

БАЗА ДАННЫХ ДЛЯ РАСЧЕТА ЛАМИНАРНОГО И ТУРБУЛЕНТНОГО ГОРЕНИЯ ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ АВИАЦИОННОГО КЕРОСИНА¹

А. А. Беляев¹, В. Я. Басевич², С. М. Фролов³

Аннотация: На основе численного решения задачи о скорости распространения и структуре плоского ламинарного пламени создана база данных для важнейших характеристик ламинарного горения смесей авиационного керосина JP-8 — аналога отечественного ТС-1 — с воздухом. Керосин моделировали суррогатным топливом, состоящим из смеси девяти *n*-алканов C_nH_{2n+2} ($n = 8, 9, \dots, 16$). В расчетах использован глобальный кинетический механизм окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов, проверенный сравнением результатов расчетов с известными экспериментальными данными по ламинарному горению смесей JP-8 с воздухом при различных составах смесей, начальных температурах и давлениях. В базу данных включены следующие характеристики: нормальная скорость распространения ламинарного пламени, толщина фронта ламинарного пламени, кинематическая вязкость газовой смеси и число Льюиса — параметры, входящие в полуэмпирические соотношения для скорости турбулентного горения. Значения указанных характеристик получены в широком интервале начальных температуры ($293 \leq T_0 \leq 900$ К) и давления ($1 \leq p \leq 100$ атм) и в интервале составов смеси от предельно обедненного до предельно обогащенного горючим.

Ключевые слова: горение; суррогатное топливо; авиационный керосин JP-8; ламинарное пламя; база данных

Введение

В ИХФ РАН разработан эффективный алгоритм численного моделирования горения газов, который позволяет одновременно рассматривать фронтальные и объемные химические реакции в турбулентном газовом потоке [1] и оптимизировать параметры камер сгорания [2]. Важную роль в реализации алгоритма играют электронные базы данных для характеристик ламинарного горения различных горючих при разных начальных температурах, давлениях и составах [3].

*Работа выполнена при поддержке Фонда перспективных исследований Российской Федерации и Российского научного фонда (проект № 14-13-00082).

¹Центр импульсно-детонационного горения; Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, belyaevIHF@yandex.ru

²Центр импульсно-детонационного горения; Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, basevich@chph.ras.ru

³Центр импульсно-детонационного горения; Институт химической физики им. Н. Н. Семёнова Российской академии наук, smfrol@chph.ras.ru

Цель работы — расширение базы данных включением в нее важнейших характеристик ламинарного горения газовых смесей суррогатного топлива, моделирующего авиационный керосин JP-8 — аналог отечественного ТС-1 — с воздухом.

Постановка задачи

База данных основана на численном решении задачи о распространении плоского ламинарного пламени по программе [4] с использованием проверенного кинетического механизма. Вычислительная программа [4] позволяет получить скорость стационарного распространения пламени, а также распределения температуры и концентраций газовых компонентов в зоне горения. В базу данных вносятся следующие характеристики ламинарного горения:

- нормальная скорость распространения ламинарного пламени u_n ;
- толщина фронта ламинарного пламени δ ;
- кинематическая вязкость газовой смеси ν ;
- число Льюиса Le .

Эти характеристики входят в полуэмпирические соотношения для скорости турбулентного пламени, используемые в методе [1].

Керосин моделируется суррогатным топливом, состоящим из смеси девяти n -алканов C_nH_{2n+2} ($n = 8, 9, \dots, 16$), концентрации которых задаются исходя из экспериментальных данных [5]. В расчетах применяется глобальный кинетический механизм окисления и горения нормальных парафиновых углеводородов [6–8]. Кинетический механизм проверен путем сравнения расчетов с известными экспериментальными данными по горению смесей керосина JP-8 с воздухом в широких

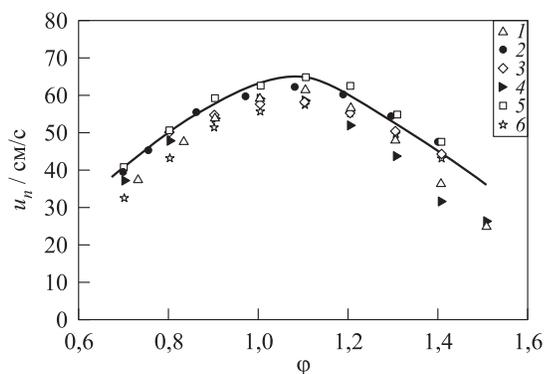


Рис. 1 Зависимость скорости ламинарного пламени от коэффициента избытка горючего в смесях JP-8 с воздухом при $T_0 = 400$ К и $p = 1$ атм. Кривая — расчет; значки — эксперимент: 1 — [9]; 2 — [10]; 3 — [11]; 4 — [12]; 5 — [13]; 6 — [14]

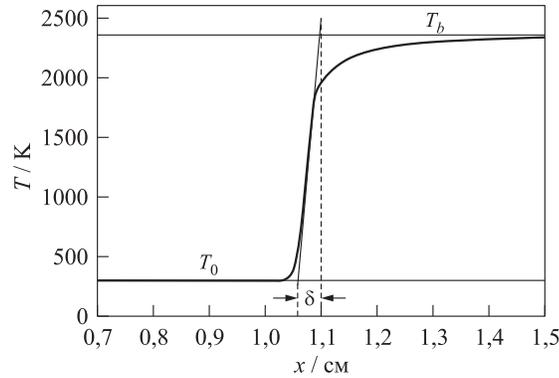


Рис. 2 Определение толщины фронта ламинарного пламени δ по распределению $T(x)$ в зоне горения

интервалах начальных составов смеси, температуры и давления. На рис. 1 представлены результаты сравнения расчетных и измеренных в [9–14] значений u_n . Видно удовлетворительное согласие результатов.

Для определения толщины фронта ламинарного пламени δ используется температурный профиль $T(x)$, полученный из численного решения задачи. Для этого, как показано на рис. 2, проводится касательная к температурной кривой $T(x)$ в точке перегиба, а также проводятся две линии, параллельные оси абсцисс и соответствующие температуре свежей смеси T_0 и температуре горения T_b . Толщина фронта пламени определяется как расстояние (по оси абсцисс) между точками, в которых касательная пересекает линии $T = T_0$ и $T = T_b$.

Кинематическая вязкость свежей горючей смеси рассчитывается по формуле:

$$v = \frac{1}{2\rho_0} \left(\sum_{i=1}^M \mu_i X_i + \left(\sum_{i=1}^M \frac{X_i}{\mu_i} \right)^{-1} \right),$$

где μ_i и X_i — коэффициент динамической вязкости и мольная доля i -го компонента смеси соответственно; M — число компонентов в газовой смеси; ρ_0 — плотность свежей газовой смеси. Величины μ_i определяются по методике [15].

Число Льюиса для свежей горючей смеси рассчитывается по формуле:

$$\text{Le} = \left(\sum_{j=1}^9 (D_j)_{\text{F-N}_2} X_j + \left(\sum_{j=1}^9 \frac{X_j}{(D_j)_{\text{F-N}_2}} \right)^{-1} \right) \frac{\rho_0 c_{p0}}{2\lambda}, \quad (1)$$

где $(D_j)_{\text{F-N}_2}$ — коэффициент диффузии j -го компонента смеси в инертном разбавителе (азот); λ — коэффициент теплопроводности газовой смеси; ρ_0 и c_{p0} —

плотность и теплоемкость свежей горючей смеси соответственно. Коэффициенты диффузии и теплопроводности определяются по методике [15].

Результаты расчетов

На основе расчетов составлены подробные таблицы характеристик ламинарного горения суррогатного топлива JP-8 с воздухом в широком диапазоне начальных температуры $293 \leq T_0 \leq 900$ К, давления $1 \leq p \leq 100$ атм и коэффициента избытка горючего (КИГ) $\varphi_L \leq \varphi \leq \varphi_R$, где φ_L и φ_R — значения КИГ на бедном и богатом концентрационных пределах распространения пламени соответственно.

В табл. 1 и 2 в качестве примера приведены расчетные значения скорости ламинарного пламени (см. табл. 1) и толщины фронта пламени (см. табл. 2) для разных значений φ и T_0 при $p = 1$ атм. Прочерки в ячейках таблицы означают, что стационарное решение задачи о распространении ламинарного пламени не найдено. В определенной мере эти условия соответствуют концентрационным пределам распространения пламени.

Расчеты показали, что скорость пламени увеличивается с ростом T_0 и снижается с ростом p при прочих равных условиях. Как правило, u_n достигает максимального значения при $\varphi \cong 1,1$. Значения δ несколько уменьшаются с ростом начальной температуры и давления и достигают минимума в смесях, по составу близким к стехиометрическим.

Аналогичные таблицы построены для значений кинематической вязкости и числа Льюиса. Значения кинематической вязкости при прочих равных условиях увеличиваются с ростом начальной температуры и уменьшаются с ростом давления и содержания топлива в смеси. Числа Льюиса Le заметно отличаются от единицы, причем это отличие становится тем заметнее, чем больше разница между молекулярной массой топлива и средней молекулярной массой газовой смеси. Если считать Le по коэффициенту диффузии кислорода, то и в смеси тяжелых углеводородов с воздухом число Льюиса будет близко к 1. Из формулы (1) видно, что число Льюиса не зависит от давления. Оно немного увеличивается с ростом начальной температуры и содержания горючего в смеси.

Таблица 1 Скорость ламинарного пламени (см/с) в смеси суррогата JP-8 с воздухом ($p = 1$ атм)

T_0 , К	φ								
	0,61	0,67	0,8	1,0	1,1	1,2	1,4	1,5	2,0
300	—	21	29	39	40	37	28	22	—
450	33	50	65	80	82	75	56	45	35
600	71	105	130	148	150	136	101	80	61
750	144	213	250	262	262	236	173	133	100
900	291	450	498	468	456	403	289	221	158

Таблица 2 Толщина фронта пламени (см) в смеси суррогата JP-8 с воздухом ($p = 1$ атм)

T_0 , К	φ								
	0,61	0,67	0,8	1,0	1,1	1,2	1,4	1,5	2,0
300	—	0,053	0,033	0,024	0,023	0,028	0,034	0,046	—
450	0,055	0,036	0,028	0,022	0,020	0,026	0,031	0,040	0,058
600	0,040	0,029	0,023	0,019	0,018	0,021	0,029	0,035	0,045
750	0,028	0,022	0,019	0,017	0,017	0,019	0,027	0,032	0,039
900	0,021	0,015	0,014	0,015	0,016	0,017	0,023	0,030	0,034

Таким образом, на основе решения задачи о распространении плоского ламинарного пламени создана база данных для характеристик ламинарного горения смесей суррогата JP-8 с воздухом в широком диапазоне изменения начальной температуры, давления и состава смеси. В качестве примера представлены таблицы значений скорости ламинарного пламени и толщины фронта пламени для разных значений φ и T_0 при $p = 1$ атм. В настоящее время ведется работа над созданием базы данных характеристик ламинарного горения для указанных выше смесей при наличии в свежей смеси остаточных газов.

Литература

1. Frolov S. M., Ivanov V. S., Basara B., Suffa M. Numerical simulation of flame propagation and localized preflame autoignition in enclosures // J. Loss Prevention Proc. Ind., 2013. Vol. 26. P. 302–309.
2. Иванов В. С., Фролов С. М., Басара П., Пришинг П., Суффа М. Многомерный расчет рабочего процесса в поршневом двигателе с искровым зажиганием // Горение и взрыв, 2012. Вып. 5. С. 97–102.
3. Беляев А. А., Басевич В. Я., Фролов Ф. С., Фролов С. М., Басара Б., Суффа М. База данных для характеристик ламинарного горения н-гептана // Горение и взрыв, 2010. Вып. 3. С. 30–37.
4. Беляев А. А., Посвянский В. С. Нормальная скорость распространения ламинарного пламени. Алгоритмы и программы // Информ. бюлл. Гос. фонда алгоритмов и программ СССР, 1985. Т. 3. № 66. С. 35.
5. Allen C., Toulson E., Edwards T., Lee T. Application of a novel charge preparation approach to testing the autoignition characteristics of JP-8 // Combust. Flame, 2012. Vol. 159. No. 9. P. 2780–2788.
6. Басевич В. Я., Беляев А. А., Фролов С. М. Глобальные кинетические механизмы для расчета турбулентных реагирующих течений. Ч. 1. Основной химический процесс тепловыделения // Хим. физика, 1998. Т. 7. № 9. С. 112–128.
7. Басевич В. Я., Фролов С. М. Глобальные кинетические механизмы, разработанные для моделирования многостадийного самовоспламенения углеводородов в реагирующих течениях // Хим. физика, 2006. Т. 25. № 6. С. 54–62.

8. Басевич В. Я., Беляев А. А., Медведев С. Н., Посвянский В. С., Фролов С. М. Кинетические детальный и глобальный механизмы для суррогатного топлива // Горение и взрыв, 2015. Т. 8. № 1. С. 21–28.
9. Ji C., You X., Holley A. T., et al. Propagation and extinction of mixtures of air with *n*-dodecane, JP-7, and JP-8 fuels. AIAA Paper No. 2008-974, 2008.
10. Kumar K., Sung C. J., Hui X. Laminar flame speeds and extinction limits of conventional and alternative jet fuels. AIAA Paper No. 2009-991, 2009.
11. Singh D., Nishiie T., Qiao L. Laminar burning speeds and Markstein lengths of *n*-decane/air, *n*-decane/O₂/He, Jet-A/air and S-8/air flames. AIAA Paper No. 2010-951, 2010.
12. Meeks E., Naik C. V., Puduppakkam K. V., et al. Experimental and modeling studies of the combustion characteristics of conventional and alternative jet fuels. Final Report. NASA/CR-2011-216356, 2011.
13. Dooley S., Won S. H., Heyne J., et al. The experimental evaluation of a methodology for surrogate fuel formulation to emulate gas phase combustion kinetic phenomena // Combust. Flame, 2012. Vol. 159. No. 4. P. 1444–1466.
14. Munzar J. D. Laminar flame speed of jet fuel surrogates and second generation biojet fuel blends. M.Eng. Thesis. Montreal, Quebec: McGill University, 2013.
15. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей / Пер. с англ. — 3-е изд. — Л.: Химия, 1982. 592 с. (Read R., Prausnitz J., Sherwood T. The properties of gases and liquids. — 3rd ed. — New York: McGraw – Hill Book Co., 1977. 592 p.)

Поступила в редакцию 01.11.14

DATABASE FOR CALCULATING LAMINAR AND TURBULENT COMBUSTION OF AVIATION KEROSENE – AIR MIXTURES

A. A. Belyaev^{1,2}, V. Ya. Basevich^{1,2}, and S. M. Frolov^{1,2}

¹Noncommercial Partnership Center of Pulse Detonation Combustion, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation

²N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation

Abstract: Based on the numerical solution of the problem of planar laminar flame propagation velocity and structure, a database for the most important characteristics of laminar combustion of jet fuel JP-8 — an analogue of domestic TS-1 — with air has been developed. Kerosene surrogate was simulated by fuel consisting of a mixture of nine *n*-alkanes, C_{*n*}H_{2*n*+2} (*n* = 8, 9, ..., 16). Calculations were made with the overall kinetic mechanism of oxidation and combustion of normal paraffin hydrocarbons validated by comparing the predicted and measured laminar burning velocities in JP-8–air mixtures of different compositions at different initial temperatures and pressures. The database includes the following characteristics: normal laminar flame velocity, laminar flame thickness, kinematic viscosity, and Lewis number of gas mixture — parameters entering various semiempirical relations for the turbulent burning velocity. The values

of these characteristics are obtained in wide ranges of initial temperature (up to 900 K), pressure (up to 100 atm), and mixture composition (from extremely fuel-lean to extremely fuel-rich).

Keywords: combustion; surrogate fuel; JP-8; laminar flame database

Acknowledgments

The work is supported by the Foundation for Advanced Research of Russian Federation and Russian Science Foundation (project No. 14-13-00082).

References

1. Frolov, S. M., V. S. Ivanov, B. Basara, and M. Suffa. 2013. Numerical simulation of flame propagation and localized preflame autoignition in enclosures. *J. Loss Prevention Proc. Ind.* 26:302–309.
2. Ivanov, V. S., S. M. Frolov, B. Basara, P. Priesching, and M. Suffa. 2012. Mnogomernyy raschet rabocheho protsessa v porshnevom dvigatele s iskrovym zazhiganiem [Multidimensional calculation of the operation process in a spark-ignition piston engine]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 5:95–100.
3. Belyaev, A. A., V. Ya. Basevich, F. S. Frolov, S. M. Frolov, B. Basara, and M. Suffa. 2010. Baza dannykh dlya kharakteristik laminarnogo goreniya n-geptana [Database for characteristics of laminar burning of *n*-heptane]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 3:30–37.
4. Belyaev, A. A., and V. S. Posvyanskiy. 1985. Normal'naya skorost' rasprostraneniya laminarnogo plameni [Normal velocity of laminar flame propagation]. *Algoritmy i programmy. Inform. byull. Gos. fonda algoritmov i program SSSR* [Algorithms and programs. Newsletter of the USSR State Fund of Algorithms and Programs] 3(66):35.
5. Allen, C., E. Toulson, T. Edwards, and T. Lee. 2012. Application of a novel charge preparation approach to testing the autoignition characteristics of JP-8. *Combust. Flame.* 159(9):2780–2788.
6. Basevich, V. Ya., A. A. Belyaev, and S. M. Frolov. 1998. Global'nye kineticheskie mekhanizmy dlya rascheta turbulentnykh reagiruyushchikh techeniy. 1. Osnovnoy khimicheskoy protsess teplovydeleniya [Global kinetic mechanisms for calculating turbulent reactive flows. 1. The basic chemical heat release process]. *Khim Fiz.* 17(9):1747–1772.
7. Basevich, V. Ya., and S. M. Frolov. 2006. Global'nye kineticheskie mekhanizmy, razrabotannyye dlya modelirovaniya mnogostadiynogo samovosplamneniya uglevodorodov v reagiruyushchikh techeniyakh [Global kinetic mechanisms for modeling multistage ignition of hydrocarbons in reactive flows]. *Khim. Fiz.* 25(6):54–62.
8. Basevich V. Ya., A. A. Belyaev, S. N. Medvedev, V. S. Posvianskii, and S. M. Frolov. 2015. Kineticheskie detal'nyy i global'nyy mekhanizmy dlya surrogatnogo topliva [Detailed and global kinetic mechanisms for surrogate fuel]. *Goren. Vzryv (Mosk.) — Combustion and Explosion* 8(1):21–28.
9. Ji, C., X. You, A.T. Holley, *et al.* 2008. Propagation and extinction of mixtures of air with *n*-dodecane, JP-7, and JP-8 fuels. AIAA Paper No. 2008-974.
10. Kumar, K., C.J. Sung, and X. Hui. 2009. Laminar flame speeds and extinction limits of conventional and alternative jet fuels. AIAA Paper No. 2009-991.

11. Singh, D., T. Nishiie, and L. Qiao. 2010. Laminar burning speeds and Markstein lengths of *n*-decane/air, *n*-decane/O₂/He, Jet-A/air and S-8/air flames. AIAA Paper No. 2010-951.
12. Meeks, E., C. V. Naik, K. V. Puduppakkam, *et al.* 2011. Experimental and modeling studies of the combustion characteristics of conventional and alternative jet fuels. Final Report NASA/CR-2011-216356.
13. Dooley, S., S. H. Won, J. Heyne, *et al.* 2012. The experimental evaluation of a methodology for surrogate fuel formulation to emulate gas phase combustion kinetic phenomena. *Combust. Flame* 159(4):1444–1466.
14. Munzar, J. D. 2013. Laminar flame speed of jet fuel surrogates and second generation biojet fuel blends. Montreal, Quebec: McGill University. M.Eng. Thesis.
15. Reid, R., J. Prausnitz, and T. Sherwood. 1977. The properties of gases and liquids. 3rd ed. New York: McGraw-Hill Book Co. 592 p.

Received November 01, 2014

Contributors

Belyaev Andrey A. (b. 1954) — Candidate of Science in physics and mathematics, senior research scientist, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; specialist, Noncommercial Partnership Center of Pulse Detonation Combustion; belyaevIHF@yandex.ru

Basevich Valentin Ya. (b. 1926) — Doctor of Science in technology, professor, chief research scientist, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; consultant, Noncommercial Partnership Center of Pulse Detonation Combustion; basevich@chph.ras.ru

Frolov Sergey M. (b. 1959) — Doctor of Science in physics and mathematics, head of department, N. N. Semenov Institute of Chemical Physics, Russian Academy of Sciences, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; scientific head, Noncommercial Partnership Center of Pulse Detonation Combustion, 4 Kosygin Str., Moscow 119991, Russian Federation; smfrol@chph.ras.ru