

УДК 536.64

## **О влиянии молекулярных свойств газов на тепло- и массообмен при горении перемешанных и неперемешанных реагентов\***

**Б.Ф. Бояршинов**

*Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе СО РАН, Новосибирск*

E-mail: boyar@itp.nsc.ru

На основании известных расчетных и опытных данных по распределению температуры и состава газов вблизи фронта пламени в струях показано, что характер изменения полной энтальпии при горении перемешанных и неперемешанных реагентов в разной степени, но одинаковым образом зависит от молекулярных свойств газов. Системы с числами Льюиса меньше единицы в профиле энтальпии имеют максимум, если же число Льюиса больше единицы, появляется минимум вблизи фронта пламени. Получены данные о тепловых потоках, связанных с теплопроводностью и диффузией. Установлено, что при горении неперемешанных реагентов поток тепла, переносимый диффузией, на порядок меньше потока, переносимого теплопроводностью. Для перемешанной смеси потоки тепла, переносимого диффузией и теплопроводностью, превышают потоки тепла в пламени неперемешанных реагентов.

**Ключевые слова:** атомарная концентрация, полная энтальпия, перенос теплопроводностью, диффузионный перенос энтальпии, число Льюиса, подобие процессов переноса, тепло- и массообмен.

### **Введение**

Химическое реагирование характеризуется кардинальным влиянием на локальные параметры системы, которое обусловлено тепловыделением, образованием и исчезновением отдельных компонентов газовой смеси. Известно большое количество расчетных и экспериментальных работ для разных реагирующих систем, в которых были получены данные о локальных параметрах газа, о составе стабильных веществ и радикалов, которые необходимы при изучении кинетики химического реагирования. Однако распределение атомов и энтальпии для анализа тепло- и массообмена [1, 2] в таких исследованиях, как правило, не рассматривалось.

### **Атомарные концентрации**

В работе [3] отмечалось, что без наличия ядерных превращений источники и стоки атомов отсутствуют. Поэтому в распределении массовой концентрации химических элементов  $K_n(y)$  нет минимумов и максимумов:

$$K_n = \sum_{i=1} a_n \cdot C_i, \quad (1)$$

---

\* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 18-03-00282а).

здесь  $a_n$  — массовая доля  $n$ -го химического элемента в  $i$ -м веществе с массовой концентрацией  $C_i$ . Для одномерного движения газовой смеси при переходе через плоский фронт пламени массовая концентрация какого-либо химического элемента остается постоянной, т.е.  $K_n(y) = \text{const}$ . В случаях с неперемешанными реагентами функция  $K_n(y)$  монотонно изменяется при переходе от зоны горючего к окислителю через область химических превращений. В моделях Бурке–Шумана или Шваба–Зельдовича состав стабильных веществ при химическом реагировании однозначно связан с распределением атомов. В работах [4, 5] из подобия профилей атомарных концентраций и полных энтальпий были рассчитаны профили температуры и состава газов. Такой подход фактически исключает из рассмотрения влияние диффузионных и тепловых процессов на перенос атомов, входящих в состав молекул реагентов и продуктов сгорания.

### Полная энтальпия

Полная энтальпия  $h$  (Дж/кг) включает в себя тепловую  $C_p T$  и химическую  $h^0$  энергии вещества:

$$h = \sum_{i=1}^n C_i h_i = \sum_i C_i \cdot \left( \int_{298}^T C_{pi} dT + h_i^o \right). \quad (2)$$

Из работы [6] следует, что при горении смеси, у которой одинаковы коэффициенты диффузии ( $D$ ) и температуропроводности ( $\lambda/\rho C_p$ ), полная энтальпия не изменяется по пространству, а убыль энергии химических связей компенсируется возрастанием температуры смеси. Когда отсутствует равенство коэффициентов диффузии и температуропроводности и число Льюиса  $Le = \rho D C_p / \lambda < 1$ , то при переходе через фронт пламени энтальпия  $h(y)$  имеет максимум. Если в исходной смеси  $Le > 1$ , то в профиле  $h(y)$  формируется минимум. Здесь  $\rho$  — плотность, кг/м<sup>3</sup>;  $T$  — температура, К;  $D$  — коэффициент диффузии, м<sup>2</sup>/с;  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности, Вт/м/град;  $C_p$  — теплоемкость, Дж/кг/К;  $y$  — координата поперек поверхности фронта химических реакций, м.

Наличие экстремумов не означает отклонения от закона сохранения энергии и не обусловлено появлением дополнительных источников и стоков энергии, а связано с разной скоростью тепловых и химических изменений в релаксационных процессах при прохождении газа через тонкую область химических превращений.

### Массоперенос

Уравнения переноса вещества [7], записанные для химических элементов, не содержат источников членов и включают в себя обобщенный коэффициент диффузии  $\underline{D}$ :

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (\rho U_k K_n) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \rho \underline{D} \frac{\partial K_n}{\partial x_k} \right), \quad (3)$$

здесь  $x_k$  и  $U_k$  — координата и проекция скорости на координатную ось  $k$ . Наличие такого коэффициента диффузии, который одинаков для разных атомов, исключает зависимость распределения химических элементов от числа Льюиса. Таким образом, для одинаковых граничных условий в конкретной реагирующей системе распределение атомов будет подобно друг другу, а скорость образования (или исчезновения) веществ, определение которой часто вызывает затруднения, можно не рассматривать вовсе.

### Теплообмен

При описании переноса энергии часто используется уравнение, подобное (3), в котором атомарные концентрации заменены полными энтальпиями  $h$ , а произведение  $\rho \underline{D}$  заменено на  $\lambda/C_p$ . Это фактически соответствует случаю  $Le = 1$ , кроме того, из рассмотрения

исключается тепловыделение. Насколько справедливы такие упрощения? В реагирующей системе тепловые потоки определяются либо по величине градиента полной энтальпии  $(\lambda/C_p)(dh/dy)$  [1, 2], либо по градиенту тепловой ее части  $\lambda(dT/dy)$  [8]. Насколько отличаются между собой эти потоки — не всегда очевидно.

Цель настоящей работы — используя известные данные о составе стабильных веществ и температуре вблизи фронта пламени, исследовать закономерности изменения атомарных концентраций и полных энтальпий при горении перемешанных и неперемешанных реагентов. С помощью полученных результатов предполагается проанализировать подобие процессов переноса тепла и вещества, изучить влияние молекулярных свойств реагентов на тепломассообмен в области химических превращений.

## Результаты анализа

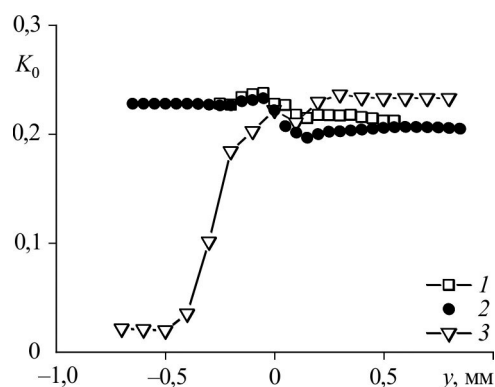
### Распределение химических элементов

Сопоставление отмеченных закономерностей с результатами известных исследований структуры пламени заранее перемешанных и неперемешанных реагентов приводится ниже. На рис. 1 показаны результаты расчета массовой доли атомов кислорода по формуле (1) при горении стехиометрической смеси водорода с воздухом по данным работы [9] (маркеры 1). Видно, что концентрация атомов кислорода при переходе через фронт пламени изменяется в пределах (10–15 %). С учетом эффектов термодиффузии в [9] были получены данные для богатой и бедной смесей, а также для тройного пламени при горении струи водорода в воздухе. Из расчетов [10] (маркер 2) в стехиометрической водородо-воздушной смеси концентрация атомов кислорода  $K_0$  восстанавливается к исходному значению с удалением от зоны горения.

Для сравнения характеристик пламени неперемешанных и предварительно перемешанных реагентов за начало отсчета на оси абсцисс рис. 1 выбрано положение максимума энтальпии кислорода  $O_2$ . Наличие этого максимума отмечается в основных случаях химического реагирования. Для горения неперемешанных реагентов в опытах [11] были получены данные для горения в воздухе струи водорода, разбавленного азотом в объемном соотношении 1:1 (маркеры 3, координата  $y$  на рис. 1 уменьшена в десять раз). Видно, что профиль атомов кислорода (для сечения струи на удалении 3 мм от среза сопла) в окрестности  $y = 0$  имеет особенность, которая отмечается также для распределения молекул инертного азота  $N_2$ . Наличие экстремумов, по-видимому, связано с проявлением молекулярных свойств инертного вещества и реагентов в зоне химического реагирования.

Известно, что для смеси водорода с воздухом  $Le > 1$ , для метана с воздухом  $Le \sim 1$ , в смеси гептан/воздух  $Le < 1$ . На рис. 2 показаны профили атомарных концентраций для этих реагентов в случае горения без предварительного перемешивания. Рассматривались данные [10] для горения встречных струй водорода и воздуха. В расчетах [12] струя смеси метан/азот была направлена против потока воздуха (параметр растяжения  $a = 56 \text{ с}^{-1}$ ), результаты расчетов [13] были получены для случая горения встречных

Рис. 1. Профили атомарных концентраций в окрестности фронта пламени водорода при горении перемешанных и неперемешанных реагентов.  
1 и 2 — данные расчетов [9] и [10] для стехиометрической водородо-воздушной смеси,  
3 — неперемешанная струя водорода в воздухе (опыты [11], абсцисса уменьшена в десять раз).



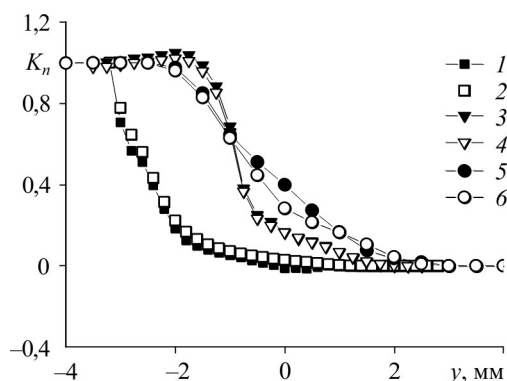


Рис. 2. Подобие профилей атомарных концентраций при горении неперемешанных реагентов во встречном потоке воздуха.

Химические элементы  
 в пламени водорода: 1 — азот, 2 — водород;  
 в пламени гептана: 3 — углерод, 4 — водород;  
 в пламени метана: 5 — углерод, 6 — водород.

струй смеси гептан/азот (в соотношении 15/85 по объему) и струи воздуха при давлении, повышенном до 4 МПа. На рисунке данные отнесены к разности концентраций перед фронтом и за фронтом пламени и представлены таким образом, чтобы вдали от фронта пламени в зоне горючего при  $y = -4$  мм концентрация атомов  $K_n = 1$ , а при  $y = +4$  мм —  $K_n = 0$ . Нулевое значение оси абсцисс соответствует максимуму температуры. Видно, что при горении водорода в воздухе профили атомарного водорода 2 вдали от области  $y = 0$  сближаются с профилем азота 1. При горении гептана профили углерода 3 и водорода 4 близки между собой. При горении метана профили углерода и водорода 5 и 6 расходятся вблизи зоны горения. Профили монотонны и представляют собой распределение различных атомов без источников и стоков.

Таким образом, при горении неперемешанных реагентов подобие в распределении атомов для выбранных экспериментов выполняется вдали от зоны горения и нарушается непосредственно в области химических превращений.

### Профили полной энтальпии

Для расчетов полной энтальпии по измерениям состава  $C_i(y)$  и температуры  $T(y)$  газовых смесей по формуле (2) использовались справочные данные [14] о теплоемкости ( $C_p$ ) и теплоте образования сложных веществ из простых, которые представлены соответственно в табл. 1 и 2 (в обозначениях справочника  $h_i^0 \equiv \Delta H_{f,298}^0$  — теплота образования  $i$ -го соединения при 298,15 К из простых веществ в стандартном состоянии).

Полная энтальпия определялась в виде суммы энтальпии и стандартной теплоты образования  $i$ -го соединения при 298,15 К из простых веществ [13]:

$$h = \sum_{i=1}^n C_i h_i = \sum_i (C_i / m_i) \cdot \left( \int_{298}^T C_{p_i} dT + \Delta H_{f,298}^0 \right), \quad (4)$$

здесь  $m_i$  — моль вещества (г/моль).

Таблица 1

Зависимость энтальпии от температуры (по данным работы [14])

$$\int_{298}^T C_{p_i} dT, \text{ Дж/моль}$$

Вещество	Энтальпия, Дж/моль
CO <sub>2</sub>	$44,17 \cdot T + 9,04 \cdot 10^{-3} \cdot (T^2/2) + 8,54 \cdot 10^5 \cdot (1/T) - 16430$
H <sub>2</sub> O	$30,02 \cdot T + 10,72 \cdot 10^{-3} \cdot (T^2/2) - 0,33 \cdot 10^5 \cdot (1/T) - 9311$
O <sub>2</sub>	$29,98 \cdot T + 4,2 \cdot 10^{-3} \cdot (T^2/2) + 1,7 \cdot 10^5 \cdot (1/T) - 9691$
N <sub>2</sub>	$27,88 \cdot T + 4,27 \cdot 10^{-3} \cdot (T^2/2) - 8498$
CO	$28,43 \cdot T + 4,1 \cdot 10^{-3} \cdot (T^2/2) + 0,46 \cdot 10^5 \cdot (1/T) - 8808$
CH <sub>4</sub>	$17,6 \cdot T + 60,5 \cdot 10^{-3} \cdot (T^2/2) + 1,118 \cdot 10^{-6} \cdot (T^3/3) - 7,21 \cdot 10^{-9} \cdot (T^4/4) - 7927$
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	$-4,81 \cdot T + 307,52 \cdot 10^{-3} \cdot (T^2/2) - 160,27 \cdot 10^{-6} \cdot (T^3/3) + 32,78 \cdot 10^{-9} \cdot (T^4/4) - 10872$
H <sub>2</sub>	$27,3 \cdot T + 3,27 \cdot 10^{-3} \cdot (T^2/2) - 0,5 \cdot 10^5 \cdot (1/T) - 8113$
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	$5,02 \cdot T + 654,19 \cdot 10^{-3} \cdot (T^2/2) - 348,97 \cdot 10^{-6} \cdot (T^3/3) + 72,39 \cdot 10^{-9} \cdot (T^4/4) - 27608$

Таблица 2  
Стандартная теплота образования  
сложных веществ из простых [14]

Вещество	$-\Delta H_{f-298}^0$ , кДж/моль
CO	110,599
CO <sub>2</sub>	393,777
H <sub>2</sub> O	241,98
CH <sub>4</sub>	74,86
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	103,92
C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	187,74

### Горение перемешанных смесей

На рис. 3 показаны профили полной энтальпии, полученные с использованием результатов расчетов [10] для горения предварительно перемешанных смесей воздуха с водородом ( $Le > 1$ , маркеры 1) и для смеси воздуха с пропаном в экспериментах [15] ( $Le < 1$ , маркеры 2, пламя над плоским перфорированным диском диаметром 4 мм). Из-за отличия в схемах течения в разных горелочных устройствах в качестве начала отсчета на оси абсцисс было принято положение максимума энтальпии кислорода. Видно, что в профиле  $h(y)$  для водородо-воздушной смеси присутствует минимум, а при горении пропано-воздушной смеси образуется максимум. По данным опытов [16] с горением встречных струй метано-воздушной смеси полная энтальпия при переходе через фронт пламени меняется в меньшей степени.

На рис. 3 представлено количественное подтверждение выводов [6] о характере изменения полной энтальпии в окрестности фронта пламени для систем с различными числами Льюиса в исходной смеси. Для водородо-воздушных смесей отличие формы профилей атомарных концентраций (рис. 1) и профилей энтальпий (рис. 3) свидетельствует об отсутствии подобия в распределении этих параметров в реагирующих смесях с  $Le \neq 1$ . Для всех трех смесей в зоне горения происходит изменение направления потока полной энтальпии  $q_H = -(\lambda / C_p) \cdot (\partial h / \partial y)$ , т.к. изменяется знак производной  $dh/dy$ .

Сравнительно малый градиент полной энтальпии в случае горения смеси метана с воздухом (рис. 3, маркеры 3), когда градиент температуры достигал  $\sim 1700$  К/мм, показывает, что поток полной энтальпии  $q_H = -(\lambda / C_p) \cdot (\partial h / \partial y)$  (Вт/м<sup>2</sup>) в общем случае не является аналогом теплового потока, определяемого известными законами переноса теплоты, например, законом Фурье для теплопроводности многокомпонентной смеси  $q = -(\lambda / C_p) \cdot (\partial C_p T / \partial y)$ .

В работе [17] с использованием программы CHEMKIN были получены профили полной энтальпии в плоском адиабатическом пламени водорода. Было показано, что градиенты энтальпии зависят от состава и достигают  $\sim 3 \cdot 10^3$  Дж/г/мм (при объемной доле водорода 48 %). Для бедной смеси (при объемной доле водорода 18 %) градиенты на порядок меньше, а в профиле полной энтальпии проявляются и минимум, и максимум.

### Диффузионное горение

При диффузионном горении градиенты энтальпии существенно меньше по сравнению со случаем горения перемешанной смеси. В работе [18] исследовалось горение восходящей затопленной струи водорода в воздухе. Спонтанное комбинационное рассеяние света и когерентное антистоксово комбинационное рассеяние света использовались для

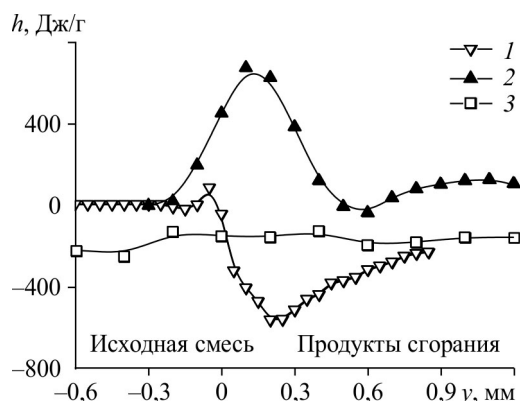


Рис. 3. Изменение полной энтальпии вдоль оси струи реагентов, предварительно перемешанных с воздухом.

Данные расчетов [10] с горением водорода (1), расчетов [16] с горением метана (3) и экспериментов [15] с пропаном (2).

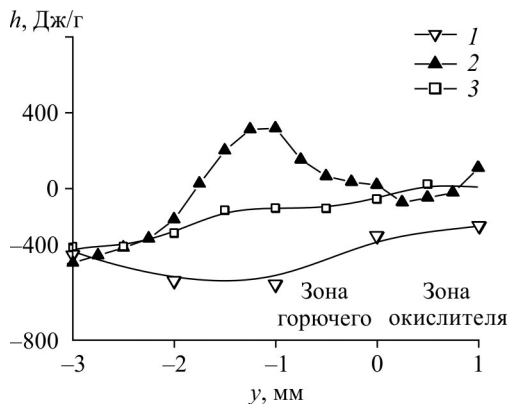


Рис. 4. Профили полной энтальпии в опытах с горением в воздухе струи водорода (1), гептана (2) и метана (3), отличающихся молекулярными свойствами.

измерения профилей состава и температуры. Было получено, что включение эффектов термодиффузии в расчетах приводит к расхождению с результатами измерений. Величина различий не превышала 25 %, а градиенты энтальпии достигали  $\sim 500$  Дж/г/мм. По данным работы [10] для встречных струй водорода и воздуха максимальный градиент

энтальпии составлял  $\sim 380$  Дж/г/мм.

На рис. 4 маркерами 1 показаны профили полной энтальпии в опытах с горением в воздухе водорода [11] (восходящая струя азот-водородной смеси 50/50, расстояние от среза сопла 10 мм), маркерами 2 в экспериментах [13] — с горением встречных струй воздуха и гептана, разбавленного азотом 15/85 при давлении 4 МПа, и маркерами 3 — для встречных струй метана и воздуха [12]. За ноль оси абсцисс принято положение максимума температуры. Взаимное расположение экстремумов в профилях полной энтальпии дает основание считать, что на качественном уровне влияние молекулярных свойств реагентов на распределение полной энтальпии повторяет выводы, относящиеся к горению перемешанных смесей (рис. 3). В профиле энтальпии для струи водорода присутствует минимум, при горении гептана — максимум, а профиль энтальпии горящей струи метана в воздухе соответствует монотонному переходу через область химического реагирования.

Прямая количественная оценка влияния числа Льюиса на теплообмен может быть получена из сравнения потоков тепла, обусловленных теплопроводностью и диффузионным переносом.

#### Влияние молекулярных свойств газов на теплообмен

О влиянии молекулярных свойств газов на теплообмен можно судить по распределению измеряемых физических параметров в уравнении энергии. В работе [8] исследовались слагаемые, ответственные за конвективный перенос, теплопроводность и тепловыделение при горении смеси. В настоящей работе рассматривается соотношение между потоками тепла, переносимыми теплопроводностью  $q$  и диффузией реагентов  $d$ , входящими в состав общего потока тепла [2] в направлении  $y$ . Для плоского фронта пламени принято:

$$q = -(\lambda / C_p) \cdot (\partial C_p T / \partial y), \quad d = -\sum_{i=1}^n \left( \rho D_i - \frac{\lambda}{C_p} \right) \cdot C_{p_i} \cdot T \cdot \frac{\partial C_i}{\partial y}. \quad (5)$$

Слагаемые, отвечающие за перенос теплоты диффузией, отражают влияние числа Льюиса, т.к.  $(\rho D_i - \lambda / C_p) = (\lambda / C_p) \cdot (Le_i - 1)$ . В расчетах коэффициентов теплопроводности и диффузии использовались известные соотношения модели [19] и справочные данные [20]. Теплоемкость многокомпонентной газовой смеси рассчитывается как  $C_p = \sum (C \cdot C_p)_i$ . Теплопроводность смеси (Вт/м/К) записывается в виде

$$\lambda = \sum_{j=1}^n \frac{C_j \lambda_j}{C_j + \sum_{k=1}^n \frac{M_j}{M_k} C_k \Psi_{jk} - C_j \Psi_{jj}}, \quad (6)$$

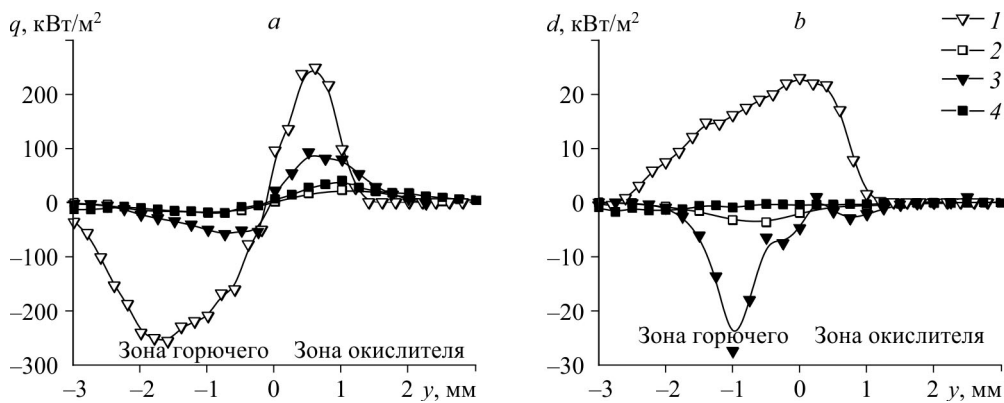


Рис. 5. Перенос тепла при горении газов, неперемешанных с воздухом.

Газы: 1 — водород, 2 — метан, 3 — гептан, 4 — пропан;

*a* — перенос теплопроводности потоками тепла, *b* — перенос тепла диффузией.

где  $M$  — молекулярный вес компонента,  $\Psi_{jk}$  — коэффициент взаимодействия  $j$ -ого и  $k$ -го компонентов смеси для теплопроводности.

В число Льюиса  $Le_i = \rho D_i C_p / \lambda$  входит коэффициент диффузии  $D_i$   $i$ -го вещества в многокомпонентную смесь:

$$D_i = \left( \sum_{j=1}^n \frac{C_j}{M_j} - \frac{C_i}{M_i} \right) / \left( \sum_{j=1}^n \frac{C_j}{M_j D_{ij}} - \frac{C_i}{M_i D_{ii}} \right), \quad (7)$$

где  $D_{ij}$  — коэффициент самодиффузии.

Ниже представлено сравнение потоков теплоты разной природы ( $q$  и  $d$ ) при горении перемешанных и неперемешанных с воздухом реагентов. За ноль абсциссы на рис. 5 принято положение максимума температуры. В пламени неперемешанных реагентов перенос теплопроводности потоками тепла (рис. 5а) направлен от зоны горения, где  $y = 0$ , в сторону горючего и в зону окислителя. Из расчетных данных [10] для горения встречных струй водорода и воздуха (1) максимальное значение потоков тепла, переносимых теплопроводностью, составляет  $\sim 250$  кВт/м<sup>2</sup>. На рисунке представлены данные экспериментов [12], относящиеся к горению встречных струй метана и воздуха 1, эксперимента [13] с горением гептана в воздухе 2 и опытов [21] с горением пропана, разбавленного аргоном 3 (пламя у поверхности горизонтального пористого цилиндра). В опытах [22] использовались термопарные измерения, а также отбор пробы с последующим масс-спектрометрическим анализом.

Интенсивность переноса тепла диффузией (рис. 5б) для всех рассмотренных выше веществ на порядок слабее. Для пламени водорода в зоне горючего ( $y < 0$ )  $d$  и  $q$  не совпадают по направлению. Для метана и гептана потоки тепла, переносимые диффузией, в зоне горючего имеют экстремум и одинаково направлены навстречу потокам этих веществ.

В отличие от случая горения неперемешанных реагентов (рис. 5) при горении перемешанных реагентов (рис. 6) во всех рассмотренных опытах потоки  $d$  и  $q$  направлены в сторону исходной смеси. Здесь за ноль абсциссы принято положение максимума энthalпии кислорода  $O_2$ . Маркерами 1 показаны данные из расчетов [10] для стехиометрической водородо-воздушной смеси, маркерами 2 — численный расчет [16] для встречных струй смеси метана с воздухом, данные, соответствующие маркерам 3, относятся к опытам с плоским пламенем пропано-воздушной смеси над пористой пластиной [15]. Измерения профилей температуры в этих опытах проводились термопарой, газовый состав определялся в ходе газохроматографических исследований с отбором проб кварцевым микрозондом. Величина потока тепла, переносимая теплопроводностью при

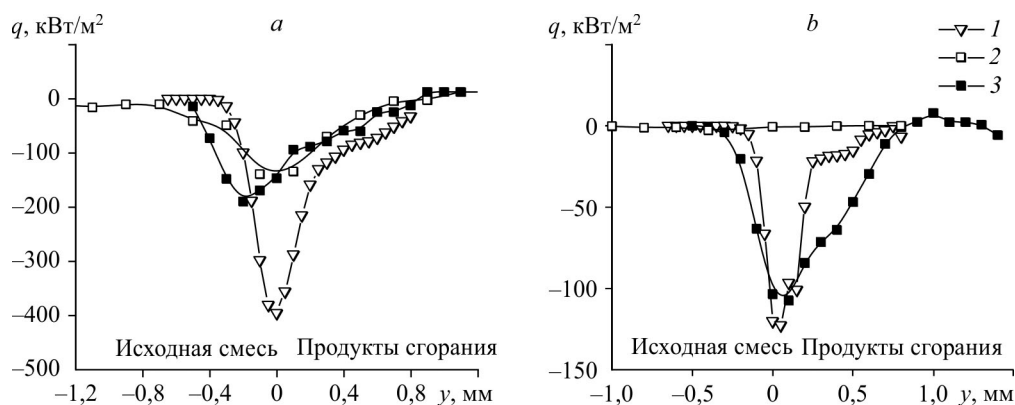


Рис. 6. Перенос тепла при горении перемешанных смесей воздуха с горючими газами.

Газы: 1 — водород, 2 — метан, 3 — пропан;

$a$  — перенос теплопроводности потоками тепла,  $b$  — перенос теплоты диффузией.

горения смесей (рис. 6а), существенно превышает ее значение в случае отсутствия перемешивания (рис. 5а). Для горения воздушных смесей с пропаном (рис. 6б) на отдельных участках фронта пламени по данным работы [15] потоки тепла, переносимые теплопроводностью и диффузией, оказываются сопоставимы между собой и превышают потоки неперемешанных реагентов (рис. 5б).

На рис. 5а и 6б обращает на себя внимание низкий уровень потоков тепла, переносимого диффузией, относящихся к горению метана. Для воздушных смесей метана по данным [22] число Льюиса близко к единице:  $Le = 0,96-1,02$ . Именно метан может оказаться наиболее приемлемым горючим газом в случае необходимости минимизации диффузионного переноса теплоты в исследованиях структуры пламени.

Слагаемые  $d$  и  $q$  — это лишь часть общего потока тепла, включающего конвективный перенос энергии. Конвективная составляющая учитывает тепловыделение и может значительно превосходить потоки, обусловленные градиентами температуры и концентраций веществ [8].

### Обсуждение результатов и выводы

В теории тепло- и массообмена [2] рассматриваются задачи взаимодействия газа или жидкости с поверхностью. Настоящая работа имеет отношение к передаче энергии внутри реагирующего газа. Сравняется интенсивность переноса тепловой энергии перемешанных и неперемешанных реагентов. Для анализа неравновесного процесса, каким является химическое реагирование, использовались общепринятые для равновесных систем консервативные параметры — атомарные концентрации и полные энтальпии. В качестве меры влияния молекулярных свойств выбрано, как обычно, число Льюиса, отличное от единицы. Рассматривались круглые восходящие и встречные струи. Исходя из профилей состава газов и профилей температуры, рассчитано распределение атомарных концентраций и полных энтальпий. При исследовании влияния молекулярных свойств газа на тепло- и массообмен получены данные о потоках тепла, переносимого теплопроводностью и диффузией. Практически во всех случаях в разной степени наблюдается отклонение от закономерностей, соответствующих упрощающему допущению —  $Le = 1$ .

Проведенное исследование позволяет сделать следующие выводы.

1. В непосредственной окрестности фронта пламени расхождение в распределении атомов может превосходить погрешность проведенного анализа, т.е. составлять более 10 %. С удалением от зоны горения подобие профилей атомарных концентраций восстанавливается, что видно на рис. 2.

2. Характер изменения полной энтальпии в опытах с горением газовых смесей подтверждает известные расчеты для одномерного движения газа с плоским фронтом пламени,



а именно: системы с числами Льюиса меньше единицы в профиле энтальпии имеют максимум, системы с числами Льюиса больше единицы имеют минимум вблизи фронта пламени (см. рис. 3). По этой причине, подобие профилей полной энтальпии и атомарных концентраций при горении смесей, когда  $Le \neq 1$  отсутствует. Показано, что отмеченная связь между особенностями в распределении энтальпий и молекулярными свойствами газов относится к горению неперемешанных реагентов (рис. 4).

3. При горении струи водорода в воздухе (горение неперемешанных реагентов) максимальный поток теплоты, переносимой диффузией, на порядок меньше потока тепла, переносимого теплопроводностью (рис. 5). Поток, переносимый теплопроводностью, направлен от фронта пламени в зону горючего и в зону окислителя. Поток теплоты, переносимой диффузией, направлен в сторону окислителя в случае горения струи водорода, а при горении струи пропана — в сторону горючего.

4. Для перемешанной стехиометрической смеси водорода с воздухом поток тепла, переносимого диффузией, может превышать 25 % от потока, переносимого теплопроводностью (рис. 6). На отдельных участках пламени пропано-воздушной смеси потоки тепла, переносимые теплопроводностью и диффузией, оказываются сопоставимы между собой и превышают потоки неперемешанных реагентов. И тот и другой потоки направлены навстречу несгоревшей смеси.

Результаты проведенного анализа могут быть полезны при оценке влияния молекулярных свойств на процессы переноса в ламинарных реагирующих газовых потоках перемешанных и неперемешанных реагентов. Возможно, они будут скорректированы при расширении набора исследуемых реагентов с применением бесконтактных методов диагностики в различных горелочных устройствах.

Автор признателен В.С. Наумкину за помощь в подготовке расчетов.

### Список литературы

1. Волчков Э.П. Пристенные газовые завесы. Новосибирск: Наука, 1983. 240 с.
2. Леонтьев А.И., Исаев С.И., Кожин И.А., Кофанов В.И. и др. Теория теплообмена. М.: Высш. школа, 1979. 495 с.
3. Лапин Ю.В. Турбулентный пограничный слой в сверхзвуковых потоках газа. М.: Наука, 1982. 312 с.
4. Споддинг Д.Б., Ауслендер Д.М., Сандерем Т.Р. Расчет тепло- и массообмена в турбулентном пограничном слое на плоской пластине при больших числах  $Ma$  как при наличии, так и отсутствии химических реакций. Москва. Препринт БНИ ЦАГИ. 1966. № 180-66. 72 с..
5. Бояршинов Б.Ф., Волчков Э.П., Терехов В.И., Шутков С.А. Турбулентный пограничный слой со вдувом реагирующих веществ // Физика горения и взрыва. 1981. № 6. С. 21–28.
6. Зельдович Я.Б., Баренблатт Г.И., Либрович В.Б., Махвиладзе Г.М. Математическая теория горения и взрыва. М.: Наука, 1980. 478 с.
7. Turbulent reacting flows // Topics in Applied Physics / Ed. P.A. Libby, F.A. Williams. Berlin-Heidelberg-New York: Springer-Verlag, 1980. Vol. 44. 243 p.
8. Бояршинов Б.Ф., Фёдоров С.Ю., Абдрахманов Р.Х. Экспериментальное исследование теплообмена в ячеистом пламени богатой и бедной смеси пропан/бутан/воздух // Теплофизика и аэромеханика. 2019. Т. 26, № 1. С. 85–94.
9. Owston R., Abraham J. Structure of triple flames for premixed flames compared // Combustion and Flame. 2010. Vol. 157, No. 8. P. 1552–1565.
10. Law C.K. Combustion physics. N.Y.: Cambridge University Press, 2006. 722 p.
11. Maragkos G., Rauwoens P., Merci B. Differential diffusion effects in numerical simulations of laminar, axisymmetric  $H_2/N_2$ -air diffusion flames // Intern. J. Hydrogen Energy. 2014. Vol. 39, No. 25. P. 13285–13291.
12. Sung C.J., Liu J.B., Law C.K. Structural response of counterflow diffusion flames to strain rate variations // Combustion and Flame. 1995. Vol. 102. P. 481–492.
13. Liu S., Hewson J.C., Chen J.H., Pitsch H. Effects of strain rate on high-pressure non-premixed n-heptane autoignition in counter flow // Combustion and Flame. 2004. Vol. 137. P. 320–339.
14. Рябин В.А., Остроумов М.А., Свифт Т.Ф. Термодинамические свойства веществ. Справочник. Л.: Химия, 1977. 392 с.
15. Biet J., Delfau J.-L., Seydi A., Vovelle C. Experimental and modeling study of lean premixed atmospheric-pressure propane/ $O_2/N_2$  flames // Combustion and Flame. 2005. Vol. 142, No. 3. P. 197–209.
16. Lee S.D., Chung S.H. On the structure and extinction of interacting lean methane/air premixed flames // Combustion and Flame. 1994. Vol. 98. P. 80–92.

17. **Бунёв В.А., Коржавин А.А., Шварцберг В.М.** О распределении энтальпии во фронте одномерного ламинарного пламени // Физика горения и взрыва. 2016. Т. 52, № 1. С. 40–45.
18. **Toro V.V., Mokhov A.V., Levinsky H.B., Smooke M.D.** Combined experimental and computational study of laminar, axisymmetric hydrogen-air diffusion flames // Proceedings of the Combustion Institute. 2005. Vol. 30. P. 485–492.
19. **Wilke C.R.** Diffusional properties of multicomponent gases // Chemical Engng Progress. 1950. No. 46. P. 95–104.
20. **Gordon S., McBride B.J.** Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications. I. Analysis. Washington: NASA RP1311, 1994. Vol. 1. 58 p.
21. **Law C.K., Sung C.J., Yu G., Axelbaum R.L.** On the structural sensitivity of purely strained planar premixed flames to strain rate variations // Combustion and Flame. 1994. Vol. 98. P. 139–154.
22. **Evans S., Simmons R.F.** A structural study of f propane-oxygen diffusion flame diluted with argon // Twenty-Second Symp. (International) on Combustion. 1988. P. 1433–1439.

*Статья поступила в редакцию 21 октября 2019 г.,  
после доработки — 3 ноября 2020 г.,  
принята к публикации 16 декабря 2020 г.*