МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ГОРЕНИЯ СМЕСИ МЕТАНА И ВОЗДУХА НА ОСНОВЕ МЕТОДА КРУПНЫХ ВИХРЕЙ

© 2019 г. С.А. Чепрасов

Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова cheprasov@ciam.ru

Работа выполнена при поддержке РФФИ 19-08-01045.

DOI: 10.1134/S0234087919100058

Описана методология моделирования турбулентного горения. Методика основана на вихреразрешающем подходе моделирования турбулентности совместно с одностадийной реакцией окисления метана. Представлены результаты расчётов характеристик горения для лабораторной установки. Проведён анализ влияния констант модели скорости химических реакций на результаты вычислений. Показано, что используемая методика позволяет вычислять статистические характеристики пульсаций температуры в камере сгорания с удовлетворительной точностью.

Ключевые слова: турбулентность, горение, метод крупных вихрей, моделирование.

NUMERICAL SIMULATION OF METHANE AIR MIXTURE TURBULENT COMBUSTION WITH USING LES

S.A. Cheprasov

Central Institute of Aviation Motors (CIAM)

The methodology of turbulent combustion simulation is presented. The methodology base on large eddy simulation coupled with global reaction. Numerical simulation of flow in laboratory combustion chamber was performed. An analysis of the reaction model constant was carried out. It is shown the methodology provides good agreement between numerical and experimental results in laboratory combustion chambers.

Key words: turbulence, combustion, large eddy simulation.

1. Введение

В перспективных малоэмиссионных камерах сгорания для газотурбинных двигателей и газотурбинных энергетических установок, работающих по принципу сжигания заранее перемешанных смесей, возникают различные виды неустойчивого горения – автоколебания, бедный срыв, проскок пламени [1,2]. Появление режимов неустойчивого горения сопровождается увеличением механических, тепловых нагрузок и может приводить к разрушению камеры сгорания.

Для численного моделирования данных эффектов необходимо решать задачу описания особенностей взаимодействия турбулентности и горения, генерации акустических волн (волн давления) вследствие нестационарного тепловыделения и др. Кроме того, для прогнозирования экологически вредных выбросов, таких как NOx и CO требуется подробная информация о статистических характеристиках пульсаций температуры [3,4]. В начале 2000-х годов начали активно развиваться методы моделирования турбулентного горения, которые позволяют решать рассмотренные проблемы (см. [5-14]). Эти методы основаны на решении трёхмерных нестационарных уравнений газовой динамики для вязкого, теплопроводного газа совместно с химическими реакциями. При этом турбулентный перенос моделируется с помощью вихреразрешающих подходов (LES, DES), а процесс горения описывается с использованием обобщенных химических реакций. Одна из основных трудностей применения этой методологии заключается в разрешении структуры фронта пламени при умеренных вычислительных затратах. Это комплексная проблема, решение которой состоит в разработке «подсеточных» (SGS) моделей взаимодействия турбулентности и горения совместно с развитием обобщённых химических реакций.

В настоящее время уже разработаны различные подходы для преодоления вышеописанных проблем, каждый из которых имеет свои преимущества, недостатки и область применимости. Анализ результатов [7,9,10] показывает, что популярные модели горения (EDC, TFM, PASR и др.) приводят к схожим результатам вычисления средней температуры и её среднеквадратичных пульсаций при моделировании горения перемешанных смесей различных углеводородных топлив (метан, керосин) независимо от используемой модели химических реакций. Более заметное влияние модели взаимодействия горения и модели химических реакций наблюдаются в расчётах экологически вредных выбросов, таких как CO, NO_x. Среди широко применяемых методик следует отметить подход, состоящий в процедуре искусственного утолщения фронта пламени (TFM) совместно с двухстадийной адаптированной моделью химических реакцией [6,8,14]. Использование этой методики позволило получить удовлетворительное описание статистических характеристик пульсаций температуры и неустойчивого горения в камерах сгорания, близких по геометрии и режимам к промышленным камерам сгорания, при вычислениях на сетках, содержащих 3–10 млн неструктурированных ячеек.

В данной работе предлагается методика, основанная на LES совместно с одношаговой реакцией окисления метана и квазиламинарном подходе к описанию взаимодействия турбулентности и горения. Отличительной особенностью этого подхода является вычислительная простота и экономичность. На примере моделирования турбулентного горения за уступом демонстрируются возможности методики, и проводится анализ влияния констант используемой модели химических реакций на структуру фронта пламени.

2. Описание методики моделирования

Численное моделирование проводилось на основе решения усечённой системы уравнений газовой динамики для низкоскоростных течений:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}\rho u_{\alpha} = 0, \qquad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho u_i + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}\rho u_{\alpha}u_i = -\frac{\partial}{\partial x_i}p + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}\tau_{i\alpha}, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho Y_k + \frac{\partial}{\partial x_\alpha}\rho u_\alpha Y_k = \frac{\partial}{\partial x_\alpha}(D + D_T)\frac{\partial}{\partial x_\alpha}Y_k + \omega_k, \qquad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho h + \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}\rho u_{\alpha}h = \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}(\lambda + \lambda_T)\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}}T - \sum_{k=1}^{N}h_k^0\omega_k.$$
(4)

Для моделирования турбулентного переноса применялся подход LES с динамической моделью [15]. Коэффициенты молекулярного переноса предполагались постоянными и одинаковыми для всех веществ. Для замыкания системы определяющих уравнений использовались термодинамические соотношения:

$$h = \sum_{k=1}^{N} h_k Y_k$$
, $h_k = \int_{T_0}^{T} c_{p,k} dT$, $p = \rho RT \sum_{k=1}^{N} \frac{Y_k}{W_k}$.

Зависимость теплоемкости C_p от температуры T задавалась с помощью полинома второй степени, адаптированного в диапазоне температур 300 K - 5000 K.

Процесс горения описывался на основе одношаговой реакции окисления метана:

$$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$$
.

Скорость реакции вычислялась без использования «подсеточной» модели горения на основе выражения:

$$\omega = A \left[CH_4 \right]^n \left[O_2 \right]^m \exp(-E / RT).$$
⁽⁵⁾

Значение предэкспоненциального фактора $A \approx 2.1 \times 10^{11} (\text{кмоль/м}^3)^{-0.5} \text{c}^{-1}$, энергии активации $E = 2 \times 10^8 \text{ Дж/кмоль}$.

Данная методика предполагает варьирование показателей степени при вычислении скорости реакции (5), а именно, n=0.2-0.5, m=1-1.3. При этом сумма n+m выдерживалась равной 1.5. Это значение обеспечивает качественно верную зависимость скорости ламинарного горения от давления и температуры смеси [6].

Моделирование было выполнено с использованием программы Fluent. Дискретизация уравнений производилась методом конечных объемов. Численное решение системы уравнений проводилось методом SIMPLEC по неявной схеме с использованием схем второго порядка аппроксимации по пространству и времени. Для установления решения на каждом временном слое производилось 7 итераций. При этом временной шаг выбирался равным Δt =0.003 H/U, где H – поперечный размер, U – характерная скорость для камер сгорания, что соответствовало числу Куранта CFL ~ 1. Для получения осредненных параметров набиралась статистика, содержащая 20 000 шагов по времени. Вычисления были проведены на 12-ядерном процессоре. Типичное время расчета одного варианта составляло 2 месяца.

3. Расчёт турбулентного горения за уступом

Моделирование проводилось для лабораторной камеры сгорания ONERA/LAERTA [16], которая представляет собой канал квадратного сечения 100*100 мм с уступом высотой 35 мм для создания рециркуляционной зоны и стабилизации горения (см. рис.1). На уступ набегает турбулентный поток однородной смеси метана и воздуха со следующими параметрами $U=58 \text{ м/c}, T=525 \text{ K}, \phi=0.8 (\alpha=1.25), \text{ Re}_{\delta}=5*10^4 - число Рейнольдса, вычисленное по толщине пограничного слоя вблизи уступа <math>\delta \sim 13 \text{ мм}.$



Рис.1. Схематичное представление течения и положения фронта пламени в лабораторной камере сгорания ONERA/LAERTA. Слева – вид спереди, справа – вид сбоку.

Входная граница расчетной области располагалась на расстоянии X=Hвверх по потоку от положения уступа, выходная граница – на расстоянии L=10H от уступа вниз по потоку. На входе задавался профиль скорости с толщиной пограничного слоя приблизительно равной $\delta=13$ мм на всех стенках камеры сгорания. В дополнение к этому, на входе для имитации набегающей турбулентности задавались возмущения в виде случайных 2D вихрей, масштаб и интенсивность которых составляла $\Delta=0.03H$; u'=0.1U. На выходе из расчетной области задавалось статическое давление $P=10^5$ Па. Для вычисления параметров в ячейках, прилегающих к стенке, применялись «пристеночные функции», $Y^+=5-10$, $Z^+=30-50$. Температура стенок задавалась постоянной T=700 K, что позволяет упрощенно моделировать теплообмен между потоком и охлаждаемыми стенками камеры сгорания. Вычисления проводились на структурированной сетке, содержащей $500*150*50\approx$ ≈ 3.75 млн узлов.

Результаты моделирования мгновенного распределения температуры, представленные на рис.2, показывают, что фронт пламени (граница раздела между холодной смесью и горячими продуктами реакций) становится турбулентным практически сразу же за уступом, при этом он изгибается крупномасштабными вихрями так, что первые калибры его развития X < 4H происходят параллельно стенкам камеры сгорания. При X > 4H начинается приближение фронта к верхней стенке камеры сгорания, но присоединение фронта к стенке происходит только в самом конце расчетной области. Подобная картина течения наблюдается в обоих расчетах как с константами n=0.2, m=1.3, так и при n=0.5, m=1.





Сопоставление результатов расчетов средней температуры и её пульсаций с экспериментальными данными представлено на рис.3, 4. Как можно увидеть из анализа рис.3, вариация констант *n*, *m* относительно слабо влияет на распределение средней температуры в камере сгорания. При этом в обоих расчетах получено вполне удовлетворительное соответствие между расчетными и экспериментальными данными по средней температуре, не уступающее по точности расчётам из [11,14]. Бо́льшая разница между результатами расчетов с различными константами наблюдается при сравнении профилей среднеквадратичных пульсаций температуры. Причем в расчете с n=0.2 получено заметно лучшее согласование с экспериментальными данными. Важно отметить, что наиболее сильное разногласие между расчетными и экспериментальными данными наблюдается в конце камеры сгорания при X>7D, где горение происходит в пристеночной области. Отмеченное разногласие расчётных и экспериментальных данных указывает на недостаток предлагаемой методики при моделировании турбулентного горения в пристеночной области.



Рис.3. Профили средней температуры в различных сечениях *X/D*=2.1, *X/D*=4.6, *X/D*=7.1. Точки – экспериментальные данные [20]; сплошная линия – расчет с константами *n*=0.2, *m*=1.3; прерывистая линия – расчет при *n*=0.5, *m*=1.



Рис.4. Профили средней температуры в различных сечениях *X/D*=2.1, *X/D*=4.6, *X/D*=7.1. Точки – экспериментальные данные [16]; сплошная линия – расчет с константами *n*=0.2, *m*=1.3; прерывистая линия – расчет при *n*=0.5, *m*=1.

Теперь более детально рассмотрим структуру фронта пламени. Анализ сопоставления на рис.5 показывает, что значения констант *n*, *m* заметно влияют на структуру фронта пламени. А именно, на верхней части рис.5,

где n=0.2, m=1.3, фронт пламени более сильно искривлён турбулентными вихрями, в отличие от результатов вычислений с n=0.5, m=1, представленных в нижней части рис.5. Также наблюдаются на верхней части рисунка большие неоднородности скорости реакции, разрывы и образование отдельных кусочков пламени. Если следовать диаграмме Борги [17], то смоделированные пламена соответствуют различным режимам турбулентного горения. При n=0.2 структура фронта пламени соответствует режиму горения с высокой интенсивностью набегающей турбулентности. В расчете же с n=0.5 структура фронта ближе к слабо искривлённому ламинарному фронту горения, который наблюдается при небольших числах Рейнольдса с малым уровнем набегающей турбулентности.



Рис.5. Распределение скорости реакции в продольном (справа) и поперечном сечении *X*=5*H* (слева). Для расчетов с константами *n*=0.2, *m*=1,3 (сверху); *n*=0.5, *m*=1 (снизу).

Наиболее ёмкой количественной характеристикой структуры фронта пламени является функция распределения температуры. На рис.6 показано сопоставление расчетных и экспериментальных данных о функции распределения температуры в точке, находящейся вблизи фронта пламени. Анализ рис.6 показывает, что в обоих расчетах, так же, как и в эксперименте, функция распределения состоит из квази-дельта-функции при температуре свежей смеси T_u =525 K, и квазигауссовского «колокола» вблизи температуры

продуктов сгорания $T_b \approx 2000$ К. В эксперименте ширина колокола заметно шире, чем в обоих расчетах, а в случае вычислений с n=0.5 «колокол» практически сужается до дельта-функции.

Таким образом, вычисления с константой n=0.2 заметно лучше описывают статистические характеристики пульсаций температуры в рассмотренной точке.



Рис.6. Функция распределения температуры в середине камеры сгорания в точке *X*= 4.6 *H*, *Y*=0.6 *H*. Сопоставление экспериментальных данных с расчётными.

Заключение

В данной работе представлена методика моделирования турбулентного горения метана и воздуха. Сопоставление расчётных и экспериментальных данных показало, что применение методики обеспечивает удовлетворительную точность вычислений профилей осреднённой температуры и среднеквадратичных пульсаций температуры для лабораторной камеры сгорания. Анализ констант модели скорости реакции показал, что уменьшение степени при концентрации метана позволяет более детально описывать структуру фронта пламени и с большей точностью вычислять статистические характеристики пульсаций температуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Секундов А.Н. Некоторые проблемы моделирования турбулентных течений. Germany: LAP Lambert Academic Publi., 2014. 132 с.; Secundov A.N. Some difficulties of turbulence flow modeling. Germany: Lambert Academic Publishing, 2014, 132 p.
- 2. Poinsot T. and Veynante D. Theoretical and Numerical Combustion, 3rd ed. 2011. 588 p.
- 3. Секундов А.Н., Чепрасов С.А., Якубовский К.Я. Сопоставление результатов моделирования полей СО на фронте пламени на основе методов RANS и LES // ТВТ 2015, т.53, № 5, с.1–5.;

Secundov A.N., Cheprasov S.A., Yakubovskii K.Ya. Comparison of simulated results for CO fields at the flame front by the RANS and LES methods // High Temperature, 2015, v.53, №5, p.709-712.

- Кузнецов В.Р., Сабельников В.А. Турбулентность и горение. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит, 1986, 288 с. *Kuznetsov V.R., Sabel'nikov V.A.* Turbulence and Combustion. Hemispfere Publishing Corporation. 1990.
- 5. *Angelberger C., Veynante D., Egolfopoulos F.* LES of Chemical and Acoustic Forcing of a Premixed Dump Combustor // Flow, Turbulence and Combustion, 2000, v.65, p.205–222.
- 6. Schmitt P., Poinsot T., Schuermans B. & Geigle K.P. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high-pressure burner // J. Fluid Mech, 2007, 570, p.17–46.
- 7. *Fureby C.* Comparison of Flamelet and Finite Rate Chemistry LES for Premixed Turbulent Combustion // 45th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 2007, Reno, Nevada.
- Franzelli B., Riber E., Gicquel L.Y.M., Poinsot T. Large Eddy Simulation of combustion instabilities in a lean partially premixed swirled flame // Combustion and Flame, 2012, v.159, p.621–637.
- Franzelli B., Riber E. and Cuenot B. Impact of the chemical description on a Large Eddy Simulation of a lean partially premixed swirled flame // Article submitted to 3rd INCA Colloquim, p.12.
- 10. Sabelnikov V. and Fureby C. Extended LES PaSR model for simulation of turbulent combustion // Progress in Propulsion Physics, 2013, v.4, p.539–568.
- 11. *Matveev S.G., Zubrilin I.A.* Large-eddy simulation of flow structure after a bluff-body flameholder with different chemical kinetics mechanisms // Life Sci. J., 2014, v.11, №11, p.644-649. (ISSN:1097-8135). http://www.lifesciencesite.com. 118
- 12. *Grinstein F.F. & Kailasanath K.K.* Three Dimensional Numerical Simulations of Unsteady Reactive Square Jets // Comb. & Flame, 1994, v.100, p.2.
- 13. Чепрасов С.А. Моделирование автоколебаний в установках с горением // Математическое моделирование, 2018, т.30, № 4, с.66-72. *Cheprasov S.A.* Modeling of Self - Oscillation in Combustion Chambers // Mathematical Models and Computer Simulations, 2018, v.10, №6, p.709–713.
- 14. *Franzelli B., Riber E., Sanjose M., Poinsot T.* A two step chemical scheme for kerosene air premixed flames // Combustion and Flame, 2010, v.157, p.1364–1373.
- 15. Germano M., Piomelli U., Moin P. and Cabot W.H. A dynamic subgrid scale eddy viscosity model // Phys. Fluids, 1991, v.3, №7, p.1760-1765.
- 16. *Magre P., Moreau G., Collin R., Borghi and Péalat M.* Further studies by CARS of premixed turbulent combustion in a high velocity flow // Comb. and Flame, 1988, v.71, p.147-168.
- 17. Варнатц Ю., Маас У., Диббл Р. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. – М.: Физмалит, 2006, 352 с.;

Warnatz J., Maas U., Dibble R.W. Physical and chemical fundamentals, modeling and simulations, experiments, pollutant formation. Springer, 2001.

Поступила в редакцию 04.03.2019 После доработки 24.06.2019 Принята к публикации 01.07.2019