

УДК 544.452

ОСОБЕННОСТИ ПРОЦЕССОВ ТЕПЛО- И МАССООБМЕНА И КИНЕТИКИ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ ПРИ ГОРЕНИИ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА В УСЛОВИЯХ СВОБОДНОЙ КОНВЕКЦИИ В ВОЗДУХЕ

Т. А. Большова, А. Г. Шмаков

Институт химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского СО РАН, 630090 Новосибирск, bolshova@kinetics.nsc.ru

Процессы тепло- и массообмена, а также скорость окисления топлива являются определяющими параметрами при горении предварительно не перемешанных газовых потоков топлива и окислителя, а также горения конденсированных топлив в газообразном окислителе. Корректное описание этих процессов представляет как научный, так и практический интерес. Методом численного моделирования изучено влияние кинетики химических реакций и диффузии молекул топлива на тепловую и химическую структуру пламени, формирующегося вокруг сферы из полиметилметакрилата (ПММА) в условиях естественной конвекции в воздушной среде. Расчет трехмерного течения газа вокруг твердого тела проводился на основе системы полных уравнений Навье — Стокса для многокомпонентной смеси с учетом диффузии и теплообмена между поверхностью и газом, конвекции, радиационного теплообмена. Кинетическая модель представляет собой сопряженные реакции как на поверхности конденсированного материала, так и в газовой фазе. На поверхности образование газообразного топлива метилметакрилата (ММА) описывается одностадийной эффективной реакцией пиролиза ПММА. Окисление ММА в газовой фазе описывается глобальной реакцией $C_5H_8O_2 + 6O_2 \rightarrow 5CO_2 + 4H_2O$. Установлено, что профили температуры и концентрации компонентов пламени практически не зависят от константы скорости этой реакции при условии, что характерное время реакции гораздо меньше характерного времени диффузии ММА. Показано, что варьирование коэффициента диффузии ММА заметно влияет на тепловую и химическую структуру пламени. Повышение коэффициента диффузии ММА приводит к росту максимальной температуры пламени. Полученные результаты показали, что транспортные свойства соединений, необходимые для расчета их коэффициентов переноса, являются одними из важнейших параметров для точного CFD-моделирования.

Ключевые слова: полиметилметакрилат, CFD-моделирование, коэффициенты переноса, диффузионное пламя.

DOI 10.15372/FGV2022.9257

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время численное моделирование является быстроразвивающейся областью науки, вносящей важный вклад в понимание процессов горения [1]. При моделировании горения многокомпонентных смесей требуется задание термодинамических, транспортных и химико-кинетических свойств реагирующих компонентов. Термодинамические свой-

ства большинства веществ, участвующих в горении, хорошо изучены и описаны (например, в базах данных JANAF). Огромное число работ посвящено созданию химико-кинетических механизмов горения, вычислению и уточнению констант скоростей элементарных химических реакций [2, 3]. В [4–6] показано, что при численном моделировании процессов горения транспортные свойства реагирующих частиц столь же важны, как и константы скорости химических реакций. Влияние различных подходов в оценке транспортных свойств соединений на скорость распространения пламени предварительно перемешанной метановоздушной смеси обсуждалось в работе [7].

С практической точки зрения представляет интерес моделирование горения реальных

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках гос. задания FWGF-2021-0001.

Доложено на 10-й Международной конференции им. В. В. Воеводского «Химия и физика элементарных химических процессов», 5–9 сентября 2022 г., Новосибирск.

© Большова Т. А., Шмаков А. Г., 2023.

объектов и материалов сложной формы. В условиях свободной конвекции горение твердых тел протекает в диффузионном режиме, когда горящая поверхность служит источником топлива, а окислитель находится в окружающем воздухе. При моделировании такого процесса диффузия топлива, а значит, и его транспортные свойства становятся важными параметрами задачи. Целью настоящей работы является изучение влияния кинетики химических реакций топлива и его транспортных свойств в газовой фазе на горение конденсированного полимерного топлива сложной формы.

Проведен численный расчет химической и тепловой структуры диффузионного пламени вокруг сферы из ПММА при ее горении в условиях естественной конвекции в воздухе. ПММА — синтетический полимер метилметакрилата (ММА, $C_5H_8O_2$), термопластичный прозрачный пластик, широко применяемый в промышленности, строительстве и быту. Особенностью горения ПММА является его пиролиз, при котором в газовую фазу выходит в виде мономера почти 99 % исходного полимера. Это позволяет использовать для описания горения ПММА кинетику химических реакций окисления ММА в газовой фазе. Горение полимеров активно изучается экспериментально [8–12] и численно [13–18]. Для построения модели горения твердых тел требуется задание кинетики реакций превращения как в конденсированной, так и в газовой фазе. Прогностическая способность моделей горения конденсированных топлив на основе вычислительной гидродинамики (CFD) в значительной степени зависит от точности, с которой определена сопряженная модель поверхностного пиролиза топлива и горения продуктов пиролиза в газовой фазе. Для описания горения топлива в диффузионном режиме, как правило, используется быстрая одностадийная реакция [13, 16]. Для горения ММА в этом качестве может быть рассмотрена реакция



с аррениусовской зависимостью константы скорости и первым порядком реакции по кислороду и топливу. В литературе можно найти несколько выражений для константы скорости этой реакции. В работе [8] константа скорости реакции (R1), обозначенная k_1 , была определена из экспериментов по гашению пламени на противотоках, которое достига-

лось либо снижением концентрации кислорода в потоке, либо увеличением скорости потока и градиента скорости у поверхности. Это приводило к достижению критического значения числа Дамкёлера (минимальное отношение времени пребывания реагирующей смеси в зоне реакции к времени протекания химической реакции), ниже которого время пребывания горючей смеси в зоне пламени недостаточно для протекания экзотермической реакции окисления топлива. В предложенном подходе не учитывается пиролиз топлива, т. е. топливо и различные продукты его превращения рассматриваются как единое эффективное топливо. Предполагалось, что транспортные свойства такого эффективного топлива определяются диффузией кислорода. В [8] предложены следующие параметры для константы скорости реакции (R1): энергия активации $E = 34$ ккал/моль и предэкспоненциальный множитель $A = 1.4 \cdot 10^{15}$ см³/(моль · с). В [13] авторы несколько модифицировали параметры константы скорости реакции (R1) (k_2). Они провели численное исследование горения и гашения диффузионного пламени вокруг цилиндра ПММА при его обдуве низкоскоростным потоком воздуха в условиях микрогравитации. Скорость реакции задавалась выражением $\dot{w} = -AT\rho^2 Y_{MMA} Y_{O_2} \exp(-E/RT)$, где ρ — плотность, T — температура, Y_{MMA} и Y_{O_2} — массовая доля ММА и кислорода соответственно, $E = 27$ ккал/моль, $A = 1.43 \cdot 10^8$ см³/(К · г · с). В работах [14, 15] энергия активации и предэкспоненциальный множитель были скорректированы до значений $E = 34.4$ ккал/моль и $A = 6.6 \cdot 10^{12}$ см³/(К · моль · с), что привело к повышению константы скорости реакции (k_3) в области высоких температур. Авторы [15] использовали указанные параметры при разработке CFD-моделей горения ПММА в гибридных двигателях. Нестационарная численная модель воспламенения, роста и гашения пламени на сферической поверхности конденсированного топлива в низкоскоростном потоке в условиях микрогравитации предложена в работе [19]. Авторы подчеркивали важность согласованности скоростей реакции пиролиза в конденсированной фазе и реакции окисления топлива в газовой фазе. В [19] параметры константы скорости реакции (k_4) были определены эмпирически с помощью параметрических исследований, выполненных путем минимизации разницы в расчетной скорости распростра-

нения пламени по сравнению с результатом, полученным в эксперименте BASS [19]. Значения энергии активации и предэкспоненциального множителя для константы скорости k_4 в этом случае составляли $E = 23.9$ ккал/моль и $A = 9.42 \cdot 10^{13}$ см³/(К·моль·с).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Важнейшей характеристической горения сферы ПММА в воздухе является распределение температуры, которое было измерено снизу вдоль вертикальной оси по центру сферы. Для измерения распределения температуры в газовой фазе при горении сферы ПММА использовалась тонкая термопара Pt-Pt(10 %)Rh диаметром 0.05 мм. Для предотвращения каталитических процессов на поверхности платины термопары покрывались тонким слоем SiO₂. Для измерения профиля температуры образец после зажигания перемещался к неподвижно закрепленной термопаре со скоростью 4 мм/с до момента ее соприкосновения с поверхностью образца. Момент соприкосновения контролировался с помощью катетометра. Погрешность измерения температуры составляет ± 50 °С.

МЕТОДИКА ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

В программном пакете ANSYS Fluent [20] был проведен численный расчет течения газа возле твердого тела на основе системы полных уравнений Навье — Стокса для многокомпонентной смеси с учетом диффузии, теплообмена между поверхностью и газом, конвекции, потерь на излучение. Газовая смесь содержит пять компонентов — MMA, O₂, CO₂, H₂O, N₂. Горение MMA описывается одностадийной глобальной химической реакцией, константа скорости которой обсуждается ниже. Сфера задана как твердое тело с теплофизическими свойствами ПММА при нормальных условиях (плотность $\rho_{\text{ПММА}} = 1190$ кг/м³; удельная теплоемкость при постоянном давлении $c_p = 1270$ Дж/(кг·К); теплопроводность $\lambda = 0.18$ Вт/(м·К)). На поверхности сферы задана реакция пиролиза, которая приводит к переходу топлива из конденсированной в газовую фазу. Считается, что деградация поверхности происходит медленно и за время установления пламени геометрические размеры не изменяются.

Расчетная область представляет собой куб $40 \times 40 \times 40$ см, в центре которого установлена твердая сфера из ПММА диаметром 4 см. Координатные оси заданы так, чтобы ускорение свободного падения g было направлено против оси Y . Для оптимизации времени расчетов решалась симметричная задача. Все границы расчетной области проницаемые. Внутри расчетной области задан несжимаемый идеальный газ, соответствующий составу воздушной смеси O₂/N₂ = 0.21/0.79 при температуре $T_0 = 300$ К и давлении $p = 1$ атм. Важным параметром для задания граничных условий на поверхности сферы является температура поверхности, которая была определена экспериментально и составляла $T_b = 650$ К. Для разрешения зоны горения возле сферы была сгенерирована нерегулярная сетка со сгущением к поверхности. Термодинамические, транспортные и кинетические свойства реагирующих компонентов были импортированы из входных файлов CHEMKIN [21].

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Для описания горения ПММА были заданы: реакция пиролиза ПММА, которая определяет массовый поток топлива с поверхности конденсированного горючего, и реакция окисления MMA в газовой фазе — глобальная одностадийная реакция (R1). Скорость пиролиза ПММА во многом определяет максимальную температуру пламени и концентрацию топлива у поверхности. Для того чтобы описать выход MMA в газовую фазу, была задана реакция на поверхности конденсированного топлива в виде



где ПММА — конденсированное вещество, MMA — газообразный компонент пламени, АС — активные частицы на поверхности сферы. Концентрация активных центров составляла $1.1 \cdot 10^{-2}$ моль/см², а константа скорости реакции $k = 8.3 \cdot 10^{11} \exp(-E/RT)$ [моль, см, с, К], где $E = 40.0$ ккал/моль [17]. При заданных параметрах скорость реакции (R2) составила 0.936 моль/(с·см²). Для определения влияния кинетики окисления MMA в газовой фазе было проведено моделирование горения с константами скорости реакции k_1 – k_4 . На рис. 1 представлены зависимости константы скорости реакции от обратной температуры по данным различных авторов. Видно, что в диапазоне температур, характерных для горения ПММА, они

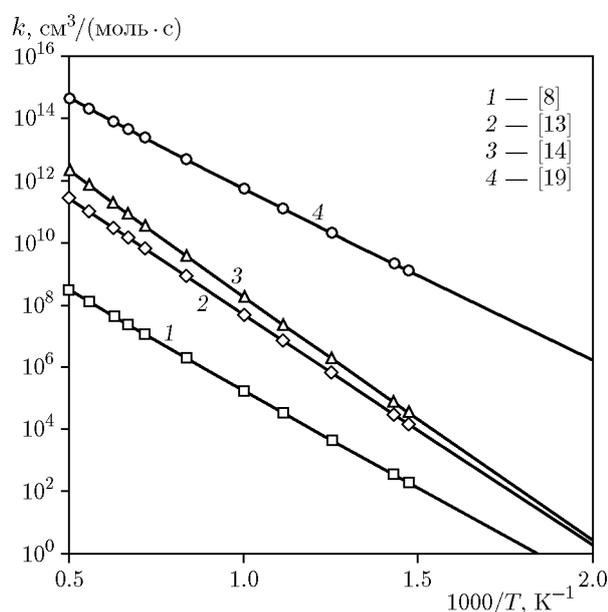


Рис. 1. Константа скорости реакции $C_5H_8O_2 + 6O_2 \rightarrow 5CO_2 + 4H_2O$ по данным разных авторов

сильно различаются: константа скорости реакции k_2 , предложенная в [13], значительно меньше оцененной в [8] константы k_1 , в то же время константа скорости реакции k_4 почти на шесть порядков больше константы k_1 во всем диапазоне температур. Это различие можно объяснить тем, что указанные константы используются для описания горения ПММА в довольно различных условиях, например, константы скорости k_2 и k_4 использовались для изучения горения в условиях микрогравитации.

КОЭФФИЦИЕНТЫ ПЕРЕНОСА

Для определения влияния процессов молекулярного переноса на горение сферы из ПММА проведены численные расчеты с использованием различных значений коэффициента переноса. В пакете ANSYS Fluent [20] используется приближение потенциала Леннарда — Джонса для определения межмолекулярных взаимодействий между компонентами смеси и вычисления коэффициентов диффузии веществ. Авторам не удалось найти данных по экспериментальному определению коэффициента диффузии MMA, поэтому вместо вариации коэффициентов диффузии использовалась вариация параметров потенциала Леннарда — Джонса, предложенная авторами [22]. В табл. 1 приведены три варианта параметров потенциала Леннарда — Джонса для молекулы MMA.

Таблица 1

Молекулярные данные для расчета коэффициента переноса и коэффициент диффузии топлива в смеси MMA/воздух

Вариант	ε/k , К	σ , Å	D_{MMA} , см ² /с ($T = 1500$ К)
1	523.2	5.66	1.32
2	570.0	7.00	1.00
3	280.8	3.97	2.08

Примечания. σ — эффективный радиус взаимодействия, ε — глубина межмолекулярного потенциала (энергия молекулярного взаимодействия), k — постоянная Больцмана.

На их основе вычислен коэффициент диффузии молекул MMA D_{MMA} в смеси MMA/воздух при $T = 1500$ К и $p = 1$ атм. Коэффициенты переноса рассчитаны с использованием программы CHEMKIN [21] при заданных температуре, давлении и составе смеси. В варианте 1 параметры соответствуют данным работы [22], в которой моделировалась структура плоских, стабилизированных на горелке пламен перемешанных смесей MMA/O₂/Ar при атмосферном давлении. В варианте 2 параметры выбраны таким образом, чтобы коэффициент диффузии MMA уменьшился по сравнению с [22]. Уменьшение составило $\approx 23\%$ по сравнению с вариантом 1. При варианте параметров 3 коэффициент диффузии MMA в смеси MMA/воздух увеличивался на $\approx 57\%$ по сравнению с результатами [22]. Данный набор значений из базы CHEMKIN [21] соответствует молекуле этилена C₂H₄. Уменьшение эффективного радиуса взаимодействия σ и глубины межмолекулярного потенциала ε/k приводит к увеличению коэффициента диффузии D_{MMA} . Самое большое его значение соответствует варианту 3 параметров потенциала Леннарда — Джонса.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В результате проведенных численных расчетов получены трехмерные поля температуры, скорости газового потока, концентрации веществ, скорости химической реакции в зависимости от вариации константы скорости реакции (R1) и коэффициента диффузии MMA, которые обсуждались выше.

На рис. 2 показано двумерное поле температуры и поле концентрации MMA, форми-

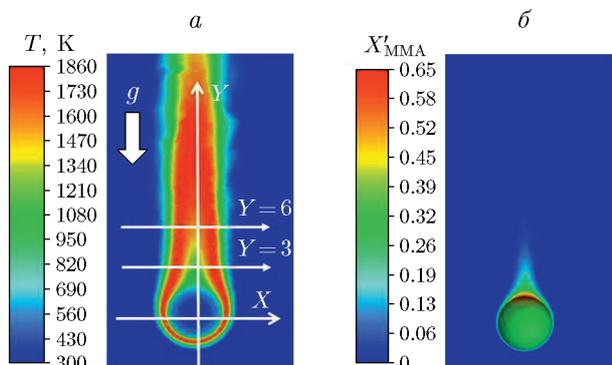


Рис. 2. Поля температуры и концентрации MMA в пламени сферы ПММА в условиях свободной конвекции при горении в воздухе

рующееся у поверхности сферы при моделировании. Видно, что возле боковой поверхности и снизу сферы пламя имеет узкую зону, сверху сферы пламя имеет конусообразную форму, вытянутую из-за эффекта плавучести. Концентрация MMA (рис. 2, б) возле поверхности неоднородна, сверху горячей сферы формируется область с более высокой концентрацией MMA, до молярной доли $X'_{\text{MMA}} = 0.65$, чем снизу и сбоку сферы.

Для сравнения различных вариантов расчета в трехмерном пространстве (X, Y, Z) были построены нормали от поверхности сферы в точках $(0, -2.0 \text{ см}, 0)$, $(2.0 \text{ см}, 0, 0)$, по которым рассматриваются профили температуры и концентрации. Начало координат совпадает с центром сферы. На рис. 2, а показаны линии, параллельные оси X , проведенные на разных расстояниях ($Y = 3, 6 \text{ см}$) от центра сферы. Построенные вдоль этих прямых профили температуры и концентрации позволяют охарактеризовать конусообразное пламя сверху сферы.

Согласно уравнению Бернулли в стационарном потоке несжимаемой жидкости при обтекании твердых тел на поверхности тела формируются точки, в которых давление максимально, а скорость обращается в нуль. Такие точки называют критическими, в условиях нашей задачи эта точка имеет координаты $(0, -2.0 \text{ см}, 0)$. Далее мы будем называть область вблизи этой точки в газовой фазе критической областью. Авторы [12, 13, 19] связывают процессы воспламенения и гашения пламени вокруг конденсированного топлива со сферической и цилиндрической формой именно с этой областью.

Таблица 2

Характерные времена диффузии и реакции окисления MMA в области критической точки

$\tau_{dif}, \text{ с}$	Константа скорости	$\tau_{reac}, \text{ с}$
0.27	k_1	$4.24 \cdot 10^{-4}$
	k_2	0.262
	k_3	$6.9 \cdot 10^{-5}$
	k_4	$1.4 \cdot 10^{-7}$

На рис. 3 приведены профили температуры и концентрации компонентов пламени, а также скорость реакции (R1) как функции расстояния от критической точки вниз по оси Y , L — расстояние от поверхности сферы. Видно, что расходование MMA вблизи горячей поверхности происходит в узкой зоне $\approx 0.4 \text{ см}$, в критической области кислород полностью расходуется. Область продуктов горения H_2O и CO_2 имеет более широкую зону, чем MMA, — $\approx 1.2 \text{ см}$. Возле горячей сферы формируется температурный профиль с максимумом на расстоянии $\approx 0.3 \text{ см}$ от поверхности. Как видно из рис. 3, б, положение максимума скорости реакции (R1) не совпадает с положением максимума температуры и находится на расстоянии $\approx 0.4 \text{ см}$ от поверхности сферы. На рис. 3 приведены данные расчета с различными значениями константы скорости реакции (R1) в газовой фазе. Сравнение показывает, что замена константы k_1 на k_4 не влияет на рассчитанные профили температуры и концентрации компонентов пламени. Хотя, как видно из рис. 3, б, максимальная скорость реакции меняется почти в 40 раз. Такие же результаты получены и при моделировании горения сферы из ПММА с использованием константы скорости реакции k_3 . Однако при замене константы k_1 на k_2 , предложенной в работе [13], в расчете происходит гашение уже установившегося вокруг сферы пламени. Для объяснения полученного эффекта проведена оценка характерных времен диффузии и химической реакции окисления MMA (табл. 2). Характерное время химической реакции было оценено по формуле $\tau_{reac} = (1/k)C$ [23], где k — константа скорости реакции k_1 , C — концентрация лимитирующего компонента, являющегося в данном случае топливом (MMA). При температуре

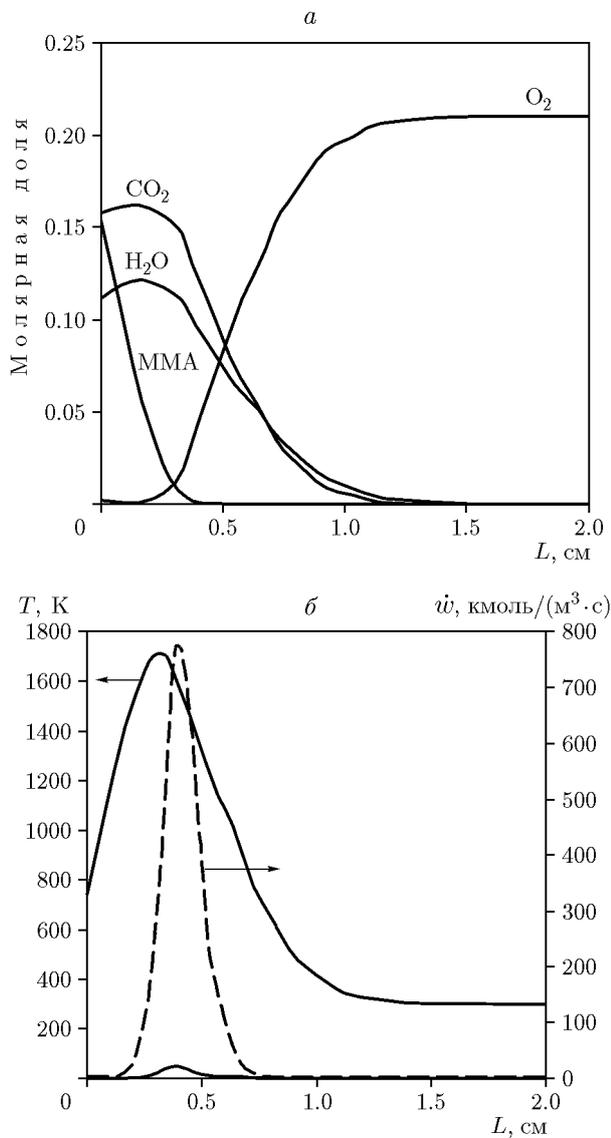


Рис. 3. Профили молярных долей компонентов (а) и профили температуры и скорости реакции (R1) (б) в области критической точки. Расчет с константами скорости реакции окисления MMA в газовой фазе k_1 (пунктирная линия) и k_4 (сплошная линия)

$T = 1500$ К молярная концентрация MMA составляет ≈ 0.02 . Время диффузии молекул газа через пламя определяется как $\tau_{dif} = \delta^2/D$, где δ — ширина фронта пламени, D — коэффициент диффузии. Считая $\delta \approx 0.6$ см и $D_{MMA} = 1.32$ см²/с, получаем характерное время диффузии, равное $\tau_{dif} \approx 0.27$ с.

Сравнение характерных времен процессов диффузии и химической реакции показывает, что при горении сферы скорость химической

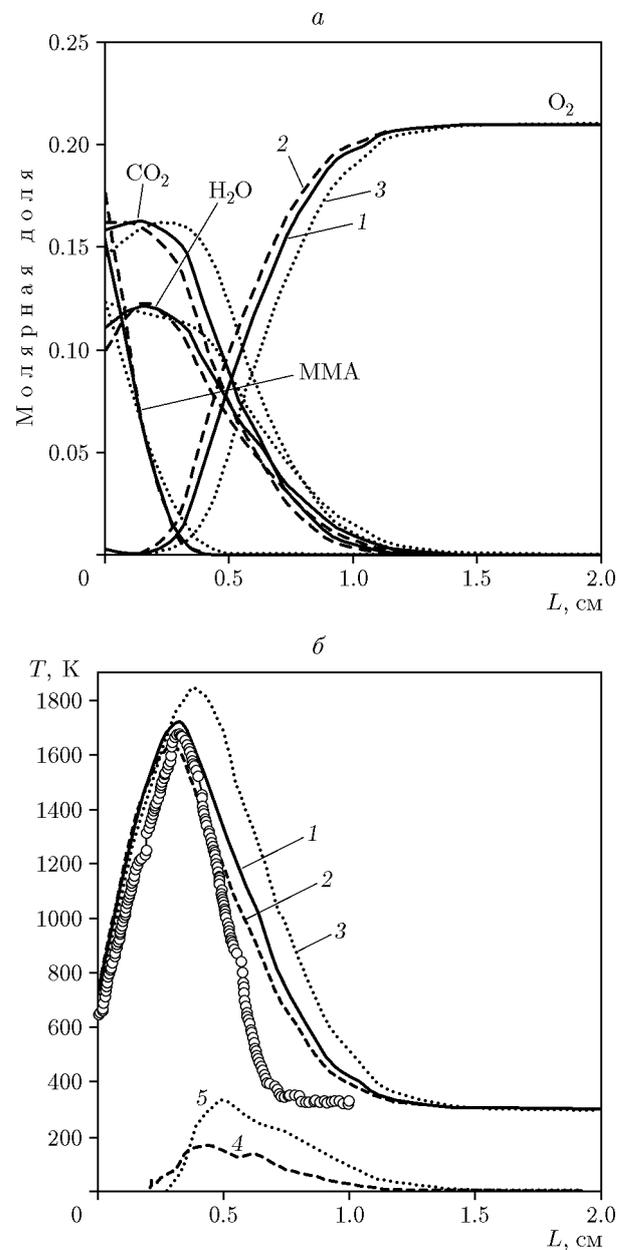


Рис. 4. Профили молярных долей компонентов (а) и температуры (б) в области критической точки:

точки — эксперимент, линии 1–3 — моделирование с различными (см. табл. 1, варианты 1–3) параметрами потенциала Леннарда — Джонса, линия 4 — $dT_1 = |T_2 - T_1|$, линия 5 — $dT_2 = |T_3 - T_1|$

реакции гораздо выше скорости диффузионных процессов. Когда характерное время химической реакции окисления MMA становится сравнимым или больше характерного времени диффузии MMA, происходит гашение пламени.

На рис. 4 приведены профили концентра-

ций компонентов и температуры в зависимости от расстояния от критической точки по оси Y вниз, полученные в эксперименте и при моделировании с различными значениями транспортных коэффициентов для молекулы MMA (см. табл. 1). Сравнение данных показывает, что с увеличением коэффициента диффузии MMA, а значит, и диффузионного потока топлива концентрация MMA у поверхности сферы снижается, а зона расщепления кислорода O_2 заметно расширяется. Это отражается на профилях концентрации продуктов реакции CO_2 и H_2O , ширина которых также увеличивается. Увеличение диффузионного потока MMA приводит также к уширению температурного профиля. С увеличением коэффициента диффузии MMA возрастает максимальная температура пламени (рис. 4, б). Сравнение профилей температуры, полученных в эксперименте и в расчетах с использованием параметров потенциала Леннарда — Джонса из [22] (вариант 1 в табл. 1), показало, что если рассчитанная максимальная температура согласуется с измерениями в эксперименте, то зона изменения температуры в эксперименте уже, чем при моделировании. Для согласования рассчитанных профилей температуры с экспериментом были проведены вычисления с уменьшенным коэффициентом диффузии MMA (вариант 2 в табл. 1). Сравнение показало, что ширина профиля температуры заметно уменьшилась, но уменьшение коэффициента диффузии на 23 % не привело к согласованию с экспериментом профиля температуры во всей зоне пламени. Для лучшего согласования требуется дальнейшее уменьшение коэффициента диффузии топлива.

Полученные результаты расчетов позволяют вычислить разницу между температурой в каждой точке расчетной сетки при различных вариантах параметров потенциала Леннарда — Джонса и построить профили температуры в различных зонах горячей сферы.

На рис. 4, б приведены результаты вычислений изменения температуры dT_1 (линии 4) и dT_2 (линии 5) по данным моделирования горения сферы с использованием различных вариантов параметров межмолекулярного взаимодействия (см. табл. 1). Изменение температуры определялось как $dT_{i-1} = |T_i - T_1|$, где $i = 2, 3$ соответствуют различным вариантам набора параметров потенциала Леннарда — Джонса. Профили dT_1 и dT_2 имеют максимумы на расстоянии $\approx 0.45 \div 0.5$ см и широкую зо-

ну изменения $0.3 \div 1.4$ см. Анализ результатов численных расчетов показывает, что изменение коэффициента диффузии MMA приводит к максимальному изменению температуры: $dT_1 \approx 170$ К и $dT_2 \approx 340$ К. Изменение температуры, связанное с изменением транспортных коэффициентов, может служить критерием влияния диффузии на горение в различных областях криволинейной поверхности сферы: в зоне пламени снизу сферы, в зоне горения боковой поверхности или в факеле сверху сферы из ПММА. В табл. 3 приведены значения максимальной молярной доли MMA и вычисленные максимальные изменения температуры dT_2 в различных зонах: в критической зоне по оси Y вниз, по оси X в боковом направлении, а также в конусообразном факеле сверху сферы по прямому, расположенным на разных расстояниях от начала координат (см. рис. 2).

Анализ данных табл. 3 показывает, что вблизи поверхности горения сферы в различных зонах пламени изменения температуры близки к значениям $dT_2 \approx 320 \div 350$ К, и только на расстоянии двух радиусов ($Y = 6$ см) от поверхности сферы, когда максимальная концентрация MMA падает почти в два раза, dT_2 уменьшается до ≈ 260 К. Следует отметить, что диффузионный поток имеет разные направления по сравнению с направлением движения газа, которое формируется конвекцией. В случае пламени в критической зоне диффузионный поток MMA направлен против конвективного движения газа, а для области пламени сбоку и сверху сферы конвективный поток имеет большую скорость и направлен перпендикулярно диффузионному потоку MMA, но это слабо влияет на максимальное изменение температуры в различных зонах горения вблизи

Таблица 3

Максимальное изменение температуры в различных зонах горения сферы ПММА

Область пламени	Молярная концентрация MMA	dT_2 , К
По оси Y	0.154	338.0
По оси X	0.168	353.2
$Y = 3$ см	0.192	318.7
$Y = 4$ см	0.137	319.4
$Y = 6$ см	0.082	264.3

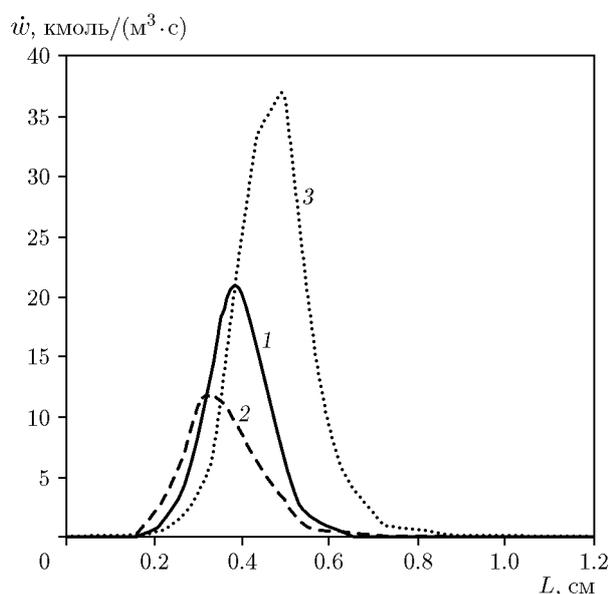


Рис. 5. Профили скорости реакции (R1) в области критической точки, рассчитанные с различными (см. табл. 1) параметрами потенциала Леннарда — Джонса (линии 1–3)

поверхности сферы.

Так как основное выделение тепла в пламени связано с реакцией окисления MMA в газовой фазе, то представляют интерес профили скорости этой реакции (рис. 5). Анализ результатов расчета скорости реакции (R1) показал, что профили скорости и профили повышения температуры dT_i хорошо коррелируют между собой (см. рис. 5). Увеличение диффузионного потока MMA (увеличение коэффициента его диффузии) в направлении от поверхности конденсированного топлива в область с избытком кислорода приводит к возрастанию скорости реакции окисления MMA в газовой фазе и, как результат, к увеличению тепловыделения и повышению температуры, которое мы и наблюдаем в расчетах при изменении транспортных свойств MMA.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Было бы ошибкой считать, что горение конденсированного топлива в условиях свободной конвекции в воздухе контролируется только диффузией кислорода в силу того, что он имеет более высокий коэффициент диффузии, чем относительно тяжелые молекулы топлива. Результаты моделирования горения сферы из ПММА в воздухе показали, что тепло-

вая структура пламени чувствительна к значению коэффициента диффузии MMA, представляющего собой основной газообразный продукт пиролиза этого конденсированного топлива. С увеличением коэффициента диффузии MMA увеличивается максимальная температура пламени, расширяется зона образования основных продуктов горения MMA и смещается профиль концентрации кислорода от поверхности топлива. Анализ скорости реакции окисления MMA в газовой фазе показал, что увеличение диффузионного потока топлива приводит к росту скорости этой реакции, а значит, и скорости тепловыделения.

Полученные результаты показали, что транспортные свойства соединений, необходимые для расчета коэффициентов переноса, являются одними из важнейших параметров для точного CFD-моделирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Veynante D., Vervisch L.** Turbulent combustion modeling // *Prog. Energy Combust. Sci.* — 2002. — V. 28, N 3. — P. 193–266. — DOI: 10.1016/S0360-1285(01)00017-X.
2. **Simmie J. M.** Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbon fuels // *Prog. Energy Combust. Sci.* — 2003. — V. 29, N 6. — P. 599–634. — DOI: 10.1016/S0360-1285(03)00060-1.
3. **Bramlette R. B., Depcik Ch. D.** Review of propane-air chemical kinetic mechanisms for a unique jet propulsion application // *J. Energy Inst.* — 2020. — V. 93, N 3. — P. 857–877. — DOI: 10.1016/j.joei.2019.07.010.
4. **Coffee T. P., Heimerl J. M.** Transport algorithms for premixed, laminar steady-state flames // *Combust. Flame.* — 1981. — V. 43. — P. 273–289. — DOI: 10.1016/0010-2180(81)90027-4.
5. **Smooke M. D., Rabitz H., Reuven Y., Dryer F. L.** Application of sensitivity analysis to premixed hydrogen-air flames // *Combust. Sci. Technol.* — 1988. — V. 59, N 4-6. — P. 295–319. — DOI: 10.1080/00102208808947102.
6. **Vajda S., Rabitz H., Yetter R. A.** Effects of thermal coupling and diffusion on the mechanism of H_2 oxidation in steady premixed laminar flames // *Combust. Flame.* — 1990. — V. 82, N 3-4. — P. 270–297. — DOI: 10.1016/0010-2180(90)90003-A.
7. **Bongers H., De Goey L. P. H.** The effect of simplified transport modeling on the burning velocity of laminar premixed flames // *Combust. Sci. Technol.* — 2003. — V. 175, N 10. — P. 1915–1928. — DOI: 10.1080/713713111.

8. **Seshadri K., Williams F. A.** Structure and extinction of counterflow diffusion flames above condensed fuels: Comparison between poly(methyl methacrylate) and its liquid monomer, both burning in nitrogen–air mixtures // *J. Polymer Sci.: Polymer Chem. Ed.* — 1978. — V. 16, N 7. — P. 1755–1778. — DOI: 10.1002/pol.1978.170160726.
9. **Korobeinichev O., Gonchikzhapov M., Tereshchenko A., Gerasimov I., Shmakov A., Paletsky A., Karpov A.** An experimental study of horizontal flame spread over PMMA surface in still air // *Combust. Flame.* — 2018. — V. 188. — P. 388–398. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2017.10.008.
10. **Olson S. L., T'ien J. S.** Buoyant low-stretch diffusion flames beneath cylindrical PMMA samples // *Combust. Flame.* — 2000. — V. 121, N 3. — P. 439–452. — DOI: 10.1016/S0010-2180(99)00161-3.
11. **Thomsen M., Fernandez-Pello C., Olson S. L., Ferkul P. V.** Downward burning of PMMA cylinders: The effect of pressure and oxygen // *Proc. Combust. Inst.* — 2021. — V. 38, N 3. — P. 4837–4844. — DOI: 10.1016/j.proci.2020.05.024.
12. **Tao S., Fang J., Zhao L., Wang J., Hassan Raza Sh., Yang L.** Burning characteristics of PMMA with varied stretch rates under stagnation-point diffusion flames // *Combust. Flame.* — 2020. — V. 220. — P. 63–72. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2020.06.022.
13. **Yang C. T., T'ien J. S.** Numerical simulation of combustion and extinction of a solid cylinder in low-speed cross flow // *J. Heat Mass Transfer.* — 1998. — V. 120, N 4. — P. 1055–1063. — DOI: 10.1115/1.2825890.
14. **Bedir H., Tien J. S.** A computational study of flame radiation in PMMA diffusion flames including fuel vapor participation // *Symp. (Int.) Combust.* — 1998. — V. 27, N 2. — P. 2821–2828. — DOI: 10.1016/S0082-0784(98)80140-9.
15. **Novozhilov V., Joseph P., Ishiko K., Shimada T., Wang H., Liu J.** Polymer combustion as a basis for hybrid propulsion: A comprehensive review and new numerical approaches // *Energies.* — 2011. — V. 4, N 10. — P. 1779–1839. — DOI: 10.3390/en4101779.
16. **Karpov A. I., Korobeinichev O. P., Shaklein A. A., Bolkisev A. A., Kumar A., Shmakov A. G.** Numerical study of horizontal flame spread over PMMA surface in still air // *Appl. Therm. Eng.* — 2018. — V. 144. — P. 937–944. — DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2018.08.106.
17. **Trubachev S. A., Korobeinichev O. P., Karpov A. I., Shaklein A. A., Glaznev R. K., Gonchikzhapov M. B., Paletsky A. A., Tereshchenko A. G., Shmakov A. G., Besspalova A. S., Hu Y., Wang X., Hu W.** The effect of triphenyl phosphate inhibition on flame propagation over cast PMMA slabs // *Proc. Combust. Inst.* — 2021. — V. 38, N 3. — P. 4635–4644. — DOI: 10.1016/j.proci.2020.05.043.
18. **Shaklein A. A., Bolkisev A. A., Karpov A. I., Korobeinichev O. P., Trubachev S. A.** Two-step gas-phase reaction model for the combustion of polymeric fuel // *Fuel.* — 2019. — V. 255. — P. 115878. — DOI: 10.1016/j.fuel.2019.115878.
19. **Endo M., T'ien J. S., Ferkul P. V., Olson S. L., Johnston M. C.** Flame growth around a spherical solid fuel in low speed forced flow in microgravity // *Fire Technol.* — 2020. — V. 56. — P. 5–32. — DOI: 10.1007/s10694-019-00848-2.
20. **ANSYS 2019 R3.** Release 19.5.0. Academic Research. — <http://www.ansys.com/>.
21. **Kee R. J., Rupley F. M., Miller J. A.** CHEMKIN–II: A Fortran chemical kinetics package for the analysis of gas phase chemical kinetics // *Rep. No. SAND 89-8009B.* — Sandia Nat. Lab., 1989.
22. **Dakshnamurthy S., Knyazkov D. A., Dmitriev A. M., Korobeinichev O. P., Nilsson E. J. K., Konnov A. A., Narayanaswam K.** Experimental study and a short kinetic model for high-temperature oxidation of methyl methacrylate // *Combust. Sci. Technol.* — 2019. — V. 191, N 10. — P. 1789–1814. — DOI: 10.1080/00102202.2018.1535492.
23. **Замараев К. И.** Химическая кинетика: курс лекций: в 3 ч. / под ред. А. Г. Окунева. — Новосибирск: Новосиб. гос. ун-т, 2003. — Ч. 1.

*Поступила в редакцию 09.11.2022.
Принята к публикации 14.12.2022.*