

УДК 533, 536, 538.9, 544

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНУСНОГО ПЛАМЕНИ ГАЗОКАПЕЛЬНОЙ ВЗВЕСИ ЭТАНОЛА В ВОЗДУХЕ. СРАВНЕНИЕ С ГОРЕНИЕМ ГАЗОВОЙ СМЕСИ

А. А. Пономарев^{1,2}, М. Ю. Хребтов¹, Р. И. Мулляджанов^{1,2},
В. М. Дулин^{1,2}

¹Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, 630090 Новосибирск, aap@itp.nsc.ru

²Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск

Выполнено численное исследование эффекта увеличения скорости распространения ламинарного пламени этанола в богатом режиме с инъекцией капель, и проведено сравнение полученных результатов с расчетом горения спирта без инъекции с таким же массовым расходом топлива. Данные расчетов показывают, что наличие дисперсной фазы в виде капель размером 14 мкм с массовым расходом 0.5 г/мин и расходом газа 1.6 г/мин значительно увеличивает скорость распространения пламени по сравнению с горением газообразного этанола с расходом 2.1 г/мин. Скорость ламинарного пламени увеличивается с 23 см/с в режиме горения только газообразного топлива до 42 см/с в режиме с инъекцией капель. Данный эффект коррелирует с ростом в пламени концентрации атомарного водорода более чем в три раза и с ростом концентрации НСО в два раза.

Ключевые слова: ламинарное конусное пламя, газочапельное горение, этанол, метод конечных объемов, OpenFOAM.

DOI 10.15372/FGV2023.9388

EDN KIGLLS

ВВЕДЕНИЕ

В применяемых на практике системах камер сгорания с инъекцией жидкого топлива, как правило, реализуются турбулентные пламена с полидисперсным распределением частиц. Тем не менее, понимание основ процессов, протекающих при горении распыленного жидкого топлива, может быть получено на упрощенных модельных конфигурациях ламинарных пламен с монодисперсным распределением частиц, примером которых является пламя в форме конуса.

Одной из первых работ [1–5], в которой был описан эффект увеличения скорости пламени при инъекции капель, является работа [1]. В ней представлены экспериментальные доказательства увеличения скорости распространения конического пламени тетралина в воздухе с диаметром капель более 40 мкм. Позже в [6] наблюдали аналогичный эффект для пламени аэрозоля этанола и *n*-октана, обнаружено существование оптимального размера капель, который приводит к максимальному увеличению скорости пламени. В численном одномерном исследовании [7] показано, что при определенных условиях можно достичь максимальной скорости распространения пламени в газочапельной взвеси, большей максимально достижимой скорости чисто газового пламени. Кроме того, была показана возможность горения смеси в присутствии распыленной фазы за пределами области воспламенения газа как при бедных ($\phi < 0.6$), так и при богатых режимах ($\phi > 4$). Одно из возможных объяснений данного эффекта предложено в [6] и заключалось в том,

что горение в присутствии капель происходит при некотором эффективном коэффициенте избытка топлива, который близок к стехиометрическому значению, что увеличивает скорость пламени.

Несмотря на длительный период исследования особенностей горения газокapельных смесей, в литературе всё еще имеются противоречивые данные о влиянии дисперсной фазы на структуру и характеристики пламен. Так, например, в работе [8], в которой исследовалось распространение пламени этанола в условиях микрогравитации, утверждается, что увеличение скорости возможно в области бедных пламен ($\phi < 1$) и в области богатых пламен, далеких от стехиометрии ($\phi > 1.6$). В то же время в [3] было показано, что увеличение размера капель в бедных и стехиометрических пламенах уменьшает скорость распространения пламени.

В области численного моделирования большинство работ, посвященных исследованию структур газокapельных пламен, выполнены либо в одномерной постановке [7], либо в конфигурации противоточного пламени [9]. Детальные численные исследования структуры газокapельных ламинарных пламен в трехмерной постановке в литературе практически отсутствуют. Рассмотренная в данной работе конфигурация пламени является классической ввиду удобства организации экспериментальных исследований.

В настоящей работе представлено численное исследование эффекта увеличения скорости распространения пламени газозвеси этанола в воздухе в богатом режиме горения с коэффициентом избытка топлива $\phi_t = 1.47$. Для сравнения проведено исследование горения чисто газового топлива с аналогичным расходом.

1. РАСЧЕТНЫЙ МЕТОД

1.1. Математическая модель

Для моделирования процессов газокapельного горения использовался пакет CFD с открытым исходным кодом OpenFOAM [10] с применением решателя sprayFoam, рассчитывающий процессы в лагранжево-эйлеровой постановке методом конечных объемов. Газовая фаза разрешалась в эйлеровой постановке, капли — в лагранжевой. Для описания теплопереноса применялось выражение Ранца — Маршалла для числа Шервуда. Для описания радиационного теплообмена использовалась модель P1. Подробное описание применяемых в расчете математических моделей тепло- и массопереноса можно найти в предыдущей работе авторов [11].

1.2. Детали численного моделирования

Исследуемые режимы соответствовали смеси с полным коэффициентом избытка топлива $\phi_t = 1.47$. В режиме горения газокapельной смеси задавался массовый расход капель и газообразного спирта 0.5 и 1.6 г/мин соответственно. В режиме горения газовой смеси в качестве топлива использовался только газообразный этанол с полным массовым расходом 2.1 г/мин.

Расчетная область представляла собой цилиндр высотой 180 мм и радиусом 100 мм, на входе которого находилось сопло Витошинского с входным диаметром 30 мм и выходным диаметром 7.5 мм. Выбор горелочной системы был обусловлен тем, что ранее полученные численные данные по горению газокapельной взвеси этанола в воздухе были валидированы на экспериментальных данных, что подробно описано в статье [11].

Расчетная сетка состояла из 7 млн гексагональных ячеек. Ее изображение представлено на рис. 1. Для повышения точности расчета фронта пламени на выходе из сопла

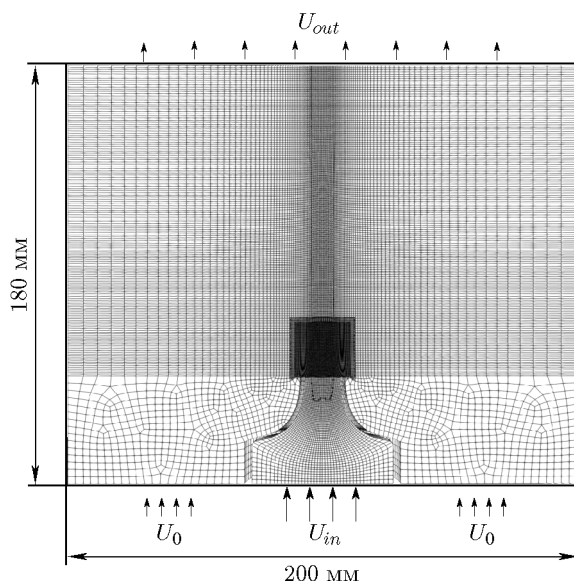


Рис. 1. Визуализация расчетной области в сечении

было выполнено двойное адаптивное сгущение, что обеспечило размер ячеек во фронте пламени около 100 мкм. Выбор сеточного разрешения основан на литературных данных [12, 13], согласно которым 100 мкм является достаточным разрешением для описания процессов горения при использовании метода прямого численного моделирования. Поэтому для расчета было выбрано соответствующее разрешение. Дополнительно сходимость была проверена путем локального сгущения сетки.

На входе сопла задавался пуазелевский профиль скорости:

$$U_{in} = 2U_b(1 - r^2/R^2),$$

где $U_b = 0.063$ м/с — среднерасходная скорость, $R = 0.03$ м — входной радиус сопла. Вокруг сопла устанавливался спутный поток со скоростью U_0 , соответствующей 5 % от среднерасходной скорости потока на выходе из сопла. Стенки сопла считались теплоизолированными. Начальная температура воздуха, а также газообразного топлива и капель составляла 296 К. Концентрация инжектируемого газообразного спирта соответствовала концентрации насыщенных паров этанола при температуре 296 К, ввиду чего капли не претерпевали значительного испарения до фронта пламени. Размер капель задавался монодисперсным распределением с диаметром 14 мкм.

Описание химической кинетики проводилось с помощью упрощенного химического механизма [14], состоящего из 31 компонента и 66 реакций и основанного на механизме San Diego [15].

2. РЕЗУЛЬТАТЫ

Исследуемые режимы соответствовали расходу с полным коэффициентом избытка топлива $\phi_t = 1.47$. В режиме горения газокapельной смеси задавался расход капель 0.5 г/мин ($\phi_l \approx 0.35$) и газообразного спирта 1.6 г/мин ($\phi_g \approx 1.12$). В режиме горения газовой смеси в качестве топлива использовался только газообразный этанол с полным массовым расходом, соответствующим 2.1 г/мин. Размер капель составлял 14 мкм и задавался монодисперсным распределением. Так как расход газа вычислялся в предположении равновесной концентрации паров спирта внутри сопла, капли, инжектируемые на входе

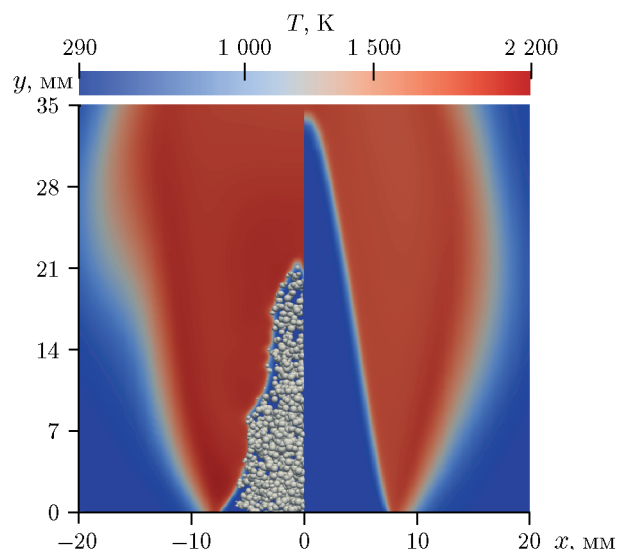


Рис. 2

Рис. 2. Мгновенные поля температуры горения газокapельной взвеси (слева, для визуализации диаметр капель увеличен в 50 раз) и газовой смеси (справа)

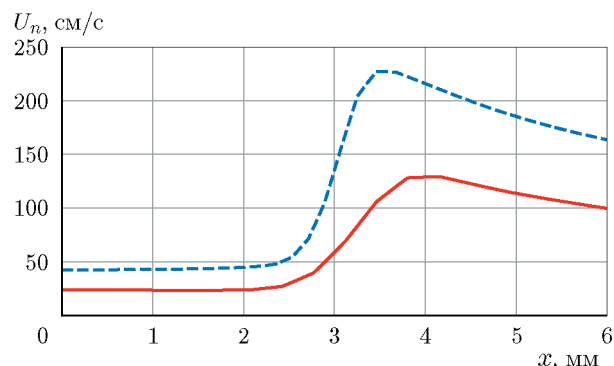


Рис. 3

Рис. 3. Нормальная компонента скорости распространения ламинарного пламени: результаты 3D-расчета в OpenFOAM для режима без инъекции капель (сплошная линия), с инъекцией (штриховая линия)

в сопло, не претерпевали значительного испарения непосредственно до области, близкой к фронту пламени. Оценка влияния радиационной составляющей теплового потока показала, что за счет излучения температура газа и капель при подлете к фронту поднимается на величину до 0.8 K, что приводит к незначительному испарению и уменьшению диаметра капель с 14 до 13.5 мкм вблизи фронта пламени.

На рис. 2 представлены мгновенные поля температуры в режиме с инъекцией капель (слева) и без инъекции (справа). В режиме с инъекцией капель высота конуса пламени составила 23 мм. При этом подлетающие к фронту пламени капли его растягивали и вызывали непрерывные осцилляции. В режиме без инъекции конус пламени стабилизировался на высоте 35 мм. Разница высот конусов указывает на то, что в режиме газокapельного горения скорость пламени значительно выше, чем в режиме газового горения, при одинаковом массовом расходе топлива.

Графики нормальной компоненты скорости распространения пламени представлены на рис. 3. В режиме без инъекции скорость ламинарного пламени составила 23 см/с, что согласуется с литературными данными по этанолу при $\phi_t = 1.47$. В режиме с инъекцией скорость ламинарного пламени составляла 42 см/с, что более чем в два раза превосходит скорость горения чисто газовой смеси. Данное значение скорости соответствует скорости горения газообразного этанола с коэффициентом избытка топлива $\phi \approx 1.2$. Таким образом, режим горения оказывается ближе к стехиометрии, что приводит к увеличению скорости пламени. Полученные результаты согласуются с предположением из работы [6] о поведении пламени при горении богатых пламен.

На рис. 4 представлены профили концентраций основных компонентов газовой фазы поперек фронта пламени при горении газокapельной и газовой смесей соответственно. В режиме с инъекцией капель молярная доля газообразного спирта до фронта пламени составила $\chi = 0.072$, в то время как в режиме без инъекции $\chi = 0.093$. Концентрации

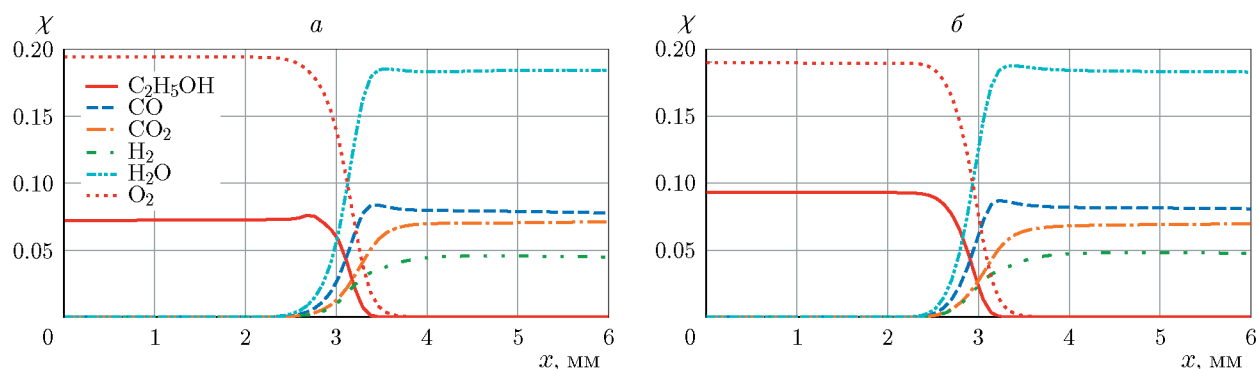


Рис. 4. Профили молярных долей основных компонентов смеси поперек фронта пламени в газовой фазе, рассчитанные в OpenFOAM (3D), для режима с инъекцией капель (а) и без инъекции капель (б)

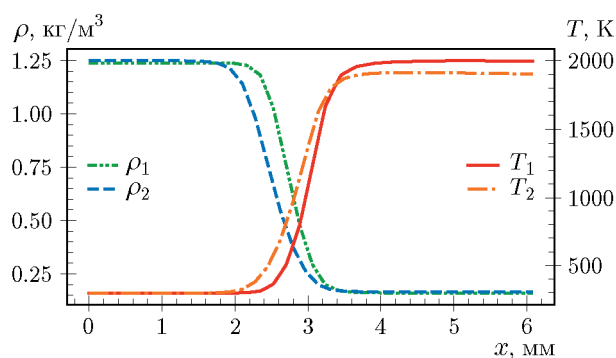


Рис. 5

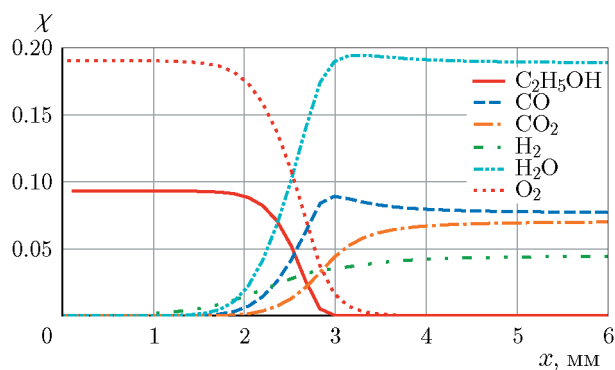


Рис. 6

Рис. 5. Профили плотности и температуры поперек фронта пламени, рассчитанные в OpenFOAM (3D), для режима с инъекцией капель (ρ_1, T_1) и без инъекции капель (ρ_2, T_2)

Рис. 6. Профили молярных долей основных компонентов смеси поперек фронта пламени в газовой фазе, рассчитанные в CANTERA (1D)

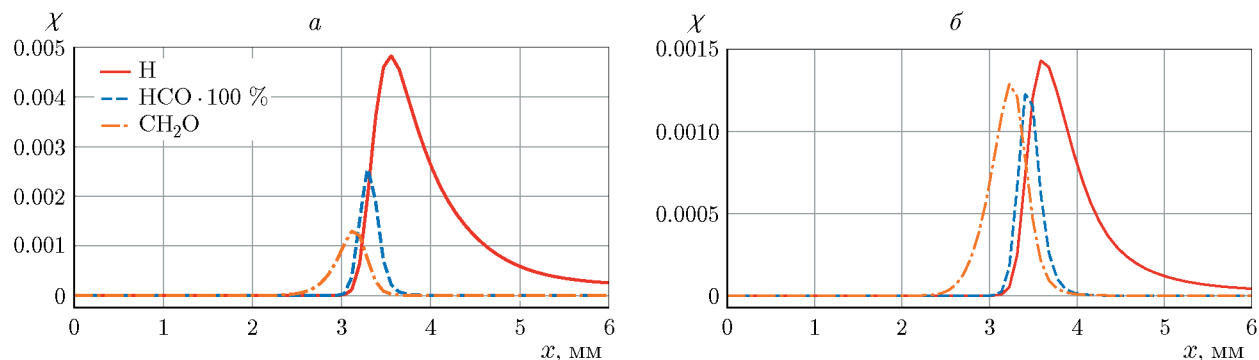


Рис. 7. Профили молярных долей промежуточных компонентов смеси поперек фронта пламени в газовой фазе, рассчитанные в OpenFOAM (3D), для режима с инъекцией капель (а) и без инъекции (б)

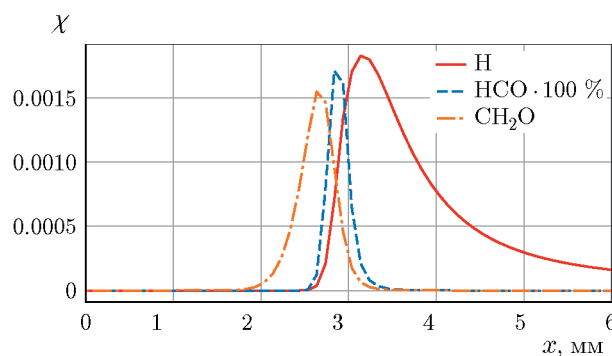


Рис. 8. Профили молярных долей промежуточных компонентов смеси поперек фронта пламени в газовой фазе, рассчитанные в CANTERA (1D)

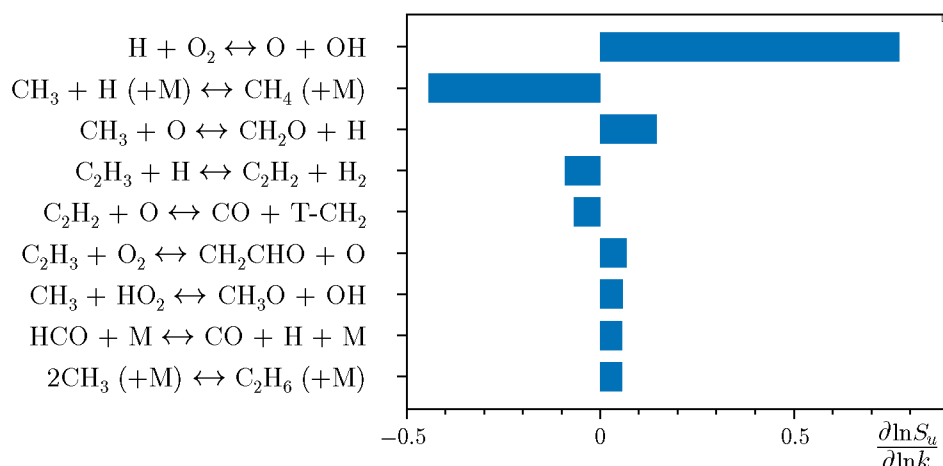


Рис. 9. Чувствительность химических реакций, рассчитанная в CANTERA

основных компонентов смеси за фронтом пламени в двух режимах в значительной степени схожи. Небольшие отличия наблюдаются в концентрациях CO_2 и CO .

При инъекции капель концентрация CO_2 оказывается несколько больше, чем в режиме горения только газообразного спирта. Данные результаты согласуются с профилями температуры и плотности, представленными на рис. 5. Температура газокapельного режима составила 2000 K, в то время как для газового режима она равнялась 1915 K.

Также проводилось сравнение структуры газового пламени с результатами расчетов концентраций компонентов смеси, температуры и плотности, выполненных в одномерной постановке по программе CANTERA [16].

Концентрации основных компонентов смеси при горении чисто газового пламени, полученные методом 3D-моделирования, совпадают с результатами численного моделирования одномерного фронта пламени этанола (рис. 6) в программе CANTERA. Для газокapельного режима горения имеется локальная область, в которой идет рост концентрации газообразного этанола (1.7 % по молярной доле), что свидетельствует о локальном превышении скорости испарения над скоростью расходования в химической реакции.

На рис. 7 изображены профили концентраций промежуточных компонентов горения этанола в газовой фазе в режимах с инъекцией и без нее, рассчитанные в программе OpenFOAM, а на рис. 8 — профили тех же промежуточных компонентов горения этано-

ла в газовой фазе в режиме без инъекции, рассчитанные в программе CANTERA. Концентрации H_2CO и HCO на фронте пламени отличаются незначительно, в то время как концентрация H в режиме с инъекцией капель в три раза выше, чем для газообразного топлива. Максимальные значения концентрации H в одномерном пламени и пламени газовой смеси в трехмерном случае совпадают.

Анализ чувствительности реакций $\frac{\partial \ln S_u}{\partial \ln k}$, где S_u — скорость распространения ламинарного пламени, k — скорость химической реакции, проведенный для одномерного фронта газового пламени в программе CANTERA (рис. 9), показал, что наибольшей восприимчивостью обладают реакции с участием атомарного водорода H . Полученные данные, вероятно, указывают на то, что инъекция капель способна значительно менять концентрацию атомарного водорода в пламени и увеличивать тем самым скорость распространения пламени.

ВЫВОДЫ

В данной работе проведено исследование эффекта ускорения распространения фронта пламени в богатом режиме горения с полным коэффициентом избытка топлива 1.47. Для режима горения только газового топлива было выполнено сравнение характеристик фронта пламени, рассчитанных в программе OpenFOAM (3D) и в программе CANTERA (1D).

Скорость горения только газообразного этанола, рассчитанная в OpenFOAM, составила 23 см/с. При инъекции капель скорость распространения ламинарного пламени составила 42 см/с.

Профили основных компонентов смеси H_2 , CO , CO_2 , H_2O , O_2 и $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, а также атомарного водорода H , рассчитанные в трехмерной постановке для газовой смеси, совпадают с данными одномерного расчета в программе CANTERA. В расчете с инъекцией капель концентрация H на фронте пламени возросла более чем в три раза, а концентрация HCO — в два раза по сравнению с режимом горения только газофазного пламени. При этом концентрации продуктов реакции за фронтом пламени согласуются с данными одномерного расчета.

Таким образом, полученные данные указывают на то, что изменение способа инъекции топлива способно значительно влиять на концентрацию промежуточных компонентов смеси во фронте пламени. Влияние на концентрацию продуктов реакции оказывается слабым. Тем не менее метод инъекции способен изменять температуру за фронтом пламени.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (проект № 22-19-00803). Использование инфраструктуры предоставлено в рамках государственного задания № 123012000019-3 Институту теплофизики СО РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Burgoyne J., Cohen L.** The effect of drop size on flame propagation in liquid aerosols // Proc. Roy. Soc. London. Ser. A. Math. Phys. Sci. — 1954. — V. 225, N 1162. — P. 375–392.
2. **Browning J. A., Tyler T. L., Krall W. G.** Effect of particle size on combustion of uniform suspensions // Ind. Eng. Chem. — 1957. — V. 49, N 1. — P. 142–147. — DOI: 10.1021/ie50565a042.
3. **Ballal D. R., Lefebvre A. H.** Flame propagation in heterogeneous mixtures of fuel droplets, fuel vapor and air // Symp. (Int.) Combust. — 1981. — V. 18, N 1. — P. 321–328. — DOI: 10.1016/S0082-0784(81)80037-9.

4. **Polymeropoulos C. E., Das S.** The effect of droplet size on the burning velocity of kerosene-air sprays // *Combust. Flame.* — 1975. — V. 25. — P. 247–257. — DOI: 10.1016/0010-2180(75)90091-7.
5. **Myers G. D., Lefebvre A. H.** Flame propagation in heterogeneous mixtures of fuel drops and air // *Combust. Flame.* — 1986. — V. 66, N 2. — P. 193–210. — DOI: 10.1016/0010-2180(86)90091-X.
6. **Hayashi S., Kumagai S., Sakai T.** Propagation velocity and structure of flames in droplet-vapor-air mixtures // *Combust. Sci. Technol.* — 1977. — V. 15, N 5-6. — P. 169–177. — DOI: 10.1080/00102207708946782.
7. **Neophytou A., Mastorakos E.** Simulations of laminar flame propagation in droplet mists // *Combust. Flame.* — 2009. — V. 156, N 8. — P. 1627–1640. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2009.02.014.
8. **Nomura H., Koyama M., Miyamoto H., Ujiie Y., Sato J., Kono M., Yoda S.** Microgravity experiments of flame propagation in ethanol droplet-vapor-air mixture // *Proc. Combust. Inst.* — 2000. — V. 28, N 1. — P. 999–1005. — DOI: 10.1016/S0082-0784(00)80307-0.
9. **Guo H., Liu F., Smallwood G. J.** A numerical study on NO_x formation in laminar counter-flow CH_4 /air triple flames // *Combust. Flame.* — 2005. — V. 143, N 3. — P. 282–298. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2005.06.004.
10. **OpenFOAM** Home Page. — 2004. — Available online: <http://www.openfoam.com>.
11. **Пономарев А. А., Шараборин Д. К., Хребтов М. Ю., Мулладжанов Р. И., Дулин В. М.** Численное исследование горения взвеси этанола в воздухе // *Физика горения и взрыва.* — 2023. — Т. 59, № 2. — С. 7–15. — DOI: 10.15372/FGV20230202. — EDN: LPWVJN.
12. **Vreman A. W., Bastiaans R. J. M., Geurts B. J.** A similarity subgrid model for premixed turbulent combustion // *Flow, Turbul. Combust.* — 2009. — V. 82. — P. 233–248. — DOI: 10.1007/s10494-008-9174-y.
13. **Mukhopadhyay S., Bastiaans R. J. M., van Oijen J. A., de Goey L. P. N.** Analysis of a filtered flamelet approach for coarse DNS of premixed turbulent combustion // *Fuel.* — 2015. — V. 144. — P. 388–399. — DOI: 10.1016/j.fuel.2014.12.045.
14. **Millán-Merino A., Fernández-Tarrazo E., Sánchez-Sanz M., Williams F. A.** A multi-purpose reduced mechanism for ethanol combustion // *Combust. Flame.* — 2018. — V. 193. — P. 112–122. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2018.03.005.
15. **Williams F.** Chemical-kinetic Mechanisms for Combustion Applications. — San Diego Mechanism web page, Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), Univ. of California at San Diego, 2018.
16. **CANTERA** Home Page. — 2004. — Available online: <https://cantera.org/>.

Поступила в редакцию 13.09.2023.

После доработки 02.11.2023.

Принята к публикации 08.11.2023.