



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Борисов В.Е., Якуш С.Е.

Численное моделирование
распространения
метанового пламени в
зазоре между
параллельными пластинами

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Борисов В.Е., Якуш С.Е. Численное моделирование распространения метанового пламени в зазоре между параллельными пластинами // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 4. 20 с. doi:[10.20948/prepr-2019-4](https://doi.org/10.20948/prepr-2019-4)
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-4>

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОРДЕНА ЛЕНИНА
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М. В. КЕЛДЫША

В.Е. Борисов, С.Е. Якуш

**Численное моделирование распространения
метанового пламени в зазоре между
параллельными пластинами**

Москва, 2019

В.Е. Борисов, С.Е. Якуш, Численное моделирование распространения метанового пламени в зазоре между параллельными пластинами

Аннотация. Методом численного моделирования изучено горение предварительно перемешанной метановоздушной смеси в узком зазоре между параллельными горизонтальными пластинами. Расчеты проведены на основе решения системы уравнений Навье–Стокса многокомпонентного газа в приближении малых чисел Маха, химические реакции описываются детальной кинетической схемой. Интегрирование производится явной схемой на иерархических адаптивно измельчаемых декартовых сетках (метод AMR). Продемонстрировано развитие неустойчивости, приводящее к возникновению ячеек на фронте расходящегося от точки зажигания пламени. Показана зависимость видимой скорости распространения и размеров ячеек от ширины зазора между пластинами.¹

Ключевые слова: горение, гидродинамическая неустойчивость, ячеистые пламена, прямое численное моделирование, адаптивные сетки

V.E. Borisov, S.E. Yakush, Numerical simulation of methane flame propagation in a gap between parallel plates

Abstract. Numerical simulations are performed for premixed methane-air combustion in a narrow gap between parallel horizontal plates. Simulations are based on the solution of Navier–Stokes equations for multicomponent gas in the small Mach number approximation, chemical reactions are described by a detailed kinetic scheme. Numerical integration is performed by an explicit scheme on hierarchical adaptively refined meshes (AMR). Instability development resulting in the formation of cells on the flame front diverging from the ignition point is demonstrated. Dependence of the visible flame speed and cell size on the gap width between the plates is shown.

Key words and phrases: premixed combustion, hydrodynamic instability, cellular flames, direct numerical simulation, adaptive mesh refinement

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект РФФИ 16-01-00557 а)

1 Введение

Горение предварительно перемешанных газовых смесей в узких плоских каналах, образованных параллельными пластинами и имеющих ширину зазора в поперечном направлении значительно меньше, чем размеры пластин, представляет интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. В значительной мере этот интерес продиктован задачами, возникающими при разработке микроустройств, источником энергии в которых служит горение [1]. Для микрогорелок, как правило, рассматривается непрерывная подача топлива через отверстие в одной из пластин, с образованием кольцевого пламени и оттоком продуктов сгорания в атмосферу на периферии, причем одна из стенок канала может быть обогреваемой. Для такой конфигурации было показано, что в определенных режимах горение может становиться неустойчивым, приводя к возникновению специфических режимов горения (пульсирующие и вращающиеся виды пламени), см. [2–6].

С фундаментальной точки зрения в первую очередь интересно изучение механизмов неустойчивости фронта горения при распространении пламени в узком зазоре между пластинами. Плоское пламя, рассматриваемое как бесконечно тонкий разрыв, является абсолютно неустойчивым вследствие проявления гидродинамической неустойчивости Дарье–Ландау. Нелинейные эффекты стабилизируют пламя, на фронте которого возникают гладкие ячейки, разделенные угловыми точками [7–10]. Диффузионно-тепловая неустойчивость пламени, проявляющаяся при числах Льюиса (отношении коэффициента температуропроводности к коэффициенту диффузии недостающего компонента), меньших единицы, также приводит к возникновению ячеистых видов пламени [11]. Кроме того, определенный вклад могут вносить неустойчивость Рэлея–Тейлора, вызванная влиянием силы тяжести и разностью плотностей исходной смеси и горячих продуктов горения, а также неустойчивость Саффмана–Тейлора, связанная со скачком вязкости газа на фронте пламени. Детальный анализ различных механизмов неустойчивости и их относительной роли можно найти в работе [12].

Изучение трехмерной структуры ячеистых пламен осложняется тем, что ячейки на поверхности пламени – это динамические структуры, возникающие, сливающиеся и исчезающие с течением времени. Поэтому весьма плодотворной оказалась идея исследования ячеистых видов пламени в квазидвумерной конфигурации, то есть в зазоре между двумя прозрачными пластинами (ячейка Хеле–Шоу) [13]. В этом случае облегчается экспериментальная визуализация фронта пламени, а также становится возможным развитие теоретических моделей, основанных на осреднении характеристик пламени поперек канала. Установлено влияние числа Льюиса на процесс развития неустойчивости и образование ячеек [12, 14, 15], исследовано поведение околопредель-

ных типов пламени с распадом на отдельные очаги, переходом к спиновому горению и скручиванием пламени в спираль [16, 17]. В недавней экспериментальной работе [18] выполнена визуализация распространения пламени методом длительной экспозиции, позволившая выявить характер движения угловых точек, разделяющих ячейки, возникновение ячеек и их поглощение соседними ячейками.

Следует иметь в виду, что при распространении пламени в узком зазоре структура течения остается трехмерной вследствие влияния стенок канала (условие прилипания, теплообмен). Поэтому представляет интерес прямое численное моделирование такого пламени в полной трехмерной постановке. В настоящей работе приведены результаты расчетов на основе вычислительной модели, представленной в [19] и реализованной в виде программного комплекса ParTCS-3D [20]. Предварительные расчеты возникновения неустойчивости пламени, а также экспериментальные результаты приведены в предыдущей работе [21]. Используемая в настоящей работе модель основана на решении уравнений Навье–Стокса в приближении малых чисел Маха [22, 23] с использованием блочно-структурированных адаптивных сеток, состоящих из иерархии топологически одинаковых блоков с двукратным уменьшением шага по пространству между последовательными уровнями [24].

В работе представлены результаты численных расчетов возникновения и развития неустойчивости фронта пламени при горении метановоздушных смесей в зазорах различной ширины.

2 Математическая модель

Используемая математическая модель и ее численная реализация подробно рассмотрены в предыдущих работах [19–21]. В данном разделе приводится краткое описание основных определяющих уравнений и методов их решения.

Для описания течений многокомпонентной смеси реагирующих газов используется система уравнений Навье–Стокса в приближении малых чисел Маха [19, 22, 23, 25].

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} + \nabla \cdot \rho Y_m \mathbf{U} &= \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_m + \dot{\omega}_m, \\ \frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) &= -\nabla \pi + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \\ \frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot \rho h \mathbf{U} &= \nabla \cdot \left(\lambda \nabla T + \sum_m h_m \mathbf{\Gamma}_m \right). \end{aligned}$$

Здесь m – индекс компонента смеси, ρ – плотность смеси, $\mathbf{U} = (u, v, w)^T$ – вектор скорости смеси, Y_m – относительная массовая концентрация компонента

m , $\dot{\omega}_m$ – приток компонента m за счет химических реакций, $\pi = p - p_0$ – динамическая составляющая давления, p – локальное давление, p_0 – среднее по области термодинамическое давление, $\boldsymbol{\tau}$ – тензор вязких напряжений, h_m – энтальпия компонента m , h – энтальпия смеси, T – температура смеси, λ – коэффициент теплопроводности смеси, $\boldsymbol{\Gamma}_m$ – вектор диффузионного потока соответствующей компоненты смеси.

Тензор вязких напряжений $\boldsymbol{\tau}$ имеет вид:

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left(\nabla \otimes \mathbf{U} + (\nabla \otimes \mathbf{U})^T - \frac{2}{3}(\nabla \cdot \mathbf{U})\mathbf{I} \right),$$

где μ – динамическая вязкость смеси, \mathbf{I} – единичный тензор.

Энтальпия h и удельная теплоемкость c_p смеси записываются в виде:

$$h(T, Y_m) = \sum_m Y_m h_m(T), \quad c_p(T, Y_m) = \sum_m Y_m c_{p,m}(T),$$

где h_m и $c_{p,m}$ – соответствующие величины для m -го компонента.

Уравнение состояния смеси совершенных газов имеет следующий вид:

$$p_0 = \rho \mathcal{R}T/W = \rho \mathcal{R}T \sum_m (Y_m/W_m),$$

где \mathcal{R} – универсальная газовая постоянная, W_m – молекулярная масса компонента m , W – средняя молекулярная масса смеси.

Диффузионные потоки компонент описываются моделью средних по смеси значений [26]:

$$\boldsymbol{\Gamma}_m = \rho D_{m,mix} \nabla Y_m,$$

где $D_{m,mix}$ – средний коэффициент диффузии компонента m относительно смеси, определяемый через бинарные коэффициенты диффузии D_{ml} компонент смеси как [27]

$$D_{m,mix} = \frac{1 - Y_m}{\sum_{l \neq m} X_l / D_{ml}}$$

(здесь X_l – относительная объемная (мольная) концентрация l -го компонента).

В приближении малых чисел Маха дивергенция скорости удовлетворяет обобщенному условию несжимаемости, учитывающему изменение плотности вследствие нагрева газа и изменения его состава:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{U} = & \frac{1}{\rho c_p T} \left(\nabla \cdot \lambda \nabla T + \sum_m \boldsymbol{\Gamma}_m \nabla h_m \right) + \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_m \frac{W}{W_m} (\nabla \cdot \boldsymbol{\Gamma}_m) + \frac{1}{\rho} \sum_m \left(\frac{W}{W_m} - \frac{h_m}{c_p T} \right) \dot{\omega}_m. \end{aligned}$$

Выполняются следующие нормировочные соотношения:

$$\sum_m Y_m = 1, \quad \sum_m \dot{\omega}_m = 0, \quad \sum_m \Gamma_m = 0.$$

Массовая скорость притока компонента m в химических реакциях равна

$$\dot{\omega}_m = \sum_n \dot{\omega}_{mn} = W_m \sum_n \left(\nu''_{mn} - \nu'_{mn} \right) \dot{R}_n,$$

где n — номер реакции, ν''_{mn} и ν'_{mn} — стехиометрические коэффициенты компонента m в продуктах и исходных веществах реакции n , \dot{R}_n — скорость протекания n -й реакции, имеющая вид

$$\dot{R}_n = K_{fn} \prod_m [X_m]^{\nu'_{mn}} - K_{rn} \prod_m [X_m]^{\nu''_{mn}}.$$

Здесь K_{fn} и K_{rn} — константы скорости прямой и обратной реакций.

Константы скорости прямых реакций определяются из закона Аррениуса [25] в виде

$$K_{fn} = A_{fn} T^{\beta_n} \exp \left(-\frac{E_n}{\mathcal{R}T} \right),$$

где A_{fn} — предэкспоненциальный множитель, β_n — показатель степени в температурном факторе, E_n — энергия активации. Константы скорости обратных реакций определяются через константы равновесия:

$$\frac{K_{rn}}{K_{fn}} = \left(\frac{p_0}{\mathcal{R}T} \right)^{\sum_m (\nu''_{mn} - \nu'_{mn})} \exp \left(\frac{\Delta s_n}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta h_n}{\mathcal{R}T} \right).$$

Здесь Δh_n и Δs_n — изменение удельной энтальпии и энтропии при переходе от исходных веществ к продуктам n -й реакции:

$$\begin{aligned} \Delta h_n &= \sum_m \nu''_{mn} h_m - \sum_m \nu'_{mn} h_m, \\ \Delta s_n &= \sum_m \nu''_{mn} s_m - \sum_m \nu'_{mn} s_m, \end{aligned}$$

где $s_m(T)$ — удельная энтропия m -го компонента.

Теплофизические и термодинамические свойства индивидуальных веществ $h_m(T)$, $c_{p,m}(T)$, $s_m(T)$ определяются по полиномиальным аппроксимациям [28, 29]. Коэффициенты переноса μ_m , λ_m , D_{ml} для компонент, а также μ , λ для смеси рассчитываются по молекулярно-кинетической теории, соответствующие формулы и константы совместимы с известным пакетом CHEMKIN [30]. Более детально все используемые соотношения приведены в [19].

3 Численная и программная реализация

Численная реализация метода решения системы определяющих уравнений подробно описана в [20]. Используется алгоритм адаптивного поблочного измельчения сетки (Adaptive Mesh Refinement, AMR) [24], в котором расчетная область покрывается исходными блоками нулевого уровня измельчения (наиболее грубой сеткой), а затем производится адаптация сетки к решению. Все блоки сетки имеют идентичную логическую структуру, представляя собой параллелепипеды, содержащие равномерную по всем направлениям декартову сетку. Если для блока сетки выполнены условия необходимости измельчения, блок заменяется на восемь одинаковых подблоков, имеющих вдвое меньшие размеры по каждому направлению, но такое же число узлов, что и измельчаемый блок. Тем самым разрешающая способность сетки локально увеличивается вдвое. Процесс измельчения продолжается до тех пор, пока не будет достигнут заданный предельный уровень измельчения либо дальнейшее измельчение станет ненужным в соответствии с выбранным критерием.

Параллельная программная реализация алгоритма адаптивного измельчения сеток осуществлялась с использованием библиотеки PARAMESH [31], позволяющей проводить динамическое измельчение и укрупнение сеточных блоков, распределение блоков между доступными для вычисления процессорами, динамическое распределение и балансировку данных между потоками исполнения, управление всеми межблоковыми и межпроцессорными коммуникациями, а также заполнение массивов фиктивных ячеек. Для организации межпроцессорных обменов использовался интерфейс параллельного программирования MPI.

Алгоритм решения на одном сеточном блоке основывается на использовании проекционной схемы типа предиктор–корректор [32], а также расщеплении по физическим процессам с выделением подшага решения уравнений химической кинетики [23]. Для аппроксимации уравнений по времени используется однослойная явная схема Эйлера; для аппроксимации по пространству – метод конечных объемов, записанный на разнесенной сетке, с использованием схем реконструкции значений на гранях ячеек VONOS [33] или WENO3 [34].

Решение уравнения Пуассона для коррекции давления осуществлялось с помощью функций программного пакета HYPRE [35]. В расчетах использовался вариант параллельного метода сопряженных градиентов PCG с предобуславливанием алгебраическим многосеточным методом Boomer AMG.

Уравнения химической кинетики интегрировались при помощи алгоритма VODE (использована его версия с двойной точностью DVODE) [36].

Выходные данные программы для визуализации записывались с помощью библиотек HDF5 [37] и TecIO [38].

4 Параметры расчетов

4.1 Кинетическая схема

Кинетический механизм горения метана [39], включающий 35 элементарных реакций для 16 компонент (CH_4 , O_2 , CO_2 , H_2O , CO , CH_3 , CHO , CH_2O , CH_3O , H_2 , H , O , OH , HO_2 , H_2O_2 и N_2), приведен в таблице 1.

Таблица 1. Кинетический механизм горения метана [39].

ELEMENTS H O C N END															
SPECIES CH4 CH3 CH2 CH CH2O HCO CO2 CO H2 H O2 O OH HO2 H2O2 H2O N2 END															
REACTIONS															
CH3+H+M=CH4+M	8.0E26	-3.	0.	HCO+H=CO+H2	4.0E13	0.	0.								
CH4+O2=CH3+HO2	7.9E13	0.	56000.	HCO+O=CO2+H	1.0E13	0.	0.								
CH4+H=CH3+H2	2.2E4	3.	8750.	HCO+O2=HO2+CO	3.3E13	-0.4	0.								
CH4+O=CH3+OH	1.6E6	2.36	7400.	CO+O+M=CO2+M	3.2E13	0.	-4200.								
CH4+OH=CH3+H2O	1.6E6	2.1	2460.	CO+OH=CO2+H	1.51E7	1.3	-758.								
CH3+O=CH2O+H	6.8E13	0.	0.	CO+O2=CO2+O	1.6E13	0.	41000.								
CH3+OH=CH2O+H2	1.0E12	0.	0.	HO2+CO=CO2+OH	5.8E13	0.	22934.								
CH3+OH=CH2+H2O	1.5E13	0.	5000.	H2+O2=2OH	1.7E13	0.	47780.								
CH3+H=CH2+H2	9.0E13	0.	15100.	OH+H2=H2O+H	1.17E9	1.3	3626.								
CH2+H=CH+H2	1.4E19	-2.	0.	H+O2=OH+O	5.13E16	-0.816	16507.								
CH2+OH=CH2O+H	2.5E13	0.	0.	O+H2=OH+H	1.8E10	1.0	8826.								
CH2+OH=CH+H2O	4.5E13	0.	3000.	H+O2+M=HO2+M	3.61E17	-0.72	0.								
CH+O2=HCO+O	3.3E13	0.	0.	H2O/18.6/ CO2/4.2/											
CH+O=CO+H	5.7E13	0.	0.	H2/2.86/ CO/2.11/ N2/1.26/											
CH+OH=HCO+H	3.0E13	0.	0.	OH+HO2=H2O+O2	7.5E12	0.	0.								
CH+CO2=HCO+CO	3.4E12	0.	690.	H+HO2=2OH	1.4E14	0.	1073.								
CH2+CO2=CH2O+CO	1.1E11	0.	1000.	O+HO2=O2+OH	1.4E13	0.	1073.								
CH2+O=CO+H+H	3.0E13	0.	0.	2OH=O+H2O	6.0E8	1.3	0.								
CH2+O=CO+H2	5.0E13	0.	0.	H+H+M=H2+M	1.0E18	-1.0	0.								
CH2+O2=CO2+H+H	1.6E12	0.	1000.	H+H+H2=H2+H2	9.2E16	-0.6	0.								
CH2+O2=CH2O+O	5.0E13	0.	9000.	H+H+H2O=H2+H2O	6.0E19	-1.25	0.								
CH2+O2=CO2+H2	6.9E11	0.	500.	H+H+CO2=H2+CO2	5.49E20	-2.0	0.								
CH2+O2=CO+H2O	1.9E10	0.	-1000.	H+OH+M=H2O+M	1.6E22	-2.0	0.								
CH2+O2=CO+OH+H	8.6E10	0.	-500.	H2O/5/											
CH2+O2=HCO+OH	4.3E10	0.	-500.	H+O+M=OH+M	6.2E16	-0.6	0.								
CH2O+OH=HCO+H2O	3.43E9	1.18	-447.	H2O/5/											
CH2O+H=HCO+H2	2.19E8	1.77	3000.	H+HO2=H2+O2	1.25E13	0.	0.								
CH2O+M=HCO+H+M	3.31E16	0.	81000.	HO2+HO2=H2O2+O2	2.0E12	0.	0.								
CH2O+O=HCO+OH	1.81E13	0.	3082.	H2O2+M=OH+OH+M	1.3E17	0.	45500.								
HCO+OH=CO+H2O	5.0E12	0.	0.	H2O2+H=HO2+H2	1.6E12	0.	3800.								
HCO+M=H+CO+M	1.6E14	0.	14700.	H2O2+OH=H2O+HO2	1.0E13	0.	1800.								
END															

4.2 Расчетная область и сетка

Расчетная область представляла собой параллелепипед с боковыми сторонами $L_x = L_y = 0.03$ м и расстоянием между нижней и верхней твердыми границами, варьируемым в диапазоне $L_z = 0.0025 - 0.006$ м. Для повышения скорости расчетов рассматривается четверть реальной области горения.

Блоки расчетной сетки имели фиксированный размер $10 \times 10 \times 10$ ячеек, сетка начального уровня содержала $3 \times 3 \times 1$ блок (так что размер ячейки на самой грубой сетке составлял 1 мм в двух горизонтальных направлениях). Адаптация сетки осуществлялась по объемной доле метана в смеси X_{CH_4} . Расчеты проводились с использованием трех уровней расчетной сетки.

Численные расчеты распространения фронта ламинарного метановоздушного пламени в плоском узком канале проводились на суперкомпьютере К-100 [40] в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, а также с использованием вычислительных мощностей Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН [41]. В зависимости от серии расчетов использовались от 48 до 252 вычислительных ядер.

4.3 Начальные и граничные условия

Первоначально вся расчетная область заполняется смесью заданного состава при температуре $T_0 = 298^\circ$ К, среднее давление в системе составляет $p_0 = 101325$ Па. Для стехиометрической метановоздушной смеси задавались объемные (мольные) доли метана $X_{CH_4} = 0.095$, кислорода $X_{O_2} = 0.19005$, азота $X_{N_2} = 0.71495$, для остальных компонент начальное содержание принималось нулевым. Для нестехиометрической смеси в качестве входного параметра принимался коэффициент избытка топлива

$$\phi = (X_{CH_4}/X_{O_2})/(X_{CH_4}/X_{O_2})_{stoi},$$

где $(X_{CH_4}/X_{O_2})_{stoi} = 1/2$ – отношение мольных долей топлива и окислителя в стехиометрической смеси. Отношение мольных долей кислорода и азота при этом задавалось тем же, что и в воздухе: $X_{O_2}/X_{N_2} = 0.21/0.71$.

На боковых границах области (координатные плоскости $x = 0$ и $y = 0$) задавались условия симметрии. На выходных границах (плоскости $x = L_x$ и $y = L_y$) ставились условия свободного вытекания (фиксированное давление, нулевая производная по нормали при вытекании, параметры невозмущенной атмосферы при втекании). Верхняя и нижняя границы области ($z = 0$ и $z = L_z$) считались твердыми стенками, на них ставились граничные условия прилипания и поддерживалась постоянная температура T_0 .

Горение инициировалось путем задания небольшой области высокой температуры вблизи оси симметрии, моделирующей искровое зажигание смеси

в экспериментах. Область высокой температуры задавалась в виде гауссовой функции $T(x, y) = T_0 + (T_{ign} - T_0) \exp(-(x^2 + y^2)/r_{ign}^2)$, где $T_{ign} = 2200^\circ \text{ К}$, $r_{ign} = 10^{-2} \text{ м}$. Кроме того, в области $0 \leq x \leq 0.003 \text{ м}$, $0 \leq y \leq 0.003 \text{ м}$ изначально задавался чистый азот. Это обеспечивало более плавное зажигание, а также давало начальное возмущение фронта пламени вследствие наличия угловой точки, способствовавшее развитию неустойчивости.

5 Результаты

5.1 Горение стехиометрической смеси

Для стехиометрической смеси (начальный состав $X_{CH_4} = 0.095$, $X_{O_2} = 0.19005$, $X_{N_2} = 0.71495$) расчеты проводились для следующих значений ширины зазора между пластинами: $L_z = 2.5, 3.0, 4.0, 5.0$ и 6.0 мм .

При ширине зазора $L_z = 2.5 \text{ мм}$ расчеты показали, что после зажигания от центра области начинает распространяться кольцевое пламя, однако вследствие сильных теплотерь в холодные стенки канала происходит его погасание. При ширине зазора от $L_z = 3 \text{ мм}$ и выше удалось получить распространение пламени от точки зажигания и до внешних границ расчетной области.

Рассмотрим последовательно полученные результаты. На рис. 1 для канала шириной $L_z = 3 \text{ мм}$ показано поле температуры в последовательные моменты времени в горизонтальном сечении, проходящем на половине высоты зазора. На рис. 2 для тех же моментов времени показаны распределения объемной (мольной) доли промежуточного радикала ОН, максимум которого достигается в зоне реакции. Видно, что первоначально близкое к цилиндрическому пламя теряет устойчивость и искривляется, при этом лидирующая часть пламени приобретает характерную М-образную форму, наблюдающуюся в экспериментах [21].

С увеличением ширины зазора распространение пламени становится более быстрым, а возникающие на фронте пламени возмущения – более длинноволновыми, что продемонстрировано на рис. 3 для канала шириной $L_z = 4 \text{ мм}$ и на рис. 4 для канала шириной $L_z = 5 \text{ мм}$.

Для определения скорости распространения пламени в зазорах различной ширины для каждого варианта в несколько моментов времени определялся радиус описанной окружности, касающийся фронта в наиболее удаленной от центра точке R_c . На рис. 5 показаны соответствующие зависимости радиуса пламени от времени, полученные для различной ширины зазора. Видно, что в каждом случае зависимости с хорошей точностью являются линейными. Методом наименьших квадратов была определена скорость пламени (тангенс угла наклона соответствующей прямой, показанной на рисунке):

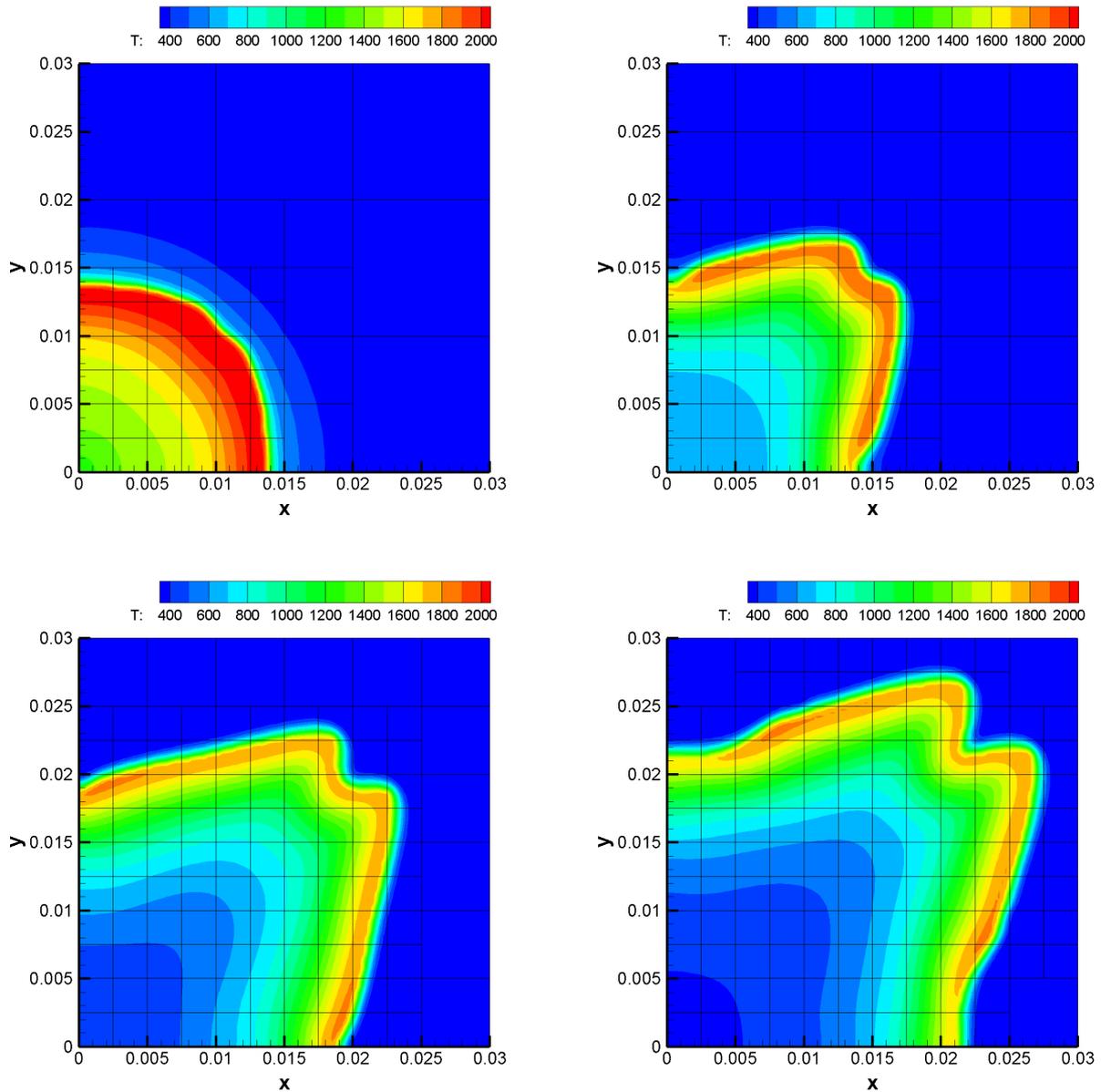


Рис. 1. Распространение метанового пламени при $L_z = 3$ мм: поле температуры в сечении $z = 1.5$ мм в моменты времени $t = 5, 20, 40$ и 55 мс.

$V_f = 0.3718$ м/с (зазор 3 мм), 0.644 м/с (4 мм), 1.143 м/с (5 мм), 1.475 м/с (6 мм). Полученные значения несколько меньше, чем измеренные экспериментально [21], однако следует иметь в виду, что расчеты покрывают лишь начальный этап эволюции пламени, и, кроме того, эксперименты проводились для метановоздушной смеси с $\phi = 1.1$. Более детально сравнение с экспериментом будет проведено в дальнейшей работе.

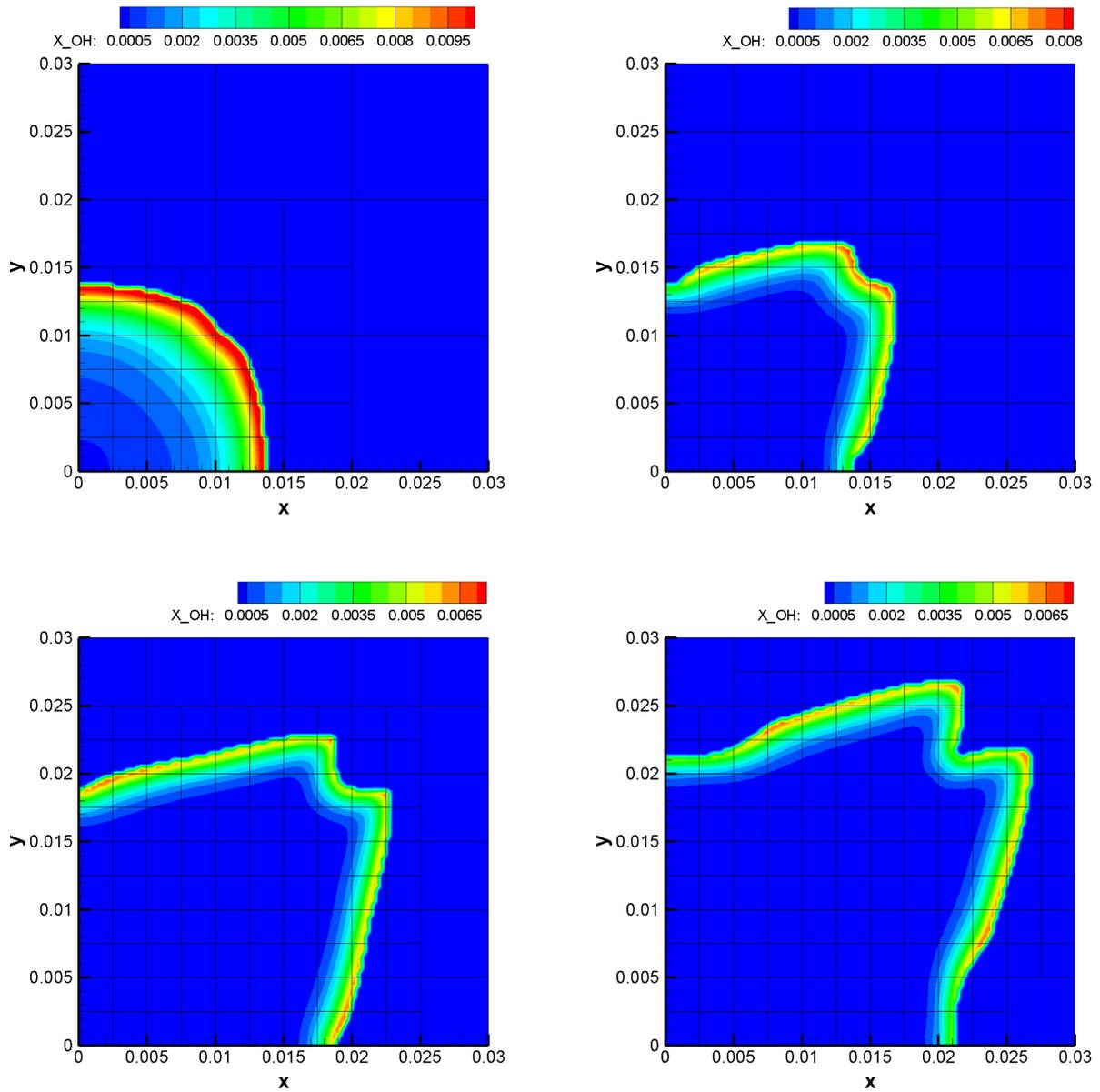


Рис. 2. Развитие метанового пламени при $L_z = 3$ мм: мольная доля радикала ОН в сечении $z = 1.5$ мм в моменты времени $t = 5, 20, 40$ и 55 мс.

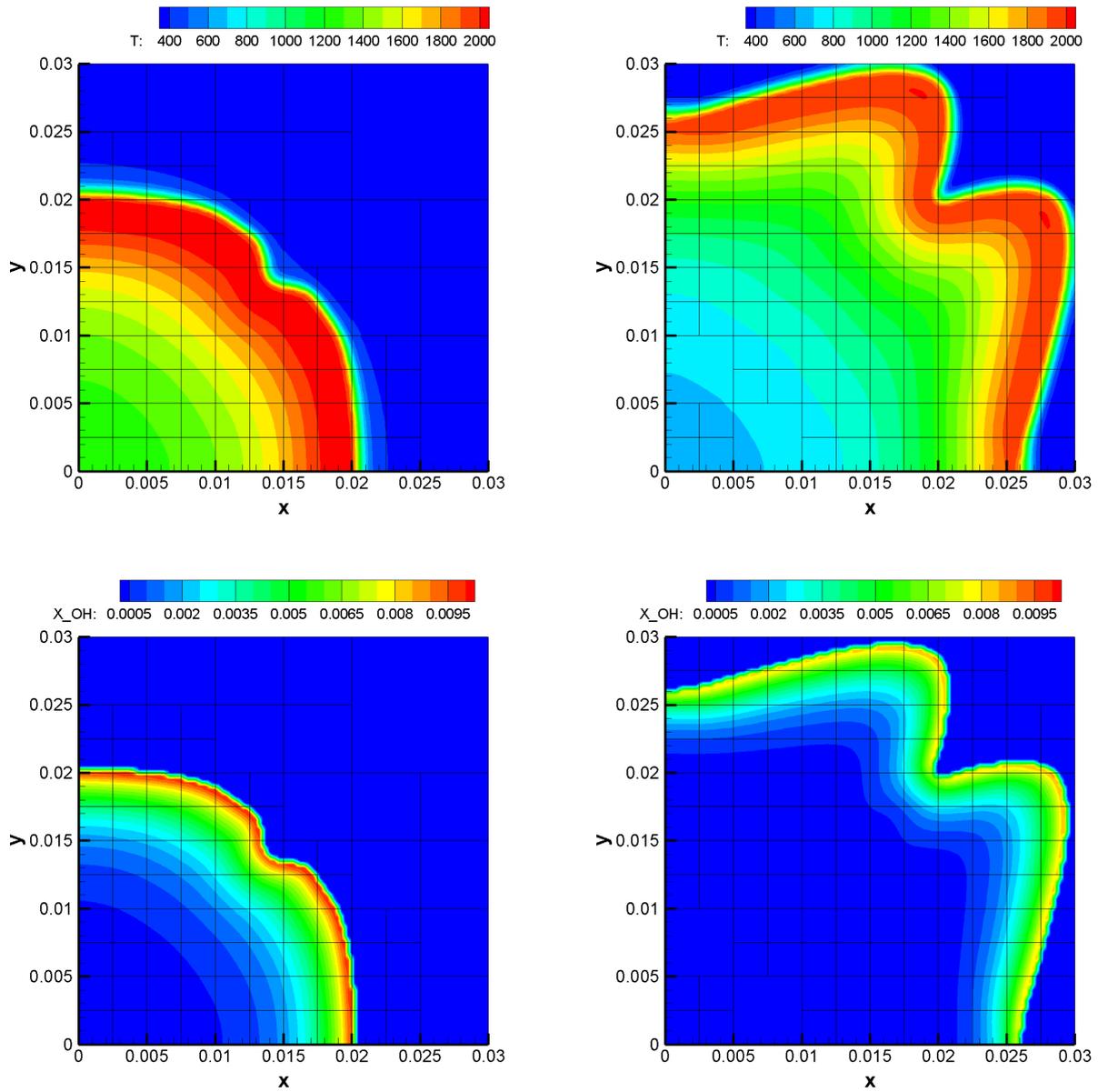


Рис. 3. Развитие метанового пламени при $L_z = 4$ мм: температура (верхний ряд) и мольная доля радикала ОН (нижний ряд) в сечении $z = 2$ мм в моменты времени $t = 10$ и 30 мс.

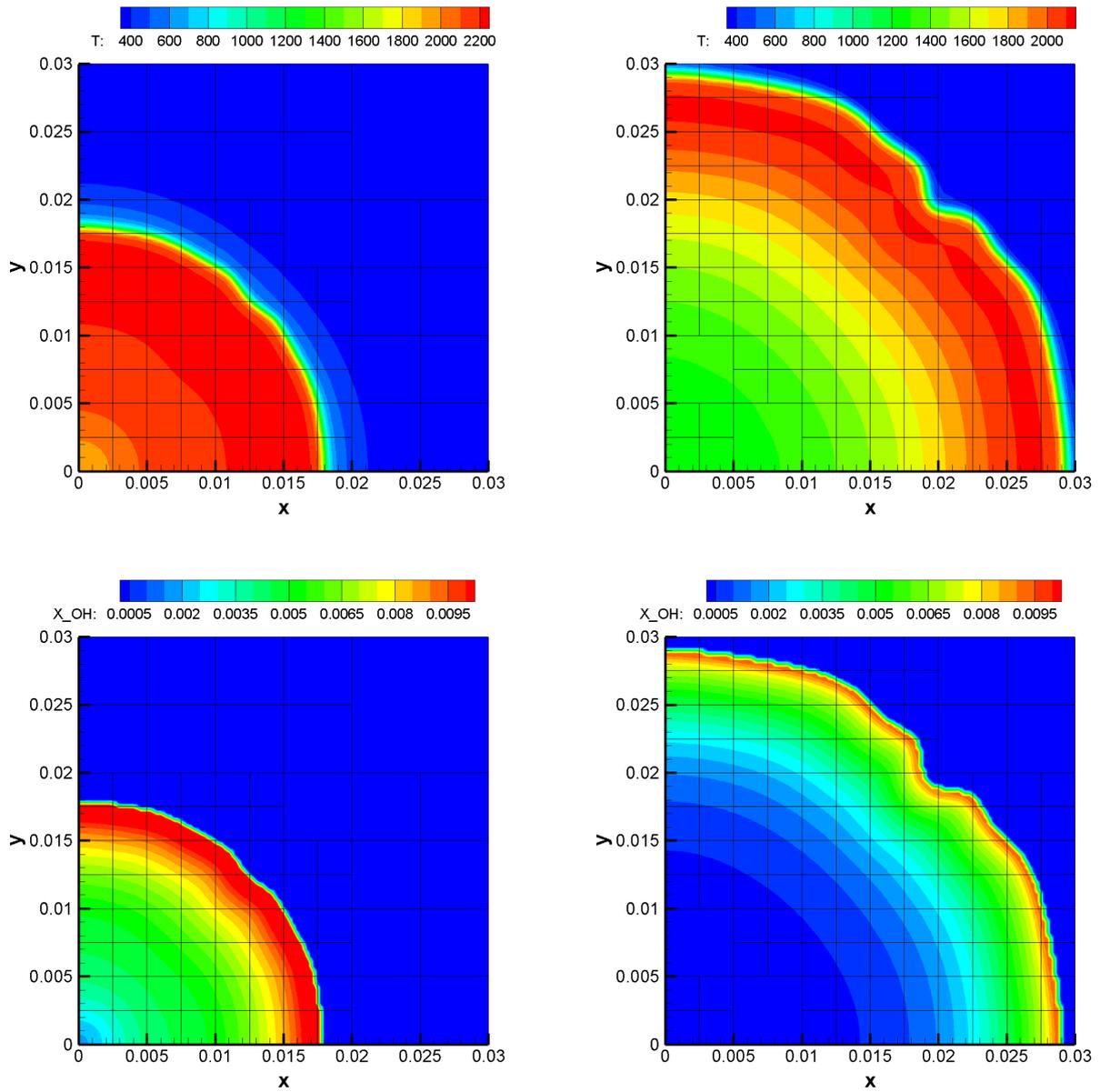


Рис. 4. Развитие метанового пламени при $L_z = 5$ мм: температура (верхний ряд) и мольная доля радикала OH (нижний ряд) в сечении $z = 2.5$ мм в моменты времени $t = 5$ и 15 мс.

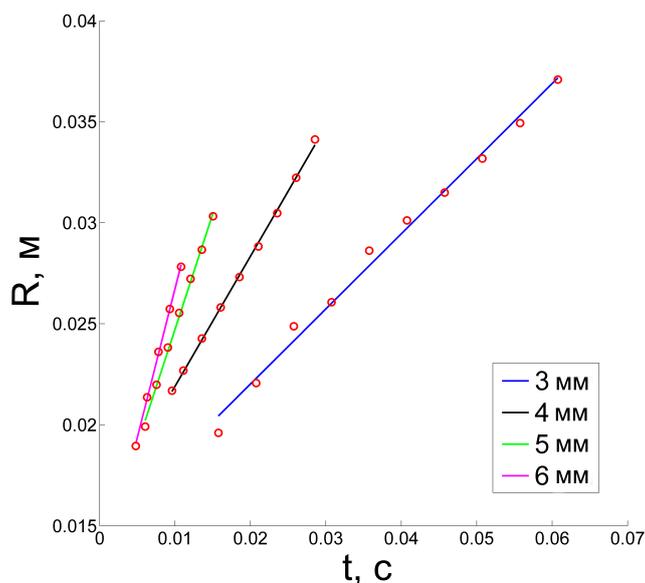


Рис. 5. Зависимость от времени радиуса фронта пламени при различной ширине зазора между пластинами при горении стехиометрической метановоздушной смеси.

5.2 Горение нестехиометрических смесей

Проведены расчеты для двух нестехиометрических смесей – бедной ($\phi = 0.9$) и богатой ($\phi = 1.2$). На рис. 6 представлены распределения температуры и радикала ОН в момент времени $t = 23$ мс, полученные для указанных смесей. Видно, что для богатой смеси неустойчивость пламени выражена сильнее: на фронте пламени возникают более коротковолновые возмущения, которые практически приводят к фрагментации фронта пламени на несколько очагов горения.

6 Заключение

В работе проведено численное моделирование горения стехиометрических и нестехиометрических метановоздушных смесей в узком зазоре между двумя параллельными пластинами. Получено развитие неустойчивости фронта пламени, приводящее к возникновению ячеек, продемонстрировано влияние состава смеси на скорость и длину волны возмущений. Для богатого топливом пламени получен распад единого фронта на очаги горения.

Дальнейшие исследования будут посвящены расчетам более поздних стадий эволюции пламен. Для более адекватного описания неустойчивости расчеты будут проводиться без использования предположения о симметрии течения, которое может играть стабилизирующую роль, подавляя развитие возмущений.

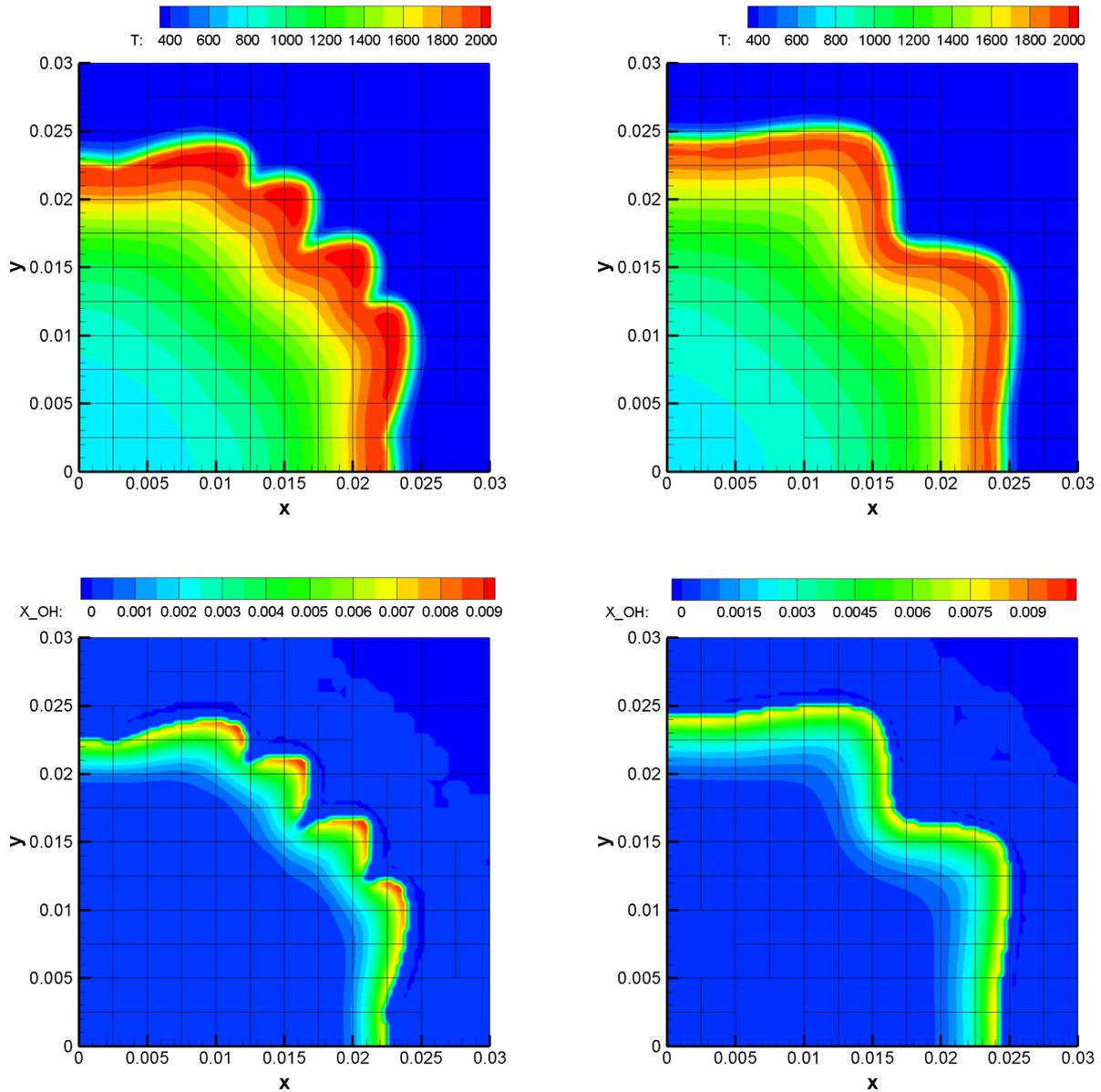


Рис. 6. Сравнение формы пламени для богатой (левая колонка) и бедной (правая колонка) смесей при $L_z = 4$ мм в момент времени $t = 23$ мс; температура (верхний ряд) и мольная доля радикала ОН (нижний ряд) в сечении $z = 2$ мм.

Список литературы

- [1] Y. Ju, K. Maruta. Microscale combustion: Technology development and fundamental research // Progress in Energy and Combustion Science. 2011. V. 37, № 6. P.669–715.
- [2] A. Fan, S. Minaev, S. Kumar, W. Liu. Regime diagrams and characteristics of flame patterns in radial microchannels with temperature gradients // Combustion and Flame. 2008. V. 152, № 4. P. 479–489.
- [3] A. Fan, S. Minaev, E. Sereshchenko, R. Fursenko, S. Kumar, W. Liu, K. Maruta. Experimental and numerical investigations of flame pattern formations in a radial microchannel // Proceedings of the Combustion Institute. 2009. V. 32, № 2. P. 3059–3066.
- [4] S. Minaev, R. Fursenko, E. Sereshchenko, A. Fan, S. Kumar. Oscillating and rotating flame patterns in radial microchannels // Proceedings of the Combustion Institute. 2013. V. 34. № 2. P. 3427–3434.
- [5] В.В. Замащиков. Газовые вращающиеся пламена // Физика горения и взрыва. 2003. Т. 39. № 2. с. 9–10.
- [6] В.В. Замащиков. Спиновое газовое горение в узкой щели // Физика горения и взрыва. 2006. Т. 42. № 3. с. 23–26.
- [7] Я.Б. Зельдович, Г.И. Баренблатт, В.Б. Либрович, Г.М. Махвиладзе. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.
- [8] V.V. Bychkov, M.A. Liberman. Dynamics and stability of premixed flames // Physics Reports. 2000. V. 325. № 4-5. P. 115–237.
- [9] M. Matalon. Intrinsic flame instabilities in premixed and nonpremixed combustion // Annual Review of Fluid Mechanics. 2007. V. 39. № 1. P. 163–191.
- [10] P. Clavin, G. Searby. Combustion Waves and Fronts in Flows: Flames, Shocks, Detonations, Ablation Fronts and Explosion of Stars. Cambridge University Press, 2016.
- [11] G.I. Sivashinsky. Diffusional-thermal theory of cellular flames // Combustion Science and Technology. 1977. V. 37. № 3–4. P. 137–146.
- [12] D. Fernández-Galisteo, V.N. Kurdyumov, P.D. Ronney. Analysis of premixed flame propagation between two closely-spaced parallel plates // Combustion and Flame. 2018. V. 190. P. 133–145.

- [13] G. Joulin, G.I. Sivashinsky. Influence of momentum and heat losses on the large-scale stability of quasi-2D premixed flames // *Combustion Science and Technology*. 1994. V. 98. № 1–3. P. 11–23.
- [14] D. Fernández-Galisteo, J. Gross, V.N. Kurdyumov, P.D. Ronney. Premixed flame propagation between two closely spaced parallel plates // *25th ICDERS*. 2015. Leeds, UK, P. 1–6.
- [15] J. Wongwiwat, J. Gross, P.D. Ronney. Flame propagation in narrow channels at varying Lewis number // *25th ICDERS*. 2015. Leeds, UK, P. 3–8.
- [16] М.М. Алексеев, И.В. Смирнова, В.П. Самсонов. Формирование спиновоего фронта газоздушного пламени // *Письма в Журнал технической физики*. 2011. Т. 37, Вып. 7. С. 80–87.
- [17] В.П. Самсонов, М.М. Алексеев, И.В. Смирнова. Механизм формирования спиновоего фронта пламени // *Успехи физических наук*. 2011. Т. 181, № 9. С. 965–972.
- [18] M.M. Alexeev, O.Yu. Semenov, S.E. Yakush. Experimental study on cellular premixed propane flames in a narrow gap between parallel plates // *Combustion Science and Technology*. 2018. Published online 10 Oct 2018. DOI: 10.1080/00102202.2018.1521394
- [19] В.Е. Борисов [и др.] Программный комплекс TCS 3D: математическая модель // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*. 2015. № 6. 20 с.
<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-6>
- [20] В.Е. Борисов [и др.] Программный комплекс TCS 3D: вычислительная модель // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. 2015. № 110. 20 с.
<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2015-110>
- [21] М.М. Алексеев, В.Е. Борисов, О.Ю. Семенов, С.Е. Якуш Моделирование горения в узком плоском канале // *Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша*. 2016. № 134. 32 с.
<http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-134>
- [22] Ю.В. Лапин, М.Х. Стрелец. Внутренние течения газовых смесей. М.: Наука, 1989.
- [23] M.S. Day, J.B. Bell. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry // *Combustion Theory and Modelling*, 4:4, p. 535–556, DOI: 10.1088/1364-7830/4/4/309

- [24] J. Bell, M. Day. Adaptive Methods for Simulation of Turbulent Combustion. In: Turbulent Combustion Modeling: Advances, New Trends and perspectives. Chapter 13. Volume 95 of Fluid mechanics and its applications, Springer London. 2010. P. 201–329.
- [25] T. Poinso, D. Veynante. Theoretical and Numerical Combustion. 2nd Ed. Philadelphia, Edwards Inc., 2005, 522 p.
- [26] J.F. Grcar. An Explicit Runge-Kutta Iteration for Diffusion in the Low Mach Number Combustion Code. Lawrence Berkeley National Laboratory report LBNL-63375, 2007
- [27] Дж. Гиршфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Иностранная литература, 1961, 928 с.
- [28] S. Gordon and B.J. McBride: «Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions, Rocket Performance, Incident and Reflected Shocks and Chapman-Jouguet Detonations». 1971, NASA Report SP-273.
- [29] A. Burkat, B. Ruscic. Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables. Technion Report TAE 960 and ANL Report ANL-05/20, 2005. <https://burkat.technion.ac.il/>
- [30] R.J. Kee, G. Dixon-Lewis, J. Warnatz, M.E. Coltrin and J.A. Miller. «A Fortran Computer Code Package for the Evaluation of Gas-Phase Multicomponent Transport Properties». 1986, Sandia National Laboratories Report SAND86-8246.
- [31] PARAMESH: Parallel Adaptive Mesh Refinement. <https://sourceforge.net/projects/paramesh>
- [32] J.B. Bell and D.L. Marcus. A second-order projection method for variable-density flows // J. Comput. Phys., 101:334-348, 1992
- [33] V.G. Ferreira, M.F. Tomé, N. Mangiavacchi, A. Castelo, J.A. Cuminato, A.O. Fortuna and S. McKee. High-order upwinding and the hydraulic jump // Int. J. Numer. Meth. Fluids, 2002, 39: 549–583. doi:10.1002/fld.234
- [34] C.W. Shu. High order weighted essentially non-oscillatory schemes for convection dominated problems // SIAM Review, 2009, v. 51, p. 82–112.

- [35] HYPRE: Scalable Linear Solvers and Multigrid Methods.
http://computation.llnl.gov/project/linear_solvers/software.php
- [36] P.N. Brown, G.D. Byrne, A.C. Hindmarsh. VODE: a variable coefficient ODE solver. // SIAM J. Sci. Stat. Comp., 1989, vol. 10, p. 1038–1051.
- [37] HDF5 Tutorial. <https://www.hdfgroup.org/HDF5/Tutor/>
- [38] TecIO Library. <http://www.tecplot.com/my/tecio-library/>
- [39] B. Rogg. Sensitivity analysis of laminar premixed CH₄-air flames using full and reduced kinetic mechanisms, in Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Me-thane-Air flames, in Lecture Notes in Physics, 384, M.D. Smooke, Ed., Springer Verlag, 1991, p. 159–192.
- [40] Гибридный вычислительный кластер К-100.
<http://www.kiam.ru/MVS/resources/k100.html>
- [41] Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН.
<http://www.jscc.ru>

Содержание

1	Введение	3
2	Математическая модель	4
3	Численная и программная реализация	7
4	Параметры расчетов	8
4.1	Кинетическая схема	8
4.2	Расчетная область и сетка	9
4.3	Начальные и граничные условия	9
5	Результаты	10
5.1	Горение стехиометрической смеси	10
5.2	Горение нестехиометрических смесей	15
6	Заключение	15
	Литература	17