

РАЗНОЕ

УДК 536.46; 662.61

## ОДНОСТАДИЙНАЯ МОДЕЛЬ ГОРЕНИЯ МЕТАН-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ ДЛЯ ШИРОКОГО ДИАПАЗОНА ПАРАМЕТРОВ

А. Д. Морошкина, В. Е. Рогожников, К. Д. Хвосточенко,  
В. В. Миславский, Е. В. Серещенко, В. В. Губернов

*Проведено численное исследование применимости одностадийного глобально-го механизма горения метан-воздушной смеси, построенного на основе экспериментальных данных для свободного пламени, к описанию пламени, стабилизированного на плоской пористой горелке. Моделирование выполнялось в программном пакете Cantera с использованием многокомпонентной диффузионной модели. Сопоставление результатов, полученных в рамках одностадийной модели, с экспериментальными данными и расчетами с детальными механизмами Ggatso и FFCM показало хорошее количественное согласие для зависимости высоты пламени от массового расхода и распределения температуры в диапазоне давлений от 1 до 10 атм. Показано, что одностадийная модель корректно воспроизводит немонотонную зависимость высоты пламени от массового расхода топливной смеси и монотонный рост температуры фронта горения. В то же время выявлено, что структура пламени, предсказываемая одностадийной моделью, характеризуется существенно более узкой зоной реакции по сравнению с детальными механизмами и экспериментом, что связано с отсутствием в модели медленных процессов выхода CO и CO<sub>2</sub> к равновесным концентрациям. Обсуждаются пути дальнейшего совершенствования модели путем добавления второй реакции окисления CO до CO<sub>2</sub>.*

**Ключевые слова:** одностадийный механизм горения метана, горение при повышенном давлении, кинетические параметры реакции, скорость ламинарного горения, пламя, стабилизированное на плоской пористой горелке.

*Введение.* Исторически горение самых различных видов топлива моделировалось в рамках одностадийной необратимой реакции. Несмотря на то что данный подход иг-

ФИАН, 119991 Россия, Москва, Ленинский пр-т, 53; e-mail: moroshkina.ad@phystech.edu.

норирует сложный многостадийный характер большинства реакций горения, он позволил получить значительное количество классических результатов по структуре, скорости распространения и устойчивости пламен в самых различных конфигурациях [1]. В отличие от описания элементарных реакций, для которых кинетические константы могут быть измерены экспериментально или оценены с помощью, например, квантово-механических расчетов [2, 3], в случае глобальной одностадийной реакции горения стериический фактор, предэкспоненциальный множитель, порядки реакции и энергия активации рассматриваются как феноменологические. Анализ, проведенный в целом ряде работ [4–6], показывает, что для таких видов топлив, как метан, существует неоднозначность в выборе констант реакции. Можно описать одни и те же экспериментальные данные различными наборами кинетических констант. Более того, для того чтобы иметь возможность описывать свойства пламени в широком диапазоне изменения параметров (коэффициента избытка топлива, давления и т. д.), необходимо описывать кинетические параметры как функции этих параметров [7, 8]. Сложность и неоднозначность подобного подхода привели к тому, что даже для одного типа топлива (например, метана) и одних и тех же экспериментальных параметров системы существует целый набор одностадийных кинетических моделей. Они активно используются в численном моделировании динамики ламинарных пламен [9, 10], термоакустических неустойчивостей [11], фильтрационного горения [12], турбулентного горения [13], детонационных волн [14] и т. д. Их использование оправдано прежде всего тем, что глобальные одностадийные модели позволяют существенно повысить скорость расчетов за счет пренебрежения сложной кинетикой и деталями превращения начальных реагентов в продукты, а также точным составом конечных продуктов. На сегодняшний день, одностадийные механизмы горения метана успешно встроены в целый ряд широко известных программных кодов: OpenFOAM [15], Cantera [16], Ansys Fluent (ANSYS, Inc., Canonsburg, PA.). Тем не менее, вопросы, касающиеся оптимального выбора констант реакции и единственности такого выбора, остаются открытыми.

Известно, что часть кинетических параметров глобальной одностадийной модели, например, энергия активации, может быть оценена из экспериментальных данных [17–19]. Основываясь на этом подходе, в работах [19, 20] были получены систематические данные о ламинарной скорости горения метан-воздушной смеси для различных составов и давлений. С их помощью в работе [21] построен одностадийный глобальный механизм реакции горения метана, в котором большинство констант реакции: предэкспоненциальный фактор, порядки реакции, энергия активации определены на основе

экспериментальных данных. Было продемонстрировано, что данный механизм способен описать скорость и структуру свободного фронта горения метан-воздушной смеси в широком диапазоне коэффициентов избытка топлива  $\varphi$  и давлений  $P$  ( $0.7 \leq \varphi \leq 1.3$ ,  $1 \leq P \leq 6$  атм). В данной работе мы исследуем применимость полученного в [21] механизма для описания метан-воздушных пламен, стабилизированных на плоской пористой горелке.

*Математическая модель.* Численное исследование процессов горения предварительно перемешанных метан-воздушных смесей на плоской пористой горелке проводилось с использованием программного обеспечения Cantera[16], решающего систему уравнений для стационарного осесимметричного одномерного реагирующего потока методом Ньютона (модель “burner-stabilized premixed flame”). Использовалась диффузионная модель, учитывающая многокомпонентные коэффициенты переноса. В качестве уравнения состояния применялся закон идеального газа, и предполагалось, что давление квазиоднородно из-за низкого числа Маха. Считалось, что поверхность горелки поддерживается при постоянной температуре  $T_0 = 20$  °С, которая в экспериментах контролируется системой термостабилизации. На входе в горелку для компонентов смеси применялись смешанные граничные условия, позволяющие описать поток топливной смеси с заданным расходом  $m$  через пористую структуру горелки. На выходной границе для всех переменных использовались граничные условия Неймана. При этих стандартных предположениях о распространении ламинарных волн горения, система зависящих от времени уравнений сохранения для плотности  $\rho$ , массового расхода  $m$ , температуры  $T$  и массовых долей  $Y_i$   $i$ -го компонента смеси, а также соответствующие граничные условия записываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial m}{\partial x} &= 0, \\ \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} + c_p m \frac{\partial T}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \sum_j h_j r_j, \\ \rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + m \frac{\partial Y_i}{\partial x} + \frac{\partial j_i}{\partial x} &= r_i, \\ P &= \rho \sum_i \frac{Y_i}{M_i} RT, \end{aligned} \tag{1}$$

$$\begin{aligned} T = T_0, \quad mY_i + j_i &= mY_i^0, \quad \text{при } x = 0, \\ \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial Y_i}{\partial x} &= 0, \quad \text{при } x = \infty, \end{aligned} \tag{2}$$

где  $t$  и  $x$  – время и пространственная координата вдоль оси горелки;  $c_p$  и  $\lambda$  – удельная

теплоемкость и теплопроводность смеси, соответственно;  $M_i$ ,  $r_i$ ,  $h_i$ ,  $j_i$  и  $Y_i^0$  – молярная масса, скорость химического образования, удельная энтальпия, диффузионный массовый поток и массовая доля в свежей смеси  $i$ -го компонента, соответственно.  $P$  – давление,  $R$  – универсальная газовая постоянная. Следует отметить, что в зависимости от механизма реакции скорости элементарных стадий могут зависеть как от давления, так и от температуры.

Для проверки предсказательной способности одностадийного механизма горения метана, предложенного нами в работе [21], проводилось сопоставление результатов с данными, полученными в рамках расчета с детальными механизмами реакций Ggmsco [22] и FFCSM [23]. При этом детальные механизмы Ggmsco и FFCSM экспортировались в формат, используемый Cantera, встроенным конвертером, тогда как для одностадийного механизма он настраивался вручную. Для этого в механизме использовалась одна глобальная необратимая реакция  $\text{CH}_4 + 2\text{O}_2 \rightarrow 2\text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2$ , а её скорость записывалась в виде  $W = k(T, P)[\text{CH}_4]^a[\text{O}_2]^b$ , где  $k(T, P) = AT^s \exp(-E_a/RT)$  – константа скорости, а  $a + b = n$  – порядок реакции, который может быть дробным числом. При этом параметры  $A$ ,  $a$  и  $b$  для разработанного нами механизма зависели от стехиометрического соотношения  $\varphi$ , но не зависели от давления, т. е. являлись функциями  $A(\varphi)$ ,  $a(\varphi)$  и  $b(\varphi)$ , тогда как  $s$  и энергия активации  $E_a$  были константами и равнялись 0 и 61.2 ккал/моль, соответственно. Таким образом, при численном моделировании для каждого состава смеси параметры  $A$ ,  $a$  и  $b$  выбирались согласно их зависимостям от  $\varphi$ . В статье [21] из экспериментальной зависимости ламинарной скорости горения адиабатического плоского пламени от давления была получена следующая зависимость порядка реакции  $n$  от  $\varphi$ :

$$n(\varphi) = -7.889\varphi^3 + 19.798\varphi^2 - 14.748\varphi + 3.967. \quad (3)$$

Как упоминалось выше, порядок реакции  $n$  представляет собой сумму показателей  $a$  и  $b$ , и знание  $n$  не позволяет нам определить  $a$  или  $b$ . Большинство литературных данных по показателям степени  $a$  и  $b$  согласуются с неравенствами  $0 < a < b$ . Однако в ряде работ значение  $a$  отрицательно. Это может привести к ложным результатам при описании пламени, в котором концентрация метана может локально или временно принимать малые значения. Поэтому здесь мы считаем, что оба показателя степени являются положительными числами. Заметим, что глобальная стехиометрия реакции горения метана с кислородом подразумевает, что  $a \div b$  должно быть близко к 0.5.

В работе [21] зависимость предэкспоненциального множителя  $A(\varphi)$  была получена для трех случаев разбиения  $n$  на  $a$  и  $b$ : 1)  $a_1(\varphi) = 0.5n(\varphi)$  и  $b_1(\varphi) = 0.5n(\varphi)$ ; 2)  $a_2(\varphi) =$

$0.4n(\varphi)$  и  $b_2(\varphi) = 0.6n(\varphi)$ ; 3)  $a_3(\varphi) = 0.3n(\varphi)$  и  $b_3(\varphi) = 0.7n(\varphi)$  и была аппроксимирована как:

$$\begin{aligned} \ln A_1(\varphi) &= -140.28\varphi^3 + 363.04\varphi^2 - 289.33\varphi + 95.13, \\ \ln A_2(\varphi) &= -146.39\varphi^3 + 381.79\varphi^2 - 307.82\varphi + 100.89, \\ \ln A_3(\varphi) &= -150.00\varphi^3 + 393.87\varphi^2 - 320.54\varphi + 105.04. \end{aligned} \quad (4)$$

В данном исследовании рассматривался случай  $a_1(\varphi) = b_1(\varphi) = 0.5n(\varphi)$ .

Размер расчетной области составлял 5 см, что значительно превышает тепловую толщину пламени, которая составляет порядка нескольких сотен микрон. В результате численных расчетов в зависимости от стехиометрического соотношения  $\varphi$  и расхода  $m$  были получены профили распределения плотности, скорости, температуры и концентрации веществ вдоль оси горелки.

*Результаты.* В данной работе мы сосредоточились на численном моделировании структуры и свойств стационарных метан-воздушных пламен, стабилизированных на плоской пористой горелке. Общее поведение данной системы хорошо изучено и наиболее удобно описывается в рамках варьирования массового расхода  $m$  топливно-воздушной смеси, подаваемой через горелку. Глобальными характеристиками пламен, стабилизированных на плоской горелке, являются высота пламени  $x_f$  и температура горения  $T_b$ . Первая может быть определена как расстояние от поверхности горелки до поверхности, где достигается максимум тепловыделения. Температура горения  $T_b$  соответствует максимальной температуре, достигаемой в пламени. При фиксированных параметрах системы зависимость  $x_f$  от  $m$  является функцией с единственным минимумом при некотором  $m^*$ . С уменьшением или увеличением  $m$  от значения, соответствующего минимальной высоте пламени над поверхностью горелки,  $x_f$  монотонно растет. При стремлении  $m$  к значению  $m_0$ , соответствующему ламинарной скорости горения, одномерная модель предсказывает неограниченный рост высоты пламени  $x_f \rightarrow \infty$ . Температура горения является монотонно возрастающей функцией массового расхода. Таким образом, одно и то же  $x_f$  может достигаться при двух разных  $T_b$  и  $m$  [18, 24]. Качественно, данная картина воспроизводится как в экспериментах, так и в численных расчетах. Это продемонстрировано на рис. 1, на котором показана зависимость высоты пламени от массового расхода, нормированного на  $m_0$ . Экспериментальные данные для случая нормального давления взяты из работы [24] и показаны круглыми красными маркерами. Они построены по обработке фотографий пламени и соответствуют положению максимума хемилюминесценции радикалов  $\text{CH}^*$ . В рамках моделей с детальной кинетикой FFCM и Agamso были проведены расчеты и найдены положения максимума  $\text{CH}^*$ ,

которые нанесены на рис. 1 пунктирными синей и розовой линиями. В связи с тем, что в одностадийной кинетике радикал  $\text{CH}^*$  отсутствует, то прямое сопоставление с экспериментальными данными на основе  $\text{CH}^*$ -диагностики невозможно. Поэтому высота пламени для одностадийной модели определялась по максимуму тепловыделения и на рис. 1 представлена черной линией. Как это обсуждается в целом ряде работ (см. [25] и ссылки в ней) положение максимумов радикалов  $\text{CH}^*$  и тепловыделения находятся близко друг к другу. Высота пламени, полученная в рамках детальных механизмов и построенная по максимуму тепловыделения, также продемонстрирована на рисунке сплошными линиями и подтверждает данное утверждение. В целом, на рисунке видно, что при давлении 1 атм одностадийная модель прекрасно количественно согласуется как с экспериментальными данными, так и с результатами расчетов в рамках детальных механизмов. Более того, данная картина повторяется для численных данных и при давлении 10 атм.

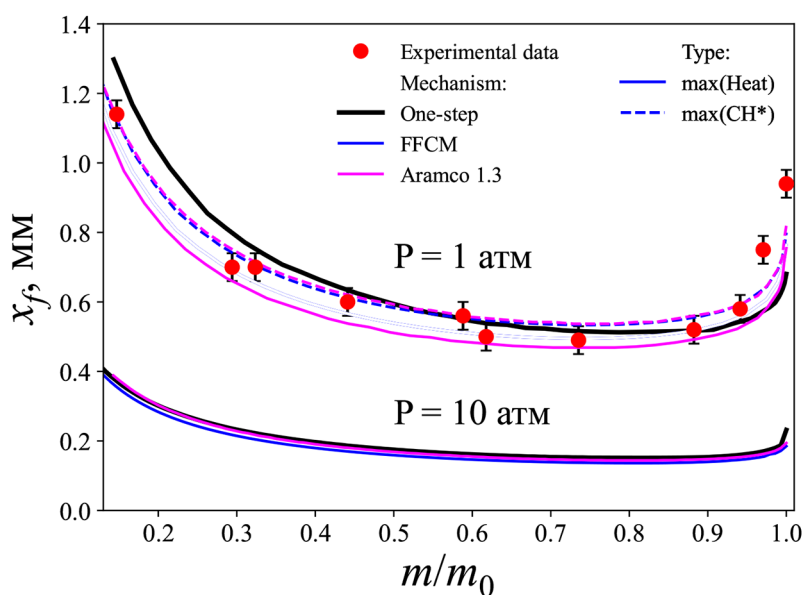


Рис. 1: Зависимость положения фронта пламени от нормированного массового расхода для  $\varphi = 0.95$ . Линии снизу соответствуют давлению 10 атм, линии и точки сверху – давлению 1 атм. Сплошными линиями показана координата фронта, определенная по максимуму суммарного тепловыделения, а пунктирными линиями по максимуму радикалов  $\text{CH}^*$ .

Структура фронта метан-воздушного пламени, стабилизированного на плоской пористой горелке, продемонстрирована на рис. 2, где показано распределение температу-

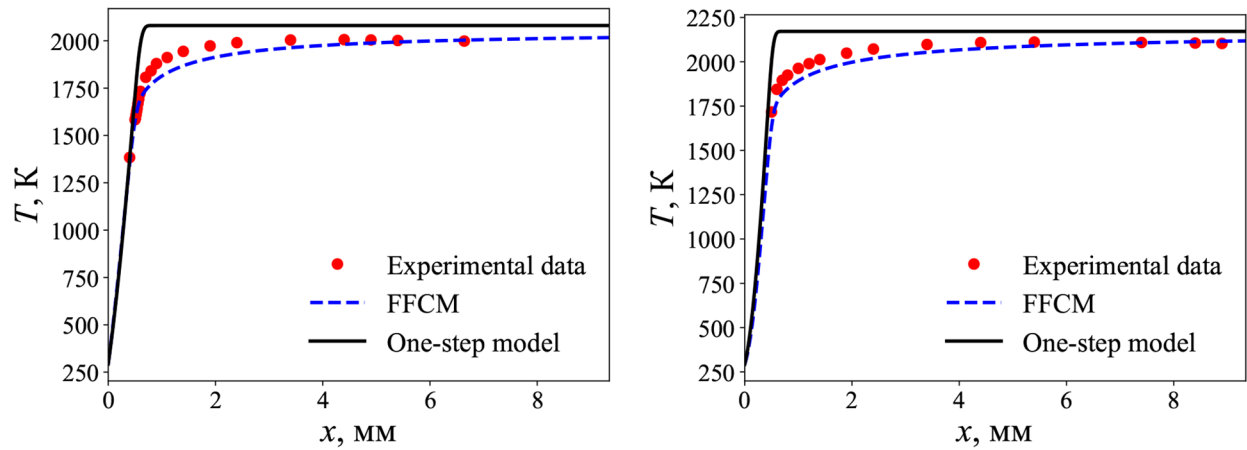


Рис. 2: Профили температуры для  $\varphi = 0.95$  при массовых расходах  $0.21 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})$  (слева) и  $0.31 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})$  (справа). Точками представлены экспериментальные данные, а сплошной синей и зелеными кривыми – результаты расчетов с помощью одностадийной модели и механизма FFCM, соответственно.

ры в зависимости от расстояния от поверхности горелки для  $\varphi = 0.95$  при давлении 1 атм и двух значений массовых расходов  $m = 0.21 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})$  и  $m = 0.31 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})$ . Отметим, что в нормированных величинах это соответствует  $m/m_0 = 0.5$  и  $0.74$ . Красными кружками на графиках показаны данные, полученные экспериментально методом тонковолоконной пирометрии в работе [26]. Сплошные зеленые линии соответствуют результатам расчетов, проведенных с использованием механизма FFCM в данной работе. В целом, предсказания, полученные с помощью детального механизма горения, очень хорошо согласуются с экспериментальными данными. Сплошная синяя кривая построена на основе данных вычислений в модели с одностадийной глобальной кинетикой. Видно, что в зоне прогрева, вблизи поверхности горелки ( $x < 0.5 \text{ мм}$ ), и в зоне продуктов, на большом расстоянии от горелки ( $x > 8 \text{ мм}$ ), распределение температуры хорошо количественно описывается моделью с одностадийной реакцией горения. Ошибка в предсказании  $T_b$  составляет порядка 70 К. В зоне реакции ( $x < 5 \text{ мм}$ ) экспериментальные и численные данные, полученные в рамках детальных механизмов реакции, демонстрируют гораздо более плавный рост температуры с увеличением расстояния от горелки по сравнению с результатами расчетов с одностадийной реакцией горения. Это связано с медленными реакциями выхода CO и CO<sub>2</sub> к равновесным концентрациям в зоне продуктов. Подобная проблема одностадийной модели имеет место и в случае свободного пламени [21]. Хотелось бы отметить, что подобное соответствие

между экспериментальными и численными данными наблюдается во всем диапазоне  $\varphi$ , для которого разработан рассматриваемый механизм ( $0.7 \leq \varphi \leq 1.3$ ).

*Заключение.* В данной работе численно верифицируется одностадийный механизм горения метан-воздушной смеси, предложенный в работе [21] и построенный на основании экспериментальных данных для свободного пламени. В качестве исследуемой конфигурации взято пламя, стабилизированное на плоской пористой горелке, а в качестве основных характеристик пламени рассмотрены зависимости высоты и температуры пламени от массового расхода смеси. Было продемонстрировано, что оба параметра, полученные численно в рамках одностадийной модели, хорошо количественно согласуются с доступными экспериментальными данными и результатами вычислений, проведенных с помощью детальных механизмов реакции. Несмотря на то что одностадийная модель получена на экспериментальных данных при давлениях от 1 до 6 атм, она сохраняет свою предсказательную способность вплоть до давлений порядка 10 атм. Структура пламени, получаемая в рамках одностадийной модели, имеет существенно более узкую зону реакции, чем это следует из экспериментальных и численных расчетов, проведенных с помощью детальных механизмов. Это связано с тем, что она не учитывает достаточно медленные процессы выхода CO и CO<sub>2</sub> на равновесные концентрации в продуктах горения. Дальнейшее совершенствование модели может быть проведено с учетом этих процессов в виде второй реакции окисления CO до CO<sub>2</sub>.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Y. B. Zel'dovich, G. I. Barenblatt, V. B. Librovich, G. M. Makhviladze, *Mathematical theory of combustion and explosions* (Consultants Bureau, New York, NY, 1985).
- [2] P. J. Linstrom, W. G. Mallard, NIST Chemistry Webbook: NIST Standard Reference Database Number 69. National Institute of Standards and Technology (U.S.), Gaithersburg MD, 20899, (retrieved October 29, 2024), 2024. DOI: 10.18434/T4D303. <http://webbook.nist.gov/>.
- [3] D. L. Baulch, C. T. Bowman, C. J. Cobos, et al., *Journal of physical and chemical reference data* **34**(3), 757 (2005). DOI: 10.1063/1.1748524. <https://doi.org/10.1063/1.1748524>.
- [4] V. I. Babushok, A. N. Dakdancha, *Combustion, Explosion and Shock Waves* **29**(4), 464 (1993). DOI: 10.1007/BF00782974.

- [5] G. V. Grenkin, A. Yu. Chebotarev, V. I. Babushok, S. S. Minaev, *Mathematical Modelling of Natural Phenomena* **13**(6), 50 (2018). DOI: 10.1051/mmnp/2018048.
- [6] A. D. Zakharov, R. V. Fursenko, S. S. Minaev, *Combustion Theory and Modelling* **27**(2), 153 (2023). DOI: 10.1080/13647830.2022.2153743.
- [7] T. P. Coffee, A. J. Kotlar, M. S. Miller, *Combustion and flame* **54**(1-3), 155 (1983). DOI: 10.1016/0010-2180(83)90029-9.
- [8] T. P. Coffee, A. J. Kotlar, M. S. Miller, *Combustion and Flame* **58**(1), 59 (1984). DOI: 10.1016/0010-2180(84)90078-6.
- [9] Wei Mei, Min Li, Huahua Xiao, *Combustion Science and Technology* 1–21 (2025). DOI: 10.1080/00102202.2025.2520795.
- [10] S. Minaev, E. Sereshchenko, V. Gubernov, *Combustion Theory and Modelling* **28**(4), 393 (2024). DOI: 10.1080/13647830.2024.2310319.
- [11] D. Rodríguez-Gutiérrez, R. Gómez-Miguel, E. Fernández-Tarrazo, M. Sánchez-Sanz, *Bulletin of the Lebedev Physics Institute* **52**(S2), S213 (2025). DOI: 10.3103/S1068335624602565.
- [12] A. Moroshkina, E. Dats, E. Sereshchenko, A. Ponomareva, et al., *Combustion, Explosion and Shock Waves* **61**(5), 699 (2025). DOI: 10.1134/S0010508225700376.
- [13] S. Yakush, O. Semenov, M. Alexeev, *Energies* **16**(3), 1516 (2023). DOI: 10.3390/en16031516.
- [14] Songbai Yao, Xinmeng Tang, Wenwu Zhang, *Physics of Fluids* **35**(3), 031712 (2023). DOI: 10.1063/5.0144920.
- [15] Hrvoje Jasak, *Journal of Naval Architecture and Ocean Engineering* **1**(2), 89 (2009). ISSN 2092-6782. DOI: 10.2478/IJNAOE-2013-0011. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2092678216303879>.
- [16] D. G. Goodwin, H. K. Moffat, I. Schoegl, et al., *Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes*. <https://www.cantera.org>, 2024. Version 3.1.0.
- [17] V. Arutyunov, A. Belyaev, A. Arutyunov, et al., *Processes* **10**(11), 2177 (2022). DOI: 10.3390/pr10112177.
- [18] W. E. Kaskan, *Symposium (International) on Combustion* **6**(1), 134 (1957). DOI: 10.1016/S0082-0784(57)80021-6.
- [19] A. Moroshkina, A. Ponomareva, V. Mislavskii, et al., *Fire* **7**(2), 42 (2024). DOI: 10.3390/fire7020042.

- [20] A. Moroshkina, S. Babina, A. Ponomareva, et al., *Combustion and Flame* **280**, 114336 (2025). DOI: 10.1016/j.combustflame.2025.114336.
- [21] A. Moroshkina, A. Ponomareva, E. Sereshchenko, et al., One step model of methane combustion for normal and elevated pressure, 2026. submitted to *Combustion Theory and Modelling*.
- [22] Chong-Wen Zhou, Yang Li, Ultan Burke, et al., *Combustion and Flame* **197**, 423 (2018). DOI: 10.1016/j.combustflame.2018.08.006.
- [23] Yue Zhang, Wendi Dong, Laurien Vandewalle, et al., Foundational Fuel Chemistry Model Version 2.0 (FFCM-2), 2023. <https://web.stanford.edu/12group/haiwanglab/FFCM2>.
- [24] S. Nechipurenko, T. Miroshnichenko, N. Pestovskii, et al., *Combustion and Flame* **213**, 202 (2020). DOI: 10.1016/j.combustflame.2019.12.016.
- [25] A. Moroshkina, E. Sereshchenko, V. Mislavskii, et al., *Combustion and Flame* **270**, 113755 (2024). DOI: 10.1016/j.combustflame.2024.113755.
- [26] A. D. Moroshkina, A. A. Ponomareva, V. V. Mislavskii, et al., *Combustion Theory and Modelling* **27**(7), 909 (2023). DOI: 10.1080/13647830.2023.2245380.

Поступила в редакцию 27 апреля 2026 г.

После доработки 7 июня 2026 г.

Принята к публикации 8 июня 2026 г.