

Влияние дисперсных капель воды на ускорение пламени и переход к детонации

И. С. Яковенко, А. Л. Котельников и А. Д. Киверин

Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

E-mail: yakovenko.iivan@bk.ru

Статья поступила в редакцию 3 декабря 2022 г.

Аннотация. В работе представлены результаты численного анализа задачи об ускорении пламени и переходе к детонации в газовых смесях и газозвесьях, содержащих дисперсные микрокапли воды. Рассмотрены механизмы воздействия микрокапель на динамику развития процесса ускорения пламени в смесях на основе водорода. Показано, что топология фронта пламени, формируемая в ходе его ускорения в каналах, определяет особенности влияния капель на эволюцию волны горения. Так, ввиду особенностей структуры поверхности ускоряющегося в канале пламени, траектории взвешенных в газовой смеси микрокапель воды проходят тангенциально поверхности фронта, тем самым значительно увеличивается время их пребывания в зоне реакции и усиливаются ингибирующие эффекты. Кроме того, в условиях горения в канале, генерация возмущений на фронте пламени при взаимодействии с каплями ведет к уменьшению площади его поверхности и соответствующему торможению. <https://doi.org/10.33849/2022209>

1. ВВЕДЕНИЕ

Задачи современной энергетики, связанные с обеспечением эффективного, безопасного и экологичного сжигания топлив имеют принципиальное значение для дальнейшего развития отрасли. Одним из наиболее важных направлений, требующих как фундаментального, так и практического анализа, является разработка новых, комбинированных видов топлива и изучение процессов горения в сложных многокомпонентных и многофазных системах в целом. Так, среди перспективных топливных систем стоит выделить водонасыщенные топлива, которые возможно утилизировать в форме вспененных эмульсий [1] и микропен [2], пузырьковые жидкости [3, 4], угольные суспензии [5]. Процесс горения топлив в присутствии капель воды также применяется в двигателях внутреннего сгорания, где с помощью впрыска воды совместно с топливной смесью удается подавить детонационные процессы и обеспечить дополнительное охлаждение камеры сгорания [6, 7]. Также необходимо отметить, что распыление диспергированной воды является одним из наиболее эффективных способов подавления процессов горения и является распространенной основой систем пожаротушения [8].

Важно отметить, что влияние капель воды на процесс горения не всегда является однозначным. Так, эксперимент показывает, что при определенных условиях добавление капель воды в горючую газовую смесь обеспечивает гашение дефлаграционных и детонационных режимов горения [9, 10], снижает интенсивность взрывных волн [11], снижает темпы нарастания скорости и замедляет процесс перехода горения в детонацию в процессе ускорения пламени [12]. В то же время, в некоторых случаях впрыск капель воды может приводить к интенсификации горения. Так, согласно [13], генерация направленных потоков капель воды связана с формированием турбулентных потоков в газовой среде, что может привести к ускорению развития горения. Наличие в смеси взвешенных капель может быть причиной турбулизации потока перед ускоряющимся фронтом пламени и в том случае, когда капли изначально покоятся [14]. Другим важным фактором является непосредственное

взаимодействие между каплями воды и фронтом горения. При прохождении волны горения через среду с взвешенными каплями жидкости или инертными микрочастицами поверхность фронта горения локально деформируется. В результате эффективная площадь поверхности фронта пламени увеличивается, что приводит к его ускорению [15, 16]. Как было показано ранее в работе [17] этот механизм тесно связан с развитием естественной неустойчивости фронта пламени. Так, совместный рост гидродинамической и термодиффузионной неустойчивостей при горении в цилиндрической камере, заполненной обедненной смесью водорода с воздухом, интенсифицируется в присутствии капель воды, что приводит к более быстрому развитию поверхности фронта горения и, как следствие, сгоранию смеси в объеме [18]. При этом важно отметить, что характер влияния взвешенной фазы меняется в зависимости от размера капель и расстояния между ними. Для небольших капель реализуется сценарий с полным их испарением на масштабах зоны реакции. В этом случае капли эффективно ингибируют процесс горения, а процессы, связанные с потерями импульса потока и деформацией поверхности фронта пламени, не являются первостепенными. В свою очередь, крупные капли испаряются медленнее и обладают большей инерцией. В результате, взаимодействие крупных капель с фронтом горения определяет интенсивную генерацию возмущений на его поверхности и существенные потери импульса потока, в то время как процесс испарения капель реализуется уже после их прохождения в область продуктов горения. Данные механизмы интенсификации горения крупными каплями воды могут быть причиной формирования высокоинтенсивных режимов горения во вспененных эмульсиях [19, 20] и должны быть учтены при разработке новых топлив и надежных систем пожаро- и взрывобезопасности.

Особенности нестационарного развития горения в каналах и трубах, заполненных высокоактивными газовыми смесями, могут существенно влиять на характер воздействия капель на эволюцию процесса. В связи с этим, настоящее исследование направлено на изучение методами численного анализа эффектов, обуслов-

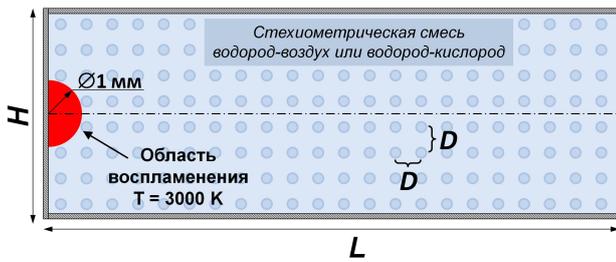


Рисунок 1. Постановка задачи о нестационарном распространении пламени в канале, заполненном газовой смесью на основе водорода с добавлением взвешенных микрокапель воды. Штрих-пунктирная линия — ось симметрии.

ленных наличием взвешенных микрокапель воды в химически активной газовой смеси на процессы ускорения пламени и перехода к детонации.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим процессы нестационарного распространения пламени в каналах, заполненных химически активными газовыми смесями на основе водорода, как чистых, так и в присутствии дисперсных капелек воды. Будем рассматривать стехиометрические смеси водорода с кислородом и воздухом. В качестве управляющих параметров зададим ширину канала, размер капелек воды, начальное расстояние между каплями и их распределение в пространстве. Постановка задачи схематически изображена на рисунке 1. Каналы шириной $H = 10$ мм и длиной 0.15 м или шириной 20 мм и длиной $L = 0.3$ м заполнены предварительно перемешанной стехиометрической газовой смесью водорода с кислородом или водорода с воздухом соответственно при нормальных условиях (при температуре 300 К и давлении 1 атм). В канале задано распределение микрокапель воды диаметром $d_d = 10, 50, 100, 200$ мкм, начальное расстояние между каплями характеризуется параметром $D = 0.25, 0.5, 1.0$ мм. В начальный момент времени горение инициируется точечным источником, мгновенно изобарически нагревающим смесь до температуры 3000 К вблизи закрытого торца канала. В результате формируется волна горения, распространяющаяся от левого закрытого торца к открытой правой границе. На стенках канала заданы условия прилипания потока и постоянной температуры (изотермические стенки с температурой $T_{wall} = 300$ К).

Моделирование газодинамических потоков выполнено на основе полной системы уравнений Навье–Стокса для вязкой сжимаемой среды с учетом эффектов теплопроводности, многокомпонентной диффузии и химических превращений. Для нахождения численного решения рассматриваемой системы была использована современная бездиссипативная методика КАБАРЕ [21], адаптированная для решения задач газодинамики горения и прошедшая тщательную валидацию и верификацию на специально разработанном наборе тестовых задач физики горения [22]. Химическая кинетика окисления водорода моделировалась с использованием современной схемы [23], включающей 21 химическую реакцию между 8 активными элементарными компонентами. Расчеты проводились в двухмерной постановке, нижняя граница расчетной области представляла собой

ось симметрии. Размер ячейки расчетной сетки составлял 100 мкм. Проведение расчетов выполнялось на базе разрабатываемой в ОИВТ РАН программной платформы вычислительной газодинамики с открытым исходным кодом NRG [24].

Динамика индивидуальных капелек воды описывалась в лагранжевом приближении, с учетом нагрева, испарения и межфазных взаимодействий. Коэффициент сопротивления сферической капли рассчитывался в приближении Шиллера–Наумана [25]. Система уравнений динамики, нагрева и фазовых превращений капелек решалась с применением алгоритма, приведенного в работе [26].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Процесс горения в горючих газовых смесях, содержащих капли воды, сопровождается локальными взаимодействиями между каплями, газодинамическими течениями и фронтом горения [27]. При этом, как показывают экспериментальные [15] и расчетные исследования [17, 18], в определенных условиях капли воды могут оказывать интенсифицирующее влияние на процесс горения. В случае изначально покоящихся капелек основным механизмом интенсификации выступает локальная деформация поверхности пламени при прохождении волны горения через массив капелек. Важно отметить, что в работах [15, 17, 18] рассматриваемые эффекты наблюдались в газовых смесях с малой химической активностью, где развитие процесса горения не сопровождается интенсивным самопроизвольным ускорением. При этом, особенности нестационарной эволюции пламени высокоактивных газовых смесей в ограниченном пространстве, каналах и трубах, могут иметь принципиальное влияние на интегральные эффекты, связанные с наличием в среде взвешенных капелек. Рассмотрим процессы ускорения пламени и последующего перехода к детонации на примере стехиометрической водород-кислородной смеси. На рисунке 2 представлена структура ускоряющегося фронта пламени вплоть до перехода к детонации в момент времени $t = 484$ мкс. В случае стехиометрической водород-кислородной смеси фронт горения на всем протяжении процесса ускорения представляет собой характерную вытянутую вдоль оси канала структуру (“finger flame”). При этом распределение скорости потока свежей смеси, выталкиваемой расширяющимися продуктами горения, имеет U-образную форму, с максимумом в ядре потока и минимумом вблизи стенок канала, где торможение газа обусловлено вязким трением о боковые стенки. Именно обратная связь между ускорением потока и растяжением пламени обуславливает механизм перехода от медленного горения к детонации в высокоактивной смеси водорода с кислородом [27].

На рисунке 3 представлены характерные структуры фронта пламени в случае газовой смеси без примесей и в присутствии микрокапель воды разного размера. В присутствии капелек воды в смеси боковая поверхность пламени насыщается возмущениями, которые ускоряют движение пламени в поперечном направлении канала. Тем самым, влияние капелек снижает роль естественного механизма растяжения фронта горения вдоль оси канала, что в случае ограничения поверхности пламени стенками канала определяет уменьшение его эффективной площади. Также, ввиду растяжения пламени вдоль оси

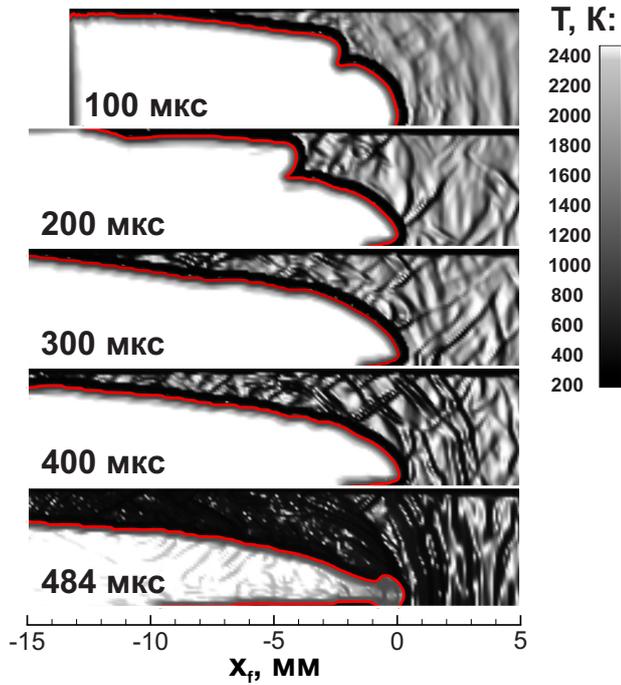


Рисунок 2. Эволюция волны горения в стехиометрической водород-кислородной смеси в канале шириной 10 мм в системе координат, связанной с положением ведущей точки фронта пламени x_f (нижняя граница — ось симметрии). Красной линией изображена изотерма 1500 К.

канала, траектории капель проходят вдоль поверхности пламени, а не по нормали к ней, как это происходит в случае свободного распространения пламени от точечного источника (см. рисунок 4). В результате, способность капель генерировать возмущения на поверхности фронта существенно снижается. При этом время пребывания капель в зоне реакции наоборот, увеличивается по сравнению со случаем свободно расходящегося пламени. Таким образом, ингибирующие эффекты, связанные с разбавлением смеси инертными парами воды и отводом теплоты на испарение на масштабах зоны реакции начинают играть принципиальную роль, как для капель небольшого размера, так и более крупных капель.

На рисунке 5 приведены хронограммы скорости ведущей точки фронта пламени $U_{f,L}$. Исходя из представленной на рисунке 5(a) динамики развития процесса в случае капель различного начального размера, расположенных на расстоянии 1 мм друг от друга, можно заключить, что присутствие капель препятствует ускорению пламени во всем рассмотренном диапазоне размеров капель (d_d). При этом капли практически не оказывают влияния на начальную стадию процесса, в ходе которой скорость ведущей точки нарастает экспоненциально во времени [28]. Далее распространение пламени приобретает квазистационарный характер, и волна горения распространяется со средней скоростью, близкой к полученной в результате ускорения на начальной стадии и составляющей величину порядка нескольких сотен метров в секунду. При уменьшении начального расстояния между каплями (увеличении массовой концентрации капель в единице объема) начинают падать темпы нарастания скорости волны горения на экспоненциальной стадии (рисунок 5(b)), что ведет также к сниже-

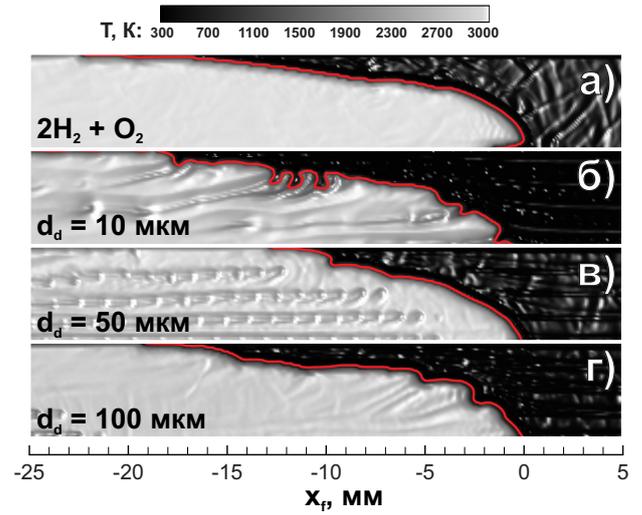


Рисунок 3. Характерные структуры фронта пламени в канале шириной 10 мм в системе координат, связанной с положением ведущей точки фронта пламени x_f (нижняя граница — ось симметрии). а) Стехиометрическая смесь водорода с кислородом без примесей $t = 300$ мкс; б) с добавлением капель воды диаметром $d_d = 10$ мкм $t = 375$ мкс; в) с добавлением капель воды диаметром $d_d = 50$ мкм $t = 360$ мкс; г) с добавлением капель воды диаметром $d_d = 100$ мкм $t = 320$ мкс. Расстояние между каплями — 1 мм. Красной линией изображена изотерма 1500 К.

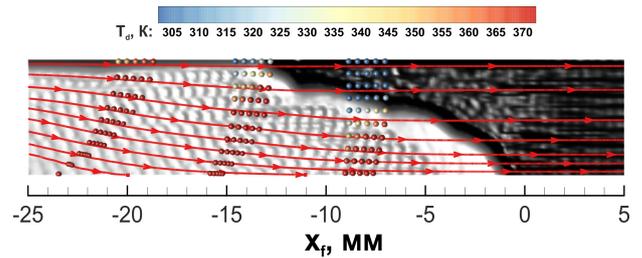


Рисунок 4. Динамика капель в ходе процесса ускорения пламени. Представлены положения капель на моменты времени 270–290 мкс с интервалом 5 мкс. Красными кривыми даны траектории капель. Структура фронта горения водород-кислородной смеси в канале шириной 10 мм приведена на момент времени 280 мкс.

нию средней скорости дальнейшего квазистационарного распространения пламени. Однако, исходя из полученных результатов, снижение начального расстояния между каплями с $D = 0.5$ мм до $D = 0.3$ мм уже не дает дополнительного торможения волны горения.

Развитие горения в менее химически активной стехиометрической смеси водорода с воздухом имеет качественные отличия от рассмотренного выше процесса ускорения пламени в смеси водорода с кислородом. На рисунке 6 представлена последовательность картин течения в стехиометрической водородно-воздушной смеси в канале шириной 20 мм в различные моменты времени. Здесь в ходе процесса ускорения пламени структура фронта претерпевает существенные изменения. Так, на начальных стадиях фронт вытягивается в потоке вдоль оси канала, аналогично тому как это происходит в стехиометрической смеси водорода с кислородом. Однако далее происходит трансформация структуры фрон-

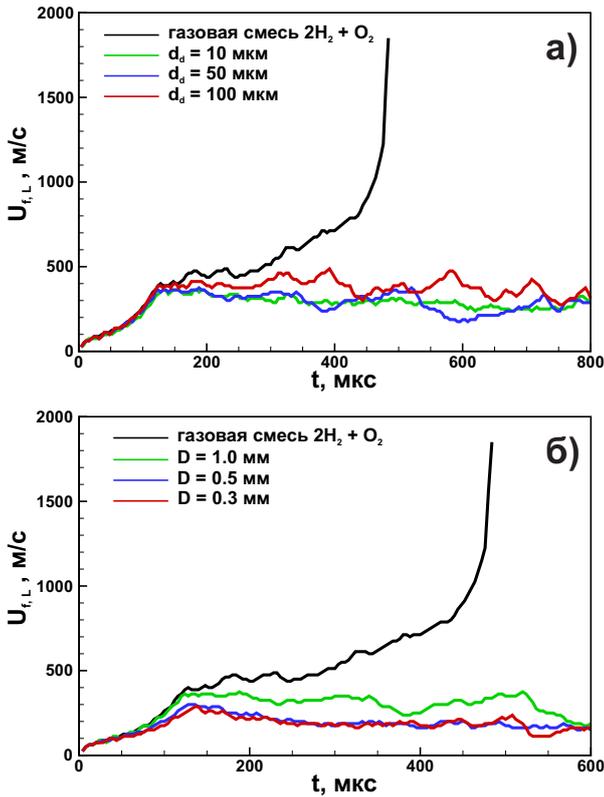


Рисунок 5. Хронограммы скорости ведущей точки фронта пламени $U_{f,L}$. а) влияние размера капель для начального расстояния между каплями 1 мм; б) влияние начального расстояния между каплями для начального размера капель 50 мкм.

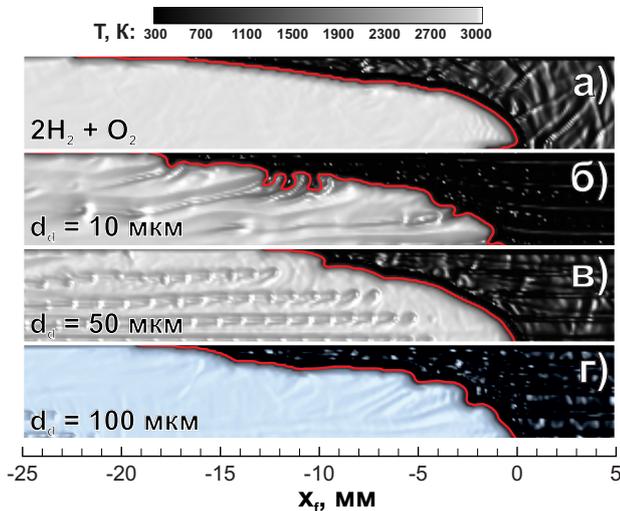


Рисунок 6. Характерные структуры фронта пламени стехиометрической смеси водород–воздух в канале шириной 20 мм (нижняя граница — ось симметрии). Красной линией изображена изотерма 1000 К.

та в так называемую тюльпанообразную форму (“tulip flame”). В ходе этой трансформации фронт горения занимает все сечение канала и становится практически плоским и далее вытягивается вдоль стенок. Перестройка структуры фронта горения отражается на динамике скорости ведущей точки (рисунок 7). Так, начальная стадия экспоненциального ускорения сменяется резким

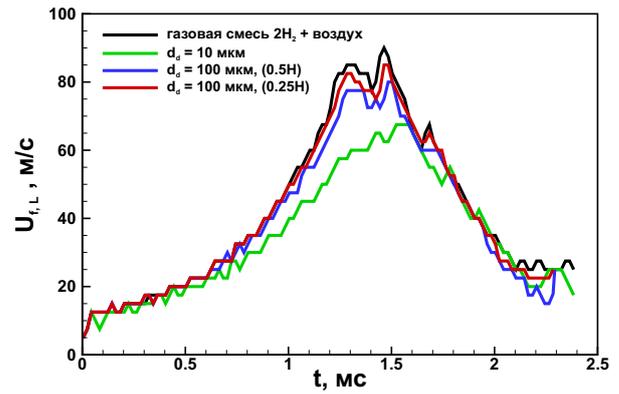


Рисунок 7. Хронограммы скорости ведущей точки фронта пламени $U_{f,L}$ в канале шириной 20 мм, заполненном чистой стехиометрической смесью водород–воздух или газозвесью с содержанием капель воды диаметром 10 и 100 мкм и начальным расстоянием между каплями 1 мм. В скобках указана степень исходного заполнения канала каплями в поперечном направлении.

падением скорости, когда пламя приобретает плоскую структуру и эффективная площадь горения резко снижается.

С точки зрения взаимодействия капель с фронтом горения, V-образная форма пламени имеет аналогичные особенности, что и пламя, вытянутое вдоль оси канала. Так, рост неустойчивости вблизи оси симметрии препятствует дальнейшему растяжению пламени и в случае узких каналов может привести к смыканию боковых языков пламени и переходу к плоскому фронту, что в свою очередь является фактором торможения волны горения. Обобщая результаты, представленные на рисунке 7, можно заключить, что и для менее активных газовых смесей присутствие капель обеспечивает снижение интенсивности ускорения пламени в канале.

На примере стехиометрической смеси водорода с воздухом были рассмотрены также варианты с неполным заполнением сечения канала каплями. Так, на рисунке 7 представлена также динамика волны горения при заполнении каплями половины (0.5H) и четверти канала (0.25H). Расстояние между каплями оставалось равным 1 мм, но капли на этот раз располагались только вблизи боковых стенок канала. При этом постановка задачи становится близка к задаче ускорения пламени в загроможденных каналах с расположенными вдоль стенок регулярными препятствиями. Хорошо известно, что в этом случае препятствия позволяют значительно ускорить развитие процесса и добиться более стремительного ускорения пламени и перехода к детонации. Однако в случае капель, расположенных вблизи боковых стенок канала, дополнительного ускорения по сравнению с темпами процесса в чистой смеси водорода с воздухом не наблюдается. Это обусловлено характером воздействия капель на фронт горения. Для возмущения поверхности пламени и соответствующего дополнительного ускорения пламени, капли должны двигаться по нормали к фронту горения. В случае их движения вдоль фронта и попадания в область зоны реакции, испарение даже крупных капель может начать сказываться уже на масштабах фронта пламени, что определяет локальное ингибирование реакций горения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе выполнен детальный анализ механизмов влияния микрокапель воды на нестационарное распространение пламени и переход к детонации. Впервые использована современная бездиссипативная методика КАБАРЕ для комплексного изучения процессов ускорения пламени и перехода к детонации в газовых смесях и газозвесах. Анализ особенностей развития процессов ускорения пламени и перехода к детонации в каналах показывает, что интенсификация этих нестационарных режимов горения путем добавления капель представляется возможным лишь в случае крупных пространственных масштабов развития горения. Показано, что ввиду геометрической конфигурации поверхности фронта горения, генерация возмущений на поверхности фронта при прохождении через массив микрокапель является фактором, замедляющим процесс горения. Самопроизвольное ускорение пламени в каналах сопряжено с формированием вытянутой вдоль оси канала (“finger flame”) или вдоль стенок канала (“tulip flame”) пространственной конфигурации фронта горения. При этом, возмущения на боковой поверхности фронта приводят к росту поперечной скорости распространения пламени и препятствуют формированию вытянутых структур фронта пламени. Кроме того, траектории капель проходят по касательной к боковой поверхности пламени, что увеличивает время их присутствия в области энерговыделения и способствует проявлению ингибирующих свойств. Данные механизмы определяют снижение темпов нарастания скорости в газовых смесях при добавлении в нее взвешенных микрокапель воды. Полученные результаты расширяют имеющиеся представления о развитии нестационарных процессов горения в газовых смесях и газозвесах и должны быть учтены при разработке новых технических решений, реализующих горение предварительно перемешанных газовых смесей с добавлением дисперсных капель воды.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2020-806 от 29 сентября 2020 г.) и с использованием суперкомпьютерных вычислительных ресурсов Межведомственного Вычислительного Центра РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kichatov B, Korshunov A, Son K and Son E 2016 *Combustion and Flame* **172** 162–172
2. Kichatov B, Korshunov A, Kiverin A and Son E 2017 *International Journal of Hydrogen Energy* **42** 16866–16876
3. Hasegawa T and Fujiwara T 1982 *Symposium (International) on Combustion* **19** 675–683
4. Mitropetros K, Hieronymus H and Steinbach J 2006 *Chemical Engineering Science* **61** 397–416
5. Egorov R I, Antonov D V, Valiullin T R and Strizhak P A 2018 *Fuel Processing Technology* **174** 26–32

6. Boretti A 2013 *Applied Thermal Engineering* **52** 62–68
7. Iacobacci A, Marchitto L and Valentino G 2017 *SAE International Journal of Engines* **10** 928–937
8. Grant G, Brenton J and Drysdale D 2000 *Progress in Energy and Combustion Science* **26** 79–130
9. Thomas G O, Jones A and Edwards M J 1991 *Combustion Science and Technology* **80** 47–61
10. Thomas G O, Edwards M J and Edwards D H 1990 *Combustion Science and Technology* **71** 233–245
11. van Wingerden K, Wilkins B, Bakken J and Pedersen G 1995 *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* **8** 61–70
12. Boeck L, Kink A, Oezdin D, Hasslberger J and Sattelmayer T 2015 *International Journal of Hydrogen Energy* **40** 6995–7004
13. van Wingerden K and Wilkins B 1995 *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* **8** 53–59
14. Thomas, G O and Brenton, J R 1996 An investigation of factors of relevance during explosion suppression by water sprays *Preprint OTH 94 463* (London, UK: The University College of Wales)
15. Gieras M 2008 *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* **21** 472–477
16. Zhang P, Zhou Y, Cao X, Gao X and Bi M 2014 *Journal of Loss Prevention in the Process Industries* **29** 313–318
17. Thimothée R, Chauveau C, Halter F, Nicoli C, Haldenwang P and Denet B 2017 *Comptes Rendus Mécanique* **345** 99–116
18. Yakovenko I S and Kiverin A D 2021 *International Journal of Hydrogen Energy* **46** 1259–1272
19. Kichatov B, Korshunov A, Gubernov V, Kiverin A and Yakovenko I 2020 *Fuel Processing Technology* **198**
20. Kiverin A and Yakovenko I 2021 *Energies* **14** 6233
21. Головизнин ВМ, Зайцев МА, Карабасов СА и ИА Короткин 2013 *Новые алгоритмы вычислительной гидродинамики для многопроцессорных вычислительных комплексов 1-е изд.* (Москва: Издательство Московского Университета)
22. Bykov V, Kiverin A, Koksharov A and Yakovenko I 2019 *Computers & Fluids* **194** 104310
23. Kéromnès A, Metcalfe W K, Heufer K A, Donohoe N, Das A K, Sung C J, Herzler J, Naumann C, Griebel P, Mathieu O, Krejci M C, Petersen E L, Pitz W J and Curran H J 2013 *Combustion and Flame* **160** 995–1011
24. Numerical reactive gas-dynamics <https://github.com/yakovenko-ivan/NRG>
25. Schiller L and Naumann A 1935 *Zeitschrift des Vereins Deutscher Ingenieure* **77** 318–320
26. McGrattan K, McDermott R, Hostikka S, Floyd J and Vanella M 2019 *Fire Dynamics Simulator Technical Reference Guide Volume 1: Mathematical Model Preprint NIST Special Publication 1018-1* (Gaithersburg, MD: U.S. Department of Commerce, National Institute of Standards and Technology)
27. Киверин АД и Яковенко ИС 2022 *Физика горения и взрыва* **58** 32–39
28. Clanet C and Searby G 1996 *Combustion and Flame* **105** 225–238