

Тема работы

Моделирование отбора газовой пробы из пламени.

Состав коллектива

- Князьков Денис Анатольевич, ст. преп. КОФ ФФ НГУ, с.н.с. ИХКГ СО РАН;
- Большова Татьяна Анатольевна, с.н.с. ИХКГ СО РАН;
- Дмитриев Артём Михайлович, асс. КОФ ФФ НГУ, м.н.с. ИХКГ СО РАН;
- Осипова Ксения Николаевна, асс. КХиБФ ФФ НГУ, м.н.с. ИХКГ СО РАН.

Контактное лицо

Князьков Денис Анатольевич, daknyazkov@gmail.com

Научное содержание работы

Постановка задачи

Разработать метод учета влияния пробоотборного зонда на профили концентраций компонентов пламени, стабилизированного на плоской горелке при атмосферном давлении. Для этого необходимо провести моделирование течения между поверхностью горелки и зондом в рамках полной системы нестационарных уравнений Навье-Стокса. Изучение внешнего течения перед пробоотборниками различного типа в системе, моделирующей пламя, стабилизированное на горелке, с решением уравнений химической кинетики позволит рассчитать поля течения, температуры и концентраций компонентов пламени. Сравнение полученных полей вблизи зонда с соответствующими характеристиками невозмущенного пламени даст не только качественные, но и количественные величины возмущающих факторов, вносимых в пламя пробоотборником.

Современное состояние проблемы

Как известно, метод зондовой молекулярно-пучковой масс-спектрометрии с мягкой электронной ионизацией является наиболее информативной методикой для идентификации и измерения распределений концентраций широкого спектра промежуточных (не только стабильных, но и лабильных, включая атомы и радикалы) и конечных продуктов горения. В результате адиабатического расширения в вакуум через отверстие пробоотборника установки формируется молекулярный пучок, в котором происходит «замораживание» химических реакций между компонентами пробы. Таким образом, состав газа в молекулярном пучке остается практически таким же, что и перед зондом, что позволяет определять концентрации компонентов пламени. Изучению влияния пробоотборника на характеристики пламени посвящены наши предыдущие работы [1-3]. Использование источниковых членов для задания профиля температуры и концентраций компонентов пламени, позволил предсказать сдвиг по потоку основных характеристик течения (температуры газа на оси потока и др.) по сравнению с соответствующими величинами невозмущенного пламени, но количественных характеристик в зависимости от типа зонда не было получено. Влияние зонда на промежуточные компоненты пламени не были изучены. Для этого необходим учет детальной модели химических реакций, что значительно усложняет расчеты, и, соответственно, повышает требования к вычислительной производительности.

1. •П. А. Сковородко, А. Г. Терещенко и др. Исследование возмущений, вносимых в пламя пробоотборным зондом. I - возмущения газодинамической структуры течения. // Химическая физика. - 2006. - Т. 25, № 10. - С. 23-32

2. •П. А. Сквородко, А. Г. Терещенко и др. Исследование возмущений, вносимых в пламя пробоотборным зондом. II - возмущения распределения концентраций компонентов. // Химическая физика. - 2006. - Т. 25, № 10. - С. 33-4
3. •P.A. Skovorodko, A.G. Tereshchenko, O.P. Korobeinichev, D.A. Knyazkov & A.G. Shmakov (2012): Experimental and numerical study of probe-induced perturbations of the flame structure, Combustion Theory and Modelling, DOI:10.1080/13647830.2012.715674

Полученные результаты

Расчет газодинамического течения газа вблизи пробоотборного зонда в пламени предварительно перемешанной смеси $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{Ar}$ (0.06/0.15/0.79, $\phi = 0.8$), стабилизированном на плоскопламенной горелке, проводился в программном пакете ANSYS Fluent [Academic Research, Release 19.5.0 for ANSYS 2019 R3, <http://www.ansys.com/>]. Решение уравнений Навье-Стокса осуществлялось с использованием опции Pressure-Based, которая подключает алгоритм, основанный на методе коррекции давления. Задача решалась в стационарной постановке. Химическое превращение компонентов пламени описывалось кинетическим механизмом, включающим 17 компонентов и 30 реакций.

Схема области моделирования представлена на рис.1. Расчетная область представляет собой прямоугольник, в которой по оси x установлен осесимметричный пробоотборный никелевый зонд. Левая и правая границы – это проницаемые границы входа и выхода. Левая граница – поверхность горелки. Осевая длина конуса зонда фиксирована и равна 16 мм. Проведены расчеты для разных расстояний от зонда до поверхности горелки z_0 в диапазоне от 0.2 до 2 мм. Радиальный размер расчетной области 15 мм. Течение за пробоотборником также рассчитывалось в рамках решения уравнений Навье-Стокса, однако полученные данные имеют смысл лишь вблизи отверстия зонда ($\sim 200\mu\text{м}$ внутрь зонда), пока работают условия применимости модели.

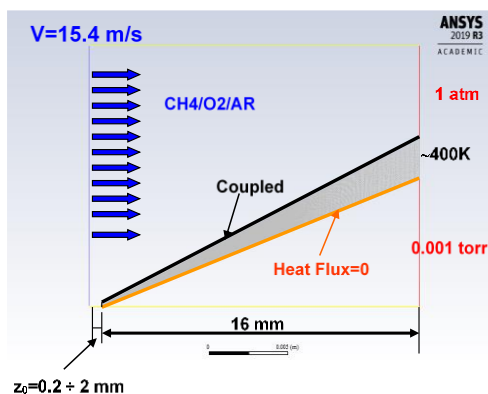


Рис. 1. Схема расчетной области.

Иллюстрации, визуализация результатов

На рис. 2 для примера представлены результаты 3D-расчета температурного поля вблизи пробоотборника для расстояния «зонд-горелка» $z_0=1.0$ мм. Как видно, пробоотборник значительно охлаждает газ вокруг себя. В качестве примера на рис. 3 показано пространственное распределение мольной доли воды в пламени, когда зонд расположен в зоне пламени на $z_0=0,4$ мм. Интересно отметить, что у поверхности зонда наблюдается более высокая концентрация воды, чем в конечной зоне невозмущенного пламени. Это связано с тем, что на холодных его стенках происходит рекомбинация H и OH радикалов, приводящая к увеличенному образованию H_2O .

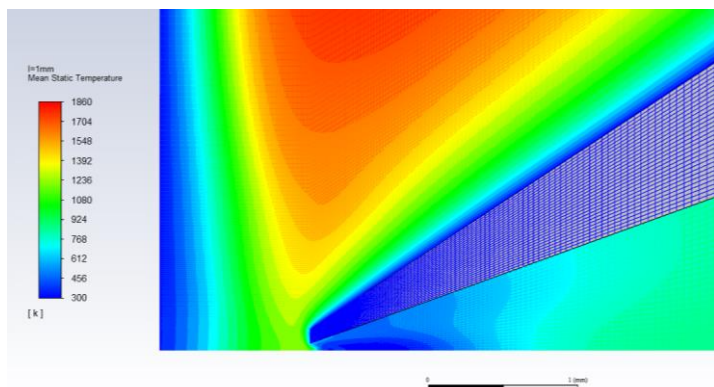


Рис. 2. Температурное поле вблизи никелевого пробоотборника.

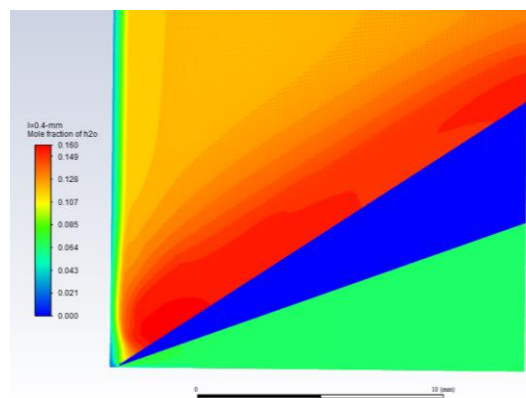


Рис. 3. Рассчитанное (ANSYS) распределение мольной доли воды в пламени

На рис. 4 сопоставлены рассчитанные и измеренные профили мольной доли основных компонентов бедного пламени $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{Ar}$. Представлены три набора данных: результаты 3D расчета в пакете ANSYS, результаты измерений и результаты одномерного расчета в CANTERA (по измеренному температурному профилю и путем решения уравнения энергии).

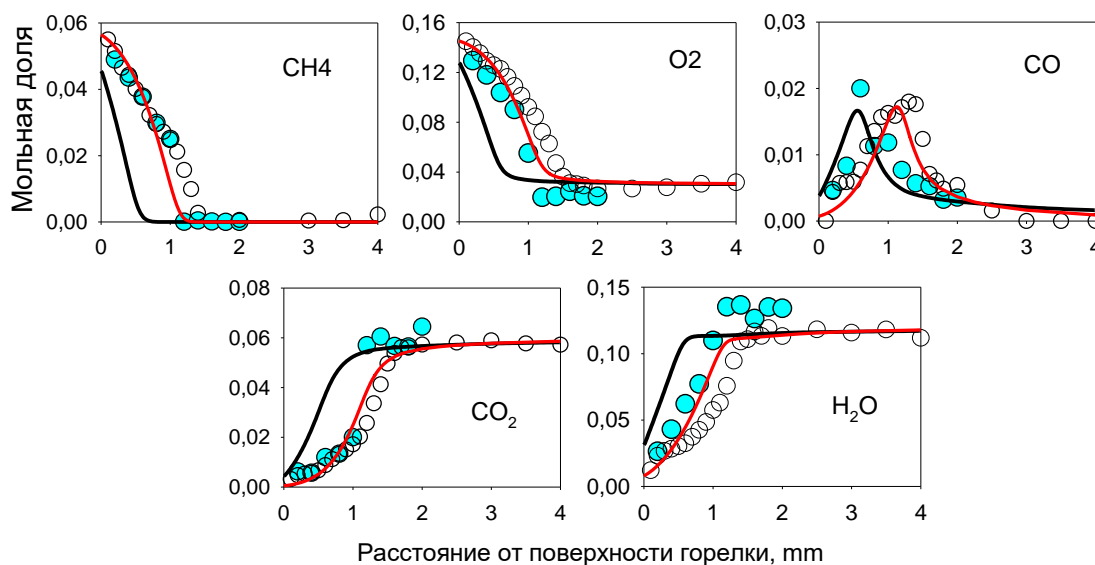


Рис. 4. Измеренные и рассчитанные профили мольной доли основных компонентов бедного пламени $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{Ar}$. Красные линии – 1D-моделирование (CANTERA) по профилю температуры, измеренному термопарой вблизи зонда, черные линии - 1D-моделирование (CANTERA) с включенной опцией решения уравнения энергии (невозмущенные профили мольной доли). Темные точки – рассчитанная мольная доля на входе в пробоотборник (ANSYS), светлые точки – эксперимент (масс-спектрометрическая установка HIDEN, никелевый пробоотборник).

Каждая расчетная точка, соответствующая определенному положению z_0 , получена в ANSYS путем полного расчета течения у пробоотборника (расчеты проведены для десяти значений z_0 , охватывающих всю зону горения). Каждая расчетная точка, представленная на рисунке 4 – это значение мольной доли соединения, взятое на оси пробоотборного зонда в точке z_0 (т.е. на входе в зонд). Как видно, решение, полученное в рамках трехмерной модели и в рамках одномерной с использованием измеренного термопарой температурного профиля довольно хорошо совпадают

между собой, а также с результатами измерений. Это приводит к заключению, что несмотря на то, что пробоотборник «довольно холодный» и оказывает сильное возмущающее влияние, последнее можно учесть в одномерном расчете, используя температурный профиль, измеренный с помощью термодпары, расположенной перед кончиком пробоотборника на расстоянии ≈ 200 мкм.

Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Для расчетов одновременно использовались 8 узлов. Таким образом, было задействовано 64 процессора, что позволило рассчитывать поле течения для одного положения пробоотборника менее чем за сутки. При расчете на персональном компьютере это заняло бы несколько дней.

Перечень публикаций, содержащих результаты работы

Статья о катионной структуре пламени метана, содержащая результаты проведенных расчетов, в процессе написания. Предварительное название: «Cationic structure of a premixed lean $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{Ar}$ flame: mass spectrometric and numerical study».

Впечатления от работы вычислительной системы и деятельности ИВЦ НГУ, а также предложения по их совершенствованию

Быстрая связь с удаленным компьютером – это не может не радовать. Однажды в летнее время из-за перегрева произошел сбой, и произошла потеря данных.