

ВЕРИФИКАЦИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ СХЕМ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ГОРЕНИЯ ВОДОРОДА В ВОЗДУХЕ

А.В. Федоров, Н.Н. Федорова, О.С. Ванькова, Д.А. Тропин

*Институт теоретической и прикладной механики им. Христиановича СО РАН
630090, ул. Институтская, 4/1, Новосибирск, Россия*

Физико-математическое моделирование поведения горючих газовых смесей под ударно-волновой нагрузкой является важной проблемой в теоретическом и практическом аспекте. Проблема обеспечения взрыво- и пожаробезопасности позволяют рассматривать процессы горения газовых смесей как актуальную задачу механики неравновесных сред. В настоящее время водород считается одним из важных сырьевых ресурсов будущего. Это требует более точного представления о характеристиках его воспламенения и горения, а так же о способах управления этими процессами. Важную роль при этом играет адекватность моделей воспламенения и горения водорода, в частности, соответствие результатов расчета по определенным кинетическим схемам и данным экспериментов по времени задержки воспламенения в зависимости от начальных параметров.

В настоящей работе представлены результаты верификации численных исследований воспламенения и горения водородосодержащих смесей и экспериментальных данных. Приведены обоснования использования некоторых кинетических моделей для описания воспламенения и горения газовой водородовоздушной смеси. В работе использовались три детальных кинетических механизма с 16, 38 и 50 реакциями [1-3].

На первом этапе рассматривалась ударная труба, заполненная смесью водорода, кислорода и аргона/азота [4]. По смеси распространяется ударная волна (УВ). При некоторых значениях числа Маха УВ параметры смеси могут превысить критические значения и произойдет воспламенение.

В одномерной постановке динамика смеси описывается уравнениями неравновесной динамики:

$$\begin{aligned}\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u^2 + p)}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial[(\rho E + p)u]}{\partial x} &= 0,\end{aligned}\tag{1}$$

где $E = e + u^2/2$ – полная энергия, ρ , u , p , e – плотность, скорость, давление и внутренняя энергия смеси соответственно. Внутренняя энергия реакционноспособной смеси определяется из соотношения

$$e = c_v T + \sum_{\alpha=1}^{\mu} \xi_{\alpha} h_{0\alpha} - c_p T_{00}$$

где c_p , c_v – удельные теплоемкости смеси при постоянном давлении и постоянном объеме,

ме, $c_v = \sum_{\alpha=1}^{\mu} c_{v\alpha} \xi_{\alpha}$, ξ_{α} – относительная массовая концентрация компонента α , $h_{0\alpha}$ – эн-

© А.В. Федоров, Н.Н. Федорова, О.С. Ванькова, Д.А. Тропин, 2017

тальпия образования компонента α , μ – количество компонентов смеси, $T_{00} = 298.15$ К. Система уравнений неравновесной динамики, дополненная уравнением состояния

$$p = \rho TR \sum_{\alpha=1}^{\mu} \frac{\xi_{\alpha}}{M_{\alpha}} \quad (2)$$

и кинетическими уравнениями детальной химической кинетики

$$\frac{d\xi_{\alpha}}{dt} = \frac{1}{\rho} M_{\alpha} \sum_{r=1}^R \rho^{m_r} (v'_{\alpha r} - v_{\alpha r}) \times \left[k_{fr} \prod_{\beta=1}^N \left(\frac{\xi_{\beta}}{M_{\beta}} \right)^{\nu_{\beta r}} - k_{br} \prod_{\beta=1}^N \left(\frac{\xi_{\beta}}{M_{\beta}} \right)^{\nu'_{\beta r}} \right] \quad (3)$$

позволяет после постановки соответствующей начально-краевой задачи рассчитать картину распространения УВ в канале, наполненном данной рабочей смесью. Здесь M_{α} , M_{β} – молекулярные массы компонентов α , β смеси; R – универсальная газовая постоянная; m_r – порядок r -й реакции; $v_{\alpha r}$, $v_{\beta r}$ – стехиометрические коэффициенты, переменные со

штрихом – относятся к продуктам реакции r ; k_{fr} , k_{br} – скорости прямой и обратной реакции, соответственно. Математическую модель (1)-(3) будем называть нестационарной.

На рис.1 приведены данные расчетов по кинетическим схем [1-2] и экспериментальных данных [5-8] по зависимости времени задержки воспламенения смеси, разбавленной аргонем и азотом от температуры - T . Критерием определения времени задержки воспламенения выбран максимум скорости изменения радикала ОН.

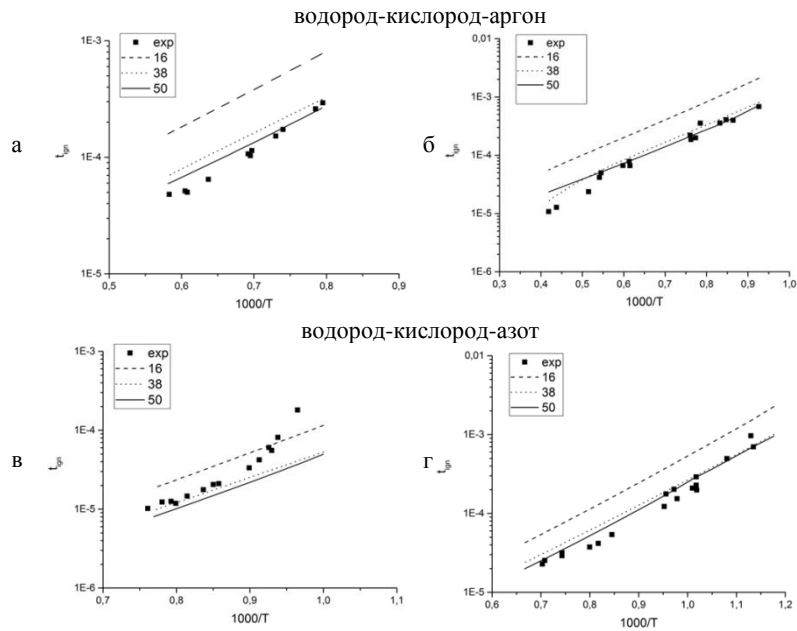


Рис.1 Времена задержки воспламенения для смесей водород-кислород-аргон/азот
 ----- 16 реакций, 38 реакций, — 50реакций

В эксперименте [5], данные которого приведены на рис.1,а, смесь содержала 1% H₂, 1% O₂ и 98% Ar при начальном давлении $p = 1.6 \text{ atm}$. Видно, что расчетные кривые для кинетических схем из 50 реакций проходят по экспериментальным данным, а полученные по двум другим кинетическим схемам лежат выше.

На рис.1,б, смесь содержит 1% H₂, 2% O₂ и 97% Ar при заданном давлении $p = 1 \text{ atm}$. Результаты по кинетическим схемам с 38 и 50 реакциями проходят по экспериментальным данным [6], а результаты по 16 реакциям лежат выше.

В эксперименте [7] представленном на рис.1,в, смесь состояла из 29,59% H₂+14,79% O₂+55,62% N₂ при начальном давлении $p = 3 \text{ atm}$. На графике видно, что кривая расчетов для 16 реакций проходит по верхней границе экспериментальных данных, а расчетные кривые для 38 и 50 реакций по нижней границе.

На рис.1,г, представлены экспериментальные данные [8] со стехиометрической смесью H₂ + air при заданном давлении $p = 0.5 \text{ atm}$ соответственно. На графике, представленном на рис.2, е видно, что расчетные кривые для кинетических схем с 38 и 50 реакциями проходят по экспериментальным точкам. Кривая расчета с 16 реакциями проходит выше.

На втором этапе расчет проводился с помощью коммерческого пакета ANSYS CFD Fluent на основе полных осредненных по Фавру уравнений Навье-Стокса, дополненных $k-\omega$ SST моделью турбулентности. Было проведено тестирование расчетов для кинетических схем на экспериментальных данных [9] о воспламенении струи водорода.

Рассматривались процессы смешения и самовоспламенения водородо-воздушной смеси, подаваемой соосно из конического сопла в сверхзвуковой поток. Начальные данные представлены в таблице.

Таблица 1. Начальные данные

	Водородная струя	Свободный поток
Число Маха, M	2.00	1.90
Температура, T _{ст} , К	251	1495
Скорость, u, м/с	2432	1510
Давление, P _{ст} , МПа	0.1	0.1
Массовая концентрация:		
H ₂	1.000	0
O ₂	0	0.241
N ₂	0	0.478
H ₂ O	0	0.281

На рис.2 приведена геометрия расчетной области. Диаметр сечения сопла для подачи свободного потока $D = 0.0653 \text{ м}$, диаметр трубки для подачи струи водорода $d_j = 0.009525 \text{ м}$, толщина стенки трубки 0.0015 м. Рассматривались три конических сверхзвуковых сопла для числа Маха $M = 2$ с разным углом расширения $\beta = 4^\circ, 4.5^\circ$ и 5° . Во внешнем потоке ставились стандартные атмосферные граничные условия: $P_0 = 101325 \text{ Па}$, $T_0 = 300 \text{ К}$, массовая концентрация O₂ ~ 21 %. На стенке трубки и стенке форсунки ставилось условие адиабатической стенки.

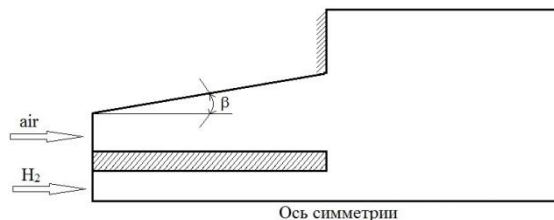


Рис.2 Геометрия расчетной области с коническим соплом

На рис.3,а,б, показаны графики массовой концентрации H_2O в сечениях $x/d_j = 15.5$, 27.9. Расчетные данные качественно совпадают с экспериментальными. Однако вблизи оси симметрии расчеты имеют количественное рассогласование с экспериментом. В частности, значения массовой концентрации H_2O в расчете ниже экспериментальных точек, особенно вблизи оси симметрии. Пики концентраций смещены по радиусу вверх.

На рис.3,в,г, представлены графики распределения полного давления в сечениях $x/d_j = 13.8$, 26.2. На графиках видно образование трех зон: вблизи оси симметрии, в слое смещения и горения, выше слоя смещения. В первой зоне, расчетные кривые для $\beta = 4^\circ$, 4.5° , 5° проходят по нижней границе экспериментальных точек, а кривая без учета коничности течения выше. Во второй зоне, наблюдается расхождение экстремумов расчетных кривых с коническим соплом и без него. Графики проходят ниже точек экспериментов. В третьей зоне кривая расчета с углом расширения сопла $\beta = 4.5^\circ$ проходит выше экспериментальных точек, остальные кривые проходят по нижней границе.

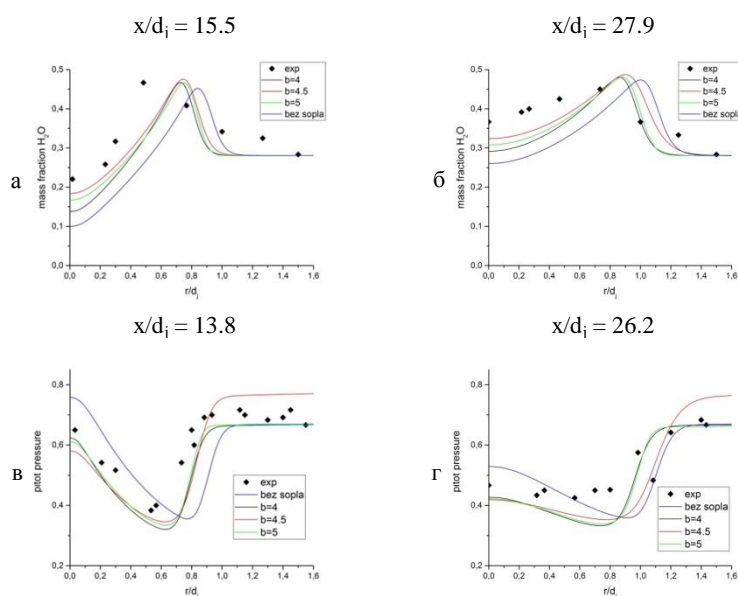


Рис.3 а, б) массовая концентрация H_2O , в,г) распределение полного давления

Выводы. Численный анализ кинетических схем горения водорода показал, что схема с 38 реакциями состоящая из восьми компонент [3] наилучшим образом описывает взятые для численных исследований экспериментальные данные. Такой же результат был получен и в [11].

Исследования проведены при поддержке гранта РФФ №16-19-00010.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Chul Park**, Review of Chemical-Kinetic Problems of Future NASA Missions, I: Earth Entries // Journal of Thermophysics and Heat Transfer, Vol. 7, No. 3, July-Sept. 1993
2. **Foluso Ladeinde**, A Critical Review of Scramjet Combustion Simulation (Invited) //AIAA Paper, 209-127, 13 pp
3. **Tien J. H., Stalker R. J.**, Release of Chemical Energy by Combustion in a Supersonic Mixing Layer of Hydrogen and Air// Combustion and Flame, 2002. No. 130, pp. 329–348
4. **Бедарев И.А., Рылова К.В., Федоров А.В.**, Применение детальных и приведенных кинетических схем для описания детонации водородовоздушных смесей с разбавителем // ФГВ 2015, №5, 22-33с.,

5. Hidaka Y., Sato K., Henmi Y., et al., Shock-tube and modeling study of methane pyrolysis and oxidation // Combust. Flame. 1999. N 118. P. 340–358
6. **Schott G. L., Kinsey J. L.**, Kinetic studies of hydroxyl radicals in shock waves. II. Induction times in the hydrogen-oxygen reactions // J. Chem. Phys. 1958. N 29. P. 1177–1188
7. **Bhaskaran K.A., Gupta M.C., Just Th.**, Shock tube study of the effect of unsymmetric dimethyl hydrazine on the ignition characteristics of hydrogen-air mixtures // Comb Flame 1973, 21, 45–48
8. Slack M. W. and Grillo A., Investigation of Hydrogen-Air Ignition Sensitized by Nitric Oxide and by Nitrogen Dioxide // NASACR-2896, 1977
9. **John S. Evans and Charls J. Schexnayder Jr.**, Influence of Chemical Kinetics and Unmixedness on Burning in Supersonic Hydrogen Flames // AIAA Jour. Vol. 18, No. 2, 188-193
10. **О.С. Ванькова, Н.Н. Федорова**, Верификация кинетических схем горения водородо-воздушной смеси в сверхзвуковом потоке // Материалы IX Всероссийской научно-технической конференции «Актуальные вопросы строительства», Новосибирск: НГАСУ (Сибстрин), 2016, 218-223
11. **И.А. Бедарев, А.В. Федоров**, Сравнительный анализ трех математических моделей воспламенения водорода // ФГВ 2006, №1, С. 26-33.