。紧致差分格式在可压混合层直接数值模拟中已被广为采用。Fu 和 Ma 近年提出了计及流场中波的传播特性的 5 阶迎风紧致差分格式<sup>[2]</sup>。本文将该算法用于化学反应流动。

### 1 数值模型

#### 1.1 控制方程

对于可压化学反应混合流动, Cartesian 坐标系下, 无量纲守恒型控制方程的张量形式为

$$\frac{\partial}{\partial t} = - \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \quad (1a)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = - \frac{\partial (\rho u_i u_i + p \delta_{ii})}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \quad (1b)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} = - \frac{\partial (\rho E + p) u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial (u_i \tau_{ij} - q_j)}{\partial x_i} + D a_1 \beta v^\circ \quad (1c)$$

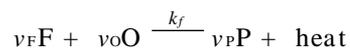
$$\frac{\partial f_\delta}{\partial t} = - \frac{\partial f_\delta u_i}{\partial x_i} + \frac{1}{P e} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \mu \frac{\partial f_\delta}{\partial x_j} \right) - D a w^\circ \quad (1d)$$

其中: 方程(1d)省去了组元扩散过程中伴随的热

扩散和压力扩散影响; 符号  $\rho$ ,  $p$ ,  $E$ ,  $\mu$  和  $f_\delta$  分别为混合气体的密度、压力、单位质量总能、分子粘性系数和组元的质量分数;  $\tau_{ij}$  是粘性应力张量;  $q_j$  是热通量; Reynolds 数  $Re = \rho^* U_1^* \delta_{w0}^* / \mu_1^*$ ,  $\delta_{w0}^*$  是初始速度剖面涡量厚度; Schmidt 数  $Sc = \mu^* / (\rho^* D^*)$ ,  $D^*$  是组元扩散系数; Peclet 数  $Pe = Re \cdot Sc$ ; 第一 Damkohler 数  $Da_1 = \delta_{w0}^* \rho_1^* k_f^* / U_1^*$ ,  $k_f^*$  是正反应率常数; 放热参数  $\beta = \Delta H_f^* / U_1^{*2}$ ,  $\Delta H_f^*$  是反应热。以上关系式中下标 1 表示氧化物量; 上标 \* 表示有量纲值。混合气体状态方程满足 Dalton 分压定律, 分子粘性系数由 Sutherland 公式给出。

#### 1.2 化学动力学模型

考虑由燃料(F)和氧化物(O)直接生成产物(P)的整体双元单步不可逆化学反应过程



其中:  $v_F$ ,  $v_O$ ,  $v_P$  是化学计量系数, 本文均取作 1。进一步认为反应生成率不受温度的影响<sup>[3]</sup>, 只是反应物浓度的函数, 于是由质量作用原理, 得反应生成率源项无量纲形式

收稿日期: 1998-05-05; 修订日期: 1998-07-03  
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(NNSFC-1939100)



$$w^{\circ} = \rho_F \rho_O$$

这里:  $\rho_F$ ,  $\rho_O$  分别是燃料和氧化物的质量浓度, 它们对应文献[3]低速反应流计算中的摩尔浓度。

### 1.3 差分格式

以  $x$  方向为例, 记  $f$  为控制方程组(1)中  $x$  方向的对流通量, 其 Jacobian 矩阵  $A$  的特征值为  $\lambda$ , 则  $f$  有 Steger-Warming 矢量通量特征分裂形式

$$f = f^+ + f^-, f^{\pm} = A^{\pm} U$$

其中:  $U$  是变元通量, 特征矩阵  $A^{\pm}$  的特征值为  $\lambda^{\pm}$ 。由文献[2],  $f$  的一阶导数  $f'$  的 5 阶迎风紧致格式为

$$f'^{\pm}: \frac{3}{2} f'_{i+1} + f'_{i-1} = \frac{1}{24 \Delta x} (\mp f_{i \pm 2} \pm 12 f_{i \pm 1} \pm 36 f_i \mp 44 f_{i-1} \mp 3 f_{i-2}) \quad (2)$$

同样, 记  $g$  为式(1)中  $x$  方向输运通量, 由文献[4],  $g$  的一阶导数  $g'$  的 6 阶对称紧致 Collatz 差分格式为

$$\frac{1}{3} g'_{i+1} + g'_i + \frac{1}{3} g'_{i-1} = \frac{1}{36 \Delta x} (g_{i+2} + 28 g_{i+1} - 2 g_i - 28 g_{i-1} + g_{i-2}) \quad (3)$$

其中:  $g$  包含的一阶导数项也由类似于式(3)的格式离散计算。式(2)、式(3)各自独立地构成一个关于一阶导数变量的带状线性方程组, 易于求解。  $y$  方向对流通量和输运通量的计算与式(2)、式(3)相似。

方程组(1)的空间半离散形式沿时间方向以 Wray<sup>[5]</sup> 给出的三步三阶紧致存储显式 Runge-Kutta 算法推进求解。计算是在每个方向一维坐标变换后的曲线坐标系下进行的。可以证明, 只要坐标变换是单调上升的, 则变换前后对流通量的迎风性质不变, 且彼此数值上仅差一个网格变换导数。

### 1.4 定解条件

本文研究二维时间发展模式化学反应混合流动。取上下流质分别为纯的等比热比非预混氧化物和燃料, 二者来流压力和来流温度相同, 来流速度大小相等而方向相反。初始平均场的压力相同。平均流向速度呈双曲正切分布。平均温度分布由 Busemann-Crocco 能量积分关系式确定。由文献[3], 初始产物质量分数取 0, 反应物质量分数设作正规误差函数分布。初始扰动场由文献[6]二维可压粘性线性稳定性分析得到的给定对流 Mach 数  $Mc$  和  $Re$  下最不扰动模态的流向波

数和特征函数确定。特征函数以流向速度特征函数归一化。特别地, 对初始反应物浓度不加扰动。

## 2 计算结果及分析

时间发展可压化学反应混合流场是一个典型的扩散火焰混合燃烧问题。这里主要讨论化学反应放热的影响。取  $Mc = 0.6$ , 它略大于二维情况下混合层表现强压缩性的分界 Mach 数 ( $Mc = 0.5$ ), 而且该 Mach 数下混合层主导扰动由二维向三维转化。以  $Da = 5$  近似有限速率化学反应, 该 Damkohler 数下, 问题具有较弱的化学反应源项刚性, 适于显式求解。放热参数  $\beta$  取不同值以区别不同的化学反应放热量。其余参数维持不变, 且  $Re = 400$ ,  $Pr = 0.75$ ,  $Sc = 1$ ,  $Pe = 400$ 。

### 2.1 混合层结构等值线

本计算不形成涡的对并和小尺度生成, 仅分析至涡的卷起阶段。以下考虑  $t = 20$  时刻, 不计算例之间时间历程差异。图 1 是无放热 ( $\beta = 0$ ) 和

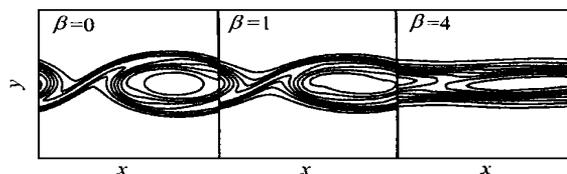


图 1 展向涡量等值线

不同放热量 ( $\beta = 1, 4$ ) 计算所得等涡量线对比。可以看出, 初始扰动引起的混合层 Kelvin-Helmholtz 不稳定增长放大而形成大尺度涡的卷起结构。受放热效应作用, 随  $\beta$  增大, 涡的卷起滞后且涡层变薄, 涡心被拉长, 从而混合层的质量卷吸能力减弱, 当放热量足够大时 ( $\beta = 4$ ), 强应变率使辫子区消失, 涡卷已不明显。该趋势类似于文献[7]所分析的高对流 Mach 数下压缩性与放热效应间的耦合作用, 混合层将不再以大尺度结构从上下两侧卷吸流质完成氧化物和燃料的混合, 代之以氧化物和燃料先分别同产物混合再扩散至另一方的两步过程, 混合效率及产物生成浓度随之降低。数据分析显示, 混合层中涡量的最大值也随  $\beta$  的增大而减小, 因计算初始涡量场均相同, 故该现象同放热量直接相关。此外, 因所取化学反应生成率不依赖于温度, 且设组元分子量和扩散系数相同, 则当  $\beta = 0$  时, 流动混合特性不受化学反应的影响, 其大尺度涡结构和无反应冻结混合层相同。图 2 是上层氧化物质量分数  $f_O$  等值线对比, 从中同样可以看出涡卷及其

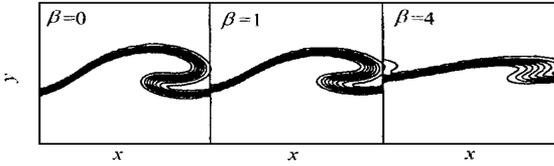


图 2 氧化物质量分数等值线

尺度所受的放热抑制作用。如果选定一条等值线近似氧化物和燃料的接触火焰面, 则随  $\beta$  增大, 该火焰面的面积变小, 导致产物总生成率下降, 该结论同文献[3]的计算和相应实验定性一致。图中等值线的密集程度反映了氧化物质量分数的变化梯度, 放热量较小时, 氧化物和燃料的一步与两步混合反应过程程度间无显著差别, 当  $\beta=4$  时, 氧化物几乎未受扰动地扩散至反应层而受两步混合反应主控。图 3 是产物摩尔分数等值线, 与图 1 对应, 放热缩小了生成产物范围, 其中粗线表示产物摩尔分数大于 0.5 的范围, 该范围也随  $\beta$  的增大而减小, 最后离开辫子区, 缩至涡心。另外, 数据分析发现相应产物摩尔分数最大值也随之减小。与图 2 一致, 这同样表明放热减小了产物总生成率, 且化学反应逐渐以类似于辫子区中由薄产物层分隔的两步扩散反应过程为主, 表现为那里的化学反应产物生成率最高。

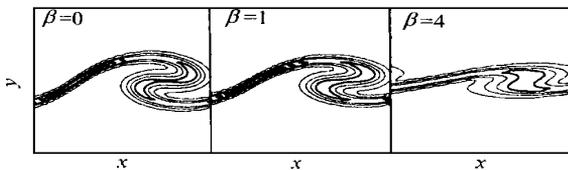


图 3 产物摩尔分数等值线

### 2.2 混合层平均特性

混合层平均特性沿  $x$  方向得到, 其中平均流向速度  $\bar{u}$  采用 Favre 加权平均。以  $y$  方向上下层  $\bar{u}$  达到自由流值所处的位置差表示混合层厚度  $\delta_r$ , 图 4 是  $\delta_r$  随时间  $t$  的变化曲线。与图 1 的分析一致, 在混合层后期发展阶段, 放热抑制了涡卷的形成, 放热  $\delta_r$  值明显低于无放热结果, 而且对于无约束混合层, 放热引起的  $\delta_r$  下降使得对应  $\bar{u}$  梯度变大, 无明显拐点。在混合层早期发展阶段, 即 Kelvin-Helmholtz 不稳定形成期, 混合层尚未形成较强的涡量场, 热膨胀作用占主导, 故此时放热  $\delta_r$  值较高。下面依然考虑  $t=20$  时刻。图 5 表明化学反应放热使混合层平均温度上升, 而且同无放热计算相比, 其上升区域趋于减小, 即以  $\bar{T}$  表征的混合层厚度也与  $\bar{u}$  类似, 随  $\beta$

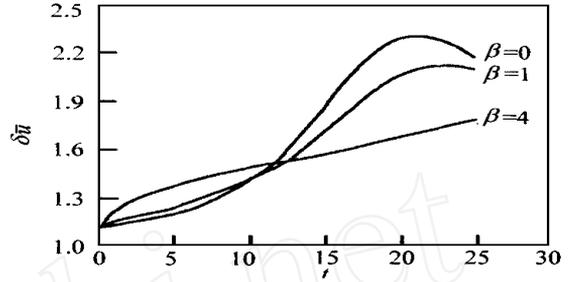


图 4 混合层平均速度厚度变化

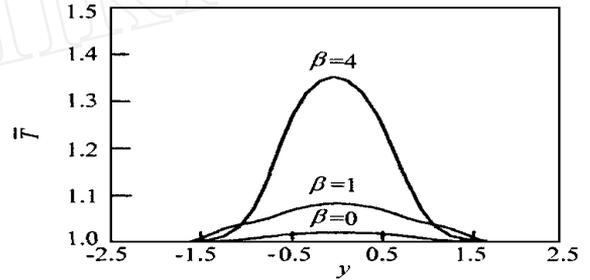


图 5 平均温度

增大而明显减小。文献[3]的低 Mach 数近似不可压计算则显示这种减小并不突出, 显然此差异源于二者压缩性的不同。涡强度随  $\beta$  的增大而减小还可由平均密度  $\bar{\rho}$  曲线反映出来, 表现为混合层涡卷吸能力的下降使混合层中央密度也下降。图 6 是平均化学反应生成率  $\bar{w}$  随  $y$  的变化曲线, 放热使对应曲线包络面积减小, 即如 2.1 节的分析, 总的化学反应生成率变小。此外, 图中中央和外缘的两个峰值表明涡心和辫子区的反应较强, 且后者更强, 这也是上节的分析结论。放热使化学反应生成率下降所引起的产物浓度的下降可从比较图 7 中平均产物摩尔浓度曲线的包络面积看出, 其中极值点与图 6 的极值点对应, 该对应基本上有高产物浓度对应低化学反应速率的关系,  $\beta=4$  情形因未形成高浓度辫子区(图 3)而使中心处  $\bar{C}_p$  低于外缘值。对于可压化学反应混合层, 图 8 平均分子粘性系数  $\bar{\mu}$  的曲线表明放热提高了混合层流动的粘性, 减小了其局部 Reynolds 数, 这意味着化学反应放热使可压混合层流动产

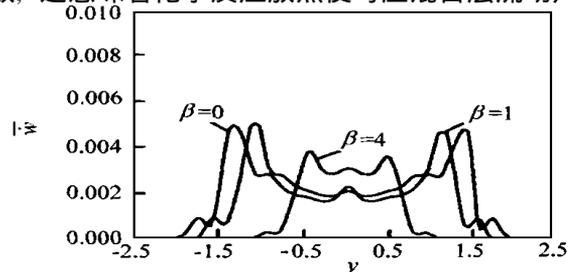


图 6 平均反应生成率

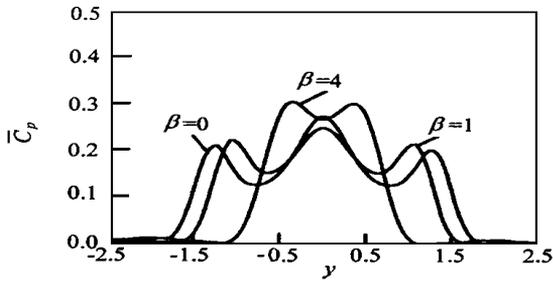


图7 平均产物摩尔浓度

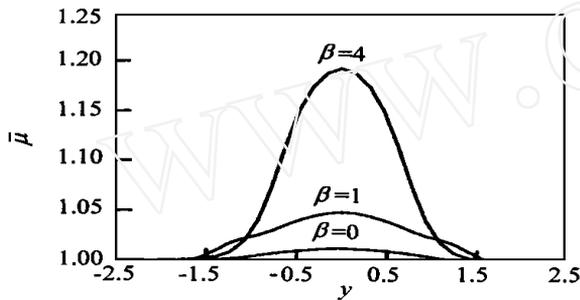


图8 平均粘性系数

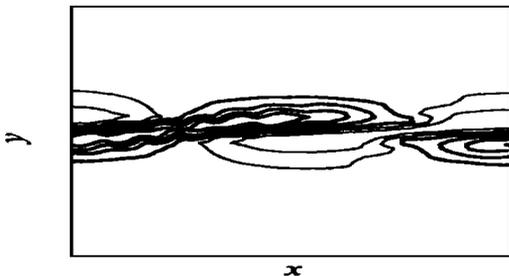
生稳定化趋势,同相应涡结构的减弱相一致。当然,同边界层流动不同,当 Reynolds 数足够大时,混合层的动力学特性并不强烈地依赖于 Reynolds 数,化学反应放热对其稳定性的影响也会相对较弱。

### 2.3 混合层涡动力特性分析

考虑二维可压涡量方程

$$\frac{D\omega}{Dt} = \{-\omega \nabla \cdot \mathbf{u}\} + \left\{ \frac{1}{\rho^2} \nabla \rho \times \nabla p \right\} + S_{vis} \quad (4)$$

其中:右端第一项是膨胀项;第二项是斜压项; $S_{vis}$ 是粘性扩散项。图9是计算所得的膨胀项等值

图9 膨胀项等值线( $\beta=4$ )

线( $\beta=4$ ),粗线代表正值,细线代表负值。可压条件下,混合层中存在的速度散度场、密度和压力梯度场是使涡量沿流线不守恒的主要因素。其中放热引起的混合层热膨胀通过式(4)的膨胀项使混合层涡量发生改变。由图9,膨胀项等值线正负相间使混合层被拉伸,这既增加了涡的拉伸面

积,降低了混合层的厚度,又因涡面环量守恒,导致混合层的涡量减小。当 $\beta=4$ 时,狭长的膨胀项等值线于涡心处完全变负,连同外缘的正膨胀项一起将涡量向外输运,表现为涡结构的丧失。另一方面,分析表明斜压项等值线近似同图9的膨胀项等值线正负性相同,从而随 $\beta$ 的增加,斜压项和膨胀项对混合层产生相同的拉伸作用。由计算数据看出,斜压项值域与膨胀项值域十分接近,因此它也是化学反应混合层一个重要的涡变化源,而且其数值和符号的变化趋势上比膨胀项更复杂。可见,化学反应放热形成的不同运动学变量散度场和热力学变量梯度场决定了可压化学反应混合层涡结构之间的差异,这种差异最终影响了混合层中燃料和氧化物的混合效率及产物生成率。

### 参 考 文 献

- [1] Vreman B, Geurts B, Kuerten H. Large-eddy simulation of the turbulent mixing layer [J]. J Fluid Mech, 1997, 339: 357~390
- [2] Fu D X, Ma Y W. A high order accurate difference scheme [J]. J Comput Phys, 1997, 134(1): 1~15
- [3] Riley J J, Metcalfe R W. Direct numerical simulations of chemically reacting turbulent mixing layers [R]. AIAA Paper 85-0321, 1985
- [4] Lele S K. Direct numerical simulation of compressible free shear flows [R]. AIAA Paper 89-0374, 1989
- [5] Wray A A. Very low storage time advancement schemes [R]. Internal Report, NASA Ames Research Center, 1986
- [6] 王强,傅德薰,马延文.可压缩平面混合层稳定性数值计算[J].计算物理,1997,16(4-5):414~416
- [7] Planche O H. A numerical investigation of the compressible reacting mixing layer [D]. Ph D thesis, Stanford University, 1992

作者简介:



王强 1990年毕业于北京大学数学系。曾从事过激波边界层干扰,战术弹大攻角绕流,三角翼非定常气动响应,以及空气动力学并行算法等方面的数值研究。发表论文10余篇。现以可压自由剪切流动稳定性及直接数值模拟为主要研究方向。通讯地址:北京7201信箱16分箱(邮编100074)。电话:

68375013, 68374679。

傅德薰 女,62岁,中国科学院力学研究所研究员,流体力学专业博士生导师。电话:010-62525300。

马延文 男,61岁,中国科学院力学研究所研究员,流体力学专业博士生导师。电话:010-62525300。