



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 134 за 2016 г.



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

Алексеев М.М., [Борисов В.Е.](#),  
Семенов О.Ю., Якуш С.Е.

Моделирование горения в  
узком плоском канале

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Моделирование горения в узком плоском канале / М.М.Алексеев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2016. № 134. 32 с.  
doi:[10.20948/prepr-2016-134](https://doi.org/10.20948/prepr-2016-134)  
URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2016-134>

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

М.М. Алексеев, В.Е. Борисов, О.Ю. Семенов, С.Е. Якуш

**Моделирование горения в узком  
плоском канале**

Москва, 2016

*М.М. Алексеев, В.Е. Борисов, О.Ю. Семенов, С.Е. Якуш*, Моделирование горения в узком плоском канале

**Аннотация.** В работе приводятся результаты численного исследования распространения фронта ламинарного пламени в плоском узком канале в условиях развития неустойчивости пламени. Моделирование проводилось с помощью разработанного авторами параллельного программного комплекса для расчета трехмерных течений многокомпонентной смеси реагирующих газов с использованием иерархии адаптивно измельчаемых сеток. Результаты расчетов сравниваются с данными натуральных экспериментов.<sup>1</sup>

**Ключевые слова:** прямое численное моделирование, фронт пламени, адаптивные сетки, гидродинамическая неустойчивость

*M.M. Alekseev, V.E. Borisov, O.Yu. Semenov, S.E. Yakush*, Numerical study on combustion in a plane narrow channel

**Abstract.** A model and some results of numerical simulation of laminar flame propagation in a plane narrow channel where flame front instability develops are presented. The simulation was performed by a parallel software developed for the calculation of three-dimensional reacting multicomponent flows on hierarchical structured grids. Numerical results are compared with experimental data.

**Key words and phrases:** Direct Numerical Simulation, flame front, adaptive mesh refinement, hydrodynamic instability

## Содержание

<b>1</b>	<b>Введение</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Математическая модель</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Методы решения</b>	<b>6</b>
<b>4</b>	<b>Особенности программной реализации</b>	<b>10</b>
<b>5</b>	<b>Результаты натуральных и численных экспериментов</b>	<b>11</b>
<b>6</b>	<b>Заключение</b>	<b>29</b>
	<b>Литература</b>	<b>30</b>

---

<sup>1</sup>Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект РФФИ 16-01-00557 А)

# 1 Введение

В последнее десятилетие значительный интерес в мире проявляется к разработке микрокамер сгорания и микродвигателей внутреннего сгорания как устройств, перспективных с точки зрения развития энергосберегающих технологий. Уменьшение расстояния между стенками камеры сгорания рассматривается как метод повышения энергосбережения и коэффициента полезного действия энергетической установки. При этом, однако, в определенных условиях возникает новый физический эффект, требующий детального изучения, – распад фронта пламени и переход к спиновому режиму горения [1–4].

Горение в узких каналах характеризуется тем, что существенную роль в распространении и устойчивости пламени играет взаимодействие со стенками и связанные с этим теплопотери и повышенное сопротивление. Как было установлено в экспериментах по распространению ламинарных околопредельных пропановых пламен в узком зазоре между параллельными пластинами [5, 6], при искровом центральном зажигании предварительно перемешанной смеси возможна потеря устойчивости пламени, его распад на отдельные очаги, движущиеся по искривленным траекториям, а также переход к спиновому горению и скручиванию пламени в спираль. Важный результат работ [5, 6] состоит в том, что спиновые режимы распространения пламени получены, в отличие от [1–3], для изначально покоящейся смеси. Это свидетельствует о том, что переход к спиновому горению является внутренне присущим, самопроизвольным и может осуществляться даже в отсутствие внешних возмущений и градиентов температуры.

Целью настоящей работы является разработка вычислительной модели ламинарного горения предварительно перемешанных топливовоздушных смесей, позволяющей изучать структуру течения газа при спиновом распространении фронта пламени в узком плоском канале, исследовать закономерности роста и гибели волновых возмущений на фронте пламени и выявить связи гидродинамики спинового горения газа с интенсивностью теплопередачи от газа к стенкам канала.

Для численного моделирования использован разработанный авторами программный комплекс ParTCS-3D, модифицированный для расчета рассматриваемых задач. В качестве математической модели используются уравнения Навье–Стокса в приближении малых чисел Маха [7, 8], для описания диффузионного и теплового потока используется модель средних по смеси значений [9]. Для расчетов используются блочно-структурированные адаптивные сетки, состоящие из иерархии топологически одинаковых блоков, причем каждый следующий уровень измельчения соответствует уменьшению пространственного шага сетки в два раза [10]. В пределах блока аппроксимация уравнений осуществляется на декартовой сетке с постоянным шагом по

каждому пространственному направлению, что обуславливает простоту алгоритма и возможность использования уже существующих вычислительных моделей. Для аппроксимации уравнений по времени используется однослойная явная схема Эйлера; для аппроксимации по пространству – метод конечных разностей, записанный на разнесенной сетке, с использованием схемы реконструкции VONOS [11] или WENO3 [12] значений на гранях ячеек.

## 2 Математическая модель

Для описания течений многокомпонентной смеси реагирующих газов используется система уравнений Навье–Стокса. В настоящей работе используется ее модификация, записанная в приближении малых чисел Маха [7, 8, 13], при этом для описания диффузионных членов и теплового потока применяется модель средних по смеси значений [9]. Данная система имеет следующий вид:

$$\frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} + \nabla \cdot \rho Y_m \mathbf{U} = \nabla \cdot (\rho D_{m,mix} \nabla Y_m) + \dot{\omega}_m, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}) = -\nabla \pi + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot \rho h \mathbf{U} = \nabla \cdot \left( \lambda \nabla T + \sum_m h_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \right). \quad (3)$$

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

$$\begin{aligned} \mathcal{S} \equiv \nabla \cdot \mathbf{U} = & \frac{1}{\rho c_{p,mix} T} \left( \nabla \cdot \lambda \nabla T + \sum_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m \nabla h_m \right) + \\ & + \frac{1}{\rho} \sum_m \frac{W}{W_m} (\nabla \cdot \rho D_{m,mix} \nabla Y_m) + \frac{1}{\rho} \sum_m \left( \frac{W}{W_m} - \frac{h_m}{c_{p,mix} T} \right) \dot{\omega}_m, \end{aligned}$$

при этом должны быть выполнены следующие нормировочные соотношения:

$$\sum_m Y_m = 1, \quad \sum_m \dot{\omega}_m = 0, \quad \sum_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m = \mathbf{0}.$$

Здесь  $m$  – индекс компонента смеси,  $\rho$  – 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,  $\boldsymbol{\tau}$  – тензор вязких напряжений,  $h_m$  – энтальпия компонента  $m$ ,  $h$  – энтальпия смеси,

$\pi = p - p_0$  – динамическая составляющая давления,  $p_0$  – термодинамическая составляющая давления,  $T$  – температура смеси,  $\lambda$  – коэффициент теплопроводности смеси,  $c_{p,mix}$  – теплоемкость смеси при постоянном давлении,  $D_{m,mix}$  – средний по смеси коэффициент диффузии компонента  $m$  относительно смеси,  $W_m$  – молекулярная масса компонента  $m$ ,  $W$  – средняя молекулярная масса 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  $\mu$  – динамическая вязкость смеси,  $\mathbf{I}$  – единичный тензор.

Энтальпия смеси  $h$  записывается в виде:

$$h(T, Y_m) = \sum_m Y_m h_m(T).$$

Уравнение состояния смеси совершенных газов имеет следующий вид:

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

где  $\mathcal{R}$  – универсальная газовая постоянная.

Массовая скорость притока компонента  $m$  за счет химических реакций имеет вид

$$\dot{\omega}_m = \sum_n \dot{\omega}_{mn} = W_m \sum_n \left( \nu''_{mn} - \nu'_{mn} \right) Q_n.$$

Здесь  $n$  обозначает номер реакции;  $\nu''_{mn}$  и  $\nu'_{mn}$  – стехиометрические коэффициенты компонента  $m$  в реакции  $n$ , а  $Q_n$  – скорость протекания  $n$ -й реакции.

При использовании детальной кинетической схемы скорости реакции записываются в виде

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

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

Константы скорости прямых реакций определяются из закона Аррениуса [14] в виде

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

где  $A_{fn}$  – предэкспоненциальный множитель,  $\beta_n$  – показатель степени в температурном факторе,  $E_n$  – энергия активации.

Константы скорости обратных реакций определяются по константам скорости прямых реакций при помощи констант равновесия:

$$K_{rn} = \frac{K_{fn}}{\left(\frac{p_0}{RT}\right)^{\sum_m \nu_{mn}} \exp\left(\frac{\Delta s_n}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta h_n}{RT}\right)},$$

где  $\Delta h_n$  и  $\Delta s_n$  – изменение энтальпии и энтропии смеси при переходе от исходных веществ к продуктам  $n$ -й реакции:

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

Представленные уравнения математической модели должны быть дополнены соотношениями для определения стехиометрических коэффициентов  $\nu_{mn}''$  и  $\nu_{mn}'$ , коэффициентов переноса для смеси (вязкость  $\mu$ , теплопроводность  $\lambda$ , коэффициент диффузии  $D_{m,mix}$ ), а также теплофизическими свойствами смеси (теплоемкость  $c_{p,mix}$  и энтальпия  $h$ ). Для многих веществ полные данные не могут быть найдены в справочных таблицах, а должны рассчитываться на основе молекулярно-кинетической теории либо определяться экспериментально. Такие исследования были проведены и представлены в виде полиномиальных аппроксимаций NASA [15]. Коэффициенты полиномов были найдены для очень широкого круга веществ, представляющих интерес при расчете задач горения, а соответствующие данные представлены в стандартизированном формате [16, 17]. В настоящей работе используется подход, аналогичный применяемому в пакете CHEMKIN [18].

### 3 Методы решения

В настоящей работе для автоматического разрешения особенностей решения используются динамические адаптивные блочно-структурированные сетки (AMR) [10]. При таком подходе строится иерархия подсеток, покрывающих всю расчетную область, с пространственным разрешением, варьирующимся в зависимости от локальных особенностей решения. Пример блочно-структурированной сетки, используемой для построения иерархии адаптивных сеток, представлен на рис. 1.

Иерархия блоков адаптивной сетки образует дерево. Все блоки сеток имеют идентичную логическую структуру однородной декартовой ортогональной сетки. Любой подблок может, в свою очередь, снова быть измельчен тем же способом. Этот процесс продолжается до тех пор, пока вся поверхность

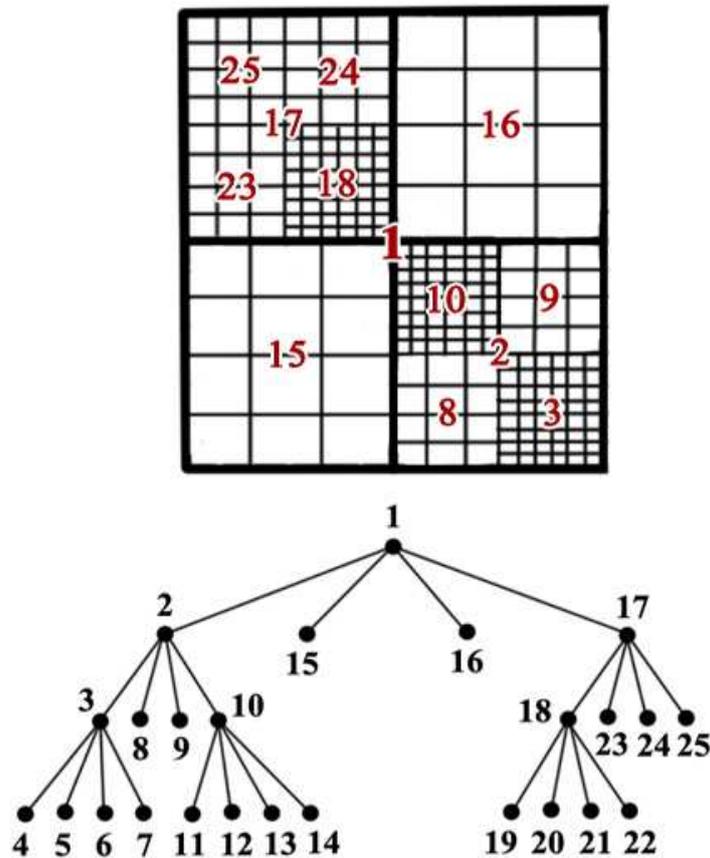


Рис. 1. Представление адаптивной блочно-структурированной сетки в виде логического дерева

вычислений не будет покрыта блоками нужного пространственного разрешения. Блоки сеток предполагаются логически структурированными, т.е. сетка внутри блока имеет структуру декартовой ортогональной сетки, ячейки которой индексируются тремя целочисленными индексами. При этом физическая геометрия сетки может быть декартовой, цилиндрической, сферической, полярной или любой другой. Каждый блок сеток имеет приписанное число слоев фиктивных ячеек на каждой границе. Эти фиктивные ячейки заполняются данными из соответствующих соседних блоков или вычислением заданных граничных условий, если граница блока совпадает с границей расчетной области.

Степень измельчения определяется локально в соответствие с заданным критерием. В настоящей работе используется следующий критерий для величины  $D$ , в качестве которой может выступать температура, концентрация

компонента и т.д.:

$$E_{i_x, i_y, i_z} = \left[ \frac{\sum_{pq} \left( \frac{\partial^2 D}{\partial x_p \partial x_q} \Delta x_p \Delta x_q \right)^2}{\sum_{pq} \left( \left[ \left| \frac{\partial D}{\partial x_p} \right|_{i_p+1/2} + \left| \frac{\partial D}{\partial x_p} \right|_{i_p-1/2} \right] \Delta x_p + \varepsilon \frac{\partial^2 |D|}{\partial x_p \partial x_q} \Delta x_p \Delta x_q \right)^2} \right]^{1/2},$$

где  $p$  и  $q$  обозначают координатные направления,  $\varepsilon$  – некоторый весовой коэффициент, а  $\partial^2 |D|$  находится по аналогии со следующей формулой [19]:

$$\left[ \frac{\partial^2 |D|}{\partial x \partial y} \right]_{i,j,k} = \frac{|D_{i+1,j+1,k}| + |D_{i+1,j-1,k}| + |D_{i-1,j+1,k}| + |D_{i-1,j-1,k}|}{4 \Delta x \Delta y}.$$

Алгоритм решения на одном сеточном блоке основывается на использовании проекционной схемы типа предиктор-корректор [20], а также методе расщепления по физическим процессам [8]. Для аппроксимации уравнений по времени используется однослойная явная схема Эйлера; для аппроксимации по пространству – метод конечных разностей, записанный на разнесенной сетке, с использованием схемы реконструкции VONOS [11] или WENO3 [12] значений на гранях ячеек.

Временной шаг вычисляется из условий устойчивости для явной схемы по числу Куранта:

$$\Delta t = \sigma \min_{m,i,j,k} \left( \frac{\Delta x}{|u_{i,j,k}|}, \frac{\Delta y}{|v_{i,j,k}|}, \frac{\Delta z}{|w_{i,j,k}|}, \sqrt{\frac{2\rho h_N}{|(\nabla \pi)_{i,j,k}|}}, \frac{1}{2^N} \frac{\rho h_N^2}{\mu}, \frac{1}{2^N} \frac{h_N^2}{D_{m,mix}} \right),$$

где  $h_N = \min(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$  – минимальный шаг сетки,  $0 < \sigma < 1$  – число Куранта.

Согласно схеме расщепления по физическим процессам из системы (1)–(3) выделяется подсистема уравнений химической кинетики, интегрирование которой в каждой ячейке сетки производится отдельно в начале каждого временного шага:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho Y_m}{\partial t} = \dot{\omega}_m, & m = 1 \dots N_c, \\ \rho c_{p,mix} \frac{\partial T}{\partial t} = - \sum_m \dot{\omega}_m h_m, \end{cases} \quad (4)$$

где  $N_c$  – число компонент. Получающаяся система ОДУ является жесткой, для ее решения используется многошаговый метод интегрирования жестких систем ОДУ [21]. После интегрирования системы (4) и обновления полей  $\rho Y_m$

и  $T$  поле плотности пересчитывается с использованием соотношения

$$\rho = \sum_m \rho Y_m.$$

После этого осуществляется интегрирование уравнений законов сохранения (1)–(3), в которых конвективные члены  $\nabla \cdot (\rho Y_m \mathbf{U})$ ,  $\nabla \cdot (\rho h \mathbf{U})$  и  $\rho \mathbf{U} \otimes \mathbf{U}$  вычисляются с использованием выбранной схемы реконструкции. Тензор вязких напряжений, тепловой и диффузионные потоки аппроксимируются стандартным для разнесенной сетки образом по полученным выше значениям первичных (и вычисленных по ним вторичных) переменных [11]. Для того чтобы исключить диффузионный перенос массы через грань (являющийся известной проблемой [22, 23] модели средних по смеси диффузионных потоков), в работе применяется метод коррекции, который состоит во введении специальной поправки  $\mathbf{V}_c$ :

$$\rho \mathbf{V}_c = \sum_m \rho D_{m,mix} \nabla Y_m.$$

Скорректированный таким образом диффузионный поток будет иметь вид

$$\mathbf{\Gamma}_m = \rho D_{m,mix} \nabla Y_m + \rho Y_m \mathbf{V}_c, \quad \sum_m \mathbf{\Gamma}_m = 0.$$

Далее уравнения (1) и (3) интегрируются для определения на следующем временном слое величин  $(\rho Y_m)^{n+1}$  и  $(\rho h)^{n+1}$ :

$$\begin{aligned} (\rho Y_m)^{n+1} &= (\rho Y_m)^n - \Delta t \nabla \cdot (\rho Y_m \mathbf{U})^n + \Delta t \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_m, \\ (\rho h)^{n+1} &= (\rho h)^n - \Delta t \nabla \cdot (\rho h \mathbf{U})^n + \Delta t \nabla \cdot \left( \lambda^n (\nabla T)^n + \sum_m h_m^n \mathbf{\Gamma}_m^n \right). \end{aligned}$$

Аппроксимация по времени для уравнения (2), преобразованного с учетом уравнения неразрывности, записывается следующим образом:

$$\frac{\mathbf{U}^{n+1} - \mathbf{U}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U})^n = \frac{1}{\rho^n} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n - \frac{1}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1}.$$

Для его решения используется схема типа предиктор-корректор. Предиктор для уравнения скорости имеет вид

$$(\mathbf{U})^* = (\mathbf{U})^n - \Delta t \nabla \cdot (\mathbf{U} \otimes \mathbf{U})^n + \frac{\Delta t}{\rho^n} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}^n.$$

Корректор для уравнения скорости записывается как

$$(\mathbf{U})^{n+1} = (\mathbf{U})^* - \frac{\Delta t}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1}.$$

Для его вычисления необходимо определить величину  $\pi^{n+1}$ , которая находится из соответствующего уравнения Пуассона:

$$\nabla \cdot \frac{1}{\rho^n} \nabla \pi^{n+1} = \frac{1}{\Delta t} (\nabla \cdot \mathbf{U}^* - \mathcal{S}^{n+1}). \quad (5)$$

В отличие от остальных уравнений модели, решение которых производится отдельно для каждого сеточного блока с последующим согласованием на границах, уравнение Пуассона должно решаться сразу на всей иерархии подсеток, что приводит к необходимости решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с большой разреженной матрицей, размерность которой совпадает с полным числом ячеек расчетной области.

## 4 Особенности программной реализации

В работах [7, 24] был представлен разработанный авторами программный комплекс TCS-3D для расчета трехмерных турбулентных течений реагирующих газов на адаптивных иерархических сетках. В настоящей работе использован его вариант для высокопроизводительных вычислительных систем, получивший название ParTCS-3D. Программный комплекс написан на языках программирования Fortran и C/C++ с использованием интерфейса параллельного программирования MPI. Для проведения текущих расчетов его функциональность была расширена, в частности были существенно переработаны блок расчета химических реакций и блок расчета уравнений конвекции-диффузии.

Для организации иерархии адаптивных блочно-структурированных сеток (AMR) использовались процедуры из программной библиотеки PARAMESH [25]. С их помощью осуществлялось динамическое измельчение и укрупнение сеточных блоков, распределение блоков между доступными для вычисления процессорами, динамическое распределение и балансировка данных между потоками исполнения, управление всеми межблоковыми и межпроцессорными коммуникациями, а также заполнение массивов фиктивных ячеек.

Решение СЛАУ, возникающей при решении уравнения Пуассона (5) для коррекции давления, осуществлялось с помощью функций программного пакета HYPRE [26]. Данный пакет содержит множество процедур для решения систем линейных алгебраических уравнений и предобуславливателей для них. При этом в данном пакете предусмотрен ряд процедур и структур данных для работы со структурированными многоуровневыми сетками, что позволило применить данный пакет (после разработки необходимых программных интерфейсов) для адаптивных иерархических сеток AMR. В настоящей работе для расчетов использовался вариант параллельного метода сопряженных

градиентов PCG с предобуславливанием алгебраическим многосеточным методом Boomer AMG.

Уравнения химической кинетики интегрировались при помощи известного и хорошо зарекомендовавшего себя свободно распространяемого пакета VODE (использована его версия с двойной точностью DVODE) [27].

Выходные данные программы для визуализации записывались с помощью библиотек HDF5 [28] и TecIO [29].

## 5 Результаты натуральных и численных экспериментов

В данном разделе приведены результаты экспериментальных и численных исследований неустойчивости распространения фронта ламинарного пламени в плоском узком канале. Натурные исследования осуществлялись на экспериментальной установке в Сургутском государственном университете. Численное моделирование проводилось на суперкомпьютере K-100 [30], установленном в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, а также с использованием вычислительных мощностей Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН [31]. В зависимости от серии расчетов использовались от 48 до 252 вычислительных ядер.

### 5.1 Экспериментальная установка и результаты исследований

На рис. 2 представлена схема экспериментальной установки. В модельной камере экспериментально исследовались вихревые структуры фронта пламени и продуктов сгорания в узкой щели между плоскими параллельными дисками. Расстояние между дисками было сопоставимо с критическим расстоянием для нормальных условий зажигания исследуемой смеси. Использовалось центральное воспламенение неподвижной горючей смеси, заполняющей открытую камеру сгорания. Подача смеси осуществлялась через сопло в центре одной из пластин. Пластины камеры сгорания были изготовлены из стекла в виде дисков диаметром 0.6 м. Экспериментальная установка позволяла менять наклон пластин камеры и расстояние между ними. Регистрация процесса распространения пламени при различных условиях производилась цифровой камерой с функцией скоростной видеозаписи. Для оценки температурного и концентрационного полей прозрачного «цилиндрического» пламени применялся метод цифровой фотометрии, метод сканирующего лазерного луча использовался для измерения распределения температуры в щелевом пространстве и коэффициента теплоотдачи из зоны горения в стенки щели,

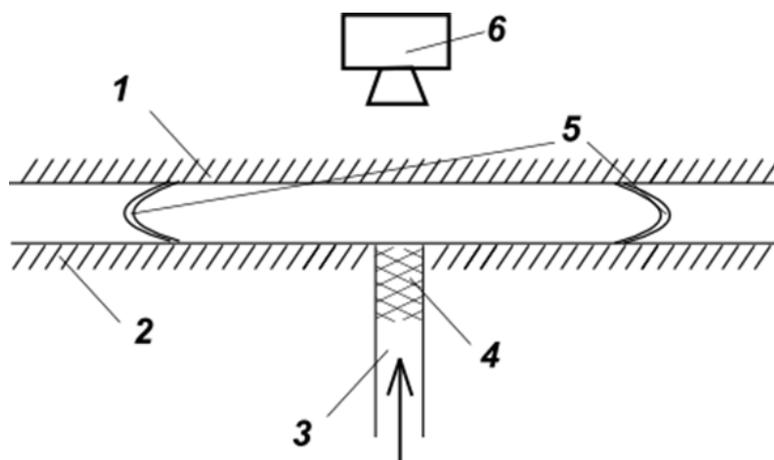


Рис. 2. Схема экспериментальной установки: 1 и 2 – верхняя и нижняя стенки камеры сгорания, 3 – шланг, подводящий в камеру сгорания газовую смесь, 4 – пламегаситель, 5 – расходящийся цилиндрический фронт пламени, 6 – видеокамера.

метод цифровой обработки изображений — для изучения эволюции возмущений на поверхности фронта пламени.

На рис. 3 показано полученное в экспериментах развитие неустойчивости пламени метана. Эксперименты проводились для смеси 14% метана с воздухом при ширине зазора 7.5 мм. Видно, что на первоначально гладком фронте пламени возникают неустойчивости, нарастающие со временем. Пламя искривляется, приобретая характерную М-образную форму. В дальнейшем происходит распад единого фронта пламени на несколько фрагментов.

На рис. 4 и 5 показаны типичные фрагменты видеопленки экспериментов, иллюстрирующие развитие возмущений на поверхности метано-воздушного пламени при начальной концентрации метана 10%. Видно, что при распространении пламени в узком зазоре камеры сгорания на поверхности фронта формируются складки – возмущения с различной амплитудой и длиной волны. При этом на поверхности пламени формируется строгая последовательность таких возмущений (ячеек). Ячеистая структура имеет две характерные особенности. Первая из них заключается в том, что возмущения поверхности фронта начинают развиваться спустя определенное время, когда радиус кривизны пламени превышает некоторое значение. Эволюция возмущений проявляется в изменении амплитуды и длины волны (числа ячеек). Вторая особенность проявляется в укладке трех-четырех мелкомасштабных возмущений на возмущении с большей длиной волны – «модуляции» возмущений. Число длинноволновых возмущений с ростом радиуса пламени практически не изменяется. Общее число возмущений на поверхности фронта возрастает за счет появления новых возмущений с меньшей длиной волны.

Из рис. рис. 4 и 5 видно, что с увеличением расстояния между пластинами

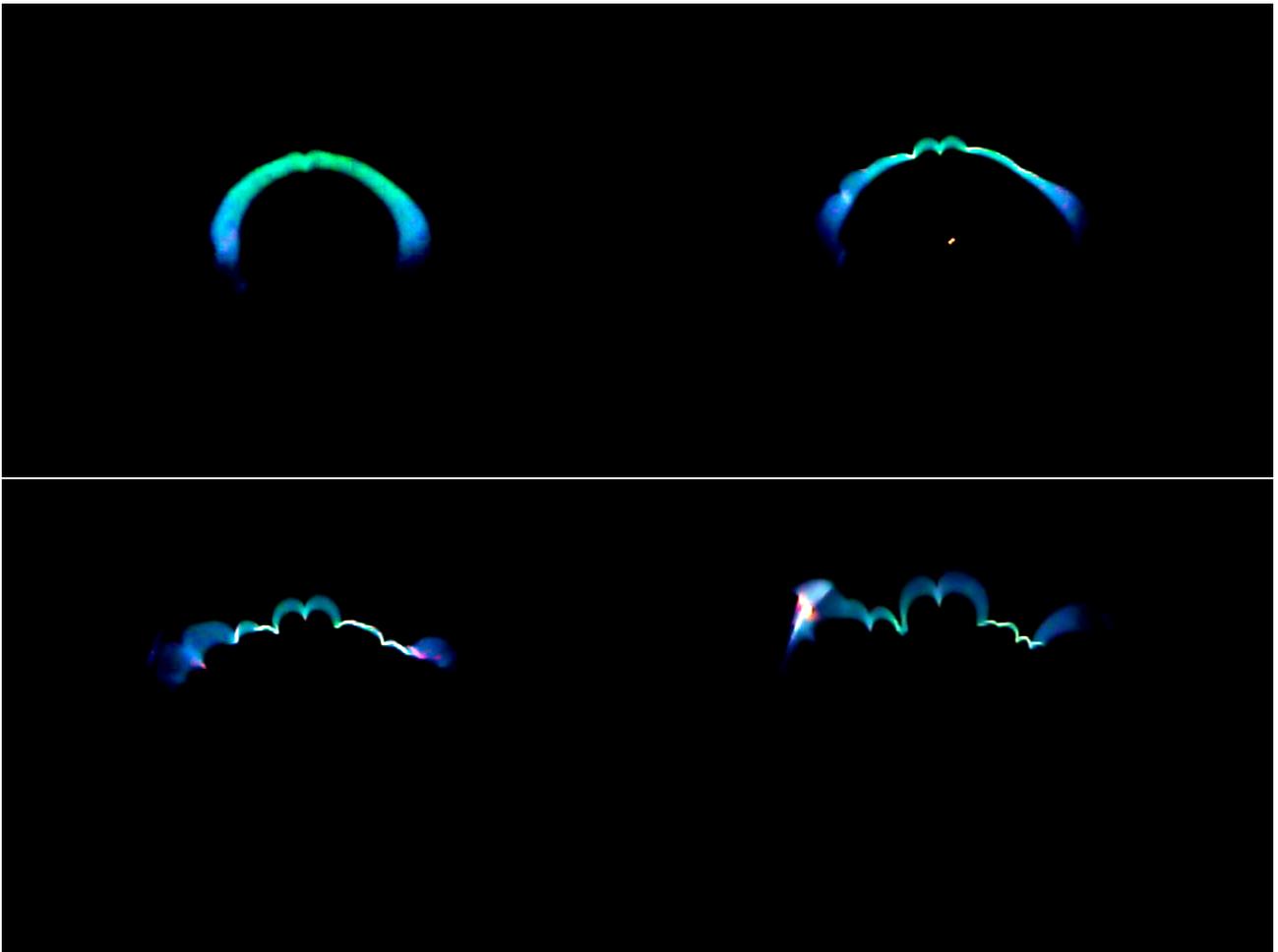


Рис. 3. Развитие неустойчивости метанового пламени

возрастает видимая скорость распространения фронта пламени и уменьшается количество мелкомасштабных возмущений. Амплитуда возмущений во всех опытах не превышала ширину щели.

## 5.2 Численные расчеты

В расчетах моделируется горение предварительно перемешанной газовой смеси в зазоре между двумя плоскими параллельными пластинами. Параметры задачи в целом соответствуют условиям проведения экспериментов, результаты которых представлены в разделе 5.1. На данном этапе целью работы была отработка и реализация численного алгоритма расчета ламинарных пламен в узких зазорах, поэтому результаты сравниваются на качественном уровне.

Расчетная область представляет собой трехмерный прямоугольный параллелепипед с боковыми сторонами  $L_x = L_y = 0.05$  м и зазором между нижней и верхней твердыми границами  $L_z = 0.003$  или  $0.005$  м, в зависимости от моделируемого эксперимента. Для повышения скорости расчетов

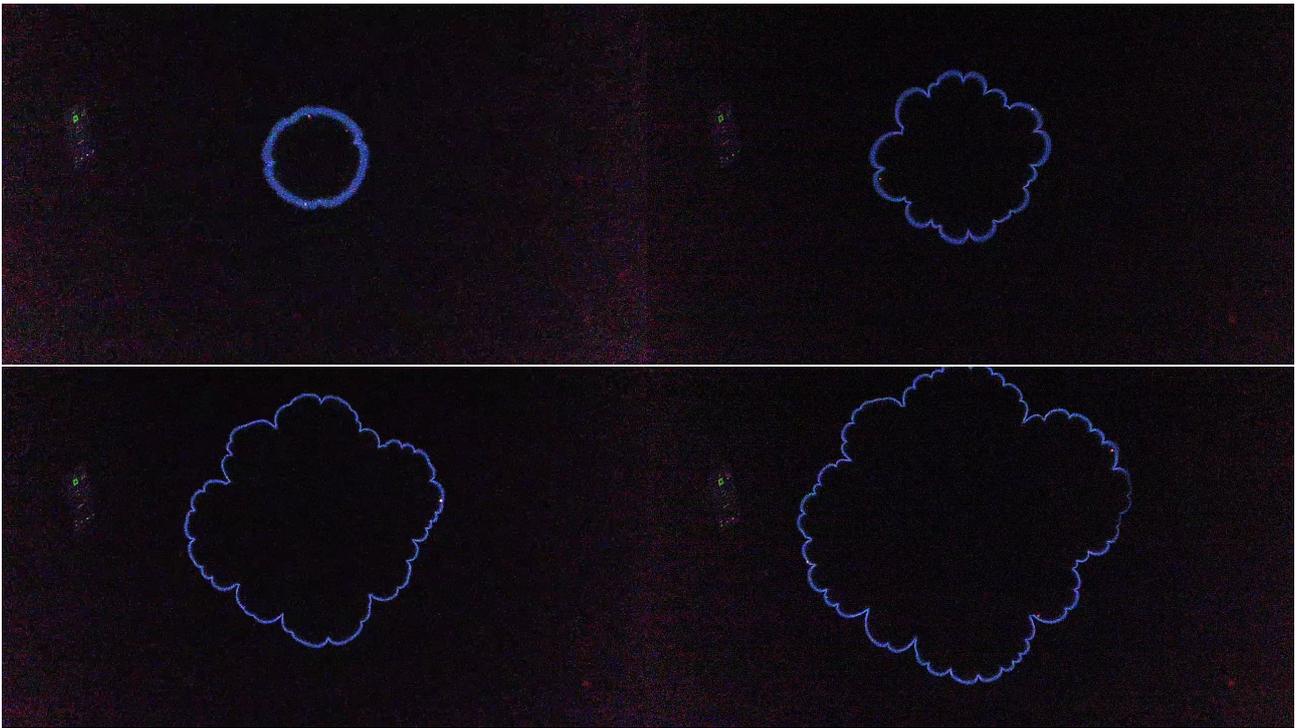


Рис. 4. Развитие неустойчивости метанового пламени при концентрации топлива 10% и ширине щели 4.9 мм (показаны моменты  $t = 0.05, 0.1, 0.2$  и  $0.3$  с)

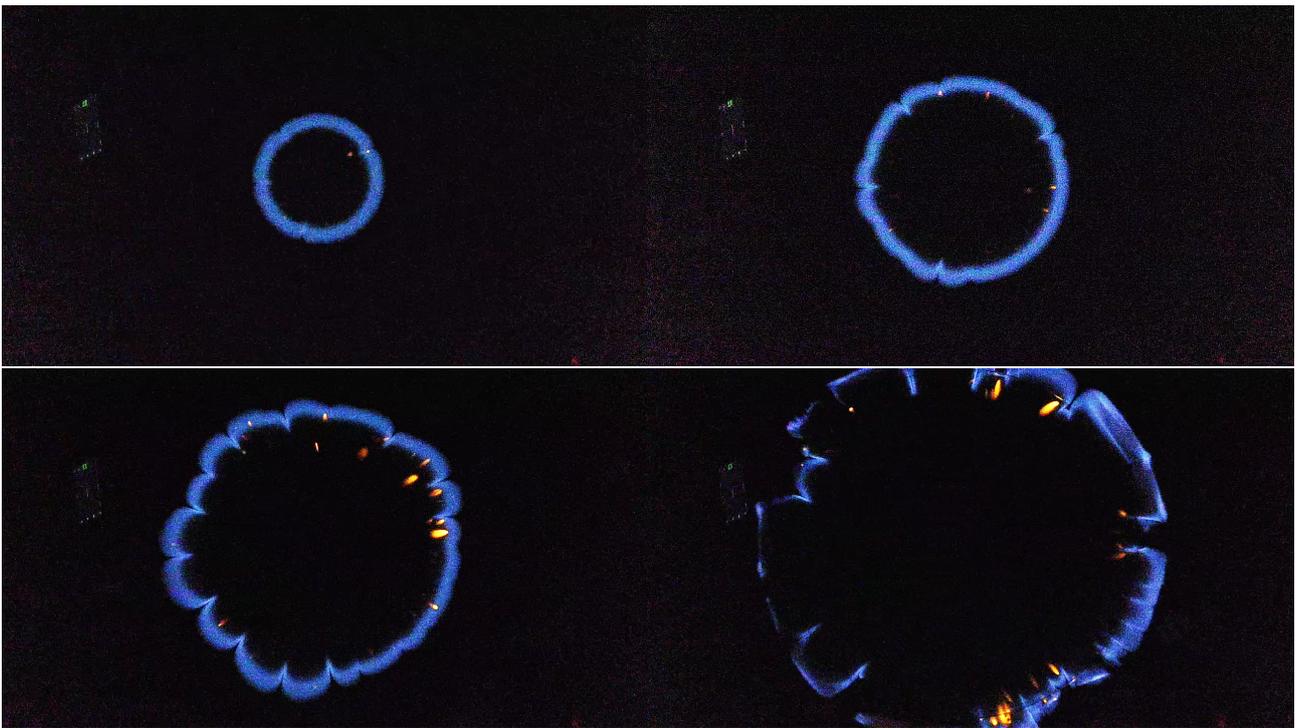


Рис. 5. Развитие неустойчивости метанового пламени при концентрации топлива 10% и ширине щели 7.5 мм (показаны моменты  $t = 0.05, 0.075, 0.10$  и  $0.133$  с)

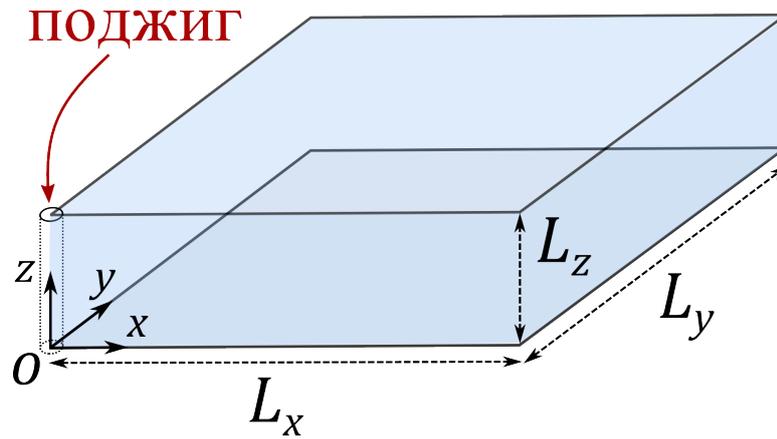


Рис. 6. Схема расчетной области

рассматривается четверть реальной области горения. Схематично постановка задачи приведена на рис. 6.

Первоначально вся расчетная область заполняется смесью заданного состава при температуре  $T_0 = 298^\circ \text{K}$ . Горение инициируется путем задания небольшой области высокой температуры вблизи оси симметрии, что соответствует искровому зажиганию смеси в натуральных экспериментах. Область высокой температуры задавалась в виде параллелепипеда, чтобы обеспечить начальное возмущение фронта пламени вследствие наличия угловой точки и вызвать развитие его неустойчивости.

На боковых границах области (координатные плоскости  $x = 0$  и  $y = 0$ ) задаются условия симметрии. На выходных границах (плоскости  $x = L_x$  и  $y = L_y$ ) ставятся условия свободного вытекания. Верхняя и нижняя границы области ( $z = 0$  и  $z = L_z$ ) являются твердыми стенками, на них ставятся граничные условия прилипания и поддерживается постоянная температура  $T_0$ .

Расчеты проведены для стехиометрической метановоздушной смеси, в которой объемная доли метана  $X_{\text{CH}_4} = 0.095$ , кислорода  $X_{\text{O}_2} = 0.19005$ , азота  $X_{\text{N}_2} = 0.71495$ . Использован кинетический механизм горения метана [32], состоящий из 35 элементарных реакций для 15 реагирующих компонент и инертного азота ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CHO}$ ,  $\text{CH}_2\text{O}$ ,  $\text{CH}_3\text{O}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{H}$ ,  $\text{O}$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$  и  $\text{N}_2$ ).

В расчетной области вводилась начальная сетка, в которой каждый блок сетки содержал  $10 \times 10 \times 10$  ячеек, а число блоков начального уровня составляло  $5 \times 5 \times 1$ . На первой стадии расчетов адаптация сетки осуществлялась по полю температуры  $T$ , далее – после инициирования горения – по объемной доли метана в смеси  $X_{\text{CH}_4}$ , что позволило разрешить области больших градиентов на фронте пламени. Расчеты проводились с использованием четырех уровней расчетной сетки. Как показала практика численных экспериментов, при меньшем уровне измельчения шаги сетки являлись слишком грубыми

для адекватного моделирования фронта пламени, что приводило к затуханию процесса горения уже на начальных этапах расчетов.

На рис. 7, 8 показаны поля температуры при распространении пламени по стехиометрической метановоздушной смеси в щелевом пространстве между параллельными пластинами при ширине зазора  $L_z = 5$  мм. Рисунки 1–8 соответствуют моментам времени  $t = 1, 4, 6, 9, 12, 14, 16, 20$  мс. На рис. 9, 10 показаны поля мольной доли метана  $X_{CH_4}$  в те же моменты времени. Видно, что для данных параметров в расчетах наблюдается рост только длинноволновых возмущений. Для выяснения возможности перехода к неустойчивому режиму распространения пламени необходимы более длительные расчеты. На рис. 11, 12 для тех же моментов времени показана структура пламени в вертикальном сечении, проходящем через плоскости симметрии  $y = 0$  и  $x = 0$ , свидетельствующие о деформации пламени вследствие влияния стенок.

С вычислительной точки зрения, важное значение имеет выбор управляющего критерия, по которому осуществляется измельчение-заглубление сетки (см. раздел 3). На всех представленных рисунках показаны границы блоков сетки, демонстрирующие адаптивное изменение сетки в процессе расчета. Видно, что область фронта покрыта блоками наименьшего размера, то есть максимальной степени измельчения.

Аналогичные поля температур и концентраций показаны на рис. 13–18 для меньшего расстояния между пластинами,  $L_z = 3$  мм. Рисунки 1–8 соответствуют моментам времени  $t = 1, 3, 5, 8, 10, 14, 16, 19$  мс. Уменьшение зазора щели, как свидетельствуют эксперименты (см. раздел 5.1), увеличивает теплотери и усиливает тенденцию к развитию неустойчивости пламени. В расчетах было получено возникновение впадины на поверхности пламени, приводящее к формированию характерной М-образной формы фронта, см. рис. 14, 16. Для количественного сравнения результатов расчетов с данными экспериментов требуется проведение систематических расчетов, включая моделирование нестехиометрических пламен, которые, как показывают эксперименты, легче теряют устойчивость. Кроме того, расчеты необходимо проводить на более длинных интервалах времен, охватывающих не только начало, но и более поздние стадии развития неустойчивости, вплоть до погасания пламени.

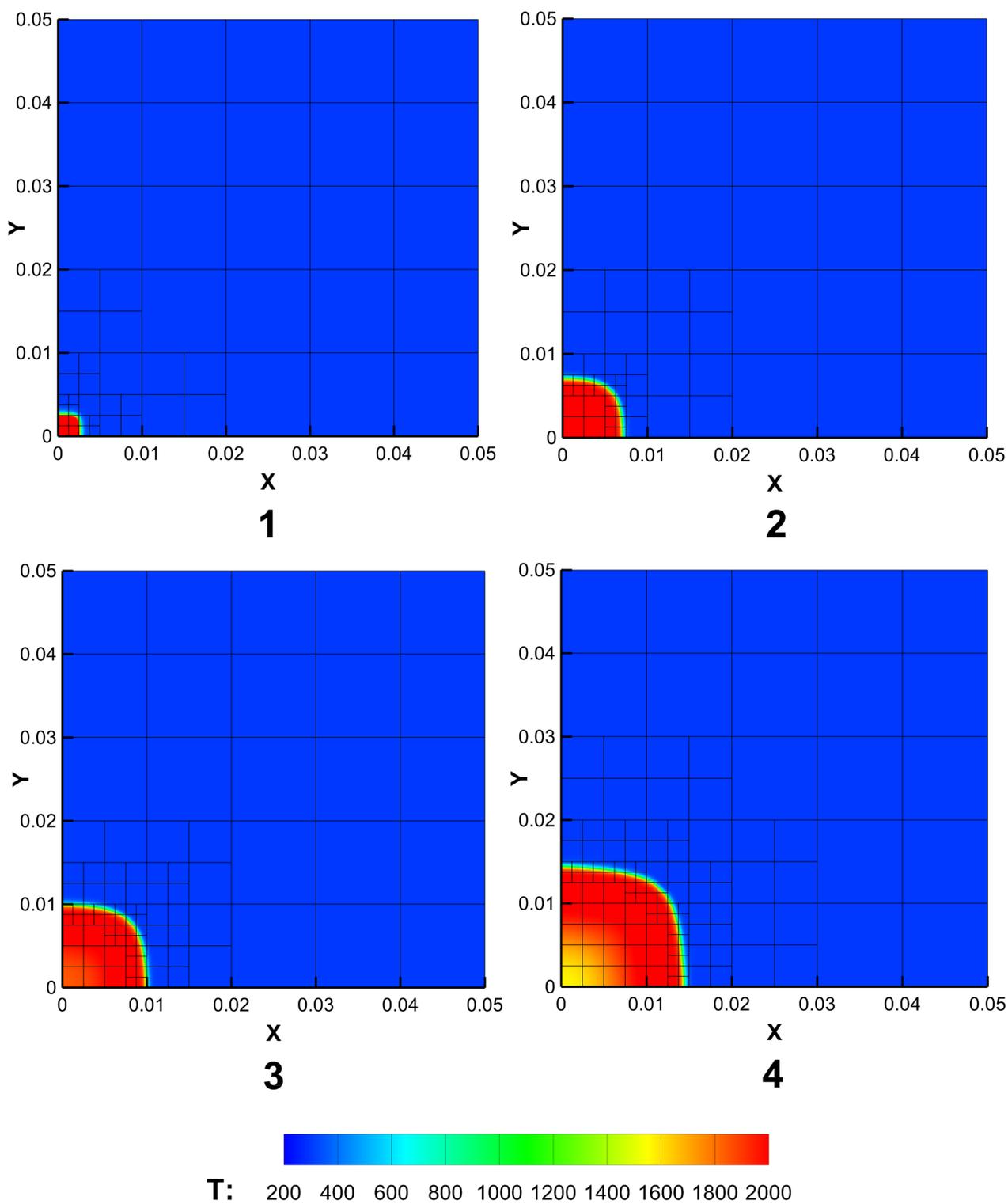


Рис. 7. Развитие метанового пламени при  $L_z = 5$  мм в сечении  $z = 2.5$  мм. Поле температуры в последовательные моменты времени. Часть 1.

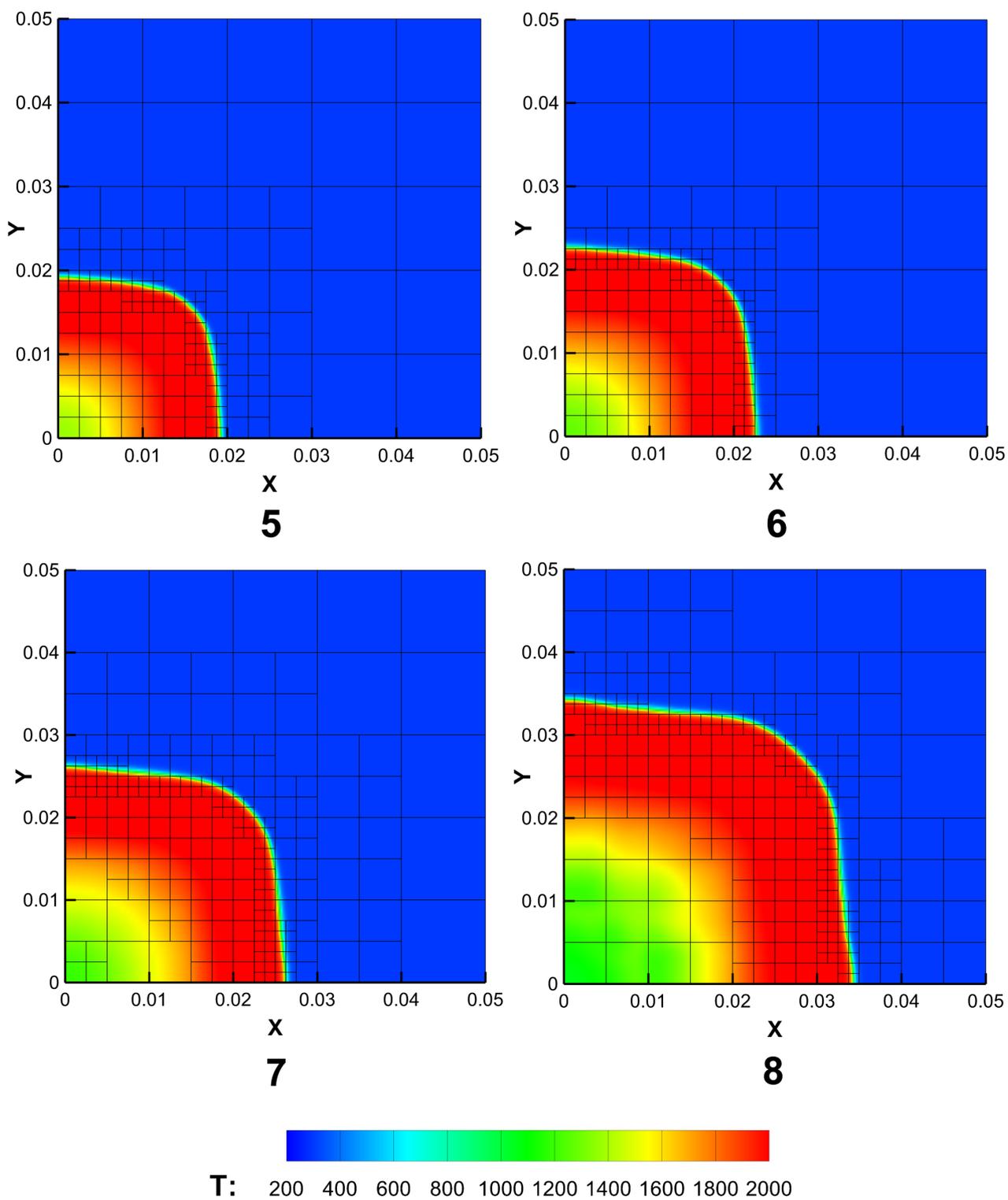


Рис. 8. Развитие метанового пламени при  $L_z = 5$  мм в сечении  $z = 2.5$  мм. Поле температуры в последовательные моменты времени. Часть 2.

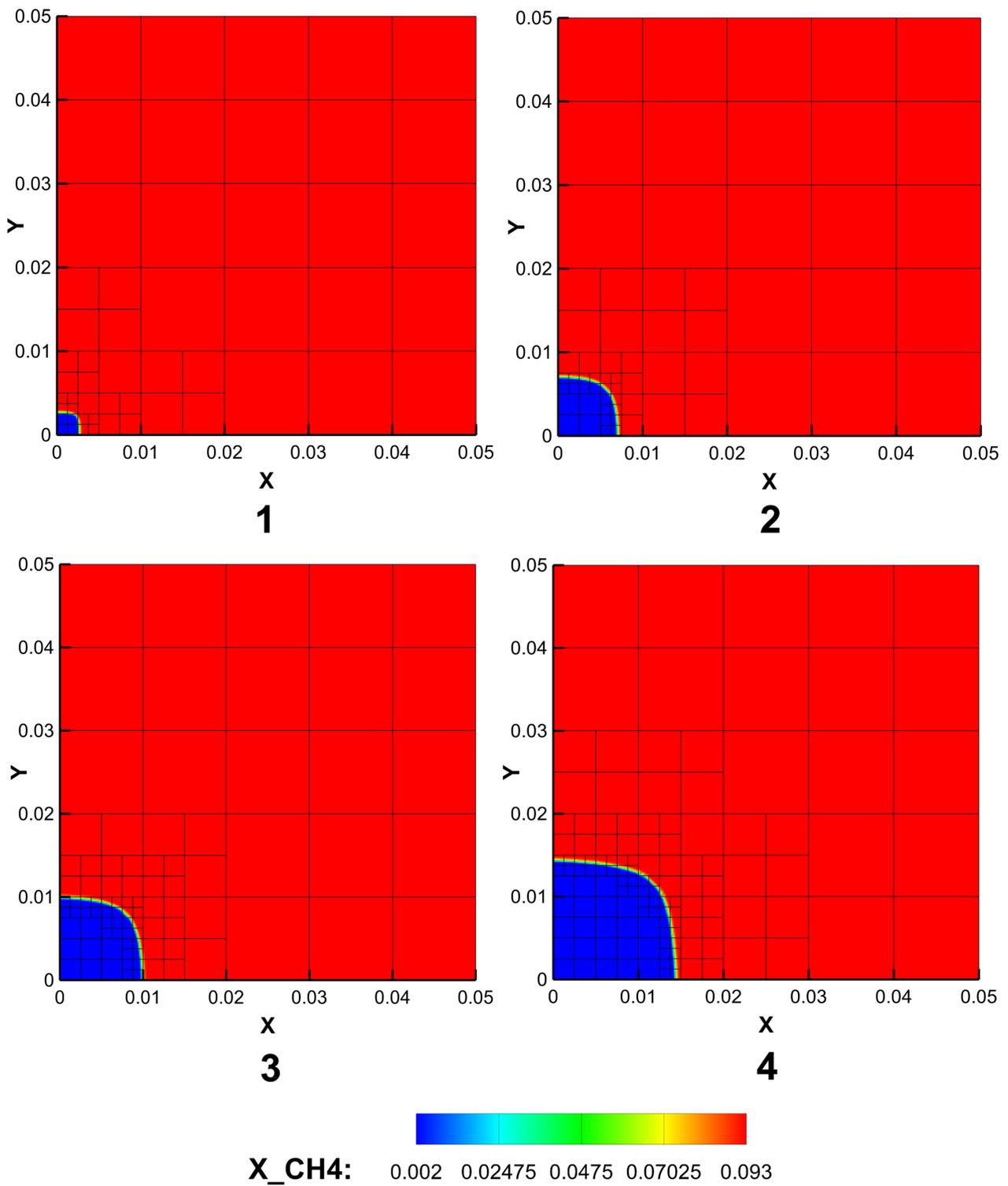


Рис. 9. Развитие метанового пламени при  $L_z = 5$  мм в сечении  $z = 2.5$  мм. Объемная доля метана в последовательные моменты времени. Часть 1.

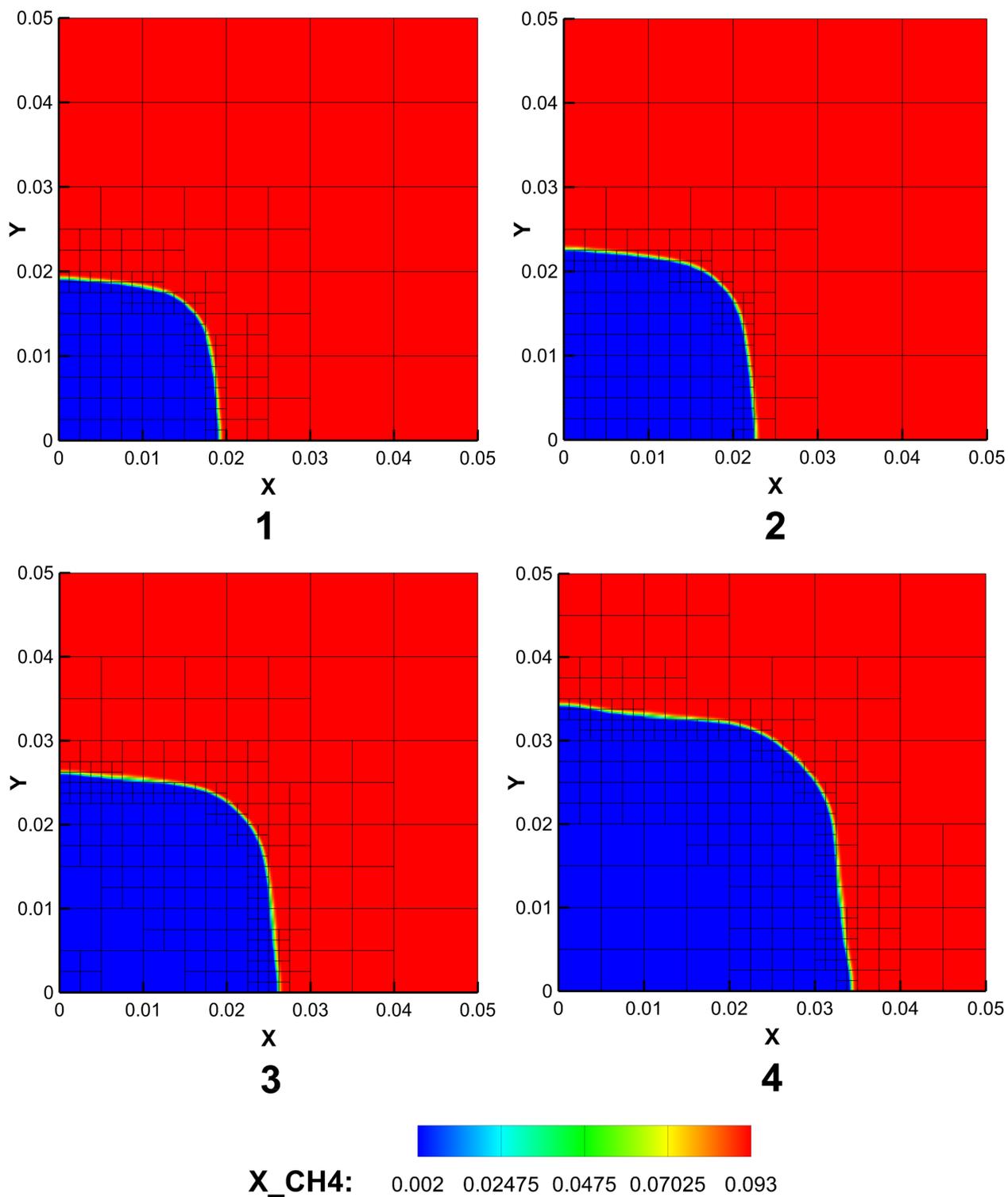


Рис. 10. Развитие метанового пламени при  $L_z = 5$  мм в сечении  $z = 2.5$  мм. Объемная доля метана в последовательные моменты времени. Часть 2.

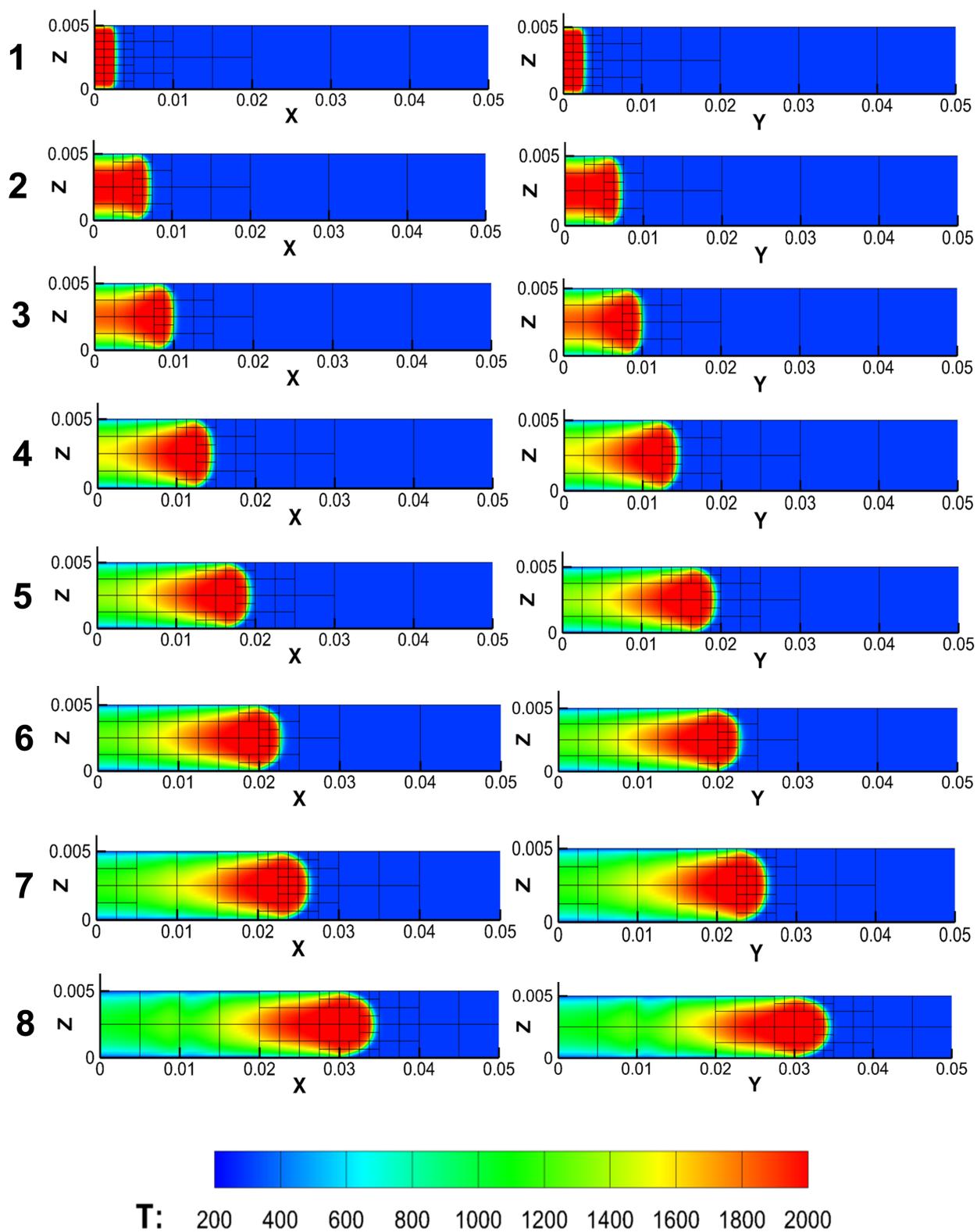


Рис. 11. Развитие метанового пламени при  $L_z = 5$  мм в сечениях  $y = 0$  и  $x = 0$ . Поле температуры в последовательные моменты времени.

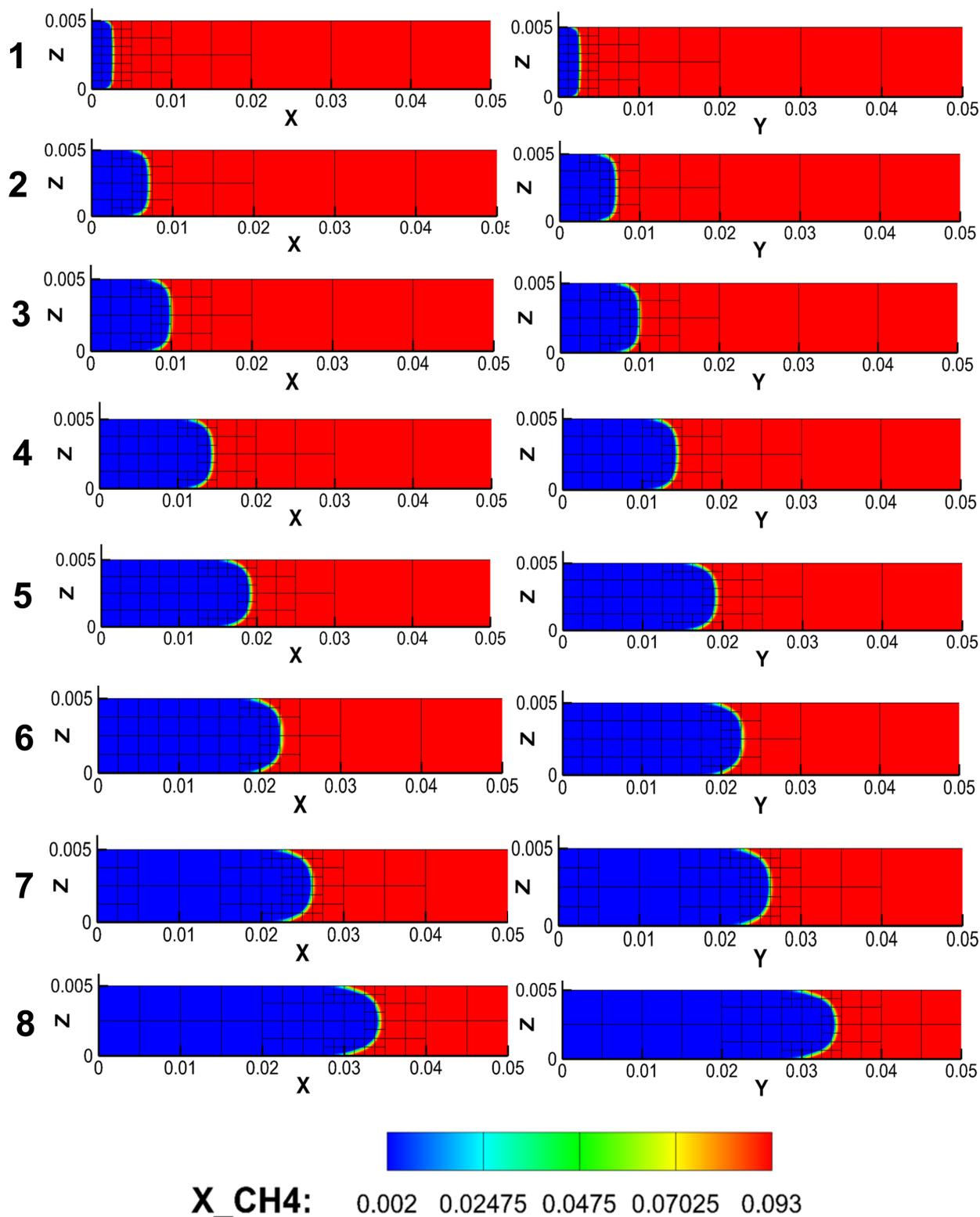


Рис. 12. Развитие метанового пламени при  $L_z = 5$  мм в сечениях  $y = 0$  и  $x = 0$ . Объемная доля метана в последовательные моменты времени.

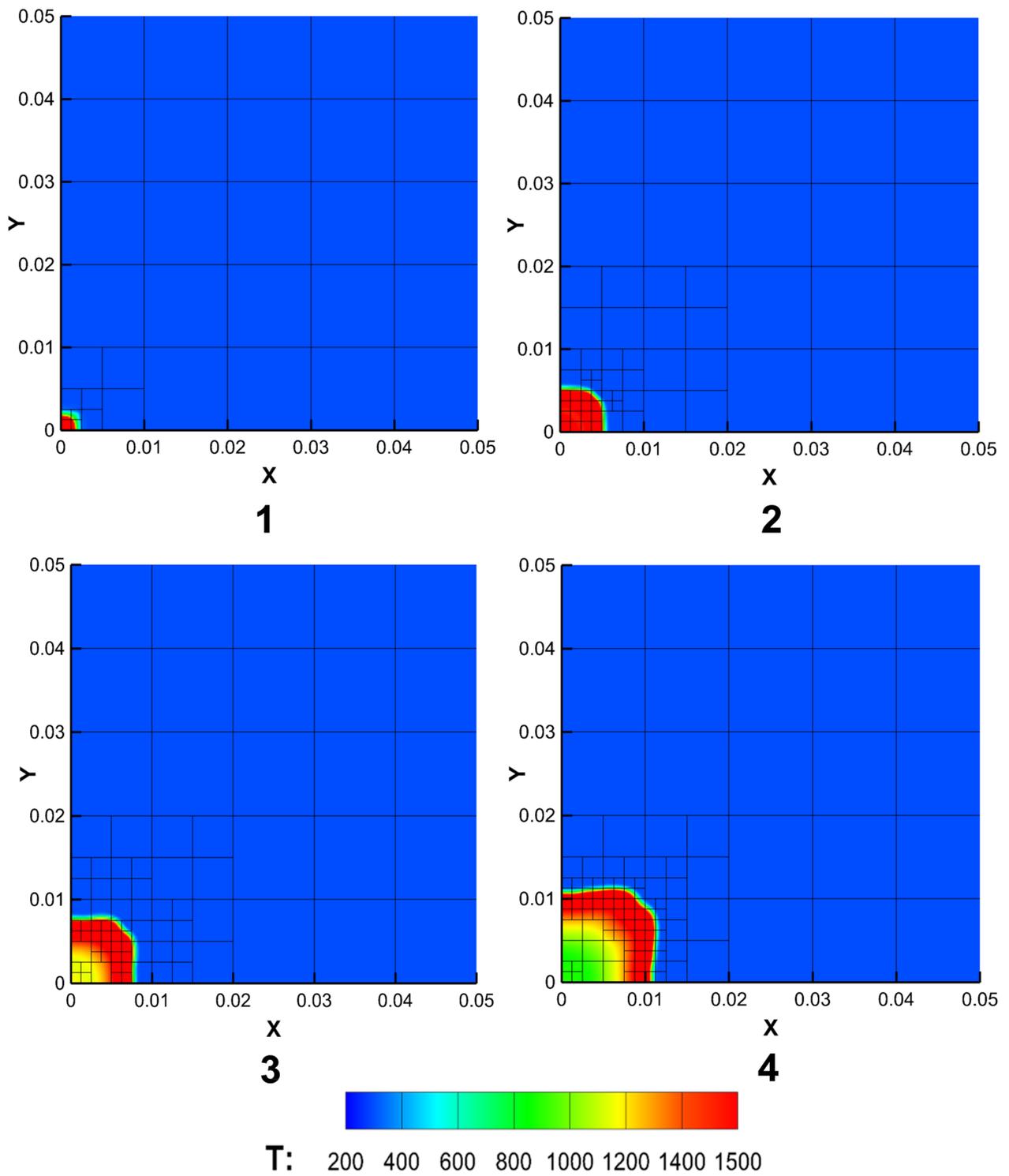


Рис. 13. Развитие метанового пламени при  $L_z = 3$  мм в сечении  $z = 2.5$  мм. Поле температуры в последовательные моменты времени. Часть 1.

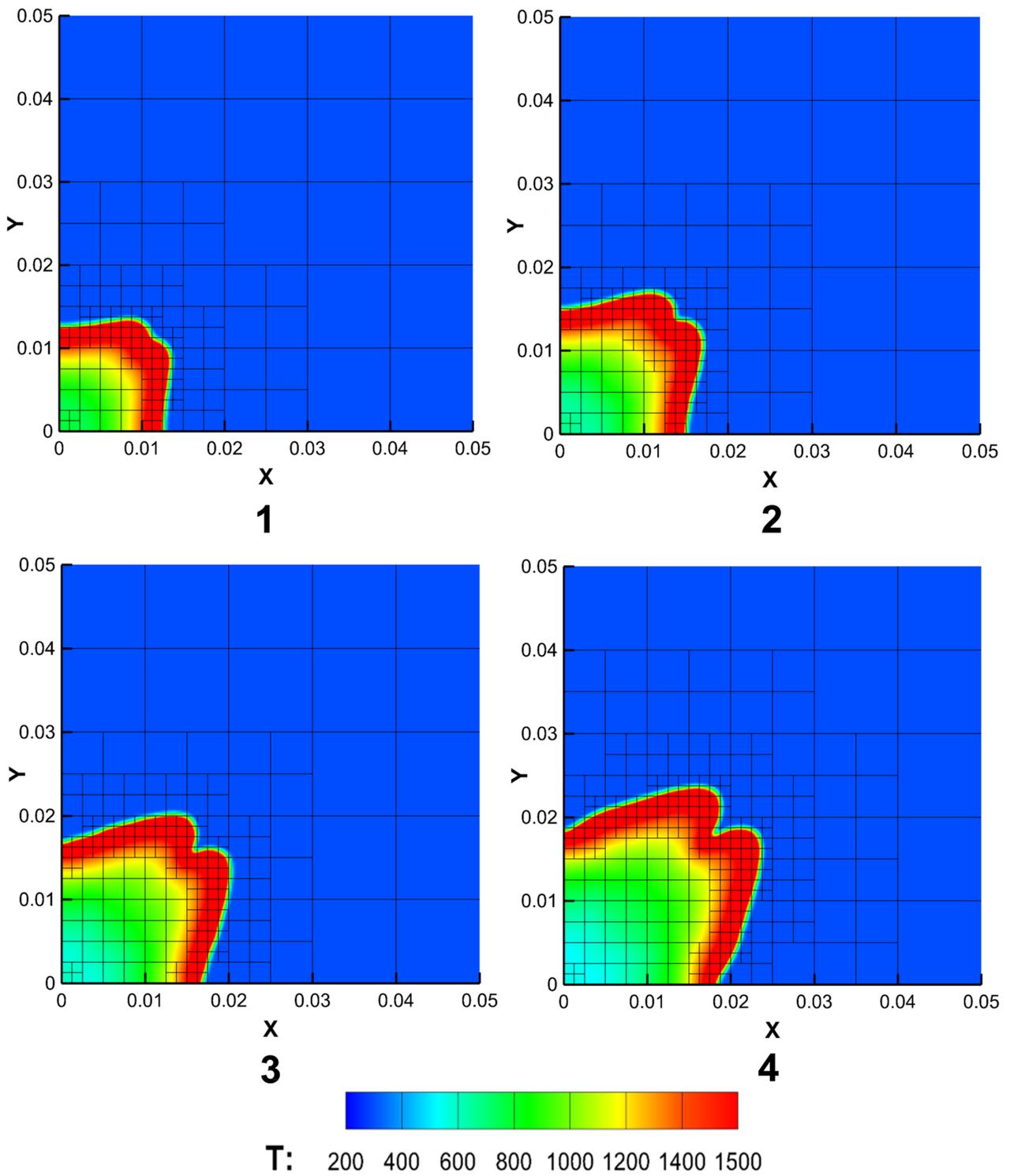


Рис. 14. Развитие метанового пламени при  $L_z = 3$  мм в сечении  $z = 2.5$  мм. Поле температуры в последовательные моменты времени. Часть 2.

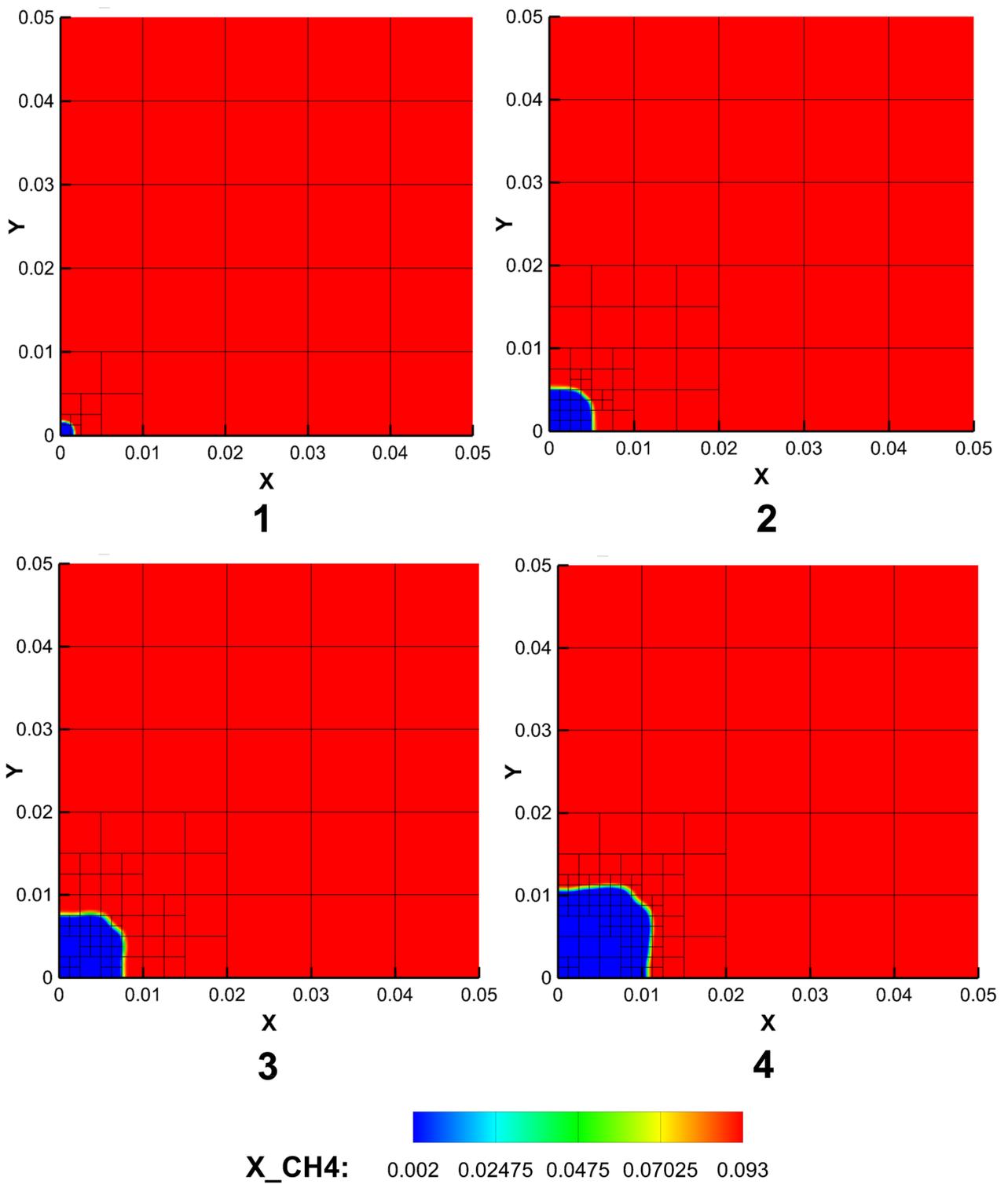


Рис. 15. Развитие метанового пламени при  $L_z = 3$  мм в сечении  $z = 2.5$  мм. Объемная доля метана в последовательные моменты времени. Часть 1.

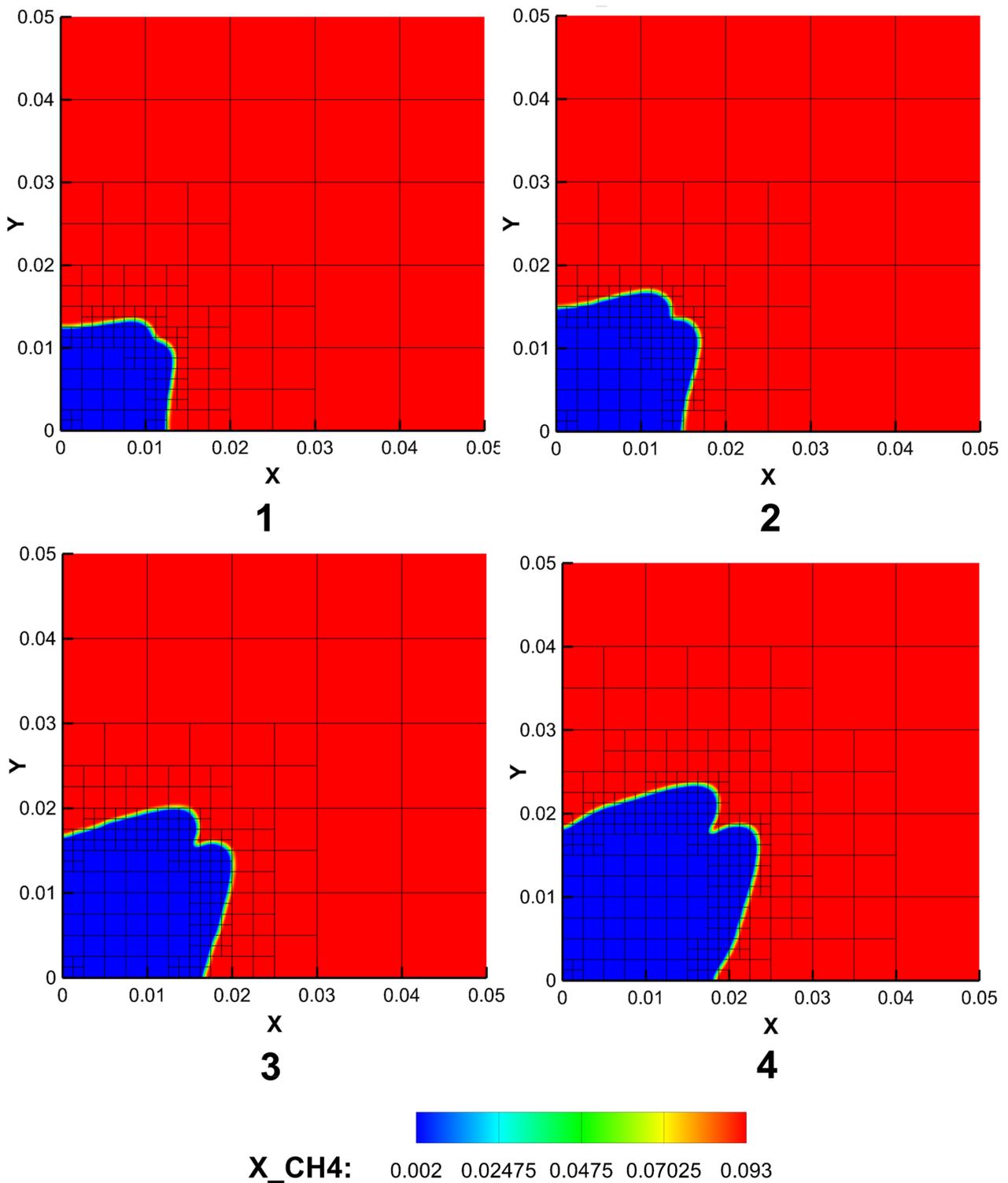


Рис. 16. Развитие метанового пламени при  $L_z = 3$  мм в сечении  $z = 2.5$  мм. Объемная доля метана в последовательные моменты времени. Часть 2.

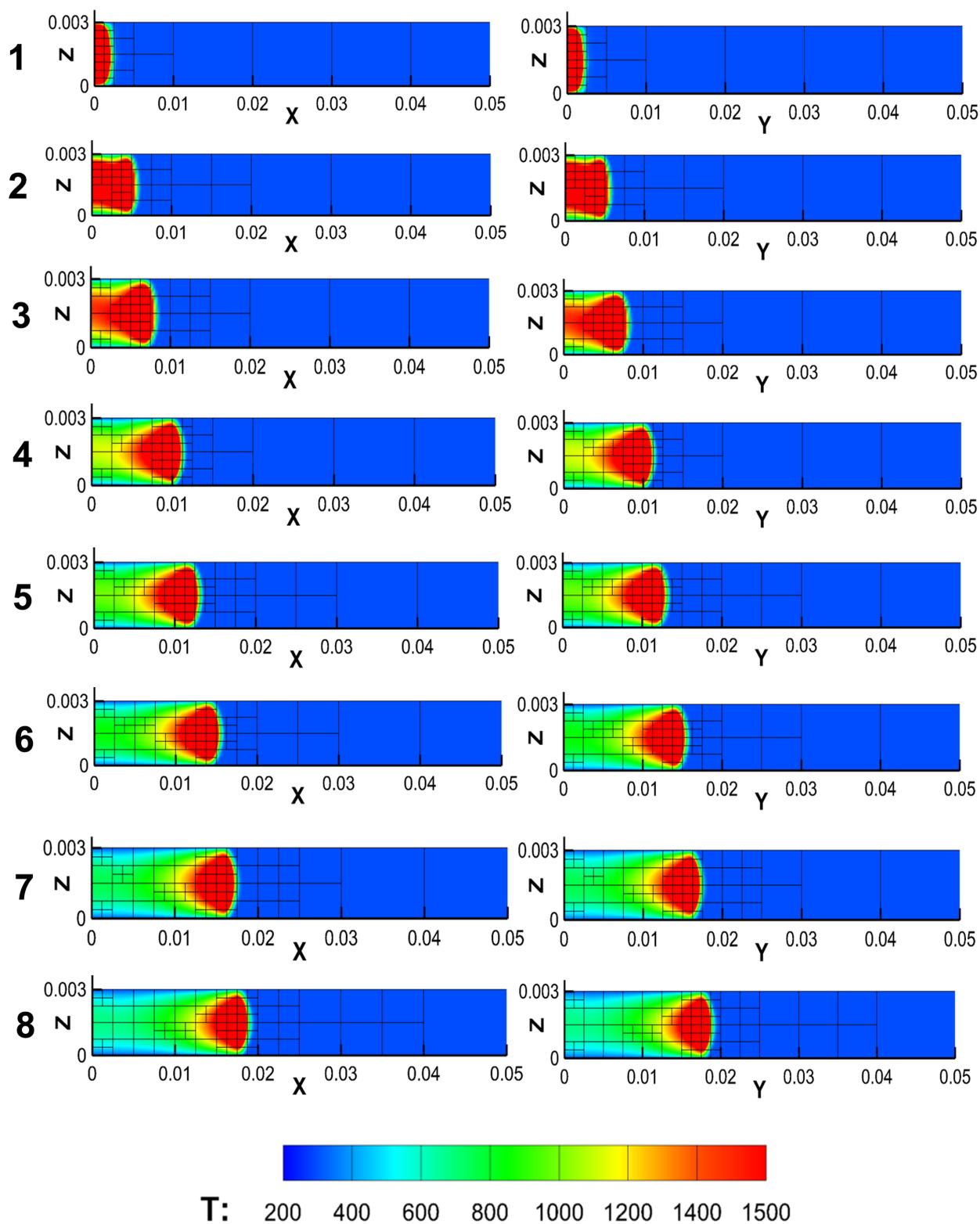


Рис. 17. Развитие метанового пламени при  $L_z = 3$  мм в сечениях  $y = 0$  и  $x = 0$ . Поле температуры в последовательные моменты времени.

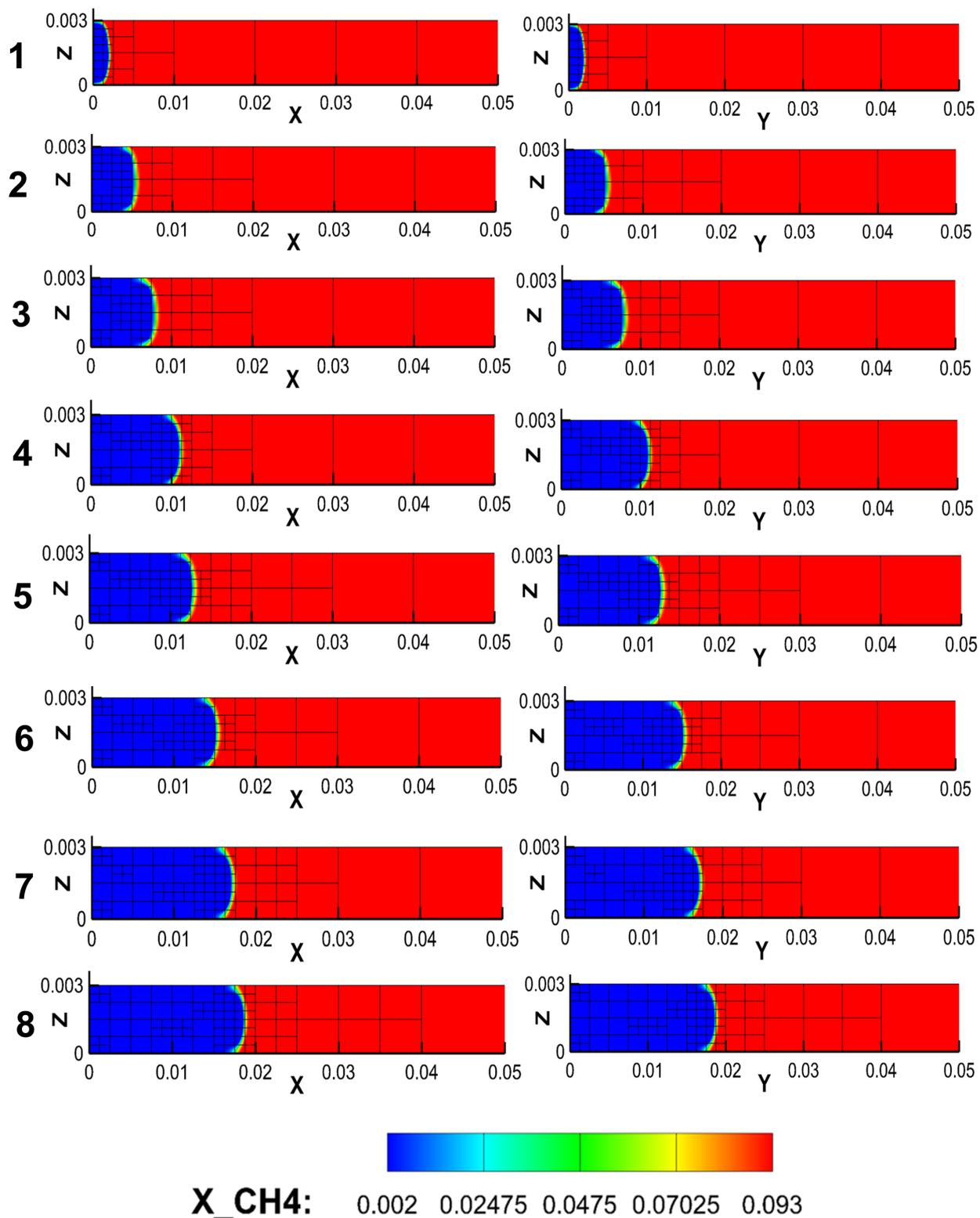


Рис. 18. Развитие метанового пламени при  $L_z = 3$  мм в сечениях  $y = 0$  и  $x = 0$ . Объемная доля метана в последовательные моменты времени.

## 6 Заключение

В работе представлена вычислительная модель ламинарного горения, описана ее реализация и приведен пример использования для расчета горения метана на основе детальной кинетической схемы. Расчеты горения в узком зазоре между двумя параллельными пластинами показали, что при относительно большой толщине зазора наблюдается развитие только длинноволновых возмущений, тогда как уменьшение ширины зазора приводит к развитию коротковолновой неустойчивости пламени.

Численные расчеты продемонстрировали важность правильного подбора критерия, по которому осуществляется измельчение–загрубление адаптивной сетки. Неудачный выбор критерия приводит или к измельчению сетки в значительной части расчетной области, что снижает эффективность расчета, или к выходу пламени на грубый участок сетки с его быстрым погасанием. По-видимому, для надежной работы алгоритма необходимо строить критерий по нескольким переменным одновременно.

Дальнейшие исследования будут посвящены применению разработанного программного обеспечения для систематических расчетов горения бедных и богатых (в том числе околопредельных) метановоздушных смесей, что позволит провести количественное сопоставление численных результатов с экспериментом. Кроме того, планируется проведение расчетов распространения пропановых пламен в узком зазоре, также подверженных развитию неустойчивости.

## Список литературы

- [1] В.В. Замащиков. Газовые вращающиеся пламена // Физика горения и взрыва. 2003. Т. 39. № 2. с. 9–10.
- [2] В.В. Замащиков. Спиновое газовое горение в узкой щели.// Физика горения и взрыва. 2006. Т. 42. № 3. с. 23–26.
- [3] 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.
- [4] G. Pizza, C.E. Frouzakis, J. Mantzaras, A.G. Tomboulides. Dynamics of premixed hydrogen/air flames in microchannels // Combustion and Flame. 2008. V. 152, № 4. P. 433–450.
- [5] 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.
- [6] В.П. Самсонов, М.М. Алексеев, И.В. Смирнова. Механизм формирования спиновоего фронта пламени // Успехи физических наук. 2011. Т. 181, № 9. С. 965–972.
- [7] 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>
- [8] 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
- [9] 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
- [10] John Bell and Marcus Day. Chapter 13 «Adaptive Methods for Simulation of Turbulent Combustion». Turbulent Combustion Modeling: Advances, New Trends and perspectives. Volume 95 of Fluid mechanics and its applications, Springer London, 2010, p. 201–329
- [11] 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/flf.234

- [12] C.W. Shu. High order weighted essentially non-oscillatory schemes for convection dominated problems // SIAM Review, 2009, v. 51, p. 82–112.
- [13] Ю.В. Лапин, М.Х. Стрелец. Внутренние течения газовых смесей. М.: Наука, 1989.
- [14] T. Poinso, D. Veynante. Theoretical and Numerical Combustion. 2nd Ed. Philadelphia, Edwards Inc., 2005, 522 p.
- [15] 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
- [16] R.J. Kee, F.M. Rupley and J.A. Miller «The CHEMKIN Thermodynamic Data Base». 1990, Sandia National Laboratories Report SAND87-8215B
- [17] А. Буркат. «База термодинамических данных 3-го тысячелетия об идеальных газах и конденсированных средах для изучения горения». Технион, Авиационный факультет (ТАЕ) доклад 867 от января 2001 года. <http://garfield.elte.chem/Burcat/burcat.html>
- [18] 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
- [19] The FLASH Code. <http://flash.uchicago.edu/site/flashcode/>
- [20] J.B. Bell and D.L. Marcus. A second-order projection method for variable-density flows // J. Comput. Phys., 101:334-348, 1992
- [21] М.П. Галанин, Е.Б. Савенков. Методы численного анализа математических моделей. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010, 591 с.
- [22] T.P. Coffe, J.M. Heimerl. Transport algorithms for premixed laminar steady-state flames // Combust. Flame., 1981, 43, 273
- [23] V. Giovangigli. Convergent iterative methods for multicomponent diffusion // IMPACT Comput. Sci. Eng., 1991, 3, p. 244–76
- [24] 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>

- [25] Parallel Adaptive Mesh Refinement.  
[http://www.physics.drexel.edu/~olson/\paramesh-doc/Users\\_manual/amr.html](http://www.physics.drexel.edu/~olson/\paramesh-doc/Users_manual/amr.html)
- [26] HYPRE Software.  
[http://computation.llnl.gov/project/linear\\_solvers/software.php](http://computation.llnl.gov/project/linear_solvers/software.php)
- [27] 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.
- [28] HDF5 Tutorial. <https://www.hdfgroup.org/HDF5/Tutor/>
- [29] TecIO Library. <http://www.tecplot.com/my/tecio-library/>
- [30] Гибридный вычислительный кластер K-100.  
<http://www.kiam.ru/MVS/resources/k100.html>
- [31] Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН.  
<http://www.jscc.ru>
- [32] B. Rogg. Sensitivity analysis of laminar premixed CH<sub>4</sub>-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.