



**ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
BOOK OF ABSTRACTS**

**III Международная конференция
НЕИЗОТЕРМИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ И ПРОЦЕССЫ:
ОТ ТЕОРИИ ТЕПЛОВОГО ВЗРЫВА
К СТРУКТУРНОЙ МАКРОКИНЕТИКЕ**

**К 85-летию со дня рождения
академика А.Г. Мерджанова**

**III International Conference on
NONISOTHERMAL PHENOMENA AND PROCESSES:
FROM THERMAL EXPLOSION THEORY TO STRUCTURAL
MACROKINETICS**

Devoted to the 85th Anniversary of Academician A.G. Merzhanov

**28–30 ноября 2016 года
Черноголовка**

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ОКИСЛЕНИЕ И ГОРЕНИЕ КАПЕЛЬ В УСЛОВИЯХ КОСМИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

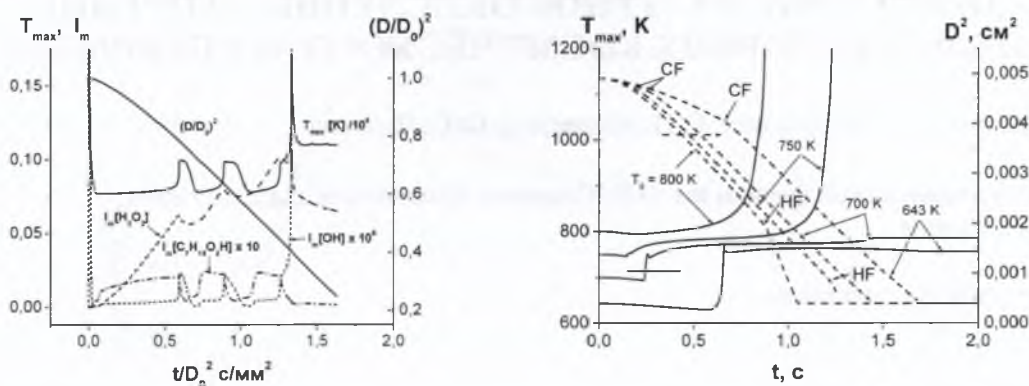
С.М. Фролов, В.Я. Басевич, С.Н. Медведев, Ф.С. Фролов

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук,
Москва, Россия

e-mail: smfrol@chph.ras.ru

В [1] сообщалось о не наблюдавшемся ранее явлении радиационного затухания сферического горячего пламени вокруг одиночных капель жидких углеводородов (*n*-декан и *n*-гептан) с их последующим низкотемпературным окислением и горением в условиях микрогравитации. Эксперимент FLEX (Flame-Extinguishment Experiments) проводился на Международной космической станции. Обнаруженное в [1] низкотемпературное окисление капель иногда сопровождалось кратными скачками температуры. В данной работе на основе математической модели горения капли [2] и детального кинетического механизма (ДКМ) окисления и горения *n*-додекана [3] воспроизведены все основные особенности обнаруженного явления и предсказано существование новых режимов низкотемпературного горения капель без стадии горячего пламени. Важное достоинство используемого ДКМ – то, что он описывает как многостадийное низкотемпературное окисление с “холодными” и “голубыми” пламенами, так и высокотемпературное горение *n*-додекана и включенных в ДКМ *n*-алканов. Единственное изменение в модели [2] и в ДКМ [3] заключалось в учете излучения сажи, образующейся при горении. Для этого в ДКМ включили простой макрокинетический механизм сажеобразования, предложенный в [4].

На рис. 1а показан пример расчета горения капли *n*-гептана начального диаметра $D_0 = 2.8$ мм в воздухе при начальной температуре $T_0 = 293$ К и давлении $P = 0.1$ МПа в виде зависимостей максимальной температуры газа T_{\max} в окрестности капли, приведенной площади поверхности капли D^2/D_0^2 , а также относительных концентраций OH , $\text{C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2\text{H}$ и H_2O_2 (I_m – массовая доля компонента в газовой фазе по отношению к начальной массе капли) от приведенного времени t/D_0^2 . В соответствии с [1] температура T_{\max} вокруг капли постепенно снижается вследствие потерь энергии на излучение, приводя к погасанию высокотемпературного пламени и установлению «холоднопламенного горения» (по терминологии [1]). В действительности, режим «холоднопламенного горения» представляет собой низкотемпературную реакцию окисления при $T \approx 770$ К с трехкратным ступенчатым повышением температуры (вспышками) до 1000 К с последующим ее понижением до начального уровня и даже с одной высокотемпературной вспышкой до 1750 К. В ходе такого процесса диаметр капли непрерывно уменьшается, а относительные концентрации OH , $\text{C}_7\text{H}_{15}\text{O}_2\text{H}$ и H_2O_2 зависят от времени немонотонно, следуя немонотонному изменению T_{\max} . Детальный анализ результатов расчета показал, что вспышки на температурной кривой возникают вследствие периодического распада H_2O_2 – разветвления с выходом радикалов OH , т.е. благодаря «голубым пламенам» [5].



(a)

(б)

Рис. 1: (а) Расчетные зависимости максимальной температуры газа T_{max} в окрестности капли *n*-гептана, приведенной площади поверхности капли D^2/D_0^2 и относительных концентраций OH , $C_7H_{15}O_2H$ и H_2O_2 от приведенного времени t/D_0^2 при горении в воздухе. (б) Расчетные зависимости T_{max} в окрестности капли *n*-гептана и квадрата диаметра D^2 капли от времени при ее самовоспламенении в воздухе при $T_0 = 643, 700, 750$ и 800 К и $P = 0,1$ МПа: CF и HF – моменты возникновения холодного и горячего пламени соответственно.

Переход от задачи с искровым зажиганием капли к задаче о ее самовоспламенении в воздухе приводит к новому (не обнаруженному экспериментально) режиму низкотемпературного горения капли. На рис. 1б представлены расчетные зависимости $T_{max}(t)$ для капли *n*-гептана с $D_0 = 0,7$ мм. Судя по ступенчатому изменению T_{max} в момент времени $t \sim 0,16$ с при $T_0 = 750$ К и $t \sim 0,25$ с при $T_0 = 700$ К, в этом диапазоне начальных температур происходит многостадийное самовоспламенение капли. Соответствующие расчетные зависимости $D^2(t)$ показаны штриховыми кривыми. Стрелки CF и HF указывают на моменты возникновения холодных и горячих пламен соответственно.

Авторы выражают благодарность В.С. Посвянскому за помощь в организации расчетов. Исследования проведены в рамках выполнения работ по космическому эксперименту «Зарево».

- [1] Farouk T., Dietrich D.L., *Combust. Theory and Modelling*. 2011. V. 15. № 4. pp. 487–515.
- [2] Басевич В.Я., Беляев А.А., Медведев С.Н., Посвянский В.С., Фролов Ф.С., Фролов С.М., *Хим. физика*. 2010. Т. 29. № 12. сс. 50–59.
- [3] Басевич В. Я., Беляев А. А., Посвянский В. С., Фролов С. М., *Хим. физика*. 2013. Т. 32. № 4. сс. 87–96.
- [4] Басевич В.Я., Медведев С.Н., Фролов С.М., Фролов Ф.С., Basara B., Priesching P., *Горение и взрыв*. 2016. Т. 9. № 3. сс. 36–47.
- [5] Басевич В.Я., Фролов С.М., *Успехи химии*. 2007. Т. 76. № 9. сс. 927–944.