



**В. С. Иванов**  
инженер-исследователь Института  
химической физики им. Н. Н. Семенова  
РАН, г. Москва, Россия



**С. М. Фролов**  
д-р физ.-мат. наук, заведующий отделом  
Института химической физики  
им. Н. Н. Семенова РАН, г. Москва, Россия

УДК 614.841.41

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ В ГЛАДКИХ ТРУБАХ И ТРУБАХ С РЕГУЛЯРНЫМИ ПРЕПЯТСТВИЯМИ

Разработан эффективный вычислительный алгоритм многомерного моделирования начальной стадии процесса перехода горения в детонацию (ПГД) в газах. Алгоритм основан на методе явного выделения фронта пламени. Проведены двумерные расчеты ускорения пламени в стехиометрической пропановоздушной смеси в гладких трубах и в трубах с регулярными препятствиями. Получено удовлетворительное согласие результатов расчетов с известными экспериментальными данными по зависимостям скорости пламени от времени и от пройденного расстояния как для гладких труб, так и для труб с регулярными кольцевыми препятствиями разной высоты и с разным шагом установки.

**Ключевые слова:** вычислительная газовая динамика, горение, ускорение пламени, взрывобезопасность.

### Введение

Численное моделирование ускорения фронта пламени в канале — сложная задача, требующая рассмотрения стадий зажигания, ламинарного горения, развития неустойчивости пламени, возникновения турбулентности в свежей смеси, взаимодействия пламени с турбулентным течением и т. д. В настоящее время существует большое количество математических моделей горения, как ламинарного, так и турбулентного. В двух предельных режимах, соответствующих бесконечно большой скорости химических реакций и бесконечно быстрому смешению продуктов горения со свежей смесью, моделирование турбулентного горения в гомогенных газовых смесях не вызывает принципиальных сложностей. Однако на практике такие предельные режимы горения реализуются редко: как правило, характерные масштабы времени процесса смешения и химических превращений в турбулентных пламенах близки по порядку величины.

При расчете средней скорости химических превращений при турбулентном горении необходимо, вообще говоря, учитывать взаимное влияние турбулентных пульсаций скорости течения и химической кинетики. Для этого используют либо статистические модели, основанные на функциях плотности распределения вероятностей (ФПРВ) разных параметров течения [1], либо модели микроламинарных

пламен (МП), основанные на представлении фронта горения в виде набора элементарных площадок ламинарного пламени в турбулентном поле течения [2, 3]. Существует целый класс моделей МП с выделением фронта пламени [4–10].

Для применения современных математических моделей гомогенного горения в практических расчетах требуются многопроцессорные вычислительные комплексы, позволяющие сократить расчетное время до приемлемого уровня. В связи с этим весьма актуальна задача разработки быстрых алгоритмов расчета, позволяющих с достаточной точностью моделировать гомогенное горение в многомерном турбулентном потоке. Цель данной работы — создание эффективного вычислительного алгоритма для моделирования начальной стадии процесса ПГД в газах, основанного на методе явного выделения фронта пламени.

### Модель выделения фронта пламени

Для моделирования гомогенного горения газов нами разработан алгоритм явного выделения фронта пламени в турбулентном потоке. Суть алгоритма заключается в следующем. При заданной начальной геометрической форме очага горения поверхность, отделяющая свежую смесь от продуктов горения, представляется в виде набора элементарных площадок турбулентного или ламинарного пламени.

В турбулентном потоке каждая площадка фронта пламени движется со скоростью, равной сумме нормальной скорости горения и локальной скорости течения. Нормальная скорость горения определяется по одной из известных моделей турбулентного пламени и зависит от локальной скорости ламинарного горения и локальных параметров турбулентности. Локальная скорость течения и параметры турбулентности определяются из решения системы осредненных уравнений течения методом контрольных объемов с использованием специальной процедуры интерполяции. Вследствие того что поле течения нестационарное и неоднородное, очаг горения деформируется. Непрерывность фронта горения обеспечивается системой эвристических правил, исключающих из рассмотрения невероятные конфигурации пламени. Важную роль в реализации алгоритма играют электронные таблицы скорости ламинарного горения как функции начальных температуры, давления и состава смеси. Такие таблицы составляются на основе решения задачи о структуре плоского ламинарного пламени с использованием как детальных, так и полуэмпирических кинетических механизмов. Кроме того, таблицы содержат информацию о концентрационных пределах распространения пламени.

Отличие от других методов выделения фронта пламени, когда для определения плотности поверхности пламени решаются дополнительные уравнения в частных производных (например, G-уравнение), в нашей модели фронт пламени выделяется явно. Предполагается, что толщина элемента фронта пламени бесконечно мала по сравнению с характерным размером расчетной ячейки и все химические превращения сосредоточены во фронте, который отделяет продукты горения от свежей смеси. Результаты апробации описанной выше “подсеточной” модели выделения фронта пламени впервые изложены в [11], а затем — в [12, 13].

### Расчет скорости ламинарного пламени

Для составления электронных таблиц скорости ламинарного пламени  $u_n$  как функции начальных температуры, давления и состава смеси предварительно решается задача о распространении стационарного одномерного ламинарного пламени в однородной газовой смеси. Структура фронта описывается системой дифференциальных уравнений теплопроводности и диффузии:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - c \rho_0 u_n \frac{\partial T}{\partial x} + \Phi = 0;$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \rho D_j \frac{\partial Y_j}{\partial x} \right) - \rho_0 u_n \frac{\partial Y_j}{\partial x} + w_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (1)$$

где  $x$  — продольная координата, нормальная к фронту пламени;  
 $\lambda$  — коэффициент теплопроводности;  
 $T$  — температура;  
 $c$  — теплоемкость при постоянном давлении;  
 $\rho_0$  — плотность газа перед фронтом пламени;  
 $\Phi$  — скорость энерговыделения вследствие химических реакций;  
 $\rho$  — плотность;  
 $D_j$  — коэффициент молекулярной диффузии;  
 $Y_j$  — массовая доля  $j$ -го компонента смеси;  
 $N$  — количество веществ, участвующих в реакциях;  
 $w_j$  — скорость изменения концентрации  $j$ -го компонента смеси в  $i$ -й реакции:

$$w_j = G_j \sum_{i=1}^M (v'_{ij} - v_{ij}) A_i T^{n_i} \times \exp \left( - \frac{E_i}{R^0 T} \right) \prod_{k=1}^N \left( \frac{\rho Y_k}{G_k} \right)^{v_{ik}}, \quad j = 1, 2, \dots, N; \quad (2)$$

$G_j, G_k$  — молекулярная масса  $j$ -го и  $k$ -го компонентов смеси соответственно;  
 $M$  — полное количество химических реакций, протекающих в смеси;  
 $v_{ij}$  и  $v'_{ij}$  — стехиометрические коэффициенты соответственно для реагентов и продуктов реакции;  
 $A_i, E_i$  и  $n_i$  — предэкспоненциальный множитель, энергия активации и показатель степени при температуре в законе Аррениуса соответственно;  
 $R^0$  — универсальная газовая постоянная.

Система уравнений (1) замыкается кинетическим механизмом окисления горючего и уравнением состояния смеси:

$$p = \rho R^0 T \sum_{j=1}^M \frac{Y_j}{G_j}, \quad (3)$$

где  $p$  — давление.

Для системы уравнений (1) задаются граничные условия:

$$x \rightarrow -\infty, \quad T = T_0, \quad Y_j = Y_{j0} \quad (j = 1, 2, \dots, N);$$

$$x \rightarrow \infty, \quad dT/dx = 0, \quad dY_j/dx = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, N).$$

Задача решается численно с помощью вычислительной программы, разработанной в ИХФ РАН. В качестве примера в табл. 1 приведены расчетные значения скорости ламинарного пламени (см/с) для стехиометрической пропановоздушной смеси при разных давлениях (от 0,1 до 10 МПа) и начальных температурах (от 300 до 900 К). В расчетах использовали формальный кинетический механизм окисления пропана [14]. Полученные данные используются для построения электронных таблиц. Для расчета значений нормальной скорости горения при промежуточных значениях давления и температуры

**Таблица 1.** Скорости горения стехиометрической пропановоздушной смеси (см/с)

Давление, МПа	Начальная температура, К				
	300	450	600	750	900
0,1	39	78	143	247	451
0,3	28	55	102	178	306
1,0	19	35	64	112	191
4,0	8,9	19	36	62	105
10,0	6,0	13	24	41	69

свежей смеси использовали линейную интерполяцию данных, представленных в табл. 1.

### Расчет скорости турбулентного пламени

Известно, что турбулентные пульсации искривляют фронт пламени. Искривление фронта приводит в свою очередь к увеличению нормальной (турбулентной) скорости распространения фронта горения. В нашем методе искривленная поверхность пламени представляется элементами усредненного фронта, скорость перемещения каждого из которых складывается из нормальной скорости турбулентного горения  $u_T$  и локальной средней скорости потока.

В литературе существует множество полуэмпирических формул для расчета скорости турбулентного пламени. Классический пример — формула Щелкина:

$$u_T \approx u_n \sqrt{1 + u'^2 / u_n^2},$$

где  $u'$  — локальная интенсивность турбулентности.

Таким образом, при рассмотрении турбулентного горения вместо скорости ламинарного пламени  $u_n$  используется величина  $u_T$ . Более того, применение формул типа (5) дает асимптотический переход от турбулентного к ламинарному режиму горения в отсутствие турбулентности ( $u' \rightarrow 0, u_T \rightarrow u_n$ ). Это одно из преимуществ модели, которое допускает ее использование для расчета как начальной стадии распространения фронта пламени (когда пламя ламинарное), так и стадии последующего ускорения пламени (когда пламя искривляется турбулентными пульсациями). Отметим также, что модель не имеет подгоночных параметров, что является еще одним ее достоинством.

### Результаты расчетов

На основе описанного алгоритма явного выделения фронта пламени проведены двумерные расчеты горения стехиометрической пропановоздушной смеси в гладких трубах и в трубах с регулярными препятствиями. Алгоритм внедрен в вычисли-

тельную программу AVL FIRE [15]. Для определения локальной мгновенной скорости ламинарного пламени  $u_n$  использовались данные табл. 1 и метод линейной интерполяции. Локальную мгновенную скорость турбулентного пламени определяли по формуле (5). Параметры турбулентности, включая  $u_n$ , рассчитывали по стандартной  $k$ - $\epsilon$ -модели.

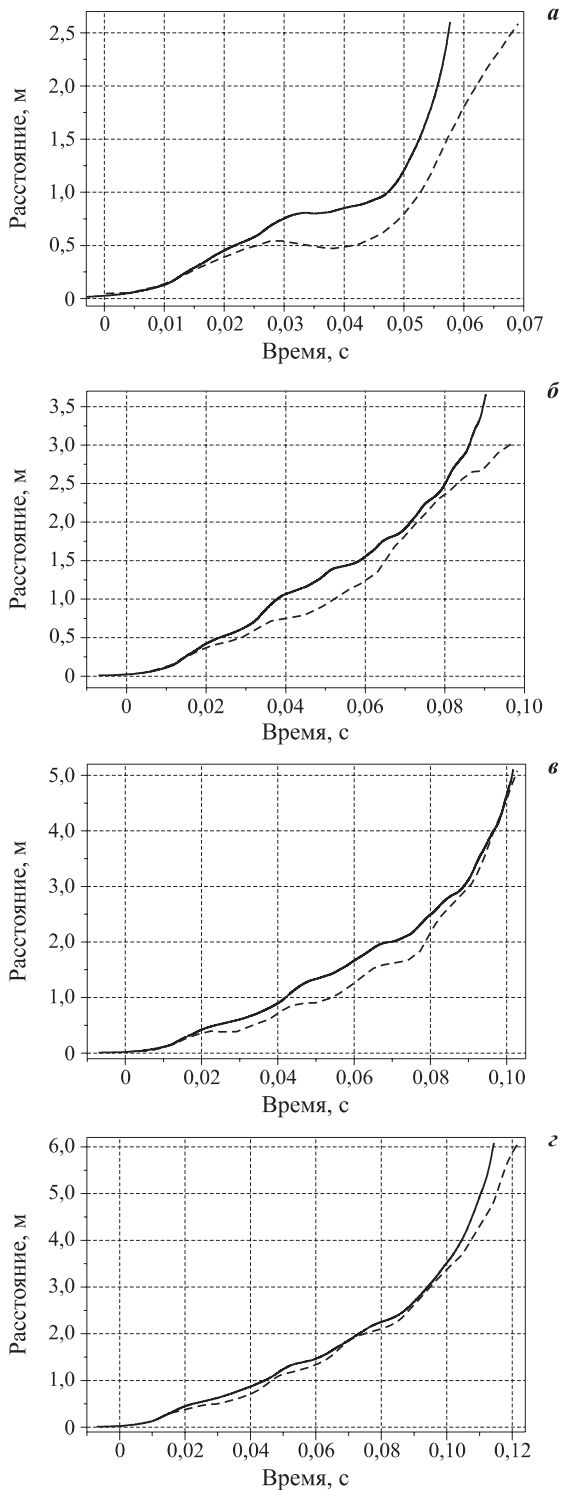
Были проведены две серии расчетов.

Расчеты первой серии основаны на экспериментальной работе [16], в которой исследовалось распространение пропановоздушного пламени в гладких трубах квадратного сечения со стороной 40 мм разной длины (2,6; 3,6; 5,1 и 6,1 м) с одним открытым и одним закрытым концом при нормальных начальных условиях. Для зажигания смеси использовали нагреваемую проволочку [16]. В опытах, описанных в [16], в начальный момент времени смесь покоилась.

В плоских двумерных расчетах температуру стенки трубы считали постоянной и равной 300 К. На открытом конце трубы использовали условия постоянного статического давления (0,1 МПа). Начальный очаг фронта пламени был представлен в виде круга радиусом 1 мм, расположенного на расстоянии 1 см от закрытого конца трубы на оси симметрии (в соответствии с [16]). В расчетах использовали однородную структурированную сетку с размером ячеек 2 мм. В каждой расчетной ячейке фронт пламени описывали не менее чем 15 элементами.

На рис. 1 представлено сравнение расчетных и экспериментальных зависимостей пройденного пламенем расстояния от времени. Как и в экспериментах [16], в качестве характерной точки на фронте пламени выбирали лидирующую точку фронта пламени. Несмотря на то что двумерный расчет распространения фронта пламени по каналу квадратного сечения не может претендовать на точное отражение реальной трехмерной структуры течения, видно удовлетворительное согласие расчетов с экспериментальными данными. Важно то, что расчет дает правильное качественное и удовлетворительное количественное описание движения фронта пламени от закрытого конца трубы к открытому и учитывает взаимодействие пламени с возникающими волнами разрежения и сжатия.

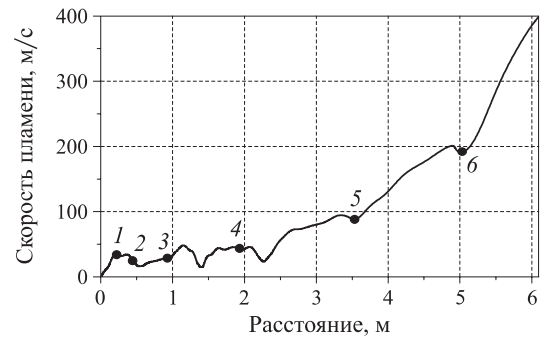
При дифференцировании расчетных кривых, представленных на рис. 1, можно получить зависимости видимой скорости фронта пламени от времени. Например, на рис. 2 показана расчетная зависимость видимой скорости пламени от пройденного расстояния для трубы длиной 6,1 м. Видно, что ближе к открытому концу трубы видимая скорость пламени достигает 400 м/с. Ускорение фронта пламени не монотонно. Локальные максимумы и минимумы на рис. 1 соответствуют взаимодействию фронта



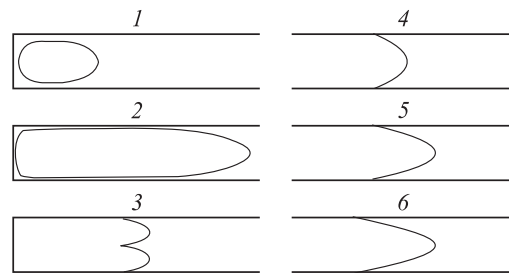
**Рис. 1.** Сравнение расчетных (сплошная кривая) и экспериментальных [16] (пунктир) зависимостей расстояния, пройденного пламенем в гладких трубах квадратного сечения длиной 2,6 (а), 3,6 (б), 5,1 (в) и 6,1 м (г)

пламени с волнами сжатия и разрежения. Эти волны возникают вследствие отражений от закрытого и открытого концов трубы волн давления, формирующихся при ускорении фронта пламени.

Взаимодействие пламени с волнами сжатия и разрежения влияет не только на его движение, но и



**Рис. 2.** Расчетная зависимость видимой скорости фронта пламени от пройденного расстояния: 1–6 — положения пламени с различными формами фронта (см. рис. 3)



**Рис. 3.** Форма фронта пламени в точках, отмеченных на рис. 2

на изменение его осредненной формы. На рис. 3 представлены формы фронта пламени при его распространении по трубе длиной 6,1 м. Координата и скорость фронта, при которых фиксировалась форма пламени, указаны цифрами на рис. 2. Особый интерес вызывает тюльпанообразная форма фронта в точке 3, которая наблюдалась в экспериментах, описанных в [16] и других работах. Такая форма пламени возникает после первого взаимодействия с волной сжатия, отраженной от открытого конца трубы, когда видимая скорость пламени достаточно мала. Образование такой формы пламени вызвано неоднородным распределением турбулентности по сечению трубы. Турбулентность около стенок выше и, следовательно, выше скорость турбулентного горения. В результате точки фронта пламени вблизи стенок перемещаются быстрее и обгоняют точку фронта в центре канала.

Расчеты второй серии основаны на экспериментальной работе [17], в которой исследовалось распространение пропановоздушного пламени в цилиндрической трубе круглого сечения диаметром 15,2 см и длиной 3,1 м с регулярными кольцевыми препятствиями, с одним открытым и одним закрытым концом при нормальных начальных условиях. В качестве препятствий в экспериментах использовались кольца со степенью затенения сечения 0,43; 0,6 и 0,75. Степень затенения определяли как отношение площади препятствия к площади поперечного

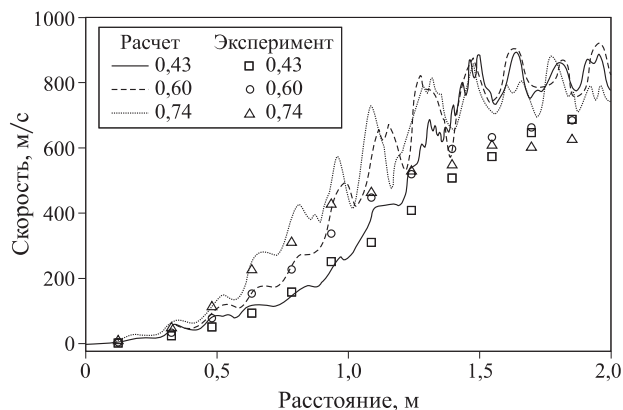


сечения трубы. Для зажигания стехиометрической пропановоздушной смеси использовался слабый искровой разряд [17]. В опытах, описанных в [17], в начальный момент времени смесь покоилась и находилась в нормальных условиях.

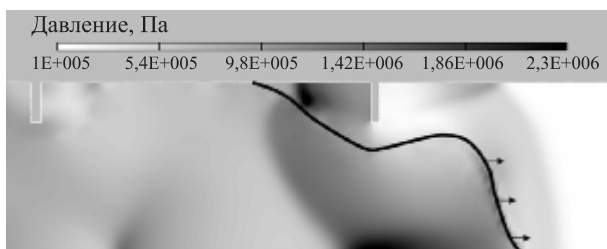
Для двумерного осесимметричного численного моделирования условий опытов [17] использовали те же настройки, что и в первой серии расчетов, в частности применяли однородную структурированную сетку с размером ячеек 2 мм. На рис. 4 представлено сравнение экспериментальных и расчетных зависимостей скорости фронта пламени от пройденного расстояния для трех значений степени затенения сечения препятствиями при шаге установки препятствий, равном диаметру трубы.

Из рис. 4 видно, что результаты расчетов удовлетворительно согласуются с экспериментальными наблюдениями. Очень хорошее согласие наблюдается на начальном участке ускорения пламени до 300–400 м/с. Пламя ускоряется до скорости 800–900 м/с, что соответствует адиабатической скорости звука в продуктах горения (около 890 м/с). На начальной стадии ускорение пламени более эффективно в трубе с препятствиями большего размера. Это связано с более высоким уровнем турбулентных пульсаций, возникающих около препятствий. Однако с увеличением скорости пламени возрастают потери импульса на препятствиях, и ускорение пламени при более высоких степенях затенения сечения замедляется. Колебания скорости распространения фронта пламени связаны с сужением (увеличение скорости) потока около препятствий и его расширением (уменьшение скорости) между препятствиями.

Одно из важнейших явлений, представляющее большой интерес для взрывобезопасности, — самовоспламенение смеси перед фронтом пламени и переход горения в детонацию. На рис. 5 представлено расчетное распределение давления в окрестности



**Рис. 4.** Сравнение расчетных (кривые) и экспериментальных (точки) зависимостей видимой скорости фронта пламени от пройденного расстояния



**Рис. 5.** Расчетное распределение давления в окрестности фронта пламени, распространяющегося со скоростью около 700–800 м/с

фронта пламени, распространяющегося со скоростью около 700–800 м/с. На рис. 5 изображена лишь половина продольного сечения трубы, т. е. нижняя граница соответствует оси симметрии. Хорошо видны лидирующая и отраженная от препятствий ударные волны. Обращает на себя внимание тот факт, что лидирующая ударная волна находится на очень малом расстоянии от фронта пламени, что затрудняет самовоспламенение в ударно-сжатом газе и переход в детонацию. Однако самовоспламенение возможно при отражении ударной волны от препятствия — механизм, неоднократно обсуждавшийся в литературе [18].

### Выводы

Разработан эффективный вычислительный алгоритм многомерного моделирования начальной стадии процесса перехода горения в детонацию в газах, который основан на методе явного выделения фронта пламени. Проведены двумерные расчеты ускорения пламени в стехиометрической пропановоздушной смеси в гладких трубах и в трубах с регулярными препятствиями. Получено удовлетворительное согласие результатов расчетов с известными экспериментальными данными по зависимостям скорости пламени от времени и от пройденного расстояния как для гладких труб, так и для труб с регулярными кольцевыми препятствиями разной высоты и с разным шагом установки. Расчет распространения пламени в гладкой трубе показал, что метод выделения фронта пламени дает правильное качественное и удовлетворительное количественное описание движения фронта пламени от закрытого конца трубы к открытому и учитывает взаимодействие пламени с возникающими волнами разрежения и сжатия. Расчеты показали также, что метод выделения фронта пламени позволяет отслеживать изменения его формы вследствие взаимодействий с волнами давления. Расчеты распространения фронта пламени в трубах с регулярными препятствиями показали, что ударная волна находится на очень малом расстоянии от фронта пламени. Таким образом, переход горения в детонацию в рассмотренных конфигурациях трубы маловероятен.

Работа выполнена в рамках государственных контрактов № П502 “Разработка методов численного моделирования нестационарного горения и детонации газов и капельных смесей в каналах сложной геометрии и полуграниченных объемах для применения в импульсно-детонационных энер-

гетических установках” и № 02.516.12.6026 “Разработка процесса импульсного детонационного горения природного газа для повышения эффективности работы энергетических установок”, а также при частичной поддержке РФФИ (проект 08-08-00068).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Pope, S. B.** Computation of turbulent combustion: progress and challenges / S. B. Pope // Proc. Comb. Inst. — 1990. — Vol. 23.
2. **Unverdi, S. O.** A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows / S. O. Unverdi, G. Tryggvason // Journal of Computational Physics. — May 1992. — Vol. 100, Issue 1. — P. 25–37.
3. **Chern, I.-L.** Front tracking for gas dynamics / I.-L. Chern, J. Glimm, O. McBryan, B. Plohr, S. Yaniv // Journal of Computational Physics. — January 1986. — Vol. 62, Issue 1. — P. 83–110.
4. **Aulisa, E.** A mixed markers and volume-of-fluid method for the reconstruction and advection of interfaces in two-phase and free-boundary flows / E. Aulisa, S. Manservigi, R. Scardovelli // Journal of Computational Physics. — July 2003. — Vol. 188, Issue 2, 1. — P. 611–639.
5. **Aulisa, E.** A surface marker algorithm coupled to an area-preserving marker redistribution method for three-dimensional interface tracking / E. Aulisa, S. Manservigi, R. Scardovelli // Journal of Computational Physics. — July 2004. — Vol. 197, Issue 2, 1. — P. 555–584.
6. **Haldenwang, P.** Dynamically adapted mesh refinement for combustion front tracking / P. Haldenwang, D. Pignol // Computers & Fluids. — 2002. — Vol. 31. — P. 589–606.
7. **Chord, R.** An efficient particle-locating algorithm for application in arbitrary 2D and 3D grids / R. Chord, J. A. Blasco, N. Fueyo // International Journal of Multiphase Flow. — 2002. — Vol. 28. — P. 1565–1580.
8. **Barrero, D.** A physics based multi-resolution model for the simulation of turbulent gases and combustion. IRIT / D. Barrero, M. Paulin, R. Caubet.
9. **Schmidt, H.** A generalized level-set / in-cell-reconstruction approach for accelerating turbulent premixed flames / H. Schmidt, R. Klein // Combust. Theory Modeling. — 2003. — Vol. 7. — P. 243–267.
10. **Arntzen, B. J.** Modeling of gas explosions in complex geometries using the Simple Interface Flame model, SIF / B. J. Arntzen // 7th Symp. (Intern.) on hazards, prevention, and mitigation of industrial explosions. — St. Petersburg, July 7–11, 2008. — Vol. 1. — P. 255–264.
11. **Иванов, В. С.** Модель горения газов с выделением фронта пламени / В. С. Иванов, В. Я. Басевич, С. М. Фролов // XIV Симпозиум по горению и взрыву : тез. докл. — Черногловка : Изд-во ИПХФ РАН, 2008. — С. 73.
12. **Frolov, S. M.** Tracking of propagating turbulent flames and autoignition in enclosure / S. M. Frolov, V. S. Ivanov, V. A. Smetanyuk, B. Basara // Proc. XXII YUMV International Automotive Conference with Exhibition “Science and Motor Vehicles”. — Belgrade, April 14–16, 2009. — P. 1–9.
13. **Frolov, S. M.** Numerical simulation of propane-air turbulent flame acceleration in straight tubes of different length / S. M. Frolov, V. S. Ivanov, V. A. Smetanyuk, B. Basara, M. Suffa // Nonequilibrium Phenomena: Plasma, Combustion, Atmosphere / Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov, A. M. Starik. — Moscow : Torus Press, 2009. — P. 356–365.
14. **Basevich, V. Ya.** Global kinetic mechanisms developed for modeling multistage autoignition of hydrocarbons in reactive flows / V. Ya. Basevich, S. M. Frolov // Russian Journal of Chemical Physics. — 2006. — Vol. 25, No. 6. — P. 54–62.
15. FIRE Users Manual Version (v2008). — AVL List GmbH Graz, Austria, 2008.
16. **Kerampran, S.** Influence of the pressure waves generated at the initial stage of flame propagation on the DDT process in smooth tubes / S. Kerampran, D. Desbordes, B. Veyssiere // Confined detonations and pulse detonation engines / Eds. Roy, Frolov, Santoro, Tsyganov. — Moscow : Torus Press, 2003. — P. 3–16.
17. **Ciccarelli, G.** Effects of obstacle size and spacing on the initial stage of flame acceleration in an obstacle laden tube / G. Ciccarelli, C. J. Fowler, M. Bardon // Proc. 19th International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS). — Hakone, Japan, July 27 – August 1, 2003.
18. **Фролов, С. М.** Быстрый переход горения в детонацию / С. М. Фролов // Химическая физика. — 2008. — Т. 27, № 6. — С. 31–44.

Материал поступил в редакцию 5 ноября 2009 г.  
© Иванов В. С., Фролов С. М., 2010 г.  
(e-mail: ivanov.vls@gmail.com).