

ПРЯМОЕ ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ГОРЕНИЯ

А.С. Петрусёв

Институт проблем механики Российской академии наук, Москва

Аннотация

Настоящая работа посвящена прямому численному моделированию горения водородо-воздушной смеси в спутных дозвуковых потоках горючего (смесь H_2 , N_2) и окислителя (воздух) в двумерной геометрии с использованием подробной кинетической схемы в рамках системы уравнений многокомпонентной гидродинамики вязкого, теплопроводного, химически активного газа при умеренных числах Рейнольдса (случай слабо-развитой турбулентности). Использование прямого численного моделирования позволяет снять ряд проблем, возникающих при использовании параметрических моделей турбулентности или функций плотности вероятности, а также из-за сильной нелинейности задачи, вызванной резкой температурной зависимостью скоростей химических реакций, однако приводит к высокой вычислительной трудоёмкости.

DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF TURBULENT COMBUSTION.

The work is devoted to direct numerical modeling of turbulent combustion of hydrogen-air mixture in subsonic flow. The modeling occurs in 2D geometry with detailed kinetic scheme at small Reynolds number in framework of multi-component hydrodynamic equations system. By the using of DNS it is possible to resume a lot of problems of parametric turbulence models, nonlinearity of task due to abrupt temperature dependence of chemical rates. There is effective numerical algorithm proposed, which is important for DNS modeling with fine spatial mesh. The algorithm gets an opportunity to calculate the non stationary fields of averaged velocities, pressure, concentrations and temperature of turbulent hydrogen – air torch. The calculated fields of averaged values are in satisfactory agreement with experimental one.

1. ВВЕДЕНИЕ

Процессы горения в спутных и противоточных потоках привлекают интерес исследователей как с точки зрения множества практических приложений, так и возможностью достижения лучшего понимания роли турбулентности в процессах переноса и формирования структуры и формы факела. Для численного моделирования данная проблема сложна по ряду причин [1, 2]. В случае химически активных турбулентных потоков, корректный учёт пульсаций осложняется резкой температурной зависимостью скоростей химических реакций, что делает плохо применимыми параметрические модели турбулентности. В этой связи представляет интерес прямое численное моделирование турбулентных пламён, ставшее возможным в случае слабо-развитой турбулентности благодаря появлению современных высокопроизводительных компьютеров. В большинстве работ, связанных с численным моделированием турбулентных пламён используется сильно сокращённая кинетическая схема горения и упрощённый учёт многокомпонентной диффузии [3,4]. Настоящая работа посвящена прямому численному моделированию горения водородо-воздушной смеси в спутных дозвуковых потоках горючего ($H_2/N_2=1.0/0.68$) и окислителя (воздух) в двумерной геометрии (рис. 1) с использованием подробной кинетической схемы в рамках системы уравнений многокомпонентной гидродинамики вязкого, теплопроводного, химически активного газа.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Моделируемый факел образован спутными дозвуковыми потоками окислителя и горючего в геометрии, примерно соответствующей условиям эксперимента

[5]. Форма факела определяется преимущественно размерами центрального сопла и скоростью ддува горючего через него. Наружные стенки оказываются достаточно удалёнными от факела даже в выходном сечении и на его форму существенно не влияют.

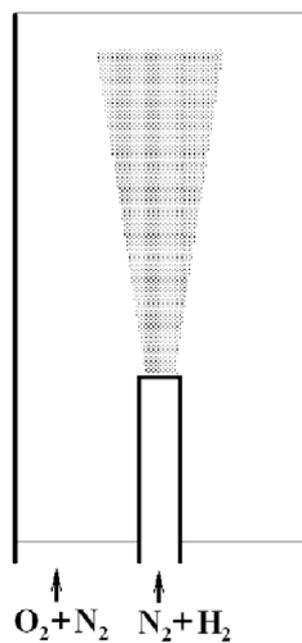


Рис. 1. Общая схема факела

2.1. Основные уравнения

Для моделирования использована сокращённая дивергентная форма уравнений многокомпонентной гидродинамики вязкого, теплопроводного, химически активного газа:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + (\operatorname{div} \mathbf{v}) \rho \mathbf{v} + \nabla p - (\operatorname{div} \eta \nabla) \mathbf{v} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} + (\operatorname{div} \rho \mathbf{v}) e - (\operatorname{div} \lambda \nabla) T + \operatorname{div} \sum_i h_i \mathbf{J}_i = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho c_i}{\partial t} + (\operatorname{div} \rho \mathbf{v}) c_i + \operatorname{div} \mathbf{J}_i = W_i, \quad i = \overline{1, m}. \quad (4)$$

Здесь ρ – плотность газовой смеси; \mathbf{v} – среднemasовая скорость газа; p – давление; η – вязкость; e – массовая плотность внутренней энергии; λ – теплопроводность; T – температура; c_i – массовая доля i -го компонента смеси; \mathbf{J}_i – массовый поток i -го компонента смеси; h_i – массовая плотность энтальпии i -го компонента смеси; W_i – химический источниковый член; m – число химических компонентов в смеси.

В связи с дозвуковым характером течения, сжимаемость газа проявляется слабо, поэтому в уравнении движения (2) опущен член, отвечающий второй вязкости, а в уравнении энергобаланса (3) – член $p \operatorname{div} \mathbf{v}$. Уравнения неразрывности (1) и (4) особенностей не имеют.

2.2. Вспомогательные соотношения

Для замыкания, система уравнений (1)–(4) дополняется уравнениями Стефана – Максвелла (5), выражениями для химических источников (6), уравнением состояния газовой смеси (7), а также выражениями для вычисления транспортных коэффициентов газа (8), (9):

$$\frac{M^2}{\rho} \sum_{j \neq k} \frac{c_j \mathbf{J}_k - c_k \mathbf{J}_j}{M_k M_j D_{jk}} = \frac{\nabla M c_k}{M_k}, \quad k = \overline{1, m}, \quad (5)$$

$$W_k = \frac{M_k}{\text{Na}} \left(\sum_s K_s^+ \prod_{j_s} n_{j_s} - \sum_s K_s^- \prod_{j_s} n_{j_s} \right), \quad (6)$$

$$p = \frac{RT\rho}{M}, \quad M = \sum_k \frac{c_k}{M_k}, \quad (7)$$

$$D_{ij} = \frac{3}{8\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{RT(M_i + M_j)} / (M_i M_j)}{n \sigma_{ij}^2 \Omega^{(1,1)}(T/\varepsilon_{ij})}. \quad (8)$$

Здесь D_{ij} – коэффициенты бинарной диффузии; M_i – молекулярный вес i -го компонента смеси; M – средний молекулярный вес смеси; Na – число Авогадро; n_i – концентрация i -го компонента смеси; K_s^\pm – константы скорости прямой и обратной реакций соответственно; ε_{ij} , σ_{ij} – коэффициенты Ленарда – Джонса потенциала взаимодействия молекул i -го и j -го компонентов. В уравнениях Стефана – Максвелла (5) пренебрегается термо- и бародиффузией. При вычислении σ_{ij} , ε_{ij} использованы обычные комбинационные правила [6]:

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}, \quad \varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}.$$

Для вычисления вязкости и теплопроводности газовой смеси использованы приближённые формулы Уилки (9) и Масона – Саксены (10) [6]:

$$\eta_i = \frac{5}{16\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{M_i RT}}{\text{Na} \sigma_i^2 \Omega^{(2,2)}(T/\varepsilon_i)},$$

$$\eta = \sum_{i=1}^m \frac{\eta_i}{\sum_{i=1}^m x_k \frac{\left[1 + \sqrt{(\eta_i/\eta_k) \sqrt{M_k/M_i}}\right]^2}{2\sqrt{2} \sqrt{1 + (M_i/M_k)}}}, \quad (9)$$

$$\lambda_i^0 = \frac{5}{2} \eta_i C_{Vi},$$

$$\lambda = \sum_{i=1}^m \frac{\lambda_i^0 \left[0.115 + 0.354(C_{Pi}/R)\right]}{1.065 + \sum_{k \neq i} x_k \frac{\left(1 + \sqrt{(\lambda_i^0/\lambda_k^0) \sqrt{M_k/M_i}}\right)^2}{2\sqrt{2} \sqrt{1 + (M_i/M_k)}}}. \quad (10)$$

Здесь η_i, λ_i – коэффициенты вязкости и теплопроводности соответственно чистого i -го компонента смеси, C_{Vi}, C_{Pi} – молярные теплоёмкости i -го компонента смеси; $\Omega^{(1,1)}, \Omega^{(2,2)}$ – стандартные интегралы, затабулированные в [6]. Для вычисления последних использованы следующие аппроксимации:

$$\Omega^{(1,1)}(T^*) = \exp(0.35596 - 0.44742x + 0.08337x^2 - 0.00726x^3),$$

$$\Omega^{(2,2)}(T^*) = \exp(0.44433 - 0.44086x + 0.08278x^2 - 0.00705x^3),$$

где $x = \ln(T^*)$.

Для вычисления теплоёмкостей, удельной внутренней энергии и энтальпии химических компонентов использовались стандартные термодинамические полиномы [7].

2.3. Кинетическая схема

Для вычисления химических источниковых членов использовался следующий список реакций, составленный на основе механизма горения углеводородов Gri-Mech 3.0 [8].

Таблица 1

Список химических реакций

Реакция	Lg(A)	n	Ea
H ₂ +O ₂ →OH+OH	-11.54	0.0	39.04
OH+OH→H ₂ +O ₂	-12.96	0.3	29.2
OH+H ₂ →H ₂ O+H	-15.78	1.6	3.299
H ₂ O+H→OH+H ₂	-15.12	1.6	18.57
H+O ₂ →OH+O	-10.05	0.14	16.06
OH+O→H+O ₂	-10.03	0.0	1.0
O+H ₂ →OH+H	-16.6	2.0	7.55
OH+H→O+H ₂	-20.09	2.8	3.88
O+H ₂ O→OH+OH	-13.6	1.1	17.26
OH+OH→O+H ₂ O	-14.6	1.1	0.0
H+H+M→H ₂ +M	-29.75	-1.0	0.0
H ₂ +M→H+H+M	-5.01	-1.10	104.39
H+O ₂ +M→HO ₂ +M	-29.71	-0.8	0.0
HO ₂ +M→H+O ₂ +M	-4.72	-1.2	48.41
OH+H+M→H ₂ O+M	-25.64	-2.0	0.0
H ₂ O+M→H+OH+M	-8.67	0.0	105.1
HO ₂ +H ₂ →H ₂ O ₂ +H	-10.3	0.0	26.03
H ₂ O ₂ +H→HO ₂ +H ₂	-10.1	0.0	7.95
HO ₂ +HO ₂ →H ₂ O ₂ +O ₂	-11.52	0.0	0.0
H ₂ O ₂ +O ₂ →HO ₂ +HO ₂	-10.05	0.0	39.74
H+HO ₂ →OH+OH	-9.38	0.0	1.9
OH+OH→H+HO ₂	-10.7	0.0	40.1
H+HO ₂ →H ₂ O+O	-10.63	0.0	2.08

$H_2O+O \rightarrow H+HO_2$	-11.04	0.0	57.53
$H+HO_2 \rightarrow H_2+O_2$	-9.66	0.0	2.13
$H_2+O_2 \rightarrow H+HO_2$	-9.62	0.0	56.64
$O+HO_2 \rightarrow OH+O_2$	-10.54	0.0	-0.4
$OH+O_2 \rightarrow O+HO_2$	-10.43	0.0	52.66
$OH+HO_2 \rightarrow H_2O+O_2$	-10.3	0.0	0.0
$H_2O+O_2 \rightarrow OH+HO_2$	-9.18	0.0	73.0
$OH+OH+M \rightarrow H_2O_2+M$	-22.6	-3.0	0.0
$H_2O_2+M \rightarrow OH+OH+M$	9.33	-4.9	53.25
$HO_2+H_2 \rightarrow H_2O+OH$	-12.	0.0	18.68
$OH+H_2O \rightarrow HO_2+H_2$	-12.34	0.0	73.74
$HO_2+H_2O \rightarrow H_2O_2+OH$	-10.38	0.0	32.29
$H_2O_2+OH \rightarrow HO_2+H_2O$	-10.72	0.0	1.76
$H+H_2O_2 \rightarrow H_2O+OH$	-10.4	0.0	3.97
$H_2O+OH \rightarrow H+H_2O_2$	-9.72	0.0	79.19
$OH+M \rightarrow O+H+M$	-8.4	0.0	99.36
$O+H+M \rightarrow OH+M$	-29.89	-1.0	0.0
$O+O+M \rightarrow O_2+M$	-34.28	0.0	-1.79
$O_2+M \rightarrow O+O+M$	-5.52	-1.0	118.1

В Табл. 1. предэкспонент A выражен в $m^{3(1-\nu)}$, где ν – число реагентов в реакции, показатель n безразмерный, а энергия активации Ea – в Ккал/моль.

Отношения констант скоростей прямых и обратных реакций согласованы с константами равновесия, вычисленными на основе данных [7].

3. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ

3.1. Конечно-разностные уравнения

Расчётная область 10×18 см разбивалась подробной равномерной шахматной сеткой 1024×1024 узлов с размещением скалярных величин p, T, c_i в целых узлах сетки, а потоковых G_x, G_y, J_{xi}, J_{yi} – в полужелтых. При аппроксимации на сетку уравнения (1)–(4) относительно консервативных переменных $\rho, \mathbf{G} = \rho \mathbf{v}$, $\rho_i = \rho c_i, E = \rho \epsilon$ принимают вид

$$\frac{\hat{p} - p}{\tau} = f_p \equiv -(\mathbf{A}, \mathbf{G}),$$

$$\frac{\hat{\mathbf{G}} - \mathbf{G}}{\tau} = \mathbf{f}_G \equiv -(\mathbf{A}, \mathbf{v})\mathbf{G} + (\mathbf{A}, \eta \mathbf{A})\mathbf{G}/\rho - \Lambda p,$$

$$\frac{\hat{E} - E}{\tau} = f_\epsilon \equiv (\bar{\Lambda} \lambda \mathbf{A})T - (\mathbf{A}, \mathbf{G})\epsilon - \left(\bar{\Lambda}, \sum_i h_i \mathbf{J}_i \right),$$

$$\frac{\hat{\rho}_i - \rho_i}{\tau} = f \equiv W_i - (\mathbf{v}, \mathbf{A})\rho_i - (\bar{\Lambda} \mathbf{J}_i).$$

Путём линеаризации относительно приращений основных переменных $\xi_p = \hat{p} - p, \xi_G = \hat{\mathbf{G}} - \mathbf{G}, \xi_T = \hat{T} - T, \xi_i = \hat{c}_i - c_i$ и взаимных подстановок уравнения приводятся к виду

$$\frac{\xi_G}{\tau} + (\mathbf{A}, \mathbf{v})\xi_G^1 - (\mathbf{A}, \eta \mathbf{A})\xi_G^1 = \mathbf{f}_G, \quad (11)$$

$$\hat{c}_s^{-2} \frac{\xi_p}{\tau} + (\mathbf{A}, \xi_G^2) = f_p - \frac{p}{\tau} (\hat{c}_s^{-2} - c_s^{-2}), \quad (12)$$

$$\frac{\xi_i}{\tau} + (\mathbf{v}, \mathbf{A}) \xi_i + \frac{(\bar{\Lambda} \delta \mathbf{J}_i)}{\rho} - \frac{\delta W_i}{\rho} = \frac{f_i - c_i f_p}{\rho}, \quad (13)$$

$$\rho C_v \frac{\xi_T}{\tau} + \left(\rho C_v \mathbf{v} + \sum_i C_{p_i} \mathbf{J}_i, \mathbf{A} \right) \xi_T - (\bar{\Lambda} \lambda \mathbf{A}) \xi_T + \delta \sum_i e_i W_i = f_\epsilon - \sum_i \epsilon_i f_i, \quad (14)$$

Члены $(\bar{\Lambda} \delta \mathbf{J}_i)$ и δW_i , следуя методике [1], приводятся к виду

$$\frac{\bar{\Lambda} \delta \mathbf{J}_i}{\rho} \sim -\alpha_D (\bar{\Lambda} B_i \mathbf{A}) \xi_i,$$

$$\frac{\delta W_i}{\rho} \sim -\alpha_C \omega_i \xi_i,$$

где
$$\frac{1}{B_i} = M \sum_{j \neq i} \frac{c_j}{M_j D_{ij}};$$

α_D, α_C – коэффициенты порядка единицы, подбираемые экспериментально для обеспечения устойчивости алгоритма. Член $\sum_i e_i W_i$ в (14) преобразуем следующим образом. Переходя от суммирования по компонентам к суммированию по реакциям и линеаризуя по приращению температуры, получаем

$$\begin{aligned} \delta \sum_i e_i W_i / \rho &= \delta \sum_j \Delta E_j w_j \approx \sum_j \Delta E_j \frac{\partial w_j}{\partial T} \xi_T = \\ &= \sum_j \Delta E_j w_j \frac{\partial \ln K_j}{\partial T} \xi_T = C_V \omega_T \xi_T, \end{aligned}$$

где ΔE_j – энергетический эффект j -й реакции; w_j – её скорость. Для обеспечения устойчивости алгоритма используется несколько видоизменённое выражение для ω_T , гарантирующее $\omega_T > 0$:

$$\omega_T = \frac{1}{C_V} \sum_j w_j \left| \Delta E_j \frac{\partial \ln(K_j)}{\partial T} \right|.$$

Окончательно уравнения (13), (14) принимают вид, удобный для численного решения:

$$\left[\frac{1}{\tau} + v_y \Lambda_y - \alpha_D \bar{\Lambda}_y B_i \Lambda_y + \alpha_C \omega_i + \left(v_x + \alpha_{cx} \alpha_D \frac{B_i}{h_x} \right) \Lambda_x \right] \xi_i = \frac{f_i - c_i f_p}{\rho}, \quad (15)$$

$$\left[\left(v_x + \frac{\sum_i C_{p_i} J_{ix} + \frac{\lambda \alpha_{Tx}}{h_x}}{\rho C_V} \right) \Lambda_x - \frac{\bar{\Lambda}_y \lambda \Lambda_y}{\rho C_V} + \left(v_y + \frac{\sum_i C_{p_i} J_{iy}}{\rho C_V} \right) \Lambda_y + \frac{1}{\tau} + \alpha_T \omega_T \right] \xi_T = \frac{f_\epsilon - \sum_i e_i f_i}{\rho C_V}, \quad (16)$$

где коэффициент α_T в (16) аналогичен α_D, α_C в (15), а α_{cx} и α_{Tx} являются коэффициентами релаксации.

3.2. Алгоритм решения

Указанная система нестационарных уравнений решалась методом расщепления по физическим процессам с приближённой факторизацией конечно-разностных уравнений. Вначале независимо друг от друга решались уравнения неразрывности компонентов (15) и уравнение для температуры (16) с помощью релаксации в направлении потока (по оси x) с последовательными скалярными прогонами по линиям перпендикулярным потоку (вдоль оси y). После вычисления новых значений массовых долей, производилась их нормировка на единицу, пересчёт и нормировка диффузионных массовых потоков

$$\tilde{c}_i = c_i + \xi_i, \quad \hat{c}_i = \tilde{c}_i / \sum_j \tilde{c}_j$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{J}}_i &= (1 - \alpha_{\mathbf{J}}) \mathbf{J}_i + \alpha_{\mathbf{J}} B_i \times \\ &\times \left[M \hat{c}_i \sum_{j \neq i} \mathbf{J}_j \left(\frac{1}{M_j D_{ji}} - \frac{1}{M_i D_{ii}} \right) - \frac{\rho}{M} \Lambda(M \hat{c}_i) \right], \quad (17) \\ \hat{\mathbf{J}}_i &= \tilde{\mathbf{J}}_i - \hat{c}_i \sum_j \tilde{\mathbf{J}}_j, \end{aligned}$$

с тем, чтобы сумма последних равнялась нулю.

Схеме [1] соответствует $\alpha_{\mathbf{J}} = 1$ в (17). В данном расчёте коэффициент $\alpha_{\mathbf{J}}$ брался меньшим единицы для обеспечения устойчивости алгоритма.

Затем решались собственно уравнения гидродинамики (12), (13). Для их решения использовалось дополнительное расщепление по процессам на конвективный и акустический дробные шаги. Вычислительная схема, основанная на восстановлении дивергенции потока, имеет следующий вид. На первом (конвективном) дробном шаге решалось уравнение переноса с диффузией для приращения потока

$$\left[\frac{1}{\tau} + \left(v_x + \frac{\alpha_{Gx} \eta}{h_x} \right) \Lambda_x + \left(v_y - \bar{\Lambda}_y \eta \right) \Lambda_y \right] \xi_G^{(1)} = \mathbf{f}_G \quad (18)$$

комбинацией релаксации и прогонок по линиям. Второй (акустический) дробный шаг

$$\xi_G^{(2)} + \tau \Lambda \xi_p^{(2)} = \xi_G^{(1)},$$

$$\hat{c}_s^{-2} \frac{\xi_p^{(2)}}{\tau} + \left(\Lambda, \xi_G^{(2)} \right) = f_p - \frac{p}{\tau} (\hat{c}_s^{-2} - c_s^{-2}),$$

где $c_s^2 = RT/Mp$, сводился к параболическому уравнению для приращения давления

$$\hat{c}_s^{-2} \frac{\xi_p^{(2)}}{\tau} - \tau (\Lambda \bar{\Lambda}) \xi_p^{(2)} = f_p - \frac{p}{\tau} (\hat{c}_s^{-2} - c_s^{-2}) - \left(\Lambda, \xi_G^{(1)} \right),$$

решаемому с помощью многосеточного метода.

При вычислении правых частей в (11)–(14) для аппроксимации первых производных использовались центральные разности, а в уравнениях (15)–(17) – направленные. Благодаря достаточно подробной сетке, использование центральных разностей не приводило к паразитным осцилляциям решения и позволило получить второй порядок точности аппроксимации по пространству. Порядок временной аппроксимации был первым.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТОВ

Первый цикл расчётов проводился с целью отработки алгоритма и подбора вычислительных параметров. В ходе него были определены оптимальные значения итерационных параметров, приведённые в Табл. 2.

Таблица 2

Значения вычислительных параметров

α_T	α_D	α_c	$\alpha_{\mathbf{J}}$	α_{cx}	α_{Tx}	α_{Gx}
2.8	1.5	3.0	0.4	1.2	1.7	1.5

Второй цикл расчётов был посвящён моделированию реального факела. Расчёты проводились для условий, близких к эксперименту [5]: скорости ввода

горючего 55 м/с через сопло шириной 6мм и скорости воздуха 5 м/с с начальной температурой 300 К при давлении 1 атм. Потoki на входе считались ламинарными. Вычисленные поля средних величин представлены на рис. 2–5.

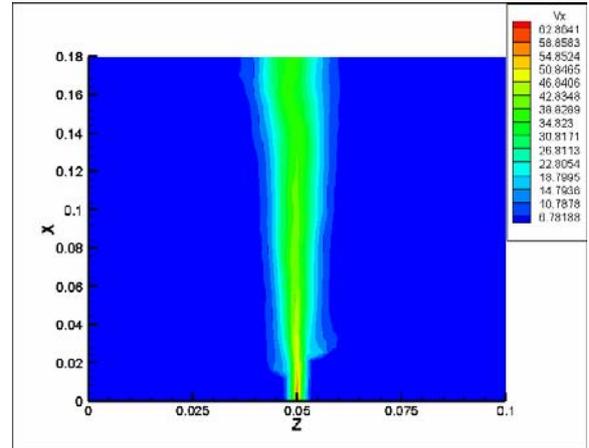


Рис. 2. Продольная скорость смеси

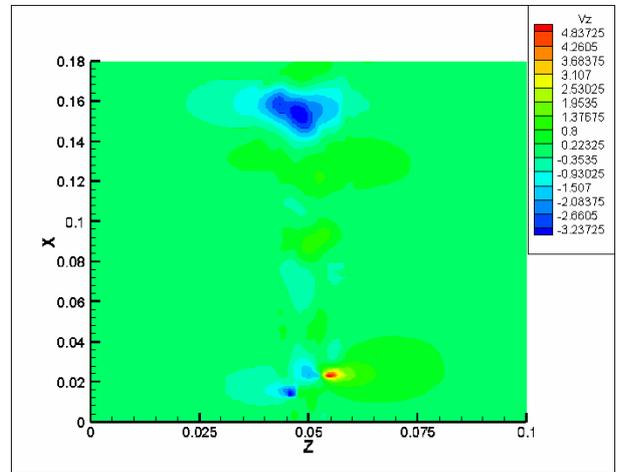


Рис. 3. Поперечная скорость потока

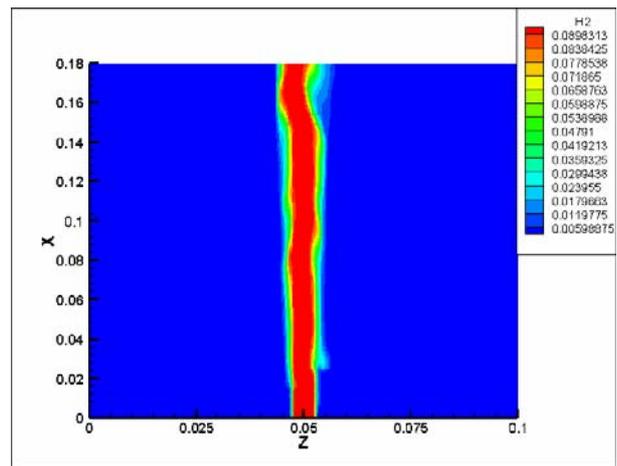


Рис. 4. Массовая доля H₂

Как вычисленные среднемассовые величины, так и спектры турбулентных пульсаций среднемассовой скорости, температуры и давления сопоставлены с экспериментом [5]. При сопоставлении профилей усреднённых компонент скорости, профилей концентрации и температуры наблюдалось удовлетворительное согласие (см. рис. 6).

Профили вычисленных среднеквадратичных пульсаций компонент скорости не согласуются с измерен-

ными, что говорит о необходимости доработки алгоритма первым.

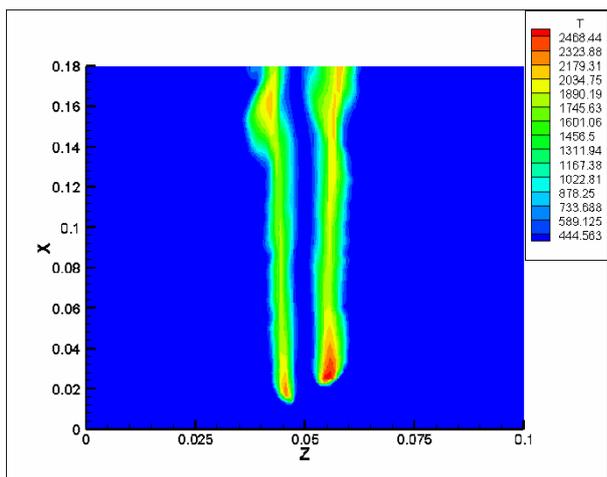


Рис. 5. Температура смеси

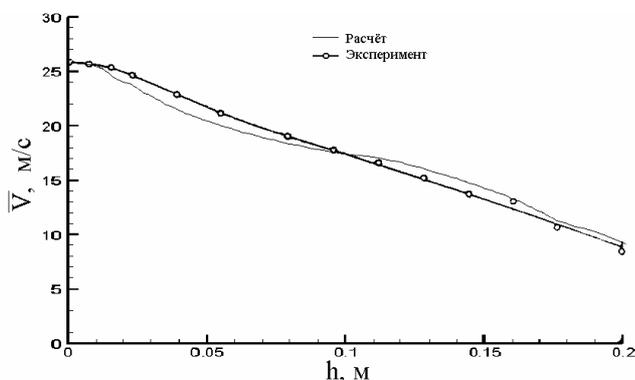


Рис. 6. Усреднённая продольная скорость смеси

5. ВЫВОДЫ

Предложен алгоритм прямого моделирования турбулентного водородо-воздушного факела на основе двумерных уравнений многокомпонентной гидродинамики, полных уравнений многокомпонентной диффузии и подробной кинетической схемы горения. Сеточные уравнения неразрывности компонентов и энергобаланса решаются последовательными скалярными прогонками в направлении поперечном потоку и релаксацией вдоль потока. Уравнения гидродинамики решаются расщеплением по процессам на конвективный и акустический дробные шаги. Акустический дробный шаг включает итерационное решение уравнения для приращения давления. Остальные дробные шаги реализованы по экономичной безитерационной схеме.

Алгоритм позволяет вычислить нестационарные распределения усреднённых скоростей, давлений, концентраций и температур турбулентного водородо-воздушного факела. Вычисленные поля усреднённых величин находятся в удовлетворительном согласии с опытом.

Алгоритм дорабатывается для достижения лучшего согласия с наблюдаемыми распределениями пульсаций основных величин.

СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

- ρ — плотность газовой смеси, кг/м³
- v — среднемассовая скорость газа, м/с
- p — давление, Па
- η — вязкость смеси, кг/м·с
- e — массовая плотность внутренней энергии, Дж/кг
- E — объёмная плотность внутренней энергии, Дж/м³
- λ — теплопроводность смеси, Вт/м·К
- T — температура, К.
- c_i — массовая доля i -го компонента смеси
- J_i — массовый поток i -го компонента смеси, кг/м²·с
- h_i — массовая плотность энтальпии i -того компонента смеси, Дж/кг
- W_i — химический источниковый член, кг/м³·с
- t — число химических компонентов в смеси
- A — предэкспонент, м³/с
- Ea — энергия активации, Ккал/Моль
- D_{ij} — коэффициенты бинарной диффузии, м²/с
- M_i — молекулярный вес i -го компонента смеси, кг/моль
- M — средний молекулярный вес смеси, кг/моль
- N_A — число Авогадро, 1/моль
- n_i — концентрация i -того компонента смеси, м⁻³
- K_s^+, K_s^- — константы скорости реакций, м³/с
- $\epsilon_{ij}, \sigma_{ij}$ — коэффициенты Ленарда–Джонса потенциала взаимодействия молекул i -го и j -го компонентов
- ϵ_i, σ_i — коэффициенты Ленарда–Джонса для чистого i -го компонента
- η_i — коэффициент вязкости чистого i -го компонента смеси, кг/м·с
- λ_i — коэффициент теплопроводности чистого i -го компонента смеси, Вт/м·К
- C_{Vi}, C_{pi} — молярные теплоёмкости i -го компонента смеси, Дж/моль·К
- $\Omega^{(\alpha,\beta)}$ — стандартные интегралы
- ω_b, ω_T — стабилизирующие коэффициенты, с⁻¹
- $\alpha_T, \alpha_D, \alpha_c, \alpha_J$ — весовые коэффициенты
- $\alpha_{cx}, \alpha_{Tx}, \alpha_{Gx}$ — коэффициенты релаксации
- ξ_p — приращение давления на временном шаге, Па
- ξ_ρ — приращение плотности на временном шаге, кг/м³
- ξ_G — приращение потока на временном шаге, кг/м²·с
- ξ_i — приращение массовой доли i -го компонента смеси на временном шаге
- ξ_T — приращение температуры на временном шаге, К
- f_k — правые части в уравнениях для вычисляемых величин
- $\Lambda=(\Lambda_x, \Lambda_y)$ — конечно-разностный оператор
- c_s — изотермическая скорость звука, м/с

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках программы фундаментальных исследований ОЭМПУ РАН под руководством академика Д.М. Климова и программы фундаментальных исследований ОЭМПУ РАН под руководством академика Г.Г. Чёрного и грантов РФФИ № 05-01-00780, № 07-01-00133.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лапин Ю.В., Стрелец М.Х. Внутренние течения газовых смесей. М.: Наука, 1989.
2. Либби П., Вильямс Ф. Турбулентные течения реагирующих газов. М.: Мир, 1983.
3. Im H.G., Chen J.H. Preferential diffusion effects on the burning rate of interacting turbulent premixed hydrogen-air flames. // Combustion and Flame. 2002. V. 131. Pp. 246 – 258.

4. Пакди В., Махалингэм Ш. Численное исследование турбулентного горения неперемешанной смеси газов пиролиза древесины. // Физика горения и взрыва 2007, Т. 43. № 3, С. 15 – 34.
5. Takagi T., Shin H.-D., Ishio A. Properties of Turbulence in Turbulent Diffusion Flames. // Combustion and flame, 1981, Pp. 121–140.
6. Гишфельдер Д., Кертис Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.:ИЛ, 1961.
7. В.П.Глушко (ред.) и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ и химических соединений. т.2, М.:АН СССР, 1962.
8. Mechanical Engineering Berkeley University of California, GRI-Mech Home Page, <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/data/gri30a.dat>