

УДК 536.46:532.517.4

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОРЕНИЯ И САМОВОСПЛАМЕНЕНИЯ ДВУХФАЗНЫХ ХИМИЧЕСКИ РЕАГИРУЮЩИХ ТЕЧЕНИЙ С ВПРЫСКАМИ

А.С. Аскарова, М.Ж. Рыспаева, И.Э. Волошина

Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан
E-mail: aliya.askarova@kaznu.kz

Проведено исследование дисперсии впрыска и влияния впрыскиваемой массы жидкого топлива на самовоспламенение и горение в камере сгорания на основе решения дифференциальных уравнений турбулентного реагирующего течения. Получены распределения капель по размерам, полей средней температуры при горении топлива с различными начальными массами. В работе использована глобальная модель химических реакций, учитывающая образование сажи при горении жидких топлив.

Ключевые слова:

Численное моделирование, химическая кинетика, горение, впрыск, жидкое топливо, камера сгорания, самовоспламенение, сажа, двухфазные течения.

Key words:

Numerical simulation, chemical kinetics, combustion, injection, liquid fuel, combustion chamber, self-ignition, soot, two-phase flows.

Одной из актуальных задач является проблема моделирования горения жидких распыленных топлив в связи с их широким использованием в различных двигателях в качестве автомобильного, авиационного, дизельного и ракетного топлив. При горении жидких топлив может быть выделено несколько его стадий [1, 2]. На первой стадии происходит впрыск топлива в камеру сгорания через форсунку с распылением на мелкие капли. Затем происходит испарение капель и смешение их с окислителем, после чего происходит самовоспламенение и горение топливовоздушной смеси.

Первая часть процесса – распыление топлива во многом определяет эффективность последующего горения. Чем меньше капля, тем быстрее происходит испарение, смешение с окислителем и горение.

В дизельных двигателях жидкость подается через малые отверстия под действием очень высокого давления. За счет этого происходит распыление топлива – жидкость распадается на тонкие пленки и нити, которые затем принимают капельную форму. В ракетных двигателях распыление часто осуществляют столкновением струй. Это дает возможность подать большое количество топлива в камеру [3, 4].

Математическое моделирование горения жидких топлив является сложной задачей, так как требует учета большого количества сложных взаимосвязанных процессов и явлений: многоступенчатые цепные химические реакции, перенос импульса, тепла и массы путем конвекции, молекулярный перенос, излучение, турбулентность, испарение жидких капель и т. д. [5].

В работе проведено исследование дисперсии и горения впрыска жидкого топлива на основе численного решения системы дифференциальных трехмерных уравнений турбулентного реагирующего течения с помощью программы KIVA-II для численного расчета двух- и трехмерных, реагирующих жидких потоков с впрысками. Рассматриваемые уравнения и алгоритм решения являются очень общими и могут быть применены к ламинарным и турбулентным потокам, дозвуковым и сверхзвуковым течениям, а также к однофазным и двухфазными средам. Для того, чтобы смоделировать испаряющиеся жидкие капли, включая эффекты столкновений капель и аэродинамические разрывы, используется стохастический метод. Хотя начальные и граничные условия были написаны для инженерных расчетов двигателя внутреннего

сгорания, данная модель может быть легко изменена для различных других применений [5–9].

Решение задачи об испарении жидких капель и взаимодействия их с газовой фазой – чрезвычайно сложная проблема. Для того чтобы вычислить массу, момент импульса и теплообмен между испаряющейся каплей и газом, нужно принять во внимание распределение капель по размерам, по скоростям и температуре. Во многих течениях при расчете распыленных жидкостей необходимо учитывать колебания капель, искажения и разрывы. Для расчета двигателей внутреннего сгорания также очень важен учет столкновений капель между собой и их объединения в более крупные капли.

Математическая модель, которая способна объяснить эти сложные физические процессы, сводится к формулировке уравнения испарения. Из этого уравнения находится распределение функции плотности вероятности f , имеющей десять независимых переменных дополнительно ко времени: три позиции капли по x , три компоненты скорости v , радиус r , температура T_d (принята одинаковой в пределах капли), отклонение от сферы y и изменение со временем отклонения $dy/dt = \dot{y}$ [5].

Безразмерная величина θ пропорциональна перемещению поверхности капли из своей позиции равновесия на радиус капли r . Физический смысл функции f определяется как $f(x, v, r, T_d, y, \dot{y}, t) dv dr dT_d dy d\dot{y}$ – вероятное число капель в единице объема с координатой x и временем t , скоростями в интервале $(v, v+dv)$, радиусами в интервале $(r, r+dr)$, температурами в интервале (T_d, T_d+dT_d) , и параметрами смещения в интервалах $(y, y+dy)$ и $(\dot{y}, \dot{y}+d\dot{y})$. Два момента функции f имеют важное физическое значение. Элемент жидкого объема θ определяется как:

$$\theta = \int f 4/3\pi r^3 dv dr dT_d dy d\dot{y}.$$

Макроскопическая плотность жидкой фазы ρ'_l определена как:

$$\rho'_l = \rho_d \theta,$$

где ρ_d – микроскопическая плотность жидкой фазы, которая может быть сравнима с газовой плотностью, потому что отношение ρ_d к ρ велико. Величина ρ_d принята постоянной.

Изменение со временем функции f может быть получено путем решения уравнения испарения жидкой капли:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla_x(fv) + \nabla_v(fF) + \frac{\partial}{\partial r}(fR) + \frac{\partial}{\partial T_d}(f\dot{T}_d) + \frac{\partial}{\partial y}(f\dot{y}) + \frac{\partial}{\partial \dot{y}}(f\ddot{y}) = \dot{f}_{coll} + \dot{f}_{bu}. \quad (1)$$

В уравнении (1) величины F , R , \dot{T}_d и \ddot{y} изменяются со временем, исходя из особенностей капли, ее скорости, радиуса, температуры, и скорости колебаний \dot{y} . Величины \dot{f}_{coll} , \dot{f}_{bu} – источники, обусловленные столкновением и разрывом капель. Источник столкновения \dot{f}_{coll} определен как:

$$\begin{aligned} \dot{f}_{coll} = & \frac{1}{2} \iint f(x, v_1, r_1, T_{d1}, y_1, \dot{y}_1, t) \times \\ & \times f(x, v_2, r_2, T_{d2}, y_2, \dot{y}_2, t) \pi(r_1 + r_2)^2 |v_1 - v_2| \times \\ & \times (\sigma(v, r, T_d, y, \dot{y}, v_1, r_1, T_{d1}, y_1, \dot{y}_1, v_2, r_2, T_{d2}, y_2, \dot{y}_2) - \\ & - \delta(v - v_1) \delta(r - r_1) \delta(T_d - T_{d1}) \delta(y - y_1) \delta(\dot{y} - \dot{y}_1)) - \\ & - \delta(v - v_2) \delta(r - r_2) \delta(T_d - T_{d2}) \delta(y - y_2) \delta(\dot{y} - \dot{y}_2) \times \\ & \times dv_1 dr_1 dT_{d1} dy_1 d\dot{y}_1 dv_2 dr_2 dT_{d2} dy_2 d\dot{y}_2. \end{aligned}$$

Здесь δ – дельта-функция Дирака.

Функция плотности вероятности столкновения σ определена как $\sigma dv dr dT_d dy d\dot{y}$ – вероятное число капель со свойствами в заданных интервалах, которые следуют из столкновения между каплями 1 и каплями 2. Возможны два типа столкновений:

- если под воздействием столкновения параметр b уменьшается по сравнению с критической оценкой b_{cr} , то капли сливаются;
- если b превышает b_{cr} , то капли сохраняют свой размер и температуру, но их скорости подвергаются изменению.

Критический параметр воздействия b_{cr} определен как:

$$b_{cr}^2 = (r_1 + r_2)^2 \min(1.0, 2.4 f(y) / We),$$

$$f(y) = y^3 - 2.4 y^2 + 2.7 y,$$

$$y = r_2 / r_1,$$

$$We = \rho_d |v_1 - v_2| r_1 / a(\bar{T}_d),$$

где $r_1 \leq r_2$; $\bar{T}_d = \frac{r_1^3 T_{d1} + r_2^3 T_{d2}}{r_1^3 + r_2^3}$.

Величина We – число Вебера, a – коэффициент поверхностного натяжения, который изменяется в пределах от значения a_0 при начальной температуре T_0 и до нуля при критической температуре T_{cr} . Выражение для σ имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \sigma = & \frac{b_{cr}^2}{(r_1 + r_2)^2} \delta \left[r - (r_1^3 + r_2^3)^{\frac{1}{3}} \right] \delta \left[v - \frac{r_1^3 v_1 + r_2^3 v_2}{r_1^3 + r_2^3} \right] \times \\ & \times \delta \left[T_d - \frac{r_1^3 T_{d1} + r_2^3 T_{d2}}{r_1^3 + r_2^3} \right] \delta(y - y_2) \delta(\dot{y} - \dot{y}_2) + \\ & + \frac{2}{(r_1 + r_2)^2} \times \\ & \times \int_{b_{cr}}^{r_1+r_2} \left[\delta(r - r_1) \delta(v - v'_1) \delta(T_d - T_{d1}) \delta(y - y_1) \delta(\dot{y} - \dot{y}_1) \right. \\ & \left. + \delta(r - r_2) \delta(v - v'_2) \delta(T_d - T_{d2}) \delta(y - y_2) \delta(\dot{y} - \dot{y}_2) \right] b db, \end{aligned}$$

где

$$v'_1 = \frac{r_1^3 v_1 + r_2^3 v_2 + r_2^3 (v_1 + v_2)}{r_1^3 + r_2^3} \frac{b - b_{cr}}{r_1 + r_2 - b_{cr}},$$

$$v'_2 = \frac{r_1^3 v_1 + r_2^3 v_2 + r_2^3 (v_2 + v_1)}{r_1^3 + r_2^3} \frac{b - b_{cr}}{r_1 + r_2 - b_{cr}}.$$

Источниковый член, обусловленный разрывом капель, \dot{f}_{bu} , определяется как:

$$\dot{f}_{bu} = \int f(x, v_1, r_1, T_{d1}, 1, \dot{y}_1, t) \times \dot{y}_1 B(v, r, T_d, y, \dot{y}, v_1, r_1, T_{d1}, \dot{y}_1, x, t) dv_1 dr_1 dT_{d1} d\dot{y}_1. \quad (2)$$

Функция плотности вероятности разрыва B , определенная как $BdvdrdT_d dydy$ – это вероятное число капель со свойствами в заданных интервалах. Смысл формулы (2) следующий: когда искажение капли y превышает значение координаты их объединенного состояния, то капли распадаются на более мелкие и их распределение задается B .

Радиусы капель задаются квадратичным распределением:

$$g(r) = \frac{1}{\bar{r}} e^{-r/\bar{r}}.$$

Саутеровский средний радиус r_{32} дается формулой:

$$r_{32} = 3\bar{r} = \frac{r_1}{\frac{7}{3} + \frac{1}{8} \frac{\rho_d r_1^3}{a(T_{d1})} \dot{y}_1^2}.$$

Скорости капель также отличаются от родительской капли скоростью w и направлением, распределенным случайным образом, в нормальной проекции для вектора релятивистской скорости между родительской каплей и газом. Величина w задается формулой:

$$w = 1/2 r_1 \dot{y}_1.$$

Выражение для B имеет вид:

$$B = g(r) \delta(T_d - T_{d1}) \delta(y) \delta(\dot{y}) \frac{1}{2\pi} \int \delta[v - (v_1 + \omega \vec{n})] d\vec{n},$$

где интеграл указывает направление к нормали вектора скорости. Далее определяются функции F , R , T_d , \dot{y}_1 , которые характеризуют траектории индивидуальных капель. Ускорение капли F за счет аэродинамического сопротивления и гравитационной силы имеет следующий вид:

$$F = \frac{3}{8} \frac{\rho}{\rho_d} \frac{|u + u' - v|}{r} (u + u' - v) C_D + g.$$

Коэффициент сопротивления C_D определен как:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}_d} (1 + 1/6 \text{Re}_d^{2/3}); & \text{Re}_d < 1000 \\ 0,424, & \text{Re}_d > 1000 \end{cases},$$

где число Рейнольдса

$$\text{Re}_d = \frac{2\rho |u + u' - v| r}{\mu_{air}(\hat{T})}, \quad \hat{T} = \frac{T + 2T_d}{3}.$$

Турбулентная скорость газа u' добавлена к средней скорости газа при вычислении сопротивления капель и степени испарения. Предполагается, что каждый компонент u' взят из гауссовского распределения со средним квадратным отклонением $2/3k$. Таким образом, принимается:

$$G(\vec{u}') = (4/3\pi k)^{-3/2} \exp\{-3|\vec{u}'|^2/4k\}.$$

Степень изменения радиуса капли R :

$$R = -\frac{(\rho D)_{air}(\hat{T})}{2\rho_d r} \frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*} \text{Sh}_d,$$

где Sh_d – число Шервуда для переноса массы, Y_1^* – массовая доля паров топлива на поверхности капли, $Y_1 = \rho_1/\rho$, $(\rho D)_{air}(\hat{T})$ – коэффициент диффузии паров топлива в воздухе.

Поверхностная массовая доля Y_1^* получена из выражения:

$$Y_1^*(T_d) = \frac{W_1}{W_1 + W_0 \left(\frac{p}{p_0(T_d)} - 1 \right)},$$

где W_0 – локальная средняя молярная масса для всех разновидностей паров топлива, а $p_0(T_d)$ – равновесное давление паров топлива при температуре T_d . Температура капли является однородной, а парциальное давление паров топлива на поверхности капельки равняется равновесному давлению пара. Для диффузии пара в воздухе используется эмпирическое соотношение $(\rho D)_{air}(T) = D_1 T^{D_2}$ где D_1 и D_2 – константы.

Изменение температуры капли обусловлено уравнением баланса энергии:

$$\rho_d \frac{4}{3} \pi r^3 c_l \dot{T}_d - \rho_d 4\pi r^2 RL(T_d) = 4\pi r^2 Q_d, \quad (3)$$

где c_l – удельная теплоемкость жидкости, $L(T_d)$ – удельная теплота парообразования, и Q_d – теплопроводность на поверхности капли в единичном объеме. Уравнение (3) означает, что энергия, подводимая к капле, нагревает ее, вследствие чего происходит испарение. Теплопроводность Q_d дается соотношением:

$$Q_d = \frac{K_{air}(\hat{T})(T - T_d)}{2r} \text{Nu}_d,$$

где

$$\text{Nu}_d = (2,0 + 0,6 \text{Re}_d^{1/2} \text{Pr}_d^{1/2}) \frac{\ln(1 + B_d)}{B_d};$$

$$\text{Pr}_d = \frac{\mu_{air}(\hat{T}) c_p(\hat{T})}{K_{air}(\hat{T})}; \quad K_{air}(\hat{T}) = \frac{K_1 \hat{T}^{3/2}}{\hat{T} + K_2};$$

c_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении и при температуре $\hat{T} = (T + 2T_d)/3$, K_1 и K_2 – константы.

Уравнение для ускорения и для параметров изменения капли имеет следующий вид:

$$\ddot{y} = \frac{2}{3} \frac{\rho}{\rho_d} \frac{(u + u' - v)^2}{r^2} - \frac{8a(T_d)}{\rho_d r^3} y - \frac{5\mu(T_d)}{\rho_d r^2} \dot{y}, \quad (4)$$

где $\mu(T_d)$ – вязкость жидкости. Уравнение (4) – это уравнение затухающих гармонических колебаний. Внешняя сила обеспечивается газовыми аэродина-

мическими силами капли. Возвратная сила обеспечивается поверхностными силами напряженности. Затухание происходит за счет вязкости жидкости.

Для замыкания системы уравнений необходимо дать определение функциям взаимодействия \dot{p}^s , F^s , \dot{Q}^s , \dot{W}^s :

$$\dot{p}^s = -\int fp_d 4\pi r^2 R dv dr dT_d dy dy,$$

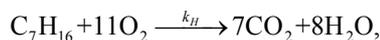
$$F^s = -\int fp_d (4/3\pi r^3 \bar{F}' + 4\pi r^2 Rv) dv dr dT_d dy dy,$$

$$\dot{Q}^s = -\int fp_d \left\{ 4\pi r^2 R [I_1(T_d) + 1/2(\bar{v} - \bar{u})] + \right. \\ \left. + 4/3\pi r^3 [c_p \dot{T}'_d + \bar{F}'(\bar{v} - \bar{u} - \bar{u}')] \right\} \times \\ \times d\bar{v} dr dT_d dy dy,$$

$$\dot{W}^s = -\int fp_d 4/3\pi r^3 \bar{F}' \cdot \bar{u}' d\bar{v} dr dT_d dy dy,$$

где $F^s = F - g$.

В работе вид кинетики задается с помощью глобальной модели химических реакций. Реакция горения гептана с образованием воды и углекислого газа выглядит так [10]:



где $k_H = 5 \cdot 10^{12} \exp(-15780/T)$.

Результаты численного эксперимента по горению жидкого топлива

Были проведены вычислительные эксперименты по горению жидкого распыленного топлива (гептана C_7H_{16}), а также исследовано влияние массы впрыскиваемого топлива (6, 12 и 18 мг) на его самовоспламенение и горение.

Жидкое топливо при температуре 300 К впрыскивается в камеру сгорания через круглое сопло, расположенное в центре нижней части камеры. Камера сгорания представляет собой цилиндр (рис. 1) высотой 8 см и радиусом 2 см, заполненный воздухом при температуре 800 К и при давлении 32 Бар.

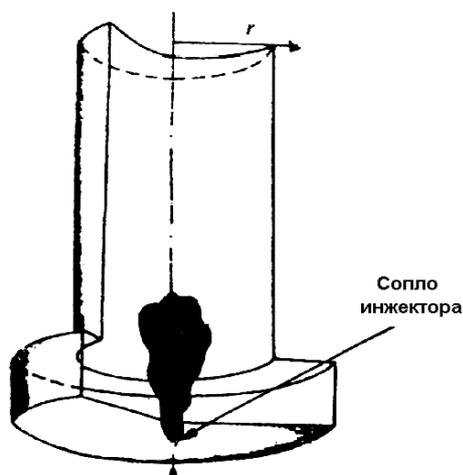


Рис. 1. Геометрия камеры сгорания

После впрыска происходит быстрое испарение топлива, пары топлива смешиваются с окислите-

лем, и сгорание осуществляется в газовой фазе. Процесс горения жидкого топлива является быстро протекающим, и его длительность составляет в среднем 4 мс.

На рис. 2 представлено распределение капель по объему камеры сгорания при впрыскивании в нее жидкого топлива. Анализ данного распределения показывает, что чем больше масса впрыскиваемого топлива, тем на большую высоту поднимаются его капли и распыляются на больший объем камеры. В первом случае высота впрыска равняется 2 см, во втором – 4 см, а в третьем достигает 5 см, почти заполняя все пространство камеры сгорания.

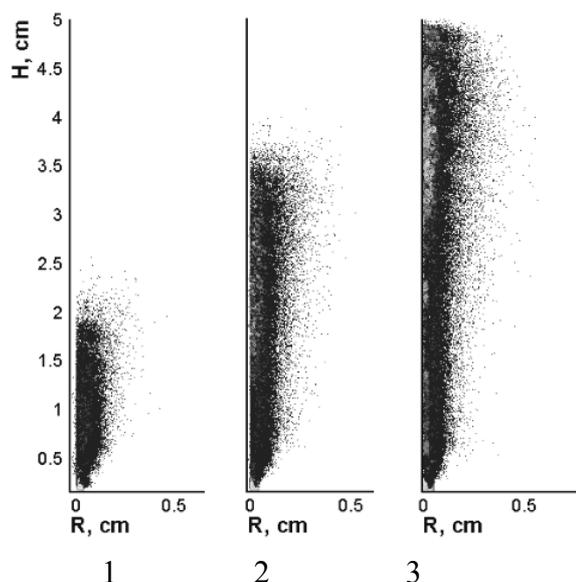


Рис. 2. Распределение капель в пространстве камеры сгорания. Масса: 1) 6; 2) 12; 3) 18 мг

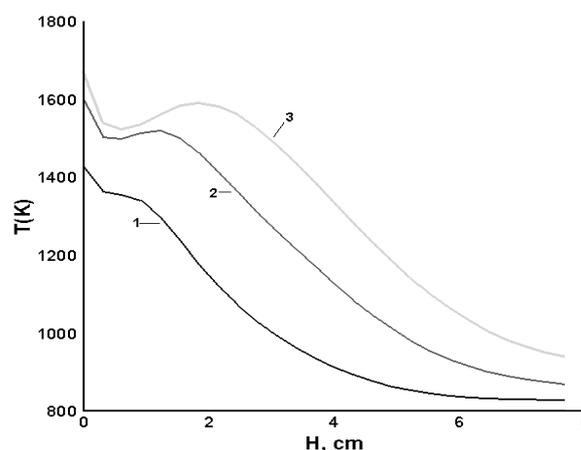


Рис. 3. Распределение средней температуры по высоте камеры сгорания при впрыскивании жидкого топлива (гептан. Масса: 1) 6; 2) 12; 3) 18 мг

В процессе горения топлива происходит увеличение температуры в камере сгорания, причем ее распределение не является однородным, что видно на рис. 3. Наиболее высокая температура наблюдается в области 2...3 см по высоте камеры сгорания и находится в диапазоне от 1400 до 1600 К.

При сравнении средних температур мы видим, что увеличение массы впрыскиваемого топлива приводит к увеличению температуры (рис. 3). Для всех трех случаев наблюдается плавное понижение температуры вдоль высоты камеры сгорания.

На рис. 4 приведены поля температур для трех различных впрыскиваемых масс в моменты самовоспламенения топлива. В первом случае время задержки воспламенения равно 0,935 мс, во втором – 0,953 мс, в третьем – 0,992 мс. Видно, что в третьем случае самовоспламенение происходит позже, чем при меньшей массе топлива. Значения максимальных температур близки по значению: при впрыскивании гептана массой 6 мг – 2600 К, при 12 мг – 2645 К, 18 мг – 2675 К, т. е. наблюдается рост температуры при увеличении массы впрыскиваемого топлива.

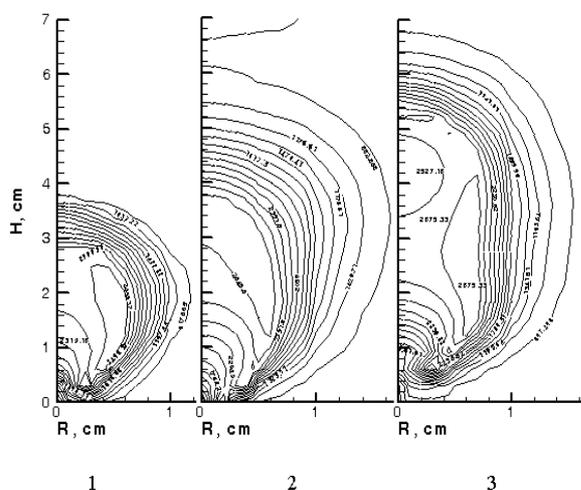


Рис. 4. Поля температуры в момент самовоспламенения впрыска жидкого топлива для масс топлива. Масса: 1) 6; 2) 12; 3) 18 мг

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ярин Л.П., Сухов Г.С. Основы теории горения двухфазных сред. – Л.: Энергоатомиздат, 1987. – 240 с.
2. Зайцев С.А., Кузнецов В.Р., Кунцев Г.М. Влияние прогрева и испарения жидкого топлива на горение в модельной камере сгорания // Физика горения и взрыва. – 1991. – Т. 27. – № 6. – С. 45–52.
3. Основы практической теории горения / Под ред. В.В. Померанцева. – Л.: Энергия, 1973. – 264 с.
4. Сполдинг Д.Б. Горение и массообмен. Пер. с англ. Р.Н. Гизатуллина и В.И. Ягодкина / Под ред. В.Е. Дорошенко. – М.: Машиностроение, 1985. – 240 с.
5. Amsden A.A., O'Rourke P.J., Butler T.D. KIVA-II: A computer program for chemically reactive flows with sprays. – Los Alamos, 1989. – 160 p.
6. Аскарова А.С., Рыспаева М.Ж. Расчет горения впрыска жидкого топлива в замкнутой камере // Вестник КазНУ. Сер. Физическая. – 2006. – № 1. – С. 74–78.
7. Аскарова А.С., Гороховски М.А., Локтионова И.В., Рыспаева М.Ж. Горение жидких топлив в камере сгорания // Известия НАН РК. Сер. Физ.-мат. – 2006. – № 3. – С. 10–14.
8. Рыспаева М.Ж. Моделирование горения жидких впрысков в камерах сгорания и образования CO_2 // Физика окружающей среды: Матер. V Междунар. школы молодых ученых и специалистов. – Томск, 2006. – С. 120–124.
9. Аскарова А.С., Волошина И.Э., Рыспаева М.Ж. Численное исследование влияния массы на процесс горения впрыска жидкого топлива // Проблемы промышленной теплотехники: Тез. докл. V Междунар. конф. – 22–26 мая 2007. – Киев, 2007. – С. 26–27.
10. Gorokhovski M., Borghi R. Numerical simulation of soot formation and oxidation in diesel engines // Journal of Diesels, Transactions of SAE. – 1993. – 930075.

Поступила 10.06.2009 г.

Можно отметить, что используемая математическая модель для вычислительных экспериментов адекватно отражает реальные процессы сжигания жидких топлив.

Полученные результаты позволяют выбрать оптимальный вариант организации процесса горения жидкого топлива с целью повышения эффективности камеры сгорания и уменьшения отрицательно-го воздействия на окружающую среду.

Полученные в данной работе результаты исследования имеют большое значение для развития таких областей науки как физика горения, численные методы в теплофизике и теплоэнергетика; они могут быть использованы при разработке и проектировании двигателей внутреннего сгорания.

Выводы

Исследованы дисперсия впрыска и влияние впрыскиваемой массы жидкого топлива на самовоспламенение и горение в камере сгорания. Получены распределения капель по размерам, полей средней температуры при горении топлива с различными начальными массами.

Из анализа экспериментальных данных следует, что:

- увеличение массы впрыскиваемого топлива приводит к возрастанию области больших температур и к повышению общей температуры в камере сгорания;
- впрыскивание большей массы топлива приводит к задержке самовоспламенения, что связано с большим потреблением теплоты на испарение капель топлива.