

ОТЧЕТ О ПРОДЕЛАННОЙ РАБОТЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОБОРУДОВАНИЯ ИВЦ НГУ

1. Аннотация.

Было проведено моделирование диффузионного горения жидкого топлива метилметакрилата ($C_5H_8O_2$, MMA) в чашечной горелке малого диаметра в ламинарном режиме. Для этого применялся программный пакет с открытым исходным кодом Fire Dynamics Simulator (FDS). В ходе работы было исследовано влияние различных параметров и методов расчёта на результаты моделирования. Установлено, что при использовании одностадийной модели горения MMA влияние кинетики реакции полного сгорания MMA на скорость расхода топлива и структуру пламени отсутствует. Проведено сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными. Установлена применимость метода q -DNS для связанного («газ-твёрдое») моделирования горения жидких топлив в ламинарном режиме.

2. Тема работы

Численное моделирование распространения пламени по полимерным материалам.

3. Состав коллектива

Трубачев Станислав Альбертович - Аспирант НГУ, Физика и Астрономия (очная форма), Физический факультет, каф. Химической и Биологической Физики, Специальность 01.04.17 - Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества. Научный руководитель диссертации: г.н.с. лаб. КПГ ИХКГ СО РАН, профессор Коробейничев Олег Павлович, д.ф.-м.н.

4. Научное содержание работы

4.1 Постановка задачи

Как правило, в литературе для моделирования распространения пламени по полимерам применяются простые модели пиролиза и бесконечно-быстрая кинетика реакций в газовой фазе. Кроме того, практически отсутствуют данные сравнения детальной тепловой и химической структурой пламени между моделью и экспериментом. Полимер полиметилметакрилат обладает простым механизмом пиролиза – его продуктом разложения является MMA. Из обзора литературы установлено, что относительно мало исследований посвящены характеристикам пламени ПММА и MMA. Структура пламени, поле течения и скорость горения в таких конфигурациях, а также влияние численного подхода на эти характеристики имеют фундаментальный характер. Это служило мотивацией настоящего исследования.

Таким образом, было проведено численное моделирование горения метилметакрилата в чашечной горелке.

4.2 Современное состояние проблемы

Исследования пламени в чашечных горелках с жидким топливом проводятся уже относительно давно. На пламя влияет количество поступающего кислорода (к поверхности топлива), плавучесть, механизм испарения и т.д. Структура такого пламени аналогична структуре газоструйного диффузионного пламени. Пламя чашечной горелки стабилизируется вблизи кромки горелки, то есть градиенты температуры и концентрации

веществ у поверхности топлива достаточно велики, что усложняет их изучение. Теоретический анализ распространения пламени по горючим твердым поверхностям был представлен Сибулкиным и др. [1]. Сообщалось, что передача тепла от пламени к поверхности исходного топлива имеет большой вклад в значение скорости распространения пламени. Подход воздуха в резервуар с гептаном было экспериментально изучен в [2]. Гептан сжигался в резервуарах пяти разных размеров, и изучалось влияние диаметра резервуара на скорость горения, скорость вдоль оси пламени, пиковую температуру и вовлечение воздуха. Они сообщили, что по мере увеличения диаметра резервуара скорость горения также увеличивалась. Однако в литературе содержится мало результатов численного моделирования горения жидкого топлива в чашечной горелке в сравнении с экспериментальными исследованиями, в частности по детальной структуре пламени.

4.3 Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы

На Рис. 1 представлена схема экспериментальной установки для измерения структуры пламени MMA в чашечной горелке.

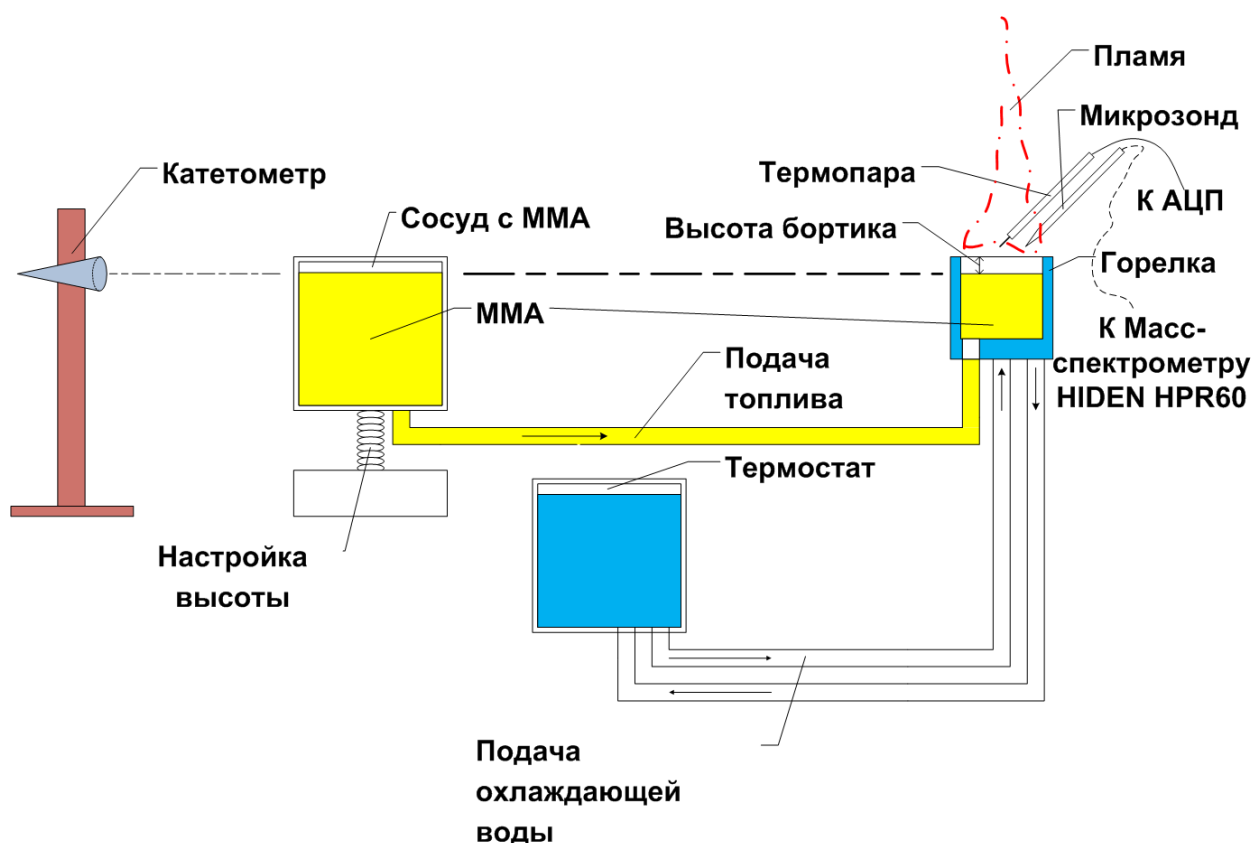


Рис.1 Установка для изучения структуры пламени жидкого метилметакрилата в чашечной горелке.

Сосуд с жидким ММА располагался на небольшом штативе, позволяющем производить настройку высоты расположения сосуда с ММА относительно чашечной горелки. Горелка представляет собой открытый сверху медный цилиндр внутренним диаметром 25-50 мм (в зависимости от конфигурации) и высотой стенок 2,3 см. Уровень

жидкости MMA был на 3 мм ниже уровня края горелки (это важно для создания ламинарного режима горения). Конструкция горелки позволяет производить охлаждение стенок с помощью подачи воды комнатной температуры по полиэтиленовым трубкам, идущим от термостата. Сосуд с MMA соединен с горелкой по принципу сообщающихся сосудов полиэтиленовой трубкой, по которой производится подача топлива в горелку. Измерение температуры в пламени проводилось микротермопарной методикой, а концентраций основных веществ в пламени (MMA, CO, CO₂, O₂, N₂, H₂O) – микрозондовой методикой.

Для моделирования горения MMA в чашечной горелке применялась программа с открытым исходным кодом Fire Dynamics Simulator (FDS) 6.7.4 [3]. Горение твёрдых топлив является сложным физико-химическим процессом. Главные уравнения сохранения массы, момента и энергии рассчитывались в газовой фазе. Для решения уравнений Навье-Стокса для разных течений в FDS реализовано применение несколько подходов в зависимости от задачи. В данной работе сравнивались два подхода к моделированию пламени метилметакрилата в чашечной горелке: прямое численное моделирование (DNS) и моделирование в приближении больших вихрей (LES). Как правило, DNS расчёты значительно более ресурсозатратны, так как в этом подходе не применяются дополнительные упрощающие предположения и учитываются все масштабы турбулентности.

В первом случае (DNS) применялись следующие уравнения момента сохранения импульса:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = - \frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{d\tau_{ij}}{dx_j} + \rho g_i + \dot{m}_b''' u_{b,i} \quad (1)$$

i, j – компоненты направления скорости, ρ – плотность, u – скорость, t – время, x – расстояние, p – давление, τ_{ij} – тензор вязких напряжений, g – ускорение свободного падения, \dot{m}''' – массовая скорость испарения на единицу объёма.

Для применения метода DNS необходимо обеспечить, чтобы шаг сетки был меньше масштаба минимальных вихрей Колмогорова η [4]:

$$\eta = (v^3 / \varepsilon)^{1/4} \quad (2)$$

где, v – кинематическая вязкость газа, ε – скорость вязкой диссипации.

Оцененный (и позже рассчитанный средствами FDS) масштаб Колмогорова для чашечной горелки диаметром 30 мм составляет ~170 мкм, что связано с тем, что маленькое пламя является ламинарным. В экспериментах с чашечной горелкой наблюдалось полностью ламинарное однородное пламя, поэтому применение DNS подхода было оправдано. Тем не менее, в работе применялся q-DNS (квази-DNS) подход, когда размеры сетки больше масштабов Колмогорова, но градиенты температуры и концентраций хорошо разрешены из-за низкой скорости потока.

Основные уравнения для сохранения массы, импульса, частиц и энергии были решены в газовой фазе [3]. Эффекты потока, вызванные плавучестью, были включены в

уравнение количества движения. В случае прямого численного моделирования использовались одностадийный и двухстадийный глобальные реакционные механизмы. Кинетические параметры реакции подбирались для согласования моделирования и эксперимента по массовой скорости горения. Конденсированная фаза, представляющая собой метилметакрилат в жидком состоянии, была связана с газовой фазой в едином моделировании, т.е. применялась т.н. сопряженная модель. Уровень жидкости в горелке при моделировании поддерживался постоянным, как и в эксперименте.

В моделировании использовалась цилиндрическая симметрия, то есть расчёт проводился в двумерной области, соответствующей одному сектору цилиндра (R,Z) с фиксированным $\delta\phi$.

Граничные условия в модели были использованы следующие:

$Z=Z_{\max}$: Открытые

$R=R_{\max}$, $Z > R_{\text{горелки}}+3$ мм: Открытые

$R=0$: Отражающие с цилиндрической симметрией

Выше уровня стенки на краю радиальной координаты были открытые граничные условия. Также и на максимальной аксиальной координате были использованы открытые граничные условия. В модели применялась аксиальная симметрия, то есть цилиндрические координаты, повторяющие форму горелки. Высота расчётной области составляла 100 мм, ширина расчётной области зависела от размеров горелки (радиус горелки+3мм). Сетка была равномерной квадратной.

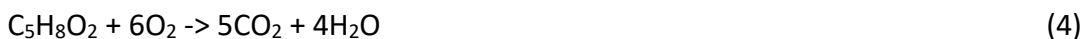
Для проверки сходимости решения использовались расчёты при разных размерах ячеек. Размер ячеек составлял от 200 мкм до 1000 мкм. В модели поджиг топлива осуществлялся с помощью нагревательной пластинки, располагающейся над центром горелки. Температура нагрева составляла 450 °С, время нагрева от 0.05 до 0.3 сек в зависимости от шага по времени. Временная шкала зависит от размера ячейки для удовлетворения условия Куранта:

$$\partial t |u| < \partial x, \quad (3)$$

где dt – шаг по времени, $|u|$ - среднеквадратичная скорость и dx – шаг по координате (длина сетки).

Наступление стационарного режима горения определялось по рассчитанной массовой скорости горения. Как правило, в расчётах стационарное горение наступало после 120 секунд от поджига топлива.

В модели, в основном, применялся одностадийный глобальный механизм с макрореакцией в предположении полного сгорания топлива метилметакрилата (ММА, $C_5H_8O_2$):



Скорость газофазной макрореакции W_g выглядит следующим образом.

$$W_g = k_g C_o C_{MMA}$$

$$k_g = A_g e^{-E_g/R_0 T_g} \quad (5)$$

Где C – концентрация компонента, k_g – константа скорости в газовой фазе, E_g – предэкспонент газофазной реакции, R_0 – универсальная газовая постоянная, T_g – температура в пламени (в данной ячейке). Энергия активации была взята из [5].

Для проверки возможного улучшения результатов моделирования был использован двустадийный глобальный механизм Вестбука и Драера [6]:



На Рис. 2 представлена зависимость массовой скорости расхода топлива MMA в чашечной горелке диаметром 30 мм в зависимости от размера сетки при использовании одностадийной бесконечно-быстрой макрореакции окисления MMA в газовой фазе. Экспериментальное значение скорости горения хорошо согласуется с результатами расчётов даже при довольно больших размерах сетки.

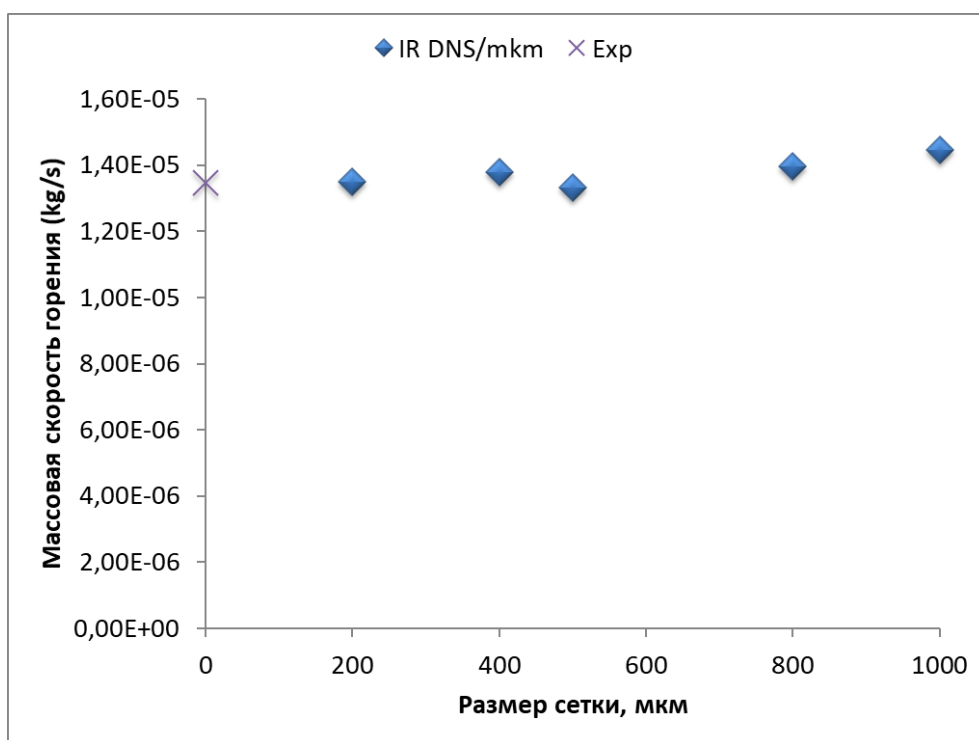


Рис.2. Сопоставление рассчитанной (синие символы) в FDS и экспериментальной (фиолетовый крест) массовой скорости горения. В модели предполагалась бесконечно-быстрая скорость реакции в газовой фазе.

Из результатов расчётов выявлено (Рис. 3), что константа скорости (5) газофазной макрореакции слабо влияет на массовую скорость расхода MMA в чашечной горелке диаметром 30 мм. Энергия активации была зафиксирована (90 кДж/моль), а предэкспонент варьировался от $1 \cdot 10^{22}$ см³/мол·с до $1 \cdot 10^{26}$ см³/мол·с. При $A_g = 5 \cdot 10^{22}$

см³/мол·с поджиг топлива и самоподдерживающееся горение MMA возможно только при длительном разогреве горелки. При этом размер сетки составлял 400 мкм.

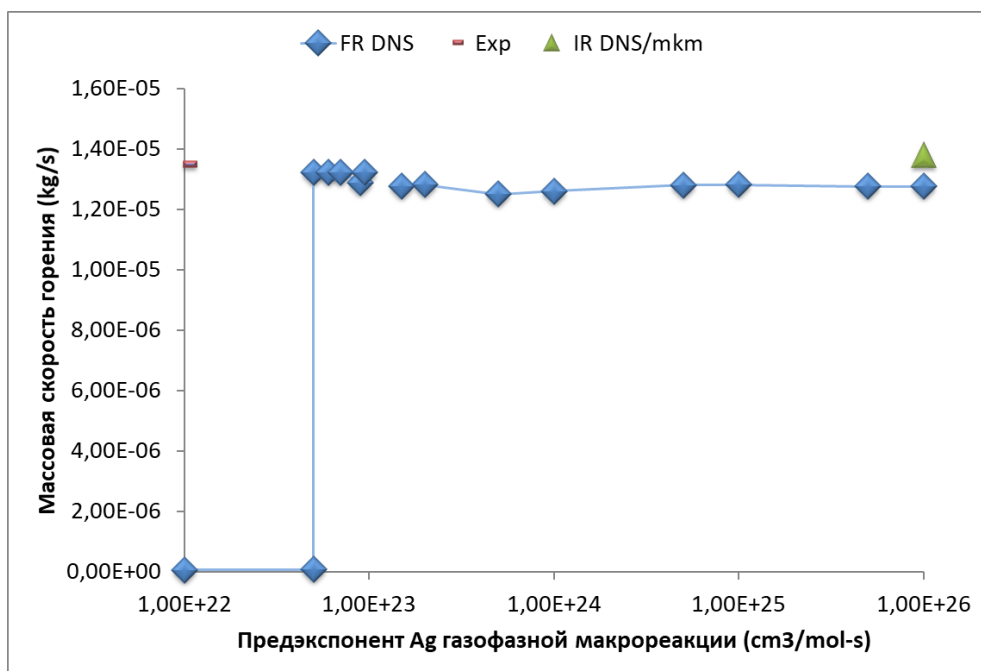
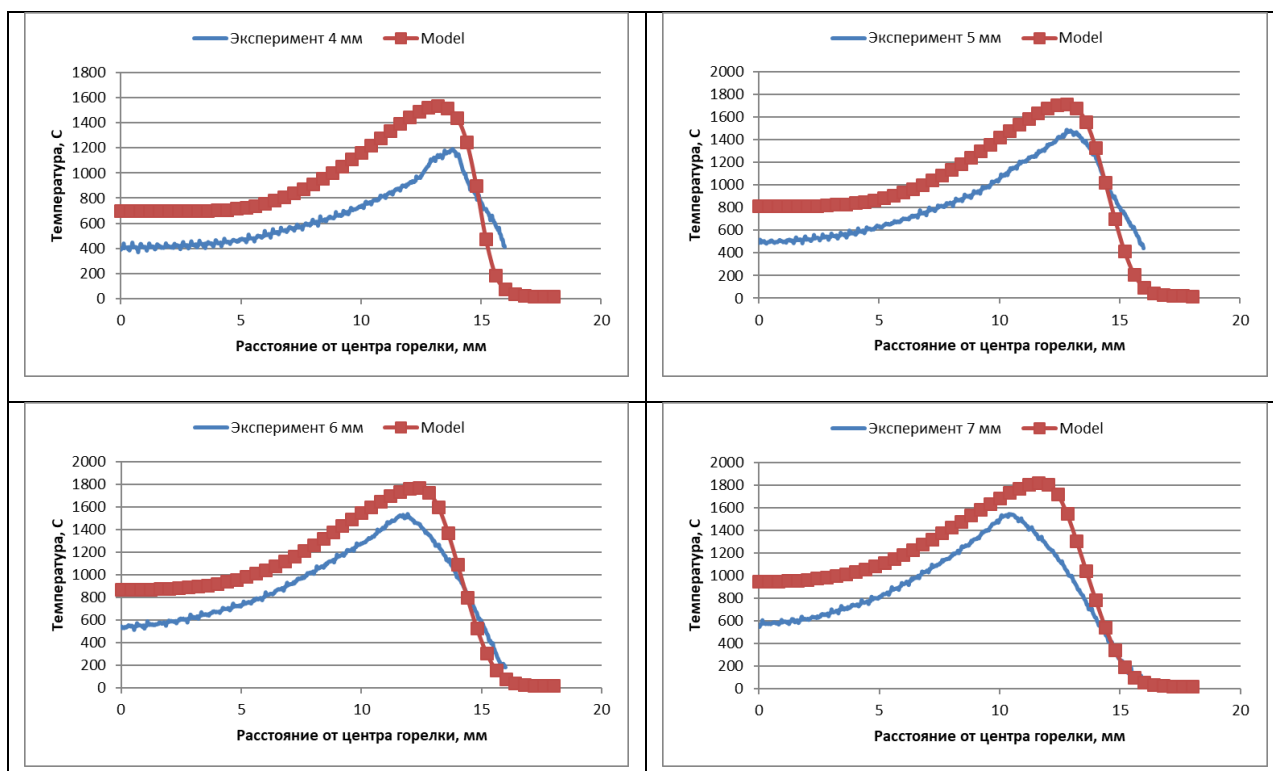


Рис. 3. Влияние A_g на массовую скорость горения MMA в модели. В модели предполагалась бесконечно-быстрая скорость реакции в газовой фазе.

Результаты расчётов (Рис. 2 и Рис. 3) показывают, что метод q-DNS с использованием бесконечно-быстрой газовой фазной одностадийной макрореакции подходит для расчётов скорости горения жидкофазных топлив в ламинарном режиме. Результаты моделирования выявили недостаток применения двухстадийной модели окисления топлива (б)-(7) из высокой скорости тепловыделения в газовой фазе.



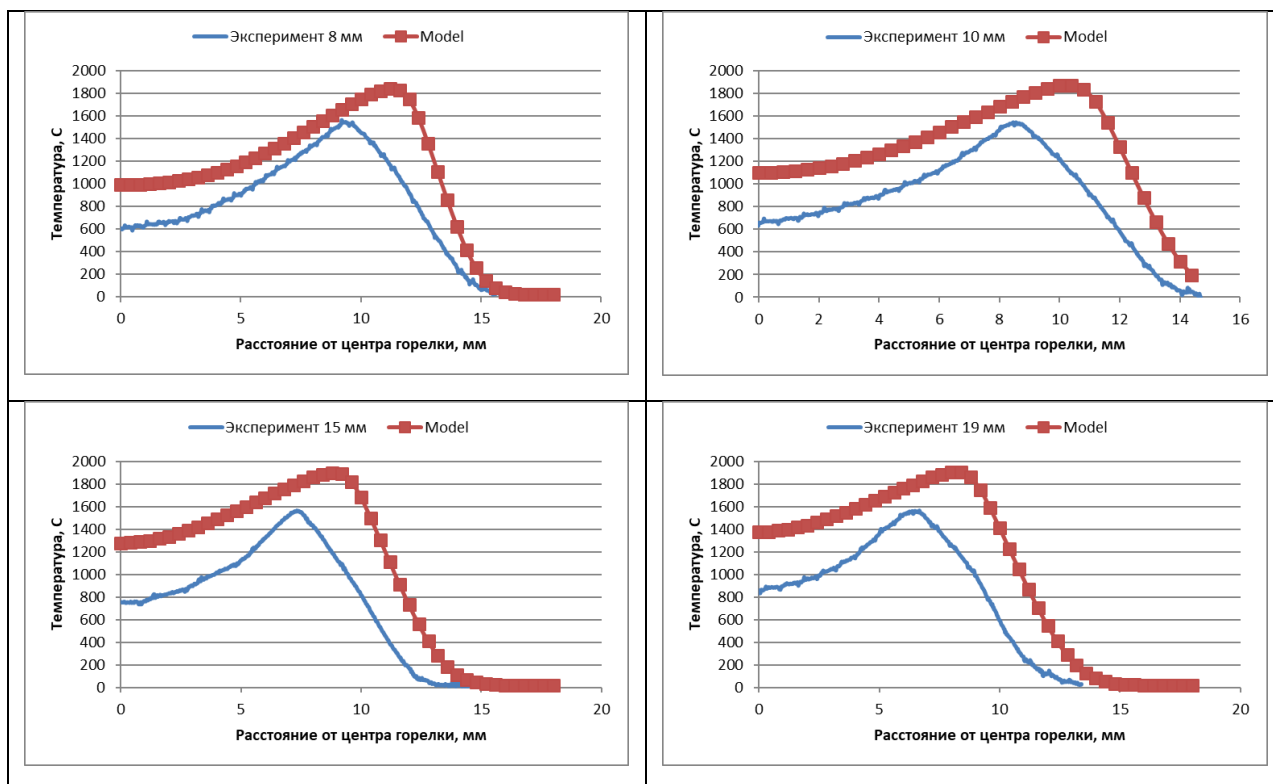


Рис. 4. Сравнение профилей температуры в модели и эксперименте при бесконечно-быстрой скорости реакции окисления MMA на разных высотах от уровня топлива MMA (3 мм от уровня топлива – это край горелки). Диаметр горелки 30 мм.

На Рис. 4 представлено сравнение рассчитанных и измеренных профилей температуры на высотах 4 – 19 мм от уровня топлива (1-16 мм от края горелки) при использовании одностадийной модели окисления топлива в газовой фазе с бесконечно-быстрой скоростью реакции. По оси абсцисс отложено расстояние от центра горелки вдоль радиуса. Измерения температуры на расстояниях менее 1 мм от края горелки затруднено, поэтому эти профили не приводятся. Можно видеть, что согласие модели с экспериментом удовлетворительное по положению и ширине пиков. Сильное различие наблюдается для 4 мм от уровня топлива из-за недостатков применения бесконечно-быстрой скорости окисления MMA (как правило, в такой модели расходование MMA происходит ближе к поверхности). В целом, температурные профили в модели лежат выше экспериментальных, что связано с отсутствием механизма генерации и излучения сажи в модели. Расхождение между моделью и экспериментом увеличивается на высотах более 10 мм от уровня топлива также связано с отсутствием модели сажи. Тем не менее, модель неплохо предсказывает скорость горения MMA (Рис.2) в чашечной горелке. Для улучшения результатов моделирования тепловой структуры пламени требуется улучшение модели FDS с включением механизма образования и излучения сажистых частиц.

5. Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Решение уравнений Навье-Стокса вместе с расчётом химических реакций всё ещё остаётся ресурсозатратной задачей. Использование ресурсов ИВЦ НГУ позволило провести полноценное моделирование сложного физико-химического двухфазного процесса (горения жидкого топлива), а также провести анализ чувствительности модели к используемым параметрам.

Список литературы.

- [1] M. Sibulkin, J. Kim, The Dependence of Flame Propagation on Surface Heat Transfer II. Upward Burning, Combust. Sci. Technol. 17 (1977) 39–49. <https://doi.org/10.1080/00102209708946811>.
- [2] K. Hiroshi, Y. Taro, Air entrainment and thermal radiation from heptane pool fires, Fire Technol. 24 (1988) 33–47. <https://doi.org/10.1007/BF01039639>.
- [3] fds-smv, Fire Models, 2022. <https://github.com/firemodels/fds-smv> (доступно 30 Мая, 2022).
- [4] А.Н. Колмогоров, Локальная структура турбулентности в несжимаемой вязкой жидкости при очень больших числах Рейнольдса, Успехи Физических Наук. 93 (1967) 476–481.
- [5] S.A. Trubachev, O.P. Korobeinichev, A.I. Karpov, A.A. Shaklein, R.K. Glaznev, M.B. Gonchikzharov, A.A. Paletsky, A.G. Tereshchenko, A.G. Shmakov, A.S. Beshpalova, H. Yuan, W. Xin, H. Weizhao, The effect of triphenyl phosphate inhibition on flame propagation over cast PMMA slabs, Proc. Combust. Inst. 38 (2021) 4635–4644. <https://doi.org/10.1016/j.proci.2020.05.043>.
- [6] C.K. Westbrook, F.L. Dryer, Chemical kinetics and modeling of combustion processes, Eighteenth Symp. Int. Combust. 18 (1981) 749–767. [https://doi.org/10.1016/S0082-0784\(81\)80079-3](https://doi.org/10.1016/S0082-0784(81)80079-3).