

УДК 621.43.056+519.6

Д. А. ДОЛМАТОВ, М. ХАДЖИВАНД

*Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «ХАИ», Украина***МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОРЕНИЯ ГЕТЕРОГЕННОЙ СМЕСИ ПРИ ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ СТИМУЛЯЦИИ**

Статья содержит результаты численного моделирования высокотемпературного горения гексано-гептановой смеси в кислородо-озонной атмосфере при повышенном содержании активных частиц. В качестве дополнительной стимуляции пламени используются: а) скачок концентрации возбужденных атомов кислорода; б) скачок скорости расщепления углерод-углеродных связей без рассмотрения природы возникновения данных эффектов. Получены поля параметров, свидетельствующие о возникновении нестационарного горения и интенсификации процесса образования гидроксильных радикалов при определенных условиях горения.

Ключевые слова: *возбужденная частица, скачок концентрации, скорость реакции, механизм окисления, нестационарное горение.*

Введение и постановка задачи

Исследование высокотемпературных пламен сложной кинетической схемой и аномальным содержанием возбужденных частиц, помимо поиска путей оптимизации их практического использования и изучения возможностей стимуляции пламени для улучшения характеристик устройств, в качестве первоочередных задач включает наработку большой фундаментальной базы знаний о физико-химических процессах в зоне стимуляции и ее непосредственной окрестности [1]. Данный аспект особенно важен с учетом того, что непосредственные практические эксперименты с замерах в зоне горения зачастую затруднены вследствие высокой температуры, больших градиентов концентраций (и, во многих случаях, частоты их изменения), короткого времени существования некоторых характерных реагентов и их слабой различимости.

Поскольку природа формирования определенных возмущающих факторов в стимулированном пламени в настоящее время изучена сравнительно слабо и может существенно различаться при различных условиях горения, актуальной задачей является численное моделирование стимулированных пламен с увеличенным содержанием характерных компонент и/или повышенной скоростью детерминирующих реакций без глобального моделирования всей зоны горения, что существенно снижает требования к вычислительным мощностям. Важным ограничивающим фактором при этом является соблюдение ограничений, накладываемых природой горения на связанные с возмущающими факторами реакции и реагенты, во избежание возникновения

нефизических процессов и составов смеси. В настоящей работе рассматриваются традиционные для стимулированных пламен [1, 2, 3] возбуждения пламени за счет: а) увеличения концентрации возбужденных атомов кислорода, весьма характерных как для ствола разрядов различного типа, так и для зоны вторичной ионизации, а также для некоторых случаев термического горения с аномальным сдвигом распределения частиц по энергоуровням; б) прироста скорости расщепления предельных углерод-углеродных связей по сравнению с нормальным термическим горением, что свойственно зонам начального горения с высоким содержанием активных возбужденных частиц, ионов, электронов. В качестве объекта исследования выбрано горение гексано-гептановой смеси в смеси состава $80\% \text{O}_2 + 20\% \text{O}_3$, поскольку высокая концентрация озона позволяет моделировать скачок возбужденного атомарного кислорода без дополнительной проверки спектра возбужденных частиц, что было бы неизбежно при строго электрохимической природе возмущения вследствие высокой энергии свободных электронов разряда для обеспечения требуемых уровней возбуждения – и, как следствие, большого количества побочных возбужденных частиц.

Математическая модель и кинетическая схема процесса

В качестве математической модели используется система уравнений Навье – Стокса для реагирующей среды с различными веществами в различном энергетическом состоянии [4, 5], что необходимо для корректной записи диффузионного чле-

на уравнения неразрывности J_D :

$$J_D = \frac{\partial}{\partial x^j} \left(D_i^M \frac{\bar{\rho} \omega_i}{v_i} \frac{\partial v_i}{\partial x^j} - \frac{D_i^T}{T} \frac{\partial T}{\partial x^j} \right), \quad (1)$$

где второе слагаемое соответствует термодиффузионному переносу массы.

Поскольку исследование предполагает моделирование процессов с высокой детализацией распределения частиц по уровням возбуждения, то для определения мгновенной скорости m -ой реакции

$$v_m = \frac{\partial c_n}{\partial t} = k_m \prod c_p, \quad (2)$$

используются две различные формы записи константы скорости в форме Аррениуса. Для реакций с прогнозно-нормальным распределением участвующих реагентов по уровням возбуждения как функции температуры, применяется традиционная форма с корректирующим степенным коэффициентом [6]:

$$k_m = A_m T^{b_m} e^{-E_m/RT}. \quad (3)$$

В реакциях, для которых ожидается аномальное смещение реагентов и значимое количество реагентов в возбужденном состоянии, в особенности – для реакций с участием возбужденного O, используются собственные константы для всего спектра состояний без температурной коррекции:

$$k'_m = A'_m e^{-E'_m/RT}, \quad (4)$$

где аррениусов коэффициент скорости A'_m и энергия активации E'_m определены для каждого состояния как единственного [7].

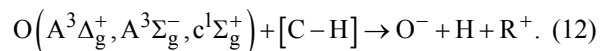
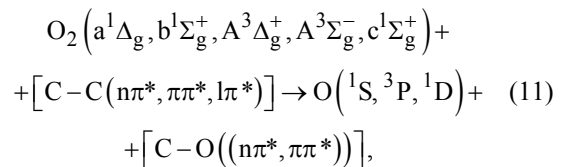
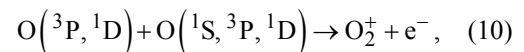
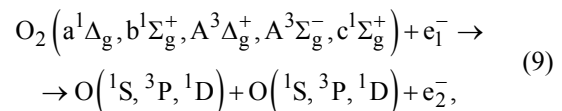
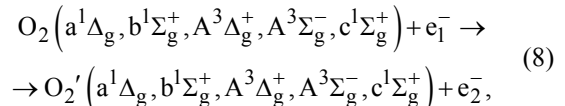
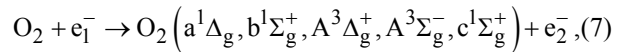
Фильтрация кинетической схемы выполняется по коэффициентам чувствительности путем решения системы уравнения для всего генерального баланса [6, 8]:

$$\frac{\partial}{\partial k_m} \left(\frac{\partial c_n}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial k_m} f_n(k_m, c_n), \quad (5)$$

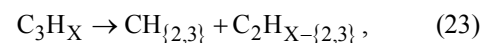
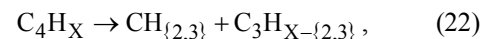
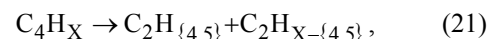
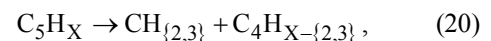
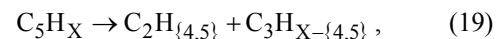
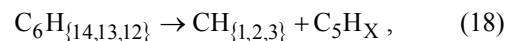
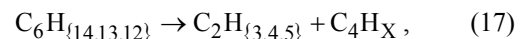
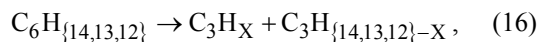
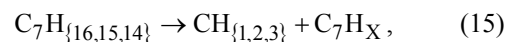
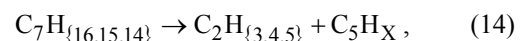
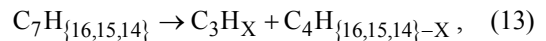
$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial c_n}{\partial k_m} \right) = \left(\frac{\partial f_n}{\partial k_q} \right)_{c_n, k_q \neq m} + \sum_{p=1}^{i_{\max}} \left(\frac{\partial f_r}{\partial c_p} \right)_{c_p \neq n, k_r} \left(\frac{\partial c_p}{\partial k_r} \right)_{k_r \neq m}, \quad (6)$$

причем критерий значимости для реакций, сопряженных с возмущающими факторами, ужесточен в 5 раз по сравнению с общим фильтром.

В численном эксперименте с увеличенной концентрацией возбужденного O, помимо внешнего возмущения, учитываются электрохимические реакции производства – расходования возбужденных частиц, свойственные процессам с повышенным содержанием атомарного кислорода вблизи разряда:



При исследовании влияния скачка скорости расщепления связей C – C использовалось увеличение скоростей следующих реакций:



при этом, разумеется, в (13) – (23) отсутствуют соединения с кратными связями C – C – только расщепленные алкильные радикалы с 1 и более отсутствующим водородным атомом.

Скачок концентрации возбужденного атомарного кислорода

Атомарный кислород даже в S_0 -состоянии является сильнейшим окислителем для углеводородов и продуктов их распада, а с повышением уровня возбуждения его реакционная способность значительно повышается. Таким образом, стимуляция пламени возбужденным O при практически любых условиях гарантированно приводит к увеличению скорости горения и температуры пламени. Интерес представляют, в первую очередь, изменения в кинетическом механизме горения (на данном этапе исследований – кислородно-озоновом, т.к. присутствие атмосферного азота существенно усложняет кинетическую схему и может приводить к формированию локальных экстремумов воздействий различного типа) и связь количественных характеристик пламени с профилем стимуляции – дополнительными долями возбужденного кислорода и типами возбужденных атомов.

На рис. 1 – 4 представлены результаты моделирования различных параметров горения при варьируемых характеристиках стимуляции и температуре зоны стимуляции. Под относительной интенсивностью реакций возбужденных частиц в данном случае понимается доля реакций с участием возбужденных частиц от общего количества реакций в единицу времени.

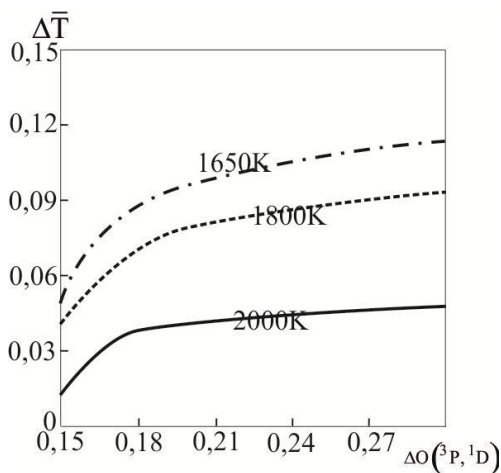


Рис. 1. Относительный прирост температуры

Как видно из рис. 2, до определенных значений дополнительных концентраций возбужденного O (определяемых температурой зоны горения) процесс горения остается стационарным. Затем происходит развитие нестационарного процесса, заключающегося в колебаниях полей температуры и концентраций контрольных веществ (гидроксидов, атомарного кислорода, озона и молекул воды) с амплитудой до

10% (T) и 65% (концентрации, максимальные значения амплитуды колебаний – O_3).

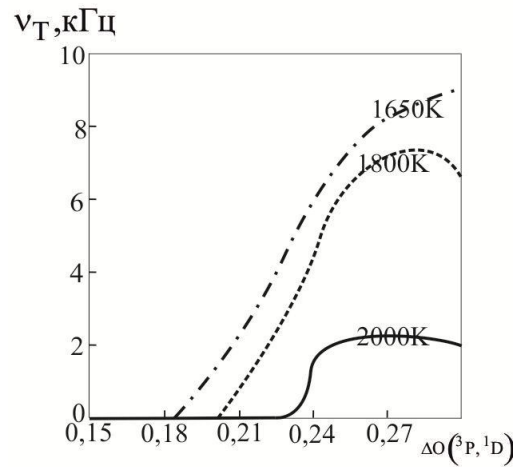


Рис.2. Частота пульсаций температуры

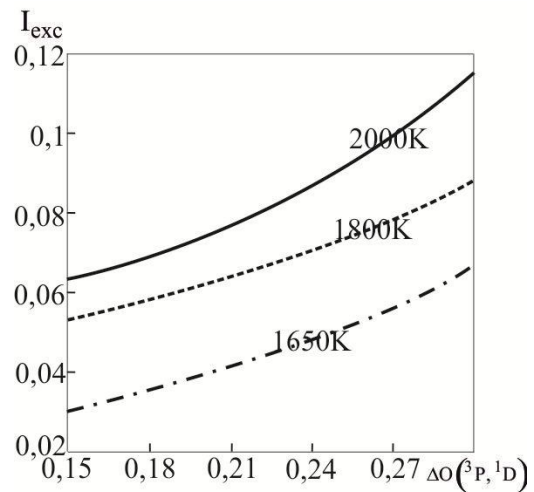


Рис. 3. Относительная интенсивность реакций возбужденных частиц

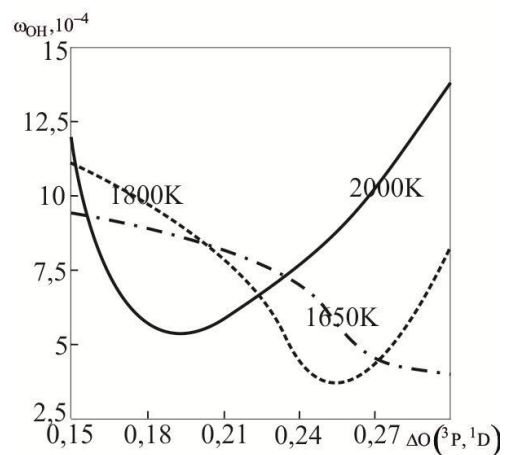


Рис. 4. Молярная доля OH

Наиболее интересным эффектом следует признать разнородность проявляющейся нестационарности при различных температурах зоны горения – так, при 1800К и 2000К наблюдается максимум частоты колебаний при дополнительной доле возбужденного кислорода 0,275 – 0,285, в то время как при 1650 К в исследуемом диапазоне имеет место практически монотонный рост v_T . Также важное значение имеет выявленная разнородность воздействия возмущений на молярную долю ОН (см. рис. 4), причем для $T=2000\text{K}$ при значительном приросте $O(^3P, ^1D)$ наблюдается увеличение ω_{OH} выше базовых значений.

Скачок скорости расщепления углеродных связей

Несмотря на то, что скорость расщепления связей С – С при гетерогенном горении средних и тяжелых углеводородов слишком высока для того, чтобы служить скоростьюопределяющей стадией процесса, дополнительное увеличение данной величины приводит к росту концентраций легких алкильных радикалов в зоне основного горения, что может способствовать изменению параметров и кинетической схемы. В частности, снижение пространственной затрудненности атаки на водородные атомы по мере уменьшения углеродного числа может способствовать увеличению концентраций водородсодержащих молекул и радикалов ОН, HO_2 , H_2O , СНО и некоторых других, играющих важную роль в механизмах окисления.

На рис. 5 – 6 представлены результаты моделирования процессов, протекающих в первичной зоне горения при увеличении скорости разрушения связей С – С по алгоритму (13) – (23) на 50%. В качестве варьируемого параметра выбрана остаточная молярная доля углеводородов (включая радикалы) в моделируемой зоне. Распределение реагентов по уровням возбуждения, в отличие от предыдущего численного эксперимента, принято нормальным, константы скорости рассчитаны по (3).

Как видно из сравнения рис. 6 и 4, даже минимальная стимуляция смеси возбужденным кислородом приводит к гораздо большему производству гидроксильных радикалов, чем прирост скорости расщепления углеродных связей. Вместе с тем следует отметить, что для низких температур при стимуляции $O(^3P, ^1D)$ очевидно конкурирующие реакции существенно преобладают над реакциями образования ОН, что выражается в падении молярной доли ОН (рис. 4) и при воздушном горении представляет опасность увеличения эмиссии NO. Напротив, рост скорости расщепления С – С ведет к уве-

личению доли гидроксильных в смеси (в особенности в относительно богатых зонах, см. рис. 6) и, таким образом, является предпочтительным способом стимуляции при низких температурах пламени.

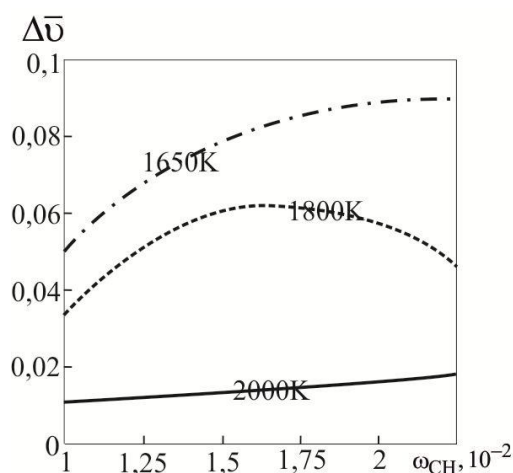


Рис. 5. Относительное изменение скорости горения

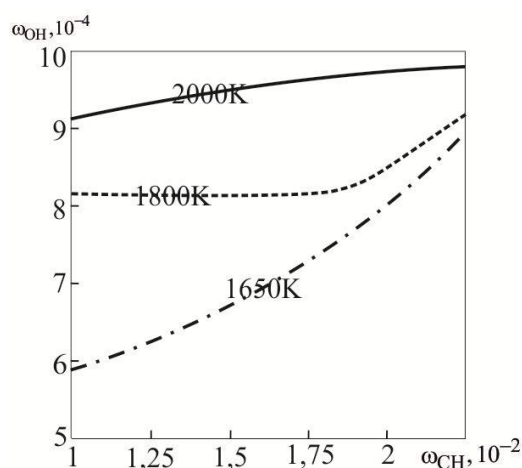


Рис. 6. Молярная доля ОН

Для дальнейшего развития теории и практического применения стимулированного горения необходимо проведение последующих численных экспериментов по изучению влияния стимуляции описанных типов на структуру пламени, а также разработка практических способов достижения возмущающих воздействий с заданными параметрами.

Литература

1. Битюрин, В. А. Исследование горения углеводородного топлива, стимулированное неравновесными плазменными образованиями в воздушном высокоскоростном потоке. Законы горения [Текст] / В. А. Битюрин, А. И. Климов / под общ. ред. Ю. В. Полежаева. – М. : Энергомаш, 2006. – 352 с.

2. Galley, D. *Plasma-enhanced combustion of lean premixed air-propane turbulent flame using a nanosecond repetitively pulsed plasma [Text]* / D. Galley, G. Pilla, D. Lacosta // *AIAA 2005-1193. – Proc. 43rd AIAA Aerospace sciences meeting&exhibit, 2005. – P. 1012 – 1014.*

3. Долматов, Д. А. *Развитие нестационарного горения при химической стимуляции бедного пламени [Текст]* / Д. А. Долматов, А. В. Кукурудза, М. Хадживанд // *Авиационно-космическая техника и технология. – 2013. – № 1/98. – С. 61 -65.*

4. *Химия горения [Текст]* / под ред. У. Гарднера. – М. : Мир, 1988. – 865 с.

5. Райзер, Ю. П. *Физика газового разряда [Текст]* / Ю. П. Райзер. – Долгопрудный : Изд. Дом Интеллект, 2009. – 736 с.

6. Варнати, Ю. *Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ [Текст]* / Ю. Варнати, У. Маас, Р. Диббл. – М. : ФИЗМАТ-ЛИТ, 2006. – 352 с.

7. *LEEDS – Reaction Kinetic Database [Text]*. – University of Leeds, 2004. – 890 p.

Поступила в редакцию 07.06.14, рассмотрена на редколлегии 14.06.214

Рецензент: д-р техн. наук, проф., проф. каф. конструкции авиационных двигателей Д. Ф. Симбирский, Национальный аэрокосмический ун-т им. Н. Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Харьков.

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ГОРІННЯ ГЕТЕРОГЕННІЇ СУМІШІ ПРИ ДОДАТКОВІЙ СТИМУЛЯЦІЇ

Д. А. Долматов, М. Хадживанд

Стаття містить результати чисельного моделювання високотемпературного горіння гексано-гептанової суміші у киснево-озоновій атмосфері при підвищеному вмісті активних часток. В якості додаткової стимуляції полум'я використано: а) стрибок концентрації збуджених атомів кисню; б) стрибок швидкості розщеплення вуглець-вуглецевих зв'язків без уточнення причин виникнення згаданих ефектів. Отримано поля параметрів, що свідчать про виникнення нестационарного горіння та інтенсифікації процесу утворення гідроксильних радикалів за певних умов.

Ключові слова: збуджена частинка, стрибок концентрації, швидкість реакції, механізм окислення, нестационарне горіння.

SINGLE HYDROCARBON DROP COMBUSTION IN THE PRESENCE OF STATIONARY ARC

D. A. Dolmatov, M. Hajivand

The article contains the results of the numerical modeling of hexane – heptanes mixture high temperature oxygen – ozone combustion in presence of additional active particles. There were used two different flame stimulation methods: excited atomic oxygen concentration jump and increased carbon-carbon bond dissociation reaction rate; without determination of stimulation processes' sources. The parameters' fields were received, the transient combustion process and hydroxyl creation intensification appearance were discovered.

Key words: excited particle, concentration jump, reaction rate, oxidation mechanism, transient combustion.

Долматов Дмитрий Анатольевич – канд. техн. наук, доцент кафедры теории авиационных двигателей Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «ХАИ», Харьков, Украина, e-mail: ditrihantelson@yandex.ru.

Хадживанд Масуд – аспирант кафедры конструкции авиационных двигателей, Национальный аэрокосмический университет им. Н. Е. Жуковского «ХАИ», Харьков, Украина.