

А.В. Евлампиев, С.М. Фролов, В.Я. Басевич, А.А. Беляев
(Россия, Москва, ИХФ РАН)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИОННОГО ГОРЕНИЯ МОТОРНЫХ ТОПЛИВ*

Введение. При математическом моделировании процессов горения в транспортных двигателях возникают проблемы описания турбулентных реагирующих течений предварительно перемешанных компонентов. Существует ряд подходов к моделированию диффузионного горения [1]. Одним из перспективных методов описания диффузионного горения является модель микроламинарных пламен [2].

Концепция микроламинарного пламени в задачах о турбулентном диффузионном горении газов позволяет учитывать конечную скорость химических реакций и взаимодействие химических процессов с турбулентным течением. Согласно этой концепции, изогнутая поверхность турбулентного пламени представляет собой ансамбль ламинарных поверхностей горения с локально одномерной структурой. По этой причине ламинарное диффузионное пламя стало предметом детальных теоретических и экспериментальных исследований. На практике такое горение можно наблюдать при столкновении соосных противоположенных ламинарных потоков горючего и окислителя. Численное решение задачи о ламинарном диффузионном горении углеводородного топлива не встречает принципиальных трудностей, если речь идет о легких углеводородах. Однако при исследовании горения тяжелых углеводородов возникает проблема, связанная с недостаточной изученностью соответствующих механизмов химических реакций. Вместе с тем для практических целей наибольший интерес представляют именно тяжелые углеводороды, являющиеся компонентами моторных топлив. Одним из эффективных путей решения проблемы может служить использование эмпирических схем окисления углеводородов.

Цель работы – проверка применимости эмпирического механизма окисления углеводородов [3...4] к задачам диффузионного горения газов.

Постановка задачи. Ламинарное диффузионное пламя, образованное при столкновении соосных противоположенных потоков горючего и окислителя, схематически изображено на рис. 1.

* Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 99-03-32261.

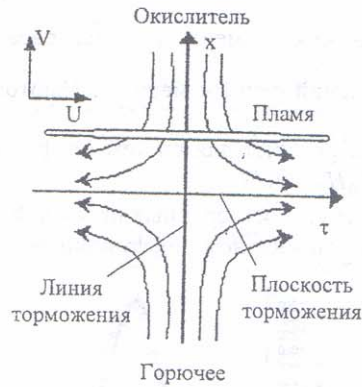


Рис. 1. Схема течения при ламинарном диффузионном горении во встречных потоках горючего и окислителя

Система уравнений, описывающих течение, принимает вид [5]:

$$\frac{\partial(V)}{\partial x} + 2a\rho U = 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial U}{\partial x} \right) - V \frac{\partial U}{\partial x} + a(\rho_{+\infty} - \rho U^2) = 0; \quad (2)$$

$$-\frac{\partial}{\partial x} (\rho Y_k V_{kx}) - V \frac{\partial Y_k}{\partial x} + \omega_k W_k = 0; \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - V C_p \frac{\partial T}{\partial x} - \sum_k \rho Y_k V_{kx} C_{pk} \frac{\partial T}{\partial x} - \sum_k \omega_k W_k h_k = 0. \quad (4)$$

Система замыкается уравнением состояния идеального газа

$$\rho = \frac{p\bar{W}}{RT}. \quad (5)$$

В уравнениях (1)...(5) символом V обозначена осевая составляющая потока массы, $U = u/u_\infty$ – безразмерная радиальная скорость течения, Y_k – массовая доля k -го химического компонента, T – температура, p – давление, ρ – плотность, W_k – молярная масса k -го вещества, \bar{W} – средняя молекулярная масса смеси, μ – коэффициент вязкости смеси, λ – коэффициент теплопроводности смеси, C_p – изобарная теплоемкость смеси, C_{pk} – изобарная теплоемкость k -го химического компонента, ω_k – молярная скорость химической реакции образования k -го компонента смеси на единицу объема, h_k – удельная энтальпия k -го вещества, V_{kx} – диффузионная скорость k -го химического компонента в осевом направлении. Величина

Пламя стабилизируется в области, прилежащей к плоскости торможения потоков. Символами V и U обозначены осевая и радиальная составляющие скорости течения. Ограничимся поиском решения задачи о ламинарном диффузионном горении лишь на линии торможения струй. В этом случае плоская задача может быть сведена к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Предполагается, что все скалярные величины (температура, плотность и концентрации химических реагентов) являются функциями только осевой координаты X .

$a = \left. \frac{du}{dr} \right|_{\infty}$, называемая скоростью растяжения пламени, является параметром задачи. Полученную систему уравнений решали методом Ньютона с использованием матричной прогонки.

Результаты расчетов. Выполнены расчеты для систем по формуле $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{N}_2$, (2) $\text{C}_2\text{H}_4/\text{O}_2/\text{N}_2$ и (3) $\text{C}_{10}\text{H}_{22}/\text{O}_2/\text{N}_2$.

На рис. 2 показано сравнение расчетных и измеренных профилей температуры и концентраций реагентов при ламинарном диффузионном горении метана.

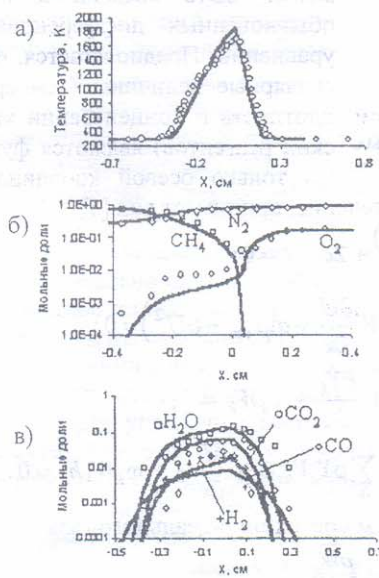


Рис. 2. Экспериментальные [5] и расчетные профили температуры и концентраций при горении системы (1): а – профиль температуры, б и в – мольные доли веществ. Точки – данные [5], кривые – результаты настоящей работы. Условия: $a=32,83 \text{ c}^{-1}$, $p = 0,1 \text{ МПа}$; $X=-\infty$: $T=294 \text{ К}$, $\text{CH}_4 - 72 \%$, $\text{N}_2 - 28 \%$; $X=+\infty$: $T=294 \text{ К}$, $\text{CH}_4 - 16 \%$, $\text{N}_2 - 84 \%$

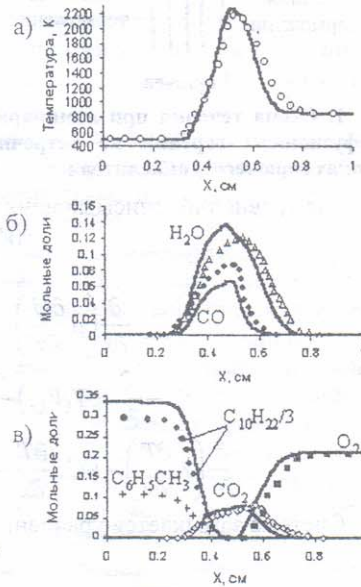


Рис. 3. Сравнение расчетных профилей температуры и концентраций при горении моторного топлива на основе $\text{C}_{10}\text{H}_{22}$: а – профиль температуры, б и в – мольные доли веществ. Точки – данные [6], кривые – результаты настоящей работы. Условия: $a=32,83 \text{ c}^{-1}$, $p = 0,1 \text{ МПа}$; $X=-\infty$: $T=294 \text{ К}$, $\text{CH}_4 - 72 \%$, $\text{N}_2 - 28 \%$; $X=+\infty$: $T=294 \text{ К}$, $\text{CH}_4 - 16 \%$, $\text{N}_2 - 84 \%$

Видно, что расчетные результаты для горения метана удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [5]. При исследовании горения тяжелых углеводородов (гептан, тетрадекан и т.д.) использо-

вание механизма окисления горючего [3...4] (таблица, реакции 1...7) приводит к вычислительным трудностям. В настоящей работе показано, что для получения стационарного решения необходимо видоизменить механизм [3...4] таким образом, чтобы тяжелое углеводородное топливо участвовало в реакциях неполного окисления и термического распада до низших углеводородов (этилен, ацетилен) (см. таблицу, реакции 1', 1'', 1'''). Результаты расчета для системы $C_{10}H_{22}/O_2/N_2$ показаны на рис. 3, где проведено сравнение расчетов по новой кинетической схеме с результатами расчетов работы [6], в которой используется кинетический механизм с участием 84 реагентов и 440 реакций. Отметим, что в работе [6] моторное топливо моделируется как смесь $C_{10}H_{22}$ и $C_6H_5CH_3$.

Модифицированный механизм окисления углеводородного топлива

№ п/п	РЕАКЦИЯ	→/←	A	b	E
1	$C_nH_{(2n+2)} + (n+0,5)O_2 = nCO + (n+1)H_2O$	→	7,0E+14	0,0	50,0
2	$H_2 + H_2 + O_2 = H_2O + H_2O$	→	7,0E+13	0,0	21,0
3	$CO + CO + O_2 = CO_2 + CO_2$	→	8,5E+12	0,0	21,0
4	$CO + H_2O = CO_2 + H_2$	→	1,0E+12	0,0	41,5
		←	3,1E+13	0,0	49,1
5	$C + C + O_2 = CO + CO$	→	2,55E+14	0,0	0,0
6	$N_2 + O_2 = NO + NO$	→	1,7E+17	-0,5	136,0
7	$H_2O + M = R + R + M$	←	4,1E+15	-0,5	93,3
		→	1,7E+22	-0,5	120,0
1'	$C_{10}H_{22} + (3,0)O_2 = (5,0)C_2H_2 + (6,0)H_2O$	←	3,0E+13	0,0	0,0
		→	7,0E+14	0,0	50,0
1''	$C_{10}H_{22} + C_{10}H_{22} = (8,0)C_2H_2 + (4,0)C + (14,0)H_2$	→	2,55E+14	0,0	50,0
1'''	$C_2H_2 + (1,5)O_2 = CO + CO + H_2O$	→	50,0E+14	0,0	50,0

Данные в таблице представлены для условий стехиометрии и давления $p = 1$ атм. Единицы измерения: A – литры, моли, секунды; E – ккал/моль. Механизм, используемый в расчетах при исследовании горения системы (3), оказался применимым как к диффузионному, так и к гомогенному горению. Например, расчетная скорость ламинарного пламени в предварительно перемешанной смеси $C_{10}H_{22}$ – воздух оказалась равной 35 см/с, что согласуется с экспериментом.

Заключение. Таким образом, в работе предложен модифицированный эмпирический механизм окисления углеводорода, позволяющий исследовать структуру пламени при горении моторных топлив. Создана и апробирована вычислительная методика расчета характеристик ламинарного диффузионного пламени в противонаправленных соосных потоках горючего и окислителя.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Турбулентные течения реагирующих газов // Под ред. Ф.А. Вильямс, П.А. Либби. – М.: Мир, 1983. – 320 с.
2. Peters, N., «Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion», Progress in Energy and Combustion Science, 1984, Vol. 10, p. 319.
3. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. // Химическая физика. – 1998, – Т. 17. – № 9. – С. 112-128.
4. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. // Химическая физика. – 1998, – Т. 19. – № 10. – С. 71-79.
5. M. D. Smooke, I. K. Puri and K. Seshadri, «A Comparison Between Numerical Calculations and Experimental Measurement Of The Structure Of A Counterflow Diffusion Flame Burning Diluted Methane In Diluted Air», Twenty-first Symposium (International) on Combustion / The Combustion Institute, 1986, pp. 1783-1792.
6. A. G. Kyne, P. M. Pourkashanian, A. Williams and C.W. Wilson, «Combustion Of Kerosene In Counter-Flow Diffusion Flames», International Society for Air Engines and American Institute of Aeronautics & Astronautics, 1999, A99-34249.

С.В. Путинцев (Россия, Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана)

ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ РАЗВИТИЯ СОВРЕМЕННЫХ ДВС

В начале третьего тысячелетия уже нет необходимости доказывать важность применения трибологии (науки о трении и износе) в двигателестроении. Уровень требований к мощностным, экономическим и экологическим показателям современных ДВС настолько высок, что достичь его уже невозможно без оптимизации процессов трения и износа на всех этапах «жизни» двигателя – от расчета до эксплуатации.

Следует признать, что несмотря на явно неудовлетворительную динамику роста механического КПД на протяжении почти всей истории развития ДВС, проблеме трения и износа не уделялось должного внимания. Это привело к значительному отставанию изделий двигателестроения от объектов ряда смежных отраслей машиностроения во внедрении трибологиче-

© Путинцев С.В., 2001