

УДК 536.46

Выбор детальной модели химической кинетики в расчетах газодинамики горения

08, август 2012

А.Е. Смыгалина

*Студент
кафедра «Физика»*

*Научный руководитель: М.Ф. Иванов,
доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Физика»*

МГТУ им. Н.Э. Баумана
Anna.smygalina@gmail.com

Актуальной задачей современной теории горения является исследование переходных нестационарных режимов горения, что обусловлено востребованностью фундаментальных знаний о протекающих процессах при решении задач разработки широкого класса энергетических установок от двигателей внутреннего сгорания, включая перспективные детонационные двигатели, до камер сгорания теплоэлектроцентралей. К настоящему времени сформировались достаточно устойчивые теоретические представления о физических процессах, определяющих стационарные режимы дозвукового (медленного) горения и сверхзвуковой детонации. Однако, в реальной ситуации процессы распространения волн горения в ограниченных объемах (например, в камере сгорания или в хранилище газообразного горючего) представляют собой последовательность нестационарных режимов, обусловленных большим разнообразием физико-химических факторов. При компьютерном моделировании газодинамики нестационарных режимов горения важно достоверное описание процесса химического превращения, определяющего весь процесс. Происходящие химические процессы цепного превращения реагентов наиболее адекватно описываются полными кинетическими схемами, включающими в себя уравнения химических реакций с участием промежуточных продуктов. Широко распространено использование одношаговых аррениусовских моделей, имеют распространение двухшаговые и трехшаговые модели и модели глобальной кинетики. Однако для более детального описания целесообразно использовать редуцированные схемы химической кинетики, в которых сохраняются ведущие реакции, определяющие процесс. Наиболее надежной и хорошо изученной является кинетика горения водородосодержащих смесей (водород-воздух, водород-кислород), что определяет наличие большого числа редуцированных схем, описывающих их горение. Несмотря на непрерывно ведущиеся работы в этом направлении, остается нерешенным вопрос корректности выбора кинетической схемы для совместного ее решения с уравнениями газовой динамики.

Данная работа имеет своей целью изучить, как влияет выбор схемы химической кинетики на результаты численных экспериментов, проведенных с использованием программного кода, предназначенного для комплексного изучения процессов горения горючих газообразных смесей, разработанного в ОИВТ РАН. Результаты настоящей работы можно также приобщить в систему валидации и верификации используемого программного кода. Кроме того, результаты должны показать, какая схема химической кинетики наиболее точно соответствует экспериментальным данным.

В работе рассматриваются четыре наиболее распространенные схемы химической кинетики горения водородосодержащих смесей: схема из девяти элементарных реакций, рекомендованная ОИВТ РАН [1], схема из 19 реакций, взятая из монографии [2], схема из 21 реакции [3], разработанная в ИХФ РАН, а также схема [4], составленная в Университете Беркли.

Первоначальное сравнение различных кинетических механизмов может быть проведено при рассмотрении исключительно процесса химического превращения (т.е. без рассмотрения диффузии и теплопередачи). Таким образом, одной из задач работы являлся расчет времен индукции смеси водород-воздух. Указанная задача может быть решена в рамках так называемой нульмерной задачи горения. Для численного решения задачи система дифференциальных уравнений химической кинетики на каждом выбранном временном шаге решалась с использованием специальной подпрограммы, взятой из стандартной библиотеки Slatec [7], в основу которой заложен метод Гира решения жестких дифференциальных уравнений. Константы скоростей химических реакций рассчитывались по закону Аррениуса с зависящим от температуры предэкспоненциальным коэффициентом. Расчет теплоемкости был проведен на основе метода представления термодинамических характеристик веществ в виде полиномов пятого порядка по температуре.

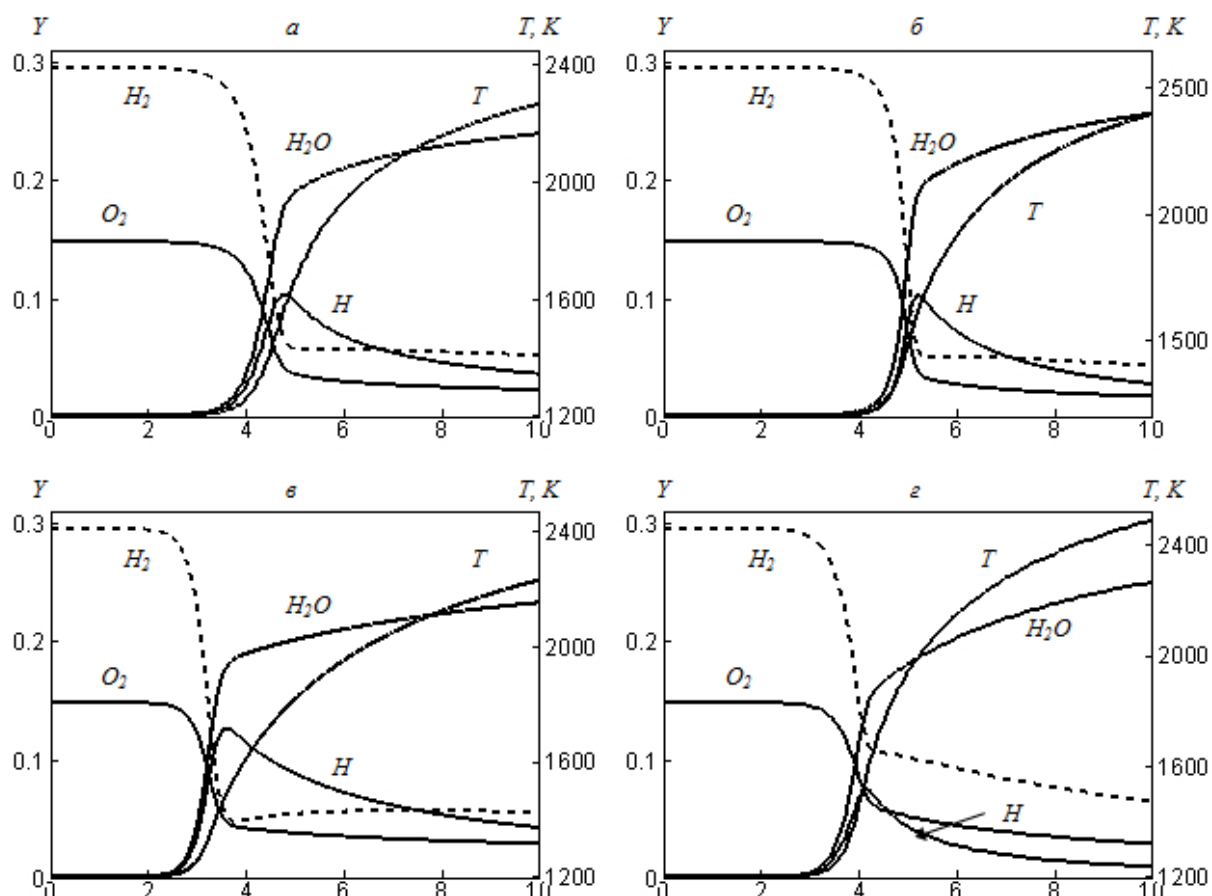


Рис.1 Профили концентраций и температуры, рассчитанные с использованием схем [1-4] для рисунков а-г соответственно ($p=1$ bar, $\%N_2=55,6$)

Результаты расчетов – временные профили концентраций и химических компонентов, представленные на рис.1. Подобные профили позволяют определить время индукции данной горючей смеси при выбранной температуре и давлении как время, прошедшее от начального момента до момента, когда мольная доля промежуточного компонента (радикала Н) достигнет максимального значения [2]. Значения времен индукции, рассчитанные для начальных температур горючей смеси 800-3000 К (при стандартном давлении), показаны на рис.2. Зависимость времени индукции от давления (в диапазоне 0,1-1,2 МПа, $T=1050$ К) представлена на рис.3.

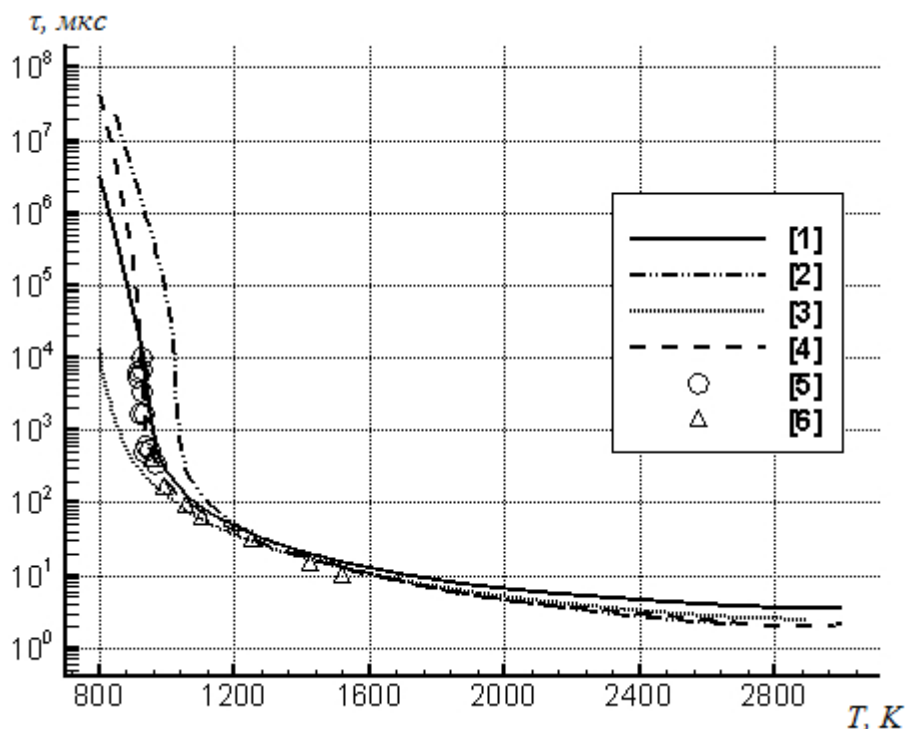


Рис.2 Зависимости времен индукции от начальной температуры ($p=1$ bar, 55,6% N_2), полученные для разных кинетических схем [1-4], и соответствующие экспериментальные данные [5-6]

Анализ расчетных и экспериментальных данных, приведенных на рис.2, позволяет сделать вывод о том, что все выбранные схемы достаточно хорошо воспроизводят данные по временам индукции при высоких температурах в области за “продленным вторым пределом воспламенения”, где время индукции много меньше времени протекания экзотермической реакции обрыва цепей. Во всем диапазоне температур наиболее достоверно экспериментальные данные воспроизводятся только с помощью отдельных схем. С другой стороны анализ имеющихся экспериментальных данных показывает, что участок, отвечающий малым температурам воспламенения, наименее точно определяется экспериментально в виду сильной чувствительности времени индукции к колебаниям температуры в эксперименте. Представленные на рис.3 расчетные и экспериментальные данные времен индукции при различных давлениях, демонстрируют тот факт, что при проведении экспериментов по определению времени индукции при повышенных давлениях существует определенный разброс значений, и при разработке того или иного механизма элементарных реакций кинетики пользуются некоторым конкретным набором экспериментальных данных, иными словами, каждый кинетический механизм соответствует тем экспериментальным данным, на основе которых он был построен.

Другой важной задачей работы являлось определение ламинарной скорости горения стехиометрической смеси водород-кислород. При этом рассматривалось распространение пламени в гладком одномерном канале с адиабатическими

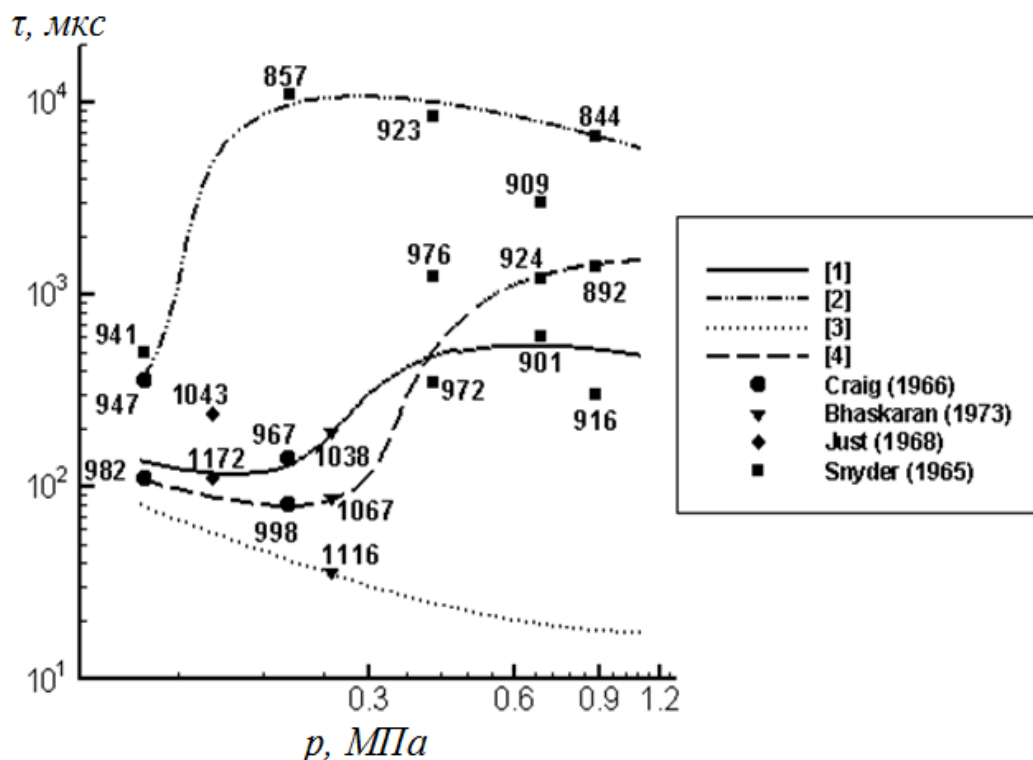


Рис.3 Зависимости времен индукции от начального давления ($T=1050$ К, $55,6\%N_2$), полученные для разных кинетических схем [1-4], и соответствующие экспериментальные данные [5]

стенками. Задача была решена с использованием двух постановок. Первая постановка, наиболее используемая для решения задач по определению ламинарной скорости горения, подразумевала исследование процесса в канале с одним закрытым торцом, от которого происходило движение пламени. Искомая ламинарная скорость может быть найдена по двум формулам [8], которые можно вывести из уравнения неразрывности:

$$D_f^* = U/\theta, \quad (1)$$

$$D_f^{**} = \frac{u_f - u_b}{\rho_f / \rho_b - 1}, \quad (2)$$

где U – скорость движения пламени в канале, θ – коэффициент расширения, u_f , u_b , ρ_f , ρ_b – массовые скорости и плотности непосредственно за и перед фронтом. Формула (1) является менее точной, так как не учитывает реальную динамику движения продуктов сгорания.

Вторая постановка моделирует реальный эксперимент по определению ламинарной скорости пламени и предполагает рассмотрение горения в канале, оба торца которого открыты. В этом случае ламинарная скорость определяется непосредственно из эксперимента: она равна скорости движения пламени в канале.

Результаты численных расчетов скоростей приведены в таблице 1. Так, вторая постановка дает результаты, наилучшим образом согласующиеся с экспериментальным значением скорости. В соответствии с этим в таблице 1 также приведены некоторые параметры горения, полученные при решении задачи во второй постановке.

Таблица 1.

Основные параметры горения смеси водород-кислород

	D_f , м/с	θ	T_b , К	$Y(H_2)$	$Y(H)$	D_f^* , м/с	D_f^{**} , м/с
Эксперим. данные	10,0	8,0	3083,0	0,16	0,08	-	-
Схема из 9 реакций	9,7	7,8	2998,2	0,14	0,06	4,2	7,3
Схема из 21 реакции	11,7	7,6	2892,0	0,16	0,07	6,8	11,6
Схема из 19 реакций	10,0	7,9	3047,5	0,20	0,03	4,4	8,7
Схема из 26 реакций	13,5	7,7	2914,7	0,21	0,03	5,6	12,2

Проведенный сравнительный анализ численного моделирования процессов горения в одномерном канале при использовании различных схем химической кинетики показал, что выбор схемы химической кинетики может сказаться на скорости ламинарного пламени, которая является скоростью горения, несмотря на то, что все схемы удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными по временам индукции, что на практике служит критерием применимости таких схем. Таким образом, при проведении исследований методами численного моделирования необходимо осуществлять тестирование задачи по определению скорости ламинарного пламени. В свою очередь, скорость ламинарного пламени необходимо определять в постановке, близкой к условиям реального физического эксперимента.

Литература

1. Ivanov M.F., Kiverin A.D., Galburt V.A. Computational study of the external shock-wave impact on the combustion regime.// Combustion Science Technology. 2010. V. 182. Iss. 11, P. 1683 — 1692.
2. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ. /Варнатц Ю [и др.] М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. 352 с.
3. Бохон Ю.А., Гальбурт В.А., Гостинцев Ю.А. и др. Развитие взрыва газовой смеси за ударными волнами. Препринт ИВТАН №2-416. М.: 1998. 59с.
4. GRI-Mech3.0, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/version30/text30.html#cite.
5. M. Slack, A. Grillo, Investigation of Hydrogen-Air Ignition Sensitized By Nitric Oxide and Nitrogen Dioxide, NASA Report CR-2896, 1977.
6. E. Schultz, J. Shepherd, Validation of Detailed Reaction Mechanisms for Detonation Simulation, Cal. Inst. of Tech. Graduate Aeronautical Lab. Tech. Rep. FM 99-5, 2000, p. 230.
7. Библиотека стандартных подпрограмм SLATEC. IBM-89.
8. Иванов М.Ф., Киверин А.Д., Рыков Ю.В. Особенности распространения пламени в замкнутых объемах // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Естественные науки» 2010. № 1. С. 21-38.