

РАСЧЕТ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ТУРБУЛЕНТНОЙ ГОМОГЕННОЙ МЕТАНОВОЗДУШНОЙ СМЕСИ

К. Л. Кармен, Д. А. Фейкема

Университет Алабамы в Хантсвилле, Отделение механики и космической техники,
Центр исследований реактивного движения, 35899 Хантсвилль, Алабама, США

Представлены результаты численных расчетов нестационарным методом Монте-Карло одномерного распространения гомогенного пламени в среде с изотропной турбулентностью. Метод Монте-Карло представляет собой статистический метод слежения за жидкой частицей для моделирования турбулентности. Чтобы избежать решения полных уравнений движения, в предлагаемом методе используется функция распределения вероятности (PDF). Модель описывает распространение пламени в гомогенной турбулентной среде с использованием гауссовского распределения функции PDF для описания поля пульсаций скорости и концентрации топлива. Рассматриваемая модель уникальна в том смысле, что не требует моделирования сложных химических процессов и проведения сложных и дорогостоящих вычислений. Решение было получено для начальной стадии искрового воспламенения бедной метановоздушной смеси в турбулентной, сферически-симметричной среде. Простой и надежный метод Монте-Карло правильно предсказывает такую тенденцию, как рост скорости распространения пламени с увеличением интенсивности турбулентности. Данные по расчету турбулентной скорости пламени, полученные в настоящей работе, хорошо согласуются с опубликованными в литературе экспериментальными и численными результатами. Выражение, устанавливающее связь между турбулентной скоростью пламени и интенсивностью пульсаций скорости, хорошо согласуется с корреляционными соотношениями других исследователей.

ВВЕДЕНИЕ

Анализ турбулентных реагирующих потоков представляет собой трудную задачу ввиду сложного взаимодействия нескольких процессов, в том числе диффузии, реакции и объемного расширения в турбулентном потоке. Из-за трудностей интерпретации и обобщения эмпирических данных, полученных при работе технических устройств, где имеет место турбулентное горение, необходимы методы предсказания, основанные на теоретическом моделировании турбулентности. Цель настоящей работы — моделирование роли турбулентности в начальной фазе воспламенения гомогенной горючей смеси. Хотя для анализа распространения турбулентного пламени существует множество численных моделей, проблеме искрового воспламенения в турбулентном потоке уделялось недостаточно внимания. Для численных расчетов используется нестационарный метод Монте-Карло одномерного распространения гомогенного пламени в среде с изотропной турбулентностью. Этот метод статистически моделирует транспортные уравнения со-

вместных функций PDF в турбулентном потоке в предположении первоначально гауссовского распределения концентрации топлива и пульсационной скорости; тем самым удалось избежать полного решения уравнений. Конечно-разностные решения этих уравнений часто непрактичны ввиду высокой размерности функций PDF. Поэтому в данной работе внимание сосредоточено на модели с совместной функцией PDF для химических и термодинамических характеристик в реагирующих турбулентных потоках. Для статистической аппроксимации этого уравнения использован метод Монте-Карло слежения за этой частицей.

В настоящей работе для моделирования горения метановоздушной смеси использовали химические параметры одноступенчатой реакции аррениусовского типа. Рассматривалось одномерное сферически-симметричное пламя, инициируемое искрой. Расчеты выполнены в следующих диапазонах параметров: отношение пульсационной скорости к ламинарной скорости пламени $u'/S_l = 2 \div 2,4$; неизменное (для данного набора параметров) турбулентное чи-

сло Рейнольдса $Re_{turb} = 28,4 \div 38,7$; турбулентное число Дамкеллера $Da_{turb} = 0,1$.

1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ И ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОДЫ

Транспортное PDF-уравнение, приведенное в [1–3], описывает в замкнутой форме транспорт функции PDF $P(\psi)$ (ψ — вектор) в пространстве и в поле концентраций с включением эффектов химической реакции. Уравнение описывает конвекцию, обусловленную осредненным течением и турбулентностью в пространстве и времени. Учитывается также транспорт функции $P(\psi)$ в поле концентраций, обусловленных химической реакцией и смешением. В этом стохастическом анализе не требуется полного численного решения транспортного уравнения, так как начальные распределения пульсационной скорости и концентрации топлива представлены функцией Гаусса. Метод Монте-Карло следит за каждой индивидуальной частицей путем моделирования всех упомянутых выше процессов.

1.1. Физическая и вычислительная среда

В настоящих вычислениях физическая среда представляет собой одномерную сферически-симметричную область с изменением параметров только в радиальном направлении. Перемешанная метановоздушная смесь первоначально неподвижна, и пламя инициируется локальным выделением тепловой энергии, генерируемой горячим источником (искра, лазерное излучение, пиротехническое устройство и т. д.), подобно тому, как это происходит в двигателях внутреннего сгорания и других устройствах. Вычислительное пространство в радиальном направлении состоит из 100 ячеек, каждая размером Δr . Ячейка первоначально содержит определенное количество жидких частиц (в данных расчетах — 1000 частиц), и каждая частица характеризуется скоростью, температурой и концентрацией топлива. Давление считается постоянным (1 атм).

1.2. Численная процедура

Численная процедура отслеживает каждую жидкую частицу на каждом временном шаге, чтобы вычислить конвективный перенос осредненным течением и турбулентностью в пространстве и времени. Температура и химический состав частиц изменяются из-за химической реакции и молекулярного смешения.

Исходные параметры. Для расчетов требуются следующие исходные данные: временной шаг (Δt), размер ячейки (Δr), турбулентная кинетическая энергия (k), диссипация кинетической энергии (ε), нормализованная осредненная концентрация топлива (c_f) в несгоревшей смеси, среднеквадратичная пульсация концентрации топлива (c'_f), время химической реакции (t_c), коэффициент воспламенения, давление, время воспламенения, длина искрового зазора, начальное число частиц в каждой ячейке, температура активации (T_a), адиабатическая температура пламени и начальная температура смеси. Значение числа Льюиса принято равным единице.

Константы и исходные профили средней и пульсационной скоростей. Перечень необходимых констант включает турбулентное время (t_{turb}), турбулентное число Рейнольдса (Re_{turb}), масштаб турбулентности (l_{turb}), которые определяются следующим образом:

$$t_{turb} = k/\varepsilon, \quad (1)$$

$$Re_{turb} = u' l_{turb} / \nu, \quad (2)$$

$$l_{turb} = b(k^{1,5}/\varepsilon), \quad (3)$$

где ν — кинематическая вязкость, $b = 1$. Определение турбулентного времени и турбулентного числа Рейнольдса обычно согласованы. Однако коэффициент b в выражении (3), согласно литературным данным [1, 4, 5], изменяется от 0,16 до 1,0. Определение, приведенное выше, соответствует [4]. Турбулентность в расчетах не затухающая, при этом $k = 3u'^2/2$.

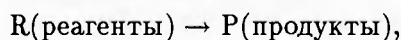
Турбулентность моделировалась статистически, при этом начальные распределения концентрации топлива и пульсационной скорости были гауссовскими. Гауссовское распределение для пульсационной скорости обновлялось на каждом интервале турбулентного времени. После того как вычислено начальное гауссовское распределение для начального распределения концентрации топлива, распределение концентрации развивается во времени случайным образом, изменяясь только благодаря перемешиванию и реакции.

Расчет начальной концентрации и пульсационной скорости каждой частицы. На этом этапе каждой частице приписываются значения пульсационной скорости и концентрации топлива. Значения средней и среднеквадратичной пульсационной скоростей, а также концентрации топлива определены. В начальный момент средняя скорость равна нулю, поскольку смесь неподвижна.

Случайная диффузия частицы. В течение каждого временного шага частицы в каждой ячейке проходят определенное расстояние, определяемое их мгновенной скоростью $U + u'$ и временным шагом Δt , где U — средняя скорость частиц.

Мелкомасштабное смещение. Для расчета смещения использована модель [6]. Существуют и более сложные и точные модели, использование которых влечет увеличение необходимых вычислительных ресурсов. Так, развитая в работе [4] модель смещения дает небольшое отличие от результатов расчетов по модели [6].

Скорость одноступенчатой глобальной реакции. Химическая реакция представлена одноступенчатым механизмом



и скорость реакции задается выражением

$$\omega_{\text{react}} = B \rho c_f \exp(-T_a/T), \quad (4)$$

где $T_a = E_a/R$, R — газовая постоянная. Это выражение можно интерпретировать как бинарную реакцию, в которой один из реагентов (c_f) всегда в дефиците.

Вычисление плотности и температуры каждой ячейки. Средняя плотность вычисляется на основе закона идеального газа при постоянном давлении p с использованием вычисленной средней размерной температуры T :

$$\bar{\rho} = \frac{p}{RT}. \quad (5)$$

Вычисление средней скорости каждой ячейки. На каждом временном шаге решалось дискретизированное уравнение неразрывности для определения средней скорости:

$$\frac{\Delta \rho}{\Delta t} + \frac{1}{r^2} \frac{\Delta(\rho \bar{U} r^2)}{\Delta r} = 0. \quad (6)$$

Начальная средняя скорость газа равна нулю:

$$U(t=0) = 0.$$

Расчеты выполнены на Фортране на рабочей станции SUN с операционной системой Solaris 2.5.1.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Представленные здесь результаты показывают, что предложенная модель правильно предсказывает ход процесса и, в частности, влияние турбулентности на скорость распространения пламени. Результаты вычислений хорошо согласуются с данными, полученными с использованием более сложных моделей,

требующих больших вычислительных ресурсов. Рассмотрено несколько вариантов моделирования воспламенения бедной метановоздушной смеси искровым источником в сферической бомбе при постоянном давлении. Все результаты получены относительно центра шарового пламени. Случайное движение центра шарового пламени не принималось во внимание. Поэтому такие результаты, как изменение радиуса пламени, вычислены относительно центра шарового пламени.

2.1. Энергия воспламенения

Предполагалось, что энергия искры линейно уменьшается во времени и параболически убывает в зависимости от расстояния до точки инициирования [7]. Искра не вносит энергию по прошествии времени воспламенения, а также на расстоянии, превышающем длину искрового промежутка.

2.2. Воспламенение с турбулентностью

Расчеты по данной модели были выполнены для бедной метановоздушной смеси (коэффициент избытка топлива $\varphi = 0,8$ и $u' = 1,93$ м/с). Сравнение результатов с данными работ [4, 8] показано на рис. 1. В экспериментах [8] равномерно перемешанная смесь метана с воздухом поджигалась искрой, в результате формировалось сферическое ядро пламе-

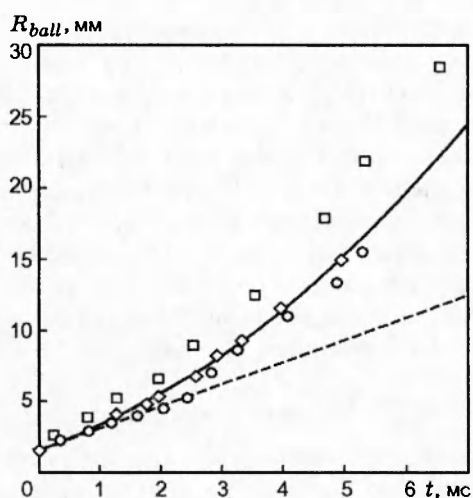


Рис. 1. Зависимость радиуса шара турбулентного пламени от времени:

$\varphi = 0,8$, $u' = 1,93$ м/с; \circ — настоящая работа, \square , \diamond — эксперимент [8], сплошная линия — расчет [4], штриховая — ламинарное пламя

ни. Турбулентность в перемешанной смеси генерировалась перфорированной пластиной, которая формировала равномерное течение с однородной, изотропной турбулентностью. Смесь поджигалась ниже по потоку (за перфорированной пластиной). При этом формировалось ядро сферического пламени, которое расширялось и искажалось турбулентностью. В работе [4] условия экспериментов [8] моделировали статистическим методом Монте-Карло. При этом использовали совместную PDF-функцию для скоростей и переменной, отражающей развитие реакции. Из рис. 1 следует очень хорошее соответствие между результатами настоящих расчетов, экспериментами [8] и статистическими расчетами [4]. В работах [4, 8] турбулентная скорость пламени определена в виде

$$S_{turb} = (\rho_b/\rho_u)R'_{turb}(t), \quad (7)$$

где ρ_b, ρ_u — плотности продуктов горения и свежей смеси соответственно, $R'_{turb}(t)$ — скорость роста радиуса шара ($R_{turb}(t)$) турбулентного пламени. В [4, 8] $\rho_b/\rho_u = 0,19$, что согласуется со значением, полученным в настоящей работе. Из рис. 1 видно, что $S_{turb} = S_l$ в промежутке времени $t = 0 \div 2$ с; $S_{turb} > S_l$ в диапазоне $t = 2 \div 5$ с и $S_{turb} \approx const$ при $t > 5$ с. Эти наблюдения согласуются с результатами работы [1], в которой скорость пламени вначале увеличивается, а затем достигает асимптотического значения. В [4] для турбулентной скорости пламени получено значение $\approx 0,75u'$ или 1,45 м/с; настоящая модель предсказывает значение $\approx 0,62u'$ или 1,20 м/с.

2.3. Влияние интенсивности турбулентности

Исследовано три варианта с различной степенью турбулентности (табл. 1). В каждом случае характерное турбулентное время составляло 1 мс, давление оставалось постоянным ($p = 1$ атм). Длительность искры 1,5 мс, а искровой зазор 2,5 мм. Колмогоровский микромасштаб определялся по соотношению $\eta = (\nu^3/\varepsilon)^{1/4}$ [9]. Кинематическая вязкость $\nu = 15,5 \cdot 10^{-6}$ м²/с [10, 11].

Таблица 1

Вариант	u' , м/с	$\frac{u'}{S_l}$	Re_{turb}	Da_{turb}	l_{turb} , мкм	η , мкм
1	0,6	2,0	28,4	0,1	735	51
2	0,65	2,2	33,4	0,1	796	49
3	0,7	2,4	38,7	0,1	857	47

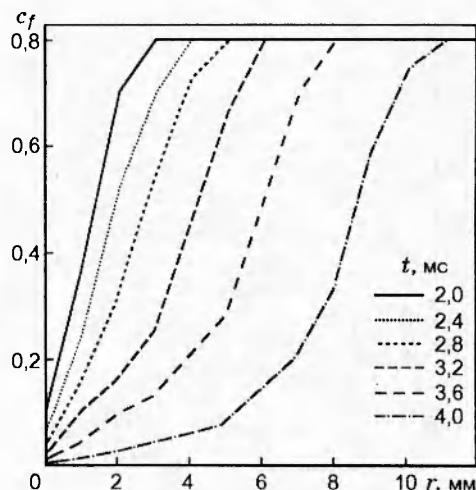


Рис. 2. Зависимость нормализованной концентрации топлива от расстояния до точки воспламенения для различных моментов времени ($\varphi = 0,8, u' = 0,7$ м/с)

На рис. 2 показана зависимость нормализованной концентрации топлива от расстояния до точки воспламенения (вариант 3). Падение значения c_f до нуля означает полное сгорание в центре. Видно, что пламя распространяется радиально наружу и толщина турбулентного пламени возрастает с увеличением времени от момента инициирования. Толщина фронта значительно больше толщины ламинарного пламени (90 ÷ 100 мкм). Это свидетельствует о сильной турбуликации фронта.

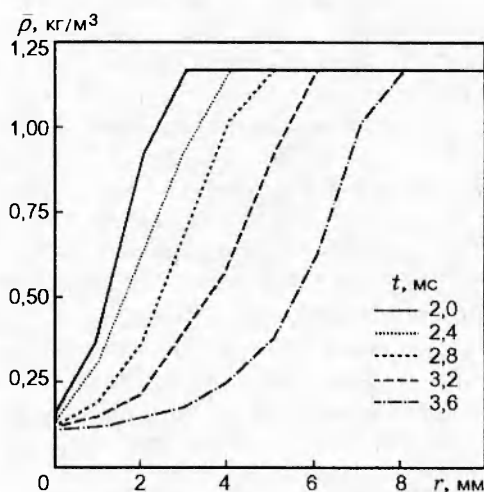


Рис. 3. Радиальное распределение плотности для различных моментов времени ($\varphi = 0,8, u' = 0,7$ м/с)

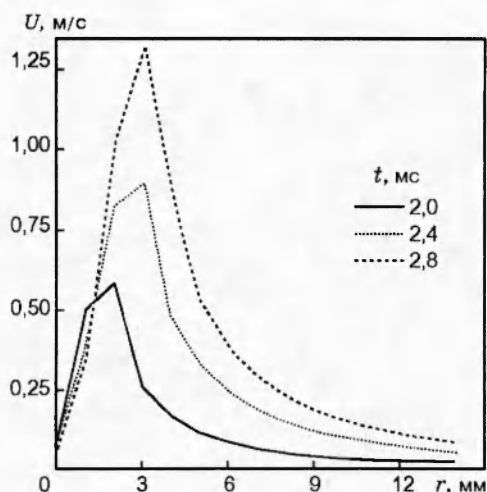


Рис. 4. Распределение средней скорости вдоль радиуса для различных моментов времени ($\varphi = 0,8$, $u' = 0,7$ м/с)

Рис. 3 иллюстрирует распределение плотности газа в радиальном направлении для варианта 3. Отношение плотностей свежей смеси и продуктов сгорания $\rho_u/\rho_b \approx 9$. Это значение характерно для большинства углеводородных пламен, для которых $\rho_u/\rho_b = 5 \div 10$ [1]. Вид зависимостей на рис. 3 аналогичен характеру кривых на рис. 2.

Средняя радиальная скорость газа показана на рис. 4. До воспламенения средняя скорость всюду равна нулю. Однако каждая индивидуальная жидкая частица обладает среднеквадратичной пульсационной скоростью 0,7 м/с. Рис. 4, в отличие от рис. 2 и 3, показывает, что максимальное значение радиальной скорости имеет место внутри фронта пламени. Например, из рис. 4 видно, что максимум скорости в момент времени 2,8 мс наблюдается на расстоянии ≈ 3 мм. При сопоставлении с рис. 2 и 3 видно, что эта координата лежит между областями сгоревшего и несгоревшего газа во фронте пламени. Таким образом, максимальная средняя скорость газа достигается внутри фронта пламени.

На рис. 5 показано радиальное положение пламени как функции времени для трех вариантов, представленных в табл. 1. Видно, что чем выше уровень турбулентности, тем быстрее распространяется пламя. Таким образом, с ростом интенсивности турбулентности значение S_{turb} увеличивается. Однако, как было показано, продолжительность существования ламинарной области турбулентного пламени со-

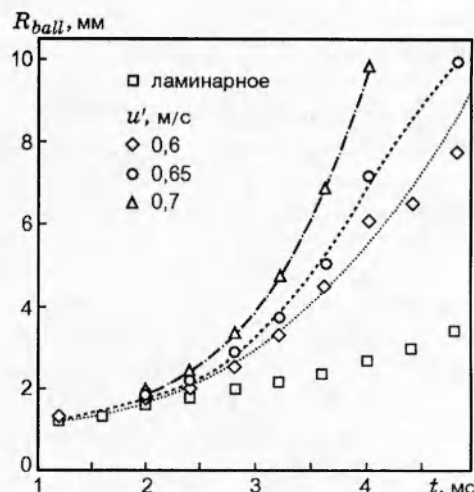


Рис. 5. Зависимость радиуса шара турбулентного и ламинарного пламен при различной интенсивности турбулентности от времени ($\varphi = 0,8$)

ставляет $\approx 2,5$ с и не зависит от интенсивности турбулентности.

2.4. Сравнение с опубликованными результатами

Различными исследователями были установлены экспериментальные и теоретические зависимости S_{turb}/S_l от u'/S_l . Ввиду существования многих масштабов и параметров, необходимых для описания перемешанного турбулентного пламени, результирующие корреля-

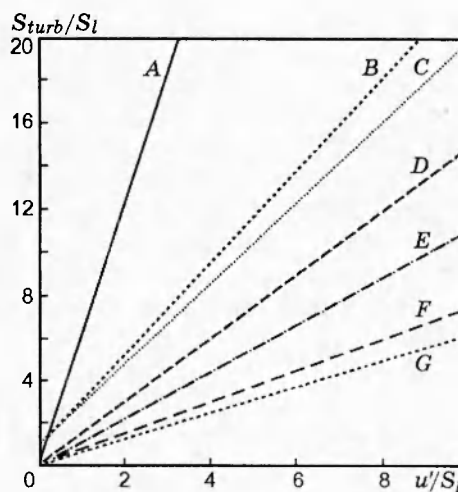


Рис. 6. Различные соотношения для скорости свободного от растяжения турбулентного пламени: кривые A, B, C, E, F соответствуют данным табл. 2, D — результаты [13], G — результаты [16]

Таблица 2

Уравнение	Метод	Ссылка	Кривая на рис. 6
$\frac{S_{turb}}{S_l} = 2,56 \left(\frac{T_b}{T_u}\right)^{0,5} \left(\frac{u'}{S_l}\right)$	Отношение температур продуктов горения и свежей смеси, $T_b/T_u = 6$	[12]	A
$\frac{S_{turb}}{S_l} = \left[1 + \left(\frac{2u'}{S_l}\right)^2\right]^{0,5}$	Использование приближения Дамкеллера для складчатого пламени	[14]	B
$\frac{S_{turb}}{S_l} = 1,5 \frac{u'}{S}$	Расчетная модель с использованием транспортного уравнения для совместной функции PDF для скорости и переменной, характеризующей развитие реакции. Приближение малого ламинарного пламени моделировало турбулентность в терминах переменной, характеризующей развитие химической реакции. Химическая реакция считалась одноступенчатой	[15]	C
$\frac{S_{turb}}{S_l} = 0,75 \frac{u'}{S}$	Моделирование турбулентности близко к методу [15]. В этой модели, однако, введена скорость ламинарного пламени; используется модель смешения, основанная на влиянии скорости, а функция PDF обусловлена скоростью в момент разряда искры	[4]	E
$\frac{S_{turb}}{S_l} = 0,62 \frac{u'}{S}$	Метод Монте-Карло	Настоящая работа	F

ции сильно различаются. Однако во всех соотношениях, описывающих свободное от растяжения складчатое пламя, величина S_{turb} в основном зависит от u' , не зависит от S_l и не управляется химической кинетикой. На рис. 6 представлены графики различных корреляционных зависимостей из работ [4, 12–16] и зависимости, полученной нами. В табл. 2 приведены соотношения, полученные в некоторых из перечисленных работ.

Интересно отметить, что результаты работы [16] зависят от растяжения пламени, так как в ней используется экспериментальное значение S_{turb} .

3. МЕТОД МОНТЕ-КАРЛО

Моделирование турбулентного горения перемешанных смесей и сравнение полученных результатов с данными других экспериментальных и теоретических исследований представляет собой сложную проблему из-за многопараметричности задачи. Во всех обсуждаемых здесь случаях учитывалось максимально возможное число параметров.

Метод Монте-Карло традиционно чувствителен к таким факторам, как число ис-

пользуемых частиц, количество рассматриваемых ячеек и т. д. Настоящий метод показал свою работоспособность при проведении параметрического анализа. Однако предложенная модель оказалась чувствительной к начальному числу частиц в расчетной ячейке. Представленные здесь результаты соответствуют учету 1000 частиц в исходной ячейке. При использовании 100 частиц скорость пламени увеличилась на $\approx 20\%$.

Настоящая модель предсказывает также рост скорости пламени при увеличении межэлектродного расстояния и длительности разряда.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе использован уникальный по своей простоте и точности статистический метод Монте-Карло слежения за частицей.

Показано, что интенсивность турбулентности представляет собой доминирующий фактор в определении величины скорости турбулентного пламени в начальной фазе воспламенения гомогенной метановоздушной смеси.

Предсказана физически верная природа воспламенения: вначале пламя распространя-

ется со скоростью S_l , а затем скорость увеличивается до асимптотического значения скорости турбулентного пламени. Расчетное асимптотическое значение скорости турбулентного пламени при $\varphi = 0,8$ составляет 1,2 м/с, что близко к величине, полученной другими исследователями.

Увеличение интенсивности турбулентности влечет за собой рост S_{turb} , при этом ламинарная часть турбулентного пламени очень слабо зависит от интенсивности турбулентности. Показано, что максимальное значение средней скорости достигается в области пламени.

Корреляционная зависимость $S_{turb}/S_l = f(u'/S_l)$ для складчатого пламени без растяжения показывает, что турбулентная скорость пламени в основном зависит от турбулентности и расчетная величина S_{turb} очень чувствительна к уровню интенсивности турбулентности.

Полученные в настоящей работе результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными [8], с численными расчетами [4] и теоретическими корреляциями для турбулентной скорости пламени, полученными различными исследователями. В предложенном методе используется одноступенчатая модель реакции, простая модель смешения, статистически обоснованная модель турбулентности; получены точные данные по начальной фазе воспламенения гомогенной метановоздушной смеси. Выводы основаны на количественном сопоставлении с результатами одной экспериментальной работы и сравнении с несколькими численными и аналитическими исследованиями. Дальнейшие усилия должны быть направлены на получение дополнительной экспериментальной информации.

Авторы признательны д-ру Николасу Фручарду из фирмы Пежо, д-ру Алану Пикарту и проф. Роланду Борги из Национального исследовательского центра университета Руэна, чья работа и помощь стимулировали данные исследования. Мы также благодарны университету Алабамы в Хантсвилле за финансовую поддержку.

ЛИТЕРАТУРА

1. Anand M. S., Pope S. B. Calculation of premixed turbulent flames by PDF methods // Combust. Flame. 1987. V. 67. P. 127–142.
2. Pope S. B. The statistical theory of turbulent flames // Proc. Roy. Soc. London. 1979. V. 291. P. 529–568.
3. Pope S. B. A Monte-Karlo method for the PDF equations of turbulent reactive flow // Combust. Sci. Technol. 1981. V. 25. P. 159–174.
4. Pope S. B., Cheng W.K. Statistical calculations of spherical turbulent flames // Twenty-first Symp. (Intern.) on Combustion. The Combustion Inst., 1986. P. 1473–1482.
5. Poinso T. J. Flame Ignition in a Premixed Turbulent Flow. Center for Turbulence Research, Stanford University. Annual Research Briefs. 1991.
6. Curl R. L. Dispersed phase mixing: I. Theory and effects in simple reactors // AIChE Journal. 1963. V. 9, N 2. P. 175–181.
7. Herweg R., Maly R. R. A Fundamental Model for Flame Kernel Formation in S. I. Engines. SAE Congress 922243. 1992.
8. Hainsworth E. Study of free turbulent premixed flames. M. S. Thesis, M.I.T., 1985.
9. Hinze J. O. Turbulence. 2nd ed. New York: McGraw-Hill, 1975. Ch. 2.
10. Gulder O. L. Turbulent premixed flame propagation models for different combustion regimes // Twenty-third Symp. (Intern.) on Combustion. The Combustion Inst., 1990. P. 743–650.
11. Gulder O. L. Turbulent premixed combustion modeling using fractal geometry // Ibid. P. 835–842.
12. Bray K. N. C. Studies of the turbulent burning velocity // Proc. Roy. Soc. London. 1990. V. A431. P. 315.
13. Bradley D. How fast can we burn? // Twenty-fourth Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh, PA: The Combustion Inst., 1992. P. 247–262.
14. Щелкин К. И. О сгорании в турбулентном потоке // Журн. теор. физики. 1943. Т. 13, вып. 9–10. С. 520–530.
15. Pope S. B., Anand M. S. Twentieth Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh, PA: The Combustion Inst., 1984. P. 403.
16. Abdel-Gayed R. C., Bradley D. A two-eddy theory of premixed turbulent flame propagation // Roy. Soc. (London), Philosophical Trans. 1981. Ser. A. V. 301. P. 1–25.

Поступила в редакцию 23/IX 1997 г.