

# 液体燃料表面脉动火焰蔓延机理数值研究\*

单聪慧, 张慧颖, 程崇律, 徐宝鹏, 赵广

(大连理工大学 能源与动力学院, 辽宁 大连 116024)

**摘要:** 针对液体表面火焰蔓延提出了一种基于气液两相耦合的三维数值模拟模型, 并针对低于闪点温度的液体燃料表面脉动火焰蔓延机理进行了数值研究。本文提出的数值方法成功捕捉到脉动火焰蔓延现象, 预测的火焰蔓延脉动频率及传播速率与实验值吻合良好。本研究表明: 火焰前锋后方存在显著横向对流流动, 促进从慢速蔓延向快速蔓延的转变; 气液两相中的回流区是成对出现的, 即使在快速蔓延阶段火焰前锋下方仍然存在较小的气相回流区; 火焰前锋前方的表面对流流动强度不是始终单调衰减的, 在慢速蔓延阶段存在“双峰流动”特征; 火焰前锋前方的液面温度是单调下降的, 不存在温度“波谷”, 温度“波谷”的发现是存在薄热边界层和实验手段无法分辨薄边界层中的温度梯度导致的。

**关键词:** 火焰蔓延; 热毛细效应; 浮力效应; 闪点温度; 数值模拟

**中图分类号:** V312 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-4055 (2024) 05-2211065-11

**DOI:** 10.13675/j.cnki.tjjs.2211065

## 1 引言

液体燃料表面的火焰蔓延现象是燃烧理论中一个经典问题, 与火灾安全密切相关。液体燃料表面的火焰蔓延特性与燃料的闪点温度密切相关, 当燃料初始温度低于闪点, 液面上方的气体燃料浓度低于可燃极限, 此时需要对火焰前锋前方的液体燃料进行预热并生成可燃混合物, 才能维持火焰传播。因此, 在燃料初温低于闪点条件下的火焰蔓延具有其独特的火焰蔓延特性。

依据液体燃料初温相对于其闪点温度之间的差异, 在低于闪点温度条件下液体燃料表面火焰蔓延表现出三种不同的传播特性<sup>[1]</sup>: 稳定蔓延、脉动蔓延和“伪”稳定蔓延。当初温略低于闪点温度, 火焰蔓延速率保持恒定, 表现出稳定蔓延的特性; 当初温继续降低, 火焰蔓延速率呈现出周期性的变化, 包含了快速蔓延的跳跃阶段和慢速蔓延的爬升阶段(在这个阶段有时会出现火焰前锋滞止或后退现象), 即表现出脉动蔓延特性; 当初温进一步降低, 火焰蔓延速率又恢复恒定, 因为在这个温度范围内的蔓延过程

可看作为脉动波长较大的脉动蔓延, 所以被定义为“伪”稳定火焰蔓延。

脉动蔓延现象是液体燃料独有的火焰传播特性, 针对其蔓延机理, 众多学者围绕火焰前锋附近的传热/传质过程、流动条件以及火焰结构开展了大量研究。实验研究发现, 在脉动蔓延过程中液面处交替出现快速传播的预混火焰前锋和慢速传播的扩散火焰前锋<sup>[2]</sup>。在慢速爬升蔓延阶段, 由于火焰传播速率小于液体表面对流流动速度, 在火焰前锋前方出现由热毛细效应<sup>[3]</sup>诱导的高于闪点温度的液体表面对流区<sup>[1]</sup>, 因此该阶段为液相控制的预热传播阶段。在预热阶段, 火焰前锋前方逐渐生成可燃混合物, 当可燃混合物浓度达到某一临界值火焰前锋以预混方式进行快速传播, 当火焰前锋前方的可燃混合物消耗殆尽, 火焰慢速速度减慢, 开始下一个脉动蔓延过程。

虽然不同学者对脉动火焰蔓延进行了广泛研究, 关于其机理仍然存在很大分歧。Akita<sup>[1]</sup>认为火焰前锋前方的液体表面对流区是引起脉动火焰蔓延的主要原因, 然而在“伪”稳定蔓延中存在相同的对流

\* 收稿日期: 2022-11-23; 修订日期: 2023-12-01。

基金项目: 国家自然科学基金(12172073); 国家科技重大专项(77960800000200007)。

作者简介: 单聪慧, 博士生, 研究领域为燃烧学、计算流体力学。

通讯作者: 徐宝鹏, 博士, 教授, 计算燃烧学, 火灾数值模拟。E-mail: baopengxu@dlut.edu.cn

引用格式: 单聪慧, 张慧颖, 程崇律, 等. 液体燃料表面脉动火焰蔓延机理数值研究[J]. 推进技术, 2024, 45(5):2211065. (SHAN C H, ZHANG H Y, CHENG C L, et al. Numerical simulation of pulsating flame spread over liquid fuel surface [J]. Journal of Propulsion Technology, 2024, 45(5):2211065.)

区<sup>[3]</sup>,因此液体表面对流区不是引起脉动蔓延的唯一控制机理。Sirignano<sup>[3]</sup>通过实验发现,在慢速爬升蔓延阶段火焰前锋前方始终存在一个由液体表面对流和气相浮力效应共同诱导的气相回流区,此回流区可促进燃料在火焰前锋的累积和混合;在快速跳跃蔓延阶段,由于火焰前锋的放热膨胀效应此回流区逐渐消失。为此,Sirignano<sup>[3]</sup>和Schiller等<sup>[4]</sup>认为此气相回流区是引起脉动蔓延的主要原因,然而在“伪”稳定蔓延中观测到同样的气相回流区<sup>[5]</sup>。Glassman等<sup>[6]</sup>认为脉动蔓延是由气相控制的预混火焰传播和液相控制的液体预热扩散火焰传播之间的相互转换导致的。Glassman等<sup>[6]</sup>和Konishi等<sup>[7]</sup>实验发现,在慢速爬升蔓延阶段,火焰前锋前方的液体表面温度并非单调下降,而是在火焰前锋前端存在一个由液体表面对流流动和液体浮力效应引起的低温波谷,由于这个低温区域的温度低于闪点温度,阻碍由爬升阶段向跳跃阶段的转变。然而,在Ito等<sup>[8]</sup>的实验研究以及文献中的相关数值研究<sup>[1,9-13]</sup>中均未发现低温波谷。

综上所述,虽然文献中存在大量的理论研究,但目前支配液体表面火焰在低于闪点温度下脉动蔓延的传热/传质机理仍不明确,相关的实验研究主要依据实验观测到的现象来推测内在机理。火焰在液体燃料表面的蔓延是一个十分复杂的气液两相传热/传质和流动相互紧密耦合问题。实验表明<sup>[8]</sup>典型火焰前锋到液面的距离以及气相回流区的高度均约为1 mm量级,火焰前锋附近的流动条件对燃料表面火焰蔓延过程至关重要,现有的实验手段难以分辨这种小尺度流动。此外,分析火焰蔓延机理需要瞬态三维流场、温度场和浓度场信息,然而目前的实验手段难以满足这种要求。因此,为了进一步揭示液体表面火焰蔓延机理,需要开展相关数值研究,得到气、液两相的瞬时三维流场、温度场和浓度场信息,辅助于现有的实验发现,阐明和完善液体表面火焰蔓延机理。

虽然文献中存在大量的实验研究,但相关数值研究甚少,目前只有加州理工大学研究团队<sup>[10-12]</sup>进行了三维数值研究,国内还未见相关的数值研究。液体表面火焰蔓延的数值研究极其复杂,需要同时求解紧密耦合的气液两相流动,并需要直接求解液面处的马兰戈尼流动和蒸发过程、主体扩散火焰和液面处火焰前锋预混火焰以及可动物性的不可压缩流动。本文针对脉动火焰蔓延的具体特点提出一种气、液两相紧密耦合的三维数学模型,该模型考虑了

可动物性燃料物性、气相多组分物质扩散系数和有限速率化学反应,并利用该模型开展了脉动火焰蔓延机理的数值研究。通过分析火焰前锋的火焰结构、气液两相在火焰前锋上下游的流动、气相燃料浓度场分布和传热/传质规律,以及横向流动对火焰蔓延特性的影响,进一步厘清脉动火焰蔓延的机理。

## 2 数学模型

脉动火焰蔓延是一种在液面处存在显著质量、动量及能量交换的双向气液耦合问题。本文根据气液两相的不同流动特性构建了不同的控制方程,并通过保证液面处的质量、动量以及能量平衡实现气液两相之间的双向耦合。

### 2.1 气相控制方程

气相流动可作为由浮力驱动层流流动处理,直接求解考虑浮力效应和具有化学反应源项的可压缩Navier-Stokes控制方程组。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial (\rho_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m) = \dot{\rho}_m^c \quad (2)$$

$$m = 1, \dots, N - 1$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \nabla p + \rho \mathbf{g} \quad (3)$$

$$\frac{\partial (\rho h_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h_s \mathbf{u}) = \frac{\partial p}{\partial t} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \dot{Q}^c \quad (4)$$

式中 $t, \rho, \mathbf{u}, \rho_m, p, \mathbf{g}, h_s, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{q}$ 以及 $N$ 分别为时间、混合物密度、速度矢量、组分分密度、压力、重力、显焓、粘性应力张量、热流密度以及组分数目, $\mathbf{v}_m$ 为气体组分的质量扩散速度,采用混合平均方法进行计算, $\dot{Q}^c$ 为化学反应源项。

气体组分的扩散速度采用混合平均方法进行计算,即

$$\mathbf{u}_m = -\frac{D_m}{X_m} \nabla X_m \quad (5)$$

式中 $D_m$ 和 $X_m$ 分别为混合物的平均扩散系数和摩尔分数。

粘性应力张量由下式计算

$$\boldsymbol{\tau} = -\frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} + \mu [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T] \quad (6)$$

式中 $\mu$ 和 $\mathbf{I}$ 分别为动态黏度和单位张量。

能量方程中的热流密度定义为

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \rho \sum_{m=1}^N h_{s,m} Y_m \mathbf{V}_m \quad (7)$$

式中 $\lambda, T$ 以及 $h_{s,m}$ 分别为气体导热系数、温度以及组

分显焓;  $Y_m$  为组分  $m$  的质量分数。

动态黏度  $\mu$ 、导热系数  $\lambda$  及  $D_m$  采用半经验公式进行计算<sup>[14]</sup>

$$\mu = \frac{\sum_{m=1}^N X_m \mu_m}{\sum_{j=1}^N X_j \phi_{mj}} \quad (8)$$

$$\lambda = \frac{1}{2} \left( \sum_{m=1}^N X_m \lambda_m + \frac{1}{\sum_{m=1}^N X_m / \lambda_m} \right) \quad (9)$$

$$D_m = \frac{\sum_{j \neq m}^N (X_j + \varepsilon) W_j}{\bar{W} \sum_{j \neq m}^N (X_j + \varepsilon) D_{mj}} \quad (10)$$

式中  $W_j$  和  $\bar{W}$  分别为组分摩尔质量以及混合气体的摩尔质量。 $\phi_{mj}$  为粘性系数和分子量的函数,其定义式参见文献[15],  $\mu_m$  以及  $D_{m,j}$  通过标准分子动力学理论进行计算<sup>[16]</sup>,  $\lambda_m$  采用 Warnatz<sup>[14]</sup> 的方法进行计算。

控制方程组中的化学源项  $\dot{\rho}_m^c$  及  $\dot{Q}^c$  由单步化学反应机理确定,即

$$\dot{\rho}_F^c = -W_F \dot{\omega}_r \quad (11)$$

$$\dot{\rho}_{O_2}^c = -v_{O_2} W_{O_2} \dot{\omega}_r \quad (12)$$

$$\dot{\rho}_{CO_2}^c = v_{CO_2} W_{CO_2} \dot{\omega}_r \quad (13)$$

$$\dot{\rho}_{H_2O}^c = v_{H_2O} W_{H_2O} \dot{\omega}_r \quad (14)$$

$$\dot{Q}^c = Q_r \dot{\omega}_r \quad (15)$$

式中  $v_{O_2}$ ,  $v_{CO_2}$  以及  $v_{H_2O}$  为反应系数,  $\dot{\omega}_r$  为化学反应速率,  $Q_r$  为绝对零度时的化学反应热,上标 C 代表化学反应源项,下标 r 代表化学反应。

## 2.2 液相控制方程

液相流动为由热毛细效应和浮力效应共同驱动的不可压缩层流流动。本文求解考虑浮力效应和可变量性的不可压缩控制方程组:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (16)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \nabla p + \rho \mathbf{g} \quad (17)$$

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h \mathbf{u}) = \nabla \cdot \left( \frac{\lambda}{c_p} \nabla h \right) \quad (18)$$

式中  $\lambda$  及  $c_p$  分别为液体燃料的导热系数以及比热。

## 2.3 气液交界面处耦合边界条件

### 2.3.1 动量平衡条件-考虑热毛细效应的速度边界条件

本文采用笛卡尔坐标系,液面平行于  $x$ - $y$  平面。由热毛细效应驱动的液体表面对流速度取决于液面温度梯度。

$$\mu_l \frac{\partial u_l}{\partial z} - \mu_g \frac{\partial u_g}{\partial z} = \frac{\partial \sigma}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x} \quad (19)$$

$$\mu_l \frac{\partial v_l}{\partial z} - \mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} = \frac{\partial \sigma}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial y} \quad (20)$$

式中下标 l 和 g 分别代表液相及气相参数,  $\frac{\partial \sigma}{\partial T}$  为表面张力温度系数。

### 2.3.2 质量平衡条件-蒸发速率

液体燃料在火焰加热条件下发生相变,并在液面处产生气体组分浓度梯度,形成各组分相互扩散的物质流,即 Stefan 流。基于气液平衡假设,且环境压力为 0.1 MPa,液面处的气态燃料的摩尔浓度根据 Clausius-Clapeyron 公式进行计算。

$$X_{\text{Equil}} = \exp \left[ \frac{\Delta H_v}{R_g} \left( \frac{1}{T_s} - \frac{1}{T_b} \right) \right] \quad (21)$$

式中  $\Delta H_v$ ,  $R_g$ ,  $T_s$  以及  $T_b$  分别为气化热、气体常数、表面温度以及燃料沸点温度。蒸发速率  $\dot{m}$  由下式确定

$$\rho_g D \frac{\partial Y_F}{\partial z} = \dot{m} (Y_F - 1) \quad (22)$$

$$\rho_g D \frac{\partial Y_i}{\partial z} = \dot{m} Y_i, \quad i \neq F \quad (23)$$

式中  $D$  为扩散系数,下标 F 代表燃料组分。

### 2.3.3 能量平衡条件-基于共轭传热的热边界条件

气相热反馈作用于液面,致使燃料升温并蒸发。因此液面处的热边界为表达式为

$$T_l = T_g \quad (24)$$

$$\lambda_l \frac{\partial T_l}{\partial z} + m \Delta H_v = \lambda_g \frac{\partial T_g}{\partial z} \quad (25)$$

式中下标 l 和 g 分别代表液相和气相。

## 2.4 数值方法

在基于 C++ 语言的开源 CFD 平台 OpenFOAM 自主开发求解器 flameSpreadFOAM,将上述数学模型植入其中。该求解器采用 PISO 和 SIMPLE 相结合的 PISO 算法处理压力-速度耦合问题。将计算区域划分为气液两个子区域,并在每个子区域内生成正交网格;采用有限体积法对气液两相的控制方程进行空间离散。利用设定的气液交界温度求解相应的能量输运方程,得到新的温度解。重复此迭代过程,直到满足收敛标准。求解示意图如图 1 中所示。

非稳态项采用二阶精度的时间后插格式,动量方程中的对流项采用二阶精度的高斯线性离散格式,标量方程中对流项采用二阶精度的限制线性离散格式以抑制数值振荡,所有的扩散项均采用二阶精度的高斯离散格式。

## 3 问题描述

本文以 Miller 等<sup>[17]</sup> 的火焰蔓延实验为研究对象,对模型进行验证和开展脉动蔓延机理的数值研究。

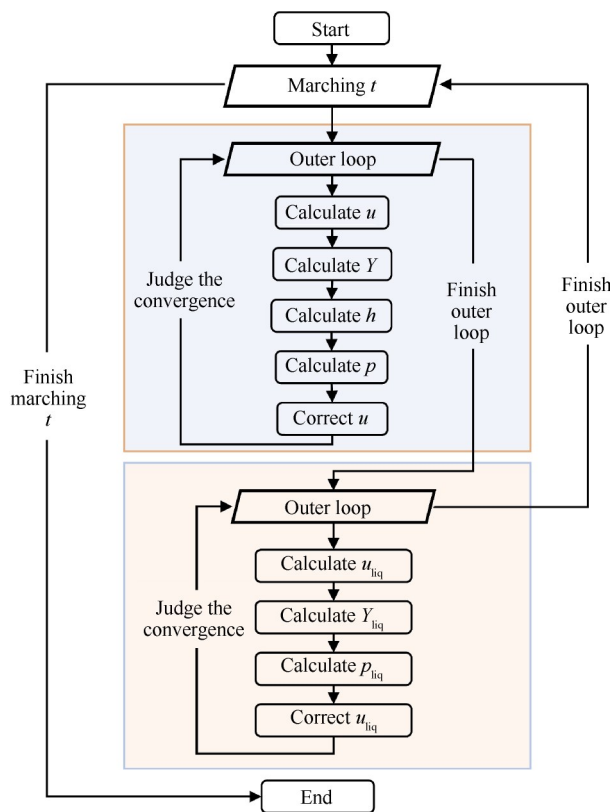


Fig. 1 flameSpreadFOAM solution process

### 3.1 计算区域

图 2 为计算区域示意图。图中灰绿色部分为液相区域,橘色部分为气相区域。液相区域(油池)长度为 16 cm,宽 2 cm,燃料深度  $d$  分别为 2 mm, 5 mm 及 10 mm。为减小点火过程对气相区域左侧边界产生的流动影响,气相区域在燃料池左侧扩展 3 cm,同时气相计算区域沿横向方向分别向两侧扩展 1 cm,气相计算域的高度设为 6 cm。

### 3.2 正丙醇物性参数

正丙醇的闪点温度为  $25\text{ }^\circ\text{C}$ <sup>[17]</sup>,接近室温条件,便于在室温条件下生成脉动火焰蔓延。正丙醇物性参数与温度相关,为方便计算将其物性拟合成温度的多项式

$$P(T) = \beta_0 + \beta_1 T + \beta_2 T^2 + \beta_3 T^3 + \beta_4 T^4 + \beta_5 T^5 \quad (26)$$

拟合多项式的各项系数见表 1。此外,正丙醇的气化热以及沸点分别为  $790\text{ kJ/kg}$ ,  $370.3\text{ K}$ <sup>[18-19]</sup>,表面

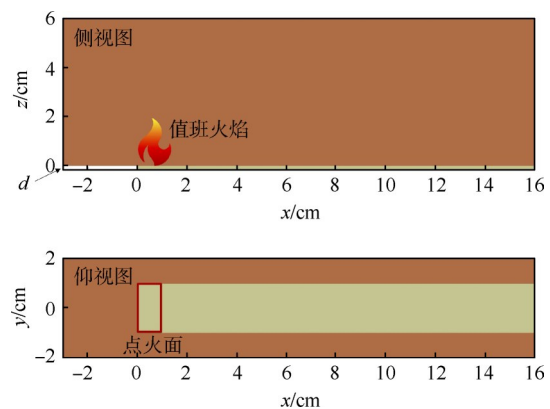


Fig. 2 Computational domain

张力的温度系数为  $-0.08\text{ mN}/(\text{m}\cdot\text{K})$ <sup>[19]</sup>。

文献中已有的火焰蔓延数值模型全都采用单步总包反应机理,成功地对火焰蔓延过程进行了数值模拟,所以本研究也采用了同样方法。正丙醇的全局化学反应式可表示为<sup>[20]</sup>



活化能为  $125.58\text{ kJ/gmol}$ <sup>[20]</sup>,指数前因子为  $2.55 \times 10^{11}\text{ m}^3/(\text{kmol}\cdot\text{s})$ ,该因子已依据层流预混火焰传播速度进行了校准。

### 3.3 网格分辨率

火焰蔓延数值模拟的成败在于能否分辨液面处的流动微结构(毫米量级的回流区)、火焰结构、液面处较大的温度梯度、液面处的气相扩散层等。气、液相在液面处第一层网格高度分别取为  $30\text{ }\mu\text{m}$  以及  $15\text{ }\mu\text{m}$ , Schiller 等<sup>[4]</sup>的研究表明,该尺度足够分辨液面处的梯度。在距液面 3 mm 高度范围内,气相区域的计算网格高度从  $30\text{ }\mu\text{m}$  逐渐增加至 0.5 mm。其他气相区域计算网格高度均保持为 0.5 mm。液体区域的计算网格高度同样从近液面处的  $15\text{ }\mu\text{m}$  逐渐增加到底部面的 0.12 mm。在  $x, y$  方向,采用统一的网格尺寸,均取为 0.5 mm。

为了检查计算网格分辨率对计算结果的影响,在气液两相在液面处网格高度大小保持不变的前提下,将气相区域的主体网格(边界层外的网格)大小由 0.5 mm 减小至 0.25 mm,同时为减少计算时间,油

Table 1 Thermo-physical properties for 1-propanol<sup>[19]</sup>

属性	$\beta_0$	$\beta_1$	$\beta_2$	$\beta_3$	$\beta_4$	$\beta_5$
密度/( $\text{kg}/\text{m}^3$ )	$-4.9672 \times 10^3$	93.030 6	-0.587 2	$1.84 \times 10^{-3}$	$-2.8755 \times 10^{-6}$	$1.7949 \times 10^{-9}$
比热/( $\text{kJ}/(\text{kg}\cdot\text{K})$ )	$8.0983 \times 10^3$	-1 312	0.848 7	-0.274	$4.407 \times 10^{-6}$	$-2.8301 \times 10^{-9}$
黏度/( $\text{Pa}\cdot\text{s}$ )	6.938 9	-0.106 7	$6.5715 \times 10^{-4}$	$-2.0256 \times 10^{-6}$	$3.1217 \times 10^{-9}$	$-1.9231 \times 10^{-12}$
导热系数/( $\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ )	7.182 8	-0.109 7	$6.9108 \times 10^{-4}$	$-2.1932 \times 10^{-6}$	$3.4482 \times 10^{-9}$	$-2.2436 \times 10^{-12}$

池长度取为 10 cm。

计算表明两种网格分辨率下的火焰前锋的火焰厚度均约为 4 mm, 两种网格尺度均能很好地分辨火焰结构。图 3 为网格分辨率敏感性分析结果。火焰前锋定义在最大化学反应速率处, 对流前锋则定义在表面对流流动速度衰减至 0.5 cm/s 处的位置, 该速度约为最大表面对流速度的 3%。两种网格分辨率下预测的平均蔓延速率以及脉动波长均与实验<sup>[17]</sup>值吻合良好, 因此本文采用 0.5 mm 的主体计算网格。

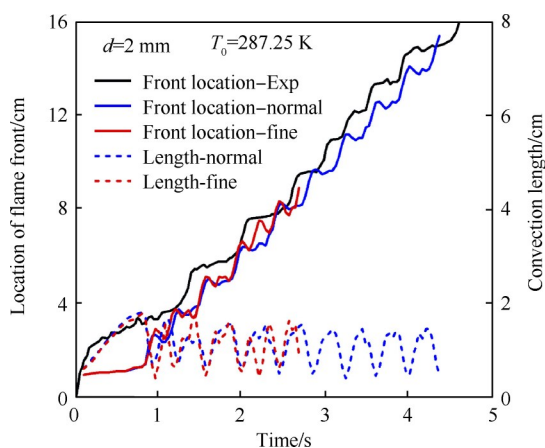


Fig. 3 Results of grid sensitivity study

### 3.4 点火

低于闪点温度的液体燃料需经过预热才能实现点火。为了缩短点火时间, 本研究采用与 Li 等<sup>[18]</sup>同样的点火方案, 即在油池左端设置固定的点火面, 如图 2 所示。点火面为长 2 cm、宽 1 cm 的矩形区域, 数值模拟过程中设定该点火面的气相燃料质量分数为 0.3。在点火面中心位置上方 2 mm 处设置一个边长为 4 mm 的正方体点火源, 点火源内温度在 1 ms 内上升至 1 700 K, 总点火时长为 20 ms。当火焰开始向前蔓延, 其蔓延速率不再受点燃火焰的影响。

### 3.5 初始及边界条件

初始燃油温度设为 287.3 K, 气相区域的初始环境温度均设为 293 K。实验中的燃料池壁面进行了绝热处理, 因此所有固体壁面设置为绝热、无滑移边界条件。气相区域的侧面和顶部设为自由边界条件。

## 4 结果与讨论

预测的火焰形状如图 4 所示, 火焰面由化学反应速率等值面表示, 火焰面由火焰温度进行了渲染。整个火焰面由贴近液面的火焰蔓延前锋及其后方的主体火焰构成。主体火焰为非预混火焰, 在蔓延过程中发生上下脉动现象; 火焰前锋为预混火焰, 在传

播过程中发生前后脉动现象。火焰前锋前方为由热毛细效应诱导的液体表面对流流动。

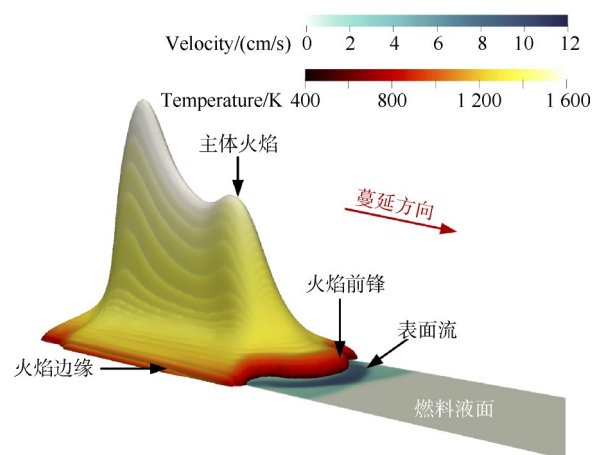


Fig. 4 Predicted flame shape over fuel surface with subsurface flow

图 5 为火焰前锋位置模拟值与实验值的对比。三种燃料深度条件下火焰前锋预测的位置和脉动波长与实验数据<sup>[17]</sup>吻合较好。火焰跳跃速度即火焰前锋向前跳跃阶段的火焰传播速率, 在三种情况下几乎保持 13 cm/s 的速度不变, 与 12.5 cm/s 的实验观测值非常吻合。值得指出的是, 火焰跳跃速度在第一个脉动周期受点火的影响较大, 而这种影响在接下来几个脉动周期内逐渐减小。

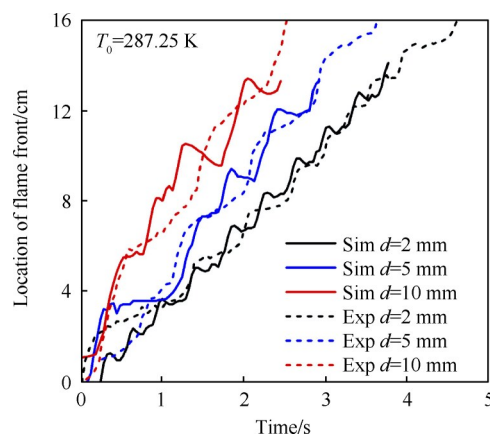


Fig. 5 Comparisons of simulation flame front locations with the experiment data

图 6 显示在燃料深度为 2 mm 情况下, 气相区域中在  $z=1$  mm 的水平面上四个不同时刻脉动火焰蔓延的演变过程, 火焰蔓延前锋由化学反应速率等值线表征。预测的火焰前锋呈现出凸凹交替变化的形状, 这与 1~2 cm 宽的窄油池火焰蔓延实验观测结果一致<sup>[5]</sup>。这种交替变化的火焰前锋形状是由油池中

心部分和燃料池边缘部分相反的脉动相位导致的。

图中的四个典型时刻以火焰前锋中心处的脉动相位为基准,分别对应于:

$t_1$ 时刻:快速蔓延结束时刻,此时火焰前锋追赶上对流前锋,表面对流长度(火焰前锋与表面对流前锋之间的距离)最小。

$t_2$ 时刻:缓慢蔓延阶段,此时火焰前锋传播速度减缓,表面对流前锋逐渐远离火焰前锋,表面对流长度逐渐增加。

$t_3$ 时刻:快速蔓延开始时刻,此时表面对流长度最大。

$t_4$ 时刻:处于快速蔓延阶段,此时表面对流长度逐渐减小,火焰前锋逐渐接近对流前锋。

图6中的气相燃料质量分数的分布表明中央区域的气相燃料浓度很高,存在朝向火焰前锋的扩散通量,这有利于火焰前锋处可燃混合物的生成,从而促进火焰蔓延过程。图中可见由气相浮力诱导的由两侧向内部的流动速度约为20 cm/s,其数值远大于蔓延速度和表面对流速度。

图7为对应上述四个典型时刻的液面温度演变过程。火焰前锋位置位于红蓝交界处。燃料池边缘和火焰前锋处存在较大的温度梯度,诱导出横向和纵向表面对流流动,流向火焰前锋,对火焰前锋处燃料进行预热,促进火焰蔓延过程。从图7中可见火焰前锋前方存在明显的对流区,对流区内的流体温度

在300~320 K,高于燃料闪点温度。 $t_1$ 时刻为快速蔓延结束时刻,火焰前锋中心处表面对流速度较高,在燃料池边缘处表面对流速度较小; $t_2$ 时刻,火焰前锋中心处的表面对流速度开始衰减,而边缘处速度开始逐渐增加;在 $t_3$ 时刻,边缘处速度达到最大,而中心处最小,呈现出内凹形火焰前锋;在 $t_4$ 时刻,中心区火焰开始加速,火焰前锋呈现出外凸形状。由此可见,在中心处和边缘处的火焰蔓延的相位始终是相反的。

图8为液面速度在不同时刻的演变过程。图中可见火焰前锋前端始终存在速度较高的带状对流区,对流前锋的形状受到火焰前锋影响呈现出轻微的凹凸形状交替现象。在 $t_1$ 时刻,快速蔓延结束阶段内,高流速对流区向前移动并追赶上对流前锋的位置;在 $t_2$ 时刻,高速对流区由于惯性继续向前传播,但是其强度不断衰减,同时在火焰前锋位置由于热毛细效应诱导出新的高速对流区;在 $t_3$ 时刻,由于火焰前锋中心处与两端的脉动相位相反,高速对流区呈现出“V”型结构;在 $t_4$ 时刻,火焰前锋中心处于快速蔓延阶段,在中心处诱导出高速对流区。

图9为液面中心线处温度和速度在不同时刻的变化趋势。 $t_1$ 时刻为快速蔓延起始时刻,火焰前锋和对流前锋之间的对流长度达到了最大值1.5 cm,在火焰前锋前端液面温度首先快速下降,而后稳步下降到燃料初始温度。从图中可以看出火焰前锋前方存在较大的表面温度高于闪点温度的区域,火焰可以

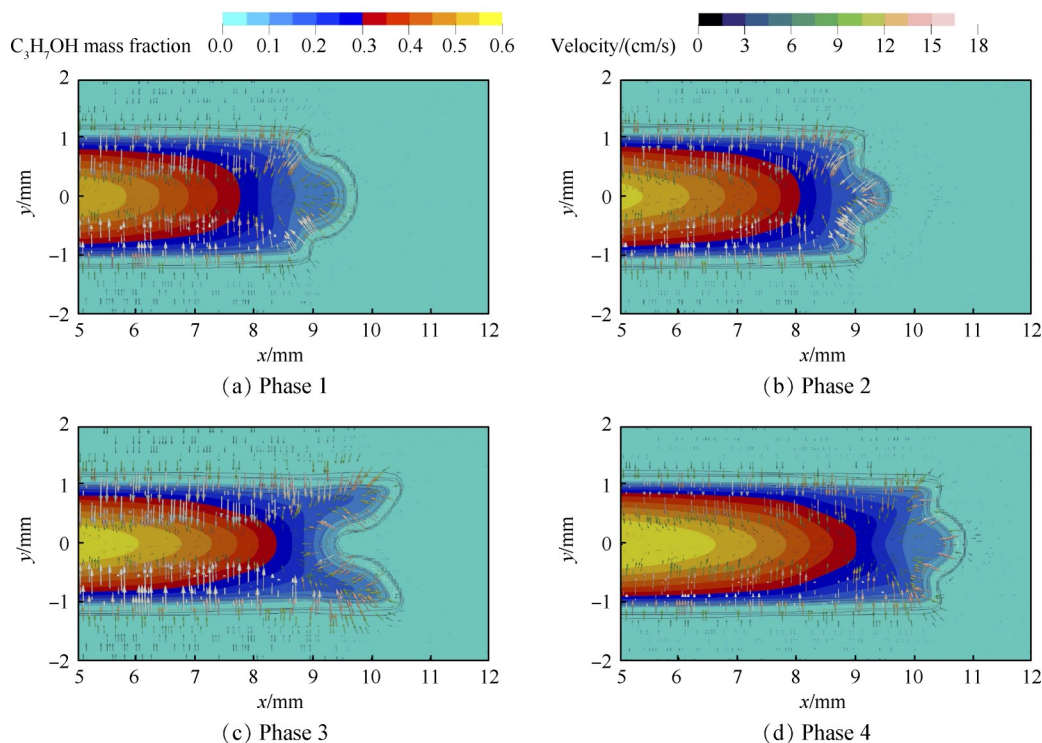


Fig. 6 Evolution of flame front on the horizontal plane of  $z=1$  mm during the four phases over 2 mm deep pool

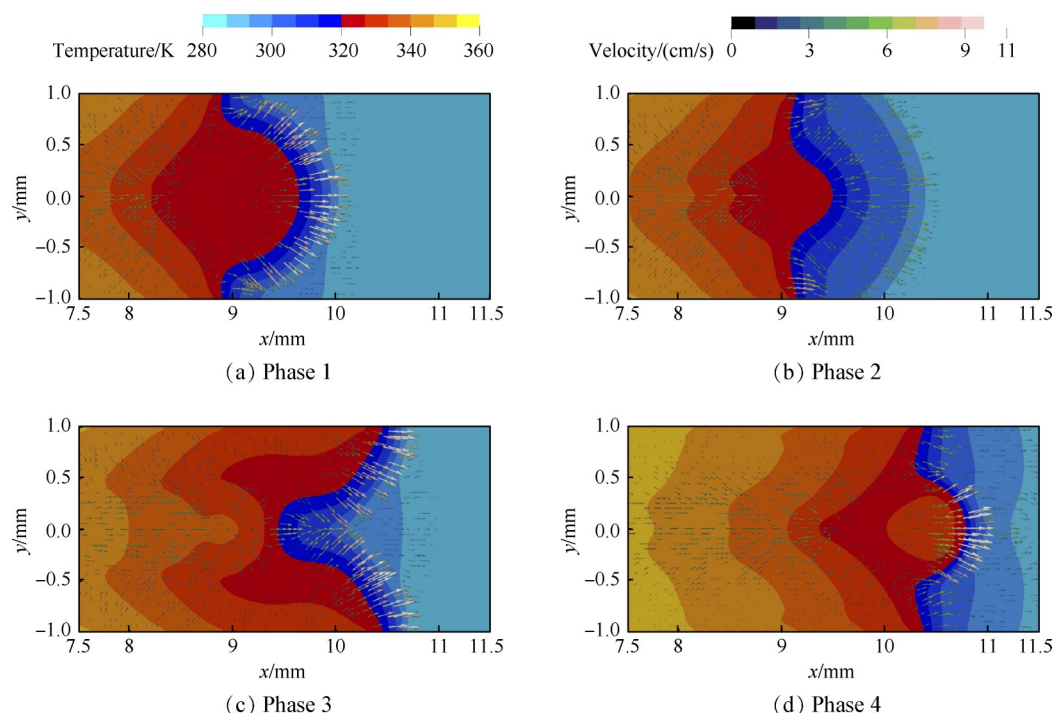


Fig. 7 Evolution of surface temperature on the fuel surface during the four phases over 2 mm deep pool

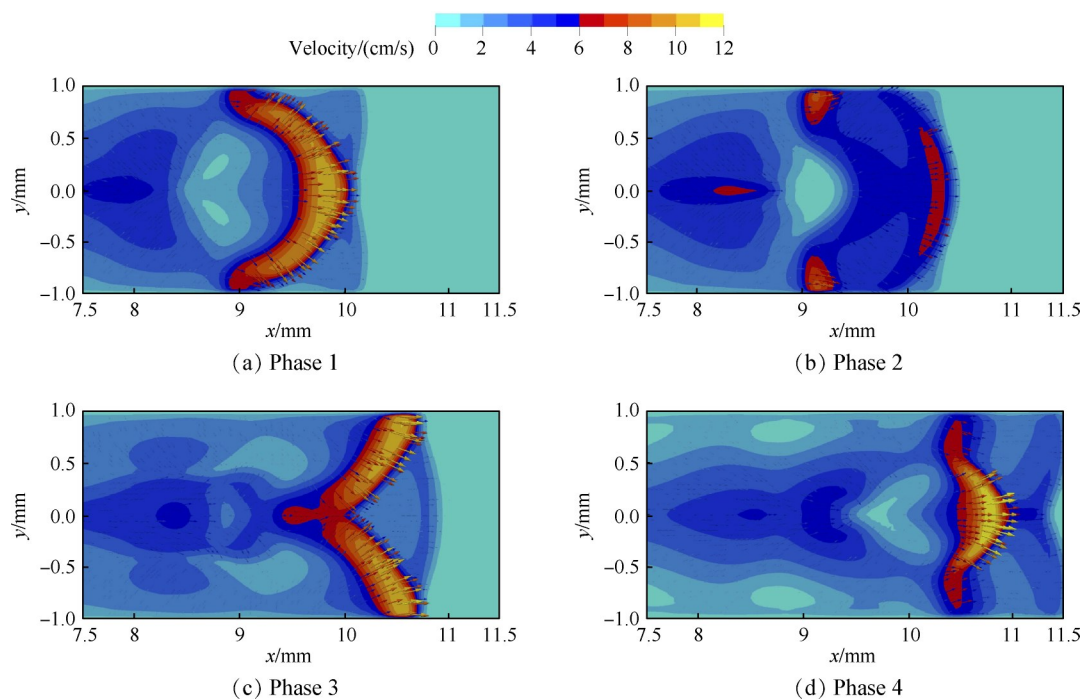


Fig. 8 Evolution of surface velocity on the fuel surface during the four phases over 2 mm deep pool

在该区域内进行传播。由于液体表面对流速度是由温度梯度引起的,因此表面对流速度峰值始终略微滞后于相应的温度峰值。在 $t_1$ 时刻,表面对流速度在火焰前锋前方非单调下降而是出现如图9中所示的两个峰值,这一变化规律与图7中 $t_2$ 时刻中的速度分布相对应。时刻“2~5”对应于快速蔓延阶段,其表面温度和速度均高于 $t_1$ 时刻, $t_3$ 时刻的最大表面流速和

温度分别为15 cm/s和340 K。在 $t_6$ 时刻火焰前锋几乎停滞,最高温度下降至330 K,温度和速度值均线性下降到初始值。 $t_7$ 时刻的温度和速度峰值位置较 $t_6$ 时刻后缩,速度峰值大幅下降,表明火焰前锋在 $t_7$ 时刻发生后退现象,表面对流流动持续衰减,然而温度却因表面对流的加热而略有升高。在这里特别值得指出的是,在本研究中预测结果显示,液面温度在火

焰前锋前端始终是单调下降的,未出现温度“波谷”,这与 Schiller 等<sup>[4]</sup>的数值模拟预测结论是一致的,下面会对具体原因做进一步分析。

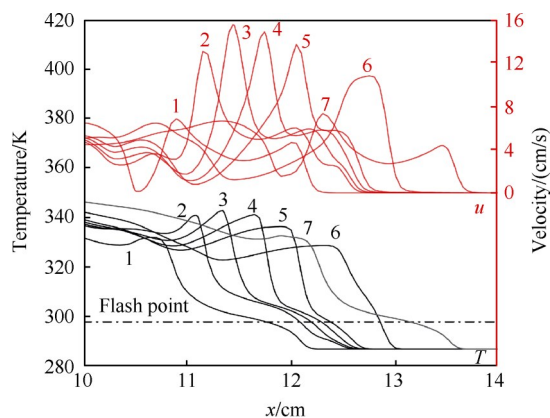


Fig. 9 Profiles of surface temperature and velocity on the central line at successive moments over 2 mm deep pool

图 10 为  $y=0$  的纵向中心截面处气液两相流动结构在不同时刻的演变过程。在  $t_1$  时刻,由于火焰前锋前方的可燃混合物浓度不足以维持火焰蔓延,导致火焰前锋停滞,并在火焰前锋处形成一对反向回流区(如图中黄、红箭头所示),其中气相回流区可促进可燃混合物在火焰前锋处积聚。气相回流区是由热毛细效应和浮力效应共同诱导的;而液相回流区是由热毛细效应和粘性效应联合诱导的。在  $t_2$  时刻,由于火焰传播速度减慢,由浮力效应诱导的气相逆向流动增强,阻碍可燃混合物在火焰前锋处聚集,导致火焰前锋略微后退,并伴随火焰前锋倾角(火焰与液面的夹角)增大。由于对流前锋几乎以恒定的速度向前移动,导致液体表面流长度增加,同时气液两相中的成对回流区也随之向前传播并伴随着回流中心高度略有降低。在  $t_3$  时刻火焰前锋继续后退,气相中逆向流动强度进一步增强,在  $t_2$  时刻中随着表面流向前传播的成对的回流区强度逐渐衰减(如 Phase 3 中一对白色旋转箭头所示),而在  $t_3$  时刻中火焰前锋处又诱导出一对新的回流区(如图中黄、红旋转箭头所示),这与 Ito 等实验<sup>[8]</sup>观察一致。由于在慢速蔓延阶段气体燃料在火焰前锋前方不断累积、可燃混合物浓度随之增加,最终导致  $t_4$  时刻中由于化学反应速率快速增加而引起的火焰前锋加速向前蔓延,此阶段中由于火焰前锋倾角变小而靠近液面,同时火焰前锋略微向液面移动,进一步加强了对下方液体的加热作用,促进火焰的快速传播。在  $t_4$  时刻的快速蔓延阶段火焰前锋快速向前传播,火焰前锋处的气体膨胀“摧毁”前方的气相回流区,并在火焰前锋前方形

成顺流流动条件,与此同时火焰前锋正下方又生成一个气相回流区。随后火焰前锋追赶上对流前锋,火焰前锋前端的燃料浓度不足以维持快速火焰蔓延,其传播速度减慢,进入下一个脉动蔓延循环。

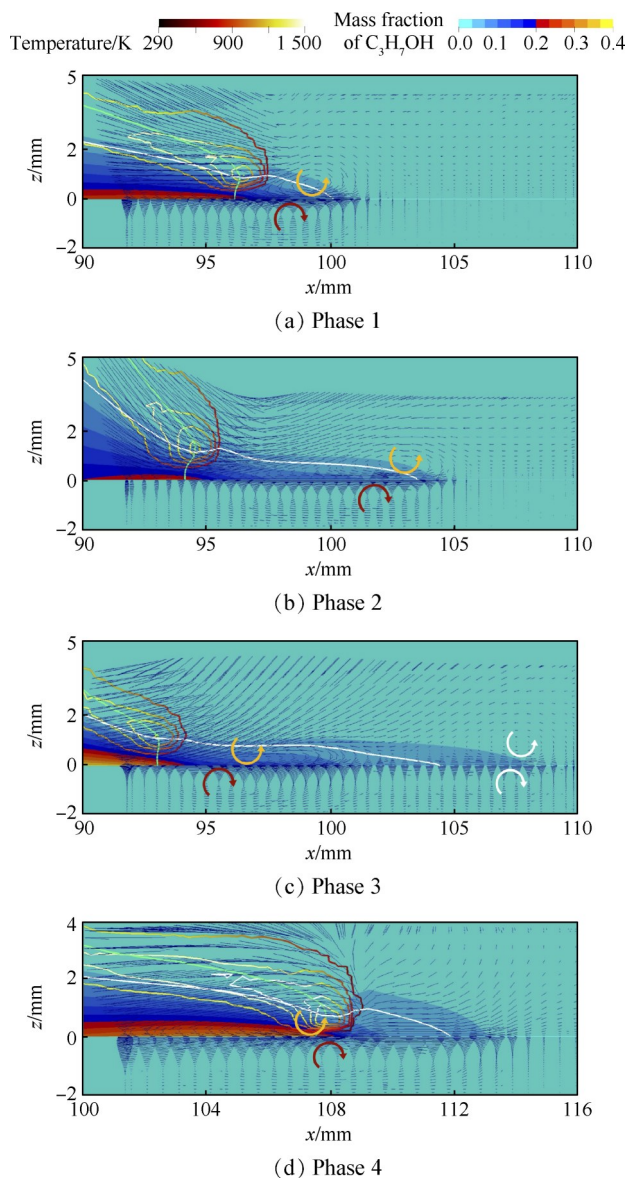
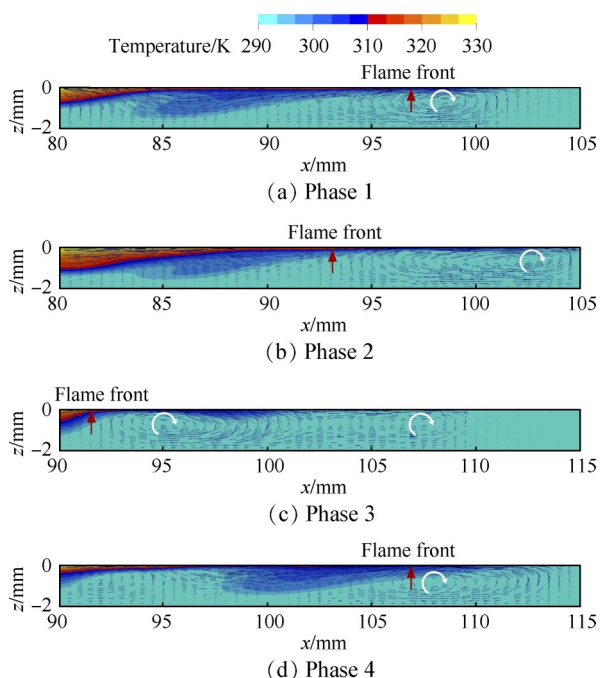


Fig. 10 Evolution of the flow structures at the flame front in the middle plane over the 2 mm deep pool

图 11 为  $y=0$  的纵向中心截面处液相热边界层结构在不同时刻的演变过程。图中用红色箭头标记火焰前锋所在位置,在火焰前锋下方可观察到波浪状的热边界层结构,这与 Ito 等<sup>[8]</sup>的实验观察结果一致。火焰前锋处的热边界层结构与液相回流区密切相关,顺时针方向的回流区将液面热流体向下输送,增加了热边界层的厚度,同时将冷流体向上输运,阻止火焰前锋前端的热边界层生长。如图 11 所示,在慢速蔓延阶段(时刻“2”和“3”),火焰前锋前方的热边



界层非常薄,其厚度仅0.3 mm。薄热边界层的位置与前面提到的温度“波谷”的位置一致,然而温度“波谷”仍存在争议,因为它只在部分实验中观测到并且其形成机制尚不完全清楚。Konishi等<sup>[7]</sup>将温度“波谷”的形成归因于液面对流流动和浮力效应综合作用的结果,但是目前普遍认为在火焰的脉动蔓延过程中浮力效应是可以忽略的<sup>[5]</sup>。此外,由于温度波谷处的热边界层厚度仅为0.3 mm,加之液面处存在较大的温度梯度,导致其测量极为困难<sup>[5]</sup>。尽管Di Blasi等<sup>[9]</sup>在二维数值模拟中预测到了该温度“波谷”,但使用的网格分辨率远大于热边界层厚度,计算结果实际上是代表热边界层处的平均温度。因此,认为由于实验手段无法分辨薄边界层的存在,导致测量到的液面温度为薄边界层处的平均温度,因此得到温度“波谷”的结论。



**Fig. 11 Evolution of the thermal boundary layer of the liquid phases underneath the flame front in the middle plane over the 2 mm deep pool (The location of the flame front is indicated by red arrows)**

前面讨论的结果是针对2 mm厚度的燃料池,对于燃料深度为5 mm和10 mm的火焰脉动蔓延行为与2 mm的情况类似,这里不再详细讨论。这里值得指出的是,在慢速蔓延阶段预测结果表现出轻微的火焰前锋后退行为。虽然在2 mm情况下实验<sup>[17]</sup>中也观察到火焰前锋存在微小的后退现象,然而在5 mm和10 mm情况下与本研究预测结果不同实验<sup>[17]</sup>中均未观察到火焰前锋后退现象。造成这种差异的原因

可能是燃料池固体壁面的绝热边界条件假设所导致的,火焰蔓延行为对壁面热损失非常敏感,尽管在实验中对壁面做了隔热处理,但仍然会存在一些热损失。Cai等<sup>[11]</sup>的三维数值模拟中采用绝热壁面条件同样预测了火焰后退行为,然而在使用相同计算程序的二维数值模拟中,由于没有考虑壁面热损失,没有预测到火焰前锋后退行为,说明了壁面热损失对火焰蔓延行为有较大的影响。

## 5 结论

通过本文研究,得到以下结论:

(1)该模型可准确地预测火焰蔓延速率和脉动波长,并成功地捕捉到了文献中相关实验观测到的结果。

(2)脉动火焰蔓延机理在于由热毛细效应诱导的液面对流流动,该对流流动将火焰前锋前方的燃料预热到闪点温度以上;当火焰前锋前方的燃料浓度增加到一定数值,火焰前锋在预混条件下实现快速蔓延;当火焰前锋追赶上对流前锋,火焰前锋前方的燃料浓度不足以维持快速火焰传播,进入慢速蔓延阶段,在此阶段表面对流长度增大,火焰前锋前方的燃料浓度不断增加,导致火焰传播速度快速增加,以上阶段循环往复的维持火焰的脉动蔓延过程。

(3)气液两相中的回流区是成对出现的,即使在快速蔓延阶段火焰前锋下方仍然存在较小的气相回流区。

(4)火焰前锋后方存在显著的流向火焰前锋的纵向和横向对流流动,将表面热流体携带至火焰前锋处,促进火焰快速蔓延。

(5)火焰前锋前方的表面对流流动强度不是始终单调衰减的,在慢速蔓延阶段存在双峰流动特点;火焰前锋前方的液面温度是单调下降的,不存在温度“波谷”,温度“波谷”的存在是由于薄热边界层的存在和实验手段无法分辨薄边界层中的温度梯度导致的。

本研究发现油池壁面的热边界条件对火焰蔓延影响显著,在以后的研究工作中将深入探讨不同油池壁面传热条件对火焰蔓延的影响。

**致谢:**感谢国家自然科学基金和国家科技重大专项的资助。

## 参考文献

- [1] AKITA K. Some problems of flame spread along a liquid surface [J]. Symposium (International) on Combustion, 1973, 14(1): 1075-1083.

- [ 2 ] MACKINVEN R, HANSEL J G, GLASSMAN I. Influence of laboratory parameters on flame spread across liquid fuels [J]. *Combustion Science and Technology*, 1970, 1(4): 293-306.
- [ 3 ] SIRIGNANO W A. A critical discussion of theories of flame spread across solid and liquid fuels [J]. *Combustion Science and Technology*, 1972, 6(1/2): 95-105.
- [ 4 ] SCHILLER D N, ROSS H D, SIRIGNANO W A. Computational analysis of flame spread across alcohol pools [J]. *Combustion Science and Technology*, 1996, 118(4/6): 203-255.
- [ 5 ] ROSS H D. Ignition of and flame spread over laboratory-scale pools of pure liquid fuels [J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1994, 20(1): 17-63.
- [ 6 ] GLASSMAN I, DRYER F L. Flame spreading across liquid fuels [J]. *Fire Safety Journal*, 1981, 3(2): 123-138.
- [ 7 ] KONISHI T, TASHTOUSH G, ITO A, et al. The effect of a cold temperature valley on pulsating flame spread over propanol [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2000, 28(2): 2819-2826.
- [ 8 ] ITO A, MASUDA D, SAITO K. A study of flame spread over alcohols using holographic interferometry [J]. *Combustion and Flame*, 1991, 83(3): 375-389.
- [ 9 ] DI BLASI C, CRESCITELLI S, RUSSO G. Model of pulsating flame spread across liquid fuels [J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1991, 23(1): 1669-1675.
- [ 10 ] CAI J S, LIU F, SIRIGNANO W A. Three-dimensional structures of flames over liquid fuel pools [J]. *Combustion Science and Technology*, 2003, 175(11): 2113-2139.
- [ 11 ] CAI J S, LIU F, SIRIGNANO W A. Three-dimensional flame propagation above liquid fuel pools [J]. *Combustion Science and Technology*, 2002, 174(5/6): 5-34.
- [ 12 ] KIM I, SIRIGNANO W A. Computational study of opposed-force-flow flame spread across propanol pools [J]. *Combustion and Flame*, 2003, 132(4): 611-627.
- [ 13 ] SCHILLER D N, SIRIGNANO W A. Opposed-flow flame spread across n-propanol pools [J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1996, 26(1): 1319-1325.
- [ 14 ] WARNATZ J. Influence of transport models and boundary conditions on flame structure [J]. *Numerical Methods in Flame Propagation*, 1982, 6: 87-111.
- [ 15 ] BIRD R B, STEWART W E, LIGHTFOOT E N. *Transport phenomena* [M]. New York: John Wiley & Sons, Inc, 2002.
- [ 16 ] HIRSCHFELDER J, CURTISS C F, BIRD R. *Molecular theory of gases and liquids* [J]. *Physics Today*, 1955, 8: 3-17.
- [ 17 ] MILLER F J, ROSS H D. Further observations of flame spread over laboratory-scale alcohol pools [J]. *Symposium (International) on Combustion*, 1992, 24(1): 1703-1711.
- [ 18 ] LI M H, LU S X, CHEN R Y, et al. Experimental investigation on flame spread over diesel fuel near sea level and at high altitude [J]. *Fuel*, 2016, 184: 665-671.
- [ 19 ] BASF. Technical information data sheet, TI/E-CPI\_1018e\_n-Propanol [EB/OL]. (2021-01-29) [2022-05-17]. <https://www.basf.com/global/en.html>.
- [ 20 ] WESTBROOK C K, DRYER F L. Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames [J]. *Combustion Science and Technology*, 1981, 27(1/2): 31-43.

(编辑:朱立影)

# Numerical simulation of pulsating flame spread over liquid fuel surface

SHAN Conghui, ZHANG Huiying, CHENG Chonglyu, XU Baopeng, ZHAO Guang

(School of Energy and Power Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

**Abstract:** A three-dimensional numerical model based on the coupling between gas and liquid phases was proposed for flame spread over liquid fuel. The proposed model was also used to investigate the mechanism of pulsating flame spread over liquid fuel below the flash point temperature. The pulsating flame spread was successfully captured and both the predicted pulsating frequency and spread rate are in good agreement with experimental data. The following findings were revealed in this study: significant transverse motions exist behind the flame front, facilitating the transition from the crawling stage to the jump stage; the recirculation cells are paired in both the liquid and gas phases and a small recirculation cell was also found under the flame front in the jump stage; the convective surface flow intensity in front of the flame front does not monotonically attenuate and a two-peak flow structure was found in crawling stage; fuel surface temperature monotonically decreases in front of flame front and the temperature valley was not predicted, and the existence of the temperature valley might be due to the fact that the liquid thermal boundary layer is too thin and the inability to resolve the temperature gradient by the current experimental technique.

**Key words:** Flame spread; Thermocapillary effect; Buoyancy effect; Flash point; Numerical simulation

**Received:** 2022-11-23; **Revised:** 2023-12-01.

**DOI:** 10.13675/j.cnki. tjjs. 2211065

**Foundation items:** National Natural Science Foundation of China (12172073); National Science and Technology Major Project of China (77960800000200007).

**Corresponding author:** XU Baopeng, E-mail: baopengxu@dlut.edu.cn