

РАСЧЕТ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ И ГОРЕНИЯ КАПЕЛЬ Н-ГЕПТАНА

**В. Я. Басевич, А. А. Беляев, В. С. Посвянский,
С. М. Фролов**

ИХФ РАН
г. Москва, Россия

Методы современной математической теории горения позволяют проводить расчеты самовоспламенения и ламинарного горения газов на основе первых принципов, т. е. без привлечения каких-либо подгоночных коэффициентов, и получать очень хорошее согласие с экспериментальными данными. Такие расчеты проводятся с использованием детальных кинетических механизмов (ДКМ) окисления горючего и баз данных теплофизических свойств веществ. Что касается самовоспламенения и горения жидких капель, то до последнего времени в расчетах этих процессов использовались лишь глобальные или полуэмпирические кинетические механизмы [1–3].

Цель данной работы — математическое моделирование самовоспламенения и горения капель н-гептана с использованием неэмпирической модели [1] и ДКМ окисления горючего. Модель [1] основана на нестационарных дифференциальных уравнениях сохранения вещества и энергии в жидкой и газовой фазах при переменных теплофизических свойствах. В постановке задачи использована концепция многокомпонентной диффузии в газовой фазе и учтено влияние силы поверхностного натяжения жидкости. Модель построена для условий постоянного давления в системе «газ-капля». В работе впервые использовали ДКМ, созданный в ИХФ РАН и содержащий 83 компонента и 623 обратимых реакции. Механизм описывает как многостадийное низкотемпературное окисление с холодными и голубыми пламенами [4], так и высокотемпературное горение н-гептана.

Решали задачу о самовоспламенении и горении сферических капель н-гептана в условиях микрогравитации. Первоначально в

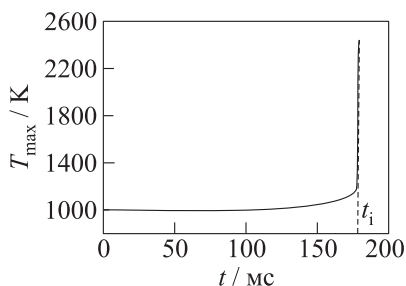


Рис. 1 Расчетная зависимость максимальной температуры газа вокруг капли *n*-гептана от времени при самовоспламенении в воздухе: $T_0 = 1000$ К, $p = 1$ атм, $r_0 = 350$ мкм, $\Phi = 0,46$; вертикальная штриховая линия соответствует расчетной задержке самовоспламенения t_i

воздухе вокруг капли задавали постоянную начальную температуру T_0 , а температуру самой капли принимали равной 293 К. Радиус расчетной области R вокруг капли принимали достаточно большим по сравнению с начальным радиусом капли r_0 , так что в процессе воспламенения физические параметры на границе расчетной области не изменялись. Подчеркнем, что в соответствии с [1] любому выбранному значению R соответствует определенное значение коэффициента избытка горючего Φ в однородной монодисперсной каплевой газозвеси.

По истечении некоторого периода времени — времени задержки самовоспламенения t_i — в газе на некотором расстоянии от поверхности капли происходило самовоспламенение (рис. 1). Задержку самовоспламенения t_i условно определяли как время, при котором скорость нарастания температуры в газе достигала 10^6 К/с. Результаты расчетов задержки самовоспламенения представлены в табл. 1. Кроме расчетных значений в таблице представлены значения t_i , измеренные в [5, 6]. Отличие расчетных и измеренных задержек самовоспламенения не превышает 40%–50%, что при существующей неопределенности кинетических констант в ДКМ можно рассматривать как удовлетворительное согласие результатов.

После самовоспламенения капля начинает гореть: вокруг нее возникает высокотемпературное пламя. На рис. 2 представлена та часть температурной кривой рис. 1, которая непосредственно предшествует самовоспламенению ($t < t_i$) и включает условный момент самовоспламенения ($t = t_i$), переходный период ($t_i < t < t_f$), а также период возникновения высокотемпературного пламени ($t \geq t_f$). Начиная с момента времени $t = t_f \approx 178,5$ мс, макси-

Таблица 1 Задержки самовоспламенения одиночных капель н-гептана при $p = 1$ атм

Радиус капли r_0 , мкм	Температура воздуха T_0 , К	Задержка самовоспламенения t_i , мс	
		эксперимент	расчет
350	1000	≈ 300 [5]	≈ 178
500	960	≈ 580 [6]	≈ 270

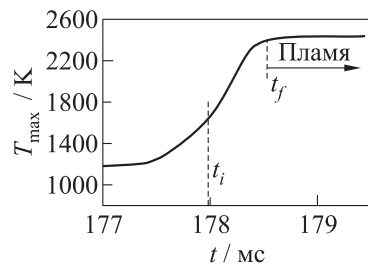


Рис. 2 Часть расчетной температурной кривой рис. 1, которая непосредственно предшествует самовоспламенению ($t < t_i$) и включает условный момент самовоспламенения ($t = t_i$), переходный период ($t_i < t < t_f$), а также период возникновения высокотемпературного пламени ($t \geq t_f$)

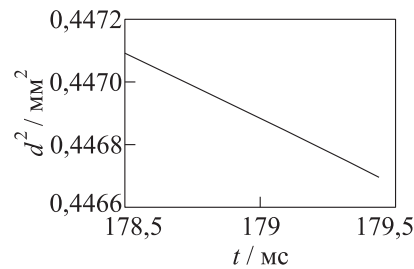


Рис. 3 Расчетная зависимость $d^2(t)$ в начале стационарного периода горения капли н-гептана при $r_0 = 350$ мкм, $T_0 = 1000$ К, $p = 1$ атм и $\Phi = 0,46$. Расчетное значение константы горения $K = 0,43$ мм²/с

мальная температура пламени выходит на стационарное значение, а пламя размещается на некотором определенном расстоянии от поверхности капли: наступает период стационарного горения капли.

По скорости регрессии квадрата диаметра капли $d^2(t)$ можно определить значение так называемой константы горения K , входящей в классическое выражение

$$d^2 = d_0^2 - Kt,$$

где $d_0 = 2r_0$ — начальный диаметр капли. На рис. 3 показана расчетная зависимость $d^2(t)$ в начале стационарного периода горе-

ния капли н-гептана при $r_0 = 350$ мкм, $T_0 = 1000$ К, $p = 1$ атм и $\Phi = 0,46$. Расчетное значение константы горения оказалось равным $K = 0,43$ мм²/с. При той же начальной температуре $T_0 = 1000$ К, но при давлении $p = 20$ атм для капли начального радиуса $r_0 = 30$ мкм получено расчетное значение $K = 1,06$ мм²/с. По литературным данным для н-гептана разные авторы получали экспериментальные значения K от 0,47 до 1,57 мм²/с [7–11]. Полученные расчетные результаты достаточно хорошо согласуются с опытными данными.

Таким образом, впервые проведены расчеты самовоспламенения и горения капель н-гептана с применением ДКМ, описывающего многостадийное низкотемпературное окисление с холодными и голубыми пламенами и высокотемпературное горение. Используемая модель основана на первых принципах и не содержит каких-либо подгоночных параметров. Полученные значения задержек самовоспламенения и константы горения удовлетворительно согласуются с известными экспериментальными данными.

Работа выполнена в рамках Государственного контракта № П502 по Федеральной целевой программе «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг., а также при частичной поддержке РФФИ (проекты 08-08-00068 и 07-08-00558).

Литература

1. Фролов С. М., Басевич В. Я., Посвянский В. С., Сметанюк В. А. Испарение и горение капли углеводородного топлива. IV. Испарение капли с учетом коллективных эффектов // Химическая физика, 2004. Т. 23. № 7. С. 49–58.
2. Фролов С. М., Басевич В. Я. Горение капель // В кн. Законы горения / Под ред. Ю. В. Полежаева. — М.: УНПЦ «Энергомаш», 2006. С. 130–159.
3. Фролов С. М., Басевич В. Я., Фролов Ф. С., Борисов А. А., Сметанюк В. А., Авдеев К. А., Гоц А. Н. Корреляция между испарением и самовоспламенением капли // Химическая физика, 2009. Т. 28. № 5. С. 3–18.
4. Басевич В. Я., Фролов С. М. Кинетика «голубых» пламен при газофазном окислении и горении углеводородов и их производных // Успехи химии, 2007. Т. 76. № 9. С. 927–944.

5. Takei, M., H. Kobayashi, and T. Niioka. 1993. Ignition experiment of a blended-fuel droplet in microgravity field. *Microgravity Sci. Technol.* 6:184–87.
6. Niioka, T., H. Kobayashi, and D. Mito. 1994. Ignition experiment on droplet array in normal and microgravity environments. *IVTAM Symposium on the Mechanics and Combustion of Droplet and Sprays Proceedings*. Tainan. 367–77.
7. Bolt, J. A., and T. A. Boyle. 1956. The combustion of liquid-fuel spray. *Trans. ASME* 78:609–15.
8. Goldsmith, M. 1956. Experiments on the burning of single drops of fuel. *Jet Propul.* 26:172–78.
9. Rex, J. F., A. E. Fuhs, and S. S. Penner. 1956. Interference effects during burning in air for stationary *n*-heptane, ethyl alcohol and methyl alcohol droplets. *Jet Propul.* 26:179–87.
10. Kumagai, S. 1956. Combustion of fuel droplets in a falling chamber with special reference to the effect of natural convection. *Jet Propul.* 26:786.
11. Kanevsky, J. 1956. Interference during burning in air for nine stationary fuel droplets arranged in a body-centered cubic lattice. *Jet Propul.* 26:788.