

ВЛИЯНИЕ ТУРБУЛЕНТНОСТИ НА СРЕДНЮЮ СКОРОСТЬ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ: ОБЗОР*

С. М. Фролов¹

Аннотация: Приведен обзор моделей, позволяющих приближенно рассчитать среднюю скорость реакции, протекающей в турбулентном реагирующем потоке во фронтальном, объемном или комбинированном фронтально-объемном режимах. Рассмотрены модели реактора идеального и частичного смешения, модели априорных функций плотности распределения вероятностей (ФПРВ) и модель совместных ФПРВ массовой скорости и скалярных параметров реагирующего потока.

Ключевые слова: турбулентное реагирующее течение; средняя скорость химической реакции; реактор частичного смешения; функции плотности распределения вероятностей

Введение

При численном моделировании турбулентных реагирующих течений на основе осредненных уравнений движения, когда область течения представляется в виде дискретного набора контрольных объемов (расчетных ячеек), возникает проблема определения средней скорости химических превращений в расчетной ячейке. Эту проблему часто называют проблемой «взаимодействия» турбулентности с химией (ВТХ; в англоязычной литературе: turbulence – chemistry interaction), поскольку при определении средней скорости химических превращений необходимо учесть пространственную неоднородность химической активности в расчетной ячейке, вызванную турбулентностью.

В формальном отношении проблема сводится к получению среднего значения нелинейной функции W (скорость химической реакции)

$$W = k_0 F(C_1, C_2, \dots) \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

мгновенных локальных значений температуры T и мольных концентраций веществ C_1, C_2, \dots :

$$\overline{W} = k_0 F(C_1, C_2, \dots) \exp\left(-\frac{E}{RT}\right).$$

* Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 15-08-00782). Автор признателен В. С. Посвянскому за вывод соотношений для Гауссовских квадратур.

¹ Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук; Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», smfrol@chph.ras.ru

Здесь и далее черта сверху означает осреднение по объему расчетной ячейки; k_0 — предэкспоненциальный множитель; F — функция; E — энергия активации; R — газовая постоянная. Очевидно, что в общем случае

$$\bar{W} \neq W(\bar{T}, \bar{C}_1, \bar{C}_2, \dots),$$

где \bar{T} — средняя температура; \bar{C}_i — средняя мольная концентрация i -го компонента смеси.

Из теории турбулентного горения следует [1], что независимо от режима протекания реакции (фронтальный, объемный или комбинированный фронтально-объемный) корректное определение \bar{W} должно быть основано на совместной ФПРВ температуры и мольных концентраций компонентов $P(T, C_1, C_2, \dots)$:

$$\bar{W} = \int W(T, C_1, C_2, \dots) P(T, C_1, C_2, \dots) dT dC_1 dC_2 \dots, \quad (1)$$

которая, как правило, неизвестна, а уравнение переноса для $P(T, C_1, C_2, \dots)$ требует замыканий. Именно поэтому в литературе используется множество упрощенных моделей ВТХ, позволяющих приближенно рассчитать среднюю скорость реакции \bar{W} , протекающую в том или ином режиме.

При протекании реакции во фронтальном режиме турбулентность деформирует пламя — тонкую зону реакции, отделяющую свежую смесь от продуктов горения. В этом случае для определения средней скорости реакции в расчетной ячейке фактически требуется знать вероятность попадания в тонкую зону реакции, поскольку ни в свежей смеси, ни в продуктах горения реакция не идет. Классические примеры фронтального режима горения — пламя бунзеновской горелки и распространение пламени в трубе с препятствиями.

Для объемного режима характерны широкие зоны реакции с высокой вероятностью обнаружения промежуточных состояний вещества между свежей смесью и продуктами горения. Примеры объемного режима горения — самовоспламенение газа в машине быстрого сжатия и детонация.

Наконец, комбинированный фронтально-объемный режим протекания реакции, обладая особенностями обоих режимов, наиболее сложен для моделирования, поскольку включает переходные процессы. Пример такого комбинированного режима горения — переход горения в детонацию (ПГД) в газах: при ПГД протекание реакции во фронте турбулентного пламени сопровождается объемной реакцией перед фронтом пламени в ударно сжатом газе, которая приводит к серии локальных взрывов и к возникновению детонации. Другой пример — стук в поршневом двигателе с искровым зажиганием: сгорание заряда топливной смеси происходит во фронте турбулентного пламени до тех пор, пока в конечной части заряда не произойдет объемное самовоспламенение.

Модели

В модели реактора «идеального смешения» принимают, что в расчетной ячейке

$$\bar{W} = W(\bar{T}, \bar{C}_1, \bar{C}_2, \dots) . \quad (2)$$

Считается, что модель (2) применима к реагирующим течениям с сильной мелкомасштабной турбулентностью, в которых характерное время смешения меньше характерного времени химических превращений. Такая ситуация реализуется, например, при так называемом «беспламенном» горении [2] или при форкамерном зажигании [3, 4]. Для организации беспламенного горения топливо и окислитель подают в камеру сгорания таким образом, чтобы обеспечить очень быстрое смешение компонентов до начала горения. Другими словами, смешение компонентов должно произойти в течение периода индукции самовоспламенения так, что после самовоспламенения горючее окисляется в кинетически лимитированном режиме со скоростью, определяемой средними значениями температуры и концентраций компонентов. При форкамерном зажигании быстрая струя с относительно малым поперечным сечением гасится, и в дальнейшем продукты реакции после периода индукции вызывают самовоспламенение горючей смеси в основном объеме [4]. Таким образом, модель (2) применима лишь к объемному режиму протекания реакции.

В отличие от модели реактора идеального смешения в модели «реактора частичного смешения» [5] учитывается конечное время молекулярного смешения («микросмешения») реагентов. Однако и здесь предполагается, что реакция протекает в объемном режиме. Расчетная ячейка рассматривается как реактор постоянного объема, в который поступают моли свежей реакционноспособной смеси. Каждый моль, поступающий в реактор, взаимодействует с молями, поступившими ранее и уже имеющими более высокую температуру и другой состав благодаря частичному или полному превращению в реакторе. Следовательно, вновь поступающие моли в результате смешения нагреваются, и в них начинают протекать химические превращения. Скорость смешения молей зависит от некоторого характерного времени микросмешения τ_{mix} .

Среднюю скорость химических превращений \bar{W} в таком реакторе определяют как скорость реакции $W(T, C)$ при некоторой (заранее неизвестной) температуре T и некоторых (заранее неизвестных) мольных концентрациях компонентов C_i , причем для T и C_i записывают обыкновенные дифференциальные уравнения типа:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\bar{T} - T}{\tau_{\text{mix}}} + LW(T, C), \quad T(0) = T_0; \quad (3)$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{\bar{C} - C}{\tau_{\text{mix}}} + W(T, C), \quad C(0) = C_0, \quad (4)$$

где в (4) для простоты опущены индексы, соответствующие номерам компонентов смеси; t — время; L — коэффициент, зависящий от теплоты реакции; T_0 и C_0 —

начальные значения температуры и концентрации. Неизвестные средние значения температуры \bar{T} и концентрации \bar{C} определяются с помощью ФПРВ $P_T(T)$ и $P_C(C)$:

$$\bar{T} = \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} T P_T(T) dT; \quad \bar{C} = \int_{C_{\min}}^{C_{\max}} C P_C(C) dC, \quad (5)$$

где индексами min и max обозначены минимальные и максимальные значения переменных в реакторе. Если предположить, что температура и концентрации компонентов смеси представляют собой эргодическую динамическую систему, можно записать:

$$P_T(T) dT = P_C(C) dC = \phi(t) dt, \quad (6)$$

где $\phi(t)$ — случайная функция. В качестве такой функции часто выбирают экспоненциальную функцию вида

$$\phi(t) = \frac{e^{-t/\tau_{\text{res}}}}{\tau_{\text{res}}}. \quad (7)$$

Здесь τ_{res} — среднее время пребывания моля смеси в реакторе. С учетом этих соображений средняя температура и средняя концентрация рассматриваемого компонента в зоне реакции определяются интегралами:

$$\bar{T} = \int_0^{\infty} T(t) \phi(t) dt; \quad \bar{C} = \int_0^{\infty} C(t) \phi(t) dt. \quad (8)$$

Таким образом, задача (3)–(8) оказывается замкнутой и позволяет рассчитать искомую скорость объемной реакции \bar{W} с учетом турбулентно-молекулярного смешения. Характерные времена молекулярного смешения τ_{mix} и пребывания τ_{res} обычно определяются из модели турбулентности ($\tau_{\text{mix}} \sim k/\varepsilon$, где k — турбулентная кинетическая энергия; ε — ее диссипация) и на основе средней скорости направленного движения молей ($\tau_{\text{res}} \sim L/u$, где L — характерный размер реактора, u — средняя скорость направленного движения).

Модель [5] была модифицирована в [6], где в качестве «реактора частичного смешения» рассматривалась каждая ячейка объемной расчетной сетки, на которой численно решалась задача о турбулентном горении. При этом считалось, что

$$\bar{W} = W(\bar{T}, \bar{C}),$$

причем значения \bar{T} и \bar{C} определялись в процессе решения уравнений сохранения энергии и вещества методом расщепления по физическим и химическим процессам: сначала учитывался вклад конвективного переноса вещества, затем вклад диффузионных потоков без учета микросмешения и, наконец, вклад химических превращений с учетом микросмешения. Последний этап расчета соответствовал

объемному горению в «реакторе частичного смешения», представленного ячейкой расчетной сетки.

В модифицированной модели [6] аналогами дифференциальных уравнений (3) и (4) служат уравнения для \bar{T} и \bar{C} :

$$\frac{d\bar{T}}{dt} = \frac{\bar{T}^1 - \bar{T}^0}{\tau} = kW(\bar{T}, \bar{C}); \quad \frac{d\bar{C}}{dt} = \frac{\bar{C}^1 - \bar{C}^0}{\tau} = W(\bar{T}, \bar{C}), \quad (9)$$

где τ — шаг интегрирования по времени; \bar{T}^0 и \bar{C}^0 — средние значения температуры и концентрации на входе в реактор; \bar{T}^1 и \bar{C}^1 — температура и концентрация на выходе из реактора. Из (9) следует, что в данной модели фигурируют три пары значений температуры и концентрации: искомые средняя температура и средняя концентрация в зоне реакции \bar{T} и \bar{C} , известные значения средней температуры и средней концентрации на входе в реактор \bar{T}^0 и \bar{C}^0 , а также неизвестные значения средней температуры и средней концентрации на выходе из реактора \bar{T}^1 и \bar{C}^1 . В простейшем случае, когда $\bar{T} = \bar{T}^1$ и $\bar{C} = \bar{C}^1$, уравнения (9) решаются обычным образом с помощью стандартной кинетической программы. В других случаях уравнения (9) незамкнуты: имеется два набора переменных — \bar{T} и \bar{C} , с одной стороны, и \bar{T}^1 и \bar{C}^1 , с другой стороны. В этом случае для замыкания задачи в [6] используются решения стационарных уравнений (9):

$$\frac{\bar{T}^1 - \bar{T}^0}{\tau} = \frac{\bar{T}^1 - \bar{T}}{\tau_{\text{mix}}} = kW(\bar{T}, \bar{C});$$

$$\frac{\bar{C}^1 - \bar{C}^0}{\tau} = \frac{\bar{C}^1 - \bar{C}}{\tau_{\text{mix}}} = W(\bar{T}, \bar{C}),$$

которые дают связь между переменными \bar{T} и \bar{T}^1 , а также \bar{C} и \bar{C}^1 .

В [7, 8] предложена модель «реактора частичного смешения», которая предназначена для описания комбинированных фронтально-объемных режимов горения. При численном решении задачи на объемной расчетной сетке в расчетной ячейке выделяются две зоны: зона реакции с объемной долей $0 \leq \lambda \leq 1$ и химически инертная зона с объемной долей $(1 - \lambda)$. Считается, что химические превращения возможны только в зоне реакции. Коэффициент λ рассчитывается по формуле:

$$\lambda = \frac{\tau_{\text{res}} + \tau_c}{\tau_{\text{res}} + \tau_c + \tau_{\text{mix}}},$$

где время пребывания τ_{res} равно шагу интегрирования по времени ($\tau_{\text{res}} = \tau$); τ_c и τ_{mix} — характерные времена реакции и смешения. Для определения времени смешения используется формула:

$$\tau_{\text{mix}} = \sqrt{\frac{\mu_{\text{eff}}}{\rho\varepsilon}},$$

где $\rho = \bar{\rho}$ — средняя плотность; μ_{eff} — эффективная турбулентно-молекулярная вязкость. Характерное время реакции определяется по полной мольной концентрации в ячейке и по средней скорости реакции образования продуктов. Средняя скорость химических превращений \bar{W} , входящая в осредненное уравнение энергии для турбулентного реагирующего течения, рассчитывается по средним значениям температуры и массовой концентрации в расчетной ячейке, однако химический источниковый член в уравнении энергии умножается на коэффициент λ :

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y})}{\partial t} + \nabla (\bar{\rho} \tilde{U} \tilde{Y}) = \nabla (\mu_{\text{eff}} \nabla \tilde{Y}_i) + \lambda \bar{W}, \quad (10)$$

тем самым учитывая тот факт, что реакция протекает лишь в определенной части расчетной ячейки. В уравнении (10) Y — массовая доля химического компонента; \vec{U} — вектор массовой скорости; тильда здесь и далее означает осреднение по Фавру ($\tilde{Y} = \bar{\rho} Y / \bar{\rho}$). Модель [7, 8] использовалась, например, в [9].

Одна из наиболее часто используемых моделей учета ВТХ — модель априорных ФПРВ. Суть модели состоит в том, что для учета влияния турбулентности на среднюю скорость реакции априорно вводится ФПРВ $\rho(\xi)P(\xi)/\bar{\rho}$ для некоторой случайной переменной ξ , связанной либо с концентрацией того или иного компонента C , либо с некоторой консервативной функцией концентраций f (например, переменной смещения), либо с температурой T . Если форма функции $P(\xi)$ задана, то ФПРВ можно определить по первому ξ , второму $\rho(\xi)\xi^{n2}/\bar{\rho}$ и высшим $\rho(\xi)\xi^{nm}/\bar{\rho}$ моментам переменной ξ , получаемым из решения осредненных уравнений турбулентного реагирующего течения.

Такой подход использовался в [10–12] для определения средней скорости реакции по формуле:

$$\bar{W} = \int_0^1 W(C)P(C) dC, \quad (11)$$

в [13] — по формуле:

$$\bar{W} = \int_0^1 W(\tilde{C}, f) P(f) df$$

и в [14–16] — по формуле:

$$\bar{W} = \int_0^1 \int_0^1 W(C, f) P(c, f) dC df.$$

В большинстве работ для задания формы ФПРВ используют бета-функцию:

$$P(\xi, s, t) = \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \xi^{\alpha(x,t)-1} (1 - \xi)^{\beta(x,t)-1}, \quad (12)$$

где x — набор координат, причем отношение гамма-функций в (12)

$$\Gamma(z) \equiv \int_0^{\infty} \eta^{z-1} e^{-\eta} d\eta$$

используется только для нормировки ФПРВ

$$\int_0^1 P(\xi) d\xi = 1.$$

В функции (12) содержатся два неизвестных параметра

$$\varepsilon(x, t) = \bar{\xi} (g^{-1} - 1) ; \quad \beta(x, t) = (1 - \bar{\xi}) (g^{-1} - 1) ,$$

где $g = \xi^2 / (\bar{\xi}(1 - \bar{\xi}))$. Эти параметры определяются из решения уравнений сохранения для первого и второго моментов переменной ξ : для $\tilde{\xi}(x, t)$ и для $\overline{\rho \xi^{1/2}}(x, t)$. После определения параметров α и β ФПРВ становится полностью определенной и позволяет вычислить средние значения других переменных, включая и среднюю скорость реакции \bar{W} , например по (11). Отметим, что форма ФПРВ в виде бета-функции, в принципе, позволяет моделировать и фронтальный, и объемный режимы протекания реакции.

В [17–20] предложена модель расчета средней скорости реакции для фронтальных режимов горения. Среднюю скорость энерговыделения \bar{S} в турбулентном реагирующем течении смеси с коэффициентом избытка горючего Φ и средней температурой \bar{T} предложено определять по линейной интерполяционной формуле:

$$\bar{S} = a\bar{S}_1 + (1 - a)\bar{S}_2.$$

Здесь a — весовой множитель; \bar{S}_1 и \bar{S}_2 — средние скорости энерговыделения в предварительно перемешанных смесях с фиксированными коэффициентами избытка горючего Φ_1 и Φ_2 такими, что $\Phi_1 < \Phi < \Phi_2$:

$$\bar{S}_1 = \sum_j \int_{T_0}^{T_{c1}} D_j W_{j1}(T) P(T, \bar{T}) dT ; \quad \bar{S}_2 = \sum_j \int_{T_0}^{T_{c2}} D_j W_{j2}(T) P(T, \bar{T}) dT ,$$

где W_{j1} и W_{j2} — скорости изменения концентрации j -го компонента при горении предварительно перемешанной смеси с $\Phi = \Phi_1$ и $\Phi = \Phi_2$ соответственно; D_j — теплота разложения на атомы j -го компонента смеси; T_0 , T_{c1} и T_{c2} — начальная температура и температуры горения смесей с $\Phi = \Phi_1$ и $\Phi = \Phi_2$ соответственно; $P(T, \bar{T})$ — априорная бимодальная ФПРВ температуры во фронте турбулентного пламени с малой, но отличной от нуля плотностью вероятности промежуточных

значений температуры $T_0 < T < T_{c1}$ и $T_0 < T < T_{c2}$. При этом в [17–20] считается, что W_{j1} и W_{j2} в турбулентном пламени такие же, как в ламинарном пламени. Последнее означает, что расчеты \bar{S} должны предшествовать расчеты ламинарного пламени с табуляцией W_j .

В рамках модели априорных ФПРВ можно получить приближенные аналитические выражения для средней скорости химических превращений в объемном режиме протекания реакции. Например, для вычисления интегралов типа (1) можно задаться формой ФПРВ пульсаций температуры и/или концентраций компонентов и использовать Гауссовы квадратуры с ограниченным числом членов ряда. Такой подход был использован в [21], где для этой цели использовались ФПРВ температуры в форме треугольника и в форме распределения Гаусса и учитывались 2–3 члена ряда. Ниже приведены аналитические выражения для средней скорости химической реакции, полученные для ФПРВ пульсаций температуры в форме распределения Гаусса при учете до 7 членов ряда.

Предположим, что температура T — случайная переменная, удовлетворяющая распределению Гаусса, т. е. $T = a + \sigma x$, где $a = \bar{T}$ — среднее значение; $\sigma = \sqrt{T'T'}$ — дисперсия; T' — турбулентная пульсация температуры; x — стандартная Гауссова переменная, изменяющаяся в диапазоне от 0 до 1 и удовлетворяющая ФПРВ

$$p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

Среднее значение любой нелинейной функции от температуры (включая арренусовскую функцию) $f(T) = f(a + \sigma x)$, равно

$$\overline{f(T)} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(a + \sigma x) p(x) dx.$$

Чтобы найти интеграл в правой части, воспользуемся формулой для Гауссовых квадратур

$$\overline{f(T)} \approx \sum_{k=1}^n f(a + \sigma x_k) c_k, \quad (13)$$

где узлы (x_1, x_2, \dots, x_n) и коэффициенты (c_1, c_2, \dots, c_n) определяются, как показано ниже.

Рассмотрим систему ортогональных полиномов $H_n(x)$ с весом $p(x)$, или, другими словами, полиномов Эрмита для $p(x)$. В этом случае узлы (x_1, x_2, \dots, x_n) будут корнями полиномов $H_n(x)$, а коэффициенты (c_1, c_2, \dots, c_n) можно рассчитать по формуле:

$$c_k = \int_{-\infty}^{+\infty} l_{n,k}^2(x) p(x) dx.$$

Здесь $l_{n,k}(x)$ — элементарные полиномы Лагранжа:

$$l_{n,k}(x_k) = 1; \quad l_{n,j}(x_k) = 0, \quad j \neq k;$$

$$l_{n,k}(x) = \prod_{j \neq k} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}.$$

При $n = 3$ для уравнения (13) можно получить значения узлов и коэффициентов:

$$x_1 = -\sqrt{3}; \quad x_2 = 0; \quad x_3 = \sqrt{3};$$

$$c_1 = \frac{1}{6}; \quad c_2 = \frac{2}{3}; \quad c_3 = \frac{1}{6};$$

$$c_1 + c_2 + c_3 = 1.$$

В этом случае формула (13) сводится к соотношению:

$$\overline{f(T)} \approx \frac{1}{6} f(a - \sqrt{3}\sigma) + \frac{2}{3} f(a) + \frac{1}{6} f(a + \sqrt{3}\sigma). \quad (14)$$

Видно, что $\overline{f(T)} \neq f(\overline{T})$ и $\overline{f(T)} = f(\overline{T})$ только при $\sigma = 0$ (этот случай соответствует однородному полю температуры).

При $n = 5$ значения узлов и коэффициентов определяются так:

$$x_1 = -\sqrt{5 + \sqrt{10}}; \quad x_2 = -\sqrt{5 - \sqrt{10}}; \quad x_3 = 0;$$

$$x_4 = \sqrt{5 - \sqrt{10}}; \quad x_5 = \sqrt{5 + \sqrt{10}};$$

$$c_1 = \frac{1}{60} (7 - 2\sqrt{10}); \quad c_2 = \frac{1}{60} (7 + 2\sqrt{10}); \quad c_3 = \frac{8}{15};$$

$$c_4 = \frac{1}{60} (7 + 2\sqrt{10}); \quad c_5 = \frac{1}{60} (7 - 2\sqrt{10});$$

$$c_1 + c_2 + c_3 + c_4 + c_5 = 1.$$

В этом случае формула (13) сводится к соотношению:

$$\overline{f(T)} \approx \frac{1}{60} (7 - 2\sqrt{10}) f(a - \sqrt{5 + \sqrt{10}}\sigma) +$$

$$+ \frac{1}{60} (7 + 2\sqrt{10}) f(a - \sqrt{5 - \sqrt{10}}\sigma) + \frac{8}{15} f(a) +$$

$$+ \frac{1}{60} (7 + 2\sqrt{10}) f(a + \sqrt{5 - \sqrt{10}}\sigma) + \frac{1}{60} (7 - 2\sqrt{10}) f(a + \sqrt{5 + \sqrt{10}}\sigma). \quad (15)$$

Из (15) видно, что $\overline{f(T)} \neq f(\overline{T})$ и $\overline{f(T)} = f(\overline{T})$ только при $\sigma = 0$.

При $n = 7$ узлы и коэффициенты в (13) определяются так:

$$\begin{aligned}x_1 &= -3,75044; & x_2 &= -2,36676; & x_3 &= -1,15441; & x_4 &= 0; \\x_5 &= 1,15441; & x_6 &= 2,36676; & x_7 &= 3,75044; \\c_1 &= 0,000548269; & c_2 &= 0,0307571; & c_3 &= 0,240123; & c_4 &= 0,457143; \\c_5 &= 0,240123; & c_6 &= 0,0307571; & c_7 &= 0,000548268; \\c_1 + c_2 + c_3 + c_4 + c_5 + c_6 + c_7 &= 1,\end{aligned}$$

а формула (13) сводится к соотношению:

$$\begin{aligned}\overline{f(T)} &\approx 0,000548269f(a - 3,75044\sigma) + 0,0307571f(a - 2,36676\sigma) + \\&+ 0,240123f(a - 1,15441\sigma) + 0,457143f(a) + 0,240123f(a + 1,15441\sigma) + \\&+ 0,0307571f(a + 2,36676\sigma) + 0,000548269f(a + 3,75044\sigma).\end{aligned}\quad (16)$$

Как и ранее, находим, что $\overline{f(T)} \neq f(\overline{T})$ и $\overline{f(T)} = f(\overline{T})$ только при $\sigma = 0$.

При внимательном рассмотрении соотношений (14)–(16) можно видеть, что среднее значение аррениусовской экспоненты, входящей в выражение скорости химической реакции, должно рассчитываться множество раз. Так, при $n = 3$ экспоненту нужно рассчитывать для трех значений температуры: $T = a - \sqrt{3}\sigma$, a и $a + \sqrt{3}\sigma$. При $n = 5$ экспоненту требуется рассчитывать пять раз: для температур $T = a - \sqrt{5 + \sqrt{10}}\sigma$, $a - \sqrt{5 - \sqrt{10}}\sigma$, a , $a + \sqrt{5 - \sqrt{10}}\sigma$ и $a + \sqrt{5 + \sqrt{10}}\sigma$. Наконец, при $n = 7$ экспоненту потребуется рассчитать для семи значений температуры: $T = a - 3,75044\sigma$, $a - 2,36676\sigma$, $a - 1,15441\sigma$, a , $a + 1,15441\sigma$, $a + 2,36676\sigma$ и $a + 3,75044\sigma$. Для сокращения времени счета эти операции проще проводить непосредственно в кинетическом решателе.

Для применения соотношений (14)–(16) необходимо знать дисперсию турбулентных пульсаций температуры $\sigma = \sqrt{\overline{T'T'}}$. Ее можно определить, решая дифференциальное уравнение переноса для σ^2 (см., например, [21]).

Одна из наиболее перспективных моделей ВТХ — модель совместных ФПРВ массовой скорости и скалярных параметров реагирующего потока (энтальпии и концентраций компонентов), предложенная в [1, 22] и реализованная в [23] и, например, в [24]. В отличие от модели априорных ФПРВ в этой модели совместная ФПРВ определяется из решения многомерного интегродифференциального уравнения переноса методом Монте Карло. Рассматриваемая модель одинаково применима к реагирующим турбулентным течениям с протеканием реакции во фронтальном, объемном и комбинированном фронтально-объемном режимах.

Мгновенные локальные состояния турбулентного реагирующего течения представляются в виде набора взаимодействующих (лагранжевых) частиц. Каждая i -я частица обладает индивидуальными свойствами: положением в пространстве x_k^i и тремя локальными мгновенными компонентами скорости u_k^i ($k = 1, 2, 3$), объ-

емом V^i , плотностью ρ^i , статической энтальпией h^i , массовыми долями химических компонентов y_l^i ($l = 1, \dots, N$) и статистическим весом w^i , используемым при определении средних значений переменных по ансамблю частиц. Для каждой i -й частицы решается следующая система уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx_k^i}{dt} &= u_k^i; & \frac{d(\rho_l^i V^i)}{dt} &= \nabla J_l^i + J_l^i; \\ \rho^i \frac{du_k^i}{dt} &= \frac{\partial P^i}{\partial x_k} - \nabla \tau^i; & \rho^i \frac{dh^i}{dt} &= -\nabla q^i + \rho^i \dot{Q}_V^i + \frac{\partial P^i}{\partial t} - P^i \frac{\partial u_k^i}{\partial x_k}, \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

где $\rho_l^i = y_l^i \rho^i$ — парциальная плотность l -го вещества в i -й частице; J_l^i — изменение массовой концентрации l -го вещества за счет химических реакций; P^i — среднее давление в точке, где находится i -я частица; \dot{Q}_V^i — скорость энерговыделения за счет химических реакций в i -й частице; ∇J_l^i — диффузионный поток l -го вещества к i -й частице; $\nabla \tau^i$ — поток количества движения к i -й частице за счет молекулярной вязкости; ∇q^i — поток тепла к i -й частице.

Для определения потоковых (обменных) членов ∇J_l^i , $\nabla \tau^i$ и ∇q^i используются классические модели релаксации к среднему:

$$\left. \begin{aligned} \nabla J_l^i &= -0,5C (y_l^i - Y_l^i) \rho^i V^i \omega; \\ (\rho^i)^{-1} \nabla (P^i E - \tau^i) &= -\zeta (u_k^i - U_k^i) + A(t); \\ \nabla q^i &= -0,5C (h^i - H^i) \rho^i \omega, \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

где $C \approx 2,0$ и $\zeta \approx 2,075\omega$ — коэффициенты; Y_l^i , U_k^i и H^i — средняя массовая доля l -го компонента, средняя скорость и средняя энтальпия газа в точке, где расположена i -я частица соответственно; $\omega = \varepsilon/k$ — частота турбулентных пульсаций; $A(t) = (C_0 \varepsilon)^{1/2} dG(t)/dt$ — случайная функция, описывающая влияние пульсаций давления и скорости на движение частицы (здесь $C_0 \approx 2,1$; G — непрерывная случайная переменная с нормальным распределением, удовлетворяющая условиям $dG_i(t) = 0$ и $dG_i(t) dG_j(t) = \delta_{ij} dt$, δ_{ij} — символ Кронекера). Средние значения Y_l^i , U_k^i и H^i определяются либо интерполяцией соответствующих значений Y_l , U_k и H (полученных из решения осредненных уравнений турбулентного реагирующего течения), либо осреднением по ансамблю частиц по формулам:

$$Y_l^i = \sum_i w^i y_l^i; \quad U_k^i = \sum_i w^i u_k^i; \quad H^i = \sum_i w^i h^i,$$

где статистический вес i -й частицы

$$w^i = \frac{\rho^i V^i}{\sum_i \rho^i V^i}.$$

Поле среднего давления $P(t, x_k)$ и локальная частота турбулентных пульсаций ω , требуемые для решения системы уравнений (17) с дополнительными соотношениями (18), определяются из решения осредненных уравнений турбулентного

реагирующего течения и уравнений модели турбулентности (например, $k-\varepsilon$ модели).

Важнейшее преимущество модели — возможность точного определения средних скоростей химических реакций в турбулентном потоке: они определяются по известным механизмам химических реакций на основе мгновенных значений массовых долей y_l^i ($l = 1, \dots, N$) и температуры θ^i .

Мгновенная локальная скорость изменения массовой концентрации l -го компонента в i -й частице рассчитывается по формуле:

$$J_l^i = V^i \mu_l \sum_{k=1}^L (\nu_{l,k}'' - \nu_{l,k}') A_k (\theta^i)^{n_k} \exp\left(-\frac{E_k}{R\theta^i}\right) \prod_{j=1}^N \left(\frac{y_j^i \rho^i}{W_j}\right)^{\nu_{j,k}'},$$

где μ_l — молекулярная масса l -го компонента; $\nu_{l,k}'$ и $\nu_{l,k}''$ — стехиометрические коэффициенты для l -го компонента в случае, когда он является реагентом и продуктом в k -й реакции соответственно; A_k , n_k и E_k — предэкспоненциальный множитель, показатель степени при температуре и энергия активации для k -й реакции соответственно; L и N — полное число реакций и компонентов в химическом механизме соответственно.

Мгновенная локальная скорость энерговыделения за счет химических реакций в i -й частице рассчитывается по формуле:

$$\dot{Q}_V^i = \frac{1}{\rho^i} \sum_{k=1}^L H_k A_k (\theta^i)^{n_k} \exp\left(-\frac{E_k}{R\theta^i}\right) \prod_{j=1}^N \left(\frac{y_j^i \rho^i}{W_j}\right)^{\nu_{j,k}'},$$

где H_k — тепловой эффект k -й химической реакции.

Наконец, зная J_l^i и \dot{Q}_V^i , можно определить искомые средние значения химических источников в уравнении неразрывности l -го компонента \overline{W}_{lV} и в уравнении энергии \dot{Q}_V :

$$\overline{W}_{lV} = \frac{\sum_i w^i J_l^i}{\sum_i \rho^i V^i}; \quad \dot{Q}_V = \sum_i w^i \dot{Q}_V^i.$$

Заключение

Приведен обзор моделей ВТХ, позволяющих приближенно рассчитать среднюю скорость реакции, протекающей в турбулентном реагирующем потоке во фронтальном, объемном или комбинированном фронтально-объемном режимах. Рассмотрены модели реактора идеального и частичного смешения, модели априорных ФПРВ и модель совместных ФПРВ массовой скорости и скалярных параметров реагирующего потока (энтальпии и концентраций компонентов).

Литература

1. Pope S. B. PDF methods for turbulent reactive flows // Prog. Energ. Combust. Sci., 1985. Vol. 11. P. 119–192.
2. Wunning J. A., Wunning J. G. Flameless oxidation to reduce thermal no-formation // Prog. Energ. Combust. Sci., 1997. Vol. 23. Iss. 1. P. 81–94.
3. Воинов А. Н. Исследования детонации и самовоспламенения в условиях двигателей легкого топлива. Дисс. . . . докт. техн. наук. — М.: АН СССР, 1957. Ч. 1. 44 с.
4. Фролов С. М., Фурмански П., Волански П. Термохимическая модель форкамерно-факельного зажигания и горения // Хим. физика, 1996. Т. 15. № 12. С. 75–91.
5. Villermaux J., Devillon J. C. Représentation de la coalescence et de la redispersion des domaines de ségrégation dans un fluide per modèle d'interaction phénoménologique // 2nd Conference (International) on Chemical Reaction Engineering Proceedings. — Netherlands, 1972. P. 1–13.
6. Golovitchev V. I., Atarashiya K., Tanaka K., Yamada S. Towards universal EDC-based combustion model for compression ignited engine simulations. SAE Paper No. 2003-01-1849, 2003.
7. Вулис Л. А. Тепловой режим горения. — М.—Л.: ГЭИ, 1954. 288 с.
8. Chomiak J., Karlsson A. Flame liftoff in diesel sprays // 26th Symposium (International) on Combustion Proceedings, 1996. P. 2557–2564.
9. Marzouk O. A., Huckaby E. D. A comparative study of eight finite rate chemistry kinetics for CO/H₂ combustion // EACFM J., 2010. Vol. 4. No. 3. P. 331–356.
10. Peters N. The premixed turbulent flame in the limit of a large activation energy // J. Non-Equilibrium Thermodyn., 1982. Vol. 7. P. 25–38.
11. Bradley D., Gaskell P. H., Gu X. J. Application of a Reynolds stress, stretched flamelet, mathematical model to computations of turbulent burning velocities: Comparisons with experiments and the predictions of other models // Combust. Flame, 1994. Vol. 96. P. 221–248.
12. Vreman A. W., van Oijen J. A., de Goey L. P. H., Bastiaans R. J. M. Subgrid scale modeling in large-eddy simulation of turbulent combustion using premixed flamelet chemistry // Flow Turbul. Combust., 2009. Vol. 82. P. 511–535.
13. Domingo P., Vervisch L., Bray K. N. C. Partially premixed flamelets in LES of nonpremixed turbulent combustion // Combust. Theor. Model., 2002. Vol. 6. P. 529–551.
14. Bradley D., Gaskell P. H., Lau A. K. C. A mixedness-reactedness flamelet model for turbulent diffusion flames // Proc. Combust. Inst., 1990. Vol. 23. P. 685–692.
15. Ribert G., Champion M., Plion P. Modeling a turbulent reactive flow with variable equivalence ratio: Application to the calculation of a reactive shear layer // Combust. Sci. Technol., 2004. Vol. 176. P. 907–923.
16. Darbyshire O. R., Swaminathan N., Hochgreb S. The effects of small-scale mixing models on the prediction of turbulent premixed and stratified combustion // Combust. Sci. Technol., 2010. Vol. 182. P. 1141–1170.
17. Фролов С. М., Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Радвогин Ю. Б. Моделирование стабилизации пламени в турбулентном потоке // Хим. физика, 1999. Т. 18. № 3. С. 86–99.
18. Фролов С. М., Басевич В. Я., Беляев А. А. Механизм стабилизации турбулентного пламени на плохообтекаемом теле // Хим. физика, 1999. Т. 18. № 8. С. 50–61.
19. Фролов С. М., Басевич В. Я., Беляев А. А. Моделирование стабилизации турбулентного пламени на плохообтекаемых телах // Хим. физика, 1999. Т. 18. № 9. С. 54–64.

20. *Фролов С. М., Басевич В. Я., Беляев А. А.* Влияние режимных параметров на стабилизацию турбулентного пламени на плохообтекаемом теле // *Хим. физика*, 2001. Т. 20. № 1. С. 76–83.
21. *Smirnov N. N., Nikitin V. F., Tyurnikov M. V., Boichenko A. P., Legros J. C., Shevtsova V. M.* Control of detonation onset in combustible gases // *High-speed deflagration and detonation: Fundamentals and control* / Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov, D. W. Netzer, A. A. Borisov. — Moscow: ELEX-KM Publ., 2001. P. 3–30.
22. *Pope S. B.* Turbulence combustion modeling: Fluctuations and chemistry // *Advanced computation and analysis of combustion* / Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov, P. Givi. — Moscow: ENAS Publ., 1997. P. 310–320.
23. *Frolov S. M., Basevich V. Ya., Neuhaus M. G., Tatshl R.* A joint velocity-scalar PDF method for modeling premixed and non-premixed combustion // *Advanced computation and analysis of combustion* / Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov, P. Givi. — Moscow: ENAS Publ., 1997. P. 537–561.
24. *Frolov S. M., Ivanov V. S., Basara B., Suffa M.* Numerical simulation of flame propagation and localized preflame autoignition in enclosures // *J. Loss Prevent. Proc. Ind.*, 2013. Vol. 26. P. 302–309.

Поступила в редакцию 18.12.15

EFFECT OF TURBULENCE ON THE MEAN RATE OF CHEMICAL TRANSFORMATIONS: REVIEW

S. M. Frolov^{1,2}

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

²National Research Nuclear University MEPhI, 31 Kashirskoe Sh., Moscow 115409, Russian Federation

Abstract: The models allowing approximate calculation of the mean reaction rate in turbulent reactive flow in frontal, volumetric, and mixed frontal-volumetric modes of combustion have been reviewed. Considered are the models of perfectly and partially stirred reactors, presumed probability density function (PDF), and transported joint velocity-scalar PDF.

Keywords: turbulent reactive flows; mean chemical reaction rate; turbulence-chemistry interaction; partially stirred reactor; probability density functions

Acknowledgments

This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (grant No. 15-08-00782). The author is grateful to V. S. Posvyanskii for the derivation of relationships for Gauss quadratures.

References

1. Pope, S. B. 1985. PDF methods for turbulent reactive flows. *Prog. Energ. Combust. Sci.* 11:119–192.
2. Wüning, J. A., and J. G. Wüning. 1997. Flameless oxidation to reduce thermal NO-formation. *Prog. Energ. Combust. Sci.* 23(1):81–94.
3. Voinov, A. N. 1957. Issledovaniya detonatsii i samovosplamneniya v usloviyakh dvigateley legkogo topliva [Investigations of detonation and autoignition under conditions of engines utilizing light fuels]. Moscow: USSR Academy of Sciences. D.Sc. Thesis. Part 1. 44 p.
4. Frolov, S. M., P. Furmanskyy, and P. Wolansky. 1996. Termokhimicheskaya model' forkamerno-fakel'nogo zazhiganiya i goreniya [Thermochemical model of prechamber-jet ignition and combustion]. *Khim. Fiz.* 15(12):75–91.
5. Villermaux, J., and J. C. Devillon. 1972. Représentation de la coalescence et de la redispersion des domaines de ségrégation dans un fluide par modèle d'interaction phénoménologique. *2nd Conference (International) on Chemical Reaction Engineering Proceedings*. Netherlands. 1–13.
6. Golovitchev, V. I., K. Atarashiya, K. Tanaka, and S. Yamada. 2003. Towards universal EDC-based combustion model for compression ignited engine simulations. SAE Paper No. 2003-01-1849.
7. Vulis, L. A. 1954. *Teplovoy rezhim goreniya* [Thermal mode of combustion]. Moscow–Leningrad: Gosenergoizdat. 288 p.
8. Chomiak, J., and A. Karlsson. 1996. Flame liftoff in diesel sprays. *26th Symposium (International) on Combustion Proceedings*. 2557–2564.
9. Marzouk, O. A., and E. D. Huckaby. 2010. A comparative study of eight finite rate chemistry kinetics for CO/H₂ combustion. *EACFM J.* 4(3):331–356.
10. Peters, N. 1982. The premixed turbulent flame in the limit of a large activation energy. *J. Non-Equil. Thermody.* 7:25–38.
11. Bradley, D., P. H. Gaskell, and X. J. Gu. 1994. Application of a Reynolds stress, stretched flamelet, mathematical model to computations of turbulent burning velocities: Comparisons with experiments and the predictions of other models. *Combust. Flame* 96:221–248.
12. Vreman, A. W., J. A. van Oijen, L. P. H. de Goeij, and R. J. M. Bastiaans. 2009. Subgrid scale modeling in large-eddy simulation of turbulent combustion using premixed flamelet chemistry. *Flow Turbul. Combust.* 82:511–535.
13. Domingo, P., L. Vervisch, and K. N. C. Bray. 2002. Partially premixed flamelets in LES of nonpremixed turbulent combustion. *Combust. Theor. Model.* 6:529–551.
14. Bradley, D., P. H. Gaskell, and A. K. C. Lau. 1990. A mixedness-reactedness flamelet model for turbulent diffusion flames. *Proc. Combust. Inst.* 23:685–692.
15. Ribert, G., M. Champion, and P. Plion. 2004. Modeling a turbulent reactive flow with variable equivalence ratio: Application to the calculation of a reactive shear layer. *Combust. Sci. Technol.* 176:907–923.
16. Darbyshire, O. R., N. Swaminathan, and S. Hochgreb. 2010. The effects of small-scale mixing models on the prediction of turbulent premixed and stratified combustion. *Combust. Sci. Technol.* 182:1141–1170.
17. Frolov, S. M., V. Ya. Basevich, A. A. Belyaev, V. S. Posvyanskii, and Yu. B. Radvugin. 1999. Modelirovaniye stabilizatsii plameni v turbulentnom potoke [Simulation of flame holding in turbulent flow]. *Khim. Fiz.* 18(3):86–99.

18. Frolov, S. M., V. Ya. Basevich, and A. A. Belyaev. 1999. Mekhanizm stabilizatsii turbulentnogo plameni na plokhobtekaemom tele [Mechanism of turbulent flame stabilization on a bluff body]. *Khim. Fiz.* 18(8):50–61.
19. Frolov, S. M., V. Ya. Basevich, and A. A. Belyaev. 1999. Modelirovanie stabilizatsii turbulentnogo plameni na plokhobtekaemykh telakh [Simulation of turbulent flame stabilization of bluff bodies]. *Khim. Fiz.* 18(9):54–64.
20. Frolov, S. M., V. Ya. Basevich, and A. A. Belyaev. 2001. Vliyanie rezhimnykh parametrov na stabilizatsiyu turbulentnogo plameni na plokhobtekaemom tele [Effect of mode parameters on turbulent flame stabilization on a bluff body]. *Khim. Fiz.* 20(1):76–83.
21. Smirnov, N. N., V. F. Nikitin, M. V. Tyurnikov, A. P. Boichenko, J. C. Legros, and V. M. Shevtsova. 2001. Control of detonation onset in combustible gases. *High-speed deflagration and detonation: Fundamentals and control*. Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov, D. W. Netzer, and A. A. Borisov. Moscow: ELEX-KM Publ. 3–30.
22. Pope, S. B. 1997. Turbulence combustion modeling: Fluctuations and chemistry. *Advanced computation and analysis of combustion*. Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov, and P. Givi. Moscow: ENAS Publ. 310–320.
23. Frolov, S. M., V. Ya. Basevich, M. G. Neuhaus, and R. Tatshl. 1997. A joint velocity-scalar PDF method for modeling premixed and non-premixed combustion. *Advanced computation and analysis of combustion*. Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov, and P. Givi. Moscow: ENAS Publ. 537–561.
24. Frolov, S. M., V. S. Ivanov, B. Basara, and M. Suffa. 2013. Numerical simulation of flame propagation and localized preflame autoignition in enclosures. *J. Loss Prevent. Proc. Ind.* 26:302–309.

Received December 18, 2015

Contributor

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