

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК БЕЛАРУСИ

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова

СБОРНИК ДОКЛАДОВ

**VII Минский международный коллоквиум
по физике ударных волн, горения и детонации
2-5 октября 2023 г.**



МИНСК 2023

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК БЕЛАРУСИ
Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова

СБОРНИК ДОКЛАДОВ

**VII Минский международный коллоквиум
по физике ударных волн, горения и детонации**

2–5 октября 2023 г.

Научное электронное издание

Минск 2023

УДК 536.24

Публикуются доклады, представленные на VII Минский международный коллоквиум по физике ударных волн, горения и детонации (2–5 октября 2023 г.). Доклады посвящены актуальным проблемам динамики систем с ударными волнами, химическими и фазовыми превращениями, рассматриваются вопросы диагностики быстропротекающих процессов и вычислительной газодинамики.

Редакционная коллегия:

академик НАН Беларуси О. Г. Пенязьков
канд. физ.-мат. наук А. Д. Чорный

Рецензенты:

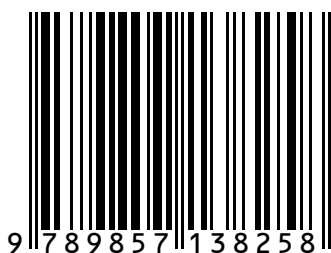
доктор физ.-мат. наук М. А. Журавков
доктор физ.-мат. наук О. С. Рабинович

URL: http://itmo.by/conferences/abstracts/?ELEMENT_ID=24207

URL: <http://itmo.by/conferences/abstracts/mmk-7/MMK-2023.pdf>

Дата доступа: 29.09.2023 г.

ISBN 978-985-7138-25-8



© Институт тепло- и массообмена
имени А. В. Лыкова НАН Беларуси,
2023

УДК 620.92

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАГРЕВА И ИСПАРЕНИЯ ОДНОКОМПОНЕНТНЫХ КАПЕЛЬ**Д.В. Антонов¹, О.В. Высокоморная¹, С.С. Сажин², П.А. Стрижак¹**¹ Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия² Университет Брайтона, Великобритания

Разработка достоверных моделей нагрева капель, испарения и связанных с ними проблем требуется в многочисленных инженерных, фармацевтических и экологических приложениях [1]. Различные подходы к этой задаче освещены в многочисленных статьях и обобщены в монографиях [1, 2]. Обычно используемые подходы к моделированию этих процессов основаны на допущении, что теплопроводность жидкости бесконечно велика, а тепломассоперенос в газовой фазе может быть описан с помощью модели Абрамзона и Сириньяно [3]. Первое предположение обычно основывается на том, что теплопроводность жидкости намного больше, чем теплопроводность паровой фазы. Однако это утверждение применимо к стационарным процессам, но процессы при нагреве и испарении капель являются переходными, и их характеристики в жидкой фазе в основном определяются температуропроводностью, а не теплопроводностью. Значение температуропроводности для газа значительно больше, чем для жидкости [1]. Важность теплопроводности жидкости при анализе нагрева/испарения капель была обоснована в ряде моделей, обобщенных в [1]. Среди них наиболее применимой для практического использования является модель, основанная на аналитическом решении уравнения теплопереноса в капле с учетом граничного условия Робена на ее поверхности. Это решение было реализовано в числовых кодах и использовалось на каждом временном шаге расчетов [4]. Эффект микротечений жидкости внутри капли за счет ее движения относительно окружающего газа рассматривался с использованием модели эффективной теплопроводности [1]. Одно из важнейших допущений модели Абрамзона и Сириньяно [5] состоит в том, что плотность смеси воздуха и пара над поверхностью испаряющейся капли постоянна (не зависит от расстояния до этой поверхности). Это допущение не работает для условий, когда капли испаряются при высокой температуре. В работе [5] представлена модель, не использующая данное допущение. Хотя эта модель не дает явного выражения для скорости испарения, найти эту скорость с помощью предложенного в [5] подхода гораздо проще, чем использовать строгий подход, основанный на уравнениях импульса и сохранения энергии. Также в [5] использовалось предположение об отсутствии градиентов температуры в капле (теплопроводность жидкости бесконечно велика).

Цель настоящей работы – создание и тестирование новой модели нагрева и испарения однокомпонентной капли.

Модель была разработана путем объединения модели жидкой фазы, представленной в [4], и модели газовой фазы, представленной в [5]. Процесс теплопереноса в капле радиусом R_d описывается с помощью аналитического решения нестационарного уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial R^2} + \frac{2}{R} \frac{\partial T}{\partial R} \right), \quad (1)$$

где t – время, R – радиус капли, κ – температуропроводность жидкости.

Считалось, что теплофизические свойства жидкости не зависят от температуры (не меняются в процессе нагрева). Модель учитывала изменение радиуса капли из-за увеличения объема и испарения, но радиус считался постоянным в рамках одного временного шага.

Полное описание математической постановки представлено в [6], а также было задано граничное условие третьего рода.

Алгоритм численного моделирования включал следующие шаги:

1. Задавалось начальное распределение температуры внутри и снаружи капли или использовались распределения, вычисленные на предыдущем временном шаге.
2. Рассчитывалась средняя температура капли по объему.
3. Вычислялись значения теплопроводности.
4. Рассчитывались другие теплофизические свойства жидкости при средней температуре капли.
5. Теплофизические свойства смеси окружающего воздуха и пара при эталонной температуре рассчитывались с использованием «правила 1/3» [9].
6. Рассчитывалась скорость испарения [6].
7. Вычислялись значения числа Нуссельта [6] и соответствующий коэффициент конвективной теплоотдачи.
8. Распределения температуры внутри и снаружи капли вычислялись с использованием решений для жидкой и газовой фаз.
9. Вычислялся радиус капли в конце временного шага с учетом испарения и расширения.
10. Расчет возвращался к шагу 1 и процесс повторялся.

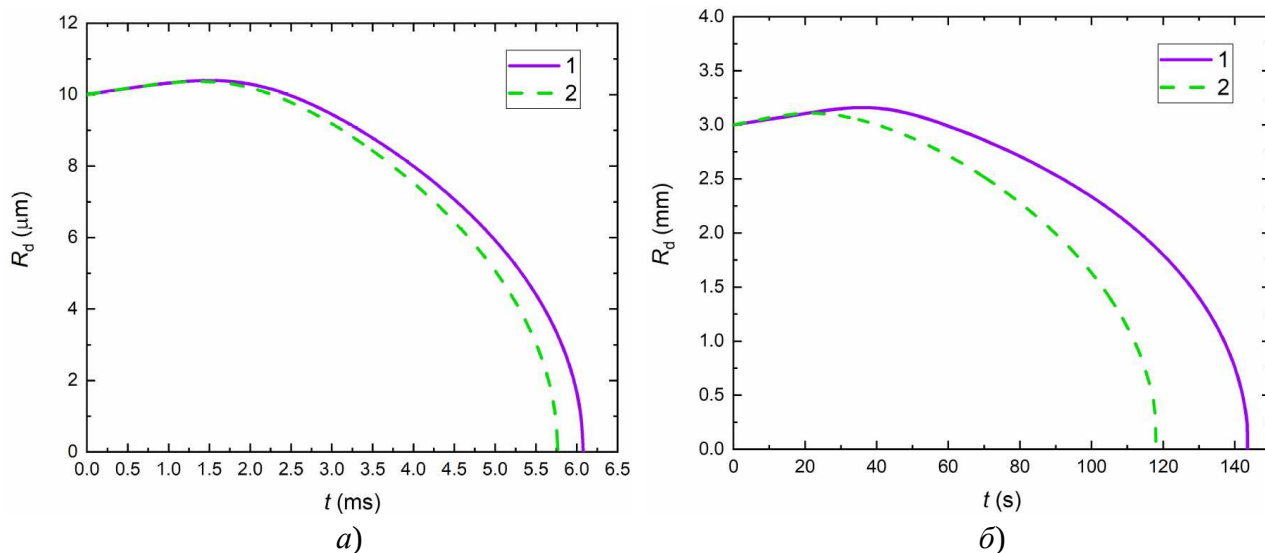


Рис. 1. Изменения радиуса капель во времени, вычисленные с применением модели бесконечной теплопроводности ($\lambda = 1000 \text{ Вт/(м·К)}$) (кривая 1) и с учетом реальной зависимости теплопроводности н-гексадекана от температуры (кривая 2) при $R_{d0} = 0,1 \text{ мм}$ и $T_g = 600 \text{ К}$ (а) и при $R_{d0} = 3 \text{ мм}$ и $T_g = 1200 \text{ К}$ (б)

Выполнен анализ влияния значения теплопроводности жидкости на нагрев и испарение капель н-гексадекана. Были рассмотрены два значения теплопроводности жидкости: 1000 Вт/(м·К) (модель бесконечной теплопроводности) и ее эмпирические значения, зависящие от температуры. Изменение радиусов капель во времени, вычисленные для обоих случаев, представлены на рис. 1а. Видно, что учет эффекта изменения теплопроводности жидкости при разных значениях температуры приводит к сокращению времени существования капли на 5,4%. На рис. 1б представлены аналогичные зависимости для начального радиуса капель $R_{d0} = 3 \text{ мм}$ и температуры греющей среды $T_g = 1200 \text{ К}$. Анализ этих зависимостей позволяет сделать вывод о том, что для более крупных капель эффект конечной теплопроводности жидкости приводит к сокращению

времени существования капля на 21,7%, что существенно больше, чем в случае, представленном на рис. 1а, и реальные значения теплопроводности жидкости следует учитывать в практических инженерных приложениях.

Графики температуры капли в зависимости от относительного расстояния до центра капли для пяти моментов времени t при тех же начальных параметрах, что и на рис. 1а (с учетом влияния конечной теплопроводности жидкости), представлены на рис. 2. Наличие градиента температуры в капле хорошо видно в начале процесса нагрева. При $t = 3$ мс этот градиент становится близким к нулю по всему объему капли. Полученный результат позволяет утверждать о применимости модели бесконечной теплопроводности жидкости в данном случае.

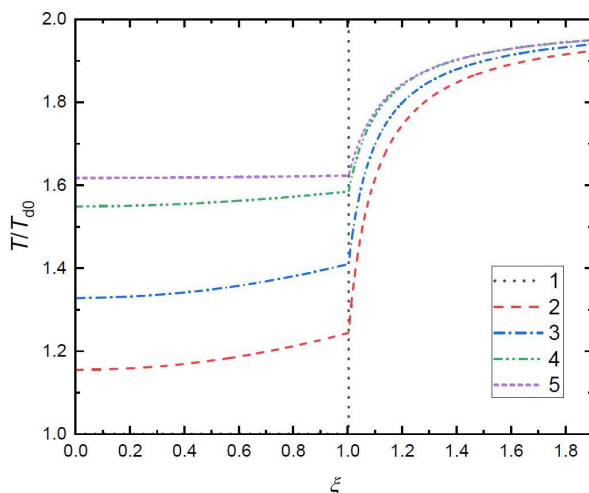


Рис. 2. Температуры жидкости и паровой фазы в зависимости от приведенного расстояния до центра капли $\xi = R/R_d$ при $R_{d0} = 0,1$ мм и $T_g = 600$ К с учетом изменения теплопроводности жидкого н-гексадекана при нагреве (1 – $t = 0$ мс; 2 – 0,5 мс; 3 – 1 мс; 4 – 2 мс; 5 – 3 мс)

На рис. 3 представлены аналогичные рис. 2 зависимости для $R_{d0} = 3$ мм и $T_g = 1200$ К в разные моменты времени. Приведенные результаты подтверждают, что влияние градиента температуры в жидкой фазе существенно в начале процесса, но менее важно на его заключительных стадиях.

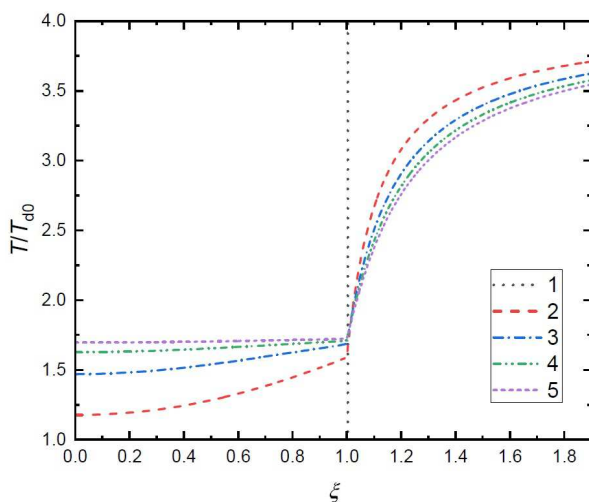


Рис. 3. Температуры жидкости и паровой фазы в зависимости от приведенного расстояния до центра капли $\xi = R/R_d$ при $R_{d0} = 3$ мм и $T_g = 1200$ К с учетом изменения теплопроводности жидкого н-гексадекана при нагреве (1 – $t = 0$ мс; 2 – 20 мс; 3 – 40 мс; 4 – 60 мс; 5 – $t = 80$ мс)

Для верификации полученных численных результатов проведена серия соответствующих экспериментов. Капли нагревали в трубчатой муфельной печи Nabertherm R 50/250/13 (диапазон температур от 300 до 3000 K). Подвешенные на держателе капли н-декана вводили в зону видеорегистрации с помощью моторизованного манипулятора, на конце которого находился припой малоинерционной термопары типа K диаметром 0,2 мм. Капли н-декана генерировали с помощью электронного дозатора FinnpiPETTE Novus с функциями забора жидкости от 5 до 50 мкл (шаг 0,1 мкл). Начальный диаметр капель н-декана в трех сериях опытов составлял $0,85 \times 0,05$ мм, $0,95 \times 0,05$ мм и $1,05 \times 0,05$ мм соответственно.

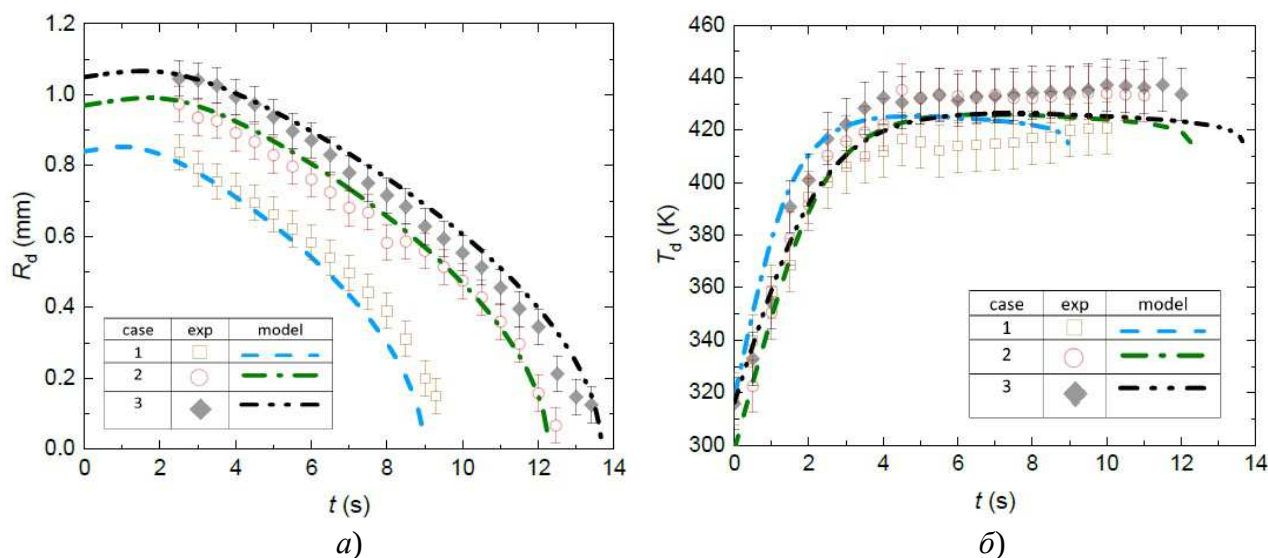


Рис. 4. Экспериментальные и численные результаты и изменения радиуса (а) и средней температуры (б) капель н-декана при $T_g = 760 \pm 10$ K и $T_0 = 300 \pm 10$ K и $R_{d0} = 0,85 \pm 0,05$ мм (1), $R_{d0} = 0,95 \pm 0,05$ мм (2), $R_{d0} = 1,05 \pm 0,05$ мм (3)

Для каждого размера капель проводили от пяти до десяти опытов. Температуру газа в печи (T_g) и среднюю температуру капель (T_d) измеряли с помощью комплекса сбора данных National Instruments и малоинерционных термопар типа K. Систематические ошибки измерения температуры составили ± 3 K, а систематические ошибки регистрации времени – $\pm 0,1$ с. Начальная температура капли контролировалась термопарой и составляла 298–318 K. Атмосферное давление окружающей среды принималось равным 101325 Па. Температура газа контролировалась термопарой и поддерживалась на уровне 760 ± 10 K. Зону регистрации освещали с помощью светодиодного прожектора MultiLed QT (GS Vitex GmbH, Германия) для улучшения контрастности изображения капель. Процесс испарения капель регистрировали с помощью скоростной видеокамеры Phantom Miro M310. Изображения регистрировались с частотой 1000 кадр/с, разрешением 512×512 пикселей и временем экспозиции 1 мкс. Видеозапись начиналась, когда капли достигали зоны регистрации. Скорость воздуха относительно капли составляла $0,2 \pm 0,05$ м/с. Она измерялась термоанемометром Testo 425. Время достижения капель зоны регистрации (около 2,5 с) учитывалось при анализе регистрируемой зависимости радиусов капель от времени. Видеокадры обрабатывались с помощью специально разработанного авторского программного кода в среде MatLab. Систематические ошибки измерения начальных радиусов капель были менее $\pm 0,044$ мм. Суммарные ошибки (сумма систематических и случайных ошибок) измерений были менее $\pm 0,05$ мм [7]. Экспериментальные и теоретические значения R_d и T_d и их изменения во времени при нагреве и испарении капель н-декана представлены на рис. 4. Эти данные согласуются в пределах ошибок эксперимента.

Отклонение прогнозируемых и наблюдаемых результатов на заключительном этапе испарения капель (до 7% и 10% для радиусов капель и температуры соответственно) связано с рядом ограничений, введенных при численном моделировании. К ним относятся допущения о том, что капли имеют сферическую форму и что влияние подложки для капель невелико.

Исследование выполнено за счет средств Российского научного фонда, грант № 23-69-10006.

Литература

1. Sazhin S.S. Droplets and Sprays: Simple Models of Complex Processes. 2022.
2. Cossali G.E., Tonini S. Drop Heating and Evaporation: Analytical Solutions in Curvilinear Coordinate Systems. 2021.
3. Abramzon B., Sazhin S. Convective vaporization of a fuel droplet with thermal radiation absorption // Fuel. 2006. Vol. 85. Pp. 32–46.
4. Sazhin S.S., Krutitskii P.A., Abdelghaffar W.A., Sazhina E.M., Mikhlovsky S.V., Meikle S.T., et al. Transient heating of diesel fuel droplets // Int. J. Heat Mass Transf. 2004. Vol. 47. Pp. 3327–3340.
5. Abramzon B., Sirignano W.A. Droplet vaporization model for spray combustion calculations // Int. J. Heat Mass Transf. 1989. Vol. 32. Pp. 1605–1618.
6. Sazhin S.S., Bar-Kohany T., Nissar Z., Antonov D., Strizhak P.A., Rybdylova O.D. A new approach to modelling micro-explosions in composite droplets // Int. J. Heat Mass Transf. 2020. Art. 120238.
7. Antonov D.V., Strizhak P.A., Fedorenko R.M., Nissar Z., Sazhin S.S. Puffing/micro-explosion in rapeseed oil/water droplets: The effects of coal micro-particles in water // Fuel. 2021. Vol. 289. Art. 119814.

УДК 532.5

МИКРО-ВЗРЫВНАЯ ФРАГМЕНТАЦИЯ В РАЗНЫХ ПРАКТИЧЕСКИХ ПРИЛОЖЕНИЯХ**Д.В. Антонов, П.А. Стрижак**

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

Микро-взрывная фрагментация представляет собой процесс, при котором двухжидкостные родительские капли распадаются на мелкие вторичные фрагменты вследствие локального вскипания дисперсной низкокипящей жидкости, например воды [1]. Впервые этот эффект был обнаружен В.М. Ивановым и П.И. Нефедовым в 1962 г. при изучении распыления эмульгированного топлива [2]. Сейчас тематика микро-взрывного измельчения двухжидкостных капель, эмульсий, суспензий, твердых частиц охватывает области топливно-энергетического сектора, химической и пищевой промышленности, синтеза новых материалов, медицины, утилизации промышленных и бытовых отходов на базе результатов лабораторных экспериментов, стендовых и натурных испытаний, а также многопараметрического математического моделирования с учетом всех технологических этапов: поиск перспективного сырья, компонентов и добавок, их приготовление, стабилизация, хранение, первичное и вторичное распыление, горение, улавливание выбросов, формирование замкнутых циклов для возврата части продуктов в технологический цикл.

В данной работе представлены основные результаты, полученные на экспериментальных стендах, адаптированных под широкий класс практических приложений, включая предельные условия фрагментации и последствия распада. Визуализация эффектов микро-взрывной фрагментации капель реализовывалась с использованием оптических методов диагностики газожидкостных потоков, в том числе высокоскоростной съемки, методов трассерной визуализации, индуцированной флюоресценции и т.д. Результаты опытов обрабатывались в собственных и коммерческих программных кодах (Actual Flow, Davis и т. д.).

Исследование выполнено за счет Российского научного фонда (грант РНФ 21-71-10008, <https://rscf.ru/project/21-71-10008/>).

Литература

1. Boggavarapu P., Ramesh S.P., Avulapati M.M. Secondary breakup of water and surrogate fuels: Breakup modes and resultant droplet sizes // Int. J. Multiph. Flow. 2021. Vol. 145. P. 103816.
2. Ivanov V.M., Nefedov P.I. Experimental investigation of this combustion process of natural and emulsified liquid fuels. NASA Techincal Transl. 1962.

УДК 534.222.2:536.46:621.215.1

УСЛОВИЯ ПЕРЕХОДА ГОРЕНИЯ В ДЕТОНАЦИЮ В МАЛОРАЗМЕРНОЙ ИМПУЛЬСНОЙ УСТАНОВКЕ С КАНАЛОМ СУБКРИТИЧЕСКИХ РАЗМЕРОВ

М.С. Ассад, И.И. Чернухо

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Введение

Увеличение эффективности реактивных двигателей, в частности для малых летательных объектов, при существующих схемах организации процесса горения представляется крайне сложной задачей. Переход от циклов с подводом тепла при постоянном давлении или при постоянном объёме к циклу с детонационным сжиганием топлива дает возможность решить эту задачу, о чем свидетельствуют многочисленные публикации [1–5]. Основной научной и технической проблемой при разработке малоразмерного детонационного двигателя является организация управляемой детонации в импульсном режиме в устройстве субкритических размеров. При этом должны решаться две задачи: инициирование детонации и получение устойчивого детонационного режима на возможно малых расстояниях от источника воспламенения (до 600–700 мм) с частотой импульсов не менее 50 Гц.

Экспериментальная установка

Эксперименты проводились на малоразмерной импульсной детонационной установке (МИДУ), представляющей собой реактивное устройство с каналом из нержавеющей стали диаметром 20 мм и длиной 664 мм (рис. 1). Детонационная установка работает в циклическом режиме. Ее описание, принцип работы и измерительная аппаратура изложены в [4, 5].

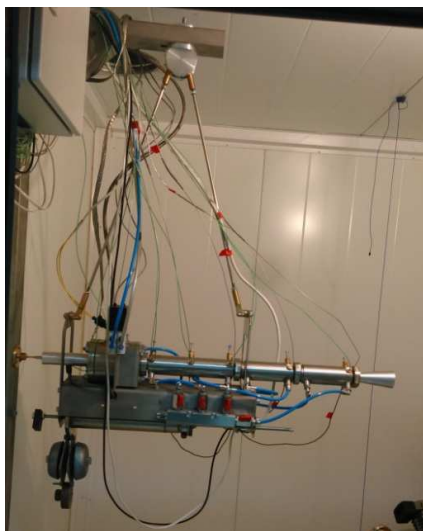


Рис. 1. Общий вид малоразмерной импульсной детонационной установки реактивного типа

Параметры рабочего процесса детонационной установки (скорость волны горения, давление на фронте волны горения, сила тяги установки) исследовались в широком диапазоне изменения соотношения компонентов смеси (гептан, воздух, кислород) и при разных температурных режимах установки. Расход воздуха варьировали от 0 до 500 л/мин, расход кислорода – от 50 до 300 л/мин. Массовый расход гептана через форсунку был постоянным и составлял 3,0 г/с.

Скорость волны горения вычислялась базовым методом на основе измеренных времен прохождения фронта пламени между двумя соседними датчиками давления, образующими

данную измерительную базу (База 2: 140–240 мм; База 3: 240–340 мм; База 4: 340–640 мм). Частота детонационной установки задавалась вручную и контролировалась системой управления ($f = 10\text{--}100$ Гц). Эксперименты проводились при 100%-м наполнении трубы горючей смесью.

Результаты и их обсуждение

Для установления условий существования детонационного режима определялись граничные концентрации компонентов смеси. В связи с этим исследовалось влияние коэффициента избытка горючего ϕ и отношения добавочного кислорода к воздуху в смеси $[O_2/Air]$ на переход горения в детонацию.

Проводились две серии экспериментов: в первой серии массовый расход гептана (3,0 г/с) и объёмный расход воздуха (500 л/мин) были постоянными, а объёмный расход кислорода варьировали от 50 до 300 л/мин, во второй серии массовый расход гептана (3,0 г/с) и объёмный расход кислорода (200 л/мин) были постоянными, а объёмный расход воздуха варьировали от 0 до 500 л/мин. При этом воздух подавался постоянно, а топливо и кислород – импульсно с одинаковой длительностью. На рис. 2 показаны зависимости интегральной скорости волны горения в смесях гептана с воздухом, обогащенных кислородом, от величины отношения добавочного кислорода к воздуху $[O_2/Air]$ (ϕ – коэффициент избытка горючего; β – отношение фактического объёма азота к объёму кислорода в смеси). Видно, что скорость волны имеет прямую зависимость от отношения $[O_2/Air]$, при этом во второй серии экспериментов (когда $[O_2/Air] > 1$) скорость волны резко и существенно возрастает в диапазоне $[O_2/Air] < 2$. Далее рост скорости замедляется и кривая становится более полой. В то же время величина ϕ также оказывает существенное влияние на скорость волны, при этом детонационная способность смеси и рост скорости волны обратно пропорциональны ϕ . Объясняется это уменьшением удельной концентрации балластного азота с $\beta = 3,76$ до $\beta = 0,90$ и количества несгорающего топлива по мере обогащения смеси кислородом. Как следствие, повышается температура горения, а также химическая активность смеси и скорость образования перекисных соединений в период, предшествующий сгоранию.

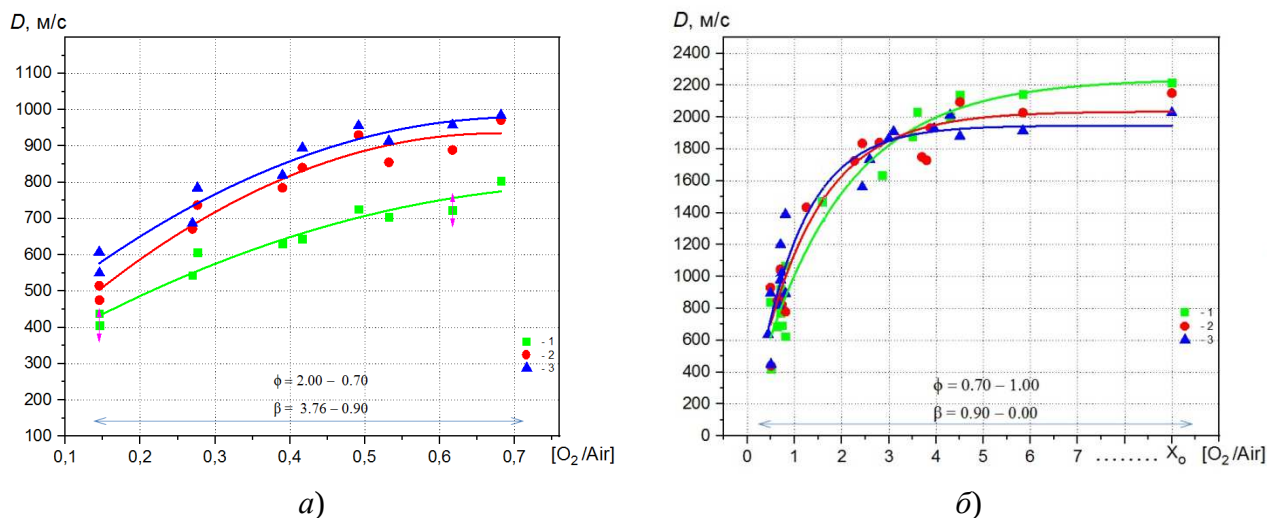


Рис. 2. Зависимости интегральной скорости волны горения смесей гептана с воздухом, обогащенных кислородом, от величины $[O_2/Air]$ в первой (а) и во второй (б) сериях экспериментов (1 – База 2; 2 – База 3; 3 – База 4); значение X_0 показаны для смеси гептан–кислород

В таблице приведены условия экспериментов при использовании различных приёмов ускорения ПГД (нагрев стенок установки, наличие препятствия в предкамере и обогащение смеси кислородом) в смеси гептан–воздух–кислород. Здесь $D_{чж}$ – скорость детонации в точке Чепмена–Жуге, рассчитанная с помощью программы Chemkin; λ – коэффициент наполнения камеры сгорания смесью; ТА – термическая активация смеси (нагрев стенок установки), ПНМС – наличие пористой набивки из медной стружки в предкамере; Е – порожняя предкамера без препятствия при $T_0 = 20$ °С. Обнаружено, что одновременное воздействие на процессы в установке термической активации смеси, установления в предкамере препятствия и обогащения смеси кислородом приводят к синергетическому эффекту, заключающемуся в получении устойчивого детонационного режима с высокой частотой в условиях, при которых перечисленные способы ускорения детонации как в отдельности, так и в случае использования двух приемов вместе, показывают свою работоспособность. Так что при нагреве установки до $T_0 > 50$ °С, установлении в предкамере профилированного препятствия и обогащении топливо-воздушной смеси кислородом до $[O_2/air] \geq 0,8$ с изменением ϕ в диапазоне 0,95–2,1 наблюдался сильный детонационный режим с частотой до 80 Гц. При этом, переход горения в детонацию происходил на второй измерительной базе. Это означает, что синергетический эффект использованных приемов позволил сократить преддетонационное расстояние более чем 60% (с 565 до 190 мм). Из таблицы видно, что в смесях № 6 и 7 детонация возникает на первой измерительной базе, т. е. сразу после выхода из предкамеры независимо от формы последней (сферическая или коническая). При этом детонационная волна в смеси № 6 испытывает профицит скорости $\Delta D = +84$ м/с, а в смеси № 7 волна распространяется с профицитом $\Delta D = +280$ м/с. Очевидно, это свидетельствует (косвенно) о более высокой реакционной способности в этих смесях, вызванной синергетическим эффектом.

Параметры детонационного сжигания смесей гептан–воздух–кислород

Номер смеси	Приём ускорения ПГД	ϕ	$[O_2/Air]$	T_0 , °С	Скорость волны горения, D , м/с			$D_{чж}$, м/с	ΔD , м/с	λ
					База 2	База 3	База 4			
1	Е	1,13	0,80	22	988	935	1000	2297	-1297	0,82
2	ТА	1,15	0,60	65	1452	2175	1974	2281	-106	0,62
3		1,17	0,62	95	553	1635	2222	2286	-64	1,00
4	ПНМС	1,03	0,70	24	1066	1330	2195	2270	-75	1,00
5		0,97	0,73	25	1132	1402	2225	2284	-59	0,96
6	ТА + ПНМС + O_2	1,11	0,92	65	2316	1954	1970	2232	+84	0,85
7		1,38	0,86	113	2333	1892	1863	2051	+280	0,94

Можно заключить, что обнаруженный синергетический эффект позволяет получить импульсный детонационный режим с частотой до 80 Гц при длине субкритического канала установки около 200 мм, что дает возможность сократить общую длину установки почти на 50% (с 664 до 364 мм) и тем самым уменьшить массу установки более чем на 20%.

Литература

1. Tan W., Zheng L., Lu J., Wang L., Zhou D. Experimental investigations on detonation initiation characteristics of a liquid-fueled pulse detonation combustor at different inlet air temperatures // Energies. 2022. Vol. 15. P. 9102. <https://doi.org/10.3390/en15239102>.

2. Bhattarai S., Tang H. Comparative performance analysis of combined-cycle pulse detonation turbofan engines (PDTEs) // *Propulsion and Power Research*. 2013. Vol. 2. No. 3. Pp. 214–224.
3. Zhou R., Wu D., Wang J. Progress of continuously rotating detonation engines // *Chinese J. Aeronaut.* 2016. Vol. 29. No. 1. Pp. 15–29.
4. Alhussan Kh., Assad M.S., Penyazkov O.G. Influence of the temperature of a heterogeneous mixture on the DDT in a small-size pulsed detonation combustor // *Proc. of the 25nd Int. Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*. August 2–7, 2015. Leeds, UK, 2015. No. 164. Pp. 1–5.
5. Ассад М.С., Пенязьков О.Г., Чернухо И.И. Реактивная тяга пульсирующей детонационной установки при сжигании гептан-воздушных смесей, обогащенных кислородом // *Горение и взрыв*. 2018. Т. 11. № 3. С. 88–92.

УДК 621.384.6

РЕНТГЕНОГРАФИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС РФЯЦ-ВНИИТФ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ БЫСТРОПРОТЕКАЮЩИХ ПРОЦЕССОВ

**А.Р. Ахметов, И.А. Журавлев, П.А. Колесников, О.А. Никитин, И.В. Пензин,
Д.В. Петров, Р.В. Протас, Д.В. Сысков, С.Д. Хренков, В.Ю. Эверт**

Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина», Снежинск, Россия

Введение

В газодинамическом отделении РФЯЦ-ВНИИТФ для исследования быстропротекающих процессов, происходящих в оптически непрозрачных объектах, применяется метод импульсной рентгенографии [1], в основе которого лежит использование проникающих свойств рентгеновского излучения. Метод включает импульсный источник излучения и систему регистрации рентгеновских изображений, между которыми располагается исследуемый объект. Излучение, сгенерированное источником, проходя через объект формирует на системе регистрации теневое изображение, вид которого определяется распределением оптической толщины объекта в плоскости рентгенографирования.

В РФЯЦ-ВНИИТФ использование метода импульсной рентгенографии началось практически сразу после создания института (1955 г.), а в настоящее время создан рентгенографический комплекс, оснащенный всеми типами ускорителей электронов, используемых в качестве импульсных рентгеновских источников излучения, и широким спектром цифровых систем регистрации рентгеновских изображений. В данной работе рассмотрен состав рентгенографического комплекса РФЯЦ-ВНИИТФ и результаты исследований быстропротекающих процессов, проводимых на комплексе.

Рентгенографический комплекс РФЯЦ-ВНИИТФ

Рентгенографический комплекс РФЯЦ-ВНИИТФ включает три составляющих:

1. Комплекс на базе сильноточного ускорителя ИГУР-3,5 [2];
2. Комплекс на базе двух безжелезных бетатронов БИМ234.3000 [3] и линейного индукционного ускорителя электронов ЛИУ-2 [4];
3. Комплекс на базе линейного индукционного ускорителя ЛИУ-20 [5].

Рассмотрим данные комплексы.

Комплекс на базе сильноточного ускорителя ИГУР-3,5. Комплекс на базе сильноточного ускорителя электронов ИГУР-3,5 (рис. 1) введен в эксплуатацию в 2006 г.



Рис. 1. Фотография ускорителя ИГУР-3,5

Ускоритель ИГУР-3,5 основан на индуктивном накопителе энергии и электрически взрывающихся проводниках [2] и обеспечивает формирование до двух последовательных импульсов тормозного излучения (ТИ). Основные характеристики комплекса на базе ускорителя ИГУР-3,5 приведены в табл. 1.

Таблица 1. Основные характеристики комплекса на базе ускорителя ИГУР-3,5

Параметр	Величина
Граничная энергия электронов	до 4 МэВ
Амплитуда тока электронного пучка	до 45 кА
Длительность импульса ТИ на полувысоте	30–90 нс (регулируется)
Минимальный размер фокусного пятна источника излучения на полувысоте	1,5 мм
Просвечивающая способность на расстоянии 1 м от источника излучения	до 120 мм по Pb
Система регистрации теневых изображений	фотолюминесцентный экран с запоминанием – ФЭЗ [6]

Комплекс обеспечивает исследования развития детонации и ударных волн, исследования процессов пыления, а также регистрацию кумулятивных струй и процессов образования и движения высокоскоростных тел (рис. 2).

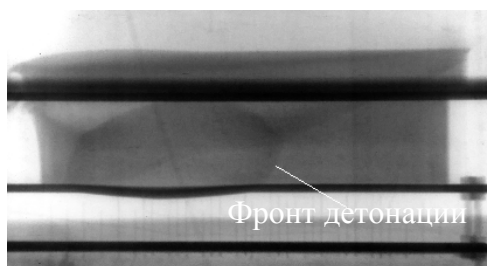


Рис. 2. Рентгенограмма развития детонации [7]

Комплекс на базе безжелезных бетатронов БИМ234.3000 и линейного индукционного ускорителя ЛИУ-2. Комплекс на базе бетатронов БИМ234.3000 и ЛИУ-2 введен в эксплуатацию в 2011 г. (рис. 3). Безжелезные бетатроны созданы в РФЯЦ-ВНИИЭФ, а ЛИУ-2 – в ИЯФ СО РАН совместно с РФЯЦ-ВНИИТФ. Каждый бетатрон БИМ234.3000 обеспечивает формирование до трех последовательных импульсов ТИ, а ЛИУ-2 – двух последовательных импульсов излучения. Ускорители могут работать автономно либо совместно. Комплекс обеспечивает проведение исследований быстропротекающих процессов в трехракурсном режиме, при этом бетатроны расположены ортогонально, а ЛИУ-2 размещен между бетатронами (рис. 4). Основные характеристики комплекса приведены в табл. 2.

Основное применение комплекса – это определение во взрывных экспериментах общей конфигурации элементов и внутренних областей в объектах исследования, характеризующихся большой оптической толщиной. Типичные рентгенограммы, полученные при совместной работе ускорителей, показаны на рис. 5.



БИМ234.3000



ЛИУ-2

Рис. 3. Фотографии ускорителей

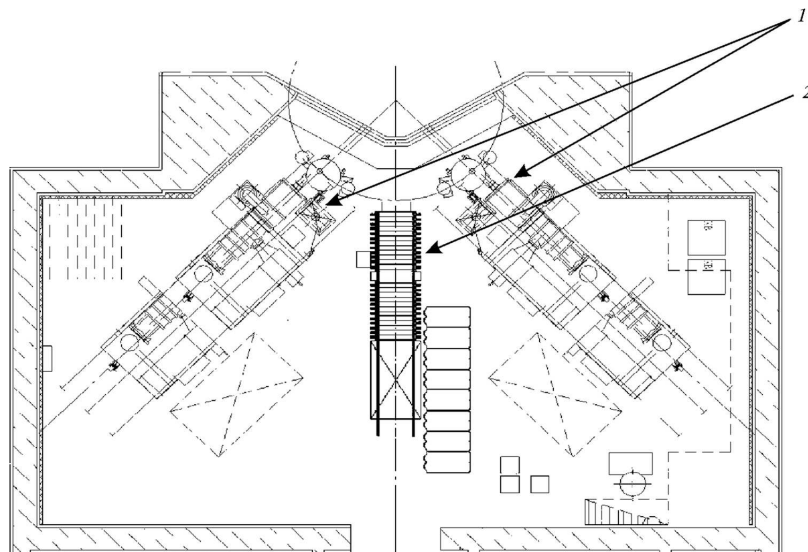


Рис. 4. Схема размещения ускорителей: 1 – бетатроны БИМ234.3000; 2 – ЛИУ-2

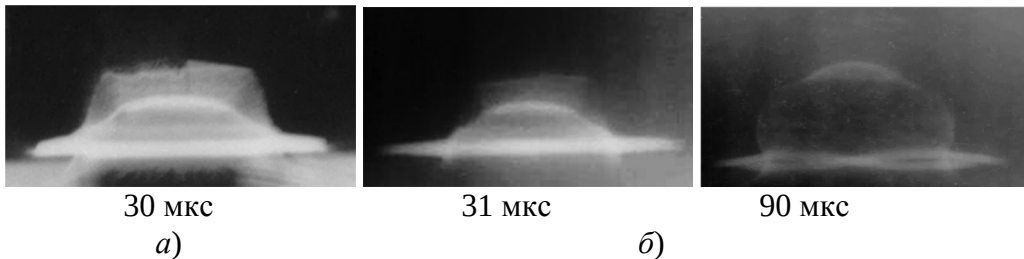
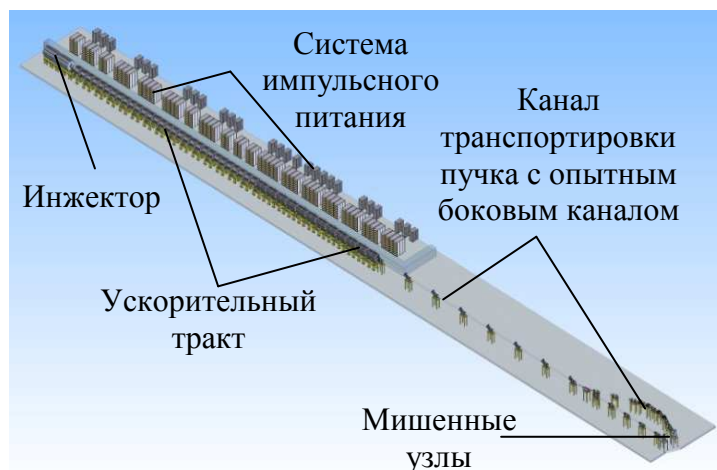


Рис. 5. Рентгенограммы взрывного эксперимента, полученные при совместной работе ЛИУ-2 (а) и бетатронов БИМ234.3000 (б)

Таблица 2. Основные характеристики комплекса на базе БИМ234.3000 и ЛИУ-2

Параметр	Величина
БИМ234.3000	
Граничная энергия электронов	до 70 МэВ
Ток электронного пучка	200 А
Длительность импульсов ТИ на полувысоте	100 нс
Количество последовательных импульсов ТИ	до 3
Временной интервал между импульсами в режиме генерации трех пиков излучения	0,5 – 5 мкс
Размер фокусного пятна источника излучения по уровню 0,1	2,5×6 мм
Просвечивающая способность на расстоянии 4 м от источника излучения	165 мм по Pb
Система регистрации теневых изображений	Одноимпульсный режим – ФЭЗ Многоимпульсный режим – сцинтилляционный экран (ортогерманат висмута) и система быстродействующих электронно-оптических камер [8]
ЛИУ-2	
Граничная энергия электронов	до 2 МэВ
Ток электронного пучка	до 2 кА
Длительность вершины импульса тока	200 нс
Количество последовательных импульсов ТИ	2
Временной интервал между импульсами	2 – 30 мкс
Размер фокусного пятна источника излучения на полувысоте	1,6 мм
Просвечивающая способность на расстоянии 1,5 м от источника излучения при использовании ФЭЗ	40 мм по Pb
Система регистрации теневых изображений	Одноимпульсный режим – ФЭЗ Двухимпульсный режим – сцинтилляционный экран (ортогерманат висмута) и система быстродействующих электронно-оптических камер

Комплекс на базе линейного индукционного ускорителя ЛИУ-20. Комплекс, созданный РФЯЦ-ВНИИТФ совместно с ИЯФ СО РАН, на базе линейного индукционного ускорителя электронов ЛИУ-20 (рис. 6) введен в эксплуатацию в 2019 г. Основными узлами ускорителя являются: инжектор; ускорительный тракт; система импульсного питания; канал транспортировки и разводки электронного пучка; мишенные узлы; система управления [5, 9]. В настоящее время ускоритель работает в одноимпульсном одноракурсном режиме, а в перспективе позволит исследовать трехмерное течение быстропротекающих процессов в плотных объектах, т. к. он будет оснащен девятиракурсной системой транспортировки и разводки электронного пучка, а также трехимпульсной системой питания [10]. Система регистрации (рис. 7) комплекса включает: многоэлементный сцинтилляционный экран (МСЭ) с системой термостабилизации (СТ); волоконно-оптические линии (ВОЛПС); фотоприемники (pin-диоды); измерительный комплекс (ИК). Основные характеристики комплекса на базе ускорителя ЛИУ-20 приведены в табл. 3.

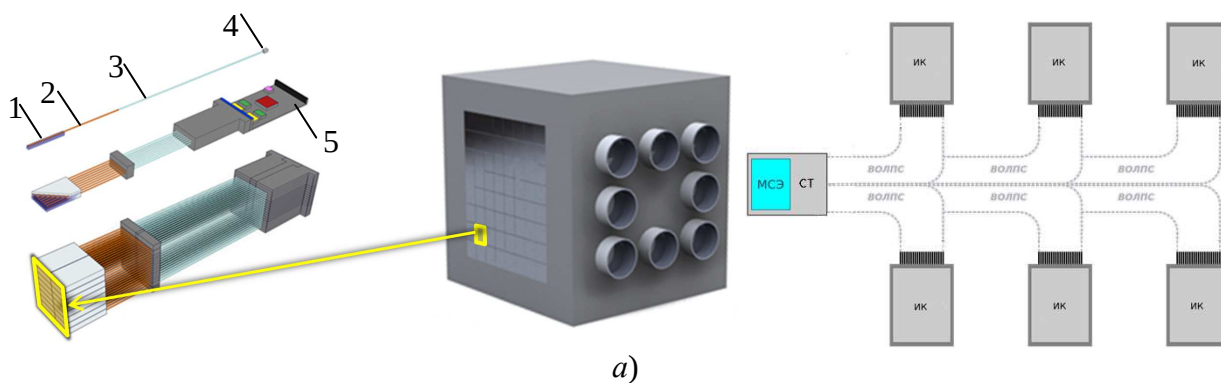


а)



б)

Рис. 6. Общий вид (а) и фотографии ускорителя ЛИУ-20 (б)



а)



б)

1 – сцинтилляционный кристалл; 2 – спектросмещающее волокно;
3 – оптоволокно; 4 – фотодиод; 5 – плата регистрации

Рис. 7. Общий вид (а) и фотография системы регистрации (б)

Таблица 3. Основные характеристики комплекса на базе ЛИУ-20

Параметр	Величина
ЛИУ-20	
Граничная энергия электронов	20 МэВ
Ток электронного пучка	2 кА
Длительность вершины импульса тока	60 нс
Размер фокусного пятна источника излучения на полувысоте	1,2 мм
Просвечивающая способность на расстоянии 4 м от источника излучения	230 мм по Pb
Система регистрации (детектирующая станция)	
Материал сцинтиллятора	Ортогерманат висмута ($\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$)
Время высвечивания сцинтиллятора	300 нс
Размер чувствительной области детектора	$512 \times 512 \text{ мм}^2$
Количество регистрирующих каналов	16384 штук
Поперечный размер разрешаемого элемента	$4 \times 4 \text{ мм}^2$
Длина разрешаемого элемента	50 мм
Динамический диапазон	от $2 \cdot 10^2$ до $5 \cdot 10^6$ квант/элемент
Количество регистрируемых кадров	3
Разрешение на объекте	не более 1 мм
Поле изображения на объекте	не менее $100 \times 100 \text{ мм}^2$

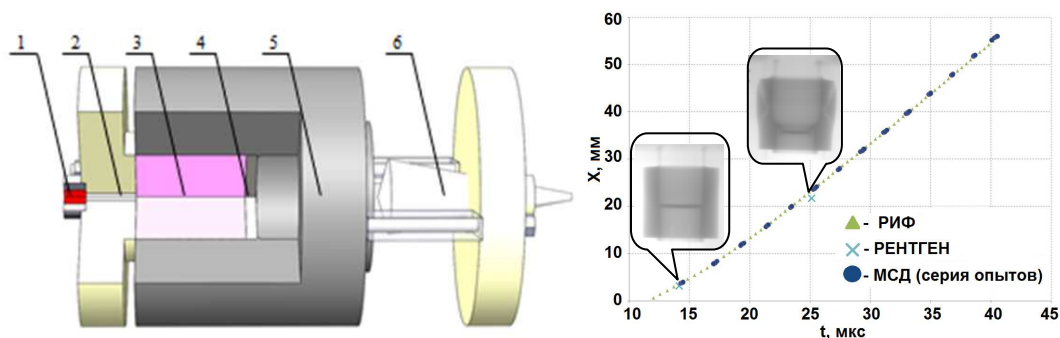
Созданный комплекс не имеет аналогов в Российской Федерации и является уникальным инструментом для исследования быстропротекающих процессов в объектах с толщинами (рис. 8), не доступными для ранее использованных установок.



Рис. 8. Рентгенограмма исследования струйных течений в газодинамическом макете.
Оптическая толщина – 460 мм по Fe

Совмещение методик на базе рентгенографического комплекса

В РФЯЦ-ВНИИТФ в газодинамических исследованиях совместно с методом импульсной рентгенографии используются и другие методики: методика симметрии динамики (МСД) – основана на применении электроконтактных датчиков; лазерно-интерферометрические методики (ЛИМ) и радио-интерферометрическая методика (РИФ) – основаны на использовании эффекта Доплера; методика манганинового датчика (ММД) – основана на использовании пьезорезистивного эффекта [11, 12]. В настоящее время отработаны режимы исследования быстропротекающих процессов при совместном использовании рентгенографической методики и перечисленных выше методик (рис. 9).



1 – электродетонатор; 2 – пруток; 3 – образец исследуемого взрывчатого вещества;
4 – метаемая пластина; 5 – корпус; 6 – антенна радиоинтерферометра

Рис. 9. Результаты исследований процесса движения ударника с помощью рентгенографической, радиоволновой и электроконтактной методик

Литература

1. Козловский В.Н. Информация в импульсной рентгенографии / Под ред. Литвинова Б.В. Снежинск: Изд-во РФЯЦ – ВНИИТФ, 2006.
2. Импульсные ускорители электронов с индуктивным накопителем энергии / Под ред. Ковалева В.П. Снежинск: Изд-во РФЯЦ – ВНИИТФ, 2012.
3. Развитие физики и технологии ускорителей заряженных частиц / Ред.-сост. Б.Ю. Шарков, И.Н. Мешков. М.: РАН, 2021.
4. Логачев П.В., Кузнецов Г.И., Корепанов А.А. и др. Линейный индукционный ускоритель ЛИУ-2 // Приборы и техника эксперимента. 2013. № 6. С. 42–49.
5. Батраков А.М., Сенченко А.И., Бак П.А. и др. Источник тормозного излучения на базе линейного индукционного ускорителя // Ядерные и электрофизические установки – источники мощных ионизирующих излучений. Сборник трудов научно-технической конференции 5-18 июня 2021. Снежинск: Изд-во РФЯЦ – ВНИИТФ. С. 428–431.
6. Мартынюк А.В. Введение в цифровую радиографию. Фосфорные пластины вместо рентгеновской пленки / На правах рукописи. Киев, 2012.
7. Ахметов А.Р., Полеев В.Г., Никитин О.А. и др. Регистрация возникновения детонации в глубине взрывчатого вещества рентгенографическим и электроконтактным методами // Физика горения и взрыва. 2022. Т. 58. № 1. С. 118–126.
8. Кустарев К.Ю., Иванушкин А.В., Сазонова А.В. и др. Изготовление и исследование характеристик мозаичного сцинтилляционного конвертора для рентгенографического комплекса // Методы и средства физических измерений. Сборник докладов отраслевой научно-технической конференции 10-14 декабря 2018. М.: Изд-во ВНИИА. С. 39–43.
9. Бак П.А., Батраков А.М., Бехтенёв Е.А. и др. Комплекс цифровой осциллографии ускорителя ЛИУ-20 // Приборы и техника эксперимента. 2021. № 2. С. 49–64.
10. http://www.vniitf.ru/data/files/video/2021/kit_final_8m.webm.
11. Шапошников В.В. Электрические методы и средства регистрации процессов при исследовании характеристик взрывчатых веществ. Снежинск: Изд-во РФЯЦ – ВНИИТФ, 2011.
12. Козлов Е.А., Бричиков С.А., Кучко Д.П. и др. Результаты экспериментов по разгону стальных пластин с диагностикой процессов одновременно двумя лазерно-интерферометрическими методиками // Физика горения и взрыва. 2014. Т. 50. № 6. С. 114–121.

УДК 662.613

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОГО МНОГОФАЗНОГО ПОТОКА ПРОДУКТОВ ГОРЕНИЯ АЛЮМИНИЗИРОВАННЫХ ТВЕРДЫХ ТОПЛИВ

В.А. Бабук, Н.Л. Будный, Д.И. Куклин, А.А. Низяев

Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ»
им. Д.Ф. Устинова, Санкт-Петербург, Россия

Введение

Одним из следствий введения металлического горючего (алюминия) в состав твердого топлива является формирование многофазного потока продуктов горения. В соответствии с современными представлениями такой многофазный поток можно представить в виде совокупности следующих составляющих:

- 1) газовая фаза – смесь газообразных продуктов;
- 2) «мелкая» фракция частиц конденсированной фазы – высокодисперсный оксид (ВДОК);
- 3) «крупная» фракция частиц конденсированной фазы – агломераты [1–3].

Для частиц ВДОК характерными являются размеры $\sim 0,1\text{--}1$ мкм, они состоят полностью из жидкого оксида алюминия, имеют сферическую форму. Размер агломератов находится в диапазоне от десятков до сотен и даже тысяч мкм. Они состоят из капель оксида алюминия и активного металла, могут включать газовые полости и обладать сложной структурой.

Сравнительно медленная скорость горения металла движущихся в потоке агломератов приводит к эффекту так называемого «распределенного горения» в объеме камеры [4]. Вследствие тепло- и массообмена агломератов с газовой фазой в процессе горения происходит изменение температуры и химического состава потока газообразных продуктов сгорания, а также перераспределение массовых долей между газовой и конденсированной фазами. Взаимодействие в потоке между агломератами и ВДОК приводит к изменению дисперсности частиц этих фракций и перераспределению их массовых долей вследствие горения агломератов с образованием и укрупнением ВДОК, а также за счет коагуляции ВДОК и агломератов в потоке. Кроме того, возможно осаждение на элементах камеры сгорания некоторой части агломератов, на которое оказывают влияние, помимо размеров частиц, также конфигурация течения и интенсивность физико-химических превращений частиц в потоке. Таким образом, можно говорить об изменении свойств (эволюции) многофазного потока продуктов сгорания в целом в процессе течения.

Определение характеристик многофазного потока продуктов сгорания необходимо для решения ряда практически значимых задач. К ним относятся прогнозирование полноты сгорания металлического горючего, определение дисперсности и доли частиц на выходе из камеры сгорания [5], прогнозирование влияния характеристик частиц и распределенного горения на устойчивость внутрикамерных процессов [6–8]. Важной задачей является также прогнозирование интенсивности осаждения частиц на элементы конструкции камеры сгорания и оценка массы шлакового остатка [9, 10].

К настоящему времени предложено значительное количество работ, посвященных моделированию двухфазных течений продуктов сгорания [11–15 и др.] При этом широкое распространение получил комбинированный подход Эйлера–Лагранжа, в соответствии с которым свойства газовой фазы описываются в Эйлеровых координатах в виде функций $\varphi = \varphi(\mathbf{r}, t)$, где $\mathbf{r}$ – радиус-вектор точки в расчетной области, t – время. Такие функции получаются путем решения уравнений механики сплошной среды. Конденсированная фаза описывается в соответствии с подходом Лагранжа и представляется в виде совокупности

дискретных частиц, свойства каждой из которых описываются в виде функций $\chi = \chi(\chi_0, t)$, где χ_0 – значение рассматриваемого свойства, например, координаты или размера частицы, в начальный момент времени. Для получения таких функций необходимо решить систему обыкновенных дифференциальных уравнений применительно к каждой рассматриваемой частице. При этом вследствие незначительных скоростного и температурного запаздываний поток ВДОК часто также описывается с использованием подхода Эйлера как один из компонентов сплошной среды [11–14]. Межфазное взаимодействие учитывается с помощью введения источников членов в уравнения неразрывности, энергии и импульса газовой фазы.

Общим для упомянутых работ является использование упрощенных моделей горения, например модели [16], в которой скорость горения отдельных частиц выражается в виде функции размера частицы, давления, концентрации окислительных компонентов и набора поправочных коэффициентов.

В работах [17, 18] авторами предложены детальные модели физико-химических превращений как агломератов, так и ВДОК в потоке продуктов сгорания. Помимо горения металла агломератов также описывается высокотемпературное химическое взаимодействие между жидким металлом и оксидом с образованием газообразных продуктов, образование и рост газовых полостей в составе агломератов, изменение структуры агломератов, коагуляция ВДОК и агломератов в потоке продуктов сгорания [17]. Применительно к ВДОК предложено описание гетерогенной нуклеации и укрупнения ВДОК в зоне газозафазного горения металла агломератов в результате конденсации субоксидов алюминия – продуктов горения металла агломератов [18]. В составе потока продуктов сгорания наблюдаются изменения массовой доли и дисперсности ВДОК вследствие реализации процесса эволюции агломератов, а также коагуляции частиц этой фракции конденсированных продуктов [19]. Созданные описания базируются на результатах экспериментального исследования процесса эволюции конденсированных продуктов [20].

Настоящая работа посвящена созданию обобщенного описания эволюции химически активного многофазного низкоскоростного потока в камере сгорания с учетом явлений, проходящих в каждой из рассматриваемых фаз. Для описания этих явлений используются ранее созданные модели [17–19]. Детализация моделирования отдельных существенно различающихся явлений потребовала использования и разработки отдельных программных модулей, а также разработки процедур, позволяющих решать задачу комплексно. Возникла необходимость поиска решений для описания межфазного взаимодействия, обусловленного наличием «распределенного горения». Описание принятых подходов и разработанных моделей приводится ниже. Практически значимой задачей является прогнозирование параметров потока на выходе из камеры сгорания, а также определение интенсивности шлакообразования.

1. Моделирование процесса эволюции

В основе моделирования лежит использование комбинированного подхода Эйлера-Лагранжа применительно к многофазному потоку продуктов сгорания, содержащему смесь химически активных газообразных продуктов, эволюционирующие агломераты и ВДОК.

Эволюция агломератов оказывает определяющее влияние на изменение химического состава и температуры газовой фазы. Учет этого влияния осуществляется посредством введения в уравнения неразрывности, движения, энергии, материального баланса источников членов. В свою очередь, для определения этих членов вводится понятие «расчетная ячейка». Данные ячейки представляют собой часть трубки тока газообразных продуктов сгорания, опирающиеся на участки поверхности топлива Ω_m (рис. 1). Агломераты вследствие реализации процесса эволюции, попадая в соответствующую ячейку, приводят к изменению температуры и химического состава газовой фазы. Информация об этих

изменениях является исходной для определения источниковых членов в данной пространственной области («расчетной ячейке»). Таким образом, введение подобных ячеек является «инструментом» для описания межфазного взаимодействия.

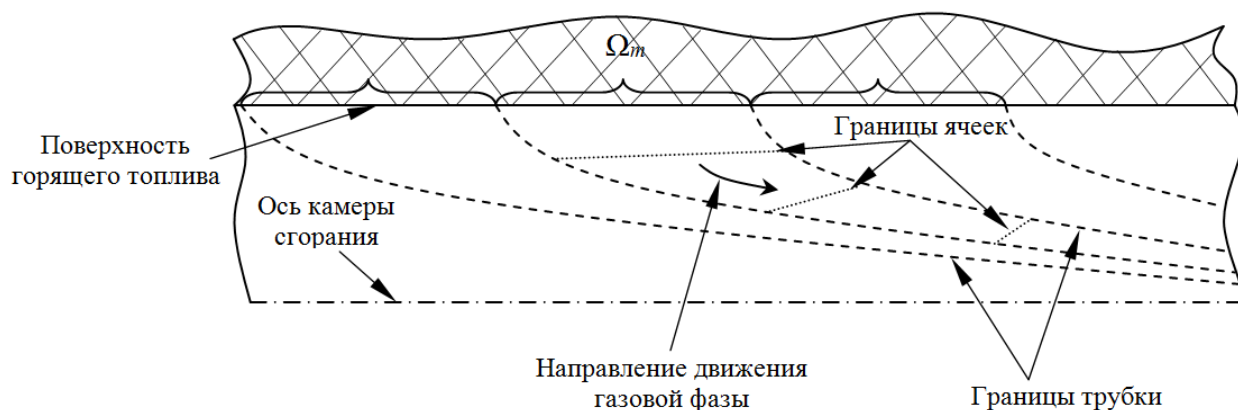


Рис. 1. Схема построения расчетной сетки

Рассмотрим принятые решения, связанные с описанием характеристик конденсированной и газовой фаз.

1.1. Свойства и течение газообразных продуктов

Сравнительно малая скорость сгорания металла агломератов является основанием для использования методов равновесной термодинамики для определения состава и температуры газообразных продуктов в пределах расчетной ячейки [17].

В составе газовой фазы рассматривается смесь из N индивидуальных веществ, включающих химические соединения элементов С, Н, О, N, Cl, Al. Наличие информации о составе и температуре газообразных продуктов горения позволяет определить изобарную теплоемкость, а также параметры молекулярного переноса [21].

Значительные размеры камеры сгорания, гетерогенная структура топлива дают основания считать, что режим течения является турбулентным. Моделирование течения смеси газообразных продуктов осуществляется путем численного решения системы осредненных по Рейнольдсу уравнений движения, энергии, неразрывности и материального баланса. Для условий в камере сгорания вводятся следующие допущения: поток является несжимаемым, стационарным, кинетическая энергия пренебрежимо мала по сравнению с внутренней энергией. Отметим, что в рамках решаемой задачи не рассматриваются области, связанные с предсопловым объемом и собственно соплом, что позволяет говорить о несжимаемости газа. Размеры расчетной области, определяемые внутренним объемом камеры сгорания, обуславливают сравнительно малые скорости движения газовой фазы, что является основанием не учитывать кинетическую энергию направленного движения.

Уравнения движения в проекциях на i -е координаты:

$$(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) u_i + \frac{\partial P}{\partial x_i} - \nabla (\mu_e \nabla u_i) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\mu_e \nabla \cdot \mathbf{u}) - \rho F_i = S_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (1)$$

уравнение неразрывности:

$$\rho (\nabla \cdot \mathbf{u}) = \sum_j S_j, \quad (2)$$

уравнение энергии:

$$(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) h - \nabla (\lambda_e \nabla T) - \rho \sum_{j=1}^N h_j \nabla (D_{ej} \nabla Y_j) = S_h, \quad (3)$$

уравнения материального баланса:

$$(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) Y_j - \rho \nabla (D_{ej} \nabla Y_j) = S_j, \quad j = 1, \dots, N, \quad (4)$$

где ρ – плотность; $\mathbf{u}$, u_i – соответственно вектор скорости и его проекции; x_i – координаты; P – давление; μ_e – эффективная динамическая вязкость; F_i – проекция массовой силы; n – число осей координат ($n = 2$ если задача плоская или осесимметричная, $n = 3$ – задача объемная); λ_e – эффективный коэффициент теплопроводности; T – температура; $h(T)$ – удельная энтальпия смеси продуктов сгорания; $h_j(T)$ – удельная энтальпия j -го компонента; Y_j – массовая доля j -го компонента; D_{ej} – эффективный коэффициент диффузии j -го компонента; S_i , S_j , S_h – источниковые члены, рассчитываемые при моделировании межфазного взаимодействия.

В качестве модели турбулентности используется k – ε модель турбулентности, замыкающая систему (1)–(4) двумя дополнительными уравнениями переноса кинетической энергии турбулентности k и скорости ее диссипации ε [22]:

$$(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) k = \nabla \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \quad (5)$$

$$(\rho \mathbf{u} \cdot \nabla) \varepsilon = \nabla \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} (C_{\varepsilon 1} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon) \quad (6)$$

где P_k – скорость генерации кинетической энергии турбулентности вследствие наличия градиентов средней скорости.

Постоянным параметрам модели присваиваются следующие значения: $C_\mu = 0,09$; $\sigma_k = 1,0$, $\sigma_\varepsilon = 1,3$; $C_{\varepsilon 1} = 1,44$; $C_{\varepsilon 2} = 1,92$. Пристеночная область при обтекании поверхностей разрешается при использовании пристеночных функций [22], связывающих параметры турбулентного течения с расстоянием от стенки.

Расчет поля параметров газовой фазы проводится в осесимметричной постановке. Расчетная область ограничена поверхностями горящего топлива и стенками двигателя, а также выходным сечением, которое является поверхностью входа в предсупловой объем. Граничные условия задаются из следующих условий:

- непроницаемости стенки камеры и «прилипания» на ней потока;
- знания скорости горения топлива и характеристик продуктов сгорания на поверхности топлива;
- неперевышения числа Маха величины 0,2 на входе в предсупловой объем.

Система уравнений (1)–(4) с учетом (5), (6) решается численно с использованием пакета прикладных программ, реализующего метод конечных объемов.

1.2. Эволюция агломератов

Моделирование движения и эволюции агломератов в потоке осуществляется при использовании подхода Лагранжа. Учитывая практическую невозможность моделирования каждой отдельной образующейся частицы, расчет проводится для ограниченного количества заранее выбранных агломератов.

Решение задачи моделирования эволюции агломератов сводится к расчету траекторий в известном поле параметров газовой фазы и определению изменений характеристик агломерата вдоль траектории. Для этого интегрируются системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Эти уравнения описываются в работе [17].

1.3. Межфазное взаимодействие

Считается, что взаимное влияние фаз связано с взаимодействием крупной фракции конденсированных продуктов – агломератов и газовой фазы.

Влияние эволюции агломератов на свойства газовой среды моделируется введением источников членов в уравнения (1)–(4). Для расчета параметров поля источников членов выполняются следующие действия.

1. Расчетная область представляется как совокупность расчетных ячеек (см. рис. 1). Выбор характерных размеров этих ячеек обусловлен следующими соображениями: уменьшение указанных размеров приводит, с одной стороны, к увеличению точности расчета, а с другой – к росту времени счета.

2. После интегрирования системы уравнений, описывающих эволюцию агломератов, проводится геометрический анализ траекторий агломератов и определяются изменения их характеристик при нахождении в пределах ячеек.

3. По изменениям массового потока и химического состава агломератов в пределах каждой расчетной ячейки определяются количество веществ, поступивших в газовую фазу вследствие эволюции агломератов, а также изменение энтальпии газовой фазы в ячейке. Использование аппарата равновесной термодинамики обеспечивает определение изменения химического состава смеси в ячейке. Это учитывается далее при расчете источников членов.

4. Источниковые члены в каждой ячейке определяются следующим образом:

$$S_i = \frac{\bar{u}_{a_i} (M_g - M_g^0)}{V}, S_j = \frac{M_g Y_j - M_j^0 Y_j^0}{V}, S_h = \frac{M_g h - M_g^0 h^0}{V}, \quad (7)$$

где V – объем ячейки; $\bar{u}_{a_i}$ – проекция осредненного вектора скорости всех агломератов в ячейке на i -ю ось координат; M_g – массовый поток газообразных продуктов сгорания через расчетную ячейку. Индексом 0 здесь обозначены исходные значения параметров в ячейке.

5. Поле источников членов определяется посредством интерполяции значений, полученных в каждой расчетной ячейке, после чего осуществляется расчет значений источников членов в ячейках сетки газодинамического расчета.

1.4. Определение параметров продуктов сгорания

Расчет параметров смеси газообразных продуктов и крупной фракции конденсированных продуктов горения (КППГ) – агломератов осуществляется посредством реализации глобальных итераций. На каждом шаге этого процесса решаются системы уравнений (1)–(4) с учетом (5), (6) при имеющихся данных об источниковых членах. Затем определяются характеристики агломератов, которые являются следствием процесса их эволюции, и новые значения источников членов. Эти значения используются для повторения расчета.

Итерации осуществляются до тех пор, пока не будет достигнут заданный уровень сходимости параметров газовой фазы (параметров химического состава и температуры) в контрольных точках, расположенных в расчетной области.

1.5. Эволюция высокодисперсного оксида

Моделирование эволюции ВДОК базируется на информации о параметрах газовой фазы и свойствах агломератов в пределах расчетной области. Рассматриваемыми характеристиками ВДОК являются массовая доля в составе газовой фазы, а также массовая функция плотности распределения по размерам, представляемая в виде L отдельных дискретных фракций. Подробное описание модели эволюции ВДОК приведено в работе [19].

2. Результаты численного анализа

Наиболее практически значимыми явлениями, которые в существенной мере зависят от проявлений процесса эволюции, являются шлакообразование в камере и формирование конденсированных продуктов на входе в сопло. Анализ разработанных средств был осуществлен применительно к этим явлениям.

2.1. Шлакообразование

Определялась интенсивность осаждения частиц конденсированной фазы на стенках камеры сгорания энергосиловой установки, геометрические параметры которой указаны на рис. 2. Частицы, траектории которых пересекают физические границы камеры сгорания, считаются выпавшими в шлак.

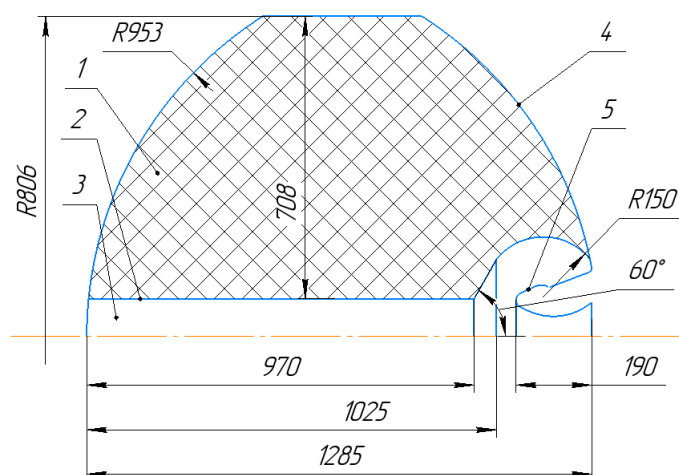


Рис. 2. Камера сгорания: 1 – заряд топлива, 2 – поверхность горения топлива, 3 – канал заряда топлива, 4 – стенка камеры сгорания, 5 – утепленная часть сопла

Геометрические размеры расчетных случаев определялись степенью выработки топлива в различные моменты времени работы энергосиловой установки. Свойства конденсированной фазы у поверхности топлива, а также давление и температура в камере сгорания определялись выбранным топливом – CSP-F5 [23], общая масса которого в данной энергосиловой установке составляет 3150 кг.

Результаты ранее выполненного исследования [19] позволили сделать вывод о значительном влиянии процесса эволюции потока продуктов горения на шлакообразование.

При проведении настоящего анализа акцент был сделан на определении влияния учета межфазного взаимодействия на интенсивность шлакообразования – поток агломератов на стенки камеры сгорания. Рассматривались две ситуации: расчет при отсутствии (начальное приближение) и наличии (конечные результаты) учета межфазного

взаимодействия. Отметим, что ранее [19] моделирование осуществлялось без учета данного взаимодействия.

На рис. 3 приведены результаты расчетов для двух указанных ситуаций в зависимости от времени работы двигателя. Видно, что в начальный момент интенсивность осаждения практически одинаковая в обеих ситуациях. В конце работы двигателя осаждение практически отсутствует. Для других моментов времени результаты существенно разнятся. Это связано с различиями в характере течения газовой фазы.

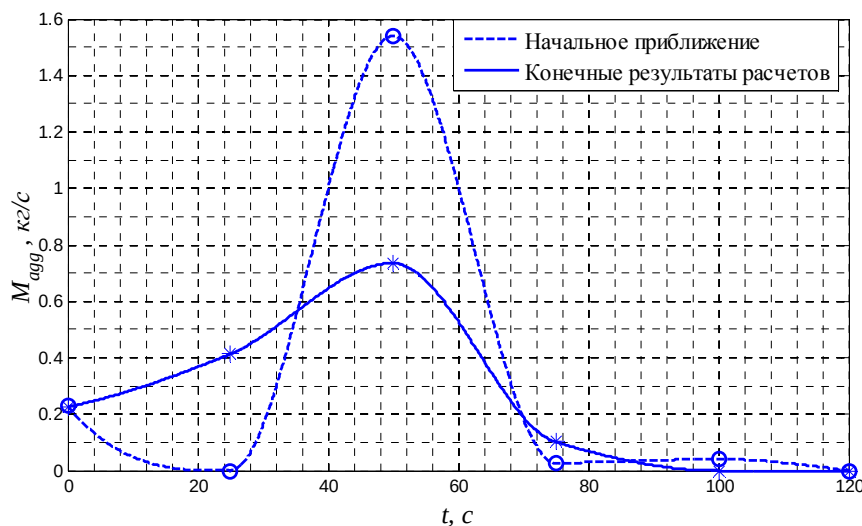


Рис. 3. Интенсивность осаждения агломератов на стенки КС

2.2. Формирование конденсированных продуктов на входе в сопло

Следствием процесса эволюции являются снижение массовой доли агломератов в потоке и падение их дисперсности. Так, в конечный момент времени работы двигателя массовая доля агломератов в составе конденсированных продуктов изменяется от значения 0,38 у поверхности горения до 0,18 на входе в сопло, трансформируется и функция распределения агломератов по размерам.

В процессе эволюции наблюдается очевидный рост содержания ВДОК в потоке конденсированных продуктов и происходит укрупнение частиц оксида. Последнее явление является следствием реализации процессов коагуляции и гетерогенной конденсации субоксидов алюминия на частицах ВДОК.

Таким образом, разработанные средства позволяют описать все характеристики конденсированных продуктов на входе в сопло. Отметим, что эта информация необходима для расчета потерь удельного импульса тяги.

Заключение

При выполнении настоящей работы разработано описание процесса эволюции многофазного потока продуктов горения в камере двигателя, в рамках которого учитывается широкий круг явлений, составляющих этот процесс. Это описание включает совокупность взаимодействующих между собой математических моделей рассматриваемых явлений и алгоритм численного анализа. Отметим наиболее существенные результаты.

1. Создано комплексное описание эволюции многофазного потока продуктов сгорания, включающее модели существенно различающихся явлений, происходящих как в газовой фазе, так и в конденсированной фазе – фракциях агломератов и ВДОК. Разработана методика взаимодействия моделей, основанная на глобальных итерациях.

2. Реализована модель течения многокомпонентной смеси, которая позволяет получать параметры поля скоростей, температуры и концентраций компонентов газовой фазы с учетом явлений тепло- и массопереноса в многофазном потоке. Разработана идеология учета межфазного взаимодействия, базирующаяся на введении понятия «расчетная ячейка».

3. Проведен параметрический анализ модели, который показал существенное влияние учитываемых факторов на результаты моделирования.

4. Показана практическая значимость работы, обусловленная возможностью прогнозирования шлакообразования в камере и характеристик конденсированных продуктов на входе в сопло.

Исследование выполнено за счет Российского научного фонда, грант № 21-19-00044.

Литература

1. Zarko V.E., Glotov O.G. Formation of al oxide particles in combustion of aluminized condensed systems // *Sci. Tech. Energetic Materials*. 2013. Vol. 74. No. 6. Pp. 139–143.
2. Ao W., Liu P., Yang W. Agglomerates, smoke oxide particles, and carbon inclusions in condensed combustion products of an aluminized GAP-based propellant // *Acta Astronautica*. 2016. Vol. 129. Pp. 147–153.
3. Babuk V.A., Vasilyev V.A., Malakhov M.S. Condensed combustion products at the burning surface of aluminized solid propellant // *J. Propul. Power*. 1999. Vol. 15. No. 6. Pp. 783–794.
4. Beckstead M.W. Evidences for distributed combustion // *Proceedings of the 24th JANNAF Combustion Meeting*, CPIA Publ. 1987. Vol. 1. No. 476. Pp. 1–12.
5. Maggi F., Dossi S., DeLuca L.T. Combustion of metal agglomerates in a solid rocket core flow // *Acta Astronautica*. 2013. Vol. 92. No. 2. Pp. 163–171.
6. Dupays J., Fabignon Y., Villedieu P., Lavergne G. and Estivalezes L. Some aspects of two-phase flows in solid-propellant rocket motors // *Progress in Astronautics and Aeronautics*. AIAA. 2000. Vol. 185. Pp. 859–883.
7. Emelyanov V.N., Teterina I.V., Volkov K.N., and Garkushev A.U. Pressure oscillations and instability of working processes in the combustion chambers of solid rocket motors // *Acta Astronautica*. 2017. Vol. 135. Pp. 161–171.
8. Gallier S., Godfroy F. Aluminum combustion driven instabilities in solid rocket motors // *J. Propul. Power*. 2009. Vol. 25. No. 2. Pp. 509–521.
9. Salita M. Deficiencies and requirements in modeling of slag generation in solid rocket motors // *J. Propul. Power*. 1995. Vol. 11. No. 1. Pp. 10–23.
10. Boraas S. Modeling slag deposition in the space shuttle solid rocket motor // *J. Spacecraft Rockets*. 1984. Vol. 21. No. 1. Pp. 47–54.
11. Sabnis J.S. Numerical simulation of distributed combustion in solid rocket motors with metalized propellant // *J. Propul. Power*. 2003. Vol. 19. No. 1. Pp. 48–55.
12. Shimada T., Daimon Y., Sekino N. Numerical simulation of flow inside a solid rocket motor by eulerian-hybrid approach with relation to nozzle inlet ablation // *Proc. 8th Intern. Sympos. on Experimental and Computational Aerothermodynamics of Internal Flows*, July 2007, Lyon, France. Paper ref. ISAI8-00109.2007. Pp. 1–10.
13. Attili A., Favini B., Di Giacinto M. Numerical simulation of multiphase flows in solid rocket motors // *45th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit 2–5 August 2009*. Denver, Colorado. AIAA Paper 2009-5507. 2009. Pp. 1–19.
14. Thakre P., Rawat R., Clayton R. Mechanical erosion of graphite nozzle in solid-propellant rocket motor // *J. Propul. Power*. 2013. Vol. 29. No. 3. Pp. 593–601.
15. Воронецкий А.В., Смоляга В.И., Арефьев К.Ю., Гусев А.А., Абрамов М.А. Параметрическое исследование взаимодействия частиц конденсированной фазы с

- высокоэнтальпийным потоком воздуха в прямоточной камере сгорания // Инженерный журнал: наука и инновации. 2017. Т. 8. № 68. С. 1–16.
16. Hermesen R.W. Aluminum combustion efficiency in solid rocket motors // AIAA 19th AEROSPACE SCIENCES MEETING, January 12–15, 1981 / St. Louis, Missouri. AIAA Paper 81-0038. 1981. Pp. 1–8.
 17. Babuk V.A., Nizyaev A.A. Modeling of evolution of the coarse fraction of condensed combustion products on a surface of burning aluminized propellant and within a combustion products flow // Int. J. of Energetic Materials and Chemical Propulsion. 2017. Vol. 16. No. 1. Pp. 23–38.
 18. Бабук В.А., Будный Н.Л. Моделирование эволюции высокодисперсного оксида в составе потока продуктов сгорания алюминизированного твердого топлива // Химическая физика и мезоскопия. 2017. Т. 19. № 1. С. 5–19.
 19. Бабук В.А., Будный Н.Л., Куклин Д.И., Низяев А.А. Модель эволюции многофазного потока продуктов сгорания в камере двигательной установки и результаты ее численного анализа // Изв. Российской академии ракетных и артиллерийских наук. 2020. № 1 (111). С. 53–60.
 20. Babuk V.A., Vasilyev V.A., and Naslednikov P.A. Experimental study of evolution of condensed combustion products in gas phase of burning solid rocket propellant // Combustion of Energetic Materials, Eds. K. Kuo and L. De Luca. 2002. Pp. 412–426.
 21. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: Справочник в 5 т. Т. 1 / Под ред. В.П. Глушко. М.: ВИНТИ, 1971. – 266 с.
 22. Волков К.Н., Дерюгин Ю.В., Емельянов В.Н., Карпенко А.Г., Козелков А.С., Тетерина И.В. Методы ускорения газодинамических расчетов на неструктурированных сетках. М.: Физматлит, 2014. – 536 с.
 23. Babuk V.A., Vasilyev V.A., Sviridov V.V. Propellant formulation factors and metal agglomeration in combustion of aluminized solid rocket propellant // Combustion Science and Technology. 2001. Vol. 29. Pp. 261–289.

УДК 536.46:533.6

ИЗМЕРЕНИЯ ВРЕМЕНИ ИНДУКЦИИ И РЕАКЦИИ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ РАЗЛИЧНОГО СТЕХИОМЕТРИЧЕСКОГО СОСТАВА В УДАРНОЙ ТРУБЕ

Е.А. Баранышин, В.В. Кузьмицкий, О.Г. Пенязьков, К.Л. Севрук

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Получение новых данных о воспламенении горючих смесей, содержащих водород, по-прежнему имеет важное значение как для последующего применения при проектировании энергетических установок и двигателей, так и для верификации разрабатываемых и применяемых для описания процессов горения кинетических механизмов. Представленные в литературе экспериментальные работы по воспламенению и детонации содержащих водород газовых смесей [1–7], как правило, были выполнены при низких давлениях и/или разбавлении инертным газом (аргоном или азотом). В данной работе представлены результаты исследования воспламенения водородно-воздушных смесей различного стехиометрического состава ($\phi = 0,5–2$) в диапазоне температур 900–1600 К (вплоть до минимальных значений задержек воспламенения 2 мкс) и давлениях 0,1, 0,3 и 0,6 МПа. Различными методиками были зарегистрированы времена индукции исследованных смесей. Для полученных зависимостей в области высоких температур были выполнены оценки энергии активации (64–83 кДж/моль). Экспериментально полученные данные сопоставлялись с расчетными и показали хорошее согласование при температурах выше 1100 К. В работе показано, что в диапазоне температур 1000–1200 К происходит изменение характера протекания процесса воспламенения и его параметров.

Методика эксперимента. Экспериментальный стенд для измерения времени индукции и времени реакции водородно-воздушных смесей был выполнен на базе круглой ударной трубы из нержавеющей стали. Длина трубы составляла ~8,5 м, внутренний диаметр – 50 мм. В качестве толкающего газа применялся гелий, подаваемый в камеру высокого давления с электропневматическим управлением. Измерения осуществлялись в измерительной секции ударной трубы (рис. 1) за отраженной ударной волной. Измерительная секция была выполнена прозрачной из цельного куска органического стекла с внутренним круглым сечением, равным внутреннему сечению ударной трубы. Внешняя поверхность измерительной секции имела квадратное сечение, позволяющее осуществлять видеосъемку протекающих внутри нее процессов через боковую стенку. Отражающая поверхность (торец ударной трубы), которой оканчивалась измерительная секция, также выполнялась из прозрачного органического стекла.

В центре торца ударной трубы был установлен высокочастотный пьезоэлектрический датчик давления РСВ 113В24. Ниже его по радиусу был установлен датчик тока ионизации таким образом, чтобы расстояние между корпусами датчиков составляло 10 мм. На расстоянии 98 и 198 мм от отражающей поверхности ударной трубы были организованы измерительные сечения, в каждом из которых в стенке трубы был установлен датчик давления и тока ионизации (угол между ними относительно центра трубы составлял 45°). Все используемые датчики были подключены к высокочастотным цифровым осциллографам, соединенным с персональным компьютером для обработки данных.

Возникающее в объеме ударной трубы в процессе воспламенения и горения исследуемых смесей излучение, пройдя через прозрачный торец трубы, регистрировалось фотоэлектронным умножителем. На его входе была установлена диафрагма и спаренный узкополосный оптический фильтр с длиной волны $\lambda = 308,9$ нм, что соответствовало излучению радикалов ОН переход $(A^2\Sigma - X^2\Pi)$.

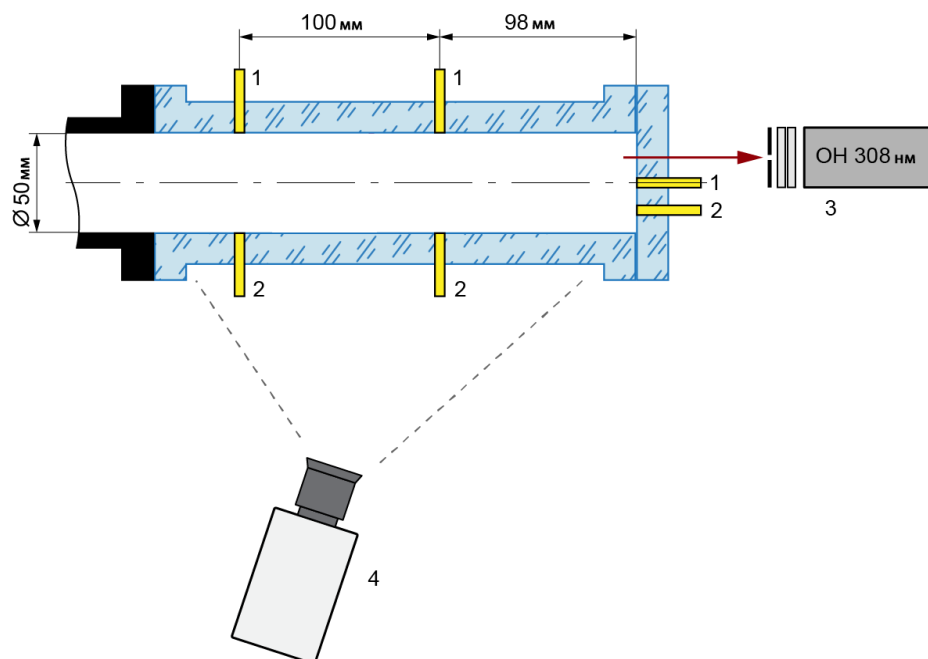


Рис. 1. Принципиальная схема измерительной секции ударной трубы: 1 – датчик давления; 2 – датчик тока ионизации; 3 – фотоэлектронный умножитель с диафрагмой и спаренным узкополосным оптическим фильтром; 4 – скоростная камера

Через боковую стенку измерительной секции осуществлялась скоростная видеосъемка процесса воспламенения и горения исследуемых водородно-воздушных смесей. С этой целью использовалась камера Photron FAST CAM SA-Z (скорость съемки – 224 000 кадр/с, время экспозиции – 1/0,35 мкс), которая устанавливалась на расстоянии ~0,63 м от оси измерительной секции не строго перпендикулярно к ней, а с отклонением ~10°. Такое расположение камеры позволяло визуализировать процессы как внутри измерительной секции на протяжении ~0,29 м от торца, так и у самой отражающей поверхности.

Исследование выполнялось для предварительно приготовленных водородно-воздушных смесей следующего состава:

29,58% H_2 + 14,79% O_2 + 55,63% N_2 – стехиометрическая водородно-воздушная смесь, $\phi = 1$ (коэффициент стехиометрии);

45,652% H_2 + 11,413% O_2 + 42,935% N_2 – богатая водородно-воздушная смесь, $\phi = 2$;

14,79% H_2 + 14,79% O_2 + 70,42% N_2 – бедная разбавленная азотом водородно-воздушная смесь, $\phi = 0,5$ (разбавлена на 15% N_2).

Для приготовления горючих газовых смесей использовался водород с чистотой 99,99%; кислород с чистотой 99,95%; азот с чистотой 99,99%. Исследованные газовые смеси приготавливались методом парциальных давлений и выдерживались перед применением не менее суток.

Параметры газовой смеси за падающей и отражённой ударными волнами рассчитывались с помощью ударной адиабаты (для случая не протекающих химических реакций) на основании измеренных значений скорости падающей ударной волны (датчиками давления) и данных о температурной зависимости теплоемкости смеси [8, 9]. В табл. 1 приведены условия за отраженной ударной волной (давление и температура), при которых в экспериментах выполнялись измерения времени индукции и реакции смеси.

Экспериментально времена индукции (задержки воспламенения) смесей определялись по показаниям торцевого датчика давления, торцевого датчика тока ионизации, регистрации возникающего в объеме трубы излучения (соответствующего появлению радикалов OH) и записям скоростной видеокамеры.

Таблица 1. Параметры газовых смесей за отраженной ударной волной

Смесь	Давление, МПа	Температура, К
29,58% H ₂ + 14,79% O ₂ + 55,63% N ₂	0,11±0,01	900–1600
	0,31±0,02	1000–1560
	0,58±0,04	1100–1320
45,652% H ₂ + 11,413% O ₂ + 42,935% N ₂	0,31±0,04	1000–1500
	0,59±0,04	1100–1360
14,79% H ₂ + 14,79% O ₂ + 70,42% N ₂	0,31±0,04	950–1350
	0,61±0,05	1150–1450

В первом случае t_{pressure} соответствует временному интервалу между приходом падающей ударной волны на торец трубы (определяется по датчику давления) и дополнительным ростом давления, связанным с воспламенением смеси за отраженной ударной волной. Во втором случае t_{ion} – время между приходом падающей ударной волны на торец трубы и появлением сигнала (5% от максимального значения) на торцевом датчике тока ионизации. В третьем случае t_{OH} – время между приходом падающей ударной волны на торец трубы и появлением сигнала (5% от максимального значения) на фотоэлектронном умножителе. В четвертом t_{cam} – время между приходом падающей ударной волны на торец трубы и регистрацией свечения из объема измерительной секции скоростной камерой.

Время реакции смеси t_{reaction} экспериментально определялось как временной интервал между появлением тока ионизации на торцевом датчике и достижением им максимального значения. Для теоретических оценок задержек воспламенения смеси (определяемых по образованию соответствующих радикалов – 5% от максимального значения) использовался ранее разработанный лабораторный компьютерный код, в котором процесс высокотемпературного окисления топлива за отраженной ударной волной рассматривался в адиабатическом приближении идеального газа при постоянном давлении, и применялись детальные кинетические механизмы GRIMECH [10] и Konnov [11].

По нашим оценкам погрешность измерения скорости ударной волны датчиками давления составляла ~0,5%, что приводило к погрешности определения температуры, давления и плотности газовой смеси ~0,75, ~1,5 и ~0,7% соответственно. Погрешность измерения времени индукции не превышала 15%.

Результаты исследования. Экспериментальное исследование процесса воспламенения водородно-воздушных смесей различного стехиометрического состава осуществлялось в ударной трубе за отраженной ударной волной. Высокочастотными пьезоэлектрическими датчиками давления регистрировалось прохождение по смеси ударной и отраженной волн с последующим определением их скорости и вычислением параметров газовой смеси за ними. В процессе экспериментов регистрировалось самовоспламенение горючей смеси с последующим распространением волны горения, детонации или перехода горения в детонацию.

Задержки воспламенения (времена индукции) смесей были измерены различными методиками для температур из диапазона 900–1600 К и давлений 0,1–0,6 МПа. Для указанных условий за отраженными ударными волнами измерялось время реакции смесей. Полученные данные приведены на рис. 2–4. Видно, что с увеличением температуры значительно уменьшаются задержки воспламенения всех исследованных водородно-воздушных смесей. Если в начале исследованных температурных интервалов они могут составлять сотни микросекунд, то наименьшие зарегистрированные нами времена индукции соответствуют 2 мкс. Значения, измеренные с применением разных методик, дополняют друг друга и имеют схожую динамику с изменением температуры. Отмечено, что при температурах выше 1100–1200 К для смеси постоянного стехиометрического состава время индукции уменьшается с ростом давления, а при меньших температурах – увеличивается.

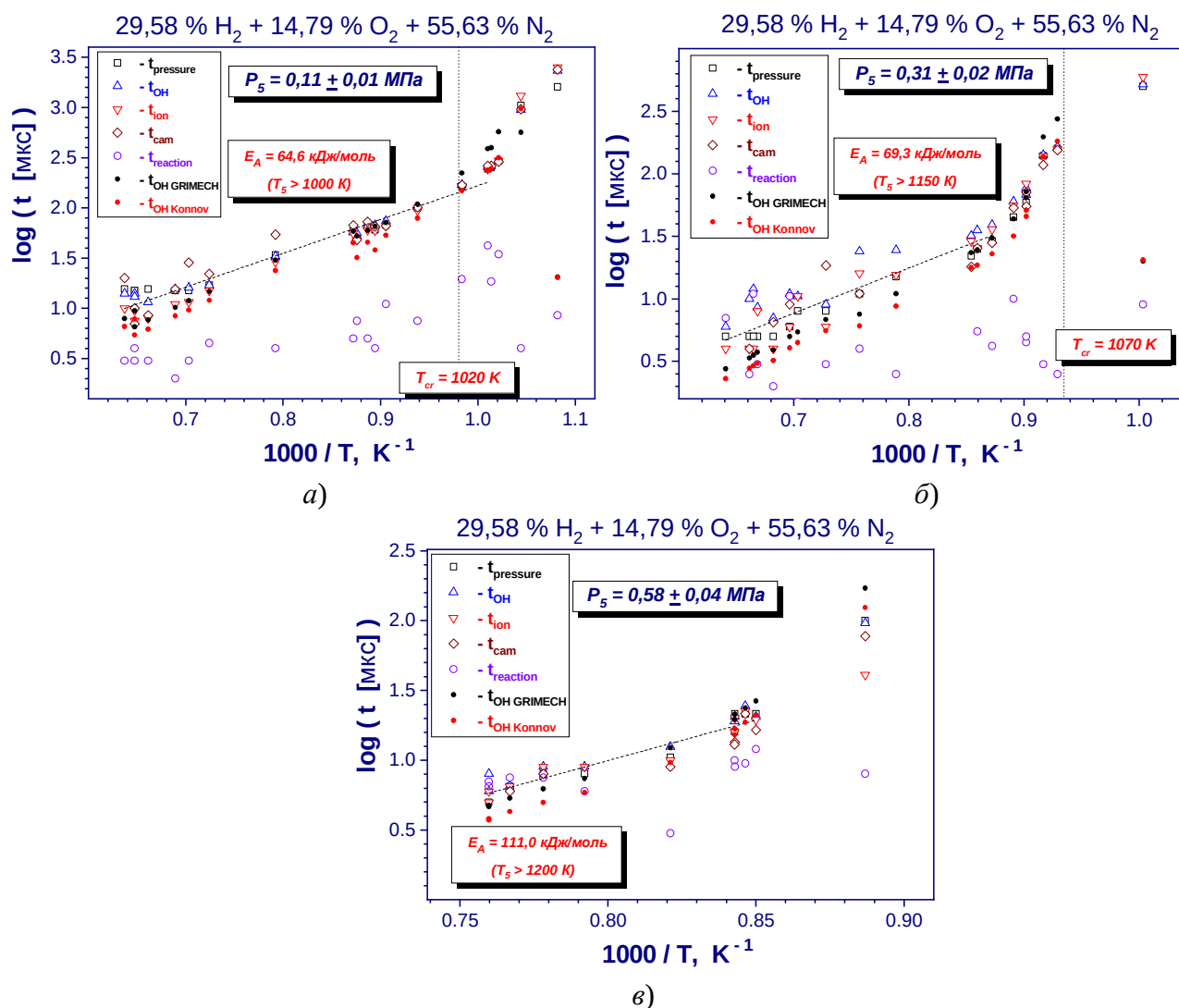


Рис. 2. Зависимость времени индукции и реакции стехиометрической водородно-воздушной смеси от обратной температуры при давлении 0,1 (а), 0,3 (б) и 0,6 (в) МПа

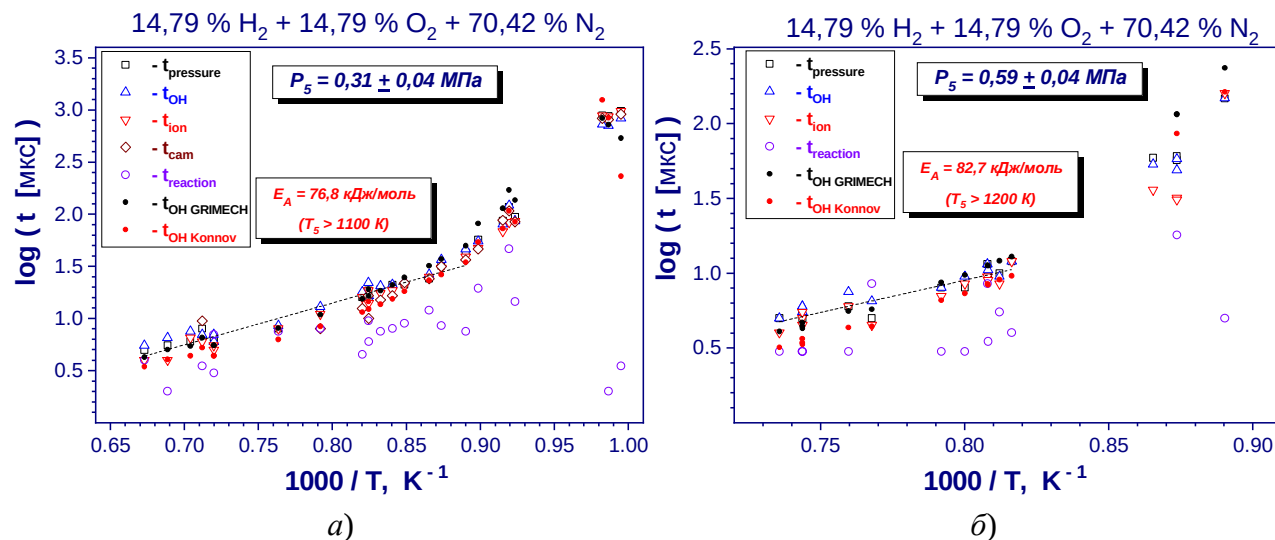


Рис. 3. Зависимости времени индукции и реакции богатой водородно-воздушной смеси от обратной температуры при давлении 0,3 (а) и 0,6 (б) МПа

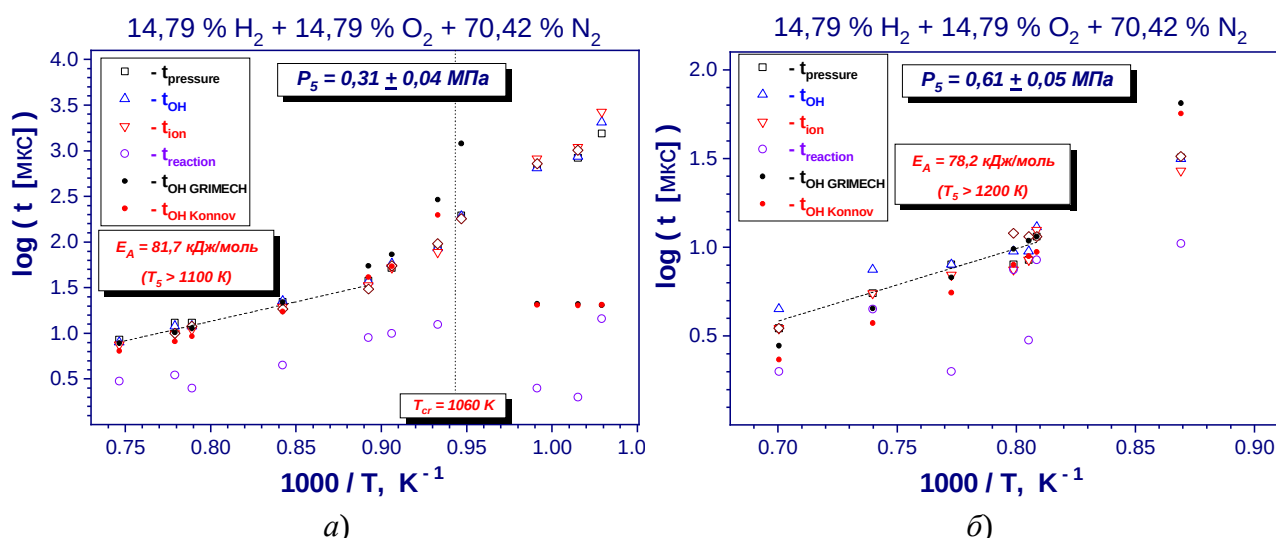


Рис. 4. Зависимости времени индукции и реакции бедной разбавленной азотом водородно-воздушной смеси от обратной температуры при давлении 0,3 (а) и 0,6 (б) МПа

В выбранной системе координат температурная зависимость времени индукции нелинейна, однако можно выделить линейный высокотемпературный участок. Для данного участка температурной зависимости была выполнена линейная аппроксимация (штриховая линия на рис. 2–4) и получены корреляционные уравнения между временем индукции и обратной температурой с последующим определением энергии активации E_A . Установлено, что для исследованных смесей (кроме стехиометрической при давлении $\sim 0,6$ МПа, где $E_A = 110$ кДж/моль) она лежит в интервале 64–83 кДж/моль и изменяется не более чем на 6 кДж/моль с изменением давления. Необходимо отметить, что полученные значения энергии активации близки к данным [3], где для реакции $O_2 + H \rightarrow OH + O$ она составляет 70,3 кДж/моль.

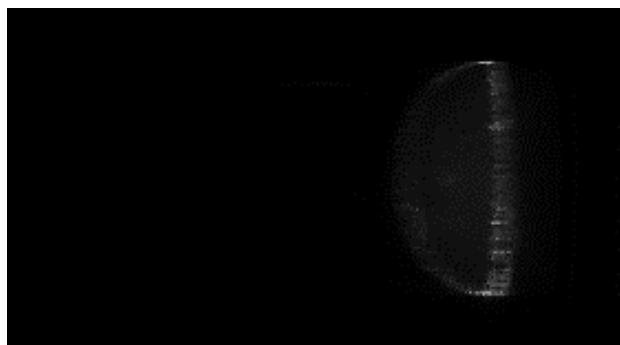
Экспериментальные данные по задержкам воспламенения водородно-воздушных смесей, полученные по регистрации свечения радикалов OH, сопоставлялись с полученными расчетным путем с применением детальных кинетических механизмов GRIMECH [10] и Konnov [11]. Расчетные результаты также приведены на рис. 2–4. Видно, что они хорошо соответствуют экспериментально зарегистрированным при температурах выше 1000 К (совпадает динамика их поведения, они остаются величинами одного порядка; напомним, что погрешность экспериментального измерения времени индукции не более 15%). При этом можно отметить, что во всех расчетах результаты по GRIMECH превосходят данные, полученные по Konnov. Можно видеть, что в высокотемпературной области расчетные значения ниже экспериментальных, а в низкотемпературной превышают их. При значительном снижении температуры использованные нами детальные кинетические механизмы не применимы для описания полученных экспериментальных данных.

Данные рис. 2–4 свидетельствуют об изменении режима воспламенения в интервале температур 1000–1200 К. Изменение наклона температурной зависимости указывает на изменение энергии активации процесса (ее росте с уменьшением температуры). Для имеющегося набора данных нами была найдена критическая температура «сильного» режима воспламенения исследованных смесей T_{cr} (вертикальная пунктирная линия на рис. 2, 4). Она определялась на основании температурных зависимостей скорости отраженной ударной волны (рассчитанной как сумма скорости отраженной ударной волны, вычисленной в лабораторной системе координат, и скорости потока газа за падающей ударной волной), измеренных на различном расстоянии (98 и 198 мм) от торца ударной трубы. Предполагалось, что при смене режима воспламенения происходит скачкообразное

изменение скорости отраженной волны в соседних измерительных сечениях трубы. Соответствующая этому температура – критическая температура «сильного» режима воспламенения. В наших исследованиях она лежит в диапазоне 1000–1100 К и близка к температуре, при которой происходит смена энергии активации смеси.

В процессе исследований осуществлялась одновременно скоростная видеорегистрация процесса воспламенения горючей смеси. К сожалению, яркость процесса не всегда была достаточной (особенно при низких температурах) для ее успешного осуществления. Анализ полученных записей показал, что в исследованных смесях при температурах выше 1000–1200 К за отраженной ударной волной наблюдалось объемное воспламенение у отражающей поверхности ударной трубы с последующим распространением плоской зоны горения (детонации). На первом кадре (рис. 5а), регистрирующем появление излучения, можно было видеть, что свечение (воспламенение) присутствует на всей внутренней поверхности торца трубы (особенно ярко в местах слияния с боковыми стенками трубы, где образуются зоны повышенных параметров). Далее оно равномерно по сечению трубы распространяется по потоку. При температурах ниже указанного интервала регистрируется очаговое воспламенение смеси за отраженной ударной волной (рис. 5б) со значительно большими задержками воспламенения. Очаги воспламенения могут находиться не у отражающей поверхности, а далее по потоку, как правило в пристеночной области, что согласуется с данными [12, 13]. Возникающий при этом фронт горения не плоский, но он постепенно ускоряется с переходом горения в детонацию.

В ходе экспериментального исследования также были измерены времена реакции водородно-воздушных смесей (рис. 2–4). Отмечалось их уменьшение с ростом температуры от десятков до 2 мкс.



а)



б)

Рис. 5. Воспламенение стехиометрической водородно-воздушной смеси:

а – объемное у отражающего торца при 1230 К и 0,53 МПа;

б – с появлением «горячих точек» при 1100 К и 0,31 МПа

Закключение. В результате выполненного в ударной трубе экспериментального исследования процесса воспламенения водородно-воздушных смесей различного стехиометрического состава ($\phi = 0,5–2$) за отраженной ударной волной получены данные о задержках воспламенения, временах реакции и характере протекания процесса в широком диапазоне температур (900–1600 К) при различных давлениях (0,1, 0,3 и 0,6 МПа).

В логарифмической системе координат зависимость времени индукции от обратной температуры нелинейная, однако позволяет выделить линейные участки. Для высокотемпературного линейного интервала на основании выполненной аппроксимации была определена энергия активации смесей, которая составила 64–83 кДж/моль. Снижение температуры ниже 1100 К приводит к увеличению энергии активации.

Сравнение экспериментальных данных по задержкам воспламенения с результатами численных расчетов по кинетическим механизмам GRIMECH и Konnov показали их хорошее соответствие при температурах выше 1100 К.

По анализу измерений скорости отраженной ударной волны в двух измерительных сечениях ударной трубы получены критические температуры «сильного» режима воспламенения смесей в исследованных условиях. Они соответствуют интервалу 1000–1100 К.

Выполненная в прозрачной измерительной секции из органического стекла видеорегистрация процесса позволила установить при температурах ниже 1200 К переход режима воспламенения от объемного у отражающей стенки к очаговому (в том числе ниже по потоку).

Можно сделать вывод, что для исследованных водородно-воздушных смесей в указанных условиях температурный интервал 1000–1200 К является критическим: в нем происходит смена режима воспламенения и критические изменения параметров процесса.

Литература

1. Skinner G.B.; Ringrose G.H. Ignition Delays of a hydrogen-oxygen-argon mixture at relatively low temperatures // *J. Chem. Phys.* 1965. Vol. 49. Pp. 2190–2192.
2. Craig R. A shock tube study of the ignition delay of hydrogen-air mixtures near the second explosion limit // *Technical Report AFAPL-TR-66-74*, Air Force Aero-Propulsion Lab, Wright-Patterson. 1966.
3. Maas U., Warnatz J. Ignition processes in hydrogen–oxygen mixtures // *Combust. Flame*. 1988. Vol. 74. Iss. 1. Pp. 53–69.
4. Blumenthal R.K., Fieweger K.K., Adomeit G., Gelfand B. Self-ignition of H₂-air mixtures at high pressure and low temperature // *20th Symp. Int. Shock Waves*. 1996. Pp. 935–940.
5. Petersen E., Davidson D., Rohrig M., Hanson R. High-pressure shock-tube measurements of ignition times in stoichiometric H₂/O₂/Ar mixtures // *20th Symp. Int. Shock Waves*. 1996. Pp. 941–946.
6. Lee D., Hochgreb S. Hydrogen autoignition at pressures above the second explosion limit (0.6–4.0 MPa) // *Int. J. of Chemical Kinetics*. 1998. Vol. 30. Iss. 6. Pp. 385–406.
7. Гельфанд Б.Е., Попов О.Е., Чайванов Б.Б. Водород: параметры горения и взрыва. М.: Физматлит, 2008. – 288 с.
8. Солоухин Р.И. Ударные волны и детонация в газах. М.: ГИФМЛ, 1963. – 175 с.
9. Gaydon A.G., Hurler I.R. The shock tube in high-temperature chemical physics // *New York: Reinhold Pub. Corp.* 1963.
10. Smith P., Golden D., Frenklach M., Moriarty N., Eiteneer B., Goldenberg M., Bowman C., Hanson R., Song S., Gardiner W., Lissianski V., Qin Z. GRIMECH 3.0 Reaction Mechanism. 1999. <http://www.me.berkeley.edu/gri.mech/>.
11. Konnov A.A. Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion // *Release 0.4*. 1998. <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov>.
12. Baranyshyn Y.A., Krivosheyev P.N., Penyazkov O.G., Sevrouk K.L. Flame front dynamics studies at deflagration-to-detonation transition in a cylindrical tube at low-energy initiation mode // *Shock Waves*. 2020. Vol. 30. Iss. 3. Pp. 305–313.
13. Krivosheyev P., Penyazkov O., Sakalou A. Analysis of the final stage of flame acceleration and the onset of detonation in a cylindrical tube using high-speed stereoscopic imaging // *Combust. Flame*. 2020. Vol. 216. Pp. 146–160.

УДК 533.6.07

ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЗАПУСКА СВЕРХЗВУКОВОЙ АДТ**Н.И. Батура, А.В. Руденко, А.Г. Ереза**

Центральный аэрогидродинамический институт имени профессора Н.Е. Жуковского
(ФАУ «ЦАГИ»), Жуковский, Московская обл., Россия

Существенным этапом при создании новых образцов авиационной и космической техники являются наземные экспериментальные исследования, проводимые с использованием аэродинамических труб (АДТ) и различных газодинамических стендов.

Важнейшим элементом таких установок являются сопла, обеспечивающие получение рабочего потока с необходимыми параметрами. При создании сопел сверхзвуковых АДТ обычно более пристальное внимание уделяется сверхзвуковому участку сопла, где формируется равномерное поле скоростей рабочего потока. Контур дозвуковых участков таких сопел выполняются по более простым и технически удобным в реализации зависимостям, часто не без оснований полагая, что геометрия входного участка не оказывает существенного воздействия на рабочий поток. Однако при определенных условиях геометрия входного участка сопла может в значительной степени влиять на качество рабочего потока в рабочей части АДТ.

На основе моделирования различных вариантов геометрии входного участка сопла (исходная геометрия или профилированный контур с различной степенью перфорации) проведена оценка степени влияния особенностей входного участка на особенности запуска трубы и качество рабочего потока в зоне установки модели. Численное моделирование нестационарного течения в рабочем тракте АДТ проводилось в комплексе ANSYS CFX. Моделирование перфорированного входного участка производилось с помощью модели пористой структуры, перепад давлений на которой соответствует перепаду на перфорированной стенке с заданным процентом перфорации [1]. В ходе моделирования рассматривалось влияние величины и распределения проницаемости перфорации вдоль входного участка сопла на особенности запуска АДТ и качество рабочего потока.

В результате проведенного исследования было подтверждено образование мощных вихревых структур в зоне входного участка сопла исходной геометрии, что приводит к существенным колебаниям параметров потока в зоне установки модели. Показано, что амплитуда колебаний числа Маха и давления могут быть значительно (на порядок) уменьшены при соответствующем профилировании входного участка сопла. Результаты проведенного экспериментального исследования подтвердили выявленный факт.

Использование перфорации на подвижных панелях входного устройства в значительной степени упростило его конструкцию из-за существенного снижения перепада давления на панелях.

Литература

1. Идельчик И.Е. Справочник по гидравлическим сопротивлениям. М.: Физматгиз, 1978.

УДК 536.24.01

ВЛИЯНИЕ УДАРНЫХ ВОЛН НА ТЕМПЕРАТУРНОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ В ГАЗАХ В СИСТЕМАХ С ГРАДИЕНТОМ ДАВЛЕНИЯ

Я.Д. Белявский

PG Wave LTD, Израиль

Объединим под термином “волна звукового типа” упругие волны, распространяющиеся со скоростью звука, независимо от частоты колебаний источника волны (звук, ультразвук, инфразвук). Тогда можно сказать, что в газах существуют только два типа упругих волн: волна звукового типа и ударная волна.

Ударные волны (УВ) распространяются со сверхзвуковой скоростью. Их появление связано с появлением новой массы (взрыв) или со сверхзвуковым движением. Ударная волна переносит энергию, это всегда волна сжатия. По мере продвижения энергия и скорость УВ снижаются и, когда скорость УВ становится равной скорости звука, она преобразуется в волну звукового типа.

Накопилось большое число наблюдений о влиянии звука на температурные процессы в газах: нагревание [1], сушку [2], охлаждение [3]. Общими характеристиками этих процессов является то, что они происходят в газах и имеют резонансный характер, т. е. наблюдается зависимость интенсивности процесса от частоты звука. К этому же классу явлений следует отнести температурные эффекты Ранка (вихревые трубы) [4] и Гартмана–Шпренгера [5]. Температурная сепарация в этих устройствах всегда сопровождается громким звуком. Дополнительным общим свойством этих устройств является наличие градиента давления, причём область нагрева находится в зоне повышенного давления, а область охлаждения – сниженного.

Закрутка газа в вихревых трубах создаёт градиент давления с максимумом давления на периферии у цилиндрической стенки и минимумом в центральной области возле оси трубки. В трубках Гартмана–Шпренгера (ТГШ) градиент давления создаётся за счёт торможения газовой струи. Дно полости, установленной напротив сопла, разогревается до значительных температур, в этом месте давление максимально (кинетическая энергия струи переходит в потенциальную). В экспериментах [6] с использованием гелиевой струи на дне полости была достигнута температура ~ 1000 °С. Область минимального давления – это зона между соплом и полостью, где скорость струи максимальна. Отводя тепло от наружной стенки полости и выводя газ из пространства между соплом и полостью, добиваются значительного снижения температуры выходящего газа.

Для объяснения температурного разделения в этих устройствах выдвигались различные концепции. В качестве источника охлаждения газа в этих устройствах рассматривалось адиабатное снижение давления при разгоне струй в соплах. Нагрев обуславливался вязким трением струй газа, рассматривались также микрохолодильные процессы (или взаимодействие вихрей), в результате которых образовывались холодные и горячие микрообъёмы, которые затем разделялись. Нагревание в эффекте Гартмана–Шпренгера объяснялось ударными волнами.

Однако до настоящего времени не была сформулирована теория, адекватно описывающая эти температурные процессы. Отсутствие понимания физической основы этих процессов вынуждало нас относить их к области экспериментальных парадоксов.

Концепция упругих волн градиента давления

Нами были выполнены экспериментальные исследования температурного разделения в устройствах, упомянутых выше, а также в короткой вихревой камере. Результаты

экспериментов подтвердили, что ранее существовавшие теории не могут объяснить температурное разделение в газах. Нами представлена и обоснована концепция упругих волн градиента давления (ВГД) (Pressure Gradient Elastic Wave) [7–11].

ВГД – это волны звукового типа. Они распространяются со скоростью звука в соответствии с принципом Гюйгенса–Френеля, интерферируют, отражаются, поглощаются. Однако ВГД отличаются от других волн звукового типа природой сил, которые создают стартовые флуктуации плотности, и направлением распространения. ВГД возникают в объёме (пространстве) при одновременном выполнении трех условий: объём заполняет сжимаемая среда (газ), в этом объёме существует градиент давления и генерируются флуктуации плотности (звуковые или турбулентные).

Обоснование существования ВГД не требует введения новых физических сущностей и основывается на классической термодинамике. С учётом того, что явление относится к неравновесной термодинамике (системы с градиентом давления). Наиболее простой способ обосновать существование ВГД – это аналогия с известным явлением естественной (вынужденной) конвекции. Рассмотрим мысленный эксперимент (рис. 1).

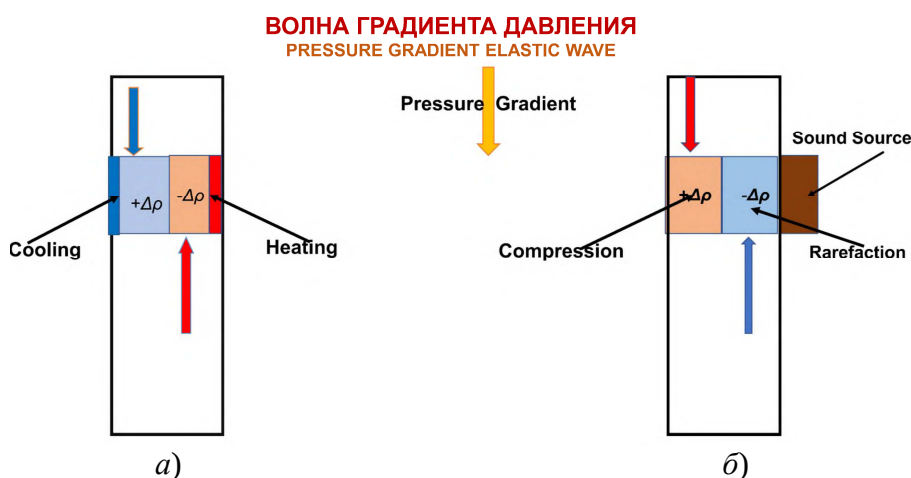


Рис. 1. Удлиненный объём, заполненный газом, в присутствии градиента давления

На рис. 1 показаны два удлиненных объёма, заполненных газом, находящиеся в силовом поле, создающем градиент давления (гравитация, вращение и т. д.). Вектор градиента давления направлен сверху вниз в сторону увеличения давления. На рис. 1а на стенке объёма установлены пластины, которые создают в прилегающем пространстве нагретый и охлажденный микрообъёмы. Теория конвекции рассматривает баланс сил, действующих на границы микрообъёма по закону Архимеда. Результирующая сила давления, смещающая микрообъём, возникнет, когда плотность газа внутри микрообъёма будет отличаться от плотности окружающего газа. Очевидно, холодный микрообъём (более высокой плотности) будет смещаться в сторону увеличения давления (вниз), а нагретый (более низкой плотности) – в противоположном направлении.

На рис. 1б на стенке объёма установлен источник звука, который создал звуковую флуктуацию плотности с образованием смежных зон сжатия и разрежения. Акустические процессы изучаются в рамках классической термодинамики, поэтому мы можем обоснованно рассматривать баланс сил давления, действующих на границы этих зон (так же как в явлении конвекции). По закону Архимеда результирующие силы, действующие на зоны сжатия и разрежения звуковой волны, не равны нулю, так как плотности в этих зонах сместились от равновесных значений. Эти силы направлены вдоль вектора градиента давления. На зону сжатия сила действует в направлении увеличения давления, а на зону разрежения в противоположном направлении – в сторону уменьшения давления. Важным отличием от

рассмотренного выше явления конвекции является адиабатический характер звуковых процессов, поэтому зона сжатия в газе нагрета, а зона разрежения охлаждена.

Давление в газах определяется средней скоростью молекул, которая выше скорости звука. Звуковые флуктуации плотности развиваются со скоростью звука. На эти зоны действуют более быстрые силы давления, создавая дополнительное вторичное возмущение плотности, которое (согласно принципу Гюйгенса) обязательно создаёт вторичную упругую волну. В соответствии с принципом суперпозиции эту волну можно рассматривать отдельно – это волна градиента давления. ВГД состоят из фронта сжатия и фронта разрежения. Однако в соответствии с направлением сил, создающих звуковые возмущения плотности, фронт сжатия ВГД направлен в сторону увеличения давления, а фронт разрежения ВГД – в противоположном направлении (в сторону уменьшения давления).

ВГД возникают в каждой точке объёма, внутри которой произошли флуктуации плотности. Эта волна представляет собой последовательность волн сжатия, распространяющихся в направлении увеличения давления, и последовательность волн разрежения, распространяющихся в противоположном направлении. В ограниченном объёме ВГД нагревают стенку, ограничивающую зону высокого давления, и охлаждают стенку (или область) сниженного давления. В таком объёме ВГД переносят энергию из зоны низкого давления в зону высокого давления.

Концепция ВГД полностью описывает температурные эффекты в газах, в том числе эффекты Ранка и Гартмана–Шпренгера, а также результаты всех экспериментов. На основе явления ВГД может быть создан новый тип теплового насоса. Физика процесса позволяет обоснованно предсказать, что эти новые тепловые насосы будут более эффективными, чем существующие.

Трубки Гартмана–Шпренгера

Нагревание в эффекте Гартмана–Шпренгера объяснялось ударными волнами. Действительно, при работе этого устройства, безусловно, образуются УВ и они проникают в полость, дно которой нагревается. Схема трубки Гартмана–Шпренгера (ТГШ) показана на рис. 2.

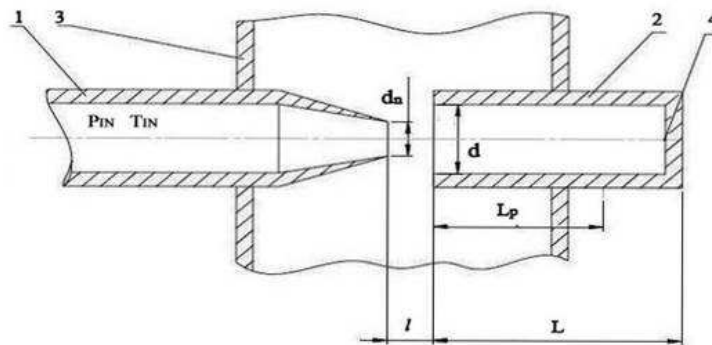


Рис. 2. Схема трубки Гартмана – Шпренгера: 1 – сопло; 2 – полость; 3 – стенка канала; 4 – термопара; d_n – диаметр сопла; d – диаметр полости; l – зазор между соплом и полостью; L – глубина полости; L_p – глубина проникновения струи; P_{IN} – входное давление; T_{IN} – температура на входе

Нет сомнения, что "пережатая" струя в пространстве между соплом и полостью создаёт бочкообразные пульсации (рис. 3). Скорость газа в областях расширения сверхзвуковая, при этом генерируются УВ, которые проникают в полость ТГШ. Глубина проникновения потока L_p зависит от параметров струи и геометрии устройства. Важно подчеркнуть, что L_p всегда меньше глубины полости ТГШ L ($L_p < L$), т. е. ударная волна не

достигает дна полости. Вырожденная УВ ("нулевой скачок" [12, гл. 3], когда скорости газа до и после разрыва равны) преобразуется в зону сжатия в звуковой волне. Этот факт подтверждён экспериментами [13], в которых давление на дне полости измерялось высокоскоростным датчиком. Зафиксированные изменения давления на дне полостей ТГШ имеют периодическую "пилообразную" форму с зонами сжатия и разрежения, которые характерны для мощных звуковых волн, изучаемых нелинейной акустикой. Таким образом, внутри полости ТГШ энергия УВ выделяется в верхней части трубки и ударные волны не могут нагревать дно полости, где фиксируются самые высокие температуры.

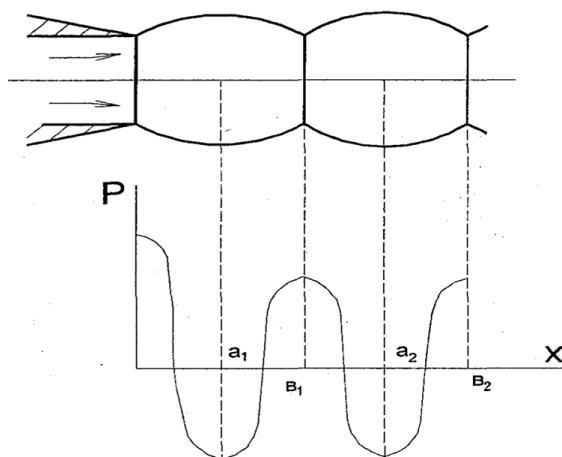


Рис. 3. Форма поверхности струи и распределение в ней давления при сверхкритическом истечении газа из сопла

Фотография периодических структур (рис. 4) подтверждает отсутствие ударной волны внутри полости ТГШ. Сфотографированная полость ТГШ была изготовлена из прозрачной плексигласовой трубки (диаметр полости 14 мм, глубина полости 375 мм). Трубка была установлена горизонтально, в полость засыпан тонкий порошок. Воздушная струя проникала в полость горизонтально вдоль оси.



Рис. 4. Фотография периодических структур внутри прозрачной полости ТГШ

При вводе воздушной струи в полость наблюдался интересный эффект. На фотографии показано стационарное состояние. Частицы порошка перегруппировывались в периодические структуры. Эти структуры образуются в результате воздействия звуковой стоячей волны на тонкие частицы внутри полости ТГШ, подобно тому, как это происходит внутри известной трубки Кундта. Фотография демонстрирует ситуацию, когда частицы сгруппированы в виде "пластинок" в узлах стоячей волны. Наличие периодических структур внутри полости ТГШ, в которую входит газовая струя, находится в противоречии с представлением о том, что УВ достигает дна полости ТГШ. Данное наблюдение подчёркивает тот факт, что глубина проникновения струи (и проникновения УВ) невелика и в большей части объёма полости звуковая волна распространяется через покоящийся газ. Следовательно, этот факт является дополнительным подтверждением того, что в этом устройстве ударные волны не переносят энергию ко дну полости ТГШ.

Кроме того, как описано в [5], значительное нагревание дна полости ТГШ наблюдалось при малых давлениях на сопле (докритических условиях), когда образование УВ невозможно.

Дополнительным аргументом, который ставит под сомнение ответственность УВ за нагрев полости ТГШ, являются режимы работы, когда УВ существует, а нагрев отсутствует. Действительно, УВ всегда возникают, когда отношение давления на сопле превышает критическое значение. Однако нагрев, а также мощный звук, возникают только в узком диапазоне расстояний между соплом и полостью ТГШ.

Короткая вихревая камера

В вихревых трубах (эффект Ранка) микрохолодильные циклы были предложены как источник нагревания и охлаждения. Предполагалось, что горячие и холодные микрообъёмы формируются в результате процессов, проходящих внутри вихревого слоя, затем эти микрообъёмы разделяются.

Неожиданное обнаружение разогрева боковой стенки короткой вихревой камеры стимулировало наши исследования в области температурного разделения. На рис. 5 схематично изображена короткая вихревая камера с отношением высоты к диаметру 0,18 (в вихревых трубах это отношение 10–30).

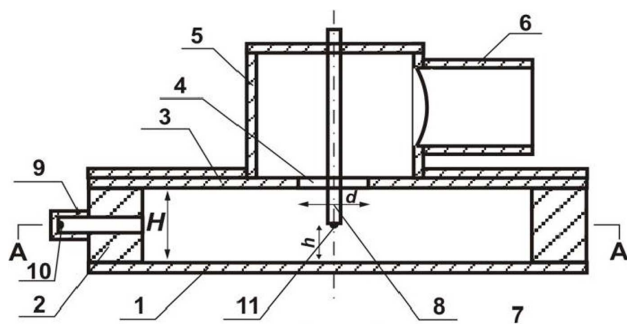


Рис. 5. Экспериментальная вихревая камера (схематическое изображение, поперечный разрез): 1 – нижний диск; 2 – цилиндрическая боковая стенка; 3 – верхний диск; 4 – выходная диафрагма; 8 – центральный стержень; 9 – заглушенный боковой патрубок; 10 – «горячая» термопара; 11 – «холодная» термопара; d – диаметр выходной диафрагмы

В этом устройстве сжатый воздух при комнатной температуре нагнетался от боковой стенки к центру вихревой камеры [7]. В экспериментах на периферии вихревой камеры была получена максимальная температура 465°C , а в центральной зоне – минимальная температура -45°C . Мощный поток воздуха нагнетается от периферии к центру вихревой камеры. Воздух выходит из камеры через диафрагму 4. Если в этой вихревой камере присутствуют «горячие» микрообъёмы, то они не могут перемещаться на периферию из-за мощного радиального воздушного потока к центру. Следовательно, концепция микрохолодильных циклов не может объяснить нагрев периферии внутри этого устройства.

Вместе с тем влияние ударных волн, на первый взгляд, вполне возможно. Действительно, воздух входит в камеру тангенциально через четыре цилиндрических сопла, установленных на боковой стенке 2. На фотографии (рис. 6) показан фрагмент боковой стенки, включающий три тангенциальных сопла, имеющих прямой выход в камеру.

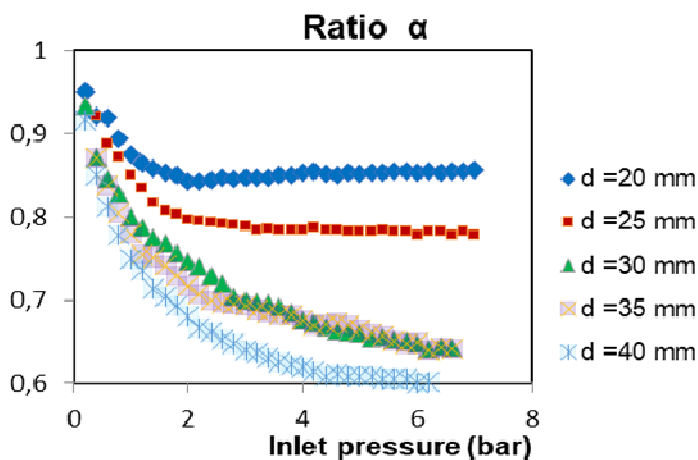
Эксперименты выполнялись на режимах с давлением на входе в сопла до 7 бар. Следовательно выходящие в камеру струи вполне могут быть «пережаты», иметь сверхкритическую структуру, как на рис. 3, с образованием ударных волн.



Рис. 6. Фрагмент боковой стенки вихревой камеры

Для исследования этого вопроса была выполнена серия экспериментов. Измерения давлений на короткой вихревой камере [7] дали неочевидный результат. Значение отношения давлений на сопле P_{out}/P_{in} во всех режимах работы было больше, чем критическое значение для воздуха, т. е. 0,53. Например, когда давление на входе в сопла было равно 7 бар, значение выходного давления составляло 4,6 бар и отношение давлений равнялось 0,66. Этот результат показывает, что возможные значения скорости входных струй в этом устройстве являются дозвуковыми и ударные волны в вихревой камере не возникают.

Диаграмма на рис.7 показывает зависимость измеренных значений отношения α от давления на входе в вихревую камеру: измерения были выполнены для вихревых камер с различными диаметрами выходных диафрагм d .



$$\alpha = \frac{P_{side\ wall} + 1}{P_{input} + 1}$$

P_{input} – входное давление (бар),
 $P_{side\ wall}$ – давление на боковой стенке (бар)

Рис. 7. Отношение α как функция давления на входе в вихревую камеру

Значение отношения α определяет величину скорости воздушных струй, входящих в вихревую камеру. Важно указать, что $\alpha > 0,53$ (критического значения для воздуха) для всех диаметров диафрагм на всех режимах течения. Это обстоятельство означает, что скорости струй на входе в вихревую камеру во всех экспериментах были ниже скорости звука. Следовательно, течение вихревого потока не сопровождалось распространением ударных волн внутри вихревой камеры.

Выявленная автомодельность является интересной задачей для теоретиков и относится к области экспериментальных парадоксов.

Выводы

Ранее выдвигавшиеся теории о возможном влиянии ударных волн на нагрев газа при температурной сепарации в трубках Гартмана–Шпренгера и в короткой вихревой камере проверены в серии экспериментов. Результаты экспериментов показали, что ударные волны при работе этих устройств не образуются или не влияют на температурное разделение. Следовательно, перенос энергии в них осуществляется упругими Волнами Градиента Давления.

Исследования явления переноса энергии в сжимаемых средах Волнами Градиента Давления финансировались в 2014–2015 гг. и в 2020–2022 гг. Министерством Энергетики Израиля.

Литература

1. Птицын В., Фиалков Б. К вопросу о влиянии колебаний давления газового потока на теплообмен в слое // Акуст. журн. 1969. Т. 15. С. 468.
2. Soloff R. Sonic Drying // J. Acoustic Soc. Am. 1964. Vol. 36. Issue 5. Pp. 961–965.
3. Дмитриев М.В., Панов Л.И. Влияние низкочастотного акустического излучения на температуру нагретого тела // Технология и конструирование в электронной аппаратуре. 2008. № 2.
4. Ranque G.J. Method and Apparatus for Obtaining from Fluid under Pressure Two Currents of Fluids at Different Temperatures. US Patent No. 1,952281. 1934.
5. Sprenger H. Über thermische Effekte in Resonanzrohren, Mitteilungen aus dem Institut fuer Aerodynamik // Zurich. 1954. Vol. 21. Pp. 18–35.
6. Brocher E., Ardisson J.P. Heating characteristics of a new type of Hartman–Sprenger tube // Int. J. of Heat and Fluid Flow. 1983. Vol. 4. No. 2. Pp. 97–102.
7. Beliaevsky Y. Experimental investigation of a temperature separation effect inside a short vortex chamber // Proc. of 9 Int. Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, Malta, 2012. Pp. 1482–1487.
8. Beliaevsky Y. The pressure gradient elastic wave: energy transfer process for compressible fluids with pressure gradient // J. of Mech. Engineering and Automation. 2013. Vol. 3. No. 1. Pp. 53–64.
9. Beliaevsky Y. The influence of sound on heat transfer in gases // Electron. J. Technical Acoustics. 2014. <http://www.ejta.org>.
10. Beliaevsky Y. Experimental arguments in favour of heat transfer in compressible fluids by Pressure Gradient Elastic Waves // Int. J. of Heat and Mass Transfer. 2017. Vol. 107. Pp. 723–728.
11. Beliaevsky Y. Method and devise for transfer of energy. US Patent 9670938 B2. 2013.
12. Mises R. Mathematical Theory of Compressible Fluid Flow. Chapter 1.4. New York: Academic press, 1958.
13. Bouch D.J., Cutler A.D. Investigation of a Hartmann–Sprenger tube for passive heating of scramjet injectant gases // AIAA 2003-1275.

УДК 543.054

ЭКСТРАКЦИОННАЯ ПРОБОПОДГОТОВКА ПРИ ИЗУЧЕНИИ ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ ПИРОЛИЗА НА ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ ПИРОЛИЗНЫХ МАСЕЛ, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ РЕЗИНОТЕХНИЧЕСКИХ ОТХОДОВ

Т.Н. Бочко, Ю.П. Дубовик, В.В. Савчин, А.А. Степанюк, С.А. Никитенко

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

В настоящее время существует проблема утилизации изношенных автомобильных шин, из которых можно выделять ценные химические соединения посредством их термической обработки. Кроме того, возрастает интерес к производству энергии и топлива с использованием технологий термохимической конверсии резины [1]. Пиролиз является термохимической альтернативой обработке вулканизированной резины. Он включает разложение каучука при высоких температурах в отсутствие кислорода [2]. Основными продуктами пиролиза являются твёрдая фракция (обычно сажа), жидкая фракция, состоящая из лёгкой нефти и гудрона, и газовая фракция.

Пиролиз – безвредный способ переработки органополимерных отходов, т. к. имеет более низкий уровень выбросов, за исключением утечек оборудования и незначительных неорганизованных источников [3–5]. Пиролиз биомассы осуществляется в две стадии: сначала образуются летучие вещества или пары, а затем при более высоких температурах начинается вторичный крекинг. Доминирующими параметрами являются температура, время реакции, тип газовой атмосферы и давление [6].

Пиролиз изношенных шин – это благоприятный способ переработки органополимерных отходов, при котором шины превращаются в пиролизное масло. Резина шин имеет очень сложную полимерную структуру. Когда шину нагревают, процесс растрескивания первоначально начинается на связях S-S, поскольку они требуют меньше энергии диссоциации по сравнению со связями C-C и C-S. Энергия, необходимая для разрыва связей S-S, C-C и C-S, составляет 429, 607 и 699 кДж/моль соответственно. На рис. 1 показана молекула шины с вероятными положениями термических трещин [7].

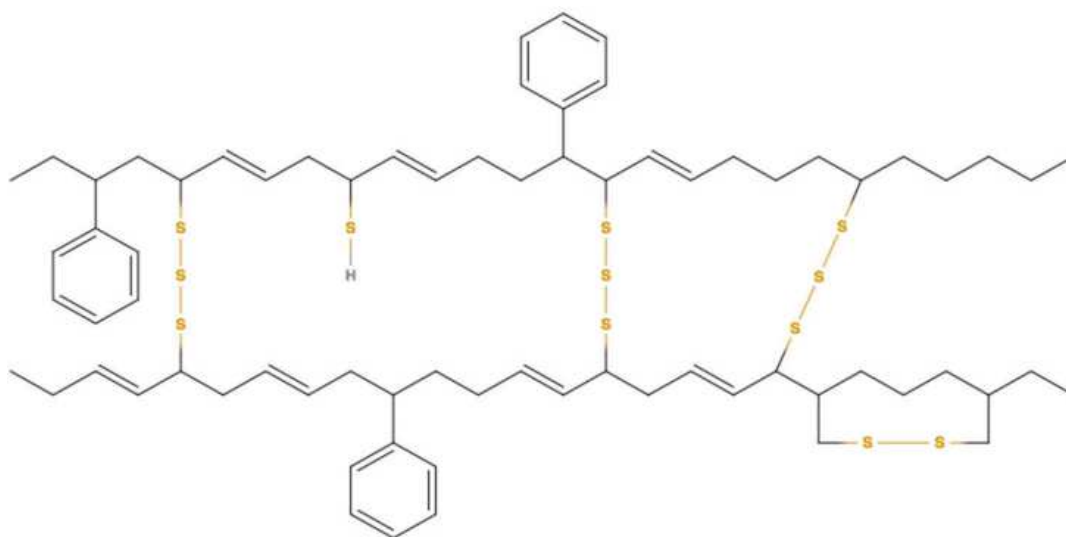


Рис. 1. Молекула шины с возможными позициями растрескивания при пиролизе

Экспериментальные исследования проводились на установке с шнековым термолизным реактором ШТР-10 (рис. 2).

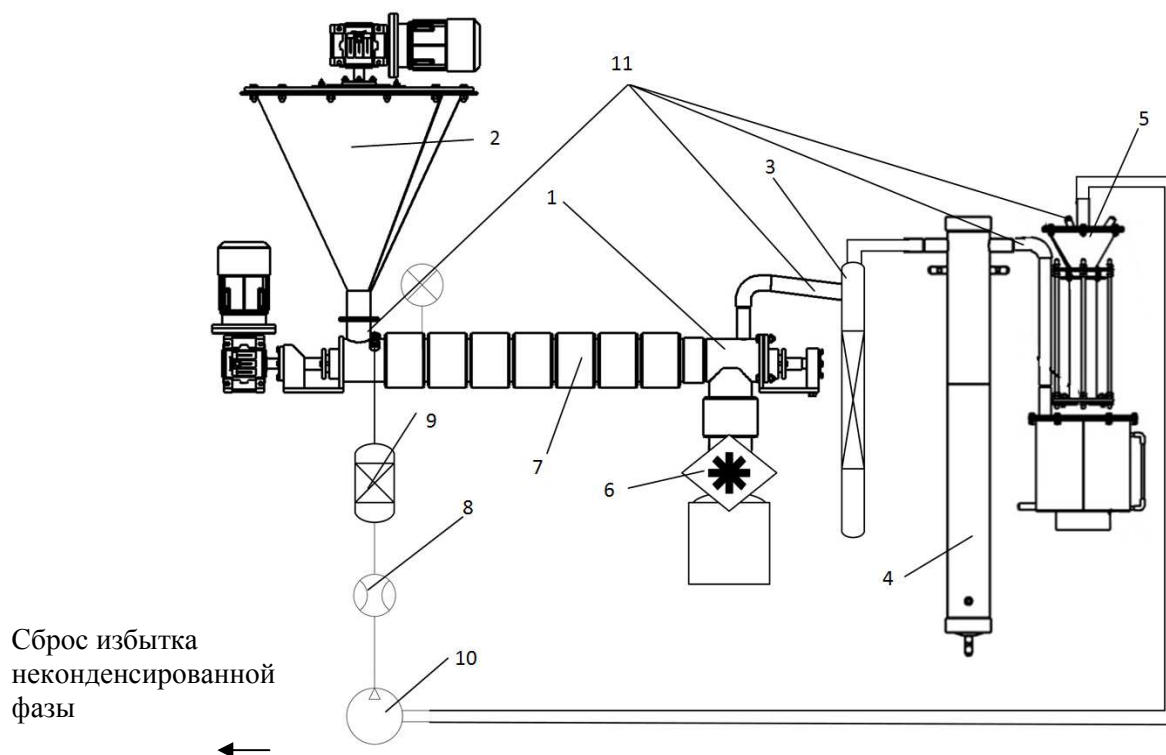


Рис. 2. Схема установки: 1 – шнековый реактор; 2 – дозатор; 3 – контактный конденсатор (К1); 4 – трубчатый конденсатор (К2); 5 – сетчатый конденсатор (К3); 6 – шлюз выгрузки твердого остатка; 7 – нагреватели; 8 – клапан регулировки подачи обратного газа; 9 – нагреватель газа; 10 – компрессор; 11 – точки определения давления в системе

Процесс пиролиза резиновой крошки размером 1–5 мм проходит при температурах 450, 500 и 550 °С и времени нахождения материала в реакторе порядка 12 мин. Эксперименты проводились на установке с двумя конденсаторами: трубчатым и сетчатым. Материальный баланс процесса пиролиза представлен в табл. 1.

В хроматографическом анализе приняли участие пиролизные масла, изготовленные из резинотехнических отходов при температурах 450, 500 и 550 °С.

Анализ пиролизного масла, полученного при температуре 450 °С. Основные вещества, содержащиеся в масле: D-лимонен (23,75%), о-цимол (6,67%), альфа-метилстирол (3,81%), 1,3-диметилбензол (3,41%), 1-этил-3-метилбензол (2,88%), 1,2,4-триметилбензол (2,2%), 2,4-диметилхинолин (1,93%), 1-метил-4-(1-метилэтинил)-бензол (1,75%), этилбензол (1,52%) и 2-карен (1,42%).

Анализ состава пиролизного масла резины, полученного при 450 °С, показывает, что наиболее значимым веществом является D-лимонен, содержание которого 23,75%. Также в значительном количестве присутствуют ароматические углеводороды, среди которых наиболее распространены бензол, ксилол, триметилбензол, этилбензол, альфа-метилстирол. В составе также обнаружены алкены, кетоны, эфиры, азотистые соединения, серные соединения, нитрилы, спирты и фенолы.

Анализ пиролизного масла, полученного при температуре 500 °С. Основные вещества, содержащиеся в масле: 1,3-диметилбензол (8,02%), D-лимонен (7,20%), о-цимол (4,08%), 1,1-диметил-1H-инден (2,46%), (1-метил-2-циклопропен-1-ил)-бензол (2,24%), 2,4-диметилхинолин (2,12%), 1,2,4-триметилбензол (2,11%), 1-этил-2-метилбензол (2,02%), 1,3-диметил-1H-индол (1,99%) и нафталин (1,98%).

Таблица 1. Материальный баланс процесса пиролиза

№ эксперимента	Расход материала, кг/ч	Подано материала, кг (%)	Подано воды, кг (%)	Твёрдый углерод, кг (%)	Трубочатый конденсатор, кг	Сетчатый конденсатор, кг (%)	Ресивер + компрессор, кг	Суммарно собрано материала, кг (%)	Неконденсированная часть, кг (%)
1	2,1	2,858 (59,8)	1,919 (40,2)	1,07 (37,4)	2,432	0,236 (9,2)	0,001	3,766 (78,8)	1,011 (21,2)
2	2,6	1,057 (63,7)	0,603 (36,3)	0,369 (34,9)	0,84	0,122 (11,5)	0	1,331 (80,2)	0,329 (19,8)
3	2,8	2,614 (86,4)	0,412 (13,6)	0,947 (36,2)	1,195	0,281 (10,7)	0,126	2,549 (84,2)	0,477 (15,8)
4	3,4	2,542 (66,2)	1,296 (33,8)	0,866 (34,1)	2,236	0,291 (11,4)	0	3,393 (88,4)	0,445 (11,6)
5	2,3	2,284 (72,4)	0,869 (27,6)	0,951 (41,6)	1,65	0,494 (21,6)	0	3,095 (98,2)	0,058 (1,8)
6	3	5,212 (84,1)	0,986 (15,9)	1,92 (36,8)	2,831	0,84 (16,1)	0,101	5,692 (91,8)	0,506 (8,2)

Состав пиролизного масла представлен ароматическими углеводородами, терпенами, эфирами, фенолами, гетероциклическими соединениями, а также спиртами, альдегидами и кетонами, алканами и алкенами.

Анализ пиролизного масла, полученного при температуре 550 °С. Основные вещества, содержащиеся в масле: 1,3-диметилбензол (10,35 %), 1-метил-3-(1-метилэтил)-бензол (3,56%), мезитилен (3,23%), 1-метил-1,2-пропандиенил-бензол (2,3%), 1,3-диметил-1H-инден (2,12%), этилбензол (1,96%), п-ксилол (1,95%), азулен (1,94%), 1-этил-2-метилбензол (1,94%), N-метил-1-нафталинамин (1,93%).

Состав пиролизного масла представлен множеством классов органических соединений: амины, эфиры, спирты, ароматические углеводороды, алканы, нитрилы, кетоны, эфиры, алкены (диены, триены), циклические углеводороды, гетероциклические соединения, амины, ПАУ.

Из сравнения химических составов пиролизных масел, полученных при разных температурах видно, что при повышении температуры содержание тяжёлых компонентов увеличивается, однако при слишком высоких температурах может происходить разложение большей части компонентов. При более высокой температуре пиролиза начинают образовываться более сложные соединения, такие как мезитилен и N-метил-1-нафталинамин. При температуре 450 °С в пиролизном масле преобладают более лёгкие компоненты, такие как бензол, толуол и ксилол, а также алкены. Также в основном составе такого масла преобладают терпены (D-Лимонен).

При температуре 500 °С увеличивается содержание нафталина и других тяжёлых компонентов. При температуре 550 °С содержание 1,3-диметилбензола и мезитилена значительно выше, а содержание более лёгких компонентов снижено. При повышении температуры пиролиза увеличивается количество ароматических соединений, включая диметилбензолы и их производные.

Литература

1. Zhdanov V.L., Kornev N.V., Hassel E., Chorny A.D. Mixing of confined coaxial flows // *Int. J. Heat and Mass Transfer*. 2006. Vol. 49. Pp. 3942–3956.
2. Yongrong Y., Jizhong C., Guibin Z. Technical advance of the pyrolysis of used tires in China // *China-Japan Intern. Academic Sympos. on Enviromental Problem in Chinese Iron-Steelmaking Industries and Effective Technology Transfer*. Sendai. Japan. March 2000. Pp. 84–93.
3. Ramirez-Canon A., Muñoz-Camelo Y.F., Singh P. Decomposition of used tyre rubber by pyrolysis: enhancement of the physical properties of the liquid fraction using a hydrogen stream // *Environments*. 2018. Vol. 5, No. 6. Pp. 72–83; doi:10.3390/environments5060072.
4. Perondi D., Scopel B.S., Collazzo G.C., Silva J.P., Botomé M.L., Dettmer A., Godinho M., Vilela A. Characteristics of pyrolysis products from waste tyres and spent foundry sand co-pyrolysis progress in rubber // *Plastics and Recycling Technology*. 2016. Vol. 32. No. 4. Pp. 213–240; <https://doi.org/10.1177/147776061603200403>.
5. Williams P. T. Pyrolysis of waste tyres: a review // *Waste Management*. 2013. Vol. 33. Pp. 1714–1728; <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2013.05.003>.
6. Sfetsas T., Michailof C., Lappas A., Li Q., Kneale B. Qualitative and quantitative analysis of pyrolysis oil by gas chromatography with flame ionization detection and comprehensive two-dimensional gas chromatography with time-of-flight mass spectrometry // *J. of Chromatography A*. 2011. Vol. 1218. No. 21. Pp. 3317–3325; <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2010.10.034>.
7. Quek A., Balasubramanian R. Liquefaction of waste tires by pyrolysis for oil and chemicals – a review // *J. Anal. Appl. Pyrolysis*. 2013. Vol. 101. Pp. 1–16.
8. Ложечник А.В., Савчин В.В. Исследование пиролиза резины в шнековом реакторе // *ИФЖ*. 2016. Т. 89. № 6. С. 1504–1508.

УДК 533.1

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВРЕМЕН ЗАДЕРЖКИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ
В СМЕСИ ПРОПИЛЕН/КИСЛОРОД/АРГОН**

**Н.Г. Быкова¹, Г.Я. Герасимов¹, В.Н. Глебов⁴, Г.А. Дуброва⁴, И.Е. Забелинский¹,
П.В. Козлов¹, М.А. Котов^{1,2}, В.Ю. Левашов¹, А.М. Малютин⁴, Н.Г. Соловьев²,
А.М. Тереза³, А.Н. Шемякин², М.Ю. Якимов²**

¹ Институт механики МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

² Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия

³ Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия

⁴ ИПЛИТ РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, Шатура, Россия

Для повышения эффективности сжигания углеводородных топлив в различных энергетических установках требуются знания об окислительных процессах, которые протекают при воспламенении топлив в различных температурных условиях и их особенностях. В работе представлены данные по исследованию характеристик воспламенения пропилена (пропена) в широком диапазоне условий. Пропилен (пропен) – газ, который является важным промежуточным соединением при сгорании более крупных углеводородов и может выступать в качестве газа-ингибитора, отводящего тепло от очага возгорания. Существующие в литературе данные по характеристикам воспламенения пропена ограничены относительно высокими температурами и низкими давлениями [1–6]. Целью настоящей работы является расширение имеющихся экспериментальных данных по окислению пропена, в том числе за счет добавления данных нового типа, а именно тепловых потоков, измеренных термоэлектрическим детектором в процессе самовоспламенения горючих смесей. Подобные результаты ранее были получены авторами для пропан-воздушных смесей [7].

Для исследования процесса воспламенения в работе используется ударная труба. Ударные трубы являются традиционным инструментом для исследования различных высокотемпературных процессов, включая измерение времен задержки воспламенения в горючих смесях [8]. В данной работе эксперименты проводились на ударной трубе, входящей в состав экспериментального комплекса «Ударная труба» НИИ механики МГУ [9]. Установка (рис. 1) снабжена системами откачки, приготовления и напуска, которые использовались для подготовки смеси, состоящей из пропилена, кислорода и аргона.

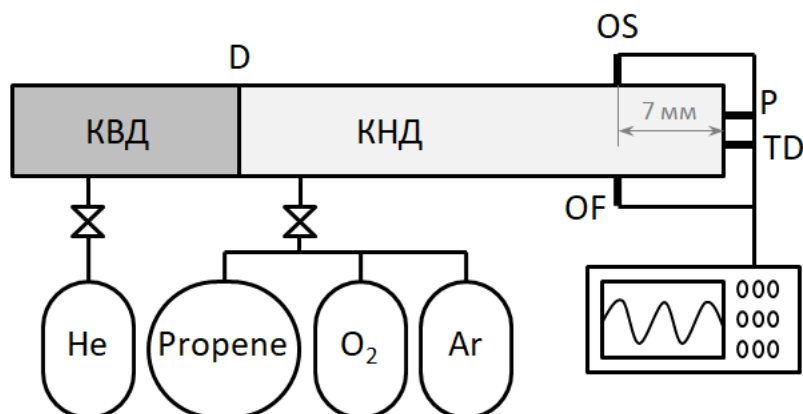


Рис. 1. Схема ударной трубы: D – диафрагма, P – датчик давления, TD – термоэлектрический детектор, OF – световод с ФЭУ, OS – спектрограф

В качестве толкающего газа в камере высокого давления (КВД) использовался гелий. Для определения времени задержки воспламенения исследуемой смеси в торцевой стенке камеры низкого давления (КНД) ударной трубы установлены датчик давления P и термоэлектрический детектор TD . За 7 мм до стенки ударной трубы также располагался спектрограф OS и световод OF . После раскрытия диафрагмы D , формирования падающей ударной волны ($УВ$) и ее отражения от торцевой стенки КНД в этой области происходило воспламенение исследуемой смеси за счет резкого увеличения давления и температуры. Времена задержки воспламенения измерялись в диапазоне температур $T = 1505 \div 2457$ К при давлениях сжатого газа $p = 5,9\text{--}25,4$ атм и коэффициенте стехиометрии смеси $\phi = 1,0$.

Типичные временные зависимости сигналов OF , P и TD для режима с числом Маха $M = 3,1$ и начальным давлением смеси в КНД $p_0 = 0,36$ атм представлены на рис. 2. В момент времени $t = 0$ наблюдается резкое увеличение давления и теплового потока, что соответствует приходу ударной волны на торцевую стенку. Далее давление в показаниях датчика P остается постоянным, хотя в период $t = 0\text{--}5$ мкс можно увидеть небольшой рост среднего значения. Осцилляции сигнала P имеют частоту ~ 500 кГц и обусловлены характеристиками инерционности используемого датчика (PCB 113B24). Вместе с тем в показаниях TD отчетливо наблюдается второй резкий рост в момент времени $t = 4$ мкс. Это свидетельствует о приходе дополнительного теплового потока на торцевую стенку и обусловлено тепловыделением, говорящем о начале самовоспламенения смеси вследствие роста давления и температуры за отраженной $УВ$. ФЭУ световода OF настраивался для регистрации линии CH^* (431 нм) в логарифмической шкале, что позволяло сохранять временную зависимость всплесков интенсивности излучения радикала полностью по амплитуде. Поскольку OF расположен за 7 мм до торцевой стенки, то после $t = 4$ мкс здесь также начинают наблюдаться слабые возмущения, которые потом сменяются резким ростом при времени $t = 10$ мкс. Незадолго до этого периода наблюдается рост теплового потока в показаниях TD ($t = 8$ мкс и далее), что свидетельствует о дополнительных воспламенениях в обозначенные моменты времени, которые могут носить частичный и/или локальный характер. В пользу этого также говорят и соответствующие изменения вида осцилляций датчика давления – уменьшение амплитуды колебаний в показаниях P при $t \sim 5; 12$ мкс.

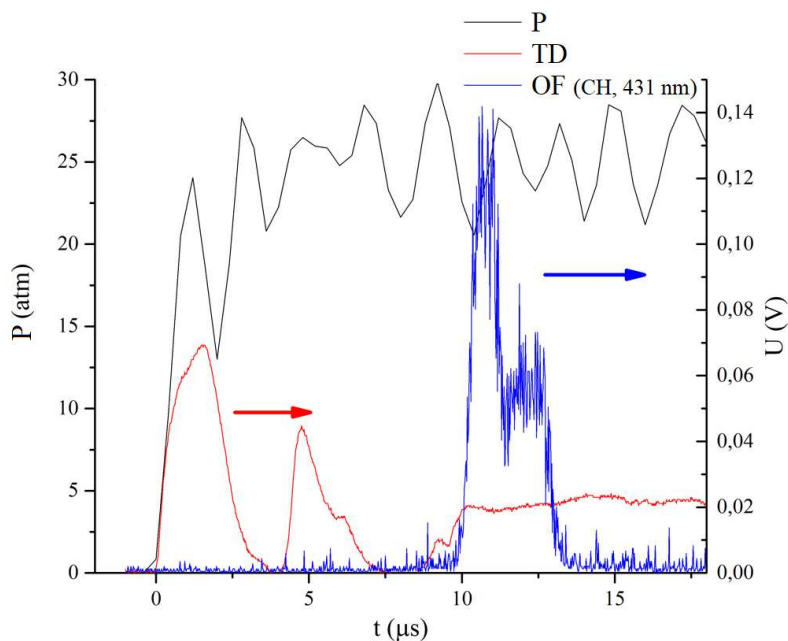


Рис. 2. Показания P , TD и OF , свидетельствующие о воспламенении смеси пропилен/кислород/аргон за отраженной $УВ$ при $T = 2457$ К, $p = 20,6$ атм

На рис. 3 приведены типичные показания спектрографа OS, в которых наблюдаются линии излучения радикалов OH* и CH*, молекулярного углерода и атомов Li и Na.

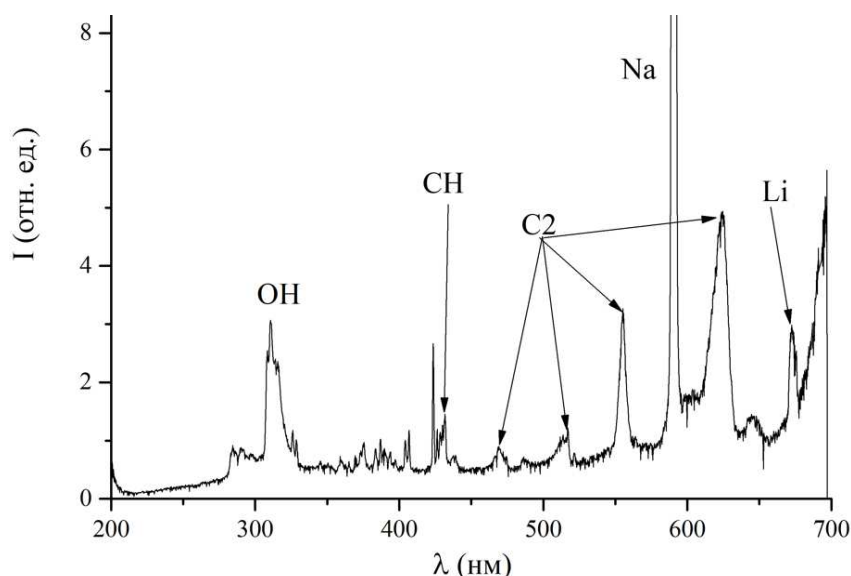


Рис. 3. Показания OS во время воспламенения смеси при $T = 1505$ К, $p = 5,9$ атм

Результаты измерений времен задержки воспламенения τ_{ign} в зависимости от обратной температуры смеси и коэффициента избытка топлива приведены на рис. 4. Анализ приведенных данных показывает, что поведение измеренных значений величины τ_{ign} следует аррениусовой зависимости, что выражается в прямолинейности аппроксимирующей кривой (черная линия). Данные наших экспериментов согласуются с результатами измерений других авторов в аналогичной области температур [10, 11]. При этом наблюдается расхождение аппроксимирующих линий (синяя, фиолетовая, черная, красная) при повышении температуры. Однако продолжение этих линий в высокотемпературную область должно привести к их пересечению при температурах порядка 2000 К.

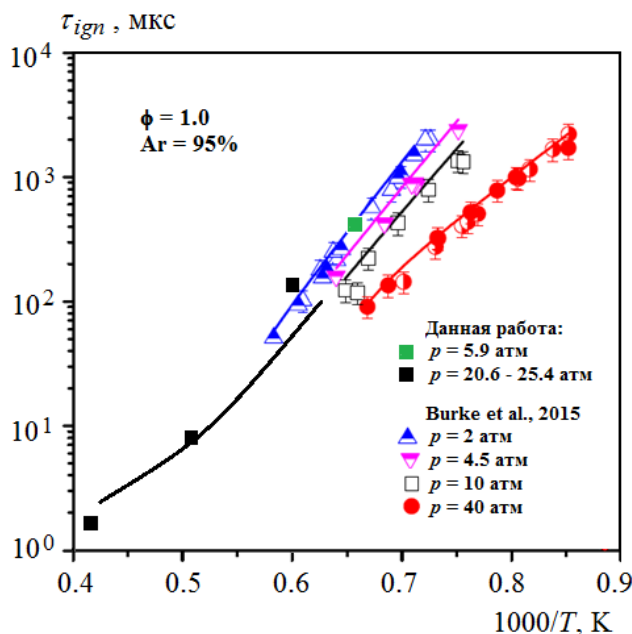


Рис. 4. Сравнение измеренных времен задержки воспламенения с данными [11]

Полученная информация расширяет диапазон имеющихся экспериментальных данных, являющихся основой для тестирования редуцированных кинетических механизмов, которые используются для моделирования процесса горения пропилена в различных камерах сгорания. Представленные результаты также свидетельствуют о возможности достоверного измерения коротких времен τ_{ign} задержки воспламенения смеси (короче 5 мкс) с помощью использования термоэлектрического детектора.

Исследование выполнено в рамках государственных заданий Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № АААА-А19-119012990112-4, № 123021700057-0 и ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН.

Литература

1. Burke S.M., Metcalfe W.K., Herbinet O., Battin-Leclerc F., Haas F.M., Santner J., Dryer F.L., Curran H.J. *Combust. Flame* 160 (11) (2014) 2765–2784.
2. Burcat A., Radhakrishnan K. // *Combust. Flame* 60 (1985) 157–169.
3. Hidaka Y., Nakamura T., Tanaka H., Jinno A., Kawano H., Higashihara T. // *Int. J. Chem. Kinet.* 24 (1992) 761–780.
4. Qin Z., Yang H., Gardiner W.C. // *Combust. Flame* 124 (2001) 246–254.
5. Davis S.G., Law C.K., Wang H. // *Combust. Flame* 119 (1999) 375–399.
6. Jomaas G., Zheng X.L., Zhu D.L., Law C.K. // *Proc. Combust. Inst.* 30 (2005) 193–200.
7. Kotov M.A., Kozlov P.V., Gerasimov G.Y., Levashov V.Y., Shemyakin A.N., Solovyov N.G., Glebov V.N., Dubrova G.A., Malyutin A.M. // *Acta Astronautica* 204 (2023) 787–793.
8. Kozlov V.E., Titova N.S., Torokhov S.A., *Russ. J. Phys. Chem. B* 14, 395 (2020).
9. Kozlov P.V., Akimov Yu.V., Gerasimov G.Ya., et al. // *High Temp.* 59, 9 (2021).
10. Burke S.M., et al. // *Combustion and Flame* 161 (11) (2014) 2765–2784.
11. Burke S.M., et al. // *Combustion and Flame* 162 (2) (2015) 296–314.

УДК 532.517.4

ИССЛЕДОВАНИЕ СВЕРХЗВУКОВОГО ГОРЕНИЯ ПЕРЕМЕШАННЫХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ, ИНИЦИИРУЕМОГО БЫСТРОЛЕТЯЩИМ ОСЕСИММЕТРИЧНЫМ ТЕЛОМ В КАНАЛЕ КВАДРАТНОГО СЕЧЕНИЯ

В.А. Васецкий, В.М. Грищенко, В.В. Лещевич, О.Г. Пенязьков

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Воспламенение газовых смесей за ударной волной, создаваемой летящим со сверхзвуковой скоростью телом, впервые было реализовано в [1]. В последующем этот способ многократно использовался для фундаментальных исследований, так как в зависимости от соотношения параметров тела (размер, форма, скорость) и физико-химических параметров смеси (давление и реакционная способность) дает возможность наблюдать все известные режимы горения [2], изолированные от влияния процесса смешения и эффектов, связанных с развитием пограничного слоя. В последних работах больше внимания уделялось вопросам инициирования и стабилизации сверхзвуковых режимов горения, что обусловлено возрастающим интересом к реализации детонационного сжигания топлива в прямоточных реактивных двигателях. Накоплен значительный экспериментальный материал, который позволил подтвердить теоретически обоснованные критерии прямого инициирования [2, 3] и эмпирический критерий стабилизации детонации [4]. В меньшей степени остались изучены эффекты, возникающие при отражении баллистической волны от стенок объема, ограничивающего исследуемую газовую смесь. Как правило, размеры баллистической трассы всегда выбирались так, чтобы отраженные волны не искажали течение в ближнем следе полета тела в момент наблюдения. В то же время в работе [3], ссылаясь на ранние эксперименты [5], отмечается, что даже при существенном уменьшении лобового сопротивления тела можно все равно получить прямое инициирование детонации в области отражения ударной волны от стенок трассы. Для изучения этого эффекта в настоящей работе в качестве трассы специально использовался узкий канал квадратного сечения.

Схематичное изображение экспериментального стенда приведено на Рис.1. Для метания тела использовали комбинированную двухступенчатую систему, первой ступенью которой является квазистационарный эрозионный плазменный ускоритель, что позволяет задавать скорость метаемого тела, изменяя начальное напряжение конденсаторной батареи. Второй ступенью системы является легкогазовая пушка с пластиковым поршнем. Канал разгона и легкогазовая секция имеют внутренний диаметр 6 и 13 мм, длину 300 и 760 мм, соответственно, и разделены латунной диафрагмой. Метательное устройство способно разгонять тела массой не более 0,2 г до 3 км/с. В качестве метаемых тел в данной работе использовали калиброванные по массе (0,12 г) пластмассовые шарики диаметром 6 мм, что исключало трудности с неповторяемостью угла атаки при пролете в тестовой секции. В качестве последней использовали канал квадратного сечения с размером грани 35 мм и длиной 370 мм и установленными кварцевыми окнами размером 200x35 мм на расстоянии 35 мм от места влета шарика. На входе и выходе из камеры устанавливали круглые мембраны диаметром 35 мм из двух слоев лавсана толщиной 10 мкм. Тестовую секцию размещали в герметично закрытой баллистической трассе, что позволяет изменять окружающий газ и его давление от атмосферного до среднего вакуума. Используемое в данной работе расстояние между выходом из канала разгона и входом в тестовую секцию 680 мм и атмосферное давление воздуха внутри трассы изолировали экспериментальные результаты от влияния дульной ударной волны и мелких осколков, так как они быстро тормозились. Тестовую секцию перед экспериментом откачивали до остаточного давления не более 10 Па и наполняли исследуемой смесью до заданного начального давления с точностью $\pm 0,2$ кПа.

Смеси предварительно готовили методом парциального давления из индивидуальных газов высокой чистоты (99,95-99,99 %) с точностью $\pm 0,51$ % для C_2H_2 и H_2 , $\pm 0,11$ % для O_2 и $\pm 0,12$ % для N_2 и Ar , соответственно, и выдерживали несколько дней до полного смешения.

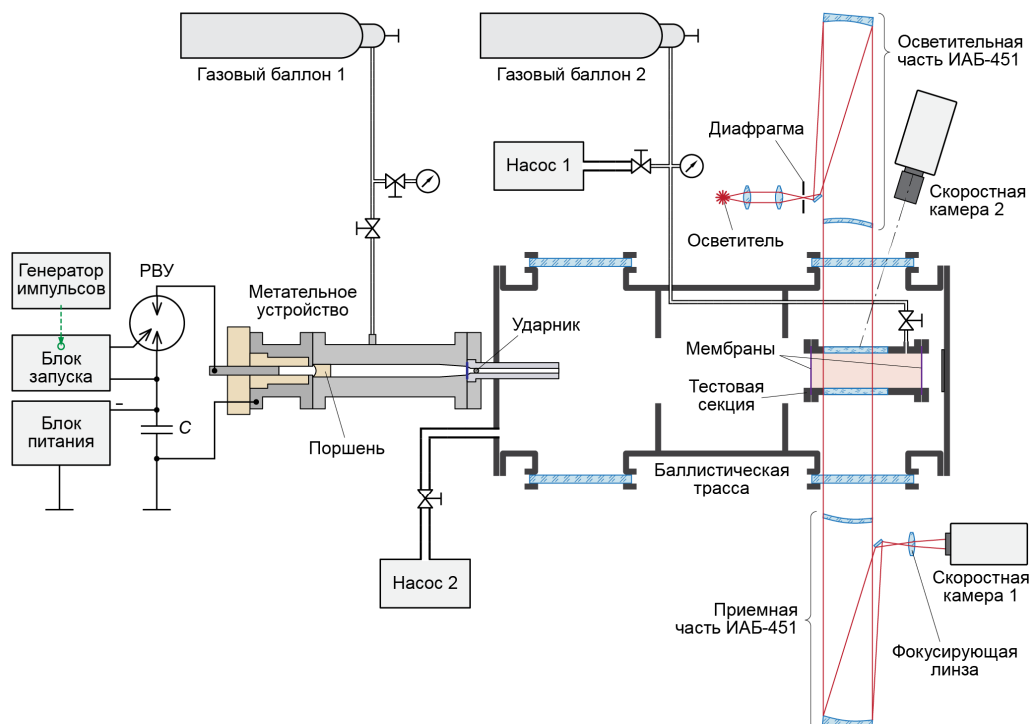


Рис. 1. Схема экспериментального стенда (вид сверху)

В ходе эксперимента для регистрации теневых изображений градиента плотности и естественного свечения из зоны реакции использовали две высокоскоростные видеокамеры Photron FASTCAM SA-Z (скорость 112000 кадр/с, время экспозиции 160 нс, разрешение 896x184 пикселей). Камеры располагали так, как показано на рис.1: для теневого изображения перпендикулярно оси и естественного света под углом 78° к встречному движению летящего тела. В качестве системы построения теневых изображений использовали стандартный прибор ИАБ-451 с подсветкой от ртутной лампы через диафрагму диаметром 1 мм. Для регистрации теневого изображения на ПЗС-сенсоре камеры применяли фокусирующую линзу с $f=0,22$ м. Скорость тела измеряли по первому и последнему изображениям в области наблюдения. Пространственное разрешение каждого кадра составляет 0,18 мм/пиксель, но из-за нечеткости изображения шарика положение его центра определяли с точностью $\pm 0,55$ мм, что с учетом его торможения за время наблюдения приводит к максимальной относительной погрешности приведенных в данной работе скоростей не более 5%.

Параметры экспериментов и их результаты приведены в таблице. Скорость стационарного распространения детонации (D_{C-J}) для каждого начального давления рассчитывали с помощью собственного программного обеспечения с использованием термодинамической базы данных [6]. При изменении давления в тестовой секции (P_0) и скорости шарика (V) были зарегистрированы различные режимы горения, которые были разделены на четыре типа в зависимости от регистрируемой картины течения в зоне наблюдения. Наиболее полно они были изучены для стехиометрической смеси ацетилена с кислородом, разбавленной на 55% азотом, поэтому далее обсуждаться будут результаты только для этого состава. Для остальных смесей основная задача заключалась в определении условий стабилизации сверхзвукового режима горения.

Параметры и результаты экспериментов

Состав смеси	P_0 , кПа	V , м/с	D_{C-J} , м/с	Режим	Изображение
$C_2H_2 + 2,5O_2 + 4,28N_2$	98	1800	2049	Обгоняющая детонация	Рис. 2а
	88,9	1900	2046		
	89,1	1980	2047		Рис. 2б
	80,3	2020	2043		Рис. 2в
	79,7	2350	2042	Отстающая детонация	Рис. 3а
	81,9	2620	2044		Рис. 3б, 4а
	50,2	2640	2027		Рис. 3а
	91,5	2830	2048		Рис. 4б
	90,5	2060	2047	Стабилизированная детонация	
	100	2110	2051		
	98,5	2660	2049		Рис. 4в
	98,4	2910	2049		
	98,2	2930	2049		
	99,2	3130	2050		
	20	2660	1995	Ударно-инициированное горение	
	5	2700	1947	Нет инициирования	
	5	3060	1947		
$C_2H_2 + 2,5O_2 + 7Ar$	17	2970	1933	Отстающая детонация	
	20	3010	1940		
	23	3070	1946	Стабилизированная детонация	
	30	3100	1958		
	50	3150	1981		
$2H_2 + O_2 + 3,76N_2$	100	3050	1970	Ударно-инициированное горение	
	300	3040	1991		

Когда скорость шарика меньше значения D_{C-J} , перед ним развивается плоская детонационная волна, которая распространяется вверх по потоку со скоростью Чепмена–Жуге. Длительность этого процесса зависит от скорости шарика, а механизм образования чувствителен к давлению и расстоянию до стенки канала. При близком к атмосферному давлении (рис. 2а) ускорение и выпрямление инициированного сразу при влете шарика детонационного фронта происходят одновременно выше и ниже оси его полета: в верхней части за счёт последовательности сильных локальных взрывов за шариком, а в нижней, ближе к стенке канала, непрерывно и быстрее. При уменьшении начального давления наблюдается нестационарное ударно-инициированное горение вокруг шарика, фронт которого отщепляется от ударной волны по мере удаления от оси полета (рис. 2б). Иницирование детонации происходит за счет локальных взрывов у верхней и нижней стенок (вероятно, в углах, где смесь нагрелась, но не воспламенялась). При уменьшении давления и увеличении скорости шарика процесс формирования плоской волны детонации затягивается и не проявляется в течение времени наблюдения (рис. 2в). Но это должно произойти, так как локальные взрывы у стенок канала постоянно сопровождают и догоняют шарик. Данный режим был назван «обгоняющая детонация».

В случае когда скорость шарика превышает значение D_{C-J} и при начальном давлении 50-90 кПа наблюдается ударно-инициированное горение с последующим развитием детонационной волны. На рис. 3а (представлено только теневое изображение) видно, что этот процесс начинается с сильного локального взрыва сразу после влета шарика и распространяется вблизи стенок в нагретой и непрореагировавшей смеси. Наклон детонационной волны, возможно, связан с отклонением оси полета от центра канала, что привело к более раннему нагреву газа у нижней стенки. Так как скорость шарика превышает

скорость распространения этой волны, она отстает. Поэтому данный режим был назван «отстающая детонация».

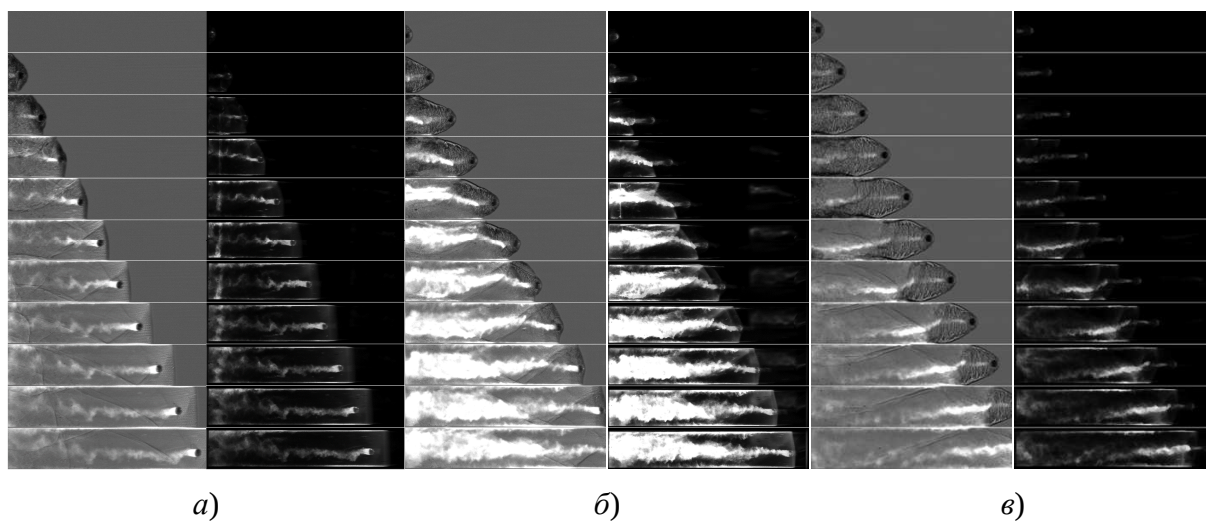


Рис. 2. Обгоняющая детонация: теневое (слева) и естественное (справа) изображения

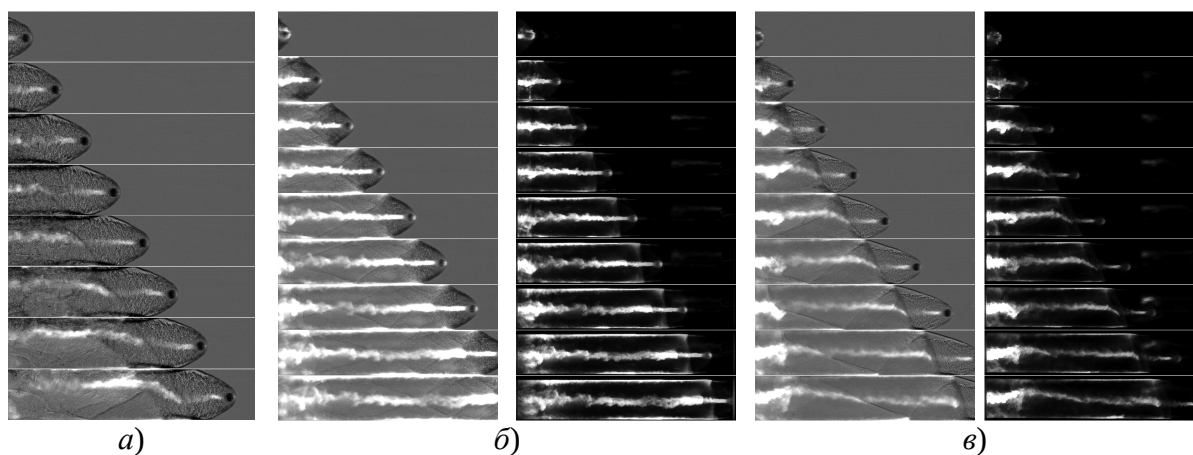


Рис. 3. Отстающая детонация: теневое (слева) и естественное (справа) изображения

Поле течения, представленное на рис.3б, было зарегистрировано при давлении, близком к давлению что и на рис.3а, но когда шарик летел близко к оси канала и с большей скоростью (2620 против 2350 м/с). При этом не наблюдается отщепления зоны реакции от ударной волны и процесс сгорания похож на стабилизированную коническую детонационную волну, но точки ее контакта со стенками постепенно смещаются вниз по потоку (рис. 4а справа) и нормальная составляющая скорости уменьшается с 0,75 до 0,58 значения D_{C-J} . Картина отражения вблизи стенок, напоминающая «маховское отражение», за время наблюдения исчезает, поэтому этот режим был классифицирован как нестабилизированный, но околокритический, так как при более высоком давлении и такой же скорости шарика (рис. 4б) была зафиксирована более высокая нормальная составляющая скорости, которая увеличилась за время наблюдения от 0,89 до 0,9 значения D_{C-J} . Этот режим близок к описанному в [7] как «стабилизированная косая детонационная волна с нестационарной областью». Отличие нашего случая состоит в том, что отражение волны от стенки заменяет эффект нестационарных локальных взрывов, ускоряющих нормальную составляющую скорости до значения D_{C-J} , поэтому этот режим был назван «стабилизированная детонация». Возможное наличие верхнего предела значения скорости шарика для стабилизации сверхзвукового режима горения в канале при давлении, близком к атмосферному, видно из результатов эксперимента, представленного на рис.4б. В отличие от

картины, зарегистрированной при скорости меньше нижнего предела (рис. 4а), видно как со временем формируется картина «маховского отражения» у верхней стенки, а локальная нормальная составляющая скорости увеличивается от 0,9 до 1,2 значения D_{C-J} . Этот режим напоминает режим «соломенной шляпы со стабилизированной косой детонационной волной» [7], который был классифицирован авторами как переходный к режиму стабилизированной косой детонационной волны. Из представленного совмещения передних контуров волны (рис. 4б, справа) в различные моменты времени видно, что нестационарная, «пересжатая» область у верхней стенки постепенно сдвигается вниз по потоку, поэтому такой режим распространения горения, на наш взгляд, неустойчивый. Искривление фронта вблизи точки перегиба, заметное на последних двух кадрах, вероятно, вызвано локальным взрывом, который в случае типа «соломенной шляпы со стабилизированной косой детонационной волной» является источником стабилизации. Но данный сценарий не развивается за время наблюдения в представленном эксперименте. В то же время течение вблизи нижней стенки, расположенной ближе к оси полета, остается устойчивой. Это указывает на то, что расстояние до стенки может стать новым критерием стабилизации сверхзвукового горения.

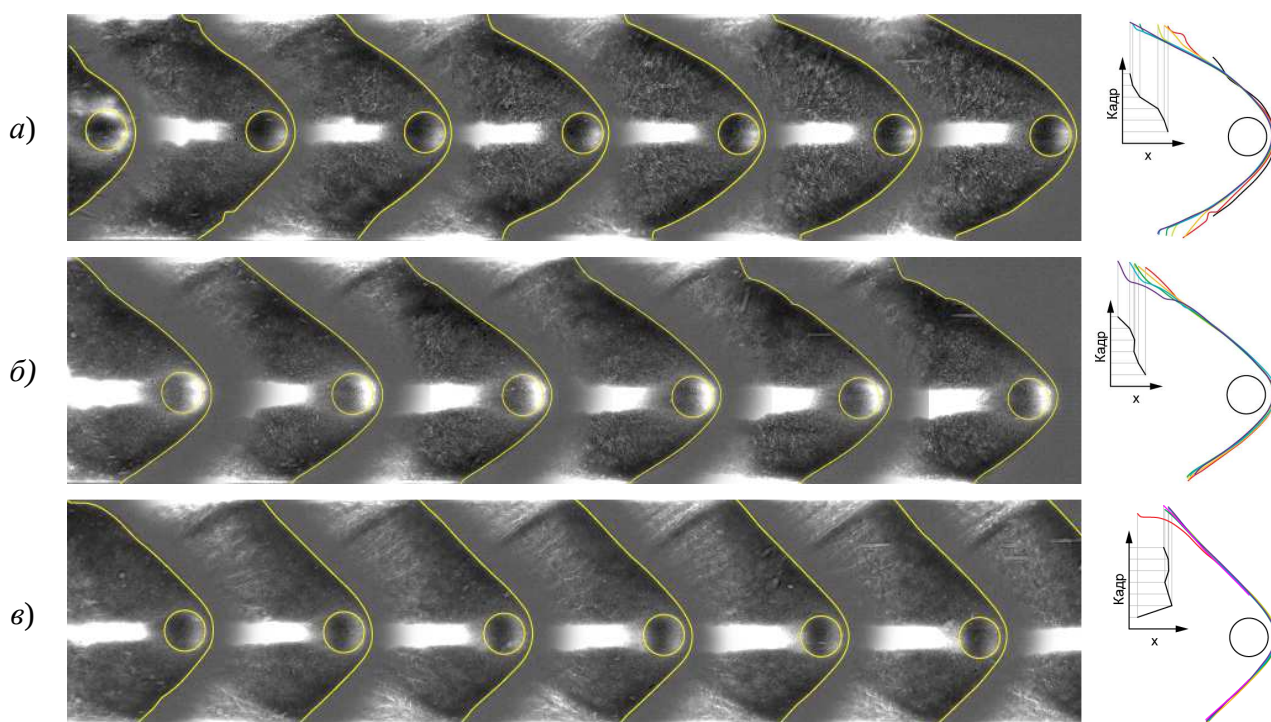


Рис. 4. Определение стабилизированного режима детонации с помощью оконтуривания последовательности теневых картин (слева) и совмещения контуров (справа)

При давлении ниже 20 кПа не было обнаружено возникновения детонационной волны для скоростей полета выше значения D_{C-J} . Наблюдалось резкое расщепление ударной волны и фронта реакции вблизи шарика, поэтому горение происходит в небольшом объеме вдоль оси полета. Горение у стенок канала наблюдалось на некотором расстоянии от точки отражения волны от стенки и, скорее всего, инициировалось в результате распространения фронта реакции от точки влета шарика, так как заметно сильное отставание от него. Этот режим горения был назван «ударно-инициированное горение». Воспламенение при давлении 5 кПа инициировалось только в начале канала после разрыва мембраны, после чего горение медленно распространялось к выходу из канала. Эти условия близки к пределу воспламенения. Горение вокруг шарика зафиксировано не было ни по фотографиям естественного свечения, ни по теневым изображениям.

Все результаты, полученные в условиях настоящей работы, графически представлены на рис. 5 в виде зависимости безразмерного диаметра шарика от его безразмерной скорости. Такое представление позволяет сопоставить результаты экспериментов с критериями прямого инициирования [3] и стабилизации [4]. Для этого необходимо знать размер детонационной ячейки λ и скорость стационарной детонации D_{C-J} . Значение D_{C-J} для конкретного состава смеси и давления можно рассчитать, а значение λ определяется экспериментально по сажевым отпечаткам на стенках детонационной трубы. Так как экспериментальные данные представлены для ограниченного количества условий [8], обычно используются аппроксимационные уравнения в виде степенной зависимости от давления для конкретного состава смеси. Для стехиометрической ацетиленкислородной смеси, разбавленной на 55% азотом, прямых измерений λ не проводилось. Поэтому мы использовали уравнения, полученные ранее из экспериментальных данных [9, 10] по критическому диаметру трубы для дифракции детонации ацетилено-кислородно-азотных смесей с использованием 13λ -критерия в виде $\lambda = AP_0^{-1.1}$, где λ – размер ячейки в мм, P_0 – начальное давление в кПа, значение коэффициента A зависит от отношения азот/кислород (β): 24,6 при $\beta = 0$, 225,1 при $\beta = 1,4$ и 1608,2 при $\beta = 3,76$. Для смеси, разбавленной на 55% азотом, $\beta = 1,71$, поэтому значение A было аппроксимировано как 3301.

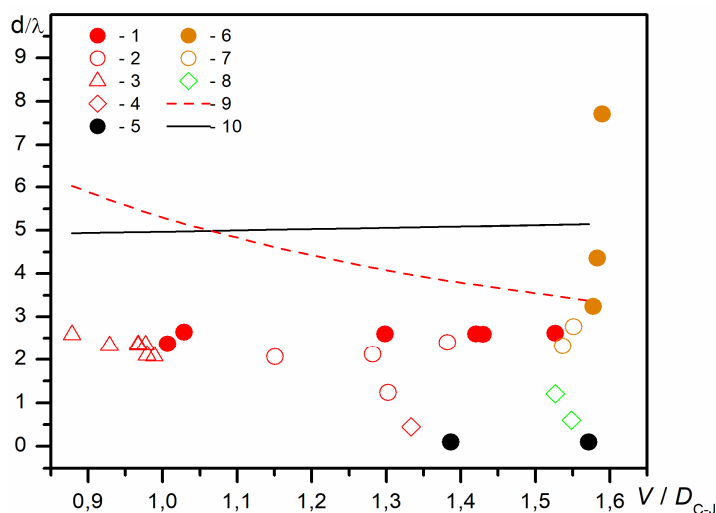


Рис. 5. Безразмерная диаграмма параметров реализации различных режимов горения: 1–5 – стабилизированная, отстающая, опережающая детонация, ударно-инициированное горение и его отсутствие для стехиометрической ацетилен-кислородной смеси, разбавленной на 55% азотом соответственно; 6, 7 – стабилизированная и отстающая детонация стехиометрической ацетиленкислородной смеси, разбавленной на 50% аргонном; 8 – ударно-инициированное горение стехиометрической водородно-воздушной смеси; 9, 10 – теоретический предел прямого инициирования детонации [3] и эмпирический критерий стабилизации детонации [4]

Из рис. 5 видно, что обнаруженные режимы стабилизированной детонации (точки 1), наблюдаются при условиях значительно ниже линий, соответствующих критериям стабилизации (линия 10) и даже прямого инициирования (линия 9). Для исключения возможной неточности определения λ и, соответственно, положения экспериментальных точек на графике как раз и проводилась серия экспериментов со смесью, разбавленной на 50% аргонном, так как, во-первых, для этого состава имеются экспериментальные данные по размеру детонационной ячейки, а во-вторых, такой же состав использовался в [4] для определения эмпирического критерия стабилизации. Как и в указанной работе для расчета λ применялось уравнение $\lambda = 61,52 \cdot P_0^{-1.117}$, где λ – размер ячейки в мм, P_0 – начальное давление в кПа. Критические условия, при которых наблюдалась стабилизированная детонация

данной смеси, также находятся ниже критерия стабилизации и примерно около критерия прямого инициирования, что подтверждает обнаруженное в данной работе снижение предельных условий инициирования и стабилизации детонационного режима горения, инициируемого при пролете тела со сверхзвуковой скоростью в реагирующей смеси, за счет наличия стенок, достаточно близких к оси полета. Факт того, что данный режим горения относится к детонационному, был подтвержден экспериментально. В этой серии экспериментов на нижнюю горизонтальную стенку канала помещалась тонкая алюминиевая пластина с полированной и закопченной поверхностью, на которой после пролета шарика и сгорания смеси «гравировалась» характерная для детонации картина с ячеистой структурой. Для стехиометрической водородно-воздушной смеси реализовать стабилизированный детонационный режим не удалось. Для такого состава из аппроксимации экспериментальных данных [11] было получено уравнение для зависимости размера ячейки от давления в виде $\lambda = 191,92 \cdot P_0^{-0,641}$. Согласно данной зависимости при близком к атмосферному давлении размер детонационной ячейки равен примерно 10 мм, а в соответствии с обнаруженной в данной работе закономерностью для использованного канала для стабилизации требуется, чтобы отношение d/λ было как минимум равно 2,5. Для получения такого значения необходимо увеличить диаметр шарика до 25 мм или начальное давление до 950 кПа, что сложно реализовать на данном экспериментальном стенде. Это ставит задачу для дальнейшего исследования влияния размеров и формы сечения канала на стабилизацию детонационного режима горения, инициируемого при пролете в нем тела со сверхзвуковой скоростью.

Исследование выполнено в рамках задания № 2.13 ГПНИ «Энергетические и ядерные процессы и технологии».

Литература

1. Зельдович Я.Б., Шляпинтох И.Я. Воспламенение взрывчатых газовых смесей в ударных волнах // Докл. АН СССР. 1949. Т. 115. № 6. С. 871–874.
2. Васильев А.А. Основные результаты исследований детонационного горения газовых смесей, возбуждаемого быстролетящим телом // ФГВ 1997. Т. 33. № 5. С. 86–102.
3. Lee J.H.S. Initiation of detonation by a hypervelocity projectile // Advances in Combustion Science: In Honor of Ya. B. Zel'dovich. AIAA. 1997. V. 173. Pp. 293–310.
4. Kasahara J., Arai T., Chiba S., Takazawa K., Tanahashi Y., Matsuo A. Criticality for stabilized oblique detonation waves around spherical bodies in acetylene/oxygen/krypton mixtures // Proc. Combust. Inst. 2002. V. 29. Pp. 2817–2824.
5. Benedick W.B. Review of large scale fuel-air explosion tests and techniques // Fuel-Air Explosions / Eds. J.H.S. Lee, C.M. 1982. Pp. 507–552.
6. Kee R.J., Rupley J.A., Miller F.M. The chemkin thermodynamic data base // Sandia Technical Report SAND87-8215B, UC-4. 1994. Sandia National Laboratories, Livermore, CA.
7. Maeda S., Kasahara J., Matsuo A. Oblique detonation wave stability around a spherical projectile by a high time resolution optical observation // Combust. Flame. 2012. V. 159. No. 2. Pp. 887–896.
8. Kaneshige M.J., Shepherd J.E. Detonation database // GALCIT Technical Report FM97-8. 1997. http://www.galcit.caltech.edu/detn_db/html/.
9. Matsui H., Lee J.H. On the measure of the relative detonation hazards of gaseous fuel-oxygen and air mixtures // Proc. Combust. Inst. 1978. V. 17. Pp. 1269–1279.
10. Knystautas R., Lee J.H., Guirao C.M. The critical tube diameter for detonation failure in hydrocarbon-air mixtures // Combust. Flame. 1982. V. 48. Pp. 63–83.
11. Stamps D.W., Tieszen S.R. The influence of initial pressure and temperature on hydrogen-air-diluent detonations // Combust. Flame. 1991. V. 83. No. 3. Pp. 353–364.

УДК 62-634.5

ГОРЕНИЕ ЖИДКИХ КОМПОЗИЦИОННЫХ ТОПЛИВ: ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ И ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

К.Ю. Вершинина, О.В. Высокоморная, В.В. Дорохов, Д.С. Романов, П.А. Стрижак

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

Несмотря на планы многих стран, преимущественно членов ЕС, по переходу на альтернативные и возобновляемые источники энергии, на сегодняшний день существует большой спрос на рынке жидких углеводородных топлив. Согласно [1] к числу наиболее востребованных жидких углеводородов относятся керосин, бензин, дизель и мазут. Бензин и дизель являются распространенными топливами для наземных транспортных средств. Дизельное топливо используется в двигателях надводных судов, в также во множестве видов технологических машин. Керосин выступает в качестве топлива для газотурбинных двигателей летательных аппаратов, а мазут является наиболее используемым топливом на объектах энергогенерации, оставляя за собой более 30% генерируемой энергии [1]. В связи с тем, что стоимость жидких углеводородов неуклонно растет, на сегодняшний день существует потребность в создании жидких композиционных топлив, пригодных для использования на существующих двигателях и энергоустановках, либо с их минимальной модификацией. При этом такие композиционные топлива должны превосходить традиционные энергоресурсы или, как минимум, не уступать им по сумме эксплуатационных и экономических характеристик.

Цель настоящей работы – исследовать характеристики зажигания и горения композиционных топлив на основе традиционных жидких углеводородов и группы распространенных горючих компонентов.

В качестве основных компонентов композиционных топлив использовались керосин марки ТС-1, бензин (АИ-92), дизельное топливо и мазут марки М100. В качестве добавок использовались дистиллированное талловое масло (ДТМ), рапсовое масло (РМ) и отработанное кулинарное масло на основе подсолнечного масла (КМ). Талловое масло является побочным продуктом при варке целлюлозы из древесины сульфатным способом и широко используется в рецептурах буровых растворов, в качестве смазочных агентов и при производстве эмульгаторов [2]. Рапсовое масло является распространенным компонентом в пищевой, лакокрасочной и нефтехимических промышленности, а также служит сырьем для изготовления биодизеля [3, 4]. Отработанные пищевые масла (главным образом подсолнечное) являются широко распространенным отходом, формирующимся в масштабах более 16 млн тонн в год [5].

На рис. 1 представлена схема экспериментального стенда. Процессы зажигания и горения композиционных топлив протекали в горизонтальной электрической печи Nabertherm R 50/250/13 (диапазон варьирования температуры 20–1200 °С; температура регулировалась по сигналу встроенной термопары типа S). Диапазон температур в эксперименте составлял 700–900 °С. Контроль и измерение состава газа, образующегося при сжигании рассматриваемых топлив, осуществлялись с применением газоаналитической системы Тест 1 («Бонэр-ВТ», г. Новосибирск). В состав системы входил модульный зонд, система конденсации и фильтрации, измерительный блок с группой сенсоров (указаны диапазон и погрешность): электрохимические – O_2 (0–25%, $\pm 0,2\%$), CO (0–40000 ppm, $\pm 5\%$), SO_2 (0–1000 ppm, $\pm 5\%$), NO (0–2000 ppm, $\pm 5\%$), NO_2 (0–500 ppm, $\pm 7\%$), H_2S (0–500 ppm, $\pm 5\%$); оптические – CO_2 (0–30%, $\pm 2\%$), CH_4 (0–30%, $\pm 5\%$), CO (0–30%, $\pm 5\%$); полярографический – H_2 (0–5%, $\pm 5\%$). Характеристики зажигания (времена задержки газофазного (τ_d) зажигания), а также длительности горения (τ_b) определялись при помощи

высокоскоростной камеры Phantom Miro C110 (запись велась с разрешением 800×600 пикселей и скоростью съемки 1000 кадр/с, погрешность измерения составляла 0,001 с). Координатный механизм обеспечивал перемещение держателя с топливом в печь. Для управления движением координатным механизмом, управления видеорегистрацией, а также для мониторинга и контроля за концентрациями газов использовался персональный компьютер.

Для приготовления многокомпонентной топливной смеси применялась магнитная мешалка AIBOTE ZNCLBS-2500. Жидкие компоненты в течение 10 мин смешивались до получения однородной эмульсии при скорости вращения магнитного якоря 1500 об/мин.

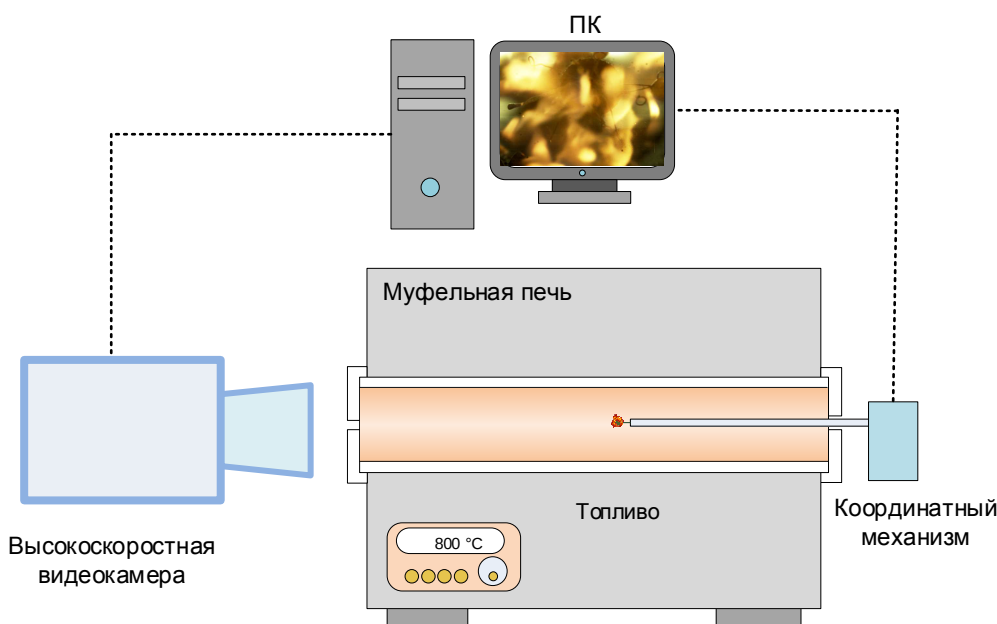


Рис. 1. Схема экспериментального стенда

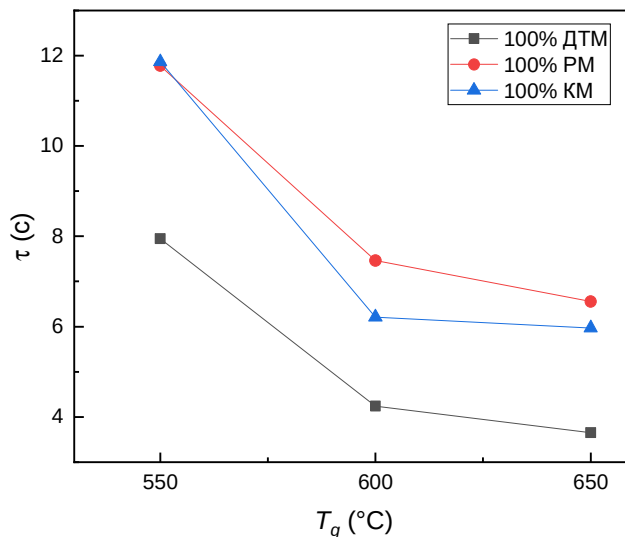


Рис. 2. Времена задержки зажигания исследуемых масел при различных температурах окислительной среды

На рис. 2 представлены времена задержки зажигания используемых в качестве добавок масел. Установлено, что на всем исследуемом температурном диапазоне минимальными задержками зажигания характеризуется дистиллированное талловое масло

(ДТМ). В зависимости от температуры окислительной среды задержка зажигания ДТМ оказывается ниже на величину до 79%, по сравнению с другими исследуемыми добавками. Данный результат обуславливается различиями в теплофизических характеристиках используемых масел. Так, например, температура самовоспламенения ДТМ составляет 304 °С, в то время как для рапсового масла и отработанного кулинарного масла данные показатели равняются 318 °С и 316 °С соответственно. Другим важным фактором является теплоемкость используемых масел. Так, теплоемкость ДТМ составляет порядка 1,63 КДж/(кг·К), в то время как для РМ и КМ данные параметры составляют 2,01 КДж/(кг·К) и 2,16 КДж/(кг·К).

На рис. 3 представлены времена задержки зажигания исследуемых топлив в зависимости от температуры окислительной среды.

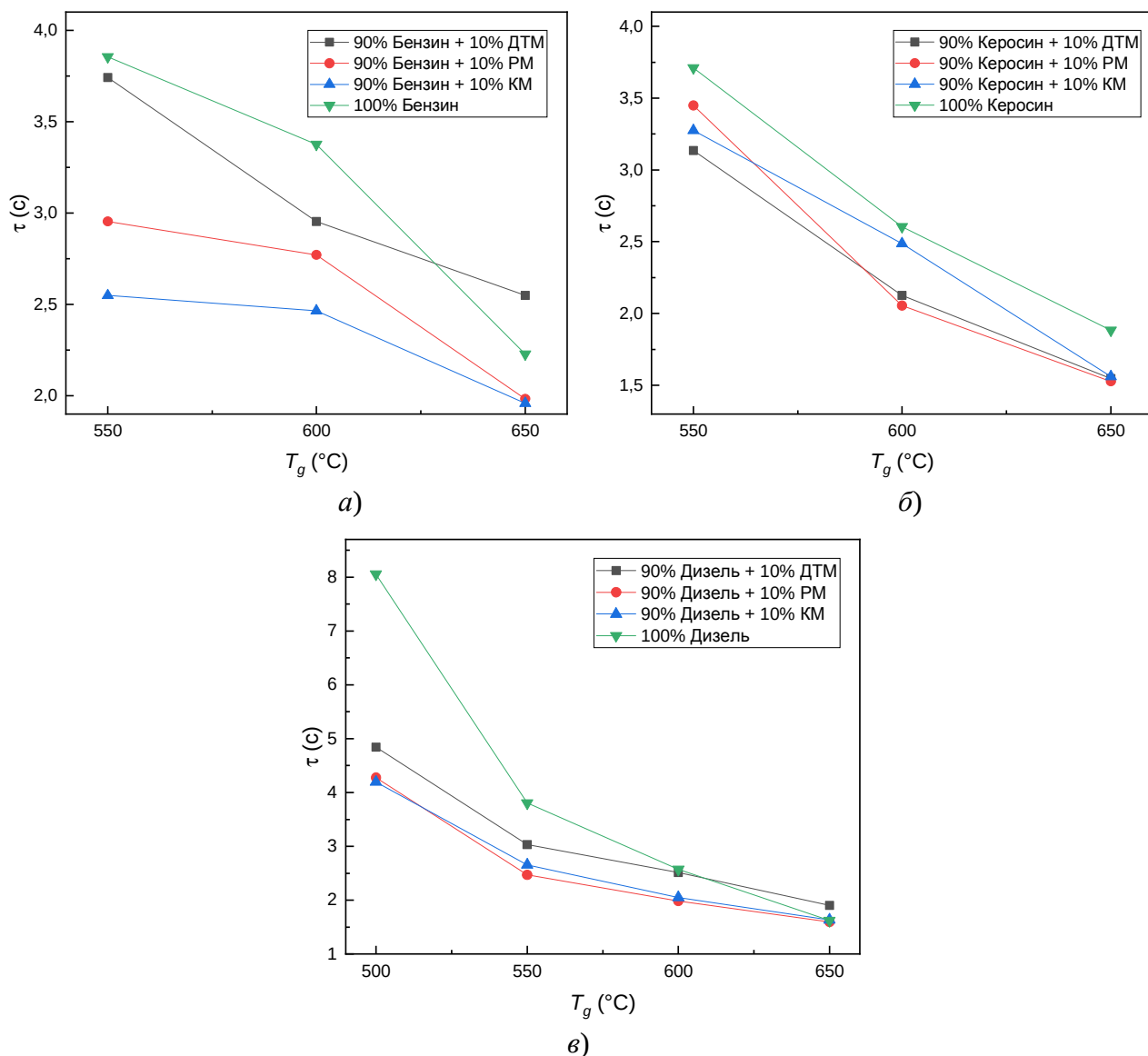


Рис. 3. Времена задержки зажигания исследуемых топлив при различных температурах окислительной среды (а – топлива на основе бензина; б – топлива на основе керосина; в – топлива на основе дизеля)

Отчетливо видно, что увеличение температуры окислительной среды приводит к сокращению времени задержки зажигания исследуемых топлив. Так, например, время задержки

зажигания дизельного топлива при увеличении температуры окислителя в диапазоне 500–650 °С приводит к сокращению времени зажигания капли топлива на величину до 5,1 раз. Данный эффект вызван увеличением скорости прогрева капли топлива при повышении температуры окислителя в камере сгорания. Также экспериментально установлено, что использование масляных добавок позволяет интенсифицировать зажигание исследуемых топливных смесей. Особенно этот эффект заметен при низких температурах окислителя в камере сгорания. Так, при температуре окислительной среды 550 °С времена задержки зажигания композиционных топлив на основе бензина снизились на 3–52% при добавлении масел, для композиционных топлив на основе керосина снижение задержки зажигания при добавлении масел составило 7–19%, а для топлив на основе дизеля – 26–54%. Однако наибольшего эффекта от добавки масел к дизельному топливу удалось достичь при температуре окислительной среды 500 °С. В зависимости от используемого масла время задержки зажигания капли топлива снизилось на величину 63–92%.

На рис. 4 представлены отношения оксидов углерода в составе дымовых газов, образующиеся при сжигании используемых в качестве добавок масел, в зависимости от температуры окислительной среды. Отчетливо видно, что наибольшим отношением CO_2/CO в составе дымовых газов, показывающим полноту выгорания топлива, характеризуется дистиллированное талловое масло, а минимальным на всем исследуемом температурном диапазоне – отработанное кулинарное масло.

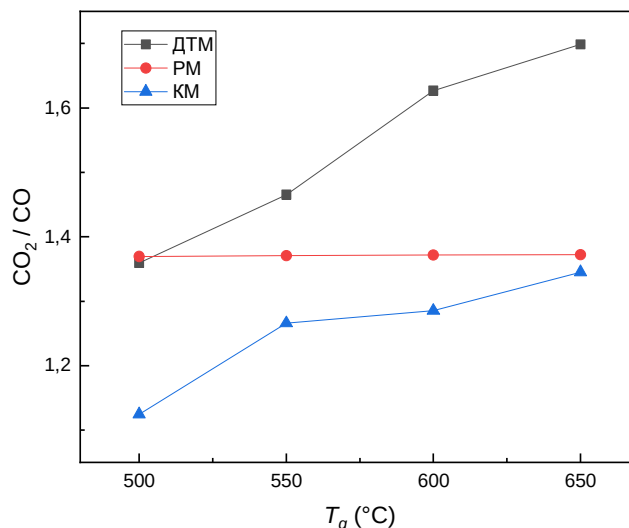


Рис. 4. Соотношение оксидов углерода в составе продуктов сгорания исследуемых масел при различных температурах окислительной среды

На рис. 5 представлены отношения оксидов углерода в составе дымовых газов, образующиеся при сжигании исследуемых топлив, в зависимости от температуры окислительной среды. Как и ожидалось, повышение температуры окислителя приводит к росту соотношения CO_2/CO в составе дымовых газов, что говорит об увеличении полноты выгорания исследуемых топлив. При сжигании композиционных топлив с добавками масел установлено, что внесение масляного компонента в состав топлива приводит к уменьшению отношения CO_2/CO в дымовых газах. Исключением является использование добавки ДТМ совместно с дизельным топливом и бензином (рис. 5в), в результате чего удастся добиться более высокой степени выгорания композиционного топлива, особенно при низких температурах в камере сгорания.

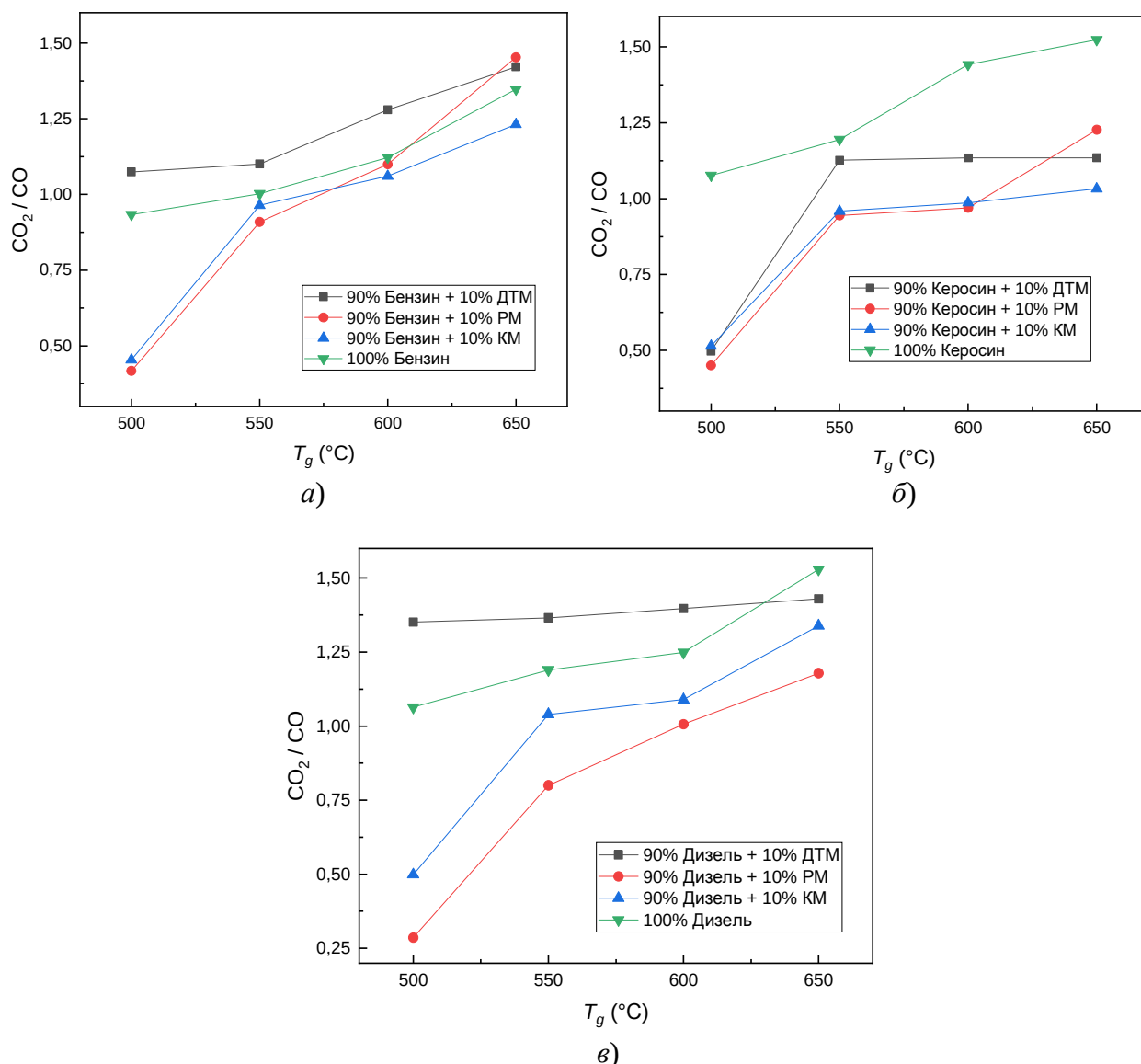


Рис. 5. Соотношение оксидов углерода в составе продуктов сгорания при различных температурах окислительной среды (а – топлива на основе бензина; б – топлива на основе керосина; в – топлива на основе дизеля)

Исследование выполнено за счет гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, соглашение № 075-15-2020-806 (договор № 13.1902.21.0014).

Литература

1. Coal – World Energy Outlook 2019 – Analysis - IEA [Electronic resource].
2. Özer S. The effect of diesel fuel-tall oil/ethanol/methanol/isopropyl/n-butanol/fusel oil mixtures on engine performance and exhaust emissions // Fuel. 2020. Vol. 281. P. 118671.
3. Emberger P. et al. Combustion characteristics of pure rapeseed oil fuel after injection in a constant volume combustion chamber with a non-road mobile machinery engine solenoid injector // Fuel. 2022. Vol. 320. P. 123979.
4. Wang Z. et al. Performance and emissions of camelina oil derived jet fuel blends under distributed combustion condition // Fuel. Elsevier. 2020. Vol. 271. P. 117685.
5. Irsyad M. et al. Experimental study of the thermal properties of waste cooking oil applied as thermal energy storage // Results Eng. 2023. Vol. 18. P. 101080.

УДК 536.331

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ КОМПОЗИЦИОННЫХ ТОПЛИВ В ТЕПЛОЭНЕРГЕТИКЕ

К.Ю. Вершинина, Д.О. Глушков, Д.В. Феоктистов, К.К. Паушкина

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

Композиционные топлива на основе углеродсодержащих промышленных отходов и сточных вод, в том числе содержащих нефтепродукты, перспективны для практического применения в условиях дефицита и роста цен на традиционные энергетические ресурсы [1, 2]. В качестве топливных компонентов могут быть использованы разнообразные твердые и жидкие составляющие: угольный шлам, отходы углеобогащения (угольные суспензии), отработанные технологические масла, некондиционные фракции нефти, побочные продукты химических производств, различные виды биомассы [3–5].

Вовлечение отходов угле- и нефтепереработки в виде водоугольных топлив (ВУТ) и органоводоугольных топлив (ОВУТ) в промышленную теплоэнергетику позволит снизить экологическую нагрузку на окружающую среду не только за счет сокращения площадей полигонов для складирования отходов [3, 6], но также благодаря уменьшению объема выбросов парниковых газов [7, 8]. Такой эффект достигается за счет увеличения полноты выгорания компонентов суспензионного топлива вследствие вторичной атомизации неоднородных капель при интенсивном нагреве. Компоненты (твердые, жидкие) капли композиционного топлива прогреваются с разной скоростью, вследствие чего на границе их контакта (в том числе взаимно нерастворимых жидкостей) могут возникать локальные очаги парообразования [9, 10]. Рост напряжения вблизи границы раздела компонентов (в особенности твердых и жидких) может приводить к микровзрыву, в результате которого капля диспергирует на десятки и сотни мелкодисперсных фрагментов [11–13]. Диспергирование капли на порядки увеличивает площадь поверхности теплообмена топлива с источником нагрева (разогретым воздухом), интенсифицируя тем самым процессы испарения и термического разложения компонентов, а следовательно – зажигания и горения. Кроме того, наличие воды в составе топлива является благоприятным фактором для интенсивных окислительных реакций и нейтрализации вредных выбросов, протекающих при относительно высоких температурах в топках котлов. Водяной пар при относительно высокой температуре термически диссоциирует, в результате чего высвобождаются молекулы кислорода и водорода. Эти молекулы интенсифицируют процесс окисления, снижая тем самым химический недожог топлива [14, 15]. Также к благоприятным факторам замены угля на композиции ВУТ и ОВУТ можно отнести снижение пожарной опасности из-за наличия воды в составе на этапах приготовления, транспортировки и хранения, а также более низкую стоимость топлива [16].

Целью данной работы является численное моделирование процессов, протекающих в топке парового котла с факельным сжиганием топлива, при сжигании трех топливных композиций (угольная пыль, капли ВУТ и ОВУТ). Разработанный прогностический аппарат является одним из компонентов комплексного алгоритма оценки перспектив практического применения композиционных топлив вместо ископаемых твердых топлив.

Объектом исследования являлась топка парового котла БКЗ-210-140Ф ($D_{ss} = 210$ т/ч, $P_{ss} = 14$ МПа, $T_{ss} = 560$ °С) [17–20]. Внутренние поверхности топки размерами 7424×7808×24 000 мм (рис. 1а) полностью экранированы трубами диаметром 60 мм (толщина стенки 5,5 мм) с шагом 64 мм. Фронтальный и задний экраны образуют в нижней части топки скат холодной воронки. В верхней части топки задний экран образует аэродинамический выступ (рис. 1а). Над аэродинамическим выступом внутри топочного пространства расположен ширмовый пароперегреватель. Топка оснащена четырьмя

прямоточными горелками с чередующимися по высоте пятью каналами вторичного воздуха и четырьмя каналами первичного воздуха (рис. 1б). Горелки расположены в один ярус по углам топki и направлены тангенциально к условной окружности в центре топki диаметром 900 мм (рис. 1в). Ширина горелки 670 мм, высота 2270 мм.

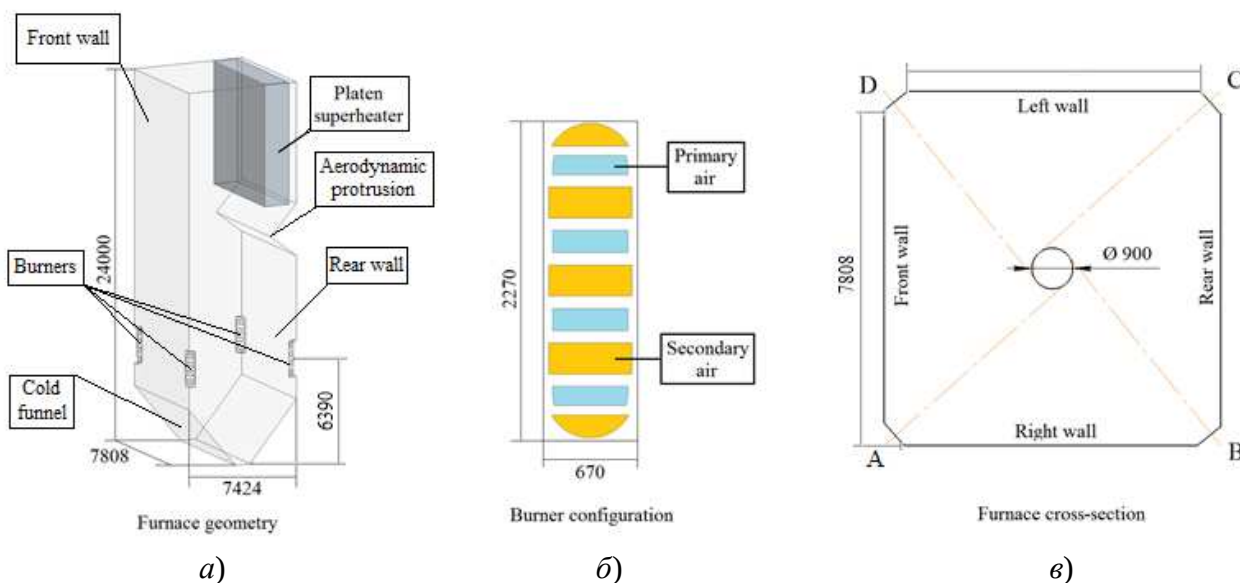


Рис. 1. Схема топki парового котла БКЗ-210-140Ф (а), конфигурация горелки (б), поперечный разрез топki (в)

Численное моделирование процесса горения в топке проводилось для трех топлив:

- бурый уголь Большесырского месторождения, Канско-Ачинский угольный разрез, Красноярский край, Российская Федерация (далее – уголь);
- водоугольное топливо (ВУТ) – суспензия на основе угля, состоящая из 50 мас. % угля и 50 мас. % воды;
- органоугольное топливо (ОВУТ) – суспензия на основе угля, состоящая из 45 мас. % угля, 45 мас. % воды и 10 мас. % отработанного моторного масла.

Теплотехнические характеристики топлив представлены в табл. 1 [21–23]. В рамках разработанной математической модели вода, добавляемая в процессе приготовления ВУТ и ОВУТ, при распылении топлив форсунками смоделирована как жидкость, которая сосредоточена на поверхности угольных частиц. Испарение этой влаги с поверхности угольных частиц описывается моделью испарения капли [12]. Масло в составе ОВУТ описано в математической модели как компонент летучих веществ твердого компонента.

В топке котла БКЗ-210-140Ф для снижения выбросов оксидов азота и снижения шлакования топki были применены технологии “горелка не в работе”. Первичный воздух с топливом подается через горелки В, С и D (рис. 1в), а вторичный подается во все четыре горелки. Таким образом создается недостаток кислорода для горелок “в работе”. Расход и температуру первичного/вторичного воздуха во всех вариантах расчета принимали постоянными. Расход каждого вида топлива задавался, исходя из требуемой паропроизводительности котла при идентичной нагрузке.

Ширмовый пароперегреватель (рис. 1а) смоделирован пространственной областью, в которой задано объемное поглощение теплоты 12,4 МВт согласно эксплуатационным данным котла [18, 24].

Размеры мелкодисперсных частиц топлива задавались распределением Розина–Раммлера [25]. Принималось, что тонина помола угля или угольной составляющей ВУТ и ОВУТ соответствует размолу твердого топлива в мельницах-вентиляторах (табл. 2).

Таблица 1. Основные характеристики топлив

	Уголь	БУТ	ОВУТ
Теплотехнические характеристики			
Влажность рабочая, %	20,8	60,4	54,36
Зольность рабочая, %	6,2	3,1	2,8
Выход летучих, %	32,56	16,28	24,65
Высшая теплота сгорания, МДж/кг	21,41	10,7	14,03
Элементный состав (для сухого беззольного состояния)			
C, %	74,1	74,1	77,4
H, %	5	5	5,5
N, %	0,9	0,9	0,74
S, %	0,3	0,3	0,24
O, %	19,7	19,7	16,12
Теплофизические характеристики (для сухого состояния)			
Плотность, кг/м ³	1220	1220*	1220*
Теплоемкость, Дж/(кг·°C)	1130	1130*	1130*

* – значения характеристик аналогичны значениям характеристик угля, являющегося твердой горючей основой БУТ и ОВУТ

Таблица 2. Размольная характеристика топлив

Характеристики	$d_{\min}$, МКМ	$d_{\max}$, МКМ	d_{mean} , МКМ	n
Уголь	1	1000	75	0,9

Типичные значения параметров размолла промышленными мельницами-вентиляторами были приняты в соответствии с данными [17, 18]. Численное моделирование проводилось для десяти топливных фракций, размер которых определялся автоматически в рамках вычислительных алгоритмов ANSYS FLUENT. Подача суспензий БУТ и ОВУТ в топочную камеру имитирует впрыск жидкого топлива через форсунки, установленные посередине каждого канала первичного воздуха. Угол распыления форсунок принят 30°, скорость топливной суспензии в узком сечении форсунки 250 м/с.

Численные исследования выполняли с использованием коммерческого пакета ANSYS FLUENT. Факел топливно-воздушной смеси в топке задавался в модели как двухфазная турбулентная система течений, состоящая из газа и твердой фазы. Для газа формулировались осредненные по времени уравнения сохранения массы, движения и энергии с использованием Эйлера подхода с учетом межфазного взаимодействия.

Для твердой фазы траектории частиц вычислялись с помощью модели случайного блуждания частиц (Лагранжев подход) с учетом термофореза и времени жизни случайных вихрей [26]. Горение частиц твердой фазы в модели реализовано в виде следующей последовательности стадий: инертный нагрев, испарение влаги, выход летучих веществ и горение коксового остатка. Физико-химические процессы и соответствующие им встроенные в ANSYS FLUENT использованные численные подмодели представлены в табл. 3 [26].

Учет радиационной составляющей теплового потока выполнен при следующих условиях: степень черноты частиц $\epsilon=0,85$; коэффициент рассеяния излучения частицами 0,6; коэффициент поглощения газовой среды соответствовал смеси «серых» газов.

Построение конечно-элементной сетки является важным этапом для получения достоверных результатов моделирования. В проведенных численных расчетах была использована сетка с количеством элементов $0,5 \times 10^6$. Дальнейшее измельчение сетки до 10^6

элементов не привело к изменению результатов численного моделирования, поэтому не является целесообразным.

Таблица 3. Численные модели

Процесс	Модель
Турбулентность	Реализуемая $k-\epsilon$
Теплообмен излучением	Модель дискретных ординат и взаимодействие частиц с излучением
Выход летучих	Одностадийная модель по уравнению Аррениуса
Гомогенное горение с учетом влияния турбулентности	Комбинация кинетической модели горения газовых компонент с моделью «обрыва вихря»
Гетерогенное горение	Диффузионно-кинетическая модель

На рис. 2–4 представлены температурные поля в топке котла. Самые высокие температуры в котле можно ожидать при сжигании угольной пыли (рис. 2).

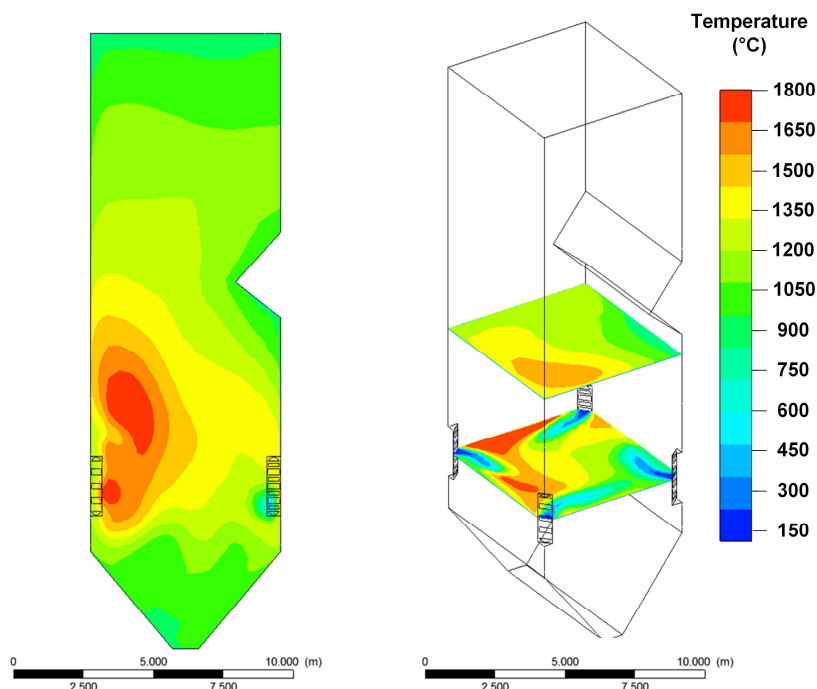


Рис. 2. Температурные поля в топке котла при сжигании угля

В данном случае в разных точках расчетной зоны температура варьировалась в максимально широком диапазоне – 300–1800 °С (рис. 2). При сжигании ВУТ значения температуры менялись от 200 °С до 1200 °С (рис. 3); при сжигании ОВУТ – от 200 °С до 1350 °С (рис. 4). При этом температура дымовых газов в верхней части топки вблизи ширмовых пароперегревателей имела приблизительно одинаковые значения независимо от типа сжигаемого топлива. Значения температуры в указанной области составляли 1000–1050 °С (рис. 2–4).

При сжигании ВУТ и ОВУТ зоны низкой температуры (200–600 °С) вблизи топливных горелок значительно обширнее, чем при сжигании угольной пыли, что особенно заметно при анализе температурного распределения в поперечном сечении топки. Данный результат обусловлен наличием большого количества воды в составе суспензий. При впрыске в топку капля суспензии, в отличие от частицы твердого топлива, претерпевает

относительно длительную стадию парообразования, сопровождающуюся поглощением тепловой энергии и, как следствие, снижением температуры газа.

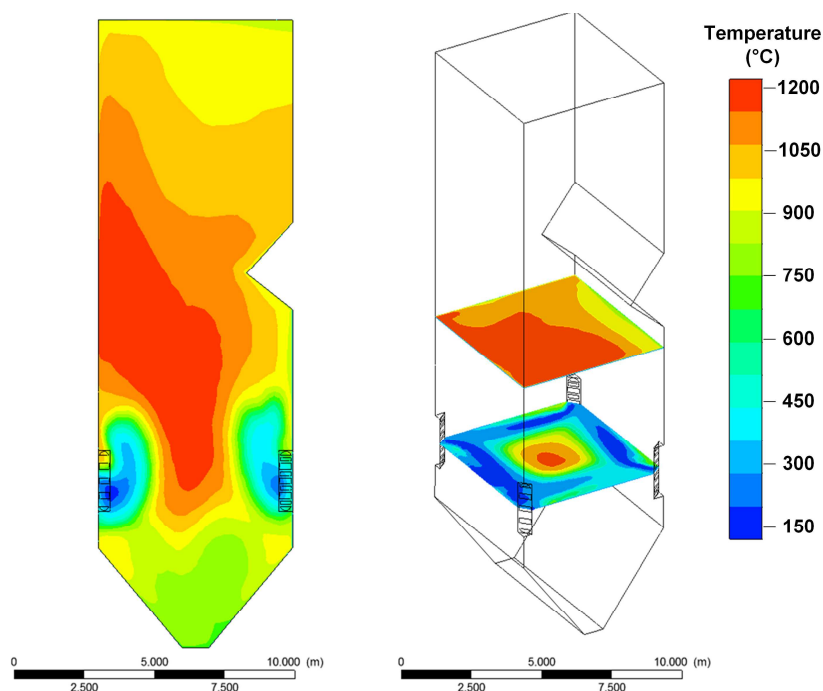


Рис. 3. Температурные поля в топке котла при сжигании ВУТ

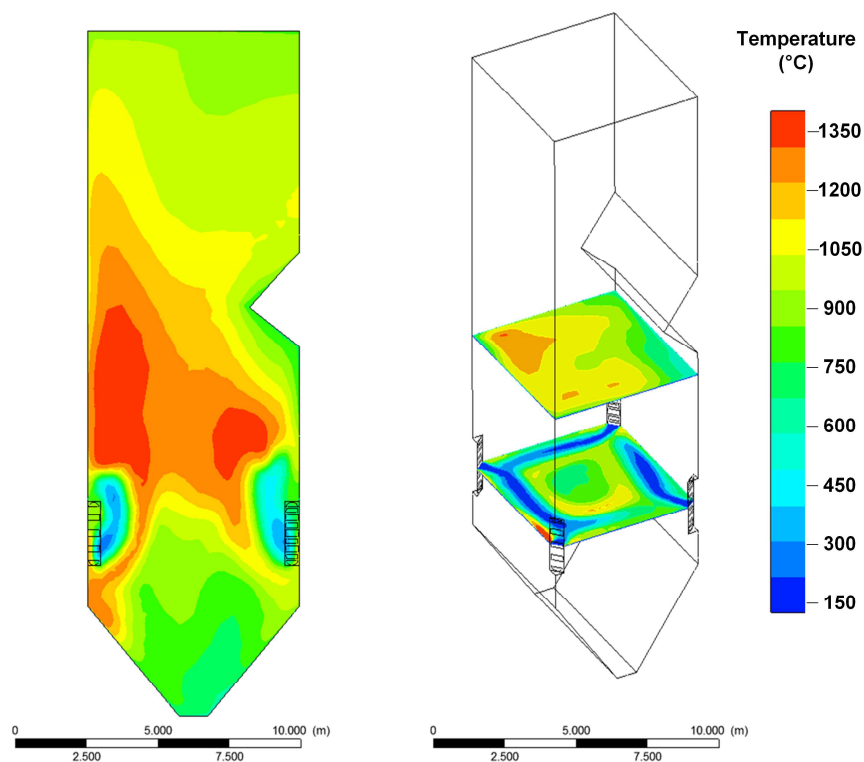


Рис. 4. Температурные поля в топке котла при сжигании ОВУТ

Была разработана математическая модель для исследования процессов, протекающих в топке парового котла с факельным сжиганием топлива при сжигании традиционного пылеугольного топлива и перспективных композиционных топлив – ВУТ и ОВУТ.

Проведено численное моделирование в программных пакетах ANSYS FLUENT для исследования влияния параметров процесса горения для трех топлив (угольная пыль, капли ВУТ и ОБУТ) на характеристики работы котельного агрегата. Процесс сжигания ОБУТ, по сравнению с ВУТ, демонстрирует более высокие пиковые температуры в топке (выше на 13–38%) и более низкую среднюю скорость роста отложений (ниже на 5%) и сопряженные с этим более низкие потери теплового потока (ниже на 2%) на теплообменных поверхностях.

Исследование выполнено за счет гранта РНФ (проект № 22-23-00040).

Литература

1. Zhang K., Hou Y., Ye Z., Wang T., Zhang X., Wang C. Interactions of coal pitch with amphoteric polycarboxylate dispersant in coal pitch–water slurry: Experiments and simulations // *Fuel*. 2022. Vol. 318. P. 123608.
2. Du L., Zhang G., Hu S., Luo J., Zhang W., Zhang C., Li J., Zhu J. Upgrade of low rank coal by using emulsified asphalt and its application for preparation of coal water slurry with high concentration // *J. Dispers. Sci. Technol.* 2021. Pp. 1–10.
3. Zhou L., Li X., Zhang R., Zhou W., Jin J., Wang C., Tian Y., Zhang K. New method for utilizing waste tire pyrolysis residue to prepare slurry fuel: Adsorption and slurry characteristics // *Powder Technol.* 2021. Vol. 386. Pp. 236–246.
4. Al-Lwayzy S.H., Yusaf T., Saleh K., Yousif B. The influence of emulsified water fuel containing fresh water microalgae on diesel engine performance, combustion, vibration and emission // *Energies*. 2019. Vol. 12, No. 13. P. 2546.
5. Ma Y., Huang R., Huang S., Zhang Y., Xu S., Wang Z. Experimental investigation on the effect of n-pentanol blending on spray, ignition and combustion characteristics of waste cooking oil biodiesel // *Energy Convers. Manag.* 2017. Vol. 148. Pp. 440–455.
6. Mohanty J.K., Guru S.R., Dash P., Pradhan P.K. Fly ash management and condition monitoring of ash pond // *Earth Syst. Environ.* 2021. Vol. 5, No. 2. Pp. 445–457.
7. Gonzalez-Salazar M.A., Kirsten T., Prchlik L. Review of the operational flexibility and emissions of gas- and coal-fired power plants in a future with growing renewables // *Renew. Sustain. Energy Rev.* 2018. Vol. 82. Pp. 1497–1513.
8. Guttikunda S.K., Jawahar P. Atmospheric emissions and pollution from the coal-fired thermal power plants in India // *Atmos. Environ.* 2014. Vol. 92. Pp. 449–460.
9. Feoktistov D.V., Glushkov D.O., Kuznetsov G.V., Orlova E.G., Paushkina K.K. Ignition and combustion enhancement of composite fuel in conditions of droplets dispersion during conductive heating on steel surfaces with different roughness parameters // *Fuel*. 2022. Vol. 314. P. 122745.
10. Glushkov D.O., Paushkina K.K., Pleshko A.O., Vysokomorny V.S. Characteristics of micro-explosive dispersion of gel fuel particles ignited in a high-temperature air medium // *Fuel*. 2022. Vol. 313. P. 123024.
11. Castanet G., Antonov D.V., Strizhak P.A., Sazhin S.S. Effects of water subdroplet location on the start of puffing/micro-explosion in composite fuel-water droplets // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2022. Vol. 186. P. 122466.
12. Fedorenko R.M., Antonov D.V., Strizhak P.A., Sazhin S.S. Time evolution of composite fuel/water droplet radii before the start of puffing/micro-explosion // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2022. Vol. 191. P. 122838.
13. Rao D.C.K., Karmakar S., Basu S. Atomization characteristics and instabilities in the combustion of multi-component fuel droplets with high volatility differential // *Sci. Reports* 2017 71. 2017. Vol. 7. No. 1. Pp. 1–15.
14. Baranova M.P., Kulagina T.A., Lebedev S. V. Combustion of water and coal suspension fuels of low-metamorphized coals // *Chem. Pet. Eng.* 2009. Vol. 45. No. 9–10. Pp. 554–557.

15. Antonov D.V., Valiullin T.R., Iegorov R.I., Strizhak P.A. Effect of macroscopic porosity onto the ignition of the waste-derived fuel droplets // *Energy*. 2017. Vol. 119. Pp. 1152–1158.
16. Glushkov D.O., Kuznetsov G.V., Paushkina K.K. Switching coal-fired thermal power plant to composite fuel for recovering industrial and municipal waste: combustion characteristics, emissions, and economic effect // *Energies*. 2020. Vol. 13. No. 1. P. 259.
17. Dik E.P., Soboleva A.N. Slagging properties of Irsha-Borodino and Berezovo coals from the Kansk-Achinsk coal field // *Therm. Eng.* 2004. Vol. 51. No. 9. Pp. 716–721.
18. Marshak Y.L., Pronin M.S., Protsaylo M.Y., Vasil'yev V.V. Experimental combustion of the Berezovskiy coal in a semiopen eddy furnace with liquid slag removal // *Therm. Eng.* 1982. Vol. 5. Pp. 24–28.
19. Osintsev K.V., Prikhodko Y.S., Dudkin M.M. The Influence of burner design on efficiency of electric power plant // *Smart Innovation, Systems and Technologies*. 2022. Vol. 272. Pp. 317–325.
20. Kuzmin V.A., Zagrai I.A., Desiatkov I.A. Investigation of emission characteristics and temperature of furnace gases in BKZ-210-140F steam boiler: milled peat combustion and support flaming with natural gas // *Thermophys. Aeromechanics*. 2021. Vol. 28. No. 2. Pp. 281–290.
21. Khzmalyan D.M., Kagan Y.A. Combustion theory and furnace devices [in Russian]. *Energiya*, 1976. – 488 p.
22. Thermal calculation of boilers (normative method), third edition, revised and expanded. 1998. – 258 p.
23. Glushkov D.O., Matiushenko A.I., Nurpeiis A.E., Zhuikov A. V. An experimental investigation into the fuel oil-free start-up of a coal-fired boiler by the main solid fossil fuel with additives of brown coal, biomass and charcoal for ignition enhancement // *Fuel Process. Technol.* 2021. Vol. 223. Pp. 106986.
24. Marshak Y.L., Kozlov S.G., Dik E.P., Suchkov S.I. Slag formation of furnace chamber when burning Berezovsk coal // *Therm. Eng.* 1980. Vol. 1. Pp. 16–22.
25. Scott G.S. Application of the Rosin-Rammler law to the “missing sizes” in screened coal // *Report of investigations*. 1943. Vol. 3732. 9 p. URL: https://books.google.ru/books?id=YggL8wL3HZAC&dq=rosin-rammler+distribution+coal+deposits&lr=&hl=ru&source=gbs_navlinks_s
26. Ranade V.V., Gupta D.F. Computational modeling of pulverized coal fired boilers // *Computational Modeling of Pulverized Coal Fired Boilers*. 2014. Pp. 1–264.

УДК 536.46

СОВМЕСТНОЕ СЖИГАНИЕ ГИДРАТА МЕТАНА С ТРАДИЦИОННЫМИ ТОПЛИВАМИ

О.С. Гайдукова, Н.Е. Шлегель, В.В. Дорохов, П.А. Стрижак

Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

В энергетическом секторе широко используются топлива на основе полезных ископаемых [1]: природный газ, уголь, нефть. На сегодняшний день остро стоит экологический вопрос, связанный с высоким уровнем антропогенных выбросов в атмосферу, образованных при сжигании углеводородных топлив [2]. Парниковый эффект, глобальное потепление, существенное изменение климата, в целом нестабильная климатическая обстановка в ряде регионов мира мотивируют разработку новых и развитие существующих технологических решений по минимизации этих эффектов. Горение жидких и твердых топлив сопровождается выделением достаточно большого объема выбросов [3]. Соответствующие тенденции становятся еще более масштабными при активном вовлечении в топливно-энергетический сектор низкосортных топлив и отходов нефтепереработки и углеобогащения [4]. Из анализа результатов исследований (в частности, [5, 6]) характеристик сжигания композиций с водой, в смеси водяного пара, а также обогащенных газовых смесей сформулирована гипотеза о том, что совместное сжигание жидкого топлива с газовым гидратом позволит повысить теплоту сгорания и реакционную способность топлива, по сравнению с раздельным сжиганием газового гидрата в камерах сгорания установок и двигателей, а также специализированных реакторах. Прямое сжигание гранул гидрата в качестве основного топлива не всегда может быть эффективным вследствие значительного расхода энергии на прогрев композиций, плавление льда, испарение воды, диссоциацию газа. В свою очередь, использование газового гидрата с жидким топливом приведет к снижению антропогенных газовых выбросов, образованных в результате пиролиза, газификации и горения компонентов, за счет высокой экологичности газовых композиций [7]. Газовые гидраты целесообразно использовать в качестве добавки к традиционным топливам при раздельной или совместной подаче в камеру сгорания, так как они представляют собой композицию, содержащую высокореакционный газ (например, метан) и воду, нагрев которой приводит к формированию паров и фрагментации капель и частиц за счет вскипания. Продукты термического разложения и испарения являются основными компонентами так называемых обогащенных газовых смесей, в которых реализуются эффективный пиролиз и газификация. Водяной пар и метан являются перспективными компонентами парогазовоздушных смесей для камер сгорания в двигателях различного назначения и энергетических установках. Особенно важно определить критические (необходимые и достаточные) условия стабильного инициирования горения и концентрации антропогенных выбросов при использовании гидратов совместно с малоинерционными и высокоинерционными горючими компонентами, к их числу относятся, соответственно, жидкие и твердые низкосортные топлива. Это послужило мотивацией настоящего исследования. Цель настоящей работы – определение по результатам экспериментов характеристик совместного инициирования горения перспективных и широко используемых жидких и твердых топлив с гидратом метана.

Для изучения закономерностей горения газового гидрата совместно с тонкораспыленным жидким топливом и отходом углеобогащения в окислительной среде использовался экспериментальный стенд, приведенный на рис. 1. Камера сжигания оснащена нагревательным элементом (6) и смотровыми окнами (2). Нагревательный элемент (QFE 125 Вт и 250 Вт, 60×60×26 мм) представлял собой керамическую пластину, внутри

которой находилась нихромовая нить. Для регулирования нагрева камеры сжигания использован щит (ЩМП-2,3,1-0 36 УХЛ3) автоматизации на базе регулятора температур ТРМ500 с прямым доступом к OwenCloud. Применялся ПИД-закон регулирования. Использовались сигналы термопары S (платинородий-платиновая; максимальная рабочая температура 1350 °С, предел допускаемых отклонений ± 1 °С). Для применения систем высокосортной регистрации в камере сжигания предусмотрены два смотровых окна из кварцевого стекла (2)

(тип Г 50×50×8). Камера сгорания топлива выполнена из стали 09Г2С ГОСТ 8639-82 и имеет размер 100×100×3 мм. В камере расположены два форсуночных устройства. Первое служило для распыления топлива, а второе – для подачи воздуха. Давление в топливной системе создавал топливный насос. Оно составляло около 4 атм. Форсуночное устройство имело соленоидный клапан, который открывался по команде с щита управления. Подача воздуха осуществлялась при помощи компрессорной установки. Газовый гидрат подавался в верхней части камеры сгорания через специализированное отверстие как отдельно, так и совместно с жидким топливом. Уголь и угольный шлак перед подачей в камеру сгорания смешивался с гранулами газового гидрата и остужался до его температуры, после чего засыпался в камеру. Попадая в камеру сгорания, топливо прогревалось, инициировалось испарение. При помощи пьезоэлектрического поджига (искровой механизм) происходило воспламенение сформированной парогазовой смеси. После проведения опытов камера продувалась воздушным компрессором. Для регистрации антропогенных выбросов в камере сгорания предусмотрено отверстие, в которое помещался щуп газоанализатора. Концентрации газов, выделяемые во время горения, измерялись с помощью газового анализатора Тест 1 (электрохимические – O₂ (0–25%, $\pm 0,2\%$), SO₂ (0–1000 ппм, $\pm 5\%$), NO (0–2000 ппм, $\pm 5\%$), NO₂ (0–500 ппм, $\pm 7\%$), H₂S (0–500 ппм, $\pm 5\%$); оптические – CO₂ (0–30%, $\pm 2\%$), CH₄ (0–50%, $\pm 5\%$), CO (0–50%, $\pm 5\%$), H₂ (0–30%, $\pm 5\%$)). Анализ полученных концентраций газов осуществлялся при помощи специального программного обеспечения. Расчет средних значений концентраций газов проводился методом трапеций. Более подробное описание методики расчета приведено в [8].

Регистрация характеристик процессов распыления, зажигания и горения топлива выполнялась при помощи высокоскоростной видеокамеры Fastcam Mini UX100. Эксперименты проводились при разрешении 1280×1024 пикселей при 5000 кадр/с, с межкадровой задержкой 1/25000. Высокоскоростная камера использовалась совместно с объективом Sigma 105mm f/2.8 EX DG OS HSM Macro Nikon F. Напротив противоположного смотрового окна устанавливался светодиодный прожектор для подсветки области регистрации, перед которым устанавливался матовый рассеиватель Arlight. Регистрировались основные параметры движения и воспламенения гранул газового гидрата и жидкого топлива: время задержки зажигания (τ_d) (т.е. интервал времени от входа частицы в нагревательную камеру, а именно начало теплового воздействия, до воспламенения); радиус частицы газового гидрата (R_d) и ее скорость движения (U_d). При проведении экспериментов масса порции газового гидрата контролировалась при помощи аналитических весов ViBRA HT 84RCE (дискретность измерения 0,0001 г). В качестве жидкого топлива использовались бензин, керосин и дизель. Подача жидкого топлива осуществлялась импульсом с расходом около 5–10 мл.

При обработке полученных экспериментальных данных рассчитывались значения систематических и случайных погрешностей. Средняя квадратичная погрешность проведенных экспериментов определялась как $^nS = (\sum_{i=1}^n (R_{av} - R_i)^2)^{0,5} / (n - 1)$, где R_{av} – средний радиус капли, n – количество измерений. По правилу three Sigma rule отсеивались грубые ошибки. Затем вычислялась среднеквадратичная погрешность серии измерений как $^nS_x = ^nS / n^{0,5}$. Доверительный интервал (абсолютная погрешность серии измерений) определялся по формуле $\Delta R_d = ^nS_x t(\alpha, n)$, где $t(\alpha, n)$ – коэффициент Стьюдента.

Систематическая погрешность измерения размеров частиц, их скоростей движения и времени задержки зажигания составила 2,1%, 3,4% и 2,8% соответственно.

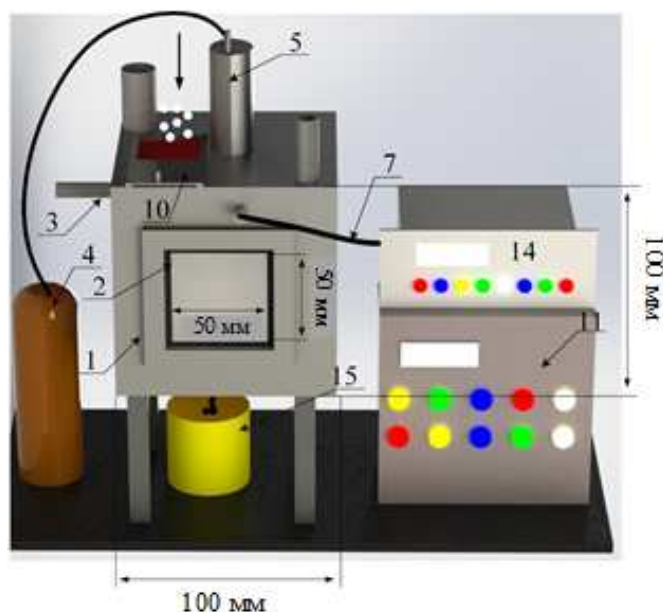
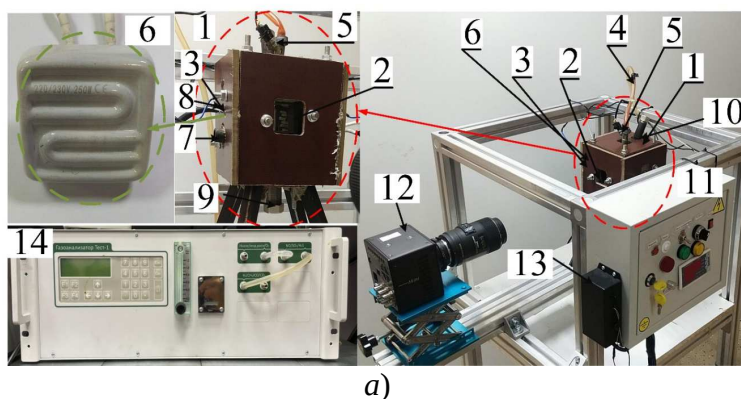


Рис. 1. Экспериментальный стенд (а) и его схема (б) для совместного сжигания газового гидрата и топлива: 1 – нагревательная камера; 2 – смотровое окно; 3 – датчик температуры; 4 – капилляр подачи жидкого топлива; 5 – форсуночное устройство; 6 – нагреватель; 7 – щуп газоанализатора; 8 – трубопровод подачи воздушной смеси; 9 – сливное отверстие; 10 – отверстие подачи газового гидрата; 11 – щит управления; 12 – высокосортная видеокамера; 13 – блок розжига искры зажигания; 14 – газоанализатор; 15 – компрессор для подачи воздушной смеси

В качестве компонентов топливных смесей использовались: бензин, керосин, дизельное топливо, уголь, угольный шлам, гидрат метана. Компонентный состав гидрата: 76–77% воды, 13–14% метана. Размер частиц гидратного порошка CH_4 составлял 0,3–0,5 мм.

На рис. 2 и 3 показаны кадры из проведенных экспериментов с демонстрацией типичных условий воспламенения жидких топлив, газового гидрата, угля и угольного шлама. Установлено, что для топлив с высокой концентрацией легких фракций (например, бензин) искровое зажигание парогазовой смеси помогает (ускоряет процесс) интенсифицировать горение инерционного газового гидрата. В случае же использования керосина и дизельного топлива газовый гидрат выступает добавкой, интенсифицирующей процесс горения топливной смеси. Аналогичные закономерности зарегистрированы при анализе видеogramм

экспериментов с подачей угольного шлама и гидрата. Интенсивное выделение газа вследствие диссоциации способствовало формированию парогазовой смеси с высокими скоростями окисления. Интенсивность протекания последних высокая, что достаточно для прогрева частиц угольного шлама, выделения летучих, их зажигания, фрагментации частиц и ускорения горения углеродистого каркаса. Чем выше температура газовой среды в камере перед вдувом топлива, тем интенсивнее протекали соответствующие процессы.

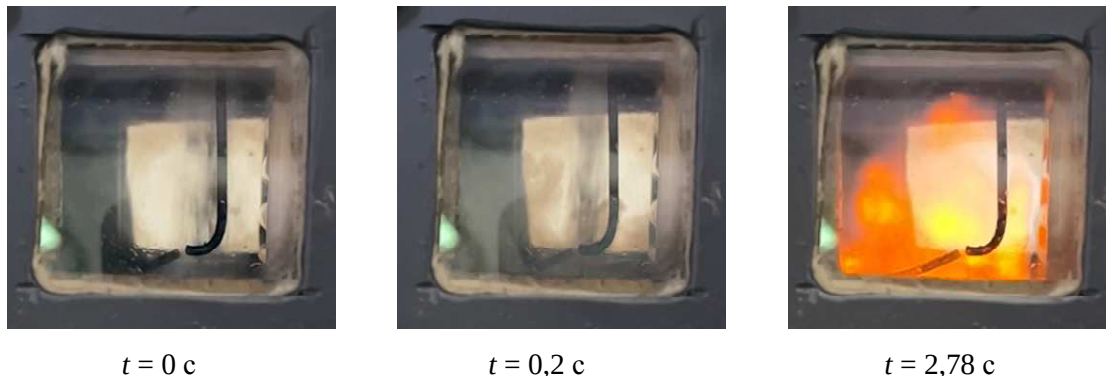


Рис. 2. Кадры видеogramм процесса зажигания в экспериментальном стенде бензина совместно с газовым гидратом при температуре воздушной среды в камере $T_g = 90 \text{ °C}$

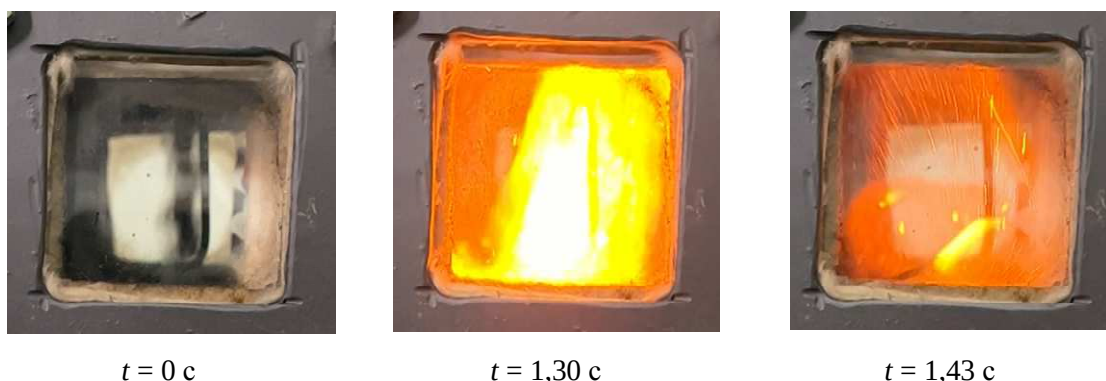


Рис. 3. Кадры видеogramм процесса зажигания в экспериментальном стенде угольного шлама совместно с газовым гидратом при температуре воздушной среды в камере $T_g = 215 \text{ °C}$

На рис. 4 показаны установленные в проведенных экспериментах значения времени задержки зажигания топливной смеси из двух компонентов (газовый гидрат и бензин). Видно, что при сопоставимой температуре газовой среды в камере времена задержки зажигания смеси топлив ниже. Это обусловлено большей концентрацией горючих газов в объеме камеры сгорания. Бензин содержит достаточно большую долю легких фракций, что является причиной малоинерционного зажигания газовой среды. Если же использовать дополнительно газовый гидрат с сопоставимым объемом, то концентрация одновременно поступающих к искровой системе горючих газов в несколько раз повышается. Это приводит к менее инерционному зажиганию. Чем выше температура газовой среды в камере, тем существеннее отличия времен задержки зажигания отдельных топлив и их смеси. При анализе рис. 4 установлена зависимость времен задержки зажигания топлив от температуры: $\tau = a e^{-0,012 \cdot T_g}$, для бензина $a = 10,96$, а бензина с гидратом метана $a = 15,76$.

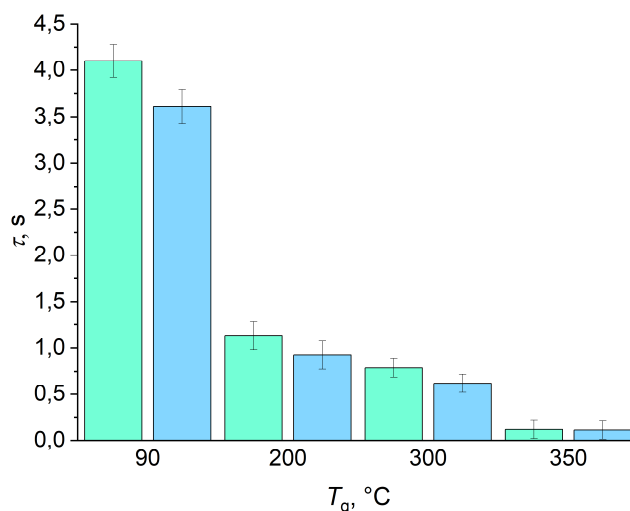


Рис. 4. Времена задержки зажигания бензина без гидрата метана (зеленый цвет) и с гидратом метана ($m = 1.4 \text{ г}$) (голубой цвет) при разной температуре T_g

В опытах с углем и угольным шламом, одновременно подаваемыми с газовым гидратом, установлены разные зависимости инерционности процесса зажигания от температуры газовой среды в реакторе. В случае угля зарегистрировано ожидаемое снижение времени задержки с ростом температуры, а в опытах с угольным шламом обнаружена обратная зависимость. Это обусловлено существенной ролью летучих в составе твердого топлива. В использованной марке угля концентрация летучих веществ высока: чем выше температура, тем быстрее они выходят вследствие термического разложения и выше концентрации горючих газов в объеме камеры сгорания. При росте температуры в таком случае времена задержки сокращаются по закону Аррениуса. Угольные шламы содержат мало летучих и имеют высокую зольность, поэтому роль стадии газовой фазы зажигания минимальна. Для гетерогенного зажигания требуются высокие тепловые потоки к поверхности коксового остатка. Избыточные тепловые потоки приводят к инициированию гетерогенных реакций в приповерхностном слое, которые формируют зольную корку. В таких условиях окислительные реакции замедляются, что приводит к повышению инерционности процесса зажигания. Как следствие, времена задержки зажигания на рис. 5б увеличиваются при повышении температуры. Эти закономерности позволяют сделать вывод о том, что при использовании высокозольных твердых компонентов в составе топливных смесей целесообразно обеспечивать умеренные тепловые потоки в камере сгорания, т. е. важно избегать кратковременных скачков и чрезвычайно больших значений температуры. При анализе результатов, представленных на рис. 5, получено выражение, описывающее зависимость времен задержки зажигания от температуры воздуха: $\tau = a e^{-0,002 \cdot T_g}$, где коэффициент a зависит от компонента топлива: для угля $a = 1,93$, а для угольного шлама – 2,34.

Инерционность зажигания керосина и дизельного топлива (рис. 6) совместно с гидратом метана существенно ниже, чем в опытах с твердыми топливами (рис. 5). При этом чем больше объем вдуваемого топлива, тем быстрее инициируется горение. Данные закономерности являлись более выраженными в опытах с керосином. В экспериментах с дизельным топливом темпы снижения времен задержки зажигания умеренные. Это обусловлено меньшей реакционной способностью дизельного топлива по сравнению с керосином (выше температуры воспламенения, ниже температуропроводность и скорости испарения).

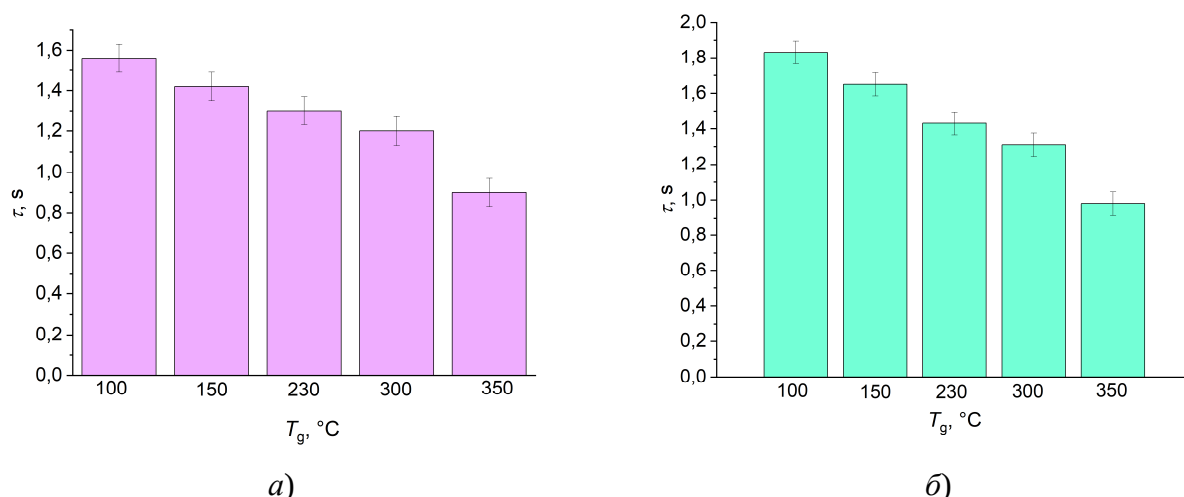


Рис. 5. Времена задержки зажигания угля с $m = 1,4$ г (а) и угольного шлама с $m = 1,4$ г (б) с гидратом метана с $m = 1,4$ г при разной температуре T_g

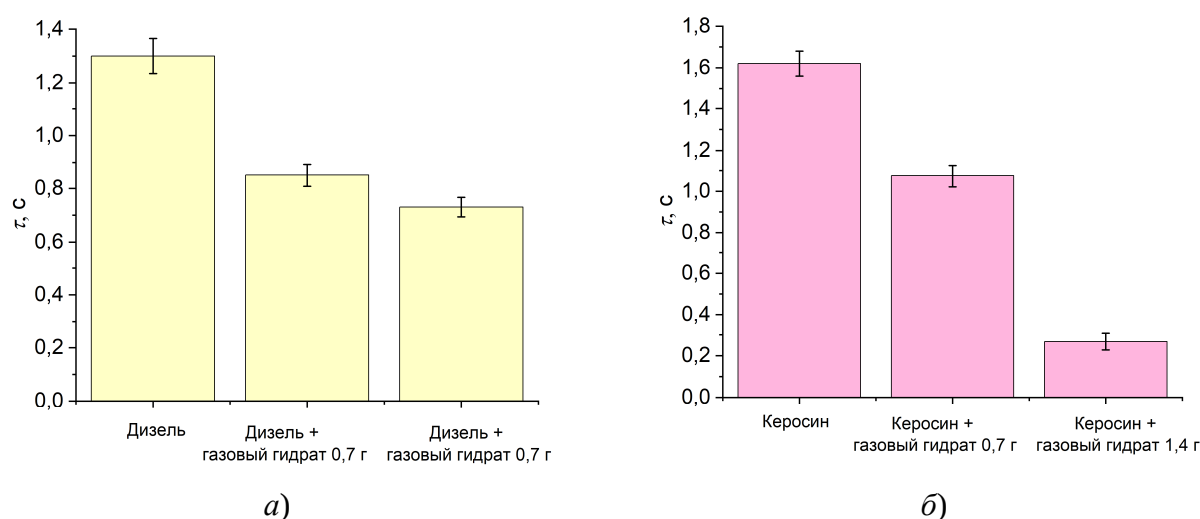


Рис. 6. Времена задержки зажигания дизельного топлива (а) и керосина (б) с гидратом метана с разной массой при температуре $T_g = 90$ °C

Проведенные эксперименты обосновали перспективность совместного сжигания традиционных топлив с газовыми гидратами по ряду энергетических и экологических показателей. Наиболее важно отметить снижение инерционности зажигания топлив за счет комбинированной подачи жидких, твердых и газообразных компонентов. В частности, показано, что бензин может использоваться для интенсификации зажигания газовых гидратов даже при относительно невысоких температурах в камере сгорания. Гидраты представляют перспективные добавки для сжигания низкосортных твердых топлив, в частности, угольных шламов.

Результаты экспериментов подтверждают существенное снижение времени задержки зажигания отдельных компонентов топлив в составе смесей. В частности, при совместной подаче в камеру сгорания даже высокоинерционных компонентов времена их зажигания могут быть приближены к аналогичным параметрам для газовых гидратов. Например, времена задержки зажигания бензина при добавлении гидрата метана массой 1,4 г снижаются в 1,1–1,2 раза, аналогично для дизельного топлива – в 1,2–1,5 раза и керосина – в 3–3,5 раза. Экологические индикаторы работы энергетических установок могут быть улучшены даже при небольшом объеме вдуваемого порошка газового гидрата. В частности, при сравнительном анализе выделены преимущества подачи данного порошка совместно с

бензином, керосином, дизельным топливом и угольным шламом. По ключевым компонентам дымовых газов установлены диапазоны снижения концентраций. Например, при совместном сжигании керосина и гидрата метана с массой 0,4 г при температуре в камере сгорания около 90 °С происходит снижение концентраций CO_2 и CO на 35–44% и 32–37% соответственно. При сжигании бензина с гидратом метана массой 1,4 г концентрация CO_2 снижается на 15–37%, а концентрация CO – на 10–13%. Эти закономерности обусловлены синергетическими эффектами, вызванными одновременным выделением из каркаса гидрата метана и водяных паров. Гидрат метана способствует повышению температуры в зоне горения, а водяные пары несколько снижают эту температуру и вступают в реакции, снижающие концентрации опасных антропогенных выбросов.

Исследование выполнено по проекту № Приоритет-2030-НИП/ЭБ-006-375-2023.

Литература

1. Mayer A. Fossil fuel dependence and energy insecurity // *Energy. Sustain. Soc.* 2022. Vol. 12. Art. 27.
2. Cheng X., Chen L., Luan H., Zhang J., Jiang Y. Why coal permeability changes under unconstrained displacement boundary conditions: Considering damage effects // *J. Nat. Gas Sci. Eng.* 2022. Vol. 105. Art. 104702.
3. Ye H., Wu X., Li D., Jiang Y. Numerical simulation of productivity improvement of natural gas hydrate with various well types: Influence of branch parameters // *J. Nat. Gas Sci. Eng.* 2022. Vol. 103. Art. 104630.
4. Huang W., Genaro Reivan Ortiz G., Kuo Y.-L., Maneengam A., Nassani A.A., Haffar M. The non-linear impact of renewable energy and trade on consumption-based carbon emissions // *Fuel*. 2022. Vol. 324. Art. 124423.
5. Yu X., Luo Z. Upgrading of low-grade high-sulfur lignite using differential dynamic field dry cascade cleaning apparatus // *Fuel*. 2022. Vol. 324. Art. 124485.
6. Gaber C., Wachter P., Demuth M., Hochenauer C. Experimental investigation and demonstration of pilot-scale combustion of oil-water emulsions and coal-water slurry with pronounced water contents at elevated temperatures with the use of pure oxygen // *Fuel*. 2020. Vol. 282. Art. 118692.
7. Yang M., Zhao J., Zheng J. nan, Song Y. Hydrate reformation characteristics in natural gas hydrate dissociation process: A review // *Appl. Energy*. 2019. Vol. 256. Article number 113878.
8. Dorokhov V.V., Kuznetsov G.V., Nyashina G.S., Strizhak P.A. Composition of a gas and ash mixture formed during the pyrolysis and combustion of coal-water slurries containing petrochemicals // *Environ. Pollut.* 2021. Vol. 285. Art. 117390.

УДК: 544.452.2

УСКОРЕНИЕ ФРОНТА ПЛАМЕНИ В ШЕРОХОВАТОМ КАНАЛЕ**С.В. Головастов, Г.Ю. Бивол, В.В. Голуб**

Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Условия ускорения пламени и инициирования детонации в узких каналах представляют большой интерес как для практического применения, так и для обеспечения взрывобезопасности. При ускорении пламени и распространении детонации в узком канале немаловажную роль играет пограничное течение у стенок канала [1]. Из-за сильного влияния пограничного слоя неровности стенок или препятствия в канале могут привести к ускорению фронта пламени и к переходу горения в детонацию [2, 3]. В работе [4] показано, что шероховатость на внутренней поверхности стенок канала существенно ускоряет пламя и переход к детонации в водородно-кислородной смеси. В работе [5] изучалось влияние мелких пирамидальных элементов на динамику фронта пламени, которые также приводили к ускорению пламени и к формированию детонации [6]. При этом размер элементов шероховатости оказывает существенное влияние на динамику пламени. Численное моделирование показало, что увеличение размера шероховатости приводит к более быстрому ускорению пламени и к более быстрому переходу к детонации [6, 7]. Распространение детонации в узких каналах часто сопровождается дефицитом скорости или переходом к галопирующему режиму распространения [8, 9]. В работе [10] показано, что размещение винтовой спирали в канале приводило к сужению пределов детонации и к дефициту скорости до 50%. Результат влияния шероховатых покрытий внутренней поверхности ударной трубы на период индукции представлен в работе [11]. Таким образом, распространение фронта пламени в узком канале с шероховатостью может иметь неоднозначный характер, сопровождаемый как формированием детонации, так и её последующим распадом или переходом в галопирующий режим. При этом тип шероховатого покрытия может иметь определяющее значение при распространении фронта пламени.

В данной работе определялось влияние шероховатого покрытия стенок узкого канала на динамику пламени ацетилено-воздушных смесей в канале, поперечный размер которого сравним с шириной детонационной ячейки. Варьировался состав горючей смеси и средние размеры шероховатости. Определялось влияние степени покрытия канала на динамику фронта пламени.

Экспериментальная установка состояла из инициирующего участка длиной 200 мм с внутренним диаметром 20 мм и диагностической секции длиной 1200 мм с поперечным сечением 7*7 мм. Эти поперечные размеры соизмеримы с шириной детонационной ячейки в ацетилено-воздушной смеси [12]. Две боковые стенки диагностической секции изготавливались из оргстекла, что позволяло регистрировать динамику фронта пламени. Зажигание осуществлялось с помощью искрового разрядника у закрытого левого конца инициирующей секции. Правый конец диагностической секции был открытым, так что начальное давление равнялось атмосферному. Горючая смесь заранее приготавливалась в сосуде объёмом 3 л при максимальном давлении 0,5 МПа. Варьировался мольный избыток (ER , equivalence ratio) ацетилена в ацетилено-воздушной смеси от 0,8 до 1,4. Смесь перемешивалась не менее 20 мин с помощью вентилятора внутри сосуда. Каждый эксперимент повторялся не менее 3 раз.

Для покрытия одной или двух стенок канала использовалась наждачная бумага двух типов. Крупнозернистая наждачная бумага имела толщину 1,0–1,1 мм и размер зерна 500 мкм, мелкозернистая – 0,6 мм и 100 мкм соответственно. Визуализация пламени осуществлялась с помощью высокоскоростной камеры Phantom VEO 710. Давление

измерялось четырьмя датчиками давления РСВ на расстояниях 200, 400, 600 и 800 мм от начала диагностической секции прямоугольного сечения.

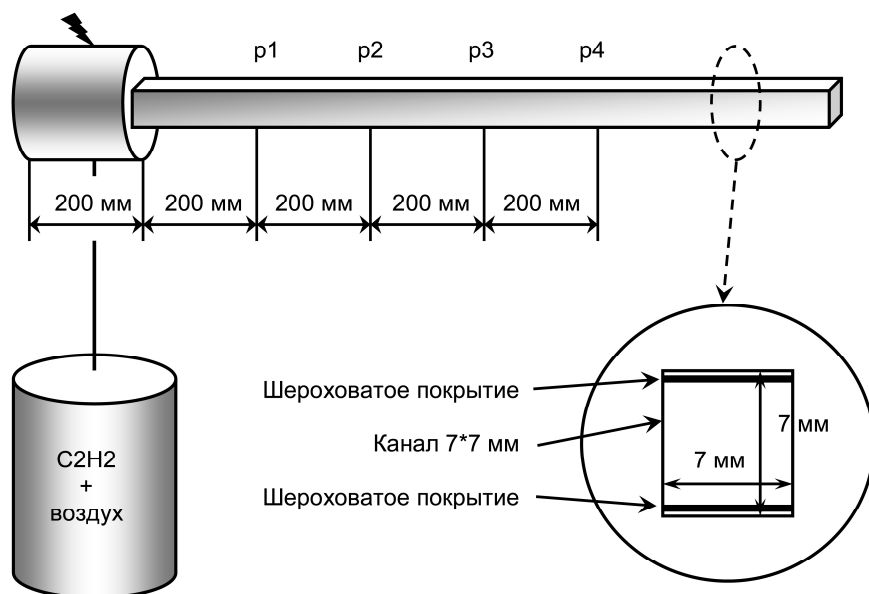


Рис. 1. Схема экспериментального стенда и поперечное сечение диагностической секции

На рис. 2а представлена характерная пространственно-временная развёртка распространения фронта пламени в стехиометрической смеси ($ER = 1$) в канале с одной стенкой, покрытой крупнозернистой (500 мкм) наждачной бумагой. Видеорегистрация производилась с частотой 200 000 кадр/с. Высокоскоростная камера позволяла визуализировать фронт пламени и продукты горения в спектральном диапазоне 350–1050 нм. Одновременное использование инфракрасной камеры Infratec ImageIR позволяло подтвердить регистрацию продуктов сгорания непосредственно в светлой области визуализации камерой Phantom VEO 710 (рис. 2б). Спектральный диапазон ИК-камеры составляет 1,5–5,7 мкм, что дает возможность регистрировать свечение паров воды. Это позволяет определить линию свечения на рис. 2а как траекторию фронта пламени.

На основе серий высокоскоростных пространственно-временных развёрток построены графики изменения скорости фронта пламени вдоль оси диагностической секции. На рис. 3 представлены данные для стехиометрической ацетилено-воздушной смеси. Также на рисунке приведена скорость детонации Чепмена–Жуге (V_{C-J}). Как видно из рис. 3, в гладком канале фронт пламени ускорялся до 1200 м/с на расстоянии 650 мм, после чего происходило замедление до 100 м/с на расстоянии 950 мм. При покрытии одной из стенок диагностической секции крупнозернистой (500 мкм) наждачной бумагой фронт пламени ускорялся до скорости детонации Чепмена–Жуге на расстоянии 400 мм. После этого скорость пламени медленно уменьшалась до 1600 м/с к концу секции. При покрытии двух стенок канала крупнозернистой наждачной бумагой также регистрировалось ускорение до 1400 м/с на расстоянии 200 мм. Однако после этого фронт тормозился до 600 м/с на расстоянии 600 мм и продолжался распространяться с этой скоростью до конца канала. При покрытии одной из стенок секции мелкозернистой (100 мкм) наждачной бумагой пламя достигло максимальной скорости 1250 м/с на расстоянии 500 мм. Затем пламя замедлилось до 600 м/с и снова ускорилось до более чем 1000 м/с к концу канала.

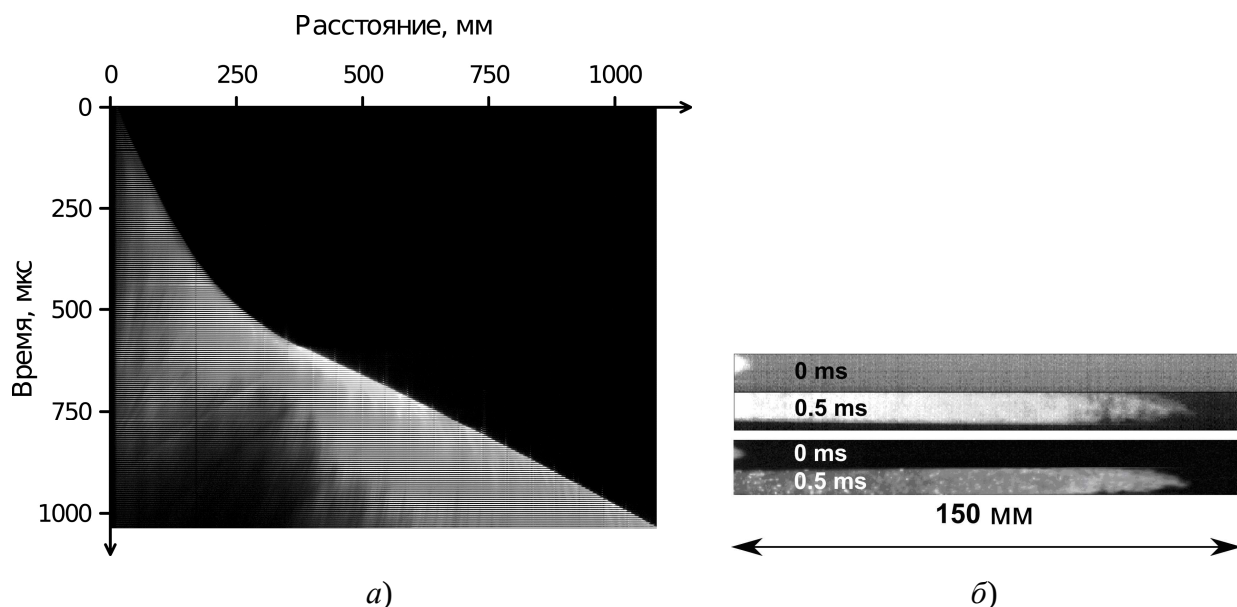


Рис. 2. Пространственно-временная развёртка распространения пламени в стехиометрической смеси ($ER = 1$) в канале с одной стенкой, покрытой крупнозернистой наждачной бумагой (а); совмещение двух последовательных кадров, полученных одновременно в инфракрасном (сверху) и видимом (снизу) оптических диапазонах (б)

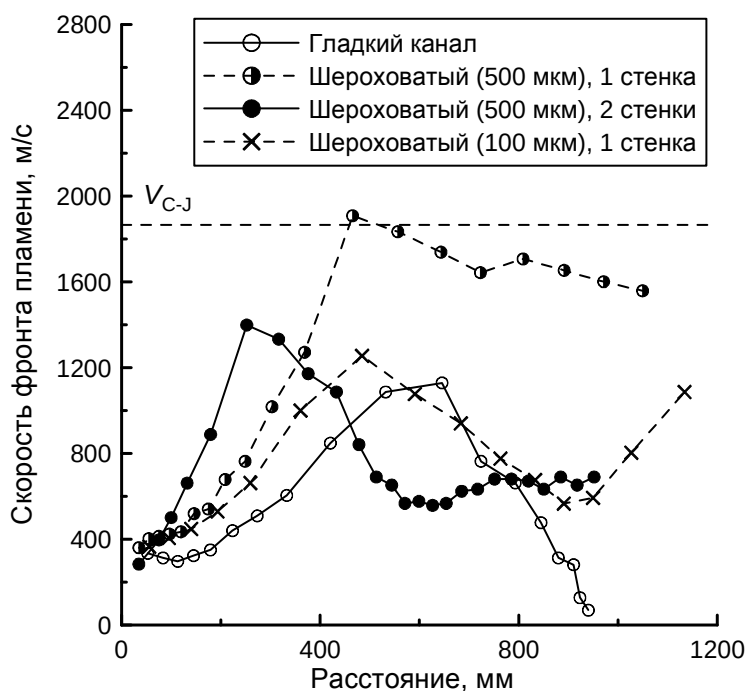


Рис. 3. Зависимость скорости фронта пламени от расстояния в диагностической секции для стехиометрической ($ER = 1$) смеси ацетилена с воздухом в пустом и шероховатых каналах

При проведении экспериментов в диапазоне мольного избытка ацетилена $ER = 0,8–1,4$ установлено, что наибольшее ускорение фронта пламени регистрировалось в канале с одной покрытой стенкой. При $ER = 1$ и $ER = 1,4$ пламя достигало скорости детонации Чепмена–Жуге. Наименьшая скорость пламени регистрировалась в гладком канале. Например, в смеси с $ER = 0,8$ наибольшая скорость пламени составила 400 м/с, в каналах с одной или двумя шероховатыми стенками наибольшая скорость фронта пламени составляла 1500 м/с и 800 м/с соответственно. Когда две стенки канала были покрыты наждачной бумагой, скорость

фронта пламени была выше, чем в гладком канале, но ниже, чем в канале с одной шероховатой стенкой. В канале с двумя шероховатыми стенками наибольшая скорость фронта составляла около 0,75–0,85 от скорости детонации Чепмена–Жуге для смесей с $ER = 0,9–1,4$.

Из рис. 3 видно, что более высокая шероховатость приводит к более значительному ускорению фронта пламени. При этом скорость пламени может достигать детонационных значений. Такое ускорение может быть связано с развитием турбулентного пограничного слоя. При этом одновременное покрытие двух стенок приводит к повышению гидравлического сопротивления потоку, что помимо турбулизации потока приводит к замедлению течения и к снижению скорости фронта пламени [13, 14].

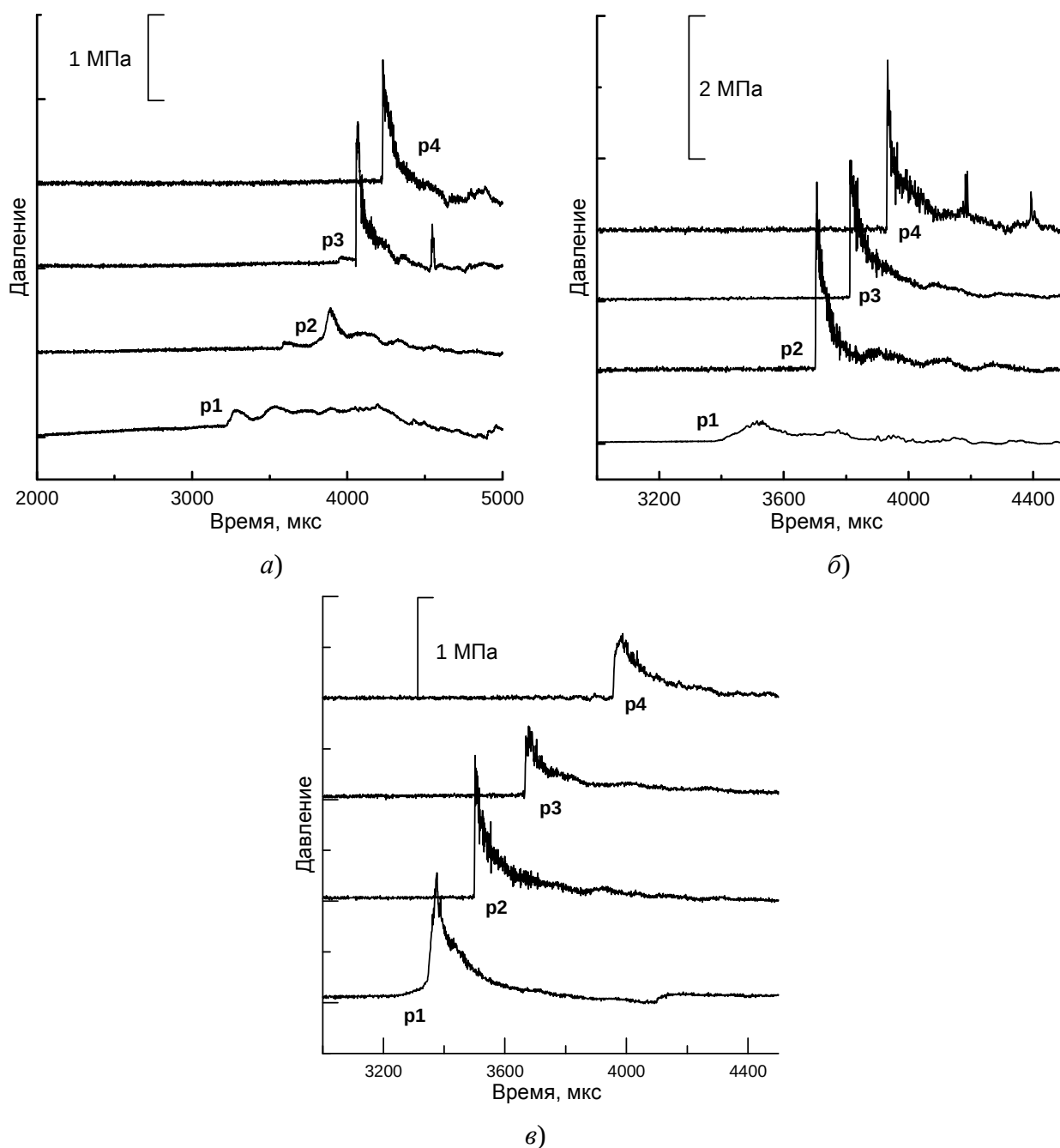


Рис. 4. Осциллограммы давления при распространении фронта пламени в стехиометрической ацетилено-воздушной смеси: *а* – гладкий канал; *б* – канал с одной шероховатой (500 мкм) стенкой; *в* – канал с двумя шероховатыми (500 мкм) стенками

Осциллограммы давления при распространении фронта пламени в стехиометрической ацетилено-воздушной смеси представлены на рис. 4. В гладком канале регистрировалось постепенное повышение давления для датчиков давления p_1 и p_2 , расположенных на расстоянии 200 и 400 мм от начала диагностической секции. Датчики p_3 и p_4 регистрировали ударную волну с перепадом давления 1,5 МПа. В канале, где одна стенка покрыта наждачной бумагой, регистрировалась ударная волна с перепадом давления 2 МПа (p_2 , p_3 , p_4). В канале с двумя покрытыми стенками ударная волна также регистрировалась датчиками давления p_2 , p_3 , p_4 . Однако датчик давления p_4 регистрировал снижение давления до 0,7 МПа. Как видно из сравнения рис. 3 и 4, замедление фронта пламени в гладком канале после 800 мм от начала секции не влияет на давление ударной волны.

Таким образом, на основе проведённых экспериментов можно заключить, что шероховатое покрытие одной стенки канала существенно ускоряет фронт пламени, приводя к формированию детонации в стехиометрической и обогащённых смесях. Однако шероховатое покрытие двух стенок не приводило к значительному ускорению фронта пламени, а наибольшая скорость в этом случае ниже, чем в канале с одной шероховатой стенкой, и не достигает скорости детонации Чепмена–Жуге.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание № 075-01129-23-00).

Литература

1. Ballossier Y., Virof F., Melguizo-Gavilanes J. Flame propagation and acceleration in narrow channels: sensitivity to facility specific parameters // *Shock Waves*. 2021. Vol. 31. P. 307.
2. Щёлкин К.И. Влияние шероховатости трубы на возникновение и распространение детонации в газах // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 1940. Т. 10. № 7. С. 823–827.
3. Щёлкин К.И. Возникновение детонации в газах в шероховатых трубах // *Журнал технической физики*. 1947. 17. С. 613–618.
4. Maeda S., Fujisawa M., Ienaga S., Hirahara K., Obara T. Effect of sandpaper-like small wall roughness on deflagration-to-detonation transition in a hydrogen–oxygen mixture // *Proc. Combust. Inst.* 2019. Vol. 37. P. 3609.
5. Maeda S., Irokawa M., Taneichi D., Obara T. Flame acceleration process and detonation transition in a channel with roughness elements on a wall // *Proc. Combust. Inst.* 2022.
6. Houim R.W., Oran E. Effect of surface roughness on deflagration-to-detonation transition in submillimeter channels // *Proc. 26th Int. Colloq. Dynam. Explos. React. Syst.* 2017. P. 1067.
7. Dziemiska E., Hara Y., Morishita M. Roughness Influence on Flame and Detonation Propagation // *Proc. 26th Int. Colloq. Dynam. Explos. React. Syst.* 2017. P. 1056.
8. Cao W., Ng H., Lee J. Near-limit detonations of methane–oxygen mixtures in long narrow tubes // *Shock Waves*. 2020. Vol. 30. P. 713.
9. Golovastov S.V., Bivol G.Y., Golub V.V. An experimental study of detonation propagation and re-initiation for acetylene–air mixtures in a narrow channel // *Shock Waves*. 2021. Vol. 31. P. 49.
10. Liu Y., Lee J.H., Tan H., Ng H.D. Investigation of near-limit detonation propagation in a tube with helical spiral // *Fuel*. 2021. Vol. 286. P. 119384.
11. Пенязков О.Г., Скилондъ А.В. Влияние пристеночных эффектов на результаты измерений времени индукции смеси $H_2/O_2/Ar$ в ударной трубе // *Горение и взрыв*. 2016. Т. 9. № 1. С. 14–20.
12. Knystautas R. Measurement of cell size in hydrocarbon-air mixtures and predictions of critical tube diameter, critical initiation energy and detonability limits // *Progr. Astronaut. Aero.* 1984. Vol. 94. P. 23.

-
13. Ding S., Huang K., Han Y., Valiev D. Numerical study of the influence of wall roughness on laminar boundary layer flashback // *Phys. Rev. Fluids*. 2021. Vol. 6. P. 023201.
 14. Fay J.A. Two-dimensional gaseous detonations: velocity deficit // *Phys. Fluids*. 1959. Vol. 2. Pp. 283–289.

УДК 536.461

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ САЖИ В ПЛОСКОМ ПЛАМЕНИ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

Е.В. Гуренцов, А.В. Еремин, Р.Н. Колотушкин, Е.С. Ходыко

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Введение

При горении богатых углеводородных смесей в двигателях и камерах сгорания образуется ряд различных углеродосодержащих продуктов, таких как углекислый газ, газообразные полиароматические углеводороды (ПАУ) и твердая конденсированная фаза в виде частиц сажи. Изучение образования и роста последних является актуальной задачей, поскольку частицы сажи имеют ряд практических важных приложений. Во-первых, известно, что частицы сажи, выброшенные в атмосферу, оказывают существенное влияние на тепловой баланс тропосферы, способствуя глобальному потеплению. Во-вторых, из-за малых размеров (порядком сотни нанометров и меньше) частицы сажи могут проникать вглубь дыхательных путей человека, вызывая риск респираторных и сердечно-сосудистых заболеваний. В-третьих, поскольку частицы сажи тесно связаны с горением углеводородных топлив, расчеты тепломассообмена всех камер сгорания и тепловых машин, использующих в качестве топлива углеводороды, должны учитывать свойства сажевых частиц.

Реальные оптические и теплофизические свойства сажевых частиц определяются их внутренней структурой, которая сильно варьируется в зависимости от условий их формирования [1]. Известно, что одним из основных факторов, определяющих структуру образующихся сажевых частиц, является время их нахождения в высокотемпературном реакторе, когда происходит трансформация структуры сажи от зарождающихся аморфных частиц до «взрослых» частиц с высокой степенью графитизации, содержащих кристаллические области с размерами порядка 1 нм. Эти области напоминают структуру графита из 2–4 параллельных слоев, состоящих из крупных полиароматических молекул с числом атомов до 50–60 и около 20 ароматических колец. В нашей работе [2] было показано, что такое изменение структуры сажевых частиц хорошо коррелирует со средним размером первичных частиц, обладающих квазисферической формой. Эти частицы, в свою очередь, объединены в разветвленные или компактные агрегаты различной величины.

Зависимости оптических и теплофизических свойств от среднего размера первичных частиц, полученные в работах [2, 3], указывают на значительный разброс их свойств в зависимости от типа топлива, использованного для синтеза частиц. К сожалению, метод просвечивающей электронной микроскопии, использованный для анализа внутренней структуры сажевых частиц, не позволяет объяснить эту вариативность. Однако это явление может быть исследовано другим методом анализа морфологии конденсированных частиц – спектроскопией комбинационного рассеяния (КР) (или «рамановская спектроскопия»). Известно, что этот спектроскопический метод основан на неупругом рассеянии фотонов на образце (комбинационное рассеяние) и является отличным инструментом для получения подробной информации об электронной и химической структуре любого материала на основе углерода [4].

Таким образом, целью данной работы было изучение свойств сажевых частиц, образующихся в плоском ламинарном пламени, методом спектроскопии комбинационного рассеяния. Отбор частиц в пламени проводился на высотах над срезом горелки, соответствующих конечной стадии роста сажевых частиц и промежуточной стадии, где частицы сажи принято характеризовать как «молодые». Для оценки влияния типа

углеводородного топлива на процесс формирования сажевых частиц было решено использовать два типа углеводородных топлив: этилен (C_2H_4) и ацетилен (C_2H_2).

Экспериментальная установка

В качестве экспериментального реактора для синтеза сажевых наночастиц была использована стандартная горелка плоского пламени типа МакКенна («Holthuis & Associates») с пористой поверхностью из бронзы диаметром 62 мм (рис. 1). Для стабилизации пламени использовался латунный диск диаметром 60 мм и толщиной 20 мм, расположенный на высоте 23 мм над срезом горелки.

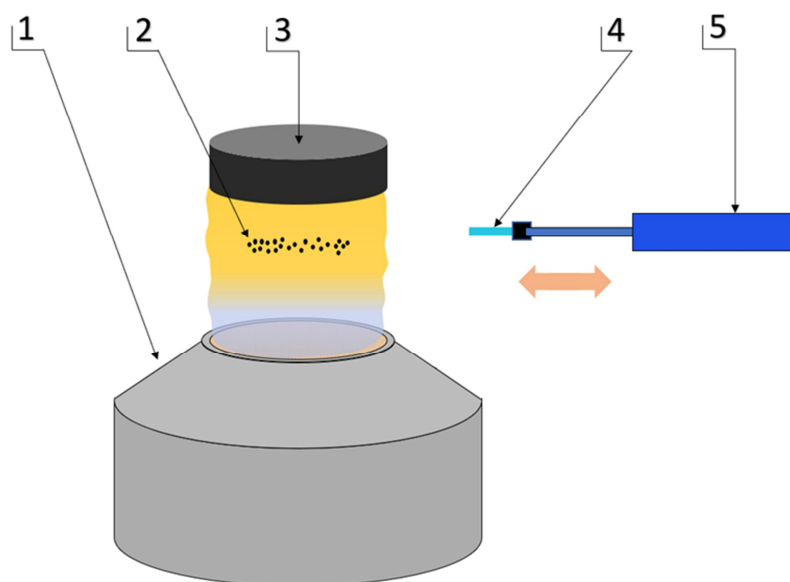


Рис. 1. Плоская горелка предварительного смешения и схема отбора проб сажевых частиц:

- 1 – стандартная горелка типа МакКенна; 2 – частицы сажи, формирующиеся в пламени;
3 – стабилизатор; 4 – кварцевая пластинка; 5 – пневмоцилиндр

Горелка оснащена внешним кольцевым контуром для подачи экранирующего газа (N_2). Этот поток дополнительно стабилизирует пламя и изолирует его от воздействия внешних возмущений. Когда соотношение топлива и окислителя больше стехиометрического, часть топлива расходуется на нагрев смеси в процессе горения, а при пиролизе оставшегося топлива происходит формирование сажевых частиц. В одномерной структуре плоского пламени молярные доли веществ и температура изменяются только в зависимости от высоты над поверхностью горелки. Составы топливных смесей, использованных для анализа данных по внутренней структуре сажевых частиц, представлены в табл. 1.

Как было упомянуто выше, горелка МакКенна формирует одномерное плоское пламя. Высота над срезом горелки при данных условиях является аналогом времени химических реакций, происходящих при горении, в том числе индикатором различных этапов процессов образования и роста сажевых частиц. В рамках данной работы отбор образцов частиц сажи проводился на высотах 5 и 20 мм для пламени этилен–воздух и на высотах 5 и 15 мм для пламени ацетилен–воздух. Предполагалось, что эти высоты соответствуют промежуточному и конечному этапам формирования углеродных наночастиц. Отбор проводился на кварцевые пластинки размером $20 \times 10 \times 1$ мм. Эти пластинки импульсным образом с помощью пневмоцилиндра горизонтально вводились в центр пламени на 2 с (см. рис. 1). Затем вне пламени они остывали в течение 10 с в окружающем воздухе. Данная операция повторялась 50–100 раз с целью накопления достаточного количества исследуемого материала на данной высоте для спектроскопии комбинационного рассеяния.

Таблица 1. Составы смесей в пламенах предварительного смешения, использованных для анализа структуры сажи

Смесь	C_nH_m , %	O_2 , %	N_2 , %	$[C]/[O]$
Этилен–воздух	14,1	18	67,9	0,78
Ацетилен–воздух	13,3	18,4	68,3	0,72

Спектры комбинационного рассеяния образцов сажи измерялись на спектрометре «InVia Reflex» фирмы «Reinshaw». Для возбуждения спектров использовался твердотельный Nd: YAG лазер с длиной волны 532 нм. Мощность излучения, падающего на образец, составляла 5,3 мВт, чтобы не повредить его структуру. При измерениях лазерный луч фокусировался через длиннофокусный объектив $\times 50$ в круглую область диаметром ~ 2 мкм. При измерениях линий КР использовалась дифракционная решетка разрешением 1800 штр/мм, диапазон измерения от 100 до 3600 см^{-1} . В каждой точке накопление сигнала проводилось суммарно в течение 250 с. Прибор был откалиброван по кремниевому стандарту. В общей сложности от 3 до 6 точек случайным образом выбирались на каждом образце для проверки однородности материала. Позднее эти спектры усреднялись для получения статистически значимого спектра комбинационного рассеяния.

Анализ спектров КР

На рис. 2 представлен типичный спектр комбинационного рассеяния образца сажи. Можно заметить две основные особенности, а именно пики D и G, которые доминируют в спектре КР углеродистых материалов [5]. Полоса D при $\sim 1350\text{ см}^{-1}$ активируется связями атомов C в ароматических кольцах. При этом в идеальной гексагональной решетке (например, в графите) она запрещена [6], т. к. для ее активации необходимо наличие дефектов в структуре материала. Полоса G при $\sim 1600\text{ см}^{-1}$ обусловлена каждым атомом углерода sp^2 -гибридизации. Также спектр комбинационного рассеяния помимо пиков D и G имеет непрерывную вертикальную составляющую, увеличивающуюся с ростом сдвига КР и обусловленную наличием дополнительного сигнала фотолюминесценции (штриховая линия на рис. 2).

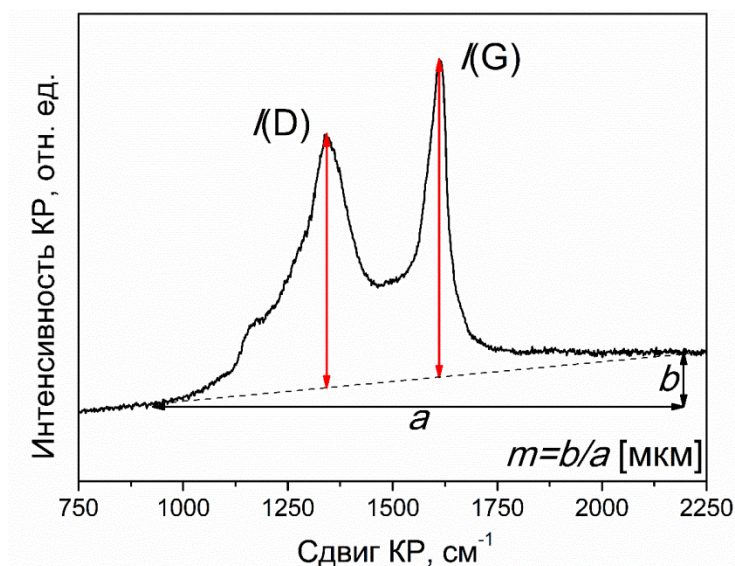


Рис. 2. Усредненный спектр комбинационного рассеяния образца сажи, полученного в пламени ацетилен/воздух на высоте 5 мм. Штриховой линией показан фон фотолюминесценции

Хорошо известно, что отношение интенсивности пиков D и G, $I(D)/I(G)$, может быть выражено как функция размера графеновых плоскостей L_f , составляющих частицу сажи [6]. Эмпирическое выражение для этой зависимости было приведено в работе [5] и имеет следующий вид:

$$L_f^2 [\text{нм}^2] = 5,4 \times 10^{-2} \times (E_L)^4 [\text{эВ}^4] \times I(D)/I(G), \quad (1)$$

где E_L – энергия падающего фотона. Стоит отметить, что $I(D)/I(G)$ определяется с учетом фона фотолюминесценции, как показано на рис. 2.

Вторым важным параметром, который можно определить из спектра КР, является процентное содержание атомов H, характеризующее химическую структуру частиц сажи. Казираги и др. [7] вывели эмпирическое уравнение, которое можно использовать для определения содержания атомов водорода в структуре образца на основе измеренного отношения между интенсивностью фона фотолюминесценции спектра комбинационного рассеяния (m) и интенсивностью полосы $I(G)$ (рис. 2):

$$H[\%] = 21,7 + 16,6 \times \lg\{m/I(G)\}, \quad (2)$$

где $H [\%]$ – доля атомов водорода, из которой можно рассчитать отношение H/C , $m = b/a$.

Результаты

Из измеренных спектров комбинационного рассеяния сажи были определены значения $I(D)/I(G)$. В пламени этилен–воздух они составили 0,66 и 0,82 для высот 5 и 20 мм соответственно. Использование уравнения (1) дает значения размера графеновых плоскостей $L_f = 1,03$ нм для высоты 5 мм и $L_f = 1,15$ нм для высоты 20 мм. Аналогичным образом были получены результаты для ацетиленового пламени: для высоты над срезом горелки 5 мм $I(D)/I(G) = 0,8$, $L_f = 1,13$ нм; для высоты 15 мм $I(D)/I(G) = 0,99$, $L_f = 1,26$ нм. На рис. 3 эти значения L_f сопоставлены со средним размером графеновых плоскостей, полученных с помощью метода просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) [2], а также с результатами исследования [8], где методом КР изучалось схожее пламя этилен–воздух ($[C]/[O] = 0,72$). Размер графеновых плоскостей 1–1,3 нм примерно соответствует молекуле ПАУ циркумкоронену ($C_{54}H_{18}$). Это интересное наблюдение, неплохо согласующееся с результатами работы Ванга [9], где подробно рассмотрен процесс образования зародышей сажевых частиц и показано, что молекулы ПАУ только при достижении размеров циркумкоронена могут образовывать димеры с достаточно прочной связью для выживания в условиях пламени.

Важнейшим результатом данных измерений является заметный рост величины графеновых плоскостей с увеличением высоты пламени. Хорошо известно, что с увеличением высоты пламени изменяется не только структура, но и размер первичных сажевых частиц. С другой стороны, результаты работы [2] говорят о том, что при росте сажевых частиц размер графеновых плоскостей, составляющих их структуру, существенно не изменяется и равен $1,5 \pm 0,1$ нм. Однако результаты спектроскопии КР корректируют этот вывод, показывая, что некоторый рост L_f в процессе роста частиц сажи всё-таки имеет место. Анализируя всю совокупность экспериментальных данных (рис. 3), можно предположить следующее: размер графеновых плоскостей действительно увеличивается в процессе роста сажевых частиц, однако этот размер достигает предельного значения на промежуточном этапе формирования частиц, хотя сами частицы еще продолжают расти в размерах и объеме.

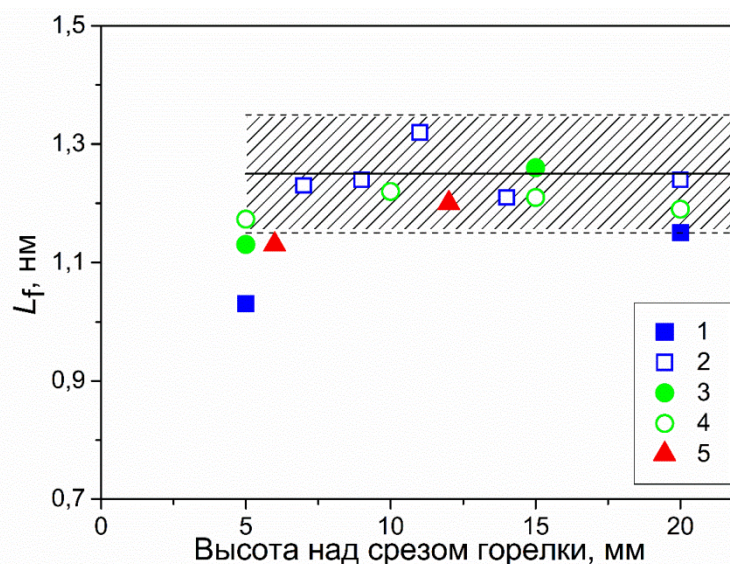


Рис. 3. Средняя длина графеновых плоскостей сажевых частиц в зависимости от высоты пламени над срезом горелки. Результаты получены: 1 – методом КР в пламени этилен–воздух; 2 – методом ПЭМ в пламени этилен–воздух [2]; 3 – методом КР в пламени ацетилен–воздух; 4 – методом ПЭМ в пламени ацетилен–воздух [2]; 5 – методом КР в пламени этилен–воздух ($[C]/[O] = 0,72$) [8]. Заштрихованная область показывает средний размер графеновых плоскостей $1,25 \pm 0,1$ нм из работы [2]

На основании измерений интенсивности фона фотолюминесценции на спектрах КР сажи в пламени этилен–воздух на высотах 5 и 20 мм над срезом горелки были получены значения $m/I(G) = 1,92 \pm 0,05$ мкм и $m/I(G) = 0,56 \pm 0,05$ мкм, что с использованием уравнения (2) позволяет определить среднее значение процентного содержания атомов водорода в частицах сажи $H = 26,4 \pm 0,3\%$ и $H = 17,5 \pm 0,8\%$, соответственно. Такие же измерения были проведены для исследования структуры сажевых частиц, сформировавшихся в пламени ацетилен–воздух, на высотах 5 и 15 мм над срезом горелки. Для высоты над срезом горелки 5 мм были получены значения $m/I(G) = 1,22 \pm 0,05$ мкм и $H = 23,1 \pm 0,4\%$, для высоты 15 мм – $m/I(G) = 0,23 \pm 0,05$ мкм и $H = 11 \pm 1,8\%$.

Атомы Н в структуре сажевых частиц содержатся в виде органического углерода [8]. Наличие включений органического углерода оказывает сильное влияние на структуру и, как следствие, на свойства сажевых частиц (оптические, теплофизические, склонность к окислению и др.). На рис. 4а на основе полученных результатов показано как уменьшается отношение Н/С в процессе роста сажевых частиц с увеличением высоты пламени. Как и на рис. 3, здесь для сравнения добавлены результаты работы [8], где методом КР были определены величины $m/I(G)$ для схожего пламени этилен–воздух ($[C]/[O] = 0,72$). Разница величин Н/С пламен различных топлив достигает максимума в диапазоне высот пламени 15–20 мм и составляет $\sim 50\%$. Такое существенное расхождение во внутренней структуре частиц приводит к разнице в их оптических свойствах. Для сравнения на рис. 4б показана зависимость функции коэффициента преломления на длине волны 1064 нм $E(m, 1064)$ сажевых частиц от высоты пламени, полученная в работе [2] методом ЛИИ при параметрах пламен, полностью эквивалентным параметрам, использованным в данной работе (табл. 1). На рис. 4б величины $E(m, 1064)$ ацетиленовой сажи превосходят значения $E(m, 1064)$ этиленовой сажи на всех участках пламени, где была возможность зарегистрировать сигналы ЛИИ. Поскольку $E(m, 1064)$ напрямую связана с коэффициентом поглощения для частиц в пределе Рэлея, можно сделать вывод, что частицы сажи из пламени ацетилен–воздух

обладают лучшей поглощательной способностью, чем частицы сажи из пламени этилен–воздух, что качественно коррелирует с уменьшением содержания водорода в составе частиц.

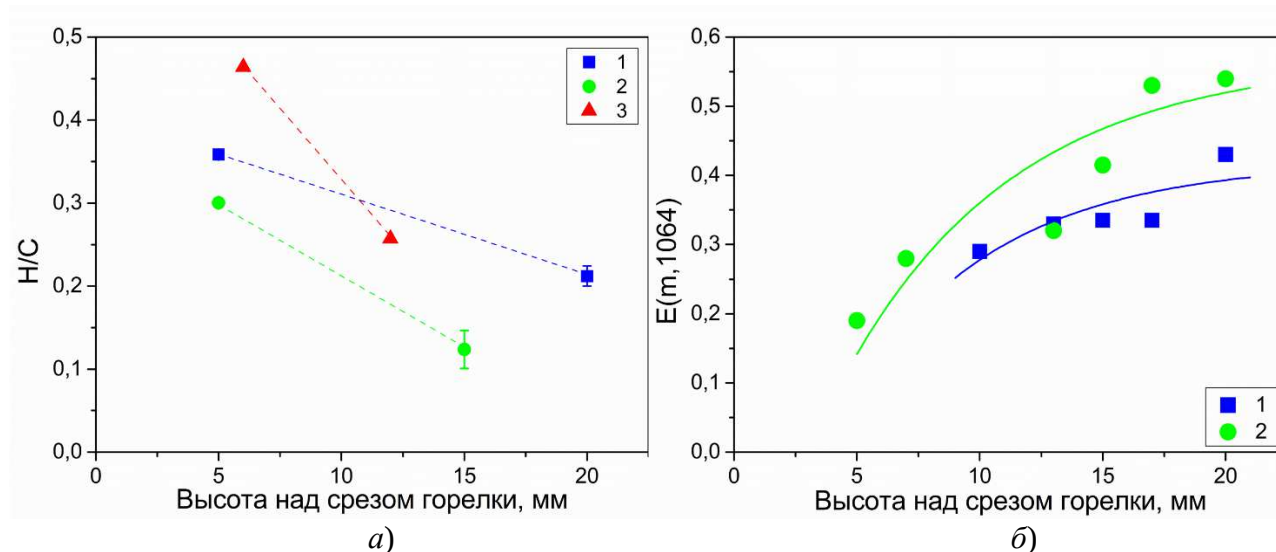


Рис. 4. Изменение свойств сажевых частиц в зависимости от высоты над срезом горелки: *а* – соотношение Н/С; *б* – $E(m, 1064)$ из работы [2]: 1 – пламя этилен–воздух; 2 – пламя ацетилен–воздух; 3 – пламя этилен–воздух ($[C]/[O] = 0,72$) [8]

В работе [2] было показано, что причиной изменения оптических свойств сажевых частиц в процессе их роста является процесс их графитизации: уменьшение среднего расстояния между графеновыми плоскостями и увеличение объема кристаллических областей в структуре частицы сажи, что полностью подтверждается данными спектроскопии КР об увеличении размеров графеновых плоскостей в структуре частиц (см. рис. 3). Более того, результаты спектроскопии комбинационного рассеяния говорят о том, что соотношение Н/С также необходимо учитывать в качестве параметра, влияющего на структуру и свойства сажевых частиц в процессе их роста. Предполагается, что различия в содержании Н и степени его уменьшения в процессе роста частиц напрямую зависят от типа топлива, используемого для синтеза.

Заключение

Методом спектроскопии КР были исследованы сажевые частицы, синтезированные в пламенах этилен–воздух и ацетилен–воздух. Отбор проб образцов проводился на высотах пламени, соответствующих стадиям формирования так называемых «молодых» и «зрелых» частиц.

Было установлено, что графеновые плоскости – базовые элементы структуры сажевых частиц, растут в размерах с увеличением высоты пламени. Для пламени этилен–воздух размер графеновых плоскостей L_f возрастает от 1,03 нм до 1,15 нм, для пламени ацетилен–воздух – от 1,13 нм до 1,26 нм. Эти результаты дополняют данные, полученные ранее методом просвечивающей электронной микроскопии, указывая на процесс увеличения размера графеновых плоскостей L_f на начальных этапах роста сажевых частиц. Размер графеновых плоскостей 1–1,3 нм соответствует полиароматической молекуле циркумкоронена с количеством атомов углерода 54.

Содержание водорода в сажевых частицах также зависит от типа исходного топлива и стадии формирования частиц, определяемой высотой над срезом горелки, и существенно уменьшается с ростом этой высоты. Для пламени этилен–воздух доля Н уменьшается с $26,4 \pm 0,3\%$ до $17,5 \pm 0,8\%$; для пламени ацетилен–воздух – с $23,1 \pm 0,4\%$ до $11 \pm 1,8\%$. Процесс дегидрирования отражает изменение во внутренней структуры сажевых частиц при их росте

и является одним из процессов, характеризующих графитизацию частиц, наряду с увеличением объема кристаллических областей внутри сажевых частиц и уменьшением среднего расстояния между графеновыми плоскостями.

Ацетиленовая сажа демонстрирует более графитизированную структуру, чем этиленовая сажа, что выражается в больших значениях L_f и меньшем содержании Н в процессе роста сажевых частиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 23-19-00407.

Литература

1. Apicella B., Pre P., Alfe M., Ciajolo A., Gargiulo V., Russo C., Tregrossi A., Deldique D., Rouzaud J.N. Soot nanostructure evolution in premixed flames by high resolution electron transmission microscopy (HRTEM) // *Proc. Combust. Inst.* 2015. Vol. 35. Pp. 1895–1902.
2. Gurentsov E.V., Drakon A.V., Eremin A.V., Kolotushkin R.N., Mikheyeva E.Yu. Effect of the size and structure of soot particles synthesized during pyrolysis and combustion of hydrocarbons on their optical properties // *High Temperature*. 2022. Vol. 60(3). Pp. 335–344.
3. Gurentsov E.V., Eremin A.V., Kolotushkin R.N., Khodyko E.S. Correlation of changes in optical properties of soot particles synthesized in a premixed flame with increasing mean particle size // *Bull. Lebedev Phys. Inst.* 2022. Vol. 49(12). Pp. 422–428.
4. Ferrari A.C., Robertson J. Raman spectroscopy of amorphous, nanostructured, diamond-like carbon, and nanodiamond // *Philos. Trans. R. Soc., A*. 2004. Vol. 362. Pp. 2477–2512.
5. Ferrari A.C., Basko D.M. Raman spectroscopy as a versatile tool for studying the properties of graphene // *Nat. Nanotechnol.* 2013. Vol. 8. Pp. 235–246.
6. Tuinstra F., Koenig J.L. Raman spectrum of graphite // *J. Chem. Phys.* 1970. Vol. 53. Pp. 1126–1130.
7. Casiraghi C., Piazza F., Ferrari A.C., Grambole D., Robertson J. Bonding in hydrogenated diamond-like carbon by Raman spectroscopy // *Diamond Relat. Mater.* 2005. Vol. 14. Pp. 1098–1102.
8. Bocchicchio S., Commodo M., Sgro L.A., Chiari M., D’Anna A., Minutolo P. Thermo-optical-transmission OC/EC and Raman spectroscopy analyses of flame-generated carbonaceous nanoparticles // *Fuel*. 2022. Vol. 310. 122306.
9. Wang H. Formation of nascent soot and other condensed-phase materials in flames // *Proc. Combust. Inst.* 2011. Vol. 33(1). Pp. 41–67.

УДК 536.468, 544.454.3, 621.039.587

ВОДОРОДНАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ НА ЭНЕРГБЛОКАХ АЭС**А.В. Дойникова, П.К. Нагула, Д.Л. Третинников**

Государственное научное учреждение
«Объединенный институт энергетических и ядерных исследований – Сосны»
Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

Введение

После аварии на АЭС Фукусима-1 повысилась актуальность проблемы обеспечения водородной взрывобезопасности на энергоблоках АЭС для условий тяжелых аварий.

11 марта 2011 г. в Японии в результате землетрясения и вызванного им цунами произошло полное обесточивание станции (включая потерю работоспособности систем аварийного и резервного электроснабжения), что привело к отказу систем аварийного охлаждения и расплавлению остановленных реакторов. В результате протекания пароциркониевой реакции и взаимодействия расплава кориума с бетоном в защитную оболочку (ЗО) было выброшено большое количество водорода. Именно произошедшие взрывы водорода на энергоблоках в конечном итоге определили разрушение последнего защитного барьера безопасности и значительные выбросы радиоактивных продуктов в окружающую среду [1].

Формально на АЭС Фукусима-1 были предусмотрены системы для минимизации вероятности водородного взрыва. Однако функциональная устойчивость технических средств в условиях тяжелой запроектной аварии оказалась недостаточной для поддержания целостности герметичного ограждения.

Авария на АЭС Фукусима-1 показала, что исключение водородного взрыва или смягчение его последствий является одной из приоритетных проблем безопасности АЭС.

В настоящий момент специалистами научного учреждения «ОИЭЯИ – Сосны» ведутся работы по проведению детерминистического анализа безопасности Белорусской АЭС, включая обоснование водородной безопасности при тяжелых авариях.

Цель работы – выполнить оценку возможности дефлаграции / детонации водородсодержащей смеси в атмосфере под защитной оболочкой Белорусской АЭС при протекании тяжелой запроектной аварии.

Нормативные требования и критерии водородной взрывобезопасности для АЭС

Водородная взрывобезопасность на атомной станции согласно НП-040-02 [2] и документу [3] считается обеспеченной, если:

- при проектных авариях (ПА) исключаются детонация и дефлаграция водородсодержащих смесей (ВСС) в помещениях, расположенных в объеме, ограниченном герметичным ограждением;

- при запроектных авариях (ЗПА) детонация ВСС исключается, а дефлаграция допускается при условии, если локализирующие системы безопасности выполняют функции, определенные проектом атомной станции.

Достаточными условиями дефлаграции и детонации ВСС является критическое сочетание концентраций горючего (водород), окислителя (кислород воздуха) и флегматизатора (водяной пар) при определенном термодинамическом состоянии газовой смеси (давлении и температуре).

При анализе взрывоопасности принято в качестве критерия возникновения условий дефлаграции и детонации ВСС использовать трехкомпонентную диаграмму Шапиро–Моффетти (рис. 1) [4], из которой следует, что критерием безопасности при ПА является состояние атмосферы под ЗО, определенное вне области В; при ЗПА – состояние атмосферы под ЗО, определенное вне области А.

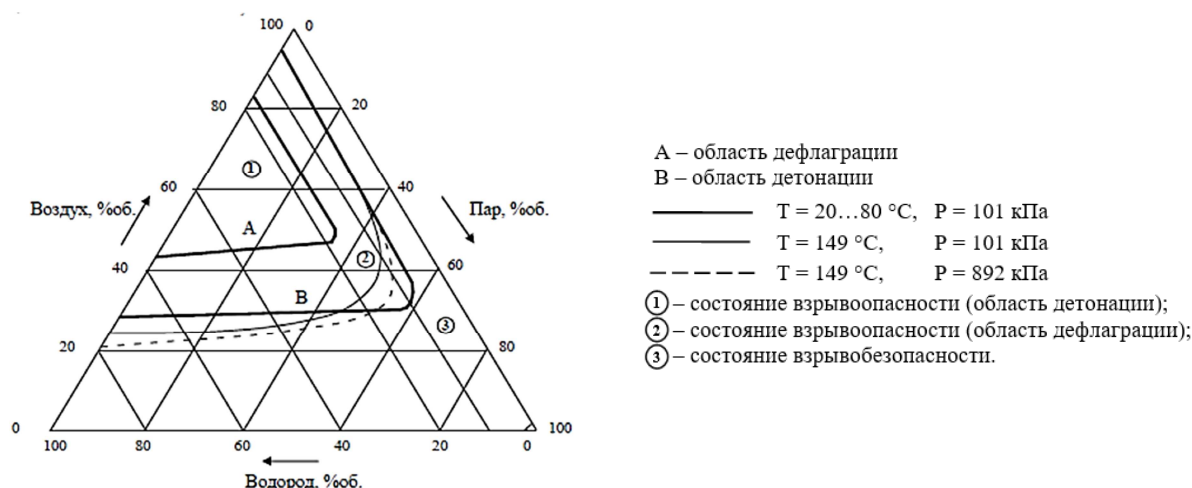


Рис. 1. Треугольная диаграмма Шапиро–Моффетти для смеси водород–пар–воздух

Тогда проектные пределы определяются следующим образом:

- при ПА составляет не более 2 об.% концентрации водорода в среднем по объему ЗО, т. е. 50% от нижнего концентрационного предела распространения пламени (НКПРП);
- при ЗПА определяется одним из трех требований:
 - 1) не более 4% объемной концентрации водорода в сухой атмосфере ЗО;
 - 2) более 8% объемной концентрации водорода при концентрациях водяного пара более 60 об.% и воздуха менее 20 об.% (кислорода менее 5 об.%);
 - 3) в интервале 4–8% объемной концентрации водорода при концентрациях водяного пара менее 60 об.% и воздуха более 20 об.% (кислорода более 5 об.%) должно быть показано отсутствие повреждений систем, важных для безопасности.

Описание системы удаления водорода из ЗО, реализованной на Белорусской АЭС

В настоящий момент в большинстве стран, в том числе в Беларуси и России, обеспечение водородной взрывобезопасности реализуется оснащением АЭС системами удаления водорода при авариях. В системе аварийного удаления водорода, как правило, применяются пассивные каталитические рекомбинаторы водорода (ПКРВ), которые располагаются в местах возможного скопления водорода при авариях.

Принцип действия ПКРВ заключается в рекомбинации водорода с кислородом воздуха на катализаторе, при этом не используется внешний источник энергии. При попадании водорода на поверхность катализатора происходит экзотермическая химическая реакция соединения водорода и кислорода, сопровождающаяся выделением водяного пара и тепла.

Энергия, выделяющаяся в ходе реакции, расходуется на нагрев каталитической поверхности и смеси газов внутри бокса. Такой нагрев приводит к возникновению свободно-конвективного течения, которое ускоряется в тяговом участке, расположенном над областью рекомбинации. В корпусе ПКРВ возникает устойчивый восходящий поток, обеспечивающий непрерывное поступление газовой смеси к катализатору и отвод образующегося водяного пара через перфорацию, выполненную в верхней части корпуса ПКРВ. Нагретая и обедненная водородом газовая смесь, выходящая из верхней части рекомбинатора, способна частично перемешивать газ внутри помещения, в котором установлены ПКРВ. Тем самым снижается риск локального воспламенения горючей смеси.

Пассивные каталитические рекомбинаторы водорода начинают самостоятельно функционировать при образовании в помещении повышенной концентрации водорода и продолжают работать, пока концентрация водорода не снизится до безопасного значения. В остальное время находятся в режиме ожидания в состоянии готовности.

В большинстве существующих конструкций ПКРВ каталитические активные

материалы (обычно платина или палладий) нанесены на несущие элементы – металлические пластины (Siemens / AREVA (Франция)) или пористые керамические элементы с развитой поверхностью контакта: шарики или цилиндры (NIS Ingenieurgesellschaft mbH (Германия); AECL / CNL (Канада); ЗАО ИНПК «РЭТ» (Россия)).

На Белорусской АЭС первоначально согласно разработанному проекту должны были использоваться 44 рекомбинатора фирмы AREVA двух типоразмеров: FR90/1-750T и FR90/1-1500 [5], суммарной производительностью по водороду равной ~188 кг/ч при давлении 0,15 МПа и объемной концентрации водорода 4 об.%. Позднее проектировщиком было принято решение использовать ПКРВ производства АО ИНПК «РЭТ» модели РВК-3 и РВК-4, применяемые на российских АЭС с реакторной установкой (РУ) типа ВВЭР [6]. Катализатор в рекомбинаторах производства этой фирмы устанавливается в металлические рамки и представляет собой цилиндрический стержень из пористого оксида алюминия с нанесенным в поверхностные поры платиновым покрытием. Суммарная производительность 16 рекомбинаторов РВК-3 и 28 РВК-4 при давлении 0,15 МПа и объемной концентрации водорода 4 об.% составляет ~193 кг/ч. Технические характеристики рекомбинаторов представлены в табл. 1.

Таблица 1. Технические характеристики рекомбинаторов Белорусской АЭС

Характеристики рекомбинаторов	AREVA		«РЭТ»	
	FR90/1-750T	FR90/1-1500	РВК-3	РВК-4
Количество рекомбинаторов, шт.	16	28	16	28
Размеры (длина, ширина, высота), мм	800×326×1400	1550×326×1400	850×530×1650	1720×530×1650
Масса, кг	75	125	175	350
Материал корпуса	Нержавеющая сталь			
Материал основы катализатора	Жаропрочная нержавеющая сталь		Оксид алюминия	
Каталитическое покрытие	Pt / Pd субстрат		Pt	
Количество каталитических пластин для AREVA (рамок каталитических для РЭТ), шт.	75	150	480	960
Размер каталитических пластин для AREVA (рамок каталитических для РЭТ), мм	140×290		198×13×80	
Площадь каталитического покрытия, м ²	5,7	11,0	8,4	16,8
Производительность при давлении 0,15 МПа и концентрации водорода 4 об.%, кг/ч	2,4	5,36	2,68	5,36
Стартовая концентрация водорода, об.%	2,0		0,45	
Время выхода на номинальную производительность, с	Не более 100		Не более 180	

Анализ водородной безопасности Белорусской АЭС при протекании тяжелой запроектной аварии

В настоящее время (начиная с 2021 г.) специалистами института ведутся работы по проведению расчетной оценки обоснования безопасности Белорусской АЭС при тяжелых запроектных авариях с помощью программного средства (ПС) COCOSYS. ПС COCOSYS – теплогидравлический реалистический код, предназначенный для расчета термодинамических параметров парогазовой среды в объеме 30 при протекании аварийных процессов с учетом работы систем безопасности. ПС COCOSYS (версия v2.4) была официально передана белорусской стороне немецкими разработчиками GRS (Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit) в рамках международной программы BE/RA/07 «Развитие технического сотрудничества в области ядерной безопасности».

Для расчета параметров под защитной оболочкой с использованием ПК COCOSYS необходимо провести дискретизацию пространства внутри защитной оболочки: разделение всей расчетной области на контрольные объемы (КО). На рис. 2а показана разработанная схема дискретизации ЗО для проведения анализа тяжелых запроектных аварий, состоящая из 120 КО, 253 атмосферных и 133 дренажных соединений, 204 теплообменных структур. В модели ЗО учитывается работа системы пассивного отвода тепла от ЗО (СПОТ ЗО); тепло- и массообмена в межоболочечном пространстве ЗО; системы удаления водорода из ЗО.

При расчетах принималось, что стартовая пороговая концентрация водорода для рекомбинаторов системы удаления водорода принималась равной 2 об.%. Для всех рекомбинаторов задавалось снижение производительности на 10% вследствие возможного отравления каталитических пластин.

В рамках научно-исследовательской работы за 2022 год было выполнено расчетное моделирование протекания тяжелой запроектной аварии с течью Ду179 с отказом активной части системы аварийного охлаждения активной зоны (САОЗ).

В качестве исходного события (ИС) принимается отрыв трубопровода впрыска Ду179, осуществляющего связь компенсатора давления (КД) с напорным участком «холодной» нитки 3-й петли (место разрыва показано на рис. 2б).

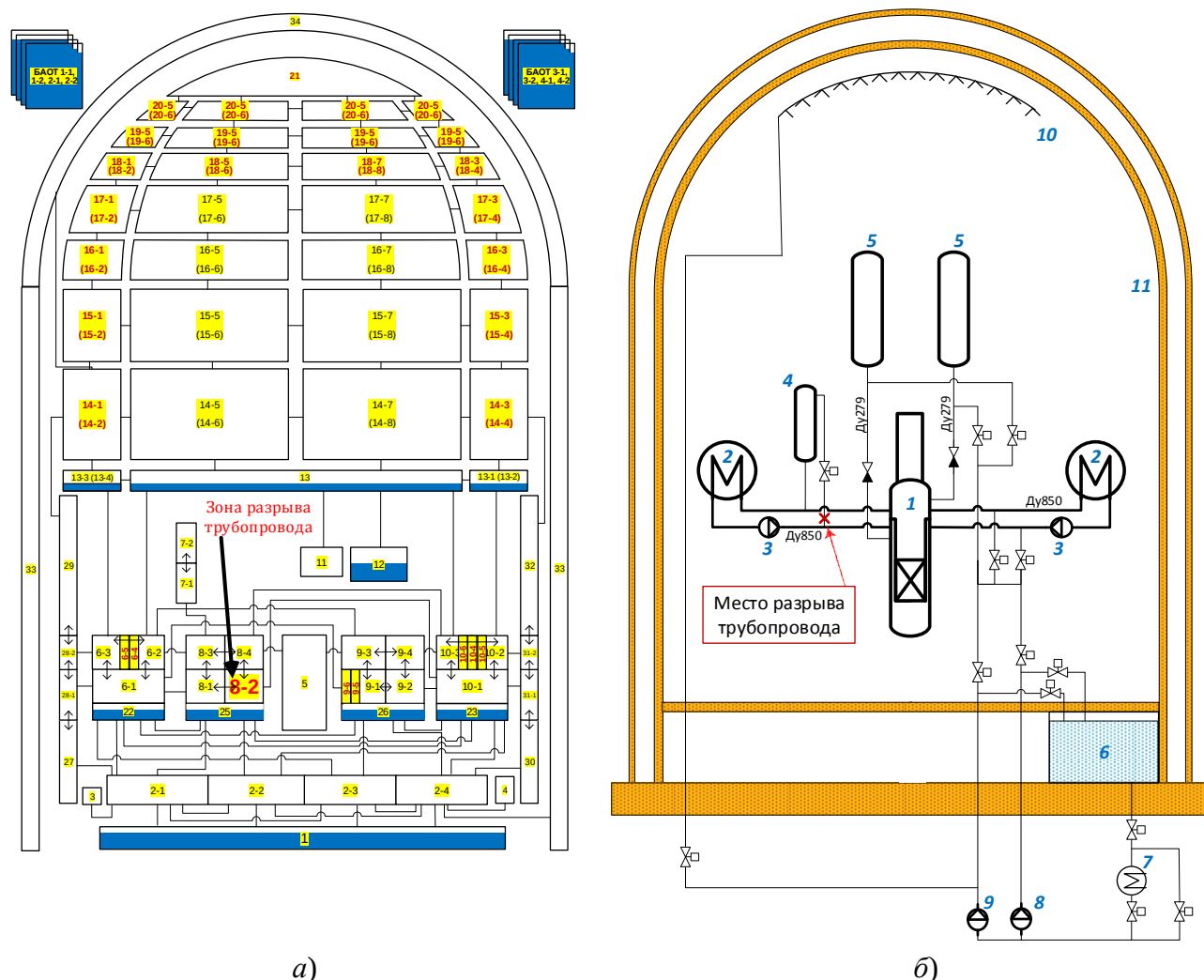


Рис. 2. Схема дискретизации расчетной области ЗО для анализа тяжелых ЗПА (а); упрощенная схема реакторной установки Белорусской АЭС (б): 1 – реактор; 2 – парогенератор (ПГ); 3 – главный циркуляционный насос (ГЦН); 4 – КД; 5 – гидроемкость САОЗ; 6 – бак-приямк борированной воды; 7 – теплообменник САОЗ; 8 – насос САОЗ ВД; 9 – насос САОЗ НД; 10 – спринклерный коллектор с соплами; 11 – защитная оболочка

На ИС по принятым условиям протекания запроектной аварии накладывается отказ всех каналов активной части САОЗ – наносы систем аварийного впрыска высокого и низкого давления (САОЗ НД и САОЗ ВД) на рециркуляцию не запускаются.

Вследствие выброса теплоносителя в течь происходит уменьшение массы теплоносителя в реакторе, опорожнение КД и снижение давления теплоносителя в 1-м контуре. Вследствие образования течи из 1-го контура сработает аварийная защита (АЗ) и вскипает теплоноситель. После срабатывания АЗ (0,9 с) мощность реактора падает до уровня остаточных энерговыделений (2,9 с).

После остановки турбины (5,9 с) отвод тепла осуществляется через 2-й контур системами, сбрасывающими пар в атмосферу: быстродействующей редуцирующей установкой сброса пара в атмосферу (БРУ-А) (10,9 с), системой пассивного отвода тепла через парогенераторы (СПОТ ПГ) (123,1 с).

Временное улучшение условий охлаждения активной зоны и рост уровня теплоносителя в реакторе происходит за счет начала подачи (174,4 с) борированной относительно холодной воды из ГЕ САОЗ в 1-й контур. После прекращения подачи воды из ГЕ САОЗ (420,3 с) снижается уровень теплоносителя в активной зоне и по мере выпаривания воды и осушения активной зоны начинается постепенный рост температур оболочек ТВЭЛОВ. После достижения температуры 650 °С над активной зоной (1472 с) температура оболочек ТВЭЛОВ возрастает до 1200 °С и начинается пароциркониевая реакция с генерацией водорода (1635 с). Нарушается герметичность циркониевых оболочек (2015 с) и летучие продукты деления выходят в 1-й контур. Далее начинается нагрев и расплавление направляющих каналов и поглощающих стержней. Расплав (сталь, карбид бора, циркониевые оболочки ТВЭЛОВ) стекает в нижнюю часть активной зоны (4266 с), он взаимодействует с остатками воды в нижней части корпуса реактора, происходит диспергирование расплава, его доокисление и дополнительный выход пара и водорода через разрыв в атмосферу под ЗО.

Эффективность системы удаления водорода из ЗО представлена на рис. 3а. На графике показаны интегральные выходы водорода в помещения ЗО, масса рекомбинированного водорода и масса водорода, оставшегося в помещениях. Видно, что за расчетное время протекания аварии (6600 с) система рекомбинирует приблизительно около 45% массы водорода, поступившего в атмосферу ЗО через разрыв.

На рис. 3б показаны объемные концентрации водорода в контрольных объемах 8-1, 8-2, 8-3 и 8-4 (см. рис. 2а), моделирующих аварийный отсек парогенераторов (ПГ).

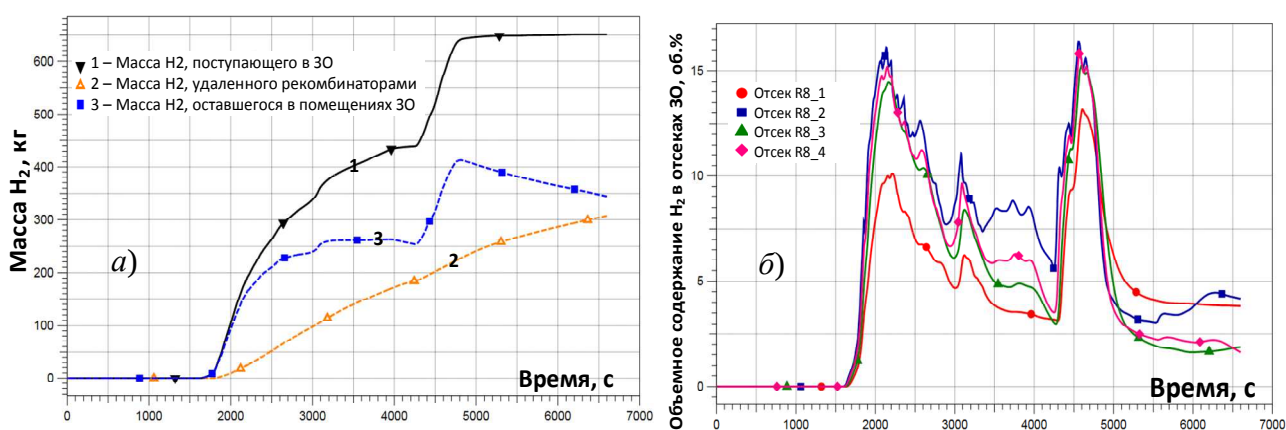


Рис. 3. Графики поступления (1), рекомбинации (2) и накопления (3) водорода в помещениях ЗО АЭС во время аварии (а); концентрация водорода в аварийном отсеке ПГ (б)

Максимальные объемные концентрации водорода (до 17 об.%) достигаются в расчетных объемах аварийного бокса ПГ в моменты пиковых выбросов водорода через

разрыв. После 5000 с с момента начала аварии в помещениях ЗО наблюдается снижение и выравнивание концентраций водорода по объему ЗО, происходящие за счет активного перемешивания среды и работы рекомбинаторов водорода. Расчеты показывают, что в другом отсеке парогенераторов (КО 9-3, рис. 2а) максимальная концентрация водорода составляет 8,8 об.%. В остальных контрольных объемах эта величина не превышает 5 об.% за весь расчетный промежуток 6600 с.

Для анализа возможности дефлаграции/детонации водородсодержащей смеси в атмосфере под ЗО Белорусской АЭС при протекании рассматриваемой тяжелой запроектной аварии на диаграмме Шапиро–Моффетти были построены характерные точки объемных концентраций газов в отсеках ЗО за все расчетное время. В качестве примера полученных результатов на рис. 4 приведены характерные точки для КО над баками приемками (рис. 4а), в неаварийном отсеке ПГ (рис. 4б), в аварийном отсеке ПГ (рис. 4в, г). На представленных трехкомпонентных графиках видно, что точки, характеризующие состояние атмосферы, для всех рассчитанных контрольных объемов лежат вне области А (см. рис. 1), т.е. возможность детонации ВСС на протяжении всего расчетного периода исключена. Результаты расчетов показывают, что в область дефлаграции ВСС (зона В на рис. 1) попадает только контрольный объем 8-2 (рис. 4в), относящийся к аварийному отсеку ПГ, где происходит отрыв трубопровода и через разрыв выделяется основная масса пара и водорода. На рис. 4г диаграмма Шапиро–Моффетти для указанного КО увеличена в масштабе, и на ней отмечены соответствующие временные точки.

На рис. 5 показаны временные зависимости объемной концентрации пара и водорода в аварийном отсеке ПГ – КО 8-2. На начальном этапе развития аварии в КО 8-2 наблюдается резкий рост объемной концентрации пара, связанный с выбросом большого количества теплоносителя 1-го контура через разрыв, который мгновенно вскипает в атмосфере ЗО. Далее количество пара снижается до момента времени $T_{8\sim 4250}$ с за счет конденсации на поверхностях «холодных» строительных конструкций и оборудования, а также вследствие эффективной работы СПОТ ЗО. В момент времени $T_{1\sim 1500}$ с начинается интенсивная пароциркуляционная реакция, объемная концентрация водорода в КО быстро возрастает почти до 17 об.%, однако ввиду большого количества пара (инертизация атмосферы паром) даже при пиковой концентрации водорода дефлаграция исключена. Область возможной дефлаграции ВСС начинается с момента $T_{1\sim 2200}$ с, т.к. количество пара становится ниже 55 об.% с концентрацией водорода выше 14 об.%. Первая область возможной дефлаграции заканчивается в точке $T_{7\sim 4100}$ с, когда количество водорода за счет активного перемешивания водородсодержащей среды и работы рекомбинаторов водорода опускается ниже 7 об. % с относительно высоким содержанием пара ~ 48 об.%.

Вторая область возможной дефлаграции с момента $T_{8\sim 4250}$ с (см. рис. 5) образуется вследствие того, что расплав, образовавшийся в реакторе, стекает в нижнюю часть активной зоны и взаимодействует с остатками воды в нижней части корпуса реактора, что приводит к повторному быстрому росту количества водорода в КО 8-2. Однако во временной точке $T_{9\sim 4400}$ с вторая область заканчивается, т.к. указанный процесс сопровождается также выделением пара, что снижает возможность попадания в область В диаграммы Шапиро–Моффетти даже в момент пиковой концентрации водорода. После точки $T_{10\sim 4650}$ с начинается медленное снижение концентрации пара в КО с существенно более быстрым уменьшением количества водорода, тем самым дальнейшая возможность дефлаграции ВСС в атмосфере аварийного отсека исключается.

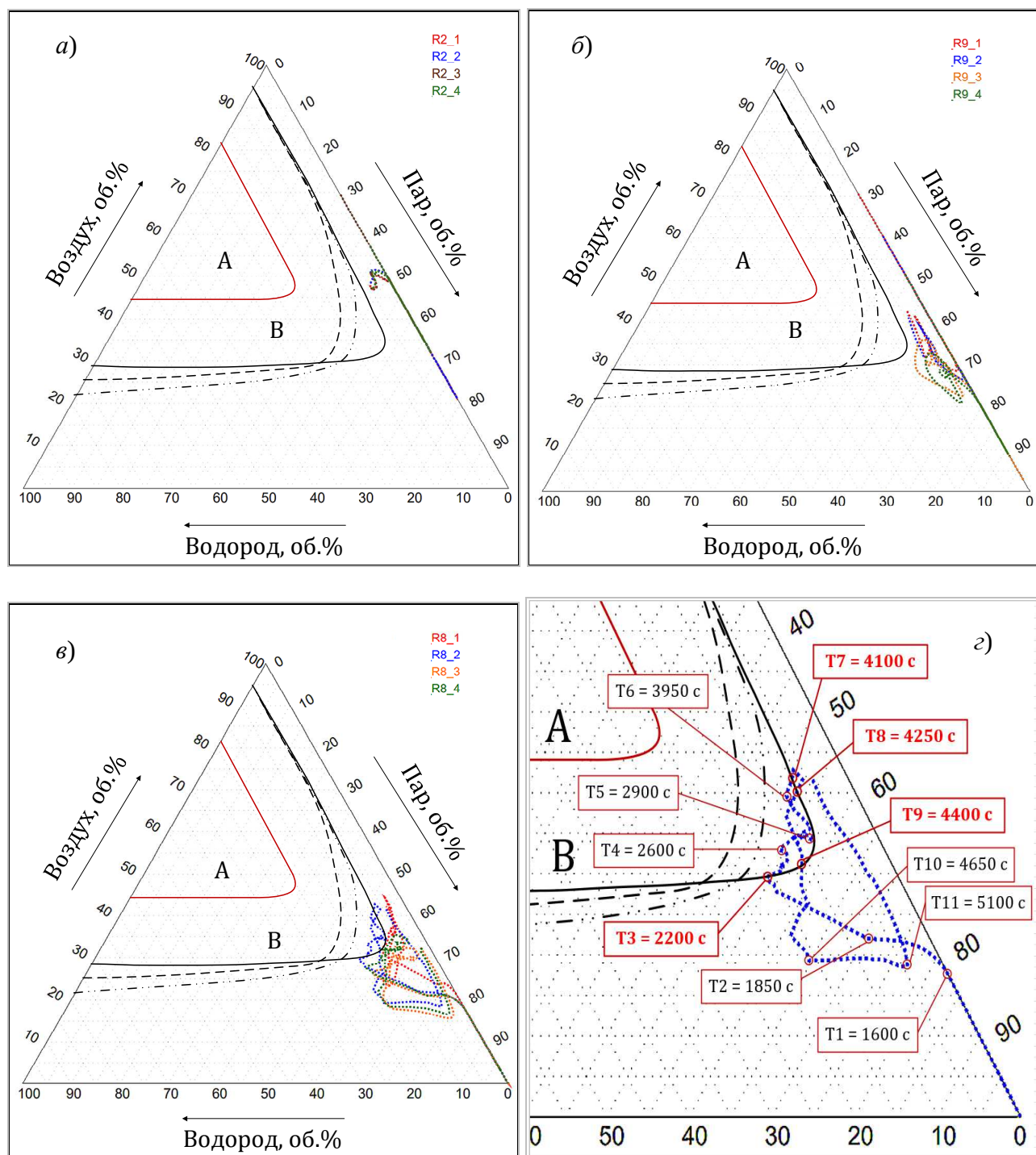


Рис. 4. Точки параметров ВСС в помещениях ЗО: над баками-прямыми (а); во втором отсеке ПГ (б); в аварийном отсеке ПГ (в); в аварийном объеме ПГ (КО 8-2) (г)

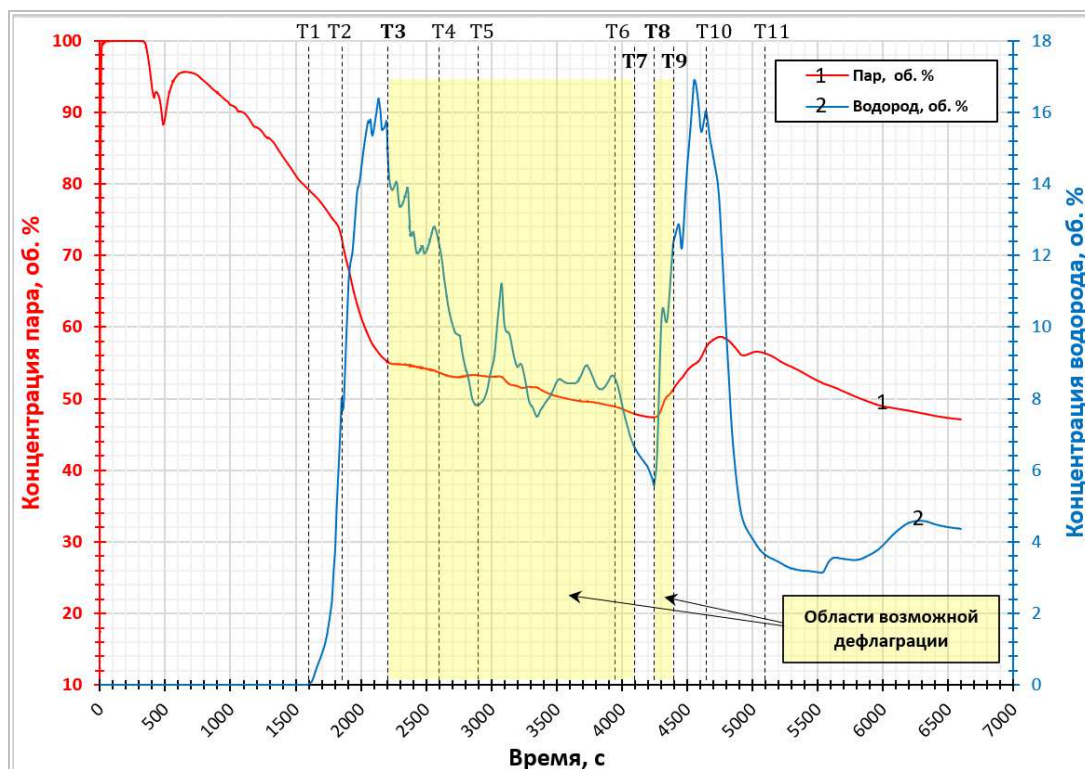


Рис. 5. Концентрация пара (1) и водорода (2) в аварийном отсеке ПГ (КО 8-2)

Заключение

Работа ведется в научном учреждении «ОИЭЯИ – Сосны» в рамках Государственной программы «Наукоемкие технологии и техника» на 2021–2025 гг., подпрограммы 3 «Научное обеспечение эффективной и безопасной работы Белорусской атомной электростанции и перспективных направлений развития атомной энергетики».

Проведена расчетная оценка водородной безопасности Белорусской АЭС при протекании тяжелой запроектной аварии с течью Ду179 с наложением отказа активной части САОЗ. Результаты расчетов показали, что при указанной тяжелой ЗПА детонация водородсодержащих смесей под защитной оболочкой исключается, дефлаграция возможна только в отсеке парогенераторов, в котором происходит разрыв трубопровода. Таким образом, водородная взрывобезопасность на атомной станции согласно «Правил обеспечения водородной взрывозащиты на атомных электростанциях с реакторами типа ВВЭР» считается обеспеченной.

Литература

1. Анализ причин и последствий аварии на АЭС Fukushima как фактор предотвращения тяжелых аварий в корпусных реакторах: монография / В. И. Скалозубов [и др.]; под ред. В. И. Скалозубова – Чернобыль (Киев. обл.): Ин-т проблем безопасности АЭС, 2012. – 280 с.
2. Правила обеспечения водородной взрывозащиты на атомной станции: федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии НП-040-02. – Введ. 01.09.2003. М.: ФБУ «НТЦ ЯРБ», 2003. – 6 с.
3. Правила обеспечения водородной взрывозащиты на атомных электростанциях с реакторами типа ВВЭР: нормы и правила по обеспечению ядерной и радиационной безопасности: постановление М-ва по чрезвычайным ситуациям Респ. Беларусь, 11 мая 2010 г., № 19 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://gosatomnadzor.mchs.gov.by/upload/iblock/05e/postanovlenie_mchs_19.pdf – Дата доступа: 22.05.2023.

4. Shapiro Z.M., Moffette T.R. Hydrogen flammability data and application to PWR loss-of-coolant accident / WAPD-SC-545, Westinghouse Electric Corp. Bettis Plant, Pittsburgh, 1957. – 23 p.
5. AREVA Passive Autocatalytic Recombiner G-008-V3-13-ENGPB / Brochure: AREVA GmbH. Germany, 2013. – 4 p.
6. Анализ и устранение замечаний Ростехнадзора к пассивным каталитическим рекомбинаторам водорода для энергоблоков ВВЭР / А.В. Михальчук [и др.] // Краткие результаты научно-технической деятельности ВНИИАЭС за 2016 год: сб. работ / АО «ВНИИАЭС»; редкол.: Л.М. Воронин (гл. ред.) [и др.]. М.: ВНИИАЭС, 2017. С. 17–26.

УДК 62.611

ГОРЕНИЕ УГЛЕЙ И ШЛАМОВ В ПАРОВОЗДУШНОЙ СРЕДЕ**В.В. Дорохов, О.В. Высокоморная, Г.С. Няшина, П.А. Стрижак**

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Томск, Россия

В настоящее время ископаемое топливо используется для удовлетворения 80% мирового спроса на энергию [1]. Более 27% получаемой энергии вырабатывается за счет сжигания углей [1], вследствие чего в атмосферу выбрасываются оксиды серы (до 55%), оксиды азота (до 25%), диоксид углерода (до 45%), мелкодисперсные летучие частицы золы (до 20%) [2]. Опасность таких веществ для здоровья человека и их влияние на состояние окружающей среды достаточно широко освещены [3]. Одним из вариантов решения проблемы, вызванной высоким уровнем антропогенных выбросов, образующихся при сжигании традиционного угля, является его замещение водоугольными (ВУТ) или органоводоугольными (ОВУТ) топливами [4]. Сжигание водосодержащих топлив на основе угля и отходов углеобогащения характеризуется меньшим уровнем антропогенных выбросов по сравнению с пылеугольным топливом [5]. Такие суспензионные топлива обладают сопоставимыми, а иногда и лучшими энергетическими характеристиками, по сравнению с традиционными видами котельных топлив [5]. Известны результаты исследований [6, 7], в которых вода в виде пара подается в зону сжигания топлив с целью повышения эффективности процесса выработки теплоты и снижения выбросов NO_x и CO . Другим вариантом сжигания является совместная подача частиц твердого топлива и капель воды в камеру сгорания путем впрыскивания через форсунки. Данные варианты применения воды и водяного пара в системах сжигания имеют ряд преимуществ. По сравнению с суспензиями они не требуют существенной модернизации систем подачи топлива на реальных энергетических установках, использование водяного пара в качестве компонента внутритопочной газовой среды позволяет увеличить температуры горения и полноту прогорания топлива, а также снизить длительности и температуры зажигания [6, 8].

Паровоздушная среда оказывает существенное влияние на характеристики горения угольных топлив. Однако целесообразен сравнительный анализ влияния способа создания паровоздушной среды на условия горения частиц твердых топлив. Цель работы – экспериментальное исследование влияния способа подачи воды в камеру сгорания на характеристики горения угольных топлив.

В качестве угольных компонентов выбирались каменный уголь марки «К» (коксующийся) Березовского месторождения Кемеровской области РФ и угольный шлам, полученный при обогащении угля аналогичной марки. Результаты технического и элементного анализа используемых твердых топливных компонентов приведены в табл. 1.

Таблица 1. Технический и элементный анализ топливных компонентов

Компонент	W^a , %	A^d , %	V^{daf} , %	$Q_{s,v}^a$, МДж/кг	C^{daf} , %	H^{daf} , %	N^{daf} , %	S_t^d , %	O^{daf} , %
Уголь	2,05	14,65	27,03	29,76	79,79	4,486	1,84	0,868	12,70
Угольный шлам	43,5	26,46	23,08	24,83	87,20	5,090	2,05	1,022	4,46

На рис. 1 представлена схема стенда, используемого для определения состава дымовых газов при варьировании способа подачи воды и угольного компонента в камеру сгорания. Сжигание исследуемых топлив проводилось в электрической трубчатой муфельной печи Nabertherm R 50/250/13 (внутренний диаметр керамической трубки 0,04 м, длина 0,45 м; диапазон температур 20–1200 °С; температура регулируется по сигналу

встроенной термопары типа S). Для анализа состава газа применялся газоанализатор Test 1, в который установлены электрохимические сенсоры O_2 (диапазон 0–25%, абсолютная погрешность $\pm 0,2\%$), CO (диапазон 0–40000 ppm, относительная погрешность $\pm 5\%$), SO_2 (диапазон 0–1000 ppm, относительная погрешность $\pm 5\%$), NO (диапазон 0–2000 ppm, относительная погрешность $\pm 5\%$), NO_2 (диапазон 0–500 ppm, относительная погрешность $\pm 7\%$), H_2S (диапазон 0–500 ppm, относительная погрешность $\pm 5\%$), HCl (диапазон 0–2000 ppm, относительная погрешность $\pm 5\%$). Дополнительно газоанализатор оснащен оптическими сенсорами CO_2 (диапазон 0–30%, приведенная погрешность $\pm 2\%$), CH_4 (диапазон 0–30%, приведенная погрешность $\pm 5\%$), CO (диапазон 0–30%, приведенная погрешность $\pm 5\%$) и полярографическим сенсором H_2 (диапазон 0–5%, абсолютная погрешность $\pm 5\%$). В состав прибора входят модульный зонд, конденсатосборник и система фильтрации для осушения и очищения газовой пробы. Для подачи топлива в камеру сгорания использовался координатный механизм, управление которым осуществлялось через компьютер. На него устанавливалось программное обеспечение Test 1, которое позволяло в режиме реального времени отслеживать изменение концентраций антропогенных газов в процессе горения. Подробное описание экспериментальной методики приведено в [9].

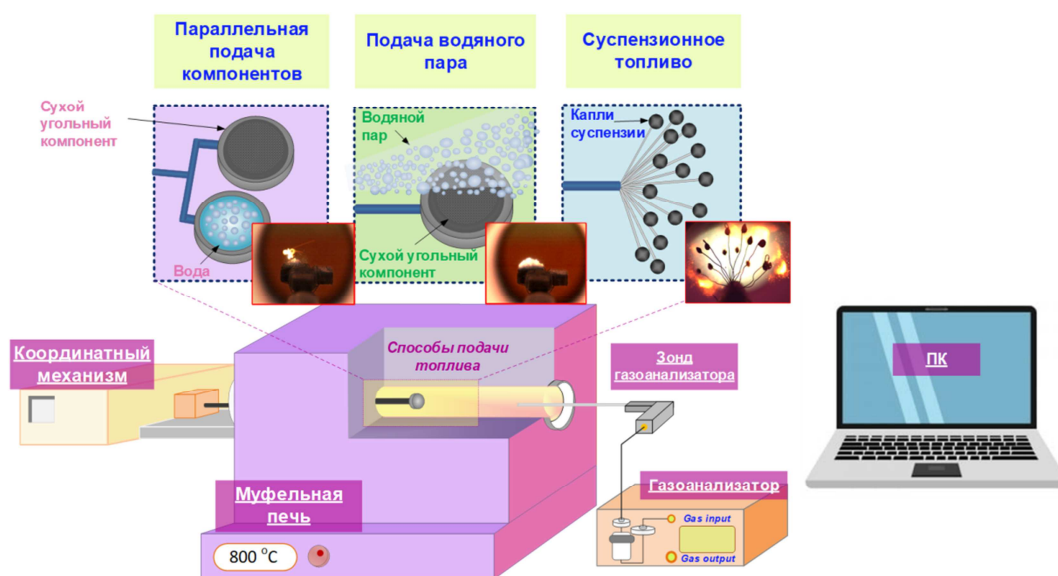


Рис. 1. Схема экспериментального стенда

Экспериментально установлено, что процесс горения исследуемых топлив характеризовался несколькими стадиями. К ним относились сушка и пиролиз топлива, газофазное горение парогазовой смеси, гетерогенное горение твердого коксового остатка.

На рис. 2 представлены установленные по результатам экспериментов зависимости времени задержки газофазного зажигания исследуемых топлив от температуры в камере сгорания. Максимальные времена задержки зажигания зарегистрированы при подаче воды в виде капель, расположенных рядом с частицами угля/шлама на подложке. Полученный результат обусловлен тем, что значительная доля энергии затрачивалась на нагрев и испарение жидкости и последующий нагрев паров (удельная теплоемкость которых вдвое выше, чем у воздуха). При подаче частиц твердого топлива в камеру сгорания, насыщенную водяным паром, зарегистрирована наименьшая инерционность зажигания. По сравнению с горением угля и шлама в воздухе времена задержки газофазного зажигания снижались на 27–50% и 25–59%, соответственно. Этот результат иллюстрирует, что высокая теплоемкость воды в виде связки с твердыми угольными частицами оказывает положительное влияние на прогрев, пиролиз и газофазное зажигание топлив. Аккумулируемая энергия в тонком слое

воды в приповерхностном слое капли суспензии способствует локальному довольно существенному нагреву твердых частиц угля. Последние пиролизуются, формируется парогазовая смесь в малом приповерхностном слое вблизи частиц угля и капли суспензии. Данная смесь имеет высокую концентрацию горючих газов и достаточно высокую температуру, при которой инициируется газофазное горение. Данный процесс приводит к повышению температуры поверхности топлива, не только усиливает выход летучих, но и прогревает твердый каркас, который впоследствии воспламеняется, инициируется гетерогенное горение. Водяной пар интенсивно поглощает тепловое излучение. Этот эффект играет определяющую роль в данной системе. Впрыск водяного пара в камеру сгорания несколько снижает температуру газовой среды в окрестности частиц топлива, но за счет поглощения излучения последняя довольно быстро восстанавливается и затем растет. Если же использовать капли водяной суспензии, то интенсивное реагирование топлива на начальном этапе происходит интенсивно в малом приповерхностном слое. Поэтому существенного снижения температуры не происходит. Приповерхностные слои капли водяной суспензии интенсивно прогреваются, инициируется газофазное и затем гетерогенное горение.

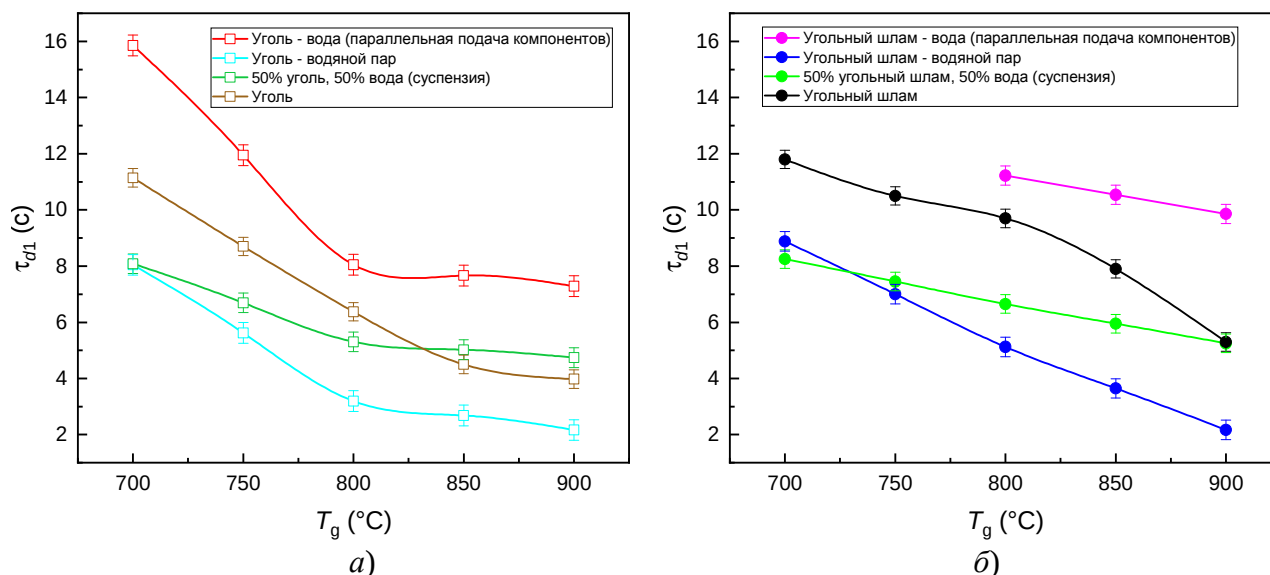


Рис. 2. Времена задержки газофазного зажигания топлив на основе каменного угля (а) и угольного шлама (б) при варьировании способа подачи компонентов и температуры в камере сгорания

На рис. 3 представлены установленные в проведенных экспериментах зависимости максимальных температур горения коксового остатка при изменении температуры в камере сгорания. Наименьшим значением максимальной температуры горения во всем исследуемом диапазоне характеризуется топливная суспензия на основе угольного шлама, что связано с меньшей теплотой сгорания. В свою очередь, при использовании параллельной подачи компонентов либо при создании паровоздушной атмосферы в камере сгорания максимальные температуры горения топлив повышались и становились сопоставимыми с температурами топлив, реагирующих в воздушной среде. Это объясняется тем, что при интенсивном парообразовании увеличивается скорость диффузии кислорода в зоне горения и, соответственно, возрастает скорость реакции термического разложения углеродного остатка, приводя к увеличению температуры в зоне реакции. Однако, несмотря на отличия, разница в значениях максимальных температур горения не превышала 5%. Это обусловлено тем, что основной компонент этих топлив был идентичным (уголь и угольный шлам), его

характеристики в большей степени определяют максимальную температуру горения твердой части, чем внешней парогазовой среды.

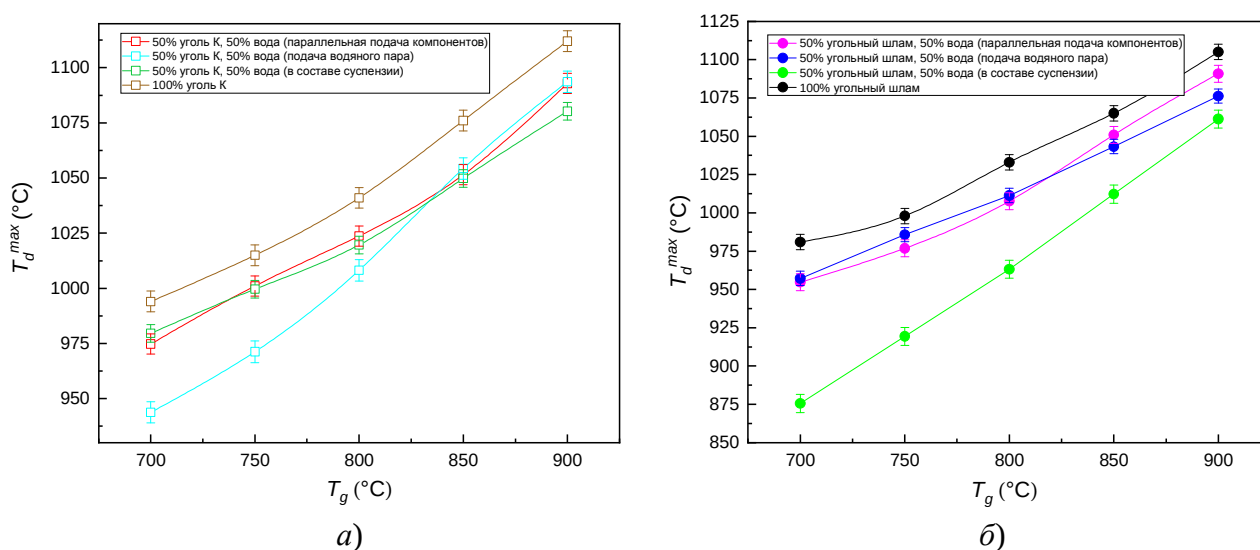


Рис. 3. Максимальные температуры горения топлив на основе каменного угля (а) и шлама (б) при варьировании способа подачи компонентов и температуры в камере сгорания

На рис. 4 представлены зависимости относительного показателя выгорания топлива от температуры в камере сгорания, который вычислялся по формуле

$$\bar{m} = \frac{m_0 - m_1}{m_0} \cdot 100\%, \quad (1)$$

где m_0 – начальная масса образца, а m_1 – масса несгоревшего остатка.

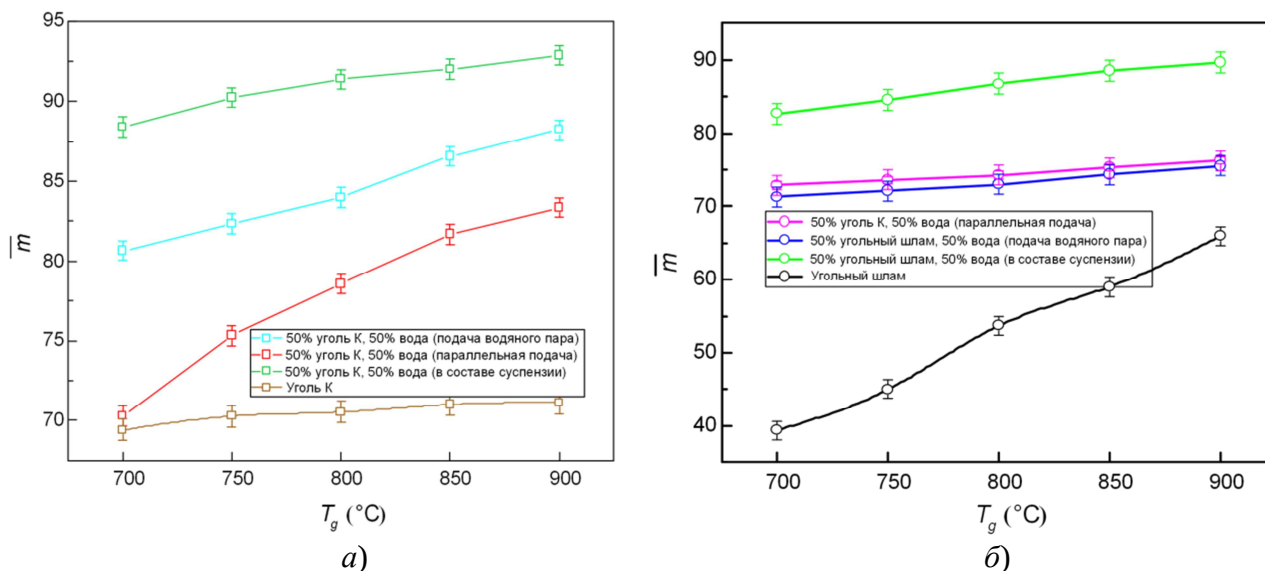


Рис. 4. Относительный показатель полноты реагирования топлив на основе каменного угля (а) и шлама (б) при варьировании схемы подачи компонентов и температуры в камере сгорания

В соответствии с выражением (1) можно отметить, что чем выше значение $\bar{m}$, тем интенсивнее выгорает топливо. Полученные значения относительных показателей выгорания (рис. 4) достаточно хорошо согласуются с данными по влиянию температуры в печи на длительность горения топлив. Полнота выгорания повышалась с ростом температуры. Максимальная скорость выгорания зарегистрирована при реагировании суспензионных топлив на основе угольного шлама и каменного угля. Как и в случае с длительностями горения, данный эффект обусловлен равномерным нагревом и прогоранием капель топлива. По сравнению с углем и угольным шламом, реагирующим в воздухе, показатель выгорания суспензионных топлив увеличивался на 21–23% и 26–52% соответственно. В целом при сравнении двух угольных компонентов можно заключить, что показатель выгорания для угля до 15% выше, чем для угольного шлама ввиду высокой зольности последнего (табл. 1). Важным результатом можно считать то, что создание паровоздушной среды посредством испарения рядом расположенной воды или впрыска пара позволяет увеличить степень выгорания угольного топлива до 46%, причем для угольного шлама данный эффект более заметен (особенно в низкотемпературной области).

Рис. 5 иллюстрирует зарегистрированные тренды (на примере угольного шлама) изменения концентраций оксидов серы при варьировании способа сжигания топлива.

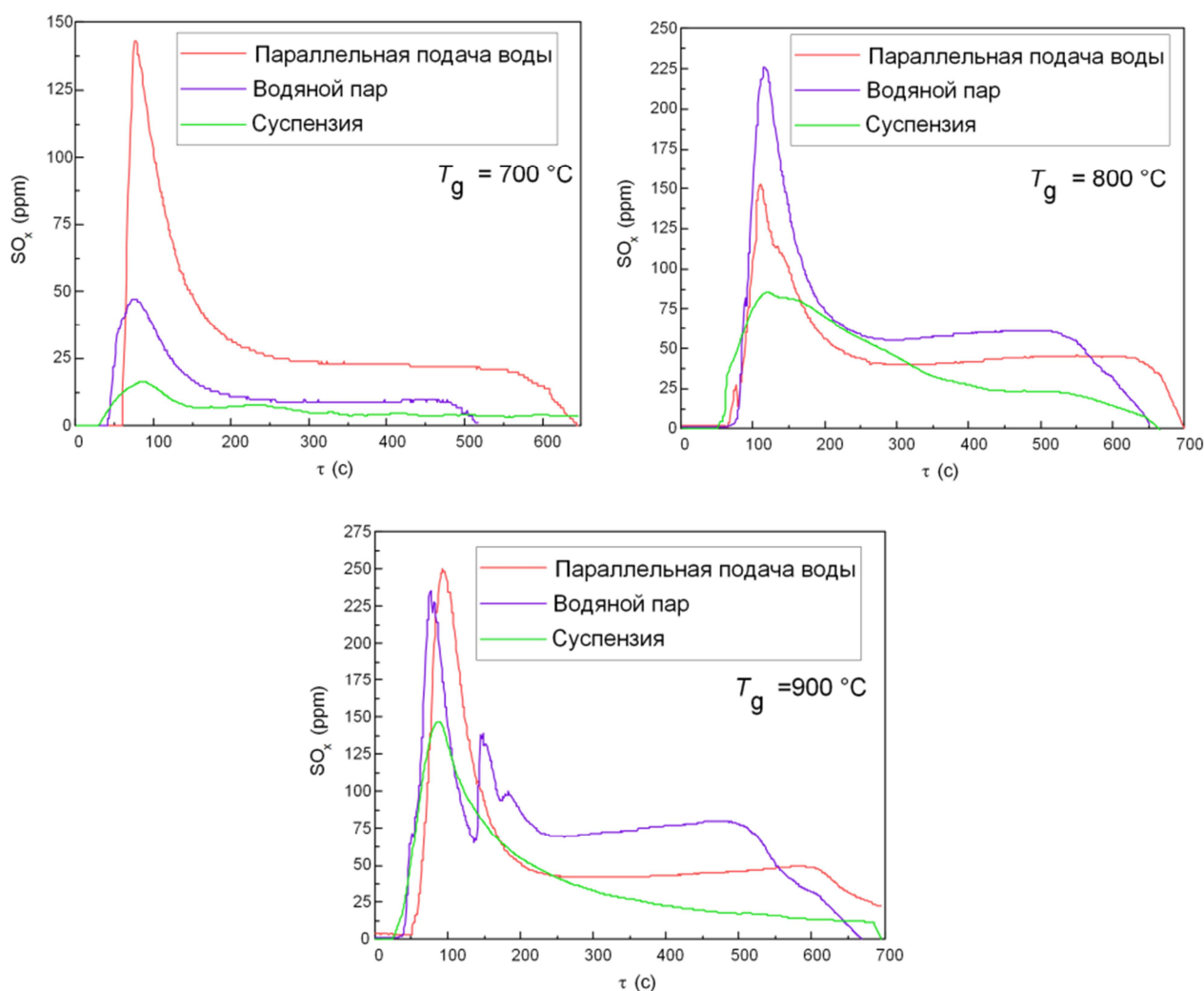


Рис. 5. Тренды изменения концентраций оксида серы при варьировании способа сжигания угольного шлама и воды

На стадии выхода летучих веществ (газофазное горение, интервал времени 50–150 с) зарегистрированы максимальные концентрации оксидов серы, после чего они снижались. Показано, что при горении шлама в составе суспензий данные амплитуды минимальны. Наличие пара, напротив, интенсифицировало данный процесс. Зарегистрированы достаточно высокие концентрации оксидов серы на данной стадии. Максимальные выбросы SO_x возрастают до 7 раз относительно сжигания суспензии. Отмечено, что на стадии гетерогенного горения (интервал времени 200–700 с) концентрации оксидов серы при использовании пара выше, чем при параллельной подаче компонентов, в результате чего средние концентрации выше. Однако при впрыске пара длительность выделения газа ниже, чем в случае испарения воды, располагающейся рядом на подложке.

Для определения наиболее эффективного топлива с учетом полученных энергетических и экологических характеристик вычислены значения относительных показателей эффективности. Использовался метод взвешенных сумм, состоящий из нескольких этапов [10]. Выбиралось наилучшее значение по каждому из регистрируемых параметров. Затем значения всех параметров нормировались относительно наилучшего значения, показатель эффективности которого в результате был равен единице. Для задержки газофазного и гетерогенного зажигания, температуры зажигания и концентраций антропогенных выбросов наилучшим значением являлось минимальное в серии. Для коэффициента выгорания и максимальной температуры горения в качестве наилучшего выбиралась максимальная величина в серии. На заключительном этапе относительный показатель эффективности рассчитывался как:

$$A_n = \sum w_j \cdot x_{ij}, \quad (2)$$

где w_j – весовой коэффициент каждого параметра, x_{ij} – нормализованное значение параметра.

Сумма всех весовых коэффициентов составляла единицу. В рамках настоящего исследования все весовые коэффициенты принимались равными. Наилучшим при таком подходе является топливо, показатель эффективности которого (A_n) максимален. Во всем исследованном диапазоне температуры в печи значения полученных коэффициентов для суспензии превышали аналогичные значения для топлив, сжигаемых в паровой и воздушной среде, на 7–35% и 34–47% соответственно. Данный результат обосновывает высокую перспективность сжигания топливных суспензий, особенно на основе угольных шламов, вследствие возможности существенного снижения времени газофазного и гетерогенного зажигания, минимальных температур зажигания, концентраций антропогенных газов, а также потерь из-за неполного выгорания.

С целью иллюстрации вклада каждой составляющей в коэффициент A_n на рис. 6 приведена векторная диаграмма для топлив на основе шлама, так как при сравнении двух угольных компонентов при температурах 800 и 900 °С именно суспензии на основе шлама характеризовались наибольшими показателями эффективности. Согласно полученным данным (рис. 6) видно, что шесть из восьми рассмотренных относительных показателей для суспензии характеризуются максимальными значениями. Площадь поверхности на векторной диаграмме для суспензии больше, чем для двух других рассмотренных способов сжигания шлама и воды. Наибольший вклад в отмеченное увеличение вносят показатели по задержкам гетерогенного зажигания (τ_{d2}), показатель выгорания ($\bar{m}$) и выбросам оксидов углерода.

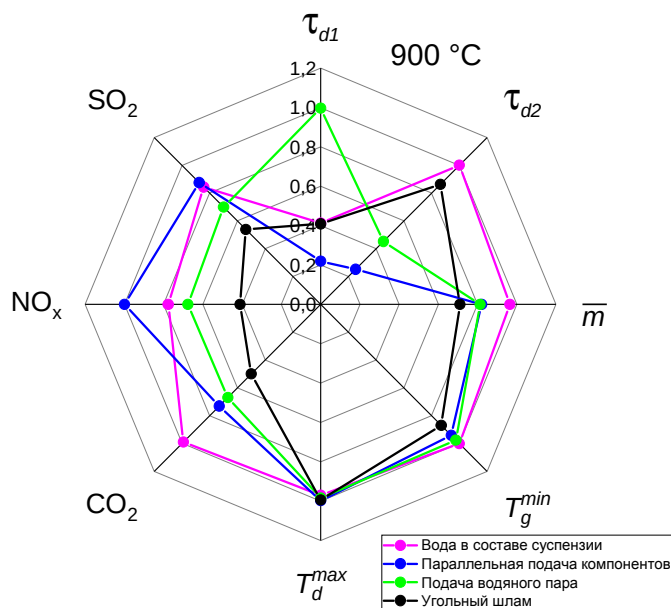


Рис. 6. Показатели эффективности исследуемых способов сжигания угольного шлама и воды (при температуре в камере сгорания 900 °С)

Выводы

- Создание паровоздушной атмосферы в камере сгорания значительно влияет на характеристики процесса реагирования угольных топлив, в том числе низкорекреационных. При впрыске водяного пара в камеру сгорания зарегистрированы наименьшие значения времени задержек газовой фазы зажигания.

- Паровоздушная среда позволяет увеличить степень выгорания угольных топлив до 46%. Установлено, что с экологической точки зрения наиболее перспективным оказался способ использования воды в составе суспензии. Средние концентрации CO_2 , NO и SO_2 снизились на 19–53%, 9–28% и 30–78%, соответственно, относительно отдельной подачи воды на подложке и в виде пара.

- Вычисленные значения комплексных показателей эффективности показали, что наиболее предпочтительной схемой сжигания угольных топлив является создание водосодержащих суспензий на их основе. Совокупный показатель, объединяющий энергетические и экологические характеристики сжигания для суспензии, на 7–47% выше, чем для других рассмотренных вариантов. Наибольшая эффективность зафиксирована для суспензий на основе шлама для температур от 800 до 900 °С.

Исследование выполнено при поддержке проекта Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение 075-15-2020-806/7) и проекта Приоритет-2030-НИП/ЭБ-038-375-2023.

Литература

1. International Energy Agency. Key World Energy Statistics. 2020.
2. Wang C., Feng Q., Mao Q., Wang C., Li G., Che D. Oxy-fuel co-combustion performances and kinetics of bituminous coal and ultra-low volatile carbon-based fuels // Int. J. Energy Res. 2021. Vol. 45. Pp. 1892–1907.
3. Munawer M.E. Human health and environmental impacts of coal combustion and post-combustion wastes // J. Sustain. Min. 2018. Vol. 17. Pp. 87–96.
4. Wan G., Yu J., Wang X., Sun L. Study on the pyrolysis behavior of coal-water slurry and coal-oil-water slurry // J. Energy Inst. 2022. Vol. 100. Pp. 10–21.

5. Jianzhong L., Ruikun W., Jianfei X., Junhu Z., Kefa C. Pilot-scale investigation on slurring, combustion, and slagging characteristics of coal slurry fuel prepared using industrial wasteliquid // *Appl. Energy*. 2014. Vol. 115. Pp. 309–319.
6. Escudero A.I., Aznar M., Díez L.I. Oxy-steam combustion: The effect of coal rank and steam concentration on combustion characteristics // *Fuel*. 2021. Vol. 285. Article No. 119218.
7. Yi B., Zhang L., Huang F., Mao Z., Zheng C. Effect of H₂O on the combustion characteristics of pulverized coal in O₂/CO₂ atmosphere // *Appl. Energy*. 2014. Vol. 132. Pp. 349–57.
8. Lei K., Zhang R., Ye B., Cao J., Liu D. Combustion of single particles from sewage sludge/pine sawdust and sewage sludge/bituminous coal under oxy-fuel conditions with steam addition // *Waste Manag.* 2020. Vol. 101. Pp. 1–8.
9. Akhmetshin M.R., Nyashina G.S., Strizhak P.A. Normalizing anthropogenic gas emissions from the combustion of industrial waste as part of fuel slurries // *Fuel*. 2022. Vol. 313. Article No. 122653.
10. Vershinina K., Dorokhov V., Romanov D., Nyashina G., Kuznetsov G. Multi-Criteria Efficiency Analysis of Using Waste-Based Fuel Mixtures in the Power Industries of China, Japan, and Russia // *Appl. Sci.* 2020. Vol. 10. Article No. 2460.

УДК 53.044, 544.43

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПАУ И САЖИ ПРИ ПИРОЛИЗЕ УГЛЕВОДОРОДОВ

А.В. Еремин, В.Н. Золотаренко, М.Р. Коршунова, Е.Ю. Михеева

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Введение

Результаты исследований образования углеродных наночастиц и их предшественников имеют широкий диапазон как прикладных, так и фундаментальных применений. Полиароматические углеводороды (ПАУ) – основные предшественники сажи, которые по современным представлениям образуются при горении и пиролизе различных видов топлив, их выбросы загрязняют атмосферу и представляют опасность для здоровья человека. В то же время сажа является коммерческим продуктом, мировое производство которого оценивается в сотни млн тонн/год. Для описания сажеобразования активно разрабатываются кинетические модели [1], которые, в свою очередь, нуждаются в различных экспериментальных данных для валидации. В настоящее время накоплено большое количество экспериментальных работ по исследованию процессов образования ПАУ и сажи в условиях горения. Однако при работе реальных устройств могут возникать условия пиролиза, например, ввиду недостатка/неравномерного распределения окислителя, или при попадании топливной смеси на относительно холодные стенки конструкций, поэтому изучение процессов образования ПАУ и углеродных наночастиц в условиях пиролиза имеет фундаментальную и практическую значимость.

Изучение процессов образования ПАУ и углеродных наночастиц интересно не только с точки зрения развития кинетических моделей сажеобразования, но и для поиска новых видов топлив, снижающих вредные выбросы в атмосферу. Поэтому другая актуальная сторона исследований сажеобразования – рассмотрение влияния добавок биотоплив на процесс образования ПАУ и сажи. Среди различных видов биотоплив выделяют класс кислородсодержащих (оксигенатов). Работы исследователей показывают [2], что кислородсодержащие добавки в некоторых условиях приводят к уменьшению сажеобразования. Данный факт объясняется тем, что присутствие кислорода увеличивает эффективность процессов окисления, а также снижает количество атомов углерода, участвующих в росте сажи, посредством их «удаления» из цепи роста и образования оксидов CO и CO_2 . В работе [3] отмечается, что химическая структура молекулы играет важную роль в ее эффективности снижения образования сажи, помимо этого условия пиролиза могут качественно менять эффект сажеподавления биотопливной добавки.

Целью данной работы являлось изучение процессов образования ПАУ и углеродных наночастиц сажи в условиях пиролиза с добавками кислородсодержащих биотоплив. В качестве модельного углеводорода был выбран этилен C_2H_4 , он широко применяется для исследований процессов сажеобразования в пламенах и ударных трубах [4, 5], поскольку среди легких углеводородов он по совокупности характеристик является наиболее удобным для проведения таких исследований, а детальные кинетические механизмы иерархически строятся на кинетике легких C_1 – C_3 углеводородов. В качестве добавок были выбраны кислородсодержащие вещества различной химической структуры, рассматривающиеся как биотоплива [2]: спирты (метанол CH_3OH и бутанол C_4H_9OH), линейные эфиры (диметиловый (ДМЭ) CH_3OCH_3 , диэтиловый (ДЭЭ) $C_2H_5OC_2H_5$ и диметоксиметан (ДММ) $CH_3OCH_2OCH_3$) и циклические эфиры (фуран C_4H_4O и тетрагидрофуран (ТГФ) C_4H_8O).

Экспериментальная установка и оптические методы диагностики

В качестве установки, воспроизводящей условия пиролиза, в данной работе использовалась ударная труба стандартной конструкции диафрагменного типа. Измерения проводились за отраженными ударными волнами (ОУВ), параметры за ОУВ (давление и температура) определялись при помощи измерения скорости падающей ударной волны (ПУВ) по пьезоэлектрическим датчикам давления. Исследовательские смеси готовились манометрическим способом и разбавлялись аргоном (94–97,5% разбавления). Составы исследованных смесей представлены в таблице 1.

Таблица 1. Состав исследовательских смесей и параметры проведенных экспериментов.

Газовая смесь	Давление за ОУВ, P_{OUB} , атм	Температура за ОУВ, T_{OUB} , К
5% C_2H_4 + 95% Ar	2,4–3,6	2030–2500
5% C_2H_4 + 1% CH_3OH в Ar	3,0–3,6	2030–2510
5% C_2H_4 + 1% C_4H_9OH в Ar	2,9–3,5	2010–2435
4% C_2H_4 + 1% CH_3OCH_3 в Ar / 5% C_2H_4 + 1% CH_3OCH_3 в Ar	3,0–3,7 / 2,6–3,4	1705–2550 / 2025–2610
2,5% $C_2H_5OC_2H_5$ в Ar	2,7–3,5	2000–2380
4% C_2H_4 + 0,5% $C_2H_5OC_2H_5$ в Ar / 5% C_2H_4 + 1% $C_2H_5OC_2H_5$ в Ar	3,0–3,8 / 2,3–3,1	1650–2355 / 2095–2660
4% C_2H_4 + 0,7% $C_3H_8O_2$ в Ar / 5% C_2H_4 + 1% $C_3H_8O_2$	2,9–3,8 / 2,6–3,5	1685–2305 / 1985–2455
5% C_2H_4 + 1% C_4H_4O в Ar	2,5–3,4	1890–2550
2,5% C_4H_8O в Ar	3,1–4,2	1490–2410
4% C_2H_4 + 0,5% C_4H_8O в Ar / 5% C_2H_4 + 1% C_4H_8O в Ar	3,2–4,0 / 2,7–3,4	1725–2055 / 2120–2510

В качестве методов исследований формирования ПАУ и углеродных наночастиц на ударной трубе применялись различные оптические диагностики методами лазерно-индуцированной флуоресценции (ЛИФ), лазерной экстинкции и лазерно-индуцированной инкандесценции (ЛИИ). Схема их реализации представлена на рис. 1.

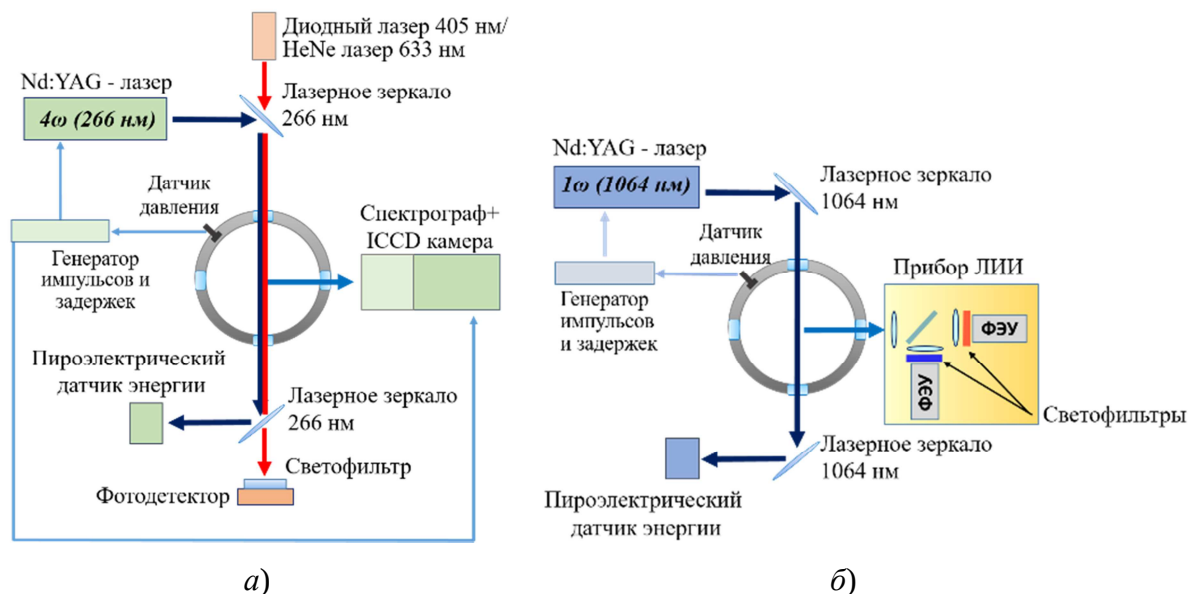


Рис. 1. Схема оптической диагностики методом ЛИФ (а – зеленые элементы), лазерной экстинкции (а – оранжевые элементы) и ЛИИ (б)

Наличие в молекулах ПАУ π -связей позволяет использовать для их диагностики метод лазерно-индуцированной флюоресценции: спектры ЛИФ ПАУ основаны на π^* – π переходах, с ростом молекулы ПАУ уменьшается разница между энергиями орбиталей основного и электронно-возбужденного уровней, что расширяет их полосы поглощения и смещает полосы излучения в сторону более длинных волн. Поскольку регистрируемый сигнал ЛИФ представляет собой сумму сигналов от различных компонент, концентрация которых неизвестна, а спектры различных соединений ПАУ перекрывают друг друга, такие измерения носят только качественный характер. Достоинство измерений ЛИФ в ударно-трубной постановке – возможность широкого варьирования температуры, давления и концентраций, а также измерений, соответствующих разным стадиям протекания химических реакций. Последнее осуществляется при помощи синхронизации регистрирующей оптической системы с моментом прохождения ОУВ. Для возбуждения флюоресценции ПАУ использовался Nd:YAG лазер с длиной волны 266 нм с плотностью энергии 20 мДж/см², регистрация сигналов флюоресценции осуществлялась при помощи системы, состоящей из спектрометра ACTON SP 150, выделяющего определенную область спектра, и электронно-оптической ICCD камеры K008UV. Длительность накопления сигнала ЛИФ составляла 300 нс, включая импульс лазера. Интерпретация полученных сигналов строилась на зависимости положения спектра флюоресценции молекул ПАУ от их размера: например, центр ЛИФ молекул ПАУ 1-2 колец находится в диапазоне 280–360 нм, 3-4 колец – в диапазоне 350–400 нм и т. д. [6].

Для контроля начала появления крупных ПАУ (5 и более колец) и конденсированной фазы углеродных наночастиц применялся метод лазерной экстинкции. Для этого излучение от диодного или HeNe лазеров ($\lambda = 405$ и $\lambda = 633$ нм соответственно), проходящее через исследовательское сечение ударной трубы, фокусировалось на фотодетектор THORLABS PDA10A-ES с временем нарастания сигнала 10 нс, оснащенный узкополосным интерференционным светофильтром для подавления сигнала теплового излучения реагирующей газовой смеси. Предполагалось, что на длине волны 405 нм зондирующее излучение поглощали крупные ПАУ и углеродные наночастицы, а на 633 нм – углеродные наночастицы. Как мера поглощения зондирующего излучения в данной работе использовалась величина оптической плотности реагирующей среды D , определяемая соотношением

$$D = \frac{\ln(I_0/I_t)}{c * l}, \quad (1)$$

где I_0 , I_t – падающий и прошедший сигнал лазерного излучения; c – концентрация атомов углерода в смеси; l – длина оптического пути.

Поскольку экстинкция на длине волны 633 нм принадлежит формирующимся углеродным наночастицам, при помощи измерений временного профиля экстинкции можно определить периоды индукции появления конденсированной фазы углерода. Строя температурную зависимость периодов индукции в координатах Аррениуса, по углу наклона кривой при помощи зависимости (2) можно определить эффективную энергию активации начальных реакций пиролиза исследуемой смеси:

$$\frac{1}{\tau_{\text{инд}}} = A \exp\left(-\frac{E_{\text{эфф}}}{RT}\right) * c^{-1}, \quad (2)$$

где $\tau_{\text{инд}}$ – период индукции появления конденсированной фазы; A – предэкспотенциальный множитель; $E_{\text{эфф}}$ – эффективная энергия начальных реакций пиролиза; R – универсальная газовая постоянная; T – температура; c – концентрация атомов углерода в смеси.

Количественные измерения размеров углеродных наночастиц методом ЛИИ производились путем регистрации их время-разрешенного сигнала теплового излучения, и его последующей аппроксимации расчетной зависимостью. Для индуцирования теплового излучения использовался Nd:YAG лазер на длине волны 1024 нм с плотностью энергии 100 мДж/см², а для регистрации сигналов – прибор ЛИИ, состоящий из двух ФЭУ с узкополосными интерференционными светофильтрами на длинах волн 450 нм и 670 нм. Расчетная зависимость сигналов ЛИИ строилась при помощи модели ЛИИ, основанной на решении уравнений сохранения энергии и массы для сферической частицы и учитывающей процессы лазерного нагрева и конвективного, радиационного охлаждения, а также охлаждения испарением. Измерения сигналов ЛИИ проводились через 1,5 мс после прохождения фронта ОУВ. Помимо метода ЛИИ для определения размеров образующихся углеродных наночастиц применялся метод отбора проб и их анализа на просвечивающем электронном микроскопе (ПЭМ). Результаты, полученные при помощи метода ПЭМ, сопоставлялись с результатами, полученными методом ЛИИ.

Кинетическое моделирование

Численное моделирование использовалось для оценки изменения температуры вследствие протекания химических реакций в течение эксперимента, установления путей химических реакций роста ПАУ и анализа влияния кислородсодержащих биотопливных добавок на процессы сажеобразования при пиролизе этилена. Моделирование проводилось в программе *OpenSMOKE++* [7] с кинетической моделью CRECK, в рамках которой процессы формирования тяжелых газофазных ПАУ и твердых сферических углеродных наночастиц описываются при помощи дискретного секционного подхода [4]. Расчет проводился в 0-мерном реакторе постоянного объема.

Основные результаты

Результаты измерений ЛИФ ПАУ. Полученные спектры ЛИФ ПАУ в «модельной» смеси 5% C_2H_4 этилена показали, что на начальных стадиях пиролиза максимум спектра находится в области 320 нм в диапазоне температур $T_{OUB} = 1770–2000$ К, что говорит о формировании преимущественно легких (1-2 кольца) ПАУ. С увеличением времени задержки измерений, соответствующей более поздним стадиям протекания химических реакций, спектр сдвигался в область 350–400 нм, что отражает формирование ПАУ большего размера (3-4 кольца). Добавки биотоплив (исследованные смеси: 4% C_2H_4 + 1% CH_3OCH_3 , 4% C_2H_4 + 0,5% $C_2H_5OC_2H_5$, 4% C_2H_4 + 0,7% $C_3H_8O_2$, 4% C_2H_4 + 0,5% C_4H_8O) привели к увеличению размеров образующихся молекул ПАУ и ускорению появления крупных (5 и более колец) ПАУ: зарегистрированные спектры имели более широкие максимумы и наблюдался сигнал в спектральной области 400–600 нм.

Результаты измерений лазерной экстинкции. При измерениях лазерной экстинкции на длинах волн 405 нм и 633 нм были получены температурные зависимости оптической плотности исследованных смесей на временах реакции 1 и 1,5 мс. Для «модельной» смеси 5% C_2H_4 этилена было получено, что с увеличением времени реакции величина оптической плотности на 405 нм меняется незначительно, в то время как на длине волны 633 нм увеличивается в 3 раза. Данный факт свидетельствует о том, что крупные молекулы ПАУ формируются быстрее, чем углеродные наночастицы, и ко времени 1,5 мс количество сформировавшихся углеродных наночастиц существенно возрастает. Отметим, что кинетическое моделирование показывает существенное падение температуры на 300–400 К в течение времени измерений при пиролизе смеси этилена из-за теплопоглощения на его распад, это приводит к сдвигу температурного максимума оптической плотности в область $T \approx 1800$ К.

Полученные температурные зависимости оптической плотности (с учетом падения температуры) при времени измерений 1 мс на 405 нм показали, что исследованные добавки:

диметилловый CH_3OCH_3 , диэтиловый $\text{C}_2\text{H}_5\text{OC}_2\text{H}_5$ эфиры, диметоксиметан $\text{CH}_3\text{OCH}_2\text{OCH}_3$ и тетрагидрофуран $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$, привели к сдвигу максимумов оптической плотности в область меньших температур, что свидетельствует об ускорении формирования крупных ПАУ в смесях с добавками биотоплив (рис. 2а). Измерения оптической плотности на 633 нм в смесях с перечисленными добавками показали существенное возрастание величины оптической плотности в 3 раза (рис. 2б), что говорит о большем количестве образующихся углеродных наночастиц в смесях с добавками биотоплив. Однако те же измерения при времени 1,5 мс показывают, что количественного эффекта от добавок нет, и они лишь ускоряют формирование как крупных ПАУ, так и конденсированной фазы углерода. Измерения оптической плотности на 633 нм при времени измерений 1 мс в смесях с добавками спиртов: метанола CH_3OH и бутанола $\text{C}_4\text{H}_9\text{OH}$, показали сдвиг температурных зависимостей в область меньших температур (рис. 2б), что свидетельствует об ускорении формирования углеродных наночастиц. С увеличением момента измерений количественного эффекта не было, несмотря на увеличение концентрации углерода в исследовательских смесях.

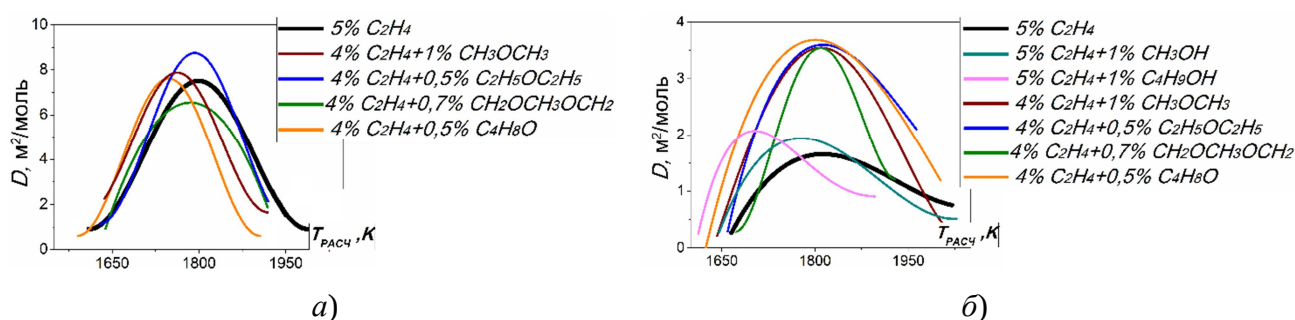


Рис. 2. Температурные зависимости оптической плотности на длине волны 405 нм (а) и 633 нм (б) при времени измерений 1 мс, построенные от вычисленной температуры $T_{\text{расч}}$ (черным – смесь 5% C_2H_4 , цветным – смеси с добавками). Кривые – аппроксимации наборов экспериментальных точек

В серии измерений поглощения в смеси чистого фурана 1% $\text{C}_4\text{H}_4\text{O}$ уровень оптической плотности был выше, чем в «модельной» смеси этилена, что свидетельствует о его высокой склонности к сажеобразованию в условиях проведенных экспериментов. Стоит отметить, что склонность к сажеобразованию также показали диэтиловый эфир и тетрагидрофуран: при пиролизе чистых смесей биотоплив были зарегистрированы сигналы поглощения на длинах волн 405 нм и 633 нм.

Результаты измерений размеров углеродных наночастиц методом ЛИИ. Размеры углеродных наночастиц, определенные методом ЛИИ при времени измерений 1,5 мс для смеси этилена, находились в диапазоне 7–18 нм (рис. 3).

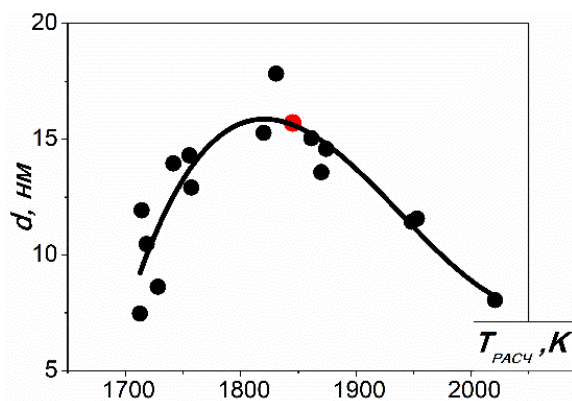


Рис. 3. Температурная зависимость размеров углеродных наночастиц, полученная в смеси 5% C_2H_4 при времени измерений 1,5 мс, построенная от вычисленной температуры $T_{\text{расч}}$

Максимум размеров частиц приходится на температурную область $T_{PACЧ} \approx 1800$ К. Средний размер частиц, определенный при помощи метода ПЭМ, составил 15,7 нм (отмечено красной точкой на рис. 3), что хорошо согласуется с результатами измерений методом ЛИИ. Уменьшение размеров в области $T_{PACЧ} = 1850\text{--}2000$ К предположительно связано с увеличением количества центров нуклеации, что приводит к формированию большего числа частиц, но меньших размеров. Добавки спиртов привели к увеличению размеров углеродных наночастиц в области низких температур, линейные эфиры не оказали влияния на размеры, а циклические эфиры, в частности фуран, увеличили размеры в области высоких температур, а тетрагидрофуран увеличил размеры во всем температурном диапазоне.

Результаты измерений периодов индукции появления конденсированной фазы углерода. Измерения температурных зависимостей периодов индукции появления конденсированной фазы углерода позволили определить значение эффективной энергии активации начальных реакций пиролиза исследованных смесей. Было получено, что для модельной смеси этилена данное значение составляет 49 ± 8 кДж/моль. Ее величина соответствует характерной реакции пиролиза этилена: $C_2H_4 + H = C_2H_3 + H_2$. Все исследованные добавки не оказали влияния на значение энергии активации – полученные значения находятся в диапазоне погрешности измерений, однако привели к уменьшению периодов индукции появления конденсированной фазы (рис. 4), что отражает эффект промотирования сажеобразования.

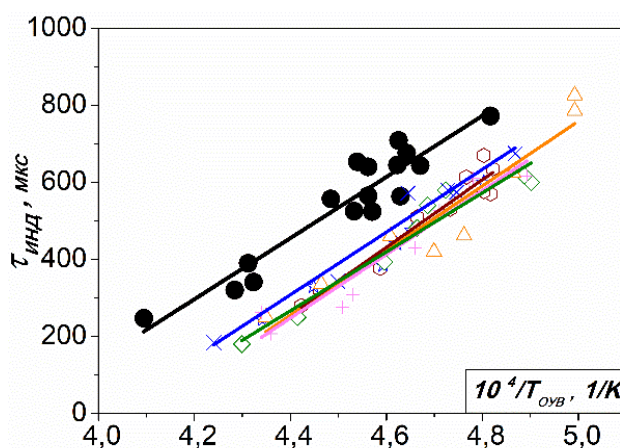
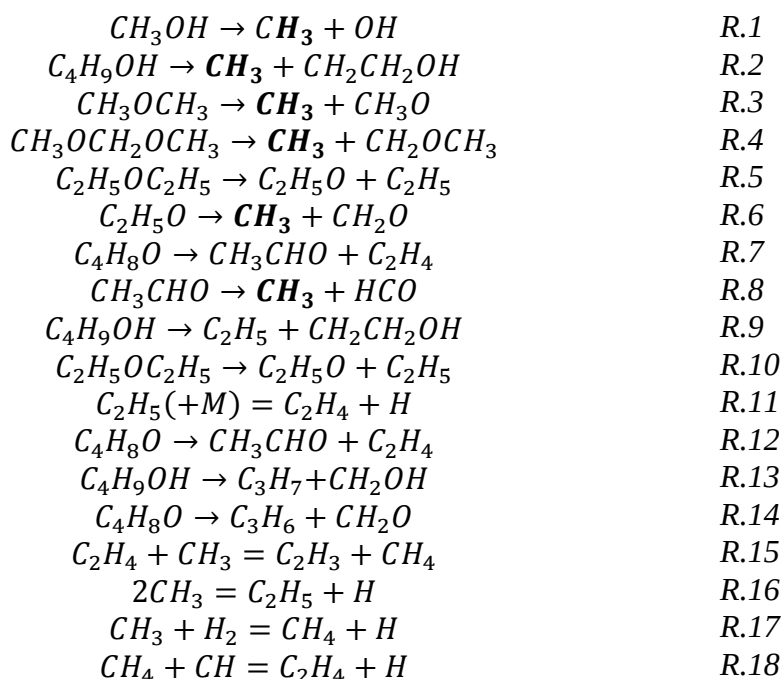


Рис. 4. Температурные зависимости периодов индукции появления конденсированной фазы углерода в смеси 5% C_2H_4 этилена (черным) и смесях с добавками метанола, бутанола, ТГФ, ДМЭ, ДММ и ДЭЭ (цветным). По экспериментальным точкам проведены интерполяционные кривые (для удобства чтения)

Кинетическое моделирование. При помощи кинетического моделирования был проведен анализ эффекта ускорения сажеобразования в присутствии выбранных биотоплив, который указал на две основных причины: образование метильного радикала CH_3 в процессах распада всех выбранных биотоплив ($R.1\text{--}R.8$), образование дополнительных каналов формирования этилена C_2H_4 в случае добавок бутанола, ДЭЭ и ТГФ ($R.9\text{--}R.12$) и образование пропилена C_3H_6 в случае добавок бутанола и ТГФ ($R.13, R.14$). Метильный радикал CH_3 способствует ускорению распада этилена ($R.15$), а также формированию дополнительных каналов его образования ($R.16\text{--}R.18$). Дополнительные каналы формирования C_2H_4 и C_3H_6 (или C_3H_7) приводят к ускорению формирования бензола C_6H_6 (наименьшему ароматическому соединению, служащем «строительным блоком» для дальнейшего роста ПАУ).



При пиролизе этилена основным каналом роста ПАУ является механизм НАСА (рис. 5), а в присутствии биотоплив, посредством метильного радикала, усиливаются каналы формирования C_9H_8 и $C_{12}H_8$ по схеме MAC (methyl addition/cyclization) (рис. 5).

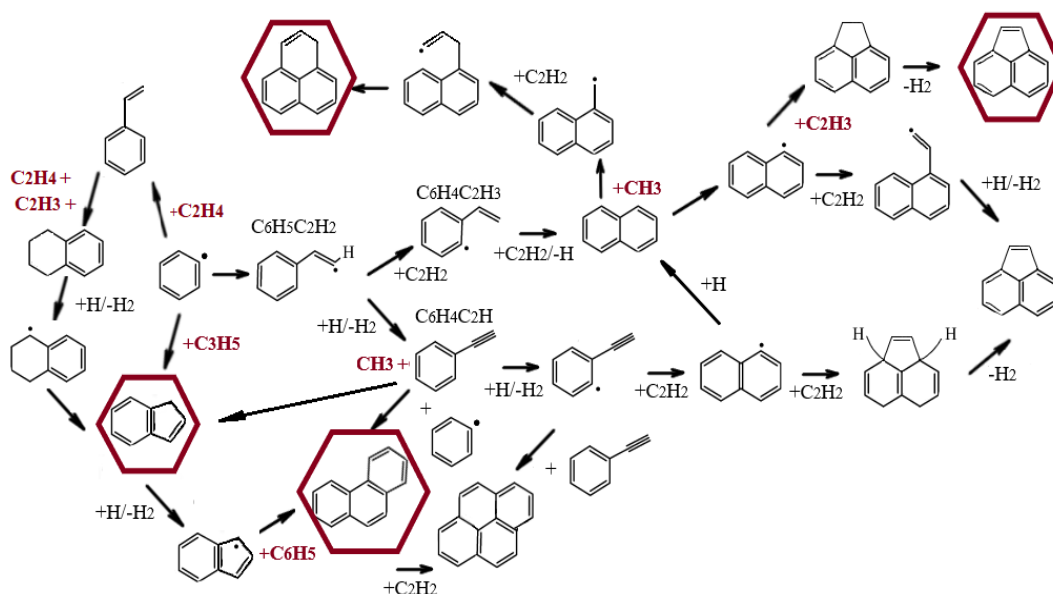


Рис. 5. Схема образования и роста ПАУ, образующихся при пиролизе смеси 5% C_2H_4 + 95%Ar (в рамку выделены ПАУ, образующиеся активнее в присутствии биотопливных добавок)

Выводы

В данной работе экспериментальными методами лазерно-индуцированной флуоресценции и лазерно-индуцированной инкандесценции, лазерной экстинкции было проведено исследование образования ПАУ и углеродных наночастиц при ударно-волновом пиролизе этилена с добавками перспективных биотоплив: метанола, бутанола, тетрагидрофурана, диметилового и диэтилового эфиров, диметоксиметана. В присутствии

всех выбранных добавок наблюдалось промотирование образования крупных ПАУ и углеродных наночастиц. Численным моделированием установлена причина наблюдаемого эффекта – формирование метильного радикала, этилена и пропина. Таким образом, выполненное исследование показывает, что в условиях пиролиза этилена выбранные добавки кислородсодержащих биотоплив не только не приводят к сажеподавлению, а, напротив, ускоряют сажеобразование.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № 075-15-2020-806 от 29.09.2020).

Литература

1. Reizer E., Viskolcz B., Fiser B. Formation and growth mechanisms of polycyclic aromatic hydrocarbons: A mini-review // *Chemosphere*. 2022. Vol. 291. P. 132793.
2. Xu L., Wang Y., Liu D. Effects of oxygenated biofuel additives on soot formation: A comprehensive review of laboratory-scale studies // *Fuel*. 2022. Vol. 313. P. 122635.
3. Barrientos E., Lapuerta M., Boehman A. Group additivity in soot formation for the example of C5 oxygenated hydrocarbon fuels // *Combust. Flame*. 2013. Vol. 160. Pp. 1484–1498.
4. Saggese C. et al. Kinetic modeling of particle size distribution of soot in a premixed burner-stabilized stagnation ethylene flame // *Combust. Flame*. 2015. Vol. 162. Pp. 3356–3369.
5. Commodo M. et al. On the early stages of soot formation: Molecular structure elucidation by high-resolution atomic force microscopy // *Combust. Flame*. 2019. Vol. 205. Pp. 154–164.
6. Desgroux P., Mercier X., Thomson K. Study of the formation of soot and its precursors in flames using optical diagnostics // *Proceed. Combust. Inst.* 2013. Vol. 34. Pp. 1713–1738.
7. Cuoci A., Frassoldati A., Faravelli T., Ranzi E. OpenSMOKE++: An object-oriented framework for the numerical modeling of reactive systems with detailed kinetic mechanisms // *Comput. Phys. Commun.* 2015. Vol. 192. Pp. 237–264.

УДК 536.46;533.98

ИНИЦИИРОВАНИЕ ГОРЕНИЯ В ПОТОКЕ ОДНОВРЕМЕННЫМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ И ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

В.Н. Зудов, О.А. Шмагунов

Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН,
Новосибирск, Россия

Воспламенение и стабилизация горения в воздушных потоках является важным элементом рабочего процесса в камерах сгорания (КС) для летательных аппаратов (ЛА) [1–6]. Для решения вопросов, возникающих при разработке КС, сформировался ряд направлений фундаментального характера по исследованию внешнего энергетического воздействия на течение топливовоздушных смесей [1–3]. Для воспламенения в потоке горючих смесей предложено использовать различного типа электрические разряды (тлеющий, дуговой, микроволновой, барьерный и т.п.), оптический разряд. Применение оптического разряда для воспламенения и стабилизации горения в двигательных системах усиливает генерацию активных радикалов, ионов и электронов, которые могут существенно увеличить скорость химических реакций, участвующих в горении [4–6]. Такой подход был проверен на горелочных устройствах, двигателях внутреннего сгорания, при воспламенении жидких и твердых топлив и т.п. [1].

В [1] рассмотрены основные принципы воспламенения и стабилизации горения оптическим разрядом в покоящихся и медленно движущихся средах (до 30 м/с). Из обзора [1] следует, что наименее изученной остается область сверхзвуковых скоростей при давлениях выше 1 атм.

Стабильная плазма в газовом потоке может быть сформирована когда локальная энергетическая плотность сфокусированного лазерного излучения становится порядка 10^{10} Вт/см² [1, 2]. В литературе есть описание четырех различных механизмов, по которым лазерное излучение может взаимодействовать с горючей смесью, чтобы вызвать ее воспламенение: тепловое инициирование, фотохимическое воспламенение, резонансный пробой и нерезонансный пробой [1–4]. Эффективность каждого механизма зависит от различных параметров, в том числе от длины волны используемого лазерного луча. Нерезонансный пробой является наиболее часто используемым режимом воспламенения для зажигания в потоке [1].

Длительное квазистационарное воздействие на структуру сверхзвукового течения может быть осуществлено при использовании СО₂-лазера. Его преимущества в экспериментальном моделировании связаны с возможностью формирования импульсно-периодического режима генерации с высокой частотой следования импульсов в течение длительного, практически неограниченного, времени.

Возможность применения оптического разряда для инициирования горения при сверхзвуковых скоростях была продемонстрирована в [7, 8], но параметры лазерного излучения не позволили организовать в опытах квазистационарный режим горения оптического разряда. Для перехода к такому режиму требуется увеличить либо частоту следования импульсов, либо размеры плазменного образования, что достаточно сложно сделать. Пространственные размеры области энергетического воздействия могут быть расширены за счет наложения электрического поля, результатом которого будут электрические разряды, создающие дополнительные плазменные области.

В работе представлены результаты исследования инициирования горения и стабилизации водородно-воздушного пламени в сверхзвуковой затопленной струе при совместном воздействии плазмой оптического разряда и электрическим полем высокой напряженности. Термодинамические параметры входящей в область гомогенной смеси

далеки от режима самовоспламенения. При этом наложение электрического поля с заданной в опытах напряженностью не приводило к пробоем струи.

Схема эксперимента. Для образования лазерной плазмы оптического пульсирующего разряда (ОПР) применялся электроразрядный CO_2 -лазер ЛОК-ЗСГУ (разработка Института лазерной физики СО РАН), который в опытах обеспечивал импульсно-периодический режим излучения с частотой следования импульсов до 40 кГц и средней мощностью до 900 Вт. При работе лазера в экспериментах были использованы два режима: первый (стандартный) – импульсно-периодический, второй – пакетный. Во втором режиме частота в пакете была задана $f_1 = 30\text{--}40$ кГц, частота следования пакетов $f_2 = 3\text{--}4$ кГц (в пакете 3–6 импульсов).

Излучение CO_2 -лазера распространялось поперек потока и фокусировалось линзой из ZnSe на оси струи на заданном расстоянии от среза сопла. В ходе эксперимента применялись линзы с различным фокусным расстоянием ($f = 95, 125$ мм).

При мощности лазера, превышающей пороговое значение, в фокусе за линзой в потоке зажигался ОПР. Расстояние от среза сопла до места формирования оптического разряда 14 мм и в ходе экспериментов изменялось незначительно. Воздух и водород подавались в форкамеру по системе подачи газов, оборудованной запорно-регулирующей арматурой и участками измерения расходов. Внутренний диаметр форкамеры 80 мм, длина 95 мм. Для формирования потока газа использовалось коническое сопло с угловой точкой, рассчитанное на числа Маха $M = 1,4$. Гомогенная водородно-воздушная смесь с коэффициентом избытка воздуха $\alpha = 0,9$ истекала в затопленное воздушное пространство. Максимальное давление в форкамере $P^* = 0,8$ МПа, температура 290 К. Для регистрации структуры течения применялась теневая схема со щелью и плоским ножом, расположенным вдоль потока. В приборе Теплера для подсветки применялся искровой источник (экспозиция 10^{-6} с). Изображение фиксировалась скоростной камерой со временем экспозиции 1,5 мкс и частотой кадров 1000 1/с.

Для получения данных о структуре зоны горения применялась спектрозональная съёмка на длине волны излучения радикала OH^* . Для этого была задействована Imager intense CCD камера с динамическим диапазоном 12 бит, пространственным разрешением 1376×1040 пиксел, частотой кадров 10 Гц, с PC PCI граббером, минимальной экспозицией 1 мкс.

Расход газов измерялся регуляторами расхода Bronkhorst ElFlow (с точностью не хуже 1%). В качестве топлива использовался водород.

В эксперименте регистрировалась форма импульса падающего излучения, а также его временные характеристики при различных частотах. Форма импульса падающего излучения фиксировалась ИК фотоприемником ФД-511-2 (спектральный диапазон до 11 мкм). Излучения плазмы оптического разряда фиксировалось на фотоприемник ФД 256, 0,4–1,1 мкм.

Длительность лазерных импульсов ($\tau = 1,1$ мкс) была значительно меньше интервала времени t между ними (от 10 мкс и более), поэтому в потоке периодически происходило практически «мгновенное» образование плазмы протяженностью L , которая к моменту следующего импульса смещалась вниз по течению на расстояние ut или u/f .

Форма и полярность электродов в ходе опытов менялись. Величина напряжения на электродах варьировалась от 6 до 30 кВ.

Результаты экспериментов. Предварительно было исследовано влияние электрического поля на плазму ОПР, находящуюся в воздушном потоке. Получено, что слабое электрическое поле (до 1 кВ/см) практически не влияет на размеры плазменного образования. При этом наблюдается снижение вероятности оптического пробоя при наличии поля вне зависимости от конфигурации силовых линий и полярности прикладываемого напряжения. Для напряженностей поля свыше 3 кВ/см наличие плазмы ОПР приводило к

возникновению электрического пробоя. Форма и предельные характеристики электрического пробоя зависели от конфигурации электродов, полярности прикладываемого напряжения и скорости воздушного потока. В случае направления поля по потоку наблюдался пробой от среза сопла (положительно заряженный электрод) до места фокусировки лазерного луча, выше по потоку от плазмы оптического пробоя стримеры отсутствовали.

При инициировании воспламенения водородно-воздушной смеси в сверхзвуковом потоке были рассмотрены два случая: с оптическим разрядом и с оптическим разрядом при наличии электрического поля. Присутствие электрического поля необходимо для увеличения энергоподвода в поток. Тогда плазма, созданная совместным воздействием сфокусированного лазерного излучения и электрического разряда, может инициировать горение и стабилизировать пламя гомогенной водородно-воздушной смеси в высокоскоростном потоке.

Горение водорода в воздухе без электрического поля в сверхзвуковом потоке удалось получить только в виде периодических зон. Результаты спектрозональной регистрации для числа Маха на срезе сопла $M = 1,4$ при горении водорода в воздухе показаны на рис. 2а. Виден прерывистый режим горения. Высота зоны горения превышала $h = 100$ мм, а поперечные размеры сравнимы с областью плазменного образования. Результаты эксперимента для числа Маха на срезе сопла $M = 2,0$ дали подобный результат (рис. 2б), однако высота зоны горения больше и превышает $h = 150$ мм. Области с высокой интенсивностью излучения совпадают с положением скачков ударно-волновой структуры струи.

Полученные данные свидетельствуют о локализации горения непосредственно в тепловом следе за оптическим пробоем без существенного распространения поперек потока.

Изучалось комбинированное энергетическое воздействие оптического и электрического разрядов на горение топливовоздушной смеси в сверхзвуковой струе. Теневая регистрация комбинированного разряда в сверхзвуковой струе показана на рис. 1.

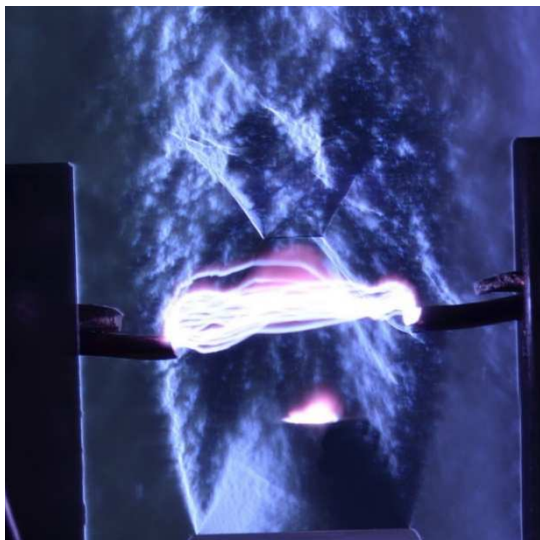


Рис. 1. Теневая регистрация оптического разряда в сверхзвуковой струе при наличии электрического разряда (выдержка 0,004 с)

В экспериментах использовались различные электроды: плоские пластины; кольцевые электроды, расположенные как по потоку, так и поперек потока; электроды в виде затупленных конусов. Применение последних позволило получить квазистационарный режим электрических разрядов при регулярном воспроизведении пробоя струи, т. е. на электродах в виде двух затупленных конусов тепло подводилось внутрь потока. Кольцевые

электроды давали электрические разряды, которые проходили по границе струи, и большая часть подведенной энергии попадала на периферию. Плоские электроды не давали квазистационарную картину электрических разрядов.

Было изучено влияния формы электрического сигнала на процесс формирования ОПР и электрических разрядов. Электрическая схема имела несколько модификаций с различной формой электрических сигналов на электродах. Устойчивые электрические разряды были зафиксированы на вершинах синусоиды, где было максимальное напряжение. В области минимального напряжения электрические разряды отсутствовали. Форма электрического сигнала на электродах очень сильно влияла на процесс воспламенения и горения в сверхзвуковом потоке. Наиболее стабильное инициирование горения наблюдалось с синусоидальными сигналами.

При инициировании ОПР и электрического разряда получено значительное уменьшение напряжения, при котором возникают стримеры. Так, без ОПР пробойное напряжение равнялось 24 кВ, а при его наличии напряжение уменьшилось до 17 кВ. При этом ток на электродах менялся от 1 мА до 0,6 мА.

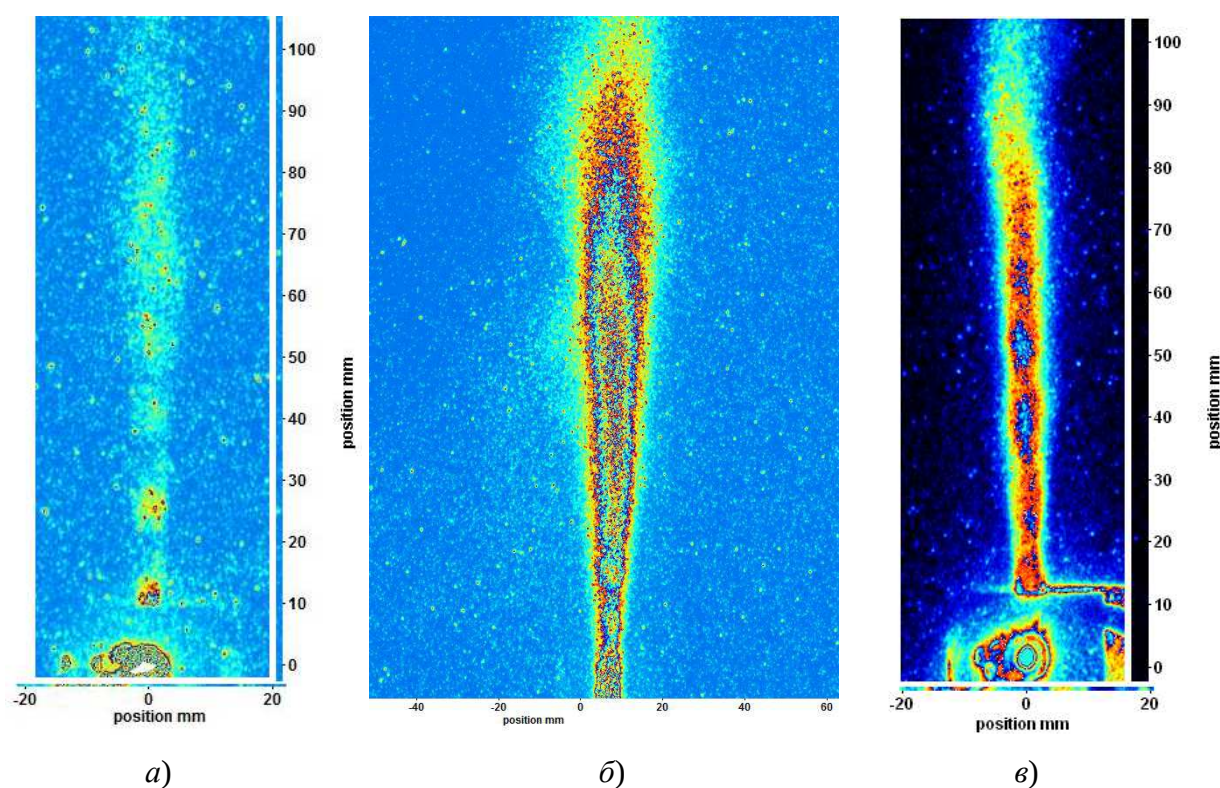


Рис. 2. Экспериментальная регистрация горения: а – оптический пробой; б – пробой с механическим стабилизатором, в – комбинированный пробой

Рассмотрим влияние комбинированного разряда на инициирование и горение сверхзвуковой водородно-воздушной струи, истекающей в затопленное пространство. Результаты спектрозональной регистрации представлены на рис. 2в. Число Маха на выходе из сопла равно $M = 1,4$. Давление в форкамере 0,55 МПа, а температура 290 К. Сравним полученные результаты по горению вызванному только оптическим разрядом (рис. 2а) и комбинированным разрядом (рис. 2в). Наблюдается различие в формах областей реакций. Слабая периодическая структура зон локального горения меняется на устойчивое пламя, занимающее всю площадь поперечного сечения сверхзвуковой струи. Высота области горения становится более 120 мм.

Применение комбинированного разряда дало эффект, сравнимый по результатам со случаем, когда применялся механический стабилизатор. В [8] экспериментально показано, что механический стабилизатор (конус), помещенный в сверхзвуковой поток (с числом Маха $M = 2$), с оптическим разрядом, расположенным в его следе, позволяет зажечь высокоскоростную водородно-воздушную струю по всей площади поперечного сечения. Об этом свидетельствуют результаты спектрозональной регистрации возбужденных радикалов ОН (рис. 2б).

Использование в сверхзвуковом потоке механического стабилизатора и поддерживающего его пилон приводит к значительным потерям полного давления. Потери растут с увеличением скорости потока. Применение для тех же целей комбинированного разряда существенно снизит потери полного давления.

Таким образом, получено стабильное горение в сверхзвуковом потоке при использовании комбинированного способа подвода энергии в сверхзвуковой поток водородно-воздушной смеси. Инициирование горения осуществлялось поперечным импульсно-периодическим оптическим разрядом совместно с поперечным импульсно-периодическим электрическим полем. В поперечном сечении область горения занимала всю площадь сверхзвуковой струи и превышала площадь зоны оптического разряда.

Численное моделирование. Выполнено численное моделирование воспламенения водородно-воздушной смеси с использованием уравнений Навье–Стокса. По пространственным переменным была использована конечно-разностная аппроксимация шестого порядка точности. По времени была использована схема Рунге–Кутты третьего порядка точности. Для гидродинамических расчетов размер временного шага рассчитывается на основе ряда ограничений, включающих максимальные значения скорости, вязкости и других величин в правой части эволюционных уравнений. Расчет проводился для заданной кинетической схемы горения водорода в воздухе, состоящей из 8 компонент и 6 элементарных реакций. Моделирование инициирования горения выполнено в прямоугольной области.

Поскольку в настоящей работе используются алгоритмы, которые имеют очень низкую численную диссипацию, то требуются точные граничные условия, чтобы избежать численных неустойчивостей на расчетных границах области. На границах области используется методика NSCBC (Navier–Stokes characteristic boundary conditions), основанная на одномерных нестационарных уравнениях Навье–Стокса.

Рассмотрена задача о воспламенении и горении во времени расширяющейся области. В расчетах была использована равномерная по пространству сетка $N_x \times N_y = 512 \times 256$. По пространственной координате z была использована одна ячейка. Расчетная прямоугольная область имела следующие размеры: длина прямоугольника $L = 1,6$ см, высота $H = 0,8$ см. Вычислительная область имела форму прямоугольника, дискретизация уравнений выполнялась в декартовой системе координат. Кроме того, использовалась равномерная сетка. Все границы вычислительной области рассматривались как выходные, чтобы предотвратить повышение давления в этой области.

В качестве топлива был выбран водород. Этот выбор сделан из-за относительно хорошо известного кинетического механизма реакции водорода. Радикалы не включены в исходную смесь, даже если температурный профиль уже существует в системе в нулевой момент времени. Радикалы начнут формироваться сразу после начала моделирования. Исходная водородно-воздушная смесь состояла из следующих компонентов: N_2 , O_2 , H_2 . Массовые доли смеси в набегающем потоке были равны $Y_{H_2} = 0,024$, $Y_{N_2} = 0,746$, $Y_{O_2} = 0,23$. Вне области энергоподвода температура смеси равнялась $T = 600$ К. Максимальная температура в центре области энергоподвода $T = 3000$ К. Скорость потока топливовоздушной смеси на входе в вычислительную область изменялась в диапазоне $u = 100\text{--}500$ м/с. Радиус области энергоподвода $r_{s0} = 0,192$ см.

На рис. 3–5 представлены результаты расчетов по влиянию скорости набегающего для фиксированной частоты $f = 100$ кГц. Для скорости $U = 250$ м/с показаны изообласти температуры. Из рис. 3 следует, что за областью энергоподвода ($x = 0$) формируется тепловой след, в котором происходит догорание водорода. Внешние очертания следа соответствуют наблюдаемой в эксперименте картине течения. В следе за тепловым источником существуют ограниченные зоны, в которых поток имеет как положительную, так и отрицательную компоненту продольной скорости. Возможно эти зоны являются следствием взаимодействия двух соседних тепловых пятен.

С увеличением скорости в потоке выделяются отдельные тепловые пятна (рис. 4), которые возникают последовательно один за другим. При этом тепловое пятно от предыдущего импульса и последующего отличаются поперечными размерами. Отличие в размерах обусловлено тем, что ранее возникшее пятно увеличилось в диаметре и сдвинулось вниз по потоку. Вновь появившееся пятно находится в месте своего образования. Дальнейшее увеличение скорости приводит к тепловому следу, в котором видны отдельные зоны горения (рис. 5).

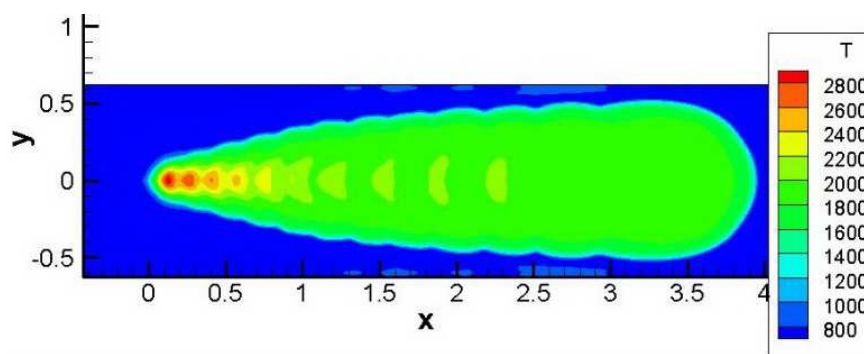


Рис. 3. Развитие области воспламенения во времени ($u = 250$ м/с, $f = 100$ кГц)

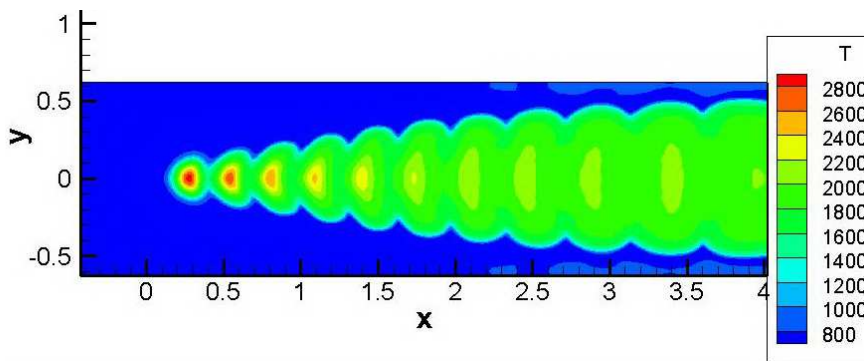


Рис. 4. Развитие области воспламенения во времени ($u = 350$ м/с, $f = 100$ кГц)

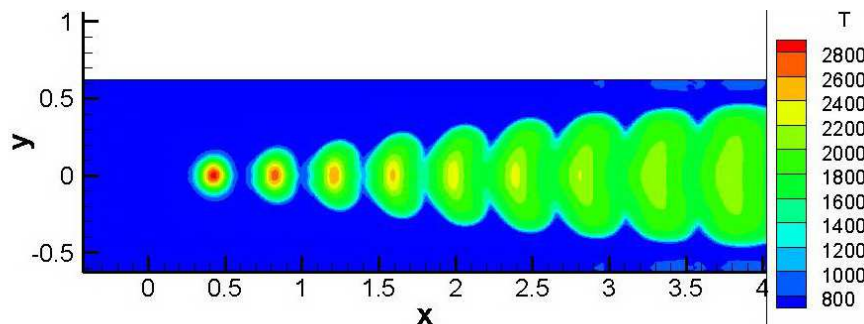


Рис. 5. Развитие области воспламенения во времени ($u = 450$ м/с, $f = 100$ кГц)

В заключение следует отметить, что численное моделирование влияния частоты при фиксированной скорости потока приводило к следующим результатам: при малых частотах наблюдались отдельные области горения, с увеличением частоты наблюдался монотонный переход к квазинепрерывному следу.

Выводы. Проведено экспериментальное исследование воздействия сфокусированного импульсно-периодического излучения CO₂-лазера на инициирование и развитие процесса горения в до- и сверхзвуковом потоке гомогенных водородно-воздушных смесей. Инициализация горения осуществлялась совместным воздействием плазмой оптического разряда и электрическим разрядом в центре потока.

Показано, что применение комбинированного (оптический + электрические разряды) энергетического воздействия на высокоскоростную водородно-воздушную струю дает возможность зажечь её по всей площади поперечного сечения. Такой подход позволяет избежать наличия механического стабилизатора в сверхзвуковом потоке для организации горения, что существенно уменьшает потери полного давления.

Проведено численное моделирование воздействия локальной области энерговыделения на развитие процесса распространения горения в скоростном потоке гомогенной топливовоздушной смеси (H₂ + air).

Исследование выполнено в рамках государственного задания (№ госрегистрации 121030500157-3).

Литература

1. Tran X. Phuoc. Laser-induced spark ignition fundamental and applications (Review) // Optics and Lasers in Eng. 2006. Vol. 44. Pp. 351–397.
2. Ronney P.D. Laser versus conventional ignition of flames // Optical Eng. 1994. Vol. 33. Pp. 510–521.
3. O'Briant S.A., Gupta S.B., Vasu S.S. Review: laser ignition for aerospace propulsion // Propulsion and Power Research. 2016. Vol. 5. Iss. 1. Pp. 1–21. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jprr.2016.01.004>
4. Do H., Cappelli M.A., Mungal M.G. Plasma assisted cavity flame ignition in supersonic flows // Combustion and Flame. 2010. Vol. 157. Pp. 1783–1794.
5. Leonov S., Yarantsev D., Carter C. Experiments on electrically controlled flame holding on a plane wall in a supersonic airflow // Propulsion and Power. 2009. Vol. 25. Pp. 289–294.
6. Brieschenk S., O'Byrne S., Kleine H. Ignition characteristics of laser-ionized fuel injected into a hypersonic crossflow // Combustion and Flame. 2014. Vol. 161. Pp. 1015–1025.
7. Зудов В.Н., Третьяков П.К., Тупикин А.В. Воздействие лазерным излучением и электрическим полем на горение углеводородовоздушных смесей // Физика горения и взрыва. 2009. Т. 45. № 4. С. 77–85.
8. Зудов В.Н., Третьяков П.К. Иницирование оптическим разрядом гомогенного горения топливовоздушной смеси в высокоскоростной струе // Физика горения и взрыва. 2017. Т. 53. № 3. С. 1–9.

УДК 536.46

ВИХРЕВАЯ СТАБИЛИЗАЦИЯ ГОРЕНИЯ В ПОТОКЕ**А.В. Ильинков, А.В. Щукин, В.В. Такмовцев, И.А. Попов**ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технический университет
им. А.Н. Туполева - КАИ», Казань, Россия**Введение**

Стабильность горения топлива в потоке является важнейшим условием надежной работы теплотехнологических установок. При нарушении устойчивости горения происходит либо отрыв пламени от горелки, либо проскок пламени в смесительную часть горелки. В горелках энергетических котлов, газотурбинных и технологических установок для предотвращения отрыва или проскока пламени применяются специальные устройства, называемые стабилизаторами горения. Они служат для приведения в соответствие скорости выхода смеси со скоростью распространения пламени. Общим принципом стабилизации горения является повышение температуры в зоне горения и, особенно, у корня факела. При повышении температуры значительно увеличивается скорость распространения пламени, которая приближается по своему значению к скорости выхода смеси из горелки.

Сегодня существуют много типов стабилизаторов горения – струйные, с закруткой потока, вихревые, микрофакельные и с перфорированным фронтом, воздушно-форсуночные, на базе плохо- и хорошообтекаемых тел. Среди стабилизаторов горения можно выделить вихревые, суть которых заключается в том, что при большой скорости смеси в корне факела создаются специальные зоны пониженного давления (разрежение) вследствие резкого увеличения сечения. За счет разрежения происходит возвратное движение раскаленных продуктов сгорания в эти зоны, т. е. к корню факела; холодная смесь быстро нагревается и воспламеняется. Вихревые стабилизаторы можно классифицировать на следующие типы: туннельные диффузорные и конфузорные стабилизаторы; хорошо- и плохообтекаемые тела; локальные или круговые выемки.

Результаты исследования горения топлива в полусферических выемках представлены в [1, 2]. Газ подавался на переднюю кромку сферической выемки. Было получено, что одиночная сферическая выемка способствует стабилизации горения и хорошему смесеобразованию. При использовании рельефа из сферических выемок подача природного газа также осуществлялась внутрь объема каждой сферической выемки. При работе системы выемок горение было нестабильное из-за неустойчивости вихревых структур. Для более устойчивого вихреобразования в зоне горения в выемке увеличивали глубину выемки за счет вдавливания сферы глубже радиуса образующей. При значительных скоростях потока внутри глубокого углубления происходило стабильное горение и полное сгорание топлива.

Таким образом, установлено, что вихревые устройства различного вида являются хорошими стабилизаторами горения. Наименьшее количество исследований посвящено изучению процессов в стабилизаторах горения в виде поверхностных вихрегенераторов – выемок различной формы, которые более перспективны для теплотехнологических установок – печей, сушилок и т. д.

Исследование поверхностных вихрегенераторов в виде выемок

Исследованию аэрогидродинамики и тепломассообмена в выемках различной формы посвящено большое количество научных работ. Основная их часть посвящена исследованию гидродинамики и теплообмена в сферических выемках. Попытки стабилизировать горение с помощью сферических выемок впервые описаны в [1]. Однако сферические выемки не обеспечивали полноту сгорания топлива из-за нестабильной вихревой структуры и переключающегося режима генерации вихрей. Было показано, что повышение устойчивости

вихревой структуры повышает и стабилизацию горения. В настоящее время наибольшая стабилизация вихревой структуры наблюдается в овально-траншейных выемках [3]. Образующаяся вихревая структура в выемке становится упорядоченной, но в вытянутой по длине овально-траншейной выемке обратные течения не доходят до входной кромки выемки, что не обеспечивает подачи высокотемпературных объемов газа к корню факела при подаче топлива внутри выемки. Поэтому предложены для исследования выемки, в которых вихревая структура обеспечивает подвод высокотемпературных объемов газа к корню факела, высокое смесеобразование в вихревой структуре.

Объект исследования

Объектом исследования являлись вихрегенераторы в виде одно- и двухполостных выемок – полусферической (ПСВ), однополостной диффузорной (ОДВ) и двухполостной диффузорной (ДДВ). Внешний вид и схемы выемок показаны на рис. 1.

Основными задачами исследования являлась не только стабилизация горения, но и интенсификация теплообмена от продуктов сгорания к стенкам канала и выемок, что считается необходимым условием для проектирования теплотехнологического оборудования.

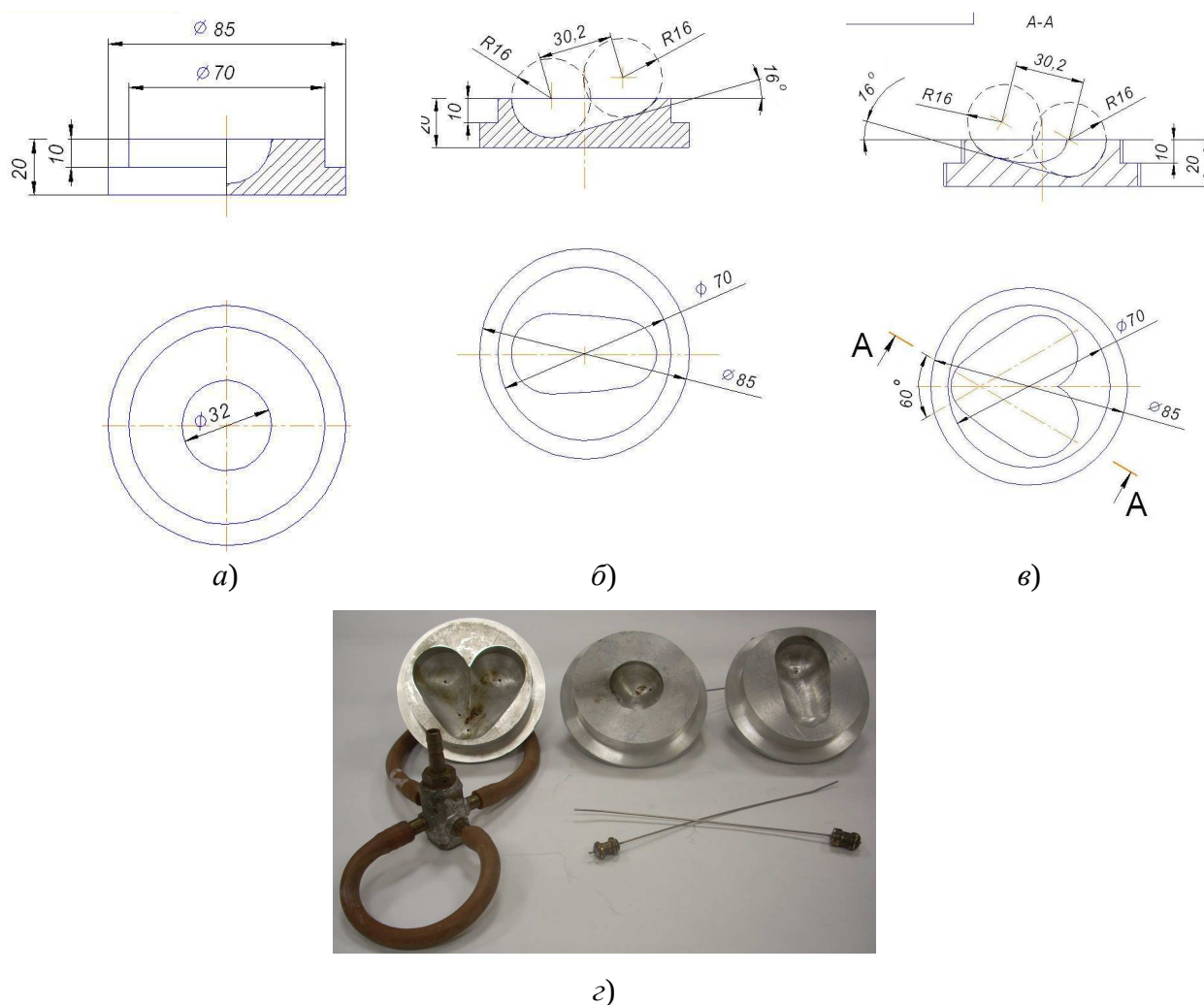


Рис. 1. Объекты исследования: а – схема ПСВ, б – схема ОДВ, в – схема ДДВ, г – внешний вид всех видов вихрегенераторов

Экспериментальная установка и методика проведения исследований

Для проведения экспериментов по стабилизации пламени в диффузорных выемках была подготовлена экспериментальная установка в виде разомкнутого воздушного контура (рис. 2). Воздух, проходя через систему подготовки 1, состоящую из входного ресивера, хонейкомба и предвключенного участка с плавным входом, попадал в рабочий участок 3 установки. Рабочий участок имел коробчатую форму с прямоугольным сечением 140×80 мм. На его нижней стенке располагался объект исследования 5 – модель диффузорной выемки. Воздух после рабочего участка вместе с продуктами сгорания отводился в атмосферу через выхлопную систему 4. Для измерения скорости потока на входе в рабочий участок установлена трубка полного напора 2 с направляющим насадком, что делает ее нечувствительной к отклонению угла потока от ее оси до 15°. На стенке рабочего участка имеется отверстие для отбора статического давления. Природный газ из баллона 8 подводится к диффузорной выемке через регулировочный вентиль 7 и ротаметр 6.

Скорость воздуха W_∞ перед ПСВ изменялась от 10,5 до 31,5 м/с. Число Рейнольдса Re_d , вычисленное по диаметру ПСВ, составляло $3,4 \cdot 10^4$ – $10,2 \cdot 10^4$. В связи с изменением диаметра ОДВ и ДДВ согласно теории подобия физических процессов скорость W_∞ обтекания ОДВ и ДДВ при равенстве чисел Рейнольдса должна быть в диапазоне 16,5–50 м/с.

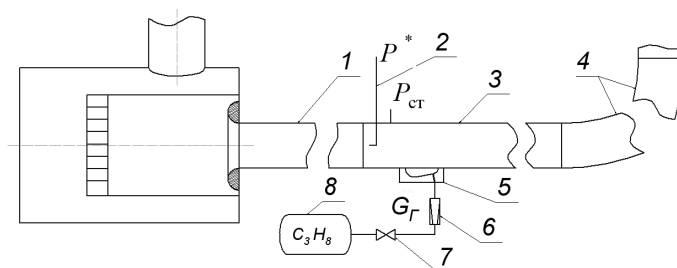


Рис. 2. Схема экспериментальной установки

В эксперименте предусмотрено использование сменных жиклеров подачи природного газа в выемки диаметром 1,6 и 0,4 мм, позволяющих изменять скорость вдува газа при постоянном расходе.

Результаты исследования горения в выемках различной формы

Первые рекомендации по организации горения в ПСВ были приведены в [1]. ПСВ в данном исследовании используются как базовый вариант при сравнительном анализе. Исследовалась ПСВ диаметром $d_{\text{ПСВ}} = 50$ мм и относительной глубиной $h_{\text{ПСВ}}/d_{\text{ПСВ}} = 0,5$. Подвод газа осуществлялся через отверстия диаметром 2,5 мм, расположенные по нормали к стенке выемки на глубине $h = 0,25h_{\text{ПСВ}}$ от нижней точки. Скорость воздуха W_∞ перед выемкой изменялась в диапазоне 10,5–31,5 м/с. Число Рейнольдса Re_d , вычисленное по диаметру выемки, составляло $3,4 \cdot 10^4$ – $10,2 \cdot 10^4$. Наиболее предпочтительными вариантами расположения отверстий для подвода газа являются положения отверстий под углом $\varphi = 135^\circ$ – 225° к направлению потока, что обеспечивает наиболее продолжительную задержку газа в рециркуляционной зоне в выемке и его лучшее смешение с воздухом. Схема подвода газа к ПСВ была организована в соответствии с рис. 3.

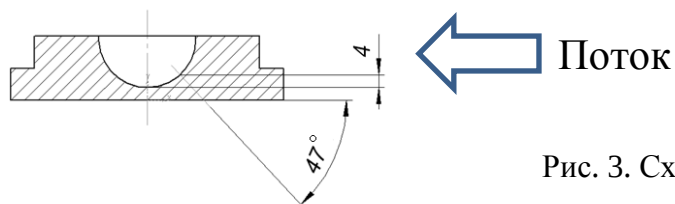


Рис. 3. Схема подвода газа к ПСВ

Как показали испытания ПСВ, возможны два режима горения – организация факела внутри выемки и в потоке над и за ней. В первом случае, в соответствии с рис. 4а, горение происходит внутри выемки. Пламя полностью заполняет ее, затем выходит в нижней по потоку части выемки. Далее горение природного газа продолжается в потоке вблизи нижней стенки. Можно предположить, что в этом случае теплота сгорания максимально передается поверхности ПСВ и исходно гладкой поверхности за ней. Во втором случае, в соответствии с рис. 4б, горение происходит по большей части в потоке. Такой режим обеспечивался вдувом природного газа через малый жиклер. В этих условиях высокоскоростная струя природного газа пробивала возвратное течение в рециркуляционной зоне в выемке, выходила из выемки и основное горение наблюдалось на расстоянии от стенки. Тем не менее ПСВ являлась стабилизатором и в этом случае. Так, при отсутствии основного потока и подаче природного газа горение происходит полностью в отрыве от отверстия вдува газа и неустойчиво. При организации основного потока в выемке образуется вихревая структура с обратным течением и стабилизация горения происходит за счет подачи высокотемпературных продуктов сгорания возвратным течением к месту вдува топлива, обеспечивая непрерывное поджигание смеси. На рис. 4б видно, что при наличии основного потока горение происходит непосредственно от отверстия вдува. При втором режиме теплота сгорания максимально передается потоку воздуха.

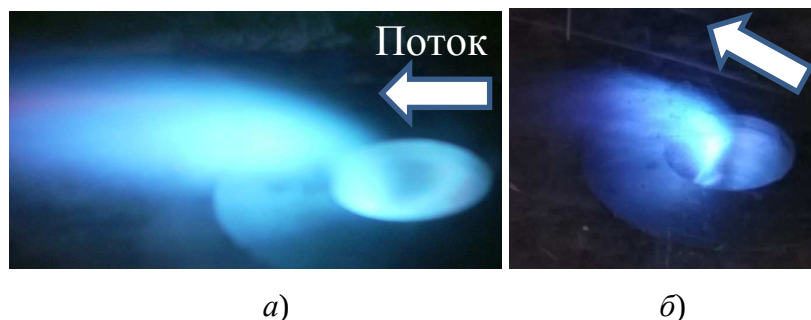


Рис. 4. Режимы горения в ПСВ: а – в выемке; б – в потоке

Поскольку два режима отличаются кинетической энергией струи природного газа, то для их описания будет правомерно использовать такую величину как параметр вдува m . Так как струя газа взаимодействует с возвратным течением в ПСВ, имеющим скорость, равную примерно 40% от скорости основного потока, то формулу для расчета параметра вдува можно записать как

$$m = \frac{\rho_{\Gamma} W_{\Gamma}}{0,4 \rho_{осн} W_{осн}}.$$

Как показали результаты измерений, граничным значением между горением в ПСВ и горением в потоке является $m \approx 3$. При меньших значениях параметра вдува горение происходит в ПСВ, при больших – в потоке.

Гидродинамика течения на поверхностях с ДДВ подробно исследована в [4]. В ДДВ реализуется схема устойчивого возвратного течения в соответствии с рис. 5. Хотя течение в ДДВ стабильно, видно, что поток входит в выемку в ее задней части и покидает выемку в области ее донных точек. Обнаружено, что в этих точках реализуется наименьшее давление по поверхности ДДВ. В соответствии с рис. 6 для ДДВ принимаются следующие места вдува газа.

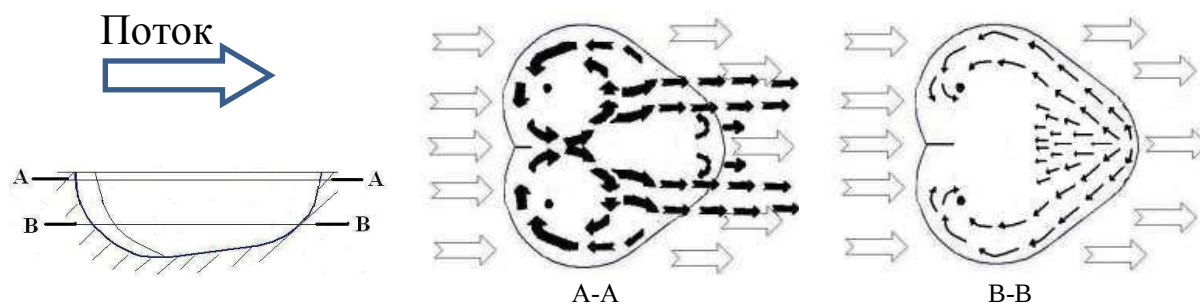


Рис. 5. Схема течения в ДДВ

Возможен вдув природного газа вблизи выхода потока из выемки в точке 1, но поскольку выемка двухполостная, то природный газ может распределиться по полостям неравномерно и горение будет только в одной полости. В соответствии с рис. 7 видно, что подвод газа в точке 1 не позволил осуществить устойчивое горение. Горящий газ не заходит в выемку и легко сносится основным потоком. По-видимому, из-за переменной глубины ДДВ струя газа легко пробивает тонкий слой возвратного течения даже при минимальных значениях параметра m .

Для обеспечения поступления газа в обе полости подачу предполагается производить в осесимметричных точках 2. Они расположены близко к задней части выемки, т. е. будет время для смешения газа с воздухом. С другой стороны, в этих точках уже сформировалось разделение полостей. Как показывает визуализация горения (рис. 8), при подаче природного газа через отверстия в точках 2 наблюдается аналогичная картина течения и горения, как при вдуве газа в точке 1. Горящий газ также не заходит в выемку, слой возвратного течения в этих точках все еще недостаточно толстый.

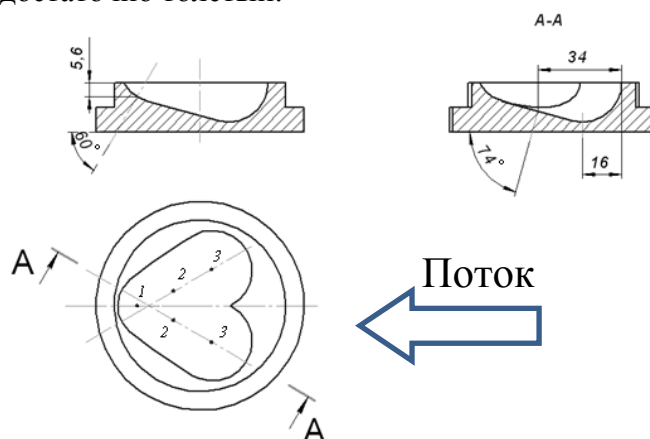


Рис. 6. Схема подвода газа к ДДВ



Рис. 7. Горение при подаче газа в точке 1: а – без основного потока; б – с основным потоком

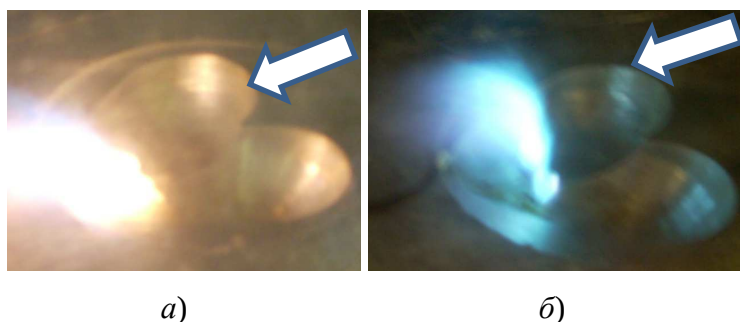


Рис. 8. Горение при подаче газа в точке 2: *а* – без основного потока; *б* – с основным потоком

Визуализация показала, что устойчивое горение наблюдается при подаче природного газа в точки 3. Это можно объяснить структурой течения в ДДВ, показанного на рис. 5. В ДДВ формируется сложное, самопересекающееся течение, напоминающее цифру 8. Между полостями ДДВ существует значительный массообмен. Это дает преимущества ДДВ как стабилизатора горения, так как вдув газа через слой воздуха максимальной толщины способствует хорошему смешению воздуха и газа для получения горючей смеси, а самопересекающееся течение способствует стабилизации пламени путем непрерывного поджигания свежей порции смеси. Дополнительным фактором стабилизации являются два источника горения, взаимодействующие друг с другом. В соответствии с рис. 9, благодаря этим преимуществам устойчивое горение в ДДВ возможно как в прямом, так и в обратном ее положении относительно основного потока. Установлено (рис. 10), что часть пламени распространяется и в другую полость при горении в ДДВ при подаче газа только в одну точку 3. На основании изложенного выше можно сделать вывод, что ДДВ является лучшим стабилизатором пламени, чем ПСВ.

Геометрически ОДВ является половиной ДДВ (рис. 11). С учетом результатов исследований ДДВ для ОДВ была выбрана одна точка подвода газа – донная точка.



Рис. 9. Горение при подаче газа в точке 3: *а* – в прямом положении; *б* – в обратном положении

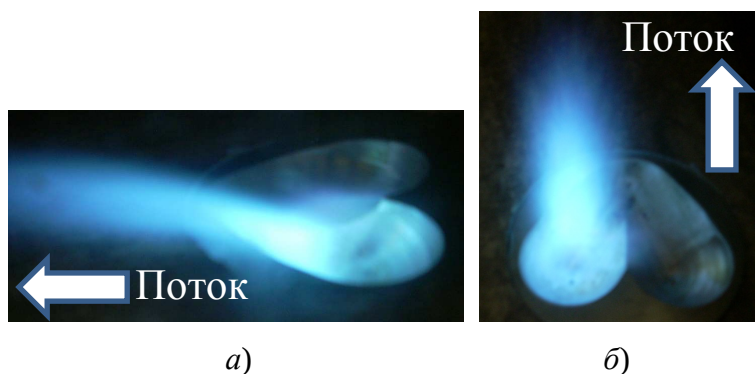


Рис. 10. Горение при подаче газа только в одну полость: *а* – в прямом положении; *б* – в обратном положении

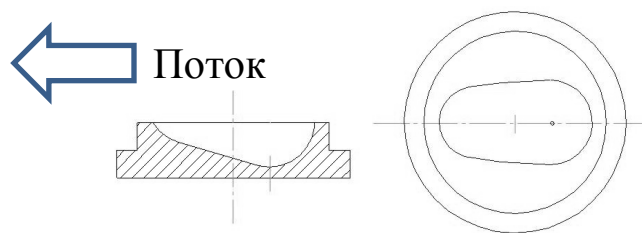


Рис. 11. Схема подвода газа к ОДВ

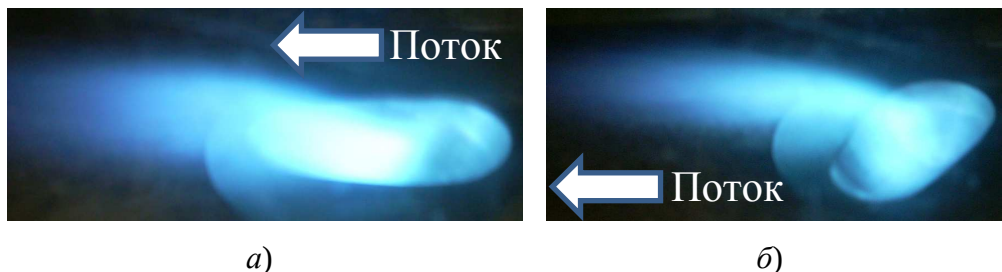


Рис. 12. Горение в ОДВ: а – ориентированной вдоль потока, б – под углом 60° к потоку

В соответствии с рис. 12, наиболее устойчивое горение удалось получить при прямом положении ОДВ (угол между большей осью выемки и направлением потока равен 0°). Следует отметить, что устойчивое горение наблюдалось в широком диапазоне углов атаки выемки к основному потоку – от 0° до 60° и при параметре вдува $m \approx 2$. В ОДВ, развернутой в обратную к потоку сторону (угол 180°), устойчивого горения нет.

На рис. 12 видно, что в ОДВ, расположенной под углом к потоку, зона горения занимает только часть выемки, фактически соответствующую ПСВ. Таким образом, более сложная в изготовлении ОДВ не имеет особых преимуществ по сравнению с ПСВ.

Заключение

Проведено исследование горения природного газа в потоке при вихревой стабилизации пламени. В качестве вихревых стабилизаторов горения использованы вихрегенераторы в виде ПСВ, ОДВ и ДДВ. Устойчивое горение удалось получить во всех типах исследованных выемок. Эффективности ОДВ и ПСВ практически одинаковы. Наибольшая стабилизация горения получена при использовании ДДВ. Стабильное горение обеспечивается при параметре вдува $m \approx 2$. Точки подачи газа (вдува) у ДДВ и ОДВ следует выполнять в их полюсной (самой глубокой) части.

Исследования горения при вихревой стабилизации горения с использованием ДДВ целесообразно продолжить с определением полноты сгорания топлива, теплоотдачи к стенкам камеры сгорания.

Полученные результаты применимы для проектирования плоских камер сгорания теплотехнологических установок, например печей для сушки сыпучих материалов, подогрева рабочих газовых сред и т. д., обеспечивающих нагрев стенок оборудования за счет сжигания топлива.

Исследование проведено в рамках соглашения с Министерством науки и высшего образования Российской Федерации № 075-03-2023-032.

Литература

1. Щукин А.В., Козлов А.П., Агачев Р.С., Чудновский Я.П. Интенсификация теплообмена сферическими выемками при воздействии возмущающих факторов / Под ред. академика В.Е. Алемасова. Казань: Изд-во Казан. гос. техн. ун-та, 2003. – 143 с.

2. Chudnovsky Y., Kozlov A., Sherrow L. Laboratory Development of a High Capacity Gas-Fired Paper Dryer. Final Technical Report GTI/DOE/SMP/GRI-61134/80042/30797. Gas Technology Institute. Chicago, USA. 2004. – 45 p.
3. Исаев С.А., Грицкевич М.С., Леонтьев А.И., Попов И.А., Судаков А.Г. Аномальная интенсификация турбулентного отрывного течения в наклоненных однорядных овально-траншейных лунках на стенке узкого канала // Теплофизика высоких температур. 2019. Т. 57. № 5. С. 797–800.
4. Ильинков А.В., Такмовцев В.В., Щукин А.В., Хабибуллин И.И., Зарипов И.Ш. Интенсивность вихревых структур в диффузорных выемках // Изв. ВУЗов. Авиационная техника. 2018. № 4. С. 75–80.

УДК 532.517.4

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДО- И СВЕРХЗВУКОВОГО ОБТЕКАНИЯ ВОЗДУХОМ ПЛАСТИНЫ С НАКЛОННОЙ НЕГЛУБОКОЙ КАНАВКОЙ**С.А. Исаев^{1,2}, Д.В. Никущенко¹, М.А. Зубин³**¹ Санкт-Петербургский государственный морской технический университет, Санкт-Петербург, Россия² Санкт-Петербургский государственный университет гражданской авиации имени Главного Маршала авиации А.А. Новикова, Санкт-Петербург, Россия³ Институт механики МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Численно открытое явление аномальной интенсификации отрывного низкоскоростного течения и теплообмена в наклонной канавке на структурированной пластине и стенке узкого канала получило частичное экспериментальное подтверждение, как представлено в обзоре [1]. Во входной части ориентированной под углом к потоку канавки возникает экстраординарный перепад давления между зоной торможения на наветренном склоне и областью отрицательного давления в месте генерации торнадоподобного вихря. В результате резко интенсифицируется возвратное и вторичное течение, причем максимальные скорости оказываются сравнимыми с характерной скоростью, а подчас и превосходящими. В продольном срединном и характерном поперечном сечении дна наклонных канавок в однорядном пакете на стенке узкого канала минимальная отрицательная величина трения и максимальная величина числа Нуссельта многократно (в 4–6 раз) превосходят соответствующие величины на стенке плоскопараллельного канала. При обтекании единичной канавки на пластине и стенке узкого канала относительные градиенты отрывного течения и теплообмена растут менее интенсивно (в 1,5–2,5 раза). Актуальным представляется численное определение влияния сжимаемости на аномальную интенсификацию отрывного течения и теплообмена в единичной канавке на нагретой пластине при до- и сверхзвуковых скоростях потока воздуха.

Численное моделирование отрывных течений базируется на конечно-объемных, факторизованных методах решения осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье–Стокса и энергии для сжимаемого газа при их замыкании с помощью дифференциальной модели турбулентности. В исследованиях конца 90-х годов прошлого века для решения двумерных задач широко применялась популярная двухпараметрическая диссипативная модель Лаундера–Сполдинга [2]. В настоящее время ее заменила модель переноса сдвиговых напряжений Ментера, которая прошла апробацию и верификацию на задачах осесимметричного до- и сверхзвукового обтекания затупленных тел, в том числе компоновок выступающего диска перед соосным цилиндром [3–7], истечения недорасширенной струи [8], до- и трансзвукового обтекания цилиндров и утолщенных профилей с вихревыми ячейками [9–14]. Предложена модификация улучшенной версии модели Ментера 2003 года, учитывающая влияние кривизны линий тока в рамках подхода Роди–Лещинера–Исаева [15–17]. Оригинальные распараллеленные коды VP2/3 аэродинамического и теплофизического профилей [18] базируются на многоблочных вычислительных технологиях, использующих разномасштабные сетки с частичным перекрытием.

Развитые коды применены для расчета многомерных отрывных течений, в том числе сжимаемых и имеющих физические аналоги [19–24]. Отдельно следует отметить тестовые исследования по верификации модели турбулентности и расчетных кодов, связанные с расчетом сверхзвукового обтекания шара и конуса из атласа Ван-Дайка [19], падения косога скачка уплотнения и обтекания угла сжатия [20]. Исследования [21–24] ориентированы на моделирование сверхзвукового обтекания пластин, структурированных сферическими

лунками. Выявлен интересный эффект захлаживания криволинейных поверхностей при сверхзвуковом нагреве.

Численное моделирование конвективного теплообмена в отрывных течениях сжимаемого вязкого газа выполняется на основе развитой обобщенной процедуры коррекции давления SIMPLEC, базирующейся на концепции расщепления по физическим процессам [18]. Адаптируемые на класс сжимаемых задач многоблочные вычислительные технологии реализуются в модифицированном распараллеленном пакете VP2/3 с использованием разномасштабных структурированных сеток с пересечением. Верификация пакета проводится на тестовых двумерных задачах взаимодействия косого скачка уплотнения с турбулентным пограничным слоем и обтекания угла сжатия [16], каплевидных тел с конической юбкой [3], цилиндра с соосными дисками [4]. Показывается приемлемость модифицированной с учетом влияния кривизны линий тока модели переноса сдвиговых напряжений Ментера [15–17] для расчета теплообмена в отрывных течениях сжимаемого газа.

В данной работе проводится сравнение численных прогнозов относительного числа Нуссельта в срединном сечении сферической лунки на плоской изотермической ($T = 1,1448$) пластине при сверхзвуковом обтекании воздухом, полученного на цифровом аналоге экспериментальной установки [25] с экспериментальными данными для числа Маха 4 и числа Рейнольдса $3 \cdot 10^5$ (рис. 1а). Глубина лунки составляет 0,25 от характерного размера – диаметра пятна. Установлено, что теплообмен в зоне отрывного течения внутри лунки угнетен ($Nu/Nu_{pl} < 1$) по сравнению с гладкой пластиной.

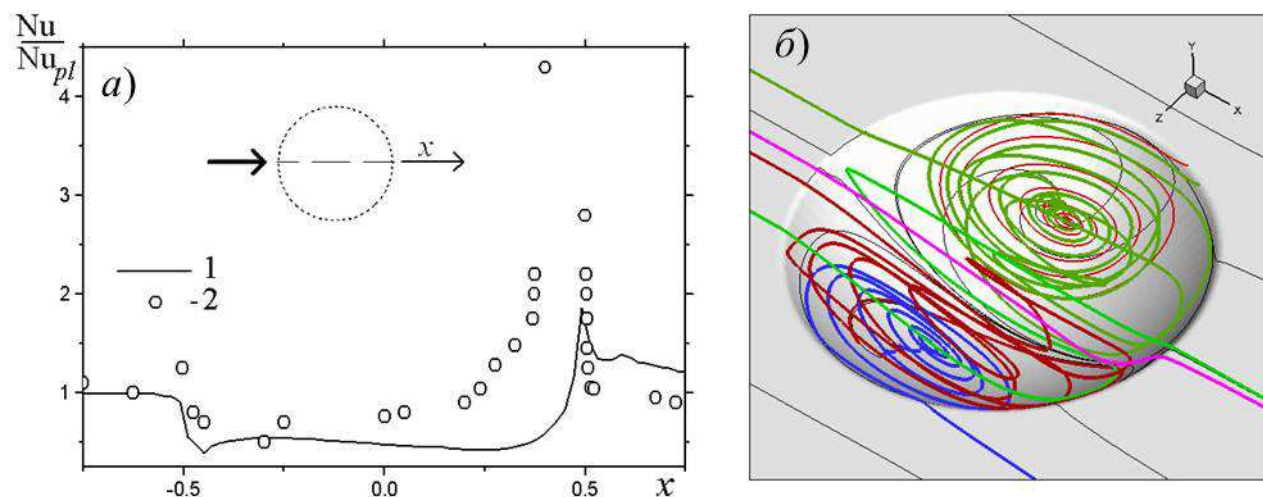


Рис. 1. Сравнение численных прогнозов (1) относительных чисел Нуссельта (а), рассчитанных в срединном сечении сферической лунки (б) на пластине при сверхзвуковом обтекании воздухом с $M = 4$, с экспериментальными данными (2) [25]

Показанная на рис. 1б, вихревая картина течения в лунке с двумя симметричными вихревыми ячейками подобна струйно-вихревым структурам, самоорганизующимся в сферической лунке на плоской стенке канала при турбулентном обтекании [26]. Однако при рассматриваемой глубине лунки для $M = 0$ наблюдается асимметричная вихревая картина с интенсивным моносмерчевым вихрем, ориентированным под углом 45° к набегающему потоку.

На рис. 2, 3 и в табл. 1, 2 представлены некоторые результаты расчета сверхзвукового обтекания пластины с наклонной канавкой, площадь пятна которой эквивалентна рассмотренной сферической лунке. Конфигурация канавки повторяет овально-траншейную лунку в узком канале [27, 28]. Ширина канавки составляет 0,3458, длина 2,3458, глубина

0,13. Радиус скругления кромки задается равным 0,025. Числа Маха и Рейнольдса выбираются такими же, как в случае сферической лунки. Относительная глубина канавки – 0,39 в отношении к ее ширине, а относительное удлинение – 6,78. Угол наклона канавки 45° . Контрольный участок пластины с канавкой имеет размеры $2,6 \times 2,6$. Также рассматриваются участки, ограниченные контурами сферической лунки и канавки. Декартовы координаты x, y, z согласованы с вектором скорости набегающего воздушного потока.

Таблица 1. Сравнение относительной теплоотдачи и относительного лобового сопротивления контрольного участка с лункой и с канавкой, а также участка, ограничивающего контуры лунки и канавки (индекс d)

	Nu_{mm}/Nu_{mmp}	C_x/C_{xpl}	Nu_{mmd}/Nu_{mmdpl}
Сферическая лунка	1,011	1,4	0,822
Наклонная канавка	1,019	1,87	1,049

Таблица 2. Сравнение экстремальных величин параметров течения и теплообмена

	Сферическая лунка	Наклонная канавка
P_{min}	-0,01	-0,04
P_{max}	0,064	0,114
U_{min}	-0,291	0,258
U_{max}	1,005	1,009
V_{min}	-0,104	-0,215
V_{max}	0,126	0,246
W_{min}	-0,195	-0,515
W_{max}	0,195	0,093
k_{max}	0,0513	0,0206
μ_{tmax}	0,00141	0,00107
ρ_{min}	0,306	0,1
ρ_{max}	2,048	3,166

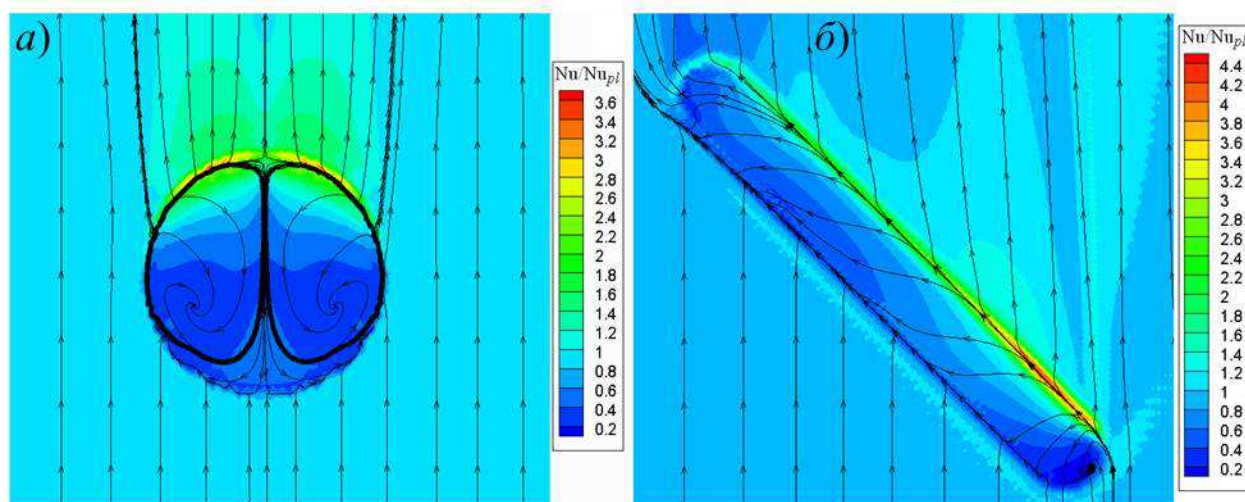


Рис. 2. Сравнение картин относительных чисел Нуссельта для контрольных участков пластин со сферической лункой (a) и наклонной канавкой эквивалентной площади пятна (б)

В перечень параметров течения, характеристик турбулентности и теплообмена входят статическое давление P , декартовы составляющие скорости U, V, W , энергия турбулентности k и коэффициент вихревой вязкости μ_t , плотность ρ и температура T .

Зависимые переменные обезразмериваются по плотности, скорости и температуре набегающего потока.

Сравнение характеристик течения и теплообмена около пластины со сферической лункой и наклонной канавкой фиксированной площади пятна показывает существенное различие в экстремальных величинах параметров потока, а также локальной и суммарной относительной теплоотдаче. Интересно отметить снижение теплоотдачи в сферической лунке и, в то же время, интенсификацию теплообмена в наклонной канавке (см. табл. 1).

Отрывное течение в лунке характеризуется заметно более низкими скоростями по сравнению с канавкой. Следует подчеркнуть, что значительная величина скорости вторичного потока $W_{\max}$ обусловлена перепадом статического давления между зоной торможения на наветренном склоне канавки и областью отрицательного давления на входе в месте генерации торнадоподобного течения (см. табл. 2). Таким образом, аномальная интенсификация отрывного течения в канавке сохраняется при больших сверхзвуковых скоростях потока. В отличие от низких дозвуковых скоростей [27, 28] формирующийся в канавке закрученный поток достигает ее конца без вторичных отрывов (рис. 2).

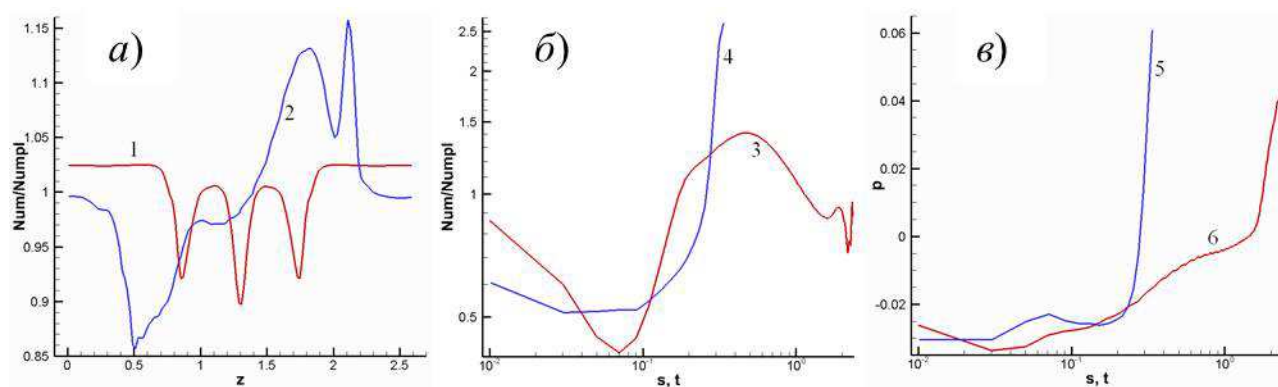


Рис. 3. Сравнение проинтегрированных по продольным полосам относительных чисел Нуссельта (а) поперек контрольного участка со сферической лункой (1) и наклонной канавкой (2), проинтегрированных по поперечным полосам относительных чисел Нуссельта поперек (3) и вдоль (4) участка внутри контура наклонной канавки (б), распределений давления (в) в поперечном сечении стыковки входного сферического и траншейного участков канавки (5) и продольном срединном сечении канавки (6)

Сравнение проинтегрированных по продольным полосам в поперечном z -направлении контрольного участка со сферической лункой и наклонной канавкой относительных чисел Нуссельта показывает различие в поведении тепловых потоков (рис. 2а) и в суммарной теплоотдаче (табл. 1) на структурированной пластине. Максимум отношения Nu_m/Nu_{mpl} достигает 15%.

Сравнение проинтегрированной по продольным и поперечным полосам в поперечном t и продольном s направлениях относительной теплоотдачи на участке, ограниченном контуром наклонной канавки, показывает, что зона угнетенного теплообмена ($Nu_m/Nu_{mpl} < 1$) локализуется во входной и в подветренной частях канавки (рис. 2б). В то же время на наветренном склоне относительная теплоотдача достигает 2,5, а в срединной донной части – 1,5.

Характерные сечения канавки – продольное срединное и поперечное в месте перехода от входного сферического сегмента к траншейной части. Статическое давление нарастает вдоль наклонной канавки от отрицательных величин. Также давление возрастает от подветренного склона к наветренному, причем на дне канавки давление отрицательное.

Исследование выполнено за счет грантов РНФ (проект №22-19-00056 (эксперимент) №23-19-00083 (расчет)).

Литература

1. Исаев С.А. Генезис аномальной интенсификации отрывного течения и теплообмена в наклонных канавках на структурированных поверхностях // МЖГ. 2022. № 5. С. 13–24.
2. Бобышев В.К., Исаев С.А. Численное исследование влияния сжимаемости на механизм снижения лобового сопротивления цилиндра с организованными срывными зонами в турбулентном потоке вязкого газа // ИФЖ. 1998. Т. 71. № 4. С. 606–612.
3. Исаев С.А., Михалев А.Н., Судаков А.Г., Усачов А.Е. Моделирование турбулентного обтекания каплевидного тела с конической юбкой // ЖТФ. 2007. Т. 52. № 8. С. 29–35.
4. Исаев С.А., Липницкий Ю.М., Михалев А.Н., Панасенко А.В., Усачов А.Е. Моделирование сверхзвукового турбулентного обтекания цилиндра с соосными дисками // ИФЖ. 2011. Т. 84. № 4. С. 764–776.
5. Исаев С.А., Баранов П.А., Михалев А.Н., Судаков А.Г. Моделирование эффекта снижения лобового сопротивления цилиндра с выступающим диском при высоких числах Маха // Письма в ЖТФ. 2014. Т. 40. № 22. С. 21–29.
6. Исаев С.А., Судаков А.Г., Никущенко Д.В., Чунг К. Влияние сжимаемости на уловленный вихрь в зазоре между соосными диском и цилиндром и сопротивление компоновки при осесимметричном до-, транс- и сверхзвуковом обтекании // МЖГ. 2022. № 6. С. 125–134.
7. Исаев С.А., Липницкий Ю.М., Михалев А.Н., Панасенко А.В., Баранов П.А. Моделирование снижения лобового сопротивления спускаемого аппарата типа “Союз” при размещении перед ним соосного диска // Письма в ЖТФ. 2013. Т. 39. № 16. С. 80–86.
8. Исаев С.А., Липницкий Ю.М., Баранов П.А., Панасенко А.В., Усачов А.Е. Моделирование турбулентной сверхзвуковой недорасширенной струи, истекающей в затопленное пространство, с помощью модели переноса сдвиговых напряжений // ИФЖ. 2012. Т. 85. № 6. С. 1253–1267.
9. Баранов П.А., Исаев С.А., Судаков А.Г., Усачов А.Е. Численное моделирование турбулентного обтекания вязким газом цилиндра с круговой вихревой ячейкой при отсосе с поверхности центрального тела // МЖГ. 2007. № 6. С. 34–45.
10. Исаев С.А., Судаков А.Г., Баранов П.А., Мордынский Н.А. Численное моделирование кризисных явлений при дозвуковом обтекании толстого профиля с вихревыми ячейками // ИФЖ. 2007. Т. 80. № 6. С. 122–126.
11. Isaev S.A., Sudakov A.G., Usachov A.E., Baranov P.A. Numerical simulation of sub-, trans- and supersonic flow around bodies with vortex cells in the framework of multiblock computational technologies // Proc. West-East High Speed Flow Field Conf. Moscow, 2007. 6 p.
12. Исаев С.А., Баранов П.А., Пригородов Ю.С., Судаков А.Г., Усачов А.Е. Численный анализ влияния сжимаемости на турбулентное, симметричное обтекание вязким газом цилиндра с круговой вихревой ячейкой // ИФЖ. 2008. Т. 81. № 2. С. 330–337.
13. Isaev S., Baranov P., Popov I., Sudakov A., Usachov A. Improvement of aerodynamic characteristics of a thick airfoil with a vortex cell in sub- and transonic flow // Acta Astronautica. 2017. Vol. 132. Pp. 204–220.
14. Аэродинамика утолщенных тел с вихревыми ячейками. Численное и физическое моделирование / Под ред. С.А. Исаева. СПб.: Изд-во Политех. ун-та, 2016. – 215 с.
15. Исаев С.А. Верификация модифицированной с учетом влияния кривизны линий тока в рамках подхода Роди–Лешцинера–Исаева модели переноса сдвиговых напряжений на расчетных примерах до- и сверхзвуковых отрывных течений // Сб. докл. IV Минского междунар. colloквиума по физике ударных волн, горения и детонации. 9–12 ноября 2015 г. Минск: ИТМО им. А.В. Лыкова, 2015. С. 62–69.

16. Исаев С.А., Судаков А.Г., Баранов П.А., Жукова Ю.В., Усачов А.Е. Многоблочные вычислительные технологии применительно к расчету турбулентных отрывных и струйных течений сжимаемого вязкого газа со скачками уплотнения и ударными волнами в рамках модели переноса сдвиговых напряжений. 6 глава в коллективной монографии под редакцией В.А. Левина, Н.А. Фомина, В.Е. Фортова. Физика ударных волн, горения, детонации, взрыва и неравновесных процессов. Часть 2. Минск: ИТМО НАН Беларуси, 2018. С. 216–228.
17. Isaev S.A. Experience of application of SST-model-2003 with correction on streamline curvature according to Rodi-Leshziner-Isaev approach for (U)RANS calculations of separated and vortex sub- and supersonic flows // AIP Conf. Proc. 2018. P. 020015.1-7.
18. Исаев С.А., Баранов П.А., Усачов А.Е. Многоблочные вычислительные технологии в пакете VP2/3 по аэротермодинамике. Саарбрюкен: LAP LAMBERT Academic Publishing. 2013. 316 с.
19. Альбом течений жидкости и газа / Сост. М. Ван-Дайк. М.: Мир, 1986. – 184 с.
20. Horstman C.C. Hypersonic shock-wave turbulent boundary-layer interaction flows - Experiment and computation // AIAA Paper. 1991. No. 91-1760. – 23 p.
21. Isaev S.A., Leontiev A.I., Sudakov A.G., Baranov P.A. Numerical simulation of supersonic flow around a dimpled surface // Minsk International Colloquium on Physics of Shock Waves, Combustion, Detonation and Non-Equilibrium Processes. MIC2005. Minsk. 2005. Pp. 48–49.
22. Баранов П.А., Исаев С.А., Леонтьев А.И., Усачов А.Е. Численное моделирование снижения аэродинамического нагрева рельефа со сферическими и сотовыми лунками при сверх- и гиперзвуковых скоростях // Тр. Четвертой РНКТ. Т.6. Дисперсные потоки и пористые среды. Интенсификация теплообмена. М.: Издательский дом МЭИ, 2006. С. 158–161.
23. Леонтьев А.И., Исаев С.А., Садовников Г.С. Моделирование вихревого охлаждения при сверх- и гиперзвуковом обтекании рельефов с траншеями и лунками // Тр. XVII школы-семинара молодых ученых и специалистов под рук. акад. РАН А.И. Леонтьева “Проблемы газодинамики и тепломассообмена в аэрокосмических технологиях”. М.: Издательский дом МЭИ, 2009. Т. 1. С. 208–212.
24. Леонтьев А.И., Исаев С.А., Садовников Г.С. Численное моделирование снижения тепловых нагрузок при сверх- и гиперзвуковом обтекании плоской стенки с нанесенными траншеями и лунками // ТПТ. 2009. № 9. С. 362–366.
25. Боровой В.Я., Яковлев Л.В. Теплообмен при сверхзвуковом обтекании одиночной лунки // МЖГ. 1991. № 5. С. 48–52.
26. Исаев С.А., Леонтьев А.И., Щелчков А.В., Гульцова М.Е. Анализ перестройки струйно-вихревой структуры отрывного турбулентного течения в сферической лунке на стенке узкого канала при увеличении ее глубины и интенсификации вторичного течения в ней // ИФЖ. 2015. Т. 88. № 5. С. 1260–1264.
27. Исаев С.А., Леонтьев А.И., Гульцова М.Е., Попов Ю.А. Перестройка и интенсификация смерчеобразного течения в узком канале при удлинении овальной лунки с фиксированной площадью пятна // Письма в ЖТФ. 2015. Т. 41. Вып. 12. С. 89–96.
28. Isaev S.A., Schelchikov A.V., Leontiev A.I., Gortyshov Yu.F., Baranov P.A., Popov I.A. Tornado-like heat transfer enhancement in the narrow plane-parallel channel with the oval-trench dimple of fixed depth and spot area // Int. J. Heat and Mass Transfer. 2017. Vol. 109. Pp. 40–62.

УДК 532.517.4

О ПОДОБИИ В ЗАДАЧАХ УСКОРЕНИЯ ПЛАМЕНИ И ПЕРЕХОДА В ДЕТОНАЦИЮ**А.Д. Киверин, А.В. Тюнин, И.С. Яковенко, А.В. Ярков**

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

На сегодняшний день горение топливно-воздушных смесей составляет основу современной энергетики. При этом основными направлениями развития энергетических систем является повышение энергоэффективности и взрывобезопасности циклов, основанных на горении топлив. Это, в свою очередь, требует четкого понимания конкретных сценариев развития горения в конкретных условиях и определения критериев реализации того или иного режима горения. Здесь важно отметить, что, как правило, развитие горения имеет нестационарный характер, что определяет разнообразие нештатных режимов работы энергетических систем и аварийных сценариев. В настоящей работе суммируется опыт исследований нестационарных режимов горения в открытом пространстве и замкнутых объемах с целью освещения базовых механизмов, определяющих эволюцию пламени в тех или иных условиях. Особое внимание уделяется подобию, наблюдаемому в процессе нестационарного развития горения.

На основе данных, полученных ранее в цикле работ [1–4], продемонстрировано, что ведущими механизмами нестационарного развития горения в открытом пространстве являются гидродинамическая неустойчивость фронта пламени [5] и термоакустическая неустойчивость, определяющая нарастание давления в окрестности фронта пламени и, как следствие, формирование ударных волн и их усиление. При этом наравне с известным фактом, что гидродинамическая неустойчивость определяет автомодельный характер ускоренного распространения свободно расходящегося пламени [5], результаты численного моделирования показывают, что локальная пространственная структура фронта пламени может быть существенно усложнена (рис. 1а) в результате взаимодействия пламени с потоком, генерируемым в ходе развития горения. При этом в отдельных случаях может иметь место сначала локальное, а позже и глобальное, отклонение закона ускорения пламени от автомодельного. В результате этого взаимная интенсификация волн сжатия и горения во фронте пламени приводит к генерации сильных ударных волн или даже к переходу медленного горения в детонацию, что, например, наблюдалось экспериментально [6]. Здесь важно подчеркнуть, что базовым механизмом как установления автомодельного режима ускоренного распространения пламени, так и его вырождения является гидродинамическая неустойчивость фронта пламени и согласованная с нею эволюция потока в окрестности фронта пламени. При этом стоит отметить, что классическая теория довольно точно описывает развитие свободно распространяющегося пламени (рис. 1б), что делает возможной прогностическую оценку вероятности перехода медленного горения в детонацию на основе анализа основных характеристик системы, таких как нормальная скорость горения, ширина фронта пламени, скорость звука в среде и т.п. Таким образом, может быть оценена степень опасности при утечках летучих горючих материалов, включая газообразные топлива, таких как водород и метан, рассматриваемых сегодня как перспективные топлива для широкого класса энергетических систем, включая газопоршневые двигатели [7].

Известно, что в ограниченных объемах описанные выше эффекты нарастания давления, генерации сильных ударных волн и перехода медленного горения в детонацию могут проявляться в существенно большей степени. В связи с этим решение задачи взрывобезопасности при наполнении ограниченного объема топливно-воздушной смесью представляется еще более принципиальным для оценки ресурса работы камер сгорания и взрывобезопасности при утечке горючих материалов внутрь ограниченного объема. Отметим здесь, что процесс ускорения пламени и перехода горения в детонацию внутри

ограниченных объемов исследован значительно шире в сравнении со случаем развития горения в неограниченном пространстве. Тем не менее, остается открытым ряд вопросов, включая оценку критических условий, достижение которых необходимо для ускорения пламени и перехода медленного горения в детонацию. В недавней работе [8] на основе анализа расчетных данных было продемонстрировано, что пламя, инициированное и распространяющееся в канале, заполненном горючей газообразной смесью, подчиняется некоему закону масштабирования в том смысле, что характерные параметры задачи, такие как нормальная скорость горения (u_f) и ширина канала (H), могут быть использованы для определения подобия процесса ускоренного распространения пламени в каналах различной геометрии, заполненных смесями различного состава. Здесь, однако, стоит отметить, что по мере увеличения как реакционной способности смеси, так и ширины канала может иметь место отклонение от закона подобия за счет развития вторичной неустойчивости на фронте пламени (рис. 2). Тем не менее, как впоследствии показали экспериментальные исследования [9], подобие сохраняется в относительно широком диапазоне параметров задачи. Этот факт, в свою очередь, позволяет сделать вывод о возможности использования лабораторных стендов и экономичных расчетов для предсказания возможного ускорения пламени в каналах и ограниченных объемах другой геометрии. Таким образом, доступными лабораторными средствами могут быть получены базы данных по критическим условиям реализации нештатных режимов горения, включая наиболее опасные режимы со значительным ускорением пламени, генерацией сильных ударных волн и переходом медленного горения в детонацию.

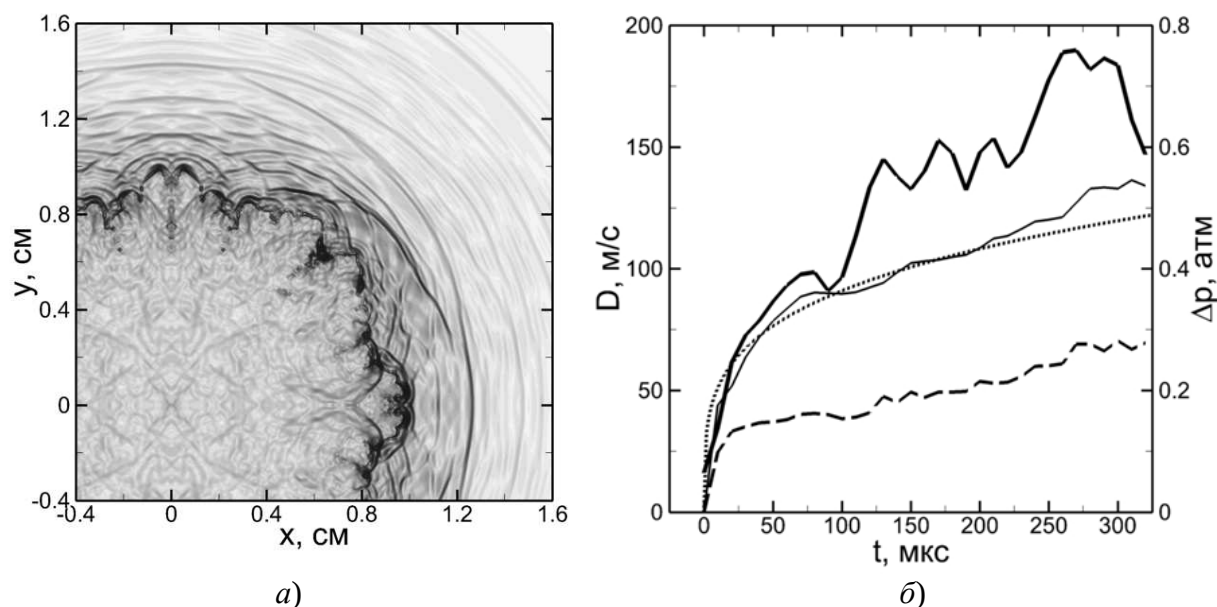


Рис. 1. Структура течения в окрестности свободно расходящегося фронта пламени (эквимоллярная водород-кислородная смесь при повышенном давлении в 10 атм, момент времени незадолго до перехода медленного горения в детонацию) (а) и сопоставление хронограмм скорости фронта пламени, полученной численно и оцененной согласно автомодельному закону, предложенному в [5] (эквимоллярная водород-кислородная смесь при нормальном давлении) (б): толстая сплошная – максимальное значение скорости фронта, тонкая сплошная – средняя скорость фронта, пунктирная – автомодельный закон из [5], штриховая – давление

На основе представленных в настоящей работе данных можно сделать принципиальный вывод, что в широком диапазоне масштабов особенности газодинамики

определяют подобие в развитии нестационарных режимов горения. Этот неочевидный факт, в свою очередь, позволяет получать достоверные сведения о развитии тех или иных сценариев, включая горение в нештатных режимах и переход медленного горения в детонацию, с использованием лабораторных стендов и доступных вычислительных средств.

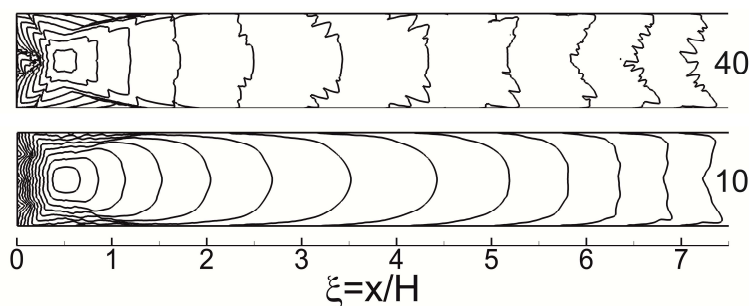


Рис. 2. Эволюция фронта пламени в каналах шириной 10 и 40 мм, заполненных водородно-воздушной смесью

Литература

1. Киверин А.Д., Яковенко И.С., Фортон В.Е. Механизм формирования детонации при свободном распространении пламени в неограниченном пространстве // Докл. РАН. 2019. Т. 489. № 5. С. 461–464.
2. Kiverin A., Yakovenko I. Mechanism of transition to detonation in unconfined volumes // *Acta Astronautica*. 2020. Vol. 176. Pp. 647–652.
3. Kiverin A., Yakovenko I. Thermo-acoustic instability in the process of flame propagation and transition to detonation // *Acta Astronautica*. 2021. Vol. 181. Pp. 649–654.
4. Kiverin A., Medvedkov I., Yakovenko I., Bykov V. Three-dimensional structure of freely-propagating flame prior to deflagration-to-detonation transition // *Acta Astronautica*. 2023. Vol. 204. Pp. 686–691.
5. Гостинцев Ю.А., Истратов А.Г., Шуленин Ю.В. Автомодельный режим распространения свободного турбулентного пламени в перемешанных газовых смесях // *Физика горения и взрыва*. 1988. Т. 24. № 5. С. 63.
6. Зельдович Я.Б., Розловский А.И. Об условиях возникновения неустойчивости нормального горения // Докл. АН СССР. 1947. Т. 57. № 4. С. 365–368.
7. Киверин А.Д., Смыгалина А.Е. Механизмы развития интенсивных динамических процессов при сжигании водорода в камерах сгорания ДВС // *Теплофизика высоких температур*. 2022. Т. 60. № 1. С. 103–107.
8. Киверин А.Д., Тюрнин А.В., Яковенко И.С. Автомодельность процесса распространения пламени в канале // *Химическая физика*. 2021. Т. 40. № 12. С. 18–22.
9. Yakovenko I., Kiverin A., Krivosheyev P., Kuzmitski V., Navitski A., Penyazkov O., Tyurnin A., Yarkov A. Burning rate estimation based on flame evolution in a channel // *Acta Astronautica*. 2023. Vol. 204. Pp. 768–775.

УДК 536.2

ПОЛИНОМИАЛЬНОЕ РЕШЕНИЕ ОДНОГО УРАВНЕНИЯ В ТЕОРИИ ТЕПЛОВОГО ВЗРЫВА: КРАЕВАЯ ЗАДАЧА БРАТУ

В.А. Кот

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Введение

Настоящая работа посвящена нахождению приближенного полиномиального решения задачи Лиувилля–Брату–Гельфанда, а именно, ее частной краевой задачи – классической нелинейной задачи Брату. Данная задача имеет большую историю. В 1914 г. появилась собственно сама статья Г. Брату [1]. Ее обобщение иногда называют задачей Лиувилля–Брату–Гельфанда [2, 3]. Укажем, что задача Брату используется в разных приложениях, например, как модель расширения Вселенной Чандрасекара, модель воспламенения твердого топлива в теории теплового горения и воспламенения, модель тепловых реакций, теория химических реакций, отдельные приложения нанотехнологии, физика плазмы и т. д. [4].

Что касается так называемого теплового взрыва, то всестороннее изучение данного явления восходит к работам Д. А. Франк-Каменецкого [5, 6] и его последователям, например, [7–16]. Предположим, что твердое тело изначально находится при температуре окружающей среды. Предположим, что в какой-то момент времени внутри тела начинает происходить экзотермическая химическая реакция, при протекании которой выделяется тепловая энергия, приводящая к повышению температуры. Одновременно на открытой поверхности тела данная тепловая энергия теряется за счет конвекции и, возможно, излучения в окружающую среду. Если предположить, что выделяемая теплота превышает скорость, с которой тепло теряется на его поверхности, то можно ожидать неустойчивого накопления тепла внутри тела. В этом случае установившееся температурное состояние тела невозможно. Это связано, прежде всего, с тем, что повышение температуры приводит к росту скорости реакции, что, в свою очередь, вызывает дальнейшее повышение температуры тела. Таким образом, если увеличение скорости реакции преобладает над увеличением скорости теплоотдачи с поверхности тела, то в этом случае можно ожидать неустойчивого теплового взрыва, что сопровождается неограниченным возрастанием температуры твердого тела.

Общий анализ проблемы

Задачи стационарной теории теплового взрыва [6, 13] приводят к уравнению

$$\Delta\theta + \lambda \exp\left(\frac{\theta}{1+\epsilon\theta}\right) = 0, \quad (1)$$

$$\theta = \frac{(T - T_0)E}{RT_0^2}, \quad \gamma = \frac{QL^2}{kRT_0^2}EA \exp\left(-\frac{E}{RT_0}\right), \quad \epsilon = \frac{T_0R}{E}.$$

Здесь Δ – оператор Лапласа, θ – безразмерная температура, λ – параметр Франк-Каменецкого, E – энергия активации, T – абсолютная температура, T_0 – температура среды, R – универсальная газовая постоянная, k – коэффициент теплопроводности, Q – тепловой эффект реакции на единицу объема, A – предэкспоненциальный множитель в выражении для скорости реакции. На границе области имеем условие

$$\left(\frac{\partial\theta}{\partial n} + \text{Bi}\theta\right)\Big|_{\Gamma} = 0. \quad (2)$$

Здесь Bi – критерий Био, n – нормаль к границе области Γ .

Для одномерного случая теплового взрыва в протяженной пластине ($-L < x < L$), если пренебречь относительно малой величиной ϵ , а также допустить протекание интенсивного теплоотвода с поверхности пластины (большие значения критерия Био $Bi \rightarrow \infty$), приходим к следующей формулировке задачи:

$$\frac{d^2\theta}{dx^2} + \lambda e^\theta = 0, \quad 0 < x < 1, \quad (3)$$

$$\frac{d\theta(0)}{dx} = 0, \quad \theta(1) = 0. \quad (4)$$

Снова возвращаясь к задаче Лиувилля–Брату–Гельфанда, отметим, что она связана с нахождением положительных решений уравнения

$$\begin{aligned} \Delta u + \lambda e^u &= 0, & x \in \Omega, \\ u &= 0, & x \in \partial\Omega, \end{aligned} \quad (5)$$

где Ω – ограниченная область в R^N , N – дискретный параметр, который может также изменяться непрерывно. В работе [17] показано, что уравнение (1) радиально симметрично и оно эквивалентно краевой задаче для обыкновенного дифференциального уравнения

$$\begin{aligned} u'' + \frac{N-1}{r} u' + \lambda e^u &= 0, & r \in [0, 1], & \quad N = 1, 2, 3, \dots, \\ u'(0) &= u(1) = 0, \end{aligned} \quad (6)$$

где $u(r) = u(|x|)$, штрих означает дифференцирование по r . Существование решений, зависящих от λ и N , хорошо изучено: для $N = 1$ – Лиувиллем [2], для $N = 2$ – Брату [1], для $N = 3$ – Д.А. Франк-Каменецким [5] и И.М. Гельфандом [11], для всех N – Д. Джозефом и Т. Лундгреном [18], установившими связь между множественностью решений и размерностью пространства N (рис. 1). Радиальные решения задач типа Лиувилля–Брату–Гельфанда достаточно подробно исследованы Дж. Якобсеном и К. Шмиттом [3, 19].

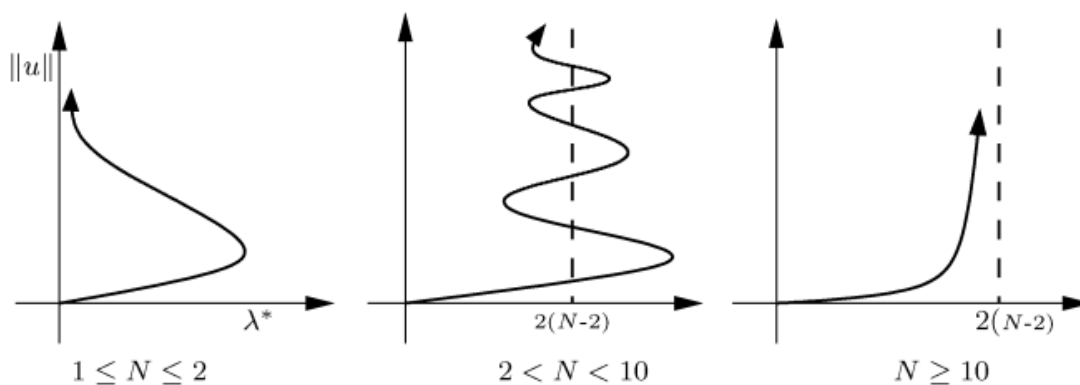


Рис. 1. Глобальные континуумы для (4) в зависимости от N [3]

Стандартная форма краевой задачи Брату при $N = 1$ имеет вид

$$u''(x) + \lambda e^{u(x)} = 0, \quad (7)$$

$$u(0) = 0, \quad u(1) = 0. \quad (8)$$

Интуитивно можно ожидать, что при больших значениях параметра λ второе слагаемое уравнения (7) должно доминировать над первым слагаемым и в итоге доводить температуру тела до бесконечности (тепловой взрыв), тогда как при меньших значениях параметра λ возможно стационарное температурное состояние [20].

Точное решение уравнения (7) имеет вид

$$u^*(x) = 2 \ln \left[\frac{\cosh \alpha}{\cosh(\alpha(1-2x))} \right], \quad (9)$$

где α – решение трансцендентного уравнения

$$\cosh \alpha = \frac{4}{\sqrt{2\lambda}} \alpha. \quad (10)$$

Задача Брату вида (7), (8) имеет одно решение при $\lambda = \lambda_c = 3.513830719$ (точка ветвления) [21]. У данной задачи два решения при параметре $\lambda < \lambda_c$, ведущем к двум ветвям (рис. 1), и не имеется решений при $\lambda > \lambda_c$. Решение (9) имеет симметрию относительно точки $x = 1/2$, в которой функция u максимальная:

$$u_{\max} = u(1/2) = 2 \ln(\cosh \alpha) = 2 \ln(4\alpha / \sqrt{2\lambda}). \quad (11)$$

Некоторые подходы в приближенном решении задачи Брату

Уравнение (7) является нелинейным дифференциальным уравнением и не имеет малых параметров. По этой причине приближенное решение данной задачи с высокоточными аппроксимациями вызывает известные затруднения. Многие авторы приближенно решали нелинейное уравнение Брату, используя разные аналитические подходы, в частности, с помощью полиномов Чебышева [22], методом коллокаций посредством W -функций Ламберта [23], на основе вариационных подходов [24, 24], с помощью не полиномиальных сплайн-функций [26], методом разложения Адомиана [21].

Численные методы решения проблемы включают псевдоспектральный метод Чебышева на основе полиномов Гегенбауэра [27], аппроксимацию низкого порядка с полиномами Чебышева [23]. В [28] решения даны в B -сплайнах. Разложение в ряд Тейлора и метод дифференциального преобразования использовались в работе [29]. Применение разложения Адомиана, неявно реализующего разложение Тейлора, рассматривалось в [21, 30–33]. Метод гомотопического анализа представлен в работах [34–36].

Метод последовательного дифференцирования (SDM)

В работе [37] задача Брату решена последовательным дифференцированием уравнения (The Successive Differentiation Method – SDM) с разложением искомого решения в ряд Тейлора в точке $x = 0$. Для начала рассмотрим обобщенное обыкновенное дифференциальное уравнение n -го порядка

$$u^{(n)}(x) = R(u(x), u'(x), \dots, u^{(n-1)}(x)) + q(x), \quad (12)$$

$$u(0) = \alpha_0, \quad u'(0) = \alpha_1, \quad u''(0) = \alpha_2, \quad \dots, \quad u^{(n-1)}(0) = \alpha_{n-1},$$

где R может быть линейным или нелинейным оператором функции $u(x)$ и ее производных с постоянными или переменными коэффициентами, при этом α_i , $0 \leq i \leq (n-1)$ определяют собой начальные условия. Последовательно дифференцируя обе части (12) k раз, получаем

$$(u^{(n)})^{(k)}(x) = R^{(k)}(u(x), u'(x), \dots, u^{(n-1)}(x)) + q^{(k)}(x), \quad k \geq 1. \quad (13)$$

Подставляя на каждом шаге дифференцирования $x=0$, вычисляем значения функций $(u^{(n)})'(0)$, $(u^{(n)})''(0)$, $(u^{(n)})'''(0)$, ... Определяя эти значения и используя начальные условия, получаем ряд Тейлора для функции $u(x)$ с ее разложением в точке $x=0$.

Применение метода SDM к задаче Брату (7), (8) дает [37]

$$\begin{aligned} u(x) &\rightarrow u(0)=0, \\ u'(x) &\rightarrow u'(0)=\alpha, \\ u''(x) &=-\lambda e^{u(x)} \rightarrow u''(0)=-\lambda, \\ u'''(x) &=-\lambda u'(x)e^{u(x)} \rightarrow u'''(0)=-\alpha\lambda, \\ u^{(4)}(x) &=-\left(\lambda(u'(x))^2 + \lambda u''(x)\right)e^{u(x)} \rightarrow u^{(4)}(0)=-\alpha^2\lambda + \lambda^2, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (14)$$

Отсюда следует решение в виде степенного ряда

$$u(x) = \sum_{k=1}^N \frac{u^{(k)}}{k!} x^k = \alpha x - \frac{\lambda}{2!} x^2 - \frac{\alpha\lambda}{3!} x^3 - \frac{\alpha^2\lambda - \lambda^2}{4!} x^4 - \frac{\alpha^3\lambda - 4\alpha\lambda^2}{5!} x^5 + \dots + \frac{u^{(N)}}{N!} x^N. \quad (15)$$

Из точного решения (9), (10) при $\lambda=1$ находим

$$u_1'(0) = \alpha_1^* = 0.549352729, \quad u_2'(0) = \alpha_2^* = 10.846899019. \quad (16)$$

В частности, при $N=4, 6$ и 8 из (15) и граничного условия $u(1)=0$ получаем три обыкновенных алгебраических уравнения, из которых находим:

$$\left. \begin{aligned} N=4: & \quad \alpha_1 = 0.56601886, \quad \alpha_2 = 19.4339 \\ N=6: & \quad \alpha_1 = 0.54604304, \quad \alpha_2 = 6.11590 \\ N=8: & \quad \alpha_1 = 0.54995012, \quad \alpha_2 = 6.09782 \end{aligned} \right\} \leftrightarrow \begin{cases} \alpha_1^* = 0.549352729 \\ \alpha_2^* = 10.846899019 \end{cases}. \quad (17)$$

В итоге (для α_1)

$$u(x) = 0.566019x - 0.5x^2 - 0.0943365x^3 + 0.0283176x^4, \quad (18)$$

$$\begin{aligned} u(x) &= 0.546043x - 0.5x^2 - 0.0910072x^3 + \\ &+ 0.0292432x^4 + 0.0168447x^5 - 0.00112376x^6, \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} u(x) &= 0.549950x - 0.5x^2 - 0.0916584x^3 + 0.0290648x^4 + 0.0169456x^5 - \\ &- 0.00106191x^6 - 0.00286191x^7 - 0.000378319x^8. \end{aligned} \quad (20)$$

Графики приближенных решений (18)–(20) в сравнении с точным решением (9) представлены на рис. 2а. Абсолютное отклонение $u(x)$ от точного решения $u^*(x)$ согласно (9), (10) рассчитывалось как $|E| = |u(x) - u^*(x)|$. Относительно хорошее решение имеем лишь для $N=8$. В этом случае $|E|_{\max} = 0.000366$ (рис. 2б). Отметим, что метод SDM оказался «чувствительным» к величине параметра λ , с ростом которого для получения более-менее приемлемой аппроксимации требуется существенное увеличение степени полинома.

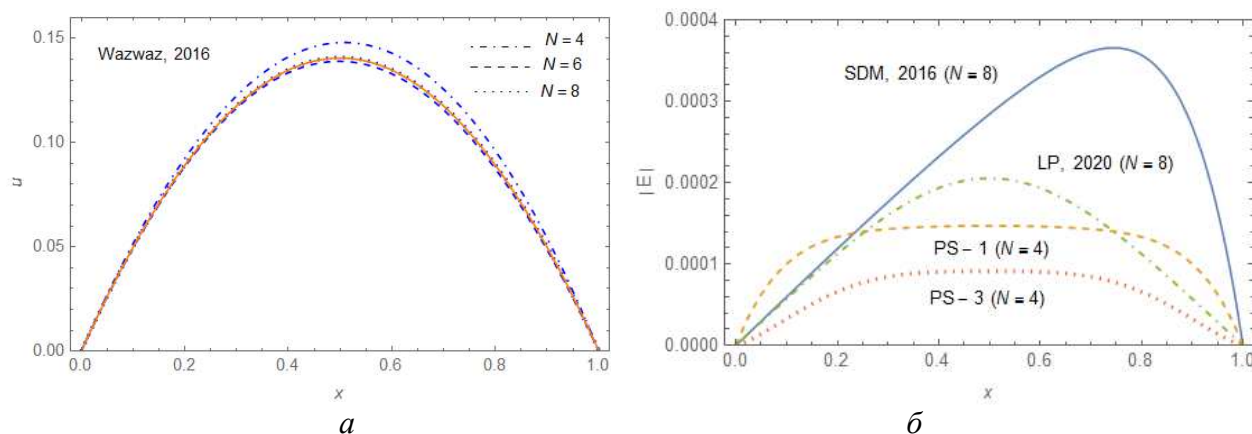


Рис. 2. Графики приближенных (18)–(20) и точного (9) (сплошная линия) решений (а) и абсолютных отклонений согласно SDM, LP и PS (варианты 1 и 3) (б)

Двухточечное разложение в степенной ряд: полиномы Лиля (LP)

В работе [38] изложен метод решения посредством разложения функции в степенной ряд (Leal-polynomials – LP) в граничных точках $x = 0$ и $x = 1$ с заданием (как и в работе [37]) неизвестной, подлежащей определению, производной $u'(0)$. Для левой границы ($x = 0$) имеем разложение функции $u(x)$ в виде (15). Аналогично для $x = 1$ в работе [38] получено:

$$\begin{aligned} u(1) = 0, \quad u'(1) = -\alpha, \quad u''(1) = -\lambda, \quad u'''(1) = \alpha\lambda, \quad u^{(4)}(1) = -\alpha^2\lambda + \lambda^2, \\ u^{(5)}(1) = \alpha^3\lambda - 4\alpha\lambda^2, \quad u^{(6)}(1) = 4\lambda^3 + 11\alpha^2\lambda^2 - \alpha^4\lambda, \quad \dots \end{aligned} \quad (21)$$

Решение ищется в виде

$$u(x) = \sum_{k=0}^{(N-1)/2} \frac{u^{(k)}(0)}{k!} x^k + \sum_{k=0}^{(N-1)/2} b_k x^{(N+1)/2+k}, \quad (22)$$

где коэффициенты b_k определяются из соотношений (21). Для отыскания $u'(0)$ в [38] применена экстраполяция Ричардсона (с помощью Maple 15) для интервала $\lambda = [0, 3.45]$ с интервалом $\Delta\lambda = 0.05$. Анализ кривых для $|E(x)|$, построенных согласно SDM и LP при $N = 8$ и $\lambda = 1$ (рис. 1б), показывает, что аппроксимация на основе SDM имеет отклонение от точного решения примерно того же порядка, что и в решении LP. При достаточно больших значениях параметра λ метод LP также дает достаточно неплохие аппроксимации, о чем свидетельствует построенная на рис. 2а кривая $u(x)$ для $\lambda = 3.4$ [38]

$$\begin{aligned} u(x) = 3.173281398x - 1.7x^2 - 1.798192792219x^3 - 0.9448762677414x^4 - \\ - 0.6626993715473x^5 + 5.013344070797x^6 - 4.107809383098x^7 + \\ + 1.02695234577x^8 - 2.353570116956 \cdot 10^{-9}x^9. \end{aligned} \quad (23)$$

Максимальное отклонение (по абсолютной величине) составляет ~ 0.002 . По сравнению с LP метод SDM в редакции [37] здесь явно не «справляется» (рис. 2а).

Метод оптимальной гомотопической асимптотики (ОНАМ)

Авторы работы [39] предложили метод оптимальной гомотопической асимптотики (The Optimal Homotopy Asymptotic Method – ОНАМ) для решения задач, описываемых нелинейными дифференциальными уравнениями. В частности, для приближенного решения краевой задачи Брату (7), (8) предложен полином в виде

$$u(x) = a_1 x(1-x) + a_2 x^2(1-x)^2 + a_3 x^3(1-x)^3 + \dots + a_m x^m(1-x)^m. \quad (24)$$

Это автоматически обеспечивает симметрию решения относительно $x = 1/2$. Коэффициенты $\{C_k\}_{k=1}^{k=m}$ определяются из решения системы уравнений, получаемых из условия минимизации невязки уравнения (7). В частности, при $\lambda = 1$ и $m = 4$ получено

$$u(x) = a_1 x(1-x) + a_2 x^2(1-x)^2 + a_3 x^3(1-x)^3 + a_4 x^4(1-x)^4, \quad (25)$$

где

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.5493504955765137, & a_2 &= 0.0493729162162237, \\ a_3 &= 0.00704598645115735, & a_4 &= 0.0014180540705019094. \end{aligned} \quad (26)$$

Анализ (25) указывает на достигнутую высокую точность. Максимальное абсолютное отклонение составляет $\sim 1.5 \cdot 10^{-7}$. Сравнительный анализ известных полиномиальных аппроксимаций позволяет заключить, что ОНАМ дает одно из наилучших приближенных решений рассматриваемой нами краевой задачи Брату.

Новые полиномиальные решения краевой задачи Брату

Ниже представлены три новых варианта получения приближенных полиномиальных (Polynomial Solutions – PS) решений краевой задачи Брату.

Первый вариант

Используя уравнение (7) и граничные условия (8), запишем решение задачи в виде его разложения в Ряд Тейлора в точке $x = s$, ($0 < s < 1$):

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k (x-s)^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{u^{(k)}(s)}{k!} (x-s)^k. \quad (27)$$

В качестве точки разложения выберем центральную точку $s = 1/2$, для которой

$$u'(1/2) = 0, \quad u(1/2) = A. \quad (28)$$

Введем новую неизвестную, подлежащую определению, величину

$$B = e^{u(1/2)} \rightarrow A = u(1/2) = \ln B. \quad (29)$$

С учетом (29) из уравнения (7) определяем вторую производную

$$u''(1/2) = -\lambda e^{u(1/2)} \rightarrow u''(1/2) = -\lambda B. \quad (30)$$

Проведя последовательное дифференцирование уравнения (7) и применив полученное (после дифференцирования) новое уравнения для точки $x = 1/2$ с учетом граничного условия $u'(1/2) = 0$, находим третью производную

$$u^{(3)}(1/2) = -\lambda e^{u(1/2)} u'(1/2) \rightarrow u^{(3)}(1/2) = 0. \quad (31)$$

Продолжая аналогичным образом, получаем ряд

$$\begin{aligned} u(1/2) &= \ln C / \lambda, & u'(1/2) &= 0, & u''(1/2) &= -\lambda C, & u'''(1/2) &= 0, & u^{(4)}(1/2) &= \lambda^2 C^2, & u^{(5)}(1/2) &= 0, \\ u^{(6)}(1/2) &= -4\lambda^3 C^3, & u^{(7)}(1/2) &= 0, & u^{(8)} &= 34\lambda^4 C^4, & u^{(9)}(1/2) &= 0, & u^{(10)} &= -496\lambda^5 C^5, & \dots \end{aligned} \quad (32)$$

Для нового параметра $C = \lambda B$ ряд (32) принимает вид

$$\begin{aligned} u(1/2) &= \ln C / \lambda, & u'(1/2) &= 0, & u''(1/2) &= -C, & u'''(1/2) &= 0, & u^{(4)}(1/2) &= C^2, & u^{(5)}(1/2) &= 0, \\ u^{(6)}(1/2) &= -4C^3, & u^{(7)}(1/2) &= 0, & u^{(8)} &= 34C^4, & u^{(9)}(1/2) &= 0, & u^{(10)} &= -496C^5, & \dots \end{aligned} \quad (33)$$

Отсюда, используя (27)–(30), приходим к полиномиальному решению вида

$$u(x) = \ln \frac{C}{\lambda} + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{b_k}{(2k)!} C^k \left(x - \frac{1}{2}\right)^{2k}, \quad (34)$$

где первые 10 коэффициентов b_k представлены в таблице.

Коэффициенты полиномиального решения (34)

k	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
b_k	1	1	4	34	496	11 056	349 504	14 873 104	819 786 496	56 814 228 736

Используя (34) и данные таблицы, получаем

$$u(x) = \ln \frac{C}{\lambda} - \frac{C}{2} \left(x - \frac{1}{2}\right)^2 + \frac{C^2}{24} \left(x - \frac{1}{2}\right)^4 - \frac{C^3}{180} \left(x - \frac{1}{2}\right)^6 + \frac{17 C^4}{20 160} \left(x - \frac{1}{2}\right)^8 - \frac{31 C^5}{226 800} \left(x - \frac{1}{2}\right)^{10} + \dots \quad (35)$$

Из граничного условия $u(0) = 0$ получаем определяющее алгебраическое уравнение

$$\sum_{k=1}^m \frac{(-1)^{k-1}}{2^{2k}} \frac{b_k}{(2k)!} C_m^k = \ln \frac{C_m}{\lambda}, \quad (36)$$

где m – степень полинома $N = 2m$. Из (34) и (36) приходим к полиномиальному решению

$$u(x) = \sum_{k=1}^m (-1)^k \frac{b_k}{2^{2k} (2k)!} C_m^k \left[(2x-1)^{2k} - 1 \right]. \quad (37)$$

Для $m = 2$ из (36) получаем уравнение, дающее первый корень :

$$\ln \frac{C}{\lambda} - \frac{C}{8} + \frac{C^2}{384} = 0 \rightarrow \lambda = 1 \rightarrow C_1 = 1.150725 \quad (38)$$

и соответствующее полиномиальному решению

$$u(x) = 0.1403923 - 0.5753633 \left(x - \frac{1}{2}\right)^2 + 0.0551737 \left(x - \frac{1}{2}\right)^4, \quad (39)$$

либо в форме (37):

$$u(x) = \frac{C_1}{8} \left[1 + (1-2x)^2 \right] - \frac{C_1^2}{384} \left[1 + (1-2x)^4 \right]. \quad (40)$$

График приближенного решения в сравнении с точным приведен на рис. 3а. Констатируем очень хорошую аппроксимацию, поскольку оба графика полностью сливаются. Максимальная абсолютная ошибка в точке $x = \frac{1}{2}$ не превышает 0.00015 (рис. 2б; рис. 3б).

При $m = 3$ и 4 из (36) получаем

$$\frac{C}{8} - \frac{C^2}{384} + \frac{C^3}{11 520} = \ln \frac{C}{\lambda} \rightarrow \lambda = 1 \rightarrow C_1 = 1.1509016, \quad (41)$$

$$\frac{C}{8} - \frac{C^2}{384} + \frac{C^3}{11 520} - \frac{17 C^4}{5 160 960} = \ln \frac{C}{\lambda} \rightarrow \lambda = 1 \rightarrow C_1 = 1.15089386737, \quad (42)$$

что дает, соответственно, полиномиальные решения

$$u(x) = 0.1405456 - 0.5754508(x - \frac{1}{2})^2 + 0.055191(x - \frac{1}{2})^4 - 0.0084692(x - \frac{1}{2})^6, \quad (43)$$

$$u(x) = 0.1405389 - 0.575447(x - \frac{1}{2})^2 + 0.05519(x - \frac{1}{2})^4 - 0.008469(x - \frac{1}{2})^6 + 0.001480(x - \frac{1}{2})^8. \quad (44)$$

Точность аппроксимации с увеличением m на единицу существенно повышается (рис. 3б): при $m=3$ имеем $|E|_{\max} = 6.40 \cdot 10^{-6}$, а при $m=4$ – $|E|_{\max} = 2.98 \cdot 10^{-7}$. Сравнив решения (25)–(26) и (44), мы можем констатировать, что предложенный подход с разложением искомой функции в степенной ряд в точке $x = \frac{1}{2}$ дает того же порядка точность аппроксимации, как и гораздо более сложный и трудоемкий метод ОНАМ.

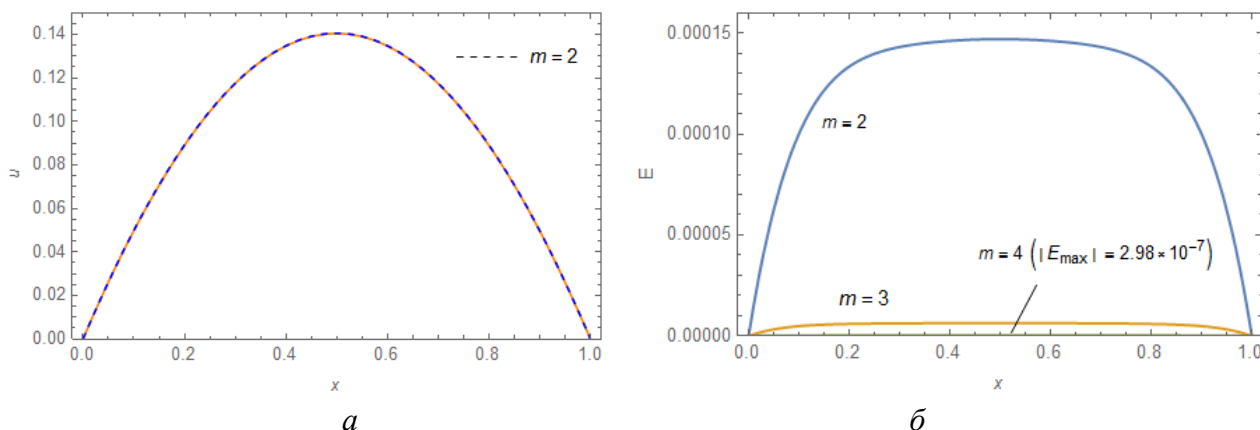


Рис. 3. Графики приближенного (39), (40) и точного (9) (сплошная линия) решений (а) и абсолютных отклонений решений (39), (43) и (44) согласно PS (вариант 1) (б)

Решение в виде полинома (37) быстро сходится с увеличением степени $N = 2m$. Так, например, при $m=6$ ($N=12$), $m=8$ ($N=16$) и $m=10$ ($N=20$) максимальная ошибка аппроксимации составляет $|E|_{\max} = 7.22 \cdot 10^{-10}$, $1.91 \cdot 10^{-12}$ и $5.61 \cdot 10^{-15}$ соответственно (рис. 4).

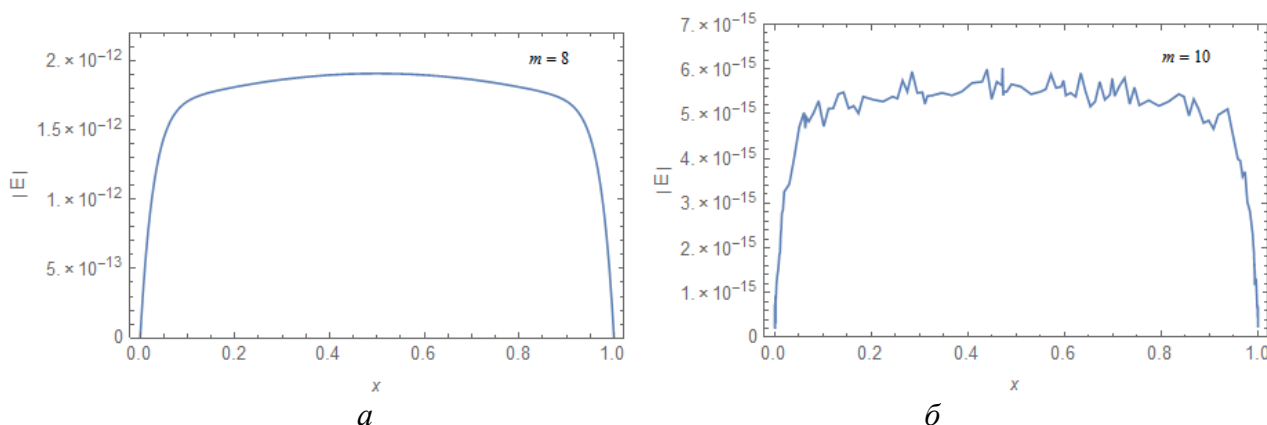


Рис. 4. Графики абсолютных отклонений полиномиальных решений (37) от точного решения (9) при $m=8$ (а) и $m=10$ (б)

Второй вариант

Опишем приближенное решение задачи (7), (8) в виде полиномиального ряда, подобного (24), который применен в [39]:

$$u(x) = \sum_{k=1}^m a_k x^k (1-x)^k. \quad (45)$$

В отличие от авторов [39], будем определять коэффициенты $\{a_k\}_{k=1}^{k=m}$, используя полученные нами выше соотношения (33). Пусть $m = 2$ ($N = 4$). Тогда, записав искомую функцию как

$$u(x) = a_1 x(1-x) + a_2 x^2(1-x)^2, \quad (46)$$

из условий

$$u''(1/2) = -C, \quad u^{(4)}(1/2) = C^2 \quad (47)$$

находим коэффициенты a_1 и a_2 , придающие функции $u(x)$ следующий вид:

$$u(x) = \frac{C}{2} \left(1 - \frac{C}{24} \right) x(1-x) + \frac{C^2}{24} x^2(1-x)^2. \quad (48)$$

Применим для (48) первое условие из (33), т. е. $u(1/2) = \ln C / \lambda$. В результате приходим к уравнению (38) с первым корнем ($\lambda = 1$) $C_1 = 1.150725$. Основываясь на (46), получаем

$$u(x) = 0.547776(1-x)x + 0.0551737(1-x)^2 x^2. \quad (49)$$

Данное решение совпадает (по точности) с решением (39) согласно первому варианту.

Задавая искомое решение в виде полинома

$$u(x) = a_1 x(1-x) + a_2 x^2(1-x)^2 + a_3 x^3(1-x)^3 + a_4 x^4(1-x)^4 \quad (50)$$

и поступая аналогично, используя со второго по пятое условия (33), находим

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{C}{2} \left(1 - \frac{C}{24} + \frac{C^2}{480} - \frac{17C^3}{161280} \right), \quad a_2 = \frac{C^2}{24} \left(1 - \frac{C}{10} + \frac{17C^2}{2240} \right), \\ a_3 &= \frac{C^3}{180} \left(1 - \frac{17C}{112} \right), \quad a_4 = \frac{17C^4}{20160}. \end{aligned} \quad (51)$$

Применив первое условие (33), приходим к уравнению, аналогичному (42) с тем же корнем $C_1 = 1.15089386737$. Итоговое решение в виде (50) совпадает (по точности аппроксимации) с ранее полученным решением (44). Для полинома (50) запишем коэффициенты

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.54934747895580, & a_2 &= 0.049392887582215, \\ a_3 &= 0.0069895759084691, & a_4 &= 0.0014794472918347. \end{aligned} \quad (52)$$

Третий вариант

Будем использовать представление искомой функции в виде (45). Для определения коэффициентов $\{a_k(C)\}_{k=1}^m$ применим первые m соотношений (33). Для нахождения параметра C получим определяющее уравнение. С этой целью умножим дифференциальное уравнение (7) на производную $u'(x)$ и проинтегрируем по области $x = [0, 1/2]$:

$$\begin{aligned} \int_0^{1/2} u'' \cdot u' dx + \lambda \int_0^{1/2} e^u u' dx &= 0 \rightarrow \frac{1}{2} (u'(1/2)^2 - u'(0)^2) + \lambda \int_0^{u(1/2)} e^u du = 0 \rightarrow \\ &\rightarrow \frac{1}{2} (u'(1/2)^2 - u'(0)^2) + \lambda (e^{u(1/2)} - e^{u(0)}) = 0. \end{aligned} \quad (53)$$

С учетом условий $u(0) = 0$ и $u'(\frac{1}{2}) = 0$, а также учитывая, что $C = \lambda \exp u(\frac{1}{2})$ и $u'(0) > 0$, из (53) приходим к соотношению

$$u'(0)^2 = 2(C - \lambda) \leftrightarrow u'(0) = \sqrt{2(C - \lambda)}. \quad (54)$$

Из (45) находим $u'(0) = a_1(C)$, что окончательно дает следующее определяющее уравнение:

$$a_1(C) = \sqrt{2(C - \lambda)}. \quad (55)$$

Опишем функцию $u(x)$ полиномом (50). Его подстановка в первые два соотношения (33) дает линейные алгебраические уравнения, из которых находим

$$a_1 = -C/2 + 8\ln(C/\lambda), \quad a_2 = 2C - 16\ln(C/\lambda). \quad (56)$$

Из (55) и (56) получаем трансцендентное уравнение

$$16\ln(C/\lambda) - C = \sqrt{8(C - \lambda)}, \quad (57)$$

дающее корень $C_1 = 1.1509992$. Отсюда получаем решение в виде

$$u(x) = 0.5495437846(1-x)x + 0.05191161641(1-x)^2 x^2. \quad (58)$$

График для абсолютного отклонения (58) от точного решения (9) представлен на рис. 2б. Как видим, третий вариант приближенного решения дает более лучшую аппроксимацию по сравнению с первыми двумя. Для (58) имеем $|E|_{\max} = 9.12 \cdot 10^{-5}$.

Теперь получим решение задачи при $m = 4$ в виде полинома (50). Из первых четырех соотношений (33), решив систему линейных алгебраических уравнений, находим

$$\begin{aligned} a_1 &= -\frac{3C}{2} + \frac{C^2}{48} - \frac{C^3}{2880} + 16\ln\left(\frac{C}{\lambda}\right), & a_2 &= 12C - \frac{5C^2}{24} + \frac{C^3}{240} - 96\ln\left(\frac{C}{\lambda}\right), \\ a_3 &= -32C + \frac{2C^2}{3} - \frac{C^3}{60} + 256\ln\left(\frac{C}{\lambda}\right), & a_4 &= 32C - \frac{2C^2}{3} + \frac{C^3}{45} - 256\ln\left(\frac{C}{\lambda}\right). \end{aligned} \quad (59)$$

Из (55) и (59) получаем определяющее трансцендентное уравнение

$$\frac{3C}{2} - \frac{C^2}{48} + \frac{C^3}{2880} - 16\ln\left(\frac{C}{\lambda}\right) + \sqrt{2(C - \lambda)} = 0 \rightarrow (\lambda = 1) \rightarrow C_1 = 1.1508943025756. \quad (60)$$

Подставив найденный корень уравнения (60) C_1 в (59), окончательно получаем

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.54935289673504, & a_2 &= 0.04936160664440, \\ a_3 &= 0.007073093440503, & a_4 &= 0.001395939367356. \end{aligned} \quad (61)$$

График $|E(x)|$ для данного решения приведен на рис. 5а. По сравнению с первым и вторым вариантами, для которых $|E|_{\max} = 2.98 \cdot 10^{-7}$, в данном случае (вариант 3) максимальная ошибка в несколько раз меньше: $|E|_{\max} = 8.02 \cdot 10^{-8}$. Также отмечаем, что решение вида (50) с коэффициентами (61) оказывается даже более точным (в аппроксимационном смысле) по сравнению с аналогичным полиномиальным решением (25) с коэффициентами (26), которое получено методом ОНАМ авторами работы [39].

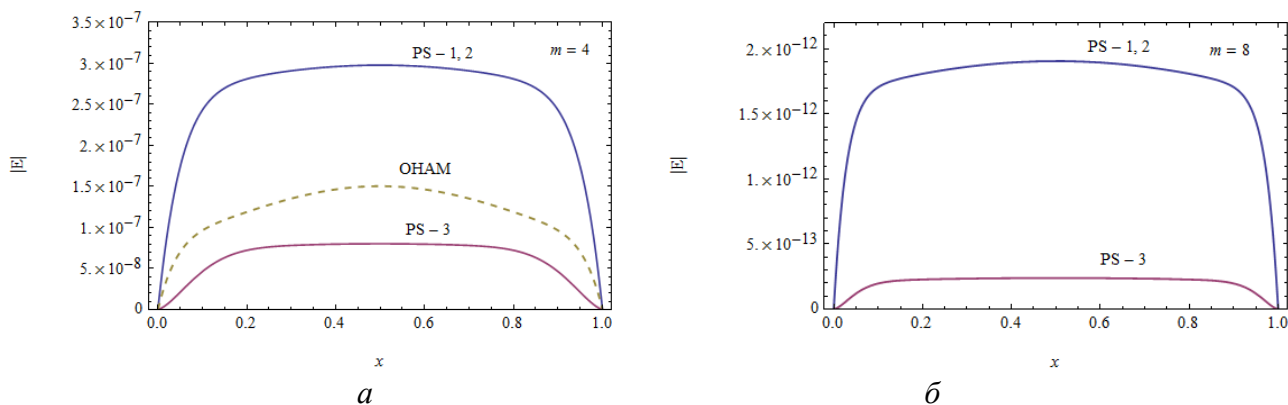


Рис. 5. Графики для $|E|$ согласно PS (1, 2, 3) и ОНАМ при $m = 4$ (а)
и для PS (1, 2, 3) при $m = 8$ (б)

График зависимости $C(\lambda)$, задаваемой уравнением (60), представлен на рис. 6. Как видим, форма зависимости $C(\lambda)$ качественно полностью повторяет известные кривые (рис. 1), построенные для $u_{\max}(\lambda)$ [3]. Красной точкой на графике указано граничное (критическое) состояние, при котором уравнение (7) имеет единственное решение. При $\lambda > \lambda_c$ температурное равновесие невозможно, что приводит к тепловому взрыву.

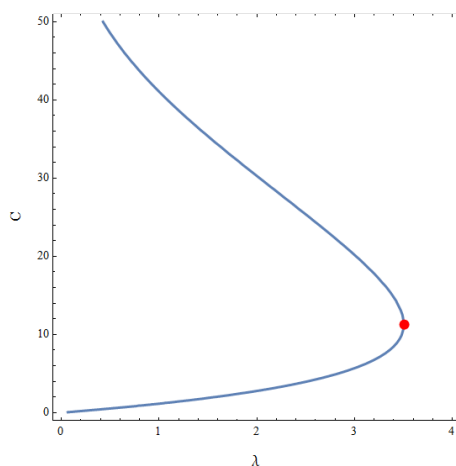


Рис. 6. График зависимости $C(\lambda)$ согласно трансцендентному уравнению (60)
с указанием критической точки теплового взрыва

Для приближенного решения при $m = 8$, описываемого полиномом

$$u(x) = \sum_{k=1}^8 a_k x^k (1-x)^k, \quad (62)$$

приходим к определяющему уравнению

$$\begin{aligned} & \frac{7C}{2} - \frac{C^2}{16} + \frac{C^3}{576} - \frac{17C^4}{322560} + \frac{31C^5}{19353600} - \frac{691C^6}{15328051200} + \frac{5461C^7}{5579410636800} - \\ & - 32 \ln\left(\frac{C}{\lambda}\right) + \sqrt{2(C-\lambda)} = 0 \rightarrow (\lambda=1) \rightarrow C_1 = 1.1508942103067 \end{aligned} \quad (63)$$

и, соответственно, к полиному (62) с коэффициентами

$$\begin{aligned}
a_1 &= 0.5493527287757742, & a_2 &= 0.04935272888125297, \\
a_3 &= 0.007146667403446827, & a_4 &= 0.0011794467659456132, \\
a_5 &= 0.000207799019335653, & a_6 &= 0.0000384907798434142, \\
a_7 &= 6.58884528093 \cdot 10^{-6}, & a_8 &= 2.0667721400969 \cdot 10^{-6}.
\end{aligned} \tag{64}$$

График для абсолютного отклонения $|E|$ данного решения представлен на рис. 5б. Максимальное абсолютное отклонение составляет $|E|_{\max} = 2.39 \cdot 10^{-13}$, что почти на порядок меньше по сравнению с $|E|_{\max} = 1.91 \cdot 10^{-12}$ для решений в вариантах 1 и 2.

Определение критической точки теплового взрыва

Определим критическое значение параметра $\lambda = \lambda_c$, отвечающее тепловому взрыву. С этой целью воспользуемся восьмым четным соотношением (33). Из таблицы 1 получаем

$$u^{(16)}(\frac{1}{2}) = 14\,873\,104\,C^8. \tag{65}$$

Используя (62), (64) и (65), получаем уравнение

$$\begin{aligned}
&8192C - \frac{512C^2}{3} + \frac{256C^3}{45} - \frac{68C^4}{315} + \frac{124C^5}{14175} - \frac{691C^6}{1871100} + \\
&+ \frac{5\,461C^7}{340\,540\,200} - \frac{929\,569C^8}{1\,307\,674\,368\,000} = 65\,536 \ln\left(\frac{C}{\lambda}\right)
\end{aligned} \tag{66}$$

Или, иначе,

$$\begin{aligned}
65\,536 \ln \lambda &= 65\,536 \ln(C) - 8192C + \frac{512C^2}{3} - \frac{256C^3}{45} + \frac{68C^4}{315} - \\
&- \frac{124C^5}{14175} + \frac{691C^6}{1871100} - \frac{5\,461C^7}{340\,540\,200} + \frac{929\,569C^8}{1\,307\,674\,368\,000}.
\end{aligned} \tag{67}$$

Учитывая, что зависимость $\lambda(C)$ образует максимум (рис. 6), а также принимая во внимание, что максимумы для λ и $\ln \lambda$ достигаются при одинаковом значении $\lambda = \lambda_c$, приравняем к нулю производную от правой части уравнения (67):

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{8} + \frac{1}{C} + \frac{C}{192} - \frac{C^2}{3840} + \frac{17C^3}{1290\,240} - \frac{31C^4}{46\,448\,640} + \frac{691C^5}{20\,437\,401\,600} - \\
&- \frac{5\,461C^6}{3188\,234\,649\,600} + \frac{929\,569C^7}{10\,712\,468\,422\,656\,000} = 0.
\end{aligned} \tag{68}$$

Полученное (после дифференцирования) уравнение (68) имеет один действительный положительный корень $C = 11.6953531438$. Его подстановка в (63) дает новое трансцендентное уравнение

$$44.2535803 - \sqrt{23.3907063 - 2\lambda} - 32 \ln \lambda = 0, \tag{69}$$

из которого находим

$$\lambda_c = 3.513135071 \quad (\lambda_c^* = 3.513830719). \tag{70}$$

Относительная ошибка определения критического параметра λ_c составляет всего 0.012%.

Заключение

Для решения классической краевой задачи Брату применен новый подход, который основан на последовательном дифференцировании уравнения с применением результатов дифференцирования к точке $x = 1/2$. Предложено три варианта получения полиномиальных решений задачи Брату и ей подобных задач. Продемонстрирована высокая скорость сходимости получаемых решений. Наилучшие результаты дает комбинированный подход, объединяющий разложение искомой функции и наложение на нее дополнительного ограничения, вытекающего из специального интегрирования уравнения Брату. По простоте получения решений с достижением очень высокой точности аппроксимации все предложенные варианты (особенно комбинированный подход) достойно конкурируют с лучшими современными численно-аналитическими подходами и алгоритмами, зачастую превосходя их. В работе предложен достаточно простой и эффективный метод расчета критической точки теплового взрыва λ_c . В частности, при полиноме порядка $m = 8$ и параметре Франк-Каменецкого $\lambda = 1$ ошибка расчета критического значения λ_c составляет всего 0.012%. Предложенные расчетные схемы могут быть, по всей видимости, применимы к более сложным задачам теплового взрыва, которые предусматривают наличие зависимости коэффициента теплопроводности от температуры, а также более сложный конвективный либо конвективно-радиационный теплообмен на поверхности тела.

Литература

1. Bratu G. Sur les equations integrales non lineaires // Bull. Soc. Math. France. 1914. Vol. 42. Pp. 113–142.
2. Liouville J. Sur l'equation aux derivees partielles $\frac{d^2 \ln \lambda}{du dv} \pm \frac{\lambda}{a^2} = 0$ // J. de Math. Pure Appl. 1853. Vol. 18. Pp. 71–72.
3. Jacobsen J., Schmitt K. The Liouville–Bratu–Gelfand problem for radial operators // J. Diff. Equations. 2002. Vol. 184. No. 1. Pp. 283–289.
4. Kenkatesh S.G., Ayyaswamy S.K., Balachandar S.R. The Legendre wavelet method for solving initial value problem of Bratu-type // Comput. Math. Appl. 2012. Vol. 63 Pp. 1287–1295.
5. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Изд-во АН СССР, 1947.
6. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.
7. Барзыкин В.В., Мержанов А.Г. Краевая задача в теории теплового взрыва // ДАН СССР. 1958. Т. 120. № 6. С. 1271–1273.
8. Bowden F.P., Yoffe A.D. Fast reactions in solids. Butterworths Scientific Publications. 1958.
9. Gavalas G.R. Nonlinear Differential Equations of Chemically Reacting Systems. Springer-Verlag, New York Inc., New York, 1968.
10. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980.
11. Gelfand I.M. Some problems in the theory of quasi-linear equations // Amer. Math. Soc. Transl. 1963. Ser. 2. Vol. 29. Pp. 295–381.
12. Squire P. T. Thermal Explosions: a simple treatment // Eur. J. Phys. 1985. Vol. 6. Pp. 275.
13. Конторова Т.А., Тодес О.М. К тепловой теории взрыва // Журн. физ. химии. 1933. Т. 4. № 1. С. 81.
14. Семенов Н.Н. Цепные реакции. М.: Наука, 1934.
15. Тодес О.М. Теория теплового взрыва // Журн. физ. химии. 1939. Т. 13. С. 75.
16. Мержанов А.Г., Барзыкин В.В., Абрамов В.Г. Теория теплового взрыва: от Н.Н. Семенова до наших дней // Химическая физика. 1996. Т. 15. № 6. С. 3–43.

17. Gidas B., Ni W., Nirenberg L. Symmetry and related properties via the maximum principle // *Comm. Math. Phys.* 1979. Vol. 68. Pp. 209–243.
18. Joseph D.D., Lundgren T.S. Quasilinear Dirichlet problems driven by positive sources // *Arch. Ration. Mech. Anal.* 1972–1973. Vol. 49. Pp. 241–269.
19. Jacobsen J., Schmitt K. Radial solutions of quasilinear elliptic differential equations // *ODE.* 2004. Vol. 1. Pp. 359–435.
20. Pan H., Xing R. Radial solutions for a prescribed mean curvature equation with exponential nonlinearity // *Nonlinear Analysis.* 2012. Vol. 75. Pp. 103–116.
21. Wazwaz A.M. Adomian decomposition method for a reliable treatment of the Bratu type Equations // *Appl. Math. Comput.* 2005. Vol. 166. Pp. 652–663.
22. Boyd J.P. Chebyshev polynomial expansions for simultaneous approximation of two branches of a function with applications to the one-dimensional Bratu equation // *Appl. Math. Comput.* 2003. Vol. 143. Pp. 189–200.
23. Boyd J. One-point pseudospectral collocation for the one-dimensional Bratu equation // *Appl. Math. Comput.* 2010. Vol. 217. Pp. 5553–5565.
24. He J.H., Liu H.M. Variational approach to nonlinear problems and a review on mathematical model of electrospinning // *Nonlinear Anal.* 2005. Vol. 63. Pp. 919–929.
25. Syam M. The modified Broyden-variational method for solving nonlinear elliptic differential equations // *Chaos Solitons Fractals.* 2007. Vol. 32. Pp. 392–404.
26. Jalilian R. Non-polynomial spline method for solving Bratu's problem // *Comput. Phys. Commun.* 2010. Vol. 181. Pp. 1868–1872.
27. Boyd J.P. Chebyshev polynomial expansions for simultaneous approximation of two branches of a function with application of the one-dimensional Bratu equation // *Appl. Math. Comput.* 2003. Vol. 142. Pp. 189–200.
28. Caglar H. et al. B-spline method for solving Bratu's problem // *Int. J. Comput. Math.* 2010. Vol. 87. Pp. 1885–1891.
29. Hassan I.H.A.H., V.S. Erturk V.S. Applying differential transformation method to the one-dimensional planar Bratu problem // *Int. J. Contemp. Math. Sci.* 2007. Vol. 2. Pp. 1493–1504.
30. Deeba E., Khuri S.A., Xie S. An algorithm for solving boundary value problems // *J. Comput. Phys.* 2000. Vol. 159. Pp. 125–138.
31. Syam M.I., Hamdan A. An efficient method for solving Bratu equation // *Appl. Math. Comput.* 2006. Vol. 176. Pp. 704–713.
32. Ozis T., Yildirim A. Comparison between Adomian method and He's homotopy perturbation method // *Comput. Math. Appl.* 2008. Vol. 56. Pp. 1216–1224.
33. Mohyud-Din S.T., Yildirim A., Usman M., Hosseini M.M. An efficient algorithm for Bratu type models // *World Appl. Sci. J.* 2010. Vol. 11. Pp. 847–850.
34. Li S., Liao S.J. An analytic approach to solve multiple solutions of a strongly nonlinear problem, *Appl. Math. Comput.* 2005. Vol. 169. Pp. 854–865.
35. Hassan H.N., El-Tawil M.A. An efficient analytic approach for solving two-point nonlinear boundary value problems by homotopy analysis method // *Math. Methods Appl. Sci.* 2011. Vol. 34. Pp. 977–989.
36. Ananthaswamy V., Rajendran L. Analytical solutions of some two-point non-linear elliptic boundary value problems // *Appl. Math.* 2012. Vol. 3. Pp. 1044–1058.
37. Wazwaz A.M. The successive differentiation method for solving Bratu equation and Bratu-type equations // *Rom. J. Phys.* 2016. Vol. 61. No. 5-6. Pp. 774–783.
38. Vazquez-Leala H. et. all. The novel Leal-polynomials for the multi-expansive approximation of nonlinear differential equations // *Heliyon.* 2020. Vol. 6. P. 03695.
39. Marinca V., Herisanu N. *The Optimal Homotopy Asymtotic Method: Engineering Applications.* Springer Int. Publ., 2015.

УДК 536.2

НАЧАЛЬНАЯ ЗАДАЧА ТИПА БРАТУ: ИЗВЕСТНЫЕ ПОДХОДЫ И НОВЫЕ РЕШЕНИЯ

В.А. Кот

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Введение

В последние годы исследование начальных задач в обыкновенных дифференциальных уравнениях второго порядка привлекло многих исследователей. К одному из такого типа уравнений относится уравнение Брату [1], сформулированное как

$$\frac{d^2v}{dx^2} + \lambda e^v = 0, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (\lambda = \text{const}). \quad (1)$$

Уравнение Брату – это нелинейное дифференциальное уравнение, имеющее множество приложений в математике, физике, технике и в других областях [2, 3], при этом оно формулируется в виде нелинейной задачи с начальными или граничными условиями. Стандартная задача Брату использовалась для моделирования задачи горения в плоской плите [4]. Задача Брату [5–9] также используется в самых разных приложениях, таких как модель воспламенения топлива в теории термического горения, модель процесса тепловой реакции, модель Чандрасекара расширения Вселенной [10], некоторые вопросы в области геометрии и теории относительности, касающиеся модели Чандрасекара, теория химических реакций, радиационный теплоперенос и нанотехнологии [11–16]. В настоящей работе рассмотрена одномерная задача типа Брату с начальными условиями

$$v(0) = v'(0) = 0. \quad (2)$$

Поскольку начальные задачи типа Брату имеют достаточно большую важность в вопросах моделирования различных реальных явлений, они получили должное внимание у многих численных аналитиков. Поэтому разработка высокоточных численно-аналитических и тем более аналитических подходов к аппроксимации решений уравнений типа Брату представляется важной и актуальной задачей. В последние годы в литературе можно найти множество аналитических и численных методов приближенного решения задачи Брату [4, 17–20]. В частности, Дж. Бойд [17, 18] предложил разложения по полиномам Чебышева и Гегенбауэра, выступающих в качестве базовых функций, для одновременной аппроксимации задачи Брату в двумерной постановке. В работе [21] авторы представили метод разложения Адомиана-Лапласа, а в [22] авторы обсудили новые итерационные решения методом возмущений. Кроме того, для решения задачи Брату (1), (2) были представлены метод разложения Адомиана [23] и метод групповой стрельбы Ли [24]. В работе [25] для решения задачи Брату предложен и развит вейвлет-метод Лежандра.

Метод возмущений применительно к решению начальной задачи типа Брату достаточно подробно рассмотрен в работе [26]. Широко распространенный гомотопический метод возмущений для решения рассматриваемой задачи достаточно успешно применен в работе [27]. В особую группу выделим вариационно-итерационный метод, на основе которого решена данная задача [28–30]. В виде незначительных «усовершенствований» этого метода выступают, в частности, работы [31–33]. Дальнейшее развитие вариационно-итерационный метод нашел в работе [34], в которой был применен предложенный в [35] подход, позволивший преобразовать исходное дифференциальное уравнение (1) в новое уравнение, лишенное экспоненты. При этом был введен в рассмотрение новый

дополнительный параметр, позволивший проводить минимизацию модуля невязки самого дифференциального уравнения.

Электроспиннинг и его математическая формулировка: начальная задача Брату.

Электроспиннинг (Electrospinning process – ESP) признан одним из наиболее удобных и экономичных методов изготовления полимерных нановолокон [36]. Это метод производства сверхтонких волокон диаметром от 10 мкм до 10 нм путем пропускания расплавленного полимера или раствора полимера через фильеру под действием электрического поля. Под действием электростатического поля полусферическая поверхность раствора полимера на кончике капилляра удлиняется и принимает коническую форму, называемую конусом Тейлора [37]. Когда напряжение превышает пороговое значение, электростатические силы преодолевают поверхностное натяжение и заряженная мелкая струя выбрасывается на кончике конуса Тейлора. Струя движется к опорной пластине, действующей как противоположный электрод, при этом растворитель испаряется. В конечном счете волокна достигают коллектора и укладываются на него. В дальнейшем полученный «продукт» подвергается термической обработке для создания графитовой структуры. Управляющими параметрами процесса являются гидростатическое давление в капилляре и внешнее электрическое поле. Элементы, необходимые для электропрядения, включают в себя источник полимера, источник высокого напряжения и коллектор (рис. 1) [38].

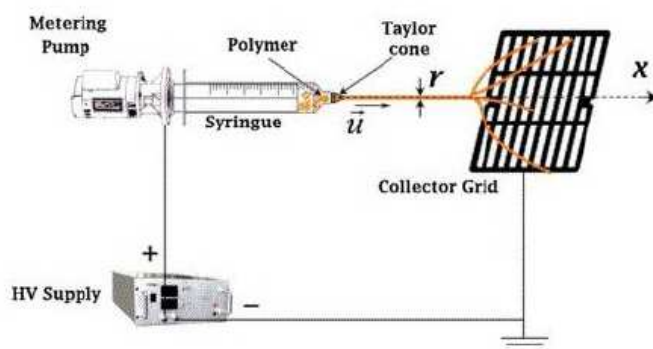


Рис. 1. Функциональная схема процесса электроспиннинга [38]

Примеры успешного применения нановолокон, изготовленных методом электропрядения, и изделий на их основе широки и многообразны. Например, пористая нановолоконная мембрана, изготовленная ESP, применяется в качестве повязки на рану [36], которая может пропускать через себя жидкость из раны, предотвращая накопление под ней, а также высыхание раны. Такая нановолоконная мембрана обеспечивает контролируемое испарение жидкости, превосходную кислородопроницаемость и повышенную эффективность в дренаже жидкости, одновременно препятствуя вторжению экзогенных микроорганизмов вследствие ультратонкой пористой структуры. Другие примеры – это, в частности, различное фильтрационное применение [36, 39], инженерия костной ткани [40], доставка лекарств и носителей катализаторов [41], изготовление волокнистых матов для армирования композитов [41] и т. д.

Несмотря на существенную изученность ESP, его теоретическое моделирование остается весьма «узким местом», серьезно препятствующим дальнейшему повышению качества получаемых нановолокон и эффективности самого процесса. В работе [41] построена математическая модель, которая с некоторыми допущениями описывает физику ESP. При этом принимается допущение о существенном превалировании электрической силы над другими силами, что позволяет получить классическое уравнение Брату, объясняющее возможную в ESP нестабильность (бифуркацию).

В работе [37] математическая модель ESP связана с уравнением Брату, полученным из уравнений баланса термоэлектрогидродинамики. Модель описывает скорость жидкости на внешнем крае шприца. Основными уравнениями процесса являются уравнения баланса массы, линейного импульса и электрического заряда соответственно [42–44]:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla F_m + \nabla F_e, \quad (4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (5)$$

где $\mathbf{u}$ – осевая скорость, $\mathbf{j}$ – плотность электрического тока, ρ – плотность материала, F_m и F_e – члены, обозначающие вязкие и электрические силы соответственно. В случае установившейся струи электрически генерируемая сила является доминирующей, поэтому одномерное уравнение количества движения принимает вид

$$u \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{2\sigma E}{\rho r}, \quad (6)$$

где u – модуль осевой скорости, r – радиус струи вдоль осевой координаты x (рис. 1), σ – плотность поверхностного заряда, E – напряженность электрического поля в осевом направлении. Запишем уравнение баланса заряда

$$2r\sigma E + r^2 k E = I, \quad (7)$$

где I — сила электрического тока, k – константа, которая в случае несжимаемого полимера зависит только от температуры. Отсюда получаем

$$u \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{E(I - r^2 k E)}{\rho r^2}. \quad (8)$$

Далее, введя в рассмотрение новую переменную $v = -6 \ln(u)$, получаем

$$\frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{6E(I - r^2 k E)}{\rho r^2} e^{v/2}. \quad (9)$$

Дифференцируя уравнение (9), с учетом $dr/dx \ll 1$ [43] имеем

$$\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{3E(I - r^2 k E)}{\rho r^2} e^{v/2} \frac{\partial v}{\partial x} = 0. \quad (10)$$

Объединяя оба уравнения, в итоге приходим к одномерному уравнению Брату

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \lambda e^v = 0, \\ \lambda = -\frac{18E^2(I - r^2 k E)^2}{\rho^2 r^4}. \end{cases} \quad (11)$$

Некоторые подходы в приближенном решении начальной задачи Брату.Метод разложения Адомиана (Adomian decomposition method – ADM).

Данный метод [45–47] определяет функцию $v(x)$ бесконечным рядом

$$v(x) = \sum_{n=0}^{\infty} v_n(x), \quad (12)$$

где компоненты $v_n(x)$ определяются рекуррентно. Нелинейный оператор $F(v)$ может быть разложен в виде бесконечного ряда полиномов, задаваемых формулой

$$F(v) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n, \quad (13)$$

где A_n – так называемые полиномы Адомиана, включающие функции $v_0, v_1, v_2, \dots$:

$$A_n = \frac{1}{n!} \frac{d}{d\lambda^n} \left[F \left(\sum_{i=0}^n \lambda^i v_i \right) \right]_{\lambda=0}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (14)$$

или эквивалентно

$$\begin{aligned} A_0 &= F(v_0), \\ A_1 &= v_1 F'(v_0), \\ A_2 &= v_2 F'(v_0) + \frac{1}{2} v_1^2 F''(v_0), \\ A_3 &= v_3 F'(v_0) + v_1 v_2 F''(v_0) + \frac{1}{3} v_1^3 F'''(v_0), \\ A_4 &= v_4 F'(v_0) + \left(v_1 v_3 + \frac{1}{2} v_2^2 \right) F''(v_0) + \frac{1}{2} v_1^2 v_2 F'''(v_0) + \frac{1}{24} v_1^4 F^{(IV)}(v_0), \quad \dots \end{aligned} \quad (15)$$

В настоящее время эти полиномы могут быть сгенерированы для всех классов нелинейности согласно специальным алгоритмам. В частности, один из таких альтернативных алгоритмов построения полиномов Адомиана представлен в работе [47].

Далее кратко изложим получение на основе ADM [48] решения задачи при $\lambda = -2$. Начнем с того, что уравнение (1) можно записать в операторной форме

$$\begin{aligned} Lv &= 2e^v, \\ v(0) &= v'(0) = 0, \end{aligned} \quad (16)$$

где дифференциальный оператор L определен как

$$L = \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (17)$$

Обратный оператор L^{-1} представляется двукратным интегральным оператором

$$L^{-1} = \int_0^x \int_0^x (\cdot) dx dx. \quad (18)$$

Применяя обратный оператор L^{-1} к обеим частям уравнения (16) и используя начальное условие (2), получаем

$$v(x) = 2L^{-1}(e^v). \quad (19)$$

Подстановка (12) и (13) в функциональное уравнение (19) дает

$$\sum_{n=0}^{\infty} v_n(x) = 2L^{-1}\left(\sum_{n=0}^{\infty} A_n\right), \quad (20)$$

где A_n – так называемые полиномы Адомиана нелинейного члена e^v дифференциального уравнения (1), определенные в [48] в виде

$$\begin{aligned} A_0 &= e^{v_0}, \\ A_1 &= v_1 e^{v_0}, \\ A_2 &= \left(v_2 + \frac{1}{2}v_1^2\right) e^{v_0}, \\ A_3 &= \left(v_3 + v_1 v_2 + \frac{1}{6}v_1^3\right) e^{v_0}, \\ A_4 &= \left(v_4 + v_1 v_3 + \frac{1}{2}v_2^2 + \frac{1}{2}v_1^2 v_2 + \frac{1}{24}v_1^4\right) e^{v_0}, \quad \dots \end{aligned} \quad (21)$$

Приняв для нулевой компоненты $v_0(x) = 0$, остальные компоненты $u_n(x)$ ($n \geq 1$) могут быть получены рекуррентно с помощью соотношения

$$v_{k+1}(x) = 2L^{-1}(A_k), \quad k \geq 0. \quad (22)$$

В свою очередь это дает

$$\begin{aligned} v_0(x) = 0 &\rightarrow v_1(x) = x^2 \rightarrow v_2(x) = \frac{1}{6}x^4 \rightarrow v_3(x) = \frac{2}{45}x^6 \rightarrow \\ \rightarrow v_4(x) &= \frac{17}{1260}x^8 \rightarrow v_5(x) = \frac{62}{14175}x^{10} \rightarrow v_6(x) = \frac{691}{467775}x^{12} \dots \end{aligned} \quad (23)$$

С учетом (13) решение $v(x)$ принимает вид

$$v(x) = x^2 + \frac{1}{6}x^4 + \frac{2}{45}x^6 + \frac{17}{1260}x^8 + \frac{62}{14175}x^{10} + \frac{691}{467775}x^{12} + \dots \quad (24)$$

Решение (24) ограничено областью $0 \leq x \leq 1$. Точное решение задачи (1), (2) имеет вид [48]

$$v^*(x) = -2 \ln [\cos(x)]. \quad (25)$$

Если разложим в ряд Тейлора точное решение (25), то придем к степенному ряду (24). Для приближенного решения, описываемого полиномом

$$v(x) \cong \sum_{n=0}^{m=3} v_n(x) = x^2 + \frac{1}{6}x^4 + \frac{2}{45}x^6, \quad (26)$$

построен график (рис. 2, а). Отклонение решения (26) от точного (25), определяемого формулой $E = |v(x) - v^*(x)|$, достигает максимального значения ~ 0.020 (рис. 2, б).

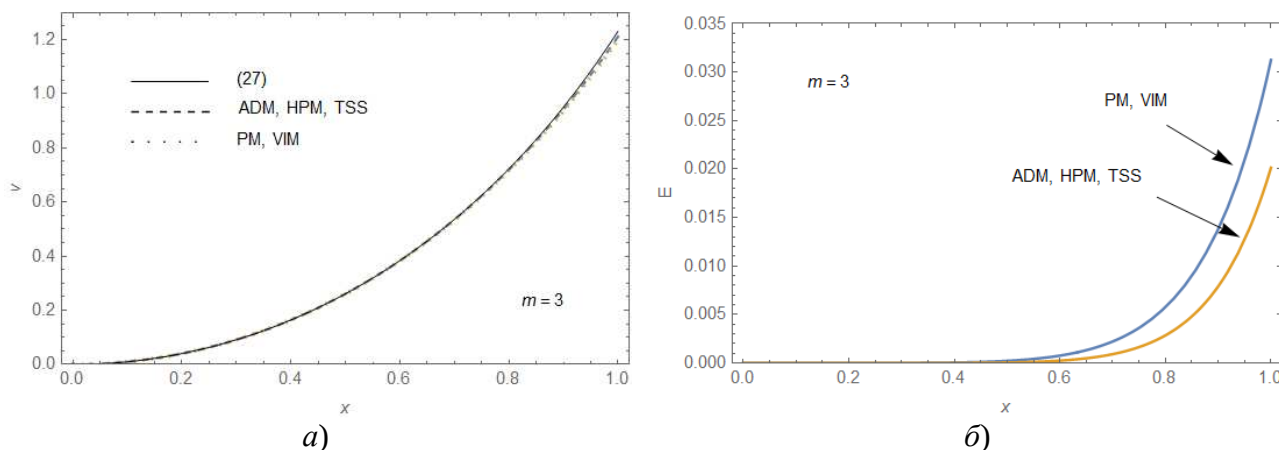


Рис. 2. Графики приближенных (ADM, HPM, TSS, PM, VIM) и точного (27) (сплошная линия) решений (а) и графики абсолютных отклонений (б)

Метод возмущений (Perturbation method – PM).

Этот метод хорошо известен [49] и одним из первых стал применяться при решении многих типов нелинейных задач прежде всего в таких областях как классическая механика, механика жидкости и газа, аэродинамика [50].

Следуя работе [51], будем предполагать, что нелинейный член в уравнении (1) представляет собой малое возмущение и что решение может быть выражено в виде степенного ряда по малому параметру:

$$v(x) = v_0 + \varepsilon v_1 + \varepsilon^2 v_2 + \dots \quad (27)$$

Подстановка (27) в (1) и приравнивание членов с равными степенями дает серию обыкновенных дифференциальных уравнений, которые можно рекурсивно проинтегрировать для определения функций v_0 , v_1 , v_2 и т. д.

Обратившись к задаче Брату (1), (2), зададим $\lambda = -2$. Подстановка (27) в (1) дает

$$\begin{aligned} v'' - 2e^{\varepsilon u_0} &= 0, \\ v_0'' + \varepsilon v_1'' + \varepsilon^2 v_2'' - 2 \left(1 + \varepsilon v_0 + \varepsilon^2 \frac{v_0''}{2} + \dots \right) &= 0. \end{aligned} \quad (28)$$

Далее потребуем, чтобы члены одного порядка были равны друг другу:

$$\begin{aligned} \varepsilon^0: \quad v_0'' - 2 &= 0, & v_0(0) = v_0'(0) &= 0, \\ \varepsilon^1: \quad v_1'' - 2v_0 &= 0, & v_1(0) = v_1'(0) &= 0, \\ \varepsilon^2: \quad v_2'' - v_0^2 &= 0, & v_2(0) = v_2'(0) &= 0. \end{aligned} \quad (29)$$

Решение системы уравнений (29) дает

$$v_0(x) = x^2, \quad v_1(x) = \frac{x^4}{6}, \quad v_2(x) = \frac{x^6}{30}, \quad \dots \quad (30)$$

Подставив (30) в (27), получим приближенное решение

$$v(x) \cong x^2 + \varepsilon \frac{x^4}{6} + \varepsilon^2 \frac{x^6}{30} + \dots \quad (31)$$

В работе [51] показано, что наиболее точная аппроксимация достигается при $\varepsilon = 1$. В частности, для $m = 3$ имеем приближенное решение [51]

$$v(x) \cong x^2 + \frac{x^4}{6} + \frac{x^6}{30}. \quad (32)$$

Для полинома (32) построен график (рис. 2, а). По сравнению с решением на основе ADM здесь мы имеем гораздо худшую аппроксимацию (рис. 2, б).

Гомотопический метод возмущений (Homotopy perturbation method – НРМ)

В 1998 г. Хе [52, 53] использовал основные идеи гомопотии в топологии, чтобы предложить общий аналитический метод — гомотопический метод возмущений (НРМ) для решения нелинейных задач. Этот метод успешно применялся в решении многих типов нелинейных задач (см., например, [54] и [55]). На практике НРМ представляет собой достаточно мощный и относительно простой в применении аналитический инструмент, которому не требуется наличие малых параметров в дифференциальных уравнениях. Для решения начальной задачи типа Брату (1), (2) в работе [56] применен метод с введением малого параметра и с разложением нелинейного члена уравнения в ряд Тейлора, основанный на методе НРМ [52].

Следуя авторам работы [56], применим НРМ для решения задачи (1)–(2), введя непосредственно в уравнение Брату (1) параметр $p \in [0, 1]$ в виде

$$-v'' = \lambda e^{pv}, \quad (33)$$

$$v(0) = v'(0) = 0. \quad (34)$$

При $p = 1$ уравнение (33) становится исходным. Отметим, что ввиду того, что $p \in [0, 1]$, так называемый параметр вложения p можно рассматривать как «малый параметр». Применив технику метода возмущений [57], будем предполагать, что решение уравнений (33), (34) может быть выражено в виде степенного ряда по параметру p :

$$v(x) = \sum_{n=0}^{\infty} p^n v_n = v_0 + p v_1 + p^2 v_2 + p^3 v_3 + \dots \quad (35)$$

Положив $p = 1$, получим

$$v(x) = \sum_{n=0}^{\infty} v_n = v_0 + v_1 + v_2 + v_3 + \dots \quad (36)$$

Чтобы получить приближенное решение уравнения (33) с начальными условиями (34), разложим экспоненту e^v в ряд Тейлора:

$$e^v = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{v^n}{n!} = 1 + v + \frac{v^2}{2} + \frac{v^3}{6} + \dots \quad (37)$$

Подставив (35)–(37) в (33), (34) и приравняв коэффициенты с одинаковыми степенями для параметра p , получаем:

$$\begin{aligned} p^0: \quad & -v_0'' = \lambda, & v_0(0) = v_0'(0) = 0, \\ p^1: \quad & -v_1'' = \lambda v_0, & v_1(0) = v_1'(0) = 0, \\ p^2: \quad & -v_2'' = \lambda \left(v_1 + \frac{1}{2} v_0^2 \right) = 0, & v_2(0) = v_2'(0) = 0, \\ p^3: \quad & -v_3'' = \lambda \left(v_2 + v_0 v_1 + \frac{1}{6} v_0^3 \right) = 0, & v_3(0) = v_3'(0) = 0. \end{aligned} \quad (38)$$

Из уравнений (38) последовательно находим

$$v_0 = -\frac{\lambda}{2} x^2, \quad v_1 = \frac{\lambda^2}{24} x^4, \quad v_2 = -\frac{\lambda^3}{180} x^6, \quad v_4 = \frac{17\lambda^4}{20160} x^8, \quad v_5 = -\frac{31\lambda^5}{226800} x^{10}, \quad \dots \quad (39)$$

При $\lambda = -2$ из (38) и (39) получаем приближенное решение в виде степенного ряда

$$v(x) = x^2 + \frac{1}{6} x^4 + \frac{2}{45} x^6 + \frac{17}{1260} x^8 + \frac{62}{14175} x^{10} + \dots \quad (40)$$

Как видим, в итоге мы нашли приближенное решение, которое идентично решению (24), полученному в [48] на основе метода разложения Адомиана (ADM).

Метод вариационной итерации (Variational Iteration Method – VIM).

Для иллюстрации основных положений метода вариационной итерации [58–60] рассмотрим дифференциальное уравнение

$$L(v) + N(v) = g(x), \quad (41)$$

где L – линейный оператор, N – нелинейный оператор, $g(t)$ – неоднородный член. Тогда можем построить корректно выполняемый функционал следующим образом:

$$v_{n+1}(x) = v_n(x) + \int_0^1 \lambda [Lv_n(s) + N\bar{v}_n(s) - g(s)] ds, \quad (42)$$

где λ – множитель Лагранжа [58, 59], который можно оптимально определить на основе вариационной теории. Второе слагаемое справа – это поправка, причем $\bar{u}_n$ рассматривается как ограниченная вариация, т.е. $\delta \bar{v}_n = 0$. В нелинейном дифференциальном уравнении (42) нелинейный член $N(u)$ может быть представлен в виде ряда Тейлора

$$N(v) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k v^k. \quad (43)$$

Множитель Лагранжа λ в функционале (42) определяется с учетом граничных условий (2). В результате получаем

$$v_{n+1}(x) = v_n(x) + \int_0^1 \lambda \left[L v_n(s) + \sum_{k=0}^{\infty} a_k v^k(s) - g(s) \right] ds. \quad (44)$$

Применительно к задаче (1), (2) при $\lambda = -2$ из (44) имеем итерационную формулу [32]

$$v_{n+1}(x) = v_n(x) + \int_0^1 (s-x) \left\{ v''(s) - 2 \left[1 + v + \frac{v^2}{2} \right] \right\} ds. \quad (45)$$

Из (45) последовательно находим

$$\begin{aligned} v_1(x) &= x^2, \\ v_2(x) &= x^2 + \frac{x^4}{6} + \frac{x^6}{30}, \\ v_3(x) &= x^2 + \frac{x^4}{6} + \frac{2x^6}{45} + \frac{x^8}{140} + \frac{17x^{10}}{16200} + \frac{x^{12}}{11880} + \frac{x^{14}}{163800}, \dots \end{aligned} \quad (46)$$

График приближенного решения (46) для $v_2(x)$ полностью совпадает с аналогичным графиком для решения на основе РМ в виде полинома (32) (рис. 2, а). Аналогичное совпадение имеет место для абсолютного отклонения (рис. 2, б).

Метод контролируемой вариационной итерации (Controlled Variational Iteration Method – CVIM).

Предложен новый алгоритм вариационной итерации для решения задачи типа Брату (1), (2) на основе ESP с введением ненулевого вспомогательного параметра χ , управляющего областью сходимости. Данный подход устраняет сложности, которые имеют место в стандартных вариационно-итерационных алгоритмах, проиллюстрированных в работах [29, 38], и здесь не требуется аппроксимация экспоненциального члена посредством его разложения в ряд Тейлора. Правильный выбор вспомогательного параметра χ приводит к более точной аппроксимации по сравнению со стандартным VIM.

Стандартная вариационная итерационная формула (42), примененная авторами [30, 33] для решения уравнения Брату, имеет два основных недостатка. Первый недостаток связан с уравнением Брату, которое усложняет формулу итерации ввиду сложности интегрирования (после первой итерации) вследствие присутствия нелинейного члена e^v . Практически все авторы, использовавшие VIM для решения уравнения Брату, преодолевали эту проблему, аппроксимируя нелинейный член e^v с помощью ряда Тейлора (37). Второй недостаток связан именно с самой схемой VIM, которая не предусматривает возможности повышения и контроля точности решения. Авторы работы [34] воспользовались примененным в [61] преобразованием дифференциального уравнения (1) посредством его умножения на $v'(x)$ и интегрирования по области $x \in [0, 1]$. Ими было получено уравнение

$$\frac{d^2 v}{dx^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{dv}{dx} \right)^2 + \lambda = 0. \quad (47)$$

Используя алгоритм (42), с учетом (47) и параметра χ имеем [34]

$$v_{n+1}(x) = v_n(x) + \chi \int_0^1 (s-x) \left\{ \frac{d^2 v_n(s)}{dx^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{dv_n(s)}{dx} \right)^2 + \lambda \right\} ds. \quad (48)$$

Из (48) для второй и третьей итераций получаем решения в виде [34]

$$v_2(x, \chi) = (2\chi - \chi^2)x^2 + \frac{1}{6}\chi^3x^4, \quad (49)$$

$$v_3(x, \chi) = (3\chi - 3\chi^2 + \chi^3)x^2 + \frac{1}{6}(5\chi^3 - 5\chi^4 + \chi^5)x^4 + \frac{1}{45}(4\chi^5 - 2\chi^6)x^6 + \frac{1}{252}\chi^7x^8. \quad (50)$$

Для решения (49), отвечающего второй итерации, был найден параметр $\chi = 1.17$, при котором абсолютная невязка уравнения (47) минимальная. Для третьей итерации (50) проведенные расчеты дают значение $\chi = 1.163$ с окончательным решением

$$v(x) \cong 1.00433x^2 + 0.140936x^4 + 0.0791483x^6 + 0.0114198x^8. \quad (51)$$

График для абсолютного отклонения $E(x)$ решения (52) представлен на рис. 3. Как видим, по сравнению со стандартным алгоритмом VIM здесь достигается достаточно существенное повышение аппроксимационной точности решения: максимальное отклонение уменьшается примерно в три раза. Однако если сравнить графики $E(x)$ для VIM, ADM и НРМ, то для всех данных решений получаются примерно одинаковые максимальные аппроксимационные ошибки.

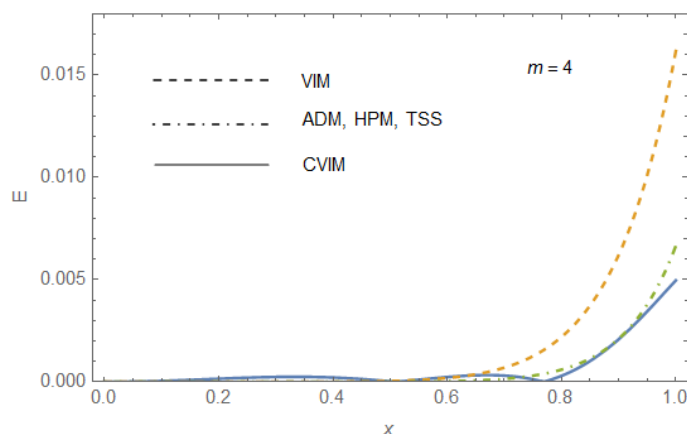


Рис. 3. Графики для абсолютных отклонений

Новые приближенные решения начальной задачи типа Брату.

Ниже представлены некоторые новые варианты получения приближенных полиномиальных (Polynomial Solutions – PS) решений начально-краевой задачи Брату (1), (2).

Применение разложения в ряд Тейлора (Taylor Series Solution – TSS).

В работе [62] краевая задача Брату решена методом разложения искомого решения в ряд Тейлора в точке $x = 0$ с граничными условиями $v(0) = v(1) = 0$. Применим данный метод для решения начальной задачи Брату, т. е. с граничными условиями (2). Представим уравнение Брату в виде

$$v''(x) = \lambda e^v. \quad (52)$$

Далее продифференцируем многократно уравнение (52):

$$\begin{aligned}
v^{(3)} &= \lambda e^v v', \\
v^{(4)} &= \lambda \left[(v')^2 + v'' \right] e^v, \\
v^{(5)} &= \lambda \left[(v')^3 + 3v'v'' + v^{(3)} \right] e^v, \\
v^{(6)} &= \lambda \left[(v')^4 + 6(v')^2 v'' + 3(v'')^2 + 4v'v^{(3)} + v^{(4)} \right] e^v, \dots
\end{aligned} \tag{53}$$

Для точки $x=0$, применив граничные условия (2), из (52) и (53) получаем

$$\begin{aligned}
v''(0) &= \lambda, \quad v^{(3)}(0) = 0, \quad v^{(4)}(0) = \lambda^2, \quad v^{(5)}(0) = 0, \quad v^{(6)}(0) = 4\lambda^3, \\
v^{(7)}(0) &= 0, \quad v^{(8)}(0) = 34\lambda^4, \quad v^{(9)}(0) = 0, \quad v^{(10)}(0) = 496\lambda^5, \dots
\end{aligned} \tag{54}$$

Решение задачи в виде ряда Тейлора с учетом (54) запишем как

$$\begin{aligned}
v(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{v^{(n)}(0)}{n!} x^n = v(0) + v'(0)x + \frac{1}{2!} v''(0)x^2 + \frac{1}{3!} v^{(3)}(0)x^3 + \frac{1}{4!} v^{(4)}(0)x^4 + \dots = \\
&= \frac{\lambda}{2!} x^2 + \frac{\lambda^2}{4!} x^4 + \frac{4\lambda^3}{6!} x^6 + \frac{34\lambda^4}{8!} x^8 + \frac{496\lambda^5}{10!} x^{10} + \dots
\end{aligned} \tag{55}$$

В общем виде полученное решение (55) можно записать в виде

$$v(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{v^{(2k)}(0)}{(2k)!} x^{2k} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{b_k}{(2k)!} \lambda^k x^{2k}. \tag{56}$$

Первые 10 значений коэффициента b_k в (56) приведены в таблице.

Коэффициенты полиномиального решения (34)

k	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
b_k	1	1	4	34	496	11 056	349 504	14 873 104	819 786 496	56 814 228 736

При $\lambda = 2$ из (56) с учетом данных таблицы получаем

$$v(x) = x^2 + \frac{1}{6} x^4 + \frac{2}{45} x^6 + \frac{17}{1260} x^8 + \frac{62}{14175} x^{10} + \frac{691}{467775} x^{12} + \frac{21844}{42567525} x^{14} + \dots \tag{57}$$

Как видим, в итоге мы получили приближенное решение, идентичное решениям (24) и (40), полученным методами ADM и НРМ соответственно (рис. 2 и 3).

Новый комбинированный метод (Combined Method – CM).

В начальной задаче типа Брату (1), (2) отсутствие граничных условий для $x=1$ приводит к существенному росту ошибки аппроксимации вблизи данной точки. Поэтому имеет смысл ввести в рассмотрение такие соотношения, которые каким-либо образом «задают» искомую функцию $v(x)$ и ее производную $v'(x)$ в граничной точке $x=1$, т. е.

$$v(1) = a, \quad v'(1) = b. \tag{58}$$

Несмотря на то, что значения a и b в (58) не известны, мы можем тем не менее их «определить» посредством некоторых соотношений, о которых пойдет речь ниже.

Умножим уравнение (1) на $v'(x)$ и проинтегрируем по области $x \in [0, 1]$:

$$\int_0^1 v''(x)v'(x) dx + \lambda \int_0^1 e^{v(x)} v(x) dx = 0. \quad (59)$$

В итоге получим

$$(e^{v(1)} - 1)\lambda + \frac{1}{2}v'(1)^2 = 0 \rightarrow (e^a - 1)\lambda + \frac{1}{2}b^2 = 0. \quad (60)$$

Отсюда находим

$$v'(1) = b = \sqrt{2\lambda(1 - A)} \quad (A = e^a). \quad (61)$$

Из соотношения $A = e^a$ имеем для точки $x = 1$

$$v(1) = a = \ln A. \quad (62)$$

Полученные соотношения (61) и (62) будем в дальнейшем использовать в виде дополнительных «граничных условий» для точки $x = 1$ согласно (58).

Соотношения (61) и (62) содержат неизвестный параметр A . Для его определения применим интегральное соотношение, которое получим интегрированием уравнения (1), предварительно умноженного на $(1 - x)$. Применяв интегрирование по частям, приходим к определяющему интегральному соотношению

$$S(A) = 0 \leftrightarrow \int_0^1 e^{v(x,A)} (1 - x) dx + \frac{\ln(A)}{\lambda} = 0. \quad (63)$$

Левая часть (63) может быть проинтегрирована либо численно (например, в среде Mathematica), либо посредством предварительного разложения экспоненциальной функции e^v в ряд Тейлора, например, в виде

$$e^v \cong 1 + v + \frac{1}{2}v^2 + \frac{1}{6}v^3 + \frac{1}{24}v^4. \quad (64)$$

Далее применим полученные соотношения (61)–(63) совместно с результатами решения задачи, например, на основе TSS. Искомое решение запишем в виде

$$v(x) \cong \sum_{n=1}^{m-2} a_n x^{2n} + C_1 x^{2(m-1)} + C_2 x^{2m} \quad (m = 3, 4, \dots). \quad (65)$$

Коэффициенты $\{a_n\}_{n=1}^{m-2}$ соответствуют решениям, полученным одним из методов: ADM, НРМ, TSS. Тогда для входящих в (65) неизвестных коэффициентов C_1 и C_2 достаточно будет использовать «граничные условия» (61) и (62) с последующим применением интегрального соотношения (63). Получим приближенные решения при $m = 3, 4, 5$ и 6 .

$N = 6$ ($m = 3$). Запишем приближенное решение задачи при $\lambda = -2$ в виде полинома

$$v(x) \cong x^2 + C_1 x^4 + C_2 x^6. \quad (66)$$

Подстановка (66) в (61) и (62) дает систему линейных уравнений, из которой находим

$$C_1 = -2 - \sqrt{A-1} + 3 \ln A, \quad C_2 = 1 + \sqrt{A-1} - 2 \ln A. \quad (67)$$

Применив численное интегрирование (63) с учетом (66) и (67), получим зависимость $S(A)$. Для $S(A) = 0$ получаем $A = 3.42163$. Отсюда, используя (67), находим коэффициенты

$$C_1 = 0.134193, \quad C_2 = 0.0959245. \quad (67)$$

В итоге, учитывая (65), приходим к приближенному решению в виде

$$v(x) \cong x^2 + 0.134193x^4 + 0.0959245x^6. \quad (68)$$

Теперь получим решение, исключив численное интегрирование в (63), применив (64). Подстановка (64) в (63) с учетом (66) и (67) приводит к трансцендентному уравнению

$$\begin{aligned} S(A) \cong & \frac{1}{160\,626\,866\,400} \left\{ 86\,043\,771\,594 - 2\,781\,474\,675\sqrt{A-1} + \right. \\ & + (129\,910\,421 - 4\,923\,824\sqrt{A-1})A + 138\,914B^2 - \\ & 3 \left[22\,968\,743\,312 + 380\,339\,463\sqrt{A-1} + (862\,574\sqrt{A-1} - 22\,349\,143)A \right] \ln A + \\ & + (2\,703\,314\,565 - 323\,214\,648\sqrt{A-1} + 18\,991\,656A)(\ln A)^2 + \\ & \left. + (571\,746\,387 - 66\,396\,228\sqrt{A-1})(\ln A)^3 + 97\,176\,834(\ln A)^4 \right\} = 0 \end{aligned} \quad (69)$$

Графики функции $S(A)$, рассчитанные на основе интегрального соотношения (63) (численное интегрирование в среде Mathematica) и уравнения (69) представлены на рис. 3, а. Отмечаем практически полное слияние данных графиков. На основе (69) получаем значение $A = 3.42039$, которое отличается от выше приведенного «точно рассчитанного» значения $A = 3.42163$ всего на 0.036%. В этом случае получаем следующее решение:

$$v(x) \cong x^2 + 0.133504x^4 + 0.0962509x^6. \quad (70)$$

Графики абсолютного отклонения $E(x)$ для решений (63), (68) и (69), (70) приведены на рис. 4, б. Констатируем почти одинаковое для обеих вариантов аппроксимационное решение.

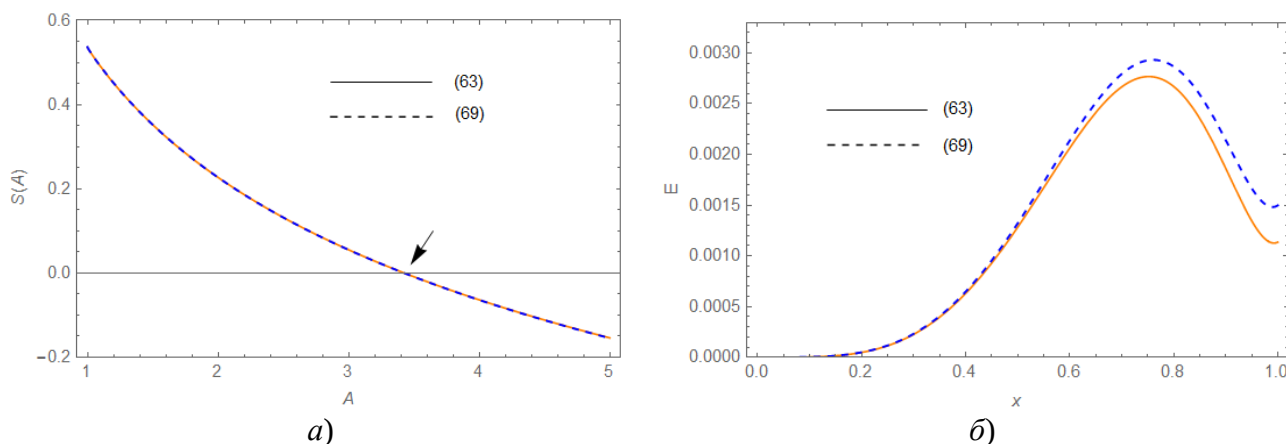


Рис. 4. Графики $S(A)$ для (63) и (69) (а) и для абсолютных отклонений СМ в решениях (68) и (70) при $m = 3$ (б)

График решения (70) представлен на рис. 5, а. Отмечаем полное слияние графиков для приближенного (70) и точного (25) решений. График для абсолютного отклонения $E(x)$ (по сравнению с другими решениями) представлен на рис. 5, б. Мы видим существенное снижение максимального абсолютного отклонения по сравнению с решениями на основе ADM, HPM и TSS.

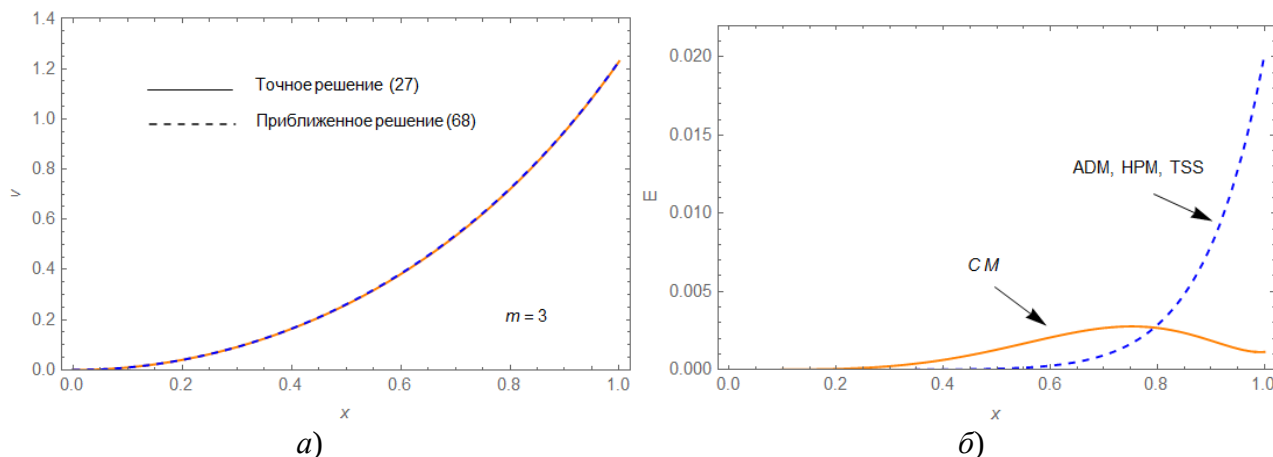


Рис. 5. Графики для точного (27) и приближенного (68) решений (а) и для абсолютных отклонений ADM, HPM, TSS и CM при $m = 3$ (б)

$N = 8$ ($m = 4$). Для решения в виде полинома степени $N = 8$ из (64) имеем

$$v(x) \cong x^2 + \frac{x^4}{6} + C_1 x^6 + C_2 x^8. \quad (71)$$

Проведя аналогичные случаю $m = 3$ вычисления, получаем

$$C_1 = -\frac{10}{3} - \sqrt{A-1} + 4 \ln A, \quad C_2 = \frac{13}{6} + \sqrt{A-1} - 3 \ln A. \quad (72)$$

Используя интегральное соотношение (63), находим $A = 3.425$, откуда из (7)

$$C_1 = 0.0338305, \quad C_2 = 0.030604. \quad (73)$$

Искомое решение из (71) получаем в виде полинома

$$v(x) = x^2 + \frac{x^4}{6} + 0.0338305x^6 + 0.030604x^8. \quad (74)$$

Аналогичным образом могут быть получены решения для приближений более высокого порядка. В частности, при $N = 10$ и 12 соответственно находим

$$N = 10 \quad (m = 5): \quad A = 3.42543 \rightarrow \{C_1 = 0.0098682, \quad C_2 = 0.010248\}, \quad (75)$$

$$N = 12 \quad (m = 6): \quad A = 3.4255 \rightarrow \{C_1 = 0.00310123, \quad C_2 = 0.00354352\}. \quad (76)$$

Из (76) получаем следующие приближенные решения:

$$v(x) = x^2 + \frac{1}{6}x^4 + \frac{2}{45}x^6 + 0.0098682x^8 + 0.010248x^{10}, \quad (77)$$

$$v(x) = x^2 + \frac{x^4}{6} + \frac{2x^6}{45} + \frac{17x^8}{1260} + 0.00310123x^{10} + 0.00354352x^{12}. \quad (78)$$

Графики абсолютных отклонений полученных приближенных решений (68), (74), (77) и (78) представлены на рис. 6. Констатируем высокую сходимость данных приближенных решений, которые получены предложенным новым комбинированным методом.

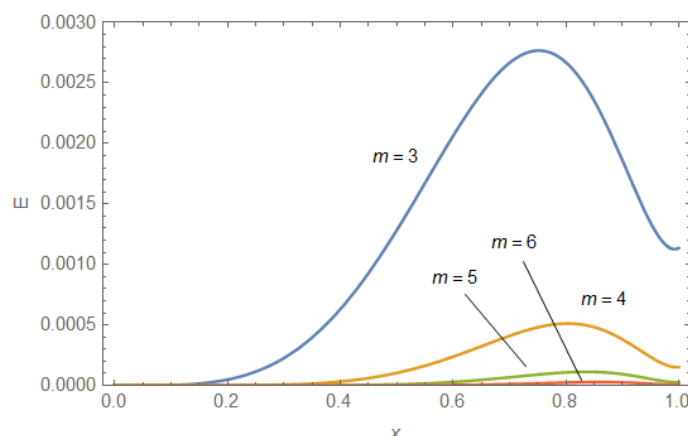


Рис. 6. Графики абсолютных отклонений E на основе нового комбинированного метода

Заключение

Для решения начальной задачи типа Брату, описывающей процесс электроспиннинга, проанализировано большинство основных приближенных аналитических и численно-аналитических методов, которые применялись многими исследователями. Показано, что среди них следует особо выделить приближенный метод разложения Адомиана (Adomian decomposition method – ADM) и метод гомотопических возмущений (Homotopy perturbation method – HPM). Данные приближенные методы дают достаточно точные аппроксимации начальной задачи типа Брату. В то же время метод возмущения (Perturbation method – PM) и вариационно-итерационный метод (Variational Iteration Method – VIM) заметно уступают в точности методам ADM и HPM. Применение других «усовершенствований» рассмотренных методов, как правило, не дает каких-либо существенных преимуществ. Среди них достаточно интересным и более точным выглядит метод контролируемой вариационной итерации (Controlled Variational Iteration Method – CVIM), который дает приближенные решения на уровне точности ADM.

В работе показано, что применение последовательного дифференцирования уравнения Брату в точке $x=0$ с применением формулы Тейлора в виде разложения в степенной ряд (Taylor Series Solution – TSS) позволяет достаточно легко получать аппроксимационное решение начальной задачи типа Брату, которое полностью идентично решениям, отвечающим методу разложения Адомиана (ADM) и гомотопическому методу возмущения (HPM).

Использование комбинации TSS (ADM, HPM) и полученных новых дополнительных «граничных условий» для $x=1$ с привлечением специального интегрального соотношения позволяет очень существенно улучшить точность приближенных решений по сравнению со всеми рассмотренными методами, включая ADM и HPM, причем точность аппроксимационного решения повышается на порядок и более.

Литература

1. Bratu G. Sur les equations integrales non lineaires // Bull. Soc. Math. France. 1914. Vol. 42. Pp. 113–142.
2. Aris R. The mathematical Theory of Diffusion and Reaction in Permeable Catalyst. Oxford University Press, 1975.
3. Bebernes J., Eberly D. Mathematical Problems From Combustion Theory. Springer-Verlag, 1989.
4. Ascher U.M., Matheij R, Russell R.D. Numerical Solution of Boundary Value Problems for Ordinary Differential Equations. SIAM, Philadelphia, 1995.
5. Chui C.K. Wavelets: A Mathematical Tool for Signal Analysis. SIAM, Philadelphia, 1997.
6. Davis H. T. Introduction to Nonlinear Differential and Integral Equations. Dover, New York, 1962.
7. Frank-Kamenetski D.A. Diffusion and Heat Exchange in Chemical Kinetics. Princeton Univ. Press, Princeton, NJ, 1955.
8. Hassan I.H.A.H., Erturk V.S. Applying differential transformation method to the onedimensional planar Bratu problem, Int. J. Contemp. Math. Sci. 2007, Vol. 2. Pp. 1493–1504.
9. Caglar H., Caglar N., Özer M., Valaristos A., Miliou A. N., Anagnostopoulos A. N. Dynamics of the solution of Bratu's equation // Nonlin. Anal. Theory Methods Appl. 2009. Vol. 71. Pp. 672–678.
10. Chandrasekhar S. Introduction to the Study of Stellar Structure. Dover, New York, 1967.
11. Hsiao C.H. Haar wavelet approach to linear stiff systems // Math. Comput. Simul. 2004. Vol. 64. Pp. 561–567.
12. Jacobson J., Schmitt K. The Liouville–Bratu–Gelfand problem for radial operators // J. Differ. Equations. 2002. Vol. 184. Pp. 283–298.
13. Lepik U. Numerical solution of evolution equations by the Haar wavelet method // Appl. Math. Comput. 2007. Vol. 185. Pp. 695–704.
14. Lepik U. Numerical solution of differential equations using Haar wavelets // Math. Comput. Simul. 2005. Vol. 68. Pp. 127–143.
15. Mounim A.S. From the fitting techniques to accurate schemes for the Liouville-Bratu-Gelfand problem // Numer. Methods Partial Differ. Equations. 2006. Vol. 22. Pp. 761–775.
16. Wazwaz A.M. A new method for solving singular initial value problems in the second order differential equations // Appl. Math. Comput. 2002. Vol. 128. Pp. 47–57.
17. Boyd J.P. Chebyshev polynomial expansions for simultaneous approximation of two branches of a function with application to the one dimensional Bratu equation // Appl. Math. Comput. 2003. Vol. 142. Pp. 189–200.
18. Boyd J.P. An analytical and numerical study of the two-dimensional Bratu equation // J. Sci. Comput. 1986. Vol. 1. Pp. 183–206.
19. Buckmire R. Investigations of nonstandard Mickens-type finite difference schemes for singular boundary value problems in cylindrical or spherical coordinates // Numer. Methods Partial Differ. Equations. 2003. Vol. 19. Pp. 380–398.
20. Buckmire R. Application of Mickens finite difference scheme to the cylindrical Bratu Gelfand problem // Numer. Methods Partial Differ. Equations. 2004. Vol. 20. Pp. 327–337.
21. Syam M.I., Hamdan A. An efficient method for solving Bratu equations // Appl. Math. Comput. 2006. Vol. 176. Pp. 704–713.
22. Aksoy Y., Pakdemirli M. New perturbation iteration solutions for Bratu type equations // Comput. Math. Appl. 2010. Vol. 59. Pp. 2802–2808.
23. Wazwaz A.M. A domain decomposition method for a reliable treatment of the Bratu type equations // Appl. Math. Comput. 2005. Vol. 166. Pp. 652–663.
24. Abbasbandy S., Hashemi M.S., Liu C.S. The Lie group shooting method for solving the Bratu equation // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 2011. Vol. 16. Pp. 4238–4249.

25. Venkatesh S.G., Ayyaswamy, S.K., Balachandar S.R. The Legendre wavelet method for solving initial value problems of Bratu type // *Comput. Math. Appl.* 2012. Vol. 63. Pp. 1287–1295.
26. Salem S.A., Thanoon T.Y. On solving Bratu's type equation by perturbation method // *Int. J. Nonlinear Anal. Appl.* 2022. Vol. 13. No 1. Pp. 2755–2763.
27. Feng X., He Y., Meng J. Application of homotopy perturbation method to the Bratu-type equation // *Topological Methods in Nonlinear Analysis*. 2008. Vol 31. Pp. 243–252.
28. He J.H., Wu X.H. Variational iteration method: New development and applications // *Computers & Mathematics with Applications*. 2007. Vol. 54. Pp. 881–894.
29. He J.H., Kong H.Y., Chen R.X., Hu M.S., Chen Q. L. Variational iteration method for Bratu-like equation arising in electrospinning // *Carbohydrate Polymers*. 2014. Vol. 105. Pp. 229–230.
30. Saravi M., Hermann M., Kaiser D. Solution of Bratu's equation by He's variational iteration method // *American J. Comput. Appl. Math.* 2013. Vol. 3. Pp. 46–54.
31. Jin L. Application of modified variational iteration method to the Bratu-type problems // *Int. J. Contemp. Math. Sciences*. 2010. Vol. 5. No. 4. Pp. 153 – 158.
32. Abolarin O.E. New improved variational homotopy perturbation method for Bratu-type problems // *American Journal of Computational Mathematics*. 2013. Vol. 3. Pp. 110–113.
33. Batiha B. Numerical solution of Bratu-type equations by the variational iteration method // *Haceteepe Journal of Mathematics and Statistics*. 2010. Vol. 39. Pp. 23–29.
34. Mousa M.M. Controlled variational iteration method for Bratu equation arising in electro-spun organic nanofibers elaboration // *British Journal of Mathematics & Computer Science*. 2015. Vol. 5. No. 4. Pp. 515–524.
35. Turkyilmazoglu M. An optimal variational iteration method // *Applied Mathematics Letters*. 2011. Vol. 24. Pp. 762–765.
36. Khil M.S., Cha D.I., Kim H.Y., Kim I.S., Bhattarai N. Electrospun nanofibrous polyurethane membrane as wound dressing // *J. Biomedical Materials Research Part B: Applied Biomaterials*. 2003. Vol. 67B. No. 2. Pp. 675–679.
37. Taylor G. Electrically driven jets // *Proceedings of the Royal Society A*. 1969. Vol. 313. doi: 10.1098/rspa.1969.0205.
38. Colantonia A., Boubakerb K. Electro-spun organic nanofibers elaboration process investigations using comparative analytical solutions // *Carbohydrate Polymers*. 2014. Vol. 101. Pp. 307–312.
39. Jacobson M. The Nonwovens Industry meets the Filtration Business. *Nonwovens Industry*, 1991
40. Li W.J., Laurencin C.T., Caterson E.J., Tuan R.S., Ko F.K., Electrospun nanofibrous structure: a novel scaffold for tissue engineering // *J. Biomed. Mater. Res.* 2002. Vol. 60. Pp. 613–621.
41. Wan Yu-Qin, Guo Q., Pan N. Thermo-electro-hydrodynamic model for electrospinning process // *Int. J. Nonlinear Sci. and Num. Simulat.* 2004. Vol. 5. No 1. Pp. 5–8.
42. Spivak A.F., Dzenis Y.A. Asymptotic decay of radius of a weakly conductive viscous jet in an external electric field // *Applied Physics Letters*. 1998. Vol. 73. No. 21. Pp. 3067–3069.
43. Spivak A.F., Dzenis Y.A., Reneker D.H. A model of steady state jet in the electrospinning process // *Mech. Research Communications*. 2000. Vol. 27. No 1. Pp. 37–42.
44. Jafar H., Tajadod H. Electro-spun organic nanofibers elaboration process investigations using BPs operational matrices // *Iranian J. of Mathematical Chemistry*. 2016. Vol. 7. No.1. Pp. 19– 27
45. Adomian G. *Solving Frontier Problems of Physics: The Decomposition Method*. Kluwer, Boston, 1994.
46. Adomian G. A review of the decomposition method in applied mathematics // *J. of Mathematical Analysis and Application*. 1988. Vol. 135. Pp. 501–544.
47. Wazwaz A.M. A new algorithm for calculating Adomian polynomials for nonlinear operators // *Applied Mathematics and Computation*. 2000. Vol. 111. Pp. 53–69.
48. Wazwaz A.M. Adomian decomposition method for a reliable treatment of the Bratu-type equations // *Applied Mathematics and Computation*. 2005. Vol. 166. Pp. 652–663.

49. Holmes M.H. Introduction to Perturbation Methods. Springer-Verlag, New York, 1995.
50. Chow T.L. Classical Mechanics. John Wiley and Sons Inc., USA, 1995.
51. Salema S.A., Thanoon T.Y. On solving Bratu's type equation by perturbation Method // Int. J. Nonlinear Anal. Appl. 2022. Vol. 13. No. 1. Pp. 2755–2763.
52. He J.H. Homotopy perturbation technique // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 1999. Vol. 178. Pp. 257–262.
53. He J.H. Newton-like iteration method for solving algebraic equation // Comm. Nonlinear Sci. Num. Simul. 1998. Vol. 3. Pp. 106–109.
54. Abd El-Latif G.M. A homotopy and a perturbation technique for non-linear problems // Appl. Math. Comput. 2005. Vol. 169. Pp. 576–588.
55. Ghorri Q.K., Ahmed M., Siddiqui A.M. Application of homotopy perturbation method to squeezing flow of a Newtonian fluid // Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 2007. Vol. 8. Pp. 179–184.
56. Xinlong Feng X., He Y., Meng J. Application of homotopy perturbation method to the Bratu-type equations // Topological Methods in Nonlinear Analysis. 2008. Vol. 31. Pp. 243–252.
57. Nayfeh A.H. Perturbation Methods. Wiley, New York, 2000.
58. He J.H. Homotopy Perturbation method for bifurcation of nonlinear problems // Int. J. of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation. 2005. Vol. 6. No. 2. Pp. 207–208.
59. He J.H. Some asymptotic methods for strongly nonlinear equations // Int. J. of Modern Physics B. 2006. Vol. 20. No. 10. Pp. 1141–1199.
60. He J.H. Variational iteration method for delay differential equations // Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 1997. Vol. 2. No. 4. Pp. 235–236.
61. Hassan H.N., Semary M.S. Analytic approximate solution for the Bratu's problem by optimal homotopy analysis method // Communications in Numerical Analysis. 2013. Pp. 1–14. doi:10.5899/2013/can-00139.
62. He Chun-Hui, Shen Y., Ji F.Y., He J.H. Taylor series solution for fractal Bratu-type equation arising in electrospinning process // Fractals. doi: 10.1142/S0218348X20500115.

УДК 536.2

ЗАДАЧА О ПРОНИКНОВЕНИИ ПОТОКА ЛУЧИСТОЙ ЭНЕРГИИ: ВОЛНА МАРШАКА

В.А. Кот

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Введение

Тепловые волны, вызванные излучением, встречаются в различных процессах. В частности, радиационные тепловые волны играют важную роль в физике плазмы, в термоядерном синтезе с инерционным удержанием (ICF). В экспериментах с непрямым возбуждением ICF лазерные лучи освещают внутреннюю стенку резонатора с высоким импедансом Z , который преобразует энергию лазерных пучков в рентгеновское излучение. Классическим примером нелинейной диффузии лучистой энергии является так называемая волна Маршака, впервые рассмотренная в 1958 г. [1]. Решения подобного типа представляют несомненный интерес для ICF [2].

Несмотря на то, что современные вычислительные методы позволяют получить высокоточные решения, по-прежнему сохраняют актуальность аналитические подходы, дающие понимание природы рассматриваемых проблем и позволяющие получать быстрые оценки в экспериментальных исследованиях [2, 3]. Первый шаг в данном направлении был сделан Г.И. Баренблаттом [4], исследовавшим автомодельные решения для тепловой волны. Данная волна рассматривается в приближении диффузии в материал с постоянной удельной теплоемкостью и со средней непрозрачностью по Росселанду, представляемой в виде степенной функции от температуры. Гидродинамическое движение материала при этом не учитывается. Одно из полученных решений дает линейно возрастающую во времени глубину проникновения тепловой волны; второе решение отвечает сохранению полной энергии, содержащейся в волне и остающейся постоянной после ее начального выброса в отдельной точке пространства. Последний случай подробно рассмотрен в работе Я.Б. Зельдовича и Ю.Л. Райзера [5]. Два других решения представлены Дж. Хаммером и М. Розеном [5], при этом фактически повторены решения Г.И. Баренблатта, но с заменой точки на поверхность. В классической работе Р. Маршака [6] исследованы варианты получения точных решений рассматриваемой задачи. Также отметим работу Р. Паттла [7]. Приближенные аналитические решения задачи о расчете волны Маршака представлены М. Хаслетом и А. Алксне [2], К. Лонгом и Н. Тахиром [8], Ж. Гарнье (с соавт.) [9] и в последнее время – М. Крифом [10]. Достаточно подробное обсуждение данной проблемы дано Д. Михаласом [12]. Автомодельные решения получены в работах [1, 2, 12, 13], когда в пределе твердую стенку можно считать бесконечно плотной [14]. При этом найдено весьма разумное согласие расчета с экспериментом [15]. В упомянутой работе [5] Дж. Хаммер и М. Розен предложили приближенные решения, основанные на разложении по малому параметру $\varepsilon = \beta/(4+\alpha)$, когда внутренняя энергия изменяется как T^β , а непрозрачность по Росселанду k_R – как $T^{-\alpha}$. К. Смит [3] получил автомодельные решения задачи без учета нагретой поверхности с последующим наложением граничного условия на поверхности.

Наше рассмотрение ограничим сверхзвуковой волной излучения, имеющей четко выраженный фронт, при этом свойства среды зададим степенными функциями от температуры. В приближении лучистой теплопроводности (отсутствие движения, постоянство плотности среды) уравнение лучистого переноса принимает вид [1]

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} E = - \frac{\partial}{\partial x} F, \quad F = - \frac{4}{3K\rho} \frac{\partial}{\partial x} \sigma T^4, \quad (1)$$

где E – внутренняя энергия на единицу массы, ρ – плотность, T – температура, F – тепловой поток, σ – постоянная Стефана–Больцмана, K – средняя непрозрачность по Росселанду, t – время, x – пространственная координата. Предполагаем, что e и K имеют степенную зависимость от плотности и температуры: $E = f T^\beta / \rho^\mu$, $K^{-1} = q T^\alpha / \rho^\lambda$, где f и q – константы, α , β , μ и λ – показатели степени.

Задача 1

Математическая постановка

Пусть полупространство $x > 0$ заполнено средой с плотностью ρ . Начиная с момента времени $t = 0$, «холодная» среда ($x > 0$) вступает в контакт со средой при температуре T_0 . Если пренебречь перемещением, то уравнение лучистого переноса примет вид

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{K \rho} \frac{\partial \sigma T^4}{\partial x}. \quad (2)$$

Подставив в него соотношение (1) с учетом $\rho = \text{const}$, приходим к уравнению

$$\frac{\partial T^\beta}{\partial t} = \chi \frac{\partial T^{4+\alpha}}{\partial x^2}, \quad (3)$$

где $\chi = \frac{16}{12+3\alpha} \frac{q\sigma}{f\rho^{2-\mu+\lambda}}$ – коэффициент, характеризующий тепловой поток [5]. Введя степень $m = (4+\alpha)/\beta$, $T^\beta = \theta$, $m = n+4$, уравнение (3) запишется как

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 \theta^m}{\partial x^2} \rightarrow \frac{\partial \theta}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 \theta^{n+4}}{\partial x^2}, \quad (4)$$

что отвечает лучистой теплопроводности [9]. Для начальных и граничных условий имеем

$$T(x, 0) = 0 \rightarrow \theta(x, 0) = 0, \quad (5)$$

$$T(0, t) = T_0 \rightarrow \theta(0, t) = \theta_0 = T^{1/\beta}. \quad (6)$$

Для безразмерных переменных $\theta = \theta / \theta_0$, $\eta = x / \sqrt{2\chi \theta^{n+3} t}$ вместо (4)–(6) имеем [9]

$$\frac{d^2 \theta^{n+4}}{d\eta^2} + \eta \frac{d\theta}{d\eta} = 0, \quad \eta > 0, \quad (7)$$

$$\theta(0) = 1, \quad \theta(\infty) = 0. \quad (8)$$

Приближенное решение задачи

Умножим уравнение (7) на η и проинтегрируем по области $\eta = [0, \eta_0]$, где η_0 – фронт радиационной (тепловой) волны при $\theta(0 \leq \eta < \eta_0) \neq 0$ и $\theta(\eta > \eta_0) = 0$:

$$\begin{aligned} \int_0^{\eta_0} \eta \frac{d^2 \theta^{n+4}}{d\eta^2} d\eta + \int_0^{\eta_0} \eta^2 \frac{d\theta}{d\eta} d\eta &= \left[\eta \frac{d\theta^{n+4}}{d\eta} \right]_0^{\eta_0} - \int_0^{\eta_0} \frac{d\theta^{n+4}}{d\eta} d\eta + \left[\eta^2 \theta \right]_0^{\eta_0} - 2 \int_0^{\eta_0} \eta \theta d\eta = \\ &= -\theta(\eta_0) + \theta(0) - 2 \int_0^{\eta_0} \eta \theta d\eta = 1 - 2 \int_0^{\eta_0} \eta \theta d\eta. \end{aligned} \quad (9)$$

В итоге (после соответствующих преобразований и интегрирования по частям) имеем интегральное соотношение

$$\int_0^{\eta_0} \theta(\eta) \eta d\eta = \frac{1}{2} \rightarrow \int_0^1 \theta(\zeta) \zeta d\zeta = \frac{1}{2\eta_0^2}, \quad \zeta = \frac{\eta}{\eta_0}. \quad (10)$$

Функцию θ опишем в виде полинома

$$\theta = (1 + a\zeta)(1 - \zeta)^{\frac{1}{n+3}}, \quad (11)$$

который содержит лишь один неизвестный коэффициент a . Отметим, что данная форма температурного профиля в тепловой волне (волне Маршака) представляется впервые. Для определения коэффициента a введем в рассмотрение вспомогательную функцию $V = \theta^{n+3}$, для которой из (7) получаем уравнение

$$\frac{\eta}{n+4} \frac{dV}{d\eta} + \frac{1}{n+3} \left(\frac{dV}{d\eta} \right)^2 + V \frac{d^2V}{d\eta^2} = 0. \quad (12)$$

Применив для (12) условие $V(\eta_0) = 0$, приходим к дифференциальному соотношению

$$\frac{dV(\eta_0)}{d\eta} = -\frac{n+3}{n+4} \eta_0. \quad (13)$$

Тогда из (10), (11), (13) получаем определяющее алгебраическое уравнение

$$\left(\frac{n+3}{n+4} \eta_0 \right)^{\frac{1}{n+3}} + \frac{3n+10}{2(n+3)} \left[1 - \frac{(n+4)(2n+7)}{2(n+3)^2 \eta_0^2} \right] = 1. \quad (14)$$

Данное уравнение позволяет найти, в зависимости от показателя степени n , параметр η_0 , с помощью которого определяется, в конечном счете, положение фронта волны Маршака в твердом теле:

$$x_* = \eta_0 \sqrt{2\chi \theta^{n+3} t}. \quad (15)$$

Расчет согласно определяющему уравнению (13) при $n=0$ и 3 дает практически точные значения параметра η_0 , задающего положение во времени фронта тепловой волны. В данном случае имеем $\eta_0 = 1.231188$ и 1.1199365 с относительными ошибками 0.0012% и 0.00014% по сравнению с точными значениями $\eta_0 = 1.231173$ и $\eta_0 = 1.119935$ [8]. Таким образом, полученные решения уравнения лучистой теплопроводности с отмеченными выше приближениями при постоянстве температуры на поверхности тела можно считать практически точными. Из (10) и (11), (13) находим

$$\theta = (1 - \zeta)^{\frac{1}{n+3}} \left[1 + \left(\left(\frac{n+3}{n+4} \eta_0^2 \right)^{\frac{1}{n+3}} - 1 \right) \zeta \right]. \quad (16)$$

Результаты расчета на основе приближенного решения и численного решения уравнения (12) представлены на рис. 1, 2. Графики, отвечающие аналитическому и численному решениям, практически полностью сливаются.

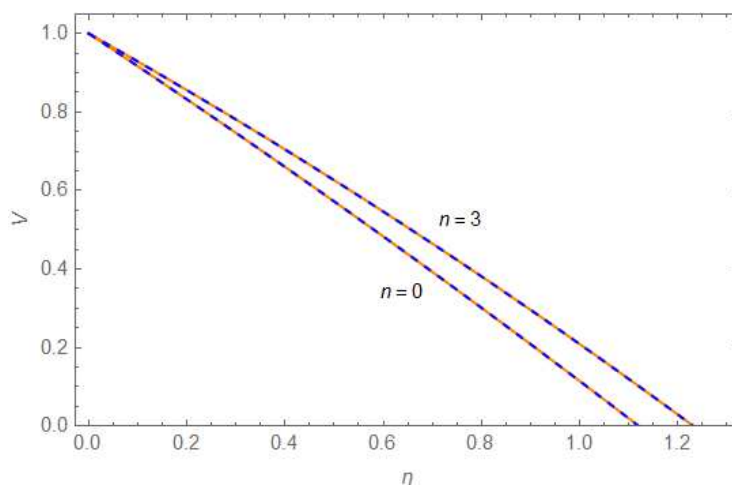


Рис. 1. Графики функции $V(\eta)$ на основе численного (сплошная линия) и аналитического (пунктирная линия) решений

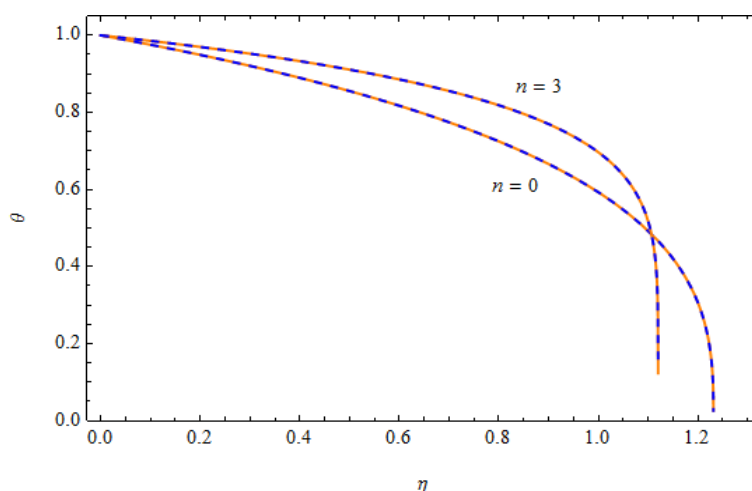


Рис. 2. Графики функции $\theta(\eta)$ на основе численного (сплошная линия) и аналитического (пунктирная линия) решений

Задача 2

Математическая постановка

Пусть при $t > 0$ на поверхность пластины ($x = 0$) падает излучение, в результате чего температура поверхности изменяется по степенному либо экспоненциальному законам:

$$T(0, t) = T_0 (t / t_0)^k, \quad (17)$$

$$T(0, t) = T_0 \exp(2kt / t_0). \quad (18)$$

Примем постоянными плотность материала ρ и удельную теплоемкость c_v . Задача состоит в расчете высокоэнергетической сверхзвуковой волны, проникающей в тело с одновременным определением положения подвижного фронта.

Для теплового потока F в любой локальной точке имеем [16]

$$F = - \frac{16 \sigma T^3}{3 k_R(T_0) \rho} \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (19)$$

Представим непрозрачность по Росселанду функцией $k_R = k_R(T_0)(T/T_0)^{-n}$. В частности, показатель степени $n=0$ описывает рассеяние электронов, а $n=3$ – случаи связанно-свободного либо свободно-свободного поглощения [16]. Подстановка формулы для непрозрачности в (3) дает выражение для теплового потока

$$F = - \frac{16 \sigma}{3(n+4) T_0^n k_R(T_0) \rho} \frac{\partial T^{n+4}}{\partial x}. \quad (20)$$

Отсюда получаем уравнение лучистой теплопроводности (диффузии излучения)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{\rho c_v} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{16 \sigma}{3(n+4) T_0^n k_R(T_0) \rho} \right) \frac{\partial T^{n+4}}{\partial x} \rightarrow \frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T^{n+4}}{\partial x^2} \quad (x > 0), \quad (21)$$

где параметр χ описывает лучистую теплопроводность и задается выражением

$$\chi = \frac{16 \sigma T_0^3}{3(n+4) k_R(T_0) \rho^2 c_v}. \quad (22)$$

Для решения поставленной задачи запишем искомую функции при степенном законе (17) в виде

$$T = T_0 \left(\frac{t}{t_0} \right)^k \theta(\eta), \quad (23)$$

где безразмерный автомодельный параметр η задается соотношением

$$\eta = \frac{x}{\sqrt{2 \chi T_0^n t^{(n+3)k}}}. \quad (24)$$

Для экспоненциального закона изменения температуры поверхности согласно (2) получаем

$$T = T_0 \exp(2kt) \theta(\eta), \quad (25)$$

$$\eta = x \exp[2(n+3)kt]. \quad (26)$$

Подстановка (23)–(26) в исходное дифференциальное уравнение дает, соответственно, дифференциальные уравнения для одной независимой переменной:

$$\frac{d^2 \theta^{n+4}}{d\eta^2} + (1 + k(n+3)) \eta \frac{d\theta}{d\eta} - 2k\theta = 0, \quad (27)$$

$$\frac{d^2\theta^{n+4}}{d\eta^2} + (n+3)\eta \frac{d\theta}{d\eta} - 2\theta = 0. \quad (28)$$

Умножим дифференциальные уравнения (27) и (28) на η и проинтегрируем по частям по области $\eta = [0, \eta_0]$. Для параметра $\eta = \eta_0$ имеем $V(\eta_0) = 0$. В итоге приходим к следующим интегральным соотношениям для степенного и экспоненциального законов изменения температуры поверхности соответственно:

$$\int_0^1 \theta(\zeta) \zeta d\zeta = \frac{1}{2(1+k(n+4))\eta_0^2}, \quad (29)$$

$$\int_0^1 \theta(\zeta) \zeta d\zeta = \frac{1}{2(4+n)\eta_0^2}, \quad \zeta = \frac{\eta}{\eta_0}. \quad (30)$$

Введем в рассмотрение вспомогательную функцию $V = \theta^{n+3}$. Для нее уравнение (27) принимает вид

$$\frac{1+k(n+3)}{n+4} \eta \frac{dV}{d\eta} + \frac{1}{n+3} \left(\frac{dV}{d\eta} \right)^2 + V \frac{d^2V}{d\eta^2} - 2k \frac{n+3}{n+4} V = 0. \quad (31)$$

Уравнение (28) в этом случае преобразуется следующим образом:

$$\frac{n+3}{n+4} \eta \frac{dV}{d\eta} + \frac{1}{3+n} \left(\frac{dV}{d\eta} \right)^2 + V \frac{d^2V}{d\eta^2} - 2 \frac{n+3}{n+4} V = 0. \quad (32)$$

Применив уравнение (29) для точки $\eta = \eta_0$ ($\zeta = 1$), получим граничное соотношение

$$\frac{dV(1)}{d\zeta} = -\frac{n+3}{n+4} (1+k(n+3)) \eta_0^2. \quad (33)$$

Таким же образом мы поступаем и для уравнения (30). В итоге получаем

$$\frac{dV(1)}{d\zeta} = -\frac{(n+3)^2}{n+4} \eta_0^2. \quad (34)$$

Последовательно дифференцируя (29) и (30) с последующим их применением в точке $\eta = \eta_0$, можем получить сколь угодно дополнительных граничных соотношений. Однако в данном случае мы ограничимся только первым приближением, которое основано на использовании лишь дополнительных граничных соотношений вида (31) и (32).

Искомую функцию опишем в виде простого полинома

$$\theta = (1+a\zeta)(1-\zeta)^{\frac{1}{n+3}}. \quad (35)$$

Из (33) и (35) находим коэффициент

$$a = \left[\frac{(n+3)(1+k(n+3))\eta_0^2}{4+n} \right]^{\frac{1}{3+n}} - 1. \quad (36)$$

Применив (35), (36) и (29), приходим к алгебраическому уравнению для η_0 :

$$\left[\frac{3+n}{4+n} (1+k(n+3))\eta_0^2 \right]^{\frac{1}{3+n}} + \frac{10+3n}{2(n+3)} \left[1 - \frac{(n+7)(2n+7)}{2(n+3)^2 (1+k(n+4))\eta_0^2} \right] = 1. \quad (37)$$

Аналогично можно получить уравнение для η_0 при экспоненциальном законе (26).

Некоторые результаты расчета на основе (35), (37) и численного решения представлены на рис. 3 и 4. Графики кривых для функций $V(\eta)$ и $\theta(\eta)$, отвечающих аналитическому описанию функции (35) с граничным условием (34), полностью совпадают с численным решением задачи.

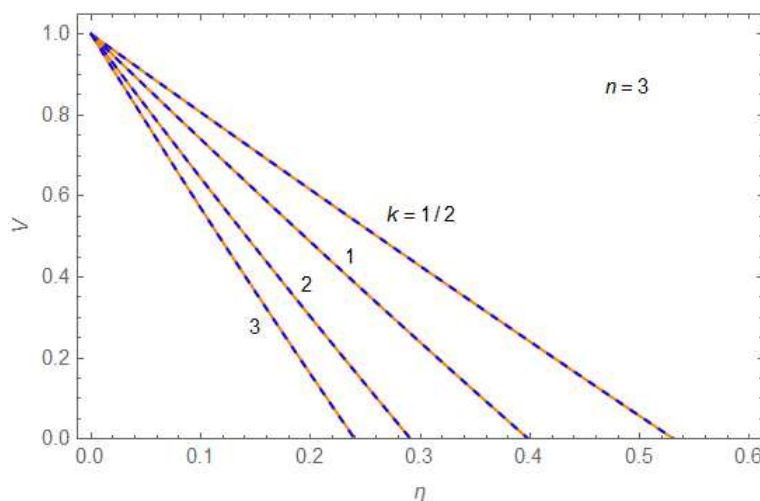


Рис. 3. Графики функции $V(\eta)$ на основе численного (сплошная линия) и аналитического (пунктирная линия) решений

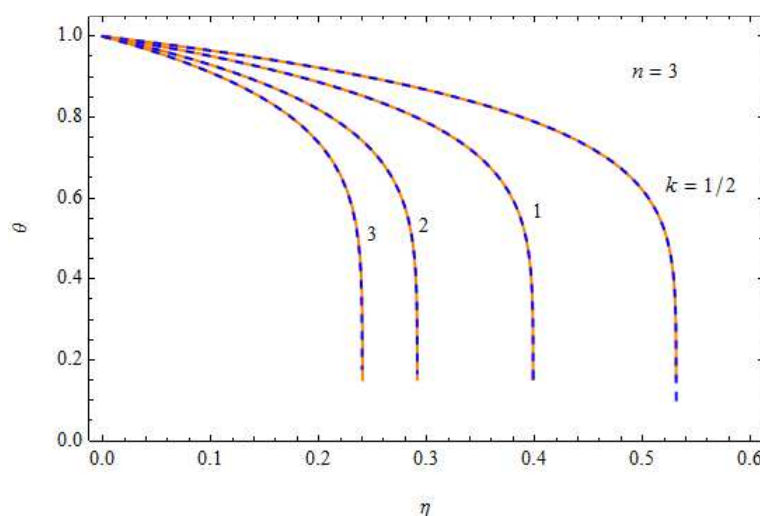


Рис. 4. Графики функции $\theta(\eta)$ на основе численного (сплошная линия) и аналитического (пунктирная линия) решений

Заклучение

Решены две задачи для волны Маршака: температура поверхности тела принимается постоянной; температуры поверхности тела переменная и изменяется по степенному либо экспоненциальному законам. Для приближенного решения введены соответствующие интегральные соотношения для первого момента и дополнительные граничные соотношения, вытекающие из выполнения дифференциального уравнения на переднем фронте тепловой волны. Задачи сведены к обыкновенным алгебраическим уравнениям относительно безразмерного параметра η_0 , задающего, в конечном счете, положение фронта тепловой волны и ее температурный профиль. Ошибка расчета фронта волны Маршака в первом приближении составляет от сотых до тысячных и десятитысячных долей процента.

Литература

1. Hammer J.H., Rosen M.D. A consistent approach to solving the radiation diffusion equation // *Physics of Plasmas* 2003. Vol. 10. No. 5. Pp. 1829–1845.
2. Heaslet M.A., Alksne A. Diffusion from a fixed surface with a concentration-dependent coefficient // *J. Soc. Industr. and Appl. Math.* 1961. Vol. 9. No. 4. Pp. 584–596.
3. Smith C.C. Solutions of the radiation diffusion equation // *High Energy Density Physics*. 2010. Vol. 6. Pp. 48–56.
4. Баренблатт Г.И. О некоторых неустановившихся движениях жидкости и газа в пористой среде // *Прикладная математика и механика*. 1952. Т. 16. № 1. С. 67–78.
5. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.Л. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматлит, 2008.
6. Marshak R.E. Effect of radiation on shock wave behavior // *Physics of Fluids*. 1958. Vol. 1. No. 1. Pp. 24–29.
7. Pattle R.E. Diffusion from an instantaneous point source with a concentration-dependent coefficient // *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*. 1959. Vol. 12. Pp. 407–409.
8. Long K.F., Tahir N.A. Plasma induced energy deposition and radiation transport effects in ion beam heated plane metal targets and analytic solutions of the non-linear radiation conduction equation // *Laser and Particle Beams*. 1986. Vol. 4. No. 2. Pp. 287–313.
9. Garnier J., Malinié G., Saillard Y., Cherfils-Cléroutin C. Self-similar solutions for a nonlinear radiation diffusion equation // *Physics of Plasmas*. 2006. Vol. 13. doi: 10.1063/1.2350167.
10. Krief M. Analytic solutions of the nonlinear radiation diffusion equation with an instantaneous point source in non-homogeneous media // *Physics of Fluids*. 2021. 057105. doi: 10.1063/5.0050422.
11. Mihalas D. *Foundation of radiation hydrodynamics*. New York. Oxford University Press, 1984.
12. Brun L., Dautray R., Delobbeau F., Patou C., Perrot F., Reisse J.-M., Sitt B., Watteau J.-P. *Laser interaction and related plasma phenomena*. New York, 1977. Vol. 4. Pp. 1059–1080.
13. Sanmartin J.R., Barrero A. Self-similar motion of laser half-space plasmas // *Physics of Fluids* 1978. Vol. 21. No. 11. Pp. 1957–1966.
14. Sanz J., Piriz A.R., Tomasel F.G., Self-similar model for tamped ablation driven by thermal radiation // *Physics of Fluids*. 1992. Vol. 4. No. 3. Pp. 683–692.
15. Sigel R., Pakula R., Sakabe S., Tsakiris G.D. X-ray generation in a cavity heated by laser light III. Comparison of the experimental results with theoretical predictions for x-ray confinement // *Physical Review A*. 1988. Vol. 38. No. 11. Pp. 5779–5785.
16. Castor J.I. *Radiation Hydrodynamics*. U.S. Department of Energy by University of California: Lawrence Livermore National Laboratory, 2003.

УДК 536.468

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ БЕДНЫХ СМЕСЕЙ ВОДОРОДА С ВОЗДУХОМ ПРИ НОРМАЛЬНОМ ДАВЛЕНИИ

П.Н. Кривошеев¹, К.Л. Севрук¹, А.В. Скилонд¹, О.Г. Пенязьков¹, А.М. Тереза²

¹ Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

² Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия

Прогнозирование самовоспламенения и горения бедных смесей водорода с воздухом при нормальном давлении является важной и актуальной на сегодняшний день задачей.

Различные методы численного моделирования режимов воспламенения, горения, взрыва и детонации смесей водорода с воздухом требуют [1, 2] использования детальных кинетических механизмов (ДКМ), которые представляют собой более подробное описание процесса превращения исходных реагентов в продукты, включающее в себя как можно более полное описание реакций, состава и свойств промежуточных веществ, переходных состояний, а также констант, необходимых для описания таких реакций (константы скоростей прямых и обратных реакций, полиномиальные зависимости теплоемкости, энтальпии и энтропии от температуры, стандартные энтальпии образования тех или иных веществ, включая промежуточные радикалы и т. д.).

Существует множество детальных кинетических механизмов (моделей) окисления водорода [3, 4], которые различаются как количеством задействованных химических компонентов (включая промежуточные), так и количеством реакций, в которые эти компоненты могут вступать. Кроме того, в ряде моделей (или же механизмов) коэффициенты прямых и обратных реакций заданы напрямую, в то время как в некоторых моделях они вычисляются непосредственно через константы химического равновесия, часть моделей специально создавались для учета зависимости скорости протекания химических реакций от давления. Валидация каждого ДКМ проходит посредством сравнения результатов численного моделирования с собственными и представленными в литературе экспериментальными данными и подбора параметров констант скорости элементарных реакций. Все механизмы не являются универсальными, разрабатывались под конкретные научно-исследовательские и конструкторские задачи, их применимость к процессам горения при других или более широких условиях воспламенения смесей водорода может приводить к заметным расхождениям результатов расчетов с данными эксперимента.

Однако к настоящему времени отсутствуют данные о детальном кинетическом механизме воспламенения водорода, который достоверно описывает воспламенение ультрабедных и бедных смесей водорода при нормальном давлении, в литературе практически отсутствуют данные об экспериментальном исследовании воспламенения подобных смесей.

Для получения максимально достоверных данных эксперименты выполнялись одновременно на двух ударных трубах с внутренним диаметром 50 и 76 мм. На рис. 1 приведены схемы измерительных секций задействованных установок. Каждое измерительное сечение, включая расположенное в торце труб, оснащено быстродействующими датчиками давления фирмы РСВ и ионизационными датчиками. Свечение регистрировалось фотоэлектронными умножителями. Временное разрешение для ФЭУ составляло 0,6 мкс, для ионизационных датчиков - 0,15 мкс. Сигналы регистрировались с частотой 10 МГц. Оптические схемы наблюдения установок (помимо диаметра) имеют некоторые отличия.

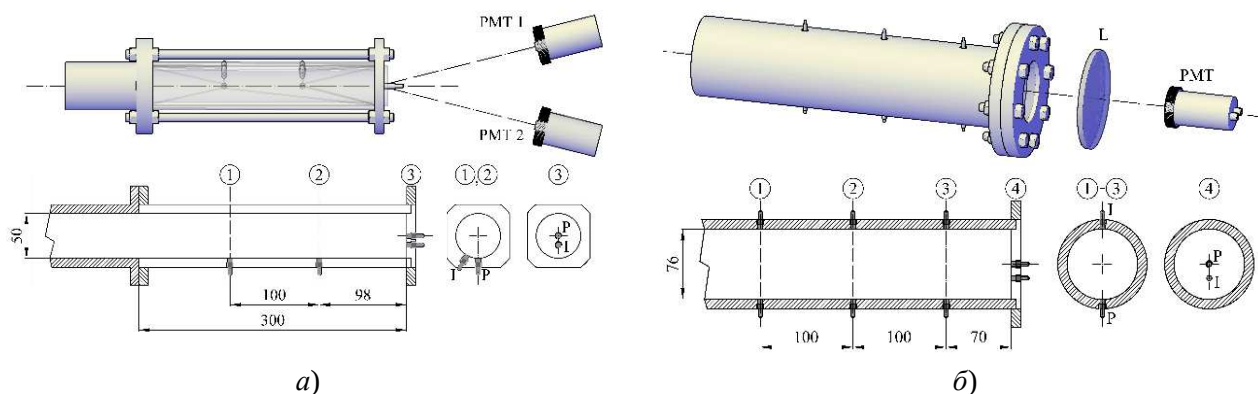


Рис. 1. Измерительные секции ударной трубы диаметром 50 мм (а) и 76 мм (б). 1–4 - измерительные сечения с ионизационными датчиками (I) и датчиками давления (P), PMT – фотоумножитель с диафрагмой и сдвоенными узкополосными светофильтрами (L)

Цилиндрическая ударная труба диаметром 50 мм имеет длину 8,5 м. Ее измерительная секция выполнена из прозрачного оргстекла с квадратным сечением внешней поверхности. Торцевой фланец также выполнен из прозрачного стекла. Со стороны торца трубы производилась регистрация хемилюминесценции перехода ($A^2\Sigma - X^2\Pi$), характерного для радикала OH, на длине волны $\lambda = 308,9$ нм при помощи двух ФЭУ на расстоянии 28 см от трубы с установленной диафрагмой 1,7 мм и сдвоенным узкополосным светофильтром. Цилиндрическая ударная труба диаметром 76 мм имеет длину 6,5 м. Фланец трубы изготовлен из органического стекла СО-95. Пропускание ультрафиолетового излучения на длине волны 309 нм для него составляет 20%. Свет от реагирующей смеси собирался из объема измерительной секции при помощи линзы с фокусным расстоянием $f = 500$ мм, которая изготовлена из стекла КУ-1 с низкими люминесцирующими свойствами. Фокусировка параллельного пучка света из объема осуществлялась на диафрагму ФЭУ, имеющую диаметр 2 мм. На ФЭУ установлен узкополосный светофильтр 309BP1.5 № 210898 (Omega, США) с центром 309 нм и шириной на полувысоте контура пропускания 1,5 нм.

Измерения выполнены за отраженной ударной волной при постоянном начальном давлении 1 атм, для водородно-воздушных смесей с коэффициентом стехиометрии $\varphi = 0,15$ и $0,25$, т. е. смесей $5,93\text{H}_2 + 19,76\text{O}_2 + 74,31\text{N}_2$ и $9,5\text{H}_2 + 19\text{O}_2 + 71,5\text{N}_2$ соответственно. Времена индукции по свечению определялись как промежуток времени с момента достижения ударной волны торца трубы до момента начала роста сигнала свечения. Времена индукции по остальным датчикам измерялись по критерию 5% от максимального уровня сигнала.

На рис. 2 представлены результирующие зависимости задержки воспламенения от обратной температуры для бедных ($\varphi = 0,15$ и $\varphi = 0,25$) смесей водорода с воздухом в диапазоне температур 882–1630 К и давлении за отраженной волной 1 атм. Приведены результаты, полученные на двух трубах (диаметром 50 и 76 мм) двумя различными методами (хемилюминесценция промежуточного радикала OH на длине волны $\lambda = 308,9$ нм и ток ионизации) на каждой. Хорошо видно, что результаты измерений различными методами на разных установках совпадают между собой, что свидетельствует о высоком качестве и достоверности полученных экспериментальных данных, правильно выбранной методике проведения тестов.

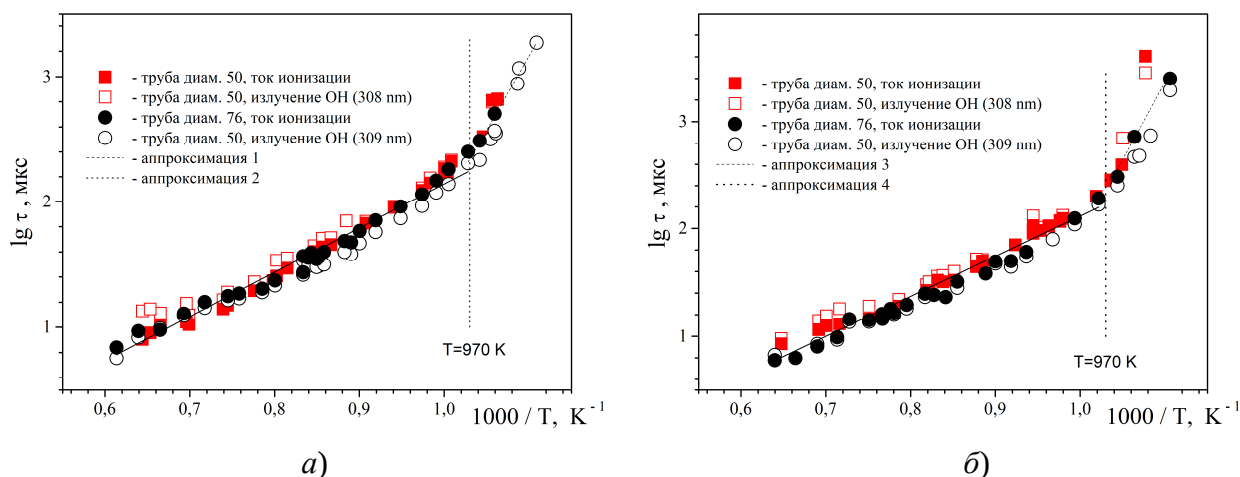


Рис. 2. Зависимости задержки воспламенения от обратной температуры для бедных смесей водорода с воздухом в диапазоне температур 882–1630 К и давления за отраженной волной 1 атм, $\phi = 0,15$ (а) и $\phi = 0,25$ (б)

Представленные данные для исследованных смесей условно можно разделить на две группы, каждая из которых хорошо аппроксимируется линейной зависимостью. Границей раздела между такими группами данных является область температуры порядка 960–970 К. После обработки массива данных были определены следующие зависимости:

для смеси с $\phi = 0,15$ (рис. 2,а):
при $T > 970$ К

$$Lg(\tau) = -1,373 + 3,515 \left(\frac{1000}{T} \right), \quad E = 67,3 \quad (\text{аппроксимация 1})$$

при $T < 970$ К

$$Lg(\tau) = -9,76 + 11,76 \left(\frac{1000}{T} \right), \quad E = 224,9 \quad (\text{аппроксимация 2})$$

для смеси $\phi = 0,25$ (рис. 2,б):
при $T > 970$ К

$$Lg(\tau) = -1,6 + 3,717 \left(\frac{1000}{T} \right), \quad E = 71,2 \quad (\text{аппроксимация 3})$$

при $T < 970$ К

$$Lg(\tau) = -12,5 + 14,43 \left(\frac{1000}{T} \right), \quad E = 276,2 \quad (\text{аппроксимация 4})$$

Здесь τ – задержка воспламенения (мкс); T – температура за отраженной ударной волной (К); E – энергия активации (кДж/моль).

Были выполнены расчеты с использованием программного модуля CHEMKIN-Pro, входящего в пакет ANSYS (Academic version) [5]. Начальное давление в расчетах полагалось равным 1 атм, температура варьировалась в диапазоне от 800 до 1700 К. При всех расчетах использовались термофайлы в стандарте NASA [6], прилагаемые к каждому из используемых детальных кинетических механизмов. Задержка воспламенения τ

определялась при условии $V = \text{const}$ по моменту времени, соответствующему максимальной скорости роста давления. Для сравнения были выбраны три популярных механизма окисления водорода [7–9]. На рис. 3 представлены сравнительные кривые результатов экспериментального измерения (аппроксимации 1–4) задержки воспламенения с результатами численного моделирования с использованием выбранных детальных кинетических механизмов.

В ходе работы были экспериментально измерены задержки воспламенения бедных ($\phi = 0,15$ и $\phi = 0,25$) смесей водорода с воздухом в диапазоне температур 882–1630 К и давлении за отраженной волной 1 атм. Выполнено численное моделирование воспламенения указанных смесей с использованием нескольких популярных детальных кинетических механизмов. Продемонстрировано, что все механизмы достаточно точно (как количественно, так и качественно) описывают задержку воспламенения исследованных смесей.

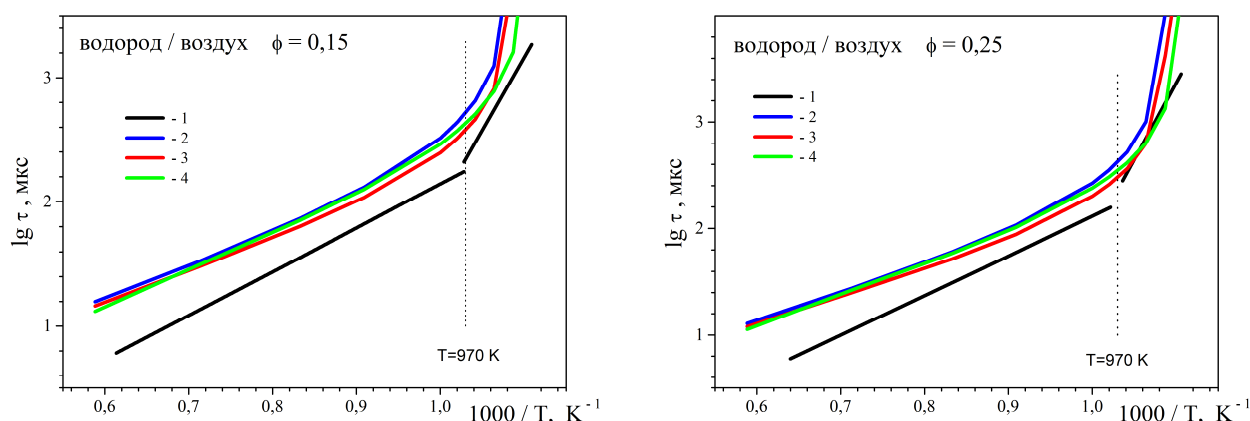


Рис. 3. Зависимости задержки воспламенения от обратной температуры для бедных смесей водорода с воздухом. 1 – экспериментальные данные, аппроксимации (1–4), 2–4 – расчет по механизмам [7], [8] и [9] соответственно

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке Департамента по ядерной и радиационной безопасности Министерства по чрезвычайным ситуациям Республики Беларусь (Госатомнадзор), договор № 87/21 от 22.12.2021 года.

Литература

1. Гельфанд Б.Е., Попов О.Е., Чайванов Б.Б. Водород: параметры горения и взрыва. М.: Физматлит, 2008. - 288 с.
2. Dounia O., Vermorel O., Misdariis A., Poinot T. Influence of kinetics on DDT simulations // Combustion and Flame. 2019. Vol. 200. Pp. 1–14.
3. Борисов С.П., Кудрявцев А.Н., Шершнев А.А. Сравнение детальных химических моделей горения водорода при численном моделировании детонации // Физика горения и взрыва. 2021. Т. 57. № 3. С. 18–33.
4. Тереза А.М., Агафонов Г.Л., Андержанов Э.К., Бетев А.С., Медведев С.П., Хомик С.В. Численное моделирование характеристик самовоспламенения бедных смесей H_2 -воздух // Химическая физика. 2022. Т. 41. № 8. С. 66–73.
5. CHEMKIN-Pro 15112. CK-TUT-10112-1112-UG-1. Reaction Design: San Diego, 2011.
6. Burcat A., Ruscic B. Third Millennium Ideal Gas and Condensed Phase Thermochemical Database for Combustion with Updates from Active Thermochemical Tables. Argonne National Laboratory: Technion Israel Institute of Technology. Tech. Rep. ANL-05/20 and TAE-960. IL, Chicago; Tel-Aviv, 2005.

7. Alan Kéromnès, Wayne K. Metcalfe, Karl A. Heufer, Nicola Donohoe, Apurba K. Das, Chih-Jen Sung, Jürgen Herzler, Clemens Naumann, Peter Griebel, Olivier Mathieu, Michael C. Krejci, Eric L. Petersen, William J. Pitz, Henry J. Curran. An experimental and detailed chemical kinetic modeling study of hydrogen and syngas mixture oxidation at elevated pressures // *Combustion and Flame*. 2013. Vol. 160. Issue 6. Pp. 995–1011.
8. Vlasov P.A., Smirnov V.N. & Tereza A.M. Reactions of initiation of the autoignition of H₂–O₂ mixtures in shock waves // *Russ. J. Phys. Chem.* 2016. В 10. Pp. 456–468.
9. Konnov A.A. Yet another kinetic mechanism for hydrogen combustion // *Combustion and Flame*. 2019. Vol. 203. Pp. 14–22.

УДК 536.4

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ОЧАГА ВОЗГОРАНИЯ В ПОМЕЩЕНИИ ПРИ ПОМОЩИ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННОЙ НЕЙРОСЕТИ

Г.В. Кузнецов, П.А. Стрижак, Р.С. Волков, А.О. Жданова

Томский политехнический университет, Томск, Россия

Пожары в помещениях разного назначения являются актуальной проблемой всего мирового сообщества [1–4]. Активно обсуждаются вопросы повышения огнестойкости зданий и сооружений [2], поскольку восстановление помещений и здания в целом после возгорания может занимать длительный период времени и в ряде случаев невозможно в полной мере. Достоверная и своевременная информация о характеристиках горения материалов и веществ в помещении позволяет моделировать поведение очага возгорания на разных стадиях развития, локализации и подавления пожара [5]. Целью настоящей работы является определение эффективной комбинации технических средств (тепловых и дымовых датчиков, датчиков излучения пламени, контактных и бесконтактных средств измерения температуры, системы газоанализа, видеорегистрирующей техники), необходимых для ранней идентификации возгораний, своевременного инициирования тушения, прекращения горения и тления в условиях, соответствующих начальной стадии пожара в помещениях.

Для проведения исследований по определению характеристик идентификации, локализации и ликвидации возгораний в условиях обратной связи спроектирован и сконструирован экспериментальный комплекс [6]. Огнеупорный стенд представляет полый параллелепипед размерами 1,5×1×1,25 м, грани которого выполнены из стекломгнезитового негорючего листа, прикрепленного к каркасу из алюминиевых несущих элементов. Смотровое окно изготовлено из огнеупорного стекла толщиной 4 мм размерами 0,7×0,8 м. В нижней боковой поверхности стенда выполнен канал приточной вентиляции (SV), с противоположной стороны в верхней части стенда – канал вытяжной вентиляции (EV). Внутри стенда размещаются модельный очаг пожара, точечные детекторы (промышленные пожарные извещатели и термопары) для идентификации характеристик очага возгорания и момента начала возгорания, система газоанализа, высокоскоростной термостойкий промышленный пирометр, видеокамера и форсуночное устройство с каналом подачи огнетушащей жидкости (воды) для локализации и ликвидации пожара. Для дополнительной регистрации температур модельного очага стенд оснащался тепловизором “Testo-885” (спектральный диапазон 7,5–14 мкм; диапазон измеряемых температур –30–1200 °C; диапазон изменения коэффициента излучения 0,01–1; разрешение кадра 640×480 pix), информация с которого передавалась напрямую на ПК. Сигналы с точечных детекторов (датчик пламени, тепловой датчик, датчик дыма), а также высокоскоростного пирометра (PSE) подаются на щит автоматики, который оснащен набором электрических устройств для осуществления функций отображения данных с пожарных извещателей, передачи данных датчиков и сигналов с термопар и PSE на ПК для последующей регистрации, а также управления электрической задвижкой на трубопроводе огнетушащего состава (перед распылительной форсункой).

В ходе исследования выполнялись два типа экспериментов по аналогии с [6]: первый – без воздействия на очаг возгорания потоком распыленной воды; второй – с использованием воды (полным тушением модельного очага).

Установлено, что на стадии тушения очага дымовыделение интенсифицируется. Такая особенность зарегистрирована для всех типов исследованных модельных очагов пожара. Необходимо также отметить, что при тушении модельного очага с линолеумом на тканевой подложке сложно выделить стадию тления, так как после подачи распыленного аэрозоля и

исчезновения пламени отсутствуют какие-либо видимые признаки тления. Регистрировалось полное тушение модельного очага.

По результатам экспериментов проанализированы характеристики работы дымовых датчиков (SD) в условиях обратной связи. В табл. 1 и 2 приведены результаты экспериментальных исследований по определению времени задержки срабатывания (t_D) SD при горении, а также при тушении модельных очагов пожара, состоящих из различных типов материалов, в условиях работы линии обратной связи. Результаты (табл. 1 и 2) представлены для SD двух типов: проводных (SD1, SD2, подключенных по шлейфу пожарной сигнализации) и беспроводных (SD3, SD4, радиоканальных). Видно, что времена задержки срабатывания SD при горении различных материалов в среднем варьируются в пределах 1–2 мин. Такой результат удовлетворительно коррелирует с результатами исследований [7]. Так, в [7] показано, что времена задержки срабатывания SD могут составлять 1–10 мин, что является безусловным недостатком таких систем обнаружения возгорания. Результаты экспериментальных и численных исследований [5, 8] показывают, что распространение пламени пожара по всему помещению может занимать от 3 до 16 мин. При этом результаты численного моделирования [5] показывают, что в случае горения древесины распространение пламени на всю площадь помещения может занять 15–16 мин, в случае горения мягкой мебели – 4 мин. Таким образом, несмотря на значения времен срабатывания (табл. 1 и 2) SD, установленных по результатам настоящих экспериментов, применение SD в системах идентификации возгораний в ряде случаев может способствовать более быстрому обнаружению очага по сравнению с тепловыми датчиками и датчиками пламени из-за особенностей распространения фронта пожара.

Таблица 1. Зависимости времени задержки срабатывания (t_D) SD (по шлейфу) от массы навески (m_f)

m_f (г)	Древесина, t_D (с)		Бумага, t_D (с)		Картон, t_D (с)	
	Горение	Тушение	Горение	Тушение	Горение	Тушение
10	195	141			91,5	95
20	223,5	132,2			89	77
30	170	138		71	59	55
40	197,8	158		68	24,6	30
50	198,9	140		66	17,2	18,5
60	189,2	121,5	71,5	59		
70	214,2	139	74	60		
80	222	141,7	78,5	52		

Таблица 2. Зависимости времени задержки срабатывания (t_D) беспроводных SD от массы навески (m_f)

m_f (г)	Древесина, t_D (с)		Бумага, t_D (с)		Картон, t_D (с)	
	Горение	Тушение	Горение	Тушение	Горение	Тушение
10	159	113,3			83,8	87
20	125,4	105,5			78,2	76,8
30	114,7	97,5		97,5	53	45
40	173	99,5		93	15,5	23
50	110	91		75	17,1	16
60	132,2	91,9	99	71		
70	146,2	118,8	91	58		
80	171,7	130,6	70,5	49		

Анализ экспериментальных данных по определению времени задержки срабатывания SD (табл. 1 и 2) показал, что для модельных очагов, состоящих из древесины и бумаги, процесс тушения способствует более раннему срабатыванию SD по сравнению со случаем, когда на очаг не подается тушащий состав: для древесины в среднем на 40–60 с; для бумаги – на 10–20 с. Для очагов, состоящих из бумаги, в экспериментах с тушением устойчивое срабатывание SD начиналось уже с массы навески $m_f \approx 30$ г, в то время как в экспериментах без тушения срабатывание SD стабильно происходило лишь при массе навески более 60 г. Для очагов из картона времена задержки срабатывания SD для двух рассмотренных случаев не отличались. Для модельных очагов пожара на основе линолеума срабатывание SD регистрировалось еще до момента полного разгорания очага и, как следствие, до момента начала тушения. По этой причине в таблицах результаты экспериментов для данного типа очагов отсутствуют.

Полученные характеристики работы SD могут быть использованы, в том числе, для исключения ложных срабатываний FD. Так, например, при непродолжительном (2–5 с) тушении очага древесины массой 20–30 г быстро образуется довольно плотный поток дыма, приводящий к срабатыванию практически всех SD. При этом в случае горения такого очага без тушения срабатывание SD в экспериментах не происходило. Таким образом, в случае срабатывания FD следует осуществить генерацию водяного аэрозоля в течение 2–5 с (один импульс). Если это приводит к срабатыванию SD, то возгорание регистрируется и тушение пожара продолжается (возобновляется). Если SD не срабатывают, то можно отнести срабатывание FD к ложному.

Результаты экспериментальных исследований получены с применением разработанного специализированного программного обеспечения, которое позволяет накапливать статистику срабатывания широкой номенклатуры сенсоров в испытательном комплексе, анализировать статистические данные в режиме нейронной сети и выдавать рекомендации для оператора системы пожарной безопасности по типу целесообразного к применению огнетушащего состава, плотности орошения и методики его подачи. Статистическая база для работы такой системы формировалась по результатам опытов, проводимых на протяжении двух лет в Heat Mass Transfer Laboratory TPU (<http://hmtslab.tpu.ru/>). В общей сложности база содержит более 800 экспериментов с разными материалами и механизмами инициирования их термического разложения, а также способами локализации и подавления горения на ранних стадиях идентификации возгораний с применением жидкостных спреев на основе воды и составов со специализированными добавками, в частности смачивателями.

Статистическая база данных Heat Mass Transfer Laboratory TPU (<http://hmtslab.tpu.ru/>) представляет собой аналог нейронной сети, используя которую становится возможным на основе набора измерений (температура, времена задержки срабатывания пожарных извещателей, концентрация газовых компонентов) определить тип горючего материала, его массу, механизм нагрева (пиролиза), а также спрогнозировать необходимый и достаточный для локализации и тушения очага объем тушащего состава и время тушения. Работа с базой данных осуществляется следующим образом:

- при обнаружении в защищаемом помещении возгорания (с использованием нескольких различных датчиков, устройств или систем) показания установленных в объеме помещения датчиков, устройств или систем загружаются в статистическую базу данных;

- из статистической базы выгружаются данные, содержащие все характеристики работы датчиков, устройств или систем, расположенных в защищаемом помещении и соответствующих широкой группе горючих материалов и механизмов инициирования возгорания;

- посредством сравнения данных, полученных датчиками и системами из защищаемого помещения, с выгруженными из статистической базы данными

осуществляется выбор группы данных, содержащих наиболее близкое совпадение (в первую очередь анализируется сам факт срабатывания датчика/системы/сенсора, далее сравниваются вероятности срабатывания датчика/системы/сенсора);

– по наиболее близкому совпадению определяется материал либо группа материалов, а также их масса (диапазон масс);

– руководствуясь данными статистической базы для материала или группы материалов, выдаются соответствующие рекомендации: необходимые времена тушения, тип тушащего состава, его требуемую плотность орошения и объем тушащего вещества.

Так, например, тестовое использование изложенной выше статистической базы при условии срабатывания таких датчиков, сенсоров и систем как SD, CO (GDS) и VC, позволило с точностью 82% идентифицировать горючий материал – древесину, а также определить минимальную необходимую плотность орошения очага – $2,97 \text{ л/м}^2$ и время тушения – 90 с. В результате получаем, что при площади помещения около 20 м^2 требуемый объем огнетушащего вещества (воды) для полной локализации и тушения пожара составит около 59,4 л. По сравнению с регламентированной [9] интенсивностью орошения водой (в диапазоне $0,08\text{--}0,12 \text{ л/(м}^2\text{с)}$ при максимальной продолжительности орошения не менее 30–60 мин), которая достигает значений около $144\text{--}432 \text{ л/м}^2$, использование предлагаемого по результатам проведенных исследований подхода позволяет сократить объем затраченной на тушение воды в несколько десятков раз. Последнее, в частности, позволит существенно минимизировать убытки от чрезмерного залива помещения водой.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-19-00009, <https://rscf.ru/en/project/21-19-00009/>).

Литература

1. Festag S. The Statistical Effectiveness of Fire Protection Measures: Learning from Real Fires in Germany // *Fire Technol.* 2021. Vol. 57. No. 4. Pp. 1589–1609.
2. Himoto K. Conceptual framework for quantifying fire resilience – A new perspective on fire safety performance of buildings // *Fire Saf. J.* 2021. Vol. 120. Art. 103052.
3. Sheng D., Deng J., Zhang W., Cai J., Zhao W., Xiang J. A Statistical Image Feature-Based Deep Belief Network for Fire Detection // *Complexity.* 2021. Vol. 2021. Art. ID 5554316.
4. Bonner M., Wegrzynski W., Papis B.K., Rein G. KRESNIK: A top-down, statistical approach to understand the fire performance of building facades using standard test data // *Build. Environ.* 2020. Vol. 169. Art. 106540.
5. Moon M.H., Kim H.J., Min S.G., Kim S.C., Park W.J. Simulation of indoor fire dynamics of residential buildings with full-scale fire test // *Sustain.* 2021. Vol. 13. Art. 4897.
6. Kuznetsov G., Volkov R., Sviridenko A., Zhdanova A. Compartment Fire Behavior at the Stages of Detection, Containment and Suppression Using Water Mist // *Fire.* 2022. Vol. 5. Art. 155.
7. Gutmacher D., Hoefler U., Wöllenstein J. Gas sensor technologies for fire detection // *Sensors Actuators B. Chem.* 2012. Vol. 175. Pp. 40–45.
8. Srivastava G., Nakrani D., Ghoroi C. Performance of Combustible Facade Systems with Glass, ACP and Firestops in Full-Scale, Real Fire Experiments // *Fire Technol.* 2020. Vol. 56. Pp. 1575–1598.
9. SP 485.1311500.2020 Fire protection systems. Automatic fire extinguishing installations. Design Code of 31 August 2020.

УДК: 544.452.2

ВЛИЯНИЕ ПЕРЕГОРОДКИ ИЗ ПОРИСТОЙ МЕДИ НА РАСПРОСТРАНЕНИЕ ФРОНТА ПЛАМЕНИ В ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ

Ф.С. Кулешов, С.В. Головастов, Г.Ю. Бивол, В.В. Голуб

Объединённый институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Введение

Проблема взрывобезопасности газовых смесей является чрезвычайно актуальной. Это особенно важно в настоящее время в связи с развитием водородной энергетики. Для предотвращения распространения фронта пламени разрабатываются методы, основанные как на химическом подавлении горения, так и на отводе тепла из зоны реакции [1, 2]. Последние не требуют использования сложных реагентов и в некоторых случаях более эффективны. Распространённый способ отвода тепла заключается в помещении на пути распространения фронта пламени пористой перегородки или перфорированной пластины, обладающих высоким отношением площади поверхности к объёму, что способствует эффективности теплоотвода [3–5].

Важным критерием в задачах отвода тепла из зоны горения является величина теплопроводности пористого каркаса и характер взаимодействия фронта пламени с материалом пористой перегородки [6]. Если интенсивность отвода тепла недостаточна, то пористая среда или перфорированная пластина могут выступать в качестве турбулизаторов потока горючей смеси, приводя к значительному ускорению фронта пламени [7–9]. Как правило, большая часть работ по определению эффекта пористой перегородки выполняется в полуоткрытом канале [3, 10], в закрытом канале [11, 12], в закрытом канале с мембраной или клапаном [6, 13]. В некоторых случаях использовались пластины из оргстекла [14] или две съёмные пластины, перекрывающие канал [15].

В данной работе исследовалось влияние медной перегородки с открытым типом пор на динамику фронта пламени в открытом и полуоткрытом каналах. Эксперименты проводились в водородно-воздушных смесях. Исследовано влияние потока горючей смеси на динамику фронта пламени. Исследования проводились в канале переменного диаметра с внезапным расширением. Влияние количества пор (количество пор на дюйм, пнд) и длины медной перегородки на динамику фронта пламени было определено для нескольких концентраций водорода в водородно-воздушной смеси.

1. Экспериментальная установка

Схема экспериментальной установки приведена на рис. 1. Открытый канал состоял из двух секций. Первая секция представляла собой цилиндрическую трубку с искровым разрядником, шаровым краном и трубкой для подачи заранее смешанной газовой смеси. Внутренний диаметр трубы и шарового крана составлял 20 мм. Положение искрового разрядника показано на рис. 1.

Цилиндрическая трубка была подсоединена ко второй секции, которая представляла собой диагностическую секцию прямоугольного сечения. Размеры поперечного сечения прямоугольного канала составляли 20×40 мм. Таким образом, площадь поперечного сечения канала увеличилась в 2,5 раза. В данном случае расстояние между стеклянными стенками составляло 20 мм. Медные пористые элементы были установлены на расстоянии 60 мм от начала диагностической секции. Длина пористого элемента варьировалась от 10 до 90 мм.

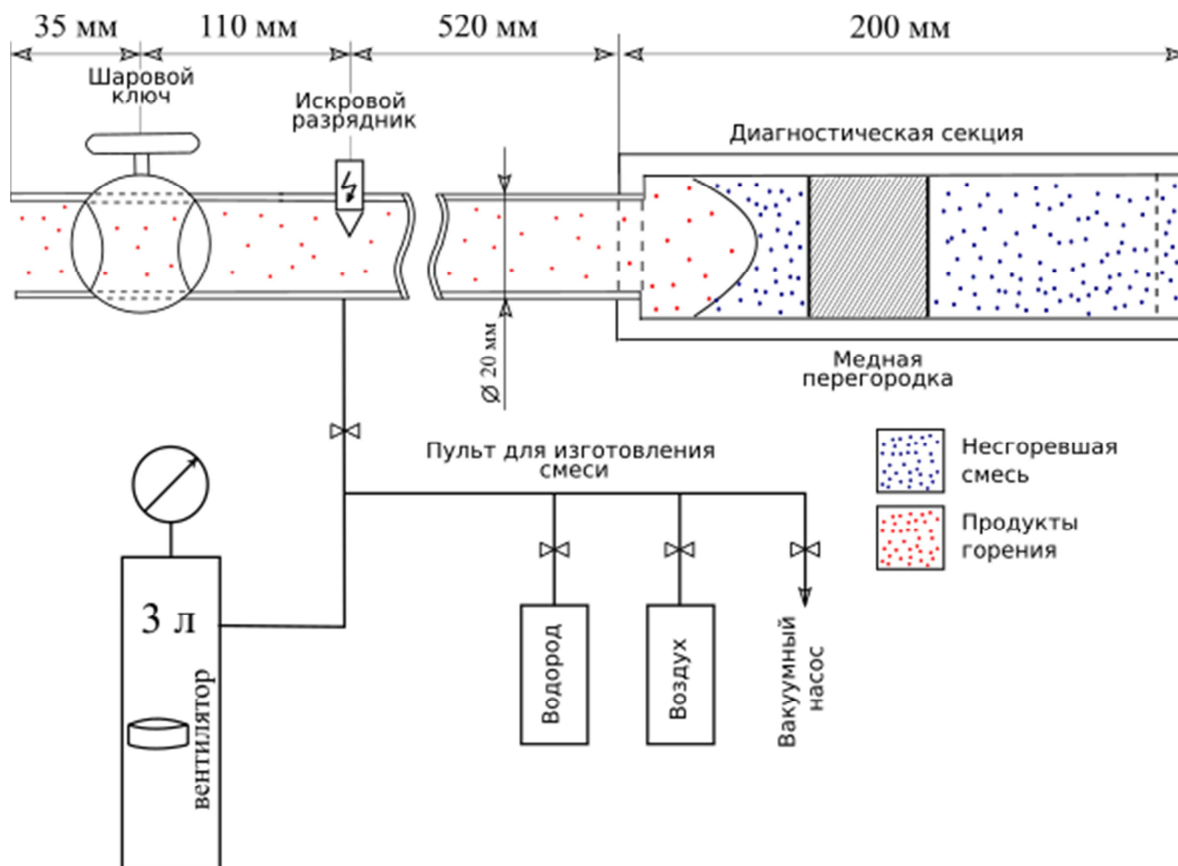


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для определения скоростей фронта пламени

Смесь водорода с воздухом изготовлялась в баллоне объемом 3 л путем измерения парциальных давлений образцовым манометром. Максимальное давление в сосуде составляло 0,7 МПа. Смесь перемешивалась с помощью вентилятора, установленного внутри баллона. Сначала четырехкратный объем смеси (около 2 л) продувался через канал при закрытом шаровом кране, после шаровой кран открывался и горючая смесь (около 1 л) снова подавалась в канал. После заполнения канала горючая смесь воспламенялась с помощью искрового разрядника мощностью 0,1 Дж. Варьировался коэффициент ϕ , определяемый как мольный избыток водорода по отношению к воздуху. В экспериментах ϕ составлял 0,3, 0,4 и 0,6.

Динамика фронта пламени фиксировалась с помощью высокоскоростной камеры Phantom VEO 710 и прибора ИАБ-451 с ножом Фуко. Размеры стеклянных окон позволили зарегистрировать сегмент длиной 150 мм. Непрерывное освещение осуществлялось с помощью ксеноновой лампы мощностью 35 Вт. Частота регистрации составляла 300–60000 кадр/с, время экспозиции – 3 мкс, размер кадра – 1280×168 или 1280×80 пикселей. Инфракрасная камера Infracam ImageIR использовалась для регистрации зоны горения внутри пористой меди. Длительность экспозиции была установлена равной 27 мкс, а количество кадров в секунду составляло 670 при разрешении 671×312.

2. Результаты

Как видно из рис. 2, фронт пламени перед перегородкой имеет возмущенную вытянутую форму (0, 7,5 мс, 15 мс). Взаимодействие фронта пламени с медной перегородкой приводит к более интенсивному образованию возмущений на фронте пламени после его прохождения через перегородку (37,2 мс, 37,8 мс).

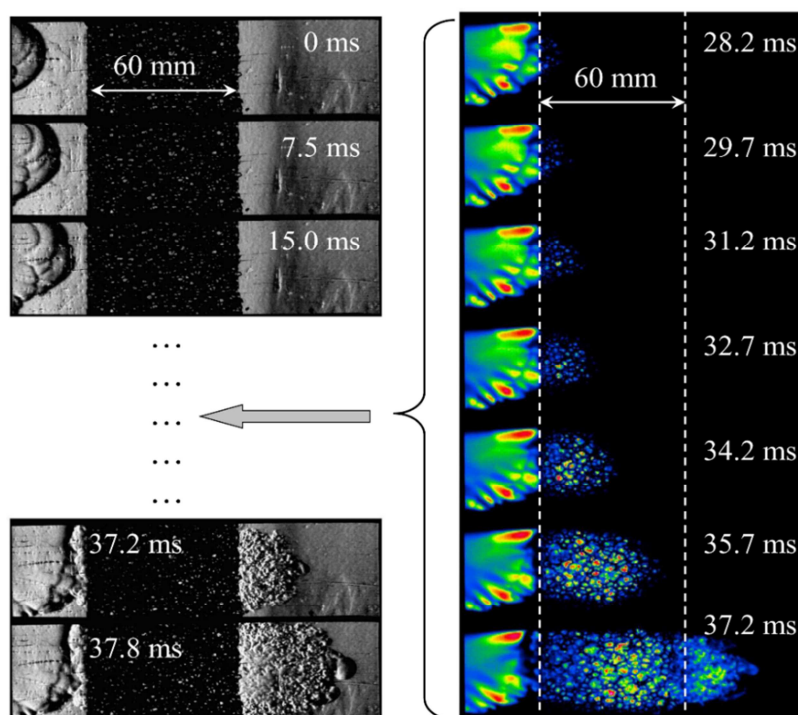


Рис. 2. Теневые и инфракрасные фотографии фронта пламени в водородно-воздушной смеси при прохождении через медную перегородку. 7 пнд, длина 60 мм, $\phi = 0,3$. За нулевое принимается время первого изображения

На рис. 3 представлены данные для открытых и полуоткрытых каналов, а также для пустого канала (без перегородки). Скорость фронта пламени u_1 в водородно-воздушной смеси $\phi = 0,3$ до прохождения перегородки изменялась во всех случаях от 1 до 3 м/с (7 пнд), от 0,5 до 2 м/с (20 пнд). Увеличение длины перегородки от 10 до 60 мм привело к росту скорости u_2 фронта пламени после прохождения перегородки от 3 до 15 м/с (7 пнд) и от 3 до 12 м/с (20 пнд). Увеличение длины с 60 до 90 мм привело к ускорению пламени для 7 пнд и гашению для 20 пнд. После ускорения фронт замедляется до начальных скоростей.

На рис. 4 показано отношение скорости u_2 после прохождения перегородки к скорости u_1^* до перегородки с учетом расширения продуктов сгорания и увеличения скорости фронта пламени в пустом канале. Многократный разброс значений на длине 90 мм обусловлен образованием и развитием вторичных источников воспламенения внутри медной перегородки, которые не зависят от первоначального распространения фронта пламени перед медью. Рассматривая в качестве максимального значения только длину перегородки 60 мм, стоит отметить, что зависимость скорости фронта пламени растет в основном линейно с увеличением длины пористого элемента.

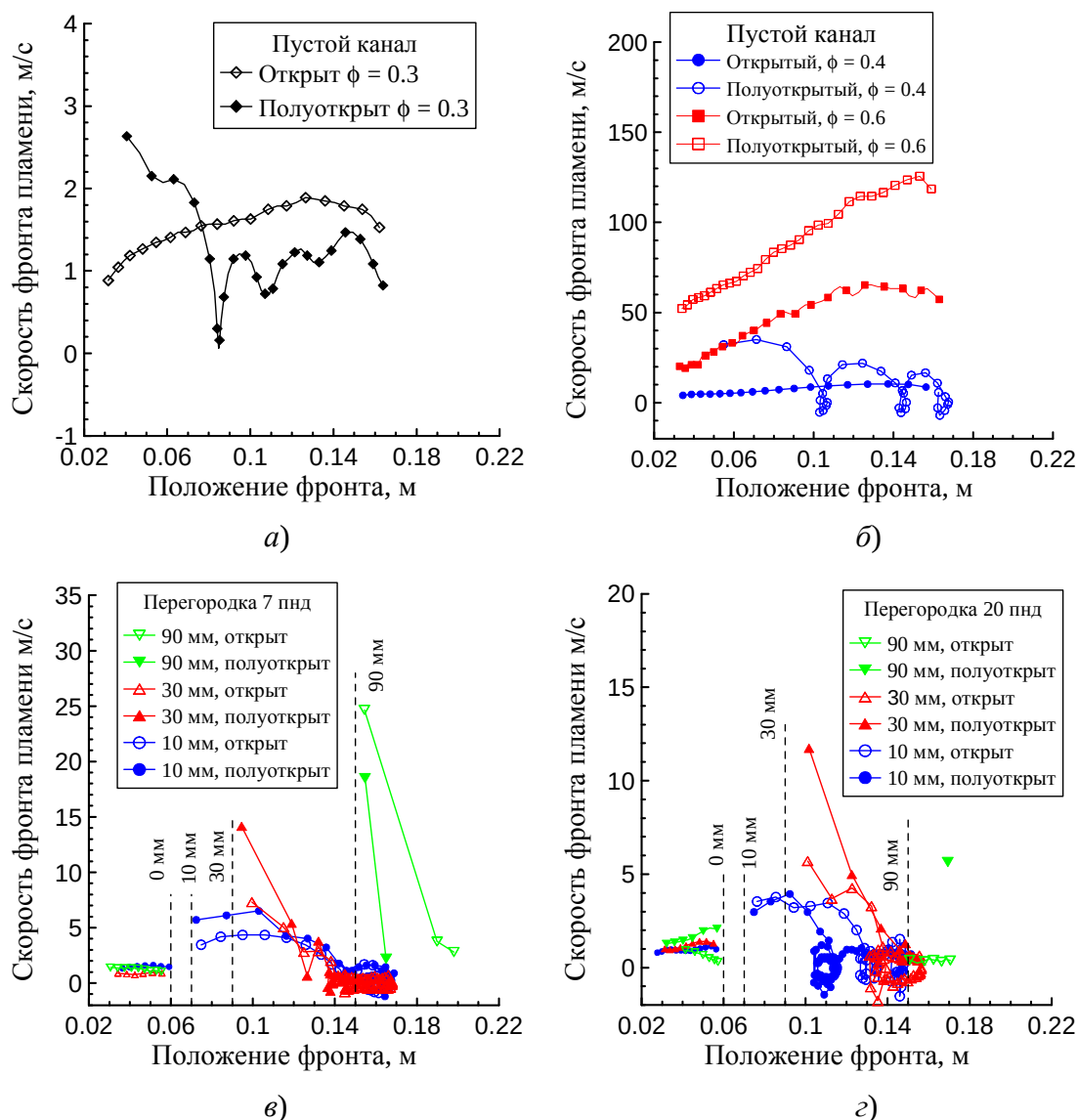


Рис. 3. Скорость фронта пламени водородно-воздушной смеси в канале (в пустом канале, $\phi = 0,3$ (а); в пустом канале, $\phi = 0,4, 0,6$ (б); в канале с перегородкой 7 пнд, $\phi = 0,3$ (в); в канале с перегородкой 20 пнд, $\phi = 0,3$ (г). Расстояние указано от начала диагностической секции

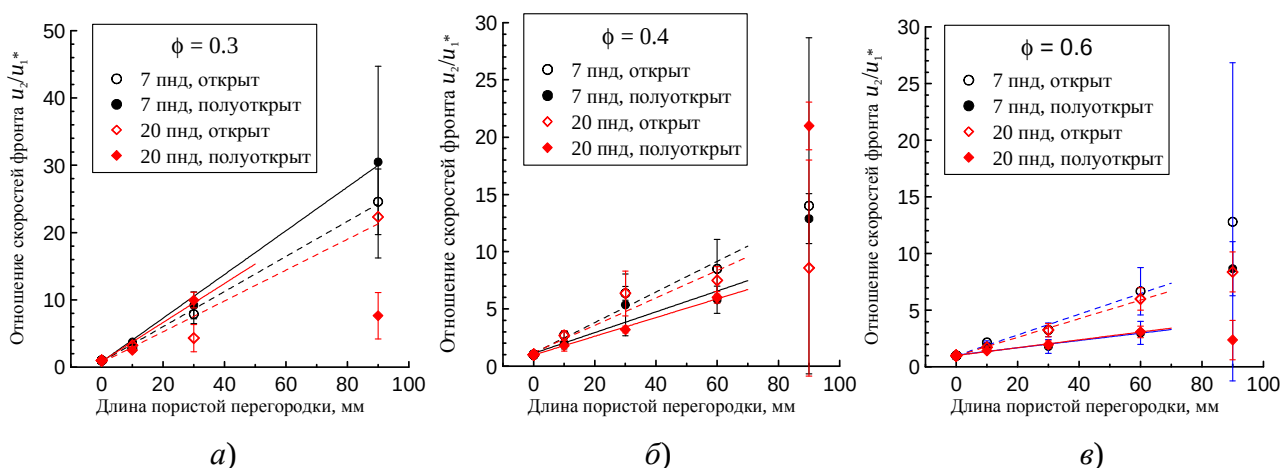


Рис. 4. Отношение скоростей фронта пламени u_2/u_1^* для водородно-воздушной смеси $\phi = 0,3$ (а), $\phi = 0,4$ (б), $\phi = 0,6$ (в)

Эффективность $K_{\text{пнд}}$ воздействия перегородки на ускорение фронта пламени может быть определена как тангенс угла наклона линейной зависимости отношения скоростей u_2/u_2^* от длины перегородки l :

$$\frac{u_2}{u_2^*} \approx 1 + K_{\text{пнд}} l,$$

где u_2^* соответствует значению скорости фронта пламени, достигаемому на таком же расстоянии в пустом канале. Как видно из рис. 5, максимальная эффективность $K_{\text{пнд}} = 0,22\text{--}0,32 \text{ мм}^{-1}$ достигается для обедненной смеси $\phi = 0,3$, а минимальная эффективность $K_{\text{пнд}} = 0,03\text{--}0,10 \text{ мм}^{-1}$ – при $\phi = 0,6$. Значения коэффициентов одинаковы для одного количества пор на дюйм и не зависят от того, является ли канал открытым или полуоткрытым.

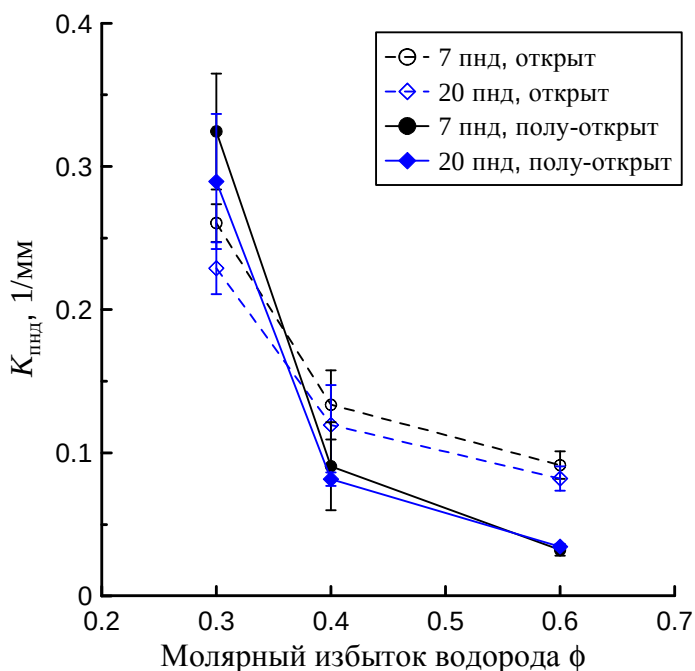


Рис. 5. Зависимость эффективности $K_{\text{пнд}}$ от молярного избытка ϕ водорода. Сплошные линии/заполненные символы – полуоткрытый канал; пунктирные линии/пустые символы – открытый канал

На основе выполненных работ по изучению динамики распространения фронта пламени в открытом или в полуоткрытом каналах с медной пористой перегородкой можно сделать заключение о том, что размещение в канале такой перегородки с линейной плотностью пор 7 пнд или 20 пнд приводит к ускорению фронта пламени. Относительное ускорение фронта пламени при прохождении через перегородку может быть аппроксимировано линейной функцией в зависимости от длины перегородки. Наклон линейной функции, таким образом, определяет эффективность ускоряющего действия перегородки $K_{\text{пнд}}$. Определена зависимость эффективности коэффициента $K_{\text{пнд}}$ от молярного избытка ϕ водорода, максимальное значение которого $K_{\text{пнд}} = 0,22\text{--}0,32 \text{ мм}^{-1}$ достигается для бедной смеси $\phi = 0,3$.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-79-10363).

Литература

1. Babkin V., Korzhavin A., Bunev V. (1991). Propagation of premixed gaseous explosion flames in porous media // *Combust. Flame*. 87: 182.
2. Golub V., Korobov A., Mikushkin A., Solntsev O., Volodin V. (2018). Influence of a heat-absorbing surface on the propagation of a hemispherical flame // *J. Loss Prev. Process Ind.* 51: 1.
3. Cheng F., Chang Zh., Luo Zh., Liu Ch., He Ch. (2020). Large eddy simulation and experimental study of the effect of wire mesh on flame behaviours of methane/air explosions in a semi-confined pipe // *J. Loss Prev. Process Ind.* 68: 104258.
4. Jin K., Wang Q., Duan Q., Sun J. (2020). Effect of single-layer wire mesh on premixed methane/air flame dynamics in a closed pipe // *Int. J. Hydrogen Energy*. 45: 32664.
5. Wen X., Guo Zh., Wang F., Pan R., Liu Zh., Zhang X. (2020). Experimental study on the quenching process of methane/air deflagration flame with porous media // *J. Loss Prev. Process Ind.* 65: 104121.
6. Доброго К.В., Жданок С.А. Физика фильтрационного горения газов. Мн.: Ин-т тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАНБ, 2002. 203 с.
7. Щелкин К.И. Быстрое горение и спиновая детонация газов. М.: Воениздат, 1949. 196 с.
8. Фролов С.М., Аксенов В.С., Басевич В.Я. Инициирование гетерогенной детонации в трубах с витками и спиралью Щелкина // *TBT*. 2006. Т. 44. Выпуск 2. С. 285–292.
9. Ciccarelli G. (2012). Explosion propagation in inert porous media. *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A*. 370: 647.
10. Dai H., Wang X., Chen X., Nan X., Hu Y., He S., Yuan B., Zhao Q., Dong Zh., Yang P. (2020) Suppression characteristics of double-layer wire mesh on wheat dust flame // *Powder Technol.* 360: 231.
11. He Y, Fang Q, Yuan B, Cao C, Zhan Y, Chen X, Ding Q. (2022) Explosion evolution behavior of methane/air premixed gas in a closed pipe filled with a bio-based porous material. *Fuel*. 318: 123716.
12. Li Y., Zhao Q., Liu L., Chen X., Huang C., Yuan B. (2022) Investigation on the flame and explosion suppression of hydrogen/air mixtures by porous copper foams in the pipe with large aspect ratio // *J Loss Prevent. Proc.* 76: 104744.
13. Duan Y., Wang Sh., Yang Y., Li Y. (2020). Experimental study on explosion of premixed methane-air with different porosity and distance from ignition position // *Combust. Science Tech.* 193: 2070.
14. Wang J., Liu G., Zheng L., Pan R., Lu Ch., Wang Y., Fan Z., Zhao Y. (2022) Effect of opening blockage ratio on the characteristics of methane/air explosion suppressed by porous media // *Process. Saf. Environ. Protec.* 164: 129.
15. Joo H.I., Duncan K., Ciccarelli G. (2006) Flame-quenching performance of ceramic foam // *Combust. Sci. Techn.* 178: 1755.

УДК 544.452

КОМБИНИРОВАННОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА АНАЛИЗА ГРАФА ПРЯМЫХ СВЯЗЕЙ И АНАЛИЗА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ДЛЯ РЕДУЦИРОВАНИЯ ДЕТАЛЬНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО МЕХАНИЗМА ГОРЕНИЯ КЕРОСИНА

Б.И. Луховицкий, А.С. Шарипов

Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова, Москва, Россия

Большая работа по исследованию кинетики воспламенения и горения различных топлив ведется сегодня по всему миру. Множество работ при этом посвящено разработке детальных механизмов химических реакций для описания окисления сложных углеводородных топлив, таких как керосин и его суррогаты. Разумеется, такие механизмы содержат большое число компонентов и, соответственно, химических реакций, например, механизм JetSurf 2.0 [1] содержит 348 компонентов и 2163 реакции, а механизм CRECK(HT<) [2] – 537 компонентов и 18250 реакций. Механизмы такого размера на сегодняшний день пока не могут быть использованы в практических многомерных 3D и даже 2D газодинамических расчетах ввиду огромных вычислительных затрат. В связи с этим возникает необходимость в сокращении (редуцировании) размеров (числа компонентов) механизма. Естественно, что такое сокращение невозможно без потери точности описания отдельных параметров реагирующего потока, однако если ограничить диапазоны условий расчета и выбрать целевые определяемые параметры газа, задав при этом допустимую точность, с которой они должны быть определены, то такое редуцирование вполне может быть успешно произведено.

Существуют несколько подходов к редуцированию кинетических схем химических реакций. Во-первых, схема может быть сокращена вручную на основе анализа концентраций компонентов и скоростей реакций в расчете. Такой подход является крайне трудоемким, длительным и требует знания детальной специфики кинетики окисления отдельных углеводородов.

Механизм химических реакций также может быть редуцирован на основе метода анализа чувствительности (sensitivity analysis) к исключению отдельного компонента из механизма (SA). Опишем этот подход подробнее. На начальном этапе создается набор вычислительно легких тестовых задач (таких как задача об определении времени индукции при воспламенении смеси в замкнутом адиабатическом реакторе постоянного давления или объема, задача о скорости распространения ламинарного фронта пламени, реакторная модель), для которых существуют экспериментальные значения целевых параметров. Далее для каждой из задач созданного набора проводится серия из N расчетов (N – число компонентов в исходном кинетическом механизме), в каждом из которых из механизма исключен один из компонентов, после чего определяется, исключение какого компонента приводит к наименьшей ошибке, и данный компонент удаляется из кинетической схемы. Для новой кинетической схемы операция повторяется, и таким образом схема покомпонентно сокращается, пока ошибки в определении целевых параметров не достигнут предельно допустимых. Таким образом, для механизма из N компонентов для каждой из тестовых задач нужно сделать порядка $(N^2 + N) / 2$ расчетов ($\sim 10^5$ расчетов для механизма CRECK(HT<) [2]). Поэтому редуцирование больших механизмов только методом анализа чувствительности на большом наборе тестовых задач, особенно если среди них есть задача о распространении ламинарного фронта пламени, вычислительно очень затратно.

Еще один класс методов редуцирования кинетических схем химических реакций основан на теории графов. Среди популярных подходов – метод графа прямых связей (direct relation graph – DRG) [3] и модифицированный, более совершенная модификация метода

DRG – метод прямых связей с распространением ошибки (direct relation graph with error propagation – DRGEP) [4]. В основе данных методов лежит построение графа связей между компонентами механизма и выбранными заранее целевыми компонентами (такими как компоненты топлива и окислителя, важнейшие продукты, а также продукты, отдельно интересующие исследователя, например, CO, NO, NO₂) в каждой расчетной точке (например, на каждом временном шаге) решения тестовой задачи химической кинетики. Длина связей между двумя компонентами в этих графах определяется скоростями реакций, в которых они участвуют. В ходе редуцирования задается порог длины связи и отбрасываются несвязанные с целевыми компонентами. Данный подход является достаточно быстрым, но приводит к худшим результатам, нежели метод анализа чувствительности.

В связи с вышесказанным видится целесообразным комбинированное использование методов DRGEP и SA. В данной работе предпринята попытка реализации такого подхода при редуцировании популярного механизма [2] для описания воспламенения керосина (его простейших суррогатов: н-декана и смеси н-декана с бензолом).

На первом этапе редуцирования, пока количество компонентов кинетической схемы еще слишком велико для проведения анализа чувствительности, сокращение схемы производилось по методу DRGEP. В качестве тестового набора были выбраны данные экспериментов из работы [5], посвященной определению времени индукции смеси н-декана (n-C₁₀H₂₂) с воздухом, для различных значений коэффициентов избытка воздуха $\alpha = 0,5, 1$ и 2 ; давлений $P = 13$ и 50 атм в диапазоне температур от 800 до 1300 К за отраженной ударной волной (всего 43 точки). Данные эксперименты моделировались в приближении замкнутого адиабатического реактора постоянного объема. Также в тестовый набор были включены результаты расчетов индекса эмиссии NO_x, полученные с использованием реакторной модели [6].

В ходе редуцирования как по методу DRGEP, так и по методу SA ошибка в описании тестовых данных δ определялась в зависимости от типа задачи в следующем виде:

$$\delta = \begin{cases} \frac{|\lg(\tau_{\text{ind}}^{\text{exp}}) - \lg(\tau_{\text{ind}}^{\text{red}})|}{\lg(\tau_{\text{ind}}^{\text{exp}})}, \\ \frac{|E\text{INO}_x^{\text{full}} - E\text{INO}_x^{\text{red}}|}{E\text{INO}_x^{\text{full}}}, \\ \frac{|U_n^{\text{exp}} - U_n^{\text{red}}|}{U_n^{\text{exp}}}. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $\tau_{\text{ind}}^{\text{exp}}$ и $\tau_{\text{ind}}^{\text{red}}$ – времена индукции, полученные экспериментально и с использованием редуцированного механизма соответственно; $E\text{INO}_x^{\text{full}}$ и $E\text{INO}_x^{\text{red}}$ – индексы эмиссии NO_x, полученные с использованием полного и редуцированного кинетических механизмов; U_n^{exp} и U_n^{red} – скорости ламинарного фронта пламени, полученные экспериментально и с использованием редуцированного кинетического механизма.

На рис. 1а показаны зависимости максимальной и средней ошибки от числа компонентов в кинетической схеме на первом (DRGEP) этапе редуцирования. Как видно из рисунка, резкий рост средней ошибки начинается после сокращения числа компонентов меньше 81, при этом такое число компонентов в кинетической схеме уже позволяет перейти к более медленной, но в тоже время и более точной процедуре редуцирования по методу анализа чувствительности. Таким образом, данная схема из 81 компонента была выбрана в качестве начальной для редуцирования по методу SA.

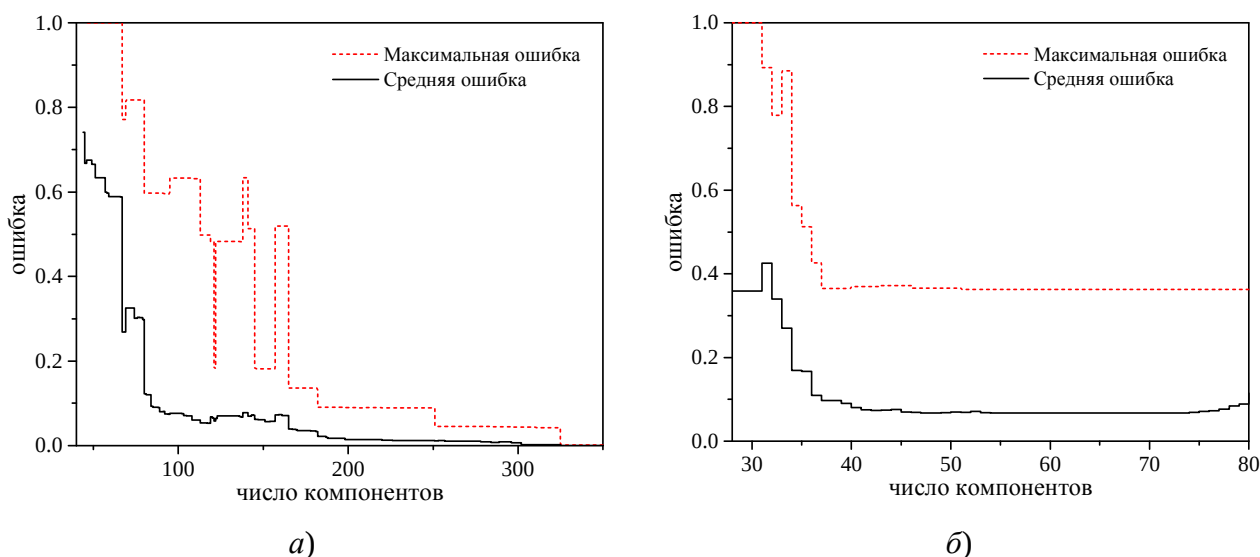


Рис. 1. Зависимость средней и максимальной ошибки от числа компонентов в кинетической схеме при редуцировании: *a* – DRGEP; *б* – SA

Перед дальнейшим сокращением числа компонентов кинетической схемы набор тестовых (валидационных) задач был дополнен задачей о скорости распространения ламинарного фронта пламени на основе экспериментальных данных, приведенных в работе [7], в которой были получены зависимости скорости ламинарного фронта пламени в смеси (80% $C_{10}H_{22}$ + 20% C_6H_6) / воздух от коэффициента избытка воздуха ($\alpha = 0,7 - 1,3$) для двух значений температуры смеси – 338 и 358 К.

На рис. 1б показано, как изменялись средняя и максимальная ошибки, определенные с использованием выражения (1) в ходе сокращения числа компонентов схемы химических реакций по методу SA.

Процесс сокращения кинетической схемы был остановлен после достижения средней ошибки 10%, число оставшихся компонентов при этом равно 38. В составе итогового редуцированного кинетического механизма оказались следующие компоненты: $n-C_{10}H_{22}$, C_6H_6 , H_2O , CO_2 , H_2 , H , O , OH , O_2 , CO , N_2 , N , NO , NO_2 , H_2O_2 , HO_2 , CH_3 , CH_2O , HCO , C_2H_5 , C_2H_4 , C_2H_3 , C_2H_2 , CH_2CHO , $n-C_3H_7$, C_3H_6 , C_2H_5CHO , C_4H_7 , C_4H_6 , C_5H_5 , $n-C_{10}-OQOON$, $n-C_{10}H_{21}-OO$, $n-C_{10}-QOON$, $n-C_{10}-OOQOON$, $n-C_5H_{10}$, $n-C_7H_{14}$, $n-C_{10}H_{21}$, $n-C_{10}H_{20}$.

На рис. 2 показано сравнение результатов, полученных с использованием созданного редуцированного механизма, с результатами экспериментов по определению времени индукции [5] и скорости ламинарного фронта пламени [7], а также с результатами расчета индекса эмиссии NO_x , полученными с использованием полной кинетической схемы химических реакций [2] для реакторной модели [6]. Как можно видеть из рисунка, использование редуцированного кинетического механизма приводит к отклонению индекса эмиссии NO_x от значения, полученного с использованием полной кинетической схемы реакций в рамках реакторной модели [6], не более чем на 3 г/кг, что можно считать очень хорошим результатом для такой относительно компактной кинетической схемы. Как видно из рис. 2а и рис. 2б, разработанный механизм описывает времена задержки воспламенения и скорости распространения ламинарного фронта пламени несколько хуже, чем индекс эмиссии NO_x , но тем не менее данную точность можно считать приемлемой на фоне известных трудностей воспроизведения исследуемых величин даже большими детальными кинетическими механизмами.

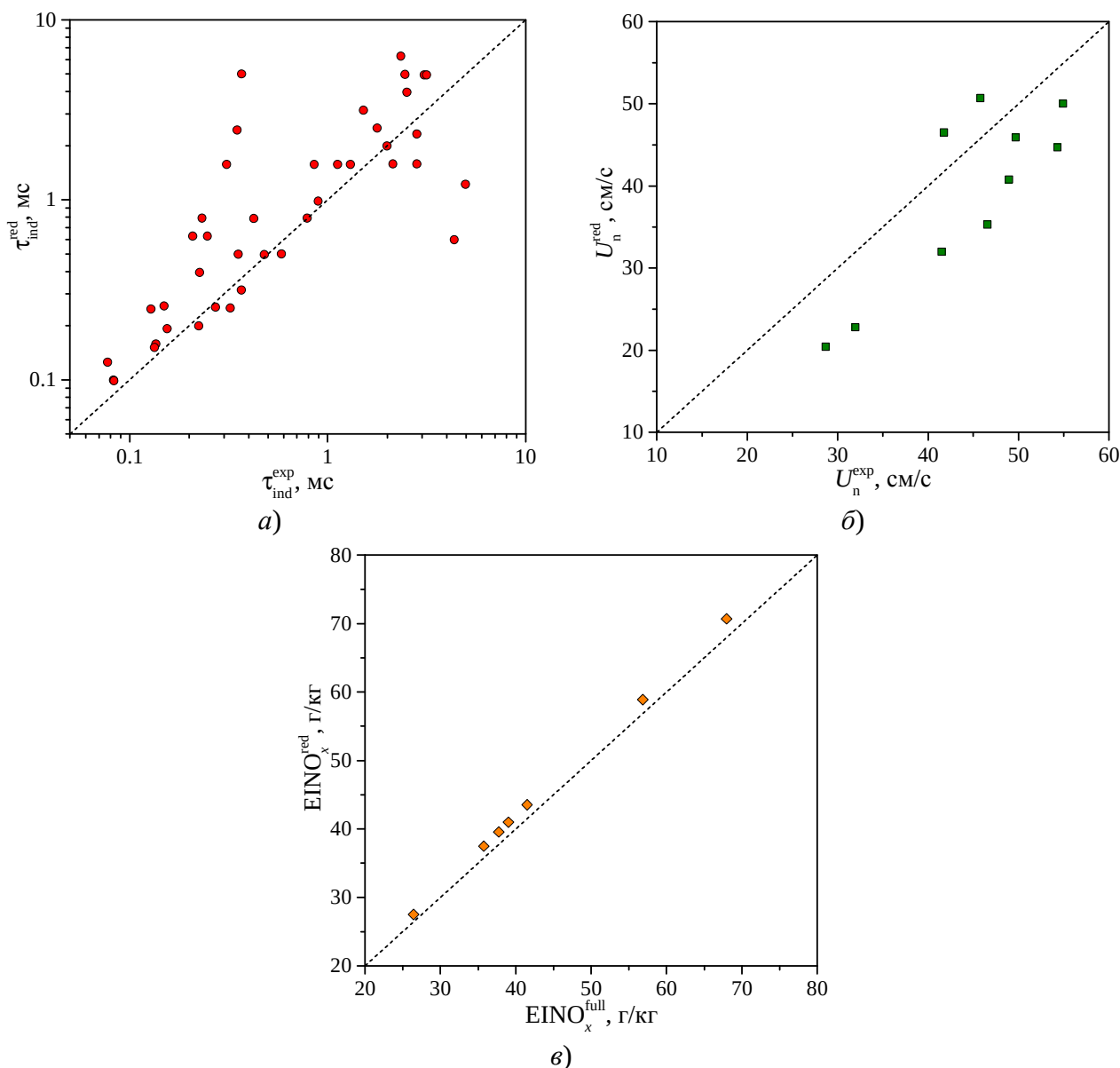


Рис. 2. Зависимость определяемых с использованием редуцированной кинетической схемы параметров от референсных значений (точки): а – время индукции; б – скорость ламинарного горения; в) индекс эмиссии NO_x . Пунктиром показаны линии идеального соответствия

Несмотря на получение обнадеживающих предварительных результатов, возможно дальнейшее повышение предсказательной способности механизма путем сокращения числа химических реакций (которых в финальном редуцированном механизме получилось 190 шт.) и варьирования отдельных констант скоростей. Однако стоит заметить, что в этой работе, в первую очередь посвященной именно методике комбинированного использования DRGER и SA методов, при демонстрационном редуцировании кинетической схемы горения керосина было задействовано весьма ограниченное количество экспериментальных данных, и, конечно, для получения сокращенного механизма реакций с лучшей предсказательной способностью работа может быть повторно проделана с расширенным набором эталонных данных.

Публикация подготовлена в рамках реализации Программы создания и развития научного центра мирового уровня «Сверхзвук» на 2020–2025 годы при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение от «24» июня 2021 г. № 075-15-2021-605).

Литература

1. Wang H., Dames E., Sirjean B. et al. A high-temperature chemical kinetic model of n-alkane (up to n-dodecane), cyclohexane, and methyl-, ethyl-, n-propyl and n-butyl-cyclohexane oxidation at high temperatures. JetSurF version 2.0. September 19, 2010 (<http://web.stanford.edu/group/haiwanglab/JetSurF/JetSurF2.0/index.html>).
2. Ranzi E., Frassoldati A., Grana R., Cuoci A., Faravelli T., Kelley A., Law C.K. Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels // *Progress in Energy and Combustion Science*. 2012. Vol. 38. Pp. 468–501.
3. Lu T., Law C.K., A directed relation graph method for mechanism reduction // *Proceed. of the Combustion Institute*. 2005. Vol. 30. Pp. 1333–1341.
4. Pepiot-Desjardins P., Pitsch H. An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms // *Combustion and Flame*. 2008. Vol. 154. Pp. 67–81.
5. Pfahl U., Fieweger K., Adomeit G. Self-ignition of diesel-relevant hydrocarbon-air mixtures under engine conditions // *Proceed. of Combustion Institute*. 1996. Vol. 26. Pp. 781–789.
6. Козлов В.Е., Лебедев А.Б., Секундов А.Н., Старик А.М., Титова Н.С. Применение реакторных моделей для расчета характеристик диффузионных и гомогенных камер сгорания // *Экологические проблемы авиации* / Под ред. Ю.Д. Халецкого. М.: ТОРУС ПРЕСС, 2010. С. 321–338.
7. Alekseev V.A., Soloviova-Sokolova J.V., Matveev S.S., Chechet I.V., Matveev S.G., Konnov A.A. Laminar burning velocities of n-decane and binary kerosene surrogate mixture // *Fuel*. 2017. Vol. 187. Pp. 429–434.

УДК 533.9+535.3+539.1

О ВЛИЯНИИ ТЕРМИЧЕСКОЙ НЕРАВНОВЕСНОСТИ И ИОНИЗАЦИИ НА ПОКАЗАТЕЛЬ ПРЕЛОМЛЕНИЯ РЕАГИРУЮЩЕГО ВОЗДУХА

Б.И. Луховицкий, А.С. Шарипов, И.Н. Кадочников

Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова, Москва, Россия

Точные оценки показателя преломления газа важны для целого ряда задач, имеющих как фундаментальный, так и прикладной характер: в первую очередь для оптической диагностики газодинамических процессов, основанной на регистрации оптической плотности (теневой и шлирен-методы визуализации газовых потоков, а также интерферометрия) [1]; для диагностики кинетики элементарных процессов (химических превращений и колебательного энергообмена) [2, 3]; для моделирования распространения электромагнитных волн (в том числе лазерного излучения) в газе [4], а также и в ряде других задач более частного характера, например при разработке прецизионных датчиков давления и температуры [5].

Для разреженного газа, когда показатель преломления n близок к единице, справедливо следующее соотношение:

$$n-1=\rho K^{\text{GD}}. \quad (1)$$

Здесь ρ – плотность газа, а K^{GD} – так называемая «константа» Гладстона–Дейла, которая определяется составом газа и электрическими свойствами его компонентов, в основном изотропной поляризуемостью α и дипольным моментом μ , которые, в свою очередь, могут существенным образом зависеть от того, в каких вращательных, колебательных и электронных состояниях находится компонент смеси. Таким образом, показатель преломления газа может меняться не только в результате вариации его плотности, но и в результате изменения его состава (за счет химических и плазмохимических реакций), а также изменения поступательной температуры (в случае термически равновесного газа) или перераспределения его молекулярных компонентов по вращательным и колебательным степеням свободы (при нарушении термического равновесия).

Отметим, что ранее уже предпринимались попытки разработки и использования термически равновесных и неравновесных моделей для описания оптических и электрических свойств химически реагирующих потоков, однако в большинстве случаев рассматривалось лишь влияние химических превращений и образования электронов [1, 6]. При этом только в немногих работах учитывалась специфика влияния колебательного и вращательного возбуждения на электрические свойства молекул [7, 8], тогда как влияние электронного возбуждения до сих пор рассматривалось лишь для молекулярного азота и кислорода [7].

Таким образом, актуальной задачей является построение исчерпывающих моделей для учета влияния уровней возбуждения внутренних степеней свободы молекул (вращательных, колебательных, электронных) и ионизации на показатель преломления (диэлектрическую проницаемость) реагирующего газа.

Цель этой работы – построить наиболее полную комплексную модель, позволяющую описывать изменение показателя преломления реагирующего газа при протекании в нём химических реакций с учетом термической неравновесности и ионизации, и на примере задачи о релаксации атмосферного воздуха за фронтом сильной ударной волны (УВ) рассмотреть, какие ошибки при вычислении показателя преломления и константы Гладстона–Дейла возникают в результате пренебрежения зависимостью электрических

свойств компонентов воздушной плазмы от степени колебательного и электронного возбуждения, а также ионизации.

Для нахождения термодинамических параметров непосредственно за УВ использовались известные соотношения Ренкина–Гюгонио в предположении, что химический состав газа и колебательные температуры остаются неизменными при переходе через фронт УВ, а дальнейшая эволюция температуры и компонентного состава релаксирующего воздуха рассматривалась в одномерном приближении с использованием уровневой термически неравновесной кинетической модели, построенной на основе разработанных ранее уровневых моделей для воздушной плазмы [9] и водородно-воздушной смеси [10]. При этом согласовано учитывались поуровневая колебательная кинетика молекул N_2 , O_2 , OH и NO и широкий набор химических и плазмохимических процессов с участием следующих независимых компонентов смеси: $N_2(X^1\Sigma_g^+)$, $N_2(A^3\Sigma_u^+)$, $N_2(B^3\Pi_g)$, $O_2(X^3\Sigma_g^-)$, $O_2(a^1\Delta_g)$, $O_2(b^1\Sigma_g^+)$, $NO(X^2\Pi_r)$, $NO(A^2\Sigma^+)$, $NO(B^2\Pi_r)$, $N(^4S)$, $N(^2D)$, $N(^2P)$, $O(^3P)$, $O(^1D)$, O_3 , N_2O , NO_2 , Ar , H , H_2 , OH , H_2O , HO_2 , H_2O_2 , HNO , HNO_2 , HNO_3 , NH , NH_2 , NH_3 , NNH , N_2H_2 , N_2H_3 , N_2H_4 , $N_2^+(X^2\Sigma_g^+)$, $N_2^+(A^2\Pi_u)$, $N_2^+(B^2\Sigma_u^+)$, N^+ , O_2^+ , O^+ , NO^+ , N_2O^+ , NO_2^+ , O^- , O_2^- , O_3^- , NO^- , NO_2^- , N_2O^- , Ar^+ и электронов.

Значение константы Гладстона–Дейла для газовой смеси определялось согласно методологии [11] путем усреднения вкладов в наблюдаемый показатель преломления от молекул на каждом колебательно-вращательном уровне согласно имеющим место относительным заселённостям для отдельных компонентов смеси.

Рассмотрим, какие процессы необходимо учитывать при расчете профилей показателя преломления и константы Гладстона–Дейла для рассматриваемой задачи. На рис. 1 показаны профили параметров атмосферного воздуха (77% N_2 , 21% O_2 , 1% Ar , 1% H_2O) за фронтом УВ со скоростью $u_0 = 5$ км/с (температура и давление перед УВ составляют $T_0 = 293$ К и $P_0 = 1$ торр). Видно, что для заданной интенсивности УВ (поступательная температура сразу за фронтом составляет около 12250 К) в релаксационной зоне существенных концентраций, помимо радикалов и исходных компонентов смеси, достигают и электронно-возбужденные компоненты (около 1% в максимуме), ионы (около 0,1%) и электроны (около 0,1%). Таким образом, можно сделать вывод, что при расчете показателя преломления воздуха за УВ такой (и очевидно большей) интенсивности нельзя пренебрегать процессами релаксации электронных уровней и ионизации, поскольку данные процессы начинают играть важную роль при расчете величин, напрямую определяющих показатель преломления газа, а именно термодинамических параметров газа (температура и плотность) и его состава.

На рис. 2 для атмосферного воздуха, содержащего 1% водяного пара, приведены зависимости K^{GD} от расстояния до фронта УВ со скоростью $u_0 = 8$ км/с для различных приближений: без учета влияния колебательного возбуждения, электронного возбуждения и ионизации на электрические свойства компонентов, а также без учета электронного вклада и с учетом всех этих явлений. Видно, что неправильное определение электрических свойств ионов или пренебрежение вкладом электронов в величину константы Гладстона–Дейла не только ведет к достаточно серьезным ошибкам в определении показателя преломления ($n - 1$), которые превышают 10% в рассматриваемых условиях, но и приводит к получению качественно неверных профилей K^{GD} при релаксации воздуха за фронтом УВ.

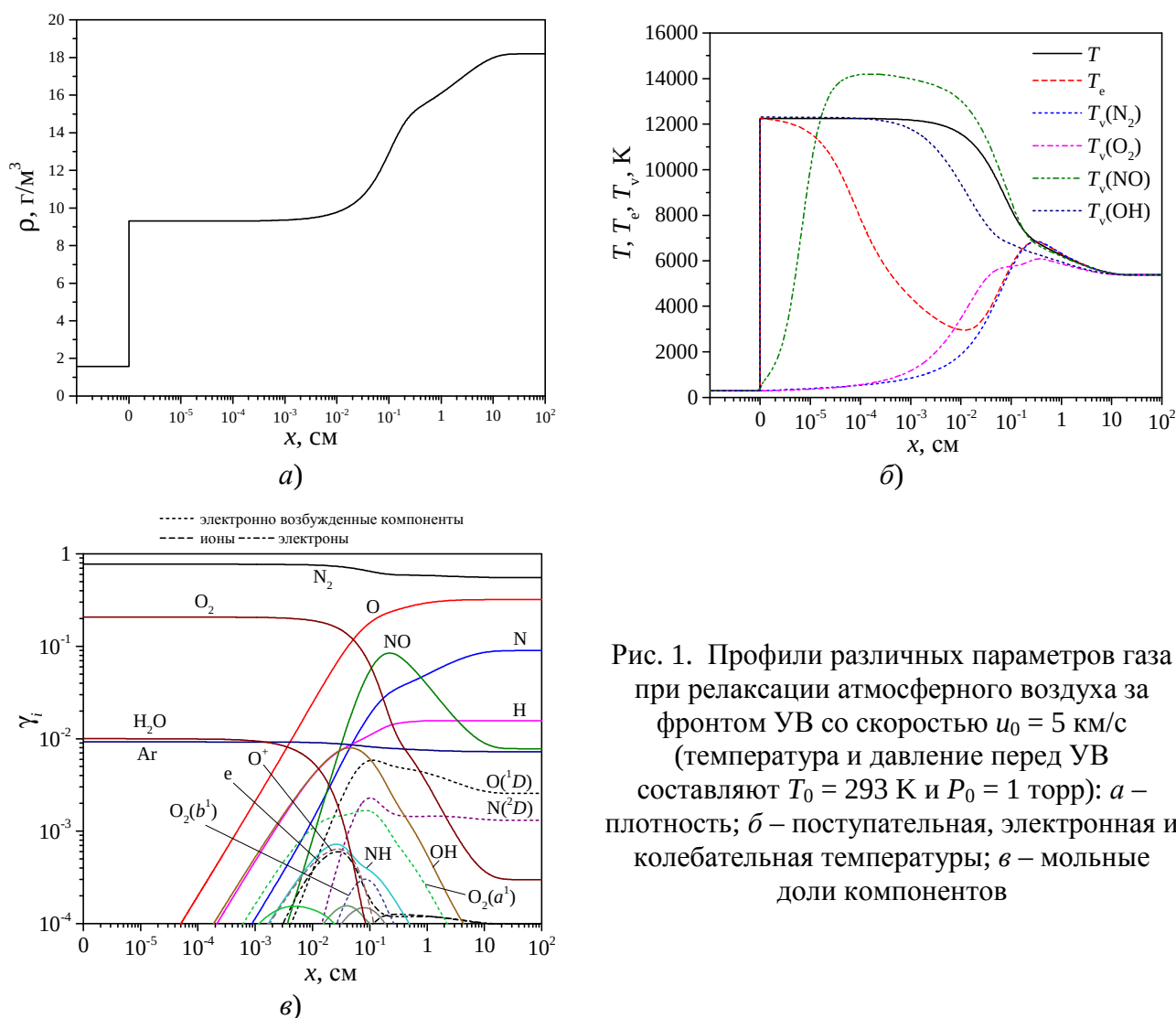


Рис. 1. Профили различных параметров газа при релаксации атмосферного воздуха за фронтом УВ со скоростью $u_0 = 5$ км/с (температура и давление перед УВ составляют $T_0 = 293$ К и $P_0 = 1$ торр): а – плотность; б – поступательная, электронная и колебательная температуры; в – мольные доли компонентов

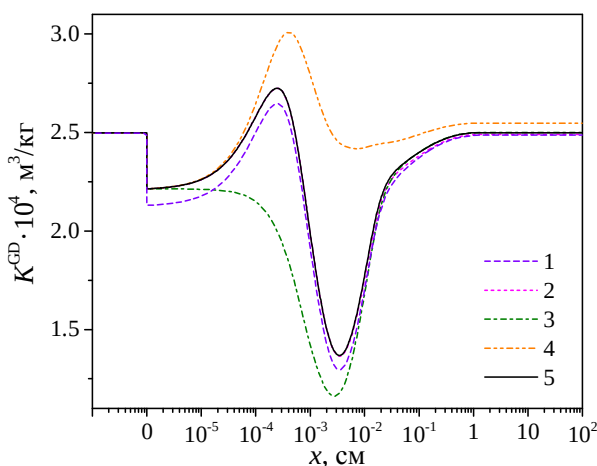


Рис. 2. Профили константы Гладстона–Дейла (для длины волны излучения $\lambda = 532$ нм), полученные в пренебрежении влиянием колебательного возбуждения (1), электронного возбуждения (2), ионизации (3) на оптические свойства компонентов, а также без учета вклада электронов (4), и профиль (5), полученный без этих допущений, для атмосферного воздуха (1% H_2O) при скорости УВ $u_0 = 8$ км/с ($T_0 = 293$ К и $P_0 = 1$ торр)

Рассмотрим теперь, к каким ошибкам при определении показателя преломления и константы Гладстона–Дейла приводит пренебрежение зависимостью электрических свойств компонентов от уровня колебательного возбуждения (δ_{vib}) и электронного возбуждения (δ_{ex}), а также проанализируем ошибки, возникающие в результате пренебрежения отличием значений поляризуемости и дипольного момента ионов от значений этих свойств для соответствующих нейтральных компонентов (δ_{ion}), и ошибки, возникающие если не учитывать вклад электронов в константу Гладстона–Дейла (δ_{el}). На рис. 3 показаны зависимости от скорости УВ u_0 для максимальных (по всему профилю вдоль потока) относительных ошибок δ_{vib} , δ_{ex} , δ_{ion} и δ_{el} .

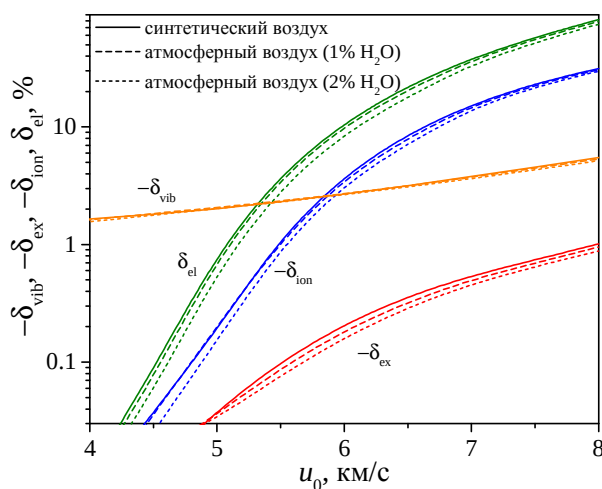


Рис. 3. Ошибки определения показателя преломления ($\lambda = 532$ нм), возникающие в пренебрежении изменением электрических свойств компонентов при их колебательном возбуждении (δ_{vib}), электронном возбуждении (δ_{ex}), ионизации (δ_{ion}), и без учета вклада электронов (δ_{el}) для различных скорости УВ и состава газа ($T_0 = 293$ К и $P_0 = 1$ торр)

Видно, что величина δ_{vib} слабо зависит от интенсивности УВ и во всем рассматриваемом диапазоне скоростей ударной волны превышает 1%. При высоких скоростях УВ наибольшее значение имеет правильный учет вклада электронов в величину K^{GD} , причем величина δ_{el} достигает 1% при скорости ударной волны $u_0 > 5$ км/с. Чуть меньшее значение имеет учет электрических свойств ионов. Так, если предположить, что эти свойства для ионов равны свойствам соответствующих нейтральных компонентов, то величина K^{GD} будет занижена на 1% и более при скорости УВ $u_0 > 5.5$ км/с. Наименьшая точность требуется при определении электрических свойств электронно-возбужденных компонентов, однако при высоких интенсивностях УВ ($u_0 > 8$ км/с) максимальная ошибка для профиля показателя преломления ($n - 1$) будет также превышать 1%. Отдельно стоит отметить, что величина приведенных ошибок слабо зависит от состава газа.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 22-29-00124).

Литература

1. Kharitonov A.I., Khoroshko K.S., Shkadova V.P. Temperature dependence of air refraction at high temperature // Fluid Dyn. 1974. Vol. 9. Pp. 851–853.
2. Zuev A.P., Negodyaev S.S., Tkachenko B.K. Laser schlieren measurement of vibrational relaxation times for N_2O in mixtures containing CO, N_2 , and Ar behind a shock wave // Sov. Phys. J. 1984. Vol. 27. Pp. 911–914.

3. Kiefer J.H., Sathyanarayana R. Vibrational relaxation and dissociation in the perfluoromethyl halides, CF_3Cl , CF_3Br , and CF_3I // *Int. J. Chem. Kinet.* 1997. Vol. 29. Pp. 705–716.
4. Gladkov S.M., Koroteev N.I. Quasiresonant nonlinear optical processes involving excited and ionized atoms // *Sov. Phys. Usp.* 1990. Vol. 33. Pp. 554–575.
5. Egan P.F., Stone J.A., Scherschligt J.K., Harvey A.H. Measured relationship between thermodynamic pressure and refractivity for six candidate gases in laser barometry // *J. Vac. Sci. Technol. A*. 2019. Vol. 37. No. 031603.
6. Mackey L.E., Boyd I.D. Assessment of hypersonic flow physics on aero-optics // *AIAA J.* 2019. Vol. 57. Pp. 3885–3897.
7. Lukhovitskii B.I., Sharipov A.S., Arsent'ev I.V., Kuzmitskii V.V., Penyazkov O.G. On the refractive index of a gas under high-thermal-nonequilibrium conditions // *J. Eng. Phys. Thermophys.* 2020. Vol. 93. Pp. 850–857.
8. Tropina A.A., Wu Y., Limbach C.M., Miles R.B. Influence of vibrational non-equilibrium on the polarizability and refraction index in air: computational study // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2019. Vol. 53. No. 105201.
9. Kadochnikov I.N., Arsentiev I.V. Kinetics of nonequilibrium processes in air plasma formed behind shock waves: state-to-state consideration // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2018. Vol. 51. No. 374001.
10. Kadochnikov I.N., Arsentiev I.V. Modelling of vibrational nonequilibrium effects on the H_2 -air mixture ignition under shock wave conditions in the state-to-state and mode approximations // *Shock Waves*. 2020. Vol. 30. Pp. 491–504.
11. Луховицкий Б.И., Кадочников И.Н., Арсентьев И.В., Шарипов А.С. Учет влияния термической неравновесности и ионизации на показатель преломления реагирующего газа: атмосферный воздух и продукты сгорания // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2023. Т. 24, вып. 4. <http://chemphys.edu.ru/issues/2023-24-4/articles/1053/>.

УДК 662.61:62-405.8

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ТЕЧЕНИЙ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ИНИЦИИРОВАНИИ ГОРЕНИЯ КОМПОЗИТОВ ИЗ ФРАГМЕНТИРОВАННОГО ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ И ПЕРХЛОРАТА НАТРИЯ В ИНЕРТНЫХ ГАЗАХ И АЗОТЕ

В.Н. Миронов, Е.С. Голомако, П.Н. Кривошеев, О.Г. Пенязьков, К.Л. Севрук

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

В настоящее время актуальным является создание энергонасыщенных композитов на основе наноструктурированного кремния со стабильными характеристикам процесса горения. В рамках решения этой задачи представляется полезным изучить особенности распространения процесса по длине композитов с помощью высокоскоростной съемки и теневого метода визуализации возмущений, возникающих при физико-химических превращениях в различных газовых средах. В частности, интерес представляет установление условий и механизмов появления предвестников воспламенения перед фронтом первичной волны горения и их влияния на протекание процесса. Развитие предвестников может, с одной стороны, существенно увеличить массовую скорость химических превращений в системе pSi-NaClO_4 , а с другой – дестабилизировать процесс и способствовать переходу горения в детонацию. Изучение горения композитов в средах разных составов и давления позволит, на наш взгляд, выделить параметры, ответственные за развитие предвестников и приблизиться к пониманию механизмов их возникновения.

Исследуемые композиты формировались в стальном пенале 1 (полость $82 \times 3 \times 3$ мм), устанавливаемом непосредственно перед экспериментом в массивный пьедестал 2 (рис. 1а).

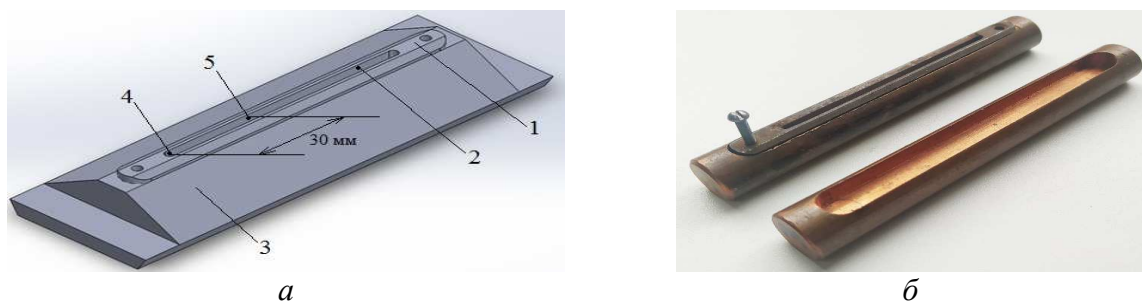


Рис. 1. Элементы экспериментальной установки: а – извлекаемый модуль рабочей камеры: 1 – пенал (Ст 45), 2 – полость композита, 3 – пьедестал (Ст 35), 4 – точка инициирования горения, 5 – точка регистрации температуры; б – заряженный («горячий») и пустой («холодный») кондуктивные теплообменники

Процесс подготовки образцов из фрагментированного пористого кремния (ФПК) описан в [1]. Из-за того что в нашем случае формирование композитов происходит в пенале массой около 50 г, а не в желобе из алюминиевой фольги толщиной 50 мкм (масса – до 0,4 г), процесс сушки образцов после заливки слоя ФПК водно-спиртовым раствором перхлората натрия (в количестве, обеспечивающем, как правило, коэффициент стехиометрии композита $\varphi \approx 1$) имеет некоторые особенности. Так, для быстрого прогрева пенала с композитом до заданной температуры в сушильном шкафу 2В-151 (около 80 °С), как начального, так и в процессе текущего контроля убыли массы на электронных весах РА 214С (дискретность – 10^{-4} г), пенал помещался многократно на полке сушильного шкафа в предварительно нагретый до температуры сушки медный цилиндр массой 215 г с соответствующей выборкой (рис. 1б). После выхода массы композита на заданную влажность моногидрата перхлората натрия (МПН) W нагретый пенал помещался максимально быстро в такой же медный цилиндр массой 215 г, непосредственно перед этим извлеченный из морозильной камеры с

температурой $-18\text{ }^{\circ}\text{C}$. В силу значительной теплоемкости и теплопроводности меди пенал остывал до температуры около $20\text{ }^{\circ}\text{C}$ в течение десятков секунд, после чего устанавливался в пьедестал извлекаемого модуля с той же температурой. Таким образом, влажность W «замораживалась» на уровне последнего измерения массы пенала с композитом.

Модуль со сформированным в пенале композитом размещался в вакуумируемой рабочей камере (РК) с внутренним объемом $4 \times 1 \times 0,5 = 2\text{ дм}^3$ с оптическими окнами 2 толщиной 30 мм и апертурой 128×102 мм (рис. 2). С помощью углового упора 7 он устанавливался таким образом, чтобы его поверхность, направленная к осветительной части теневого прибора, не перекрывала коллимированный поток излучения ртутной лампы непосредственно над заполненной композитом полостью пенала, а поворот его верхней кромки обеспечивал регистрацию поверхностного горения композита приемной частью ИАБ-451. После этого рабочая камера герметизировалась, вакуумировалась (до видимой остановки стрелки вакуумметра ($\sim 10^{-3}$ бар, далее принимаем 0,001 бар) и заполнялась до заданного давления (1 бар, 0,2 бар) одним из рабочих газов (He, Ar, Kr, N₂). Если планировалось проводить процесс в форвакууме, то камера заполнялась рабочим газом до 0,2 бар, после чего вновь откачивалась до 0,001 бар.

Отказ от глубокого вакуумирования перед напуском рабочего газа связан с тем, что при низком давлении происходит быстрое испарение из моногидрата перхлората натрия свободной влаги, потери которой трудно оценить. Таким образом, фактическая влажность МПН при иницировании процесса неизвестна, ясно только, что она тем ближе к заданной, чем меньше время нахождения композита при низком давлении. Поэтому в большинстве экспериментов время нахождения композита в форвакууме не превышало 10–15 с.

Горение инициировалось с помощью сфокусированного пучка излучения лазера LOTIS LS-2134D (30 мДж при $\lambda = 532,7$ нм, рис. 2). Для обеспечения устойчивого инициирования луч лазера должен падать на поверхность композита под минимально возможным углом. В геометрии эксперимента требовалось, чтобы предварительно этот же луч падал на поверхность стекла под максимальным углом, т. е. со значительными потерями интенсивности на отражение. Выбранная в результате предварительных экспериментов траектория лазерного пучка (угол падения на стекло 34°) показана на рис. 2. Как видно, сфокусированный пучок падает на поверхность композита под достаточно большим углом, однако благодаря некоторой ее выпуклости и диффузному отражению в большинстве экспериментов поджиг композита происходил с первой попытки.

На рис. 2 показана оптическая ось 16 фотоэмиссионного пирометра ПИФ 18 (сертифицированный прибор, разработанный в Институте тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси). Температуры горения измерялись на расстоянии 30 мм от места воспламенения композита (рис. 1а), чтобы исключить эффекты, связанные с иницирующим лазерным импульсом. Видно, что угол падения фиксируемого пирометром излучения на внутреннюю поверхность стекла даже больше (около 40°), чем лазерного на внешнюю. Однако в данном случае это даже полезно, так как интенсивность излучения горящего композита такова, что требует, как правило, ее ослабления перед регистрацией с помощью ПИФ 18.

Визуализация течений и возмущений при горении энергонасыщенных композитов теневым методом затруднена из-за существенного превышения интенсивности излучения горящего объекта и продуктов его сгорания I_{comb} над интенсивностью источника излучения теневого прибора. Задача может быть решена за счет того, что спектры излучения горящего композита и стандартного источника света ИАБ-451 (ртутной лампы ДРШ-250) заметно отличаются (рис. 3а и б, I_{λ} – спектральная излучательная способность). Таким образом, подбором светофильтров можно добиться существенного ослабления излучения от горящего композита при некритичном уменьшении полной интенсивности излучения ртутной лампы.

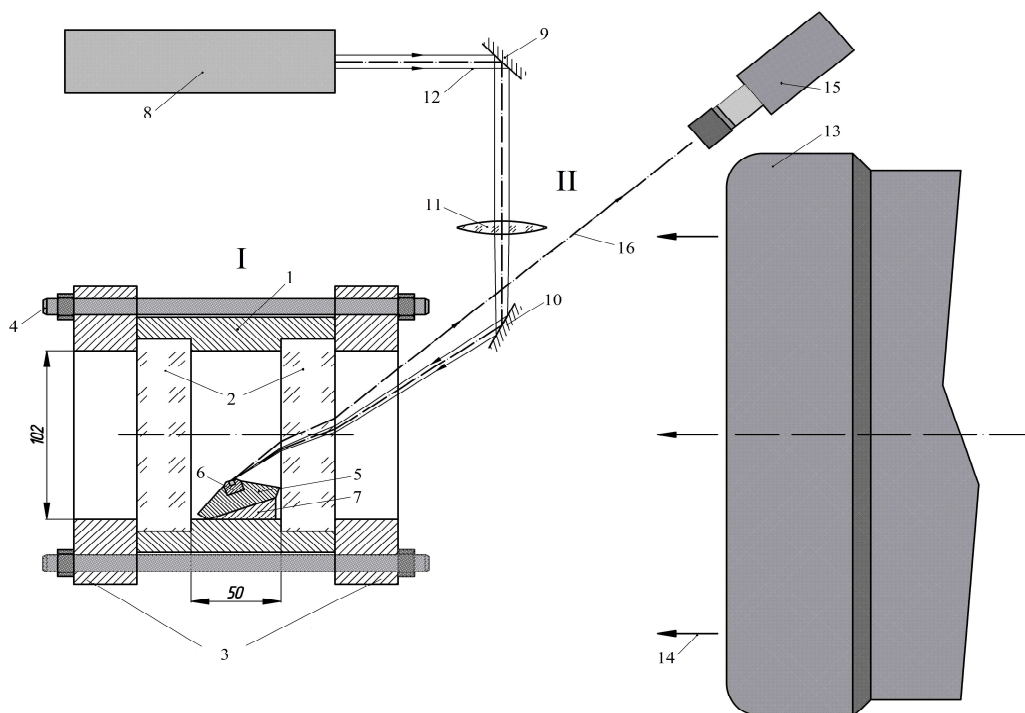


Рис. 2. Узлы экспериментального стенда: I – рабочая камера с извлекаемым модулем (поперечное сечение): 1 – корпус, 2 – окна из оптического стекла К8 (уплотнения не показаны), 3 – апертурные рамки (упрощенно), 4 – стяжные шпильки М10 (4 шт.), 5 – пьедестал, 6 – пенал с композитом, 7 – угловой упор; на заднем фланце рабочей камеры (не показан) в пределах сечения канала 50×102 мм размещены: место установки ввертного штуцера подачи–откачки газа, оптическое окно для световодов спектрометра Solar S150A-4 и фотоэмиссионного пирометра ПИФ 4/2 (в экспериментах серии не использовался), место установки датчика давления РСВ 113В24 (мембрана датчика на 210 мм от точки поджига); II – оптические элементы: 8 – лазер LS-2134D, 9, 10 – плоские зеркала на 3D-юстировочных столиках, 11 – линза ($F = +670$ мм), 12 – линиями со стрелками схематично обозначены «границы» лазерного пучка, 13 – осветительная часть ИАБ-451, 14 – крайними стрелками обозначена апертура прибора, 15 – фотоэмиссионный пирометр ПИФ 18, 16 – оптическая ось пирометра ПИФ 18

Анализ спектральных характеристик продукции из каталога цветного стекла [2] показывает, что перспективными для визуализации возмущений при горении композитов являются синие стекла СС1, СС5 и СС8, оптические плотности $D_\lambda = -\lg(I_{\text{проп}}/I_0)$ которых в видимом диапазоне показаны на рис. 3в; $\tau_\lambda = I_{\text{проп}}/I_0$ – коэффициент пропускания стеклом толщиной l монохроматического света с длиной волны λ . Начальные эксперименты показали, что при использовании стекол СС1 даже при увеличенной толщине $l = 3,3$ мм ослабление излучения горящего композита недостаточно для уверенной диагностики возмущений плотности, регистрируемых теневым прибором ИАБ-451. Поэтому рабочий светофильтр выбирался из стекол СС5 и СС8.

Из анализа рис. 3а и в видно, что оба светофильтра практически полностью поглощают правый пик в спектре излучения композита, область максимума левого пика также существенно ослабляется обоими светофильтрами, поэтому основной вклад в регистрируемое скоростной камерой Fastcam SA-Z излучение вносит восходящая ветвь левой части спектра со сравнительно невысокой интенсивностью. На графиках рис. 3в указаны символами левые границы областей, справа от которых прошедшее излучение в интервале 30 нм (СС8) и 20 нм (СС5) ослабляется более чем на порядок. Несмотря на существенную интенсивность излучения композита, потери настолько велики (ослабление спектральной

плотности потока излучения в окрестности символов указано на рис. 3в), что в отдельные моменты горения положения его фронта определяются с трудом, особенно для СС5. Поэтому в качестве рабочего светофильтра выбран СС8.

На рис. 3г показан спектр лампы ДРШ-250 (при выборке значений λ кратных 10 нм) и спектр ее излучения, прошедшего через светофильтр СС8. Видно, что практически исчезли линии длинноволновой части спектра, что в принципе могло бы повысить чувствительность теневого прибора из-за уменьшения дифракции излучения. Однако интегрирование представленных на рис. 3г спектральных кривых по λ показывает, что полная интенсивность излучения лампы при использовании СС8 уменьшается более чем в три раза. Время экспозиции камеры FASTCAM SA-Z составляло в большинстве экспериментов 0,16 мкс (за это время фронт горения перемещался на 0,2–0,3 мм). С учетом этого для обеспечения необходимой освещенности теневого изображения ширину щели ИАБ-451 пришлось увеличить до 0,4 мм, что не могло не привести к снижению чувствительности прибора, не компенсируемому уменьшением спектрального интервала и сдвигом в коротковолновую область проходящего излучения. Отметим, что для качественной регистрации процесса при указанном размере щели напряжение на дросселе блока питания ДРШ-250 непосредственно перед инициированием горения плавно увеличивалось на 50% выше рабочего и резко сбрасывалось сразу после завершения процесса.

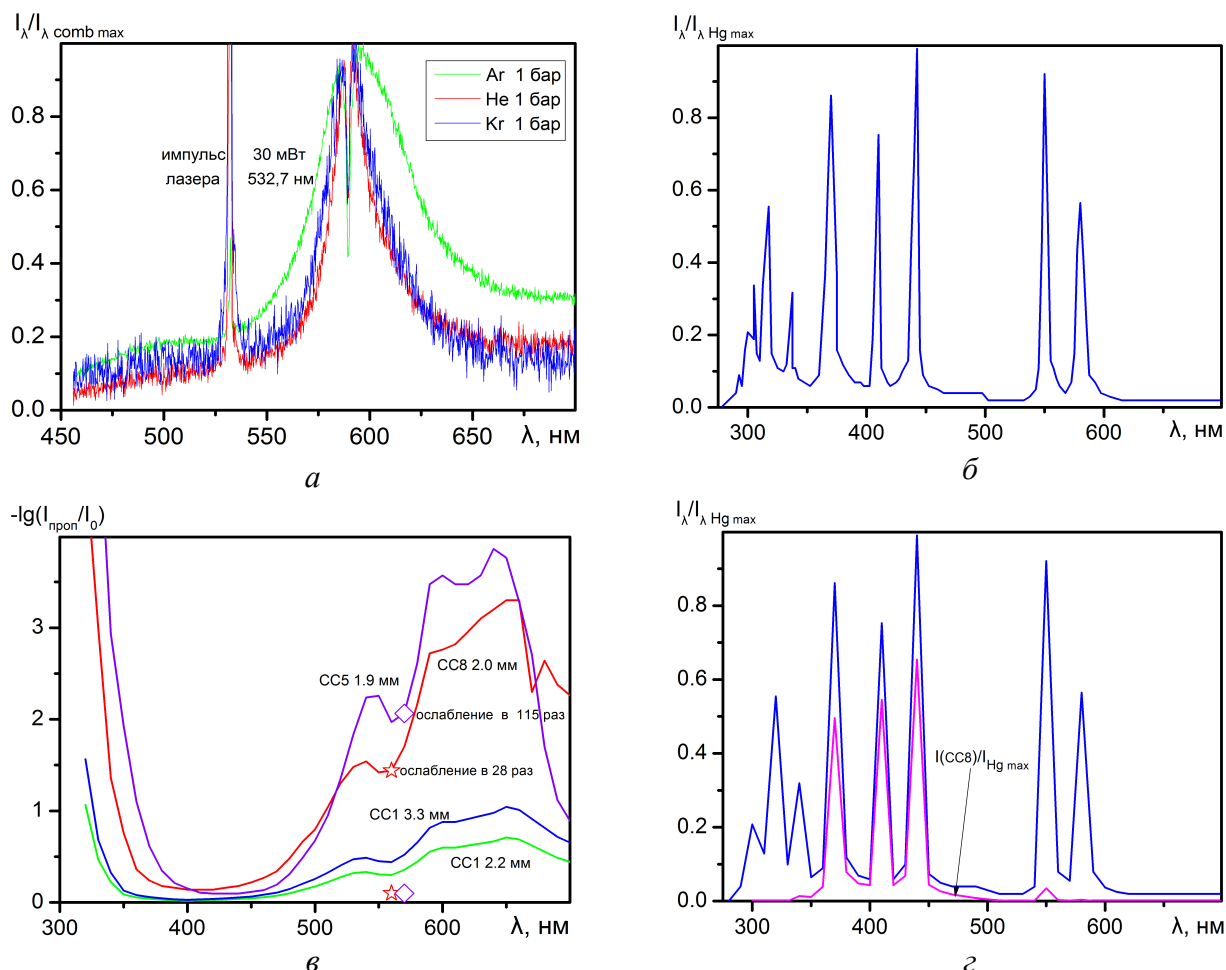


Рис. 3. Спектры излучения горящего композита в инертных газах (а) и ртутной лампы ДРШ-250 (б); оптические плотности $D_{\lambda} = -\lg(I_{\text{проп}}/I_0)$ синих светофильтров СС1, СС5 и СС8 указанной толщины (в); ослабление спектральной излучательной способности ртутной лампы светофильтром СС8 (при шаге спектра и оптической плотности 10 нм) (г)

На рис. 4 показаны кадры из видеозаписей течения при горении композита в атмосфере аргона при давлении 1 бар. В первом из экспериментов (рис. 4а) нож ИАБ-451 стоял слева, при этом ударная волна визуализировалась лишь после завершения фронтального горения в виде белой линии слабой интенсивности. Щель и кромка ножа располагались в фокусе оптической системы вертикально, поэтому вблизи горизонтальной поверхности композита градиенты плотности сжимаемого продуктами горения аргона должны регистрироваться достаточно уверенно. Вероятно, фронт ударной волны сливается при фронтальном горении с засветкой от раскаленных компонентов аэрозольной фазы горения [3] и продуктов сгорания композитов. Ситуация усугубляется тем, что излучение горящего композита недостаточно ослаблено. С учетом этого перед следующим экспериментом параметры регистрации изменены (рис. 4б), в результате ударная волна удовлетворительно визуализируется в виде достаточно широкой темной полосы, окаймляющей область распространения аэрозольного горения и его продуктов, а уменьшение интенсивности излучения процесса позволяет выявить структуру и динамику течения в зоне горения.

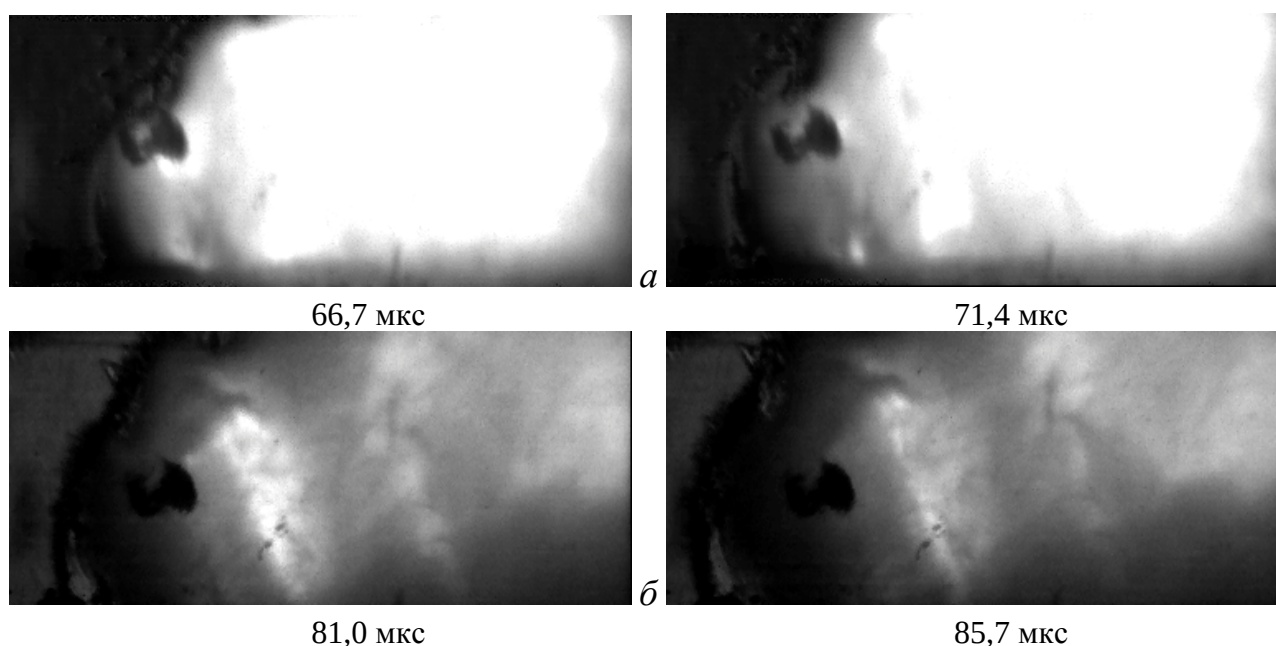


Рис. 4. Кадры процессов горения энергонасыщенных композитов в атмосфере аргона (1 бар). Камера FASTCAM SA-Z (210 000 к/с, 384×160 пикселей). Указаны времена с моментов лазерного инициирования. Условия регистрации: а – эксперимент 103 – нож слева, фильтр СС1 (2,2 мм); б – эксперимент 104 – нож справа, фильтр СС8 (2,0 мм)

Условия и результаты экспериментов представлены в таблице. Здесь T_{cp} – средняя (по областям на рис. 8) температура, регистрируемая ПИФ 18, V_{comb} и V_{wave} – максимальные скорости горения и возмущений плотности, не совпадающие, как правило, по пространству и времени, P_{max} – максимальное избыточное давление в РК, m_k – масса композита после сушки.

В эксперименте с гелием около 30 мкс после инициирующего лазерного импульса горение композита происходило в тлеющем режиме, с малым тепловыделением, при этом регистрировалась слабая, близкая к звуковой, ударная волна. Такое начало процесса объясняется высокой теплопроводностью гелия ($a_{He} = 0,177 \cdot 10^{-3} \text{ м}^2/\text{с}$ [4]). Как отмечено в [3], при указанной теплопроводности происходит охлаждение прогреваемой зоны горения свежей горючей смеси, замедляющее ее воспламенение.

Вследствие этого искровой поджиг композита в гелии произошел только при 4 бар, когда его теплопроводность уменьшилась до $0,044 \cdot 10^{-3} \text{ м}^2/\text{с}$ [3]. Лазерный импульс

обеспечил воспламенение композита в гелии с первой попытки, но к моменту когда ударная волна достигла конца образца, ускоряющийся фронт горения дошел только до его середины.

Параметры и результаты экспериментов

Номер эксп.	Газ	P_0 , бар	$W+1$	φ	T_{cp} , К	V_{comb} , м/с	V_{wave} , м/с	P_{max} , бар	m_k , г	Примечания
102	He	1	1,251	0,825	-	1330	960		0,420	
103	Ar	1	1,290	0,992	-	2000	-		0,370	
104	Ar	1	1,259	0,982	2600	1360	1360	17,5	0,366	
105	Ar	0,2	1,262	0,989	-	1440	1700		0,368	
106	Ar	0,001	1,264	0,999	2720	1630	1930	5,2	0,364	
107	Ar	0,2	1,262	0,994	2670	1340	1510	15,5	0,363	
108	Kr	1	1,259	0,988	-				0,365	взорвался в РК
109	Kr	1	1,251	1,001	-	1610	-	12,7	0,359	
110	Kr	1	1,275	0,993	2590	1420	1300	14,0	0,367	
111	Kr	0,2	1,268	1,002	-	1980	1510	8,8	0,363	
112	N ₂	0,001	1,265	0,997	2790	1470	2140		0,363	
113	N ₂	1	1,233	0,985	2840	1720	1660	17,1	0,359	2 предвестника
114	N ₂	0,2	1,226	1,001	2760	1390	1830	13,9	0,354	предвестник
115	N ₂	1	1,264	0,991	2800	1550	1420	11,7	0,363	

Скорости горения в аргоне, криптоне и азоте в несколько раз выше соответствующих скоростей звука, поэтому регистрируемые возмущения плотности, как правило, примыкают к продуктам и компонентам горения. На рис. 5 показаны картины течения и горения для газов с наиболее полным набором данных (Ar и N₂). Анализ показывает, что регистрируемые возмущения плотности при давлениях 1 и 0,2 бар являются возмущениями на фронтах ударных волн (УВ), формирующихся в рабочих газах при образовании газообразных продуктов сгорания композитов. При контакте УВ с продуктами и компонентами горения локальные пульсации параметров при аэрозольной фазе процесса легко искажают поверхность ударных фронтов (рис. 5а, аргон). Вероятно, менее масштабные возмущения при аэрозольном горении отвечают за «махровость» фронтов, а их трехмерность – за регистрируемую толщину.

В азоте, судя по профилю ударной волны, вклад аэрозольного горения более значителен. Возможно, «нависание» зоны объемного горения над поверхностью не горящего композита приводит к энергичному радиационному нагреву его поверхности и самовоспламенению с возникновением очага на значительном расстоянии от фронта горения (формированию предвестника). В этом случае наблюдается и ранее описанное нами в [5] возникновение вторичного предвестника: между фронтом горения и распространяющимся навстречу ему очагом (рис. 5а₁, а₂, азот). Однако в [5] предвестники возникали при горении пористых слоев кремния толщиной меньше 100 мкм, пропитанных МПН, и их формирование связывалось с возмущениями в монокристаллической подложке толщиной более 350 мкм. В данном случае возможной причиной возникновения предвестников могли явиться сильные колебания скорости горения (рис. 6б). Она сначала возрастает с 800 до 1200 м/с, затем падает до 1000 м/с, а к моменту возникновения первого предвестника возрастает до 1170 м/с. В пользу этого предположения говорит динамика горения в эксперименте 115, где скорость фронта изменяется достаточно плавно, и очагов перед ним не наблюдается. При давлении 0,2 бар ударная волна в аргоне не привязана жестко к раскаленным продуктам горения, она то сливается с ними, то незначительно их опережает. После завершения фронтального горения ($s = 0,08$ м), когда масса горящего топлива резко уменьшается, ударный фронт окончательно отрывается от продуктов горения. Отметим, что после достижения зоной горения конца композита отчетливый отрыв ударной волны наблюдался и при 1 бар

(см. рис. 4б). В азоте при 0,2 бар также зарегистрировано возникновение предвестника. И в этом случае наблюдается «нависание» зоны раскаленных компонентов и продуктов реакции над областью его формирования, присутствует и возрастание скорости горения, хоть и незначительное.

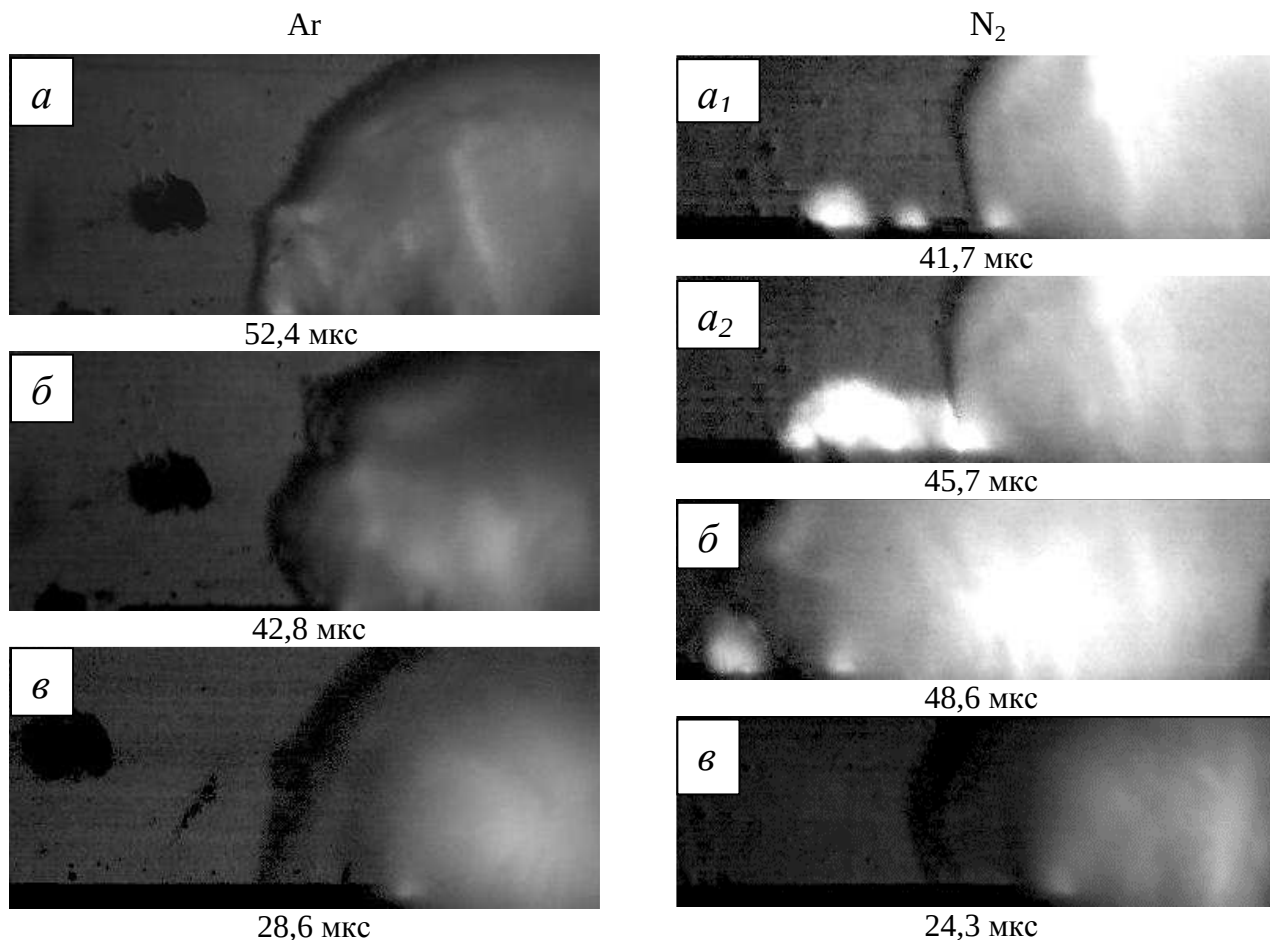


Рис. 5. Кадры горения композитов в атмосфере Ar (210 000 кадр/с, 384×160 пикселей, эксперимент 104) и в атмосфере N_2 (288 000 кадр/с, 384×104 пикселей, эксперимент 113): а – 1 бар, б – 0,2 бар, в – 0,001 бар. Нож справа, фильтр СС8

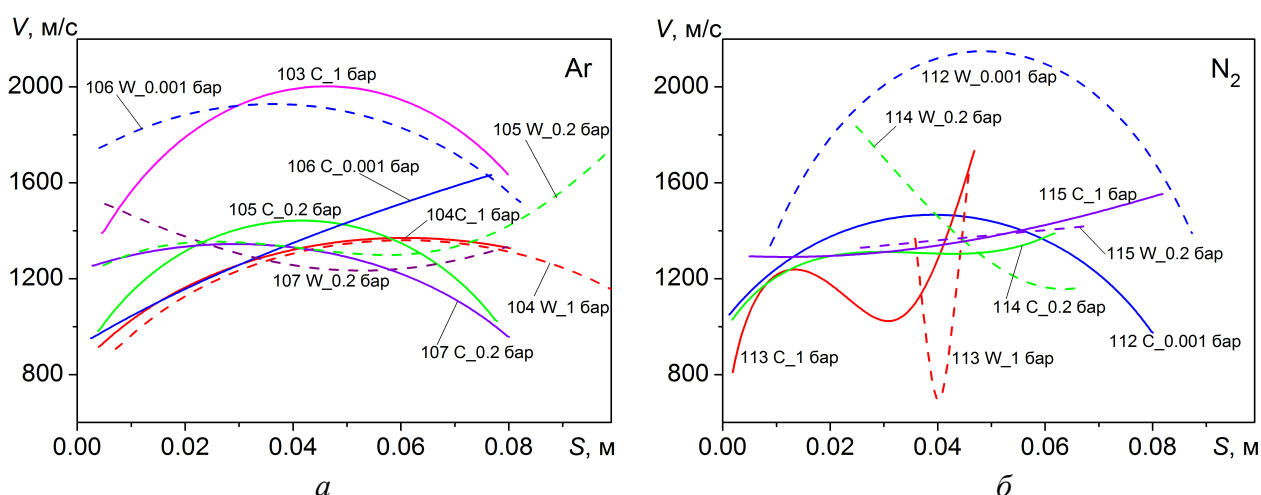


Рис. 6. Скорости горения композитов С (сплошные линии) и скорости возмущений W (штриховые) в атмосфере Ar (а) и N_2 (б). Первое число в надписях – номер эксперимента

Наиболее интересно поведение возмущений плотности при горении композитов в форвакууме (см. рис. 5в). Если при давлении 1 бар (и в меньшей степени – при 0,2 бар) положение фронтов возмущений вблизи поверхности композита (ударных волн на границе раздела рабочий газ–продукты горения) было локализовано вблизи фронта горения, то в форвакууме граница возмущений плотности существенно опережает фронт горения. Обусловлено это, в первую очередь, тем, что потоки продуктов горения и раскаленных компонентов композитов не испытывают в этом случае сопротивления окружающей среды. По существу, происходит их истечение в вакуум, при этом более темные области сразу за зоной наибольших градиентов плотности обусловлены, возможно, резким снижением температуры потока при расширении, приводящим к «замораживанию» химического состава или, по крайней мере, к снижению скорости химических реакций в аэрозоле.

На рис. 7 представлены давления, регистрируемые в РК в разных средах на расстоянии 210 мм от точки инициирования горения. Видно, что чем ниже начальные давления, тем быстрее распространяются возмущения. Увеличивается скорость их распространения и с ростом скорости звука среды. Максимальные избыточные давления ведут себя менее предсказуемо: в аргоне они падают с уменьшением давления среды, а в азоте – возрастают. Массы композитов m_k в каждой из сред практически одинаковые (в аргоне отличие не превышает 1%, в азоте – 2,5%), поэтому различие в поведении обусловлено, на наш взгляд, динамикой горения. В аргоне скорость горения при 0,2 бар сначала существенно выше (до 35%), чем скорость при 1 бар, в середине образца скорости выравниваются, далее при 1 бар они практически постоянны, а при меньшем начальном давлении быстро падают, в результате в конце образца скорость при 0,2 бар более чем на 40% ниже, чем скорость при 1 бар (рис. 6а). Это приводит к существенному снижению скорости образования продуктов сгорания и их давления. В азоте (см. рис. 6б) со второй четверти образца скорости горения при сравниваемых начальных давлениях достаточно близки (при 1 бар выше до 4%), поэтому образование продуктов сгорания происходит практически с одинаковой скоростью; однако после формирования вблизи конца образца предвестника (см. рис. 5б, N_2 , 0,2 бар), т.е. при наличии трех фронтов горения композита, массовая скорость образования продуктов сгорания возрастает по крайней мере вдвое, что и приводит к большему пиковому давлению для случая 0,2 бар (рис. 7в).

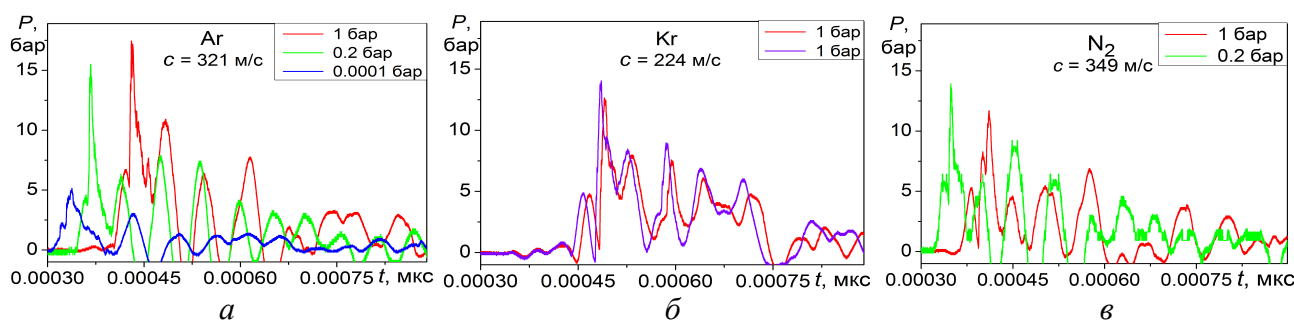


Рис. 7. Избыточные давления при горении композитов в разных газах при различных начальных давлениях. Скорости звука в газах согласно [4]. На рис. б красная кривая соответствует эксперименту 109, фиолетовая - эксперименту 110

Отметим, что в связи с таким эффектом на рис. 7в для азота при 1 бар выбран эксперимент 115, а не 113, где зарегистрировано возникновение двух предвестников, что привело к еще большим пиковым нагрузкам на рабочую камеру (17,1 бар, т.е. почти в полтора раза выше, чем при таком же начальном давлении в случае стабильного горения композита; см. таблицу). Это подчеркивает важность выявления факторов, провоцирующих формирование предвестников при горении энергонасыщенных композитов. К числу этих факторов, наряду с ранее указанной нестабильностью скорости горения, следует, на наш взгляд, отнести низкую влажность МПН W (в обоих случаях неустойчивостей она близка к

23%). Отметим, что при заметном превышении указанного значения W и близких значениях φ , динамика распространения ударных возмущений в РК при горении композитов воспроизводится удовлетворительно (рис. 7б).

На рис. 8 представлены температурные кривые для экспериментов в аргоне и азоте с временным разрешением ПИФ 18 равным 1 МГц и приборным ограничением по температуре 3300 К (в этой области возрастающая с измеряемой величиной погрешность не превышает 7–12%). Шкала времени на графиках начинается с моментов прохождения фронта горения через реперную точку 5 (см. рис. 1а). Это время определяется при анализе видеозаписей горения в конкретном эксперименте с выполнением интерполяции между кадрами. Излучение регистрируется в телесном угле, определяемом окружностью диаметром 1,5 мм с центром в реперной точке 5 и входной апертурой ПИФ 18. Правая граница фиксирована (90 мкс). Таким образом, в пределах телесного угла пирометра в начале представляемых на графиках областей происходит прохождение пространственной зоны фронтального горения и сопровождающий эту фазу резкий выброс в газовую среду расплавленных, испаренных и взаимодействующих в ней компонентов композита, далее – фронтальное горение за реперной точкой 5 и аэрозольное горение за перемещающимся фронтом (после вертикальной линии – чисто аэрозольное горение). Температуры в зоне фронта обычно превышают 3300 К, в начале аэрозольного горения они близки к этому значению (в отдельных случаях их пики разнесены и можно оценить «ширину» фронта $b_{i\text{ фр}} = V_{i\text{ comb } 30\text{ мм}} \cdot \Delta t_{i\text{ фр}}$, так при 0,2 бар $b_{i\text{ фр}} \leq 10\text{ мм}$ в обеих средах). Продолжительность эффективного энерговыделения в аэрозольной фазе горения составляет, как правило, 7–10 мкс, в дальнейшем в пределах рабочего телесного угла ПИФ 18 регистрируются температуры продуктов сгорания последующих слоев композита и их аэрозольных компонентов (распространяющихся, в том числе, в сторону зоны регистрации), возрастающие после прохождения отраженных от стенок рабочей камеры (см. рис. 2) ударных волн.

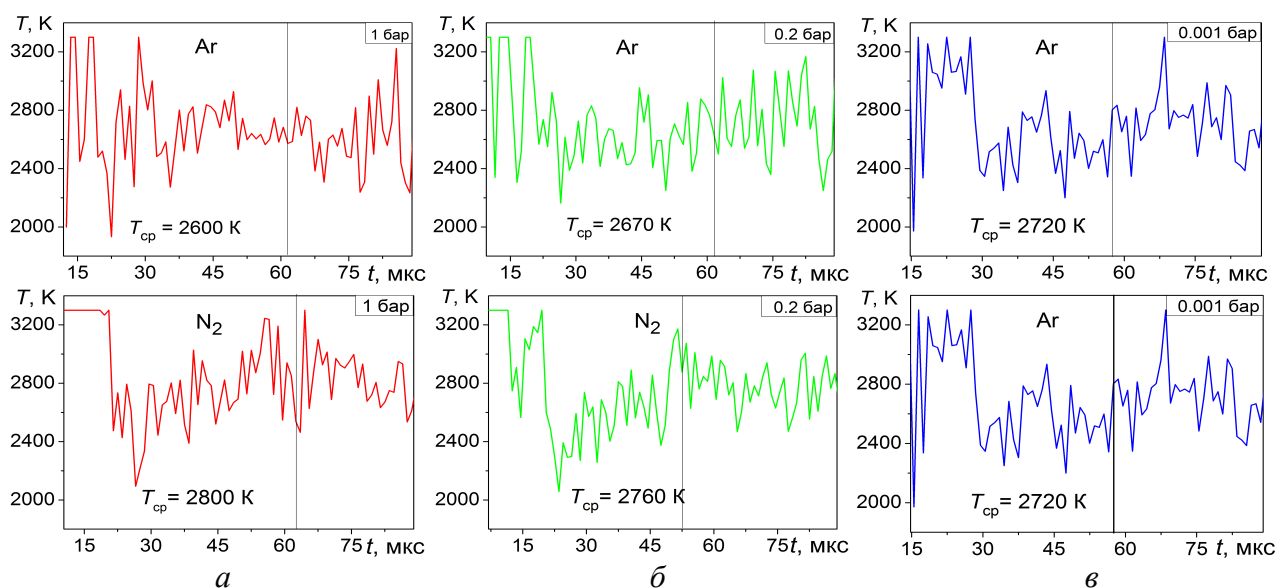


Рис. 8. Динамика температуры, регистрируемой на 30 мм от точки поджига в атмосфере аргона (верхний ряд) и азота (нижний ряд) при начальных давлениях: *а* – 1 бар, *б* – 0,2 бар, *в* – 0,001 бар. Указаны времена с моментов лазерного инициирования. Вертикальные линии – границы фронтального горения образцов

При выполнении проекта разработаны методики формирования энергонасыщенных композитов в стальной полости 82×3×3 мм, инициирования их горения в инертных газах и азоте при давлениях 1, 0,2 бар и в форвакууме с помощью сфокусированного лазерного

импульса 30 мДж, методика визуализации в процессе горения течений и возмущений, а также фронтов реакции, с помощью ИАБ-451.

Подтверждено, что фактором, препятствующим воспламенению композитов, может являться высокая температуропроводность внешней среды.

Зарегистрировано распространение возмущений плотности, формирующихся в газовых средах при образовании продуктов сгорания композитов. При давлении сред 1 и 0,2 бар это возмущения на фронтах звуковых и ударных волн. Когда скорости горения существенно выше скоростей звука в газах, указанные возмущения, как правило, примыкают к продуктам и компонентам горения, при этом локальные пульсации параметров при аэрозольной фазе горения легко искажают поверхность ударных фронтов.

В форвакууме граница возмущений плотности существенно опережает фронт горения, так как потоки продуктов сгорания и раскаленных компонентов композитов не испытывают сопротивления окружающей среды. При истечении продуктов в форвакуум более темные области сразу за зоной наибольших градиентов плотности обусловлены, на наш взгляд, резким снижением температуры потока при расширении, приводящим к «замораживанию» химического состава или, по крайней мере, к снижению скорости химических реакций в аэрозоле.

Отмечено, что при формировании предвестников резко возрастает массовая скорость горения, что приводит к высоким пиковым давлениям в рабочей камере. Это подчеркивает важность выявления факторов, провоцирующих при горении энергонасыщенных композитов формирование предвестников. К числу этих факторов можно отнести нестабильность скорости горения V_{comb} и низкую влажность моногидрата перхлората натрия W .

При использовании в процессе горения композитов фотоэмиссионного пирометра ПИФ 18 установлено, что температуры в зоне фронтального горения, как правило, превышают 3300 К, в начале аэрозольного горения они близки к этому значению. Если пики этих фаз процесса разнесены, можно оценить «ширину» фронта $b_{i\text{фр}} = V_{i\text{comb } 30\text{ мм}} \cdot \Delta t_{i\text{фр}}$. Так при 0,2 бар $b_{i\text{фр}} \leq 10$ мм в средах аргона и азота. Продолжительность эффективного энерговыделения в аэрозольной фазе горения составляет обычно 7–10 мкс, в дальнейшем в пределах рабочего телесного угла ПИФ 18 регистрируются температуры продуктов сгорания последующих слоев композита и их аэрозольных компонентов (распространяющихся в том числе в сторону зоны регистрации температуры), возрастающие после прохождения отраженных от стенок рабочей камеры ударных волн.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (договор № T23-092).

Литература

1. Mironov V.N., Penyazkov O.G., Golomako E.S., Shumlyayev S.O. Fast combustion modes of composites “mound of porous silicon fragments–sodium perchlorate monohydrate” in the atmosphere // Горение и взрыв. 2021. Т. 14. № 2. С. 55–63.
2. Каталог цветного стекла / Под ред. В.В. Варгина. М.: Машиностроение. 1967. – 63 с.
3. Миронов В.Н., Голомако Е.С., Кривошеев П.Н., Пенязков О.Г., Шумляев С.О. Особенности горения композитов из фрагментированного пористого кремния и моногидрата перхлората натрия в инертных газах // Восьмой Белорусский космический конгресс. 25–27 октября 2022 г. Минск: ОИПИ НАН Беларуси, 2022. Т. 2. С. 172–175.
4. Физические величины: справочник / Под ред. И.С. Григорьевой, Е.З. Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
5. Миронов В.Н., Пенязков О.Г., Кривошеев П.Н., Баранышин Е.А., Голомако Е.С. Особенности горения пористого кремния в кислороде при повышенных давлениях и в атмосфере в системе пористый кремний–перхлорат натрия // Тепло- и массообмен – 2018. Минск: Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, 2019. С. 152–162.

УДК 62-643, 662.61, 536.462

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА ГОРЕНИЯ ЖИДКИХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВ, РАСПЫЛЯЕМЫХ ПЕРЕГРЕТЫМ ВОДЯНЫМ ПАРОМ, В ПРИСУТСТВИИ ГАЗОВ-РАЗБАВИТЕЛЕЙ

М.А. Мухина, Е.П. Копьев, И.С. Садкин, Е.Ю. Шадрин

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия

Введение. Энергетика является важнейшей отраслью, определяющей эффективность экономики и технический уровень промышленности. Однако энергетический комплекс – один из основных источников антропогенного воздействия и выбросов загрязняющих веществ [1]. Несмотря на активное развитие альтернативных и рост доли возобновляемых источников энергии [2], потребление ископаемого топлива в абсолютном выражении не снижается, а его доля в мировом энергобалансе превышает 3/4 [2, 3]. При этом одной из актуальных проблем при сжигании ископаемого топлива является то, что помимо углекислого газа могут образовываться опасные для здоровья человека и окружающей среды вещества, такие как окислы азота и серы, сажа, монооксид углерода и другие соединения [4]. Отсюда вытекает необходимость поиска экономически оправданных технологий снижения выбросов, стоимость использования которых была бы конкурентоспособна, а общие затраты на подавление выбросов не превышали величину экономического эквивалента предотвращенного ущерба от данных выбросов. Другой значимой проблемой является накопление большого количества некондиционных горючих отходов, в том числе углеводородных отходов, образующихся в процессе добычи, транспортировки и переработки ископаемого топлива. Как правило, это загрязненные механическими примесями, зачастую содержащие большое количество воды, горючие вещества с низкой стоимостью и выделяющие при традиционном сжигании большое количество вредных веществ.

Одним из возможных путей снижения вредных выбросов при сжигании низкокачественных топлив является организация низкотемпературного сгорания – Low-Temperature Combustion (LTC). Основная идея этого подхода заключается в использовании systems of exhaust gas recirculation (EGR), flue gas recirculation (FGR) или добавлении газов-разбавителей для уменьшения концентрации окислителя и, как следствие, снижения температуры пламени. В совокупности это позволяет снизить выбросы сажи, NO_x , CO и других вредных веществ.

Известно, что при воздушном сжигании органического топлива основу смеси рециркулирующего газа, помимо азота, составляют углекислый газ и пары воды, причем вода находится в состоянии перегретого пара, а ее молярная доля в продуктах сгорания может быть кратно больше, чем у CO_2 , например, вдвое больше, если в качестве топлива используется метан. Таким образом, эффективность столкновения H_2O более чем в четыре раза выше, чем у CO_2 , что подразумевает значительные эффекты реакций рекомбинации, в частности, при высоком давлении [5]. При этом температуропроводность как H_2O , так и CO_2 меньше, чем у воздуха, что локально может оказывать влияние на структуру пламени и скорость горения [6]. Поэтому важно учитывать влияние перегретого водяного пара как важнейшего компонента в системе рециркуляции газов на процессы горения в схемах низкотемпературного сжигания. Кроме того, возможно использовать воду и водяной пар в качестве самостоятельного разбавителя.

Другое направление в развитии низкоэмиссионного сжигания – потенциальное использование в качестве разбавителя чистого углекислого газа, который в промышленных объемах можно получать в процессе работы перспективных высокоэффективных кислородно-топливных энергетических циклов: Аллама, ОИВТ, Граца и прочих [7, 8].

Однако, несмотря на достаточно большое количество предлагаемых подходов применения газов-разбавителей, степень и механизмы воздействия чистых по составу веществ (особенно CO_2 и водяной пар) на характеристики пламени и протекание химических реакций еще имеют некоторые пробелы, нет однозначных выводов о преимуществе того или иного вещества при утилизации горючих отходов.

Задачи исследования. Ранее в ИТ СО РАН был предложен способ сжигания жидких углеводородных топлив и горючих отходов в высокоскоростной струе перегретого водяного пара [9–11]. Авторами были разработаны и испытаны различные конструкции низкоэмиссионных жидкотопливных горелочных устройств для утилизации жидких горючих отходов с производством тепловой энергии, использующих предложенный принцип сжигания в потоке водяного пара. На оригинальном атмосферном горелочном устройстве распылительного типа при сжигании гептана, дизельного топлива, отработанного масла, мазута и сырой нефти было показано, что такой способ позволяет на треть снизить образование CO и NO_x . При этом горелочное устройство не претерпевает значительных изменений при смене топлива и отличается простотой конструкции.

Предложенный способ и разработанные горелочные устройства рассматриваются как высокоэффективные и экологически безопасные, что потенциально позволяет применять их при задачах утилизации некондиционных жидких горючих отходов путем утилизации с получением полезной энергии. Однако кинетика горения жидких углеводородов, особенно некондиционных, при впрыске пара до сих пор остается малоизученной, точные механизмы до сих пор не раскрыты, что не позволяет проводить достоверные численные расчеты при проектировании горелочных устройств такого типа. Кроме того, не были изучены возможности замены перегретого водяного пара, получение которого в некоторых ситуациях может быть технически затруднено, на другие типы разбавителей, нет оценок изменения параметров горения некондиционного топлива при такой замене. Поэтому для развития предыдущих исследований и выявления возможности полной либо частичной замены перегретого водяного пара в рамках настоящей работы проведено изучение характеристик сжигания жидких углеводородов в присутствии смеси перегретого водяного пара с газом-разбавителем в горелочном устройстве распылительного типа. А именно, учитывая высокие качественные показатели сжигания жидких топлив в струе перегретого водяного пара и перспективность данного метода для утилизации низкокачественных углеводородов, целью настоящей работы является экспериментальное сравнение показателей при использовании в качестве разбавляющего агента как водяного пара, так и смеси пар–углекислый газ, а так же чистого CO_2 как одного из основного газа-разбавителя для уточнения механизмов протекающих реакций и создания экспериментальной базы для численных расчетов.

Результаты экспериментального исследования. Экспериментальное исследование экологических и теплотехнических показателей сжигания дизельного топлива при его распылении водяным паром, углекислым газом и их смесью проводилось с использованием атмосферного горелочного устройства мощностью до 20 кВт, схема которого показана на рис. 1.

Исследование проводилось на экспериментальном стенде для изучения сажепарового режима горения жидких углеводородов, который входит в состав уникальной научной установки УСУ «Крупномасштабный термогидродинамический стенд для исследования тепловых и газодинамических характеристик энергоустановок» [12]. Установка состоит из горелочного устройства, автоматизированной системы подачи воды, системы подачи углекислого газа, электрического парогенератора для перегрева водяного пара и нагрева углекислого газа до заданной температуры, системы подачи жидкого топлива.

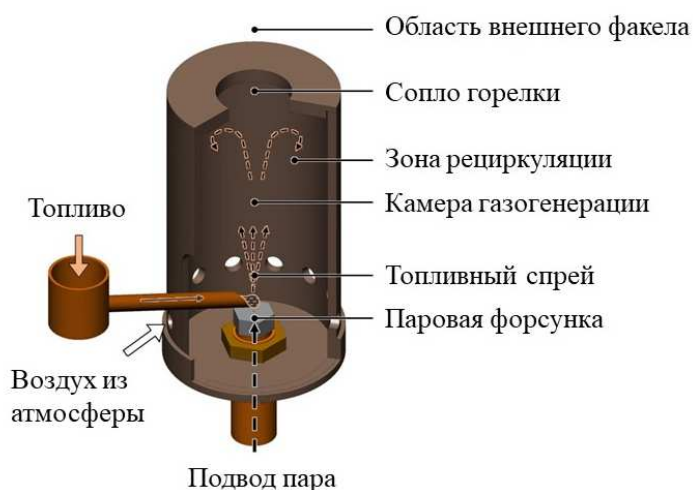


Рис. 1. Распылительное горелочное устройство

В ходе экспериментального исследования дизельное топливо распылялось водяным паром, углекислым газом или их смесью. Для соответствия режимов друг другу, расход топлива брался одинаковый, а расход CO_2 (только или в смеси с паром) подбирался, исходя из равенства сил реакции струи распылителя на каплю топлива. Подробно задача расчета импульса струи распылителя рассмотрена в работе [13]. При одинаковой интенсивности динамического воздействия пара, углекислого газа или их смеси в подобранных режимах подсасывается одинаковое количество окислителя (воздуха) из атмосферы через отверстия в нижней части корпуса горелочного устройства. Равный приток внешнего воздуха обеспечивает схожие значения интегрального коэффициента избытка воздуха, что делает правомерным сравнение режимов, параметры которых представлены в табл. 1.

Таблица 1. Описание исследуемых режимов

Параметры	Номер режима				
	1	2	3	4	5
Расход топлива, кг/ч	1,2				
Расход пара, кг/ч	0,8	0,6	0,4	0,2	0
Расход CO_2 , кг/ч	0	0,34	0,64	0,95	1,3
Импульс струи [57], Н	0,203	0,207	0,206	0,205	0,207
Температура пара/ CO_2 /смеси, °С	250				

Для подобранных параметров подачи пара, CO_2 и их смеси (см. табл. 1) были получены профили средней по времени температуры вдоль оси симметрии пламени (рис. 2).

Измерение температур вдоль оси симметрии пламени показывает близость значений по всей длине пламени для всех рассматриваемых режимов. При этом максимум температур достигается на некотором удалении от сопла горелки, что говорит о догорании топлива во внешнем факеле и соответствует характеру горения диффузионного пламени.

На правой части рис. 2 можно видеть, что разброс максимума температур (обозначенный на рисунке как Δ) для всех режимов не превышает 50 градусов и лежит в районе 1750 °С. Это можно объяснить схожим эффектом повышения теплоемкости смеси при добавлении в нее струи водяного пара или углекислого газа. Хотя CO_2 имеет меньшую теплоемкость (~1.9 раза), чем водяной пар, он подается в большем количестве (~1.6 раза, если сравнивать режим 1 и 5), в результате чего получается близкий эффект разбавления горючей смеси.

В таблице 2 представлены результаты газового анализа конечных продуктов сгорания дизельного топлива, охлажденных до комнатной температуры, на выходе из калориметра.

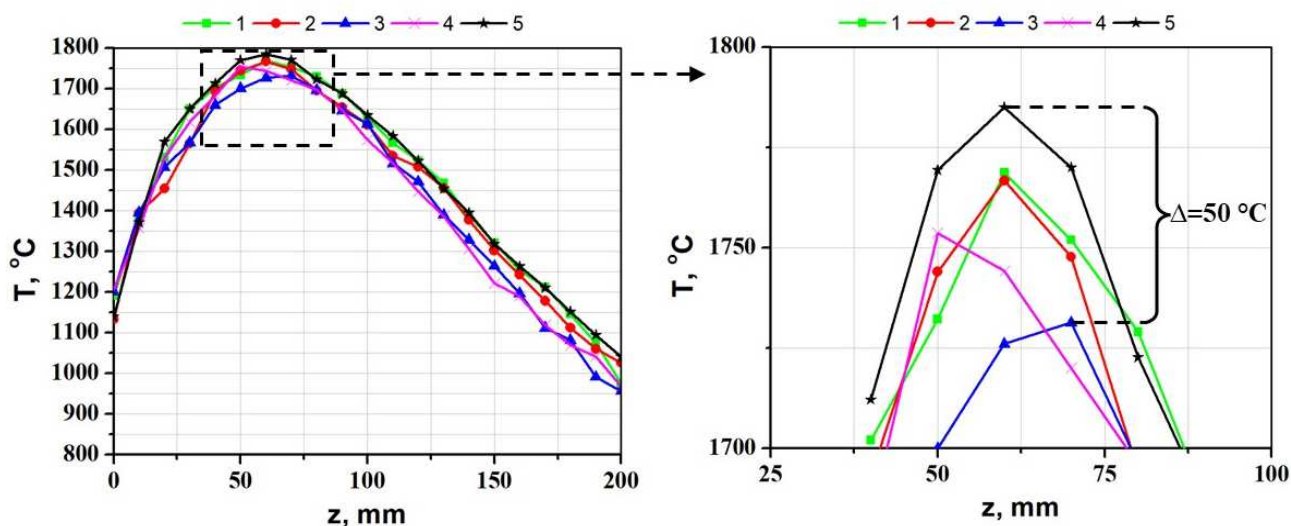


Рис. 2. Измерение температуры вдоль оси симметрии пламени (по центру выходного сопла горелки). Каждому режиму соответствует свой тип кривой

Таблица 2. Характеристики продуктов сгорания дизеля на выходе из калориметра в зависимости от исследуемого режима

Параметры	Номер режима				
	1	2	3	4	5
O ₂ , %	4,06	3,85	3,65	3,40	3,19
CO ₂ , %	13,29	14,32	15,30	16,36	17,48
CO, ppm	27	29	30	35	37
NO _x , ppm	35	38	40	43	45
Q, МДж/кг	45,14	46,00	45,87	45,39	45,61

Можно отметить, что при последовательном замещении водяного пара углекислым газом (по мере движения от режима 1 к режиму 5) снижается концентрация кислорода в продуктах сгорания и возрастает доля углекислого газа. Так как расход топлива постоянен, а присос атмосферного воздуха в горелочное устройство, обусловленный эжекционным эффектом струи-распылителя, одинаков во всех режимах ввиду равенства импульсов, то это объясняется вводом дополнительного объема CO₂ по мере замещения им водяного пара. При этом концентрация CO и NO_x в уходящих газах медленно возрастает по мере замещения водяного пара углекислым газом. Однако изменяется и объем уходящих газов. Поэтому целесообразно выполнить пересчет объемных концентраций оксидов азота и монооксида углерода, определяемых газоанализатором, в удельные величины выбросов для возможности сопоставления с нормативными документами и мировыми аналогами. Результаты расчетов представлены графически (рис. 3).

Пересчитанные в удельные величины показатели выбросов загрязняющих веществ демонстрируют рост по мере перехода с распыления водяным паром на углекислый газ, который составляет ~25% по каждому из изучаемых компонент. Можно предположить, что это связано с химическим эффектом присутствия водяного пара, влияющим на протекание химических реакций, так как физический эффект разбавления горючей смеси схож для всех вариантов смесей, что было отмечено при анализе профиля температур. Тем не менее все исследуемые режимы работы горелочного устройства с запасом соответствуют самому строгому классу норматива DIN EN 267 [14].

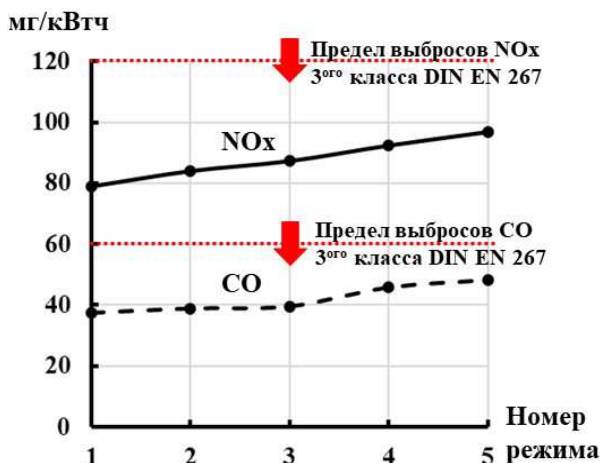


Рис. 3. Зависимость выбросов CO и NO_x от режима работы горелочного устройства

При анализе полноты сгорания топлива было получено, что во всех случаях ее значение превышает 98% и лежит в узком диапазоне 45,14–46 МДж/кг, что близко к высшей теплоте сгорания дизельного топлива (46 МДж/кг). При этом какой-либо явной зависимости полноты сгорания топлива от состава распылителя отмечено не было.

Выводы. В ходе экспериментального исследования определены следующие показатели процесса сжигания: профили температуры пламени, количество выделяемой теплоты, состав промежуточных и конечных продуктов сгорания топлива. Получено, что температура пламени вдоль вертикальной оси сопла горелочного устройства не изменяется при переходе с распыления водяным паром на углекислый газ. Для всех исследуемых режимов наблюдается высокая полнота сгорания топлива.

По полученным зависимостям концентраций газовых компонент в пламени видно, что минимумы O₂ и максимумы CO, CO₂, C_nH_m, H₂ для исследуемых режимов наблюдаются на одинаковом расстоянии от сопла горелки, профили соответствующих компонент имеют схожий вид. При этом значения H₂ и C_nH_m в пламени оказываются выше, а CO и CO₂ ниже, когда доля пара в струе распылителя больше, что указывает на различия протекающих в пламени реакций. Анализ состава конечных продуктов сгорания показывает, что при замещении пара углекислым газом концентрации токсичных продуктов сгорания CO и NO_x возрастают на 25%. Однако все исследуемые режимы работы горелочного устройства соответствуют самому строгому классу норматива EN 267.

Полученные результаты показывают, что возможно заменить частично или полностью перегретый водяной пар на углекислый газ в качестве распылителя с целью сжигания жидких горючих отходов. Однако такая замена влечет за собой некоторое увеличение содержания вредных веществ в продуктах сгорания пропорционально замещению, но при этом показатели не превышают значений, указанных в нормативных документах, что позволяет варьировать тип распылителя для различных исключительных случаев. Полученные экспериментальные данные будут использованы для верификации численных моделей, направленных на проектирование опытно-промышленных образцов горелочных устройств такого типа, которые в дальнейшем могут быть использованы для Waste to Energy.

Работы выполнены при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-79-10029).

Литература

1. IEA, Global Energy Review: CO₂ Emissions in 2021, 2021. <https://www.iea.org/reports/global-energy-review-co2-emissions-in-2021-2> (accessed 2022-09-21).

2. IEA, World Energy Balances: Overview, 2021. <https://www.iea.org/reports/world-energy-balances-overview> (accessed 2022-09-21).
3. Enerdata, Global Energy Statistical Yearbook 2020, 2020. <https://yearbook.enerdata.ru/co2-fuel-combustion/CO2-emissions-data-from-fuel-combustion.html> (accessed 2022-09-21).
4. Miller B. Fossil Fuel Emissions Control Technologies. Stationary Heat and Power Systems; Butterworth-Heinemann; 2015; 514 p. <https://doi.org/10.1016/C2014-0-00392-9>.
5. Warnatz J., Maas U., Dibble R.W. Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation, 4th ed. Heidelberg; Springer-Verlag, 2006. – 333 p.
6. Kobayashi H., Yata S., Ichikawa Y., Ogami Y. Dilution effects of superheated water vapor on turbulent premixed flames at high pressure and high temperature // Proceed. of the Combustion Institute. 2009. 32. (2). Pp. 2607–2614.
7. Crespi F., Gavagnin G., Sánchez D., Martínez G.S. Supercritical carbon dioxide cycles for power generation: A review // Applied Energy. 2017. No. 195. Pp. 152–183.
8. Darabkhani H.G., Varasteh H., Bazooyar B. Oxyturbine power cycles and gas-CCS technologies // Carbon Capture Technologies for Gas-Turbine-Based Power Plants. Elsevier, 2023. Pp. 39–74.
9. Anufriev I.S., Vigriyanov M.S., Alekseenko S.V., Sharypov O.V., Kopev E.P. Steam-oil burner device. RU 2684300 C1, 2018.
10. Anufriev I.S., Kopyev E.P., Sadkin I.S., Mukhina M.A. Diesel and waste oil combustion in a new steam burner with low nox emission // Fuel. 2021. Vol. 290. Art. 120100.
11. Anufriev I., Kopyev E., Alekseenko S., Sharypov O., Butakov E., Vigriyanov M., Sadkin I. Cleaner crude oil combustion during superheated steam atomization // Thermal Science. 2021. Vol. 25. No. 1A. Pp. 331–345.
12. Unique scientific installation "Large-scale thermohydrodynamic stand for the study of thermal and gas-dynamic characteristics of power plants". <http://ckp-rf.ru/usu/73570>.
13. Kopyev E.P., Sadkin I.S., Mukhina M.A., Shadrin E.Yu., Krasinsky D.V., Shimchenko S.Yu. Experimental study of liquid hydrocarbon combustion under conditions of steam gasification in the presence of diluent gas // J. Phys.: Conf. Ser. 2022. Vol. 2233, 012015.
14. DIN EN 267:2011-11. Automatic forced draught burners for liquid fuels.

УДК 539.3

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СЛОИСТЫХ ПРЕГРАД ПРИ УДАРЕ**М.Ю. Орлов, В.П. Глазырин, Т.В. Фазылов**

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

В настоящее время весьма актуальны исследования поведения слоистых систем при ударе ввиду их широкого использования в качестве защит различных объектов и техники. Отличительной особенностью любой слоистой системы является то, что она сохраняет специфические свойства слоев, но при этом в условиях ударных нагрузок может обладать своими индивидуальными свойствами [1–5]. Поэтому, скорее всего, слоистые системы останутся объектами исследования еще долгое время. Анализ научно-технической литературы показал, что наиболее используемые материалы в ударостойких защитах это сталь, алюминий, титан, керамика. Современной альтернативой являются, быть может, функционально-градиентные материалы.

Недавние исследования показали [6], что не всегда монолитная преграда может обладать большей ударной стойкостью, чем слоистая система такой же толщины. Отклик преград на ударные нагрузки зависит от многих условий, в том числе от начальной скорости ударника, угла соударения, формы и состава его головной части, прочности взаимодействующих материалов и т. д. В данном аспекте численное моделирование выступает удобным теоретическим инструментом, позволяющим без больших материальных и временных затрат выявлять фундаментальные механизмы и закономерности процесса разрушения слоистых систем в недоступной для лабораторного эксперимента области условий.

В настоящей работе предпринята попытка оценить ударную стойкость слоистых алюминиевых систем при нормальном ударе ударника с оживальной головной частью. Начальная скорость ударника во всех вариантах была выше баллистического предела.

Математическая модель и численный метод

Рассматриваемая среда предполагается сжимаемой, пористой, изотропной, при отсутствии массовых сил, внутренних источников тепла и теплопроводности. Основная система уравнений, описывающая нестационарные пространственные адиабатические движения сжимаемой, упругопластической, пористой среды, состоит из уравнений неразрывности, движения, энергии и изменения удельного объема пор [6].

Поведение материалов описывается с позиций феноменологической макроскопической теории механики сплошных сред. Материал взаимодействующих тел моделируется однофазной, сжимаемой, прочной, пористой, упруго-пластической средой с учетом ударно-волновых явлений и совместного образования отрывных и сдвиговых разрушений. Совместное использование нескольких критериев разрушения позволяет описывать морфологию разрушения наиболее приближенную к реальной.

Определяющие соотношения задаются уравнениями Прандтля–Рейса при условии текучести Мизеса. Уравнение состояния выбрано в форме Уолша. Численное моделирование проведено с применением модифицированного численного метода Г.Р. Джонсона для решения многоконтактных динамических задач механики деформируемого твердого тела, который содержит специальный способ выделения поверхностей разрыва сплошности материалов. Расчеты проведены при помощи некоммерческого программного комплекса Удар.Ос.1 в двумерной осесимметричной постановке [7].

Тестовые расчеты

Вначале были проведены тестовые расчеты для проверки феноменологической модели и численного метода, а именно, смоделировано соударение двух стальных цилиндров с целью проверки выполнения универсального принципа симметрии и сравнения численных результатов с аналитическим решением Ренкина–Гюгонио. Далее проведено сравнение с результатами экспериментальных баллистических тестов по пробитию стальным шариком монолитных и двухслойных преград, а также по глубокому внедрению ударников с оживальной головной частью в полубесконечные металлические преграды.

Ударник и преграды

В качестве ударника был выбран сердечник немецкой пули 6,1Smk диаметром 6,1 мм, массой 2,55 г, длиной 16 мм [2]. Начальная скорость задавалась выше предела сквозного пробития рассматриваемых преград и равнялась 450 м/с. Объектами исследований были многослойные преграды из алюминиевого сплава Д16. Всего рассмотрено восемь преград, включая монолитные, преграды с воздушным зазором, двухслойные и трехслойные преграды. Суммарная толщина многослойных преград не превышала толщины 6 мм. Ранее мы изучили отклик на удар только пяти преград [7]. Для более детального выявления влияния роли слоев на процесс пробития преград были рассмотрены еще «зеркальные» преграды. Например, преграда с расположением тонкого слоя в качестве лицевого и воздушного зазора имела третий порядковый номер и обозначалась как (1+0+4). «Зеркальной» по отношению к ней преградой являлась «перевернутая» преграда (4+0+1), имеющая четвертый порядковый номер, т. е. монолитный 4 мм слой поменял внутри свое расположение с лицевого на тыльный. На рис. 1 показаны все «зеркальные» преграды (монолитные преграды здесь не приведены) Для удобства преграды сгруппированы попарно. Направление действия ударника слева направо.

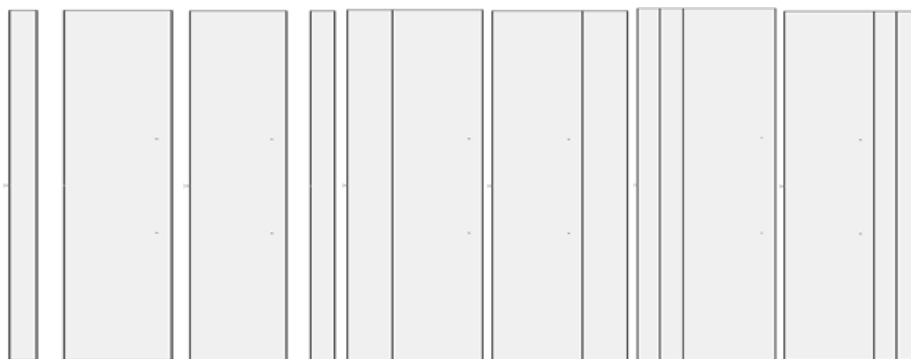


Рис. 1. Поперечное сечение многослойных преград (слева направо): преграды с воздушным зазором (1+0+4) и (4+0+1); двухслойные преграды (2+4) и (4+2); трехслойные преграды (1+1+4) и (4+1+1)

Серия вычислительных экспериментов состояла из 8 вариантов. Расчеты проведены в осесимметричной постановке при помощи 2D решателя Удар.Ос.1. Конечно-элементные модели ударника и преграды были построены при помощи оригинального генератора построения сеток. В качестве расчетного элемента использовались 3-х и 5-ти узловые элементы. В процессе счета строго отслеживалось выполнение законов сохранения, а также дисбаланс внутренней энергии.

Результаты расчетов

На рис. 2 приведены рассчитанные конфигурации для некоторых вариантов расчетов на конечной стадии процесса пробития. Анализ деформационных картин и областей

разрушения показал, что пробитие происходило по механизму «прокалывания». Все преграды были пробиты насквозь. Диаметр пробоины в монолитных преградах был приблизительно равен диаметру ударника в цилиндрической части. В дополнительных слоях многослойных преград диаметр пробоины был несколько больше. Следует отметить, что там же была максимальная остаточная деформация. Например, это видно по состоянию преграды (4+1+1) после ее сквозного пробития. Здесь была зафиксирована максимальная остаточная деформация нижних слоев с небольшим зазором между ними. В целом отмечено слабое затупливание носика ударника и незначительная пластическая деформация всей его оживальной части. Области разрушения в преградах сконцентрированы в зоне контактной поверхности ударник–мишень. Имели место слабые очаги разрушения по границам сформировавшейся пробоины во всех вариантах.

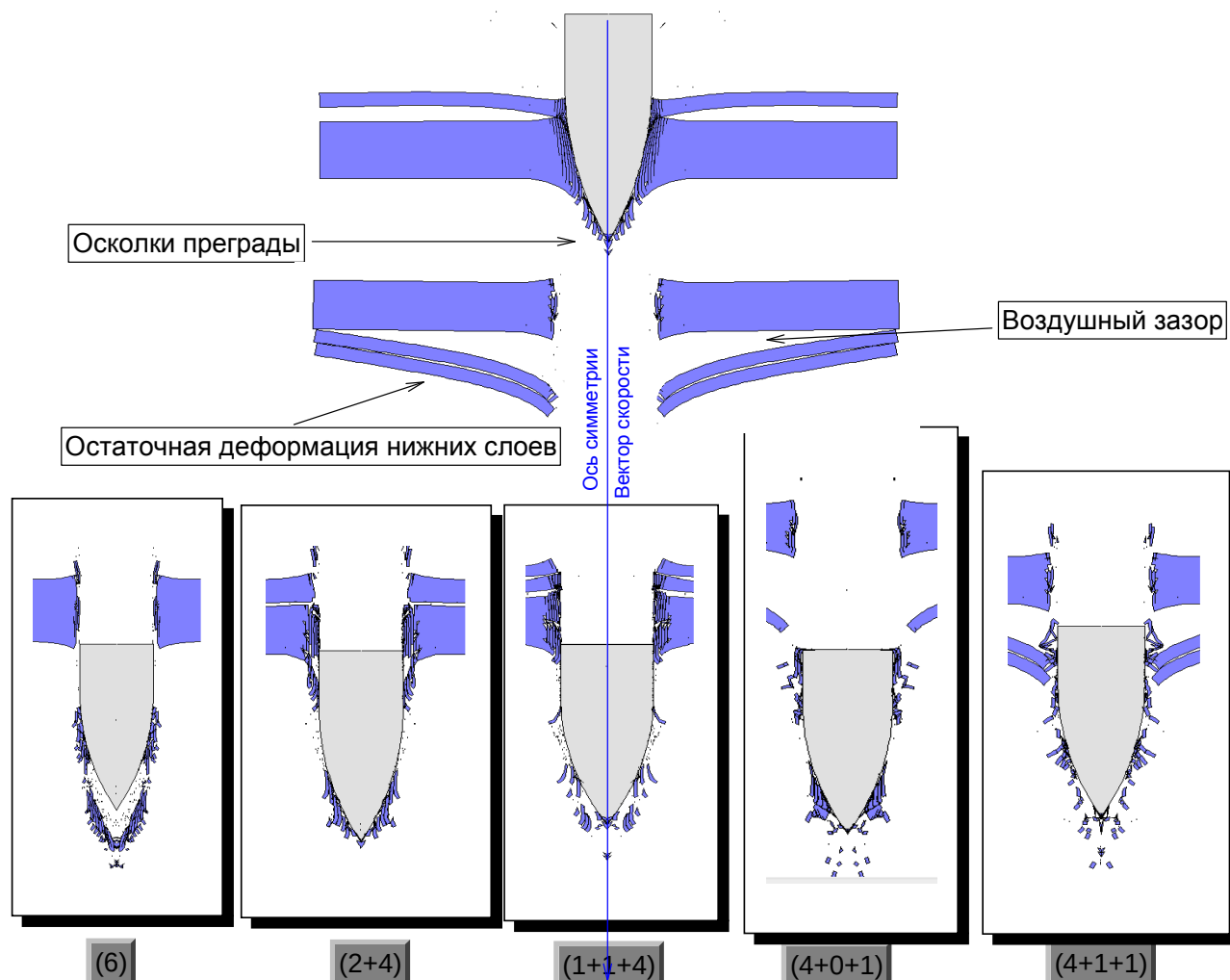


Рис. 2. Рассчитанные конфигурации ударник–мишень на финальных стадиях процесса

Динамику пробития всех преград можно отследить по временной зависимости скорости ударника на рис. 3. Скорость ударника рассчитывалась как скорость его центра масс. Кривые скорости для вариантов (4) и (6) не представлены на графике. Видно, что характер кривых является типичным для подобных процессов, их форма близка к графику гиперболической функции. Особенностью можно считать их совпадение на начальных стадиях процесса и различие на конечных. Например, кривые скорости для слоистых преград на финальный момент времени различались, причем преграда (2+4) показала несколько большую ударную стойкость, чем преграда (4+2).

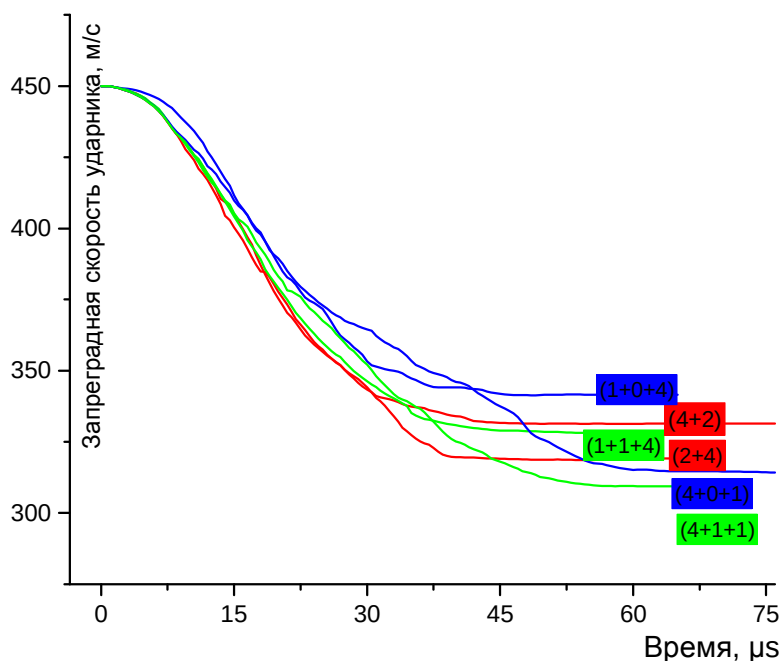


Рис. 3. Временные зависимости скорости ударника при соударении с преградами (1+0+4), (4+2), (1+1+4), (2+4), (4+0+1) и (4+1+1) со скоростью 450 м/с

На рис. 4 приведена энергия диссипации для каждого варианта, рассчитанная на финальных стадиях процесса. Как и следовало ожидать, минимальная энергия диссипации равная 72 Дж была после пробития преграды (4), а максимальная 136 Дж – после пробития преграды (4+1+1)

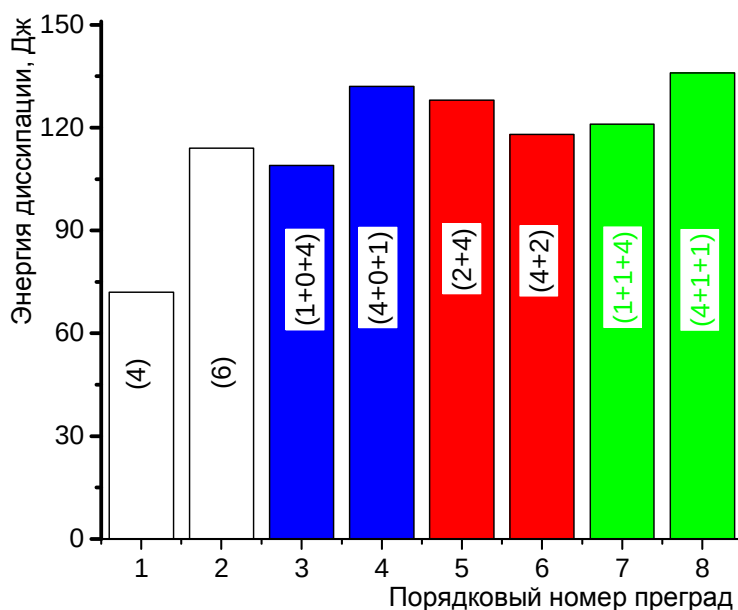


Рис. 4. Энергия диссипации ударника на финальной стадии процесса

В табл. 1 приведены результаты численного моделирования, а именно: численные значения запреградной скорости ударника, время пробития (рассчитывался случай полного выхода ударника из преграды), а также диаметры пробоины в преградах. Диаметр рассчитывался для основного и дополнительного слоев, а в случае трехслойных преград для всех трех в отдельности.

Таблица 1. Результаты расчетов

Обозначение преграды	(4)	(6)	(1+0+4)	(4+0+1)	(2+4)	(4+2)	(1+1+4)	(4+1+1)
Номер преграды	1	2	3	4	5	6	7	8
Начальная скорость ударника, м/с	450 м/с							
Запреградная скорость, м/с	382	336	341	314	319	331	328	309
Время пробития, мкс	50	60	60	70	63	72	63	75
Диаметры пробоин в преградах								
Диаметр в усиливающем (основном) слое, мм	6,6	6,8	6,7	7,4	6,7	6,5	6,5	6,6
Диаметр пробоины в дополнительных слоях, мм			6,7	8,2	7,1	6,2	7,0/6,8	7,1/7,2

Согласно расчетным данным максимальная скорость зафиксирована после сквозного пробития преграды (4), а минимальная – после пробития преграды (4+1+1). Поэтому считаем, что преграда (4) имеет наименьшую ударную стойкость, а преграда (4+1+1) – наибольшую ударную стойкость. Монолитная преграда (6) не показала наибольшую ударную стойкость. Видно, что преграды с воздушным зазором в первом случае (1+0+4) показали большую ударную стойкость, а во втором случае (4+0+1), наоборот, меньшую стойкость, чем для преграды (6). Видимо, это можно объяснить тем, что часть энергии была потрачена ударником на пластическую деформацию верхнего слоя. Однако разница не была значительной. Ударная стойкость двухслойных преград была приблизительно равной ударной стойкости преграды (6).

Как и ожидалось, минимальное время пробития зафиксировано для самой тонкой преграды (4). Максимальное время пробития отмечено в случае с преградой (4+1+1), что можно объяснить максимальным уровнем пластической деформации и максимальным количеством слоев. В случае с двухслойными преградами получилось, что время сквозного пробития преграды (4+2) было на 9 мкс больше, чем время пробития преграды (2+4). В целом процесс пробития длился не более 75 мкс.

В заключении обратим внимание на диаметры пробоин в преградах. Как было ранее сказано, процесс пробития проходил по механизму прокола, поэтому диаметр пробоины незначительно превышал диаметр цилиндрической части ударника. Детальный анализ показал, что диаметры в основном и дополнительных слоях в преграде (1+0+4) были одинаковыми. Это можно объяснить тем, что имела место остаточная деформация тонкого слоя в осевом направлении, в результате которого две пластины преграды соединились. Максимальный диаметр зафиксирован в преграде (4+0+1), что также объясняется остаточной деформацией нижнего слоя.

Заключение

Таким образом, проведенные численные исследования показали, что процесс пробития слоистых преград длился не более 75 мкс при доминировании механизма прокалывания. Это сопровождалось небольшим затуплением носика ударника и пластической деформацией его оживальной части. В трехслойных преградах тыльные слои получили наибольшую пластическую деформацию. За счет этого, увеличивалось время их

пробития, и немного уменьшалась запреградная скорость ударника. Ударная стойкость монолитной преграды (6) оказалась ниже, чем ударная стойкость преграды (4+1+1).

Исследование выполнено за счет Российского научного фонда, грант № 23-29-00257, <https://rscf.ru/project/23-29-00257>.

Литература

1. Walker J.D. Modern Impact and Penetration Mechanics. – Cambridge: Cambridge University Press, 2021. DOI: 10.1017/9781108684026.
2. Герасимов А.В., Глазырин В.П., Зелепугин С.А. и др. Высокоскоростной удар. Моделирование и эксперимент. Томск: Издательство научно-технической литературы, 2016. – 568 с.
3. Ben-Dor G., Dubinsky A., Elperin T. High speed penetration dynamics: Engineering models and methods. Singapore: World Scientific Publishing Company, 2019.
4. Hazell P.J. Armor Materials, Theory, and Design. 2nd Edition. CRC Press, 2022.
5. Фомин В.М., Гулидов А.И., Сапожников Г.А. и др. Высокоскоростное взаимодействие тел. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1999. – 600 с.
6. Scazzosi R., Giglio M., Manes A. Experimental and numerical investigation on the perforation resistance of double-layered metal shield under high-velocity impact of armor-piercing projectiles // Materials. 2021. Vol. 14. Iss. 3. P. 626.
7. Орлов М.Ю., Глазырин В.П., Фазылов Т.В. Численное моделирование процесса пробития многослойных пластин удлиненными ударниками // Материалы XI Всерос. науч. конф. с междунар. участием «Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики – 2021». Томск: Национальный исследовательский Томский государственный университет, 2022. С. 22–27.

УДК 533.6.011.5

ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ УДАРНЫХ ТРУБ В ИССЛЕДОВАНИЯХ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ НЕРАЗБАВЛЕННЫХ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ

А.В. Скилондз, О.Г. Пенязьков, А.И. Леончик

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, Минск, Беларусь

В исследованиях на ударных трубах в неразбавленных водородно-воздушных смесях при низких и средних температурах по мере уменьшения температуры регистрируется загиб кривой времени индукции реакции, не характерный для других газовых смесей. При этом получаемые экспериментальные результаты существенно отличаются от теоретических [1]. Полагают, что за расхождение с теорией отвечают вязкостные эффекты в пограничном слое за падающей ударной волной, которые в аргоне выражены в меньшей степени. Поэтому для изучения таких смесей принято разбавлять исследуемую смесь аргоном, что позволяет исключить факторы, влияющие на загиб кривой времени индукции реакции. Однако механизмы такого влияния до сих пор не установлены. Определяющее влияние могут оказывать локальный перегрев смеси и, как следствие, очаговое самовоспламенение [2], которое возникает в пределах элементов бифуркационной структуры, т.е. в области вихрей [3, 4], вблизи траектории тройной точки [5], в пограничном слое [6], в области ядра потока или из-за неустойчивости на границе области торможения потока бифуркационной структуры и неподвижного газа за отраженной ударной волной [6]. Причинами могут быть также особенности химической реакции, которые возникают при изменении состава смеси, или погрешность экспериментальной установки [1]. Чтобы определить область применимости ударных труб для исследования времени индукции неразбавленных смесей, необходимо установить механизмы влияния на результаты измерений и отделить их от влияния реальных химических процессов, которые исследуют на ударных трубах.

В данной работе экспериментально проверено предположение, что использование ударных труб для определения времени индукции реакции за отраженной ударной волной ограничено влиянием на результаты измерений вязкостных эффектов вблизи пограничного слоя или бифуркации отраженной ударной волны. Они приводят к отклонению от идеальных условий за отраженной ударной волной, в частности нарушается условие неподвижности потока за отраженной волной. Отклонение от идеальных условий приводит к неоднородному воспламенению. Таким образом, неоднородность воспламенения является одним из показателей отклонения от идеальных условий и может служить критерием применимости метода ударных труб для определения времени индукции. Такой подход не исключает существование мягких режимов самовоспламенения, но предполагает исследование вероятности возникновения очагов в определенных точках пространства. Полагая, что при идеальных условиях воспламенение будет протекать одновременно или равновероятно на оси трубы и в области у стенки в пределах равных объемов реагирующей смеси, мы определили область применимости метода ударных труб для измерения времени индукции реакции для водородно-воздушной смеси при плотностях газа за отраженной ударной волной $1,5 \text{ кг/м}^3$ и $2,8 \text{ кг/м}^3$. Идея исследования заключается в усилении вязкостных эффектов у стенки трубы за счет придания стенке трубы небольшой шероховатости поверхности с последующей оценкой ее влияния на зависимости времени индукции реакции от температуры.

Экспериментальная установка и методики измерения

Измерения производились в цилиндрической ударной трубе с внутренним диаметром 76 мм за отраженной ударной волной. Исследована стехиометрическая смесь водорода с

модельным воздухом $\text{H}_2/\text{O}_2/\text{N}_2$, соответствующее отношение молярных концентраций компонентов 2:1:3,76. Плотность за отраженной ударной волной поддерживалась постоянной для двух значений плотности: $\rho_5 = 2,8 \pm 0,1 \text{ кг/м}^3$ при температуре и давлении $T_5 = 880\text{--}1300 \text{ К}$, $P_5 = 9,5\text{--}14 \text{ атм}$, а также при $\rho_5 = 1,53 \pm 0,03 \text{ кг/м}^3$ и $T_5 = 980\text{--}1200 \text{ К}$, $P_5 = 6,0\text{--}7,2 \text{ атм}$. Толкающий газ – гелий. Эксперименты проводились для измерительной секции с гладкой и шероховатой стенками. Участок шероховатой и гладкой поверхности располагался у торца и составляли 400 мм в длину. Для гладкой трубы размер шероховатости составлял $Ra = 0,18 \pm 0,04 \text{ мкм}$, а для шероховатой $Ra = 20 \pm 3 \text{ мкм}$ (рис. 1). В обоих случаях параметр Ra определен вдоль оси ударной трубы.

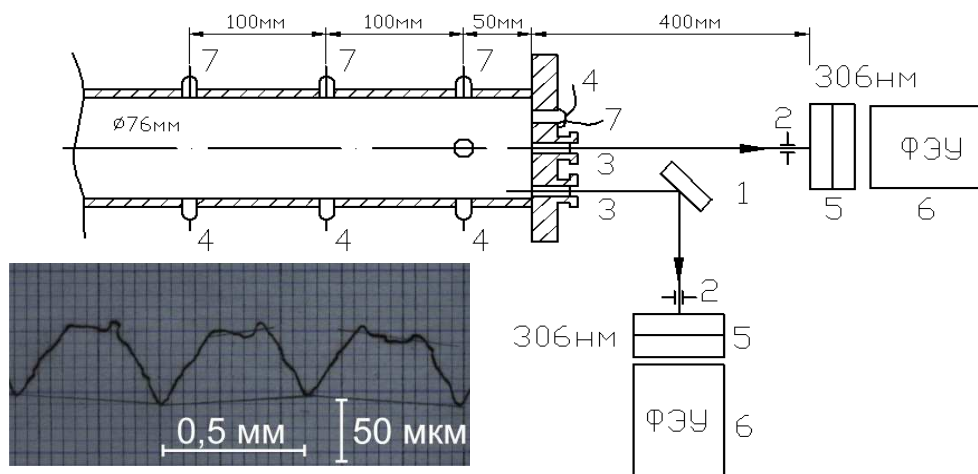


Рис. 1. Экспериментальная установка, схема хода световых лучей и профиль шероховатой поверхности: 1 – зеркало; 2 – диафрагма диаметром 7 мм; 3 – оптическое окно диаметром 7 мм; 4 – датчики давления; 5 – узкополосный светофильтр; 6 – фотоумножитель; 7 – ионизационные датчики

Значение шероховатости поверхности было выбрано таким образом, чтобы создать небольшую турбулентность в пограничном слое, но исключить существенное влияние турбулентных возмущений на ядро потока. Параметры газа рассчитаны по ударной адиабате, измеренной скорости падающей ударной волны и начальному давлению. Скорость ударной волны измерялась по данным датчиков давления PCB Piezotronics, установленными заподлицо с поверхностью ударной трубы на расстоянии 0, 50, 150, 250 мм от торца.

Время индукции измерялось по свечению OH^* на длине волны, соответствующей пропусканию узкополосного светофильтра с $\lambda = 306 \text{ нм}$, $\Delta\lambda = 2,4 \text{ нм}$. Чтобы оценить влияние бифуркации отраженной ударной волны на самовоспламенение, измерялась интенсивность излучения в пограничном слое, которое проходило через оптическое окно диаметром 7 мм, расположенное на расстоянии 1,5 мм от стенки трубы. Второе ФЭУ регистрировало излучение на оси трубы через оптическое окно такого же размера, установленное в торце трубы (рис. 1). Задержка самовоспламенения по свечению определялась как интервал времени между моментом, когда ударная волна отразилась от торца, и моментом, когда уровень сигнала свечения газа достигает уровня 5% от уровня первого минимума или перегиба сигнала свечения для эксперимента с жестким режимом самовоспламенения при той же плотности за отраженной ударной волной. Задержка самовоспламенения по давлению определялась как интервал времени между моментом, когда ударная волна отразилась от торца и моментом, когда уровень сигнала давления за отраженной волной вырос на 5% по сравнению с уровнем давления P_5 . Наличие и положение очагов самовоспламенения дополнительно контролировалось ионизационными датчиками, которые располагались в одном сечении с датчиками давления напротив них, а также в торце трубы.

Результаты

Результаты измерения времени индукции реакции для водородно-воздушной смеси при плотности за отраженной ударной волной $1,5 \text{ кг/м}^3$ для гладкой и шероховатой поверхностей измерительной секции приведены на рис. 2. Если результат измерений оценивать только по времени индукции, измеренному по датчику давления у торца τ_p , по ионизационному датчику τ_{ion} и по излучению вблизи пограничного слоя τ_{bl} , то может показаться, что особенностью процесса самовоспламенения является увеличение разброса данных с уменьшением температуры и переходом к мягкому режиму самовоспламенения, причем для шероховатой трубы этот разброс выражен в большей степени. Однако, принимая во внимание положение очагов, т.е. если учитывая характер зависимостей времени индукции реакции измеренных на оси трубы τ_{axis} и вблизи пограничного слоя τ_{bl} , можно заметить, что разброс данных вблизи $1000\text{--}1015 \text{ K}$ обусловлен особенностями самовоспламенения и не носит случайного характера. Для гладкой и шероховатой трубы при высоких температурах очаги самовоспламенения образуются одновременно ближе к оси и вблизи стенки трубы. При снижении температуры для шероховатой трубы резко выражена тенденция к началу самовоспламенения на оси, а затем в области у стенки. В случае более раннего самовоспламенения на оси трубы зависимости времени индукции реакции, определенные остальными методами, имеют изгиб и практически выходят на плато с уменьшением температуры. При дальнейшем снижении температуры за отраженной ударной волной до значений $T_5 = 1000\text{--}1015 \text{ K}$ раннее самовоспламенение на оси прекращается и значение времени индукции, определенное по другим датчикам, резко возрастает. Последнее также подтверждает влияние воспламенения на оси на процесс воспламенения у стенки и в объеме.

Как можно видеть из зависимости $\tau_p(T^{-1})$, к моменту самовоспламенения вблизи пограничного слоя уже как минимум изменяется давление смеси. Рост $\tau_p(T^{-1})$ при $T_5 = 1000\text{--}1015 \text{ K}$ происходит также резко, как и исчезновение самовоспламенения на оси. Из этого следует, что самовоспламенение вблизи пограничного слоя нельзя считать независимым от самовоспламенения вблизи оси.

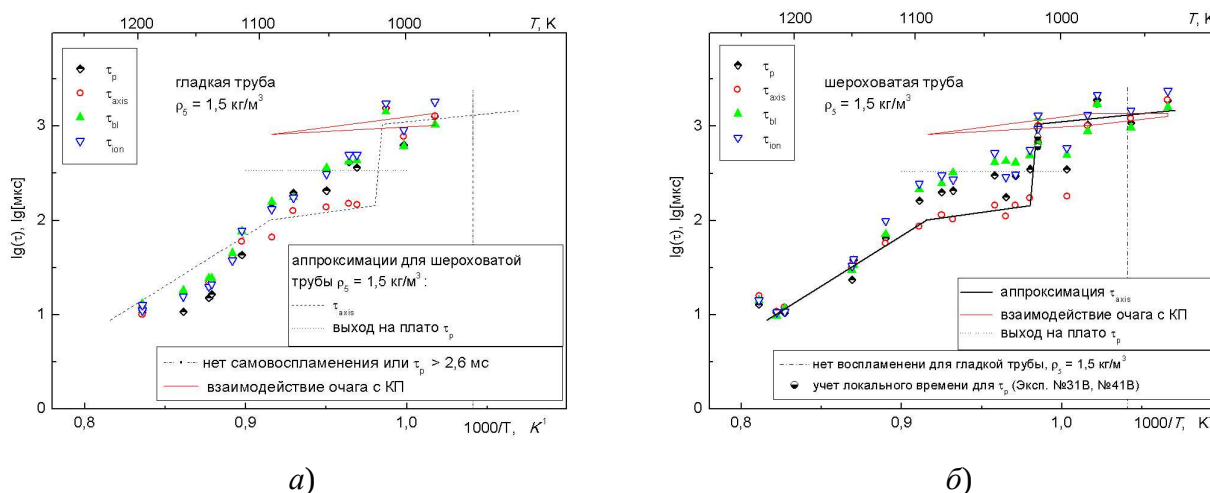


Рис. 2. Зависимость времени индукции реакции от обратной температуры для модельной водородно-воздушной смеси при $\rho_5 = 1,5 \text{ кг/м}^3$ для разной шероховатости поверхности измерительной секции: а) гладкая труба; б) шероховатая труба

Результаты измерения времени индукции реакции в модельной водородно-воздушной смеси при плотности за отраженной ударной волной $2,8 \text{ кг/м}^3$ для гладкой и шероховатой поверхностей измерительной секции приведены на рис. 3. Описанные для плотности $1,5 \text{ кг/м}^3$ закономерности проявляются еще более выразительно даже для гладкой трубы.

Исчезновение более раннего самовоспламенения на оси происходит при более низких температурах для большей плотности. Если для гладкой трубы при плотности $1,5 \text{ кг/м}^3$ зависимость $\tau_p(T^{-1})$ можно аппроксимировать прямой линией, то при плотности $2,8 \text{ кг/м}^3$ четко выражен загиб зависимости с выходом на плато, которое наблюдается и при плотности $1,5 \text{ кг/м}^3$ в шероховатой трубе.

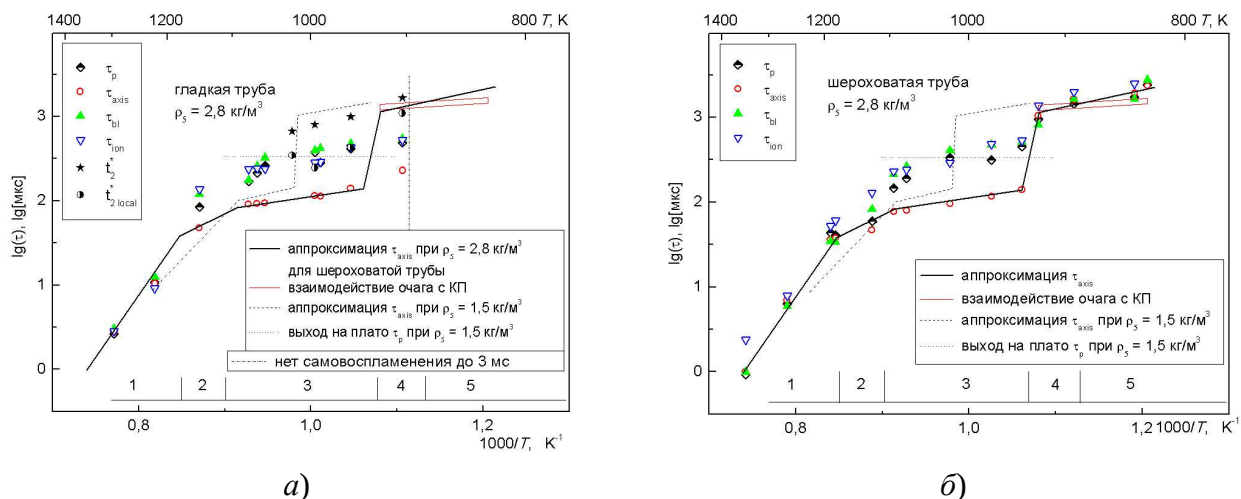


Рис. 3. Зависимость времени индукции реакции от обратной температуры для водородно-воздушной смеси при $\rho_5 = 2,8 \text{ кг/м}^3$ для разной шероховатости поверхности измерительной секции: а) гладкая труба; б) шероховатая труба

В случае низких температур и мягкого самовоспламенения проведена оценка влияния локального времени на результаты измерений (рис. 3а). Очаги, которые удалены от торца существенно, имеют другое локальное время, но, как правило, при этом и величина времени индукции реакции такова, что погрешность, которая возникает за счет локальности времени, несущественна. В нашем случае на существование описанных эффектов локальное время влияния не оказывает.

Для описания и анализа процесса самовоспламенения исследуемой смеси температурный диапазон разбит на 5 условных областей с соответствующей нумерацией, как показана на рис. 3. Дальнейшие рассуждения основаны на предположении, что причиной воспламенения в области № 3 и частично № 4 является возникновение очага вблизи оси.

Для оценки влияния бифуркации отраженной ударной волны на давление и температуру вблизи оси трубы в программе ANSYS было выполнено моделирование физических процессов вблизи торца ударной трубы за отраженной ударной волной с учетом расширения газа из области торможения потока. Эта область возникает вследствие торможения потока, проходящего через косую и присоединенную ударную волну бифуркационной структуры, и характеризуется повышенным по сравнению с P_5 давлением P_6 .

Представляется возможным провести оценку методом верхней границы (оценка сверху) влияния расширения пристеночного газа на поджатие газа на оси трубы для гладкой трубы без учета особенностей геометрии области с давлением P_6 . Для оценки максимального влияния на температуру и давление вблизи оси трубы рассмотрено расширение газа из пристеночной области высотой h с давлением P_6 выше давления в ядре P_5 в 1,025, 1,05 и 1,1 раза. Газовая смесь состоит из компонентов Н:О:Н в соотношении 2:1:3.76. Расчет проведен для идеального газа для труб диаметром $D = 50, 75, 100 \text{ мм}$. Высота пристеночного слоя составляла $h = 0,025D, 0,05D, 0,075D$, т.е. соответственно 2,5, 5 и 7,5 % от диаметра трубы. Начальная температура $T_5 = 1000 \text{ К}$, начальное давление 1 МПа. Для расчета взят участок

трубы длиной 20 мм. Применена осесимметричная модель с размером ячейки 0,1 мм. Временное разрешение $5 \cdot 10^{-8}$ с. Типовая расчетная кривая изменения давления и температуры на оси трубы приведена на рис. 4. Давление и температура отличаются на коэффициент R_p/M , поэтому, для упрощения представления результата, масштаб осей температуры и давления подобран так, что кривые $p(t)$ и $T(t)$ на графике совпадают.

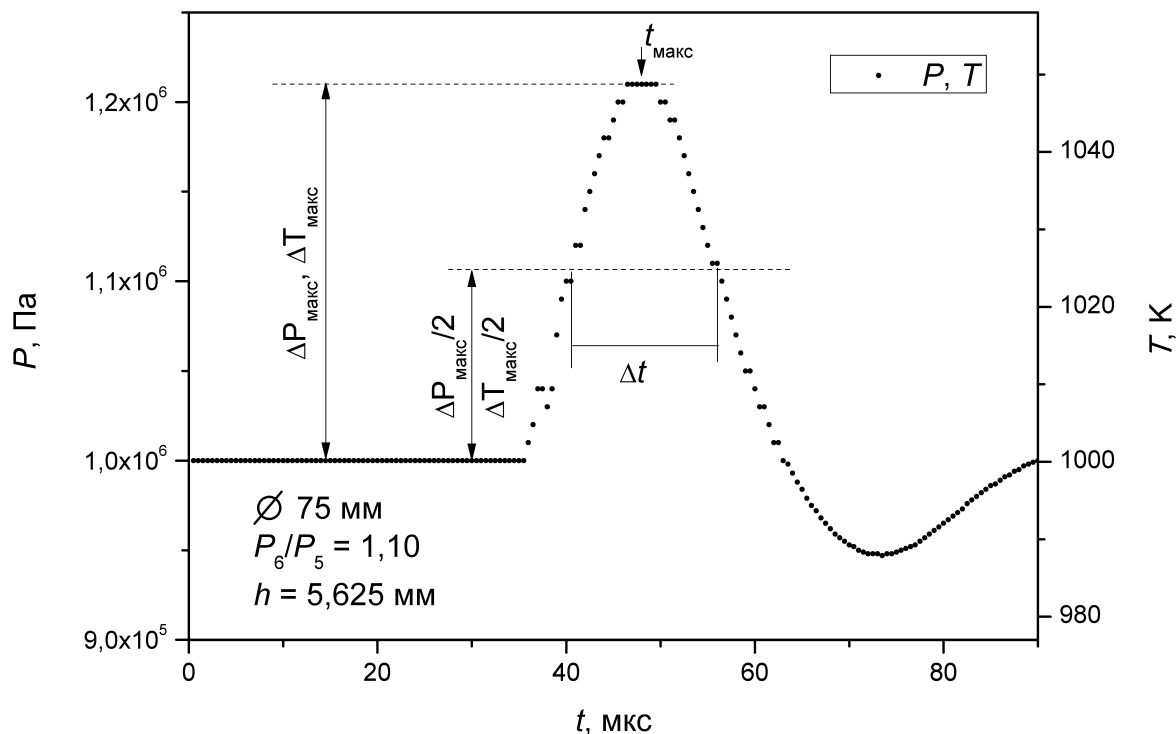


Рис. 4. Типовые кривые давления и температуры в центре цилиндрической трубы вследствие расширения газа из пограничной области с повышенным давлением

Для каждого расчетного случая проводились измерения времени начала роста давления и температуры t_0 , время до достижения пика $t_{\text{макс}}$, максимальное изменение температуры в пике $\Delta T_{\text{макс}}$, а так же эффективное время воздействия на газовую смесь Δt , которое измерялось на полувысоте максимального роста параметров. Рассчитывались максимальная доля времени эффективного воздействия на газ $e(\Delta t)$, на сколько процентов растет давление $e(P_{\text{макс}})$ и температура $e(T_{\text{макс}})$, а также на сколько градусов растет температура в момент максимального сжатия $\Delta T_{\text{макс}}$.

Вся динамика развития процесса нам не известна, но известны конкретные значения параметров бифуркационной структуры в определенный момент времени, так как ранее были экспериментально определены нами для аналогичных условий [7]. Для $\rho_5 = 2,8$ кг/м³ высота тройной точки при $M = 2,3$ – $2,5$ составляет 8–10 мм ($0,1D$ – $0,13D$) для шероховатой и 4,5–6 мм ($0,06D$ – $0,08D$) для гладкой поверхности на расстоянии 50 мм до торца [7]. При этом максимальное давление у стенки $P_6/P_5 = 1,06$ и $1,12$ для гладкой и шероховатой труб соответственно. Значит, исходя из данных таблицы, для гладкой трубы при плотности 2,8 кг/м³ $\Delta T_{\text{макс}}$ составляет до 23 К, а для шероховатой — до 70 К. Косвенно измеренные величины роста температуры на оси достигают 260 К как для гладкой, так и для шероховатой трубы (см. рис. 3б).

Из таблицы видно, что для $h = 3,75$ мм для труб диаметром 50 и 75 мм и $P_6/P_5 = 1,1$ максимальное увеличение температуры на оси тем больше, чем меньше диаметр. Это же можно с некоторым допущением заметить для $h = 5$ – $5,625$ мм для труб диаметром 100 и

75 мм при $P_6/P_5 = 1,1$. Доля площади поперечного сечения пристеночного слоя, в котором заключен газ с давлением P_6 , возрастает по отношению к общей площади сечения трубы при одинаковой высоте бифуркационной структуры с уменьшением диаметра трубы. Это обстоятельство позволяет предположить, что в трубах большего диаметра пристеночные эффекты должны сказываться на результатах измерений в меньшей степени. Величина прироста давления в области торможения потока должна существенно больше влиять на перегрев газа вблизи оси. Результаты косвенных оценок температуры газа на оси в экспериментах в несколько раз превышают максимальные оценки, полученные в расчетах даже для шероховатой трубы.

Результаты расчета параметров газа на оси трубы вследствие расширения пристеночного слоя газа

h , мм	P_6/P_5	t_0 , мкс	$t_{\text{макс}}$, мкс	Δt , мкс	$e(\Delta t / t_4)$, %	$e(P_{\text{макс}})$, %	$e(T_{\text{макс}})$, %	$\Delta T_{\text{макс}}$, К
50 мм								
1,25	1,025	27,5	32	6	18,31	3,1	0,8	8
	1,05	26,5	32,5	9	25,33	5	1,25	12,5
	1,1	26,5	32,5	7	23,29	9,6	2,32	23,2
2,5	1,025	26	32	10	23,29	4,3	1,09	10,9
	1,05	25	32,5	10,5	28	7,1	1,75	17,5
	1,1	25	32,5	8	23,29	16,7	4,06	40,6
3,75	1,025	24,5	31,5	11,5	29,33	4,9	1,24	12,4
	1,05	23,5	32,5	10,5	30,26	8,5	2	20
	1,1	23,5	31,5	9,5	27,03	20,5	5,1	51
75 мм								
1,875	1,025	42,5	48,5	8,5	15,89	3,8	1	10
	1,05	41	49	13	23,01	6,1	1,5	15
	1,1	40	50	14,5	24,78	11	2,7	27
3,75	1,025	40	48,5	13	23,42	5,2	1,3	13
	1,05	38,5	49	17	28,7	8,3	2,04	20,4
	1,1	38	49	13,5	25	18	4,5	45
5,625	1,025	37,5	48	16	28,32	5,6	1,4	14
	1,05	36,5	49,5	18,5	32,76	9,8	2,3	23
	1,1	35,5	48	15,5	27,43	21,1	5,3	53
100 мм								
2,5	1,025	57	64,5	12	15,49	4,4	1,1	11
	1,05	56	66	17,5	22,37	7	1,75	17,5
	1,1	54,5	67,5	20,5	26,28	12	2,9	29
5	1,025	54,5	65,5	17	23,33	5,8	1,47	14,7
	1,05	52,5	66,5	21	27,27	9,3	2,3	23
	1,1	51	66	19,5	25,66	18,8	4,67	46,7
7,5	1,025	51	64	21,5	27,81	6,1	1,5	15
	1,05	49,5	67	25	32,05	10,9	2,6	26
	1,1	48	64,5	21,5	29,22	21,9	5,46	54,6

Расчет может давать существенно расходящийся с экспериментом результат вследствие особенности расчета осесимметричных моделей вблизи оси, когда $1/r \rightarrow \infty$, а также в случае, когда неидеальностью газа нельзя пренебречь.

Выводы

Допустимое применение ударных труб в исследованиях химической кинетики неразбавленных водородно-воздушных смесей ограничено областью 1 на рис. 3. Однако, ввиду того, что время индукции обычно определяют по свечению из большого объема, а для труб большого диаметра доля перегретой области вблизи оси мала, наблюдаемое влияние осевого упреждения реакции в большей степени сказывается в экспериментах в трубах с малым диаметром. Это обусловлено только построением схем экспериментальных исследований. С уменьшением плотности как видимое, так и реальное влияние раннего воспламенения на оси снижается (см. рис.3) и для низких плотностей может исчезнуть вообще. Для высоких плотностей область времен индукции, не подверженных влиянию реакции вблизи оси, составляет величину до 100 мкс. Отсутствие загиба кривой времени индукции при средних и низких температурах не свидетельствует об отсутствии эффекта поджата газа вблизи оси, так как это может зависеть и от построения экспериментального исследования. Возникновения раннего воспламенения на оси не может быть объяснено при помощи оценки влияния на поджатие газа вблизи оси за счет расширения газа из области торможения потока бифуркационной структуры. Существенное охлаждение газа у стенки на расстоянии до стенки 8,5 мм, где оканчивается пристеночное оптическое окно, не происходит, из-за небольшой высоты пограничного слоя вблизи фронта падающей ударной волны, поэтому необходимо рассматривать именно вариант перегрева газа вблизи оси трубы.

Литература

1. Pang G.A., Davidson D.F., Hanson R.K. Experimental study and modeling of shock tube ignition delay times for hydrogen–oxygen–argon mixtures at low temperatures // *Proc. Combust. Inst.* 2009. Vol. 32. Pp. 181–188.
2. Medvedev S.P., Gel'fand B.E., Agafonov G.L., Khomik S.V., Ignition delay in hydrogen-air and syngas-air mixtures: Experimental data interpretation via flame propagation // *Combustion and Flame*. 2010. Vol. 157. Pp. 1436–1438.
3. Daru V., Tenaud C. Numerical simulation of the viscous shock tube problem by using a high resolution monotonicity-preserving scheme // *Computers & Fluids*. 2009. Vol. 38. Pp. 664–667.
4. Daru V., Tenaud C. Evaluation of TVD high resolution scheme for unsteady viscous shocked flows // *Computers & Fluids*. 2001. Vol. 30. Pp. 89–113.
5. Yamashita H., Kasahara J., Sugiyama Y., Matsuo A. Visualization study of ignition modes behind bifurcated reflected shock waves // *Combust. Flame*. 2012. Vol. 159 (9). Pp. 2954–2966.
6. Ihme M., Sun Y., Deiterding R. Detailed Simulations of Shock-Bifurcation and Ignition of an Argon-diluted Hydrogen/Oxygen Mixture in a Shock Tube // *AIAA Paper* 2013-0538. 2013.
7. Penyazkov O., Skilandz A. Bifurcation parameters of a reflected shock wave in cylindrical channels of different roughnesses // *Shock Wave*. 2017. Vol. 28 (2). Pp. 299–309. doi.org/10.1007/s00193-017-0739-3.

УДК 532.517.4

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАЖИГАНИЯ ЧАСТИЦЫ ДРЕВЕСНОУГОЛЬНОГО ТОПЛИВА, ВЫПОЛНЕННОЙ В ВИДЕ ПЕЛЛЕТЫ**С.В. Сыродой¹, Г.В. Кузнецов¹, М.В. Пурин¹, Вл.В. Саломатов²**¹ ФГАОУ ВО НИ Томский политехнический университет, Томск, Россия² ФГБУН Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе, Новосибирск, Россия

Актуальными проблемами мирового сообщества в настоящее время являются задачи минимизации отходов промышленных производств всех отраслей [1] и переработка таких отходов, скопившихся на полигонах и в хранилищах [2]. По данным [3] только отходы лесопиления и деревопереработки, скопившиеся на территории России к настоящему времени, увеличиваются более чем на 40 млн тонн в год. При этом древесная биомасса в любом состоянии представляет собой топливо, которое можно использовать в результате сжигания. Наибольший интерес для практического использования представляет технология пеллетирования диспергированных отходов лесопиления. Цель настоящей работы – обоснование эколого-эффективной и экономически выгодной технологии утилизации отходов лесоперерабатывающих отраслей промышленности в результате сжигания топливных смесей на основе каменного угля и древесной биомассы путем экспериментальных и теоретических исследований процессов зажигания пеллет таких топливных смесей.

На рис. 1 приведены зависимости времен задержки зажигания от концентрации древесины в смесевом топливе типа уголь/биомасса. Хорошо видно влияние доли древесной компоненты на времена задержки зажигания пеллет на основе каменного угля марки Т и сосновых опилок. Исследования, проведенные при температуре ниже 600 °С, выявили отсутствие условий устойчивого зажигания пеллет смесевых топлив. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что отходы лесопиления являются добавкой, существенно интенсифицирующей процесс зажигания смесевых топлив вследствие физико-химических взаимодействий основных компонентов пиролиза в условиях интенсивного нагрева.

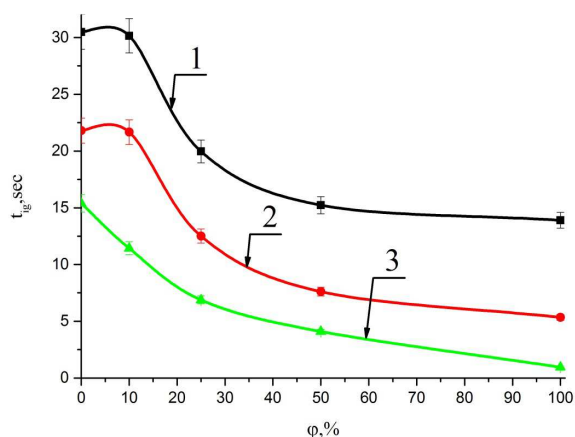


Рис. 1. Зависимость времени задержки зажигания пеллет смесевых топлив на основе угля марки Т от концентрации древесной компоненты при температурах: 1 – 600 °С; 2 – 700 °С; 3 – 800 °С

Литература

1. World-Energy-Issues-Monitor/Registered in England and Wales // Published by the World Energy Council. 2017.
2. Coal Information: Overview (2017 edition) / Energy Efficiency Indicators Highlights. 2017.
3. Фридланд В.С., Лившиц И.М. Твердые бытовые отходы как возобновляемый ресурс: европейский опыт // Теплоэнергетика. 2011. № 1. С. 72–77.

УДК 541.124

ИЗУЧЕНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ЛАМИНАРНОМ ПЛАМЕНИ ВОДОРОДНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ

А.М. Тереза, Г.Л. Агафонов, Э.К. Андержанов, А.С. Бетев, С.П. Медведев,
С.В. Хомик, Т.Т. Черепанова

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН,
Москва, Россия

Исследования распространения пламени в смесях водорода с воздухом обусловлены развитием водородной энергетики и решением технологических проблем, которые с ней связаны. Если оптимизация процессов горения касается смесей, близких к стехиометрическому составу водород–воздух, то проблемы пожаровзрывобезопасности относятся к смесям, близким к концентрационным пределам воспламенения. В данной работе с помощью численного моделирования исследована кинетика ламинарных пламен в бедных (12–15%), богатой (80%) и околостехиометрической (29,6%) смесях водорода с воздухом. Расчеты проводились с помощью программного модуля PREMIX программного комплекса CHEMKIN-Pro [1]. Исследовалось распространение пламени по смесям при нормальных начальных условиях и повышенном давлении 6 атм, являющемся предельно допустимым значением для аварийных ситуаций на АЭС. Установлено, что для всех изученных бедных смесей наблюдается характерная симметричная инверсия кинетического механизма в сечении, соответствующем максимальному градиенту температуры в пламени (сечение А на рис. 1). При этом температура кроссовера (точка, соответствующая конкуренции реакций разветвления и обрыва цепи $\text{H} + \text{O}_2$, сечение С) лежит выше точки максимального градиента температуры (рис. 1). При стехиометрии инверсия кинетического механизма не наблюдается (рис. 2). В богатой смеси наблюдается несимметричная инверсия (рис. 3). Выявлены основные реакции, определяющие нормальную скорость пламени при различных значениях коэффициента избытка горючего ϕ и давления. Показано, что изменение констант скорости ведущих реакций изменяет профиль температуры пламени, при этом само значение температуры в сечении ее максимального градиента остается неизменным.

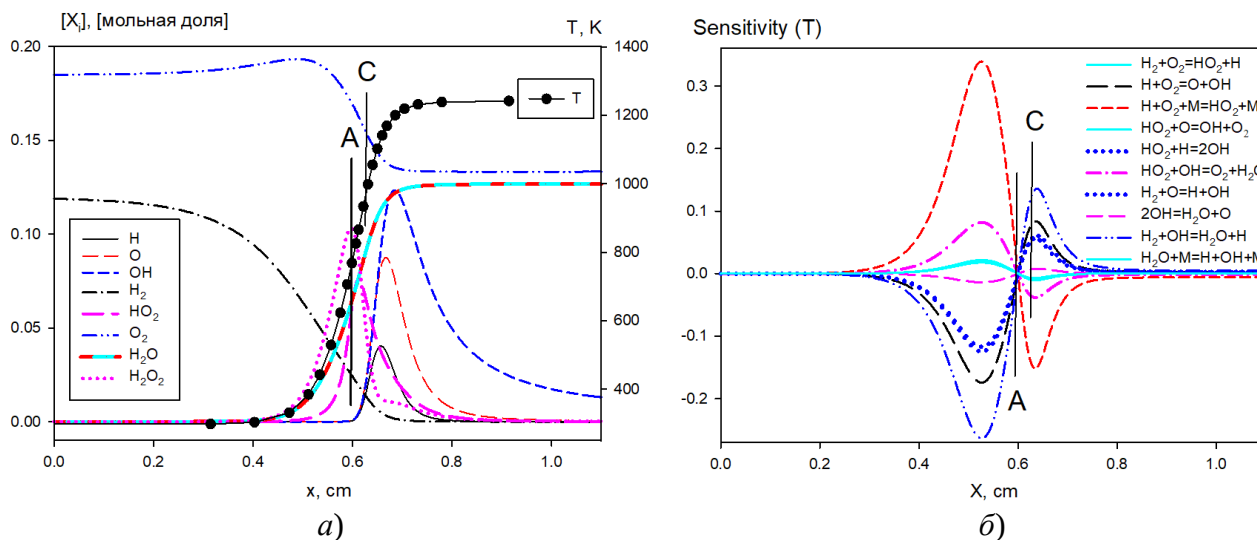


Рис. 1. Профили концентраций X_i и T (а) и анализ чувствительности (б) основных реакций, определяющих тепловыделение в пламени, распространяющемся по смеси 12% H_2 в воздухе при нормальных условиях. Масштаб для (а): $[\text{H}]$, $[\text{O}]$, $[\text{OH}] \times 200$; $[\text{HO}_2]$, $[\text{H}_2\text{O}_2] \times 1000$

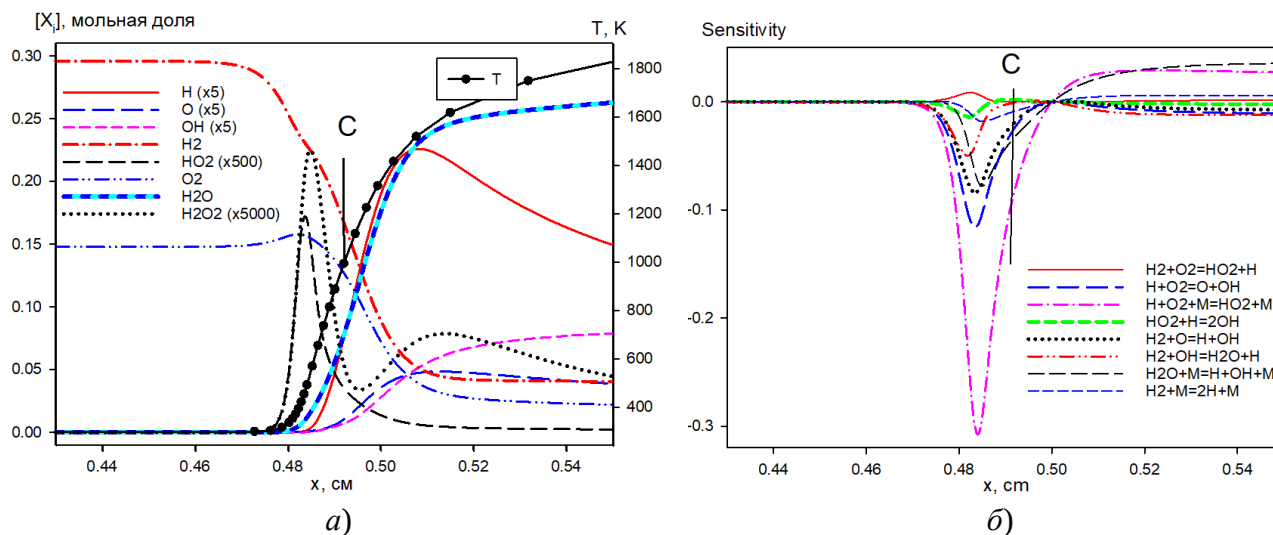


Рис. 2. Профили концентраций X_i и T (a) и анализ чувствительности (б) основных реакций, определяющих тепловыделение в пламени, распространяющемся по стехиометрической смеси H_2 –воздух при нормальных условиях

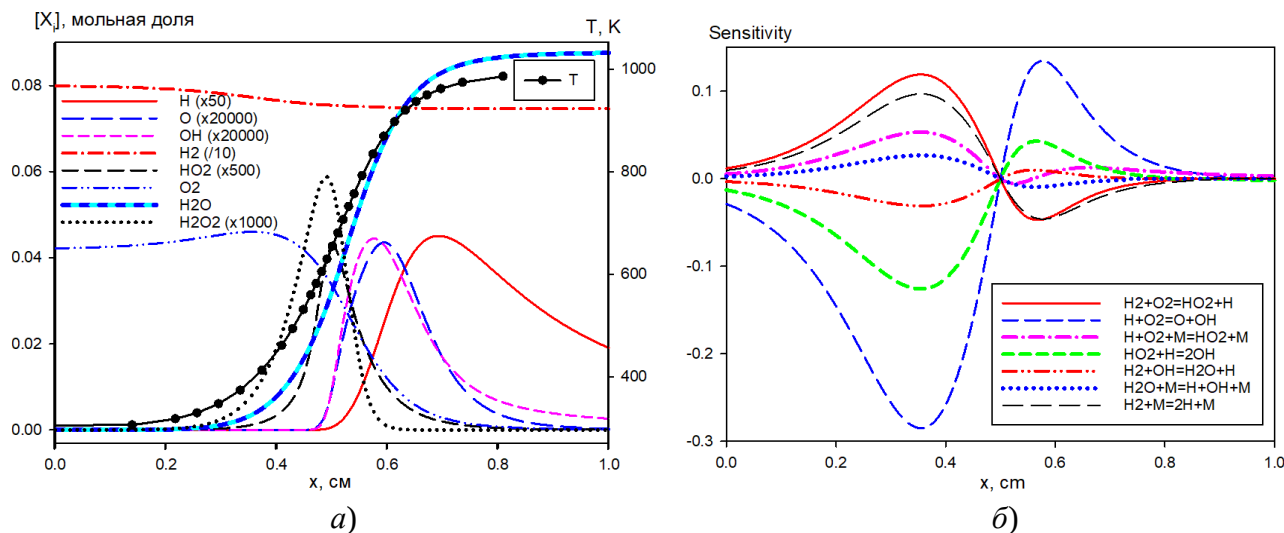


Рис. 3. Профили концентраций X_i и T (a) и анализ чувствительности (б) основных реакций, определяющих тепловыделение в пламени, распространяющемся по смеси 80% H_2 в воздухе при нормальных условиях

Литература

1. CHEMKIN-Pro 15112, Reaction Design, CK-TUT- 10112-1112-UG-1 (San Diego, 2011).

УДК 533; 004.4:004.9

МОДЕЛЬ ОЦЕНКИ ОПАСНОСТИ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ГОРЮЧИХ СМЕСЕЙ НА ОСНОВЕ СКОРОСТИ ЭНЕРГОВЫДЕЛЕНИЯ

А.В. Тетерев, И.М. Козлов, Н.И. Мисюченко, Л.В. Рудак

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

Возгорание и взрыв водорода в контайнменте АЭС с водоохлаждаемым ядерным реактором возможны лишь при аварии, в результате которой происходит разрушение активной зоны. Причиной подобных аварий является нарушение теплосъема, вызванного значительной потерей теплоносителя первого контура вследствие внезапного выхода из строя главного циркуляционного насоса или аналогичных разрушений, или отказов оборудования, что приводит к недопустимому разогреву и возможному разрушению конструктивных элементов ядерного реактора [1].

При нарушении целостности реактора концентрация водорода может достигать 20 об. %, а концентрация пара колеблется от 20 до 70 об. % [2]. В зависимости от степени неоднородности полученной смеси, а также от концентраций и геометрии потока водорода и кислорода, ее горение может происходить в разных режимах. Эти режимы классифицируются в [3] следующим образом: (1) – медленная дефлаграция (SD – slowdeflagration): скорость пламени ниже, чем скорость звука; (2) – ускорение пламени (FA – Flameacceleration): скорость пламени выше скорости звука в реагентах, но ниже скорости звука в продуктах сгорания (>500 м/с); (3) – переход горения в детонацию (DDT – Deflagration-to-detonation transition): скорость пламени выше, чем скорость звука в продуктах сгорания (~ 1200 м/с).

Одним из лучших параметров, указывающих на наличие ускорения пламени (FA), оказалась степень расширения, называемая σ -параметром. В [4] показано, что существует критическое значение (σ^*), разделяющее смесь на SD-смесь и FA-смесь. Для того, чтобы смесь была DDT-смесью необходимо, чтобы ее минимальный размер был больше определенного значения, измеряемого в единицах размера детонационной ячейки, известного как параметр λ . В настоящее время в качестве инструмента, подразделяющего области в контайнменте на зоны с прогнозируемым режимом горения, чаще всего используется диаграмма Шапиро–Моффетти [5]. Поскольку не всегда доступна диаграмма Шапиро, соответствующая каким-то конкретным условиям: заданному давлению, температуре или составу воздуха, и не всегда возможно провести экспериментальное определение пределов режимов горения в конкретных условиях, например, в производственных помещениях, имеет смысл обладать инструментом, позволяющим быстро и дешево получать теоретические оценки пределов горения.

Скорость превращения химической энергии в тепловую играет решающую роль в приобретении газом кинетической энергии за счет его теплового расширения и, следовательно, в распространении пламени. Таким образом, параметр, определяющий интенсивность энерговыделения в химическом процессе, может рассматриваться как основной претендент на роль критерия в определении пределов горения газовой смеси. Принимая во внимание, что в процессе горения основная энергия выделяется в течение очень узкого интервала времени по сравнению с полной длительностью протекания реакции, можно в качестве критерия рассматривать только пиковое (максимальное) значение этой характеристики на всем временном диапазоне.

Учитывая, что этот параметр является исключительно внутренней характеристикой химического процесса горения, для его определения достаточно уметь решать систему обыкновенных дифференциальных уравнений химической кинетически, кратко опишем это решение.

Элементарные обратимые (или необратимые) реакции с участием K химических компонент могут быть представлены следующим образом:

$$\sum_{k=1}^K v'_{ki} \chi_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^K v''_{ki} \chi_k \quad (i = 1, \dots, I). \quad (1)$$

Здесь I – общее количество реакций. Стехиометрические коэффициенты v_{ki} для k -й компоненты в i -й реакции являются целыми числами, а χ_k это символ для k -й химической компоненты. Верхний индекс «'» означает прямой стехиометрический коэффициент, а индекс «''» означает стехиометрический коэффициент обратной реакции. Уравнение (1) описывает также не элементарные реакции, хотя стехиометрические коэффициенты в этом случае могут быть не целыми числами.

Переменная скорости роста q_i для i -й реакции определяется как разность скоростей прямой и обратной реакции:

$$q_i = k_{fi} \prod_{k=1}^K [X_k]^{v'_{ki}} - k_{ri} \prod_{k=1}^K [X_k]^{v''_{ki}}. \quad (2)$$

Здесь $[X_k]$ – мольная концентрация k -й компоненты, а k_{fi} и k_{ri} – константы скоростей прямой и обратной реакций соответственно. Тогда скорость изменения концентрации k -й компоненты $\dot{\omega}_k$ с учетом всех реакций, в которых она участвует, будет:

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^I (v''_{ki} - v'_{ki}) q_i = \frac{d}{dt} [X_k]. \quad (3)$$

Если в реакции для ее активации необходима третья частица (+M), как, например, в реакциях диссоциации и рекомбинации, то переменная скорости роста, определяемая выражением (2), умножается на среднюю мольную концентрацию смеси $[M]$:

$$q_i \Rightarrow [M]q_i.$$

Предполагается, что температурная зависимость констант скорости реакции подчиняется обобщенному закону Аррениуса (энергия активации разлагается в степенную последовательность от температуры):

$$k_f = AT^\beta \exp\left(-\frac{E_0 + E_1 T + E_2 T^2 + \dots}{T}\right).$$

Здесь энергия активации выражается в единицах температуры.

При описании химических процессов будем использовать массовые удельные величины Y_k , которыми удобнее пользоваться в газовой динамике. Тогда получим

$$[X_k] = \frac{\rho}{w_k} Y_k, \quad \dot{\omega}_k = \frac{d}{dt} [X_k] = \frac{\rho}{w_k} \frac{dY_k}{dt}. \quad (4)$$

Здесь w_k – молекулярный вес k -й компоненты, а плотность ρ вынесена из-под знака производной, поскольку рассматривается задача о горении в замкнутом объеме и плотность остается постоянной на протяжении всего процесса.

Подставив (4) в (3), получим систему уравнений, выражающую закон сохранения массы вещества при химических превращениях в следующем общем виде:

$$\frac{dY_k}{dt} = f_k(Y_1, \dots, Y_K, T), \quad k = 1, 2, \dots, K, \quad (5)$$

причем сохранение массы вещества обеспечивается при этом тождеством:

$$\sum_{k=1}^K f_k(Y_1, \dots, Y_K, T) \equiv 0. \quad (6)$$

В отличие от обычного подхода, где закон сохранения энергии представлен в виде дифференциального уравнения по времени от температуры, будем использовать консервативную форму этого закона. Предполагая, что внешние (не химические) источники энергии отсутствуют, уравнение сохранения энергии записывается как:

$$\frac{d}{dt} u(Y_1, \dots, Y_K, T) = 0. \quad (7)$$

Здесь u – удельная внутренняя энергия рассматриваемой смеси, определяемая через известные функции:

$$u(Y_1, \dots, Y_K, T) = \sum_{k=1}^K Y_k u_k(T). \quad (8)$$

Численное решение системы дифференциальных уравнений (5)–(8) проводится с помощью одношагового полностью неявного метода.

Значение скорости энерговыделения $Q(t)$ вычисляется через рассчитанные временные зависимости параметров течения следующим образом:

$$Q = \sum_{k=1}^K w_k \dot{Y}_k u_k(T) = \rho \sum_{k=1}^K \frac{dY_k}{dt} u_k(T).$$

Здесь u_k – удельная (массовая) энтальпия k -й компоненты или в случае постоянного объема ее удельная энергия.

На рис. 1 показаны поведение максимальной скорости энерговыделения на линии стехиометрии диаграммы Шапиро–Моффетти (слева) и зависимость максимальной скорости энерговыделения от объемной доли водорода при заданных постоянных долях воды в смеси (справа).

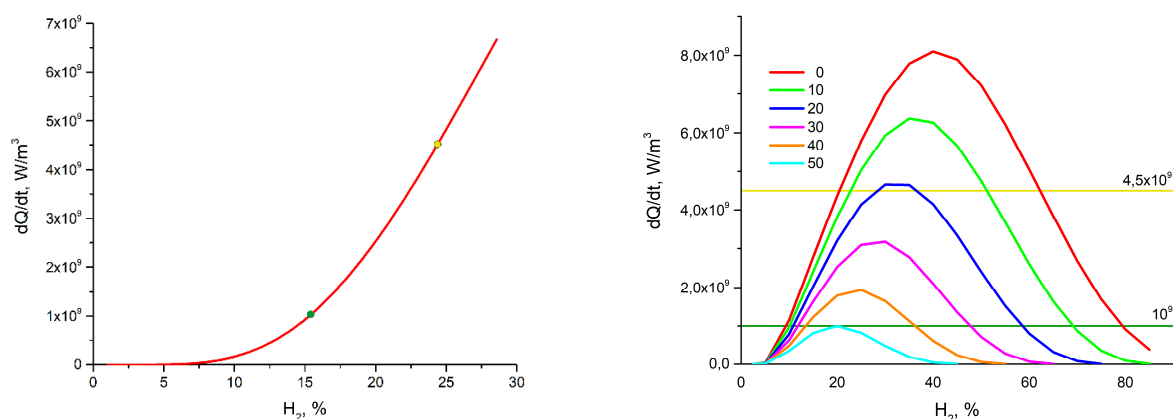


Рис. 1. Скорость энерговыделения на стехиометрической кривой (слева) и при заданной постоянной доле паров воды (справа)

Чтобы представить критерий пределов горения на диаграмме Шапиро–Моффетти, было выбрано два значения максимальной скорости энерговыделения, одно из которых соответствует пределу дефлаграции 10^9 Вт/м⁻³, а другое – детонации $4,5 \cdot 10^9$ Вт/м⁻³. Значения абсцисс пересечения ординат этих величин с кривыми на рис. 1 перенесены на треугольник диаграммы рис. 2 (слева), где они изображены кружками зелёного цвета для

предела дефлаграции и желтого цвета для предела детонации. Здесь же изображена в виде отрезка прямой, соединяющей правый нижний угол диаграммы с левой гранью треугольника, линия стехиометрии, по параметрам которой рассчитывалась максимальная скорость энерговыделения.

Представленные на рис. 2 результаты по максимальной скорости энерговыделения были рассчитаны с помощью разработанного нами кода KINETICS с использованием уравнений и констант скоростей химических реакций для горения водорода в воздухе и парах воды, взятых из документов CHEMKIN. Кинетические уравнения решались для начальной температуры газовой смеси 800 К и при постоянном давлении в 1 атм.

На рис. 2 (справа) изображена модифицированная диаграмма Шапиро–Моффетти с упрощенным видом областей пожароопасности, но зато с расширенным их количеством, что позволяет наглядно представлять степень опасности с помощью графического изображения. Обозначение выделенных зон: 1 – совершенно безопасная зона; 2 – безопасная зона; 3 – зона перехода к горению; 4 – зона горения; 5 – зона интенсивного горения; 6 – зона перехода от горения к детонации; 7 – зона детонации; 8 – зона интенсивной детонации; 9 – зона взрыва.

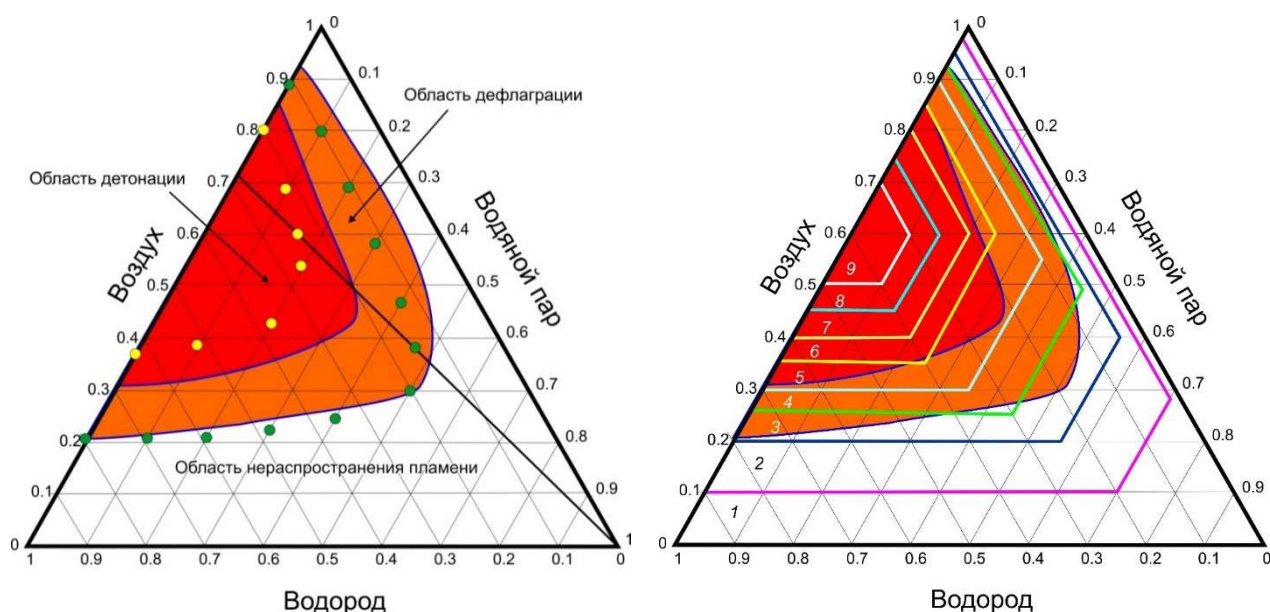


Рис. 2. Диаграмма пределов воспламенения для $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2-\text{Air}$ смеси (слева) и модифицированная девятизонная диаграмма Шапиро–Моффетти (справа)

Чтобы сравнить результаты по степени опасности воспламенения водородосодержащих смесей внутри контайнмента АЭС, полученные по разработанной нами новой модели, с подобными результатами по модифицированной диаграмме Шапиро–Моффетти, была разработана упрощенная методика заполнения контайнмента АЭС водородом и парами воды с заданным распределением температуры и при заданном постоянном давлении. Суть этой методики заключается в следующем. В области контайнмента АЭС, который пока представляется в виде параллелепипеда с непроницаемыми стенками и объемом в 70 % от истинного объема, задаются две точки, одна из которых является источником воды, а вторая – источником водорода. Поскольку поступление паров гораздо интенсивнее и больше, то полагается, что воздух в этой точке источника имеет минимальную плотность, которая увеличивается в любом направлении от нее по линейному закону. Аналогично по такому же закону плотность водорода понижается от точки его источника, в которой задается его максимальная плотность. При распределении воздуха сохраняется его исходная масса, а масса поступившего водорода является вводимой величиной. Плотность паров воды задается последней, исходя из того, чтобы в любой точке пространства контайнмента давление

составляло величину, задаваемую заранее. Это чрезвычайно упрощенная модель, однако для сопоставления различных методик вполне достаточная.

Слева на рис. 3 показаны результаты по степени опасности, максимальное значение которой достигало в этом заданном распределении компонент смеси 6, полученные по диаграмме, изображенной на рис. 2. Для наглядности приведены прореженные через одну зоны опасности. Справа на рис. 3 представлены результаты по степени пожароопасности, полученные по новой методике, основанной на максимальной скорости энерговыделения при горении образовавшейся горючей смеси. Видно, что в этом случае диапазон изменения исследуемой величины гораздо шире, чем при диаграммном подходе, и это позволяет значительно информативнее трактовать степень опасности водородно-воздушных смесей, возникающих при тяжелых запроектных авариях на АЭС.

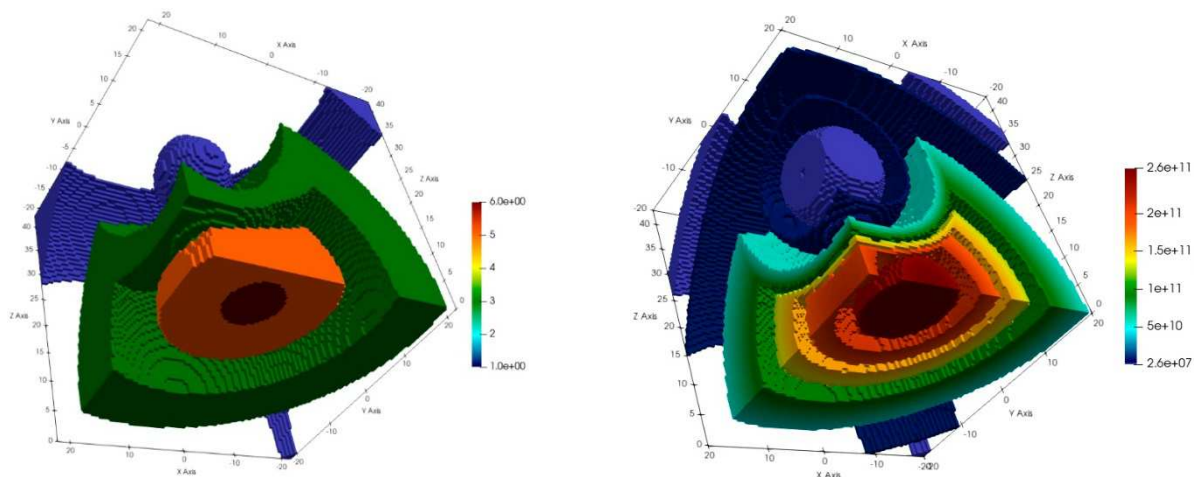


Рис. 3. Степень опасности горения и детонации по модифицированной диаграмме Шапиро–Моффетти (слева) и по новой методике (справа)

Несмотря на существенное различие в количественном диапазоне изменения степени опасности по сравниваемым методикам, их хорошее совпадение по пространственному распределению, что следует из сопоставления приведенных на рис. 3 результатов, говорит о явной обоснованности предлагаемой методики.

К настоящему моменту просматривается следующая схема компьютерного моделирования запроектных аварий, в результате которых возможно возникновение ситуаций возгорания водородосодержащих смесей.

Во-первых, поскольку интенсивное образование водорода происходит при температурах порядка 1000 К и выше, что означает перегрев активной зоны ядерного реактора, будем рассматривать только аварии с потерей теплоносителя первого контура, либо с аварийным засорением системы охлаждения внутри активной зоны, что приводит к перегреву, а затем и к расплавлению части ТВЭЛов.

Во-вторых, при подобных авариях происходит образование большого количества водяных паров. Существует множество работ (см., например, [1]), в которых парообразование рассматривается от возникновения зародышей парообразования. Естественно, что это представляет научный интерес, но, как нам кажется, не совсем подходит для описания аварий, которые нас интересуют.

С нашей точки зрения необходимо оценить максимально возможное количество паров и водорода, которые могут возникнуть в результате гипотетической аварии, а также минимальные их количества, для которых необходимо рассматривать возможность разгерметизации контейнмента. Так, максимально возможное количество паров само по себе может привести к повышению давления в защитной оболочке до критического значения, а с

точки зрения взрывобезопасности водородной смеси оно скорее является сдерживающим фактором, поскольку будет понижать температуру в области воспламенения.

Таким образом, в вариантах расчета предполагаемой аварии следует по возможности учитывать следующие факторы:

- Причину, повлекшую аварию из предполагаемого списка возможных ситуаций, например, разрыв трубопроводов первого контура теплоносителя, засорение каналов теплоносителя в зоне реактора.
- Пространственное расположение аварийной зоны с помощью названия объекта, например, главный циркуляционный насос № 3, или с помощью непосредственно расстояния вдоль трубопровода с отсчетом от входа в реакторную установку или от ГЦН.
- Максимальное количество паров, возможное при такого рода аварии, и временная зависимость парообразования за весь цикл аварии.
- Максимальное количество выделяющегося водорода, возможное при такого рода аварии, и временная зависимость парообразования за цикл аварии.
- Интересующие моменты времени от начала аварии, в которые необходим полный вывод всех параметров в контейнменте.
- Возможные места возгорания водородной смеси, которые выбираются на основе анализа выводимой информации.

Кроме того, предполагается использовать температурное поле в контейнменте при мгновенном сгорании всей водородовоздушной смеси. Подобное поле температур позволит оценить наиболее опасные места в защищенной оболочке и именно в них выбирать точки возгорания. Для прогноза горения водородосодержащей среды планируется использовать критериальные подходы, аналогичные применяемым в [6], обоснование которых содержится в работах С.Б. Дорофеева [4, 7, 8].

Литература

1. Ключников А.А., Шараевский И.Г., Фиалко Н.М. и др. Теплофизика аварий ядерных реакторов. Чернобыль: Ин-т проблем безопасности АЭС НАН Украины, 2012. – 528 с.
2. Breitung W. The analysis of hydrogen behaviour in severe accidents. Ed. A. Alonso // EURO-COURSE-97: Analysis of Severe Accidents in Light Water Reactors, Lecture 11, F2I2, EC-Nuclear Fission Safety Programme (1994–1998). 1997.
3. CSNI, 2000. State of Art Report on Flame Acceleration and Deflagration to Detonation Transition in Nuclear Safety. CSNI Report, OECD Nuclear Energy Agency, Nuclear Safety, NEA/CSNI/R (2000) 7.
4. Dorofeev S.B., Kuznetsov M.S., Alekseev V.I., Efimenko A.A., Breitung W. Evaluation of limits for effective flame acceleration in hydrogen mixtures // J. Loss Prevent. Process Ind. 2001. Vol. 4. Issue 6. Pp. 583–589.
5. Shapiro Z.M., Moffette T.R., Hydrogen flammability data and application to PWR loss of coolant accident. 1957. WAPD-SC-545, Bettis Plant.
6. Безлепкин В.В., Капица Д.В., Котов В.В., Шурыгина Н.Ю., Яшкин А.В. Трехмерный расчет горения водородосодержащих паровоздушных смесей в рамках обоснования безопасности АЭС с ВВЭР // Сб. тр. 10-й Междунар. науч.-техн. конф. «Обеспечение безопасности АЭС с ВВЭР». Подольск, 2017. С. 1–11.
7. Dorofeev S.B., Kotchourko A.S., Chaivanov B.B. Detonation onset conditions in spatially non-uniform combustible mixtures. // Proc. of Sixth Intern. Sympos. on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industries. 1989. Vol. 4. Pp. 221–229.
8. Dorofeev S.B., Efimenko A.A., Bezmelnitsin A.V. Analysis and Evaluation of DDT Criteria for Severe Accidents Conditions. KIM Report. Final. 1996.

УДК 532.517.4

ГОРЕНИЕ УГЛЕВОДОРОДНОГО ТОПЛИВА В СЛАБОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ**А.В. Тупикин, В.М. Дулин**

Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск, Россия

Пламена углеводородных составов имеют значительные концентрации носителей зарядов ($\sim 10^{12} \text{ см}^{-3}$), обеспечиваемые реакциями хемоионизации [1–3], поэтому такие фронты горения обладают сильной чувствительностью к воздействию внешнего электрического поля. Электрические поля, которые не оказывают значительного влияния на кинетику химических реакций, называют слабыми. При этом считается, что ведущим физическим механизмом является «ионный ветер». При горении углеводородного топлива в воздухе условие, определяющее электрическое поле как «слабое», записывается следующим образом: $E[\text{В/см}]/P[\text{тор}] < 2$, где E – напряженность, P – давление. Другими словами, на длине свободного пробега электроны не успевают набрать энергию, достаточную для перевода молекул азота в возбужденное состояние при столкновении. Другие возможные пути изменения кинетики реакций имеют еще более высокий энергетический порог. На сегодня по-прежнему остаются актуальными вопросы, связанные с расширением пределов стабилизации пламени и повышением эффективности сжигания топлив. Рассматриваются различные масштабы пламен от малоразмерных жидкостно-топливных [4] до крупномасштабных газовых [5]. Отмечается, что в диффузионном режиме особую роль играет смешение, на которое активно влияет внешнее электрическое поле. При этом в газофазных крупномасштабных пламенах пульсации скорости коррелируют с изменениями в величине протекающего тока. Но в любом случае наложение внешнего электрического поля ведет к увеличению полноты сгорания топлива, о чем свидетельствует снижение количества сажи в продуктах сгорания. В более сложных конфигурациях, когда кроме факела присутствуют поверхности, ограничивающие область горения, в продуктах сгорания может снижаться не только доля сажи, но и количество СО [6]. Такая постановка задачи позволила найти решение технических проблем, связанных с выбросом зольных частиц в дымовых газах энергетических установок. В [7] представлены результаты повышения эффективности улавливания частиц летучей золы в фильтрах за счет предварительной зарядки частиц (электрический агломератор), общая эффективность сбора золы улучшилась с 54% до 86% по сравнению с условиями без агломератора. Полученный эффект напрямую связывают с возникновением отрицательного ионного ветра, т. к. наряду с положительными ионами H_3O^+ образуется значительное количество отрицательных ионов O_2^- [8]. В расчетно-теоретических исследованиях [9] учитывалось влияние как положительных, так и отрицательных ионов. Численное моделирование ламинарного диффузионного пламени, на которое воздействует постоянное электрическое поле, было выполнено с использованием многокомпонентного переноса и детального химического механизма горения метан–воздух, который включал преобразования с шестью различными носителями заряда. Было показано, что при взаимодействии поля с пламенем происходит локальная деформация фронта горения и изменяются скорости выделения энергии, из-за чего наблюдается увеличение локальной скорости горения. Хотя результаты расчетов лишь качественно согласуются с известными экспериментальными данными, в экспериментах [10, 11] применение бесконтактных методов, таких как PIV (Particle Image Velocimetry), PLIF (Planar Laser Induced Fluorescence) и спектроскопической съемки на длине излучения радикалов OH^* , CH^* и C_2^* , дало подтверждение локализации воздействия поля на области горения. С другой стороны, авторы работы [12] утверждают, что механизм увеличения скорости распространения пламени в электрических полях далеко не так прост и практически не изучен. Согласно результатам их исследований в случае переменных электрических полей зона реакции может

рассматриваться как цельный положительно заряженный объем в реакционной среде. При этом важной временной характеристикой является время жизни объемного заряда после отключения поля, в некотором смысле релаксационный процесс в факеле. Отметим, что в реакции пламени на включение/выключение электрического поля действительно наблюдается инерция, а смещение положения фронта в импульсном режиме может быть больше, чем при постоянном поле [13]. И все же гипотеза о том, что под действием электрических сил ламинарное пламя деформируется и меняется степень растяжения фронта горения (критерий Климова–Карловица) [14], выглядит более обоснованной.

Таким образом, вопрос описания механизма воздействия поля на пламя остается до конца не определенным. Для изучения влияния электрических сил на горение в работе используется ламинарное пламя горелки Бунзена как наиболее простое в реализации и описании.

На рис. 1 представлена схема эксперимента. Пламя типа Бунзена (1), стабилизировалось на кромке сопла, размещенного между пластинами (2), на которые подано напряжение от источника питания (3) до $U = 3,5$ кВ. Напряженность поля соответствовала условиям слабого электрического поля. Пластины имели прорезы для оптической системы регистрации полей скорости с помощью PIV-системы (4–7). Для регистрации фронта горения применялась съемка ПЗС камерой с усилителем изображения (8) на длине волны излучения радикала OH^* . Исследования проводились на лабораторной горелке аксиальной симметрии, на выходе которой устанавливалось течение Паузейля бедной гомогенной топливно-воздушной смеси (см. рис. 1, I), либо реализовывался режим неустановившегося течения с «ударным профилем скорости» (см. рис. 1, II).

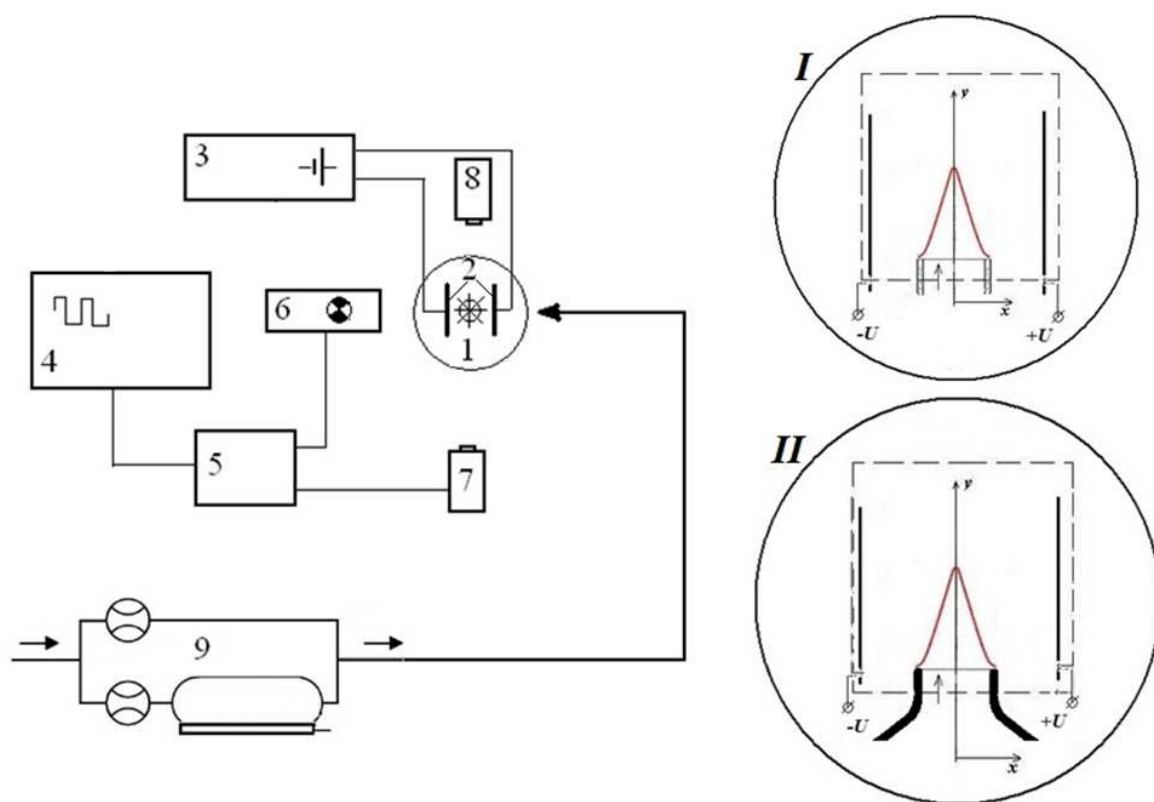


Рис. 1. Схема эксперимента: 1 – пламя Бунзена; 2 – электроды; 3 – источник напряжения; 4 – генератор импульсов; 5 – синхронизатор; 6 – двоянный лазер; 7 и 8 – ПЗС-камеры; 9 – система подготовки и подачи топливно-воздушной смеси

Как правило, скорость распространения фронта гомогенного ламинарного пламени можно представить функцией физико-химических свойств смеси $u_n = f(\alpha, P, T)$, где состав определен через α – коэффициент избытка воздуха, P – давление, T – температура, которая практически не зависит от газодинамики течения. На рис. 2а приведена зависимость $u_n = f(\alpha)$ для предварительно перемешанной метано-воздушной смеси при нормальных условиях (атмосферное давление и комнатная температура 20 °С) из [15, 16].

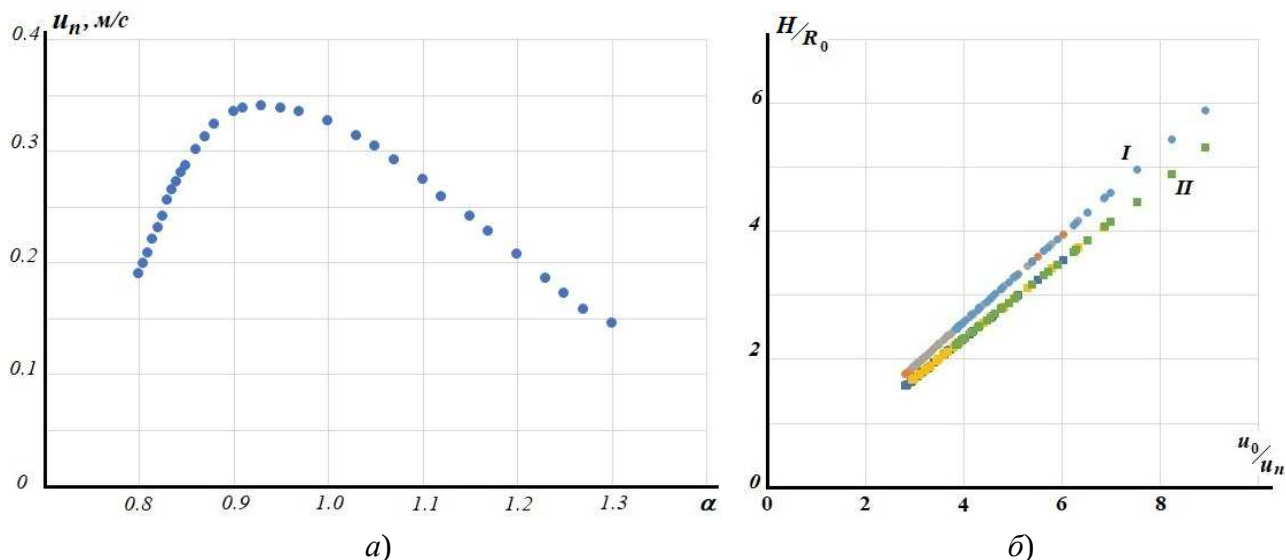


Рис. 2. Скорость распространения ламинарного фронта метано-воздушного пламени (а) и высота пламени Бунзена (б): I – течение Пуазейля, II – с «ударным профилем скорости»

Скорость распространения гомогенного ламинарного пламени определяется как нормальная к фронту горения составляющая скорости потока $u_n = (\vec{u}, \vec{n})$. Если положение пламени описывается гладкой дифференцируемой функцией $y = L(x)$, то в точке (x, y) вектор нормали к поверхности будет равен

$$\vec{n} = (n_x, n_y) = \left(-\frac{L'(x)}{\sqrt{L'(x)^2 + 1}}, \frac{1}{\sqrt{L'(x)^2 + 1}} \right).$$

В условиях, когда модуль скорости распространения пламени постоянен по пространству, можно записать

$$u_n = (\vec{u}, \vec{n}) = \left(-\frac{u_x L'(x)}{\sqrt{L'(x)^2 + 1}} + \frac{u_y}{\sqrt{L'(x)^2 + 1}} \right) = \text{const}.$$

Отсюда для построения фронта пламени $L(x)$ по известному распределению скорости холодной смеси $\vec{u} = [u_x, u_y]$ необходимо решить дифференциальное уравнение

$$L'(x)^2 + 2 \left(\frac{u_x u_y}{u_n^2} \frac{1}{(1 - u_x^2/u_n^2)} \right) L'(x) - \left(\frac{u_y^2/u_n^2 - 1}{1 - u_x^2/u_n^2} \right) = 0. \quad (1)$$

В случае ламинарного пламени горелки Бунзена (с радиусом R_0) можно считать, что поперечная компонента скорости $u_x \approx 0$, при этом

$$u_y(x) = 2u_0 \left(1 - \frac{x^2}{R_0^2} \right) - \text{для установившегося течения Пуазейля,}$$

$$u_y(x) = \begin{cases} u = u_0 & \text{при } x/R_0 < 1; \\ u = 0 & \text{при } x/R_0 \geq 1, \end{cases} - \text{для истечения «с ударным профилем скорости»,}$$

где u_0 – средняя по расходу скорость. Так как $x = 0$ соответствует вершине пламени, то при решении уравнения (1) выбирается корень с отрицательным значением и тогда

$$L(x) = L(0) - \int_0^x \left(\sqrt{\frac{u_y^2}{u_n^2} - 1} \right) dx. \quad (2)$$

Высота пламени Бунзена

$$H = L(0) = \int_0^{R_0} \left(\sqrt{\frac{u_y^2}{u_n^2} - 1} \right) dx.$$

На рис. 2б приведены расчеты высоты пламени в зависимости от скорости истечения для распределений скорости на срезе горелки: течение Пуазейля и с «ударным профилем скорости». На рис. 3 сравнение расчетного и экспериментального положений фронта пламени дает хорошее согласование.

Следует отметить особенности представляемых данных:

1. Для течения Пуазейля на краю горелки решение уравнения (2) уходит в область комплексных чисел, т. к. подкоренное выражение становится отрицательным, т. е. необходимо учитывать, что область расчета ограничивается значениями продольной координаты

$$\frac{x}{R_0} \leq \sqrt{1 - \frac{u_n^2}{2u_0^2}}.$$

С физической точки зрения это означает, что $u_n \neq \text{const}$, т. к. уменьшается из-за потерь тепла, а с расчетной – исключение области не удовлетворяющих условий значений x , и, соответственно, уменьшение поверхности пламени для течения Пуазейля в сравнении с «ударным профилем скорости» и экспериментом.

2. При $x \rightarrow 0$ постоянство скорости распространения пламени также не выполняется из-за значительной кривизны фронта горения. Зависимость от радиуса кривизны фронта представлена в работе [17]:

$$u_n = u_n^0 \left(1 + \frac{\mu \delta_{th}}{R_F} \right),$$

где u_n^0 – скорость распространения плоского фронта пламени, δ_{th} – толщина пламени, R_F – радиус кривизны фронта пламени, μ – коэффициент, связанный с влиянием

избирательной диффузии. Таким образом, в расчете появляется дополнительная невязка, отличающаяся в решениях для течений Пуазейля и с «ударным профилем скорости».

Поэтому отличие в высотах пламени для разных профилей скорости на срезе горелки при сохранении состава и общего расхода (см. рис. 2б), вполне ожидаемо.

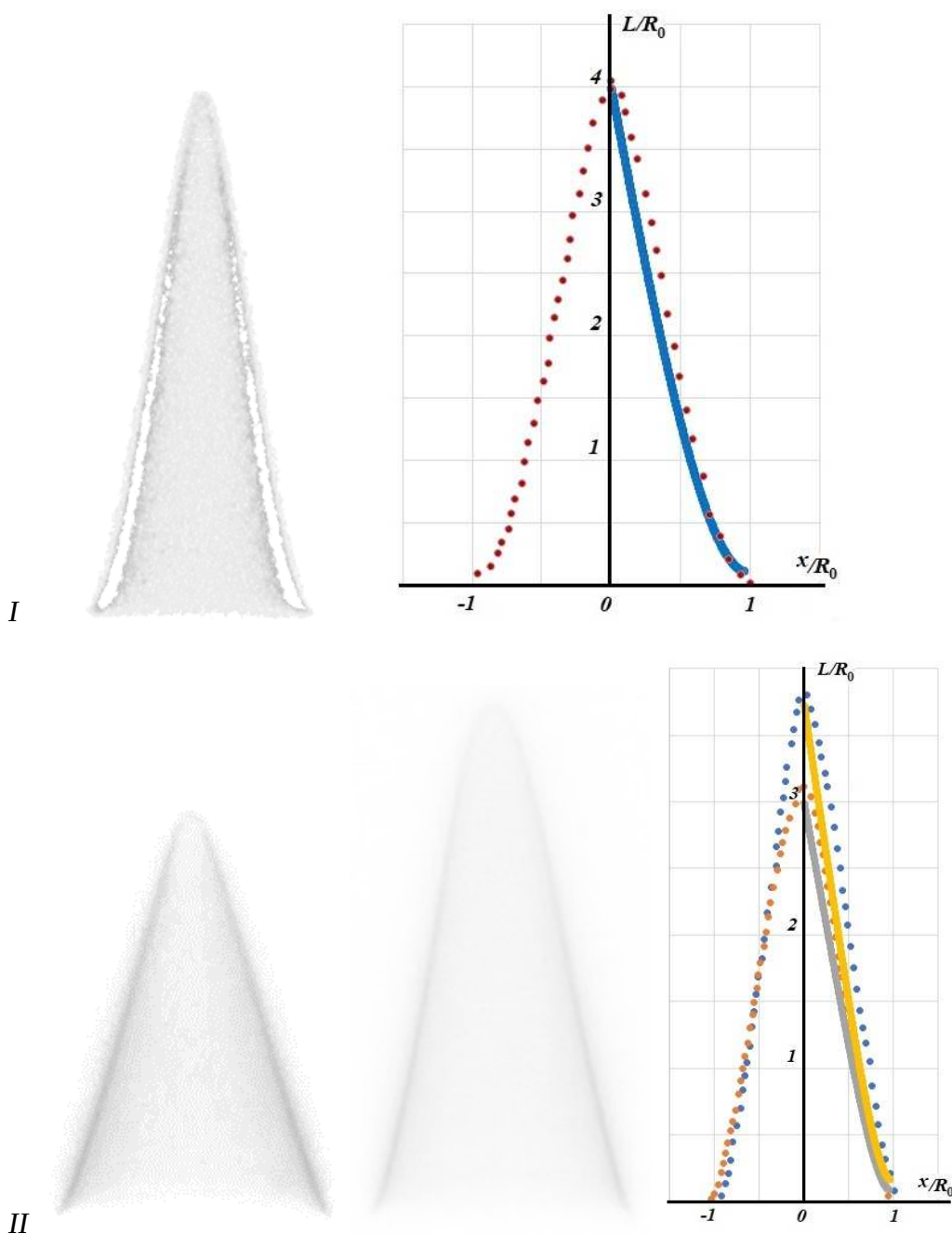


Рис. 3. Изображение пламени Бунзена и положение фронта горения (I – течение Пуазейля, II – течение с «ударным профилем скорости»): точки – эксперимент; линии – расчет

Рассмотрим пламя Бунзена, находящееся в однородном электрическом поле, направленном поперек потока. Согласно экспериментальным данным (рис. 4) вдоль линии тока компонента скорости u_y при подаче напряжения на пластины практически сохраняется, а при постоянном поле компонента u_x достаточно хорошо описывается как равноускоренное смещение в сторону катода, за исключением вершины пламени.

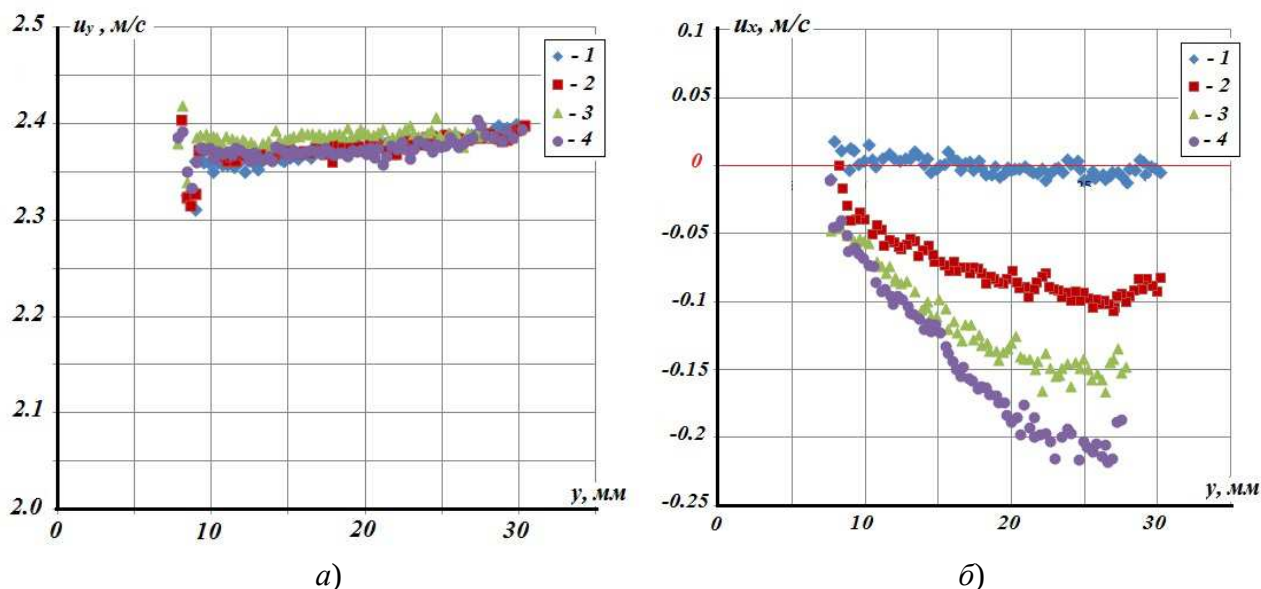


Рис. 4. Компоненты скорости (a – продольная, b – поперечная) вдоль центральной линии тока: 1 – без электрического поля; 2 – через 10 мс после включения поля; 3 – через 20 мс после включения поля; 4 – при постоянном поле

Рассмотрим положение фронта горения $L(x)$ с учетом, что $u_x \neq 0$. Параметр t определим как величину, равную отношению положения пламени к скорости u_y в точке x : $t(x) = L(x) / u_y(x_0)$, где $u_y(x_0)$ – распределение скорости на срезе горелки, а $x = x_0 + at^2/2$ и $u_x(x) = at$.

Тогда форма пламени будет описываться нелинейным дифференциальным уравнением с некоторой характеристической константой a , определяемой параметрами электрического поля:

$$L'(x) = - \left(\frac{1}{(1 - [aL(x)]^2 / u_y^2(x_0) u_n^2)} \right) \left(\frac{aL(x)}{u_n^2} + \sqrt{\frac{u_y^2(x_0)}{u_n^2} + \frac{[aL(x)]^2}{u_y^2(x_0) u_n^2}} - 1 \right). \quad (3)$$

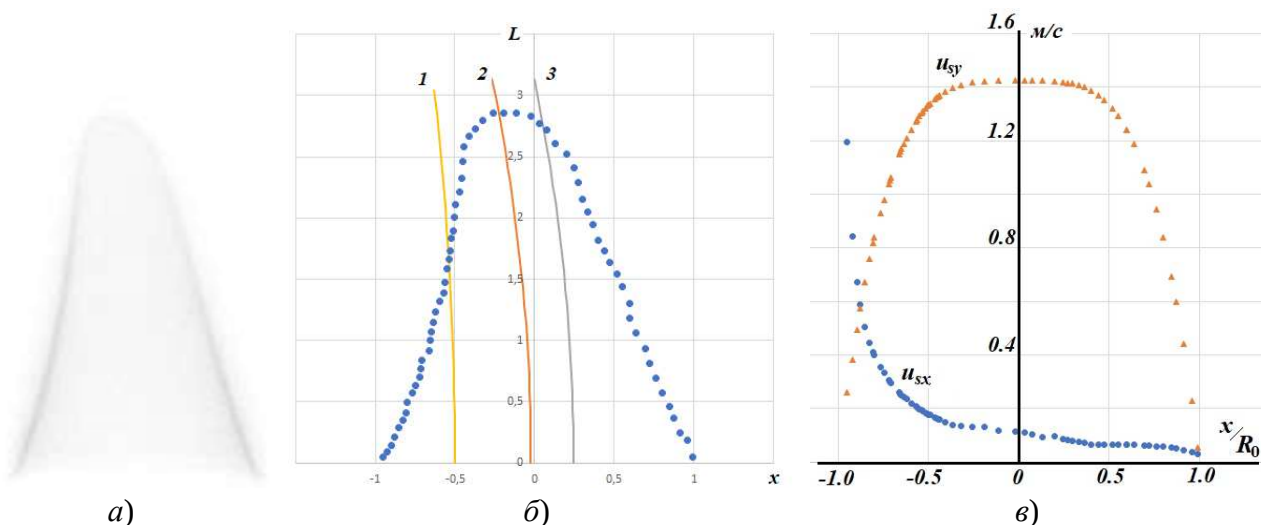


Рис. 5. Фронт пламени Бунзена в электрическом поле (a), пример графического расчета продольной компоненты скорости на фронте (b) и распределение скорости вдоль фронта пламени (c).

Имея форму фронта пламени из эксперимента (рис. 5а), можно по пересечениям с линиями тока графически разрешить задачу определения распределения скорости на фронте горения в электрическом поле. На рис. 5б пример определения точек пересечения линий тока с фронтом пламени:

- 1) $x = -0,53$, $y = 1,52$, $u_x = -0,25$ м/с и $u_y = 1,33$ м/с;
- 2) $x = -0,22$, $y = 2,85$ $u_x = -0,15$ м/с и $u_y = 1,44$ м/с;
- 3) $x = 0,06$, $y = 2,7$, $u_x = -0,01$ м/с и $u_y = 1,41$ м/с.

Распределение скорости на фронте пламени представлено на рис. 5в.

Проведены исследования воздействия слабого электрического поля на пламя горелки Бунзена, на выходе которой устанавливалось течение Паузейля, либо реализовывался режим неустановившегося течения с «ударным профилем скорости». Получены данные о полях скоростей и положении фронта горения при наложении внешнего электрического поля и в случае невозмущенного течения. При анализе результатов учитывался установленный в экспериментах факт, что скорость распространения ламинарного фронта горения остается постоянной, кроме области стабилизации и вершины пламени. Для пламени Бунзена в однородном электрическом поле, направленном поперек потока, компонента скорости по оси течения практически сохраняется, а компонента поперек потока может быть представлена как равноускоренное движение. По положению фронта пламени и профилю скорости на срезе горелки можно восстановить распределение скорости вдоль фронта и найти характеристическую константу, связанную с параметрами внешнего электрического поля.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-19-00803).

Литература

1. Colcote H.F. Mechanism of the formation of ions of flames // *Combustion & Flame*. 1957. Vol. 1. Pp. 385–403.
2. Gooding J.M., Bohme D.K. and Chung-Wai Ng. Detailed ion chemistry in methane-oxygen flames. I. Positive ions // *Combustion & Flame*. 1979. Vol. 36. Pp. 27–43.
3. Gooding J.M., Bohme D.K. and Chung-Wai Ng. Detailed ion chemistry in methane-oxygen flames. II. Negative ions // *Combustion & Flame*. 1979. Vol. 6. Pp. 45–62.
4. Luo Y., Gan Y., Jiang X. Investigation of the effect of DC electric field on a small ethanol diffusion flame // *Fuel*. 2017. Vol. 188. Pp. 621–627.
5. Gillon P., Gilard V., Idir M., Sarh B. Electric field influence on the stability and the soot particles emission of a laminar diffusion flame // *Combustion Science and Technology*. 2019. Vol. 191, № 2. Pp. 325–338.
6. Chien Y.-C., Escofet-Martin D., Dunn-Rankin D. Ion current and carbon monoxide release from an impinging methane/air coflow flame in an electric field // *Combustion & Flame*. 2019. Vol. 204. Pp. 250–259.
7. Chang Q., Zheng C., Yang Z., Luo Z., Cen K. Electric agglomeration modes of coal-fired fly-ash particles with water droplet humidification // *Fuel*. 2017. Vol. 200. Pp. 134–145.
8. Yoon S.H., Seo B., Park J., Chung S.H., Cha M.S. Edge flame propagation via parallel electric fields in nonpremixed coflow jets // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2019. Vol. 37, № 4. Pp. 5537–5544.
9. Di Renzo M., Urzay J., De Palma P., Tullio M.D., Pascasio G. The effects of incident electric fields on counterflow diffusion flames // *Combustion and Flame*. 2018. Vol. 193. Pp. 177–191.
10. Altendorfner F., Kuhl J., Zigan L., Leipertz A. Study of the influence of electric fields on flames using planar LIF and PIV techniques // *Proceedings of the Combustion Institute*. 2011. Vol. 33, № 2. Pp. 3195–3201.

11. Третьяков П.К., Тупикин А.В., Ганеев О.В., Денисова Н.В., Замашников В.В., Козорезов Ю.С. Ламинарное пропано-воздушное пламя в слабом электрическом поле // Физика горения и взрыва. 2012. Т. 48, № 2. С. 9–14.
12. Tran M.-V., Cha M.S. Time evolution of propagating nonpremixed flames in a counterflow, annular slot burner under AC electric fields // Proceedings of the Combustion Institute. 2017. Vol. 36. № 1. Pp. 1421–1430.
13. Гаранин А.Ф., Третьяков П.К., Тупикин А.В. Влияние постоянного и импульсно-периодического электрического поля на горение пропано-воздушной смеси // Физика горения и взрыва. 2008. Т. 44. № 1. С. 22–25.
14. Тупикин А.В., Замашников В.В. Растяжение ламинарного пламени в слабом электрическом поле // Физика горения и взрыва. 2020. Т. 56. № 2. С. 3–9.
15. Баев В.К., Третьяков П.К. Характерные времена горения топливовоздушных смесей // Физика горения и взрыва. 1968. Т. 4. № 3. С. 367–376.
16. Григорьев Е.Г., Колубаев Б.Д., Ерохов В.И., Зубарев А.А. Газобаллонные автомобили М.: Машиностроение, 1989. – 216 с.
17. Нестационарное распространение пламени / Под ред. Дж.Г. Маркштейна. М.: Мир, 1968. – 437 с.

УДК 533.6.011.72

РЕГУЛЯРНОЕ И МАХОВСКОЕ ОТРАЖЕНИЕ СКАЧКОВ УПЛОТНЕНИЯ С ИМПУЛЬСНЫМ ЭНЕРГОПОДВОДОМ

М.В. Чернышов, К.Э. Савелова

Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова,
Санкт-Петербург, Россия

Введение

Анализ течений с нерегулярным (маховским) отражением скачков уплотнения важен при газодинамическом конструировании и оптимизации сверхзвуковых воздухозаборников, сопловых блоков, аппаратов струйных технологий, стартовых комплексов. Согласно [1–3] разнообразные параметры течения (давления торможения, скорости, скоростные напоры и т. д.) в потоках, разделенных тангенциальным разрывом за тройной точкой маховского отражения, могут значительно различаться (при больших сверхзвуковых скоростях – в десятки раз), что может определять проектный облик газодинамических устройств. К примеру, в работах [4–6] предложена и теоретически обоснована идея нового комбинированного прямоточного реактивного двигателя. Согласно этой концепции, поток газа за отраженным скачком j_2 (в области 2 на рис. 1а, б), обладающий существенно большим давлением, чем поток за главным (маховским) скачком j_3 (в области 3), используется в термодинамическом цикле классического прямоточного воздушно-реактивного двигателя. Поток за главным скачком, обладающий значительно более высокой температурой, особенно при полете с большими сверхзвуковыми скоростями, используется в термодинамическом цикле детонационного двигателя. Для успешного разделения двух потоков за тройной точкой T маховского отражения необходимо определить высоту u_T тройной точки и форму $y(x)$ исходящего из неё тангенциального разрыва τ , а для оценки интегральных характеристик перспективного комбинированного двигателя – форму и размеры всех других газодинамических разрывов в поле течения.

Одна из первых приближенно-аналитических моделей плоского сверхзвукового течения с маховским отражением сформулирована в [7]. В рамках этой модели вполне обоснованно предполагалось, что течение в области 3 формирует так называемое «виртуальное сопло Лавалья» (“virtual nozzle”) с ускорением дозвукового течения за скачком j_3 до критической скорости ($M_3 = 1$) в наиболее узком сечении (CC' на рис. 1б). Достижение критической скорости звука совпадает с разворотом тангенциального разрыва τ в горизонтальном направлении (угол течения $\theta = 0$ в точке C) под воздействием волны разрежения ψ_4 , падающей с задней кромки клина (рис. 1а), или с границы струи (рис. 1б), или формирующейся другим способом. Однако в [7] необоснованно предполагалось, что тангенциальный разрыв τ прямолинеен, а критическое сечение «виртуального сопла» 3 соответствует точке падения первой характеристики BD волны разрежения ψ_4 , что привело к большим (50–90%) ошибкам в определении высоты тройной точки и других параметров течения. Преобразование Гриба–Рябинина к области 2 сверхзвукового течения, примененное в работе [8], позволило незначительно уточнить результаты при одновременном усложнении математической модели.

Аналитическая модель, предложенная в [9] и подробно изложенная в [10] для течений в струях и в сужающихся каналах, рассматривает область 2 как простую волну разрежения Прандтля–Майера, сопряженную с областью 3 условием равенства давлений на сторонах выпуклого вверх на отрезке TD разрыва τ [11]. Учет изменения угла θ наклона тангенциального разрыва значительно улучшает точность расчетов сверхзвуковой части течения (ошибка определения высоты тройной точки составляет величину порядка 0,5–2%

по сравнению с результатами расчетов методом характеристик). Обратный разворот разрыва τ осуществляется на конечном отрезке DC и рассчитывается, исходя из решения задачи о падении волны разрежения ψ_4 на тангенциальный разрыв.

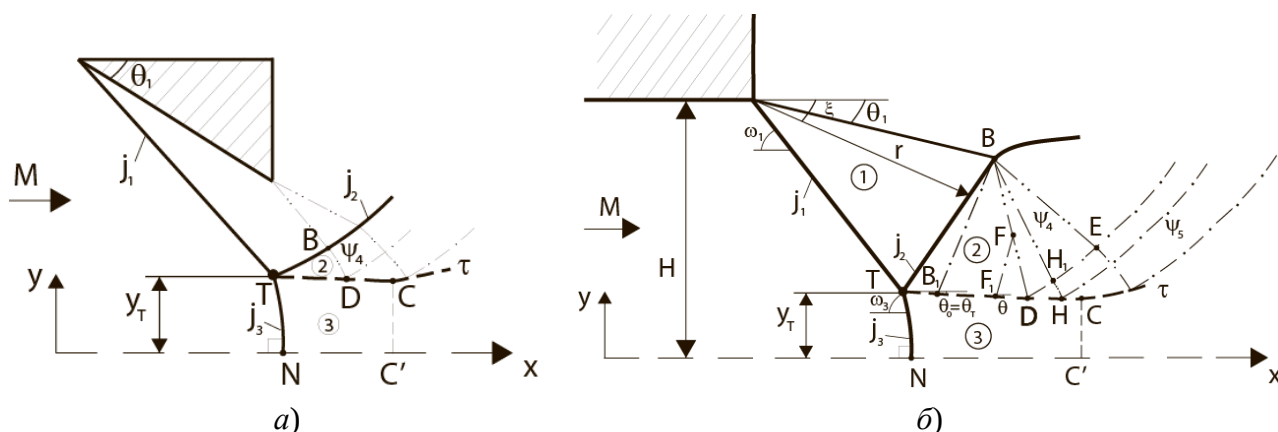


Рис. 1. Схема течения с маховским отражением в сужающемся канале между клиньями (а) и в сильноперерасширенной струе (б)

Интерес к методикам быстрой оценки параметров ударно-волновой структуры плоских, в том числе асимметричных [12–14], течений с маховским отражением возрос в последнее время [12–15], что, по-видимому, связано с развитием авиационной и ракетной техники, совершающей полёты с большими сверхзвуковыми скоростями в атмосфере.

Наличие сильных скачков уплотнения в сверхзвуковом потоке реакционноспособной газовой (топливно-воздушной) смеси способно инициировать химические реакции и детонационные эффекты. В связи с этим требуется обобщение аналитических моделей [9, 10], хорошо зарекомендовавших себя для течений совершенного нереагирующего газа, на случай изменения химического состава и импульсного энерговыделения на возникающих скачках. В [16–18] классические соотношения на скачках уплотнения обобщаются на этот случай, в частности, вместо классических ударных поляр построены «детонационные» поляры, выведены обобщенные критерии смены типа (регулярного или маховского) отражения косых скачков и проанализировано их смещение по сравнению с течением без энергоподвода и изменения химического состава.

Численные и теоретические результаты работ [16–20] не всегда напрямую применимы на практике. В частности, важные аналитические соотношения, полученные в [16], основаны на предположении наличия детонационных эффектов на падающем (j_1) и главном (j_3) скачках. В то же время заметно более высокая температура газовой смеси инициирует детонационные эффекты, в первую очередь, на главном скачке ([5, 6]; см. также рис. 2). При этом ни на падающем скачке, ни на отраженном не наблюдаются изменения химического состава и энерговыделения, что учтено в [17], где для описания течения на главном скачке введен усредненный (между сырой смесью и продуктами её сгорания) показатель адиабаты.

В работах [21, 22] приближенно-аналитическая модель течения с маховским отражением [9, 10] обобщена на случай изменения химического состава и импульсного энергоподвода на главном скачке. На примере сильноперерасширенной струи метановоздушной и кислород-водородной смесей изложен алгоритм расчёта параметров ударно-волновой структуры и показаны первичные результаты его применения, а также проведено сравнение с аналогичными данными для сильноперерасширенной струи нереагирующего газа. В представленной работе приводятся краткое изложение алгоритма применения модели [21, 22] и некоторые примеры его сопоставления с численными результатами.

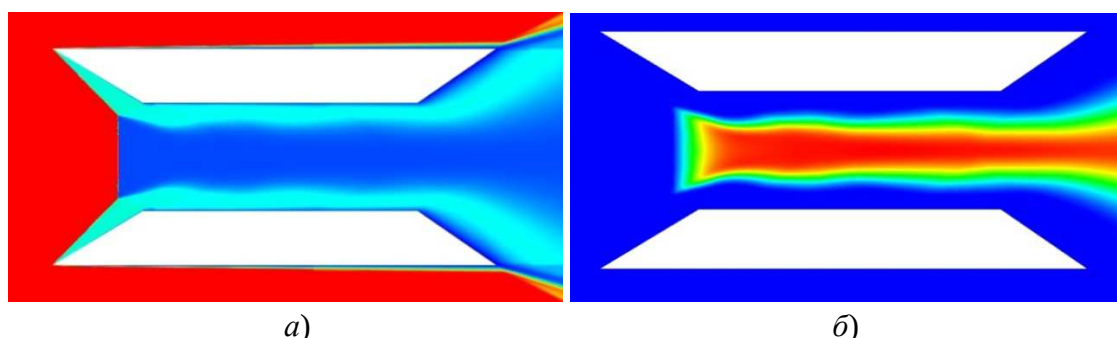


Рис. 2. Распределение полного давления (а) и массовой доли углекислого газа (б) в поле течения стехиометрической метановоздушной смеси. Число Маха невозмущенного потока $M = 6$, угол при вершине клиньев, формирующих вход в сужающийся канал, $\theta_1 = 24^\circ$. Давление торможения сверху от тангенциального разрыва заметно больше, но химические реакции с образованием CO_2 происходят только за главным скачком

1. Алгоритм применения приближенно-аналитической модели

Для быстрой оценки параметров ударно-волновой структуры сверхзвукового потока с маховским отражением, импульсным энергоподводом и изменением химического состава на главном скачке в первую очередь задаются параметры течения начальной смеси (значения числа Маха M и показателя адиабаты γ), а также показатель адиабаты γ_3 продуктов сгорания, безразмерный импульсный энергоподвод ϕ [21, 22] и интенсивность J_1 падающего скачка (отношение статических давлений на его сторонах). Далее параметры течения определяются следующим образом:

1. Задается значение y_T высоты тройной точки в первом приближении.

2. Согласно модели, изложенной в [21, 22], решается задача расчета параметров течения в окрестности тройной точки с учётом импульсного энергоподвода и изменения химического состава газа (что изменяет и его показатель адиабаты) на главном скачке. Определяются числа Маха на сторонах тангенциального разрыва и угол $\theta_0 = \theta_3$ его наклона в окрестности тройной точки, а также начальное число Маха M_{30} течения по «виртуальному соплу» 3. Параллельно могут быть определены, в частности, углы ω_1 – ω_3 наклона скачков j_1 – j_3 к вектору скорости потока перед ними.

3. Устанавливаются форма слегка искривленного (выпуклого вверх) отраженного скачка уплотнения j_2 (TB), а также координаты точки B и параметры течения за скачком в этой точке. Как правило, задача о форме отраженного скачка решается в полярных координатах (r, ξ) в соответствии с рис. 1б. Некоторое уменьшение интенсивности скачка j_2 при удалении от тройной точки объясняется воздействием течения в области 2 (до характеристики B_1B , рис. 1б), фактически являющегося простой волной разрежения Прандтля–Майера.

4. Определяются форма граничной характеристики BD (BFD , рис. 1б), тангенциального разрыва τ (на отрезке TD) и параметры течения на их сторонах (в частности, в произвольной точке F_1 (рис. 1б) на тангенциальном разрыве).

5. Решается задача о падении волны разрежения ψ_4 , вызывающем разворот тангенциального разрыва τ на участке DC (DHC , рис. 1б). Если обнаруживается, что критическая скорость течения в области 3 достигается до горизонтального разворота разрыва, то предлагаемая высота y_T недостаточна, в противном случае – избыточна. При этом расчёт параметров волны ψ_5 , отраженной от разрыва τ и располагающейся за характеристикой DH_1E , не является обязательным.

б) По результатам проведенной итерации значение u_T уточняется, после чего расчеты выполняются в следующем приближении.

Более подробное изложение математической модели и алгоритма её применения приведено в работах [21, 22].

2. Результаты применения приближенно-аналитической модели

В качестве примера использования представленной модели рассчитывается истечение равномерной (в выходном сечении) плоской струи топливно-воздушной газовой смеси. Показатели адиабаты смеси в набегающем потоке и за главным скачком уплотнения принимались равными $\gamma = 1,396$ и $\gamma_3 = 1,290$, что примерно соответствует стехиометрической метановоздушной смеси (массовые доли – 4,856% CH_4 , 74,212% N_2 , 19,980% O_2 , 0,951% других примесей) и продуктам ее полного сгорания, включающим углекислый газ и водяной пар. Удельная теплота сгорания горючего принималась равной 55,266 МДж/кг, что соответствует значению 2,684 МДж/кг в пересчете на всю газовую смесь и безразмерной величине импульсного энергоподвода $\phi = 30,045$ при $T = 300$ К. Это значение удельного энергоподвода на порядок превосходит рассматриваемое в работе [16].

Ввиду достаточно большой величины импульсного энергоподвода решение системы уравнений, описывающей стационарное маховское отражение, в рассматриваемых условиях существует лишь при $M > 5,436$. При $M = 5,436$ детонационная поляра главного скачка сжимается в точку, соответствующую интенсивности (отношению статических давлений на отраженном скачке)

$$J_{3\min} = J_{3\max} = \frac{\gamma+1}{\gamma_3+1} \frac{J_m(M)+1}{2} = \frac{\gamma+1}{\gamma_3+1} \frac{(1+\varepsilon)M^2+(1-\varepsilon)}{2} = \frac{\gamma M^2+1}{\gamma_3+1},$$

а при меньших числах Маха – исчезает. Решение, описывающее тройную конфигурацию маховского отражения, при $M < 5,436$ следует искать, допустив движение главной ударной волны j_3 вверх по потоку, т. е. нестационарность течения. Здесь $\varepsilon = (\gamma - 1)/(\gamma + 1)$, а $J_m = (1 + \varepsilon)M^2 - \varepsilon$ – интенсивность прямого скачка в совершенном газе без энергоподвода.

На рис. 3 приведены примеры расчета безразмерной (отнесенной к полуширине выходного сечения) высоты тройной точки u_T в зависимости от интенсивности J_1 падающего скачка (при условии, что осуществляется безотрывное истечение рассматриваемой сильноперерасширенной струи). Кривые 1–6 соответствуют истечению с числами Маха $M = 6; 6,5; 7; 8; 9$ и 10 во всём диапазоне теоретически возможных интенсивностей падающего скачка. Для сравнения кривыми 1а–6а показаны значения $u_T(J_1)$, рассчитанные при тех же параметрах истечения, но при отсутствии энерговыделения ($\phi = 0$) и изменения химического состава смеси ($\gamma_3 = \gamma = 1,396$), т. е. согласно алгоритму [9, 10], обобщение которого представлено в [21, 22]. Из сравнения кривых 1–6 и 1а–6а видно, что значительный импульсный энергоподвод заметно смещает условия возникновения маховского отражения (из точек vN_1 – vN_6 , соответствующих «классическому» критерию фон Неймана, в точки N_1 – N_6). Кроме того, энерговыделение приводит к существенному увеличению размеров главного (маховского) скачка и ширины области дозвукового течения.

Следующий пример применения предлагаемой приближенно-аналитической модели соответствует полю течения, показанному на рис. 2. Это плоское течение стехиометрической метановоздушной смеси в сужающемся канале между двумя клиньями (угол при вершине клиньев $\theta_1 = 24^\circ$, расстояние между передними кромками 200 мм, минимальная ширина канала 100 мм). В примерах расчёта, показанных на рис. 2а, б, экзотермические реакции, возбужденные сильным увеличением температуры на главном скачке, рассчитывались на основе уравнений химической кинетики. Для сравнения были получены результаты в

условиях, когда химические реакции были искусственно запрещены и смесь считалась нереагирующей. В результате относительная (отнесенная к ширине входного сечения) высота y_T маховского скачка уплотнения уменьшилась с 0,377 (при наличии химических реакций) до 0,277 (при их отсутствии). Используемая здесь приближенно-аналитическая модель (с включением решения задачи о взаимодействии встречных скачка уплотнения и волны разрежения, предложенного в [23, 24]) оценивают безразмерную высоту тройной точки как 0,412 и 0,215 соответственно. Степень соответствия численных и аналитических данных представляется удовлетворительной.

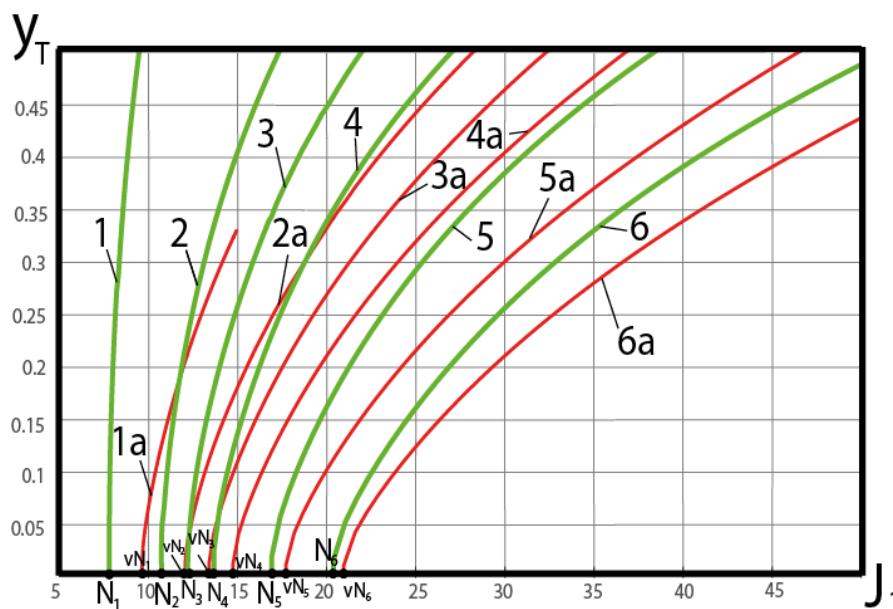


Рис. 3. Значения высоты тройной точки в зависимости от интенсивности падающего скачка при наличии (кривые 1–6) и отсутствии (кривые 1а–6а) импульсного энергоподвода и изменения химического состава в стехиометрической метановоздушной смеси

Из рис. 2б также видно, что химические реакции с образованием продуктов сгорания имеют место только за главным (маховским) скачком.

На следующей стадии исследования результаты, получаемые в рамках развиваемой здесь модели, сравнивались с данными численного эксперимента [25]. Сначала рассматривалось течение бедной водородовоздушной смеси ($0,4 \text{ H}_2 + 4,772 \text{ Air}$) при $M = 3,0$ и $M = 3,15$. Задача маховского отражения в таком потоке не имела численного решения в работе [25] — или происходило регулярное отражение, или течение оказывалось неустановившимся. Если предположить полное сгорание водорода, то удельный импульсный энергоподвод оказывался равным 0,821 МДж/кг, что превосходит критическое значение (0,538 МДж/кг при $M = 3,15$ или 0,477 МДж/кг при $M = 3$), при котором возможно решение для стационарной детонации Чепмена–Жуге. В этом случае детонационная поляра вырождается в точку и исчезает (по крайней мере при $\gamma = 1,403$ и $\gamma_3 = 1,322$, что соответствует начальной смеси и продуктам полного сгорания водорода в ней). По этой причине можно говорить о соответствии аналитических и численных данных (хотя и «негативном» в смысле отсутствия существования решения). Более содержательные результаты могут быть получены для течения той же смеси с числом Маха $M = 4$.

В последнюю очередь рассматривалось течение стехиометрической смеси водорода и кислорода в условиях, аналогичных рассматриваемым в работе [29]. При $M = 4$ импульсный энергоподвод превосходит критическое значение, что объясняет отсутствие решения для стационарной детонации при $M = 4$ и $\theta_1 = 25^\circ$ в [25].

При $M = 7$ численное решение для стационарной детонации было получено в работе [25] только для узкого диапазона углов поворота потока на падающем скачке (от $\theta_1 = 20^\circ$ до $\theta_1 = 23,5^\circ$ – 24°). Верхняя граница существования решения полностью соответствует применяемой здесь модели (максимальная интенсивность падающего скачка соответствует углу поворота потока $\theta_1 = 23,824^\circ$). При этом главный (маховский) скачок занимает практически всё поперечное сечение сужающегося канала или истекающей сверхзвуковой струи. Нижний предел ($\theta_1 = 20^\circ$) практически соответствует классическому критерию фон Неймана для перехода к регулярному отражению в совершенном газе без химических реакций ($\theta_1 = 19,716^\circ$). С учетом импульсного энергоподвода это предельное значение снижается до $\theta_1 = 17,104^\circ$ (смещение от точки 1' до точки 1 на рис. 4). Сложно утверждать, какой из этих критериев воплощается на практике, особенно учитывая существование решений как для маховского, так и для регулярного отражения [26], вплоть до $\theta_1 = 30,245^\circ$. Согласно вычислительным результатам авторов, регулярное отражение скачков в описываемых условиях преобладает даже при $\theta_1 = 22^\circ$. Кроме того, в высокоскоростных потоках стехиометрической смеси водорода и кислорода детонационные процессы возможны не только за маховским, но и за падающим скачком.

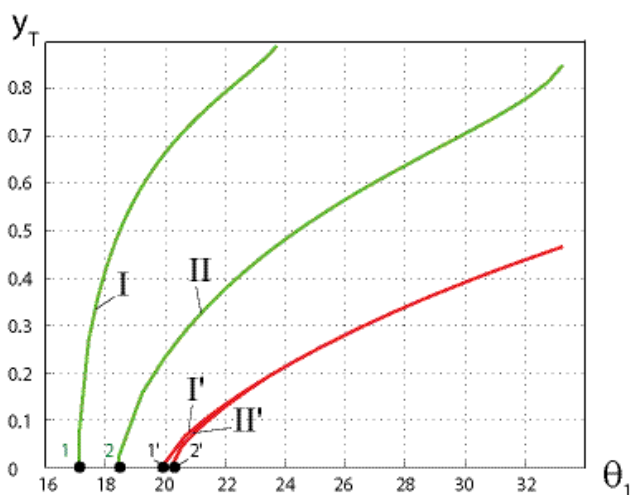


Рис. 4. Значения высоты тройной точки в зависимости от угла поворота потока на падающем скачке при наличии (кривые I, II) и отсутствии (кривые I', II') импульсного энергоподвода и изменения химического состава в стехиометрической смеси водорода и кислорода

Зависимость $y_T(\theta_1)$ высоты тройной точки от угла поворота потока на падающем скачке в стехиометрической смеси водорода и кислорода показана на рис. 4. Кривые I и I' соответствуют наличию и отсутствию химических реакций в потоке с $M = 7$, кривые II и II' – в потоке с $M = 8$.

3. Заключение

Температура потока за главным скачком маховского отражения, образующегося в высокоскоростных сверхзвуковых потоках газа, значительно выше, чем за падающим и отраженным скачками. По этой причине детонационные эффекты (импульсное энерговыделение и изменение химического состава реакционноспособной газовой смеси) инициируются, в первую очередь, за главным (маховским) скачком. Анализ возникающих тройных конфигураций показывает, что значительное импульсное выделение энергии приводит к смещению критериев вида отражения косых скачков. Скачки уплотнения, регулярно отражающиеся согласно классической теории, могут отражаться с образованием тройной точки, если допустить импульсное энерговыделение на маховском скачке.

В данной работе представлена приближенно-аналитическая модель для быстрого расчёта параметров ударно-волновой структуры течения реакционноспособной газовой смеси с маховским отражением. Предлагаемая модель впервые учитывает изменение химического состава и импульсный энергоподвод на главном скачке. Первичные результаты, полученные при расчете сверхзвукового струйного течения стехиометрического состава метановоздушной газовой смеси, показывают не только более раннее возникновение маховского отражения по сравнению с аналогичным течением без химических реакций, но и значительное увеличение геометрических размеров главного скачка уплотнения. Расчет и анализ течений бедной и стехиометрической смесей водорода и кислорода приводит к аналогичным выводам.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект «Создание опережающего научно-технического задела в области разработки передовых технологий малых газотурбинных, ракетных и комбинированных двигателей сверхлегких ракет-носителей, малых космических аппаратов и беспилотных воздушных судов, обеспечивающих приоритетные позиции российских компаний на формируемых глобальных рынках будущего», № FZWF-2020-0015).

Литература

1. Чернышов М.В., Гвоздева Л.Г. Тройные конфигурации скачков уплотнения и бегущих ударных волн // Изв. вузов. Авиационная техника. 2022. № 2. С. 87–110.
2. Усков В.Н., Чернышов М.В. Особые и экстремальные тройные конфигурации скачков уплотнения // Прикладная механика и техническая физика. 2006. Т. 47. № 4. С. 39–53.
3. Чернышов М.В. Экстремальные тройные конфигурации с отрицательным углом наклона отраженного скачка // Изв. вузов. Авиационная техника. 2019. № 2. С. 82–88.
4. Иванов М.С., Кудрявцев А.Н., Троцюк А.В., Фомин В.М. Способ организации детонационного режима горения в камере сгорания сверхзвукового прямоточного воздушно-реактивного двигателя. Заявка № 2004136236/06 от 10.12.2004, пат. RU 2285143 C2 от 10.10.2006.
5. Chernyshov M.V., Murzina K.E., Matveev S.A., Yakovlev V.V. Shock-wave structures of prospective combined ramjet engine // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2019. Vol. 618. 012068.
6. Savelova K.E., Alekseeva M.M., Matveev S.A., Chernyshov M.V. Shock-wave structure of prospective combined jet engine // J. of Physics: Conference Series. 2021. Vol. 1959. 012043.
7. Azevedo D.J., Liu C.S. Engineering approach to the prediction of shock patterns in bounded high-speed flows // AIAA J. 1993. Vol. 31. No. 1. Pp. 83–90.
8. Медведев А.Е., Фомин В.М. Приближенно-аналитический расчет маховской конфигурации стационарных ударных волн в плоском сужающемся канале // Прикладная механика и техническая физика. 1998. Т. 39. № 3. С. 52–58.
9. Омельченко А.В., Усков В.Н., Чернышов М.В. Об одной приближенной аналитической модели течения в первой бочке перерасширенной струи // Письма в Журнал технической физики. 2003. Т. 29. Вып. 6. С. 56–62.
10. Chernyshov M.V., Savelova K.E., Kapralova A.S. Approximate Analytical Models of Shock-Wave Structure at Steady Mach Reflection // Fluids. 2021. Vol. 6. Iss. 9. No. 305. 18 p.
11. Silnikov M.V., Chernyshov M.V. The interaction of Prandtl–Meyer wave and quasi-one-dimensional flow region // Acta Astronautica. 2015. Vol. 109. Pp. 248–253.
12. Tao Y., Liu W., Fan X., Xiong B., Yu J., Sum M. A study of the asymmetric shock reflection configurations in steady flows // J. of Fluid Mechanics. 2017. Vol. 825. Pp. 1–15.
13. Roy S., Gopalapillai R. An analytical model for asymmetric Mach reflection configuration in steady flows // J. of Fluid Mechanics. 2019. Vol. 863. Pp. 242–268.

14. Lin J., Bai C.-Y., Wu Z.-N. Study of asymmetrical shock wave reflection in steady supersonic flow // J. of Fluid Mechanics. 2019. Vol. 864. Pp. 848–875.
15. Choe S.-G. A method for predicting Mach stem height in steady flows // Proc. of the Institution of Mechanical Engineers. Part G: Journal of Aerospace Engineering. 2021. Vol. 236. Iss. 1. P. 095441002110015.
16. Медведев А.Е. Отражение косой ударной волны в реагирующем газе с конечной длиной зоны реакции // Прикладная механика и техническая физика. 2001. Т. 42. № 2. С. 33–41.
17. Chernyshov M.V., Kapralova A.S., Matveev S.A., Savelova K.E. Stationary Mach Configurations with Pulsed Energy Release on the Normal Shock // Fluids. 2021. Vol. 6. Iss. 12. 439.
18. Денисов Ю.Н. Газодинамика детонационных структур. М.: Машиностроение, 1989. – 176 с.
19. Li J., Ning J., Le J.H.S. Mach reflection of ZDN detonation wave // Shock Waves. 2015. Vol. 25. Iss. 3. Pp. 293–304.
20. Jing T., Ren H., Li J. Onset of the Mach reflection of Zel'dovich – von Neumann – Döring detonations // Entropy. 2021. Vol. 23. Iss. 3. 314.
21. Чернышов М.В., Савелова К.Э. Приближенно-аналитическая модель струйного течения с маховским отражением и импульсным энергоподводом на главном скачке // Изв. вузов. Авиационная техника. 2023. № 1. С. 43–54.
22. Chernyshov M.V., Savelova K.E. An Approximate Analytical Model of a Jet Flow with Mach Reflection and Pulsed Energy Supply at the Main Shock // Fluids. 2023. Vol. 8. Iss. 4. 132.
23. Li H., Ben-Dor G. Oblique Shock – Expansion Fan Interaction – Analytical Solution // AIAA J. 1996. Vol. 34. Iss. 2. Pp. 418–421.
24. Мешков В.Р., Омельченко А.В., Усков В.Н. Взаимодействие скачка уплотнения со встречной волной разрежения // Вестн. Санкт-Петербургского университета. Сер. 1. Математика, механика, астрономия. 2002. Т. 2. № 9. С. 99–106.
25. Троцюк А.В., Кудрявцев А.Н., Иванов М.С. Численное исследование стационарных детонационных волн // Вычислительные технологии. 2006. Т. 11. Ч. 2 спец. выпуск. С. 37–44.
26. Ben-Dor G. Shock Wave Reflection Phenomena; Berlin – Heidelberg – NewYork: Springer, 2007. – 342 p.

УДК 539.196+535.35+537.562

**ПРОСТЫЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ДЛЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ
ЭЛЕКТРОННО-ВОЗБУЖДЕННЫХ И ЗАРЯЖЕННЫХ КОМПОНЕНТОВ****А.С. Шарипов, Б.И. Луховицкий, А.В. Пелевкин**

Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова, Москва, Россия

В докладе описаны недавно предложенные нами простые полуэмпирические модели для оценки влияния электронного возбуждения и ионизации на статическую изотропную поляризуемость произвольных атомов и молекул любого элементного состава и размера [1, 2]. С помощью этих двух аналитических моделей можно с легкостью оценить статическую поляризуемость для компонентов с произвольными энергией возбуждения T_e [1] и степенью ионизации (характеризующейся отношением числа электронов N к числу протонов Z в системе) [2]. При этом в качестве входных данных требуется задать лишь поляризуемость, элементный состав и потенциал ионизации соответствующего невозбужденного (незаряженного) компонента, а при оценке влияния на поляризуемость электронного возбуждения – также мультиплетности возбужденного и основного электронных состояний.

Обе разработанные нами модели основаны на анализе закономерностей для поляризуемости электронно-возбужденных и заряженных многоэлектронных систем и базируются на теоретических предпосылках, сформулированных ранее в рамках полуклассического описания для атомов [3, 4]. Следуя [3, 4], в качестве искомой величины было принято безразмерное отношение поляризуемости в возбужденном состоянии $\alpha(T_e)$ (либо поляризуемости иона α_i) к поляризуемости основного состояния $\alpha(T_e = 0)$ (либо поляризуемости незаряженной частицы α_n), т.е. обе модели представляют собой аналитические функции для определения искомых относительных величин $\xi_e = \alpha(T_e)/\alpha(T_e = 0)$ и $\xi_i = \alpha_i/\alpha_n$.

Заметим, что, несмотря на теоретически обоснованную структуру, обе аналитические модели содержат ряд подстроечных параметров, которые могут быть найдены только эмпирически. При этом для анализа закономерностей нами были собраны большие наборы литературных данных теоретического и экспериментального происхождения по поляризуемости электронно-возбужденных частиц и ионов (а точнее, по безразмерным величинам ξ_e и ξ_i), дополненные результатами наших собственных квантово-химических расчетов поляризуемости в рамках многодетерминантного подхода (для возбужденных частиц) [1] и теории функционала электронной плотности (для ионов) [2]. Эти же наборы данных были использованы для настройки моделей, т.е. для нахождения наборов эмпирических коэффициентов, позволяющих наилучшим образом описать имеющиеся данные по влиянию электронного возбуждения и ионизации на поляризуемость. В общей сложности при оптимизации моделей для электронно-возбужденных частиц и ионов использовались 195 и 540 точек данных соответственно.

В ходе анализа отдельных случаев существенного расхождения между предсказаниями аналитических моделей и литературными значениями, а также посредством дополнительного тестирования моделей на небольших наборах данных, не включенных в использованные при настройке моделей наборы, было продемонстрировано, что предложенные нами аналитические инструменты обладают разумной погрешностью в прогнозировании статической изотропной поляризуемости ионов любого заряда и частиц произвольной степени возбуждения (особенно если принимать во внимание в общем-то невысокую точность, достигаемую при теоретическом и экспериментальном определении поляризуемости электронно-возбужденных частиц и ионов). Кроме того, предложенные

нами аналитические выражения можно использовать для частиц любого размера и атомного состава.

Так, из рис. 1, на котором в графической форме представлены предсказания относительных поляризуемостей ξ_e и ξ_i обеими моделями в зависимости от значений, принятых за эталонные (на основе литературных рекомендаций и собственных квантово-химических расчетов), можно убедиться, что хотя сами значения ξ_e и ξ_i могут быть отличными от единицы на несколько порядков величины, имеет место неплохая корреляция между предсказаниями моделей и эталонными данными. Соответствующие значения коэффициента детерминации R^2 составили 0,937 для случая электронного возбуждения и 0,931 для ионизации.

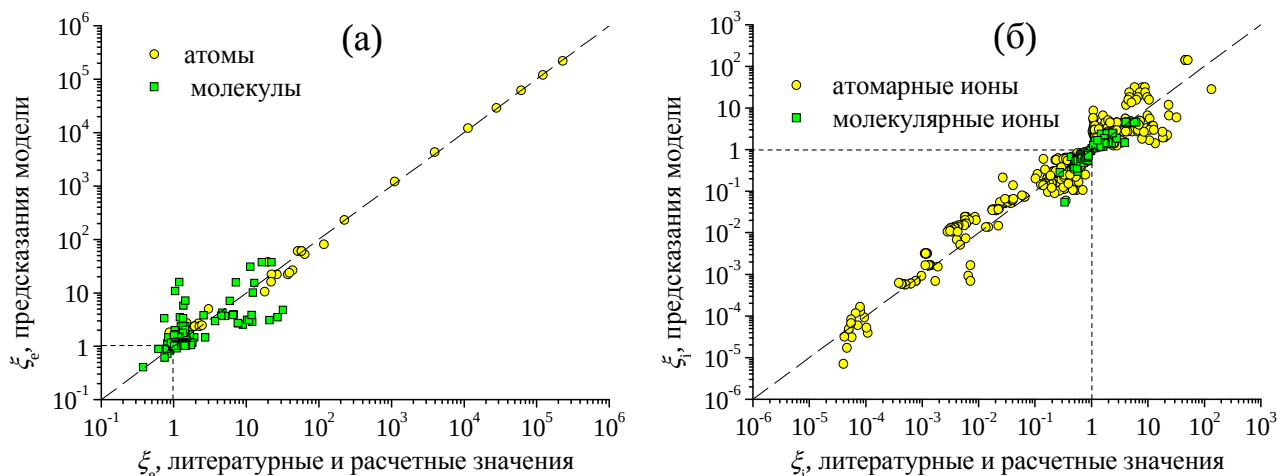


Рис. 1. Значения относительной поляризуемости (ξ_e и ξ_i) для наборов электронно-возбужденных (а) и заряженных (б) компонентов согласно разработанным моделям в зависимости от величин ξ_e и ξ_i , рекомендованных в литературе либо рассчитанных с помощью методов квантовой химии. Штриховые линии соответствуют линиям идеального соответствия предсказанных значений эталонным

При этом оказалось, что в силу заметного перекоса в сформированных наборах данных в сторону атомов и двухатомных молекул, а также вследствие того, что теоретические предпосылки, лежащие в основе моделей [3, 4], представляют собой аналитические оценки, строго говоря, справедливые лишь для атомов, предсказательная способность обеих моделей несколько падает с ростом числа атомов в исследуемой системе.

Заметим, что созданные нами аналитические инструменты универсальны и могут быть полезны для ряда приложений, в которых существует необходимость в вычислительно недорогой и быстрой оценке статической поляризуемости электронно-возбужденных и ионизированных атомов и молекул в газовой фазе. В особенности это актуально при построении сложных моделей неравновесной химической кинетики, предназначенных для прецизионного описания наблюдаемого показателя преломления (диэлектрической проницаемости) термически-неравновесных потоков реагирующего газа (плазмы), а также для физически-обоснованного учета молекулярного переноса в таких течениях (см., например, работы [5–9]). Кроме того, разработанные модели могут оказаться полезными для ряда перспективных приложений, основанных на электромагнитном удержании холодных атомов и ионов (атомные часы и квантовые вычисления) [10, 11]. Наконец, предложенные аналитические выражения для относительных величин ξ_e и ξ_i представляют особую ценность для критического анализа зачастую противоречивых и недостоверных литературных данных по поляризуемости электронно-возбужденных и заряженных компонентов.

В заключение отметим, что предложенные модели не претендуют на полноту и завершенность. При появлении в будущем новых надежных данных по поляризуемости электронно-возбужденных частиц и ионов рекомендованные нами наборы подстроечных параметров могут быть уточнены, а также не исключено, что потребуются пересмотр структуры аналитических выражений в целом.

Работа была поддержана Российским научным фондом (проект № 22-29-00124).

Литература

1. Sharipov A.S., Pelevkin A.V., Loukhovitski B.I. A simple semiempirical model for the static polarizability of electronically excited atoms and molecules // *Chin. Phys. B.* 2023. Vol. 32. No. 043301.
2. Sharipov A.S., Loukhovitski B.I. A simple semiempirical model for the static polarizability of ions // *Chin. Phys. B.* 2023. Vol. 32. No. 083301.
3. Dmitrieva I.K., Plindov G.I. Dipole Polarizability, Radius and Ionization Potential for Atomic Systems // *Phys. Scr.* 1983. Vol. 27. Pp. 402–406.
4. Sharipov A.S., Loukhovitski B.I., Loukhovitskaya E.E. Influence of Internal Degrees of Freedom on Electric and Related Molecular Properties / ed. G. Maroulis. Springer International Publishing, 2022.
5. D'Angola A., Colonna G., Gorse C., Capitelli M. Thermodynamic and transport properties in equilibrium air plasmas in a wide pressure and temperature range // *Eur. Phys. J. D.* 2008. Vol. 46. Pp. 129–150.
6. Gould T., Bučko T. C_6 coefficients and dipole polarizabilities for all atoms and many ions in rows 1–6 of the periodic table // *J. Chem. Theory Comput.* 2016. Vol. 12. Pp. 3603–3613.
7. Kuverova V.V., Adamson S.O., Berlin A.A. et al. Chemical physics of D and E layers of the ionosphere // *Adv. Space Res.* 2019. Vol. 64. Pp. 1876–1886.
8. Луховицкий Б.И., Шарипов А.С., Арсентьев И.В., Кузьмицкий В.В., Пенязьков О.Г. О показателе преломления газа в условиях сильной термической неравновесности // *ИФЖ.* 2020. Т. 93. С. 882–889.
9. Шарипов А.С., Луховицкий Б.И., Пелевкин А.В. Коэффициенты диффузии электронно-возбужденных молекул // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике.* 2021. Т. 22. <http://chemphys.edu.ru/issues/2021-22-1/articles/913/>.
10. Mitroy J., Safronova M.S., Clark C.W. Theory and applications of atomic and ionic polarizabilities // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2010. Vol. 43. No. 202001.
11. Wineland D.J., Leibfried D. Quantum information processing and metrology with trapped ions // *Laser Phys. Lett.* 2011. Vol. 8. Pp. 175–188.

УДК 535.379+544.452

КИНЕТИЧЕСКИЙ ПОДМЕХАНИЗМ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ OH^* ПРИ ОКИСЛЕНИИ РАЗЛИЧНЫХ ТОПЛИВ**А.С. Шарипов, А.В. Пелевкин, Б.И. Луховицкий**

Центральный институт авиационного моторостроения им. П.И. Баранова, Москва, Россия

Общепризнано, что видимая и ультрафиолетовая (УФ) хемилюминесценция пламени как оптический «отпечаток» химических реакций, протекающих при окислении топлив [1], может быть сравнительно легко использована для невозмущающей бесконтактной диагностики процессов воспламенения и горения [2–4]. Действительно, поскольку спектрометрия спонтанного излучения хемилюминесцентных частиц (для углеводородо-воздушных пламен основные излучающие частицы – это, как известно, электронно-возбужденные двухатомные радикалы OH^* , CH^* и C_2^* ; здесь и далее звездочкой обозначено электронное возбуждение) не требует внешнего источника излучения и, соответственно, дорогостоящего лазерного оборудования, анализ наблюдаемых эмиссионных спектров потоков реагирующих газов является в некотором отношении привлекательной и практичной альтернативой лазерным методам диагностики горения [5].

Хотя хемилюминесценция пламени, обусловленная присутствием в газовой смеси электронно-возбужденных частиц в очень малых количествах, как таковая не содержит непосредственной информации о структуре пламени и динамике горения, кинетика образования и убыли электронно-возбужденных излучающих компонентов тесно увязана с эволюцией концентраций активных радикалов в основном электронном состоянии (так называемых носителей цепного механизма), определяющих химию горения. Следовательно, надлежащая количественная интерпретация спектрально- и пространственно-разрешенного хемилюминесцентного излучения пламени (и реагирующих потоков, нагретых ударными волнами) может помочь глубже понять лежащую в основе горения кинетику реакций [6, 7] и охарактеризовать структуру пламени в целом [3–5, 8].

В частности, пики интенсивности излучения хемилюминесцирующих электронно-возбужденных частиц могут служить маркерами положения фронта пламени и зоны тепловыделения [3–5, 8], а также быть использованы для получения пространственных распределений таких важных характеристик как локальные коэффициент избытка воздуха [3] и скорость тепловыделения [4, 5, 8]. Кроме того, хемилюминесценция пламени, помимо ее самоочевидной ценности для лабораторных исследований горения, позволяет относительно легко в режиме реального времени осуществлять диагностику эффективности и стабильности горения в практических горельных устройствах [4, 5].

Хемилюминесцентное излучение на длине волны около 309 нм (ближний УФ) от электронно-возбужденного гидроксильного радикала OH^* (в состоянии $A^2\Sigma^+$ с энергией относительно основного состояния $X^2\Pi$ $T_e = 4,06$ эВ и радиационным временем жизни около 700 нс), пожалуй, наиболее часто используется для диагностики пламени [2–4, 8–11]. Кроме того, почти стандартной практикой является использование хемилюминесценции OH^* для экспериментального определения задержек воспламенения в ударных трубах [7, 11–14]. Дело в том, что хотя положение пика излучения OH^* в ближнем ультрафиолете накладывает определенные ограничения на выбор оптики регистрирующего оборудования, излучательные переходы $\text{OH}(A^2\Sigma^+ \rightarrow X^2\Pi)$ относительно сильны, а работа именно в этом диапазоне длин волн минимально подвержена загрязнению от фонового излучения других хемилюминесцирующих частиц [4, 9].

Конечно, количественная интерпретация измерений излучения OH^* требует надежных моделей химической кинетики, описывающих образование (в достаточно экзотермических реакциях) и уход (в процессах тушения и обменных реакциях)

возбужденных молекул OH^* в условиях горения. Однако из анализа известной литературы следует, что, к сожалению, несмотря на востребованность, разработка таких кинетических моделей применительно к воспламенению и горению различных топлив в последние годы практически остановилась.

Фактически все относительно современные модели для описания ультрафиолетовой хемилюминесценции $\text{OH}(A^2\Sigma^+ - X^2\Pi)$, сопровождающей окисление различных топлив (водород, углеводороды и др., см., например, [7, 8, 14]), основаны на простейшем кинетическом подмеханизме, восходящем к основополагающим работам [12, 13, 15] и представляющем, по сути, не что иное как одну трехчастичную реакцию образования OH^*



дополненную процессами радиационного



и столкновительного



тушений OH^* .

К сожалению, динамика элементарного процесса R1 на данный момент не совсем ясна, хотя проведенный ранее *ab initio* анализ [16] определенно свидетельствует в пользу её неадиабатического характера. Так или иначе отсутствуют надежные теоретические оценки соответствующей константы скорости k_{R1} . Более того, доподлинно неизвестно, в какой степени предположение об её трехчастичном характере, неявно разделяемое большинством исследователей в этой области [8, 10, 12–14], справедливо для типичных условий воспламенения и горения, особенно в условиях повышенного давления, интересных для практических приложений. Наконец, открытым и весьма спорным вопросом, который возникает в связи с этим, является влияние разбавителей на наблюдаемую величину k_{R1} [13, 14, 16].

По этим причинам зависящая от температуры константа скорости реакции R1 $k_{\text{R1}}(T)$ фактически выступает в качестве основного подстроечного параметра при количественном описании излучения OH^* в конкретных экспериментах с водородом [12, 13, 16, 17] (константы тушения k_{Q1} и k_{Q2} обычно, хотя и не всегда оправдано [18, 19], считаются надежно установленными). При интерпретации хемилюминесценции OH^* , сопровождающей воспламенение и горение углеводородов, зависимость $k_{\text{R1}}(T)$ также используется в роли важного подстроечного параметра моделей, хотя в этом случае упомянутые выше процессы образования и убыли OH^* традиционно [2, 7, 8, 10, 12, 14] дополняются другой, по сути гипотетической, реакцией



формально ответственной за всё многообразие потенциально возможных реакционных взаимодействий OH^* с углеродсодержащими частицами (на самом деле этот умозрительно введенный процесс, как можно заключить из *ab initio* анализа [20], должен быть либо неэлементарным, либо неадиабатическим).

При этом впечатляющая вариативность от источника к источнику величины, зависящей от температуры константы скорости $k_{\text{R1}}(T)$ (в частности, для Ag в качестве третьего тела разброс данных между различными рекомендуемыми значениями при фиксированной температуре может достигать 40 раз [12, 13, 17]), и большая

неопределенность в так называемых коэффициентах эффективности третьего тела для различных буферных газов (см., например, [13, 14, 16]) не могут не указывать на то, что в действительности кинетика образования (и распада) OH^* должна быть более сложной, чем принято считать. В частности, в условиях, характерных для горения в технических устройствах (давление в десятки атмосфер), константа скорости k_{R1} может проявлять сложную переходную зависимость по давлению. Не менее важно, что возбужденный гидроксильный радикал, вероятно, может образовываться (или расходоваться) в каких-то других возможных реакциях с участием Н-содержащих (см., например, работы [10, 12, 13, 16, 17]) и, в случае горения углеводородов, С-содержащих соединений (но, как ни странно, нам не удалось найти в литературе другие предположения по этому вопросу, кроме введения упомянутой выше реакции R2). Между тем элементарная динамика некоторых реакций и процессов столкновительного тушения с участием OH^* исследовалась в ряде относительно недавних теоретических и экспериментальных работ (см., например, ссылки [18–22]), которые, по-видимому, остались по большей части незамеченными исследователями, занимающимися горением. Следовательно, существует острая необходимость в пересмотре имеющихся представлений о кинетике образования и убыли OH^* при воспламенении и горении различных видов топлива.

Несомненно, для анализа реакционной динамики, по крайней мере ключевых процессов с участием OH^* , предпочтительнее использовать теоретические подходы, основанные на квантово-химических *ab initio* расчетах, поскольку лишь в этом случае отдельные реакции, включаемые в разрабатываемый кинетический подмеханизм для хемилюминесценции OH^* , будут соответствовать элементарным процессам, фактически протекающим в пламени, а их константы скорости будут физически значимыми, в то время как сам кинетический механизм будет обладать самосогласованностью и прогностической способностью [23].

Однако в связи с этим нельзя не признать, что количественное теоретическое описание элементарных процессов с электронно-возбужденными частицами по сей день остается непростой задачей как вследствие известных трудностей в описании возбужденных поверхностей потенциальной энергии [23], так и из-за необходимости соответствующим образом учитывать электронно-неадиабатические переходы [1, 6, 21, 23]. Вот почему зачастую [24] при построении сложных кинетических механизмов, включающих электронно-возбужденные атомы и молекулы, приходится полагаться лишь на фрагментарно доступные качественные и полуколичественные теоретические оценки реакционной способности и скоростей тушения возбужденных частиц, которые, в сущности, пригодны лишь для критической оценки известных и порой противоречивых экспериментальных данных.

Итак, конечной целью этой работы было построить физически обоснованную детальную кинетическую подмодель, которая при совместном использовании с соответствующими кинетическими моделями, описывающими эволюцию компонентов в основном электронном состоянии, могла бы количественно правильно описывать экспериментально наблюдаемые профили излучения OH^* для произвольных условий окисления различных топлив (водород, метан, этан, этилен, ацетилен, этанол) [2, 8, 7, 11–14, 25]. При этом для выполнения поставленной задачи мы полагались как на тщательный критический анализ известных литературных данных экспериментального и теоретического происхождения о константах скорости отдельных процессов, так и на результаты наших собственных *ab initio* расчетов для некоторых из них.

Особое внимание здесь было уделено ключевому процессу R1, для которого, ввиду противоречивости рекомендованных ранее данных по его константе скорости (различие в константе более чем на порядок), с помощью метода XMCQDPT2 с динамическим взвешиванием по рассматриваемым состояниям системы был проведен *ab initio* расчет потенциальных кривых и матричных элементов спин-орбитального взаимодействия для

этого неадиабатического процесса, после чего была сделана оценка соответствующей зависимой от давления константы скорости.

Для ряда реакций с участием OH^* , для которых отсутствуют надежные литературные данные, а проведение *ab initio* расчетов невозможно из-за требований к вычислительным ресурсам или нецелесообразно из-за слабой чувствительности динамики концентрации OH^* к константам скорости этих процессов, необходимые оценки констант скорости были сделаны с использованием разработанной ранее полуэмпирической модифицированной модели вибронных термов [24].

Таким образом, предложенный нами подмеханизм непосредственно может быть использован для описания УФ хемилюминесценции OH^* при воспламенении и горении водорода и ряда простейших углеводородов, таких как метан, этан, этилен, ацетилен.

Кроме того, поскольку набор реакций, необходимый для описания окисления водорода и простейших углеводородов, как известно, иерархически входит в детальные кинетические механизмы для многих других более сложных топлив и топливных композиций, разработанная нами подмодель для эволюции OH^* может лечь в основу соответствующих более общих схем моделирования хемилюминесценции.

Публикация подготовлена в рамках реализации Программы создания и развития научного центра мирового уровня «Сверхзвук» на 2020–2025 годы при финансовой поддержке Минобрнауки России (соглашение от «24» июня 2021 г. № 075-15-2021-605).

Литература

1. Golde M.F. Chemiluminescence in gases // *Adv. At. Mol. Phys.* 1976. Vol. 11. Pp. 361–409.
2. Kojima J., Ikeda Y., Nakajima T. Basic aspects of $\text{OH}(\text{A})$, $\text{CH}(\text{A})$, and $\text{C}_2(\text{d})$ chemiluminescence in the reaction zone of laminar methane–air premixed flames // *Combust. Flame*. 2005. Vol. 140. Pp. 34–45.
3. Nori V.N., Seitzman J.M. CH^* chemiluminescence modeling for combustion diagnostics // *Proc. Combust. Inst.* 2009. Vol. 32. Pp. 895–890.
4. Bedard M.J., Fuller T.L., Sardeshmukh S., Anderson W.E. Chemiluminescence as a diagnostic in studying combustion instability in a practical combustor // *Combust. Flame*. 2020. Vol. 213. Pp. 211–225.
5. Chen X., Wang Y., Zirwes T., Zhang F., Bockhorn H., Chen, Z. Heat Release Rate Markers for Highly Stretched Premixed CH_4/Air and $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{Air}$ Flames // *Energy Fuels*. 2021. Vol. 35. Pp. 13349–13359.
6. Bystrov N., Emelianov A., Eremin A., Loukhovitski B., Sharipov A., Yatsenko P. Experimental study of high temperature oxidation of dimethyl ether, n-butanol and methane // *Combust. Flame*. 2020. Vol. 218. Pp. 121–133.
7. Tereza A.M., Medvedev S.P., Smirnov V.N. Experimental study and numerical simulation of chemiluminescence emission during the self-ignition of hydrocarbon fuels // *Acta Astronaut.* 2019. Vol. 163. Pp. 18–24.
8. Sardeshmukh S., Bedard M., Anderson W. The use of OH^* and CH^* as heat release markers in combustion dynamics // *Int. J. Spray Combust. Dyn.* 2017. Vol. 9. Pp. 409–423.
9. Haber L.C., Vandsburger U. A global reaction model for OH^* chemiluminescence applied to a laminar flat-flame burner // *Combust. Sci. Tech.* 2003. Vol. 175. Pp. 1859–1891.
10. Smith G., Park C., Luque J. A note on chemiluminescence in low-pressure hydrogen and methane–nitrous oxide flames // *Combust. Flame*. 2005. Vol. 140. Pp. 385–389.
11. Tereza A.M., Medvedev S.P., Smirnov V.N. Chemiluminescence of electronically excited species during the self-ignition of acetylene behind reflected shock waves // *Acta Astronaut.* 2021. Vol. 181. Pp. 612–619.

12. Hall J.M., Petersen E.L. An Optimized Kinetics Model for OH Chemiluminescence at High Temperatures and Atmospheric Pressures // *Int. J. Chem. Kinet.* 2006. Vol. 38. Pp. 714–724.
13. Kathrotia T., Fikri M., Bozkurt M., Hartmann M., Riedel U., Schulz C. Study of the H+O+M reaction forming OH*: Kinetics of OH* chemiluminescence in hydrogen combustion systems // *Combust. Flame.* 2010. Vol. 157. Pp. 1261–1273.
14. Bozkurt M., Fikri M., Schulz C. Investigation of the kinetics of OH* and CH* chemiluminescence in hydrocarbon oxidation behind reflected shock waves // *Appl. Phys. B.* 2012. Vol. 107. Pp. 515–527.
15. Smith G.P., Luque J., Park C., Jeffries J.B., Crosley D.R. Low Pressure Flame Determinations of Rate Constants for OH(A) and CH(A) Chemiluminescence // *Combust. Flame.* 2002. Vol. 131. Pp. 59–69.
16. Skrebkov O.V., Myagkov Y.P., Karkach S.P., Vasil'ev V.M., Smirnov A.L. Formation mechanism of the excited OH($^2\Sigma^+$) radical during the ignition of the diluted H₂-O₂ mixture by shock waves // *Doklady Phys. Chem.* 2002. Vol. 383. Pp. 93–96.
17. Hidaka Y., Takahashi S., Kawano H., Suga M., Gardiner W.C., Jr. Shock Tube Measurement of the Rate Constant for Excited OH(A $^2\Sigma^+$) Formation in the Hydrogen-Oxygen Reaction *J. Phys. Chem.* 1982. Vol. 86. Pp. 1429–1433.
18. Lehman J.H., Lester M.I., Yarkony R.D. Reactive quenching of OH A $^2\Sigma^+$ by O₂ and CO: Experimental and nonadiabatic theoretical studies of H- and O-atom product channels // *J. Chem. Phys.* 2012. Vol. 137. P. 094312.
19. Han S., de Oliveira-Filho A.G., Shu Y., Truhlar D.G., Guo H. Semiclassical Trajectory Studies of Reactive and Nonreactive Scattering of OH(A $^2\Sigma^+$) by H₂ Based on an Improved Full-Dimensional Ab Initio Diabatic Potential Energy Matrix // *Chemphyschem.* 2022. Vol. 23. P. e202200039.
20. Keshavarz F., Mousavipour H. A single- and multireference study on CH(X $^2\Pi$) reaction with O₂(X $^3\Sigma_g^-$) // *Int. J. Chem. Kinet.* 2019. Vol. 51. Pp. 161–177.
21. Dillon J., Yarkony D.R. Seams of Conical Intersections Relevant to the Quenching of OH(A $^2\Sigma^+$) by Collisions with H₂ // *J. Phys. Chem. A.* 2013. Vol. 117. Pp. 7344–7355.
22. Gamallo P., Akpınar S., Defazio P., Petrongolo C. Conical-intersection quantum dynamics of OH(A $^2\Sigma^+$) + H(2S) collisions // *J. Chem. Phys.* 2013. Vol. 139. P. 094303.
23. Miller J.A., Sivaramakrishnan R., Tao Y. et al. Combustion Chemistry in the Twenty-First Century: Developing Theory-Informed Chemical Kinetics Models // *Prog. Energy Combust. Sci.* 2021. Vol. 83. P. 100886.
24. Starik A.M., Loukhovitski B.I., Sharipov A.S., Titova N.S. Physics and Chemistry of the Influence of Excited Molecules on Combustion Enhancement // *Phil. Trans. R. Soc. A.* 2015. Vol. 373. P. 20140341.
25. Vlasov P.A., Demidenko T.S., Smirnova V.N., Tereza A.M., Atkin E.V. Chemiluminescent Emission of CH*, C₂*, OH*, and CO₂* during the Ignition of Ethane behind Reflected Shock Waves // *Russ. J. Phys. Chem. B.* 2016. Vol. 10. Pp. 983–990.

УДК 534.222.2

**РАЗВИТИЕ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ФРОНТА ГОРЕНИЯ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ
С СОДЕРЖАНИЕМ МИКРОКАПЕЛЬ ВОДЫ В ОТКРЫТОМ КАНАЛЕ****И.С. Яковенко, И.С. Медведков, А.Д. Киверин**

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Процессы горения многофазных сред, в том числе газокapельных смесей и газозвесей с содержанием микрокапель жидкости, повсеместно встречаются во многих отраслях промышленности и энергетики. В частности, газокapельные смеси формируются в двигателях внутреннего сгорания с системами впрыска воды или при распыле воды спринклерными системами пожаротушения. Динамика развития пламени в присутствии капель жидкости существенно меняется. Так, естественное развитие неустойчивости, наблюдаемое в чистых газовых смесях, определяет как локальную структуру фронта пламени, так и интегральные характеристики его распространения. В присутствии микрокапель развитие неустойчивости может быть интенсифицировано, что влечет за собой общее ускорение процесса горения [1]. С другой стороны, микрокапли могут оказывать ингибирующее влияние на процесс горения в результате потерь энергии на испарение и разбавление смеси инертными или менее реакционно-способными парами жидкости [2].

В рамках настоящей работы рассматривается динамика развития горения в обедненной водородно-воздушной смеси в открытом канале, с одной стороны которого осуществляется подача свежей смеси с содержанием микрокапель воды, а с другой – отвод продуктов горения. Горение обедненных водородно-воздушных смесей характеризуется интенсивным ростом неустойчивости пламени как по механизмам гидродинамической неустойчивости, так и в результате термодиффузионных эффектов. В работе проведен анализ механизмов генерации и динамики развития локальных возмущений фронта горения в результате взаимодействия с микрокаплями воды и их влияния на развитие естественной неустойчивости фронта горения и интегральные характеристики процесса. Получены характерные пространственные и временные масштабы, на которых воздействие капель оказывает наибольшее влияние на эволюцию пламени.

Исследование выполнено за счет гранта Президента Российской Федерации (проект № МК-1784.2022.1.1).

Литература

1. Gieras M. Flame acceleration due to water droplets action // J. of Loss. Prev. 2008. Vol. 21. Pp. 472–477.
2. Thomas G.O., Jones A., Edwards M.J. Influence of water sprays on explosion development in fuel-air mixtures // Comb. Sci. Techn. 1991. Vol. 80. Pp. 47–61.

УДК 544.452.2

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПЕРЕХОДА ГОРЕНИЯ В ДЕТОНАЦИЮ В СМЕСЯХ НА ОСНОВЕ АЦЕТИЛЕНА В КАНАЛАХ РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИИ

А.В. Ярков, А.Д. Киверин, И.С. Яковенко

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия

Широкая сфера применения ацетилена подкрепляет актуальность исследований его свойств и особенностей, представляющих особую важность при использовании его в качестве топлива для различных технических устройств. В частности, смеси на основе ацетилена используются в качестве рабочего газа детонационных пушек, применяемых для напыления покрытий на различных конструкциях [1]. Такие покрытия наносятся путем разгона порошкообразного материала до сверхзвуковых скоростей за счет формирования детонационной волны, впоследствии распространяющейся по трубе. Как известно, организация дефлаграционного режима горения с последующим переходом в детонацию требует значительно меньшего начального энерговложения по сравнению с прямым инициированием детонации, в связи с чем важно знать механизмы, по которым возможна реализация перехода в детонацию при свободном распространении пламени. Кроме того, понимание того как различные параметры системы влияют на процесс перехода горения в детонацию важно не только с точки зрения управления свойствами наносимого покрытия, но и в целях правильной интерпретации результатов эксперимента с помощью численных расчетов. Цель настоящей работы – исследование на основе численного моделирования влияния геометрии канала на процесс нестационарного ускорения пламени и переход горения в детонацию в смесях на основе ацетилена.

Исследование проводилось путем численного решения полной системы уравнений газовой динамики для сжимаемой среды, включающей теплопроводность, вязкость и многокомпонентную диффузию:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0, \#(1)$$

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i Y_k)}{\partial x_i} = M_k \dot{\omega}_k - \frac{\partial j_{ki}}{\partial x_i}, \quad k = \overline{1, K} \#(2)$$

$$\frac{\partial(\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\sigma_{ji} - \delta_{ij} p), \#(3)$$

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i E)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} (u_j \sigma_{ji} - u_i p) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\kappa(T) \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \rho \sum_{k=1}^K \frac{h_k}{M_k} \left(\frac{\partial Y_k}{\partial t} \right), \#(4)$$

где $\frac{\partial}{\partial x_i}$ – пространственная дивергенция; $\frac{\partial}{\partial t}$ – частная производная по времени; ρ – плотность; u_i – вектор массовой скорости; Y_k – мольная доля k -го компонента; M_k – молярная масса k -го компонента; $\dot{\omega}_k$ – скорость образования k -го компонента в результате химических реакций; j_{ki} – диффузионный поток k -го компонента; K – число компонентов в системе; σ_{ij} – тензор вязких напряжений; δ_{ij} – символ Кронекера; p – давление; $E = \varepsilon + \frac{1}{2} \sum_i u_i^2$ – удельная полная энергия смеси; ε – удельная внутренняя энергия; $\kappa(T)$ – коэффициент теплопроводности; T – температура; h_k – удельная энтальпия образования k -го компонента. Система (1)–(4)

решалась с использованием метода CABARET, обладающего вторым порядком точности, низкой схемной вязкостью и низкой дисперсией [2]. Процесс химических превращений описывался при помощи редуцированного кинетического механизма, включающего 17 компонент и 25 реакций [3]. Несмотря на то, что используемый механизм дает завышенные значения скорости горения, что сказывается на результатах расчета, на фоне более детальных механизмов он позволяет проводить моделирование с достаточно высокой детализацией [4].

Расчетная область при постановке задачи численного моделирования представляет собой канал заданной ширины H (рис. 1), заполненный стехиометрической смесью ацетилена с кислородом и разбавленной азотом до его содержания 25 об.%. Система изначально находилась под давлением 20 кПа и при температуре 300 К, что соответствует условиям экспериментов по исследованию процесса перехода горения в детонацию, проводимых в Институте тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси [5]. С закрытого торца канала смесь поджигалась путем изобарического повышения температуры до 1500 К, а с противоположной стороны канал открыт для свободного истечения смеси. На стенках канала задавались изотермические граничные условия с прилипанием. С целью исследования влияния конфигурации канала система уравнений (1)–(4) решалась в двух различных системах координат: декартовой, что соответствует плоскому каналу, и цилиндрической, что соответствует осесимметричному каналу круглого сечения.

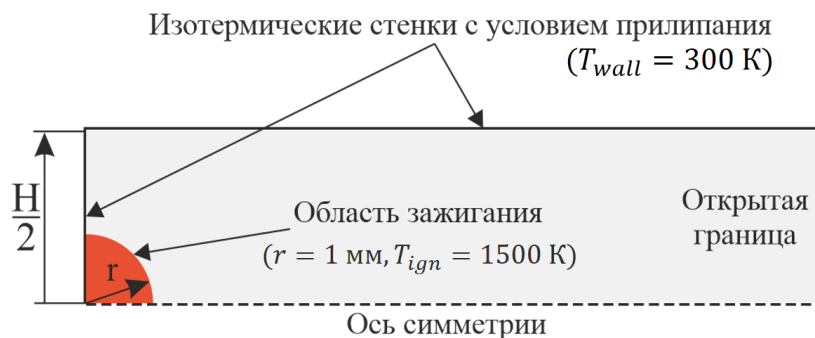


Рис. 1. Схема расчетной области

На первом этапе был проведен анализ стадии экспоненциального ускорения пламени, в рамках которого скорость фронта пламени аппроксимировалась экспоненциальной зависимостью, в которую включены такие настраиваемые параметры как, нормальная скорость распространения пламени S_L и безразмерный параметр α , величина которого порядка единицы [6]:

$$U_f = S_L \theta \exp\left(\frac{\alpha S_L \theta (t - t_0)}{H}\right), \#(5)$$

где U_f – скорость фронта; S_L – нормальная скорость горения; θ – коэффициент расширения; α – параметр порядка единицы; H – ширина канала; t_0 – время начала стадии ускорения пламени.

Результаты расчета показали, в плоском канале скорость фронта пламени имеет заниженные значения по сравнению с экспериментом, проводимым в цилиндрическом канале (рис. 2а), о чем говорит меньший наклон аппроксимационной кривой в логарифмическом масштабе, тогда как в осесимметричной постановке наклон соответствующей кривой приближен к эксперименту (рис. 2б). Слегка завышенные значения скорости фронта пламени на выходе из стадии экспоненциального ускорения объясняются ранее указанной особенностью используемого кинетического механизма. Следует отметить,

что даже при этих обстоятельствах скорость фронта в плоской геометрии значительно ниже, чем в эксперименте.

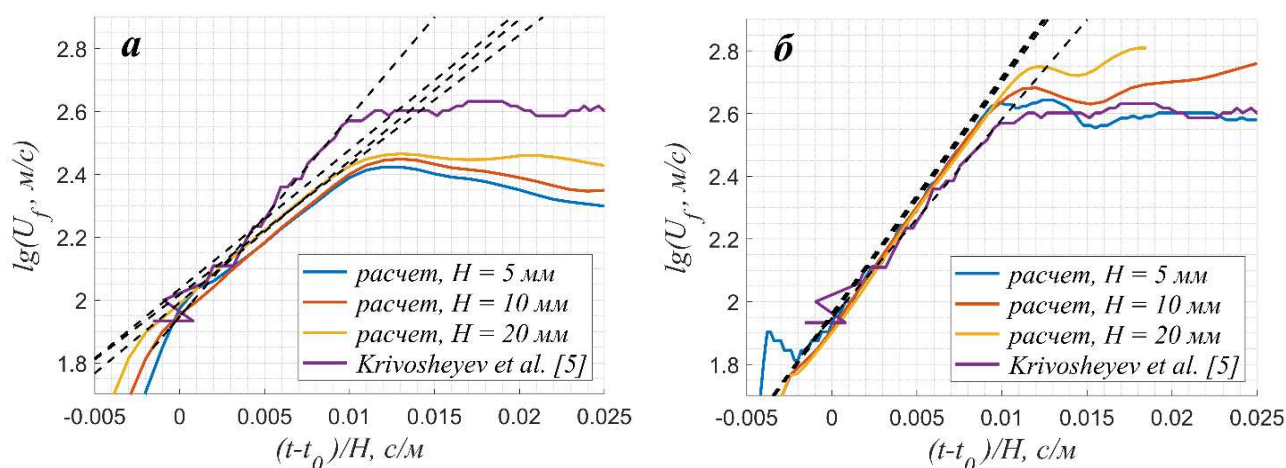


Рис. 2. Скорость фронта пламени на стадии экспоненциального ускорения: (а) расчет в прямоугольной постановке; (б) расчет в осесимметричной постановке

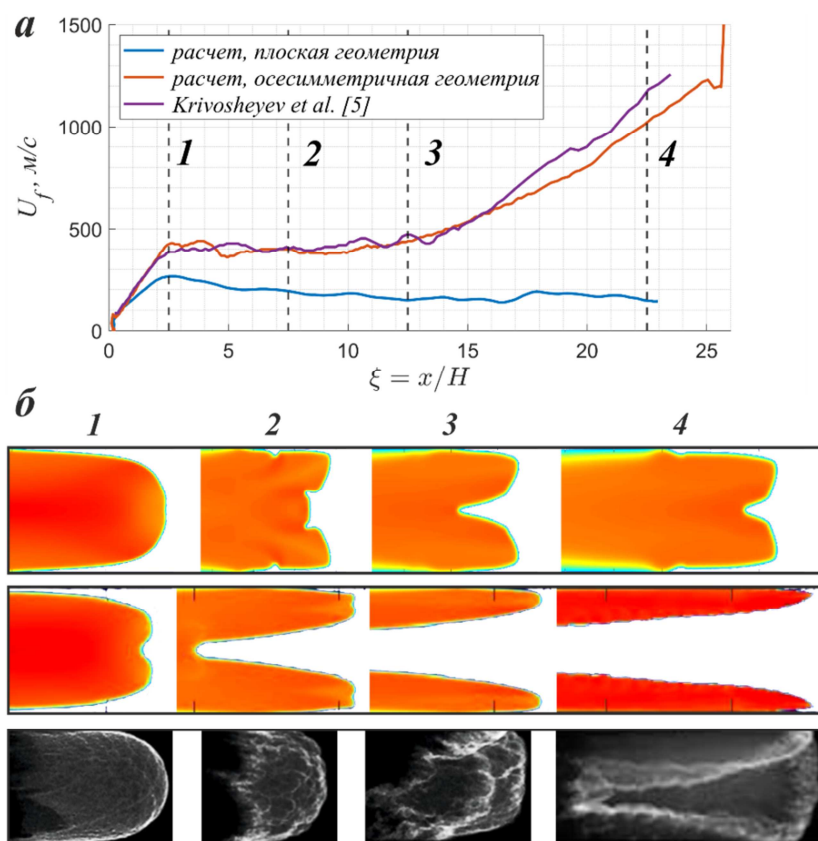


Рис. 3. Скорость фронта пламени смеси ацетилен–кислород (стехиометрия), разбавленной азотом ($X_{N_2} = 0.25$), в зависимости от автомодельной переменной ξ (а); профили фронта пламени: верхний ряд – расчет в плоской геометрии, средний ряд – расчет в осесимметричной геометрии, нижний ряд – эксперимент [5] (б). Номерами отмечены характерные этапы эволюции пламени в эксперименте: 1 – конец стадии ускорения; 2 – квазистационарный режим; 3 – начало второго ускорения; 4 – пламя перед переходом в детонацию

В процессе аппроксимации скорости фронта зависимостью (5) проводится настройка величины скорости плоского фронта пламени $U_{f,1D} = S_L \theta$, что при известном коэффициенте расширения ($\theta \approx 12,3$) позволяет оценить значение нормальной скорости горения в исследуемой смеси. Аппроксимация в плоской геометрии дает значение нормальной скорости $S_L \approx 7,5$ м/с, а в осесимметричной – $S_L \approx 6,6$ м/с, тогда как эксперимент дает значение $S_L \approx 6,5$ м/с. Следует отметить, что полученное таким образом значение нормальной скорости горения есть лишь результат аппроксимации, который в действительности может отличаться от реального значения, в общем-то говоря не зависящего от геометрии.

Сравнение скорости фронта пламени в каналах различной конфигурации с экспериментом (рис. 3а) показало, что переход к цилиндрической геометрии приводит к значительному росту скорости пламени. Кроме того, на стадии тюльпанообразного пламени, когда пристеночные языки пламени выходят вперед, в плоском канале процесс выходит на квазистационарный режим, в котором пламя распространяется с дозвуковой скоростью, тогда как в цилиндрическом канале пламя переходит на стадию второго ускорения с последующим развитием детонации. С другой стороны, по сравнению с плоским каналом в осесимметричном случае наблюдается большая схожесть профилей фронта пламени с экспериментальными (рис. 3б) на заключительной стадии эволюции. За формирование такой структуры ответственно воздействие волны разрежения, формируемой в пристеночной области в продуктах горения и догоняющей фронт пламени. Из сравнения профилей давления в каналах различной геометрии (рис. 4) можно выделить тот факт, что в осесимметричном случае формируются волны сжатия и разрежения более высокой амплитуды, что объясняет наблюдаемые отличия в структурах.

Переход к цилиндрической геометрии открывает возможность детального изучения особенностей развития детонационного режима горения в разбавленных смесях на основе ацетилена. Было, в частности, установлено, что на заключительной стадии эволюции пламени происходит интенсивное нарастание давления на фронте (рис. 5а), что свидетельствует о формировании устойчивой структуры «запертого пламени» [7], и последующим переходом в детонацию с очагом на фронте пламени (рис. 5б).

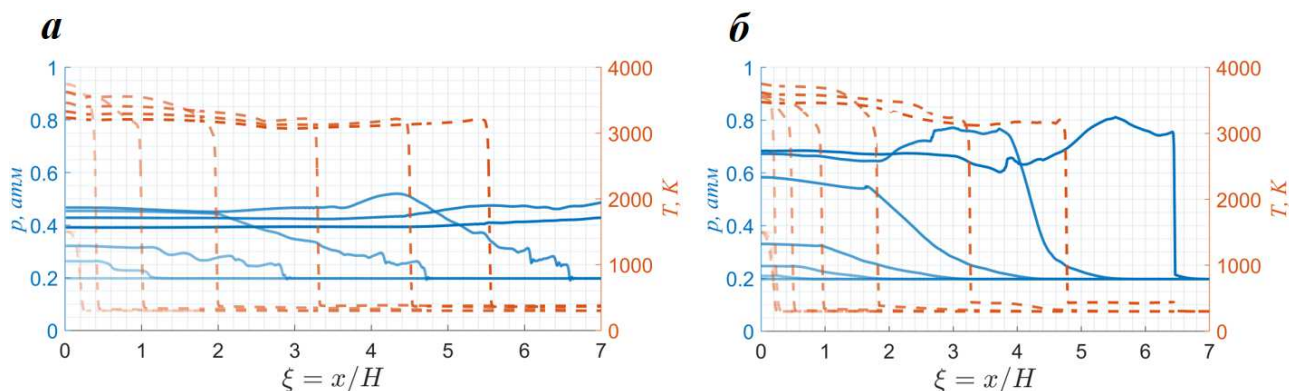


Рис. 4. Профили давления и температуры в центре системы на стадии формирования тюльпанообразного пламени в случае (а) плоского и (б) осесимметричного каналов

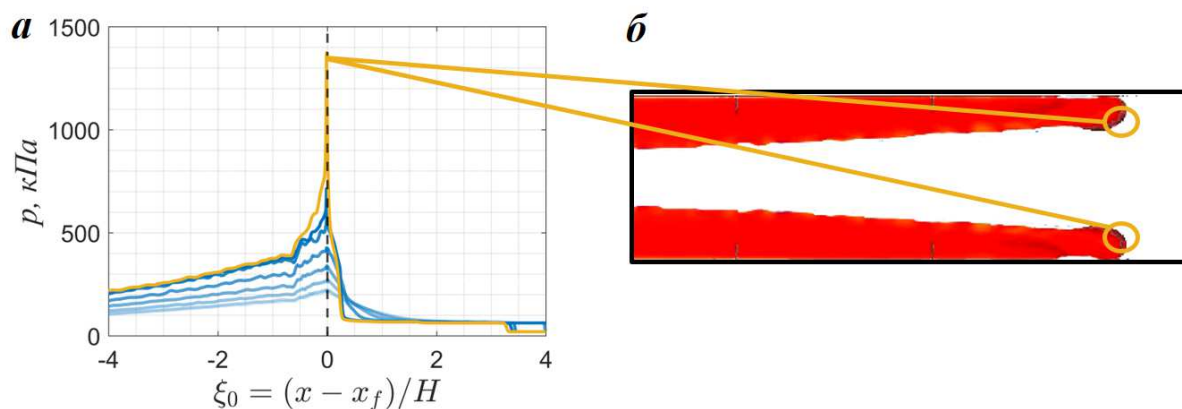


Рис. 5. Профили давления в окрестности фронта пламени (а) и структура фронта пламени в момент перехода горения в детонацию (б)

Таким образом, в рамках настоящей работы были проведены численные расчеты по распространению пламени в каналах различной геометрии, заполненных смесью на основе ацетилена. Было установлено, что в цилиндрических каналах стадия экспоненциального ускорения проходит с большей интенсивностью в соответствии с экспериментом, тогда как в плоских каналах получаются заниженные значения скорости пламени. Кроме того, выявлено, что на стадии тюльпанообразного пламени в плоских каналах устанавливается квазистационарный режим, тогда как в цилиндрических каналах пламя нестационарно вплоть до перехода в детонацию. Численное моделирование показало, что в высокоактивных смесях на основе ацетилена переход горения в детонацию возможен по механизму формирования структуры «запертого пламени» с очагом детонации на фронте пламени.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ (проект № 20-58-04024).

Литература

1. Souza V.A.D., Neville A. Aspects of microstructure on the synergy and overall material loss of thermal spray coatings in erosion-corrosion environments // *Wear*. 2007. Vol. 263. Iss. 1–6. Pp. 339–346.
2. Kuznetsov M., Alekseev V., Matsukov I., Dorofeev S. DDT in a smooth tube filled with a hydrogen–oxygen mixture // *Shock Waves*. 2005. Vol. 14. Pp. 205–215.
3. Varatharajan B.N., Williams F.A. Chemical-kinetic descriptions of high-temperature ignition and detonation of acetylene-oxygen-diluent systems // *Combustion and Flame*. 2001. Vol. 124. Iss. 4. Pp. 624–645.
4. Яковенко И.С., Ярков А.В., Тюрнин А.В., Тереза А.М., Новицкий А.О., Кривошеев П.Н. Оценка возможностей современных кинетических механизмов окисления ацетилена для моделирования нестационарных процессов горения // *Вестн. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*. 2022. Т. 5. № 104. С. 62–85.
5. Krivosheyev P.N., Novitski A.O., Penyazkov O.G. Evolution of the Reaction Front Shape and Structure On Flame Acceleration and Deflagration-to-Detonation Transition // *Russian Journal of Physical Chemistry B*. 2022. Vol. 16. Iss. 4. Pp. 661–669.
6. Yakovenko I., Kiverin A., Krivosheyev P., Kuzmitski V., Navitski A., Penyazkov O., Tyurnin A., Yarkov A. Burning rate estimation based on flame evolution in a channel // *Acta Astronautica*. 2023. Vol. 204. Pp. 768–775.
7. Киверин А.Д., Яковенко И.С. Высокоскоростные режимы распространения пламени в канале и переход к детонации // *Теплофизика высоких температур*. 2020. Т. 58. № 4. С. 707–716.

СОДЕРЖАНИЕ

Антонов Д.В., Высокоморная О.В., Сажин С.С., Стрижак П.А. Моделирование нагрева и испарения однокомпонентных капель.....	3
Антонов Д.В., Стрижак П.А. Микро-взрывная фрагментация в разных практических приложениях.....	8
Ассад М.С., Чернухо И.И. Условия перехода горения в детонацию в малоразмерной импульсной установке с каналом субкритических размеров.....	9
Ахметов А.Р., Журавлев И.А., Колесников П.А., Никитин О.А., Пензин И.В., Петров Д.В., Протас Р.В., Сысков Д.В., Хренков С.Д., Эверт В.Ю. Рентгенографический комплекс РФЯЦ-ВНИИТФ для исследования быстропротекающих процессов.....	13
Бабук В.А., Будный Н.Л., Куклин Д.И., Низяев А.А. Моделирование высокотемпературного многофазного потока продуктов горения алюминизированных твердых топлив.....	20
Баранышин Е.А., Кузьмицкий В.В., Пенязьков О.Г., Севрук К.Л. Измерения времени индукции и реакции водородно-воздушных смесей различного стехиометрического состава в ударной трубе.....	29
Батура Н.И., Руденко А.В., Ереза А.Г. Исследование особенностей запуска сверхзвуковой АДТ.....	36
Белявский Я.Д. Влияние ударных волн на температурное разделение в газах в системах с градиентом давления.....	37
Бочко Т.Н., Дубовик Ю.П., Савчин В.В., Степанюк А.А., Никитенко С.А. Экстракционная пробоподготовка при изучении влияния температуры пиролиза на химический состав пиролизных масел, полученных из резинотехнических отходов.....	44
Быкова Н.Г., Герасимов Г.Я., Глебов В.Н., Дуброва Г.А., Забелинский И.Е., Козлов П.В., Котов М.А., Левашов В.Ю., Малютин А.М., Соловьев Н.Г., Тереза А.М., Шемякин А.Н., Якимов М.Ю. Исследование времен задержки воспламенения в смеси пропилен/кислород/аргон.....	48
Васецкий В.А., Грищенко В.М., Лещевич В.В., Пенязьков О.Г. Исследование сверхзвукового горения перемешанных газовых смесей, инициируемого быстролетающим осесимметричным телом в канале квадратного сечения.....	52
Вершинина К.Ю., Высокоморная О.В., Дорохов В.В., Романов Д.С., Стрижак П.А. Горение жидких композиционных топлив: энергетические и экологические характеристики.....	59
Вершинина К.Ю., Глушков Д.О., Феоктистов Д.В., Паушкина К.К. Перспективы применения композиционных топлив в теплоэнергетике.....	64
Гайдукова О.С., Шлегель Н.Е., Дорохов В.В., Стрижак П.А. Совместное сжигание гидрата метана с традиционными топливами.....	71
Головастов С.В., Бивол Г.Ю., Голуб В.В. Ускорение фронта пламени в шероховатом канале.....	78
Гуренцов Е.В., Еремин А.В., Колотушкин Р.Н., Ходыко Е.С. Исследование свойств сажи в плоском пламени методом спектроскопии комбинационного рассеяния.....	84
Дойникова А.В., Нагула П.К., Третинников Д.Л. Водородная безопасность на энергоблоках АЭС.....	91
Дорохов В.В., Высокоморная О.В., Няшина Г.С., Стрижак П.А. Горение углей и шламов в паровоздушной среде.....	100
Еремин А.В., Золотаренко В.Н., Коршунова М.Р., Михеева Е.Ю. Экспериментальное исследование образования ПАУ и сажи при пиролизе углеводородов.....	108

Зудов В.Н., Шмагунов О.А. Инициирование горения в потоке одновременным воздействием лазерного излучения и внешнего электрического поля.....	116
Ильинков А.В., Щукин А.В., Такмовцев В.В., Попов И.А. Вихревая стабилизация горения в потоке.....	123
Исаев С.А., Никущенко Д.В., Зубин М.А. Моделирование до- и сверхзвукового обтекания воздухом пластины с наклонной неглубокой канавкой	131
Киверин А.Д., Тюрнин А.В., Яковенко И.С., Ярков А.В. О подобии в задачах ускорения пламени и перехода в детонацию	137
Кот В.А. Полиномиальное решение одного уравнения в теории теплового взрыва: краевая задача Брату.....	140
Кот В.А. Начальная задача типа Брату: известные подходы и новые решения.....	154
Кот В.А. Задача о проникновении потока лучистой энергии: волна Маршака	172
Кривошеев П.Н., Севрук К.Л., Скилондъ А.В., Пенязьков О.Г., Тереза А.М. Экспериментальное и теоретическое исследования воспламенения бедных смесей водорода с воздухом при нормальном давлении	180
Кузнецов Г.В., Стрижак П.А., Волков Р.С., Жданова А.О. Идентификация очага возгорания в помещении при помощи специализированной нейросети.....	185
Кулешов Ф.С., Головастов С.В., Бивол Г.Ю., Голуб В.В. Влияние перегородки из пористой меди на распространение фронта пламени в водородно-воздушной смеси	189
Луховицкий Б.И., Шарипов А.С. Комбинированное использование метода анализа графа прямых связей и анализа чувствительности для редуцирования детального кинетического механизма горения керосина	195
Луховицкий Б.И., Шарипов А.С., Кадочников И.Н. О влиянии термической неравновесности и ионизации на показатель преломления реагирующего воздуха	200
Миронов В.Н., Голомако Е.С., Кривошеев П.Н., Пенязьков О.Г., Севрук К.Л. Визуализация течений при лазерном инициировании горения композитов из фрагментированного пористого кремния и перхлората натрия в инертных газах и азоте	205
Мухина М.А., Копьев Е.П., Садкин И.С., Шадрин Е.Ю. Изучение процесса горения жидких углеводородных топлив, распыляемых перегретым водяным паром, в присутствии газов-разбавителей	215
Орлов М.Ю., Глазырин В.П., Фазылов Т.В. Исследование поведения слоистых преград при ударе	221
Скилондъ А.В., Пенязьков О.Г., Леончик А.И. Границы применимости ударных труб в исследованиях химической кинетики неразбавленных водородно-воздушных смесей.....	227
Сыродой С.В., Кузнецов Г.В., Пурин М.В., Саломатов Вл.В. Математическое моделирование процесса зажигания частицы древесноугольного топлива, выполненной в виде пеллеты.....	234
Тереза А.М., Агафонов Г.Л., Андержанов Э.К., Бетев А.С., Медведев С.П., Хомик С.В., Черепанова Т.Т. Изучение химических превращений в ламинарном пламени водородно-воздушной смеси.....	235
Тетерев А.В., Козлов И.М., Мисюченко Н.И., Рудак Л.В. Модель оценки опасности воспламенения горючих смесей на основе скорости энерговыделения.....	237
Тупикин А.В., Дулин В.М. Горение углеводородного топлива в слабом электрическом поле	243
Чернышов М.В., Савелова К.Э. Регулярное и маховское отражение скачков уплотнения с импульсным энергоподводом	251
Шарипов А.С., Луховицкий Б.И., Пелевкин А.В. Простые полуэмпирические модели для поляризуемости электронно-возбужденных и заряженных компонентов.....	259

Шарипов А.С., Пелевкин А.В., Луховицкий Б.И. Кинетический подмеханизм для описания хемилюминесценции OH^* при окислении различных топлив.....	262
Яковенко И.С., Медведков И.С., Киверин А.Д. Развитие неустойчивости фронта горения газовых смесей с содержанием микрокапель воды в открытом канале.....	267
Ярков А.В., Киверин А.Д., Яковенко И.С. Численное моделирование процесса перехода горения в детонацию в смесях на основе ацетилена в каналах различной геометрии.....	268

Научное электронное издание

СБОРНИК ДОКЛАДОВ

**VII Минский международный colloquium
по физике ударных волн, горения и детонации
2–5 октября 2023 г.**

Ответственный за выпуск Т. А. Баранова

Подписано к использованию 29.09.2023 г.

Дата размещения на сайте: 29.09.2023 г.

Объем данных в формате PDF 37,7 Мб

Системные требования:

PC не ниже класса Pentium I, 32 Mb RAM; свободное место на HDD 500 Mb;
Windows 95/98; Adobe Acrobat Reader; мышь

Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси.

ул. П. Бровки, 15, 220072, г. Минск

www.itmo.by