

ВЫБОР МЕХАНИЗМА ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ МЕТАН - ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ ПРИ ТЕМПЕРАТУРЕ ОТ 900 ДО 1740 К

Лосик Е. С., Лещевич В. В., Севрук К. Л., Пенязьков О. Г.

«Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси», Минск, Беларусь,

В настоящее время, в связи с увеличением мощности вычислительной техники и компьютерного моделирования сложных физических явлений, широкое распространение получили детальные механизмы химической кинетики [1-4] для описания процессов воспламенения, горения и детонации в реагирующих средах. Тем не менее, построение и верификация данных моделей невозможно без наличия исходных экспериментальных данных. Одной из наиболее применяемых для этих целей макрокинетических характеристик реагирующей среды, которая может быть достаточно точно определена из эксперимента, является зависимость времени индукции горючей смеси (задержки самовоспламенения) от температуры и концентрации исходных компонентов.

Среди множества экспериментальных методик измерения задержек самовоспламенения лидирующее место занимает техника ударных труб (УТ), позволяющая изучать быстротекающие процессы в газовых смесях при высоких температурах (более 1500 К) и практически в идеальных газодинамических условиях. Но так как в области промежуточных и низких температур время индукции смеси увеличивается, и влияние газодинамических эффектов становится существенным, в связи с образованием пограничного слоя и воздействием контактной поверхности на нагретую за отраженной волной горючую смесь, правильность трактовки измерений может существенно ухудшаться. Это приводит к тому, что полученные с помощью техники УТ данные в этой области температур не могут быть напрямую использованы для верификации кинетических схем. Наиболее адекватным в этом случае является использование других методик, например реакторов и установок быстрого сжатия (УБС). Тем не менее, измерения с помощью данных устройств также ограничиваются определенным температурным диапазоном. Например, минимальное время индукции, которое может быть определено в проточных реакторах, ограничено временем перемешивания исходных компонентов смеси, а в УБС временем сжатия. Максимальное же время задержки самовоспламенения, которое может быть достоверно измерено с помощью УБС, определяется скоростью теплоотдачи от нагретой при сжатии поршнем среды стенкам камеры сгорания. Таким образом, чтобы получить массив экспериментальных данных в диапазоне температур, наиболее привлекательном для практического применения, необходимо использовать одновременно несколько экспериментальных методик. Тем не менее, исторически, существующие детальные кинетические механизмы химических реакций разрабатывались и верифицировались с помощью данных, полученных только на ударных трубах, что вызывает сомнения об их пригодности для описания процессов при более низких температурах. Поэтому целью данной работы была проверка наиболее популярных механизмов одновременно с помощью данных, полученных на УТ и УБС для одинаковых газовых смесей и выбор оптимальной схемы для моделирования процессов самовоспламенения в определенном температурном диапазоне.

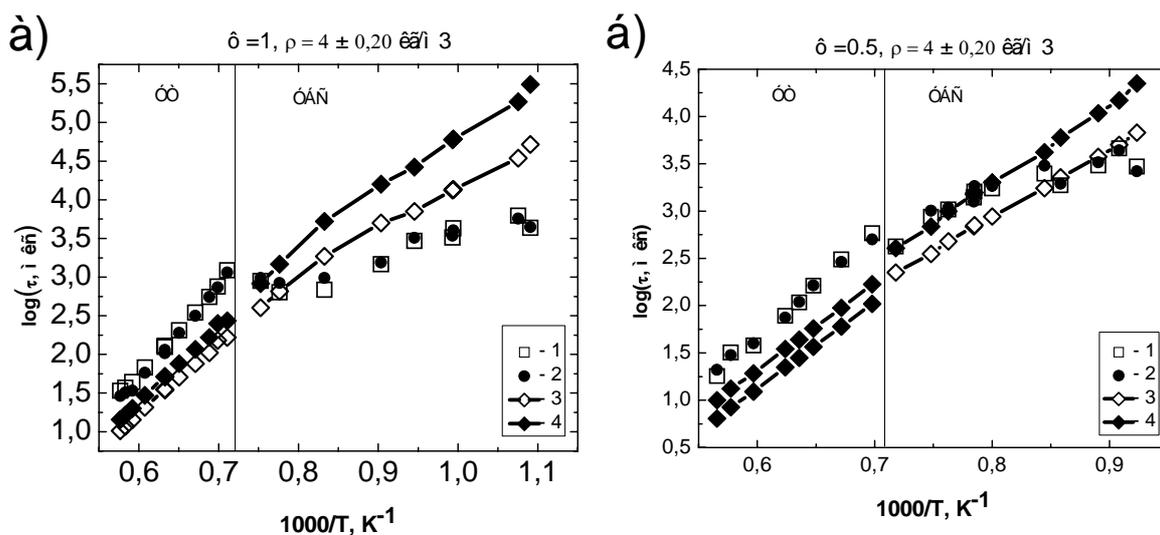
В данной работе использовались механизмы GRI-mech [3] и Konnov's Chemkin [4]. Такой выбор обусловлен их широким применением при моделировании процессов горения углеводородных топлив и открытым доступом к этим базам данных. Оптимальный механизм определялся путем сравнения задержек самовоспламенения,

экспериментально измеренных на УТ [5] и УБС [6] со значениями, определенными в ходе моделирования с применением указанных детальных механизмов.

Экспериментальные данные, использованные для сравнения, были получены для стехиометрической, обедненной и обогащенной (коэффициент стехиометрии $\phi = 1; 0,5$ и 2 соответственно) смеси метан–воздух в диапазоне температур $900 - 1740$ К. Для получения корректной температурной зависимости времени индукции от температуры смеси эксперименты на УТ и УБС проводились для двух постоянных плотностей (2 и 4 кг/м³). Это позволяет не учитывать влияние концентрации исходных компонентов газовой смеси на время индукции и получить простую корреляционную зависимость задержки самовоспламенения от температуры. Для определения задержек самовоспламенения в экспериментах регистрировалось свечение возбужденных радикалов ОН на длине волны $308,9$ нм, СН радикалов на длине волны $431,5$ нм и изменение давления в тестовом объеме.

Время индукции самовоспламенения смеси как в экспериментах, так и в расчетах определялось как временной интервал от момента установления максимального давления в рабочем объеме до 5% прироста давления и изменения концентрации радикалов СН и ОН (в экспериментах соответственно 5% прирост сигналов ФЭУ) вследствие воспламенения горючей смеси.

В качестве начальных данных для моделирования использовались экспериментальные значения давления за отраженной ударной волной (для УТ) и максимальное давление в конце такта сжатия (для УБС). Температура за отраженной ударной волной рассчитывалась из уравнения ударной адиабаты, используя измеренную скорость падающей волны в предположениях об одномерности газового потока, отсутствии теплопотерь и вязкости. Температура в конце такта сжатия УБС рассчитывалась, используя измеренное максимальное давление и полиномиальную зависимость теплоемкости смеси газов от температуры (для УБС), также в предположении отсутствия теплопотерь.



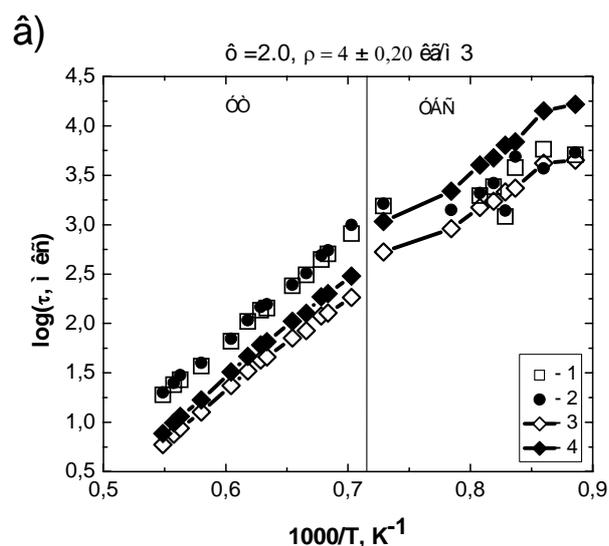


Рис. 1. Зависимость времен индукции стехиометрической (а), обедненной (б) и обогащенной (в) метан - воздушных смесей при плотности $4.0 \pm 0.20 \text{ кг/м}^3$: 1, 2 – экспериментальные измерения по свечению радикалов СН и ОН соответственно, 3, 4 – значения, рассчитанные по изменению концентрации ОН, полученному при моделировании с использованием механизма Konnov's chemkin и GRI-mech соответственно.

Экспериментальные значения времен индукции стехиометрической, обедненной и обогащенной метан-воздушных смесей для конечной плотности $4.0 \pm 0.20 \text{ кг/м}^3$ изображены точками 1, 2 на рис. 1а, 1б, 1в соответственно. Линиями 3, 4 на этих графиках представлены значения, вычисленные с использованием механизмов GRI-mech и Konnov's chemkin. Так как задержки самовоспламенения, определенные по полученному в ходе моделирования изменению концентрации радикалов СН и ОН в индукционный период, отличаются незначительно, на графиках представлены только значения, измеренные по приросту концентрации ОН радикалов.

Таким образом, было установлено, что в области более высоких температур (1400-1740 К) рассчитанные данные лежат ниже экспериментальных, а в низкотемпературной области (900- 1400 К) выше. Такая же зависимость была выявлена и для смесей при плотности $2 \pm 0,10 \text{ кг/м}^3$. Кроме этого, теоретические значения в области более низких температур соотносятся хуже (расхождение 25 – 30 %) с экспериментальными данными, чем в области более высоких (отличие 17 – 20 %). По нашему мнению, это обусловлено несколькими причинами. С одной стороны, это может быть связано с тем, что расчеты проводились для идеальных условий, без учета возможного влияния продолжительности процесса сжатия, незначительных пульсаций давления и теплопотерь на измеренные с помощью УБС значения времени индукции. С другой стороны, существует вероятность того, что расчеты аппроксимируют низкотемпературную область довольно неточно, так как использованные механизмы разрабатывались и верифицировались на данных, полученных при высоких температурах.

Для обедненной и обогащенной смеси наблюдается похожая картина. Однако для бедной смеси в области более низких температур (900 – 1390 К) рассчитанные с применением рассмотренных механизмов значения лучше совпадают с экспериментальными данными.

Таким образом, в результате сравнения задержек самовоспламенения метан - воздушной смесей, экспериментально измеренных на УБС и на УТ со значениями, определенными в ходе моделирования процессов самовоспламенения с применением механизмов химической кинетики GRI-mech и Konnov's Chemkin можно сделать следующие выводы:

1. Теоретические значения в области более низких температур (900 – 1400 К) соотносятся значительно хуже с экспериментальными данными, чем в высокотемпературной области (1400 – 1740 К).
2. Для моделирования процессов высокотемпературного горения более рациональным использовать детальный механизм GRI-mech, так как он лучше соотносится с экспериментальными значениями, чем результаты Konnov's chemkin, а для низкотемпературного горения – Konnov's chemkin.

Литература

1. Combustion Kinetics Laboratory [электронный ресурс] – Режим доступа: <http://ignis.usc.edu/Mechanisms/Model%20release.html> Дата доступа: 18.02.2012
2. The San Diego Mechanism [электронный ресурс] – Режим доступа: <http://web.eng.ucsd.edu/mae/groups/combustion/mechanism.html> Дата доступа: 18.02.2012
3. Gas Research Institute reaction mechanism (GRI Mech, version 3.0) [электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/> Дата доступа: 15.11.2011
4. Alexander Konnov's combustion mechanisms (version 0.5) [электронный ресурс] – Режим доступа: <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/> Дата доступа: 15.11.2011
5. Penyazkov O.G., Sevrouk K.L., Tangirala V., and Joshi N., Auto-ignitions of methane/air mixtures at elevated temperatures and pressures, Proceedings of 7th ISHPMIE, July 7–11, 2008, Vol. 1, P. 101–107.
6. Leschevich V.V., Penyazkov O.G., Tangirala V. E., and Joshi N. D., RCM study of methane auto-ignitions at intermediate temperatures, Proc. of Combustion Institute – Canadian Section Spring Technical Meeting, May 9-12, 2010, Ottawa, Canada