

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ГОРЕНИЯ НЕПЕРЕМЕШАННОЙ СМЕСИ ГАЗОВ ПИРОЛИЗА ДРЕВЕСИНЫ

В. Пакди¹, Ш. Махалингэм²

¹Машиностроительный факультет, Университет Тамасат (университетский городок Рангсит), Патумтхани 12121, Таиланд, wprakdee@engr.tu.ac.th

²Машиностроительный факультет, Калифорнийский университет, Риверсайд, Калифорния 92521, США

С использованием метода прямого численного моделирования (DNS — direct numerical simulation) разработана база данных для расчета турбулентных пламен смесей сжимаемых неперемешанных газов пиролиза древесины. Для моделирования горения смеси пиролизного газа и воздуха использовался редуцированный кинетический механизм. Исследовалось уравнение эволюции мгновенной поверхностной плотности пламени, основанное на понятии относительной скорости. Нормальная составляющая этой скорости почти постоянна относительно кривизны, в то время как составляющая, связанная с кривизной, стремится привести фронт пламени к плоской форме. Скорость деформации служит основным источником растяжения пламени. Нормальная составляющая ответственна как за положительный, так и за отрицательный вклад в площадь пламени. А составляющая, связанная с кривизной, является прежде всего стоком, поскольку в нем преобладает эффект кривизны. Влияние деформации и кривизны анализируется путем рассмотрения их корреляций со скоростями реакций. Скорости реакций растут с увеличением положительных скоростей деформации вследствие увеличения площади поверхности пламени, а также с уменьшением кривизны. Проанализированные результаты полезны при разработке моделей турбулентного горения. Наконец, предложена и рассмотрена новая модель для средней вариации скалярной скорости диссипации, основанная на подходе скалярного подобия. Сравнение с результатами прямого численного моделирования показывает, что предложенная модель обеспечивает значительное улучшение по сравнению с существующими моделями.

Ключевые слова: горение, турбулентное диффузионное пламя, прямое численное моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

Применение прямого численного моделирования (DNS — direct numerical simulation) турбулентных пламен неперемешанных смесей способствует не только более глубокому пониманию сложного взаимодействия между горением и турбулентностью, но и играет важную роль при разработке и оценке моделей турбулентного горения. DNS позволяет проводить детальные исследования основных физических процессов. В течение последнего десятилетия этот метод применяли для решения задач теории турбулентных пламен неперемешанных смесей [1–3]. Исследования турбулентно-химического взаимодействия и влияния турбу-

лентности на структуру пламени выполнялись с использованием различных химических моделей и конфигураций пламени. В работе [4] при прямом численном исследовании нестационарных воздействий на турбулентные пламена неперемешанных смесей применяли двухступенчатую химическую кинетику конечной скорости. В работе [5] в компьютерную программу прямого численного моделирования горения смеси метана и воздуха со смесью азота и кислорода был включен редуцированный (двухступенчатый) механизм; при этом предполагалось, что термодинамические свойства постоянны. В исследовании [6] пламен неперемешанных смесей методом DNS самовоспламенение смеси *n*-гептана и воздуха описывали одной необратимой реакцией. В недавно опубликованной работе [7] методом DNS выполнено двумерное моделирование режимов горения предельно перемешанных и неперемешанных самовоспламеняющихся смесей водорода и нагретого воздуха.

W. Pakdee¹, S. Mahalingam²

¹Department of Mechanical Engineering, Thammasat University (Rangsit Campus), Pathumthani 12121, Thailand.

²Department of Mechanical Engineering, University of California, Riverside, CA 92521, USA.

В случае достаточно быстрых химических реакций характерное время реакций мало по сравнению с временами конвекции и диффузии. Следовательно, горение происходит внутри асимптотически тонких элементов в пределах пламени. Эти элементы называются элементарными пламенами [8]. Скорость горения элементарного пламени можно оценить с помощью поверхностной плотности пламени (FSD — flame surface density), которая определяется как площадь поверхности пламени в единичном объеме. Понятие поверхностной плотности пламени впервые введено Марблом и Бродуэллом [9] для описания турбулентного горения неперемешанных смесей. Анализ физических эффектов, приводящих к изменению поверхности пламени, позволяет понять, как создается, разрушается, искажается и распространяется поверхность пламени под воздействием ряда механизмов, таких как конвекция, эффекты кривизны и молекулярная диффузия. Вводились разные формы уравнения переноса — из геометрических соображений [9–11] или на основе статистического подхода [12, 13]. В [11] на основе предположения о горении неперемешанной смеси выведено два эквивалентных точных уравнения переноса для изоравновесной поверхностной плотности. Одно из них базируется на уравнении баланса долей смеси с учетом определения поверхностной плотности пламени, другое выводится из G-уравнения. В уравнениях переноса были выделены члены из результатов DNS и проанализированы отдельно. Предложены модели для незамкнутых членов и выполнено DNS слоя смешения постоянной плотности в предположении бесконечно быстрой кинетики, описываемой одной реакцией топлива с окислителем. Эти исследования были продолжены в работе [14], где изучалось влияние тепловыделения в течениях с переменной плотностью в предположении идеальности газов и постоянства отношения удельных теплоемкостей.

В настоящей работе проведено прямое численное моделирование турбулентных пламен неперемешанной смеси газов пиролиза древесины, которая является основным горючим при лесном пожаре. В некоторых ситуациях интенсивного пожара местные метеорологические условия могут существенно меняться и приводить к «взрыву» [15]. Поэтому при разработке физически оправданной модели интенсивного пожара необходимо учитывать горение в газо-

вой фазе, в процессе которого выделяется большое количество энергии.

В настоящей работе вводится результирующая база данных с описанием основных особенностей и статистики. В работе проведена проверка вклада отдельных членов, входящих в уравнение эволюции поверхностной плотности пламени. Как обсуждалось ранее, аналогичный анализ был выполнен для течения с турбулентным слоем смешения, моделируемого с помощью простой одноступенчатой реакции [11, 14]. В отличие от указанных исследований, в которых топливо было чистым газом, в нашей работе топливо является пиролизным газом, состоящим из смеси газов с более реалистичной химической кинетикой. Физически интерпретируется и исследуется влияние скорости вытеснения пламени относительно движущегося потока и его кривизны на динамику FSD. Следует отметить, что пока накоплено мало данных по кривизне и скорости деформации пламен неперемешанных смесей. В предыдущих работах [10, 16–19] в основном исследовались пламена предварительно перемешанных смесей. В настоящей работе изложены некоторые предварительные результаты, касающиеся влияния кривизны и скорости деформации на структуру турбулентного пламени. Введен новый подход к моделированию средней вариации скалярной скорости диссипации, основанный на понятии подобия масштабов.

1. МЕТОД РАСЧЕТА И ПАРАМЕТРЫ ПЛАМЕНИ

В настоящем исследовании использовалось двумерное DNS-моделирование турбулентных пламен неперемешанной смеси газов пиролиза древесины, образующейся при высокотемпературном пиролизе материала лесной подстилки. Это топливо — сложная смесь, состоящая из четырех основных газов (CO , H_2 , CH_4 и CO_2) [20]. Механизм горения пиролизных газовых смесей включает в себя несколько сотен элементарных реакций. Точное описание подробного механизма реакций сложной химической кинетики хотя и возможно, но требует значительных вычислительных ресурсов. Поэтому здесь применяется недавно полученная редуцированная схема химической кинетики [21] для моделирования горения газа пиролиза древесины, включающая четыре реакции.

Численное моделирование турбулентных реагирующих потоков с такой сложной химической кинетикой остается весьма трудной про-

блемой вследствие сильной жесткости и нелинейности основных уравнений, включающих большое количество реагирующих компонентов, и широкого диапазона масштабов длин и времен. В настоящей работе выбрана двумерная геометрия расчетной области, что позволяет использовать более реалистичную химическую кинетику. Хотя двумерная турбулентность препятствует моделированию таких физических эффектов, как растяжение вихря, предыдущие исследования показали, что вероятность найти локально-трехмерные сферические пламена, ассоциированные с растяжением вихря, намного меньше, чем вероятность найти двумерные цилиндрические слои пламени [22]. Двумерная турбулентность обеспечивает детальные статистические корреляции, аналогичные корреляциям в трехмерном случае [14]. В работе [23] выполнены двух- и трехмерные расчеты турбулентного горения. Авторы, исследуя роль тройных пламен и горения частично перемешанных смесей в процессах воспламенения турбулентной неперемешанной смеси, установили, что результаты двумерных расчетов аналогичны полученным в трехмерном случае. Кроме того, в предыдущих исследованиях [24, 16] было показано, что различия между двух- и трехмерными воздействиями на динамику и статистику поверхности пламени незначительны. Таким образом, двумерное моделирование способно учитывать большую часть турбулентных и химических взаимодействий. Выполненные в прошлые годы многочисленные работы по двумерному моделированию [14, 17, 25] дали ценные результаты в области турбулентных реагирующих течений, включая горение.

Горение пиролизного газа описывают системой следующих основных уравнений: уравнения сохранения массы, импульса, энергии и компонентов [26]. Используется двумерная область размером 1.0×1.0 см с равномерной конечно-разностной сеткой с разрешением 256×256 , достаточным для учета самых мелких зон реакций. Предполагается первоначально деформированное одномерное ламинарное диффузионное пламя между пиролизной газовой смесью и воздухом, которое было рассчитано с применением кода OPPDIF [27]. Для «иницирования» зоны реакции деформация исключается, как только пламя становится недеформированным. Начальные профили массовых долей реагентов и температур приведены

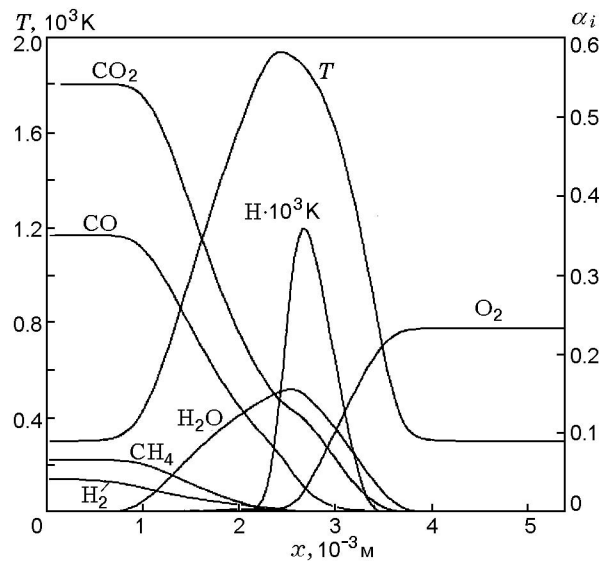


Рис. 1. Начальные профили массовых долей (α_i) и температуры противоточных диффузионных пламен для древесного пиролизного газа

ны на рис. 1. Поле гомогенной турбулентности «иницируется» в расчетной области после того, как акустические волны начального возмущения покидают ее. Генерируется поле пульсации скорости. Преобразование Фурье скоростей вычисляется в соответствии со спектром турбулентной кинетической энергии Пассо — Пуке [28]. Затем используется быстрое преобразование Фурье для восстановления скоростей в физическом пространстве. Начальное турбулентное число Рейнольдса, основанное на интегральном масштабе длины, принимается равным 118.

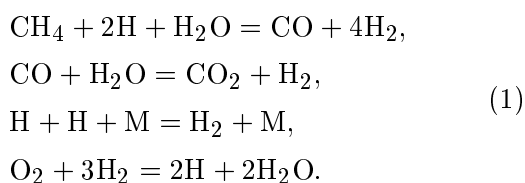
DNS-программа, первоначально разработанная для расчета горения совершенных сжимаемых газов с постоянными удельными теплоемкостями [29], была модифицирована для точного моделирования смеси газов с переменными термодинамическими свойствами и сложной химической кинетикой. В качестве модели переноса для отдельных компонентов используется закон Фика с аппроксимацией числа Льюиса, рекомендованной в [30]. Производные по пространственным переменным аппроксимируются с использованием компактной конечно-разностной схемы с аппроксимациями шестого порядка точности [31]. Эта схема точно моделирует поведение акустической волны и обеспечивает спектральное разрешение как амплитуды, так и фазы решения. На границе и в узлах, прилегающих к границе, порядок точно-

сти соответственно третий и четвертый. Для интегрирования уравнений во времени используется схема Рунге — Кутты третьего порядка точности. Для реализации граничных условий используется модифицированный метод характеристических граничных условий для уравнений Навье — Стокса, подробно описанный в [26]. В направлении оси y задаются неотражающие граничные условия, в направлении оси x — периодические.

Значительная часть расчетов в данном исследовании проведена на параллельных компьютерах. Параллельный алгоритм основан на методе, разработанном для расчета турбулентных стратифицированных сдвиговых течений методом DNS [32]. Коммуникация между компьютерами осуществлялась с использованием стандарта MPI (message passing interface — интерфейс для передачи сообщений) [33].

2. ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА

Химическая кинетика моделируется с использованием редуцированного механизма, развитого в [21]. Модель включает в себя реагирующие компоненты CO, H₂ и CH₄, продукты горения H₂O и CO₂ и радикал H в качестве промежуточного компонента. Предполагается, что концентрации других компонентов (CH₃, CH₂O, HCO, O, OH и HO₂) стационарны. Установлено, что приближение частичного равновесия приводит к ошибкам. Это частично обусловлено тем, что CO и H₂ являются частью топлива в процессе окисления пиролизного газа, в отличие от углеводородовоздушных пламен чистых газов, где они учитываются как промежуточные компоненты. Редуцированный механизм включает в себя следующие реакции:



Тестирование редуцированного механизма осуществляли с использованием трех тестовых сред: реактор идеального смешения, пламя предварительно перемешанной смеси и диффузионное пламя в противоположно направленных потоках окислителя и топлива [21]. Проведено сравнение результатов расчетов, выполненных с полной, скелетной и редуцированной

химической кинетикой в широком диапазоне газовых составов пиролизного топлива, коэффициентов избытка топлива и скоростей деформации. Путем сравнения распределений температур, профилей концентраций компонентов, скоростей распространения пламени предварительно перемешанной смеси газов и условий затухания диффузионного пламени найдено, что в общем случае редуцированный механизм обеспечивает хорошее описание процесса окисления пиролизного газа [21]. В настоящей работе выбраны следующие массовые доли газообразного топлива: $Y_{\text{CO}} = 0.35$, $Y_{\text{H}_2} = 0.042$, $Y_{\text{CH}_4} = 0.066$ и $Y_{\text{CO}_2} = 0.542$, что соответствует пиролизу осиновой древесины [34].

3. УРАВНЕНИЕ ПЕРЕНОСА ДЛЯ ПОВЕРХНОСТНОЙ ПЛОТНОСТИ ПЛАМЕНИ

В предположении элементарного пламени диффузионное пламя находится вблизи стехиометрического изоуровня $Z(\mathbf{x}, t) = Z_{st}$, где \mathbf{x} — вектор пространственных координат, t — время, Z — доля смеси, определяемая для смеси пиролизного газа [21],

$$Z = \frac{\frac{Y_{\text{C}} - Y_{\text{C},ox}}{v_{\text{C}}W_{\text{C}}} + \frac{Y_{\text{H}} - Y_{\text{H},ox}}{v_{\text{H}}W_{\text{H}}} + 2\frac{Y_{\text{N},ox} - Y_{\text{N}}}{v_{\text{N}}W_{\text{N}}}}{\frac{Y_{\text{C},f} - Y_{\text{C},ox}}{v_{\text{C}}W_{\text{C}}} + \frac{Y_{\text{H},f} - Y_{\text{H},ox}}{v_{\text{H}}W_{\text{H}}} + 2\frac{Y_{\text{N},ox} - Y_{\text{N},f}}{v_{\text{N}}W_{\text{N}}}}, \quad (2)$$

W — молекулярная масса, индексами C, H и N обозначены величины, относящиеся к атомам углерода, водорода и азота, индексами f и ox — первоначально не перемешанные состояния топлива и окислителя соответственно. Коэффициенты v_{C} , v_{H} и v_{N} вычисляются в соответствии с упрощенной глобальной реакцией. При таком определении доли смеси максимальная температура близка к стехиометрической в диапазоне составов пиролизного газа. Для выбранного состава пиролизного газа, горящего в воздухе, $Z_{st} = 0.226$. Поскольку фронт пламен перемешанных смесей соответствует частному изоуровню пассивного скаляра, можно получить точное выражение для FSD (Σ) как произведение скалярного градиента и «мелкозернистой» функции плотности вероятности [14]:

$$\Sigma = |\nabla Z| \delta(Z - Z_{st}), \quad (3)$$

где δ — дельта-функция Дирака. Уравнение баланса поверхностной плотности пламени впервые было получено в [9] при анализе турбулентных диффузионных пламен. Его вывод основан исключительно на феноменологических соображениях.

Альтернативная форма уравнения переноса для Σ получена в [14] на основе уравнения баланса долей смеси в форме G-уравнения:

$$\frac{\partial Z}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla Z = w |\nabla Z|, \quad (4)$$

где \mathbf{u} — вектор скорости, w — относительная скорость.

Величина w представляет собой скорость изоскалярного распространения относительно поля течения. Рассматривается изо-поверхность доли смеси Z . Если эта изо- Z -поверхность распространяется в направлении нормали в поле течения \mathbf{u} аналогично случаю горения предварительно перемешанной смеси [10], то абсолютная скорость распространения \mathbf{v} изо- Z -поверхности дается формулой

$$\mathbf{v} = \mathbf{u} + w\mathbf{n}, \quad (5)$$

где вектор единичной нормали \mathbf{n} изо- Z -поверхности направлен в сторону окислителя:

$$\mathbf{n} = -\frac{\nabla Z}{|\nabla Z|}. \quad (6)$$

Величина w определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} w &= \frac{1}{\rho |\nabla Z|} \nabla \cdot (\rho \mathcal{D} \nabla Z) = \\ &= -\underbrace{\frac{1}{\rho |\nabla Z|} \frac{\partial}{\partial n} (\rho \mathcal{D} |\nabla Z|)}_{w_n} - \underbrace{\mathcal{D} \nabla \cdot \mathbf{n}}_{w_c}, \end{aligned} \quad (7)$$

где $\frac{\partial}{\partial n}$ — производная вдоль вектора нормали к пламени \mathbf{n} , \mathcal{D} — коэффициент диффузии. Кривизна $\mathcal{K} = \nabla \cdot \mathbf{n}$ принимает положительные значения в случае, когда пламя выпуклое по направлению к окислителю. Первый член w_n отражает влияние диффузионных процессов, происходящих по нормали к фронту пламени в стехиометрической доле смеси. Второй член w_c связан с кривизной изо- Z -поверхности. Уравнение переноса для мгновенной FSD имеет вид

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{\partial \Sigma}{\partial t}}_{\text{I}} + \underbrace{\nabla \cdot (\mathbf{u} \Sigma)}_{\text{II}} &= \underbrace{(\nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{n} \mathbf{n} : \nabla \mathbf{u}) \Sigma}_{\text{III}} - \\ &- \underbrace{\nabla \cdot (w \mathbf{n} \Sigma)}_{\text{IV}} + \underbrace{(w \nabla \cdot \mathbf{n}) \Sigma}_{\text{V}}. \end{aligned} \quad (8)$$

Члены в левой части соответствуют нестационарному эффекту (I) и конвекции средним потоком (II), в правой части — тангенциальной скорости деформации, действующей на поверхности (III), влиянию нормальной компоненты скорости w (IV) и влиянию смещения/кривизны (V). С учетом определения скорости w можно разложить член кривизны на два слагаемых [14]:

$$w \nabla \cdot \mathbf{n} = w_n \nabla \cdot \mathbf{n} - \mathcal{D} (\nabla \cdot \mathbf{n})^2, \quad (9)$$

где первое слагаемое обозначает эффекты, возникающие вследствие смещения пламени вдоль нормали, второе представляет собой разрушение поверхности пламени, вызванное действием молекулярной диффузии в сморщенных площадях фронта пламени. Члены, присутствующие в уравнении (8), подробно рассмотрены в параграфе, посвященном обсуждению результатов.

Приведенная выше формулировка поверхностной плотности пламени аналогична уравнению переноса, выведенному для горения смеси предварительно перемешанных газов в работах [10, 35], где было получено уравнение баланса для горения такой смеси. Уравнение переноса было выведено исходя из скорости изменения фронта пламени:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \Sigma) &= \\ &= (\nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{n} \mathbf{n} : \nabla \mathbf{u}) \Sigma - \mathbf{n} \cdot \nabla (w \Sigma), \end{aligned} \quad (10)$$

где последний член можно представить в виде

$$\mathbf{n} \cdot \nabla (w \Sigma) = \nabla \cdot (\mathbf{n} w \Sigma) - w \Sigma \nabla \cdot \mathbf{n}. \quad (11)$$

Единственное различие между уравнениями переноса (8) и (10) состоит в определении скорости w . В отличие от пламен предварительно перемешанных смесей, где можно оценить скорость w по скорости ламинарного пламени S_l на основе баланса процессов диффузии/реакции, при горении неперемешанных смесей скорость w зависит только от диффузионных процессов.

4. МОДЕЛЬ СРЕДНЕЙ ВАРИАЦИИ СКАЛЯРНОЙ СКОРОСТИ ДИССИПАЦИИ, ИСПОЛЬЗУЮЩАЯ МЕТОД ПОДОБИЯ МАСШТАБОВ

Модель подобия масштабов была предложена и успешно применена для подсчетной вариации доли смеси при моделировании крупномасштабных вихрей [36–38]. Модель основана на идее о том, что самые большие неразрешенные масштабы имеют структуру, аналогичную самым малым разрешенным структурам. Покажем, что метод подобия масштабов можно обобщить для оценки вариации скалярной скорости диссипации, которая требуется в модели элементарного пламени [8]. Скалярная скорость диссипации χ представляет собой скорость молекулярного перемешивания, определяемую как

$$\chi \equiv 2D \frac{\partial Z}{\partial x_j} \frac{\partial Z}{\partial x_j}. \quad (12)$$

При моделировании элементарного пламени турбулентное диффузионное пламя рассматривается как статистический ансамбль тонких ламинарных пламен, называемых элементарными [39]. В модели элементарного пламени предполагается, что для турбулентных пламен локальный баланс между диффузией и реакцией аналогичен балансу в ламинарном противоточном диффузионном пламени [3]. Среднемассовые доли и скорости реакций вычисляются по формулам

$$\bar{Y}_i = \int_0^1 \int_0^1 Y_i(Z, \chi) P(Z, \chi; x, t) dZ d\chi, \quad (13)$$

$$\bar{\omega}_i = \int_0^1 \int_0^1 Y_i(Z, \chi) P(Z, \chi; x, t) dZ d\chi, \quad (14)$$

где $Y_i(Z, \chi)$ описывает локальную структуру пламени, а $P(Z, \chi; x, t)$ — совместимая функция плотности вероятности, функции плотности вероятности Z и ее скорости диссипации χ . Совместная функция плотности вероятности учитывает статистику перемешивания топливовоздушной смеси. Библиотека $Y_i(Z, \chi)$ строится путем расчета ламинарного диффузионного пламени. Можно моделировать совместную функцию плотности вероятности $P(Z, \chi; x, t)$ в

предположении, что Z и χ статистически независимы. Поэтому $P(Z, \chi; x, t)$ можно записать в виде

$$P(Z, \chi; x, t) = P(Z; x, t) P(\chi; x, t). \quad (15)$$

Хорошо известно, что функция плотности вероятности применялась для разработки подсчетных моделей замыкания при моделировании турбулентного горения [40–43]. Можно моделировать функции плотности вероятности в правой части уравнения (15). Для $P(Z; x, t)$ предполагается бета-функция [44]. Моделирование величины $P(\chi; x, t)$ обсуждается ниже.

Формулировка метода

В работе [45] функцию $P(\chi; x, t)$ приближали, используя известное логарифмически-нормальное распределение для определения вероятности горения элементарных пламен:

$$P(\chi; x, t) = \frac{\exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2(x, t)} (\ln \chi - \gamma(x, t))^2\right)}{\sqrt{2\pi\chi}\sigma(x, t)}. \quad (16)$$

Здесь параметры σ и χ связаны с первым и вторым моментами скалярной скорости диссипации формулами

$$\bar{\chi} = \exp\left(\gamma + \frac{\sigma^2}{2}\right), \quad (17)$$

$$\overline{\chi'^2} = \bar{\chi}^2 (\exp(\sigma^2) - 1). \quad (18)$$

Модели средней скалярной скорости диссипации $\bar{\chi}$ были предложены в [37, 46, 47]. В экспериментах [48, 49] было найдено, что σ^2 должно быть близко к единице. Как только значение σ найдено, можно вычислить параметр γ . Следовательно, можно получить функцию плотности вероятности $P(\chi; x, t)$ из (16).

В данной статье мы сосредоточимся на средней вариации скалярной скорости диссипации $\overline{\chi'^2}$, которая определяется как [36]

$$\overline{\chi'^2} = \overline{\chi^2} - \bar{\chi}^2. \quad (19)$$

Предлагается более простая альтернатива моделированию $\overline{\chi'^2}$ с использованием модели подобия масштабов. Этот подход успешно применялся при моделировании вариации скалярной

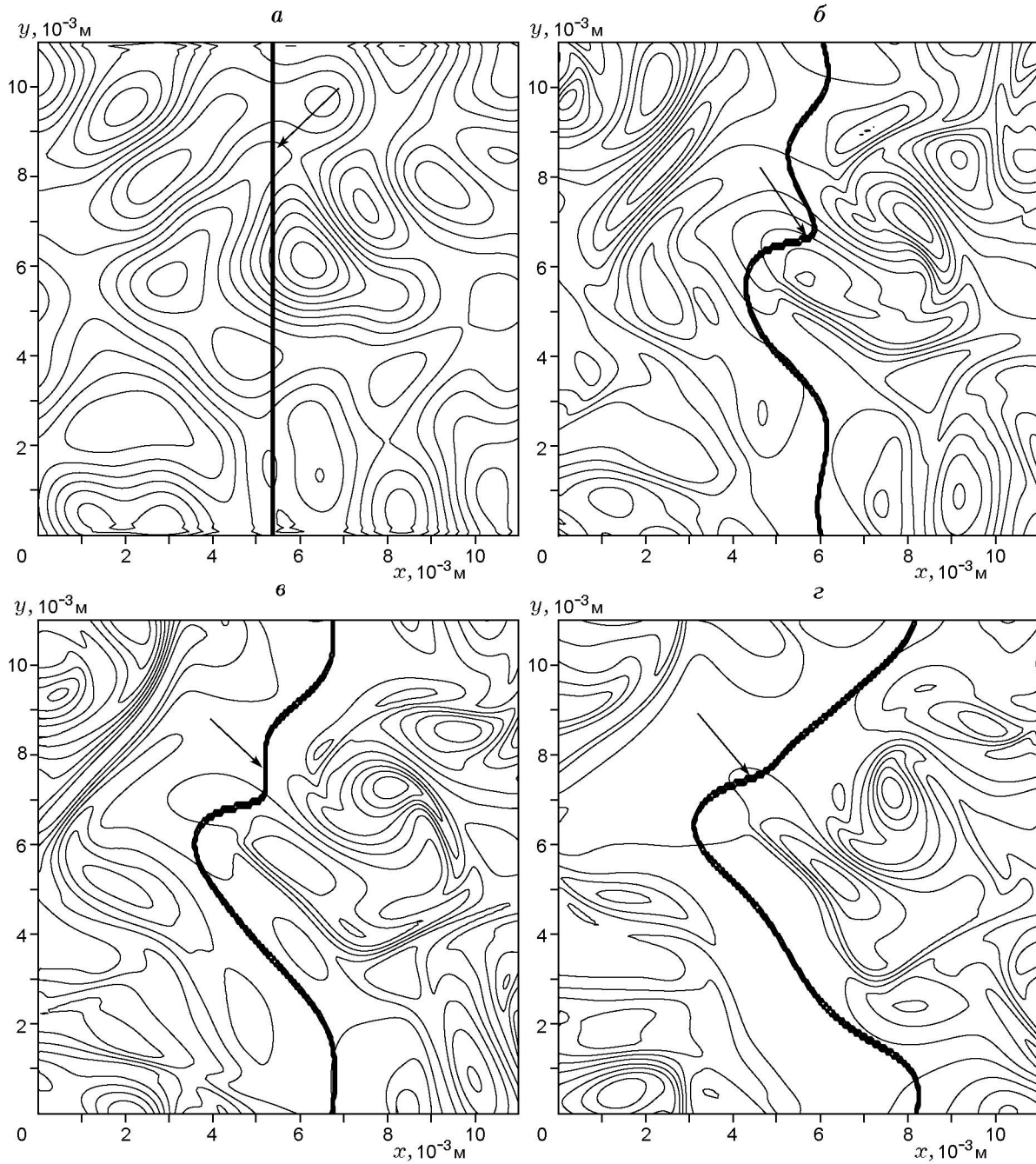


Рис. 2. Эквидистантные изолинии завихренности и наложенные на них изолинии поверхностной плотности пламени (указаны стрелками) с 10 уровнями:

изолинии завихренности варьируются в диапазоне: a — $-2377.19 \div 3146.54 \text{ с}^{-1}$, $б$ — $-9856.26 \div 8158.42 \text{ с}^{-1}$, $в$ — $-9337.52 \div 7007.6 \text{ с}^{-1}$, $г$ — $-8816.56 \div 6439.8 \text{ с}^{-1}$

пассивной доли смеси [37, 50]. В недавней публикации [51] предполагалось подобие масштабов скалярной скорости диссипации при разработке моделей динамической структуры для моделирования крупномасштабных вихрей. Таким образом, можно моделировать $\overline{\chi'^2}$ как

$$\overline{\chi'^2} \cong c(\widehat{\chi^2} - \widehat{\chi}^2), \quad (20)$$

где c — постоянная подобия масштабов, а знаком $\widehat{}$ обозначен тестовый фильтр с размером, превосходящим сетку фильтра. Операция фильтрации определена в § 5.3. В правую часть уравнения (20) входят вихри с размерами, варьируемыми от масштаба сетки фильтра до масштаба тестового фильтра. Параметры γ и σ можно легко вывести в терминах $\overline{\chi'^2}$ и $\bar{\chi}$:

$$\gamma = \ln \bar{\chi} - \left(\frac{\overline{\chi'^2}}{\bar{\chi}^2} + 1 \right) / 2, \quad (21)$$

$$\sigma = \sqrt{\ln \left(\frac{\overline{\chi'^2}}{\bar{\chi}^2} + 1 \right)}. \quad (22)$$

Эта модель и предшествующие сравниваются и оцениваются с использованием данных DNS. Результаты изложены в § 5.3.

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

5.1. Уравнение переноса FSD

Поверхностную площадь пламени (FSD) можно также определить из феноменологических соображений как площадь поверхности пламени δA , заключенную в объеме [14]:

$$\delta A = \int_{\delta V} \Sigma dV. \quad (23)$$

Этот метод полезен при вычислении плотности пламени по данным DNS. В двумерной конфигурации он включает в себя вычисление длины пламени в пределах площади ячейки сетки $\Delta_x \Delta_y$.

Полученные расчетные поля затем были выделены и изучены. Контуры мгновенной завихренности и результаты расчетов FSD в разные моменты турбулентного взаимодействия, рассчитанные на основе начального времени исчезновения вихря $t_e = l_t/u_t$, где l_t — началь-

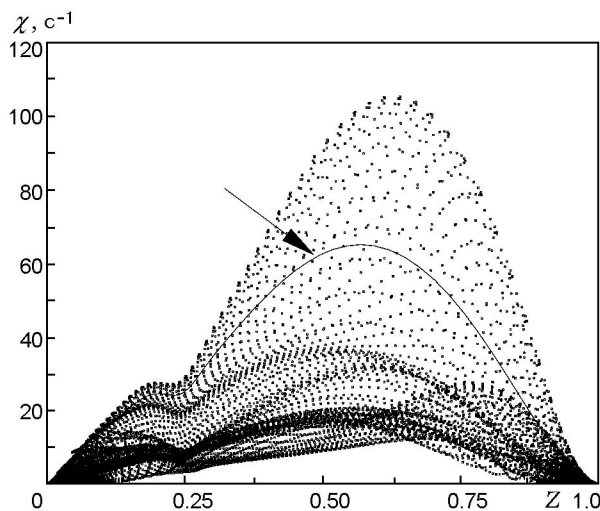


Рис. 3. Кривые рассеяния скалярной скорости диссипации при $t = 0.75t_e$:

сплошная линия — расчет для ламинарного пламени (указана стрелкой); каждая третья точка данных вдоль оси y пропущена

ная интегральная длина, u_t — начальная турбулентная скорость, показаны на рис. 2. Первоначально плоское ламинарное пламя вытягивается и искажается турбулентностью. Однако завихренность вблизи зоны пламени ослабевает как вследствие роста кинематической вязкости с температурой, так и вследствие объемного расширения. При искажении пламени турбулентностью вблизи криволинейных участков фронта пламени появляются максимальные значения FSD. Наряду с FSD, скалярная скорость диссипации χ является полезной мерой для описания горения неперемешанной смеси. Зависимость χ от доли смеси в момент времени $t = 0.75t_e$ показана на рис. 3. Сплошной линией представлены результаты для ламинарного пламени. Из-за турбулентности наблюдается значительный разброс скалярной скорости диссипации по сравнению с ламинарным пламенем. Максимальные значения появляются приблизительно при $Z = 0.6$. Как в ламинарном, так и в турбулентном случае имеется участок плато в окрестности стехиометрического значения Z_{st} . Это расположение соответствует области пламени, где происходит выделение энергии. Высокая вязкость в этом месте выравнивает градиенты смеси доли и тем самым понижает значения χ .

На рис. 4 приведены зависимости мгновенной скорости w_n от доли смеси Z в различные моменты времени в течение взаимо-

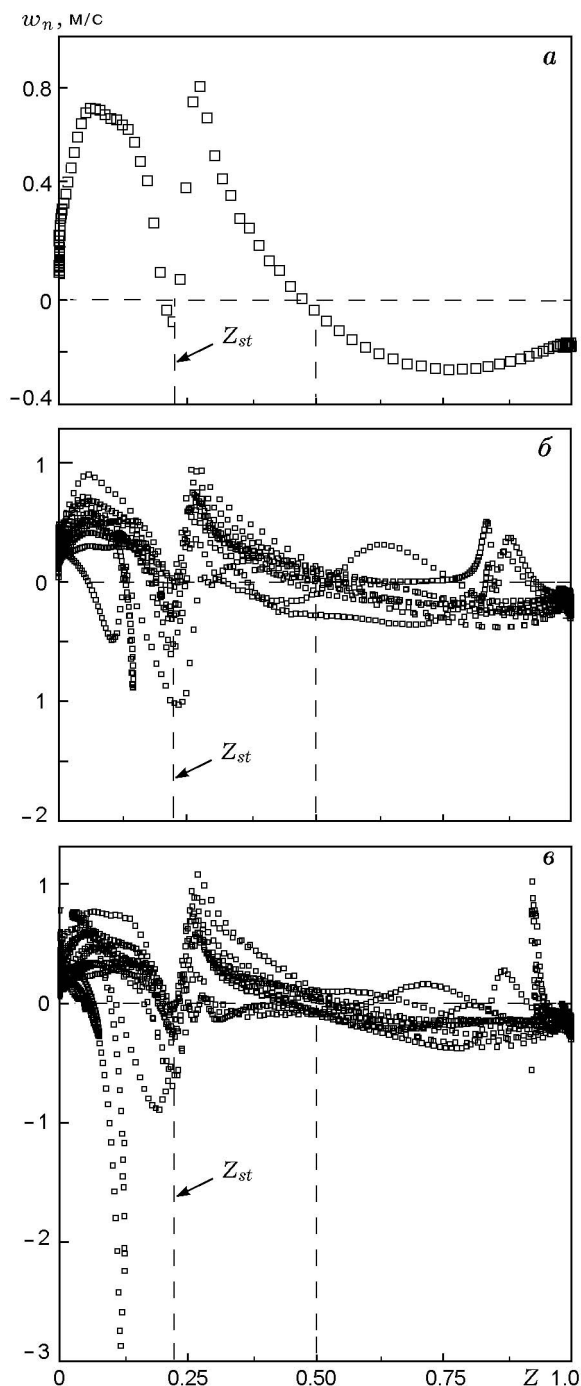


Рис. 4. Кривые рассеяния скорости w_n как функции массовой доли смеси в различные моменты времени:

a — $t = 0$ (ламинарный режим), $б$ — $t = 0.5t_e$ (турбулентный режим), $в$ — $t = t_e$ (турбулентный режим); каждая 15 точка данных вдоль оси Y пропущена

действия турбулентности с пламенем. Ламинарный и турбулентный случаи имеют одну и ту же общую тенденцию. Скорость w_n индуцируется диффузионными процессами вдоль нормали к зоне смешения, которая утолщается со временем [14]. В зоне топлива изо- Z -поверхности значения w_n отрицательные, так как поверхности смещаются в сторону топлива. В области окислителя скорость w в основном положительная. Это указывает на то, что изо- Z -поверхности движутся в сторону окислителя, удаляясь от центральной области. Но в небольшой области вблизи Z_{st} наблюдаются малые по модулю отрицательные значения w_n . На основании этого можно сделать вывод, что имеется локальный дефицит топлива, что заставляет изоповерхности распространяться в сторону топлива. Отметим, что в окрестности Z_{st} растягивающее движение, индуцированное турбулентностью, заставляет изо- Z -поверхности смещаться по направлению друг к другу. Это, очевидно, обусловлено тем, что значения w_n положительные (отрицательные) для $Z > Z_{st}$ ($Z < Z_{st}$).

В соответствии с уравнением (9) скорость w имеет два слагаемых. На рис. 5 представлено изменение компонент скорости w в зависимости от кривизны, а также слагаемые вдоль стехиометрической линии. Как и ожидалось, скорость w_c , обусловленная кривизной, которая об-

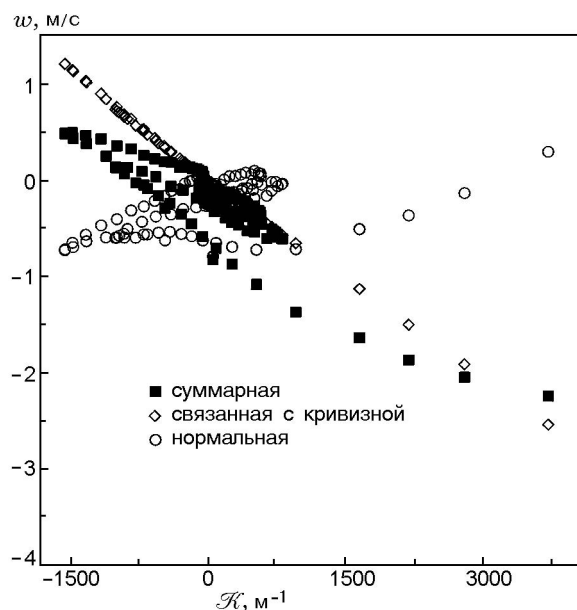


Рис. 5. Кривые рассеяния скорости w как функции кривизны при $t = t_e$

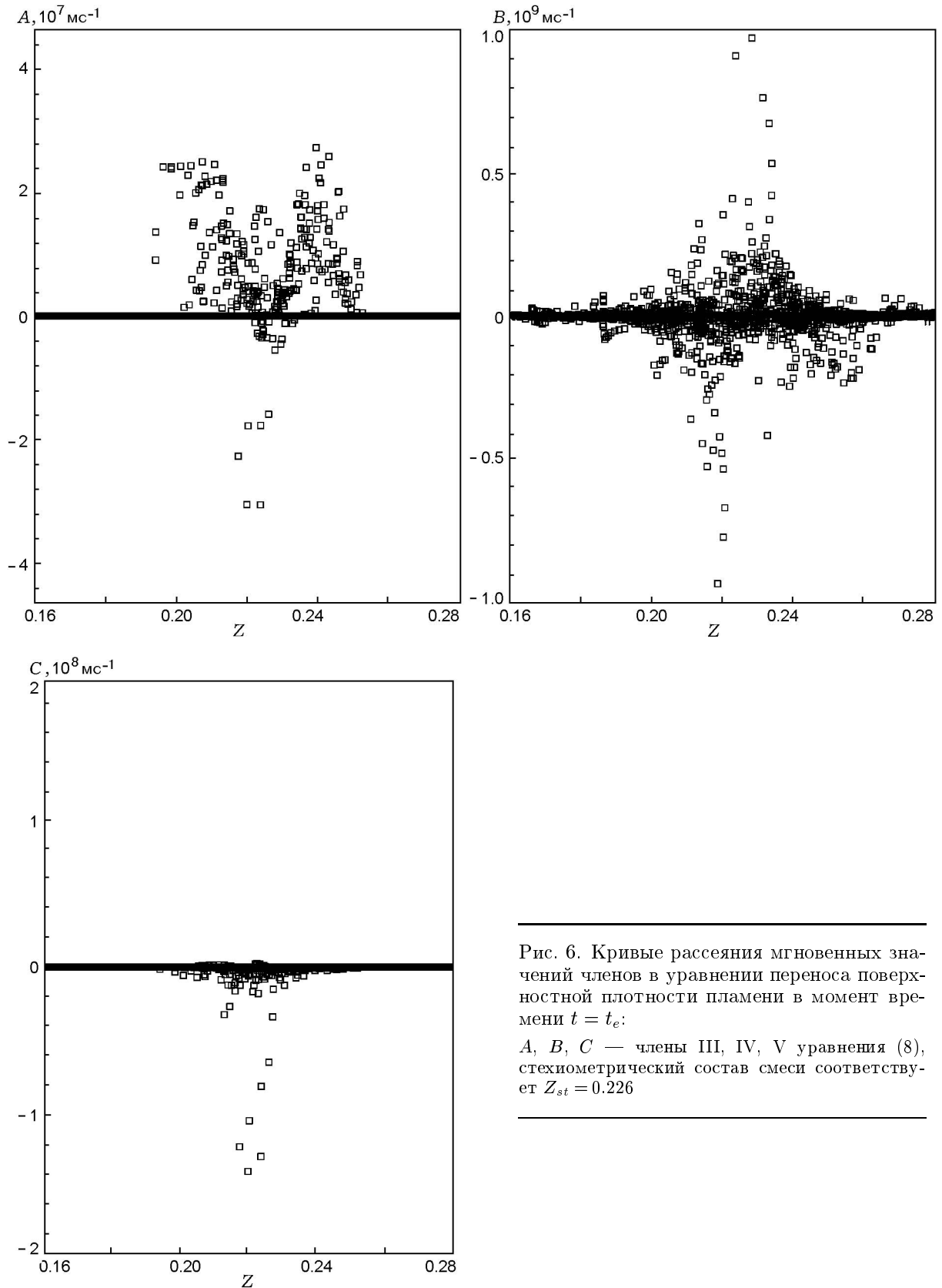


Рис. 6. Кривые рассеяния мгновенных значений членов в уравнении переноса поверхностной плотности пламени в момент времени $t = t_c$:

A, B, C — члены III, IV, V уравнения (8), стехиометрический состав смеси соответствует $Z_{st} = 0.226$

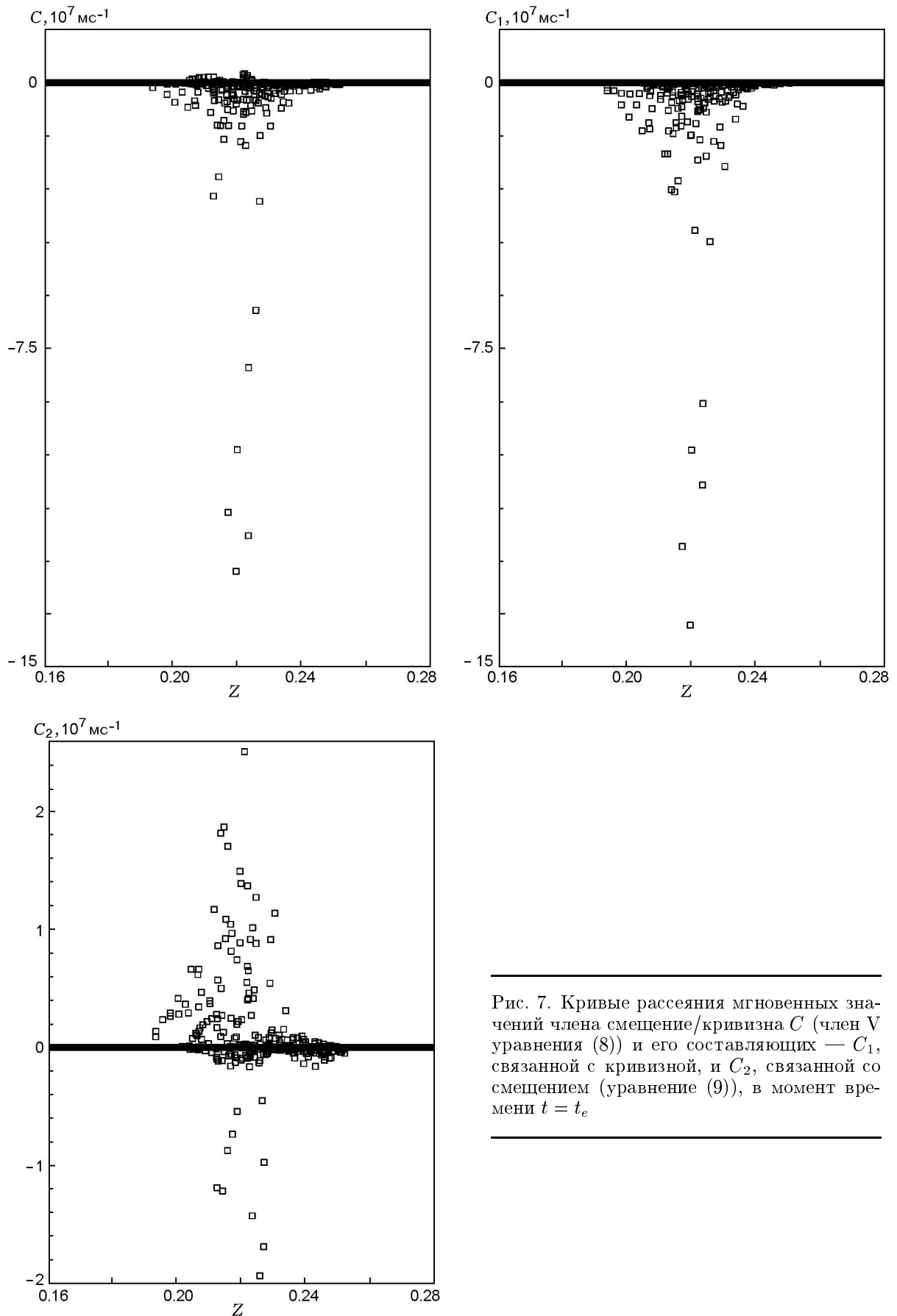


Рис. 7. Кривые рассеяния мгновенных значений члена смещение/кривизна C (член V уравнения (8)) и его составляющих — C_1 , связанной с кривизной, и C_2 , связанной со смещением (уравнение (9)), в момент времени $t = t_e$

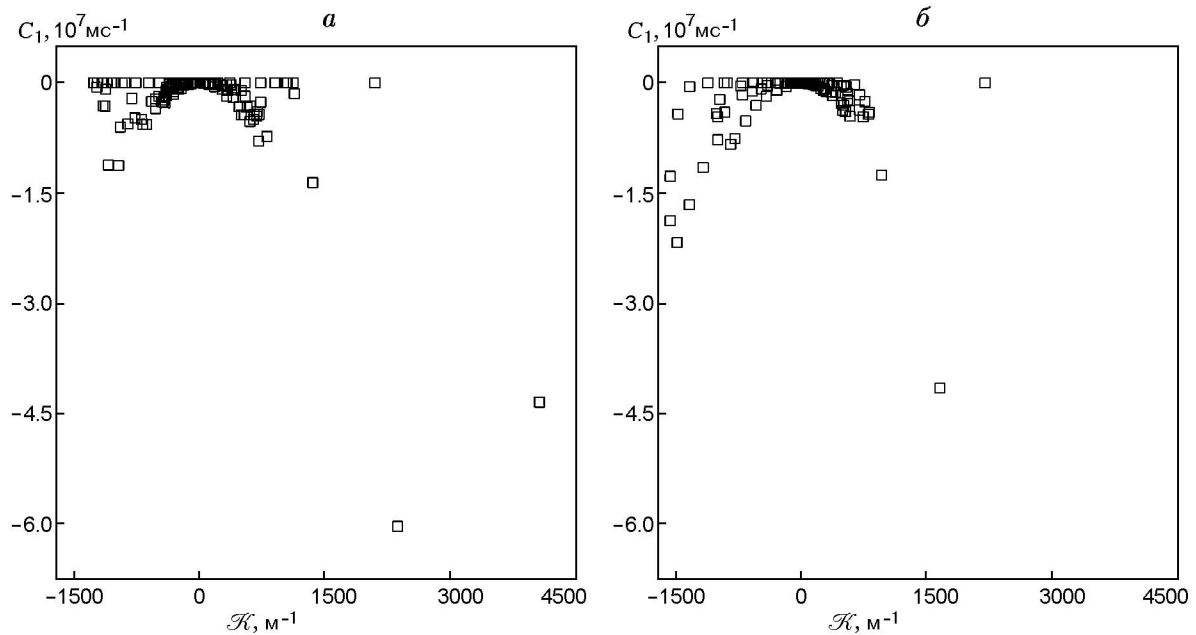


Рис. 8. Кривые рассеяния мгновенных значений члена кривизны (уравнение (9)) как функции кривизны вдоль линии Z_{st} в моменты времени $t = 0.5t_e$ (а) и $t = t_e$ (б)

ратно пропорциональна ей, положительна (отрицательна) при отрицательной (положительной) кривизне и обращается в нуль при нулевой кривизне. В результате поверхность пламени смещается в сторону потока топлива (окислителя) при положительной (отрицательной) кривизне. Иными словами, она движется в направлении, обеспечивающем вытягивание поверхности пламени в плоскую форму. Скорость w_n , по-видимому, слабо зависит от кривизны. Она имеет в основном отрицательные значения с меньшими амплитудами. Этот результат согласуется с наблюдаемым на рис. 4. Вследствие этого величина w_c вносит более существенный вклад в суммарное значение w .

Мгновенные значения членов в уравнении переноса FSD приведены на рис. 6. Видно, что член скорости деформации III ведет себя как источник, что приводит к увеличению поверхности пламени за счет местного растяжения. Значение члена IV гораздо больше. Его основным воздействием является конвективный процесс, ведущий к вытеснению изо- Z -поверхности. Его значения близки к нулю вблизи Z_{st} . С одной стороны, этот член ведет себя в основном как сток на стороне окислителя, с другой стороны — как источник, связанный с большими положительными значениями в области, направленной к топливу. Член кривиз-

ны V с двумя его составляющими иллюстрирует рис. 7. Составляющая смещения ответственна как за создание, так и за разрушение поверхности. Однако составляющая, содержащая кривизну, действует только как сток, так как восстанавливает поверхность пламени до ее плоской формы, разрушая тем самым поверхность пламени. Эта составляющая имеет намного более высокий порядок величины. Поэтому член V, содержащий кривизну, является главным образом стоком.

Графики вклада члена кривизны (см. уравнение (9)) в члене кривизна/смещение (V) в различные моменты времени даны на рис. 8. Как и ожидалось, этот член является стоком. Его значения увеличиваются с ростом кривизны. Он вносил бы больший вклад, если бы значения кривизны были выше, чем ожидалось при более высоких значениях числа Рейнольдса для турбулентного потока.

5.2. Влияние турбулентности: скорость деформации и кривизна

Чтобы лучше понять эволюцию разнообразных скалярных переменных, характеризующих турбулентность, осуществлялось их осреднение по Фавру при каждом значении x вдоль оси y . Эти осредненные по Фавру величины изображены как функции x на рис. 9 в

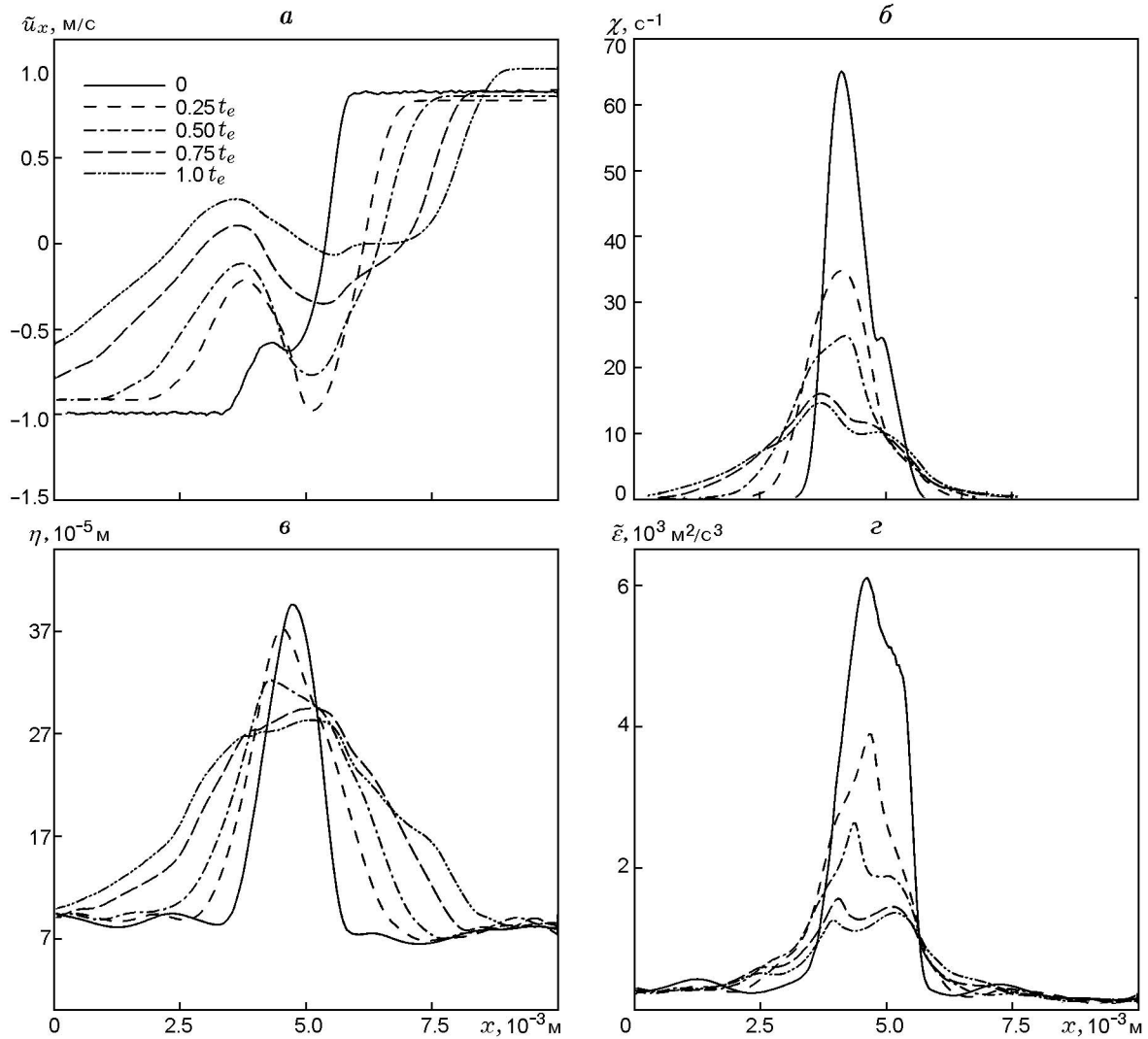


Рис. 9. Зависимости осредненных по Фавру величин x -составляющей скорости (а), скалярной скорости диссипации (б), длины Колмогорова (в) и скорости диссипации энергии (г) в зависимости от x в различные моменты времени

начальный и последующие моменты времени, соответствующие $t = 0.25t_e, 0.5t_e, 0.75t_e$ и t_e . Средние по Фавру значения x -составляющей скорости

$$\tilde{u}_x = \frac{\overline{\rho u}}{\bar{\rho}}, \quad (24)$$

где ρ — плотность жидкости, представлены на рис. 9,а. Видно, что эффект расширения из-за тепловыделения в зоне пламени заставляет пламя удаляться от центральной области. На рис. 9,б общая скорость скалярной диссипации уменьшается с ростом времени, когда турбулентность затухает. Масштаб длины Колмогорова [5]

$$\eta = \left(\frac{\tilde{\nu}^3}{\tilde{\epsilon}} \right)^{1/4}, \quad (25)$$

где $\tilde{\nu}$ и $\tilde{\epsilon}$ — осредненные по Фавру кинематическая вязкость и скорость диссипации кинетической энергии соответственно, представлены на рис. 9,в, а средняя по Фавру скорость диссипации турбулентной кинетической энергии, задаваемая формулой [52]

$$\tilde{\epsilon} = \frac{\overline{\rho \nu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2}}{\bar{\rho}}, \quad (26)$$

показана на рис. 9,г. Масштаб Колмогорова убывает со временем в центральной области

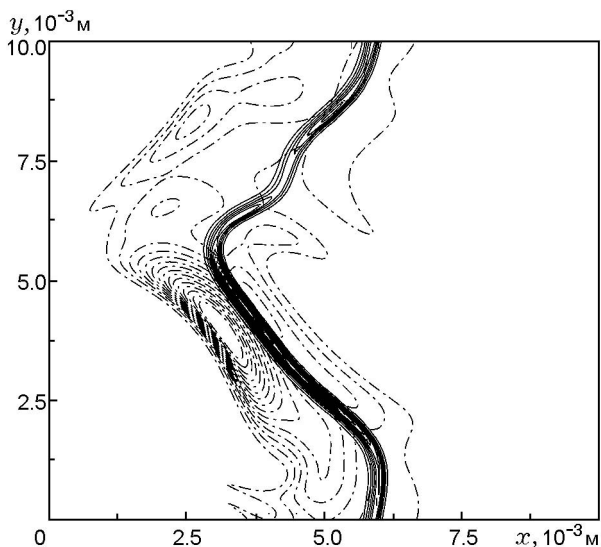


Рис. 10. Эквидистантные изолинии с 15 уровнями скалярной скорости диссипации (штрихпунктирная линия) и скорость реакции (сплошная линия) CH_4 в момент времени $t = 0.75t_e$:

изолинии скорости диссипации и скорости реакции CH_4 изменяются в диапазонах $6.2 \div 92.7 \text{ c}^{-1}$ и $1.9 \div 28.3 \text{ кг/м}^3$ соответственно

(в окрестности пламени) из-за высокой вязкости, в то же время он растет при удалении от центра вследствие затухания турбулентности. Аналогичные общие тенденции наблюдаются для осредненной по Фавру скорости диссипации энергии. Из рассмотрения определения η следует, что кинематическая вязкость — преобладающий параметр по сравнению со скоростью диссипации энергии.

Чтобы лучше понять структуру турбулентного пламени и взаимодействие между турбулентностью и пламенем, рассматривались мгновенные контуры скорости реакции CH_4 и соответствующая скалярная скорость диссипации (рис. 10). Высокие скорости реакции появляются там, где пламя относительно плоское. Пики скорости реакции лежат вблизи области высокой скалярной скорости диссипации, где скорость смешения высока. Соответственно, скорости реакции растут с увеличением скорости подачи реагентов. Пиковые значения χ появляются в области, расположенной ближе к топливу. Его градиенты выравниваются в месте положения пламени, вызывая формирование плато, представленного на рис. 3. Хотя зона реакции испытывает сильное влияние кривизны и эффекта растяжения, струк-

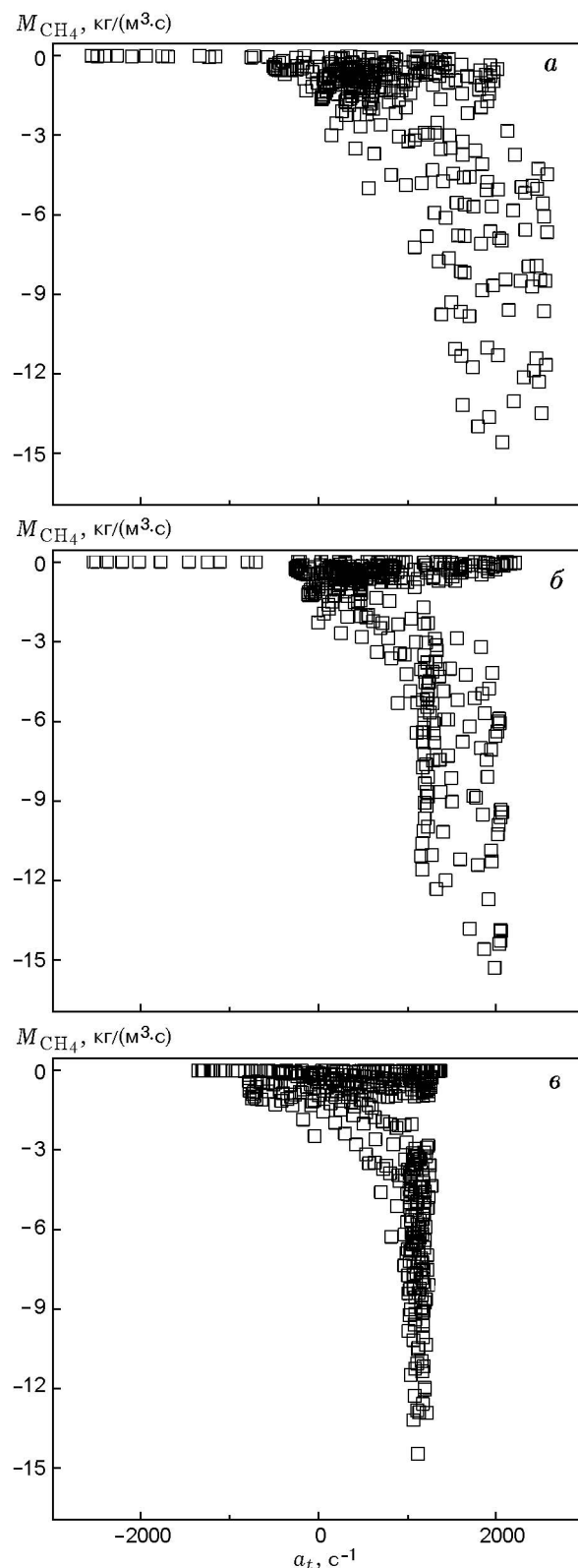


Рис. 11. Кривые рассеяния значений скорости реакции CH_4 в зависимости от скорости деформации в моменты времени $t = 0.2t_e$ (а), $0.5t_e$ (б) и t_e (в)

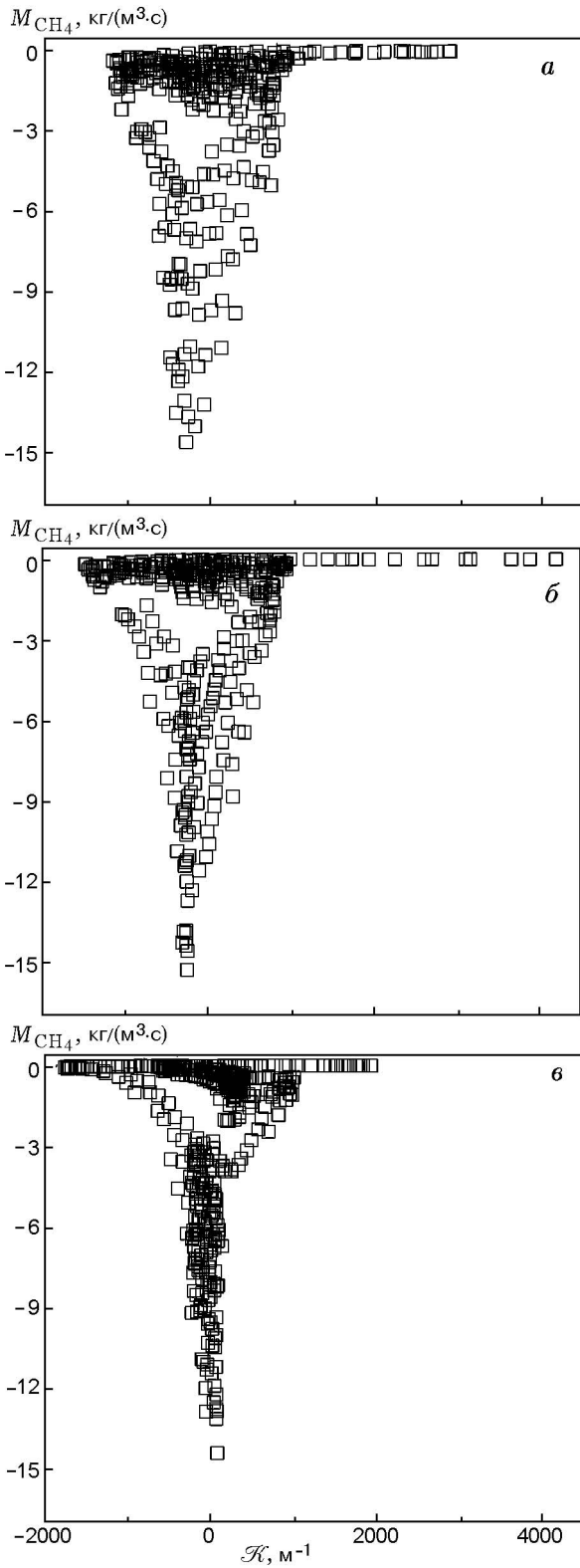


Рис. 12. Кривые рассеяния значений скорости реакции CH_4 в зависимости от кривизны в моменты времени $t = 0.2t_e$ (*a*), $0.5t_e$ (*б*) и t_e (*в*)

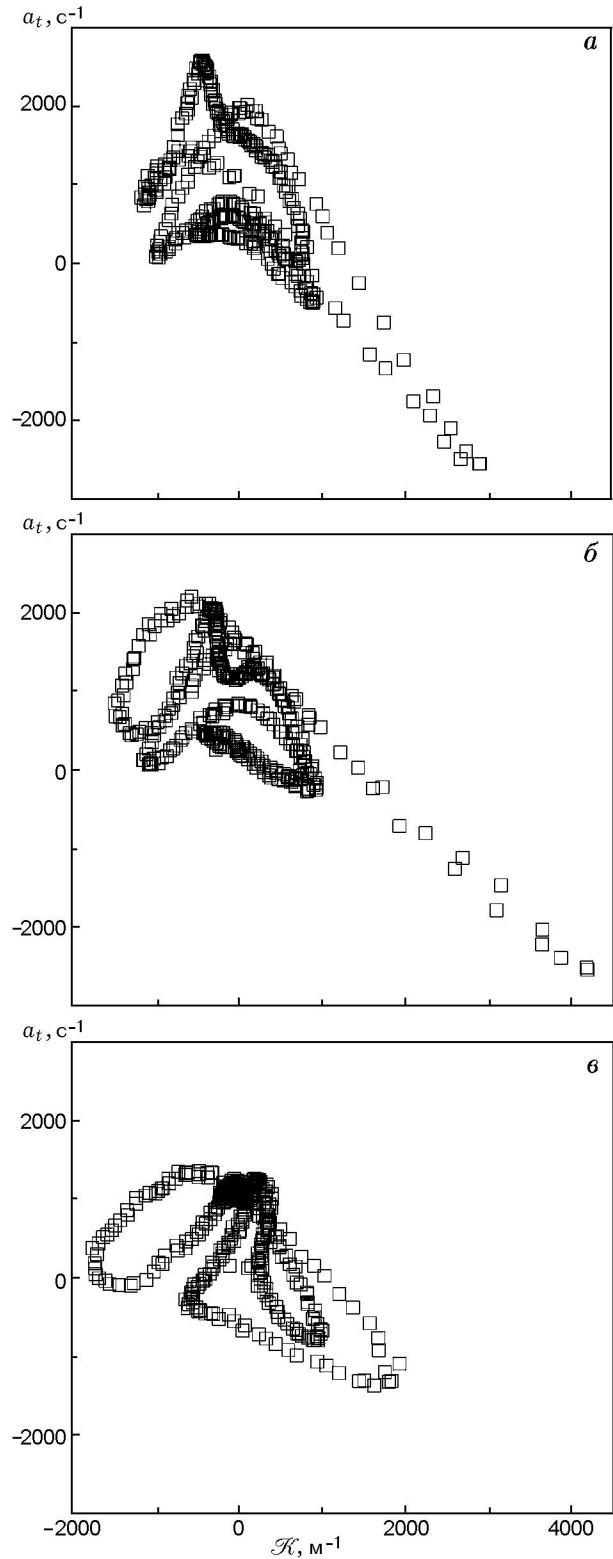
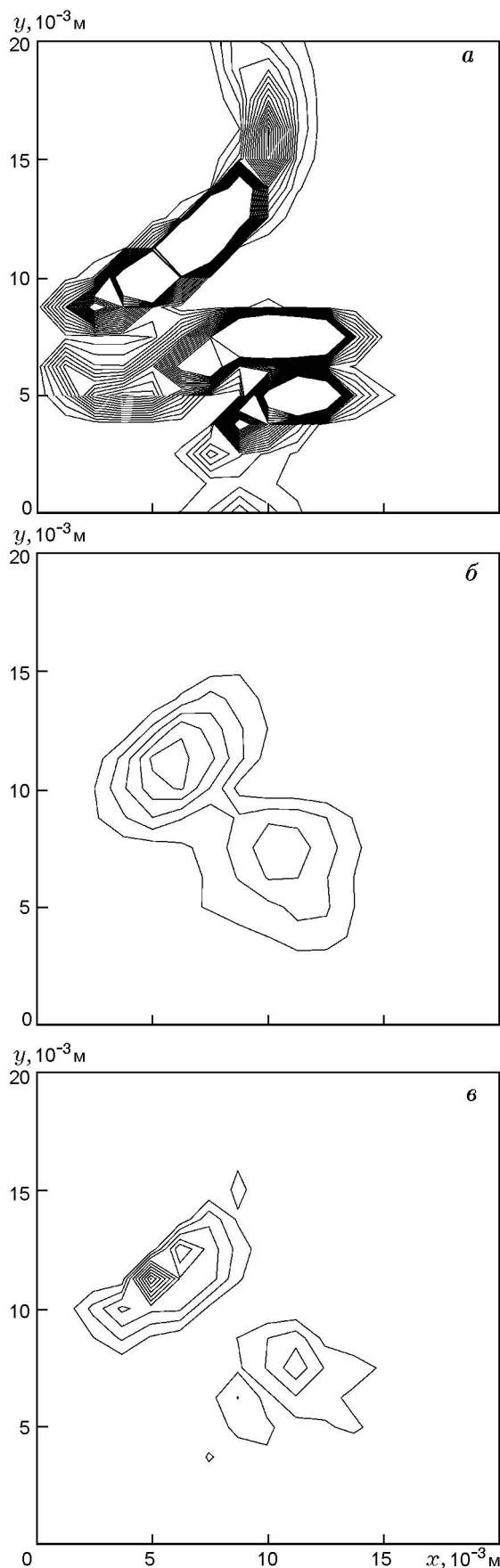


Рис. 13. Кривые рассеяния значений скорости деформации в зависимости от кривизны в моменты времени $t = 0.2t_e$ (*a*), $0.5t_e$ (*б*) и t_e (*в*)



тура самой реагирующей зоны, по-видимому, не изменяется из-за турбулентности, интенсивность которой ослабляется вследствие высокой вязкости в зоне реакции. Это позволяет полагать, что в данном случае применимо понятие элементарного пламени.

Чтобы получить дополнительную информацию о взаимодействии между турбулентностью и горением, анализировались корреляции скорости реакции со скоростью деформации и кривизной. Скорость деформации ассоциируется со скоростью тангенциального растяжения, действующего на поверхность пламени [14, 10], и задается формулой

$$a_t = \nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{nn} : \nabla \mathbf{u}. \quad (27)$$

Кривизна \mathcal{K} снова определяется положительной, когда пламя выпуклое по направлению к окислителю [14].

На рис. 11 приведена зависимость скорости реакции CH_4 от скорости деформации в различные моменты времени. Из этой статистики можно заключить, что скорость реакции CH_4 близка к нулю в областях отрицательной скорости деформации и увеличивается с ростом положительных значений скорости деформации. Это вызвано увеличением площади поверхности пламени вследствие растяжения. С ростом времени большинство точек концентрируется при значении скорости деформации, близком к 1200 s^{-1} . Зависимость скорости реакции CH_4 от кривизны \mathcal{K} представлена на рис. 12. Видно, что скорость реакции растет по мере убывания кривизны и со временем достигает максимального значения вблизи нулевой кривизны. Это согласуется с областью пиковой скорости реакции, наблюдаемой на рис. 10. Корреляцию скорости деформации с кривизной в различные моменты времени иллюстрирует рис. 13. Видно, что положительные скорости деформации увеличиваются, а отрицательные скорости уменьшаются с убыванием кривизны \mathcal{K} . Из этих результатов можно заключить, что вытянутое пламя стремится расширяться с убыванием кривизны. Пиковая скорость деформации появляется почти при ну-

Рис. 14. Эквидистантные изолинии с 20 уровнями в диапазоне $\overline{\chi'^2} = 0 \div 7000 \text{ s}^{-1}$, полученные по предыдущей модели (а), по новой модели подобия масштабов (б) и из DNS (в)

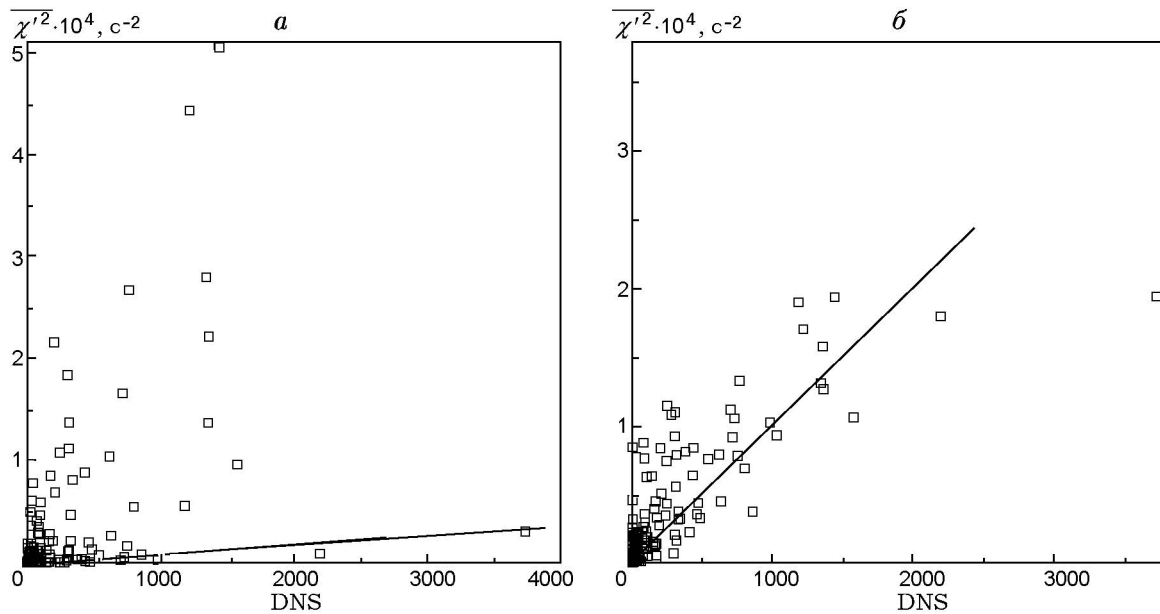


Рис. 15. Разброс реальных значений $\overline{\chi'^2}$ в сравнении с значениями, полученными по предыдущей модели (а) и новой модели подобию масштабов (б)

левой кривизне и может быть связана с максимальной скоростью реакции, наблюдаемой на рис. 11, 12. Заметим, что на рис. 11–13 степень разброса точек уменьшается в более поздние моменты времени вследствие ослабления турбулентности. Другая заметная статистическая тенденция состоит в том, что большинство точек данных соответствует положительным скоростям деформации, что в результате дает положительную статистическую среднюю величину, в то время как осредненная кривизна близка к нулю. Этот результат согласуется с полученными в предыдущих работах, посвященных горению предварительно перемешанных смесей [17, 53].

5.3. Модель средней вариации скалярной скорости диссипации

В этом параграфе исследуется применимость модели подобию масштабов для оценки средней вариации скалярной скорости диссипации, представленной в § 4. Средняя вариация скалярной скорости диссипации моделируется предположением о подобию масштабов (уравнение (20)), и предыдущая модель, вычисляемая по формуле (18), тестируется априори. Используется база данных DNS с большей областью 2.0×2.0 см, рассмотренная в [25]. Данные DNS на сетке 512×512 фильтруются и используются

для оценки. Отфильтрованное значение \overline{f} величины f определяется по формуле

$$\overline{f}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Delta} \int_0^{\Delta} f(\mathbf{x}', t) d\mathbf{x}', \quad (28)$$

где Δ имеет размер 32 ячеек сетки DNS. В данном исследовании используется предложенное в [48, 49] значение параметра σ , равное единице. Оценки $\overline{\chi'^2}$ можно вычислить по обеим моделям. Эквидистантные изолинии средней вариации χ , рассчитанные по предыдущей модели и новой модели на основе подобию масштабов, представлены на рис. 14; на рисунке приведены также данные прямого численного моделирования. Для облегчения прямого сравнения изолинии на всех рисунках имеют по 20 уровней. Из сравнения ясно, что профили изолиний, полученные по предложенной модели, намного ближе к изолиниям DNS, чем рассчитанные по предыдущей модели. На рис. 15 приведены графики разброса значений $\overline{\chi'^2}$ в сравнении с реальными значениями из DNS для предыдущей модели и новой модели подобию масштабов. На каждом рисунке показана линия с единичным наклоном, представляющая точную модель. Легко видеть, что значения $\overline{\chi'^2}$, рассчитанные по модели подобию масштабов, достаточно хорошо согласуются с реальными значениями DNS, в то время как зна-

чения $\overline{\chi'^2}$, полученные по предыдущей модели, значительно превосходят их. С целью количественного сравнения моделей вычислялась ошибка (ε) моделируемой величины x по формуле $\varepsilon = \left[\frac{\sum_{i=1}^N (x_{i\text{mod}} - x_{i\text{DNS}})^2}{\sum_{i=1}^N (x_{i\text{DNS}})^2} \right]^{1/2}$, где N —

число точек данных, индекс i относится к точке данных. Значения ε , вычисленные по предыдущей модели и предлагаемой, равны 21.04 и 0.39 соответственно. Ясно, что предсказания $\overline{\chi'^2}$ значительно улучшаются при использовании модели подобия масштабов.

ВЫВОДЫ

Выполнено прямое численное моделирование турбулентных пламен неперемешанных смесей древесного пиролизного газа в сочетании с реалистичной химической кинетикой. Физическая задача состоит во взаимодействии первоначально не вытянутого ламинарного диффузионного пламени с гомогенным полем затухающей турбулентности. В случае, когда пламя вытягивалось и искажалось, учитывалось влияние турбулентности на структуру пламени. Полученная база данных обеспечивает более глубокое понимание турбулентной структуры пламени и взаимодействия между турбулентностью и химией, что полезно для улучшения и верификации моделей турбулентного горения неперемешанных смесей.

Скорость w_n положительна в области окислителя ($Z < 0.5$) и отрицательна в области топлива ($Z > 0.5$). Однако отрицательные значения w_n наблюдаются вблизи области Z_{st} , что свидетельствует о локальном дефиците топлива, приводящем к распространению пламени относительно поля течения по направлению к топливу. В области вблизи Z_{st} растягивающее движение, индуцированное турбулентностью, заставляет изо- Z -поверхности сдвигаться по направлению друг к другу. Нормальная составляющая скорости w почти постоянна, в то время как компонента, связанная с кривизной, ведет себя таким образом, чтобы привести криволинейное пламя к плоскому.

Проанализированы отдельные члены в уравнении переноса поверхностной плотности пламени. Члены скорости деформации являются основным источником деформации и растяжения пламени. Член, определяемый величиной w_n , порядок величины которого наибольший, вносит отрицательный (положительный)

вклад в генерацию поверхности пламени в области окислителя (топлива). Член кривизны является прежде всего стоком, поскольку составляющая кривизны, $-\Sigma \mathcal{D}(\nabla \cdot \mathbf{n})^2$, превосходит его. Порядок величины этого члена наименьший, что обусловлено малым значением кривизны.

Установлена корреляция скоростей реакций со скоростью деформации и кривизной пламени. Скорости реакций, которые оказываются высокими в областях высокой скалярной скорости диссипации, растут с увеличением положительных скоростей деформации, что обусловлено увеличением поверхности пламени из-за его растяжения. Скорости реакций растут с убыванием кривизны и достигают максимума вблизи нулевой кривизны. Из корреляции деформации с кривизной найдено, как и ожидалось, что скорости деформации становятся более положительными с уменьшением кривизны при растяжении пламени.

Наконец, была рассмотрена и оценена справедливость новой модели, использующей предположение о подобии масштабов при получении замыкания для средней вариации скалярной скорости диссипации. Результаты показывают, что модель подобия масштабов обеспечивает намного более точное предсказание по сравнению с существующей моделью.

Авторы благодарят д-ра Сяньянь Чжу за ценные обсуждения. Мы также признательны за предоставленную возможность использования ресурсов кластера Беовулф в Институте геофизики и планетарной физики (ИГПФ). Авторы выражают благодарность Национальному научному фонду (грант № 0049007) за финансовую поддержку работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Poinsot T., Candel S., Trouvé A.** Applications of direct numerical simulation to premixed turbulent combustion // Prog. Energy Combust. Sci. 1996. V. 21. P. 531–576.
2. **Vervisch L., Poinsot T.** Direct numerical simulation of non-premixed turbulent flame // Annu. Rev. Fluid Mech. 1998. V. 30. P. 655–691.
3. **Veynante D., Vervisch L.** Turbulent combustion modeling // Prog. Energy Combust. Sci. 2002. V. 28. P. 193–266.
4. **Mahalingam S., Chen J. H., Vervisch L.** Finite-rate chemistry and transient effects in direct numerical simulations of turbulent non-premixed flames // Combust. Flame. 1995. V. 102. P. 285–297.

5. **Bushe W. K., Bilger R. W., Ruetsch G. R.** Direct numerical simulation of non-premixed combustion with realistic chemistry // Tech. Rep. CTR Manuscript 173. Center for Turbulent Research, Stanford University, Stanford, CA, 1999.
6. **Sreedhara S., Lakshmisha K. N.** Direct numerical simulation of autoignition in a non-premixed, turbulent medium // Proc. Symp. Intern. Combustion. Pittsburgh: Combustion Inst., 2000. V. 28. P. 25–33.
7. **Echekki T., Chen J. H.** High-temperature combustion in autoigniting non-homogeneous hydrogen/air mixture // Proc. Symp. Intern. Combustion. Pittsburgh: Combustion Inst., 2002. V. 29. P. 2061–2068.
8. **Peters N.** Laminar flamelet concepts in turbulent combustion // Proc. Symp. Intern. Combustion. Pittsburgh: Combustion Inst., 1986. V. 21. P. 1231–1250.
9. **Marble F., Broadwell J.** The coherent flame model for turbulent chemical reactions // Tech. Rep. TRW-9-PU. Project Squid Head quarters, Chaffee Hall, Purdue University, IN, 1977.
10. **Candel S. M., Poinot T. J.** Flame stretch and balance equation for the flame area // Combust. Sci. Technol. 1990. V. 70. P. 1–15.
11. **Van Kalmthout E., Veynante D., Candel S.** Direct numerical simulation analysis of flame surface density equation in non-premixed turbulent combustion // Proc. Symp. Intern. Combustion. Pittsburgh: Combustion Inst., 1996. V. 26. P. 35–42.
12. **Pope S. B.** Computational of turbulent combustion: progress and challenges // Proc. Symp. Intern. Combustion. Pittsburgh: Combustion Inst., 1990. V. 23. P. 591–612.
13. **Vervisch L., Bidaux E., Bray K. N. C., Kollmann W.** Surface density function in premixed turbulent combustion modeling similarities between probability density function and flame surface approaches // Phys. Fluids. 1995. V. 7. P. 2496–2503.
14. **Van Kalmthout E., Veynante D.** Direct numerical simulation analysis of flame surface density models for nonpremixed turbulent combustion // Phys. Fluids. 1998. V. 10. P. 2347–2368.
15. **Clark T. L., Jenkins M. A., Coen J., Packham D.** A coupled atmosphere-fire model: role of the convective Froude number and dynamic fingering at the fireline // J. Wildland Fire. 1996. V. 6. P. 177–190.
16. **Echekki T., Chen J. H.** Unsteady strain rate and curvature effects in turbulent premixed methane-air flames // Combust. Flame. 1996. V. 106. P. 184–202.
17. **Im H. G., Chen J. H.** Preferential diffusion effects on the burning rate of interacting turbulent premixed hydrogen-air flames // Combust. Flame. 2002. V. 131. P. 246–258.
18. **Haq M. Z., Sheppard C. G. W., Woolley R., et al.** Wrinkling and curvature of laminar and turbulent premixed flame // Ibid. P. 1–15.
19. **Law C. K.** Dynamics of stretched flames // Proc. Symp. Intern. Combustion. Pittsburgh: Combustion Inst., 1988. V. 22. P. 1381–1402.
20. **Agee J. K.** The influence of forest structure on fire behavior // Proc. Forest Vegetation Management Conference. Redding, CA, 1996. V. 17. P. 52–68.
21. **Zhou X., Mahalingam S.** Evaluation of reduced mechanism for modeling combustion of pyrolysis fuel gas // Phys. Fluids. 2001. V. 171. P. 39–70.
22. **Yeung P. K., Grimaji S. S., Pope S. B.** Straining and scalar dissipation on material surfaces in turbulence: implication for flamelets // Combust. Flame. 1990. V. 79. P. 340–354.
23. **Domingo P., Vervisch L.** Triple flames and partially premixed combustion in autoignition of non-premixed turbulent mixtures // Proc. Symp. Intern. Combustion. Pittsburgh: Combustion Inst., 1996. V. 26. P. 233–240.
24. **Rutland C. J., Trouvé A.** Direct simulations of premixed turbulent with nonunity Lewis numbers // Combust. Flame. 1993. V. 94. P. 41–57.
25. **Zhou X., Pakdee W., Mahalingam S.** Assessment of flame surface density-based subgrid turbulent combustion model for nonpremixed flames of wood pyrolysis gas // Phys. Fluids. 2004. V. 16. P. 3795–3807.
26. **Pakdee W., Mahalingam S.** Accurate method to implement boundary conditions for reacting flows based on characteristic wave analysis // Combust. Theory Modelling. 2003. V. 7. P. 705–729.
27. **Kee R. J., Rupley F. M., Miller J. A.** CHEMKIN-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics. Tech. Rep. SAND89-89009B. Sandia National Laboratories, Livermore, CA, 1989.
28. **Passot T., Pouquet A.** Numerical simulation of compressible homogeneous flows in the turbulent regime // J. Fluid Mech. 1987. V. 181. P. 441–446.
29. **Guichard L., Vervisch L.** Study of shock vortex interaction within a mixing zone // LMFN-CORIA N 1993-25, 1993.
30. **Smooke M. D., Giovangigli V.** Reduced kinetic mechanisms for asymptotic approximations for methane-air flames // Lecture Notes in Physics. Berlin: Springer-Verlag, 1991. V. 384. P. 1–37.
31. **Lele S. K.** Compact finite difference schemes with spectral-like resolution // J. Comput. Phys. 1992. V. 103. P. 16–42.
32. **Jacobitz F.** A direct numerical study of turbulent dispersion in stratified shear flows // Bull. Amer. Phys. Soc., Division of Fluid Dynamics Meeting. 2003.
33. **Gropp W., Lusk E., Skjellum A.** Using MPI: Portable Parallel Programming with the Message Passing Interface. MIT Press, 1994.

34. **Klose W., Damm S., Wiest W.** Pyrolysis and activation of different woods — Thermo analysis (TG/EGA) and formal kinetics // Oral presentation at 4th Intern. Symp. of Catalytic and Thermochemical Conversions of Natural Organic Polymers. Krasnoyarsk, 2000.
35. **Trouvé A., Poinsot T.** The evolution equation for the flame surface density in turbulent premixed combustion // *J. Fluid Mech.* 1994. V. 278. P. 1–31.
36. **Cook A. W., Riley J. J., Kosály G.** A laminar flamelet approach to subgrid-scale chemistry in turbulent flows // *Combust. Flame.* 1997. V. 109. P. 332–341.
37. **Cook A. W., Riley J. J.** Subgrid-scale modeling for turbulent reacting flows // *Combust. Flame.* 1998. V. 112. P. 593–606.
38. **Zhou X., Mahalingam S.** A flame surface density based model for large eddy simulation of turbulent nonpremixed combustion // *Phys. Fluids.* 2001. V. 14. P. 77–80.
39. **Swaminathan N., Bilger R. W.** Assessment of combustion submodels for turbulent nonpremixed hydrocarbon flames // *Combust. Flame.* 1999. V. 116. P. 519–545.
40. **Pope S.** Computations of turbulent reactive flows: progress and challenges // *Proc. Combust. Inst.* 1990. V. 23. P. 591–612.
41. **Gao F., O'Brien E. E.** A large-eddy simulation scheme for turbulent reacting flows // *Phys. Fluids.* 1993. V. A 5. P. 1282–1295.
42. **Jaberi F. A., Colucci P. J., James S., et al.** Filtered mass density function for large-eddy simulation of turbulent reacting flows // *J. Fluid Mech.* 1999. V. 401. P. 85–99.
43. **Givi P.** Subgrid scale modeling in turbulent combustion: A review // *AIAA Paper* 2003–5081, 2003.
44. **Cook A. W., Riley J. J.** A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flow // *Phys. Fluids.* 1994. V. 6. P. 2868–2870.
45. **Peters N.** Local quenching due to flame stretch and non-premixed turbulent combustion // *Combust. Sci. Technol.* 1983. V. 30. P. 1–17.
46. **de Bruyn Kops S. M., Riley J. J., Kosály G., Cook A. W.** Investigation of modeling of non-premixed turbulent combustion // *Flow, Turbul. Combust.* 1998. V. 60. P. 105–122.
47. **Desjardin P. E., Frankel S. H.** Two-dimensional large eddy simulation of soot formation in the near-field of a strongly radiating nonpremixed acetylene-air turbulent jet flame // *Combust. Flame.* 1999. V. 119. P. 121–132.
48. **Peters N., Kee R. J.** The computation of stretched laminar methane-air diffusion flames using a reduced four-step mechanisms // *Combust. Flame.* 1987. V. 68. P. 17–29.
49. **Nandula S. P., Brown T. M., Pitz R. W.** Measurements of scalar dissipation in the reaction zones of turbulent H₂-air flames // *Combust. Flame.* 1994. V. 99. P. 775–783.
50. **Reveillon J., Vervisch L.** Response of the dynamic LES model to heat release induced effects // *Phys. Fluids.* 1996. V. 8. P. 2248–2259.
51. **Chumakov S., Rutland C. J.** Dynamic structure models for scalar flux and dissipation in large eddy simulation // *AIAA Journal.* 2004. V. 42. P. 1132–1139.
52. **McComb W. D.** The energy cascade in isotropic turbulence // *The Physics of Fluid Turbulence.* 1st ed. Oxford: Oxford Univ. Press, 1994. V. 25. P. 64–73.
53. **Haworth D. C., Poinsot T. J.** Numerical simulations of Lewis number effects in turbulent flames // *J. Fluid Mech.* 1992. V. 244. P. 405–436.

*Поступила в редакцию 2/II 2006 г.,
в окончательном варианте — 25/IX 2006 г.*
