

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ ОБЛАКА МИКРОКАПЕЛЬ УГЛЕВОДОРОДНОГО ТОПЛИВА

А. В. Фёдоров

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, 630090 Новосибирск  
Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, 630008 Новосибирск  
fedorov@ngasu.nsk.ru

Предложена упрощенная математическая модель, являющаяся точечным приближением математической модели механики гетерогенной смеси газов, твердых частиц и жидких капель для описания воспламенения и горения подобных композитных газовзвесей. На ее основе решена задача о воспламенении взвеси микрокапель тридекана за фронтом отраженной ударной волны в некоторой довольно широкой области давлений газа за фронтом отраженной ударной волны.

Ключевые слова: ударные волны, смеси капель и газа, воспламенение, время задержки воспламенения.

### ВВЕДЕНИЕ

В [1, 2] была предложена математическая модель механики гетерогенной смеси газов, твердых частиц и жидких капель для описания воспламенения и горения подобных композитных газовзвесей. На ее основе в рамках точечного приближения была решена задача о воспламенении взвеси микрокапель тридекана за фронтом отраженной ударной волны в некоторой области начальных параметров смеси. В данной работе проводится верификация математической модели в более широкой области давлений газа за фронтом отраженной ударной волны.

### ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ КАПЕЛЬ УГЛЕВОДОРОДНОГО ТОПЛИВА

Рассмотрим смесь газов, состоящую из окислителя (кислорода), испаренных паров горючего, газообразных продуктов горения и конденсированной фазы в виде микрокапель углеводородного топлива. Уравнения сохранения массы и энергии для неподвижных компонентов смеси имеют следующий вид:

$$\dot{r}_3 = -\frac{\text{Nu}}{2r_3\rho_{23}^0} \frac{\lambda}{c_p} \ln\left(1 + \frac{T_1 - T_{vap}}{L/c_p}\right) = w_{vap},$$

$$\dot{\rho}_{13} = v_{13}w^2, \quad (1)$$

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 00-01-00587), фонда INTAS OPEN (грант 97-2027) и фонда МО РФ (E00-4.0-9.0).

$$w^2 = K_2 \left(\frac{\rho_{11}}{\rho_{110}}\right) \left(\frac{\rho_{12}}{\rho_{120}}\right) \exp\left(-\frac{E}{\mathcal{R}T_1}\right),$$

$$\rho_1 c_p \dot{T}_1 = w^2 q_2 - w_{vap} \eta L - n 4\pi r_3^2 k (T_1 - T_2),$$

$$\rho_2 c_2 \dot{T}_2 = -w_{vap} (1 - \eta) L + n 4\pi r_3^2 k (T_1 - T_2).$$

Здесь  $\rho_1 = m_1(\rho_{11}^0 + \rho_{12}^0 + \rho_{13}^0)$ ,  $\rho_2 = m_2\rho_{23}^0$  — средние плотности газовой (состоящей из трех компонентов) и конденсированной фаз,  $\rho_{ij}^0$  — истинная плотность соответствующего газового компонента ( $i = 1$ ) и конденсированного ( $i = 2$ ),  $\rho_{23}^0$  — истинная плотность тридекана,  $m_i$  — объемная концентрация  $i$ -й фазы;  $\rho_{1i} = m_1\rho_{1i}^0$  — средняя плотность  $i$ -го газового компонента; индексом 11 обозначен кислород, 12 — испаренные реагирующие пары горючего, 13 — газообразные продукты реакции;  $r_3$  — радиус испаряющейся капли;  $c_p$ ,  $c_2$  — средние теплоемкости газового и конденсированного компонентов;  $T_1$ ,  $T_2$  — температуры газового и конденсированного компонентов;  $\mathcal{R}$  — универсальная газовая постоянная;  $w^2$ ,  $w_{vap}$  — функции, описывающие источники и стоки массы за счет химической реакции и испарения [3];  $\eta$  — доля тепла фазового перехода (испарения)  $L$ , выделяемого в первой фазе;  $q_2$  — тепло, выделяемое при протекании химической реакции;  $n$  — число частиц в единице объема;  $k = \lambda_1 \text{Nu} / 2r_3$  — коэффициент теплообмена между газом и микрокаплями,  $\lambda_1$  — коэффициент теплопроводности газа,  $\text{Nu}$  — число Нуссельта;  $K_2$  — константа в законе горения;  $E$  — энергия активации химической реакции; точкой сверху обозначена производная по

времени. Замыкание системы осуществляется за счет интегралов уравнений неразрывности компонентов системы, которые можно записать в виде

$$\rho_1 = \rho_{10} + \rho_{20}(1 - \bar{r}_3^3), \quad \rho_2 = \rho_{20}\bar{r}_3^3, \quad \bar{r}_3 = \frac{r_3}{r_0},$$

$$\rho_{11} = \rho_{110} - \frac{v_{11}}{v_{13}}(\rho_{13} - \rho_{130}), \quad (2)$$

$$\rho_{12} = \rho_{120} - \frac{v_{12}}{v_{13}}(\rho_{13} - \rho_{130}) + \rho_{20}(1 - \bar{r}_3^3).$$

Кроме того, химическая реакция окисления подчиняется стехиометрическому соотношению [2]

$$v_{11} + v_{12} = v_{13},$$

где  $v_{1j}$  — произведение молекулярной массы и стехиометрического коэффициента  $j$ -го компонента.

### ФИЗИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

При изучении вопроса о воспламенении микрокапель углеводородного топлива часто применяют следующую постановку эксперимента в ударной трубе [4–7]. Макроскопическая капля топлива диаметром несколько миллиметров помещается на расстоянии нескольких десятков миллиметров от торца ударной трубы в камере низкого давления. После разрыва диафрагмы, разделяющей камеры низкого и высокого давления, в камере низкого давления формируется ударная волна (УВ). В некоторый момент времени она достигает макрокаплю и воздействует на нее. Капля от этого воздействия разрушается и трансформируется в облако микрокапель. Отраженная от торца УВ проходит через образованную совокупность микрокапель и при определенных условиях воспламеняет образовавшееся облако микрокапель. Экспериментальные данные, например, в [4], обрабатывались в виде зависимости времени задержки воспламенения от обратной температуры за фронтом отраженной УВ для различных давлений газа  $p_5$  за отраженной УВ вблизи торца:  $p_5 = 23$  и  $45$  атм. Как оказалось, в интервале температур  $900 \div 1400$  К время задержки воспламенения может быть аппроксимировано двумя прямыми линиями с различными наклонами. Точка разрыва наклона соответствует  $1200$  К. Данные экспериментов приведены в таблице. Здесь из множества экспериментальных точек выбраны представительные сглаженные величины.

Зависимость времени задержки воспламенения от температуры газа за отраженной УВ

$\bar{T}$ , К	$t_{ign}$ , мс	$\bar{\rho}$ , кг/м <sup>3</sup>
1100,9	0,1	8,04
1000,10	0,2	8,84
909,11	0,4	9,82

Для построения математической модели, описывающей воспламенение облака микрокапель вблизи торца ударной трубы, т. е. в отраженных УВ, необходимо знание начальной объемной концентрации облака микрокапель суспензии, образованной от воздействия УВ на макрокаплю. Для приближенной оценки этой величины будем полагать в соответствии с [4], что облако микрокапель, возникшее от воздействия проходящей УВ на макроскопическую каплю радиусом  $1,5$  мм, занимает цилиндр радиусом  $R = 5$  мм и длиной  $l = 5$  см. Тогда определим количество частиц из условия сохранения объема микрокапель и макроскопической капли, записанного в виде  $\rho_{23}^0 n \frac{4\pi r_3^3}{3} = \rho_{23}^0 \frac{4\pi r_1^3}{3}$  ( $r_1$  — радиус макрокапли); таким образом,  $n = (r_1/r_3)^3$ . Поскольку  $m_2 = (n \cdot 4\pi r_3^3/3)/\pi R^2 l$ , то найдем и объемную концентрацию микрокапель по формуле

$$m_2 = \frac{4}{3} \left(\frac{r_3}{R}\right)^3 \frac{R}{l}.$$

### ОБЕЗРАЗМЕРИВАНИЕ

Уравнение кинетики кипения капли позволяет определить масштаб времени испарения следующим образом:  $t_{vap} = r_{30}^2 \rho_{23}^0 c_p / 2\lambda_1$ . Из уравнения кинетики горения газообразной паровой фазы находим масштаб для обезразмеривания предэкспонента:  $K_{20} = \rho_{110}^0 / t_{vap} v_{13}$ . Аналогично находим масштаб скорости испарения —  $w_{vap,0} = \rho_{11}^0 / t_0$ , теплоты горения паровой фазы —  $q_{20} = v_{13} c_p T_0$ , времени теплообмена —  $t_T = 4\rho_{110}^0 \rho_1 c_{p1} / 3Nu \cdot \rho_{23}^0 m_2 r_3$ , времени химической реакции —  $1/K_2$ . После этого безразмерные уравнения математической модели для описания воспламенения облака принимают вид

$$\dot{r}_3^2 = -Nu \cdot \ln \left( 1 + \frac{T_1 - T_{vap}}{L/c_p} \right),$$

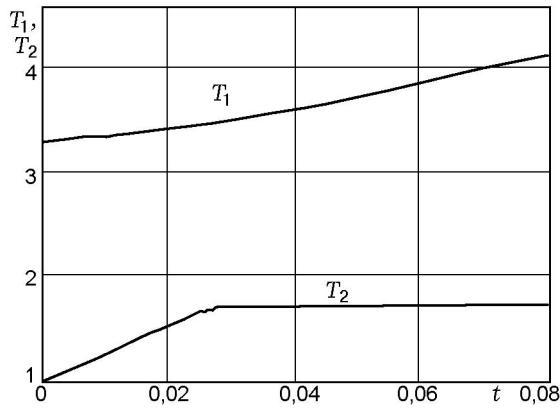


Рис. 1. Зависимость температуры капле (нижняя кривая) и температуры газа (верхняя кривая) от времени ( $p_0 = 23$  атм,  $T_{10} = 1000$  К,  $m_{20} = 0,005$ )

$$\dot{\rho}_{13} = \nu_{13} w^2,$$

$$\rho_1 c_p \dot{T}_1 = w^2 q_2 - w_{vap} \eta L - A_1 (T_1 - T_2),$$

$$A_1 = \frac{3Nu \cdot \rho_{23}^0 m_{20} r_3}{4\rho_{110}^0},$$

$$\rho_2 c_2 \dot{T}_2 = -w_{vap} (1 - \eta) L + A_1 (T_1 - T_2),$$

$$w_{vap} = \frac{3\rho_{23} Nu}{2r_3^2} \ln \left( 1 + \frac{T_1 - T_{vap}}{T_{vap}} \right) \equiv \frac{3\rho_{20} r_3 Nu}{2} \ln \left( 1 + \frac{T_1 - T_{vap}}{T_{vap}} \right),$$

$$T_{vap} = \frac{L}{c_p}.$$

Тем самым, с математической точки зрения решение задачи о воспламенении облака микрокапель в отраженной УВ сводится к решению задачи Коши для вышеприведенной системы уравнений.

### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ РАСЧЕТОВ

Некоторые типичные результаты численных расчетов представлены на рис. 1–4. Проведенные расчеты показали (рис. 1), что на первом временном интервале температура конденсированной фазы  $T_2$  под действием тепла, получаемого от нагретого за УВ газа, возрастает до

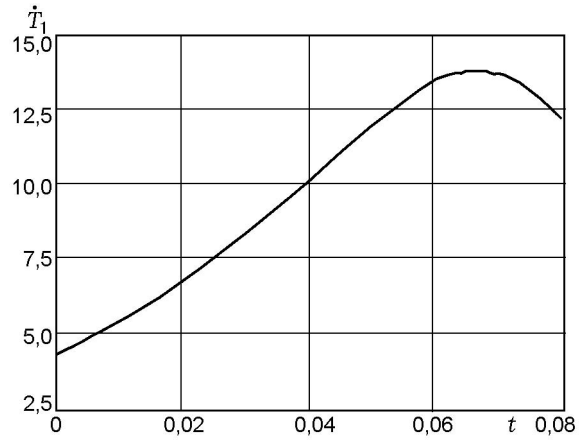


Рис. 2. Зависимость скорости нагрева газа и капли от времени ( $p_0 = 23$  атм,  $T_{10} = 1000$  К,  $m_{20} = 0,005$ )

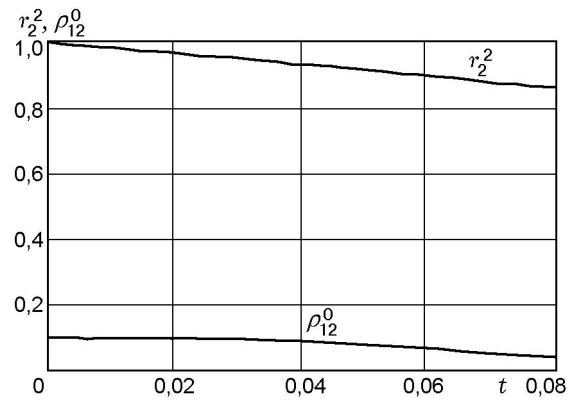


Рис. 3. Зависимость квадрата радиуса капли (верхняя кривая) и истинной плотности паров горючего (нижняя кривая) от времени ( $p_0 = 23$  атм,  $T_{10} = 1000$  К,  $m_{20} = 0,005$ )

температуры испарения. В последующем временном интервале температура микрокапель сохраняется постоянной, поскольку все получаемое тепло расходуется на испарение. Температура газовой фазы  $T_1$  при этом возрастает, поскольку в газ поступает тепло химической реакции, а на испарение расходуется не слишком много тепла. Очевидно, что испарение топлива происходит в неравновесном температурном режиме.

Скорость нагрева газовой фазы приведена на рис. 2. Она является важным параметром, так как достижение величиной  $T_1$  максимального значения определяет время срыва теплового равновесия или время задержки воспламенения. Как видно, на данном временном интервале этот параметр процесса достигает миниму-

ма в момент времени  $t = 0,07$ . Отметим, что на графике зависимости  $T_1(t)$  (см. рис. 1) в данной точке имеется перегиб, который определяется точкой, где  $\dot{T}_1 = 0$  (см. рис. 2).

В соответствии с дифференциальной формой записи закона Срезневского при испарении уменьшается радиус микрокапли (рис. 3). Из рис. 3 видно, что частица успевает воспламениться, притом что квадрат радиуса капли изменился только на 15 %. Здесь мы, кроме того, полагаем, что после достижения радиусом микрокапли значения, равного нулю, скорость испарения равняется тождественно нулю. Истинная плотность горючих паров в процессе воспламенения убывает, что и изображено на рис. 3 (нижняя кривая). Истинная плотность кислорода при этом уменьшается, а продуктов горения — возрастает (рис. 4).

Для верификации предложенной математической модели были определены такие параметры, как энергия активации  $E$  и предэкспонент  $K_2$ . При этом исходили из условия наилучшего совпадения расчетных и экспериментальных данных по зависимости времени задержки воспламенения от обратной температуры [4].

В качестве момента воспламенения, как упоминалось выше, нами принималось время достижения максимума производной от температуры газовой фазы. Это соответствует критерию Семенова в теории теплового взрыва.

Были проведены серии прямых расчетов с различными значениями  $E$ ,  $K_2$ . В расчетах принималось, что объемная концентрация конденсированной фазы равна  $5 \cdot 10^{-3}$  и  $K_2 = 1,1 \cdot 10^5$ , давление газа за фронтом отраженной ударной волны 23 атм. При этих значениях параметров определены значения  $t_{ign} = 0,18$  (0,14), 0,07 (0,07), 0,0225 (0,036) (в скобках приведены наиболее близкие значения из экспериментальных данных [4]) при температуре газа в отраженной волне 900, 1000, 1100 К. С тем же значением  $K_2$  были проведены расчеты  $t_{ign}$  для тех же значений температур, но с давлением вблизи торца 42 атм и объемной концентрацией капелек  $10 \cdot 10^{-3}$ . Это обусловлено тем обстоятельством, что после прохождения по смеси более сильной УВ увеличивается объемная концентрация облака частиц. В результате были получены значения  $t_{ign} = 0,125$  (0,07), 0,036 (0,036) при  $T = 925$  и 1000 К соответственно. Как следует из сравнения с данными [4], погрешность при этом не слишком большая.

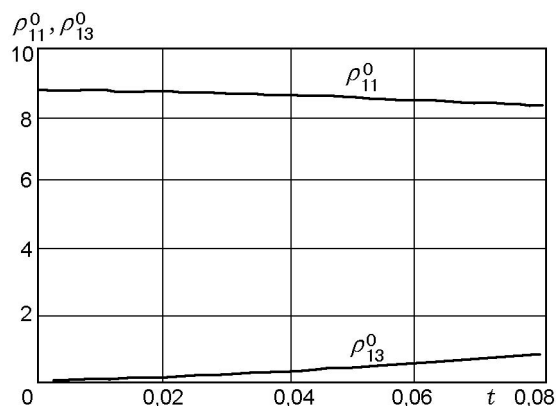


Рис. 4. Зависимость истинной плотности кислорода (верхняя кривая) и газообразных продуктов горения (нижняя кривая) от времени ( $p_0 = 23$  атм,  $T_{10} = 1000$  К,  $m_{20} = 0,005$ )

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный упрощенный вариант математической модели воспламенения облака микрокапель частиц тридекана удовлетворительно описывает картину воспламенения в диапазоне давлений за фронтом отраженной волны  $23 \div 42$  атм.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Федоров А. В., Фомин В. М. Численное исследование течений композитных реагирующих газовзвесей // ПМТФ. 1999. Т. 40, № 2. С. 128–136.
2. Федоров А. В., Фомин В. М., Волков С. И. Математическая модель воспламенения аэрозвеси жидкого горючего и твердых частиц // Физика горения и взрыва. 1997. Т. 33, № 3. С. 86–94.
3. Сборник задач по теории горения / В. В. Померанцев, К. М. Арефьев, Д. Б. Ахмедов и др. Л.: Энергоатомиздат, 1983.
4. Boiko V. M., Lotov V. V., Papyrin A. N. Ignition of liquid fuel drops in shock waves // Progress in Astronautics and Aeronautics; V. 124 / A. L. Kuhl, J.-C. Leyer, A. A. Borisov, W. A. Sirignano (Eds). 1989.
5. Kauffman C. W. and Nicholls J. A. Shock-wave ignition of liquid fuel drops // AIAA Journal. 1971. V. 9. P. 880–885.
6. Lu P. L., Slagg N. Chemical aspects in shock ignition of fuel droplets // Astronaut. Acta. 1972. V. 17. P. 693–702.
7. Sang-Chun Ran, Adel F. Sarofim and Janos M. Beer. Ignition and combustion of liquid fuel droplets. Part II: Ignition studies // Combust. Sci. Technol. 1986. V. 49. P. 169–184.