ПРОНИКНОВЕНИЕ ПЛАМЁН РАЗБАВЛЕННЫХ МЕТАНО-КИСЛОРОДНЫХ СМЕСЕЙ ЧЕРЕЗ ДИФФУЗОРЫ И КОНФУЗОРЫ

<u>Н.М. Рубцов*</u>, Г.И. Цветков и В.И. Черныш

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова Российской академии наук, г. Черноголовка, Россия *<u>nmrubtss@mail.ru</u>

В случае техногенной аварии в атмосферу может быть выброшено существенное количество легковоспламеняющегося газа. После смешения с атмосферным воздухом, получившаяся взрывчатая смесь при воспламенении может подвергнуть опасности целостность помещения, в котором произошла авария. В связи со сложностью, как физико-химических процессов горения, так и геометрии реактора, особенности распространения пламени и нагрузки на фрагменты реактора сложной геометрии не могут быть к настоящему времени рассчитаны с нужной точностью. Полная система уравнений Навье-Стокса для сжимаемой реагирующей среды с целью описания медленных процессов турбулентного горения может быть приемлемо упрощена и решена для неизотермических потоков только в приближении малого числа Маха [1, 2]. При этом любое сравнение экспериментально зарегистрированного движения фронта пламени (ФП) с результатом численного моделирования может считаться достоверным только в качественном аспекте, поскольку теоремы единственности для уравнений Навье-Стокса в сжимаемой реагирующей среде отсутствуют. Кроме того, подавляющее большинство кинетических параметров не известно с достаточной точностью, чтобы сделать адекватные выводы на основе численного моделирования, и вопрос полноты кинетического механизма также всегда является открытым. Таким образом, целесообразными являются качественные расчёты, позволяющие прослеживать тенденции развития процессов в условиях выполняемых экспериментов.

В работе описано экспериментальное исследование проникновения пламени через конфузор и диффузор. Опыты проводили со стехиометрическими смесями метана и кислорода, разбавленными CO₂ и Kr при начальных давлениях 100–200 мм рт. ст. и начальной температуре 298 К. Использовали горизонтально расположенный цилиндрический кварцевый реактор длиной 70 см и диаметром 14 см [3] в который вставлялась воронка в положении диффузор/конфузор. Использовали коническую воронку диаметром 14 см с углом раскрытия 90⁰, носик воронки составлял 1 см длиной и 1 см в диаметре, материал – оргстекло. Два электрода инициирования пламени искровым разрядом были расположены у торца реактора, который был вакуумно уплотнён в двух шлюзах из нержавеющей стали, снабженных вводами для напуска и откачки газов. Один из шлюзов был снабжен дверцей безопасности, которая открывалась наружу, когда полное давление в реакторе превышало 1 атм.

Воронка была уплотнена так, что волна горения могла её сдвинуть, но проникнуть через препятствие могла только через центральное отверстие. Горючую смесь (15.4% СН₄ + 30.8% O₂ + 46% CO₂ + 7.8% Kr) готовили предварительно; CO₂ добавляли, чтобы уменьшить скорость ФП и соответственно повысить качество съемки; Кг добавляли, чтобы уменьшить энергию пробоя газовой смеси. Реактор заполняли горючей смесью до необходимого давления. Затем осуществляли искровой разряд (энергия разряда 1.5 Дж). Киносъемка динамики распространения фонта горения осуществлялась с боковой стороны реактора с использованием цветной скоростной цифровой камеры Casio Exilim F1 Pro [3]. Изменение давления в ходе горения регистрировали пьезоэлектрическим датчиком, синхронизированным с разрядом.

На рисунке 1 представлены результаты скоростной киносъемки распространения ФП в горючей смеси через диффузор/конфузор, описанный выше. В наших условиях ФП проникает через диффузор, но не проникает через конфузор (рис. 1).

Качественное рассмотрение проникновения пламени через диффузор и конфузор проводилось на примере двухмерной плоской задачи в проекции «вид сбоку» с целью сопоставления результатов качественного расчета с экспериментальными. Как известно из литературы [1], взаимосвязь основных факторов, обуславливающих неустойчивость пламен, гидродинамического и акустического, можно учесть при рассмотрении уравнений Навье-Стокса для сжимаемой среды в акустическом приближении (что соответствует существенно дозвуковым пламенам).

Система безразмерных уравнений Навье-Стокса в приближении малого числа Maxa [1, 2, 4], описывающая распространение пламени в двухмерном канале, показала качественное согласие с экспериментами [4]. Начальные значения и безразмерные параметры были выбраны те же, что и в [4]. Будем рассматривать двумерную задачу:



Рисунок 1. Результаты скоростной съёмки распространения пламени через воронку 14 см в диаметре: а – диффузор, b – конфузор. Смесь 15.4% CH_4 + 30.8% O_2 + 46% CO_2 + 7.8% Kr при начальном давлении 170 мм рт. ст., скорость съемки 600 кадров/с. Число на кадре соответствует номеру кадра после инициирования воспламенения. Результаты численного расчёта изменения безразмерной температуры пламени для реакции первого порядка для распространения пламени через препятствие: с – конфузор, угол раскрытия 90°; d – конфузор, угол раскрытия 150°; е – конфузор, угол раскрытия 150°, большее отверстие; f – диффузор, угол раскрытия 150°. Шкала изменения безразмерной температуры приведена слева.

$$\rho T = P, \qquad (a)$$

$$\rho_t + (\rho v)_y + (\rho u)_x = 0, \qquad (6)$$

$$\rho \left[u_t + v u_y + u u_x \right] + \frac{P_y}{\gamma M^2} = \frac{1}{\mathrm{Fr}} + \mathrm{Sc} \left(\nabla^2 v + \frac{1}{3} K_y \right), \tag{B}$$

$$\rho\left(v_t + vv_y + vu_x\right) + \frac{P_x}{\gamma M^2} = \frac{1}{\mathrm{Fr}} + \mathrm{Sc}\left(\nabla^2 u + \frac{1}{3}K_x\right) \tag{1}$$

$$\rho \Big[T_r + \nabla T_y + u T_x \Big] - \frac{(\gamma - 1)P_t}{\gamma} - (\gamma - 1)M^2 \Big[P_t + u P_x + v P_y \Big] = \nabla^2 T + \beta_1 W, \quad (A)$$

$$\rho \Big[C_t + v C_y + u C_x \Big] = \nabla^2 C - \beta W , \qquad (e)$$

$$W = \left(1 - C\right) \exp\left(\zeta - \frac{\zeta}{T}\right),\tag{*}$$

$$P_{tt} - \frac{1}{M^2 \nabla^2 P} = q \left(C_p - 1 \right) \beta_1 W_t \,, \tag{3}$$

Где K= u_x + v_y – член, учитывающий вязкую диссипацию; σ^2 – двухмерный оператор Лапласа; $P(x, y, t) = P_0(t) + \gamma M^2 p_2(x, y, t) + O(M^3)$, где $P_0(t)$ – статическое давление, которое рассчитывается на основе законов сохранения [5]; p2 (x, y, t) – динамическое давление; (u, v) – компоненты скорости в направлениях (x, y) соответственно; ρ -плотность; T – температура. Химическая реакция представлена одностадийной реакцией Аррениуса первого порядка; P – давление; C – концентрация реагирующего вещества; 1-C – степень превращения реакции; ζ – безразмерный коэффициент, имеющий смысл E/R, где E – энергия активации, R – газовая постоянная. Безразмерный параметр – критерий Шмидта Sc = v/D, где D – коэффициент диффузии, v – кинематическая вязкость; γ – отношение теплоемкостей при постоянном давлении и постоянном объеме; β_1 характеризует выделение тепла на единицу концентрации C; β – кинетический коэффициент (пропорциональный второму числу Дамкёлера [6]). Плотность, температуру, давление и концентрацию обезразмеривали с использованием начальных значений: $\rho_0 = 0.001 \, г/cm^3$ [7], $T_0 = 1$, $P_0 = \rho_0 T_0$, $\zeta = 10.5$, $\gamma = 1.4$, $\beta = 0.2$, $\beta_1 = 0.3$, $C_P = 0.3$ кал/г.град [7] и $C_0 = 0$, соответственно. Число Льюиса

полагается равным Le=1, что предполагает равенство Sc=Pr, где Pr= $\rho_0 C_p v / \lambda$, λ – коэффициент теплопроводности и С_р – теплоемкость при постоянном давлении. Масштабы длины и скорости определены, как $l_d^2 = Dt_d$ и $U_d = l_d/t_d$, соответственно. Тогда число Рейнольдса с учетом выбора l_d и U_d имеет вид $\text{Re} = l_d U_d / v = 1/\text{Sc}$. Число Фруда $Fr = U_d^2/gl_d$, где g – ускорение свободного падения, принималось равным 0. Число Маха определено, как $M = U_d/c_0$ и принято равным 0.025, где c_0 – скорость звука. Очевидно, если M = 0, то колебания давления отсутствуют. При $M \rightarrow 0$ исходное значение среднего давления P_0 становится намного выше, чем среднее значение $\rho_0 U_d^2$ для колебаний давления около среднего давления P₀. Поле скоростей в зависимости от градиента давления определялось этими колебаниями давления вокруг его среднего значения. Если используется стандартное представление давления, тогда обычная замена переменных $P = P_0 p$ приводит к появлению фактора $1/M^2$ в члене grad p в уравнении импульса [2]. $P_{tt} = D^2 P/Dt^2$, D/Dt - материальная производная. В расчетахпринималось, что значения давления удовлетворяют волновому уравнению (последнее уравнение (1)), которое в допущении малых возмущений, вносимых волной, можно получить из уравнений неразрывности и сохранения импульса с учетом внутренних источников энергии и в пренебрежении членами, имеющими порядок $1/M^4$ [8].

В ряде расчетов скорость реакции задавалась не уравнением Аррениуса, а с помощью простейшего цепного механизма

$$C \rightarrow 2n$$
 w_0
 $n + C \rightarrow 3n +$ продукты W

где C – безразмерная концентрация исходного вещества, n – безразмерная концентрация активного промежуточного продукта, w_0 и W – скорости реакций зарождения и разветвления реакционных цепей соответственно. В дальнейших расчётах скорость реакции зарождения w_0 для процесса распространения пламени считается малой [7].

Температурная зависимость скорости реакции n + C \rightarrow 3n + продукты описывается законом Аррениуса. В этом случае уравнения (е) и (ж) системы (1) заменяли на следующие уравнения: $\rho [C_t + vC_y + uC_x] = \nabla^2 C - \beta n W$,

$$\rho \Big[n_t + v n_y + u n_x \Big] = \nabla^2 n + 2\beta n W$$

$$W = C \exp\left(\zeta - \frac{\zeta}{T}\right)$$

Начальное условие для концентрации исходного вещества изменяется на $C_0=1$. Условие инициирования T=10 на правой границе канала (начальная безразмерная температура T=1); в канале находится одиночная вертикальная преграда с центрально расположенным отверстием или сферическая сетчатая преграда. Граничные условия (включая препятствие) $C_x = 0$, $C_y = 0$, n = 0, u = 0, v = 0, $\rho_x = 0$, $\rho_y = 0$, а также конвективный теплообмен $T_t = T - T_0$.

Результаты моделирования находятся в качественном согласии с результатами эксперимента (рис. 1a, 1b). Действительно, в согласии с опытом пламя проникает через диффузор (рис. 1a, 1f), а проникновение пламени через конфузор не наблюдается, имеет место тушение пламени (рис. 1b, 1c, 1d). Такое качественное отличие от процесса проникновения пламени через плоское препятствие с центральным отверстием [4] указывает на заметную роль взаимодействия акустических колебаний в реакторе, содержащем препятствие, с распространяющимся фронтом горения. Кроме того, численный эксперимент показывает, что при более широком отверстии воронки пламя проникает через конфузор, т.е. существует критический диаметр отверстия; угол раскрытия воронки слабо влияет на проникновение пламени. Результаты экспериментов могут быть использованы для совершенствования численных моделей распространения пламени и решения вопросов взрывобезопасности.

Литература

- [1] Th. Alasard, Archive for Rational Mechanics and Analysis, 180, (2006) 1–73.
- [2] A. Majda, Applied Mathematical Sciences, Springer-Verlag, New York, 1984, p. 150.
- [3] N.M. Rubtsov, B.S. Seplyarskii, K.Ya. Troshin, V.I. Chrenysh, G.I. Tsvetkov, Mendeleev Comm., 21, (2011) 218–221.
- [4] N.M. Rubtsov, The Modes of Gaseous Combustion, Springer International Publishing, 2016, p. 302
- [5] Nicoud, F., J. Comput. Phys. 158, (2000) 71 82.
- [6] V. Akkerman, V. Bychkov, A. Petchenko, L.-E. Eriksson, Combustion and Flame, 145, (2006) 675-687
- [7] B. Lewis, G. Von Elbe, Combustion, Explosions and Flame in Gases, New York, London.: Acad.Press, 1987, p.566
- [8] Clavin, P., Ann. Rev. Fluid Mech., 26, (1994) 321-352