

Implementation of ISAT in Combustion in Porous Media Modeling

Youning Xu¹, Junrui Shi¹, Zhijia Xue¹, Shuqun Wang¹, Jinfeng Ma¹, Maozhao Xie²

1. Shenyang Key Laboratory on Circulating Fluidized Bed Combustion Technology, Shenyang Institute of Engineering, Shenyang, China

2. School of Energy and Power Engineering, Dalian University of Technology, Dalian, China

Email: tigeryear26@yahoo.com.cn

Abstract: In Situ Adaptive Tabulation (ISAT) has been implemented into premixed combustion in porous media modeling with detailed chemical kinetics, and the performance of ISAT was discussed. It is showed that ISAT could reduce the computational time remarkably, and control the global error efficiently. In addition, results showed that the ISAT method provides sufficient computational accuracy compared with the direct integration method and experimental results.

Keywords: ISAT; porous media; premixed combustion

ISAT 在预混气多孔介质中燃烧的应用

徐有宁¹, 史俊瑞¹, 薛治家¹, 王树群¹, 马金凤¹, 解茂昭²

1. 沈阳工程学院沈阳市循环流化床燃烧技术重点实验室, 沈阳, 中国, 110136

2. 大连理工大学能源与动力学院, 大连, 中国, 116024

E-mail address: tigeryear26@yahoo.com.cn

摘要: 考虑详细化学反应机理, 通过非适应自动列表法 (ISAT) 在预混气体多孔介质中燃烧模拟中的应用, 讨论了 ISAT 的性能。结果显示, ISAT 可显著减少化学反应的计算时间, 并能够有效地控制总体误差; 与直接积分法和实验值相比, ISAT 能够提供足够的精度。

关键词: 非适应自动列表; 多孔介质; 预混燃烧

1 引言

预混气体多孔介质中燃烧是一项新的燃烧技术, 具有燃烧效率高、污染物排放低和燃料适应性好等优点, 而基于此项技术开发的多孔介质燃烧-换热器, 具有热效率高, 污染物排放低和功率调节范围宽等显著特性, 对于节能减排具有十分重要的意义。但目前该方面的基础研究还不多。值得注意的是: 准确预测预混气体多孔介质中燃烧的放热率、组分分布和燃烧温度等, 使用详细化学反应机理是非常必要的^[1]。但气体燃料的详细化学反应机理包括几十种组分、几百甚至上千个基元反应。求解气体组分方程、能量方程需要与化学动力学耦合求解, 其中多维化学反应求解需消耗大量 CPU 时间。因此, 在使用详细化学反应机理计算预混气体多孔介质燃烧时, 为了控制计算成本, 绝大多数

研究者采用一维稳态模型^[1]。

为了能够在使用详细反应机理的同时减少计算时间, 目前解决化学反应计算量过大的方法有并行计算^[2]和加速化学反应动力学计算速度两种方法。其中 Pope^[3]于 1997 年提出的当地自适应列表方法 (in situ Adaptive Tabulation, 简称 ISAT) 具有较高的存储/提取效率、近似误差动态控制等优点, 在众多的加速方法中具有较大的优越性^[4-5]。

国内也开展了 ISAT 方面的研究。贾明等^[6]研究了 ISAT 在多维内燃机反应动力学中的应用。结果表明, 在容差为 0.001 时, ISAT 加速算法所用时间为直接积分 (Direct Integration, 简称 DI) 的 1/14.9, 大大地节省了计算时间。陈华蕾等^[7]研究了 ISAT 在射流火焰 PDF 计算方法中的应用。董刚等^[8]用 ISAT 计算了激波诱导火焰失稳的非稳态过程, 其总体计算时间比直接积分法减少了 2.53 倍。据笔者了解, 国内目前还没有 ISAT 在预混气体多孔介质中应用

辽宁省自然科学基金: 生物质与煤混合燃烧特性及其协同作用研究
20092137

的研究。

本文利用ISA T加速预混气体多孔介质燃烧的计算速度,讨论了ISA T的基本性能,为ISA T在多维和非稳态计算预混气体多孔介质中燃烧奠定基础。

2 物理模型

真实的实验装置如图1所示。图1为两层多孔介质燃烧器,在燃烧器中布置了不同的多孔介质,分别为火焰扩散层和支持层。

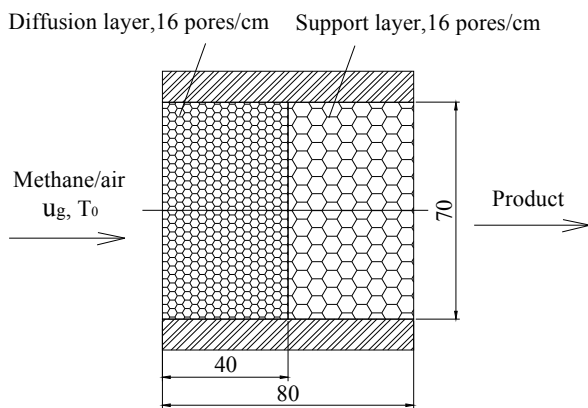


Figure 1. Schematic diagram of combustion-heater

图1 燃烧器及多孔介质布置示意图

考虑到实验中燃烧器良好的绝热,采用一维模型进行模拟。为了简化起见,作如下假设:多孔介质为各向同性的、惰性的光学厚介质;混合气为理想气体,气体在多孔介质中的流动为层流;多孔介质的孔隙率较大,忽略气体通过多孔介质填充床的压力降。基于上述假设,则控制方程为:

连续方程:

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_g u_g)}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

气体组分方程:

$$\varepsilon \rho_g u_g \frac{\partial Y_i}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \rho_g D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \right) - \varepsilon \dot{\omega}_i W_i = 0 \quad (2)$$

混合气体能量方程:

$$\varepsilon \rho_g c_g u_g \frac{\partial T_g}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) = h_v (T_s - T_g) + \sum_{i=1}^N \varepsilon \rho_g c_{gi} D_{im} \frac{\partial Y_i}{\partial x} \frac{\partial T_g}{\partial x} - \sum_{i=1}^N \varepsilon \dot{\omega}_i h_i \quad (3)$$

多孔介质能量方程:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left((1-\varepsilon) \lambda_s + \lambda_{rad} \right) \frac{\partial T_s}{\partial x} = h_v (T_g - T_s) - \beta (T_s - T_0) \quad (4)$$

理想气体状态方程:

$$P = \rho_g R T_g / \bar{W} \quad (5)$$

式中 ε 是多孔介质孔隙率, ρ_g , u_g 分别为气体混合物的密度和流速。 Y_i , $\dot{\omega}_i$, W_i 和 D_{im} 分别为气体混合物中第 i 种组分的质量分数、反应速率、分子量和扩散系数。 c_g , c_{gi} 分别为混合气体和第 i 种组分的比热容, λ_s 是多孔介质导热系数^[9]。 λ_{rad} 是氧化铝-氧化锆的辐射折合导热系数,由 Rosseland 简化模型得出其表达式:

$$\lambda_{rad} = 16 \sigma T_s^3 / 3 \alpha,$$

σ 为 Stefan-boltzmann 常数, α 是多孔介质的衰减系数,由文献估算。 h_v 是气固相间的对流换热系数,由于缺乏泡沫氧化铝-氧化锆多孔介质 h_v 的实验数据,利用网状的氧化铝泡沫来代替。 P 是大气压力,在计算中保持不变, R 为气体通用常数。

3 数值计算

本文对预混气体多孔介质中的燃烧进行了模拟,反应机理采用 GRI2.11。该机理包括 32 种组分和 177 个反应。计算中所采用的模型是实验装置简化而来的,如图1所示。计算中模型简化为一维稳态模型。Fluent 中的多孔介质模型为单温模型,本文通过 Fluent 提供的自定义函数和标量方程,将单温模型改进为双温模型。为了模拟点火过程,在火焰扩散层和支持层处设置了 2000K 的高温区域。本文没有考虑通过燃烧器壁面的热损失。由于燃烧器出口的温度较高,本文通过自定义函数,考虑了通过燃烧器出口的热损失。

4 当地自适应列表方法

化学反应动力学计算中需要求解受化学反应影响的组分方程和能量方程。如使用燃料的详细反应机理,则组分方程和能量守恒方程是一个典型的刚性方程组。直接求解化学反应源项将消耗大量的 CPU 时间。

为了节省计算时间, ISAT 采用动态存储/取回法, 将计算中的化学反应项存入表中, 在满足精度要求的条件下, 通过从表中查出和取回相近的数据来替代后来的计算过程, 如果不满足精度要求, ISAT 则要追加表项, 这一过程称为增长操作数。由于查找和取回的时间仅为计算时间的千分之一, 因此可以大大加快计算过程。

4.1 ISAT 的有效性验证

图 2 比较了使用 DI 和 ISAT 预测的多孔介质燃烧器内的气体温度分布。此外, 为了验证模型, 同时给出了实验值。由图可以看出, 使用 DI 和 ISAT 都较好地预测了燃烧器内的温度分布。与实验相比, DI 和 ISAT 预测的燃烧器出口的气体温度均高于实验值。图 3 是 ISAT 预测的燃烧器出口的多孔介质固体温度与实验值的比较。可以看出, 预报的固体温度与实验值在燃烧器的出口处相差不大, 但在其它区域, 则低于实验值。

与 DI 预测的温度场相比, 当容差为 0.001 和 0.0005 时, ISAT 预测的温度场与 DI 预测的几乎重合, 只是在燃烧器的出口有很小的差异。因 DI, ISAT 预测的温度场差异很小, 在图画中很难标出, 故作者没有标出。由图 2 看出, 与 DI 计算的结果相比, ISAT 具有相当高的精度, 为计算预混气体多孔介质中燃烧提供了很好的思路。值得指出的是, 当容差继续减小时 (小于 0.0005), 预测的结果与容差为 0.0005 的结果相差很小。

4.2 ISAT 的效率和性能分析

为了比较 ISAT 的加速性能, 定义化学反应加速

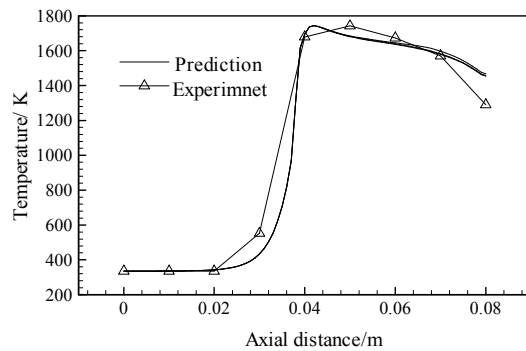


Figure 2. Comparison of temperature using DI and ISAT with different tolerances (Equivalence ratio=0.6, $u_g=0.4\text{m/s}$)

图 2 DI 和不同容差的 ISAT 预测的气体温度场与实验值比较 (当量比 0.6, 流速 0.4m/s)

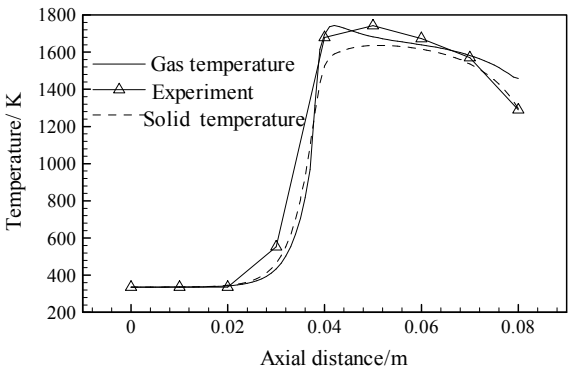


Figure 3. Comparison of gas and solid temperatures with experiment using DI and ISAT (tolerance=0.001, Equivalence ratio=0.6, $u_g=0.4\text{m/s}$)

图 3 ISAT 预测的气体、固体温度和实验值的比较 (容差 0.001, 当量比 0.6, 流速 0.4m/s)

比为 DI 化学反应计算时间和 ISAT 化学反应计算时间的比值。同理, 整体加速比定义为 DI 整体计算时间与 ISAT 整体计算时间的比值。由表 1 可见, 容差为 0.001 时, 化学反应比和整体加速比分别为 20.6 和 22.2。容差降低, 加速比也相应的降低, 但加速比仍然很大。当容差为 0.0005 时, ISAT 加速比大于 10, 仍然有较大的优势。由表 1 同时可以看出, 回访点总数与计算点总数相差不大, 说明提取的比例很高, 因此具有非常高的提取效率。与此相对应, 增长点的总数并不大, 与记录点总数相差 600 倍左右。即使是容差为 0.0005 时, 回访点的比例也是相当高的。这说明, ISAT 在预混气体多孔介质中燃烧具有极大的优势。

Table 1. Summary of ISAT performance (Equivalence ratio=0.6, $u_g=0.4\text{m/s}$)

表 1. ISAT 性能概要 (当量比 0.6, 流速 0.4m/s)

	容差 0.001	容差 0.0005	DI
总体计算时间/min	35.1	60.4	780
化学反应计算时间/min	10.2	13.2	210.6
增长操作总数	2.49E+03	3.71E+03	—
回访点总数	1476659	3135654	—
记录点总数	1479365	3139682	—
化学反应加速比	20.6	16	—
总体加速比	22.2	12.9	—

5 结论

(1) ISAT 预测的预混气体多孔介质中燃烧过程的结果基本与 DI 一致, 只是预报的燃烧器出口的温度产生

了一定的偏差,但是ISAT可以有效地控制误差,通过缩小容差,预测的结果可以进一步改进。但过小的容差会使ISAT的加速性能大大下降

- (2) 与DI相比,ISAT的总体加速比可以达到20以上,大大地提高了化学反应和总体的计算效率,是有效减少预混气体多孔介质中燃烧计算所需时间的有力工具。

References (参考文献)

- [1] Hsu P F, Matthews R D, The necessity of using detailed kinetics in models for premixed combustion in porous media[J], *Combustion and Flame*, 1993, 93: 474-466.
- [2] Ali A, Cazzoli G, Kong S C, et al. Improvement in computational efficiency for HCCI engine modeling by using reduced mechanisms and parallel computing [C]. 13th International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting, 2003.
- [3] Li Yu, Liu Jingsen, Pope S B, Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation[J], *Combustion Theory and Modeling*, 1997, 1(1): 41-63
- [4] Pope S B. PDF simulation of turbulent combustion incorporating detailed chemistry[J], *Combustion and Flame*, 1999, 117: 340-350.
- [5] Chen J Y, Blasco J A. An economical strategy for storage of chemical kinetics: Fitting in situ adaptive tabulation with artificial neural networks[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2000, 128: 115-121
- [6] Jia Ming, Xie Mao-zhao, Implementation and Improvement of ISAT in HCCI Multidimensional Modeling with Detailed chemical Kinetics[J], *Transactions of CSICE*, 2006, 24(1): P9-14 (Ch).
- 贾明, 解茂昭. ISAT 在 HCCI 发动机多维详细动力学计算中的应用和改进. *内燃机学报*, 2006, 24 (1): 9-14
- [7] Chen Hua-lei, Wang Hai-feng, Cheng Yi-liang, Application of the ISAT in situ Adaptive Tabulation Method in the PDF Simulation of a Turbulent Jet Diffusion Flame[J], *Journal of University of Science and Technology of China*, 2005, 35 (4): P557-562 (Ch).
- 陈华蕾, 王海峰, 陈义良. ISAT 方法在射流火焰 PDF 计算中的应用. *中国科技大学学报*, 2005, 35 (4): 557-562
- [8] Dong Gang, Li Xiang-feng, Fan Bao-chun, Jiang Yong, Chen Yi-liang, Computations of Flame Instability Induced by Shock Wave Using Multiple in Situ Adaptive Tabulation, *Journal of Combustion Science and Technology*, 2007, 13 (6): P515-520 (Ch).
- 董刚, 李先锋, 范宝春等. 用多次建表方法的 ISAT 方法计算激波诱导火焰失稳. *燃烧科学与技术*, 2007, 13 (6): 515-520
- [9] Henneke M R, Ellzey J L, Modeling of filtration combustion in a packed bed. *Combustion and Flame*, 1999, 117:832-840