

ВРЕМЕНА ЗАДЕРЖКИ ОБРАЗОВАНИЯ УГЛЕРОДА ПРИ ВОСПЛАМЕНЕНИИ МЕТАНО-КИСЛОРОДНОЙ СМЕСИ

Д.А. Тропин, А.В. Федоров

*Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН, 630090, Новосибирск*

Процесс образования углерода из углеводородного топлива, сопровождающийся неполным сгоранием или пиролизом частиц, исследуется в течении многих лет. Исходно основной целью таких исследований было уменьшить количество сажи и таким образом увеличить эффективность процесса горения. С расширением границ применения углеродных наночастиц в промышленности (в производстве резины, краски, пластика и др.) интерес к этим процессам возрос. Сегодня, с открытием новых форм углерода (фуллерен, нанотрубки, графен и т.д.) процессы образования конденсированных частиц углерода находятся в центре внимания широкого круга исследований.

Постановка задачи. Рассмотрим задачу о воспламенении смеси метан-кислород в отраженной ударной волне (УВ) вблизи торца ударной трубы. Температура газа определяется уравнениями математических моделей [1–2]. Массовые концентрации компонентов газовой смеси определяются уравнениями детальной кинетики [3], дополненной реакциями образования углерода [4, 5].

Результаты расчетов. На рис. 1. представлены изменения массовой концентрации углерода при воспламенении богатых смесей метана и кислорода. Начальные массовые концентрации метана и кислорода приведены на рисунке. Видно, что существует некоторая задержка по времени в образовании углерода. Причем эта задержка тем больше, чем меньше температура газовой смеси. Т.е. существует некоторая температурная зависимость времени задержки образования углерода от температуры. По истечении этого времени происходит очень быстрое нарастание массовой концентрации углерода, которая в дальнейшем из-за реакций рекомбинации углерода ($C + O_2 \rightleftharpoons CO + O$, $C + OH \rightleftharpoons CO + H$) плавно уменьшается до некоторого равновесного значения, зависящего от начальной температуры смеси. Кроме того, оказалось, что уменьшение начальной температуры смеси приводит к уменьшению максимума концентрации углерода и при температуре 1000 К образование углерода вообще не наблюдается. Т.е. при таких температурах реакции образования углерода протекают с очень маленькой скоростью.

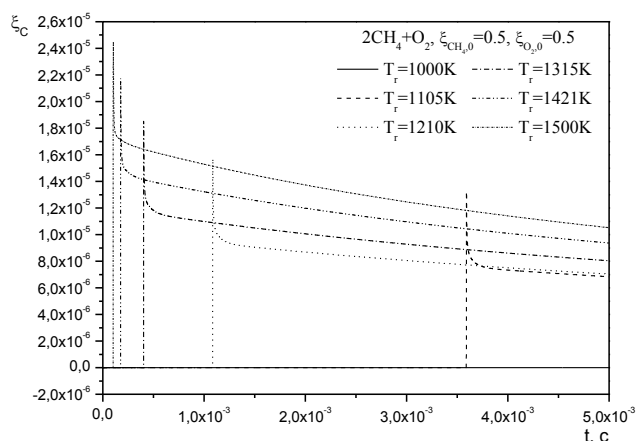


Рис. 1. Изменение массовой концентрации углерода со временем при воспламенении богатой смеси метана и кислорода.

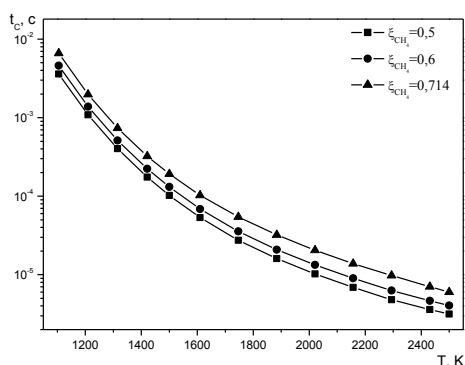


Рис. 2. Зависимость времени задержки образования углерода от температуры смеси.

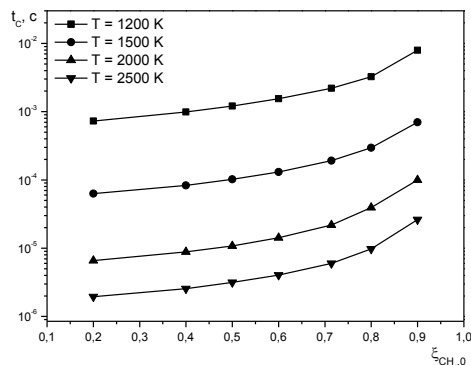


Рис. 3. Зависимость времени задержки образования углерода от начальной концентрации метана в смеси.

Далее, на рис. 2 представлены зависимости времени задержки образования углерода от температуры для различных составов смесей ($2CH_4 + O_2$, $3CH_4 + O_2$, $5CH_4 + O_2$). Видно, что увеличение температуры смеси, так же как и уменьшение концентрации метана, приводит к уменьшению времени задержки образования углерода. Причем из рис. 3, на котором представлены зависимости времени задержки образования углерода от начальной концентрации метана в смеси, следует, что при увеличении концентрации метана, времена задержки образования углерода монотонно возрастают для всего рассматриваемого диапазона температур.

Выводы. Построена физико-математическая модель воспламенения смеси метан-кислород за отраженной УВ, учитывающая детальную кинетику образования углерода.

Рассчитаны распределения концентрации углерода за отраженной УВ. Выявлено, что существует задержка по времени в образовании углерода. Причем эта задержка тем больше, чем меньше температура газовой смеси и чем больше начальная концентрация метана в смеси. Кроме того, по истечении этого времени происходит быстрое нарастание массовой концентрации углерода, которая в дальнейшем за счет рекомбинации убывает до некоторого равновесного значения, зависящего от начальной температуры смеси.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 14-08-31044-мол_а, 15-08-01947-а) и Министерства образования и науки Российской Федерации (проект № 211, задача №2015/140).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тропин Д.А., Федоров А.В. Физико-математическое моделирование подавления детонации инертными частицами в смесях метан-кислород и метан-водород-кислород // Физика горения и взрыва, 2014, Т.50, № 5, С. 48–52.
2. Тропин Д.А., Федоров А.В., Пенязков О.Г., Лешевич В.В. Времена задержки воспламенения в метано-воздушной смеси в присутствии частиц железа // Физика горения и взрыва. 2014. Т.50, № 6.
3. Вестбрук Ч., Уртъев П. Применение химической кинетики для определения критических параметров газовой детонации // Физика горения и взрыва, 1983, Т. 19, №6, С. 65-76.
4. Miller J.A., Melius C.F. Kinetic and Thermodynamic Issues in the Formation of Aromatic Compounds in Flames of Aliphatic Fuels // Combustion and Flame, 1992, V. 91, pp. 21-39.
5. Murrell J.N., Rodriguez J.A. Predicted rate constants for the exothermic reactions of ground state oxygen atoms and CH radicals // J. Mol. Struct. THEOCHEM. 1986, V. 139, pp. 267.