湍流提升火焰条件矩封闭模拟

蒋 勇 邱 榕 周 为 范维澄

(中国科学技术大学火灾科学国家重点实验室, 合肥 230026. E-mail:yjjiang@ustc.edu.cn)

摘要 采用 k–ε–g 湍流模型、23 步反应机理和径向平均条件矩封闭(Conditional Moment Closure)CMC 技术, 模拟了氢气湍流提升火焰结构, 并探讨了火焰稳定机理. 作为针对湍流提升火焰进行耦合 CMC 模型的多维大涡模拟 LES 的第一步, 计算考虑了湍流对燃烧的作用, 数值格式采用高精度 Padé 格式, 推导并采用了基于特征波分析的多组分条件矩 Navier-Stokes 特征边界条件 NSCBC, 本研究暂不考虑热释放对湍流的影响, 模拟集中于火焰提升区域. 与国际上公布的相关实验数据的比较表明, 模型精确地预测了提升高度、Favre 径向平均温度和组分浓度. 研究结果表明, 径向平均 CMC 模型能够较好重构目前仍争议较大的提升火焰稳定机理.

关键词 条件矩封闭模拟 **CMC** 湍流提升火焰 **Navier-Stokes** 特征边界条件 **NSCBC** **Padé** 格式

由于湍流火焰结构中宽广的时空尺度差异, 必须对脉动关联项进行模化. 非线性对流项使得平均控制方程不封闭, 即速度脉动关联、标量和速度脉动关联尚待模化. 反应流中强非线性的化学源项导致对平均反应速率的计算出现重大困难. 我们尚不能采用无条件平均方法模化湍流反应流控制方程中的未知项, 因为无法封闭平均反应源项[1]. 针对非预混湍流反应流, 较为典型的处理方式有层流小火焰LFM模型和概率密度函数PDF模型. Damköhler数足够大时, 湍流火焰具有小火焰特征, 湍流火焰可以模化为微元层流小火焰的集合[2,3], LFM能够较为精确地预测主产物和主反应物, 但对痕迹组分的计算可靠性较差. Bilger 指出, 当局部反应区厚度小于湍流耗散长度尺度时, 小火焰概念才是合理的; 否则, 反应区内湍流脉动会导致特征混合量发生较大的变化, 从而使小火焰模型存在较大问题[4]. PDF和CMC模型将反应标量作为随机量, 没有先验的物理假设. PDF可以精确地处理反应源项和对流输运. 由于PDF输运方程的高维特性, 因而目前一般采用Monte Carlo颗粒模拟技术, 但耦合详细反应机理的PDF计算, 仍存在计算量巨大的困难. 同时Nuemann边界条件下Poisson方程的奇异性问题、颗粒压力进化方程的推导、以及分子扩散项的模化是该研究值得注意的方面[5,6]. 针对非预混湍流反应流, CMC模型假定标量湍流脉动强烈依赖于局部关键量—— 混合分数, 因而非线性的化学源项可以根据条件平均量直接模化. CMC可以对复杂非线性系统进行有效解耦, 是目前值得注意的湍流反应流模拟技术[1,7,8]. 针对各向同性均质湍流, CMC和LFM的计算对比见文献[4]. Kim和Huh对甲烷非流线体火焰结构成功地进行了CMC模拟, 并准确预测了NO生成量[9,10]. Fairweather和Woolley采用一阶精度一维CMC模型, 对氢气和甲烷非预混射流火焰分别进行了预测[11,12]. Cleary等人对CMC数值方法进行了研究和讨论[13,14]. Barlow等人分别采用PDF和CMC模拟技术, 对氢气射流火焰结构进行了模拟对比[15], 发现: 两种模型很好地预测了火焰中条件平均温度和H_2O浓度, 同时能够较好预测NO生成, 还发现PDF方法对NO生成的预测值较CMC模型计算值低, 他们分析了可能的原因. Jiménez等人对稀薄分层丙烷-空气火焰进行了模化和计算研究, 证明CMC方法可以较好预测次级反应区域的出现[16]. Kronenburg等人采用CMC模型较好模拟了甲烷射流火焰中的碳黑生成[17]. Roomina 和Bilger采用激光诊断技术测量了甲烷射流火焰中气流速度、混合场、温度场、以及包括NO的组分质量分数, 证明CMC模型的预测值具有较高的精度[18]. 近期, Bilger将CMC思想扩展到湍流预混火焰结构的计算中[19].

相关领域学者对湍流提升火焰进行了不懈的研究, 但对于其机理的解释目前仍有较大争议[20]. Vanquickenborne与van Tiggelen最早对提升火焰进行研究, 他们提出, 在提升火焰结构中, 点燃之前燃料和氧化剂就已充分混合, 火焰提升高度稳定在化学当量比下当地流动速度等于湍流火焰速度的地方, 而这种湍流火焰速度必须满足燃料和氧化剂预混下的化学当量比条件[21]. Peters和Williams则认为轴对称射流火焰中的分子扩散程度不足以支持预混燃烧.

他们认为湍流扩散火焰可以看作为湍流拉伸与化学反应作用下的连续皱褶层流扩散火焰面，如果作用在层流扩散火焰面上的拉伸率大于某个阈值，化学反应就会突然中止并产生熄火[22]. 近几年来，对提升火焰的理论分析和实验结果表明，提升火焰结构与部分预混火焰传播(皱褶小火焰)有关. 实验结果显示在火焰提升高度区存在部分预混现象，激光图像分析也支持了这一观点[23,24]. Ma和Mahmud等学者运用修正的层流小火焰模型计算分析了湍流提升火焰结构[25].

从理论上来看，CMC技术可以运用于宽广的湍流反应流研究，但其成功实现目前仍有很大困难. 作者在研究时发现：(1)由于目前的CMC方程仍不是Favre平均意义上的守恒方程，导致计算时易发生数值发散现象；(2)虚假矩的产生和传播会使计算结果产生较大误差; (3)奇点的存在，使β 函数的积分出现较大困难. Bilger和Kim在他们的研究中也发现上述问题. 第 1 个问题主要存在于非定常计算中；第 3 个问题可采用Liu和Chen等学者建议的方法解决[26,27]. Bilger建议采用适当的边界条件和基本形式的CMC方程有助于解决上述的第 2 个问题.

目前，CMC 模拟基本采用低阶精度的数值离散格式，使得其本身的优点并未充分发挥，其中主要的原因之一在于多组分条件变量特征边界制定的困难. 因而，采用高阶精度 Padé 数值格式，推导并运用多组分条件变量特征边界条件，具有重要的意义.

1 CMC 方法

1.1 数学模型

Klimenko和Bilger分别采用不同方法，推导出条件平均量守恒方程[1,7,8]. 组分的条件平均质量分数定义为

$$Q_i(\eta,\ x,\ t)=\langle Y_i(x,t)\,|\,\xi(x,t)=\eta\rangle, \tag{1}$$

其中, x 为空间坐标, t 为时间, η表示混合分数, ξ 为采样空间变量，括号表示集合平均. Y_i 可以分解为其平均 Q_i和脉动值 y_i,

$$Y_i(x,\ t)=Q_i(\xi(x,\ t)=(\eta,\ x,\ t)+y_i(x,\ t) \tag{2}$$

显然, $\langle y_i(\boldsymbol{x},t)\,|\,\eta\rangle=0.$.

CMC 方程为

$$\langle\rho\,|\,\eta\rangle\frac{\partial Q_i}{\partial t}+\langle\rho\,|\,\eta\rangle\langle V\,|\,\eta\rangle\cdot\nabla Q_i$$

$$=\langle\rho\,|\,\eta\rangle\langle\dot{\omega}_i\,|\,\eta\rangle+\langle N\,|\,\eta\rangle\frac{\partial^2 Q_i}{\partial\eta^2}+eQ+ey, \tag{3}$$

其中,

$$eQ=\left\langle\left(\nabla\cdot(\rho D\nabla Q_i)+\rho D\nabla\xi\cdot\nabla\frac{\partial Q_i}{\partial\eta}\right)|\,\eta\right\rangle,$$

$$ey=-\left\langle\left(\rho\frac{\partial y_i}{\partial t}+\rho(\boldsymbol{v}"\cdot\nabla y_i)-\nabla\cdot(\rho D\nabla y_i)\right)|\,\eta\right\rangle,$$

式中, D 为扩散系数, $\dot{\omega}_i$表示反应源项, $\langle\boldsymbol{V}\,|\,\eta\rangle$ 为条件平均速度, $\langle\rho\,|\,\eta\rangle$ 为条件平均密度, $\langle N\,|\,\eta\rangle$ 表示条件平均标量耗散, eQ 和 ey 分别表示 Q_i的分子扩散和湍流脉动 y_i的影响. 在较高 Reynold 数 Re 下, eQ 可以忽略, ey 中的第 1 项和第 3 项也可忽略，第 2 项即为条件湍流通量.

基于上述封闭假设，可得

$$\frac{\partial Q_i}{\partial t}=\langle\dot{\omega}_i\,|\,\eta\rangle-\langle\boldsymbol{V}\,|\,\eta\rangle\cdot\nabla Q_i+\langle N\,|\,\eta\rangle\frac{\partial^2 Q_i}{\partial\eta^2}$$

$$-\frac{\mathrm{div}(\langle\mathbf{v}"y_i\,|\,\eta\rangle\langle\rho\,|\,\eta\rangle P(\eta))}{P(\eta)\langle\rho\,|\,\eta\rangle}. \tag{4}$$

上式左侧为条件质量分数随时间的导数，右侧第 1 项为条件平均化学反应源项，第 2 项表示条件对流输运，第 3 项表示分子混合作用，第 4 项为条件湍流通量.

非条件标量值可通过相应条件值被 Favre 概率密度函数加权，并在混合分数空间中积分得到

$$\tilde{\phi}=\int_0^1\langle\phi\,|\,\eta\rangle\tilde{P}(\eta)\mathrm{d}\eta, \tag{5}$$

Favre 概率密度函数 $\tilde{P}(\eta)$ 根据实验数据假定为β 概率密度函数的形式，它是混合分数及混合分数方差的函数.

1.2 CMC 方程封闭

方程(4)中的条件湍流通量可应用梯度扩散假定进行模化,

$$\langle\boldsymbol{v}"y_i\,|\,\eta\rangle\approx-D_t\nabla Q_i, \tag{6}$$

其中，湍流扩散系数 D_i表示为

$$D_t=C_\mu k^2/(\varepsilon\sigma_t), \tag{7}$$

式中, σ_t=0.7 为湍流 Schmidt 数.

对于稳态轴对称射流火焰，渐进分析和实验表明，径向条件平均量变化很小[28~30]，因此，可通过径向积分获得CMC方程. 定义任意函数$F(r)$的径向平均算子为

$$\{F\}_R=\frac{2}{R^2}\int_0^R F(r)r\mathrm{d}r, \tag{8}$$

其中, R 为特征半径.

概率密度函数加权的径向平均算子定义为

$$\{F\mid\eta\}_{R+}=\frac{\{F(r)\tilde{P}(\eta,r)\}_R}{\{\tilde{P}(\eta,r)\}_R},\tag{9}$$

最后得

$$\{V_x\mid\eta\}_R+\frac{\partial Q_i}{\partial x}-\frac{\{D_t\mid\eta\}_{R+}}{\tilde{P}(\eta)}\frac{\partial\tilde{P}(\eta)}{\partial x}\frac{\partial Q_i}{\partial x}$$
$$-\frac{\partial}{\partial x}(\{D_t\mid\eta\}_{R+}\frac{\partial Q_i}{\partial x})$$
$$=\langle\dot{\omega}_i\mid\eta\rangle\frac{W_i}{\langle\rho\mid\eta\rangle}+\frac{1}{2}\{N\mid\eta\}_{R+}\frac{\partial^2 Q_i}{\partial\eta^2},\tag{10}$$

其中,

$$\{V_x\mid\eta\}_{R+}=\frac{\int_0^R\widetilde{V_x}(x,r)\tilde{P}(\eta)r\mathrm{d}r}{\{\tilde{P}(\eta)\}_R},$$
$$\langle\dot{\omega}_i\mid\eta\rangle=\dot{\omega}(Q_1,\ Q_2,\ \ldots,\ Q_n,\ Q_T).$$

精确的条件平均标量耗散率模型对于条件矩封闭数值预测结果有重要意义. 条件平均标量耗散率定义为

$$\langle N\mid\eta\rangle=C\cdot\exp\{-2[erf^{-1}(2\eta-1)]^2\},\tag{11}$$

该形式可以通过各向同性湍流的AMC封闭模型, 或通过解层流对撞扩散火焰控制方程获得[31,32], 常数 C 定义为

$$C=\frac{\tilde{\chi}}{\int_0^1\exp\{-2[erf^{-1}(2\eta-1)]^2\}\tilde{P}(\eta)\mathrm{d}\eta}.\tag{12}$$

平均标量耗散率 $\tilde{\chi}$ 基于湍流特征时间尺度分析, 有

$$\tilde{\chi}=2\varepsilon\tilde{\xi}''^2/k.\tag{13}$$

$\tilde{P}(\eta)$ 采用β 概率密度函数形式,

$$\tilde{P}(\eta)=\frac{\eta^{\alpha-1}(1-\eta)^{\beta-1}}{I_\beta}\tag{14}$$

其中,

$$I_\beta=\int_0^1 f^{a-1}(1-f)^{b-1}df$$
$$a=\tilde{\xi}\left[\tilde{\xi}(1-\tilde{\xi})/\widetilde{\xi''^2}-1\right]$$
$$b=(1-\tilde{\xi})\left[\tilde{\xi}(1-\tilde{\xi})/\widetilde{\xi''^2}-1\right].$$

条件焓方程与(10)式类似.

1.3 数值方法

采用 k–ε–g 湍流模型, 运用 FLUENT 软件包进行湍流流动过程计算. 通过数值实验, 发现设定湍流模型常数 $C_{\varepsilon1}$=1.44 及 $C_{\varepsilon2}$=2.1 可以得到较为满意的计算结果. 采用分步计算法求解CMC方程(10), 可以将刚性化学反应源项有效分离, 从而使用刚性反应系统算法器 VODE 处理化学反应源项, 即

(1) 轴向输运计算

$$\frac{\partial Q_i^{(1)}}{\partial t}=\underbrace{-\{V_x\mid\eta\}_{R+}\frac{\partial Q_i}{\partial x}}_{\text{convection}}+\underbrace{\{D_t\mid\eta\}_{R+}\frac{1}{\tilde{P}(\eta)}\frac{\partial\tilde{P}(\eta)}{\partial x}\frac{\partial Q_I}{\partial x}}_{\text{pdf term}}$$
$$+\underbrace{\frac{\partial}{\partial x}(\{D_t\mid\eta\}_{R+}\frac{\partial Q_I}{\partial x})}_{\text{axial diffusion}}.\tag{15}$$

(2) 混合分数空间混合计算

$$\frac{\partial Q_i^{(2)}}{\partial t}=\frac{1}{2}\{N\mid\eta\}_{R+}\frac{\partial^2 Q_i^{(1)}}{\partial\eta^2}.\tag{16}$$

(3) 化学反应源项计算

$$\frac{\partial Q_i^{(3)}}{\partial t}=\langle\dot{\omega}_i\mid\eta\rangle^{(2)}\frac{W_i}{\langle\rho\mid\eta\rangle}.\tag{17}$$

时间离散采用显式三阶低存储Runge-Kutta方法, 空间离散采用类谱六阶精度紧致Padé格式[33,34].

1.4 边界条件

入口处:

$$Q_i(x=0,\eta=0)=Y_{i,\text{oxidizer}}(x=0),\tag{18}$$
$$Q_i(x=0,\eta=1)=Y_{i,\text{fuel}}(x=0).\tag{19}$$

在条件矩封闭计算空间域的末端(r=30 mm), 将低应变速率稳态层流小火焰模型 SLFM 的计算结果作为平衡状态, 以确定边界物理值.

由于高阶精度数值格式无耗散, 且具有极低的色散误差, 因此需要精确的边界条件以避免数值发散和计算域内伪波发射现象. 基于特征波分析和一维无粘LODI关系[35~37], 经推导, 边界上控制方程为

$$\frac{\partial Q_1}{\partial x}=-\frac{W_1}{\langle V_x\mid\eta\rangle\overline{W}}\left(\frac{\Gamma_1}{\langle T\mid\eta\rangle}+\frac{\Gamma_{Ns+1}}{\langle\rho\mid\eta\rangle}\right),\tag{20}$$

$$\frac{\partial Q_i}{\partial x}=-\frac{W_i}{\langle V_x\mid\eta\rangle\langle T\mid\eta\rangle\overline{W}}\Gamma_j\quad(j=2-Ns),\tag{21}$$

其中, $\overline{W}$ 为平均分子量, W_i为 i 组分分子量, T为温度, ρ为密度, Ns 表示组分总数, Γ_j为特征波振幅, 可表示为,

$$\Gamma_1=\langle V_x\mid\eta\rangle\left(\frac{1-\gamma}{\gamma}\frac{\langle T\mid\eta\rangle}{\langle\rho\mid\eta\rangle}+\left(\frac{1}{\gamma}\right)\frac{\partial\langle T\mid\eta\rangle}{\partial x}\right.$$

$$-\left(\frac{\overline{W}\langle T\mid\eta\rangle}{W_1}\right)\frac{\partial Q_1}{\partial x}\Bigg)+\langle V_x\mid\eta\rangle\sum_{i=1}^{N_s}\left(\frac{1}{\gamma}\frac{\overline{W}\langle T\mid\eta\rangle}{W_i}\frac{\partial Q_1}{\partial x}\right), \tag{22}$$

$$\Gamma_i=\langle V_x\mid\eta\rangle\left[-\left(\frac{\overline{W}\langle T\mid\eta\rangle}{W_i}\right)\frac{\partial Q_i}{\partial x}\right](i=2-Ns), \tag{23}$$

$$\Gamma_{Ns+1}=\langle V_x\mid\eta\rangle\Bigg[\left(\frac{\gamma-1}{\gamma}\frac{\partial\langle\rho\mid\eta\rangle}{\partial x}\right)-\left(\frac{\langle\rho\mid\eta\rangle}{\gamma\langle T\mid\eta\rangle}\right)\frac{\partial}{\partial x}\langle T\mid\eta\rangle-\sum_{i=1}^{N_s}\left(\frac{\overline{W}}{W_i}\frac{\langle\rho\mid\eta\rangle}{\gamma}\frac{\partial Q_i}{\partial x}\right)\Bigg], \tag{24}$$

式中, γ为比热比.

2　反应动力学机理

氢燃烧采用 23 步机理, 涉及 H_2, H, O_2, O, OH, HO_2, H_2O_2, H_2O, N, N_2, NO 11 种组分, 见表 1.

表 1　23-步机理 a)

No.	反应	A	b	E
1	$H_2+O_2=2OH$	1.70×10^{13}	0	47780
2	$OH+H_2=H_2O+H$	1.17×10^{9}	1.3	3626
3	$O+OH=O_2+H$	4.00×10^{14}	−0 5	0
4	$O+H_2=OH+H$	5.06×10^{4}	2.67	6290
5	$H+O_2+M=HO_2+M$	3.61×10^{17}	−0.72	0
6	$OH+HO_2=H_2O+O_2$	7.50×10^{12}	0	0
7	$H+HO_2=2OH$	1.40×10^{14}	0	1073
8	$O+HO_2=O_2+OH$	1.40×10^{13}	0	1073
9	$2OH=O+H_2O$	6.00×10^{8}	1.3	0
10	$H+H+M=H_2+M$	1.00×10^{18}	−1	0
11	$H+H+H_2=H_2+H_2$	9.20×10^{16}	−0.6	0
12	$H+H+H_2O=H_2+H_2O$	6.00×10^{19}	−1.25	0
13	$H+OH+M=H_2O+M$	1.60×10^{22}	−2	0
14	$H+O+M=OH+M$	6.20×10^{16}	−0.6	0
15	$O+O+M=O_2+M$	1.89×10^{13}	0	−1788
16	$H+HO_2=H_2+O_2$	1.25×10^{13}	0	0
17	$HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$	2.00×10^{12}	0	0
18	$H_2O_2+M=OH+OH+M$	1.30×10^{17}	0	45500
19	$H_2O_2+H=HO_2+H_2$	1.60×10^{12}	0	3800
20	$H_2O_2+OH=H_2O+HO_2$	1.00×10^{13}	0	1800
21	$O+N_2=NO+N$	1.40×10^{14}	0	75800
22	$N+O_2=NO+O$	6.40×10^{9}	1	6280
23	$OH+N=NO+H$	4.00×10^{13}	0	0

a) 单位: mol-cm-s-K, 能量单位: cal/mol(1cal =4.1868 J)

3　计算结果与分析

图 1 为使用稳态层流小火焰模型 SLFM, 混合分数对于温度的计算结果.

图 2 示出当量比处, CMC 预测的条件温度随轴向的变化情况. 可以发现, 温度在 13~14 mm 附近迅速升高. 本文的计算结果表明, 在轴向位置 13.70 mm

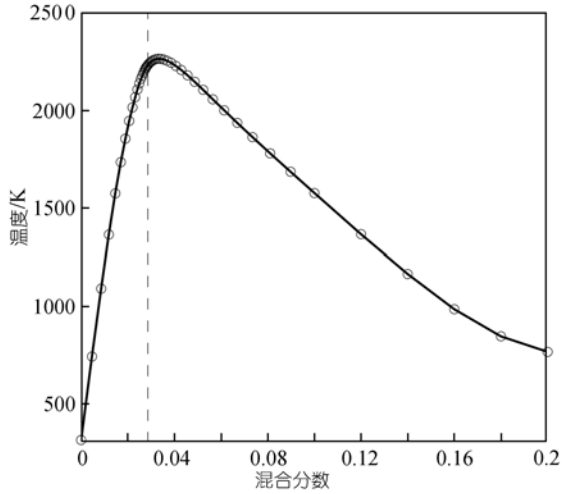

图 1　温度变化

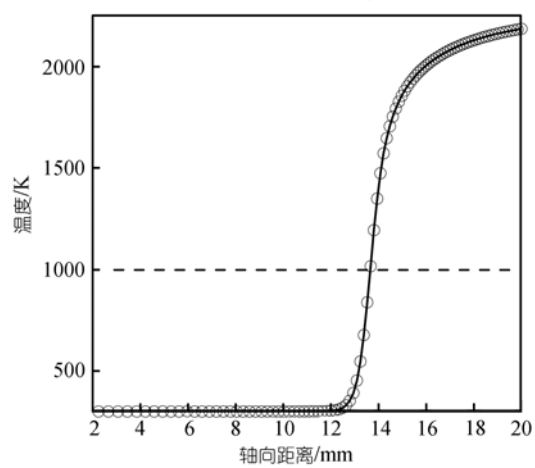

图 2　轴向当量比下条件温度变化

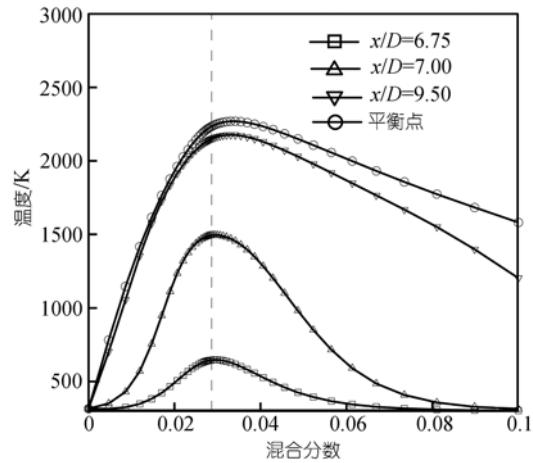

图 3　不同轴向位置条件温度随混合分数的变化

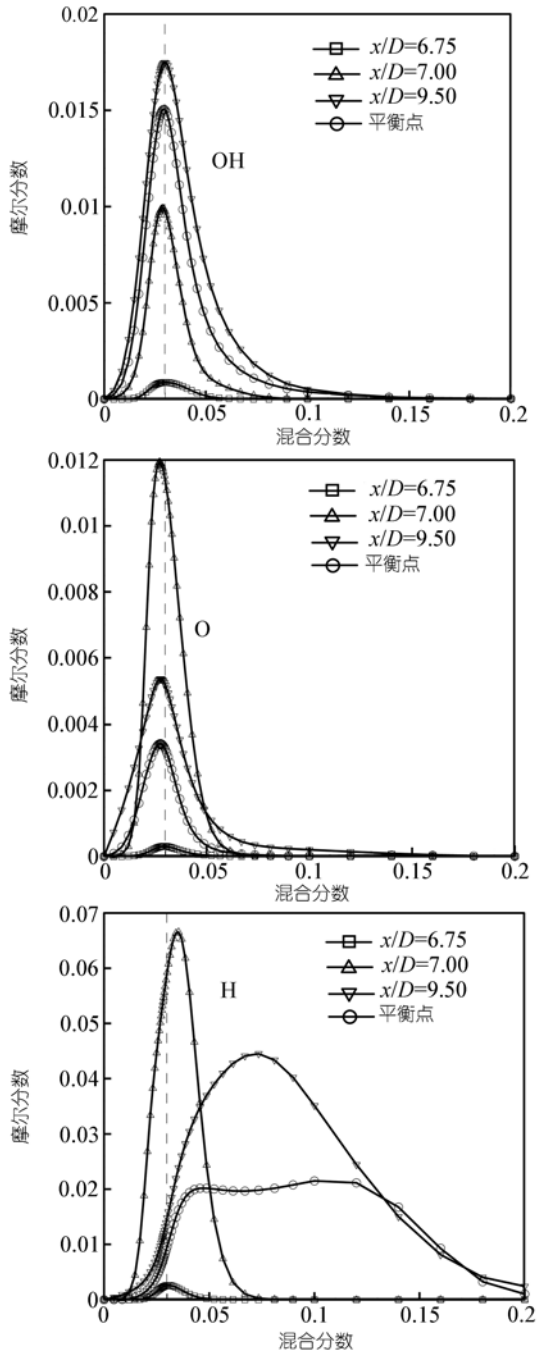

图 4 不同轴向位置条件 OH, O 和 H 摩尔分数

处温度达 1000 K, 如果当温度达 1000 K时认为氢气-空气混合物可靠着火[38], 则提升火焰高度在轴向位置 13.70 mm处, 这和实验值(14.00 mm)相当接近, Devaud的计算结果为 13 mm. 由图 2 可见, 在提升高度附近, 有一个高温的区间. 在该区间里, 燃料与氧化剂以接近当量比混合, 此时流动的大尺度结构对火焰的稳定起了重要的作用. 计算还发现提升火焰高度处, 标量耗散率远远低于进口附近标量耗散率, 因而, 在H_2湍流提升火焰中, 火焰的稳定性并不取决于其标量耗散率.

图 3 为不同轴向位置条件温度分布情况, 在x/D=6.75 处即氢气尚未燃烧, 因而条件温度较低, 随着离下游越近, 温度逐渐升高, 最后趋向于平衡时温度. 值得注意的是, 所有温度曲线峰值都出现在化学当量比 $\tilde{\xi}_{st}=0.029$ 处, 这和激光实验结果[39,40]一致.

典型自由基物质 H, OH, O 是传播整个链式反应的重要活性物质, H, OH 和 O 生成与消耗主要在“自由基池”中进行: $O+OH=O_2+H$, $OH+OH=O+H_2O$, $O+H_2=OH+H$, $OH+H_2=H_2O+H$, $H+OH+M=H_2O+M$, $H+H+M=H_2+M$. 自由基 OH, O 和 H 的浓度分布情况见图 4 所示. 可以发现 OH, O 和 H 处于超平衡状态, 即其峰值大于平衡状态值.

NO 生成由 Zeldovich 过程控制, Zeldovich 过程表示 NO 由氧气和氮气在较高温度下形成, 其主要反应为: $N+O_2=NO+O$, $N_2+O=NO+N$, $N+OH=NO+H$. 不同轴向位置 NO 生成随混合分数的变化见图 5.

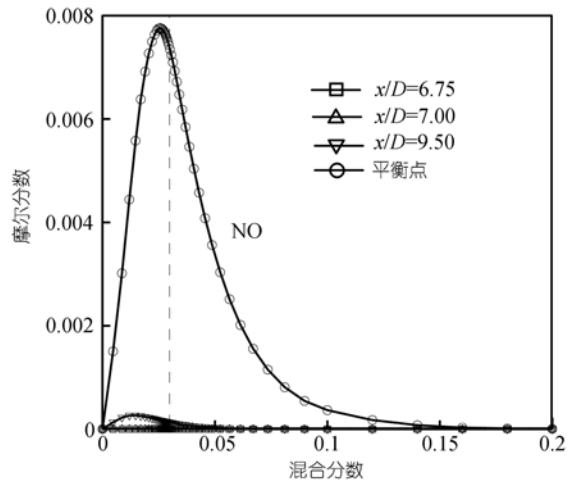

图 5 不同轴向位置条件 NO 摩尔分数

运用 Favre 概率密度函数加权积分, 将条件量变换为非条件量. 图 6 示出不同轴向位置下, H_2O 摩尔分数随径向距离的变化情况(其中符号点处为跳 4 个数据点作出).

Cheng等学者应用Raman散射及激光诱导荧光技术, 测量了在不同轴向位置x/D =7 和x/D=9.5, 其温度以及H_2, O_2, N_2, H_2O 和 OH的摩尔分数随径向的分布[41]. 图 7 给出x/D=7 处的Favre平均温度曲线与实验值对比, 其中“—”代表计算值, “□”代表实验值. 由图 7 可见计算温度与实验值符合的较好, 温度

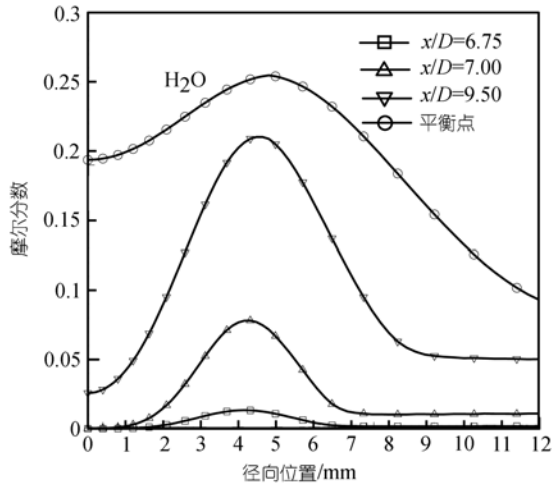

图 6　不同轴向位置 Favre 平均 H_2O 摩尔分数随径向距离的变化

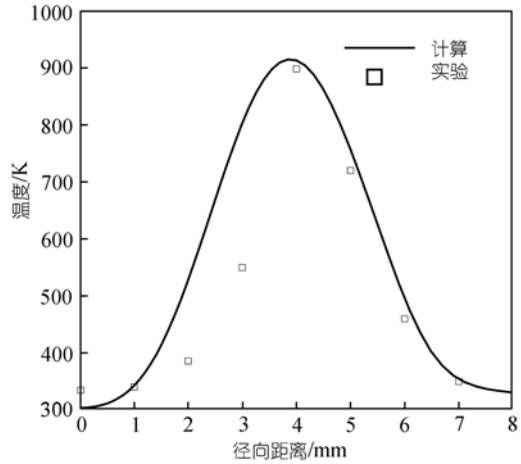

图 7　x/D =7 处径向 Favre 平均温度计算值与实验值比较

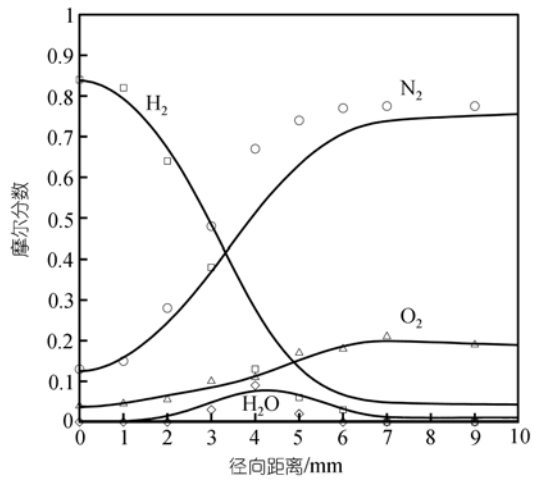

图 8　x/D =7 处径向 Favre 平均 H_2O, H_2, N_2 和 O_2 摩尔分数计算值与实验值比较

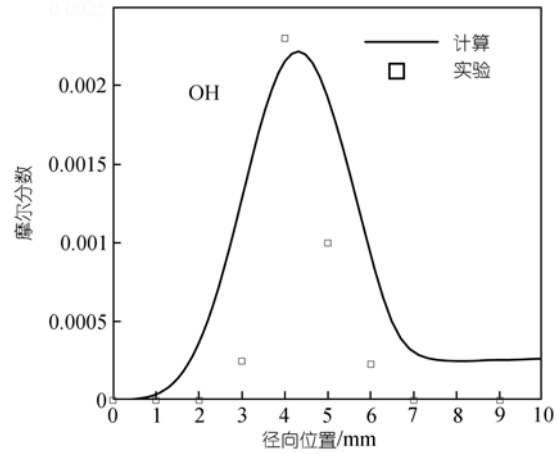

图 9　x/D=7 处径向 Favre 平均 OH 摩尔分数计算值与实验值比较

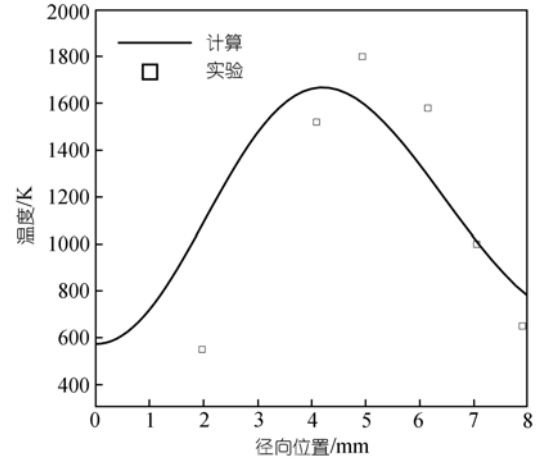

图 10　x/D=9.5 处径向 Favre 平均温度计算值与实验值比较

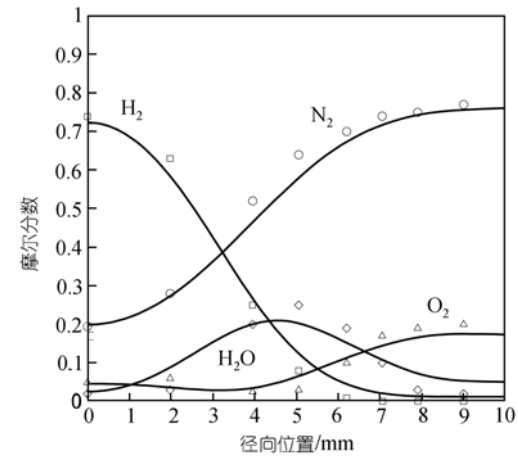

图 11　x/D = 9.5 处径向 Favre 平均 H_2O, H_2, N_2 和 O_2 计算值与实验值比较

峰值被准确预测，右侧温度曲线与实验值完全吻合. 图 8 和图 9 为 x/D=7 处, H_2、O_2、N_2、H_2O 和自由基 OH 的 Favre 平均摩尔分数与实验值的对比，其中“—”代表计算值, “□, △, ○, ◇”代表实验值. 图 10 示出 x/D=9.5 处 Favre 平均温度随径向的分布曲线, 其中“—”代表计算值, “□”代表实验值.

图 11 和图 12 分别是 x/D=9.5 处 H_2、O_2, N_2、H_2O 和自由基 OH 的 Favre 平均摩尔分数与实验值对比, 其中“—”代表计算值, “□, △, ○, ◇”代表实验值. 从图 11 中可以发现, 对于 O_2 浓度分布, CMC 在 $r\approx3$ mm 的径向位置预测了一个较小值, 这与由“△”代表的实验值完全符合. 与 x/D=7 处有所不同, x/D=9.5 处, O_2 在 $r\approx3$ mm 径向位置处消耗较大, 条件矩封闭 CMC 计算结果准确地表现了这一趋势. 图 12 示出 x/D=9.5 处 Favre 平均 OH 摩尔分数曲线, 其中, “—”代表计算值, “□”代表实验值.可以观察到羟基 OH 浓度峰值较 x/D=7 处有所增加.

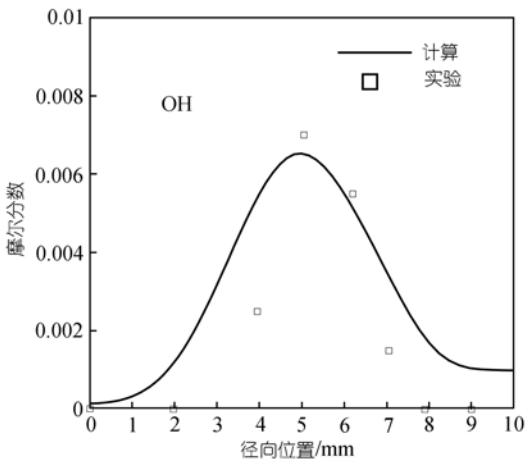

图 12 x/D=9.5 处径向 Favre 平均 OH 计算值与实验值比较

由以上可以看出，总体预测结果较好，表明 CMC 理论、所用模型、反应机理、数值方法和边界条件具有较高的可靠性. 由温度、OH 预测曲线和实验值的对比可以发现，实验值量值梯度变化较大，峰值宽度较窄，表明实际中近中心处的径向方向仍存在一定强度的大尺度径向对流现象，流动的大尺度结构和反应动力学机理共同控制火焰前锋面位置和厚度，实际的 H_2 湍流提升火焰前锋面为一个有限的较窄宽度.

4 结论

(1) CMC 方法能较为有效地预测湍流非预混提升火焰结构: 预测的提升高度与实验值非常吻合，积分平均量与现有实验数据有很好的一致性;

(2) 由于目前国际上仍没有混合分数空间实验数据，预测的条件量值尚无法得到实验支持;

(3) 目前, CMC 模拟大多采用低阶精度的数值离散格式，使得其理论本身的优点未能充分发挥，多组分条件变量特征边界制定的困难是其主要的原因之一. 本文通过特征分析和局部一维无粘关系 LODI, 推导出其特征关系，数值计算结果表明其具有较好的可靠性，这为今后耦和 CMC 模型的多维大涡模拟 LES 打下了坚实的基础;

(4) 实际运用 CMC 理论时，如何克服虚假矩的产生和传播是重大的困难之一. 采用高阶精度数值格式，配合无反射边界条件 NSCBC，可以较好解决该问题;

(5) 对于 H_2 提升火焰，流动的大尺度结构对火焰的稳定和火焰前锋面结构起了更为重要的作用，而分子扩散的作用并不明显.

致谢 本工作为国家自然科学基金项目(批准号: 50276057, 50476027)和国家重点基础研究专项经费项目(批准号: 2001CB409600)资助项目.

参 考 文 献

1 Klimenko A Y, Bilger R W. Conditional moment closure for turbulent combustion. Progress in Energy and Combustion Science, 1999, 25: 595~687[DOI]
2 Bilger R W. Future progress in turbulent combustion research. Progress in Energy and Combustion Science, 2000, 26:367～380[DOI]
3 Williams F A. Progress in knowledge of flamelet structure and extinction. Progress in Energy and Combustion Science, 2000, 26: 657~682[DOI]
4 Swaminathan N, Bilger R W. Assessment of combustion submodels for turbulent nonpremixed hydrocarbon flames. Combustion and Flame, 1999, 116: 519~545[DOI]
5 Pope S B. PDF methods for turbulent reactive flows. Progress in Energy and Combustion Science, 1985, 11: 119~192[DOI]
6 Muradoglu M, Liu K, Pope S B. PDF modeling of a bluff-body stabilized turbulent flame. Combustion and Flame, 2003, 132: 115~137[DOI]
7 Bilger R W. Conditional moment closure for turbulent reacting flow. Physics of Fluids, 1993, 5:436~444[DOI]
8 Klimenko A Y. Multicomponent diffusion of various admixtures in turbulent flow. Fluid Dynamics, 1990, 25: 327~334[DOI]
9 Kim S H, Huh K Y, Liu T. Application of the elliptic conditional moment closure model to a two-dimensional nonpremixed metha-

nol bluff-body flame. Combustion and Flame, 2000, 120: 75~90[DOI]

10 Kim S H, Huh K Y. Use of the conditional moment closure model to predict NO formation in a turbulent CH_4/H_2 flame over a bluff-body. Combustion and Flame, 2002, 130: 94~111[DOI]

11 Fairweather M, Woolley R M. First-order conditional moment closure modeling of turbulent, nonpremixed hydrogen flames. Combustion and Flame, 2003, 133: 393~405[DOI]

12 Fairweather M, Woolley R M. First-order conditional moment closure modeling of turbulent, nonpremixed methane flames. Combustion and Flame, 2004, 138: 3~19[DOI]

13 Cleary M J, Kent J H. A numerical method for conditional moment closure, 2003 Australian Symposium on Combustion & the 8th Australian Flames Days, 8-9 December 2003, Monash University, Australia

14 Cleary M J, Kent J H, Bilger R W. A computational method for combustion using conditional moment closure, Report

15 Barlow R S, Smith N S A, Chen J Y, et al. Nitric oxide formation in dilute hydrogen jet flames: isolation of the effects of radiation and turbulence-chemistry submodels. Combustion and Flame, 1999, 117: 4~31[DOI]

16 Jiménez C, Cuenot B, Poinsot T. Numerical simulation and modeling for lean stratified propane-air flames. Combustion and Flame, 2002, 128: 1~21[DOI]

17 Kronenburg A, Bilger R W, Kent J H. Modeling soot formation in turbulent methane–air jet diffusion flames. Combustion and Flame, 2000, 121: 24~40[DOI]

18 Roomina M R, Bilger R W. Conditional moment closure (CMC) predictions of a turbulent methane-air jet flame. Combustion and Flame, 2001, 125: 1176~1195[DOI]

19 Bilger R W. Marker fields for turbulent premixed combustion. Combustion and Flame, 2004, 138: 188~194[DOI]

20 Devaud C B, Bray K N C. Assessment of the applicability of conditional moment closure to a lifted turbulent flame: first order model. Combustion and Flame, 2003, 132: 102~114[DOI]

21 Vanquickenborne L, Tiggelen A V. The stabilization mechanism of lifted diffusion flames. Combustion and Flame, 1966, 10: 59~68[DOI]

22 Peters N, Williams F. Lift-off characteristics of turbulent jet diffusion flames. AIAA Journal, 1983, 21: 423~429

23 Schefer R, Namazian M, Kelly J. Stabilization of lifted turbulent flames. Combustion and Flame, 1994, 99: 75~86[DOI]

24 Brockhinke A, Andresen P, Kohse-Hoinghaus K. Quantitative one-dimensional single-pulse multispecies concentration and temperature-measurement in the lift-off region of a turbulent H_2 air diffusion flame. Applied Physics B, 1995, 61: 533~545[DOI]

25 Ma C Y, Mahmud T, Fairweather M, et al. Prediction of lifted, non-premixed turbulent flames using a mixedness-reactedness flamelet model with radiation heat loss. Combustion and flame, 2002, 128: 60~73[DOI]

26 Liu F, Guo H, Smallwood G J. A robust and accurate algorithm of the β-pdf integration and its application to turbulent methane-air diffusion combustion in a gas turbine combustor simulator. International Journal of Thermal Science, 2002, 41: 763~772[DOI]

27 Chen C S, Chang K C, Chen J Y. Application of a robust β-pdf treatment to analysis of thermal no formation in nonpremixed hydrogen-air flame. Combustion and Flame, 1994, 98: 375~390[DOI]

28 Klimenko A Y. Note on the conditional moment closure in turbulent shear flows. Physics of Fluids A, 1995, 7: 446~448[DOI]

29 Stårner S, Bilger R W, Lyons K, et al. Conserved scalar measurements in turbulent diffusion flames by a Raman and Rayleigh ribbon imaging method. Combustion and flame, 1994, 99: 347~354[DOI]

30 Chen Y -C, Mansour M. Measurements of scalar dissipation in turbulent hydrogen diffusion flames and some implications of combustion modeling. Combustion Science and Technology, 1997, 126: 291~313

31 O'Brien E E, Jiang T L. The conditional dissipation rate of an initial binary scalar in homogeneous turbulence. Physics of Fluids, 1991, 3: 3121~3123[DOI]

32 Peters N. Laminar diffusion flamelet models in nonpremixed turbulent combustion. Progress in Energy and Combustion Science, 1984, 10: 319~339[DOI]

33 Jiang X, Luo K H. Combustion-induced buoyancy effects of an axisymmetric reactive plume. Proceedings of the Combustion Institute, 2000, 28: 1989~1995

34 Sanjiva K L. Compact finite difference Schemes with spectral-like resolution. Journal of Computational Physics, 1992, 116: 247~261

35 Kevin W T. Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems. Journal of Computational Physics, 1987, 68: 1~24[DOI]

36 Poinsot T J, Lele S K. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. Journal of Computational Physics, 1992, 101: 104~129[DOI]

37 Baum M, Poinsot T J, Thévenin D. Accurate boundary conditions for multicomponent reactive flows. Journal of Computational Physics, 1994, 116: 247~261[DOI]

38 Brockhinke A, Andresen P, Kohse-Hoinghaus K. Quantitative one-dimensional single-pulse multispecies concentration and temperature-measurement in the lift-off region of a turbulent h2 air diffusion flame. Applied Physics B, 1995, 61: 533~545[DOI]

39 Tacke M, Geyer D, Hassel E, et al. A detailed investigation of the stabilization point of lifted turbulent diffusion flames. Twenty-seventh Symposium (International) on Combustion. Pittsburgh: The Combustion Institute, 1998. 1157~1165

40 Brockhinke A, Haufe S, Kohse-Hoinghaus K. Structural properties of lifted hydrogen jet fla measured by laser spectroscopic techniques. Combustion and Flame, 2000, 121: 367~377[DOI]

41 Cheng T, Wehrmeyer J, Pitz R. Simultaneous temperature and multispecies measurement in a lifted hydrogen diffusion flame. Combustion and Flame, 1992, 91: 323~345[DOI]

(2004-08-10 收稿，2005-05-13 收修改稿)