

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ  
ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

УДК 536.79

На правах рукописи

Мельникова Ксения Сергеевна

**«Горение ультра-бедных составов водородно-воздушных смесей на  
больших пространственных масштабах»**

Специальность 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

ДИССЕРТАЦИЯ  
на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук  
Киверин Алексей Дмитриевич

Москва – 2022

**Оглавление**

<b>Введение .....</b>	<b>4</b>
<b>Глава 1. Математическая модель и вычислительный алгоритм, описывающий динамику горения в низкоактивных газовых смесях .....</b>	<b>14</b>
1.1 Математическая модель .....	14
1.2 Вычислительный алгоритм .....	25
<b>Глава 2 Математическое моделирование горения ультра-бедных составов водородно-воздушных смесей на больших пространственных масштабах .....</b>	<b>29</b>
2.1 Литературный обзор .....	29
2.2 Постановка вычислительного эксперимента .....	36
2.3 Валидация и верификация математической модели и ее компьютерной реализации. Определение нормальной скорости горения.....	37
2.4 Особенности динамики распространения ультра-бедного водородно-воздушного пламени .....	40
2.5 Динамика очага горения, при наличии вертикальной стенки.....	47
2.6 Постановка эксперимента по горению ультра-бедной водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 6%.....	50
2.6 Сравнительный анализ расчетных и экспериментальных данных .....	51
2.7 Основные результаты .....	57
<b>Глава 3 Пределы горения ультра-бедных водородно-воздушных смесей .....</b>	<b>58</b>
3.1 Литературный обзор .....	58
3.2 Нижний концентрационный предел горения водородно-воздушных смесей .....	61
3.3 Основные результаты .....	67

<b>Глава 4 Динамика газовых пузырьков в приближении несмешивающихся газов, как модель эволюции ультра-бедного пламени в условиях земной гравитации.....</b>	<b>68</b>
4.1 Обзор литературных источников.....	68
4.2 Постановка вычислительного эксперимента.....	76
4.3 Анализ горения водородно-воздушных смесей с учетом аналогии всплывающих газовых пузырьков.....	79
4.4 Основные результаты .....	92
<b>Заключение.....</b>	<b>94</b>
<b>Список литературы .....</b>	<b>96</b>

## **Введение**

Диссертация посвящена исследованию методами численного моделирования процесса распространения пламени в ультра-бедных водородно-воздушных смесях на больших масштабах объемах.

### **Актуальность темы исследования**

На сегодняшний день темы, связанные с особенностями развития горения в водородно-воздушных смесях являются актуальными, с одной стороны, по причине востребованности водородосодержащих газовых смесей в качестве источника энергии для различных отраслей промышленности и энергетики, а с другой стороны, в виду связанных с эксплуатацией водорода вопросов пожаро- и взрывобезопасности. Согласно современной концепции развития альтернативной энергетики, основанной на признанной необходимости переоценки существующей зависимости от ископаемого топлива [1-5], водород является одним из наиболее перспективных топлив в виду следующих особенностей: водород самый легкий элемент с самой высокой теплотворной способностью; водород является устойчивым и нетоксичным топливом, и в отличие от нефтепродуктов, природного газа или угля, он является экологически чистым энергоносителем, так как единственным продуктом его экзотермической реакции с кислородом является вода.

Однако, учитывая высокую химическую активность водорода, проектирование и эксплуатация объектов, на которых возможны случаи выброса и аккумуляции водорода, требует тщательного анализа возможных сценариев развития аварийных ситуаций и разработки средств эффективного подавления взрыва. В условиях эксплуатации реальных технических систем и энергообъектов образование и взрыв стехиометрических газовых смесей является довольно редким явлением. В большинстве случаев горючие газы выделяются постепенно в результате декомпрессии топливных баков или химического пути образования горючего компонента. В больших объемах,

характерных для реальных технических систем, требуется очень интенсивное выделение и длительные периоды времени, чтобы горючий газ смешался с атмосферой окислителя и образовал высокоактивную газовую смесь близкого к стехиометрическому составу. В реальных условиях наличие вентиляции также эффективно снижает количество горючего компонента в газовой смеси внутри объема. Более того, из-за естественной конвекции имеет место стратификация горючего компонента, выражаемой в формировании вертикального градиента концентрации. Так как водород легче атмосферного воздуха, то состав водородно-воздушной смеси у потолка оказывается богаче, чем у пола.

Аналогичный сценарий может наблюдаться при развитии аварийной ситуации на АЭС, в ходе которой водород, генерируемый в подверженной разрушению реакторной зоне, может накапливаться под куполом контейнента [6]. При этом локальное содержание водорода в атмосфере вблизи нижней части реакторной зоны может соответствовать ультра-бедному составу, близкому к нижнему пределу воспламенения смеси. Развитие горения в такой среде протекает без значительных тепловых и динамических нагрузок на оболочку или на оборудование внутри нее. Тем не менее, нестационарное развитие очага горения и его конвективный перенос в условиях земной гравитации может стать причиной инициирования интенсивного горения в верхней части ограниченного объема, заполненной более богатой и химически активной смесью. Таким образом, проблема точного определения концентрационных пределов воспламеняемости обедненной смеси и развития пламени в газовых смесях, близких к предельным, имеет первостепенное значение для анализа безопасности реальных объектов. Все эти соображения следует учитывать при разработке надежных систем пожаро- и взрывобезопасности, а описанные физические процессы и особенности их развития требуют более детального изучения.

## Степень разработанности темы исследования

С развитием методов численного моделирования газодинамических процессов стало возможным решение задач горения водородно-воздушных газовых смесей в широком диапазоне концентраций водорода, включая ультра-бедные составы, и исследовать влияние состава на развитие процессов воспламенения и горения. Проблема оценки концентрационных пределов воспламенения и горения обедненных смесей, являющаяся одной из фундаментальных проблем горения, была тщательно изучена экспериментально, и в настоящее время накоплен большой объем экспериментальных данных о предельных значениях концентрации в зависимости от различных условий, включая добавки инертных и ингибирующих компонентов, а также изменение термодинамического состояния смеси и ее турбулизацию. В зависимости от концентрации водорода водородно-воздушные смеси классифицируются на ультра-бедные (от 4-6% до 9-10 % водорода в водородно-воздушной смеси), бедные (менее 15 %), около стехиометрические (менее 29,6%), стехиометрическая (29,6%) и богатые (более 29,6%). Исследования режимов горения ультра-бедных и бедных водородно-воздушных смесей методами математического моделирования проведены в работах [7-8]. Ввиду слабой активности ультра-бедных и бедных водородно-воздушных смесей, особое внимание уделяется вопросам устойчивости пламени. Впервые теоретический анализ структуры пламени и механизмов поддержания горения в ультра-бедных горючих газовых смесях был проведен Я. Б. Зельдовичем в работе [9]. В частности, в работе предсказано, что горение ультра-бедных газовых смесей возможно в форме сферического очага горения, основным механизмом поддержания горения в котором является диффузионный перенос недостающего компонента смеси в зону реакции. Однако, теоретический анализ [9] показал также, что структура сферических диффузионных пламен внутренне неустойчива из-за термодиффузионной неустойчивости. Тем не менее, дальнейшие

исследования показали, что возможна стабилизация таких очагов горения в условиях гравитации [10, 11]. В условиях микрогравитации, устойчивое ультра-бедное горение также наблюдается благодаря наличию тепловых потерь на излучение [12, 13] или тепловых потерь на холодную стенку [14]. Влияние термодиффузионной неустойчивости на режимы распространения пламени ультра-бедных газовых смесей, в условиях микрогравитации проанализировано в работе [13]. В работах [15, 16] исследовано влияние конвективной неустойчивости на фронт пламени при восходящем распространении пламени. При этом неустойчивость Ландау-Дарье [17-19] не проявляется по причине низкого значения скорости горения ультра-бедных и бедных смесей.

Сопоставление экспериментальных и расчетных данных для количественной оценки динамики горения бедных смесей  $H_2-O_2-N_2$  проведено в работах [11,20]. В экспериментальных работах [21-24] наблюдалась начальная стадия распространения горения от источника энерговыделения и образование характерной шапкообразной (колпачковой, cap-shaped) структуры очага горения. В работах [25-27], посвященных горению метано-водородных и водородных смесей, горение рассматривалось в цилиндрической горелке, а в работах [21, 23, 28] исследование динамики горения рассматривалось в трубах. В экспериментальных работах [23,29] исследовались смеси с концентрацией, близкой к нижнему концентрационному пределу. Бабкин и его коллеги наблюдали восходящее распространение горения в форме шариков пламени и более сложные структуры очага горения в зависимости от концентрации смеси и от диаметра трубы. В экспериментальной работе [30] исследуется горение водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 5 % – 13% в узких каналах (hele-shaw cells). Авторы исследовали влияние высоты канала на скорость пламени и полноту сгорания смеси. В работе [31] горение бедных водородно-воздушных смесей рассматривалось в полузакрытых каналах различной высоты. Было показано, что при  $\phi \leq 0,26$  основным механизмом,

определяющим структуру фронта пламени, является неустойчивость Рэлея-Тейлора. Также авторы отметили, что давление, зарегистрированное в канале, остается постоянным в течение всего процесса горения.

Несмотря на широкое исследование вопросов горения околопредельных ультра-бедных составов, динамика околопредельного пламени и физические механизмы, определяющие развитие горения в реальных условиях, на крупных пространственных масштабах с учетом земной гравитации, все еще плохо изучены.

### **Цели и задачи работы**

Основной целью диссертации является выявление методами детального численного моделирования механизмов, определяющих распространение горения в ультра-бедных водородно-воздушных газовых смесях. Для достижения цели исследования в работе решались следующие задачи:

1. Выбор математической модели и вычислительного алгоритма для оптимального решения методами численного моделирования задач о развитии горения в ультра-бедных водородно-воздушных смесях.
2. Двухмерное детальное моделирование пламен, распространяющихся под действием гравитационного поля в водородно-воздушных смесях обедненного состава.
3. Исследование влияния концентрации водорода в ультра-бедной водородно-воздушной смеси на устойчивость пламени в условиях земной гравитации и микрогравитации.
4. Сопоставление результатов численного моделирования с экспериментальными данными, полученными в лаборатории Физической газовой динамики ОИВТ РАН.
5. Двухмерное моделирование восходящего движения химически неактивных легких газовых пузырьков в более тяжелом окружающем

газе для дополнительной интерпретации роли силы Архимеда и конвективных течений в эволюции очагов горения.

### **Научная новизна работы**

Проведено детальное моделирование процессов горения ультра-бедных водородно-воздушных смесей в больших объемах в условиях земной гравитации.

Определены основные физические механизмы, влияющие на устойчивость и развитие процесса горения в рассмотренных постановках, выявлена определяющая роль газодинамических течений.

Разработан подход к классификации различных режимов горения в околопредельных смесях. На основе расчетов химически неактивных газовых пузырьков получена диаграмма на плоскости безразмерных чисел Рейнольдса и Фруда, позволяющая выделить области устойчивого и неустойчивого режимов горения.

**Теоретическая и практическая значимость работы** определяется новыми результатами в области теории горения и взрыва, которые могут быть использованы для исследования задач пожаро- и взрывобезопасности технических систем, использующих в качестве топлива смеси на основе водорода. Предложенный подход к численному исследованию газодинамических течений в приближении малой сжимаемости применим для различных смесей, характеризующихся избытком или недостатком топлива, развитие горения в которых сопровождается газодинамическими процессами малой интенсивности.

### **Методология и методы исследования**

Поставленные в рамках диссертации задачи решались методами вычислительной газовой динамики, с использованием программного комплекса «NRG», предназначенного для исследования процессов горения и детонации, разработанного в лаборатории Вычислительной физики ОИВТ

РАН. Для решения поставленных задач в ходе диссертационной работы программный код был модернизирован, с учетом специфики исследуемых задач. За основу был взят хорошо зарекомендовавший себя вычислительный алгоритм для решения задач динамики газов в приближении малой сжимаемости.

Результаты математического моделирования сопоставлялись с экспериментальными данными, полученными в лаборатории Физической газовой динамики ОИВТ РАН.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Результаты численного моделирования горения ультра-бедных водородно-воздушных смесей в приближении малой сжимаемости.
2. Детальное описание процесса распространения горения в ультра-бедных составах водородно-воздушных смесей в свободном пространстве, в условиях земной гравитации.
3. Механизм развития неустойчивости очагов ультра-бедного горения вблизи нижнего концентрационного предела, в условиях земной гравитации.
4. Результаты количественного определения нижнего концентрационного предела горения водородно-воздушной смеси в свободном пространстве в условиях земной гравитации.
5. Классификация режимов горения, полученная на основе расчетов химически неактивных газовых пузырьков, позволяющая выделить область устойчивого горения ультра-бедных водородно-воздушных смесей в свободном пространстве.

### **Степень достоверности и апробация результатов**

Качественные и количественные оценки, полученные численно, были сопоставлены с экспериментальными данными, полученными в лаборатории Физической газовой динамики ОИВТ РАН, и дали хорошее согласие с

экспериментальными данными по динамике очага ультра-бедного горения на крупных масштабах.

Расчеты ультра-бедного горения в условиях микрогравитации и оценка нижнего концентрационного предела находятся в хорошем согласии с известными экспериментальными и расчетно-теоретическими данными.

Количественная оценка нижнего концентрационного предела горения водорода в воздухе находится в хорошем согласии с известными экспериментальными данными.

Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих научных конференциях: V Минский международный коллоквиум по физике ударных волн, горения и детонации (Минск, Белоруссия, 2017), XXIII- International Conference on Equations of State for Matter (Эльбрус, 2018), 8<sup>th</sup> International Symposium on Nonequilibrium Processes, Plasma, Combustion and Atmospheric Phenomena NEPCAP 2018 (Сочи, 2018), XIX Школа молодых ученых ИБРАЭ РАН (Москва, 2018), XXXIV International conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Эльбрус, 2019), 27<sup>th</sup> International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (Пекин, Китай, 2019), XV Всероссийский симпозиум по горению и взрыву (Москва, 2020).

### **Личный вклад автора**

Автором диссертации лично выполнена разработка новой методики расчета горения ультра-бедных составов в приближении малых чисел Маха, проведены математическое моделирование и обработка расчетных данных. Автор принимал активное участие в обсуждении полученных результатов, их интерпретации и написании научных статей по теме исследования.

## Публикации

Основные результаты квалификационной работы опубликованы в 11 печатных изданиях, 6 из которых в журналах, рекомендованных ВАК, 5 - в сборниках и трудах конференций.

### Публикации в журналах из перечня ВАК

I. Yakovenko, I.S. Large-scale flame structures in ultra-lean hydrogen-air mixtures / Yakovenko I.S., Ivanov M.F., Kiverin A.D., Melnikova K.S. // International Journal of Hydrogen Energy. — 2018. — Vol. 43. — P. 1894-1901.

II. Динамика очагов горения в ультра-бедных водородно-воздушных смесях в крупных масштабах в условиях земной гравитации / Володин В.В., Голуб В.В., Киверин А.Д., Мельникова К.С., Микушкин А.Ю., Яковенко И.С. // Горение и взрыв. — 2019. — № 2(12). — С. 53-59.

III. Volodin, V.V. Large-scale dynamics of ultra-lean hydrogen-air flame kernels in terrestrial gravity conditions / Volodin V.V., Golub V.V., Kiverin A.D., Melnikova K.S., Mikushkin A.Y., Yakovenko I.S. // Combustion science and technology. — 2021. — № 193(2). — P. 225-34.

IV. Yakovenko, I. Ultra-Lean Gaseous flames in terrestrial gravity conditions / Yakovenko I., Kiverin A., Melnikova K. // Fluids. — 2021. — Vol. 6(21). — 1058113. (ISSN 2311-5521).

V. Kiverin, A.D. On the structure and stability of ultra-lean flames / A. D. Kiverin, I.S. Yakovenko, K. S. Melnikova // Journal of Physics: Conference series. — 2019. — V. 1147. — 012048.

VI. Kiverin, A.D. Peculiarities of mathematical modeling of combustion of hydrogen flames / A. D. Kiverin, K. S. Melnikova, K. O. Minaev, A.E.Smygalina, I.S. Yakovenko // Journal of Physics: Conference series. — 2019. — V. 1348. — 012091.

**Публикации в сборниках материалов и тезисов научных конференций**

ii.1 Иванов, М.Ф. Развитие горения в водородно-воздушных смесях обедненного состава/ Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Мельникова К.С., Яковенко И.С. // Сборник докладов V Минский международный коллоквиум по физике ударных волн, горения и детонации. — 2017. — С. 65-71.

ii.2 Yakovenko, I. Stability of ultra-lean hydrogen flames in terrestrial conditions” / Yakovenko I., Melnikova K., Kiverin A. // Proceedings of 8<sup>th</sup> International Symposium on Nonequilibrium Processes, Plasma, Combustion and Atmospheric Phenomena. — 2019.

ii.3 Мельникова, К.С. Устойчивость ультра-бедных водородных пламен в условиях земной гравитации / Мельникова К.С. // Сборник трудов XIX научной школы молодых ученых ИБРАЭ РАН. — 2018. — С. 121-124.

ii.4 Volodin, V.V Ultra-lean hydrogen-air flame kernels large-scale dynamics in terrestrial gravity conditions / Volodin V.V., Golub V.V., Kiverin A.D., Melnikova K.S., Mikushkin A.Yu., Yakovenko I.S. // Proceedings of international colloquium on the dynamics of explosions and reactive systems. — 2019.

ii.5 Володин, В.В. Динамика очагов горения в ультра-бедных водородно-воздушных смесях в крупных масштабах в условиях земной гравитации / Володин В.В., Голуб В.В., Киверин А.Д., Мельникова К.С., Микушкин А.Ю., Яковенко И.С. // Тезисы XV Всероссийского симпозиума по горению и взрыву. — 2020. — Т.1. — С. 145-46.

### **Структура диссертации**

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Диссертация содержит 109 страниц, 28 рисунков. Список литературы включает 128 наименований.

## **Глава 1. Математическая модель и вычислительный алгоритм, описывающий динамику горения в низкоактивных газовых смесях**

В Главе 1 описана математическая модель, используемая для моделирования процессов всплытия газовых пузырей и горения в ультра-бедных водородно-воздушных смесях [VI]. Представлен вычислительный алгоритм, реализующий математическую модель, для решения задач о горении низкоактивных обедненных составов водородно-воздушных смесей и задач о динамике газовых пузырей. Рассмотрен метод решения системы газодинамических уравнений с учетом особенностей горения ультра-бедных водородно-воздушных смесей на больших пространственных масштабах. Представлен алгоритм расчета транспортных коэффициентов, термодинамических величин и параметров химической кинетики.

### **1.1 Математическая модель**

Для детального описания процессов, протекающих в газовой фазе в процессе горения использовалась система нестационарных уравнений газодинамики. Для воспроизведения особенностей развития динамических процессов в реагирующей среде в системе уравнений газодинамики учтены вязкость, теплопроводность, многокомпонентная диффузия и выделение тепла за счет химических реакций. Система уравнений газодинамики в совокупности с табличными уравнениями состояния среды позволяют получить решения, содержащие в себе информацию обо всех процессах,

сопутствующих явлению распространения горения в реагирующей газовой смеси.

Основной сложностью при прямом численном моделировании процессов горения горючих смесей реальных составов является необходимость разрешать локальную структуру пламени, характеризуемую масштабами порядка ширины фронта пламени (порядка 1 мм для бедных водородно-воздушных смесей при нормальных условиях). Кроме того, для более точного воспроизведения количественных характеристик горения необходимо использовать детальные кинетические механизмы, описывающие реакцию окисления водорода на основании системы элементарных реакций с участием всех промежуточных радикалов. 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 возможно только при двухмерной постановке задачи. Как показало прямое сравнение результатов численного моделирования с экспериментальными данными по динамике пламени в ультра-бедной водородно-воздушной смеси, представленное в Главе 2, структура пламени и геометрия фронта в двухмерном расчете с хорошей степенью точности соответствуют трехмерным экспериментальным данным. Двухмерные расчеты, представленные в [I, ii.2], удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными по пределам горения в условиях микрогравитации [13] и земной гравитации [32-34].

Будем рассматривать процесс горения внутри двухмерной расчетной области заданного размера с открытыми граничными условиями сверху и по бокам и жесткой непроницаемой стенкой снизу, моделирующими развитие процесса в неограниченном пространстве, а также в области, ограниченной

жесткими непроницаемыми стенками снизу и слева и открытыми граничными условиями справа и сверху.

Горение бедных и ультра-бедных газовых смесей характеризуется малой интенсивностью. Наиболее существенное влияние на динамику распространения пламени в таких средах оказывают факторы, связанные с гравитацией, гидродинамической и термодиффузионной неустойчивостями. Ламинарная скорость горения в этих смесях невелика по сравнению со скоростями горения стехиометрических составов, в то время как ширина фронта горения может быть на порядок больше. Данные особенности позволяют использовать более грубые сетки в расчетах горения бедных смесей. Необходимость измельчения расчетной сетки может возникать при необходимости лучшего воспроизведения неустойчивостей. В ряде случаев их вклад в динамику процесса и определение выходных его характеристик достаточно мал и может быть учтен в рамках численной погрешности используемых методов и математических моделей.

Как было сказано выше, более детальное исследование процессов, сопровождающих развитие горения в ультра-бедных смесях в неограниченном пространстве, указывает на относительно малую интенсивность формирующихся в ходе развития процесса течений [31], характеризуемых малыми числами Маха  $M=U/c \ll 1.0$ , где  $U$  – модуль массовой скорости,  $c$  – скорость звука. В таком случае целесообразно решать задачу о динамике среды в приближении малой сжимаемости (или малых чисел Маха). В рамках такого приближения намеренно пренебрегается сжимаемостью среды, что позволяет исключить из рассмотрения акустические процессы. Если представить полное давление  $p$  в виде суммы статического давления  $\bar{p}$  (определяемого термодинамическим состоянием среды) и динамического давления  $\tilde{p}$  (определяемого возмущениями среды за счет локального подвода энергии), то изменениями термодинамической части в пространстве можно пренебречь, тогда как, динамическая часть оказывается малой по сравнению с

термодинамической ( $\tilde{p} \ll \bar{p}$ ). Это позволяет в явном виде разделить две компоненты полного давления и значительно упростить исходную систему уравнений, описывающую движение реагирующей среды. В частности, поле динамического давления на каждый момент времени в такой постановке является решением уравнения эллиптического типа, и динамика среды рассчитывается согласно уравнению переноса с источником, задаваемым согласно текущему полю динамического давления. Таким образом, при использовании приближения малой сжимаемости нет необходимости в воспроизведении характерных времен распространения волн сжатия, что позволяет значительно смягчить требования, накладываемые на величину временного шага. Существенное увеличение временного шага при использовании алгоритмов на основе приближения малой сжимаемости открывает возможность проведения крупномасштабного моделирования медленных процессов горения и наблюдать процесс на относительно больших временных интервалах.

Приведем систему уравнений, описывающих динамику реагирующей газообразной среды в приближении малой сжимаемости [35]:

Закон сохранения массы:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

Законы сохранения масс отдельных компонент смеси:

$$\left( \frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i Y_k)}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial(\rho Y_k V_{k,j})}{\partial x_i} + \rho \dot{\omega}_{chem} \quad (2)$$

В приближении малых чисел Маха закон сохранения импульса записывается в следующем виде:

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} - \vec{u} \times \vec{\omega} + \nabla H - \tilde{p} \nabla \left( \frac{1}{\rho} \right) = \frac{1}{\rho} ((\rho - \rho_0) + \nabla \cdot \sigma) \quad (3)$$

Закон сохранения энтальпии:

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho h_s u_k}{\partial x_k} = \frac{d\bar{p}}{dt} + \frac{\partial(u_i \sigma_{ik})}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho \sum_k h_{s,k} Y_k \vec{V}_{k,i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x_k} \right) - \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k \Delta h_{s,k}^0 \quad (4)$$

Уравнение для пространственного распределения возмущений давления запишется следующим образом:

$$\nabla^2 H = - \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \vec{u}) + \nabla \cdot \vec{F} \right] \quad (5)$$

$$\vec{F} = -\vec{u} \times \omega - \frac{1}{\rho} [(\rho - \rho_0) \vec{g} + \nabla \cdot \sigma] - \tilde{p} \nabla \left( \frac{1}{\rho} \right)$$

Правая часть уравнения (5) определяет источники возмущений давления – локальные градиенты скоростей, вызванные перераспределением энергии в пространстве и вязкими напряжениями.

$x_k = \{x, y, z\}$  - радиус-вектор частицы в трехмерной декартовой системе координат Эйлера;

$u_i = \{u_x, u_y, u_z\}$  компоненты массовой скорости по направлениям  $x, y, z$ ;

$\rho$  – плотность смеси,  $[\rho] = \text{кг}/\text{м}^3$ ;

$\rho_0$  – начальная плотность смеси,  $[\rho_0] = \text{кг}/\text{м}^3$ ;

$p = \bar{p} + \tilde{p}$  - полное давление,  $[p] = \text{Па} = \text{кг}/\text{м} * \text{с}^2$ ;

$\bar{p}$  - термодинамическая составляющая давления,  $[\bar{p}] = \text{Па} = \text{кг}/\text{м} * \text{с}^2$ ;

$\tilde{p}$  - динамическая составляющая давления,  $[\tilde{p}] = \text{Па} = \text{кг}/\text{м} * \text{с}^2$ ;

$\sigma_{ij}$  – тензор вязких напряжений,  $\sigma_{ij} = \mu(Y_k, T) \left[ \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right]$

$[\sigma_{ij}] = \text{Па} = \text{кг}/\text{м} * \text{с}^2$ ;

$\lambda(T)$  – коэффициент теплопроводности,  $[\lambda] = \text{Дж}/\text{К} * \text{м} * \text{с}$ ;

$\dot{\omega}_{chem}$  – источниковый член, описывающий энерговыделение за счет химических превращений  $[\dot{\omega}_{chem}] = \text{моль} / \text{с} * \text{м}^3$ ;

$\vec{\omega}$  – вектор завихренности;

$Y_k = \rho_k / \rho$  – массовая доля  $k$ -ой компоненты смеси  $[Y_k] = \text{ед.}$ ;

$\Delta h_{s,k}^0$  – молярная энтальпия образования компоненты смеси  $[h_{s,k}] = \text{Дж} / \text{моль}$ ;

$h_s$  – энтальпия образования смеси  $h_s = \sum_k h_{s,k} Y_k = \sum_k T c_{p,k} Y_k$ ;  $[h_s] = \text{Дж} / \text{моль}$ ;

$\vec{V}_{k,i}$  – скорость диффузии  $k$ -й компоненты смеси;

$H = \left| \vec{u} \right|^2 / 2 + \tilde{p} / \rho$  – энергия торможения на единицу массы,  $[H] = \text{Дж} / \text{кг}$

Для замыкания системы уравнений динамики используются табличные уравнения состояния:

$$\bar{p} = \rho R T \sum_k \frac{Y_k}{M_k} \quad (6)$$

$$dh_s = C_p(Y_k, T) dT$$

где  $C_p(Y_k, T)$  – удельная теплоемкость при постоянном давлении,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $M_k$  – молярная масса  $k$ -й компоненты смеси  $[M_k] = \text{кг} / \text{моль}$ . Зависимость теплоемкостей смеси от температуры задавались из теплофизических таблиц JANAF путем интерполяции полиномами пятого порядка [36, 37]. В математическую модель не включались модели подсеточной турбулентности, так как размер вычислительной ячейки позволял разрешать мелкомасштабные вихри.

### Механизм химической кинетики

В общем случае, механизм химической кинетики, состоящий из нескольких необратимых элементарных химических реакций, может быть представлен в виде:



Представленный механизм математически описывается системой жестких обыкновенных дифференциальных уравнений относительно молярных плотностей отдельных компонент смеси  $X_i$  [38]:

$$\dot{\omega}_{chem} = \sum_{r=1}^R \left( k_{rf}(T) \cdot (\nu_{ri}^{(p)} - \nu_{ri}^{(r)}) \prod_{s=1}^K X_s^{\nu_{rs}^{(r)}} + k_{rb}(T) \cdot (\nu_{ri}^{(r)} - \nu_{ri}^{(p)}) \prod_{s=1}^K X_s^{\nu_{rs}^{(p)}} \right) \quad (8)$$

, где  $K$  – число компонент в смеси,  $k_{rf}(T)$  и  $k_{rb}(T)$  – скорости протекания  $r$ -й реакции в прямом и обратном направлении,  $\nu_{ri}^{(p)}$  и  $\nu_{ri}^{(r)}$  – стехиометрические коэффициенты  $i$ -й компоненты  $r$ -й реакции в продуктах и реагентах соответственно.

Константы скоростей реакций описываются законом Аррениуса:

$$k_r(T) = A_r T^{\beta_r} \exp\left(\frac{-E_r}{RT}\right) \quad (9)$$

где  $A_r$  – предэкспоненциальный множитель,  $\beta_r$  – температурный показатель степени,  $E_r$  – энергия активации. Эти три параметра определяются из физико-химических расчетов при разработке кинетических механизмов и считаются постоянными.

Стоит отметить, что в отличие от задач, где оправданным является использование одноступенчатой реакции окисления водорода (например, задачи о распространении и дифракции детонации [17, 39-43]) при решении нестационарных задач горения, а тем более при исследовании особенностей горения вблизи концентрационных пределов, использование детальных

кинетических механизмов является принципиальным. В работе использовалась современная кинетическая схема горения водородно-воздушной смеси, включающая 21 обратимую элементарную реакцию между 8 компонентами  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $H$ ,  $O$ ,  $OH$ ,  $HO_2$ ,  $H_2O_2$  [44].

Блок расчета химической кинетики реализован следующим образом:

1) Рассчитываются константы скоростей химических реакций при заданных на данный момент времени локальных значениях температуры и концентраций отдельных компонент смеси;

2) Записываются правые части системы дифференциальных уравнений химической кинетики для компонент, принимающих участие в цепной реакции горения водорода:  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $H_2O$ ,  $H$ ,  $O$ ,  $OH$ ,  $HO_2$ ,  $H_2O_2$ .

3) Составленная жесткая система обыкновенных дифференциальных уравнений [45] решается численно в каждой ячейке, на каждом временном шаге, методом Гира, реализованном в системе подпрограмм из библиотеки Slatec [46].

### **Вычисление коэффициентов переноса**

Процессы молекулярного переноса, т.е. диффузия, теплопроводность и вязкость, имеют в своей основе одно явление: соответствующие физические свойства распространяются в среде за счет движения молекул рассматриваемой среды. Диффузия представляет собой перенос массы за счет градиентов концентрации, вязкость – перенос импульса за счет градиентов скорости, теплопроводность – перенос энергии за счет градиентов температуры. Кроме того, существуют и другие явления, которые связаны с переносом массы за счет градиентов температуры, такие как термодиффузия (эффект Соре), и переносом энергии за счет градиентов концентрации (эффект Дюфо). Коэффициенты переноса вычислялись из первых принципов молекулярно-кинетической теории [37,47].

Согласно эмпирически установленному закону теплопроводности Фурье плотность теплового потока пропорциональна градиенту температуры:

$$\mathbf{J}_T = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_k} \quad [\text{Вт}/\text{м}^2].$$

Это означает, что тепловой поток направлен из области с высокой температурой в область с низкой температурой. Коэффициент пропорциональности  $\lambda$ , называется коэффициентом теплопроводности. Для смеси газов коэффициент теплопроводности вычислялся согласно соотношению:

$$\lambda = \frac{1}{2} \left[ \sum_i X_i \lambda_i + \left( \sum_i \frac{X_i}{\lambda_i} \right)^{-1} \right], \text{ где}$$

$X_i = n_i/n$  – мольная доля, а коэффициенты теплопроводности для каждого компонента смеси находились из соотношения [38]:  $\lambda_i = \frac{25}{32} \frac{\sqrt{\pi M_i k T}}{\pi \sigma_i^2 \Omega^{(2,2)}} \frac{c_{v_i}}{M_i}$ , где

$M_i$  – молекулярная масса  $i$ -ой компоненты смеси,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – абсолютная температура газа,  $\sigma_i$  – эффективный диаметр столкновения частицы. Так как в настоящей диссертации рассматриваются реальные газовые смеси, для расчета коэффициента теплопроводности использовался множитель  $\Omega^{(2,2)*}$  (приведенный интеграл столкновений). В приложении потенциала Леннарда-Джонса приведенный интеграл столкновений  $\Omega^{(2,2)*}$  зависит только от приведенной температуры  $T^*$ , которая является отношением абсолютной температуры  $T$  межмолекулярного взаимодействия и глубины потенциальной ямы  $\varepsilon_i$ :  $T^* = \frac{kT}{\varepsilon_i}$ . Значения  $\varepsilon_i$  и  $\sigma_i$  были взяты из таблиц

транспортных коэффициентов химического механизма [44].

Закон Ньютона для вязкости гласит, что плотность потока импульса пропорциональна градиенту скорости:

$$\mathbf{J}_{mv} = -\mu \frac{\partial v_k}{\partial x_k}.$$

Таким образом, импульс (момент количества движения) переносится из области с высокой скоростью к области с более низкой скоростью. Коэффициент пропорциональности  $\mu$  называется коэффициентом динамической вязкости и определяется из соотношения [38]:

$$\mu = \frac{1}{2} \left[ \sum_i X_i \mu_i + \left( \sum_i \frac{X_i}{\mu_i} \right)^{-1} \right], \text{ где}$$

$$\mu_i = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi M_i k T}}{\pi \sigma_i^2 \Omega^{(2,2)*}} - \text{коэффициент вязкости } i\text{-ой компоненты смеси.}$$

Диффузионная модель основана на аппроксимации нулевого порядка Hirschfelder-Curtis [47]. Скорость диффузии  $k$ -ой компоненты определялась из соотношения:  $V_{k,i} = \frac{D_{km}(T)}{Y_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}$ , где  $D_{km}(T)$  – среднемассовый коэффициент

диффузии  $k$ -го компонента, который определяется как [48]

$$\frac{1}{D_{km}} = \sum_{j \neq k} \frac{X_j}{D_{kj}} + \frac{X_k}{1 - Y_k} \sum_{j \neq k} \frac{Y_j}{D_{kj}}. \quad \text{Коэффициенты бинарной диффузии}$$

рассчитывались на основе формулы из кинетической теории газов [47]:

$$D_{kj} = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi k^3 T^3 / m_{kn}}}{r \pi \sigma_{kn}^2 \Omega^{(1,1)}}, \text{ где } m_{kn} = \frac{m_k m_n}{m_k + m_n} - \text{приведенная молекулярная масса}$$

для  $k$ -ой и  $n$ -ой компонент,  $\sigma_{kn} = 0.5(\sigma_k + \sigma_n)$  – приведенное эффективное сечение взаимодействия для  $k$ -ой и  $n$ -ой компонент,  $\Omega^{(1,1)}$  аналог  $\Omega^{(2,2)*}$ , является функцией приведенной температуры [49]. Единицы измерения величин – единицы системы СГС.

Для обеспечения выполнения закона сохранения массы, диффузионные скорости были рассчитаны так, чтобы  $\sum_N Y_k V_{k,i} = 0$  [35]. Это достигается за счет введения поправочного слагаемого  $\vec{V}_C = \sum_N Y_k \vec{V}_k$ , предложенного в [50]. В

результате этого, вектор диффузионной скорости записывается в виде:

$$Y_k V_{k,i} = Y_k (V_{k,i}^* - V_{c,i}) = \left( D_{km}(T) \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) - Y_k \sum_N \left( D_{km}(T) \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right).$$

Коэффициент диффузии для k-ой компоненты в смеси газов:

$$D_k = \frac{1 - X_k}{\sum_{n \neq k}^K X_n / D_{nk}}.$$

Термодиффузия (или эффект Соре) представляет собой диффузию массы вещества за счет градиентов температуры. Данный механизм действует наряду с обычным диффузионным переносом массы. Для бедных водородно-воздушных смесей, с малым коэффициентом избытка горючего (в настоящей диссертации рассматриваются водородно-воздушные смеси с  $\varphi=0,099-0,151$ ), эффект Соре оказывает незначительное влияние на скорость пламени и значения концентраций радикалов [51-53]. Поэтому термодиффузия не была включена в используемую нами математическую модель.

В рассмотренных ниже задачах о распространении пламени в объеме, ограниченном изотермической стенкой, и распространении пламени в полуоткрытых пространствах в условиях земной гравитации, передача тепла из зоны реакции к холодной стенке и конвекция являются основными механизмами стабилизации ультра-бедного пламени. Поэтому фактор переноса излучения в рамках решения этих задач не учитывался.

Согласно термодинамике необратимых процессов существует перенос тепла, обусловленный градиентами концентрации (эффект Дюфо), данный процесс является обратным процессу термодиффузии. Эффект Дюфо пренебрежимо мал в процессах горения [38, 50]. Поэтому влияние эффекта Дюфо на динамику распространения пламени в принятой математической модели не учитывалось.

## 1.2 Вычислительный алгоритм

Решение приведенной выше системы уравнений выполнялось с помощью алгоритма, предложенного в работе [54]. Для математического моделирования динамики реагирующей среды в приближении малой сжимаемости, алгоритмы, описанные во внутреннем коде [54], были адаптированы и внедрены в программный комплекс NRG для расчета нестационарных процессов горения и взрыва, разработанном в лаборатории Вычислительной физики ОИВТ РАН. Использование программного комплекса NRG позволило использовать подробные модели описания химической кинетики, уравнений состояния и явлений молекулярного переноса, которые отсутствуют в Fire Dynamics Simulator [54].

Система уравнений (1-5) решалась с помощью явной схемы предиктор-корректор. Опишем основные этапы решения модельных уравнений с использованием выбранного алгоритма. Алгоритм представляет собой схему предиктор-корректор, где на первом шаге определяются промежуточные значения параметров потока, а на втором шаге происходит коррекция полученных значений и вычисление окончательных параметров потока на новом временном шаге.

Приведем последовательность расчетных операций на этапе предиктора:

1. Вычисление промежуточных значений плотности, массовых концентраций компонент и термодинамического давления на временном шаге с помощью явной конечно-разностной схемы

$$\frac{(\rho Y)_k^* - (\rho^n Y_k^n)}{\delta t} + \nabla \cdot \rho Y_k^n \vec{u}^n = \nabla \cdot \rho^n Y_k^n V_{k,j}^n + \dot{\omega}_k^n, \text{звездочкой} \quad \text{отмечено}$$

промежуточное значение на временном шаге.

2. Вычисление плотности  $\rho^* = \sum_k (\rho Y_k)^*$  и массовой доли  $Y_k^* = (\rho Y)_k^* / \rho^*$ .
3. Вычисление температуры  $T^*$  из уравнения состояния.

4. Расчет дивергенции скорости  $(\nabla \cdot \vec{u})^*$  из уравнения

$$(\nabla \cdot \vec{u})^* = \frac{1}{\rho h_s} \left[ \frac{D}{Dt} (\bar{p} - \rho h_s) + \nabla(k \nabla T) + \left( \nabla \cdot \rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} Y_k \vec{V}_k \right) \right], \quad \text{которое}$$

является следствием закона сохранения энергии. Само уравнение энергии в явном виде в рамках описываемого алгоритма не решается.

При нахождении  $(\nabla \cdot \vec{u})^*$  используются промежуточные значения термодинамических величин.

5. Решение уравнения Пуассона и определение давления.

$$\nabla^2 H = - \left[ \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \vec{u}) + \nabla \cdot \vec{F} \right], \text{ где}$$

$$\vec{F} = -\vec{u} \times \omega - \frac{1}{\rho} [(\rho - \rho_0) \vec{g} + \nabla \cdot \sigma] - \tilde{p} \nabla \left( \frac{1}{\rho} \right)$$

На этапе предиктора это уравнение принимает форму:

$$\nabla^2 H^n = - \frac{(\nabla \cdot \vec{u})^* - \nabla \cdot \vec{u}^n}{\delta t} - \nabla \cdot \vec{F}^n. \quad \text{Для решения уравнения Пуассона}$$

используется классический итерационный метод последовательной свёрхрелаксации (successive overrelaxation). При решении методом свёрхрелаксации использовался подход к индексации ячеек в шахматном порядке (метод «красное-черное»), что позволяет проводить независимый расчет в каждой отдельной расчетной точке.

6. Оценка массовой скорости на временном шаге:

$$\frac{\vec{u}^* - \vec{u}^n}{\delta t} + \vec{F}^n + \nabla H^n = 0.$$

7. Коррекция временного шага в соответствии с критериями устойчивости разностной схемы.

Приведем последовательность расчетных операций на этапе корректора:

1. Коррекция значений плотности и массовых концентраций компонент на временном шаге с помощью явной конечно-разностной схемы

$$\frac{(\rho Y)_k^{n+1} - \frac{1}{2}(\rho^n Y_k^n + \rho^* Y_k^*)}{\delta t/2} + \nabla \cdot \rho^* Y_k^* \vec{u}^* = \nabla \cdot \rho^* Y_k^* \vec{V}_{k,j}^* + \dot{\omega}_k^n.$$

2. Вычисление плотности  $\rho^{n+1} = \sum_k (\rho Y_k)^{n+1}$  и массовой доли

$$Y_k^{n+1} = (\rho Y)_k^{n+1} / \rho^{n+1}.$$

3. Вычисление температуры  $T^{n+1}$  из уравнения состояния.  
4. Вычисление источниковых членов с использованием новых термодинамических параметров.

5. Расчет дивергенции скорости  $(\nabla \cdot \vec{u})^{n+1}$  из уравнения

$$(\nabla \cdot \vec{u})^{n+1} = \frac{1}{\rho h_s} \left[ \frac{D}{Dt} (\bar{p} - \rho h_s) + \nabla \cdot (k \nabla T) + \left( \nabla \cdot \rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} Y_k \vec{V}_k \right) \right], \quad \text{которое}$$

является следствием закона сохранения энергии. При нахождении  $(\nabla \cdot \vec{u})^{n+1}$  используются окончательные значения термодинамических величин.

6. Решение уравнения Пуассона и определение давления.

На этапе корректора это уравнение принимает форму:

$$\nabla^2 H^* = - \left[ \frac{(\nabla \cdot \vec{u})^{n+1} - \frac{1}{2}((\nabla \cdot \vec{u})^* + \nabla \cdot \vec{u}^n)}{\delta t/2} \right] - \nabla \cdot \vec{F}^*.$$

7. Вычисление массовой скорости на временном шаге:

$$\frac{\vec{u}^{n+1} - \frac{1}{2}(\vec{u}^* - \vec{u}^n)}{\delta t/2} + \vec{F}^* + \nabla H^* = 0.$$

В отличие от математической модели, представленной в [54], в настоящей диссертации производился учет зависимости удельной теплоемкости смеси при постоянном давлении от температуры. Учет зависимости  $c_p$  от температуры заключался в введении дополнительного слагаемого при расчете  $\nabla \cdot \vec{u}$ .

В рамках предлагаемой математической модели использовалось уравнение закона сохранения энтальпии, левая часть которого записывается,

как:  $\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} = h_s \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \frac{\partial h_s}{\partial t}$ , где  $h_s = \sum_k h_{sk} Y_k = \sum_k T c_{pk} Y_k$ . Из уравнения состояния

идеального газа значение температуры:  $T = \frac{\bar{p} \bar{M}}{R \rho}$ , где  $\bar{M} = \left( \sum_k \frac{Y_k}{M_k} \right)^{-1}$ .

Тогда  $\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} = \rho \sum_k \left( h_{s,k} - c_p T \frac{\bar{M}}{M_k} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \frac{\rho c_p T}{\bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \sum_k \rho T Y_k \frac{\partial c_p}{\partial t}$ . Запишем

последнее слагаемое в виде  $\sum_k \rho T Y_k \frac{\partial c_p}{\partial t} = \sum_k \rho T Y_k \frac{\partial c_{pk}}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = \rho T \frac{\partial c_p}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}$ . В итоге

получим уравнение закона сохранения энтальпии в следующей форме:

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} = \rho \sum_k \left( h_{s,k} - c_p T \frac{\bar{M}}{M_k} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \frac{\rho c_p T}{\bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \rho T \frac{\partial c_p}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}.$$

Запишем уравнение (4) в виде

$$\nabla \bar{u} = \frac{1}{\rho h_s} \left[ \frac{d\bar{p}}{dt} - \frac{\partial \rho h_s}{\partial t} - \bar{u} \nabla \rho h_s + \dot{q}''' - \nabla \dot{q}'' \right], \text{ где}$$

$\nabla \dot{q}'' = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho \sum_k h_{s,k} Y_k V_{k,i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( k \frac{\partial T}{\partial x_i} \right)$ . Подставив значение  $\frac{\partial \rho h_s}{\partial t}$  получим:

$$\nabla \bar{u} = \frac{1}{\rho c_p T} \frac{d\bar{p}}{dt} - \frac{1}{\bar{p}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \sum_k \left( \frac{\bar{M}}{M_k} - \frac{h_{sk}}{h_s} \right) \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \frac{1}{\rho c_p T} \left[ \dot{q}''' - \bar{u} \nabla \rho h_s - \nabla \dot{q}'' \right] - \frac{1}{c_p} \frac{\partial c_p}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t}.$$

Последнее слагаемое является поправкой при учете зависимости удельной теплоемкости при постоянном давлении от температуры.

## **Глава 2 Математическое моделирование горения ультра-бедных составов водородно-воздушных смесей на больших пространственных масштабах**

В Главе 2 представлено исследование динамики горения ультра-бедного водородно-воздушного пламени с объемным содержанием водорода 6%. Проведен анализ результатов численного моделирования, описаны основные эффекты, влияющие на динамику пламени. Также представлен сравнительный анализ результатов численного моделирования и результатов эксперимента по горению ультра-бедной водородно-воздушной смеси в большом объеме в условиях земной гравитации. Эксперимент был проведен в лаборатории Физической газовой динамики ОИВТ РАН. Экспериментальные результаты позволили подтвердить корректность результатов математического моделирования и выявленных на их основе основных физических механизмов, влияющих на динамику распространения пламени в ультра-бедной водородно-воздушной смеси. Показано, что скорость подъема очагов горения значительно превышает нормальную скорость горения. Причиной этому является конвективный подъем очага горения в гравитационном поле Земли. Результаты исследований опубликованы в [I,II,III].

### **2.1 Литературный обзор**

Развитие водородной энергетики стратегически важно, как одно из направлений развития альтернативной энергетики наравне с возобновляемыми источниками энергии.

Водород может быть получен из возобновляемых источников энергии, путем преобразования энергии гидро-, ветровых и солнечных электростанций, путем переработки биомассы и ископаемых источников энергии, таких как уголь и природный газ. Водород может использоваться в качестве топлива для транспортных средств, а также в системах выработки электроэнергии с использованием топливных элементов, в двигателях внутреннего сгорания или турбинах [55-63], он также широко применяется в промышленности в процессах гидрирования, восстановления и гидроочистки.

Водород, как альтернативный источник энергии, обратил на себя внимание исследователей по причине того, что запасы водорода на Земле неисчерпаемы и он обладает хорошей теплотворной способностью. Энергия, содержащаяся в 1 кг водорода, составляет около 120 МДж, что вдвое превышает это значение для традиционных видов топлива [64-66]. Концепция использования водорода в качестве энергоносителя появилась более двух веков назад, однако глобальный энергетический кризис 1970-х годов и технологический прогресс в 1980-х годах привели к возобновлению разработок в этой области [67, 68]. Применение водорода, в качестве альтернативного источника энергии имеет ряд преимуществ [69]:

- энергетическая безопасность за счет сокращения импорта нефти;
- энергетическая устойчивость за счет максимизации использования возобновляемых источников энергии;
- уменьшение загрязнения и улучшение качества городского воздуха за счет минимальных выбросов углерода, парниковых газов и оксидов при использовании топлива на основе водорода.

Однако водород обладает высокой химической активностью, что может приводить к катастрофам и авариям, вызывающим человеческие и экономические потери. Катастрофа дирижабля Гиндербург в 1937 году [70], а также авария на АЭС Фукусима-1 показали, что необходимы прогнозирование и оценка рисков воспламенения водорода во время его транспортировки, хранения и эксплуатации. Важное значение имеет не только информация о

пределах воспламенения водорода, но также и о способах подавления взрыва водородно-воздушных смесей.

С развитием методов численного моделирования газодинамических процессов стало возможным решать задачи горения водородно-воздушных газовых смесей различного состава и исследовать влияние концентрации на развитие процессов горения и воспламенения. Стоит отметить, что процесс развития горения в бедных и ультра-бедных смесях весьма сложен и нестационарен, что затрудняет его детальное экспериментальное изучение. В работах [7,8,17,71] проведено математическое моделирование горения водородно-воздушных смесей околостехиометрического и бедного состава (с содержанием водорода более 10%). Показано, что при таких концентрациях процесс горения водородно-воздушных смесей осуществляется в классическом дефлаграционном режиме. При уменьшении доли водорода в смеси до 10% и ниже, осуществляется смена основного физического механизма распространения пламени с термодиффузионного на конвективно-диффузионный механизм подачи недостающего компонента смеси в зону горения.

Одним из основных факторов, определяющих динамику ультра-бедного пламени, являются газодинамические течения, связанные с расширением горячих продуктов горения. При этом низкая реакционная способность ультра-бедной смеси не обеспечивает достаточной скорости выделения тепла для формирования стабильной волны дефлаграции, и одного лишь расширения горячих продуктов сгорания недостаточно для стабильного распространения пламени. Поэтому в случае микрогравитации в ультра-бедных смесях образуется структура, называемая «шариком пламени», устойчивость которой поддерживается за счет механизмов диффузии водорода внутрь очага, сформированного при расширении продуктов горения из области воспламенения. В случае земной гравитации распространение пламени в ультра-бедных составах (с концентрацией ниже 10 %) возможно в вертикальном направлении за счет подъема горячих продуктов в поле силы

тяжести. Особенность данного явления заключается в том, что водород из области, занятой свежей смесью, избирательно диффундирует внутрь очага горения быстрее кислорода, таким образом, наблюдается дополнительная подача водорода в область горения [32]. Коэффициент диффузии водорода составляет  $1,86 \text{ см}^2/\text{с}$ , что намного больше, чем значение  $0,43 \text{ см}^2/\text{с}$  для кислорода [72].

Впервые теоретически существование сферических структур пламени, в которых процесс горения определяется диффузионным потоком реагента в зону реакции было предсказано Я.Б. Зельдовичем [24]. Я.Б. Зельдович также показал, что такие сферические пламена или так называемые «шарики пламени» являются внутренне неустойчивыми из-за термодиффузионной неустойчивости [9]. Однако дальнейшие исследования показали, что диффузионные сферические пламена могут быть стабилизированы внешними силами, такими как гравитация [10, 11]. Экспериментальная работа по исследованию устойчивости околопределных водородно-воздушных пламен в условиях микрогравитации описана в [13]. Анализ процесса горения околопределных водородно-воздушных пламен показал, что устойчивость пламени может быть достигнута посредством тепловых потерь на излучение [12, 13] или на холодную стенку [14].

В условиях земной гравитации, пламя, распространяющееся в ультрабедных смесях, характеризуемых значением числа Льюиса ниже единицы, подвержено развитию различных неустойчивостей, таких как термодиффузионная и конвективная неустойчивости. Здесь стоит отметить, что низкое значение скорости горения не обеспечивает развития гидродинамической неустойчивости Ландау-Дарье при распространении пламени в гравитационном поле Земли [17, 18].

Оценить влияние каждой неустойчивости, по отдельности, на динамику распространения пламени в общепринятых концепциях достаточно сложно, по причине того, что объем, в котором наблюдается горение, чаще всего, характеризуется сложной геометрией и присутствием гравитационной силы.

Часто для упрощения исследования газодинамических процессов проводят вычислительные или натурные эксперименты в условиях микрогравитации или невесомости. В этом случае эффекты, связанные с естественной конвекцией, становятся незначительными и основным механизмом, влияющим на динамику процесса, является развитие термодиффузионной неустойчивости.

Многочисленные теоретические и экспериментальные исследования в микрогравитации позволили определить существенные особенности динамики ультра-бедных водородно-воздушных пламен. Согласно исследованиям, для смесей с числом Льюиса менее единицы, наблюдалась корреляция между значением кривизны фронта пламени и интенсивностью горения. При увеличении кривизны фронта пламени наблюдалась интенсификация горения [13]. Эта особенность горения ультра-бедных газовых смесей является основополагающей в отношении устойчивости пламени. Также в работе [13] были определены пределы воспламенения и режимы распространения пламени в ультра-бедных газовых смесях под воздействием термодиффузионной неустойчивости в условиях микрогравитации. Однако эти результаты не применимы для решения практических вопросов взрывобезопасности в условиях земной гравитации по причине того, что учет конвективных потоков приводит к изменению предела воспламенения, а также структуры и скорости распространения пламени.

Теоретические исследования показали, что неустойчивости, вызванные конвекцией, могут стабилизировать фронт пламени при восходящем распространении пламени, а также оказывают решающее влияние на медленное ультра-бедное горение [15, 16]. Дальнейшее численное исследование подтвердило теоретические оценки [11,20] для бедных смесей  $H_2-O_2-N_2$ , а также качественно воспроизвело начальные стадии распространения пламени от источника энерговыделения и образование шапкообразной структуры пламени, наблюдаемой в экспериментах [21, 22].

Исследование горения ультра-бедных водородно-воздушных смесей проводится для различных постановок. Так, структура очагов ультра-бедного горения в трубах широко обсуждается в экспериментальных работах по определению пределов горения [21, 23, 28]. Анализ экспериментальных данных позволил выявить несколько важных закономерностей распространения очагов горения в околопредельных смесях при наличии конвективного переноса. Так, конвективный подъем очага горения ультра-бедной водородно-воздушной смеси в гравитационном поле имеет ускоренный характер вплоть до достижения пламенем терминальной скорости подъема, которая с высокой точностью может быть описана формулой для терминальной скорости всплытия пузыря газа в жидкости [73, 74] и на несколько порядков превышает величину нормальной скорости горения такой смеси. Кроме того, эксперимент показывает, что значения концентрационных пределов воспламенения зависят от диаметра трубы [23, 29]. Структура фронта ультра-бедного пламени в условиях земной гравитации определяется структурой конвективных течений, формируемых при всплытии горячего очага. Характерная «шапкообразная» («cap-shaped») форма очага, формирующаяся на начальной стадии развития горения, представлена в экспериментальных работах [22-24]. В недавних работах [25, 26] представлены результаты анализа динамики пламени в ультра-бедной смеси  $H_2$ - $CH_4$ -воздух. Авторы экспериментально и численно продемонстрировали возможность формирования «шариков пламени», стабилизированных в условиях земной гравитации в трубке с натекающим потоком свежей смеси.

Также горение бедных и ультра-бедных водородно-воздушных смесей исследуется в узких каналах (hele-shaw cells). В работе [30] исследуется горение водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 5 % – 13% в закрытой прямоугольной камере размером  $200 \times 900 \times h$  мм<sup>3</sup> с варьируемой высотой  $h$  (1, 2, 4, 6, 8, 10 мм). На основе экспериментальных данных было выявлено, что для водородно-воздушных смесей с концентрацией водорода 5-8% наблюдается неполное сгорание смеси и гашение пламени. Показано, что

именно наличие силы плавучести определяет поведение пламени. При воспламенении смеси с концентрацией водорода 5 % и 6 %, пламя стремится к верхней стенке камеры и распространяется со скоростью около 0,2 м/с и гаснет на расстоянии около 300 мм от точки воспламенения - для 5% H<sub>2</sub> и 850 мм - для 6 % H<sub>2</sub>. Пламя состоит из ведущей сферической зоны реакции и области, где осуществляется остывание продуктов горения. Продукты горения диффундируют в непрореагировавшую смесь, не вызывая при этом процессов воспламенения. Большая часть смеси (98% для 5 % H<sub>2</sub> и 94% для 6 % H<sub>2</sub>) остается несгоревшей. Аналогичное поведение имеет место для 8% H<sub>2</sub> с полнотой сгорания 85–90%. При увеличении концентрации водорода до 10-13% скорость распространения пламени увеличивается до 1,5 м/с и наблюдается полное сгорание смеси в слое толщиной 10 мм. Структура пламени бедной смеси становится сильно деформированной (сморщенной) из-за влияния гидродинамической и термодиффузионной неустойчивостей. В работе [31] исследуется горение водородно-воздушной смеси с  $0,15 \leq \phi \leq 0,26$  в полуограниченной прямоугольной камере размером 950\*200\*10 мм<sup>3</sup>. Авторы исследовали влияние состава смеси, геометрии и силы тяжести на возникновение акустических возмущений фронта пламени. Выявлено, что для ультра-бедной водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 6% ( $\phi = 0,15$ ), поверхность очага горения гладкая (диаметр очага порядка ширины канала 200 мм) и очаг не подвержен влиянию термоакустической неустойчивости. Давление, зарегистрированное в камере, является постоянным.

Описанные выше исследования были в основном направлены на фундаментальный анализ различных особенностей ультра-бедного горения и не освещали проблем, связанных с пожаро- или взрывобезопасностью. В частности, для предотвращения аварий, вызванных конвективным переносом пламени в бедной смеси, необходим подробный анализ динамики горения и механизмов его устойчивости в реальных условиях. Конвективный перенос очагов горения в ультра-бедных составах может способствовать переносу

энергии в область с большей концентрацией водорода (в условиях неравномерного перемешивания водорода с атмосферным воздухом или при естественной стратификации водорода при его истечении в большой объем, заполненный воздухом), возбуждая в ней интенсивное горение. Таким образом, вероятность развития горения в бедных смесях также должна учитываться при формулировании критериев взрывобезопасности, что невозможно без анализа процессов воспламенения и горения в неустойчивой области, характеризуемой низким содержанием горючей компоненты (водорода) или низкой энергетикой источника воспламенения.

## **2.2 Постановка вычислительного эксперимента**

В настоящей работе численно решалась задача о формировании и распространении шарика пламени в полуограниченном пространстве, заполненном ультра-бедной водородно-воздушной смесью при нормальных условиях. Расчетная область представляла собой полуограниченное пространство с непроницаемой изотермической стенкой в нижней части и условием “протекания” на верхней и боковых границах области. Температура нижней изотермической стенки задавалась равной температуре окружающей среды в начальный момент времени (300 К). Воспламенение смеси моделировалось путем мгновенного локального изобарического нагрева небольшой области горючей смеси вблизи нижней стенки до температуры 1500 К. Схематически постановка задачи вычислительного эксперимента показана на рисунке 1. Для выявления эффекта влияния геометрии на эволюцию шарика пламени также решалась задача с источником воспламенения, расположенным вблизи вертикальной изотермической стенки. Температура вертикальной стенки также задавалась равной 300 К. Размер

расчетной ячейки декартовой сетки составлял 0.2 мм. Это значение было определено с помощью одномерного теста на сходимость по скорости ламинарного пламени для рассматриваемой смеси.

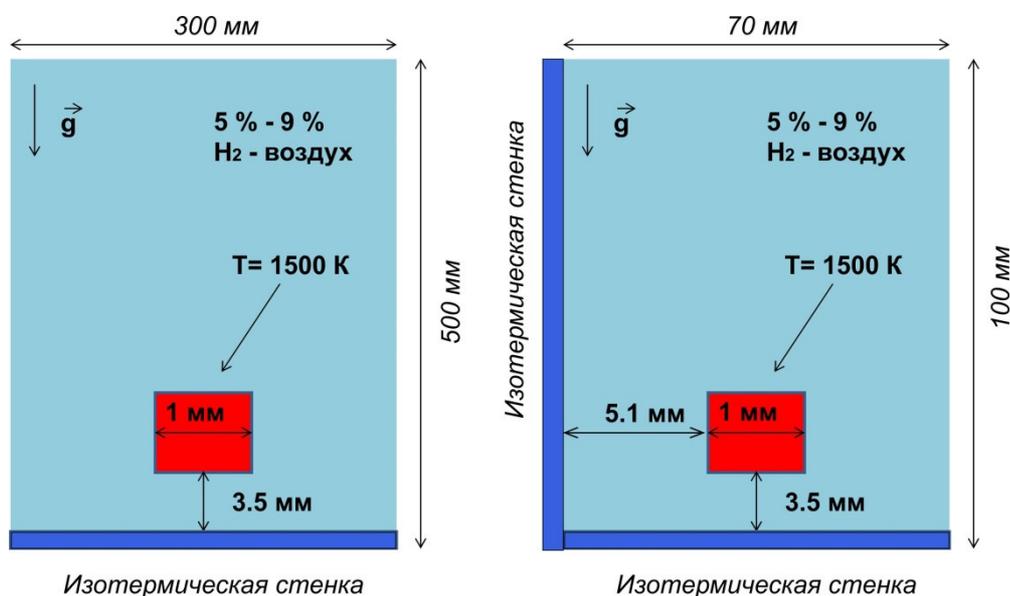


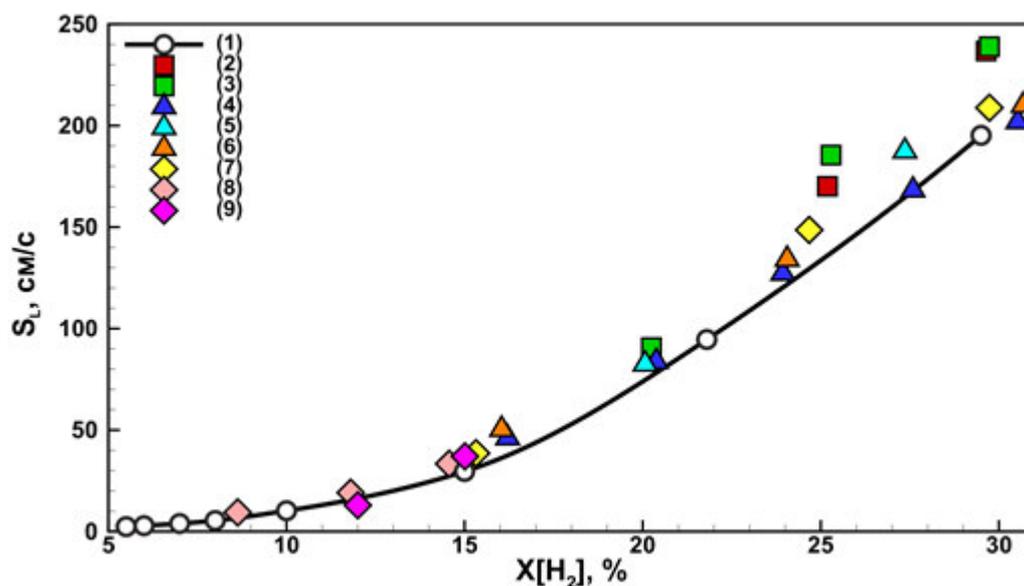
Рисунок 1. Постановка вычислительного эксперимента: а) распространение пламени от стенки; б) распространение пламени от угла.

### 2.3 Валидация и верификация математической модели и ее компьютерной реализации. Определение нормальной скорости горения

Базовой количественной характеристикой горения газообразных смесей, является нормальная скорость горения – скорость распространения пламени относительно покоящейся смеси. Значение нормальной скорости горения определяется протекающими на масштабах фронта пламени кинетическими процессами, собственно и определяющими распространение горения в смеси, такими как химическая кинетика, теплопроводность и диффузия. В связи с

этим, целесообразно рассматривать нормальную скорость горения как базовую характеристику для валидации выбранной математической модели и верификации ее реализации в компьютерных кодах. При этом следует ориентироваться в первую очередь на согласие расчетных значений нормальной скорости горения с экспериментальными данными. В эксперименте даже ламинарное пламя может иметь вполне сложную многомерную структуру, и в рамках многолетних исследований в этой области разработан ряд методик обработки экспериментальных данных для определения нормальной скорости горения. Большинство алгоритмов обработки представлены, например, в обзоре [69]. Самым простым алгоритмом, применимым для анализа ламинарных пламен с неразвитой поверхностью, являются формулы Михельсона  $s_L = U_{f,L}/\theta$ , связывающие нормальную скорость горения  $s_L$  со скоростью изотропно распространяющегося пламени в лабораторной системе отсчета  $U_{f,L}$  или со скоростью вытесняемого расширяющимися продуктами газа  $u$  в канале при иницировании горения у закрытого торца  $s_L = u/(\theta - 1)$ , здесь  $\theta$  – коэффициент расширения, определяемый как отношение плотностей свежей смеси  $\rho_f$  и продуктов горения  $\rho_b$ ,  $\theta = \rho_f/\rho_b$ . В рамках процедуры валидации и верификации программного комплекса целесообразно решение серии специально поставленных тестовых расчетов распространения пламени в одномерном приближении. На основе этих простых соображений в недавней работе [70] предложено рассматривать две одномерные постановки задачи: распространение пламени в одномерном канале от закрытого торца (в плоской геометрии) и распространение свободно расходящегося сферического пламени (в сферически симметричной геометрии). В рамках диссертации выполнены аналогичные расчеты с использованием предложенной здесь математической модели и разработанного программного комплекса. На рисунке 2 представлено сравнение расчетных значений и доступных в литературе экспериментальных данных по величине нормальных скоростей горения водородно-воздушных смесей. При этом внимание сфокусировано на

области обедненных составов водородно-воздушных смесей при нормальных условиях ( $T_0=300$  К,  $p_0=1$  атм), что представляет объект исследования диссертационной работы. Удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных данных указывает на работоспособность используемой математической модели при численном воспроизведении режимов горения в обедненных водородно-воздушных смесях.



1 – расчет, проведенный в диссертационной работе, 2–9 – экспериментальные данные, опубликованные в работах [75-83] соответственно.

Рисунок 2. Нормальная скорость горения обедненных составов водородно-воздушных смесей.

## 2.4 Особенности динамики распространения ультра-бедного водородно-воздушного пламени

Рассмотрим детально стадии эволюции шарика пламени в ультра-бедной смеси. Сразу после воспламенения, образуется сферический очаг горения в области воспламенения. На этой ранней стадии процесс определяется в большей степени диффузией водорода из окружающей среды в область реакции, таким образом, очаг горения представляет собой классический шарик пламени, наблюдаемый в условиях микрогравитации. В соответствии с теоретическим анализом подобных задач, устойчивость пламени на начальных стадиях главным образом поддерживается за счет потерь тепла на стенки [12]. В течение процесса горения пламя расширяется до критических размеров, и расширение горячих продуктов реакции обеспечивает возникновение подъемной силы [24]. С этого момента основным механизмом, влияющим на дальнейшую динамику очага горения, является конвективное всплытие очага в гравитационном поле. По причине того, что плотность газа претерпевает скачок на фронте пламени, движение шарика пламени может быть качественно описано, с помощью теории всплывающего газового пузыря в ограниченном пространстве [74]. На основе результатов, представленных на рисунке 3 можно сделать вывод, что начальная стадия всплытия шарика пламени характеризуется постоянным значением ускорения ведущей точки фронта пламени (наивысшая точка на поверхности фронта пламени).

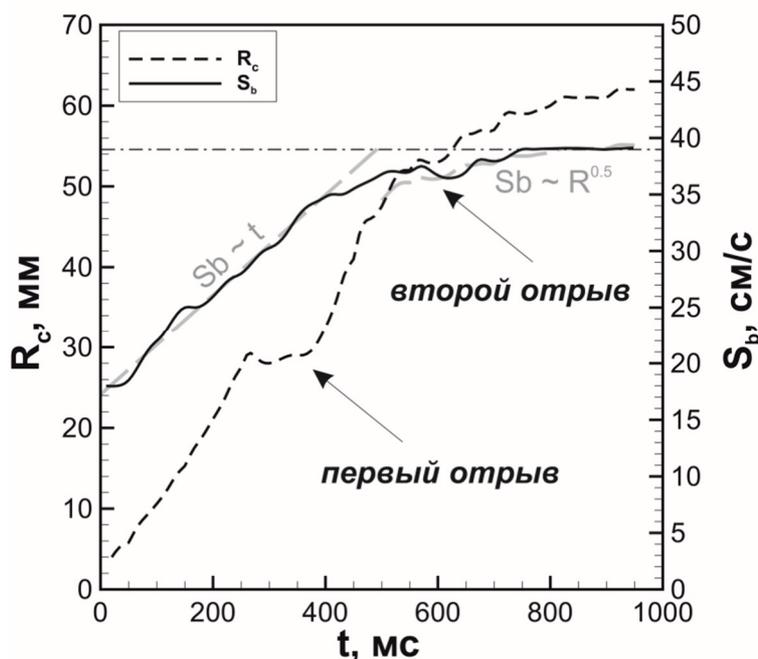


Рисунок 3. Зависимость радиуса кривизны и скорости всплытия основного очага горения с течением времени. Теоретическое значение скорости всплытия газового пузыря в неограниченном пространстве 38,9 см/с (отмечено пунктиром) при радиусе кривизны 62 мм.

Газодинамические потоки, генерируемые за счет роста шарика пламени, также схожи с потоками, возникающими при подъеме газового пузыря в жидкости [84]. При вертикальном всплытии пламени образуется зона рециркуляции, состоящая из двух крупных вихрей, представленных на рисунке 4 а [85]. Свежая смесь взаимодействует с задней кромкой шарика пламени посредством вертикальных потоков. При этом недостающий реагент диффундирует к задней кромке пламени, что определяет ненулевое значение скорости реакции [25].

Вследствие наличия вихревых потоков, пламя растягивается, что приводит к формированию характерной шапкообразной формы фронта пламени (рис. 4 б). Такие структуры наблюдались экспериментально и численно для пузырей [84] и околопредельных пламен [22,24,27]. Подобно всплывающему пузырю с малым значением поверхностного натяжения [86], шапкообразная структура пламени не является устойчивой. Боковая

поверхность фронта пламени подвержена воздействию сдвиговых течений, что ведет к её локальному растяжению и разрыву, в результате этого от основного очага отрываются два дополнительных вторичных очага горения (рис. 4 б и в). По сравнению с динамикой газовых пузырей в жидкости, где пузыри не меняются в размерах, дополнительные очаги горения ультрабедной водородно-воздушной смеси представляют собою активные зоны горения, становясь крупнее при потреблении свежей смеси.

После отрыва дополнительных очагов горения, наблюдается снижение темпа ускорения основного шарика пламени. Стадия линейного роста, которая наблюдалась на ранней стадии процесса и до 400 мс, сменяется нелинейной стадией, которая характеризуется следующими друг за другом отрывами вторичных очагов. Известно, что терминальная скорость всплытия пузыря в жидкости пропорциональна квадратному корню радиуса кривизны фронта пламени вблизи оси симметрии [73].

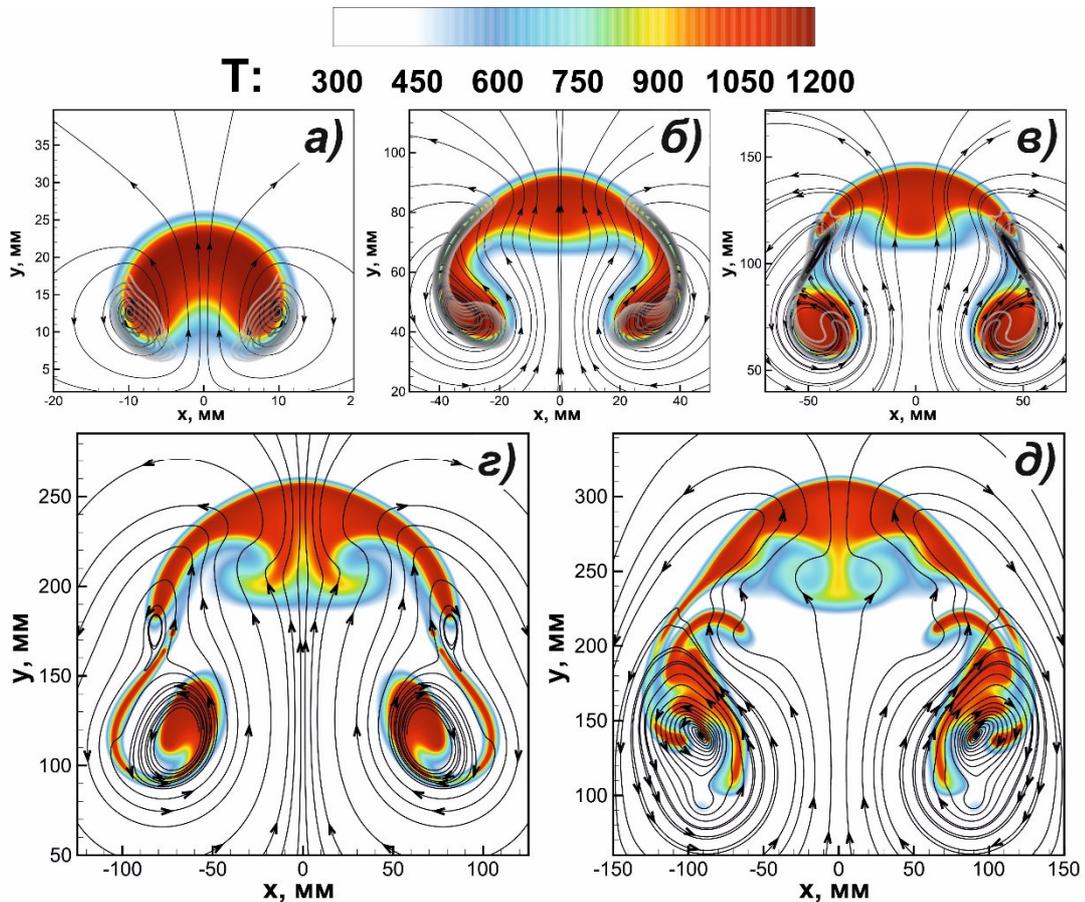


Рисунок 4. Эволюция структуры ультра-бедного водородно-воздушного пламени. а – 100 мс, б – 350 мс, в – 500 мс, г – 800 мс, д – 950 мс. Цветом отмечена температура. На графиках а, б, в линиями отмечен контур завихренности, который окрашен бело-черным цветом в зависимости от модуля ее значения.

Таким образом, рост скорости всплывания может быть интерпретирован в терминах радиуса кривизны. Временная зависимость радиуса кривизны шарика пламени вблизи оси симметрии представлена на рисунке 3. Анализ представленных результатов показывает, что после первого отрыва очага радиус кривизны становится постоянным для короткого периода времени, приводя к временному замедлению роста скорости. После отрыва, очаг горения представляет собой линзообразный шарик пламени, который развивается аналогично шарикку пламени на начальной стадии. Очаг приобретает шапкообразную форму из-за горения на задней кромке боковой поверхности фронта пламени. Этот процесс подробно показан на рисунке 5, где поле радикала  $\text{OH}$  иллюстрирует структуру зоны реакции внутри основного очага горения и вторичных очагов спутников. По результатам математического моделирования можно отчетливо наблюдать интенсификацию горения на нижней кромке фронта пламени и нисходящее распространение пламени на этой поверхности пламени. При протекании процессов горения этот новый шапкообразный очаг горения разрывается, приводя к образованию новой пары очагов позади. Также, исходя из анализа результатов, можно сделать вывод, что второй случай отрыва в момент времени 570 мс менее интенсивен по сравнению с первым, случившимся в момент времени 410 мс. Новый отделившийся очаг оказывается довольно маленьким и процессы горения в нем быстро затухают. После второго отрыва дополнительного очага, скорость ведущей точки пламени зависит исключительно от радиуса кривизны фронта пламени около оси симметрии и может быть аппроксимирована квадратным корнем.

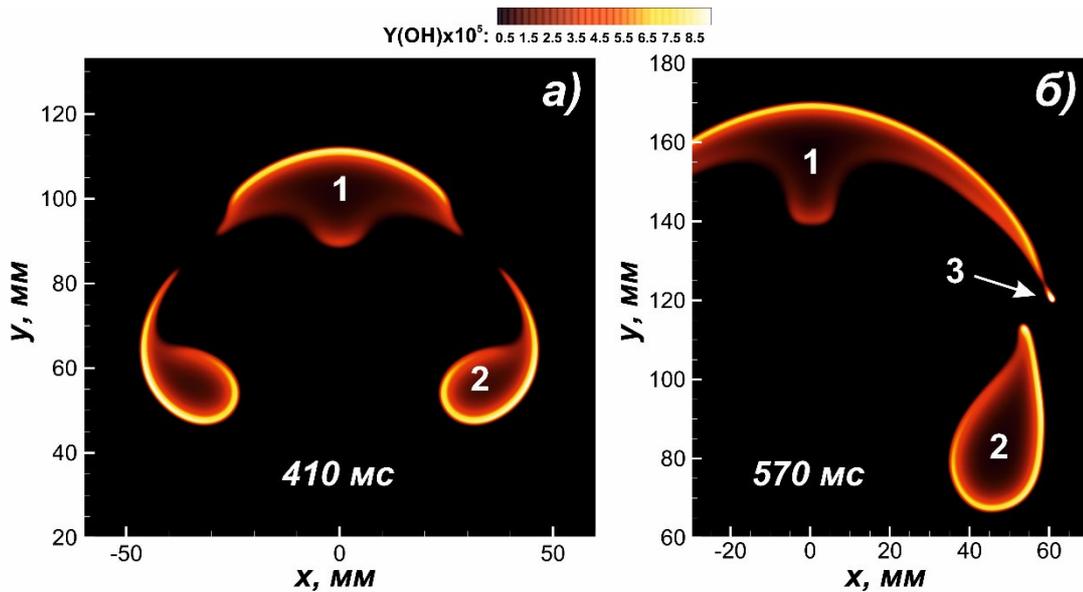


Рисунок 5. Структура пламени ультра-бедной водородно-воздушной смеси после отрыва дополнительных очагов. 1 – основной очаг горения. 2 – вторичные очаги горения, отделившиеся первыми (устойчивые). 3 – вторичные очаги горения (неустойчивые).

После отрыва дополнительного очага мы можем наблюдать области высокой температуры между вторичным и основным очагами горения. Из-за высокого значения локальной температуры в этих областях наблюдается интенсификация горения, что приводит к повторному слиянию вторичного очага с основным на рисунке 6. Таким образом, в момент времени 520 мс мелкие очаги, распространяясь в следе за основным очагом горения вверх, попадают в нагретую область, что обеспечивает их локальное ускорение. Этот вторичный мелкомасштабный очаг обгоняет вихрь, распространяющийся за основным очагом горения в момент 650 мс. Взаимодействие между двумя очагами горения (основного и вторичного) влияет на структуру и динамику нижней поверхности основного очага горения. Однако стоит отметить, что в это время основной линзообразный очаг расширяется в пространстве. Таким образом, можно сделать вывод, что изменения в форме нижней поверхности фронта почти не оказывают влияния на динамику передней (верхней)

поверхности фронта пламени. Более того, следующий отрыв боковой поверхности основного очага горения, в момент времени 920 мс, также не оказывает влияния на динамику основного очага горения.

Согласно рисунку 3 вскоре после отрыва можно наблюдать стагнацию скорости пламени, скорость всплытия очага горения при этом больше не зависит от случаев отрыва горящих очагов с поверхности основного очага. К этому времени, основной очаг горения принимает линзообразную форму с почти постоянным радиусом кривизны (рис. 3) вблизи оси симметрии.

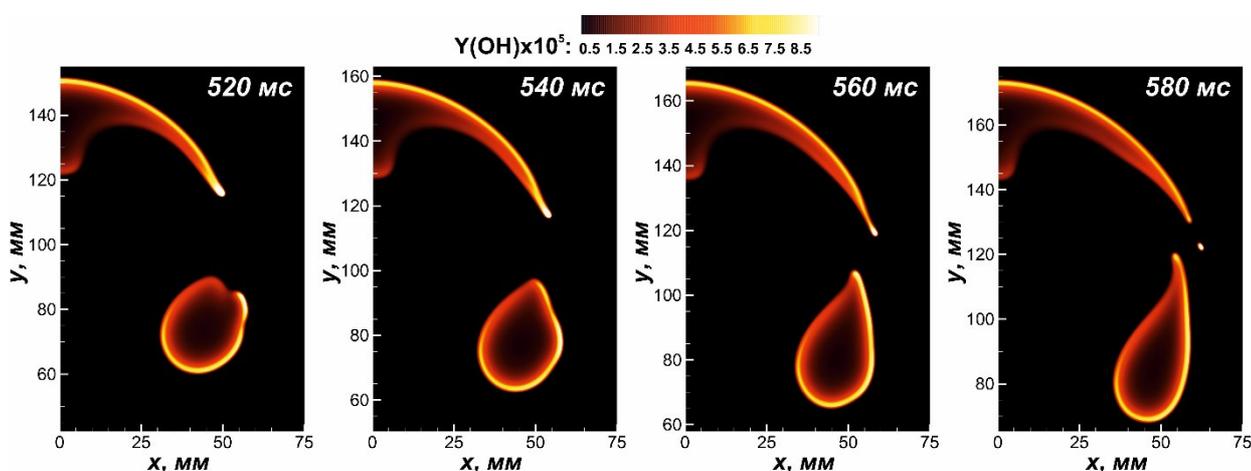


Рисунок 6. Ускоренный подъем вторичных очагов горения в температурном следе за основным очагом.

Как уже отмечалось ранее, особенности динамики скорости пламени и радиуса кривизны схожи со случаем подъема газового пузыря в жидкости. Полученная терминальная скорость всплытия шарика пламени хорошо согласуется с теоретической оценкой, представленной в работе [73]:  $S_b = 0.5\sqrt{gR}$ , где  $g$  - ускорение свободного падения,  $R$  - радиус кривизны. Для наблюдаемого случая горения водородно-воздушной смеси с концентрацией водорода 6%, терминальная скорость всплытия соответствует 38,9 см/с.

После первого случая отрыва, вторичный очаг горения сливается с основным очагом и вновь отделяется от него в момент времени 690 мс. Затем,

он развивается независимо от основного. Далее этот горящий вторичный очаг претерпевает разрыв также, как и основной очаг, что приводит к образованию сложной структуры, представленной на рисунке 7, состоящей из большого количества независимых очагов горения, охватывающих достаточно большую область пространства. Вторичные очаги сносятся от оси симметрии вихревыми потоками так, что зона активного горения расширяется, образуя конус с вершиной в начальной точке воспламенения. Таким образом, можно отметить следующий режим устойчивого распространения пламени. Основной очаг горения имеет шапкообразную форму и согласно рисунку 3 распространяется с постоянной скоростью. За основным очагом распространяется «юбка пламени», которая включает в себя разрозненные независимые зоны горения. Такие устойчивые структуры пламени могут рассматриваться как возможный путь передачи энергии в пространстве, заполненном ультра-бедной смесью. В случае естественной стратификации в условиях земной гравитации и выделения энергии в нижней части объема, такой перенос энергии может стать причиной воспламенения более богатой и химически активной водородно-воздушной смеси, в которой может быть инициировано дефлаграционное или даже детонационное горение. В случае почти равномерного распределения водорода в пространстве такой процесс передачи энергии может разрушить электрическую проводку и любое другое оборудование, приводя к неисправности технических систем.

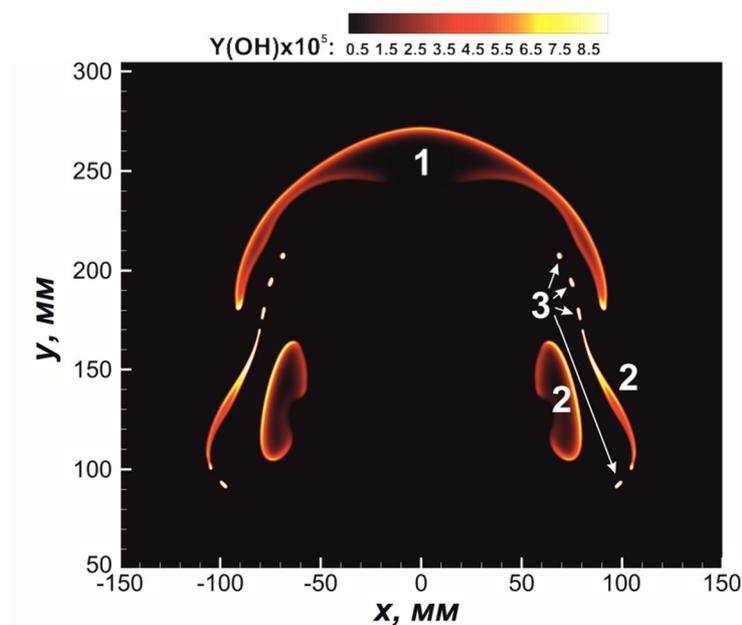


Рисунок 7. Структура пламени ультра-бедной водородно-воздушной смеси в момент времени 840 мс. 1 – основной очаг пламени, 2 – вторичные очаги горения, отделившиеся первыми (устойчивые), 3 – вторичные очаги горения (неустойчивые).

## 2.5 Динамика очага горения, при наличии вертикальной стенки

Ввиду того, что пространственное развитие ультра-бедного пламени играет большую роль в его динамике, следует понять, какие условия могут влиять на его развитие. Рассуждая в этом направлении, были проведены дополнительные вычислительные эксперименты по изучению эволюции пламени в той же смеси, но с источником воспламенения, расположенным возле вертикальной стенки. Поведение потока вблизи стенки определяет ограничение распространения основного пламени. Более того, направление распространения изменяется, и пламя распространяется вверх и немного от стенки. Разрыв полученной структуры не наблюдается, по причине потерь тепла и импульса на стенке, что приводит к меньшей интенсивности горения

на задней поверхности пламени. В результате, все описанные выше явления влияют на развитие горения только на боковой поверхности основного очага горения, распространяющегося в направлении от вертикальной стенки.

Анализ результатов, представленных на рисунках 8 и 9 показал, что при расчете в двухмерной постановке, наличие стенки является причиной почти вдвое менее интенсивного распространения основного очага горения. По этой причине скорость распространения пламени оказывается меньше практически в два раза (23 см/с при наличии стенки, по сравнению с 39 см/с в неограниченном пространстве). При этом выход на стационар скорости всплывания происходит через 200 мс после воспламенения, то есть раньше, чем в случае свободного распространения (700 мс). Таким образом, можно сделать вывод, что с уменьшением количества преград в объеме, заполненном водородно-воздушной смесью, интенсифицируется передача энергии посредством описанного выше механизма. Ограничение пространства, наверняка не может рассматриваться как единственная мера для снижения скорости горения, так как в объеме может находиться более богатая горючая смесь. Поэтому, такой метод ограничения распространения пламени можно рассматривать только для областей, где заранее известен состав ультра-бедной смеси.

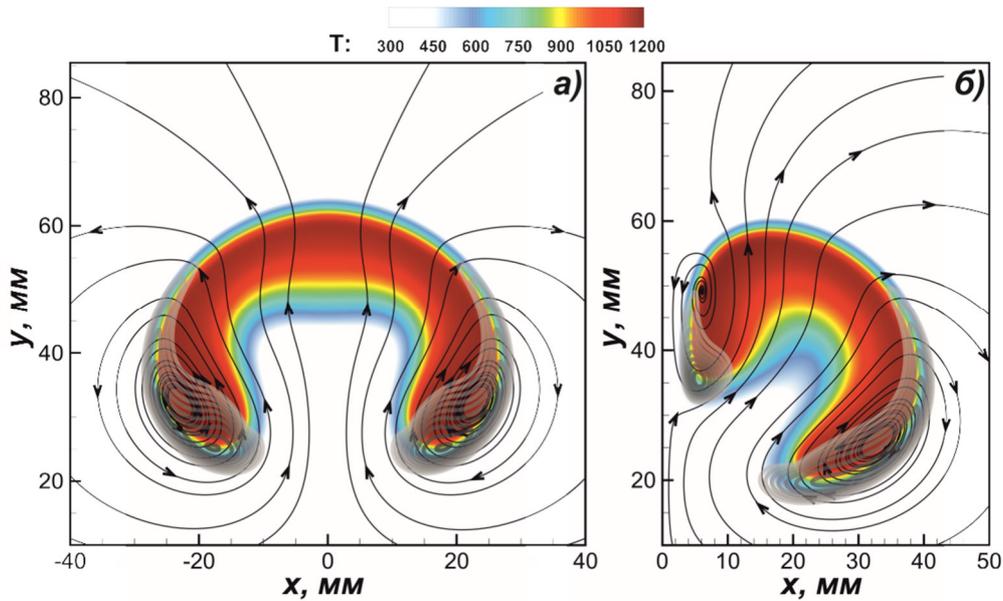


Рисунок 8. Структура ультра-бедного пламени водородно-воздушной смеси в момент времени 250 мс: а – случай свободного распространения пламени, б – распространение пламени вблизи вертикальной стенки. Цветом отмечено поле температур. Линии тока отмечены сплошными линиями. Контуры завихренности отмечены цветом (от белого к черному в зависимости от значения).

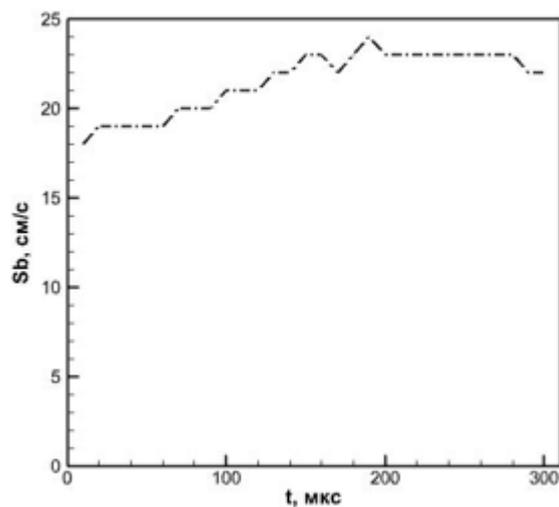


Рисунок 9. Эволюция скорости всплывания очага горения при наличии вертикальной стенки.

## 2.6 Постановка эксперимента по горению ультра-бедной водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 6%

Эксперименты по развитию очагов ультра-бедного горения в больших объемах проводились в лаборатории Физической газовой динамики ОИВТ РАН на двух экспериментальных установках: лабораторном стенде и в цилиндрической стальной камере ВБК-2. Конструкция камеры ВБК-2 рассчитана на взрыв мощностью до 20 кг ТНТ. Схема экспериментальной установки показана на рисунке 10. Взрывная камера ВБК-2 представляет собой двухслойный высокопрочный стальной сосуд цилиндрической формы. Длина камеры – 9 м, диаметр поперечного сечения 4,5 м. В ходе эксперимента горючая водородно-воздушная смесь наполняла цилиндрический объем, который был ограничен непроницаемой пленкой. Диаметр основания цилиндрического объема составлял 1,5 м, высота 4 м, объем  $7 \text{ м}^3$ . Водородно-воздушная горючая смесь с содержанием водорода 6% предварительно смешивалась в баллоне и выдерживалась в течение суток. Цилиндрическая оболочка, размещенная внутри камеры ВБК-2, вмещала в себя 7,8 кг свежей смеси. После заполнения цилиндрической оболочки газовой смесью она выдерживалась в течение 3 минут, для остановки внутренних течений. Поджигание осуществлялось искрой с энергией 1 мДж. На момент поджига смесь находилась при нормальных условиях ( $T=300 \text{ К}$ ,  $p=10^5 \text{ Па}$ ). Визуализация распространения фронта пламени на ранней стадии в газовой смеси также проводилась на лабораторном стенде, для этого использовался теневой прибор ИАБ-451, оснащенный видеокамерой Видеоспринт G/2 с частотой 200 кадр/с. Для визуализации распространения фронта пламени в стальной камере ВБК-2 использовалась инфракрасная камера InfraTec ImageIR 8320 со скоростью съемки 200 кадр/с. С помощью автоматизированной обработки полученных изображений были получены временные зависимости

положения верхней и нижней точек поверхности основного очага горения, ширины очага горения и радиуса кривизны верхней поверхности пламени.

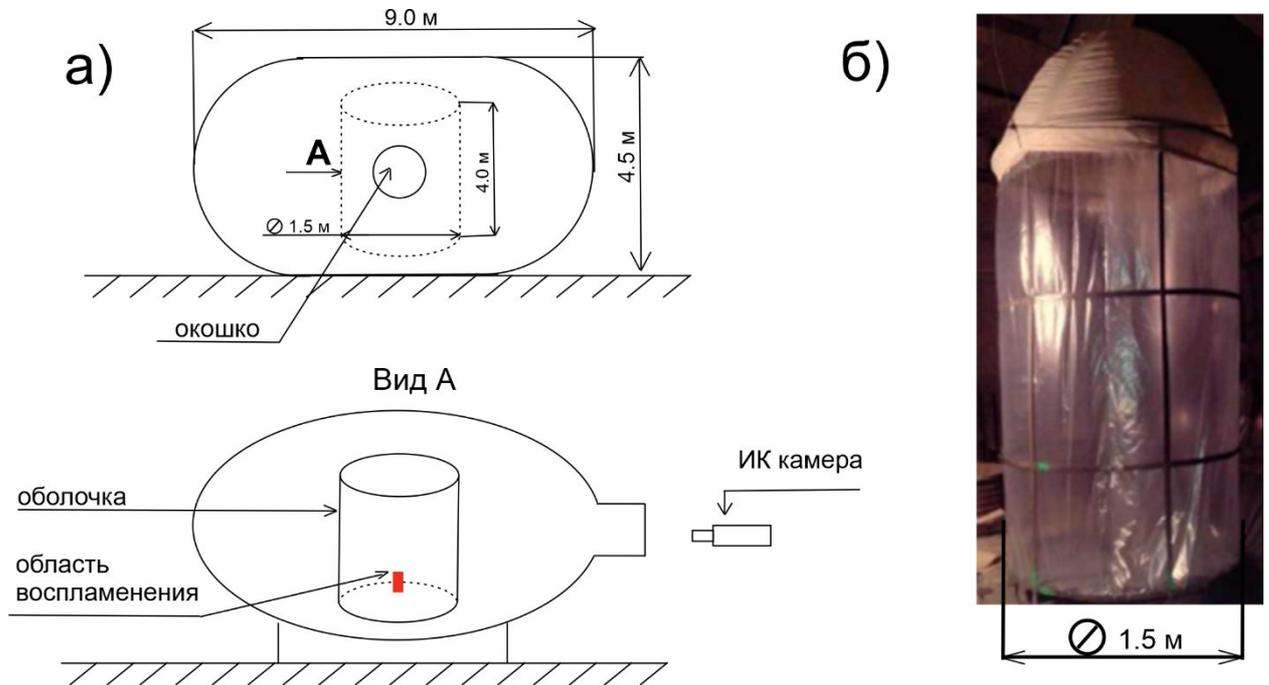


Рисунок 10. а) Схема камеры сгорания ВБК-2 б) фотография экспериментальной установки.

## 2.6 Сравнительный анализ расчетных и экспериментальных данных

Рассмотрим динамику очага ультра-бедного пламени при его конвективном подъеме. Как было сказано ранее, сферическая структура очага горения, сформированная после воспламенения смеси, подвержена влиянию подъемной силы [24]. Как показано на рисунке 11 под действием подъемной силы очаг начинает вертикальный подъем. По причине наличия вихревого течения поверхность фронта пламени искривляется и растягивается, что приводит к формированию осесимметричной «шапкообразной» структуры фронта пламени.

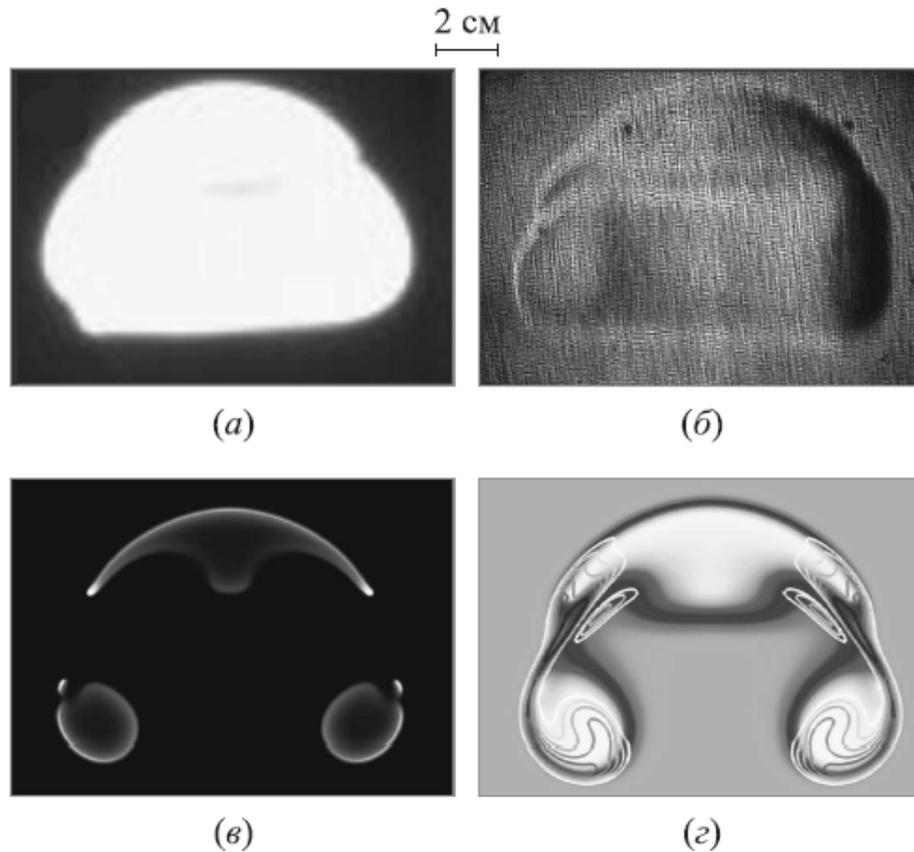


Рисунок 11. Формирование «шапкообразной» формы пламени на начальном этапе конвективного подъема очага: а) теневая фотография; б) снимок инфракрасной (ИК) камеры; в) расчетное поле концентрации ОН; г) расчетное поле температуры и изолинии завихренности. Масштаб на всех сегментах рисунка сохранен.

Дальнейший подъем очага сопровождается боковым расширением фронта пламени и его растяжением. В результате воздействия вихревого течения на фронт пламени наблюдается отрыв вторичного очага от основного (рис. 12). Вторичный очаг после отрыва ведет себя как независимая активная зона горения и продолжает движение в тепловом следе за всплывающим основным очагом. С течением времени наблюдается видимое воссоединение вторичного очага и основного. Анализ скорости всплытия очага горения, представленный на рисунке 13, позволяет сделать вывод, что явление воссоединения очагов связано с ускоренным подъемом вторичного очага

горения. Возможной причиной ускоренного движения вторичного очага является то, что его движение осуществляется по смеси, предварительно нагретой основным очагом. В дальнейшем наблюдается повторный процесс отрыва вторичного очага от основного, за которым снова следует их соединение.

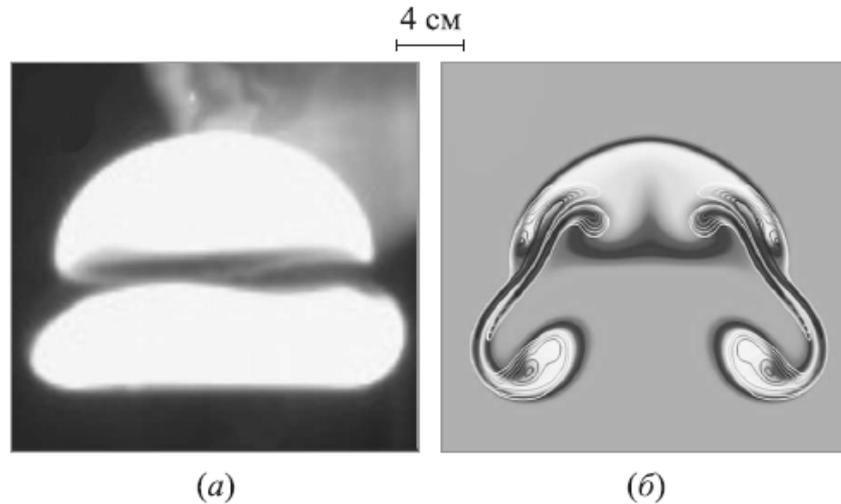


Рисунок 12. Двухочаговая структура пламени, наблюдаемая после отрыва вторичного очага: а) снимок ИК камеры (625 мс, радиус кривизны очага вблизи верхней точки 75,3 мм); б) расчетное поле температуры и изолинии завихренности (760 мс, радиус кривизны очага вблизи верхней точки 76,7 мм). Пространственный масштаб в обоих случаях выбран одинаковым.

На рисунке 13 и 14 представлены результаты измерения скорости всплывания и радиуса кривизны очага с течением времени. Сравнение результатов эксперимента и результатов численного моделирования, представленных в параграфе 2.2, показывает качественное совпадение характерных особенностей эволюции очага горения в ультра-бедной водородно-воздушной смеси. Однако существуют некоторые количественные различия в динамике восходящего шарика пламени. Разница между значениями скорости подъема, полученными в эксперименте и расчете, связана с тем, что математическое моделирование проводилось в двухмерной плоской системе координат. Что согласуется с выводами, сделанными авторами работы [87], в которой

исследуются пузыри газа, всплывающие в жидкости. Авторы утверждают, что имеет место количественное отличие между двухмерными и трехмерными пузырями.

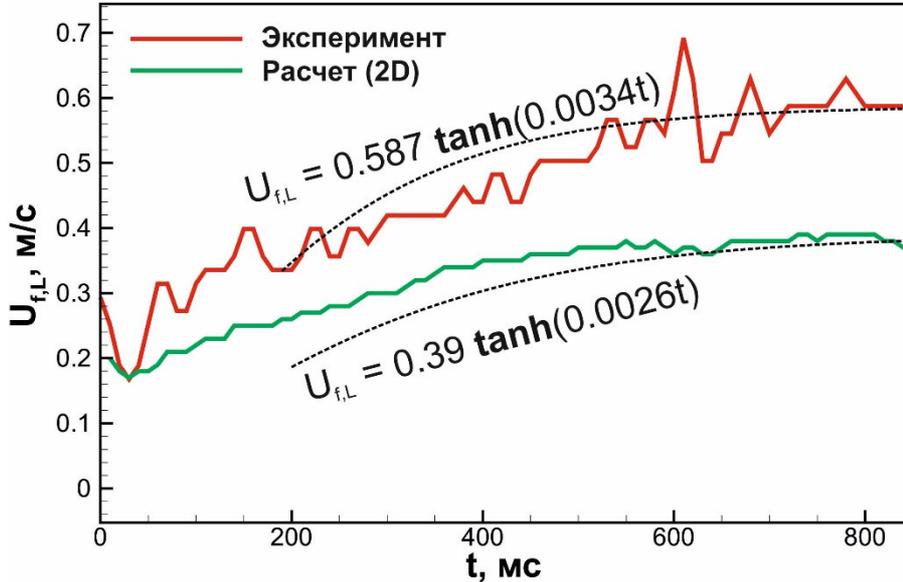


Рисунок 13. Зависимость скорости верхней точки очага горения, измеренная в эксперименте (красная сплошная линия) и полученная из расчета (зеленая сплошная линия). Пунктирные линии соответствуют закону зависимости скорости от времени, применимому к переходной стадии подъема газового пузыря в жидкости [88].

Теоретический анализ динамики замкнутых пузырьков [88] показал, что переходная динамика замкнутого пузырька может быть описана через соотношение для скорости подъема пузырька  $u = Fr \sqrt{gR} \tanh(\delta \sqrt{g/R_0 t})$ , где  $Fr$  - число Фруда, определяющее отношение сил инерции к силе тяжести,  $R_0$  - начальный радиус пузыря,  $\delta$  - размерность системы ( $\delta=2$  для двухмерных пузырей,  $\delta=3$  для трехмерных пузырей). Поскольку сила инерции пропорциональна площади поверхности пузырька, а сила плавучести пропорциональна объему пузырька, число Фруда можно оценить из геометрических соображений как  $Fr = \frac{\delta - 1}{\delta}$  [88].

На рисунке 13 показаны зависимость скорости ультра-бедного пламени от времени в лабораторной системе отсчета, полученная из эксперимента и численно. Подбор коэффициентов осуществлялся таким образом, чтобы конечная скорость всплытия и числа Фруда соответствовали случаям двухмерных расчетов и трехмерных экспериментов. Скорость всплытия пламени стремится к постоянной величине. При этом конечная скорость всплытия может быть точно оценена по соотношению для конечной скорости всплытия закрытого пузырька, поднимающегося в жидкости  $u_i = Fr\sqrt{gR_i}$  [73,88,89]. Таким образом, для трехмерных пузырьков с одинаковым радиусом кривизны конечная скорость всплытия больше в  $Fr_{3D}/Fr_{2D} = 4/3$  раз. При горении ультра-бедной смеси установившийся радиус кривизны фронта пламени в двухмерной и трехмерной постановках также оказывается различным. Таким образом, конечная скорость всплытия в реальном эксперименте больше в  $Fr_{3D}\sqrt{R_{i3D}}/(Fr_{2D}\sqrt{R_{i2D}}) \approx 1.5$  раза. Временная зависимость радиуса кривизны поверхности пламени вблизи высшей точки представлена на рисунке 14.

Немонотонное поведение радиуса кривизны пламени связано, как уже отмечалось ранее, с явлениями разрушения фронта пламени, которые приводят к временному замедлению роста радиуса кривизны. Когда рост радиуса кривизны замедляется, локальные значения длины Маркштейна  $L_M$  (по определению длина Маркштейна может быть оценена из соотношения:

$$U_{f,L} = u_f - L_M \frac{2}{R_f} \frac{dR_f}{dt}, \text{ где } u_f \text{ – нормальная скорость горения) становятся}$$

отрицательными вблизи боковой поверхности фронта пламени. В свою очередь, отрицательное значение длины Маркштейна указывает на развитие неустойчивости поверхности фронта пламени, которая в конечном итоге вызывает отделение вторичного очага горения.

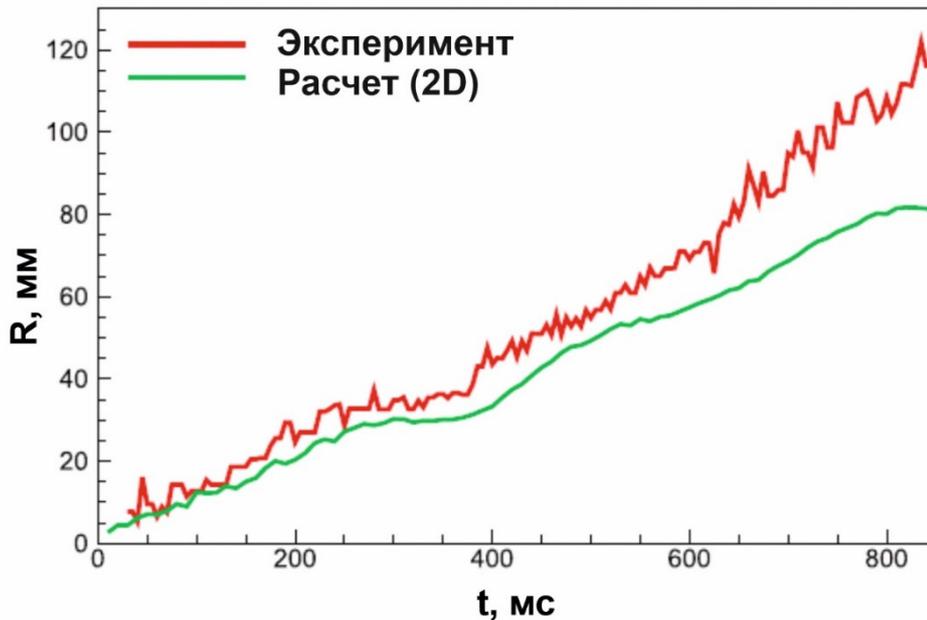


Рисунок 14. Изменение во времени радиуса кривизны фронта пламени вблизи верхней точки очага.

Помимо общей формулы для расчета терминальной скорости всплытия очага, между движением пузыря в жидкости и динамикой горения ультра-бедного очага горения наблюдается схожесть в эволюции их пространственных структур [90, 91]. В случае подъема газовых пузырей в жидкости, при определенных значениях безразмерных параметров, также можно наблюдать случаи отрыва вторичных пузырьков с периферии основного газового пузыря. Основное различие между двумя этими задачами, состоит в том, что в случае газовых пузырей не наблюдаются случаи ускоренного подъема вторичных пузырьков и их повторного слияния с основным пузырем. Тем не менее, так как динамика горения ультра-бедной водородно-воздушной смеси схожа с динамикой газового пузыря, всплывающего в жидкости, становится возможным ввести классификацию различных режимов подъема и деформации очагов горения на основе безразмерных параметров, характеризующих горючую смесь. Этот вопрос подробнее освещен в Главе 4.

## 2.7 Основные результаты

В настоящей главе проведен качественный и количественный анализ динамики горения ультра-бедной водородно-воздушной смеси на основе результатов математического моделирования и экспериментальных данных. Динамика горения ультра-бедной водородно-воздушной смеси развивается существенно нестационарным образом. За счет конвективного подъема и наличия вихревых течений от основного очага горения отделяются вторичные очаги, тем самым формируя в объеме развитую многоочаговую структуру, состоящую из основного очага горения и системы вторичных очагов. Такая структура оказывается устойчивой и распространяется в объеме за счет всплытия в гравитационном поле. Формирование такого устойчивого фронта горения определяет механизм переноса энергии в области пространства, заполненные ультра-бедными смесями.

Проведено сравнение результатов численного моделирования со специально поставленным в ОИВТ РАН экспериментом. Показано, что значения радиуса кривизны пламени в обоих случаях достаточно близки. С течением времени, однако, наблюдается количественное расхождение между расчетом и экспериментом, что связано с тем, что вычислительный эксперимент был проведен для двухмерной геометрии. Тем не менее, вычислительный эксперимент корректно воспроизводит структуру очага горения в моменты времени, характеризуемые одинаковым значением радиуса кривизны.

## Глава 3 Пределы горения ультра-бедных водородно-воздушных смесей

В Главе 3 представлено исследование пределов горения ультра-бедного водородно-воздушного пламени. Для количественного определения пределов существования горения в водородно-воздушных смесях были проведены вычислительные эксперименты для смесей с объемным содержанием водорода 3-10 %. Показано, что околопредельные пламена водородно-воздушной смеси обладают сверхадиабатической температурой. Нижний концентрационный предел горения водородно-воздушной смеси при нормальных условиях оценен в  $5,25 \pm 0,25\%$  объемного содержания водорода в условиях земной гравитации. Результаты исследований опубликованы в [V].

### 3.1 Литературный обзор

Традиционные подходы к экспериментальному исследованию горения газовых смесей [92, 93] позволяют определить критические условия формирования и распространения устойчивых волн горения при воспламенении смеси от локализованного источника. Значение нижнего концентрационного предела (НКП) воспламенения было определено в 1952 году [32]. На значение НКП при экспериментальном исследовании влияют:

- объем, занимаемый газовой смесью [14, 92];
- методика зажигания смеси (точечный/объемный источник, величина мгновенного энерговыделения) [14];
- величина избытка давления, на основании которого полагается, что смесь воспламенилась и не гаснет [14];

- наличие турбулентных потоков [6, 4, 32];
- начальные значения температуры смеси [92].

В работе [33] проводилось исследование горения водородно-воздушной смеси в двух сферических объемах – 20 л и 120 л. Значение НКП определялось как значение концентрации водорода в смеси, при сгорании которой давление повышалось по крайней мере на 3 % по сравнению с первоначальным, и составляет  $5.0 \pm 0.5$  % водорода при воспламенении искрой, вне зависимости от объема резервуара. Если в качестве критерия реализации устойчивого горения брать превышение давления на 7% при искровом зажигании, то результаты меняются в зависимости от рассматриваемого объема:  $5.0 \pm 0.5$  % для камеры объемом 8 л [94];  $6.0 \pm 0.5$  % для сферического резервуара объемом 20 л [33];  $6.5 \pm 0.5$  % для сферического резервуара объемом 120 л [33];  $7.5 \pm 0.5$  % для сферического резервуара объемом  $25.5 \text{ м}^3$  [95]. В работах [92, 96, 97] проводилось визуальное определение НКП для водородно-воздушной смеси в трубках, значение НКП составило 4%. Объем камеры имеет важное значение при определении НКП горения при распространении пламени вверх. Чем больше объем камеры, тем меньшую его часть будет охватывать пламя и, следовательно, тем меньшее повышение давления будет наблюдаться. При наличии турбулентных течений скорость горения увеличивается за счет интенсификации переноса тепла и свежей смеси в область горения и за счет увеличения площади поверхности пламени при его искривлении и дроблении. С другой стороны, турбулентность может вызвать уменьшение скорости из-за влияния локального стретч-эффекта [98]. В работе [33] исследовалось влияние умеренной турбулентности на значение НКП водородно-воздушной смеси при искровом зажигании. Испытание проводилось в сферическом объеме 120 л, для задания турбулентных течений использовался вентилятор (диаметр лопасти 8 см, частота вращения 3000 об / мин). Скорость воздушного потока вдоль оси вращения составляла 1,4 м/с на расстоянии 15 см, 1,1 м/с на расстоянии 30 см и 0,7-1,1 м/с на расстоянии 45 см от лопасти вентилятора. Уровень турбулентности, создаваемой

вентилятором, напрямую не измерялся; вентилятор использовался только для определения того, оказывает ли умеренная турбулентность значительное влияние на характеристики воспламенения газовых смесей вблизи НКП. Анализ экспериментальных данных показал, что эффект турбулентности заключается в увеличении скорости пламени, что значительно уменьшает влияние эффектов подъемной силы. Это приводит к тому, что распространение пламени становится более изотропным, а потребляемый объем свежей смеси увеличивается, что, соответственно, приводит к дополнительному росту давления при сгорании бедной смеси. Турбулентность способствует течению продуктов горения в область перед фронтом пламени во всех направлениях. Вихревое течение вовлекает реагирующий газ и продукты горения в движение во всех направлениях (вниз, в горизонтальном направлении и вверх) и способствует их переносу далеко за пределы так называемого «ограничивающего угла конуса горения». Таким образом, имеет место распространение горения в форме множественных источников воспламенения, которые отсутствуют в ламинарном случае.

В работе [33] критерий повышения давления составлял 7%, при этом НКП при наличии турбулентности оценивался в 4%, что сопоставимо с НКП для покоящейся водородно-воздушной газовой смеси в трубках с использованием визуального критерия [96]. Эти данные о влиянии турбулентности на воспламенение водородно-воздушных смесей согласуются с некоторыми более ранними данными [94] для сферической камеры объемом 8 л и данными других исследователей [99, 100].

В работе [33] исследовалось также влияние типа воспламенения на НКП. При использовании объемного пиротехнического источника с энерговыделением 5000 Дж НКП для восходящего распространения пламени в сферическом объеме 120 л, оценивается в  $5,0 \pm 0,5\%$ . Как было сказано ранее, при искровом зажигании в этой камере сгорания НКП составил  $6.5 \pm 0.5\%$ . Объемный пиротехнический источник при воспламенении водородно-воздушной смеси генерирует турбулентные потоки, что снижает значение

НКП. Эти данные подтверждают влияние турбулентных потоков на воспламенение.

Влияние начальной температуры смеси исследовалось в работе [92]. С ростом температуры наблюдается уменьшение значения минимальной критической концентрации водорода в смеси. В исследованном диапазоне температур (от 100 до 200 °С) НКП уменьшается примерно на 0,5% на каждые 100 °С для пламени распространяющегося вверх. Значение давления смеси слабо влияет на НКП [6] водородно-воздушных смесей.

На сегодняшний день, общепринятым значением нижнего концентрационного предела для водородно-воздушной газовой смеси при нормальных условиях является 4 % водорода [98, 101]. Как уже отмечалось ранее значение НКП напрямую зависит от постановки эксперимента [6, 32, 33,92] и от критерия, по которому осуществляется оценка устойчивости горения. Отсюда следует, что выбранные критерии распространения пламени и, следовательно, результирующие пределы воспламенения являются в некоторой степени произвольными.

### **3.2 Нижний концентрационный предел горения водородно-воздушных смесей**

В настоящей главе диссертации предлагается постановка задачи численного моделирования для изучения пределов горения бедных водородно-воздушных смесей различного состава в неограниченном объеме. В результате решения поставленной задачи удалось исследовать горение газовых смесей с концентрациями от 3 % до 10% водорода в смеси с воздухом и определить величину нижнего концентрационного предела. Постановка задачи представлена на рисунке 1а.

Сразу после воспламенения шарик пламени имеет сферическую форму. Как было сказано ранее, горение поддерживается за счет преимущественной

диффузии водорода в зону горения. Горячие продукты расширяясь становятся подвержены влиянию подъемной силы и за счет вертикального подъема очага наблюдается образование зоны рециркуляции. Вихревое течение изгибает и растягивает поверхность пламени. В случае смеси с 6% содержанием водорода, эта деформация приводит к формированию очага горения шапкообразной формы (рис. 15 а). В случае более бедной смеси, с концентрацией водорода 5%, активности смеси недостаточно для преодоления растяжения пламени, вызванного вихревыми течениями. Фронт пламени разрушается в верхней (самой выдающейся точке) пламени, образуя структуру, состоящую из двух независимых очагов (рис. 15 б). Сформированные очаги пламени, расположенные в центре вихревого движения поддерживаются диссипацией кинетической энергии потока. Однако пространственных масштабов этих очагов недостаточно для поддержания стабильного горения, поэтому, в итоге горение прекращается

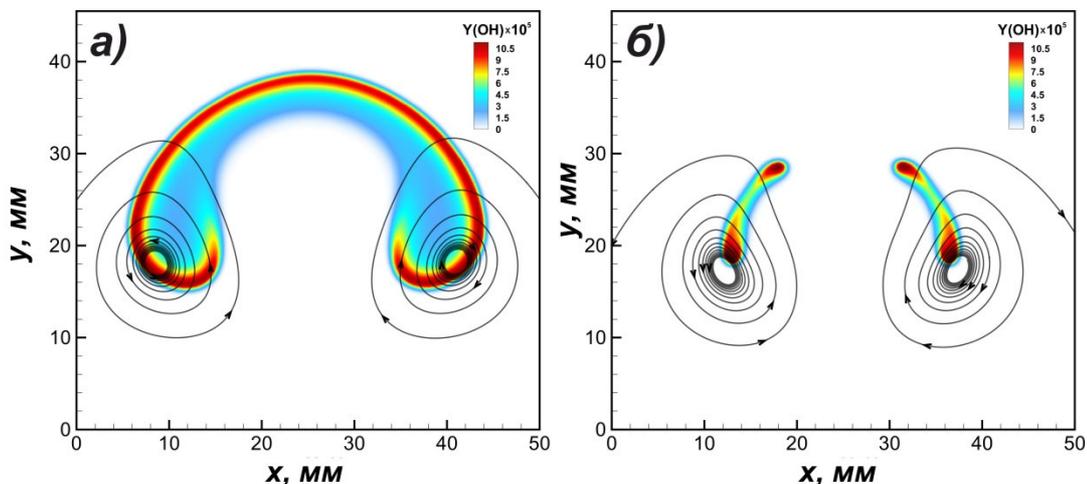


Рисунок 15. Структура пламени водородно-воздушной смеси через 180 мс после зажигания: а – концентрация водорода 6 %, б – концентрация водорода 5 %. Сплошной линией отмечены линии тока.

Рисунок 16 демонстрирует динамику роста площади шарика пламени (двухмерная область), нормированную на площадь источника воспламенения (изначально нагретая область). При концентрации водорода в 5 % (синяя

линия на рисунке 16) на графике зависимости относительной площади пламени от времени наблюдаются локальные спады, которые соответствуют случаям отрыва очагов от основной поверхности пламени. Случай отрыва, произошедший в момент времени  $\sim 90$  мс, приводит к формированию структуры пламени, представленной на рисунке 15 б. Здесь следует отметить, что такая структура является устойчивой в течение 120 мс, в промежутке времени от 140 до 260 мс. Затем от образовавшихся очагов отделяются более мелкие очаги (рис. 16). Эти горячие очаги горения меньших размеров оказываются менее устойчивыми. В итоге наблюдается окончательное затухание горения.

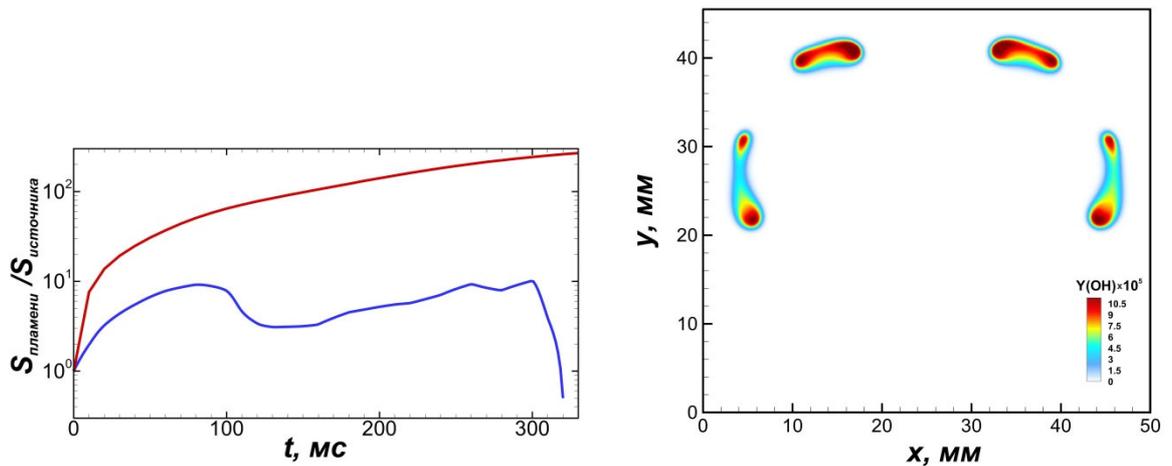


Рисунок 16 (слева). Зависимость площади пламени, отнесенной к площади источника начального энерговыделения от времени. Синяя линия – водородно-воздушная смесь с концентрацией водорода 5 %. Красная линия – концентрация водорода 6 %.

Рисунок 17 (справа). Структура пламени через 270 мс после воспламенения водородно-воздушной смеси с концентрацией водорода 5 %.

Подобный режим горения в ультра-бедных смесях был получен в работе [102], где для описания процесса использовалась математическая модель с учетом лучистых потерь тепла, но без учета гравитации. В этой работе авторы показали, что растяжение и локальный разрыв изначально

слегка возмущенного фронта плоского пламени, возмущение которого вызвано термодиффузионной неустойчивостью, усиленной за счет потерь тепла на излучение, приводит к образованию подобных изолированных округлых очагов горения. Однако при условии отсутствия гравитации эти очаги горения оказываются устойчивыми.

Для сравнения условий устойчивого горения в микрогравитации и в условиях земной гравитации были проведены дополнительные расчеты. На рисунке 18 представлены результаты расчетов температуры продуктов горения для различных составов смесей.

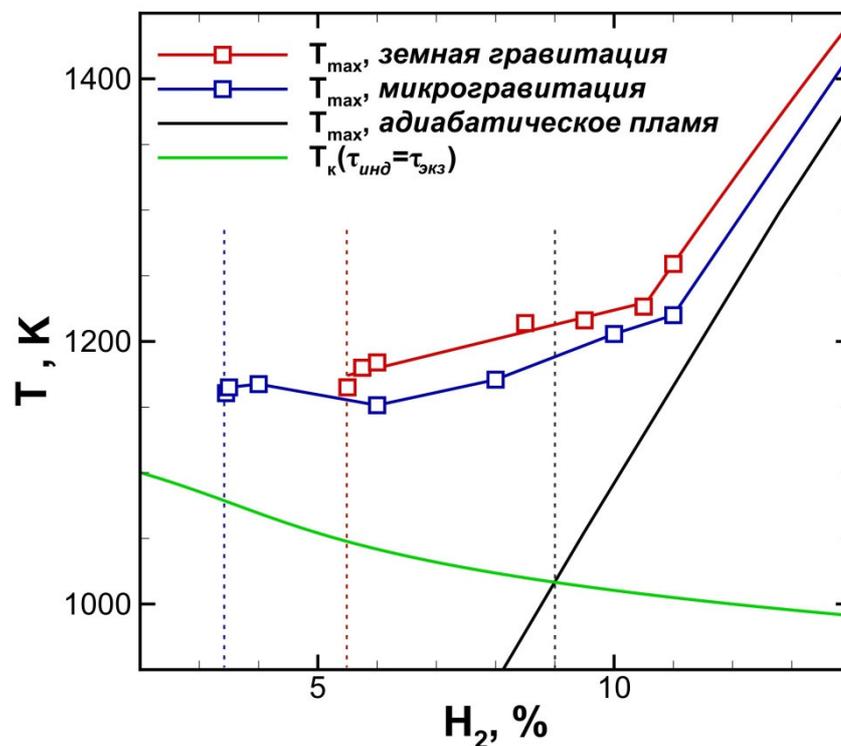


Рисунок 18. Значения температуры горения для водородно-воздушных смесей различного состава: зеленая линия – температура «кроссовера» [38,103], красная линия – максимальная температура пламени в условиях земной гравитации, голубая линия – максимальная температура пламени в условиях микрогравитации в сферически симметричной задаче, черная линия – термодинамическая оценка максимальной температуры адиабатического пламени. Пунктирные линии обозначают нижние концентрационные пределы для ультра-бедных пламен в условиях микрогравитации (голубой пунктир), в

условиях земной гравитации (красный пунктир) и для дефлаграционного пламени (черный пунктир).

В процессе горения имеют место потери тепла из зоны горения, что приводит к снижению максимальной температуры пламени  $T_{\max}$  по сравнению с адиабатической температурой  $T_{\text{ad}}$ . Снижение температуры горения приводит к уменьшению скорости распространения пламени. Чем меньше скорость пламени, тем больше времени газ проводит в активной зоне горения и тем большее количество энергии будет потеряно в процессе горения. Таким образом возникает обратный механизм, на который впервые указал Зельдович [104]. Из-за существования такой обратной связи наблюдается увеличение относительных теплотерь и при преодолении определенного уровня потерь становится невозможным дальнейшее распространение пламени. При достижении этого предельного уровня теплоотвода наблюдаемая скорость горения будет отлична от нуля. Для свободно распространяющегося пламени наибольший теплоотвод достигается посредством излучения. Именно отвод тепла определяет концентрационные пределы распространения пламени. Условие возможности распространения пламени также может быть представлено как равенство времени индукции и характерного времени теплоотвода, отнесенных к температуре пламени [104].

Итак, для устойчивого распространения пламени необходимо равенство «кроссовер» температуры и температуры пламени. Кроссовером называется температура, при которой время индукции равно времени протекания экзотермической реакции. В соответствии с классической теорией горения, устойчивая дефлаграционная волна может быть сформирована только при содержании водорода свыше 9%. Исходя из рисунка 18 видно, что пересечение зеленой и черной линий определяет критические условия для распространения устойчивой волны дефлаграции. В околопредельных пламенах максимальная температура выше адиабатической, что связано с

переходом к диффузионному механизму горения. Поэтому, стабильное горение может происходить даже в смесях с содержанием водорода менее 9%.

При анализе процесса в условиях микрогравитации и земной гравитации можно заметить, что концентрационные пределы для этих условий оказываются намного ниже оценки нижних концентрационных пределов для адиабатических пламен. Анализ полученных результатов позволяет сделать вывод, что важную роль в ограничении распространения пламени начинают играть иные физические механизмы. В результате воздействия этих механизмов наблюдается затухание пламени даже при достижении продуктами горения сверхадиабатических температур. В частности, воздействие гравитации приводит к разрыву шарика пламени на начальной стадии его формирования, в точке, лежащей на оси симметрии. Поэтому даже при достаточно высокой температуре продуктов горения, мы наблюдаем первичный разрыв фронта пламени в точке на оси симметрии уже в смеси с концентрацией водорода менее 5.5 %. Таким образом, характерная шапкообразная структура, которая не подвержена центральному разрыву в условиях земной гравитации, наблюдается только при концентрации водорода в смеси, начиная с 5,5%. На основании этих данных нижний концентрационный предел горения оценивается в  $5,25 \pm 0,25$  %. Нижний концентрационный предел для ультра-бедных водородно-воздушных смесей в условиях микрогравитации оценивается в  $\sim 3,45 \pm 0,05$ %. Полученное значение нижнего концентрационного предела в условиях микрогравитации для ультра-бедных водородно-воздушных смесей хорошо согласуется с ранее представленными численными оценками. Например, в работе [105] были представлены результаты математического моделирования динамики горения ультра-бедных водородно-воздушных смесей и был получен предел для бедных смесей, который составил 3,4%. Также в экспериментальной работе [106] измеренный нижний концентрационный предел в условиях микрогравитации составил  $3,6 \pm 0,1$ %. В работе [34] предельное значение

концентрации водорода в газовой смеси в условиях земной гравитации оценивается, как  $6,0 \pm 0,3\%$ .

### 3.3 Основные результаты

В рамках проведенного исследования показано, что устойчивость очага горения, развивающегося в ультра-бедных водородно-воздушных смесях, определяет широкий спектр физических факторов. В Главе 3 показано, что горение в форме стационарного сферического шарика пламени, в условиях микрогравитации, может быть устойчивым даже в смесях с меньшим содержанием водорода, чем нижний концентрационный предел для свободно распространяющегося пламени. Согласно полученным результатам, устойчивое ультра-бедное горение может быть также получено в условиях земной гравитации, где устойчивость очагов горения, главным образом, определяется конвективным движением, устанавливающимся уже на начальной стадии развития процесса. Конвективные потоки газовой смеси в форме вихревых структур взаимодействуют с очагом горения и определяют растяжение поверхности пламени. Этот эффект становится причиной локального разрыва поверхности пламени в наивысшей точке фронта, расположенной на оси симметрии и дальнейшего угасания горения. В результате, концентрационные пределы устойчивого горения оказываются выше, по сравнению со случаем горения в условиях микрогравитации, но еще ниже, чем в случае адиабатических плоских пламен.

## **Глава 4 Динамика газовых пузырьков в приближении несмешивающихся газов, как модель эволюции ультра-бедного пламени в условиях земной гравитации**

В Главе 4 решается задача о всплытии легкого газа в атмосфере тяжелого с целью построения критериев формирования различных режимов развития очагов ультра-бедного горения на основе аналогии наблюдаемых газодинамических потоков при подъеме пузырька и при горении ультра-бедной водородно-воздушной смеси. В процессе горения водородно-воздушных газовых смесей основное влияние на значение нижнего концентрационного предела оказывают конвективные и турбулентные газодинамические потоки [107,108], в связи с этим можно сделать вывод о том, что основную роль в задачах об определении нижнего концентрационного предела играет газодинамика. При математическом моделировании восходящего движения газовых пузырьков, холодная газовая смесь играет роль тяжелого газа, а продукты сгорания – легкого газа. На основе результатов, полученных для химически неактивных газовых пузырей, построена диаграмма на плоскости безразмерных чисел Рейнольдса и Фруда, а также выделены области устойчивого и неустойчивого режимов горения. Результаты опубликованы в [IV].

### **4.1 Обзор литературных источников**

Структуры очагов горения, формирующиеся в ультра-бедных предварительно перемешанных горючих смесях с низким процентным содержанием топлива (водорода), обладают рядом специфических

особенностей, освещенных в Главе 2. При этом, как уже отмечалось ранее, динамика ультра-бедного очага горения качественно схожа с динамикой всплытия газообразного пузырька в жидкости, а также схожа с динамикой капель жидкости в несмешивающихся жидкостях [74]. Наряду с параметрами, описывающими подъем очага, такими как характер зависимости скорости всплытия от времени и ее стремление к конечному значению, наблюдаемая структура шарика пламени также коррелирует со структурами, наблюдаемыми при всплытии пузырька или падении капли жидкости в пространстве, заполненном другой жидкостью, или при рассмотрении газообразных сред [109, 110].

Аналогия пламя-пузырек была плодотворно применена В. Бычковым для анализа распространения искривленного пламени и связанного с ним развития неустойчивости Рэлея – Тейлора в горизонтальных трубах [74, 111] и астрофизических пламенах [74]. В настоящей главе диссертации численно изучено ультра-бедное пламя и предложена классификация структуры пламени, используя аналогию пламя-пузырек. Для описания динамики ультра-бедного водородно-воздушного пламени и газовых пузырьков используют следующие безразмерные критерии:

- Число Галилея (или число Архимеда), характеризующее отношение гравитационной силы к силе вязкого трения  $Ga = \rho_l \sqrt{gRR} / \mu_l$ ;
- Число Этвоша (или число Бонда) характеризует форму пузырьков и описывает отношение выталкивающей силы к силе поверхностного натяжения  $EO = \rho_l g R^2 / \sigma$ ;
- Число Вебера  $We = \rho_l R U^2 / \sigma$  отражает соотношение между силой поверхностного натяжения и силой инерции. Оно характеризует способность границы раздела жидкость-газ к деформации;
- Число Рейнольдса описывает отношение инерционных сил к силам вязкого трения  $Re = \rho_l U d / \mu_l$ ;

- Число Фруда  $Fr$  характеризует соотношение силы инерции и силы тяжести  $Fr = U/\sqrt{gR}$ . Сила инерции вызывает возмущение в потоке, приводящее к перемешиванию фаз, а сила тяжести, наоборот, стремится вызвать их расслоение;

- Число Мортон - комбинация чисел Рейнольдса, Вебера и Фруда  $Mo = We^3 / Fr^2 \cdot Re^4 = g\mu^4 / \rho_l^2 \sigma^3$  характеризует форму пузырьков [90], где  $\rho_l$  - плотность легкого газа;  $\mu_l$  - коэффициент вязкости легкого газа;  $R$  - радиус кривизны газового пузыря вблизи верхней точки;  $d$  - диаметр газового пузыря вблизи верхней точки;  $\sigma = (\Delta p R) / 2$  - коэффициент поверхностного натяжения,  $U$  – скорость всплытия пузырька.

Одним из направлений исследований является создание фазовой диаграммы, то есть классификации структур газовых пузырьков, в зависимости от заданных параметров. В работах [86, 91] исследованы формы и траектории воздушного пузыря, поднимающегося в жидкости. Около трехсот экспериментов проводились для создания классификации режимов, в зависимости от значения чисел Галилея и Этвоша [91]. В работе [90] для создания фазовой диаграммы проводились вычислительные эксперименты. Исследовано влияние вязкости на образование тороидальных пузырьков в случае, когда числа Архимеда и Бонда стремятся к бесконечности.

Рассмотрим какие физические параметры влияют на динамику пузырьков. В работах [84,109,112-117], посвященных математическому моделированию, отмечено, что на структуру пузырьков не влияет их масса, а также соотношения плотности и вязкости. Однако исследование Sharaf и его коллег [91] показывает, что отношения вязкости и/или плотности могут влиять на динамику пузырьков. Также исследователи в работе [109] отмечали влияние эффекта начальной формы пузырька. Окончательная структура пузырька зависит от того, насколько сферической была его начальная форма. Кроме того, все еще плохо изучена особенность больших пузырьков,

закрывающаяся в том, что они могут эволюционировать либо в форме сферической шапочки, либо становиться тороидальными в зависимости от геометрии системы впрыска, используемой для их создания [90, 118].

Известные на сегодняшний день структуры газовых пузырей получены экспериментально и с помощью математического моделирования. Исследователи выявили существование одиночного шапкообразного пузырька, пузырька с юбкой, структуру, характеризующуюся разрывом в наиболее выдающейся точке поверхности всплывающего пузырька. Особенности этих структур приведены ниже.

Одиночный шапкообразный пузырь может быть, как окончательной структурой [109, 119, 120], так и промежуточной стадией в развитии более сложной структуры пузырька [84, 86, 90, 121]. Стоит отметить, что на нижней границе пузыря наблюдается максимальный перепад давления, провоцирующий большее значение выталкивающей силы, вследствие чего, нижняя часть пузыря поднимается быстрее, чем верхняя [90].

В работе [122] описаны результаты математического моделирования, в котором исследовалось влияние поверхностного натяжения, вязкости и плотности на структуру пузырька. Авторы отмечают, что при превышении определенного значения поверхностного натяжения или вязкости жидкости, геометрия пузырька остается связанной, а окончательная форма пузырька принимает шапкообразную форму.

Пузыри с юбкой относят к разрыву периферического типа. При разрыве с образованием юбки на периферии пузырька образуются небольшие пузырьки-спутники, поднимающиеся в области следа за основным пузырьком. Пузыри с юбкой образуются из-за, так называемых, спутниковых и тороидальных разрывов. Такие структуры получены путем численного моделирования в работах [86, 90] и экспериментально [87, 91, 118]. Эти разрывы происходят произвольно, и между ними нет принципиальных различий. На рисунке 19 представлены экспериментальные результаты по наблюдению периферического разрыва. В случае, представленном на рисунке

19 (слева) пузырь теряет свою целостность вблизи центра, образуя маленькие пузырьки спутники в следе и сферический пузырь в виде шапки. При тороидальном разрыве, представленном на рисунке 19 (справа), кольцевая структура отделяется от основного тела пузыря. Уолтерс и Дэвидсон [87] во время предварительных экспериментов по исследованию сферического всплывающего пузыря в жидкости наблюдали образование тороидальных пузырьков. При постановке эксперимента подача воздуха в резервуар из оргстекла с водой осуществлялась двумя способами. Сначала воздух содержался в небольшом сосуде и впускался в резервуар, быстро открывая и закрывая клапан. Размер пузырька регулировался разным временем впрыска и давлением в сосуде. В последующей серии экспериментов вдувание одиночного импульса воздуха осуществлялось через маленькую трубку, вставленную в дно большого резервуара, заполненного водой. Покидая отверстие, пузырек двигался с большой скоростью, но после прохождения небольшого расстояния передняя поверхность замедлялась, и в нее проникал язычок жидкости, идущей за нижней кромкой пузырька, образуя тороидальный пузырь.

Ряд работ посвящен исследованию влияния структуры пузырька на скорость всплытия. В результате проведения эксперимента в работе [118] было показано, что скорость всплытия газового пузыря с юбкой больше на 4%, чем скорость всплытия пузыря того же объема, однако имеющего шапкообразную форму. Причиной этого явления является то, что пузырь с маленькими пузырьками-спутниками имеет менее вогнутую заднюю часть, больше похожую на линзу, которая способствует уменьшению силы сопротивления движению [118]. Поскольку пузырьки спутники поднимаются с той же скоростью, что и ведущий пузырь, средняя сила плавучести  $\rho g V$  одинакова для систем с шапкообразным пузырем и пузырем с юбкой, при равном объеме газа  $V$ . Так как общая сила плавучести одинакова в обоих случаях, но при этом наблюдается небольшое увеличение скорости всплытия в присутствии пузырьков спутников, то можно предположить, что именно

пузырьки-спутники влияют на поток в следе пузыря. Наличие пузырьков-спутников приводит к небольшому уменьшению турбулентной диссипации и, следовательно, среднего сопротивления. Кроме того, это уменьшение турбулентных сил сопротивления может быть однозначно объяснено присутствием пузырьков в следе, потому что никакого увеличения скорости всплытия не наблюдается в отсутствие спутниковых пузырьков [118]. Однако, точный механизм, с помощью которого сопротивление потока уменьшается в присутствии спутниковых пузырьков, в настоящее время неизвестен [118].

Интересно отметить, что результаты математического моделирования, описанные в [90], не согласуются с экспериментальными результатами [118]. Результаты математического моделирования показали, что тороидальный пузырь поднимается медленнее, чем его сферическая крышка. Авторы связывают это с влиянием на тороидальный пузырь вихря, который замедляет его движение вверх.

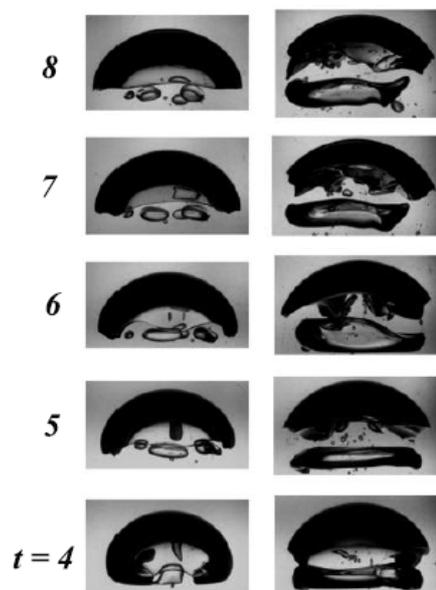


Рисунок 19. Спутниковый разрыв (слева). Всплытие пузырька воздуха ( $R=22.8$  мм) в водном растворе глицерина (70%)  $Ga = 221.5$ ,  $Е_0 = 92.1$ .

Тороидальный разрыв (справа). Всплытие пузырька воздуха ( $R=26.7$  мм) в водном растворе глицерина (80%) ( $Ga = 171.0$ ,  $Е_0 = 131.0$ ) [91].

Помимо шапкообразного одиночного пузырька и пузырьков с юбкой исследователи наблюдали структуры, характеризующиеся центральным разрывом основного пузырька в его наивысшей точке. В литературных источниках представлено три механизма, по которым осуществляется центральный разрыв в пузырьке. Чаще всего центральный разрыв при всплытии газа в жидкости наблюдается если плотность жидкости во много раз превышает плотность газа и если вязкость жидкости во много раз превышает вязкость газа. В литературе для центральных разрывов предложены три типа механизмов распада:

- механизм инерционной струи вверх [87];
- механизм струйной тяги вниз [90, 123];
- механизм струйной тяги вниз со значительным расширением пузыря [91].

В режиме с преобладанием инерции, когда пузырь поднимается, он деформируется под действием дополнительного давления, создаваемого гидростатическим напором, эквивалентным  $2\rho_0 gR$  между верхней и нижней точками пузыря. Это, в свою очередь, создает восходящую струю жидкости, которая сжимает пузырь в вертикальном направлении. Этой деформации в целом противодействует сила поверхностного натяжения. В этой конкуренции между силами инерции и поверхностного натяжения, при выигрыше инерции пузырь разрывается в центре, образуя тороидальный пузырь. Нисходящая струя может быть объяснена следующим образом. Повышение давления на передней части пузырька уравнивается капиллярным давлением и нормальным вязким трением. Однако, если капиллярные эффекты малы (высокий  $Е_0$ ), и если вязкие силы также малы по сравнению с инерционными силами (высокий  $Ga$ ), избыток давления на передней части пузыря вызывает дестабилизацию границы раздела нисходящей струи [90].

В работе [91] представлен третий вид центрального разрыва, который происходит при гораздо более высоком значении поверхностного натяжения, хотя он напоминает механизм струи, направленной вниз. Предпосылкой к разрыву служит то, что пузырь приобретает форму диска и продолжает увеличивать радиус своей окружности, что в итоге приводит к разрыву от центра. Следует отметить, что значительная часть воздуха накапливается в периферийных областях, а не в центральной части, что делает пузырь более тонким в центре. Объяснением этого эффекта служит формирование встречно вращающихся вихрей, представленных на рисунке 20, в следе поднимающегося пузырька, которые вытесняют жидкость наружу от центра пузырька. В результате чего расстояние между внешней и внутренней поверхностью пузырька уменьшается и через некоторое время мы наблюдаем разрыв. Кроме того, пузырь остается плоским в этих случаях из-за высокой инерции [91].

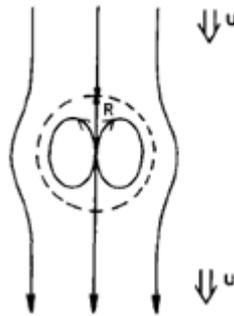


Рисунок 20. Схема обтекания сферического пузыря радиуса  $R$ . Жидкость имеет одинаковую асимптотическую скорость  $u$  выше и ниже пузыря. У потока есть точки застоя в верхней и нижней точках сферы [88].

Газодинамические потоки, наблюдаемые при горении ультра-бедной водородно-воздушной смеси, подобны потокам, формируемых в процессе всплытия газового пузырька в жидкости или капли в несмешивающихся жидкостях [74]. Наряду с динамическими параметрами восходящего движения, такими как характер зависимости скорости всплытия очага от

времени и стремление скорости к конечному значению, структура очага горения также аналогична движущимся газовым пузырькам или каплям жидкости в несмешивающихся жидкостях [109,110]. Как отмечалось ранее, аналогия “пламя-пузырек” была успешно применена для анализа распространения искривленного пламени и развития неустойчивости Рэлея – Тейлора в горизонтальных трубах. В настоящей диссертации аналогия «пламя-пузырек» была применена для исследования горения водородно-воздушных смесей.

#### **4.2 Постановка вычислительного эксперимента**

Для исследования пространственных структур пламени, образующихся в процессе горения и конвективного движения водородно-воздушной газовой смеси, были выбраны две постановки задачи. Первый вычислительный эксперимент по исследованию горения ультра-бедной водородно-воздушной смеси схож с постановками в предыдущих главах диссертации. Второй вычислительный эксперимент с химически неактивной газовой смесью позволил нам рассмотреть отдельно газодинамику вертикального всплытия легкого газа в тяжелом. Как уже было сказано ранее, именно газодинамические потоки влияют на динамику горения ультра-бедной водородно-воздушной смеси. Рассмотрение задач с химически неактивной газовой смесью позволило значительно снизить требования к вычислительным ресурсам, необходимым для решения поставленных задач.

На рисунке 21 показана расчетная область, представляющая собой двухмерное полуограниченное пространство с граничным условием, моделирующим открытые стенки сверху и по бокам расчетной области, и

условием изотермической стенки снизу. Изначально область заполнена водородно-воздушной смесью с содержанием водорода 4,5-6,0 %, при нормальных условиях ( $T_0 = 300 \text{ K}$ ,  $p_0 = 1 \text{ атм}$ ). Возгорание смеси происходит у изотермической стенки при мгновенном повышении температуры до 2000 К. Область воспламенения представляет собой круг радиусом  $R_0 = 1-4 \text{ мм}$ . После зажигания пламя распространяется вверх за счет влияния выталкивающей силы. В настоящей главе диссертации была изучена динамика водородно-воздушного пламени в диапазоне концентраций, соответствующем околопредельным пламенам. Для исследования влияния режима зажигания на динамику пламени проводились расчеты с инициированием горения тремя различными очагами воспламенения (различного радиуса,  $R_0 = 1, 2, 4 \text{ мм}$ ).

В ультра-бедных пламенах значения скорости горения довольно низкие, и развитие очага горения в основном определяется конвективным переносом горячих продуктов горения. Зная этот факт, можно спрогнозировать поведение ультра-бедного очага горения, анализируя динамику системы, в которой легкий газ окружен более тяжелым газом, так называемое приближение «несмешивающихся газов». Для поддержания градиента плотности между пузырем и атмосферой эффектами диффузии пренебрегается. Это необходимо для того, чтобы избежать перемешивания и сохранить четкую границу, разделяющую область легкого газа и тяжелого газа, являющую собой аналог фронта пламени в реагирующей среде, где экзотермические реакции на фронте поддерживают его целостность. Атмосфера, как и содержимое пузыря, состояли из водородно-воздушной смеси с различным составом, определяющим различные соотношения плотностей. Отношения плотностей между пузырем и окружающим газом варьировались в диапазоне  $\theta_b = 1.5-4.0$ . Первоначально пузырек имел круглую форму с радиусом  $R_{0,b} = 1-4 \text{ мм}$ .

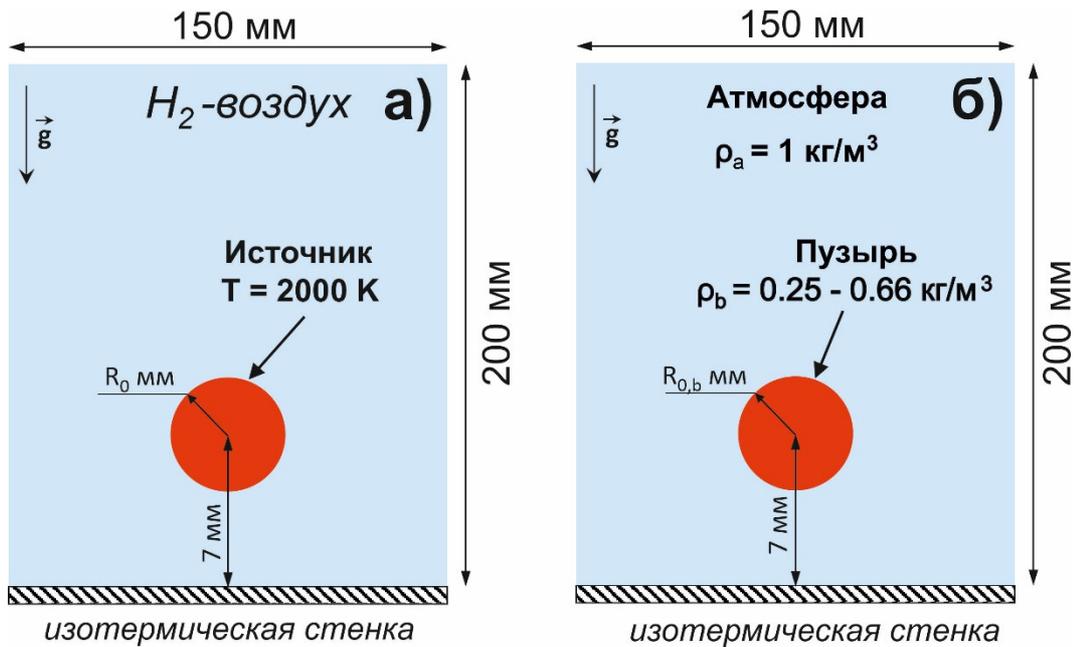


Рисунок. 21 Постановка вычислительного эксперимента по исследованию водородно-воздушного пламени в приближении «несмешивающихся газов».

Для математического моделирования был проведен тест на сходимость, результаты которого представлены на рисунке 22. Как показали результаты математического моделирования при использовании расчетной ячейки  $0,4 \times 0,4$  мм решение сходится. Ширина фронта пламени для наиболее химически активной водородно-воздушной смеси из рассмотренных в этой главе диссертации (содержание водорода 6 %) составляет около 10 мм. Таким образом, пространственная структура фронта пламени разрешается с помощью не менее 25 ячеек при размере ячейки  $\Delta x = 0,4$  мм. При таких условиях достигается сходимость.

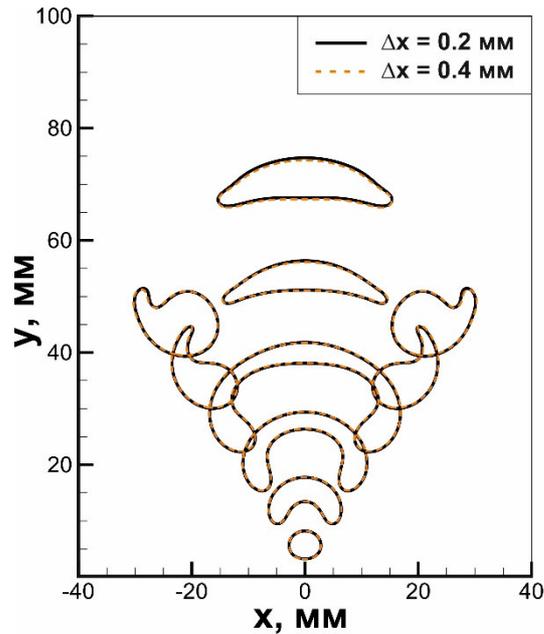


Рисунок. 22 Исследование влияния размера расчетной ячейки на сходимость решения. Сравнение решений, полученных в расчетных областях с ячейками 0,2 мм и 0,4 мм

#### 4.3 Анализ горения водородно-воздушных смесей с учетом аналогии всплывающих газовых пузырьков

Сначала рассмотрим эволюцию всплывающих газовых пузырей. Динамика газового пузырька определяется только конвективным движением легкого газа. Меняя начальный радиус пузырька и отношение плотностей  $\theta_b$ , можно контролировать количество легкого газа и интенсивность подъемной силы, воздействующей на легкий газ, и, таким образом, наблюдать различные сценарии эволюции формы газового пузырька. На рисунке 23 представлены четыре различных пути эволюции газовых пузырьков. Когда легкий газ начинает вертикальный подъем, его первоначально круглая форма слегка деформируется и приобретает характерную структуру в форме колпачка (рис. 23а). Такая форма очага горения наблюдалась в реальных экспериментах по

исследованию горения ультра-бедных составов газовых смесей [22,24], а также в исследованиях, посвященных анализу форм всплывающих газовых пузырей [86], и падающей капли жидкости [109]. Поднимаясь вверх, газовый пузырь создает вихревое газодинамическое движение в своем следе. Это вихревое течение влияет на структуру пузыря. Таким образом, для малых пузырей  $R=1$  мм с отношением плотностей  $\theta_b = 1.5-4.0$  этот вихревой поток определяет центральное разрушение пузыря (рис. 23б). Такой сценарий наблюдался ранее в Главе 3 при математическом моделировании развития очага ультра-бедного горения в водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 5%. Стоит отметить, что центральный разрыв газового пузырька, поднимающегося в жидкости, не наблюдался ни в одном экспериментальном исследовании, но наблюдался при математическом моделировании [88].

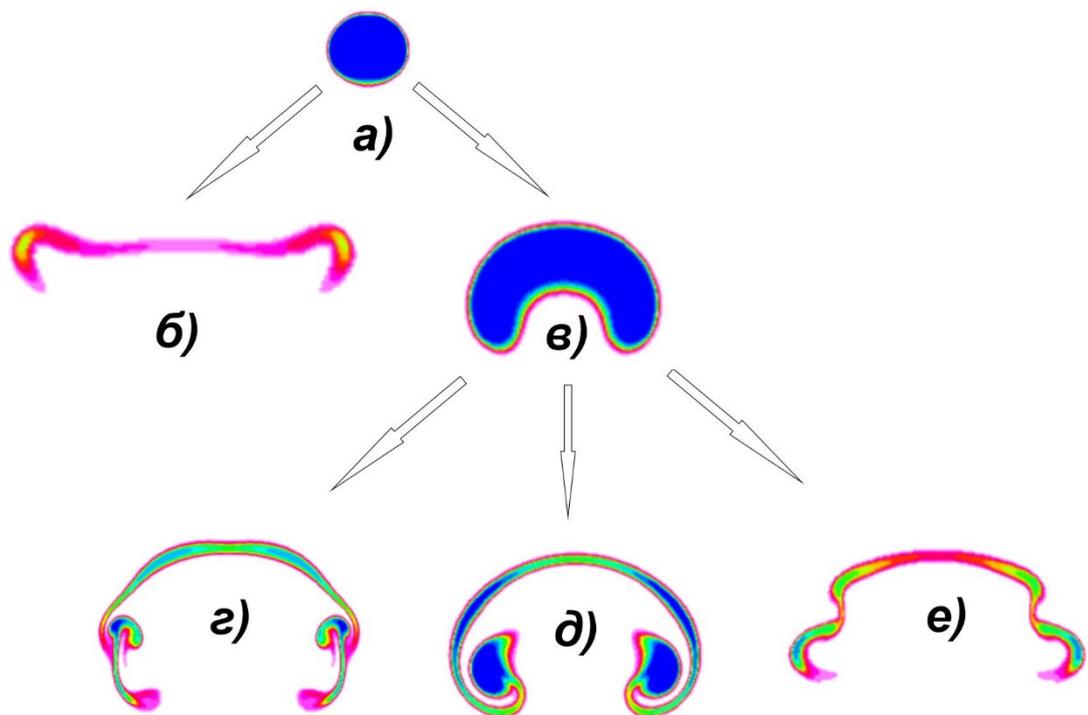


Рисунок 23. Характерные структуры газового пузыря, полученные с помощью математического моделирования в приближении «несмешивающихся газов» для различных  $\theta_b$  и  $R_{0,b}$ . а) начальная структура пузырька; б) структура пузырька с начальным радиусом  $R_{0,b} = 1$  мм; в) промежуточная шапкообразная структура пузырька в случае если  $R_{0,b} > 1$  мм;

г) структура пузырька с начальным радиусом  $R_{0,b} = 3$  мм; д) структура пузырька с начальным радиусом  $R_{0,b} = 4$  мм; е) структура пузырька с начальным радиусом  $R_{0,b} = 2$  мм; Определяющим структуру пузырька фактором являлся начальный радиус, изменение коэффициента расширения  $\theta_b = 1.5, 2.0, 3.0, 4.0$  не влияло на структуру пузырька.

При значениях начального радиуса пузыря  $R \geq 2$  мм структура пузыря остается закрытой, и пузырь продолжает расти в форме колпачка (рис. 23 в). Воздействие вихревых потоков сводится к деформации пузырька на его периферии и последующему разрушению пузырька и образованию пузырьков-сателлитов (рис. 23 г, д, е).

На рисунке 24 показаны пространственные структуры пламени, образованные в реагирующих водородно-воздушных смесях с концентрацией водорода 5.0-6.0 %  $H_2$ , воспламеняемые нагретой областью радиусом  $R_0 = 1$  мм. Стоит отметить, что даже небольшое изменение (менее 1 %) концентрации водорода в ультра-бедной смеси может приводить к существенному различию в структурах ультра-бедного пламени. Для водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 4,5% не наблюдалось зажигания смеси при использовании источника воспламенения с  $R_0 = 1$  мм. При содержании водорода 5 % шапкообразная структура пламени, образовавшаяся на ранней стадии развития пламени, практически сразу разрушается вихревыми потоками, создаваемыми поднимающимися вверх продуктами горения. Это приводит к образованию двух отдельных очагов горения, которые продолжают распространяться вверх под действием подъемной силы, а область горения со временем немного увеличивается. Однако с течением времени пламя гаснет. Увеличение содержания водорода до 5,5% приводит к более сложной структуре пламени. Здесь, как и в случае 5,0 %  $H_2$  в воздухе, пламя на начальной стадии всплывания приобретает шапкообразную форму. Боковая поверхность фронта пламени подвержена воздействию сдвиговых

течений, что ведет к её локальному растяжению. В результате чего от боковой поверхности основного очага горения отделяются дополнительные очаги, интенсивность горения которых достаточно высока, поэтому мы наблюдаем три отдельные зоны горения. Динамика очага, расположенного на оси симметрии схожа с динамикой шарика пламени после воспламенения. При дальнейшем движении очага вверх индуцируется вихревой поток. В результате чего наблюдается вторичный разрыв очага, расположенного на оси симметрии. Как уже отмечалось ранее, общая эволюция пламени очень чувствительна к газодинамике, генерируемые потоки легко растягивают и разрывают поверхность пламени на более мелкие очаги горения (рис. 24). Однако из-за более высокой скорости горения такие разрушения фронта пламени не вызывают полного гашения пламени, и оно продолжает подниматься вверх уже в виде сложной многоочаговой структуры, которая характеризуется наличием активных зон горения, которые не гаснут на протяжении всего вычислительного эксперимента. Предположительно именно этот режим многоочагового горения был экспериментально зарегистрирован в [126], где для визуализации структуры пламени в трубке длиной 5 см, заполненной 6%  $H_2$ , 20%  $O_2$ , 74%  $SO_2$  использовался хромилхлорид ( $CrO_2Cl_2$  0,3 %).

В водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 6% формируется устойчивая шапкообразная структура пламени. Здесь также можно наблюдать отделение вторичных очагов, но только на периферии фронта пламени. Подробный анализ этого режима горения уже был проведен в Главе 2.

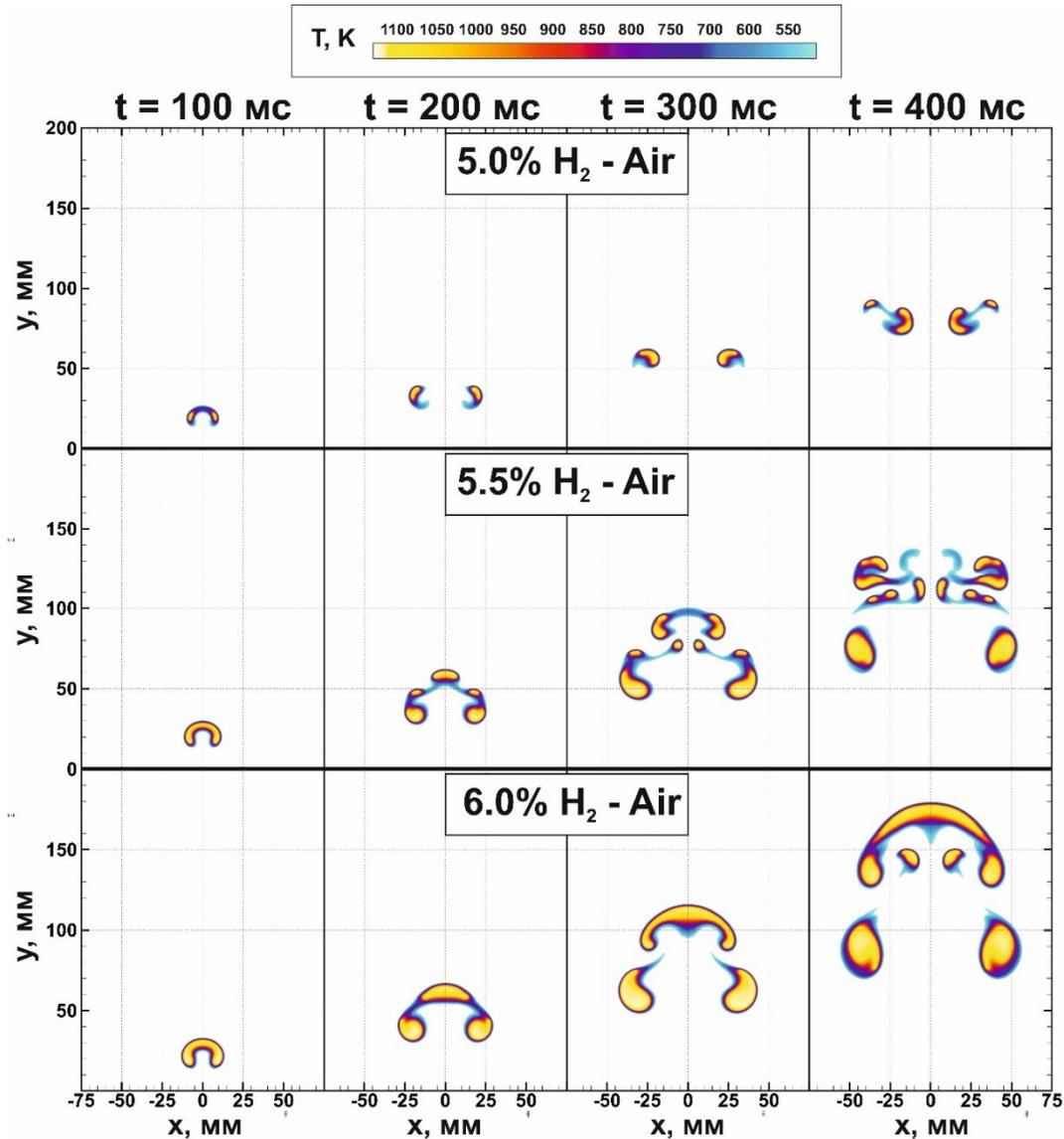


Рисунок 24. Структуры пламени околопредельной водородно-воздушной смеси с концентрацией водорода 5.0 %, 5.5 %, 6.0 %.

Анализ динамики ультра-бедного горения в условиях земной гравитации позволяет сделать вывод, что газодинамические потоки, связанные с естественной конвекцией горячих продуктов сгорания в атмосфере холодной свежей смеси, могут препятствовать распространению пламени. Механизм торможения здесь аналогичен механизму турбулентных потоков, где вызванное потоком растяжение приводит к гашению пламени [127]. Однако турбулентность также может вызвать усиление пламени, особенно в смесях с ярко выраженными эффектами преимущественной диффузии [128]. Таким

образом, в ультра-бедных водородно-воздушных смесях можно ожидать увеличения скорости горения за счет растяжения пламени и образования отдельных очагов горения при определенных условиях.

На рисунке 25 показано сравнение динамики пламени в 6 % водородно-воздушной смеси, инициированной тремя различными очагами воспламенения (различного радиуса,  $R_0 = 1, 2, 4$  мм). Стоит отметить, что радиус области инициирования горения не сказывается на основных характеристиках пламени. Во всех случаях максимальная температура пламени приближается к сверхадиабатическому значению  $T_{\max}$ , соответствующему приблизительно 1150 К, тогда как температура пламени, полученная из дополнительных одномерных сферически-симметричных расчетов, составляет  $T_{\max, 1D} = 1104$  К. Скорость горения можно оценить как производную по времени от радиуса круговой области, эквивалентной площади продуктов сгорания  $dR_{eq}/dt$ . Наблюдаемая скорость горения водородно-воздушной смеси, с содержанием водорода 6%, была постоянна для трех расчетов, в которых варьировался начальный радиус области воспламенения. Можно отметить, что после воспламенения скорость горения стремится к значению 30 мм/с, что близко к нормальной скорости горения, полученной при решении одномерной задачи о нормальном распространении горения. Однако, после отрыва и образования вторичных очагов на периферии основного очага скорость горения увеличивается. Это связано с явлением преимущественной диффузии и дополнительной подачи водорода в зону горения. Основное различие между тремя режимами зажигания связано со скоростью охлаждения очага горения и начальным значением эквивалентного радиуса. Чем больше количество первоначально нагретого газа, тем медленнее очаг остывает и за счет того, что он теряет меньше тепла в единицу времени, мы наблюдаем повышенную скорость распространения очага горения в течение более длительного периода времени. Это также определяет более высокое начальное значение  $R_{eq}$ . В случае 6 % водородно-воздушной смеси этот механизм существенной роли не играет. Ситуация меняется при

снижении концентрации водорода в смеси и приближении к предельным составам.

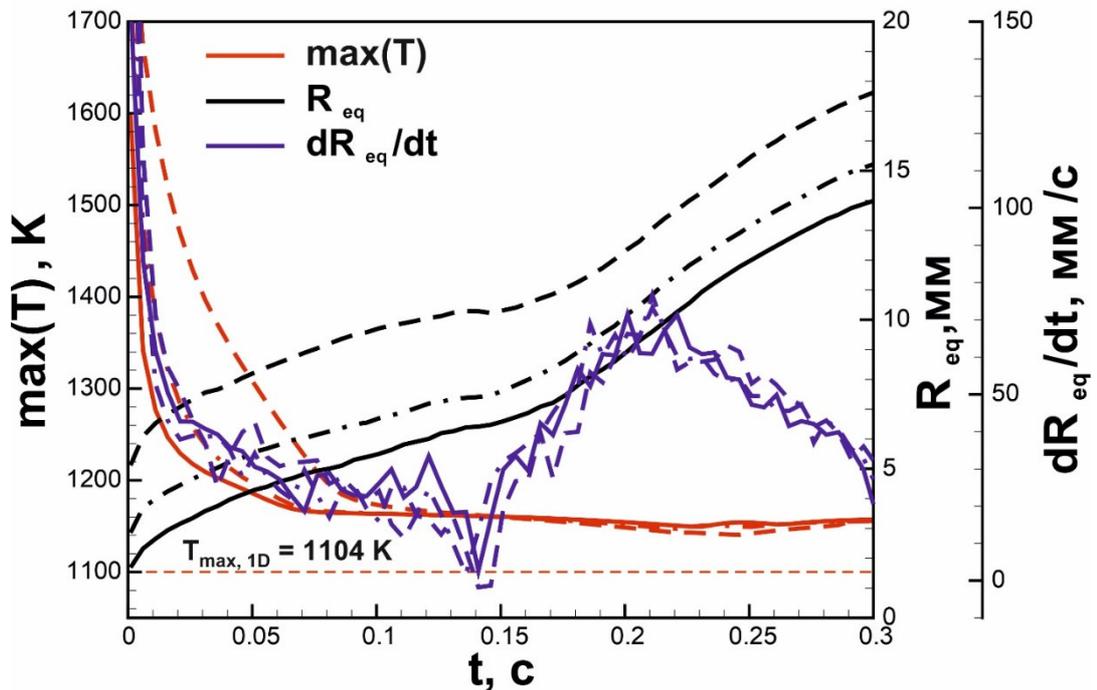


Рисунок 25. Зависимость максимальной температуры пламени, эквивалентного радиуса  $R_{eq}$  и скорости изменения эквивалентного радиуса  $dR_{eq}/dt$  от времени, для 6 % водородно-воздушной смеси.  $R_0 = 1$  мм сплошные линии,  $R_0 = 2$  мм штрихпунктирная линия,  $R_0 = 4$  мм пунктирная линия.

На рисунке 26а показана структура пламени в водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 4,5 %. Пламя состоит из двух отдельных очагов, которые не растут во времени, а движутся вверх по зигзагообразной траектории. Такой режим подъема также ранее наблюдали для небольших газовых пузырьков [86]. На рисунке 26б изображены зависимость максимальной температуры пламени и эквивалентного радиуса от времени. Стоит отметить, что зависимость температуры пламени имеет колебательный характер, приближаясь к температуре устойчивого сферического очага (оцененной согласно решению без учета гравитации) в нижнем положении. С другой стороны, эквивалентный радиус демонстрирует аналогичное поведение и колеблется около среднего значения, равного приблизительно 1,5

мм. Как уже отмечалось ранее, в смеси с содержанием водорода 4,5 % воспламенения от источника с  $R_0 = 1$  мм не наблюдалось, однако при увеличении площади инициирования горения смесь воспламенялась. По-видимому, именно избыточное количество продуктов сгорания, образующихся на ранней стадии развития пламени из-за увеличенной до 4 мм в диаметре области воспламенения позволяет наблюдать горение в водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 4,5 %. Поэтому можно сделать вывод, что при увеличении энергии зажигания смеси можно наблюдать процесс горения водородно-воздушной смеси при концентрации водорода 4,5 %.

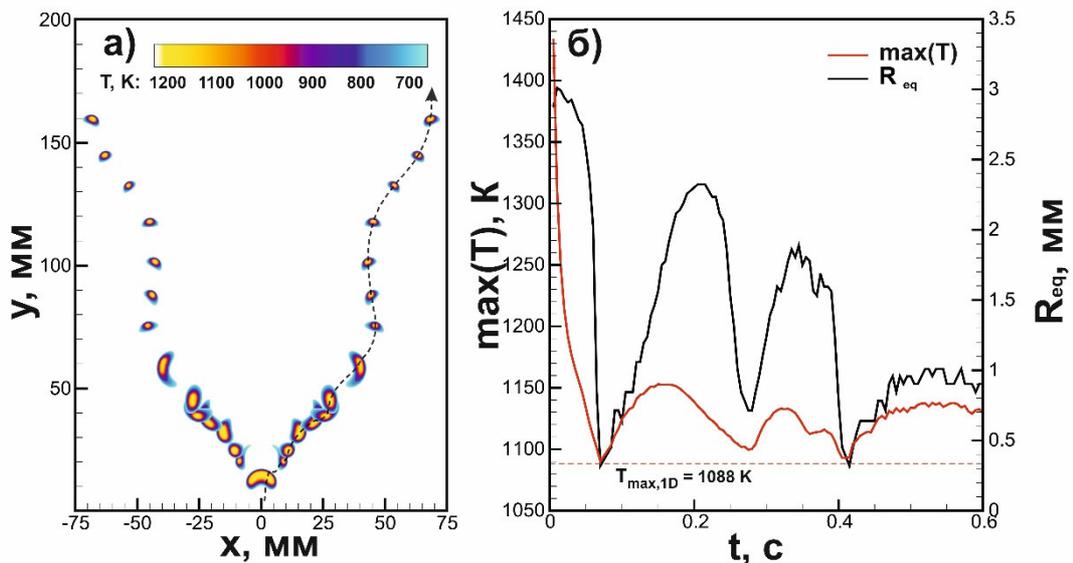


Рисунок 26. а) Структура пламени водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 4,5 %, воспламенение иницировалось нагретой областью  $R_0=2$  мм; б) Зависимость максимальной температуры и эквивалентного радиуса  $R_{eq}$  от времени для смеси с содержанием водорода 4,5 %.

На рисунке 27 показан график зависимости удельной энергии, необходимой для воспламенения ультра-бедных водородно-воздушных

смесей в двумерном расчете. Как уже отмечалось ранее, чем беднее смесь, тем большее значение подведенной энергии необходимо для воспламенения смеси.

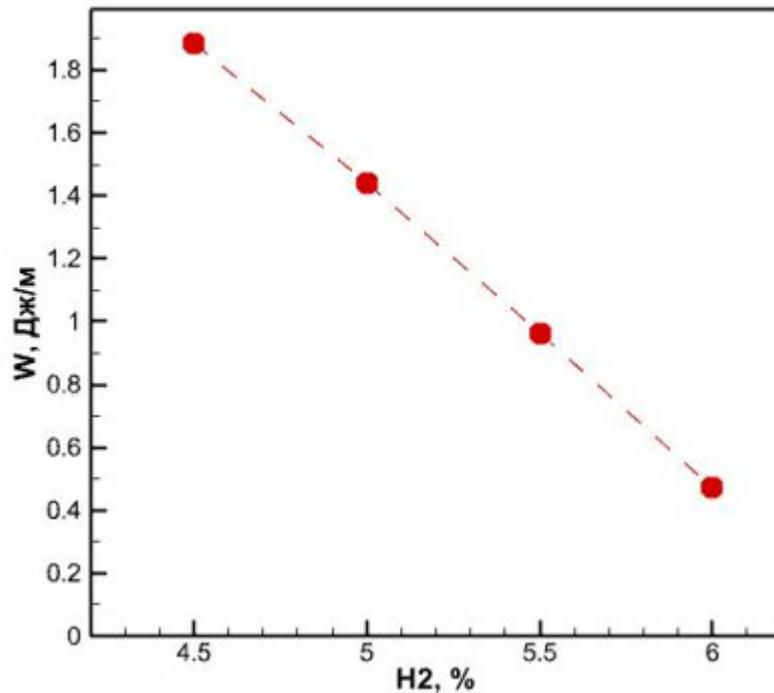


Рисунок 27. Зависимость минимальной удельной энергии, необходимой для воспламенения ультра-бедной водородно-воздушной смеси в зависимости от ее состава.

Как уже было сказано ранее, для анализа динамики пламени мы использовали аналогию пламени и газового пузырька. Для этого были выполнены расчеты двух безразмерных критериев подобия, числа Рейнольдса

$$Re = \frac{\rho_a U d_{eq}}{\mu_a} \quad \text{и} \quad Fr = \frac{U}{\sqrt{g d_{eq}}}. \quad \text{Число Рейнольдса отражает влияние сил}$$

инерции и вязкости, а число Фруда отражает соотношение сил инерции и силы тяжести. Такой набор безразмерных параметров является обычным для анализа динамики пузырьков в жидкости [90]. Разница лишь в том, что нет

прямой аналогии для поверхностного натяжения пузырька и очага горения, поэтому наш анализ ограничен только этими двумя безразмерными критериями. Характеристическая скорость  $U$  вычислялась как разница между скоростью подъема  $U_f$  и скоростью горения, оцененной, как  $dR_{eq}/dt$ . Для пузырьков характерная скорость является скоростью подъема пузырька. На рисунке 28 представлены диаграммы, полученные в плоскости чисел Рейнольдса и Фруда. Сначала мы провели расчеты безразмерных величин для пузырьков с различными начальными радиусами  $R_{0,b}$  и различными  $\theta_b$ . Оказалось, что траектория пузырька в плоскости чисел Рейнольдса и Фруда представляет собой отрезок прямой для промежутка времени, характеризующего первоначальное ускоренное движение вверх пузырька (рис. 28а). Конвективное смешивание уменьшает градиент плотности, и площадь пузырьков уменьшается, пока они не перестают быть различимыми. Уменьшение площади пузырька за счет конвективного перемешивания приводит к отклонению траектории от линейной зависимости в плоскости чисел Рейнольдса и Фруда, поскольку число Рейнольдса увеличивается с ростом площади пузырька, а число Фруда, наоборот, уменьшается. Этот процесс неизбежен из-за отсутствия поверхностного натяжения. Конвективное перемешивание становится более выраженным при увеличении  $\theta_b$ , так как отношение плотностей определяет значение подъемной силы, а значит и значение начального ускорения пузырька. Таким образом, длина линейного сегмента на нашей диаграмме уменьшается с увеличением  $\theta_b$ . При  $\theta_b = 5$  линейный сегмент перестает существовать, поскольку конвективное смешивание начинает доминировать в структуре пузырька. Таким образом, мы построили линейные участки динамики начального пузыря для отношений плотностей  $\theta_b = 1.5 - 4.0$ . Линейные отрезки для пузырьков с одинаковым начальным радиусом  $R_{0,b}$  имеют одинаковый наклон, а значение отношения плотностей  $\theta_b$  определяет расположение начальной точки линейного отрезка и его длину. Все пузырьки с одинаковым начальным радиусом  $R_{0,b}$  образуют похожие пространственные структуры, что позволило разделить плоскость

чисел Рейнольдса и Фруда на области, определяемые наклонами линейных сегментов (рис. 28), в которых будут наблюдаться различные структуры пузырька. Полученная диаграмма может быть использована для прогнозирования и классификации пространственной структуры пузырьков и очагов горения бедного водородно-воздушного пламени. Сравнивая структуры пламени на рисунке 24 и структуры пузырьков на рисунке 23б, можно отметить явное сходство. В области вблизи линии  $R_{0,b} = 1$  мм пузырьки теряют свою целостность и приобретают двухочаговую структуру, аналогичную режимам горения, наблюдаемым в водородно-воздушных смесях с концентрацией водорода 5,0% и 4,5%. С другой стороны, линия  $R_{0,b} = 4$  мм определяет область с устойчивыми шапкообразными пузырьками. Линии  $R_{0,b} = 2$  мм и  $R_{0,b} = 3$  мм соответствуют неустойчивым пузырькам, склонным к развитию неустойчивости Рэлея-Тейлора на границе раздела [88].

Траектории развития очагов горения на плоскости чисел Рейнольдса и Фруда отмечены стрелками на рисунке 28, и эти траектории не являются линейными. Анализ диаграммы показал, что траектории пламени стремятся к двум пределам. Первый предел соответствует низкому значению числа Фруда,  $Fr < 1$  и высокому значению числа Рейнольдса. Вторым пределом характеризуется высоким значением числа Фруда  $Fr > 1$  и низким значением числа Рейнольдса.

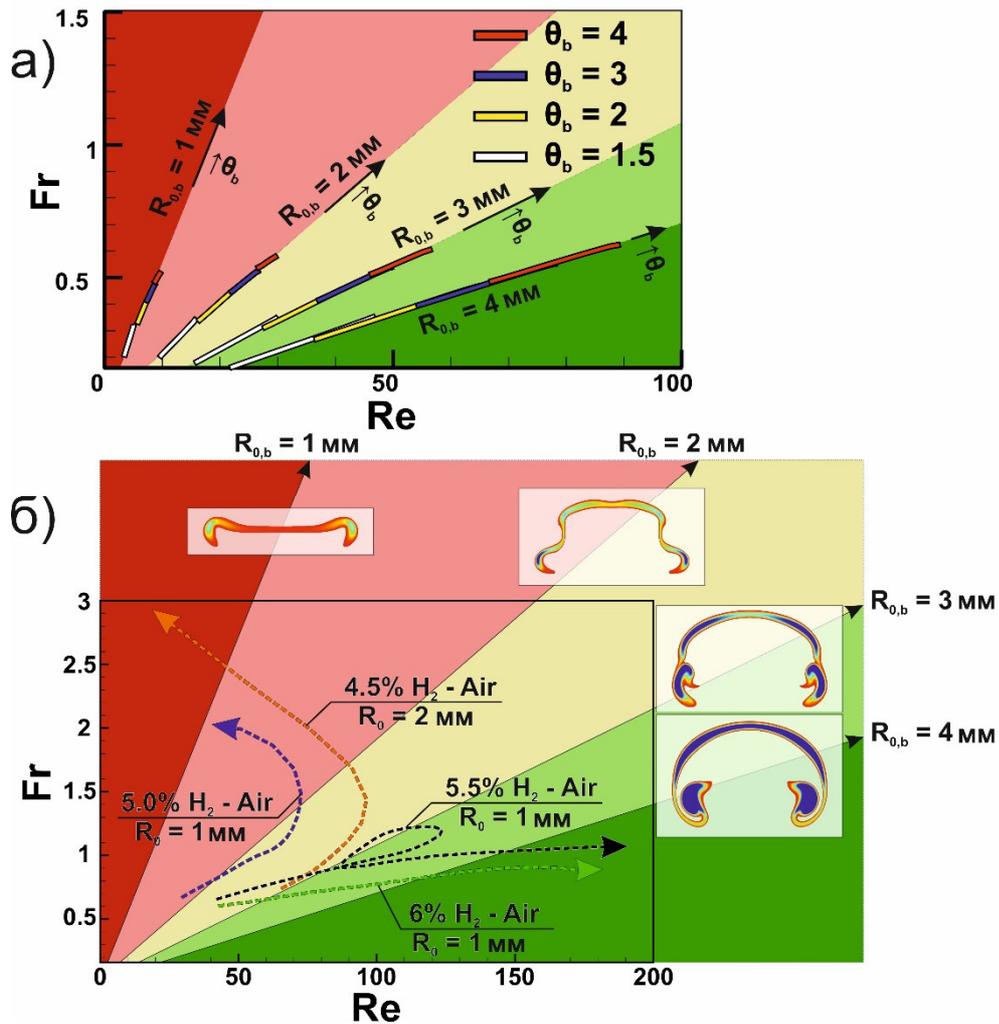


Рисунок 28. Диаграмма в координатах Re-Fr. а) Линейные сегменты соответствуют расчетам химически неактивных газовых пузырьков. Линейные аппроксимации этих сегментов делят плоскость на пять областей. Начальный радиус пузыря определяет наклон линейного участка, коэффициент расширения  $\theta_b$  определяет начальную точку и длину линейного участка. Стрелки указывают направление увеличения  $\theta_b$ . Линейные сегменты отмечены цветом: белый  $\theta_b=1.5$ , желтый  $\theta_b=2.0$ , синий  $\theta_b=3.0$ , красный  $\theta_b=4.0$ . б) Траектории распространения пламени на диаграмме Re-Fr для водородно-воздушных смесей с различным содержанием водорода: зеленая — 6%,  $R_0 = 1$  мм, черная — 5.5%,  $R_0 = 1$  мм, оранжевая — 4.5%,  $R_0 = 2$  мм, синяя — 5.0%,  $R_0 = 1$  мм. Структуры газовых пузырьков различных радиусов  $R_{0,b}=1-4$  мм изображены снаружи диаграммы

Низкое значение числа Фруда  $Fr < 1$  характерно для устойчивых режимов развития очагов горения, невосприимчивых к развитию неустойчивости Рэля-Тейлора в условиях земной гравитации. Так многоочаговое пламя водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 5,5% и шапкообразное пламя смеси с содержанием водорода 6,0% не подвержено влиянию неустойчивости Рэля-Тейлора. Для такого типа ультра-бедного пламени эффективная площадь горения увеличивается вместе со скоростью всплывания, а скорость всплывания увеличивается медленнее или с тем же приращением, что и квадрат площади продуктов сгорания. С другой стороны, второй предел, характеризующийся высоким  $Fr$  и низким  $Re$ , относится к пламенам в более бедных составах, характеризующихся структурами с небольшими очагами (5,0%  $H_2$ -воздух и 4,5%  $H_2$ -воздух с  $R_0 = 2$  мм). В таком пламени конвективные потоки вызывают сильный эффект гашения горения. При этом наблюдается уменьшение эффективной площади пламени после каждого случая разрушения фронта пламени. Таким образом, эквивалентный радиус пламени быстро уменьшается, а число Фруда увеличивается. Интересно отметить, что процесс горения в водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 5,5% имеет петлю на траектории в плоскости чисел Рейнольдса и Фруда. Траектория входит в область с возможностью разрыва пламени из-за неустойчивости Рэля-Тейлора. Такое поведение отражает формирование многоочаговой структуры на начальных этапах развития пламени, во время которых эффект конвективного гашения проявляется наиболее сильно, а эффективная площадь горения существенно уменьшается. После первого разрыва фронта пламени пламя восстанавливается и продолжает распространяться. Следует отметить, что скорость подъема очага горения определяется степенью расширения продуктов горения, которая практически постоянна в рассматриваемом диапазоне содержания водорода. Таким образом, именно скорость горения и способность противостоять конвективному охлаждению во время растяжения и разрушения фронта пламени определяют различие траекторий в плоскости чисел  $Re$  и  $Fr$  для

разных смесей. Этим объясняется смещение предела воспламенения с увеличением начального радиуса зоны воспламенения  $R_{0,b}$ . Чем больше начальная площадь очага воспламенения, тем меньшее влияние на него оказывает конвективное охлаждение во время первого разрыва фронта пламени в водородно-воздушной смеси с содержанием водорода 4,5%. Таким образом, при большом начальном радиусе области воспламенения, можно наблюдать процесс горения после первого разрушения фронта пламени, однако с течением времени отдельные мелкомасштабные очаги гаснут. Такой же эффект может быть достигнут при повышении температуры воспламенения (интенсивности источника возгорания).

#### 4.4 Основные результаты

В настоящей главе проведен численный анализ динамики газовых пузырьков в приближении несмешивающихся газов. Разработанный подход аналогии “пузырек-пламя” позволил провести классификацию различных режимов горения в околопредельных водородно-воздушных смесях. Выявлено, что существует широкий спектр возможных пространственных структур очагов горения, образующихся при горении ультра-бедных водородно-воздушных смесей. На структуру очага горения, а также на интенсивность горения влияют газодинамические потоки, возникающие в процессе восходящего движения очага горения под действием сил плавучести в условиях земной гравитации. В составах, близких к предельным, газодинамическое растяжение, связанное с вихревыми потоками, образующимися за восходящими продуктами сгорания, может привести к нарушению целостности фронта пламени. Если первичный разрыв фронта

пламени происходит в точке, лежащей на оси симметрии, то всегда наблюдается затухание горения (случаи 4,5 % и 5% водорода в водородно-воздушной смеси). При отделении вторичных очагов горения с боковой поверхности основного очага, пламя остается устойчивым, и горение наблюдается в течение всего вычислительного эксперимента. С другой стороны, из-за эффектов преимущественной диффузии искривление фронта пламени газодинамическими потоками может приводить к увеличению температуры горения и увеличению скорости горения в водородно-воздушных смесях.

На основе расчетов химически неактивных газовых пузырьков построена диаграмма на плоскости безразмерных чисел Рейнольдса и Фруда, на которой выделены области устойчивого и неустойчивого режимов горения. Полученные результаты математического моделирования показывают, что к области устойчивого горения можно отнести водородно-воздушные смеси с содержанием водорода 5,5 % и 6 %. К области неустойчивого горения можно отнести смеси с содержанием водорода менее 5 %.

## Заключение

В заключении сформулируем основные результаты диссертации:

1. Показано, что ведущую роль в динамике пламени в ультра-бедных водородно-воздушных смесях играют газодинамические течения, сформированные при всплывании очага горения в гравитационном поле. Из-за наличия вихревых потоков, фронт пламени растягивается и разрушается на более мелкие очаги. Первичный разрыв фронта пламени в наивысшей точке фронта, расположенной на оси симметрии всегда приводит к гашению пламени (в водородно-воздушных смесях с содержанием водорода 5% и менее). В более активных смесях с содержанием водорода 5,5 % и более первичный отрыв очагов горения осуществляется с боковой поверхности пламени. Отделившиеся очаги здесь являются активными зонами горения, поэтому наблюдается устойчивое горение в виде сложной многоочаговой структуры пламени. Устойчивое горение, характеризуемое отрывом очагов горения с боковой поверхности пламени, наблюдается для ультра-бедных смесей с содержанием водорода 5.5 – 9.0%.

2. Продемонстрирован способ подавления образования вторичных очагов пламени и снижения скорости всплывания очага горения, с помощью теплоотвода к стенкам.

3. Продемонстрировано хорошее согласие проведенных расчетов с экспериментальными данными по динамике всплывания очага горения, его топологии.

4. Определены значения концентраций водорода в ультра-бедных водородно-воздушных смесях на больших пространственных масштабах, при которых не наблюдается затухание очагов горения. На основе математического моделирования в условиях микрогравитации нижний концентрационный предел оценен как  $\approx 3,45 \pm 0,05$  %, а в условиях земной

гравитации -  $5,25 \pm 0,25\%$ . Базовым механизмом, определяющим критические условия горения, является неустойчивость очагов ультра-бедного горения по отношению к формируемому вихревому течению, разрушающему целостность очага в наивысшей точке фронта пламени, расположенной на оси симметрии. Фронт пламени под действием вихревого течения разрушается в своей наивысшей точке на мелкие очаги, которые с течением времени гаснут.

5. Проведена классификация режимов устойчивого и неустойчивого горения ультра-бедных водородно-воздушных смесей на основе аналогии «пламя-пузырек» и на основе совместного анализа динамики газовых пузырьков в приближении несмешивающихся газов и динамики очагов ультра-бедного горения. Выявлено два основных сценария развития горения в ультра-бедных водородно-воздушных смесях в зависимости от содержания водорода в смеси.

**Список литературы**

1. Cyclic Dehydrogenation-(Re)Hydrogenation with Hydrogen-Storage Materials: An Overview / R. Chamoun, U. B. Demirci, P. Miele // *Energy Technology*. — 2015. — Vol. 3(2). — P. 100–117.
2. Veziroglu, T. N. Conversion to Hydrogen Economy / T. N. Veziroglu // *Energy Procedia*. — 2012. — Vol. 29. — P. 654–656.
3. Sahaym, U. Advances in the application of nanotechnology in enabling a “hydrogen economy” / U. Sahaym, M. G. Norton // *Journal of Materials Science*. — 2008. — Vol. 43(16). — P. 5395-5429.
4. Development and Application of Hydrogen Storage / Zhang Y., Jia Z., Yua Z., et al. // *Journal of Iron and Steel Research*. — 2015. — Vol. 22(9). — P. 757–770.
5. Jain, I.P. Hydrogen the fuel for 21st century / I.P. Jain // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2009. — Vol. 34(17). — 7368-78.
6. International atomic energy agency, Mitigation of Hydrogen Hazards in Severe Accidents in Nuclear Power Plants. Vienna: International atomic energy agency, 2011, iAEA-TECDOC-1661.
7. Jiménez, C. DNS study of the propagation and flashback conditions of lean hydrogen-air flames in narrow channels: Symmetric and non-symmetric solutions / Jiménez C., Fernández-Galisteo D., Kurdyumov V. N. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2015. — Vol. 40(36). — P. 12541–12549.
8. Nonlinear evolution of 2D cellular lean hydrogen/air premixed flames with varying initial perturbations in the elevated pressure environment / Yu J., Yu R., Bai X. et al. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2017. — Vol. 42(6). — 3790-3803.

9. Математическая теория горения и взрыва / Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе. — М.: Наука, 1980. — 478 с.
10. Brailovsky, I. On stationary and travelling flame balls / I. Brailovsky, G. Sivashinsky // *Combustion and Flame*. — 1997. — Vol. 110(4). — P. 524-529.
11. Patnaik, G. Effect of gravity on the stability and structure of lean hydrogen-air flames / G. Patnaik, K. Kailasanath // *Symposium (International) on Combustion*. — 1991. — Vol. 23(1). — P. 1641–1647.
12. The structure and stability of nonadiabatic flame balls: II. Effects of farfield losses / J. D. Buckmaster, G. Joulin, P.D. Ronney // *Combustion and Flame*. — 1991. — Vol. 84(3-4). — P. 411–422.
13. Ronney, P. D. Near-limit flame structures at low Lewis number / P. D. Ronney // *Combustion and Flame*. — 1990. — Vol. 82(1). — P. 1–14.
14. Buckmaster, J. D. Influence of boundary-induced losses on the structure and dynamics of flame-balls / J. D. Buckmaster, G. Joulin // *Combustion Science and Technology*. — 1993. — Vol. 89(1-4). — P. 57-69.
15. McIntosh, A. C. On the cellular instability of flames near porous-plug burners / A. C. McIntosh // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1985. — Vol. 161. — P. 43-75.
16. Pelce, P. Influence of hydrodynamics and diffusion upon the stability limits of laminar premixed flames / P. Pelce, P. Clavin // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1982. — Vol. 124. — P. 219.
17. Self-acceleration and fractal structure of outward freely propagating flames / Liberman M., Ivanov M., Peil O. et al. // *Physics of Fluids*. — 2004. — Vol. 16(7). — P. 2476-2482.
18. Gostintsev, Y. A. Self-similar propagation of a free turbulent flame in mixed gas mixtures / Y. A. Gostintsev, A. G. Istratov, Y. V. Shulenin // *Combustion, Explosion and Shock Waves*. — 2008. — Vol. 24(5). — P. 563-569.

19. Influence of heat absorption on hydrogen-air flame instability / Golub V., Elyanov A., Korobov A. et al. // *Experimental Thermal and Fluid Science*. — 2019. — Vol.109. — P. 109845.
20. Patnaik, G. Effect of gravity on flame instabilities in premixed gases / G. Patnaik, K. Kailasanath, E. S. Oran // *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*. — 1991. — Vol. 29(12). — P. 2141-2148.
21. Levy, A. An optical study of flammability limits / A. Levy // *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. — 1965. — Vol. 283(1392). — P. 134-145.
22. Buoyant unstable behavior of initially spherical lean hydrogen-air premixed flames / Sun Z.-Y., Li G.-X., Li H.-M. et al. // *Energies*. — 2014. — Vol. 7(8). — P. 4938-4956.
23. Effect of tube diameter on homogeneous gas flame propagation limits / Babkin V. S., Zamashchikov V. V., Badalyan A. M. et al. // *Combustion, Explosion and Shock Waves*. — 1982. — Vol. 18(2). — P. 164-171.
24. Dynamics of unconfined spherical flames / Leblanc L., Manoubi M., Dennis K. et al. // *Physics of Fluids*. — 2012. — Vol. 25(9). — P. 91-106.
25. Formation, prediction and analysis of stationary and stable ball-like flames at ultra-lean and normal-gravity conditions / Hernandez-Perez F. E., Oostenrijk B., Shoshin Y. et al. // *Combustion and Flame*. — 2015. — Vol. 162(4). — P. 932-943.
26. Experimental and computational study of the transition to the flame ball regime at normal gravity / Shoshin Y., van Oijen J., Sepman A., de Goey L. // *Proceedings of the Combustion Institute*. — 2011. — Vol. 33(1). — P. 1211-1218.
27. Effect of pressure on the lean limit flames of H<sub>2</sub>-CH<sub>4</sub>-air mixture in tubes / Zhou Z., Shoshin Y., Hernandez-Perez F. E. et al. // *Combustion and Flame*. — 2017. — Vol. 183. — P. 113-125.
28. Jarosinski, J. The mechanisms of lean limit extinguishment of an upward and downward propagating flame in a standard flammability tube / J. Jarosinski, R.

- Strehlow, A. Azarbarzin // International Symposium of Combustion. — 1982. — Vol. 19(1). — P. 1549-1557.
29. Shoshin, Y. Experimental and computational study of lean limit methane-air flame propagating upward in a 24 mm diameter tube / Y. Shoshin, L. Tecce, J. Jarosinski // Combustion Science and Technology. — 2008. — Vol. 180(10-11). — P. 1812-1828.
  30. Experiments on combustion regimes for hydrogen/air mixtures in a thin layer geometry / Kuznetsov M., Grune J. // International Journal of Hydrogen Energy. — 2018. — S0360319918337492.
  31. Thermoacoustic analysis of lean premixed hydrogen flames in narrow vertical channels / Veiga-Lopez F., Martinez-Ruiz D., Kuznetsov M. et al. // Fuel. — 2020. — Vol. 278. — 118212.
  32. Limits of flammability of gases and vapors. Bulletin 503 US Bureau of Mines / Coward H.F., Jones G.W. — 1952.
  33. Flammability of methane, propane, and hydrogen gases / Cashdollar K.L., Zlochower I.A., Green G.M. et al. // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. — 2000. — Vol. 13(3-5). — P. 327-340.
  34. Project SAFEKINEX 2002 Report on the experimentally determined explosion limits, explosion pressures and rates of explosion pressure rise Contractual deliverable No. 8 (Berlin: Federal Institute for Materials Research and Testing (BAM)).
  35. Kuo K. Principles of combustion, 2<sup>nd</sup> Edition / K. Kuo, Kenneth K. — Hoboken, New Jersey: Wiley-Inter-science, 2005. — 732 p. ISBN 0-471-04689-2.
  36. Chase M. W. J. NIST-JANAF Thermochemical Tables, 4th Edition. — New York: American Institute of Physics, 1998.
  37. Chemkin collection / R. J. Kee [et al.]. — San Diego, CA: Reaction Design, Inc., 2000.

38. Warnatz J., Maas U., Dibble R. Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation. — Springer Berlin Heidelberg, 2006.
39. Регенерация и подавление детонации водородовоздушной смеси преградой с отверстиями / Медведев С. П., Хомик С. В., Гельфанд Б. Е. // Химическая физика. — 2009.—Т. 28.—№ 12.— С. 52.
40. Критические условия трансформации плоской детонационной волны в цилиндрическую / Михалкин В.В., Медведев С.П., Малков А.Е., Хомик С.В. // Химическая физика. — 2019.—Т. 38.—№ 8.—С. 52.
41. Medvedev, S.P. Low-temperature ignition delay for hydrogen-air mixtures in light of a reaction mechanism with quantum correction / S.P. Medvedev, G.L. Agafonov, S.V. Khomik // Acta Astronautica. — 2016.—V. 126. — P.150-153.
42. Oran, E. S. Origins of the deflagration-to-detonation transition in gas-phase combustion / E. S. Oran, V. N. Gamezo // Combustion and flame. — 2007. — Vol. 148. — P. 4-47.
43. Gamezo, V. N. Flame acceleration and DDT in channels with obstacles: Effect of obstacle spacing / V. N. Gamezo, T. Ogawa, E. S. Oran // Combustion and flame. — 2008. — Vol. 155. — P. 302-315.
44. An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures / Keromnes A., Metcalfe W.K., Heufer K.A. et al. // Combustion and Flame. — 2013. — Vol. 160(6). — P. 995–1011.
45. Хайпер, Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи / Э. Хайпер, Г. Ваннер; пер. с англ. — М.: Мир, 1999. — 685 с.
46. Slatec. Common mathematical library [Электронный ресурс]. — 1993. — Режим доступа: <http://www.netlib.org/slatec/index.html>.
47. Hirschfelder J., Curtiss C., Bird R. B. Molecular theory of gases and liquids. — New York: Wiley, 1964. — 1280 p.

48. Kee, R.J. Chemically reacting flow / R. J. Kee, M.E. Coltrin, Glarborg P. — New York: Wiley-Inter-science, 2003. — 848 p.
49. Neufeld, P. D. Empirical equations to calculate of the transport collision integrals ( $l,s$ ) $\star$  for the Lennard Jones (12–6) Potential / P. D. Neufeld, A. R. Janzen, R. A. Aziz // Journal of Chemical Physics. — 1972. — Vol. 57(3). — P. 1100–1102.
50. Coffee, T.P. Transport algorithms for premixed, laminar steady-state flames / T.P. Coffee, J.M. Heimerl // Combustion and Flame. — 1981. — Vol. 43. — P. 273-89.
51. Ern, A. Thermal diffusion effects in hydrogen-air and methane-air flames / A. Ern, V. Giovangigli // Combustion Theory and Modelling. — 1998. — Vol. 2(4). — P. 349–372.
52. Ern, A. Impact of detailed multicomponent transport on planar and counterow hydrogen/air and methane/air flames / A. Ern, V. Giovangigli, // Combustion Science and Technology. — 1999. — Vol. 149(1-6). — P. 157–181.
53. Grcar, J.F. The Soret effect in naturally propagating, premixed, lean, hydrogenair flames / J. F. Grcar, J. B. Bell, M. S. Day // Proceedings of Combustion Institute. — 2009. — Vol. 32(1). — P. 1173–1180.
54. McGrattan, K. Fire Dynamics Simulator: Technical Reference Guide Volume 1: Mathematical Model / K. McGrattan, R. McDermott, S. Hostikka et al. // Tech. Rep. NIST Special Publication 1018-1, Gaithersburg, MD: U.S. Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology, 2019.-171 p.
55. Rusman, N.A.A. A review on the current progress of metal hydrides material for solid-state hydrogen storage applications / N.A.A. Rusman, M. Dahari // Journal of Materials Science. — 2016. — Vol. 41(28). — P. 12108-26.
56. Prabhukhot, P.R. A review on solid state hydrogen storage material / P.R. Prabhukhot, M.M. Wagh, A.C. Gangal // Advances in Energy and Power. — 2016. — Vol. 4(2). — P. 11-22.

57. Rand, D.A.J. A journey on the electrochemical road to sustainability / D.A.J. Rand // *Journal of Solid State Electrochemistry*. — 2011. — Vol. 15. — P. 1579-622.
58. Marban, G. Towards the hydrogen economy? / Marban G., Valdes-Solis T. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2007. — Vol. 32(12). — 1625-37.
59. Jain, I.P. Hydrogen the fuel for 21st century / I.P. Jain // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2009. — Vol. 34(17). — 7368-78.
60. Edwards, P.P. Hydrogen energy / P.P. Edwards, V.L. Kuznetsov, W.I. David // *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. — 2007. — Vol. 365(1853). — 1043-56.
61. Webb, C.J. A review of catalyst-enhanced magnesium hydride as a hydrogen storage material / C.J. Webb // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. — 2015. — Vol. 84. — 96-106.
62. Design and synthesis of a magnesium alloy for room temperature hydrogen storage / Edalati K., Uehiro R., Ikeda Y., et al. // *Acta Materialia*. — 2018. — Vol.149. — P. 88–96.
63. Rosen, M.A. The prospects for hydrogen as an energy carrier: an overview of hydrogen energy and hydrogen energy systems / M.A. Rosen, S. Koohi-Fayegh // *Energy, Ecology and Environment*. — 2016. — Vol. 1(1). — P. 10–29.
64. Hwang, H.T. Hydrogen storage for fuel cell vehicles / H.T. Hwang, A. Varma // *Current Opinion in Chemical Engineering*. — 2014. — Vol.5. — P. 42–8.
65. Hydrogen energy storage: new techno-economic emergence solution analysis / Becherif M., Ramadan H.S., Cabaret K., et al. // *Energy Procedia*. — 2015. — Vol.74. — P. 371–80.
66. Renewable hydrogen economy in Asia-Opportunities and challenges: an overview / Pudukudy M., Yaakob Z., Mohammad M., et al. // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. — 2014. — Vol.30. — P. 743–57.

67. Mazloomi, K. Hydrogen as an energy carrier: prospects and challenges / K. Mazloomi, D. Gomes // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. — 2012. — Vol.16. — P. 3024–33.
68. Niaz, S. Hydrogen storage: materials, methods and perspectives / S. Niaz, T. Manzoor, A.H. Pandith // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. — 2015. — Vol.50. — P. 457–69.
69. Hydrogen energy, economy and storage: Review and recommendation / Abe J. O., Popoola, A. P. I., Ajenifuja, E., et.al. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2019. — Vol.44. — P. 15072–15086.
70. Jeon, J. Recent progress in hydrogen flammability prediction for the safe energy systems / J. Jeon, S.J. Kim // *Energies*. — 2020. — Vol. 13(23). — P. 6263.
71. Pan, K.-L. Characteristics of cylindrical flame acceleration in outward expansion / K.-L. Pan, R. Fursenko // *Physics of Fluids*. — 2008. — Vol. 20. — P. 1-13.
72. Hertzberg, M. Selective diffusional demixing: occurrence and size of cellular flames / M. Hertzberg // *Progress in Energy and Combustion Science*. — 1989. — Vol. 15. — P. 203–239.
73. Davies, R. M. The Mechanics of Large Bubbles Rising through Extended Liquids and through Liquids in Tubes / R. M. Davies, G. Taylor // *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. — 1950. — Vol. 200(1062). — P. 375-390.
74. Bychkov, V. V. Dynamics and stability of premixed flames / V. V. Bychkov, M. A. Liberman // *Physics Reports*. — 2000. — Vol. 325(3-4). — P. 115-237.
75. Uncertainty in stretch extrapolation of laminar flame speed from expanding spherical flames / Wu F., Linang W., Chen Z. et al. // *Proceedings of the Combustion Institute*. — 2015. — Vol. 35. — P. 663-670.
76. Analysis of transient combustion with the use of contemporary CFD techniques / Bykov V., Kiverin A., Koksharov A., Yakovenko I. // *Computers and Fluids*.—2019.—Vol. 194.—P. 104310.

77. Measurements of the laminar burning velocity of hydrogen-air premixed flames / Pareja J., Burbano H.J., Ogami Y. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2010. — Vol. 35(4). — P.1812-18.
78. Laminar burning velocity of hydrogen-air premixed flames at elevated pressure / Qin X., Kobayashi H., Niioka T. // *Experimental Thermal and Fluid Science*. — 2000. — Vol. 21(1-3). — P. 58-63.
79. Morphology and burning rates of expanding spherical flames in H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/inert mixtures up to 60 atmospheres / Tse S.D., Zhu D.L., Law C.K. // *Proceedings of the Combustion Institute*. — 2000. — Vol. 28. —P. 1793-1800.
80. Flame/stretch interactions of premixed hydrogen-fueled flames: measurements and predictions / Kwon O.C., Faeth G.M. // *Combustion and Flame*. — 2001. —Vol. 124. —P. 590-610.
81. Effects of pressure and nitrogen dilution on flame/stretch interactions of laminar premixed H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> flames / Aung K.T., Hassan M.I., Faeth G.M. // *Combustion and Flame*.— 1998. —Vol. 112.—P. 1-15.
82. Flammability limits and laminar flame speeds of hydrogen-air mixtures at sub-atmospheric pressures / Kuznetsov M., Kobelt S., Grune J., Jordan T. // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2012. — Vol. 37. — P.17580-88.
83. The use of expanding spherical flames to determine burning velocities and stretch effects in hydrogen/air mixtures / Dowdy D.R., Smith D.B., Taylor S.C., Williams A. // *Proceedings of the Combustion Institute*. — 1990. —Vol. 23. — P. 325-32.
84. Hua, J. Numerical simulation of 3D bubbles rising in viscous liquids using a front tracking method / J. Hua, J.F. Stene , P. Lin // *Journal of Computational Physics*. — 2008. — Vol. 227(6). — P. 3358–3382.
85. Higuera, F. Effect of radiation losses on very lean methane/air flames propagating upward in a vertical tube / F. Higuera, V. Muntean // *Combustion and Flame*. — 2014. — Vol. 161(9). — P. 2340–2347.

86. Tripathi, M.K. Dynamics of an initially spherical bubble rising in quiescent liquid / M.K. Tripathi, K.C. Sahu, R. Govindarajan // Nature Communications. — 2015. — Vol. 6. — P. 62–68.
87. Walters, J.K. The initial motion of a gas bubble formed in an inviscid liquid. Part 2. The three-dimensional bubble and the toroidal bubble / Walters J.K., Davidson J.F. // Journal of Fluid Mechanics. — 1963. — Vol.17. — P. 321–36.
88. Kull, H. Theory of the Rayleigh-Taylor instability / H. Kull // Physics Reports. — 1991. — Vol. 206(5). — P. 197–325.
89. Bychkov, V. V. Propagation of curved stationary flames in tubes / V. V. Bychkov, S. M. Golberg, M.A. Liberman, L.E. Eriksson // Physics Review. — 1996. — Vol. 54(4). — P. 3713-24.
90. Bonometti, T. Transition from spherical cap to toroidal bubbles / T. Bonometti, J. Magnaudet // Physics of Fluids. — 2006. — Vol. 18(5). — P. 052102.
91. Shapes and paths of an air bubble rising in quiescent liquids / Sharaf D.M., Premalata A. R., Tripathi M.K. et al. // Physics of Fluids. — 2017. — Vol. 29. — P. 122104.
92. Flammability Limits of Hydrogen-Oxygen-Diluent Mixtures / Kumar R.K. // Journal of Fire Sciences.—1985.—Vol. 3. — P. 245—262.
93. Пределы горения водородовоздушных смесей в присутствии ультрадисперсных капель воды (тумана) / Медведев С.П., Гельфанд Б.Е., Поленов А.Н., Хомик С.В. // Физика горения и взрыва. — 2002(4).— С. 3-8.
94. Hertzberg, M. Flammability behavior and pressure development of hydrogen mixtures in containment volumes. / M. Hertzberg, K. L. Cashdollar // Thermal-Hydraulics of Nuclear Reactors. — 1983. — Vol. 1. — P. 29–37.
95. Some observations on near-limit flames / A. L. Furno, E. B. Cook, J. M. Kuchta et al. // Symposium (International) on Combustion. — 1971. — Vol. 13(1). — P. 593-599.

96. Kuchta J. M. Investigation of fire and explosion accidents in the chemical, mining, and fuel-related industries — a manual. — Bureau of Mines Bulletin, 1985.
97. Koroll, G. W. Isotope effects on the combustion properties of deuterium and hydrogen / G. W. Koroll, R. K. Kumar // *Combustion and flame*. — 1991. — Vol. 84. — P. 154-159.
98. Гельфанд, Б.Е. Водород: параметры горения и взрыва / Б.Е. Гельфанд, О.Е. Попов, Б.Б. Чайванов. — М.: Физматлит, 2008. — 288 с.
99. Combustion of hydrogen at high concentrations including the effect of obstacles / R. K. Kumar, H. Tamm, W. C. Harrison et al. // *Thermal-Hydraulics of Nuclear Reactors*. — 1983. — Vol. 2. — P. 1203–1211.
100. Cummings, J. C. Hydrogen combustion results from the Sandia intermediate-scale (VGES) tank and the Sandia critical-tube-diameter test facility / J. C. Cummings, W. B. Benedick, P. G. Prassinis // *Thermal-Hydraulics of Nuclear Reactors*. — 1983. — Vol. 2. — P. 1212–1218.
101. Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition in Nuclear Safety. State-of-the Art Report, OCDE-Nuclear Safety, NEA/CSNI/R. — 2000.
102. Kagan, L. Self-fragmentation of nonadiabatic cellular flames / L. Kagan, G. Sivashinsky // *Combustion and Flame*. — 1997. — Vol. 108. — P. 220-226.
103. Lewis B., von Elbe G. *Combustion, Flames, and Explosions of Gases*. — Academic Press, New York, 1961.
104. Франк-Каменецкий, Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. — М.: Наука, 1987. — 502 с.
105. Wu, M. S. Detailed numerical simulation of flame ball structure and dynamics / Wu M.S. , Ronney P.D. , Colantonio R. , VanZandt D. // *Combustion and Flame*. — 1999. — Vol. 116. — P. 387-397.
106. Stationary premixed flames in spherical and cylindrical geometries / Ronney P.D., Whaling K.N., Abbud-Madrid A. et al. // *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*. — 1994. — Vol. 32. — P. 569-577.

107. Liang, Z. Effect of igniter type and number of igniters on vented deflagrations for near lean flammability limit hydrogen-air mixtures in a large scale rectangular volume / Z. Liang // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2018. — Vol.43. — P. 8569–77.
108. Liang, Z. Scaling effects of vented deflagrations for near lean flammability limit hydrogen-air mixtures in large scale rectangular volumes / Z. Liang // *International Journal of Hydrogen Energy*. — 2017. — Vol. 42. — P. 7089–7103.
109. A computational study of the effect of initial bubble conditions on the motion of a gas bubble rising in viscous liquids / M. Ohta, T. Imura, Y. Oshida, et al. // *International Journal of Multiphase Flow*. — 2005. — Vol.31. — P. 499–550.
110. Ray, B. On skirted drops in an immiscible liquid / B. Ray, A. Prosperetti // *Chemical Engineering Science*. — 2014. — Vol.108. — P. 213-222.
111. Modestov, M. Bubble velocity in the nonlinear Rayleigh-Taylor instability at a deflagration front / M. Modestov, V. Bychkov, R. Betti, L. Eriksson // *Physics of Plasma*. — 2008. — Vol. 15. — P. 042703.
112. Steady bubble rise and deformation in Newtonian and viscoplastic fluids and conditions for bubble entrapment / J. Tsamopoulos, Y. Dimakopoulos, N. Chatzadai, et al. // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2008. — Vol.601. — P. 123–64.
113. Numerical and experimental investigations of an air bubble rising in a Carreau-Yasuda shear-thinning liquid / A. R. Premlata, M. K. Tripathi, B. Karri et al. // *Physics of Fluids*. — 2017. — Vol. 29(3). — P. 033103.
114. Dynamics of an air bubble rising in a non-Newtonian liquid in the axisymmetric regime / A. R. Premlata, M. K. Tripathi, B. Karri, et al. // *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. — 2017. — Vol.239. — P. 53–61.
115. Premlata, A. R. Dynamics of rising bubble inside a viscosity-stratified medium / A. R. Premlata, M. K. Tripathi, K. C. Sahu // *Physics of Fluids*. — 2015. — Vol.27. — P. 072105.

116. Bhaga, D. Bubbles in viscous liquids: shapes, wakes and velocities / D. Bhaga, M. E. Weber // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1981. — Vol.105. — P. 61–85.
117. Acrivos, A. Bubbles, Drops and Particles. By R. C. Lift, J. R. Grace and M. E. Weber. Academic Press. — 1978. — 380 pp.
118. Landel, J. R. Spherical cap bubbles with a toroidal bubbly wake / J. R. Landel, C. Cossu, C. P. Caulfield // *Physics of Fluids*. — 2008. — Vol.20. — P. 122101.
119. Wairegit, T. The behavior of large drops in immiscible liquids / T. Wairegit, J.R. Grace // *International Journal of Multiphase Flow*. — 1975. — Vol.3. — P. 61–77.
120. Grace, J.R. Shapes and velocities of bubbles rising in infinite liquids / J.R. Grace // *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*. — 1973. — Vol.51. — P. 116–120.
121. Baker, G.R. The rise and distortion of a twodimensional gas bubble in an inviscid liquid / Baker G.R., D.W. Moore // *Physics of Fluids*. — 1989. — Vol. 1(9). — P. 1451–59.
122. Chen, L. The development of a bubble rising in a viscous liquid / L. Chen, S.V. Garimella, J.A. Reizes and E. Leonardi // *Journal of Fluid Mechanics*. — 2007. — Vol. 222. — P. 769–795.
123. Collins, R. Structure and behaviours of wakes behind two-dimensional air bubbles in water / R. Collins // *Chemical Engineering Science*. — 1965. — Vol.20. — P. 851–853.
124. Bychkov, V. V. Bubble motion in a horizontal tube and the velocity estimate for curved flames / V. V. Bychkov // *Physics Review*. — 1997. — Vol. 55. — P. 6898-6901.
125. Bychkov, V. The Rayleigh–Taylor instability in inertial fusion, astrophysical plasma and flames / Bychkov V., Modestov M. , Akkerman V. , Eriksson L.E. // *Plasma Physics and Controlled Fusion*. — 2007. — Vol. 49. — P. 513-520.
126. Bohm G., Die Struktur aufsteigender H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub>-Flammens / G. Bohm, Clusius K. // *Z. Naturforsch*. — 1948. — Vol. 3. — P. 386-391.

127. Chomiak, J. Flame quenching by turbulence / J. Chomiak, J. Jarosinski // Combustion and flame. — 1982. — Vol. 48. — P. 241-249.
128. Extreme role of preferential diffusion in turbulent flame propagation / S. Yang, A. Saha, W. Liang et al. // Combustion and flame. — 2018. — Vol. 188. — P. 498-504.