

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОКИСЛЕНИЯ УГЛЕВОДОРОДНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ В ПРЯМОТОЧНОМ РЕАКТОРЕ*

А. КАЛТАЕВ, З. А. МАНСУРОВ, Н. Т. ДАНАЕВ

Казахский государственный университет им. Аль-Фараби, Алматы

e-mail: kaltayev@physics.freenet.kz

Numerical simulation problems for reacting flows at low Mach number are considered. The numerical techniques for solution of equations of dynamically incompressible flows has been proposed. Modelling and investigation of the low temperature oxidation regimes of hydrocarbon-air mixture has been performed.

В большинстве случаев газофазное горение проходит при малых скоростях течения, когда число Маха существенно меньше единицы и газ ведет себя как динамически несжимаемая среда. В то же время из-за больших неоднородностей температуры и концентрации смеси изменения плотности могут быть как угодно большими и использование модели Буссинеска становится неправомерным. С другой стороны, при использовании полной системы уравнений Навье—Стокса для численного моделирования горения встречаются значительные вычислительные трудности [1, 4, 7–10].

Действительно, если записать уравнения Навье—Стокса в недивергентной матричной форме

$$\frac{\partial U}{\partial t} + A \frac{\partial U}{\partial x} = 0,$$

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ e \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0.5(k-3)u^2 & (3-k)u & k-1 \\ ((k-1)u^2 - ke/\rho)u & ke/\rho - 0.5(k-1)3u^2 & ku \end{pmatrix},$$

$$e = p/(k-1) + 0.5\rho u^2,$$

то уравнения для характеристических переменных

$$W = R^{-1}U$$

примут вид

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial W}{\partial x} = 0,$$

где R^{-1} — матрица, обратная к R , составленной из правых собственных векторов матрицы A . Λ — диагональная матрица, элементами которой являются собственные значения матрицы A : $\lambda_1 = u$, $\lambda_2 = u - a$, $\lambda_3 = u + a$, или в безразмерной форме $\bar{\lambda}_1 = M$, $\bar{\lambda}_{2,3} = M \pm 1$,

*Работа выполнена в рамках совместного с Гейдельбергским университетом (Германия) исследовательского проекта KAS-002-96.

© А. Калтаев, З. А. Мансуров, Н. Т. Данаев, 1999.

$a^2 = kdp/d\rho$ — квадрат скорости звука, $M = u/a$ — число Маха, k — показатель адиабаты. С уменьшением числа Маха число обусловленности матрицы Λ —

$$r = \frac{\max |\lambda_i|}{\min |\lambda_i|} = \frac{M + 1}{M} —$$

увеличивается и может стать существенно больше единицы. Таким образом, уравнения для компонент вектора W при малых числах Маха имеют решения с существенно различными скоростями изменения со временем, соответствующие характерной скорости течения газа и скорости распространения звуковых волн, т. е. являются жесткими.

Данное обстоятельство привело к созданию численных моделей динамически несжимаемых реагирующих течений газов, справедливых при малых числах Маха [1, 4, 7–9]. В этих моделях изменением давления по пространству пренебрегают во всех уравнениях, за исключением уравнения движения, где градиент давления является величиной одного порядка с другими членами. Очевидно, что данные модели правомерно использовать, когда влияние акустических возмущений мало, иначе гидродинамические уравнения должны быть решены совместно с уравнениями распространения звуковых волн в неоднородной среде [3].

1. Математическая модель низкотемпературного окисления углеводородно-воздушной смеси

На основе уравнения динамически несжимаемых реагирующих течений проводится численное моделирование низкотемпературного окисления углеводородно-воздушной смеси в прямоточном реакторе.

Богатая углеводородно-воздушная смесь (молярное содержание углеводорода, например бутана, такое же или больше содержания молекулярного кислорода) с плотностью ρ_0 и температурой $T_0 = 450$ К подается со скоростью v_0 ($2 \text{ мм/с} \leq v_0 \leq 10 \text{ мм/с}$) с одного открытого конца цилиндрического реактора радиусом $r_0 = 32$ мм и длиной $l = 100$ мм, продукты реакций выходят с другого конца [5, 6]. Температура вдоль стенки реактора T_w поддерживается постоянной, изменяясь от эксперимента к эксперименту в пределах от 650 К до 720 К, число Маха задачи не превышает 10^{-4} , хотя изменения плотности газа и по пространству и по времени могут быть существенными.

В зависимости от температуры стенки экспериментально обнаружено существование различных режимов — медленное, стабильное и затухающее осцилляционные окисления и стационарное низкотемпературное горение при $T \approx 800 - 900$ К. С использованием одномерной модели динамически несжимаемых реагирующих течений определены приближенные кинетические параметры для двухстадийного механизма, исследованы и установлены закономерности развития процесса вдоль реактора, установлена зависимость существования различных режимов от скорости смеси [5]. Вместе с тем представляет интерес исследование влияния поперечных неоднородностей параметров течения на существования различных режимов.

Моделирование кинетики проводится при двухстадийном механизме низкотемпературного окисления углеводородно-воздушной смеси, подобной схеме Сальникова [2, 11].

В газе протекают два последовательных химических процесса. Сначала из исходной углеводородно-воздушной смеси с массовой концентрацией Y_1 , в результате холодно-пламенного

окисления со скоростью

$$w_1 = k_1 Y_1 = \rho Y_1 k_{10} \exp\left(-\frac{E_1}{RT}\right), \quad (1)$$

со слабым тепловыделением q_1 образуются углеводородные радикалы и активные частицы с концентрацией Y_2 . По мере увеличения концентраций радикалов и температуры смеси одновременно с реакцией (1) начинают идти экзотермические реакции гибели углеводородных радикалов с суммарной скоростью

$$w_2 = Y_2 k_2 = \rho Y_2 k_{20} \exp\left(-\frac{E_2}{RT}\right),$$

тепловыделением q_2 ($q_2 \gg q_1$) и частичным образованием стабильных продуктов. Здесь E_k — энергия активаций k -й реакции, R — универсальная газовая постоянная.

Мы предполагаем, что выполняется закон Фика, коэффициент вязкости линейно зависит от температуры — $\mu/\mu_0 = T/T_0$, теплоемкости и молекулярные веса всех компонентов равны между собой и постоянны — $c_{pi} = \text{const} = c_p$, $m_i = \text{const} = m_0$, все коэффициенты бинарной диффузии одинаковы и равны коэффициенту температуропроводности: $D_i = \text{const} = D$, $\lambda/c_p = \rho D$. Кроме того, для данного процесса можно положить, что среднее давление постоянно и равно давлению окружающей среды:

$$P = \text{const} = P_0.$$

При этих условиях термодинамические характеристики описываются уравнениями

$$\rho \frac{dY_1}{dt} = \text{div} \left(\frac{\Theta}{\text{Pe}} \text{grad } Y_1 \right) + W_1, \quad (2)$$

$$\rho \frac{dY_2}{dt} = \text{div} \left(\frac{\Theta}{\text{Pe}} \text{grad } Y_2 \right) + W_2, \quad (3)$$

$$\rho \frac{dH}{dt} = \text{div} \left(\frac{\Theta}{\text{Pe}} \text{grad } H \right), \quad (4)$$

$$H = \Theta + (Q_1 + Q_2)Y_1 + Q_2 Y_2, \quad (5)$$

$$\rho \Theta = 1, \quad (6)$$

где

$$W_1 = -\text{Da}_1 \rho Y_1 \exp\left(-\frac{\alpha_1}{\Theta}\right), \quad W_2 = -W_1 - \text{Da}_2 \rho Y_2 \exp\left(-\frac{\alpha_2}{\Theta}\right),$$

$\Theta = T/T_0$, $\text{Pe} = \text{RePr} = v_0 r_0 / D$ — число Пекле, $\text{Re} = v_0 r_0 \rho_0 / \mu_0$ — число Рейнольдса, $\text{Da}_k = k_k r_0 / v_0$ — число Дамкелера, $\alpha_k = E_k / RT_0$, $Q_k = q_k / c_p T_0$, $k = 1, 2$.

По известным значениям скорости из уравнений (2)–(6) определяются Y_1 , Y_2 , H , Θ и ρ . Таким образом, в уравнения движения динамически несжимаемых течений плотность газа входит как известная величина. Следовательно, уравнения для импульса $\rho \vec{v} = (\rho u, \rho v)^t$ и модифицированного давления

$$P = p + \frac{2}{3} \frac{\mu}{\text{Re}} \text{div } \vec{v},$$

становятся аналогичными системе уравнений для несжимаемой жидкости:

$$\text{div}(\rho \vec{v}) = -\frac{\partial \rho}{\partial t}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} = -\text{grad } P + \text{div} \left(2 \frac{\mu}{\text{Re}} \dot{S} - \rho \vec{v} \vec{v} \right). \quad (8)$$

В соответствии с условиями рассматриваемой задачи, уравнения (2)–(8) решаются при начальных и граничных условиях:

$t = 0$ —

$$0 \leq x \leq L, 0 \leq r \leq 1: \quad Y_1 = Y_{10}, Y_2 = 0, \Theta = 1, u = u_0(r), v = 0;$$

$t > 0$ —

$$x = 0, 0 \leq r < 1: \quad Y_1 = Y_{10}, Y_2 = 0, \Theta = 1, u = u_0, v = 0,$$

$$x = L, 0 < r < 1: \quad \frac{\partial \Theta}{\partial x} = \frac{\partial Y_k}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial x} = 0,$$

$$0 < x < L, r = 0: \quad \frac{\partial \Theta}{\partial x} = \frac{\partial Y_k}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} = 0, v = 0,$$

$$0 < x < L, r = 1: \quad \frac{\partial Y_k}{\partial x} = 0, \Theta = \Theta_w, u = 0, v = 0.$$

2. Численное решение

Для решения системы уравнений (2)–(8) используются неявные схемы на разнесенной сетке. Величины Y_k, H, p, P и ρ определяются в центрах ячеек, компоненты импульса и скорости — на их боковых сторонах. Источниковые члены в (2)–(3) линеаризируются:

$$W_k^{n+1} = W_k^n + \frac{\partial W_k^n}{\partial Y_m} \Delta Y_m, \quad k, m = 1, 2,$$

где $\Delta Y_k = Y_k^{n+1} - Y_k^n$ — поправка к решению на слое n .

После применения схемы Кранка — Николсона и введения обозначений

$$L_x = u \frac{\partial}{\partial x}, \quad L_{xx} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\Theta}{\text{Pe}} \frac{\partial}{\partial x}, \quad L_r = v \frac{\partial}{\partial r}, \quad L_{rr} = \frac{1}{\rho r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\Theta}{\text{Pe}} \frac{\partial}{\partial r},$$

уравнения (2–4) относительно поправок в цилиндрической системе координат запишутся в виде

$$\begin{aligned} & \left(1 + \Delta t \left(\beta(L_x - L_{xx} + L_r - L_{rr}) - \frac{\partial W_k^n}{\partial Y_k} \right) \right) \Delta Y_k = \\ & = -\Delta t \left((L_x - L_{xx} + L_r - L_{rr}) Y_k^n - W_k^n - \frac{\partial W_k^n}{\partial Y_m} \Delta Y_{m \neq k} \right), \end{aligned}$$

$$(1 + \Delta t \beta(L_x - L_{xx} + L_r - L_{rr})) \Delta H = -\Delta t (L_x - L_{xx} + L_r - L_{rr}) H^n.$$

Уравнения для $\Delta Y_k, \Delta H$ после факторизации решаются прогонкой в каждом из пространственных направлений, после чего вычисляются

$$Y_k^{n+1} = Y_k^n + \Delta Y_k, \quad H^{n+1} = H^n + \Delta H, \quad \Theta^{n+1}, \quad \rho^{n+1}.$$

Интегрирование по времени уравнения (8) проводится по схеме расщепления по физическим процессам методом проекций:

$$\frac{(\rho\vec{v})^* - (\rho\vec{v})^n}{\Delta t} = -\text{grad } P^n + \text{div} \left(2\frac{\mu}{\text{Re}} \dot{S}^* - (\rho\vec{v})^* \vec{v}^n \right), \quad (9)$$

$$\frac{(\rho\vec{v})^{n+1} - (\rho\vec{v})^*}{\Delta t} = -\text{grad } \Delta P, \quad (10)$$

где

$$\Delta P = P^{n+1} - P^n.$$

На первом этапе из уравнения (9) во внутренних точках определяется $(\rho\vec{v})^*$. После этого из уравнения

$$\text{div}(\text{grad } \Delta P) = -\frac{1}{\Delta t} (\text{div}(\rho\vec{v}^{n+1}) - \text{div}(\rho\vec{v})^*), \quad (11)$$

получаемого из (10), вычисляется ΔP , затем P^{n+1} . При этом во внутренних точках выражение $\text{div}(\rho\vec{v}^{n+1})$ в правой части заменяется на $-\Delta\rho/\Delta t = -(\rho^{n+1} - \rho^n)/\Delta t$. На последнем этапе из (10) определяются компоненты импульса, после чего вычисляются компоненты скорости.

В целях ослабления жесткого ограничения на шаг по времени решение первого этапа (9) осуществляется с использованием схемы Кранка — Николсона. Вводя обозначения

$$A = \begin{pmatrix} u & 0 \\ 0 & u \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} v & 0 \\ 0 & v \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} \mu & 0 \\ 0 & \mu \end{pmatrix},$$

$$\Delta\rho\vec{v} = (\rho\vec{v})^* - (\rho\vec{v})^n = (\Delta\rho u, \Delta\rho v)^t, \quad R\vec{H}S^n = -\text{grad}P + \text{div} \left(2\frac{\mu}{\text{Re}} \dot{S}^n - (\rho\vec{v}\vec{v})^n \right),$$

приближенное уравнение для поправки импульса можно записать в виде

$$\left[I + \beta\Delta t \left(\frac{\partial}{\partial x} A + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r B - \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial}{\partial x} M \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\rho} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r M \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{\rho} \right) \right) \right] \Delta\rho\vec{v} = R\vec{H}S^n. \quad (12)$$

Уравнения (12) также решаются скалярной прогонкой в каждом из пространственных направлений.

3. Результаты расчетов

Численное решение задачи проведено при значениях параметров $L = 3$, $m_0 = 1$, $Y_{10} = 0.2$, $\text{Da}_1 = 2.5 \times 10^4$, $\text{Da}_2 = 3.85 \times 10^9$, $Q_1 = 0.185$, $Q_2 = 5.185$, $\alpha_1 = 11.11$, $\alpha_2 = 35.33$, соответствующих значениям термокинетических величин при низкотемпературном окислении бутано-воздушной смеси [5, 6]. В этих работах также были найдены диапазоны изменения безразмерной температуры стенки Θ_w (от 1.45 до 1.6) и числа Рейнольдса входного течения (от 5 до 25), в пределах которых режим медленного окисления сменяется режимом низкотемпературного стационарного горения. При этом переход от медленного окисления к стабильному осцилляционному окислению происходит скачкообразно.

В рассматриваемой двумерной модели исследовано влияние поперечных неоднородностей параметров потока на низкотемпературное окисление бутано-воздушной смеси при тех же изменениях числа Рейнольдса и температуры стенки. Количество узлов 120×40 является достаточным для исследования структуры зоны реакций, ширина которой 3–5 мм. Условие устойчивости схемы аналогично условию КФЛ для несжимаемой жидкости. В

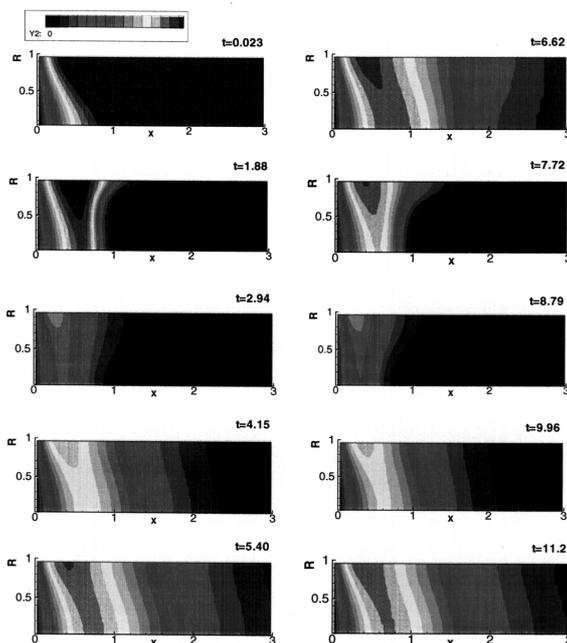
зависимости от температуры смеси и скорости газа число Маха меняется в пределах от 10^{-4} до 10^{-5} что делает его практически недоступным для численного моделирования на основе полных уравнений Навье---Стокса.

Так же, как и в одномерной модели, установлено, что в зависимости от Re и Θ_w существуют режимы медленного, стабильного и затухающего осцилляционных окислений и режим низкотемпературного стационарного горения. В отличие от одномерного случая переход из одного режима в другой (при изменении Re и Θ_w) происходит относительно плавно, что, по-видимому, связано с одновременным существованием условий для различных режимов из-за неоднородностей распределения температуры, концентраций и скорости смеси в поперечном сечении реактора. Выход к режиму стационарного низкотемпературного горения происходит как при увеличении Θ_w при заданном числе Рейнольдса, так и при увеличении числа Рейнольдса при фиксированной температуре стенки. Но в последнем случае температура низкотемпературного пламени будет выше, чем в предыдущем.

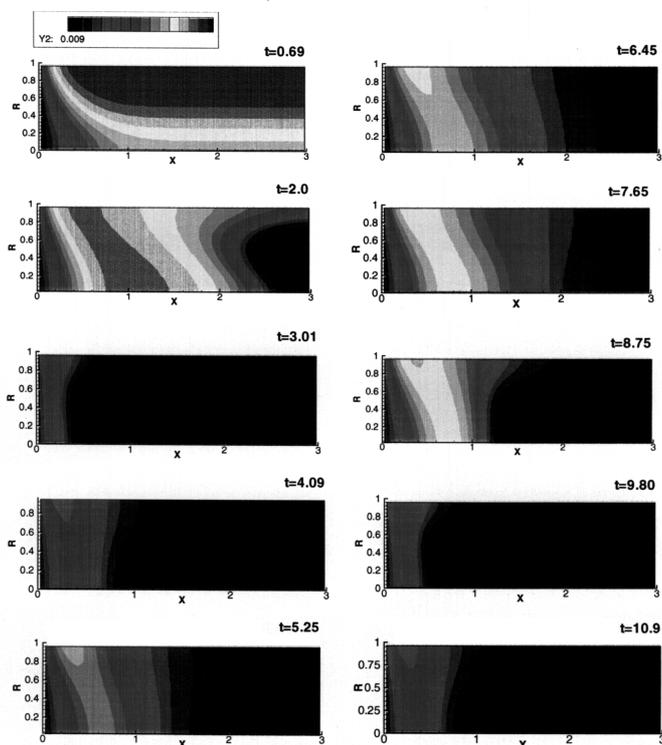
На рисунке приведены распределения концентраций радикалов в смеси по продольному сечению реактора в различные моменты времени при разных числах Рейнольдса. Течение происходит слева направо. Темная область в правой части реактора соответствует зоне продуктов реакций, где $Y_2 = 0$. Более светлая часть соответствует большему значению концентраций радикалов, серые полоски или языки внутри светлых зон --- их максимальным значениям, приблизительно равным 0.17. Видно, что увеличение числа Рейнольдса приводит к увеличению периода осцилляций пламени: $T_{пер} \approx 5.8$ при $Re = 10$ и $T_{пер} \approx 6.8$ при $Re = 15$. Одновременно уменьшается температура зоны реакций. При дальнейшем увеличении Re пламя становится стационарным --- располагается на определенном расстоянии от входа в реактор (случай *в* на рисунке). Важной особенностью влияния стенки является то, что область зажигания располагается вблизи стенки, неподалеку от входа в реактор, инициируя зажигание каждой новой порции горючей смеси.

Существование различных режимов окисления объясняется различными соотношениями

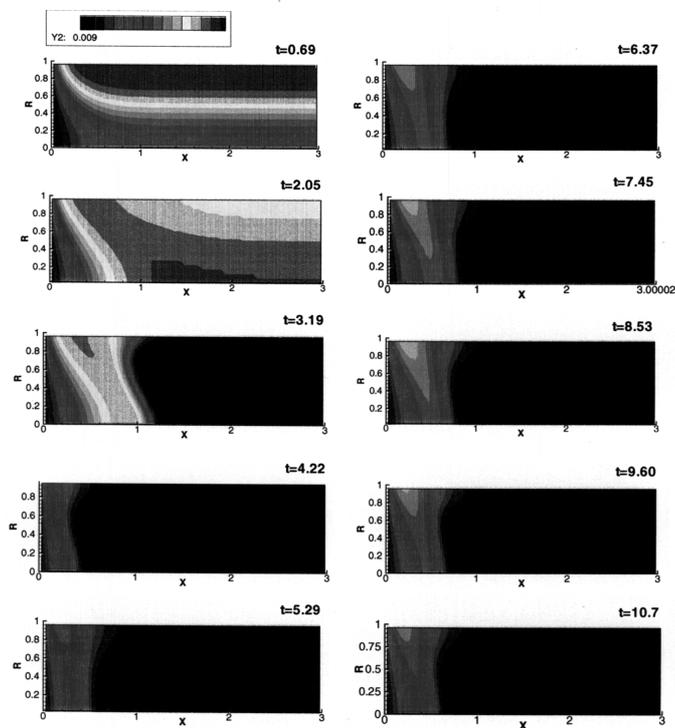
а



б



в



Распределение концентраций радикалов по продольному сечению реактора в различные моменты времени при $\Theta_w = 1.5$, $Re = 10$ (а), 15 (б), 25 (в).

ями между скоростью газа и скоростью горения смеси в зависимости от Re и Θ_w . Если скорость горения выше скорости движения смеси, имеют место осцилляционные окисления. При значительном превышении скорости горения осцилляции будут стабильными. С уменьшением скорости горения или увеличением скорости газа пространственная амплитуда осцилляций будет уменьшаться, пока скорости не сравняются и пламя не станет стабильным.

Скорость горения, как и время индукции, определяется концентрацией горючего в свежей смеси и ее температурой. При большей температуре свежей смеси окисление начинается при меньших концентрациях горючего. Следовательно, температура пламени и, соответственно, скорость горения может быть относительно меньше. Увеличивая скорость газа при фиксированном значении Θ_w , можно добиться стационарного положения пламени относительно реактора.

Список литературы

- [1] GHONIEM A. Computational methods in turbulent reacting flow. *Lectures in Applied Mathematics. Reacting Flows: Combustion and Chemical Reactors*, Ed. by G. Ludford, 24, Part 1, 1986, 199–265.
- [2] GRIFFITHS J. F. Reduced kinetic models and their application to practical combustion systems. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 21, 1995, 25–107.
- [3] KALTAJEV A. About modeling of the processes in combustion chamber at low Mach number. *Trans. of the 4-th Combust. Symp.*, Istanbul, 1995, 187–196.
- [4] ЛАПИН Ю. В., СТРЕЛЕЦ М. Х. *Внутренние течения газовых смесей*. Наука, М., 1989.
- [5] Мансуров З. А., Калтаев А., Шакибаев Н. Экспериментальное и численное исследование осцилляционного режима при низкотемпературном окислении углеводородно-воздушной смеси. *Химическая физика*, 1998 (в печати).
- [6] МАНСУРОВ З. А., МАТАФОНОВ А. А., АБДИКАРИМОВ М. С. Термокинетические осцилляции при окислении бутана. *Там же*, 10, №5, 1991, 633–637.
- [7] MAJDA A., SETHIAN J. The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion. *Combust. Sci. and Tech.*, 42, 1985, 185–205.
- [8] MCMURTY P., JOU W., RILEY J., METCALFE R. Direct numerical simulation of a reacting mixing layer with chemical heat release. *AIAA P.*, No. 143, 1985.
- [9] ORAN E., BORIS J. *Numerical Simulation of Reactive Flow*. Elsevier, N. Y., 1987.
- [10] ПЕТРАЖИЦКИЙ Г. Б., ПОЛЕЖАЕВ В. И. Исследование режимов теплообмена и структуры вихревого течения при свободном движении вязкого сжимаемого газа в двумерных полостях. *Тр. МВТУ им. Н. Баумана*, №222, 1976, 27–66.
- [11] ЩЕТИНКОВ Е. С. *Физика горения газов*. Наука, М., 1965.

Поступила в редакцию 10 сентября 1998 г.