

详细化学反应机理对预混丙烷钝体熄火模拟影响^{*}

王 方, 韩宇轩, 窦 力, 王煜栋, 金 捷

(北京航空航天大学 能源与动力工程学院 航空发动机数值仿真研究中心, 北京 100191)

摘 要: 航空发动机熄火预测是重要关键问题之一, 湍流和化学反应的非线性相互作用使预测非常困难。本文采用大涡模拟 (LES) 对湍流进行高精度模拟, 采用概率密度函数输运方程湍流燃烧模型 (TPDF) 耦合 JL4, Z66 和 H73 三种化学反应机理, 对预混丙烷钝体熄火现象和规律进行研究。JL4 的反应机理最简单, 反应释热快, 局部放热高, 火焰宽度大, 火焰两侧温度梯度大, 燃烧更加趋于稳定, 无法模拟出熄火状态。H73 机理绝热火焰温度低, 火焰温度低, 回流区中部 OH 含量高; 在近熄火状态, 大量 CO 被氧化, 释放热量过高导致无法模拟出熄火现象。Z66 机理可以模拟出火焰正常状态, 在低当量比下也可以模拟出熄火状态。算例中, 局部 $Da > 1$ 的区域超过 35% 则会发生熄火。

关键词: 概率密度函数输运方程湍流燃烧模型 (TPDF); 大涡模拟 (LES); 钝体熄火; 反应机理; AECSC 程序

中图分类号: V231.2

文献标识码: A

文章编号: 1001-4055 (2021) 10-2295-11

DOI: 10.13675/j.cnki. tjjs. 200126

Effects of Detailed Chemical Mechanism on Premixed Propane Bluff Body Blow-Off Simulation

WANG Fang, HAN Yu-xuan, DOU Li, WANG Yu-dong, JIN Jie

(Aeroengine Numerical Simulation Research Center, School of Energy and Power Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China)

Abstract: The prediction of aero engine flameout is a crucial problem. The nonlinear interaction of turbulence and chemical reactions increases the difficulty of prediction. The phenomenon and law of premixed propane bluff body blow-off were investigated by analyzing turbulence and combustion. The large eddy simulation was used to simulate turbulence with high accuracy. Three chemical mechanisms, JL4, Z66 and H73, were coupled by the transported probability density function to describe combustion process. JL4's reaction is the simplest of the three, leading to the larger rate of exothermic reaction, wider flame width, higher temperature gradient on both sides of the flame and more stable combustion, and is unable to simulate the blowoff state. The lower adiabatic flame temperature of H73 mechanism results in the lower simulated flame temperature, and the content of OH in the middle of the simulated recirculation zone is very high. In the blowoff state, a large amount of CO is oxidized, and excessive heat is released, which makes it impossible to simulate the flameout state. The mechanism of Z66 can simulate the normal state of flame, and the flameout state can be correctly simulated under low equivalence ratio. In this bluff body example, if the flame region where the local Da number is greater than 1 exceeds 35%, the extinction will occur.

^{*} 收稿日期: 2020-03-12; 修订日期: 2020-07-13。

基金项目: 国家自然科学基金 (91741125); 国家科技重大专项 (2017-I-0004-0005)。

通讯作者: 王 方, 博士, 副教授, 研究领域为航空发动机燃烧室。

引用格式: 王 方, 韩宇轩, 窦 力, 等. 详细化学反应机理对预混丙烷钝体熄火模拟影响[J]. 推进技术, 2021, 42(10): 2295-2305. (WANG Fang, HAN Yu-xuan, DOU Li, et al. Effects of Detailed Chemical Mechanism on Premixed Propane Bluff Body Blow-Off Simulation[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2021, 42(10): 2295-2305.)

Key words: Transported probability density function; Large eddy simulation; Bluff body blowoff; Reaction mechanism; Aero engine combustor simulation code

符号表

Da	Damköhler 数	ψ	ψ_α 构成的点的集合	T	温度
Ka	Karlovitz 数	μ	动力粘度	p	压强
$\tilde{P}_{sgs}$	Faver滤波后的亚网格概率密度函数	σ	施密特数	U_x	x 方向速度
$\bar{\rho}$	空间滤波后的密度	μ_{sgs}	亚网格湍流粘度	κ_s	二维 Karlovitz 数
$\tilde{u}_j$	Faver滤波后的 j 方向速度	σ_{sgs}	亚网格湍流施密特数	n_x	x 方向火焰面分量
ψ	标量(组分、总焓)	τ_{sgs}	亚网格混合时间尺度	n_y	y 方向火焰面分量
α	组分 α	$\tilde{\phi}_\alpha$	Faver滤波后的 ϕ_α	R	相关系数
F	联合概率密度函数	ζ_α^m	组分 α 第 m 个随机场	τ_{chem}	化学反应的时间尺度
$\dot{\omega}_\alpha$	组分 α 的化学反应源项	Γ'	标量方程亚格子分子粘性	τ_{flow}	流动的时间尺度
N_s	组分数	dW_i^m	第 m 个维纳过程	κ_{ext}	处理得到的拉伸率
ϕ_α	与 α 有关的标量	Φ	当量比	κ_{ref}	文献[27]中的参考拉伸率
ψ_α	ϕ_α 构成的样本空间			S_u	火焰传播速度

1 引 言

熄火边界决定航空发动机燃烧室稳定工作范围的下边界,因此对熄火预测的研究十分必要。熄火过程涉及复杂的气液两相湍流燃烧过程,其中湍流和化学反应相互作用对熄火影响作用明显。随着研究深入,对熄火预测从关系式预测模型逐渐向高精度数值模拟方法以及将熄火特征参数与数值模拟相结合的方向发展。

关系式熄火预测模型大致可分为两类:Longwell提出的均匀搅拌反应器模型^[1]和Zukoski提出的特征时间模型^[2]。Glassman^[3]与Turns^[4]将其表示为Damköhler数(Da)的形式,用于预测熄火。Nair等^[5]认为熄火经过局部熄灭和尾流扰动两个过程, Da 准则只能预测局部熄火。Shanbhogue等^[6]发现局部熄火是由于钝体后方流动分离使得局部火焰拉伸率升高引起的,而后Tuttle等^[7]和Chaudhuri等^[8]提出高的火焰拉伸率是当地速度边界层带来的高涡量与火焰边界相互作用带来的结果。局部熄火使得新鲜的反应物进入到钝体回流区内,而后在低速高温的情况下重新点火回到边界层外,引起了火焰的不稳定状态。在局部熄火后,在贫熄过程中因为流动和燃烧的不稳定性,火焰两侧密度梯度下降,导致大尺度流动状态占优,也就是出现卡门涡街流动形式^[9]。这更加增大了火焰边缘的速度脉动,最终导致火焰缩入回流区,并向钝体缩进导致熄火。

化学和流动尺度的计算方法不同, Da 的判断条件也不同,而且局部的 Da 与全局 Da 并没有直接的联系。Kedia等^[10]通过数值模拟与实验,提出火

焰速度与流动速度的梯度之间的关系:火焰速度的梯度必须大于流动速度,火焰才会发生熄灭。文中也提到了和 Da 准则的关系,并对此提出了更细化的补充条件。Morales等^[11]使用了火焰拉伸率Karlovitz数(Ka)判断准则,从局部入手来判断整体火焰状态。

随着计算机和计算技术的发展,采用高精度数值模拟方法研究熄火过程并探究熄火规律成为重要手段。Wu等^[12]使用LES-AHI方法对盘形钝体后方的熄火过程做了3D数值模拟,再现了从局部熄火到整体熄火的3D过程,与实验结果符合较好。Hodzic等^[13]采用大涡模拟(LES)结合概率密度函数输运方程湍流燃烧模型(TPDF)方法预测了接近熄火的钝体后方火焰,模拟结果的统计数据与实验值一致。LES-TPDF耦合详细化学反应机理是一种可以同时解析湍流和化学反应的高分辨率数值模拟方法,可用于熄火问题研究。

化学反应机理在熄火模拟中发挥重要作用。局部熄火过程既会受到标量耗散的时间波动的影响,也会受到输运效应的影响^[14]。基于GRI-Mech简化为19组分的甲烷机理^[13],基于USC-Mech简化为31组分的丙烷机理^[12],包括19种输运组分10种准稳态组分的乙烯详细机理^[15],57组分383可逆反应的乙醇详细机理^[14],被用于分析熄火过程。

本文采用LES-TPDF方法耦合三种化学反应机理研究丙烷钝体预混火焰熄火过程,对比化学反应机理对熄火预测的影响,探索熄火步骤和过程,尝试局部熄火参数判断和规律。

2 研究对象和模拟方法

2.1 模拟方法

LES是一种高分辨率求解湍流方法。TPDF不需要任何模化可以耦合详细化学反应机理^[16],在模拟化学反应起主要作用现象时具有明显优势。本文采用随机场解法^[17-18]求解TPDF方程。Aero Engine combustor simulation code (AECSC)是基于LES-TPDF方法的两相湍流燃烧数值模拟程序,由英国帝国理工大学的Jones教授完成初版,北京航空航天大学针对两相湍流燃烧并行模拟做了相应发展。

本文使用动态Smagorinsky-Lilly亚网格模型,采用IEM小尺度混合模型,基于预测-校正步方法耦合压力速度。空间离散使用二阶中心差,时间离散使用Crack-Nicholson格式。

由Colucci等^[19]在LES中采用等扩散系数假设,用 $\tilde{P}_{\text{sgs}}$ 表示Faver滤波后概率密度函数输运方程为

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

式(1)左侧依次为非定常项、对流项和化学源项,均完全封闭。TPDF方法可以耦合详细化学机理,对化学机理的刚性要求较小。方程右侧第一项是小尺度对流项,采用梯度近似封闭,第二项是条件扩散项,可以分解成两项,采用IEM方法封闭小尺度混合。

所有项封闭完成后的输运方程为

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

在LES滤波后,程序中最终的方程形式如下

$$\begin{aligned} & \bar{\rho} d\zeta_{\alpha}^m = -\bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \zeta_{\alpha}^m}{\partial x_j} dt + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\Gamma' \frac{\partial \zeta_{\alpha}^m}{\partial x_i} \right] dt - \\ & \frac{\bar{\rho}}{2\tau_{\text{sgs}}} (\zeta_{\alpha}^m - \tilde{\phi}_{\alpha}) dt + \bar{\rho} \dot{\omega}_{\alpha}^m (\zeta_{\alpha}^m) dt + \\ & \bar{\rho} \sqrt{\frac{2\Gamma'}{\bar{\rho}}} \frac{\partial \zeta_{\alpha}^m}{\partial x_i} dW_i^m \end{aligned} \quad (3)$$

2.2 Flame D射流火焰检验

为测试有效性,模拟了Flame D湍流火焰^[20]。采用ARM简化GRI 3.0机理^[21],包括19个组分15步反应,对次要中间组分采用准稳态假设。轴向六个截面位置的温度与CO₂组分对比结果如图1所示,图中 d 为Flame D喷口直径,为7.2mm,模拟结果与实验值比较一致。

2.3 预混钝体火焰模型、反应机理和边界条件

本文模拟的钝体熄火模型来自Chaudhuri等^[22]的实验^[7-8,23]。图2为计算域和网格,20℃丙烷-空气预混气绕过边长为9.62mm的正三棱柱钝体后点火燃烧。阻塞比0.25,冷态雷诺数在 $1.2 \times 10^4 \sim 1.8 \times 10^4$ 。使用商业软件ICEM CFD进行网格划分,对回流区、火焰根部和钝体边界层附近加密。近壁面网格 y^+ 约为3,加密层10层。计算域135mm×76mm×38mm,网格总数为152万。

使用的丙烷反应机理有三种:JL4是烷烃通用四步七组分整体反应机理^[24];Z66是丙烷骨架机理^[25],由25组分与66个不可逆反应组成;H73机理^[26]由27种组分、70个可逆反应与3个不可逆反应组成,本文对其进行了修改。

JL4, Z66, H73与详细机理USC-Mech II的火焰传播速度、点火延迟时间与绝热火焰温度对比如图3所示,大部分数据来自文献^[25],H73进行了新的数据测试。H73的火焰传播速度在富油段内误差较大,所有机理的火焰传播速度在贫油段所差无几。Z66与JL4的绝热火焰温度较高,H73的绝热火焰温度与详细机理的误差较小。在点火延迟时间上,JL4机理相比实验数据和其它机理来讲都要小得多。根据文献^[25],简单的反应步骤普遍会导致丙烷点火延迟时间较低。为节省计算量,根据文献^[12],忽略氮相关机理。进口温度293K,压力101.325kPa,轴向速度18.3m/s。采用压力出口条件和无滑移壁面条件。算例设定如表1所示。

Table 1 Propane case number

Case	Equivalence ratio	Mechanism
A1	0.85	Z66
A2	0.50	Z66
B2	0.43	H73
C2	0.43	JL4

3 结果与讨论

3.1 临近熄火燃烧状态模拟与分析

从稳态燃烧开始,保持进口速度不变,调低当量比,等新的计算条件收敛后继续调低当量比来模拟临近熄火燃烧状态。与实验中熄火判据相同,不断调低当量比直到无火焰存在判断为熄火。实验测得熄火当量比为 0.6,三种机理对应的模拟均在当量比为 0.5 或以下时发生熄火。图 4 为临近熄火瞬时温度

图。继续调低当量比,A2 发生火焰断裂然后熄火,B2 与 C2 即使当量比降低到 0.43,仍稳定燃烧。JL4 与 H73 机理在预测临近熄火状态和熄火当量比时存在不足。

JL4 机理有 7 种组分,Z66 机理有 25 种组分,组分的多样性带来了能量表现与化学反应形式的多样性,与实际情况更为接近。燃烧中主要放热在 CO 生成 CO₂ 的过程,JL4 机理从燃料反应生成 CO₂ 过程中除 CO 外无第四种组分,导致释热率极快,不能真实模拟熄火情况,而 Z66 有合适的中间组分以及能够反映真实能量转化关系的多步反应机理。

采用 A2 算例火焰即将断裂的结果与 B2 进行比较,如图 5 所示。火焰根部温度二者相差不多,温度差异来自高当量比时绝热火焰温度带来的影响。在 A2 的峰值两侧,B2 的温度已经超过 A2,此时 A2 当量比为 0.5,B2 当量比只有 0.43,B2 的绝热火焰温度理

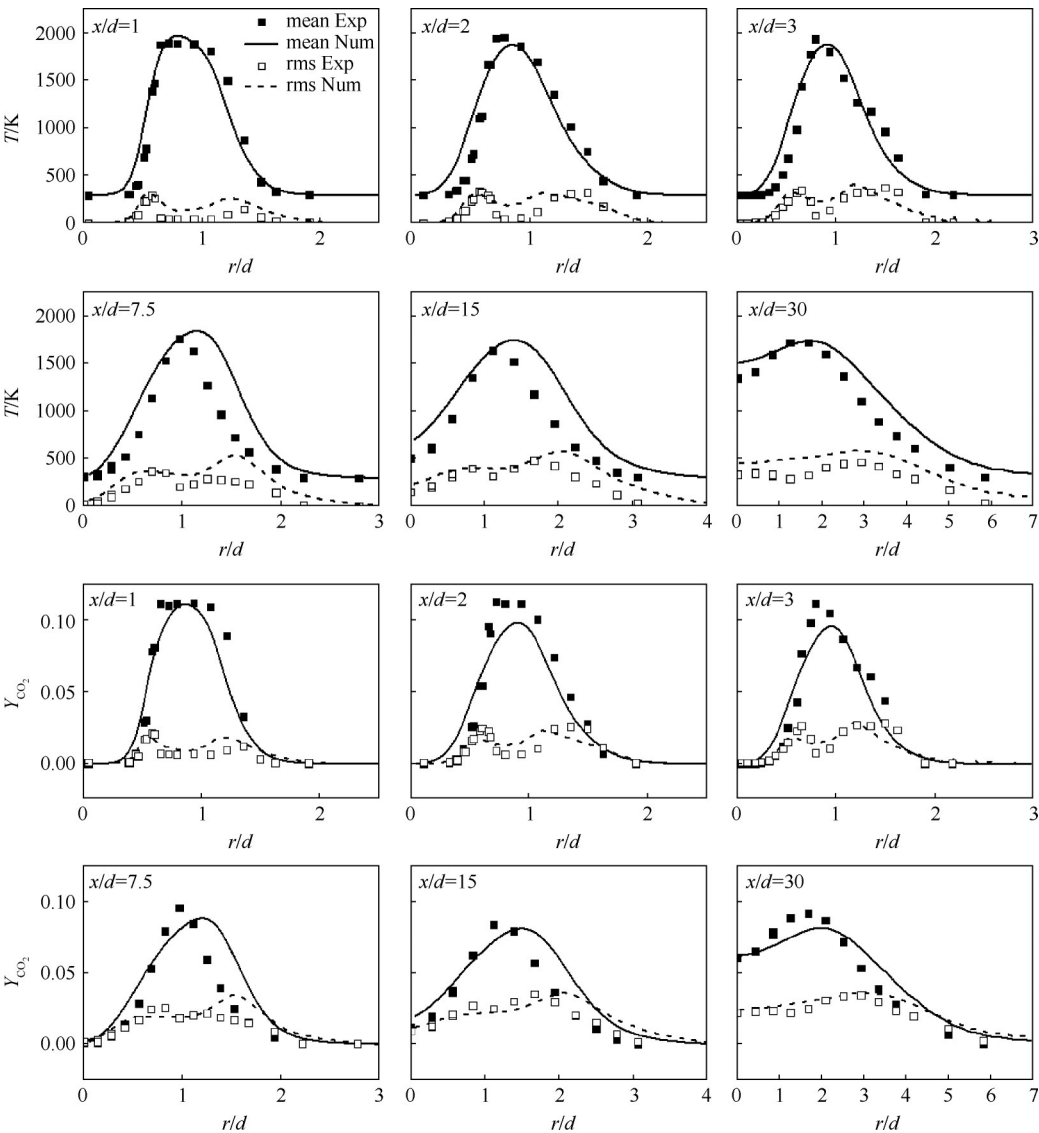


Fig. 1 Simulation of Sandia flame D

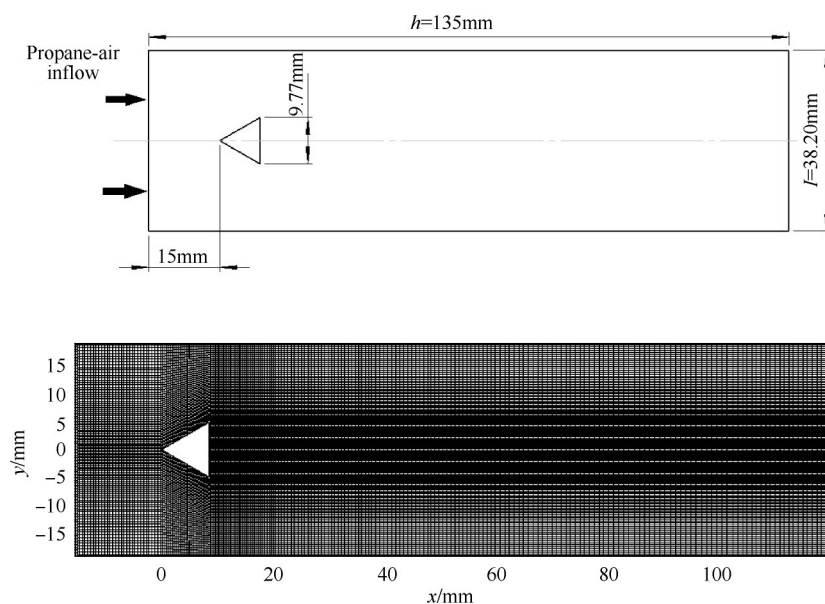


Fig. 2 Computational model and grid diagram

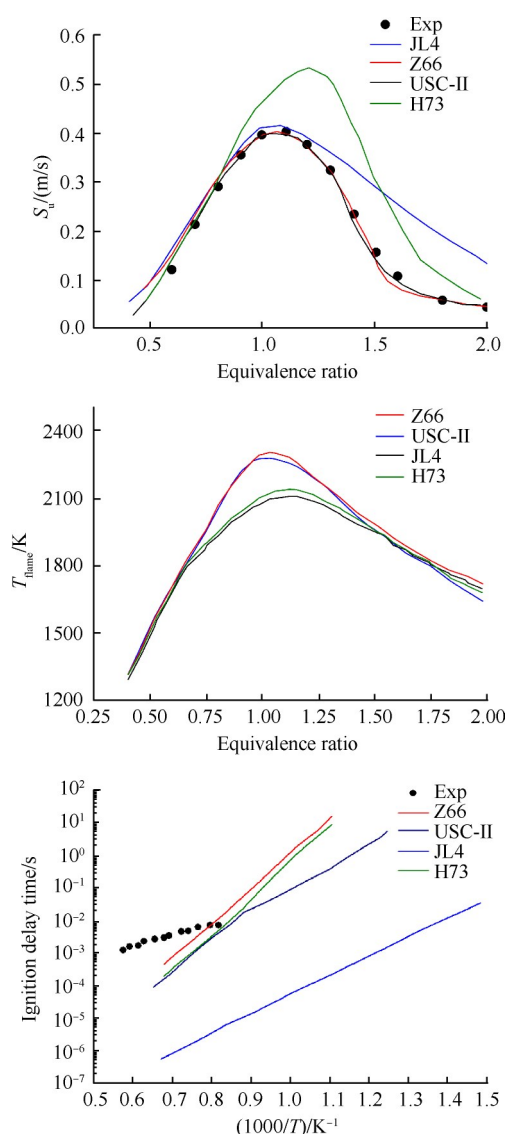


Fig. 3 Comparison of three simulated chemical mechanisms and detailed mechanism USC-II properties

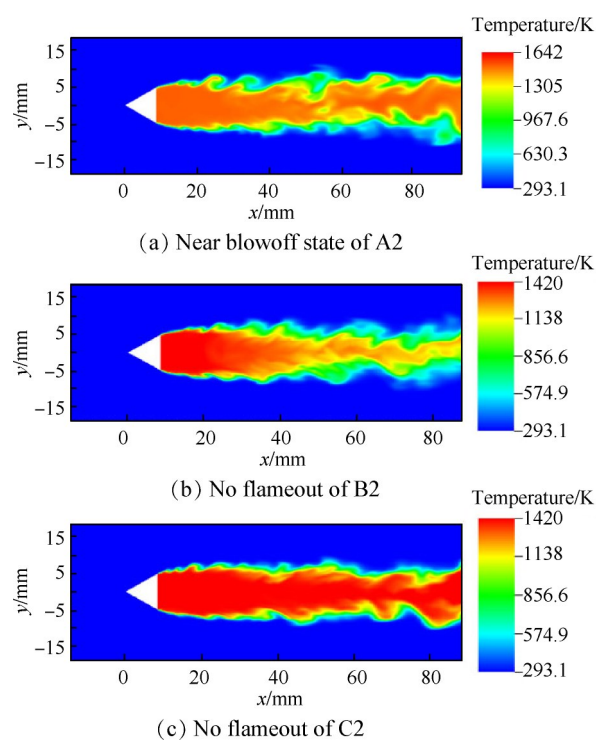


Fig. 4 Flameout results of A2, B2, C2

应更加低,说明 A2 火焰此时已经狭窄得只在中心区存在了,而 B2 依旧在稳定燃烧,所以无法模拟出熄火现象。

熄火的本质是能量耗散率大于生成率,从能量的角度出发分析,OH 自由基是燃烧中最重要反应的产物: $H+O_2=OH+O$,在高温下游离 H 将氧气还原生成的物质,同时也是 CO 消耗以及 CO_2 生成路径上最重要的反应物: $CO+OH=CO_2+H$ 。在 CO 氧化成 CO_2 的过程中会释放大量的热。同时该反应进程与燃烧过程

中热量的释放是同步的,因为只要有碳氢基团未被 OH 消耗完全,该反应便不会发生^[27]。图 6 为 A2 与 B2 上述截面的平均 OH, CO 与 CO₂ 质量分数的分布图。通过分析 $\text{CO} + \text{OH} = \text{CO}_2 + \text{H}$ 的反应进程来判断 H73 机理熄火模拟失败的原因。其中 H73 和 Z66 机理中 CO₂ 绝大部分来源此反应,近似可以认为 CO₂ 的质量分数即为该反应的生成分数。

对 OH 质量分数进行分析,虽然当量比只相差 0.07,但是火焰根部 OH 的质量分数相差很大。在同当量比的火焰中, H73 的 OH 生成比 Z66 要多很多,这首先证明了在当量比降低时,随着燃烧温度降低, OH 也会急剧减少,从而模拟出贫油熄火。OH 的峰值位置和分布在火焰根部基本一致。在火焰断裂处, Z66 的 OH 分布与温度分布也基本一致。极值没有出现

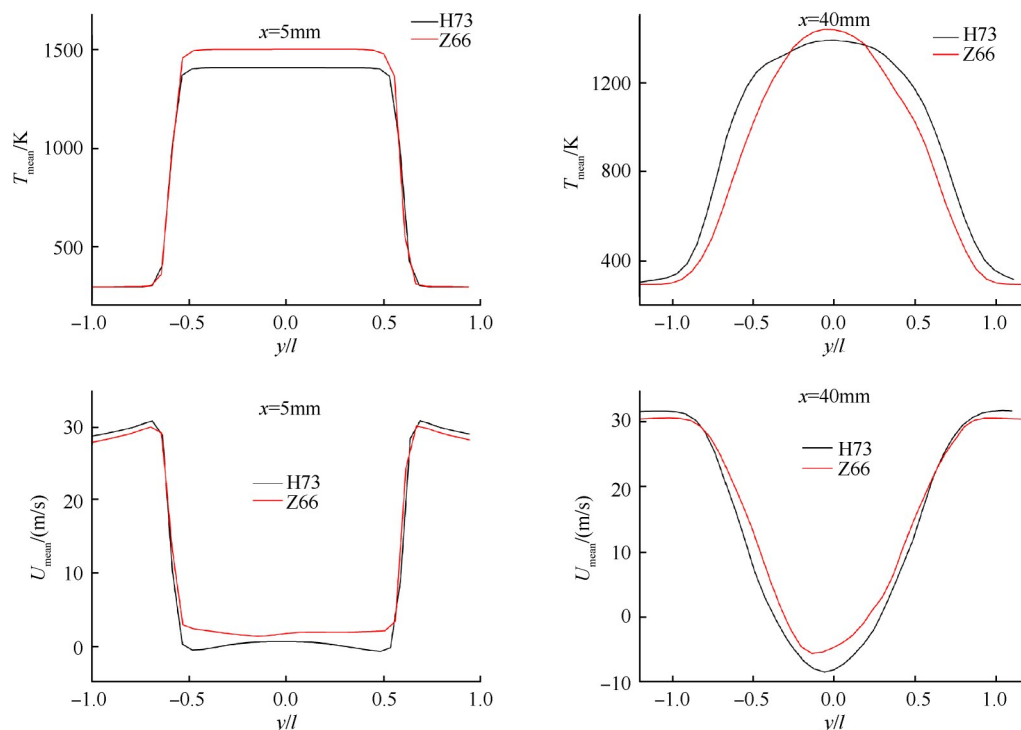


Fig. 5 Average temperature and axial velocity distribution at $x=5\text{mm}$, 40mm

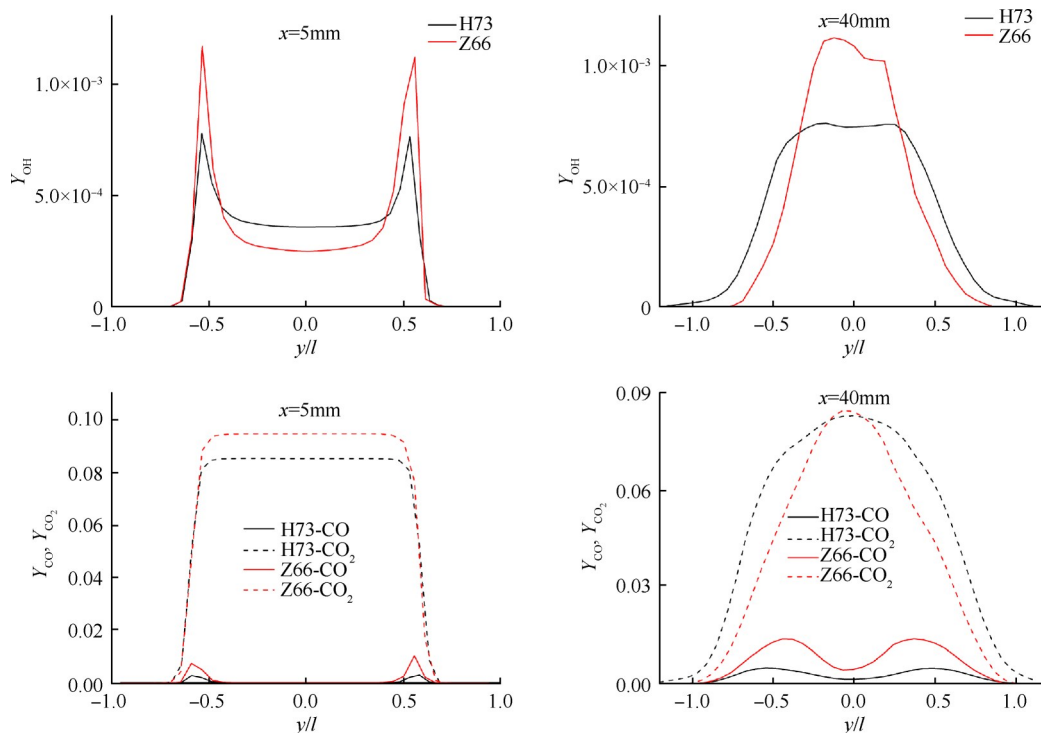


Fig. 6 Mass fraction distribution of OH, CO and CO₂ at $x=5\text{mm}$, 40mm

在回流区两侧而是出现在了回流区中部,代表着熄火即将进入第二阶段。H73的OH分布,最大值较低位于平坦分布区域的两端,而且中间平坦区域OH较高,宽度较长。结合OH基团的性质说明,B2此时依然在平缓反应,过高的OH会推动CO的氧化反应,导致燃烧反应继续进行,不会发生火焰断裂。火焰根部和火焰断裂处的CO₂分布证实了这一推论。在火焰根部,钝体火焰最高温的区域,大量的最终生成物在此堆积,与常理相符。

在火焰断裂区,此时A2的燃烧状态较弱,生成的CO₂较根部更少,质量分数与B2相近,此为A2火焰即将断裂的特点。根据元素守恒,当量比更大的A2组分中必定会存在更多的碳含量。碳含量会分散在各种中间物质中,在反应剧烈处以碳氢燃烧中碳元素的最后存在形式CO为最多。所以A2的CO含量比B2要多将近三倍。在OH峰值处过高的OH与CO含量会使CO+OH=CO₂+H的反应进程正向推进,导致放热速率升高,维持火焰不会断裂。所以A2和B2的CO含量曲线峰值为两侧高中间低的情况,与OH峰值和CO₂峰值恰好错开。对于B2来讲,根据质量作用定律,A2,B2反应速率常数一致的情况下,B2的浓度条件不可能维持此反应生成如此多的CO₂并释放热量。这说明H73的生成物H分布量过低影响了逆反应速率,或者OH的生成速率过高使得正反应进行程度太高。根据前文温度状态的分析,可能为OH生成量不正常导致模拟熄火失败。这说明骨架化学机理的选取对于熄火模拟影响非常大。

本文主要根据A2模拟的熄火过程对熄火状态进行分析。熄火分为两个步骤:(1)局部熄火,表现为火焰拉伸率升高,火焰出现收缩,局部熄灭断裂;(2)火焰缩入回流区燃烧并随着流动不稳定性而继续熄灭。在A2的熄火过程中,这两种情况都可以明显看出。

对熄火第一步骤进行模拟研究。随着当量比减

少,燃烧反应变慢,火焰出现随流动而收缩撕裂的情况。图7为OH瞬时值与实验值的对比。与实验的处理方法一致,均以除以最大值为无量纲化处理,网格起始位置和实验不一致,所以横坐标不同。火焰中心出现OH的空洞,呈现不规则皱褶。这里Z66的模拟结果与实验对比基本一致,火焰收缩与局部熄灭也可以正确模拟出来。

即使此时火焰波动极大,如实验图所示,回流区附近的涡量依然与火焰边缘有强相关性,图8为熄火第一步的瞬时OH含量与涡量云图,可以看出OH含量较大的区域,涡量也较大,与实验结果一致。文献[11]统计了涡量与火焰边缘的相关性,发现此时的涡量等值线与以OH判定火焰边缘的边缘线变化情况完全一致。这个时候局部熄火时有发生,但基本发生在回流区的尾部之后。这些局部熄火发生的部位往往都是火焰宽度最窄的部位,火焰拉伸率骤然升高,最容易发生火焰断裂,此时就进入熄火的下一阶段。

火焰断裂后,会缩进回流区稳定燃烧。根据文献[5],如果回流区燃烧过程中满足复燃条件,则会再次向外传播火焰,否则就可能因为扰动直接发生熄火。图9为火焰缩入回流区的瞬时OH云图与实验图。此时OH峰值已经不再位于回流区两侧,而是跨入了回流区内,而回流区末尾的OH含量更高。

为验证此时涡量与火焰的相关性,将模拟结果与实验值做定量比较。图10为平均速度与OH含量图,此时模拟与试验的OH的峰值已经与 $\partial u/\partial y$ 无关。这一点模拟结果和实验分析一致。火焰锋面位置的误差已经随着当量比减小而减小到0.5mm,速度与OH的误差也减小了,回流区内部高OH浓度可以正确预测。B2的速度和OH分布误差比较大,这是B2无法正常模拟熄火的原因。这说明选用合理的化学反应机理,对LES-TPDF方法在熄火模拟上非常重要。

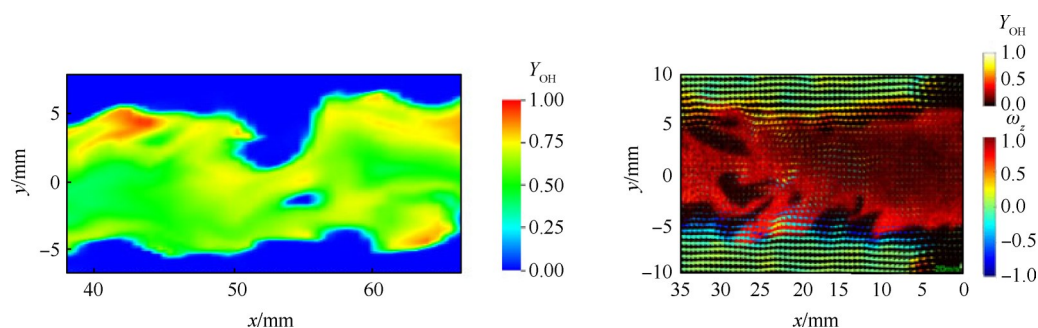


Fig. 7 Flame front tearing phenomenon of the simulation and experimental results

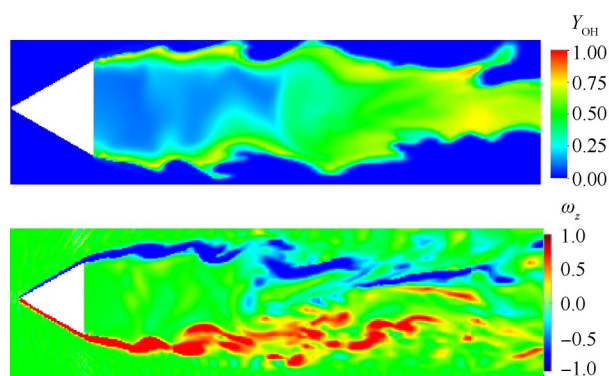


Fig. 8 Schematic diagram of OH and vorticity distribution

对于稳定燃烧状态与两步熄火过程的回流区内部流动状态对比如图 11 所示。由于速度绝对值相差不大,所以只画出流线图来表明涡和火焰之间的关系。从上到下依次是 A1, A2 的熄火两步各自的瞬时流线图。

通过三个流线图可以看出,在 A1 温度燃烧时,内部流动虽不对称,但是涡比较少且贴近回流区边缘,起到降低外部气流速度的作用,流动总体较稳定。此时火焰区域与涡量相关,火焰面比较平滑,燃烧占据主导优势。而 A2 熄火第一步的流线图则出现许多散乱的小涡,流动非常不规则,这是因为涡量依旧和火焰区域关系较大,小涡变多变散乱的同时也反应了火焰边缘濒临破碎的情况。在 A2 熄火第二步时,流线呈现出典型冷态钝体流动的特点,钝体中心线两侧有两个对称的大涡。说明这时燃烧已经不足以

和流动抗衡,这会导致流动形成卡门涡街而继续熄火的情况。通过对流线图的分析,可以从流动方面检验熄火的规律。

3.2 熄火预测方法分析

火焰拉伸率是局部熄火与整体熄火之间不可缺少的联系纽带。局部熄火可以通过火焰拉伸率的值来判断,而火焰拉伸率的集合可以对整体熄火的发生做出一定判据。下面对火焰即将断裂时的 A2 算例与 A1 算例进行火焰拉伸率的分析,找出熄火时火焰拉伸率的规律。考虑到实验的判定,二维火焰拉伸率定义如下^[22]

$$\kappa_s = | -n_x \times n_y \times \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) + (1 - n_x^2) \times \frac{\partial u}{\partial x} + (1 - n_y^2) \times \frac{\partial v}{\partial y} | \quad (4)$$

式中 n_x 与 n_y 为火焰面的方向分量。

实验时使用 OH 浓度的平均值来判断火焰边缘,这里在 OH 质量分数云图中规定最小值,当较多 OH 值的集合能够表达火焰面边界时记录下边界值,在软件中筛选对应的点的集合,以此为基准计算火焰拉伸率。而后用统计数据对比。

图 12 为 A1 与 A2 火焰拉伸率概率密度的散点图与实验测量的散点图。上方为 A1,下方为 A2。A2 的火焰拉伸率值明显比 A1 要分布更平均。火焰稳定时的火焰拉伸率普遍偏小。而熄火时拉伸率在 1000 以下的点比较少,这与实验的散点图结果基本一致。

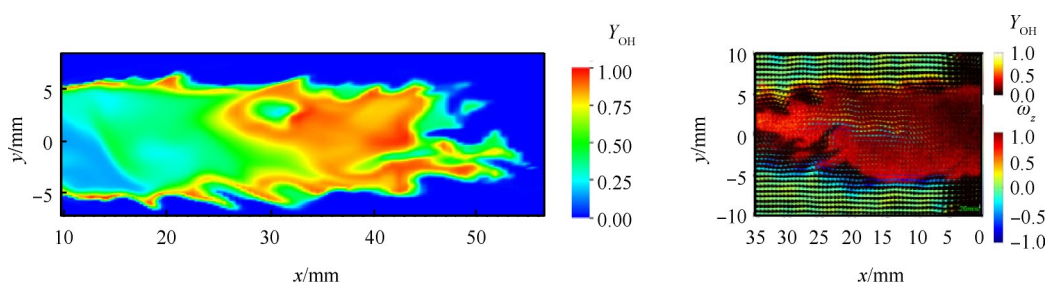


Fig. 9 Flame retracted into recirculation zone phenomenon of the simulation and experimental result

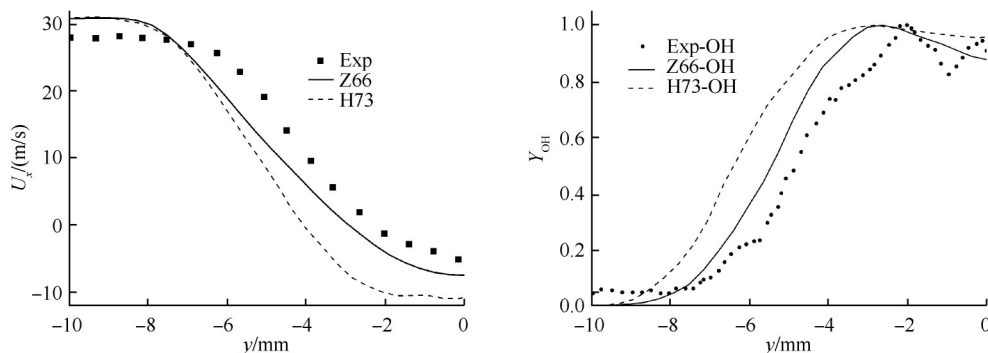


Fig. 10 Averaged velocity and OH distribution of experimental value at $x=30\text{mm}$

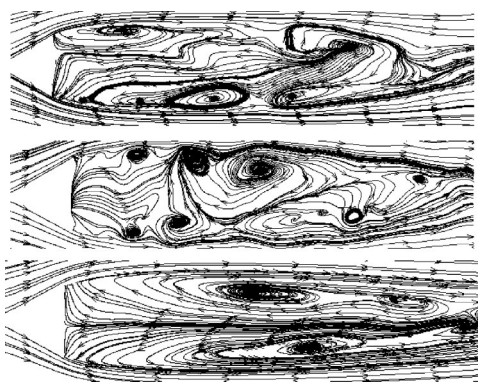


Fig. 11 Instantaneous streamline from case A1 to A2 blowoff

可以依此研究熄火判据。

下面以标准熄火拉伸率的参考值作为判断熄火的依据。图13为A1, A2算例对不同 z 轴位置的火焰拉伸率样本拟合统计成的pdf曲线, R 值分别为0.94

与0.95。与同样方法得到的火焰拉伸率实验结果非常一致。竖线为OPPDIFF^[28]算出的参考熄火拉伸率 κ_{ref} 。

Shanbhogue等^[6]对局部 Da 定义为

$$Da = \frac{\tau_{\text{flow}}}{\tau_{\text{chem}}} = \frac{\kappa_{\text{ext}}}{\kappa_{\text{ref}}} \quad (5)$$

式中 κ_{ext} 为处理得到的拉伸率。

A1算例中 $Da > 1$ 的概率极小, A2算例中 $Da > 1$ 的几率接近0.35(实验为33.9%)。A2算例整体发生熄火, 说明对此钝体以 $Da > 1$ 条件判断熄火的话, 要累计35%的局部火焰满足该条件方能熄火, 整体熄火过程是由于众多局部熄火累计而发生。所以, 判断该钝体熄火的条件为局部 $Da > 1$ 的区域 $> 35\%$ 。之所以不取特定的 Da 数值, 是因为局部拉伸率的值可以非常大, 但是局部熄火不需要判定特定的值, 只需要判断状态即可, 局部熄火 $> 35\%$ 即会发生整体熄火。

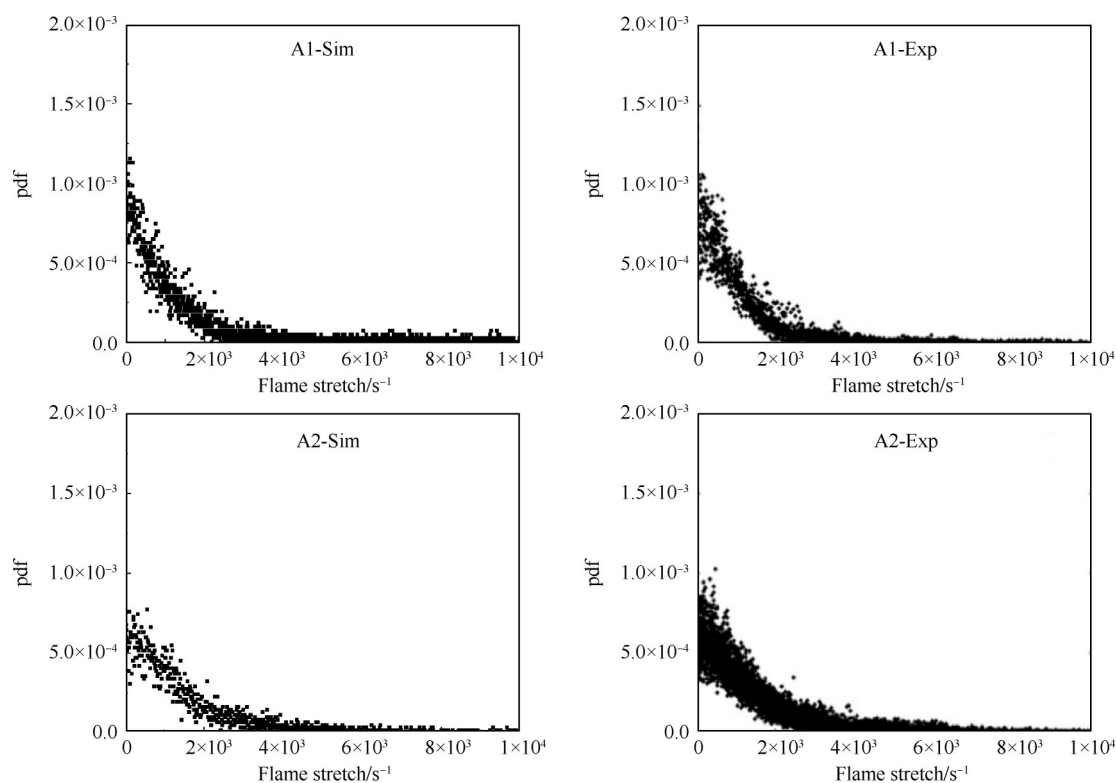


Fig. 12 Comparison of simulation and experimental results

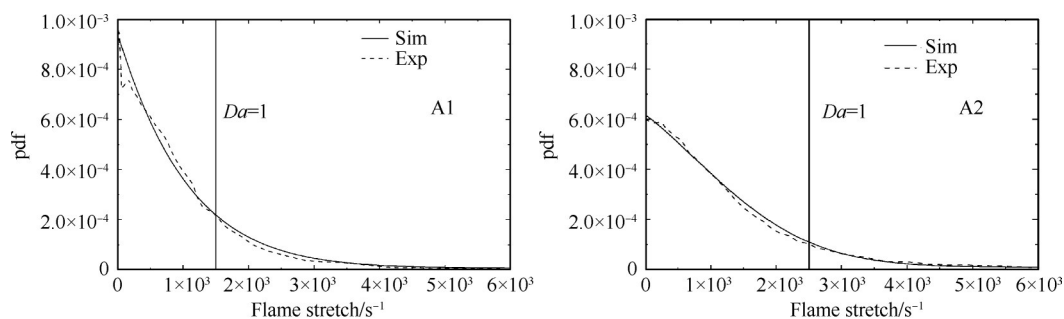


Fig. 13 Flame tensile ratio pdf curve comparison

4 结 论

通过本文对于三种机理的比较以及近熄火状态的分析,得出以下结论:

(1) 机理选取对钝体熄火模拟关系影响很大。JL4 机理组分、反应最为简单,由于缺少合适的中间产物使得释热速率高,无法模拟熄火时的状态。而 H73 机理与 Z66 机理模拟结果相近。但 H73 的 OH 生成率过高,导致了火焰内部的 OH 分数较高,放热非常稳定。这也是 H73 无法正常模拟出熄火的主要原因。

(2) 钝体熄火分为两个过程,一是火焰拉伸率增高而导致的火焰面撕裂,宽度减小直至断裂的过程。此过程的火焰放热部分依旧存在于高涡量地区,与稳定时的规律基本一致。二是火焰断裂后缩入回流区的过程。此时的回流区内成为了放热最大的部位。此时火焰与涡量相关性很低,缩入回流区后会随着漩涡运动带来的扰动逐步继续向钝体后侧缩进直至完全熄火。

(3) 火焰拉伸率是判断火焰状态的一个比较全面的参数。作为熄火判据时,可以根据局部 Da 进行判断。本文算例有 35% 区域局部 $Da > 1$ 时,会发生整体熄火现象。

致 谢:感谢国家自然科学基金、国家科技重大专项、英国皇家学会国际牛顿学者项目的资助,感谢帝国理工 William P Jones 教授及热流体研究中心的同行。

参考文献

- [1] Longwell J P, Frost E E, Weiss M A. Flame Stability in Bluff Body Recirculation Zones[J]. *Industrial and Engineering Chemistry*, 1953, 45(8): 1629-1633.
- [2] Zukowski E E. Flame Stabilization on Bluff Bodies at Low and Intermediate Reynolds Numbers[D]. *California: California Institute of Technology*, 1954.
- [3] Glassman I. Combustion[M]. *San Diego: Academic Press*, 1996.
- [4] Turns S A. An Introduction to Combustion[M]. *New York: McGraw Hill*, 2000.
- [5] Nair S, Lieuwen T. Near-Blowoff Dynamics of a Bluff-body Stabilized Flame[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2007 (23) 421-427.
- [6] Shanbhogue S J, Husain S, Lieuwen T. Lean Blowoff of Bluff Body Stabilized Flames: Scaling and Dynamics[J]. *Progress in Energy & Combustion Science*, 2009, 35(1): 98-120.
- [7] Tuttle S G, Chaudhuri S, Kopp-Vaughan K M, et al. Lean Blowoff Behavior of Asymmetrically-Fueled Bluff Body-Stabilized Flames[J]. *Combustion and Flame*, 2013, 160(9): 1677-1692.
- [8] Chaudhuri S, Kostka S, Renfro M W, et al. Blowoff Dynamics of Bluff Body Stabilized Turbulent Premixed Flames[J]. *Combustion and Flame*, 2010, 157(4): 790-802.
- [9] Lee C Y, Li L K B, Juniper M P, et al. Nonlinear Hydrodynamic and Thermoacoustic Oscillations of a Bluff-Body Stabilised Turbulent Premixed Flame[J]. *Combustion Theory and Modelling*, 2016, 20(1): 1-23.
- [10] Kedia K S, Ghoniem A F. The Blow-off Mechanism of a Bluff-Body Stabilized Laminar Premixed Flame[J]. *Combustion and Flame*, 2015, 162(4): 1304-1315.
- [11] Morales A J, Lasky I M, Geikie M K, et al. Mechanisms of Flame Extinction and Lean Blowout of Bluff Body Stabilized Flames[J]. *Combustion and Flame*, 2019, 203: 31-45.
- [12] Wu Bi-fen, Zhao Xin-yu, Chowdhury B R, et al. A Numerical Investigation of the Flame Structure and Blowoff Characteristics of a Bluff-Body Stabilized Turbulent Premixed Flame[J]. *Combustion and Flame*, 2019, 202: 376-393.
- [13] Hodzic Erdzan, Jangi Mehdi, Szasz Robert-Zoltan, et al. Large Eddy Simulation of Bluff Body Flames Close to Blow-Off Using an Eulerian Stochastic Field Method[J]. *Combustion and Flame*, 2017, 181: 1-15.
- [14] Giusti A, Mastorakos E. Detailed Chemistry LES/CMC Simulation of a Swirling Ethanol Spray Flame Approaching Blow-Off[J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2017, 36: 2625-2632.
- [15] Lignell David O, Chen Jacqueline H, Schmutz Hans A. Effects of Damköhler Number on Flame Extinction and Reignition in Turbulent Non-Premixed Flames Using DNS[J]. *Combustion and Flame*, 2011, 158(5): 949-963.
- [16] 金 捷, 刘邓欢. 航空发动机燃烧室湍流两相燃烧模型发展现状[J]. *南京航空航天大学学报*, 2016, 48(3): 303-309.
- [17] Valin O L. A Field Monte Carlo Formulation for Calculating the Probability Density Function of a Single Scalar in a Turbulent Flow[J]. *Flow, Turbulence and Combustion*, 1998, 60(2): 157-172.
- [18] Hauke G, Valin O L. Computing Reactive Flows with a Field Monte Carlo Formulation and Multi-Scale Methods[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2004, 193(15-16): 1455-1470.

- [19] Jaber F A, Colucci P J, James S, et al. Filtered Mass Density Function for Large-Eddy Simulation of Turbulent Reacting Flows[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1999, 401(2): 85–121.
- [20] Sandia 实验室数据 [DB/OL]. <https://www.sandia.gov/TNF/DataArch/FlameD.html>, 2003-07-06; <https://tnf-workshop.org/data-archives/pilotedjet/ch4-air/>, 2003-07-06.
- [21] Sung C J, Law C K, Chen J Y. Augmented Reduced Mechanisms for No Emission in Methane Oxidation[J]. *Combustion and Flame*, 2001, 125(1/2): 906–919.
- [22] Chaudhuri S, Kostka S, Tuttle S G, et al. Blowoff Mechanism of Two Dimensional Bluff-Body Stabilized Turbulent Premixed Flames in a Prototypical Combustor[J]. *Combustion and Flame*, 2011, 158(7): 1358–1371.
- [23] Tuttle S G, Chaudhuri S, Kostka S, et al. Time-Resolved Blowoff Transition Measurements for Two-Dimensional Bluff Body-Stabilized Flames in Vitiated Flow[J]. *Combustion and Flame*, 2012, 159(1): 291–305.
- [24] Jones W P, Lindstedt R P. Global Reaction Schemes for Hydrocarbon Combustion[J]. *Combustion and Flame*, 1988, 73: 233–249.
- [25] Zettervall N, Nordin-Bates K, Nilsson E J K, et al. Large Eddy Simulation of a Premixed Bluff Body Stabilized Flame Using Global and Skeletal Reaction Mechanisms[J]. *Combustion and Flame*, 2017, 179: 1–22.
- [26] Shigeki Yamaguchi N O T H. Structure and Blow-off Mechanism of Rod-Stabilized Premixed Flame[J]. *Combustion and Flame*, 1985, 62(1): 31–41.
- [27] Glassman I, Yetter R A. Combustion (Fourth Edition) [M]. London: Academic Press Elsevier, 2008.
- [28] Lutz A E, Kee R J, Grcar J F, et al. OPPDIF: A Fortran Program for Computing Opposed Flow Diffusion Flames[R]. SAND 96-8243, 1996.

(编辑:张 贺)