

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМУЩЕНИЙ, ВНОСИМЫХ В ПЛАМЯ ПРОБООТБОРНЫМ ЗОНДОМ. II. ВОЗМУЩЕНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИЙ КОМПОНЕНТОВ*

© 2006 г. П. А. Сквородко*, А. Г. Терещенко, О. П. Коробейничев,
Д. А. Князьков, А. Г. Шмаков.

Институт химической кинетики и горения Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск
**Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения Российской академии наук,*
Новосибирск

Поступила в редакцию 07.04.2006

Изучается внешнее течение метан-кислород-аргонового пламени, стабилизированного на плоской горелке при атмосферном давлении, около пробоотборного зонда, представляющего собой усеченный конус с отверстием в центре торца. На основе газодинамической структуры течения, полученной ранее в рамках полной системы нестационарных уравнений Навье–Стокса, моделируется распределение концентраций некоторых компонентов пламени (CH_4 , CO_2 , H_2O и O_2). Моделирование проводится в рамках уравнения диффузии для бинарной смеси газов (CH_4 –Ar, CO_2 –Ar, и т.д.), которое решается в линейной постановке, т.е. без учета влияния диффузии на распределение параметров течения. Для приближенного учета влияния химических реакций в уравнение диффузии добавляется источник член, обеспечивающий заданное распределение концентрации рассматриваемого компонента в плоском невозмущенном пламени. Установлено, что расчетные значения концентраций в центре отверстия зонда характеризуются наличием сдвига вниз по потоку относительно значений в невозмущенном пламени, что согласуется с результатами измерений, хотя измеренные значения сдвига заметно превышают расчетные. В литературе проблема зондовых возмущений распределения концентраций компонентов рассматривалась на основе процесса самодиффузии при использовании более простой газодинамической модели течения.

ВВЕДЕНИЕ

Проблема возмущений, вносимых пробоотборным зондом в результаты измерений, с точки зрения их применимости для невозмущенного пламени, сохраняет свою актуальность с момента возникновения данного метода диагностики вплоть до настоящего времени. Причины такого положения связаны с исключительной сложностью возмущенного течения, режимы которого охватывают весь возможный спектр от сплошного у поверхности горелки до свободномолекулярного в области за скиммером. Нелинейные эффекты, связанные с влиянием газодинамических возмущений на кинетику химических реакций и наоборот, усложняют течение, практически исключая возможность его моделирования в сколько-нибудь полной постановке на современном уровне развития вычислительных алгоритмов.

В работе [1] в рамках системы уравнений Навье–Стокса, дополненной источником членом, обеспечивающим учет теплового эффекта химической реакции, выполнено исследование зондовых возмущений газодинамической структуры метан-кислород-аргонового пламени в области между поверхностью горелки и зондом. Данная

работа, являющаяся продолжением работы [1], посвящена зондовым возмущениям распределения концентраций компонентов.

Работа Кнута [2] является, по существу, единственным теоретическим исследованием рассматриваемой проблемы, содержащим практические рекомендации, важные для интерпретации зондовых измерений. В этой работе распределение параметров течения около конического зонда с отверстием для стока газа отыскивалось с использованием известного решения задачи о точечном стоке в несжимаемой жидкости. Для учета влияния эффектов сжимаемости в полученное решение вводились соответствующие поправки. Эволюция концентраций в найденном газодинамическом поле моделировалась как процесс самодиффузии. Сопоставляя распределения концентраций при наличии зонда с таковым в его отсутствие, авторы установили, что эти распределения могут быть охарактеризованы сдвигом δ , зависимость которого от определяющих параметров имеет вид

$$\delta/d = 0.19(\text{Re}Sc)^{1/2}, \quad (1)$$

где Re – число Рейнольдса по параметрам газа в плоскости отверстия зонда и его диаметру d , Sc –

число Шмидта. Зависимость (1) используется в литературе при анализе экспериментальных результатов.

В литературе имеется большое число экспериментальных работ [3–16], включая обзоры [17, 18], посвященных возмущениям профилей концентраций компонентов при зондовой молекулярно-пучковой масс-спектрометрии (МПМС) пламен.

В ряде экспериментальных работ [3–7] влияние зонда на состав пробы и концентрационные профили исследовалось с помощью независимых измерений этих же величин бесконтактными методами. Так, в работе [3] измерены распределения концентраций атомов водорода и гидроксила в пламени $H_2-O_2-N_2$ масс-спектрометрическим и спектроскопическим методами.

Возмущающее действие зонда на профили концентраций компонентов проявляется, как правило, в их сдвиге вниз по потоку относительно соответствующих профилей в невозмущенном пламени. Величина сдвига зависит от расстояния между зондом и поверхностью горелки [4–7], а также от толщины стенок зонда [8]. В работе [4] профиль концентрации OH измерен с помощью МПМС метода, а также методами адсорбционной и лазерно-адсорбционной спектроскопии. В работах [5, 6] проведено сравнение профилей концентраций OH , измеренных в атмосферных метано-воздушном [5] и пропано-кислородном [6] пламенах с помощью адсорбционной спектроскопии и зондового МПМС метода. Зонд с $d = 0.27$ мм и диаметром торца $d_0 = 1.5$ мм приводил к сдвигу профиля концентрации OH на величину $5.4d$ [5]. Следует отметить, что этот зонд вносил и большие тепловые возмущения, так как толщина его стенки была велика и составляла $2.3d$.

В работе [7] в атмосферном метано-кислородном пламени был измерен профиль концентрации метана зондовым и лазерным спектроскопическим методами. Основываясь на результатах работы [19], в [7] была предложена полуэмпирическая формула для определения величины сдвига возмущенных зондом профилей концентраций в виде $\delta = 0.37d\alpha^{1/2}$ (определение степени отбора α дано в [1]). Следует отметить, что толщина стенки используемого зонда была велика и составляла $\sim 17d$, при этом сдвиг профиля концентрации CH_4 составил также $\sim 17d$ ($d = 0.012$ мм).

Влияние размера торца звукового кварцевого зонда с диаметром отверстия $d = 0.27$ мм и внешним углом раствора конуса 80° на профиль концентраций O_2 и CO_2 в атмосферном метано-кислородном пламени изучалось в работе [8]. Увеличение d_0 от 0.5 мм до 2 мм привело к возрастанию сдвига профилей концентраций O_2 и CO_2 на $\sim 2d$, что связано, по-видимому, с возрастанием тепловых возмущений пламени зондом, так как с уве-

личением d_0 увеличивалась и толщина стенки зонда (от $0.4d$ до $3.2d$).

Сопоставляя результаты работ [7] и [8] можно заключить, что величина сдвига профилей концентраций существенно возрастает при увеличении диаметра торца зонда, что должно приниматься во внимание при постановке зондовых измерений.

В работах [8, 20] рассмотрены особенности формирования молекулярного пучка, при этом показано, что в типичном МПМС эксперименте в отверстии скиммера поступает менее 1% общего расхода газа через отверстие зонда. Это означает, что параметры молекулярного пучка определяются, в основном, свойствами потока в малой окрестности центра отверстия зонда.

Одной из основных целей зондовой диагностики пламен является установление механизма химических реакций в пламени путем сравнения экспериментальных распределений концентраций с результатами моделирования. С этой целью в работах [9–14] применялся подход, который состоит в том, что для верификации механизма горения результаты измерения профилей концентраций с помощью метода МПМС сопоставляются с результатами их моделирования. При этом, в процессе моделирования используется возмущенный зондом температурный профиль, измеренный термопарой, расположенной на небольшом (около двух d) расстоянии перед торцем зонда. В случае, если предложенный механизм является правильным, рассчитанные профили концентраций компонентов совпадают с измеренными. Близкий подход применялся в работах [15, 16], где возмущенная зондом температура определялась по измеренным значениям расхода газа через зонд по изоэнтропическим соотношениям для параметров в критическом сечении сопла Лавалья (choked probe technique). Результаты работ [9–16], по-видимому, отражают глубокую внутреннюю связь между локальными значениями температуры и составом смеси в возмущенном пламени, хотя диапазон применимости обсуждаемого подхода не вполне ясен.

В целом, можно констатировать, что в литературе проблема зондовых возмущений распределения концентраций компонентов исследуется, в основном, экспериментально. Получаемые результаты носят обычно частный характер, что затрудняет их использование для других зондов и пламен.

В данной работе в рамках уравнения диффузии для бинарной смеси газов моделируется распределение концентраций основных компонентов метан-кислород-аргонового пламени, возмущенного зондом. Расчетные результаты удовлетворительно согласуются с экспериментальными. В литературе проблема зондовых возмущений распределе-

ния концентраций компонентов рассматривалась на основе процесса самодиффузии при использовании более простой газодинамической модели течения.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Пламя предварительно перемешанной смеси $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{Ar}$ (6/15/79%) стабилизировалось на горелке типа Бота-Сполдинга диаметром 16 мм при атмосферном давлении и температуре 368 К. Объемная скорость горючей смеси составляла $25 \text{ см}^3/\text{с}$ при нормальных условиях. Используемая горелка была детально описана в работе [1]. Потoki компонентов смеси устанавливались с помощью регуляторов расхода газа фирмы “MKS Instruments” с точностью $\pm 1\%$.

Профили концентрации компонентов в пламени измерялись методом зондовой МПМС с использованием квадрупольного масс-спектрометра MS-7302. Система молекулярно-пучкового отбора пробы на базе масс-спектрометра MS-7302 была детально описана ранее в работах [21, 22]. Погрешность измерения концентраций компонентов составила $\pm 7\%$.

Во всех измерениях использовался один и тот же кварцевый звуковой зонд с диаметром отверстия 80 мкм, диаметром торца 240 мкм и полууглом раствора внешнего конического участка 25.5° . Зонд был закреплен на съемном охлаждаемом фланце из нержавеющей стали.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ

Рассмотренная в работе [1] газодинамическая структура течения пламени около зонда, в условиях близких к таковым в реальном потоке, содержит информацию о возмущенном зондом течении, но не содержит данных о возмущениях распределения концентраций компонентов, важных для интерпретации зондовых измерений. Данная проблема может быть исследована в рамках того же подхода, который применялся при газодинамическом моделировании. Именно, поскольку основным компонентом рассматриваемого пламени является химически инертный аргон, возможно моделирование эволюции концентрации какого-либо компонента пламени в рамках диффузионного уравнения для бинарной смеси данного компонента с аргонem (компонент 2).

Уравнение диффузии

Уравнение диффузии для осесимметричного течения бинарной смеси газов имеет вид

$$\rho \frac{\partial c_1}{\partial t} + \rho u \frac{\partial c_1}{\partial r} + \rho w \frac{\partial c_1}{\partial z} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r J_{1r}) - \frac{\partial}{\partial z} J_{1z}, \quad (2)$$

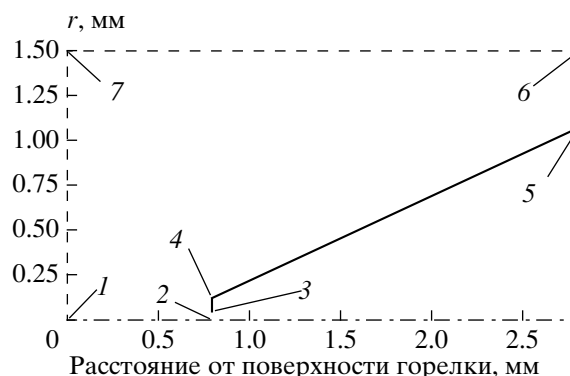


Рис. 1. Схема области моделирования.

где c_1 — массовая доля компонента 1, обозначения остальных величин те же, что и в работе [1]. Диффузионные потоки J_{1r} , J_{1z} включают члены, обусловленные концентрационной, баро- и термодиффузией и выражаются как

$$J_{1r} = -\rho D_{12} \left[\frac{\partial c_1}{\partial r} + \frac{m_2 - m_1}{m} c_1 (1 - c_1) \frac{\partial \ln p}{\partial r} + \frac{m_1 m_2}{m^2} k_T \frac{\partial \ln T}{\partial r} \right],$$

$$J_{1z} = -\rho D_{12} \left[\frac{\partial c_1}{\partial z} + \frac{m_2 - m_1}{m} c_1 (1 - c_1) \frac{\partial \ln p}{\partial z} + \frac{m_1 m_2}{m^2} k_T \frac{\partial \ln T}{\partial z} \right],$$

где D_{12} — бинарный коэффициент диффузии, m_1 , m_2 — молекулярные массы компонентов 1 и 2, m — средняя молекулярная масса смеси, k_T — термодиффузионное отношение.

Область моделирования и граничные условия

Уравнение диффузии решалось на той же гибридной сетке, что использовалась при решении уравнений Навье–Стокса [1], при этом концентрация определялась в центре ячейки. Задача решалась в линейной постановке, т.е. без учета влияния диффузии на распределение параметров течения.

На рис. 1 показана схема области моделирования для расстояния между торцом зонда и поверхностью горелки $z_0 = 0.8 \text{ мм}$. Сплошные линии соответствуют твердой поверхности, штриховые — проницаемые границы, штрихпунктиром показана ось течения. Данная область соответствует форме используемого зонда. Расстояние z_0 изменялось в диапазоне 0.2–0.8 мм, протяженность конического участка (линии 4–5) вдоль оси составляла 2 мм для всех вариантов. Моделирование про-

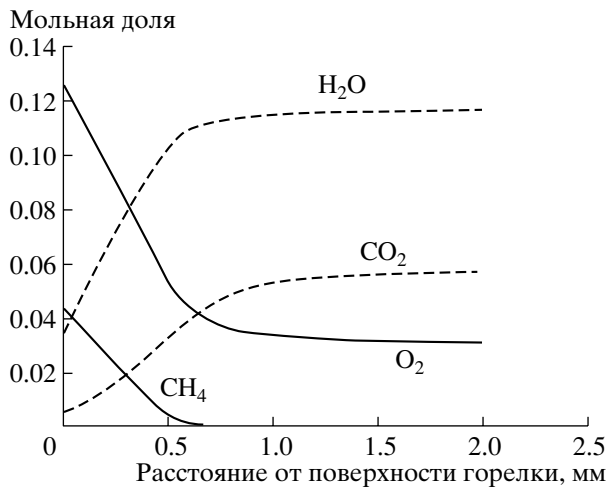


Рис. 2. Распределения концентраций компонентов в невозмущенном пламени.

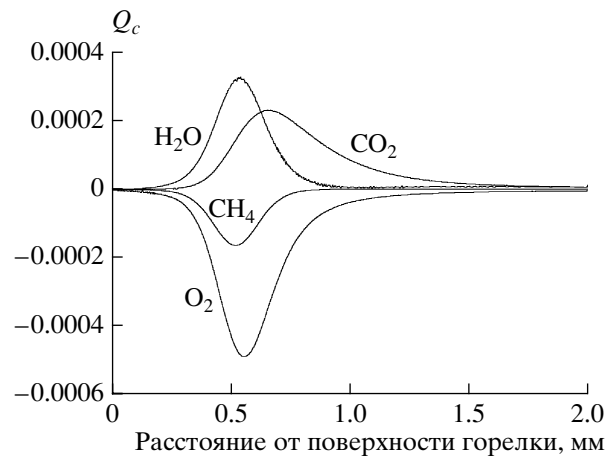


Рис. 3. Источниковые члены для уравнения диффузии.

водилось для 4 расстояний между торцом зонда и поверхностью горелки (z_0): 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8 мм.

Граничные условия для уравнения диффузии ставились следующим образом (см. рис. 1).

На поверхности горелки (линии 1–7) концентрация задавалась на основе решения для рассматриваемого изобарического пламени, полученного с помощью кода Chemkin [23].

На твердых поверхностях (линии 3–4–5) предполагалось отсутствие диффузионного потока.

На поверхности отверстия зонда (линии 2–3) и на верхней проницаемой границе (линия 7–6) концентрация задавалась путем аппроксимации изнутри расчетной области.

На оси потока (линии 1–2) радиальная производная концентрации полагалась равной нулю.

Наконец, на твердой границе (5–6) концентрация задавалась такой же, как за фронтом невозмущенного пламени. Данное условие использовалось в целях обеспечить близкое к невозмущенному распределение концентрации на периферии течения.

Источниковый член для уравнения диффузии

Уравнение диффузии решалось для четырех компонентов рассматриваемого пламени — CH₄, CO₂, H₂O и O₂, хотя развитый подход применим для анализа эволюции концентрации любого компонента, присутствующего в пламени. Для приближенного учета влияния химических реакций в уравнение диффузии добавляется источниковый член $Q_c(z)$, обеспечивающий заданное распределение концентрации рассматриваемого компонента в плоском невозмущенном пламени, т.е. в отсутствие зонда. Этот член, зависящий только от z , был получен аналогично тому, как был вы-

числен источниковый член $Q_T(z)$ для уравнения энергии [1], т.е. из записанного в безразмерном виде соотношения

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = Q_{conv} + Q_{diff} + Q_c = 0, \quad (3)$$

где конвективные члены, входящие в уравнение диффузии (2) схематично обозначены как Q_{conv} , а диффузионные члены обозначены как Q_{diff} . Конечно-разностная аппроксимация соотношения (3) для одномерного потока осуществлялась на той же гибридной сетке для осевой координаты, что использовалась в двумерных расчетах, при этом значения источникового члена определялись в центре ячейки. Распределение температуры, плотности и осевой скорости, входящие в соотношение (3), задавались так же, как в работе [1] при вычислении источникового члена $Q_T(z)$ для уравнения энергии. Распределение мольной концентрации рассматриваемого компонента задавалось в соответствии с результатами моделирования течения в невозмущенном пламени с помощью кода Chemkin [23]. Эти распределения приведены на рис. 2 (следует отметить, что в рамках применяемого подхода другие компоненты пламени, помимо рассматриваемого, заменяются атомами аргона). Температурная зависимость ρD_{12} и k_T для рассматриваемых смесей рассчитывалась для межмолекулярного потенциала взаимодействия Леннарда-Джонса (6–12) с параметрами $\sigma = 3.746 \text{ \AA}$, $\epsilon/k = 141.4 \text{ К}$ для CH₄, $\sigma = 3.763 \text{ \AA}$, $\epsilon/k = 244 \text{ К}$ для CO₂, $\sigma = 2.605 \text{ \AA}$, $\epsilon/k = 572.4 \text{ К}$ для H₂O, $\sigma = 3.458 \text{ \AA}$, $\epsilon/k = 107.4 \text{ К}$ для O₂ и $\sigma = 3.418 \text{ \AA}$, $\epsilon/k = 124 \text{ К}$ для Ar с использованием общепринятых правил комбинирования для описания взаимодействия молекул различной природы [24].

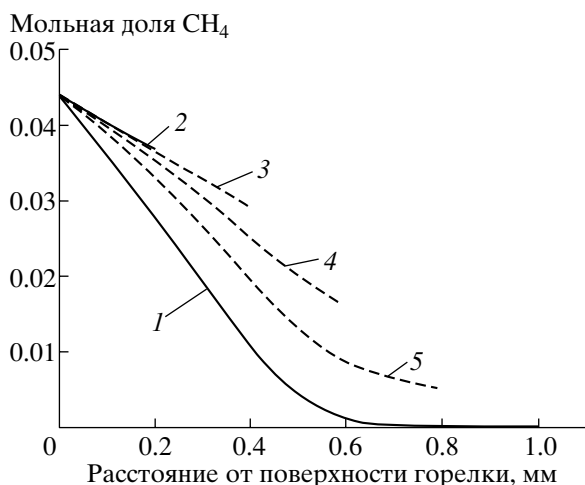


Рис. 4. Осевые распределения концентрации метана для различных положений зонда в пламени: 1 — невозмущенный профиль; 2, 3, 4, 5 — $z_0 = 0.2, 0.4, 0.6$ и 0.8 мм соответственно.

Полученные осевые распределения источников членов $Q_c(z)$ для рассматриваемых компонентов показаны на рис. 3. Положительные значения $Q_c(z)$ имеют место для продуктов реакции CO_2 и H_2O , отрицательные — для реагентов CH_4 и O_2 . Низкие значения Q_c при $z \leq 0.02$ мм отражают преимущественно диффузионную природу этого участка фронта пламени.

Расчеты показали, что влияние баро- и термодиффузии на распределение концентраций рассматриваемых компонентов мало. Мы не будем иллюстрировать это влияние, учитывая приближенный характер модели. Приводимые ниже результаты получены при учете только концентрационной диффузии.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 4 показаны осевые распределения концентрации метана для 4 рассмотренных положений зонда в пламени. Невозмущенный профиль концентрации метана также показан для сравнения. Как видно, для всех четырех положений зонда концентрация CH_4 с увеличением z уменьшается значительно медленнее, чем в невозмущенном пламени, несмотря на влияние источников члена. Это связано с ускорением потока, что снижает время нахождения газа в области действия источников члена данной интенсивности (отрицательного в случае метана, см. рис. 3). Концентрация в центре отверстия зонда, представляющая наибольший интерес с точки зрения интерпретации зондовых измерений, характеризуется определенным сдвигом вниз по потоку относительно положения такой же концентрации в невозмущенном пламени. Сравнение этих распреде-

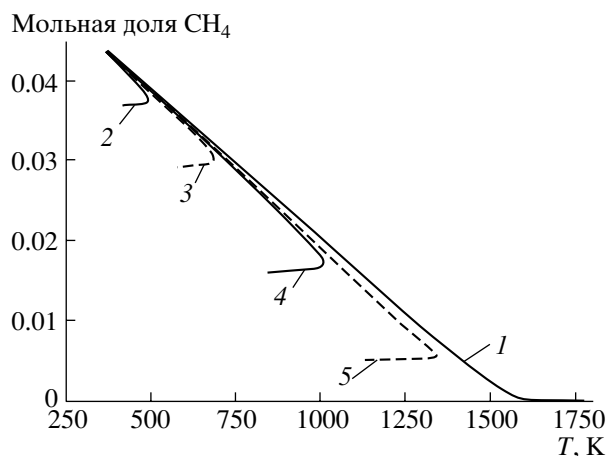


Рис. 5. Соотношение между концентрацией метана и температурой в невозмущенном пламени (1) и на оси возмущенного потока для различных положений зонда в пламени (2, 3, 4, 5 — $z_0 = 0.2, 0.4, 0.6$ и 0.8 мм соответственно).

лений с осевыми распределениями температуры [1] свидетельствует об их качественной аналогии, и отражает известное подобие между процессами тепло- и массообмена.

Степень этого подобия хорошо иллюстрируется на рис. 5, где концентрация метана на оси потока приведена в зависимости от локальной температуры для 4 рассмотренных положений зонда в пламени. Аналогичная зависимость для невозмущенного пламени также показана для сравнения. Анализ этих результатов выявляет важную особенность возмущенного пламени — соотношение между концентрацией метана и температурой на оси возмущенного потока весьма близко к таковому в невозмущенном пламени. Это правило нарушается только в малой окрестности отверстия зонда, где имеет место резкое падение температуры вследствие высокого ускорения транзвукового потока [1]. Эти результаты позволяют объяснить хорошее соответствие между измеренными и рассчитанными значениями концентраций в рамках подхода, применявшегося в работах [9–14].

Осевые распределения концентраций других рассмотренных компонентов обнаруживают те же особенности, что и показанные на рис. 4 и 5.

Невозмущенное пламя является плоским и одномерным и, следовательно, поперечные градиенты параметров не влияют на распределение концентраций. Как было показано в работе [1], возмущенное зондом течение характеризуется значительными радиальными градиентами параметров в плоскости отверстия зонда. Представляет интерес прояснить влияние радиального компонента диффузионного потока на распределение концентраций. Это невозможно сделать

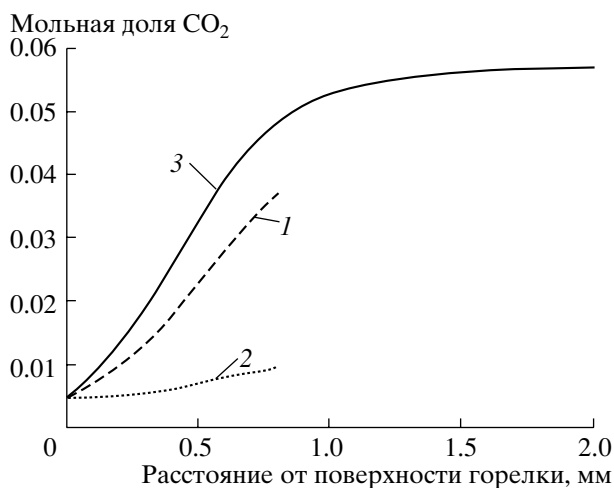


Рис. 6. Влияние радиальной диффузии на осевой профиль концентрации CO_2 для $z_0 = 0.8$ мм (1, 2 – см. текст, 3 – невозмущенный профиль).

экспериментально, однако легко выполнить численно простым пренебрежением величиной J_{1r} в уравнении (2).

На рис. 6 приведено осевое распределение концентрации CO_2 для $z_0 = 0.8$ мм, полученное с учетом (кривая 1) и без учета (кривая 2) влияния радиальной диффузии. Значительное влияние J_{1r} на распределение концентрации очевидно. Аналогичное заключение вытекает из анализа радиального распределения концентрации в плоскости отверстия зонда, приведенное на рис. 7 для того же режима (обозначения кривых те же, что и на рис. 6). Сильно неравномерное поперечное распределение концентрации, обусловленное различной эволюцией параметров вдоль линий тока, наблюдаемое для $J_{1r} = 0$, становится значительно более равномерным при учете влияния радиальной диффузии.

Основываясь на консервативности давления в поле течения [1], на начальной стадии данного исследования рассматривалась идея моделирования состава смеси возмущенного течения в рамках кода Chemkin [23] (в котором предполагается изобаричность пламени), путем задания площади трубки тока на оси течения на основе двумерного расчета. В этом случае появлялась возможность расчета возмущенных концентраций в окрестности отверстия зонда в строгой квази-одномерной постановке. Проиллюстрированное выше значительное влияние радиального компонента диффузионного потока исключает плодотворность подобного подхода.

Как видно из рис. 7, разность между возмущенной и невозмущенной концентрациями на одном и том же расстоянии от горелки имеет разные знаки на оси и на периферии потока. Эта особен-

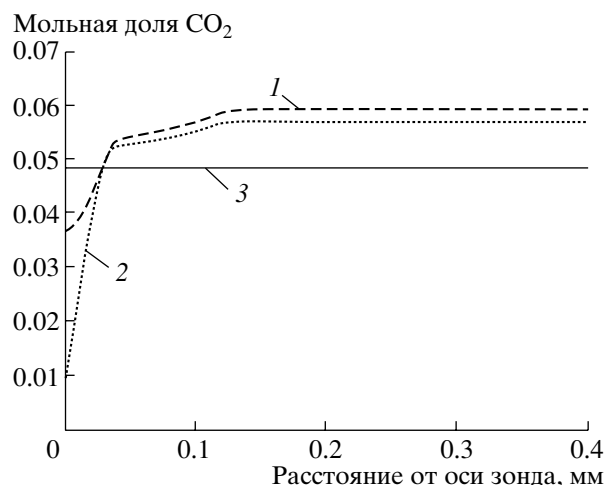


Рис. 7. Влияние радиальной диффузии на радиальный профиль концентрации CO_2 в плоскости торца зонда для $z = 0.8$ мм (1, 2 – см. текст, 3 – невозмущенный профиль).

ность радиальных профилей концентраций в плоскости отверстия зонда имеет место для всех рассмотренных режимов и связана с различной эволюцией параметров вдоль разных линий тока, а также с возвратным течением газа вдоль конической поверхности зонда [1], вследствие чего отверстия зонда достигают порции газа из областей, расположенных как ниже, так и выше по потоку от торца зонда. Аналогичная особенность радиальных профилей концентрации была ранее отмечена в работе [2], где эволюция концентраций рассматривалась на основе процесса самодиффузии при использовании более простой газодинамической модели течения.

На рис. 8 проведено сравнение расчетных профилей концентраций CH_4 и H_2O с экспериментальными, полученными методом МПМС, расчетные данные соответствуют центру отверстия зонда. Профили концентраций CH_4 и H_2O в невозмущенном пламени также показаны для сравнения.

Профиль концентрации CH_4 , рассчитанный с помощью кода Chemkin [23] на основе температурного профиля, заданного на основании измерений с помощью термопары, расположенной перед торцом зонда [1], т.е. в рамках подхода, использованного в работах [9–14], также показан на рис. 8 (профиль 4). Эти результаты находятся даже в лучшем согласии с экспериментом, чем предсказания модели (профиль 3).

Как видно из рис. 8, расчетные и экспериментальные профили сдвинуты вниз по потоку относительно невозмущенных, причем измеренные значения сдвига выше расчетных приблизительно в 2 раза.

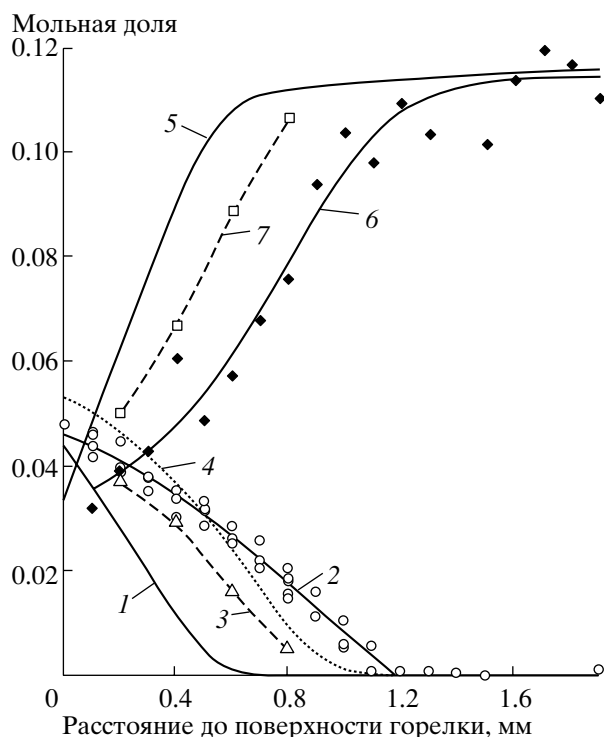


Рис. 8. Осевые профили концентраций CH_4 (1 – невозмущенный, 2 – эксперимент, 3 – расчет, 4 – см. текст) и H_2O (5 – невозмущенный, 6 – эксперимент, 7 – расчет).

Все полученные данные для величин сдвига приведены на рис. 9. Предсказания приближенной модели, имеющейся в литературе [2], также показаны для сравнения (данные для δ рассчитаны по соотношению (1) для звукового потока в плоскости отверстия зонда, с параметрами, связанными с параметрами невозмущенного пламени изоэнтропическими соотношениями. Входящий в (1) коэффициент диффузии вычислялся для смеси $\text{CH}_4\text{-Ar}$. Значения δ для других рассмотренных смесей несколько отличаются от приведенных на рис. 9 вследствие различия в коэффициентах диффузии. Максимальный разброс значений δ для рассмотренных смесей не превосходит 20%. Штриховой прямой показан максимально возможный сдвиг для данного расстояния z_0 между зондом и горелкой.

Как уже упоминалось, расчетные значения сдвига систематически ниже экспериментальных приблизительно в 2 раза, что может быть связано с нелинейным эффектом влияния возмущений потока на кинетику химических реакций. Этот эффект не может быть учтен в рамках модели с пространственно закрепленными источниками энергии [1] и концентраций.

Как видно из рис. 9, приближенное соотношение для сдвига, имеющееся в литературе [2], может использоваться только для оценок порядка

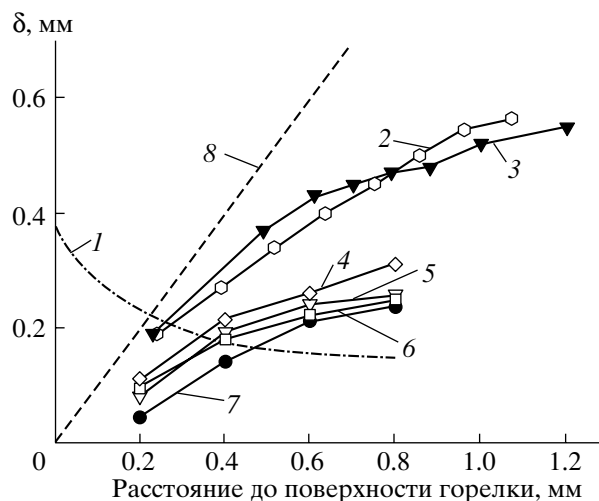


Рис. 9. Величины сдвига профилей концентраций относительно невозмущенных (1 – модель [2]; эксперимент: 2 – CH_4 , 3 – H_2O ; расчет: 4 – CH_4 , 5 – O_2 , 6 – H_2O , 7 – CO_2 , 8 – $\delta = z_0$).

его величины. Это соотношение предсказывает уменьшение сдвига с увеличением расстояния между зондом и горелкой, что противоположно результатам измерений. Более того, при малых расстояниях z_0 соответствующие предсказания ($\delta > z_0$) лишены физического смысла.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. На основе уравнения диффузии с источником членом, учитывающим влияние химических реакций, разработана методика расчета распределения концентраций в бинарной смеси газов для течения около пробоотборного зонда, помещенного в стационарную волну горения. Задача решена в линейной постановке, т.е. без учета влияния процесса диффузии на распределение параметров течения.

2. Проведено численное исследование течения бинарных смесей $\text{CH}_4\text{-Ar}$, $\text{H}_2\text{O-Ar}$, $\text{CO}_2\text{-Ar}$, и $\text{O}_2\text{-Ar}$ около зонда с диаметром отверстия 80 мкм, диаметром торца 240 мкм и полууглом раствора конического участка 25.5° для основных компонентов метано-кислород-аргонового пламени, стабилизированного на плоской горелке при атмосферном давлении.

3. Моделирование показало, что значения концентраций в центре отверстия зонда характеризуются наличием сдвига вниз по потоку относительно значения концентрации рассматриваемого компонента в невозмущенном пламени в точке расположения торца зонда. Указанная особенность типична для рассматриваемого течения.

4. Профили основных компонентов пламени измерены с помощью метода МПМС. Проведено

сравнение экспериментальных результатов с результатами расчета невозмущенного пламени с помощью кода Chemkin [23], а также с результатами моделирования возмущенного пламени. Определены величины сдвига измеренных профилей концентраций относительно невозмущенных.

5. Расчетная величина сдвига концентраций приблизительно одинакова для рассмотренных компонентов пламени (CH_4 , H_2O , CO_2 , O_2), что свидетельствует о соответствии предсказываемого состава смеси таковому в некоторой точке невозмущенной волны горения. Величина сдвига возрастает с увеличением расстояния между торцем зонда и горелкой, что согласуется с результатами экспериментов, хотя измеренные значения сдвига выше расчетных приблизительно в 2 раза.

6. Из анализа литературных данных следует, что величина сдвига концентраций существенно возрастает при увеличении диаметра торца зонда (d_0), что должно приниматься во внимание при постановке зондовых измерений.

7. Известная особенность поперечных распределений концентраций в плоскости отверстия зонда [2], состоящая в том, что разность между возмущенными концентрациями и концентрациями в невозмущенном потоке на том же расстоянии от горелки, имеет различные знаки на оси и на периферии потока, хорошо воспроизводится моделью.

8. Приближенное соотношение для значений сдвига, имеющееся в литературе [2], может использоваться только для оценок порядка его величины. Это соотношение предсказывает уменьшение сдвига с увеличением расстояния между торцем зонда и горелкой, что противоположно результатам наблюдений. Более того, при малых расстояниях z_0 соответствующие предсказания ($\delta > z_0$) лишены физического смысла.

9. Соотношение между локальными значениями концентрации и температуры на оси возмущенного потока очень близко к таковому в невозмущенном пламени. Эти результаты позволяют объяснить хорошее соответствие между измеренными и рассчитанными концентрациями, полученными в широко распространенном подходе к верификации химического механизма, в котором измеренный профиль температуры в возмущенном пламени используется при моделировании [9–14].

10. Профиль концентрации CH_4 , рассчитанный с помощью кода Chemkin [23] на основе распределения температуры, измеренной термопарой, размещенной перед торцем зонда, удовлетворительно согласуется с результатами молекулярно-пучковых измерений.

11. Исследования выявили существенное влияние диффузионных потоков в радиальном направлении на формирование распределения концентраций в плоскости отверстия зонда. Влияние баро- и термодиффузии на распределение концентраций относительно мало.

В последующей версии модели вместо введения источников членов в уравнения энергии и диффузии планируется моделировать течение в рамках простой модели химической кинетики типа модели Зельдовича, или приближения глобальной кинетики.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сквородко П.А., Терещенко А.Г., Коробейничев О.П. и др. // Хим. физика. 2006. Т. 25. № 10. С.
2. Yi A.C., Knuth E.L. // Combust. and Flame. 1986. V. 63. P. 369.
3. Hastie W.J. // Int. J. Mass Spectr. Ion Phys. 1975. V. 16. P. 89.
4. Stepowski D., Puechberty D., Cottreau M.J. // Eighteenth Symp. (Intern.) on Combust. The Combust. Inst. 1981. P.1567.
5. Cattolica R. J., Yoon S., Knuth E.L. // Combust. Sci. and Techn. 1982. V. 28. P. 225.
6. Revet J.M., Puechberty D., Cottreau M.J. // Combust. and Flame. 1974. V. 33. P. 5.
7. Коробейничев О.П., Терещенко А.Г., Емельянов И.Д. и др. Препринт № 14. Новосибирск: ИХКиГ, ИТПМ, НГУ, 1985.
8. Yoon S., Knuth E.L. // Rarefied Gas Dynamics. Part II. Proc. 12th Intern. Symp., Progress in Astronautics and Aeronautics / Ed. Fisher S.S. N.Y.: AIAA, 1980. V. 74. P. 867.
9. Bastin E., Delfau J.-L., Reuillon M. et al. // Twenty-Second Symp. (Intern.) on Combust. Pittsburgh: The Combust. Inst., 1989. P. 313.
10. Musick M., Van Tiggelen P.J., Vandooren J. // Combust. and Flame. 1996. V. 105. P. 433.
11. Korobeinichev O.P., Shvartsberg V.M., Ilyin S.B. et al. // Combust., Explosion, and Shock Waves. 1999. V. 35. №. 3. P. 239.
12. Korobeinichev O.P., Ilyin S.B., Bolshova T.A. et al. // Combust. and Flame. 2000. V. 121. P. 593.
13. Korobeinichev O.P., Shvartsberg V. M., Shmakov A.G. // Proc. of Combust. Inst. / Eds. Barlow R.S. et al. Elsevier, 2004. V. 30. № 2. P. 2350.
14. Marschallek K., Lefort D., Gasnot L. et al. // Proc. of European Combust. Meeting. 2005. Paper 028.
15. Kaiser E.W., Wallington T.J., Hurley M.D. et al. // J. Phys. Chem. A. 2000. V. 104. P. 8194.
16. Nogueira M.F.M., Fisher E.M. // Combust. and Flame. 2003. V. 132. P. 352.
17. Коробейничев О.П. // Успехи химии АН СССР. 1980. Т. 49. Вып. 6. С. 945.

18. *Knuth E.L.* // Proc. of Workshop on Applications of Free-Jet, Molecular Beam, Mass Spectrometric Sampling. Estes Park. Colorado, 1994. P. 18.
19. *Дубинин В.В., Колесников Б.Я., Ксандопуло Г.И.* // Физика горения и взрыва. 1977. Т. 13. № 6. С. 920.
20. *Smith O.I.* // Combust. and Flame. 1981. V. 40. P. 187.
21. *Korobeinichev O.P., Ilyin S.B., Mokrushin V.M. et al.* // Combust. Sci. and Techn. 1996. V. 116–117. P. 51.
22. *Korobeinichev O.P., Ilyin S.B., Shvartsberg V.M. et al.* // Combust. and Flame. 1999. V. 118. P. 718.
23. *Kee R.J., Rupley F.M., Miller J.A.* Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas Phase Chemical Kinetics, Report № SAND89–8009B, Sandia National Laboratories, 1989.
24. *Гирифельдер Дж., Кермисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей // М.: Изд-во иностр. лит., 1961.