
**ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ
И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ**

УДК 541.126

**ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО
ГОРЕНИЯ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ РАЗНОГО СОСТАВА
В ДВУМЕРНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ**

© 2019 г. В. Я. Басевич¹, А. А. Беляев¹, С. М. Фролов^{1,2,3*}, Ф. С. Фролов^{1,3}

¹Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, Москва, Россия

²Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, Россия

³Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований
Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: smfrol@chph.ras.ru

Поступила в редакцию 14.03.2018;

после доработки 14.03.2018;

принята в печать 20.03.2018

Предложена методика двумерного прямого численного моделирования распространения турбулентного пламени в газовых реагирующих смесях в условиях стационарной, однородной и изотропной турбулентности. Методика основана на детальном кинетическом механизме горения многокомпонентной смеси и не содержит каких-либо подгоночных параметров. Эта методика применена к расчету турбулентного горения водородно-воздушной смеси. Предложено условие, позволяющее сравнивать результаты двумерных расчетов — зависимости скорости распространения пламени от интенсивности турбулентности — с реальным “трехмерным” экспериментом. Полученное согласие расчетных и измеренных зависимостей подтверждает применимость предложенного условия. Рассмотрено влияние давления на скорость распространения пламени. Расчетные концентрации активных центров реакции — гидроксила OH, атомов H и O — в турбулентном пламени меньше, чем в ламинарном, что также согласуется с экспериментом.

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

DOI: 10.1134/S0207401X19010047

ВВЕДЕНИЕ

Прямое численное моделирование турбулентного горения предполагает неэмпирический подход на основе применения детальных кинетических механизмов (ДКМ) и учета поля пульсационных скоростей. Первые работы по математическому моделированию турбулентного горения появились достаточно давно [1, 2], однако общепринятых методов математического описания физико-химических процессов в турбулентном пламени до сих пор в литературе нет [3–9]. 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 прямое численное моделирование (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 [7–9]. Численное интегрирование определяющих уравнений течения проводят на расчетных сетках, обеспечивающих пространственное разрешение турбулентных вихрей колмогоровского масштаба, используя схемы высокого порядка аппроксимации.

Несмотря на значительные успехи в развитии ПЧМ турбулентного горения, на этом пути есть еще много проблем. Так, при сравнении самых “свежих” опубликованных решений для скорости распространения турбулентного пламени, полученных с помощью ПЧМ (см., например, [10]), с известными экспериментальными данными выясняется, что их точность все еще заметно уступает точности, достигаемой при решении за-

дач 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.

В данной работе используется альтернативный подход к ПЧМ турбулентного горения гомогенной газовой смеси, который ранее был предложен в работе [11]. Вместо численного решения всех уравнений, определяющих распространение турбулентного пламени в реагирующем газе, в [11] было предложено решать только уравнения переноса скалярных величин – концентраций реагентов и энергии в искусственном (“синтетическом”) поле турбулентности, характеризуемом заданной (постоянной) среднеквадратичной интенсивностью пульсаций скорости и заданными (постоянными) интегральными пространственными и временными масштабами. При этом считается, что распространение пламени не влияет на характеристики синтетического поля турбулентности в предпламенной зоне.

В отличие от [11] в данной работе химический процесс описывается не одной глобальной реакцией, а детальным кинетическим механизмом с участием активных центров. Первые результаты по такому моделированию турбулентного горения представлены нами в работе [12] для одного конкретного состава водородно-воздушной смеси в простейших условиях стационарной, однородной и изотропной турбулентности. Цель данной работы – совершенствование методики из работы [12] и ее применение для расчетов распространения турбулентного пламени в водородно-воздушных гомогенных смесях разного состава и при разных давлениях, а также сравнение результатов расчетов с известными экспериментальными данными.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Система уравнений, определяющих распространение турбулентного пламени, основана на уравнениях Навье–Стокса в трехмерной постановке, уравнении сохранения энергии и уравнениях неразрывности для всех химических компонентов в смеси идеальных газов [13]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) &= 0, \\ \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \nabla \mathbf{v} &= -\nabla p + \rho \sum_{i=1}^N Y_i \mathbf{f}_i, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \nabla e &= -\nabla \mathbf{q} - \mathbf{P} : (\nabla \mathbf{v}) + \rho \sum_{i=1}^N Y_i \mathbf{f}_i \mathbf{v}_i, \\ \rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \nabla Y_i &= \omega_i - \nabla(\rho Y_i \mathbf{V}_i), \quad i = 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (1)$$

$$p = \rho R^0 T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{\mu_i},$$

$$e = \sum_{i=1}^N h_i Y_i - \frac{p}{\rho},$$

$$h_i = h_i^0 + \int_{T_0}^T c_{p,i} dT, \quad i = 1, \dots, N,$$

где t – время; ρ – плотность; \mathbf{v} – вектор скорости; p – статическое давление; e – внутренняя энергия; \mathbf{q} – вектор молекулярного потока тепла; \mathbf{P} – тензор сил давления, \mathbf{f}_i – вектор силы тяжести, действующей на единицу массы i -го вещества; Y_i , \mathbf{V}_i , h_i и ω_i – соответственно массовая доля, вектор скорости диффузии, удельная энтальпия и скорость химического превращения i -го вещества, h_i^0 – стандартная энтальпия образования i -го вещества; N – число веществ в реагирующем газе; R^0 – универсальная газовая постоянная; μ_i – молекулярный вес i -го вещества; T – температура; $c_{p,i}$ – теплоемкость i -го вещества при постоянном давлении; ∇ – дифференциальный оператор, индекс “0” означает начальные условия в свежей смеси.

Предполагается, что система (1) дополнена ДКМ окисления горючего, термохимическими данными каждого вещества (h_i^0 , $c_{p,i}$) и соответствующими соотношениями для \mathbf{f}_i , \mathbf{q} , \mathbf{P} , \mathbf{V}_i и ω_i , а также начальными и граничными условиями. В результате решения задачи должны быть получены скорость стационарного распространения u_t (скорость турбулентного горения) и структура турбулентного пламени в многокомпонентном реагирующем газе. Чтобы упростить решение задачи, введем следующие основные допущения:

1. Область течения имеет простейшую геометрию; турбулентность стационарная, однородная и изотропная.

2. Давление постоянно ($p = p_0$), а влиянием силы тяжести можно пренебречь. Благодаря этим допущениям задача существенно упрощается, так как отпадает необходимость решать уравнение сохранения количества движения.

3. Тепловой поток \mathbf{q} определяется только молекулярной теплопроводностью (лучистым теплообменом можно пренебречь).

4. Эффекты термодиффузии малы.

5. Реагирующая смесь сильно разбавлена инертным газом (азотом), так что диффузионные потоки всех химических компонентов определяются законом Фика с коэффициентом бинарной диффузии.

С учетом допущений 2–5 система дифференциальных уравнений (1) сводится к виду

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) &= 0, \\ \rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \nabla e &= -\nabla(\lambda \nabla T), \\ \rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \nabla Y_i &= \omega_i - \nabla(D_i \rho \nabla Y_i), \quad i = 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (2)$$

где λ – коэффициент молекулярной теплопроводности газа, а D_i – коэффициент бинарной диффузии i -го вещества в азоте. Отметим, что благодаря второму предположению (см. выше) плотность ρ в уравнении (2) – функция только температуры и состава смеси.

Для дальнейшего упрощения задачи предположим, что решение системы (2) стремится к некоторому стационарному решению, для которого

$$\nabla(\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (3)$$

Поскольку нас интересует именно такое стационарное решение, уравнение (3) можно использовать вместо уравнений неразрывности смеси, т.е. вместо первого уравнения в системе (2). В этом случае постановка задачи допускает дальнейшее упрощение. Вектор мгновенной местной скорости $\mathbf{v} = (u, v, w)$ в (3), где u, v, w – компоненты вектора, можно представить в виде суммы вектора средней скорости $\mathbf{V} = (U, V, W)$ и вектора пульсаций скорости $\mathbf{v}' = (u', v', w')$:

$$\mathbf{v} = \mathbf{V} + \mathbf{v}'.$$

Здесь и далее прописные буквы означают среднее значение, а штрихи относятся к пульсациям скорости. Тогда (3) можно преобразовать к виду

$$\nabla(\rho \mathbf{v}) = \nabla(\rho \mathbf{V} + \rho \mathbf{v}') = \nabla(\rho \mathbf{V}) + \nabla(\rho \mathbf{v}') = 0. \quad (4)$$

Основываясь на первом предположении об однородной и изотропной турбулентности, предположим далее, что

$$\nabla(\rho \mathbf{v}') = 0, \quad (5)$$

и, следовательно,

$$\nabla(\rho \mathbf{V}) = 0. \quad (6)$$

В области течения с простейшей геометрией (см. допущение (1)) всегда существует усредненное направление распространения турбулентного пламени, и можно устремить одну ось пространственных координат в этом направлении. Тогда (6) можно проинтегрировать и получить

$$\rho \mathbf{V} = \rho_0 \mathbf{V}_0 = \mathbf{B}, \quad (7)$$

где \mathbf{B} – постоянный поток вещества. С учетом (7) систему (2) можно привести к виду

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{B} \nabla e &= -\nabla(\lambda \nabla T) - \nabla(\rho \mathbf{v}' u), \\ \rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \mathbf{B} \nabla Y_i &= \omega_i - \nabla(D_i \rho \nabla Y_i) - \nabla(\rho \mathbf{v}' Y_i), \quad (8) \\ & i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Последние члены в обоих уравнениях системы (8) определяют перенос вещества и энергии с турбулентными пульсациями скорости. Если вектор \mathbf{B} известен, то производные по времени в обоих уравнениях системы (8) можно положить равными нулю, чтобы получить структуру стационарного турбулентного пламени. Однако, как правило, значение вектора \mathbf{B} заранее неизвестно. Поэтому, чтобы получить его значение, необходимо решить нестационарную систему (8), описывающую движение волны горения до достижения некоторой постоянной скорости. В этом случае конвективные члены в системе (8) можно опустить, а система уравнений примет вид

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial e}{\partial t} &= -\nabla(\lambda \nabla T) - \nabla(\rho \mathbf{v}' e), \\ \rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} &= \omega_i - \nabla(D_i \rho \nabla Y_i) - \nabla(\rho \mathbf{v}' Y_i), \quad (9) \\ & i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Наконец, можно упростить и последние члены в двух уравнениях (9), используя (5) и предполагая, что

$$\nabla_x(\rho u') = \nabla_y(\rho v') = \nabla_z(\rho w') = 0, \quad (10)$$

где $\nabla_x = \frac{\partial}{\partial x}$, $\nabla_y = \frac{\partial}{\partial y}$ и $\nabla_z = \frac{\partial}{\partial z}$. Интегрирование уравнений (10) дает

$$\begin{aligned} \rho u' &= \rho_0 u'_0, \\ \rho v' &= \rho_0 v'_0, \\ \rho w' &= \rho_0 w'_0. \end{aligned} \quad (11)$$

После подстановки соотношений (11) в систему (9) окончательно получим

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial e}{\partial t} &= -\nabla(\lambda \nabla T) - \rho_0 c_v \mathbf{v}'_0 \nabla T, \\ \rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} &= \omega_i - \nabla(D_i \rho \nabla Y_i) - \rho_0 \mathbf{v}'_0 \nabla Y_i, \quad (12) \\ & i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Таким образом, как и в [11, 12], вместо численного решения системы (1) предлагается решать систему (12), состоящую только из уравнений переноса скалярных величин – концентраций всех N реагентов и энергии на заданном синтетическом поле турбулентности, характеризуемом среднеквадратичной интенсивностью пульсаций скорости \mathbf{v}' и заданными интегральными пространственными и временными масштабами. В качестве

первого шага можно ограничиться решением двумерной задачи, хотя в двумерном приближении поверхность пламени меньше, чем в трехмерном, а двумерная турбулентность воздействует на пространство турбулентного пламени слабее, чем трехмерная. В двумерном приближении в системе координат (x, y) уравнения (12) с учетом калорического уравнения состояния примут вид

$$\begin{aligned} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} &= \sum_{i=1}^N h_i \omega_i + \left(\frac{\partial}{\partial x} \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \\ &\quad - \rho_0 c_p \left(u'_0 \frac{\partial T}{\partial x} + v'_0 \frac{\partial T}{\partial y} \right), \\ \rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} &= \omega_i + \left(\frac{\partial}{\partial x} D_i \rho \frac{\partial Y_i}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} D_i \rho \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right) - \\ &\quad - \rho_0 \left(u'_0 \frac{\partial Y_i}{\partial x} + v'_0 \frac{\partial Y_i}{\partial y} \right), \quad i = 1, \dots, N, \\ p_0 &= \rho R^0 T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{\mu_i}. \end{aligned} \quad (13)$$

Система (13) состоит из $N + 2$ уравнений для $N + 2$ переменных (N веществ с массовой долей Y_i , температурой T и плотностью ρ). Для замыкания системы используем следующие соотношения для c_p , λ и D_i :

$$\begin{aligned} c_p &= \sum_{i=1}^N c_{p,i} Y_i, \\ c_{p,i} &= \frac{R^0}{\mu_i} (a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4), \quad (14) \\ \lambda &= \lambda(T, Y_1, \dots, Y_N, \mu_1, \dots, \mu_N, c_{p,1}, \dots, c_{p,N}), \\ D_i &= D_i(T, p, \mu_i, \mu_{in}), \end{aligned}$$

где a_1, a_2, a_3, a_4 и a_5 – коэффициенты полиномов, а индекс “in” относится к инертному разбавителю (азот).

Для скорости химических реакций используется соотношение [13]

$$\begin{aligned} \omega_i &= \mu_i \sum_{k=1}^M (v_{i,k}^- - v_{i,k}^+) A_k T^{\alpha_k} \times \\ &\quad \times \exp\left\{-(E_k/R^0 T)\right\} \prod_{j=1}^N \left(\frac{X_j P}{R^0 T}\right)^{\nu_{j,k}}, \quad i = 1, \dots, N, \end{aligned}$$

где $v_{i,k}^+$ и $v_{i,k}^-$ – стехиометрические коэффициенты для i -тых веществ, являющихся реагентами и продуктами k -й реакции, соответственно; A_k – предэкспоненциальный множитель k -й реакции; α_k – показатель степени, определяющий температурную зависимость предэкспоненциального множителя k -й реакции; E_k – энергия активации k -й реакции; M – общее количество химических реакций и X_j – мольная доля j -го вещества.

Уравнения (13) содержат параметры стационарной, однородной и изотропной турбулентности реагирующего газа (две компоненты вектора $\mathbf{v}'_0 = (u'_0, v'_0)$). Компоненты вектора пульсационной скорости можно получить статистическим разыгрыванием по методу Монте-Карло, предположив, что мгновенные местные компоненты вектора пульсационной скорости удовлетворяют нормальному распределению Гаусса ϕ , а вихревая структура турбулентности описывается экспоненциально затухающими пространственными (R' и R'') и временной (R) корреляционными функциями:

$$\phi(u') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left[-\frac{(u' - \bar{u})^2}{2\sigma^2}\right], \quad (15)$$

$$\begin{aligned} R' &= \exp(-r_k/L'), \quad R'' = \exp(-r_k/L''), \\ R &= \exp(-t/\tau), \end{aligned} \quad (16)$$

где u' – мгновенная составляющая вектора пульсационной скорости, \bar{u} – длина вектора средней пульсационной скорости, σ – среднеквадратичное отклонение пульсаций скорости, r_k – расстояние в физическом пространстве, L' и L'' – масштабы турбулентности в направлениях y и x , соответственно, τ – временной масштаб Лагранжа. Несмотря на допущение об изотропности поля турбулентности (допущение 1, см. выше) здесь для общности введены два пространственных масштаба: L' и L'' . В соответствии с допущением о стационарности и однородности поля турбулентности масштабы τ , L' и L'' приняты постоянными. Граничные и начальные условия для системы (13) рассмотрены ниже для конкретной расчетной области.

МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

На рис. 1 показана схема простейшей расчетной области с выбранной системой координат (x, y) . Расчетная область представляет собой прямоугольник, в котором левая и правая границы – непроницаемые стенки со скольжением потока, а нижняя и верхняя границы удалены от пламени на достаточно большое расстояние, чтобы обеспечить постоянство давления в системе за все время расчета. Начальное положение плоского фронта пламени в момент времени $t = t_0 = 0$ показано нижней горизонтальной штриховой линией. Пламя распространяется снизу–вверх: выше штриховой линии находится свежая горячая смесь, а ниже – продукты горения. Здесь и далее при $t > 0$ положение фронта пламени определяется как геометрическое место точек, в которых температура равна среднему арифметическому между начальной температурой свежей смеси T_0 и термодинамически равновесной температурой продуктов сгорания T_1 : $T_m = (T_0 + T_1)/2$.

Мгновенное положение фронта пламени в момент времени $t = t_i > 0$ показано сплошной линией, а усредненное положение фронта пламени – верхней горизонтальной штриховой линией, которая проведена таким образом, чтобы площади областей, отсекаемых сплошной кривой выше и ниже штриховой линии, были одинаковы.

Задача о распространении турбулентного пламени решалась с помощью численного интегрирования системы (13) с дополнительными соотношениями методом переменных направлений [14]. Для решения уравнений по каждому из направлений (x, y) применялась 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 $0.5 \times 4 \text{ см}^2$. Все расчетные ячейки имеют форму квадрата размером $0.005 \times 0.005 \text{ см}^2$. Полное количество расчетных ячеек равно 80000. Шаг интегрирования по времени изменяется в зависимости от числа итераций, но не превышает 10^{-6} с .

Важная операция – моделирование синтетического поля турбулентности $\mathbf{v}'_0 = (u'_0, v'_0)$ в (13). Моделирование полей пульсационных скоростей $u' = u'_x(x, y, t)$ и $v' = u'_y(x, y, t)$ проводится путем разыгрывания их возможных значений при заданных характеристиках турбулентности \bar{u} , L' , L'' и τ . Соответствующая методика описана в *Приложении*. Подчеркнем, что принятая методика получения синтетического поля турбулентности не требует задания ни спектра турбулентности, ни колмогоровского масштаба. Мгновенная длина вектора пульсационной скорости, u , определяется по значениям u'_x и u'_y :

$$u = \left[(u'_x)^2 + (u'_y)^2 \right]^{1/2}.$$

Ниже представлены используемые здесь начальные и граничные условия, соответственно:

$$t = t_0 = 0, \quad y > y(t = t_0): Y_j = Y_{j0}, T = T_0, \quad j = 1, \dots, N, \quad (17)$$

$$y < y(t = t_0): Y_j = Y_{j1}, \quad T = T_1, j, \dots, N;$$

$$x = 0: \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial Y_j}{\partial x} = 0, \quad j = 1, \dots, N,$$

$$x = L_x: \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial Y_j}{\partial x} = 0, \quad j = 1, \dots, N,$$

$$y = 0: \frac{\partial T}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial Y_j}{\partial y} = 0, \quad j = 1, \dots, N,$$

$$y = L_y: \frac{\partial T}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial Y_j}{\partial y} = 0, \quad j = 1, \dots, N. \quad (18)$$

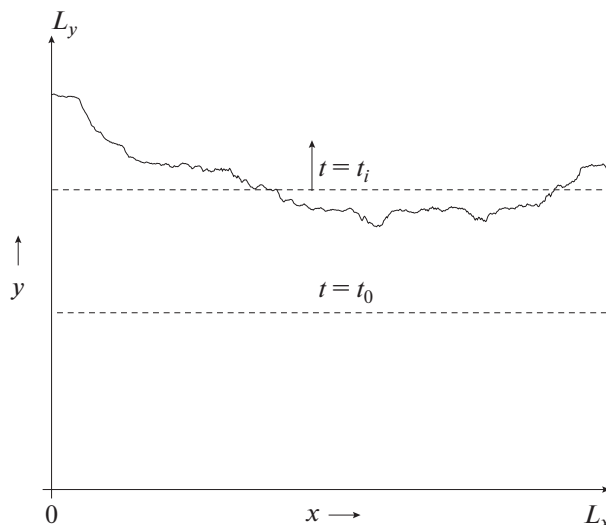


Рис. 1. Схема расчетной области.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Как и в [12], в данной работе рассматривается турбулентное горение гомогенной водородно-воздушной смеси. Для описания кинетики химических превращений используется блок реакций окисления водорода из ДКМ окисления и горения нормальных углеводородов [15]. Значения коэффициентов полиномов для всех веществ взяты из [16]. Коэффициенты переноса λ и D_i рассчитывались по методике, описанной в [17].

Прежде чем решать задачу о распространении турбулентного пламени мы провели численное интегрирование системы (13) с начальными и граничными условиями (17), (18) без синтетической турбулентности, т.е. с нулевыми пульсационными скоростями $\mathbf{v}'_0 = (u'_0, v'_0) = 0$, чтобы проверить применимость методики к описанию распространения плоского ламинарного пламени со скоростью u_n . Расчеты проведены для условий с $T_0 = 293 \text{ К}$ и $p = 1 \text{ ата}$. Объемное содержание водорода в смеси изменялось от 9.09% до 23.09%. На рис. 2 результаты этих расчетов представлены символами 1. Полученные результаты сравниваются на рис. 2 с экспериментальными данными [3, 18–23], а также с расчетами по программе [24] для более широкого интервала объемного содержания водорода: от 6% до 75%. Отметим, что в работе [18] представлены экспериментальные данные как по ламинарным, так и по турбулентным пламенам, полученные для смесей с объемным содержанием H_2 от 9.09% до 23.09%. Ниже именно эти данные [18] используются для сравнения расчетных и измеренных скоростей турбулентного горения смесей разного состава от интенсивности турбулентности. Для водородно-воздушных смесей с содержанием водорода $\text{H}_2 < 9.0\%$

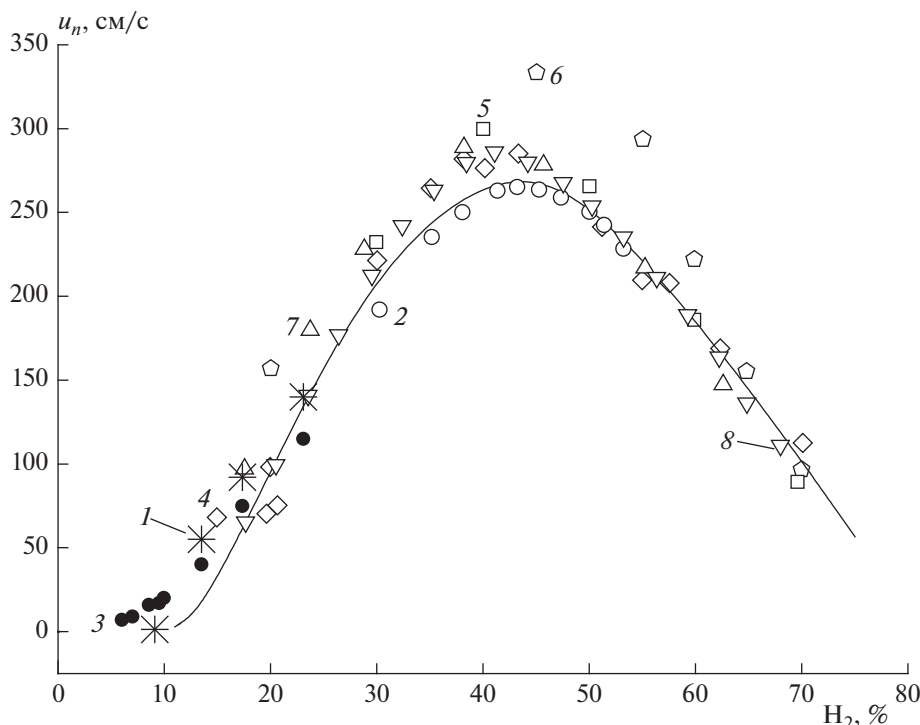


Рис. 2. Сравнение расчетных и измеренных значений скорости распространения ламинарного пламени u_n от состава водородно-воздушной смеси. Начальная температура $T_0 = 293$ К, давление атмосферное. Обозначения: 1 – расчеты данной работы, опытные точки 2 – [3], 3 – [18], 4 – [19], 5 – [20], 6 – [21], 7 – [22], 8 – [23], кривая – расчеты [24].

получить стационарное решение для плоского ламинарного пламени не удалось.

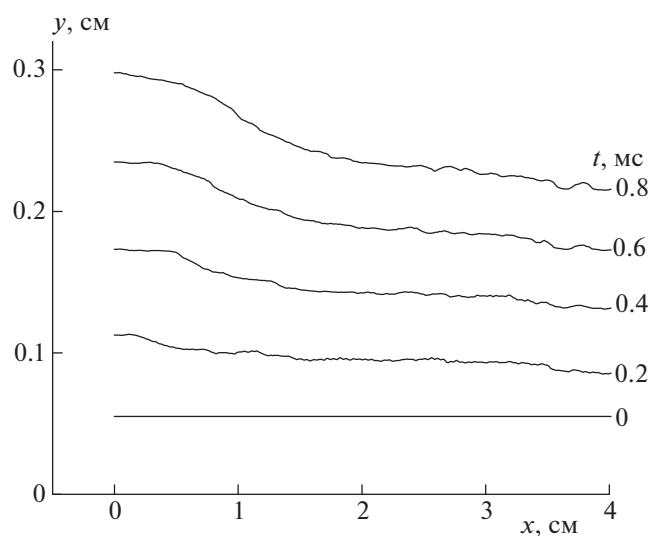


Рис. 3. Расчетные положения фронта турбулентного пламени в разные моменты времени ($t = 0–0.8$ мс). Водородно-воздушная смесь, коэффициент избытка горючего $\Phi = 0.5$ (объемное содержание $H_2 = 17.36\%$), начальная температура $T_0 = 293$ К, давление атмосферное, характеристики турбулентности: $\bar{u} = 130$ см/с, $L' = 1$ см, $L'' = 0.7$ см, $\tau = 0.010$ с.

На рис. 3 показаны примеры мгновенной формы фронта турбулентного пламени в различные моменты времени после начала расчета. Максимальное физическое время расчета турбулентного пламени достигало 10^{-3} с, т.е. было меньше характерного временного масштаба τ . Кривые на рис. 3 представляют собой индивидуальные реализации положения фронта турбулентного пламени. На фронте пламени наблюдаются и мелкие, и крупные пространственные неоднородности. Как будет показано ниже, здесь присутствуют линейные размеры, которые и меньше, и больше толщины фронта пламени. Мелкомасштабная турбулентность изменяет (увеличивает) скорость обменных процессов (обмен массой и энергией) внутри фронта пламени, а крупномасштабная турбулентность изменяет форму пламени и увеличивает площадь его поверхности.

Несмотря на относительно короткое физическое время расчета ($t < \tau$), полученное значение скорости распространения усредненного турбулентного пламени почти постоянно во времени (рис. 4). По положениям фронта пламени, усредненным по нескольким реализациям (обычно 5–7 реализаций), можно определить видимую скорость его распространения U при данной пульсационной скорости. Если учесть тепловое расширение продуктов реакции, можно определить скорость распространения турбулентного пламени:

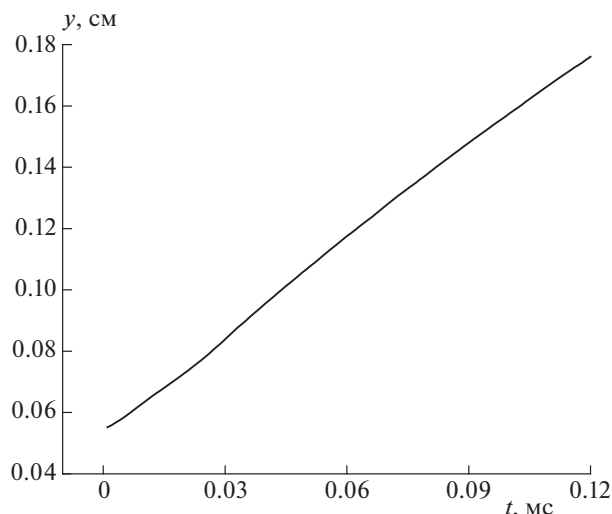


Рис. 4. Расчетная зависимость расстояния, пройденного усредненным фронтом турбулентного пламени, от времени. Водородно-воздушная смесь, коэффициент избытка горючего $\Phi = 0.5$, начальная температура $T_0 = 293$ К, давление атмосферное, характеристики турбулентности: $\bar{u} = 660$ см/с, $L = 1$ см, $L' = 0.7$ см, $\tau = 0.010$ с.

$$u_t = U \frac{T_0 m_0}{T_1 m_1},$$

где m_0 и m_1 – число молей в свежей смеси и в продуктах реакции соответственно.

На рис. 5 сравниваются расчетные и измеренные зависимости скорости распространения турбулентного пламени u_t в смесях разного состава от среднеквадратичной пульсационной скорости \bar{u} . Отметим одно важное обстоятельство. На рис. 5, как и у авторов экспериментальной работы [18], по оси абсцисс отложена величина $\bar{u} = \sqrt{3}u'$ – среднеквадратичное значение пульсационной скорости, где u' – проекция \bar{u} на ось y . Согласно (4), для корректного сравнения двумерных расчетов с реальным “трехмерным” экспериментом вдоль оси абсцисс должна быть отложена величина $\bar{u} = \sqrt{2}u'$, т.е. для расчетных значений пульсационной скорости линейный масштаб должен быть уменьшен в отношении $\sqrt{2} : \sqrt{3} \approx 0.815$. Именно это условие позволяет сравнивать результаты дву-

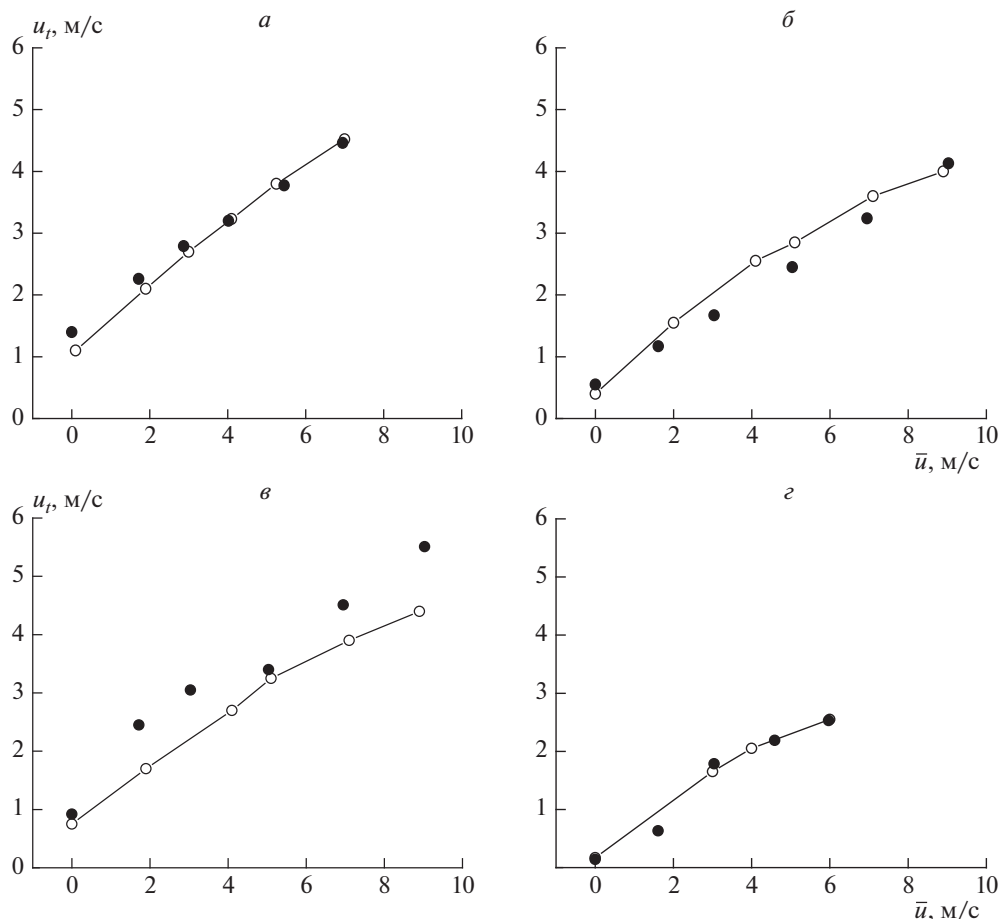


Рис. 5. Зависимости скорости распространения турбулентного пламени u_t от среднеквадратичной пульсационной скорости \bar{u} . Черные кружки – расчет, светлые кружки с линиями – эксперимент [18], водородно-воздушные смеси с содержанием $H_2 = 23.09\%$ (а), 13.51% (б), 17.36% (в) и 9.09% (г), начальная температура $T_0 = 293$ К, давление атмосферное, характеристики турбулентности: $L = 1$ см, $L' = 0.7$ см, $\tau = 0.010$ с.

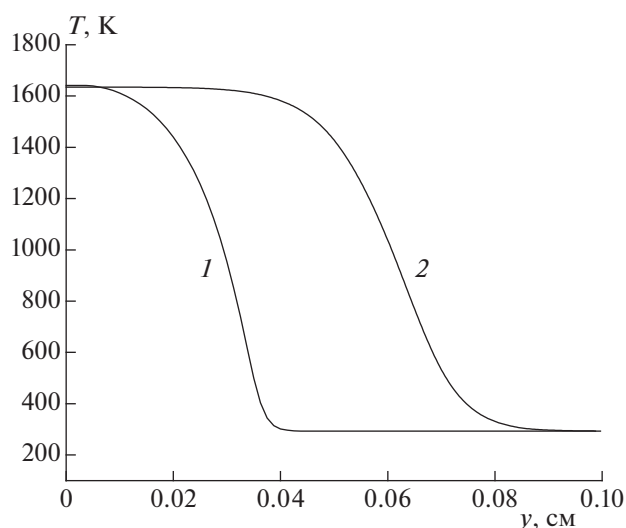


Рис. 6. Расчетные профили температуры в ламинарном (1) и турбулентном (2) пламенах. Водородно-воздушная смесь, коэффициент избытка горючего $\Phi = 0.5$, начальная температура $T_0 = 293$ К, давление атмосферное. Для турбулентного пламени характеристики турбулентности: $\bar{u} = 1100$ см/с, $L' = 1$ см, $L'' = 0.7$ см, $\tau = 0.010$ с.

мерных расчетов с “трехмерным” экспериментом. Из приведенного сравнения расчетных и измеренных результатов следует вывод об их удовлетворительном согласии.

На рис. 6 сравниваются расчетные профили температуры в ламинарном и турбулентном пламенах (мгновенная реализация). По этим профилям можно оценить толщину пламени и сравнить ее с пространственными масштабами пульсаций скорости. Профиль температуры в турбулентном пламени более пологий, чем в ламинарном пламени, а само турбулентное пламя шире, чем ламинарное, вследствие влияния мелкомасштабных обменных процессов.

На рис. 7 представлен пример расчетных профилей температуры и концентраций промежуточных и конечных продуктов реакции в турбулентном пламени (мгновенная реализация). Несмотря на схожесть структуры зон реакции турбулентного и ламинарного пламен, здесь все же есть некоторые количественные различия. Так, концентрации самых активных промежуточных продуктов реакции – гидроксила ОН, атомов Н и О в турбулентном пламени оказываются ниже, чем в ламинарном. Это отчетливо видно из рис. 8, на котором представлены примеры расчетных зависимостей максимальных по зоне реакции концентраций гидроксила от среднеквадратичной пульсационной скорости \bar{u} . Понижение концентрации активных центров есть следствие увеличения интенсивности турбулентности, т.е. ускорения обменных процессов. По косвенным данным такой вывод был сделан и в экспериментах [25].

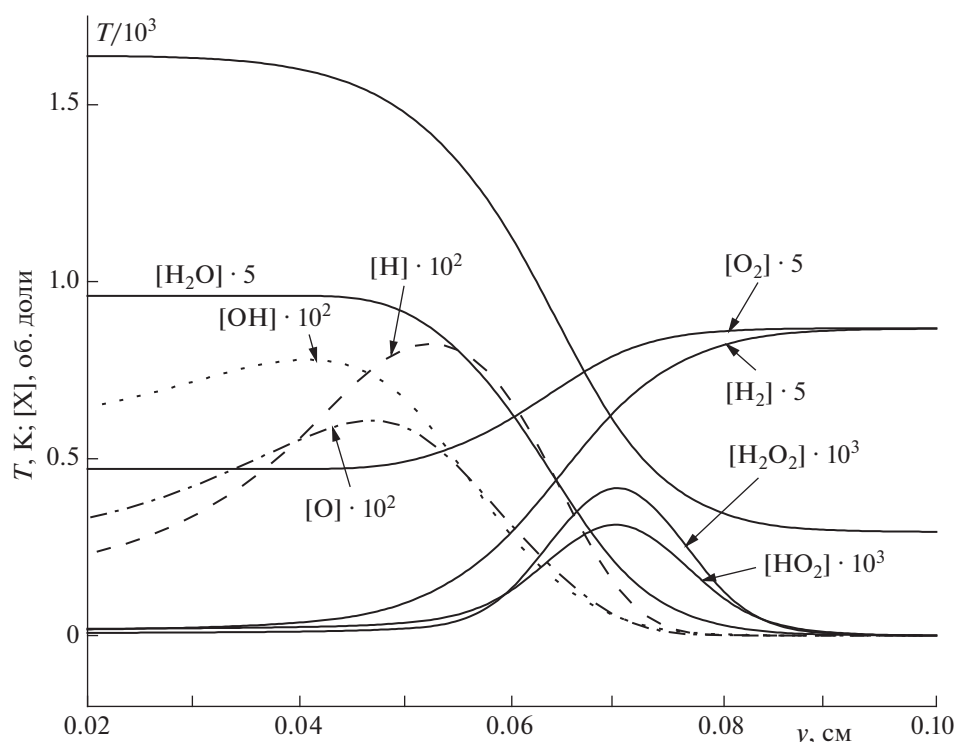


Рис. 7. Расчетные профили температуры и концентраций некоторых веществ в турбулентном пламени. Водородно-воздушная смесь, коэффициент избытка горючего $\Phi = 0.5$, начальная температура $T_0 = 293$ К, давление атмосферное, характеристики турбулентности: $\bar{u} = 1100$ см/с, $L' = 1$ см, $L'' = 0.7$ см, $\tau = 0.010$ с.

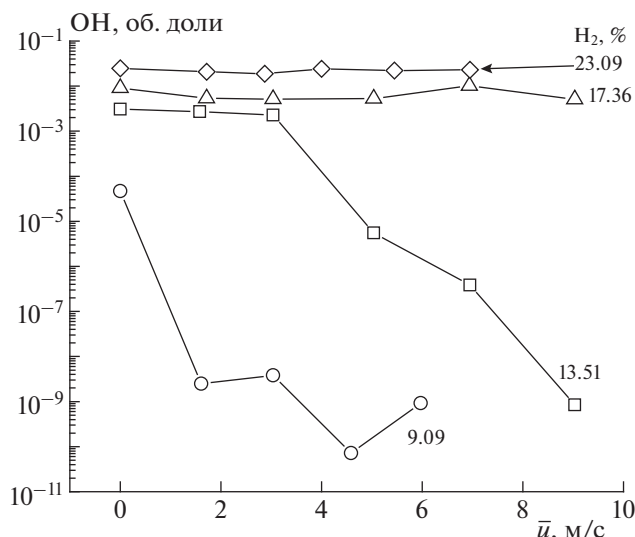


Рис. 8. Расчетные зависимости концентрации гидроксила от среднеквадратичной пульсационной скорости \bar{u}_r . Водородно-воздушные смеси разного состава, начальная температура $T_0 = 293$ К, давление атмосферное, характеристики турбулентности: $L' = 1$ см, $L'' = 0.7$ см, $\tau = 0.010$ с.

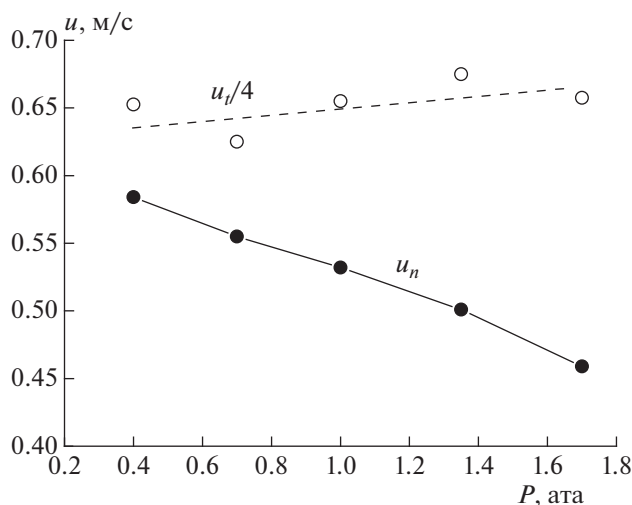


Рис. 9. Расчетные зависимости скоростей распространения ламинарного, u_n , и турбулентного, u_t , пламен от давления. Водородно-воздушная смесь, $\Phi = 0.5$, $T_0 = 293$ К, характеристики турбулентности (для u_t): $\bar{u} = 510$ см/с, $L' = 1$ см, $L'' = 0.7$ см, $\tau = 0.010$ с.

Хорошо известно, что с повышением давления скорость распространения ламинарного пламени уменьшается, а скорость распространения турбулентного пламени либо остается постоянной, либо несколько увеличивается [5]. Последнее обнаруживается и в наших расчетах распространения турбулентного пламени при разных давлениях. На рис. 9 сравниваются расчетные зависимости для скоростей распространения ламинарного и турбулентного пламен.

В заключение отметим один результат, который важен для понимания структуры зоны горения в турбулентном пламени: во всех проведенных расчетах поверхность фронта пламени была односвязной. Даже при максимальных интенсивностях турбулентности расчеты не показали наличия “островков” свежей горючей смеси, окруженных продуктами горения, как это было описано в [10]. По-видимому, здесь сказываются различия в методиках описания синтетического поля турбулентности или недостаточно длительное моделирование процесса распространения турбулентного пламени. Этот вопрос будет исследоваться дополнительно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена методика двумерного ПЧМ распространения турбулентного пламени в газовых реагирующих смесях в условиях стационарной, однородной и изотропной синтетической турбулентности. Методика основана на ДКМ горения многокомпонентной смеси и не содержит каких-либо подгоночных параметров. Она применена к расчету турбулентного горения водородно-воздушных смесей разного состава при разных начальных давлениях. Предложено условие, позволяющее сравнивать результаты двумерных расчетов с реальным экспериментом.

Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показало, что между ними есть удовлетворительное качественное согласие: и в расчете, и в эксперименте скорость турбулентного горения возрастает с увеличением интенсивности турбулентности. Правильно отражается и зависимость скорости распространения турбулентного пламени от давления. Кроме того, расчеты показывают, что концентрации активных центров реакции – гидроксила OH, атомов H и O в турбулентном пламени меньше, чем в ламинарном, что также согласуется с экспериментом. Полученное качественное согласие подтверждает применимость предложенного условия для сравнения двумерных расчетов с реальным экспериментом. Дальнейшая работа будет направлена на расширение предложенной методики на трехмерный случай и учет вихревой структуры турбулентности.

Работа выполнена при частичной поддержке Российским фондом фундаментальных исследований (проект офи-м № 16-29-01065), а также за счет субсидии, выделенной ИХФ РАН на выполнение государственного задания ФАНО России (темы 0082-2016-0011, AAA-A17-117040610346-5 и 0082-2014-0004, AAA-A17-117040610283-3).

Приложение

Моделирование поля синтетической турбулентности

Геометрические характеристики поля: x – ширина (масштаб пульсаций L'), y – направление движения пламени (масштаб пульсаций L), Δx_k и Δt – пространственные и временные шаги интегрирования, $k = 1, 2$ ($x_1 = x$, $x_2 = y$).

1. Вычисление $u_x(x = 0, \dots, N, y = 0, t = 0)$:

– в точке ($x = 0, y = 0, t = 0$) в соответствии с заданным значением \bar{u} генератор случайных чисел выдает $u_x(0, 0, 0)$; здесь и далее перед каждым вызовом генератора случайных чисел необходимо проверить среднее значение (СЗ): если $|\text{СЗ}| > u$, заданной в начальных условиях, то следует положить $|\text{СЗ}| = u$;

– в точке ($x = \Delta x_1, 0, 0$) вычисляются значение R'' , среднее значение пульсационной скорости $u_x(0, 0, 0)R''$, дисперсия $\bar{u}^2(1 - R''^2)$ и разыгрывается значение пульсационной скорости $u_x(\Delta x_1, 0, 0)$;

– аналогично через интервалы Δx_i до конца расчетного отрезка x определяются $u_x(1, 0, 0), u_x(2, 0, 0), \dots, u_x(N, 0, 0)$.

2. Вычисление $u_y(x = 0, \dots, N, y = 0, t = 0)$:

– в точке ($x = 0, y = 0, t = 0$) в соответствии с заданным \bar{u} генератор случайных чисел выдает $u_y(0, 0, 0)$;

– в точке ($x = \Delta x_1, 0, 0$) вычисляются значение R'' , среднее значение пульсационной скорости $u_y(0, 0, 0)R''$, дисперсия $\bar{u}^2(1 - R''^2)$ и разыгрывается значение пульсационной скорости $u_y(\Delta x_1, 0, 0)$;

– аналогично через интервалы Δx_i до конца расчетного отрезка x определяются $u_y(1, 0, 0), u_y(2, 0, 0), \dots, u_y(N, 0, 0)$.

3. Вычисление $u_y(x = 0, \dots, N, y = 1, t = 0)$:

– по полученным в п.1 значениям u_x в точках 1, 2, ..., N вычисляются производные $\partial u_x / \partial x$ по всей оси $x(0 - N, 0, 0)$;

– по уравнению неразрывности определяются значения производных $\partial u_y / \partial y$ по всей оси $x(0 - N, 0, 0)$;

– в точке ($x = 0, 1, 0$) вычисляется

$$\langle u_y(0, 1, 0) \rangle = u_y(0, 0, 0) + \{[\partial u_y / \partial y](0, 0, 0)\} \Delta y_1;$$

– в точке ($x = 0, y = 1, t = 0$) вычисляются значение R' , среднее значение пульсационной скорости $[\langle u_y(0, 1, 0) \rangle]R'$, дисперсия $\bar{u}^2(1 - R'^2)$ и разыгрывается вероятное значение пульсационной скорости $u_y(0, 1, 0)$;

– аналогично через интервалы Δx_i до конца расчетного отрезка x определяются $u_y(1, 1, 0), u_y(2, 1, 0), \dots, u_y(N, 1, 0)$;

– для всех $u_y(N, 1, 0)$ вычисляется получившееся среднеквадратичное значение $\langle u_y(0, \dots, N, 1, 0) \rangle$, определяется корректирующий коэффициент

$$a_u = \langle u_y(N, 1, 0) \rangle / \bar{u},$$

находятся скорректированные значения $u_y(0, \dots, N, 1, 0) = u_y(0, \dots, N, 1, 0) / a_u$.

4. Вычисление $u_x(x = 0, \dots, N, y = 1, t = 0)$:

– по полученным в пп. 1, 3 значениям u_y в точках 1, 2, ..., N вычисляются производные $\partial u_y / \partial y$ по всей оси $x(0, \dots, N, 0, 0)$;

– по уравнению неразрывности определяются значения производных $\partial u_x / \partial x$ по всей оси $x(0, \dots, N, 1, 0)$;

– в точке ($x = 0, y = 1, t = 0$) в соответствии с заданным \bar{u} генератор случайных чисел выдает $u_x(0, 1, 0)$;

– в точке ($x = 1, 1, 0$) вычисляется

$$\langle u_x(1, 1, 0) \rangle = u_x(0, 1, 0) + \{[\partial u_x / \partial x](1, 1, 0)\} \Delta x_1;$$

– в точке ($x = 1, y = 1, t = 0$) вычисляется значение R'' , среднее значение пульсационной скорости $[\langle u_x(1, 1, 0) \rangle]R''$, дисперсия $\bar{u}^2(1 - R''^2)$ и разыгрывается вероятное значение пульсационной скорости $u_x(1, 1, 0)$;

– аналогично через интервалы Δx_i до конца расчетного отрезка x определяются $u_x(1, 1, 0), u_x(2, 1, 0), \dots, u_x(N, 1, 0)$;

– для всех $u_x(N, 1, 0)$ вычисляется получившееся среднеквадратичное значение $\langle u_x(0, \dots, N, 1, 0) \rangle$, определяется корректирующий коэффициент

$$a_{ux} = \langle u_x(N, 1, 0) \rangle / \bar{u},$$

находятся скорректированные значения $u_x(0, \dots, N, 1, 0) = u_x(0, \dots, N, 1, 0) / a_{ux}$.

5. Вычисление $u_x(x = 0, \dots, N, y = 1, \dots, N, t = 0)$:

– как в пп.1–4.

6. Вычисление $u_x(x = 0, \dots, N, y = 1, \dots, N, t = 0, \dots, t_{end})$ и $u_y(x = 0, \dots, N, y = 1, \dots, N, t = 0, \dots, t_{end})$:

– как изменяются значения u_x и u_y при переходе от оси $x(0, \dots, N, 0, 0)$ к оси $x(0, \dots, N, 1, 0)$, так они изменяются и при переходе от оси $x(0, \dots, N, 0, 0)$ к оси $x(0, \dots, N, 0, 1)$, но с использованием коэффициента корреляции τ . Эта методика сохраняется на протяжении всего расчета: от $t = 0$ до t_{end} .

Проверка алгоритма. Получаемые поля пульсационных скоростей следует проверить на соблюдение задаваемых характеристик турбулентности \bar{u} , соответствие распределения пульсационных скоростей нормальному закону Гаусса, соблюдение масштабов L, L' и τ .

Примечание. Из предположения, что для турбулентных пульсаций выполняются условия (10),

следует связь “холодных” (индекс “0”) и “горячих” ($T > T_0$) пульсаций скорости:

$$\rho u_k = \rho_0 u_{k,0},$$

где $u_{k,0}$ — проекции мгновенной пульсационной скорости на ось x_k при начальной плотности. Этим уравнением определяется изменение интенсивности турбулентности в процессе горения, а разыгрывание пульсаций скорости требуется только при начальной температуре.

Согласно алгоритму моделирования синтетического поля турбулентности значение среднеквадратичной пульсационной скорости \bar{u} постоянно во времени, а для всего расчетного пространства постоянны характеристики турбулентности L , L' и τ .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Damkoler G.* // Z. Elektrochem. 1940. В. 46. S. 601.
2. *Щелкин К.И.* // ЖТФ. 1943. Т. 13. С. 520.
3. *Lewis B., Elbe G.* Combustion, Flames and Explosions of Gases. Orlando: Acad. Press. 1987.
4. *Соколик А.С.* Самовоспламенение, пламя и детонация в газах. М.: Изд-во АН СССР, 1960.
5. *Щетинков Е.С.* Физика горения газов. М.: Наука, 1965.
6. *Bernard J.A., Bradley J.N.* Flame and Combustion. L.—N.Y.: Chapman. Hall, 1985.
7. *Echekki T., Chen J.H.* // Combust and Flame. 2003. V. 134. P. 169.
8. *Bell J.B., Day M.S., Grcar J.F.* // Proc. Combust. Inst. 2002. V. 29. P. 1987.
9. *Bell J.B., Cheng R.K., Day M.S., Shepherd I.G.* // Ibid. 2006. V. 31. P. 1309.
10. *Aspden A.J., Day M.S., Bell J.B.* // Combust and Flame. 2016. V. 166. P. 266.
11. *Басевич В.Я., Володин В.П., Козарко С.М., Перегудов Н.И.* // Хим. физика. 1982. Т. 1. № 8. С. 1130.
12. *Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М., Басара Б.* // Горение и взрыв. 2017. Т. 10. № 1. С. 4.
13. *Вильямс Ф.А.* Теория горения. М.: Наука, 1971.
14. *Годунов С.К., Рябенский В.С.* Разностные схемы. М.: Наука, 1977.
15. *Басевич В.Я., Беляев А.А., Посвянский В.С., Фролов С.М.* // Хим. физика. 2013. Т. 32. № 4. С. 87.
16. Thermodynamic Data at the Web Site of the Laboratory for Chemical Kinetics. *Alexander Burcat's*. Ideal Gas Thermodynamic Data in Polynomial Form for Combustion and Air Pollution Use; <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html>.
17. *Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т.* Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1982.
18. *Карпов В.П., Северин Е.С.* // Физика горения и взрыва. 1980. Т. 16. № 1. С. 45.
19. *Козаченко Л.С.* Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. М.: ИХФ АН СССР, 1954.
20. *Manton J., Milliken B.B.* // Proc. Gas Dynamics Symp. (Aerothermochem.) Northwestern Univ., 1956. P. 151.
21. *Andrews G.E., Bradley D.* // Combust and Flame. 1973. V. 20. P. 77.
22. *Iijima T., Takeno T.* // Ibid. 1986. V. 65. P. 35.
23. *Dowdy D.R., Smith D.B., Taylor S.C., Williams A.* // Proc. Combust. Inst. 1990. V. 23. P. 325.
24. *Беляев А.А., Посвянский В.С.* // Алгоритмы и программы. Информ. бюлл. гос. фонда алгоритмов и программ СССР. 1985. № 3. С. 35.
25. *Басевич В.Я., Козарко С.М.* // Физика горения и взрыва. 1985. Т. 21. № 5. С. 12.