arXiv:2303.00911v1 [physics.flu-dyn] 2 Mar 2023

湍流预混氢-空气火焰在局部火焰相互作用过程中的火焰速度增强

Yuvraj[a]，Yazdan Naderzadeh Ardebili[a]，Wonsik Song[b]，Hong G. Im[b]，Chung K. Law[c]，Swetaprovo Chaudhuri[a,*]

[a]航空航天研究所，多伦多大学，多伦多，加拿大[b]清洁燃烧研究中心，阿卜杜拉国王科技大学，图瓦勒，沙特阿拉伯[c]机械与航空航天工程系，普林斯顿大学，美国

摘要

湍流预混火焰的局部火焰位移速度 S_d 在基础研究和实际应用中都备受关注。对于 H_2-空气火焰，鉴于近期电力和航空发动机应用领域均致力于开发零碳燃烧室，这一研究兴趣进一步凸显。本研究考察了若干预混 H_2-空气湍流火焰的三维直接数值模拟（3D DNS）工况，并在近期研究的基础上，建立理论模型来描述负曲率 S_d 处的情况。所呈现的四个直接数值模拟案例中，有两个在大气压下模拟，另外两个在高压下模拟。这些直接数值模拟案例采用详细化学反应机理生成，涵盖不同的湍流雷诺数（Re_t）和卡洛维茨数（Ka）。先前研究表明，在大气压下，由于火焰间相互作用，大负曲率 κ 处的密度加权火焰位移速度 $\widetilde{S_d}$ 显著高于其层流值（S_L）。因此，本研究采用内爆圆柱层流火焰构型，来表征三维湍流火焰中发生火焰间相互作用的局部火焰表面。为深入理解大负曲率处相互作用火焰的动力学，在相应的大气压和高压条件下，针对向内传播的圆柱形 H_2-空气层流预混火焰开展了采用详细化学反应机理的一维模拟（1D）。具体而言，

*通讯作者电子邮箱：swetaprovo.chaudhuri@utoronto.ca（Swetaprovo Chaudhuri）

预印本提交至 — *2023年3月3日*

一维模拟着重揭示了这些相互作用过程中火焰结构的瞬态性质。基于一维模拟的研究结果，我们采用解析方法，对三维直接数值模拟中极端负 κ 区域的 S_d 进行建模。该解析方法纳入了变密度、对流以及内反应区运动的影响。三维直接数值模拟获得的 S_d 和 κ 的联合概率密度函数（JPDF）及相应条件平均值，显示在所有压力下， S_d 与 κ 之间均存在明显的负相关性。该模型成功地预测了大负曲率（$\kappa\delta_L \ll -1$）火焰表面区域中 $\langle S_d|_\kappa \rangle$ 随 κ 的变化，在大气压和高压下均具有良好的准确性。这表明，一维圆柱形相互作用火焰模型能够有效表征三维湍流火焰中持续存在的局部火焰间相互作用，并能捕捉其内在的瞬态动力学。三维直接数值模拟案例进一步表明，即使在 $\kappa = 0$的非相互作用状态下，平均 S_d 也可能偏离 S_L。 $\kappa = 0$处的 S_d 体现了由大 Ka区间内的湍流输运所控制的内部火焰结构。因此，我们考察了 $\kappa = 0$ 处 $\langle S_d \rangle / S_L$ 与$\langle |\nabla c|_{c_0} \rangle$ 进度变量的归一化梯度之间的相关性。

关键词：局部火焰位移速度、湍流预混火焰、相互作用火焰

---

1. 引言

稳态一维未拉伸自由传播层流火焰的传播速度， S_L，是由混合物的热化学性质和输运性质决定的基本量 [1]。它作为扩散反应输运方程的特征值出现，并被常规用于验证新开发的化学反应机理。在多维流场中，火焰位移速度 S_d定义于火焰结构内部的任意一点 [2, 3], ，表示火焰表面（位置矢量为 $\boldsymbol{x}_F$）相对于局部流体速度的局部速度$\boldsymbol{u}$，方向沿火焰表面的局部单位法向量 $\boldsymbol{n}$ ，其中 $\boldsymbol{n}$ 指向反应物混合物的方向为正，因此：

$$S_d\, \boldsymbol{n} = \frac{d\boldsymbol{x}_F}{dt} - \boldsymbol{u} \tag{1}$$

若使用等温线表示火焰表面，即火焰内部的各层，则 S_d 也记作$S_{d,\ T}$ 可通过能量守恒方程 [4]确定。

$$S_{d,T} = \frac{1}{\rho C_p |\nabla T|} \left[\nabla \cdot (\lambda' \nabla T) + \rho \nabla T \cdot \sum_k (\mathcal{D}_k C_{p,k} \nabla Y_k) - \sum_k h_k \dot{\omega}_k \right] \quad (2)$$

其中， λ' 是该等温面处混合物的热导率； $\mathcal{D}_k$、h_k 和 $\dot{\omega}_k$ 分别是该等温面处第k种组分的质量扩散率、焓和净生成率。$C_{p,\ k}$ 和 C_p 分别表示采用混合物平均公式计算的第 k种组分和整体混合物的定压比热。

在有限火焰结构内，采用密度加权的火焰位移$\widetilde{\ }$速度定义 $S_d = \rho_0 S_d / \rho_u$，可以减小密度效应引起的 S_d 变化。其中， ρ_0 是所关注等温面处的密度，ρ_u 是新鲜反应物的密度。这种密度加权的$\widetilde{\ }$火焰位移速度 S_d 可解释为流入某等温面的反应物局部质量通量与新鲜反应物密度之比。

火焰位移速度是降阶模型的重要输入，例如 G方程 [5] 或火焰表面密度模型 [6] ，用于预测火焰传播，进而预测总体燃烧速率。已知局部 S_d 和 $\widetilde{S_d}$ 会受到外部流体动力学效应的影响，例如曲率、 κ [2, 7–13], 应变率 [2, 11], ，以及由路易斯数 Le表示的差异扩散效应 [14–17]。位移速度与局部拉伸之间的关联式已通过理论 [18–23] 和实验 [22, 24, 25]进行了广泛研究。湍流相对强度通常用湍流卡洛维茨数Ka表征，其定义为特征火焰时间与柯尔莫哥洛夫涡周转时间之比。对于低至中等强度的湍流脉动$\widetilde{\ }$（$Ka < 10$），通过定义两个不同的马尔克斯坦长度 [26–28]，可以描述 S_d 相对于 S_L 的偏差：

$$\widetilde{S_d}(\theta^*) = S_L - \mathcal{L}_{\mathbb{K}}(\theta^*)\mathbb{K} - \mathcal{L}_{\kappa}(\theta^*) S_L \kappa \quad (3)$$

其中， $\mathbb{K} = a_T + S_d \kappa$ 为总拉伸率， a_T 为切向应变率， $\kappa = \nabla \cdot \boldsymbol{n}$ 为曲率；无量纲温度为$\theta^* = T_0 / T_u$ ，其中 T_0 和 T_u 分别为所关注等温面的温度和未燃混合物的温度。基于

切向应变率 ($\mathcal{L}_{\mathbb{K}}$)和曲率($\mathcal{L}_{\kappa}$)根据线性弱拉伸区间内的理论表达式 [27]计算。

然而，在更高湍流强度下，基于弱拉伸火焰理论的关联式会产生很大的误差 [29]。在一项针对中等卡洛维茨数（Ka）的直接数值模拟研究中，Lee等人 [30] 发现，在火焰表面大多具有负曲率的极值点处，关联性很强；但在正曲率位置则并非如此。在另一项研究中，Suillaud等人 [31] 提出了一种改进的关联式，采用两个有效湍流马肯斯坦长度，它们同时取决于路易斯数（Le）和Ka，这与层流情况下的马肯斯坦长度不同。

总体而言，与弱拉伸理论的偏差主要归因于大曲率及其相关的复杂火焰拓扑[32–35]。例如，研究发现，隧道形成（大正曲率）和隧道闭合（大负曲率）分别是反应物团和产物团火焰面积损失的重要原因 [32–34]。火焰湮灭过程中，不同典型拓扑结构的更复杂组合也已被观察到 [35]。Haghiri等人 [36]发现，孤岛燃尽、夹断和隧道形成等湮灭事件伴随着较大的 S_d ，其中反应项贡献最大，其次是在大负曲率下的曲率项。然而，在低曲率下，增强的 S_d 主要由反应项主导。除了复杂的火焰湮灭事件，过去也有研究探讨平面火焰相互作用 [37, 38]。Wichman和Vance [37] 利用控制方程对两个相同的预混平面层流火焰之间相互作用的模型进行了解析研究，并通过对该模型进行数值求解来验证结果。后来，Lu和Ghosal [38]在恒密度假设下，提出了单位 Le 时平面火焰相互作用的相似解。

Dave和Chaudhuri [28]进行了拉格朗日向后 [39]和向前 [40] 火焰粒子追踪分析，发现随着火焰间相互作用接近熄灭事件，会出现较大的偏差 $\backsim S_d \gg S_L$。为描述这一现象，研究者对内爆圆柱形预混火焰中相互作用的预热区进行了理论分析，得出了一个相关关系 [41]

$$\frac{\widetilde{S_d}}{S_L} = 1 - \frac{2\widetilde{\alpha_0}\kappa}{S_L} \tag{4}$$

w这里 $\widetilde{\alpha_0} = \rho_0\alpha_0/\rho_u$ 是等温面处的密度加权热扩散率

。式（4）被发现能够很好地关联中等至强湍流大气压火焰 [41]，其中 Le 不太偏离 1。顺便一提，该结果在定性上与 Pe-$\widetilde{\ }$ters [3]，$S_d = \rho_0 S_L/\rho_u - \widetilde{\alpha_0}\kappa$针对波纹火焰面和薄反应区间推导出的结果一致。

方程（4）中的简单线性关联式被发现能够恰当地描述涉及火焰间相互作用的大负曲率下的火焰行为。其适用性还在高 Ka 湍流火焰条件[41, 42]下得到了进一步验证。然而，若要将这种线性模型作为通用关联式采用，还需要进行额外而严谨的理论分析，以确定其斜率和截距。方程（4）基于一个简化模型推导而来：在恒定密度假设下，层流预混火焰以稳态方式向内传播，且呈圆柱形 [28]。此外，分析中忽略了未燃气体混合物的速度，因此恒定密度混合物处于零对流状态。为进一步贴近实际，有必要开展更全面的分析。

因此，本研究的主要目标是建立一个全面的模型，用于描述火焰间相互作用过程中的火焰速度关联式。本研究采用与Dave和Chaudhuri [28]，类似的一维圆柱形相互作用层流火焰作为模型构型，同时纳入其他物理因素。例如，在大负曲率下，火焰表面不一定以相同速度移动，因此分析将具有瞬态特征。利用DNS数据，将论证采用内爆式圆柱火焰构型来描述大负曲率下的火焰间相互作用是合理的。模型还考虑了有限火焰厚度以及火焰横向的密度变化。变密度会使径向流体流速不为零，因此分析预热区相互作用时必须纳入对流。随后将推导出更全面、通用的火焰速度关联式，并通过详细的一维模拟加以验证。

随后，在涵盖不同雷诺数（Re_t）和卡洛维茨数（Ka），且压力条件包括大气压和高压的三维直接数值模拟（DNS）数据集中，对推导出的关联式进行验证。首先，分析火焰表面主曲率的统计分布，以证明所采用的圆柱模型能够恰当地表征真实的三维湍流火焰。根据局部火焰结构分析所得的见解，将湍流中大负曲率对应的局部火焰状态表征为

瞬态、高曲率、圆柱形、相互作用的层流火焰结构。随后，对三维直接数值模拟、一维模拟和建模所得结果进行详细的比较分析。

2. 一维模拟与理论模型

本节将详细介绍理论分析，并展示一维算例的结果，这些内容对于解释分析过程中的火焰间相互作用动力学至关重要。

参数	P1C	P3C	P7C
P [大气压]	1	3	7
计算域尺寸 [厘米]	0.800	0.600	0.400
网格点	4000	6000	8000
S_L [厘米/秒]	133.456	102.158	72.858
$\delta_L[cm]$	3.485E-02	1.021E-02	4.599E-03
$\delta_L/\Delta x$	174.250	102.100	91.980
δt [μ秒]	1.000E-03	1.000E-03	1.000E-04

表1：本文研究的内爆火焰一维算例的参数详情。对于所有工况，$T_u = 300$ K、$\phi = 0.7$、$\delta_L = (T_b^\circ - T_u)/|\nabla T|_{max}$。

表1中列出了三个一维工况，即 P1C、P3C 和 P7C，它们对应向内传播的 H_2-空气圆柱形火焰，并使用 Pencil Code [43]进行了模拟。质量、动量、能量和组分守恒方程采用完全可压缩形式求解，并在流入—流出方向上使用 NSCBC。Pencil Code 的主要优势在于支持圆柱坐标系下的模拟，因此适用于对一维圆柱形层流预混火焰进行直接数值模拟。质量、动量和能量控制方程的空间离散化采用六阶精度中心差分格式；另一方面，对流项采用五阶精度迎风格式，以消除流场变量中的寄生振荡。时间推进采用低存储三阶精度 Runge-Kutta RK3-2N 格式。化学反应采用 Li等人 [44]提出的详细化学反应机理，该机理包含 9 种组分和 21 个反应，用于模拟 H_2-空气化学反应。这里将问题设置为流场变量沿方位角方向保持不变，使火焰传播呈轴对称，从而将问题简化为一维。初始时，火焰位于远离

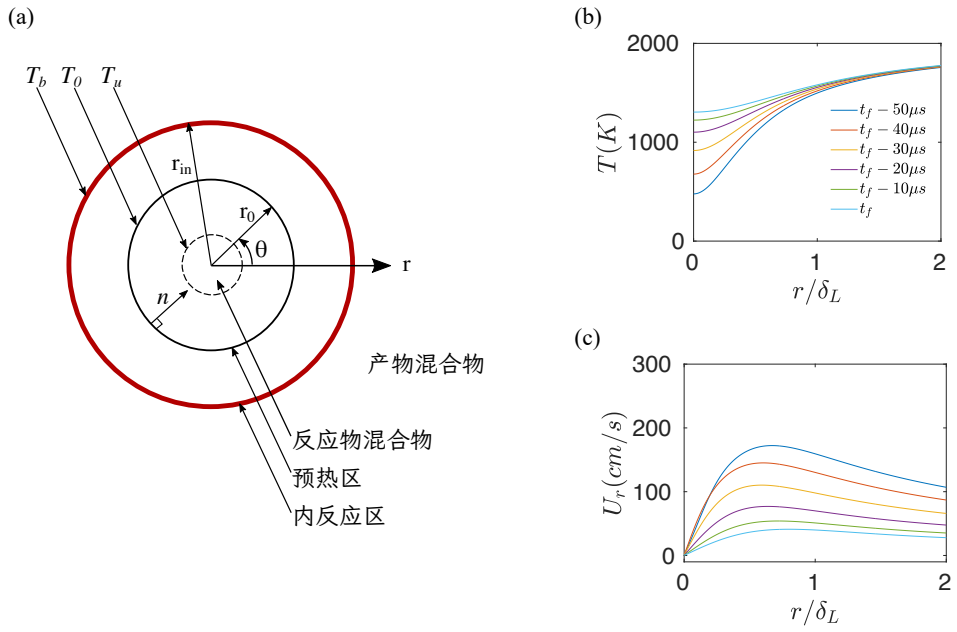

图1: （a）非定常内爆圆柱层流火焰示意图。（b）非定常内爆圆柱层流火焰每隔 $10\mu s$ 的径向温度和（c）速度剖面，数据取自一维圆柱层流火焰（P1C）。t_f 是 $c_0 = 0.6$ 等温面发生湮灭的时刻。横坐标以相应的层流火焰厚度 δ_L 归一化。

在计算域中心的位置生成，随后在向中心传播的过程中发展。当火焰（预热等温线）与中心的距离约为 $3\delta_L$ （δ_L 为层流火焰厚度）时，以 $0.2\mu s$ 为间隔保存解。

继 Dave和Chaudhuri [28], 图 1a 展示了预混火焰中一个内爆、相互作用的等温面示意图（内侧实心黑色圆），该等温面位于远离内反应区（外侧实心红色圆）的预热区内。未燃反应物混合物位于最内侧的虚线圆内。采用圆柱内爆火焰来表征火焰间相互作用的适用性将在第4.1节中讨论。在本研究中，我们使用等温面表示火焰内的各层，并据此评估 S_d 通过 DNS 结合式（2）获得的 c 定义基于温度的反应进度变量 $c = (T - T_u)/(T_b^\circ - T_u)$。图 1b 和 c 展示了通过一维

模拟获得的内爆圆柱形层流火焰（P1C）在相互作用阶段至最终等标量 $10\mu s$ 湮灭过程中，以增量 $c_0 = 0.06$捕获的结果。1D 模拟揭示了相互作用现象期间火焰热结构的瞬态性质（图 1b）。这强调了火焰间相互作用的物理机制超出了先前提出的线性模型 [19, 20, 26, 27]的适用范围，因为这些模型基于稳态下的火焰结构。温度分布显示，随着相互作用的进展，$|\nabla T|$ 逐渐降低，这与 Dave和Chaudhuri[28] 以及 Yuvraj 等人 [41] 针对火焰间相互作用期间中度湍流火焰获得的局部一维热结构一致。基于圆柱火焰构型，可推导出火焰位移速度的简单解析表达式如下。

圆柱坐标下的质量、能量和组分守恒方程写为：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial r \rho U_r}{\partial r} = 0 \tag{5}$$

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + U_r \frac{\partial T}{\partial r}\right) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\lambda' r \frac{\partial T}{\partial r}\right) + qw \tag{6}$$

$$\rho \left(\frac{\partial Y}{\partial t} + U_r \frac{\partial Y}{\partial r}\right) = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(\rho \mathcal{D} r \frac{\partial Y}{\partial r}\right) - w \tag{7}$$

其中 q 和 w 分别表示放热率和反应速率； C_p、 U_r和 λ'分别表示热容、径向流速和热导率。由式（5）可知，考虑 ρ的变化会导致 U_r变化。因此，变密度的影响体现在式（6）和（7）中非零对流项的形式上。

首先在预热区求解能量方程，同时考虑位于反应区内的等温面的运动。在本分析中，我们假设热扩散率 $\alpha_0 = \lambda'/(\rho C_p)$ 为常数。感兴趣的等温面的温度和半径分别设为 T_0 和$r_0(t)$。等温面的运动取决于内部反应层的位置。因此，有必要在新的坐标系中定义式（6），以考虑反应区的运动。

引入无量纲温度， $\theta = (T_0 - T)/(T_0 - T_u)$，其中 T_u 为未燃气体混合物的温度，并对两个独立变量 $\xi = r/r_0(\tau)$ 和应用坐标变换

$\tau = t$，式（6）可表示为式（8）所示，其中 τ 为简便起见，重命名为 t：

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \frac{\xi}{r_0}\left(\frac{dr_0}{dt} - \frac{U_r}{\xi}\right)\frac{\partial \theta}{\partial \xi} = \frac{\alpha_0}{r_0^2}\left[\frac{1}{\xi}\frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2}\right] - \frac{qw}{\rho C_p(T_0 - T_u)} \tag{8}$$

此外，如图 1c 所示，$U_r = 0$ 在 $r = 0$ 和$U_r = U_{r处,\ 0}$ 在$r = r_0$处。此外，U_r 可近似为 $\xi U_{r,\ 0}$ 在区域 $0 \leq \xi \leq 1$内作为首阶近似（见图 1）。考虑到 $dr_0/dt = U_{r,\ 0} - S_d$[3],式（8）变为：

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + S_d\frac{\xi}{r_0}\frac{\partial \theta}{\partial \xi} = \frac{\alpha_0}{r_0^2}\left[\frac{1}{\xi}\frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2}\right] - \frac{qw}{\rho C_p(T_0 - T_u)} \tag{9}$$

将式（9）乘以 ξ，并对 [0,1] 关于 ξ积分

$$\begin{aligned}\int_0^1 \xi\theta_t d\xi + \frac{S_d}{r_0}\int_0^1 \xi^2\theta_\xi d\xi = \frac{\alpha_0}{r_0^2}\left[\int_0^1 \theta_\xi d\xi + \right.\\ \left.\int_0^1 \xi\theta_{\xi\xi} d\xi\right] - \int_0^1 \frac{qw}{\rho C_p(T_0 - T_u)}\xi d\xi\end{aligned} \tag{10}$$

其中，下标 ξ 和 t 是导数的简写。已知边界条件为 $\theta = 1$ 在 $\xi = 0$处，以及 $\theta = 0$ 在 $\xi = 1$处。利用近似温度分布，$\theta(\xi) = (\xi - 1)\theta_\xi(1)$，可进一步简化该积分，使其在首阶近似下满足

$$\theta_\xi(\xi) = \theta_\xi(1), \theta_t(\xi) = (\xi - 1)\theta_{t\xi}(1) \tag{11}$$

并进一步考虑到反应项在范围 $0 \leq \xi \leq 1$内为零，式（10）得：

$$\frac{\theta_{t\xi}(1)}{6} - \frac{S_d}{r_0}\frac{\theta_\xi(1)}{3} = -\frac{\alpha_0}{r_0^2}\theta_\xi(1) \tag{12}$$

这体现了反应区前沿各种输运项之间的平衡。

现在我们考虑彼此不相互作用、稳态传播的反应区所产生的影响。反应区的上游边缘称为位于 的内层，即 $\xi = \xi_{in}$，其中 $T = T_b^\circ$ 在主阶近似下成立，而 T_b°是单位 Le 极限下的绝热火焰温度。同样，内层处的 θ变为 $\theta(\xi_{in}) = (T_0 - T_b^\circ)/(T_0 - T_u)$，并假设温度呈线性

在 $1 < \xi < \xi_{in}$内的温度分布为 $\theta_\xi(1) \approx \theta(\xi_{in})/(\xi_{in} - 1)$。尽管在该模型配置中，$T_b^\circ$和 $\theta(\xi_{in})$为常数，但在预热区相互作用期间，内层持续稳态移动。因此， r_{in} 和 ξ_{in} 仍是时间的函数。对 $\theta_\xi(1)$ 求时间导数，

$$\theta_{t\xi}(1) \approx -\frac{\theta(\xi_{in})}{(\xi_{in}-1)^2}\frac{\partial \xi_{in}}{\partial t} \tag{13}$$

其中

$$\frac{\partial \xi_{in}}{\partial t} = \frac{1}{r_0}\frac{dr_{in}}{dt} - \frac{\xi_{in}}{r_0}\frac{dr_0}{dt} \tag{14}$$

根据定义。对于半径较小的圆柱形火焰，式（14）十分重要，它体现了相互作用动力学。图2展示了 r_0/r_{in}、dr_0/dt、 dr_{in}/dt 和 $\mathcal{Z}/S_L$ （将在后文定义并讨论）随 $-\kappa\delta_L$ 变化的分布，其中包括 $c_0 = 0.05$为 0.2、0.4 和 0.6 时的一维算例 P1C、P2C 和 P3C；颜色标尺表示对应的 c_0值。对于半径较大或曲率较小的向内传播火焰， $r_{in} \approx r_0 >> \delta_L$，即 $r_0/r_{in} \approx 1$。与此同时， dr_0/dt 和 dr_{in}/dt 也近似相等且为常数。图2（第二、三列）的放大图表明，在非相互作用极限下，工况 P1C、P3C 和 P7C 中的dr_0/dt 和 dr_{in}/dt 分别近似为 -150、-100 和 -80。因此，根据一维结果，对于 $-\kappa\delta_L$ 足够小的情况（图2中约小于或等于 0.1），我们可以假设 $\xi_{in}dr_0/dt \approx dr_{in}/dt$ 。因此，由式（14）可得 $\partial\xi_{in}/\partial t \approx 0$ ，从而得到一个稳态问题。

然而，火焰表面发生相互作用时，情况并非如此。当位于预热区的目标等温面（T_0）发生相互作用时，其曲率半径 r_0 相对于反应层半径 r_{in} 显著较小，如图2 所示的一维算例（第一列）。随着相互作用的推进， κ减小， $r_0/r_{in} \to 0$。在相互作用初期， dr_0/dt 的大小增加（图2第二列），而 dr_{in}/dt 的大小减小（图2第三列）。随着相互作用继续进行（ $\kappa\delta_L \ll -1$ 和 $r_0/r_{in} \to 0$），内层 dr_{in}/dt趋于稳定在一个恒定值。另一方面， dr_0/dt的大小则急剧增加。然而，实际上， dr_{in}/dt 并非恒定不变，而是在整个相互作用过程中仅有微小变化，直至目标等温面最终消亡。这也证实了相互作用阶段极为短暂。将从一维算例相互作用阶段获得的认识应用于公式（14）中的理论， $\partial\xi_{in}/\partial t \neq 0$ 从而证明相互作用火焰具有瞬态性质。

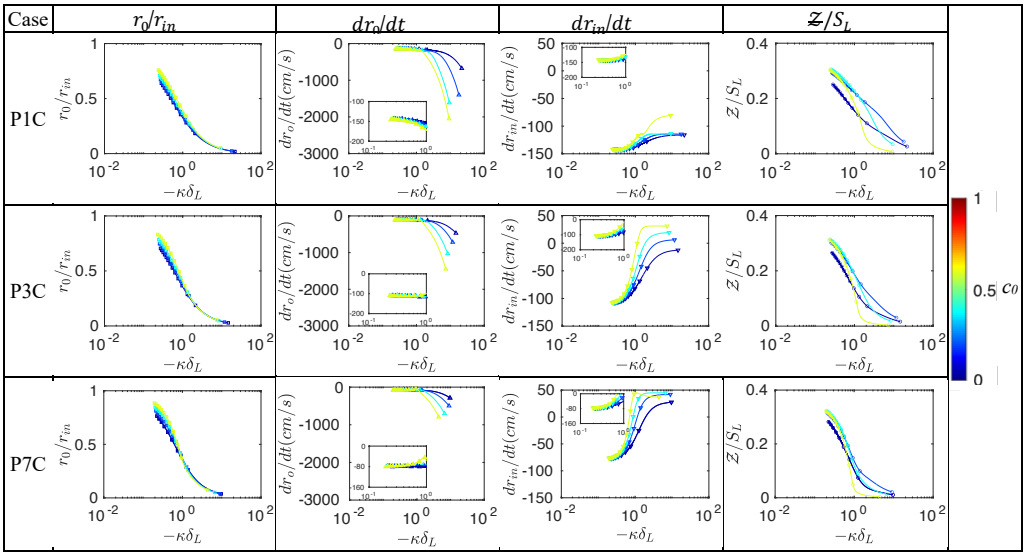

图2：基于旁侧所示颜色标度，所有工况下 $c_0 = 0.05$,0.2,0.4 和 0.6 对应的 r_0/r_{in}、dr_0/dt、dr_{in}/dt 和 $\mathcal{Z}/S_L$ 的 $-\kappa\delta_L$ 一维剖面。横坐标采用对数尺度。 r_0 和 r_{in} 分别为关注的等温线半径（T_0）和内部反应层（T_{in}）。此处取 $T_{in} = 1800$ K。

利用公式 $\partial\xi_{in}/\partial t$ （13）和公式（14）消去，将 $\theta_{t\xi}$ 代入公式（12），

$$\frac{r_0}{r_{in}-r_0}\frac{dr_{in}}{dt} - \frac{r_{in}}{r_{in}-r_0}\frac{dr_0}{dt} + 2S_d = \frac{6\alpha_0}{r_0} \tag{15}$$

由于在相互作用阶段， $r_0 \ll r_{in}$，我们得到 S_d 的简化表达式：

$$\frac{r_0}{r_{in}}\frac{dr_{in}}{dt} - \frac{dr_0}{dt} + 2S_d = \frac{6\alpha_0}{r_0} \tag{16}$$

再次，将 dr_0/dt 利用 $\frac{dr_0}{dt} = U_{r,0} - S_d$ 代入方程（16，可得 S_d 的方程：

$$S_d = \frac{2\alpha_0}{r_0} + \frac{1}{3}\left[U_{r,0} - \frac{r_0}{r_{in}}\frac{dr_{in}}{dt}\right] \tag{17}$$

其中， S_d 定义为等温面 $T = T_0$ 的位移速度，而 $-dr_{in}/dt$ 是内层的速度，$\kappa = -1/r_0$，且 $U_{r,\ 0}$ 是等温面 $T = T_0$处的径向气体速度。对方程（17）进行密度加权，得到

$$\widetilde{S_d} = -2\widetilde{\alpha_0}\kappa + \frac{1\rho_0}{3\rho_u}\left[U_{r,0} - \frac{r_0}{r_{in}}\frac{dr_{in}}{dt}\right] \tag{18}$$

其中 $\widetilde{\alpha_0}$ 和 S_d/S_L 分别表示密度加权热扩散率 $\widetilde{\alpha_0} = \sim\rho_0\alpha_0/\rho_u$ 和火焰位移速度 $S_d = \rho_0 S_d/\rho_u$。我们将式（18）右侧的第二项记为

$$\mathcal{Z} = \frac{1\rho_0}{3\rho_u}\left[U_{r,0} - \frac{r_0}{r_{in}}\frac{dr_{in}}{dt}\right] \tag{19}$$

在式（18）中，考虑气体速度和内层运动时，我们得到一个有限截距， $\mathcal{Z}$ 然而，在相互作用构型中，当负值 κ绝对值非常大时，如图2 （第四列）所示，因此，即使在当前分析中纳入密度变化， S_d 在负值$U_{r,\ 0}$ 绝对值较大时仍独立于 κ。因此，式（18）简化为$\sim S_d = -2\widetilde{\alpha_0}\kappa$，这与 Dave 等人 [28]得到的结果一致。然而，在非相互作用极限下，当 $\kappa \to 0$时， S_d 趋近于某个有限截距$S_{d,\ 0}$。由此得到：

$$\widetilde{S_d} = \widetilde{S_{d,0}} - 2\widetilde{\alpha_0}\kappa \tag{20}$$

作为最简单的近似，对于 Le 接近 1 的火焰，可以将$S_{d,0} \to S_L$ 视为主导阶。因此，

$$\widetilde{S_d} = S_L - 2\widetilde{\alpha_0}\kappa \tag{21}$$

尽管截距 $S_{d,0}$ 可能由于非单位 S_L 以及湍流效应而偏离 Le（将在第4.3节讨论），但在不作过多限制性假设的情况下，当前推导更具一般性，并且恢复了 Yuvraj 等人提出的与公式（21）相同的复合结果 [41] 。因此，适用于 $\kappa \leq 0$ 相互作用构型和非相互作用构型的模型可表示为公式（21）。

3. 直接数值模拟案例

现在通过使用直接数值模拟，对上一节推导的理论模型和关联式在真实湍流火焰背景下进行评估

数据集。本文研究的三维直接数值模拟案例列于表2中。常压工况由 Song 等人为此前的研究生成 [45]，Yuvraj 等人 [41], 则高压工况来自 Song 等人。 [46]这些模拟采用贫燃 H_2-空气预混火焰，在长方体计算域中向由改变湍流参数产生的强制湍流中传播。所研究的四个数据集中的两个，即 F1 和 F2，处于大气压下。其余数据集 P3 和 P7 分别处于 3 个和 7 个大气压的高压条件下。

参数	F1	F2	P3	P7
P [大气压]	1	1	3	7
Le	0.408	0.408	0.408	0.408
Le_{eff} [47]	0.758	0.758	0.698	0.656
计算域尺寸 [厘米]	1.998	0.427	0.647	0.656
	×1.000	×0.146	×0.215	×0.218
	×1.000	×0.146	×0.215	×0.218
网格点	1000	1645	648	1440
	×500	×560	×216	×480
	×500	×560	×216	×480
积分尺度，l_o [cm]	0.200	0.029	0.043	0.043
均方根速度-度，u_{rms} [厘米/秒]	678.096	4746.669	317.644	225.699
科尔莫戈罗夫长度尺度，η [μ米]	14.915	2.141	7.921	5.421
卡洛维茨数 ，Ka	23.189	1125.660	10.243	5.888
雷诺数，Re_t	686.350	699.530	204.225	338.590
Damk¨ohler 数。Da	1.130	0.023	1.395	3.125
S_L [厘米/秒]	135.619	135.619	105.882	75.233
δ_L [厘米]	3.541E-02	3.541E-02	1.022E-02	4.565E-03
$\Delta x/\eta$	1.341	1.215	1.263	0.841
$\delta_L/\Delta x$	17.705	136.192	10.224	10.010
δt [μ秒]	1.000E-02	1.000E-03	2.500E-03	1.250E-03

表2：本文研究的四个三维直接数值模拟工况的参数详情。对于所有工况，$T_u = 300$ K, $\phi = 0.7$，$\delta_L = (T_b^\circ - T_u)/|\nabla T|_{max}$

图 3 展示了经修正的 Borghi-Peters 湍流状态区间图 [48]，图中根据输入条件下的积分长度尺度 l_0 和湍流强度 u_{rms} 标出了各模拟工况，这些条件对应于不同的湍流雷诺数（Re_t）和卡洛维茨数（Ka）。δ_L 是标准层流火焰的相应热厚度，其定义为

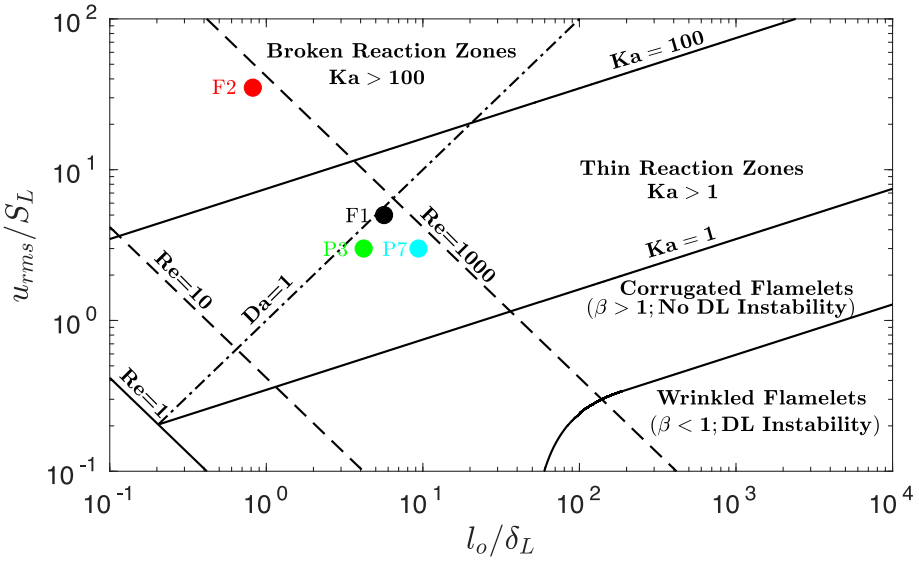

图3：状态区间图，标明了工况：F1、F2、P3、P7。

，其中 $\delta_L = (T_b^\circ - T_u)/|dT/dx|_{max}$ 为绝热火焰温度。工况 F1、P3 和 P7 位于薄反应区，而 F2 则位于破碎反应区状态。

KAUST自适应反应流求解器 (KARFS) [49] 用于以完全可压缩形式求解质量、动量、能量和组分的守恒方程。空间离散化采用八阶中心差分格式，时间积分则采用四阶龙格–库塔格式。此外，使用十阶滤波器去除虚假波动。出口处采用非反射纳维–斯托克斯特征边界条件 (NSCBC) [50, 51]，而横向方向采用周期性边界条件。采用了一个包含 9 种组分和 23 个反应的详细反应机理，该机理来自 [52]。

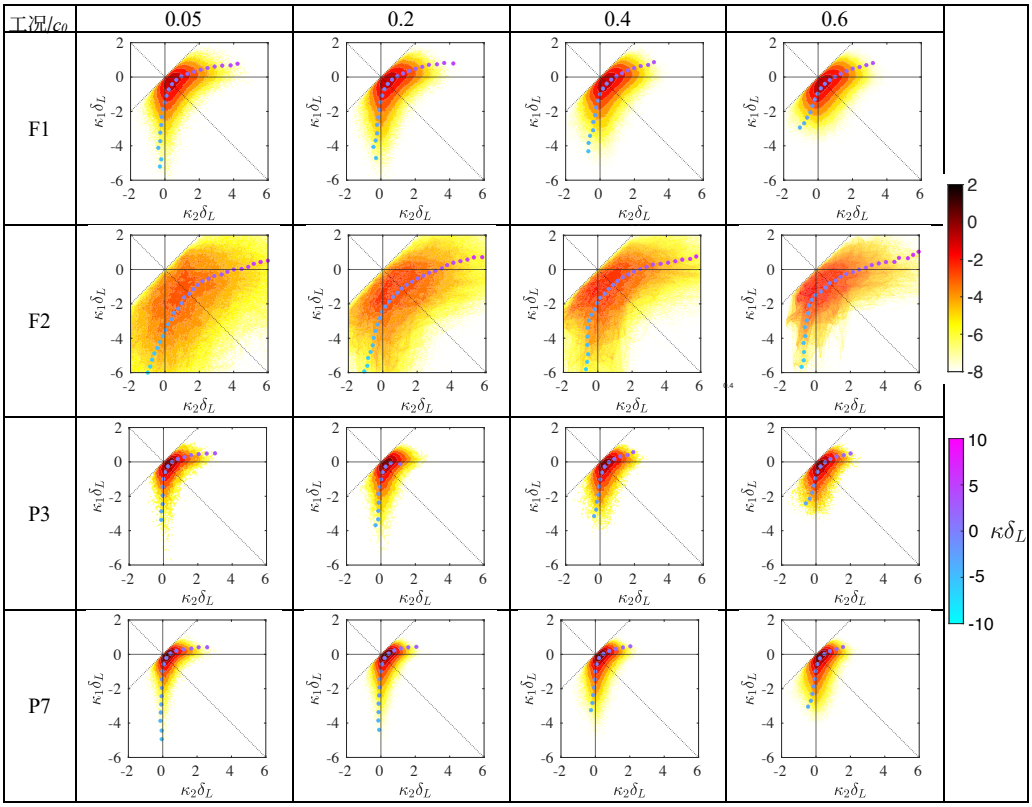

图4：四个时刻下，$c_0 = 0.05$、0.2、0.4 和 0.6 时归一化主曲率 $\kappa_1\delta_L$ 和 $\kappa_2\delta_L$（$\kappa_1\delta_L < \kappa_2\delta_L$）的联合概率密度函数。顶部颜色标度表示联合概率密度函数幅值的自然对数。实心圆表示给定 $\langle\kappa_2\delta_L|_{\kappa\delta_L}\rangle + \langle\kappa_1\delta_L|_{\kappa\delta_L}\rangle = \kappa\delta_L$ 时的点集（$\langle\kappa_2\delta_L|_{\kappa\delta_L}\rangle$，$\langle\kappa_1\delta_L|_{\kappa\delta_L}\rangle$）；标记颜色根据 $\kappa\delta_L$ 的取值确定（底部颜色标度）。

4. 结果与讨论

4.1. 主曲率和主平面

在火焰内等标量面上的任意一点，都可以构造两个唯一且相互垂直的平面，它们分别包含向量 $(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{e}_1)$ 和 $(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{e}_2)$，使得该表面在这两个平面上的局部曲率分别达到最小值和最大值。由此得到的曲率值称为主曲率（$\kappa_1 < \kappa_2$），相应的平面称为主平面。在本研究中，给定点处的曲率 κ

火焰表面上的总曲率是主曲率之和，

$$\kappa = \nabla \cdot \boldsymbol{n} = \kappa_1 + \kappa_2 \tag{22}$$

其中， $\boldsymbol{n}$ 是单位法向量， $\boldsymbol{e_1}$和 $\boldsymbol{e_2}$ 是表面上彼此垂直的两个单位向量，分别沿局部最大曲率和最小曲率的方向。在给定点处，根据定义，三个单位向量 $\boldsymbol{n}$、 $\boldsymbol{e_1}$ 和 $\boldsymbol{e_2}$ 两两正交。

图 4 展示了四种不同等值面的无量纲主曲率联合概率密度函数（联合概率密度函数）， $\kappa_1\delta_L$ 和 $\kappa_2\delta_L$ 。c 所有工况均选取 .05、0.2、0.4 和 0.6 进行研究。色图显示联合概率密度函数数值的自然对数。 κ_1沿水平实线为零，而 κ_2 沿垂直实线为零。 $\kappa_1 = \kappa_2$ 沿斜率为 $+1$ 的点线。 $\kappa_1 = -\kappa_2$ 沿斜率为 -1的点线。$\langle \kappa_1\delta_L|_{\kappa\delta_L}\rangle$ 和 $\langle \kappa_2\delta_L|_{\kappa\delta_L}\rangle$ 分别是给定总无量纲曲率 $\kappa\delta_L$时相应无量纲主曲率的条件均值。对于满足$\langle \kappa_2\delta_L|_{\kappa\delta_L}\rangle$、$\langle \kappa_1\delta_L|_{\kappa\delta_L}\rangle$的点集， $\langle \kappa_2\delta_L|_{\kappa\delta_L}\rangle + \langle \kappa_1\delta_L|_{\kappa\delta_L}\rangle = \kappa\delta_L$ 在每个联合概率密度函数图中以实心圆表示。圆的颜色表示归一化曲率 $\kappa\delta_L$的大小。因此，如果实心圆与斜率为 = -1 的点线相交，则从统计意义上说，局部表面为双曲面。如果实心圆与其中一条坐标轴相交，则局部表面为圆柱形。

在所有工况的所有表面上（包括大气压和高压），显然，一个主曲率的极大值会同时伴随另一个主曲率较小（接近于零）的值。更重要的是，局部曲率的极值主要由其中一个主曲率贡献。高 Ka 工况 F2 确实显示出 κ_1 和 κ_2 值的分布较为分散，但总体分布特征仍然相同。大负曲率或大正曲率的近圆柱形火焰表面出现概率很高，这与 Shim 等人的结果一致。[53] 然而，随着 c_0 增大或向火焰产物侧移动，出现极大曲率的可能性会降低。从图 4 可以看出，至少对于 $c_0 \leq 0.4$而言，最大的负曲率（正曲率）主要由 κ_1 (κ_2)贡献，因此这些局部火焰表面大多呈圆柱形，而非球形。这也说明了为何采用圆柱形构型来局部分析具有极大负曲率的湍流火焰结构。此外还应注意， $\langle \kappa_1\delta_L|_{\kappa\delta_L=0}\rangle$ 和 $\langle \kappa_2\delta_L|_{\kappa\delta_L=0}\rangle$均不为零。这表明，尽管人们可能会认为火焰

表面平均而言在 $\kappa\delta_L = 0$ 处是平面的，但实际上这些表面是双曲面，且 $\langle\kappa_1\delta_L|_{\kappa\delta_L=0}\rangle + \langle\kappa_2\delta_L|_{\kappa\delta_L=0}\rangle = 0$。这类负高斯曲率（$\kappa_1\kappa_2 < 0$）鞍点在局部聚集，共同构成局部鞍面，即双曲双曲面。尽管如此，可以认为局部平面火焰表面（$\kappa_1\delta_L = \kappa_2\delta_L = 0$）确实存在，但并不常见。

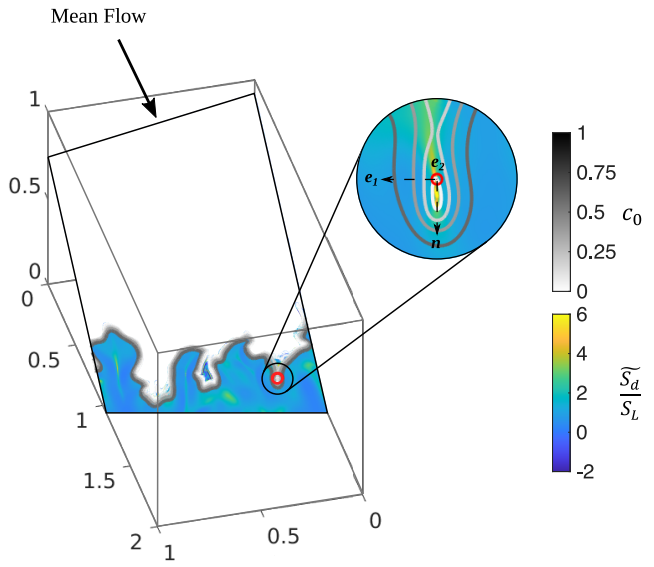

图5：示意图显示，关注点（红色圆圈）处曲率最小的主平面包含向量 $\boldsymbol{n}$ 和 $\boldsymbol{e_1}$。向量 $\boldsymbol{e_2}$ 与该平面的法向量重合。色标表示进度变量 c_0 （上图）$\widetilde{}$和归一化密度加权火焰位移速度 S_d/S_L （下图）。

由于大曲率的大小通常由某一个主曲率主导，相应的局部火焰结构会呈现准圆柱形，因此，与之相关的密度加权归一化火焰$\widetilde{}$速度 S_d/S_L 会显示在相应的主平面中。主平面的取向取决于局部单位向量 $\boldsymbol{n}$、 $\boldsymbol{e_1}$ 和 $\boldsymbol{e_2}$的方向。图中展示了案例 F1 计算域内某一点处的主平面（具有较大的负 κ_1），见图5，并$\widetilde{}$附有色图，表示 S_d/S_L 的大小以及进度变量$\widetilde{}$ c_0。较大负 S_d 时增强的 κ_1 特写视图也

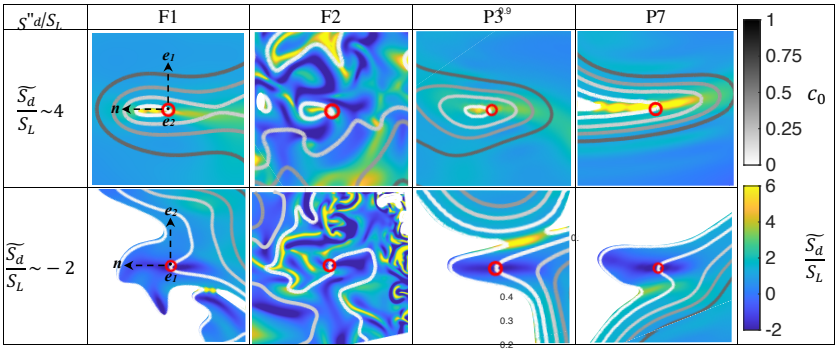

图6：归一化密度加权火焰位移速度 S_d/S_L的瞬时主平面等值线。顶行显示的是曲率 $\kappa_1\delta_L$ 最小处（以红色符号标记）的主平面，其中包含向量 $\boldsymbol{n}$和$\boldsymbol{e_1}$；底行显示的是曲率最大处（$\kappa_2\delta_L$）的主平面，其中包含向量 $\boldsymbol{n}$ 和 $\boldsymbol{e_2}$。实线表示进度变量 $c_0 = 0$为 0.01、0.05、0.2、0.4 和 0.6 时的二维等值线。每种情况下，顶行和底行中均用红色圆圈标出因较大的负 $\kappa_1\delta_L$ 而增强的 S_d/S_L（~ 4），以及因较大的正 $\kappa_1\delta_L$而呈负值的 S_d/S_L （~ -2）。每条等值线均位于边长为 $3\delta_L$的方形截取区域内。颜色条分别表示 c_0 （顶部）和S_d/S_L （底部）。

所示。

根据上述分析，图 6 展示了这些主平面上围绕特定关注点（POI）的二维火焰结构样本，其中最大曲率区域在 $c_0 = 0.05$ 等值面上以小红色圆圈标出。顶部行和底部行分别展示了包含（$\boldsymbol{n}$， $\boldsymbol{e_1}$）和（$\boldsymbol{n}$， $\boldsymbol{e_2}$）的主平面。对于所有选定的关注点， $S_d/S_L \sim 4$ （顶部行）和 $S_d/S_L \sim -2$ （底部行），二维等值c_0线（$c_0 = 0.01$、0.05、0.2、0.4 和 0.6 ）均叠加在主平面上。由于如前文所述，这些点中的大多数 c_0 等值面主要呈圆柱形，因此从筛选后的集合中随机选取位于 $c_0 = 0.05$ 上的点。顶部行清楚地显示了局部圆柱形火焰-火焰相互作用，并伴随较大的负κ_1，从而在 POI 处及其周围产生较大的正 S_d/S_L。底部行显示预热层变形为具有正曲率的结构，并伴随负 S_d/S_L。由于 $|\nabla c|$ 在该区域非常小， S_d/S_L 沿 c_0 等值线变化显著。

图 6 表明，对于工况 F1、P3 和 P7，会发生整体火焰间相互作用；而对于具有较高 Ka 湍流的工况 F2，等值面彼此不平行，因此火焰间相互作用发生得更加局部化，正如 Yuvraj 等人所讨论的那样。 [41]。正如 Gran 等人所讨论的那样， [54], 负位移速度源于扩散通量与对流通量之间的不匹配。较大的正曲率和负曲率工况都涉及高度瞬态的现象，并伴随火焰结构的显著破坏，其行为偏离了弱拉伸层流火焰的特征。

因此，在这些瞬态事件中，内爆圆柱形火焰构型（如前所述）能够有效地（尽管并不全面地）表征在大负曲率下发生火焰间相互作用的局部火焰表面。

4.2. $\widetilde{S_d/S_L}$ 与 $\kappa\delta_L$的联合概率密度函数

本小节将模型预测与基于大气压和高压下直接数值模拟数据计算得到的 S_d 进行比较。图 7 展示了四个直接数值模拟案例在多个时刻，由等值面 $c_0 = 0.05$、0.2、0.4、0.6 构建的归一化密度加权局部火焰位移速度 S_d/S_L 与归一化曲率 $\kappa\delta_L$ 的联合概率密度函数（JPDF）。十六幅子图中的每一幅都包含：i）表示式（21）所给理论相互作用模型的黑色实线；ii）由圆柱内爆火焰的一维算例（即 P1C、P3C 和 P7C）得到的带圆形标记的黑色实线；iii）归一化密度加权火焰位移速度 $\langle S_d|_\kappa\rangle/S_L$ 的条件均值，以蓝色实线表示。颜色条表示概率密度自然对数的大小。式（21）所用不同 c_0 下的热扩散率 α_0 ，由一维平面层流预混火焰的 Chemkin-PREMIX 模拟获得。可以观察到，由于火焰间相互作用，在大气压和高压下，大负曲率 κ处的 S_d 增强了数倍。虽然式（21）在大负曲率下能很好地捕捉一维内爆火焰的趋势，但它也能解释所有

$\widetilde{\quad}$ $\widetilde{\quad}$ κ 取值下（包括 κ=0处的 S_d ）JPDF 的特征。对于常压工况 F1 和 F2，式（21）在大多数 c_0 取值下几乎与 $\langle S_d|_\kappa\rangle/S_L$ 重合。然而，在高压下，式（21）在定性层面上较好地捕捉了 $\langle S_d|_\kappa\rangle/S_L$ 。随着 c_0增大，该模型（式（21））成功捕捉到 JPDF 平均斜率以及一维算例所得斜率的下降趋势。这是由于密度加权热扩散率随.....增大而增大

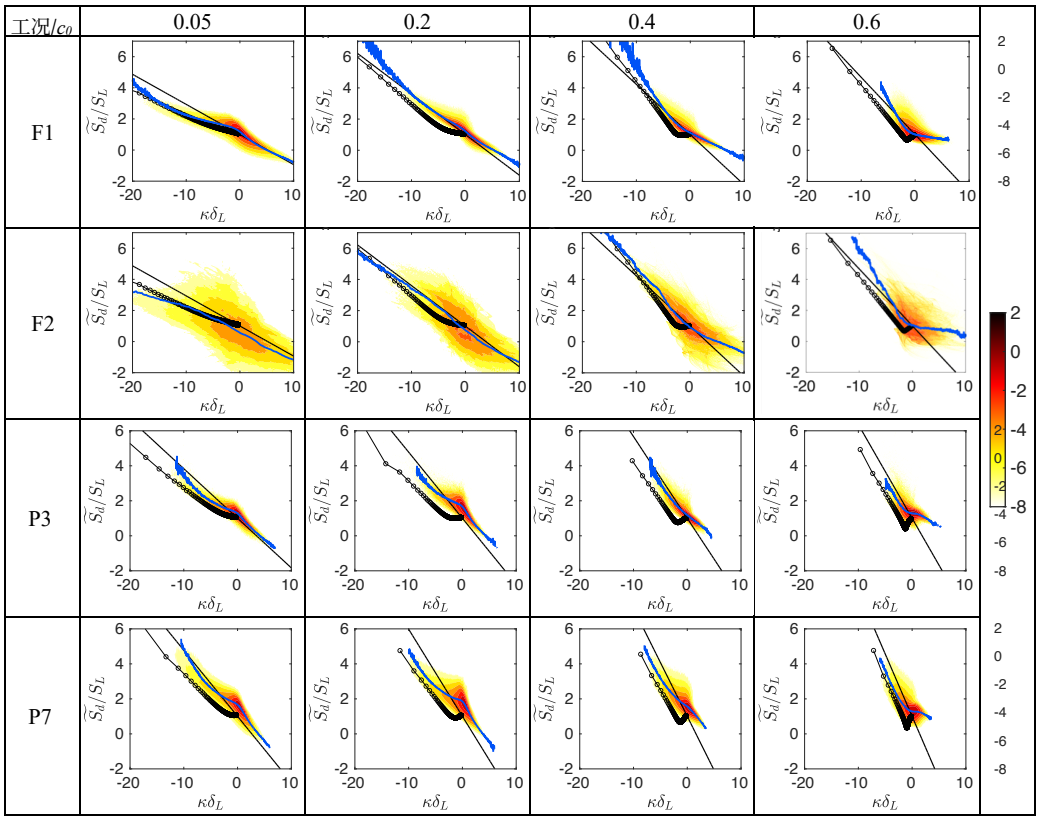

图 7：归一化密度加权火焰$\widetilde{\ }$位移速度， S_d/S_L 以及归一化曲率 $\kappa\delta_L$ 对于等标量，$c_0 = 0.05$、0.2、0.4 和 0.6 在四个时刻的联合概率密度函数（JPDF）。颜色标度表示 JPDF 数值的自然对数。黑色实线表示由公式（21）给出的解析结果。1D 结果以带圆形标记的黑色实线表示，蓝色点划线表示条件均值归一化密度加权火焰位移速度，$\sim$ $\langle S_d|_\kappa\rangle/S_L$ 由三维直接数值模拟获得。

高等温线处的混合物。对于给定的 c_0 ，随着压力升高，JPDF 的平均斜率会减小（绝对值增大）。模型也成功捕捉到了这一趋势。式$2\widetilde{\alpha_0}/\delta_L S_L$（21）中斜率的大小（$2\widetilde{\alpha_0}/\delta_L S_L$）由密度加权热扩散率、$\widetilde{\alpha_0}$ 以及归一化因子 $\delta_L S_L$共同决定。在给定 c_0 的情况下，随着压力升高， $\delta_L S_L$ 的下降幅度相较于 $\widetilde{\alpha_0}$更大，从而导致.....

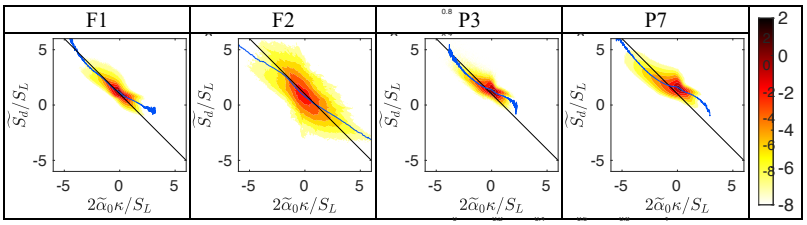

图8：工况F1、F2、P3和P7中归一化密度加权火焰位移速度、S_d/S_L 和 $2\widetilde{\alpha_0}\kappa/S_L$ 的联合概率密度函数（JPDF）。每个JPDF均汇总了来自所有等标量面（$c_0 = 0.05$、0.2、0.4和0.6）的全部数据点。颜色标度表示JPDF幅值的自然对数。黑线表示由式（21）给出的 S_d/S_L 在给定 $2\widetilde{\alpha_0}\kappa/S_L$条件下的条件均值，即 $\langle S_d|_{2\widetilde{\alpha_0}\kappa/S_L}\rangle/S_L$。

斜率幅值总体增大。此外，圆柱模型仅在大负曲率下才是合理假设（图4）；因此，对 $\kappa\delta_L$ 较小取值的进一步讨论超出了本文的范围。图8 展示了由等值面构建的 S_d/S_L 和 $2\widetilde{\alpha_0}\kappa/S_L$ 的联合概率密度函数，等值面包括 $c_0 = 0.05$、0.2、0.4、0.6，并将四个直接数值模拟案例的数据汇总在一起。直黑线表示由式（21）给出的理论线，其斜率为 = -1。另一方面，蓝色曲线表示每个工况下四个取值的条件均值 $\langle S_d|_{2\widetilde{\alpha_0}\kappa}\rangle/S_L$ 。在大多数工况下，条件均值（蓝线）保持准线性，尤其是在大曲率下，并且遵循理论线。在高压工况中，条件均值线在 $\kappa \approx 0$附近变得略微非线性。总体而言，图8表明，相互作用模型能够定性地解释大气压和高压工况下的DNS数据。

4.3. 非相互作用极限下归一化密度加权火焰位移速度 S_d/S_L的性质，$\kappa \to 0$

前文已提到，对于 $\kappa = 0$，我们定义了 $S_d = S_{d,\ 0}$。因此，我们在图 9 中考察以 $\kappa = 0$ 为条件的归一化密度加权火焰位移速度 $S_d|_{\kappa=0}/S_L$的概率密度函数（PDF）。黑色点划线和红色虚线分别表示该PDF 的最概然值和均值。需要注意，与 $S_d|_{\kappa=0}$、$S_{d\ 不同,\ 0}$ 只能取一个值，该值代入式（20）后，能最好地解释图 7中的联合概率密度函数（JPDF）。下文将均值称为

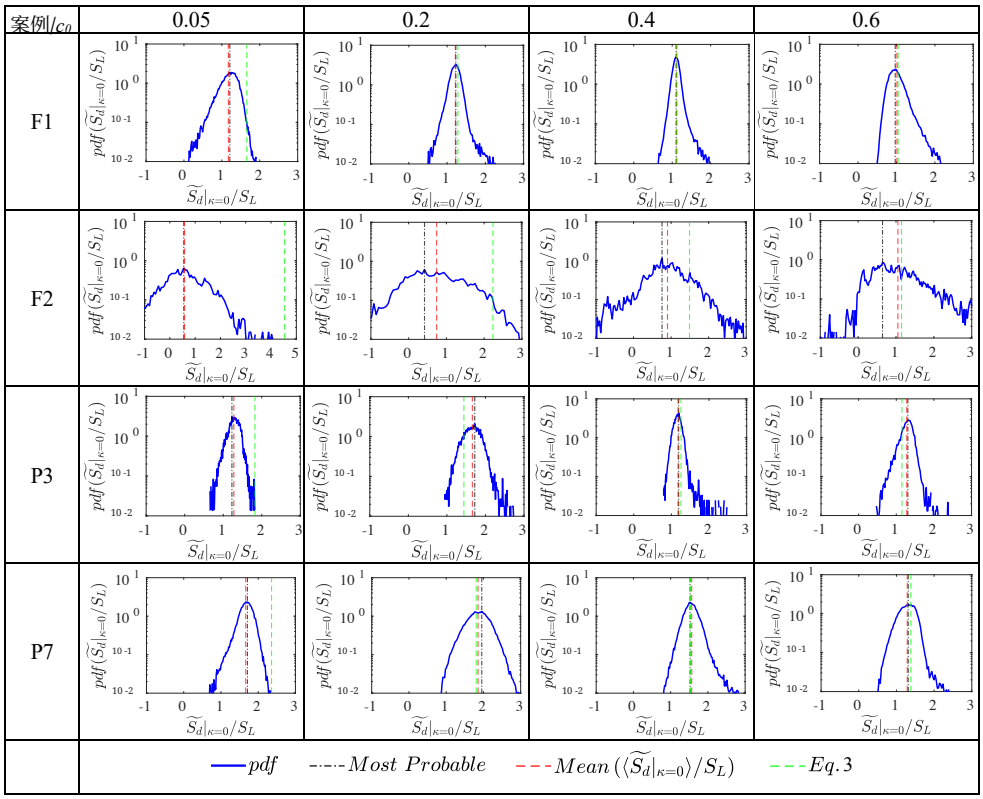

图 9：条件化于 $\widetilde{\kappa}$ 的归一化密度加权火焰位移速度的概率密度函数（PDF） $\kappa = 0$, $S_d|_{\kappa=0}/S_L$ （蓝色）对应等标量 $c_0 = 0$，在所有工况下四个时刻的 .05、0.2、0.4 和 0.6。黑色点划线和红色虚线分别表示 PDF 的最概然值和均值。根据式（$\sim S_d|_{\kappa=0}/S_L$ （3）得到的预测结果以绿色虚线表示。

$\widetilde{\kappa}$ $\widetilde{\kappa}$ 的 $S_d|_{\kappa=0}$ 记作 S_d,0。图 9 还以绿色虚线展示了弱拉伸理论（式（3））的预测。对于中等湍流工况 F1、P3 和 P7，在所有 c_0 值下，$S_d|_{\kappa=0}/S_L$ 的最概然值也都非常接近均值，即 S_d,0$/S_L$ 值。对于 F$\widetilde{\kappa}$ 2（$c_0 = 0.2$为 0.4 和 0.6），由于高 Ka下 $S_d|_{\kappa=0}/S_L$ $\widetilde{\kappa}$ 的取值分散较大，均值与最概然值之间存在明显差异。对于中等湍流工况（F1、P3 和 P7），在给定 c_0的情况下，S_d,0 相较于 S_L 呈正偏差，且该偏差随压力增加而增大。另一方面，F2 在除 $c_0 = 0.6$之外的所有 c_0 下，S_d,0 均小于 S_L。对于所有工况，随着 c_0 增加，S_d,0 最终趋近于 S_L。式（3）（绿色虚线）

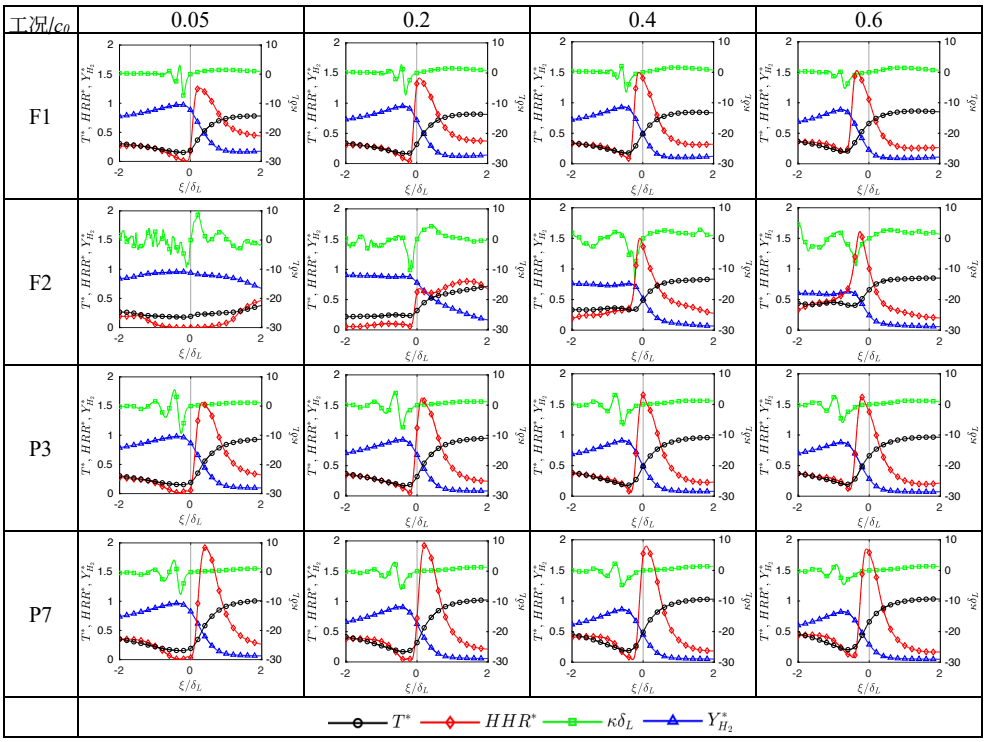

图10：所有工况下，以 $\kappa = 0$ 为条件的局部热化学火焰结构均值，针对等值标量 $c_0 = 0.05$,0.2,0.4 和 0.6。浅灰色竖线表示位于火焰表面上的点。

并不一致，因为它仅适用于中等 Ka 压力下的所有工况，适用于较高 c_0 但在 $c_0 = 0.05$时存在一些偏差。此外，对于 F2，弱拉伸模型完全失效。为进一步研究，我们考察了以下条件下的平均局部热化学火焰结构： $\kappa = 0$ 对于火焰表面 $c_0 = 0.05$，0.2，0.4 和 0.6，如图10所示。首先，在有限数量的查询点上，对温度、放热率、曲率和氢质量分数进行插值；这些查询点沿法线方向分布 $\boldsymbol{n}$ 至火焰表面，并取自满足条件 $\kappa = 0$的位置。插值在这些查询点上进行，范围从 $-2\delta_L$ 方向上的 $-\boldsymbol{n}$ 到 $+2\delta_L$ 方向上的 $+\boldsymbol{n}$ ，原点位于火焰表面上（$\xi/\delta_L = 0$）。获得局部火焰结构后，沿火焰表面对每个查询点处的温度、质量分数、曲率和放热率进行平均，这些查询点位于离散化的局部法线方向上

沿法线方向，以获得该火焰表面的平均局部热化学火焰结构（图10）。Yuvraj 等人 [41]已介绍过提取局部火焰结构及其平均值的详细算法。图10中，T^*、HRR^*和 $Y^*_{H_2}$ 分别表示温度、放热率和 H_2 质量分数，并以相应 c_0 下的最大层流值归一化。$\kappa\delta_L$ 为归一化曲率。$\xi/\delta_L = 0$ 处的浅灰色竖线表示火焰表面上的一点，局部火焰结构围绕该点提取。平均局部火焰结构揭示了两个重要现象。首先，对于常压工况 F1 和 F2（不包括 $c_0 = 0.05$、0.2），在 $Le_{eff} = 0.758$条件下，放热率有所提高，峰值约为相应层流值的 1.3–1.5 倍。转向更高压力工况时，HRR^* 对于 P3（$Le_{eff} = 0.698$）增至 1.5 以上，而对于 P7（$Le_{eff} = 0.656$）则约为 2。这可能导致温度梯度增大，进而使$\widetilde{\ }$、S_d、$_0 > S_L$。其次，对于 F2，鉴于其湍流强度极高（$Ka \sim \mathcal{O}$(1000)），在较低的 c_0 值下，平均火焰结构完全遭到破坏，预热$\widetilde{\ }$区也随之变宽。温度梯度降低会导致S_d、$_0 < S_L$。当转向更高的 c_0时，可以观察到随着湍流消散，$\widetilde{\ }$火焰结构逐渐恢复，S_d、0 最终趋近于 S_L。鉴于 Ka 较高，F2 的拉伸率很大，但其对火焰表面的影响转瞬即逝。湍流的瞬态性质会减弱火焰速度对拉伸率 [8, 31, 55] 的响应，因此，基于弱拉伸模型（式（3））对 F2 的$\widetilde{\ }S_d$、0 所作预测被证明是不正确的。此外，在强湍流下，扩散与拉伸历史$\widetilde{\ }$$\widetilde{\ }$相结合，也可能影响$S_d$、$_0$ [56]。因此显然，S_d、0 与局部火焰结构相关，而局部火焰结构受湍流强度和拉伸率之间相互作用的支配。

显然，对于.....的模型 $\widetilde{\ }$$S_{d,\ 0}$ 是所期望的。从根本上说，S_d 是对局部火焰结构的表征。对于层流火焰，当 $Le \neq 1$ 时，拉伸率和曲率会改变局部火焰结构，并反映为火焰速度的变化。然而，在湍流中，拉伸率具有高度瞬态特性，因此局部拉伸率对火焰结构的影响并非易于$\widetilde{\ }$捕捉。因此，我们在此探讨将$S_{d,\ 0}$ 与一种能够直接捕捉局部火焰结构变化的变量相关联的可能性。各等标量面上进度变量的平均梯度可以表征局部火焰结构。在此，我们给出$S_{d,\ 0}/S_L$与条件化的进度变量归一化平均梯度的散点图，条件为

零局部曲率，$\langle|\nabla c|_{c_0}|_{\kappa=0}\rangle$图11a 中的工况 F1、F2、P3、P7、F3 和 F4。工况 F3 和 F4 取自 [41, 45] 先前的研究。在讨论相应结果之前，我们重新考察 Law [1], 详细讨论过的平面拉伸层流火焰。该火焰是一个已充分理解的参考案例，可用于评估$S_{d,\,0}$ 对 $\langle|\nabla c|_{c_0}\rangle$ 的依赖性，即对火焰结构的依赖性。

我们考虑流经静止火焰结构的准一维流动。由于拉伸，流管的面积会发生变化。详细构型请参阅 Law [1]。随后分别求解预热区和反应层的控制方程。这里，$f=\rho u$是局部质量通量，$l_d=(T_b-T_u)/|dT/dx|_{x_f^-}$，其中 $|dT/dx|_{x_f^-}$是预热区与反应层边界处的温度梯度。下标 u 和 b 分别表示未燃状态和已燃状态，而“$\circ$”表示未拉伸平面层流火焰的相应参数。

根据 [1] 的分析，我们得到：

$$f_u l_d = f_u^\circ l_d^\circ = \frac{\lambda_b}{C_p} \tag{23}$$

$$\widehat{f_u} = (\widehat{l_d})^{-1} \tag{24}$$

其中，$f_u = f_u/f_u^\circ$ 和 $l_d = l_d/l_d^\circ$。假设温度呈线性分布 [1]，则有$|dT/dx|_{x_f^-} = |dT/dx|_{T_0} = (T_b^\circ - T_u)|dc/dx|_{c_0}$，因此我们写为：

$$(\widehat{l_d})^{-1} = \frac{T_b^\circ - T_u}{T_b - T_u}\frac{|\nabla T|_{T_0}}{|\nabla T|_{T_0}^\circ} \tag{25}$$

其中 T_b° 为绝热火焰温度 [1]。下标 x_f^- 表示预热区与反应区之间的边界。此外，对于拉伸一维层流火焰，质量通量可改写为 $f_u = \rho_u S_{L,\,\mathbb{K}}$ 因此，利用式（24）以及式（25）中质量通量的定义，可得：

$$\frac{S_{L,\mathbb{K}}}{S_L} = \frac{1}{\widehat{T_b} - \widehat{T_u}}\frac{|\nabla c|_{c_0}}{|\nabla c|_{c_0}^\circ} \tag{26}$$

其中，$T = C_p T/qY_u$ 为无量纲温度，且 C_p 被视为常数。没有热损失时，全部放热率都用于提高反应物的温度，直至达到绝热温度，即

$C_p(T_b^\circ - T_u) = qY_u$ 对于未拉伸平面层流火焰。对于拉伸火焰 $\widehat{T}_b$ 可近似表示为 $\widehat{T}_b = \widehat{T_b^\circ} + \epsilon$ 其中 $\epsilon = \left(\frac{1}{Le} - 1\right)\mathcal{K}$，$\mathcal{K}$ 为无量纲拉伸率 [1]。由于 $T_b^\circ \gg \epsilon$，$T_b \approx T_b^\circ = T_u + 1$ 代入上式。将方程（26）写成最终形式为

$$\frac{S_{L,\mathbb{K}}}{S_L} \approx |\widehat{\nabla c}|_{c_0} \tag{27}$$

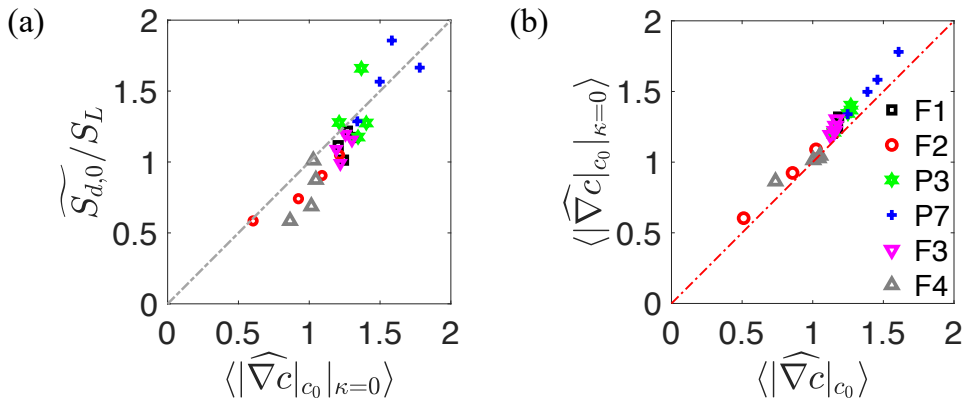

图11：(a) 在零局部曲率 ($\kappa = 0$) 条件下的归一化密度加权火焰位移速度 $S_{d,\ 0}/S_L$ 与在零局部曲率 ($\kappa = 0$) 条件下的进度变量归一化平均梯度 $\langle|\nabla c|_{c_0}|_{\kappa=0}\rangle$。灰色点划线表示由方程 (27) 给出的关系。(b) $\langle|\nabla c|_{c_0}|_{\kappa=0}\rangle$ 与进度变量归一化平均梯度的关系，$\langle|\nabla c|_{c_0}\rangle$。红色点划线的斜率为 e。

斜率为 1 的公式（27）在图11a中以灰色点划线表示。S_d在所有工况、所有 c_0下均与 $\langle|\nabla c|_{c_0}|_{\kappa=0}\rangle$ 表现出非常好的相关性。极端湍流工况 F2 和 F4（$Ka > 700$）的预热区显著变宽，归一化均值温度梯度降低，$\langle|\nabla c|_{c_0}|_{\kappa=0}\rangle$ 从而导致$S_{d、\ 0} < S_L$。P3（$Le_{eff} = 0.698$）和 P7（$Le_{eff} = 0.656$）的温度梯度高于相应的层流工况，这是由于放热率增强，如图10所示。在大气压下（$Le_{eff} = 0.758$），中等湍流工况 F1、F3 的散点与拉伸平面层流火焰这一理想工况（表示公式（27）的灰色点划线）非常吻合。图11b中的散点图显示，$\langle|\nabla c|_{c_0}|_{\kappa=0}\rangle$ 与归一化

⌢进度变量的平均梯度和 $\langle|\nabla c|_{c_0}\rangle$ 在所有工况下，包括⌢ ⌢ F3 和 F4 [41, 45]。 $\langle|\nabla c|_{c_0}\rangle \approx \langle|\nabla c|_{c_0}|_{\kappa=0}\rangle$ 这是由于火焰表面上具有 $\kappa = 0$ 的区域最为常见，如⌢图中深红色区域所示。4、7 和 8。因此，$\langle|\nabla c|_{c_0}|_{\kappa=0}\rangle$ 对.....起主要作用⌢，即 $\langle|\nabla c|_{c_0}\rangle$ 在所有工况和所有 c_0取值下。需要注意的是，只有当 27）在 $\kappa\delta_L$ 接近于零（或等于零）时，公式（该关系才成立。在大负曲率下发生整体或局部 [41]火焰间相互作用时，该关系将失效。这是由于相互作用火焰固有的瞬态性质所致。尽管如此，公式（27）所体现的局部火焰位移速度与结构之间的基本关系仍然得到强调，因为该关系仅利用质量守恒和能量守恒方程推导而得。

5. 结论

在湍流预混燃烧中，由火焰-火焰和/或火焰-湍流相互作用产生的具有极端曲率的火焰结构十分常见。近期文献表明，在小尺度或大尺度 Ka 条件下，平均而言， S_d 对大负 κ 区域⌣中 κ 的依赖关系近似为线性。因此，若采用线性模型，就需要了解两个参数：斜率和截距。本研究通过建立全面的理论分析，并利用一维和三维模拟加以验证，探讨了这些问题。

为模拟斜率，我们根据火焰表面在其主平面上的几何形态所揭示的规律以及以往文献，将火焰表面上具有较大局部负 κ 的点模拟为内爆圆柱层流火焰。为此，我们还运用严谨的理论分析了大气压和高压下的一维数据集，以突出相互作用火焰的瞬态性质。瞬态分析使我们能够有效表征内部反应层的运动，以及它在极短暂的相互作用阶段中相较于相互作用等温面的独特传播特性。尽管当前的理论分析具有通用性，并纳入了变密度和对流的影响，但仍得出了我们此前提出的相互作用模型。

研究了在大气压和高压下、不同Ka 和 Re_t 条件下的四组三维直接数值模拟数据集，以理解火焰位移速度增强 S_d的机理。采用了Burke等人 [52]提出的H_2-air混合物详细反应机理，其中包含9种组分和23个反应。

拓扑分析表明，与大负或大正曲率下的球形拓扑相比，形成近似圆柱形火焰表面的大负或大正主曲率结构更为常见。具有大负或大正主曲率的结构主要呈局部圆柱形，且反应物通量较大；相对于局部火焰表面，通量流入或流出，从而导致 S_d 相对于 S_L出现较大偏差。因此，本研究分析了高度弯曲、圆柱形、内爆、相互作用的层流预混火焰，以表征湍流中的高度弯曲火焰结构。此类构型需要进行瞬态分析，而非采用稳态、弱拉伸率理论。

与一个广泛的DNS数据库进行比较后发现，所提出的模型$\widetilde{\ }$能够准确预测在大气压下高 Ka 以及高压下低 Ka时，从DNS获得的 S_d 在较大负 κ 处的JPDF斜率。对于所研究的大多数工况，该模型以较高的精度捕捉到了 S_d 关于 κ 的条件均值，并覆盖了 κ 的较大范围。

为理解截距，分析了受拉伸的平面层流$\widetilde{\ }$火焰的结构，以研究 $S_d|_{\kappa=0}$ 如何随其由局部热梯度$|\nabla c|_{c_0}$表征的结构而变化。DNS结果表明$\widetilde{\ }$$\widehat{\ }$，$\langle S_d|_{\kappa=0}\rangle/S_L$ 与$\langle|\nabla c|_{c_0}|_{\kappa=0}\rangle$具有良好的相关性。因此，所建立的相互作用火焰理论模型被证明是描述 S_d分布的有力工具；这些分布源于湍流中复杂的瞬态火焰相互作用，并涵盖不同的状态区间和不同压力。

6. 致谢

本研究部分得益于加拿大自然科学与工程研究委员会通过探索基金提供的资助，以及 UTIAS 颁发的 Heuckroth 航空航天工程杰出教师奖。此外，KAUST 超级计算实验室（KSL）提供了计算资源，KAUST 也提供了支持。多伦多大学的 SciNet 高性能计算联盟和加拿大数字研究联盟（该联盟）也提供了计算资源。

参考文献

[1] C. K. Law，《燃烧物理学》，剑桥大学出版社，2006年。

[2] T. Echekki, J. H. Chen，湍流预混甲烷-空气火焰中的非定常应变率与曲率效应，《燃烧与火焰》106（1996年）184–190。[3] N. Peters，《湍流燃烧》，剑桥大学出版社，2000。[4] T. Poinsot, D. Veynante，《理论与数值燃烧》，《能源与燃烧科学进展》28（2005年）。[5] F. A. Williams，燃烧理论，Benjamin Cummings，1985。[6] A. Trouv´e, T. Poinsot，湍流预混燃烧中火焰表面密度的演化方程，《流体力学杂志》278（1994）1–31。[7] T. Echekki, J. H. Chen，曲率对预混火焰传播贡献的分析，《燃烧与火焰》118（1999）308–311。[8] H. G. Im, J. H. Chen，流动瞬态对层流预混氢气/空气火焰燃烧速度的影响，《燃烧学会会刊》28（2000）1833–1840。[9] J. H. Chen, H. G. Im，湍流预混甲烷/空气火焰中火焰速度与拉伸的相关性，《国际燃烧学术研讨会》27（1998）819–826。[10] L. Cifuentes, C. Dopazo, A. Sandeep, N. Chakraborty, A. Kempf，湍流预混钝体燃烧器中火焰曲率演化分析，《物理流体》30（2018）095101。[11] N. Chakraborty, R. S. Cant，薄反应区机制下湍流预混火焰中应变率和曲率对表面密度函数输运的影响，《物理流体》17（2005）065108。[12] H. A. Uranakara, S. Chaudhuri, H. L. Dave, P. G. Arias, H. G. Im，火焰粒子追踪分析：湍流-化学相互作用对预混氢气-空气火焰的影响，《燃烧与火焰》163（2016）220–240。[13] H. A. Uranakara, S. Chaudhuri, K. N. Lakshmisha，近各向同性湍流中点火火焰核的熄灭，《燃烧学会会刊》36（2017）1793–1800。

[14] D. C. Haworth, T. J. Poinsot，湍流预混火焰中路易斯数效应的数值模拟，《流体力学杂志》244（1992年）405–436。[15] C. Rutland，A. Trouv´e，非单位路易斯数预混湍流火焰的直接数值模拟，《燃烧与火焰》94（1993年）41–57。[16] N. Chakraborty，R. S. Cant，薄反应区机制下路易斯数对湍流预混火焰传播曲率效应的影响，《物理流体》17（2005年）105105。[17]A. Alqallaf，M. Klein，N. Chakraborty，路易斯数对球形扩展湍流预混火焰曲率演变的影响，《流体》4（2019年）12。[18] P. Pelce，P. Clavin，流体动力学和扩散对层流预混火焰稳定性极限的影响，《流体力学杂志》124（1982年）219–237。[19] M. Matalon，B. J. Matkowsky，作为气体动力学间断的火焰，《流体力学杂志》124（1982年）239–259。[20] M. Matalon，论火焰拉伸，《燃烧科学与技术》31（1983年）169–181。[21] S. Candel，T. Poinsot，火焰拉伸与火焰面积平衡方程，《燃烧科学与技术》70（1990年）1–15。[22] C. Law，C. Sung，预混火焰片的结构、空气动力学和几何形态，《能源与燃烧科学进展》26（2000年）459–505。[23] W. Liang，F. Wu，C. K. Law，从拉伸火焰外推层流火焰速度：有限火焰厚度的作用，《燃烧学会会刊》36（2017年）1137–1143。[24] C. Wu，C. Law，如何确定拉伸火焰的层流火焰速度，《国际燃烧学术研讨会》20（1985年）1941–1949。[25] F. Egolfopoulos，P. Cho，C. Law，降低和升高压力下甲烷-空气混合物的层流火焰速度，《燃烧与火焰》76（1989年）375–391。

[26] G. K. Giannakopoulos，M. Matalon，C. E. Frouzakis，A. G. Tomboulides，定常球形火焰的曲率马尔克斯坦长度与火焰位移速度的定义，《燃烧学会会刊》35（2015年）737–743。[27] G. K. Giannakopoulos，A. Gatzoulis，C. E. Frouzakis，M. Matalon，A. G. Tomboulides，预混火焰传播中“火焰位移速度”和“马尔克斯坦长度”的一致定义，《燃烧与火焰》162（2015年）1249–1264。[28] H. L. Dave，S. Chaudhuri，湍流中局部火焰位移速度的演变，《流体力学杂志》884（2020年）A46。[29] H. G. Im，P. G. Arias，S. Chaudhuri，H. A. Uranakara，统计定常湍流预混火焰的直接数值模拟，《燃烧科学与技术》188（2016年）1182–1198。[30] H. Lee，P. Dai，M. Wan，A. N. Lipatnikov，贫氢气-空气湍流火焰中极端点和前导点的直接数值模拟——第二部分：局部速度场与火焰拓扑，《燃烧与火焰》235（2022年）111712。[31] E. Suillaud，K. Truffin，O. Colin，D. Veynante，高卡洛维茨数预混火焰的直接数值模拟：位移速度的分析与建模，《燃烧与火焰》236（2022年）111770。[32] T. D. Dunstan，N. Swaminathan，K. N. C. Bray，N. G. Kingsbury，湍流预混双V形火焰中的火焰相互作用，《燃烧科学与技术》185（2013年）134–159。[33]R. Griffiths，J. Chen，H. Kolla，R. Cant，W. Kollmann，湍流预混火焰相互作用的三维拓扑，《燃烧学会会刊》35（2015年）1341–1348。[34] S. Trivedi，R. Griffiths，H. Kolla，J. H. Chen，R. S. Cant，湍流预混火焰中火焰袋形成的拓扑，《燃烧学会会刊》37（2019年）2619–2626。[35] D. Brouzet，A. Haghiri，M. Talei，M. J. Brear，湍流预混火焰中湮灭事件的拓扑及其产生的声音，《燃烧与火焰》204（2019年）268–277。

[36] A. Haghiri，M. Talei，M. Brear，E. Hawkes，湍流预混火焰中的火焰湮灭位移速度和拉伸率，《流动、湍流与燃烧》104（2020）977–996。[37] I. S. Wichman，R. Vance，一维层流预混火焰湮灭研究，《燃烧与火焰》110（1997）508–523。[38] Z. Lu，S. Ghosal，描述两个平面预混火焰碰撞的相似解，《燃烧理论与建模》7（2003）645–652。[39] H. L. Dave，A. Mohan，S. Chaudhuri，湍流中预混火焰的产生与演化，《燃烧与火焰》196（2018）386–399。[40] S. Chaudhuri，嵌入与近似各向同性湍流相互作用的预混火焰中的火焰粒子寿命，《燃烧学会会刊》35（2015）1305–1312。[41] Yuvraj，W. Song，H. Dave，H. G. Im，S. Chaudhuri，等，中等至强湍流中氢气-空气预混火焰的局部火焰位移速度，《燃烧与火焰》236（2022）111812。[42] S. Chaudhuri，B. Savard，基于质量流率的湍流火焰速度：理论与直接数值模拟，arXiv预印本 arXiv:2202.06719（2022）。[43]A. Brandenburg，P. C. Collaboration，等，http://pencil-code.nordita.org/，2018年。访问日期：2022-04-26。[44] J. Li，Z. Zhao，A. Kazakov，F. Dryer，更新的综合氢燃烧动力学模型，《国际化学动力学杂志》36（2004）566–575。[45] W. Song，F. E. Hernandez-Perez，E. A. Tingas，H. G. Im，高卡洛维茨数下湍流氢气/空气预混火焰局部和全局火焰速度的统计特性，《燃烧与火焰》232（2021）111523。[46] W. Song，F. E. Hern´andez-P´erez，H. G. Im，加压稀燃湍流氢气-空气预混火焰中的氢扩散效应，《燃烧与火焰》246（2022）112423。[47] M. Matalon，C. Cui，J. K. Bechtold，预混火焰的流体动力学理论：化学计量比、可变输运系数和任意反应级数的影响，《流体力学杂志》487（2003）179–210。

[48] S. Chaudhuri，V. Akkerman，C. K. Law，考虑流体动力学不稳定性的湍流火焰速度谱表述，《物理评论E》84（2011）026322。[49] F. E. Hern´andez P´erez，N. Mukhadiyev，X. Xu，A. Sow，B. J. Lee，R. Sankaran，H. G. Im，使用众核/GPU加速和详细化学反应机理对反应流进行直接数值模拟，《计算流体》173（2018）73–79。[50] C. S. Yoo，Y. Wang，A. Trouv´e，H. G. Im，湍流对冲火焰直接数值模拟的特征边界条件，《燃烧理论与建模》9（2005）617–646。[51] C. S. Yoo，H. G. Im，具有多维、黏性和反应效应的可压缩反应流模拟的特征边界条件，《燃烧理论与建模》11（2007）259–286。[52] M. P. Burke，M. Chaos，Y. Ju，F. L. Dryer，S. J. Klippenstein，高压燃烧综合H2/O2动力学模型，《国际化学动力学杂志》44（2012）444–474。[53] Y. Shim，S. Tanaka，M. Tanahashi，T. Miyauchi，氢气–空气湍流预混火焰的局部结构与分形特征，《燃烧学会会刊》33（2011）1455–1462。[54] I. R. Gran，T. Echekki，J. H. Chen，非定常二维预混火焰中的负火焰速度：一项计算研究，《国际燃烧学术研讨会》26（1996）323–329。[55] H. Chu，L. Berger，T. Grenga，Z. Wu，H. Pitsch，发动机工况下差异扩散对氢火焰核发展的影响，《燃烧学会会刊》（2022）。[56] E. Villermaux，混合与搅拌，《流体力学年度评论》51（2019）245–273。