

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение

высшего образования

«Южно-Уральский государственный университет

(национальный исследовательский университет)»

Институт естественных и точных наук

Факультет «Математики, механики и компьютерных технологий»

Кафедра вычислительной механики

РАБОТА ПРОВЕРЕНА

Рецензент, младший

научный сотрудник

_____/А.А. Бочкарева

_____/2017 г.

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ

Заведующий кафедрой ВМ,

д. ф.-м. н., профессор

_____/Ю.М. Ковалев

_____/2017 г.

Моделирование фронта пламени в водородо-воздушной смеси

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

ЮУрГУ - 03.04.01.2017.129-147.ВКР

Научный консультант, научный

сотрудник РФЯЦ ВНИИТФ

_____/И.В. Лавренюк

_____/2017 г.

Руководитель проекта, главный

научный сотрудник РФЯЦ-

ВНИИТФ, д. ф. - м. н. профессор

кафедры ВМ

_____/В.Ф. Куропатенко

_____/2017 г.

Автор работы

студент группы ЕТ-226

_____/Л.Р. Файрушина

_____/2017г.

Челябинск 2017

АННОТАЦИЯ

Файрушина Л.Р. Моделирование фронта пламени в водородо-воздушной среде. – Челябинск: ЮУрГУ, ЕТ-226, 59 с., 36 ил., 4 табл., библиогр. список – 23 наим., 1 прил.

В дипломной работе рассмотрены основополагающие уравнения модели трехмерного ламинарного пламени и исследованы модели горения газа, реализованные в Cantera [1] и OpenFOAM [2]. Проведен сравнительный анализ кинетических механизмов с помощью модели, реализованной в Cantera. Рассчитана скорость распространения детонации в приближении Чепмена-Жуге для определения режима горения в статьях с экспериментальными данными [3-8]. Разработана методика расчёта нормальной скорости сферического пламени.

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ.....	7
1 Основополагающие уравнения модели трехмерного ламинарного пламени	9
1.1 Вывод уравнения состояния идеального газа и законов сохранения массы, импульса и энергии	9
1.1.1 Уравнение состояния идеального газа	9
1.1.2 Закон сохранения массы для α -го компонента	10
1.1.3 Закон сохранения импульса	11
1.1.4 Закон сохранения энергии	12
1.2 Формулы для коэффициентов переноса	13
1.2.1 Коэффициент вязкости	13
1.2.2 Коэффициент диффузии	14
1.2.3 Коэффициент теплопроводности.....	14
1.2.4 Коэффициент термодиффузии	15
1.3 Выводы по разделу	16
2 Модели горения газа, реализованные в программных пакетах Cantera и OpenFOAM.....	17
2.1 Уравнения, используемые для моделирования горения в Cantera и OpenFOAM.....	17
2.2 Сравнительный анализ моделей, реализованных в Cantera и OpenFOAM ...	23
2.3 Сравнение кинетических механизмов с использованием модели, реализованной в Cantera.	27
2.3.1 Расчёты периодов индукции	27
2.3.2 Расчёты ламинарной скорости пламени	28
2.4 Выводы по разделу	29
3 Разработка модели распространения фронта пламени в водородо-воздушной смеси.....	30
3.1 Вывод формулы для скорости плоского пламени	30
3.2 Описание используемых экспериментальных данных.....	31
3.3 Скорость распространения детонации	34
3.4 Получение зависимости длины Маркштейна от состава смеси.....	41
3.5 Выводы по разделу	55
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	56
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	57

ПРИЛОЖЕНИЕ 1 59

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность работы

Развитие мирной ядерной энергетики началось в 1954 году с введения в эксплуатацию первой атомной электростанции (АЭС) в городе Обнинске.

Однако после аварии на Чернобыльской АЭС темпы развития ядерной энергетики замедлились. Понадобилось время для повышения безопасности действующих АЭС и разработки более безопасных атомных реакторов. К настоящему времени атомная энергетика успешно преодолела кризис и смогла продемонстрировать свою жизнеспособность, экологическую привлекательность и возможность безопасного и конкурентоспособного обеспечения энергопотребностей общества.

В результате аварии с потерей теплоносителя на АЭС с водо-водяным энергетическим реактором (ВВЭР) возможно образование больших количеств водорода и, соответственно, горючих водородсодержащих парогазовых смесей. Для обоснования пожаровзрывобезопасности АЭС с ВВЭР требуются математические модели, позволяющие описывать различные аварийные ситуации, в том числе рассчитывать скорости распространения пламени и детонации при различных начальных параметрах атмосферы в помещениях защитной оболочки (температура, давление, состав). Такие расчеты необходимы для анализа различных аварийных сценариев, оценки возможного ущерба и выработки мер по повышению безопасности атомных станций.

Данная дипломная работа направлена на разработку методики вычисления скорости фронта пламени в водородо-воздушных смесях с использованием газодинамических программных кодов.

Скорость горения перемешанных газовых смесей может быть измерена как для стабилизированного, так и для распространяющегося пламени. Стабилизация пламени достигается на горелках следующих типов: горелка плоского пламени, на горелках со встречными потоками, горелка Бунзена, сопловая горелка, щелевая горелка. Этим геометрическим конфигурациям отдается предпочтение, поскольку влияние стретч-эффекта здесь можно контролировать. Для распространяющегося пламени наиболее совершенным считается шпирен-фотографирование развивающегося сферического очага с одновременной записью давления в бомбе постоянного объема. В последнее время предприняты значительные усилия для разработки методик, направленных на усовершенствование способов измерения как ламинарных, так и турбулентных скоростей горения. Факторами, влияющими на величину измеряемой скорости горения, являются: деформация пламени (стретч-эффект), неадиабатичность, конечная толщина зоны горения и неустойчивость пламени. На данный момент с использованием горелок со встречными потоками появилась методика [9, 10] с помощью которой стало

возможным определением величины скорости горения, не искаженной стретч-эффектом. Суть метода состоит в определении нескольких значений скорости горения при разных величинах стретч-фактора Карловица и последующей экстраполяции к нулевому значению этого стретч-фактора. Другой подход был предложен в университете г. Лидс в Великобритании [6, 11, 12]. Суть этого метода сводится к коррекции скорости горения, основанной на допущении Маркштейна, что скорость горения является линейной функцией кривизны пламени.

Цель работы

Разработать методику расчёта скорости распространения фронта пламени в водородо-воздушной смеси.

Для достижения поставленных целей необходимо решить следующие задачи:

- Ознакомиться с основными уравнениями, описывающими распространение трёхмерного ламинарного пламени;
- Исследовать математические модели, реализованные в программных пакетах Cantera и OpenFOAM;
- Провести сравнительный анализ кинетических механизмов с помощью Cantera;
- Вычислить ламинарные скорости горения и скорости детонации в приближении Чепмена-Жуге для определения режима горения в статьях с экспериментальными данными [3-8];
- Выполнить сравнительный анализ расчётных и экспериментальных данных по скорости горения водородо-воздушных смесей;
- На основе гипотезы из статьи [15] о соотношении скорости пламени и его кривизны предложить способ расчёта скорости пламени;
- Определить границы применимости предложенного способа расчёта скорости пламени.

1 Основополагающие уравнения модели трехмерного ламинарного пламени

Математическое моделирование химически реагирующих потоков осуществляют с помощью системы уравнений в частных производных, выражающих законы сохранения массы, импульса и энергии. Эти уравнения описывают такие процессы как конвективное движение газа, химические реакции, молекулярный перенос (теплопроводность, диффузия, вязкость) и излучение.

1.1 Вывод уравнения состояния идеального газа и законов сохранения массы, импульса и энергии

1.1.1 Уравнение состояния идеального газа

Для газов и газовых смесей, участвующих в процессах горения, уравнение состояния связывает температуру, давление и плотность газа. Если газ состоит из частиц, не имеющих собственного объема, между которыми не действуют никакие силы, то уравнение состояния такого газа записывается в виде:

$$pV = nRT,$$

где p [Па] – давление;

V [м³] – объем;

n [моль] – число молей смеси;

T [К] – абсолютная температура;

$R = 8,314 \left[\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}} \right]$ – универсальная газовая постоянная.

Средняя молекулярная масса выражается соотношением:

$$\frac{\rho}{c} = \frac{m}{n} = \bar{M},$$

где $\rho \left[\frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \right]$ – плотность смеси;

$c \left[\frac{\text{моль}}{\text{м}^3} \right]$ – концентрация смеси;

m [кг] – масса смеси.

Выведем уравнение состояния идеального газа для многокомпонентной смеси:

$$\begin{aligned} \frac{p}{RT} &= \frac{n}{V} = c, \\ \rho &= \frac{p\bar{M}}{RT}. \end{aligned} \tag{1.1}$$

1.1.2 Закон сохранения массы для α -го компонента

Для вывода данного закона сохранения воспользуемся уравнением непрерывности для полной массы газа:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \vec{u}) = 0 \quad (1.2)$$

При наличии диффузии и члена-источника $q_\alpha = M_\alpha w_\beta$, который возникает во время образования и расходования компонентов в химических реакциях, закон сохранения массы можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial(\rho_\alpha)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_\alpha \vec{u}) - \operatorname{div} \left[\rho_\alpha D_\alpha \left(\nabla c_\alpha + \frac{k_{T\alpha}}{T} \nabla T + \frac{k_{p\alpha}}{p} \nabla p \right) \right] = M_\alpha w_\beta, \quad (1.3)$$

где $\rho_\alpha \left[\frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \right]$ – парциальная массовая плотность компонента α ;

$u \left[\frac{\text{м}}{\text{с}} \right]$ – скорость потока;

$D_\alpha \left[\frac{\text{м}^2}{\text{с}} \right]$ – коэффициент диффузии компонента α , определяющий диффузионный поток при наличии одного только градиента концентрации;

$c_\alpha \left[\frac{\text{моль}}{\text{м}^3} \right]$ – концентрация компонента α ;

$k_{T\alpha}$ – термодиффузионное отношение компонента α ;

$k_{p\alpha}$ – бародиффузионное отношение компонента α ;

$M_\alpha \left[\frac{\text{кг}}{\text{моль}} \right]$ – молярная масса компонента α ;

$w_\beta \left[\frac{\text{моль}}{\text{м}^3 \cdot \text{с}} \right]$ – скорость β -й реакции.

Для вычисления w_β воспользуемся формулой:

$$w_\beta = k_\beta \prod_{\alpha} c_\alpha^{v_{\alpha\beta}}, \quad (1.4)$$

где $k_\beta \left[\frac{1}{\text{с}} \cdot \left(\frac{\text{моль}}{\text{м}^3} \right)^{1-n} \right]$ – константа скорости β -й реакции;

n – порядок реакции;

$v_{\alpha\beta}$ – стехиометрический коэффициент при α -м компоненте в уравнении β -й реакции.

Стехиометрические коэффициенты записываются с отрицательными знаками для реагентов и с положительными – для продуктов реакции.

Константы скорости можно найти с помощью уравнения Аррениуса с учетом температурного коэффициента:

$$k_{\beta} = T^{m_{\beta}} A_{\beta} \exp\left(-\frac{E_{a\beta}}{RT}\right) \quad (1.5)$$

где m_{β} – показатель степени температурного коэффициента;

A_{β} – предэкспоненциальный множитель для β -й реакции;

$E_{a\beta} \left[\frac{\text{Дж}}{\text{моль}}\right]$ – энергия активации β -й реакции.

Выразим ρ_{α} через мольные доли:

$$\rho_{\alpha} = \omega_{\alpha} \rho = \frac{M_{\alpha} x_{\alpha} n}{m} \rho = M_{\alpha} x_{\alpha} c \quad (1.6)$$

где ω_{α} – массовая доля компонента α ;

x_{α} – мольная доля компонента α .

Подставив формулу (1.6) в (1.2) получим:

$$\frac{\partial(M_{\alpha} x_{\alpha} c)}{\partial t} + \text{div}(M_{\alpha} x_{\alpha} c \vec{u}) - \text{div}\left[\rho_{\alpha} D_{\alpha} \left(\nabla c_{\alpha} + \frac{k_{T\alpha}}{T} \nabla T + \frac{k_{p\alpha}}{p} \nabla p\right)\right] = M_{\alpha} w_{\beta} \quad (1.7)$$

1.1.3 Закон сохранения импульса

Для вывода закона сохранения импульса воспользуемся уравнением Эйлера

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \nabla) \vec{u} = f - \frac{1}{\rho} \text{grad} p, \quad (1.8)$$

где $f \left[\frac{\text{кг} \cdot \text{м}}{\text{с}^2}\right]$ – массовые силы.

Закон сохранения импульса вязкой жидкости можно получить путем добавления выражения $\frac{\partial \sigma'_{ik}}{\partial x_k}$ к правой стороне уравнения Эйлера:

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma'_{ik}}{\partial x_k},$$

где σ'_{ik} – «вязкий» тензор.

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k}\right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_k} \left\{ \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial u_l}{\partial x_l}\right) \right\} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\zeta \frac{\partial u_l}{\partial x_l}\right)$$

где η [Па · с] – динамическая вязкость;

ζ [Па · с] – объемная вязкость.

Тогда закон сохранения импульса вязкой жидкости в векторной форме будет иметь вид:

$$\rho \left[\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \nabla) \vec{u} \right] = -\text{grad} p + \nabla \left[\eta \left(\nabla \vec{u} + \text{grad} \vec{u} - \frac{2}{3} \text{grad}(\text{div} \vec{u}) \right) \right] + \text{grad}(\zeta \text{div} \vec{u}) \quad (1.9)$$

1.1.4 Закон сохранения энергии

Выберем неподвижный элемент объёма и определим, как со временем меняется энергия жидкости в этом объёме.

Энергия единицы объёма жидкости: $\rho \frac{u^2}{2} + \rho \varepsilon$, где ε – внутренняя энергия.

Вычислим изменение этой энергии:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \frac{u^2}{2} + \rho \varepsilon \right) = \frac{u^2}{2} \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial t}.$$

Используя уравнение непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\text{div}(\rho \vec{u}),$$

уравнение Навье-Стокса

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \nabla) \vec{u} = -\frac{1}{\rho} \text{grad} p + \frac{\eta}{\rho} \Delta \vec{u},$$

уравнение непрерывности для одного из веществ в смеси

$$\rho_\alpha \left(\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} + \vec{u} \nabla c_\alpha \right) = \text{div} \left\{ \rho_\alpha D_\alpha \left(\nabla c_\alpha + \frac{k_{T\alpha}}{T} \nabla T + \frac{k_{p\alpha}}{p} \nabla p \right) \right\}$$

и термодинамические соотношения

$$d\varepsilon = T ds + \frac{p}{\rho^2} d\rho + \mu dc,$$

$$dw = T ds + \frac{1}{\rho} d\rho + \mu dc, \quad \text{получим:}$$

$$\begin{aligned} \rho T \left(\frac{\partial s}{\partial t} + \vec{u} \nabla s \right) &= \frac{1}{2} \eta \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right)^2 + \zeta (\text{div} \vec{u})^2 - \\ &- \text{div} \left[\left(k_T \left(\frac{\partial \mu}{\partial c} \right) - T \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \right) \left(-\rho D \left(\nabla c + \frac{k_T}{T} \nabla T + \frac{k_p}{p} \nabla p \right) \right) - \chi \nabla T \right] - \\ &- \left(-\rho D \left(\nabla c + \frac{k_T}{T} \nabla T + \frac{k_p}{p} \nabla p \right) \right) \left(\left(\frac{\partial \mu}{\partial c} \right) \nabla c + \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right) \nabla T + \left(\frac{\partial \mu}{\partial p} \right) \nabla p \right), \end{aligned} \quad (1.10)$$

где μ – химический потенциал смеси;

χ – коэффициент температуропроводности;

D – коэффициент диффузии смеси;

k_T, k_p – термодиффузионные и бародиффузионные отношения смеси.

Подробный вывод вышеприведенных законов сохранения можно найти в книге [13].

1.2 Формулы для коэффициентов переноса

Ниже будут представлены формулы для коэффициентов переноса, взятые из книги [14].

1.2.1 Коэффициент вязкости

Формула для коэффициента вязкости чистого газа:

$$\eta_k = \frac{5}{16} \left(\frac{\sqrt{\pi m k T}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)*}} \right),$$

где k – постоянная Больцмана;

σ – диаметр столкновения;

$\Omega^{(l,s)*}$ – приведенный интеграл (см. Приложение 1).

Формула для коэффициента вязкости бинарных смесей:

$$\eta_{jk} = \frac{5}{16} \left(\frac{\sqrt{\frac{2\pi m_j m_k k T}{(m_j + m_k)}}}{\pi \sigma_{jk}^2 \Omega_{jk}^{(2,2)*} T_{jk}^*} \right),$$

где $T_{jk}^* = \frac{kT}{\varepsilon_{jk}}$ – приведенная температура.

Формула для коэффициента вязкости многокомпонентных смесей

$$\eta = \sum_{i=1}^v \frac{x_i^2}{\frac{x_i^2}{\eta_k} + 1,385 \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^v x_i x_k \frac{RT}{p M_i D_{ik}}}, \quad (1.11)$$

где 1,385 – эмпирическая величина, позволяющая получить значения вязкости, хорошо совпадающие с действительными значениями;

D_{ik} – коэффициент диффузии бинарной смеси.

1.2.2 Коэффициент диффузии

Соотношение для бинарного коэффициента диффузии:

$$D_{jk} = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{\frac{2\pi k^3 T^3}{\mu_{jk}}}}{P \pi \sigma_{jk}^2 \Omega_{jk}^{(1,1)*}},$$

где $\mu_{jk} = \frac{m_j m_k}{m_j + m_k}$ – приведенная масса сталкивающихся молекул i и j .

Коэффициенты диффузии многокомпонентных смесей могут быть найдены по формуле:

$$D = \frac{1}{M_j} \left(\sum_k x_k M_k \right) \frac{k^{ji} - k^{ii}}{|k|}, \quad (1.12)$$

где $k_{ii} = 0$;

$$k_{ij} = \frac{x_i}{D_{ij}} + \frac{M_j}{M_i} \sum_{k \neq i} \frac{x_k}{D_{ik}}, \quad i \neq j;$$

$|k|$ – детерминант из k_{ij} ;

$$k^{ji} \text{ – миноры: } k^{ji} = \begin{vmatrix} 0 & \dots & k_{1,i-1} & k_{1,i+1} & \dots & k_{1,v} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{j-1,1} & \dots & k_{j-1,i-1} & k_{j-1,i+1} & \dots & k_{j-1,v} \\ k_{j+1,1} & \dots & k_{j+1,i-1} & k_{j+1,i+1} & \dots & k_{j+1,v} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k_{v,1} & \dots & k_{v,i-1} & k_{v,i+1} & \dots & k_{v,v} \end{vmatrix}.$$

1.2.3 Коэффициент теплопроводности

Коэффициент теплопроводности чистого газа можно найти по формуле:

$$\lambda_k = \frac{25}{32} \left(\frac{\sqrt{\pi m k T}}{\pi \sigma^2 \Omega^{(2,2)*}} \right) c_v,$$

где $c_v \left[\frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}} \right]$ – удельная теплоемкость при постоянном объеме.

Коэффициент теплопроводности бинарных смесей определяется выражением:

$$\lambda_{jk} = \frac{25}{32} \left(\frac{\sqrt{\frac{\pi k T (m_j + m_k)}{2 m_j m_k}}}{\pi \sigma_{jk}^2 \Omega_{jk}^{(2,2)*} (T_{jk}^*)} \right) \left(\frac{3}{2} k \right);$$

Коэффициент теплопроводности многокомпонентных смесей вычисляется по формуле:

$$\lambda = 4 \cdot \frac{\begin{vmatrix} L_{11}^{11} & \dots & L_{1\nu}^{11} & x_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ L_{\nu 1}^{11} & \dots & L_{\nu\nu}^{11} & x_\nu \\ x_1 & \dots & x_\nu & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} L_{11}^{11} & \dots & L_{1\nu}^{11} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{\nu 1}^{11} & \dots & L_{\nu\nu}^{11} \end{vmatrix}}, \quad (1.13)$$

где

$$L_{ii}^{11} = -\frac{4x_i^2}{\lambda_i} - \sum_{k \neq i} \frac{2x_i x_k \left[\frac{15}{2} M_i^2 + \frac{25}{4} M_k^2 - 3M_k^2 B_{ik}^* + 4M_i M_k A_{ik}^* \right]}{(M_i + M_k)^2 A_{ik}^* \lambda_{ik}};$$

$$L_{ij}^{11} = \frac{2x_i x_j M_i M_j}{(M_i + M_j)^2 A_{ij}^* \lambda_{ij}} \left[\frac{55}{4} - 3B_{ij}^* - 4A_{ij}^* \right], i \neq j;$$

A_{ik}^*, B_{ik}^* – функции от T_{ik}^* , определенные формулами

$$A^* = \frac{\Omega^{(2,2)*}}{\Omega^{(1,1)*}}, B^* = \frac{5\Omega^{(1,2)*} - 4\Omega^{(1,3)*}}{\Omega^{(1,1)*}}.$$

1.2.4 Коэффициент термодиффузии

Выражение для коэффициента термодиффузии для многокомпонентных смесей записывается в виде:

$$D_k^T = -\frac{8M_k}{5R} \cdot \frac{\begin{vmatrix} L_{11}^{00} & \dots & L_{1\nu}^{00} & L_{11}^{01} & \dots & L_{1\nu}^{01} & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ L_{\nu 1}^{00} & \dots & L_{\nu\nu}^{00} & L_{\nu 1}^{01} & \dots & L_{\nu\nu}^{01} & 0 \\ L_{11}^{10} & \dots & L_{1\nu}^{11} & L_{11}^{11} & \dots & L_{1\nu}^{11} & x_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ L_{\nu 1}^{11} & \dots & L_{\nu\nu}^{11} & L_{\nu 1}^{11} & \dots & L_{\nu\nu}^{11} & x_\nu \\ x_1 \delta_{1k} & \dots & x_\nu \delta_{\nu k} & 0 & \dots & 0 & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} L_{11}^{00} & \dots & L_{1\nu}^{00} & L_{11}^{01} & \dots & L_{1\nu}^{01} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{\nu 1}^{00} & \dots & L_{\nu\nu}^{00} & L_{\nu 1}^{01} & \dots & L_{\nu\nu}^{01} \\ L_{11}^{10} & \dots & L_{1\nu}^{11} & L_{11}^{11} & \dots & L_{1\nu}^{11} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{\nu 1}^{11} & \dots & L_{\nu\nu}^{11} & L_{\nu 1}^{11} & \dots & L_{\nu\nu}^{11} \end{vmatrix}}, \quad (1.14)$$

где $L_{ii}^{00} = 0$;

$$L_{ij}^{00} = \frac{16T}{25p} \left[\frac{x_i x_j}{\mathcal{D}_{ij}} + \sum_{k \neq i} \frac{x_j x_k M_j}{M_i \mathcal{D}_{ik}} \right], i \neq j;$$

$$L_{ii}^{01} = \frac{8T}{5p} \sum_{k \neq i} \frac{x_i x_k M_k \left(\frac{6}{5} C_{ik}^* - 1 \right)}{(M_i + M_k) \mathcal{D}_{ik}};$$

$$L_{ij}^{01} = -\frac{8T}{5p} x_i x_j \frac{M_i \left(\frac{6}{5} C_{ij}^* - 1 \right)}{(M_i + M_j) \mathcal{D}_{ij}}, i \neq j;$$

$$L_{ij}^{10} = \frac{M_j}{M_i} L_{ij}^{01};$$

$$L_{ii}^{11} = -\frac{4x_i^2}{\lambda_i} - \frac{16T}{25p} \sum_{k \neq i} \frac{x_i x_k \left(\frac{15}{2} M_i^2 + \frac{25}{4} M_k^2 - 3M_k^2 B_{ik}^* + 4M_i M_k A_{ik}^* \right)}{(M_i + M_k)^2 \mathcal{D}_{ik}};$$

$$L_{ij}^{11} = \frac{16T}{5p} \frac{x_i x_j M_i M_j}{(M_i + M_j)^2 \mathcal{D}_{ij}} \left[\frac{55}{4} - 3B_{ij}^* - 4A_{ij}^* \right], i \neq j.$$

1.3 Выводы по разделу

В данной главе были рассмотрены уравнение состояния идеального газа, законы сохранения массы, импульса и энергии и формулы для коэффициентов переноса. Эти уравнения необходимы для построения модели трехмерного ламинарного пламени.

2 Модели горения газа, реализованные в программных пакетах Cantera и OpenFOAM

2.1 Уравнения, используемые для моделирования горения в Cantera и OpenFOAM

Cantera – это объектно-ориентированный программный комплекс, созданный для моделирования задач с химической кинетикой, термодинамикой и процессами переноса. С помощью Cantera можно определить состояние вещества, границу раздела между этими состояниями, можно редактировать кинетические механизмы, создавать систему реакторов с временной зависимостью и моделировать одномерные устойчивые реагирующие потоки. В настоящее время Cantera используется для моделирования процессов горения, детонации, топливных элементов, батарей, водных растворов электролитов, плазм и смещения тонкой пленки. Данную библиотеку можно использовать в программах, написанных на языках C++, Python, Matlab и Fortran.

OpenFOAM – библиотека на C++, используемая для создания двух типов приложений:

- 1) решателей, которые разработаны для решения задач механики сплошных сред;
- 2) утилит, предназначенных для обработки данных.

С помощью OpenFOAM можно создавать более сложные модели, чем с библиотекой Cantera, но он разработан для операционных систем Linux и UNIX и требует больших вычислительных ресурсов.

Составим таблицу с уравнениями, используемыми для моделирования процессов горения в библиотеках Cantera и OpenFOAM.

Таблица 1

Cantera	OpenFOAM
Уравнение для расчета теплоемкости	
$c_p(T) = R \left(\frac{a_1}{T^2} + \frac{a_2}{T} + a_3 + a_4 T + a_5 T^2 + a_6 T^3 + a_7 T^4 \right)$	
Теплоемкость задается как полиномиальная функция от температуры через коэффициенты JANAF.	
Уравнение для расчета коэффициента теплопроводности	
Коэффициент теплопроводности для газа вычисляется с учётом влияния поступательных, вращательных и колебательных степеней свободы. Для удобства коэффициенты, относящиеся к поступательным степеням, будем обозначать индексами – trans, к вращательным – rot, к колебательным – vib.	Коэффициент теплопроводности вычисляется по формуле: $\lambda_k = \eta_k \frac{c_v}{c_p} \left(1,32 + 1,77 \frac{\hat{R}}{c_v} \right),$ где $\hat{R} = c_p - c_v = \frac{R}{M}$.

<p> $\lambda_k = \frac{\eta_k}{M_k} (f_{trans} C_{v,trans} + f_{rot} C_{v,rot} + f_{vib} C_{v,vib}),$ </p> <p> где $f_{trans} = \frac{5}{2} \left(1 - \frac{2}{\pi} \frac{C_{v,rot}}{C_{v,trans}} \frac{A}{B} \right);$ </p> <p> $f_{rot} = \frac{\rho D_{kk}}{\eta_k} \left(1 + \frac{2}{\pi} \frac{A}{B} \right);$ </p> <p> $f_{vib} = \frac{\rho D_{kk}}{\eta_k};$ </p> <p> $A = \frac{5}{2} - \frac{\rho D_{kk}}{\eta_k};$ </p> <p> $B = Z_{rot} + \frac{2}{\pi} \left(\frac{5}{3} \frac{C_{v,rot}}{R} + \frac{\rho D_{kk}}{\eta_k} \right);$ </p> <p> $D_{kk} = \frac{3}{8} \frac{\sqrt{\pi k^3 T^3}}{p \pi \sigma_k^2 \Omega^{(1,1)*}};$ </p> <p> Параметр Z_{rot} (количество столкновений, которые деактивируют возмущенную молекулу с вращательной степенью свободы) будет влиять на вычисления, если молекулы будут иметь очень маленький момент инерции. </p> <p> $Z_{rot}(T) = Z_{rot}(298) \frac{F(298)}{F(T)},$ где </p> <p> $F(T) = 1 + \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right)^{\frac{1}{2}} + \left(\frac{\pi^2}{4} + 2 \right) \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right) + \pi^2 \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right)^{\frac{3}{2}};$ </p> <p> ε – молекулярная энергия; </p> <p> $C_{v,trans} = \frac{3}{2} Nk,$ где N – количество молекул; </p> <p> $C_{v,vib} = \frac{Nk x_i^2 e^{x_i}}{(e^{x_i} - 1)^2};$ </p> <p> для линейных молекул: $C_{v,rot} = Nk;$ </p> <p> для нелинейных молекул: $C_{v,rot} = \frac{3}{2} Nk.$ </p> <p> В случае одноатомных газов вращательные и колебательные степени свободы отсутствуют, поэтому формула приобретает вид: </p> <p style="text-align: center;"> $\lambda_k = \frac{5}{2} \eta_k \frac{C_{v,trans}}{M_k}.$ </p>	
---	--

Уравнение для расчета динамического коэффициента вязкости	
$\eta_k = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m_k k T}}{\pi \sigma_k^2 \Omega^{(2,2)*}(T_k^*)}$	<p>Динамический коэффициент вязкости вычисляется по формуле Сазерленда:</p> $\eta_k = \frac{A_s \sqrt{T}}{1 + T_s/T'}$ <p>где $A_s = 1,67212 \cdot 10^{-6}$; $T_s = 170,672$.</p>
Уравнения для расчета коэффициентов бинарной диффузии	
$D_{jk} = \frac{3}{16} \sqrt{\frac{2\pi k^3 T^3 (m_j + m_k)}{m_j m_k}} \frac{1}{p \pi \sigma_{jk}^2 \Omega^{(1,1)*}}$ <p>где $\sigma_{jk} = \frac{1}{2}(\sigma_j + \sigma_k)$.</p>	<p>Коэффициент бинарной диффузии можно рассчитать по следующим формулам:</p> <p>1. Модель Чапмана-Энскога:</p> $D_{jk} = 10,1325 \frac{0,001858 \cdot T M_{jk}^{-0,5}}{p \sigma_{jk}^2 \Omega_D}$ <p>где $M_{jk} = \left(\frac{1}{M_j} + \frac{1}{M_k}\right)^{-1}$;</p> $\Omega_D = \frac{1,06036}{T_N^{0,15610}} + \frac{0,19300}{e^{0,47635T_N}} + \frac{1,03587}{e^{1,52996T_N}} + \frac{1,76474}{e^{3,89411T_N}}$ <p>где $T_N = \frac{T}{E_{jk}}$, $E_{jk} = \frac{\sqrt{\varepsilon_j \varepsilon_k}}{k}$, ε_j – характеристическая энергия Леннарда-Джонса.</p> <p>2. Модель Вилке-Ли (Wilke-Lee):</p> $D_{jk} = \frac{10,1325}{p \sigma_{jk}^2 \Omega_D} \times (0,0027 - 0,0005 M_{jk}^{-0,5}) T^{1,5} M_{jk}^{-0,5}$ <p>3. Модель Фуллера (Fuller-Schettler-Giddings):</p> $D_{jk} = 10,1325 \frac{0,001 \cdot T^{1,75} M_{jk}^{-0,5}}{p [(\sum v_j)^{1/3} + (\sum v_k)^{1/3}]^2}$ <p>где v_j, v_k – диффузионные объёмы.</p> <p>4. Модель Кнудсена (для пористых тел)</p> $D_{jk} = \frac{d_p}{3} \sqrt{\frac{8RT}{\pi M_j}}$ <p>где d_p [м] – диаметр пор.</p>
Уравнение сохранения массы -й компоненты	
$\rho u \frac{\partial y_\alpha}{\partial z} = -\frac{\partial j_\alpha}{\partial z} + w_\beta M_\alpha = 0,$ <p>где y_α – массовая доля компонента α. w_β – скорость -й реакции.</p>	$\frac{\partial(\rho y_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho y_\alpha \vec{v}) + \nabla \cdot \vec{J}_\alpha = S_{y_\alpha}$ <p>где \vec{v} – скорость потока; S_{y_α} – значение стоков и источников компонента α.</p>

<p>Для вычисления массового диффузионного потока j_α используются следующие модели:</p> <p>1. Модель усреднения по смеси (Mix):</p> $j_\alpha = j_\alpha^* - Y_\alpha \sum_i j_i^*, j_k^* = \rho \frac{M_k}{M} \mathcal{D}_{km} \frac{\partial x_k}{\partial z}.$ <p>2. Многокомпонентная модель (Multi):</p> $j_\alpha = \rho \frac{M_\alpha}{M^2} \sum_i M_i \mathcal{D}_{\alpha i} \frac{\partial x_i}{\partial z} - \frac{D_\alpha^T}{T} \frac{\partial T}{\partial z}.$	
<p>Уравнение состояния</p>	
<p>Уравнение состояния идеального газа:</p> $\rho = \frac{P\bar{M}}{RT}.$	
<p>Уравнение сохранения энергии</p>	
$\rho c_p u \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \sum_k j_k c_{p,k} \frac{\partial T}{\partial z} - \sum_k h_k M_k w_L,$ <p>где h_k – энтальпия компонента k; c_p – теплоемкость при постоянном давлении; λ – коэффициент теплопроводности.</p>	$\frac{\partial(\rho h_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho h_k \vec{v}) - \nabla \cdot (\lambda \nabla h_k) + \nabla \cdot \left[\lambda \sum_{\alpha=1}^N (h_{k\alpha} \nabla y_\alpha) \right] + \nabla \cdot \left[\sum_{\alpha=1}^N (\vec{J}_\alpha h_{k\alpha}) \right] = S,$ <p>где S – внешние источники энтальпии.</p>
<p>Уравнение сохранения импульса</p>	
$\rho u \frac{\partial V}{\partial z} + \rho V^2 = -\Lambda + \frac{\partial}{\partial z} \left(\eta \frac{\partial V}{\partial z} \right),$ <p>где Λ – собственные значения давления.</p>	$\frac{\partial(\rho \vec{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) - \nabla \cdot \vec{\tau} = -\nabla p,$ <p>где $\vec{\tau}$ – тензор напряжений, который находится по формуле:</p> $\vec{\tau} = \eta_{eff} \left[(\nabla U + \nabla U^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot U I \right],$ <p>где $\eta_{eff} = \eta_k + \eta_t$; η_k – динамическая вязкость, определяемая по формуле Сазерленда; η_t – вихревая динамическая вязкость, определяемая моделью турбулентности.</p>
<p>Уравнение неразрывности</p>	
$\frac{\partial \rho u}{\partial z} + 2\rho V = 0,$ <p>где $V = \frac{v}{r}$ – нормированная радиальная скорость.</p>	$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho U) = S_m,$ <p>где U – вектор скорости; S_m – источник массы.</p>
<p>Уравнение для расчёта энтальпии</p>	
$h(T) = R \left(-\frac{a_1}{T} + a_2 \ln(T) + a_3 T + \frac{a_4 T^2}{2} + \frac{a_5 T^3}{3} + \frac{a_6 T^4}{4} + \frac{a_7 T^5}{5} + b_1 \right),$ <p>где a_1, \dots, a_7, b_1 – коэффициенты полинома.</p>	

Уравнения для расчёта коэффициентов диффузии, вязкости и теплопроводности для многокомпонентной смеси	
<p>1. Модель усреднения по смеси (Mix):</p> $\eta = \sum_{k=1}^K \frac{x_k \eta_k}{\sum_{j=k}^K x_j \Phi_{kj}}$ $\Phi_{kj} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_k}{M_j}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 + \left(\frac{\eta_k}{\eta_j}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_j}{M_k}\right)^{\frac{1}{4}}\right)^2$ $\lambda = \frac{1}{2} \left(\sum_{k=1}^K x_k \lambda_k + \frac{1}{\sum_{k=1}^K \frac{x_k}{\lambda_k}} \right)$ $D_{km} = \frac{1 - \omega_k}{\sum_{j \neq k}^K \frac{x_j}{D_{kj}}}$ <p>2. Многокомпонентная модель (Multi): Согласно этой модели кинетические свойства смеси газов вычисляются в ходе решения системы уравнений, определенных матрицей. Удобно обратиться к матрице в терминах ее девяти блоков субматриц, и в этой форме система имеет вид:</p> $\begin{pmatrix} L^{00,00} & L^{00,10} & 0 \\ L^{10,00} & L^{10,10} & L^{10,01} \\ 0 & L^{01,10} & L^{01,01} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{00}^1 \\ a_{10}^1 \\ a_{01}^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ X \\ X \end{pmatrix}$ <p>где $\begin{pmatrix} 0 \\ X \\ X \end{pmatrix}$ – вектор, составленный из молярных долей;</p> $L_{jk}^{00,00} = \frac{16T}{25P} \sum_{l=1}^K \frac{x_l}{m_j D_{jl}} (m_k x_k (1 - \delta_{jl}) - m_j x_j (\delta_{jk} - \delta_{kl}));$ $L_{jk}^{00,10} = \frac{8T}{5P} \sum_{l=1}^K x_k x_l (\delta_{jk} - \delta_{jl}) \times \left(\frac{m_l (1,2C_{kl}^* - 1)}{(m_k + m_l) D_{kl}} \right);$ $L_{jk}^{10,00} = L_{kj}^{00,10};$ $L_{jk}^{01,00} = L_{kj}^{00,01} = 0;$ $L_{jk}^{10,10} = \frac{16T}{25P} \sum_{l=1}^K \frac{m}{m_k} \frac{x_j^2 x_l}{(m_j + m_l)^2 D_{jl}} \times \left((\delta_{kl} - \delta_{jk}) \left(\frac{15}{2} m_k^2 + \frac{25}{4} m_l^2 - 3m_l^2 B_{jl}^* \right) - \right.$	<p>Массовый диффузионный поток многокомпонентной смеси рассчитывается по формулам:</p> <p>1. Модель Фика:</p> $\vec{J}_\alpha = -\rho D_{\alpha m} \nabla y_\alpha,$ <p>где $D_{\alpha m} = \frac{1-x_\alpha}{\sum_{\beta \neq \alpha} \frac{x_\beta}{D_{\alpha\beta}}}$.</p> <p>2. Модель Фика для сильно разбавленной смеси:</p> $\vec{J}_\alpha = -\rho D_{\alpha m} \nabla y_\alpha,$ <p>где $D_{\alpha m}$ – коэффициент бинарной диффузии компонента α и основного компонента m.</p> <p>3. Модель, основанная на числе Шмидта (число Шмидта – безразмерное число, показывающее соотношение вязкости и диффузии вещества):</p> $\vec{J}_\alpha = -\rho D_{\alpha m} \nabla y_\alpha,$ $\rho D_{\alpha m} = \frac{\eta}{Sc_\alpha},$ <p>где Sc_α – число Шмидта для компонента α (постоянное для всех компонентов).</p> <p>4. Модель, основанная на числе Льюиса (число Льюиса характеризует соотношение между интенсивностями переноса массы компонента диффузией и теплопроводностью):</p> $\vec{J}_\alpha = -\rho D_{\alpha m} \nabla y_\alpha,$ $\rho D_{\alpha m} = \frac{\alpha}{Le_\alpha},$ <p>где α – коэффициент температуропроводности; Le_α – число Льюиса (постоянное для всех компонентов). При $Le_\alpha = 1$ уравнения диффузии и теплопроводности становятся идентичными, и профили концентраций компонентов и температуры оказываются подобными.</p> <p>5. Модель Стефана-Максвелла:</p> $\vec{J}_\alpha = - \sum_{\beta=1}^{N-1} \rho D_{\alpha\beta} \nabla y_\beta,$ <p>где $D_{\alpha\beta} = [D] = [A]^{-1} [B]$;</p> $A_{\alpha\alpha} = - \left(\frac{x_\alpha}{D_{\alpha N}} \frac{1}{M_N} + \sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^N \frac{x_\beta}{D_{\alpha\beta}} \frac{1}{M_\alpha} \right);$

$-4m_k m_l A_{jl}^* (\delta_{kl} + \delta_{jk}) \left(1 + \frac{5}{3\pi} \left(\frac{c_{j,rot}}{R\xi_{jl}} + \frac{c_{l,rot}}{R\xi_{lj}} \right) \right);$ $L_{jj}^{10,10} = -\frac{16m_j x_j^2}{R\eta_j} \left(1 + \frac{10c_{j,rot}}{R\xi_{jj}} \right) -$ $-\frac{16T}{25p} \sum_{l \neq j}^K \frac{x_j x_l}{(m_j + m_l)^2 \mathcal{D}_{jl}} \left[\frac{15}{2} m_j^2 + \frac{25}{4} m_l^2 - \right.$ $-3m_l^2 B_{jl}^* + 4m_j m_l A_{jl}^* \left. \right] \times$ $\times \left(1 + \frac{5}{3\pi} \left(\frac{c_{j,rot}}{R\xi_{jl}} + \frac{c_{l,rot}}{R\xi_{lj}} \right) \right);$ $L_{jk}^{10,01} = \frac{32T}{5\pi p c_{k,int}} \sum_{l=1}^K \frac{m_k A_{kl}^*}{(m_k + m_l) \mathcal{D}_{kl}} \times$ $\times (\delta_{jl} + \delta_{jk}) x_k x_l \frac{c_{k,rot}}{R\xi_{kl}};$ $L_{jj}^{10,01} = \frac{16}{3\pi} \frac{m_j x_j^2}{\eta_j c_{j,int}} \frac{c_{j,int}}{R\xi_{jj}} +$ $+ \frac{32TR}{5\pi p c_{j,int}} \sum_{l \neq j}^K \frac{m_j A_{jl}^*}{(m_j + m_l) \mathcal{D}_{jl}} x_j x_l \frac{c_{j,rot}}{R\xi_{jl}};$ $L_{jk}^{01,10} = L_{kj}^{10,01};$ $L_{jj}^{01,01} = -\frac{8R^2}{\pi C_{j,int}^2} \frac{m_j x_j^2}{R\eta_j} \frac{c_{j,rot}}{R\xi_{jj}} - \frac{4RT}{c_{j,int} p} \times$ $\times \left(\sum_{l=1}^K \frac{x_j x_l}{[\mathcal{D}_{j,int,l}]} + \sum_{l \neq j}^K \frac{12x_j x_l}{5\pi c_{j,int}} \frac{m_j A_{jl}^*}{m_l \mathcal{D}_{jl}} \frac{c_{j,rot}}{R\xi_{jj}} \right);$ $L_{jk}^{01,01} = 0 (j \neq k),$ $A_{ij}^* = \frac{1}{2} \frac{\Omega_{ij}^{(2,2)}}{\Omega_{ij}^{(1,1)}};$ $B_{ij}^* = \frac{1}{3} \frac{(5\Omega_{ij}^{(1,2)} - \Omega_{ij}^{(1,3)})}{\Omega_{ij}^{(1,1)}};$ $C_{ij}^* = \frac{1}{3} \frac{\Omega_{ij}^{(1,2)}}{\Omega_{ij}^{(1,1)}};$ $c_{k,int} = c_p - \frac{3}{2} RT;$ <p>для линейных молекул: $c_{k,rot} = Nk$, где N – количество молекул;</p>	$A_{\alpha\beta} = -x_\alpha \left(\frac{1}{D_{\alpha\beta}} \frac{1}{M_\beta} + \frac{1}{D_{\alpha N}} \frac{1}{M_N} \right);$ $B_{\alpha\alpha} = -\left(x_\alpha \frac{1}{M_N} + (1 - x_\alpha) \frac{1}{M_\alpha} \right);$ $B_{\alpha\beta} = x_\alpha \left(\frac{1}{M_\beta} - \frac{1}{M_N} \right).$ <p>6. Модель Босанкета (Bosanquet's):</p> $\vec{J}_\alpha = -\rho D_\alpha^{eff} \nabla y_\alpha,$ $\frac{1}{D_{\alpha m}^{eff}} = \frac{1}{D_{\alpha m}^{eff}} + \frac{1}{D_{K\alpha}^{eff}},$ <p>где $D_{\alpha m} = \frac{1-x_\alpha}{\sum_{\beta \neq \alpha} \left(\frac{x_\beta}{D_{\alpha\beta}} \right)}$.</p>
--	---

<p>для нелинейных молекул: $c_{k,rot} = \frac{3}{2}Nk$;</p> $\xi_{jj} = \xi_{ij} = 1 + \frac{1}{4} \alpha_n^* \mu_p^* \sqrt{\frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_n}};$ <p>$\alpha_n^* = \frac{\alpha_n}{\sigma_n^3}$, где α_n – коэффициент поляризованности для неполярной молекулы;</p> <p>$\mu_p^* = \frac{\mu_p^2}{\sqrt{8\varepsilon_p\sigma_p^3}}$, где μ_p – дипольный момент полярных молекул.</p> <p>Для неполярных газов коэффициенты диффузии $D_{j,int,l}$ аппроксимируются обычными коэффициентами диффузии. Однако, в случае столкновений между полярными молекулами, требуется следующая поправка:</p> $D_{p,int,p} = \frac{D_{pp}}{1 + \delta'_{pp}},$ <p>где $\delta'_{pp} = \frac{2985}{\sqrt{T^3}}$.</p> <p>Многокомпонентные коэффициенты диффузии задаются через инверсии блока $L^{00,00}$ следующим образом:</p> $D_{jk} = x_j \frac{16}{25} \frac{T}{pm_k} \bar{M} (P_{jk} - P_{jj}),$ <p>где $(P) = (L^{(00,00)})^{-1}$.</p> <p>Коэффициенты теплопроводности и термодиффузии определяются по формулам:</p> $\lambda_{0,trans} = -4 \sum_{k=1}^K x_k a_{k10}^1,$ $\lambda_{0,int} = -4 \sum_{k=1}^K x_k a_{k01}^1,$ $\lambda_0 = \lambda_{0,trans} + \lambda_{0,int},$ $D_k^T = \frac{8m_k x_k}{5R} a_{k00}^1.$	
--	--

2.2 Сравнительный анализ моделей, реализованных в Cantera и OpenFOAM

Для разработки методики расчёта скорости распространения пламени в водородно-воздушной среде необходимо выбрать один из программных комплексов.

Для проведения анализа будем использовать данные из статьи [5], в которой эксперименты проводились в стальной цилиндрической камере путём поджигания водородно-воздушных смесей различной концентрации от искрового разряда.

Постановка задачи для OpenFOAM

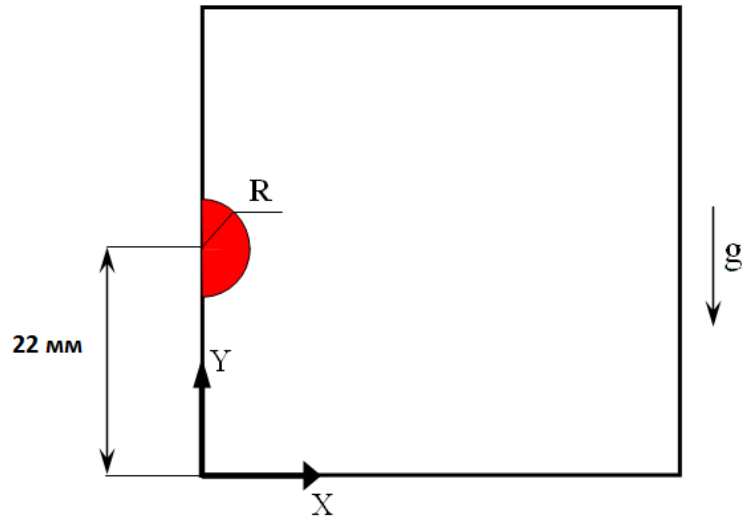


Рис. 2.1. Геометрия задачи.

В начальный момент времени расчетная область заполнена смесью из веществ H_2, O_2, N_2 . Начальная температура и давление равны соответственно $T = 293,15\text{ K}$ и $p = 101325\text{ Па}$. Внешние границы – жесткие гладкие стенки с постоянной температурой $293,15\text{ K}$. Уравнение состояния смеси – идеальный газ. Расчетная область представляет собой прямоугольник размером 35 мм вдоль оси X и 44 мм вдоль оси Y (см. рис. 2.1). Вдоль оси Y задана цилиндрическая симметрия. Ускорение свободного падения $g = 9,806\frac{\text{М}}{\text{с}^2}$ направлено против оси Y . Для инициирования горения на оси симметрии на высоте 22 мм от основания задается горячая область в виде полукруга радиусом 1 мм с температурой 1300 K .

Постановка задачи для Cantera

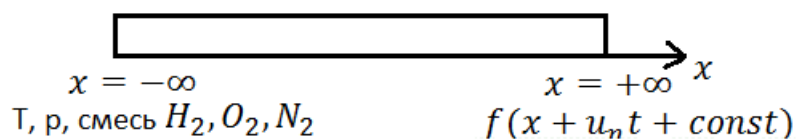


Рис. 2.2. Геометрия задачи.

Рассматривается плоский фронт ламинарного пламени, распространяющегося в бесконечной (очень длинной) трубе, заполненной горючей газовой смесью. При $x = -\infty$ задаются исходные условия – $T = 293,15\text{ K}$, $p = 101325\text{ Па}$ и начальный состав смеси H_2, O_2, N_2 , а при $x = +\infty$ – термодинамическое равновесие продуктов горения. Эти условия не включают в себя времени и не зависят от координаты. Поэтому существует не зависящее от начальных условий поджигания горючей смеси решение задачи $f(x + u_n t + const)$, описывающее волну горения, распространяющееся с постоянной скоростью u_n относительно

неподвижной исходной смеси. С течением времени форма пламени не изменяется, профили всех величин во фронте пламени остаются подобными самим себе.

Рассмотренные начальные составы смесей и экспериментальные значения скорости искривлённого пламени приведены в таблице 2.

Таблица 2

$H_2, \%$	$O_2, \%$	$N_2, \%$	$S_w, \frac{m}{c}$
17	17,4	65,6	0,881
			0,800
			0,796
24	16	60	1,520
			1,497
			1,493
29,6	14,8	55,6	2,282
			2,107
			2,066
34,4	13,7	51,9	2,754
			2,734
			2,558
38,6	12,9	48,5	2,814
			2,928
			2,857
45,6	11,4	43	2,762
			2,863
			2,811
56	9,2	34,8	2,194
			2,454
			2,230

Видимые скорости пламени, рассчитанные в программе OpenFOAM, были пересчитаны в нормальную скорость плоского пламени с помощью формулы из статьи [15].

На рис. 2.3 изображены нормальные скорости пламени, вычисленные с помощью программного комплекса Cantera и экспериментальные значения из статьи [5].

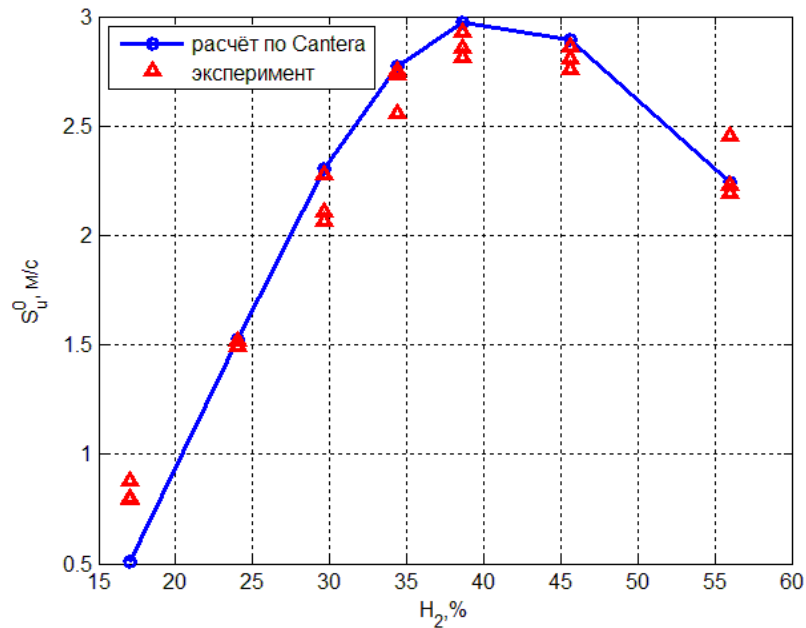


Рис. 2.3. Сравнение нормальных скоростей плоского пламени, полученных с помощью Cantera и экспериментальным путём [5].

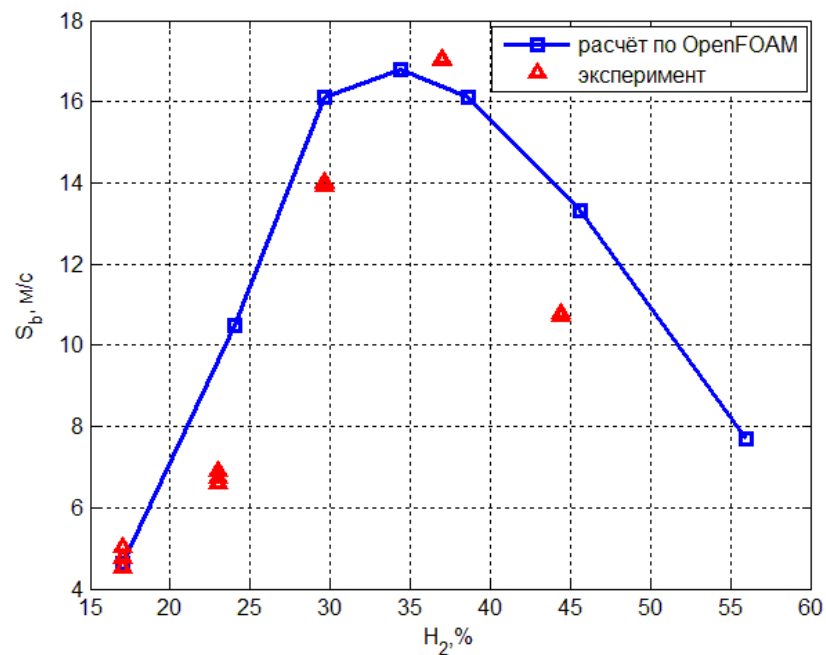


Рис. 2.4. Сравнение видимых скоростей пламени, полученных с помощью OpenFOAM и экспериментальным путём [6].

Из рис. 2.3-2.4 видно, что скорости, рассчитанные с помощью Cantera и OpenFOAM, хорошо согласуются с экспериментальными данными. Время счёта по Cantera – от 30 с до нескольких минут, а по OpenFOAM – от 20 ч до нескольких дней, в зависимости от состава смеси, начальных условий, размерности расчётной области и т.д. Поэтому для дальнейших расчётов была выбрана Cantera.

2.3 Сравнение кинетических механизмов с использованием модели, реализованной в Cantera.

2.3.1 Расчёты периодов индукции

Cantera позволяет рассчитать периоды индукции и существуют хорошие экспериментальные данные по периоду индукции, поэтому была поставлена задача тестирования кинетических механизмов [16, 17] для выбора лучшего из них и использования при дальнейших расчетах. Были получены зависимости, которые наглядно иллюстрируют области применимости и по которым можно сравнивать между собой такие механизмы.

База экспериментальных данных, приведённая в работе [18] была собрана из различных источников, но все данные были получены из экспериментов по иницированию реакции в ударной трубе. В связи с этим в каждом эксперименте варьировались как давление, так и температура. Все эксперименты разделены на серии, в рамках каждой из которых использовался один и тот же состав исходной смеси.

На рис. 2.5 приведены относительные отклонения расчётных величин периода индукции от экспериментальных значений по всем рассмотренным экспериментам в зависимости от температуры.

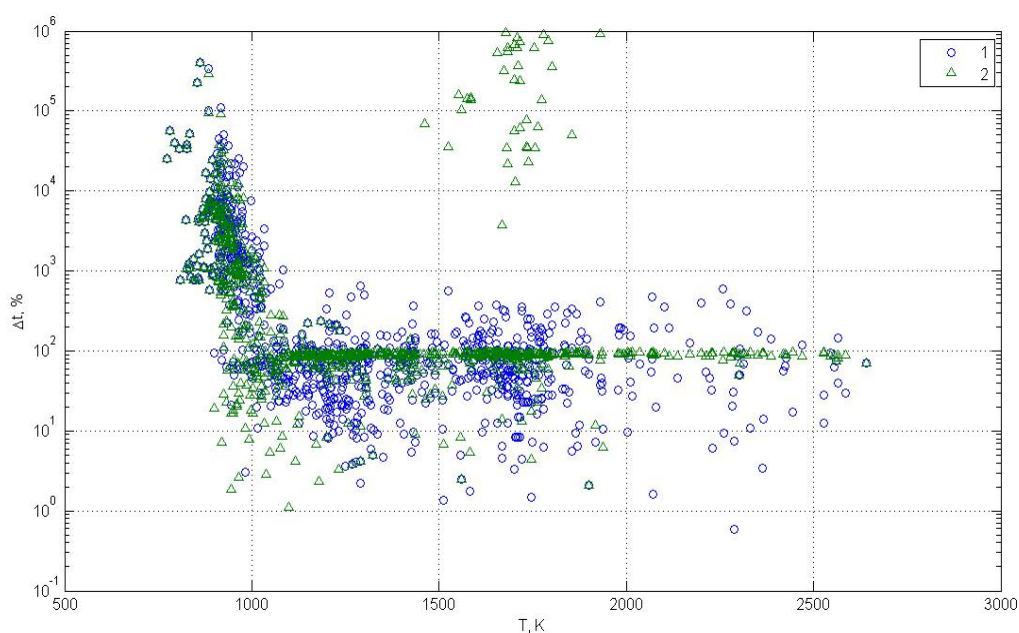


Рис. 2.5. Относительные отклонения расчётных величин периодов индукции, рассчитанных с помощью механизмов 1-[17], 2-[16] от экспериментальных значений [18] в зависимости от температуры.

В соответствии с рис. 2.5 относительное отклонение расчётных величин периода индукции от экспериментальных значений при температурах выше 1100 К: для механизма [16] преимущественно находится в интервале 1-100 %, а для

механизма [17] – от 10 % - 1000 %; при температурах ниже 1100 К: для механизма [16] – находится в интервале 10 % - 10⁴ %, для механизма [17] – от 10² % до 10⁵ %.

Такое неоднозначное поведение расчётных значений времени индукции не позволяет сделать выбор в пользу одного из рассмотренных механизмов. Кроме того, анализ результатов расчётов осложняется отсутствием достоверных данных по величине погрешности экспериментальных измерений. Поэтому были вычислены средние ошибки и время счёта периодов индукции при температурах выше 1100 К:

- 1) для механизма [16]: 84,24 % и 1838,09 с;
- 2) для механизма [17]: 84,09 % и 3513,66 с.

Поскольку средние ошибки практически одинаковы, а время счёта для механизма [16] приблизительно в 2 раза меньше, чем для механизма [17], то в дальнейших расчетах будет использован механизм [16].

2.3.2 Расчёты ламинарной скорости пламени

Ламинарная скорость горения – одна из характеристик реакционной способности горючих газовых смесей, которая определяет количество смеси, реагирующей в единицу времени на единице поверхности фронта пламени. В соответствии с классическим определением ламинарная скорость горения – это скорость по отношению к несгоревшему газу, с которой плоский одномерный фронт пламени перемещается вдоль нормали к своей поверхности.

С помощью программного комплекса Cantera были вычислены ламинарные скорости пламени водородо-воздушных смесей с использованием кинетических механизмов [16, 17].

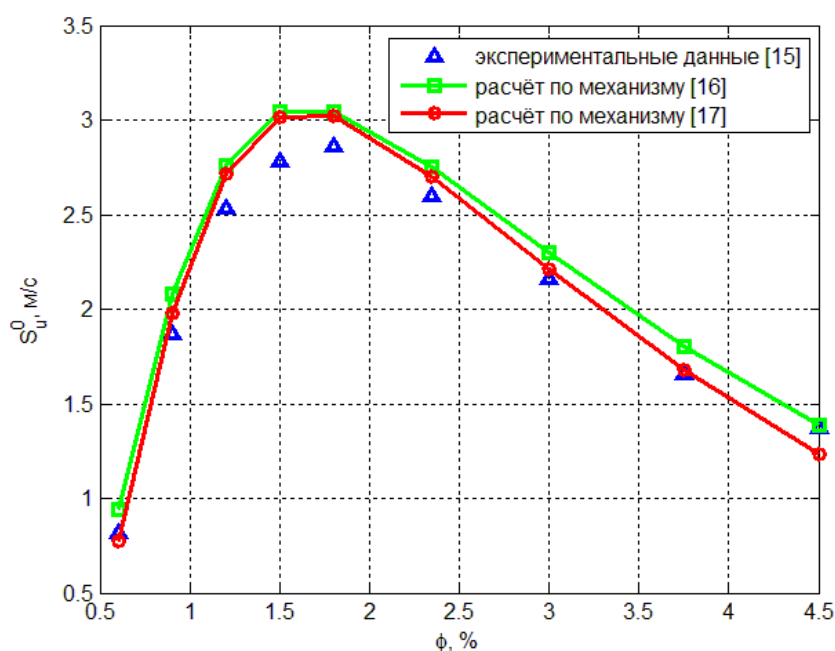


Рис. 2.6. Сравнение нормальных скоростей пламени, полученных численным моделированием с помощью различных кинетических механизмов и экспериментальным путем.

Результаты численного моделирования распространения плоского ламинарного пламени, полученные с помощью кинетических механизмов [16, 17], вполне согласуются с экспериментальными данными, полученными в сферической камере с внутренним диаметром 360 мм при температуре (298 ± 3 K) и давлении 1 атм.

2.4 Выводы по разделу

В данной главе был проведен сравнительный анализ программных комплексов Cantera и OpenFOAM. Для дальнейших расчётов была выбрана Cantera из-за быстрого времени счёта. Были рассчитаны периоды индукции и сравнены с экспериментальными данными, после чего для дальнейших расчётов был выбран кинетический механизм [16]. Также было проведено сравнение ламинарных скоростей, полученных с использованием различных кинетических механизмов и экспериментальным путем.

3 Разработка модели распространения фронта пламени в водородо-воздушной смеси

В качестве модели распространения фронта пламени будем рассматривать методику расчёта скорости сферического пламени, которая описана в главе 3.4.

3.1 Вывод формулы для скорости плоского пламени

В статье [15] приведена формула для расчета скорости распространения плоского пламени S_u^0 , м/с

$$S_u^0 = S_u(1 + MaKa), \quad (3.1)$$

где $S_u = \left(\frac{\rho_b}{\rho_u}\right) \frac{dr}{dt}$ – скорость горения искривленного пламени, м/с;

$\frac{\rho_b}{\rho_u}$ – отношение плотности продуктов горения к плотности несгоревшего газа, называемое коэффициентом расширения;

r – радиус пламени, м;

$\frac{dr}{dt}$ – скорость пламени по отношению к сгоревшим газам, м/с, называемая видимой скоростью;

$$Ka = \frac{KD_u}{S_u^2} – \text{число Карловица}, \quad (3.2)$$

где

$$K = \left(\frac{2}{r}\right) \frac{dr}{dt} – \text{стретч-фактор Карловица}, 1/\text{с}; \quad (3.3)$$

D_u – массовый коэффициент диффузии несгоревшего газа, м²/с;

$$Ma = \frac{L}{\delta_D} – \text{число Маркштейна}, \quad (3.4)$$

где

L – длина Маркштейна, которая показывает количественную меру отклика пламени на стретч, м;

$$\delta_D = \frac{D_u}{S_u} – \text{характерная ширина фронта пламени}, \text{ м}. \quad (3.5)$$

Для упрощения (3.1) подставим в нее (3.2) и (3.4):

$$S_u^0 = S_u \left(1 + \frac{L}{\delta_D} \cdot \frac{KD_u}{S_u^2} \right), \quad (3.6)$$

В (3.6) подставим (3.3) и (3.5):

$$S_u^0 = S_u \left(1 + \frac{LS_u}{D_u} \cdot \frac{2D_u}{rS_u^2} \frac{dr}{dt} \right),$$

$$S_u^0 = S_u + \frac{2L}{r} \frac{dr}{dt}. \quad (3.7)$$

Обозначим $\frac{dr}{dt}$ через S_b , подставим значение S_u и получим:

$$S_u^0 = S_b \left(\frac{\rho_b}{\rho_u} + \frac{2L}{r} \right). \quad (3.8)$$

3.2 Описание используемых экспериментальных данных

Описание экспериментов из статьи [3]

Эксперименты проводились в сферической камере объемом 0,024 м³ и внутренним диаметром 360 мм при начальных условиях $T_0 = 298$ К и $p_0 = 1$ атм для смесей с концентрациями водорода: 11%, 16%, 27,4%, 39%, 47%, 60%, 63%. Оптический доступ к камере обеспечивался с помощью двух кварцевых окон диаметром 100 мм, расположенных друг напротив друга.

Смесь реагентов была приготовлена в камере при помощи добавления газов с соответствующими парциальными давлениями до получения начального давления в 1 атм. До наполнения камеры газом для следующего теста, она была присоединена к лабораторной системе вытяжки и очищена сухим воздухом для удаления конденсированного водяного пара.

Горючую смесь поджигали в центре камеры с помощью электродов. Один из них был зафиксирован, а другой мог перемещаться с помощью микрометра, имеющего точность установки в определенном положении 10 мкм. Контакты электродов были хорошо закреплены с искровым промежутком, изменяющимся в диапазоне 0,5-2 мм (большие промежутки использовались для поджигания газовой смеси при больших числах Маркштейна и такие условия можно было наблюдать в богатых смесях, где энергия активации становилась довольно высокой) с помощью вольфрамовой проволоки, имеющей диаметр 250 мкм и свободную длину 40 мм. Энергия искры была измерена после испытаний, поэтому она близка к минимальной энергии воспламенения (5-20 мДж и с большими значениями для богатых смесей).

Фронт пламени был зарегистрирован с использованием камеры (Hусам, Model K20 S4E), которая делала снимки со скоростью 5000-6000 кадров в секунду. Скорость кадров и импульс зажигания были измерены с помощью цифрового осциллоскопа (LeCroy 9400A), благодаря которому записи на пленке были синхронизированы.

Описание экспериментов из статьи [4]

Эксперименты проводились в сферической бомбе диаметром 480 мм с четырьмя кварцевыми окнами, диаметр и толщина которых составили 100 мм и 50 мм соответственно при начальных условиях $T_0 = 303$ К и $p_0 = 100$ кПа для

смесей с концентрациями водорода: 7%, 9%, 25,1%, 33%, 60%, 72%. Два вольфрамовых стержня были расположены вдоль диаметра сферы и соединены с управляющим высоковольтным заряжающим устройством. Регулируемое расстояние между электродами было зафиксировано и составило 1 мм. В данной работе газовую смесь поджигали в центре камеры с помощью искры между двумя электродами.

Перед каждым тестом давление в камере уменьшали до значения менее 3 Па. Потом газы напрямую вводили в сферическую бомбу, используя метод парциального давления. Состав лабораторного сухого воздуха определялся по формуле $0,21 O_2 + 0,79 N_2$, а водород с чистотой свыше 99,99 % был предоставлен французской компанией Air Liquide, которая занимается производством технических газов. Основываясь на точности емкостного манометра, который использовали для измерения парциального давления, смеси газов были получены с точностью 0,2%.

Горение смеси газов контролировали двумя разными способами: измерением давления с помощью пьезоэлектрического датчика и регистрацией пламени на фотопленку. Фронт пламени, распространяющийся в камере, был визуализирован с помощью ширен-метода с использованием цифровой высокоскоростной камеры (Photron APX). Диапазон скорости съемки был от 2000 до 120000 кадров в секунду. Два метода были синхронизированы с помощью ТТЛ (транзисторно-транзисторной логики), которая генерирует сигнал в начале искры между электродами.

Описание экспериментов из статьи [5]

Эксперименты проводились в цилиндрической стальной камере диаметром 70 мм и высотой 44 мм с кварцевыми окнами, установленными в верхней части камеры при начальных условиях $T_0 = 293,15$ К и $p_0 = 1$ атм для смесей с концентрациями водорода: 17%, 24%, 29,6%, 34,4%, 38,6%, 45,6%, 56%. На поверхности камеры находятся пьезоэлектрические датчики давления, входное отверстие для наполнения камеры газом и выходное отверстие для выпуска продуктов горения. Для поджигания смеси в центре камеры были использованы вольфрамовые электроды диаметром 1 мм с искровым промежутком 2 мм. Для возникновения искрового разряда на электроды подается напряжение в течение 25 мкс с энергией 100 мДж.

Описание экспериментов из статьи [6]

Эксперименты проводились в сферической бомбе диаметром 600 мм при начальных условиях $T_0 = 296$ К и $p_0 = 1$ атм для смесей с концентраций водорода: 17%, 23%, 29,6%, 37%, 44,4%. Смесь поджигали в центре камеры с искровым промежутком 0,7 мм. Для визуализации скорости распространения пламени ширен-методом была использована высокоскоростная камера со скоростью съемки 7000 кадров в секунду. Для приготовления газовой смеси

использовали водород с чистотой 99,95 % и очищенный, отфильтрованный и сжатый воздух.

Описание экспериментов из статьи [7]

Эксперименты проводились в сферической бомбе из нержавеющей стали с внутренним диаметром 250 мм, в которой есть два окна диаметром 50 мм, расположенных друг напротив друга при начальных условиях $T_0 = 295$ К и $p_0 = 1$ атм для смесей с концентрациями водорода: 5%, 15%, 60%, 76%. Смесь поджигали в центре бомбы. Для инициирования пламени использовали свечу зажигания. Максимальная энергия инициирования была около 12,5 Дж.

В статье [7] шлирен-метод использовался с одной стороны, для визуализации процесса горения, с другой стороны, для определения скорости распространения фронта пламени на начальной стадии горения. Также визуализация пламени позволяет изучить структуру пламени и его устойчивость или неустойчивость. Электроды, используемые для поджигания смеси, незначительно влияют на скорость распространения пламени. Образование ячеистых структур пламени зависит как от начального давления, так и от состава смеси.

Описание экспериментов из статьи [8]

Тесты с быстрым горением в полусферическом мыльном пузыре проводились с помощью метода мыльного пузыря путем заполнения определенного объема смесью воздух-водород, окруженного воздухом и находящегося на плоской пластиковой поверхности при начальных условиях $T_0 = 295$ К и $p_0 = 1$ атм для смесей с концентрациями водорода: 7%, 8,9%, 11,9%, 23%, 30%. Мыльный раствор был изготовлен из 40 миллилитров моющего средства на литр воды с добавлением 0,5 г гуаровой смолы. А мыльные пузыри были получены путем опускания конца поливинилхлоридной трубки в получившийся раствор и пропускания через трубку предварительно перемешанной газовой смеси. Мыльный пузырь наполняли горючей смесью до достижения желаемого диаметра, затем трубку убирали.

Экспериментальная установка состояла из тестовой площадки, компонентов визуализации и системы управления. Тестовая площадка представляла собой плоскую пластиковую поверхность с механизмом для генерации мыльного пузыря. Система теневой фотографии включала в себя светоотражающий экран площадью около 2 м^2 , и дуговую лампу с напряжением 1600 В, которые были соединены с высокоскоростной камерой для записи видео. Система управления состояла из модуля для контролирования времени, модуля пусковой схемы и компьютера.

Эффективность экспериментов с мыльными пузырями зависит от их срока жизни. Для увеличения этого срока необходимо выбрать хорошую добавку к мыльному раствору. В связи с этим было протестировано три различных добавки:

глицерин, гуар и полиэтиленоксид. В предварительных тестах 10% глицериновая смесь показала себя как худшая добавка из трех рассмотренных. В результате оставшиеся добавки были более подробно исследованы. В дальнейших экспериментах были рассмотрены три вида раствора: мыльно-водяной, мыльно-водяной с добавлением 30 мг полиэтиленоксид на литр воды и мыльно-водяной с добавлением 0,5 г гуаровой смолы на литр воды. Из полученных смесей создавали мыльные пузыри следующих диаметров: 10, 16, 26 и 40 см. Для каждой смеси и диаметра было проведено по 10 тестов. В каждом тесте было зарегистрировано время жизни мыльного пузыря, определяемое от начала создания пузыря и до момента его разрушения. Также было записано время выживания пузыря, определяемое как часть времени между его достижением необходимого диаметра и разрушением. Мыльные пузыри из раствора с гуаровой смолой показали наибольшее время жизни для всех протестированных диаметров, поэтому данный раствор был выбран для проведения дальнейших экспериментов.

Для продления жизни мыльных пузырей был разработан дозатор для мыльного раствора, предотвращающий утончение пузыря во время его образования. Фактически, чем дольше и равномернее сверху будет подаваться мыльная пленка, тем больше времени пузырь не будет разрушаться и будет оставаться прочным и центрированным.

Реакционные водородо-воздушные смеси готовили в 50 л резервуаре под давлением 3,35 бар и оставляли для перемешивания на 24 часа. Составы смесей варьировались от 7%Н₂ (близкие к пределу горения) до 30%Н₂ (близкие к стехиометрическому составу). Азот, кислород и водород, взятые из баллона под давлением были перемешаны в соответствующих пропорциях для создания необходимой реакционной смеси. Шланг, использующийся для надувания пузыря, был полностью очищен перед наполнением газовой смесью во избежание попадания нефильтрованного воздуха в трубку и загрязнения смеси.

В данном эксперименте для воспламенения газовой смеси использовалась виниловая пластинка, находящаяся под мыльным пузырем и оборудованная свечой зажигания. К моменту воспламенения системы зажигания и визуализации были синхронизированы. Динамика распространения неограниченного фронта пламени водорода в воздушной среде была визуализирована с помощью шпирен-метода.

3.3 Скорость распространения детонации

Вывод формулы для скорости детонации в приближении Чепмена-Жуге

Горение, вызванное ударной волной достаточно большой интенсивности и распространяющееся со скоростью, равной скорости волны называется детонацией. А такая ударная волна называется детонационной.

На детонационной волне должны выполняться условия непрерывности плотностей потоков массы, энергии и импульса:

$$\rho_0 D = \rho_1 v_1 = j, \quad (3.9)$$

$$p_0 + \rho_0 D^2 = p_1 + \rho_1 v_1^2, \quad (3.10)$$

$$H_0 + \frac{D^2}{2} = H_1 + \frac{v_1^2}{2}, \quad (3.11)$$

где j – плотность потока газа через поверхность разрыва;

D – скорость распространения детонации;

v_1 – скорость детонационной волны относительно остающегося за нею газа;

Введем удельные объемы $V_0 = \frac{1}{\rho_0}, V_1 = \frac{1}{\rho_1}$ газа и выведем формулу для скорости распространения детонации из уравнений (3.9) и (3.10):

$$D = V_0 \sqrt{\frac{p_1 - p_0}{V_0 - V_1}}. \quad (3.12)$$

Запишем уравнение (3.11) в виде

$$H_0 + \frac{j^2 V_0^2}{2} = H_1 + \frac{j^2 V_1^2}{2}$$

и подставляя $j^2 = \frac{p_1 - p_0}{V_0 - V_1}$, получаем:

$$H_0 - H_1 + \frac{1}{2}(V_0 + V_1)(p_1 - p_0) = 0. \quad (3.13)$$

Зависимость (3.13) называют адиабатой Гюгонио или ударной адиабатой, которая дает совокупность всех возможных состояний сжатия (p, V) при данных начальных (p_0, V_0) .

Для определения состояний сжатия (p, V) запишем уравнения энтальпии в следующем виде:

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{\gamma}{\gamma - 1} p_0 V_0 + Q, \\ H &= \frac{\gamma}{\gamma - 1} p V + Q, \end{aligned} \quad (3.14)$$

где $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ – отношение теплоемкостей;

$Q = \frac{pV}{\gamma - 1}$ – химическая энергия.

Подставим уравнение (3.14) в (3.13) и получим уравнение кривой ударной адиабаты:

$$p = \frac{p_0 V_0 (\gamma + 1) - p_0 V (\gamma - 1)}{V (\gamma + 1) - V_0 (\gamma - 1)}. \quad (3.15)$$

Процессы, происходящие в детонационной волне, описываются прямой Михельсона:

$$p = p_0 + j^2 (V_0 - V). \quad (3.16)$$

Для нахождения состояний, где химическая реакция уже закончилась, уравнения для энтальпии будут следующими:

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{\gamma}{\gamma - 1} p_0 V_0 + Q, \\ H &= \frac{\gamma}{\gamma - 1} p V. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Подставим уравнение (3.17) в (3.13) и получим уравнение кривой детонационной адиабаты:

$$p = \frac{p_0 \left(V_0 \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} - V \right) + 2Q}{V \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} - V_0}. \quad (3.18)$$

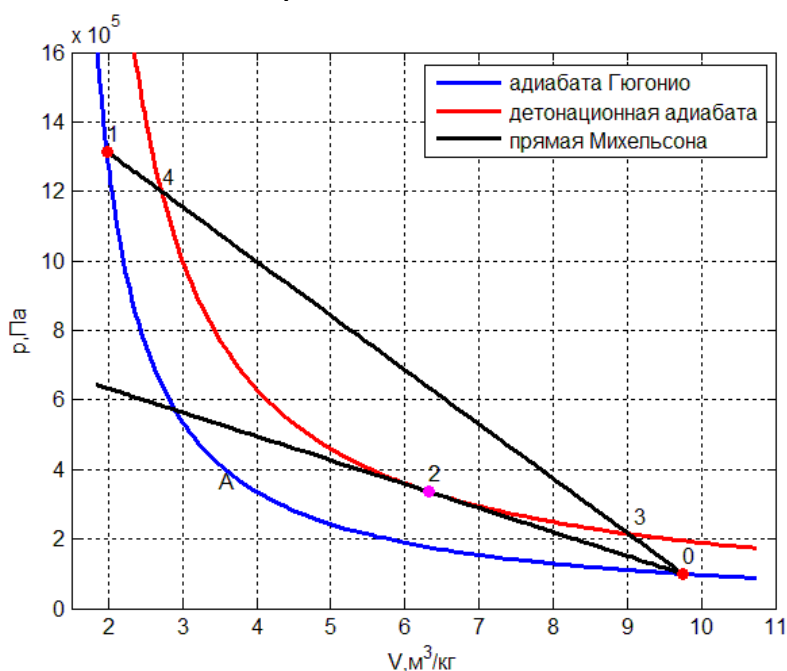


Рис. 3.1. Ударные адиабаты для состава смеси 60% H_2 +40% Air при $T_0=303$ К и $p_0=100$ кПа

На рис. 3.1 изображены зависимости, определяющиеся уравнениями (3.15), (3.16), (3.18). Точка 0 соответствует начальному состоянию газа, точка 1 – состоянию газа позади фронта волны. Состояние 1 достигается из состояния 0 скачкообразно и описывается адиабатой Гюгонио 0A1. На детонационной адиабате 324 точка 2 соответствует стационарному режиму детонации и

называется точкой Чепмена-Жуге. Точки, лежащие выше точки 2, отвечают режиму пересжатой волны детонации, а точки, лежащие ниже – режиму недосжатой волны детонации.

С помощью уравнения прямой Михельсона можно графическим или численным способом определить значения удельного объёма и давления в точке Чепмена-Жуге. Скорость распространения детонации можем найти с помощью уравнения (3.12):

$$D = V_0 \sqrt{\frac{p - p_0}{V_0 - V'}}$$

где (p, V) – значения в точке Чепмена-Жуге.

Расчёт скоростей детонации в статьях [3-8]

Для определения режима горения в статьях [3-8] были рассчитаны скорости детонации в приближении Чепмена-Жуге и проведено сравнение с экспериментальными скоростями детонации из статьи [19].

Описание экспериментов из статьи [19]

Экспериментальная установка состояла из толстостенной свинцовой трубы с внутренним диаметром 19 мм и была достаточно длинной для того, чтобы детонационная волна распространялась с постоянной скоростью. Ударная труба была соединена с тяжелой трубкой из боросиликатного стекла с отверстием для прямой фотосъемки и стальной трубкой с узким проёмом, покрытым целлофановой пленкой для фотосъемки шпирен-методом. Оба конца трубок были закрыты резиновыми пробками, которые впоследствии были вытолкнуты силой взрыва. Взрывная волна, движущаяся с постоянной скоростью, создавала на плёнке изображение в виде наклонной прямой линии. Скорость детонационной волны была вычислена по величине угла наклона этой линии, скорости барабана, использующегося для прямой фотосъемки и констант оптического устройства.

Таблица 3

Смесь	D, м/с
$2H_2 + O_2 + 5N_2$	1822
$2H_2 + O_2 + 3N_2$	2055
$2H_2 + O_2 + N_2$	2407

В таблице 3 представлены данные, полученные в ходе экспериментов при начальных условиях $T_0 = 291$ К и $p_0 = 0,98$ МПа.

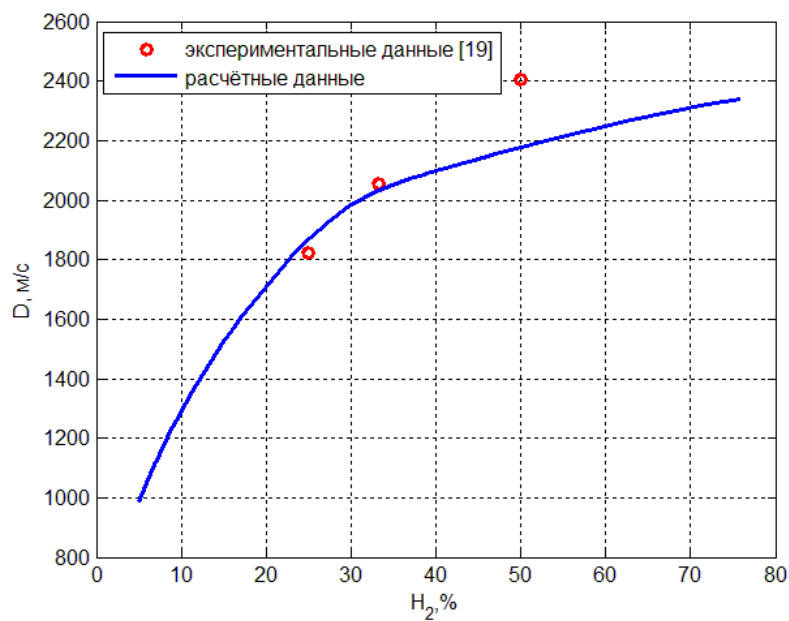


Рис. 3.2. Скорости детонации.

На рис. 3.2 изображены экспериментальные скорости детонации из статьи [19] и скорости, рассчитанные с помощью формулы (3.4) для статей [3-8].

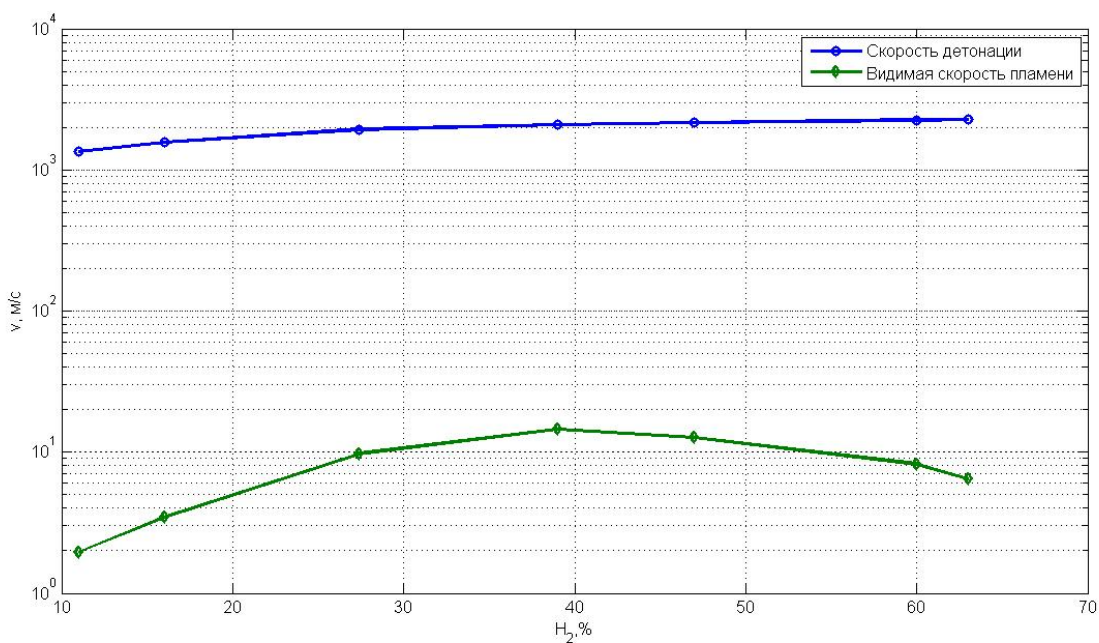


Рис. 3.3. Расчётная скорость детонации и видимая скорость пламени для статьи [3].

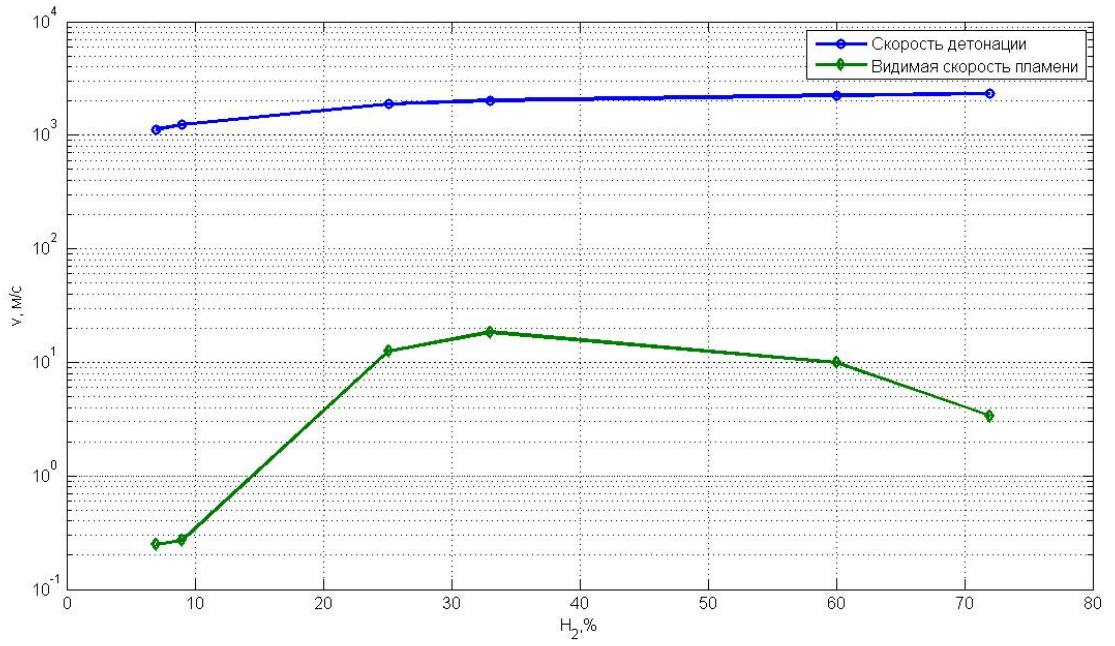


Рис. 3.4. Расчётная скорость детонации и видимая скорость пламени для статьи [4].

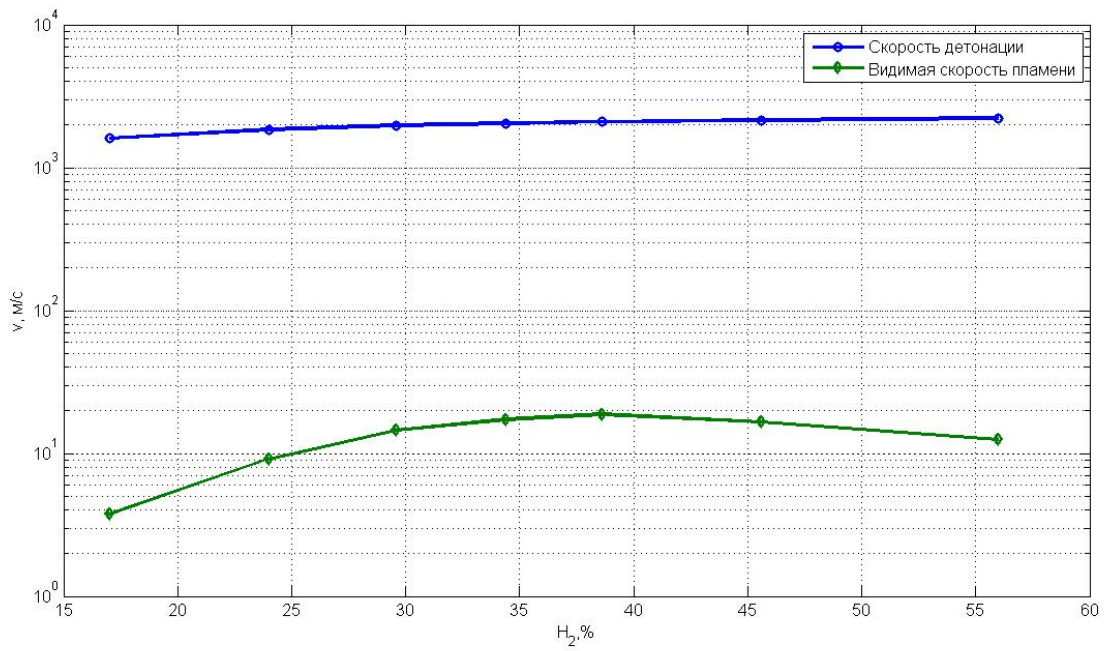


Рис. 3.5. Расчётная скорость детонации и видимая скорость пламени для статьи [5].

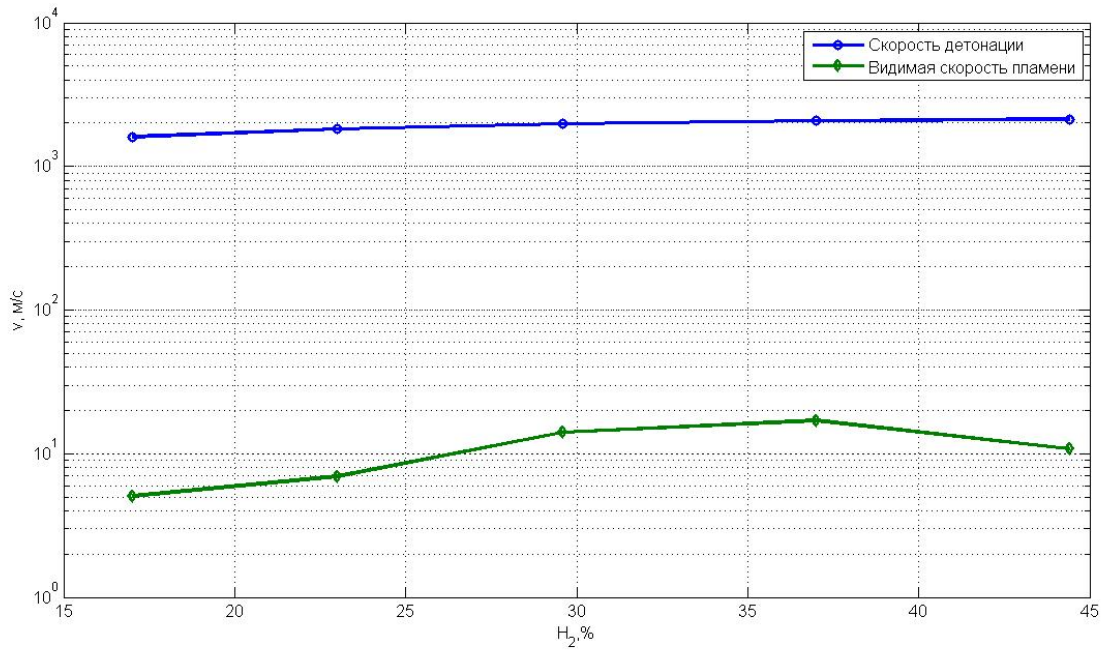


Рис. 3.6. Расчётная скорость детонации и видимая скорость пламени для статьи [6].

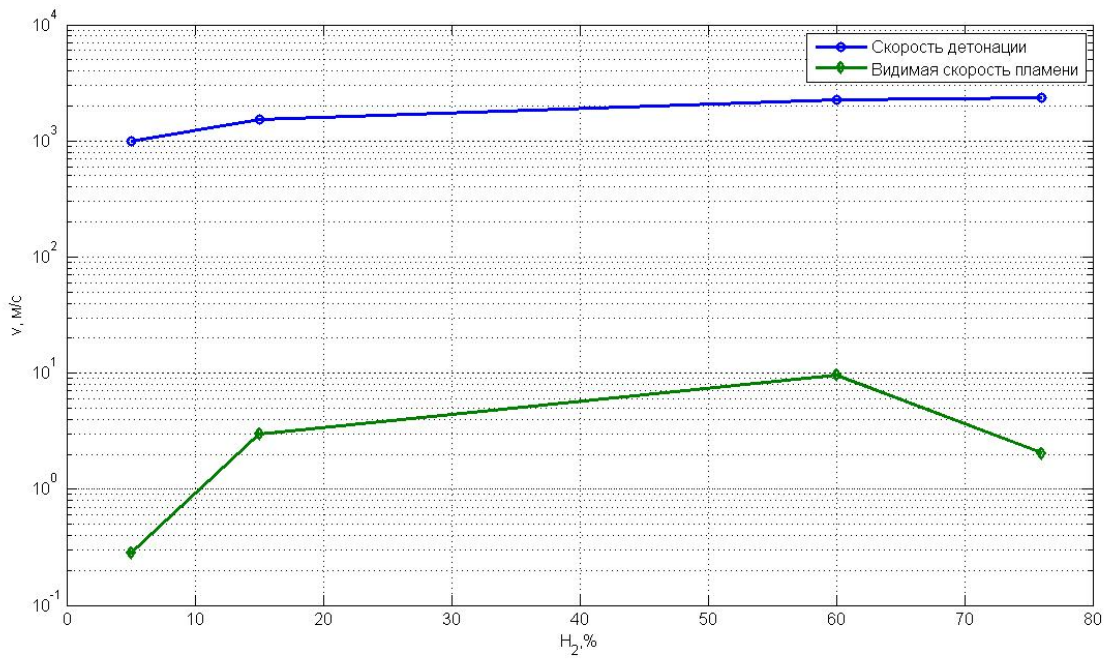


Рис. 3.7. Расчётная скорость детонации и видимая скорость пламени для статьи [7].

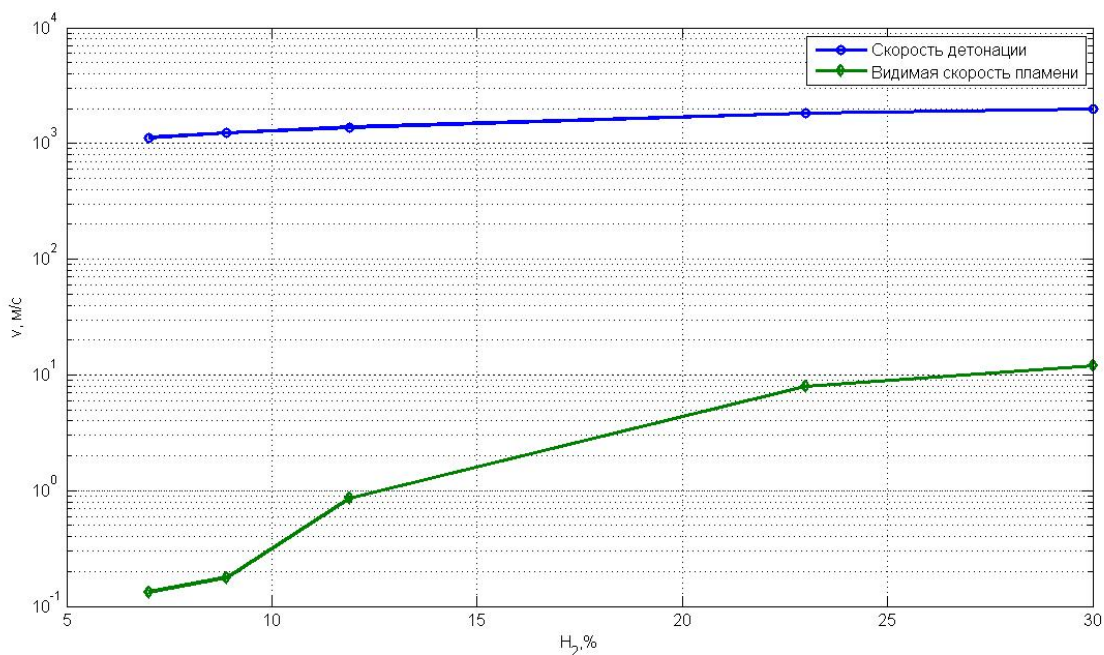


Рис. 3.8. Расчётная скорость детонации и видимая скорость пламени для статьи [8].

На рис. 3.3-3.8 изображены скорости детонации, рассчитанные в приближении Чепмена-Жуге, и видимые скорости пламени, по которым можно сделать вывод, что в статьях [3-8] осуществлялся дефлаграционный режим горения.

3.4 Получение зависимости длины Маркштейна от состава смеси

Для разработки методики расчёта скорости распространения фронта пламени в водородо-воздушной смеси были обработаны данные из статей [3-8] по горению смесей различных составов с практически одинаковыми начальными условиями. В статьях [4, 7, 8] были представлены изображения с распространением пламени, с помощью которых были рассчитаны радиусы и видимые скорости сферического пламени. В статьях [3, 6] были даны графики с зависимостями скорости сферического пламени от радиуса. В статье [5] были представлены скорости плоского пламени, а видимые скорости сферического пламени были найдены из формулы (3.7), в которой радиусы пламени были рассчитаны с помощью программы OpenFOAM, а коэффициенты расширения – с использованием программы Cantera.

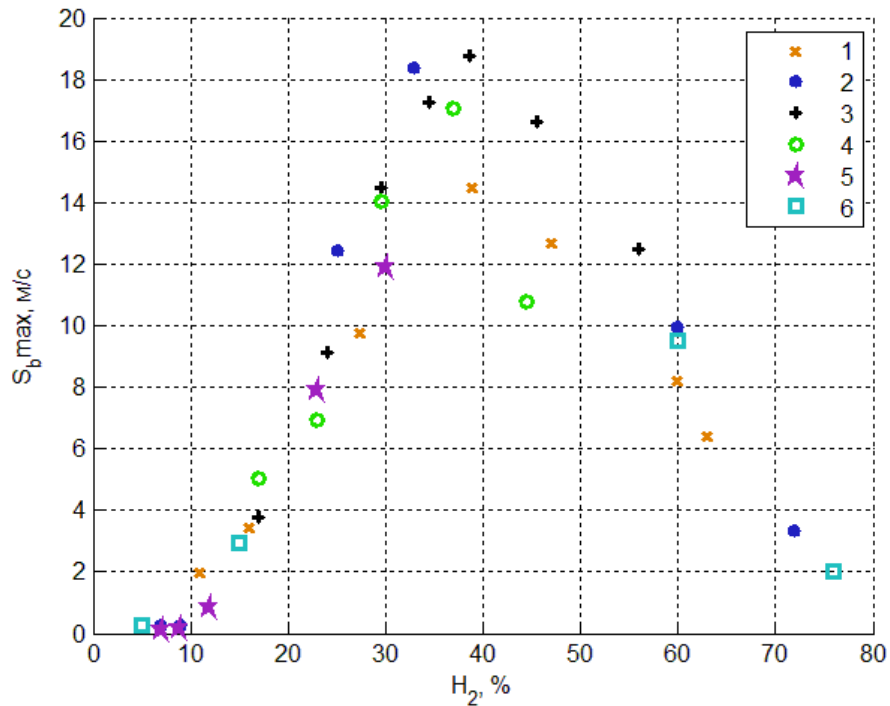


Рис. 3.9. Видимые скорости пламени: 1-[3], 2-[4], 3-[5], 4-[6], 5-[8], 6-[7].

На рис. 3.9 изображены максимальные видимые скорости для статей [3-8], по которым можно сделать вывод, что экспериментальные данные вполне согласуются друг с другом.

Выразим видимую скорость пламени S_b из формулы (3.8)

$$S_b = \frac{S_u^0}{\left(\frac{\rho_b}{\rho_u} + \frac{2L}{r}\right)}, \quad (3.19)$$

где S_u^0 и $\frac{\rho_b}{\rho_u}$ — скорость распространения плоского пламени и коэффициент расширения, которые можно рассчитать с помощью Cantera;

L — длина Маркштейна.

Проведём сравнительный анализ максимальных видимых скоростей, полученных экспериментально и по формуле (3.19), с использованием зависимости длины Маркштейна от состава смеси, приведённой в [20] и данных, рассчитанных по Cantera.

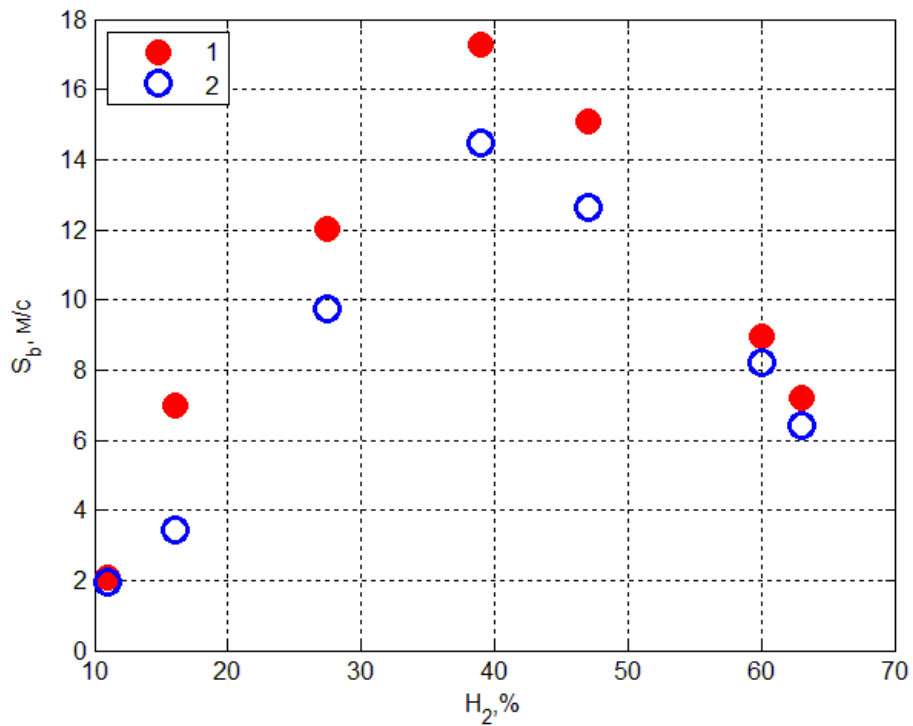


Рис. 3.10. Видимые скорости пламени из статьи [3], полученные с помощью: 1-формулы (3.19), 2-экспериментальным путём

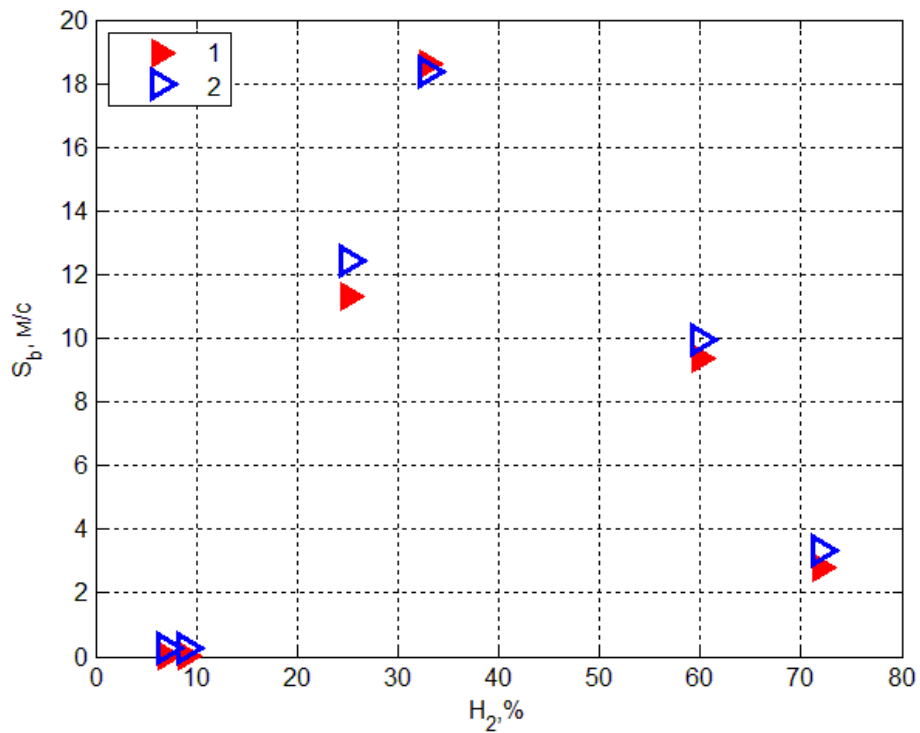


Рис. 3.11. Видимые скорости пламени из статьи [4], полученные с помощью: 1-формулы (3.19), 2-экспериментальным путём

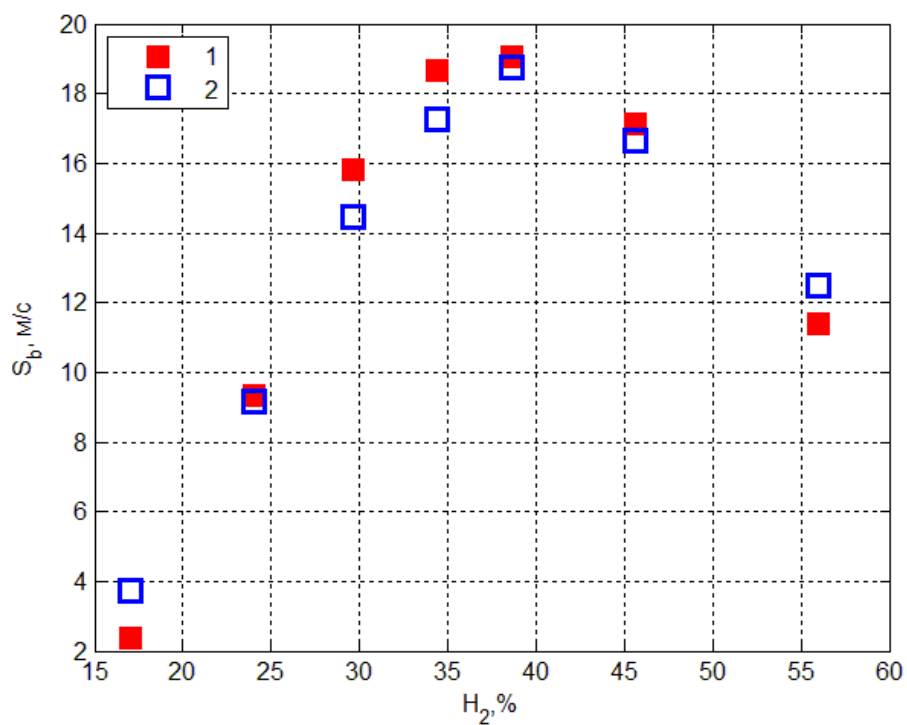


Рис. 3.12. Видимые скорости пламени из статьи [5], полученные с помощью: 1-формулы (3.19), 2-экспериментальным путём

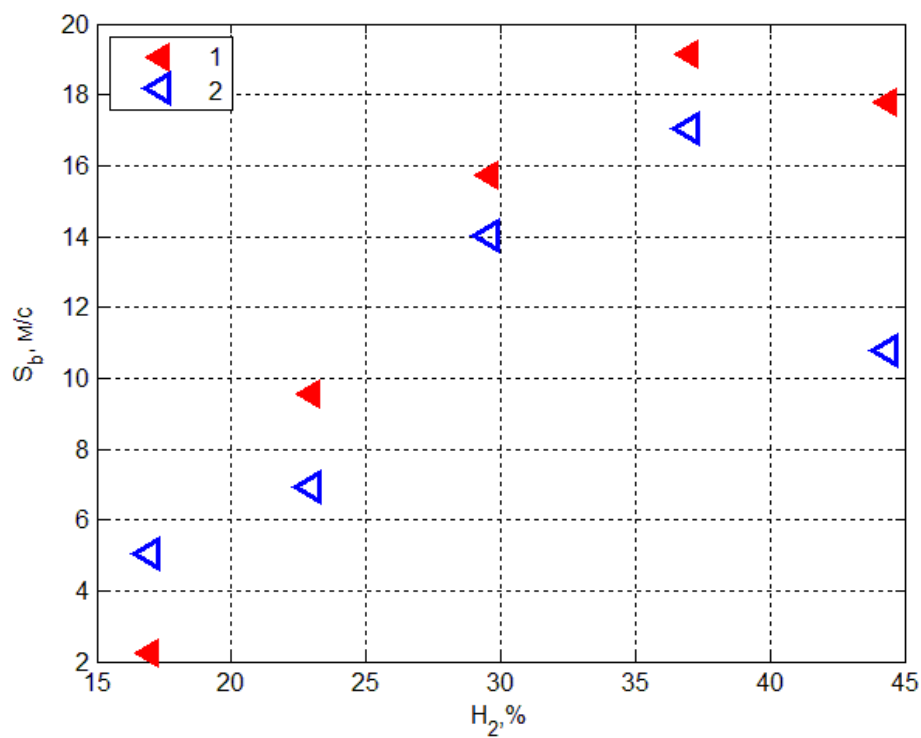


Рис. 3.13. Видимые скорости пламени из статьи [6], полученные с помощью: 1-формулы (3.19), 2-экспериментальным путём

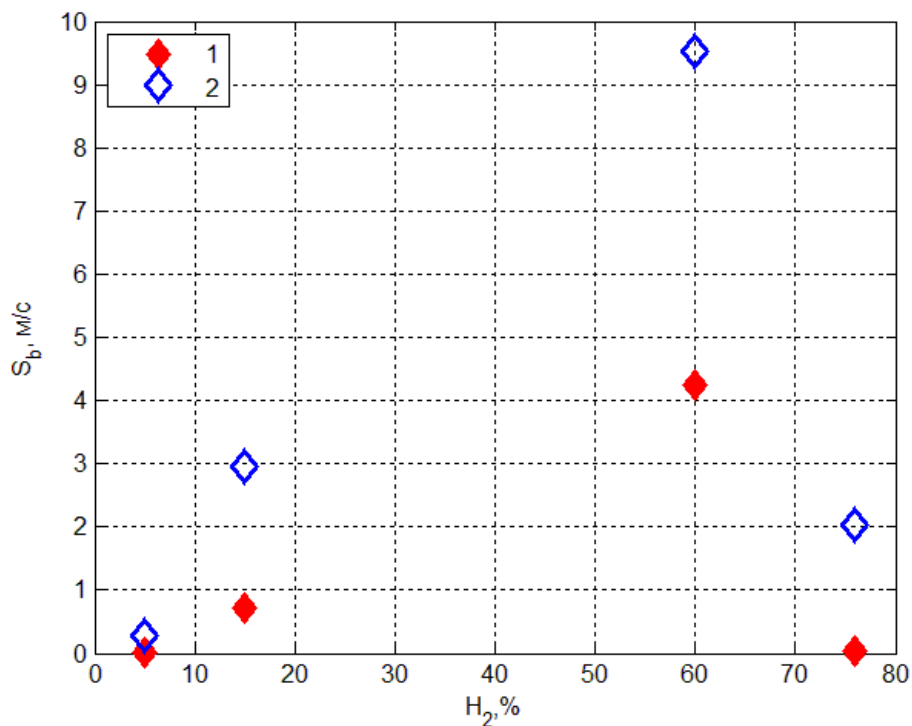


Рис. 3.14. Видимые скорости пламени из статьи [7], полученные с помощью: 1-формулы (3.19), 2-экспериментальным путём

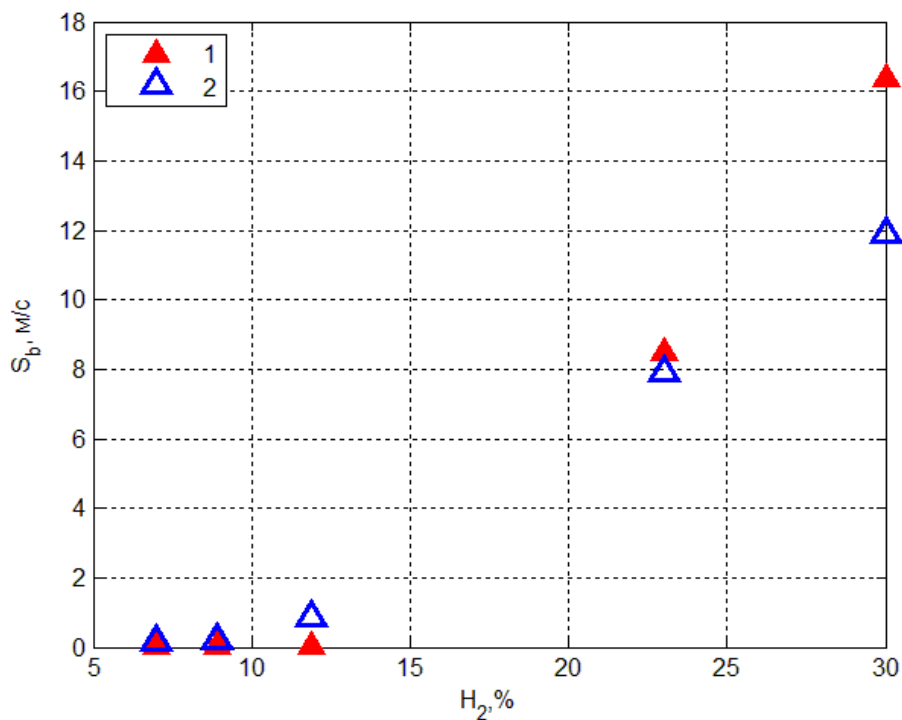


Рис. 3.15. Видимые скорости пламени из статьи [8], полученные с помощью: 1-формулы (3.19), 2-экспериментальным путём

Из рис. 3.10-3.15 видно, что видимые скорости, найденные по формуле (3.19) и с использованием длин Маркштейна из [20], не слишком хорошо описывают

экспериментальные данные из статей [3-8], более наглядно это показано на рис. 3.16-3.18.

Построим для статьи [3] экспериментальные видимые скорости и видимые скорости, рассчитанные по формуле (3.19) с использованием длин Маркштейна из [20] в зависимости от радиуса пламени для нескольких составов.

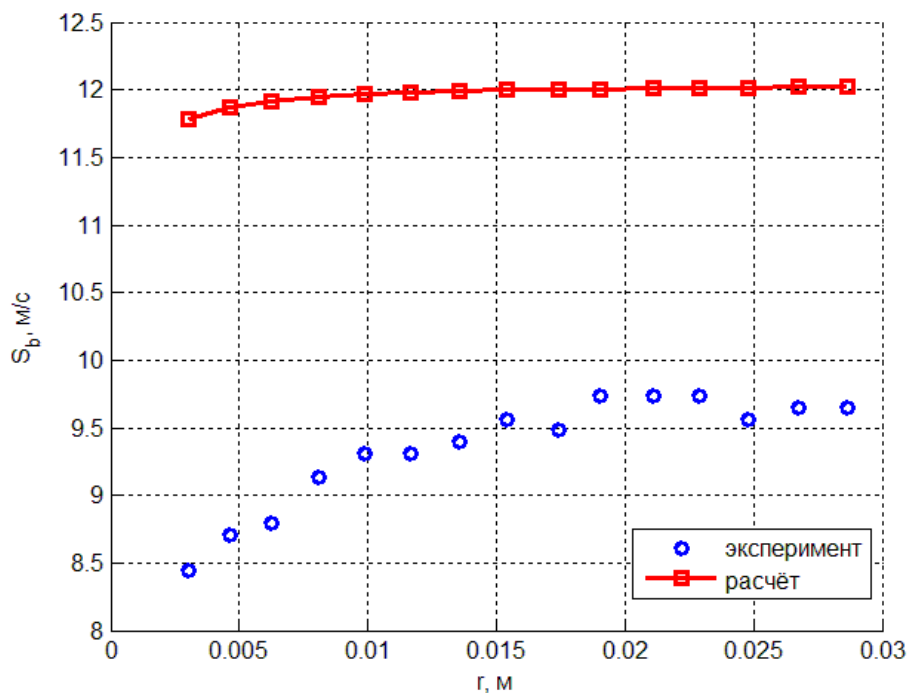


Рис. 3.16. Видимые скорости пламени для $H_2 = 27.4\%$.

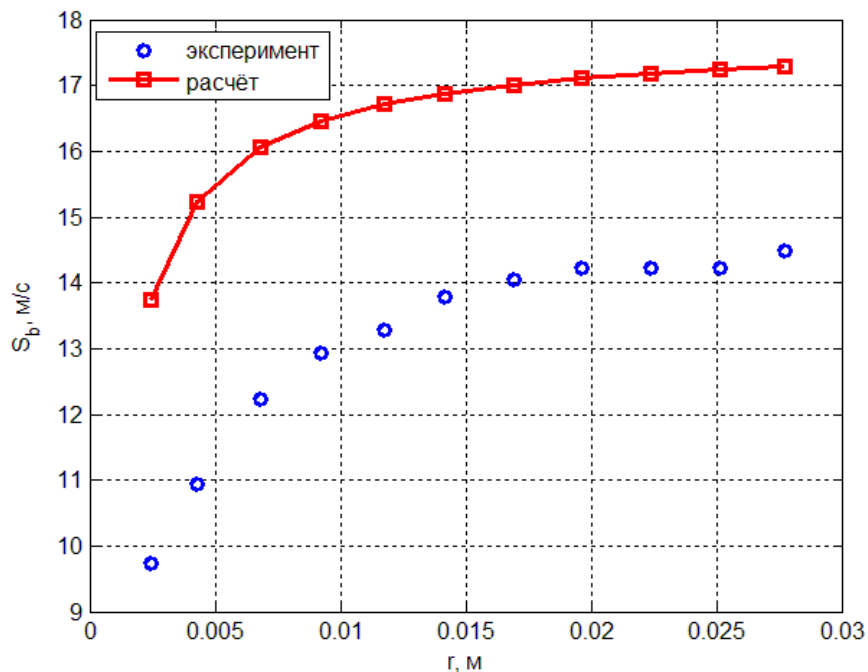


Рис. 3.17. Видимые скорости пламени для $H_2 = 39\%$.

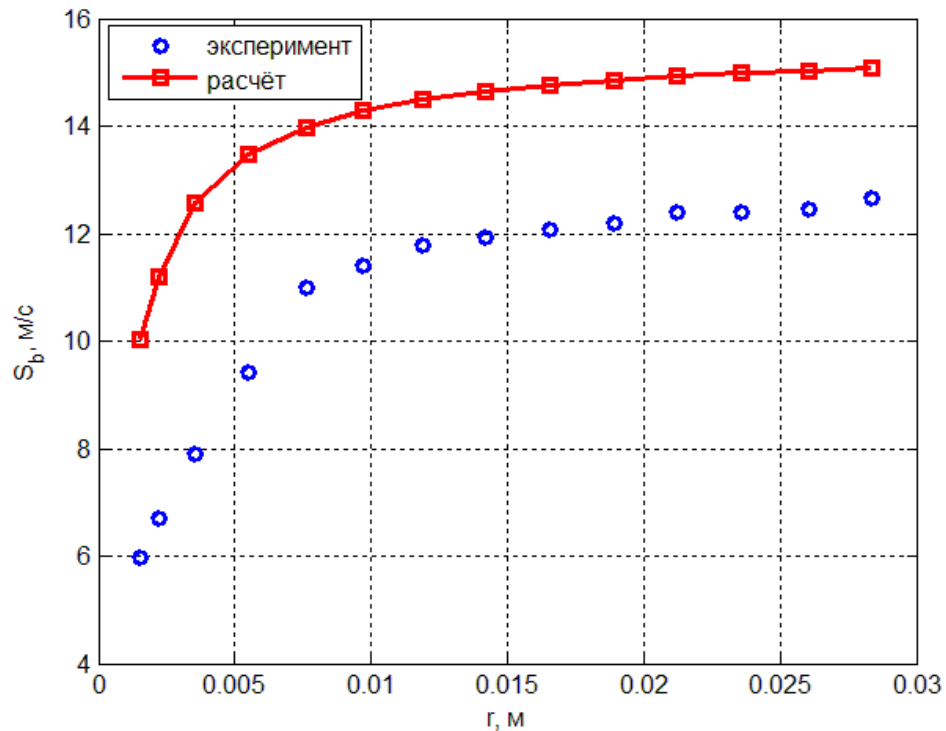


Рис. 3.18. Видимые скорости пламени для $H_2 = 47\%$.

Из рис. 3.16-3.18 видно, что значения видимых скоростей, рассчитанных по формуле (3.19) и с использованием длин Маркштейна из [20] примерно в 1,5 раза превышают значения экспериментальных видимых скоростей, поэтому было решено скорректировать зависимость длины Маркштейна от состава.

Выразим длину Маркштейна из формулы (3.8):

$$L = \frac{r}{2} \left(\frac{S_u^0}{S_b} - \frac{\rho_b}{\rho_u} \right). \quad (3.20)$$

Проанализируем зависимости длин Маркштейна, рассчитанные по формуле (3.20) от радиуса пламени для статей [3, 5, 6].

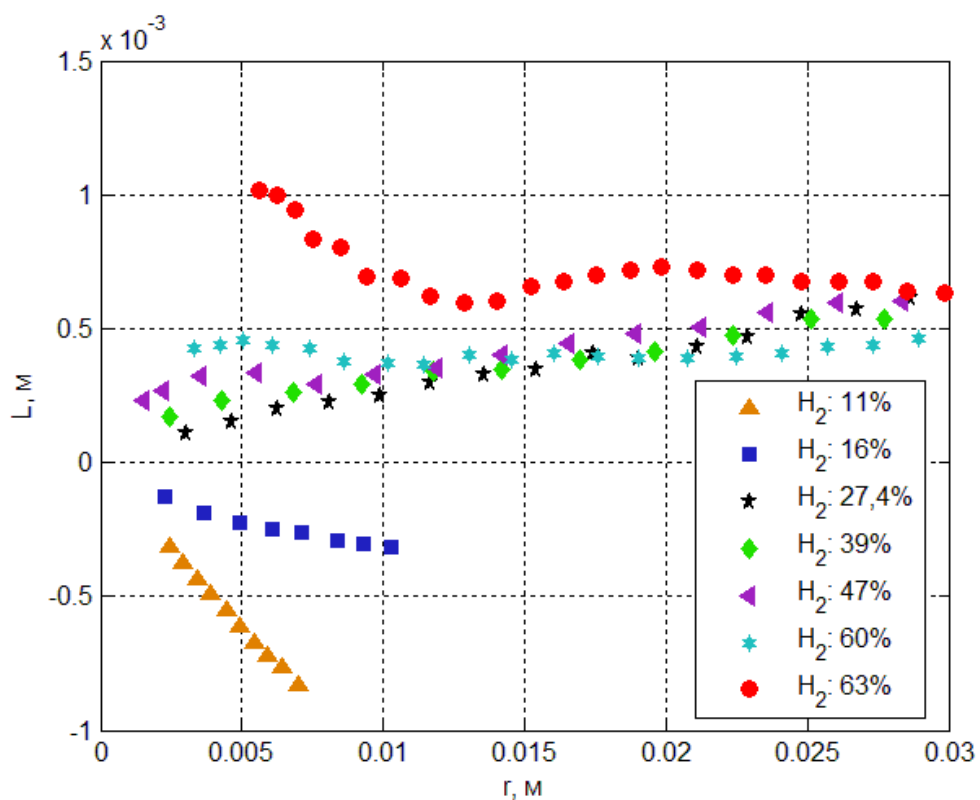


Рис. 3.19. Зависимость длины Маркштейна от радиуса пламени для статьи [3]

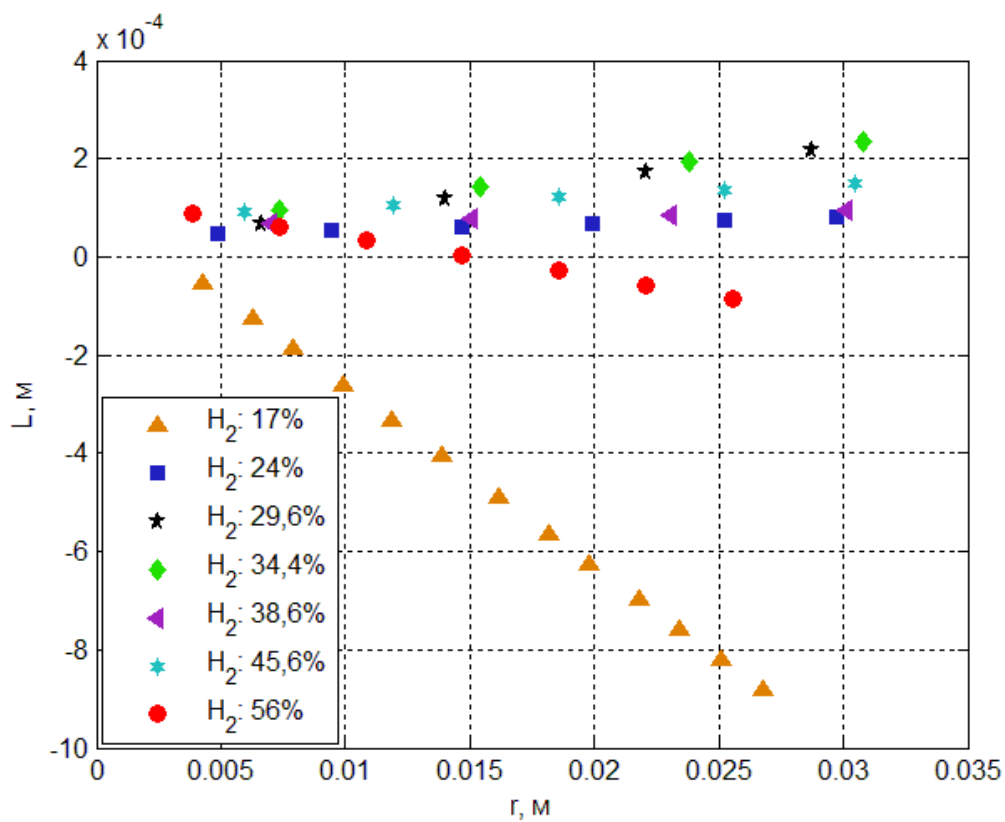


Рис. 3.20. Зависимость длины Маркштейна от радиуса пламени для статьи [5]

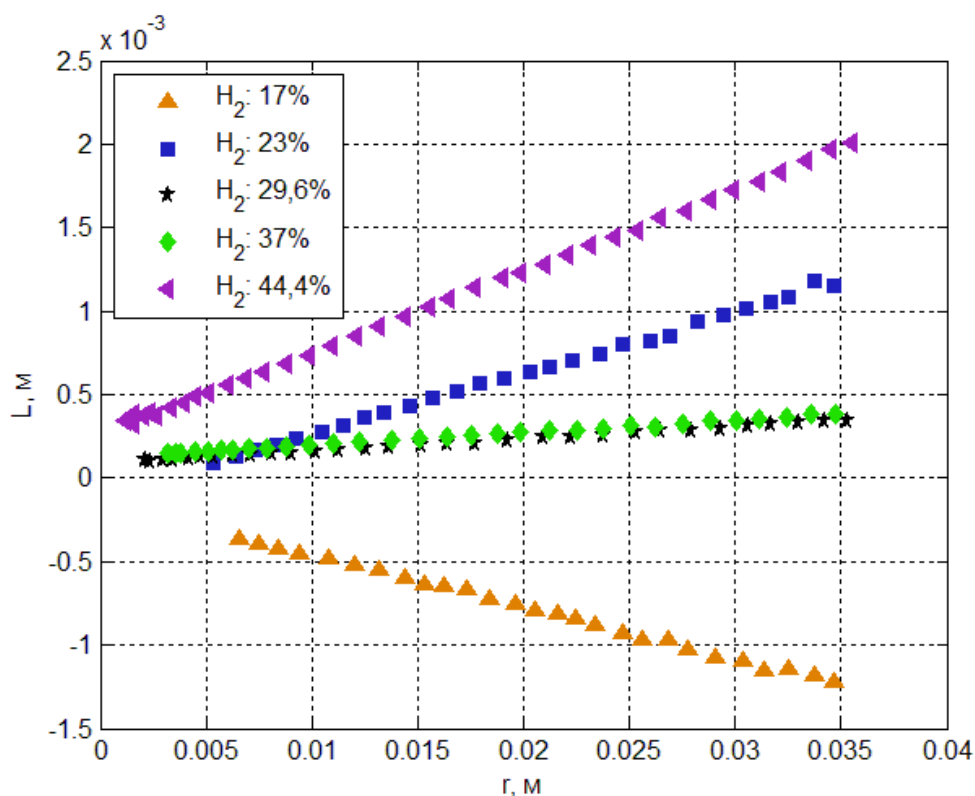


Рис. 3.21. Зависимость длины Маркштейна от радиуса пламени для статьи [6]

Из рис. 3.19-3.21 видно, что между длиной Маркштейна и радиусом пламени существует сильная корреляционная зависимость, которую можно аппроксимировать уравнением вида

$$L = a \cdot r + b, \quad (3.21)$$

где a и b – коэффициенты аппроксимации.

Были вычислены значения L в зависимости от радиуса пламени для данных из статей [3-8] и аппроксимированы уравнением вида (3.21).

Для нахождения зависимости L от состава смеси, определим зависимость коэффициентов a и b от состава.

При $r \rightarrow 0$ зависимость (3.21) принимает вид $L = b$. Аппроксимируем $b(c_{H_2})$ линейной функцией, где c_{H_2} - процентное содержание водорода в смеси.

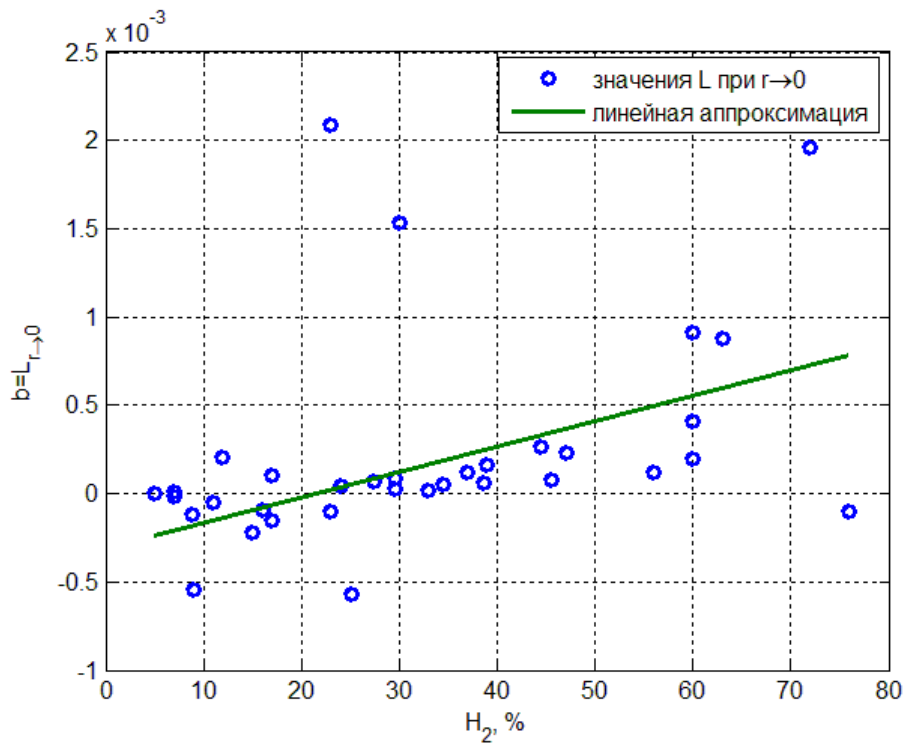


Рис. 3.22. Зависимость $L_{r \rightarrow 0}$ от процентного содержания водорода в смеси и ее аппроксимация.

Тогда

$$b(c_{H_2}) = 1,44 \cdot 10^{-5} c_{H_2} - 3,12 \cdot 10^{-4} \quad (3.22)$$

Продифференцируем зависимость (3.21) и получим $\frac{\partial L}{\partial r} = a$.

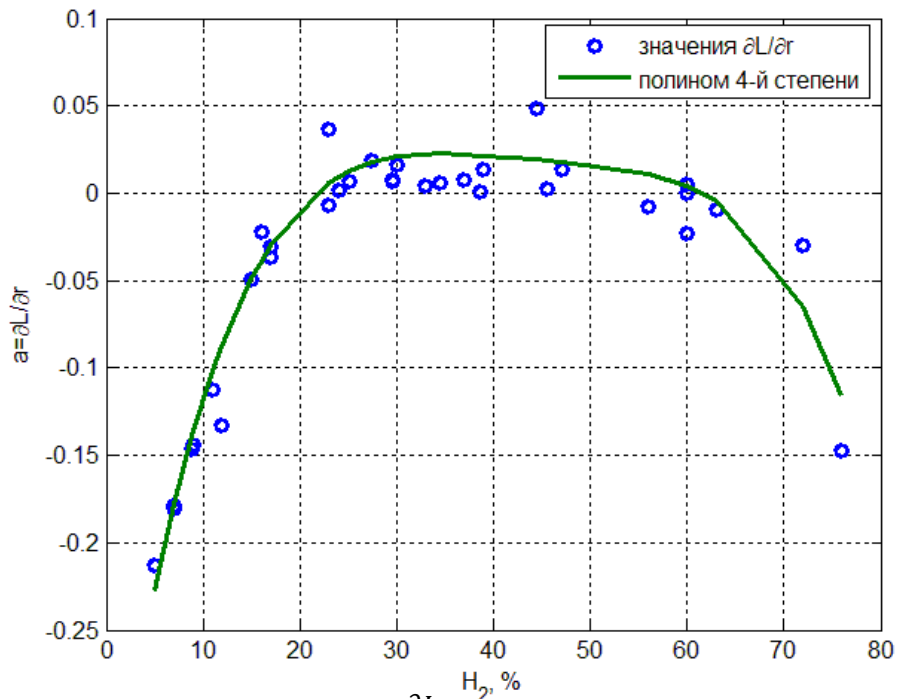


Рис. 3.23. Зависимость $\frac{\partial L}{\partial r}$ от процентного содержания водорода.

Тогда

$$a(c_{H_2}) = -1,13 \cdot 10^{-7} c_{H_2}^4 + 2 \cdot 10^{-5} c_{H_2}^3 - 1,3 \cdot 10^{-3} c_{H_2}^2 + 0,04 c_{H_2} - 0,4 \quad (3.23)$$

Теперь построим зависимости $L(r)$, рассчитанные по формуле (3.20) и с помощью формул (3.21)-(3.23) для статей [3, 5, 6].

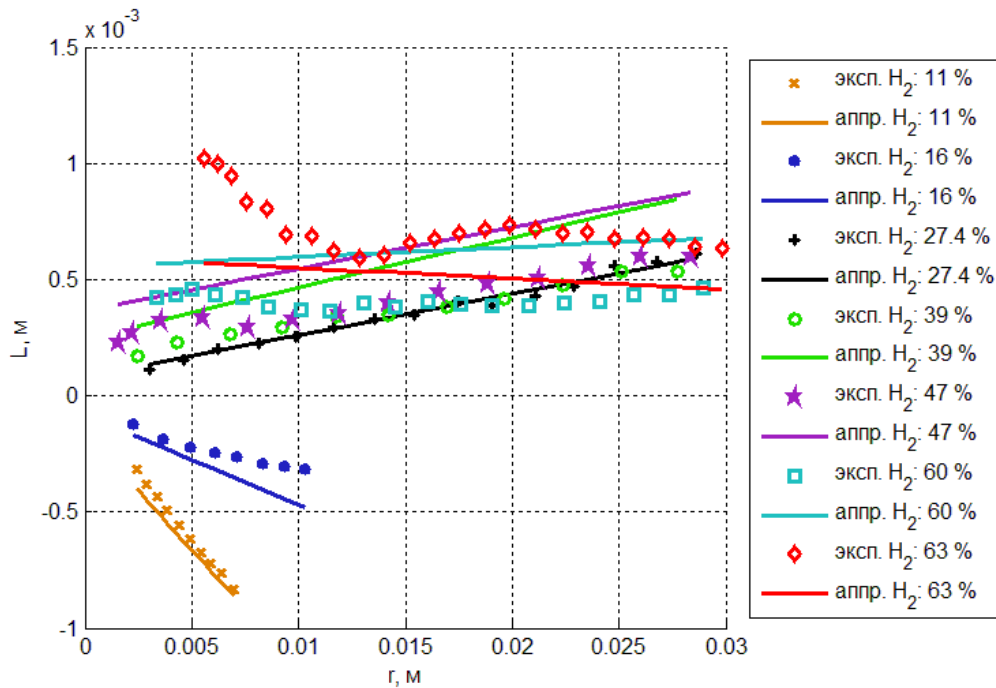


Рис. 3.24. Зависимость длины Маркштейна от радиуса пламени для статьи [3].

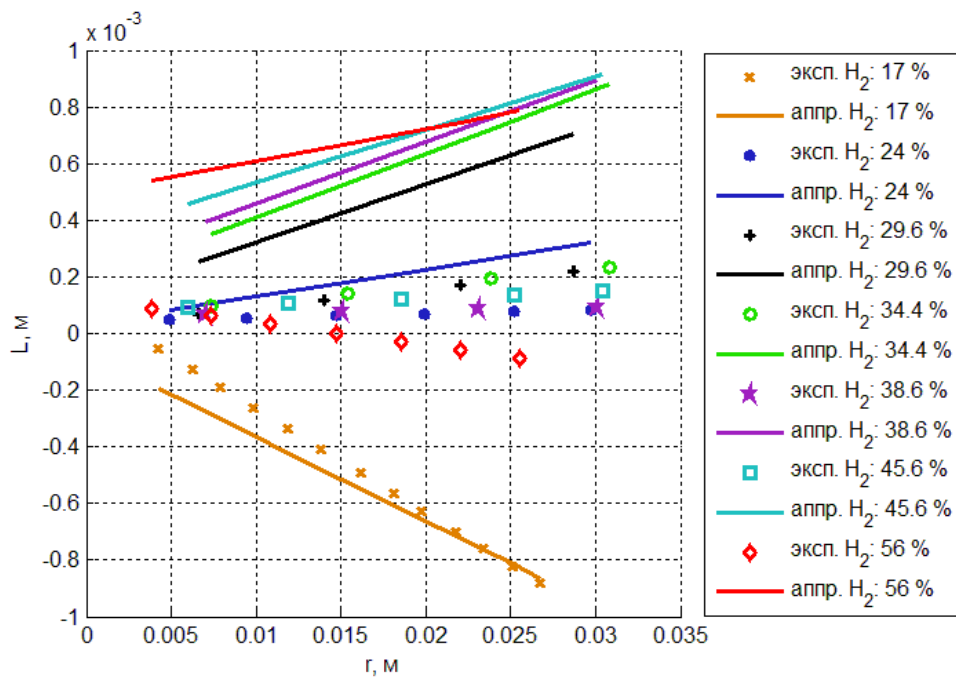


Рис. 3.25. Зависимость длины Маркштейна от радиуса пламени для статьи [5].

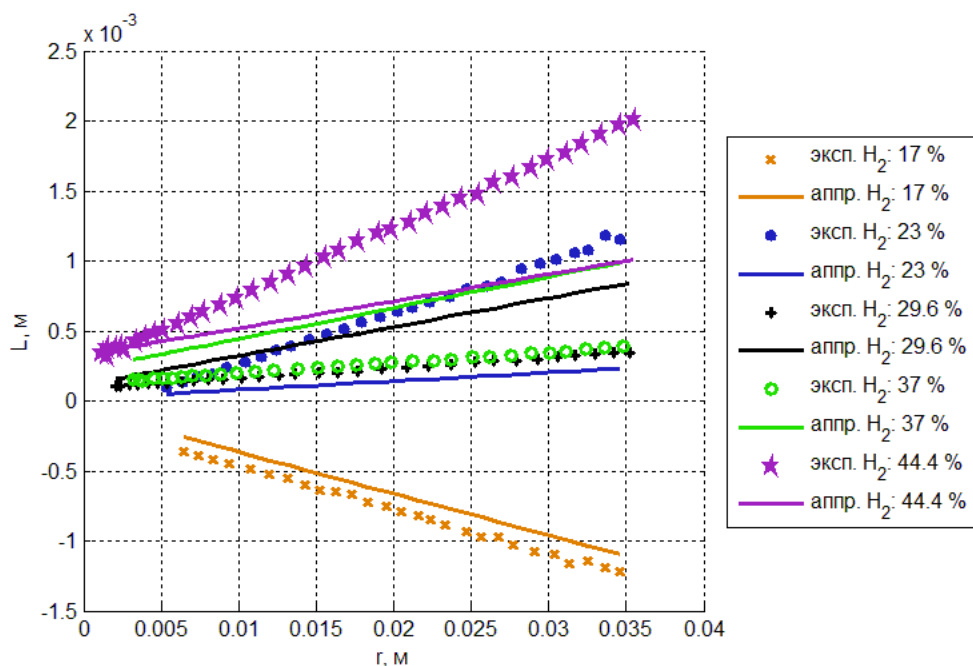


Рис. 3.26. Зависимость длины Маркштейна от радиуса пламени для статьи [6].

Из рис. 3.24-3.26 видно, что зависимость $L(c_{H_2}, r)$ некоторые экспериментальные данные хорошо описывает, а некоторые не очень, так как для нахождения $L(c_{H_2}, r)$ было аппроксимировано большое количество данных.

Построим зависимости $S_b(r)$, полученные экспериментальным путём, по формуле (3.19) с использованием длины Маркштейна из [20] и аппроксимированной длины Маркштейна $L(c_{H_2}, r)$ для статей [6, 8].

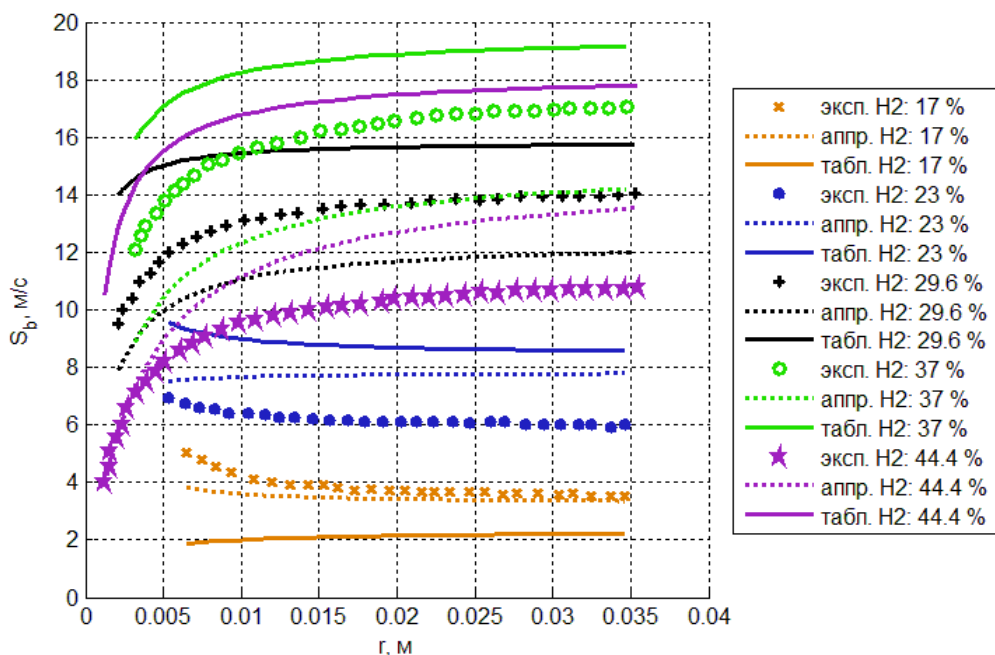


Рис. 3.27. Зависимость видимой скорости от радиуса пламени для статьи [6].

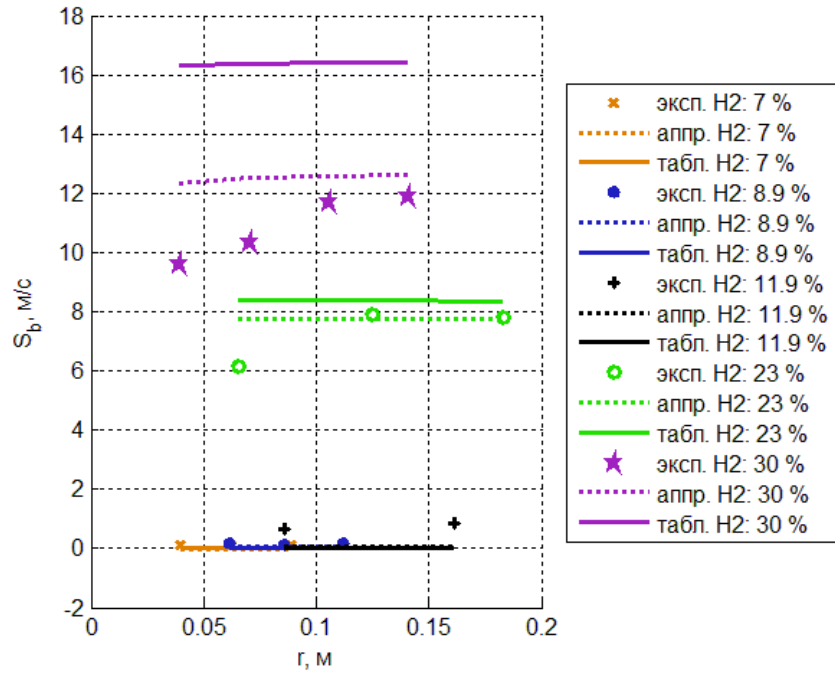


Рис. 3.28. Зависимость видимой скорости от радиуса пламени для статьи [8].

Из рис. 3.27 и 3.28 видно, что видимые скорости, рассчитанные с помощью аппроксимированных длин Маркштейна, лучше описывают экспериментальные данные, но далеко не идеально.

Выразим из формулы (3.7) скорость сферического пламени:

$$S_u = S_u^0 - \frac{2LS_b}{r}, \quad (3.24)$$

где $L(c_{H_2}, r)$ определяется по формулам (3.22) и (3.23);

S_u^0 — скорость распространения плоского пламени, рассчитанная с использованием Cantera.

Таким образом, расчёт нормальной скорости сферического пламени при больших радиусах может быть выполнен по следующей методике:

1. Расчёт скорости распространения плоского пламени и коэффициента расширения смеси с помощью Cantera;
2. Расчёт $L(c_{H_2}, r)$ по формулам (3.22) и (3.23);
3. Расчёт S_u по формуле (3.24).

Проведём расчёт видимой скорости пламени с использованием длин Маркштейна, определяющихся по формулам (3.22) и (3.23).

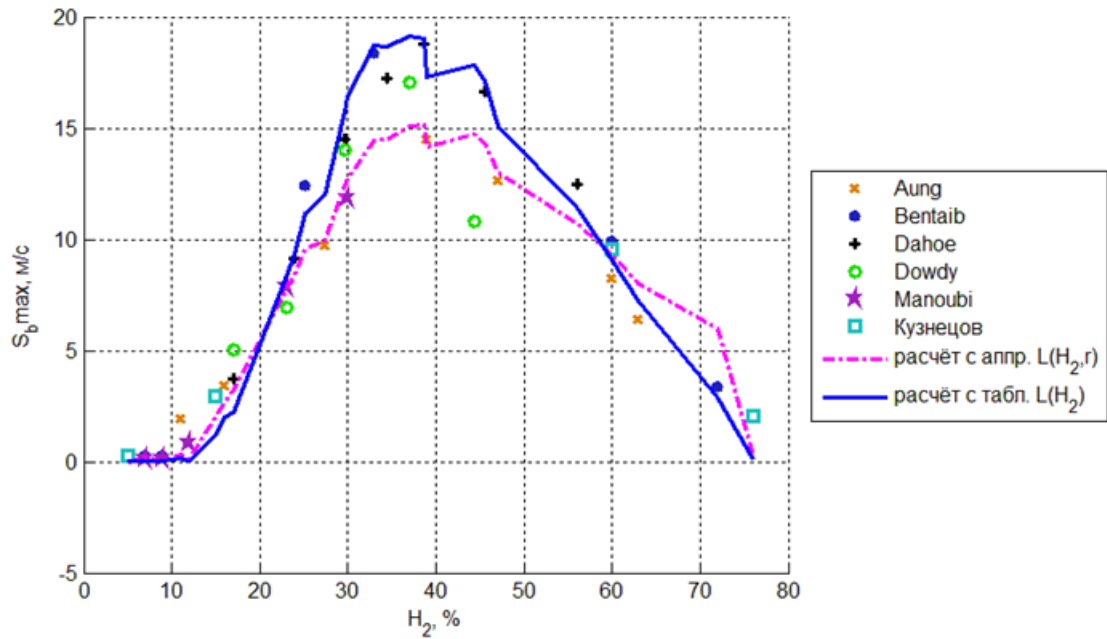


Рис. 3.29. Видимые скорости пламени: 1-[3], 2-[4], 3-[5], 4-[6], 5-[8], 6-[7], сплошная линия – расчёт с использованием L из [20], штрихпунктирная линия – расчёт с использованием формул (3.22) и (3.23).

Построим ошибки видимых скоростей, рассчитанных с помощью аппроксимированных и табличных длин Маркштейна.

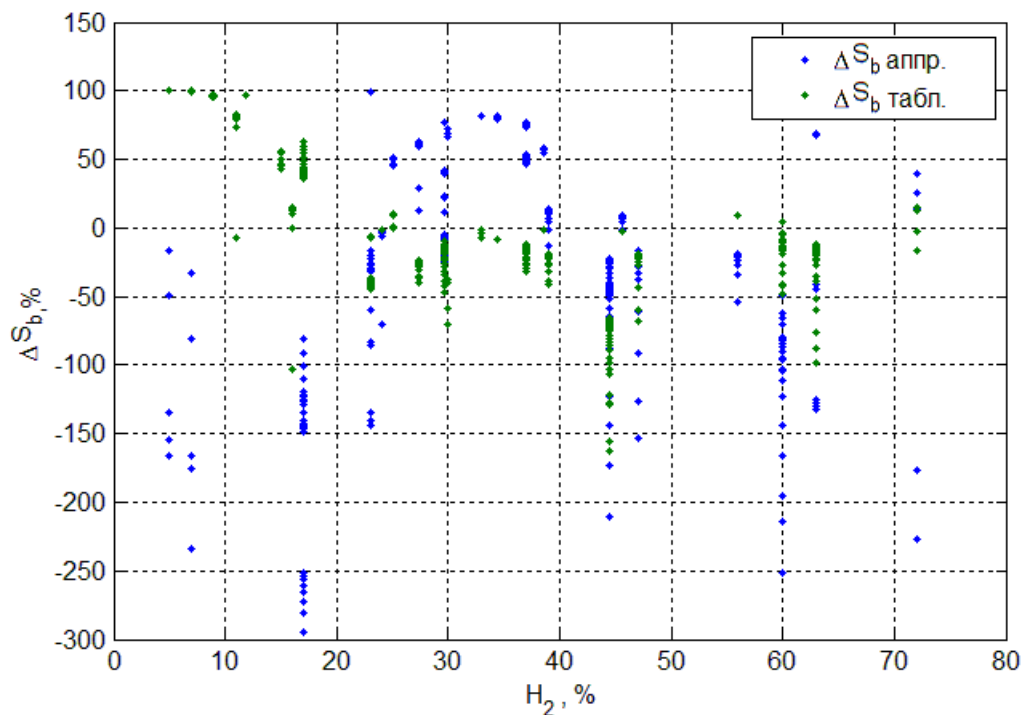


Рис. 3.30. Относительные ошибки видимых скоростей, рассчитанных с помощью аппроксимированных и табличных длин Маркштейна.

Согласно рис. 3.30 разработанная методика применима в диапазоне концентраций H_2 от 5% до 76%. Причём в диапазоне от 23% до 47% разработанная методика лучше, чем исходная [15].

Составим таблицу со средними отклонениями по видимым скоростям, рассчитанным с помощью аппроксимированных и табличных длин Маркштейна.

Таблица 4. Отклонения по видимым скоростям

Статья	Аппроксимированная L	Табличная L [20]
[3]	0,390636 %	0,320699 %
[4]	0,589595 %	0,373938 %
[5]	0,20762 %	0,148484 %
[6]	0,173294 %	0,430891 %
[7]	0,484851 %	0,655811 %
[8]	0,530155 %	0,655811 %
суммарное отклонение для [3]- [8]	2,37615 %	2,62197 %

Исследуемая методика из статьи [15] была улучшена введением зависимости $L(r)$, однако сильного эффекта от учёта этой зависимости не было.

3.5 Выводы по разделу

В данной главе было рассмотрено описание экспериментов из статей [3-8]. Была выведена формула для скорости детонации в приближении Чепмена-Жуге и проведено сравнение скоростей, рассчитанных по полученной формуле, с видимыми скоростями из статей [3-8]. Показано, что наблюдаемые во всех рассмотренных экспериментах скорости горения были ниже рассчитанных скоростей детонации минимум на два порядка. На основании этого был сделан вывод, что во всех рассмотренных экспериментах режим горения соответствовал дефлаграции.

Проведено сравнение максимальных видимых скоростей пламени, полученных экспериментальным путём, и сделан вывод, что видимые скорости из исследуемых статей вполне согласуются друг с другом. Разработана методика расчёта нормальной скорости сферического пламени с использованием Cantera. В рамках предложенной методики используется полученная в настоящей работе зависимость длины Маркштейна от состава смеси и радиуса пламени.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В дипломной работе были рассмотрены основные уравнения трехмерного ламинарного пламени: уравнение состояния идеального газа, законы сохранения массы, импульса и энергии и формулы для коэффициентов переноса.

Был проведен сравнительный анализ программных комплексов Cantera и OpenFOAM. Для дальнейших расчётов была выбрана Cantera из-за быстрого счёта. Был проведён анализ двух кинетических механизмов, используемых в Cantera. Для этого были рассчитаны периоды индукции для различных начальных условий. Полученные значения периодов индукции были сопоставлены с экспериментальными данными из работы [18]. По результатам сравнения относительных отклонений расчётных величин от экспериментальных значений невозможно было сделать выбор в пользу одного из кинетических механизмов. Поэтому для расчётов был выбран механизм [16], поскольку он обеспечивал время счёта в 2 раза ниже, чем механизм [17]. Также было проведено сравнение ламинарных скоростей, полученных с использованием различных кинетических механизмов и экспериментальным путем. После анализа проведенных расчетов сделан вывод, что Cantera хорошо описывает скорость одномерного стационарного ламинарного пламени.

Были рассчитаны скорости детонации в приближении Чепмена-Жуге и сравнены с видимыми скоростями из статей [3-8]. Был сделан вывод, что во всех рассмотренных экспериментах режим горения соответствовал дефлаграции.

Для разработки методики расчёта скорости распространения фронта пламени в водородо-воздушной смеси были исследованы экспериментальные данные из статей [3-8] и для соответствующих начальных условий выполнены серии расчётов с использованием программного комплекса Cantera. С использованием критериальных оценок, описанных в статье [15], и программного комплекса Cantera предложена методика расчёта скорости фронта искривлённого пламени. В рамках предложенной методики используется полученная в настоящей работе зависимость длины Маркштейна от состава смеси и радиуса пламени. Разработанная методика применима в диапазоне концентраций H_2 от 5% до 76%. Причём в диапазоне от 23% до 47% разработанная методика лучше, чем исходная [15]. Исследуемая методика из статьи [15] была улучшена введением зависимости $L(r)$, однако эффект от учёта этой зависимости не очень большой, поэтому в дальнейшем планируется провести дополнительные исследования.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Cantera. – www.cantera.org
2. OpenFOAM. – www.openfoam.com
3. Aung, K.T. Flame Stretch Interactions of laminar premixed hydrogen/air flames at normal temperature and pressure / K.T. Aung, M. I. Hassan, G.M. Faeth // *Combustion and Flame*. – 1997. – V. 109. – P. 1-24.
4. Cheikhravat, H. Flammability limits of hydrogen-air mixtures / H. Cheikhravat, N. Chaumeix, A. Bentaib, C.E. Paillard // *Nuclear technology*. – 2012. – V. 178. – P. 6-16.
5. Dahoe, A.E. Laminar burning velocities of hydrogen-air mixtures from closed vessel gas explosions / A.E. Dahoe // *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. – 2005. – V. 18. – P. 152-166.
6. Dowdy, D.R. The use of expanding spherical flames to determine burning velocities and stretch effects in hydrogen/air mixtures / D.R. Dowdy, D.B. Smith, S.C. Taylor, A. Williams // *Proc. Combust. Inst.* – 1990. – V. 23. – P. 325-332.
7. Kuznetsov M. Flammability limits and laminar flame speed of hydrogen-air mixtures at sub-atmospheric pressures / M. Kuznetsov, S. Kobelt, J. Grune, T. Jordan // *International journal of hydrogen energy*. – 2012. – V. 37. – P. 17580-17588
8. Manoubi, M. Combustion characteristics for non-homogeneous segregated H₂-air mixtures / M. Manoubi. – Department of mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Ottawa, 2015. – 99 p.
9. Egolfopoulos, F.N. An experimental and computational study of the burning rates of ultra-lean to moderately-rich H₂/O₂/N₂ laminar flames with pressure variations / F.N. Egolfopoulos, C.K. Law // *Proc. Combust. Inst.* – 1990. – V. 23. – P. 333-340.
10. Vagelopoulos, C.M. Further consideration of the determination of laminar flame speeds with the counterflow twin flame technique / C.M. Vagelopoulos, F.N. Egolfopoulos, C.K. Law // *Proc. Combust. Inst.* – 1994. – V.25. – P. 1341-1347.
11. Worrell, J.K. The use of the detailed computer modeling to test burning velocity and Markstein length measurement using expanding spherical flames / J.K. Worrell, S.C. Taylor, C. Robinson, D.B. Smith // *Proceedings of the Anglo-German Combustion Symposium, Cambridge*. – 1993. – P. 364-367.
12. Brown, M.J. Markstein lengths of CO/H₂/air flames, using expanding spherical flames / M.J. Brown, I.C. McLean, D.B. Smith, S.C. Taylor // *Proc. Combust. Inst.* – 1996. – V. 26. – P. 875-881.
13. Ландау, Л.Д. Механика сплошных сред / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, – Москва: государственное издательство технико-теоретической литературы, 1953. – 788 с.
14. Гиршфельдер. Молекулярная теория газов и жидкостей / Дж. Гиршфельдер Дж., Ч. Кертисс, Р. Берд – Москва: издательство иностранной литературы, 1961. – 929 с.

15. Kwon, O.C. Flame/stretch interactions of premixed hydrogen-fueled flames: measurements and predictions / O.C. Kwon, G.M. Faeth // *Combust. Flame.* – 2001. – V. 124. – P. 590-610.
16. Boivin, P. Reduced-kinetic mechanisms for hydrogen and syngas combustion including autoignition / P. Boivin, 2011. – 112 p.
17. Smith, G.P. GRI-Mech 3.0 / G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Jr. Gardiner, V.V. Lissianski, Z. Qin.
18. Schultz, E. Validation of Detailed Reaction Mechanisms for Detonation Simulation. CA 91125 Explosion Dynamics Laboratory Report FM99-5 / E. Schultz. J. Shepherd. – Pasadena: Graduate Aeronautical Laboratories California Institute of Technology, 2000. – 230 p.
19. Lewis, B. Explosions in detonating gas mixtures. I. Calculation of rates of explosions in mixtures of hydrogen and oxygen and the influence of rare gases / B. Lewis, J.B. Friauf // *Journ. Amer. Chem. Soc.* – 1930. – V.52. – P. 3905-3924.
20. Гельфанд, Б.Е. Водород: параметры горения и взрыва / Б.Е. Гельфанд, О.Е. Попов, Б.Б. Чайванов, – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 288 с.
21. Варнатц, Ю. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Ю. Варнатц, У. Маас, Р. Диббл, – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 352 с.
22. Зельдович, Я.Б. Математическая теория горения и взрыва / Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе, – М.: Наука, 1980. – 478 с.
23. Льюис, Б. Горение, пламя и взрывы в газах / Б. Льюис, Г. Эльбе, – М.: Мир, 1968. - 592 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1

$\Omega^{(l,s)*}$ – приведенный интеграл, который находится по формуле:

$$\Omega^{(l,s)*} = \frac{\Omega^{(l,s)} \sqrt{\frac{2\pi\mu}{kT}}}{\frac{1}{2}(s+1)! \left[1 - \frac{1+(-1)^l}{2(1+l)}\right] \pi\sigma^2},$$

где $\Omega^{(l,s)}(T) = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu}} \int_0^\infty e^{-\gamma^2} \gamma^{2s+3} Q^{(l)}(g) d\gamma$ – интегралы, через которые выражаются коэффициенты переноса;

$Q^{(l)}(g) = 2\pi \int_0^\infty (1 - \cos^l \chi) b db$ – эффективные сечения переноса;

$\chi(g, b) = \pi - 2b \int_{r_m}^\infty \frac{\frac{dr}{r^2}}{\sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{2\phi(r)}{\mu g^2}}}$ – угол отклонения;

g – относительная начальная скорость сталкивающихся молекул;

b – прицельное расстояние (расстояние наибольшего сближения при отсутствии взаимодействия);

r – минимальное расстояние между молекулами;

r_m – расстояние наибольшего сближения;

μ – приведенная масса для сталкивающихся молекул, определяемая выражением $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}$;

γ – приведенная относительная начальная скорость;

$\phi(r)$ – потенциальная функция.

Физический смысл $\Omega^{(l,s)*}$ состоит в том, что он указывает на отличие какой-либо модели молекулы от идеализированной модели твердых сфер.