# Д.А. ДОЛМАТОВ

### Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина

# ГОРЕНИЕ ОДИНОЧНОЙ КАПЛИ УГЛЕВОДОРОДНОГО ТОПЛИВА В ПРИСУТСТВИИ СТАЦИОНАРНОГО РАЗРЯДА

Статья посвящена математическому моделированию горения капли углеводородного топлива при прохождении через характерные зоны стационарного электрического разряда в реагирующем потоке. Рассмотрено влияние начального размера капли на скорость и механизм разрушения, обнаружена взаимосвязь формы деформации капли с положением траектории движения относительно разряда. Установлен механизм рассеивания капель разрядом и показана зависимость интенсивности рассеивания от начального размера капли. Рассчитан коэффициент дробления капли в зоне вторичной ионизации как функция энергии свободных электронов разряда.

*Ключевые слова:* испарение топлива, энергия электронов, концентрация углеводородов, коэффициент рассеивания, поле параметров, зона горения.

#### Введение и постановка задачи

По мере развития теории и практики исследования и использования электрохимических эффектов в камерах сгорания, в частности – применения стационарного электрического разряда для ускорения и модификации воздушного или кислородного пламени углеводородов [1, 2], возрастают запросы к точности и достоверности численного моделирования процесса горения. Наиболее сложным объектом исследования остается гетерогенное горение керосина и других жидких углеводородов, как явление представляющее собой совокупность параллельно протекающих и взаимно связанных процессов механической деформации, дробления, конъюгации, испарения и химических превращений капель топлива различного начального диаметра, с химической точки зрения являющихся сложными агломератами значительного числа углеводородов (в основном, алканов) с высокой степенью изомеризации. Вообще говоря, для произвольного факела пламени невозможно игнорирование взаимовлияния горящих капель, поскольку эффективный диаметр воздействия горения капли заметно превышает расстояние между каплями в большинстве современных КС [3]. Вместе с тем следует признать целесообразным предварительное изучение особенностей горения и деформации отдельных изолированных капель, реализуемое при помощи методики двусторонней трансляции параметров на мультипространственных вычислительных сетках [4]. Данный подход позволяет исследовать основные зависимости механики выгорания капель при общей достоверности картины горения для потока практически любой степени

перемешивания и подготовить материалы для численного моделирования течения с учетом конъюгации и другого взаимодействия различных капель.

В настоящее время существует достаточно много работ по исследованию горения отдельной капли с детализированной химической кинетикой, чьей тематикой является математическое моделирование траекторных эволюций капли в термическом пламени [4, 5]. Как правило, вычислительный процесс при этом подразумевает использование высокопроизводительных систем кластерного типа с мощностью от 10 – 15 до 500 и более ТФлоп, что теоретически достаточно для моделирования подвергнутого фильтрации генерального баланса горения керосина. В то же время практически отсутствуют аналогичные работы по электрохимическим пламенам, что объясняется как сравнительной новизной данной тематики, так и значительно более высокой ресурсоемкостью вычислительного процесса при учете газофазных электрохимических реакций. Для того, чтобы сделать возможным расчет горения капли в присутствии электрического разряда на сравнительно слабых (до 100 ТФлоп) вычислительных станциях, необходимо подвергнуть суммарный генеральный баланс каскадной фильтрации по основным группам реакций.

В настоящей работе принят комплексный подход к формированию математической модели и кинетической схемы, применяемой затем при вычислениях. Основным критерием фильтрации генерального баланса выступает устойчивость итоговой совокупности реакций к физической смене скоростьопределяющего базиса при максимально жестких интервалах коэффициентов чувствительности и пороговых значений констант скоростей, что позволяет без существенных потерь в точности и детализации получить универсальную кинетическую схему с небольшим (менее 400) числом реакций, представляющих все характерные типы. Задачей исследования является, в первую очередь, выявление принципиальных взаимосвязей между начальным размером капли, энергией разряда и характеристиками процесса выгорания капель. При расчетах использовался программный пакет ANSYS CFX 14.0 с авторскими подпрограммами, адаптированный к высокопроизводительной платформе мощностью 65 ТФлоп.

# Математическая модель и кинетическая схема реакций горения

Математическая модель горения отдельной капли построена на основе традиционных уравнений движения реагирующей двухфазной сплошной среды с конечной скоростью фазовых переходов [6]. Ниже приведены основные уравнения математической модели с учетом замыкающей модели турбулентности и уравнений Максвелла:

$$\frac{\partial}{\partial x^{j}} \left( D_{i}^{M} \frac{\overline{\rho}\omega_{i}}{\nu_{i}} \frac{\partial \nu_{i}}{\partial x^{j}} - \frac{D_{i}^{T}}{T} \frac{\partial T}{\partial x^{j}} \right) - \frac{\overline{\rho}C^{j} \frac{\partial \omega_{i}}{\partial x^{j}} + \sum_{l} \frac{k_{l}}{\overline{\rho}M_{i}} \prod [a_{sl}] = 0,$$
(1)

$$\frac{\partial \overline{\rho}_{l,g}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^{j}} \left( \overline{\rho}_{l,g} \tilde{C}^{j} \right) \mp \frac{\overline{\rho}_{l,g}}{\left\{ x; 1-x \right\}} \frac{\partial x}{\partial t} = 0, \qquad (2)$$

$$\frac{\overline{\rho}_{l}}{\rho_{l}} + \frac{\overline{\rho}_{g}}{\rho_{g}} = 1, \qquad (3)$$

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}_{l,g} \tilde{C}_{l,g}^{i}\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^{j}} \left(\overline{\rho}_{l,g} \tilde{C}_{l,g}^{i} \tilde{C}_{l,g}^{j}\right) = \\
= \frac{\partial}{\partial x^{j}} \left(\tau^{ij} - p_{l,g} g^{ij} - \overline{\rho}_{l,g} C \overline{C_{l,g}^{i}} C_{l,g}^{ij}\right) - \frac{K_{lg,gl}}{\overline{\rho}_{l,g}} \left(\tilde{C}_{g}^{i} - \tilde{C}_{l}^{i}\right), \\
\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{T_{g} - T_{gs}}{T_{gs} t_{l \to g}} - \frac{T_{ls} - T_{l}}{T_{ls} t_{g \to l}}, \quad (5)$$

$$\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}T} = \frac{\mathrm{Q}_{\mathrm{lg}}}{\mathrm{T}\Delta\upsilon},\tag{6}$$

$$\begin{pmatrix} C^{j}\overline{c}_{p} + \sum_{n} D_{n}^{M} \frac{\partial \omega_{n}}{\partial x^{j}} c_{pn} \end{pmatrix} \overline{\rho} \frac{\partial T}{\partial x^{j}} - \lambda \frac{\partial^{2}T}{\partial x^{j2}} + \\ + \frac{\partial}{\partial x^{j}} \left( \sum_{l} \frac{k_{l}}{\overline{\rho}M_{i}} \prod [a_{sl}] Q_{l} \right) - \frac{\partial \left(\tau_{p}{}^{j}C^{p}\right)}{\partial x^{j}} = 0,$$

$$Q_{l} = -\Delta \overline{H}_{T,l}^{0} = \sum \Delta \overline{H}_{T,a_{s}}^{0} - \sum \Delta \overline{H}_{T,a_{p}}^{0},$$

$$(8)$$

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x^{i}} \left( \rho C^{i} k \right) = P_{k} + P_{kb} - \frac{\partial}{\partial x^{i}} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_{t}}{\mu_{t}} \right) \frac{\partial k}{\partial k} \right]$$
(9)

$$\frac{-\beta \rho \kappa \omega + \frac{\partial}{\partial x^{i}} \left[ \left( \mu + \frac{\sigma_{k}}{\sigma_{k}} \right) \frac{\partial}{\partial x^{i}} \right],}{\frac{\partial (\rho \omega)}{\partial x^{i}} + \frac{\partial}{\partial x^{i}} \left( \rho C^{i} \omega \right) = \alpha \frac{\omega}{\partial x^{i}} P_{i} + P_{i} = 0$$

$$\frac{\partial (t)}{\partial t} + \frac{\partial (t)}{\partial x^{i}} \left( \rho C^{*} \omega \right) = \alpha \frac{\partial (t)}{\partial k} P_{k} + P_{\omega b} - \frac{\partial (t)}{\partial x^{i}} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\omega}} \right) \frac{\partial \omega}{\partial x^{i}} \right],$$
(10)

$$j_{si} = \left(\frac{pD_i^M}{\delta_b \overline{R}T}\right) \left[ \ln\left(\frac{p - p_{2ipar}\left(r = d + \delta_b\right)}{p - p_{2ipar}\left(r = d\right)}\right) - 1 \right], (11)$$
$$\vec{\nabla} \times \vec{F} = 0 \tag{12}$$

$$\mathbf{x} \mathbf{E} = \mathbf{0}, \tag{12}$$

$$V \times H = J, \tag{13}$$

$$\vec{j} = \sigma \left( \vec{E} + \mu_E \vec{C} \times \vec{H} \right).$$
 (14)

Основные группы химических реакций включают в себя распад углеводородов:

$$C_n H_{2n+2} \to C_m H_{2m+1} + C_{n-m} H_{2(n-m)+1},$$
 (15)

 $C_n H_{2n+1} \rightarrow C_m H_{2m} + C_{n-m} H_{2(n-m)-1}$ , и т.д., (16) молекулярную кислородную атаку:

 $\{RH; R; ...\} + O_2 \rightarrow \{R + HO_2; ROH + O;$ 

$$RO_2H;ROO + H;R_1O_2H + R_2;...\},$$
 (17)

атомарную кислородную атаку:

$$\{RH; R; H; ROH; ...\} + O \to \{R_1 + OH; R_2 + HO_2; R_3 + CH_2O; RO; ROO; ...\},$$
(18)

гидроксильную атаку:

+

$${\rm RH; R; ROH; RO} + {\rm OH} \rightarrow {\rm R + H_2O; ...;}$$

$$ROOH + H; ROO + H; ROH + H; R_1OH + R_2$$
,

сложные органические реакции кислородсодержащих частиц:

$$\{R_1; R_1H; R_1OH; R_1OO; R_1OOH; ...\} + \{R_2; R_2H; R_2OH; R_2OO; R_2OOH; ...\} \rightarrow \{...\},$$
(20)

нитрозные органические реакции:

$$\{ R; RH; RO; ROH; ROO; ROH; O; O_2; ... \} + + \{ N_2; NO; N; CN; CNO; NH_x; ... \} \rightarrow \{ ... \},$$
(21)

реакции ударного возбуждения:

$$A^0 + e_1^- \to A^1 + e_2^-,$$
 (22)

реакции ударной диссоциации:

$$AB + e_1^- \to A + B + e_2^-, \qquad (23)$$

реакции ударной ионизации:

$$A_2 + e_1^- \to A_2^+ + e_2^- + e_3^-$$
, (24)

реакции конъюгационной ионизации:

$$A + e^- \to A^-. \tag{25}$$

Фильтрация генерального баланса [6] выполняется по смешанным коэффициентам чувствительности при учете величин констант скорости.

## Численное моделирование

Объектом моделирования является одногорелочный отсек кольцевой камеры сгорания с установленным на относительной длине  $\bar{x} = 0,15$  разрядником, генерирующем постоянный дуговой разряд. На рис. 1 представлено распределение средней температуры по длине КС, на рис. 2 – зависимость относительного диаметра капли от координаты для термического (t) и электрохимического (e) пламени.







На рис. 3 – 5 представлены поля мольных долей не полностью окисленных углеводородов при движении капли в термическом пламени (рис. 3), при прохождении через ствол разряда (рис. 4) и сквозь вторичную зону ионизации (рис. 5).







 $B - \overline{x} = 0, 2$ 

Рис. 3. Суммарная мольная доля углеводородов (термическое горение)







Рис. 4. Суммарная мольная доля углеводородов (движение сквозь ствол разряда)



$$a - \overline{x} = 0,12$$





Рис. 5. Суммарная мольная доля углеводородов (движение сквозь зону вторичной ионизации)

Характер деформации и разрушения капли, как видно из рис. 3 – 5, сильно зависит от присутствия электрического разряда. Отметим, что зоны максимальной концентрации не полностью окисленных углеводородов на рис. 4 и 5, в отличие от термического пламени, не совпадают с зонами жидкой фракции, поскольку при прохождении вблизи от дугового разряда капля топлива гарантированно испаряется вне зависимости от размера. Весьма интересно также проявление вязких и упругих сил, заключающееся в сложном характере изменения формы капли и прилегающего кипящего слоя и интенсификации/ингибировании реакций, наиболее ярко выраженных в зоне вторичной ионизации.

Хорошо известен эффект рассеивания капель топлива электрическим разрядом за счет электростатических сил. В ходе численных экспериментов была установлена зависимость вероятности сохранения траектории  $\overline{P}_d$  от размера капли и энергии электронов. На рис. 6 представлено влияние вышеназванных параметров на вероятность сохранения траектории.



Рис. 6. Вероятность сохранения каплей траектории

Согласно полученным данным, мелкие капли (с начальным диаметром до 15 мкм) гораздо лучше рассеиваются разрядом – и, таким образом, участвуют преимущественно в реакциях, соответствующих термической зоне горения или зоне вторичной ионизации. Более крупные и тяжелые капли, напротив, склонны к сохранению траектории движения через область разряда и, таким образом, значительно эффективнее испаряются и быстрее выгорают. В целом увеличение энергии разряда приводит к повышению эффективности рассеивания, хотя для капель разного начального диаметра зависимость вероятности сохранения траектории от энергии свободных электронов существенно различается – наиболее резко эта величина падает для средних капель в зоне энергий 55 – 70 эВ, для тяжелых же капель разряд средней энергии на вероятность рассеивания влияет слабо.

На основании полученных данных возможно дальнейшее изучение физической химии электрохимических пламен и, в перспективе, переход к моделированию движения множественных капель с решением сопряженных баллистических задач.

## Литература

1. Долматов, Д.А. Регулирование воздушного горения углеводородов разрядами малой длины [Текст] / Д.А. Долматов // Вестник двигателестроения. – 2011. – №2. – С. 41-51.

2. Битюрин, В.А. Исследование горения углеводородного топлива, стимулированное неравновесными плазменными образованиями в воздушном высокоскоростном потоке [Текст] / В.А. Битюрин, А.И. Климов // Законы горения. Гл. 4 / под общ. ред. Ю.В. Полежаева. – М.: Энергомаш, 2006. – С. 91-104.

3. Взаимодействие капли горючего с газовым потоком [Текст] / А.А. Борисов, С.М. Фролов, В.А. Сметанюк, С.А. Полихов, К. Сегал // Химическая физика. – 2005. – № 7.

4. Computation of high temperature nonequilibrium flows [Text] / A. Lagana, A. Riganelli, G. Ochoa de Aspuru, E. Garcia, and M.T. Martinez // In M. Capitelli, editor, Molecular Physics and Hypersonic Flows. – Kluwer Acad. Publishers, Netherlands, 1996. – P. 645-664.

5. Hara, H. The effect of initial diameter of free droplet combustion with spherical flame [Text] / H. Hara, S. Kumagai // Proc. 25<sup>th</sup> Symp. On Combustion. – Pittsburgh, PA, The Combustion Institute, 1994. – P. 423-430.

6. Дейч, М.Е. Газодинамика двухфазных сред [Текст] / М.Е. Дейч, Г.А. Филиппов. – М.: Энергоиздат, 1981. – 472 с.

#### Поступила в редакцию 30.05.2012

Рецензент: д-р техн. наук, проф. С.В. Епифанов, Национальный аэрокосмический ун-т им. Н.Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Харьков.

## ГОРІННЯ ОДИНОКОЇ КРАПЛІ ВУГЛЕВОДНЕВОГО ПАЛИВА У ПРИСУТНОСТІ СТАЦІОНАРНОГО РОЗРЯДУ

#### Д.А. Долматов

Стаття присвячена математичному моделюванню горіння краплини вуглеводневого палива при проходженні через характерні зони стаціонарного електричного розряду в реагуючому середовищі. Розглянуто вплив початкового діаметру краплі на швидкість та механізм руйнації, винайдено взаємозв'язок форми деформації краплини з розташуванням траєкторії щодо розряду. Встановлено механізм розсіювання крапель розрядом та продемонстровано залежність інтенсивності розсіювання від початкового діаметру краплі. Розрахований коефіцієнт роздроблення краплі у зоні вторинної іонізації як функція енергії вільних електронів.

**Ключові слова:** випаровування палива, енергія електронів, концентрація вуглеводнів, коефіцієнт розсіювання, поле параметрів, зона горіння.

## SINGLE HYDROCARBON DROP COMBUSTION IN THE PRESENCE OF STATIONARY ARC

#### D.A. Dolmatov

The article is belonged to single hydrocarbon fuel drop combustion mathematical modeling, then the drop is trespassing through different typical zones in the stationary arc discharge environs. There was studied the initial droplet diameter influence on the destruction velocity and dispatching mechanism; also was founded the link between drop trajectory position and deformation forms. The scattering mechanism and its intencity' dependence of the initial drop diameter and free electron energy has been developed. The coefficient of the drop dispatching in the secondary ionization zone was calculated.

**Key words:** fuel evaporation, free electron energy, hydrocarbon concentration, scattering coefficient, parameter field, combustion zone.

Долматов Дмитрий Анатольевич – канд. техн. наук, доцент кафедры теории авиационных двигателей Национального аэрокосмического университета им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков, Украина, e-mail: ditrihantelson@yandex.ru.