

ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ГОРЕНИЯ ГАЗОВ В ДВУМЕРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ*

В. Я. Басевич¹, А. А. Беляев², С. М. Фролов³, Б. Басара⁴

Аннотация: Предложена методика двумерного прямого численного моделирования (ПЧМ) распространения турбулентного пламени в газовых реагирующих смесях в условиях стационарной, однородной и изотропной турбулентности. Методика основана на детальном кинетическом механизме (ДКМ) горения многокомпонентной смеси и не содержит каких-либо эмпирических подгоночных параметров. Методика применена к расчету турбулентного горения водородно-воздушной смеси. Сравнение результатов расчетов с экспериментом показало, что между ними есть качественное согласие: и в расчете, и в эксперименте скорость турбулентного горения возрастает с увеличением интенсивности турбулентности, причем трехмерная турбулентность в эксперименте увеличивает интенсивность обменных процессов и площадь поверхности пламени, а следовательно, и скорость его распространения в большей степени, чем «двумерная» турбулентность. Кроме того, концентрации активных центров реакции — гидроксила ОН, атомов Н и О — в турбулентном пламени меньше, чем в ламинарном, что также согласуется с экспериментом.

Ключевые слова: прямое численное моделирование; турбулентное горение; детальный кинетический механизм; водород

Введение

Первые работы по математическому моделированию турбулентного горения появились достаточно давно [1], однако общепринятых методов математического описания процессов в турбулентном пламени до сих пор в литературе нет. Существующие подходы, как правило, включают всякого рода «замыкающие» гипотезы, основанные на экспериментальных наблюдениях. Поскольку область применимости той или иной гипотезы ограничена, такие полуэмпирические подходы не универсальны.

Сегодня наиболее перспективным универсальным подходом к неэмпирическому теоретическому описанию турбулентного горения считают ПЧМ (в англоязычной литературе — Direct Numerical Simulation, DNS), при котором в рассмотрение включены все основные особенности трехмерного турбулентного реагирующего течения с полным спектром турбулентных пульсаций скорости, с полным набором исходных, промежуточных и конечных химических компонентов с их индивидуальными термодинамическими свойствами и свойствами молекулярного переноса, а также с адекватными граничными условиями [2–4]. Однако при сравнении самых «свежих» опубликованных реше-

ний для скорости распространения турбулентного пламени, полученных с помощью ПЧМ (см., например, [5]), с известными экспериментальными данными выясняется, что их точность все еще заметно уступает точности, достигаемой при решении задач ламинарного горения. В теоретических работах в качестве причин расхождения результатов расчетов и экспериментов часто называют неучтенные эффекты, вызванные неопределенными граничными условиями в реальных экспериментах. Кроме того, применение ПЧМ к реальным турбулентным пламенам требует очень больших вычислительных ресурсов, в связи с чем в расчетах все еще приходится использовать различные упрощения, влияющие на точность решения.

Цель данной работы — применение ПЧМ к задаче о распространении турбулентного пламени в водородно-воздушной смеси в простейших условиях стационарной, однородной и изотропной турбулентности и сравнение результатов расчета с известными экспериментальными данными.

Постановка задачи

На рис. 1 показана схема расчетной области, частично заполненной предварительно перемешанной водородно-воздушной смесью (свежая смесь,

* Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект офи-м № 16-29-01065).

¹ Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, basevch@chph.ras.ru

² Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, belyaevIHF@yandex.ru

³ Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», smfrol@chph.ras.ru

⁴ AVL LIST GmbH, branislav.basara@avl.com

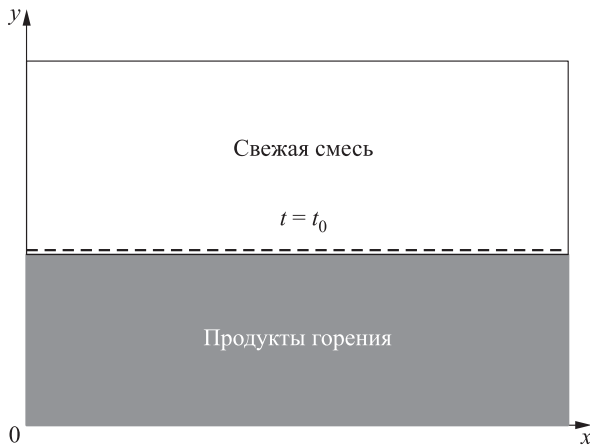


Рис. 1 Схема расчетной области

белый цвет) с коэффициентом избытка горючего Φ при нормальных атмосферных условиях (НАУ) (температура 293 К, давление 0,1 МПа) и термодинамически равновесными продуктами горения (серый цвет) при температуре T_e . Предположим, что (i) расчетная область двумерная; (ii) в ней созданы условия для существования незатухающей (стационарной), однородной и изотропной турбулентности; (iii) горение смеси происходит при постоянном давлении и не влияет на параметры турбулентности; (iv) стенки расчетной области — непроницаемые адиабатические поверхности с проскальзыванием потока.

Будем считать, что зажигание свежей смеси происходит в результате ее контакта с горячими продуктами горения. Начальное положение бесконечно тонкой плоской контактной границы между холодной свежей смесью и горячими продуктами горения в момент времени $t = t_0 = 0$ обозначено на рис. 1 горизонтальной штриховой линией. Задача заключается в том, чтобы определить скорость распространения турбулентного пламени u_T в заданном поле турбулентности, которая устанавливается в расчетной области после начального переходного периода.

Математическая постановка задачи основана на системе уравнений, предложенной ранее в [6]:

$$\left. \begin{aligned} \rho_0 C \frac{\partial T}{\partial t} &= \sum h_{ij} w_{ij} + \\ &+ \sum \frac{\partial}{\partial x_k} \lambda \frac{\partial T}{\partial x_k} - \rho_0 C \sum u_{k,0} \frac{\partial T}{\partial x_k}; \\ \rho_0 \frac{\partial (n_j / \rho)}{\partial t} &= \sum w_{ij} + \\ &+ \sum \frac{\partial}{\partial x_k} D_j \rho \frac{\partial (n_j / \rho)}{\partial x_k} - \rho_0 \sum u_{k,0} \frac{\partial (n_j / \rho)}{\partial x_k}, \end{aligned} \right\} (1)$$

где ρ_0 и ρ — начальная и текущая плотности; T — температура; C — теплоемкость при постоянном

давлении; t — время; λ — коэффициент молекулярной теплопроводности; x_k — координата (здесь $k = 1 (x)$ и $2 (y)$); n_j и D_j — концентрация и коэффициент молекулярной диффузии j -го компонента смеси; w_{ij} и h_{ij} — скорость и тепловой эффект i -го элементарного акта химической реакции с участием j -го компонента; $u_{k,0}$ — проекции мгновенной пульсационной скорости при начальной плотности на ось x_k , связанные между собой уравнением неразрывности:

$$\sum \frac{\partial \rho u_k}{\partial x_k} = 0. \quad (2)$$

Система (1) без последнего члена представляет собой известные уравнения распространения волны горения в k -мерном пространстве. Последний член в уравнениях (1) описывает вклад конвективного переноса тепла и вещества турбулентными пульсациями скорости.

Начальные условия для системы (1):

при $t = t_0 = 0$

$$\text{для } y > y(t = t_0) \quad n_j = n_{j0}, T = T_0;$$

$$\text{для } y < y(t = t_0) \quad n_j = n_{je}, T = T_e.$$

Граничные условия для системы (1):

при $x = 0$ (левая граница) и $x = X$ (правая граница)

$$\frac{\partial T}{\partial x_k} = \frac{\partial (n_j / \rho)}{\partial x_k} = 0.$$

Для моделирования поля мгновенной пульсационной скорости $u_{x,0}(x, y, t)$ и $u_{y,0}(x, y, t)$ в уравнениях (1) и (2) предполагается, что пульсации скорости подчиняются нормальному закону Гаусса:

$$\varphi(u) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(u - \bar{u})^2}{2\sigma^2} \right],$$

где u — мгновенная пульсационная скорость; \bar{u} — ее среднеквадратичное значение; σ^2 — дисперсия; σ — среднеквадратичное отклонение.

Незатухающая однородная и изотропная турбулентность в расчетной области задается в виде набора значений среднеквадратичной пульсационной скорости \bar{u} , Эйлеровых продольных L' (корреляция по направлению, совпадающему с направлением движения пламени) и поперечных L'' (корреляция по направлению, перпендикулярному вектору скорости) масштабов длины и Лагранжевого масштаба времени τ , одинаковых для всех x, y и t .

Моделирование поля пульсационных скоростей производится путем разыгрывания возможных величин при заданных характеристиках турбулентности, как это делалось ранее в [6]. При этом

коэффициенты корреляции пульсаций скорости аппроксимируются следующими экспоненциальными зависимостями:

– пространственные корреляции

$$R' = \exp\left(-\frac{\Delta x_k}{L'}\right); \quad R'' = \exp\left(-\frac{\Delta x_k}{L''}\right);$$

– временная корреляция

$$R = \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau}\right),$$

где Δx_k и Δt — расстояние и интервал времени между пространственными точками и моментами времени, в которых разыгрываются скорости (пространственные и временные шаги разыгрывания).

В описанной постановке задачи нет необходимости в использовании какой-либо модели турбулентного горения, а для получения скоростей w_{ij} химических превращений используется неэмпирический ДКМ окисления горючего, дополненный термодинамическими данными для всех компонентов смеси (коэффициентами полиномов для теплоемкости C , теплотами элементарных актов h_{ij} , коэффициентами молекулярной диффузии D_j и теплопроводности λ).

Результаты расчетов

Все расчеты, описанные ниже, проводятся для водородно-воздушных смесей с использованием ДКМ из [7], содержащего 21 реакцию из блока реакций окисления водорода. Ввиду того, что зона реакции в пламени имеет конечную толщину, положение фронта пламени определяется как геометрическое место точек с температурой, равной средней арифметической температуре $T_m = (T_0 + T_e)/2$.

Задача решается методом переменных направлений [8]. При этом для решения уравнений по каждому из направлений используется неявная разностная схема с равномерным шагом по пространству и линеаризацией нелинейных «источниковых» слагаемых на верхнем слое. Эта схема имеет первый порядок точности по времени и пространству. Расчетная область имеет размер 1×10 см, расчетная ячейка имеет прямоугольную форму и размер $0,0125 \times 0,01$ см, полное количество расчетных ячеек равно 80 000, шаг интегрирования по времени изменяется в зависимости от числа итераций, но не превышает 1 мкс. При заданных параметрах расчетной сетки на зону реакции приходится не менее 10 расчетных ячеек. Дальнейшее измельчение расчетной сетки не приводит к сколь-нибудь

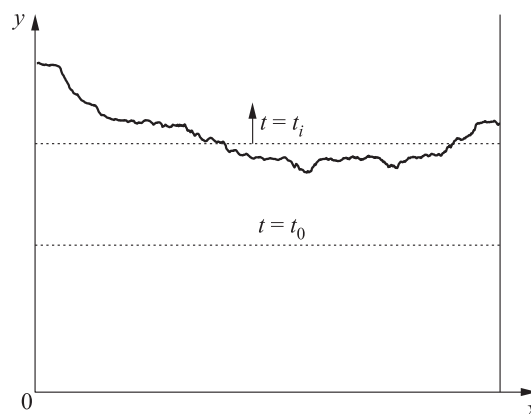


Рис. 2 Расчетные мгновенное (сплошная линия) и усредненное (горизонтальная штриховая линия) положения фронта турбулентного пламени в момент времени $t = t_i$

существенному изменению получаемых результатов.

На рис. 2 сплошной линией показано мгновенное положение искривленного фронта турбулентного пламени в некоторый момент времени $t = t_i$, а горизонтальной пунктирной линией — соответствующее усредненное положение фронта пламени в тот же момент времени при $\bar{u} = 660$ см/с, $L' = 1$ см, $L'' = 0,7$ см и $\tau = 10$ мс. Отметим, что пунктирная линия при $t = t_i$ проведена так, чтобы площади, отсекаемые ею под и над сплошной линией, были одинаковы. В результате такого расчета получаются индивидуальные реализации положения фронта турбулентного пламени. На самом фронте наблюдаются мелкие и крупные пространственные изгибы и присутствуют линейные размеры, которые по своей величине могут быть как меньше, так и больше толщины турбулентного пламени. Мелкомасштабная турбулентность изменяет скорость обменных процессов внутри фронта пламени, а крупномасштабная турбулентность увеличивает поверхность фронта. По усредненным положениям фронта пламени (пунктирные горизонтальные линии на рис. 2) можно установить его видимую скорость распространения U , причем при данной постановке задачи она получается почти постоянной. Если учесть расширение продуктов реакции, то по скорости U можно определить скорость распространения турбулентного пламени u_T :

$$u_T = U \frac{T_0}{T_e} \frac{m_e}{m_0},$$

где m_0 и m_e — число молей в свежей смеси и в продуктах реакции соответственно.

По расчетным значениям $u_{x,0}$ и $u_{y,0}$ в каждый момент времени может быть найдена длина вектора

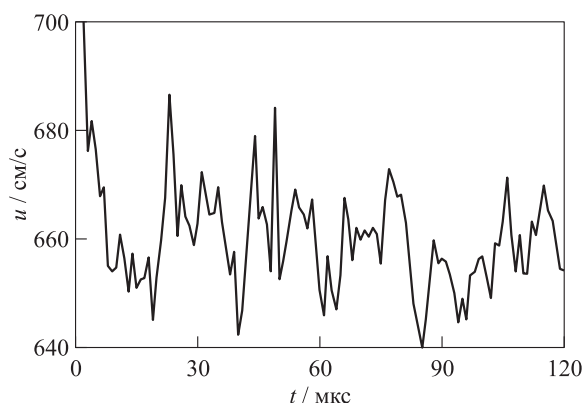


Рис. 3 Зависимость длины вектора пульсационной скорости u от времени при $\bar{u} = 660$ см/с, $L' = 1$ см, $L'' = 0,7$ см и $\tau = 10$ мс

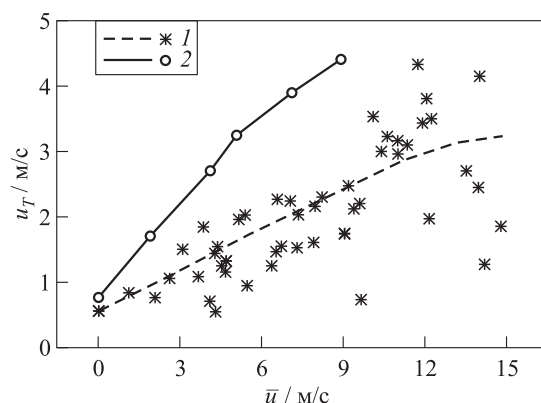


Рис. 4 Сравнение расчетных (1) и измеренных в [9] (2) зависимостей u_T от среднеквадратичной пульсационной скорости \bar{u} для бедной водородно-воздушной смеси с коэффициентом избытка горючего $\Phi = 0,5$ при НАУ и характеристиках турбулентности: $L' = 1$ см; $L'' = 0,7$ см; $\tau = 10$ мс

пульсационной скорости для «двумерной» турбулентности:

$$u = \sqrt{u_{x,0}^2 + u_{y,0}^2}.$$

На рис. 3 показан пример расчетной зависимости u от времени. Видно, что описанное выше моделирование мгновенных пульсационных скоростей действительно обеспечивает сохранение заданных характеристик турбулентности, в частности заданной среднеквадратичной скорости на уровне $\bar{u} = 660$ см/с.

В [9] представлены многочисленные экспериментальные данные для скорости распространения турбулентного пламени u_T в зависимости от интенсивности турбулентности в водородно-воздушных

смесях разного состава. На рис. 4 проведено сравнение расчетных и измеренных зависимостей u_T от среднеквадратичной пульсационной скорости \bar{u} для бедной водородно-воздушной смеси с коэффициентом избытка горючего $\Phi = 0,5$, причем звездочки соответствуют индивидуальным расчетным реализациям, а штриховая кривая — осреднению по реализациям.

Отметим, что у авторов экспериментов [9] по оси абсцисс отложена величина $\sqrt{3}u$ — длина вектора среднеквадратичной пульсационной скорости, а для результатов двумерного расчета на рис. 4 отложено расчетное значение $\sqrt{2}u$, т.е. линейный масштаб по оси абсцисс уменьшен в отношении $\sqrt{2} : \sqrt{3} \approx 0,815$. Наблюдаемое расхождение

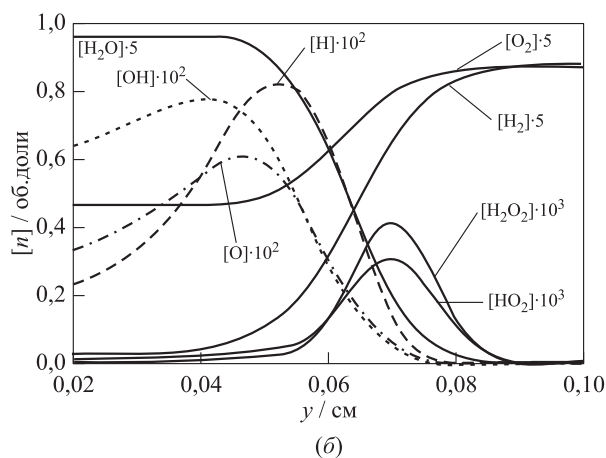
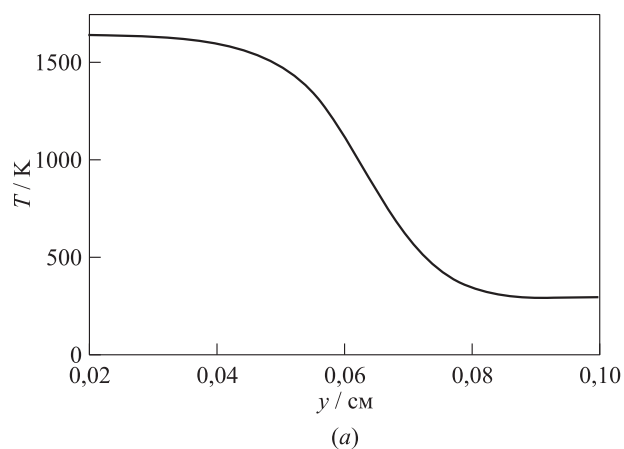


Рис. 5 Расчетные распределения температуры (а) и объемных долей (б) некоторых компонентов смеси по толщине турбулентного пламени, распространяющегося в бедной водородно-воздушной смеси с $\Phi = 0,5$ при НАУ и характеристиках турбулентности: $u = 1100$ см/с; $L' = 1$ см; $L'' = 0,7$ см; $\tau = 10$ мс

результатов двумерных расчетов с экспериментом следует считать естественным, поскольку трехмерная турбулентность в эксперименте, пока она не избыточно велика, в большей степени увеличивает интенсивность обменных процессов и площадь поверхности пламени, а следовательно, и скорость его распространения, чем «двумерная» турбулентность. Таким образом, из сравнения результатов расчетов с опытными данными можно сделать вывод об их общем качественном согласии друг с другом.

Следовало ожидать, что мелкомасштабные обменные процессы в турбулентном пламени должны делать профиль температуры в таком пламени более пологим, чем в ламинарном пламени, т. е. толщина турбулентного фронта пламени должна быть несколько больше, чем у его ламинарного аналога. Действительно, на рис. 5 представлен пример расчетных распределений температуры и концентраций некоторых компонентов смеси в турбулентном пламени, распространяющемся в бедной водородно-воздушной смеси с $\Phi = 0,5$ при НАУ и характеристиках турбулентности: $\bar{u} = 1100$ см/с, $L' = 1$ см, $L'' = 0,7$ см и $\tau = 0,010$ с. Хотя структура зоны реакции в турбулентном пламени очень похожа на структуру зоны реакции в ламинарном пламени, между ними все же есть количественные отличия. Так, концентрации самых активных центров реакции — гидроксила ОН, атомов Н и О — в турбулентном пламени меньше, чем в ламинарном.

На рис. 6 представлена расчетная зависимость максимальной по зоне реакции объемной доли гидроксила от среднеквадратичной пульсационной скорости \bar{u} : с ростом интенсивности турбулентности концентрация гидроксила снижается. Уменьшение концентрации активных центров в турбулентном пламени связано с увеличением скорости

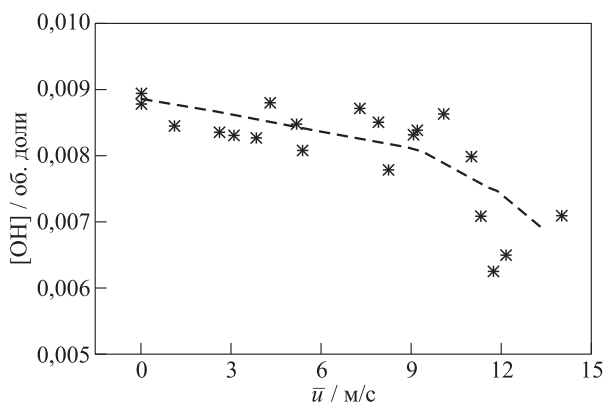


Рис. 6 Расчетная зависимость максимальной объемной доли гидроксила в турбулентном водородно-воздушном пламени от среднеквадратичной пульсационной скорости \bar{u} при $\Phi = 0,5$, НАУ и характеристиках турбулентности: $L' = 1$ см; $L'' = 0,7$; $\tau = 10$ мс

мелкомасштабных обменных процессов. На основе косвенных данных такой же вывод был сделан в экспериментальной работе [10].

Заключение

Таким образом, в работе предложена методика двумерного ПЧМ распространения турбулентного пламени в газовых реагирующих смесях в условиях стационарной, однородной и изотропной турбулентности. Методика основана на ДКМ горения многокомпонентной смеси и не содержит каких-либо эмпирических подгоночных параметров. Методика применена к расчету турбулентного горения водородно-воздушной смеси. Сравнение результатов расчетов с экспериментом показало, что между ними есть качественное согласие: и в расчете, и в эксперименте скорость турбулентного горения возрастает с увеличением интенсивности турбулентности, причем трехмерная турбулентность в эксперименте увеличивает интенсивность обменных процессов и площадь поверхности пламени, а следовательно, и скорость его распространения в большей степени, чем «двумерная» турбулентность. Кроме того, концентрации активных центров реакции — гидроксила ОН, атомов Н и О — в турбулентном пламени меньше, чем в ламинарном, что также согласуется с экспериментом.

Дальнейшая работа будет направлена на расширение предложенной методики на трехмерный случай и учет вихревой структуры турбулентности.

Литература

1. Шетинков Е. С. Физика горения газов. — М.: Наука, 1965. 739 с.
2. Bell J. B., Day M. S., Grcar J. F. Numerical simulation of premixed turbulent methane combustion // Proc. Combust. Inst., 2002. Vol. 29. P. 1987–1993.
3. Echekki T., Chen J. H. Direct numerical simulation of autoignition in nonhomogeneous hydrogen–air mixtures // Combust. Flame, 2003. Vol. 134. P. 169–191.
4. Bell J. B., Cheng R. K., Day M. S., Shepherd I. G. Numerical simulation of Lewis number effects on lean premixed turbulent flames // Proc. Combust. Inst., 2006. Vol. 31. P. 1309–1317.
5. Aspden A. J., Day M. S., Bell J. B. Three-dimensional direct numerical simulation of turbulent lean premixed methane combustion with detailed kinetics // Combust. Flame, 2016. Vol. 166. P. 266–283.
6. Басевич В. Я., Володин В. П., Козарко С. М., Перегудов Н. И. Расчеты турбулентного пламени в двухмерном приближении // Хим. физика, 1982. Т. 1. № 8. С. 1130–1137.

7. Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М. Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от C_1 – C_{10} к C_{11} – C_{16} // Хим. физика, 2013. Т. 32. № 4. С. 87–96.
8. Годунов С. К., Рябенский В. С. Разностные схемы. — М.: Наука, 1977. 440 с.
9. Карпов В. П., Северин Е. С. Влияние коэффициентов молекулярного переноса на турбулентную скорость выгорания // ФГВ, 1980. Т. 16. № 1. С. 45–51.
10. Басевич В. Я., Когарко С. М. Образование углеводородов при турбулентном горении метано-воздушной смеси // ФГВ, 1985. Т. 21. № 5. С. 12–17.

Поступила в редакцию 18.01.17

DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF TURBULENT COMBUSTION OF GASES IN TWO-DIMENSIONAL APPROXIMATION

V. Ya. Basevich¹, A. A. Belyaev¹, S. M. Frolov¹, and B. Basara²

¹N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation

²AVL LIST GmbH, 1 Hans List Platz, Graz 8020, Austria

Abstract: The technique for Direct Numerical Simulation (DNS) of two-dimensional (2D) turbulent flame propagation in gaseous reacting mixtures in a stationary, homogeneous, and isotropic turbulence has been proposed. The technique is based on the detailed kinetic mechanism of combustion of a multicomponent reacting mixture and does not contain any empirical fitting parameters. The technique was applied to the calculation of turbulent combustion of hydrogen–air mixture. Comparison of the calculation results with experimental data showed that there exists qualitative agreement between them: in both calculations and experiments, the turbulent burning velocity increases with the turbulence intensity and the three-dimensional turbulence in the experiment increases the intensity of exchange processes and the surface area of the flame and, hence, its propagation velocity more than 2D turbulence. Furthermore, the concentration of active reaction centers — hydroxyl OH and H and O atoms — in a turbulent flame is less than in its laminar analog, which also agrees with experiments.

Keywords: direct numerical simulation; turbulent combustion; hydrogen

Acknowledgments

The work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (project ofi-m No. 16-29-01065).

References

1. Shchetnikov, E. S. 1965. *Fizika gorennya gazov* [Physics of combustion of gases]. Moscow: Nauka. 739 p.
2. Bell, J. B., M. S. Day, and J. F. Grcar. 2002. Numerical simulation of premixed turbulent methane combustion. *Proc. Combust. Inst.* 29:1987–1993.
3. Echehki, T., and J. H. Chen. 2003. Direct numerical simulation of autoignition in nonhomogeneous hydrogen–air mixtures. *Combust. Flame* 134:169–191.
4. Bell, J. B., R. K. Cheng, M. S. Day, and I. G. Shepherd. 2006. Numerical simulation of Lewis number effects on lean premixed turbulent flames. *Proc. Combust. Inst.* 31:1309–1317.
5. Aspden, A. J., M. S. Day, and J. B. Bell. 2016. Three-dimensional direct numerical simulation of turbulent lean premixed methane combustion with detailed kinetics. *Combust. Flame* 166:266–283.
6. Basevich, V. Ya., V. P. Volodin, S. M. Kogarko, and N. I. Peregudov. 1982. Raschety turbulentnogo plameni v dvukhmernom priblizhenii [Calculations of turbulent flame in two-dimensional approximation]. *Khim. Fiz.* 1(8):1130–1137.
7. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, V. S. Posvyanskii, and S. M. Frolov. 2013. Mechanisms of the oxidation and combustion of normal paraffin hydrocarbons: Transition from C_1 – C_{10} to C_{11} – C_{16} . *Russ. J. Phys. Chem. B* 7(2):161–169.
8. Godunov, S. K., and V. S. Ryaben'kiy. 1977. *Raznostnye skhemy* [Differencing schemes]. Moscow: Nauka. 440 p.
9. Karpov, V. P., and E. S. Severin. 1980. Effect of molecular-transport coefficients on the rate of turbulent combustion. *Combust. Explo. Shock Waves* 16(1):41–46.
10. Basevich, V. Ya., and S. M. Kogarko. 1985. Hydrocarbon formation in turbulent combustion of a methane–air mixture. *Combust. Explo. Shock Waves* 21(5):514–518.

Received January 18, 2017

Contributors

Basevich Valentin Ya. (b. 1926) — Doctor of Science in technology, professor, chief research scientist, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; basevich@chph.ras.ru

Belyaev Andrey A. (b. 1954) — Candidate of Science in physics and mathematics, senior research scientist, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; belyaevIHF@yandex.ru

Frolov Sergey M. (b. 1959) — Doctor of Science in physics and mathematics, professor, Head of Department, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; professor, National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation; smfrol@chph.ras.ru

Basara Branislav (b. 1964) — Doctor hab., Chief Developer, AVL LIST GmbH, 1 Hanz List Pl., Graz 8020, Austria; branislav.basara@avl.com