

Numerical Simulation of Ignition Mixtures of Methane and Acetylene with Air

V. A. Levin^{1,2}, N. E. Afonina¹, G. D. Smekhov¹, A. N. Khmelevsky¹

¹ Research Institute of Mechanics, Moscow State University, Moscow, 119192, Russia,

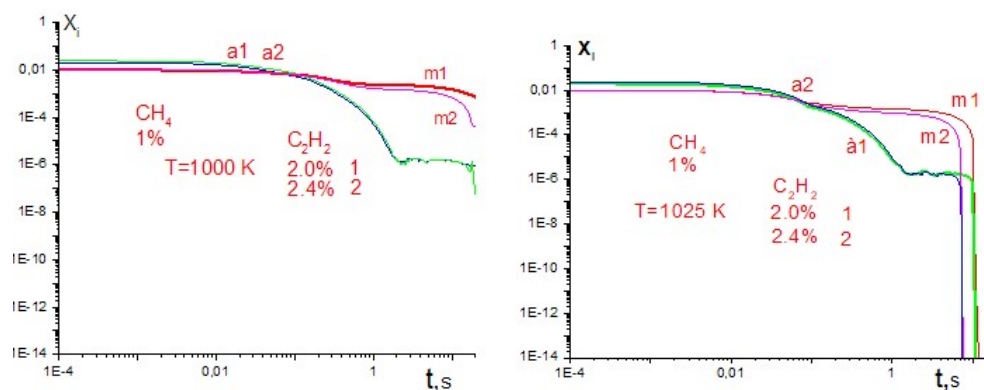
² Institute for Automation and Control Processes, Far East Branch, Russian Academy of Sciences, Vladivostok, 690041, Russia

afonina@imec.msu.ru

Abstract

The research object is the process of ignition in mixtures of methane and acetylene with air. The promoting effect of the addition of acetylene on the ignition of these mixtures has been demonstrated. The effect of the additive on the acceleration of ignition is noticeable; the temperature of the lower boundary of the region of rapid ignition of methane is found. The results of numerical simulation of chemical kinetics in the mixtures under consideration are presented, which make it possible to determine the conditions of non-ignition and ignition in methane-acetylene mixtures with air. In experiments carried out at the Research Institute of Mechanics of Moscow State University. For the given values of the methane concentration, the two closest values of the acetylene concentration were found. At a lower value, the mixture did not ignite, and at a higher value, it ignited. In the calculations, at a lower value of the acetylene concentration, the non-ignition temperature was found, and at a higher value, the ignition temperature. Thus, numerical simulation made it possible to satisfactorily explain the experimental data.

Keywords: combustible mixture, methane, acetylene, air, ignition



Shown here are the dependences of methane and acetylene at a methane concentration of 1%. The calculations were carried out up to the time $t_k = 20$ s. As can be seen from the left figure, at a temperature of 1000 K, the curves for acetylene at $a1$ and $a2$ completely coincide. The curves for methane $m1$ and $m2$ coincide in most of the sweeps, but at a higher concentration of acetylene $a2$, at the very end of the sweep, the beginning of its rapid decay is visible. At lower temperatures, the agreement was complete for the methane curves as well. Therefore, the figure really reflects the state of non-ignition of the mixture.

As the temperature of the mixture rises by 25 K, the state of the mixture changes qualitatively. As follows from the right figure, both curves for methane and acetylene demonstrate a sharp (almost vertical) drop in the concentrations of these components and a synchronous change in the $m2$, $a2$ and $m1$, $a1$ regimes at times of about 10 s. For temperatures above 1025 K, ignition occurs faster for both modes with $a1$ and $a2$. Thus, indeed, non-ignition can occur for the highest value of the non-ignition temperatures, and ignition – for the lowest value of the ignition temperatures.

УДК 541.126.2+539.196

Численное моделирование воспламенения смеси метана и ацетилен с воздухом

В. А. Левин^{1,2}, Н. Е. Афонина¹, Г. Д. Смехов¹, А. Н. Хмелевский¹

¹НИИ механики МГУ, Россия, Москва, 119192, Мичуринский проспект, дом 1

²Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, Россия, Владивосток, 690041, ул. Радио, 5

levin@imec.msu.ru

Аннотация

Объектом исследования является процесс воспламенения в смесях метана и ацетилена с воздухом. Продemonстрировано промотирующее влияние добавки ацетилена на воспламенение этих смесей. Заметно влияние добавки на ускорение воспламенения, найдена температура нижней границы области быстрого воспламенения метана. Приведены результаты численного моделирования химической кинетики в рассматриваемых смесях, позволяющие определить условия невоспламенения и воспламенения в метано-ацетиленовых смесях с воздухом. Для заданных значений концентраций метана находились два ближайших значения концентрации ацетилена. При меньшем значении смесь не воспламенялась, а при большем воспламенялась. В расчётах при меньшем значении концентрации ацетилена находилась температура невоспламенения, при большем – температура воспламенения. Таким образом, численное моделирование позволило удовлетворительно объяснить экспериментальные данные.

Ключевые слова: горячая смесь, метан, ацетилен, воздух, воспламенение

1. Введение

Разработанные ранее методики расчёта кинетики воспламенения смесей метана и кислорода, разбавленных азотом, и вычисления времени задержки воспламенения (времени индукции) [1–4], хорошо совпавшие с опубликованными данными, позволили перейти к исследованию воспламенения смесей метана и ацетилена с воздухом.

Метан является основным компонентом природного газа и широко используется во многих технических устройствах. Это обуславливает постоянный интерес к исследованию его свойств с целью повышения эффективности и скорости его сгорания в этих устройствах. Для увеличения скорости сгорания смеси горючего и окислителя можно использовать некоторые вещества (промоторы), добавка которых позволяет уменьшить время индукции. Для метана одним из таких веществ является ацетилен. Особый интерес представляет смесь, в которой окислителем является кислород и, в частности, стандартный воздух. С другой стороны, важно выяснить условия, при которых метан не должен воспламеняться, например, в угледобывающих шахтах при возникающих прорывах метана. Продemonстрировано промотирующее влияние добавки ацетилена на воспламенение метано-ацетиленовых смесей с воздухом.

Основной задачей на новом этапе исследования являлась разработка методики численного моделирования химической кинетики, позволяющей определить условия невоспламенения и воспламенения метано-ацетиленовых смесей с воздухом. Эти условия были определены в экспериментах на импульсной аэродинамической установке в НИИ механики МГУ [5]. Для заданных значений концентраций метана находились два ближайших значения концентрации ацетилена. При меньшем значении она не воспламенялась, при большем

– воспламенялась. Приведены итоги численного моделирования химической кинетики в метано-ацетиленовых смесях с воздухом, позволяющие определить условия невоспламенения и воспламенения в этих смесях и установить эквивалентность экспериментальных результатов и результатов, полученных при численном моделировании.

2. Экспериментальная установка и проведение опытов

Экспериментальное исследование воспламенения и горения метано-ацетиленовых смесей с воздухом проводилось в сферической камере сгорания (КС) из нержавеющей стали с внутренним диаметром 286 мм. Воспламенение инициировалось в центре сферы взрывом проволоочки из нихрома при разряде конденсаторной батареи ёмкостью 2 мкф за время около 1 мкс. Первичными средствами измерений являлись пьезоэлектрические датчики давления с временем разрешения 2 мкс и тензометрические датчики с временем разрешения 1 мс. Датчики устанавливались заподлицо в стенке камеры в экваториальной плоскости в четырёх диаметральных точках. Повышение давления в камере сгорания фиксировалось по изменению сигналов с датчиков давления после подачи импульса, инициирующего горение.

В опытах использовались смеси со значениями концентраций метана m и двумя значениями ацетилена $a1$, $a2$ и воздуха. Смесей с m и $a1$ не воспламенялись, с m и $a2$ воспламенялись. В опытах начальное давление смеси устанавливалось равным $P_0 = 1$ атм при начальной температуре $T_0 = 293$ К. В экспериментах считалось, что фронт пламени распространялся до стенки камеры сгорания и горючая смесь воспламенялась, если начальное давление в смеси возрастало на 5 % и более. Соответственно смесь не воспламенялась при отсутствии возрастания давления или возрастании менее 5 %.

3. Методика проведения расчётов и сделанные предположения

Точное моделирование сложного процесса воспламенения рассматриваемой горючей смеси в сферической камере сгорания затруднительно. Для этого надо рассчитать в центре сферической камеры сгорания образование области с высокими значениями давления и температурой T_r , установившейся при поджоге исходной горючей смеси. В результате необходимо найти размеры этой области, распределение в ней температуры и давления газа, возникновение теплового фронта пламени, его температуру T_f , и движение внутри камеры. В настоящей работе сделана попытка приблизительного описания процесса воспламенения этой смеси используя определённые предположения.

Нагретая взрывом область с высоким давлением вблизи центра КС играет роль поршня сжимающего газ в камере сгорания. В каждой микрообласти КС до начала воспламенения состав газа не изменяется, и молекулярный вес равен молекулярному весу холодного газа до взрыва при нормальной температуре $T_0 = 293$ К. В результате движения поршня может возникнуть ударная или детонационная волна, фронт которой движется от центра камеры к стенке. В случае достижения стенки расположенный в ней датчик должен был бы зафиксировать скачок давления, однако в опытах это не наблюдалось. Поэтому можно считать, что воспламенение горючей смеси в КС происходит в режиме с образованием теплового фронта пламени.

Предполагается равенство давлений в нём и в холодном газе. Этот момент и отражается при расчёте кинетики процесса воспламенения в режиме постоянного давления с его величиной $P = 1$ атм. Однако в дальнейшем в КС происходит процесс установления равной плотности во всём её объёме, но при новом составе газа и температуре. Равная плотность будет только при составлении начальной смеси с температурой T_0 и в конечном равновесном состоянии с температурой T и ещё не ушедшим теплом через стенки КС.

Воспламенение горючей рассматриваемой смеси происходит в результате возникновения в ней механизма цепного размножения активных радикалов. В итоге, в каждой микрообласти КС в некоторый момент времени начинают резко уменьшаться концентрации ме-

тана и ацетилен. Время достижения $1/10$ величины начальной концентрации можно считать временем задержки воспламенения (временем индукции). В проведенных расчётах это считается признаком воспламенения, отсутствие такого признака свидетельствует о невоспламенении. В экспериментах считалось, что фронт пламени распространялся до стенки камеры сгорания, и горючая смесь воспламенялась, когда начальное давление в смеси возрастало на 5 % и более. При отсутствии возрастания давления или возрастании менее 5 % смесь не воспламенялась.

Динамику этого процесса рассчитать трудно, однако следует учесть, что при численном моделировании и в эксперименте устанавливается только факт воспламенения – нет воспламенения или есть воспламенение. Качественная же картина этого процесса воспламенения при разных критериях воспламенения смеси одинакова.

Невоспламенение и воспламенение смеси в большей степени зависит от температуры в тепловом фронте пламени. Можно предположить, что при отсутствии возрастания давления или его слабом возрастании до 5 % механизм цепного размножения активных радикалов не включается, и поэтому смесь не воспламеняется, а при большем значении давления цепной процесс возникает, и смесь воспламеняется. Из этого следует, что для установления невоспламенения можно действительно использовать приближение постоянного давления равного $P=1$ атм, установление же воспламенения ограничивается регистрацией только его факта. Предполагается, что при заданных значениях концентраций метана m и концентрации ацетилена с меньшим значением $a1$ температура в тепловой волне T_1 , с большим значением $a2$ температура равна T_2 . Целью расчётов было установление невоспламенения и воспламенения смесей с величинами концентраций ацетилена $a1$ и $a2$, используемых в экспериментах. Значениями величин $a1$ и $a2$ при заданной величине m брались некоторые значения, приведенные в Таблице (стр.13) из [5], в которой факт воспламенения отмечен символом (+), а невоспламенения (–). По полученным данным можно рассчитать нижний концентрационный предел распространения пламени (НКПР) как среднее значение между концентрациями, соответствующими затуханию и распространению пламени.

При численном моделировании рассчитывались развёртки концентраций различных компонентов во времени. В опытах при значении концентрации $a1$ воспламенение отсутствовало. В расчётах невоспламенением считалось отсутствие воспламенения до максимального момента времени расчёта $t_k = 10 \div 20$ с. При моделировании для этой концентрации и нескольких значений температуры T_1 с увеличением их величин определённым образом устанавливалось отсутствие воспламенения, тогда наибольшее значение температуры, при которой смесь не воспламенялась T_{1a} можно считать искомой температурой невоспламенения. Таким же путём можно найти температуру воспламенения. Для нескольких значений температуры T_2 для концентрации ацетилена $a2$ устанавливается воспламенение, наименьшее значение температуры, при которой смесь воспламенялась можно считать температурой воспламенения T_{2b} .

4. Химическая модель газовой среды

В настоящем исследовании рассматривался блок реакций и соответствующая база данных о константах скорости этих реакций, приведенные в работе [6]. В блоке содержатся сведения о 196 реакциях с участием 32-х видов частиц. При этом брались константы скорости, приведенные для реакций, идущих в прямом направлении. Константы скорости обратных реакций рассчитывались с использованием термодинамического соотношения между константами скорости этих реакций.

5. Расчёт кинетики процесса воспламенения

В настоящее время в исследованиях процессов воспламенения и горения горючих смесей нашёл широкое применение метод математического моделирования. В детальных

схемах исследований при решении системы дифференциальных уравнений химической кинетики можно получить информацию о наблюдаемых в экспериментах величинах и делать соответствующие выводы. Организация и проведение моделирования часто приобретает черты эксперимента, и вполне уместно говорить о таком моделировании, как о численном эксперименте.

При численном моделировании использовалась система кинетических уравнений для многокомпонентного реагирующего газа, предложенная и применявшаяся ранее в НИИ механики МГУ [7–17]. В качестве интегрируемых функций в уравнениях используются глубины (степени) развития химических реакций z_{ul} , скорость изменения которых равна скоростям реакций w_{ul} , а концентрации компонентов газа γ_i определяются линейными алгебраическими зависимостями от этих величин

$$\frac{dz_{ul}}{dt} = w_{ul} \quad \text{при} \quad t = t_0, \quad z_{ul0} = 0, \quad l = 1, 2, \dots, n;$$

$$w_{ul} = k_{ul1} \prod_i \gamma_i^{a_{li}} - k_{ul2} \prod_i \gamma_i^{a'_{li}},$$

$$\gamma_i = \gamma_{i0} + \sum_l (a'_{li} - a_{li}) z_{ul}, \quad i = 1, 2, \dots, m$$

Здесь величины с индексом ноль относятся к значениям в начальный момент времени. Индекс l – номер химической реакции, полное число которых n ; индекс i перечисляет компоненты, полное число которых m ; a_{li} и a'_{li} – значения стехиометрических коэффициентов компонента i в прямом и обратном направлениях реакции l соответственно; k_{ul1} и k_{ul2} – константы скорости прямых и обратных реакций. Функции, имеющие индекс u , являются безразмерными величинами.

6. Результаты расчётов

6.1. Промотирование метана ацетиленом

В данном разделе демонстрируется качественная картина воспламенения метано-ацетиленовых смесей с воздухом и влияние добавки ацетилена в горючей смеси на скорость воспламенения. На рис. 1–4 показаны развёртки концентраций метана, ацетилена и радикала CH_3 (метила) во времени при произвольно выбранных температурах 2000 К, 1500 К, 1250 К и 1100 К. Состав воздуха взят упрощённым – 21 % кислорода и 79 % азота, давление горючей смеси 1 атм и молярная доля метана 5 %.

На рисунках в первом варианте (а) доля ацетилена равнялась 2.5 %, в варианте (б) – 0.1 %. Поскольку основной задачей численного моделирования является разработка методики расчёта НКПР в рассматриваемых смесях уместно считать меньшее значение концентрации ацетилена малой конечной величиной. Это может быть, например, примесь в используемом метане или его начальная величина в экспериментах по установлению воспламенения смеси.

На рисунках действительно видно, что момент начала резкого уменьшения концентраций метана и ацетилена проявляется отчётливо, и его при качественном рассмотрении можно считать началом воспламенения. Сравнение временных развёрток при различных температурах в вариантах (а) и (б) показывает, что воспламенение при концентрации ацетилена 2.5 % происходит раньше, чем при концентрации 0.1 %. Добавка ацетилена к метану в горючей смеси действительно ускоряет процесс воспламенения, и ацетилен является промотором для воспламенения метана.

Приблизительно можно отметить величины ускорения. При температуре 2000 К время начала воспламенения $t_a = 10^{-5}$ с, время начала воспламенения $t_b = 2 \times 10^{-5}$ с. Таким образом, при большем значении концентрации ацетилена время начала воспламенения умень-

шается в 2 раза. При температуре 1500 К время начала воспламенения $t_a = 8 \times 10^{-5}$ с, время начала воспламенения $t_b = 6 \times 10^{-4}$ с, и время начала воспламенения уменьшается почти в 8 раз. При температуре 1250 К время начала воспламенения $t_a = 2 \times 10^{-3}$ с, время начала воспламенения $t_b = 8 \times 10^{-3}$ с, время начала воспламенения уменьшается в 4 раза. При температуре 1100 К метан не воспламеняется. Это означает, что достигнута нижняя граница области высокотемпературного (быстрого) окисления метана.

В работах [1–4] эта граница температурного диапазона была определена в смесях метан – кислород – азот, в рассматриваемых смесях она также существует. Ацетилен же и при этой температуре продолжает распадаться.

Там же показано, что максимальное значение концентрации метила CH_3 возникает в момент времени, близкий к времени индукции. На рис. 1–3 слабый максимум концентрации этого радикала проявляется и в рассматриваемых смесях. Следует отметить ещё две особенности начавшегося воспламенения. Начиная с момента начала воспламенения концентрации метана и ацетилена изменяются синхронно до выхода на стационарный уровень. В используемых шкалах осей $0x$ и $0y$ концентрации метана и ацетилена изменяются по наклонной прямой, причём наклон прямой в вариантах (б) более крутой, чем в вариантах (а).

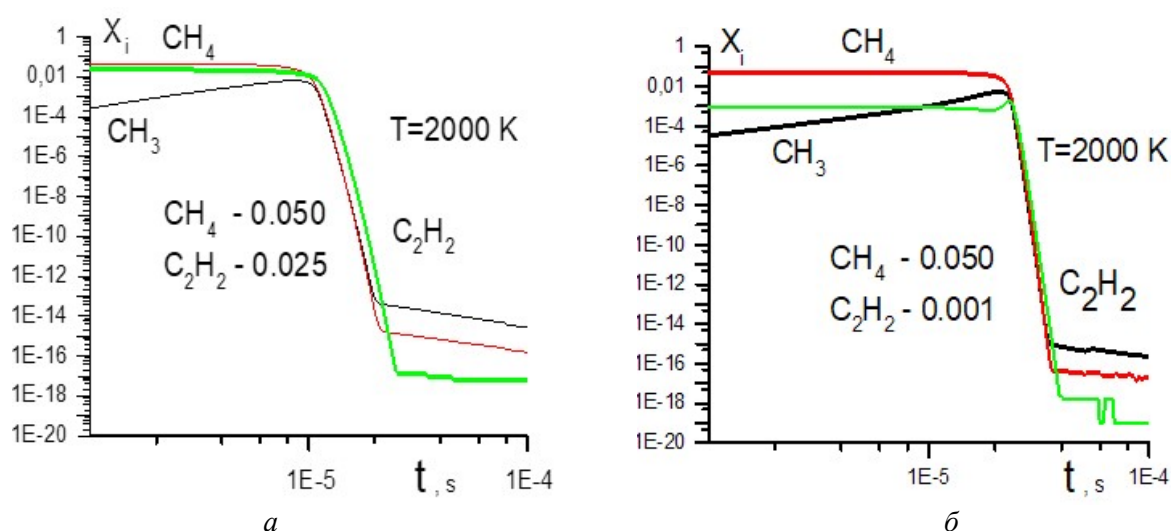


Рис. 1. Развёртки концентраций метана, ацетилена и метила во времени при $T = 2000$ К.

а – доля ацетилена 2.5 %; б – доля ацетилена 0.1 %

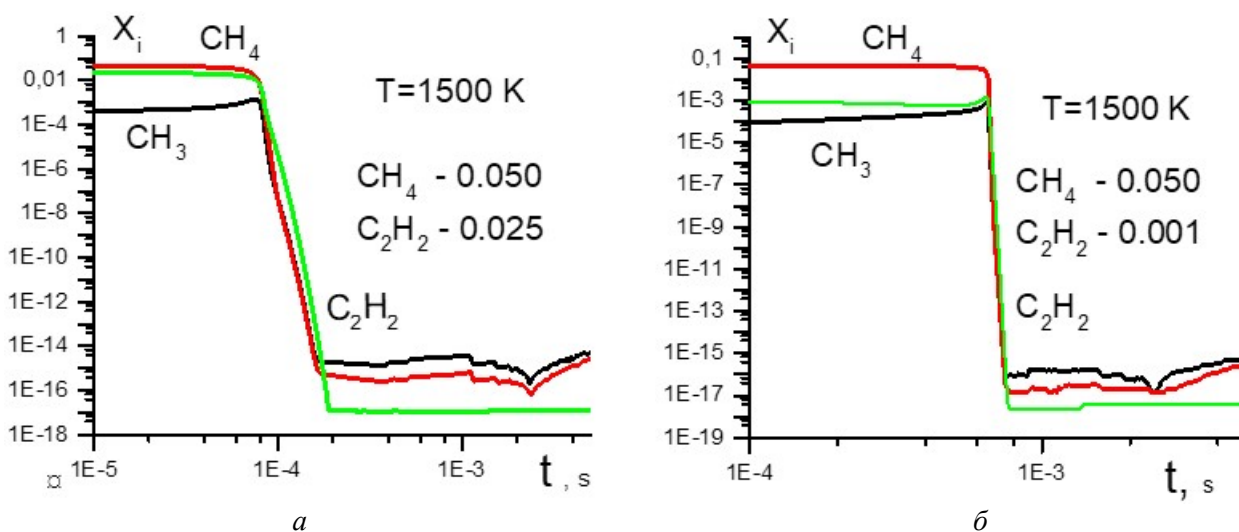


Рис. 2. Развёртки концентраций метана, ацетилена и метила во времени при $T = 1500$ К.

а – доля ацетилена 2.5 %; б – доля ацетилена 0.1 %

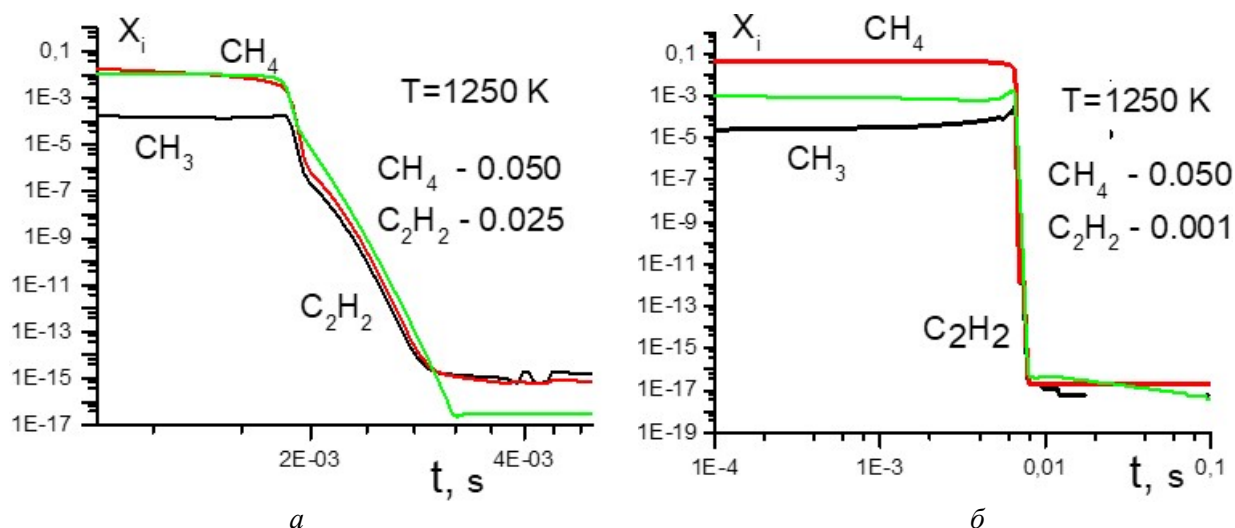


Рис. 3. Развёртки концентраций метана, ацетилена и метила во времени при $T = 1250$ К.
 a – доля ацетилена 2.5 %; b – доля ацетилена 0.1 %

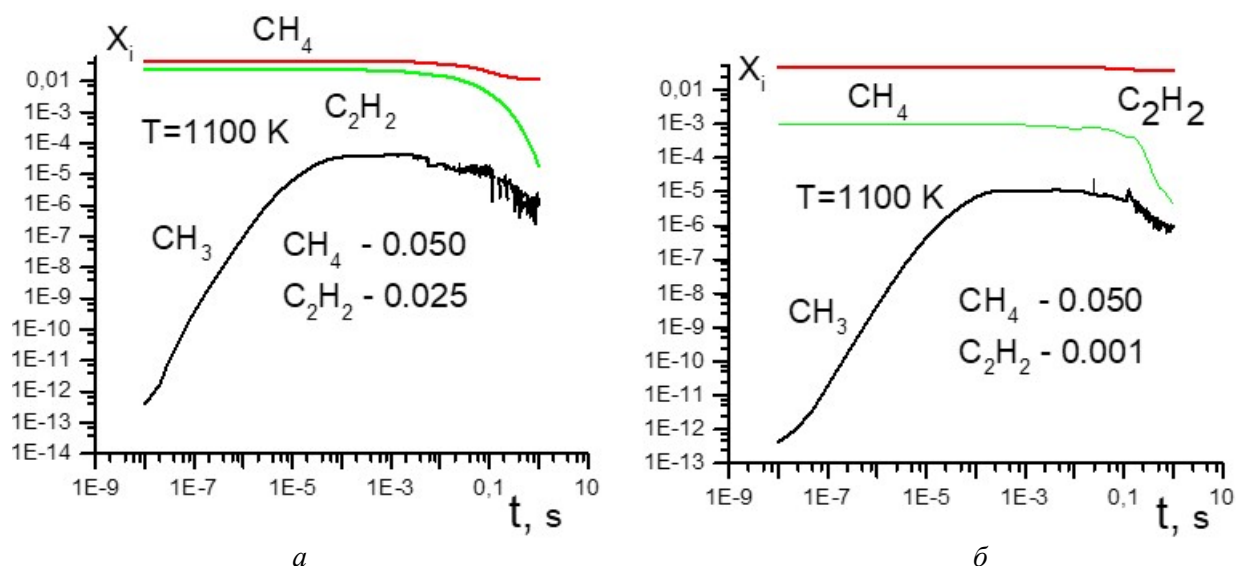


Рис. 4. Развёртки концентраций метана, ацетилена и метила во времени при $T = 1100$ К.
 a – доля ацетилена 2.5 %; b – доля ацетилена 0.1 %

6.2. Моделирование воспламенения метано-ацетиленовых смесей с воздухом

Каждую метано-ацетиленовую смесь с воздухом можно одновременно считать ацетилено-метановой смесью с воздухом. Изложение результатов исследования удобнее начинать с концентрации метана $m = 1$ %, так как при отсутствии метана $m = 0$ % смесь оказывается чисто ацетилено-воздушной.

На рис. 5–11 показаны вычисленные распределения концентраций метана и ацетилена от времени при заданном значении метана и двумя или тремя заданными значениями ацетилена, отмеченными на рисунках. В вариантах рисунков (a) зависимости отражают состояния невоспламенения горючей смеси, в вариантах (b) состояния воспламенения. На всех рисунках кривые для метана при начальной концентрации ацетилена $a2$ отмечены малиновым цветом ($m2$), при концентрации $a1$ красным ($m1$). Зависимости от времени концентрации ацетилена для начального состояния $a2$ показаны синим цветом ($a2$) при концентрации $a1$ зелёным ($a1$). В обоих вариантах рисунков рассчитывались развёртки для нескольких значений температуры. На рисунках (a) показаны распределения при максимальной температуре невоспламенения, на рисунках (b) распределения при минимальной температуре воспламенения. Эти температуры также отмечены на рисунках.

В экспериментах и расчётах регистрировался только факт невоспламенения или воспламенения. В экспериментах горючая смесь, состоящая в основном из воздуха, поджигалась в центре сферической камеры до температуры много большей 1000 К. Однако в образовавшемся фронте пламени температура может сильно упасть до величин около 1000 К и вполне возможно может незначительно изменяться при различных величинах концентрации ацетилена. Предполагается, что при заданных значениях концентраций метана m и концентрации ацетилена с меньшим значением $a1$ температура в тепловой волне T_1 и воспламенения не происходит, при концентрации с большим значением $a2$ температура равна T_2 и воспламенение возникает. Отсутствие воспламенения означает, что пламя либо совсем не выходит из центра камеры сгорания, либо затухает где-то в объёме камеры, так как температура в тепловом фронте пламени становится равной температуре невоспламенения T_1 .

Температур невоспламенения и воспламенения может быть сколь угодно. Действительно, если найдена хоть одна температура невоспламенения то очевидно, что при любой возможной меньшей температуре рассматриваемой смеси она невоспламенится (расчёты это подтверждают). С другой стороны, если найдена хоть одна температура воспламенения, то очевидно, что при любой возможной большей температуре смеси она тоже воспламенится (расчёты подтверждают). Поэтому в экспериментах и расчётах невоспламенение и воспламенение смеси возникают не при какой-то одной единственной температуре смеси, а в некотором диапазоне температур – единственного решения нет. В расчётах можно было определить максимальную температуру невоспламенения и минимальную температуру воспламенения.

На рис. 5 приведены зависимости при концентрации метана 1 %. Расчёты проведены до момента времени $t_k = 20$ с. Как видно из рис. 5, *a*, при температуре 1000 К кривые для ацетилена при $a1$ и $a2$ полностью совпадают. Кривые для метана $m1$ и $m2$ совпадают на большей части развёрток, но при большей концентрации ацетилена $a2$ в самом конце развёртки видно начало его быстрого распада. При более низких температурах совпадение было полным и для метановых кривых. Следовательно, рисунок действительно отражает состояние невоспламенения смеси.

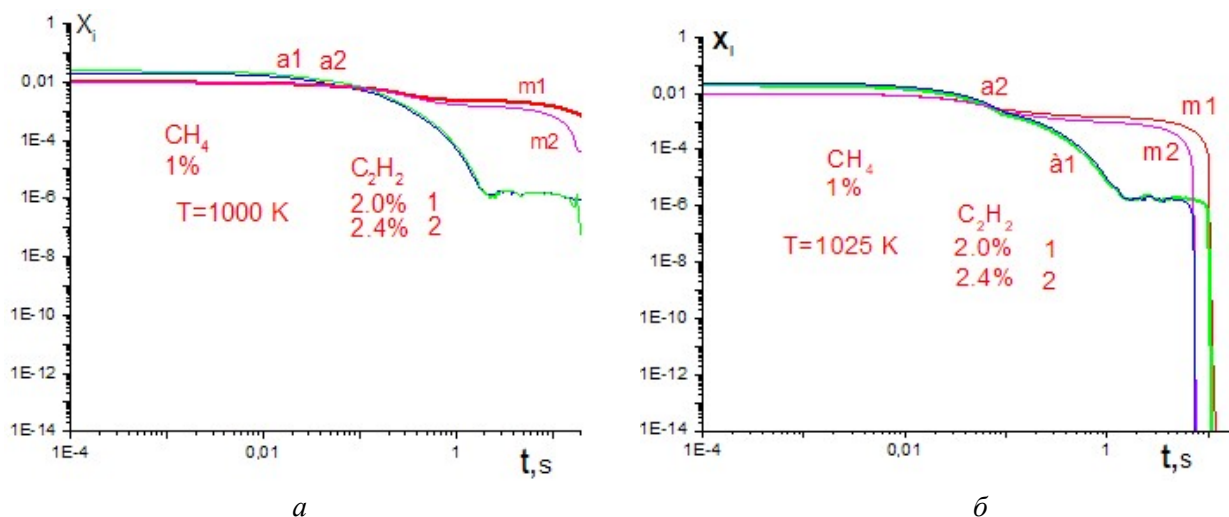


Рис. 5. Состояние смеси при концентрации метана 1 %. *a* – $T=1000$ К; *б* – $T=1025$ К

Как следует из рис. 5, *б* обе кривые для метана и ацетилена демонстрируют резкое (почти вертикальное) падение концентраций этих компонентов и синхронное изменение режимов $m2$, $a2$ и $m1$, $a1$ в моменты времени около 10 с. Для температур больших 1025 К воспламенение происходит быстрее для обоих вариантов режимов с $a1$ и $a2$. Таким образом, действительно невоспламенение может происходить для наибольшего значения из температур невоспламенения, а воспламенение – для наименьшего значения из температур воспламенения.

На рис. 6, где приведены зависимости при концентрации метана 2 %, картина воспламенения смеси почти полностью аналогична картине воспламенения при концентрации метана 1 %. Можно только отметить, что в области невоспламенения при температуре 1000 К кривые для ацетилена $a1$ и $a2$, а также для метана $m1$ и $m2$ полностью совпадают. В области воспламенения при температуре 1050 К кривая для метана $m1$ обрывается при конечном времени расчёта $t_k = 20$ с.

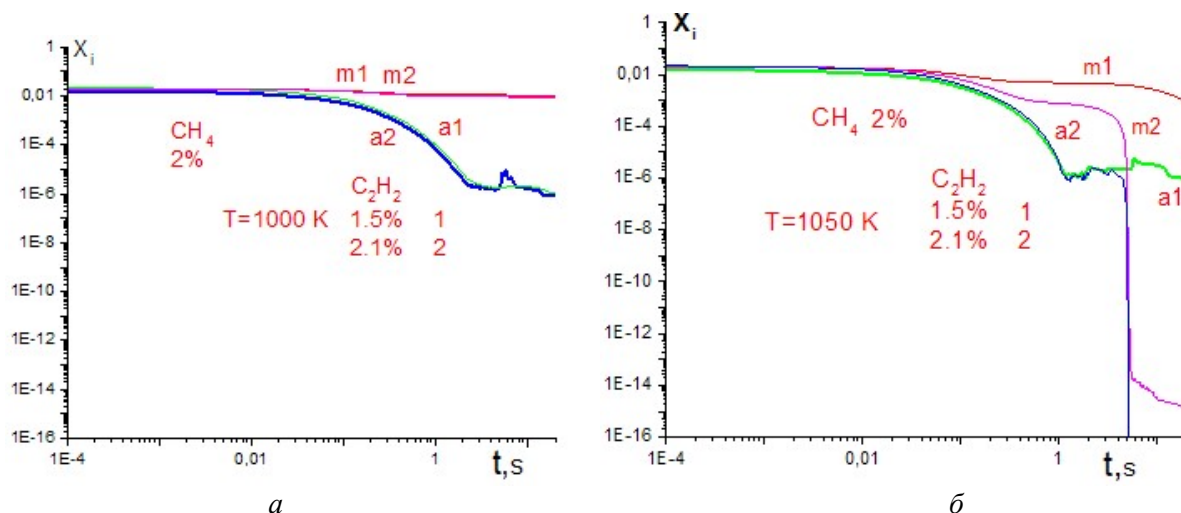


Рис. 6. Состояние смеси при концентрации метана 2 %. $a - T = 1000$ К; $b - T = 1050$ К

На рис. 7 приведены зависимости при концентрации метана 3 % с температурами невоспламенения 1050 К и воспламенения 1113 К. Картина воспламенения смеси аналогична картине воспламенения при концентрации метана 2 %, но появляется некая особенность. Конечные части развёрток ацетилена $a1$, $a2$ приобретают пульсационный характер. В области невоспламенения (рис. 7, a) возникают колебания концентрации ацетилена в режимах $a1$ и $a2$, в области воспламенения (рис. 7, b) – только в режиме $a1$. По-видимому, это связано с возникновением молекул ацетилена в самом газе, концентрация которых складывается с концентрацией нераспавшихся молекул начальной смеси. Это приводит к характерному итерационному процессу вычисления параметров состояния горючей смеси в режиме с заданным давлением [7].

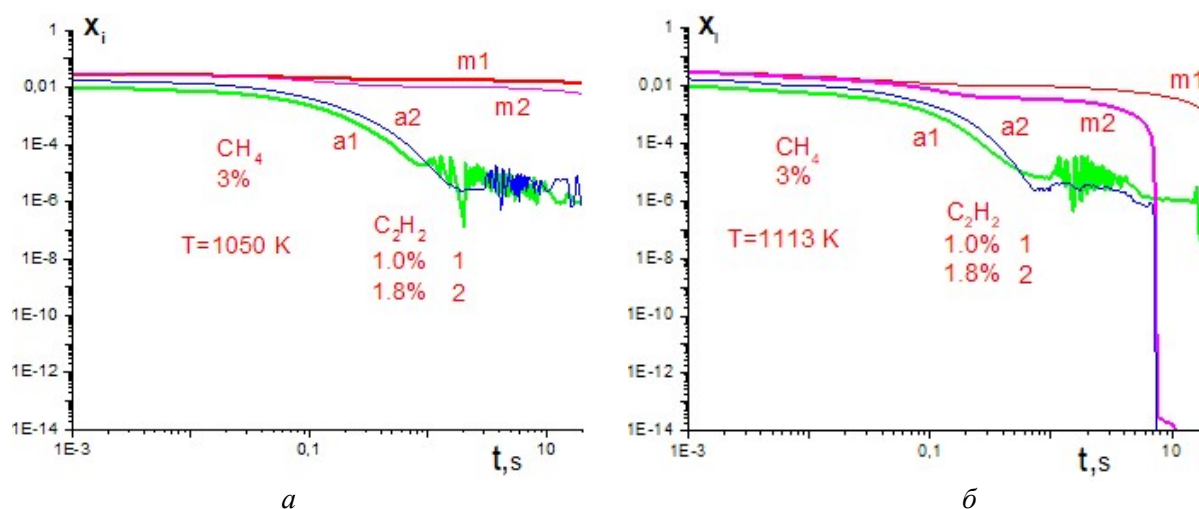


Рис. 7. Состояние смеси при концентрации метана 3 %. $a - T = 1050$ К; $b - T = 1113$ К

На рис. 8 приведены зависимости при концентрации метана 4 %, конечным временем развёртки $t_k = 10$ с и с температурами невоспламенения 1100 К и воспламенения 1158 К. Картина воспламенения близка к картине воспламенения при концентрации метана 3 %, но

пульсационный характер развёрток $a1$ и $a2$ приобрёл большую амплитуду. Другое отличие – в области невоспламенения (рис. 8, a) возникают колебания концентрации ацетилена только в режиме $a2$, в области воспламенения (рис. 8, b) – в режимах $a1$ и $a2$. В области воспламенения происходит резкое и синхронное падение концентраций и метана, и ацетилена.

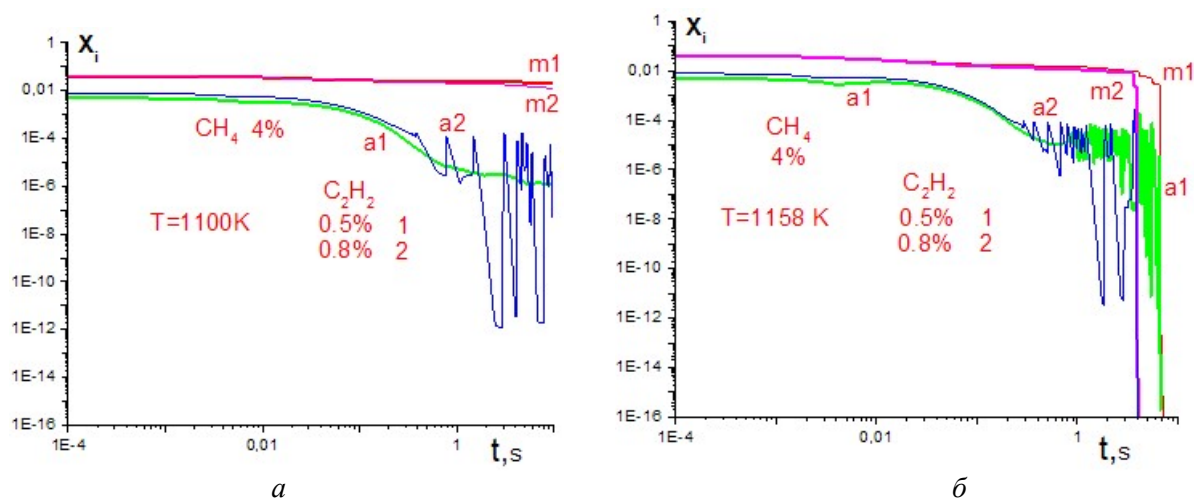


Рис. 8. Состояние смеси при концентрации метана 4 %. a – $T=1100$ K; b – $T=1158$ K

На рис. 9 приведены зависимости для концентрации метана 5 %, конечного времени развёртки $t_k = 2$ с и температурами невоспламенения 1125 K и воспламенения 1160 K. В Таблице указаны следующие значения концентраций ацетилена: 0 %, 0.2 % и 0.4 %. Однако чистого метана не бывает, в нём всегда присутствуют в небольшом количестве разные примеси, в частности, ацетилен. Чтобы оценить его влияние при численном моделировании отсутствие ацетилена заменялось присутствием малого количества в горючей смеси с величиной 10^{-20} молярной доли.

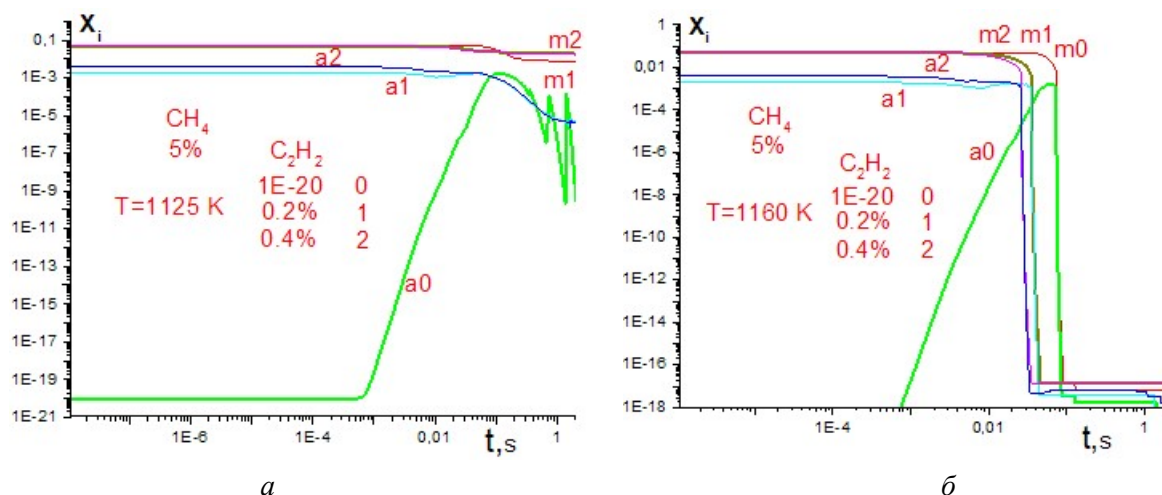


Рис. 9. Состояние смеси при концентрации метана 5 %. a – $T=1125$ K; b – $T=1160$ K

Как видно из рис. 9, в областях невоспламенения и воспламенения концентрация ацетилена возрастает сначала медленно, затем быстрее до максимального значения, сравнимого с начальными значениями в расчётах с величинами 0.2 % и 0.4 %. Далее в области невоспламенения (рис. 9, a) концентрация ацетилена уменьшается и, примерно, совпадает со значениями, полученными в предыдущих расчётах. Совпадают и концентрации метана в смесях с приведенными начальными значениями ацетилена. В области воспламенения (рис. 9, b) можно видеть возникновение процессов резкого распада метана и ацетилена с заданными начальными значениями, а также синхронное падение соответствующих величин.

На рис. 10 показаны временные развёртки чистого метана с начальными концентрациями 5 % и 6 %, с конечным временем развёртки $t_k = 2$ с и с температурами невоспламенения 1125 К и воспламенения 1160 К. Как и в предыдущем рассмотрении, отсутствие ацетилена заменялось присутствием его малого количества в горючей смеси с величиной 10^{-20} молярной доли. Как видно из рис. 10, а, в области невоспламенения концентрации метана $m1$ и $m2$, а также концентрации ацетилена $a1$ и $a2$ совпадают на всей выбранной временной развёртке. В области воспламенения (рис. 10, б) чётко проявляется возникновение в горючей смеси механизма цепных реакций. Концентрации метана и ацетилена резко и синхронно уменьшаются $m1_a1$ и $m2_a2$.

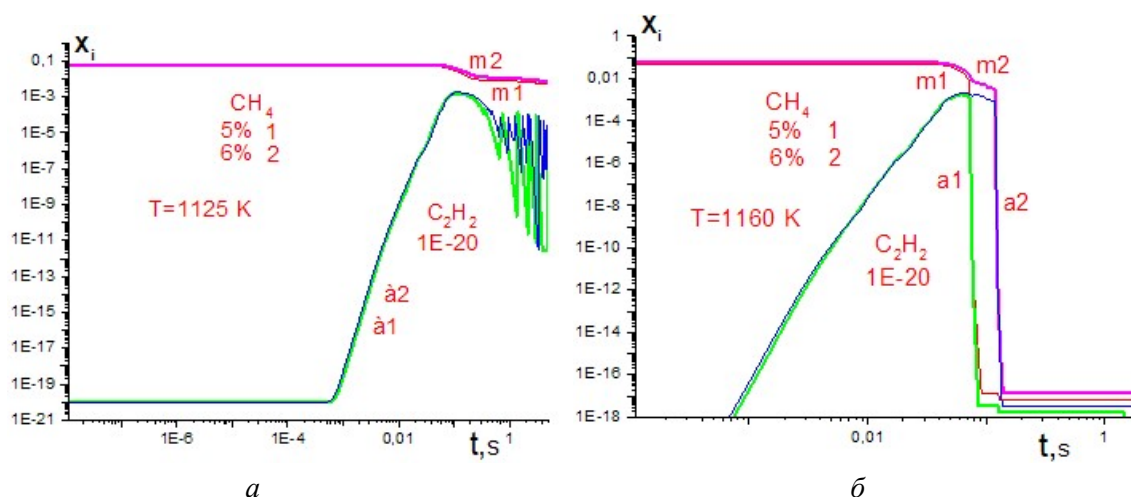


Рис. 10. Временные развёртки чистого метана с начальными концентрациями 5 % и 6 %. а – $T = 1125$ К; б – $T = 1160$ К.

Теперь можно перейти к анализу результатов расчёта в чистой ацетилено-воздушной смеси, т.е. при $m = 0$ %. По аналогии с метано-ацетиленовыми смесями отсутствие метана заменялось присутствием его малого количества в горючей смеси с величиной 10^{-20} молярной доли. В Таблице указаны значения концентраций ацетилена: 2.2 %, 2.5 % и 2.6 % (НКПР ацетилена 2.5 %), расчёты проведены при концентрациях ацетилена 2 % и 3 %. На рис. 11 приведены временные развёртки концентраций метана и ацетилена с конечным временем развёртки $t_k = 10$ с и с температурами невоспламенения 975 К и воспламенения 990 К.

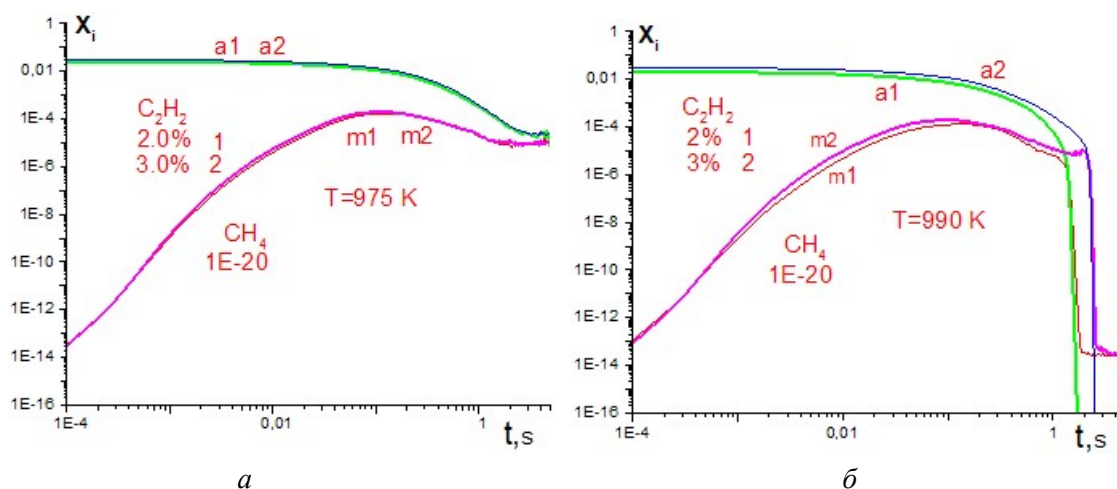


Рис. 11. Временные развёртки концентраций метана и ацетилена с конечным временем развёртки $t_k = 10$ с. а – температурами невоспламенения 975 К; б – температура воспламенения 990 К

В области невоспламенения (рис. 11, *а*) видно полное совпадение концентраций ацетилена $a1_a2$ и метана $m1_m2$ на всей выбранной временной развёртке. В области воспламенения (рис. 11, *б*) чётко проявляется возникновение в горючей смеси цепного механизма протекающих реакций. Концентрации ацетилена и метана резко и синхронно уменьшаются – $a1_m1$ и $a2_m2$.

Таблица

Таблица начальных опытных данных

N п/п	Состав смеси, % объёмные		Факт воспламенения
	CH ₄	C ₂ H ₂	
1	0	2.6	+
2	0	2.5	+
3	0	2.2	–
4	1.0	2.4	+
5	1.0	2.2	–
6	1.0	2.0	–
7	2.0	2.1	+
8	2.0	1.8	+
9	2.0	1.5	–
10	3.0	1.8	+
11	3.0	1.5	+
12	3.0	1.3	–
13	3.0	1.0	–
14	4.0	0.8	+
15	4.0	0.6	–
16	4.0	0.5	–
17	5.0	0.4	+
18	5.0	0.2	–
19	5.0	0	–
20	6.0	0	+

7. Заключение

1. В метано-ацетиленовых смесях с воздухом добавка ацетилена к метану заметно ускоряет распад метана. Определена температура нижней границы области высокотемпературного (быстрого) окисления метана.

2. Разработана методика расчёта фактов невоспламенения и воспламенения метана при добавках ацетилена.

3. Численное моделирование подтвердило эти факты для найденных экспериментальных значений концентраций метана и ацетилена, полученных на импульсной аэродинамической установке в НИИ механики МГУ.

Благодарности и ссылки на гранты

Работа выполнена в соответствии с планом исследований НИИ механики МГУ (тема АААА-А19-119012990113-1).

Литература

- Афони́на Н.Е., Смехов Г.Д., Хмелевский А.Н. Высокотемпературное окисление метана: признаки воспламенения и время индукции. Отчёт № 5381. НИИ механики МГУ. 2017 г. 22 С.

2. Афонина Н.Е., Смехов Г.Д., Хмелевский А.Н. Расчёт времени индукции при высокотемпературном окислении метана. Отчёт № 5415. НИИ механики МГУ. 2018. 30 С.
3. Афонина Н.Е., Смехов Г.Д., Хмелевский А.Н. Расчёт времени индукции при высокотемпературном окислении метана//Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2018. Т. 19. вып. 4. <http://chemphys.edu.ru/issues/2018-19-4/articles/788/>
4. Афонина Н. Е., Смехов Г. Д., Хмелевский А. Н. Высокотемпературное окисление метана// Вестник Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилёва. Серия Математика. Информатика. Механика. 2018. Т. 125. № 4. С. 120–124.
5. Левин В.А., Афонина Н.Е., Громов В.Г., Мануйлович И.С., Марков В.В., Смехов Г.Д., Хмелевский А.Н. Концентрационные пределы пламени в метано-воздушных смесях с углеводородными добавками//Горение и плазмохимия. 2016. Т. 14. № 4. С. 258–267.
6. Бочков М.В., Ловачёв Л.А., Четверушкин Б.Н. Химическая кинетика образования NO_x при горении метана в воздухе//Матем. моделирование. 1992. Т. 4. № 9. С. 3–36.
7. Смехов Г.Д. Эффективные алгоритмы расчёта состояний многокомпонентного реагирующего газа в газовой динамике//Матем. моделирование. 1993. Т. 5. № 2. С. 104.
8. Смехов Г.Д. Равновесие и кинетика в химически реагирующем многотемпературном газе при заданных температурах подсистем//Химическая физика. 1999. Т. 18. № 6. С. 26.
9. Смехов Г.Д., Хмелевский А.Н. Исследование альтернативных механизмов образования окиси азота при горении. Отчёт № 4421. НИИ механики МГУ. 1995. 45 С.
10. Левин В.А., Смехов Г.Д., Хмелевский А.Н. Численное моделирование образования окиси азота при горении метано-воздушных смесей//Физика горения и взрыва. 1997. Т. 33. № 1. С. 12–23.
11. Левин В.А., Смехов Г.Д., Хмелевский А.Н. Образование окиси азота в различных группах реакций при горении метано-воздушных смесей. Тезисы докладов Всероссийской научной конференции «Физико-химические проблемы сжигания углеводородных топлив». Россия. Москва, 20-22 мая 1998 г. С. 149–150.
12. Ибрагимова Л.Б., Смехов Г.Д., Диковская Г.С. Определение константы скорости диссоциации молекул CN за фронтом сильных ударных волн//Химическая физика. 2000. Т. 19. № 8. С. 57–67.
13. Смехов Г.Д., Ибрагимова Л.Б., Каркач С.П., Скребков О.В., Шаталов О.П. Численное моделирование воспламенения водородно-кислородной смеси с учётом электронно-возбуждённых компонентов//Теплофизика высоких температур. 2007. Т. 45. № 3. С. 440–452.
14. Смехов Г.Д., Павлов В.А., Шаталов О.П. Исследование воспламенения водородно-кислородных смесей за фронтом падающих ударных волн: эксперимент и численное моделирование// Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2009. Т. 8. <http://www.chemphys.edu.ru/issues/2009-8/articles/194/>
15. Смехов Г.Д. Зависимости времени задержки воспламенения водородно-кислородных смесей от их начальных параметров//Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2009. Т. 8. <http://www.chemphys.edu.ru/issues/2009-8/articles/195/>
16. Smekhov G.D., Shatalov O.P. Modeling of ignition and combustion of hydro-genoxxygen mixtures behind the front of the shock wave // Book of Proceedings 27th international Symposium on Shock Waves. 19-24 July 2009 St. Petersburg, Russia. 2009. P. 428.
17. Смехов Г.Д., Шаталов О.П. Исследование воспламенения водородно-кислородных смесей в диапазоне температур 700÷2500 К//Теплофизика высоких температур. 2016. Т. 54. № 1. С. 1–11.

References

1. Afonina, N. E., Smehov, G. D., Hmelevskij, A. N., *Vysokotemperaturnoe okislenie metana: priznaki vosplamenenija i vremja indukcii* (High-Temperature Oxidation of Methane: Signs of Ignition and Induction Time), Report No. 5381. NII mehaniki MGU, 2017, 22 S.
2. Afonina, N. E., Smehov, G. D., Hmelevskij, A. N., *Raschjot vremeni indukcii pri vysokotemperaturnom okislenii metana* (Calculation of the induction time for high-temperature methane oxidation), Report No. 5415, NII mehaniki MGU, 2018. 30 S.
3. Afonina, N. E., Smekhov, G. D., Hmelevskij, A. N., "Calculation of induction time during high-temperature oxidation of methane," *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, Vol. 19, No. 4, 2018. <http://chemphys.edu.ru/issues/2018-19-4/articles/788/>
4. Afonina, N. E., Smehov, G. D., Hmelevskij, A. N., "Vysokotemperaturnoe okislenie metana," *Vestnik Evrazijskogo nacional'nogo universiteta im. L. N. Gumiljova. Serija Matematika. Informatika. Mehanika*, Vol. 125, No. 4, 2018, pp. 120–124.
5. Levin, V. A., Afonina, N. E., Gromov, V. G., Manujlovich, I. S., Markov, V. V., Smehov, G. D., Hmelevskij, A. N., "Koncentracionnye predely plameni v metano-vozdushnyh smesjah s uglevodorodnymi dobavkami," *Gorenie i plazmohimija*, Vol. 14, No. 4, 2016, pp. 258–267.
6. Bochkov, M. V., Lovachjov, L. A., Chetverushkin, B. N., "Himicheskaja kinetika obrazovanija NOx pri gorenii metana v vozduhe," *Matem. Modelirovanie*, Vol. 4, No. 9, 1992, pp. 3–36.
7. Smehov, G. D., "Jeffektivnye algoritmy raschjota sostojanij mnogokomponentnogo reagirujushhego gaza v gazovoj dinamike," *Matem. Modelirovanie*, Vol. 5, No. 2, 1993, P. 104.
8. Smehov, G. D., "Ravnovesie i kinetika v himicheski reagirujushhem mnogotemperaturnom gaze pri zadannyh temperaturah podsystem," *Himicheskaja fizika*, Vol. 18, No. 6, 1999, P. 26.
9. Smehov, G. D., Hmelevskij, A. N., *Issledovanie al'ternativnyh mehanizmov obrazovanija okisi azota pri gorenii* (Study of Alternative Mechanisms of Nitrogen Oxide Formation during Combustion), Report 4421, NII mehaniki MGU, 1995, 45 p.
10. Levin, V. A., Smehov, G. D., Hmelevskij, A. N., "Chislennoe modelirovanie obrazovanija okisi azota pri gorenii metano-vozdushnyh smesej," *Fizika gorenija i vzryva*, Vol. 33, No. 1, 1997, pp. 12–23.
11. Levin, V. A., Smehov, G. D., Hmelevskij, A. N., "Obrazovanie okisi azota v razlichnyh gruppah reakcij pri gorenii metano-vozdushnyh smesej," *Tezisy dokladov Vserossijskoj nauchnoj konferencii «Fiziko-himicheskie problemy szhiganiya uglevodorodnyh topliv»*, Moskva, 1998, pp. 149–150.
12. Ibragimova, L. B., Smehov, G. D., Dikovskaja, G. S., "Opredelenie konstanty skorosti dissociacii molekul CN za frontom sil'nyh udarnykh voln," *Himicheskaja fizika*, Vol. 19, No. 8, 2000, pp. 57–67.
13. Smehov, G. D., Ibragimova, L. B., Karkach, S. P., Skrebkov, O. V., Shatalov, O. P., "Chislennoe modelirovanie vosplamenenija vodorodno-kislorodnoj smesi s uchjotom jelektronno-vozbuzhdjonykh komponentov," *Teplofizika vysokih temperature*, Vol. 45, No. 3, 2007, pp. 440–452.
14. Smehov, G. D., Pavlov, V. A., Shatalov, O. P., "Investigation of hydrogen-oxygen mixture ignition behind the shock wave front: experiment and numerical simulation," *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, Vol. 8, 2009. <http://www.chemphys.edu.ru/issues/2009-8/articles/194/>
15. Smehov, G. D., "Dependence of the ignition delay time of hydrogen-oxygen mixtures on the initial parameters," *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics*, Vol. 8, 2009. <http://www.chemphys.edu.ru/issues/2009-8/articles/195/>
16. Smekhov, G. D., Shatalov, O. P., "Modeling of ignition and combustion of hydro-genoxigen mixtures behind the front of the shock wave," *Book of Proceedings 27th international Symposium on Shock Waves*, St. Petersburg, Russia, July 2009, P. 428.
17. Smehov, G. D., Shatalov, O. P., "Issledovanie vosplamenenija vodorodno-kislorodnyh smesej v diapazone temperatur 700÷2500 K," *Teplofizika vysokih temperature*, Vol. 54, No. 1, 2016, pp. 1–11.

Статья поступила в редакцию 15 марта 2022 г.