

УДК 536.46:533.6+534.222.2

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГОРЕНИЯ СУСПЕНЗИОННЫХ ГОРЮЧИХ

А. И. Кузьмин, С. С. Харченко

НПО «Государственный институт прикладной химии»,
197198 С.-Петербург

Предложена математическая модель горения суспензионных горючих в квазиодномерном приближении. Проведено численное исследование горения суспензии на основе углерода и толуола в камере сгорания и в сопле Лавала. Выявлена сильная зависимость полноты сгорания суспензии от коэффициента избытка окислителя α_{ox} с максимумом при $\alpha_{ox} \sim 1$.

Улучшение характеристик различных технических устройств с использованием жидких горючих требует большого труда. В связи с этим внимание исследователей привлекают суспензионные топлива. Отличительные особенности суспензий по сравнению с жидкими топливами — более высокая теплота сгорания единицы объема горючего и возможность регулирования состава продуктов сгорания в широких пределах за счет изменения содержания углерода. В то же время преимуществом жидких суспензий перед твердыми порошкообразными топливами является возможность их подачи в камеру сгорания аналогично жидким горючим.

Данная работа посвящена численному исследованию горения суспензий на основе углеводородного горючего и углерода в камере сгорания, а также в сопле Лавала. Для описания движения двухфазной среды использована модель вложенных континуумов [1].

При постановке задачи приняты следующие основные допущения: движение квазиодномерное, т. е. параметры среды осреднены по поперечному сечению канала; газ невязкий, вязкость и теплопроводность учитываются только при взаимодействии фаз; объемное содержание конденсированной фазы мало; химические реакции в газовой фазе равновесны; конденсированная фаза монодисперсна. Капли сферические, не взаимодействуют, их горение происходит индивидуально. В соответствии с экспериментальными данными [2] предполагалось, что горение суспензии происходит в две стадии: сначала испаряется и сгорает жидкий компонент, затем прогреваются и горят твердые частицы углерода. Частицы углерода, содержащиеся в капле суспензии, после выгорания жидкой фазы образуют агломерат. Поскольку при некоторых условиях, по-видимому, агломерат разрушается [2], рассматривалось также горение одиночных частиц углерода. Температура внутри и на поверхности капель и углеродных агломератов (частиц) постоянна. Газовая среда считается оптически тонкой для излучения частиц, излучение газовой фазы не учитывается.

С учетом вышеперечисленных предположений можно записать следующие уравнения:

баланса массы и импульса для газовой фазы

$$\frac{d}{dx}(\rho u S) = \chi_{21} S, \quad (1)$$

$$\frac{d}{dx}(\rho u^2 S) = -\frac{dn}{dx} S + F_{21} S + \chi_{21} u_p S; \quad (2)$$

для полной энергии системы

$$\frac{d}{dx} E = -Q_{\sigma} S; \quad (3)$$

для континуума частиц

$$\frac{d}{dx} (\rho_p u_p S) = -\chi_{21} S, \quad (4)$$

$$\frac{d}{dx} (\rho_p u_p^2 S) = -F_{21} S - \chi_{21} u_p S, \quad (5)$$

$$\frac{d}{dx} (\rho_p u_p h_p S) = -(E_{21} + \chi_{21} h_p + Q_{21} + Q_{\sigma}) S. \quad (6)$$

Уравнения баланса химических элементов в газовой фазе имеют вид

$$\frac{d}{dx} (\rho u C_{O, N}^* S) = 0, \quad (7)$$

$$\frac{d}{dx} (\rho u C_H^* S) = \chi_{21} \chi_H S, \quad (8)$$

$$C_C^* = 1 - C_N^* - C_O^* - C_H^*.$$

Уравнение состояния газовой фазы

$$p/\rho = RT/m.$$

Энтальпия газа вычисляется из уравнения полной энергии:

$$h = (E - \rho_p u_p h_p S - S \rho_p u_p^3 / 2) / \rho u S.$$

Здесь χ_H^0 — коэффициент массового содержания водорода в жидком горючем; $\chi_H = \chi_H^0$ или 0 соответственно при наличии и отсутствии жидкой фазы; S — площадь поперечного сечения канала; C_C^* , C_N^* , C_O^* , C_H^* — массовые концентрации химических элементов. Переносные свойства газовой смеси рассчитываются по формулам Уилки и Мэйсона — Саксена. Межфазное взаимодействие в записанной системе уравнений определяется источниками слагаемыми χ_{21} , F_{21} , E_{21} , Q_{21} , Q_{σ} , которые рассматриваются ниже. Остальные обозначения — общепринятые. Индекс p относится к конденсированной фазе.

Слагаемое, выражающее массообмен, запишем следующим образом [3]: для стадии нагрева жидкой фазы до температуры кипения $\chi_{21} = 0$; для стадии выгорания жидкой фазы

$$\chi_{21} = \pi N D_p Nu \ln(1 + B) \lambda(O_2) / c_p(O_2),$$

где $B = (T - T_{\text{кн}}) c_p / L$; для стадии нагрева и горения углерода $\chi_{21} = \pi N D_p^2 \sum K_i^{\text{эф}}$. Здесь $\lambda_{O_2} / c_p O_2$ рассчитывается при $T_m = (T_p + T) / 2$; N — число частиц в единице объема; D_p — диаметр частицы; L — удельная теплота сгорания жидкого горючего.

Межфазный обмен энергией, связанный с массообменом и протекающими при этом физико-химическими превращениями, выражен с помощью законов сохранения на поверхностях разрыва [4]:

$$E_{21} = \begin{cases} \chi_{21} L & \text{для стадии выгорания жидкой фазы,} \\ \sum_j \dot{\omega}_j h_j - \chi_{21} \dot{h}_C & \text{для стадии горения углерода,} \end{cases}$$

где h_C — энтальпия углерода; h_j — энтальпия компонентов газовой фазы; $\dot{\omega}_j$ — скорости образования и расходования газовых компонентов в гетерогенных реакциях.

Используемая модель физически соответствует тому, что тепло гетерогенных реакций, которое выделяется на поверхности частицы, мгновенно распределяется по ее объему и за счет теплообмена может передаваться газу. В действительности ситуация при горении углерода, по-видимому, несколько иная: заметная доля энергии гетерогенных реакций может выделяться прямо в газ, и часть ее идти на накачку колебательных степеней свободы [5]. К сожалению, данных для описания этого процесса недостаточно.

Предполагалось, что на поверхности углерода происходят следующие химические реакции:

1. $2C + O_2 = 2CO$;
2. $C + CO_2 = 2CO$;
3. $C + H_2O = CO + H_2$.

Для скорости первой реакции использовались данные [6], подтвержденные более поздними экспериментами [7]. Для второй реакции была выбрана константа, полученная в работе [8]. Для третьей реакции, следуя [6], константа была выбрана такой же, как и для второй.

В соотношениях для скоростей реакций используются концентрации газов на поверхности частиц $C_{i,s}$, которые очевидно не равны их значениям в потоке. Для нахождения неизвестных концентраций использован подход [2], в соответствии с которым массовые доли химических элементов на поверхности частицы

$$C_{C,s}^* = 1 - (1 - C_C^*) \exp(-2K/Sh) \quad \text{для углерода,}$$

$$C_{i,s}^* = C_i^* \exp(-2K/Sh) \quad \text{для остальных элементов.}$$

Здесь $K = (\bar{D}_z / \rho \bar{D}) \sum \kappa_i^{\text{эфф}}$ — безразмерная массовая скорость горения; \bar{D} — коэффициент диффузии. Так как K зависит от состава газа, определение концентраций и скоростей реакций происходило итерационно. Концентрации компонентов определялись соотношением химического равновесия по известным концентрациям элементов.

При составлении выражения для скорости горения должно учитываться наличие или отсутствие пор в рассматриваемом углеродном материале. Судя по экспериментальным данным [8], в частицах сажи, используемой при создании суспензий, при $T \approx 1800\text{--}2000$ К поры практически отсутствуют. Но при сжигании суспензий углерод горит в виде агломератов, обладающих большой внутренней поверхностью. В работе [9] предполагалось, что углеродные частицы скапливаются у поверхности капли суспензии, и агломерат представлялся в виде пористой оболочки и ядра, заполненного жидким горючим. Однако эксперимент [10] подтверждает это предположение, по-видимому, только для суспензий с низким (~ 10 % по массе) содержанием углерода и относительно нелетучим жидким горючим. Результаты экспериментов [2] для суспензии с 50 % углерода свидетельствуют о существенном изменении диаметра капли за время горения жидкого компонента, что указывает на сравнительно компактную упаковку углеродных частиц в агломерате.

Для учета внутреннего реагирования воспользуемся достаточно простым, но обоснованным подходом [11, 12], в соответствии с которым по-

правочный коэффициент

$$a_j = 1 + \Phi_j D \sigma (\operatorname{cth}(\Phi_j D_p / 2) - 2 / \Phi_j D_p) K_{jy},$$

где $\bar{\Psi}_j = \sqrt{S_V K_{jy} / D \sigma}$; $K_{jy} = \Psi_j (m_j / m_C) K_j / C_{js}$; S_V — поверхность, приходящаяся на единицу объема частицы; σ — коэффициент пористости (относительный объем пор); K_{jy} — скорость реакции с исключением влияния концентрации реагента; Ψ_j — стехиометрический коэффициент (для реакции с кислородом равен 0,5, для остальных — единице); D — коэффициент диффузии. Подчеркнем, что данный подход приближенный, приведенная формула для a_j получена для реакций первого порядка и не учитывает взаимовлияния реакций.

Запишем окончательное выражение для эффективной скорости реакции

$$K_j^{\text{эфф}} = K_j a_j.$$

Тогда для углеродных частиц

$$\chi_{21} = \dot{\omega}_1^C + \dot{\omega}_2^C + \dot{\omega}_3^C,$$

где $\dot{\omega}_j^C = K_j^{\text{эфф}} N S_1$; S_1 — площадь внешней поверхности одной частицы агломерата.

Использованные выше скорости расходования и образования газовых компонентов в гетерогенных реакциях в единице объема представим в виде

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_{O_2} &= -1/2 \cdot m_{O_2} / m_C \cdot \dot{\omega}_1^C, & \dot{\omega}_{CO_2} &= -m_{CO_2} / m_C \cdot \dot{\omega}_2^C, \\ \dot{\omega}_{H_2O} &= -m_{H_2O} / m_C \cdot \dot{\omega}_3^C, & \dot{\omega}_{CO} &= m_{CO} / m_C (\dot{\omega}_1^C + 2\dot{\omega}_2^C + \dot{\omega}_3^C), \\ \dot{\omega}_{H_2} &= m_{H_2} / m_C \cdot \dot{\omega}_3^C. \end{aligned}$$

Запишем силу межфазного трения в форме

$$F_{21} = -\frac{\rho_p (u - u_p)}{\tau_u},$$

где

$$\begin{aligned} \tau_u &= \frac{4}{3} \frac{\rho^0 D_p}{\rho C_D |u_p - u|}; & \rho^0 & \text{— плотность частицы суспензии;} \\ C_D &= \begin{cases} 0,44 f_{\text{ш}} & \text{при } Re > 10^3, \\ ((1 + 0,15 Re^{0,687}) 24 / Re) f_{\text{ш}} & \text{при } Re \leq 10^3; \end{cases} \\ f_{\text{ш}} &= \begin{cases} 1 & \text{для капли,} \\ \zeta & \text{для агломерата;} \end{cases} & Re &= \rho |u - u_p| D_p / \mu; & Pr &= \mu c_p / \lambda. \end{aligned}$$

Для фактора, учитывающего шероховатость, принято $\zeta = 6,7$ [2].

Для расчета контактного теплообмена использовалось выражение

$$Q_{21} = N \pi D_p^2 \alpha \frac{z}{e^z - 1} (T_p - T),$$

где $z = c_p \chi_{21} / (N \pi D_p \lambda Nu)$; $Nu = (2 + 0,552 Re^{1/2} Pr^{1/3}) f_{\text{ш}}$; $\alpha = Nu \lambda / D_p$.

Излучение твердых частиц Q_σ вычисляется на основе закона Стефана — Больцмана.

Система дифференциальных уравнений (1)–(8) с учетом выписанных дополнительных замыкающих алгебраических соотношений решалась с помощью неявного численного метода относительно переменных ρ , u , E ,

ρ_p, u_p, h_p, C_p^* . Критерием перехода от расчета капли к расчету агломерата служило равенство расходов конденсированной фазы и частиц углерода, содержащихся изначально в суспензии.

Для тестирования разработанной модели было проведено сопоставление результатов расчетов (рис. 1) с экспериментальными данными [2]. Поскольку физико-химические свойства жидкого топлива, использованного в [2], неизвестны, расчет проводился, начиная с момента выгорания жидкой компоненты суспензии и начала прогрева и горения углеродных частиц. Такая частичная проверка модели представляет интерес, так как именно горение агломерата дает основной вклад во время горения частицы суспензии (см. ниже). Как видно из рис. 1 расчет (при $\sigma = 0,45$) и эксперимент удовлетворительно согласуются. Подобное соответствие получено также в [9]. Однако сопоставление с другими экспериментами [2] дало качественно сходные, но количественно сильно отличающиеся результаты. Расхождение может быть вызвано теплоотводом в термопару, на которой была подвешена капля. Следует также отметить, что в [2] не приведена температура стенки, которую необходимо знать для расчета лучистых потоков тепла. Между тем излучение играет важную роль в горении частиц, особенно при высоких температурах. В настоящей работе, так же как и в [9], температура стенки принята постоянной и равной 1200 К. В дальнейшем желательно продолжить сопоставление разработанной модели с поставленными экспериментами.

Проведено численное исследование горения углеродной суспензии на основе толуола и углерода с воздухом в камере сгорания. Диаметр капле суспензии $D_p = 50$ мкм, диаметр частиц углерода $d = 0,3$ мкм, $\sigma = 0,37$, $T_p = 300$ К, $u_p = 10$ м/с. Расход конденсированной фазы $g_p = 60$ г/с (соответствует коэффициенту избытка окислителя по жидкой компоненте $\alpha_{ox} = 2$), массовая доля углерода в суспензии 0,5. Начальные условия для воздуха: $T = 1000$ К, $u = 50$ м/с, $p = 2 \cdot 10^6$ Па. Диаметр камеры сгорания полагался равным 6,5 см, температура стенок 500 К. Предполагалось, что горение происходит без какой-либо стабилизации, за счет самовоспламенения жидкого компонента.

Результаты расчета (рис. 2) показывают, что выравнивание скоростей двух фаз происходит быстро в начале камеры сгорания, а выравнивание температур частиц и газа — существенно медленнее из-за химического реагирования. На рисунке явно выделяются две разномасштабные области — горения жидкого топлива и существенно более длинная

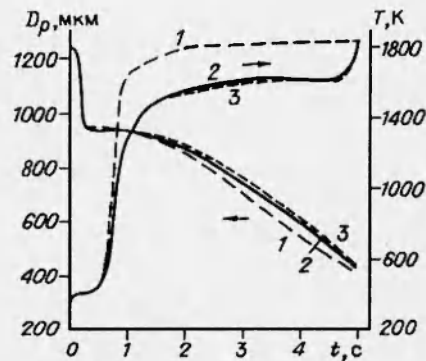


Рис. 1. Эволюция во времени капли суспензии:

1 — настоящая работа, 2 — эксперимент [2], 3 — расчет [9].

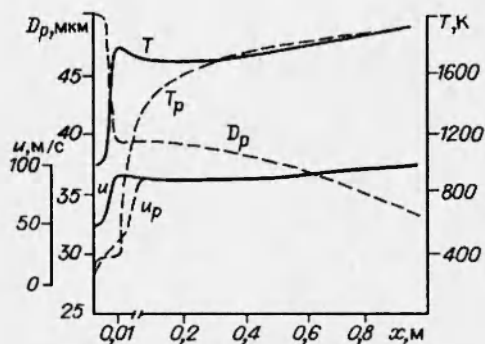


Рис. 2. Изменение параметров газа и суспензии по длине камеры сгорания.

область горения углеродного агломерата. В последней наблюдаются зоны прогрева углеродной частицы, индукции и интенсивного химического реагирования.

На рис. 3 приведены результаты расчета полноты сгорания

$$\varphi = ((\rho_p u_p S)_0 - (\rho_p u_p S)) / (\rho_p u_p S)_0$$

на выходе камеры сгорания (длиной 1 м) при различных начальных диаметрах частиц и коэффициентах избытка окислителя α_{ox} . Увеличение диаметра капель (свыше 15–20 мкм) сильно затрудняет их сжигание. Согласно [2], катализированная суспензия обладает способностью к самопроизвольному разрушению агломерата после полного испарения жидкости. В случае распада агломерата после выгорания жидкой фазы предполагалось, что конденсированная фаза состоит не из углеродных агломератов, образующихся из капель суспензии, а из первичных сажевых частиц. Результаты расчета показывают, что распад агломерата существенно ускоряет горение при $\alpha_{ox} \leq 2,5$. При этом за счет малого размера частиц происходит ускорение теплообмена с газом, и температуры газа и частиц практически полностью выравниваются.

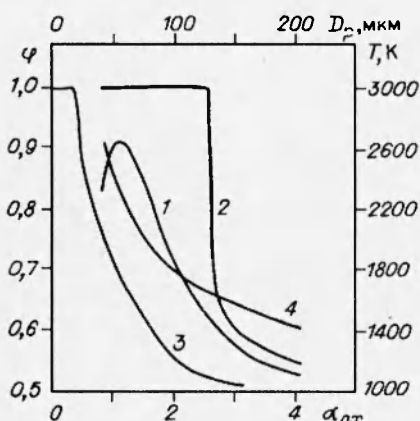


Рис. 3. Полнота сгорания (1–3) и температура газа после выкипания жидкой фазы (4).

1, 2 — $\varphi(\alpha_{ox})$ (1 — агломерат, 2 — с распадом агломерата); 3 — $\varphi(D_p)$; 4 — $T(\alpha_{ox})$.

интервале α_{ox} . Максимальная полнота сгорания достигалась при $\alpha_{ox} \approx 1$.

Также рассмотрено двухстадийное смешение суспензии с воздухом. В начале камеры сгорания задавались значения $\alpha_{ox} = 1$ и 1,5, затем на расстоянии 2–20 см подавалось дополнительное количество воздуха до $\alpha_{ox} = 2,5$. Температура воздуха 600 К, диаметр капель суспензии 50 мкм. Параметры потока и состав газовой среды рассчитывались в предположении мгновенного смешения исходя из законов сохранения расхода, импульса и энергии.

Результаты расчетов показали, что двухстадийная подача оказывается лучше одностадийной. Наибольшая полнота сгорания достигалась при $\alpha_{ox} = 1$ и при подаче воздуха на максимальном расстоянии. Это связано с тем, что при $\alpha_{ox} = 1$ достигается максимальная температура продуктов сгорания жидкого компонента суспензии, и процесс горения на начальном участке камеры сгорания идет наиболее интенсивно. Добавление более холодного воздуха приводит к быстрому охлаждению частиц и торможению их горения. Расчеты показали, что при уменьшении α_{ox} (за счет высоких

Характер горения углеродных частиц существенно зависит от α_{ox} . При $\alpha_{ox} > 2,5$ температура газа невелика и режим горения кинетический. Скорость расходования агломерата в этом случае определяется скоростью реакций и сравнительно слабо зависит от размера частиц. При уменьшении α_{ox} (и, соответственно, увеличении температуры газа) скорости реакций растут и становятся сравнимыми со скоростями диффузии. Это приводит к уменьшению концентраций реагирующих газов на поверхности частиц. Расчеты показывают, что при $\alpha_{ox} < 1,5$ режим горения диффузионный. Для мелких частиц (в частности, при распаде агломерата) скорости диффузии велики и горение определяется скоростями реакций во всем

температур) горение идет более интенсивно на начальном участке камеры сгорания, а затем на расстоянии порядка десятка сантиметров тормозится в связи с нехваткой окислителя. Таким образом, наиболее эффективным представляется сжигание суспензии при $\alpha_{ox} \approx 1$ с последующей дополнительной подачей воздуха для получения требуемого состава газа в одну или две стадии.

На рис. 4 представлены результаты расчета течения в сопле за камерой сгорания. Угол полураствора дозвуковой части сопла 45° , сверхзвуковой части 15° , радиус критического сечения 1 мм. Расход конденсированной фазы 0,6 г/с, $T = 1200$ К, $T_p = 300$ К, $u = 0,6$ м/с, $u_p = 0,5$ м/с. Из приведенных данных видно, что при течении по соплу температура частиц и полнота сгорания плавно «замораживаются». В сверхзвуковой части сопла температура углеродных агломератов остается весьма высокой и горение их продолжается, но время пребывания слишком мало, поэтому масса частиц практически не меняется. Отметим, что вследствие сильного разогрева частиц поток продуктов сгорания на выходе из сопла будет интенсивно излучать. Сама по себе суспензия — горючее малораспространенное, но она может быть применена как модель для широко используемых тяжелых углеводородных горючих, при горении которых образуется коксовый остаток. Кроме того, рассмотренная модель включает в себя как частные случаи горения жидких капель и углеродных частиц. Поэтому разработанная математическая модель может быть использована для исследования горения широкого круга горючих с воздухом.

В заключение сформулируем основные результаты работы. Предложена математическая модель горения суспензионных горючих с воздухом, проведено сопоставление с экспериментом основной стадии выгорания углеродного агломерата.

На ее основе получены новые результаты. В частности, для исследованного диапазона параметров установлено, что при одностадийном смешении суспензии с воздухом максимальная полнота сгорания достигается при $\alpha_{ox} \approx 1$. Выявлена сильная зависимость $\varphi(\alpha_{ox})$, особенно ярко выраженная для случая распада агломерата. В этом случае зависимость носит практически пороговый характер, и при $\alpha_{ox} \geq 2,5$ наблюдается резкое падение полноты сгорания.

Авторы выражают признательность Г. Н. Волчковой за обсуждение материалов работы.

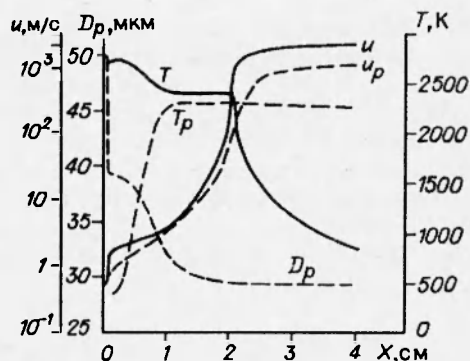


Рис. 4. Изменение параметров газа и суспензии по длине сопла.

ЛИТЕРАТУРА

1. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. М.: Наука, 1987. Ч. 1, 2.
2. Шекли Г. А., Фит Г. М. Характеристики горения капель углеродного па-стообразного топлива // Ракетная техника и космонавтика. 1982. Т. 20, № 4. С. 118.
3. Сполдинг Д. Б. Горение и массообмен. М.: Машиностроение, 1985.
4. Вильямс Ф. А. Теория горения. М.: Наука, 1971.

5. **Веселов С. Н., Заклязьминский Л. А., Маркачев Ю. Е.** Численное моделирование горения частиц углерода в воздухе // Физика горения и взрыва. 1986. Т. 22, № 3. С. 38–44.
6. **Nagle J., Strickland-Constable R. F.** Oxidation of carbon between 1000–2000 °C // Proc. 5th Conf. of Carbon. 1962. P. 154.
7. **Park C., Appleton J. P.** Shock-tube measurements of soot oxidation rates // Combust. Flame. 1973. V. 20. P. 369.
8. **Цыбулевский А. М., Теснер П. А.** Газификация дисперсного углерода в диффузионных пламенах углеводородов. I. Пламена ацетилен-азотных смесей // Физика горения и взрыва. 1966. Т. 2, № 2. С. 61–67.
9. **Chung J. N.** A numerical model of coal/hydrocarbons droplets in spray combustion. N. Y., 1984. (Paper / AIAA; N 84-0039).
10. **Miyasaka K., Law C. K.** Combustion and agglomeration of coal-oil mixtures in furnace environments // Combust. Sci. Technol. 1980. V. 24. P. 71.
11. **Предводителев А. С., Хитрин Л. Н.** Горение углерода. М.: Изд-во АН СССР, 1949.
12. **Кнорре Г. Ф. и др.** Теория топочных процессов. М.; Л.: Энергия, 1966.

*Поступила в редакцию 13/VIII 1992 г.,
в окончательном варианте — 19/V 1995 г.*
