

УДК 62-61: 536.46:519.8

РАЗРАБОТКА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ МНОГОФРАКЦИОННЫХ ТОПЛИВ В ПОТОКАХ ОКИСЛИТЕЛЯ

В. Ф. Никитин¹, В. В. Тюренкова², М. Н. Смирнова²

¹Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт
системных исследований Российской академии наук

²Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
vfnikster@gmail.com, tyurenkova.v.v@yandex.ru, wonrims@inbox.ru

В статье описана разработка физической и математической моделей, позволяющих учесть эффект влияния многофазности горючего (жидкий углеводород + твердый горючий материал) на условия зажигания и режимы распространения горения полидисперсных неоднородных смесей. При этом горение фракций происходит в различных режимах: летучая фракция испаряется и горит в газофазном режиме, а твердая горючая фракция реагирует с окислителем в гетерогенном режиме. Изучено влияние наличия твердой фракции в каплях, реагирующей в гетерогенном режиме, на скорость испарения летучего горючего компонента. Проведен учет влияния стесненности за счет наличия других капель на скорость испарения каждой капли. Приводятся результаты вычислительного моделирования распространения пламени при зажигании полидисперсной смеси капель жидкого углеводородного горючего с твердыми мелкодисперсными частицами углерода.

Ключевые слова: вычислительное моделирование, горение, полидисперсность, капли, частицы твердого горючего, испарение, газофазные реакции, гетерогенные реакции, многофракционность.

DEVELOPMENT OF COMPUTER SYSTEMS FOR PREDICTIVE MODELING OF COMBUSTION PROCESSES OF MULTIFRACTIONAL FUELS IN OXIDANT FLOWS

V. F. Nikitin¹, V. V. Tyurenkova², M. N. Smirnova²

¹System Research Institute, Russian Academy of Sciences

²Lomonosov Moscow State University
vfnikster@gmail.com, tyurenkova.v.v@yandex.ru, wonrims@inbox.ru

The article describes the development of physical and mathematical models allowing considering the effect of multiphase fuel (liquid hydrocarbon + solid combustible material) on the conditions of ignition and modes of combustion propagation in polydisperse nonhomogeneous mixtures. In this case, the combustion of different droplet fractions occurs in different modes: the volatile fraction evaporates and burns in the gas-phase mode, and the solid fuel fraction is reactive with the oxidizer in the heterogeneous mode. The effect of the presence of a solid fraction in droplets reacting in a heterogeneous mode on the evaporation rate of the volatile fuel component is studied. The effect of tightness on the evaporation rate of each drop due to the presence of other drops is taken into account. The results of computational modeling of flame propagation during ignition of the polydisperse mixture of liquid hydrocarbon fuel droplets with solid fine carbon particles are presented.

Keywords: computational modeling, combustion, polydispersity, droplets, particles of solid fuel, vaporization, gas phase reactions, heterogeneous reactions, multifractionality.

Введение. В настоящее время с целью повышения энергонасыщенности сгорания жидких углеводородных горючих в них добавляют порошки металлов или других твердых реагентов, например, углерод или угольную пыль. Совместное диспергирование приводит к образованию агломератов, особенности горения которых мало изучены. При этом газовая

динамика турбулентного течения в камере оказывает существенное влияние на процессы горения и зажигания. Поэтому постановка комплексной задачи математического моделирования горения полидисперсных многофракционных смесей сложного состава является актуальной. Современные существующие и перспективные камеры сгорания используют полидисперсные смеси горючего и окислителя в качестве рабочей смеси.

Поэтому явление распространения пламени в реагирующих средах давно стало предметом научных исследований. Интерес к его изучению возник в связи с разработками камер сгорания различных двигателей. В последние годы интенсивно изучаются вопросы теории применительно к гетерогенным средам и, в частности, газовзвесьям капель жидкого топлива. Актуальность исследований в этой области обусловлена развитием новых технологий в двигателестроении. Одним из важных направлений является создание малогабаритных высокоэффективных камер сгорания с раздельной подачей реагентов, находящихся в различном агрегатном состоянии. Также для повышения энергетики горения в жидкое горючее добавляют мелкодисперсные твердые горючие материалы: угольную пыль, углерод, магний, алюминий, бор и др. Актуальность и новизна исследований зажигания и горения гетерогенных систем такого типа обусловлена особенностями физико-химических процессов диспергирования и горения. При диспергировании, в силу капиллярных эффектов, образуются двухфазные капли, содержащие твердые частицы, скрепленные жидкой горючей фазой. Особенность горения такой системы в том, что жидкость горит в газофазном режиме после испарения, а частицы горят в режиме поверхностной гетерогенной реакции.

Распространение пламени в реагирующих средах давно стало предметом научных исследований [1–4]. Интерес к его изучению возник в связи с разработками камер сгорания различных двигателей. Большое количество публикаций посвящено исследованию закономерностей распространения волн химического превращения в гомогенных и гетерогенных средах. Наиболее полно построена теория ламинарного пламени, распространяющегося в горючей газовой смеси.

И хотя фундамент этой теории был заложен в 30–50-е годы XX века [5–7], развитие и углубление различных ее аспектов продолжается и в настоящее время. В последние годы интенсивно изучаются вопросы теории применительно к гетерогенным средам [8–11] и, в частности, газовзвесьям капель жидкого топлива [12–14]. К описанию двухфазных течений, и в том числе течений газа с каплями, существуют различные подходы [14], которые можно разделить на категории, руководствуясь определенными критериями. Если исходить из способа описания дисперсной фазы, то следует заметить, что в одних моделях капли рассматриваются как Лагранжевы частицы в поле непрерывной газовой фазы, а в альтернативном варианте обе фазы представляются в виде непрерывных континуумов, «проникающих» друг в друга точно так же, как если бы это были компоненты газовой смеси. Существуют и другие принципы, позволяющие разбить модели на определенные классы. Важным примером может служить разделение моделей по способу описания межфазных взаимодействий: скорости передачи импульса, массы, энергии. При этом выбор того или иного описания во многом зависит от уровня и типа решаемых задач. В работе [8] в стационарной постановке рассматривалась задача о распространении плоского фронта пламени в газокapельной среде, в отличие от [9], где феноменологически была введена F-фаза – фаза микропламени, имеющая свой объем и температуру. Введение дополнительной фазы авторы мотивировали тем, что на определенном этапе процесса горения капли вокруг нее образуется узкий шаровой слой, к которому с разных сторон диффундируют реагенты и в котором происходит основная доля химического превращения. Нормальная скорость горения определялась в результате численного решения задачи. Как и в [9], внимание авторов было сосредоточено на изучении зависимости скорости пламени от начального размера частиц. Было проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными [15] и отмечено, что достигнуто удовлетворительное согласие между теорией и экспериментом. Экспериментальные измерения скорости ламинарного пламени в газовзвесьях капель и ее зависимости от параметров среды представлены в [15–17]. Сложность экспериментов обусловлена тем, что необходимо, во-первых, добиться создания смеси, близкой к монодисперсной, а во-вторых, обеспечить условия, при которых к началу наблюдений капли низкокипящих углеводородных топлив не испарялись

бы. Только при этих условиях возможна обработка экспериментальных данных с применением существующих моделей. Во многих случаях для облегчения создания однородных начальных условий используют микрогравитацию. В работе [16] приводятся результаты экспериментов в условиях сильно пониженной гравитации по измерению скорости ламинарного пламени, распространяющегося в смеси воздуха и капель *n*-декана (температура кипения). В экспериментах варьировался как средний диаметр частиц, так и массовое соотношение топлива с воздухом в исходной смеси. В работе [17] приводятся результаты численного моделирования, объясняющие особенности экспериментальных данных [16].

Математические модели взаимодействия дисперсных струй с пламенем при тушении пожаров представлены в [18]. Модели неравновесного испарения разработаны в [19]. Численное моделирование воспламенения и горения струи жидкого горючего при впрыскивании в камеру сгорания представлено в [20]. Разработаны микромодели горения одиночных капель с учетом неравновесного испарения поверхности и присутствия нескольких независимых реакций в газовой фазе [21–23].

Поэтому целью данной работы будет создание физической и математической моделей, позволяющих учесть эффект влияния многофазности горючего (жидкий углеводород + твердый горючий материал) на условия зажигания и режимы распространения горения полидисперсных неоднородных смесей. Ввиду сложного состава капли будем в дальнейшем именовать частицей, которая содержит жидкую и конденсированную фракции.

Математическая модель взаимодействия частицы с окружающим потоком. Рассмотрим моделирование движения отдельно взятой частицы. Оно сводится прежде всего к алгоритму преобразования вектора характеристик частицы с течением времени. Для целей нашего исследования каждая *i*-я модельная частица будет иметь следующий основной набор характеристик:

S – число реальных частиц, представленных модельной частицей;

m_f – масса жидкого углеводородного компонента капли;

m_s – масса частиц твердого реагента, формирующих скелет в капле;

m_t – масса конденсированного окисла;

r – координаты частицы (радиус-вектор);

u – скорость частицы;

w – стохастическая составляющая скорости окружающего частицу газа;

Φ – объем частицы;

T_s – температура частицы;

Ψ – величина, равная 1, если частица участвует в моделировании процесса, или 0, если она прекратила существовать.

Алгоритм состоит из следующих стадий:

- модель движения (преобразование *r_i*, *u_i* и *w_i*);

- модель массообмена (преобразование *m_i*, *m_{si}*, *Φ_i* и при исчезновении (сгорании) частицы – *Ψ_i*);

- модель энергообмена (в конечном итоге сводящаяся к преобразованию *T_{si}*).

Закон движения и теплообмена частицы. Для каждой *i*-й модельной частицы закон движения выглядит:

$$\begin{aligned} (m_{fi} + m_{si} + m_{ti}) \frac{du_i}{dt} &= (m_{fi} + m_{si} + m_{ti})g - \\ &- \frac{m_{fi} + m_{si} + m_{ti}}{\rho} \Delta p + f_{ri}, \\ \frac{dr_i}{dt} &= u_i \end{aligned} \quad (1)$$

где силы, действующие на частицу, следующие: сила тяжести, сила Архимеда, сила сопротивления и сила, учитывающая влияние стохастических пульсаций газа (она моделируется совместно с силой сопротивления).

Внутренняя тепловая энергия i -й модельной частицы равна:

$$E_{si} = m_{si}(c_s T_{si}) + m_{fi}(c_f T_{si}) + m_{ti}(c_t T_{si}),$$

где c_s, c_f, c_t – удельные теплоемкости соответственно твердого реагента, конденсированной углеводородной компоненты и нелетучего окисного остатка.

Для моделирования баланса внутренней энергии будем использовать следующее уравнение:

$$\frac{dE_{si}}{dt} = q_i + Q_{si} + \dot{e}_{ei} - \dot{m}_{si}(c_s T_{wi}) - \dot{m}_{fi}(c_f T_{wi}) + \dot{m}_{ti}(c_t T_{wi}), \quad (2)$$

где T_{wi} – температура поверхности частицы;

q_i – тепловой поток от газа к частице, моделируемый по формуле, учитывающей поправку на обтекание частицы газом:

$$q_i = \pi d_i \lambda Nu_i (T - T_{si});$$

$$Nu = 2 + 0,16 Re^{2/3} Pr^{1/3},$$

где λ – теплопроводность газа, вычисленная при температуре частицы;

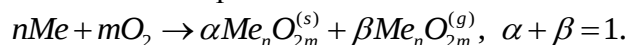
T – температура окружающего частицу газа;

Nu_i – число Нуссельта в окрестности частицы;

d_i – диаметр частицы.

Член Q_{si} определяет выделение тепла благодаря химическим реакциям на поверхности i -й частицы. Член e_{ei} , в правой части уравнения, определяет приток энергии к i -й частице извне, например, от источника зажигания.

Модель массообмена капли. В настоящей работе предполагается, что на поверхности частицы наряду с процессом испарения жидкости могут проходить необратимые гетерогенные химические реакции окисления твердого реагента, в результате которых могут образовываться конденсированные и газообразные окислы:



Для вычисления скорости испарения конденсированной летучей компоненты и скоростей горения твердого реагента вследствие воздействия на скелет кислорода используются формулы, полученные из решения задачи о гетерогенном горении в окрестности сферической частицы.

Система уравнений для случая, когда все химические превращения происходят на поверхности, имеет вид:

$$\frac{d}{dr} r^2 \rho v = 0, \quad (3)$$

$$\frac{d}{dr} (r^2 \rho v Y_i) = \frac{d}{dr} r^2 \rho D \frac{dY_i}{dr}, \quad (4)$$

$$\frac{d}{dr} (r^2 \rho v \hat{c}_p T) = \frac{d}{dr} r^2 \frac{\lambda}{\hat{c}_p} \frac{d\hat{c}_p T}{dr}, \quad (5)$$

где r – радиальная координата;

ρ, v, T – плотность, скорость и температура газа;

$Y = \rho_i / \rho$ – массовая концентрация i -го компонента,

$i = 1 - O_2$; $i = 2 - CO_2$; $i = 3 - CO$; $i = 4 - N_2$; $i = 5 - H_2O$; $i = 6 - H_2$; $i = 7 - Me_n O_{2m}$; $i = N -$

$C_k H_l$ – пары углеводорода; λ, D – коэффициенты теплопроводности и диффузии;

$\hat{c}_p = \sum_{i=1}^N c_{pi} Y_i$ – средняя теплоемкость для смеси.

Суммарный поток массы из частицы складывается из потока массы испарившегося углеводорода и газообразных продуктов реакции твердого реагента с кислородом:

$$\dot{m} = \dot{m}_f + \dot{m}_s - \dot{m}_t. \quad (6)$$

Частица необязательно имеет сферическую форму. Мы ставим граничные условия на сферической поверхности ($r = r_0$), где r_0 – характерный радиус частицы ($d_0 = 2r_0$).

Тогда массовый поток может быть определен по формуле:

$$(\rho v)_w = \frac{\dot{m}}{4\pi r_0^2}. \quad (7)$$

Скорость поверхностного окисления твердого реагента определяется из соотношения:

$$g_{Me} = -k_1(T_w)s_{Me}Y_{1w}, \quad (8)$$

где знак «–» означает, что горючее потребляется в реакции;

s_{Me} – поверхностная концентрация твердого реагента;

$k_1(T_w)$ – кинетическая функция для определения скорости реакции типа Аррениуса:

$$k_1 = A_1 T^{B_1} \exp\left(-\frac{E_1}{R_g T}\right). \quad (9)$$

Скорости поверхностного образования/потребления других реагентов в поверхностной реакции могут быть определены следующим образом:

$$g_{iw} = -\frac{\Phi_i}{\Phi_{Me}} k_1(T_w)s_{Me}Y_{1w}.$$

Граничные условия на поверхности $r = r_0$ имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} (\rho v)_w Y_{iw} - (\rho D)_w \left. \frac{dY_i}{dr} \right|_w &= g_{iw} = \\ &= -\frac{\Phi_i}{\Phi_{Me}} k_1(T_w)s_{Me}Y_{1w}. \end{aligned} \quad (10)$$

$$(\rho v)_w Y_{Nw} - (\rho D)_w \left. \frac{dY_N}{dr} \right|_w = \frac{m_N}{\pi d_0^2} = (\rho v)_w y_N;$$

$$(\rho v)_w Y_{4w} - (\rho D)_w \left. \frac{dY_4}{dr} \right|_w = 0$$

$$\begin{aligned} \lambda_f \left. \frac{dT}{dr} \right|_f + (\rho v)_w y_N h_L &= \lambda \left. \frac{dT}{dr} \right|_w - \\ - g_{Me} Q_{pw}(T_w). \end{aligned} \quad (11)$$

Формулы (10), (11) включают следующие обозначения: $\Phi_i = \frac{W_i(v_i'' - v_i')}{W_1(v_1'' - v_1')}$ – стехиометрическое соотношение для поверхностной реакции; W_i, v_i', v_i'' – молярная масса i -го компонента и его стехиометрические коэффициенты до и после реакции; $Q_{pw} = \Delta C_p T_w + \Delta H_{Me}$ – энергия поверхностной реакции; $\Delta H_{Me} = \frac{\sum_{i=1}^N h_i^0 W_i (v_i' - v_i'')}{W_{Me} (v_{Me}' - v_{Me}'')}$, $\Delta C_p = \frac{\sum_{i=1}^N c_{pi} W_i (v_i' - v_i'')}{W_{Me} (v_{Me}' - v_{Me}'')}$, $y_N = \frac{m_f}{m}$ – доля паров угле-

водородов в суммарном массовом потоке через поверхность; $y_{sg} = \frac{\beta m_s}{m} = \frac{\beta g_{7w}}{m}$ – доля твердого реагента в массовом потоке через поверхность; $y_{st} = -\frac{\alpha m_t}{m} = \frac{\alpha g_{1w}}{m} = \frac{-\alpha \frac{\Phi_1}{\Phi_{Me}} k_1(T_w) s_{Me} Y_{1w}}{m}$ – доля окислителя в потоке массы через поверхность, остающегося в капле в связанном состоянии (величина отрицательная); h_L – удельная теплота испарения углеводородов; индекс w обозначает параметры, относящиеся к поверхности. Отметим, что для введенных долей имеет место соотношение: $y_N + y_{sg} + y_{st} = 1$ (или $|y_N| + |y_{sg}| - |y_{st}| = 1$).

Граничные условия во внешней области ($r \rightarrow \infty$) для гомобарической задачи ($p = const$) следующие:

$$Y_{Ne} = 0, Y_1 = Y_{1e}, Y_2 = Y_{2e}, T = T_e, Y_i = Y_{ie}.$$

Мы предполагаем, что реакции в газе отсутствуют в окрестности частицы и все химические превращения происходят только на поверхности частицы в чисто гетерогенном режиме, то есть пары горючего не могут оказаться снаружи поверхности, не вступив в реакцию с окислителем на поверхности: $Y_{Me} \equiv 0$ для $r \geq r_0$. Введем безразмерную координату:

$$\xi = \dot{m} \int_r^\infty (4\pi r^2 \rho D)^{-1} dr,$$

тогда уравнения для концентраций примут вид:

$$\frac{dY_i}{d\xi} = -\frac{d^2 Y_i}{d\xi^2}, i = 1, 2, \dots, N, 0 \leq \xi \leq \xi_0. \quad (12)$$

Граничные условия на поверхности частицы $\xi = \xi_0$:

$$\begin{aligned} \frac{dY_1}{d\xi} \Big|_{\xi_0} + Y_{1w} &= y_{st}, \quad \frac{dY_i}{d\xi} \Big|_{\xi_0} + Y_{iw} = 0, i \neq 1, 7, N, \\ \frac{dY_7}{d\xi} \Big|_{\xi_0} + Y_{7w} &= y_{sg}, \quad \frac{dY_N}{d\xi} \Big|_{\xi_0} + Y_{Nw} = y_N. \end{aligned} \quad (13)$$

Граничные условия на бесконечности ($r \rightarrow \infty$) $\xi \rightarrow 0$: $Y_i|_{\xi \rightarrow 0} = Y_{ie}$.

Решения системы (12) с граничными условиями (13) с учетом принятых обозначений и предположения $\rho D = const$ позволяют получить следующие соотношения:

$$\left\{ \begin{aligned} \xi_0 &= \frac{m}{4\pi \rho D} \frac{1}{r_0}, \\ Y_{iw} &= -\varphi_i y_i + (Y_{ie} + \varphi_i y_i) e^{-\xi_0}, \\ y_1 &= y_{st}, y_7 = y_{sg}, y_i = 0 \forall i \neq 1, 7, N \\ y_{sg} &= \frac{\beta g_{7w} 4\pi r_0^2}{m}, \\ y_{st} &= \frac{\alpha g_{1w} 4\pi r_0^2}{m} = \frac{-\alpha \frac{\Phi_1}{\Phi_{Me}} k_1(T_w) s_{Me} Y_{1w} 4\pi r_0^2}{m} \\ \lambda_f \frac{dT}{dr} \Big|_f + (\rho v)_w y_N h_L &= \lambda \frac{dT}{dr} \Big|_w - g_{Me} Q_{pw}(T_w) \\ y_{st} + y_{sg} + y_N &= 1. \end{aligned} \right. \quad (14)$$

где $\varphi_i = \frac{\Phi_i}{\Phi_{Me}}$.

Тепловой поток, идущий на прогрев капли, может быть определен из квазистационарного решения задачи теплопроводности при наличии фазового перехода:

$$\lambda_f \left. \frac{dT}{dr} \right|_f = (\rho v)_w f(r_0) c (T_w - T_{si}),$$

$$c = \frac{m_{si} c_s}{m_i} + \frac{m_f c_f}{m_i} + \frac{m_t c_t}{m_i},$$

где $f(r_0)$ – функция, зависящая от радиуса капли.

Полагая температуру поверхности равной температуре равновесного испарения жидкости, получим из системы (14) трансцендентное уравнение для определения неизвестного параметра ξ_0 . При этом параметры $y_1 = y_{st}$ и Y_{1w} могут быть определены с помощью системы (14):

$$\xi_0 = \frac{\lambda}{\rho D c} \frac{Nu_i}{2} \frac{T_e - T_w}{T_w - T_{si} + \frac{h_L}{c}} + \frac{k_1(T_w) s_{Me} r_0}{\rho D} \times$$

$$\times \left(\frac{Q_{pw}}{c(T_w - T_{si}) + h_L} - \alpha \varphi_1 - \beta \varphi_7 \right) Y_{1w}. \quad (15)$$

$$Y_{1w} = \frac{Y_{1e} e^{-\xi_0}}{1 + s_{Me} \alpha \varphi_1^2 Ve \frac{1 - e^{-\xi_0}}{\xi_0}}, \quad Ve = \frac{k_1(T_w) r_0}{\rho D}. \quad (16)$$

Массообмен определяется по формулам (15, 16), что соответствует потоку массы через поверхность частицы в газовую фазу. При этом для расчета изменения объема частицы нас будут интересовать потоки массы углеводорода, твердого реагента, а также аккумулялирование массы связанных в продукты реакции газовых реагентов.

$$\xi_{f0} = \frac{\lambda}{\rho D c} \frac{Nu_i}{2} \frac{T_e - T_w}{T_w - T_{si} + \frac{h_L}{c}} + \frac{k_1(T_w) s_{Me} r_0}{\rho D} \cdot$$

$$\cdot \left(\frac{Q_{pw}}{c(T_w - T_{si}) + h_L} \right) Y_{1w},$$

$$\xi_{s0} = \frac{k_1(T_w) s_{Me} r_0}{\rho D} \beta Y_{1w},$$

$$\xi_{s0} = \frac{k_1(T_w) s_{Me} r_0}{\rho D} (-\alpha \varphi_1) Y_{1w}.$$

Следует отметить, что введенные нами безразмерные параметры имеют важный физический смысл: ξ_0 – это отношение скоростей подвода массы через поверхность капли и средней скорости диффузии; Ve – это отношение скорости гетерогенной реакции на единице поверхности к скорости диффузии газа к единице поверхности. Последний параметр характеризует режим гетерогенной реакции: диффузионный ($Ve \gg 1$) или кинетический ($Ve \ll 1$).

Анализ соотношений (15, 16) показывает, что при относительно малой скорости массоподачи через поверхность $\xi_0 \ll 1$ выполняется условие:

$$Y_{1w} = \frac{Y_{1e}}{1 + s_{Me} \alpha \varphi_1^2 Ve}, \quad (17)$$

а при большой скорости массоподачи $\xi_0 \gg 1$ поверхностная концентрация внешнего реагента (окислителя) стремится к нулю: $Y_{1w} \rightarrow 0$. При этом формула (15) существенно упрощается.

Рассмотрим также зависимость решения от параметра Ve , характеризующего относительную скорость диффузионных и кинетических процессов:

1. Диффузионный режим ($Ve \gg 1$): при большой скорости массоподачи $\xi_0 \ll 1$ процесс не зависит от гетерогенной реакции и лимитируется потоком тепла:

$$\xi_0 = \frac{\lambda}{\rho D c} \frac{Nu_i}{2} \frac{T_e - T_w}{T_w - T_{si} + \frac{h_L}{c}}, \quad (18)$$

а при малой скорости массоподачи $Ve \ll 1$ процесс также не зависит от скорости гетерогенной реакции, но лимитируется не только потоком тепла, но и энергосодержанием при гетерогенной реакции, скорость которой ограничена диффузией реагентов ($\alpha \neq 0$).

$$\begin{aligned} \xi_0 = & \frac{\lambda}{\rho D c} \frac{Nu_i}{2} \frac{T_e - T_w}{T_w - T_{si} + \frac{h_L}{c}} + s_{Me} \times \\ & \times \left(\frac{Q_{pw}}{c(T_w - T_{si}) + h_L} - \alpha \varphi_1 - \beta \varphi_7 \right) \frac{Y_{1e}}{\alpha \varphi_1 s_{Me}}. \end{aligned} \quad (19)$$

2. Смешанный режим ($Ve \sim 1$): при большой скорости массоподачи $\xi_0 \gg 1$ процесс также лимитируется потоком тепла (18), а при малой скорости массоподачи $\xi_0 \ll 1$ она определяется соотношением:

$$\begin{aligned} \xi_0 = & \frac{\lambda}{\rho D c} \frac{Nu_i}{2} \frac{T_e - T_w}{T_w - T_{si} + \frac{h_L}{c}} + s_{Me} Ve \times \\ & \times \left(\frac{Q_{pw}}{c(T_w - T_{si}) + h_L} - \alpha \varphi_1 - \beta \varphi_7 \right) \frac{Y_{1e}}{1 + s_{Me} \alpha \varphi_1^2 Ve}. \end{aligned} \quad (20)$$

В общем случае $\xi_0 \sim 1$ для определения скорости массоподачи используются уравнения (15), (16).

3. Кинетический режим ($Ve \ll 1$): при большой скорости массоподачи $\xi_0 \gg 1$ процесс также лимитируется потоком тепла (18), а при малой скорости массоподачи $\xi_0 \ll 1$ она определяется соотношением:

$$\begin{aligned} \xi_0 = & \frac{\lambda}{\rho D c} \frac{Nu_i}{2} \frac{T_e - T_w}{T_w - T_{si} + \frac{h_L}{c}} + s_{Me} Ve \times \\ & \times \left(\frac{Q_{pw}}{c(T_w - T_{si}) + h_L} - \alpha \varphi_1 - \beta \varphi_7 \right) Y_{1e}. \end{aligned} \quad (21)$$

В случае отсутствия внешнего теплового потока формула (21) превращается в решение задачи массообмена при чисто кинетическом режиме горения:

$$\xi_0 = s_{Me} Ve \left(\frac{Q_{pw}}{c(T_w - T_{si}) + h_L} - \alpha \varphi_1 - \beta \varphi_7 \right) Y_{1e}. \quad (22)$$

Следует отметить, что при отсутствии внутри капли твердых частиц, реагирующих в гетерогенном режиме, скорость испарения капли определялась бы по формуле (18), откуда следует, что присутствие внутри капли твердых горючих материалов, реагирующих в гетерогенном режиме, приводит к повышению скорости массообмена (формулы (15, 19, 20, 21)).

В процессе прогрева капли ее температура повышается $(T_w - T_{si}) \rightarrow 0$ и скорость массообмена также возрастает.

Учет коллективного влияния соседних капель на решение задачи массообмена. Поскольку в окрестности каждой капли присутствуют другие капли, то постановка граничного условия на бесконечном расстоянии не имеет физического смысла и нужно ставить условие на определенном характерном расстоянии.

Решим аналогичную задачу с тем отличием, что граничное условие ставится не на бесконечности, а на некотором характерном $r = R$, где R определяется следующим образом:

$$\omega = \frac{4}{3}\pi r_0^3 = \frac{4}{3}\pi R^3 \eta - \text{объем частицы,}$$

$$\eta_n = \frac{1}{|\Omega_n|} \sum_{i \in \Omega_n} \omega_i N_i - \text{объемное содержание частиц в } n\text{-й ячейке.}$$

Соответствующее данному R значение безразмерной координаты обозначим: $\xi = \xi_*$.

Покажем, каким образом можно получить решение данной задачи, используя решение предыдущей задачи:

$$\frac{dY_i}{d\xi} = -\frac{d^2 Y_i}{d\xi^2}.$$

Граничные условия на поверхности частицы $\xi = \xi_0$ те же, что и в предыдущем случае.

Граничные условия при $\xi = \xi_*$: $Y_i|_{\xi=\xi_*} = Y_{ie}$.

Тогда для элемента O_2 , например, получим формулу:

$$Y_{1w} = -\phi_1 Y_1 + (Y_{1e} + \phi_1 Y_1) e^{\xi_* - \xi_0}$$

(сравним с решением предыдущей задачи: $Y_{1w} = -\phi_1 Y_1 + (Y_{1e} + \phi_1 Y_1) e^{\xi_0}$).

Аналогичные отличия будут в решении для каждого элемента. Введем новую переменную:

$$\xi'_0 = \xi_0 - \xi_* = \frac{m}{4\pi\rho D} \frac{1}{r_0} - \frac{m}{4\pi\rho D} \frac{1}{R},$$

откуда $m = \frac{4\pi\rho D \xi'_0 r_0}{1 - r_0/R} = \frac{4\pi\rho D \xi'_0 r_0}{1 - \eta^{1/3}}.$

Обозначим $D' = \frac{D}{1 - \eta^{1/3}}$. Для новой переменной ξ'_0 и коэффициента D' справедливо

решение предыдущей задачи, отсюда получаем искомое выражение $m = 4\pi\rho D' \xi'_0 r_0$. Таким образом, получено решение задачи с граничным условием на характерном расстоянии – найдены неизвестные.

В дальнейшем в решение вносятся поправки на наличие относительного движения ($D' \rightarrow \frac{D \cdot 0,5Nu}{1 - \eta^{1/3}}$, $Nu = 2 + 0,16Re^{2/3} Pr^{1/3}$).

Решение модельной задачи об испарении капли. Для решения модельной задачи об испарении одиночной капли рассмотрим случай, когда имеет место: $(T_w - T_{si}) \rightarrow 0$, $\alpha = 0$, смешанный режим химической реакции – $Ve \sim 1$, массообмен определяется по формуле (20), что соответствует потоку массы через поверхность частицы в газовую фазу. Для расчета изменения объема частицы получим формулу:

$$\xi_{fs0} = \frac{\lambda}{\rho D c} \frac{Nu_i}{2} \frac{T_e - T_w}{T_w - T_{si} + \frac{h_L}{c}} + s_{Me} Ve \times \\ \times \left(\frac{Q_{pw}}{c(T_w - T_{si}) + h_L} + 1 \right) Y_{1e} =$$

$$= \xi_* \left(1 + s_{Me} Ve \frac{2\rho Dc}{\lambda Nu_i} \left[\frac{Q_{pw}}{c(T_e - T_w)} + \frac{T_w - T_{si} + \frac{h_L}{c}}{T_e - T_w} \right] Y_{1e} \right),$$

где $\xi_* = \frac{\lambda}{\rho Dc} \frac{Nu_i}{2} \frac{T_e - T_w}{T_w - T_{si} + \frac{h_L}{c}}$.

Уравнение для определения изменения среднего радиуса частицы примет вид:

$$\frac{dr_0}{dt} = \frac{\dot{m}}{4\pi r_0^2 \rho_i} = \frac{\rho D \xi_{fs0}}{r_0 \rho_i}. \quad (23)$$

Вводя новые обозначения $z = \frac{r_0}{r_*}$, $\tau = \frac{t}{t_*}$, $t_* = \frac{\rho_i r_*^2}{\rho D \xi_*}$, а также полагая число Льюиса близ-

ким к единице $Le = \frac{\lambda}{\rho Dc} = 1$, а число Рейнольдса малым, преобразуем (23) к следующему виду:

$$z \frac{dz}{d\tau} = 1 + s_{Me} Ve \left(\frac{Q_{pw}}{c(T_e - T_w)} + \frac{h_L}{c(T_e - T_w)} \right) Y_{1e}. \quad (24)$$

$\tau = 0, z = 1$

Отметим, что формула (24) справедлива только при наличии жидкой фракции. После испарения всей жидкой фракции температура поверхности частицы начинает расти вместе со скоростью гетерогенной реакции. Дальнейшее уменьшение радиуса рассчитывается по известным моделям гетерогенного горения [24].

На рис. 1 приведены результаты расчета уменьшения радиуса комбинированной капли со временем в зависимости от начального содержания в ней конденсированного горючего s_{Me}^0 . Для простоты рассмотрен случай, когда и удельный тепловой поток к частице, и удельное выделение энергии при гетерогенной реакции, и удельная теплота испарения жидкости с поверхности одного порядка ($\frac{Q_{pw}}{c(T_e - T_w)} \sim \frac{h_L}{c(T_e - T_w)} \sim 1$). В случае, когда конденсированного горючего в капле нет ($s_{Me} = 0$), решение имеет вид:

$$z = \sqrt{1 - \tau}, \quad 0 \leq \tau \leq 1.$$

При наличии конденсированного горючего испарение жидкости идет быстрее из-за дополнительного выделения энергии. Когда остается только твердый остаток, скорость расходования массы скачком уменьшается, но затем быстро возрастает в связи с повышением температуры конденсированного остатка.

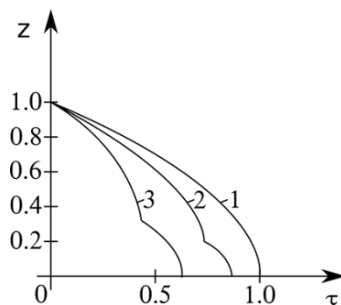


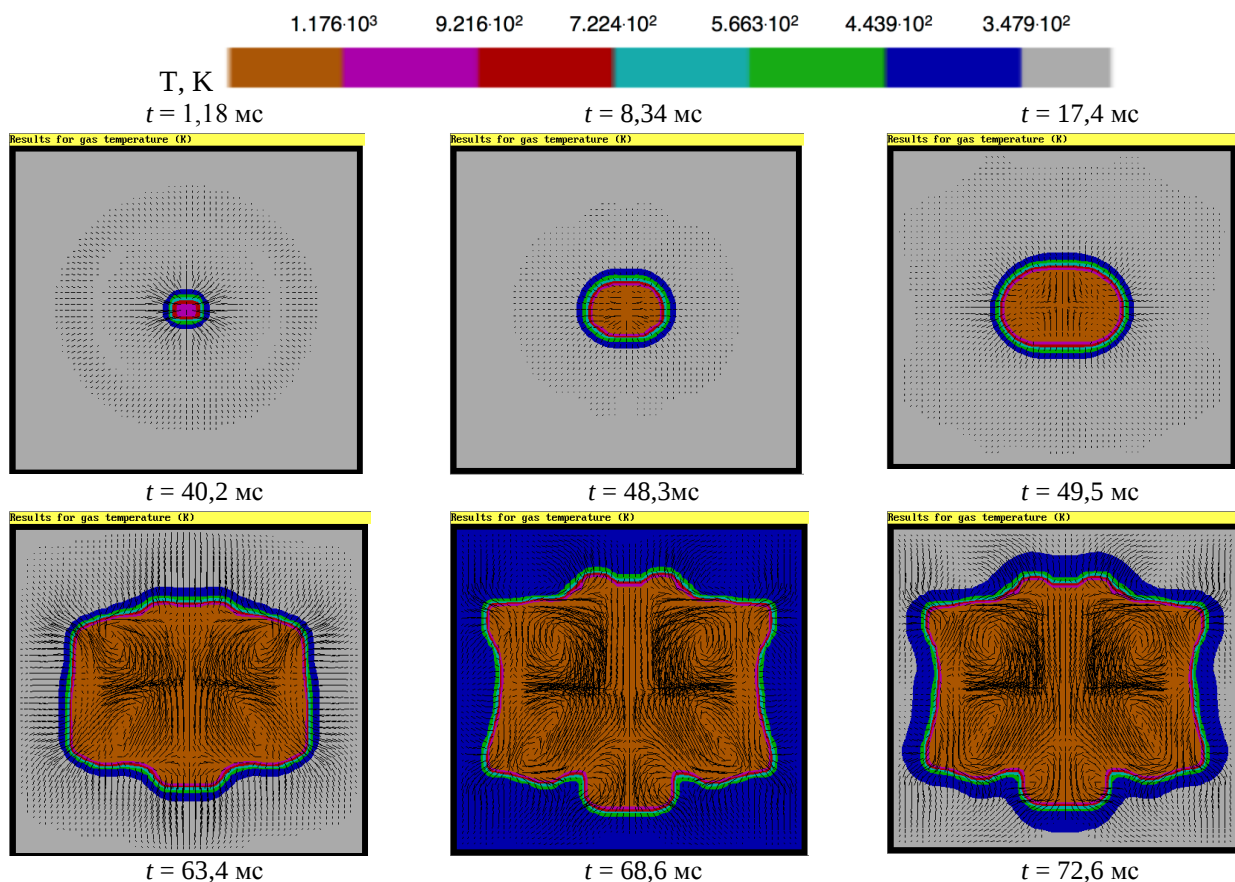
Рис. 1. Изменение радиуса комбинированной капли со временем в зависимости от начального содержания в ней конденсированного горючего:
значения s_{Me}^0 : 1 – $s_{Me}^0 = 0.0$; 2 – $s_{Me}^0 = 0.04$; 3 – $s_{Me}^0 = 0.5$

Горение полидисперсной смеси капель углеводорода с мелкими частицами твердого углерода. В закрытом цилиндрическом объеме размером $1,25 \text{ м}^3$ рассчитывалось зажигание смеси диспергированного углеводородного горючего с мелкодисперсным твердым углеродом. Используется модель зажигания, в которой энергия без участия ударного механизма вводится за время экспозиции в небольшой объем среды [20]. Границы фронта пламени определялись вдоль пяти центральных лучей (по горизонтали, вертикали и под углом 45 градусов к горизонту) как положение максимума скорости реакции окисления летучих компонентов. Также определялись границы зоны пламени там, где скорость реакции составляла $1/10$ от максимума интенсивности.

В соответствии с вычислениями процесс горения можно разделить на следующие стадии: начальная стадия формирования пламени – примерно 10–20 мс сразу после выключения источника; стадия развитого пламени – 20–50 мс; конечная стадия распространения пламени – 50–80 мс; последующее развитие процесса. Длительность каждой стадии существенно зависит от состава и концентрации диспергированного топлива, начальной турбулентности, начальной плотности твердой фазы, концентрации кислорода и т. д.

Ниже приведены иллюстрации эволюции полей температуры в задаче горения диспергированного углеводородно-углеродного горючего в воздухе. На рис. 2 представлена температура газа, на изображение температуры наложено поле скорости в виде отрезков.

На рис. 3–5 изображены следующие интегральные параметры горения в зависимости от времени: масса твердой диспергированной фазы $M_p(t)$, среднее давление в камере $P(t)$ и положение фронта пламени $R_f(t)$. Графики $P(t)$ и $M_p(t)$ сильно коррелируют: давление в камере растет прежде всего с уменьшением массы твердой фазы, которая переходит в газ.



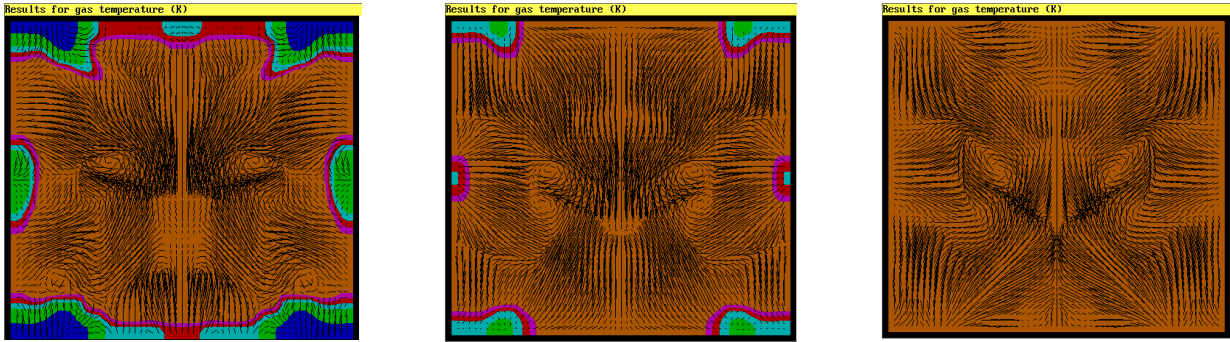


Рис. 2. Эволюции полей температуры в задаче горения диспергированного углеводородно-углеродного горючего в воздухе (время указано в секундах)

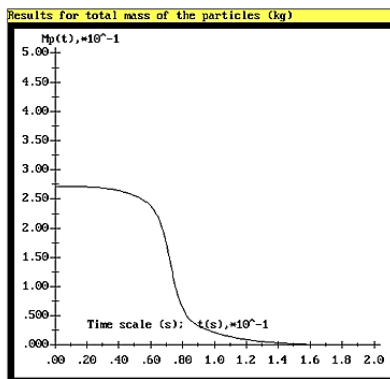


Рис. 3. Зависимость суммарной массы частиц от времени

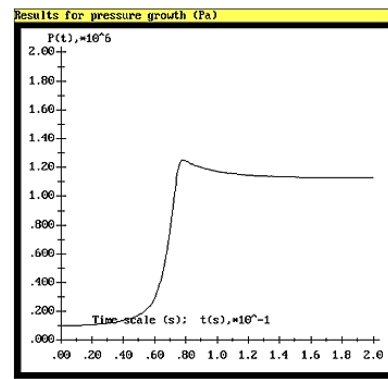


Рис. 4. Зависимость давления от времени

Максимальный подъем давления происходит уже после прохождения фронта пламени, на 70–80 мс. Он связан с тем, что в это время нагретой оказывается практически вся конденсированная фаза и испарение достигает максимума.

После $t = 80$ мс рост давления резко прекращается, а значение массы частиц начинает стремиться к значению, соответствующему массе нелетучей несгораемой компоненты. Это связано с тем, что к этому моменту заканчивается как испарение летучих компонентов, так и окисление углеродного скелета.

Из графиков распределения фронтов пламени (рис. 5) видно следующее: голубая и красная линии (практически совпадающие) соответствуют положению фронта пламени согласно максимуму градиента окислителя и температуры. Разница между этими линиями заметна лишь на этапе зажигания за счет источника энергии. К моменту $t = 65$ мс передний фронт подходит к стенке камеры.

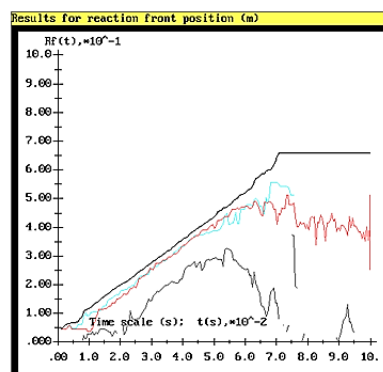


Рис. 5. Траектория фронта пламени

До момента времени $t < 57$ мс ширина фронта остается приблизительно постоянной. После этого происходит подобие его обратного движения к центру камеры, а фактически расширение зоны горения вследствие специфики определения задней границы. Причем после $t = 65$ мс его положение неустойчиво, так как при подходе центральной оси пламени к стенкам камеры ширина пламени быстро увеличивается, общая интенсивность увеличивается также, но пик этой интенсивности снижается. В результате позиция 1/10 от максимума интенсивности сдвигается назад.

Видно также, что вначале пламя распространяется со скоростью 9,6 м/с, затем, по мере подхода к стенкам, его скорость снижается до 5,8 м/с. Средняя скорость распространения пламени при выбранных параметрах равна 7,9 м/с.

Заключение. При создании физической и математической моделей горения агломератов капель проведено исследование эффекта влияния многофазности горючего (жидкий углеводород + твердый горючий материал) на условия зажигания и режимы распространения горения полидисперсных неоднородных смесей.

Введены безразмерные параметры, которые имеют важный физический смысл: ξ_0 – отношение скоростей массоподвода через поверхность капли и средней скорости диффузии от поверхности в газе; Ve – отношение скорости гетерогенной реакции на единице поверхности к скорости диффузии газа к единице поверхности. Последний параметр характеризует режим гетерогенной реакции: диффузионный ($Ve \gg 1$) или кинетический ($Ve \ll 1$).

При наличии конденсированного горючего в составе капли испарение жидкости идет быстрее из-за дополнительного выделения энергии в результате гетерогенной реакции на поверхности. Когда остается только твердый остаток, скорость расходования массы скачком уменьшается, но затем быстро возрастает в связи с повышением температуры конденсированного остатка.

При распространении пламени в полидисперсной смеси толщина фронта достигает десятка сантиметров и вначале, при распространении из центра камеры, где происходит зажигание, держится постоянной. Затем, по мере приближения пламени к стенкам камеры, толщина фронта увеличивается; размер зоны неустойчив и меняется в зависимости от направления; общая интенсивность реакции возрастает, в то время как максимум интенсивности уменьшается.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант РФФИ № 18-07-00248).

Литература

1. Михельсон В. А. О нормальной скорости воспламенения гремучих газовых смесей // Учен. записки Император. Моск. ун-та. отд. физ.-мат. наук 1893. Вып. 10. С. 1–92.
2. Льюис Б., Эльбе Г. Горение, пламя и взрывы в газах. М. : Мир, 1968. 592 с.
3. Зельдович Я. Б. Франк-Каменецкий Д. А. Теория теплового распространения пламени // Журн. физ. химии. 1938. 12. Вып. 1. С. 100–105.
4. Hirschfelder J. D., Curtiss C. F., Campbell D. E. The theory of flame propagation // J. Phys. Chem. 1953. № 57. 4. P. 403–414.
5. Зельдович Я. Б., Франк-Каменецкий Д. А. К теории равномерного распространения пламени // Докл. АН СССР. 1938. Т. 19. С. 693–695.
6. Зельдович Я. Б. Теория горения и детонации газов. Л. : Изд-во АН СССР, 1944. 70 с.
7. Хитрин Л. Н. Физика горения газов. М. : Изд-во МГУ, 1957. 452 с.
8. Вайнштейн П. Б., Нигматулин Р. И. К теории распространения пламени в смеси газа и капель // Приклад. механика и технич. физика 1973. № 4. С. 101–108.
9. Вильямс Ф. А. Теория горения. М. : Наука, 1971. 616 с.

10. Озеров Е. С. Основы теории горения газодисперсных систем. Л. : ЛПИ, 1980. 69 с.
11. Ярин Л. П., Сухов Г. С. Основы теории горения двухфазных сред. Л. : Энергоатомиздат, 1987. 240 с.
12. Law C. K. Recent advances in droplet vaporization and combustion // Prog. Energy Comb. Sci. 1982. № 8. P. 171–202.
13. Sirignano W. A. Fuel droplet vaporization and spray combustion // Prog. Energy Comb. Sci. 1983. № 9. P. 291–322.
14. Faeth G. M. Evaporization and combustion of sprays // Prog. Energy Comb. Sci. 1983. № 9. P. 1–76.
15. Burgoyne J. H., Cohen L. The effect of drop size on flame propagation in liquid aerosol // Proc. Roy. Soc. 1954. A 225. P. 357–392.
16. Kikuchi K., Otomo Y., Sitzki L., Maruta K., Kobayashi H., Nioka T., Sakuraya T. Flame propagation characteristics of n-decane spray in microgravity // Drop tower days 1998 in Hokkaido. International workshop on short-term experiments under strongly reduced gravity conditions. October 11–14, 1998. P. 82–84.
17. Smirnov N. N., Pushkin V. N., Dushin V. R., Kulchitskiy A. V. Microgravity investigation of laminar flame propagation in monodisperse gas-droplet mixtures // Acta Astronautica. 2007. Vol. 61. P. 626–636.
18. Nikitin V. F., Smirnov N. N., Nerchenko V. A., Andreini P., Manzini G. Water droplet non-equilibrium interaction with heated atmosphere // La Termotecnica. 2011. № 1. P. 67–71.
19. Dushin V. R., Kulchitskiy A. V., Nerchenko V. A., Nikitin V. F., Osadchaya E. S., Philippov Yu. G., Smirnov N. N. Mathematical simulation for non-equilibrium droplet evaporation // Acta Astronautica. 2008. Vol. 63. P. 11–12.
20. Betelin V. B., Nikitin V. F., Dushin V. R., Kushnirenko A. G., Nerchenko V. A., Evaporation and ignition of droplets in combustion chambers modeling and simulation // Acta Astronautica. 2012. Vol. 70. P. 23–35.
21. Гендугов В. М., Смирнов Н. Н., Тюренкова В. В. Решение задачи диффузионного горения капли с учетом протекания нескольких независимых реакций // Физика горения и взрыва. 2013. № 6. С. 31–40.
22. Tyurenkova V. V. Non-equilibrium diffusion combustion of a fuel droplet // Acta Astronautica. 2012. № 75. P. 78–84.
23. Tyurenkova V. V., Smirnov N. N., Guendugov V. M. Analytical solution for a single droplet diffusion combustion problem accounting for several chain reaction stages // Acta Astronautica. 2013. № 83. P. 208–215.
24. Смирнов Н. Н., Зверев И. Н. Гетерогенное горение. М. : Изд. Моск. ун-та, 1992. 446 с.