



论文

专题名称

湍流边界层回火的大涡模拟研究

韦江潮, 李文栋, 张文普*

浙江大学航空航天学院, 流体工程研究所, 杭州 310027

*联系人, E-mail: wpzhang@zju.edu.cn

收稿日期: 2025-05-××; 接受日期: 2025-××-××

国家自然科学基金资助项目(编号: 12072321)

摘要 本文应用大涡模拟 (LES) 方法和火焰面生成流形 (FGM) 燃烧模型, 针对氢气/空气混合物的非受限空间湍流边界层回火问题进行了数值模拟, 准确捕捉到了非受限空间湍流边界层回火现象的发生及火焰的动态传播过程。模拟结果表明在非受限空间边界层回火发生时, 火焰需要克服壁面热损失才能进入燃烧器内部, 而且在非受限空间火焰进入上游管道之前, 火焰-来流-壁面相互作用较弱, 没有近壁回流区促进回火发生的机制, 这可能导致相比于受限空间, 非受限空间边界层回火更难以发生。同时, 由于非受限空间 LES 模型存在边界封闭性缺失和复杂的非平衡效应等困难, 导致目前非受限空间的 LES 相关模型并不充分。基于数值研究结果和进一步的理论分析, 本文提出了 Damköhler 数修正模型, 该模型综合考虑了燃烧器边缘温度、层流火焰速度、混合物物性等一系列参数对边界层回火的影响。通过与实验数据进行对比, Damköhler 数修正模型预测结果与文献实验数据符合良好, 表明该修正模型对于非受限空间湍流边界层回火具有准确的预测能力。

关键词 预混燃烧, 湍流边界层回火, 大涡模拟, Damköhler 数模型

PACS: 47.27.ep, 47.27.nb, 47.70.Fw, 47.70.Pq

1 引言

预混燃烧是指将燃料和氧化剂先混合均匀, 然后进行燃烧的一种燃烧方式。预混燃烧可以通过改变当量比来控制燃烧的温度, 进而降低氮氧化物等污染物的生成率, 在燃气轮机等动力机械中, 预混燃烧技术

已经得到了广泛的应用^[1]。但是在预混燃烧过程中, 有时会出现一种火焰从燃烧区域向上游传播进入预混区域的现象, 即回火现象^[2]。回火的发生会破坏燃烧的稳定性, 并对燃烧器结构造成损害。因此, 避免回火发生就成为了燃气轮机制造和使用中的一个重要需求, 而这就需要回火发生的机理进行深入研究。

引用格式: 韦江潮, 李文栋, 张文普. 湍流边界层回火的大涡模拟研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2025, ××: 123456

Jiangchao Wei, Wendong Li, Wenpu Zhang. Large Eddy Simulation Study on the Tempered Turbulent Boundary Layer. Sci Sin-Phys Mech Astron, 2025, ××: 123456, doi: 10.1360/SSPMA2016-00000

目前已知的回火机理主要包括四种^[3]: 中心流回火、燃烧不稳定引发回火、燃烧诱发旋涡破碎引发回火和边界层回火。其中, 边界层回火是指由于靠近壁面处的气流速度降低, 在一定条件下, 当壁面附近的火焰传播速度大于来流速度时, 即使中心区域的火焰传播速度并未超过来流速度, 火焰仍会沿着壁面向上游传播。随着富氢燃料在燃气轮机等动力机械中的使用, 边界层回火成为引发回火的主要机理之一, 这是由于富氢燃料的火焰传播速度较快, 氢气燃烧的层流火焰速度是甲烷的 5 倍以上^[4], 同时氢气燃烧时的熄火距离较小, 这就导致了在使用富氢燃料时, 边界层回火更易发生。为了保证燃气轮机在使用富氢燃料时的稳定运行, 就需要对边界层回火机理的深入研究, 并且构建出能准确预测边界层回火的理论模型。

Lewis 等人^[5]于 20 世纪 40 年代开展的相关研究是边界层回火领域最早的研究之一^[6], Lewis 等人^[5]通过实验发现, 预混火焰在管道或狭窄通道中传播时, 可能逆流进入未燃混合气的边界层区域 (即回火)。他们系统测量了不同燃料 (如氢气、甲烷) 在不同当量比、流速和管道几何下的回火临界条件。最终 Lewis 等人^[5]通过系统的实验建立了经典的临界梯度模型 (Critical Gradient Model, CGM), 模型示意图如图 1 所示。

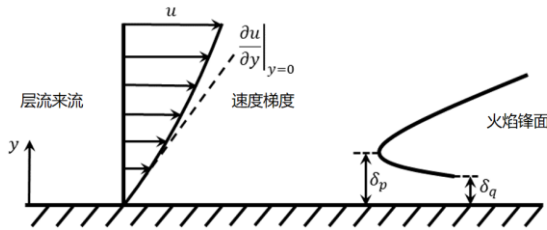


图 1 临界梯度模型示意图

Figure 1 Schematic diagram of critical gradient model

图中 δ_q 为熄火距离, δ_p 为渗透距离, 模型具体表达式为:

$$g_c = \frac{\partial u}{\partial y} \bigg|_{y=0} = \frac{\tau_w}{\mu} = \frac{S_l}{\delta_p}, \quad (1)$$

式中 g_c 为临界速度梯度, u 为流速, τ_w 为剪切应力, μ 为动力粘度, S_l 为层流火焰速度。该模型认为在渗透距离处, 火焰传播速度超过了来流速度, 边界层回火在此发生。

临界梯度模型奠定了边界层回火研究领域的理论基础。CGM 提供了首个基于速度梯度的回火临界条件预测工具, 为燃烧器设计提供了理论依据并带动了一大批针对边界层回火的研究。

在理论模型方面, Putnam 等人^[7]在临界梯度模型的基础之上, 提出了应用无量纲数来预测边界层回火, 发展了 Peclet 数模型 (Peclet Number Model, PNM)。当流动的 Peclet 数低于临界值时, 扩散效应 (火焰传播) 足以克服对流 (主流速度), 火焰逆流进入边界层。

在实验研究领域, 相关学者对于影响边界层回火的一系列因素进行了广泛的探索。Von Elbe 等人^[8]研究了燃烧器直径对于边界层回火的影响, 混合燃料是氢气/空气混合物, 实验的压力条件为一个大气压, 燃烧器的直径从 1.08mm 到 3.3mm 不等。Garside 等人^[9]则改变了实验中的压力条件, 在亚大气压条件下进行边界层回火的实验研究。Edse 等人^[10]也对压力条件进行了改变, 在高压条件下研究了氢气/氧气混合物的湍流边界层回火, 压力最高值达到了 100 倍的大气压。Grumer 等人^[11]研究了预热温度对于边界层回火的影响, 混合燃料是当量比在化学当量附近的甲烷/空气混合物。Bollinger 等人^[12]在大气压条件下, 针对氢气/氧气混合物的预混燃烧, 研究了燃烧器边缘温度对于边界层回火的影响, 燃烧器的材料、直径及壁厚都作为变量进行实验研究, 并且发现了边缘温度可能是边界层回火的重要影响因素, 热导率较低的燃烧器材料会造成燃烧器边缘温度较高, 而这可能会导致更高的回火倾向。

早期的临界梯度模型和 Peclet 数模型在预测边界层回火时, 未充分耦合流动与化学反应的动态相互作用, 尤其在湍流、高压或富氢燃料条件下误差显著。直到 21 世纪初, Kurdyumov 等人^{[13][14]}提出了 Damköhler 数模型 (Damköhler Number Model, DNM), Damköhler 数的基本含义是流体的流动特征时间和化学反应特征时间之比, 用于量化燃烧过程中化学动力学与流体运动的相对重要性。DNM 中, 在回火临界状态下有:

$$Da = \frac{1/g_c}{\delta_f/S_l} = \frac{S_l}{g_c \delta_f}, \quad (2)$$

式中 Da 为 Damköhler 数, δ_f 为层流火焰厚度。与 CGM 相比, DNM 所引入的火焰厚度等参数使得

预测模型更为完善。Kurdyumov 等人^{[13][14]}通过 Da 数将火焰传播速度、边界层速度梯度、火焰厚度等参数统一, 提出 DNM 以改进回火预测。

近年来相关学者通过实验手段, 在边界层回火研究上也取得了新的进展: Eichler 等人^[15]通过实验研究了氢气/空气混合物在不同的燃烧器结构下的边界层回火极限, 并且发现在受限空间内和非受限空间内边界层回火极限有明显差异。在 Eichler 等人^[15]的实验中, 采用了两种具有代表性的燃烧器类型: 槽道燃烧器和管道燃烧器, 并且测量了多组不同条件下的边界层回火极限。研究发现受限空间(confined)边界层回火和非受限空间(unconfined)边界层回火的回火极限差别十分明显, Eichler 等人^[15]认为火焰、来流与壁面之间复杂的相互作用也是边界层回火的重要影响因素, 而这种相互作用在经典的 CGM 中没有被认为对于边界层回火有明显影响, 这也是 CGM 的局限性所在。此后的边界层回火研究, 也逐渐着重于依据火焰是否处于受限空间来进行研究内容的区分。

Kalantari 等人^[16]对于非受限空间预混射流火焰的湍流边界层回火进行了实验研究, 相比以往的实验研究, 此次实验的压力和温度条件都较高, 压力范围是 3~8 个大气压, 温度范围是 300~500K。Kalantari 等人^[16]对于经典 CGM 预测结果与实验测量结果的吻合程度进行了检验, 但是并未发现明显的一致性, 随后基于量纲分析 π 定理, 在 Duan 等人^[17]一个大气压条件下的边界层回火极限预测研究的基础上, 将其拓展到高压条件, 建立了 Damköhler 关联模型(Damköhler Correlation, DC)。DC 中的 Damköhler 数表达式为:

$$Da = \text{Const} \cdot Le^{1.68} \cdot Pe_F^{1.91} \cdot (T_u / T_0)^{2.57} \cdot (T_B / T_0)^{-0.49} \cdot (P_u / P_0)^{-2.1}, \quad (3)$$

式中 Le 为 Lewis 数, Pe_F 为基于火焰的 Peclet 数, T_u 为未燃混合物温度, $T_0=300\text{K}$ 为参考温度, T_B 为燃烧器边缘温度, P_u 为环境压力, $P_0=1\text{atm}$ 为参考压力。与 DNM 相比, DC 拓展了在高温高压条件下的湍流边界层回火预测模型, 可以看到只需要输入混合物的物性参数及温度、压力等环境参数就可以预测出回火极限, 因此能够预见到 DC 在工业上的可用性会比较高。

除了理论分析和实验方法外, 随着计算机相关技术的高速发展, 计算流体力学(Computational Fluid

Dynamics, CFD)已经成为流体力学领域重要的研究手段之一。针对边界层回火的有记载的数值研究可以追溯至 20 世纪 80 年代, Lee 等人^[18]对于管道中层流预混火焰的边界层回火进行了数值研究, 混合燃料为化学当量下的甲烷/空气混合物。由于当时计算机技术的限制, 计算仅采用了单步化学反应机理, 管道直径也较小以缩小计算域。此次研究计算了改变管道直径后相应的临界速度梯度, 发现临界速度梯度随着管道直径的减小而增大, 但是在管道直径小到接近熄火极限时, 临界速度梯度迅速下降。Lee 等人^[19]还针对贫燃甲烷/空气混合物, 研究了火焰在圆管中的传播情况, 捕捉到了不同的火焰形状。随后的数年间, 数值方法被越来越多研究边界层回火的学者所使用, Mallens 等人^[20]对于甲烷/空气混合物的非受限空间边界层回火进行了数值研究, 所模拟的燃烧器类型是矩形截面狭缝燃烧器, 与 Lee 等人^[18]类似, Mallens 等人也发现临界速度梯度随燃烧器尺寸减小而增大。同时相关数值研究也以二维模拟居多, 如 Daou 等人^[21]对于 Poiseuille 流条件下绝热槽道中的火焰传播特性研究, Kurdyumov 等人^[22]对于不同 Lewis 数条件下的圆管层流预混火焰回火特性研究等, 而且数值研究的对象大部分是层流预混火焰, 对于湍流情况涉及不多。近年来 Gruber 等人^[23]的数值研究在受限空间边界层回火研究领域取得了新的进展, Gruber 等人对于槽道中的氢气/空气湍流预混火焰的边界层回火进行了直接数值模拟(Direct Numerical Simulation, DNS), 这是一个典型的受限空间回火情况。这次 DNS 研究的重要发现之一是回火过程中预混火焰锋面的上游在壁面附近存在回流区域, 这个发现是以往的数值研究中基本没有捕捉到的, Gruber 等人通过分析表明回流区域是火焰-来流-壁面相互作用的结果, 近壁回流区域对于回火时火焰保持向上游传播的速度有着重要作用。同时研究的压力条件分别选取了 1atm 和 2atm 两种情况, Gruber 等人发现在压力更高的条件下, 火焰向上游传播的速度更大。这次 DNS 研究所捕捉到的在火焰锋面上游回流区域的存在, 说明在经典的临界梯度模型中, 火焰-来流-壁面相互作用对回火影响较小这一假设是不能完全满足的。

Endres 等人^[24]采用了大涡模拟(Large Eddy Simulation, LES)这一数值研究手段, 对于 Eichler 等人^[15]在槽道燃烧器中进行的边界层回火实验进行了数值复现, 使用了有限速率化学以及详细化学反应动

力学对燃烧的过程进行模拟。回火过程是在受限空间内进行的, Endres 等人所选择的 LES 湍流模型及燃烧模型成功再现了边界层回火的相关物理现象。研究发现, 当边界层回火发生时, 局部流动分离区的尺寸明显超过了氢气/空气火焰的熄火距离, 这验证了 Eichler 等人^[25]在边界层回火相关研究中所提出的假设。同时此次研究在数值方法上验证了使用 LES 方法捕捉湍流边界层回火的可行性, 鉴于此次研究针对的是受限空间下的湍流边界层回火, 对于非受限空间湍流边界层回火使用 LES 方法的数值研究仍有待深入。

自从边界层回火领域逐渐被分为受限空间边界层回火和非受限空间边界层回火这两类情况进行研究之后, 对于受限空间边界层回火发生机理的研究数量增长迅速, 尤其是在数值研究领域。Gruber 等人^[23]的 DNS 研究在一定程度上揭示了受限空间边界层回火的物理过程, Endres 等人^[24]的数值研究表明了 LES 方法对于湍流边界层回火的复现能力, 但是对于非受限空间湍流边界层回火, 目前相关的数值研究数量并不多, 尤其是在对于 LES 方法的使用上。因此本文针对非受限空间湍流边界层回火进行了数值模拟研究, 揭示了非受限空间湍流边界层回火的发生及发展机制, 并提出了可以准确预测非受限空间湍流边界层回火的 Damköhler 数修正模型。

2 数值模型及模型设置

2.1 数值模型

在本文的数值研究中, 使用了大涡模拟(LES)方法, 对过滤后的 N-S 方程进行求解:

$$\frac{\partial \bar{\rho} u_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial^2 \bar{\sigma}_{ij}}{\partial x_j^2} + \frac{\partial (\bar{\rho} u_i u_j - \bar{\rho} u_i u_j)}{\partial x_j}, \quad (4)$$

式中 u_i 为 Favre 平均速度, $\bar{\rho}$ 为过滤后的密度, $\bar{p}$ 为过滤后的压力, $\bar{\sigma}_{ij}$ 为过滤后的分子粘性应力。在过滤后的方程中出现了未封闭项, 即为亚格子应力 $\tau_{ij} = \bar{\rho} u_i u_j - \bar{\rho} u_i u_j$ 。由 Boussinesq 假设将亚格子应力表示为:

$$\tau_{ij} = -2\mu_t S_{ij} + \frac{1}{3}\tau_{kk}\delta_{ij}, \quad (5)$$

式中应变率张量为:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (6)$$

为了计算亚格子湍流粘度 μ_t , 需要引入亚格子模型。本文研究中采用的亚格子模型为自适应局部涡粘模型(Wall-Adapting Local Eddy-Viscosity Model), 简称 WALE 模型^[26]。在这一模型中, 湍流粘度表达式为:

$$\mu_t = \rho L_s^2 \frac{(S_{ij}^d S_{ij}^d)^{3/2}}{(S_{ij} S_{ij})^{5/2} + (S_{ij}^d S_{ij}^d)^{5/4}}, \quad (7)$$

式中 L_s 和 S_{ij}^d 的表达式分别为:

$$L_s = \min(\kappa d, C_w V^{1/3}), \quad (8)$$

$$S_{ij}^d = \frac{1}{2} (g_{ij}^2 + g_{ji}^2) - \frac{1}{3} \delta_{ij} g_{kk}^2, \quad g_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j}, \quad (9)$$

式中 C_w 为 WALE 常数。

在湍流燃烧模拟中, 应用了火焰面生成流形(Flamelet Generated Manifold, FGM)模型, FGM 模型属于火焰面模型的一种, 在对湍流燃烧的大涡模拟中已经得到了广泛应用^{[27][28]}。火焰面模型的基本思想是将湍流火焰视为在湍流流场中的一维层流小火焰结构的集合^{[29][30]}, 小火焰的内部结构不会因为湍流作用而发生显著的变化。

FGM 模型并不求解所有组分的输运方程, 而是通过一些特征标量, 比如混合分数、反应进度变量等, 来表征流场中的化学反应相关信息。同时在湍流燃烧模拟中并未考虑差异扩散, 在本文研究中差异扩散是指由于 H_2 的高扩散性 (Lewis 数 $Le_{H_2} \approx 0.3$), 其扩散速度远高于其他组分 (如 O_2 的 $Le_{O_2} \approx 1.0$), 导致其在预混火焰中呈现非等扩散特性, 使火焰锋面局部变化, 影响热释放率与淬熄距离。

尽管本文用传统 FGM 方法假设等扩散 ($Le=1$), 但本研究的模拟结果与实验吻合良好, 主要由于在本文工况下, 湍流混合的作用大于分子扩散差异, 且湍流混合的时间尺度小于分子扩散时间尺度, 这减弱了差异扩散的影响^[31]。同时本文采用 10 组分 19 步的详细氢气/空气反应机理, 通过组分输运方程间接包含了扩散效应, FGM 表中非绝热火焰求解也反映了热扩散与质量扩散的耦合作用, 当量比为 0.4 到 0.6 时, 氢气火焰的 Markstein 数趋近于零^[32], 也表明该工况下差异扩散对火焰速度的影响较小。

混合分数表征燃料与氧化剂的混合程度, 其被定义为^[33]:

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,fuel} - Z_{i,ox}}, \quad (10)$$

式中 Z_i 为第 i 种元素的 *favre* 平均质量分数, 下标 *fuel* 和 *ox* 分别表示在燃料和氧化剂中的情况。混合分数的输运方程为:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}f) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{u} f) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{\lambda}{c_p} + \frac{\mu_t}{\sigma_t} \right) \nabla f \right), \quad (11)$$

式中 λ 为混合物的层流导热系数, c_p 为混合物的定压比热容, σ_t 为 Prantl 数。

反应进度变量表征预混燃烧中反应进行的程度, 其被归一化地定义为:

$$\tilde{c} = \frac{\sum_k \alpha_k (Y_k - Y_k^u)}{\sum_k \alpha_k (Y_k^{eq} - Y_k^u)} = \frac{Y_c}{Y_c^{eq}}, \quad (12)$$

式中 α_k 为第 k 种组分的对应系数, Y_k 为第 k 种组分的 *favre* 平均质量分数, 上标 u 和 eq 分别表示未发生反应和达到化学平衡两种状态, Y_c 为未归一化反应进度变量。 Y_c 的输运方程为:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{c})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \mathbf{u} \tilde{c}) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{\lambda}{c_p} + \frac{\mu_t}{S c_t} \right) \nabla \tilde{c} \right) + \bar{S}_{Y_c}, \quad (13)$$

式中 $S c_t$ 为 Schmidt 数, $\bar{S}_{Y_c}$ 为反应进度变量源项。反应进度变量源项, 通常可以使用有限速率方法或者湍流火焰速度模型来进行建模。本文使用湍流火焰速度模型, 即:

$$\bar{S}_{Y_c} = \rho_u S_t |\nabla \tilde{c}|. \quad (14)$$

用湍流火焰速度模型求解出反应进度变量等特征标量之后, 通过 FGM 表可以获得反应场中其他变量的分布, 这种方式使得 FGM 模型能够高效地对湍流燃烧进行模拟, 成为模拟氢气相关化学反应的主要燃烧模型之一。

在对于特征标量的输运方程进行求解之后, 可以通过温度、密度、组分质量分数等其他变量与所求解的特征标量之间的关系来得出化学反应相关量在流场中的分布情况。通过这种方式, 可以极大地减少所需要求解的方程的个数。

本文所研究的对象是湍流预混燃烧, 使用 FGM 模型, 首先要求解一维层流预混火焰。

CHEMKIN 用于生成一维层流预混火焰的控制方程包括下述四个方程:

(1)连续方程:

$$\dot{M} = \rho u A, \quad (15)$$

式中 $\dot{M}$ 为质量流量, A 为流管横截面积。

(2)能量方程:

$$\dot{M} \frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p} \frac{d}{dx} \left(\lambda A \frac{dT}{dx} \right) + \frac{A}{c_p} \sum_{k=1}^K \rho Y_k V_k c_{p,k} \frac{dT}{dx} + \frac{A}{c_p} \sum_{k=1}^K \dot{\omega}_k h_k W_k + \frac{A}{c_p} \dot{Q}_{rad} = 0, \quad (16)$$

式中 T 为温度, $c_{p,k}$ 为第 k 种组分的定压比热容,

V_k 为第 k 种组分的扩散速度, $\dot{\omega}_k$ 为化学反应中第 k 种组分的净生成速率, h_k 为第 k 种组分的比焓, W_k 为第 k 种组分的分子量, $\dot{Q}_{rad}$ 为由于气体和粒子辐射造成的热损失。

(3)组分方程:

$$\dot{M} \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho A Y_k V_k) - A \dot{\omega}_k W_k = 0 \quad (k=1, \dots, K_g), \quad (17)$$

式中 K_g 表示组分数。

(4)状态方程:

$$\rho = \frac{P \bar{W}}{RT}, \quad (18)$$

式中 $\bar{W}$ 为混合物的平均分子量, R 为理想气体常数。

净生成速率 $\dot{\omega}_k$ 需要考虑到涉及该组分的所有化学反应, 化学反应速率是根据 Arrhenius 定律计算的:

$$k_f = A T^\beta \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right), \quad (19)$$

式中 k_f 为速率常数, A 为指前因子, β 为温度指数, E_A 为活化能。

使用 FGM 模型来模拟湍流燃烧, 在求解完小火焰之后, 还需考虑湍流与化学反应之间的相互作用, 本文使用概率密度函数 (Probability Density Function, PDF) 法来进行模拟。通过构建 PDF 表征温度、密度及组分质量分数等变量与所求解的特征标

量之间的关系, 反映湍流与化学反应之间的相互作用, 就可以在求解特征标量的输运方程后, 进一步获得反应场中其他变量的分布情况。

2.2 模型设置

自从 2012 年以来, 对于受限空间边界层回火的研究数量增长迅速, 尤其是在数值模拟这一领域。但是使用 LES 方法来研究非受限空间边界层回火还少有相关实践。同时由于火焰所处燃烧区域的尺寸通常情况下大于未燃混合物流动区域的尺寸, 所以非受限空间火焰实际上也是一种常见的火焰类型, 因此对于非受限空间边界层回火的研究也具有一定的实际应用价值。

本文进行的数值研究所参考的工况是 Goldmann 等人^[34]对于类本生灯火焰边界层回火的实验研究, 实验所用的装置示意图和实物图如图 2 所示。类本生灯火焰是指与传统本生灯结构或操作条件相似但存在差异的预混燃烧系统, 该系统下火焰的特点是非常小且迅速消失, 不同于常规的燃烧火焰, 它更像是一种由于蒸汽或气体燃烧而产生的短暂亮光。

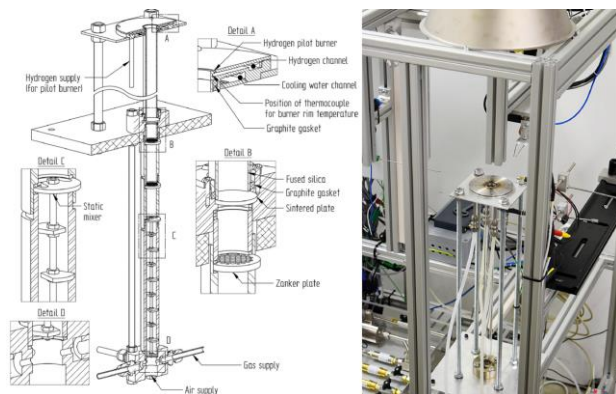


图 2 实验装置示意图^[34]和实验装置实物图^[34]

Figure 2 Schematic diagram of experimental device^[34] and Physical diagram of experimental device^[34]

如图 2 所示, 燃料和空气通过最底部的供应装置进入预混器后在其内部混合均匀, 随后进入透明的熔融石英管道燃烧器中, 燃烧器管道直径为 20mm, 长度为 500mm。金属材质的燃烧器头部包含了氢气点火装置、水冷系统以及监测燃烧器边缘温度的热电偶。实验进行的环境条件为常温常压条件(293K, 1atm)。

三维计算域的纵截面及边界条件如图 3 所示。

三维计算域总体形状为圆柱状, 燃烧器管道直径为 20mm, 长 120mm, 外部空气域长 1000mm, 计算域总直径为 500mm。燃烧器壁面附近第一层网格高度为 0.04mm, 计算得到 y^+ 的最大值为 0.67, 小于 1 倍 y^+ , 满足模拟要求^[35]。燃烧器中心处的网格横向尺寸为 0.19×0.19mm, 燃烧器出口附近网格流向尺寸为 0.2mm, 火焰锋面所处区域的网格尺寸最大不超过 0.4mm, 网格数量总计 1008.6 万, 网格示意图如图 4 和图 5 所示。

根据已有的湍流边界层回火 LES 研究^[24], 本文采用的网格尺寸适用于湍流边界层回火现象的捕捉。

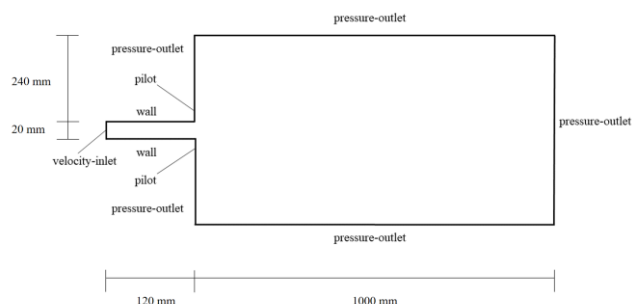


图 3 计算域纵截面示意图

Figure 3 Schematic diagram of longitudinal section of calculation domain

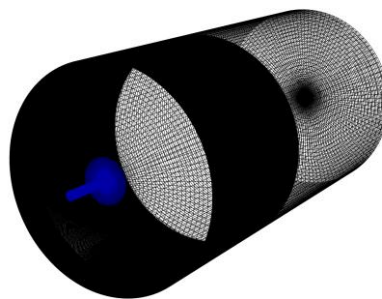


图 4 整体网格示意图(蓝色表示燃烧器)

Figure 4 Schematic diagram of the whole grid (blue indicates the burner)

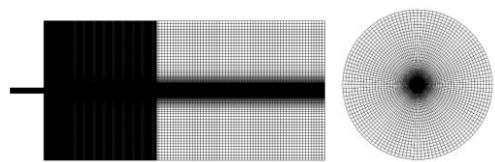


图 5 纵截面(左)和横截面(右)网格示意图

Figure 5 Schematic diagram of vertical section (left) and cross section (right) grid

对于 FGM 燃烧模型, 由于单步反应机理存在不能准确描述化学反应过程的缺陷^[36], 在求解 FGM 表时, 所采用的化学反应机理是 Burke 等人^[37]所提出的 10 组分 19 步详细氢气/空气反应机理, 该机理保留了氢气燃烧的关键链式反应路径, 并在计算效率和精度间取得平衡。组分包括 H、H₂、O、O₂、OH、H₂O、HO₂、H₂O₂、Ar、N₂。

构建 FGM 表时, 燃料入口设定为当量比为 0.8 的氢气/空气混合物, 氧化剂入口设定为空气, 空气的组成按体积分数定义为 21% 的 O₂、78% 的 N₂ 和 1% 的 Ar, 入口温度均为 293K。

对于求解小火焰并构建 FGM 表中所用的混合分数网格点, 依据当量比的变化进行了自定义, 当量比从 0.4 到 0.8 之间每隔 0.01 定义一个网格点以确保求解精度。同时所求解的小火焰是非绝热小火焰, 这是因为在研究过程中发现如果求解绝热小火焰, 虽然能降低计算成本, 但是在温度较低的壁面附近存在大量的热损失, 绝热小火焰构成的 FGM 表会计算得出非物理性的低温, 进而对计算精度造成影响, 因此本文选择求解非绝热小火焰。

氢气/空气混合物的层流火焰速度采用了 Hoferichter 等人^[38]基于已有相关研究所得出的层流火焰速度修正式, 表达式为:

$$S_l = 2.1600\phi^4 - 9.1537\phi^3 + 12.4930\phi^2 - 3.7952\phi + 0.3972. \quad (20)$$

在应用 LES 方法进行湍流燃烧模拟时, 为了模拟来流的速度脉动并避免流场中存在剧烈的化学反应而可能导致的计算收敛性问题, 在一段长度为 700mm 的管道中进行了前置 RANS 模拟, 将该管道出口处的速度分布、湍流动能和耗散率作为 LES 计算域的入口条件。

LES 的亚格子模型选择 WALE 模型, 采用 SIMPLE 算法及有界二阶时间离散格式进行非稳态计算。为了捕捉回火现象, 时间步长由基于 Courant 数的自适应系统进行控制, 保持 Courant 数小于 1。

3 非受限空间湍流边界层回火大涡模拟

3.1 稳定燃烧状态

在平均流速为 8m/s, 当量比为 0.46 时, 获得了稳定在燃烧器管口的湍流预混火焰, 纵截面上的温度

分布情况如图 6 所示。

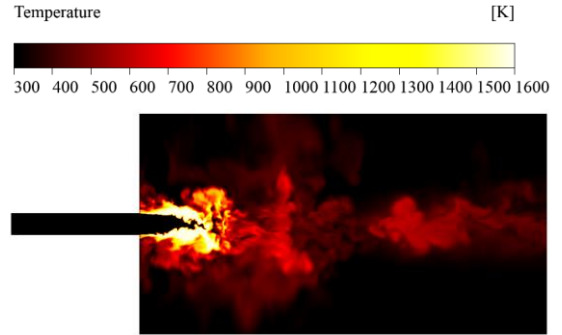


图 6 温度分布云图

Figure 6 Contour of temperature distribution

稳定在燃烧器管口的预混火焰锋面如图 7 所示, 以 $c = 0.5$ 来进行表征, 可以看到火焰锋面由于湍流作用和热扩散不稳定性而发生褶皱。

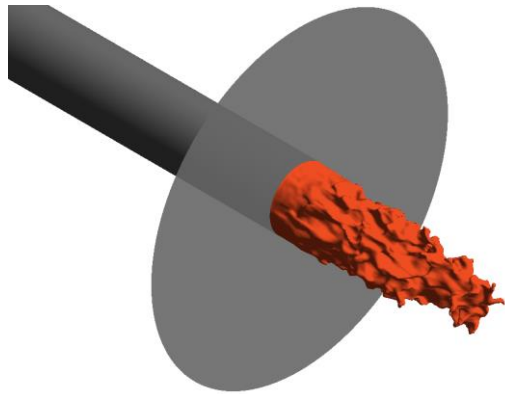


图 7 火焰锋面图($c = 0.5$)

Figure 7 Diagram of flame front ($c = 0.5$)

流场中的涡团和速度脉动通常有紧密关系, 可以采用 Q 判据来表征燃烧器出口外部的涡团分布情况^{[39][40]}, 其定义为:

$$Q = \frac{1}{2}(\Omega^2 - S^2), \quad (21)$$

式中 Ω 和 S 分别为涡量和应变率张量的范数:

$$\Omega = \sqrt{2\Omega_{ij}\Omega_{ij}}, S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}},$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (22)$$

燃烧器出口外部剖面上的 Q 等值面如图 8 所示, 可以看到混合气体刚流出燃烧器管道, 也就是在火焰锋面根部附近时, 涡团数量并未达到最多, 沿着流向涡团数量在不断增加。

根据图 8 可以看到, 在离开管口 50mm 左右的反应区域由于 Darrieus-Landau 不稳定性^{[23][41]}发生强烈的速度脉动, 这种不稳定性来源于气体在燃烧过程中由于化学反应和热膨胀造成密度的迅速变化, 进而对于来流速度场施加了强烈的扰动。在距离管口更远的位置, 随着反应结束和高温产物的冷却, 涡团数量减少。

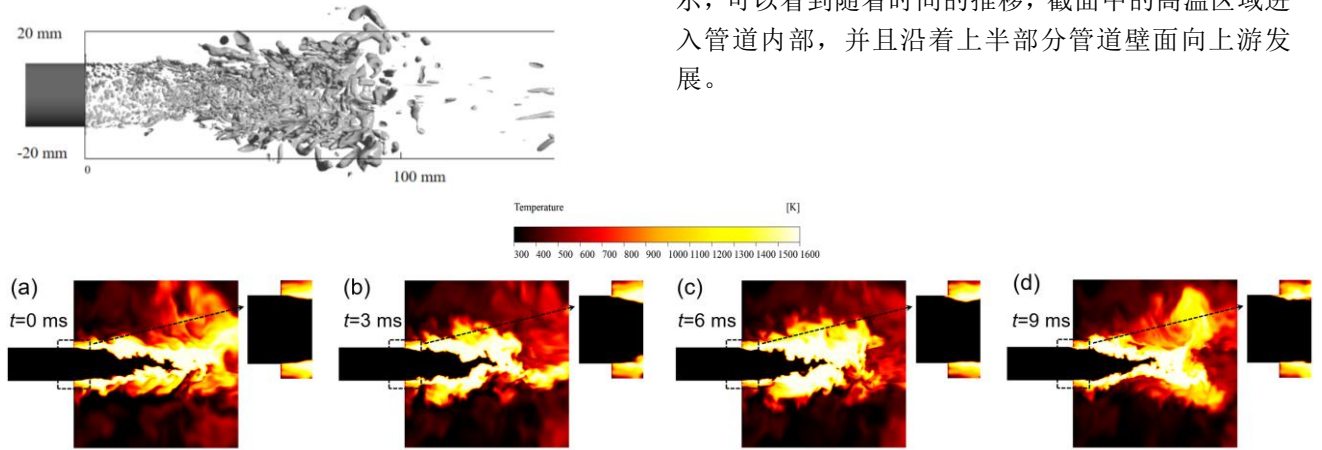


图 9 不同时刻的温度分布云图。(a) $t=0$ ms;(b) $t=3$ ms;(c) $t=6$ ms;(d) $t=9$ ms

Figure 9 Contours of temperature distribution at different times. (a) $t=0$ ms;(b) $t=3$ ms;(c) $t=6$ ms;(d) $t=9$ ms.

回火发生时火焰锋面整体随时间的变化如图 10 所示, 从图中能够看出, 随着时间的推移, 在火焰锋面的根部位置, 即燃烧器管道出口附近, 火焰锋面从稳定在燃烧器管口变为进入燃烧器内部, 并沿着燃烧器管道壁面向上游传播, 同时伴随着朝向流动中心区域的凸起。

图 8 涡团分布图($Q=5 \times 10^6 \text{ s}^{-2}$)

Figure 8 Diagram of vortex distribution($Q=5 \times 10^6 \text{ s}^{-2}$)

综上所述, 涡团分布情况表明在管口处的火焰根部附近, 也就是边界层回火发生的位置, 并不是流场中速度脉动最强烈的位置, 非受限空间火焰在此处可能没有类似受限空间火焰那样强烈的火焰与来流相互作用。

3.2 边界层回火的捕捉

在非稳态模拟中, 捕捉回火的方式仍是在流速不变的情况下将当量比以 0.02 的间隔定义一个网格点以确保求解精度, 通过实验发现在当量比达到 0.50 之后回火发生。

回火过程中温度场随时间的变化情况如图 9 所示, 可以看到随着时间的推移, 截面中的高温区域进入管道内部, 并且沿着上半部分管道壁面向上游发展。

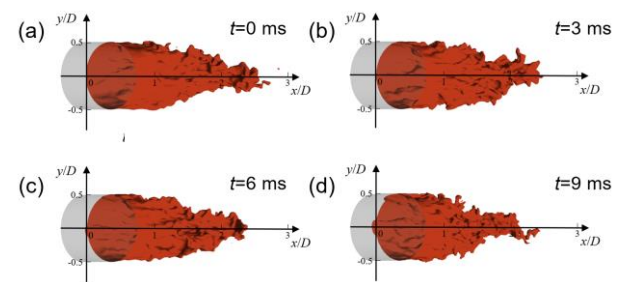


图 10 不同时刻的火焰锋面图。(a) $t=0$ ms;(b) $t=3$ ms;(c) $t=6$ ms;(d) $t=9$ ms

Figure 10 Diagrams of flame front at different times. (a) $t=0$ ms;(b) $t=3$ ms;(c) $t=6$ ms;(d) $t=9$ ms.

此外还进行了平均流速为 10m/s 和 12m/s 的非受限空间湍流边界层回火大涡模拟, 分别在当量比为 0.54 和 0.64 时捕捉到了回火的发生。

回火极限的模拟结果与实验数据的对比如图 11 所示, 图中实心圆形标记是 Goldmann 等人^[34]的实验数据, 空心三角标记是本文数值模拟所得到的边界层回火极限, 可以看到模拟结果和实验数据符合良好, 这表明应用 LES 方法可以定量捕捉到非受限空间湍流边界层回火极限。

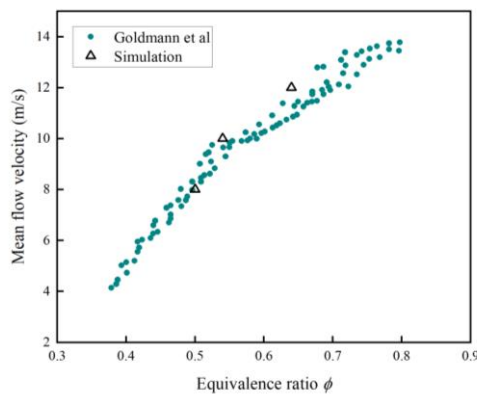


图 11 边界层回火极限模拟数据与实验数据对比图
Figure 11 Comparison between simulation data and experimental

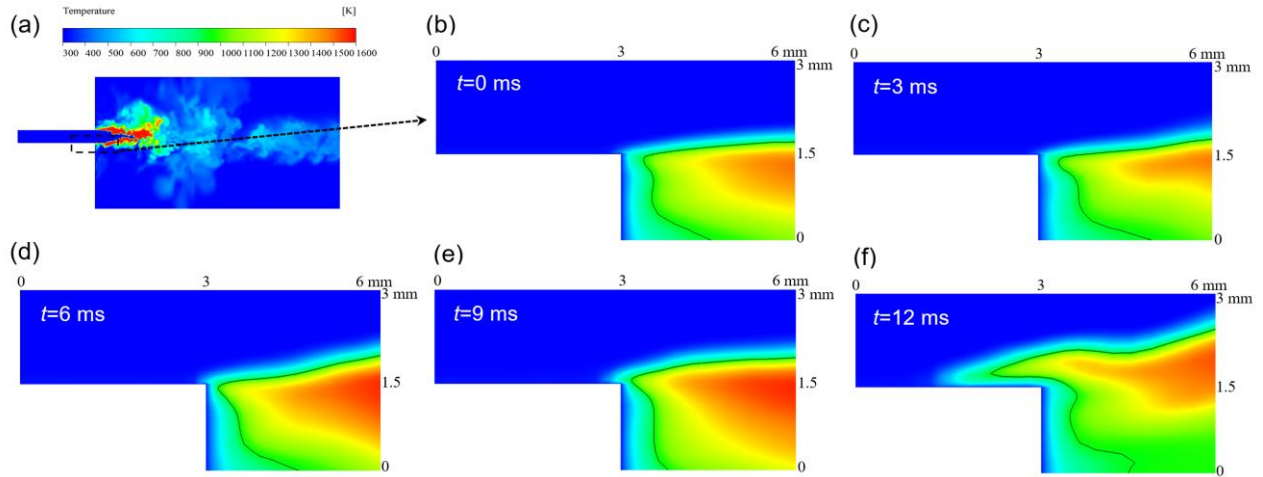


图 12 不同时刻的温度分布云图。(a) 温度分布图 (全图); (b) $t=0$ ms 的温度分布云图 (局部放大图); (c) $t=3$ ms 的温度分布云图 (局部放大图); (d) $t=6$ ms 的温度分布云图 (局部放大图); (e) $t=9$ ms 的温度分布云图 (局部放大图); (f) $t=12$ ms 的温度分布云图 (局部放大图)

Figure 12 Contours of temperature distribution at different times. (a) Overall temperature distribution (full view); (b) Close-up view of temperature distribution contour at $t=0$ ms; (c) Close-up view of temperature distribution contour at $t=3$ ms; (d) Close-up view of temperature distribution contour at $t=6$ ms; (e) Close-up view of temperature distribution contour at $t=9$ ms; (f) Close-up view of temperature distribution contour at $t=12$ ms.

data of boundary layer flashback limit

4 边界层回火局部分析

在非受限空间湍流边界层回火发生时, 燃烧器出口附近的温度场随时间的变化如图 12 所示, 图中的黑色实线为温度等于 950K 的等值线。从图中可以看出, 燃烧器壁面附近的温度较低, 这是因为在高温区域接近壁面时, 由于水冷壁面的温度远低于火焰温度, 所以造成了大量的热损失而发生降温。随着时间的推移, 壁面热损失与火焰高温之间的平衡被打破, 高温区域逐渐接近上游燃烧器管道壁面, 并且朝向来流方向偏转, 这种偏转对应着第三章中所描述的火焰锋面的凸起, 最终火焰进入了管道内部并向上游传播。

图 12 中温度场随时间的变化, 反映了火焰克服壁面热损失的过程, 表明了非受限空间边界层回火的发生需要逐渐克服壁面热损失, 才能使得火焰靠近并进入管道中, 然后沿着管道壁面向上游发展。而受限空间火焰则在回火还未发生时就锚定在燃烧器内部的管道壁面处, 相当于直接从图 12 中的 $t=9$ ms~12ms 之间开始发展, 这为边界层回火的发生提供了有利条件, 省去了火焰克服壁面热损失的过程。

与受限空间边界层回火相比,非受限空间边界层回火的发生,需要额外的火焰克服壁面热损失并向来流中心区域偏转的过程,这样火焰才能进入管道内部,这可能是非受限空间边界层回火更难以发生的原因之一。

回火发生时流向流速随时间的变化如图 13 所示,图中黑色实线为 $c = 0.5$ 的等值线,黄色实线为火焰锋面近壁区域流向速度为 0 的等值线。

可以看到在进入管道内部之前,火焰位于燃烧器头部的外壁面处,并且管口处的火焰锋面附近并没有回流区域的存在。当火焰进入管道内部之后,火焰锋面向上游传播,在这时回流区域才出现并随着火焰锋面向上游发展。

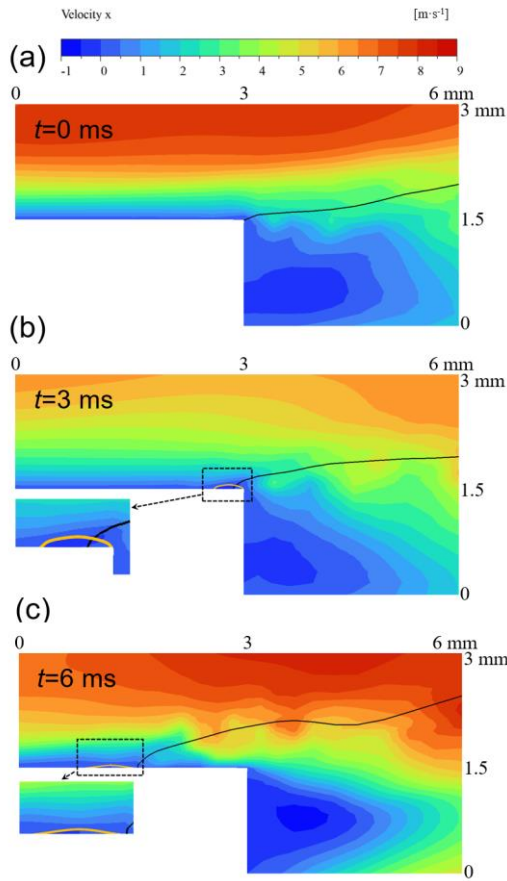


图 13 不同时刻的流向流速分布云图.(a) $t=0$ ms;(b) $t=3$ ms;(c) $t=6$ ms

Figure 13 Contours of velocity distribution in flow direction at different times.(a) $t=0$ ms;(b) $t=3$ ms;(c) $t=6$ ms.

与非受限空间边界层回火相比,已有研究发现受限空间火焰在发生回火之前就已经在火焰锋面上游

存在近壁回流区了^{[23][24]},并且回流区也一直稳定在火焰锋面上游,能够促进火焰向上游传播,回流区的存在被认为是火焰-来流-壁面相互作用的典型结果。

而从本文数值模拟的结果中可以看出,在火焰进入管道内部之前,非受限空间火焰锋面附近并没有近壁回流区的存在。这表明火焰-来流-壁面相互作用较弱,这一特征与 Baumgartner 等人^[42]的实验研究结论相符,回流区也没有从一开始就处于火焰锋面上游。由此可见回流区的存在并非是让非受限空间边界层回火发生的直接原因,缺少回流区对回火的促进作用也可能是非受限空间边界层回火更难以发生的原因之一。

回火发生时火焰锋面附近的压力场随时间的变化如图 14 所示,图中压力取相对值为 $P_r = P - P_0$, P_0 为来流入口的压力,图中黑色实线为 $c = 0.5$ 的等值线。在边界层回火发生的过程中,管道出口处的火焰锋面附近出现压力的上升,随着火焰逐渐进入管道内,高压区域也随着火焰锋面向上游发展。

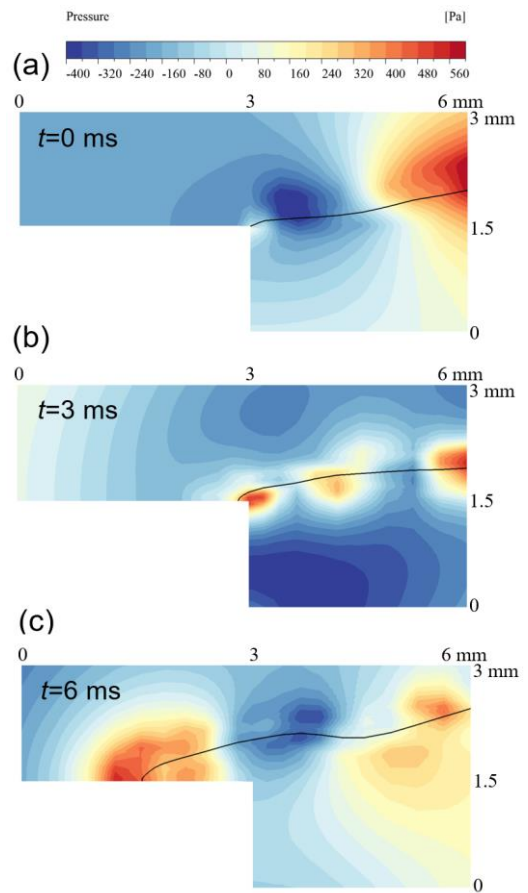


图 14 不同时刻的压力分布云图.(a) $t=0$ ms;(b) $t=3$ ms;(c) $t=6$ ms

Figure 14 Contours of pressure distribution at different times.(a) $t=0$ ms;(b) $t=3$ ms;(c) $t=6$ ms.

从压力分布随时间的变化可以看出,当火焰进入管道内部之后,火焰锋面附近出现高压区域。随着火焰进一步向上游传播,该区域也随之向上游运动,这表现出类似受限空间边界层回火的特点。高压区域与回流区域的存在及发展,都表明当非受限空间火焰进入燃烧器管道内部之后,由于壁面限制和火焰位置的变化,会表现出类似受限空间边界层回火的特征。而在非受限空间火焰进入燃烧器管道内部之前,也就是回火发生的临界状态下,火焰-来流-壁面相互作用较弱,这是与受限空间火焰的明显不同之处。

5 预测模型分析及修正

5.1 CGM 模型分析

在经典的临界梯度模型中,认为渗透距离 δ_p 是边界层回火发生的关键位置,渗透距离 δ_p 要大于熄火距离 δ_q ,而熄火距离 δ_q 与层流火焰厚度 δ_f 的关系可以使用基于壁面熄火的 Peclet 数来进行表征:

$$Pe_q = \frac{\delta_q}{\delta_f}. \quad (23)$$

Gruber 等人^[43]在关于火焰与壁面相互作用的 DNS 研究中得出氢气/空气混合物的 $Pe_q = 1.4$,基于 Pe_q 对于混合物组分比例的弱相关性^[38],在本文研究中也采用这一数值。当量比为 0.50 的氢气/空气混合物,由修正式(20)计算得到其层流火焰速度 S_l 为 0.6136 m/s,由冷态模拟得到其热导率 λ 为 0.04085 W/(m·K),比热容 c_p 为 1194.52 J/(kg·K),密度 ρ 为 1.0102 kg/m³,根据以上数据可以得出熄火距离为:

$$\delta_q = Pe_q \cdot \delta_f = Pe_q \frac{2a}{S_l} = Pe_q \frac{2\lambda}{S_l \rho c_p} = 0.154 \text{ mm}. \quad (24)$$

Gruber 等人^[43]在 DNS 研究中还发现了火焰传播速度在离壁面大约 3 倍熄火距离处开始骤降,这一特征与临界梯度模型中所描述的渗透距离十分相符。在渗透距离 δ_p 处火焰传播速度急剧下降,因此将渗透距离 δ_p 取为 $3\delta_q$ 即 0.462 mm,这个值介于 Hoferichter

等人^[38]在研究中得出的 0.16 mm (当量比为 1.30)与 1.1 mm(当量比为 0.35)之间,认为取值有效。则由 CGM 模型公式(1)可以得出临界速度梯度为:

$$g_c|_{\phi=0.50} = \frac{S_l}{\delta_p} = 1328 \text{ s}^{-1}. \quad (25)$$

在直径 20mm 的管道中,当来流平均流速为 8m/s 时,对应临界速度梯度由冷态模拟得出为 15023 s⁻¹,这与 CGM 预测值相差有一个数量级之多。这其中的原因可能是 CGM 在描述边界层回火发生的机理时,所采用的简化假设所造成的局限性。CGM 认为火焰-来流-壁面相互作用对边界层回火的影响较小,对于来流,认为流速分布没有受到明显影响,因此假设壁面附近的流速是线性分布的,使用壁面速度梯度来表征壁面附近的来流流速;对于化学反应,CGM 使用层流火焰速度来表征化学反应进行的速率。基于渗透距离,CGM 构造了线性关系来表征临界速度梯度和层流火焰速度之间的相关性。通过速度梯度和层流火焰速度的比较,确认在渗透距离处来流流速是否低于火焰传播速度,以此判断边界层回火是否会发生。

在层流边界层回火中,CGM 的基本思路及简化假设所造成的误差较小,但是在湍流边界层回火中,相同当量比下临界速度梯度要比层流边界层回火中高出数倍,流场和火焰结构都更加复杂,其核心简化假设在湍流下失效,体现出显著的局限性。CGM 中对于临界速度梯度与层流火焰速度存在线性关系的简化假设难以反应湍流边界层回火发生的机理,并且未纳入火焰厚度等关键参数,同时缺少燃烧器边缘温度和混合物的物理特性等其他影响边界层回火的因素。同时已有研究已经发现了受限空间边界层回火发生时流场中回流区的存在^[23],表明火焰-来流-壁面相互作用的影响也是难以忽略的,但是这一点在非受限空间边界层回火还未得到广泛证实。

5.2 Damköhler 数修正模型

虽然 CGM 在描述湍流边界层回火机理时有着一定的局限性,但是在此次数值研究以及所参考的实验研究所测得的数据中不难看出,对于贫燃条件下的非受限空间氢气/空气火焰来说,湍流边界层回火极限当量比存在着随平均流速的增大而增加的总体趋势,这同时也表明未燃混合物层流火焰速度随着来流速度梯度的增大而增加。同时在第 4 章中的分析表明,

非受限空间边界层回火的火焰-来流-壁面相互作用相对较弱,这就为继续使用临界速度梯度和层流火焰速度来表征边界层回火提供了可能。

现代的 Damköhler 数模型作为更优化的模型,除了临界速度梯度和层流火焰速度之外,还额外考虑了火焰厚度等参数对于边界层回火的影响,因此选择基于 Damköhler 数模型进行补充修正,以提高此类模型在非受限空间湍流边界层回火上的预测能力。

基于 DNM 模型表达式(2),结合热扩散系数和火焰厚度表达式 $\delta_f = \frac{2a}{S_l}$ 后消去常数项可以得到临界 Damköhler 数表达式为:

$$Da_c = \frac{S_l^2 \rho c_p}{g_c \lambda}. \quad (26)$$

速度梯度与平均流速的关系由 Hoferichter 等人基于 Blasius 概念给出^[44]:

$$g_c = \frac{u_\tau^2}{\nu}, \quad (27)$$

$$u_\tau^2 = 0.03955U^{-7/4}\nu^{1/4}d^{-1/4},$$

式中 d 为管道直径。

通过边界层回火预测模型,研究者们期望根据可燃混合物相关特性就可以获得回火极限。在边界层回火过程中,临界速度梯度与层流火焰速度的关联本质是流体流动与燃烧化学的耦合作用。经典临界梯度模型 (CGM) 假设二者为简单的线性关系 ($g_c \propto S_l$),但湍流边界层回火的复杂性要求更普适的关联形式。根据燃烧理论^[45],火焰速度梯度与火焰拉伸率之间存在直接关联,而拉伸率对火焰速度的影响可表述为:

$$S_l / S_{l0} = 1 - \kappa L_M, \quad (28)$$

式中, κ 为拉伸率, L_M 为 Markstein 长度。

在壁面边界层中,速度梯度主导的拉伸效应使火焰传播速度随梯度增大而降低^[46]。临界回火状态下,火焰拉伸达到极限值,此时 g_c 与 S_l 的关系可解耦为热扩散系数 α_0 和幂律修正项。因此假设临界速度梯度大小与层流火焰速度大小之间存在幂函数关系,则式(26)中包含临界速度梯度和层流火焰速度的项可以被简化为只含有层流火焰速度一个变量:

$$\frac{S_l^2}{g_c} = a_0 \left(\frac{S_l}{S_{l0}} \right)^\alpha, \quad (29)$$

式中的模型相关参数分别为: a_0 为参考热扩散系数, S_{l0} 为参考层流火焰速度, α 为层流火焰速度指数。

已有研究发现了燃烧器边缘温度对于边界层回火的影响^[12],在 Goldmann 等人^[47]的进一步实验研究中,发现水冷下的燃烧器边缘温度与绝热火焰温度的幂函数存在着线性关系。故本文依据求解小火焰所得的绝热火焰温度,将燃烧器边缘温度表示为:

$$T_{br} = T_0 + 215.12K \cdot \left(\frac{T_{ad}}{10T_0} \right)^{3.44}, \quad (30)$$

式中 T_{ad} 为绝热火焰温度, $T_0 = 293K$ 为参考温度,绝热火焰温度可以通过当量比确定。计算得出的燃烧器边缘温度与 Goldmann 等人^[34]实验测量数据的对比如图 15 所示,可以看到式(30)对于燃烧器边缘温度的计算结果十分准确。

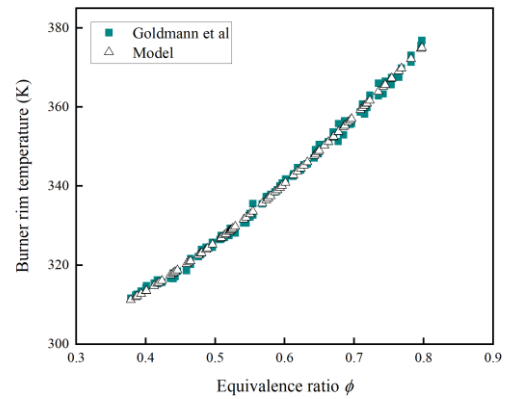


图 15 燃烧器边缘温度计算结果与实验数据对比图

Figure 15 Comparison between calculated results and experimental data of burner rim temperature

随着当量比的增大,绝热火焰温度增加,燃烧器边缘温度也会增加。考虑了燃烧器边缘温度的影响后, Damköhler 数修正模型表达式为:

$$Da_c = a_0 \frac{\rho c_p}{\lambda} \left(\frac{S_l}{S_{l0}} \right)^\alpha \left(\frac{T_{br}}{T_0} \right)^\beta. \quad (31)$$

结合 Goldmann 等人^[34]回火实验数据,修正模型采用的关键参数标定如下:取 293K 下氢气/空气混合物的热扩散率实测值,参考热扩散系数 a_0 的取值为 $2.69 \times 10^{-5} \text{m}^2/\text{s}$ 。基于对冲火焰实验,通过最小二乘拟

合应变率与 S_l/S_{l0} 之间的关系, 确定层流火焰速度指数 α 取值为 0.40, 该数值与氢气/空气火焰的理论预测值一致。结合多壁温淬熄实验, 拟合淬熄距离 $\delta_q \propto T_{edge}^{-\beta}$ 关系, 燃烧器边缘温度指数 β 取值为 4.40, 符合热损失的非线性衰减特性。 α 和 β 两个参数均基于目标物理机制的直接实验测量, 模型透明度高, 适用性强, 但是需严格限制在标定实验的燃料组分与燃烧器条件范围内, 超出范围需重新验证。参考层流火焰速度 S_{l0} 取值为化学当量下氢气/空气层流火焰速度 2.10m/s, 参考温度 T_0 为 293K。右侧输入值密度 ρ 、比热容 c_p 、热导率 λ 、层流火焰速度 S_l 和燃烧器边缘温度 T_{br} 均可基于混合物当量比确定, 故可以根据混合物性质确定临界 Damköhler 数, 以判定是否达到回火极限。

模型预测结果与 Goldmann 等人^[34]实验数据的对比如图 16 所示, 可以看到修正模型预测结果与实验数据符合良好, 这表明所提出的 Damköhler 数修正模型对于非受限空间湍流边界层回火具有准确的预测能力。

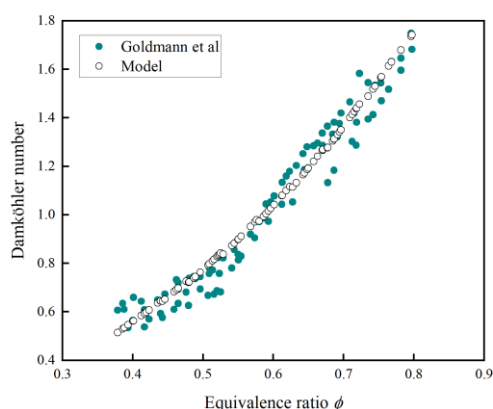


图 16 修正模型预测 Da 数与实验 Da 数对比图

Figure 16 Comparison between predicted Da number of modified model and experimental Da number

6 结论

本文应用了 LES 方法对于非受限空间湍流边界层回火进行了非稳态模拟, 首先得到了稳定燃烧状态下的湍流预混火焰, 并且发现火焰根部附近的速度脉动相对较弱。随后通过模拟捕捉到了边界层回火, 并

在平均流速不同的各个工况下, 分别模拟得到了相应的湍流边界层回火极限, 发现模拟结果与实验数据符合良好, 这表明 LES 方法适用于模拟非受限空间湍流边界层回火。

本文对于非受限空间湍流边界层回火过程中, 回火发生位置的局部流场进行了分析, 发现在回火发生时, 高温区域随着时间的推移, 在逐渐靠近上游管道壁面的同时, 向来流中心区域偏转, 反映了火焰逐渐克服壁面热损失后进入上游管道的过程。在边界层回火中, 回流区域被认为是火焰-来流-壁面相互作用的典型结果, 本文发现在非受限空间火焰进入燃烧器内部之前, 火焰锋面位于燃烧器头部的外壁面处, 此时火焰锋面附近并没有近壁回流区的存在, 这表明火焰-来流-壁面相互作用较弱。在火焰进入燃烧器内部之后, 回流区域和高压区域才出现, 并随着火焰锋面向上游发展, 表现出类似受限空间边界层回火的流速和压力分布特征。受限空间火焰由于一开始就锚定在管道内部壁面处, 火焰-来流-壁面相互作用较强, 而非受限空间火焰的火焰-来流-壁面相互作用较弱, 既没有近壁回流区的存在来促进回火发生, 又需要火焰克服壁面热损失接近上游燃烧器管道的过程, 这可能是非受限空间边界层回火更难以发生的原因。

本文根据经典的临界梯度模型计算得出回火极限预测值, 发现该模型对于非受限空间湍流边界层回火极限的预测值与模拟结果相差较大, 对于造成误差的原因进行了分析, 认为误差可能来源于临界梯度模型的一系列局限性: 该模型认为火焰-来流-壁面相互作用对于边界层回火影响较小, 假设壁面附近的来流流速线性分布, 分别使用速度梯度和层流火焰速度来表征来流流速和化学反应速率; 对于临界速度梯度和层流火焰速度之间的关联性, 直接构造了线性关系进行表征; 对于影响边界层回火的其他因素, 也没有进行考虑, 这些都可能造成预测结果的偏差。但是由于非受限空间边界层回火中火焰-来流-壁面的相互作用较弱, 这就使得临界梯度模型中认为这种相互作用对于边界层回火影响较小的基本假设在非受限空间边界层回火中的适用性提高。在此基础上对 Damköhler 数模型进行了补充修正, 对于临界速度梯度与层流火焰速度之间的相关性, 通过层流火焰速度指数、参考层流火焰速度和参考热扩散系数来进行表征, 并且量化了燃烧器边缘温度与绝热火焰温度之间的关系。最后将燃烧器边缘温度、层流火焰速度、混

合物密度、比热容和热导率等一系列参数对边界层回火的影响综合起来,提出了适用于非受限空间湍流边界层回火的 Damköhler 数修正模型,该预测模型的输入值通过未燃混合物的当量比就可以得到。随后将模型预测结果与已有实验结果进行了比较,发现与实验数据符合良好,验证了该修正模型能够准确预测非受限空间湍流边界层回火极限。

参考文献

- 1 Richards G A, McMillian M M, Gemmen R S, et al. Issues for low-emission, fuel-flexible power systems. *Prog Energy Combust Sci*, 2001, 27: 141-169
- 2 Zhang W P, Li Y B. Progress in Mechanisms and Numerical Simulation of Flame Flashback for Gas Turbine (in Chinese). *J Combust Sci Technol*, 2016, 22: 385-401 [张文普, 李宇斌. 燃气轮机燃烧回火机理与数值模拟的研究进展. *燃烧科学与技术*, 2016, 22: 385-401]
- 3 Li W D, Zhang W P. The Mathematical Model and Research Progress of the Boundary Layer Flashback in Premixed Combustion (in Chinese). *Appl Math Mech*, 2023, 44: 36-51 [李文栋, 张文普. 预混燃烧边界层回火的数理模型及研究进展. *应用数学和力学*, 2023, 44: 36-51]
- 4 Vagelopoulos C M, Egolfopoulos F N. Direct experimental determination of laminar flame speeds. *Symp (Int) Combust*, 1998, 27: 513-519
- 5 Lewis B, Von Elbe G. Stability and structure of burner flames. *J Chem Phys*, 1943, 11: 75-97.
- 6 Kalantari A, McDonell V. Boundary layer flashback of non-swirling premixed flames: Mechanisms, fundamental research, and recent advances. *Prog Energy Combust Sci*, 2017, 61: 249-292
- 7 Putnam A A, Jensen R A. Application of dimensionless numbers to flashback and other combustion phenomena. *Symp Combust Flame Explos Phenom*, 1949, 3: 89-98
- 8 Von Elbe G, Mentser M. Further studies of the structure and stability of burner flames. *J Chem Phys*, 1945, 13: 89-100
- 9 Garside J E, Forsyth J S, Townend D T A. The stability of burner flames. *J Inst Fuel*, 1945, 18: 175-185
- 10 Edse R. Studies on burner flames of hydrogen-oxygen mixtures at high pressures. Wright Air Development Center, 1952
- 11 Grumer J, Harris M E. Temperature dependence of stability limits of burner flames. *Ind Eng Chem*, 1954, 46: 2424-2430
- 12 Bollinger L E, Edse R. Effect of burner-tip temperature on flash back of turbulent hydrogen-oxygen flames. *Ind Eng Chem*, 1956, 48: 802-807
- 13 Kurdyumov V N, Fernandez E, Linan A. Flame flashback and propagation of premixed flames near a wall. *Proc Combust Inst*, 2000, 28: 1883-1889
- 14 Kurdyumov V, Fernandez-Tarrazo E, Truffaut J M, et al. Experimental and numerical study of premixed flame flashback. *Proc Combust Inst*, 2007, 31: 1275-1282
- 15 Eichler C, Baumgartner G, Sattelmayer T. Experimental investigation of turbulent boundary layer flashback limits for premixed hydrogen-air flames confined in ducts. *J Eng Gas Turb Power*, 2012, 134: 011502
- 16 Kalantari A, Sullivan-Lewis E, McDonell V. Flashback propensity of turbulent hydrogen-air jet flames at gas turbine pre-mixer conditions. *J Eng Gas Turbines Power*, 2016, 138: 061506
- 17 Duan Z, Kalantari A, McDonell V. Parametric analysis of flashback propensity with various fuel compositions and burner materials. In: *Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air*. Montreal: American Society of Mechanical Engineers, 2015
- 18 Lee S T, T'ien J S. A numerical analysis of flame flashback in a premixed laminar system. *Combust Flame*, 1982, 48: 273-285
- 19 Lee S T, Tsai C H. Numerical investigation of steady laminar flame propagation in a circular pipe. *Combust Flame*, 1994, 99: 484-490
- 20 Mallens R M M, De Goey L P H. Flash-back of laminar premixed methane/air flames on slit and pipe burners. *Combust Sci Technol*, 1998, 136: 41-54
- 21 Daou J, Matalon M. Flame Propagation in Poiseuille flow under adiabatic conditions. *Combust Flame*, 2001, 124: 337-349
- 22 Kurdyumov V N, Fernandez-Tarrazo E. Lewis Number Effect on The Propagation of premixed laminar flames in narrow open ducts. *Combust Flame*, 2002, 128: 382-394
- 23 Gruber A, Chen J H, Valiev D, Law C K. Direct numerical simulation of premixed flame boundary layer flashback in turbulent channel flow[J]. *J Fluid Mech*, 2012, 709: 516-542
- 24 Endres A, Sattelmayer T. Large eddy simulation of confined turbulent boundary layer flashback of premixed hydrogen-air flames. *Int J Heat Fluid Flow*, 2018, 72: 151-160
- 25 Eichler C. Flame flashback in wall boundary layers of premixed combustion systems. Dissertation for Doctoral Degree. Munich: Technical University of Munich, 2011
- 26 Nicoud F, Ducros F. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow Turb Combust*, 1999, 62: 183-200
- 27 Zhang J, Liu C Y, Yang T. Large-eddy simulation of turbulent combustion based on steady flamelet/progress variable approach (in Chinese).

- Sci China Ser G-Phys Mech Astron, 2017, 47: 79-90 [张健, 刘桢钰, 杨涛. 基于过程变量-火焰面模型的湍流燃烧大涡模拟. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2017, 47: 79-90]
- 28 Yang Y, Chen Z, Zhou H, et al. Numerical simulations and structure characterizations in high-Reynolds-number premixed turbulent flames (in Chinese). Sci China Ser G-Phys Mech Astron, 2017, 47: 46-61 [杨越, 陈正, 周豪, 等. 高雷诺数预混湍流火焰的数值模拟与结构表征. 中国科学:物理学 力学 天文学, 2017, 47: 46-61]
- 29 Peters N. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. Prog Energy Combust Sci, 1984, 10(3): 319-339
- 30 Peters N. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. Symp (Int) Combust. 1988, 21: 1231-1250
- 31 Chen Z, Burke M P, Ju Y. On the critical flame radius and minimum ignition energy for spherical flame initiation. Proc Combust Inst, 2011, 33(1): 1219-1226
- 32 Law C K, Jomaas G, Bechtold J K. Cellular instabilities of expanding hydrogen/propane spherical flames at elevated pressures: theory and experiment. Proc Combust Inst, 2005, 30(1): 159-167
- 33 Sivathanu Y R, Faeth G M. Generalized state relationships for scalar properties in nonpremixed hydrocarbon/air flames. Combust Flame, 1990, 82: 211-230
- 34 Goldmann A, Dinkelacker F. Experimental investigation and modeling of boundary layer flashback for non-swirling premixed hydrogen/ammonia/air flames. Combust Flame, 2021, 226: 362-379
- 35 Zhu X K, Song Y B, Yang X S, et al. Velocity transformation for compressible wall-bounded turbulence—An approach through the mixing length hypothesis. Sci. China Phys. Mech. Astron, 2024, 67: 294711
- 36 Li Y B. Numerical Study on Flashback in Laminar Boundary Layers (in Chinese). Dissertation for Master Degree. Hangzhou: Zhejiang University, 2016 [李宇斌. 层流边界层回火的数值研究. 硕士论文. 杭州: 浙江大学, 2016]
- 37 Burke M P, Chaos M, Ju Y, et al. Comprehensive H₂/O₂ kinetic model for high - pressure combustion. Int J Chem Kinet, 2012, 44: 444-474
- 38 Hoferichter V, Hirsch C, Sattelmayer T. Prediction of boundary layer flashback limits of laminar premixed jet flames. In: Turbo Expo: Power for Land, Sea, and Air. Oslo: American Society of Mechanical Engineers, 2018
- 39 Hunt J C R, Wray A A, Moin P. Eddies, streams, and convergence zones in turbulent flows. In: Studying Turbulence Using Numerical Simulation Databases, 2. Proceedings of the 1988 Summer Program, 1988
- 40 Zhan J, Li Y, Wai W O, et al. Comparison between the Q criterion and Rortex in the application of an in-stream structure. Phys Fluids, 2019, 31: 121701
- 41 Lipatnikov A N, Chomiak J. Effects of premixed flames on turbulence and turbulent scalar transport. Prog Energy Combust Sci, 2010, 36: 1-102
- 42 Baumgartner G, Boeck L R, Sattelmayer T. Experimental investigation of the transition mechanism from stable flame to flashback in a generic premixed combustion system with high-speed micro-particle image velocimetry and Micro-PLIF combined with chemiluminescence imaging. J Eng Gas Turbines Power, 2016, 138: 021501
- 43 Gruber A, Sankaran R, Hawkes E R, et al. Turbulent flame-wall interaction: a direct numerical simulation study. J Fluid Mech, 2010, 658: 5-32
- 44 Hoferichter V, Hirsch C, Sattelmayer T, et al. Comparison of two methods to predict boundary layer flashback limits of turbulent hydrogen-air jet flames. Flow Turb Combust, 2018, 100: 849-873
- 45 Gruber A, et al. Direct numerical simulation of premixed flame boundary layer flashback in turbulent channel flow. J Fluid Mech, 2012, 709: 516-542
- 46 Hoferichter V, et al. Analytic prediction of unconfined boundary layer flashback limits. Combust Theory Model, 2017, 21: 382-418
- 47 Goldmann A, Dinkelacker F. Investigation of boundary layer flashback for non-swirling premixed hydrogen/ammonia/nitrogen/oxygen/air flames. Combust Flame, 2022, 238: 111927

Large Eddy Simulation Study on the Tempered Turbulent Boundary Layer

Jiangchao Wei, Wendong Li, Wenpu Zhang^{*}

Institute of Fluid Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China

This study employs the Large Eddy Simulation (LES) method combined with the Flamelet Generated Manifold (FGM) combustion model to numerically investigate the phenomenon of boundary layer flashback in hydrogen/air mixtures within an unconfined space. The simulation results show that when the unconfined space boundary layer flashback occurs, the flame needs to overcome the wall heat loss to enter the burner interior. Moreover, before the flame enters the upstream pipe in the unconfined space, the interaction between the flame, the incoming flow and the wall is weak, and there is no near-wall recirculation zone mechanism to promote the occurrence of flashback, which may lead to the fact that the unconfined space boundary layer flashback is more difficult to occur compared to the confined space. Meanwhile, due to the absence of boundary closure and the presence of complex non-equilibrium effects, the current LES models for unconfined spaces remain insufficient. Based on the numerical research results and further theoretical analysis, a Damkohler number correction model was proposed in this paper. This model comprehensively considers the influence of a series of parameters such as the burner edge temperature, laminar flame speed, and mixture properties on the boundary layer flashback. By comparing with the experimental data, the prediction results of the Damkohler number correction model are in good agreement with the experimental data in the literature, indicating that this correction model has an accurate prediction ability for the unconfined space turbulent boundary layer flashback.

Premixed combustion; Turbulent boundary layer flashback; Large eddy simulation; Damköhler number model

PACS: 47.27.ep, 47.27.nb, 47.70.Fw, 47.70.Pq

doi: 10.1360/SSPMA2016-00000