

СФЕРИЧЕСКОЕ ДИФфуЗИОННОЕ ПЛАМЯ ЭТИЛЕНА В КОСМИЧЕСКОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ «АДАМАНТ»*

С. М. Фролов¹, С. Н. Медведев², Ф. С. Фролов³

Аннотация: Совместный космический эксперимент (КЭ) NASA и Роскосмоса Flame Design (Адамант) — один из шести экспериментов, проводимых в настоящее время астронавтами NASA и космонавтами Роскосмоса на американском сегменте Международной космической станции (МКС) в рамках проекта АСМЕ (русский перевод: «Продвинуться в понимании горения с помощью экспериментов в условиях микрогравитации»). Цель КЭ — экспериментальное и теоретическое изучение фундаментальных механизмов управления сажеобразованием в сферическом диффузионном пламени (СДП), формируемом вокруг пористой сферы (ПС), и радиационного погасания СДП в условиях микрогравитации. Объекты исследования — «прямые» и «обратные» СДП газообразного этилена в атмосфере кислорода с добавками инертных газов, азота и диоксида углерода при комнатной температуре и давлениях от 0,02 до 0,1 МПа. «Прямое» пламя — это пламя, образованное в атмосфере окислителя при подаче горючего через ПС. «Обратное» пламя — это пламя, образованное в атмосфере горючего при подаче окислителя через ПС. Данные КЭ используются для проверки одномерных, двумерных и трехмерных физико-математических моделей явления, включающих сокращенные и детальные кинетические механизмы окисления и горения этилена, сажеобразования, свойства переноса в многокомпонентной газовой смеси, а также конвективный и кондуктивный теплообмен и теплообмен излучением. Ожидается, что в результате выполнения проекта будут получены новые знания о физике и химии диффузионных пламен, которые помогут в решении задач управления горением и снижения вредных выбросов при горении. В статье представлены текущие экспериментальные и теоретические результаты проекта.

Ключевые слова: космический эксперимент; микрогравитация; сферическое диффузионное пламя; этилен; численное моделирование

DOI: 10.30826/CE21140102

1 Введение

В земных условиях гравитация может оказывать большое влияние на процесс горения, особенно если пламя распространяется с малыми скоростями. Высокотемпературные продукты горения, имея значительно меньшую плотность, чем исходные газы, под действием силы Архимеда приобретают направленное движение вверх. Зажигая спичку в безветренную погоду, мы видим вертикальный язык пламени — влияние гравитации. Роль гравитации можно показать на примере горения покоящейся капли жидкого моторного топлива, которое сопровождается образованием микроскопических частиц сажи. Сажа образуется в области между каплей и пламенем вследствие теплового разложения паров горючего в присутствии высокотемпературных продуктов горения. В земных условиях образованные частицы сажи вместе с продуктами горения

постепенно уносятся вверх от капли благодаря силе Архимеда (как при горении спички), а в области между каплей и пламенем формируются новые частицы. Так происходит до тех пор, пока капля полностью не сгорит.

Если же гравитацию «отключить» (условия невесомости), унос сажевых частиц прекратится: частицы будут накапливаться в области между каплей и пламенем, образуя рыхлую сажевую «оболочку». Такая оболочка становится своего рода экраном для потока тепла, направленного от пламени к капле. Испарение капли замедляется, пламя гаснет, а капля остается несгоревшей. При определенных условиях (после рассеяния сажевой оболочки) могут происходить самопроизвольные повторные зажигания и погасания капли. Налицо принципиальные различия в поведении капли в земных условиях и в условиях невесомости. Это, в частности, означает, что развитие пожара при проливах

* Научно-исследовательская работа выполнена в рамках космического эксперимента «Адамант». Авторы благодарны своим коллегам из Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семёнова РАН (В. Я. Басевичу, А. А. Беляеву, В. С. Посвянскому, М. Ю. Синеву, П. А. Власову), а также Р. Аксельбауму из Вашингтонского университета в Сент-Луисе, П. Сандерленду из Мэрилендского университета и Д. Урбану из Исследовательского центра Гленна НАСА за плодотворное сотрудничество.

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

²Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, medvsn@gmail.com

³Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, f.frolov@chph.ru

горючих жидкостей в земных условиях и в условиях невесомости, например на пилотируемом космическом корабле, может быть совершенно разным. Ввиду важности этого обстоятельства на МКС, начиная с 2017 г., проводятся российско-американские КЭ по изучению особенностей горения газов, жидкостей и твердых материалов в условиях невесомости [1, 2]. Так, в 2017–2018 гг. проведен КЭ «Зарево», в котором изучалось явление погасания капли тяжелого углеводородного топлива [3], а в 2019 г. — КЭ «Адамант», в котором началось изучение явления погасания сферического пламени заранее не перемешанных газов — СДП. Далее речь пойдет о КЭ «Адамант».

Цель КЭ «Адамант» — экспериментальное и теоретическое изучение фундаментальных механизмов управления сажеобразованием в СДП, наблюдаемых в условиях микрогравитации.

2 Космический эксперимент

В NASA разработана и изготовлена экспериментальная установка, которую доставили на МКС. Международный экипаж подготовил установку к работе. Установка включает камеру сгорания (КС), в центральной части которой на прямой газоподводящей трубке размещаются ПС диаметром 6,4 мм (рис. 1, *а*), вспомогательные устройства и регистрирующая аппаратура (видеокамеры, радиометры, фотоумножители, термопары). Установка работает в автоматическом режиме. В начале опыта КС заполняется газом, например воздухом. Затем в ПС с массовым расходом на уровне нескольких миллиграмм в секунду подается газобразное горючее — смесь этилена и азота или чистый этилен — и одновременно с этим включается зажигание. При удачном зажигании вокруг ПС

формируется СДП. Весь процесс горения (до 200 с) записывается на цифровые видеокамеры. Покадровый анализ изображений пламени позволяет получить зависимость радиуса пламени от времени. В течение эксперимента температура ПС, измеряемая термопарой, возрастает. Для сохранности ПС эксперимент прекращается, если ее температура превышает 500 °С. Температура СДП определяется по показаниям радиометров, измеряющих интенсивность излучения тонких (15 мкм) термостойких волокон из карбида кремния, помещаемых в пламя. В экспериментах изменяется массовый расход и состав газа, подаваемого через ПС (степень разбавления азотом), а также состав и давление газовой атмосферы в КС. Работа аппаратуры синхронизирована, а получаемая информация по каналам радиосвязи поступает в Центр управления полетами в режиме реального времени.

В экспериментах запланированы исследования «прямых» и «обратных» СДП. Прямым называют пламя, образуемое при подаче в ПС горючего газа, при этом КС заполнена окислительным газом — смесью кислорода и азота. Такое пламя моделирует горение капли жидкого топлива. Обратным называют пламя, образуемое при подаче в ПС окислительного газа, тогда как КС изначально заполняется горючим газом. Такое пламя моделирует горение капли жидкого окислителя в парах горючего.

На первом этапе КЭ в 2019 г. проведено 188 экспериментов с прямыми пламенами этилена. Экипаж следил за выполнением программы эксперимента, производил замену емкостей с газами и жидкостями, настраивал аппаратуру и при необходимости производил замену неисправных узлов. В экспериментах зарегистрированы различные физико-химические явления, в том числе новые: (1) образование устойчивого бессажистого СДП

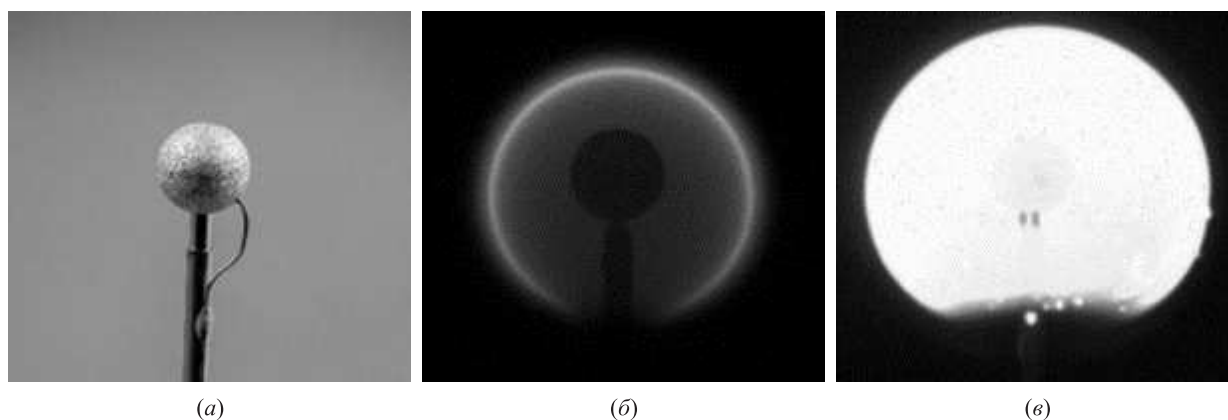


Рис. 1 Пористая сфера с термопарой и газоподводящей трубкой (*а*); бессажистое диффузионное пламя (*б*); сажистое диффузионное пламя (*в*)

голубого цвета (рис. 1, б); (2) образование бессажистого СДП с внезапным самопроизвольным погасанием; (3) образование бессажистого СДП с развитием радиальных колебаний фронта и самопроизвольным погасанием; (4) образование сажистого СДП ярко-желтого цвета с внезапным самопроизвольным погасанием (рис. 1, в); (5) образование сажистого СДП с развитием радиальных колебаний фронта и самопроизвольным погасанием; (6) образование несимметричного сажистого пламени с колебаниями фронта и самопроизвольным погасанием; (7) образование суперагломератов сажи, проникающих через пламя, и др. Эксперименты показали, что перед погасанием температура пламени снижается до 900–1000 °С. Результаты некоторых более ранних исследований СДП можно найти в [4–9].

3 Моделирование сферического диффузионного пламени

В процессе проведения КЭ «Адамант» российский научный коллектив из ФИЦ ХФ РАН исследовал СДП теоретически с помощью численного моделирования. Требовалось построить прогнозную физико-математическую модель, которая воспроизводит наблюдаемые явления. Понимается, что при наличии такой модели можно определить условия радиационного погасания СДП и исследовать влияние различных внешних воздействий (газодинамических, акустических, тепловых, химических) на сажеобразование. Кроме того, на основе такой модели можно проводить экспресс-анализ экспериментальных данных и вы-

давать научно-обоснованные рекомендации по изменению режимов выполнения КЭ.

В данном разделе приведено описание модели, а также результаты расчетов и их сравнение с экспериментальными данными, полученными на первом этапе выполнения КЭ «Адамант».

3.1 Феноменология

Пористая сфера радиусом $r_s = 3,2$ мм и проницаемостью κ изготовлена методом спекания из частиц нержавеющей стали. Газоподводящая трубка с площадью проходного сечения S_{in} (внутренний диаметр 1,5 мм) внедрена в ПС на глубину 2,5 мм. Объем камеры V , в которую помещается сборка, приблизительно равен 90 л (радиус внешней стенки $r_\infty = 288$ мм). В начальный момент времени $t = 0$ вся камера заполнена азотно-кислородной смесью с температурой T_0 , давлением P_0 и массовыми долями компонентов Y_{i0} (здесь и далее индекс i относится к конкретному компоненту смеси). При $t > 0$ через газоподводящую трубку и ПС с постоянным массовым расходом G_{in} подается горючий газ — смесь этилена и азота — с постоянными массовыми долями компонентов $Y_{i,in}$ (здесь и далее индекс ‘in’ относится к сечению подачи горючего газа). Горючий газ, проходя через поры ПС, вытесняет из нее исходную азотно-кислородную смесь и поступает в камеру. Подача горючего газа через ПС сопровождается молекулярным смешением газов и образованием в окрестности ПС горючей смеси, которая в момент времени t_{ign} поджигается внешним источником зажигания. После некоторого переходного периода вокруг ПС формируется СДП. В эксперименте радиус пламени определяет-

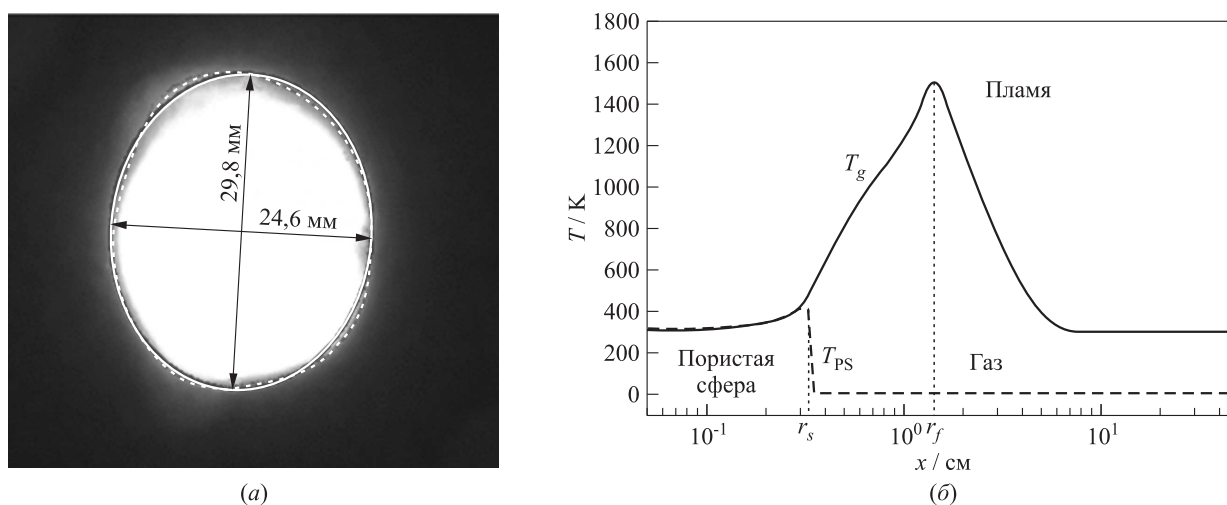


Рис. 2 Определение радиуса пламени в эксперименте (по среднему размеру светящейся зоны) (а) и в расчете (по расстоянию до максимума температуры газа) (б)

ся по среднему размеру светящейся зоны (рис. 2, а). В расчетах радиус пламени обычно определяется как координата максимума температуры газа r_f (рис. 2, б). В процессе горения положение пламени может изменяться: радиус пламени может увеличиваться и/или уменьшаться. Вообще говоря, в зависимости от определяющих параметров задачи (G_{in} , $Y_{i,in}$, Y_{i0} и др.) возможны ситуации, когда $r_f > r_s$ и $r_f \leq r_s$. Горение в пламени сопровождается не только химическим энерговыделением, но и процессами излучения и отвода тепла в окружающее пространство. Излучают в основном трехатомные молекулы (CO_2 и H_2O), а также сажа, которая может образовываться при горении. Тепловые потоки, идущие от пламени, разогревают газоподводящую трубку, ПС и горючий газ, истекающий из ПС. Последнее приводит к изменению плотности горючего газа и, следовательно, к увеличению скорости его подачи с поверхности ПС, что может отразиться на радиусе пламени.

3.2 Постановка задачи

Физико-математическая модель должна учитывать все важнейшие процессы, участвующие в описанной феноменологии изучаемого явления. Поскольку фундаментальные уравнения течения газа справедливы и внутри, и за пределами ПС, для построения модели применим обобщенные нестационарные трехмерные уравнения Навье–Стокса, осредненные по Рейнольдсу, уравнение сохранения энергии и уравнения неразрывности всех компонентов смеси:

$$\rho \frac{\partial U_i}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = - \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\tau_{ij} + \tau_{ij}^t]; \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial I}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial I}{\partial x_j} = \rho \dot{Q} + \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\tau_{ij} + \tau_{ij}^t) U_j] + \frac{\partial}{\partial x_j} (q_j + q_j^t) + \Omega; \quad (2)$$

$$\rho \frac{\partial Y_l}{\partial t} + \rho U_j \frac{\partial Y_l}{\partial x_j} = \rho \dot{w}_l + \frac{\partial}{\partial x_j} [\rho (j_{lj} + j_{lj}^t)]. \quad (3)$$

Здесь t — время; x_j ($j = 1, 2, 3$) — декартовы координаты; ρ — плотность; P — давление; U_i — i -я компонента вектора средней скорости; τ_{ij} — тензор вязких напряжений; τ_{ij}^t — тензор турбулентных напряжений; $I = H + 0,5 \sum_i U_i^2$ — средняя полная энтальпия смеси, где H — средняя статическая энтальпия; q_j — молекулярный тепловой поток; q_j^t — турбулентный тепловой поток; Y_l ($l = 1, \dots, N$) — средняя массовая доля l -го компонента смеси, где N — полное число компонентов в смеси; \dot{w}_l и \dot{Q} — средние источники массы и энергии при химиче-

ских превращениях; Ω — тепловой источник нехимической природы; j_{lj} и j_{lj}^t — молекулярный и турбулентный потоки массы l -го компонента смеси соответственно.

Турбулентные потоки вещества, количества движения и энергии в (1)–(3) можно моделировать с помощью той или иной модели турбулентности. Определяющие уравнения замыкаются калорическим и термическим уравнениями состояния, кинетическим механизмом окисления горючего и сажеобразования, соотношениями для потоков и источников членов, а также начальными и граничными условиями.

В соответствии с феноменологией изучаемых процессов примем следующие упрощающие допущения.

1. Газоподводящая трубка не влияет на эволюцию СДП.
2. Все физико-химические процессы сферически симметричны, так что справедливо одномерное приближение.
3. Пористая сфера влияет на течение газа через дополнительное сопротивление, описываемое законом Дарси, и дополнительный теплообмен, описываемый законом Ньютона, т. е. влияние пористой среды можно представить дополнительными источниками в уравнениях сохранения количества движения и энергии: $(\partial P / \partial x_i)_s$ и Ψ_s соответственно. Кроме того, поскольку пористая среда уменьшает объем, занимаемый газом, то скорость U_i и местная скорость газа внутри ПС u_i связаны через пористость φ : $U_i = \varphi u_i$.
4. Теплофизические и структурные параметры материала ПС постоянны.
5. Тепловое излучение ПС пренебрежимо мало; ПС поглощает тепловое излучение сажи, H_2O , CO_2 , N_2 и O_2 .
6. Внутри ПС отсутствуют газофазные и каталитические реакции.
7. Течение газа ламинарное.
8. Многокомпонентная смесь газов подчиняется термическому и калорическому уравнениям состояния идеального газа с переменными коэффициентами переноса.
9. Влияние термодиффузии пренебрежимо мало.
10. Сажа — эквивалентный газ с молекулярной массой атомарного углерода.
11. Сажевые частицы имеют постоянный размер и не коагулируют.

12. В газовой фазе излучают только сажа, H_2O , CO_2 , N_2 и O_2 .
13. Внешняя граница расчетной области — непроницаемая некаталитическая изотермическая стенка.

Следуя допущениям 1 и 2, расчетную область можно представить в форме малого телесного угла сферы, разделенного в радиальном направлении на контрольные объемы. Следуя допущениям 3–6, одномерное уравнение сохранения энергии для пористой среды имеет вид:

$$\rho_s c_s \frac{\partial T_s}{\partial t} = \lambda_s \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\partial T_s}{\partial x_j} \right) + \Omega_s, \quad (4)$$

где ρ_s , c_s , λ_s и T_s — плотность, удельная теплоемкость, коэффициент теплопроводности и температура материала ПС; Ω_s — тепловой источник. Более того, допущения 3 и 5 означают, что источник Ω_s в (4) содержит лишь два слагаемых: Ψ_s и поглощение потока излучения Ω_{gs} , а допущение 4 подразумевает постоянство радиуса ПС $r_s = \text{const}$. Следуя допущению 7, все турбулентные потоки в (1)–(3) равны нулю: $\tau_{ij}^t = q_j^t = j_{lj}^t = 0$. Допущение 8 общепринято и подразумевает справедливость уравнений состояния:

$$p = \rho RT \sum_{l=1}^N \frac{Y_l}{m_l};$$

$$H_l = H_l^0 + \int_{T^0}^T c_{p,l} dT,$$

где m — молекулярная масса; R — универсальная газовая постоянная; T — температура; H^0 — стандартная энтальпия образования при температуре T^0 ; c_p — удельная теплоемкость при постоянном давлении. Допущение 9 означает, что молекулярные потоки q_j и j_{lj} определяются соотношениями:

$$q_j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j};$$

$$j_{lj} = -D_l \frac{\partial Y_l}{\partial x_j}, \quad l = 1, \dots, N-1,$$

где λ — коэффициент теплопроводности газа; D_l — эффективный коэффициент диффузии l -го компонента смеси [10]. Допущение 10 означает, что в кинетическом механизме реакций сажа рассматривается как компонент газовой смеси с соответствующей массовой долей Y_{soot} . Однако для оценки влияния излучения сажи условно предполагается (допущение 11), что сажевые частицы обладают некоторой удельной (на единицу массы) излучающей

поверхностью $S_{\text{soot}} = 6/(d_{\text{soot}}\rho_{\text{soot}})$ (здесь d_{soot} — условный размер частиц сажи; ρ_{soot} — плотность сажи), которая пропорциональна массовой доле сажи в смеси Y_{soot} . Допущение 12 означает, что источник Ω в (2) содержит слагаемое Ω_{soot} , пропорциональное S_{soot} , и слагаемое Ω_g , пропорциональное локальным мгновенным объемным долям H_2O , CO_2 , N_2 и O_2 . Допущение 13 общепринято.

Таким образом, с учетом принятых допущений система уравнений (1)–(4) сильно упрощается и может быть решена в одномерном приближении с использованием любой имеющейся газодинамической программы. Ниже приведены явные выражения для потоков и источников, входящих в уравнения (1)–(4):

$$\dot{w}_l = m_l \sum_{k=1}^L (\nu''_{l,k} - \nu'_{l,k}) A_k T^{n_k} \times \exp\left(-\frac{E_k}{RT}\right) \prod_{j=1}^N \left(\frac{Y_j \rho}{m_j}\right)^{\nu'_{l,k}}; \quad (5)$$

$$\dot{Q} = \sum_{l=1}^N H_l \dot{w}_l; \quad (6)$$

$$\Omega = \Omega_{\text{soot}} + \Omega_g + \Psi_s; \quad (7)$$

$$\Omega_{\text{soot}} = \sigma S_{\text{soot}} Y_{\text{soot}} \rho (T^4 - T_0^4); \quad (8)$$

$$\Omega_g = \sigma P \sum_{l=1}^4 a_l(T) X_l (T^4 - T_0^4); \quad (9)$$

$$\Psi_s = \alpha_s S_{\text{PS}} (T - T_s); \quad (10)$$

$$\Omega_s = \Psi_s + \Omega_{sg}; \quad (11)$$

$$\Omega_{sg} = \delta_s \varepsilon_s \int (\Omega_{\text{soot}} + \Omega_g) dV; \quad (12)$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial x_i}\right)_s = \left(\frac{\partial P}{\partial x}\right)_s = \frac{\mu}{\kappa} u. \quad (13)$$

Здесь L — полное число химических реакций в кинетическом механизме окисления горючего и сажеобразования; $\nu''_{l,k}$ и $\nu'_{l,k}$ — стехиометрические коэффициенты l -го компонента смеси, являющегося продуктом и реагентом в k -й реакции соответственно; A — предэкспоненциальный множитель; n — показатель степени при температуре; E — энергия активации; σ — постоянная Стефана–Больцмана; a_l и X_l — коэффициент излучения и мольная доля l -го излучающего газа; α_s — коэффициент теплоотдачи между газом и ПС; $S_{\text{PS}} = 6(1-\varphi)/d$ — удельная площадь поверхности пористого материала ПС на единицу объема, где d — характерный размер пористого каркаса в ПС; ε_s — коэффициент поглощения излучения материалом ПС; δ_s — дельта-функция координаты поверхности ПС; μ —

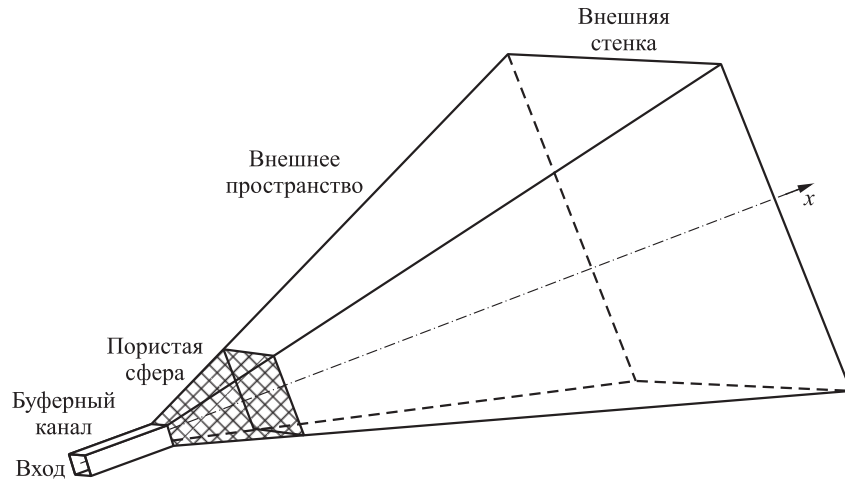


Рис. 3 Расчетная область

коэффициент динамической вязкости газа. Уравнение (13) используется по рекомендациям [11].

Значения параметров A , n , E , $\nu''_{l,k}$, $\nu'_{l,k}$, L и N берутся из детального кинетического механизма окисления горючего [12], дополненного полуэмпирическим механизмом образования и окисления сажи [13] на основе трех суммарных реакций с одним дополнительным компонентом — сажей C . В механизме [13] в качестве предвестника сажи используется ацетилен, который имеется в механизме [12]. Значения коэффициентов a_l для H_2O и CO_2 берутся из полиномов в [14], для N_2 и O_2 a_l не зависит от температуры газа и принимается равным 0,1. Коэффициенты динамической вязкости μ и теплопроводности λ для газа, а также эффективные коэффициенты диффузии D_l и удельные теплоемкости $c_{p,l}$ для компонентов газовой смеси рассчитываются по формулам, представленным в [15].

На рис. 3 показана одномерная расчетная область, которая содержит плоский буферный канал с площадью сечения S_{in} , ПС и внешнее пространство, ограниченное стенкой. Плоский буферный канал длиной $r_0 = 10$ мм используется, чтобы обеспечить невозмущенные граничные условия. Буферный канал погружен в ПС так, чтобы площадь входного сечения в ПС была равна S_{in} . На боковых поверхностях расчетной области выполнены условия симметрии.

Начальные условия:

$$t = 0,$$

$$0 \leq x \leq r_\infty : P = P_0; T = T_0; T_s = T_0;$$

$$Y_l = \begin{cases} Y_{l0}, & l = O_2, N_2; \\ 0, & l \neq O_2, N_2. \end{cases}$$

Граничные условия:

$$t > 0,$$

$$x = 0 : \rho U S_{in} = G_{in}; T = T_0;$$

$$Y_l = \begin{cases} Y_{l0}, & l = C_2H_4, N_2; \\ 0, & l \neq C_2H_4, N_2; \end{cases}$$

$$x = r_\infty : U = 0; T = T_0; \frac{\partial Y_l}{\partial x} = 0, l = 1, \dots, N.$$

Цель расчетов на данном этапе исследований сводится к определению пространственной структуры пламени и ее эволюции во времени, а также зависимости от времени таких характеристик СДП, как радиус пламени r_f , температура ПС T_s , максимальная температура газа $T_{g,max}$ (температура горения) и суммарная концентрация сажи $Y_{soot,\Sigma}$:

$$Y_{soot,\Sigma}(t) = \frac{1}{V} \int_{r_s}^{r_\infty} 2\pi Y_{soot}(t) x^2 dx.$$

3.3 Численное решение

Сферическая часть расчетной области на рис. 3 представлена сферическим сегментом с телесным углом 3° . Вся расчетная область разделена на 1333 контрольных объема, сжатых по направлению к внешней поверхности ПС, что обеспечило сеточную независимость полученных результатов. Система уравнений (1)–(4) и дополнительных соотношений (5)–(15) решается методом контрольных объемов с использованием сегрегированного алгоритма SIMPLE/PISO (semi-implicit method for pressure linked equation / pressure implicit split operator). Конвективный перенос в законе сохранения массы аппроксимируется центральной разностью,

в законе сохранения количества движения — схемой TVD (total variation diminishing) с лимитером MINMOD, а для конечнообъемной аппроксимации всех других уравнений используется стандартная схема UPWIND первого порядка. Уравнение (4) решается явным методом.

Перед расчетами конкретных пламен отработана численная процедура зажигания. Основное требование к процедуре зажигания — наименьшее влияние повышения давления, возникающего при зажигании, на эволюцию СДП. Предварительные расчеты показали, что чем сильнее зажигание, тем позднее получается решение, не зависящее от зажигания. Отработанная процедура зажигания заключалась в следующем. Через 0,2–0,3 с после начала подачи топлива в области $x \in [r_s + \Delta_1; r_s + \Delta_2]$ ($\Delta_1 = 0,5$ мм; $\Delta_2 = 0,6$ мм) температура смеси скачком заменялась на значение $T_{\text{ign}} = 1300$ К. Указанные условия по времени и по пространству подбирались так, чтобы в окрестности ПС сформировалась зона гомогенной смеси, способной к самовоспламенению при выбранной минимальной температуре T_{ign} .

Ниже представлены используемые в расчетах численные значения определяющих параметров задачи: $T_0 = 293$ К; $P_0 = 0,1$ МПа (если не указано другое значение); $S_{\text{in}} = 5 \cdot 10^{-10}$ м²; $r_s = 0,0032$ м; $r_\infty = 0,288$ м; $\varphi = 0,5$; $\kappa = 10^{-13}$ м²; $d = 10^{-5}$ м; $\varepsilon_s = 0,8$; $\rho_s = 4000$ кг/м³; $c_s = 650$ Дж/(кг·К);

$\lambda_s = 5$ Вт/(м·К); $d_{\text{soot}} = 2$ нм; $\rho_{\text{soot}} = 2000$ кг/м³; $N = 48$; $L = 209$.

4 Обсуждение результатов

В таблице представлены исходные данные четырех экспериментов. В столбцах таблицы слева направо представлены номер пламени; мольная доля этилена в горючем газе, разбавленном азотом (X_f); мольная доля кислорода в исходной азотно-кислородной смеси (X_{O_2}); массовый расход этилена через ПС (G_f); массовый расход этиленоазотной смеси через ПС ($G_{\text{in}} = G_f/X_f$); начальное давление в камере (P_0). Для всех пламен $X_{O_2} \approx 0,4$ и $P_0 \approx 0,1$ МПа.

На рис. 4 показан пример расчетной структуры СДП для условий, соответствующих пламени #10, через 20 с после зажигания. В соответствии с рис. 3 расчетное распределение температуры можно разделить на три области. Первая область с температурой 293 К соответствует течению горючего газа в буферном канале. Вторая область с «полкой» температуры 430 К и резким повышением температуры до ~ 500 К соответствует течению газа внутри ПС. Максимальная температура ПС достигается на ее поверхности (~ 450 К), причем температуры газа и пористого материала здесь отличаются приблизительно на 50 К. Третья область с ростом

Условия экспериментов с СДП

Пламя	X_f	X_{O_2}	G_f , мг/с	G_{in} , мг/с	P_0 , МПа
#2	0,29	0,40	0,52	1,80	0,100
#8	0,29	0,39	1,05	3,64	0,126
#10	1	0,38	1,24	1,24	0,127
#5	0,40	0,40	2,01	5,02	0,125

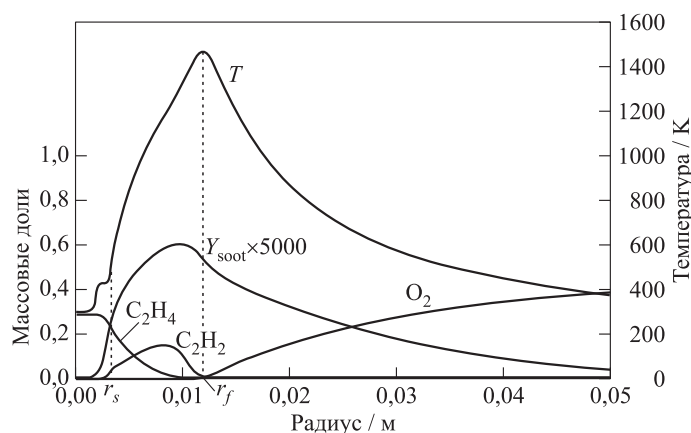


Рис. 4 Расчетные пространственные распределения температуры и массовых долей этилена, кислорода, ацетилена и сажи через 20 с после зажигания; пламя #10

температуры до максимального значения ~ 1500 К и последующим ее плавным снижением соответствует внешнему пространству вокруг ПС. Здесь максимум температуры газа достигается в пламени при $x = r_f$, а массовые доли этилена и кислорода близки к нулю ($Y_f \approx 0$; $Y_{O_2} \approx 0$). Ацетилен — предвестник сажи — образуется только «внутри» пламени, т. е. в зоне между ПС и максимумом температуры. В этой зоне находится горючий газ, а также промежуточные и конечные продукты химических превращений. Здесь же образуется сажа, причем максимум концентрации сажи достигается в точке с максимальной скоростью образования ацетилена.

Из рис. 4 видно, что сажа, образовавшись, диффундирует как по направлению к ПС, так и по направлению к внешней стенке камеры (через пламя). Последнее можно объяснить, во-первых, тем, что модель не учитывает явления термодиффузии и термофореза (допущение 9) и, во-вторых, высокими значениями энергий активации реакций окис-

ления сажи водяным паром и диоксидом углерода (80 ккал/моль) в механизме образования и окисления сажи [13]. Расчет показывает, что с течением времени максимум концентрации сажи уменьша-

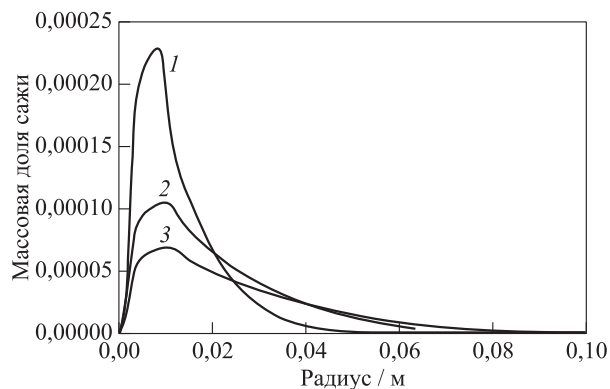


Рис. 5 Расчетные пространственные распределения массовой доли сажи через 10 (1), 20 (2) и 30 с (3) после зажигания; пламя #10

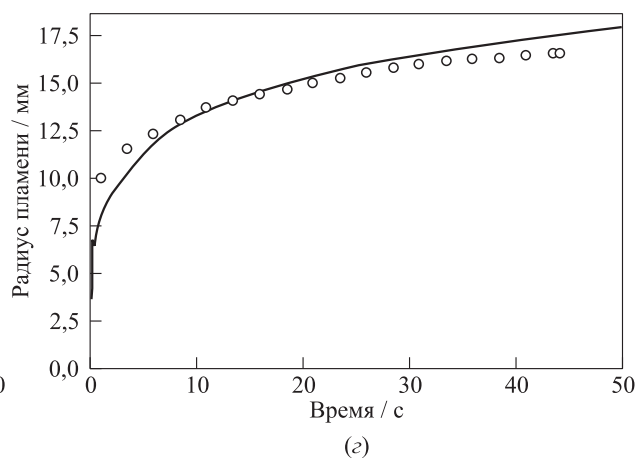
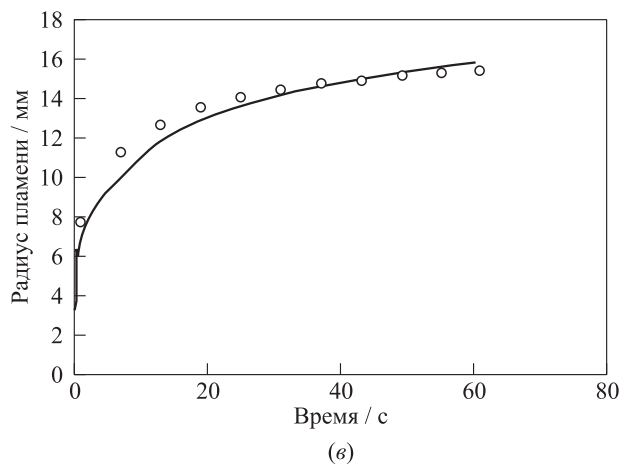
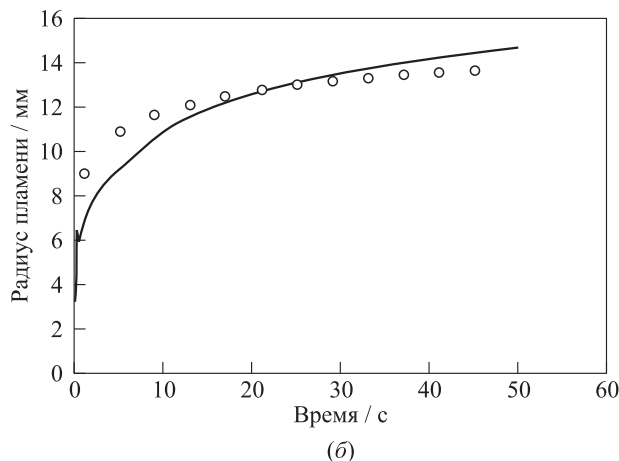
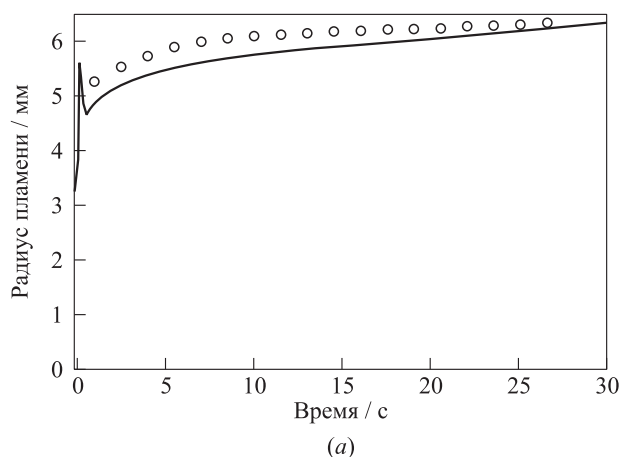


Рис. 6 Сравнение расчетных (кривые) и измеренных (значки) зависимостей радиуса пламени от времени: (а) пламя #2; (б) #8; (в) #10; (г) пламя #5

ется (рис. 5), однако суммарная концентрация сажи $Y_{\text{soot},\Sigma}$ в камере возрастает (см. ниже), т. е. сажа в пространстве вокруг ПС накапливается.

На рис. 6 сравниваются расчетные и измеренные зависимости радиуса пламени r_f от времени t . Имея в виду значительную погрешность определения радиуса пламени по среднему размеру светящейся зоны (см. рис. 2), можно отметить, что модель удовлетворительно описывает эволюцию всех рассматриваемых пламен. Укажем на некоторые особенности полученных зависимостей. После зажигания пламена непрерывно расширяются как в эксперименте, так и в расчете, т. е. стационарное СДП не реализуется. Радиус пламени r_f в рассматриваемых условиях в основном зависит от G_f . Например, к моменту времени ~ 25 с после зажигания (наименьшая продолжительность эксперимента) пламена #2, #8, #10 и #5, для которых G_f равно 0,52, 1,05, 1,24 и 2,01, находятся на расстояниях 6,5, 13, 15 и 16 мм соответственно, т. е. чем больше G_f , тем пламя дальше отодвигается от центра ПС.

На рис. 7 показано сравнение расчетных и измеренных температур ПС в рассматриваемых пламенах. В расчетах температура ПС определялась как среднее значение температуры T_s по всему объему ПС (ввиду высокой теплопроводности ПС прогревается почти однородно), тогда как в эксперименте она измерялась термопарой, спай которой находился на поверхности ПС. Видно, что результаты расчетов удовлетворительно согласуются с результатами измерений.

Следует отметить, что все рассматриваемые эксперименты были принудительно остановлены путем прекращения подачи горючего в ПС вследствие быстрого увеличения температуры ПС. Более близкое расположение пламени #2 к поверхности ПС приводит к более быстрому повышению температуры ПС по сравнению с другими пламенами (рис. 7, а). В эксперименте с пламенем #5 (см. рис. 7, з) прекращение подачи горючего в ПС отразилось на появлении излома в экспериментальных точках. В расчетах прекращение подачи горючего не моделировалось.

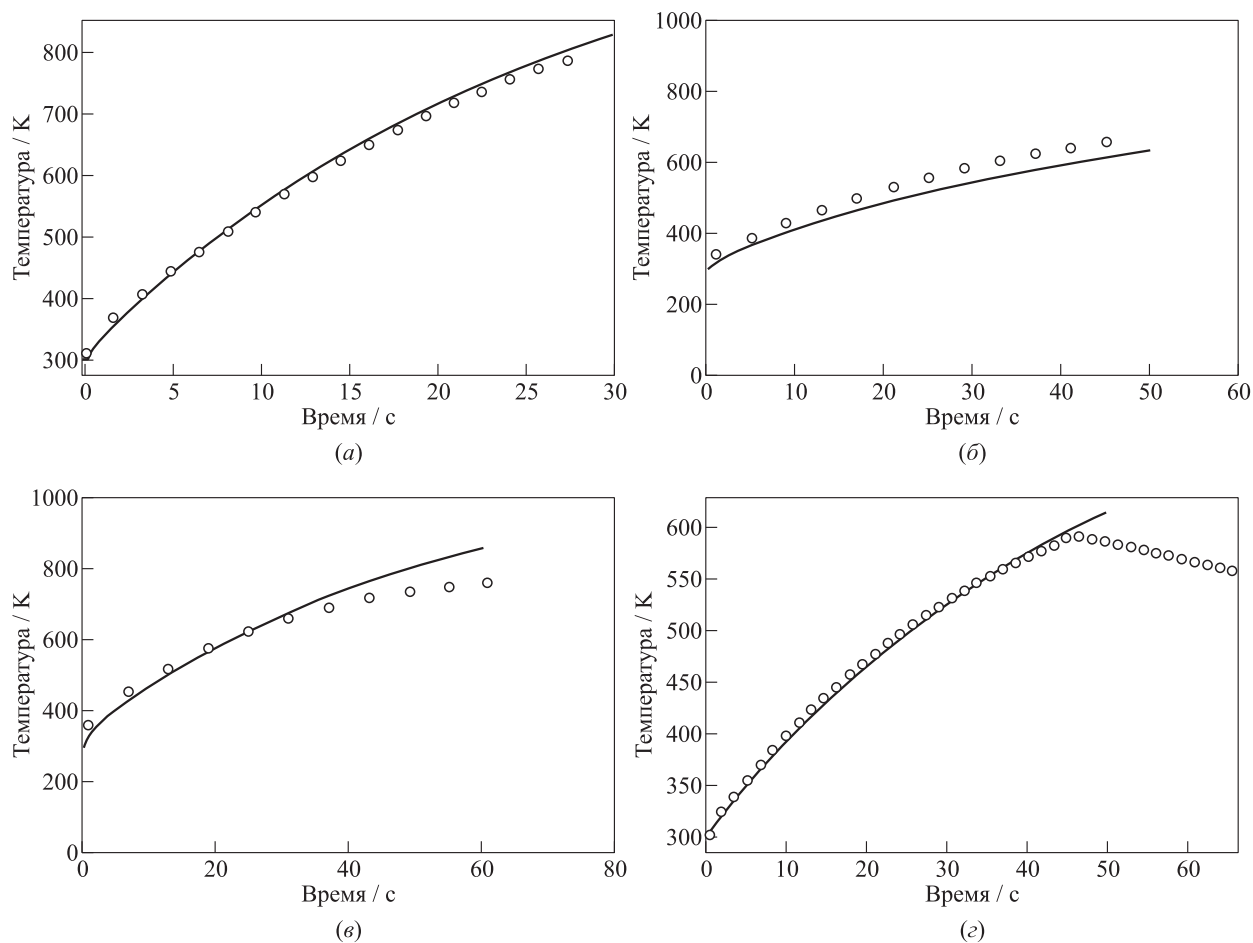


Рис. 7 Сравнение расчетных (кривые) и измеренных (значки) зависимостей температуры ПС от времени: (а) пламя #2; (б) #8; (в) #10; (г) пламя #5

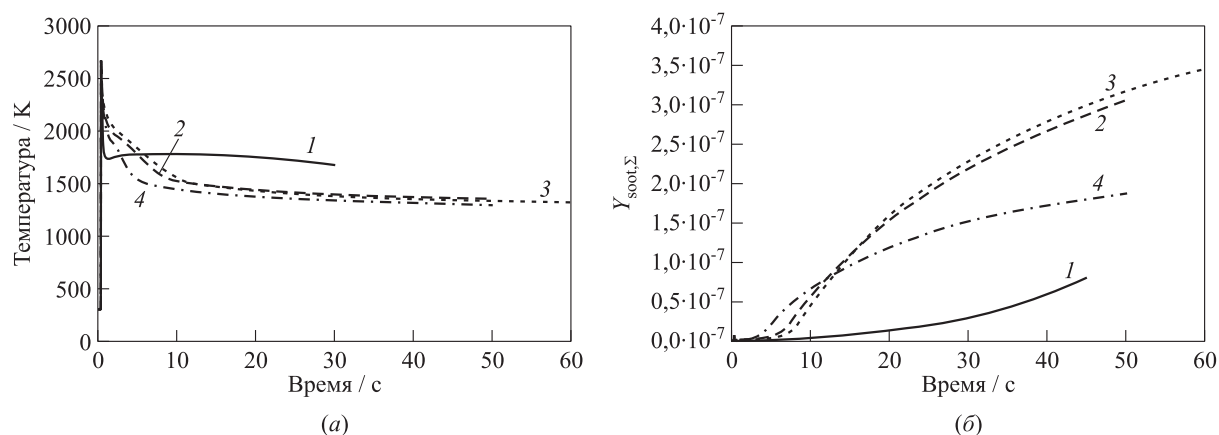


Рис. 8 Расчетные зависимости максимальной температуры газа (а) и суммарной концентрации сажи $Y_{soot,\Sigma}$ (б) от времени: 1 — пламя #2; 2 — #8; 3 — #10; 4 — пламя #5

На рис. 8,а показаны расчетные зависимости температуры горения $T_{g,max}$ от времени для всех рассматриваемых пламен. К сожалению, температура газа в этих пламенах не измерялась. Модель предсказывает резкое повышение $T_{g,max}$ при зажигании с последующим переходным периодом, в течение которого $T_{g,max}$ быстро падает, и установление квазистационарного диффузионного горения с медленным снижением $T_{g,max}$.

Наиболее короткий переходный период получен для пламени #2 (около 1 с). Для других пламен этот период составил 5–10 с. В пламени #2 при квазистационарном диффузионном горении достигается наибольшее значение $T_{g,max}$ (1700–1750 К), тогда как в СДП #8, #10 и #5 температура горения приблизительно на 250 К ниже: 1450–1500 К. Медленное снижение максимальной температуры пламени в СДП главным образом вызвано потерями на излучение сажи и трехатомных молекул (CO_2 и H_2O).

На рис. 8,б показаны расчетные зависимости суммарной концентрации сажи $Y_{soot,\Sigma}$ от времени. Видно, что во всех рассматриваемых пламенах сажа образуется и накапливается в объеме камеры, причем количество накопленной сажи различное. Минимальное накопленное количество сажи получено для пламени #2 с наивысшим значением температуры горения $T_{g,max}$. Наибольшее накопленное количество сажи получено для пламени #10, в котором поступающее через ПС горючее не разбавлено азотом ($X_f = 1$).

5 Заключение

Компьютерное моделирование в целом воспроизводит феноменологию сферических диффу-

зионных пламен, наблюдавшихся в космических экспериментах. Это означает, что разработанная физико-математическая модель позволяет трактовать наблюдаемые эффекты. Действительно, модель удовлетворительно описывает зависимость радиуса пламени и температуры ПС от времени в условиях, когда массовый расход горючего газа изменяется в 5 раз (от 1 до 5 мг/с), а содержание горючего в нем изменяется от 30% до 100%. Расчеты показывают, что с течением времени температура горения в сферическом диффузионном пламени медленно снижается, что главным образом вызвано потерями на излучение сажи и трехатомных молекул (CO_2 и H_2O). Это согласуется с экспериментами, в которых наблюдается постепенное снижение интенсивности свечения пламени вплоть до его погасания. Несмотря на упрощенное моделирование сажеобразования, в расчетах, как и в экспериментах, сажа образуется внутри пламени, причем количество образуемой сажи зависит от условий эксперимента и возрастает с увеличением содержания горючего в газе, подаваемом в ПС.

Проведенные расчеты показывают, что с течением времени в пространстве, окружающем сферическое диффузионное пламя, происходит накопление сажи. В отличие от экспериментов, в которых в основном наблюдается движение сажевых частиц по направлению к ПС, в расчетах сажа, образовавшись, диффундирует как по направлению к ПС, так и по направлению к внешней стенке камеры (через пламя). Последнее можно объяснить тем, что разработанная модель не учитывает явления термодиффузии и термофореза, а также высокими значениями энергий активации реакций окисления сажи водяным паром и диоксидом углерода в используемом механизме образования и окисления сажи.

Дальнейшие исследования будут направлены на уточнение модели и изучение условий самопроизвольного радиационного погасания пламени.

Литература

1. Flickr. www.flickr.com/photos/space-flames.
2. Space Flames. www.facebook.com/space.flames.
3. Zarevo. <https://tsniimash.ru/science/scientific-experiments-onboard-the-is-rs/cnts/experiments/zarevo/>.
4. *Sunderland P. B., Axelbaum R. L., Urban D. L., Chao B. H., Liu S.* Effects of structure and hydrodynamics on the sooting behavior of spherical microgravity diffusion flames // *Combust. Flame*, 2003. Vol. 132. P. 25–33.
5. *Christiansen E. W., Tse S. D., Law C. K.* A computational study of oscillatory extinction of spherical diffusion flames // *Combust. Flame*, 2003. Vol. 134. P. 327–337.
6. *Tang S., Chernovsky M. K., Im H. G., Atreya A.* A computational study of spherical diffusion flames in microgravity with gas radiation. Part I: Model development and validation // *Combust. Flame*, 2010. Vol. 157. P. 118–126. doi: 10.1016/j.combustflame.2009.09.010.
7. *Lecoustre V. R., Sunderland P. B., Chao B. H., Axelbaum R. L.* Numerical investigation of spherical diffusion flames at their sooting limits // *Combust. Flame*, 2012. Vol. 159. P. 194–199. doi: 10.1016/j.combustflame.2011.05.022
8. *Nayagam V., Dietrich D. L., Williams F. A.* Radiative extinction of burner-supported spherical diffusion flames: A scaling analysis // *Combust. Flame*, 2019. Vol. 205. P. 368–370. doi: 10.1016/j.combustflame.2019.04.027.
9. *Markan A., Baum H. R., Sunderland P. B., Quintiere J. G., de Ris J. L.* Transient ellipsoidal combustion model for a porous burner in microgravity // *Combust. Flame*, 2020. Vol. 212. P. 93–106. doi: 10.1016/j.combustflame.2019.09.030.
10. *Williams F. A.* Combustion theory. — Menlo Park, CA, USA: The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc. 1985. P. 636, 637.
11. *Forchheimer P.* Wasserbewegung durch boden // *Z. Ver. Dtsch. Ing.*, 1901. Vol. 45. No. 50. P. 1781–1788.
12. *Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М.* Механизмы окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов: переход от C₁–C₁₀ к C₁₁–C₁₆ // *Хим. физика*, 2013. Т. 32. № 4. С. 1–10.
13. *Басевич В. Я., Медведев С. Н., Фролов С. М., Фролов Ф. С., Басара Б., Пришинг П.* Макрокинетическая модель для расчета эмиссии сажи в дизеле // *Горение и взрыв*, 2016. Т. 9. № 3. С. 36–46.
14. TNF Workshop. <https://tnfworkshop.org/radiation/>.
15. *Reid R. C., Prausnitz J. M., Sherwood T. K.* The properties of gases and liquids. — New York, NY, USA: McGrawHill, 1977. 703 p.

Поступила в редакцию 14.02.2021

SPHERICAL DIFFUSION FLAME OF ETHYLENE IN THE SPACEFLIGHT EXPERIMENT “ADAMANT”

S. M. Frolov, S. N. Medvedev, and F. S. Frolov

N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation

Abstract: The joint spaceflight experiment Flame Design (Adamant) of NASA and Roscosmos is one of six experiments currently conducted at the International Space Station as part of the ACME (Advanced Combustion via Microgravity Experiments) project. The objective of the experiment is to study the fundamental mechanisms of control of soot formation in a spherical diffusion flame (SDF) formed around a porous sphere and the radiative extinction of the SDF under microgravity conditions. The objects of research are “direct” and “inverse” SDFs of gaseous ethylene in an oxygen atmosphere with additives of inert gases (nitrogen and carbon dioxide) at room temperature and subatmospheric and atmospheric pressures. The “direct” flame is a flame formed in an oxidizing atmosphere when fuel is supplied through the porous sphere. The “inverse” flame is a flame formed in a fuel atmosphere when an oxidizing agent is fed through the porous sphere. The experimental data are used to test one-dimensional, two-dimensional, and three-dimensional physical and mathematical models of the phenomenon, including reduced and detailed kinetic mechanisms of ethylene oxidation and combustion, soot formation, transport properties in a multicomponent gas mixture, as well as convective and conductive heat transfer and heat transfer by radiation. It is expected that the project will provide new knowledge about the physics and chemistry of diffusion flames which will help in solving the problems of combustion control and reduction of harmful combustion emissions. The article presents some current experimental and theoretical results of the project.

Keywords: spaceflight experiment; microgravity; spherical diffusion flame; ethylene; numerical simulation

DOI: 10.30826/CE21140102

Figure Captions

Figure 1 A porous sphere with a thermocouple and a gas supply tube (a); nonsooting diffusion flame (b); and sooting diffusion flame (c)

Figure 2 Determination of the flame radius in the experiment (by the average size of the luminous zone) (a) and in the calculation (by the distance to the gas temperature maximum) (b)

Figure 3 Computational domain (Inlet; Buffer channel; Porous sphere; Outer space; Outer wall)

Figure 4 Spatial distributions of temperature and mass fractions of ethylene, oxygen, acetylene, and soot 20 s after ignition; flame #10

Figure 5 Spatial distributions of the soot mass fraction 10 (1), 20 (2), and 30 s (3) after ignition

Figure 6 Comparison of predicted (curves) and measured (signs) time histories of flame radius: (a) flame #2; (b) #8; (c) #10; and (d) flame #5

Figure 7 Comparison of predicted (curves) and measured (signs) time histories of porous sphere temperature: (a) flame #2; (b) #8; (c) #10; and (d) flame #5

Figure 8 Predicted time histories of the maximum gas temperature (a) and cumulated soot mass fraction (b): 1 — flame #2; 2 — #8; 3 — #10; and 4 — flame #5

Table Caption

Experimental conditions for selected spherical diffusion flames

Acknowledgments

This work is implemented within the spacecraft experiment “Adamant.” The authors are grateful to their colleagues at the N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences (V. Ya. Basevich, A. A. Belyaev, V. S. Posvyanskii, M. Yu. Sinev, and P. A. Vlasov) as well as to R. L. Axelbaum of Washington University in St. Louis, P. B. Sunderland of the University of Maryland, and D. L. Urban of the NASA Glenn Research Center for fruitful collaboration.

References

1. Flickr. Available at: www.flickr.com/photos/space-flames (accessed February 14, 2021).
2. Space Flames. Available at: www.facebook.com/space.flames (accessed February 14, 2021).
3. Zarevo. Available at: <https://tsniimash.ru/science/scientific-experiments-onboard-the-is-rs/cnts/experiments/zarevo/> (accessed February 14, 2021).
4. Sunderland, P. B., R. L. Axelbaum, D. L. Urban, B. H. Chao, and S. Liu. 2003. Effects of structure and hydrodynamics on the sooting behavior of spherical microgravity diffusion flames. *Combust. Flame* 132:25–33.
5. Christiansen, E. W., S. D. Tse, and C. K. Law. 2003. A computational study of oscillatory extinction of spherical diffusion flames. *Combust. Flame* 134:327–337.
6. Tang, S., M. K. Chernovsky, H. G. Im, and A. Atreya. 2010. A computational study of spherical diffusion flames in microgravity with gas radiation. Part I: Model development and validation. *Combust. Flame* 157:118–126. doi: 10.1016/j.combustflame.2009.09.010.
7. Lecoustre, V. R., P. B. Sunderland, B. H. Chao, and R. L. Axelbaum. 2012. Numerical investigation of spherical diffusion flames at their sooting limits. *Combust. Flame* 159:194–199. doi: 10.1016/j.combustflame.2011.05.022.
8. Nayagam, V., D. L. Dietrich, and F. A. Williams. 2019. Radiative extinction of burner-supported spherical diffusion flames: A scaling analysis. *Combust. Flame* 205:368–370. doi: 10.1016/j.combustflame.2019.04.027.
9. Markan, A., H. R. Baum, P. B. Sunderland, J. G. Quintiere, and J. L. de Ris. 2020. Transient ellipsoidal combustion model for a porous burner in microgravity. *Combust. Flame* 212:93–106. doi: 10.1016/j.combustflame.2019.09.030.
10. Williams F. A. 1985. *Combustion theory*. Menlo Park, CA: The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc. 636, 637.
11. Forchheimer, P. 1901. Wasserbewegung durch boden. *Z. Ver. Dtsch. Ing.* 45(50):1781–1788.
12. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, V. S. Posvyanskii, and S. M. Frolov. 2013. Mechanisms of the oxidation and combustion of normal paraffin hydrocarbons: Transition from C₁–C₁₀ to C₁₁–C₁₆. *Russ. J. Phys. Chem. B* 7(2):161–169. doi: 10.1134/S1990793113020103.

13. Basevich, V. Ya., S. N. Medvedev, S. M. Frolov, F. S. Frolov, B. Basara, and P. Prieching. 2016. Makrokineticheskaya model' dlya rascheta emissii sazhi v dizele [Macrokinetic model for calculating soot emission in Diesel engine]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 9(3):36–46.
14. TNF Workshop. Available at: <https://tnfworkshop.org/radiation/> (accessed February 14, 2021).
15. Reid, R. C., J. M. Prausnitz, and T. K. Sherwood. 1977. *The properties of gases and liquids*. New York, NY: McGrawHill. 703 p.

Received February 14, 2020

Contributors

Frolov Sergey M. (b. 1959) — Doctor of Science in physics and mathematics, head of department, head of laboratory, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; smfrol@chph.ras.ru

Medvedev Sergey N. (b. 1986) — Candidate of Science in physics and mathematics, senior research scientist, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; medvsn@gmail.com

Frolov Fedor S. (b. 1981) — Candidate of Science in physics and mathematics, senior research scientist, N. N. Semenov Federal Research Center for Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; f.frolov@chph.ru