

*В.А. Волков, А.В. Иванов, В.Ю. Стрельцов, А.В. Хохлов*

Ментор Графикас Девелопмент Сервисез Лимитед

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РАВНОВЕСНЫХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ РАСЧЁТА ГАЗОФАЗНОГО ГОРЕНИЯ

### АННОТАЦИЯ

В работе представлены краткое описание методики и результаты численного моделирования газофазного горения углеводородных топлив. Расчеты проводились на базе системы уравнений Навье-Стокса, дополненной уравнениями сохранения полной энтальпии переноса компонент и турбулентности, для замыкания которой использовалось уравнение состояния, описывающее равновесное состояние химически реагирующих газовых смесей. Метод реализован в пакете гидрогазодинамического моделирования FloEFD™ с использованием автоматического генератора свойств. Приведено сопоставление результатов расчетов с экспериментальными данными.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Моделирование процессов горения газообразных и других топлив исключительно важно при проектировании технических устройств. К настоящему времени накоплен значительный опыт моделирования химически реагирующих течений, а современные возможности вычислительной техники позволяют применять сложные модели с учетом неравновесности, многофазности, турбулентности и других факторов, что позволяет достичь значимого для практических применений уровня точности расчетов.

Тем не менее, выбор модели и определение необходимой степени детализации до сих пор остаётся проблемой для большинства пользователей программных продуктов и требует экспертных знаний в области численного моделирования процессов горения. Хороший обзор современных и популярных ныне методов расчета химически реагирующих течений приведен в [1].

Подход, приводимый в данной статье, является попыткой компенсировать трудности постановки задач о горении с помощью модели, которая требует задания лишь ограниченного набора параметров, а именно, химического состава реактантов и диапазона рабочих параметров устройства. На основе этих данных и решения задачи о химическом равновесии происходит расчет термодинамических и теплофизических свойств, необходимых для замыкания системы уравнений газовой динамики.

Далее мы попытаемся ответить на вопрос, является ли равновесное приближение и его модификации достаточными для проведения расчетов, результаты которых могут быть

использованы при проектировании технических устройств.

### 2. МОДЕЛЬ ТЕЧЕНИЯ РАВНОВЕСНО РЕАГИРУЮЩИХ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

Течение равновесно реагирующих смесей газов описывается системой уравнений Навье-Стокса, дополненной уравнениями переноса термодинамической энтальпии и компонент горючей смеси, а также  $k-\varepsilon$ ,  $k-\omega$  моделями турбулентности или же их модификациями.

Термодинамическое замыкание системы уравнений строится на основе расчета химически равновесного состояния идеально-газовой смеси. Термодинамические свойства индивидуальных веществ определяются с использованием полиномиальной аппроксимации приведенных потенциалов Гиббса. Коэффициенты полиномов и данные для расчета коэффициентов молекулярного переноса хранятся в базе данных. Равновесное состояние определяется из условия максимума энтропии изолированной системы при выполнении законов сохранения атомов и энергии, а также условия электронейтральности [2].

При записи уравнений переноса полной энтальпии и реагирующих компонент используется упрощённая модель многокомпонентной диффузии, и число Льюиса полагается равным единице  $Le=1$ .

Как сама модель, так и её программная реализация строго удовлетворяют законам сохранения вещества и энергии, что, по нашему мнению, является непременным условием получения достоверных результатов.

#### 2.1. Равновесная модель горения

При использовании равновесного подхода предполагается, что химические реакции протекают до достижения химического равновесия сразу, как только исходные компоненты перемешиваются до молекулярного уровня. Для того, чтобы снизить размерность системы уравнений все вещества собираются в две условные группы, называемые «горючее» и «окислитель», а их перенос рассчитывается с помощью одного уравнения. Это означает, что перенос всех веществ в группе происходит одинаково, а смешение имеет место между двумя группами. Такое упрощение, хотя и вводится искусственно, хорошо соответствует типичным условиям организации горения в различных промышленных устройствах. В чистом виде этот подход не даёт возможности

рассчитывать горение предварительно перемешанных смесей.

## 2.2. Модель горения с ограниченной скоростью образования продуктов сгорания

Чтобы обеспечить возможность расчета предварительно перемешанных смесей используется модификация равновесной модели с ограничением скорости образования равновесных продуктов сгорания. Для этого вводится условная необратимая реакция вида:



а также дополнительное уравнение переноса продукта этой реакции в виде:

$$\frac{\partial \rho Z_P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho u_i Z_P - \left( \frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial Z_P}{\partial x_i} \right) =$$

$$m_P \rho \frac{(1-Z_P)^2}{m_O m_F} (1-Y_F) Y_F K \quad (2)$$

При этом уравнение состояния переписывается в форме, которая учитывает наличие продукта сгорания:

$$h(T, p, Y_F, Z_P) = y_O h_O + y_F h_F + y_P h_P \quad (3)$$

$$\rho(T, p, Y_F, Z_P) = \left( \frac{y_O}{\rho_O} + \frac{y_F}{\rho_F} + \frac{y_P}{\rho_P} \right)^{-1} \quad (4)$$

## 3. ПРИМЕРЫ РАСЧЕТОВ

### 3.1. Горение предварительно перемешанных компонент: 300 kW BERL Combustor

Данный расчет был выполнен для опытного образца горелки мощностью 300 кВт, работающей на природном газе. Горелка была разработана и введена в эксплуатацию в International Flame Research Foundation (IFRF), Нидерланды. Общий вид камеры сгорания и детальная геометрия горелки показаны на рис. 1.

Базовым размером горелки является диаметр трубы для подвода окислителя  $D_0$ , который равен 87 мм. Остальные размеры горелки пропорциональны  $D_0$  и показаны на рис. 1. Камера сгорания ориентирована вертикально и имеет в верхней части конический колпак, соединенный с цилиндрической трубой для отвода дымовых газов.

Горелка состоит из завихрителя и огнеупорной горловины, соединенных вместе цилиндрическим каналом. Подвод топлива осуществляется через трубу, расположенную в центре горелки. Завихритель расположен перед цилиндрическим каналом (не показан на рис. 1). Природный газ, подающийся по трубе, поступает через 24 отверстия диаметром 1.8 мм. Параметр закрутки для данного расчета равен 0.56.

Профили осевой и тангенциальных компонент скорости входного воздушного потока задавались в соответствии с данными, приведенными в [3]. Интенсивности турбулентных пульсаций для потоков воздуха и топлива составляли 25% и 5%, соответственно.

На стенках горелки и камеры сгорания

использовались граничные условия постоянства температуры в соответствии с табл. 1.

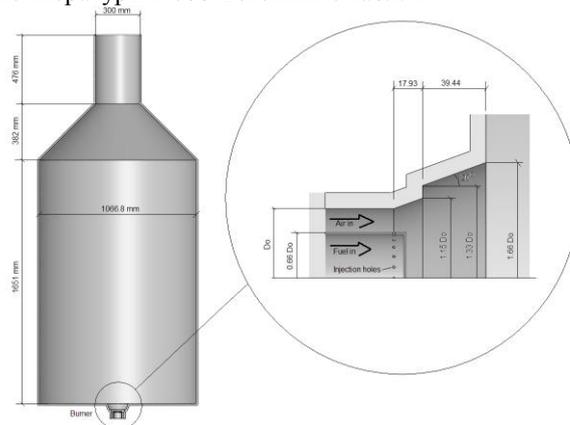


Рис. 1. Общий вид камеры сгорания и детальная геометрия 300 кВт горелки BERL [3]

Таблица 1. Температура стенок

Стенка	Температура, К
Стенка горелки (наклонная)	1273
Стык трубы и горелки	1173
Нижняя стенка камеры	1100
Остальные стенки камеры	1200

В горелку подавался природный газ голландского месторождения Slochteren при температуре 35°C, а также сухой воздух при температуре 39°C. Состав топлива и окислителя показан в табл. 2.

Таблица 2. Состав топлива и окислителя

Природный газ	Массовая доля, %
Метан	93.312
Этан	3.081
Пропан	0.2658
Бутан	0.3503
Азот	2.195
Диоксид углерода	0.7958
Воздух	
Кислород	23.3
Азот	76.7

Для решения задачи была использована равновесная модель горения с ограничением скорости образования продуктов сгорания. Расчет был выполнен в нестационарной постановке с постоянным шагом по времени равным 0.005 с. Было сделано 3000 итераций (13.0 с физического времени), и получено стационарное решение.

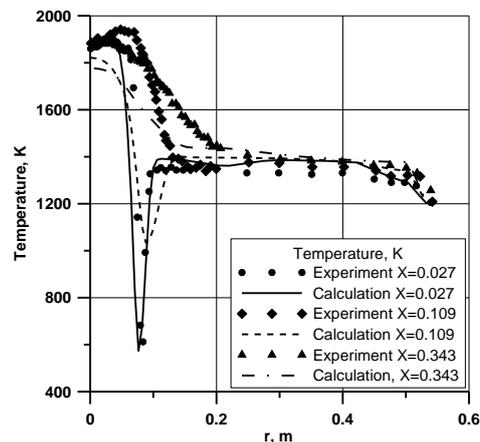


Рис. 2. Сравнение экспериментальных и рассчитанных профилей температуры.

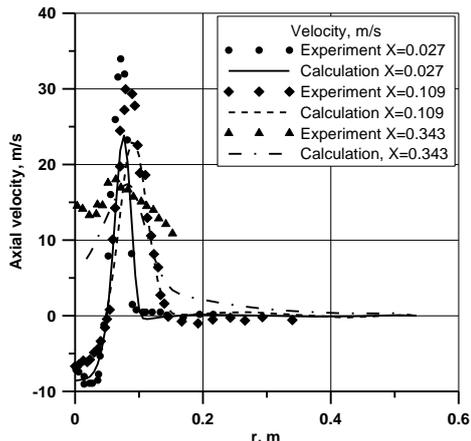


Рис. 3. Сравнение экспериментальных и рассчитанных профилей продольной скорости.

На рис. 2 и 3 показано сравнение рассчитанных профилей продольной скорости и температуры с измеренными значениями. Сравнение показывает, что размер рециркуляционной зоны и уровень скоростей хорошо согласуются с экспериментом, а профили температур весьма близки к экспериментальным, особенно в ближайшем к горелке сечении.

### 3.2. Сжигание предварительно перемешанных компонент в экспериментальной установке

В работе [4] приведены данные измерений, полученные при сжигании предварительно перемешанной обедненной топливной смеси за плохообтекаемым стабилизатором пламени.

На рис. 4 показана схема камеры сгорания, сечение рабочей части которой представляет собой квадрат (79 мм × 79 мм) со скругленными углами. На оси камеры расположен стабилизатор пламени - плохообтекаемое тело, представляющее собой усеченный конус на цилиндрическом держателе диаметром 20 мм. Диаметр основания конуса (D) 44.45 мм, угол раствора - 45°.

Топливо и окислитель предварительно перемешивались за 3 м до входа в камеру. Специальные устройства перед входом в камеру обеспечивали однородность потока и необходимый уровень турбулентных пульсаций.

Средняя скорость на входе в камеру составляла 15 м/с, а интенсивность турбулентных пульсаций 24%. Температура была равной 300 К, давление 1 атм.

Массовый расход на входе в камеру задавался в соответствии с измеренными значениями расходов для воздуха (3962 сл/мин – стандартных литров в минуту) и топлива (244 сл/мин), что дает коэффициент избытка горючего (equivalence ratio - φ) 0.586 и адиабатическую температуру пламени 1641 К.

Чтобы ускорить решение задачи рассчитывалась 1/4 камеры сгорания.

Расчет был выполнен в нестационарной постановке с постоянным шагом по времени

равным 0.000625 с. За 1000 итераций было получено стационарное решение.

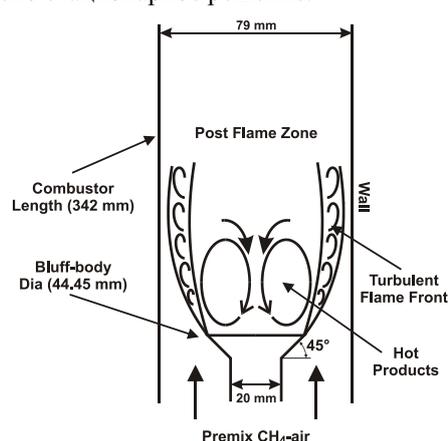


Рис. 4. Геометрия камеры сгорания и структура турбулентного пламени при его стабилизации за плохообтекаемым телом [4]

Состав топлива и окислителя приведен в табл. 3.

Таблица 3. Состав топлива и окислителя

Топливо	Массовая доля, %
Метан	100.0
Окислитель	
Кислород	23.3
Азот	76.7

Для решения задачи была использована равновесная модель горения с ограничением скорости образования продуктов сгорания.

Источник воспламенения (диск) мощностью 2кВт, был помещен внутри рециркуляционной зоны за конусом и обеспечивал воспламенение смеси. Источник включался после установления гидродинамического поля течения, работал около 0.007 с, а затем выключался.

Получено хорошее соответствие результатов расчета с экспериментальными данными (рис. 5-7), что позволяет сделать вывод о применимости используемого подхода для моделирования распределений температур и концентраций основных компонентов продуктов сгорания в факеле предварительно перемешанной топливной смеси.

Расчетные уровни концентраций второстепенных компонент продуктов сгорания (CO, NO) составили 6.3 ppm и 1200-1400 ppm, соответственно.

Расчетные концентрации CO хорошо согласуются с равновесным значением концентрации CO, приведенными в [4] (7 ppm). Экспериментальные же значения концентрации CO оказались далеки от равновесного значения, превышая последнее на два порядка. То же самое можно сказать и об уровне расчетных концентраций NO, которые на два порядка выше экспериментальных значений. Такое большое расхождение является вполне ожидаемым, если учесть, что в основе рассматриваемой модели горения лежит равновесный подход. Существующий опыт моделирования других исследователей, а также и наш опыт [5],

показывает, что использование неравновесных подходов обеспечивает предсказание концентраций этих компонент с приемлемой точностью.

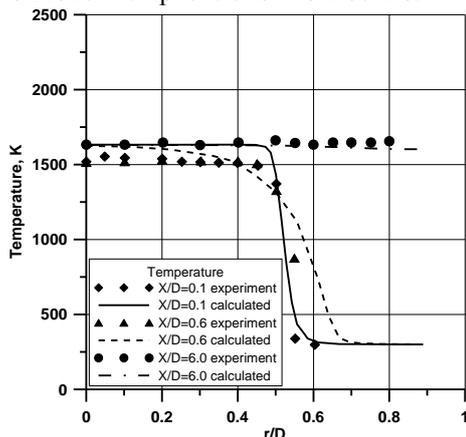


Рис. 5. Профили температуры, построенные на разных расстояниях от плоскости среза стабилизатора.

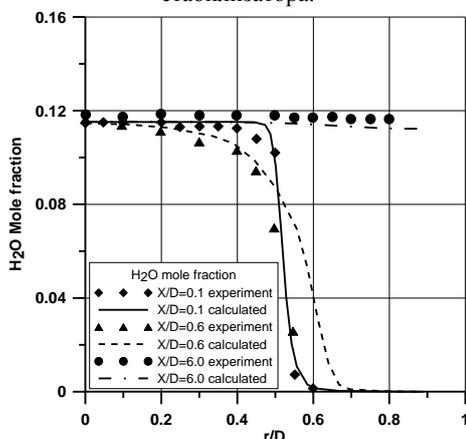


Рис. 6. Профили мольной доли воды, построенные на разных расстояниях от плоскости среза стабилизатора.

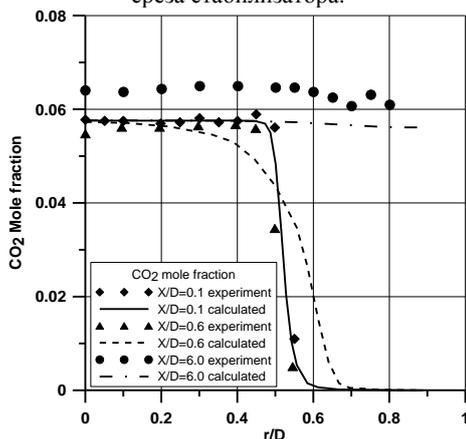


Рис. 7. Профили мольной доли двуокиси углерода, построенные на разных расстояниях от плоскости среза стабилизатора.

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сравнение расчетов, выполненных с использованием равновесных моделей, с расчетами по другим более сложным моделям [6], показывает, что описанный в данной статье подход к моделированию тепловых эффектов процесса горения значительно проще, и обладает в среднем

тем же уровнем точности при существенно меньших ресурсах, требуемых для получения конечного результата.

#### СПИСОК ОБОЗНАЧЕНИЙ

- $M_O, M_F, M_P$  – брутто-молекулы окислителя, горючего и продукта;  
 $K(T)$  – параметр скорости реакции, зависящий от температуры;  
 $Z_P$  – массовая доля продукта сгорания;  
 $Y_F$  – массовая доля горючего;  
 $\rho$  – плотность [кг/м<sup>3</sup>];  
 $\mu, \mu_t$  – ламинарная и турбулентная вязкости [Па·с];  
 $Sc, Sc_t$  – ламинарное и турбулентное числа Шмидта;  
 $m_O, m_F, m_P$  – молярные массы окислителя, горючего и продукта [кг/моль];  
 $h_O, h_F, h_P$  – термохимические энтальпии окислителя, горючего и продукта [Дж/кг];  
 $\rho_O, \rho_F, \rho_P$  – плотности окислителя, горючего и продукта при заданных температуре и давлении [кг/м<sup>3</sup>];  
 $Y_O, Y_F, Y_P$  – массовые доли остатка окислителя, остатка горючего и продукта сгорания;  
Индексы:  
 $O$  – параметры окислителя;  
 $F$  – параметры горючего;  
 $P$  – параметры продуктов сгорания;  
 $t$  – параметры, относящиеся к турбулентности;

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Warnatz J., Maas U., Dibble R.W. Combustion. Physical and chemical fundamentals, modelling and assumptions, experiments, pollutant formation. Springer, 4-th ed., 2006.
- Синярев Г.Б., Ватолин Н.А., Трусов Б.Г., Моисеев Г.К. Применение ЭВМ для термодинамических расчетов металлургических процессов. М.: Наука, 1982.
- Sayre A., Lallemand N., Dugue J., Weber R. Scaling Characteristics of Aerodynamics and Low-NOx Properties of Industrial Natural Gas Burners, The SCALING 400 Study, Part IV: The 300 kW BERL Test Results //IFRF Doc No F40/y/11, International Flame Research Foundation, The Netherlands, 1994.
- Nandula S.P., Pitz R.W., Barlow R.S. and Fiechtner G.J. Rayleigh/Raman/LIF Measurements in a Turbulent Lean Premixed Combustor //AIAA 96-0937, 34th Aerospace Sciences Meeting & Exhibit, Reno, NV, January 15-18, 1996.
- В.А. Волков, В.Н. Гаврилюк, В.Ю. Гидаспов, М.М. Макаров, А.Н. Павлов, В.Ю. Стрельцов, А.В. Хохлов. Численное моделирование газокпельных реагирующих потоков в камерах сгорания двигателейных установок //Математическое моделирование, 2005, Т. 17, № 8, С. 46-60.
- Cannon S.M., Zuo B., Adumitroaie V., Smith C.E. Linear Eddy Subgrid Modeling of Lean Premixed Methane-Air Combustion, in Quarterly Technical Progress Report LES Software for the Design of Low Emission Combustion Systems for Vision 21 Plants" //CFDRC Report No. 8321/8, Contract No. DE-FC26-00NT40975, submitted to AAD Document Control, M/S 921-107, National Energy Technology Center U.S. Department of Energy, P.O. Box 10940, Pittsburgh, PA 15236.