

УДК 533.6.011

Численное моделирование закрученных струй с неравновесными химическими процессами

О. Л. Демидова

Аннотация

Представлен алгоритм численного моделирования турбулентного горения углеводородного топлива в слабо закрученных газовых потоках. Особенностью разработанного алгоритма является применение метода расщепления по физическим процессам наряду с методом локальной линеаризации для решения уравнений химической кинетики.

Ключевые слова: численные методы решения уравнений Навье-Стокса, математическое моделирование, вязкие турбулентные течения; многокомпонентные смеси газов; неравновесные химические процессы; закрученные потоки.

Введение

Несмотря на то, что авиационные двигатели прошли более чем полувековой путь развития, современное производство и использование летательных аппаратов выводит не на последние позиции экологические вопросы при испытании и эксплуатации двигательных установок. Наряду с габаритами или тяговыми характеристиками практически любой энергетической установки обсуждаются и вопросы экономичности и экологичности устройства.

Многочисленные экспериментальные работы, посвященные исследованию течения газа и в энергетических установках, и в авиационных двигателях позволили выявить основные характеристики процессов смесеобразования и воспламенения, разработать рекомендации по организации экономичных режимов работы устройств и предложить методы нейтрализации токсичных компонент. Трудности экспериментальных исследований образования и трансформации токсичных компонент очевидны. Они связаны с разработкой методов измерения высокотемпературной химически реагирующей смеси газов, с большими

материальными затратами на проведение экспериментов и, наконец, со сложностью практического определения оптимальных, с точки зрения эффективности нейтрализации токсичных окислов, режимов работы сжигающего устройства.

Следствием поиска альтернативных натурному эксперименту методов получения характеристик течения явилась разработка численных методов расчета параметров потоков реагирующих газов. Для практического приложения используются модели течения реагирующего газа в свободных струях. Такие течения наблюдаются при распространении выхлопной струи реактивного двигателя. Кроме того, подобные процессы наблюдаются и в факеле нагрева над ванной расплава металла, и вблизи форсунок парогенератора ТЭС, в трактах испытательных стендов и т. д. Необходимость численного моделирования указанных течений определяет актуальность создания метода расчета характеристик химически реагирующих многокомпонентных струй газа.

Математическая модель

При всем разнообразии теплоэнергетических установок процесс сжигания топлива происходит практически по единой схеме, которую можно проиллюстрировать на примере газового факела с четко выраженным преобладанием в направлении движения. Для рассматриваемого течения характерно наличие двух разделенных до некоторого момента многокомпонентных потоков газа с разными физическими (температура, скорость) и химическими (молекулярный вес, концентрации компонентов) свойствами. Потоки могут состоять не только из топлива и окислителя в чистом виде, но и представлять готовую горючую смесь или продукты сгорания. Скорости потоков могут быть, и сверхзвуковыми, а сам процесс истечения может быть ламинарным или турбулентным в зависимости от конкретных параметров горелки. Внутренняя струя может быть предварительно закручена, однако ее вращение не должно приводить к появлению осевых обратных токов во всем поле течения (слабая закрутка). В этом случае в потоке возникают градиенты давления в радиальном направлении, обусловленные наличием центробежной силы. Воспламенение инициируется высокой температурой одного из потоков или локальным повышением температуры в зоне смешения, имитирующим поджигание смеси. Выделение энергии в результате протекания химических реакций приводит к резкому повышению температуры в зоне смешения, что при определенных условиях может приводить к дополнительной турбулизации потока. В таком пламени выделяются три зоны, которые на примере смешения углеводородного топлива с воздухом можно охарактеризовать следующим образом. Первая — это обогащенная топливом зона вблизи оси форсунки, где сосредоточены

продукты неполного сгорания, вторая — близкая к стехиометрической область высоких температур, и третья — обедненная горючим область внешнего потока.

Процесс химического взаимодействия потоков происходит по цепному механизму в несколько стадий, на которых образуется много промежуточных веществ — атомов и свободных радикалов. В процессе горения кроме основных продуктов окисления— CO_2 и H_2O , не являющихся токсичными, образуются окислы азота NO , NO_2 , продукты неполного сгорания углерода CO и CH_x , зола, а иногда, в зависимости от вида топлива и окислы серы SO_2 , SO_3 и другие. Большинство из этих окислов являются токсичными и даже в малых концентрациях оказывают вредное воздействие на окружающую среду.

Итак, в работе моделируется течение газа, характерное для авиационных испытательных стендов или промышленных устройств сжигания топлива. Отличительными чертами таких течений является преобладание одного направления газа, отсутствие зон с большими поперечными градиентами давления, наличие турбулентного перемешивания потоков и, быть может, слабое вращение одного потока относительно другого.

Модель для описания течения реагирующего газа может быть получена на основе совместного решения уравнений движения вязкого газа и уравнений переноса для отдельных компонентов смеси [1].

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{div}(\rho \vec{V}) = 0, \\ \text{div}(\rho \vec{V} \cdot \vec{V}) = \rho \vec{F} - \text{grad } P + \text{div } \hat{t}, \\ \text{div}(\rho \vec{V} \cdot E) = \rho \vec{F} \cdot \vec{V} + \text{div}(\hat{t} \vec{V}) - \text{div}(P \vec{V}) - \text{div } \vec{q} - \rho Q, \\ \text{div}(C_i \vec{V}) = \text{div } \vec{I}_i + W_i^*, i = 1, \dots, N, \\ E = \sum_{i=1}^N h_i C_i + \frac{\vec{V}^2}{2} \\ P = \rho R T \mu_2^{-1} \end{array} \right. \quad (1)$$

Здесь \vec{F} — вектор внешних сил, Q — приток лучистой энергии, W_i^* — скорость образования i – ой компоненты в результате протекания химических реакций, \hat{t} , — тензор вязких напряжений, \vec{q} — вектор плотности теплового потока.

Ввиду специфики представленного потока газа: течение слабо или вовсе не зависит от условий на одной из границ, для описания вязкого струйного течения целесообразно использовать параболическую аппроксимацию полной системы уравнений Навье-Стокса. Так как при описании струйного течения вязкого газа удобно использовать систему координат, связанную с линиями тока, при построении математической модели течения рассматривался вопрос о процедуре параболизации в разных системах координат. Суть

проблемы состоит в том, что параболизация полной системы уравнений, выполненная формально в той или иной системе координат, приводит не только к разным видам параболизированных уравнений, но и к “потере” некоторых членов, например, если отбрасывание вторых производных по маршевой координате выполняется в цилиндрической системе координат.

На примере координат Мизеса, определенных как

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = -\rho V \left(\frac{y}{\psi}\right)^v, \quad \frac{\partial \psi}{\partial y} = \rho U \left(\frac{y}{\psi}\right)^v \quad (2)$$

проведена параболизация полной системы Навье-Стокса, описывающей пространственное турбулентное горение газового факела, и выполнена оценка большинства смешанных производных, которые фактически теряются в цилиндрической системе координат. Показано, что вид параболизированных уравнений зависит от порядка очередности выполнения двух преобразований: перехода в криволинейную систему координат и непосредственного вычеркивания вторых производных по маршевой координате.

Для практического применения используется система уравнений Навье-Стокса в приближении вязкого слоя, параболизированная в координатах Мизеса:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho U y^v) + \frac{\partial}{\partial y} (\rho V y^v) = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} = -\frac{1}{\rho U} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{V}{U} \left(\frac{y}{\psi}\right)^v \frac{\partial P}{\partial \psi} + \left(\frac{1}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\mu \rho U \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^v \frac{\partial U}{\partial \psi} \right) \quad (4)$$

$$\frac{\partial W}{\partial x} = -\frac{VW}{yU} + \left(\frac{y}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\mu \rho U \left(\frac{y}{\psi}\right)^v \frac{\partial W}{\partial \psi} \right) - \left(\frac{y}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\mu \frac{W}{y} \right) + 2\mu \left(\frac{y}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{W}{y} \right) \quad (5)$$

при $v = 1$

$$\frac{\partial P}{\partial \psi} = \frac{1}{U} \cdot \frac{\psi}{y^2} W^2 \quad (6)$$

$$P = \rho R T \mu_{\Sigma}^{-1} \quad (7)$$

$$\frac{\partial y}{\partial \psi} = \frac{\psi^v}{\rho U y^v} \quad (8)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial x} = \left(\frac{1}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{\mu}{Sc} \rho U \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^v \frac{\partial C_i}{\partial \psi} \right) + \frac{1}{\rho U} W_i^*, i = 1, \dots, N, \quad (9)$$

$$E = \sum_{i=1}^N h_i(T) C_i + \frac{1}{2}(U^2 + V^2 + W^2) \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial x} = & \left(\frac{1}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{\mu}{Pr} \rho U \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^v \frac{\partial E}{\partial \psi} \right) + \left(1 - \frac{1}{Pr}\right) \left(\frac{1}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\mu \rho U^2 \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^v \frac{\partial U}{\partial \psi} \right) \\ & + \left(\frac{4}{3} - \frac{1}{Pr}\right) \left(\frac{1}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\mu \rho UV \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^v \frac{\partial V}{\partial \psi} \right) \\ & + \left(1 - \frac{1}{Pr}\right) \left(\frac{1}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\mu \rho UW \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^v \frac{\partial W}{\partial \psi} \right) - \frac{2}{3} v \frac{1}{\rho U} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{y^v} \mu UV \right) \\ & + \frac{2}{3} v \frac{V}{U} \left(\frac{y}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{1}{y^v} \mu UV \right) - \frac{2}{3} v \left(\frac{1}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} (\mu V^2) - v \left(\frac{1}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} (\mu W^2) \\ & - \left(1 - \frac{1}{Le}\right) \left(\frac{1}{\psi}\right)^v \frac{\partial}{\partial \psi} \left(\frac{\mu}{Pr} \rho U \left(\frac{y^2}{\psi}\right)^v \sum_{i=1}^N h_i \frac{\partial C_i}{\partial \psi} \right) - \frac{Q}{U} \end{aligned} \quad (11)$$

Выбор такой системы уравнений обусловлен, в первую очередь тем, что характерные числа Рейнольдса для исследуемых течений достаточно велики ($10^5 - 10^7$), и, поэтому в уравнения включены слагаемых порядка больше, чем $\frac{1}{Re}$. С другой стороны, относительно простой вид уравнений газовой динамики не вносит дополнительных трудностей в вычислительную процедуру и позволяет моделировать процессы химического взаимодействия для произвольного набора компонент и реакций.

Благодаря параболичности исходной системы уравнений вида (3–11) распределение параметров потока достаточно задавать в некотором начальном сечении и на двух границах рассчитываемой области. Начальные профили параметров потока могут быть непрерывными функциями по поперечной координате, что характерно для уже развитого струйного течения, или разрывными, в случае описания начального участка смешения коаксиальных газовых струй. Одна из границ зоны течения свободной струи обычно располагается в области невязкого течения. Спутный поток считается равномерным и поступательным, и поэтому, на этой границе параметры струи совпадают с постоянными параметрами внешнего течения. Другой границей струи обычно считается ось симметрии, для которой справедливо равенство нулю всех нормальных производных и поперечной и трансверсальной составляющих скорости.

В такой постановке краевая задача с начальными данными для параболизированных уравнений Навье-Стокса является корректной лишь в сверхзвуковой области течения, так

как в дозвуковой области течения возможна передача возмущений вверх по потоку, что не способен учитывать маршевый метод решения. Однако для многих практических приложений хорошим считается случай изобарического в начальном сечении по поперечной координате ($\frac{\partial P}{\partial y} = 0$) течения, для описания параметров которого применение маршевого метода является корректным во всех областях [2]. Проверка правильности работы алгоритма проводилась путем сравнения численных результатов с экспериментальными данными [3].

Моделирование образования токсичных окислов

Опишем конкретное устройство сжигания газообразного топлива — газовую горелку. Наиболее распространенная компоновка горелки, так называемый вариант "труба в трубе", обеспечивающий двухступенчатое смешение. При этом по внутренней трубе чаще всего подается топливо — чистый газ (метан, пропан), а по внешней — кислород или воздух, а также различные присадки. Смешение топлива с окислителем осуществляется в предтопочной камере за счет конструктивных особенностей горелки (форсунок, эжекторов, направляющих лопаток и т. д.), так, что смесь получается однородной. Благодаря высокой температуре в камере газ может воспламениться. Созданная таким образом устойчивая изобарическая струя, скорость которой может варьироваться в зависимости от энергетической установки от 20 м/с до 200 м/, попадает в топочную шахту, заполненную воздухом и продуктами сгорания, где и располагается факел горения.

Рассмотрим горение природного газа в воздухе в условиях близких к режиму сжигания топлива в энергетической установке. Предположим, что через щель радиусом $R_0 = 0,1$ м со скоростью $U_0 = 100$ м/с поступает метано-воздушная смесь, коэффициент избытка окислителя которой равен $\alpha = 0,4$. Предварительный нагрев газа до температуры $T_0 = 1270^\circ\text{K}$ при давлении $P_0 = 1$ атм создает предпосылки для протекания релаксационных процессов в условиях близких к равновесным. Газовая смесь вытекает в топочное пространство, заполненное воздухом при температуре $T_n = 500^\circ\text{K}$ и давлении $P_n = 1$ атм. Скорость движения внешней среды составляет $U_n = 20$ м/с.

Для такого высокотемпературного потока газа, где разложение молекул CH_x практически завершено, моделирование догорания углеводородного топлива можно выполнить, предполагая, что в смеси содержатся 11 компонент: CO_2 , H_2O , NO , O_2 , H_2 , N_2 , OH , CO , H , O , N , между которыми возможно протекание 15 реакций [5]. Для описания турбулентного смешения реагентов используются алгебраические модели [4, 5, 6].

Расчеты показывают, что в результате взаимодействия двух спутных потоков разного химического состава образуется зона перемешивания, в которой на определенном расстоянии от форсунки устанавливается пламя. В данном течении фронт пламени (линия максимальной температуры) зарождается на расстоянии $0,5 R_0$. Постепенно перемещаясь в сторону оси, фронт достигает ее на расстоянии примерно $25 R_0$. Резкий подъем температуры в слое смешения (рис 1) происходит вследствие диффузии кислорода воздуха, с одной стороны, и топливных радикалов, с другой, в зону смешения, где создаются условия для протекания химических реакций.

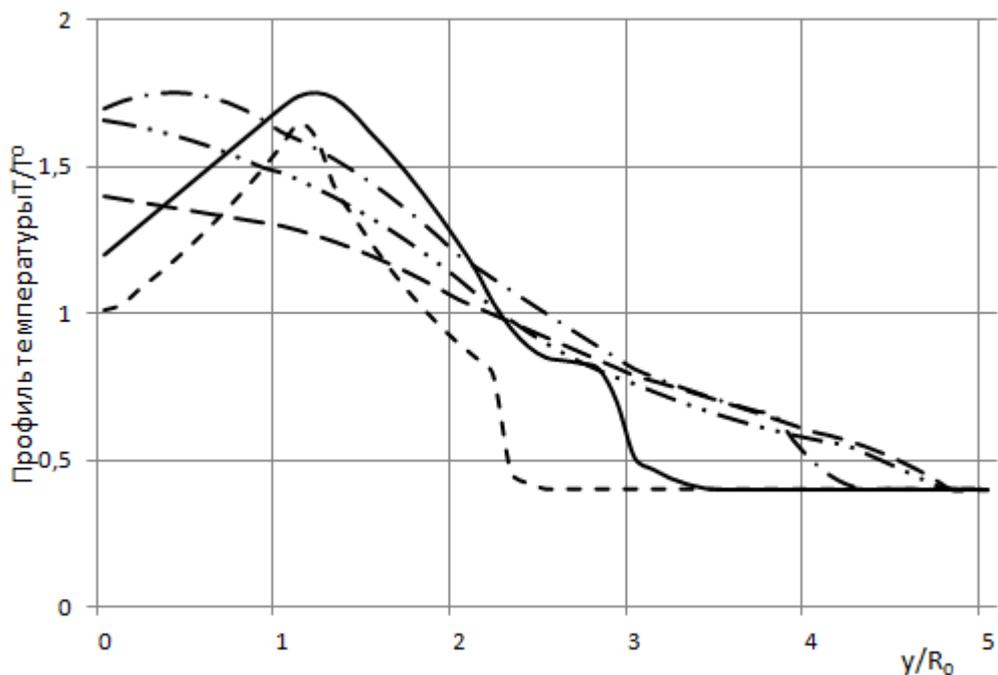


Рис. 1. Поперечное распределение температуры.

- - - Сечение $x=5 R$, — Сечение $x=10 R$,
 — · - Сечение $x=20 R$, — · · Сечение $x=30 R$,
 — — Сечение $x=40 R$,

В целом, поскольку скорость распространения химических компонентов лимитируется скоростью диффузии, процесс окисления в слое смешения носит существенно неравновесный характер. Реакция окисления CO до CO_2 начинается в слое смешения, в зоне, где коэффициент избытка окислителя ниже единицы, а при прогреве центральной части струи благодаря притоку большого количества окислителя распространяется на всю ширину факела. Этот вывод можно сделать из сравнения поперечных профилей CO , представленных на рис 2 для горящего и "замороженного" течения. Догорание CO практически заканчивается на расстоянии $35 R_0$.

Окись азота NO образуется при высокой температуре в основном в зоне, где коэффициент избытка окислителя близок к единице (рис 3). С повышением температуры факела и перемещением фронта пламени на ось струи концентрация NO растет, а на расстоянии примерно $27 R_0$ от устья горелки достигает максимального значения (рис 4).

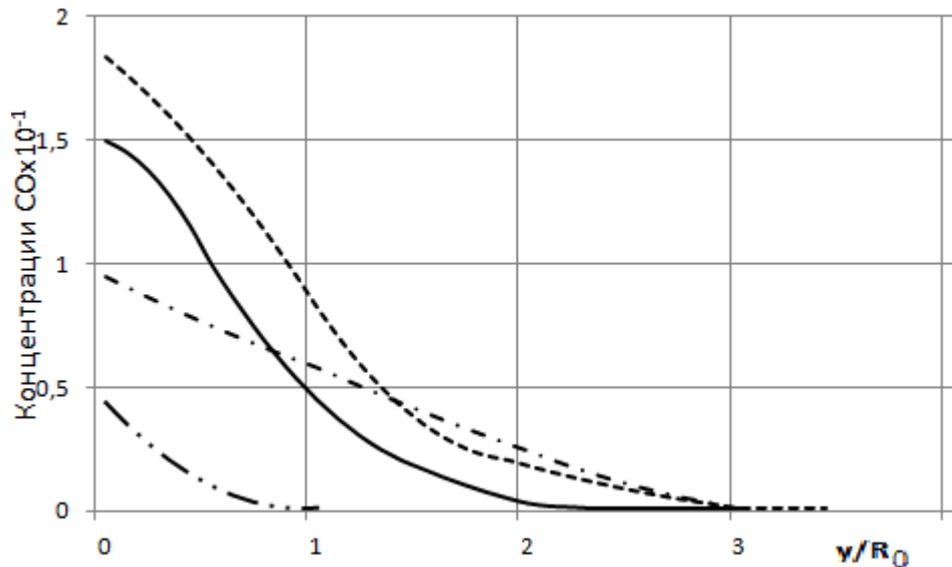


Рис. 2. Поперечные концентрации CO.

- Сечение $x=10 R$, неравновесное течение
- ⋯ Сечение $x=20 R$, неравновесное течение
- Сечение $x=10 R$, "замороженное" течение
- · - Сечение $x=20 R$, "замороженное" течение

Дальнейшее изменение концентрации NO в значительной степени становится связанным с охлаждением факела горения: темп образования NO снижается.

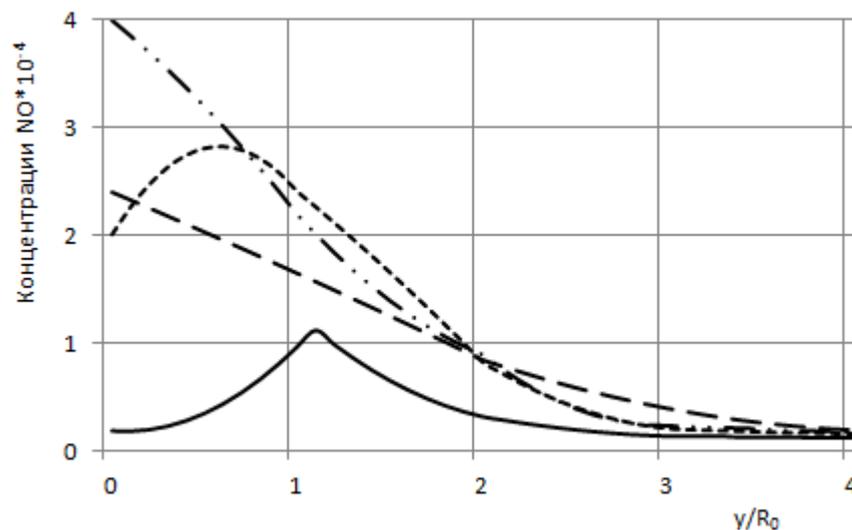
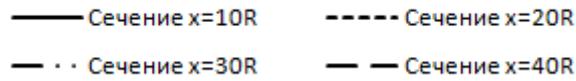


Рис. 3. Поперечные профили концентрации NO.



Распределение параметров рассчитываемого течения в сечении $x = 100 R_0$ показывает, что движение внутренней струи относительно воздушного потока практически прекратилось: скорость на оси $U = 0,29 U_0$.

Температура имеет еще достаточно высокое значение ($T = 0,9 T_0$), однако горение прекратилось в связи с тем, что все элементы топлива прореагировали с молекулами окислителя. В результате окись углерода CO полностью перешла в CO_2 , а окись азота NO, не вступая в реакции в таком диапазоне температур ($0,9T_0 - 0,4T_0$), продолжает диффундировать в потоке окружающего воздуха.

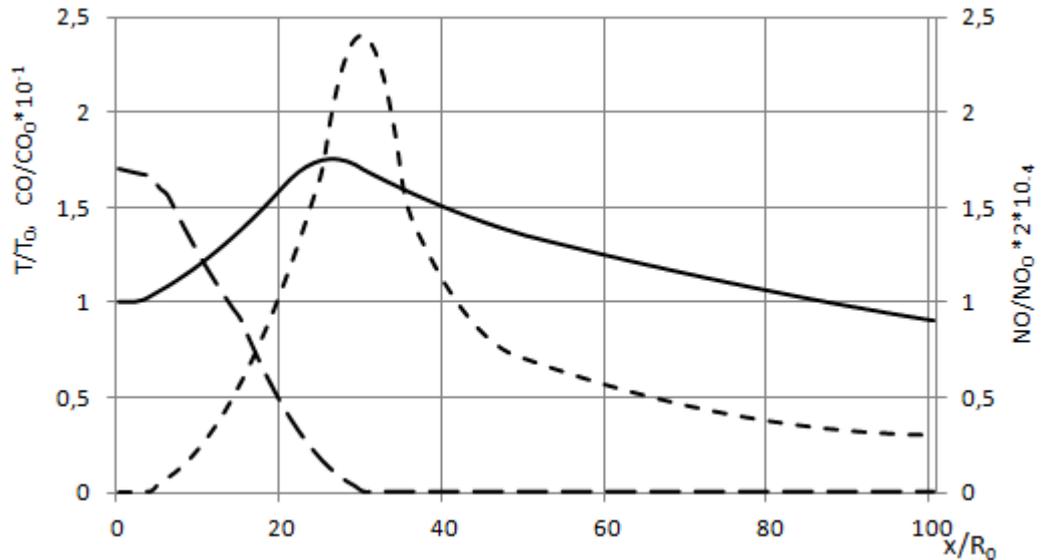


Рис. 4. Продольные профили температуры и концентраций на оси струи.



Итак, построенная модель распространения факела горения в тракте энергетической установки позволяет проанализировать динамику фронта пламени и предсказать зоны образования продуктов сгорания.

Моделирование горения в закрученном потоке

Закрутка потока является эффективным методом управления структурой неізотермических реагирующих струй, что на практике часто используется для стабилизации пламени. Известно, что предварительная закрутка струи вносит серьезные изменения в структуру потока, так как факел становится шире, вследствие увеличения основной зоны реакции, и короче, благодаря интенсивному затуханию осевой скорости [1].

Предположим, что благодаря техническим приспособлениям, например системе направляющих лопаток, струи закручиваются так, что профиль окружной составляющей скорости в начальном сечении представляет собой параболу с центром на границе внутреннего и внешнего потоков, где $W_n = 0,1 U_0$. Интенсивность закрутки такой струи составляет $\omega = 0,272$.

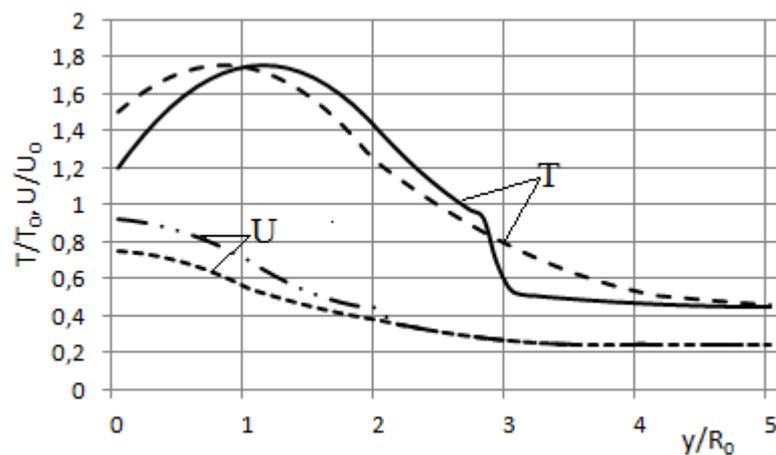


Рис. 5. Поперечные профили температуры и скорости

- Сечение $x=10R_0$, закрученный поток
- Сечение $x=10R_0$, не закрученный поток
- Сечение $x=10R_0$, закрученный поток
- · - · Сечение $x=10R_0$, не закрученный поток

Из сравнения характеристик течения закрученных и незакрученных потоков следует, что, вследствие увеличения интенсивности перемешивания, пламя для данных скоростей стабилизируется ближе к устью горелки. Фронт пламени быстрее перемещается в сторону оси потока, так например, на расстоянии $x = 10 R_0$ он располагается примерно на $0,4 R_0$ ближе к центру струи. Основная зона реакций, ограниченная кольцевым пространством между относительно холодным центральным ядром и холодным внешним потоком, значительно шире, чем в незакрученных потоках. Это видно из сравнения поперечных профилей температуры и скорости (рис. 5), построенных в сечении $x = 10 R_0$.

В закрученном потоке на начальном участке факела смешение компонент топлива с компонентами окислителя, а также горячих продуктов сгорания с более холодным газом

происходит значительно интенсивнее. В таких условиях увеличивается расход топливных радикалов, что подтверждается более быстрым окислением CO до CO₂. Однако быстрый рост температуры способствует и увеличению темпа образования NO. На начальном участке закрученного факела, согласно расчетам, токсичного окисла NO содержится примерно в два раза больше, чем в аналогичном сечении незакрученного потока (рис. 6).

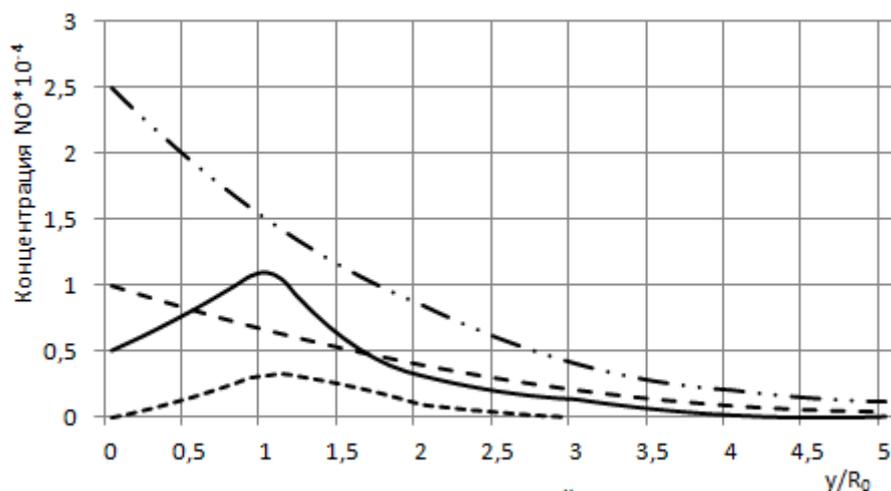


Рис. 6. Поперечные профили концентрации NO.

- Сечение $x=10R$, закрученный поток
- - - Сечение $x=40R$, закрученный поток
- Сечение $x=10R$, не закрученный поток
- · - Сечение $x=40R$, не закрученный поток

Благодаря активному перемешиванию на основном участке струи часть топливных радикалов, в частности CO, оказываются "выброшенными" за пределы зоны высоких температур в среду холодного окислителя. Так, например, в сечении $x = 40 R_0$, в кольце от $3 R_0$ до $6 R_0$ доля CO достигает 0,03%. Унос горячих продуктов из зоны горения способствует не только сокращению длины факела, но и уменьшению общего времени пребывания газовых компонент в высокотемпературной области. Вследствие этого снижается и темп образования NO по сравнению с процессом окисления в незакрученном потоке (рис. 7). Это приводит к сокращению доли NO в потоке уходящих газов. Полученные результаты численного исследования влияния закрутки потока на эффективность процесса перемешивания и горения в струях подтверждаются и экспериментальными наблюдениями.

Итак, предварительная слабая закрутка струй химически реагирующего газа, во-первых, увеличивая скорость перемешивания реагентов, увеличивает ширину пламени, во-вторых, уменьшая скорость распространения струи, уменьшает длину факела, и, в третьих,

изменяет темпы образования токсичных окислов, в частности, CO и NO, а также зоны образования загрязняющих веществ.

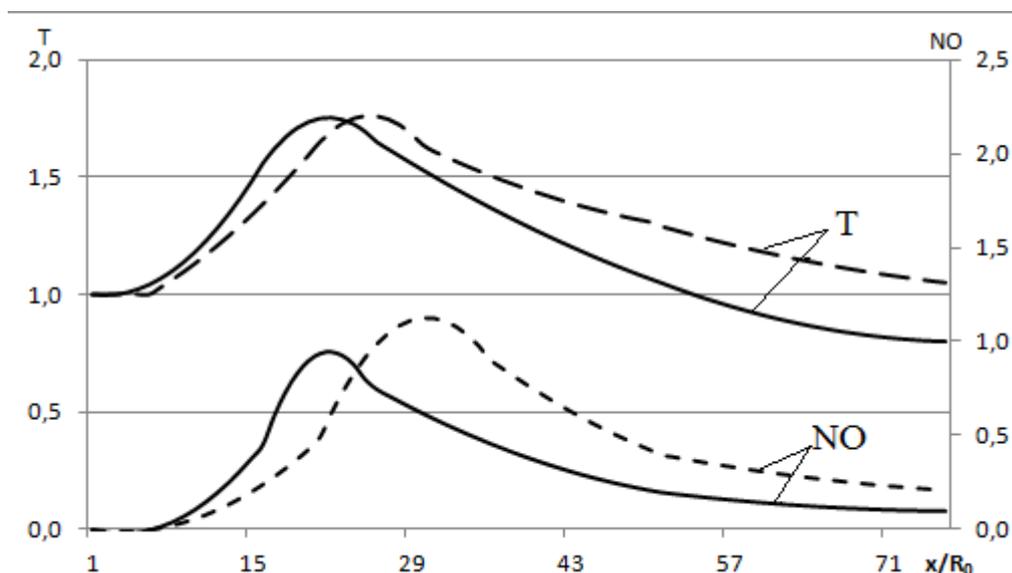


Рис. 7. Профили температуры и концентраций NO.

- Профиль температуры закрученный поток
- - Профиль температуры не закрученный поток
- Профиль концентраций NO*10-4 закрученный поток
- - Профиль концентраций NO*10-4 не закрученный поток

Заметим, что темпы образования токсичных окислов сильно зависят и от газодинамических характеристик струй — скоростей потоков и скорости подвода вещества, температуры потоков и температуры вводимого вещества и интенсивности закрутки потока. В связи с этим, приведенное параметрическое исследование нужно рассматривать лишь как иллюстрацию к применению разработанного метода расчета параметров течения химически реагирующих потоков газа.

Выводы

Разработана математическая модель и численный метод моделирования турбулентного горения углеводородного топлива в закрученных струях. Математическая модель построена на основе параболизированных уравнениях Навье-Стокса с соответствующими граничными условиями, замыкающими соотношениями в рамках алгебраических моделей турбулентности при наличии химических реакций между молекулами смеси. Построен алгоритм расчета турбулентных течений вязкого газа с неравновесно протекающими между компонентами химическими реакциями, отличающийся тем, что наряду с применением

метода расщепления по физическим процессам, используется метод локальной линеаризации для решения уравнений химической кинетики, основанный на явном разностном шаблоне. На основе предложенного численного метода исследовано образование токсичных компонентов в струях с типичными для энергетических установок данными.

Литература

1. Авдеевский В.С., Ашратов Э.А., Иванов А.В. Пирумов У.Г. Сверхзвуковые неизобарические струи газа. — М.: Машиностроение, 1985. —248с.
2. Пирумов У.Г., Росляков Г.С. Течение газа в соплах. — М.: МГУ, 1978, 350с.
3. Гупта А., Лилли Д., Сайред Н. Закрученные потоки. — М.: Мир, 1987. —588с.
4. Бойко А.В., Грек Г.Р., Довгаль А.В., Козлов В.В. Физические механизмы перехода к турбулентности в открытых течениях. — М.-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2006. — 304с.
5. Иванов И.Э., Крюков И.А. Численное исследование турбулентных течений с ограниченным и свободным отрывом в профилированных соплах. — М.: Вестник МАИ, т. 16, № 7, 2009, с. 23-30.
6. Юн А.А., Крылов Б.А. Расчет и моделирование турбулентных течений с теплообменом, смешением, химическими реакциями и двухфазных течений в программном комплексе Fastest-3D. М.: — Изд-во МАИ, 2007. —116с.

Сведение об авторе

Демидова Ольга Львовна, доцент Московского авиационного института (национального исследовательского университета), к.ф.-м.н.

МАИ. Волоколамское ш., 4, Москва, ГСП, 125871;

тел.: (499) 158-40-90; e-mail: oldnlm806@gmail.com