

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В МЕТАНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ В ПРИСУТСТВИИ ЖЕЛЕЗНЫХ ЧАСТИЦ

А.В. Шульгин, Д.А. Тропин, А.В. Федоров

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

Вопросы воспламенения и горения воздушно-метановых смесей в настоящее время являются актуальными в угледобывающей отрасли. Кроме того, процессы химических превращений в этих смесях, наполненных мелкими частицами различных металлов позволяют контролировать явления воспламенения и горения. При этом частицы выступают как параметры управления этими процессами. Поэтому тема данного исследования представляет значительный практический интерес.

Постановка задачи. Рассмотрим область, заполненную в начальный момент времени смесью газов метан-кислород-азот и продуктами их горения при высоких давлениях (10–12 атм), температуре (900–1400 К) и распределенными мелкодисперсными частицами железа. Температуры газа и частиц в точном приближении определяются уравнениями математических моделей [1–3]. Массовые концентрации компонентов газовой смеси определяются уравнениями детальной кинетики [4]. Изменения массовой концентрации частиц описывается уравнением приведенной кинетики для роста окисной пленки [5].

Результаты расчетов. Оценим влияние тепловыделения за счет горения частиц на время задержки воспламенения. На рис. 1 приведены данные расчетов времени задержки воспламенения t_{ign} стехиометрической смеси метан-воздух ($9.51\% \text{CH}_4 + 19.01\% \text{O}_2 + 71.48\% \text{N}_2$) и стехиометрических смесей метан-воздух с частицами железа радиусом 5, 10, 15 мкм от начальной температуры смеси T_{10} по модели [1] и по настоящей модели для значений параметра α_1 , определяющего количества тепла, выделяющегося при горении частиц, равного 0 (рис. 1а) и $2 \cdot 10^{-5}$ (рис. 1б). Начальное давление смеси составляло 10 атм. Кривые, расположенные левее соответствуют расчетам по модели [1], правее и несколько выше — по модели настоящей работы. Сплошными линиями обозначены результаты расчетов для частиц с начальным радиусом 5 мкм, штриховыми — 10 мкм, точечными — 15 мкм. Квадратными символами показаны результаты расчетов для метано-воздушной смеси без реагирующих частиц железа.

Видно, что с увеличением значения α_1 , т.е. с увеличением количества теплоты, выделяемого в частицах, при более низких начальных значениях температуры смеси время задержки воспламенения уменьшается, а при более высоких — увеличивается. Так же, как и в случае модели [1], зависимость $t_{ign} = t_{ign}(T_{10})$ можно разделить на две области. Область 1, в которой частицы уменьшают время задержки воспламенения метано-воздушной смеси без частиц (при низких температурах смеси, $T < 1150$ К по модели [1]) и область 2, в которой они это время увеличивают (при высоких температурах смеси, $T > 1150$ К по модели [1]). При этом увеличение радиуса частиц в первой области приводит к уменьшению времени задержки воспламенения, а во второй к обратному эффекту — увеличению времени задержки воспламенения. Однако граница раздела этих областей по настоящей модели находится при более низких температурах смеси, нежели по модели [1], $T \sim 1050$ К.

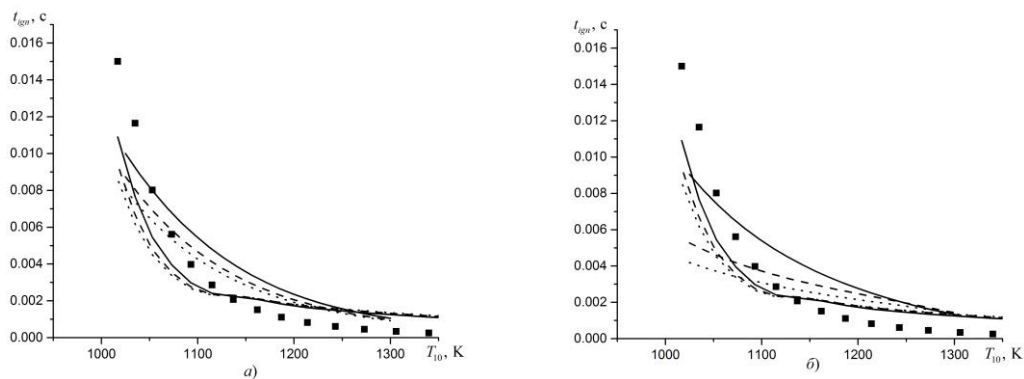


Рис. 1. Зависимости времени задержки воспламенения смеси метан-воздух-реагирующие частицы от начальной температуры смеси.

Также отметим, что из сопоставления данных рис. 1 следует, что в то время как расчет по модели [1] показывает слабое влияние радиусов частиц на значения времен задержки воспламенения, предложенная в настоящей работе модель выявила более существенное влияние размера частиц на этот параметр, особенно в области 1 относительно низких начальных температур газовой среды.

Проведем сопоставление расчетных и экспериментальных [1] данных времен задержки воспламенения t_{ign} в зависимости от начальных значений температуры смеси T_{10} и давления P_0 по модели упрощенной кинетики [1] и точной модели. В табл. 1 представлено сравнение расчетных и экспериментальных данных по временам задержки воспламенения смесей метан-воздух и метан-воздух-частицы. Два последних столбца соответствуют расчетам по модифицированной математической модели.

Из табл. 1 видно разделение на описанные выше две области воспламенения: область, в которой частицы ускоряют воспламенение газовой смеси, и область, в которой замедляют. Так, для экспериментальных данных 1 – 4 расчетные времена задержки воспламенения чистого (без частиц) газа больше, чем экспериментальные и добавление реагирующих частиц в чистую газовую смесь в расчетах приводит к уменьшению времен задержек воспламенения газовой смеси (область 1). Однако, в эксперименте 5 наблюдается обратная картина: расчетные времена задержки воспламенения чистого (без частиц) газа меньше, чем экспериментальные и добавление реагирующих частиц в чистую газовую смесь в расчетах приводит к увеличению времен задержек воспламенения газовой смеси (область 2). Таким образом, добавление частиц в реагирующую газовую смесь с такими термодинамическими параметрами может приводить как к уменьшению, так и к увеличению времен задержки воспламенения реагирующей газовой смеси. Отметим, что расчеты, проведенные по предложенной в настоящей работе модели, при низких значениях начальной температуры смеси (менее 1100 К) дают более близкие к экспериментальным значения времен задержки воспламенения по сравнению с моделью [1], однако при высоких температурах (более 1100 К) модель [1] дает более близкие к экспериментальным времена задержки воспламенения.

Таблица 1. Расчетные и экспериментальные данные времени задержки воспламенения смесей метан-воздух и метан-воздух-частицы.

№	T_{10} , К	P_0 , атм	t_{ign} , мс				
			Эксперимент [1]	Расчет (газ) [1]	Расчет (газ+частицы) [1]	$r_0 = 10$ мкм	$r_0 = 15$ мкм
1	930	16.99	6	13.6	9	9.4	6.8
2	994	10.29	6.15	8.25	6.54	7.3	6.2
3	1083	10.58	2.5	4.88	3.5	4.0	3.2
4	1107	9.82	1.35	3.63	1.78	3.6	2.8
5	1214	11.38	1.6	0.813	1.65	2.1	1.8

ВЫВОДЫ

1. Предложена физико-математическая модель воспламенения смесей метан-воздух в присутствии мелких металлических частиц, учитывающая детальные кинетические механизмы химических превращений реагирующей газовой смеси и гетерогенную химическую реакцию окисления и кинетику нарастания окисной пленки частиц.
2. Выявлено влияние температуры и давления смеси метан-воздух на времена задержки воспламенения. Показано, что в зависимости от температуры смеси существует две области воспламенения: область 1, в которой частицы ускоряют воспламенение газовой смеси (при низких температурах смеси, менее 1050 К); область 2, в которой частицы замедляют воспламенение газовой смеси (при высоких температурах смеси, более 1050 К).
3. Сопоставление данных по временам задержки воспламенения в смесях метан-воздух-частицы, полученных в расчетах по предложенной в данной работе модели (1), с расчетами по используемой нами ранее модели [1] (2), и в экспериментах в установке быстрого сжатия, показало их удовлетворительное соответствие в области изменения температур 900–1200 К и давлений 1–1.2 МПа. Выявлено, что расчеты, проведенные по модели (1), при низких значениях начальной температуры смеси (менее 1100 К) дают более близкие к экспериментальным значения времен задержки воспламенения по сравнению с моделью (2). Однако, при высоких температурах (более 1100 К) модель (2) дает более адекватные экспериментальным времена задержки воспламенения.

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., Пенязьков О.Г., Лешевич В.В. Времена задержки воспламенения в метано-воздушной смеси в присутствии частиц железа // Физика горения и взрыва. 2014. Т.50, № 6.
2. Федоров А.В. Воспламенение газозвесей в режиме взаимодействующих континуумов // Физика горения и взрыва. 1998, Т. 34, №4. С. 57–64.
3. Лешевич В.В., Пенязьков О.Г., Федоров А.В., Шульгин А.В., Ростен Ж.К. Условия и время задержки воспламенения микрочастиц железа в кислороде // Инженерно-физический журнал. 2012. Т.85, № 1. С. 139–144.
4. 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.
5. Федоров А.В., Шульгин А.В., Тропин Д.А. Расчет физико-химических превращений в смеси метан - железные частицы // Вестник НГУ. Сер. Физика. - 2014. -Т.9, No.4. -С. 74-79.