

Воспламенение и горение предварительно перемешанного пара керосина в воздухе

А.В. ФЕДОРОВ, Д.А. ТРОПИН

Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН
e-mail: fedorov@itam.nsc.ru

В работе предложена математическая модель, описывающая воспламенение и горение пара керосина в воздухе. На основе анализа экспериментальных данных по зависимостям времени задержки воспламенения от температуры получена аппроксимационная формула для этого параметра в зависимости от концентраций компонент и температуры смеси. Описан метод определения предэкспоненциального множителя в уравнении кинетики горения керосина как функции от локальной температуры смеси, что позволило удовлетворительно описать время горения смеси. На основе данной кинетики описана структура детонационной волны в стехиометрической смеси керосин - кислород - азот/аргон для режима Чепмена - Жуге и пересжатого.

Введение. Исследование воспламенения и горения паров углеводородных топлив в воздухе представляет большой практический и фундаментальный интерес. Это обусловлено широким применением таких рабочих сред в авиационной и ракетной промышленности. Важнейшей характеристикой процессов химического превращения топлив, наряду с теплотой сгорания, является и время задержки воспламенения τ_{ign} . Действительно, задержка воспламенения при определенной температуре, давлении и избытке/недостатке окислителя - важнейший параметр, характеризующий реакционную способность смеси. По зависимости этой величины от состояния среды можно сравнивать реагирующие вещества и смеси друг с другом, и тем самым определять оптимальные, в том или ином смысле, параметры (состав, давление и температуру смеси).

Для математического описания физико-химических процессов в гетерогенных/гомогенных смесях с участием керосина в двигательных установках необходимо знание их детальной/приведенной кинетики химического превращения, параметров процессов фазовых переходов и т.п. Ниже мы остановимся на использовании приведенной кинетики для исследования процессов распространения волн горения в предварительно перемешанной смеси пара керосина, окислителя и инертного газа. Для этого примем известную схематизацию процесса химического превращения. А именно, разобьем ее на две временные фазы. В первой из них - на стадии воспламенения, будем считать параметры смеси перемешанных газов слабо изменяющимися, но достаточными для воспламенения, во второй - в процессе горения состояние смеси считаем переменным.

Время задержки воспламенения. Первая стадия процесса химического превращения реагирующей смеси пара керосина и окислителя в присутствии инертного газа представляет собой период индукции и описывается простейшим уравнением:

$$\frac{d\beta}{dt} = -\frac{1}{\tau_{ign}}, \quad (1)$$

где β - параметр индукции. В начале зоны индукции $\beta = 1$, в конце $\beta = 0$.

Для области задержки воспламенения необходимо знать зависимость $\tau_{ign}(p, T, \xi_i)$, где p - давление смеси в начальном состоянии, T - локальная температура, ξ_i - концентрация компонент смеси. В литературе встречается множество таких аппроксимационных формул, но каждая из них описывает, как правило, данные экспериментов только соответствующего автора.

На основе анализа экспериментальных данных [1-3] нами предлагается следующая зависимость времени задержки воспламенения от концентраций компонент смеси $JP - 10(C_{10}H_{16})/O_2/Ar$:

$$\tau_{ign} = 1.3 \cdot 10^5 \cdot \xi_{ker}^{0.65} \cdot \xi_{O_2}^{-0.144} e^{\frac{95171}{RT}}, \quad (2)$$

где ξ_{ker} , ξ_{O_2} - относительные массовые концентрации керосина и кислорода, соответственно.

На рис. 1 представлены экспериментальные данные [1-2] по зависимости времени задержки воспламенения смеси $JP - 10(C_{10}H_{16})/O_2/Ar$ от температуры. Видно, что формула (2) дает заниженную оценку для данных [1], однако удовлетворительно аппроксимирует данные [2] в диапазоне температур (1000, 2100) К. На рис. 2 приведено сравнение данных экспериментов [3] и полученных по нашей зависимости (2). Видно, что эта формула удовлетворительно аппроксимирует экспериментальные данные в диапазоне температур (1000, 1900) К. Эксперименты [3] были проведены при одинаковых термодинамических условиях, отличался только состав смеси: стехиометрия, обогащенная или обедненная окислителем смесь.

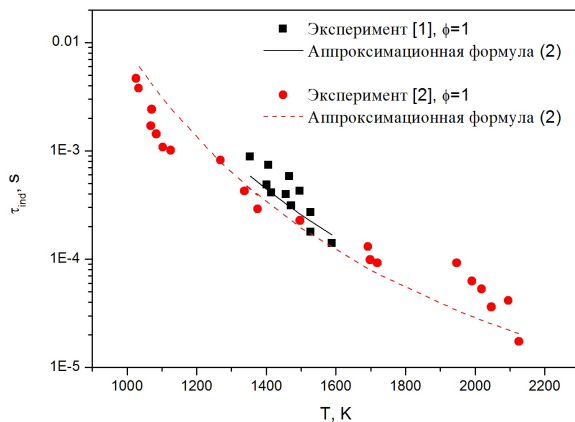


Рис. 1. Зависимость времени задержки воспламенения от температуры. Сравнение с экспериментами [1], [2].

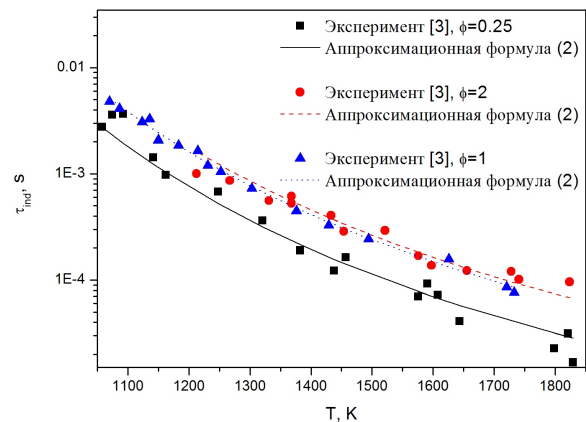


Рис. 2. Зависимость времени задержки воспламенения от температуры. Сравнение с экспериментами [3].

Горение керосина в УВ. Вторая стадия - это горение смеси керосина с окислителем. Это явление мы сразу рассмотрим в рамках физической задачи о распространении замороженной ударной волны с последующей зоной неравновесного горения. Для этого рассмотрим пространство, заполненное стехиометрической смесью пара керосина и воздуха $C_{10}H_{16} + 14 \{O_2 + 3.76N_2\}$. Пусть по смеси распространяется УВ, за фронтом которой происходит воспламенение и последующее ее горение. Уравнения, описывающие такое течение в системе координат, связанной с фронтом УВ, имеют стандартный вид трех законов сохранения - массы, импульса и энергии для смеси в целом:

$$\rho U = c_1 = \rho_0 U_0,$$

$$p + c_1 U^2 = c_2 = p_0 + c_1 U_0^2, \quad (3)$$

$$\bar{c}_p T + \sum_{\alpha=1}^5 \xi_{\alpha} h_{0,\alpha} - \bar{c}_p T_{00} + \frac{U^2}{2} = c_3 = \bar{c}_p T_0 + \sum_{\alpha=1}^5 \xi_{\alpha,0} h_{0,\alpha} - \bar{c}_p T_{00} + \frac{U_0^2}{2},$$

где $\bar{c}_p = \sum_{\alpha=1}^5 \xi_{\alpha} c_{p,\alpha}$, $c_{p,\alpha}$ - теплоемкость при постоянном давлении компоненты α , ρ - средняя плотность, p - давление, U - скорость, T - температура смеси керосина, воздуха, углекислого газа и воды, ξ_{α} - массовая концентрация компонента, $h_{0,\alpha}$ - энтальпия образования компонента. Величина α меняется от 1 до 5, $T_{00} = 298.15$ К. Индекс „0“ соответствует начальному состоянию, индекс „1“ соответствует кислороду, „2“ - керосину, „3“ - углекислому газу, „4“ - водяному пару, „5“ - азоту. Дополним (3) уравнением состояния смеси:

$$p = \rho R T \left[\frac{\xi_1}{\mu_1} + \frac{\xi_2}{\mu_2} + \frac{\xi_3}{\mu_3} + \frac{\xi_4}{\mu_4} + \frac{\xi_5}{\mu_5} \right] \quad (4)$$

Массовые концентрации компонент связаны соотношениями, которые следуют из интегралов уравнений кинетики для компонент: $\xi_1 - \xi_{1,0} = -\bar{\nu}_1/\bar{\nu}_2 (\xi_{2,0} - \xi_2)$, $\xi_3 - \xi_{3,0} = \bar{\nu}_3/\bar{\nu}_2 (\xi_{2,0} - \xi_2)$, $\xi_4 - \xi_{4,0} = \bar{\nu}_4/\bar{\nu}_2 (\xi_{2,0} - \xi_2)$, $\xi_5 = \xi_{5,0}$, $\bar{\nu}_{\alpha} = \nu_{\alpha} \mu_{\alpha}$. Тем самым, зная закон изменения массовой концентрации керосина, определяем концентрации и всех остальных компонент смеси. Изменение массовой концентрации керосина будем описывать следующим уравнением необратимой химической кинетики:

$$\frac{d\xi_2}{d\eta} = -\frac{\nu_2 \mu_2}{\rho U} K(T) \xi_1 \xi_2 e^{-\frac{E}{RT}} \quad (5)$$

Для аналитического исследования такой постановки получим предварительно уравнение для скорости смеси, которое описывает возможные особенности в течении за фронтом замороженной УВ. Действительно, с помощью (3)-(5) найдем уравнение для скорости смеси в виде:

$$\frac{dU}{d\eta} = \frac{U d\xi_2/d\eta [-p_{\xi_2} \bar{c}_p + (c_{p,\xi_2} T + Q) p_T]}{\rho \bar{c}_v (U^2 - c_f^2)} \quad (6)$$

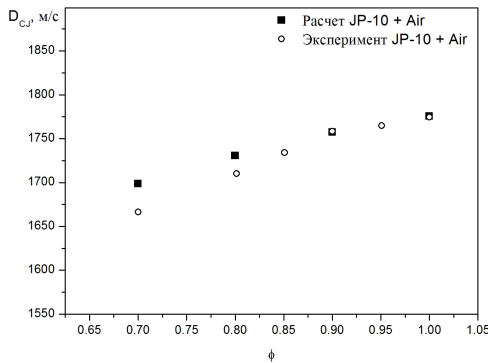


Рис. 3. Зависимость скорости ДВ в керосино - воздушной смеси от стехиометрического соотношения. Сравнение с экспериментом [4].

Верификация кинетической схемы горения.

Предварительно были проведены тестовые расчеты, верифицирующие используемую кинетическую схему (5). На рис. 3 показаны экспериментальные [4] и расчетные зависимости скорости ДВ в керосино - воздушной смеси от стехиометрического соотношения ϕ . Видно, что в диапазоне стехиометрических соотношений от 0.7 до 1 (обедненная окислителем смесь) расчетные данные удовлетворительно описывают экспериментальные. Однако, для обогащенной окислителем смеси ($\phi > 1$) имеется расхождение с экспериментом, т.е. эта схема справедлива при $\phi \in [0.7, 1]$. Поэтому, применим ее для расчета структуры ДВ в керосино - воздушной смеси для $\phi \in [0.7, 1]$.

Время горения керосина. Уравнение кинетики (5) описывает изменение массовой концентрации керосина, в нем неизвестным будем считать предэкспонентный множитель $K(T)$.

Определим этот множитель, предполагая, что время горения керосина - τ_{comb} равно времени задержки воспламенения, умноженному на некоторую постоянную величину, большую или меньшую единицы. Назовем это предположением „А“.

При расчете соответствующей краевой задачи определим время горения в расчетах по следующему критерию. Будем считать, что время горения - время, по прохождении которого горючего остается 10% от начального количества. Для керосино - воздушной смеси время задержки воспламенения можно выразить, например, такой формулой, приведенной в [5]:

$$\tau_{ign} = 10^{-9} \left(\frac{p}{p_0} \right)^{-0.39} \phi^{-0.57} e^{-\frac{14700}{T}} \quad (7)$$

Таким образом, зная время задержки воспламенения по предложению „А“ имеем оценку времени горения керосина для различных чисел Маха УВ.

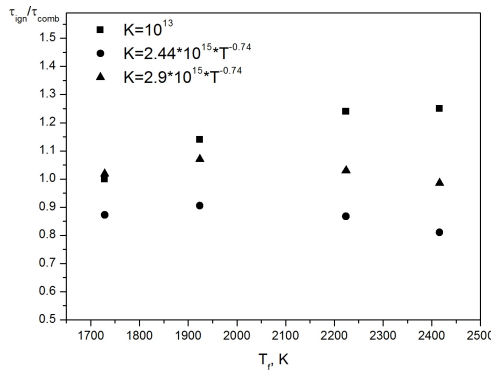


Рис. 4. Зависимость отношения времени задержки воспламенения к времени горения от температуры на замороженной УВ для различных зависимостей $K(T)$.

Постулируем такой вид $K(T)$: $K(T) = K_0 T^{-0.74}$, где T - локальная температура за замороженной УВ, K_0 - искомая величина. Была проведена серия расчетов с подобными зависимостями и найдена такая, при которой будет выполняться предположение "А". На рис. 4 представлены зависимости отношения времен задержки воспламенения и горения от температуры для различных значений константы K_0 . Видно, что при изменении этой константы отношение $\tau_{ign}/\tau_{comb} \rightarrow 1$. В результате имеем:

$$K(T) = 2.9 \cdot 10^{15} T^{-0.74} \quad (8)$$

С помощью этой функции мы смогли удовлетворительно описать зависимость времени горения смеси керосина и кислорода от числа Маха инициирующей УВ. Тем самым, нами был предложен полумпирический метод определения зависимости предэкспонента от локальной температуры смеси, который позволяет удовлетворительно описать время горения смеси за УВ.

Описание структуры зоны воспламенения и горения за фронтом УВ. По таким образом введенной математической модели с учетом стадий воспламенения и горения были проведены расчеты в поставленной задаче. Некоторые результаты обсуждаются ниже. На рис. 5а показаны распределения давления, температуры и плотности за УВ, отнесенные к их замороженным значениям, для режима нормальной детонации Чепмена - Жуге. На рисунке в точке „0“ находится фронт замороженной УВ, которая движется справа налево. За фронтом следует зона индукции, в которой параметры не меняются, и далее зона горения. Как видно основное изменение термодинамических величин (давления, температуры и плотности) происходит в узкой области толщиной 2 мм (от $x = 0.0022$ до $x = 0.0042$ м), которая является зоной химической реакции. Отметим, что скорость химической реакции достигает своего максимума в точке $x = 0.0038$ м, затем быстро уменьшается и в точке $x = 0.0042$ м составляет приблизительно 30% от максимального значения (рис. 5б). Также следует отметить, что и концентрация горючего быстро уменьшается, на длине около 2 мм в зоне реакции изменение составляет 90% (рис. 5б).

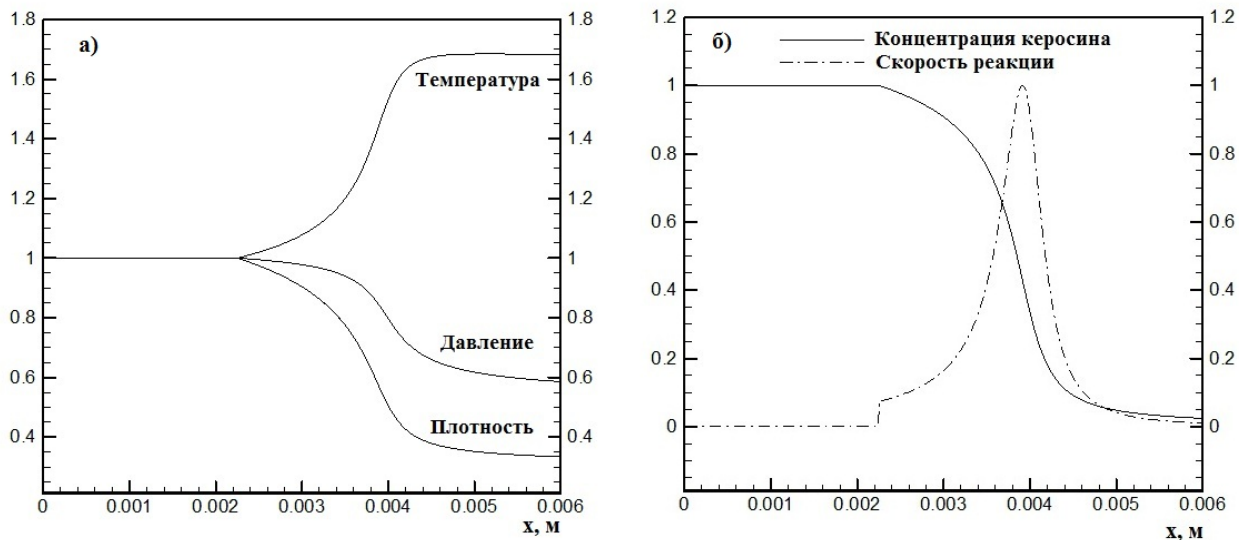


Рис. 5. Распределение параметров в ДВ: а) давление, температура и плотность смеси, б) концентрация керосина и скорость реакции.

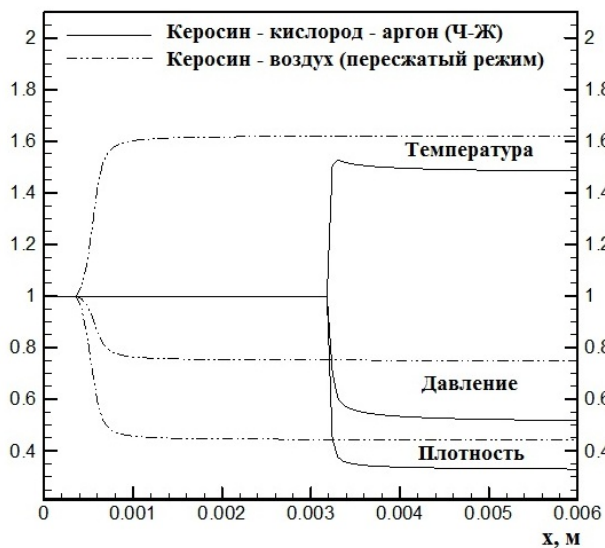


Рис. 6. Распределение давления, температуры и плотности смеси в ДВ.

времен задержки воспламенения в обоих смесях использовались вышеприведенные формулы (2), (7).

Выводы.

1. Предложена физико-математическая модель воспламенения и горения керосина в рамках двухстадийной кинетики, справедливая в области недостатка окислителя $\phi \in [0.7, 1]$.
2. Предложены аппроксимационные зависимости времени задержки воспламенения в функции от температуры, давления и начальных концентраций компонент для смесей керосин - воздух, полученные на основе обработки ряда экспериментальных данных.

На рис. 6 приведено сравнение параметров смеси за ДВ в керосино - воздушной смеси (смесь 1) и смеси керосин - кислород - аргон (смесь 2). В обоих случаях скорость ДВ была равна 2040 м/с, концентрации компонент смеси были одинаковыми и соответствовали концентрациям в стехиометрической керосино - воздушной смеси. Для смеси 1 такая скорость ДВ соответствует режиму пересжатой детонации, для смеси 2 - режиму Чепмена - Жуге. Видно, что длина зоны реакции в смеси 1 больше ($\lambda = 0.44$ мм), чем в смеси 2 ($\lambda = 0.14$ мм). Это вызвано тем, что при одинаковой скорости ДВ в смеси 2 параметры за замороженной УВ выше, в частности температура отличается примерно в полтора раза ($T_f = 2192$ К в смеси 1 и $T_f = 3171$ К в смеси 2). Для описания

3. Дан полуэмпирический метод определения зависимости предэкспоненциального множителя в уравнении кинетики горения керосина от локальной температуры смеси за фронтом замороженной УВ, который позволяет удовлетворительно описать заданное время горения смеси за УВ.
4. Используя разработанную физико-математическую модель, описана структура детонационной волны в стехиометрической смеси в режимах Чепмена - Жуге и пересжатом.

Список литературы

- [1] D.F. DAVIDSON, D.C. HORNING, J.T. HERBON, R.K. HANSON. Shock tube measurements of JP-10 ignition // Proceedings of the Combustion Institute. 2000. V. 28. pp. 1687–1692.
- [2] SU WANG, HUA-JIE GOU, BING-CHENG FAN, YU-ZHONG HE, SHENG-TAO ZHANG, JI-PING CUI. Shock Tube Study of JP-10 Ignition Delay Time // Chinese Journal of Chemical Physics. 2007. V. 20, № 1. pp. 48–52.
- [3] S. WANG, B.C. FAN, Y.Z. HE, J.P. CUI. Shock tube study of kerosene ignition delay // Chinese Journal of Chemical Physics. 2005. V. 18.
- [4] J. M. AUSTIN, J. E. SHEPHERD. Detonations in hydrocarbon fuel blends // Combustion and Flame. 2003. V. 132, Issues 1-2. pp. 73–90.
- [5] B. FRANZELLI, E. RIBER, M. SANJOS, T. POINSOT. A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flames // Combustion and Flame. 2010. V157. pp. 1364–1373.