

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ В ВОДОРОД-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЯХ

П.Е. Беляев^{1,2}, М.С. Аетпаева¹, Ю.М. Ковалев¹, Е.Е. Пигасов^{1,2}

¹Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск,

Российская Федерация

²ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТИФ им. академ. Е.И. Забабахина», г. Снежинск,

Российская Федерация

Развитие водородной энергетики неразрывно связано с обеспечением водородной безопасности и исследованием процессов, протекающих при горении водородсодержащих смесей. Использование численного моделирования позволяет исследовать поведение системы в диапазонах изменения основных параметров, не покрытых экспериментальными данными. В данной работе представлена модель, позволяющая моделировать течения химически реагирующих сплошных сред, верифицированная на экспериментальных данных по распространению пламени в ударной трубе с перегородками, заполненной водород-воздушной смесью.

Ключевые слова: водород; воспламенение; период индукции; кинетические модели.

Введение

Стремительно растущий интерес к водородной энергетике, связанный с программами по декарбонизации энергетики, делает необходимым тщательный анализ ее реальных перспектив и возможностей [1].

Развитие водородной энергетики неразрывно связано с обеспечением водородной безопасности в связи с широкими концентрационными пределами горения водород-воздушных смесей, малой энергией воспламенения, его способностью к диффузии через стенки традиционных емкостей, склонностью к стратификации и воздействию на металлы, приводящему к потере ими прочностных свойств. Масштабное производство, хранение, транспортировка и использование водорода сопряжены со значительно большей опасностью в сравнении с углеводородной энергетикой. Особенную опасность применения водорода представляет склонность водород-воздушных смесей к ускоренному переходу от дефлаграционного к детонационному режиму горения.

Проведенные исследования [2–6] показывают существенное изменение характера распространения пламени в водород-воздушных средах с изменением состава смеси и геометрии пространства: существенную роль в ускорении фронта пламени и переходе из дефлаграции в детонацию играет турбулизация течения при наличии загромождений на пути распространения. При этом, несмотря на продолжающиеся по сей день попытки вывести универсальный критерий дефлаграционно-детонационного перехода [6], множество найденных необходимых, но не достаточных, условий ускорения пламени для частных случаев, вопрос ускорения пламени в конкретных условиях по-прежнему остается открытым.

В силу того, что проведение экспериментов с водород-содержащими смесями является небезопасным, привлечение математических моделей многофазных многоскоростных моделей сплошных сред [7–9], опирающихся на известные экспериментальные данные, позволит проводить более детальные исследования по изучению влияния

состава водород-содержащих смесей и геометрии каналов на процессы перехода горения во взрыв.

При моделировании течений химически реагирующих газовых смесей [10] в диапазоне изменения температур и давлений, характерных для технологических и аварийных процессов водородной энергетики использование такой модели должно обеспечить хорошее согласие с экспериментальными данными, при этом сохраняет относительно низкие требования к вычислительным мощностям.

Следовательно, целью данной работы является исследование возможности модели многокомпонентной односкоростной однофазной сплошной среды, аналогичной предложенной в работе [11], описывать процессы горения, его ускорения и дефлаграционно-детонационный переход в водород-содержащих смесях.

1. Математическая модель

Рассмотрим математическую модель многокомпонентной односкоростной однофазной сплошной среды, состоящей из химически реагирующих газовых компонентов, поведение которой в интегральном виде описывается полной системой уравнений законов сохранения массы, количества движения и энергии в приближении осевой симметрии:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho Y_i dV = - \oint_{\partial V} \rho Y_i \vec{U} d\vec{f} + \oint_{\partial V} \vec{J}_i d\vec{f} + \int_V S_{Y_i} dV, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \vec{U} dV = - \oint_{\partial V} (\rho \vec{U} \vec{U} - K) d\vec{f} + \int_V \left[\rho \vec{g} + \begin{pmatrix} 0 \\ P \end{pmatrix} \right] dV + \int_V \vec{S}_J dV, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \varepsilon dV = - \oint_{\partial V} \rho \vec{U} \varepsilon d\vec{f} + \oint_{\partial V} K \vec{U} d\vec{f} + \oint_{\partial V} \vec{J}_q d\vec{f} + \int_V \rho (\vec{g} \cdot \vec{U}) dV + \int_V S_\varepsilon dV. \quad (3)$$

Здесь Y_i – массовая доля i -го компонента смеси, S_{Y_i} – источник i -го компонента смеси, ρ – плотность смеси, \vec{U} – вектор скорости, P – давление, E – удельная внутренняя энергия, ε – удельная полная энергия, V – объем, $d\vec{f}$ – ориентированная площадка, \vec{S}_J – источники импульса, S_ε – источник энергии.

Система уравнений (1) – (3) замыкается уравнением состояния вещества в виде

$$P = P(\rho, E). \quad (4)$$

Вязкий тензор напряжений K в данном случае имеет следующий вид:

$$K = \begin{pmatrix} -P + 2\eta \frac{\partial U_z}{\partial z} - \left(\eta_b - \frac{2}{3}\eta \right) \operatorname{div} \vec{U} & \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_r}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial r} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U_r}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial r} \right) & -P + 2\eta \frac{\partial U_r}{\partial r} - \left(\eta_b - \frac{2}{3}\eta \right) \operatorname{div} \vec{U} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Коэффициент сдвиговой вязкости η смеси вычислен с помощью формулы Уилке [11]

$$\eta_{см} = \sum_{i=1}^N \frac{\eta_i}{1 + \sum_{k=1, k \neq i}^N \frac{x_k}{x_i} \Phi_{ik}}, \quad (6)$$

$$\Phi_{ik} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_k}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 + \sqrt{\frac{\eta_i}{\eta_k} \sqrt{\frac{M_k}{M_i}}}\right). \quad (7)$$

Здесь x_i – молярная концентрация i -го компонента, M_i – молярная масса i -го компонента. Коэффициент объемной вязкости η_b для индивидуальных компонентов определяется из экспериментальных данных, однако, для простоты может быть приравнен нулю в приближении одноатомных газов. Тепловой поток за счет теплопроводности смеси \vec{J}_q определяется в приближении закона Фурье:

$$\vec{J}_q = \lambda_{см} \nabla T. \quad (8)$$

Коэффициент теплопроводности смеси $\lambda_{см}$ вычисляется по формуле Варнатца [11]

$$\lambda_{см} = \sum_{i=1}^N \frac{\lambda_i}{1 + 1,065 \sum_{k=1, k \neq i}^N \frac{x_k}{x_i} \Phi_{ik}}. \quad (9)$$

Диффузионный поток i -го компонента смеси \vec{J}_i определяется в приближении закона Фика:

$$\vec{J}_i = D_{im} \nabla Y_i. \quad (10)$$

При определении диффузионного потока используется предложенный Стефаном [11] коэффициент диффузии i -го компонента относительно смеси

$$D_{im} = \frac{\sum_{i \neq j}^N x_i M_i}{M_m \sum_{i \neq j}^N x_j / D_{ji}}. \quad (11)$$

Для вычисления индивидуальных коэффициентов вязкости и теплопроводности, а также бинарного коэффициента диффузии используются выражения первого порядка точности, предложенные в работе [12]. При вычислении коэффициента теплопроводности компонента используется модифицированная поправка Эйкена [12]. В расчетах использованы параметры потенциала Леннарда – Джонса [12], приведенные в табл. 1.

Таблица 1

Параметры потенциала Леннарда – Джонса

Вещество	σ , А	ε/k , К	Вещество	σ , А	ε/k , К
H_2	2,920	38,000	N_2	3,621	97,530
H	2,050	145,000	O	2,750	80,000
H_2O	2,605	572,400	O_2	3,458	107,400
H_2O_2	3,458	107,400	OH	2,750	80,000
HO_2	3,458	107,400	Ar	3,330	136,500

Система уравнений (1) – (4) решается с помощью метода конечных объемов. Для определения величин на поверхности сеточных элементов используется модифицированный метод Куропатенко, подробно описанный в [13].

2. Моделирование химических превращений

Важной характеристикой, определяющей выбор математической модели химических превращений в водород-воздушных и метан-воздушных смесях, является период индукции (задержка) адиабатического взрыва τ_{ad} [14, 15]. Рассмотрим реактор, в котором отсутствует тепло- и массообмен с окружающей средой, то есть реактор, у которого получаемое в ходе экзотермических реакций окисления тепло используется для нагрева системы. В ходе реакций происходит постепенный нагрев смеси и последующий тепловой взрыв, который может перейти в детонацию.

Продолжительность индукционного периода зависит как от начальных условий, так и от теплофизических свойств смеси и параметров химической реакции (постоянная скорости, энергия активации, тепловой эффект). В ходе процесса изменяется химический состав реагирующей смеси и ее температура.

Скорость j -й газовой реакции определяется законом действующих масс (зависимость от концентраций) и законом Аррениуса (зависимость от температуры) и может быть выражена как [16]:

$$W_j = k_{0j} T^{b_j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right) \prod_{k=1}^{N_C} C_k^{\nu_{k,j}}, \quad (12)$$

где k_{0j} , T^{b_j} , E_j – кинетические константы для расчета скорости j -й реакции, R – универсальная газовая постоянная.

Математическая модель адиабатического реактора описывается уравнением баланса энергии для определения температуры T реагирующей смеси и N_C уравнениями для мольных концентраций C_k каждого из реагентов [14, 15]:

$$\frac{dT}{dt} = - \sum_{k=1}^{N_C} h_k \frac{dC_k}{dt} / \sum_{k=1}^{N_C} c_{P_k} C_k, \quad (13)$$

$$\frac{dC_k}{dt} = \sum_{j=1}^{N_R} W_j (\nu'_{k,j} - \nu_{k,j}), \quad k = 1, 2, \dots, N_C, \quad (14)$$

где t – время, h_k – полная удельная молярная энтальпия, c_{P_k} – изобарная молярная теплоемкость.

Для решения поставленной задачи – определения периода индукции – данная система должна быть дополнена начальными условиями, задающими начальные концентрации и температуру: $t = 0$, $T = T_0$, $C_k = C_{0k}$.

Теплоемкость c_P и полная энтальпия h каждого вещества рассчитываются при помощи аппроксимации их зависимостей от температуры:

$$h(T) = \Delta h^0(0) + [h^0(T) - h^0(0)], \quad (15)$$

a_i – коэффициенты полинома для каждого вещества, $\Delta h^0(0)$ – стандартная энтальпия образования вещества при $T = 0$.

В химической модели тепловой эффект учитывается в соответствии с законом Гесса, что делает модель более корректной. Данная система является весьма сложной для численного решения, поскольку в ходе процесса, описываемого данными уравнениями, скорости роста величин концентрации и температуры очень сильно изменяются, что делает систему не решаемой простыми явными методами. Проблемы неустойчивости решения можно избежать, если использовать так называемые неявные методы решения. Другая возможность избежать этой проблемы – устранение быстрых стадий при помощи разделения временных масштабов.

Если нет данных о прямых измерениях констант скорости реакций диссоциации и рекомбинации при столкновении с партнером M , одним из существенных источников неопределенности в величине констант, приводимых в различных работах, является значительный разброс рекомендуемых в этих работах эффективностей партнеров по столкновению M , зачастую превышающий порядок величины. Это, естественно, приводит к значительному увеличению неопределенности рекомендуемой величины константы. В настоящей работе были использованы значения относительных эффективностей партнеров по столкновению M , приведенные в табл. 2, которые являются результатом осреднения соответствующих оценок [17].

Таблица 2

Относительные эффективности партнеров по столкновению M

M	Ar	O	H	N_2	O_2	H_2	OH	HO_2	H_2O	H_2O_2
Eff	1	11,7	5,5	1,7	3,3	2,8	2,9	17	17	17

Для выбора математической модели химических превращений в водород-кислородных смесях проведем анализ некоторых кинетических схем. В качестве анализируемых моделей химических превращений в водород-кислородных смесях были выбраны модели на основе 60 реакций (30 обратимых реакций, 8 компонентов) [18], 44 реакций (22 обратимые реакции, 8 компонентов) [19], 16 реакций (8 обратимых реакций, 6 компонентов) [19], а также одностадийная брутто-реакция [20].

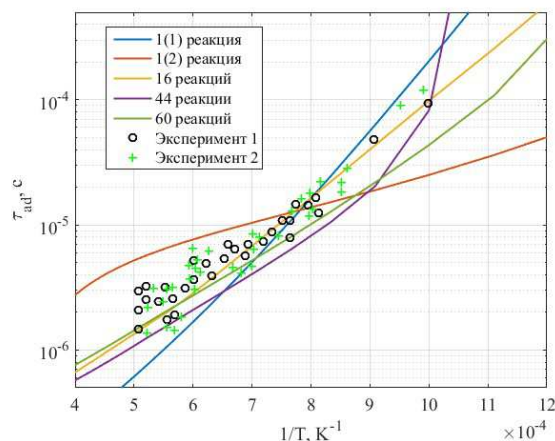


Рис. 1. Зависимость периода воспламенения от начальной температуры

Для определения наиболее универсальной модели, описывающей процесс протекания реакции в водород-кислородных смесях в широком диапазоне температур смеси, результаты расчетов сравниваются с экспериментальными данными [21, 22] по задержкам воспламенения в зависимости от температуры. На рис. 1 приведены зависимости периода воспламенения от начальной температуры кислород-водородных смесей и сравнение расчетов с экспериментальными данными работ [21, 22] для всех указанных выше моделей химического превращения.

Зависимости периода индукции адиабатического взрыва от температуры, представленные на рис. 1, показывают, что наилучшее согласование с экспериментом удастся добиться только для математической модели химических превращений, включающей 16 реакций, которая будет использована для математического моделирования горения в ударной трубе.

3. Математическое моделирование горения в ударной трубе

Для апробации предложенной в данной работе математической модели химически реагирующей водород-воздушной стехиометрической смеси было проведено сравнение результатов математического моделирования с экспериментальными данными [23]. В выбранной серии экспериментов исследуются концентрационные и геометрические пределы ускорения и перехода из дефлаграции в детонацию пламени в водородсодержащих смесях. Выбранные для моделирования эксперименты сосредоточены на исследовании распространения пламени в водород-воздушных стехиометрических смесях в ударной трубе с различной степенью «загроможденности».

Использованная в экспериментах ударная труба имеет круглое сечение, длину 6 м, диаметр 0,14 м. Были рассмотрены наборы перегородок со следующими коэффициентами загромождения: $BR = 0,4$, $BR = 0,5$, $BR = 0,6$. Так как в графики средней скорости в экспериментальной работе приведены только для расстояний между перегородками $S = 3D$, где D – диаметр канала, расчетные постановки включали только такие расстояния. Инициация горения в экспериментах производилась с помощью искры. Искровое зажигание моделировалось энерговыделением в малой сферической области в течении 1 мкс.

На рис. 2 представлен начальный этап эволюции фронта детонационной волны в водород-воздушной стехиометрической смеси, возникающей у левого торца ударной трубы, заполненной перегородками с $Br = 0,4$, размещенными с шагом $S = 3D$, при схождении отраженных от стенок ударных волн, сжимающих и придающих дополнительную энергию реагентам. Определение скорости в эксперименте производилось посредством регистрации фронта пламени оптическим датчиком. Для определения положения фронта в расчете отслеживалась максимальная мольная доля короткоживущего радикала, образующегося на фронте пламени и разлагающегося вскоре после этого. В табл. 3 представлено сравнение средних скоростей фронта пламени, определенных в эксперименте по временам прохождения первого и последнего оптических датчиков, и рассчитанных по разработанной модели. Показано, что максимальное отклонение не превышает 3 %.

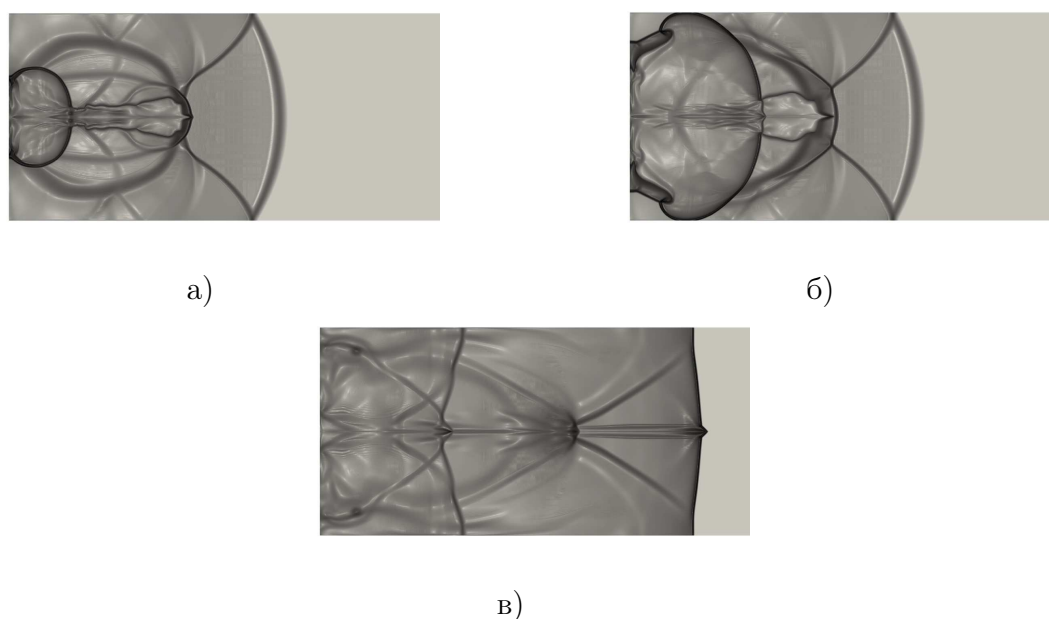


Рис. 2. Поля градиента плотности на моменты времени а) $t = 6,37e - 4$ с, б) $t = 6,58e - 4$ с, в) $t = 8,64e - 4$ с

Видно хорошее совпадение полученной скорости фронта детонационной волны со скоростью Чепмена – Жуге для такого состава. Для коэффициентов загромождения 0,4 и 0,5 наблюдается хорошее совпадение расчетных и экспериментальных данных. Для $BR = 0,6$, однако, наблюдаются заметные отклонения для четвертого и шестого датчиков, что плохо согласуется с малым отклонением расчетных и экспериментальных данных по средней скорости между крайними точками. Графики, представленные на рис. 3 – 5, позволяют сравнить расчетные и экспериментальные [23] изменения средней скорости пламени вдоль трубы со следующими коэффициентами загромождения: $BR = 0,4$, $BR = 0,5$, $BR = 0,6$ соответственно.

Таблица 3

Сравнение средних скоростей фронта пламени

	$Br = 0,4, S = 3D$	$Br = 0,5, S = 3D$	$Br = 0,6, S = 3D$
Эксперимент, м/с	2015	1977	1983
Расчет, м/с	1959	1954	1946
Отн. отклонение, %	2,78	1,16	1,87

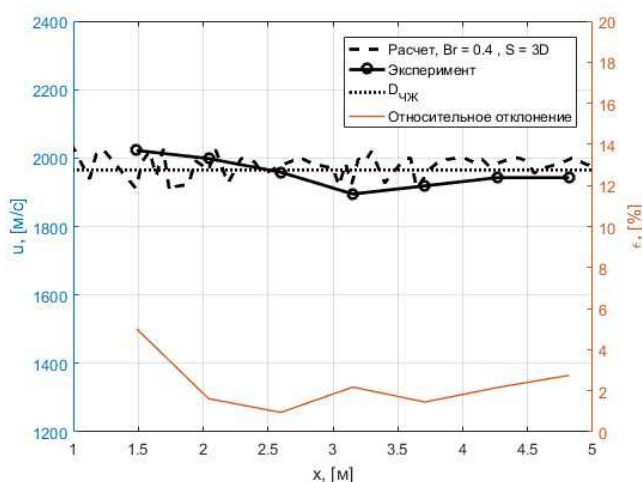


Рис. 3. Сравнение расчетных и экспериментальных скоростей фронта пламени ($Br = 0,4$)

Заключение

В данной работе представлена модель химически реагирующей сплошной среды, позволяющая моделировать интенсивные течения, включающие горение и детонацию, в осесимметричных областях. Возможность использовать произвольный кинетический механизм, представленный в одном из распространенных форматов, например, CHEMKIN [24], позволяет описывать течения произвольных смесей газов. Сравнение с экспериментальными данными по переходу дефлаграции в детонацию в ударной трубе с перегородками демонстрирует хорошее совпадение.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание № FENU-2021-0014).

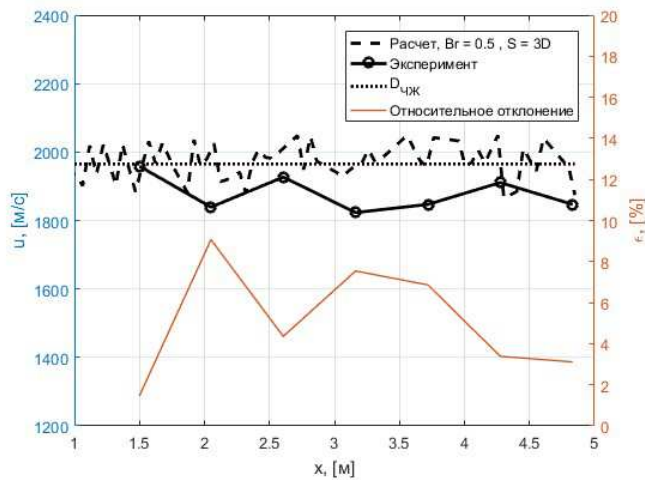


Рис. 4. Сравнение расчетных и экспериментальных скоростей фронта пламени ($Br = 0,5$)

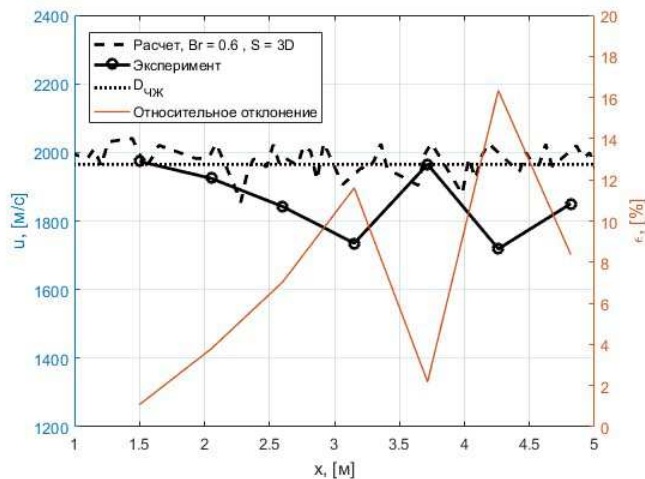


Рис. 5. Сравнение расчетных и экспериментальных скоростей фронта пламени ($Br = 0,6$)

Литература

1. Арутюнов, В.С. Проблемы и вызовы водородной энергетики / В.С. Арутюнов // Горение и плазмохимия. – 2021. – Т. 19, № 4. – С. 245–255.
2. Гельфанд, Б.Е. Водород: параметры горения и взрыва / Б.Е. Гельфанд, О.Е. Попов, Б.Б. Чайванов. – М.: Физматлит, 2008.
3. Dorofeev, S.B. Deflagration to Detonation Transition in Large Confined Volume of Lean Hydrogen-Air Mixtures / S.B. Dorofeev, V.P. Sidorov, A.E. Dvoinishnikov, W. Breitung // Combustion and Flame. – 1996. – V. 104, № 1-2. – P. 95–110.
4. Vesper, A. Deflagration to Detonation Transition Experiments with Hydrogen-Air Mixtures in Shock Tube and Obstacle Array Geometries / A. Vesper, W. Breitung, G. Engel, et al. – Karlsruhe: Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1999.
5. Баженова, Т.В. Ударноволновой механизм самовоспламенения водорода при внезапном истечении из резервуара под высоким давлением / Т.В. Баженова, М.В. Брагин, В.В. Голуб, М.Ф. Иванов // Теплофизика высоких температур. – 2007. – Т. 45, № 5. – С. 733–740.

6. Lu-Qing Wang. Experimental Study of Detonation Propagation in a Square Tube Filled with Orifice Plates / Lu-Qing Wang, Hong-Hao Ma, Zhao-Wu Shen, et al. // International Journal of Hydrogen Energy. – 2018. – V. 43, № 9. – P. 4645–4656.
7. Нигматулин, Р.И. Основы механики гетерогенных сред / Р.И. Нигматулин. – М.: Наука, 1987.
8. Ковалев, Ю.М. Анализ инвариантности некоторых математических моделей многокомпонентных сред / Ю.М. Ковалев, В.Ф. Куропатенко // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2012. – № 11. – С. 4–7.
9. Ковалев, Ю.М. Математическая модель газозвеси с химическими превращениями в приближении парных взаимодействий / Ю.М. Ковалев, Е.Е. Пигасов // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2014. – Т. 7, № 3. – С. 40–49.
10. Оран, Э. Численное моделирование реагирующих потоков / Э. Оран, Дж. Борис. – М.: Мир, 1990.
11. Варнатц, Ю. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Ю. Варнатц, У. Маас, Р. Диббл. – М.: Физматлит, 2006.
12. Гиршфельдер, Дж. Молекулярная теория газов и жидкостей / Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд. – М.: Издательство иностранной литературы, 1961.
13. Беляев, П.Е. Адаптация метода Куропатенко для расчета ударных волн в эйлеровых координатах / П.Е. Беляев, И.Р. Макеева, Е.Е. Пигасов, Д.А. Мастюк // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2021. – Т. 14, № 1. – С. 83–96.
14. Рябинин, В.К. Математическое моделирование адиабатического периода индукции для метан-кислородных смесей в широком диапазоне начальных давлений и температур / В.К. Рябинин, Ю.М. Ковалев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2013. – Т. 6, № 1. – С. 56–71.
15. Пигасов, Е.Е. Математическое моделирование адиабатического теплового взрыва для реакции окисления водорода / Е.Е. Пигасов, В.К. Рябинин, Ю.М. Ковалев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2013. – Т. 6, № 3. – С. 130–135.
16. Зельдович, Я.Б. Математическая теория горения и взрыва / Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, Б.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе. – М.: Наука, 1980.
17. Ибрагимова, Л.Б. Сравнительный анализ констант скоростей химических реакций, описывающих горение водородо-кислородных смесей / Л.Б. Ибрагимова, Г.Д. Смехов, О.П. Шаталов // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. – 2009. – Т. 8. – 25 с.
18. Димитров, В.И. Простая кинетика // В.И. Димитров. – Новосибирск: Наука, 1982.
19. Бабушок, В.И. Тестовые примеры моделирования кинетики сложных реакций / В.И. Бабушок, А.Н. Дакданча. – Красноярск, 1990.
20. Бабушок, В.И. Структура предела цепочно-теплового самовоспламенения / В.И. Бабушок, Т.В. Крахтинова, В.С. Бабкин // Кинетика и катализ. – 1984. – Т. 25, № 1. – С. 5–12.
21. Mullins, V.P. Studies of the Spontaneous Ignition of Fuels Injected into a Bot Air Stream / V.P. Mullins. – NATO AGARD AG S/P2, 1952.
22. Patch, R.W. Shock-Tube Measurement of Dissociation on Rates of H₂-J Chem / R.W. Patch // Journal of Chemical Physics. – 1962. – V. 36, № 7. – 6 p.
23. Porowski, R. Experimental Study on DDT for Hydrogen-Methane-Air Mixtures in Tube with Obstacles / R. Porowski, A. Teodorczyk // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. – 2013. – V. 26, № 2. – P. 374–379.

24. Kee, R.J. Chemkin-III: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical and Plasma Kinetics / R.J. Kee, F.M. Rupley, E. Meeks, J.A. Miller. – Springfield: Sandia National Laboratories, 1996.

Павел Евгеньевич Беляев, младший научный сотрудник, научно-исследовательская лаборатория проблем физико-химии и газодинамики двигательных установок многоразовых ракет-носителей, Южно-Уральский государственный университет (г. Челябинск, Российская Федерация); начальник группы, федеральное государственное унитарное предприятие «Российский федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина» (г. Снежинск, Российская Федерация), belyaevpe@vniitf.ru.

Мадина Салимжановна Аетпаева, инженер, научно-исследовательская лаборатория проблем физико-химии и газодинамики двигательных установок многоразовых ракет-носителей, Южно-Уральский государственный университет (г. Челябинск, Российская Федерация), zharykanovams@susu.ru.

Юрий Михайлович Ковалев, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры вычислительной механики, заведующий научно-исследовательской лабораторией «Математическое моделирование быстропротекающих процессов в многокомпонентных и многофазных средах», Южно-Уральский государственный университет (г. Челябинск, Российская Федерация), kovalevym@susu.ru.

Егор Евгеньевич Пигасов, старший преподаватель, кафедра вычислительной механики, Южно-Уральский государственный университет (г. Челябинск, Российская Федерация); начальник группы, федеральное государственное унитарное предприятие «Российский федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина» (г. Снежинск, Российская Федерация), pigasovee@vniitf.ru.

Поступила в редакцию 14 января 2024 г.

MSC 80A25, 80A30

DOI: 10.14529/mmp240101

MATHEMATICAL MODELLING OF FLAME PROPAGATION IN HYDROGEN-AIR MIXTURES

P.E. Belyaev^{1,2}, M.S. Aetpaeva¹, Yu.M. Kovalev¹, E.E. Pigasov^{1,2}

¹South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

²RFNC-VNIITF, Snezhinsk, Russian Federation

E-mail: belyaevpe@vniitf.ru, zharykanovams@susu.ru, kovalevym@susu.ru, pigasovee@vniitf.ru

The development of hydrogen power engineering is inextricably linked to the provision of hydrogen safety and the study of processes occurring during combustion of mixtures containing hydrogen. The use of numerical simulation allows us to study the behaviour of the system in the ranges of variation of the main parameters not covered by experimental data. This paper presents a model allowing to simulate the flow of chemically reacting continuous media verified on experimental data on flame propagation in a shock tube with orifice plates filled with hydrogen-air mixture.

Keywords: hydrogen; ignition; induction period; kinetic models.

References

1. Arutyunov V.S. Problems and Challenges of Hydrogen Energy. *Combustion and Plasma Chemistry*, 2021, vol. 19, no. 4, pp. 245–255. DOI: 10.18321/cpc462 (in Russian)
2. Gel'fand B.E., Popov O.E., Chajvanov B.B. *Hydrogen: Combustion and Explosion Parameters*. Moscow, Fizmatlit, 2008.
3. Dorofeev S.B., Sidorov V.P., Dvoishnikov A.E., Breitung W. Deflagration to Detonation Transition in Large Confined Volume of Lean Hydrogen-Air Mixtures. *Combustion and Flame*, 1996, vol. 104, no. 1-2, pp. 95–110. DOI: 10.1016/0010-2180(95)00113-1.
4. Vesper A., Breitung W., Engel G., Stern G., Kotchourko A. *Deflagration to Detonation Transition Experiments with Hydrogen-Air Mixtures in Shock Tube and Obstacle Array Geometries*. Karlsruhe, Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1999.
5. Bazhenova T.V., Bragin M.V., Golub V.V., Ivanov M.F. Shock-Wave Mechanism of Spontaneous Ignition of Hydrogen in Case of Sudden Discharge From a High-Pressure Tank. *High Temperature Apparatuses and Structures*, 2007, vol. 45, pp. 733–740. DOI: 10.1134/S0018151X07050148 (in Russian)
6. Wang Lu-Qing, Ma Hong-Hao, Shen Zhao-Wu, et al. Experimental Study of Detonation Propagation in a Square Tube Filled with Orifice Plates. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2018, vol. 43, no. 9, pp. 4645–4656. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2018.01.080.
7. Nigmatulin R.I. *Osnovy mekhaniki geterogennyh sred* [Dynamics of Multiphase Media]. Moscow, Nauka, 1987. (in Russian)
8. Kovalev Yu.M., Kuropatenko V.F. Analysis of the Invariance Some Mathematical Models of Multicomponent Media. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematics. Mechanics. Physics*, 2012, vol. 11, pp. 4–7. (in Russian)
9. Kovalev Yu.M., Pigasov E.E. A Mathematical Model of a Gas Suspension with Chemical Transformations in the Approximation of Paired Interactions. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling and Programming*, 2014, vol. 7, no. 3, pp. 40–49. DOI:10.14529/mmp140304 (in Russian)
10. Oran E., Boris Dzh. *Numerical Simulation of Reacting Flows*. Cambridge, Cambridge University Press, 2000. DOI: 10.1017/CBO9780511574474
11. Warnatz J., Maas U., Dibble R.W. *Combustion. Physical and Chemical Aspects, Modeling, Experiments, Formation of Pollutants*. Berlin, Heidelberg, New York, Barcelona, Hong Kong, London, Milan, Paris, Singapore, Tokyo, Springer Science and Business Media, 2006.
12. Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., Bird R.B. *The Molecular Theory of Gases and Liquids*. New York, Wiley, 1954.
13. Belyaev P.E., Makeeva I.R., Pigasov E.E., Mastuyuk D.A. Adaptation of Kuropatenko Method for Calculating Shock Waves in Euler Coordinates. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling and Programming*, 2021, vol. 14, no. 1, pp. 83–96. DOI: 10.14529/mmp210107 (in Russian)
14. Ryabinin V.K., Kovalev Yu.M. Mathematical Modeling of the Adiabatic Induction Period for Oxygen-Methane Mixtures in a Wide Range of Initial Pressures and Temperatures. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling and Programming*, 2013, vol. 6, no. 1, pp. 56–71. (in Russian)
15. Pigasov E.E., Ryabinin V.K., Kovalev Yu.M. Mathematical Modeling of an Adiabatic Thermal Explosion for a Hydrogen Oxidation Reaction. *Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling and Programming*, 2013, vol. 6, no. 3, pp. 130–135. (in Russian)
16. Zel'dovich Ya.B., Barenblatt G.I., Librovich B.B., Makhviladze G.M. *Matematicheskaya teoriya goreniya i vzryva* [Mathematical Theory of Combustion and Explosion]. Moscow, Nauka, 1980. (in Russian)

17. Ibragimova L.B., Smekhov G.D., Shatalov O.P. Comparative Analysis of the Rate Constants of chemical Reactions Describing Gorenje Hydrogen-Oxygen Mixtures. *Physico-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, 2009, vol. 8, 25 p.
18. Dimitrov V.I. *Prostaya kinetika* [Simple Kinetics]. Novosibirsk, Nauka, 1982. (in Russian)
19. Babushok V.I. Dakdancha A.N. *Testovye primery Modelirovaniya Kinetiki Slozhnyh Reakcij* [Test Examples of Modeling the Kinetics of Complex Reactions]. Krasnoyarsk, 1990. (in Russian)
20. Babushok V.I., Krahtinova T.V., Babkin V.S. The Structure of the Limit of Chain-Thermal Self-Ignition. *Kinetika i kataliz*, 1984, vol. 25, no. 1, p. 5–12. (in Russian)
21. Mullins B.P. Studies of the Spontaneous Ignition of Fuels Injected into a Bot Air Stream. *NATO AGARD AG S/P2*, 1952.
22. Patch R.W. Shock Tube Measurement of Dissociation on Rates of H₂-J chem. *Journal of Chemical Physics*, 1962, no. 7, 6 p. DOI: 10.1063/1.1701291
23. Porowski R., Teodorczyk A. Experimental Study on DDT for Hydrogen-Methane-Air Mixtures in Tube with Obstacles. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2013, vol. 26, no. 2, p. 374–379. DOI: 10.1016/j.jlp.2012.06.004
24. Kee R.J., Rupley F.M., Meeks E., Miller J.A. *Chemkin-III: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical and Plasma Kinetics*. Springfield, Sandia National Laboratories, 1996.

Received January 14, 2024