

КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. АЛЬ-ФАРАБИ  
ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

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

# Физический практикум по физике горения и взрыва

для студентов высших учебных заведений

Алматы  
2009

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 2.....</b>	<b>3</b>
<b>ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПРОДУКТОВ РЕАКЦИИ ПРИ СЖИГАНИИ ВПРЫСКА ЖИДКОГО ТОПЛИВА В КАМЕРЕ СГОРАНИЯ.....</b>	<b>3</b>
1 Краткое теоретическое введение.....	3
2 Основные уравнения.....	4
3 Постановка задачи.....	8
3.1 Описание программы (файла со входными данными «ITARE»).....	8
4 Порядок выполнения работы.....	8
5 Контрольные вопросы.....	9
6 Литература.....	10

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 2

### Численное исследование образования продуктов реакции при сжигании впрыска жидкого топлива в камере сгорания

**Цель работы:** исследование образования продуктов реакции при сжигании впрыска жидкого топлива в камере сгорания при заданных начальных условиях и определение оптимального режима горения с помощью компьютерной программы KIVA-II.

#### 1 Краткое теоретическое введение

В настоящее время более 80% всей производимой в мире энергии вырабатывается за счет сжигания органического топлива. Другие источники энергии: ядерная энергетика, гидроэнергетика, солнечные и ветряные электростанции — в ближайшие десятилетия не смогут конкурировать с традиционными способами. Ограниченность ресурсов ископаемого топлива диктует необходимость поиска более экономичных способов его сжигания, а масштабы промышленного производства таковы, что проблема образования вредных веществ при горении выходит на первый план.

Решение этих вопросов невозможно без детального исследования процесса горения. Численное 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. Поэтому компьютерное моделирование становится все более важным элементом исследования процессов горения и проектирования различных устройств, использующих процесс горения. Можно ожидать, что его роль будет возрастать и в дальнейшем. Вместе с тем говорить о полной замене экспериментальных исследований численными расчетами было бы неправильно — здесь речь идет о подходах к проектированию, которые должны взаимно дополнять друг друга [1].

*Горение* – это самоподдерживающийся и самораспространяющийся физико-химический процесс превращения молекул топлива и окислителя в молекулы продуктов реакции. В зависимости от того, в каком агрегатном состоянии находятся топливо и окислитель, разделяют два вида горения: гомогенное горение – горение газов; гетерогенное – горение жидких и твердых топлив. При гомогенном горении химическая реакция идет в объеме, где есть топливо и окислитель, при таком горении большую роль может играть физический или химический процесс. При гетерогенном горении химическая реакция протекает на поверхности раздела фаз, большую роль здесь играют физические процессы: диффузии и конвекции.

Горение является первым сложным техническим процессом, освоенным человечеством. В истории прогресса техники этот процесс занимал и продолжает занимать очень важное место, являясь основой современной энергетики.

Очевидно, что для того, чтобы существенно улучшить экологические и энергетические показатели любого топочного устройства, любой теплоэнергетической установки и комплекса в целом, увеличить их суммарный КПД, необходимо осуществлять влияние на процессы горения вещества, происходящие в камерах сгорания. А именно, интенсифицировать процессы воспламенения и горения топливно-воздушной смеси. В настоящее время разработаны и применяются различные методы интенсификации горения и подавления образования вредных пылегазовых выбросов при сжигании жидких и твердых топлив.

Жидкое топливо сгорает всегда в паровой фазе. Дело в том, что температура кипения жидких топлив не превышает несколько сот градусов, а температура пламени получается высокой. Жидкое топливо предварительно испаряется, а затем воспламеняется и сгорает в паровой фазе (испарение и горение могут идти параллельно).

В технических устройствах жидкое топливо распыляется форсунками того или иного типа и затем поступает в факел в виде капель. Распыл всегда полидисперсен. Очень мелкие капли успевают полностью испариться при прогреве, и пары образуют с окислителем газовую смесь. Эта смесь воспламеняется. Более крупные капли горят в процессе испарения, они могут окружаться собственными факелами.

В данной работе исследуется образование продуктов реакции при сжигании жидкого топлива в зависимости от значения впрыска. Капли жидкого топлива очень быстро испаряются, пары топлива смешиваются с окислителем (воздухом в камере сгорания), данная смесь воспламеняется и очень быстро сгорает. В данном случае процесс горения является гомогенным.

## 2 Основные уравнения

Математическая модель задачи о дисперсии и горении впрыска жидкого топлива [2-7] включает в себя уравнение неразрывности для компоненты  $m$  (1), уравнение импульса (2), уравнение энергии (3), уравнения  $k$ - $\varepsilon$  модели турбулентности (4-5):

уравнение неразрывности для компоненты  $m$ :

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho_m u) = \vec{\nabla} \left[ \rho D \vec{\nabla} \left( \frac{\rho_m}{\rho} \right) \right] + \dot{\rho}_m^c + \dot{\rho}^s \delta_{m1}, \quad (1)$$

уравнение импульса:

$$\frac{\partial(\rho \bar{u})}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho \bar{u} \bar{u}) = -\frac{1}{a^2} \vec{\nabla} p - A_0 \vec{\nabla} \left( \frac{2}{3} \rho k \right) + \vec{\nabla} \bar{\sigma} + \bar{F}^s + \rho \bar{g}, \quad (2)$$

уравнение энергии:

$$\frac{\partial(\rho I)}{\partial t} + \vec{\nabla}(\rho \bar{u} I) = -p \vec{\nabla} \bar{u} + (1 - A_0) \sigma \vec{\nabla} \bar{u} - \vec{\nabla} \bar{J} + A_0 \rho \varepsilon + \dot{Q}^c + \dot{Q}^s, \quad (3)$$

где  $\bar{J} = -K \nabla T - \rho D \sum_m h_m \nabla \left( \frac{\rho_m}{\rho} \right)$ ,

уравнения  $k$ - $\varepsilon$  модели турбулентности:

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho \bar{u} k) = -\frac{2}{3} \rho k \bar{\nabla} \bar{u} + \bar{\sigma} : \bar{\nabla} \bar{u} + \bar{\nabla} \left[ \left( \frac{\mu}{Pr_k} \right) \bar{\nabla} k \right] - \rho \varepsilon + \dot{W}^s, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho \bar{u} \varepsilon) = -\left( \frac{2}{3} c_{\varepsilon 1} - c_{\varepsilon 3} \right) \rho \varepsilon \bar{\nabla} \bar{u} + \bar{\nabla} \left[ \left( \frac{\mu}{Pr_\varepsilon} \right) \bar{\nabla} \varepsilon \right] + \frac{\varepsilon}{k} [c_{\varepsilon 1} \bar{\sigma} : \bar{\nabla} \bar{u} - c_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + c_s \dot{W}^s] \quad (5)$$

$$\bar{\sigma} : \bar{\nabla} \bar{u} = \sigma_{ij} e_{ij},$$

где  $\sigma_{ij} = 2\mu e_{ij} - \frac{2}{3} \mu e_{kk} \delta_{ij}$ ,  $i, j, k = 1, 2, 3$ ,  $e_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ .

$$\mu = (1.0 - A_0) \rho V_0 + \mu_{air} + A_0 \rho c_\mu k^2 / \varepsilon, \quad \mu_{air} = \frac{A_1 T^{3/2}}{(T + A_2)}.$$

Здесь  $K = \frac{\mu c_p}{Pr}$ ,  $D = \frac{\mu}{\rho Sc}$ .

Уравнение изменения массы частицы имеет вид:

$$\frac{dm_p}{dt} = -2\pi r_p (\rho D)_{air} (\bar{T}) \frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*} Sh_p. \quad (6)$$

Уравнение состояния:

$$P = R_0 T \sum_m \left( \frac{\rho_m}{W_m} \right), \quad I(T) = \sum_m \left( \frac{\rho_m}{\rho} \right) I_m(T), \quad c_p(T) = \sum_m \left( \frac{\rho_m}{\rho} \right) c_{p_m}(T), \quad \sum_m \left( \frac{\rho_m}{\rho} \right) = 1. \quad (7)$$

Уравнение движения частиц вдоль ее траектории имеет вид:

$$\frac{d\bar{u}_p}{dt} = D_p (\bar{u}_g + \bar{u}'_g - \bar{u}_p) + \bar{g}, \quad \frac{d\bar{x}_p}{dt} = \bar{u}_p. \quad (8)$$

где  $D_p = \frac{3}{8} \frac{\rho}{\rho_p} \frac{|\bar{u}_g + \bar{u}'_g - \bar{u}_p|}{r_p} C_D(Re_p)$ .

Коэффициент лобового сопротивления для жидкой капли равен:

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} \left( 1 + \frac{1}{6} Re_p^{2/3} \right), & \bar{i} \delta \bar{e} \quad Re_p \leq 1000 \\ 0,424, & \bar{i} \delta \bar{e} \quad Re_p > 1000 \end{cases}$$

Здесь  $Re_p = \frac{2\rho |\bar{u}_g + \bar{u}'_g - \bar{u}_p| r_p}{\mu_{air}(\bar{T})}$ ,  $\bar{T} = \frac{T + 2T_p}{3}$ ,

$$Pr_p = \frac{\mu_{air}(\bar{T}) c_p(\bar{T})}{K_{air}(\bar{T})}, \quad Nu_p = \left( 2.0 + 0.6 Re_p^{1/2} Pr_p^{1/3} \right) \frac{\ln(1 + B_p)}{B_p},$$

$$K_{air} = \frac{K_1 \bar{T}^{3/2}}{\bar{T} + K_2},$$

$\vec{u}'_g$  - случайный вектор возмущения скорости газа.

Дополнительные члены в уравнениях газовой фазы (1)-(5), появляющиеся за счет межфазного обмена и за счет химической реакции можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}^S &= -\int f \rho_p 4\pi r^2 R d\vec{u}_p dT_p dy dy, \\ \dot{\rho}_m^C &= W_m \sum_r (b_{mr} - a_{mr}) \dot{\omega}_r, \\ \dot{F}^S &= -\int f \rho_p \left( \frac{4}{3} \pi r^3 (\bar{F} - \bar{g}) + 4\pi r^2 R \vec{u}_p \right) d\vec{u}_p dr dT_p dy dy, \\ \dot{Q}^S &= -\int f \rho_p \left\{ 4\pi r^2 R \left[ I(T_p) + \frac{1}{2} (\vec{u}_p - \vec{u})^2 \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{4}{3} \pi r^3 \left[ c(T_p) + (\bar{F} - \bar{g}) (\vec{u}_p - \vec{u} - \vec{u}') \right] \right\} d\vec{u}_p dr dT_p dy dy, \\ \dot{Q}^C &= \sum_r \sum_m (a_{mr} - b_{mr}) (\Delta h_f^0)_m \dot{\omega}_r, \\ \dot{W}^S &= -\int f \rho_p \frac{4}{3} \pi r^3 (\bar{F} - \bar{g}) \vec{u}' d\vec{u}_p dr dT_p dy dy, \end{aligned}$$

Здесь  $\dot{\rho}^S, \dot{F}^S, \dot{Q}^S$  - скорости изменения массы, импульса и энергии всех капель, имеющих радиус - вектор  $\vec{x}$  в момент времени  $t$ .  $\dot{W}^S$  - скорость, при которой турбулентные вихри совершают работу по распространению впрыскиваемых капель.

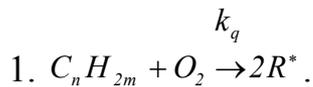
## МОДЕЛЬ ИСПАРЕНИЯ, ГОРЕНИЯ, СТОЛКНОВЕНИЯ КАПЕЛЬ

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.

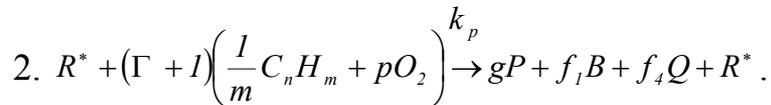
Математическая модель, которая способна объяснить эти сложные физические процессы, сводится к формулировке уравнения испарения. Из этого уравнения находится распределение функции плотности вероятности  $f$ , имеющей десять независимых переменных дополнительно ко времени: три позиции капли по  $x$ , три компоненты скорости  $v$ , радиус  $r$ , температура  $T_d$  (принята одинаковой в пределах капли), отклонение от сферы  $y$  и изменение со временем отклонения  $dy/dt = \dot{y}$  [2].

В работе, кинетика задается с помощью глобальной модели химических реакций [6]. Эта модель состоит из следующих реакций:

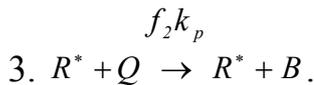
Реакция окисления углеводорода и образование радикалов:



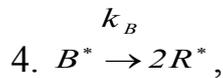
Образование промежуточных продуктов реакции, агентов ветвления и радикалов:



Взаимодействие радикалов с промежуточными продуктами и образование радикалов и агентов ветвления:



Реакция образование радикалов:



где  $R^*$  - все радикалы,  $B$  - агент ветвления,  $Q$  - промежуточный продукт.

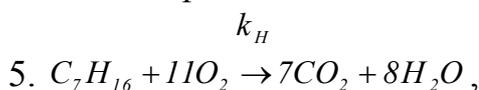
Коэффициенты  $\Gamma, p, g$  можно записать в виде:

$$\Gamma = \frac{f_1 M_B + f_4 M_Q}{\frac{M_{RH}}{m} + p M_{O_2}} , \quad p = \frac{n(2-\lambda) + m}{2m} , \quad g = \frac{n}{m} + I$$

Коэффициент  $\lambda$  определяет отношение смеси продуктов  $CO/CO_2 = \lambda/(1-\lambda)$ ,  $\lambda = 0,67$  [9]. Молекулярные веса глобальных компонентов  $M_B, M_Q$  определяются из уравнений баланса масс.

Данная модель не описывает полностью процесс горения и соответственно должна быть дополнена высокотемпературными реакциями для продуктов реакции.

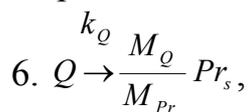
Реакция горения гептана с образованием воды и углекислого газа:



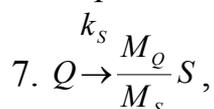
где  $k_H = 5 \cdot 10^{12} \exp(-15780/T)$ .

Промежуточные продукты реакции определяются следующим образом:

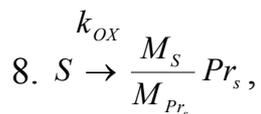
Образование глобальных продуктов окисления сажи:



Реакция образования сажи из промежуточного продукта:



Реакция образования глобальных продуктов окисления сажи:



где  $S$  - обозначает сажу,  $Pr_s$  - глобальные продукты окисления сажи,  $M_s$  - молекулярный вес сажи.

### 3 Постановка задачи

В данной лабораторной работе исследуется образование продуктов реакции при сжигании жидкого топлива в зависимости от значения впрыска. Капли жидкого топлива очень быстро испаряются, пары топлива смешиваются с окислителем (воздухом в камере сгорания), данная смесь воспламеняется и очень быстро сгорает. В данном случае процесс горения является гомогенным.

Жидкое топливо при температуре 300К впрыскивается в камеру сгорания через круглое сопло, расположенное в центре нижней части камеры. Камера сгорания представляет собой цилиндр (рис.1 лабораторная работа №1) высотой  $H$  и радиусом  $R$ , заполненный воздухом при температуре  $T$  и при давлении  $P$ .

После впрыска происходит быстрое испарение топлива, пары топлива смешиваются с окислителем, и сгорание осуществляется в газовой фазе. Процесс горения жидкого топлива является быстро протекающим, и его длительность не превышает в среднем 4 мс.

#### 3.1 Описание программы (файла со входными данными «ITARE»)

Основные входные данные находятся в файле «ITARE», начало которого имеет вид:

```

Modele de combustion Shell modifie Suies.
  irest      0
  ipost      1
  nx         20
  ny         1
  nz         26
  ...

```

Подробное описание входных данных находится в файле «ALPHABETIC», а также в описании компьютерной программы [1].

### 4 Порядок выполнения работы

4.1 Откройте файл «ITARE» с помощью редактора программ (ConTEXT, UltraEdit) (предварительно сохраните этот файл, а также exe-файл в отдельную папку).

4.2 Поменяйте вид топлива в строке 166 (вид топлива будет определен преподавателем), к примеру, вместо данной строки:

```
c7h16 rho1 0.0
```

запишите:

c12h26 rho1 0.0

Запишите химическую реакцию для данного вида топлива, найдите стехиометрические коэффициенты реакции и поменяйте их значения в строках 221 и 222:

```
am7 1 11 0 0 0 0 0 0 0 0 0
bm7 0 0 0 7 8 0 0 0 0 0 0
```

к примеру, для топлива c12h26 (додекан) эти значения будут равны, соответственно:

```
am7 2 37 0 0 0 0 0 0 0 0 0
bm7 0 0 0 24 26 0 0 0 0 0 0
```

4.3 Установите значение впрыска жидкого топлива «0», что соответствует «непрерывному» впрыску. Начальное значение в исходном файле обозначено как «pulse». Сохраните сделанные изменения и запустите файл «soot.exe».

4.4 Повторите пункт 4.2 для значений впрыска: «1» - полусинусоидальный импульс и «2» - последовательность прямоугольных импульсов.

4.5 После окончания вычисления вы получите несколько файлов с данными расчета. «Vigie.plt» или «Vigie.tec» – в этом файле содержатся данные для газа: поля концентрации компонентов реакции, скоростей, температуры и давления. «Particle.plt» или «Particle.tec» - файл, содержащий следующие данные: координаты (x, z), температуру и радиусы частиц.

4.6 С помощью программы TecPlot 7 получите графики концентрации компонентов реакции (топлива и кислорода), продуктов реакции (CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, “soot” - сажа, N<sub>2</sub>), температур частиц и газа для трех значений впрыска.

4.7 Для того чтобы построить графики, необходимо воспользоваться программой TecPlot 7. (Подробнее смотрите лабораторную работу №1).

4.8 Постройте в программе Microsoft Excel или Mathcad кривые: зависимость максимальной температуры в камере сгорания от максимальной концентрации CO<sub>2</sub>, максимальной концентрации H<sub>2</sub>O, максимальной концентрации сажи, максимальной концентрации N<sub>2</sub> для различных значений впрыска на одном графике.

4.19 Оформите лабораторную в программе Microsoft PowerPoint и сравните полученные результаты. Какие выводы вы можете сделать?

## **5 Контрольные вопросы**

5.1 Дайте определение процесса горения. Назовите виды горения.

Приведите примеры.

5.2 Как влияет значение впрыска жидкого топлива на процесс горения?

5.3 При каком значении впрыска жидкое топливо сгорает быстрее?

5.4 Как влияет значение впрыска жидкого топлива на образование продуктов реакции в камере сгорания?

## 6 Литература

1. *Ярин Л.П., Сухов Г.С.* Основы теории горения двухфазных сред.-Л.: Энергоатомиздат. Ленингр. Отд-ние, 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. Всесоюзный научно – теоретический журнал. Новосибирск. Наука. Сибирское отделение. 1991 г. с.45-52.
3. *Основы практической теории горения.* Под ред. В.В.Померанцева. Уч. пособие для студ. высших учебных заведений. Л.: Энергия, 1973г., 264с.
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, 160с.
6. *Аскарова А.С, Рыспаева М.Ж.* Расчет горения впрыска жидкого топлива в замкнутой камере//Вестник КазНУ, серия физическая, №1, 2006–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, серия физико-математическая, №3, 2006 – с.10-14.
8. *Рыспаева М.Ж.* Моделирование горения жидких впрысков в камерах сгорания и образования  $\text{CO}_2$ //Физика окружающей среды. Материалы V Междунар. школы молодых ученых и специалистов. Томск, 2006, с.120-124.
9. *Gorokhovski M. and Borghi R.* Model of soot formation and oxidation in diesel engines. Journal of diesels, Transactions of SAE, 1993, 930075.
10. *Аскарова А.С., Волошина И.Э., Рыспаева М.Ж.* Численное исследование влияния массы на процесс горения впрыска жидкого топлива. Тезисы V Международной конференции «Проблемы промышленной теплотехники», 22-26 мая 2007, Киев, Украина, с.26-27.