

УДК 621.45.024

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ДИФфуЗИОННОГО ФАКЕЛА ПРОПАНА МЕТОДОМ LES

Н. И. Гураков, А. Д. Попов, А. С. Семенихин, И. В. Чечет,
М. Ю. Анисимов, С. Г. Матвеев

Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева, 443086 Самара,
nikgurakov@gmail.com

Реализована методика моделирования турбулентного горения на примере диффузионного факела пропана. Проведены генерация и последующая проверка достаточности размеров элементов сетки на предмет их соответствия критериям масштаба турбулентности, необходимого для моделирования методом LES. Приведены результаты численного моделирования распределения температуры при горении диффузионного факела пропана с использованием подходов RANS и LES в трехмерной постановке, выполнена валидация расчетной модели по основным и промежуточным продуктам сгорания. Данные LES-расчета по распределению температуры в зоне горения намного лучше согласуются с экспериментальными данными по сравнению с аналогичными результатами RANS-расчета, а валидация модели на основе LES-подхода подтверждена посредством анализа расчетных и экспериментальных данных по основным и промежуточным продуктам сгорания. Осредненные расчетные параметры турбулентного горения диффузионного факела пропана могут быть использованы для определения методом кинетического моделирования с детальной химической кинетикой наиболее сложных продуктов неполного сгорания топлива, например полициклических ароматических углеводородов.

Ключевые слова: эмиссия вредных веществ, диффузионное горение, углеводородное топливо, численное моделирование, моделирование методом крупных вихрей.

DOI 10.15372/FGV2024.9452

EDN UXPOKZ

ВВЕДЕНИЕ

Загрязнение атмосферы Земли оксидами азота, оксидами углерода и полициклическими ароматическими углеводородами, образованными при сжигании углеводородного топлива, является одной из глобальных проблем человечества [1–3]. Эмиссия этих загрязняющих веществ жестко регламентируется различными российскими и международными организациями [4, 5].

Образование загрязняющих веществ вследствие горения углеводородных топлив исследовалось как экспериментальными [6, 7], так и численными [8–11] методами, наиболее популярными среди последних являются модели на основе осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье — Стокса (RANS) и на основе метода крупных вихрей (LES). Из анализа данных по основным характеристикам горения видно, что LES-модели показывают лучшее по сравнению с RANS-моделями согласование

с экспериментальными данными по распределению скоростей, температур, давлений, по коэффициенту избытка воздуха, а также по основным и промежуточным продуктам сгорания [12, 13]. Однако для расчета концентраций более сложных химических соединений, таких как полициклические ароматические углеводороды (ПАУ), необходимо использовать детальные кинетические механизмы [9], которые в сочетании с подходом LES требуют на порядок больше вычислительных ресурсов, что возможно сделать только на упрощенных модельных пламенах и не реализуется в инженерной практике [14, 15].

Для расчета концентрации ПАУ используются комбинированные методы с детальной химической кинетикой. Одним из таких методов является моделирование сетью химических реакторов [16–18], позволяющее довольно точно прогнозировать эмиссионные характеристики камер сгорания за счет использования детальных кинетических схем. При использовании этой модели информация о внутрика-

мерных процессах объединяется и включается в последовательность элементарных реакторов (реакторная цепочка). Для формирования цепи реакторов при определении ПАУ необходимо использовать расчетные данные по распределению температуры, коэффициента избытка воздуха, пульсаций восстановленной концентрации топлива. Применяемые при этом расчетные модели должны быть валидированы по данным соответствующих экспериментов [19, 20].

Цель настоящей работы — валидация расчетной методики на основе LES-подхода по основным и промежуточным продуктам сгорания, распределению температуры и коэффициенту избытка воздуха на примере модельного пламени диффузионного факела пропана с целью получения данных для определения концентрации ПАУ методом реакторного моделирования.

МЕТОДЫ И ИНСТРУМЕНТЫ

Экспериментальное определение параметров горения диффузионного факела пропана проводилось в работе [7]. Турбулентный диффузионный факел был образован истекающим вертикально вверх из сопла пропаном в затопленное воздушное пространство. В исследованиях применялось сопло с диаметром отверстия $d_0 = 4 \cdot 10^{-3}$ м, с длиной цилиндрической части $l_0 = 2.5d_0$. Толщина стенок топливного сопла 1 мм. Устанавливался следующий режим истечения газа: скорость на срезе сопла — $U_0 = 11$ м/с, число Рейнольдса $Re = 10^4$. Конструкция и размеры модели сопла для исследования диффузионного факела показаны на рис. 1.

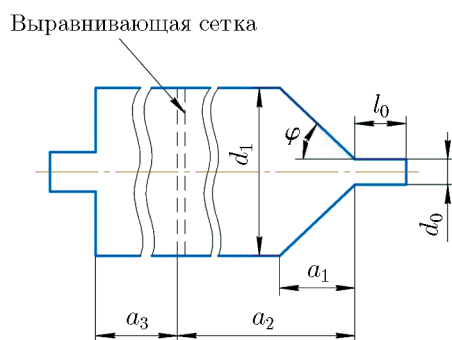


Рис. 1. Схема модели сопла

Для расчетного определения характеристик турбулентного горения диффузионного факела пропана была построена геометрическая модель расчетной области в форме цилиндра размерами 1200×600 мм, наполненного воздухом. Для проведения численного моделирования процессов горения методом LES была построена сеточная модель расчетной области.

Для построения объемной сетки выбран тип ячеек гексаэдр, а в пристеночной области сопла — 6-угольная призма с количеством пограничных призматических слоев 5. В результате генерации модели максимальный параметр скошенности составил 0.7973, что приемлемо для дальнейших расчетов. Размер ячеек в зоне подачи топлива — 0.25 мм, в зоне перехода от ламинарного течения к турбулентному — 0.5 мм, в зоне турбулентного горения — 1 мм, в оставшемся объеме — $2 \div 8$ мм. Суммарное количество элементов в модели порядка 17 млн.

Расчет проводился методом LES с подсеточной моделью kinetic-energy transport. В качестве модели горения использовалась модель flamelet generated manifold, реализованная в ANSYS Fluent 2021 R1, с кинетическим механизмом Propane- NO_x high temperature (37 компонентов, 296 реакций). В качестве топлива взят пропан [21].

Для расчета турбулентного течения методом LES необходимо, чтобы размеры элементов геометрической модели в расчетной области соответствовали критериям масштаба турбулентности [22]. В предыдущих исследованиях [23] перечислены основные критерии размера элементов сетки, которые разделены на две группы:

- основанные на RANS-решении (масштаб турбулентности Колмогорова [24], масштаб турбулентности Тейлора [25], интегральный масштаб турбулентности [26]);
- основанные на LES-решении (подсеточная турбулентная вязкость [27], разрешенная турбулентная кинетическая энергия [28], наличие закона Колмогорова — Обухова [29]).

Для данного исследования проверялись такие критерии, как подсеточная турбулентная вязкость (рис. 2,а) и наличие закона Колмогорова — Обухова (рис. 2,б).

На рис. 2,а представлено распределение значений отношения подсеточной турбулентной вязкости к молекулярной (ν_t/ν). Согласно [27] при проверке достаточности разрешения

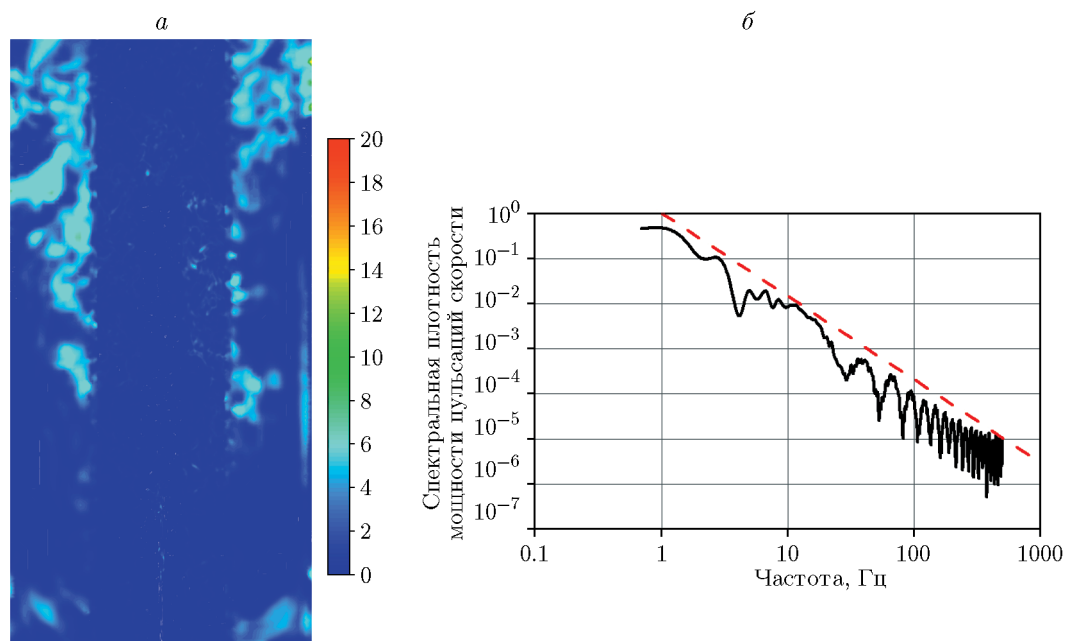


Рис. 2. Проверка геометрической модели на соответствие критериям размера ячеек:
a — критерий разрешенной турбулентной кинетической энергии, *б* — критерий наличия закона Колмогорова — Обухова

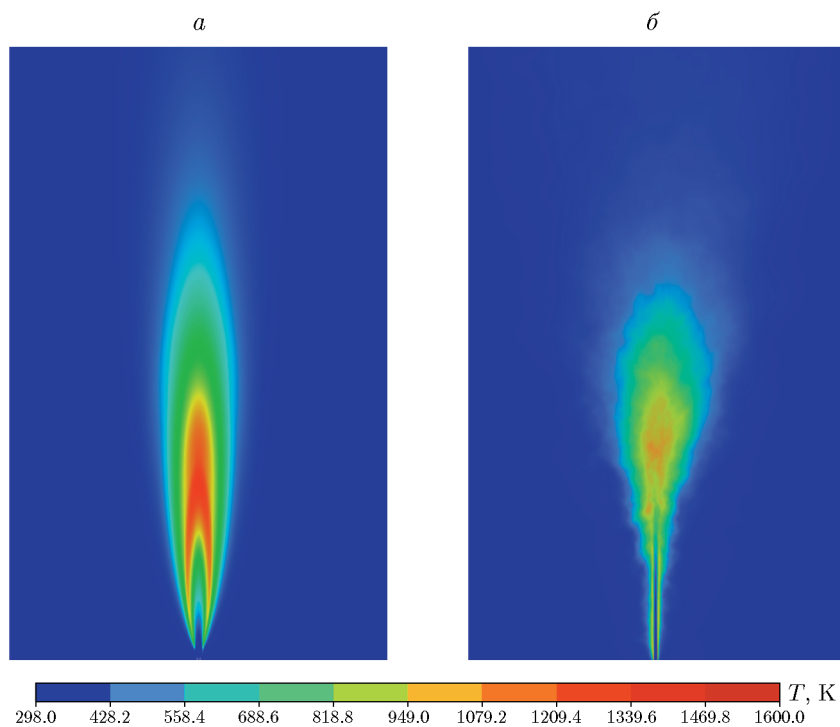


Рис. 3. Поле температуры при использовании подходов RANS (*a*) и LES (*б*)

размеров ячеек в LES-расчетах необходимо, чтобы выполнялось неравенство $\nu_t/\nu \leq 20$. Как видно из рис. 2,а, данный критерий выполняется во всей расчетной области. На рис. 2,б показана спектральная мощность пульсаций скорости потока по оси диффузионного факела. По характеру изменения пульсаций видно, что моделируемые вихри находятся в инерционном интервале энергетического спектра (закон 5/3). Из этого следует, что данная модель может использоваться для LES-расчета.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Моделирование турбулентных течений методом LES требует больших вычислительных мощностей по сравнению с подходом RANS, однако дает при этом более детальное разрешение вихревых структур, с учетом характеристик турбулентности.

С целью демонстрации преимуществ метода LES проведен сравнительный анализ полей температуры в зоне горения: результаты LES-расчетов (осредненные значения параметров, время осреднения 8 с) сравнивались с результатами RANS-расчетов и экспериментальными данными. Полученные распределения температуры газа представлены на рис. 3.

Результаты численного моделирования изменения температуры и коэффициента избытка воздуха α по оси факела приведены на рис. 4 в сравнении с данными экспериментов [17].

Из рис. 4 видно, что пиковые значения температуры при LES-моделировании и в экспериментах совпадают на расстоянии $x/d \approx 110 \div 120$ калибров от топливного сопла. При RANS-моделировании пиковые значения смещены ближе к соплу и фиксируются на расстоянии $x/d \approx 80$. Таким образом, LES-подход продемонстрировал лучшее совпадение средней температуры с экспериментальными данными по сравнению с RANS-моделированием.

Приведенные на рис. 4 расчетные и экспериментальные значения коэффициента избытка воздуха α экспоненциально увеличиваются и достигают значения $\alpha = 3$ на расстоянии $x/d \approx 140 \div 150$. Это свидетельствует о корректном моделировании смещения топлива и воздуха в зоне горения.

Была проведена фото- и видеофиксация диффузионного факела для сравнения с результатами численного моделирования методом LES (рис. 5). Для визуализации пламени в

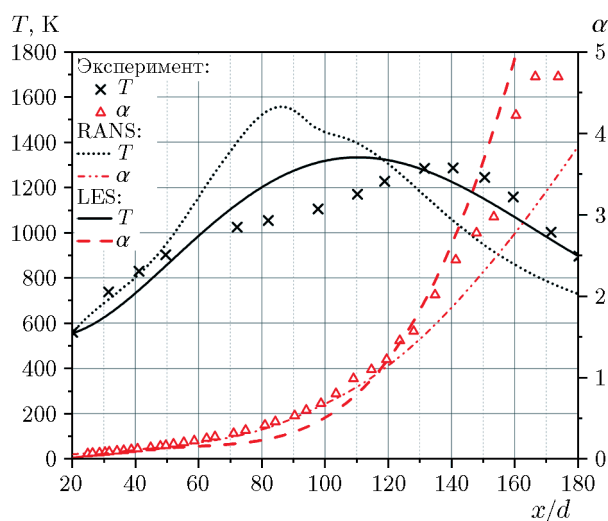


Рис. 4. Изменение температуры и коэффициента избытка воздуха по оси факела

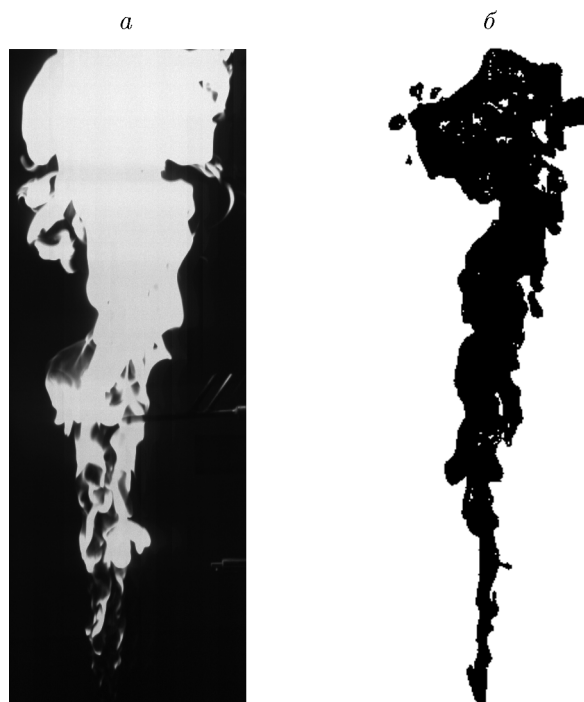
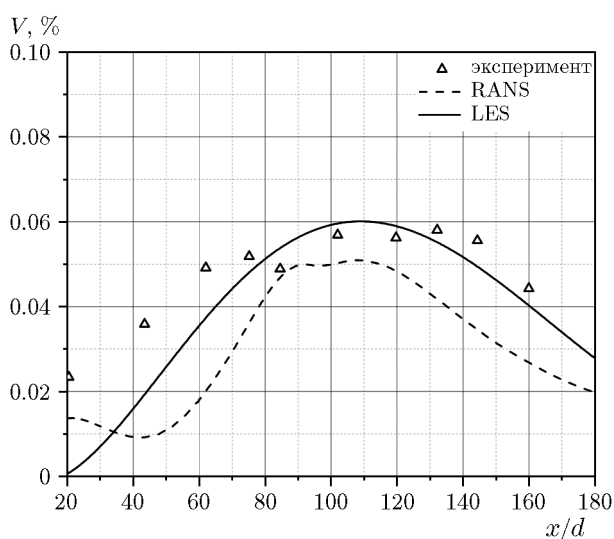
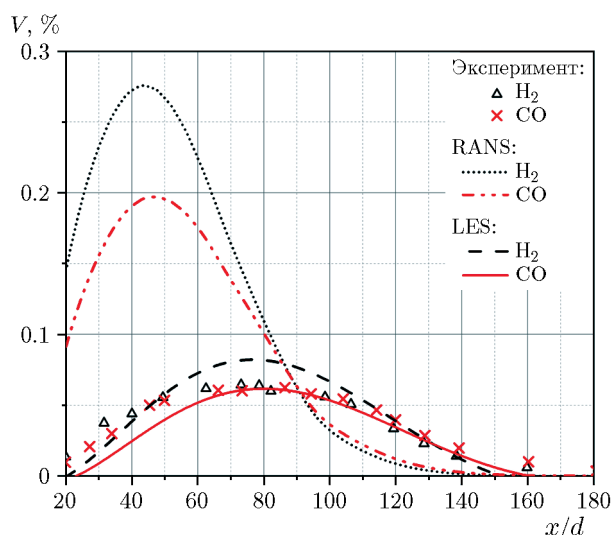


Рис. 5. Фотофиксация (а) и результат численного моделирования (б) диффузионного факела

расчете отображено мгновенное распределение концентрации ОН.

С целью валидации рассматриваемой расчетной модели для определения в дальнейших исследованиях таких сложных продуктов неполного сгорания, как ПАУ, экспериментальными и расчетными методами были получены

Рис. 6. Объемная доля CO_2 по оси факелаРис. 7. Объемные доли CO и H_2 по оси факела

концентрации основных (CO_2) и промежуточных (CO и H_2) продуктов сгорания.

На рис. 6 представлены расчетные и экспериментальные концентрации основных продуктов сгорания. Видно, что пиковые значения объемной доли CO_2 достигаются на расстоянии $x/d \approx 100 \div 110$ и, следовательно, совпадают с пиковыми температурами в зоне горения.

На рис. 7 приведены расчетные и экспериментальные концентрации промежуточных продуктов сгорания CO и H_2 . Пиковые значения их объемных долей смещены от пиковых значений CO_2 примерно на 20 калибров — в область $x/d \approx 80 \div 90$. Полученные данные можно считать корректными, так как в этой об-

ласти окислительные реакции еще не завершены, и, следовательно, CO не переходит в CO_2 , а H_2 — в H_2O .

Таким образом, расчетная модель на основе LES-подхода валидирована по экспериментальным значениям температуры, основным продуктам сгорания и продуктам неполного сгорания. Поэтому при дальнейших исследованиях осреднение параметров, полученных методом LES, может быть использовано для расчета эмиссии ПАУ с помощью сети химических реакторов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе выполнено расчетно-экспериментальное исследование процесса горения диффузионного факела пропана. Получены следующие результаты:

1) LES-подход при численном моделировании диффузионного факела пропана продемонстрировал лучшее совпадение средней температуры с экспериментальными данными по сравнению с RANS-моделированием;

2) результаты численного моделирования методом LES эмиссии продуктов сгорания и изменения коэффициента избытка воздуха хорошо согласуются с данными экспериментов как по основным (среднее расхождение не более 5 %), так и по промежуточным (среднее расхождение не более 10 %) продуктам сгорания.

Полученные в результате расчетов осредненные значения температуры, восстановленной концентрации топлива и пульсаций концентрации топлива могут быть использованы для определения методом кинетического реакторного моделирования с детальной химической кинетикой наиболее сложных продуктов неполного сгорания топлива, например ПАУ.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-79-01100, <https://rscf.ru/project/23-79-01100/>).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Савельев А. М., Старик А. М., Титова Н. С. Исследование динамики образования экологически вредных газов в элементах газотурбинного двигателя // Теплофизика высоких температур. — 1999. — Т. 37, № 3. — С. 495–503. — EDN: TNPFCF.
2. Gangisetty G., Ivchenko A. V., Jayachandran A. V. T., Sverbilov V. Y., Matveev S. S., Chechet I. V. Methodology development for the control of NO_x emissions in Aerospace Industry // J. Phys.: Conf. Ser. — 2019. — V. 1276, N 1. — 012075. — DOI: 10.1088/1742-6596/1276/1/012075.
3. Moorthy B., Chu C., Carlin D. J. Polycyclic aromatic hydrocarbons: from metabolism to lung cancer // Toxicol. Sci. — 2015. — V. 145, N 1. — P. 5–15. — DOI: 10.1093/toxsci/kfv040.
4. СТО Газпром 2-3.5-039-2005: каталог удельных выбросов вредных веществ газотурбинных газоперекачивающих агрегатов. — Разраб. ООО «ВНИИГАЗ». — Введен в действие с 15.12.2005.
5. ICAO Engine Exhaust Emission Data. — Montreal, QC, Canada: ICAO, 2005. ICAO Doc 9646-AN/943.
6. Бурико Ю. Я., Кузнецов В. Р. Влияние химических реакций и процесса смешения на концентрации окиси углерода и углеводородов в турбулентном диффузионном факеле // Физика горения и взрыва. — 1986. — Т. 22, № 4. — С. 19–25.
7. Лукачев С. В., Горбатко А. А., Матвеев С. Г. Образование и выгорание бенз(а)пирена при сжигании углеводородных топлив. — М.: Машиностроение, 1999.
8. Poinso T., Candel S., Trouvé A. Applications of direct numerical simulation to premixed turbulent combustion // Prog. Energy Combust. Sci. — 1995. — V. 21, N 6. — С. 531–576. — DOI: 10.1016/0360-1285(95)00011-9.
9. Gurakov N. I., Zubrilin I. A., Chechet I. V., Anisimov V. M., Matveev S. S., Idrisov D. V., Anisimov M. Y. Simulation of pollutant emissions in a small-sized combustion chamber with a gas fuel for various regime modes // ASME 2019: Gas Turbine India Conf., December 5–6, 2019, Chennai, Tamil Nadu, India. — GTINDIA2019-2687. — DOI: 10.1115/GTINDIA2019-2687.
10. Zadsirjan S., Tabejamaat S., Abtahizadeh E., van Oijen J. Large eddy simulation of turbulent diffusion jet flames based on novel modifications of flamelet generated manifolds // Combust. Flame. — 2020. — V. 216. — P. 398–411. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2020.02.018.
11. Matveev S. S., Zubrilin I. A., Orlov M. Yu., Matveev S. G. Numerical investigation of the influence of flow parameters nonuniformity at the diffuser inlet on characteristics of the GTE annular combustion chamber // ASME Turbo Expo 2015: Turbine Technical Conference and Exposition, June 15–19, 2015, Montreal, Quebec, Canada. — GT2015-42676. — DOI: 10.1115/GT2015-42676.
12. Xing Y., Zhang T., Tian Z., Li J., Yan Y. Large eddy simulation of a turbulent non-premixed flame based on the flamelet-generated manifolds approach and a reduced mechanism verification // Aerospace Sci. Technol. — 2020. — V. 105. — 105952. — DOI: 10.1016/j.ast.2020.105952.
13. Wang S., Wang H., Luo K., Fan J. The effects of differential diffusion on turbulent non-premixed flames LO₂/CH₄ under transcritical conditions using large-eddy simulation // Energies. — 2023. — V. 16, N 3. — 1065. — DOI: 10.3390/en16031065.
14. Семенихин А. С., Матвеев С. С., Чечет И. В., Матвеев С. Г., Идрисов Д. В., Гураков Н. И., Радин Д. В., Новичкова С. С., Фокин Н. И., Симин Н. О., Ивановский А. А., Тарасов Д. С. Кинетические модели горения метановодородных смесей: краткий обзор и их валидация // Теплоэнергетика. — 2022. — № 10. — С. 79–89. — DOI: 10.56304/S0040363622100071. — EDN: BXKHWI.
15. Matveev S. S., Idrisov D. V., Gurakov N. I., Gangisetty G., Zubrilin I. A., Matveev S. G., Shchepakina E. A. Simulation of CO and CO₂ emissions in model combustion chamber based on the combination LES and Reactor Network model // E3S Web Conf. — 2019. — V. 80. — 03008. — DOI: 10.1051/e3sconf/20198003008.
16. Gallen L., Riber E., Cuenot B. Investigation of soot formation in turbulent spray flame burning real fuel // Combust. Flame. — 2023. — V. 258, Pt 1. — 112621. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2023.112621.
17. Zubrilin I. A., Gurakov N. I., Semенихин А. С., Kolomzarov O. V., Matveev S. G., Anisimov V. M. Simulation of CO emission in primary and secondary zone of a small gas turbine combustion chamber using CFD and reactors network // ASME 2019: Gas Turbine India Conf., December 5–6, 2019, Chennai, Tamil Nadu, India. — GTINDIA2019-2594. — DOI: 10.1115/GTINDIA2019-2594.
18. Starik A. M., Lebedev A. B., Savel'ev A. M., Titova N. S., Leyland P. Impact of operating regime on aviation engine emissions: Modeling study // J. Propul. Power. — 2013. — V. 29, N 3. — P. 709–717. — DOI: 10.2514/1.B34718.
19. Зубрилин И. А., Матвеев С. Г., Marrone A., Pastrone D. G. Моделирование образования вредных веществ в малоразмерном ГТД с помощью сети реакторов // Кр. сообщ. по физике ФИАН. — 2018. — Т. 45, № 10. — С. 28–32. — EDN: YMMJOH.

20. **Matveev S. S., Semenikhin A. S., Litvinenko Z. S., Gurakov N. I., Idrisov D. V., Chechet I. V., Savchenkova A. S., Matveev S. G.** Study of the formation of polycyclic aromatic hydrocarbons in the combustion chambers of aircraft engines // AIP Conf. Proc. — 2020. — V. 2304, N 1. — 020015. — DOI: 10.1063/5.0033856.
21. **Захаров В. М., Козлов В. Е., Лебедев А. Б., Секундов А. Н., Щепин С. А., Щепин А. М., Якубовский К. Я.** Разработка реакторных моделей диффузионной камеры сгорания для сравнительного анализа детальных и редуцированных кинетических схем горения углеводородных топлив // Физика горения и взрыва. — 2009. — Т. 45, № 2. — С. 20–28. — EDN: KBAUGR.
22. **Волков К. Н., Емельянов В. Н.** Моделирование крупных вихрей в расчетах турбулентных течений. — М.: Физматлит, 2008.
23. **Zubrilin I. A., Gurakov N. I., Matveev S. G.** Lean blowout limit prediction in a combustor with the pilot flame // Energy Procedia. — 2017. — V. 141. — P. 273–281. — DOI: 10.1016/j.egypro.2017.11.105.
24. **Choi H., Moin P.** Grid-point requirements for large eddy simulation: Chapman's estimates revisited // Phys. Fluids. — 2012. — V. 24, N 1. — 011702. — DOI: 10.1063/1.3676783.
25. **Girimaji S., Abdol-Hamid K.** Partially-averaged Navier Stokes model for turbulence: Implementation and validation // 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 10–13 Jan. 2005, Reno, Nevada. — AIAA 2005-502. — DOI: 10.2514/6.2005-502.
26. **Zhang B., Wang T., Gu C.-G., Dai Z.-Y.** A novel meshing approach for large eddy simulation // ASME 2010: Fluids Engineering Division Summer Meeting, August 1–5, 2010, Montreal, Quebec, Canada. — FEDSM-ICNMM2010-30718. — P. 2527–2535. — DOI: 10.1115/FEDSM-ICNMM2010-30718.
27. **Celik I. B., Cehreli Z. N., Yavuz I.** Index of resolution quality for large eddy simulations // J. Fluids Eng. — 2005. — V. 127, N 5. — P. 949–958. — DOI: 10.1115/1.1990201.
28. **Pope S. B.** Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows // New J. Phys. — 2004. — V. 6. — 35. — DOI: 10.1088/1367-2630/6/1/035.
29. **L'vov V. S., Nazarenko V., Volovik G. E.** Energy spectra of developed superfluid turbulence // J. Exp. Theor. Phys. Lett. — 2004. — V. 80. — P. 479–483. — DOI: 10.1134/1.1839294.

Поступила в редакцию 01.02.2024.

После доработки 14.02.2024.

Принята к публикации 21.02.2024.