

УДК 533.2, 519.24, 544.43

## Влияние турбулентности на скорости химических реакций

А. М. Молчанов, Д. С. Янышев, А. С. Тушканов

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Москва, 125993, Россия

e-mail: alexmol\_2000@mail.ru

Поступила в редакцию 31.01.2018

После доработки 19.11.2018

Принята к публикации 26.11.2018

Рассмотрено влияние турбулентности на протекание химических реакций, разработана методика расчета осредненных скоростей химических реакций, основанная на использовании функции распределения плотности вероятностей. Проведено тестирование модели и сравнение результатов расчетов с расчетами других авторов и экспериментальными данными.

**Ключевые слова:** турбулентность, химическая кинетика, функция распределения плотности вероятностей, осредненные параметры потока, дисперсия температуры и концентраций.

### Введение

Возможность протекания реакций зависит от многих факторов, главными из которых являются температура, давление и скорость потока. Основным критерием, который определяет эту возможность, является число Дамкелера:

$$Da = \frac{\tau_G}{\tau_{chem}} = \frac{L/V}{\tau_{chem}},$$

где  $L$  – характерный размер расчетной области;  $V$  – скорость потока. Как правило, за  $\tau_{chem}$  принимают то время, за которое происходит полное превращение исходных реагентов в продукты реакции.

Наибольший интерес представляет расчет в случае, когда характерное газодинамическое время сопоставимо со временем протекания химических реакций. Такое течение называется химически неравновесным. Его диапазон, как правило, принимается в пределах примерно  $0.01 < Da < 100$ .

Скорость образования химического компонента в общем случае является функцией плотности, температуры и концентраций компонентов:

$$\dot{w}_s = \dot{w}_s(\rho, T, C_1, \dots, C_{Nc}).$$

Эта функция существенно нелинейна относительно своих аргументов, поэтому в турбулентных течениях допущение о том, что средняя скорость  $\dot{w}_s$  определяется через средние значения своих аргументов, может приводить к грубым ошибкам. На самом деле средняя скорость реакций зависит не только от средних значений газодинамических параметров, но и существенно образом от пульсаций этих величин.

Наиболее достоверным в процедуре математического описания комплекса химических реакций представляется подход с использованием функции распределения плотности вероятностей (ФРПВ), которая зависит от ряда газодинамических параметров, рассматриваемых в турбулентном течении в качестве случайных величин.

Для получения функции распределения плотности вероятностей можно получить специальное уравнение переноса [1, 2]. Однако в общем случае решение и использование такого уравнения представляет колоссальную математическую проблему. Поэтому в данной работе используется упрощенная модель построения ФРПВ, основанная на представлении этой функции в виде

произведения более простых функций заранее заданной формы с последующим решением уравнений, описывающих параметры этих функций. При построении этой модели использовались методы, предложенные в [3–5].

**1. Основная система уравнений, описывающих турбулентное течение химически реагирующей газовой смеси**

Эта система при использовании подхода, основанного на использовании коэффициента турбулентной вязкости  $\mu_T$ , включает в себя уравнения неразрывности, количества движения, сохранения массы химических компонентов и полной энергии:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i + \delta_{ji} \bar{p} - \tau_{ij}) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{C}_s) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{C}_s + J_{s,j}) = \bar{w}_s, \quad s=1, 2, \dots, N_c-1, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{E}_t}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \tilde{u}_j (\bar{E}_t + \bar{p}) + q_j + \frac{1}{2} \bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{u}_i'' - \tilde{u}_i \tau_{ij} \right] = 0.$$

Предполагается, что турбулентные потоки и напряжения моделируются подобно молекулярным аналогам, поэтому:

$$\tau_{ij} = (\mu + \mu_T) \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\mu + \mu_T) \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_m} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \bar{p} K,$$

$$\frac{1}{2} \bar{\rho} \tilde{u}_j'' \tilde{u}_i'' = - \frac{\mu_T}{\sigma_K} \frac{\partial K}{\partial x_j}, \quad J_{s,j} = - \left( \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_T}{Sc_T} \right) \frac{\partial \tilde{C}_s}{\partial x_j}, \quad (2)$$

$$q_j = - \left( \frac{\mu}{Pr} + \frac{\mu_T}{Pr_T} \right) \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j}. \quad (3)$$

При получении формулы для простоты записи использовалось допущение о равенстве как молекулярных чисел Прандтля Pr и Шмидта Sc, так и турбулентных:  $Pr_T = Sc_T$ .

Давление газовой смеси  $p$  подчиняется закону Дальтона и равно сумме парциальных давлений компонентов  $p_s$ .

Полная энергия складывается из внутренней и кинетической составляющих:

$$E_t = \rho \left( e + u_k^2 / 2 \right), \quad e = \sum_{s=1}^{N_c} h_s C_s - \frac{p}{\rho} = h - \frac{p}{\rho}. \quad (4)$$

Энтальпии  $h_s$  химических компонентов рассчитывались по справочным формулам:

$$\frac{h_s}{R_s T} = a_{1,s} + a_{2,s} \frac{T}{2} + a_{3,s} \frac{T^2}{3} + a_{4,s} \frac{T^3}{4} + a_{5,s} \frac{T^4}{5} + \frac{b_{1,s}}{T}. \quad (5)$$

Для расчета горения водорода использовалась система реакций Коннера и др. [6]. Она включает 19 реакций. Кроме того, в некоторых расчетах использовалась упрощенная система, состоящая из семи реакций [7]. Для учета окиси углерода в систему добавлялись еще две реакции [7].

Для замыкания системы и определения коэффициента турбулентной вязкости в большинстве расчетов использовалась трехпараметрическая  $k-\epsilon-V_n$  модель турбулентности, представленная в [8].

**2. Влияние турбулентности на скорости химических реакций**

Как уже указывалось во введении, для расчета осредненной скорости образования компонентов используется подход, основанный на функции распределения плотности вероятностей:

$$\bar{w}_s = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^1 \dots \int_0^1 \dot{w}_s(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c}) \times$$

$$\times P(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c}) d\rho dT dC_1, \dots, dC_{N_c}, \quad (6)$$

где  $P(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c})$  – функция распределения плотности вероятностей случайных величин  $(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c})$ .

Используем следующие допущения.

*Допущение 1.* Функция распределения плотности вероятностей  $P(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c})$  может быть представлена в виде произведения трех независимых функций:

$$P(\rho, T, C_1, \dots, C_{N_c}) = P_\rho(\rho) \cdot P_T(T) \cdot P_C(C_1, \dots, C_{N_c}). \quad (7)$$

При этом предполагается выполнение статистической независимости между соответствующими случайными величинами.

*Допущение 2.* Структура функции распределения вероятностей в форме (7) представляется произведением следующих известных зависимостей:

1) Функция плотности газа  $P_\rho(\rho)$  представляется дельта-функцией (функцией Дирака) [4]:

$$P_\rho(\rho) = \delta(\rho - \bar{\rho}). \quad (8)$$

2) Для температуры в данной работе использовалось два варианта задания функции распределения вероятностей: нормальное распределение (распределение Гаусса) и бета-функция.

3) Для концентраций компонентов использовалась многомерная бета-функция.

### 2.1. Функции распределения плотности вероятностей для температуры

Нормальное распределение имеет вид:

$$P_T(T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\widetilde{T}''^2}} \exp\left[-\frac{(T-\widetilde{T})^2}{2\widetilde{T}''^2}\right]. \quad (9)$$

Как известно, нормальное распределение в общем случае имеет пределы  $(-\infty, +\infty)$ , поэтому вводятся физические ограничения на пределы интегрирования при взятии моментов:

$$T_{\min} = \widetilde{T} - \varphi\sqrt{\widetilde{T}''^2}, \quad T_{\max} = \widetilde{T} + \varphi\sqrt{\widetilde{T}''^2}, \quad (10)$$

здесь принималось  $\varphi = 3$ .

Соответственно, в формулу (9) вводится поправка, так чтобы выполнялось условие:

$$\int_{T_{\min}}^{T_{\max}} P_T(T) dT = 1. \quad (11)$$

Для того чтобы обеспечить это условие, на границах  $T_{\min}$  и  $T_{\max}$  вводятся дельта-функции, которые учитывают влияние «хвостов» функции распределения плотности вероятностей в виде:

$$P_T(T) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\widetilde{T}''^2}} \exp\left[-\frac{(T-\widetilde{T})^2}{2\widetilde{T}''^2}\right] \times \\ \times [H(T-T_{\min}) - H(T-T_{\max})] + \\ + A_1\delta(T-T_{\min}) + A_2\delta(T-T_{\max}), \quad (12)$$

где  $H$  – функция Хевисайда; коэффициенты  $A_1, A_2$  учитывают площадь отрезанных частей функции распределения плотности вероятностей [9]:

$$A_1 = \int_{-\infty}^{T_{\min}} \frac{1}{\sqrt{2\pi\widetilde{T}''^2}} \exp\left[-\frac{(T-\widetilde{T})^2}{2\widetilde{T}''^2}\right] dT, \quad (13)$$

$$A_2 = \int_{T_{\max}}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\widetilde{T}''^2}} \exp\left[-\frac{(T-\widetilde{T})^2}{2\widetilde{T}''^2}\right] dT.$$

При проведении численного счета функция нормального распределения при значениях  $\widetilde{T}''^2$ , близких к нулю, имеет неопределенное значе-

ние, поэтому при  $\sqrt{\widetilde{T}''^2} / \widetilde{T} < 10^{-4}$  скорости реакций рассчитываются не через функции распределения плотности вероятностей, а по средней температуре  $\widetilde{T}$ .

Как отмечалось ранее, во втором варианте функция температуры газа  $P_T(T)$  задается бета-функцией, которая имеет следующий вид [5]:

$$P_T(T) = \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(\beta_2)} [\theta^{\beta_1-1} (1-\theta)^{\beta_2-1}], \quad (14)$$

где  $\Gamma(\beta)$  – гамма-функция;

$$\theta = \frac{T - T_{\min}}{T_{\max} - T_{\min}}, \quad \beta_1 = \widetilde{\theta} \left[ \frac{\widetilde{\theta}(1-\widetilde{\theta})}{\widetilde{\theta}''^2} - 1 \right],$$

$$\beta_2 = (1-\widetilde{\theta}) \left[ \frac{\widetilde{\theta}(1-\widetilde{\theta})}{\widetilde{\theta}''^2} - 1 \right]. \quad (15)$$

Бета-распределение является более сложным по сравнению с нормальным, но более удобным для подобных задач, так как его зависимость от двух переменных позволяет более гибко отражать характер изменения функции распределения плотности вероятностей в пламени. На ранних стадиях смешения эта функция имеет два пика, а затем постепенно переходит к виду, близкому к нормальному распределению.

Есть еще одно преимущество бета-распределения: пределы интегрирования в этом случае конечны. Новая функция  $\theta$  меняется в пределах от 0 до 1.

Среднее значения этой функции и ее дисперсия определяются формулами:

$$\widetilde{\theta} = \frac{\widetilde{T} - T_{\min}}{T_{\max} - T_{\min}}, \quad \widetilde{\theta}''^2 = \frac{\widetilde{T}''^2}{(T_{\max} - T_{\min})^2}. \quad (16)$$

### 2.2. Функции распределения плотности вероятностей для концентраций компонентов

Многомерная бета-функция распределения вероятностей имеет вид [10]:

$$P_C(C_1, \dots, C_{N_c}) = \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_{N_c})}{\Gamma(\beta_1) \cdot \Gamma(\beta_2) \cdot \dots \cdot \Gamma(\beta_{N_c})} C_1^{\beta_1-1} \times \\ \times C_2^{\beta_2-1} \cdot \dots \cdot C_{N_c}^{\beta_{N_c}-1} \delta(1-S), \quad (17)$$

где

$$S = \sum_{m=1}^{N_c} C_m, \quad \beta_m = \widetilde{C}_m \left( \frac{1 - S_C}{\sigma_C} - 1 \right), \quad (18)$$

$$S_C = \sum_{m=1}^{N_c} (\widetilde{C}_m)^2, \quad \sigma_C = \sum_{m=1}^{N_c} \widetilde{C}_m^2.$$

Основное достоинство такого представления функции распределения плотности вероятностей для концентраций состоит в том, что все необходимые моменты случайных величин находятся аналитически. В скорости реакций входят произведения концентраций компонентов, поэтому средние скорости складываются из произведений средних величин плюс дисперсии и ковариации (смешанные моменты второго порядка). Дисперсии и ковариации для многомерной бета-функции распределения (17) определяются по формулам:

$$\overline{C_m'' C_n''} = \begin{cases} \sigma_C \frac{-\widetilde{C}_m \widetilde{C}_n}{1 - S_C}, & m \neq n \\ \sigma_C \frac{\widetilde{C}_m (1 - \widetilde{C}_n)}{1 - S_C}, & m = n. \end{cases} \quad (19)$$

### 2.3. Осредненные скорости реакций, скорости образования компонентов

Скорость образования компонента в результате химических реакций  $\dot{w}_s$  складывается из скоростей всех реакций, в которых он участвует:

$$\dot{w}_s = M_s \sum_{k=1}^K (v''_{k,s} - v'_{k,s}) R_k. \quad (20)$$

Скорости химических реакций определяются на основе закона действующих масс:

$$R_k = \left( F_k \prod_{s=1}^{N_c} \left( \frac{\rho C_s}{M_s} \right)^{v'_{k,s}} - B_k \prod_{s=1}^{N_c} \left( \frac{\rho C_s}{M_s} \right)^{v''_{k,s}} \right), \quad (21)$$

где  $F_k$  и  $B_k$  – коэффициенты скоростей прямой и обратной  $k$ -ой реакции зависят только от температуры.

В соответствии с основным допущением (формулы (7) и (8)), получаем:

$$\overline{\dot{w}_s} = M_s \sum_{k=1}^K (v''_{k,s} - v'_{k,s}) \overline{R_k}, \quad (22)$$

$$\overline{R_k} = \left( \overline{F_k \prod_{s=1}^{N_c} \left( \frac{\rho C_s}{M_s} \right)^{v'_{k,s}}} - \overline{B_k \prod_{s=1}^{N_c} \left( \frac{\rho C_s}{M_s} \right)^{v''_{k,s}}} \right). \quad (23)$$

Моделирование произведений, входящих в формулу (23), зависит от числа компонентов, участвующих в реакции.

### 3. Уравнения для дисперсий температуры и концентраций

Для задания функции распределения плотности вероятностей температуры и концентраций компонентов необходимо определить дисперсии этих случайных величин.

Уравнения для  $\widetilde{C}_m''^2$  и  $\widetilde{T}''^2$  легко выводятся из уравнений сохранения химических компонентов и энергии и имеют общий вид:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left( \overline{\rho f''^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \overline{\rho \tilde{u}_j f''^2} \right) = \\ & = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \frac{\mu_r}{\sigma_{T,f}} + \frac{\mu}{\sigma_f} \right) \frac{\partial \overline{f''^2}}{\partial x_j} \right] + 2 \frac{\mu_r}{\sigma_{T,f}} \left( \frac{\partial \overline{f}}{\partial x_j} \right)^2 - \\ & - 2 \overline{\rho \varepsilon_f} + 2 \overline{f'' \omega}, \end{aligned} \quad (24)$$

где  $\widetilde{f}''^2 = \widetilde{C}_m''^2, \widetilde{T}''^2$ ;  $\sigma_{T,f}, \sigma_f$  – аналоги чисел Прандтля/Шмидта;  $\varepsilon_f$  – диссипация соответствующей скалярной величины;  $\omega$  – источник в соответствующем уравнении (вследствие химических реакций и энергетических диссипативных процессов).

Строго говоря, для диссипации можно получить уравнения переноса, аналогичные (24). Однако для оценочных расчетов можно предположить, что отношение временных масштабов пульсаций скоростей и скалярных величин примерно постоянно:

$$R = \left( \frac{\overline{f''^2}}{\varepsilon_f} \right) / \left( \frac{K}{\varepsilon} \right) \approx \text{const}. \quad (25)$$

Это допущение соответствует широко используемому заданию постоянных значений турбулентных чисел Прандтля/Шмидта. Из этого следует:

$$\varepsilon_f = \frac{1}{R} \overline{f''^2} \frac{\varepsilon}{K}. \quad (26)$$

Для последнего члена в уравнении (24) существует большое количество полуэмпирических формул [11, 12]. Зачастую они противоречат друг другу, поэтому в данной работе делается предположение, что определяющую роль в источниковой части уравнения (24) играют генерация и диссипация.

#### 4. Тестирование модели. Сопоставление с экспериментальными данными

Для оценки влияния турбулентности на процессы горения проведено тестирование модели и сопоставление с экспериментальными и расчетными данными других исследователей.

##### 4.1. Сверхзвуковая водородная струя в сверхзвуковом спутном потоке горячего воздуха

В данном тесте предлагаемая методика использовалась для расчета эксперимента Эванса и др. [13] (Test 1). Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1, исходные данные в табл. 1.

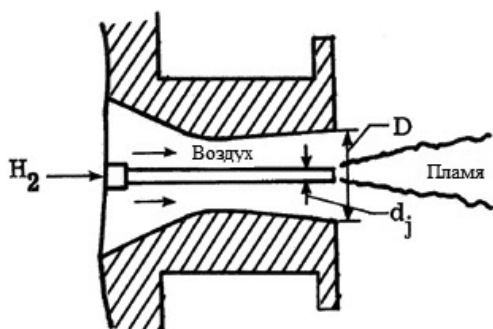


Рис. 1. Геометрия течения. Диаметр внешнего сопла  $D=0.0653$  м, диаметр внутреннего сопла  $d_j=0.009525$  м, толщина кромки внутреннего сопла 0.0015 м

На рис. 2 показаны распределения массовых концентраций химических компонентов вдоль оси потока. Сравнивались результаты расчетов без учета влияния турбулентных пульсаций на скорости химических реакций («ламинарная химия») и с учетом («турбулентная химия») с экспериментальными данными Эванса и др. [13]. Видно, что результаты расчетов в обоих случаях слабо отличаются друг от друга и удовлетвори-

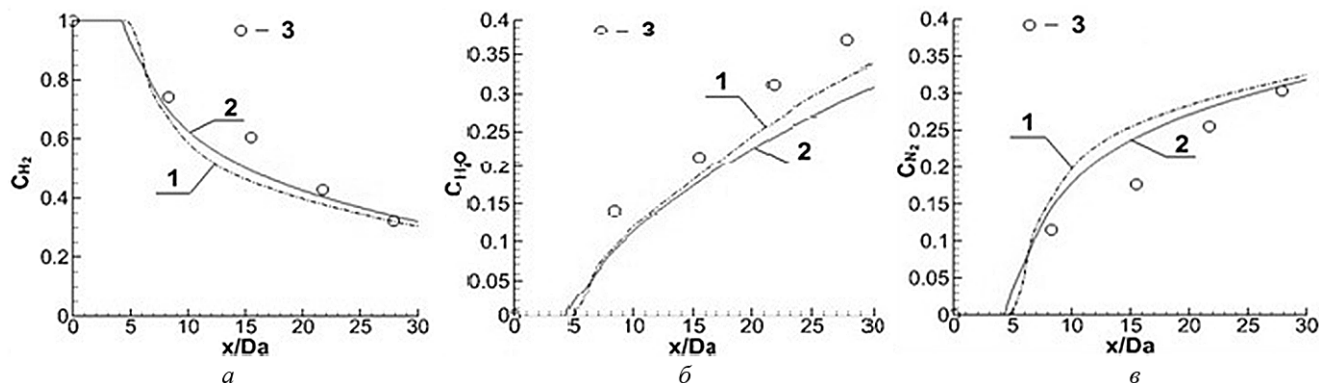


Рис. 2. Распределение массовых концентраций компонентов вдоль оси струи: а —  $H_2$ , б —  $H_2O$ , в —  $N_2$ ; 1 — расчет с использованием «ламинарной химии»; 2 — расчет с использованием «турбулентной химии»; 3 — эксперимент Эванса и др. [13]

Таблица 1. Исходные данные к эксперименту Эванса и др. [13] (Test 1)

Параметр	Водород	Внешний поток
Число Маха	1.0	2.44
Температура, К	242	1270
Статическое давление, Па	$1.013 \cdot 10^5$	$1.013 \cdot 10^5$
Массовые доли		
$C_{H_2}$	1.0	0.0
$C_{O_2}$	0.0	0.258
$C_{N_2}$	0.0	0.486
$C_{H_2O}$	0.0	0.256

тельно согласуются с экспериментом (с учетом того, что авторы [13] декларируют точность эксперимента в пределах  $\sim 30\%$ ).

Гораздо более важным результатом является то, что при использовании «турбулентной химии» воспламенение происходит выше по потоку (рис. 3).

##### 4.2. Эксперимент Барроуса и Куркова [14]

Для верификации общей математической модели горения для случая плоского течения в работе решена задача истечения пристенной плоской водородной струи в спутный сверхзвуковой поток. С такими задачами приходится сталкиваться, например, в камере сгорания гиперзвукового ПВРД. Экспериментальное исследование подобного течения проведено в работе [14]. В указанной работе исследовалось горение пристенной звуковой струи холодного водорода, инжектируемого через щель в стенке аэродинамической трубы высотой  $h_1=4$  мм, в сверхзвуковой поток подогретого воздуха. Схема экспериментальной установки приведена на рис. 4. В расчете



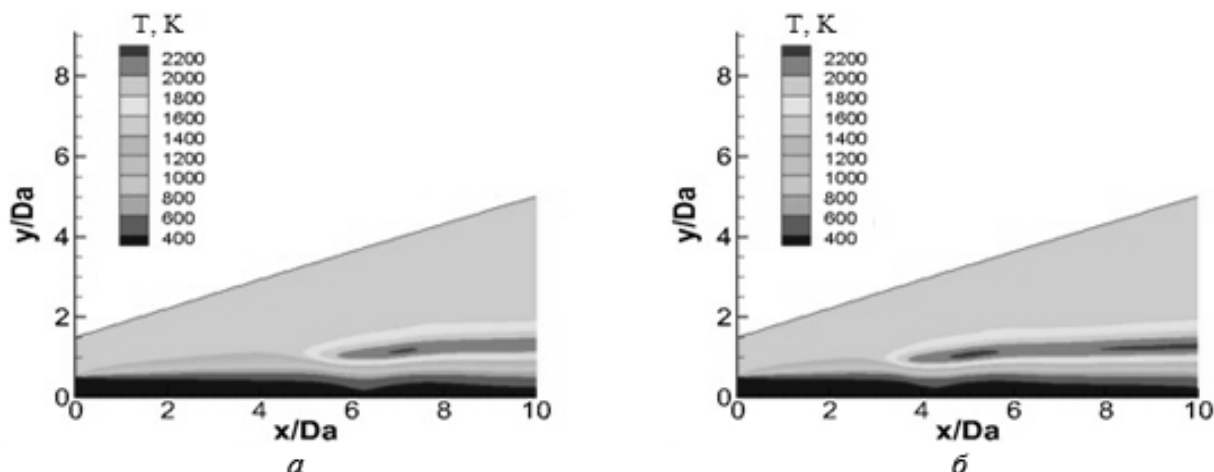


Рис. 3. Пространственное распределение температуры: а – при использовании «ламинарной химии»; б – при использовании «турбулентной химии»

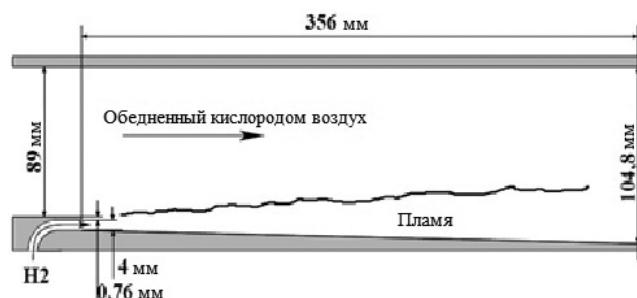


Рис. 4. Схема экспериментальной установки в эксперименте Барроуса и Куркова [14]

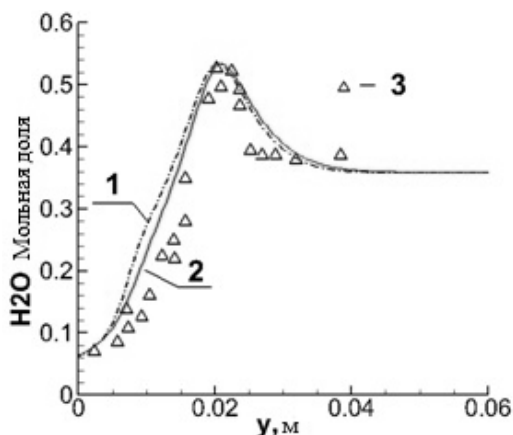


Рис. 5. Поперечные профили мольных долей  $H_2O$  в выходном сечении экспериментального участка: 1 – расчет с «ламинарной химией»; 2 – расчет с «турбулентной химией»; 3 – эксперимент Барроуса и Куркова

тах использовались условия на выходе из щели и в спутном потоке, представленные в табл. 2. Были измерены профили температуры, мольных концентраций реагентов ( $H_2$ ,  $O_2$ ) и продуктов сгорания ( $H_2O$ ) в выходном сечении камеры сгорания. В качестве примера на рис. 5 представлены результаты расчетов и экспериментальные данные по профилю  $H_2O$ .

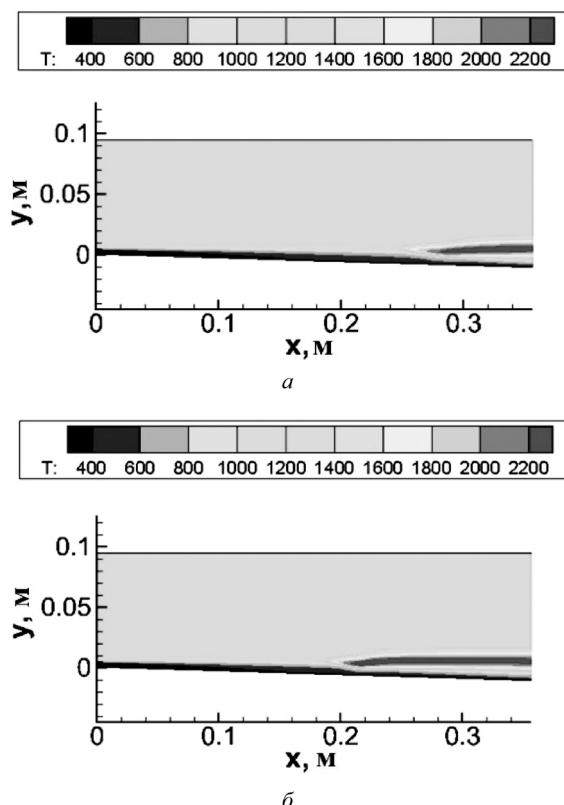


Рис. 6. Пространственное распределение температуры: а – при использовании «ламинарной химии»; б – при использовании «турбулентной химии»

Таблица 2. Исходные данные к эксперименту Барроуса и Куркова [14]

$T_a$ , К	$U_a$ , м/с	$R_a$ , м	$P_a$ , Па	$H_2$	$H_2O$	CO	$CO_2$	$N_2$
1330	2500	1.0	$0.7 \cdot 10^{-5}$	0.05	0.4	0.05	0.15	0.35

Расчеты с «ламинарной химией» и с «турбулентной химией» примерно совпадают и удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Как и в предыдущем тесте, при расчете с использованием «турбулентной химии» воспламенение происходит выше по потоку, чем без учета влияния химии на скорость химических реакций. Как видно по рис. 6, воспламенение начинается при координате  $x$ , примерно равной 0.2 м, что очень хорошо согласуется с экспериментальными данными (см. [14], Fig. 16).

### Выводы

1) Влияние турбулентных пульсаций на скорости химических реакций проявляется в основном на переходных режимах.

2) При учете влияния турбулентности на скорости химических реакций воспламенение происходит раньше, так как пульсации температуры ускоряют реакции.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Майков И.Л.** Исследование процессов гидродинамики и химической кинетики методами математического моделирования. Дисс. ... докт. физ.-мат. наук. Москва, 2007. 220 с.
2. **Bilger R.W.** The structure of diffusion flames // *Combustion Science and Technology*. 1976. V. 13. P. 155–170.
3. **Subramaniam S., Haworth D.C.** A probability density function method for turbulent mixing and combustion on three-dimensional unstructured deforming meshes // *International Journal of Engine Research*. 2000. V. 1, 2. P. 171–190.
4. **Gaffney Jr R.L., White J.A., Girimaji S.S., Drummond J.P.** Modeling temperature and species fluctuations in turbulent, reacting flows // *Computing Systems in Engineering*. 1994. V. 5. P. 117–133.
5. **Baurle R.A., Girimaji S.S.** Assumed PDF Turbulence-Chemistry Closure with Temperature-Composition Correlations // *Combustion and Flame*. 2003. V. 134. P. 131–148.
6. **Connaire M.O., Curran H.J., Simmie J.M., Pitz W.J., Westbrook C.K.** A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation // *International Journal of Chemical Kinetics*. 2004. V. 36. P. 603–622.
7. **Молчанов А.М., Быков Л.В.** Математическое моделирование струй реактивных двигателей // *Тепловые процессы в технике*. 2011. Т. 3. № 3. С. 98–107.
8. **Молчанов А.М.** Расчет сверхзвуковых неизобарических струй с поправками на сжимаемость в модели турбулентности // *Вестник Московского авиационного института*. 2009. Т. 16. № 1. С. 38–48.
9. **Lockwood F.C., Naguib A.S.** The prediction of the fluctuations in the properties of free, round-jet, turbulent diffusion flames // *Combustion and Flame*. 1975. V. 24. P. 109–124.
10. **Girimaji S.S.** A simple recipe for modeling reaction-rate in flows with turbulent-combustion // *AIAA Paper 91–1792*. 1991. 8 p.
11. **Xiao X., Hassan H.A., Baurle R.A.** Modeling scramjet flows with variable turbulent Prandtl and Schmidt numbers // *AIAA Paper 2006–128*. 2006. 13 p.
12. **Brinckman K.W., Kenzakowski D.C., Dash S.M.** Progress in practical scalar fluctuation modeling for high-speed aeropropulsive flows // *AIAA Paper 2005–508*. 18 p.
13. **Evans J.S., Schexnayder S.J., Beach H.J.** Application of a Two-Dimensional Parabolic Computer Program to Prediction of Turbulent Reacting Flows. s. l.: NASA Technical Report. 1978. 56 p. NASA TP 1169.
14. **Burrows M.C. and Kurkov A.P.** Analytical and Experimental Study of Supersonic Combustion of Hydrogen in a Vitiated Airstream. s. l.: NASA Technical Report. 1973. 34 p. NASA-TMX-2828.

## The influence of turbulence on the rate of chemical reactions

**A. M. Molchanov, D. S. Yanyshv, A. S. Tushkanov**

*Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, 125993, Russia  
e-mail: alexmol\_2000@mail.ru*

A model of chemically nonequilibrium turbulent combustion has been developed, taking into account the effect of turbulent temperature and concentration fluctuations on the intensity of chemical reactions. A turbulence model for high-speed flows is proposed. The averaged rate of chemical reactions depends not only on the average values of the gas-dynamic parameters, but also on the pulsations of these quantities. The presence of correlations between temperature fluctuations and concentrations leads to the fact that the speed of the process can both increase and decrease. In the procedure of mathematical description of a complex of chemical reactions, an approach was used based on the probability density distribution function (PDF), which depends on a number of gas-dynamic parameters that are considered as random variables in a turbulent flow. To determine the PDF, we used a model based on the representation of this function in the form of a predetermined form. This function is presented as a product of 3 independent functions of a predetermined form (delta functions for density, Gauss distribution for temperature and multidimensional beta function for concentrations) followed by solving equations describing the parameters of these

functions. It is shown that taking into account the effect of turbulence on the rates of chemical reactions is very important for determining the moment of ignition of a gas mixture in chemically nonequilibrium flows (Damköler number is within  $0.01 < Da < 100$ ). With the developed burning this influence is insignificant. Also, turbulent pulsations have a significant effect on the moment of burnout failure in the jets of aircraft engines with increasing flight altitude. The obtained calculated results are in satisfactory agreement with the experimental data.

**Keywords:** turbulence, chemical kinetics, probability density distribution function, averaged flow parameters, dispersion of temperature and concentrations.

### REFERENCES

1. **Maikov I.L.** *Issledovanie protsessov gidrodinamiki i khimicheskoy kinetiki metodami matematicheskogo modelirovaniya*. Diss. doct. fiz.-mat. nauk [Study of the processes of hydrodynamics and chemical kinetics by the methods of mathematical modeling. Dr. phys. and math. sci. diss.]. Moscow, 2007. 220 p.
2. **Bilger R.W.** The structure of diffusion flames. *Combustion Science and Technology*, 1976, vol. 13, pp. 155–170.
3. **Subramaniam S., Haworth, D.C.** A probability density function method for turbulent mixing and combustion on three-dimensional unstructured deforming meshes. *International Journal of Engine Research*, 2000, vol. 1, no. 2, pp. 171–190.
4. **Gaffney Jr R.L., White J.A., Girimaji S.S., Drummond J.P.** Modeling temperature and species fluctuations in turbulent, reacting flows. *Computing Systems in Engineering*, 1994, vol. 5, pp. 117–133.
5. **Baurle R.A., Girimaji S.S.** Assumed PDF turbulence-chemistry closure with temperature-composition correlations. *Combustion and Flame*, 2003, vol. 134, pp. 131–148.
6. **Connaire M.O., Curran H.J., Simmie J.M., Pitz W.J., Westbrook C.K.** A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2004, vol. 36, pp. 603–622.
7. **Bykov L.V., Molchanov A.M.** Matematicheskoe modelirovanie struj reaktivnykh dvigatelej [Mathematical simulation of jet engine jets]. *Teplovyje protsessy v tekhnike – Thermal processes in engineering*, 2011, vol. 3, no. 3, pp. 98–107. In Russ.
8. **Molchanov A.M.** Raschet sverkhzvukovykh neizobaricheskikh struj s popravkami na szhimaemost' v modeli turbulentsnosti [A calculation of supersonic non-isobaric jets with compressibility corrections in a turbulence model]. *Vestnik Moskovskogo aviatsionnogo instituta – Bulletin of the Moscow Aviation Institute*, 2009, vol. 16, no. 1, pp. 38–48. In Russ.
9. **Lockwood F.C., Naguib A.S.** The prediction of the fluctuations in the properties of free, round-jet, turbulent diffusion flames. *Combustion and Flame*, 1975, vol. 24, pp. 109–124.
10. **Girimaji S.S.** A simple recipe for modeling reaction-rate in flows with turbulent-combustion. *AIAA Paper 91-1792*. 1991, 8 p.
11. **Xiao X., Hassan, H.A., Baurle R.A.** Modeling scramjet flows with variable turbulent Prandtl and Schmidt numbers. *AIAA Paper 2006-128*, 2006, 13 p.
12. **Brinckman K.W., Kenzakowski D.C., Dash S.M.** Progress in practical scalar fluctuation modeling for high-speed aeropropulsive flows. *AIAA Paper 2005-508*, 2005, 18 p.
13. **Evans J.S., Schexnayder S.J., Beach H.J.** *Application of a Two-Dimensional Parabolic Computer Program to Prediction of Turbulent Reacting Flows. s.l.* NASA Technical Report, 1978. 56 p. NASA TP 1169.
14. **Burrows M.C., Kurkov A.P.** *Analytical and Experimental Study of Supersonic Combustion of Hydrogen in a Vitiated Airstream. s.l.*: NASA Technical Report, 1973. 34 p. NASA-TMX-2828.