KINTECH LABORATORY

Скрининг галогенированных соединений для ингибирования водородного (турбулентного) пламени

Введение

Эффективное ингибирование водородного пламени является важной задачей атомной энергетики и водородной безопасности в целом. Для решения данной задачи разрабатываются вещества, включая галоген-содержащие соединения. Крупномасштабные эксперименты по ингибированию водородного пламени очень дороги. Очевидно, что существует необходимость в оценке эффективности различных соединений в предотвращении возгорания водорода до проведения экспериментальной оценки.

Постановка задачи

Исследовать эффективность галоген-содержащих ингибиторов водородных пламён.

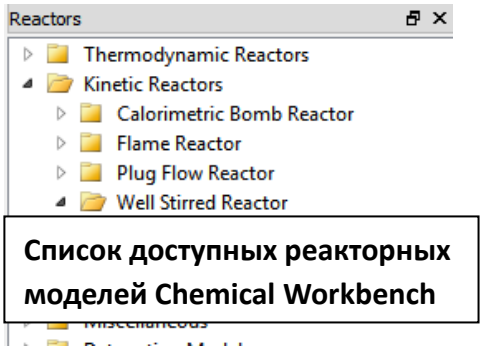
Теоретическое введение

Пределы горения возникают только в системе с потерями (тепловыми, массовыми, импульса и т. д.) [1]. Наименьшие и всегда присутствующие потери при любом процессе горения - это радиационные потери энергии из зоны реакции [1]. Для водорода наиболее распространенным режимом горения является турбулентное пламя. Когда время химической реакции становится сравнимым с характерным временем радиационных потерь тепла, горение прекращается.

Идеальной моделью турбулентного горения водорода является идеально перемешанный реактор, который характеризуется временем пребывания (время пребывания в турбулентных вихрях). В рамках этой модели можно построить диаграмму стабильности горения (нижний предел погасания, вызванный коротким временем пребывания, и верхний предел погасания из-за потерь тепла) в координатах «концентрация ингибитора» - «время пребывания». Концентрация ингибитора, который полностью гасит сгорание для любого времени пребывания, будет использоваться для скрининга эффективности ингибиторов

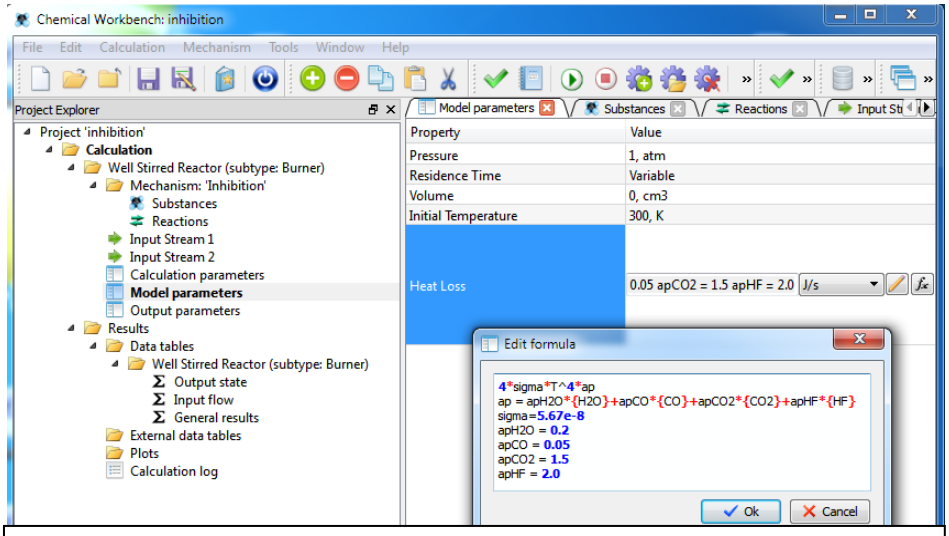
Решение задачи в Chemical Workbench

Для **моделирования турбулентного горения** стехиометрической смеси водород-воздух-ингибитор использовалась модель реактора **WSR** (подтип с поджигом). Состояние исходной смеси: Ингибитор:H_2:O_2:N_2 = X:2:1:3,76 (по объему), температура 300 K, давление 1 атм. Два параметра - независимые переменные: время пребывания от 10^{-7} с до 10000 с, молярная доля ингибитора от 0 до 0,5 об.



Список доступных реакторных моделей Chemical Workbench

Радиационные потери тепла реализуются как определяемая пользователем интенсивность теплопотерь на основе фактического состава смеси (первичные излучающие вещества H2O, CO, CO2, HCl) и температуры. Механизм горения Babushok et al. [2, 3] был загружен из формата CHEMKIN в программное обеспечение Chemical Workbench.



Заданные пользователем потери тепла на основе фактического состава смеси для модели реактора WSR в Chemical Workbench

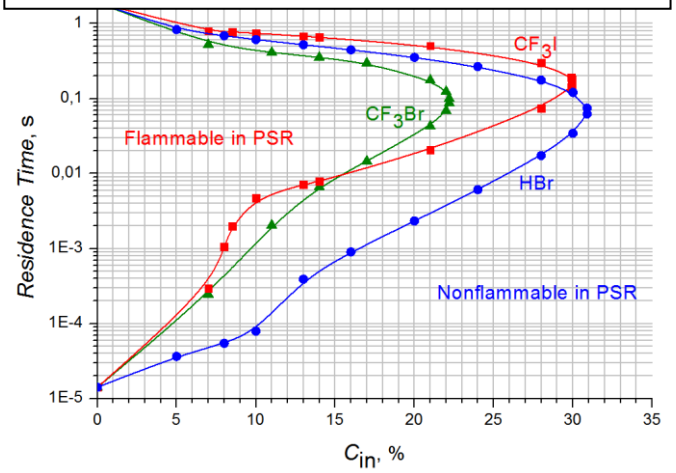
Для каждой комбинации времени пребывания и концентрации ингибитора успешность сгорания определялся по установившемуся значению температуры: 1) смесь горит, если температура в установившемся режиме много больше начальной температуры, 2) сгорание не происходит, если установившаяся температура близка к начальной (300 - 310 K)

Результаты

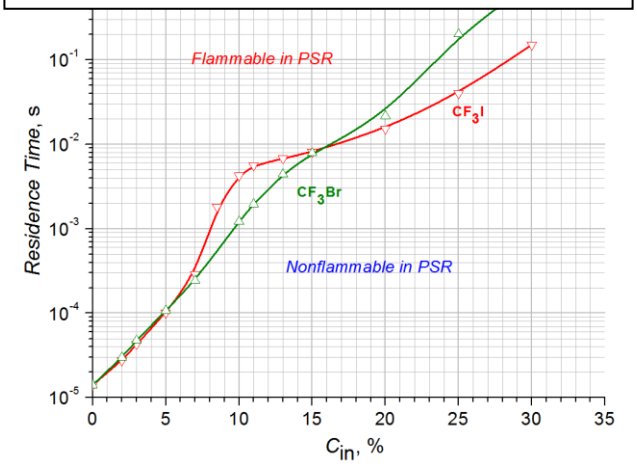
Скрининг различных галоген-содержащих ингибиторов проводили с использованием разработанной модели пределов горения. На рисунках показаны типичные диаграммы «горение / нет горения» в адиабатических WSR и неадиабатических моделях реактора WSR.

В случае адиабатического реактора присутствует только более низкий предел горения, когда время химической реакции становится сравнимым с временем пребывания. В случае неадиабатического реактора присутствуют оба предела, когда время химической реакции становится сравнимым либо с временем пребывания (нижний предел), либо с временем потери тепла (верхний предел). Также существует предельная концентрация ингибитора, когда горение в системе невозможно для любого времени пребывания реакционной смеси.

Типичная схема стабильных пределов горения в не адиабатическом реакторе WSR



Типичная схема стабильных пределов горения в адиабатическом реакторе WSR



На основе таких диаграмм все потенциальные ингибиторы могут быть ранжированы на основе предельной концентрации, которая полностью предотвращает горение. В представленном случае ранжированный набор ингибиторов: CF_3Br > CF_3I > HBr (от наиболее эффективного до наименее эффективного).

Следующие шаги

- Добавить воду как возможный ингибитор (снижает температуру из-за высокой теплоемкости и возможной диссоциации)
- Добавить комбинацию физических и химических ингибиторов

Литература

[1] Ronney, P. D., “Premixed-Gas Flames,” in: Microgravity Combustion: Fires in Free Fall (H. Ross, Ed.), Academic Press, London, U.K., 2001, pp. 35-82.
[2] T. Noto, V. Babushok, A. Hamins, W Tsang, 1998, Combust. Flame, vol. 112, pp. 147 – 160.
[3]V. Babushok, T. Noto, D.R.F. Burgess, A. Hamins, W. Tsang, 1996, Combust. Flame, vol. 107, pp. 351 – 367.