

# Численное моделирование горения метановоздушной смеси при умеренных числах Рейнольдса

Семенёв П.А., Токталиев П.Д.

Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова, г. Москва

e-mail: pasemennev@ciam.ru

В работе представлены результаты прямого численного моделирования (3D) турбулентного горения предварительно перемешанной метановоздушной смеси в модельных условиях при умеренных значениях числа Рейнольдса,  $Re_t \sim 150$ , и числе Карловица  $Ka \sim 5$ , проведено сравнение полученных результатов по значениям турбулентной скорости пламени с одномерными расчетами по представленной в работе математической модели, а также с результатами известных эмпирических формул-обобщений и отдельных экспериментов. Рассматриваемые в работе условия соответствуют режимам горения с локализацией основных реакций окисления в тонкой области и близки к реализуемым в модельных камерах сгорания, работающих на предварительно перемешанной смеси. Для описания химических превращений в работе использовался известный расширенный кинетический механизм окисления метана, содержащий 19 компонентов и 83 реакции. На основе результатов прямого численного моделирования выявлена и проанализирована структура фронта пламени, его толщина, форма и локальная кривизна.

**Ключевые слова:** прямое численное моделирование, турбулентное горение, турбулентная скорость пламени, метановоздушная смесь

## Numerical simulation of turbulent combustion of methane-air mixture in moderate Reynolds number conditions

Semenov P.A., Toktaliev P.D.

CIAM, Moscow

This paper presents the results of direct numerical simulation (3D) of turbulent combustion of a premixed methane-air mixture under model conditions at moderate Reynolds numbers  $Re_t \sim 150$  and Karlovitz numbers  $Ka \sim 5$ , compares the results obtained in terms of the turbulent flame velocity with one-dimensional calculations according to the mathematical model, as well as the results of well-known empirical generalization formulas and individual experiments. The conditions considered in this work correspond to combustion modes with localization of the main oxidation reactions in a thin region and are close to those realized in model combustion chambers on a premixed mixture. To describe the chemical transformations, the well-known extended kinetic mechanism of methane oxidation, containing 19 components and 83 reactions, was used. Based on the results of direct numerical simulation, the structure of the flame front, its thickness, shape and local curvature are revealed and analyzed.

**Keywords:** direct numerical simulation, turbulent combustion, turbulent flame velocity, methane-air mixture

### Введение

Процесс горения является определяющим для многих характеристик авиационных и наземных газотурбинных двигателей (ГТД). Однако многие закономерности этого процесса, как в инженерном, так и в фундаментальном плане, исследованы недостаточно или открыты сравнительно недавно. Так, в большинстве устройств, в том числе авиационных ГТД, реализуется турбулентный

режим горения, что, учитывая отсутствие на данный момент завершенной теории турбулентности, дополнительно усложняет задачу описания процесса горения.

На данный момент прямое численное моделирование (DNS) реагирующих турбулентных потоков сильно ограничено требуемыми вычислительными затратами, но при этом является важным инструментом для валидации и настройки подсеточных моделей переноса для метода моделирования крупных вихрей (LES). Как пра-

вило, такие DNS-расчеты ограничиваются простыми геометриями и модельными условиями. Тем не менее значительный прогресс в вычислительных технологиях в последние годы привел к многочисленным исследованиям турбулентного горения методом DNS с использованием редуцированных и детальных кинетик для различных смесей: горение предварительно перемешанной водородовоздушной [1–3] и метановоздушной [4–7] смесей.

В настоящей статье рассмотрены результаты DNS-расчетов распространения статистически плоского фронта пламени в гомогенной метановоздушной смеси в атмосферных условиях в области с прямоугольной геометрией. Результаты численного моделирования сравниваются с экспериментальными данными, отдельными полуэмпирическими зависимостями, а также результатами, полученными с помощью одномерной математической модели распространения турбулентного фронта пламени. Целью работы является сопоставление точности оценок турбулентной скорости пламени, получаемых с использованием математических моделей разной степени детализации, с данными экспериментов и полуэмпирических корреляций, а также сравнение вычислительной производительности рассматриваемых моделей.

Работа структурирована следующим образом. В первом параграфе сформулирована математическая модель реагирующего течения на основе нестационарных уравнений Навье – Стокса и расширенного кинетического механизма, а также рассмотрена производная от нее – упрощенная одномерная математическая модель. Приведено краткое описание используемых для верификации и валидации расчетов экспериментальных данных, известных эмпирических корреляций для турбулентной скорости пламени, а также дан анализ их применимости к рассматриваемым условиям. Приведены некоторые результаты сравнения используемого в многомерных и одномерных расчетах кинетического механизма окисления метана с рядом других распространенных реакционных механизмов, сравнение приведено для ламинарной скорости пламени и времен задержек воспламенения. Во втором параграфе приведены результаты расчетов с использованием описанных математических моделей, проведено их сравнение с экспериментальными данными и полуэмпирическими корреляциями. В заключении сформулированы основные выводы работы.

## Определяющие уравнения

**Система уравнений Навье – Стокса для прямого численного моделирования турбулентного реагирующего течения.** Система уравнений Навье – Стокса

для сжимаемого реагирующего потока с химическими реакциями между  $N$  компонентами состоит из уравнений неразрывности (1), импульса (2) и энергии (3) для всей смеси, а также уравнений состояния (4) и неразрывности (5) для каждого компонента:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{v}) = 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) + \nabla(\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \tau; \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla(\rho h \mathbf{v}) = -\nabla \dot{q} + \frac{Dp}{Dt} + \dot{q}_r; \quad (3)$$

$$p = \rho RT; \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla(\rho Y_k \mathbf{v}) = \nabla(\rho D_k \nabla Y_k) + \dot{r}_k, \quad k = 1 \dots N; \quad (5)$$

$$\dot{q} = -\lambda \nabla T + \sum_{k=1}^N j_k h_k,$$

где  $\rho$  – плотность;  $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$  – вектор скорости;  $p$  – давление;  $\tau$  – тензор касательных напряжений;  $h$  – энтальпия;  $T$  – температура;  $R$  – газовая постоянная смеси;  $\dot{q}_r = -\sum_k \dot{r}_k h_k / M_k$  – член в уравнении энергии, описывающий изменения энергии из-за химических реакций;

$h_k$  – энтальпия  $k$ -го компонента;  $M_k$  – молярная масса  $k$ -го компонента;  $Y_k$  – массовая доля  $k$ -го компонента;  $\dot{r}_k$  – источниковый член образования массы  $k$ -го компонента вследствие химических реакций;  $D_k$  – коэффициент диффузии  $k$ -го компонента;  $\lambda = \lambda(T)$  – коэффициент теплопроводности. Для вычисления источникового члена все химические реакции представляются как

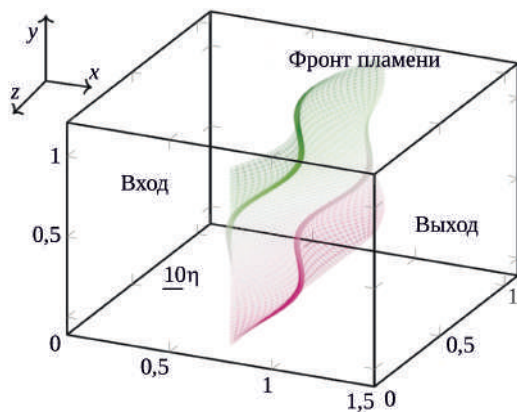
$$\sum_{k=1}^N \nu'_{k,r} A_k \xrightleftharpoons[K_{b,r}]{K_{f,r}} \sum_{k=1}^N \nu''_{k,r} A_k,$$

где  $\nu'_{k,r}$ ,  $\nu''_{k,r}$  – стехиометрические коэффициенты  $k$ -го реагента и  $k$ -го продукта в реакции  $r$  соответственно;  $K_{f,r}$  и  $K_{b,r}$  – константы скорости прямой и обратной реакции  $r$ ;  $A_k$  – символ, обозначающий  $k$ -й компонент. Тогда  $\dot{r}_k$  имеет вид

$$\dot{r}_k = M_k \sum_{r=1}^{N_R} \left[ (\nu''_{k,r} - \nu'_{k,r}) \left( K_{f,r} \prod_{k=1}^N [X_k]^{\nu'_{k,r}} - K_{b,r} \prod_{k=1}^N [X_k]^{\nu''_{k,r}} \right) \right],$$

где  $r = 1 \dots N_R$  – индекс химической реакции;  $N_R$  – число реакций, в которых  $k$ -й компонент принимает участие,  $X_k$  – молярная концентрация  $k$ -го компонента. Эффекты Дюфура, Соре, а также теплообмен излучением в расчетах не учитывались.

Расчетная область имела форму прямоугольного параллелепипеда со сторонами длиной  $1,5 \times 1,1 \times 1,1$  мм, расчетная сетка имела по  $140 \times 48 \times 48$  узлов вдоль



**Рис. 1.** Вид расчетной области со схематическим изображением положения фронта пламени ( $\eta$  – колмогоровский масштаб длины)

сторон расчетной области соответственно. Общий вид расчетной области и сравнение ее размера с масштабом длины Колмогорова ( $\eta \sim 1,5 \cdot 10^{-5}$  м) представлены на рис. 1. Реагирующая смесь стехиометрического состава ( $\phi = 1,0$ ) при  $T = 300$  К,  $p = 0,1$  МПа поступает в расчетную область через входное сечение, в фиксированном сечении расчетной области смесь воспламеняется и затем реагирует в соответствии с выбранным механизмом. На входном и выходном сечениях расчетной области использовались характеристические граничные условия. Чтобы сохранять фронт пламени внутри расчетной области, в соответствии с [6], средняя скорость на входе задавалась как

$$u_{in} = \alpha U_L + u',$$

где  $U_L$  – ламинарная скорость пламени (получена в предварительных одномерных расчетах);  $\alpha$  – отношение между турбулентной и ламинарной скоростью пламени;  $u'$  – турбулентные пульсации скорости. При этом дополнительно генерируются пульсации скорости на входе таким образом, чтобы спектр турбулентности был заданным. На выходной границе использовалось граничное условие с фиксированным статическим давлением. На боковых гранях расчетной области задавались периодические граничные условия. Начальные условия в расчетной области для переменных  $p$ ,  $\mathbf{v}$  соответствовали полю однородной изотропной турбулентности и были получены независимо, в отдельном расчете, для компонент  $Y_k(x, t = 0)$  и  $T(x, t = 0)$  использовались зависимости, полученные из 1D-расчета ламинарного пламени в области такой же протяженности. Особенности постановки граничных и начальных условий для прямого численного моделирования турбулентности могут быть найдены в [8].

Для численного решения начально-краевой задачи для системы (1)–(5) использовался конечно-объемный подход, реализованный на базе **солверов SIMPLEC** в ANSYS Fluent и reactingFoam в открытом пакете

библиотек OpenFOAM версии 2.3 [9]. В обоих случаях использовались разностные схемы второго порядка аппроксимации по пространству и времени. Для решения жесткой задачи, связанной с различными временными масштабами используемого реакционного механизма, процедура пересчета по времени была неявной. Ограничения на шаг по времени при рассматриваемых условиях были связаны с характерным временем отдельных реакций, но не с областью устойчивости метода пересчета по времени, в расчете использовался постоянный шаг по времени  $\Delta t = 1,2$  нс. Также в случае неполноты термодинамических данных и данных о коэффициентах переноса для недостающих компонентов использовались данные из [10]. Свойства переноса индивидуальных веществ были получены, исходя из их молекулярной структуры, полуэмпирическим методом [11]. Все расчеты были проведены на кластере ИПХФ РАН с использованием **24 4-ядерных узлов с процессорами Intel Xeon 5356** и сетевой файловой системой.

**Экспериментальное измерение скорости турбулентного пламени. Эмпирические корреляции.** Наряду с ламинарной скоростью пламени ( $U_L$ ) и временем задержки воспламенения ( $\tau_b$ ), турбулентная скорость пламени ( $U_T$ ) является фундаментальной характеристикой процесса горения, исключительно важной как с практической, так и с вычислительной точки зрения. Большинство популярных вычислительных моделей турбулентного горения с предварительным смешением содержат ее в явном виде. Экспериментальному измерению скорости турбулентного пламени посвящено большое количество работ, на основе эмпирических данных построено значительное число корреляций, которые описывают скорость турбулентного пламени как функцию термодинамических и турбулентных параметров и соотношения топливо/окислитель. В настоящем параграфе приведены отобранные экспериментальные данные о турбулентной скорости пламени в сходных условиях, с которыми можно сравнить результаты расчетов, а также полуэмпирические корреляции, построенные на основе большого количества экспериментальных точек и позволяющие провести сравнение  $U_T$  при тех же условиях, что и в расчете.

Режимы турбулентного горения предварительно перемешанной смеси могут быть классифицированы с помощью трех характерных безразмерных критериев:

$$- \text{турбулентного числа Рейнольдса } Re_t = \frac{u' \Lambda}{U_L \delta_F},$$

где  $u'$  – пульсации скорости;  $\Lambda$  – интегральный масштаб турбулентности;  $\delta_F$  – диффузионная или термическая толщина ламинарного пламени;

$$- \text{числа Дамкелера } Da = \frac{U_L \Lambda}{u' \delta_F};$$

– числа Карловица  $Ka = \left( \frac{u'}{U_L} \right)^{1,5} \left( \frac{\delta_F}{\Lambda} \right)^{0,5}$ .

Различные режимы горения соответствуют разным значениям чисел  $Re$ ,  $Da$  и  $Ka$  и могут быть представлены на диаграмме Борги, модифицированной Петерсом (рис. 2) [12], обычно среди них выделяют следующие: область фронта пламени с разрывами (I), область тонких зон реакции (II, соответствует условиям приведенных 3D-расчетов, см. красный маркер на рис. 2), области волнистого (III) и искривленного (IV) фронта пламени. Отдельно на рис. 2 отмечена область ламинарных пламен – V. Область II соответствует числам  $Re_t > 1$ ,  $1 < Ka < 100$  и может характеризоваться разделением внутри пламени зоны предварительного нагрева и внутреннего подслоя. Первая почти полностью инертна и подвержена влиянию турбулентных вихрей, вторая имеет значительно меньшую толщину, ~10% всей толщины реагирующей зоны, и высокую интенсивность реакций. Таким образом, колмогоровские вихри не влияют на химические превращения во внутреннем подслое.

Экспериментальное измерение  $U_T$  имеет ряд особенностей. В первую очередь, само определение  $U_T$  не является общепринятым. В качестве турбулентной скорости пламени могут быть использованы расходная скорость ( $U_{TC}$ ), определенная по изоповерхности восстановленной концентрации  $\bar{c} = 0,5$  [16], или локальная скорость лидера турбулентного фронта пламени ( $U_{TL}$ ), обычно определяемая по изоповерхности  $\bar{c} = 0,5$ . Первое определение в экспериментальных работах употребляется чаще. При этом значения скорости, определенные первым и вторым способом, могут отличаться из-за кривизны линий тока вблизи фронта, и, как следствие, отклонения локального течения от одномерного и наличия поперечного потока массы и энергии. Для экспериментальных установок на основе бунзеновской горелки (БГ), горелок с закруткой потока, V-образных пламен отношение  $U_{TL}/U_{TC} > 1$ , для сферических пламен (СП)  $U_{TL}/U_{TC} < 1$ . В работе [17] приведена зависимость, позволяющая для расширяющихся пламен (сферических и на основе бунзеновской горелки) пересчитывать  $U_T$ , определенную по различным изоповерхностям  $\bar{c}$ ; в работе [18] сделан вывод, что использование изоповерхности  $\bar{c} = 0,5$  позволяет нивелировать влияние типа используемой установки на результаты измерений. Поэтому при выборе экспериментальных данных для верификации были взяты только данные с расширяющимися пламенами с приведением к  $\bar{c} = 0,5$ . В табл. 1 представлены отобранные экспериментальные данные для стехиометрической смеси  $CH_4$  с воздухом при атмосферном давлении с указанием типа установки и диапазона изменений  $\Lambda/\delta_F$  и  $u'/U_L$ .

Табл. 1. Экспериментальные данные для метано-воздушной смеси, режим III

Тип установки	$Ka$	$Da$	$\Lambda/\delta_F$	$u'/U_L$
БГ [13]	0,3...2,6	9,6...35,5	42,7...91,0	2,12...4,80
БГ [14]	0,19...1,54	5...41	8,9...38,4	0,62...1,78
СП [18]	0,43...2,41	18,3...103,3	188...455	4,4...10,3

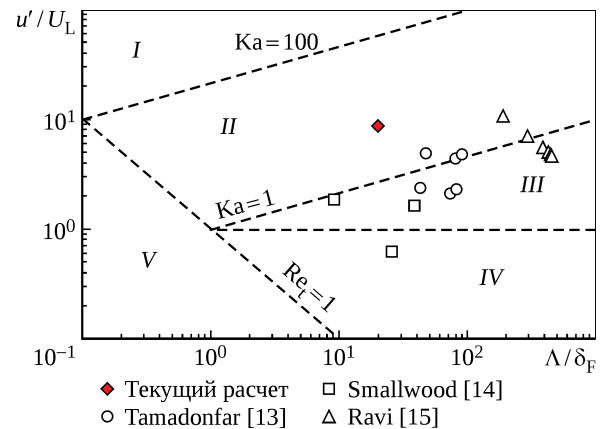


Рис. 2. Диаграмма Борги, модифицированная Петерсом [12], турбулентного горения предварительно перемешанной смеси, отобранные экспериментальные данные (режим соответствует расчетам настоящей работы)

Эти же экспериментальные режимы приведены на рис. 2 вместе с режимом, соответствующим трехмерному расчету. Следует отметить, что, несмотря на большое количество исследований, далеко не для всех диапазонов относительной интенсивности турбулентности и масштаба турбулентности в зонах II и III существуют экспериментальные точки. Полную компиляцию экспериментальных данных на момент публикации можно найти в работе [19], где приведены ссылки более чем на 1600 экспериментальных условий. Сравнительно представительную выборку экспериментальных данных, полученных после публикации работы [19], можно найти в работах [20; 21].

Существует более 50 эмпирических и полуэмпирических корреляций, описывающих зависимость  $U_T$  от ламинарных свойств течения и  $u'$ ,  $\Lambda$ ,  $Re$ ,  $Ka$ ,  $Da$ , однако ни одна из них не обладает достаточной универсальностью. В работе [18] было проведено сравнение и оптимизация параметров 16 наиболее распространенных корреляций по набору более чем из 300 экспериментальных точек, сгруппированных в соответствии со схожестью условий экспериментов. Результаты оптимизации для метановоздушной смеси при разном давлении показывают, что наименьшую среднюю ошибку, менее 30%, демонстрирует оптимизированная корреляция из работы [22]:

$$\frac{U_T}{U_L} = 1 + \frac{C}{Le} Re_t^{0,25} \left( \frac{u'}{S_L} \right)^{0,3} \left( \frac{p}{p_{ref}} \right)^{0,2}, \quad (6)$$



где оптимизированное значение параметра  $C = 0,48$ . Также в работе [20] предложена зависимость в виде степенного закона, минимизирующая среднюю ошибку для того же набора экспериментальных точек до ~22%:

$$\frac{U_T}{U_L} = a + b \left( \frac{L}{\delta_F} \right)^c \left( \frac{u'}{S_L} \right)^d \phi^e Le^f \left( \frac{p}{p_{ref}} \right)^g, \quad (7)$$

где  $\phi$  – коэффициент избытка топлива;  $Le$  – число Льюиса;  $p_{ref} = 0,1$  МПа;  $a = 2,244$ ,  $b = 0,132$ ,  $c = 0,61$ ,  $d = 0,516$ ,  $e = -0,35$ ,  $f = -1,215$ ,  $g = -2,96$  – значения параметров для атмосферных условий. То же выражение в координатах  $Re$ – $Da$ – $Ka$  при атмосферном давлении имеет следующий вид:

$$\frac{U_T}{U_L} = a + b Re^x Da^y Ka^z \phi^e Le^f,$$

где  $x = -0,047$ ;  $y = 0,563$ ;  $z = 1,0$ . Обе корреляции, (6) и (7), далее использованы для сравнения значения  $U_T$  с расчетными данными при совпадающих условиях.

**Одномерная модель распространения турбулентного фронта пламени.** Несмотря на возможность определения турбулентной скорости пламени с использованием DNS и полуэмпирических корреляций, первое не всегда обоснованно с точки зрения потребных вычислительных ресурсов, второе может использоваться только для диапазона условий, для которого собран достаточный объем экспериментальных данных. Поэтому существует потребность в вычислительно экономичном методе расчета турбулентной скорости пламени с приемлемой точностью. Одними из таких методов могут стать методы, основанные на одномерных или двумерных уравнениях сохранения. Несмотря на то, что эти методы основаны на достаточно грубых допущениях относительно протекающих физических процессов, – в первую очередь, это принципиальная трехмерность турбулентности, – в ряде случаев такие методы могут показывать приемлемую точность и даже в большей мере отражать свойства реального процесса турбулентного переноса в сравнении с широко распространенными методами крупных вихрей и методами на основе уравнений Рейнольдса (RANS). К этому классу относятся методы одномерной турбулентности (one-dimensional turbulence, ODT), развитые в цикле работ [23–25], а также методы, основанные на реакторной сети, или к ним приводимые. К последнему классу относится модель, предложенная в [20], модификация которой описана ниже. Она основывается на одномерном осесимметричном течении вблизи точки торможения, математическая модель которого повсеместно используется для определения ламинарной скорости горения [26]. Для описания турбулентного течения на основе системы из [26] может быть использован традиционный подход с представлением переменных  $u$ ,  $T$ ,  $Y_k$

в виде средних величин и пульсаций, последующим пренебрежением малыми слагаемыми и замыканием получающихся Рейнольдсовых потоков  $\overline{u'_i Y'_k}$ ,  $\overline{u'_i h'_k}$ . Представление этих потоков в виде линейных зависимостей от соответствующих градиентов приводит к следующей системе уравнений (сохранены обозначения [20; 26], средние величины приведены без черты):

$$\rho u \frac{dY_k}{dz} = -\frac{dj_{eff}}{dz} + \dot{\omega}_k M_k = 0, \quad k = 1 \dots N; \quad (8)$$

$$\rho u c_p \frac{dT}{dz} = \frac{d}{dz} \left( \lambda_{eff} \frac{dT}{dz} \right) - \sum_{k=1}^N M_k \dot{\omega}_k h_k - \sum_{k=1}^N j_k c_{p,k} \frac{dT}{dz} = 0; \quad (9)$$

$$\rho u \frac{dT'^2}{dz} = \frac{d}{dz} \left( \mu + \frac{\mu_T}{\sigma_T} \frac{dT'^2}{dz} \right) + C_g \mu_T \left( \frac{dT}{dz} \right)^2 - C_d \rho \frac{\epsilon}{k} T'^2 = 0; \quad (10)$$

$$j_{eff} = -\rho D_{k,eff} \nabla Y_k; \quad D_{k,eff} = D_{k,m} + \frac{\mu_T}{\rho Sc_T};$$

$$\lambda_{eff} = \lambda_{lam} + \frac{c_p \mu_T}{Pr_T}; \quad \mu_T = C_\mu \rho \frac{k^2}{\epsilon}.$$

Здесь  $\sigma_T = 0,85$ ;  $Pr_T = 0,85$ ;  $Sc_T = 0,7$ ;  $C_g = 0,86$ ;  $C_d = 2,0$ ;  $C_\mu = 0,09$ . В отличие от ламинарного случая в системе появляются параметры турбулентности  $k$  и  $\epsilon$  и дополнительное уравнение для пульсаций температуры. Граничные условия для этой системы

$$x = 0: Y_i = Y_{i,s}, \quad i = 1 \dots N;$$

$$x = 0: T = T_0, \quad T'^2 = T_0'^2;$$

$$x = L: \frac{dY_k}{dz} = 0, \quad \frac{dT}{dz} = 0, \quad \frac{dT'^2}{dz} = 0,$$

здесь  $L$  – длина интервала интегрирования.

При осреднении члена мольного произведения каждого компонента ( $\dot{\omega}_k$ ) необходимо выполнить осреднение констант скорости прямой и обратной реакции ( $K_{f,b}$ ), учитывая экспоненциальную зависимость этих констант от температуры, эквивалентная наблюдаемая скорость реакции  $K(T_{eq})$  может быть значительно выше, чем средняя, т.е. для достаточно высоких температур выполняется (здесь и далее черта для средней температуры сохранена):

$$\overline{K_{f,b}} = \frac{\int_0^{t_k} K(T) dt}{t_k} = K(T_{eq}) \neq K(\bar{T}).$$

Чтобы преодолеть эту проблему, для константы использовалось разложение в ряд Тейлора по степеням  $T'/\bar{T}$ , так же как в [20; 27] или в более ранней работе по моделированию выхлопной струи ТРД [28]. Стоит также отметить, что впервые замена экспоненциаль-

ной функции на полиномиальную для задач теплового распространения пламени использовалась гораздо раньше – в работе [29] (преобразование Франк-Каменецкого). Остановимся подробнее на этом преобразовании, представим экспоненциальную часть константы скорости реакции в виде

$$A = \exp\left(-\frac{E}{R\bar{T}}\right) = \exp\left(-\frac{E}{R\bar{T}}\right) \exp\left(\frac{E}{R\bar{T}} \frac{T' / \bar{T}}{1 + T' / \bar{T}}\right) = A \exp\left(\frac{E}{R\bar{T}} \frac{T' / \bar{T}}{1 + T' / \bar{T}}\right).$$

Последовательно разлагая второй множитель в ряд Тейлора по степеням  $T' / \bar{T}$  и затем  $(1 + T' / \bar{T})^n$  и подставляя результат в выражение для константы реакции, имеем

$$\overline{K_{f,b}} = K_{f,b}(\bar{T}) \left[ 1 + \left(\frac{T'}{\bar{T}}\right)^2 \frac{\frac{E_a^2}{R^2} + (2n-2) \frac{E_a}{R\bar{T}} + (n^2 - n) \bar{T}^2}{2\bar{T}^2} + \sum_{m=3}^{\infty} \left(\frac{T'}{\bar{T}}\right)^m \frac{1}{m!} \sum_{l=0}^m f_{m,l}(n) \left(\frac{E_a}{R\bar{T}}\right)^l \right].$$

Здесь  $E_a$  – энергия активации;  $n$  – показатель экспоненты;  $f_{m,l}(n)$  – полиномиальная функция показателя экспоненты. Ряд в скобках является корректирующим множителем для  $K_{f,b}(\bar{T})$ , он сходится при условии  $|T' / \bar{T}| < 1$ , однако скорость его сходимости уменьшается с увеличением комплекса  $E_a / R\bar{T}$ . Таким образом, это разложение может быть использовано для любых реакций, однако при больших  $|T' / \bar{T}|$  требуется значительное количество слагаемых. Учитывая возможную ресурсоемкость вычисления разложения, в отличие от работы [20] расчет  $\overline{K_{f,b}}$  осуществлялся единожды для набора средних температур и пульсаций ( $\bar{T}$ ,  $T'$ ), затем при решении системы использовалась интерполяция. Параметры турбулентности в области сохранялись постоянными и задавались на основе либо экспериментальных данных, либо входного уровня турбулентности в области, влияние турбулентных пульсаций на протекание химических реакций не учитывалось. Следует отметить, что, несмотря на грубость допущения о постоянстве турбулентных характеристик в расчетной области, модель показывает относительно малую погрешность для рассматриваемых режимов (область II). Введение неравномерного распределения и усложнение модели в то же время может приводить к значительно худшим результатам, как, например, в [20]. Уравнение для пульсаций температуры (10) решалось аналитически в трех зонах: в несгоревшей смеси, в области фронта пламени и в сгоревшей смеси и входило как часть в общую итерационную процедуру решения системы (8)–(10). Итерационная процедура

состояла из двух этапов: на первом решались дискретные аналоги уравнений (8)–(10) с использованием открытого пакета Cantera [30], аналогично ламинарному случаю, на втором этапе для получения следующего приближения  $T'$  использовалось точное решение (10) для случая постоянных коэффициентов, сами коэффициенты вычислялись на первом этапе. Таким образом, в дополнение к решаемым для ламинарной задачи уравнениям использовались только алгебраические соотношения, т.е. вычислительная сложность обеих задач – ламинарной и турбулентной – отличалась незначительно. Решение системы (8)–(10) было реализовано на основе решения ламинарной задачи в пакете Cantera [30].

В табл. 2 приведено сравнение экспериментальных данных из табл. 1 и результатов расчетов с решением системы (8)–(10), в качестве кинетического механизма использовался редуцированный механизм DRM-19, данные по параметрам турбулентности были взяты из экспериментов. Как видно в табл. 2, средняя погрешность для двух наборов данных меньше, чем для наилучших корреляций (6) и (7), однако для последнего набора данных результаты расчета в два раза отличаются от результатов эксперимента. С одной стороны, для малотурбулентных пламен погрешность модели (8)–(10) связана с относительно большим влиянием распределения турбулентных параметров в области, увеличение же интенсивности турбулентности уменьшает влияние допущения о постоянстве турбулентных характеристик; с другой стороны, при увеличении интенсивности турбулентности большее влияние начинает оказывать растяжение фронта пламени – результаты расчетов в целом подтверждают эти наблюдения.

Еще одним вопросом и отдельной областью для исследования и обсуждения в рамках всей вычислительной гидродинамики (CFD) является выбор наиболее подходящего кинетического механизма для данных условий. Кинетический механизм химических реакций – ключевая часть численного моделирования потоков с горением; множество возможных механизмов существует даже для метана: начиная от простого механизма Fureby, включающего две реакции и пять компонентов, до механизма GRI-Mech 3.0 и его производных. Более того, число уравнений переноса для  $N$

Табл. 2. Сравнение расчетов и экспериментальных данных, режим III

Тип установки	Погрешность	
	$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{ U_{L,exp} - U_{L,num} }{U_{L,exp}}$	Количество точек $N$
БГ [13]	0,18	6
БГ [14]	0,23	3
СП [18]	0,38	6

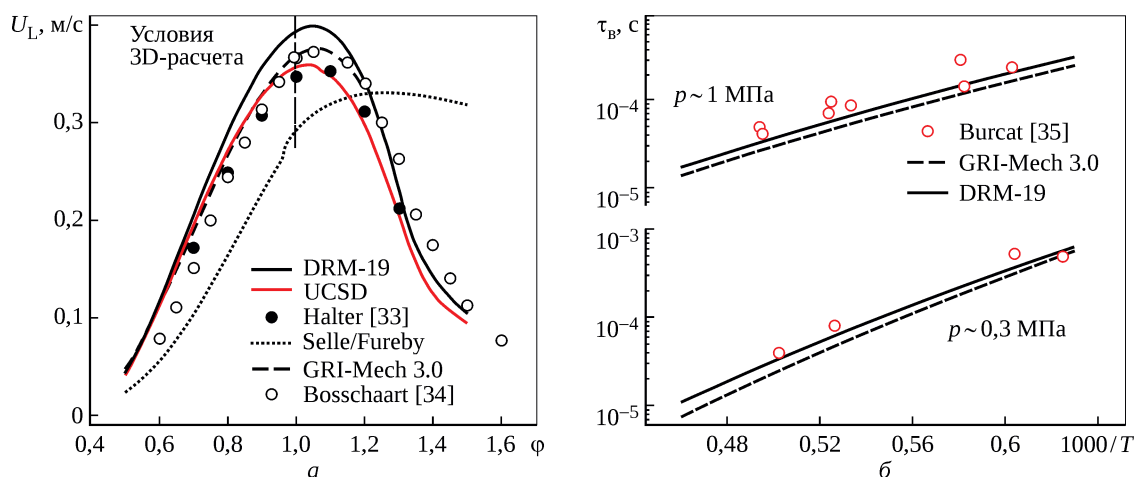


Рис. 3. Сравнение результатов 1D-расчетов с экспериментальными данными по ламинарной скорости пламени при разном отношении топливо/окислитель (а) и времени задержки воспламенения (б)

компонентов (5) варьируется от 1...2 до более чем 50 в механизме GRI-Mech 3.0, и для больших значений  $N$  это является хорошим тестом на эффективность вычислительной процедуры в многомерном случае. В предыдущих работах [7; 31] авторы провели тестирование и валидацию различных механизмов реакций в 0D- и 1D-постановках в терминах ламинарной скорости пламени и времени задержки, а также представили DNS-расчет с использованием кинетического механизма Selle/Fureby. Основываясь на этих работах, здесь авторы рассмотрели кинетический механизм DRM-19, занимающий промежуточное положение между популярным глобальным механизмом и детальной кинетикой окисления метана. Предварительное сравнение механизмов DRM-19, GRI-Mech 3.0, UCSD [32] (68 компонентов, 310 реакций) по ламинарной скорости пламени и времени задержки приведено на рис. 3, использованы экспериментальные данные о ламинарных пламенах из [33; 34] и данные о времени задержки воспламенения из [35]. Можно отметить, что существенно более простой кинетический механизм DRM-19 с 19 компо-

нентами и 84 реакциями показывает приемлемое совпадение с экспериментом и механизмом GRI-Mech 3.0 (53 компонента и 325 реакций) при стехиометрическом составе смеси. Таким образом, с целью снижения ресурсоемкости вычислений оправданно его использование в 3D-расчетах. Те же выводы могут быть сделаны относительно времени задержки воспламенения. Следует отметить, что каждая часть этих сравнений требует более подробного анализа, начиная с выбора корректных и повторяемых экспериментальных значений и заканчивая деталями вычислительной процедуры (сходимость по сетке, учет излучения, эффект Соре и т.д.). Тем не менее рис. 3 дает оценку применимости и погрешности механизма DRM-19 для рассматриваемых условий.

## Результаты моделирования

Результаты 3D-расчетов тепловыделения от всех реакций кинетического механизма и температуры смеси в среднем продольном сечении показаны на рис. 4.

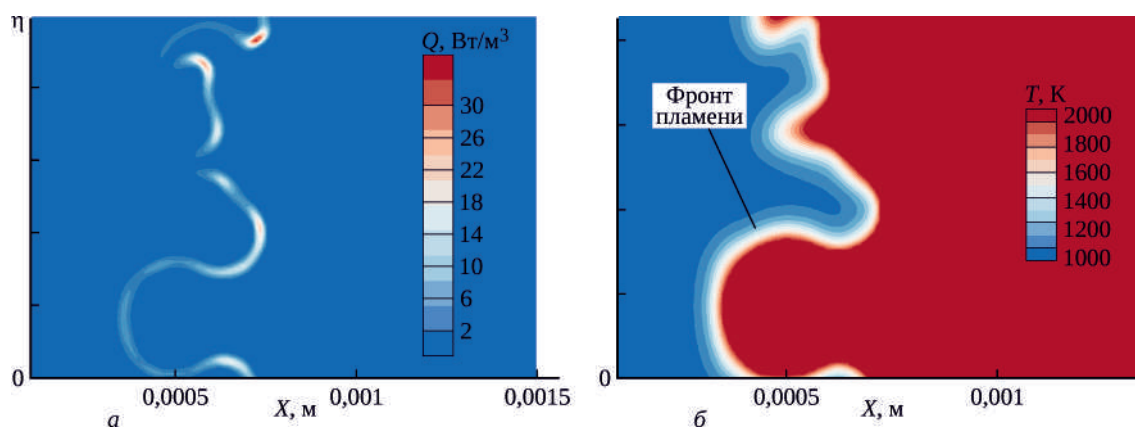


Рис. 4. Результаты трехмерного расчета в средней плоскости расчетной области вблизи фронта пламени (направление потока – слева направо): а – тепловыделение; б – температура

**Табл. 3.** Значения турбулентной скорости пламени из разных источников

Источник	$Re_t$	Da	Ka	$U_T$ , м/с
Эксперимент [13]	316	9,6	2,6	1,8
Зависимость (7)	150	3,1	4,6	1,31
Зависимость (6)				1,51
1D-расчет				1,55
3D-расчет				1,36

Характерное время для получения одного статистически стационарного режима течения составило 52 256 физических ядрочасов с шагом по времени  $\Delta t = 1,2$  нс (размер ячейки расчетной сетки  $\Delta h \sim 10$  мкм) на высокопроизводительной системе с 96 ядрами (одно ядро имело производительность  $\sim 80$  Гфлопс LINPACK). Для сравнения следует отметить, что в предыдущей работе [7], где использовался механизм Selle/Furebu, расчет одного режима занимал в среднем в пять раз меньше ядрочасов при тех же вычислительных и программных ресурсах.

Основной вклад в тепловыделение вносит группа реакций окисления, и фронт пламени может быть приближенно локализован областями интенсивного тепловыделения. Однако эта область не является равномерной и фронт пламени имеет значительные искривления и разрывы (см. рис. 4). Сравнение турбулентной скорости ( $U_T$ ) для наиболее близких экспериментальных данных из [13] ( $\phi = 1,0$ ,  $U_L = 0,386$  м/с), полуэмпирических зависимостей (6) и (7), расчета по одномерной модели и результатов прямого численного моделирования приведено в табл. 3. Можно отметить хорошее согласование между корреляциями и результатами 3D-расчетов, разница с экспериментальными данными значительнее, что объясняется расхождением во входных значениях чисел  $Re$  и  $Da$ .

Кривизна фронта пламени определяется вихрями и неоднородностью поля скорости. Параметры представленного расчетного режима следующие: число Рейнольдса, вычисленное по турбулентному масштабу длины,  $Re_t \sim 150$ , отношение турбулентных пульсаций скорости к значению ламинарной скорости пламени  $u' / U_L \sim 10$ , отношение турбулентного масштаба длины к толщине фронта пламени  $l / \delta_F \sim 20$ . Результаты 3D-расчета показали, что средние значения тепловыделения и толщина фронта пламени для рассматриваемых условий меньше, чем в случае ламинарного горения, минимальный радиус кривизны фронта пламени приблизительно в два раза больше колмогоровского масштаба длины.

## Заключение

В работе проведено прямое численное моделирование турбулентного горения предварительно перемешанной

метановоздушной смеси в модельных условиях при умеренных значениях числа Рейнольдса  $Re_t \sim 150$  и числе Карловица  $Ka \sim 5$  (область тонкой зоны реакции), а также моделирование с использованием расширенного механизма окисления метана DRM-19. Для оценки погрешностей, вносимых кинетическим механизмом DRM-19, проведены стандартные тесты и сравнение с экспериментом по времени задержки воспламенения и ламинарной скорости пламени. По результатам расчетов методом DNS турбулентная скорость пламени для рассматриваемых условий составила  $U_T = 1,36$  м/с. Для верификации результатов трехмерных расчетов были отобраны данные экспериментов со сферическими и бунзеновскими пламенами и данные расчетов по двум популярным полуэмпирическим корреляциям, для тех же условий показавшим значения  $U_T = 1,51$  и  $1,31$  м/с. При этом первая корреляция показывает погрешность в широком диапазоне экспериментальных условий  $< 30\%$ , а вторая –  $\sim 22\%$ .

Также в работе сформулирована и модифицирована одномерная модель на основе модели из [20], показавшая для набора экспериментальных точек, соответствующих режиму горения с тонкой зоной реакции, среднюю погрешность 26% по величине турбулентной скорости пламени, что приблизительно соответствует погрешности одной из лучших полуэмпирических корреляций. Внесенные в модель изменения: изменения итерационной процедуры с аналитическим решением уравнения для пульсаций температуры, использование предварительно рассчитанных зависимостей константы реакций – позволили существенно уменьшить вычислительную сложность одномерной модели, при этом модифицированная модель имеет вычислительную сложность, сравнимую с ламинарной задачей. Для условий DNS-расчета одномерная модель показала значение  $U_T = 1,55$  м/с. Таким образом, отличие данных DNS по  $U_T$  от данных корреляций и одномерной модели не превышает 14%. В то же время отличие по требуемому вычислительному времени при прочих равных условиях для одномерной и трехмерной моделей составляет несколько порядков –  $\sim 10^{-2}$  и  $10^4$  ядрочасов соответственно.

Исходя из результатов сравнения по одной из возможных средних характеристик течения – турбулентной скорости пламени  $U_T$ , можно предположить, что результаты трехмерного расчета имеют сопоставимую с экспериментальными данными погрешность и могут использоваться для верификации других расчетов с использованием различных моделей турбулентного горения.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и ТУБИТАК в рамках научного проекта № 21-51-46007.*



---

## Литература / Reference

1. Tanahashi M., Fujimura M., Miyauchi T. Coherent fine-scale eddies in turbulent premixed flames // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2000. Vol. 28, iss. 1. P. 529–535.
2. Local flame structure in the well-stirred reactor regime / M. Tanahashi, Y. Nada, Y. Ito, T. Miyauchi // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2002. Vol. 29, iss. 2. P. 2041–2049.
3. Shim Y.-S., Fukushima N., Shimura M., Nada Y., Tanahashi M. and Miyauchi T. Radical fingering in turbulent premixed flame classified into thin reaction zones / Y.-S. Shim, N. Fukushima, M. Shimura, Y. Nada, M. Tanahashi, T. Miyauchi // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2013. Vol. 34, iss. 1. P. 1383–1391.
4. Bell J.B., Day M.S., Grcar J.F. Numerical simulation of premixed turbulent methane combustion // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2002. Vol. 29, iss. 2. P. 1987–1993.
5. Carlsson H., Yu R., Bai X.-S. Flame structure analysis for categorization of lean premixed CH<sub>4</sub>/air and H<sub>2</sub>/air flames at high Karlovitz numbers: direct numerical simulation studies // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2015. Vol. 35, iss. 2. P. 1425–1432.
6. 3D DNS of methane-air turbulent premixed flame in thin reaction zones with a detailed kinetic mechanism / B. Yenerdag, Y. Naka, M. Shimura, M. Tanahashi. 2015. (Ninth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP-9), June 30 – July 3, 2015, Melbourne, Australia).
7. Semenev P.A., Martynenko S.I., Toktaliev P.D. Direct numerical simulation of methane-air mixture combustion in synthetic turbulence test conditions // *Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2019) : короткие статьи и описания плакатов : г. Калининград, 2–4 апреля 2019 г. / Рос. акад. наук, Суперкомпьютерный консорциум университетов России. С. 448. Назв. конф. на англ. яз.: Parallel computational technologies (PCT'2019). Semenev P.A., Martynenko S.I., Toktaliev P.D. Direct numerical simulation of methane-air mixture combustion in synthetic turbulence test conditions. Proc. of conference "Parallel'nye vychislitel'nye tekhnologii" [Parallel computational technologies (PCT'2019)]. Kaliningrad, 2–4 april 2019. Russian Academy of Sciences and HPC Association of Russian Universities. P. 448.*
8. Moin P., Manesh K. Direct numerical simulation: a tool in turbulence research // *Annual Review of Fluid Mechanics*. 1998. Vol. 30. P. 539–578.
9. OpenFOAM : the open source CFD toolbox / OpenCFD Ltd. URL: <http://www.openfoam.com>.
10. Prof. Burcat's Thermodynamic Data // Laboratory for Chemical Kinetics : site. URL: <http://garfield.chem.elte.hu/Burcat/burcat.html>.
11. Generalized multiparameter correlation for nonpolar and polar fluid transport properties / T.-H. Chung, M. Ajlan, L.L. Lee, K.E. Starling // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 1988. Vol. 27, iss. 4. P. 671–679.
12. Peters N. Turbulent combustion. Cambridge : Cambridge University Press, 2000. 320 p.
13. Tamadonfar P., Gülder Ö.L. Effects of mixture composition and turbulence intensity on flame front structure and burning velocities of premixed turbulent hydrocarbon/air Bunsen flames // *Combustion and Flame*. 2015. Vol. 162, iss. 12. P. 4417–4441.
14. Characterization of flame front surfaces in turbulent premixed methane/air combustion / G.J. Smallwood, Ö.L. Gülder, D.R. Snelling et al. // *Combustion and Flame*. 1995. Vol. 101, iss. 4. P. 461–470.
15. Ravi S., Morones A., Petersen E. Evaluation of numerical turbulent combustion models using flame speed measurements from a recently developed fan-stirred explosion vessel. 2013. 7 p. (8th U.S. National Combustion Meeting : organized by the Western States Section of the Combustion Institute and hosted by the University of Utah, May 19–22, 2013 ; paper 070LT-0096).
16. Driscoll J.F. Turbulent premixed combustion: flamelet structure and its effect on turbulent burning velocities // *Progress in Energy and Combustion Science*. 2008. Vol. 34, iss. 1. P. 91–134.
17. Bradley D., Lawes M., Mansour M.S. Correlation of turbulent burning velocities of ethanol–air, measured in a fan-stirred bomb up to 1.2 MPa // *Combustion and Flame*. 2011. Vol. 158, iss. 1. P. 123–138.
18. Burke E.M., Gueth F., Monaghan R.F.D. A comparison of turbulent flame speed correlations for hydrocarbon fuels at elevated pressures // *ASME Turbo Expo 2016: Turbomachinery Technical Conference and Exposition*, June 13–17, 2016, Seoul, South Korea. Vol. 4B: Combustion, fuels and emissions. GT2016-57804. 13 p.
19. Abdel-Gayed R.G., Bradley D., Lawes M. Turbulent burning velocities: a general correlation in terms of straining rates // *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Science*. 1987. Vol. 414, no. 1847. P. 389–413.

- 
20. Burke E.M. Development of correlated and computational methods for predicting premixed turbulent flame speed : a thesis ... doctor of philosophy. NUI Galway, 2018. xxiii, 208 p.
  21. Lipatnikov A.N., Chomiak J. Molecular transport effects on turbulent flame propagation and structure // Progress in Energy and Combustion Science. 2005. Vol. 31, iss. 1. P. 1–73.
  22. Development of an algebraic reaction rate closure for the numerical calculation of turbulent premixed methane, ethylene, and propane/air flames for pressures up to 1.0 MPa / S.P.R. Muppala, N.K. Aluri, F. Dinkelacker, A. Leipertz // Combustion and Flame. 2005. Vol. 140, iss. 4. P. 257–266.
  23. Kerstein A.R. One-dimensional turbulence: model formulation and application to homogeneous turbulence, shear flows, and buoyant stratified flows // Journal of Fluid Mechanics. 1999. Vol. 392. P. 277–334.
  24. Ashur W.T., Kerstein A.R. One-dimensional turbulence: variable density formulation and application to mixing layers // Physics of Fluids. 2005. Vol. 17, iss. 2. P. 1–26.
  25. Echekki T., Kerstein A.R., Sutherland J.C. The one-dimensional-turbulence model // Turbulent combustion modeling. Springer, 2011. P. 249–276. (Fluid Mechanics and Its Applications ; vol. 95).
  26. Chemically reacting flow: theory and practice / R.J. Kee, M.E. Coltrin, P. Glarborg, H. Zhu 2nd ed. John Wiley and Sons, 2017. 861 p.
  27. Modeling temperature and species fluctuations in turbulent, reacting flow / R.L. Gaffney, J.A. White, S.S. Girimaji, J.P. Drummond // Computing Systems in Engineering. 1994. Vol. 5, iss. 2. P. 117–133.
  28. Borghi R. Chemical reactions calculations in turbulent flows: application to a CO-containing turbojet plume // Turbulent diffusion in environmental pollution : proceedings of a Symposium held at Charlottesville, Virginia, April 8–14, 1973 / ed. by F.N. Frenkiel, R.R. Munn. New York etc. : Academic press, 1974. P. 349–365. (Advances in Geophysics ; vol. 18B).
  29. Зельдович Я.Б., Франк-Каменецкий Д.А. Теория теплового распространения пламени // Журнал физической химии. 1938. Т. 12, вып. 1. С. 100–105.  
Zel'dovich Ya.B., Frank-Kamenetskii D.A. Teoriia teplovogo rasprostraneniia plameni [Theory of thermal propagation of flame]. Journal of Physical Chemistry. 1938. Vol. 12, issue 1. P. 100–105.
  30. Goodwin D.G., Moffat H.K., Speth R.L. Cantera: an object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. Version 2.3.0. URL: <http://www.cantera.org>. Date of publ.: 18.01.2017.
  31. Семенов П.А., Токталиев П.Д. Анализ и тестирование детальных и полудетальных механизмов окисления метана/пропана // Проблемы газодинамики и тепломассообмена в энергетических установках : труды XXII Школы-семинара молодых ученых и специалистов под руководством акад. РАН А.И. Леонтьева, 20–24 мая 2019 года, Москва, Россия. М. : Печатный салон «Шанс», 2019. Т. 1. С. 177–178.  
Semenev P.A., Toktaliev P.D. Analiz i testirovanie detal'nykh i poludetal'nykh mekhanizmov okisleniia metana/propana [Analysis and testing of detailed and semi-detailed mechanisms of methane/propane oxidation]. Abstracts of reports of the XXII school of the problem of gas-dynamics and heat and mass-exchange in power machines . Moscow: Print Shop Shans, 2019. Vol. 1. P. 177–178.
  32. Petrova M.V., Williams F.A. A small detailed chemical-kinetic mechanism for hydrocarbon combustion // Combustion and Flame. 2006. Vol. 144, iss. 3. P. 526–544. URL: <http://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html>.
  33. Halter F., Tahtouh T., Mounam-Rousselle C. Nonlinear effects of stretch on the flame front propagation // Combustion and Flame. 2010. Vol. 157, iss. 10. P.1825–1832.
  34. Bosschaart K.J., Goey L.P.H. de. The laminar burning velocity of flames propagating in mixtures of hydrocarbons and air measured with the heat flux method // Combustion and Flame. 2004. Vol. 136, iss. 3. P. 261–269.
  35. Burcat A., Scheller K., Lifshitz A. Shock-tube investigation of comparative ignition delay times for C1–C5 alkanes // Combustion and Flame. 1971. Vol. 16, iss. 1. P. 29–33.

*Материалы получены редакцией 03.02.2021*