

用火焰面模型模拟甲烷 / 空气湍流射流扩散火焰¹⁾

董 刚 *,²⁾ 王海峰 † 陈义良 †

*(南京理工大学瞬态物理国家重点实验室, 南京 210094)

†(中国科学技术大学热科学和能源工程系, 合肥 230026)

摘要 以层流对撞扩散火焰为基础, 利用层流火焰面模型 (laminar flamelet model) 的方法生成层流火焰面数据库, 分别采用预先设定的几率密度函数 (propability density function, PDF) 模型和混合物分数 - 湍流频率的联合几率密度函数输运模型, 将火焰面方法应用于甲烷 / 空气湍流射流扩散火焰结构的模拟计算中。两个模型的计算结果和实验结果进行了比较和分析。

关键词 火焰面模型, 几率密度函数, 混合物分数, 标量耗散率, 湍流射流, 扩散火焰

中图分类号: TK227.1 文献标识码: A 文章编号: 0459-1879(2005)01-0073-07

引 言

湍流扩散燃烧的层流火焰面模型的基本思想是假定湍流火焰的反应区薄于湍流的最小尺度, 并将湍流扩散火焰看作是薄的移动的层流扩散火焰面的一个系统^[1]。在模型的计算中, 首先推导出相关的层流火焰面方程, 单独对它求解并存入火焰面数据库, 然后在湍流燃烧场中求出火焰面数据库中标量 (组分浓度和温度) 所依赖的参数值 (混合物分数 ξ 和标量耗散率 χ), 进而在火焰面数据库中查表就可以得到感兴趣的标量结果, 从而大大减少计算的工作量。此外, 层流火焰面方程可以精确处理化学反应过程, 因此在湍流燃烧计算中, 湍流和化学反应的相互作用可以使用几率密度函数 (PDF) 的方法进行处理。由于火焰面模型具有上述优越性, 因而得到了较为广泛的应用^[2~4]。

对于接近熄火限或存在局部熄火和未燃特性的湍流射流扩散火焰而言, 火焰面模型可以和两类不同的 PDF 模型结合: 一类是预先设定 PDF 模型; 另一类是 PDF 输运方程模型。然而, 考虑详细化学反应机理 (多组分) 的火焰面模型与这两类模型的结合使用, 以考察两种 PDF 模型优劣性的研究尚未见报道, 需要进一步研究。本文以二维轴对称甲烷 / 空气的湍流射流扩散火焰为研究对象, 在建立了层流火焰面数据库的基础上, 分别采用这两类 PDF 模型

计算在湍流射流扩散火焰条件下的参数 ξ 和 χ , 从而通过查表求得这种火焰的结构, 其中化学反应采用了详细的动力学机理。计算结果和实验结果进行了比较分析, 以考察火焰面模型和两种 PDF 方法结合使用的效果, 为今后更有效地使用火焰面模型提供理论参考。

1 数学模型

流场采用 Reynolds 平均的 N-S 方程求解, 其中动量方程中的 Reynolds 应力项使用标准的 $k-\varepsilon$ 两方程模型进行模化。标量 (组分浓度和温度) 为混合物分数及其方差 (ξ, ξ') 和条件标量耗散率 (χ_{st}) 的函数, 可通过层流扩散火焰求解这一函数关系并建立火焰面数据库, 最后在湍流射流扩散火焰的条件下采用不同 PDF 方法求解 ξ, ξ' 和 χ_{st} , 以最终得到需求解的组分浓度和温度。

1.1 火焰面数据库的生成

以层流对撞扩散火焰作为火焰面的采集对象, 在一定的火焰拉伸率下, 通过坐标变换^[4], 可将其火焰面方程由物理坐标转换为混合物分数空间的坐标。

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_i}{\partial \xi^2} + S_i \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 T}{\partial \xi^2} - \frac{1}{C_p} \sum_i h_i S_i + \frac{1}{C_p} \frac{\partial p}{\partial t} \quad (2)$$

2003-03-22 收到第 1 稿, 2004-08-04 收到修改稿。

1) 国家重点基础研究发展规划项目 (G1999022207) 和南京理工大学科研发展基金 (AB41411) 资助项目。

2) E-mail: dgvehicle@yahoo.com

其中, ρ 为密度; t 为时间; Y_i 为第 i 种组分的质量分数; p 为压力; S_i 为第 i 种组分的反应速率, 其表达式如下

$$S_i = \sum_{j=1}^J (\gamma''_{ij} - \gamma'_{ij})(k_{fj} \prod_{i=1}^I [X_i]^{\gamma'_{ij}} - k_{bj} \prod_{i=1}^I [X_i]^{\gamma''_{ij}}) \quad (3)$$

其中, $\gamma'_{ij}, \gamma''_{ij}$ 分别表示第 j 个基元反应中第 i 种物质正、逆反应计量系数; $[X_i]$ 为第 i 种物质的摩尔浓度; k_{fj}, k_{bj} 分别表示第 j 个基元反应的正、逆反应速率常数, 它们遵循 Arrhenius 形式

$$k_{fj} = A_{fj} T^{\beta_{fj}} \exp(-E_{fj}/RT) \quad (4)$$

其中, A_{fj} 表示第 j 个正反应的指前因子; β_{fj} 表示第 j 个正反应的温度指数; E_{fj} 表示第 j 个正反应的活化能. 本文使用了一个包含 19 个基元反应和 14 种组分的甲烷氧化的化学反应动力学机理^[5] 来表征火焰中的化学反应过程.

式(1), 式(2) 中 ξ 为混合分数, 其取值范围在 0~1 之间, 其中燃料的 ξ 定义为 1, 氧化剂(如空气) 定义为 0; χ 为标量耗散率, 它与混合物分数 ξ 具有如下的关系

$$\chi = f(\xi) = \frac{a_s}{\pi} \exp\{-2[\operatorname{erfc}^{-1}(2\xi)^2]\} \quad (5)$$

其中 a_s 为火焰面的拉伸率 (s^{-1}); erfc^{-1} 为补余误差函数的反函数. 在当量混合比下的条件标量耗散率 χ_{st} 与 χ 具有如下关系

$$\chi = \chi_{st} f(\xi)/f(\xi_{st}) \quad (6)$$

对于条件确定的对撞层流扩散火焰, ξ_{st} 是确定的常量, 因此条件标量耗散率 χ_{st} 可以作为一个独立参数引入火焰面方程中, 其中所有的标量都可表示为

$$\phi = \phi(\xi, \chi_{st}) \quad (7)$$

利用上述方法得到的标量随混合物分数 ξ 和条件标量耗散率 χ_{st} 的变化关系可以存入数据文件中, 生成所谓的火焰面数据库 $\phi(\xi, \chi_{st})$. 为将火焰面数据库应用于湍流射流扩散火焰中, 本文使用了两种不同的模型来求解或构造参数 ξ 和 χ_{st} , 再通过查数据库来获得该火焰结构的解.

1.2 预先设定的 PDF 模型(模型 I)

为考虑湍流与化学反应之间的相互作用, 采用统计平均的方法计算标量的平均值

$$\bar{\phi}(\xi, \chi_{st}) = \iint \phi(\xi, \chi_{st}) P(\xi, \chi_{st}) d\xi d\chi_{st} \quad (8)$$

式中 $P(\xi, \chi_{st})$ 为混合物分数和条件标量耗散率联合几率密度函数, 由于 ξ 和 χ_{st} 在统计上满足相互独立的条件, 因此 $P(\xi, \chi_{st})$ 简化为 $P_\xi(\xi)P_\chi(\chi_{st})$. 预先设定 $P_\xi(\xi)$ 符合 β 分布, $P_\chi(\chi_{st})$ 符合双 δ 分布, 通过积分式(8) 可以求解标量的平均值.

在实际求解中, 由于混合物分数 ξ 等于其平均值 $\langle \xi \rangle$ 和脉动值 ξ' 之和, 即

$$\xi = \langle \xi \rangle + \xi' \quad (9)$$

而脉动量的方差 $\langle \xi'^2 \rangle$ 为

$$\langle \xi'^2 \rangle = \langle (\xi - \langle \xi \rangle)^2 \rangle \quad (10)$$

因此标量的平均值进一步写为如下关系式

$$\phi(\xi, \chi_{st}) = \phi(\langle \xi \rangle, \langle \xi'^2 \rangle, \chi_{st}) \quad (11)$$

这样, 在模型 I 的求解中, 实际上是通过得到 $\langle \xi \rangle$, $\langle \xi'^2 \rangle$ 和 χ_{st} 的值后, 再利用式(11) 来查取火焰面数据库中的 $\phi(\xi, \chi_{st})$, 最后再利用式(8) 得到标量(组分浓度和温度) 平均值的解.

在模型 I 中, $\langle \xi \rangle$ 和 $\langle \xi'^2 \rangle$ 采用如下的输运方程求解

$$\langle \rho \rangle \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial t} + \langle \rho \rangle \tilde{u}_j \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \langle \xi \rangle}{\partial x_j} \right) \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle \frac{\partial \langle \xi'^2 \rangle}{\partial t} + \langle \rho \rangle \tilde{u}_j \frac{\partial \langle \xi'^2 \rangle}{\partial x_j} &= \\ \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \frac{\partial \langle \xi'^2 \rangle}{\partial x_j} \right) + C_g \mu_t \frac{\partial^2 \langle \xi'^2 \rangle}{\partial x_j^2} - \\ C_d \langle \rho \rangle \frac{\epsilon}{k} \langle \xi'^2 \rangle \end{aligned} \quad (13)$$

常数的取值为^[6] $\sigma_t = 0.85$, $C_g = 2.86$, $C_d = 2.0$.

由于在剪切流中, 一般假定湍流脉动时间尺度和标量时间尺度呈线性关系, 因而 χ_{st} 可如下求解得到

$$\chi_{st} = 2 \frac{\epsilon}{k} \langle \xi'^2 \rangle \quad (14)$$

1.3 PDF 输运方程模型(模型 II)

令 $\tilde{P}(\xi, \omega)$ 为标量(混合物分数)-湍流频率的联合 PDF(以下简记为 \tilde{P}), Ψ 为 σ 维相空间坐标;

x_j 为物理空间坐标; u_j 为射流的径向速度, 则 \tilde{P} 的径向输运方程形式可表达如下^[7,8]

$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle \frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + \langle \rho \rangle \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_j} = & \\ -\frac{\partial}{\partial x_j} (\langle \rho \rangle \tilde{P} \langle u_j'' |_{\Psi, \theta} \rangle) + & \\ \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left(\langle \rho \rangle \tilde{P} \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_{\alpha j}}{\partial x_j} \Big|_{\Psi, \theta} \right\rangle \right) - & \\ \langle \rho \rangle \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} (\tilde{P} S_\alpha) - \langle \rho \rangle \langle \omega \rangle^2 h \frac{\partial \tilde{P}}{\partial \theta} + & \\ \langle \rho \rangle C_x \langle \omega \rangle \sigma^2 \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} (\tilde{P} \theta) + & \\ \langle \rho \rangle \frac{\partial}{\partial \theta} \left\{ \tilde{P} \theta \langle \omega \rangle \left\{ S_\omega + C_x \left[\ln \left(\frac{\theta}{\langle \omega \rangle} \right) - M \right] \right\} \right\} & \end{aligned} \quad (15)$$

式中

$$\begin{aligned} S_\omega &= -C_{\omega 1} \frac{S_{ij}^2}{\langle \omega \rangle^2} + C_{\omega 2} \\ M &= \left\langle \frac{\omega}{\langle \omega \rangle} \ln \left(\frac{\omega}{\langle \omega \rangle} \right) \right\rangle \\ h &= \begin{cases} 0, & \mu_{1/2} > \mu_{1/2G} \\ \left(1 - \frac{\mu_{1/2}}{\mu_{1/2G}} \right), & \mu_{1/2} \leq \mu_{1/2G} \end{cases} \end{aligned}$$

其中, $\mu_{1/2} = \langle \omega^{1/2} \rangle / \langle \omega \rangle^{1/2}$, $\mu_{1/2G} = e^{-\sigma^2/8}$. 上述各式中出现的常数取值为: $C_{\omega 1} = 0.08$, $C_{\omega 2} = 0.92$, $C_x = 1.6$, $\sigma^2 = 1.0$.

式 (15) 右边第 1 项代表脉动速度引起的 PDF 在物理空间的输运, 采用梯度输运模型模化

$$\langle \rho \rangle \tilde{P} \langle u_j'' |_{\Psi} \rangle = -\Gamma_t \frac{\partial \tilde{P}}{\partial x_j} \quad (16)$$

其中 Γ_t 是湍流输运系数, $\Gamma_t = \mu_t / \sigma_\phi$, $\sigma_\phi = 0.7$.

右边第 2 项为小尺度混合项, 表征分子输运引起的 PDF 在相空间的输运, 该项的模拟比较困难, 迄今还没有很好的模型. 本文采用 IEM(interaction by exchange with the mean) 模型^[9] 进行模化, 该模型能够反映混合与化学反应之间的强烈耦合关系, 具有一定的优越性.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left(\langle \rho \rangle \tilde{P} \left\langle \frac{1}{\rho} \frac{\partial J_{\alpha j}}{\partial x_j} \Big|_{\Psi, \theta} \right\rangle \right) = & \\ \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left[\tilde{P} \left(\frac{\phi_\alpha^* - \tilde{\phi}_\alpha}{\tau_\phi} \right) \right] = \frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} [\tilde{P} \omega_\phi (\phi_\alpha^* - \tilde{\phi}_\alpha)] & \end{aligned} \quad (17)$$

式中 ϕ_α^* 为瞬时流体颗粒的标量值, $\tilde{\phi}_\alpha$ 为流场中当地标量的统计平均值, $\tau_\phi = 1/\omega_\phi$ 为标量时间尺度.

式 (15) 右边第 3 项表征了化学反应所引起标量的变化. 在本文中, 化学反应的计算结果已在火焰面数据库中生成, 因而不必求解此步. 右边其余各项表征了湍流频率的变化, 可根据湍流频率 ω 的随机微分方程求解

$$\begin{aligned} d\omega = -\omega \langle \omega \rangle dt \left\{ S_\omega + C_x \left[\ln \left(\frac{\omega}{\langle \omega \rangle} \right) - M \right] \right\} + \\ \langle \omega \rangle^2 h dt + \omega (2C_x \langle \omega \rangle \sigma^2)^{1/2} dW \end{aligned} \quad (18)$$

上式右边前两项代表湍流频率的平移项, 第 3 项代表 Weiner 过程, 其中, $dW = \delta (\Delta x / \tilde{u})^{1/2}$, δ 是一个满足正态分布的随机变量.

通过解模型 II 中的 PDF 输运方程, 可以得到混合物分数 ξ 和湍流频率 ω 的解. 由于 ω 代表了湍流脉动时间尺度, 因而标量耗散率 χ_{st} 可如下求解

$$\chi_{st} = 2\omega \langle \xi'^2 \rangle \quad (19)$$

其中平均混合物分数方差的定义见式 (10). 得到的标量耗散率和混合物分数通过查火焰面数据库求解组分浓度和温度的结果.

本文采用 Monte Carlo 方法求解 \tilde{P} 的输运方程, 具体过程可参见文献 [10].

2 计算结果与分析

计算模拟的甲烷 / 空气湍流射流扩散火焰构型包括燃烧装置中部的轴对称的燃料(甲烷)主射流, 外面紧接着环形分布的小火焰(值班火焰)和最外层的空气伴流. 其中甲烷主射流平均初始速度(轴向)为 41 m/s, $\xi = 1$ (纯燃料); 值班火焰的平均初始速度为 24 m/s, $\xi = 0.0547$ (即具有与按化学当量比配置的甲烷 / 空气燃烧的产物相同的炭氢比和氧氢比, 以保证值班火焰与主射流火焰具有相同的绝热温度); 空气伴流的初始平均速度为 15 m/s, $\xi = 0$ (纯空气). 计算比较用的实验数据取自 Sydney 大学 Masri 和 Bilger 等人建立的甲烷射流扩散火焰 L 的数据库(<http://www.mech.eng.usyd.edu.au/research/energy/readmelst.shtml>).

2.1 流场的计算结果与分析

Masri 和 Pope 认为^[11], 当射流扩散火焰 L 不吹熄时, 在下游 $x = 20d$ (d 为主射流内管直径) 附

近, 火焰发展为完全的湍流射流扩散火焰, 其中混合效应增强, 在 $x = 20 \sim 30d$ 的区域, 湍流和化学反应的相互作用最强, 是最为感兴趣的研究区域。因此本文计算的流场和后面的标量场均给出的是 $x = 20d$ 和 $30d$ 的结果。

图 1 和图 2 分别给出了平均流速和湍动能在 $x = 20d$ 和 $30d$ 位置上的径向分布。可以看出, 两种模型都能够较好地反映甲烷 / 空气湍流射流的流场特性。

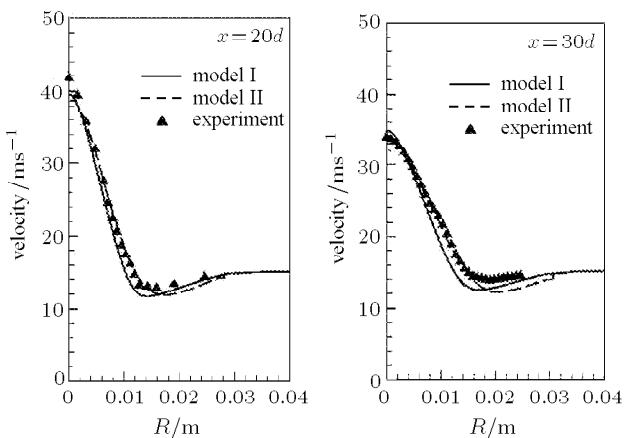


图 1 射流速度的径向分布

Fig.1 Radial distributions of jet velocity

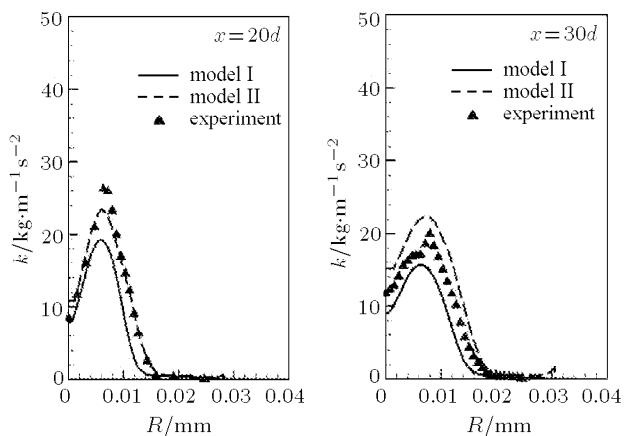


图 2 湍动能的径向分布

Fig.2 Radial distributions of turbulent kinetic energy

2.2 标量场的计算结果与分析

图 3 和图 4 给出了计算的平均混合物分数及平均混合物方差的径向分布及其与实验结果的比较。对于 $\langle \xi \rangle$, 模型 II 的结果更接近实验值, 这说明模型 II 用 PDF 输运方程的方法求解 $\langle \xi \rangle$ (式(15)) 更为合理; 而对于 $\langle \xi'^2 \rangle$, 模型 I 的结果则更接近实验值,

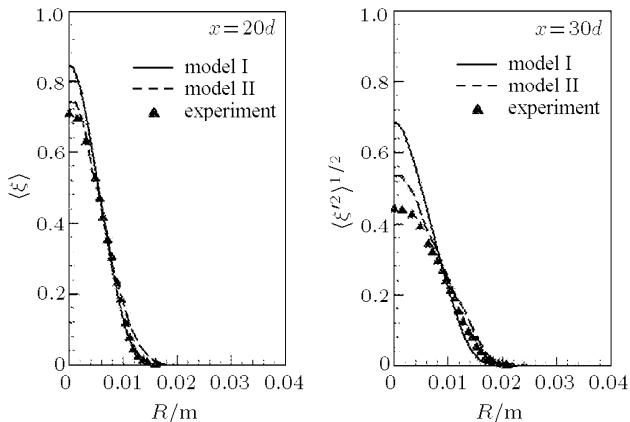


图 3 平均混合物分数的径向分布

Fig.3 Radial distributions of mean mixture fraction

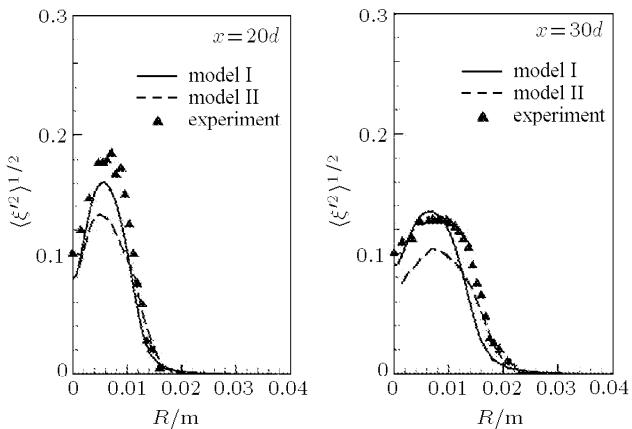


图 4 平均混合物分数方差的径向分布

Fig.4 Radial distributions of mean mixture square

由于该值主要用于求解 χ_{st} , 因此, 模型 I 用统计矩方法求解 $\langle \xi'^2 \rangle$ (式(13)) 要显得更为合理。

图 5~图 10 则分别给出了通过火焰面数据库查取的组分浓度和温度等标量的径向分布及其与实验结果的比较。对 CH_4 的浓度, 两个模型计算的结果在接近轴线的位置上都略有偏高, 但模型 II 的计算结果更接近实验值; 两个模型预测的 O_2 浓度在接近轴线的位置上都有所偏低, 即计算的 O_2 消耗偏大; 对 CO_2 的浓度, 模型 I 的预测结果和实验值吻合得较好, 而模型 II 的预测结果则明显偏大且最大值偏离轴线位置较多, 表明了模型 II 预测的 CO_2 生成量偏大; 两个模型预测的 H_2O 的浓度比实验值略有偏高, 其中模型 I 的结果更接近实验值; 对 CO 的浓度, 模型 I 的计算结果明显偏大, 而模型 II 的计算结果接近实验值; 而 H_2 的预测结果和 CO 具有相同的规律, 限于篇幅这里不再讨论。温度的计算结果再次表明, 两个模型计算的结果比实验值偏大,

其中模型 I 的结果要接近于实验值, 而模型 II 明显偏大, 且最大温度值也更偏离轴线位置.

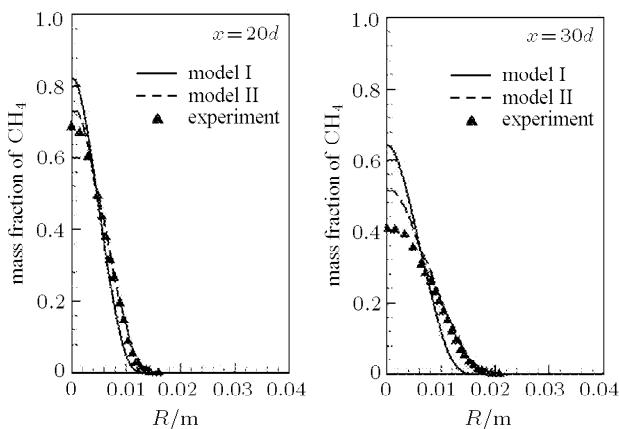
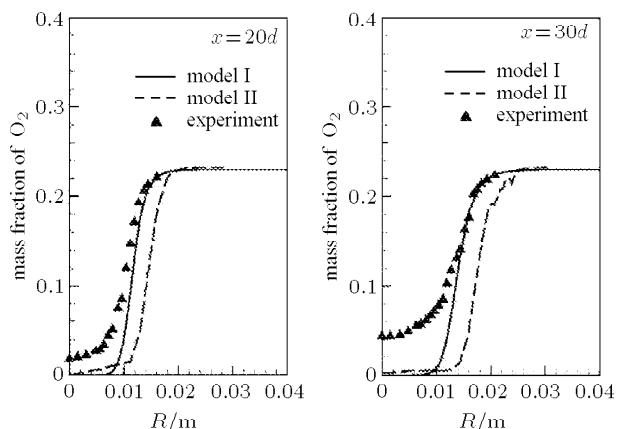
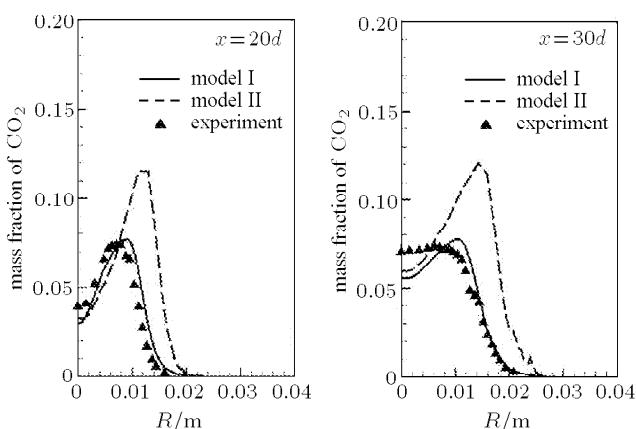
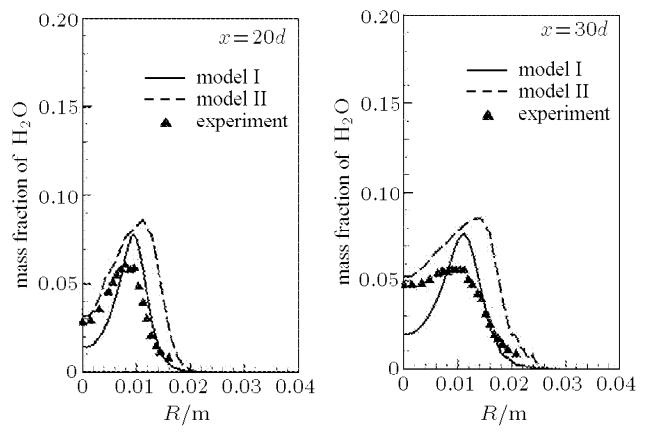
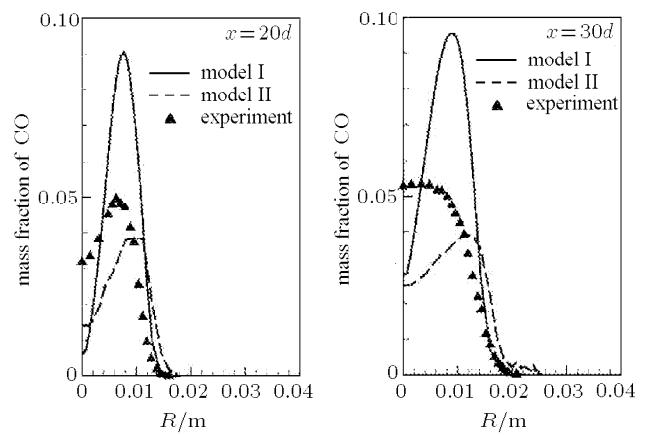
图 5 CH_4 的径向分布Fig.5 Radial distributions of CH_4 图 6 O_2 的径向分布Fig.6 Radial distributions of O_2 图 7 CO_2 的径向分布Fig.7 Radial distributions of CO_2 图 8 H_2O 的径向分布Fig.8 Radial distributions of H_2O 

图 9 CO 的径向分布

Fig.9 Radial distributions of CO

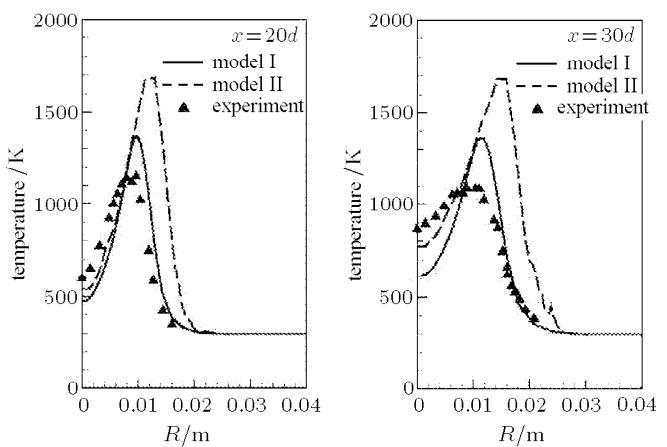


图 10 温度的径向分布

Fig.10 Radial distributions of temperature

上述结果表明, 两个模型能基本反映标量场的特性, 其中模型 I 的计算结果总体上要好于模型 II 的计算结果, 即预先设定的 PDF 模型好于 PDF 输

运方程模型。然而，两个模型预测的 O_2 消耗比实验结果偏多，而温度又偏高，这反映出两个模型预测的燃烧过程过于“完全”，尤其是模型 II 预测的主产物 CO_2 和 H_2O 生成更多，而副产物 CO 和 H_2 生成偏少，更反映了完全燃烧的模式。事实上，实验结果表明^[11]，甲烷 / 空气湍流射流扩散火焰在从 $20d$ 到 $30d$ 时，火焰温度在下降，反映出这种火焰存在局部熄火现象，而本文采用的火焰面数据库由于只考虑了火焰本身的特性，因而难以反映局部熄火现象。对火焰面方程本身而言，式(1)和式(2)中隐含了这样一个假设：所有组分的 Lewis 数为 1，即认为所有组分的扩散系数相同；而且，本文的火焰面模型也没有考虑热辐射和散热效应，这些因素使得火焰面模型预测的燃烧过于完全。计算结果还表明，和模型 I 相比，模型 II 的结果偏离较大，这主要是由于一方面，模型 I 中使用的 β 分布和双 δ 分布的函数形式本身就能够较好地反映湍流燃烧地脉动特性^[12]，因此得到部分较好的标量计算结果也是合理的；另一方面，模型 II 中的 χ_{st} 是由湍流频率 ω 得来的(式(19))，而 ω 的合理模化(式(18))目前仍存在着不确定性因素。因此，对 ω 的求解进行改进也是今后值得研究的一个方向。

3 结 论

以甲烷 / 空气层流对撞扩散火焰为对象生成了层流火焰面数据库，其中混合物分数 ξ 和条件标量耗散率 χ_{st} 作为独立变量来表征组分浓度和温度的变化值。在湍流射流扩散火焰的条件下，采用两种不同的 PDF 模型计算 ξ 和 χ_{st} ，通过查找数据库中的标量值(组分浓度和温度)来求解这种火焰的结构。计算结果表明，两种模型均能较好反映流场特性，对于标量场，两种模型也能反映火焰结构的变化，但采用预先设定的 PDF 方法(模型 I)的预测效果总体要好于 PDF 输运方程的方法(模型 II)。两种模型未能很好地反映有局部熄火现象的火焰特性，在火焰面模型中考虑组分不同的扩散系数、热辐射和散

热等因素对改进火焰面模型是有利的。此外，进一步改进 PDF 输运方程中湍流频率的求解方法，以提高模型 II 的预测能力也是值得进一步研究的。

参 考 文 献

- Peters N. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In: 21st Symp (Int) on Combustion. The Combustion Institute, 1986. 1231~1250
- Bray KN, Peters N. Laminar flamelets in turbulent flames. In: Libby PA, Williams FA, eds. Turbulent Reacting Flows. New York: Academic Press, 1994. 63~114
- Pitsch H, Barth H, Peters N. Three-dimensional modeling of NO_x and soot formation in DI-diesel engines using detailed chemistry based on the interactive flamelet approach. SAE Paper, 962057, 1996
- Pitsch H, Peters N. A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects. *Combust Flame*, 1998, 114: 26~40
- 董刚, 刘宏伟, 陈义良. 通用甲烷层流预混火焰半详细化学动力学机理. 燃烧科学与技术, 2002, 8(1): 44~48(Dong Gang, Liu Hongwei, Chen Yiliang. General, nitrogen-containing semi-detailed chemical kinetic mechanism for methane laminar premixed flame. *J Combust Sci Tech*, 2002, 8(1): 44~48(in Chinese))
- Jones WP, Whitelaw JH. Calculation methods for reacting turbulent flows: a review. *Combust Flame*, 1982, 48: 1~26
- Pope SB, Chen YL. The velocity-dissipation PDF model for turbulent flows. *Phys Fluids*, 1990, A2: 1437~1449
- Pope SB. Application of the velocity-dissipation PDF model to inhomogeneous turbulent flows. *Phys Fluids*, 1991, A3:1947~1957
- Dopazo C. Probability density function approach for a turbulent axisymmetric heated jet. Centerline evolution. *Phys Fluids*, 1975, 18: 397~404
- Pope SB. PDF methods for turbulent reactive flows. *Prog Energy Combust Sci*, 1985, 11: 119~192
- Masri AR, Pope SB. PDF calculations of piloted turbulent nonpremixed flames of methane. *Combust Flame*, 1990, 81: 13~29
- Warnatz J, Maas U, Dibble RW. Turbulent reacting flows. In: Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation. New York: Springer-Verlag, 1999. 169~174

SIMULATION OF METHANE/AIR TURBULENT JET DIFFUSION FLAME BY FLAMELET MODELS¹⁾

Dong Gang^{*2)} Wang Haifeng[†] Chen Yiliang[†]

^{}(National Key Lab of Transient Physics, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China)*

[†](Department of Thermal Science and Energy Engineering, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract Based on the laminar opposed-flow diffusion flame, a laminar flamelet database is generated using laminar flamelet model. The two different models, a presumed PDF model (Model I) and a joint mixture fraction-turbulent frequency PDF transport model (Model II), are coupled with the laminar flamelet model to predict turbulent jet diffusion flame structure of methane/air. The calculated results for both of the PDF models are compared with measured results. The present study shows that the both of PDF models predict the flow field well. In the prediction of scalar field, the Model I totally shows the better results than Model II. Finally, the improvements of Model II are suggested for future investigation.

Key words flamelet model, probability density function, mixture fraction, scalar dissipation rate, turbulent jet, diffusion flame

Received 22 March 2003, revised 4 August 2004.

1) The project supported by the Special Funds of Major State Basic Research Projects (G1999022207) and the Youth's Science Foundation of NJUST (AB41411).

2) E-mail: dgvehicle@yahoo.com