

СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТУРБУЛЕНТНОГО ГОРЕНИЯ В ПОГРАНИЧНОМ СЛОЕ

УДК 536.46.1:532.517.4

Э. П. Волчков, Н. А. Дворников, Л. Н. Перепечко

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН,
630090 Новосибирск

Проведено сравнение трех способов моделирования химических реакций при горении этанола, вдуваемого в пограничный слой через пористую пластину. Показано, что для расчета средних значений скорости и температуры, а также коэффициентов теплоотдачи простые модели горения близки по точности модели полного учета кинетики всех реакций при горении. Для определения состава продуктов реакции простые модели непригодны и требуется учет скоростей образования всех веществ, участвующих в горении.

В моделировании турбулентных химически реагирующих течений, наряду с учетом влияния турбулентности на горение, важной проблемой остается полнота учета механизма химических реакций. В некоторых работах принимается бесконечная скорость сгорания топлива, а состав продуктов сгорания задается из одностадийной глобальной реакции, при этом сгорание топлива ограничивается только диффузией топлива и окислителя [1]. В других работах задаются одностадийные реакции окисления топлива с учетом скорости сгорания и наперед заданным составом продуктов полного сгорания топлива [2]. Иногда по одностадийной глобальной реакции определяется только количество продуктов сгорания, а их состав вычисляется по условию химического равновесия [3].

Однако во всех этих случаях могут наблюдаться завышенные тепловой эффект и скорости реакции, поскольку в действительности часть веществ не успевает прореагировать из-за низких скоростей реакции. Поэтому иногда модели турбулентного горения, например модель диссипации турбулентных вихрей [4], хотя и учитывают реальные физические процессы смешения реагирующих компонентов, тем не менее могут снижать скорости реакций, искусственно завышенные из-за упрощенного механизма реакций.

В настоящей работе проведено сравнение трех способов моделирования химических реакций в турбулентном пограничном слое на пластине со вдувом реагирующего вещества (этанола) через пористую поверхность в поток воздуха. Исследовалось влияние кинетики многостадийных реакций образования продуктов сгорания этанола в воздухе. Результаты сравнивались с перечисленными выше упрощенными моделями [1, 3]. Использовалась модифицированная $k - \epsilon$ -модель турбулентности, применяемая для расчета течений с малыми числами Рейнольдса, в которой всё поле течения, в том числе и область с большими градиентами температуры, плотности и концентрации, описывается дифференциальными уравнениями [5].

Использование модели диссипации вихря [2, 6] при низких интенсивностях турбулентности приводило к затуханию пламени, поэтому в дальнейшем в расчетах она не приме-

Таблица 1

Φ	Γ_Φ	S_Φ
u	μ_{eff}	0
k	μ_{eff}/σ_k	$G_k - \rho\varepsilon - 2\mu(\partial k^{1/2}/\partial y)^2$
ε	$\mu_{eff}/\sigma_\varepsilon$	$(\varepsilon/k)(C_1 G_k - C_2 f_2 \rho\varepsilon) + 2\nu\mu_t(\partial^2 u/\partial y^2)^2$
h	μ_{eff}/σ_h	0
f	μ_{eff}/σ_f	0
m_{fu}	μ_{eff}/σ_{fu}	$A[\rho\sigma]_{fu}^{0,15} [\rho\sigma]_{oz}^{1,6} \exp(-15100/T)$
m_i	μ_{eff}/σ_i	$M_i \sum_{j=1} (\alpha''_{ij} - \alpha'_{ij})(R_j - R_{-j})$

нялась. Следует отметить, что модель диссипации вихря не допускает горения при приближении течения к ламинарному, поскольку скорости реакции в этом случае стремятся к нулю.

Система дифференциальных уравнений в частных производных, описывающая турбулентное течение на твердой поверхности, в декартовых координатах может быть представлена в следующем обобщенном виде [3]:

$$\frac{\partial(\rho u \Phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v \Phi)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\bar{\Gamma}_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + S_\Phi. \quad (1)$$

Под Φ подразумевается любая переменная, определяемая в процессе расчета: компонента скорости u , кинетическая энергия турбулентности k и скорость ее диссипации ε , энтальпия смеси h , консервативная скалярная величина для описания процесса горения f (она определяется ниже), массовые доли несгоревшего топлива m_{fu} и окислов азота m_i . Значения Γ_Φ и S_Φ приведены в табл. 1 для следующих уравнений: $\mu_t = \rho C_\mu f_\mu (k^2/\varepsilon)$, $\mu_{eff} = \mu_t + \mu$, $C_1 = 1,44$, $C_2 = 1,92$, $C_\mu = 0,09$, $\sigma_k = 1,0$, $\sigma_\varepsilon = 1,3$, $\sigma_h = \sigma_f = \sigma_{fu} = 0,9$, $G_k = \mu_t(\partial u/\partial y)^2$, $A = 1,3 \cdot 10^9$, $f_2 = 1,0 - 0,3 \exp(-R_t^2)$, $f_\mu = \exp(-2,5/(1 + R_t/50))$, $R_t = \rho k^2/\mu\varepsilon$. Здесь и в табл. 1 R_j и R_{-j} — скорости прямой и обратной реакций j ; α'_{ij} , α''_{ij} — стехиометрические коэффициенты вещества i в реакции j на стороне реагентов и продуктов соответственно.

Значения скорости глобальной реакции и способы расчета концентраций химических компонентов были различными в трех методах моделирования. В модели 1 скорость сгорания топлива считалась бесконечной, а горение задавалось одной глобальной реакцией. Поэтому для определения состава всех веществ достаточно рассчитать скаляр f , а уравнения (1) для концентрации продуктов сгорания и топлива не использовать. Модель 2 учитывала скорость сгорания топлива при равновесном составе продуктов сгорания [3]. При этом уравнение (1) для m_i не использовалось, а состав продуктов сгорания определялся по их суммарной концентрации и по температуре. Выражение для скорости глобальной реакции окисления этанола взято из [7]. Полная система уравнений с учетом скорости сгорания топлива и скоростей образования продуктов сгорания соответствовала модели 3.

Система уравнений (1) замыкалась уравнением состояния идеального газа. При этом влияние химических превращений на гидродинамические характеристики осуществлялось через изменение плотности и вязкости.

Разностная схема системы уравнений (1) получена методом контрольных объемов и решена при помощи процедуры SIMPLE [8]. Расчетная область представляла собой прямо-

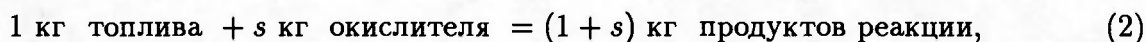
угольник, нижняя сторона которого образована пористой пластиной, через которую вдувался этанол, а через левую боковую границу подавался однородный поток воздуха. Верхняя и правая стороны прямоугольника были открытыми и сообщались с атмосферным воздухом. На входе в расчетную область задавался расход воздуха и однородный начальный профиль кинетической энергии турбулентности, а скорость диссипации определялась из соотношения $\varepsilon = C_\mu k^{3/2}/0,03L$, где L — линейный масштаб (высота входного канала). На выходе из расчетной области и на верхней границе градиенты всех параметров считались равными нулю. Поперечная компонента скорости рассчитывалась из уравнения неразрывности.

На адиабатической пористой стенке граничные условия задавались в следующем виде:

$$u = 0, \quad k = 0, \quad \varepsilon = 0, \quad \Phi = \Phi^0 + \frac{1}{(\rho\nu)_w} \left(\Gamma_\Phi \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right)_w, \quad \Phi = h, m_{fu}, f.$$

Значения $(\rho\nu)_w$, T_w и m_{fu}^0 выбирались из экспериментов, верхний индекс нуль относится к значению подводимого к пористой пластине топлива, а индекс w — к значениям на стенке.

При расчете горения принята модель одноступенчатой реакции между топливом и окислителем:



где в качестве топлива задается этанол (C_2H_5OH), в качестве окислителя — кислород. Для модели 1 продуктами реакции являются CO , CO_2 , а для моделей 1 и 2 — смесь компонентов CO , CO_2 , H_2O , O , H , H_2 , OH и HO_2 . Определение глобального состава смеси при горении этанола в предположении, что коэффициенты диффузии всех компонентов равны между собой, упрощается решением уравнения для нормированного пассивного скаляра f в форме Шваба — Зельдовича [6], определяемого следующим образом:

$$f = \frac{m_{fu} - (m_{ox}/s) - \xi_{ox}}{\xi_{fu} - \xi_{ox}},$$

где $\xi_{ox} = -(m_{ox})_{in}/s$, $\xi_{fu} = (m_{fu})_{in}$. Здесь индексом in обозначены массовые доли кислорода при $x = 0$ и топлива на проницаемой поверхности.

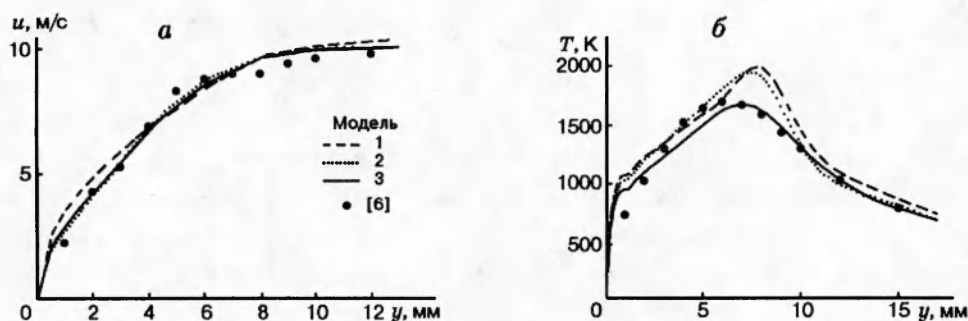
Равновесные концентрации продуктов реакции однозначно определяются суммарной энтальпией продуктов h_{pr} , суммарной концентрацией продуктов реакции, полученной с учетом глобальной реакции, и давлением [3]. В кинетическом режиме концентрации продуктов зависят еще от одной переменной — времени химического реагирования. Если при вычислении концентраций продуктов принять, что вышперечисленные вещества находятся в состоянии химического равновесия при температуре, определяемой тепловым эффектом реакции (2) (модель 2), то их концентрации можно определить из условия минимума свободной энергии Гиббса. Причем для экономии машинного времени и памяти достаточно заранее определить величину массовой доли конкретного химического компонента при нескольких значениях h_{pr} во всем диапазоне изменения энтальпии, а при расчете массовые доли продуктов горения вычислять посредством интерполяции с использованием соответствующих полиномиальных коэффициентов [3].

При учете кинетики образования химических компонентов дополнительно к равновесным интерполяционным полиномам от температуры и концентрации продуктов сгорания строились полиномы, зависящие также и от времени реагирования (модель 3).

В табл. 2 приведены кинетический механизм и константы скоростей реакций, выра-

Таблица 2

Реакция	k [м, моль, с]			
	$\log A$	B	T_a	Da_k
$\text{CO} + \text{OH} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}$	6,602	0,5	0,0	3500
$\text{CO}_2 + \text{M} \rightarrow \text{CO} + \text{O} + \text{M}$	12,0	0,0	50353,0	4,6
$\text{H} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2 + \text{O}$	6,903	1,0	3525,0	10
$\text{H}_2\text{O} + \text{M} \rightarrow \text{OH} + \text{H} + \text{M}$	12,477	0,0	52870,0	3
$\text{H} + \text{HO}_2 \rightarrow \text{OH} + \text{OH}$	11,398	0,0	957,0	1800
$\text{OH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H} + \text{H}_2\text{O}$	10,398	0,0	2618,0	4000
$\text{H} + \text{O} + \text{M} \rightarrow \text{OH} + \text{M}$	9,903	0,0	0,0	0,3
$\text{OH} + \text{O} \rightarrow \text{H} + \text{O}_2$	10,398	0,0	0,0	14
$\text{H} + \text{O}_2 + \text{M} \rightarrow \text{HO}_2 + \text{M}$	9,176	0,0	503,5	260
$\text{OH} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{O}$	9,778	0,0	503,5	300

Рис. 1. Профили скорости (а) и температуры (б) в сечении $x = 0,16$ м

женные в аррениусовской форме: $k = AT^B \exp(-T_a/T)$.

На рис. 1 представлены профили скорости и температуры в поперечном сечении $x = 160$ мм, рассчитанные по моделям 1–3 в сравнении с экспериментальными данными [9, 10]. В эксперименте длина пластины равнялась 700 мм, скорость внешнего потока 10 м/с. Видно, что распределения скорости во всех случаях близки, хотя модели 2 и 3 несколько лучше соответствуют эксперименту. Максимальная температура в пограничном слое в расчетах по моделям 1 и 2 на $\sim 15\%$ меньше экспериментального значения, но в целом совпадение с экспериментом удовлетворительное.

На рис. 2 показано распределение числа Стантона St по длине пластины в сравнении с экспериментом [9]. Число St в расчетах и эксперименте определялось в предположении, что все тепло к стенке идет на испарение этанола:

$$St = \frac{(\rho v)_w r}{(\rho u)_\infty (h_\infty - h_w)}$$

Здесь r — теплота парообразования спирта; индекс ∞ относится к значениям во внешнем потоке. Число Рейнольдса $Re_x = \rho_\infty u_\infty x / \mu_\infty$.

Из анализа результатов расчетов по различным моделям сделано заключение, что в предположении о бесконечной скорости реакции можно с хорошей степенью точности рас-

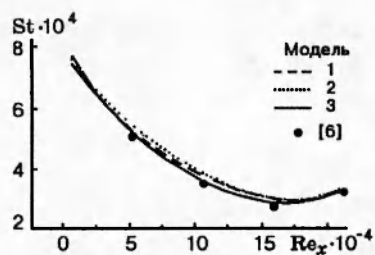


Рис. 2

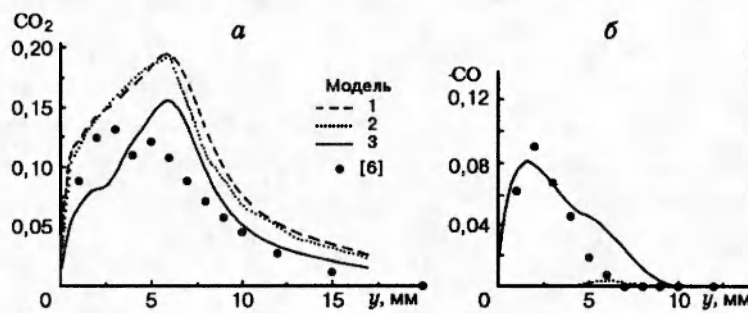


Рис. 3

Рис. 2. Распределение коэффициента теплоотдачи по длине пластины

Рис. 3. Профили массовых концентраций CO_2 (а) и CO (б) в сечении $x = 0,16$ м

считывать средние параметры течения. При этом конвективные характеристики переноса, уровень температур и коэффициенты теплоотдачи близки к экспериментальным, хотя модели 1 и 2 дают завышение температуры потока $\sim 15\%$. Различие результатов расчета состава продуктов реакций можно наблюдать на рис. 3. Видно, что модели 1 и 2 на 40% завышают концентрации CO_2 по сравнению с экспериментом, по модели 1 концентрации CO не рассчитываются, а модель 2 существенно занижает долю CO , в то время как учет кинетики дает более реалистичную картину состава продуктов реакций. По-видимому, время образования указанных компонентов вследствие химических реакций сравнимо с характерным временем переноса импульса и массы для данной области.

Характерные времена химических превращений можно определить непосредственно из выражения для скорости реакции аррениусовского вида. В зависимости от температуры, при которой протекает реакция, а также в зависимости от значений массовых концентраций реагентов и плотности смеси в данной области характерное время химической реакции (2) определяется так же, как и в [6]:

$$\tau_c = [m_{fu} m_{ox} \rho A T_c^B \exp(-T_a/T_c)]^{-1}$$

— и сравнивается с характерными гидродинамическими временами. Здесь T_c — температура, при которой протекает реакция, T_a — константа. Безразмерные параметры такого типа называют числами Дамкелера Da . Существует много разновидностей чисел Дамкелера. Например, в [6] предлагается классификация течения предварительно не перемешанных реагентов в зависимости от числа $Da = l_0 / (U_0 \tau_c)$, где l_0 и U_0 — некоторые характерные масштабы длины и скорости. Для глобальной реакции в рассматриваемом течении $Da \approx 10$, для промежуточных реакций числа $Da_k = 0,3 \div 4000$. Поэтому принятие модели химического равновесия в случае реакций с малыми числами Дамкелера (≈ 1) приводит к большим погрешностям при определении состава продуктов этих реакций.

Таким образом, при моделировании химических процессов в течениях типа пограничного слоя для данного диапазона чисел Da необходимо решать уравнения баланса масс химических компонентов смеси с учетом химической кинетики.

Основываясь на полученных результатах, можно сделать вывод, что простые модели

с бесконечной скоростью сгорания топлива и одной глобальной реакцией, а также модели с конечной скоростью реакции и равновесным составом продуктов сгорания дают удовлетворительные результаты при расчетах коэффициента теплоотдачи и профилей скорости и температуры в пограничном слое. Однако при определении состава продуктов сгорания нужно учитывать кинетику образования продуктов сгорания.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 93-02-14517).

ЛИТЕРАТУРА

1. Бояршинов Б. Ф., Волчков Э. П., Терехов В. И., Шутов С. А. Турбулентный пограничный слой со вдувом реагирующих веществ // Физика горения и взрыва. 1981. Т. 17, № 6. С. 21–28.
2. Милоевич Д. Расчет горения газообразного топлива в цилиндрической вихревой камере // Высокотемпературные течения и теплообмен. Новосибирск: Ин-т теплофизики СО АН СССР, 1990. С. 106–122.
3. Волков Э. П., Кудрявцев Н. Ю. Моделирование образование окислов азота в турбулентном диффузионном факеле // Инж.-физ. журн. 1989. Т. 56, № 6. С. 885–893.
4. Хатчинсон, Халил, Уайтлоу, Вигли. Расчет и экспериментальная проверка свойств потока в топке // Тр. амер. о-ва инженеров-механиков. Теплопередача. 1976. № 2. С. 139–146.
5. Jones W. P., Launder B. E. The prediction of laminarization with a 2-equation model of turbulence // Int. J. Heat Mass Transfer. 1972. V. 15. P. 301–314.
6. Турбулентные течения реагирующих газов / Под ред. П. А. Либби, Ф. Вильямса. М.: Мир, 1983.
7. Westbrook C. K., Dryer F. L. Chemical kinetic modeling of hydrocarbon combustion // Prog. Energy Combust. Sci. 1984. V. 10. P. 1–57.
8. Патанкар С., Сполдинг Д. Тепло- и массообмен в пограничных слоях. М.: Энергия, 1971.
9. Бояршинов Б. Ф., Волчков Э. П., Терехов В. И. Структура течения и тепло-массообмен в пограничном слое с фронтом горения // Процессы переноса в одно- и двухфазных средах. Новосибирск: Ин-т теплофизики СО АН СССР, 1986. С. 88–97.
10. Бояршинов Б. Ф. Тепло- и массоперенос в пограничном слое при испарении и горении этанола: Дис. ... канд. техн. наук. Новосибирск, 1988.

*Поступила в редакцию 15/VIII 1995 г.,
в окончательном варианте — 30/XI 1995 г.*
