

ГОРЕНИЕ, ВЗРЫВ И УДАРНЫЕ ВОЛНЫ

УДК 534.222.2

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЖИМОВ ТУРБУЛЕНТНОГО ГОРЕНИЯ ВОДОРОДА ВБЛИЗИ БЕДНОГО ПРЕДЕЛА

© 2020 г. А. С. Бетев¹, А. Д. Киверин^{2*}, С. П. Медведев¹, И. С. Яковенко²

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова
Российской академии наук, Москва, Россия

²Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: alexeykiverin@gmail.com

Поступила в редакцию 04.06.2020;
после доработки 18.06.2020;
принята в печать 22.06.2020

Предложена постановка задачи численного моделирования горения бедных водородно-воздушных смесей в замкнутом объеме с искусственно генерируемой турбулентностью. Расчеты развития пламени из малого очага в двумерной геометрии показали, что при усилении турбулентности и обеднении смеси наблюдается следующая последовательность режимов: возмущенный фронт без нарушений связности, режим с локальной потерей связности фронта и гашение пламени через распад растущего очага на фрагменты. Переходу от устойчивого горения к гашению соответствует изменение параметров смеси и турбулентности, ведущее к росту влияния турбулентного поля скоростей на локальную структуру пламени. Предложенный метод численного моделирования переходного режима, для которого характерны потеря связности фронта и фрагментация очага под действием турбулентных пульсаций, может быть использован для определения концентрационных пределов горения в зависимости от интенсивности турбулентности.

Ключевые слова: водород, режимы турбулентного горения, бедный предел, численное моделирование.

DOI: 10.31857/S0207401X2012002X

ВВЕДЕНИЕ

Целью фундаментальных исследований горения газов является анализ влияния различных факторов на концентрационные пределы воспламенения и характеристики горения топливно-воздушных смесей. Знание физических механизмов, определяющих реализацию того или иного режима горения, необходимо при разработке новых и совершенствовании существующих технических систем, а также при обосновании мер безопасности на объектах, функционирование которых связано с использованием или генерацией газообразных топливно-воздушных смесей. Отдельный интерес представляют горючие смеси на основе водорода, являющегося как перспективным топливом [1], так и опасным реагентом, генерируемым и накапливаемым в помещениях промышленных объектов, таких как атомные электростанции [2]. В условиях развития аварии на АЭС в пространстве под защитной оболочкой — контейнментом (containment) в результате конвективных течений генерируемый в поврежденной реакторной зоне водород перемешивается с воздухом, водяным паром и другими газообразными компонентами [2]. Случайное воспламене-

ние образующейся горючей смеси от локального источника энергии может привести к взрыву и, как следствие, разрушению контейнмента. Как правило, рекомендации по предотвращению таких взрывов и смягчению их последствий используют характеристики воспламеняемости и горения предварительно перемешанных газов [3–5].

Традиционные подходы к экспериментальному исследованию горения газовых смесей [6, 7] позволяют определить критические условия формирования устойчивых волн горения при локальном воспламенении смеси в замкнутом объеме. Так, бедный предел воспламенения покоящейся водородно-воздушной смеси при нормальных условиях и земной гравитации соответствует объемной доле водорода от 4 [3] до 6% [5], причем горение так называемых ультрабедных составов (от 4–6 до ~9–10%) протекает исключительно в форме “шариков пламени” (flame balls) [8, 9], всплывающих под действием силы Архимеда [10]. Как показано в недавней работе [11], основным механизмом, отвечающим за гашение ультрабедного пламени, является растяжение фронта первоначально сферического очага течением, возникающим при его всплытии. Горение прекращается,

когда происходит разрыв фронта в его ведущей точке и концентрация водорода (менее 4–6%) оказывается недостаточной для поддержания экзотермической реакции в образующихся фрагментах пламени. Аналогичный механизм гашения возможен при распространении пламени от искрового очага на фоне сильной турбулентности. Растяжение пламени наиболее интенсивными пульсациями приводит к образованию выдвинутых в свежую смесь участков фронта (“языков пламени”) и их отрыву от основного пламени [12, 13]. В результате потери связности фронта образуются отдельные очаги, затухание которых может привести к полному прекращению горения. Экспериментально установлено, что при достаточно сильной турбулентности самоподдерживающееся распространение пламени невозможно даже вдали от концентрационных пределов горения, определенных для покоящейся смеси [14]. Влияние описанного сценария гашения турбулентных пламен на скорость горения и пределы воспламенения [15] до настоящего времени мало изучено и представляет интерес для анализа режимов горения в реальных технических системах [16], включая перспективные двигатели [17] и системы подавления наиболее опасных сценариев развития взрыва [18].

В настоящей работе предложена постановка задачи численного моделирования для изучения горения бедных водородно-воздушных смесей в замкнутом объеме с искусственно генерируемой турбулентностью. В результате решения поставленной задачи удалось визуализировать возможные режимы горения в диапазоне концентраций от 5 до 10% водорода в смеси с воздухом.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Основной сложностью при прямом численном моделировании процессов горения горючих смесей реальных составов является необходимость разрешать локальную структуру пламени, характеризующую масштабами порядка ширины фронта, 1 мм, для бедных водородно-воздушных смесей при стандартных условиях. Кроме того, для более точного воспроизведения количественных характеристик горения необходимо использовать детальные кинетические механизмы. Оба фактора накладывают жесткие ограничения на выбор параметров расчета, что сужает возможности прямого численного моделирования ввиду ограниченности вычислительных ресурсов. В частности, расчет процесса горения водородно-воздушной смеси в трехмерной геометрии возможен лишь в области малого размера, и полноценное исследование пространственной структуры пламени и временной эволюции реализуемо только при двумерной постановке задачи. Как показал опыт прямого сравнения результатов численного моделирования с экспериментальными данными по динамике пламени

в бедной водородно-воздушной смеси [19], структура пламени и геометрия фронта в двумерном расчете с хорошей степенью точности соответствуют трехмерным экспериментальным данным. Двумерные расчеты, представленные в работах [10, 11], удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными по пределам горения в условиях земной гравитации [9] и микрогравитации [3–5]. Опираясь на описанный в работе [11] механизм гашения пламени, можно предполагать, что взаимодействие фронта пламени с двумерным течением с хорошей точностью воспроизводит количественные характеристики такого взаимодействия в реальной трехмерной геометрии (по крайней мере, в случае бедных водородно-воздушных смесей). При постановке задачи численного моделирования турбулентного горения целесообразно использовать искусственно генерируемую однородную изотропную турбулентность, представляющую собой стационарный процесс. Хотя характеристики стационарной турбулентности в двумерной и трехмерной геометрии различаются [20], с учетом сделанных выше замечаний ограничимся рассмотрением двумерной турбулентности. Аналогичный подход был предложен в недавней работе [21], где решение двумерной задачи позволило количественно воспроизвести экспериментально определенные параметры турбулентного горения водородно-воздушных смесей.

Расчетная область представляет собой квадрат со стороной 80 мм, ограниченный гладкими адиабатическими стенками (без прилипания). На первой стадии моделируется генерация однородной изотропной турбулентности постоянной интенсивности в горючей смеси заданного состава. На следующей стадии турбулентная смесь воспламеняется точечным источником, расположенным в центре области. Такая геометрия близка к условиям экспериментов [22], где исследовалось горение в условиях стационарной однородной изотропной турбулентности, генерируемой в центральной области камеры постоянного объема системой вентиляторов, расположенных на периферии камеры.

Движение среды описывается системой уравнений Навье–Стокса, записанных в слабосжимаемом приближении [10], что правомерно для моделирования реагирующих течений с малыми скоростями (по сравнению со скоростью звука). Для моделирования развитой однородной изотропной турбулентности используем следующую модель, предложенную ранее в работе [23]. В каждой расчетной ячейке будем рассматривать стохастическое возмущение скорости газа, как развивающийся во времени винеровский случайный процесс с единичной дисперсией и нулевым математическим ожиданием, что обеспечивает правильный закон диффузии возмущений в поле скоростей. В такой постановке компоненты скорости среды в каждой счетной ячейке имеют вид

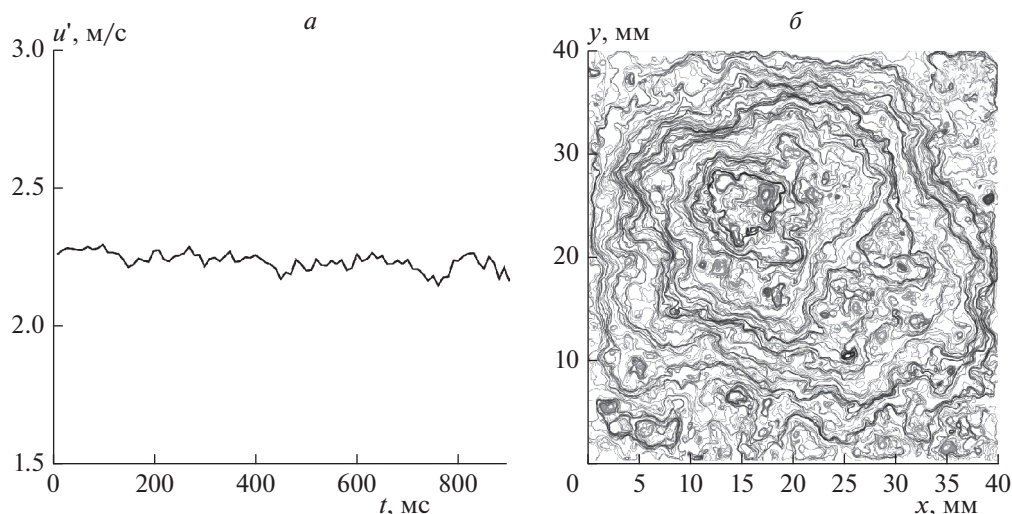


Рис. 1. *a* – Хронограмма средней амплитуды пульсаций скорости при $k = 100$, $u' \approx 2.25$ м/с; *б* – характерная картина поля возмущений скорости в замкнутом объеме (показаны линии тока для случая $k = 100$, $u' \approx 2.25$ м/с).

$$u = u_d + u_s, \quad (1)$$

$$u_s = k\gamma\tau^{1/2}, \quad (2)$$

где u_d – детерминированная составляющая, определяемая из решения уравнений газовой динамики, а u_s – стохастическая составляющая, в определении которой k – множитель, задающий уровень пульсаций, γ – безразмерная случайная величина, распределенная по нормальному закону с единичной дисперсией и нулевым математическим ожиданием, τ – шаг по времени.

Задание случайных возмущений скорости изначально покоящегося газа вызывает в последующие моменты времени движение среды, подчиняющееся уравнениям Навье–Стокса и одновременно испытывающее возмущения в каждой расчетной точке и на каждом шаге по времени. Развивающийся процесс довольно быстро выходит на стационарную по энергии возмущений (амплитуде пульсаций) стадию при всех рассмотренных значениях интенсивности пульсаций k , размеров области, величине расчетных ячеек. Характерная хронограмма пульсаций скорости, иллюстрирующая стационарный процесс при $k = 100$, приведена на рис. 1*а*. На рис. 1*б* показано соответствующее двумерное поле течения. Диссипация возмущений при такой постановке задачи происходит на масштабах меньше расчетной ячейки.

Принятое в работе описание газодинамики горения является стандартным [24] и включает в себя теплопроводность, вязкость, многокомпонентную диффузию, уравнение состояния многокомпонентной реагирующей смеси и кинетику реакций окисления водорода, рассчитываемую согласно механизму, изложенному в работе [25]. Здесь стоит отметить, что в отличие от задач, где оправданным

является использование одноступенчатой реакции окисления водорода (например, задачи о распространении и дифракции детонации [18, 26]), при решении нестационарных задач горения, а тем более при исследовании особенностей горения вблизи концентрационных пределов, использование детальных кинетических механизмов является принципиальным. Расчеты проводились с использованием вычислительного алгоритма, предложенного в работе [27] для решения газодинамических задач в приближении слабой сжимаемости. С целью разрешения в расчетах структуры фронта пламени размер расчетных ячеек выбран равным 0.1 мм (ширина фронта пламени в наименее обедненной из рассмотренных смесей, содержащей 10% водорода, оценивалась равной 1 мм и разрешалась на десяти расчетных ячейках).

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для анализа режимов турбулентного горения используются общепринятые критериальные параметры – числа Дамкелера, Da , и Карловица, Ka . Число Дамкелера определяется как:

$$Da = \frac{L_T s_L}{\delta_L u'}, \quad (3)$$

где L_T – интегральный масштаб турбулентного течения, δ_L – ширина ламинарного пламени, s_L – нормальная скорость горения, u' – амплитуда пульсаций скорости.

Число Карловица определяется как:

$$Ka = \frac{\delta_L^2}{\eta^2}, \quad (4)$$

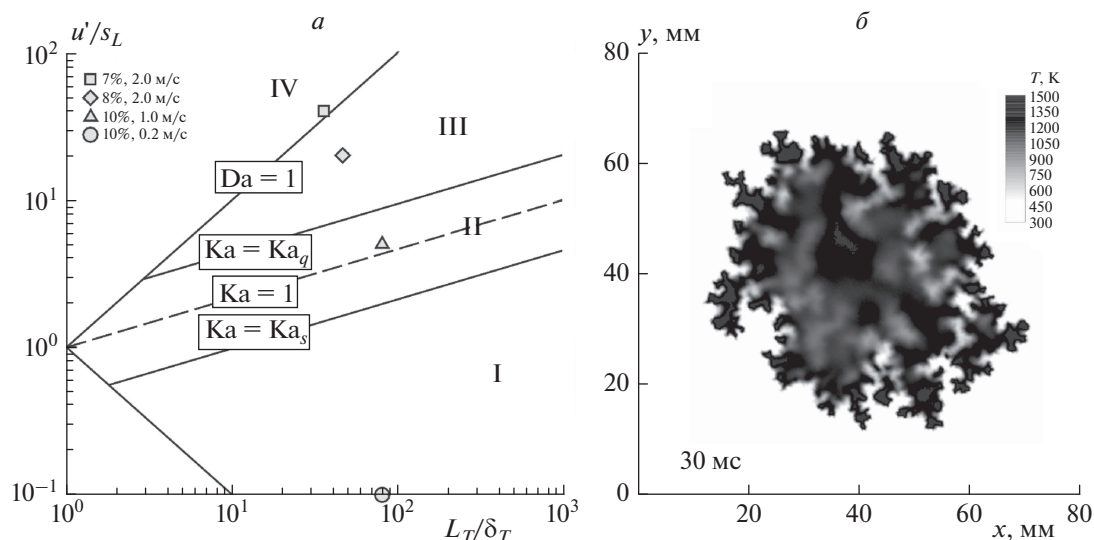


Рис. 2. *a* – Диаграмма режимов горения: I – слабо возмущенное пламя; II – пламя с сильно искривленным фронтом; III – режимы с потерей связности фронта; IV – неустойчивое горение и гашение пламени турбулентными пульсациями; *б* – характерный вид фронта пламени в 10%-ной смеси при $u' = 2.0$ м/с (режим II, $Da = 16$, $Ka = 1.25$); показано поле температуры.

где $\eta = L_T Re^{-3/4}$ – колмогоровский масштаб, Re – турбулентное число Рейнольдса, вычисленное по интегральному масштабу L_T и амплитуде пульсаций скорости u' .

На рис. 2*a* приведена диаграмма, иллюстрирующая современные представления о режимах турбулентного горения, обусловленных преобладающей локальной структурой зоны горения. Линия $Ka = Ka_q$ является условной границей между областями I и II, соответствующими режимам слабо возмущенного и сильно искривленного фронта (в стандартной терминологии “*wrinkled flame*” и “*corrugated flame*”) соответственно. Искривление и растяжение фронта в этих режимах недостаточно сильны, чтобы нарушить локальную структуру на масштабах порядка толщины пламени, и она остается подобной структуре ламинарного пламени. При $Ka > Ka_q$ (область III) появляются отдельные зоны, где сильное растяжение нарушает квазиламинарную структуру пламени и происходит локальное гашение, приводящее к потере связности фронта [13]. При $Da > 1$ структура пламени, локально подобная ламинарной, разрушается турбулентными пульсациями. Вопрос о том, какой режим следует считать доминирующим в области IV, остается предметом дискуссий, как и сама возможность самоподдерживающегося распространения пламени в этой области.

Следуя этим представлениям, рассмотрим режимы горения бедных водородно-воздушных смесей, заполняющих замкнутый объем. Начнем рассмотрение со смеси, содержащей 10% водорода. В этом случае в изначально покоящемся газе

пламя распространяется изотропно от источника воспламенения, охватывая со временем всю расчетную область. Ламинарная скорость пламени составляет ~ 0.2 м/с, а ширина фронта – около 1 мм. При интегральном масштабе, равном 80 мм (ширина расчетной области), и малой амплитуде пульсаций (0.2 м/с) горение протекает в режиме слабо возмущенного пламени (“*wrinkled flame*”, $Ka = 3 \cdot 10^{-3}$) и соответствует области I на диаграмме (рис. 2*a*). При увеличении амплитуды пульсаций скорости реализуется режим сильно искривленного фронта пламени (“*corrugated flame*”, область II на рис. 2*a*). Для 10%-ной водородно-воздушной смеси это наблюдается при амплитуде пульсаций скорости, равной 1 м/с. В данном случае $Ka = 1.25$, и потери связности фронта в проведенных расчетах не обнаружено.

При снижении содержания водорода в смеси наблюдается переход к режиму с потерей связности фронта (область III на рис. 2*a*). Так, в 8%-ной водородно-воздушной смеси при задании пульсаций с амплитудой ~ 2 м/с растяжение фронта под действием турбулентных пульсаций приводит к отрыву от пламени уединенных очагов (рис. 3, режим III). В данном случае $Da = 2.3$. На хронограмме средней скорости горения (кривая III на рис. 4) в момент времени ~ 50 мс величина скорости претерпевает скачок. Это явление можно объяснить тем, что в результате потери связности фронта появление нескольких одновременно растущих очагов приводит к резкому увеличению суммарной площади фронта горения.

В еще более бедной смеси (7% водорода в воздухе) пульсации с амплитудой 2 м/с, намного

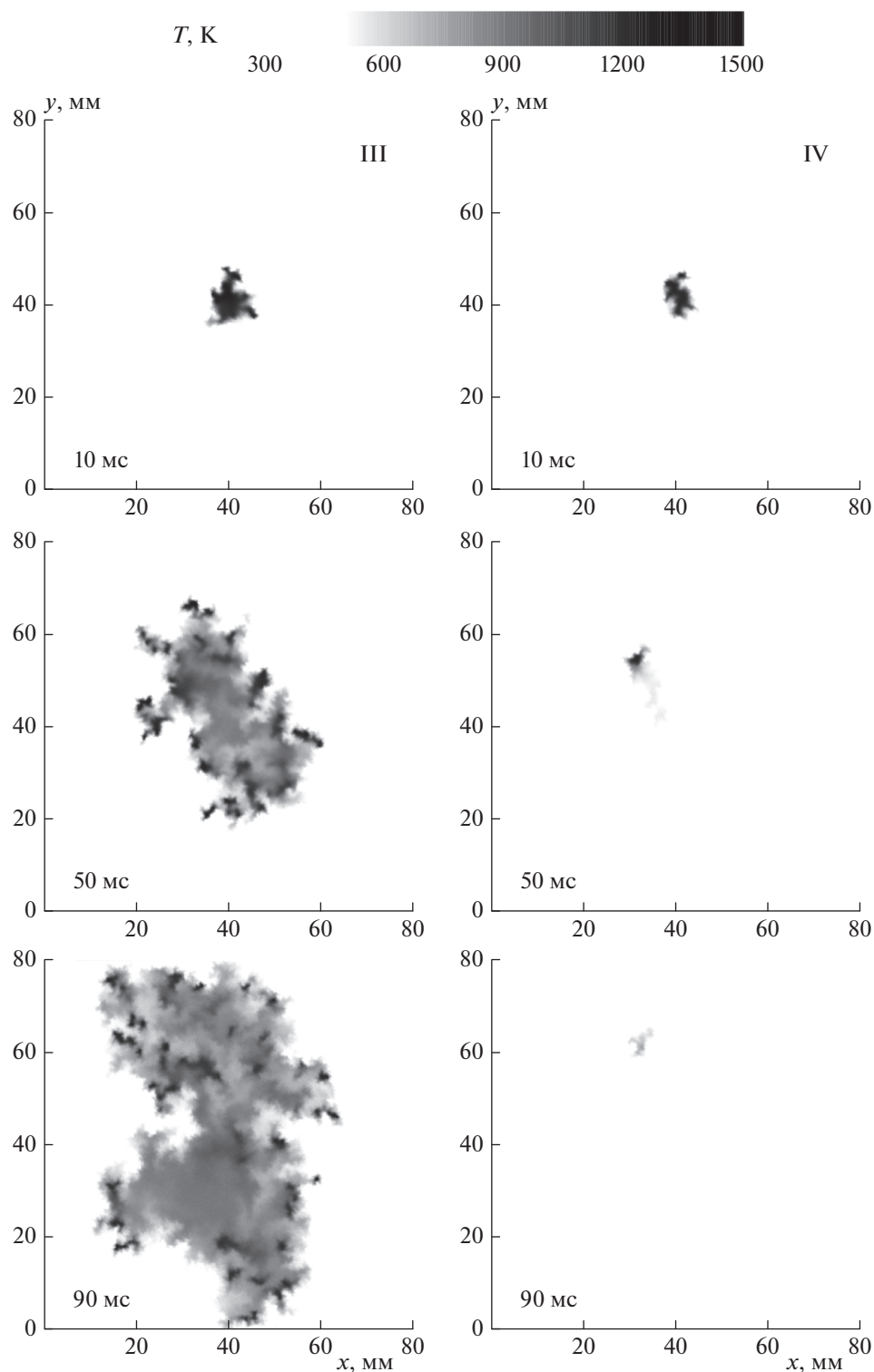


Рис. 3. Изменение во времени картины распространения фронта пламени при концентрациях водорода 8% (режим III, $Da = 2.3$, $Ka = 13.1$) и 7% (режим IV, $Da = 0.88$, $Ka = 42.4$) на фоне поля возмущений скорости с амплитудой 2 м/с; показаны поля температуры на указанные моменты времени.

превосходящей локальную скорость пламени, создают условия, препятствующие устойчивому самоподдерживающемуся горению. В качестве иллюстраций на рис. 3 (режим IV) показано типичное поведение гаснущего очага пламени. В этом режиме усиливается тенденция к распаду началь-

ных возмущений. В этом режиме усиливается тенденция к распаду началь-

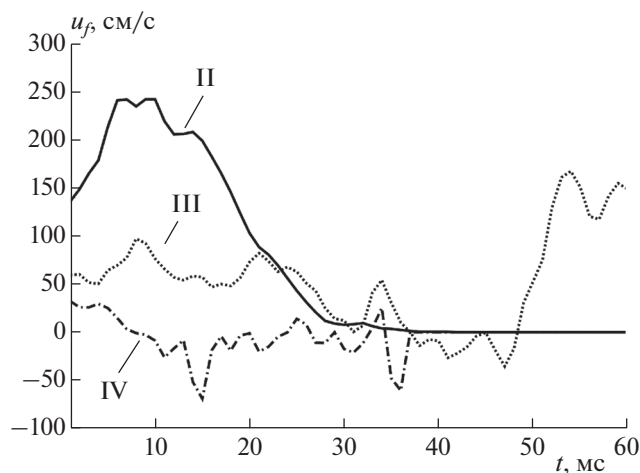


Рис. 4. Хронограммы скорости горения в различных смесях на фоне поля возмущений заданной амплитуды. Режим II – 10%, 2 м/с; режим III – 8%, 2 м/с; режим IV – 7%, 2 м/с.

го очага пламени на части. В отличие от режима III образующиеся в результате отдельные очаги находятся в околоскритическом состоянии. В типичной ситуации каждый из них или постепенно затухает, или продолжает некоторое время медленно расти прежде, чем погаснуть. Разброс времен жизни и скоростей горения этих очагов является причиной колебаний суммарной скорости горения (кривая IV на рис. 4) до его окончательного прекращения по истечении 38 мс. Аналогичное поведение околоскритических турбулентных пламен было отмечено в экспериментах [15], где оно наблюдалось в виде “ступенчатого” роста давления в камере сгорания с искусственно генерируемой турбулентностью.

ВЫВОДЫ

- Предложена постановка задачи численного моделирования турбулентного горения в бедных водородно-воздушных смесях.
- Анализ полученных результатов показал, что ведущим механизмом, определяющим режим и пределы горения в сильно турбулентных смесях, является растаивание локального фронта пламени.
- Отмечена важная роль потери связности фронта пламени в переходе от устойчивого горения к гашению при увеличении интенсивности турбулентности и снижении концентрации водорода.
- Обнаруженная расчетным путем зависимость поведения пламен от их состава и интенсивности турбулентности согласуется с диаграммой режимов, классифицируемых в соответствии с локальной структурой зоны горения.
- Предложенная постановка задачи может использоваться для численной оценки concentra-

ционных пределов турбулентного горения и для расчетно-теоретического сопровождения экспериментальных исследований.

Расчеты выполнены с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ им. М.В. Ломоносова и вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН. Компьютерные модели разработаны при поддержке грантом Президента РФ для государственной поддержки молодых российских ученых (МК-3473.2019.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Abe J., Popoola A., Ajenifuja E., Popoola O. // Intern. J. Hydrog. Energy. 2019. V. 44 (29). P. 15072.
2. Mitigation of Hydrogen Hazards in Severe Accidents in Nuclear Power Plants. IAEA-TECDOC-1661. (Vienna): IAEA, 2011.
3. Coward H.F., Jones G.W. Limits of flammability of gases and vapors // Bull. 503. Washington: US Government printing office, 1952.
4. Cashdollar K.L., Zlochower I.A., Green G.M. et al. // J. Loss Prev. Process Ind. 2000. V. 13 (3–5). P. 327.
5. SAFEKINEX. EU-Project Report on the experimentally determined explosion limits, explosion pressures and rates of explosion pressure rise. Berlin: German Federal Institute for Materials Research and Testing (BAM). 2002.
6. Kumar R.K. // J. Fire Sci. 1985. V. 3. P. 245.
7. Медведев С.П., Гельфанд Б.Е., Поленов А.Н. и др. // Физика горения и взрыва. 2002. № 4. С. 3.
8. Buckmaster J., Joulin G., Ronney P. // Combust. Flame. 1990. V. 79. P. 381.
9. Ronney P.D. // Ibid. 1990. V. 82. P. 1.
10. Yakovenko I.S., Ivanov M.F., Kiverin A.D. et al. // Intern. J. Hydrog. Energy. 2018. V. 43. P. 1894.
11. Kiverin A.D., Yakovenko I.S., Melnikova K.S. // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1147. № 1. P. 012048.
12. Карпов В.П., Соколик А.С. // ДАН СССР. 1961. Т. 141. № 2. С. 393.
13. Yang S., Saha A., Liang W. et al. // Combust. Flame. 2018. V. 188. P. 498.
14. Abdel-Gayed R.G., Bradley D. // Ibid. 1985. V. 62. № 1. P. 61.
15. Северин Е.С. // Физика горения и взрыва. 1985. № 3. С. 55.
16. Басевич В.Я., Беляев А.А., Иванов В.С. и др. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 8. С. 69.
17. Ассад М.С., Альхусан Х., Пенязьков О.Г. и др. // Хим. физика. 2014. Т. 33. № 3. С. 62.
18. Медведев С.П., Хомик С.В., Гельфанд Б.Е. // Хим. физика. 2009. Т. 28. № 12. С. 52.
19. Volodin V.V., Golub V.V., Kiverin A.D. et al. // Combust. Sci. Technol. 2020; <https://doi.org/10.1080/00102202.2020.1748606>
20. Кузнецов Е.А., Серещенко Е.В. // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 105. № 2. С. 70.

21. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. и др. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 1. С. 27.
22. Карпов В.П., Семенов Е.С., Соколик А.С. // ДАН СССР. 1959. Т. 128. С. 1220.
23. Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Шевелкина Е.Д. // Инженерный журнал: наука и инновации. 2013. № 8 (20).
24. Кюо К. Principles of combustion. 2nd ed. Hoboken, New Jersey, USA: Wiley Interscience, 2005.
25. Keromnes A., Metcalfe W.K., Heufer K.A. et al. // Combust. Flame. 2013. V. 160. № 6. P. 995.
26. Михалкин В.Н., Медведев С.П., Маилков А.Е. и др. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 8. С. 52.
27. McGrattan K., McDermott R., Hostikka S. et al. Fire Dynamics Simulator. Technical Reference Guide. Volume 1: Mathematical Model. 2019; <https://doi.org/10.6028/nist.sp.1018e6>