Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

«Национальный исследовательский Томский государственный университет»

На правах рукописи

Derugh

## ДЕМЕНТЬЕВ АЛЕКСАНДР АЛЕКСАНДРОВИЧ

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПЛАМЕНИ В ГАЗОВЗВЕСЯХ С УЧЕТОМ ОТНОСИТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ ФАЗ

01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

### ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

> Научный руководитель: доктор физико-математических наук, доцент Крайнов Алексей Юрьевич

## оглавление

ВВЕДЕНИЕ	4
1 СОСТОЯНИЕ ВОПРОСА И ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЯ	15
1.1 Обзор экспериментальных данных о гашении горючих газовых	
смесей инертными порошковыми составами	15
1.2 Обзор теоретических данных по гашению газовых пламен	
инертными порошками	20
1.3 Обзор экспериментальных исследований горения газовзвесей с	
реакционноспособными частицами	24
1.4 Обзор теоретических исследований горения газовзвесей с	
реакционноспособными частицами	29
1.5 Постановка цели и задач исследования	36
2 ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГОРЕНИЯ ГИБРИДНОЙ	
ГАЗОВЗВЕСИ	39
2.1 Постановка задачи о распространении ламинарного пламени в	
реагирующем газе с взвесью реакционноспособных частиц	40
2.2 Метод численного решения системы уравнений	
математической модели горения гибридной газовзвеси	48
2.2.1 Разностная аппроксимация системы уравнений	
математической модели	49
2.2.2 Применение метода прогонки для решения разностных	
уравнений	51
2.2.3 Вычисление скорости распространения фронта пламени	54
2.2.4 Алгоритм и программная реализация	56
2.3 Результаты тестирования методики и программы для расчета	
распространения ламинарного пламени в реагирующем газе с взвесью	
реакционноспособных частиц	57
2.3.1 Тестовая задача №1. Решение задачи о теплопроводности в	
тонкой пластинке	57

2.3.2 Тестовая задача №2. Задача о тепловом взрыве	59
2.3.3 Тестовая задача №3. Расчет скорости распространения волны	
горения в газе	62
2.3.4 Тестовая задача № 4. Расчет скорости распространения волны	
горения в газе с инертными частицами	64
Выводы	64
З РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЛАМИНАРНОГО ПЛАМЕНИ В ГАЗЕ С	
ИНЕРТНОЙ ПЫЛЬЮ	66
3.1 Распространение фронта пламени в газе с инертными	
частицами. Реакция первого порядка	66
3.2 Влияние инертных частиц на скорость распространения	
пламени при зажигании его у «закрытого торца» и «открытого торца»	75
3.3 Распространение пламени в газе с инертной пылью. Реакция	
второго порядка	85
Выводы	91
4 РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЛАМИНАРНОГО ПЛАМЕНИ В ГАЗОВЗВЕСИ	
РЕАГИРУЮЩИХ ЧАСТИЦ	93
4.1 Распространение пламени в газовзвеси реакционноспособных	
частиц в воздухе	93
4.2 Распространение пламени в газовзвеси горючих частиц в	
газовой смеси горючего и окислителя	103
4.3 Сравнение результатов численного моделирования	
распространения ламинарного пламени в пылевоздушной газовзвеси и	
экспериментальных данных	117
Выводы	123
Заключение	125
Список использованных источников	127

#### введение

Газовзвесями называются смеси, в которых в качестве дисперсионной среды выступает газ, а в качестве дисперсной фазы – твердое вещество. По степени дисперсности ЭТИ системы могут подразделяться на  $10^{-9} - 10^{-7}$  M), частиц ультрамикрогетерогенные ИЛИ золи (размер микрогетерогенные или порошки  $(10^{-7} - 10^{-5} \text{м})$  и грубодисперсные (>  $10^{-5} \text{ м}$ ). Примером грубодисперсной системы может служить песок.

Газовзвеси порошков различных веществ встречаются в природе, технике, технологии. Порошки металлов, их окислов используются в современных порошковых технологиях. В процессах сушки, десублимации, дробления, перемалывания также получаются газовзвеси порошков. Газовзвеси частиц металлов возникают при получении порошков металлов электровзрывом проводников. В процессах добычи полезных ископаемых также образуются газовзвеси частиц. Особую опасность представляют газовзвеси угольной пыли в метановоздушной смеси, которые образуются при добыче угля шахтным методом.

Некоторые газовзвеси являются взрыво- и пожароопасными и поэтому изучается их поведение в случае возникновения очагов возгорания: определяются концентрационные пределы горения, скорости распространения пламени в таких газовзвесях, а также анализируются способы и средства подавления горения в случае его возникновения.

Газовзвеси некоторых порошков используются как огнепреградители или как тушащие средства при горении газовых смесей (тушащие порошки, используемые в средствах огнепреграждения и взрывоподавления в угольных шахтах), а также при тушении пожаров с использованием порошковых огнетушителей.

Мелкодисперсные частицы возникают как отходы или сопутствующие продукты различных производств: текстильного, пищевого, химического, деревообрабатывающего, фармацевтического производств, добычи полезных

ископаемых и т.д., так и основным производственным компонентом различные пудры, гранулы, порошки металлов и т.д.

Сферы применения порошков охватывают широкий спектр областей промышленности: атомная энергетика, теплоэнергетика, строительство, производство пластмасс, военная промышленность, металлургия и многие другие.

В случае если газовзвесь способна к воспламенению и экзотермической реакции, изучается её поведение при возгорании – верхний и нижний концентрационные пределы горения, скорости распространения пламени при возможности реализации детонационных и ударноволновых пожаре, режимов. Определяются наиболее эффективные методы по подавлению дефлаграции или детонации дисперсной смеси. Кроме того порошки инертных материалов очень широко используются как тушащие средства для электрических установок газов. высоковольтных И для создания огнепреграждающих пылевых заслонов в шахтах и производственных помещениях в которых существует опасность возникновения горючих газовых смесей.

Особенную опасность представляет воспламенение И горение метановоздушной смеси в угольных шахтах. При возникновении очага возгорания метановоздушная смесь начинает реагировать в ламинарном увеличением скорости температуры, режиме, затем С И 3a счет конвекционных процессов, горение переходит в турбулентный режим и далее, если газовая смесь способна к детонации, горение переходит в детонацию. В процессе движения фронта пламени, мелкодисперсные частицы угля поднимаются со стен выработок, смешиваются с газом и создают еще более опасную пожаро - взрывоопасную ситуацию.

За последние годы производственные аварии, связанные со взрывами метано-угольной смеси на шахтах России, унесли жизни более чем 300 человек. Наиболее крупные катастрофы произошли на шахтах Кузнецкого угольного бассейна: 19 марта 2007 года на шахте Ульяновской

(г. Новокузнецк) – погибло 110 человек, 8-9 мая 2010 года на шахте Распадской (г. Междуреченск) – 91 человек.

Таким образом, исследование процессов горения и воспламенения газодисперсных систем является важной областью научно-технического знания, и имеет четко выраженный научный и прикладной интерес.

В связи с этим, целью диссертации является:

Разработать физико-математические модели и на их основе провести всесторонний расчетно-теоретический анализ влияния теплового расширения и относительного движения фаз при распространении ламинарного пламени в реакционноспособных газовзвесях различной природы: в газовзвеси инертных частиц в реагирующем газе; в газовзвеси частиц реагирующих с окислителем газовой фазы; в гибридной газовзвеси.

Для достижения цели диссертации решить следующие задачи:

1 Разработать физико-математическую модель горения гибридной газовзвеси (газовзвеси, состоящей из частиц, реагирующих с окислителем газовой фазы, взвешенных в смеси газообразных окислителя и горючего), учитывающую тепловое расширение газа и возникающее при этом относительное движение частиц и газа.

2 Разработать методику численного решения системы уравнений математической модели, провести ее всестороннее тестирование.

3 Провести численное исследование влияния теплового расширения газа и относительного движения фаз на скорость распространения фронта пламени в газовзвесях различной природы:

 а) в газовзвеси инертных частиц в реагирующем газе, имеющем избыток окислителя;

б) в газовзвеси инертных частиц в смеси газообразных окислителя и горючего в заданном стехиометрическом соотношении;

в) в газовзвеси частиц реагирующих с окислителем газовой фазы;

г) в гибридной газовзвеси;

4 Изучить зависимости скорости распространения пламени в газовзвесях от параметров дисперсной фазы: массовой концентрации частиц, размера частиц, формально-кинетических параметров гетерогенной реакции частиц с окислителем газовой фазы.

5 Исследование влияния теплового расширения газа и относительного движения фаз на скорость распространения фронта пламени в газовзвесях различной природы провести путем сравнения результатов расчетов по моделям, учитывающим и не учитывающим тепловое расширение и относительное движение фаз.

обусловлена Актуальность поставленной задачи тем, что реакционноспособные газодисперсные среды встречаются В природе, используются в промышленности, в частности при добыче полезных ископаемых, являются продуктом хозяйственной деятельности человека. Техногенные аварии и катастрофы, связанные с воспламенением и горением подобных систем приносят огромный материальный ущерб и человеческие жертвы.

#### Положения, выносимые на защиту:

1 Физико-математическая модель распространения пламени в гибридной газовзвеси, учитывающая гомогенные в газе и гетерогенные на поверхности частиц химические реакции, движение газа за счет теплового расширения, массообмен, теплообмен и динамическое взаимодействие между фазами при ламинарном распространении пламени.

2 Сравнение результатов математического моделирования горения газовзвеси угольной пыли в воздухе с экспериментальными данными показало, что созданная математическая модель адекватно отражает основные физико-химические процессы, проходящие в существующих газодисперсных системах, и может использоваться для оценки скорости распространения ламинарного пламени в газовзвесях реагирующих частиц.

3 Скорость пламени в газовзвеси реагирующих с окислителем газовой фазы частиц увеличивается с ростом массовой концентрации частиц до ее

значений, значительно больших стехиометрического соотношения и затем начинает уменьшаться. Максимум скорости распространения пламени смещен от стехиометрического соотношения в сторону избытка горючих частиц.

4 Выяснено, что при горении гибридной газовзвеси в случае малых концентраций горючего в газе (бедные смеси), присутствие в газовой смеси реагирующих частиц увеличивает скорость фронта пламени. В богатых смесях реакционноспособные частицы способны оказывать тормозящее воздействие на пламя, подобно инертным частицам.

5 Для всех изученных газовзвесей, реагирующих в режиме распространения ламинарного пламени, в зоне химической реакции наблюдается повышенная концентрация частиц, которая объясняется их инерцией. Поэтому для адекватного моделирования процессов горения газовзвесей необходимо учитывать не только тепловую, но и динамическую релаксацию между фазами.

Научная новизна выполненной диссертации заключается в следующем:

1 Разработана новая физико-математическая модель распространения пламени в гибридной газовзвеси, учитывающая гомогенные в газе и гетерогенные на поверхности частиц химические реакции, движение газа за счет теплового расширения, массообмен, теплообмен и динамическое взаимодействие между фазами при ламинарном распространении пламени.

2 Доказано, что скорость пламени в газовзвеси реагирующих с окислителем газовой фазы частиц увеличивается с ростом массовой концентрации частиц до ее значений, значительно больших стехиометрического соотношения и затем начинает уменьшаться. Это происходит из-за увеличения площади гетерогенного реагирования частиц с окислителем газовой фазы во фронте горения, наблюдается для различных размеров частиц, и сопровождается их недогоранием.

З Выяснено, что в случае малых концентраций газового горючего в

гибридной газовзвеси присутствие в газовой смеси реагирующих частиц увеличивает скорость фронта пламени. В богатых же смесях, реакционноспособные частицы способны оказывать тормозящее воздействие на пламя, подобно инертным частицам.

4 Обнаружено, что для всех изученных газовзвесей, во фронте пламени наблюдается повышенная концентрация частиц, которая объясняется их инерцией и зависит от размера частиц.

5 Сравнение результатов математического моделирования горения газовзвеси угольной пыли в воздухе с экспериментальными данными показало, что созданная математическая модель адекватно отражает основные физико-химические процессы, проходящие в существующих газодисперсных системах, и может использоваться для оценки скорости распространения ламинарного пламени в газовзвесях реагирующих частиц.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, подтверждается:

- обоснованностью предположений математической модели и применением классических методов математического моделирования;

- сеточной сходимостью численного решения задач горения газовзвесей при уменьшении шагов разностной схемы;

- совпадением результатов численного решения модельных задач с аналитическими результатами и результатами, опубликованными в научной литературе;

- удовлетворительным совпадением данных численного моделирования с экспериментальными данными.

Методологическая, научная и практическая значимость результатов исследований заключается в том, что:

- разработанная математическая модель и методика численного решения задач горения газовзвесей может быть использована для моделирования процессов распространения пламени в газодисперсной смеси горючих газа и частиц.

- математическая модель и методика расчета показали результаты, удовлетворительно согласующиеся с экспериментальными данными, и могут быть использованы при теоретическом анализе горения химических активных газодисперсных систем.

- модели позволяют более точно определить параметры за фронтом горения и скорость ламинарного пламени. Учет относительного движения фаз для газовзвесей с инертными частицами позволил выявить эффект увеличения массовой концентрации частиц в зоне интенсивных химических превращений, который однако недостаточен для существенного влияния на скорость горения.

- полученные зависимости скорости распространения пламени в гибридной газовзвеси следует учитывать при проектировании автоматических систем взрывоподавления и пожаротушения при определении времен задержки их срабатывания.

#### Апробация работы.

Материалы работы докладывались на 7-ой Международной школесеминаре по изучению структуры пламени (Новосибирск, 11 – 19 июля 2011 г.), на II Всероссийской научной конференции «Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики» (Томск, 11 – 13 2012 VIII Всероссийской г), научной конференции апреля на «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики» (Томск, 23 – 25 апреля 2013 г), на II Всероссийской молодежной научной конференции «Успехи химической физики» (Черноголовка, 19 – 24 мая 2013 г), на III Всероссийской научной конференции «Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики» (Томск, 27 – 29) ноября 2013 г).

Работа частично выполнялась в рамках НИР (Шифр 1.23.12, № госрегистрации отчета 01200903821) «Разработка математических моделей горения и взрыва высокоэнергетических веществ с наночастицами, механического поведения оксидной нанокерамики и методик их численной

реализации на многопроцессорном кластере с использованием параллельных алгоритмов», НИР №7.3960.2011 (№ госрегистрации отчета 01201257785) «Разработка теоретических основ технологии проектирования новых материалов и энергетических установок».

Основные результаты диссертации представлены в 7 печатных работах и 2 НИР. Печатные работы опубликованы отчетах 0 В журналах, рекомендованных ВАК опубликования исследований ДЛЯ ПО теме диссертации: «Физика горения и взрыва» - 1, «Известия вузов. Физика» - 1, «Вестник ТГУ. Математика и механика» - 1, и 4 статьи в материалах вышеперечисленных конференций.

#### Структура и объем диссертации:

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованных источников. Объем диссертации составляет 138 страниц. Список использованных источников содержит 104 наименования.

#### Краткое изложение содержания

**Во введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы цели и задачи исследования, новизна и практическая ценность полученных результатов, представлены положения, выносимые на защиту.

В первой главе проведен обзор научно-технической литературы посвященной горению дисперсных сред. Рассмотрены экспериментальные и теоретические работы по гашению горения газовых смесей инертными порошковыми составами. Также в обзоре представлены работы имеющие предметом исследования горение газовзвесей с реакционноспособными частицами. Анализ рассмотренных работ показал, что:

- Модели, описывающие процессы, возникающие при гашении пламени с помощью инертных порошков, хорошо разработаны. Они широко применяются при прогнозировании параметров сред, таких как пределы воспламенения смеси, необходимые пламегасящие концентрации и т.д.

- Практическое применение газовзвесей частиц, реагирующих с

кислородом воздуха, встречается редко. Математические модели таких систем используются для моделирования макрокинетических процессов горения и зажигания.

Газовзвеси состоящие из смеси горючего газа, газообразного окислителя, инертного газа и реакционноспособных частиц являются наиболее пожаро-взрывоопасными. Примером может служить газовзвесь угольной метановоздушной смеси. Существует пыли В множество экспериментальных и теоретических работ, посвященных горению таких дисперсных систем, так как проблема взрывоподавления и обеспечения пожарной безопасности в производствах, где они присутствуют, очень актуальна.

- При моделировании горения и воспламенения газовзвесей в большинстве математических моделей не учитывается движение смеси за счет теплового расширения среды. Подобное движение среды может влиять на теплообмен между дисперсионной средой и дисперсной фазой, и соответственно оказывать влияние на скорость распространения фронта пламени по газовзвеси.

С учетом выводов сделанных по обзору литературы, сформулированы цели и задачи исследования.

Во второй главе представлена общая физико-математическая постановка задачи о распространении ламинарного пламени в реагирующем газе состоящем из горючего, окислителя и инертного газа, с взвесью реакционноспособных частиц (гибридная газовзвесь). Из общей постановки получены частные варианты задачи: горение газа с взвешенными в нем инертными частицами, горения газовзвеси реакционноспособных частиц в смеси газообразного окислителя и инертного газа.

Изложена методика решения задачи. Представлена конечно-разностная аппроксимация дифференциальных уравнений системы В частных описано применение производных, метода прогонки ДЛЯ решения параболических уравнений, определение скорости фронта пламени

относительно неподвижного наблюдателя. Подробно описаны алгоритм и программная реализация решения задачи.

Представлены результаты тестирования методики и программы для расчета распространения ламинарного пламени в реагирующем газе с реакционноспособных Представлены взвесью частиц. результаты тестирования при решении модельных задач: задачи теплопроводности в тонкой пластинке, задачи 0 тепловом взрыве, расчета скорости распространения волны горения в газе, расчета скорости распространения волны горения в газе с инертными частицами.

В третьей главе представлена физико-математическая модель распространения ламинарного пламени в газе с инертной пылью с учетом теплового расширения газовой смеси и относительного движения фаз. Рассмотрены реакции первого (реакция в газе зависит от концентрации горючего) и второго порядка (реакция зависит от концентраций как окислителя, так и горючего). Получены зависимости значений видимой скорости распространения фронта пламени от параметров дисперсной фазы (массовой концентрации, размера частиц) и от концентрации горючего в газе.

Рассмотрены постановки задачи для зажигания у «открытого» и «закрытого торцов». Результаты сравнения численного решения показали согласование значений нормальной скорости горения смеси, скорости истечения продуктов реакции в случае зажигания у «открытого торца» и скорости теплового расширения в случае зажигания у «закрытого торца», при одинаковых исходных данных. Что служит дополнительным подтверждением адекватности математической модели и правильности работы программы для ЭВМ.

Сделан вывод, что при моделировании процессов распространения пламени в газовзвесях, необходимо учитывать не только тепловую релаксацию между дисперсионной средой и дисперсной фазой, но и относительное движение фаз, которое возникает при тепловом расширении газа.

**В четвертой главе** рассматривается распространение ламинарного пламени в газовзвеси с реагирующими частицами.

Представлена физико-математическая постановка описывающая горение реакционноспособных частиц в газовой смеси окислителя (кислорода) и инертного газа. Получены зависимости значений видимой скорости распространения фронта пламени от параметров характеризующих тепло - и массообмен дисперсной фазы, OT размера частиц И ИХ массовой концентрации в газовзвеси. Проведено исследование зависимости скорости фронта пламени от значений энергии активации реакции на частицах.

Также представлены результаты моделирования распространения пламени в гибридной газовзвеси. Приведены результаты сравнительного анализа влияния параметров дисперсной фазы (массовой концентрации, размеров частиц) на скорость горения при различных концентрациях газообразного горючего в газе.

Выяснено, что при горении гибридной газовзвеси в случае малых концентраций горючего в газе (бедные смеси), присутствие в газовой смеси реагирующих частиц увеличивает скорость фронта пламени. В богатых смесях реакционноспособные частицы способны оказывать тормозящее воздействие на пламя, подобно инертным частицам.

Представлены результаты сравнения математического моделирования горения газовзвеси угольной пыли в воздухе с экспериментальными данными. Сравнение с экспериментальными данными показало, что созданная математическая модель адекватно отражает основные физикохимические процессы, проходящие в существующих газодисперсных системах, и может использоваться для оценки скорости распространения ламинарного пламени в газовзвесях реагирующих частиц.

**В** заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертации.

Работа выполнена на кафедре Математической физики физикотехнического факультета Томского государственного университета.

#### 1 СОСТОЯНИЕ ВОПРОСА И ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЯ

Газовзвеси порошков различных веществ встречаются в природе, технике, технологии. Это различные порошковые технологии, процессы сушки, десублимации, получения порошков металлов. В процессах добычи полезных ископаемых также образуются газовзвеси частиц. Особую опасность представляют газовзвеси угольной пыли в метановоздушной смеси, которые образуются при добыче угля шахтным методом.

Некоторые газовзвеси являются взрыво- и пожароопасными и поэтому изучается их поведение в случае возникновения очагов возгорания – определяются концентрационные пределы горения, скорости распространения пламени в таких газовзвесях, а также анализируются способы и средства подавления горения в случае его возникновения. Кроме того газовзвеси различных порошков используются как огнепреградители или как тушащие средства при горении газовых смесей (тушащие порошки, используемые в средствах огнепреграждения и взрывоподавления в угольных шахтах).

Вопросам макрокинетики горения газовзвесей различного состава посвящено много работ. Это и экспериментальные и теоретические работы.

## 1.1 Обзор экспериментальных данных о гашении горючих газовых смесей инертными порошковыми составами

Классическим примером газовой смеси окислителя, горючего газа и частиц, способных к экзотермической реакции, может служить взвесь угольных частиц в метановоздушной смеси. В работах [1 - 8] представлены экспериментальные данные о пламегашении подобных газодисперсных систем.

Огнетушащей концентрацией называется количество огнетушащего вещества (ОТВ), которое следует подать на единичный замкнутый объём

(объём тушения) для подавления возгорания. Для порошковых средств пожаротушения их огнетушащая концентрация зависит от класса пожара, марки порошка и составляет 200 – 500 г/м<sup>3</sup> [3, 4].

В статье [1] отмечается, что основным компонентом огнетушащих составов, сертифицированных для применения (П-2АП, П-4П и П-АГС) является аммоний фосфорнокислый. Исследованиями по определению способности различных химических веществ флегматизировать вспышки метана и угольной пыли, проведёнными научными сотрудниками МакНИИ П.М. Петрухиным, М.И. Нецепляевым и Е.П. Плоскоголовым в середине 70-х годов XX века, было установлено, что наиболее эффективным из всех исследованных флегматизаторов вспышек и взрывов метана и угольной пыли является фосфорнокислый аммоний. Достаточно 0,234 кг/м<sup>3</sup> данной соли для гашения вспышек метано-пылевоздушной смеси [6].

По данным Корольченко А.Я. [5] для ингибирования метановоздушной смеси необходимо 30 % водяного пара или 25 % CO<sub>2</sub>. Это приводит к уменьшению процентного содержания кислорода в воздухе до 14,5 и 16 % соответственно. Для других флегматизаторов содержание его доводится до величины ~ 400 граммов на 1 метр кубический стехиометрической смеси метана с воздухом. В этой же книге отмечается, что огнетушащая концентрация порошков как минимум равна концентрации газового ингибитора, а зачастую больше ввиду не однородности размеров частиц в порошках.

Порошковый ингибитор по принципу своего действия аналогичен газовому ингибитору – поглощение активных центров, разбавление горючей газовой смеси, уменьшение температуры пламени. И чем быстрее ингибитор переходит в газовую фазу – плавится, и испаряется или сублимирует – тем он эффективнее.

У порошков процессы до их испарения происходят на поверхности частиц. Поэтому чем выше суммарная поверхность частиц, тем эффективнее порошковый ингибитор. А это определяется среднемассовым диаметром

частиц порошка, чем он меньше, тем больше его суммарная поверхность при одинаковой массовой концентрации частиц. Однако чем мельче частицы, тем труднее их создавать, и труднее доставлять в загазованную область газа. Имеются опыты с порошками со средним размером 10 мкм, показавшие его большую эффективность по сравнению с теми же порошками по типу, но имеющие больший средний размер частиц. По данным [6] удавалось уменьшить скорость распространения пламени порошками карбонатов и бикарбонатов калия и натрия до минимальных значений при использовании порошка с диаметром 10 мкм при добавлении такого порошка в количестве 0.1 кг/м<sup>3</sup>.

В [6] отмечается сильная зависимость удельного расхода порошка (количество порошка, необходимого ДЛЯ не воспламенения стехиометрической метано-воздушной смеси) от размера его частиц. Там же представлены данные о необходимых массовых концентрациях порошков, обеспечивающих воспламенение метано-воздушной не смеси стехиометрического состава. Дисперсность порошка была 50-60 мкм. Вот эти данные из [6]: K<sub>2</sub>C<sub>2</sub>O<sub>4</sub>\*H<sub>2</sub>O – 0,1 кг/м<sup>3</sup>, NaCl – 0,15 кг/м<sup>3</sup>, Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> – 0,2 кг/м<sup>3</sup>, NH<sub>4</sub>H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub> – 0,26 кг/м<sup>3</sup>, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> – 0,65 кг/м<sup>3</sup>, KCl – 0,84 кг/м<sup>3</sup>.

Из приведенных данных видно, что концентрации весьма большие. И эти данные только по не воспламенению. Следует ожидать, что при ингибировании горения необходимо большее массовое содержание порошков.

В [6] приводятся данные экспериментов в трубе диаметром 2 м и длиной 15 м, где порошком ПСБ (порошок сухой бикарбонатный) в количестве 5 кг было прекращено горение метано-воздушной смеси стехиометрического состава. При использовании порошка бикарбоната натрия потребовалось 10 кг порошка. Использовалась локализованная подача порошка, и нет данных о локальных значениях его массовой концентрации, обеспечившей погасание пламени в этой трубе (удельный расход порошка на весь объем трубы небольшой и составляет 0.11 и 0.22 кг/м<sup>3</sup>, данных о

создаваемой концентрации порошка в огнепреграждающем облаке не приводятся).

Приведены также данные опытов объемного тушения метановоздушной смеси стехиометрического состава в камерах объемом 4.5 и 25 м<sup>3</sup>. Успешное объемное тушение происходило при удельном расходе порошка 0.5 кг/м<sup>3</sup>.

В книге [7] есть данные о тушащих концентрациях порошков при горении угольной пыли. В частности для нейтрализации взрываемости угольной пыли необходимо вводить нейтрализующие добавки в размере от 50 до 70 % массы инертной пыли в составе смеси. Для нейтрализации взрываемости отложений пыли, которая в случае распространения ударной волны и горения MBC поднимается со стенок, и участвует в горении, составляет до 80 % инертной пыли в составе смеси [7].

В [8] представлены исследования огнетушащей концентрации порошкового состава «трополяр» изготавливаемого на основе фосфата аммония. Опыты проводились в экспериментальной штольне длиной до 300 Полностью моделировались условия взрыва в выработке шахты. М. Порошковое облако перед фронтом пламени создавалось на длине 4-5 метров в сечении 8 м<sup>2</sup> путем автоматического выброса от 120 до 180 кг. То есть порошка составляла 3-4 кг на м<sup>3</sup>. После начальная концентрация прохождения ударной волны порошковый состав вместе с газом относился от места образования на 40-60 метров в зависимости от интенсивности взрыва метана. Пламя взрыва также дальше этого места не уходило. Такое количество порошка функцию огнепреграждения выполняет. Меньшее количество, по данным их опытов, фронт пламени пропускает. Опыты, представленные в [8] кардинально отличаются от опытов, выполняемых в других условиях. Только в условиях экспериментальной шахты можно создать те динамические условия, которые действуют в шахтах в аварийной ситуации. В частности облако порошка на длине 4-5 метров с плотностью 3-4 кг порошка на кубический метр проходит перед взаимодействие с фронтом

горения порядка 60 метров испытывая воздействие турбулентной диффузии и влияние пограничных слоев стенок. При этом неизбежно концентрация порошка меняется. Кроме того, при движении ударной волны в обязательном порядке в поток газа за ударной волной вовлечется угольная и другая пыль, из отложений на стенках выработок.

Вода используется для создания водораспылительных завес перед зоной взрыва породы с использованием ВВ, чтобы пламя и продукты взрыва не воспламенили метан в выработках [7]. Согласно требованиям ПБ массовая концентрация тонко диспергированной воды должна быть не менее 300 г/м<sup>3</sup>.

Такие завесы создаются либо специальными устройствами создания водораспылительных завес путем взрыва маленькой массы ВВ в центре сосуда с водой (20 и 30 литров), либо высоконапорными форсуночными устройствами, образующими капли воды размером 100 мкм серией форсунок диаметром 1.5-2 мм при давлении воды в подающем трубопроводе 30-40 атм.

Как отмечается в книге [7] при использовании водяных заслонов в классическом исполнении (ёмкости с водой на полках), или в современном исполнении (водяные карманы) ударная волна интенсивности 0.2 атм. (перепад давления перед и за ударной волной 0.2 атм., скорость за ударной волной 50 м/с) вызывает дробление струй воды из водяного заслона до размера капель 100 мкм. Гашение пламени таким заслоном после образования мелкодисперсного аэрозоля идет с сильным поглощением тепла испарение капель, которое приводит к понижению на разогрев и температуры горения и разбавлению исходной смеси инертным газом парами воды. Как уже отмечалось, для прекращения горения метановоздушной смеси стехиометрического состава необходимо ее разбавить парами воды на 30 %.

В работе [9] проводятся исследования горения дисперсной системы вода – воздух – водород – водяной пар. Экспериментальная установка состоит из цилиндрической камеры, оснащенной датчиками давления и термопарами, нагревательными элементами, инфракрасными излучателями, а

также механизмом инициации горения. Создание рабочей газовой смеси осуществляется мгновенным расширением смеси содержащей насыщенные пары воды, технически это реализуется с помощью мембранной системы. В камеру помещается некоторое количество воды, затем производится нагрев, при достижении определенного давления, мембрана разрывается и по смеси распространяется волна разрежения, что создает условия для конденсации пара в ультрадисперсную взвесь (туман). Затем смесь поджигается и с датчиков поступает информация о процессе горения (значения температур, давлений и данные с излучателей). Значения концентрации водорода варьировали в пределах 10-30%, размер капель воды  $\approx 1.5 - 0.5$  мкм. Показано, что с ростом суммарной концентрации воды в системе (в виде водяного пара и мелкодисперсных капель), нижний предел концентрации необходимого воспламенения водорода, для смеси, увеличивается. Проведено сравнение с данными [10], пределы распространения пламени согласуются хорошо. Авторами отмечается диапазон величины видимых скоростей распространения пламени (5 – 20 м/с), однако подробное исследование зависимостей скоростей от концентраций воды и водорода отсутствует. Используемый оптический метод определения размера частиц дисперсной фазы не позволяет найти зависимости теплофизических параметров системы от размера микрокапель ввиду недостаточной точности.

# 1.2 Обзор теоретических данных по гашению газовых пламен инертными порошками

Имеются теоретические исследования эффективности огнепреграждения порошковыми составами при горении смесей горючих газов с воздухом. Моделирование в основном проводится в рамках теплодиффузионной модели горения Я.Б. Зельдовича-Д.А.Франк-Каменецкого [11-35].

Приведем некоторые результаты моделирования и расчетов

огнепреграждения порошковыми составами при горении газовых смесей, изложенные в работах [11-35].

В работах [11, 12] была впервые предложена двухтемпературная модель самовоспламенения облака газовзвеси. Этот подход получил свое развитие в работах [13-21], где проводится анализ влияния характеристик реагирующих частиц на скорость распространения пламени в газовзвеси. В работах [22-32] проводится моделирование влияния инертных частиц на скорость распространения пламени в горючем газе.

В [33] на основе сформулированной физико-математической модели распространения пламени в газе, содержащем аэрозоль воды, основанной на тепло-диффузионной модели распространения ламинарного пламени в газе и учитывающая процессы тепло- и массообмена между газовой фазой и каплями жидкости проведены расчеты взаимодействия пламени с облаком аэрозоля. Ha основе численного решения системы уравнений математической модели определена структура волны горения в газе, содержащем аэрозоль воды. Проведено параметрическое исследование дисперсной фазы (аэрозоли) влияния характеристик на скорость распространения пламени в газе, содержащем аэрозоль воды, и определена область параметров аэрозоли, при которых присутствие аэрозоли приводит к уменьшению скорости пламени. Также определены критические условия срыва горения при теплоотводе из фронта горения. При решении задачи в полной постановке выявлено, что на горение метановоздушной смеси влияют капли размером не более 100 мкм. Такие капли эффективно уменьшают скорость пламени, уменьшают концентрацию горючего и кислорода в воздухе за счет испарения. Из расчетов установлено, что достаточная массовая концентрация аэрозоли воды для уменьшения скорости фронта в 2-3 раза составляет 0.2-0.3 кг/м<sup>3</sup>. С учетом того, что горение в широких выработках происходит в турбулентном режиме, концентрация метана для неблагоприятного случая равна стехиометрической, массовая самого концентрация аэрозоля воды увеличивается до 0.4-0.5 кг/м<sup>3</sup>. Было также

проведено сравнение полученных расчетным путем характеристик аэрозоли (размера капель и массовой концентрации аэрозоли), эффективно влияющих на торможение пламени, с техническими требованиями, предъявляемыми при практическом использовании водяных завес к дисперсности и массовой концентрации аэрозоли воды. Получено хорошее количественное соответствие этих характеристик.

Сравнение эффективности использования аэрозоли воды и инертной пыли для огнепреграждения [33] показало, что существует критический размер дисперсной фазы, выше которой эффективность использования аэрозоли воды и инертных порошков для огнепреграждения становится одинаковой.

В работах [34-53] проводится математическое моделирование самовоспламенения, зажигания и распространения фронта пламени в газовзвесях сложного состава. Рассматривается самовоспламенение бикомпонентных газовзвесей [34, 35], самовоспламенение смеси аэрозолей окислителя и горючего [36-38], воспламенение аэрозоля горючего в дизельном двигателе [39]. В работах [40-42] исследуется самовоспламенение газовзвеси частиц в воздухе и учитывается выделение летучих компонентов из частиц. Фактически проводится моделирование самовоспламенения облака угольной пыли, из которых при нагревании выделяются летучие горючие компоненты. В работе [43, 44] изучается влияние неоднородности облака частиц на его воспламенение за счет теплового излучения. В работах [46-53] проводится моделирование зажигания и распространения пламени в гибридной газовзвеси (состоящей из реагирующего газа и реагирующими с одним из компонентов газовой фазы частицами), которая является аналогом взвеси частиц угольной пыли в метановоздушной смеси. Получены закономерности распространения фронта горения в зависимости от свойств дисперсной фазы и концентрации газового горючего в газовой смеси.

При развитии пожара ламинарное пламя часто переходит в турбулентный режим, что вызывает заметное увеличение скорости горения.

Этот процесс потенциально может перейти в ударноволновой или детонационный. Имеется ряд исследований, посвященных распространению ударных волн по газовзвесям с инертной пылью.

В [55] изучается возможность стационарных решений, соответствующих режимам нормальной детонации. В работе представлены математические модели детонации в релаксирующем газе и в смеси твердых частиц и реагирующего газа. В качестве параметра, оказывающего влияние на характерные времена тепловыделения и релаксации, выбран диаметр частиц. Представлена зависимость скорости нормальной детонации от размера инертных частиц. Для относительно мелких частиц ( $d \le 40$  мкм) скорость детонации постоянна и равна  $D_e = 545$  м/с. Начиная с некоторого  $d_* \approx 40$  мкм, скорость детонации начинает монотонно расти, доходя до значения  $D_f = 1324$  м/с для крупных частиц (d = 220 мкм).

В [56] решается нестационарная задача о подавлении детонации в ударной трубе, заполненной смесью водорода, кислорода, аргона, а также мелкими инертными частицами песка. Представлена математическая модель одномерной нестационарной постановке, описываемая уравнениями В неравновесной газовой динамики. Рассматриваемая ударная труба разделена на две части диафрагмой. В одной из частей находится смесь с высокими значениями давления и температуры ( $p_1 = 20$  атм.,  $T_1 = 1300K$ ), в другой находится рабочая смесь H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, Ar и частиц песка с низкими значениями температуры и давления ( $p_0 = 1$  атм.,  $T_0 = 300K$ ). После разрыва диафрагмы из камеры высокого давления в область рабочей смеси начинается истечение газа с распространением ударной волны и поверхности контактного разрыва. Представлены результаты численного моделирования. С увеличением доли аргона в смеси, скорость детонации уменьшается. При концентрации аргона более 95%, детонационная волна подавляется полностью. Уменьшение размера и увеличение массовой концентрации инертных частиц также уменьшение фронтом ударной вызывает давления 3a волны И

соответственное уменьшение скоростей и температур. Уменьшение диаметра частиц приводит к увеличению скорости их прогрева и увеличению теплового потока от газа к частицам за счет увеличения их суммарной площади поверхности. Так, для частиц с диаметром  $d = 10^{-4}$ м, температура частиц не превышает  $T_k = 400$ K, при  $d = 10^{-5}$ м, частицы прогреваются до  $T_k = 2400$ K на расстоянии 40см за фронтом ударной волны. В случае  $d = 10^{-6}$ м, инертные частицы достигают температуры  $T_k = 3000$ K уже в зоне реакции.

## 1.3 Обзор экспериментальных исследований горения газовзвесей с реакционноспособными частицами

В статье [57] рассматриваются особенности воспламенения И распространения пламени в газовзвесях порошков металлов, углей. Вводится параметр f, характеризующий соотношение между поверхностью на которой происходит реакция и поверхностью, через которую отводится тепло из системы. Для низкозольных углей, металлов не имеющих на поверхности частиц оксидной пленки (Mg, Zr) реализуется линейный закон окисления. Для таких газовзвесей температура воспламенения может быть относительно низкой (800 – 1000К). В случае высокозольных углей и металлов с оксидной пленкой (Al), имеет место параболический закон окисления. Значения температур воспламенения для таких газовзвесей лежат в интервале 1300 – 1800К. Также рассмотрено влияние параметра f на времена индукции. Для составов содержащих уголь, Mg, 50% A1 + 50% Mg (сплав), обнаружена параболическая зависимость: при значении параметра f = 1, время задержки составило  $t_{ign} = 0.6$  с, при значении f = 4,  $t_{ign} = 0.15$  с, и с дальнейшим увеличением параметра f, время уменьшалось незначительно. Для чистого алюминия зависимость получилась линейной: f = 4,  $t_{ign} = 0.68$  с и f = 12,  $t_{\rm ign} = 0.31$  c.

В [58] исследуется процесс движения фронта пламени в смесях,

состоящих из бора с алюминием и газа содержащего окислитель. Установка состоит из кварцевой трубки длиной 1 метр и диаметром 0,036 метра. Газовзвесь зажигалась у верхнего открытого торца искровым разрядом. В качестве дисперсной фазы были использованы порошки бора и алюминия с диаметром частиц 6 мкм. Получена зависимость нормальной скорости пламени от концентрации дисперсной фазы в газовзвеси. Были использованы следующие порошковые составы: 100% Al, 80% Al + 20% B, 70% Al + 30% B, 60% Al + 40% B, 50% Al + 50% B, B + O<sub>2</sub>. Концентрация твердого горючего порошка варьировалась в пределах 100 – 400 г/м<sup>3</sup>. Получены нормальные скорости распространения пламени порядка 0.1 м/с. Для чистого алюминия и малых добавках бора (10 – 20%%) пламя имело вибрационный характер с выходом на турбулентный режим горения. Добавление большего количества бора в смесь (30 – 50%%) стабилизирует горение, пламя имеет ламинарный характер с неизменной видимой скоростью. Кроме того, проведено измерение скоростей горения для газовзвеси, содержащей в своем составе помимо алюминия, инертный компонент Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. При тех же соотношениях, газовзвесь содержащая бор обладает более выраженным ингибирующим эффектом, то есть нормальная скорость распространения фронта пламени у такой смеси ниже. Это объясняется тем, что частицы бора прогреваясь, снижают температуру во фронте пламени, и активно сгорают уже позади фронта. В то же время на окисление частиц бора тратится значительное количество газообразного окислителя, и частицы алюминия окисляются уже в более бедной окислителем среде.

Горючие порошки также находят свое применение в энергетике в качестве топлива.

В [59, 60] экспериментально реализуется сжигание дисперсного твердого топлива (измельченного древесного и каменного углей) в камере кольцевой геометрии. Измельченный уголь (размер частиц  $d = 2 \div 20$ мкм) с воздухом поступает в камеру кольцевой геометрии (расход угля  $G \approx 0.3$ кг/с), где образовавшаяся смесь с установившимся течением инициировалась

разрядом конденсатора на полоску фольги. Продукты реакции выходили через выходное отверстие с варьируемым диаметром d<sub>c2</sub>. С помощью фоторегистрации обнаружено два режима сжигания топлива В экспериментальной установке. При выходного значениях отверстия  $d_{c2} = 100$ мм, расходе воздуха  $G_A = 2.6 - 3.2$  кг/с, коэффициенте избытка горючего  $\phi = 1.1 - 1.6$ , давлении в начале камеры  $p_{c1} = 6.8 - 9.3 \cdot 10^5$  Па, реализован режим непрерывной спиновой детонации. Также режим спиновой детонации был получен для меньших расходов воздуха  $G_A = 1.7 - 2.4$  кг/с, но более высоких концентраций угля  $\phi = 1.44 - 2.04$  и давлениях  $p_{c1} = 11.2 - 11.2$ 12.5·10<sup>5</sup> Па. В обоих случаях, у выходного отверстия давления были близки к значению  $p_{c4} = 9 \cdot 10^5$  Па. При увеличении давления в 1.5 – 2 раза и установке выходного отверстия диаметром 50мм, реализовывалась пульсирующая детонация с частотой пульсации f = 4 – 4.8 кГц. Результаты исследования проведенного авторами являются оригинальными и опубликованы в [59] впервые.

В [61] представлены результаты экспериментального исследования и математического моделирования горения газовзвеси метан-воздух-уголь. Установка представляет собой вертикальный проточный реактор, с верхнего конца, с помощью системы подачи, поступают дисперсный уголь, воздух и метан, затем образовавшаяся смесь проходит через ячеистую структуру устраняющую турбулентность (хонейкомб) с целью стабилизации потока и поступает зажигающий механизм (сквозную матрицу), который В воспламеняет смесь и в рабочей зоне создается плоский, ламинарный, относительно стенок реактора фронт пламени. неподвижный Далее располагается выходное отверстие для продуктов реакции. В установке реализуется низкое рабочее давление 30.4 кПа для расширения зоны реакции и более подробного изучения процесса. В эксперименте были использованы угольные пыли мелкой дисперсности с размерами частиц 12 мкм и 36 мкм. Из-за того, что термопары способствуют искажению пламени и покрываются нагаром, для определения температуры реагирующей смеси использовался

метод когерентной спектроскопии Рамана (CARS). Опыты по зажиганию газовзвеси воздух-уголь привели к важному выводу – горение таких смесей при нормальных условиях невозможно без добавления небольшого либо без количества метана, предварительного подогрева стенок реакционного сосуда. Поэтому для стабилизации фронта пламени добавлялся метан. Также в работе представлена математическая модель горения газовзвеси. Eë основные допущения: пламя плоское, одномерное, адиабатическое, с нулевыми тепловыми потерями; равномерно расположенные в смеси сферические частицы выделяют летучие, которые мгновенно смешиваются с окружающим газом; скорость смешивания продуктов реакции с летучими бесконечно велика; учитывается теплообмен влиянием теплового расширения на излучением; параметры смеси пренебрегается; скорости выхода летучих определяются соотношениями Аррениуса; температуры и скорости газа и частиц различны. Была проведена верификация модели по экспериментальным данным, полученным для метановоздушной смеси. Вычисленная стационарная температура горения смеси совпала с опытной и составила около T = 2000К на расстоянии больше 5 мм от зажигающего механизма. Для смеси метан-уголь-воздух результаты также хорошо согласуются, получено значение температуры T = 1750 К. Также концентраций представлены зависимости продуктов И промежуточных продуктов реакции (HCN, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, NO), температуры смеси от коэффициента избытка топлива.

Работа [62] является логическим продолжением и углублением исследования [61]. Представлена более детальная модель, описывающая процесс горения угля. Полагается, что в начальный момент времени исходная частица испускает летучие (HCN, CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, NO, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>), затем разлагается на смолу и твердую частицу углерода, содержащую в себе неорганический пепел. Смола, в свою очередь, разлагается на горючие газы (CH<sub>4</sub>, HCN, CO, H<sub>2</sub>) и сажу. Представлена зависимость скорости горения от диаметра частиц. Для мелких частиц диаметра порядка 5 мкм, скорость

составила 0.25 м/с, с увеличением диаметра скорость уменьшается. Для частицы диаметра 100 мкм скорость составила 0.10 м/с. Также получена зависимость скорости горения в зависимости от массовой концентрации дисперсной фазы смеси для различных углей. Нижний концентрационный предел угольной пыли составил около 80 мг/л, что касается верхнего – для различных углей он разный. Это связано с неодинаковым химическим составом угля, долей летучих, смол и углеродного остатка.

В [63, 64] экспериментально исследуется турбулентное и ламинарное горение газодисперсных взвесей, состоящих из угольной пыли и газовой смеси метана и воздуха. По сравнению с исследованиями [61, 62] авторы данной работы уделяют большее внимание именно турбулентному горению и анализу структуры пламени. Экспериментальная установка функционально похожа на представленную в [61, 62], однако имеется ряд конструктивных отличий. Камера сгорания большего размера, в связи с турбулентным характером горения. Установка оснащена системой водяного охлаждения. Конструкция горелки взята из [65]. Для получения информации о структуре пламени используется метод теневой фотосъемки. Представлены результаты эксперимента для разных типов смесей. Для получения рабочей смеси были использованы стехиометрическая метановоздушная смесь, а также смеси с 20% избытком и недостатком горючего. Использованы угольные частицы питтсбургского угля размеров 75-90 и 106-120 мкм с 30% содержанием летучих. Для получения ламинарного пламени, скорость подачи смеси была ограничена значением в 10 л/мин. Турбулентный поток был исследован при значениях расхода смеси в 30, 35 и 40 л/мин. Для частиц диаметром 75-90 мкм, для богатых и бедных смесей, при добавлении от 0 до 75 г/м<sup>3</sup>, выявлено 10% снижение нормальной скорости ламинарного пламени по сравнению со смесью без добавления частиц. Авторы объясняют это затратами тепла из фронта пламени на прогрев частиц. Частицы размера 106-120 мкм влияют на скорость ламинарного фронта в пределах ±6,5%, что не превышает погрешностей экспериментальных измерений. Исследования турбулентных

пламен показали, что добавление угольной пыли преимущественно увеличивает турбулентную скорость горения смеси, которая для каждого набора использованных параметров превышает аналогичную для ламинарного горения более чем в два раза.

## 1.4 Обзор теоретических исследований горения газовзвесей с реакционноспособными частицами

В [66] произведен обзор экспериментальных и теоретических исследований, посвященных процессу образования газовзвесей при высокоскоростных воздействиях на отложения твердых частиц.

Работы [67-69] посвящены математическому моделированию подъема и воспламенения частиц угольной пыли, после прохождения фронта ударной волны вдоль запыленной поверхности.

В [67] в рамках лагранжевого подхода, моделируется подъем частицы влиянием аэродинамической интерференции и силы Саффмана. под Результаты вычислений показали, что для слабых ударных волн и средних частиц (число Maxa  $M \le 1.5$ , размер частиц  $d \le 100$  мкм.) подъем частиц после прохождения ударной волны обусловлен действием силы Саффмана. Для средних ударных волн и крупных частиц (число Maxa  $2.1 \le M \le 3.3$ , размер частиц  $200 \le d \le 300$  мкм.) решающее значение для подъема имеет аэродинамическая интерференция между частицей и поверхностью. Также в [67] представлены результаты математического моделирования окислителя, инертного газа и горючего газа, воспламенения смеси реакционноспособных частиц, содержащих конденсированные летучие, инертную фазу и углерод. Выделено несколько вариантов воспламенения: гетерогенное (пренебрегается либо выходом летучих, либо их окислением), гомогенное (не происходит окисление углерода) и смешанное (в этом случае процесс воспламенения имеет признаки как гомогенного, так и гетерогенного горения, а времена релаксации всех происходящих физико-химических

процессов имеют конечную величину).

В [68] проведено сопряжение моделей, описанных в [67] и произведен расчет динамики подъема фронтом ударной волны как инертных частиц (оргстекло), так и способных к химической реакции (уголь). Для моделирования горения реакционноспособных частиц используется теория приведенной пленки.

Рассмотрены инертные частицы оргстекла, с диаметром d = 30 мкм. Отмечен высокий уровень теплового потока со стороны газовой фазы к частицам за счет межфазного трения. Описанная модель не учитывает влияние процессов в приведенной пленке на динамику частицы. В качестве реагирующих частиц выбраны частицы угля с плотностью  $\rho = 1.247$  кг/м<sup>3</sup> и диаметром  $d = 25 \div 200$  мкм. Показано, что увеличение интенсивности ударных волн и уменьшение размера частиц увеличивает скорость выхода летучих за счет повышения скорости нагрева частиц.

Работа [69] рассматривает подъем частиц песка за фронтом ударной волны в рамках равновесной модели механики гетерогенных сред. Решается двумерная задача, в которой учитывается турбулентность представленной смеси. Результаты расчетов показали, что при расчете с учетом турбулентности в смеси возникает пристенная струйка, поднимающая частицы более интенсивно.

В [70] решается сопряженная задача о воспламенении и детонации угольной пыли. В математической модели [70] учитываются реакции пиролиза частицы, горение летучих и коксового остатка. Проведены расчеты по экспериментальным данным для частиц питтсбургского угля [71] с размером частиц  $d = 53 \div 74$  мкм. В частности, по результатам численных экспериментов получены зависимости характерной температуры частиц от концентрации частиц и скорости ударной волны. Характерная температура растет с увеличением массовой концентрации частиц в смеси и при увеличении скорости ударной волны. Например, для массовой концентрации частиц равной 0.15 и скорости ударной волны U<sub>0</sub> = 1.5км/с., характерная

температура за фронтом составила 1400К. Также представлено сравнение расчетов с экспериментальными данными. Проведенные сравнения времен задержки воспламенения вычисленные по модели [70] и полученные в эксперименте [71] хорошо согласуются.

В [72] проводится исследование критических условий зажигания газовзвеси, содержащей твердые реакционноспособные частицы. Авторами вводится параметр Z, который представляет собой отношение характерного времени химической реакции к времени тепловой релаксации между газом и фазой. Установлено, Z > 3 реализуется конденсированной ЧТО при кинетический (однотемпературный) режим зажигания, при котором температуры газа и частиц, а также безразмерные концентрации окислителя на поверхности частиц и в газе одинаковы. При Z < 1 режим зажигания диффузионный (двухтемпературный), температура частиц много выше температуры газа, а концентрация окислителя на поверхности частиц определяется скоростью его диффузии из газа. Определены характерные времена нагревания смеси импульсным источником энергии, которые необходимы ДЛЯ зажигания газовзвеси. Расчеты проведены для кинетического и диффузионного режимов зажигания. Работа носит фундаментальный характер, в ней отсутствуют результаты, исследующие влияние изменения размера частиц дисперсной фазы на критические времена зажигания, также отсутствует сравнение с экспериментом.

В работе [73] исследуется влияние пористости частиц на характерные времена горения и воспламенения газовзвеси, максимальную температуру частиц при горении и параметры, ответственные за самопроизвольное потухание частиц (диаметр и плотность). Помимо внутренней пористости, представленная математическая модель учитывает стефановский поток, возникающий при появлении на поверхности частицы газообразных продуктов реакции окисления. Учет возгонки углеводородов при горении не учитывается, считается, что частица полностью состоит из углерода. Численные расчеты проводились для антрацита марки АШ с внутренней

пористостью  $F_v = 3 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ . Результаты вычислений показали, что время воспламенения газовзвеси пористых частиц в два раза меньше, чем для газовзвеси сплошных частиц. Приведены значения характерных времен для интервала диаметров частиц  $d = 40 \div 200$  мкм. Для пористых и сплошных частиц диаметра d = 40 мкм, времена индукции составили 0.01 с и 0.02 с. Для d = 200 мкм - 0.08 с и 0.16 с соответственно. Это объясняется увеличением общей плотности тепловыделения на внутренней поверхности пористых критических частиц. Величины диаметров, при которых смесь самопроизвольно потухает, для пористых частиц ниже, чем для сплошных. Влияния пористости частиц на температуру горения не выявлено, это объясняется торможением доступа окислителя к поверхности стефановским течением.

В [74] рассматривается горение газовой смеси, состоящей из угольных частиц и воздуха. На основе данных, полученных из [75-77] строится упрощенная кинетическая схема образования NO. Чтобы упростить исходную схему детально оценивается вклад каждой отдельной химической реакции. Каждая реакция оценивается влиянием на общие химические превращения в системе, максимальному вкладу за время процесса и за активность в малый начальный момент времени. Те реакции, которые не являются ключевыми, и не оказывают существенного влияния на кинетику всей системы, отбрасываются. Сравнение экспериментальных данных и модельных результатов динамики образования оксидов азота дает хорошее согласование. Моделирование проведено С помощью программного комплекса АВОГАДРО [78].

В исследовании [79] рассматриваются условия зажигания газовзвесей органических пылей за счет прохождения по смеси ударной волны. Авторы подчеркивают, что ударная волна возникает в результате точечного взрыва и предметом исследования является именно воздействие ударной волны на частицы конденсированного органического вещества, а не горение или детонация. На основе приближенных аналитических расчетов представлены

зависимости физико-химических параметров (температуры, давления в ударной волне) от расстояния между центром взрыва и ударной волной. Значения давлений и температур изменяются очень быстро – ОТ максимальных, в окрестности центра взрыва, и до минимальных, на некотором расстоянии от него. Считалось, что для воспламенения органических частиц требуется температура 700К. Данная температура реализуется в окрестности взрыва радиуса 1.4-2 r<sub>s</sub>, где r<sub>s</sub> – радиус сферы, содержащей необходимое количество окислителя для стехиометрической реакции. Далее этого расстояния, воспламенение может происходить за счет конвективной теплопроводности и выброса в невозмущенную смесь догорающих частиц.

Исследование [80] рассматривает распространение волны горение в газовзвеси реагирующих частиц угля с помощью приближенных аналитических В представленной методов. аналитической модели учитывается распространение тепла из реакционной ЗОНЫ за счет теплопроводности и теплопереноса излучением. Модель строится на основе некоторых упрощающих предположений: однотемпературное приближение (газ с угольными частицами имеют одну температуру); считается, что выход летучих происходит на поверхности частиц в зоне горения; угольная частица рассматривается как сплошная углеродная, за счет равенства тепловых эффектов метана и углерода, в расчете на единичную массу кислорода; скорость горения частиц постоянна. Получено два аналитических выражения для нормальной скорости пламени. Они отражают зависимость скорости пламени от основных физико-химических параметров газовзвеси. Одно выражение учитывает теплопередачу теплопроводностью, в другом кроме теплоперенос. По теплопроводности учитывается также лучистый аналитическим формулам вычислена нормальная скорость горения для различных массовых концентраций угольных частиц различного размера. Учет теплопроводности позволяет получить хорошее согласование с экспериментальными данными [81] для мелких частиц  $r_0 = 3$  мкм,  $r_0 = 6$  мкм.

Для частиц радиуса  $r_0 = 24$  мкм, полученные аналитически значения, с учетом лишь теплопроводности, меньше экспериментальных практически в два раза. С учетом теплопередачи излучением для крупных частиц, удалось получить удовлетворительное согласование с экспериментом.

Работа [82] посвящена моделированию воспламенения одиночной частицы антрацита с учетом параллельных реакций:

 $C + O_2 = CO_2, 2C + O_2 = 2CO.$ 

Аналитически получены критические условия воспламенения одиночной частицы с учетом рассмотренных параллельных реакций, критическое условие для нахождения температур воспламенения. Численно найдены значения температур воспламенения для частиц различного размера  $(d = 5 \div 200 \text{ мкм})$ , проведено сравнение с экспериментальными данными [83, 84], результаты расчетов и эксперимент хорошо согласуются. Показано, что обеих значения температур воспламенения, полученные С учетом параллельных реакций, без пренебрежения какой – либо из них, дают наилучшее согласование с экспериментом. При учете обеих реакций, температуры воспламенения меньше, чем при учете какой либо одной из них, для всего рассмотренного диапазона размеров частиц. Это связано с тем, что скорости тепловыделения от обеих реакций близки и учет обеих реакций практически удваивает общий теплоприход за счет химической реакции, что и снижает температуру воспламенения.

В работе [85] изучаются процессы воспламенения и горения одиночной угольной частицы обдуваемой потоком газа. С точки зрения термодинамики неравновесных процессов рассмотрены основные закономерности протекания химических процессов при горении частицы горючего. Математическая задачи сформулирована постановка В одномерной постановке. В нее входят уравнения сохранения массы, импульса, энергии; уравнение теплообмена излучением между частицей и газовой фазой; уравнения концентраций исходных веществ, продуктов для И промежуточных продуктов реакции; для реакции пиролиза используется

аррениусовская кинетика. Проведены численные расчеты для частиц различного размера ( $d = 60 \div 100$  мкм) и при различных температурах окружающего газа (T<sub>g</sub> =1400÷1800K). Представлены графики зависимости температуры частицы от времени. Большие значения температуры газа создают более высокий пик сверхадиабатической температуры частиц в начальный момент воспламенения частицы, и этот пик возникает раньше. Для частиц размера 100 мкм, при  $T_g = 1400$  к, температура частиц достигает значения 2000К за 150 мкс, затем уменьшается до 1800; при  $T_g = 1800 \text{ K}$ , частицы разогреваются до 2750К за 100 мкс, затем остывают до 2250К. Это связано с динамикой выхода летучих и их воспламенением. Более крупные частицы при фиксированной температуре прогреваются дольше, но достигают более высоких значений, чем относительно небольшие частицы. Кроме того выяснено, что с увеличением температуры газового потока и с увеличением размера частиц, возрастает производство энтропии за счет теплопроводности. Влияние массообмена и химической реакции в этом случае проявляется незначительно. Проведенные сравнения температур частиц, полученных численно, хорошо согласуются с экспериментальными данными.

В [86] исследуется механизм испарения и воспламенения смеси состоящей из газообразного окислителя, микрокапель конденсированного вещества (углеводородного топлива) и испаренных паров горючего. Смесь воспламеняется за фронтом ударной волны, за счет изменения параметров газовой фазы. Представлены зависимости температур, скоростей нагрева газа и капель, а также квадрата радиуса и истинной плотности паров от времени. Для верификации модели использовались такие параметры, как энергия активации и предэкспонент. Для соответствующих параметров получены значения времени воспламенения смеси. Полученная авторами [86] математическая модель удовлетворительно согласуется с экспериментом для диапазона давлений за фронтом ударной волны 23 – 42 атм.

#### 1.5 Постановка цели и задач исследования

Анализ работ, посвященных особенностям горения газовзвесей частиц в горючем газе, показал:

•Инертные порошки широко используются в пожаротушении и огнепреграждении. Разработанные математические модели для исследования влияния характеристик порошков достаточно адекватно описывают основные процессы, происходящие при горении смеси газов, запыленных инертным пламегасящим порошком. На основе этих моделей проводится оценка пламегасящих концентраций инертных порошков в горючем газе.

•Газовзвеси частиц, реагирующие с окислителем несущей газовой фазы (кислородом воздуха) В практике И технике встречаются редко. разработанные для теоретического Математические модели, изучения горения таких газовзвесей также хорошо разработаны и используются для моделирования макрокинетических процессов воспламенения, зажигания и горения газовзвесей.

•Газовзвеси частиц, реагирующих с одним из компонентов (окислителем) газовой горючей смеси относятся к наиболее опасным с точки зрения пожаро-взрывоопасности средам. К таким газовзвесям, называемым гибридными, относятся газовзвеси угольной пыли в метановоздушной смеси. Экспериментальному и теоретическому изучению горения таких газовзвесей посвящено много работ ввиду актуальности проблемы взрывоподавления и обеспечения пожарной безопасности таких сред.

•В математических моделях, разработанных для исследования горения газовзвесей, не учитывается тепловое расширение газа при его нагреве при горении и связанное с этим возникающее относительное движение фаз. Такое относительное движение может влиять на скорость теплообмена между частицами и газом и влиять на скорость распространения фронта пламени в газовзвеси.
Исходя из анализа научно-технической литературы в настоящей работе поставлена цель:

Разработать физико-математические модели и на их основе провести всесторонний расчетно-теоретический анализ влияния теплового расширения и относительного движения фаз при распространении ламинарного пламени в реакционноспособных газовзвесях различной природы: в газовзвеси инертных частиц в реагирующем газе; в газовзвеси частиц реагирующих с окислителем газовой фазы; в гибридной газовзвеси.

Для достижения поставленной цели в настоящей работе поставлены следующие задачи:

1 Разработать физико-математическую модель горения гибридной газовзвеси (газовзвеси, состоящей из частиц, реагирующих с окислителем газовой фазы, взвешенных в смеси газообразных окислителя и горючего), учитывающую тепловое расширение газа и возникающее при этом относительное движение частиц и газа.

2 Разработать методику численного решения системы уравнений математической модели, провести ее всестороннее тестирование.

3 Провести численное исследование влияния теплового расширения газа и относительного движения фаз на скорость распространения фронта пламени в газовзвесях различной природы:

 а) в газовзвеси инертных частиц в реагирующем газе, имеющем избыток окислителя;

б) в газовзвеси инертных частиц в смеси газообразных окислителя и горючего в заданном стехиометрическом соотношении;

в) в газовзвеси частиц реагирующих с окислителем газовой фазы;

г) в гибридной газовзвеси;

Изучить зависимости скорости распространения пламени в газовзвесях от параметров дисперсной фазы: массовой концентрации частиц, размера частиц, формально-кинетических параметров гетерогенной реакции частиц с окислителем газовой фазы.

4) Исследование влияния теплового расширения газа и относительного движения фаз на скорость распространения фронта пламени в газовзвесях различной природы провести путем сравнения результатов расчетов по моделям, учитывающим и не учитывающим тепловое расширение и относительное движение фаз.

### 2 ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГОРЕНИЯ ГИБРИДНОЙ ГАЗОВЗВЕСИ

Глава посвящена физико-математической постановке задач о распространении ламинарного пламени в газовзвесях, описаны методика численного решения системы уравнений математической модели, алгоритм и результаты тестирования алгоритмов и программы ЭВМ.

В главе представлена формулировка физико-математической модели горения газовой смеси со взвешенными в ней реагирующими с окислителем газовой фазы частицами. Эта модель содержит в себе как частные случаи постановку задачи о распространении ламинарного пламени в горючей газовой смеси с взвесью инертных частиц, и постановку задачи о распространении в газовзвеси с реагирующими с окислителем газовой фазы частицами.

Решение систем уравнений математических моделей проводилось численно. Для этого использовалась конечно-разностная аппроксимация дифференциальных уравнений в частных производных и использовались численные методы. В главе представлена разностная схема и описан алгоритм решения задачи о распространении пламени в газовзвеси с реагирующими частицами. Для других постановок задач алгоритм и методика решения аналогичны. Представлены результаты решения тестовых задач, на которых проверялась разработанная методика решения.

### 2.1 Постановка задачи о распространении ламинарного пламени в реагирующем газе с взвесью реакционноспособных частиц

Рассмотрим процесс горения газовой смеси горючего и окислителя, в которой равномерно распределены твердые горючие частицы. Считаем, что реакция протекает гомогенно в газовой фазе и гетерогенно на поверхности частиц. Окислитель в газовой фазе расходуется на горючий газ и на дисперсную фазу с образованием газообразных продуктов. Одновременно протекают две реакции:

 $v_{11}A_1 + v_{12}B_1 \rightarrow v_{13}X_1 + v_{14}D_1$  $v_{21}A_2 + v_{22}B_1 \rightarrow v_{23}X_2$ 

Где  $v_{11}$ ,  $v_{12}$ ,  $v_{13}$ ,  $v_{14}$  – стехиометрические коэффициенты в реакции газовой фазы, для горючего  $A_1$ , окислителя  $B_1$  и продуктов  $X_1$ ,  $D_1$ ;  $v_{21}$ ,  $v_{22}$ ,  $v_{23}$  – коэффициенты в реакции конденсированной фазы, горючее  $A_2$ , и продукты реакции  $X_2$ .

Для записи математической модели рассматриваемого процесса введем следующие предположения: будем рассматривать газовзвесь реагирующих частиц в горючем газе с окислителем, которая занимает полубесконечную область  $0 \le x < \infty$ . В начальный момент времени газ и частицы покоятся, частицы равномерно распределены во взвеси. Истинная плотность частиц  $\rho_k^0$ . координате x = 0 расположена непроницаемая горячая В стенка с температурой равной адиабатической температуре сгорания газа В изобарических условиях (зажигание у «закрытого торца»). Параметры состояния газа удовлетворяют уравнению состояния идеального газа. Учитывается перенос тепла в газовой смеси за счет теплового расширения смеси (конвективный теплоперенос) и теплопроводности. Теплообмен между частицами и газом будем учитывать с помощью закона Ньютона для теплоотдачи. Скорость тепловыделения в химических реакциях на поверхности частиц и в газе зависит от температуры по закону Аррениуса.

Реакция в газовой фазе происходит по второму порядку. Гетерогенная реакция на частицах предполагается первого порядка, константа скорости реакции определяется по методу сложения сопротивлений [87]. Предполагаем, что коэффициенты диффузии и теплопроводности не зависят от температуры и считаем их константами. Окислитель в реакции расходуется на две конкурирующие реакции – гомогенную в газе и гетерогенную на поверхности частиц; в балансе массы газа учитывается расход окислителя и массоприход газообразных продуктов от реакции на частицах. Учитывается изменение размера частиц твердого вещества при их сгорании. Предполагается, что горение протекает в ламинарном режиме в условиях постоянного давления. Применимость подобного подхода для описания распространения медленного фронта пламени с учетом теплового расширения газа обоснована в [88]. Энергия частиц изменяется за счет химической реакции на поверхности и теплообмена с газовой фазой. На частицы со стороны газа действует сила сопротивления, описываемая законом Стокса. Обратным влиянием движения частиц на движение газа пренебрегаем из-за малой их объемной концентрации. Форма частиц шаровая, между собой они не сталкиваются.

С учетом сделанных предположений математическая постановка задачи описывается следующей системой дифференциальных уравнений в частных производных с соответствующими начальными и граничными условиями:

$$c_{g}\rho_{g}\frac{\partial T_{g}}{\partial t} + u_{g}c_{g}\rho_{g}\frac{\partial T_{g}}{\partial x} = \lambda \frac{\partial^{2}T_{g}}{\partial x^{2}} - \alpha S(r_{k})n(t)(T_{g} - T_{k}) - , \qquad (2.1)$$
$$-G(c_{g}T_{g} - c_{k}T_{k})n(t) + Q\rho_{1}\rho_{2}k_{0,g}\exp(-E_{g}/RT_{g})$$

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{\partial \rho_1 u_g}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \rho_1}{\partial x^2} - \rho_1 \rho_2 k_{0,g} \exp\left(-E_g / RT_g\right), \qquad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial \rho_2 u_g}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \rho_2}{\partial x^2} - n(t)G - \left(\frac{v_{12}M_{12}}{v_{11}M_{11}}\right)\rho_1\rho_2 k_{0,g} \exp\left(-E_g / RT_g\right) \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g u_g}{\partial x} = n(t) G\left(\frac{\nu_{23} M_{23}}{\nu_{22} M_{22}} - 1\right), \qquad (2.4)$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho_k u_k}{\partial x} = -\left(\frac{v_{21}M_{21}}{v_{22}M_{22}}\right) n(t)G, \qquad (2.5)$$

$$P = \rho_g R T_g = const \,, \tag{2.6}$$

$$V_k c_k \rho_k^0 \left( \frac{\partial T_k}{\partial t} + u_k \frac{\partial T_k}{\partial x} \right) = \alpha S(r_k) (T_g - T_k) + qG, \qquad (2.7)$$

$$\frac{\partial \rho_k u_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho_k u_k^2}{\partial x} = \tau_{tr}, \quad \tau_{tr} = 6\pi r_k(t) \mu_g n(t) (u_g - u_k), \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} + \frac{\partial n_k u_k}{\partial x} = 0, \qquad (2.9)$$

$$r_{k} = \sqrt[3]{\frac{3\rho_{k}}{4\pi\rho_{k}^{0}n(t)}},$$
(2.10)

$$G = \frac{\partial m_k}{\partial t} = S(r_k) j(T_k) \rho_2, \quad j = \frac{k(T_k)\beta_m}{k(T_k) + \beta_m}, \quad k(T_k) = k_{0,k} \exp\left(-\frac{E_k}{RT_k}\right).$$

С граничными условиями:

$$T_{g}(0,t) = T_{g,0}, \quad \frac{\partial T_{g}(\infty,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T_{k}(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_{k}(0,t)}{\partial x} = 0,$$
$$\frac{\partial n(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_{1}(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_{2}(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_{1}(\infty,t)}{\partial x} = 0,$$
$$\frac{\partial \rho_{2}(\infty,t)}{\partial x} = 0, \quad u_{g}(0,t) = 0, \quad u_{k}(0,t) = 0.$$
(2.11)

Начальные условия:

$$T_{g}(x,0) = T_{g,0}, \quad T_{k}(x,0) = T_{k,0}, \quad \rho_{1}(x,0) = \rho_{1,0}, \quad \rho_{2}(x,0) = \rho_{2,0},$$
  

$$u_{g}(x,0) = 0, \quad u_{k}(x,0) = 0, \quad \rho_{g}(x,0) = \rho_{g,0}, \quad \rho_{k}(x,0) = \rho_{k,0},$$
  

$$n(x,0) = n_{0}, \quad r_{k}(x,0) = r_{k,0}.$$
(2.12)

В системе уравнений (2.1)-(2.12) приняты следующие обозначения: *t* - время;

х - координата;

- Т температура;
- $\rho$  плотность;

 $\rho_k^0$  - плотность вещества частиц;

и - скорость газа;

*w* - скорость частиц;

с - удельная теплоемкость;

λ - коэффициент теплопроводности;

*D* - коэффициент диффузии;

μ - вязкость;

 $\alpha\,$  - коэффициент теплоотдачи;

*г* - радиус частиц;

*n* - количество частиц в единице объема;

*R* - универсальная газовая постоянная;

S - площадь поверхности частицы;

G – секундный массовый поток газообразных продуктов горения частицы;

*Р* - давление;

*m* – масса частицы;

*j* – скорость гетерогенной химической реакции;

*Y* - относительная концентрация;

Q - тепловой эффект реакции в газовой фазе;

q - тепловой эффект гетерогенной реакции на поверхности частиц;

*k* - предэкспоненциальный множитель;

Е - энергия активации химической реакции;

 $V_{\phi p}$  - скорость распространения фронта горения;

 $\beta_m$  - коэффициент массоотдачи;

 $\tau_{\scriptscriptstyle tr}$  - сила, действующая на частицы со стороны газа;

π - 3,1415...;

 $M_{ij}, v_{ij}$  - молекулярные массы и стехиометрические коэффициенты в

реакциях.

Индексы:

*g* - газ,

- *k* частицы,
- \* масштаб,

0 - начальные условия,

1 – горючее,

2 - окислитель.

Система уравнений (2.1) – (2.12) в безразмерном виде:

$$\frac{\partial \theta_{g}}{\partial \tau} + \overline{u}_{g} \frac{\partial \theta_{g}}{\partial \xi} = \frac{1}{\overline{\rho}_{g}} \frac{\partial^{2} \theta_{g}}{\partial \xi^{2}} + \overline{\rho}_{g} C_{1} C_{2} \exp\left(\frac{\theta_{g}}{1 + \beta \theta_{g}}\right) - \frac{1}{\overline{\rho}_{g}} \frac{B}{\partial \xi^{2}} + \overline{\rho}_{g} C_{1} C_{2} \exp\left(\frac{\theta_{g}}{1 + \beta \theta_{g}}\right) - \frac{B}{\chi} \frac{\overline{r}_{k}}{\overline{\rho}_{g}} \overline{n}(t) \left(\theta_{g} - \theta_{k}\right) - \frac{1}{\overline{\rho}_{g}} \frac{B}{\chi} \left(\theta_{g} - C \theta_{g} + \frac{1 - C}{\beta}\right) A, \qquad (2.13)$$

$$\frac{\partial C_{1}}{\partial \tau} + \overline{u}_{g} \frac{\partial C_{1}}{\partial \xi} = \frac{Le}{\overline{\rho}_{g}} \frac{\partial^{2} C_{1}}{\partial \xi^{2}} - \gamma \overline{\rho}_{g} C_{1} C_{2} \exp\left(\frac{\theta_{g}}{1 + \beta \theta_{g}}\right) - \frac{B}{\chi} \left(\frac{V_{23}M_{23}}{V_{22}M_{22}} - 1\right) \frac{C_{1}}{\overline{\rho}_{g}} A \qquad (2.14)$$

$$\frac{\partial C_{2}}{\partial \tau} + \bar{u}_{g} \frac{\partial C_{2}}{\partial \xi} = \frac{Le}{\bar{\rho}_{g}} \frac{\partial^{2} C_{2}}{\partial \xi^{2}} - \frac{1}{\bar{\rho}_{g}} \frac{B}{\chi^{*}} A \left[ 1 + C_{2} Y_{2,0}^{*} \left( \frac{v_{23} M_{23}}{v_{22} M_{22}} - 1 \right) \right] - \left( \frac{v_{12} M_{12}}{v_{11} M_{11}} \right) \left( \frac{Y_{1,0}^{*}}{Y_{2,0}^{*}} \right) \gamma \bar{\rho}_{g} C_{1} C_{2} \exp \left( \frac{\theta_{g}}{1 + \beta \theta_{g}} \right)$$
(2.15)

$$\frac{\partial \bar{\rho}_g}{\partial \tau} + \frac{\partial \bar{\rho}_g \bar{u}_g}{\partial \xi} = \frac{B}{\chi} A \left( \frac{v_{23} M_{23}}{v_{22} M_{22}} - 1 \right), \tag{2.16}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}_k}{\partial \tau} + \frac{\partial \overline{\rho}_k \overline{u}_k}{\partial \xi} = -\frac{v_{21} M_{21}}{v_{22} M_{22}} \frac{B}{\chi Z_2} \frac{u_k}{\rho_k} A$$
(2.17)

$$\overline{\rho}_{g} = \frac{\left(1 - \beta/\gamma\right)}{1 + \beta\theta_{g}},\tag{2.18}$$

$$\frac{\partial \theta_k}{\partial \tau} + \overline{u}_k \frac{\partial \theta_k}{\partial \xi} = \frac{\left(\theta_g - \theta_k\right)}{\overline{r}_k \chi} + \frac{\delta}{\chi Z_1} \left(\frac{Y_{2,0}^*}{Y_{1,0}^*}\right) \frac{C_2 \overline{\rho}_g \overline{j}}{\overline{r}_k^2}, \qquad (2.19)$$

$$\frac{\partial \overline{u}_{k}}{\partial \tau} + \overline{u}_{k} \frac{\partial \overline{u}_{k}}{\partial \xi} = \frac{3}{2} \frac{\Pr C}{N u \chi} \frac{\left(\overline{u}_{g} - \overline{u}_{k}\right)}{\overline{r}_{k}} + \frac{v_{21} M_{21}}{v_{22} M_{22}} \frac{B}{\chi Z_{2}} \frac{\overline{u}_{k}}{\overline{\rho}_{k}} A, \qquad (2.20)$$

$$\frac{\partial \overline{n}}{\partial \tau} + \frac{\partial \overline{n} \overline{u}_k}{\partial \xi} = 0, \qquad (2.21)$$

$$\overline{r}_{k} = \left(\frac{\overline{\rho}_{k}}{\overline{n}}\right)^{\frac{1}{3}},\tag{2.22}$$

$$A = \mu Le \frac{Nu_D}{Nu} Y_{2,0}^* \overline{j} C_2 \overline{r_k}^2 \overline{\rho_g} \overline{n}, \ \overline{j} = \frac{\exp(E_{kg}\theta_k / (1 + \beta\theta_k))}{\overline{r_k} \mu \exp(E_{kg}\theta_k / (1 + \beta\theta_k)) + 1}, \ E_{kg} = \frac{E_k}{E_g}.$$

Граничные условия:

$$\theta_{g}(0,\tau) = 0, \quad \frac{\partial \theta_{g}(\infty,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial \theta_{k}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial \overline{\rho}_{k}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0,$$

$$\frac{\partial \overline{n}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial C_{1}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial C_{2}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial C_{1}(\infty,\tau)}{\partial \xi} = 0,$$

$$\frac{\partial C_{2}(\infty,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \overline{u}_{g}(0,\tau) = 0, \quad \overline{u}_{k}(0,\tau) = 0.$$
(2.23)

Начальные условия:

$$\begin{aligned}
\theta_{g}(\xi,0) &= -1/\gamma, \quad \theta_{k}(\xi,0) = -1/\gamma, \quad C_{1}(\xi,0) = C_{1,0}, \quad C_{2}(\xi,0) = 1, \\
\overline{u}_{g}(\xi,0) &= 0, \quad \overline{u}_{k}(\xi,0) = 0, \quad \overline{\rho}_{g}(\xi,0) = 1, \quad \overline{\rho}_{k}(\xi,0) = 1, \\
\overline{n}(\xi,0) &= 1, \quad \overline{r}_{k}(\xi,0) = 1.
\end{aligned}$$
(2.24)

Для приведения системы (2.1) – (2.12) к безразмерному виду, были использованы следующие характерные масштабы:

$$x_{*} = \sqrt{\frac{\lambda t_{*}}{c_{g} \rho_{g,0}}} - \text{масштаб координаты,}$$
$$t_{*} = \frac{RT_{a}^{2}c_{g}}{QE_{g} \rho_{g,0} Y_{1,0}^{*} Y_{2,0}^{*} k_{0,g} \exp\left(-\frac{E_{g}}{RT_{a}}\right)} - \text{масштаб времени,}$$
$$V_{*} = \frac{x_{*}}{t_{*}} - \text{скорости,}$$

 $\rho_{\scriptscriptstyle g,0}-$ начальная плотность газа,

 $\rho_{k,0}$  – начальная приведенная плотность частиц,

$$T_* = \frac{RT_a^2}{E_g}$$
 – температура,

$$Y_{1,0}^* = \frac{\rho_{1,0}}{\rho_{g,0}}$$
 – начальная концентрация горючего,

$$Y_{2,0}^* = \frac{\rho_{2,0}}{\rho_{g,0}}$$
 – начальная концентрация окислителя.

Безразмерные переменные:

$$\tau = \frac{t}{t_*} - \text{время};$$

$$\xi = \frac{x}{x_*}$$
 – координата;

$$\theta_{g,k} = \frac{E}{RT_a^2} (T_{g,k} - T_a) - \text{температура;}$$

 $C_1 = \frac{Y_1}{Y_{1,0}}, \quad C_2 = \frac{Y_2}{Y_{2,0}}$  – относительные концентрации горючего и

окислителя в газовой фазе, где  $Y_1 = \frac{\rho_1}{\rho_g}$ ,  $Y_2 = \frac{\rho_2}{\rho_g}$ ,  $Y_{1,0} = \frac{\rho_1}{\rho_{g,0}}$ ,  $Y_{2,0} = \frac{\rho_2}{\rho_{g,0}}$ ;

$$\bar{\rho}_{g} = \frac{\rho_{g}}{\rho_{g,0}}$$
 – плотность газа;

$$\bar{\rho}_k = \frac{\rho_k}{\rho_{k,0}}$$
 – приведенная плотность частиц;

$$\overline{u}_{g} = \frac{u_{g}}{V_{*}}$$
 – скорость газа;

$$\overline{u}_k = \frac{u_k}{V_*}$$
 – скорость частиц;

*n* – число частиц в единице объема;

 $\overline{r_k}$  – радиус частицы.

В результате обезразмеривания системы уравнений (2.1)-(2.12) получены следующие безразмерные параметры подобия:

$$\mu = \frac{k_{0,k} \exp(-E_k / RT_k)}{Nu_D D}$$
 – параметр, характеризующий интенсивность

массообмена частицы (отношение скоростей химической реакции и массообмена).

$$\delta = \frac{q\rho_{k,0}r_{k,0}\left(E_g / RT_a^2\right)k_{0,k}\exp\left(-E_k / RT_a\right)Y_{1,0}}{Nu_T\lambda} -$$
параметр,

характеризующий интенсивность теплообмена частицы (отношение скорости тепловыделения в химической реакции к скорости теплообмена),

$$\Pr = \frac{\mu_{g}c_{g}}{\lambda} -$$
число Прандтля,  

$$Nu = \frac{\alpha r_{k,0}}{\lambda} -$$
число Нуссельта,  

$$Nu_{D} = \frac{\beta_{m}r_{k,0}}{D} -$$
диффузионное число Нуссельта, определяет

соотношение между массообменом и диффузией,

$$Le = \frac{Dc_{g}\rho_{g,0}}{\lambda} - число Льюиса,$$

$$C = \frac{c_{k}}{c_{g}} - отношение теплоемкостей,$$

$$B = \frac{4}{3} \frac{\pi r_{k,0}^{3} c_{k} \rho_{k}^{0} n_{0}}{c_{g} \rho_{g,0}} - начальная массовая концентрация частиц,$$

$$\chi = \frac{r_{k,0}^{2} c_{k} \rho_{g,0}^{0}}{3 \operatorname{Nu} \lambda t_{*}} - размер частиц,$$

$$\gamma = \frac{c_{g} R T_{a}^{2}}{Q E \rho_{g,0} Y_{1,0}} - тепловой эффект реакции,$$

$$\beta = \frac{R T_{a}}{E} - параметр Аррениуса, характеризует энергию активации$$

реакции,

 $Z_1 = \frac{\rho_k^0}{\rho_{g,0}}$  – отношение истинной плотности конденсированной фазы к

начальной плотности газа,

$$Z_2 = \frac{\rho_{k,0}}{\rho_{g,0}}$$
 – отношение приведенной плотности частиц к начальной

плотности газа,

 $E_{kg} = \frac{E_k}{E_g}$  – отношение энергий активации горючего в

конденсированной и газовой фазах.

Система уравнений с начальными и граничными условиями (2.13)-(2.24) описывает распространение ламинарного пламени в реагирующем газе в котором взвешены частицы, реагирующие гетерогенно с окислителем газовой фазы. В модели учитывается эффект теплового расширения газа при увеличении его температуры. Возникающее движение газа вызывает движение частиц за счет их вязкого взаимодействия с газом. В модели не учитывается обратное динамическое влияние движения частиц на движение газа ввиду малого объемного содержания частиц дисперсной фазы.

# 2.2 Метод численного решения системы уравнений математической модели горения гибридной газовзвеси.

Система уравнений (2.13)-(2.24) решалась численно с использованием разностных методов решения уравнений параболического типа [89-91]. Задавалась расчетная область заданной длины, которая покрывалась разностной сеткой. Длина области задавалась такой, чтобы формирующийся фронт горения вышел на стационарный режим распространения «забыв» начальные условия зажигания, при этом правая граница отодвигалась на такое расстояние, чтобы она не влияла на значение стационарной скорости распространения пламени по горючей газовзвеси.

Для системы уравнений (2.13)-(2.24) на заданной сетке записывался ее

разностный аналог. Параметры сетки подбирались из условия сеточной сходимости результатов расчетов и из условия устойчивости разностной схемы. Подробности применяемой аппроксимации, численных методов и алгоритма решения задачи, а также результаты тестирования приведены ниже в п. 2.2.1-2.3.4.

# 2.2.1 Разностная аппроксимация системы уравнений математической модели

Запишем разностную аппроксимацию системы уравнений математической модели распространения ламинарного пламени по газовзвеси реагирующих частиц в реагирующем газе (2.13)-(2.24).

$$\begin{split} &\frac{\theta_{g,i}^{n+1} - \theta_{g,i}^{n}}{\tau} + \frac{\overline{u}_{g,i}^{n+1} + |\overline{u}_{g,i}^{n+1}|}{2} \frac{\theta_{g,i}^{n+1} - \theta_{g,i-1}^{n+1}}{h} + \frac{\overline{u}_{g,i}^{n+1} - |\overline{u}_{g,i}^{n+1}|}{2} \frac{\theta_{g,i+1}^{n+1} - \theta_{g,i}^{n+1}}{h} = \\ &= \frac{1}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}} \frac{\theta_{g,i+1}^{n+1} - 2\theta_{g,i+1}^{n+1} + \theta_{g,i-1}^{n+1}}{h^{2}} + \overline{\rho}_{g,i}^{n} C_{1,i}^{n} C_{2,i}^{n} \exp\left(\frac{\theta_{g,i}^{n}}{1 + \beta \theta_{g,i}^{n}}\right) - (2.25) \\ &- \frac{B}{\chi} \frac{\overline{r}_{k,i}^{n}}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}} \overline{n}_{i}^{n}(t) \left(\theta_{g,i}^{n} - \theta_{k,i}^{n}\right) - \frac{1}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}} \frac{B}{\chi} \left(\theta_{g,i}^{n} - C\theta_{g,i}^{n} + \frac{1 - C}{\beta}\right) A_{i}^{n}, \\ &\frac{C_{1,i}^{n+1} - C_{1,i}^{n}}{\tau} + \frac{\overline{u}_{g,i}^{n+1} + |\overline{u}_{g,i}^{n+1}|}{2} \frac{C_{1,i}^{n+1} - C_{1,i-1}^{n+1}}{h} + \frac{\overline{u}_{g,i}^{n+1} - |\overline{u}_{g,i}^{n+1}|}{2} \frac{C_{1,i+1}^{n+1} - C_{1,i}^{n+1}}{h} = \\ &= \frac{Le}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}} \frac{C_{1,i+1}^{n+1} - 2C_{1,i}^{n+1} + C_{1,i-1}^{n+1}}{h^{2}} - (2.26) \\ &- \gamma \overline{\rho}_{g,i}^{n} C_{1,i}^{n} C_{2,i}^{n} \exp\left(\frac{\theta_{g,i}^{n}}{1 + \beta \theta_{g,i}^{n}}\right) - \frac{B}{\chi} \left(\frac{v_{23}M_{23}}{v_{22}M_{22}} - 1\right) \frac{C_{1,i}}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}} A_{i}^{n}, \\ &\frac{C_{2,i}^{n+1} - C_{2,i}^{n}}{\tau} + \frac{\overline{u}_{g,i}^{n+1} + |\overline{u}_{g,i}^{n+1}|}{2} \frac{C_{2,i-1}^{n+1} - C_{2,i-1}^{n+1}}{h} + \frac{\overline{u}_{g,i}^{n+1} - |\overline{u}_{g,i}^{n+1}|}{2} \frac{C_{2,i+1}^{n+1} - C_{2,i}^{n+1}}{h} = \\ &= \frac{Le}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}} \frac{C_{1,i}^{n+1} - 2C_{2,i}^{n+1} + C_{2,i-1}^{n+1}}{1 + \beta \theta_{g,i}^{n}}} - \frac{1}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}} \frac{B}{\chi} A_{i}^{n} \left[ 1 + C_{2,i}^{n} Y_{2,0}^{n} \left(\frac{v_{23}M_{23}}{v_{22}M_{22}} - 1\right) \right] - (2.27) \\ &- \left(\frac{v_{12}M_{12}}}{v_{11}M_{11}}\right) \left(\frac{Y_{10}^{n}}{Y_{2,0}^{n}}\right) \gamma \overline{\rho}_{g,i}^{n} C_{1,i}^{n} C_{2,i}^{n} \exp\left(\frac{\theta_{g,i}^{n}}{1 + \beta \theta_{g,i}^{n}}\right), \end{aligned}$$

$$\frac{\overline{\rho}_{g,i}^{n+1} - \overline{\rho}_{g,i}^{n}}{\tau} + \frac{\overline{\rho}_{g,i}^{n+1}\overline{u}_{g,i}^{n+1} - \overline{\rho}_{g,i-1}^{n+1}\overline{u}_{g,i-1}^{n+1}}{h} = \frac{B}{\chi} A_{i}^{n} \left(\frac{v_{23}M_{23}}{v_{22}M_{22}} - 1\right),$$
(2.28)

$$\frac{\overline{\rho}_{k,i}^{n+1} - \overline{\rho}_{k,i}^{n}}{\tau} + \frac{I_{i+\frac{1}{2}}^{n} - I_{i-\frac{1}{2}}^{n}}{h} = -\frac{v_{21}M_{21}}{v_{22}M_{22}} \frac{B}{\chi Z_{2}} \frac{\overline{\mu}_{k,i}^{n}}{\overline{\rho}_{k,i}^{n}} A_{i}^{n},$$

$$I_{i\pm\frac{1}{2}}^{n} = \overline{\rho}_{k,i\pm\frac{1}{2}}^{n} \overline{\mu}_{k,i\pm\frac{1}{2}}^{n}, \quad \overline{\mu}_{k,i\pm\frac{1}{2}}^{n} = \frac{\overline{\mu}_{k,i\pm1}^{n} + \overline{\mu}_{k,i}^{n}}{2},$$

$$\overline{\rho}_{k,i+\frac{1}{2}}^{n} = \begin{cases} \overline{\rho}_{k,i+1}^{n}, \quad \overline{\mu}_{k,i+\frac{1}{2}}^{n} \ge 0\\ \overline{\rho}_{k,i+1}^{n}, \quad \overline{\mu}_{k,i+\frac{1}{2}}^{n} < 0, \quad \overline{\rho}_{k,i-\frac{1}{2}}^{n} = \begin{cases} \overline{\rho}_{k,i}^{n}, \quad \overline{\mu}_{k,i-\frac{1}{2}}^{n} \ge 0\\ \overline{\rho}_{k,i}^{n}, \quad \overline{\mu}_{k,i-\frac{1}{2}}^{n} < 0, \quad \overline{\rho}_{k,i-\frac{1}{2}}^{n} = \begin{cases} \overline{\rho}_{k,i}^{n}, \quad \overline{\mu}_{k,i-\frac{1}{2}}^{n} \ge 0\\ \overline{\rho}_{k,i}^{n}, \quad \overline{\mu}_{k,i-\frac{1}{2}}^{n} < 0, \quad \overline{\rho}_{k,i-\frac{1}{2}}^{n} < 0, \quad \overline{\rho}_$$

$$\bar{\rho}_{g,i}^{n+1} = \frac{(1 - \beta/\gamma)}{1 + \beta \theta_{g,i}^{n+1}},$$
(2.30)

$$\frac{\theta_{k,i}^{n+1} - \theta_{k,i}^{n}}{\tau} + \frac{\overline{u}_{k,i}^{n} + \left|\overline{u}_{k,i}^{n}\right|}{2} \frac{\theta_{k,i}^{n} - \theta_{k,i-1}^{n}}{h} + \frac{\overline{u}_{k,i}^{n} - \left|\overline{u}_{k,i}^{n}\right|}{2} \frac{\theta_{k,i+1}^{n} - \theta_{k,i}^{n}}{h} = \\
= \frac{\left(\theta_{g,i}^{n} - \theta_{k,i}^{n}\right)}{\overline{r}_{k,i}^{n}\chi} + \frac{\delta}{\chi Z_{1}} \left(\frac{Y_{2,0}^{*}}{Y_{1,0}^{*}}\right) \frac{C_{2,i}^{n} \overline{\rho}_{g,i}^{n} \overline{j}_{i}^{n}}{\left(\overline{r}_{k,i}^{n}\right)^{2}},$$
(2.31)

$$\frac{\overline{u}_{k,i}^{n+1} - \overline{u}_{k,i}^{n}}{\tau} + \frac{\overline{u}_{k,i}^{n} + \left|\overline{u}_{k,i}^{n}\right|}{2} \frac{\overline{u}_{k,i}^{n} - \overline{u}_{k,i-1}^{n}}{h} + \frac{\overline{u}_{k,i}^{n} - \left|\overline{u}_{k,i}^{n}\right|}{2} \frac{\overline{u}_{k,i+1}^{n} - \overline{u}_{k,i}^{n}}{h} = ,$$

$$= \frac{3}{2} \frac{\Pr C}{Nu \chi} \frac{\left(\overline{u}_{g,i}^{n} - \overline{u}_{k,i}^{n}\right)}{\overline{r}_{k,i}^{n}} + \frac{v_{21} M_{21}}{v_{22} M_{22}} \frac{B}{\chi Z_{2}} \frac{\overline{u}_{k,i}^{n}}{\overline{\rho}_{k,i}^{n}} A_{i}^{n},$$
(2.32)

$$\frac{\overline{n}_{i}^{n+1} - \overline{n}_{i}^{n}}{\tau} + \frac{N_{i+\frac{1}{2}}^{n} - N_{i-\frac{1}{2}}^{n}}{h} = 0,$$

$$N_{i\pm\frac{1}{2}}^{n} = \overline{n}_{i\pm\frac{1}{2}}^{n} u_{k,i\pm\frac{1}{2}}^{n}, \quad u_{k,i\pm\frac{1}{2}}^{n} = \frac{u_{k,i\pm1}^{n} + u_{k,i}^{n}}{2}, \quad , \quad (2.33)$$

$$n_{i+\frac{1}{2}}^{n} = \begin{cases} n_{i}^{n}, & u_{k,i+\frac{1}{2}}^{n} \ge 0\\ n_{i+1}^{n}, & u_{k,i+\frac{1}{2}}^{n} \le 0, \quad n_{i-\frac{1}{2}}^{n} = \begin{cases} n_{i-1}^{n}, & u_{k,i-\frac{1}{2}}^{n} \ge 0\\ n_{i}^{n}, & u_{k,i-\frac{1}{2}}^{n} \le 0, \end{cases}$$

$$\overline{r}_{k,i}^{n+1} = \left(\frac{\overline{\rho}_{k,i}^{n}}{\overline{n}_{k,i}^{n}}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad (2.34)$$

$$A_i^{n+1} = \mu Le \frac{Nu_D}{Nu} Y_{2,0}^* \overline{j}_i^n C_{2,i}^n \left(\overline{r}_{k,i}^n\right)^2 \overline{\rho}_{g,i}^n \overline{n}_i^n,$$

$$\overline{j}_{i}^{n} = \frac{\exp\left(E_{kg}\theta_{k,i}^{n}/(1+\beta\theta_{k,i}^{n})\right)}{\overline{r}_{k,i}^{n}\mu\exp\left(E_{kg}\theta_{k,i}^{n}/(1+\beta\theta_{k,i}^{n})\right)+1}.$$

Граничные условия:

$$\begin{aligned} \theta_{g,i}^{n} \Big|_{\xi=0} &= 0, \quad \frac{\theta_{g,i+1}^{n} - \theta_{g,i}^{n}}{h} \Big|_{\xi=\infty} = 0, \quad \frac{\theta_{k,i+1}^{n} - \theta_{k,i}^{n}}{h} \Big|_{\xi=0} = 0, \\ \frac{\overline{\rho}_{k,i+1}^{n} - \overline{\rho}_{k,i}^{n}}{h} \Big|_{\xi=0} &= 0, \quad \frac{\overline{n}_{i+1}^{n} - \overline{n}_{i}^{n}}{h} \Big|_{\xi=0} = 0, \\ \frac{C_{1,i+1}^{n} - C_{1,i}^{n}}{h} \Big|_{\xi=0} &= 0, \quad \frac{C_{2,i+1}^{n} - C_{2,i}^{n}}{h} \Big|_{\xi=0} = 0, \quad \frac{C_{1,i+1}^{n} - C_{1,i}^{n}}{h} \Big|_{\xi=\infty} = 0, \\ \frac{C_{2,i+1}^{n} - C_{2,i}^{n}}{h} \Big|_{\xi=\infty} &= 0, \quad \overline{u}_{g,i}^{n} \Big|_{\xi=0} = 0, \quad u_{k,i}^{n} \Big|_{\xi=0} = 0. \end{aligned}$$

$$(2.35)$$

Начальные условия:

$$\begin{aligned} \theta_{g,i}^{n} \Big|_{\tau=0} &= -1/\gamma, \quad \theta_{k,i}^{n} \Big|_{\tau=0} = -1/\gamma, \quad C_{1,i}^{n} \Big|_{\tau=0} = C_{1,0}, \quad C_{2,i}^{n} \Big|_{\tau=0} = 1, \\ \overline{u}_{g,i}^{n} \Big|_{\tau=0} &= 0, \quad \overline{u}_{k,i}^{n} \Big|_{\tau=0} = 0, \quad \overline{\rho}_{g,i}^{n} \Big|_{\tau=0} = 1, \quad \overline{\rho}_{k,i}^{n} \Big|_{\tau=0} = 1, \\ \overline{n}_{i}^{n} \Big|_{\tau=0} &= 1, \quad \overline{r}_{k,i}^{n} \Big|_{\tau=0} = 1. \end{aligned}$$

$$(2.36)$$

Уравнения (2.13)-(2.15) аппроксимировались неявной разностной схемой (2.25)-(2.27), и решались методом прогонки. Плотность газа в уравнении (2.30) получена подстановкой значений температуры на новом временном слое из (2.25). Уравнения (2.29)-(2.33) решались с помощью явной разностной схемы. Значения скорости движения газа,  $\bar{u}_{g,i}^{n+1}$  получены из уравнения (2.28) в которое подставляются значения плотности на новом временном слое. В (2.25)-(2.28), (2.31), (2.32) конвективные слагаемые аппроксимировались разностями против потока.

### 2.2.2 Применение метода прогонки для решения разностных уравнений

Разностные уравнения вида (2.25)-(2.27) можно привести к виду:

$$A_{i}X_{i+1}^{n+1} + B_{i}X_{i}^{n+1} + C_{i}X_{i-1}^{n+1} = d_{i}, (2.37)$$

где *X* – искомая неизвестная; *A*, *B*, *C* – коэффициенты; *d* – правая часть. Метод прогонки предполагает поиск неизвестной функции с помощью линейного соотношения:

$$X_i = \alpha_i X_{i+1} + \beta_i, \quad i = n, n-1, ..., 1.$$
 (2.38)

Меняя значение индекса і на і-1 в (2.38), имеем:

$$X_{i-1} = \alpha_{i-1} X_i + \beta_{i-1}$$
(2.39)

Подставляя (2.39) в (2.37) получаем:

$$A_{i}X_{i+1}^{n+1} + B_{i}X_{i}^{n+1} + C_{i}\left(\alpha_{i-1}X_{i} + \beta_{i-1}\right) = d_{i}$$
(2.40)

Из (2.40) выражаем X<sub>i</sub>:

$$X_{i} = \frac{-A}{B_{i} + C_{i}\alpha_{i-1}} X_{i+1} + \frac{d_{i} - C_{i}\beta_{i-1}}{B_{i} + C_{i}\alpha_{i-1}}$$
(2.41)

Для того, чтобы найти значения *X* требуется выполнить следующие действия:

А) Прямой ход прогонки:

По формулам (2.40) находятся значения коэффициентов  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ , i = 2,..., n. Значения  $\alpha_1$ ,  $\beta_1$  определяются из разностной аппроксимации граничных условий (2.35).

Б) Обратный ход прогонки:

По значениям  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  по формуле (2.38) восстанавливаются искомые значения *X*, при i = n-1,..., 1, значение  $X_n$  определяются из разностной аппроксимации граничных условий (2.35).

Далее приведены соотношения, полученные из (2.25)-(2.27), при приведении их к виду (2.37). Для разностного соотношения (2.25) имеем:

$$\begin{aligned} \theta_{g,i+1}^{n+1} \left[ \frac{\tau}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}h^{2}} - \frac{\tau}{2h} \Big( \overline{u}_{g,i}^{n} - \left| \overline{u}_{g,i}^{n} \right| \Big) \right] + \theta_{g,i}^{n+1} \left[ - \frac{2\tau}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}h^{2}} - \frac{\tau}{h} \left| \overline{u}_{g,i}^{n} \right| - 1 \right] + \\ + \theta_{g,i-1}^{n+1} \left[ \frac{\tau}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}h^{2}} + \frac{\tau}{2h} \Big( \overline{u}_{g,i}^{n} + \left| \overline{u}_{g,i}^{n} \right| \Big) \right] = -\theta_{g,i}^{n} - \tau \overline{\rho}_{g,i}^{n} C_{1,i}^{n} C_{2,i}^{n} \exp\left( \frac{\theta_{g,i}^{n}}{1 + \beta \theta_{g,i}^{n}} \right) + \\ + \tau \frac{B}{\chi} \frac{\overline{r}_{k,i}^{n}}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}} \overline{n}_{i}^{n}(t) \Big( \theta_{g,i}^{n} - \theta_{k,i}^{n} \Big) + \frac{\tau}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}} \frac{B}{\chi} \bigg( \theta_{g,i}^{n} - C \theta_{g,i}^{n} + \frac{1 - C}{\beta} \bigg) A_{i}^{n} \end{aligned}$$

Для разностного соотношения (2.26) имеем:

$$C_{1,i+1}^{n+1} \left[ \frac{Le \ \tau}{\overline{\rho}_{g,i}^{n} h^{2}} - \frac{\tau}{2h} \left( \overline{u}_{g,i}^{n} - \left| \overline{u}_{g,i}^{n} \right| \right) \right] + C_{1,i}^{n+1} \left[ -\frac{2Le \ \tau}{\overline{\rho}_{g,i}^{n} h^{2}} - \frac{\tau}{h} \left| \overline{u}_{g,i}^{n} \right| - 1 \right] + C_{1,i-1}^{n+1} \left[ \frac{Le \ \tau}{\overline{\rho}_{g,i}^{n} h^{2}} + \frac{\tau}{2h} \left( \overline{u}_{g,i}^{n} + \left| \overline{u}_{g,i}^{n} \right| \right) \right] = -C_{1,i} + \tau \frac{B}{\chi} \left( \frac{V_{23}M_{23}}{V_{22}M_{22}} - 1 \right) \frac{C_{1,i}^{n}}{\overline{\rho}_{g,i}^{n}} A_{i}^{n} + \tau \gamma \overline{\rho}_{g,i}^{n} C_{1,i}^{n} C_{2,i}^{n} \exp \left( \frac{\theta_{g,i}^{n}}{1 + \beta \theta_{g,i}^{n}} \right)$$

Для разностного соотношения (2.27) имеем:

$$C_{2,i+1}^{n+1} \left[ \frac{Le \ \tau}{\overline{\rho}_{g,i}^{n} h^{2}} - \frac{\tau}{2h} \left( \overline{u}_{g,i}^{n} - \left| \overline{u}_{g,i}^{n} \right| \right) \right] + C_{2,i}^{n+1} \left[ -\frac{2Le \ \tau}{\overline{\rho}_{g,i}^{n} h^{2}} - \frac{\tau}{h} \left| \overline{u}_{g,i}^{n} \right| - 1 \right] + C_{2,i-1}^{n+1} \left[ \frac{Le \ \tau}{\overline{\rho}_{g,i}^{n} h^{2}} + \frac{\tau}{2h} \left( \overline{u}_{g,i}^{n} + \left| \overline{u}_{g,i}^{n} \right| \right) \right] = -C_{2,i} + \frac{\tau}{\overline{\rho}_{g,i}^{n} Y_{2,0}^{*}} \frac{B}{\chi} A_{i}^{n} \times \left[ 1 + C_{2,i}^{n} Y_{2,0}^{*} \left( \frac{V_{23}M_{23}}{V_{22}M_{22}} - 1 \right) \right] + \tau \left( \frac{V_{12}M_{12}}{V_{11}M_{11}} \right) \left( \frac{Y_{1,0}^{*}}{Y_{2,0}^{*}} \right) \gamma \overline{\rho}_{g,i}^{n} C_{1,i}^{n} C_{2,i}^{n} \exp \left( \frac{\theta_{g,i}^{n}}{1 + \beta \theta_{g,i}^{n}} \right)$$

Для обеспечения устойчивого численного решения уравнений (2.25)-(2.27) для аппроксимации конвективных слагаемых используются разности против потока [89].

В уравнениях (2.17) и (2.21) конвективная производная в соответствии с [92] аппроксимируется следующим образом:

$$\frac{\partial \rho U}{\partial \xi} = \frac{I_{i+\frac{1}{2}}^n - I_{i-\frac{1}{2}}^n}{h},$$

где потоки определяются по формулам:

$$I_{i\pm\frac{1}{2}}^{n} = \rho_{i\pm\frac{1}{2}}^{n} U_{i\pm\frac{1}{2}}^{n}, \qquad U_{i\pm\frac{1}{2}}^{n} = \frac{U_{i\pm1}^{n} + U_{i}^{n}}{2},$$

$$\rho_{i+\frac{1}{2}}^{n} = \begin{cases} \rho_{i}^{n}, & U_{i+\frac{1}{2}}^{n} \ge 0\\ \rho_{i+1}^{n}, & U_{i+\frac{1}{2}}^{n} \le 0, \end{cases}, \qquad \rho_{i-\frac{1}{2}}^{n} = \begin{cases} \rho_{i-1}^{n}, & U_{i-\frac{1}{2}}^{n} \ge 0\\ \rho_{i}^{n}, & U_{i-\frac{1}{2}}^{n} \le 0. \end{cases}$$

### 2.2.3 Вычисление скорости распространения фронта пламени

При численном расчете задач горения необходимо знать, с какой скоростью движется фронт пламени. Будем считать скоростью фронта скорость движения координаты с концентрацией окислителя  $C_2 = 0.5$ .



Рисунок 2.2. Зависимость концентрации окислителя от координаты в последовательные моменты времени.



Рисунок 2.3. Зависимость безразмерной скорости фронта от безразмерного времени.

На рисунке 2.2 представлены типичные графики распределения концентрации окислителя, выведенные в файл данных в определенные моменты времени с заданным интервалом.

Значение скорости фронта горения рассчитывается по формуле

$$U_{fr} = \frac{\Delta \xi}{\Delta \tau},$$

где  $\Delta \xi$ - расстояние между выбранными положениями координаты с концентрацией  $C_2 = 0.5$ ,  $\Delta \tau$ - соответствующий интервал времени между моментами времени, в которые были определены координаты положения значения концентрации  $C_2 = 0.5$ . В расчетах были использованы следующие значения  $\Delta \tau$ :  $\Delta \tau_1 = 10$ ,  $\Delta \tau_2 = 20$ ,  $\Delta \tau_3 = 100$ .

На рисунке 2.3 представлены графики скоростей фронта горения, посчитанных с помощью всех использованных  $\Delta \tau$ , графики совпадают, различия в значениях скорости незначительны.

#### 2.2.4 Алгоритм и программная реализация

Решение системы уравнений (2.13)-(2.24) проводится численно. Уравнения (2.13)-(2.15) решаются по неявной разностной схеме методом прогонки, при этом конвективный член аппроксимируется разностями против потока. Получившиеся значения температуры газа на новом временном слое используются для нахождения величины плотности газа на новом временном слое из уравнения состояния при условии изобаричности (2.18). Затем из уравнения сохранения массы газа (2.16) определяется скорость газа. Уравнения (2.17), (2.19)-(2.21) решаются по явной разностной схеме, где конвективные слагаемые аппроксимируются разностями против потока. При этом гиперболическое число Куранта выбиралось из условия устойчивости для явной схемы. В процессе расчетов контролировалось, чтобы параболическое число Куранта не превышало величины 1.

Алгоритм состоит в реализации вычислений искомых величин в следующей последовательности:

1 Задаются начальные данные и безразмерные параметры задачи.

2 Проводится расчет концентрации горючего и окислителя в газовой фазе на n+1 временном слое по (2.26) и (2.27) методом прогонки.

3 Проводится расчет температуры газовой фазы на n+1 временном слое по (2.25) методом прогонки.

4 Проводится расчет плотности газа на n+1 временном слое по (2.30).

5 Проводится расчет скорости газа на n+1 временном слое по (2.28).

6 Проводится расчет скорости частиц на n+1 временном слое по (2.32).

7 Проводится расчет температуры частиц на n+1 временном слое по (2.31).

8 Проводится расчет распределенной плотности частиц на n+1 временном слое по (2.29).

9 Проводится расчет числа частиц в единице объема на n+1 временном

слое по (2.33).

10 Проводится расчет радиуса частиц конденсированной фазы на n+1 временном слое по (2.34)

11 Через заданное количество шагов по времени вычисляется скорость пламени и записывается в файл данных.

12 Через заданное количество шагов по времени проводится запись параметров состояния среды в файлы данных.

13 Проводится передача процесса вычислений на п. 2 или окончание расчета.

Полученные расчетные данные обрабатываются программными средствами построения графиков, анализируются.

Реализация математических моделей в программный код производилась на языке программирования FORTRAN.

Расчеты проводились на персональном компьютере И на «SKIF - CYBERIA» Томского суперкомпьютере государственного университета. Для улучшения быстродействия при проведении параметрических расчетов были использованы возможности интерпретатора языка FORTRAN фирмы Intel. Для распараллеливания кода использовался открытый стандарт OpenMP (Open Multi - Processing).

2.3 Результаты тестирования методики и программы для расчета распространения ламинарного пламени в реагирующем газе с взвесью реакционноспособных частиц

2.3.1 Тестовая задача №1. Решение задачи о теплопроводности в тонкой пластинке

Тонкая пластинка толщины *L*, теплоизолированная на границах, имеет различную температуру на двух своих половинках. Необходимо найти температуру пластинки после выравнивания температур за счет

теплопроводности. Будем считать, что пластинка нагрета до  $T_{g,0}$  с одной стороны на глубину  $0 < x \le \frac{L}{2}$ , с другой стороны пластинка имеет равномерное распределение температуры - $T_{g,0}$ , при  $\frac{L}{2} \le x < L$ 

Математически данную задачу можно описать следующим образом:

$$c\rho_g \frac{\partial T_g}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^2 T_g}{\partial x^2}$$
(2.42)

Граничные условия:

$$\frac{\partial T_g}{\partial x}(0,t) = 0, \quad \frac{\partial T_g}{\partial x}(L,t) = 0 \tag{2.43}$$

Начальные условия:

$$T_{g}(x,0) = T_{g,0}, \ 0 < x \le \frac{L}{2}; \ T_{g}(x,0) = -T_{g,0}, \ \frac{L}{2} \le x < L$$
(2.44)

Для обезразмеривания системы (2.42)-(2.44) выберем следующие масштабы:

$$\begin{aligned} \theta_g &= \frac{T_g}{T_*}; \qquad T_* = T_{g,0}; \qquad \tau = \frac{t}{t_*}; \qquad \xi = \frac{x}{x_*}; \\ t_* &= \frac{c\rho x_*^2}{\lambda}; \quad x_* = L \end{aligned}$$

Уравнение (2.42) в безразмерном виде запишется как:

$$\frac{\partial \theta_g}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta_g}{\partial \xi^2}$$
(2.45)

Граничные условия:

$$\frac{\partial \theta_g}{\partial \xi} (0, \tau) = 0, \ \frac{\partial \theta_g}{\partial \xi} (1, \tau) = 0$$
(2.46)

Начальные условия:

$$\theta_{g}(\xi,0) = 1, \ 0 < \xi \le 0.5; \ \theta_{g}(\xi,0) = -1, \ 0.5 \le \xi < 1$$
(2.47)



Рисунок 2.4. Распределение температуры в пластинке в последовательные моменты времени.

Уравнение (2.45) решалось по разработанной программе, в которой из всей системы уравнений (2.13)-(2.24) было оставлено уравнение (2.13) с нулевыми правыми частями и нулевым значением скорости (эквивалентное уравнение (2.45)).

Результаты вычислений представлены на рисунке 2.4. За счет теплопроводности температура в пластинке с течением времени выравнивается.

### 2.3.2 Тестовая задача №2. Задача о тепловом взрыве

В реакционном сосуде с характерным размером *L* идет химическая реакция с выделением теплоты. Необходимо определить критические условия возникновения теплового взрыва.

Размерная математическая постановка записывается в виде:

$$c_{g}\rho_{g}\frac{\partial T_{g}}{\partial t} = \lambda \frac{\partial^{2}T_{g}}{\partial x^{2}} + Qk_{0,g}e^{-\frac{E_{g}}{RT_{g}}}.$$
(2.48)

Граничные условия:

$$T_{g}(0,t) = T_{g,0}, \ T_{g}(L,t) = T_{g,0}.$$
(2.49)

Начальные условия:

$$T_{g}(x,0) = T_{g,0}.$$
 (2.50)

Используем следующие масштабные величины:

$$\begin{aligned} \theta_{g} &= \frac{E_{g}}{RT_{*}^{2}} \left( T_{g} - T_{*} \right); \qquad T_{*} = T_{g,0}; \qquad \tau = \frac{t}{t_{*}}; \qquad \xi = \frac{x}{x_{*}}; \\ t_{*} &= \frac{c\rho x_{*}^{2}}{\lambda}; \quad x_{*} = L. \end{aligned}$$

Уравнение (2.48) в безразмерном виде запишется как:

$$\frac{\partial \theta_g}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \theta_g}{\partial \xi^2} + Fk \cdot e^{\frac{\theta_g}{1 + \beta \theta_g}}.$$
(2.51)

Граничные условия:

$$\theta_g(0,\tau) = 0, \ \theta_g(1,\tau) = 0.$$
(2.52)

Начальные условия:

$$\theta_g\left(\xi,0\right) = 0, \tag{2.53}$$

где  $Fk = \frac{Qk_{0,g}E_g e^{-\frac{E_g}{RT_{g,0}}}}{\lambda RT_{g,0}^2} \cdot x_*^2$  - параметр Франк-Каменецкого.

Уравнение (2.51) решалось по разработанной программе, в которой из всей системы уравнений (2.13)-(2.24) было оставлено уравнение (2.13) с правой частью вида, как в (2.51).

При численном решении уравнения (2.51), было получено критическое значение параметра Франк-Каменецкого  $Fk_* = 3,485$ .

В работе [93] был рассмотрен стационарный случай этой задачи. При  $Fk_* = 2$  вычислено критическое значение размера сосуда, которое составило

$$\xi_* = \frac{1,2}{ch(1,2)} = 0,66.$$

Для сравнения и проверки результатов расчёта получим соотношения между параметрами задач. Параметры (2.51)-(2.53) отметим индексом «1», соответствующие параметры задачи [93] индексом «2».

Запишем соответствующие характерные размеры реакционного сосуда и значения параметров *Fk*:

$$x_{*,1} = L; Fk_1 = \frac{Qk_0E_g e^{-\frac{E_g}{RT_{g,0}}}}{\lambda RT_{g,0}^2} \cdot L^2; x_{*,2} = l; Fk_2 = \frac{Qk_0E e^{-\frac{E}{RT_0}}}{\lambda RT_0^2} \cdot l^2; (2.54)$$

*l*, *L* - характерные размеры сосуда;

Из (2.54) получаем:

$$x_{2}^{*} = l = \left(\frac{Fk_{2} \cdot \lambda RT_{g,0}^{2}}{Qk_{0}E_{g}e^{-\frac{E_{g}}{RT_{g,0}}}}\right)^{\frac{1}{2}};$$

Учитывая что,  $x_1^* = L = 2r_0$ :

$$Fk_{1}^{*} = \frac{Qk_{0}E_{g}e^{-\frac{E_{g}}{RT_{g,0}}}}{\lambda RT_{g,0}^{2}} \cdot \left(2r_{0}^{*}\right)^{2}; \qquad \xi_{2}^{*} = \frac{r_{0}^{*}}{l} = \left| r_{0}^{*} \cdot \left(\frac{QE_{g}k_{0}e^{-\frac{E_{g}}{RT_{g,0}}}}{Fk_{2}^{*} \cdot \lambda RT_{g,0}^{2}}\right)^{\frac{1}{2}} \right|; \qquad (2.55)$$

Обозначим  $\overline{C} = \frac{QE_g k_0 e^{-\frac{E_g}{RT_{g,0}}}}{\lambda RT_{g,0}^2}$ , тогда (2.55) можно переписать в виде:

 $\xi_2^* = r_0 \left(\frac{\overline{C}}{Fk_2^*}\right)^{\frac{1}{2}};$ 

$$Fk_1^* = \overline{C}\left(2r_0^*\right)^2 = 4Fk_2^*\left(\frac{\overline{C}\cdot\left(r_0^*\right)^2}{Fk_2^*}\right);$$

Окончательно получаем:



Рисунок 2.5. Распределение температуры в реакционном сосуде в различные моменты времени, при расчетных значениях параметров Fk = 3.48 (a), Fk = 3.55 (б),

На рисунке 2.5 (а) температура достигает своего стационарного распределения, в случае  $Fk > Fk_*$ , температура в реагирующем слое растет, стационарного решения не существует, происходит тепловой взрыв (на рисунке 2.5 (б)). Таким образом, результаты расчета совпадают с результатами, приведенными в [93].

## 2.3.3 Тестовая задача №3. Расчет скорости распространения волны горения в газе

Разработанный алгоритм и программа решения системы уравнений (2.13)-(2.24) тестировалась путем сравнения результатов расчетов скорости

распространения пламени в горючей газовой смеси с учетом теплового расширения газа, опубликованной в [94]. Система уравнений (2.13)-(2.24) при значениях B = 0 и  $\overline{j} = 0$  становится аналогичной системе уравнений задачи об установлении стационарного распространения пламени при зажигании газа накаленной поверхностью. Отличие заключается лишь в том, что в [94] учитывается зависимость коэффициентов теплопроводности и диффузии от температуры.

При B = 0 и  $\overline{j} = 0$  система уравнений (2.13)-(2.24) принимает вид:

$$\frac{\partial \theta_g}{\partial \tau} + \overline{u}_g \frac{\partial \theta_g}{\partial \xi} = \frac{1}{\overline{\rho}_g} \frac{\partial^2 \theta_g}{\partial \xi^2} + C_1 \exp\left(\frac{\theta_g}{1 + \beta \theta_g}\right), \qquad (2.56)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial \tau} + u \frac{\partial C_1}{\partial \xi} = \frac{Le}{\rho_g} \frac{\partial^2 C_1}{\partial \xi^2} - \gamma C_1 \exp\left(\frac{\theta_g}{1 + \beta \theta_g}\right), \qquad (2.57)$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}_{g}}{\partial \tau} + \frac{\partial \overline{\rho}_{g} \overline{u}_{g}}{\partial \xi} = 0, \qquad (2.58)$$

$$\overline{\rho}_{g} = \frac{\left(1 - \beta/\gamma\right)}{1 + \beta\theta_{g}},\tag{2.59}$$

Граничные условия:

$$\theta_{g}(0,\tau) = 0, \quad \frac{\partial \theta_{g}(\infty,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \overline{u}_{g}(0,\tau) = 0,$$

$$\frac{\partial C_{1}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial C_{1}(\infty,\tau)}{\partial \xi} = 0.$$
(2.60)

Начальные условия:

$$\theta_{g}(\xi,0) = -1/\gamma, \quad C_{1}(\xi,0) = C_{1,0}, \quad \overline{\rho}_{g}(\xi,0) = 1, \quad \overline{u}_{g}(\xi,0) = 0 \quad .$$
(2.61)

Расчеты проводились по программе, составленной для решения системы уравнений (2.13)-(2.24), при B = 0,  $\overline{j} = 0$  (в этом случае решается система уравнений (2.56)-(2.61)) и значениях  $\gamma = 0.2$  и  $\beta = 0.1$ , взятых из [94]. Получено значение скорости распространения фронта пламени 0.205 (значение скорости пламени полученное в [94] 0.28). Отличие обусловлено

некоторым различием в постановке задач.

## 2.3.4 Тестовая задача № 4. Расчет скорости распространения волны горения в газе с инертными частицами

Разработанный алгоритм и программа решения системы уравнений (2.13)-(2.24) тестировалась путем сравнения результатов расчетов скорости распространения пламени в горючей газовой смеси со взвешенными в ней инертными частицами.

Система уравнений (2.13)-(2.24) при  $\rho_g \equiv 1$ ,  $u \equiv 0$ ,  $w \equiv 0$  переходит в модель [29, 30].

Расчеты, проведенные по модели (2.13)-(2.24) при  $\rho_s \equiv 1, u \equiv 0, w \equiv 0$ полностью совпадают с результатами, представленными в [29, 30].

#### Выводы

Представлена физико-математическая модель горения газовой смеси со взвешенными в ней реагирующими с окислителем газовой фазы частицами. Сформулированы предположения математической модели, и записана система уравнений в частных производных. В отличие от известных моделей разработанная модель учитывает движение газа из-за теплового расширения газа и относительное движение частиц при ламинарном распространении пламени.

Разработан алгоритм и методика численного решения системы уравнений математической модели. Для численного решения используется неявная разностная схема для решения уравнений параболического типа и явная для решения уравнений переноса.

Написанная программа ЭВМ протестирована на решении ряда модельных задач с известными результатами. Сравнение результатов

решения этих модельных задач с известными результатами показало, что программа хорошо воспроизводит результаты других авторов для частных случаев общей системы уравнений. Результаты тестирования программы ЭВМ дают обоснование того, что при других соотношениях определяющих параметров задачи она будет давать адекватные результаты расчетов.

### 3 РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЛАМИНАРНОГО ПЛАМЕНИ В ГАЗЕ С ИНЕРТНОЙ ПЫЛЬЮ.

# 3.1 Распространение фронта пламени в газе с инертными частицами. Реакция первого порядка

Рассматривается взвесь инертных частиц в горючем газе, занимающая область  $0 < x < \infty$ . Предполагается, что частицы имеют одинаковый размер и в начальный момент времени равномерно распределены в газе. В координате x = 0 расположена горячая стенка с температурой, равной адиабатической температуре сгорания газа в изобарических условиях. Предполагается, что между газом и частицами происходит теплообмен по закону Ньютона, число Льюиса не зависит от температуры, горение происходит в изобарических условиях, на частицы со стороны газа действует сила сопротивления, описываемая законом Стокса. Движение частиц не оказывает влияния на движение газа из-за малой объемной концентрации частиц в газе. Горячая стенка предполагается непроницаемой для газа.

Данная постановка отличается от описанной во второй главе тем, что в ней отсутствует реакция на поверхности частиц, не учитывается изменение концентрации окислителя в газовой смеси, радиус частиц не изменяется. Таким образом, из математической постановки, представленной в п. 2.1 исключаются уравнения, отвечающие за переменные  $C_2$ , *n* и  $r_k$ , а именно уравнения (2.3), (2.9) и (2.10). Инертность частиц реализуется при помощи условия *j* = 0.

С учетом допущений, сделанных в п. 2.1, математическая модель горения газа с инертными частицами с учетом теплового расширения газа в безразмерной форме запишется в виде:

$$\frac{\partial \theta_g}{\partial \tau} + \overline{u}_g \frac{\partial \theta_g}{\partial \xi} = \frac{1}{\overline{\rho}_g} \frac{\partial^2 \theta_g}{\partial^2 \xi} - \frac{\overline{\rho}_k}{\overline{\rho}_g} \frac{B}{\chi} \Big( \theta_g - \theta_k \Big) + C_1 \exp\left(\frac{\theta_g}{1 + \beta \theta_g}\right), \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial \tau} + \overline{u}_g \frac{\partial C_1}{\partial \xi} = \frac{Le}{\overline{\rho}_g} \frac{\partial^2 C_1}{\partial^2 \xi} - \gamma C_1 \exp\left(\frac{\theta_g}{1 + \beta \theta_g}\right), \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial \theta_k}{\partial \tau} + \overline{u}_k \frac{\partial \theta_k}{\partial \xi} = \frac{\left(\theta_g - \theta_k\right)}{\chi},\tag{3.3}$$

$$\bar{\rho}_{g} = \frac{\left(1 - \beta/\gamma\right)}{1 + \beta\theta},\tag{3.4}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_{g}}{\partial \tau} + \frac{\partial \bar{\rho}_{g} \bar{u}_{g}}{\partial \xi} = 0, \qquad (3.5)$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}_k \overline{u}_k}{\partial \tau} + \frac{\partial \overline{\rho}_k \overline{u}_k^2}{\partial \xi} = \frac{3}{2} \frac{\Pr C}{\chi \operatorname{Nu}} \overline{\rho}_k \left( \overline{u}_g - \overline{u}_k \right), \tag{3.6}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_k}{\partial \tau} + \frac{\partial \bar{\rho}_k \bar{u}_k}{\partial \xi} = 0.$$
(3.7)

Граничные условия:

$$\theta_{g}(0,\tau) = 0, \quad \frac{\partial \theta_{g}(\infty,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial C_{1}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial C_{1}(\infty,\tau)}{\partial \xi} = 0,$$
  
$$\overline{u}_{g}(0,\tau) = 0, \quad \overline{u}_{k}(0,\tau) = 0, \quad \frac{\partial \overline{\rho}_{k}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0$$
(3.8)

Начальные условия:

$$\theta(\xi,0) = -1/\gamma, \quad \theta_k(\xi,0) = -1/\gamma, \quad a(\xi,0) = 1,$$
  
$$\bar{u}_g(\xi,0) = 0, \quad \bar{u}_k(\xi,0) = 0, \quad \bar{\rho}_g(\xi,0) = 1, \quad \bar{\rho}_k(\xi,0) = 1$$
(3.9)

При записи системы уравнений в безразмерных переменных были

выбраны масштабы времени  $t_* = \frac{RT_a^2 c_g \rho_{g,0}}{QE_g C_{1,0} k_{g,0} \exp\left(-\frac{E_g}{RT_a}\right)},$  координаты

 $x_{*} = \sqrt{\frac{\lambda t_{*}}{c_{g} \rho_{g,0}}}$ . Другие масштабы, безразмерные переменные, параметры

математической модели (3.1)-(3.9) и принятые обозначения такие же, как в п. 2.1.

Решение системы уравнений проводилось численно методом,

описанном в п. 2.2.1, 2.2.2 в соответствии с алгоритмом, описанном в 2.2.4.

Исследования зависимости стационарной скорости пламени от параметров задачи проводились при значениях параметров, характеризующих инертные частицы, выбранных в интервалах:  $0 \le B \le 0.25$ ,  $10^3 \le \chi \le 10^4$ . Значения параметров, характеризующих горючий газ, были взяты фиксированными:  $\gamma = 0.1$ ,  $\beta = 0.07$ , Pr = 1, Nu = 1, Le = 1, C = 1. Стационарные значения скорости распространения фронта горения определялись методом установления из решения системы уравнений (3.1) -(3.9).

На рисунке 3.1 представлены распределения параметров среды в времени при последовательные моменты распространении пламени. Значение безразмерной концентрации реагента в газовой фазе (рис. 3.1, а) меняется от 1 в зоне непрореагировавшей смеси, до 0 в области за фронтом пламени. Видно, что температура относительно крупных частиц ( $\chi = 8000$ ) в зоне прогрева и в области химической реакции ниже температуры газа (рис. 3.1, а). После выгорания реагента в газовой фазе частицы прогреваются, газ остывает, их температуры выравниваются за фронтом горения на большом расстоянии. Это происходит потому, что частицы достаточно крупные и прогреваются медленно. Плотность газа за фронтом уменьшается примерно в 3 раза (величина, ответственная за степень расширения газа  $1 - \beta/\gamma = 0.3$ ), так же как и распределенная плотность частиц дисперсной фазы (рис. 3.1, б). Соотношение массы частиц к массе газа перед фронтом и за зоной реакции одинаково. Перед зоной реакции, в непрореагировавшей зоне, а также после прохождения фронта пламени, газ и частицы находятся друг с другом в состоянии теплового и динамического равновесия. В зоне химической реакции относительная плотность частиц выше относительной плотности газа (рис. 3.1, б). Повышенная концентрация частиц в зоне химического реагирования дисперсной фазы объясняется ИХ инерцией. Частицы дисперсной фазы благодаря инерции не успевают за газом, и в зоне реакции

возникает их избыток (рис. 3.1, б). С уменьшением размера частиц, это выражено не так сильно, поскольку частицы с газом взаимодействуют более эффективно за счет более быстрой тепловой и динамической релаксации. В случае мелких частиц скорости, температуры, плотности газа и частиц отличаются меньше, чем для крупных частиц. Повышенная концентрация частиц во фронте пламени приводит к большему теплоотводу из газа в области фронта горения. Это вызывает уменьшение температуры газа в области интенсивных химических реакций, и как следствие, большее уменьшение скорости пламени, по сравнению с результатами, полученными по модели [26-28], где не учитывается тепловое расширение газа.

Так как горячая стенка является непроницаемой для газовзвеси (зажигание производится у закрытого торца, подробнее в п. 3.2) возникают некоторые особенности поведения параметров среды. Значение безразмерной температуры горячей стенки равняется  $\theta_g(0,\tau) = 0$ , что вызывает небольшой подогрев газовзвеси в ее окрестности (рис. 3.1, а). Также, благодаря условию  $\frac{\partial \overline{\rho}_k(0,\tau)}{\partial \xi} = 0$ , у стенки возникает повышенная концентрация инертных частиц (рис. 3.1, б). Однако на расстоянии  $\xi = 2000$ , горение выходит на стационарный режим и горячая стенка уже не оказывает влияния на значения температуры, плотности, концентрации и скорости (рис. 3.1, а, б).







B)

Рис. 3.1. Распределения безразмерных температуры газа (сплошная линия), частиц (штриховая линия), концентрации газообразного горючего (а), плотности газа (сплошная линия), распределенной плотности частиц (штриховая линия) (б), скорости газа (сплошная линия) и частиц (штриховая линия) (в) в последовательные моменты времени (слева направо) через 20000 единиц безразмерного времени.  $\gamma = 0.1$ ,  $\beta = 0.07$ ,  $\chi = 8000$ , B = 0.15.

Были проведены расчеты установившейся (стационарной) скорости фронта горения в зависимости от параметров дисперсной фазы для двух моделей – с учетом теплового расширения газа и без учета (по модели [29, 30]). Результаты расчетов представлены на рисунках 3.2 – 3.4.



Рис. 3.2. Зависимость безразмерной скорости фронта горения от начальной массовой концентрации инертных частиц. Сплошные линии – расчет по модели (3.1)-(3.7), пунктирные линии – без учета теплового расширения газа.  $\gamma = 0.1$ ,  $\beta = 0.07$ .

$$1 - \chi = 2000, 2 - \chi = 4000, 3 - \chi = 6000, 4 - \chi = 8000, 5 - \chi = 10000.$$


Рис. 3.3. Зависимость безразмерной скорости фронта горения от параметра, характеризующего размер частиц. Сплошные линии – расчет по модели (3.1)-(3.7), пунктирные линии – без учета теплового расширения газа.  $\gamma = 0.1, \beta = 0.07. 1 - B = 0.05, 2 - B = 0.1, 3 - B = 0.15, 4 - B = 0.2, 5 - B = 0.25$ 



Рис. 3.4. Зависимость относительной безразмерной скорости горения от начальной массовой концентрации инертных частиц. Сплошные линии – расчет по модели (3.1)-(3.7), пунктирные линии – без учета теплового расширения газа.  $\gamma = 0.1$ ,  $\beta = 0.07 \cdot 1 - \chi = 2000$ ,  $2 - \chi = 4000$ ,  $3 - \chi = 6000$ ,  $4 - \chi = 8000$ ,  $5 - \chi = 10000$ .

Из рисунков 3.2, 3.3 видно, что скорость пламени с увеличением начальной массовой концентрации инертных частиц в газе и уменьшением размера частиц уменьшается сильнее, чем в предположениях модели [29-31].

Значения видимых скоростей для чистого газа в модели (3.1)-(3.7) выше соответствующих значений, вычисленных по [29-31] примерно в два раза. С добавлением в газ частиц и с увеличением их массовой концентрации, разница в значениях скоростей уменьшается (рис. 3.2). Это связано с уменьшением скорости движения смеси за счет теплового расширения при увеличении массовой концентрации частиц. Чем больше в смеси частиц, тем выше теплоотвод из газовой фазы и меньше температура газа, соответственно степень теплового расширения в этом случае меньше. То есть, при достаточно больших массовых концентрациях, влияние теплового расширения газа ослабляется.

На рисунке 3.4 представлены зависимости скорости пламени, отнесенной к ее величине для чистого газа, полученные по двум моделям: с учетом теплового расширения газа и без учета. Видно, что относительное изменение скорости фронта горения с изменением начальной массовой концентрации частиц и их размера в модели с учетом теплового расширения газа более сильное (рис. 3.4). Таким образом, увеличение или уменьшение количества частиц в газовзвеси оказывает значительно большее влияние на скорость пламени при учете теплового расширения, по сравнению с результатами полученными по модели [26-28].

## 3.2 Влияние инертных частиц на скорость распространения пламени при зажигании его у «закрытого торца» и «открытого торца»

Постановка задачи, представленная в 3.1, описывает зажигание газа с частицами непроницаемой горячей стенкой (зажигание у «закрытого торца»). Существует вариант зажигания горячим источником, не препятствующим движению газа (зажигание у «открытого торца»). В первом случае фронт пламени движется относительно неподвижной горячей стенки со скоростью равной сумме скоростей теплового расширения газа и нормальной скорости пламени (рис. 3.5 а). Во втором случае, после воспламенения продукты горения вытесняются расширяющимся газом в обратном направлении (рис 3.5 б). При этом скорость пламени относительно неподвижного источника зажигания равна нормальной скорости пламени.

Отличие постановки задачи, описанной в пункте 3.1, от случая «открытого торца» заключается в изменении граничных условий (3.8) для

скоростей движения газа и частиц. Для зажигания у «открытого торца» граничные условия будут выглядеть следующим образом:



Рис. 3.5. Зажигание у «открытого» (а) и у «закрытого торцов» (б). и – скорость теплового расширения газовзвеси, v – нормальная скорость пламени.

Был проведены расчеты для случаев «открытого» и «закрытого торцов» при различных наборах параметров, определяющих характеристики горения. Варьировались параметры горючего газа  $\gamma$  и  $\beta$ :  $\gamma = 0.1$  и  $\beta = 0.07$  $(1 - \beta/\gamma = 0.3)$ ;  $\gamma = 0.0875$  и  $\beta = 0.07$   $(1 - \beta/\gamma = 0.2)$ ;  $\gamma = 0.1$  и  $\beta = 0.08$  $(1 - \beta/\gamma = 0.2)$ . Величина  $1 - \beta/\gamma$  определяет степень расширения газа при нагревании в изобарических условиях: плотность за фронтом горения пропорциональна  $1 - \beta/\gamma$  и начальной плотности газа ( $\overline{\rho}_g = (1 - \beta/\gamma)\overline{\rho}_{g,0}$ ). Интервалы изменения параметров инертных частиц *B* и  $\chi$  выбраны следующие:  $0 \le B \le 0.25$ ,  $10^3 \le \chi \le 10^4$ . Шаг по *B* - 0.05, по  $\chi$  - 2000.

Графики температуры подобны как для «открытого», так и для «закрытого» торцов (рис 3.6-3.8 a, a'). Однако в случае «закрытого торца» возникает небольшое увеличение температуры у стенки за счет источника тепла, тогда как в отсутствие стенки, газ истекает в открытое пространство, и подобного эффекта не наблюдается.

Между газом и частицами существует отставание по температурам. В области реакции за короткое время температура газа возрастает от начальной до своих пиковых значений, за фронтом температура газа уменьшается и сравнивается с температурой частиц.

Согласно формуле (3.4), плотность газа за фронтом уменьшается примерно в три раза для  $\gamma = 0.1$ ,  $\beta = 0.07$  (рис. 3.6, б, б'), в пять раз для  $\gamma = 0.0875$ ,  $\beta = 0.07$  (рис. 3.7, б, б') и  $\gamma = 0.1$ ,  $\beta = 0.08$  (рис. 3.8, б, б').

У «закрытого торца» в начальный момент времени смесь инициируется горячей стенкой, по газовзвеси начинает распространяться фронт химической реакции. Так как реакция происходит не мгновенно, у стенки остается некоторое избыточное количество частиц (рис 3.6-3.8 б), связанное с наличием непроницаемой стенки. В случае свободной границы, этого эффекта не возникает, так как прореагировавшая смесь выходит наружу.

Скорости движения газа и частиц за счет теплового расширения для всех рассмотренных наборов параметров газа и частиц после установления совпадают по модулю для обоих случаев, и отличаются направлением. Отличие в значениях модуля скорости для зажигания у «открытого» и «закрытого торцов», составило менее 1%, что является подтверждением корректной работы вычислительной программы.



Рис. 3.6. Распределения безразмерных температуры газа, частиц, концентрации реагирующего вещества (a, a'); плотности газа, приведенной плотности частиц (б, б'); скорости газа и частиц (в, в') в последовательные моменты времени (a, б, в – шаг по времени 25000, a', б', в' – шаг по времени 60000). Газ – сплошная линия, частицы – штриховая линия. Зажигание у «закрытого торца» – (a, б, в), зажигание у «открытого торца» (a' б', в'):  $\gamma = 0.1$ ,  $\beta = 0.07$ , B = 0.2,  $\chi = 8000$ 



Рис. 3.7. Распределения безразмерных температуры газа, частиц, концентрации реагирующего вещества (a, a'); плотности газа, приведенной плотности частиц (б, б'); скорости газа и частиц (в, в') в последовательные моменты времени (a, б, в – шаг по времени 25000, a', б', в' – шаг по времени 60000). Газ – сплошная линия, частицы – штриховая линия. Зажигание у «закрытого торца» – (a, б, в), зажигание у «открытого торца» (a' б', в'):  $\gamma = 0.0875$ ,  $\beta = 0.07$ , B = 0.2,  $\chi = 8000$ 



Рис. 3.8. Распределения безразмерных температуры газа, частиц, концентрации реагирующего вещества (a, a'); плотности газа, приведенной плотности частиц (б, б'); скорости газа и частиц (в, в') в последовательные моменты времени (a, б, в – шаг по времени 25000, a', б', в' – шаг по времени 60000). Газ – сплошная линия, частицы – штриховая линия. Зажигание у «закрытого торца» – (a, б, в), зажигание у «открытого торца» (a' б', в'):  $\gamma = 0.1$ ,  $\beta = 0.08$ , B = 0.2,  $\chi = 8000$ 

Установление скорости движения газа при зажигании у «закрытого торца» имеет особенности (рис. 3.6-3.8 в). В начальный момент времени смесь получает тепловой импульс соответствующий температуре стенки. За счет разогрева, смесь начинает расширяться. Если скорости движения газа и нагрева стенкой мало отличаются частиц, полученные за счет OT соответствующих стационарных скоростей, которые реализуются за счет теплоприхода от реакции в смеси, то процесс выхода на стационар осуществляется достаточно быстро (рис. 3.6 в). Когда же скорости движения газа и частиц у стенки отличаются от значений скоростей вдали от стенки установление значения скорости газа происходит от большего значения скорости к меньшему (рис. 3.7 в). При зажигании у «открытого торца» (рис. 3.6-3.8 в) скорость течения газа устанавливается быстро.

На рисунках 3.9 а-в, представлены зависимости скорости фронта горения от массовых концентраций при различных значениях  $\gamma$ . Скорость фронта при зажигании у «открытого торца» фактически является нормальной скоростью распространения фронта пламени относительно непрореагировавшего газа, из-за того, что прореагировавшая смесь вытесняется со скоростью расширения газа в направлении обратном движению фронта пламени, и не влияет на его скорость. Разница между скоростями фронта пламени для «открытого» и «закрытого торцов» составляет значение соответствующей скорости движения газа из-за теплового расширения. Значения скоростей пламени для модели с учетом теплового расширения примерно в 2 раза выше соответствующих скоростей для модели без учета движения газа и частиц при малых значениях параметра В 0≤В≤0.15. При увеличении значений массовой концентрации до значений  $0.15 \le B \le 0.25$ разница между скоростями уменьшается.



a)



б)



B)

Рис. 3.9. Распределения безразмерных видимых скоростей распространения фронта пламени относительно неподвижного наблюдателя. a)  $\gamma = 0.1$ ,  $\beta = 0.07$ , б)  $\gamma = 0.0875$ ,  $\beta = 0.07$ , в)  $\gamma = 0.1$ ,  $\beta = 0.08$ .

1 – расчет по модели без учета теплового расширения,

2 – расчет по модели с учетом теплового расширения при зажигании у «закрытого торца»,

3 – расчет по модели с учетом теплового расширения при зажигании у «открытого торца».

### 3.3 Распространение пламени в газе с инертной пылью. Реакция второго порядка

Для учета выгорания окислителя и горючего газовой фазы при распространении фронта горения в смеси газообразных окислителя и горючего с взвешенными в ней инертными частицами при формулировке математической модели примем предположения, изложенные в п. 3.1. Система уравнений (3.1)-(3.9) дополняется уравнением для концентрации окислителя.

Отличие постановки задачи от (2.1)-(2.12) заключается в отсутствии гетерогенной реакции на поверхности частиц.

Система уравнений с начальными и граничными условиями, описывающая процессы в смеси газообразных окислителя и горючего с инертными частицами, в безразмерной форме запишется в виде:

$$\frac{\partial \theta_g}{\partial \tau} + \overline{u}_g \frac{\partial \theta_g}{\partial \xi} = \frac{1}{\overline{\rho}_g} \frac{\partial^2 \theta_g}{\partial \xi^2} - \frac{\overline{\rho}_k}{\overline{\rho}_g} \frac{B}{\chi} \left( \theta_g - \theta_k \right) + \overline{\rho}_g C_1 C_2 \exp\left(\frac{\theta_g}{1 + \beta \theta_g}\right), \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial \tau} + \overline{u}_g \frac{\partial C_1}{\partial \xi} = \frac{Le}{\overline{\rho}_g} \frac{\partial^2 C_1}{\partial \xi^2} - \gamma \overline{\rho}_g C_1 C_2 \exp\left(\frac{\theta_g}{1 + \beta \theta_g}\right), \tag{3.11}$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial \tau} + \overline{u}_g \frac{\partial C_2}{\partial \xi} = \frac{Le}{\overline{\rho}_g} \frac{\partial^2 C_2}{\partial \xi^2} - \left(\frac{\nu_2 M_2}{\nu_1 M_1}\right) \left(\frac{Y_{1,0}}{Y_{2,0}}\right) \gamma \overline{\rho}_g C_1 C_2 \exp\left(\frac{\theta_g}{1 + \beta \theta_g}\right), \quad (3.12)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_g}{\partial \tau} + \frac{\partial \bar{\rho}_g \bar{u}_g}{\partial \xi} = 0, \qquad (3.13)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}_k}{\partial \tau} + \frac{\partial \bar{\rho}_k \bar{u}_k}{\partial \xi} = 0, \qquad (3.14)$$

$$\frac{\partial \theta_k}{\partial \tau} + \overline{u}_k \frac{\partial \theta_k}{\partial \xi} = \frac{\left(\theta_g - \theta_k\right)}{\chi}, \qquad (3.15)$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}_k \overline{u}_k}{\partial \tau} + \frac{\partial \overline{\rho}_k \overline{u}_k^2}{\partial \xi} = \frac{3}{2} \frac{PrC}{\chi N u} \overline{\rho}_k \left( \overline{u}_g - \overline{u}_k \right), \tag{3.16}$$

$$\overline{\rho}_{g} = \left(1 - \beta/\gamma\right) / \left(1 + \beta \theta_{g}\right), \qquad (3.17)$$

Граничные условия:

$$\theta_{g}(0,\tau) = 0, \quad \frac{\partial \theta_{g}(\infty,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial \theta_{k}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0 \quad \frac{\partial \overline{\rho}_{k}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0,$$

$$\frac{\partial C_{1}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial C_{2}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial C_{1}(\infty,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial C_{2}(\infty,\tau)}{\partial \xi} = 0,$$

$$\overline{u}_{g}(0,\tau) = 0, \quad \overline{u}_{k}(0,\tau) = 0.$$
(3.18)

Начальные условия:

$$\theta_{g}(\xi,0) = -1/\gamma, \quad \theta_{k}(\xi,0) = -1/\gamma, \quad C_{1}(\xi,0) = C_{1,0}, \quad C_{2}(\xi,0) = 1,$$
  
$$\overline{u}_{g}(\xi,0) = 0, \quad \overline{u}_{k}(\xi,0) = 0, \quad \overline{\rho}_{k}(\xi,0) = 1. \quad (3.19)$$

Расчеты проводились при значениях параметров:  $\gamma = 0.1$ ,  $\beta = 0.07$ , Le = 1, Nu = 1,  $v_1M_1 = 16$ ,  $v_2M_2 = 64$ ,  $Y_{1,0} = 0.05$ ,  $Y_{2,0} = 0.2$ , Pr = 1, C = 1, B = 0.15. В расчетах варьировались значения  $C_1$  в интервале от 1 до 0.7, параметр  $\chi$  в интервале от 2000 до 500000, B в интервале от 0 до 0.25.

В численных экспериментах горение газовзвеси инициировали передачей тепла от горячей стенки. В момент времени, когда фронт пламени достигал безразмерной координаты  $\xi = 500$ , граничное условие  $\theta_g(0,\tau) = 0$ заменялось граничным условием  $\partial \theta_g(0,\tau)/\partial \xi = 0$ . Скорость фронта определялась скоростью перемещения координаты с концентрацией горючего  $C_I = 0.5$ .

На рис. 3.10а, 3.10б представлены распределения температур и концентраций в последовательные моменты времени с интервалом безразмерного времени  $\Delta \tau = 120000$  для модели без учета теплового расширения ( $\bar{u}_g = \bar{u}_k \equiv 0$ ). На рис. 3.11а-г, то же самое для модели с учетом расширения. Использованные для расчетов параметры газа и частиц:  $\chi = 50000, C_1 = 0.8, B = 0.15$ .

Температура частиц во фронте горения ниже, чем у газовой смеси, за фронтом горения их температуры выравниваются (рис. 3.10a, 3.11a). Концентрация горючего, взятого в недостатке, за фронтом пламени

обращается в ноль, причем количество сгоревшего горючего соответствует количеству используемого в реакции окислителя, который взятый в избытке, расходуется до концентрации  $C_2 = 0.2$  (рис. 3.10 б, 3.11 б).

Перед установившимся фронтом горения скорость газа и частиц имеет одинаковое значение, позади фронта скорость газа и частиц равна нулю, во фронте прогрева газовой фазы частицы имеют скорость выше скорости газовой фазы из-за механической инерции и резких градиентов параметров среды. Частицы в области химических превращений имеют увеличенную приведенную плотность (рис. 3.11 г). В силу этого эффекта в зоне интенсивных химических реакций присутствует большее количество частиц, которые понижают температуру в зоне реакции сильнее, чем это получается в расчетах на основе модели без учета расширения газа и относительного движения частиц. Подогретые в зоне химических реакций частицы и имеющие скорость большую, чем газ, переносят тепло в зону прогрева перед фронтом горения.



Рис. 3.10. Распределения температуры (а) (сплошная линия – газ, пунктир – инертные частицы), концентраций (б) (сплошная линия – горючее, пунктир – окислитель). Модель без учета расширения.



Рис. 3.11. Распределения температуры (а), концентрации (б), скорости (в), плотности (г); (а, в, г: сплошная линия – газ, пунктир – инертные частицы, б: сплошная линия – горючее, пунктир – окислитель). Модель с учетом расширения.



Рис. 3.12. Зависимости значений скоростей фронта пламени от начальной концентрации горючего (а) – модель с учетом расширения (1 – незапыленная газовая смесь,  $2 - \chi = 500000$ ,  $3 - \chi = 500000$ ,  $4 - \chi = 2000$ ), (б) – модель без учета расширения (1 – незапыленная газовая смесь,  $2 - \chi = 300000$ ,  $3 - \chi = 500000$ ,  $4 - \chi = 2000$ ).

На рисунке 3.12 представлены зависимости скорости горения от начальной концентрации горючего, полученные на основе модели без учета теплового расширения (рис. 3.12 а) и с его учетом (рис. 3.12 б) при массовой B = 0.15частиц И трех концентрации значениях параметра χ, характеризующего размер частиц. Видно, что тепловое расширение увеличивает скорость распространения фронта пламени в чистом газе на величину от 20 до 30 % (кривые 1 на рис. 3.12 а, б). Присутствие крупных инертных частиц в газе не сказывается на скорости распространения пламени в модели без учета теплового расширения газа (кривая 2, рис. 3.12 б). Расчет на основе модели с учетом теплового расширения показывает, что скорость пламени уменьшается, не смотря на то, что частицы во фронте пламени не успевают нагреться, забрав тепло из зоны химической реакции. Этот эффект обусловлен меньшей температурой газа позади фронта реакции, в связи с

этим, и меньшим объемным расширением газа. С уменьшением размера частицы начинают влиять на скорость химической реакции во фронте горения, уменьшая в нем температуру (кривые 3, 4, рис. 3.12 a, б). Существует интервал значений  $\chi$ , при которых частицы слабо влияют на скорость пламени при стехиометрическом и близком к нему соотношении окислителя и горючего, и сильно влияют на скорость при значительном отклонении состава газовой смеси от стехиометрической (кривые 3, рис 3.12 a, б).



Рис. 3.13. Зависимости значений относительных скоростей фронта пламени от параметров дисперсной инертной фазы, пунктир – концентрация  $C_1 = 0.85$ , сплошная линия –  $C_1 = 1$ . (a) – зависимость от величины, характеризующей размер частиц  $\chi$  (1 – B = 0.05, 2 – B = 0.1, 3 – B = 0.15, 4 – B = 0.2, 5 – B = 0.25,), (б) – зависимость от массовой концентрации B (1 –  $\chi = 500000$ , 2 –  $\chi = 120000$ , 3 –  $\chi = 50000$ , 4 –  $\chi = 2000$ ).

На рисунке 3.13 представлены зависимости относительной безразмерной скорости распространения фронта пламени от параметров дисперсной фазы – B и  $\chi$ , при двух значениях начальной концентрации горючего в газовой смеси ( $C_{1,0} = 0.85$  и  $C_{1,0} = 1$ ), рассчитанные по модели учитывающей тепловое расширение.  $U_{\rm fr,0}$  – значение скорости фронта

горения для чистой газовой смеси, которое имеет значение при  $C_{1,0} = 1$ ,  $U_{\rm fr,0} = 0.02$ , при  $C_{1,0} = 0.85$ ,  $U_{\rm fr,0} = 0.01$ . Параметр  $\chi$  изменялся в следующем интервале:  $2000 \le \chi \le 500000$ , параметр  $B: 0 \le B \le 0.25$ . Из рисунка 3.13 видно, что при фиксированном  $\chi$  с увеличением массовой концентрации относительная скорость пламени уменьшается. Этот эффект реализуется как в случае недостатка горючего, так и для стехиометрической смеси.

#### Выводы

Сформулирована математическая модель горения газовой смеси с взвешенными в ней инертными частицами, учитывающая тепловое расширение газа и относительное движение фаз. Исследование проведено для реакций, как первого, так и второго порядков. Получены зависимости скорости распространения пламени от массовой концентрации, размера инертных частиц и концентрации горючего в газовой смеси.

Проведено сравнение результатов расчетов установившейся скорости распространения фронта пламени по моделям с учетом теплового расширения и без учета теплового расширения.

Рассмотрены две постановки задачи, реализующие зажигание у Результаты «открытого» И «закрытого» торцов. расчета показали согласование значений установившейся скорости движения смеси при зажигании у «закрытого торца» с соответствующим значениям истечения продуктов реакции при зажигании «у открытого торца». При необходимости вычисления скоростей горения в газовзвесях, более удобным представляется проводить расчеты по модели зажигания «у открытого торца», так как значения скоростей истечения продуктов реакции устанавливаются до своего стационарного значения быстро, а скорость фронта одновременно является нормальной скоростью распространения пламени относительно несгоревшей газовой смеси.

Выяснено, что для моделирования процессов горения газовзвесей

необходимо учитывать не только тепловую релаксацию между фазами, но и динамическую.

Учет относительного движения фаз показал, что повышенная концентрация порошка в зоне горения недостаточна чтобы значительно влиять на уменьшение скорости фронта пламени и соответственно, минимальную массовую тушащую концентрацию инертного порошка.

Показано, что при учете теплового расширения относительное уменьшение скорости пламени по сравнению с расчетами без учета теплового расширения при одинаковой массовой концентрации инертных частиц на 30 – 40% больше.

### 4 РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЛАМИНАРНОГО ПЛАМЕНИ В ГАЗОВЗВЕСИ РЕАГИРУЮЩИХ ЧАСТИЦ

4.1 Распространение пламени в газовзвеси реакционноспособных частиц в воздухе

Физическая постановка задачи заключается в следующем: Пылевоздушная смесь воспламеняется горячей стенкой, затем по газовзвеси распространяется волна горения. Смесь состоит из газа, содержащего окислитель и инертный газ, а также из твердых частиц, способных к реакции с выделением тепла и газообразных продуктов. В начальный момент времени частицы в газовзвеси распределены равномерно.

Чтобы сформулировать задачу математически, в систему уравнений (2.13)-(2.24) (п. 2.1 главы 2) вводится условие отсутствия газообразного горючего. Остальные упрощающие предположения данной задачи от постановки (2.13)-(2.24) не отличаются.

Задача в безразмерной форме запишется в следующем виде:

$$\frac{\partial \theta_g}{\partial \tau} + \bar{u}_g \frac{\partial \theta_g}{\partial \xi} = \frac{1}{\bar{\rho}_g} \frac{\partial^2 \theta_g}{\partial \xi^2} + \bar{\rho}_g C_2 \exp\left(\frac{\theta_g}{1+\beta\theta_g}\right) - \frac{1}{\bar{\rho}_g} \frac{B}{\bar{\rho}_g} \bar{\rho}_g \bar{$$

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial \tau} + \frac{\partial \rho_g u_g}{\partial \xi} = \frac{B}{\chi} A \left( \frac{v_{23} u_{23}}{v_{22} M_{22}} - 1 \right), \tag{4.3}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}_k}{\partial \tau} + \frac{\partial \overline{\rho}_k \overline{u}_k}{\partial \xi} = -\frac{v_{21} M_{21}}{v_{22} M_{22}} \frac{B}{\chi Z_2} \frac{\overline{u}_k}{\overline{\rho}_k} A$$
(4.4)

$$\bar{\rho}_{g} = \frac{\left(1 - \beta/\gamma\right)}{1 + \beta\theta_{g}},\tag{4.5}$$

$$\frac{\partial \theta_k}{\partial \tau} + \overline{u}_k \frac{\partial \theta_k}{\partial \xi} = \frac{\left(\theta_g - \theta_k\right)}{\overline{r}_k \chi} + \frac{\delta}{\chi Z_1} \left(\frac{Y_{2,0}^*}{Y_{1,0}^*}\right) \frac{C_2 \overline{\rho}_g \overline{j}}{\overline{r}_k^2}, \qquad (4.6)$$

$$\frac{\partial \overline{u}_{k}}{\partial \tau} + \overline{u}_{k} \frac{\partial \overline{u}_{k}}{\partial \xi} = \frac{3}{2} \frac{\Pr C}{N u \chi} \frac{\left(\overline{u}_{g} - \overline{u}_{k}\right)}{\overline{r}_{k}} + \frac{v_{21} M_{21}}{v_{22} M_{22}} \frac{B}{\chi Z_{2}} \frac{\overline{u}_{k}}{\overline{\rho}_{k}} A, \qquad (4.7)$$

$$\frac{\partial \overline{n}}{\partial \tau} + \frac{\partial \overline{n} \overline{u}_k}{\partial \xi} = 0, \qquad (4.8)$$

$$\overline{r}_{k} = \left(\frac{\overline{\rho}_{k}}{\overline{n}}\right)^{\frac{1}{3}},\tag{4.9}$$

$$A = \mu Le \frac{Nu_D}{Nu} Y_{2,0}^* \overline{j} C_2 \overline{r_k}^2 \overline{\rho_g} \overline{n} , \ \overline{j} = \frac{\exp\left(E_{kg}\theta_k / (1 + \beta\theta_k)\right)}{\overline{r_k} \mu \exp\left(E_{kg}\theta_k / (1 + \beta\theta_k)\right) + 1}.$$

Граничные условия:

$$\theta_{g}(0,\tau) = 0, \quad \frac{\partial \theta_{g}(\infty,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial \theta_{k}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0,$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}_{k}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial \overline{n}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial C_{2}(0,\tau)}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial C_{2}(\infty,\tau)}{\partial \xi} = 0$$

$$\overline{u}_{g}(0,\tau) = 0, \quad \overline{u}_{k}(0,\tau) = 0. \quad (4.10)$$

Начальные условия:

$$\begin{aligned}
\theta_{g}(\xi,0) &= -1/\gamma, \quad \theta_{k}(\xi,0) = -1/\gamma, \quad C_{1}(\xi,0) = C_{1,0}, \quad C_{2}(\xi,0) = 1, \\
\overline{u}_{g}(\xi,0) &= 0, \quad \overline{u}_{k}(\xi,0) = 0, \quad \overline{\rho}_{g}(\xi,0) = 1, \\
\overline{\rho}_{k}(\xi,0) &= 1, \quad \overline{n}(\xi,0) = 1, \quad \overline{r}_{k}(\xi,0) = 1.
\end{aligned}$$
(4.11)

Исследование влияния параметров  $\mu$  и  $\delta$  на скорость фронта относительно лабораторной системы координат  $V_{\text{вид}}$ , скорость движения газа  $V_{\text{тепл}}$  и скорость пламени относительно исходной газовзвеси ( $V_{\text{норм}} = V_{\text{вид}} - V_{\text{тепл}}$ ), представлено в таблице 4.1 и рисунке 4.1.

Таблица 4.1. Значения безразмерных скоростей горения в зависимости от параметров  $\mu$  и  $\delta$ , при фиксированных значениях B = 0.06,  $\chi$  = 100,  $\beta$  = 0.05,  $C_{2,0}$  = 1,  $E_{kg}$  = 0.7.

δ	μ	$V_{\scriptscriptstyle \mathrm{B}$ ид	$V_{ m tenn}$	$V_{ m hopm}$
875	0,3	0,00332	0,0018	0,00152
875	0,25	0,00571	0,00334	0,00237
700	0,25	0,00263	0,0014	0,00123
525	0,25	0,00104	0,00049	0,00055
525	0,2	0,00189	0,00098	0,00091







Рисунок 4.1 Температура газа при различных значениях параметров  $\delta$  и  $\mu$ : (a)  $\delta$ =525,  $\mu$ =0.2, (б)  $\delta$ =525,  $\mu$ =0.25, (в)  $\delta$ =875,  $\mu$ =0.25, (г)  $\delta$ =875,  $\mu$ =0.3





Рис. 4.2 Графики зависимости безразмерных скоростей от параметров частиц: (а) от массовой концентрации при различных значениях  $\chi$ , (б) от размера частиц при различных значениях *В* 

Увеличение параметра  $\delta$  приводит к увеличению  $V_{\text{норм}}$  и  $V_{\text{тепл}}$ . Это объясняется тем, что тепловыделение за счет реакции на частицах прямо пропорционально  $\delta$ . Чем больше  $\delta$ , тем выше температура частиц, соответственно выше температура газа (табл. 4.1., рис. 4.1 в, г),  $V_{\text{норм}}$  и  $V_{\text{тепл}}$ . При увеличении  $\mu$ , и фиксированном параметре  $\delta$ , скорости уменьшаются (табл. 4.1., рис. 4.1 а, б). Это связано с тем, что при больших  $\mu$  скорость горения частиц определяется скоростью массообмена. Температура во фронте пламени в этом случае также становятся ниже. Малые значения  $\mu$  соответствуют кинетическому режиму, характеризующемуся более высоким массообменом и температурой.

Для малых значений  $\chi$  (рис. 4.2а, б) скорости горения выше из-за большой суммарной поверхности частиц. Для B > 0.09 скорость слабо зависит от массовой концентрации частиц в исследованном диапазоне

0.05 < B < 0.2 (рис. 4.2а), а при малых значениях массовой концентрации 0.05 < B < 0.09, с увеличением параметра *B*, заметен рост скорости фронта при увеличении *B*. Когда массовая концентрация превышает значение B > 0.15, начинается постепенное уменьшение скоростей (рис. 4.2а).

Было обнаружено, что при значении массовой концентрации B = 0.09в реакции расходуется весь окислитель, который содержится в смеси, температура во фронте пламени имеет максимальные значения. При увеличении параметра B от стехиометрического, температура позади фронта уменьшается, частицы сгорают не полностью из-за недостатка окислителя. Во фронте пламени недогоревшие частицы ведут себя как инертные, забирая на себя часть выделяющегося тепла, что и приводит к уменьшению температуры во фронте и скорости фронта горения. Этот эффект начинает проявляться лишь для значений массовой концентрации B > 0.15 (рис. 4.2a). Это можно объяснить тем, что при увеличении количества частиц увеличивается и суммарная площадь поверхности, на которой идет гетерогенная химическая реакция. При малых значениях B, все частицы сгорают, а окислитель остается непрореагировавшим, что также приводит к уменьшению температуры и скорости фронта.



Рисунок 4.3. Зависимость скорости фронта горения от массовой концентрации при различных значениях параметра E<sub>kg</sub>.

Было проведено исследование зависимости скорости горения от *B* при различных значениях параметра  $E_{kg}$ . Скорости фронта горения для  $E_{kg} = 0.5$  и  $E_{kg} = 0.7$  (рис. 4.3), отличаются почти в два раза, для различных значений параметра *B*. В первом случае, при  $E_{kg} = 0.5$ , в исследованном интервале 0.05 < B < 0.2, скорость монотонно растет, затем уменьшается при значениях B > 0.2 вследствие увеличения теплопотерь из зоны реакции на разогрев недогоревших частиц.

На рисунках 4.4 а-г., представлены распределения параметров состояния среды в последовательные моменты времени. С уменьшением энергии активации химической реакции на поверхности частиц скорость распространения фронта пламени увеличивается.





Рисунок 4.4. Распределение параметров состояния газовзвеси: температуры (а), концентраций окислителя (б), радиуса частиц (в), скорости движения (г) при  $\mu = 0.25$ ,  $\delta = 700$ ,  $\beta = 0.05$ ,  $\gamma = 0.1$ ,  $C_{2,0} = 1$ . Пунктирная линия –  $E_{kg} = 0.7$ , сплошная линия –  $E_{kg} = 0.5$ .

# 4.2 Распространение пламени в газовзвеси горючих частиц в газовой смеси горючего и окислителя

Рассматривается газовзвесь, состоящая из смеси газообразного горючего с воздухом и частиц, взвешенных в газе, и способных к гетерогенной химической реакции с окислителем газовой фазы. Постановка данной задачи подробно изложена во второй главе, в пункте 2.1.

Система уравнений (2.1)-(2.12) решалась численно по неявной разностной схеме. В расчетах параметры, характеризующие частицы, варьировались в интервале значений:  $B = 0,005 \div 0,1$ ,  $\chi = 100 \div 10000$ , концентрация горючего  $C_{1,0} = 0,6 \div 1,0$ .

На рисунках 4.5-4.9 представлены распределения по пространству безразмерных значений параметров среды, построенные через промежутки времени, когда фронт горения проходит расстояние  $\Delta \xi$ , равное 3000. На этих рисунках представлены распределения по пространству температуры частиц и газа (а), концентрации горючего и окислителя (б), относительного числа частиц в объеме газа и радиус частиц (в), плотности газа и приведенной плотности дисперсной фазы (г), скорости движения газа и частиц (д). На рисунках 4.5-4.9 е представлена зависимость скорости распространения фронта пламени. Сплошная линия на рисунках а), г), д) – параметры газа, б) – концентрация горючего, в) – число частиц; штриховая линия на рисунках а), г), д) – параметры твердой фазы; б) – концентрация окислителя, в) – радиус частиц.



Рис. 4.5. Распределение безразмерных параметров газовзвеси.  $\chi = 100$ , B = 0,06, C<sub>1,0</sub>=1.



Рис. 4.6. Распределение безразмерных параметров газовзвеси.  $\chi = 1000$ , B = 0,06, C<sub>1,0</sub>=1



Рис. 4.7. Распределение безразмерных параметров газовзвеси.  $\chi = 10000$ , B = 0,06, C<sub>1,0</sub>=1.



Рис. 4.8. Распределение безразмерных параметров газовзвеси.  $\chi = 100$ , B = 0,06, C<sub>1,0</sub>=0,7



Рис. 4.9. Распределение безразмерных параметров газовзвеси.  $\chi = 10000$ , B = 0.06, C<sub>1,0</sub>=0.7.
При малых размерах частиц и недостатке горючего в газовой фазе,  $\chi = 100$ , C<sub>1,0</sub>=0,7 (рис. 4.8), реакция на частицах проявляется сильнее. Уменьшается радиус частиц (рис. 4.8 в) и приведенная плотность твердой фазы за фронтом горения (рис. 4.8 г). В других, приведенных на рисунках 4.5-4.8 случаях, когда размеры частиц велики, и нет недостатка в газообразном горючем, реакция идет преимущественно в газовой фазе с незначительным выгоранием частиц (рис. 4.5 – 4.7, 4.9 в, г). В то же время, температуры прореагировавшей смеси очень близки при полном расходе окислителя (рис. 4.5 – 4.8 а).

На рисунке 4.9 представлены распределения параметров среды для случая недостатка горючего в газе и достаточно крупных частиц,  $C_{1,0}=0.7$ ,  $\chi = 10000$ . Горючее, взятое в недостатке, быстро расходуется (рис. 4.9 б). Окислитель же, оставшийся после реакции в газовой фазе, продолжает медленно реагировать с частицами за фронтом, это заметно по увеличению температуры и расходу окислителя (рис. 4.9 а, в). Недостаток горючего в газе не компенсируется за счет горения частиц из-за их большого размера, что и уменьшает значения скоростей (рис. 4.9 д, е) и температур (рис. 4.9 а), по сравнению с рассмотренными случаями (рис. 4.5 – 4.8).

На рисунке 4.10 представлены результаты расчетов стационарной скорости распространения фронта горения. Видно, что наличие реагирующих частиц дисперсной фазы приводит к уменьшению скорости горения при больших значениях концентрации горючего в газовой фазе, так как они забирают часть окислителя на себя, а тепловой эффект их сгорания меньше, чем реакции в газовой фазе. При уменьшении концентрации горючего наличие реагирующих частиц малых размеров приводит к увеличению скорости фронта горения по сравнению со скоростью в газе без частиц. Для крупных частиц такого эффекта не наблюдается.





Рис. 4.10. Зависимости установившейся скорости фронта пламени U<sub>fr</sub> от безразмерной начальной концентрации горючего в газовой фазе C<sub>1,0</sub>, при различных значениях параметров дисперсной фазы. (a) –  $\chi = 100$ ; (б) –  $\chi = 1000$ , (в) –  $\chi = 10000$ .; (1) – B = 0,1; (2) – B = 0,06; (3) – B = 0,03; (4) – B = 0,005; (5) – беспылевая газовая смесь.

Проведено сравнение поведения реагирующих частиц в газовой смеси и инертных частиц (параграф 3.2). Параметры, характеризующие частицы  $(B = 4\pi r_k^3 c_k \rho_k^0 n_0 / (3c_g \rho_{g,0}) -$ начальная массовая концентрация частиц,  $\chi = r_k^2 c_k \rho_k^0 / (3 \text{Nu} \lambda t_*) -$ размер частиц,  $t_* = RT_a^2 c_g / (QE_g \rho_{g,0} Y_{1,0}^* Y_{2,0}^* k_{0,g} \exp(-E_g / (RT_a))))$ , варьировались в интервале значений:  $B = 0,005 \div 0,1$ ,  $\chi = 100 \div 10000$ , концентрация горючего  $C_1 = 0,6 \div 1,0$ . Для инертных частиц принималось, что  $G \equiv 0$ . Результаты расчетов представлены на рисунках 4.11 и 4.12.



Рис. 4.11. Зависимости установившейся скорости фронта пламени U<sub>fr</sub> от начальной концентрации горючего в газовой фазе при различных значениях параметров дисперсной фазы. (a) –  $\chi = 100$ ; (б) –  $\chi = 10000$ ; 1 – B = 0,03; 2 – B = 0,06; 3 – незапыленная газовая смесь. Сплошная линия – реагирующие частицы, штриховая – инертные частицы.



Рис. 4.12. Зависимости установившейся скорости фронта пламени U<sub>fr</sub> от начальной концентрации горючего в газовой фазе при различных значениях параметров дисперсной фазы. (а) – B = 0,06; (б) – B = 0,03; 1 –  $\chi = 100$ ; 2 –  $\chi = 10000$ ; 3 – незапыленная газовая смесь. Штриховая линия – инертные частицы.

Из рисунков 4.11 и 4.12 видно, что при относительной концентрации горючего в газовой фазе вблизи  $C_{1,0} = 1$  и инертные и горючие частицы влияют на скорость фронта горения одинаково, понижая её. Причем понижение скорости происходит на одинаковую величину для обоих типов частиц, инертных и реагирующих, в выбранном интервале их характеристик B,  $\chi$ . Горючие частицы влияют на скорость горения как инертные, так как окислитель успевает в большей части прореагировать с газообразным горючим, на реакцию с частицами окислителя не остается.

При уменьшении концентрации газообразного горючего, окислитель реагирует с горючим, оставшийся окислитель реагирует с реагирующими частицами. Это приводит к увеличению скорости пламени по сравнению с пламенем в газовзвеси с инертными частицами (на рисунке 4.11 а, кривые 1, 2, на рисунке 4.12 а, б, кривые 1). Однако такое увеличение происходит реагирующих частиц малого размера. Для крупных для частиц существенного увеличения скорости не происходит, их влияние на величину скорости фронта горения остается несущественным, близким к влиянию инертных частиц (на рисунке 4.11б, кривые 1, 2, на рисунке 4.12 кривые 2).





Рис. 4.13. Зависимости установившейся скорости фронта пламени от начальной концентрации горючего в газовой фазе  $C_{1,0}$ , при различных значениях параметров дисперсной фазы. (a) – B = 0,005; (б) – B = 0,03; (в) – B = 0,06. 1 –  $\chi$  = 100; 2 –  $\chi$  = 1000; 3 –  $\chi$  = 10000; 4 – незапыленная газовая смесь.

С ростом концентрации газообразного горючего при фиксированной массовой концентрации, твердая фаза начинает проявлять свойства инертных частиц. Выгорание частиц уменьшается настолько, что можно рассматривать реагирующие частицы как инертные. Скорость распространения фронта пламени по сравнению с чистым газом уменьшается (рис. 4.13). Это может быть объяснено тем, что начинает преобладать реакция в газовой фазе. Для частиц малого размера ( $\chi = 100$ ) при значениях концентрации горючего C<sub>1</sub> < 0.8 наблюдается некоторый прирост скорости горения, по сравнению с благодаря без частиц (рис. 4.13). Это происходит газом большей эффективной площади поверхности конденсированной фазы небольших частиц.

#### 4.3 Сравнение результатов численного моделирования

# распространения ламинарного пламени в пылевоздушной газовзвеси и экспериментальных данных.

Сложность сравнения экспериментальных и теоретических данных заключается в большом количестве различных типов угля. При этом каждый из этих углей обладает своим собственным физико-химическим составом (зольность, количество летучих, энергетические и формально-кинетические характеристики). Каждый вид угля имеет свои собственные характеристики.

В монографии [95], в главе посвященной распространению ламинарного пламени в пылевых облаках, представлены результаты экспериментального исследования газовзвеси угля с различным процентным содержанием летучих (30-40%). Исследования проведены для значений дисперсности угля, равных: 10 мкм, 12 мкм и 47 мкм (рис. 4.14). В зависимости от массовой концентрации угля в единице объема (кг/м<sup>3</sup>) получены значения скорости ламинарного пламени (0.1 – 0.4 м/с).





Рисунок 4.14. Экспериментальные значения скорости распространения пламени (м/с) в пылевоздушной газовзвеси [95]. (а) в зависимости от массы (кг) угольной пыли на 1 м<sup>3</sup>, 1 – Сьюэлльский уголь (29% летучих, d = 10мкм), 2 – Питтсбургский уголь (39% летучих, d = 10мкм), 3 – Сьюэлльский уголь (28% летучих, d = 10мкм), (б) в зависимости от относительной массовой концентрации угля  $\phi$ , 1 – уголь 1 (39% летучих, d = 12мкм), 2 – уголь 2 (37% летучих, d = 47мкм). Данные взяты из [95].

Эти результаты были взяты для проведения сравнения результатов расчетов по модели (4.1) - (4.11). Ввиду неполноты исходных данных, представленных в [95], сравнение проводилось приближенно.

В [95] приведены графики зависимости скорости пламени от массовой концентрации (рис. 4.14 а). Они имеют максимум при  $m = 0.2 - 0.4 \ \kappa c$ . Расчетные зависимости, представленные на рисунке 4.3 раздела 4.2 в безразмерных переменных и параметрах также имеют максимум.

Для определения масштаба скорости было принято, что максимум безразмерной скорости соответствует максимуму скорости в экспериментальных данных [95] в размерных величинах. Отсюда можно определить масштаб скорости.

Запишем выражение для массовой концентрации частиц:

$$B = \frac{4}{3} \frac{\pi r_{k,0}^3 c_k \rho_k^0 n_0}{c_g \rho_{g,0}}.$$

Учитывая, что масса частиц  $m = \frac{4}{3} \pi r_{k,0}^3 \rho_k^0 n_0$ , получим выражение,

связывающее безразмерную массовую концентрацию и массу:

$$B=m\frac{c_k}{c_g\rho_{g,0}}.$$

Воспользовавшись характерными значениями плотности газа, теплоёмкости газа и твердой фазы  $\frac{c_g \rho_{g,0}}{c_k} = \frac{10^3 * 1.2}{10^3}$ , получаем:

$$m = 1.2B$$
 (4.13)

Значение масштабной скорости и<sub>\*</sub> можно определить из соотношения

$$\overline{u}_{\max} = \frac{u_{\max}}{u_*}$$
, тогда  
 $u_* = \frac{u_{\max}}{\overline{u}_{\max}}$ , (4.14)

где  $\overline{u}_{max}$  - расчетное максимальное значение безразмерной скорости горения в зависимости  $\overline{u}(B)$ , полученной из расчетов по модели (4.1)-(4.11),  $u_{max}$  - экспериментальное максимальное значение скорости горения в зависимости u(m) (на рисунке 4.14)

Учитывая значение безразмерной скорости горения, рассчитанной по модели (4.1) – (4.11)  $\bar{u} = 0.0055$ , и значение, полученное из эксперимента (рис. 4.14а., зависимость 3), u = 0.25 м/с, получаем масштабное значение

скорости распространения пламени:  $u_* = \frac{u}{\overline{u}} = \frac{0.25}{0.0055} = 45.45$  м/с.

На рисунке 4.15 представлены графики зависимости скорости горения от массового содержания угольной пыли в воздухе. Кривая расчетной размерной скорости, получена путем умножения расчетной безразмерной скорости пламени на *u*<sub>\*</sub>.

Графики, изображенные на рисунке 4.14 б., представляют собой экспериментальные зависимости видимой скорости пламени от относительной массовой концентрации угольной пыли  $\phi$ .  $\phi = 1$  соответствует стехиометрическому количеству угля в газовзвеси (при таком количестве твердого дисперсного горючего в смеси полностью расходуются как горючее, так и окислитель газовой фазы).

Для сравнения расчетных данных по модели (4.1) – (4.11) (рис. 4.3) и экспериментальных значений для скорости распространения пламени по газовзвеси (рис. 4.14 б) найдем соответствие между значениями безразмерной массовой концентрации В и относительной массовой концентрацией  $\phi$ .

Значение В используемое в модели (4.1) – (4.11), при котором после прохождения фронта пламени по смеси, расходуется весь газообразный окислитель и взвешенный в смеси мелкодисперсный уголь, будем считать стехиометрическим, оно составило B = 0.1. Соотнося стехиометрические значения получаем соотношение для В и  $\phi$ :

 $\phi = 10 \text{ B}$ 

Чтобы определить масштаб скорости, как в случае зависимости u(m) (на рисунке 4.14 а), считаем, что значение расчетной безразмерной скорости при  $\phi = 1$  соответствует значению скорости в экспериментальных данных также при  $\phi = 1$ .

На рисунке 4.16 представлены графики зависимости скорости горения от относительного массового содержания угля в воздухе. Кривые,

соответствующие расчетным данным, получены путем умножения расчетной безразмерной скорости пламени на  $u_*$ . Для первого угля  $u_{*,1} = 49.95 M/c$ , для второго  $u_{*,2} = 20.35 M/c$  (найдены по формуле (4.14) при скоростях, соответствующих  $\phi = 1$ ).



Рисунок 4.15. Скорость распространения пламени в зависимости от массы частиц на 1 м<sup>3</sup> смеси. Точки – эксперимент (28% летучих, d = 10мкм) [95], сплошная линия – расчетные данные по модели (4.1) – (4.11).

Модель хорошо описывает экспериментальные данные (рис. 4.16). Однако в области значений относительной массовой концентрации частиц, превышающей стехиометрическое значение, экспериментальные значения скорости распространения фронта пламени выше вычисленных по модели (4.1)-(4.11). Это может быть объяснено тем, что в модели не учтены некоторые физические процессы, например лучистый теплоперенос, роль которого возрастает с увеличением концентрации твердого дисперсного горючего в газовзвеси из-за высокой температуры.



Рисунок 4.16. Скорость распространения пламени в зависимости от коэффициента отношения  $\phi$  ( $\phi = 1$  соответствует стехиометрической смеси). 1 – уголь 1 (39% летучих, d = 12мкм), 2 – уголь 2 (37% летучих, d = 47мкм) [95]. Сплошная линия – данные моделирования по модели (4.1) – (4.11)

Различие в значениях скоростей есть и в области малых значений  $\phi$ ,

где скорость в эксперименте меньше расчетной. Максимальные различия обнаружены в окрестности  $\phi = 0.5$ , и составили 26%, для кривой 1 и 24% для кривой 2 (рис. 4.16).

Для экспериментальных данных, полученных для широкого диапазона концентрации угольной пыли в газовзвеси [95], сравнение с результатами расчетов по модели (4.1) – (4.11) дает похожие результаты (рис. 4.15). В области малых массовых концентраций m = 100 - 250 г/м<sup>3</sup>. результаты численного счета превышают экспериментальные значения. Можно сказать, значения скорости соответствуют экспериментальным что расчетные зависимостям, однако сдвинуты по оси ординат влево. Для средних значений  $m = 250 - 600 \text{ г/m}^3$ , расчетные хорошо значения совпадают С экспериментальными данными. При *m* > 600 г/м<sup>3</sup>, экспериментальные значения скорости меньше, чем рассчитанные по модели (4.1) – (4.11).

Следует заметить, что эффект увеличения скорости горения при увеличении массовой концентрации твердого топлива выше eë обнаруженный стехиометрического значения В экспериментах, подтверждается при моделировании (рис. 4.3). Например, на рисунке 4.15, расчетное значение массы угольной пыли, соответствующее стехиометрии m = 200 r, при дальнейшем увеличении массы угля, наблюдается рост скорости горения и после достижения максимума, скорость медленно уменьшается.

## Выводы

Скорость пламени в газовзвеси реагирующих с окислителем газовой фазы частиц увеличивается с ростом массовой концентрации частиц до ее значений, значительно больших стехиометрического соотношения и затем начинает уменьшаться. Максимум скорости распространения пламени смещен от стехиометрического соотношения в сторону избытка горючих частиц. Это происходит за счет увеличения площади поверхности частиц. Данный эффект устойчив и наблюдается для различных размеров частиц.

Представлены гибридной результаты исследования горения скорости газовзвеси. Получены зависимости установившейся фронта пламени от концентрации горючего в газовой фазе при различных значениях массовой концентрации и размеров частиц. Выяснено, что в случае малых начальных концентраций горючего в газе ( $C_{1,0}$ ), присутствие в газовой смеси реагирующих частиц увеличивает скорость горения. А при значениях концентрации горючего в газе близкой к стехиометрической, частицы тормозят пламя.

Проведено сравнение результатов математического моделирования горения газовзвеси угольной пыли в воздухе с экспериментальными данными. Отличие расчетных значений скорости пламени OT экспериментальных составляет 30 – 40% в диапазоне массовых концентраций угольной пыли 200 – 800 г/м<sup>3</sup>. Созданная математическая модель адекватно отражает основные физико-химические процессы, проходящие В существующих газодисперсных системах, и может использоваться для оценки скорости распространения ламинарного пламени в газовзвесях реагирующих частиц.

Разработанная математическая модель позволяет более точно оценить параметры состояния среды за фронтом сгорания гибридной газовзвеси, по сравнению с моделями, где не проводится учет теплового расширения среды и связанного с ним относительного движения фаз.

Проведенные расчеты показывают, что при стехиометрическом соотношении газофазных горючего и окислителя в гибридной газовзвеси, сгорания ниже, чем в смеси без частиц. В бедной температура метановоздушной смеси мелкие частицы способны догорать после сгорания метана и повышать температуру за фронтом пламени. В бедных (по газообразному горючему) гибридных газовзвесях, скорость распространения фронта ламинарного пламени больше. Это следует учитывать при безопасности пожаропроектировании автоматических систем на взрывоопасных производствах.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам выполненной диссертационной работы сформулированы следующие выводы:

1 Разработана физико-математическая модель распространения пламени в гибридной газовзвеси, учитывающая гомогенные в газе и гетерогенные на поверхности частиц химические реакции, движение газа за счет теплового расширения, массообмен, теплообмен и динамическое взаимодействие между фазами при ламинарном распространении пламени.

2 Выявлено, что скорость пламени в газовзвеси реагирующих с окислителем газовой фазы частиц увеличивается с ростом массовой значений, концентрации ee значительно больших частиц ДО стехиометрического соотношения и затем начинает уменьшаться. Максимум скорости распространения пламени смещен стехиометрического OT соотношения в сторону избытка горючих частиц. Это происходит из-за увеличения площади гетерогенного реагирования частиц с окислителем газовой фазы во фронте горения, наблюдается для различных размеров частиц, и сопровождается их недогоранием.

3 Сравнение результатов математического моделирования горения газовзвеси угольной пыли в воздухе с экспериментальными данными показало, что созданная математическая модель адекватно отражает основные физико-химические процессы, проходящие в существующих газодисперсных системах, и может использоваться для оценки скорости распространения ламинарного пламени в газовзвесях реагирующих частиц.

4 Получены зависимости установившейся скорости фронта пламени в гибридной газовзвеси от концентрации горючего в газовой фазе при различных значениях массовой концентрации и размеров частиц. Выяснено, что при горении гибридной газовзвеси в случае малых концентраций горючего в газе (бедные смеси), присутствие в газовой смеси реагирующих

частиц увеличивает скорость фронта пламени. В богатых смесях реакционноспособные частицы способны оказывать тормозящее воздействие на пламя, подобно инертным частицам. Соотношение количества газового и дисперсного горючего в гибридной газовзвеси определяет ведущую реакцию, которая и определяет скорость распространения пламени в гибридной газовзвеси.

5 Для газовзвесей, реагирующих всех изученных В режиме распространения ламинарного пламени, В зоне химической реакции наблюдается повышенная концентрация частиц, которая объясняется их инерцией. Этот эффект зависит от размера частиц. Поэтому для адекватного моделирования процессов горения газовзвесей необходимо учитывать не только тепловую релаксацию между фазами, но и динамическую, которая влияет на теплообмен между фазами во фронте пламени.

Результаты исследований опубликованы в работах [96–104].

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1 Деньга В. В. Анализ порошкообразных ингибиторных составов, применяемых в автоматических системах взрывозащиты [Электронный pecypc] / В. В. Деньга // Сборник научных статей МакНИИ. – 2009. – №1. – URL: <u>http://archive.nbuv.gov.ua/portal/natural/szsb/2009\_1/Denga.pdf</u> (дата обращения 10.07.2011).

2 Автоматическая система взрывоподавления – локализации взрывов (АСВП-ЛВ.1М) [Электронный ресурс]. – буклет ЗАО «Межведомственная комиссия по взрывному делу» при Академии горных наук. – 2011. – URL: <u>http://mvkmine.ru/lrus/document/bukl\_ru.doc</u> (дата обращения 10.07.2011).

3 pozhproekt.ru [Электронный ресурс]. – 2008. – URL: <u>http://pozhproekt.ru/enciklopediya/ognetushashhaya-koncentraciya</u> (дата обращения 10.07.2011).

4 Баратов А. Я. Пожарная безопасность. Взрывобезопасность: справ. / А. Я. Баратов, Е. Н. Иванов, А. Я. Корольченко и др. – М.: Химия, 1987. – 272 с.

5 Корольченко А. Я. Процессы горения и взрыва / А. Я. Корольченко. – М. : Пожнаука, 2007. – 266 с.

6 Баратов А. Н. Огнетушащие порошковые составы / А. Н. Баратов, Л. П. Вогман. – М. : Стройиздат, 1982. – 72 с.

7 Петрухин П. М. Предупреждение взрывов пыли в угольных шахтах / П. М. Петрухин, М. И. Нецепляев, В. Н.Качан, В. С. Сергеев. – М. : Недра, 1974. – 304 с.

8 Штолль Э. В. Подавление взрывов в подземных выработках автоматическими заслонами системы BVS / Э. В. Штолль, В. Виманн // Глюкауф-форшунгсхефте. – 1979. – № 1. – С. 38–46.

9 Медведев С. П. Пределы горения водородовоздушных смесей в присутствии ультрадисперсных капель воды (тумана) / С. П. Медведев, Б. Е. Гельфанд, А. Н. Поленов, С. В. Хомик // Физика горения и взрыва – 2002, Т.

36, №4. – C. 3–8.

10 Kumar R. K. Flammability limits of hydrogen-oxygen-diluent mixtures / R. K. Kumar // J. Fire Sci. – 1985. – V. 3, P. 245–262.

11 Померанцев В. В. Самовозгорание и взрывы пыли натуральных топлив / В. В. Померанцев, С. Л. Шагалова, В. А. Резник, В. В. Кушнаренко. – Л. : Энергия, 1978. – 144 с.

12 Умнов А. Е. Предупреждение и локализация взрывов в подземных условиях / А. Е.Умнов, А. С. Голик, Д. Ю. Палеев, Н. Р. Шевцов. – М. : Недра, 1990. – 286 с.

13 Руманов Э. Н. Критические условия самовоспламенения совокупности частиц / Э. Н. Руманов, Б. И. Хайкин // Физика горения и взрыва. – 1969. – Т. 5, №1. – С. 129–136.

14 Лисицын В. И. О периоде индукции при воспламенении совокупности частиц / В. И. Лисицын, Э. Н. Руманов, Б. И. Хайкин // Физика горения и взрыва. – 1971. – Т. 7, №1. – С. 3–9.

15 Гуревич М. А. Расчет гетерогенного воспламенения совокупности частиц / М. А. Гуревич, Г. Е. Озерова, А. М. Степанов // Физика горения и взрыва. – 1971. – Т. 7, № 1. – С. 518-527.

16 Руманов Э. Н. О распространении пламени по взвеси частиц в газе / Э. Н. Руманов, Б. И. Хайкин // Доклады АН СССР. – 1971. – Т. 201, №1.

17 Горшкова С. Н. Режимы ускорения пламени в газовых взвесях / С. Н. Горшкова, П. М. Кришеник, Э. Н. Руманов, К. Г. Шкадинский // Химическая физика. – 1986. – Т. 6, №6. – С. 843–847.

18 Гуревич М. А. Критические условия самовоспламенения полидисперсной газовзвеси частиц твердого топлива / М. А. Гуревич, Г. Е. Озерова, А. М. Степанов // Физика горения и взрыва. – 1971. – Т. 7, № 1. – С. 88–93.

19 Озерова Г. Е. К расчету распространения радиационного пламени / Г. Е. Озерова, А. М. Степанов // Физика горения и взрыва. – 1979. – Т. 15, №2. – С. 66–73.

20 Озеров Е. С. Основы воспламенения газодисперсных сред : учебн. пособие / Е. С. Озеров. – Л. : ЛПИ, 1978. – 76 с.

21 Озеров Е. С. Основы теории горения газодисперсных сред : учебн. пособие / Е. С. Озеров. – Л. : ЛПИ, 1980. – 80 с.

22 Губин Е. И. Распространение пламени в запыленном газе / Е. И. Губин, И. Г. Дик // Физика горения и взрыва. – 1987. – Т. 23, № 6. – С. 25–29.

23 Кассель Г. М. Факторы, влияющие на распространение пламени в облаке пыли. Вопросы горения / Г. М. Кассель, А. К. Дас-Гупта, С. Гурусвами // Сборник переводов статей. – Т. 1. – М. : Иностранная литература. – 1953. – С. 264–273.

24 Грибкова С. И. О влиянии твердых примесей на скорость распространения пламени в горючих газовых смесях / С. И. Грибкова, А. С. Предводителев // ЖТФ. – 1937. – Т. 7, вып. 18–19. – С. 1801–1811.

25 Баратов А. Н. Ингибирование пламени метана взвесями солей / А. Н. Баратов, Л. П. Вогман, В. Н. Кобзарь, В. В. Азатян, М. Д. Мусеридзе, З. Г. Дзоцекидзе, Д. И. Петвиашвили, М. А. Наморадзе // Физика горения и взрыва. – 1976. – Т. 12, № 1. – С. 72–75.

26 Краснянский М. Е. Применение порошкового аэрозоля для предотвращения взрывов метана и угольной пыли / М. Е. Краснянский, В. С. Рыжков // Актуальные вопросы физики аэродисперсных систем. – тез. докл. XIV Всесоюзной конф. – Одесса, 1986. – С. 16.

27 Стрижевский И. И. Промышленные огнепреградители / И. И. Стрижевский, В. Ф. Заказнов – М. : Химия. – 1974. – 264 с.

28 Дик И. Г. Влияние дисперсного материала на скорость распространения пламени в газе / И. Г. Дик, Е. И. Губин, А. Ю. Крайнов, А. И. Макаров // Актуальные вопросы физики аэродисперсных систем. : тез. докл. XIV Всесоюзн. конф. – Одесса, 1986. – Т. 2.

29 Дик И. Г. Нестационарное взаимодействие волны горения с пылевым облаком / И. Г. Дик, Е. И. Губин, А. Ю. Крайнов // ИФЖ. – 1988. – Т. 55, № 2. – С. 236–243.

30 Крайнов А. Ю. О пределах распространения пламени по запыленному газу / А. Ю. Крайнов, В. А. Шаурман // Физика горения и взрыва. – 1997. – Т. 33, № 4. – С. 14–20.

31 Губин Е. И. Ингибирование газовых пламен порошковыми составами / Е. И. Губин, И. Г. Дик, А. Ю. Крайнов // Физика горения и взрыва. – 1989. – Т. 25, № 2. – С. 57–62.

32 Krainov A. Yu. Inhibition of Gas Flame by Spray / A. Yu. Krainov, V. A. Shaurman // Chemical Gasdynamics and Combustion of Energetic Materials : book of abstracts. – Tomsk, 1995. – P. 76.

33 Крайнов А. Ю. Ингибирование газовых пламен аэрозолью капельной жидкости / А. Ю. Крайнов, В. А. Шаурман // Физика горения и взрыва. – 1996. – Т. 32, № 4. – С. 55–61.

34 Krainov A. Yu. Ignition of bicomponent suspension of particles and gas. / A. Yu. Krainov // Proceeding of the 16-th International Colloquium on Dynamics of Explosion and reactive systems. – Poland, Kracov, 1997, – P. 519–522.

35 Крайнов А. Ю. О самовоспламенении двухкомпонентной газовзвеси / А. Ю. Крайнов // Физика горения и взрыва. – 1999. – Т. 35, №5. – С. 6–13.

36 Козлов Е. А. Самовоспламенение смеси аэрозолей окислителя и горючего / Е. А. Козлов, А. Ю. Крайнов // Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики: доклады конференции. – Томск : изд-во Том. ун-та, 1998. – С. 61-62.

37 Крайнов А. Ю. Численное моделирование самовоспламенения двухкомпонентного аэрозоля жидких окислителя и горючего / А. Ю. Крайнов, Е. А. Козлов // Фундаментальные проблемы охраны окружающей среды и экологии природопользования территориальных комплексов Западной Сибири: материалы научной конференции. – Горно-Алтайск, 2000. – С. 80–81.

38 Козлов Е. А. Период самовоспламенения двухкомпонентной аэрозоли жидких окислителя и горючего / Е. А. Козлов, А. Ю. Крайнов // Физика горения и взрыва. – 1999. – Т. 35, № 6. – С. 15–21.

39 Крайнов А. Ю. Моделирование сгорания топлива в дизельном двигателе / А. Ю. Крайнов, Ю. И. Тюрин // Вычислительная гидродинамика и горение конденсированных систем. – Томск : изд-во ТГПУ, 2001. – С. 130–138.

40 Крайнов А. Ю. Математическое моделирование выхода летучих компонентов при самовоспламенении газовзвеси угольной пыли / А. Ю. Крайнов, В. О. Расич // Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики: доклады конференции. – Томск : изд-во Том. ун-та, 2000. – С. 45–46.

41 Крайнов А. Ю. О влиянии выхода горючих летучих компонентов из дисперсной фазы на самовоспламенение газовзвеси / А. Ю. Крайнов // Физика горения и взрыва. – 2002. – Т. 38, №5. – С. 11–21.

42 Крайнов А. Ю. Моделирование самовоспламенения и сгорания газовзвеси угольной пыли в ограниченном объеме / А. Ю. Крайнов // Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики: доклады конференции. – Томск: Изд-во Том. ун-та, 2002. – С. 76–77.

43 Дик И. Г. Зажигание неоднородного облака частиц в поле радиационного излучения / И. Г. Дик, А. Ю. Крайнов // Электрофизика горения: тез. докл. XIV Всесоюзн. семинара по электрофизике горения. – Челябинск, 1991. – С. 68.

44 Крайнов А. Ю. Воспламенение неоднородного облака частиц лучистым потоком / А. Ю. Крайнов // Физика горения и взрыва. – 1996. – Т. 32, № 4. – С. 19–24.

45 Дик И. Г. О воспламенении газовзвеси в полости с нагретыми излучающими стенками / И. Г. Дик, А. Ю. Крайнов, А. И. Макаров // Физика горения и взрыва. – 1990. – Т. 26, № 5. – С. 20–24.

46 Зубков С. В. Исследование зажигания различными источниками и выхода на режим послойного горения гибридной смеси / С. В. Зубков, А. Ю. Крайнов // Тезисы докладов третьего Сибирского конгресса по

индустриальной математике (ИНПРИМ-98) Часть IV. – Новосибирск, изд-во Института математики, 1998. – С. 64–65.

47 Крайнов А. Ю. Численное исследование зажигания различными источниками гибридной газовзвеси (смеси реагирующих газов и частиц) / А. Ю. Крайнов // Химическая физика процессов горения и взрыва. Материалы XII симпозиума по горению и взрыву. Часть II. – Черноголовка, 2000. – С. 28–30.

48 Крайнов А. Ю. Критические условия воспламенения искрой смеси газообразных окислителя и горючего с реагирующими частицами / А. Ю. Крайнов, В. А. Баймлер // Физика горения и взрыва. – 2002. – Т. 38, №3. – С. 30-36.

49 Дик И. Г. Учет лучистого теплопереноса при зажигании пылевого облака искрой / И. Г. Дик, А. Ю. Крайнов, С. В. Цой // Математические модели и методы их исследования (задачи механики сплошных сред, экологии, технологических процессов). Красноярский госуниверситет. – Красноярск, 1997. – С. 83–84.

50 Крайнов А. Ю. Влияние лучистого теплопереноса на минимальную энергию искрового зажигания газовзвесей / А. Ю. Крайнов //Физика горения и взрыва. – 2001. – Т. 37, №3. – С. 16–24.

51 Krainov A. Yu. Flame Propagation in the Suspension of Combustible Particles and Gases / A. Yu. Krainov // Archivum combustionis, 1996. – vol. 16, № 3–4, P. 189–198.

52 Крайнов А. Ю. Распространение пламени в смеси горючих газов и частиц / А. Ю. Крайнов //Физика горения и взрыва. – 2000. – т. 36, №2. – С. 3–9.

53 Крайнов А. Ю. Распространение фронта горения по газовзвеси, выделяющей горючие летучие компоненты / А. Ю. Крайнов // Труды международной конференции «Байкальские чтения-II по моделированию процессов в синергетических системах». – Улан-Удэ-Томск : Изд-во ТГУ, 2002 – С. 48–51.

54 Льюис Б. Горение, пламя и взрывы в газах / Б. Льюис., Г. Эльбе. – М. : Мир, 1968. – 592с.

55 Казаков Ю. В. Режимы нормальной детонации в релаксирующих средах / Ю. В. Казаков, Ю. В. Миронов, А. В. Фёдоров // Физика горения и взрыва. – 1989. – Т. 25, №1. – С. 119–127.

56 Федоров А. В. Математическое моделирование подавления детонации водородокислородной смеси инертными частицами / А. В. Федоров, Д. А. Тропин, И. А. Бедарев // Физика горения и взрыва. – 2010. – Т. 46, №3. – С. 103–115.

57 Золотко А. Н. Воспламенение и горение газовзвесей / А. Н. Золотко, Я. И. Вовчук, В. Г. Шевчук, Н. И. Полетаев // Физика горения и взрыва. – 2005. – Т. 41, № 6. – С. 3–14.

58 Бойчук Л. В. Распространение пламени в двухкомпонентных составах газовзвесей алюминия и бора / Л. В. Бойчук, В. Г. Шевчук, А. И. Швец // Физика горения и взрыва. – 2002. – Т. 38, №6. – С. 51–54.

59 Быковский Ф. А. Непрерывная и пульсирующая детонация угольновоздушной смеси / Ф. А. Быковский, С. А. Ждан, Е. Ф. Ведерников, Ю. А. Жолобов // Доклады академии наук, 2010. – Т 431, №2. – С. 188–190.

60 Быковский Ф. А. Детонация угольно-воздушной смеси с добавкой водорода в вихревых плоскорадиальных камерах / Ф. А. Быковский, С. А. Ждан, Е. Ф. Ведерников, Ю. А. Жолобов // Физика горения и взрыва. – 2011. – Т. 47, № 4. – С. 109–118.

61 Bradley D. The structure of coal-air-CH<sub>4</sub> laminar flames in a lowpressure burner: cars measurements and modeling studies / D. Bradley, M. Lawes, M. J. Scott, N. Usta // Combustion and flame. – V. 124. – P. 82–105.

62 Bradley D. Modeling of laminar pulverized coal flames with speciated devolatilization and comparisons with experiments / D. Bradley, M. Lawes, Ho-Young Park, N. Usta // Combustion and Flame. – V. 144, Issues 1–2. – P. 190–204.

63 Rockwell S. R. Influence of coal dust on premixed turbulent methane-air

flames / Scott R. Rockwell, Ali S. Rangwala // Combustion and Flame. V. 160, Issue 3. – March 2013. – P. 635–640.

64 Rockwell S. R., Influence of Coal Dust on Premixed Turbulent Methane– air Flames, PhD thesis / S. R Rockwell. – Worcester Polytechnic Institute, 2012.

65 Kobayashi H. Burning Velocity of Turbulent Premixed flames in a high Pressure Environment / H. Kobayashi, T. Tamura, K. Maruta, T. Niioka, and F. A. Williams // Proc. Combust. Inst. – 1996. – V. 26 – P. 389–396.

66 Федоров А. В. Смесеобразование при распространении волновых процессов в газовзвесях / А.В. Федоров // Физика горения и взрыва. – 2004. – Т. 40, №1. – С. 21–37.

67 Гостеев Ю. А. Динамика и воспламенение частиц угольных отложений / Ю. А. Гостеев, А. В. Федоров // Труды международной конференции RDAMM-2001. – Т. 6, Ч. 2. – С. 200–207.

68 Гостеев Ю. А. Математическое моделирование подъема и воспламенения частиц угольных отложений / Ю. А. Гостеев, А. В. Федоров // Физика горения и взрыва. – 2003. – Т. 39, №2. – С. 67–74.

69 Федоров А. В. Расчет подъема пыли за скользящей вдоль слоя ударной волной. Верификация модели / А. В. Федоров, И. А. Федорченко // Физика горения и взрыва. – 2005. – Т. 41, №3. – С. 110–120.

70 Федоров А.В. Математическое моделирование гетерогенной детонации угольной пыли в кислороде с учетом стадии воспламенения / А.В. Федоров, Т.А. Хмель // Физика горения и взрыва. – 2005. – Т. 41, №1. – С. 89–99.

71 Sichel M. The shock wave ignition of dusts / M. Sichel, S. W. Baek, C. W. Kauffman, B. Maker, J. A. Nicholls // AIAA Journal, 1985. – V. 23, №9. – P. 1374–1380.

72 Сеплярский Б. С. Анализ критических условий зажигания газовзвеси нагретым телом при импульсном подводе энергии / Б. С. Сеплярский, Т. П. Ивлева // Физика горения и взрыва. – 2004. – Т. 40, №2.

73 Орловская С. Г. Тепломассообмен и кинетика химических

превращений монодисперсной газовзвеси пористых углеродных частиц с учетом стефановского течения / С. Г. Орловская, В. В. Калинчак, О. Н. Зуй, М. Н. Чесноков // Физика аэродисперсных систем, 2006. – №43. – С. 19–29.

74 Макаров В. Н. Кинетическая модель среды для процесса образования топливных оксидов азота в пылеугольном факеле / В. Н. Макаров, Г. Я. Герасимов // Физика горения и взрыва. – 1999. – Т. 35, №2. – С. 23–29.

75 Pitz N. J. A comprehensive chemical reaction mechanism for oxidation of n-butane / N.J. Pitz, C. K. Westbrook // Proc. 20<sup>th</sup> Symp. (Intern.) on Combustion.
– The Combustion Inst. – 1984. – P. 831–843.

76 Hsu D. S. CO formation in the early stage of high temperature benzene oxidation under fuel lean conditions: kinetics of the initiation reaction,  $C_6H_6 \rightarrow C_6H_5 + H$  / Hsu D. S., C. Y. Lin, M. C. Lin // Proc. 20<sup>th</sup> Symp. (Intern.) on Combustion. – The Combustion Inst. – 1984. – P. 623–630.

77 Hahn W. A. NOx formation in flat, laminar, opposed jet methane diffusion flames / W. A. Hahn, J. O. Wendt // Proc. 18<sup>th</sup> Symp. (Intern.) on Combustion. – The Combustion Inst., 1981. – P. 121–131.

78 Левицкий А. А. Задачи химической кинетики в автоматизированной системе научных исследований АВОГАДРО / А. А. Левицкий, С. А. Лосев, В. Н. Макаров // Математические методы в химической кинетике. – Новосибирск : Наука, 1990. – С. 7–38.

79 Пухлий В. А. Исследование вторичных очагов пожара при взрыве органической пыли / В. А. Пухлий // Физика горения и взрыва. – 2000. – Т. 36, № 3. – С. 60–64.

80 Сидоров А. Е. Горение угольных пылей / А. Е. Сидоров, А. Н. Золотко, В. Г. Шевчук, В. С. Муница // Физика аэродисперс. систем : межвед. науч. сб. – 2008. – вып. 45. – С. 35–44.

81 Palmer K. N. Dust Explosions and Fires / K. N. Palmer. – London, Chapman and Hall. – 1973. – 240p.

82 Золотко А. Н. Гетерогенное воспламенение одиночной частицы с параллельными химическими реакциями на ее поверхности / А. Н. Золотко, Н. А. Ушакова, М. В. Демирова // Физика аэродисперс. систем : межвед. науч. сб. – 2010. – Вып. 47. – С. 91–99.

83 Киро С. А. Критические явления в дисперсных гетерогенных системах со стадийным образованием конечных продуктов : дисс. ... канд. физ.-мат. наук / С. А. Киро. – Одесса, 1983. – 153с.

84 Канторович Б. В. Основы теории горения и газификации твердого топлива / Б. В. Канторович – Москва, АН СССР. – 1958. – 174с.

85 Mondal S. S. Modelling of transport processes and associated thermodynamic irreversibilities in ignition and combustion of a pulverized coal particle / S. S. Mondal // International Journal of Thermal Sciences. – V. 47, Issue 11. – P. 1442–1453.

86 Федоров А. В. Математическое моделирование воспламенения облака микрокапель углеводородного топлива / А. В. Федоров // ФГВ. – 2002. – Т. 38, № 5. – С. 97–100.

87 Франк-Каменецкий Д. А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике / Д. А. Франк-Каменецкий. – М. : Наука. – 1987. – 492с.

88 Шкадинский К. Г. Закономерности зажигания газов накаленной поверхностью с учетом диффузии и гидродинамики / К. Г. Шкадинский,
В. Б. Барзыкин // Физика горения и взрыва. – 1968. – Т. 4, № 2. – С. 176–181.

89 Самарский А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. – М. : Наука. – 1989. – 616с.

90 Самарский А. А. Однородные разностные схемы на неравномерных сетках для уравнений параболического типа. / А. А. Самарский // Ж. вычисл. матем. и матем. физика. – 1963. – № 2. – С. 266–298.

91 Марчук Г. И. Методы вычислительной математики / Г. И. Марчук. – М. : Наука, 1989. – 608с.

92 Беляев Н. М. Численный расчет сверхзвуковых течений газа / Н. М. Беляев, В. К. Хрущ. – К. : Вища школа. – 1984. – 224с.

93 Зельдович Я. Б. / Я. Б. Зельдович, Г. И. Баренблатт, В. Б. Либрович, Г. М. Махвиладзе. – Математическая теория горения и взрыва. – М. : Наука – 1980. – 478с.

94 Мержанов А. Г. Установление стационарного распространения пламени при зажигании газа накаленной поверхностью / А. Г. Мержанов, Б. И. Хайкин, К. Г. Шкадинский // ПМТФ. – 1969. – №5. – С. 42–48.

95 Eckhoff R K. Dust explosions in the process industries / Rolf Eckhoff. – Gulf Professional Publishing, 2003. – 720p.

96 Дементьев А. А. К вопросу о распространении ламинарного пламени в газе с инертной пылью / А. А. Дементьев, А. Ю. Крайнов // Физика горения и взрыва. – 2011. – Т. 47, № 4. – С. 70–75.

97 Дементьев А. А. Исследование влияния относительного движения взвеси инертных частиц на скорость горения газовой смеси / А. А. Дементьев, А. Ю. Крайнов // Вестник ТГУ. Математика и механика. – 2013. – № 2(22). – С. 60–66.

98 Дементьев А. А. Распространение пламени в газовзвеси реагирующих частиц / А. А. Дементьев, А. Ю. Крайнов // Известия вузов. Физика. – 2013. – Т. 56, № 9/3. – С. 162–164.

99 Дементьев А.А. Влияние концентрации горючего на скорость распространения пламени в газовой смеси с инертными частицами / А.А. А. Ю. Крайнов // Труды Томского Дементьев, государственного университета. Серия физико-математическая. Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики: Материалы II Всероссийской молодежной научной конференции, посвященной 50-летию физико-технического факультета Томского государственного университета. – Томск: Изд-во Том. ун-та., 2012. – Т. 282. – С. 24–29.

100 Дементьев А. А. Влияние концентрации горючего в реакционноспособной газовзвеси на скорость распространения фронта ламинарного пламени / А. А. Дементьев // Труды Томского государственного университета. Серия физико-математическая: Актуальные проблемы

современной механики сплошных сред и небесной механики. – Томск: Издво Том. ун-та., 2013 – Т. 292. – С. 28–33.

101 Дементьев А. А. Влияние концентрации горючего в газе на скорость фронта ламинарного пламени в газовзвесях инертных и реагирующих частиц / А. А. Дементьев // Труды Томского государственного университета. Серия физико-математическая: Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики. – Томск: Изд-во Том. ун-та., 2013 – Т. 292. – С. 33–37.

102. Dementiev A. A. Effect of inert particles on the rate of flame propagation in igniting it from a «closed end» and an «open end» / A. A. Dementiev, A. Yu. Krainov // 7 ISFS : book of abstracts. – 2011. – URL: <u>http://www.kinetics.nsc.ru/kcp/7ISFS/CD/Theses/OP-28.pdf</u> (дата обращения 20.08.2012).

103 Шрагер Э.Р., Васенин И.М., Крайнов А.Ю., Дементьев А.А., и др. Разработка математических моделей горения и взрыва высокоэнергетических веществ с наночастицами, механического поведения оксидной нанокерамики и методик их численной реализации на многопроцессорном кластере с использованием параллельных алгоритмов // Отчет о НИР. Рук. Э.Р. Шрагер. Томск, ТГУ, 2011. № госрегистрации 01200903821 – 120с.

104 Шрагер Э.Р., Васенин И.М., Крайнов А.Ю., Якутенок В.А., Крайнов Д.А., Порязов В.А., Дементьев А.А., и др. Разработка теоретических основ технологии проектирования новых материалов и энергетических установок // Отчет о НИР. Рук. Э.Р. Шрагер. Томск, ТГУ, 2014. № госрегистрации 01201257785 – 137 с.