

БАЗА ДАННЫХ ДЛЯ ХАРАКТЕРИСТИК ЛАМИНАРНОГО ГОРЕНИЯ Н-ГЕПТАНА

**А. А. Беляев¹, В. Я. Басевич¹, Ф. С. Фролов¹,
С. М. Фролов¹, Б. Басара², М. Суффа²**

¹ИХФ РАН

г. Москва, Россия

²AVL LIST GmbH

г. Грац, Австрия

В настоящее время в ИХФ РАН разрабатывается эффективный алгоритм многомерного численного моделирования турбулентного горения газов и перехода горения в детонацию, который позволит одновременно рассматривать фронтальные и объемные химические реакции в турбулентном газовом потоке [1]. Важную роль в реализации алгоритма будет играть база данных для характеристик ламинарного горения смесей различных топлив при разных начальных температурах, давлениях и составах. Цель данной работы — создание базы данных для характеристик ламинарного горения однородных воздушных смесей н-гептана на основе решения задачи о структуре плоского ламинарного пламени с использованием всесторонне проверенного глобального кинетического механизма.

К характеристикам ламинарного горения, включаемым в базу данных, относятся:

- нормальная скорость распространения ламинарного пламени u_n ;
- концентрация «быстрого» оксида азота NO, образованного в ламинарном пламени;
- концентрация остаточного кислорода $[O_2]$ в точке зоны реакции пламени, где достигается максимум «быстрого» NO;
- максимальная концентрация оксида углерода [CO] в зоне реакции ламинарного пламени;

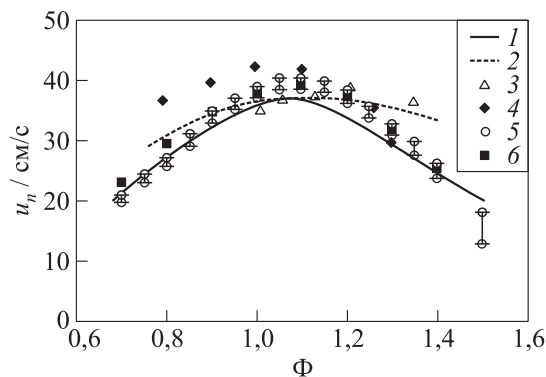


Рис. 1 Зависимость скорости ламинарного пламени в н-гептано-воздушной смеси от КИГ при $T_0 = 293\text{--}300\text{ K}$, $p = 1\text{ атм}$ и $\text{EGR} = 0$: 1 — расчет данной работы, 2 — расчет [7]; экспериментальные точки: 3 — [8], 4 — [9], 5 — [10], 6 — [11]

— концентрация «сажи» (углерода [C]) в зоне реакции ламинарного пламени.

Для решения задачи о распространении ламинарного пламени в гомогенной газовой смеси н-гептана с воздухом использовали вычислительную программу [2]. Эта программа позволяет рассчитать скорость стационарного распространения пламени u_n , а также пространственные распределения температуры и концентраций всех химических компонентов в зоне горения. В расчетах применяли глобальный кинетический механизм окисления н-гептана с учетом образования «быстрого» NO, CO и сажи, опубликованный в [3–6].

На рис. 1 показано сравнение расчетных (эта работа и [7]) и измеренных в [8–11] значений скорости ламинарного пламени в н-гептано-воздушных смесях с разным коэффициентом избытка горючего (КИГ), определяемым по формуле

$$\Phi = \frac{X_F/X_{O_2}}{(X_F)_{st}/(X_{O_2})_{st}},$$

где X_F и X_{O_2} — мольные доли горючего и кислорода соответственно (индекс st относится к стехиометрической смеси). Видно удовлетво-

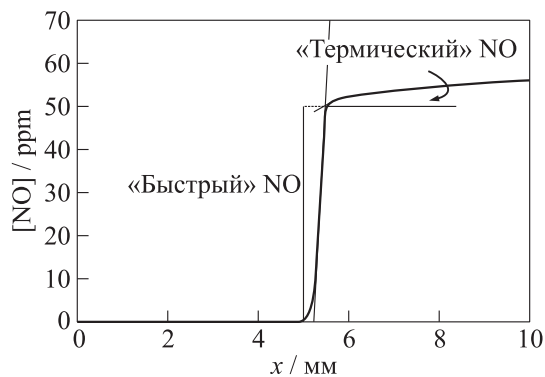


Рис. 2 Расчетное распределение мольной доли NO в зоне реакции ламинарного пламени в стехиометрической н-гептано-воздушной смеси при $T_0 = 293$ К, $p = 1$ атм и $EGR = 0$. Показано, как определялась концентрация «быстрого» NO в зоне горения

рительное согласие результатов. Проводить сопоставление расчетных значений u_n с экспериментом при повышенных температурах и давлениях весьма затруднительно вследствие того, что такие данные в литературе практически отсутствуют. Тем не менее, расчетное значение скорости $u_n = 186$ см/с, полученное при начальной температуре смеси $T_0 = 900$ К и давлении $p = 10$ атм, хорошо согласуется с измеренной в [12] (при таких же условиях) видимой скоростью распространения пламени в стехиометрической изооктано-воздушной смеси $U = 660$ см/с, если учесть, что коэффициент расширения такой смеси равен 3,11, а скорость ламинарного горения изооктана мало отличается от скорости горения н-гептана.

На рис. 2 на примере расчетного распределения мольной доли NO в зоне реакции ламинарного пламени в стехиометрической н-гептано-воздушной смеси при $T_0 = 293$ К и $p = 1$ атм показано, как определялась концентрация «быстрого» NO в зоне горения. Отчетливо видно, что концентрация NO в пламени возрастает в два этапа: сначала наблюдается очень быстрый рост со скоростью около 100 ppm/мм (приблизительно до 50 ppm на «толщине» пламени $\Delta x \approx 0,5$ мм), который затем сменяется медленным накоплением со скоростью около 1 ppm/мм. Как известно, первый этап связан с

образованием «быстрого» оксида азота вследствие реакций между молекулярным азотом и радикалами CN и CH_2 , а второй — с образованием «термического» NO .

На основе расчетов составлены подробные таблицы перечисленных выше характеристик ламинарного горения воздушных смесей n -гептана в широком диапазоне начальной температуры $293 \leq T_0 \leq 900$ К, давления $1 \leq p \leq 100$ атм и КИГ $\Phi_L \leq \Phi \leq \Phi_R$, где Φ_L и Φ_R — значения КИГ на бедном и богатом концентрационных пределах распространения пламени соответственно. Кроме того, указанные характеристики определялись для n -гептано-воздушных смесей, в разной степени разбавленных продуктами горения (остаточными газами). Предполагалось, что остаточные газы состоят из CO_2 , H_2O , O_2 и N_2 , причем концентрации этих компонентов в остаточных газах такие же, как в продуктах горения исследуемой смеси. Объемное содержание остаточных газов EGR изменяли в пределах $0\% \leq \text{EGR} \leq 60\%$.

В качестве примера приведены расчетные значения скорости ламинарного пламени (табл. 1) и данные по концентрации «быстрого» NO (табл. 2) при давлении $p = 10$ атм для разных значений Φ , T_0 и EGR. Аналогичные таблицы построены для давлений $p = 1, 3, 40$ и 100 атм. Прочерки в ячейках таблицы означают, что стационарное решение задачи о структуре ламинарного пламени при соответствующих условиях не найдено. В определенной мере эти условия соответствуют концентрационным пределам распространения пламени.

Как и следовало ожидать, с ростом температуры T_0 и уменьшением EGR скорость пламени при прочих равных условиях увеличивается, а концентрационные пределы распространения пламени расширяются (см. табл. 1). Концентрация «быстрого» NO достигает максимума при Φ , близком к 1,2, практически не зависит от начальной температуры и снижается с увеличением EGR (см. табл. 2).

Таким образом, на основе решения задачи о структуре плоского ламинарного пламени создана база данных для характеристик ламинарного горения гомогенных воздушных смесей n -гептана в широком диапазоне начальной температуры $293 \leq T_0 \leq 900$ К, давления $1 \leq p \leq 100$ атм, КИГ $\Phi_L \leq \Phi \leq \Phi_R$ и концентрации остаточных газов $0\% \leq \text{ERG} \leq 60\%$. Приведены примеры таблиц для нормальной скорости распространения пламени и концентрации «быстрого»

Таблица 1 Скорость ламинарного пламени (см/с) в смеси C_7H_{16} -воздух, $p = 10$ атм

T_0 , К	EGR, %	Φ								
		0,6	0,64	0,65	0,8	1,0	1,2	1,55	2,5	3,2
300	0	—	—	7,6	12	16	15	7,4	5,3	—
	20	—	—	2,6	4,7	6,5	6,0	2,9	2,2	—
	40	—	—	0,5	1,2	1,6	1,4	0,68	—	—
	60	—	—	—	—	—	—	—	—	—
450	0	0,57	0,6	0,65	0,8	1,0	1,2	1,55	3,0	3,6
	20	—	11	19	28	34	32	16	10	—
	40	—	4,5	8,1	13	17	15	6,9	4,8	—
	60	—	0,99	2,0	4,5	6,6	5,2	2,0	1,5	—
600	0	0,5	0,55	0,65	0,8	1,0	1,2	1,55	3,5	3,95
	20	—	19	40	54	63	58	28	17	—
	40	—	8,7	18	25	30	29	14	9,0	—
	60	—	2,5	6,0	9,6	12	11	4,7	3,4	—
750	0	0,43	0,5	0,65	0,8	1,0	1,2	1,55	4,0	4,35
	20	—	25	80	101	109	101	49	27	—
	40	—	12	39	53	58	52	26	16	—
	60	—	4,3	16	24	26	23	10	7,1	—
900	0	0,36	0,4	0,68	0,8	1,0	1,2	1,55	4,5	4,7
	20	—	32	157	185	186	168	80	39	—
	40	—	18	83	99	103	85	45	25	—
	60	—	7,8	38	47	50	39	20	—	—

оксида азота NO при $p = 10$ атм. Кроме этих характеристик получены обширные данные по концентрации остаточного кислорода $[O_2]$, максимальной концентрации оксида углерода $[CO]$ и концентрации «сажи» (углерода $[C]$) в зоне реакции ламинарного пламени. Аналогичные данные ранее получены для воздушных смесей метана (CH_4), пропана (C_3H_8), изооктана ($i-C_8H_{18}$), н-декана ($C_{10}H_{22}$), н-тетрадекана ($C_{14}H_{30}$), этанола (C_2H_5OH) и водорода (H_2).

Таблица 2 Концентрация «быстрого» NO (ppm) в ламинарном пламени в смеси C_7H_{16} -воздух, $p = 10$ атм

T_0 , К	EGR, %	Φ								
		0,6	0,64	0,65	0,8	1,0	1,2	1,55	2,5	3,2
300	0	—	—	10	17	50	67	1	0,36	—
	20	—	—	8,5	15	44	58	0,7	0,3	—
	40	—	—	8	13	38	49	0,6	—	—
	60	—	—	—	—	—	—	—	—	—
450	0	0,57	0,6	0,65	0,8	1,0	1,2	1,55	3,0	3,6
	20	—	8	9	16	46	67	2	0,24	—
	40	—	7	8	15	41	57	0,8	0,18	—
	60	—	7	7,5	12	35	46	0,6	0,14	—
600	0	0,5	0,55	0,65	0,8	1,0	1,2	1,55	3,5	3,95
	20	—	7	8	16	37	67	3	0,15	—
	40	—	7	7,5	14	31	55	0,9	0,12	—
	60	—	6,5	7	11	26	44	0,6	0,09	—
750	0	0,43	0,5	0,65	0,8	1,0	1,2	1,55	4,0	4,35
	20	—	6	8	15	41	66	5	0,11	—
	40	—	6	8	12	37	58	1,3	0,08	—
	60	—	5,5	7	10	31	48	0,6	0,06	—
900	0	0,36	0,4	0,65	0,8	1,0	1,2	1,55	4,5	4,7
	20	—	6	8	14	44	67	8	0,05	—
	40	—	5,5	7,5	13	40	59	2,3	0,1	—
	60	—	4,5	6,5	12	34	49	0,7	—	—

Работа выполнена в рамках Государственных контрактов № П502 «Разработка методов численного моделирования нестационарного горения и детонации газов и капельных смесей в каналах сложной геометрии и полуограниченных объемах для применения в импульсно-детонационных энергетических установках» и № 02.516.12.6026 «Разработка процесса импульсного детонационного горения природного газа для повышения эффективности работы

энергетических установок», а также при частичной поддержке РФФИ (проекты 08-08-00068 и 07-08-00558) и фирмы AVL LIST GmbH (Австрия).

Литература

1. Иванов В. С., Сметанюк В. А., Фролов С. М. Математическое моделирование начальной стадии перехода горения в детонацию в трубе с гомогенной газовой смесью // Горение и взрыв / Под ред. С. М. Фролова. Вып. 2. — М.: ТОРУС ПРЕСС, 2009. С. 18–21.
2. Беляев А. А., Посвянский В. С. Нахождение нормальной скорости распространения ламинарного пламени (ИХФ АН СССР, 1984), 25 с. // Информ. бюл. Госфонда алгоритмов и программ СССР, 1985. № 3(66). С. 35.
3. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. «Глобальные» кинетические механизмы ламинарных пламен для моделирования турбулентных реагирующих течений. Ч. I. Основной химический процесс тепловыделения // Химическая физика, 1998. Т. 17. № 9. С. 112–128.
4. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. «Глобальные» кинетические механизмы ламинарных пламен для моделирования турбулентных реагирующих течений. Ч. II. Образование окиси азота // Химическая физика, 1998. Т. 17. № 10. С. 71–79.
5. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. «Глобальные» кинетические механизмы ламинарных пламен для моделирования турбулентных реагирующих течений. Ч. III. Промотирование горения // Химическая физика, 1999. Т. 18. № 4. С. 67–74.
6. Евлампиев А. В., Фролов С. М., Басевич В. Я., Беляев А. А. «Глобальные» кинетические механизмы для моделирования турбулентных реагирующих течений. Ч. IV. Диффузионное горение // Химическая физика, 2001. Т. 20. № 11. С. 21–27.
7. Warnatz, J. 1984. Chemistry of high temperature combustion of alkanes up to octane. *20th Symposium (International) on Combustion*. 20(1):845–56.
8. Gerstein, M., O. Levine, and E. L. Wang. 1951. Flame propagation. II. The determination of fundamental burning velocities of hydrocarbons by a revised tube method. *J. Amer. Chem. Soc.* 73(1):418–22.
9. Gibbs, G. I., and H. F. Calcote. 1959. Effect of molecular structure on burning velocity. *J. Chem. Eng. Data* 4(3):226–37.

10. Davis, S. G., and C. K. Law. 1998. Laminar flame speed and oxidation kinetics of iso-octane/air and n-heptane/air flames. *Proc. Combust. Inst.* 27:521–27.
11. Hyang, Y., C. J. Sung, and J. A. Eng. 2004. Laminar flame speeds of primary reference fuels and reformer gas mixtures. *Combust. Flame* 139(3):239–51.
12. Walton, S. M., X. He, B. T. Zigler, M. S. Wooldridge, and A. Atreya. 2007. An experimental investigation of iso-octane ignition phenomena. *Combust. Flame* 150(3):246–62.