

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ВОЛН ГОРЕНИЯ ПРИ САМОВОСПЛАМЕНЕНИИ

В. Я. Басевич, Б. В. Лидский, С. М. Фролов

ИХФ РАН
г. Москва, Россия

Самовоспламенение горючих смесей, как правило, происходит с образованием ограниченного количества очагов, от которых волны горения распространяются на всю смесь [1]. Эту закономерность наблюдают уже более 50 лет как при горении газовых (см., например, [2]), так и капельных (см., например, [3]) систем. Классификация режимов распространения волн горения предложена в [4]. В [4] рассматривался общий случай распространения волны горения по среде, реагирующей при начальной температуре, и обсуждались условия самопроизвольного возникновения детонации в условиях, близких к самовоспламенению. В [5–9] классификация [4] подтверждена численными решениями модельных одномерных газодинамических задач. До настоящего времени все работы по моделированию горения в среде, реагирующей при начальной температуре, были направлены на выяснение качественных особенностей процесса. В данной работе предпринята попытка математического моделирования самовоспламенения и горения для количественного сравнения результатов расчетов с экспериментальными данными.

В недавней работе [10] при экспериментальном исследовании самовоспламенения изооктано-воздушных смесей (коэффициент избытка горючего $\Phi = 0,2-1,98$) в адиабатической машине быстрого сжатия (АМБС) при температурах T от 903 до 1020 К и давлениях p_0 от 8,7 до 16,6 атм наблюдали два режима самовоспламенения — почти однородный взрыв по всему объему реактора и бегущую волну горения, максимальная скорость которой достигала 7,8 м/с. В [10] такую волну горения авторы трактовали как волну самовоспламенения и для оценки ее скорости использовали известную формулу Я. Б. Зельдовича [4]:

$$u_{sp} = \left(\frac{\partial \tau_i}{\partial x} \right)^{-1},$$

где τ_i — время задержки самовоспламенения; x — пространственная координата.

Цель данной работы — применение современного математического аппарата газовой динамики сжимаемых реагирующих течений для количественного объяснения эффектов, наблюдавшихся в [10].

Процессы самовоспламенения исследовали, используя вычислительную программу [11], разработанную для решения системы одномерных нестационарных газодинамических уравнений ламинарного сжимаемого реагирующего течения. Все расчеты проводили применительно к камере сгорания АМБС [10] — замкнутого цилиндрического реактора диаметром $L = 50,8$ мм с адиабатическими стенками. Считали, что в начальный момент времени реактор заполнен гомогенной топливно-воздушной смесью с заданным коэффициентом Φ при начальном давлении p_0 . Неоднородное начальное распределение температуры смеси задавали в виде кусочно-линейной функции: $T = T_1$ при $0 \leq x \leq L_1$, $T = T(x)$ при $L_1 < x < L_2$ и $T = T_2$ при $L_2 \leq x \leq L$. Турбулизацию заряда не учитывали.

Расчеты проводили применительно к изооктану. Для описания химического процесса использовали специально разработанный короткий эмпирический механизм окисления изооктано-воздушных смесей по принципу [12]. Механизм содержал 7 реакций, включая 2 обратимые реакции. Проверочные расчеты задержек самовоспламенения по предложенному механизму в отсутствие каких-либо пространственных неоднородностей (при $T_1 = T_2$) дали результаты, практически совпадающие с экспериментальными данными [10].

Как и в экспериментах [10], в расчетах с температурными неоднородностями ($T_1 \neq T_2$) получено два режима самовоспламенения: (1) почти однородный взрыв по всему объему реактора (без бегущей волны горения) и (2) режим с бегущей волной горения.

Первый режим реализуется, главным образом, когда в объеме реактора отсутствует какая-либо пространственная неоднородность в начальных условиях. Однако он может реализоваться и при наличии начальной неоднородности температуры в условиях, когда $u_{sp} \gg a$, где a — характерная скорость звука в газе. Например,

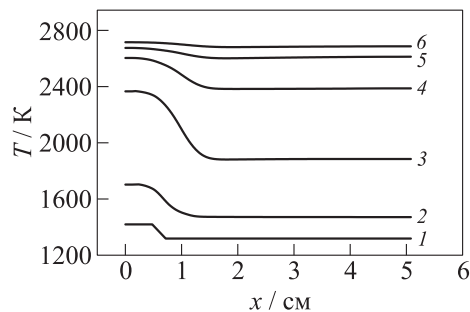


Рис. 1 Расчетные профили температуры в реакторе в разные моменты времени: 1 — $t = 0$ мс; 2 — 0,159; 3 — 0,280; 4 — 0,339; 5 — 0,419; 6 — $t = 0,641$ мс. Смесь изооктан–воздух ($\Phi = 1,0$), $T_1 = 1428$ К, $T_2 = 1328$ К, $p_0 = 13,4$ атм

на рис. 1 представлены расчетные распределения температуры в разные моменты времени при $T_1 = 1428$ К и $T_2 = 1328$ К, т.е. при $\Delta T = T_1 - T_2 = 100$ К. Видно, что температурная неоднородность практически не перемещается в пространстве. По расчетному пространственному распределению давления в разные моменты времени можно заключить, что при таком самовоспламенении возникают слабые волны давления, которые не оказывают влияния на протекание реакции в объеме. Аналогичные результаты получаются при снижении общего уровня температуры и уменьшении ΔT .

Второй режим (режим с бегущей волной горения) реализуется, когда $u_{sp} \sim a$ или $u_{sp} < a$. Такие условия достигаются, например, при снижении уровня температуры в реакторе и при сохранении выбранного значения ΔT . На рис. 2 показана эволюция поля температуры при $T_1 = 1083$ К и $T_2 = 983$ К, т.е. при таком же $\Delta T = 100$ К, как и на рис. 1. Видно, что точка с максимальным градиентом температуры $|dT/dx|_{\max}$, отмеченная на рис. 2 звездочкой, перемещается вправо: реализуется бегущая волна горения. Видимая скорость волны на рис. 2 возрастает от 1,0 до 18,7 м/с. Это вполне согласуется с данными [10], где зарегистрированы скорости от 0,5 до 7,8 м/с, и с данными [3], где получена скорость 17 м/с. Отметим, что хорошего количественного согласия расчетов с экспери-

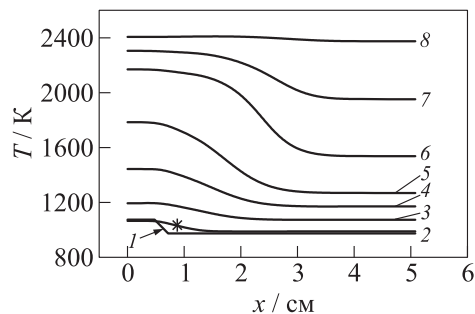


Рис. 2 Расчетные профили температуры в реакторе в разные моменты времени: 1 — $t = 0$ мс; 2 — 0,64; 3 — 2,88; 4 — 3,81; 5 — 4,17; 6 — 4,50; 7 — 4,67; 8 — $t = 5,53$ мс. Смесь изооктан-воздух ($\Phi = 0,8$), $T_1 = 1083$ К, $T_2 = 983$ К, $p_0 = 12,8$ атм

ментами [10] можно легко добиться, задавшись соответствующими значениями T_1 , ΔT и $L_2 - L_1$ в условиях экспериментов [10]. Однако конкретные данные для T_1 , ΔT и $L_2 - L_1$ в [10] отсутствуют, поэтому скорости волн горения имеет смысл сравнивать лишь по порядку величины.

Расчеты показали, что скорость и другие характеристики бегущей волны горения определяются кинетическими свойствами топливно-воздушной смеси и параметрами пространственных неоднородностей температуры и состава смеси. Для сравнения условия рис. 2 применили к моделированию самовоспламенения воздушной смеси н-гептана. Кинетические параметры для глобального механизма н-гептана получили обработкой опытов [13–16]. На рис. 3 представлены результаты расчетов в виде профилей давления в разные моменты времени. В отличие от изооктана, где скорость волны горения достигала 18,7 м/с, при самовоспламенении н-гептана в реакторе на короткое время (несколько микросекунд) образовалась ударная волна с присоединенным фронтом объемной реакции, бегущая со скоростью выше 1070 м/с. Поскольку ударная волна распространялась по реагирующему газу, ее параметры изменялись во времени и период ее существования был ограничен временем реакции при температуре $T_2 = 983$ К. Максимальное давление в ударной волне достигало 60 атм.

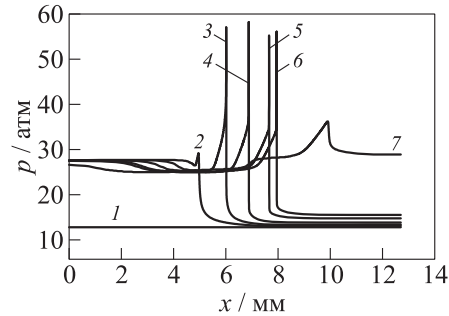


Рис. 3 Расчетные профили давления в реакторе в разные моменты времени: 1 — $t = 0$ мс; 2 — 1,12; 3 — 1,1218; 4 — 1,1226; 5 — 1,1233; 6 — 1,1236; 7 — $t = 1,1255$ мс. Смесь н-гептан-воздух ($\Phi = 0,8$), $T_1 = 1083$ К, $T_2 = 983$ К, $p_0 = 12,8$ атм

Таким образом, в работе проведено математическое моделирование самовоспламенения углеводородно-воздушных смесей в адиабатическом реакторе с начальным неоднородным распределением температуры. Показано, что в зависимости от кинетических свойств смеси и параметров пространственной неоднородности температуры в реакторе могут возникать и распространяться волны горения разного типа. Проведено количественное сопоставление расчетных и измеренных скоростей волн горения и получено удовлетворительное согласие результатов.

Работа выполнена в рамках Государственных контрактов № П502 по Федеральной целевой программе (ФЦП) «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 гг. и № 02.516.12.6026 по ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России» на 2007–2012 гг., а также при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 08-08-00068).

Литература

1. Соколик А. С. Самовоспламенение, пламя и детонация в газах. — М.: Изд-во АН СССР, 1960.

2. Воинов А. Н. Экспериментальное исследование детонации в двигателях // В кн. Сгорание в транспортных поршневых двигателях. — М.: Изд-во АН СССР, 1951. С. 212–239.
3. Соколик А. С., Басевич В. Я. О кинетической природе самовоспламенения в условиях дизеля // ЖФХ, 1954. Т. 28. С. 1935–1949.
4. Zeldovich, Ya. B. 1980. Regime classification of an exothermic reaction with nonuniform initial conditions. *Combust. Flame* 39(2):211–14.
5. Гельфанд Б. Е., Поленов А. Н., Фролов С. М., Цыганов С. А. К вопросу о возникновении детонации в неравномерно нагретой газовой смеси // ФГВ, 1985. № 4. С. 118–123.
6. Гельфанд Б. Е., Фролов С. М., Поленов А. Н., Цыганов С. А. Возникновение детонации в системах с неравномерным распределением температуры и концентрации // Химическая физика, 1986. № 9. С. 1277–1284.
7. Zel'dovich Y. B., B. E. Gelfand, S. A. Tsyganov, S. M. Frolov, and A. N. Polenov. 1988. Concentration and temperature nonuniformities of combustible mixtures as reason for pressure waves generation. In: *Dynamics of explosions*. Eds. A. L. Kuhl, J. R. Bowen, J.-C. Leyer, and A. Borisov. Progress in astronautics and aeronautics ser. — Washington, D.C.: AIAA Inc. 114:99–123.
8. Гельфанд Б. Е., Фролов С. М., Цыганов С. А. Критерии возбуждения ударных и детонационных волн в реагирующей среде // Химическая физика, 1989. № 5. С. 655–666.
9. Фролов С. М., Гельфанд Б. Е., Цыганов С. А. Спонтанные режимы горения // ФГВ, 1992. Т. 28. № 5. С. 13–27.
10. 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.
11. Басевич В. Я., Лидский Б. В., Фролов С. М. Механизм усиления ударной волны при прохождении зоны холодного пламени // Химическая физика, 2010. № 2.
12. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. «Глобальные» кинетические механизмы ламинарных пламен для моделирования турбулентных реагирующих течений. Ч. 1. Основной химический процесс тепловыделения // Химическая физика, 1998. Т. 17. № 9. С. 112–128.
13. Ciezki, H., and G. Adomeit. 1988. Experimental shock-tube investigation of the ignition-delay of *n*-Heptane–O₂–N–Ar-mixtures under high pressure. *16th Symposium (International) on Shock Tubes and Waves Proceedings*. Aachen. 481–86.

14. Ciezki, H., and G. Adomeit. 1993. Shock-tube investigation of self-ignition of *n*-heptane–air mixtures under engine relevant conditions. *Combust. Flame* 93(4):421–33.
15. Buda, F., P. A. Glaude, F. Battin-Leclerc, R. Porter, K. J. Hughes, and J. F. Griffiths. 2004. Use of detailed kinetic mechanisms for the prediction of autoignition. *5th Symposium (International) on Hazards, Prevention and Mitigation of Industrial Explosions (ISHPMIE) Proceedings*. Cracow. 235–43.
16. Gauthier, B. M., D. F. Davidson, and R. K. Hanson. 2004. Shock tube determination of ignition delay times in full-blend and surrogate fuel mixtures. *Combust. Flame* 139(4):300–11.