

*Ю. В. Агабеков, Ф. Г. Ягафаров*

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАЖИГАНИЯ  
ЖИДКОГО УГЛЕВОДОРДНОГО СЛОЯ  
ЛУЧИСТЫМ ТЕПЛОВЫМ ИМПУЛЬСОМ**

Разработана газофазная модель лучистого зажигания горючей жидкости, учитывающая поглощение лучистого потока в газовой фазе. На примере моторных топлив (бензина и дизельного топлива) численно показано определяющее влияние фактора газофазного поглощения излучения, более существенное для топлив с меньшей температурой кипения. На основе анализа экспериментальных результатов по лучистому зажиганию и полученных значений интегральных показателей поглощения моторных топлив показано, что при описании газофазного поглощения излучения необходимо учитывать возможное сажеобразование в предвоспламенительный период низкотемпературного окисления паров углеводородных горючих.

Аварии, происходящие на промышленных газо- и нефтехимических объектах, часто сопровождаются крупноразмерными горящими выбросами углеводородных горючих (УВГ) — огненными шарами, излучение которых оказывает значительное тепловое воздействие на окружающие горючие материалы, в том числе жидкие углеводородные топлива. В связи с этим для прогнозирования и оценки последствий аварийных ситуаций актуально моделирование процесса зажигания жидкого слоя УВГ лучистым тепловым импульсом.

Известно достаточно большое число работ, посвященных теоретическому изучению лучистого зажигания твердых (полимерных) горючих материалов с использованием численных газофазных моделей зажигания, подробный обзор которых приведен в [1]. Зажигание жидких горючих систем со свободной поверхностью практически не исследовалось, за исключением [2—5], где рассматриваются в основном стационарные режимы диффузационного горения жидкостей, и работы [6], в которой для модели квазигетерогенной реакции получены приближенные критериальные соотношения для конвективного воспламенения жидкости.

В данной работе предлагается газофазная модель лучистого зажигания слоя горючей жидкости со свободной поверхностью, включающая не учитывавшийся ранее фактор поглощения лучистого потока в газовой фазе горючей системы.

Наряду с газофазным поглощением лучистого потока в модель включается описание других процессов, определяющих газофазное зажигание конденсированных горючих систем [5, 7]: поглощение лучистого потока в объеме жидкости, кондуктивное распространение тепла в жидкой и газовой фазе, испарение жидкости, диффузионный массоперенос горючего и окислителя, экзотермическая газофазная реакция горючих паров с окислителем, тепло- и массообмен с окружающей средой.

Математическое описание процессов проводится при следующих допущениях. Газовая фаза горючей системы моделируется идеальной многокомпонентной смесью паров горючего, окислителя с инертной добавкой и продуктов полного окисления УВГ; жидккая фаза — однокомпонентной жидкостью, имеющей химический состав, соответствующий брутто-формуле УВГ. Химическое взаимодействие компонентов описывается газофазной одноступенчатой необратимой реакцией с эффективной кинетикой Арреняуса. Изменения молей компонентов в газовой фазе связаны стехиометрическими соотношениями в соответствии с уравнением реакции полного окисления УВГ в воздухе.

Полагается, что ослабление потока в газовой и жидкой фазах описывается законами Бэра — Бугера. Испарение считается квазиравновесным и протекает в диффузионном режиме. Тепло- и массообмен с окружающей средой задается через эффективные объемные коэффициенты

тепло- и массопереноса [5, 8], излучением продуктов горения пренебрегается. И наконец, для более достоверного описания процессов учитывается зависимость теплофизических параметров горючей системы и ее компонентов от температуры.

Исследуемая горючая система представляется в виде горизонтального одномерного слоя жидкости толщиной  $\delta$ , расположенного на теплопроводящей твердой подложке бесконечно большой теплоемкости. По свободной поверхности жидкость контактирует с неподвижной окислительной атмосферой (воздух при постоянном давлении  $p_0$ ).

В соответствии с принятыми допущениями уравнения, описывающие процесс лучистого зажигания и последующего горения жидкости, в системе координат, связанной со свободной поверхностью, имеют вид

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_i u_i)}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

$$\rho_1 c_{p1} \left( \frac{\partial T_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial q_1}{\partial x} + QW - \alpha_t (T_1 - T_{10}), \quad (2)$$

$$\rho_2 c_{p2} \left( \frac{\partial T_2}{\partial t} + u_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) + (1 - r) \varepsilon q_{1s} \exp(\varepsilon x), \quad (3)$$

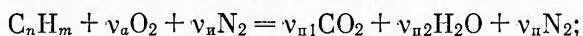
$$\rho_1 \left( \frac{\partial c_i}{\partial t} + u_1 \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho_1 D_i \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) - v_i W - \alpha_{ci} (c_i - c_{i0}), \quad (4)$$

$$\frac{\partial q_1}{\partial x} = \kappa q_0 \exp \left( \int_{-\infty}^x \kappa dx \right), \quad (5)$$

$$p_0 = R \rho_1 T_1 \sum_i \frac{c_i}{M_i}, \quad i = a, b, \text{п1, п2, и}, \quad (6)$$

$$W = \rho_1^2 c_a c_b \frac{\tau_v^2}{T_1^{3/2}} k \exp(-E/RT_1),$$

где  $T$  — температура;  $u$  — скорость;  $\rho$  — плотность;  $c$  — относительная массовая концентрация;  $c_p$  — удельная теплоемкость;  $\lambda$ ,  $D$  — коэффициенты теплопроводности и диффузии;  $q_1$  — плотность лучистого потока в газовой фазе;  $W$  — скорость химической реакции;  $Q$  — тепловой эффект реакции;  $\kappa$  и  $\varepsilon$  — коэффициенты поглощения излучения в газовой фазе и жидкости;  $r$  — коэффициент отражения излучения поверхностью жидкости;  $M$  — молекулярная масса;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $\alpha_t$ ,  $\alpha_c$  — эффективные коэффициенты переноса тепла и вещества [8]; индексы: 1 — относится к газовой фазе, 2 — к жидкости,  $i = a, b$ , п1, п2, и отвечают окислителю, парам УВГ, продуктам реакции ( $\text{CO}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$ ), инертной добавке ( $\text{N}_2$ ), 0 и  $s$  соответствуют параметрам невозмущенной среды и на границе раздела фаз;  $v_i$  — стехиометрические коэффициенты, определяемые из уравнения брутто-реакции полного окисления УВГ:



$k$ ,  $E$  — предэкспонент и эффективная энергия активации химической реакции.

Полагая, что лучистый поток в газовой фазе поглощается только парами горючего, коэффициент поглощения излучения в выражении (5) можно представить следующим образом:  $\kappa = \mu c_b \rho_1$ , где  $\mu$  — показатель поглощения паров УВГ. Тогда величина  $q_{1s}$  в уравнении (3) имеет вид

$$q_{1s} = q_0 \exp \left[ \mu \int_{-\infty}^0 c_b \rho_1 dx \right].$$

Границными условиями для системы уравнений (1) — (4) являются соотношения, отражающие материальный и тепловой баланс на границе

фазового перехода:

$$x = 0, \lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial x} - \lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial x} = - \frac{Q_L \rho_1 D_b}{1 - c_{bs}} \frac{\partial c_b}{\partial x}, \quad (7)$$

$$\rho_1 u_1 c_{bs} - \rho_1 D_b \frac{\partial c_b}{\partial x} = \rho_1 u_1 = \rho_2 u_2, \quad (8)$$

$$u_1 c_j - D_j \frac{\partial c_j}{\partial x} = 0, j = a, \text{п1, п2, и}, \quad (9)$$

где  $c_{bs} = M_b p_n / \rho_1 R T_1$  — концентрация паров УВГ на поверхности жидкости;  $p_n$  — давление насыщенного пара УВГ, определяемое из уравнения Клапейрона — Клаузиуса или эмпирических соотношений;  $Q_L$  — теплота испарения жидкости. Условия на внешних границах горючей системы:

$$x \rightarrow +\infty: c_a = c_{a0}, c_{\text{и}} = c_{\text{i}0}, c_b = c_{\text{п1}} = c_{\text{п2}} = 0, T_1 = T_{10}, \\ T_2 = T_{20}.$$

Начальные условия:

$$T_1(x, 0) = T_{10}, T_2(x, 0) = T_{20}, c_i(x, 0) = c_i^*(x),$$

где  $c_i^*(x)$  — исходное стационарное распределение концентраций компонентов в газовой фазе.

Математическая модель замыкается соотношениями для расчета теплофизических свойств компонентов газовой фазы и жидкости, входящих в виде коэффициентов в уравнения (1) — (9). Коэффициент теплопроводности газовой фазы определяется эмпирическим соотношением Ульбина [9]

$$\lambda_1(T) = \lambda_{10}(T_0) \sum_i \left[ y_i \frac{\lambda_i(T)}{\lambda_i(T_0)} \right], i = a, b, \text{п1, п2, и}, \quad (10)$$

где коэффициент теплопроводности смеси  $\lambda_{10}(T_0)$  определяется уравнением Васильевой, а коэффициенты теплопроводности индивидуальных компонентов  $\lambda_i(T)$  — эмпирическими соотношениями.

Коэффициенты диффузии компонентов газовой фазы находятся из приближения [10]:  $D_j(T) = \frac{1 - y_j}{\sum_{i, i \neq j} [y_i / D_{ji}(T)]}, j = a, b, \text{п1, п2, и}$ ,  $D_{ji}$  — ко-

эффициенты бинарной диффузии компонентов, рассчитываемые с использованием потенциалов Леннарда — Джонса в модификации Вильке — Ли [9]. Значение удельной теплоемкости газовой фазы определяется из соотношения  $c_{p1} = \sum_i c_i c_{pi}(T)$  ( $c_{pi}(T)$  задаются по известным справочным данным). Температурные зависимости теплофизических свойств жидкой фазы для индивидуальных или смесевых УВГ задаются полиномиальными аппроксимациями экспериментальных данных.

В численной реализации представленной математической модели (1) — (9) используется метод расщепления уравнений по физическим процессам. Уравнения аппроксимируются неявной абсолютно устойчивой разностной схемой и решаются методом прогонки.

Численный анализ лучистого зажигания жидкого слоя проводился на примере наиболее распространенных смесевых УВГ — моторных топлив (бензина Б-70 и дизельного топлива ДЛ). В расчетах использовались следующие значения параметров горючей системы:  $T_{10} = T_{20} = 273$  К,  $E/R = 2 \cdot 10^4$  К,  $k = 3 \cdot 10^{14}$  м<sup>3</sup>/(с · кг),  $\rho_0 = 10^5$  Па,  $\varepsilon = 2 \cdot 10^4$  м<sup>-1</sup>,  $r = 0,8$ ,  $c_{a0} = c_a^* = 0,23$ ,  $c_{i0} = c_i^* = 0,77$ ,  $c_b^* = c_{\text{п1,2}}^* = 0$ ,  $\delta = 10^{-2}$  м. Значения термодинамических и теплофизических свойств моторных топлив и компонентов газовой фазы выбирались из известных справочных и экспериментальных данных. Лучистый тепловой импульс задавался в виде прямоугольной ступеньки  $q(t) = q_0$ ,  $0 \leq t \leq \tau$ , длительность которой ограничивалась моментом срыва теплового равновесия. Интенсивность им-

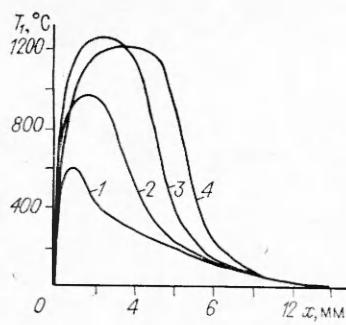


Рис. 1. Развитие процесса зажигания жидкого углеводородного слоя лучистым тепловым импульсом; топливо ДЛ,  $q_0 = 10 \text{ Вт}/\text{м}^2$ ,  $\mu = 20 \text{ м}^2/\text{кг}$ ,  $t, \text{ с: } 1 - 0,8, 2 - 0,97, 3 - 0,98, 4 - 1,05$ .

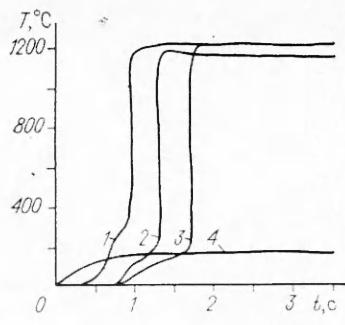


Рис. 2. Влияние степени поглощения излучения в газовой фазе на зажигание углеводородного слоя. Зависимость максимальной температуры процесса от времени;  $q_0 = 10 \text{ Вт}/\text{м}^2$ ,  $\mu, \text{ м}^2/\text{кг: } 1 - 48, 3 - 20, 4, 2 - 1 (1, 3, 4 - \text{Б-70}, 2 - \text{ДЛ})$ .

пульса ограничивалась величиной  $q_0 = 20 \cdot 10^4 \text{ Вт}/\text{м}$ , что соответствует максимальным лучистым потокам от огненных шаров, возникающих при авариях резервуаров с сжиженными нефтяными газами.

На рис. 1 представлена характерная картина зажигания жидкого слоя лучистым импульсом. После срыва теплового равновесия (рис. 1, 3) горючая система выходит на режим стационарного диффузионного горения. При этом температуры поверхности жидкости, фронта пламени и скорость испарения принимают значения  $220^\circ\text{C}$ ,  $1200^\circ\text{C}$  и  $3 \text{ мм}/\text{мин}$ , что удовлетворительно сходится с экспериментальными данными [11].

Численное исследование подтверждает предполагавшееся изначально определяющее влияние газофазного поглощения излучения на лучистое зажигание жидкости. Понижение степени поглощения (рис. 2) приводит к увеличению времени задержки зажигания  $\tau$ , а при величине ниже некоторого критического  $\mu_c$  топливо вообще не зажигается ( $\tau \rightarrow \infty$ ). При этом для жидкостей с меньшей средней температурой кипения  $\bar{T}_{\text{кип}}$  (легкие топлива)  $\mu$  имеет более высокое значение. Так, для бензина Б-70 ( $\bar{T}_{\text{кип}} = 100^\circ\text{C}$ )  $\mu_c \approx 2 \text{ м}^2/\text{кг}$ , а для тяжелого дизельного топлива ( $\bar{T}_{\text{кип}} = 230^\circ\text{C}$ )  $\mu_c \approx 0,8 \text{ м}^2/\text{кг}$ .

Установленная закономерность качественно подтверждается результатами модельных экспериментов, в которых исследовалось зажигание слоев моторных топлив лучистыми импульсами от горящих распылов керосина в воздухе. В экспериментах дизельное топливо зажигалось при воздействии лучистых импульсов длительностью 2,5–3 с и амплитудах не менее  $4 \cdot 10^4 \text{ Вт}/\text{м}^2$  (максимальная интенсивность импульсов составляла  $8 \cdot 10^4 \text{ Вт}/\text{м}^2$ ). Зажигание бензина Б-70 при тех же условиях не зафиксировано.

Для интерпретации полученных экспериментальных результатов определены показатели поглощения паров смесевых УВГ. Пары моторных топлив (дизельного топлива марок ДЛ, ДЗ, бензина Б-70, керосина ТС-1), отогнанные в вакууме при температурах выкипания 50 % топлива, имеют близкие значения интегрального показателя поглощения излучения, спектрального состава, соответствующего излучению серого тела при  $1500 \text{ K}$ , которые составляют  $0,31$ – $0,33 \text{ м}^2/\text{кг}$ .

Сравнение измеренных значений  $\mu$  с полученными численно  $\mu_c$  показывает, что газофазное поглощение излучения только парами горючего не обеспечивает условий зажигания моторных топлив. Вместе с тем анализ условий проведения экспериментов и наблюдаемая картина зажигания слоя исключают влияние внешних побочных факторов (запыленность воздуха, локальное зажигание на краях поддона и др.), которые могли бы стимулировать процесс зажигания. Наиболее обоснованной гипотезой, объясняющей наблюдаемое лучистое зажигание жидких го-

рючих, представляется протекание в предвоспламенительный период низкотемпературного окисления паров УВГ процесса сажеобразования, приводящего к увеличению коэффициента поглощения газовой фазы горючей системы. Включение данного фактора в разработанную модель требует определения кинетики сажеобразования в условиях низкотемпературного окисления УВГ и составляет предмет дальнейших исследований.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Kullkarni A. K., Kumar M., Kuo K. K. Review of solid propellant ignition studies // AIAA Paper. — 1980. — N 1240.
2. Сухов Г. С., Ярин Л. П. Диффузионное горение жидкости в потоке газообразного окислителя // ФГВ. — 1980. — 16, № 6. — С. 87—94.
3. Мильков С. Н., Сухов Г. С., Ярин Л. П. Диффузионное горение жидкости со свободной поверхностью // Там же. — 1983. — 19, № 5. — С. 3—6.
4. Сухов Г. С., Ярин Л. П. Парофазное горение жидкости в настильном турбулентном факеле // Там же. — 1984. — 20, № 6. — С. 13—18.
5. Сухов Г. С., Ярин Л. П. Теория горения жидкости со свободной поверхностью. I. Стационарный режим горения жидкости — горение полубесконечного слоя // Там же. — 1985. — 21, № 1. — С. 3—11.
6. Ярин Л. П. О срыве пламени горящей жидкости воздушным потоком // Там же. — 1983. — 19, № 1. — С. 3—12.
7. Kashiwagi T. A radiative ignition model of a solid fuel // Combust. Sci. and Tehnol. — 1974. — 8. — P. 225—236.
8. Сухов Г. С., Фишман С. В., Ярин Л. П. Диффузионное горение пленки жидкого топлива // ФГВ. — 1988. — 24, № 2. — С. 51—60.
9. Рид Ф., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. — Л.: Химия, 1982.
10. Дельмонт Б. Кинетика гетерогенных реакций. — М.: Мир, 1972.
11. Блинов В. И., Худяков Г. И. Диффузионное горение жидкостей. — М.: Изд-во АН СССР, 1961.

г. Дзержинск

УДК 536.46 : 541.126, 662.53 : 662.92

И. А. Ларионова, Б. С. Фиалков, К. Я. Калинич,  
А. Б. Фиалков, Б. С. Оспанов

#### ИОННАЯ СТРУКТУРА И ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ НОНООБРАЗОВАНИЯ В ПЛАМЕНИ АЦЕТИЛЕНА

Приведены основные результаты исследования ионного состава ацетиленовоздушного пламени, горящего при пониженном давлении. Сравниваются данные по ионообразованию в пламенах предельных углеводородов, кислородсодержащих веществ и ацетилена. Показано, что закономерности образования ионов во фронте и непосредственно перед ним близки к наблюдающимся в пламенах других топлив, а в низкотемпературной области они различны.

Изучение ионного состава различных зон пламен позволяет углубить знания о механизме процесса горения. Особый интерес представляет выявление роли ионов в процессе образования сажи в связи с предложенным в [1] ионным каналом сажеобразования.

Проведенные ранее исследования ионного состава пламен позволили установить ряд новых явлений и закономерностей и, в частности, показать, что в так называемой предпламянной или низкотемпературной зоне, где ранее предполагались лишь теплофизические процессы, идет генерация заряженных частиц, начинающаяся при температурах порядка 700 К, и ион-молекулярные реакции [2, 3]. Здесь же протекают и химические превращения по нейтральному каналу [4]. Активность физико-химических процессов в предфронтовой части пламени позволяет именовать ее областью подготовки (ОП).

© И. А. Ларионова, Б. С. Фиалков, К. Я. Калинич, А. Б. Фиалков, Б. С. Оспанов, 1993.