

УДК 534.222.2

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ДИФфуЗИОННОГО ГОРЕНИЯ КАПЛИ С УЧЕТОМ НЕСКОЛЬКИХ НЕЗАВИСИМЫХ РЕАКЦИЙ

В. М. Гендугов, Н. Н. Смирнов, В. В. Тюренькова

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119992 Москва
tyurenkova.v.v@yandex.ru

Исследовано стационарное горение капли жидкого горючего в среде газообразного окислителя при равновесном и неравновесном испарении с поверхности. Исходя из того, что взаимодействие горючего и окислителя не ограничивается одной реакцией, а идет, как правило, по цепному или нецепному многостадийному механизму, проведено обобщение метода Шваба — Зельдовича для нескольких реакций. Полученные результаты показали, что указанный способ решения, протестированный для случая двух реакций, эффективен при решении задач горения.

Ключевые слова: газ, жидкость, капля, горючее, испарение, горение, диффузия.

ВВЕДЕНИЕ

Смеси газа с каплями горючего участвуют в различных природных и технологических процессах. Разработка новых схем и типов двигателей приводит к необходимости исследования горения распыленного жидкого горючего [1–3]. Изучение этих процессов невозможно без исследования механизмов горения и испарения отдельных капель.

Одним из важных факторов в рассматриваемых процессах является скорость протекания химической реакции, которая в системах с распределенными параметрами определяется не только кинетикой, но и диффузией реагирующего вещества. В случае, когда реакционная способность реагирующего вещества много больше скорости его диффузии, основным является процесс диффузии. Если же скорость химических взаимодействий сравнима или меньше скорости диффузии, определяющей становится кинетика реакции. Таким образом, режим реагирования (диффузионный или кинетический) для каждой конкретной задачи зависит от характера распределения параметров.

Обычно математическая модель горения одиночной капли строится в предположении равновесного состояния на поверхности фазового перехода, даже при учете нестационарных эффектов [4]. Сравнение теоретических и экспериментальных результатов показало, что это

допущение эффективно для больших капель и плоских поверхностей, но дает существенную ошибку для малых капель [5–8]. Как правило, в математических моделях диффузионного горения капель учитывалась возможность протекания одной брутто-реакции и, как следствие, существование одной поверхности диффузионного пламени, на чем основан метод Шваба — Зельдовича [2, 3]. Однако эксперименты по диффузионному горению в пограничном слое [9] показывали, что существуют промежуточные продукты реакции горения спирта, которые образуются на одной поверхности и полностью реагируют на другой поверхности. Таким образом, для описания диффузионного горения необходимо учитывать возможность образования нескольких поверхностей, на которых могут протекать реакции.

Цель данной работы — это, во-первых, развитие математической модели процесса горения капли с учетом неравновесного испарения и определение степени влияния неравновесного фазового перехода на поверхности раздела на характер решения, во-вторых, построение простой модели диффузионного горения с учетом множества протекающих независимых брутто-реакций, что позволяет определить макроскопические характеристики горения.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Будем рассматривать сферически-симметричную задачу горения одиночной, равномерно прогретой капли постоянного радиуса в системе координат, начало которой совпадает с цен-

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 12-03-00213).

тром симметрии [2, 3], область $x > x_w$ соответствует смеси газов, $0 < x < x_w$ — жидкости, $x = x_w$ — поверхности капли.

Сначала определим некоторые используемые далее параметры: \dot{M}_i — массовая скорость рождения i -го компонента, h_i^0 — удельная энтальпия образования i -го компонента,

$$h = \sum_{i=1}^N Y_i h_i$$

— удельная энтальпия всей смеси,

где $h_i = c_{pi}T + h_i^0$, Y_i — концентрация i -го компонента, $h_{Li} = (h_i)_g - (h_i)_l$ — удельная теплота фазового перехода i -го компонента,

$c_p = \sum_{i=1}^N Y_i c_{pi}$ — удельная теплоемкость смеси,

ν'_{ij} , ν''_{ij} — стехиометрический коэффициент i -го компонента соответственно до и после j -й реакции, μ — коэффициент динамической вязкости, D — коэффициент диффузии.

Будем предполагать, что горение капли протекает в квазистационарном режиме, т. е. размеры капли с течением времени уменьшаются значительно медленнее, чем устанавливается газодинамическая картина течения в окрестности капли. Данное предположение подтверждается тем, что скорость уменьшения диаметра капли в $(\rho_g/\rho_l) \cdot 10^{-3}$ раз меньше скорости оттока газов от поверхности (ρ_g , ρ_l — плотность газа и жидкости). В рамках этого предположения скорость выгорания определяется в каждый момент времени из стационарного решения.

При наличии массовых сил (сил тяжести) могут возникнуть термогравитационные конвективные течения в окрестности капли, являющиеся существенным эффектом при $\text{Ma} = \frac{t_{\text{evap}}}{t_{\text{conv}}} = \frac{\sqrt{g x_w^3 h_L}}{D c_{pe} (T_e - T_w + Y_{1e} \Phi_N \Delta H)} > 1$. Здесь t_{evap} — характерное время испарения, t_{conv} — характерное время тепловой конвекции, g — ускорение свободного падения, T_e — температура во внешнем потоке, T_w — температура на поверхности капли, $\Phi_N = \frac{m_N (\nu''_N - \nu'_N)}{m_1 (\nu''_1 - \nu'_1)}$ — стехиометрическое отношение (индекс 1 относится к окислителю, индекс N — к горючему), ΔH — удельная теплота сгорания горючего. Тогда для капель радиусом $x_w^{3/2} < \frac{D c_{pe} (T_e - T_w + Y_{1e} \Phi_N \Delta H)}{\sqrt{g} h_L}$ влиянием термогравитационных конвективных те-

чений в окрестности капли можно пренебречь ($\text{Ma} < 1$) [5].

Система уравнений для описания стационарной задачи имеет следующий вид [2, 3]:

$$\frac{d}{dx} (\rho v x^2) = 0,$$

$$\frac{d}{dx} (\rho v^2 x^2) = \frac{d}{dx} \left(x^2 \mu \frac{dv}{dx} \right) - x^2 \frac{dp}{dx},$$

$$\frac{d}{dx} (\rho Y_i v x^2) = \frac{d}{dx} \left(x^2 \rho D \frac{dY_i}{dx} \right) + \dot{M}_i, \quad i = 1, \dots, N,$$

$$\frac{d}{dx} (\rho h v x^2) = \frac{d}{dx} \left(x^2 \lambda \frac{dT}{dx} \right) + \frac{d}{dx} \left(x^2 \mu v \frac{dv}{dx} \right) + \frac{d}{dx} \left(x^2 \rho D \sum_{i=1}^N h_i \frac{dY_i}{dx} \right),$$

$$p = \rho R T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{m_i}.$$

Будем предполагать, что скорости газа, вызванные наличием горения, незначительны ($v^2 \ll p/\rho$). Эффектами, связанными с трением и относительным изменением давления, можно пренебречь. Тогда вместо уравнения количества движения будем применять условие гомобаричности ($dp/dx = 0$) [2].

В данной статье рассматривается случай, когда все химические реакции происходят на K поверхностях пламени, т. е. когда N компонентов, образовавшихся при взаимодействии горючего и окислителя, участвуют в K брутто-реакциях. Система уравнений для решения данной задачи при принятых предположениях имеет вид:

$$\frac{d}{dx} (\rho v x^2) = 0, \quad (1a)$$

$$\frac{d}{dx} (\rho Y_i v x^2) = \frac{d}{dx} \left(x^2 \rho D \frac{dY_i}{dx} \right) + \dot{M}_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (1б)$$

$$\frac{d}{dx} (\rho v h x^2) = \frac{d}{dx} \left(x^2 \rho D \frac{dh}{dx} \right), \quad (1в)$$

$$p = \rho R T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{m_i} = \text{const}. \quad (1г)$$

Граничные условия на поверхности раздела фаз:

$$(\rho v)_g = \dot{m}, \quad \dot{m} Y_{ig} = \left(\rho D \frac{dY_i}{dx} \right)_g, \quad (2)$$

$$\dot{m}(Y_{Ng} - 1) = \left(\rho D \frac{dY_N}{dx} \right)_g, \quad h_L \dot{m} = \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right)_g,$$

где \dot{m} — массовая скорость испарения жидкости.

При наличии K независимых брутто-реакций скорость образования i -го компонента определяется в уравнениях (1) соотношением

$$\dot{M}_i = \sum_{j=1}^K \omega_{ij}, \quad \text{где } \omega_{ij} \text{ — массовая скорость рож-$$

дения i -го компонента в j -й реакции.

В свою очередь, ω_{ij} связаны следующими соотношениями:

$$\frac{\omega_{ij}}{m_i(\nu''_{ij} - \nu'_{ij})} = \frac{\omega_{kj}}{m_i(\nu''_{kj} - \nu'_{kj})} = \omega_j, \\ j = 1, \dots, K, \quad i = 1, \dots, N,$$

где K соответствует количеству независимых брутто-реакций. Тогда массовые скорости образования компонентов \dot{M}_i можно выразить через K независимых величин:

$$\dot{M}_i = \sum_{j=1}^K m_i(\nu''_{ij} - \nu'_{ij})\omega_j, \quad i = 1, \dots, N. \quad (3)$$

Пусть $\|m_i(\nu''_{ij} - \nu'_{ij})\| = \|M_{ij}\|$, $\det \|M_{ij}\| = D \neq 0$, A_{ij} — алгебраическое дополнение к элементу матрицы M_{ij} . Выразим независимые величины из первых K уравнений системы (3):

$$\omega_j = \frac{1}{D} \sum_{n=1}^K \dot{M}_n A_{nj}. \quad (4)$$

Подставив (4) в оставшиеся уравнения (3), получим

$$\dot{M}_i = \sum_{j=1}^K \sum_{n=1}^K M_{ij} \dot{M}_n \frac{A_{nj}}{D}, \quad i = K + 1, \dots, N. \quad (4a)$$

Умножим каждое уравнение (1б) для $j = 1, \dots, K$ на A_{nj} и просуммируем по i для каждого $j = 1, \dots, K$. Получим K сумм уравнений по числу независимых реакций. Каждую из этих сумм умножим на $m_i(\nu''_{ij} - \nu'_{ij})/D$, $i =$

$K + 1, \dots, N$, и сложим по $j = 1, \dots, K$. В результате имеем систему уравнений

$$\frac{d}{dx} (\rho v x^2 \alpha_i) = \frac{d}{dx} \left(\rho D x^2 \frac{d\alpha_i}{dx} \right) + \\ + \sum_{j=1}^K \sum_{n=1}^K M_{ij} \dot{M}_n \frac{A_{nj}}{D}, \quad i = K + 1, \dots, N, \quad (5)$$

где

$$\alpha_i = \sum_{n=1}^K \Phi_{in} Y_n, \quad \Phi_{in} = \sum_{j=1}^K \frac{m_i(\nu''_{ij} - \nu'_{ij}) A_{nj}}{D} \text{ —}$$

стехиометрическое отношение для i -го и n -го компонентов. Вычитая уравнение (5) из (1б), запишем

$$\frac{d}{dx} (\rho v x^2 \beta_i) = \frac{d}{dx} \left(\rho D x^2 \frac{d\beta_i}{dx} \right), \quad i = K + 1, \dots, N, \\ \beta_i = Y_i - \alpha_i. \quad (6)$$

Умножим уравнение (1б) для $i = 1, \dots, N$ на h_i^0 и просуммируем по $i = 1, \dots, N$. Вычитая полученную сумму из (1б) и используя (4а), приведем уравнение энергии к виду

$$\frac{d}{dx} (\rho v x^2 c_p T) = \\ = \frac{d}{dx} \left(\rho D x^2 \frac{dc_p T}{dx} \right) - \sum_{n=1}^K \Delta H_n \omega_n, \quad (7)$$

где $\Delta H_n = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^K \frac{h_i^0 m_i(\nu''_{ij} - \nu'_{ij}) A_{nj}}{D}$ — сум-

марное энерговыделение в сложной реакции на единицу массы n -го компонента. Умножим (1б) на A_{ij} , просуммируем по i , а полученные сум-

мы умножим на $\sum_{i=1}^N \frac{h_i^0 m_i(\nu''_{ij} - \nu'_{ij})}{D}$ и сложим

по j . Складывая почленно с (7), перепишем уравнение энергии в виде (6), где

$$\beta_H = c_p T + \sum_{n=1}^K \Delta H_n Y_n.$$

Таким образом, система (1а), (1б) сводится к следующей:

$$\frac{d}{dx} (\rho Y_i v x^2) = \frac{d}{dx} \left(x^2 \rho D \frac{dY_i}{dx} \right) + \dot{M}_i,$$

$$i = 1, \dots, K,$$

$$\frac{d}{dx} (\rho v x^2 \beta_i) = \frac{d}{dx} \left(\rho D x^2 \frac{d\beta_i}{dx} \right), \quad (8)$$

$$i = K + 1, \dots, N, H,$$

$$\beta_i = Y_i - \alpha_i, \quad \beta_H = c_p T + \sum_{n=1}^K \Delta H_n Y_n.$$

Для описания неравновесного испарения на поверхности фазового перехода воспользуемся уравнением Герца — Кнудсена [3]:

$$\dot{m} = \delta_i \sqrt{\frac{m_i}{2\pi RT}} (p_i^*(T_w) - p_i), \quad (9)$$

которое, введя молярную концентрацию i -го компонента X_i , перепишем в виде

$$p_e X_i = p_i^*(T_w) - \Delta p_i, \quad (10)$$

причем $\Delta p_i = \frac{1}{\delta_i} \sqrt{\frac{2\pi RT}{m_i}} \dot{m}$ в неравновесном случае и $\Delta p_i = 0$ в равновесном. Здесь δ_i — коэффициент аккомодации, p_e — полное давление на бесконечности, p_i — парциальное давление i -го компонента в газовой смеси у поверхности раздела фаз, p_i^* — равновесное давление паров у поверхности фазового перехода при температуре T_w , определяемое из уравнения Менделеева — Клапейрона $\frac{p_0}{p_i^*} = \exp \frac{h_{Li} m_i}{R} \left(\frac{1}{T_w} - \frac{1}{T_0} \right)$, где p_0 — парциальное давление паров при температуре T_0 .

Граничные условия запишем в предположении отсутствия на бесконечности продуктов реакции и наличия во внешней среде только окислителя и инертного компонента:

$$T = T_e, \quad Y_1 = Y_{1e}, \quad Y_{Ie} = 1 - Y_{1e}, \quad Y_{ie} = 0,$$

$$i = 2, \dots, N, \quad i \neq I.$$

Проинтегрируем уравнение (1а) с учетом первого граничного условия (2). Тогда в пределах газовой фазы

$$\rho v = \dot{m} \frac{x_w^2}{x^2}.$$

Введя безразмерные переменные $z = x/x_w$, $Pe = \dot{m} x_w / (\rho D)$ и используя последнее равенство, приведем систему (8) к виду

$$\frac{d\beta_i}{dz} = \frac{d}{dz} \frac{z^2}{Pe} \frac{d\beta_i}{dz}. \quad (11)$$

Используя новую переменную $\xi(z) = \int_z^\infty \frac{Pe}{z^2} dz$, преобразуем уравнение (11):

$$\frac{d\beta_i}{d\xi} = -\frac{d^2 \beta_i}{d\xi^2}. \quad (12)$$

Решение уравнения (12) имеет следующий вид:

$$\beta_i = A_i + B_i e^{-\xi}. \quad (13)$$

Тогда из граничных условий (2) для функции β_i имеем:

$$\left(\frac{d\beta_i}{d\xi} \right)_w = -Y_{iw} + \sum_{n=1}^K \Phi_{in} Y_{nw}, \quad (14a)$$

$$\left(\frac{d\beta_N}{d\xi} \right)_w = 1 - Y_{Nw} + \sum_{n=1}^K \Phi_{Nn} Y_{nw}, \quad (14б)$$

$$\left(\frac{d\beta_H}{d\xi} \right)_w = -h_L - \sum_{i=1}^K \Delta H_n Y_{nw}, \quad (14в)$$

Уравнения (13) и (14) позволяют найти выражения для ξ_w , Y_{Nw} , Y_{iw} :

$$\xi_w = \ln \left(c_{pe} T_e - c_{pw} T_w + h_L + \sum_{n=1}^K \Delta H_n Y_{ne} \right) - \ln \left(h_L + \sum_{n=1}^K \Delta H_n Y_{nw} \right), \quad (15a)$$

$$Y_{Nw} = 1 + \sum_{n=1}^K \Phi_{Nn} Y_{nw} - \left(1 + \sum_{n=1}^K \Phi_{Nn} Y_{ne} \right) e^{-\xi_w}, \quad (15б)$$

$$Y_{iw} = \left(Y_{ie} - \sum_{i=1}^K \Phi_{in} Y_{ne} \right) e^{-\xi_w} + \sum_{n=1}^K \Phi_{in} Y_{nw}. \quad (15в)$$

Используя (15), находим

$$T_w = \left[c_{pe} T_e + \sum_{n=1}^K \Delta H_n Y_{ne} + h_L - e^{\xi_w} \left(\sum_{n=1}^K \Delta H_n Y_{nw} + h_L \right) \right] / c_{pw}. \quad (16)$$

Теперь преобразуем (9):

$$X_N = X_N^* - \varsigma_N,$$

$$\text{где } \varsigma_N = \frac{\Delta p_N}{p_e} = \text{Pe} I_N \sqrt{\frac{T_w \Gamma_{ew} c_{pw} m_w}{T_e c_{pe} m_N}}, \quad I_N = \frac{D_{eN}}{\delta_N x_w} \sqrt{\frac{2\pi}{R_e T_e}}.$$

Далее получаем уравнение для определения ξ_w или числа Пекле Pe :

$$Y_{Nw} \frac{m_w}{m_N} = X_N^*(T_w) - \text{Pe} I_N \sqrt{\frac{T_w \Gamma_{ew} c_{pw} m_w}{T_e c_{pe} m_N}},$$

$$X_N^*(T_w) = \frac{p_N^*}{p_e} = \frac{p_0}{p_e} \exp \left[\frac{h_L m_N}{R} \left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T_w} \right) \right], \quad (17)$$

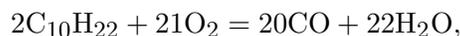
$$m_w = \left(\sum_{i=1}^N \frac{Y_{iw}}{m_i} \right)^{-1}, \quad \Gamma_{ew} = \frac{\gamma_c (\gamma_w - 1)}{\gamma_w (\gamma_c - 1)},$$

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v}.$$

Если концентрации всех независимых компонентов у поверхности раздела фаз равны нулю $Y_{iw} = 0$, $i = 1, \dots, K$, то приведенные выше формулы совпадают с соответствующими формулами для одной реакции [10].

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ГОРЕНИЯ КАПЛИ n -ДЕКАНА В ВОЗДУХЕ ПРИ ПРОТЕКАНИИ ДВУХ НЕЗАВИСИМЫХ РЕАКЦИЙ

В качестве примера рассмотрим горение углеводорода (n -декана) в воздухе, обогащенном кислородом. Расчет проведем для модельного случая, когда присутствуют две поверхности пламени ($K = 2$), на которых локализованы химические превращения, связанные следующими брутто-соотношениями: на первой поверхности пламени



на второй поверхности пламени



Пусть $x = x_*$ и $x = x_{**}$ — первая и вторая поверхности пламени соответственно. Для решения задачи проведем обобщение метода Шваба — Зельдовича следующим образом: $Y_N = 0$ при $x \geq x_*$, $Y_1 = 0$ при $x \leq x_*$, $Y_2 = 0$ при $x \geq x_{**}$.

Пусть индекс $i = 1$ соответствует кислороду O_2 , которого нет ниже первой поверхности пламени, индекс $i = 2$ — угарному газу CO , который отсутствует выше второй поверхности.

Используя уравнения (13) и (14б), определим вид функции β_N при $K = 2$:

$$\beta_N = 1 - (1 + \Phi_{N1} Y_{1e}) e^{-\xi}. \quad (18)$$

На первой поверхности пламени концентрации горючего и окислителя равны нулю ($Y_{N*} = 0$, $Y_{1*} = 0$), поэтому

$$\beta_N(\xi_*) = -Y_{2*} \Phi_{N**}. \quad (19)$$

Тогда из (18) и (19) следует, что

$$e^{-\xi_*} = \frac{1 + Y_{2*} \Phi_{N2}}{1 + \Phi_{N1} Y_{1e}}. \quad (19a)$$

Из (15а) и (19а) получаем соотношение для определения первой поверхности пламени ($x = x_*$):

$$z_* = x_*/x_w = \frac{[\ln(c_{pe} T_e - c_{pw} T_w + h_L + \Delta H_1 Y_{1e}) - \ln(h_L + \Delta H_2 Y_{2w})] / [\ln(Y_{1e} \Phi_{N1} + 1) - \ln(Y_{2*} \Phi_{N2} + 1)]}{1}.$$

На второй поверхности пламени $Y_{N**} = 0$, $Y_{2**} = 0$, поэтому

$$\beta_N(\xi_{**}) = -Y_{1**} \Phi_{N*}. \quad (20)$$

Тогда из (18) и (20) следует, что

$$e^{-\xi_{**}} = \frac{1 + Y_{1**} \Phi_{N1}}{1 + \Phi_{N1} Y_{1e}}. \quad (20a)$$

Из (15а) и (20а) вытекает соотношение для определения второй поверхности пламени ($x = x_{**}$):

$$z_{**} = \frac{x_{**}}{x_w} =$$

$$= [\ln(c_{pe}T_e - c_{pw}T_w + h_L + \Delta H_1 Y_{1e}) -$$

$$- \ln(h_L + \Delta H_2 Y_{2w})] / [\ln(Y_{1e} \Phi_{N1} + 1) -$$

$$- \ln(Y_{1**} \Phi_{N1} + 1)].$$

Первая и вторая поверхности пламени расположены соответственно ниже и выше поверхности пламени для одной брутто-реакции.

Так как вне поверхности пламени химические реакции отсутствуют, то Y_1 , Y_2 удовлетворяют соотношениям

$$Y_1 = \begin{cases} 0, & x_w \leq x \leq x_*, \\ Y_{1**} \frac{e^{-\xi} - e^{-\xi_*}}{e^{-\xi_{**}} - e^{-\xi_*}}, & x_* \leq x \leq x_{**}, \\ (Y_{1e} - Y_{1**}) \frac{e^{-\xi} - e^{-\xi_{**}}}{1 - e^{-\xi_{**}}} + Y_{1**}, & x \leq x_{**}, \end{cases} \quad (21)$$

$$Y_2 = \begin{cases} (Y_{2*} - Y_{2w}) \frac{e^{-\xi} - e^{-\xi_w}}{e^{-\xi_*} - e^{-\xi_w}} + Y_{2w}, & x_w \leq x \leq x_*, \\ -Y_{2*} \frac{e^{-\xi} - e^{-\xi_*}}{e^{-\xi_{**}} - e^{-\xi_*}} + Y_{2*}, & x_* \leq x \leq x_{**}, \\ 0, & x \leq x_{**}. \end{cases} \quad (22)$$

Концентрации остальных компонентов и температура смеси определяются следующим образом:

$$Y_i = \beta_i + Y_1 \Phi_{N1} + Y_2 \Phi_{N2}, \quad (23)$$

$$T = \frac{1}{c_p} (\beta_H - \Delta H_1 Y_1 - \Delta H_2 Y_2).$$

Подставляя выражения для β_i , полученные из совместного решения (13), (14) и определения β_i , а также используя (21)–(23), запишем распределения концентраций и температуры в газе, окружающем горящую каплю:

$$Y_i = \begin{cases} (Y_{ie} - \Phi_{i1} Y_{1e}) e^{-\xi} + \\ + \Phi_{i2} \left[(Y_{2*} - Y_{2w}) \frac{e^{-\xi} - e^{-\xi_w}}{e^{-\xi_*} - e^{-\xi_w}} + Y_{2w} \right], & x_w \leq x \leq x_*, \\ (Y_{ie} - \Phi_{i1} Y_{1e}) e^{-\xi} + \\ + \Phi_{i1} Y_{1**} \frac{e^{-\xi} - e^{-\xi_*}}{e^{-\xi_{**}} - e^{-\xi_*}} + \\ + \Phi_{i2} \left(-Y_{2*} \frac{e^{-\xi} - e^{-\xi_*}}{e^{-\xi_{**}} - e^{-\xi_*}} + Y_{2*} \right), & x_* \leq x \leq x_{**}, \\ (Y_{ie} - \Phi_{i1} Y_{1e}) e^{-\xi} + \\ + \Phi_{i1} \left[(Y_{1e} - Y_{1**}) \frac{e^{-\xi} - e^{-\xi_{**}}}{1 - e^{-\xi_{**}}} + Y_{1**} \right], & x \leq x_{**}, \end{cases} \quad (24)$$

$$Y_N = \begin{cases} 1 + (-1 - \Phi_{N1} Y_{1e}) e^{-\xi} + \\ + \Phi_{N2} \left[(Y_{2*} - Y_{2w}) \frac{e^{-\xi} - e^{-\xi_w}}{e^{-\xi_*} - e^{-\xi_w}} + Y_{2w} \right], & x_w \leq x \leq x_*, \\ 0, & x \geq x_*, \end{cases} \quad (25)$$

$$T = \begin{cases} \frac{1}{c_p} \left\{ c_{pw} T_w - h_L - \right. \\ \left. - \Delta H_2 \left[(Y_{2*} - Y_{2w}) \frac{e^{-\xi} - e^{-\xi_w}}{e^{-\xi_*} - e^{-\xi_w}} + Y_{2w} \right] + \right. \\ \left. + (c_{pe} T_e + \Delta H_1 Y_{1e} - c_{pw} T_w + h_L) e^{-\xi} \right\}, & x_w \leq x \leq x_*, \\ \frac{1}{c_p} \left[c_{pw} T_w - h_L - \right. \\ \left. - \Delta H_1 \left(Y_{1**} \frac{e^{-\xi} - e^{-\xi_*}}{e^{-\xi_{**}} - e^{-\xi_*}} \right) - \right. \\ \left. - \Delta H_2 \left(-Y_{2*} \frac{e^{-\xi} - e^{-\xi_*}}{e^{-\xi_{**}} - e^{-\xi_*}} + Y_{2*} \right) + \right. \\ \left. + (c_{pe} T_e + \Delta H_1 Y_{1e} - c_{pw} T_w + h_L) e^{-\xi} \right], & x_* \leq x \leq x_{**}, \\ \frac{1}{c_p} \left\{ c_{pw} T_w - h_L - \right. \\ \left. - \Delta H_1 \left[(Y_{1**} - Y_{1e}) \frac{e^{-\xi} - 1}{e^{-\xi_{**}} - 1} + Y_{1e} \right] + \right. \\ \left. + (c_{pe} T_e + \Delta H_1 Y_{1e} - c_{pw} T_w + h_L) e^{-\xi} \right\}, & x \leq x_{**}. \end{cases} \quad (26)$$

Концентрации независимых компонентов на поверхностях пламени Y_{1**}, Y_{2*} не могут быть найдены из решения чисто гидродинамической задачи, но их можно определить исходя из кинетики реакции следующим образом.

Условие сохранения потока массы кислорода (O_2) выразим через первую поверхность пламени, условие сохранения потока массы угарного газа (CO) — через вторую поверхность пламени:

$$\omega_* m_1 (\nu''_{1*} - \nu'_{1*}) = -\rho D \left(\frac{\partial Y_1}{\partial r} \right)_{*+}, \quad (27)$$

$$\omega_{**} m_2 (\nu''_{2**} - \nu'_{2**}) = \rho D \left(\frac{\partial Y_2}{\partial r} \right)_{**-.} \quad (28)$$

Здесь ω_* , ω_{**} — скорость химической реакции на первой и второй поверхностях пламени соответственно:

$$\omega_* = \int_{x_*-\delta}^{x_*+\delta} A_* \exp\left(-\frac{T_{a*}}{T_*}\right) dx, \quad A_* = 10^8, \quad T_{a*} = 25\,270, \quad (29)$$

$$\omega_{**} = \int_{x_{**}-\delta}^{x_{**}+\delta} A_{**} \exp\left(-\frac{T_{a**}}{T_{**}}\right) dx, \quad A_{**} = 5.89 \cdot 10^6, \quad T_{a**} = 2\,000, \quad (30)$$

где $[x_{**} - \delta, x_{**} + \delta]$ и $[x_* - \delta, x_* + \delta]$ — узкая реакционная зона в окрестности поверхности пламени, в которой происходит основная химическая реакция; T_* , T_{**} — температуры на первой и второй поверхностях пламени соответственно, полученные из (26). Подставляя (29), (30) в (27), (28), а также используя (21), (22), получаем систему уравнений для Y_{1**}, Y_{2*} . Зная Y_{1**}, Y_{2*} , концентрацию Y_{2w} можно найти из соотношения

$$\frac{m_N (\nu''_{N*} - \nu'_{N*})}{m_1 (\nu''_{1*} - \nu'_{1*})} \left(\frac{\partial Y_1}{\partial r} \right)_{*+} = - \left(\frac{\partial Y_N}{\partial r} \right)_{*-}.$$

| Вещество | i | $\nu''_{i*} - \nu'_{i*}$ | $\nu''_{i**} - \nu'_{i**}$ |
|----------------|-----|--------------------------|----------------------------|
| $C_{10}H_{22}$ | N | -1 | 0 |
| O_2 | 1 | -10.5 | -0.5 |
| CO | 2 | 10 | -1 |
| H_2O | 3 | 11 | 0 |
| CO_2 | 4 | 0 | 1 |
| N_2 | 5 | 0 | 0 |

РАСЧЕТ ГОРЕНИЯ КАПЛИ n -ДЕКАНА В ВОЗДУХЕ ПРИ ПРОТЕКАНИИ ДВУХ НЕЗАВИСИМЫХ РЕАКЦИЙ

Теплофизические свойства веществ определялись по данным [11]. На основании формул (24)–(26) и данных таблицы построим зависимости $Y_i(z)$ (рис. 1) и $T(z)$ (рис. 2) для равновесного и неравновесного случаев при $p_e = 1$ бар, $T_e = 300$ К, $Y_{1e} = 0.3$, $Y_{1**} = 0.20$, $Y_{2*} = 0.15$.

Из рис. 1 видно, что концентрация углекислого газа имеет наибольшее значение на второй поверхности пламени, а угарного газа и воды — на первой поверхности пламени. Данный результат объясняется тем, что рассматриваемые компоненты образуются на указанных поверхностях пламени.

Температура смеси достигает максимального значения на первой поверхности пламени (рис. 2) и убывает по мере приближения ко второй. Однако на второй поверхности присутствует излом профиля температуры и градиент температуры становится больше, что свидетельствует о возрастании теплового потока после прохождения второй поверхности пламени. Это возрастание обусловлено дополнитель-

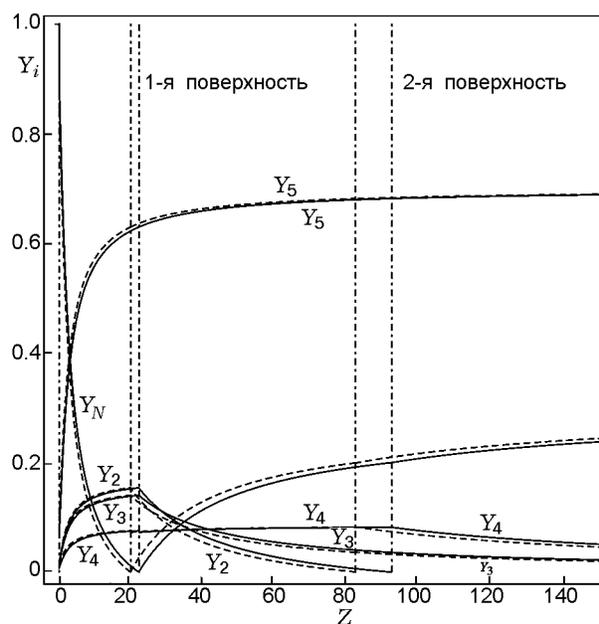


Рис. 1. Распределение концентраций в задаче горения капли n -декана в воздухе, обогащенном кислородом, при протекании двух независимых брутто-реакций в случае равновесного (сплошная линия) и неравновесного (штриховая линия) фазовых переходов

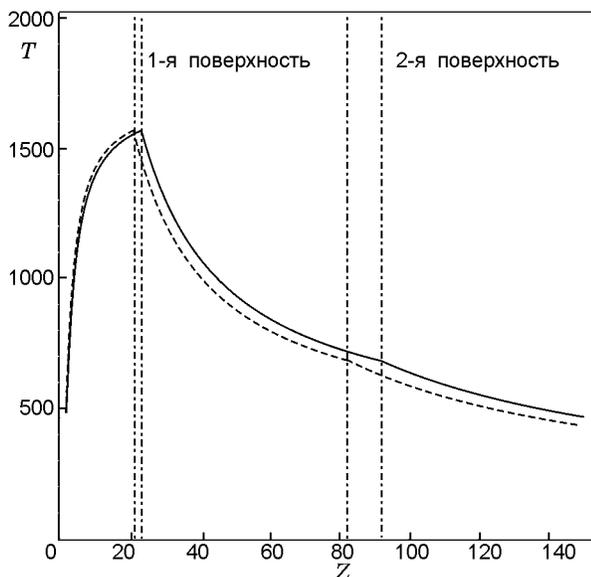


Рис. 2. Распределение температуры в задаче горения капли *n*-декана при протекании двух независимых брутто-реакций в случае равновесного (сплошная линия) и неравновесного (штриховая линия) фазовых переходов

ным энерговыделением на второй поверхности. Из рис. 1 и 2 видно, что учет неравновесных эффектов при фазовом переходе на поверхности капли приводит к приближению соответствующих поверхностей пламени к капле.

На рис. 3 приведены для сравнения распределения концентраций при протекании одной и двух реакций в равновесном случае. Видно, что первая и вторая поверхности пламени расположены соответственно ниже и выше поверхности пламени для одной брутто-реакции. Хорошо заметно различие профилей концентрации углекислого газа. Максимальная концентрация углекислого газа при протекании двух реакций намного меньше, чем в случае с одной поверхностью пламени, а для воды, наоборот, больше. Стоит отметить, что распределение углекислого газа между поверхностями пламени более равномерно при расчете по двухреакционной модели.

На рис. 4 представлена зависимость $Pe(I_N)$ при протекании одной и двух брутто-реакций с учетом неравновесных эффектов на поверхности фазового перехода. Отметим, что зависимость $Pe(I_N)$ при одной брутто-реакции совпадает с зависимостью $Pe(I_N)$ в случае двух брутто-реакций при $Y_{2w} = 0$. Так как при заданных значениях параметров $Y_{2w} = 0.0154$, то равновесные значения чисел Пекле Pe_{eq} (при

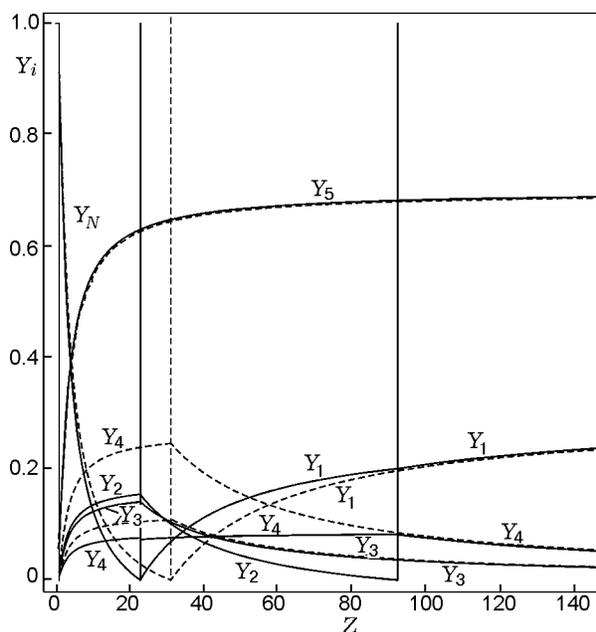


Рис. 3. Распределение концентраций в задаче горения *n*-декана при протекании одной (штриховая линия) и двух (сплошная линия) реакций в случае равновесного фазового перехода

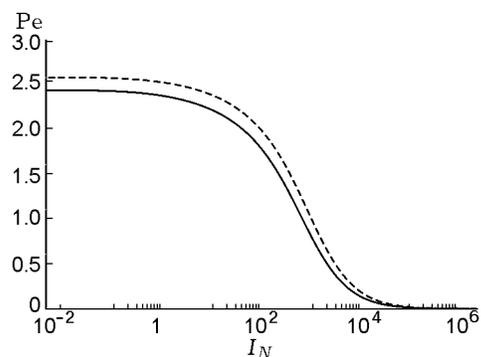


Рис. 4. Зависимость $Pe(I_N)$ в случае одной (штриховая линия) и двух (сплошная линия) брутто-реакций

$I_N = 0$) в первом и втором случаях близки.

Рис. 5 иллюстрирует зависимость $Pe(I_N)$ при двух независимых реакциях в неравновесном и равновесном случаях. Результат сравнения равновесного и неравновесного чисел Pe показывает, что при $I_N < 10$ разница между равновесным и неравновесным решениями не превышает 4 %, при $I_N = 100$ расхождение увеличивается до 10 %, а при $I_N > 1000$ превышает 30 %. Таким образом, для определения скорости диффузионного горения ма-

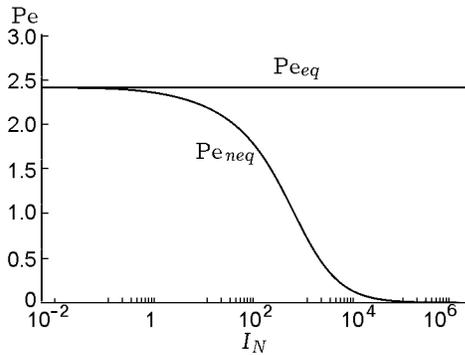


Рис. 5. Зависимость $Pe(I_N)$ при двух брутто-реакциях в случае неравновесного и равновесного фазовых переходов

лых каплей необходимо использовать неравновесную модель испарения.

КВАЗИСТАЦИОНАРНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О ГОРЕНИИ ОДИНОЧНОЙ КАПЛИ

Так как горение в данной задаче протекает в квазистационарном режиме, скорость выгорания определяется в каждый момент времени из стационарного решения (17). При этом скорость выгорания капли может быть определена из уравнения

$$\frac{dx_w}{dt} = -\frac{\dot{m}}{\rho_{Nl}}. \quad (31)$$

Введя безразмерные переменные $r = x_w/x_{w0}$, $\tau = t/t_0$, перепишем уравнение (31) в виде

$$\frac{dr}{d\tau} = -\frac{\dot{m}t_0}{\rho_{Nl}x_{w0}} = -\frac{Pe}{r} \frac{\rho_e D_e t_0}{\rho_{Nl}x_{w0}^2}, \quad (32)$$

где x_{w0} — начальный радиус, t_0 — характерное время сгорания капли при равновесном режиме испарения. Граничные условия: $r = 0$, $\tau = 1$.

Проинтегрировав уравнение (32) с использованием граничных условий, описанных выше, получаем следующее соотношение для равновесного режима:

$$t_0 = \frac{\rho_{Nl}x_{w0}^2}{2\rho_e D_e Pe_{eq}}.$$

Подставив его в (32), находим, что

$$2r \frac{dr}{d\tau} = -\frac{Pe}{Pe_{eq}}, \quad r(0) = 1. \quad (33)$$

Для равновесной модели испарения решение уравнения (33) имеет вид $r = \sqrt{1 - \tau}$, а для неравновесной модели решение может быть получено численным интегрированием (33) совместно с (17). Результаты решения представлены на рис. 6, из которого видно, что для рассматриваемого примера учет неравновес-

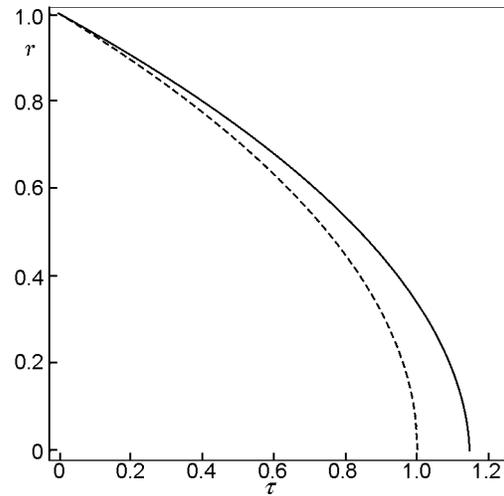


Рис. 6. Зависимость безразмерного радиуса капли от времени для равновесного (штриховая линия) и неравновесного (сплошная линия) фазовых переходов в задаче горения n -декана при протекании двух реакций

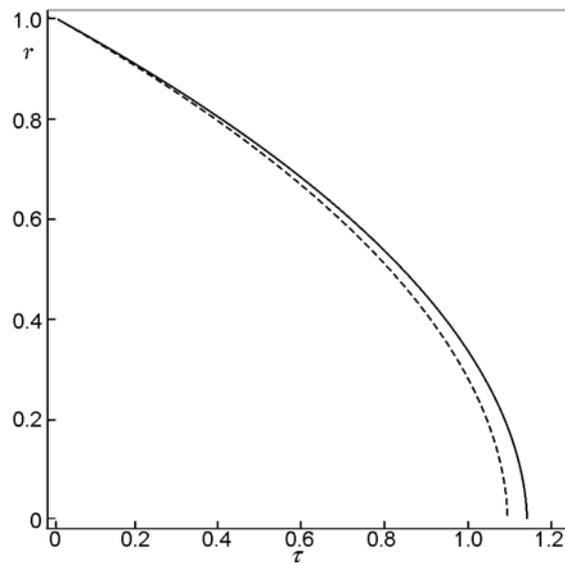


Рис. 7. Зависимость безразмерного радиуса капли от времени в задаче горения n -декана в случае неравновесного фазового перехода при протекании одной (штриховая линия) и двух (сплошная линия) реакций

ных эффектов существенно замедляет процесс горения капли. А исходя из рис. 7 можно сделать вывод, что при наличии двух поверхностей пламени время полного выгорания капли больше, чем в случае, когда протекает только одна брутто-реакция.

ВЫВОДЫ

1. Безразмерный параметр, характеризующий отклонение системы от равновесия, имеет вид

$$I_N = \frac{D_e N}{\delta_N x_w} \sqrt{\frac{2\pi}{R_e T_e}}.$$

2. Полученные аналитические и численные решения позволяют определить различие скоростей выгорания, рассчитанных по равновесной и неравновесной моделям. Это отличие возрастает при увеличении параметра I_N , характеризующего степень отклонения от равновесия.

3. Установлено, что для малых капель (т. е. при $I_N > 10$) использование равновесной модели дает существенную ошибку. Поэтому для получения достоверной информации при исследовании горения и испарения малых капель необходимо использовать неравновесную модель.

4. Предложено обобщение метода Шваба — Зельдовича для нескольких реакций в рамках классического предположения о равенстве чисел Льюиса единице, которое протестировано для случая двух независимых реакций.

5. Результаты расчетов позволяют сделать вывод, что построенная модель химических превращений, будучи относительно простой, эффективна при решении задач горения капли горючего (углеводорода).

6. Определены условия, при которых задача горения капли при наличии нескольких реакций сводится к задаче с одной поверхностью пламени.

ЛИТЕРАТУРА

1. Smirnov N. N., Pushkin V. N., Dushin V. R., Kulchitskiy A. V. Microgravity investigation of laminar flame propagation in monodisperse gas-droplet mixtures // *Acta Astronaut.* — 2007. — V. 61. — P. 626–636.
2. Williams F. A. *Combustion Theory*. 2nd ed. — Palo Alto; London: Addison-Wesley Publ. Co., 1985.
3. Смирнов Н. Н., Зверев И. Н. Гетерогенное горение. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1992.
4. Prud'homme R., Habiballah M., Matuzewski L., Mauriot Y., Nicole A. Theoretical analysis of dynamic response of a vaporizing droplet to acoustic oscillations // *J. Propulsion and Power*. — 2010. — V. 26. — P. 74–83.
5. Dushin V. R., Kulchitskiy A. V., Nerchenko V. A., Nikitin V. F., Osadchaya E. S., Phylippov Yu. G., Smirnov N. N. Mathematical simulation for non-equilibrium droplet evaporation // *Acta Astronaut.* — 2008. — V. 63. — P. 1360–1371.
6. Betelin V. B., Nikitin V. F., Kushnirenko A. G., Nerchenko V. A., Smirnov N. N. Spray injection and ignition in a heated chamber modeling // *WSEAS Trans. Fluid Mech.* — 2011. — V. 6. — P. 147–159.
7. Miller R. S., Harstad K., Bellan J. Evaluation of equilibrium and non-equilibrium models for many-droplet gas-liquid flow simulations // *Intern. J. Multiphase Flow*. — 1998. — V. 24. — P. 1025–1055.
8. Smirnov N. N., Kulchitski A. V. Unsteady-state evaporation in weightlessness // *Acta Astronaut.* — 1997. — V. 39. — P. 561–568.
9. 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.
10. Tyurenkova V. V. Non-equilibrium diffusion combustion of a fuel droplet // *Acta Astronaut.* — 2012. — V. 75. — P. 78–84.
11. Варгафтик Н. Б. *Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей*. — М.: Наука, 1972.

*Поступила в редакцию 7/VIII 2012 г.,
в окончательном варианте — 23/X 2012 г.*