

# ТРЕХМЕРНОЕ ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ГОРЕНИЯ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНЫХ И МЕТАНОВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ В ПОЛЕ СИНТЕТИЧЕСКОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ\*

В. Я. Басевич<sup>1</sup>, А. А. Беляев<sup>2</sup>, С. Н. Медведев<sup>3</sup>, С. М. Фролов<sup>4</sup>, Ф. С. Фролов<sup>5</sup>, Б. Басара<sup>6</sup>

**Аннотация:** Предложена методика трехмерного прямого численного моделирования (ПЧМ) распространения турбулентного пламени в газовых реагирующих смесях в условиях стационарной, однородной и изотропной синтетической турбулентности. Методика основана на детальном кинетическом механизме (ДКМ) горения многокомпонентной смеси. Методика применена к расчету турбулентного горения водородно-воздушных и метановоздушных смесей, в основном обедненных горючим. Рассчитанные скорости распространения турбулентного пламени удовлетворительно согласуются с измеренными значениями. Расчетные 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; синтетическая турбулентность; турбулентное горение; детальный кинетический механизм; водород; метан

**DOI:** 10.30826/CE19120206

## Введение

Наиболее перспективный универсальный подход к неэмпирическому теоретическому описанию турбулентного горения — 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 [1–4]. Численное интегрирование определяющих уравнений течения проводят на расчетных сетках, обеспечивающих пространственное разрешение турбулентных вихрей Колмогоровского масштаба, используя схемы высокого порядка аппроксимации.

В [5] на примере двумерной задачи о распространении турбулентного пламени в водородно-воздушной смеси предложен альтернативный подход к ПЧМ: вместо численного решения всех уравнений, определяющих распространение турбулентного пламени в реагирующем газе, решаются только уравнения переноса концентраций реагентов и энергии в «синтетическом» поле однородной, изотропной и стационарной турбулентности. Синтетическая турбулентность с заданными пространственными и временными корреляционными функциями генерируется с помощью генераторов случайных чисел. Считается, что распространение пламени не влияет на характеристики синтетического поля турбулентности в предпламенной зоне.

Подход [5] развит в работах [6, 7]. Если в [5] химический процесс горения водорода моделируется обобщенной одностадийной реакцией, то в [6, 7] он представлен многостадийным ДКМ окисления

\*Работа выполнена за счет субсидий, выделенных Федеральному исследовательскому центру химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук на выполнение государственного задания ФАНО России (темы 0082-2016-0011 с номером государственной регистрации ААА-А17-117040610346-5 и 0082-2014-0004 номер государственной регистрации ААА-А17-117040610283-3) и ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН на выполнение государственного задания ФАНО России (тема 0065-2019-0005 с номером государственной регистрации АААА-А19-119011590092-6), а также частично при поддержке РФФИ (проект 16-29-01065офи-м).

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, basevich@chph.ras.ru

<sup>2</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, belyaevIHF@yandex.ru

<sup>3</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, medvedevs@chph.ras.ru

<sup>4</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», smfrol@chph.ras.ru

<sup>5</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

<sup>6</sup>АВЛ Лист ГмБХ, Грац, Австрия, branislav.basara@avl.com

водорода с участием активных центров. В [6] рассмотрена горючая смесь конкретного состава, а в [7] методика [6] усовершенствована и применена для расчета распространения «двумерного» турбулентного пламени в водородно-воздушных гомогенных смесях разного состава и при разных давлениях. Как в [6], так и в [7] получено удовлетворительное согласие результатов расчетов с экспериментальными данными [8]. Однако для сравнения результатов двумерных расчетов с «трехмерным» экспериментом в [6, 7] пришлось масштабировать расчетное значение среднеквадратичной пульсационной скорости.

Цель данной работы — переход от моделирования турбулентного горения в двумерном приближении к физически адекватной трехмерной задаче, что позволит проводить прямое сравнение расчетов и экспериментов без какого-либо масштабирования пульсационной скорости.

## Математическая постановка задачи

Математическая постановка задачи в общем виде сформулирована в [7], но здесь целесообразно ее частично повторить. 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 [9]:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) &= 0; \\ \rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} &= -\nabla \cdot \mathbf{p} + \rho \sum_{i=1}^N Y_i \mathbf{f}_i; \\ \rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla e &= \\ &= -\nabla \cdot \mathbf{q} - \mathbf{P} : (\nabla \cdot \mathbf{v}) + \rho \sum_{i=1}^N Y_i \mathbf{f}_i \cdot \mathbf{V}_i; \\ \rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla Y_i &= \omega_i - \nabla \cdot (\rho Y_i \mathbf{V}_i), \\ & \quad i = 1, \dots, N; \\ p &= \rho R^0 T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{\mu_i}; \\ e &= \sum_{i=1}^N h_i Y_i - \frac{p}{\rho}; \\ h_i &= h_i^0 + \int_{T_0}^T c_{p,i} dT, \quad i = 1, \dots, N, \end{aligned} \right\} (1)$$

где  $t$  — время;  $\rho$  — 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  $\omega_i$  — 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;  $\mu_i$  — молекулярный вес  $i$ -го вещества;  $T$  — температура;  $c_{p,i}$  — теплоемкость  $i$ -го вещества при постоянном давлении;  $\nabla$  — 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  $\omega_i$ , а также начальными и граничными условиями. В результате решения задачи должна быть получена скорость стационарного распространения  $u_t$  (скорость турбулентного горения) и структура турбулентного пламени в многокомпонентном реагирующем газе. Чтобы упростить решение задачи, введем следующие основные допущения:

- (i) область течения имеет простейшую геометрию; турбулентность стационарная, однородная и изотропная;
- (ii) 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;
- (iii) тепловой поток  $\mathbf{q}$  определяется только молекулярной теплопроводностью (лучистым теплообменом можно пренебречь);
- (iv) эффекты термодиффузии малы;
- (v) реагирующая смесь сильно разбавлена инертным газом (азотом), так что диффузионные потоки всех химических компонентов определяются законом Фика с коэффициентом бинарной диффузии.

С учетом указанных допущений и с использованием соображений, описанных в [5–7], система дифференциальных уравнений (1) сводится к виду:

$$\left. \begin{aligned} \rho \frac{\partial e}{\partial t} &= \nabla \cdot (\lambda \nabla T) - \rho_0 c_v \mathbf{v}'_0 \cdot \nabla T; \\ \rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} &= \omega_i + \nabla \cdot (D_i \rho \nabla Y_i) - \rho_0 \mathbf{v}'_0 \cdot \nabla Y_i, \\ & \quad i = 1, \dots, N, \end{aligned} \right\} (2)$$

где  $\lambda$  — коэффициент молекулярной теплопроводности газа;  $c_v$  — теплоемкость вещества при постоянном объеме;  $\mathbf{v}'_0 = (u'_0, v'_0, w'_0)$  — вектор пульсаций

скорости в свежей смеси;  $D_i$  — коэффициент бинарной диффузии  $i$ -го вещества в азоте.

Таким образом, как и в [5–7], вместо численного решения системы (1) предлагается решать систему (2), состоящую только из уравнений переноса скалярных величин — концентраций всех  $N$  реагентов и энергии — на заданном синтетическом поле турбулентности, характеризуемом среднеквадратичной интенсивностью пульсаций скорости  $v'$  и с заданными интегральными пространственными и временными масштабами. При трехмерном моделировании в системе координат  $(x, y, z)$  уравнения (2) в развернутом виде и с учетом калорического уравнения состояния примут вид:

$$\left. \begin{aligned} \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} &= \sum_{i=1}^N h_i \omega_i + \\ &+ \left( \frac{\partial}{\partial x} \lambda \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \\ &- \rho_0 c_p \left( u'_0 \frac{\partial T}{\partial x} + v'_0 \frac{\partial T}{\partial y} + w'_0 \frac{\partial T}{\partial z} \right); \\ \rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} &= \omega_i + \\ &+ \left( \frac{\partial}{\partial x} D_i \rho \frac{\partial Y_i}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} D_i \rho \frac{\partial Y_i}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} D_i \rho \frac{\partial Y_i}{\partial z} \right) - \\ &- \rho_0 \left( u'_0 \frac{\partial Y_i}{\partial x} + v'_0 \frac{\partial Y_i}{\partial y} + w'_0 \frac{\partial Y_i}{\partial z} \right), \\ & \quad i = 1, \dots, N; \\ p_0 &= \rho R^0 T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{\mu_i}. \end{aligned} \right\} (3)$$

Система (3) состоит из  $N + 2$  уравнений для  $N + 2$  переменных ( $N$  веществ с массовой долей  $Y_i$ , температурой  $T$  и плотностью  $\rho$ ). Для замыкания системы используем следующие соотношения для  $c_p$ ,  $\lambda$  и  $D_i$ :

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

где  $a_1, a_2, a_3, a_4$  и  $a_5$  — коэффициенты полиномов, а индекс in относится к инертному разбавителю (азоту).

Для скорости химических реакций используется соотношение [9]:

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

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

Уравнения (3) содержат параметры стационарной, однородной и изотропной турбулентности реагирующего газа (три компоненты вектора пульсационной скорости  $u'_0, v'_0, w'_0$ ). В соответствии с методикой [5–7] генерируется синтетическая турбулентность: компоненты вектора пульсационной скорости получаются статистическим разыгрыванием методом Монте Карло на основе предположения, что мгновенные местные компоненты вектора пульсационной скорости удовлетворяют нормальному распределению Гаусса  $\varphi$ , а вихревая структура турбулентности описывается экспоненциально затухающими пространственной ( $R'$ ) и временной ( $R$ ) корреляционными функциями (в полученных разыгрывании скоростях для краткости опускаем нули и для оси  $x$  мгновенную пульсационную скорость обозначаем как  $u'$ , а среднеквадратичную компоненту по оси  $x$  как  $u$ ):

$$\varphi(u') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left[ -\frac{(u' - u)^2}{2\sigma^2} \right]. \quad (4)$$

Выражение (4) относится соответственно к осям  $y$  ( $v'$  и  $v$ ) и  $z$  ( $w'$  и  $w$ ):

$$R' = \exp \left( -\frac{r_k}{L'} \right); \quad R = \exp \left( -\frac{t}{\tau} \right).$$

Здесь  $\sigma$  — среднеквадратичное отклонение пульсаций скорости;  $r_k$  — расстояние в физическом пространстве;  $L'$  — масштаб турбулентности в направлениях  $x, y$  и  $z$  соответственно;  $\tau$  — временной масштаб Лагранжа. В соответствии с допущением (i) о стационарности и однородности поля турбулентности, масштабы  $\tau$  и  $L'$  приняты постоянными по времени и пространству. Среднеквадратичная длина пространственного вектора пульсационной скорости  $\bar{u}$  определяется по значениям среднеквадратичных значений его компонент  $u', v'$  и  $w'$ , соответственно по осям  $x, y$  и  $z$ , с помощью соотношения

$$\bar{u} = \sqrt{u'^2 + v'^2 + w'^2}.$$

Увеличение интенсивности турбулентности  $\bar{u}$  может приводить к уменьшению интегральных масштабов  $\tau$  и  $L$  (см., например, [10]), и это следует учитывать при разыгрывании синтетической турбулентности. К сожалению, какие-либо обобщенные зависимости типа

$$L = f(\bar{u}) \quad (5)$$

в литературе отсутствуют. Однако такие зависимости можно получить на основе сравнения расчетных и измеренных скоростей распространения турбулентного пламени в той или иной газовой смеси и распространить их на другие смеси того же горючего газа и, возможно, на смеси других горючих газов.

Граничные и начальные условия для системы (3) рассмотрены ниже для конкретной расчетной области.

## Методика расчетов

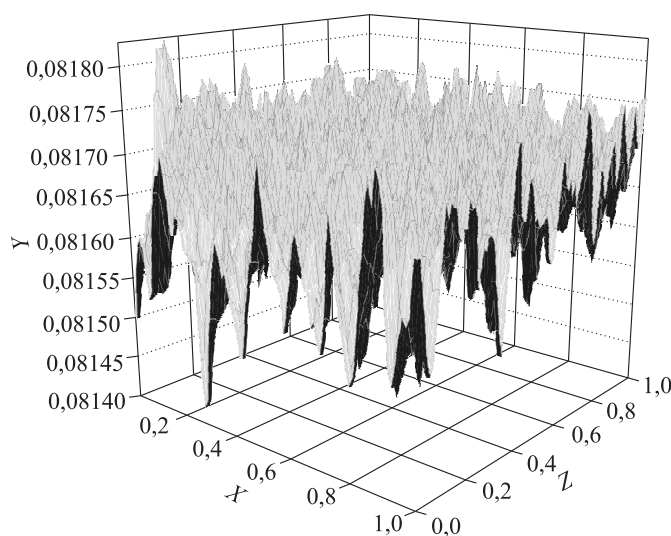
Расчетная область представляет собой параллелепипед, верхняя и нижняя грани которого — плоские квадраты. В начальный момент времени  $t = t_0 = 0$  объем расчетной области содержит два слоя, разделенных плоской поверхностью, параллельной основанию и отстоящей от него на некоторое расстояние. Нижний слой содержит продукты горения, верхний — свежую смесь. Нижняя и верхняя грани удалены от разделительной поверхности на достаточно большое расстояние, чтобы обеспечить постоянство давления в системе за все время

расчета. Боковые грани — непроницаемые стенки со скольжением потока. Пламя распространяется снизу вверх. На рис. 1 для примера показана трехмерная поверхность распространяющегося пламени, искривленная турбулентными пульсациями скорости.

На рис. 2 представлено плоское сечение (в плоскости  $(x, y)$ ) расчетной области в выбранной системе координат  $(x, y, z)$  при некотором значении  $z$ . Начальное положение поверхности пламени в момент времени  $t = t_0 = 0$  показано горизонтальной штриховой линией. При  $t > 0$  положение пламени условно представляется плоскостью, параллельной основанию параллелепипеда, выше которой находится только свежая смесь, а ниже — только продукты реакции. Подчеркнем, что это — условный фронт пламени, поскольку сама зона реакции в пламени имеет конечную толщину. Таким образом, для определения скорости распространения пламени условно принимается, что свежая смесь занимает пространство с температурой  $T < T_m$ , а продукты реакции — пространство с температурой  $T > T_m$ . Значение  $T_m$  равно среднему арифметическому между начальной температурой свежей смеси  $T_0$  и термодинамически равновесной температурой продуктов сгорания  $T_1$ :

$$T_m = \frac{T_0 + T_1}{2}.$$

На рис. 2 мгновенное положение фронта пламени в момент времени  $t = t_i > 0$  — след истинной поверхности пламени на плоскости  $x-y$  — показан тонкой сплошной линией, а положение условно-



**Рис. 1** Поверхность распространяющегося турбулентного пламени. Водородно-воздушная смесь, содержание  $H_2 = 9,09\%$ (об.), начальная температура  $T_0 = 293$  К, давление атмосферное, характеристики турбулентности:  $\bar{u} = 242$  см/с,  $L' = 1$  см,  $\tau = 0,01$  с

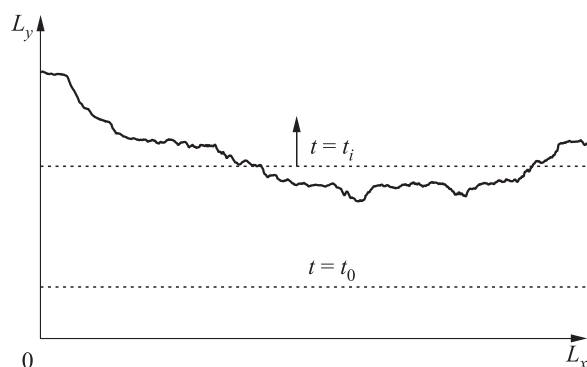


Рис. 2 Плоское сечение расчетной области

го фронта пламени — горизонтальной штриховой линией.

Задачу о распространении турбулентного пламени решали с помощью численного интегрирования системы (3) с дополнительными соотношениями методом переменных направлений [11]. Для решения уравнений по каждому из направлений  $(x, y, z)$  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 пространства  $x-y-z$  имела размер  $1 \times 0,5 \times 1$  см. Все расчетные ячейки имели форму куба размером  $0,01 \times 0,01 \times 0,01$  см или  $0,005 \times 0,005 \times 0,005$  см. Полное количество расчетных ячеек составило 500 000 и 4 000 000 соответственно. Шаг интегрирования по времени изменялся в зависимости от числа итераций, но не превышал 1 мкс.

Поля пульсационных скоростей  $u'(x, y, z, t)$ ,  $v'(x, y, z, t)$  и  $w'(x, y, z, t)$  при заданных характеристиках турбулентности  $\bar{u}$ ,  $L$  и  $\tau$  моделировали, используя процедуру, описанную в [7]. Подчеркнем, что данная процедура не требует задания спектра турбулентности: он неявно фигурирует в корреляционных функциях.

Ниже представлены используемые здесь начальные и граничные условия.

Начальные условия ( $j = 1, \dots, N$ ):

$$t = t_0 = 0; y > y(t = t_0) : Y_j = Y_{j0}, T = T_0;$$

$$y < y(t = t_0) : Y_j = Y_{j1}, T = T_1.$$

Граничные условия ( $j = 1, \dots, N$ ):

$$x = 0 : \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \frac{\partial Y_j}{\partial x} = 0;$$

$$x = L_x : \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \frac{\partial Y_j}{\partial x} = 0;$$

$$y = 0 : \frac{\partial T}{\partial y} = 0, \frac{\partial Y_j}{\partial y} = 0;$$

$$y = L_y : \frac{\partial T}{\partial y} = 0, \frac{\partial Y_j}{\partial y} = 0;$$

$$z = 0 : \frac{\partial T}{\partial z} = 0, \frac{\partial Y_j}{\partial z} = 0;$$

$$z = L_z : \frac{\partial T}{\partial z} = 0, \frac{\partial Y_j}{\partial z} = 0.$$

## Результаты расчетов

### для водородно-воздушных смесей

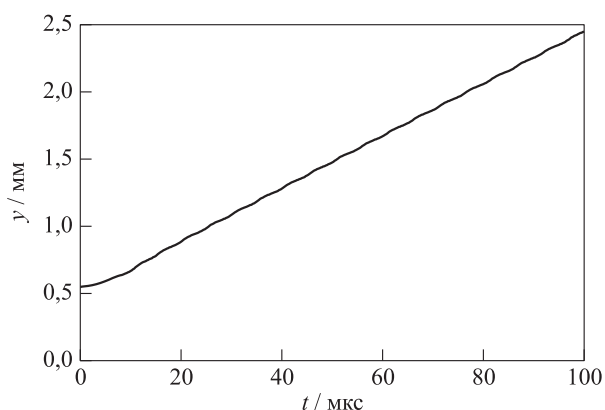
Рассмотрим сначала, как и в [7], турбулентное горение гомогенных водородно-воздушных смесей. Для описания кинетики химических превращений используется блок реакций окисления водорода из ДКМ окисления и горения нормальных углеводородов [12]. Значения коэффициентов полиномов для всех веществ взяты из [13]. Коэффициенты переноса  $\lambda$  и  $D_i$  рассчитываются по методике, описанной в [14].

Ниже для сравнения расчетных и измеренных скоростей турбулентного горения смесей разного состава в зависимости от интенсивности турбулентности используются данные [8]. Максимальное физическое время расчета турбулентного пламени достигало 1 мс, т. е. было меньше характерного временного масштаба  $\tau$ . Поэтому решения представляют собой индивидуальные реализации положения поверхности фронта турбулентного пламени. На поверхности фронта пламени наблюдаются и мелкомасштабные, и крупномасштабные пространственные неоднородности (см. рис. 1). 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 ( $t < \tau$ ), расчетная скорость распространения усредненного турбулентного пламени почти равномерна по времени (рис. 3). По положению фронта пламени можно определить видимую скорость его распространения  $U$  при заданной пульсационной скорости. Если учесть тепловое расширение продуктов реакции, можно определить скорость распространения турбулентного пламени  $u_t$  как

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

где  $m_0$  и  $m_1$  — число молей в свежей смеси и в продуктах реакции соответственно. Провер-

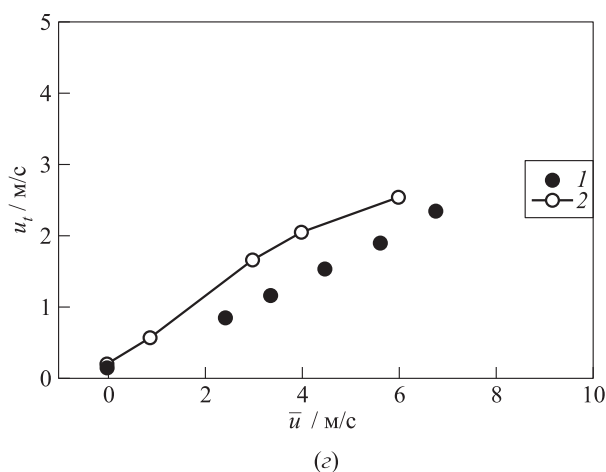
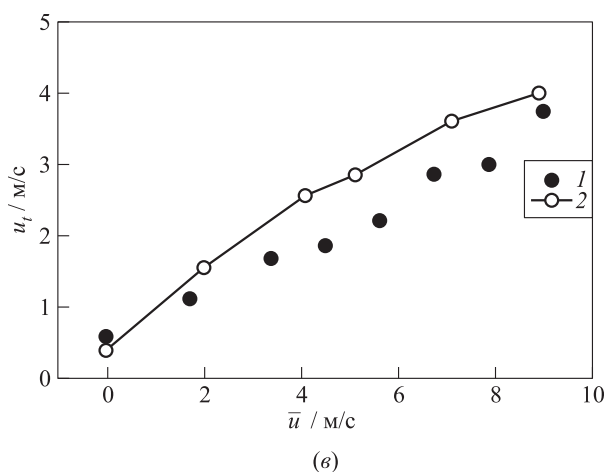
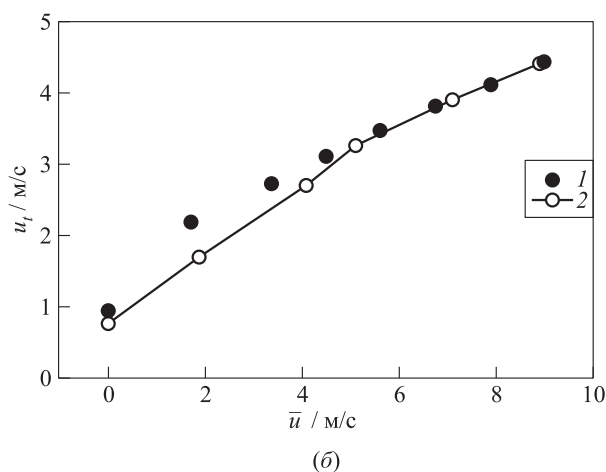
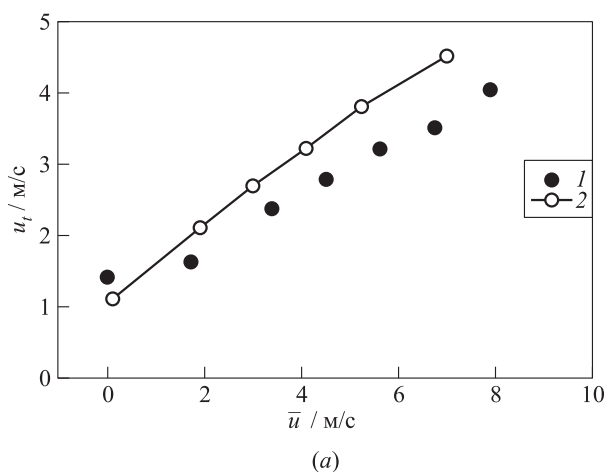


**Рис. 3** Расчетная зависимость расстояния, пройденного усредненным фронтом турбулентного пламени, от времени. Водородно-воздушная смесь,  $H_2 = 17,36\%$ , начальная температура  $T_0 = 293$  К, давление атмосферное, характеристики турбулентности:  $\bar{u} = 675$  см/с,  $L' = 1$  см,  $\tau = 0,010$  с

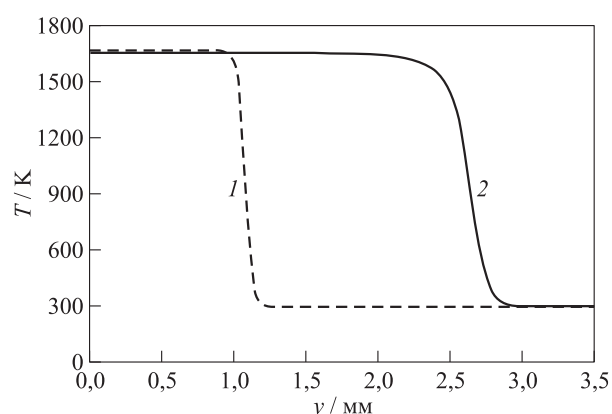
ка показала, что одновременное удвоение числа расчетных точек по трем осям при сохранении размеров расчетной области (вместо 500 000 получается 4 000 000 ячеек) практически не изменяет получаемые значения скорости распространения турбулентного пламени.

Отметим, что в редких случаях в расчетах получались сильно заниженные значения скорости (меньше нормальной скорости ламинарного пламени). Поскольку речь идет о синтетической турбулентности, вероятно, причина этого эффекта — необычные комбинации случайных чисел при нахождении функции  $y(t)$ . При этом сама функция имела, хотя и странную, но легко узнаваемую форму. В данной работе такие решения считались «паразитными» и не принимались во внимание: при повторных расчетах для тех же условий они не воспроизводились.

На рис. 4 проведено прямое сравнение расчетных и измеренных зависимостей скорости рас-



**Рис. 4** Зависимости скорости распространения турбулентного пламени  $u_t$  от среднеквадратичной пульсационной скорости  $\bar{u}$ : 1 — расчет; 2 — эксперимент [8]. Водородно-воздушные смеси с содержанием  $H_2 = 23,09\%$  (а),  $17,36\%$  (б),  $13,51\%$  (в) и  $9,09\%$  (г), начальная температура  $T_0 = 293$  К, давление атмосферное, характеристики турбулентности:  $L' = 1$  см,  $\tau = 0,010$  с



**Рис. 5** Расчетные профили температуры в ламинарном (1) и турбулентном (2) пламенах. Водородно-воздушная смесь с содержанием  $H_2 = 17,36\%$ , начальная температура  $T_0 = 293$  К, давление атмосферное. Для турбулентного пламени характеристики турбулентности:  $\bar{u} = 675$  см/с,  $L' = 1$  см,  $\tau = 0,010$  с

пространения турбулентного пламени  $u_t$  в смесях разного состава от пространственной среднеквадратичной пульсационной скорости  $\bar{u}$  (как в [8]). Отметим, что расчеты проводились как для  $\bar{u} > 0$ , так и для  $\bar{u} = 0$ , т. е. для ламинарного пламени. Из приведенного сравнения следует вывод об удовлетворительном качественном согласии результатов. Отметим, что в данных расчетах при увеличении интенсивности турбулентности какие-либо зависимости типа (5) не использовались, т. е. считалось, что интегральные масштабы  $\tau$  и  $L$  не изменяются.

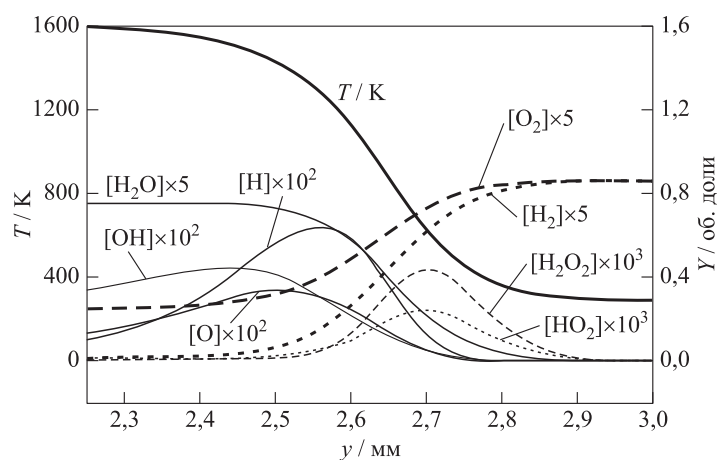
На рис. 5 проведено сравнение расчетных профилей температуры в ламинарном и турбулентном пламенах. По этим профилям можно оценить толщину пламени и сравнить ее с пространственными масштабами пульсаций скорости. Профиль тем-

пературы в турбулентном пламени более пологий, чем в ламинарном пламени, а само турбулентное пламя шире, чем ламинарное, вследствие влияния мелкомасштабных обменных процессов.

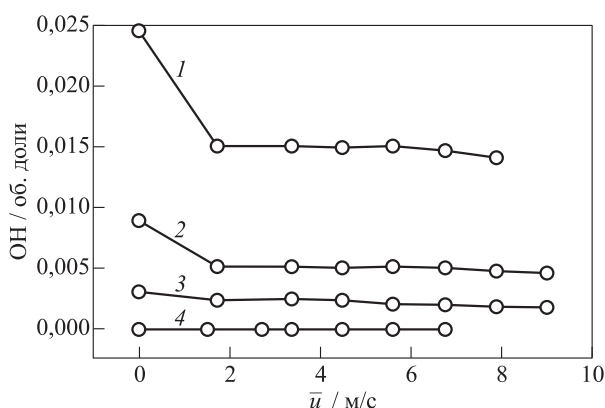
На рис. 6 представлен пример расчетных профилей температуры и концентраций промежуточных и конечных продуктов реакции в турбулентном пламени. Несмотря на схожесть структуры зоны реакции в турбулентном пламени со структурой зоны реакции в ламинарном пламени, здесь все же есть некоторые количественные 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 на рис. 7, на котором представлены примеры расчетных зависимостей максимальных по зоне реакции концентраций гидроксила от среднеквадратичной пульсационной скорости  $\bar{u}$ . Понижение концентрации активных центров является следствием увеличения интенсивности турбулентности, т. е. следствием ускорения обменных процессов. По косвенным данным такой вывод был сделан и в экспериментах [15].

## Результаты расчетов для метановоздушных смесей

Рассмотрим теперь турбулентное горение гомогенных метановоздушных смесей. Для описания кинетики химических превращений используем сокращенный блок реакций окисления метана с 22 компонентами и 150 прямыми и обратными реакциями из ДКМ окисления и горения нормальных углеводородов [12]. Как и ранее, значения коэффи-



**Рис. 6** Расчетные профили температуры и концентраций разных веществ в турбулентном пламени. Водородно-воздушная смесь с содержанием  $H_2 = 17,36\%$ , начальная температура  $T_0 = 293$  К, давление атмосферное, характеристики турбулентности:  $\bar{u} = 675$  см/с,  $L' = 1$  см,  $\tau = 0,010$  с



**Рис. 7** Расчетные зависимости концентрации гидроксила от среднеквадратичной пульсационной скорости  $\bar{u}$ . Водородно-воздушные смеси разного состава (1 —  $H_2 = 23,09\%$ ; 2 —  $H_2 = 17,36\%$ ; 3 —  $H_2 = 13,51\%$ ; 4 —  $H_2 = 9,09\%$ ), начальная температура  $T_0 = 293$  К, давление атмосферное, характеристики турбулентности:  $L' = 1$  см,  $\tau = 0,010$  с

коэффициентов полиномов для всех веществ взяты из [13], а коэффициенты переноса  $\lambda$  и  $D_i$  рассчитаны по методике, описанной в [14].

В отличие от расчетов для водородно-воздушных смесей в расчетах горения метановоздушных смесей дополнительно учтена зависимость (5) масштабного параметра  $L$  от пространственного вектора пульсационной скорости  $\bar{u}$ . В первом приближении функция  $f(\bar{u})$  в (5) представлена в виде кусочно-линейной функции:

$$L = A - k\bar{u} \text{ [см]}, \quad L > 0, \quad (6)$$

причем значения коэффициентов  $A$  и  $k$  для 1 атм и  $T_0 = 293$  К представлены в таблице. Зависимость (6) получена из условия наилучшего соответствия расчетных и измеренных значений скорости распространения турбулентного пламени в метановоздушных смесях разных составов. Некоторым приближением полученной зависимости можно рассматривать аппроксимацию:

$$L = 0,05 + 0,95 \exp(-0,008\bar{u}). \quad (7)$$

На рис. 8 проведено такое сравнение расчетных и измеренных зависимостей скорости распространения турбулентного пламени  $u_t$  в смесях разного состава от среднеквадратичной пульсационной

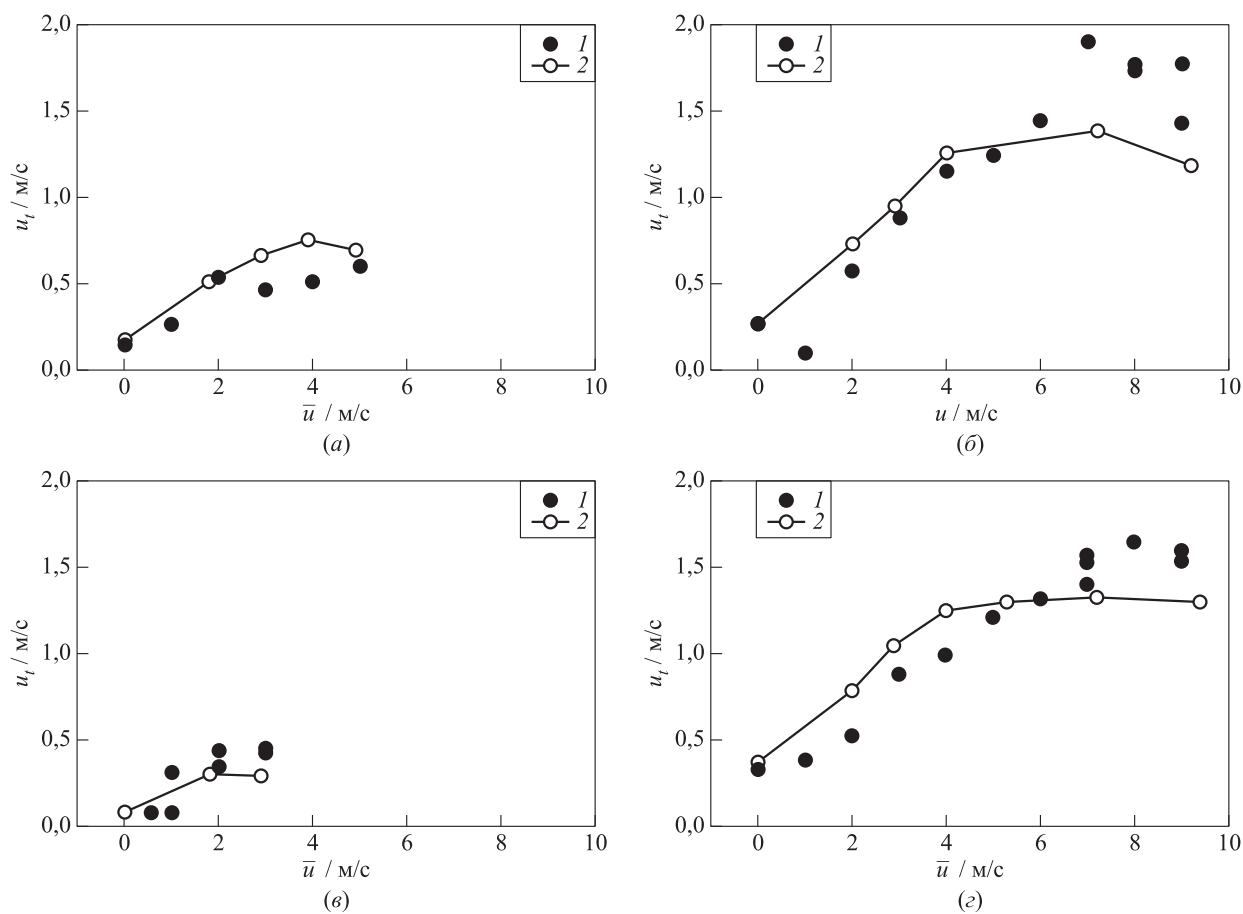
Коэффициенты  $A$  и  $k$  в (6) при 1 атм и  $T_0 = 293$  К

$\bar{u}$ , см/с	$A$ , см	$k$ , с
100–200	0,736	$2,16 \cdot 10^{-3}$
200–300	0,640	$1,80 \cdot 10^{-3}$
300–900	0,125	$8,33 \cdot 10^{-5}$

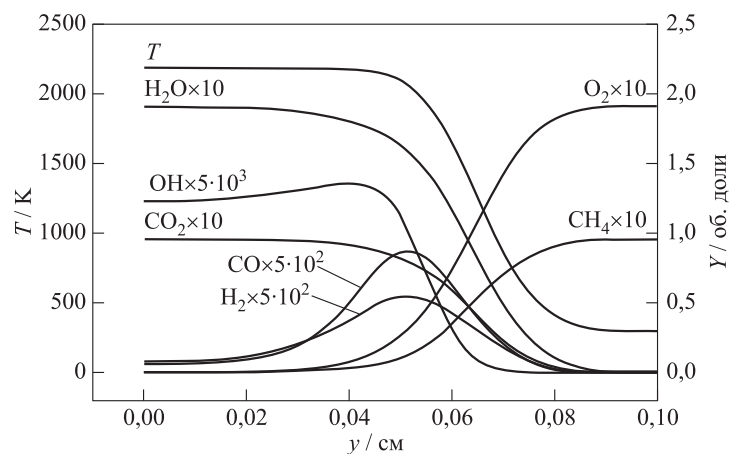
скорости  $\bar{u}$ . Видно, что в отличие от водородно-воздушных смесей (см. рис. 4) при горении метановоздушных смесей обнаруживается тенденция к затуханию турбулентного пламени с ростом интенсивности турбулентности: кривые  $u_t(\bar{u})$  выносятся и даже проходят через максимум. Такое поведение кривых  $u_t(\bar{u})$  связано с зависимостью (6) или (7). Интересно, что применение (6) или (7) к расчету турбулентного горения водородно-воздушных смесей не приводит к каким-либо заметным изменениям результатов на рис. 4–7. Последнее связано с очень узкими зонами реакции в водородно-воздушных пламенах, так что при выбранных интенсивностях турбулентности мелко-масштабные обменные процессы еще не приводят к затуханию пламени. Затухание пламени в более чувствительных метановоздушных смесях связано с заметным торможением химических превращений мелко-масштабной турбулентностью в зоне реакции. В этих условиях обменные процессы значительно снижают концентрацию активных центров реакции. У метана толщина фронта пламени заметно шире (рис. 9), чем у водорода (см. рис. 6), а интенсивность химического процесса — ниже, поэтому при моделировании горения водорода в пределах расчетных пульсационных скоростей такое затухание практически не наблюдалось.

По профилям температуры можно оценить толщину пламени и сравнить ее с пространственными масштабами пульсаций скорости. Профиль температуры в турбулентном метановоздушном пламени более пологий, чем в ламинарном пламени, а само турбулентное пламя шире, чем ламинарное вследствие влияния мелко-масштабных обменных процессов. На рис. 9 представлен пример расчетных профилей температуры и концентраций некоторых важных промежуточных и конечных продуктов реакции в турбулентном пламени метана. Несмотря на схожесть структуры зоны реакции в турбулентном пламени со структурой зоны реакции в ламинарном пламени, здесь все же есть некоторые количественные различия. Так, концентрации самых активных промежуточных продуктов реакции — гидроксила  $OH$ , атомов  $H$  и  $O$  — в турбулентном пламени оказываются ниже, чем в ламинарном. Это отчетливо видно на рис. 10, на котором представлены примеры расчетных зависимостей максимальных по зоне реакции концентраций гидроксила от среднеквадратичной пульсационной скорости  $\bar{u}$ . Понижение концентрации активных центров является следствием увеличения интенсивности турбулентности, т. е. следствием ускорения обменных процессов. По косвенным данным такой вывод был сделан и в экспериментах [15].

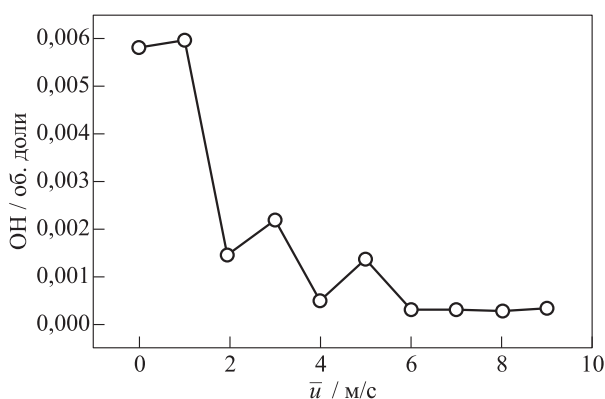




**Рис. 8** Зависимости скорости распространения турбулентного пламени  $u_t$  от среднеквадратичной пульсационной скорости  $\bar{u}$ : 1 — расчет; 2 — эксперимент [8]. Метановоздушные смеси с коэффициентом избытка горючего  $\Phi = 0,714$  (а), 0,833 (б), 0,625 (в) и 1,00 (г); начальная температура  $T_0 = 293$  К; давление атмосферное



**Рис. 9** Расчетные профили температуры и концентраций разных веществ в турбулентном пламени. Метановоздушная смесь с  $\Phi = 1,00$ ; начальная температура  $T_0 = 293$  К; давление атмосферное; среднеквадратичная пульсационная скорость  $\bar{u} = 400$  см/с



**Рис. 10** Расчетные зависимости концентрации гидроксидов от среднеквадратичной пульсационной скорости  $\bar{u}$ . Метановоздушная смесь с  $\Phi = 1,00$ ; начальная температура  $T_0 = 293$  К; давление атмосферное

## Заключение

Предложена методика трехмерного ПЧМ распространения турбулентного пламени в газовых реагирующих смесях в условиях стационарной, однородной и изотропной турбулентности. Методика основана на ДКМ горения многокомпонентной смеси. Методика применена к расчету турбулентного горения водородно-воздушных и метановоздушных смесей разного состава.

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. Для метановоздушной смеси при высокой интенсивности турбулентности наблюдается тенденция к затуханию турбулентного пламени. Расчеты показывают, что концентрации активных центров реакции — гидроксидов ОН, атомов Н и О — в турбулентном пламени меньше, чем в ламинарном, что также согласуется с экспериментом.

Следует отметить один результат, который важен для понимания структуры зоны горения в турбулентном пламени: во всех проведенных расчетах для водорода и для метана поверхность фронта пламени была односвязной. Даже при максимальных интенсивностях турбулентности в расчетах не обнаруживались «островки» свежей горючей смеси, окруженные продуктами горения, как это было в расчетах [4]. По-видимому, здесь сказывается различие в методике описания поля турбулентности или недостаточно длительное моделирование процесса распространения турбулентного пламени. Этот вопрос будет исследован дополнительно.

Одна из проблем предложенной методики — отсутствие в настоящее время физически обоснованной однозначной математической связи спектра турбулентности со среднеквадратичной пульсационной скоростью. Имея такую связь, можно было бы сравнить такой спектр турбулентности со спектром синтетической турбулентности, получаемым разыгрыванием с использованием принятой нами зависимости интегрального масштаба  $L$  от  $\bar{u}$ .

## Литература

1. Bell J. B., Day M., Grcar J. F. Numerical simulation of premixed turbulent methane combustion // P. Combust. Inst., 2002. Vol. 29. P. 1987–1993.
2. Echehki T., Chen J. H. Direct numerical simulation of autoignition in nonhomogeneous hydrogen–air mixtures // Combust. Flame, 2003. Vol. 134. No. 3. P. 169–191.
3. Bell, J. B., Cheng R. K., Day M. S., Shepherd I. G. Numerical simulation of Lewis number effects on lean premixed turbulent flames // P. Combust. Inst., 2006. Vol. 31. P. 1309–1317.
4. 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.
5. Басевич В. Я., Володин В. П., Козарко С. М., Перегудов Н. И. Расчеты турбулентного пламени в двумерном приближении // Хим. физика. 1982. Т. 1. № 8. С. 1130–1137.
6. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М., Басара Б. Прямое численное моделирование турбулентного горения газов в двумерном приближении // Горение и взрыв, 2017. Т. 10. № 1. С. 4–10.
7. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М., Фролов Ф. С. Прямое численное моделирование турбулентного горения водородно-воздушных смесей разного состава в двумерном приближении // Хим. физика, 2019. Т. 38. № 1. С. 27–37.
8. Карпов В. П., Северин Е. С. Влияние коэффициентов молекулярного переноса на турбулентную скорость выгорания // Физика горения и взрыва, 1980. Т. 16. № 1. С. 45–51.
9. Вильямс Ф. А. Теория горения / Пер. с англ. — М.: Наука, 1971. 615 с. (Williams F. A. The combustion theory. — Boca Raton, FL, USA: CRC Press, 1994. 708 p.)
10. Лойцянский Л. Г. Механика жидкости и газа. — М.: Дрофа, 2003. 840 с.
11. Годунов С. К., Рябенский В. С. Разностные схемы. — М.: Наука, 1977. 440 с.
12. Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М. Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от  $C_{10}$  к  $C_{11}$ – $C_{16}$  // Хим. физика, 2013. Т. 32. № 4. С. 87–96.

13. *Burcat A.* Ideal gas thermodynamic data in polynomial form for combustion and air pollution use. Laboratory for Chemical Kinetics. <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html>.
14. *Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т.* Свойства газов и жидкостей / Пер. с англ. — Л.: Изд-во Химия, 1982. 592 с. (*Reid C., Prausnitz J., Sherwood T.* The properties of gases and liquids. — 3rd ed. — London: McGraw Hill, 1977. 688 p.)
15. *Басевич В.Я., Козарко С.М.* Образование углеводородов при турбулентном горении метано-воздушной смеси // *Физика горения и взрыва*, 1985. Т. 21. № 5. С. 12–17.

Поступила в редакцию 18.01.19

## THREE-DIMENSIONAL DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF TURBULENT COMBUSTION OF HYDROGEN–AIR AND METHANE–AIR MIXTURES IN THE FIELD OF SYNTHETIC TURBULENCE

V. Ya. Basevich<sup>1</sup>, A. A. Belyaev<sup>1</sup>, S. N. Medvedev<sup>1</sup>, S. M. Frolov<sup>1,2,3</sup>, F. S. Frolov<sup>1,3</sup>, and B. Basara<sup>4</sup>

<sup>1</sup>N. N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation

<sup>2</sup>National Research Nuclear University MPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Shosse, Moscow 115409, Russian Federation

<sup>3</sup>Scientific Research Institute for System Studies, Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovsky Prosp., Moscow 117218, Russian Federation

<sup>4</sup>AVL LIST GmbH, 1 Hans List Platz, Graz 8020, Austria

**Abstract:** The technique of three-dimensional direct numerical simulation of turbulent flame propagation in gaseous reaction mixtures under conditions of stationary, homogeneous, and isotropic synthetic turbulence is proposed. The technique is based on a detailed kinetic mechanism of combustion of a multicomponent mixture and does not contain any adjustable parameter. The technique is applied to the calculation of the turbulent combustion of mainly fuel-lean hydrogen–air and methane–air mixtures. The calculated propagation speeds of a turbulent flame are in satisfactory agreement with the measured values. The calculated concentrations of the active reaction centers — OH, H, and O — are shown to be less in a turbulent flame than in the laminar flame which also agrees with experiment.

**Keywords:** direct numerical simulation; synthetic turbulence; turbulent combustion; detailed kinetic mechanism; hydrogen; methane

**DOI:** 10.30826/CE19120206

## Acknowledgments

This work was supported by the subsidies given to the N. N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences to implement the state assignment on the topics 0082-2016-0011 (registration number AAA-A17-117040610346-5) and 0082-2014-0004 (registration number AAA-A17-117040610283-3) and to the Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences to implement the state assignment on the topic 0065-2019-0005 (registration number AAAA-A19-119011590092-6), and partly by the Russian Foundation for Basic Research (project 16-29-01065ofi-m).

## References

- Bell, J. B., M. S. Day, and J. F. Grcar. 2002. Numerical simulation of premixed turbulent methane combustion. *P. Combust. Inst.* 29:1987–1993.
- Echekki, T., and J. H. Chen. 2003. Direct numerical simulation of autoignition in nonhomogeneous hydrogen–air mixtures. *Combust. Flame* 134(3):169–191.
- 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. *P. Combust. Inst.* 31:1309–1317.
- 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.

5. Basevich, V. Ya., V. P. Volodin, S. M. Kogarko, and N. I. Peregudov. 1982. Raschety turbulentnogo plameni v dvumernom priblizhenii [Calculations of turbulent flame in two-dimensional approximation]. *Khim. Fiz.* 1(8):1130–1137.
6. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, S. M. Frolov, and B. Basara. 2017. Pryamoe chislennoe modelirovanie turbulentnogo gorenija gazov v dvumernom priblizhenii [Direct numerical simulation of turbulent combustion of gases in two-dimensional approximation]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 10(1):4–10.
7. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, S. M. Frolov, and F. S. Frolov. 2019. Direct numerical simulation of turbulent combustion of hydrogen–air mixtures of various compositions in a two-dimensional approximation. *Russ. J. Phys. Chem. B* 13(1):75–85.
8. Karpov, V. P., and E. S. Severin. 1980. Effects of molecular-transport coefficients on the rate of turbulent combustion. *Combust. Explo. Shock Waves* 16(1):41–46.
9. Williams, F. A. 1994. *The combustion theory*. Boca Raton, FL: CRC Press. 708 p.
10. Loitsyanskii, L. G. 2003. *Mekhanika zhidkosti i gaza* [Mechanics of liquids and gases]. Moscow: Drofa Publ. 840 p.
11. Godunov, S. K., and V. S. Ryaben'kiy. 1977. *Raznostnye skhemy* [Finite-difference schemes]. Moscow: Nauka. 440 p.
12. 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<sub>1</sub>–C<sub>10</sub> to C<sub>11</sub>–C<sub>16</sub>. *Russ. J. Phys. Chem. B* 7(2):161–169.
13. Burcat, A. Ideal gas thermodynamic data in polynomial form for combustion and air pollution use. Laboratory for Chemical Kinetics. Available at: <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html> (accessed May 24, 2019).
14. Reid, C., J. Prausnitz, and T. Sherwood. 1977. *The properties of gases and liquids*. 3rd ed. London: McGraw Hill. 688 p.
15. 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, 2019

## Contributors

**Basevich Valentin Ya.** (b. 1926) — Doctor of Science in technology, professor, chief research scientist, N. N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics of the 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 Federal Research Center of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; belyaevIHF@yandex.ru

**Medvedev Sergey N.** (b. 1985) — Candidate of Science in physics and mathematics, senior research scientist, N. N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; medvedevs@chph.ras.ru

**Frolov Sergey M.** (b. 1959) — Doctor of Science in physics and mathematics, professor, Head of Department, N. N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; professor, National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), 31 Kashirskoe Shosse, Moscow 115409, Russian Federation; senior research scientist, Scientific Research Institute for System Studies, Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovsky Prosp., Moscow 117218, Russian Federation; smfrol@chph.ras.ru

**Frolov Fedor S.** (b. 1981) — Candidate of Science in physics and mathematics, senior research scientist, N. N. Semenov Federal Research Center of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; research scientist, Scientific Research Institute for System Studies, Russian Academy of Sciences, 36-1 Nakhimovsky Prosp., Moscow 117218, Russian Federation; smfrol@chph.ras.ru

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