

УДК 533.6.011 : 541.12

© 1993 г. В. А. ВОЛКОВ, В. Р. МУСИН, У. Г. ПИРУМОВ,
М. Б. ПРОХОРОВ, В. Ю. СТРЕЛЬЦОВ

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА НЕЙТРАЛИЗАЦИИ ОКИСИ УГЛЕРОДА ДОЗИРОВАННЫМ ВПРЫСКОМ ВОДЫ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНУЮ СМЕСЬ ПРОДУКТОВ СГОРАНИЯ

Описана замкнутая математическая модель течения двухфазной смеси, состоящей из испаряющихся капель воды и химически реагирующего многокомпонентного газа. В рамках данной модели изучено влияние реальной кинетики прогрева и испарения капель на протекание газофазных химических реакций в смеси продуктов сгорания.

Дозированный впрыск воды в высокотемпературную смесь газообразных продуктов сгорания [1] — достаточно эффективный прием, приводящий к уменьшению концентраций некоторых продуктов неполного окисления, например окиси углерода. Для описания данного процесса в [1] применялась упрощенная модель явления, использующая допущение о мгновенном испарении впрыскиваемой воды и о последующем, также мгновенном, смешении образовавшегося пара с исходной смесью.

Результаты настоящей работы позволили найти границы области применимости упомянутого допущения работы [1] и уточнить ее рекомендации, касающиеся выбора оптимальных доз впрыскиваемой воды.

1. Рассмотрены одномерные стационарные течения двухфазной смеси, состоящей из многокомпонентного реагирующего газа и взвешенных в нем капель воды. Предполагается, что все капли одинаковые и среднее расстояние между ними много больше их размеров. В рамках допущений, аналогичных принятым в [2, 3], рассматриваемые двухфазные течения описывались системой обыкновенных дифференциальных уравнений [2—4]

$$\frac{d}{dx} (\rho u + n_i m_i u_i) F = 0 \quad (1.1)$$

$$\frac{d}{dx} (p + \rho u^2 + n_i m_i u_i^2) F = p \frac{dF}{dx} \quad (1.2)$$

$$\frac{d}{dx} [\rho u (h + 0,5u^2) + n_i m_i u_i (h_i + 0,5u_i^2)] F = 0 \quad (1.3)$$

$$\frac{d}{dx} \rho u \gamma_i F = F W_i, \quad i \neq k \quad (1.4)$$

$$\frac{d}{dx} \left(\rho u \gamma_k + \frac{n_i m_i u_i}{\mu_k} \right) F = F W_k \quad (1.5)$$

$$\frac{d}{dx} n_i u_i F = 0, \quad u_i \frac{du_i}{dx} = \frac{u - u_i}{\tau_i} \quad (1.6)$$

$$u_i \frac{dT_i}{dx} = \frac{T - T_i}{\tau_T} - \frac{q_i}{c_{pl}} \frac{1}{\tau_m}, \quad u_i \frac{dm_i}{dx} = - \frac{m_i}{\tau_m} \quad (1.7)$$

Здесь и всюду в дальнейшем приняты следующие обозначения: x — продольная координата, отсчитываемая вдоль оси канала, F — площадь его поперечного сечения, u , ρ , p , T , h — скорость, плотность, давление, температура и удельная энтальпия газа, m_i , u_i , T_i — масса, скорость и температура капель, n_i — число капель в единице объема, h_i , q_i , c_{pl} — удельные энтальпия, теплота испарения и изобарная теплоемкость вещества капель, γ_i и μ_i — удельные концентрации и молярные массы газообразных химических компонент, W_i — скорости химических превращений, k — номер водяного пара в списке газообразных компонент, τ_m , τ_T , τ_c — текущие значения характерных времен испарения и релаксации соответственно температуры и скорости капель.

Уравнения (1.1)—(1.3) описывают перенос соответственно массы, импульса и энергии двухфазной смеси, а уравнения (1.4)—(1.5) — закономерности переноса и химических превращений содержащихся в ней компонент. Форма записи уравнения (1.5) отличается от остальных (1.4) из-за того, что молекулы воды присутствуют как в газовой, так и в жидкокапельной фазах, а все остальные — только в газовой. Первое уравнение (1.6) описывает закономерности переноса капель. Равенство нулю правой части этого уравнения эквивалентно допущению о том, что капли не дробятся и не сливаются друг с другом, так что в процессе их взаимодействия с газом могут только изменяться их скорость, температура и масса. Соответствующие взаимосвязанные процессы сопротивления и тепло-массообмена испаряющихся капель описываются остальными уравнениями (1.6)—(1.7), которые получены с помощью теории размерностей и гидродинамического подобия [4—6].

Для замыкания системы уравнений (1.1)—(1.7) необходимо привлечь соотношения, которые можно сгруппировать в соответствии с их смыслом в три подмодели: термодинамики, химической кинетики, сопротивления и тепло-массообмена капли.

2. Термодинамические свойства реагирующего газа описываются с помощью модели многокомпонентного совершенного газа в рамках приближения равновесной заселенности энергетических уровней, отвечающих всем внутренним степеням свободы молекул и атомов. В указанном случае удельный термодинамический потенциал Гиббса имеет вид [7]

$$G(p, T, \gamma) = \sum_{(0)} \gamma_i \left[RT \ln \left(\frac{p_i}{p_0} \right) + G_i^\circ(T) \right], \quad p_i = p \gamma_i \left(\sum_{(0)} \gamma_i \right)^{-1} \quad (2.1)$$

где R — универсальная газовая постоянная, p_0 — стандартное давление, $G_i^\circ(T)$ — стандартные молярные потенциалы Гиббса отдельных компонент, которые связаны с так называемыми приведенными стандартными потенциалами $\Phi_i^\circ(T)$ [7]

$$G_i^\circ(T) = H_i^\circ(0) - T \Phi_i^\circ(T) \quad (2.2)$$

где $H_i^\circ(0)$ — стандартная энтальпия $H_i^\circ(T)$ при абсолютном нуле. Прочие термодинамические величины многокомпонентного газа выражаются через $G(p, T, \gamma)$ и его частные производные, например

$$\rho = \left(\frac{\partial G}{\partial p} \right)^{-1} = p \left(RT \sum_{(0)} \gamma_i \right)^{-1} \quad (2.3)$$

$$h = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{G}{T} \right) = \sum_{(0)} \gamma_i H_i^\circ(T), \quad H_i^\circ(T) = H_i^\circ(0) + T^2 \frac{d}{dT} \Phi_i^\circ(T) \quad (2.4)$$

$$e = \sum_{(i)} \gamma_i [H_i^\circ(T) - RT], \quad c_p = \frac{\partial h}{\partial T} = \sum_{(i)} \gamma_i \frac{d}{dT} H_i^\circ(T), \quad c_{pi} = \mu_i^{-1} \frac{d}{dT} H_i^\circ(T) \quad (2.5)$$

Здесь c_p и c_{pi} — удельные изобарные теплоемкости соответственно многокомпонентного газа и отдельных его компонент.

В принципе $\Phi_i^\circ(T)$ можно вычислять по формулам статистической физики [7]. Однако непосредственное вычисление соответствующих статсумм для конкретных веществ является достаточно сложной задачей [7]. Поэтому в настоящей работе для вычислений по формулам (2.4)—(2.5) применялись предложенные в [7] полиномы, которые аппроксимируют приведенные стандартные потенциалы многих газообразных и конденсированных веществ в диапазоне температур $500 < T < 6000$ К.

Термодинамические свойства жидкой воды также можно описать молярным потенциалом Гиббса $G_i(p, T)$ [8]. В частном случае рассматриваемых ниже течений давление незначительно отличается от атмосферного, а следовательно, и от стандартного. Поэтому практически без потери точности использовалось следующее приближение:

$$G_i(p, T_i) = G_i^\circ(T_i) + \mu_k (p - p_0) [\rho_i^\circ(T_i)]^{-1} \quad (2.6)$$

где $G_i^\circ(T_i)$ связан с приведенным стандартным потенциалом жидкой воды $\Phi_i^\circ(T_i)$ соотношением (2.2). Полином для $\Phi_i^\circ(T_i)$ брался из [7], а аппроксимация температурной зависимости стандартной плотности $\rho_i^\circ(T_i)$ жидкой воды — из [8]. Прочие термодинамические свойства капель находились по следующим формулам:

$$\rho_i = \rho_i^\circ(T_i), \quad h_i = - \frac{T_i^2}{\mu_k} \frac{\partial}{\partial T_i} \left[\frac{G_i(p, T_i)}{T_i} \right] \quad (2.7)$$

$$c_{pi} = - \frac{T_i}{\mu_k} \frac{\partial^2}{\partial T_i^2} G_i(p, T_i), \quad q_i = \frac{H_k^\circ(T_i)}{\mu_k} - h_i \quad (2.8)$$

В фактических вычислениях вместо истинных значений энтальпий при абсолютном нуле $H_i^\circ(0)$, которые принципиально неизвестны, используют так называемые термохимические $I_i^\circ(0)$. Последние определяют в некоторой системе начал отсчета термохимических величин следующим образом:

$$I_B^\circ(0) = \Delta_f H_B^\circ(T_0) + [H_B^\circ(0) - H_B^\circ(T_0)] \quad (2.9)$$

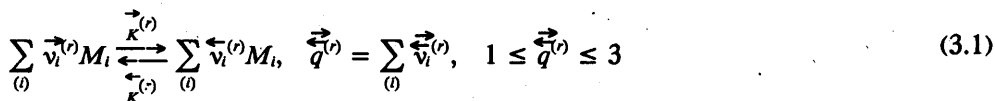
где $\Delta_f H_B^\circ(T_0)$ — энтальпия образования вещества B при температуре T_0 . В настоящей работе $I_B^\circ(0)$ для всех веществ вычислялись с использованием данных справочника [7].

Значения потенциалов, определенных по формуле (2.2) с $I_i^\circ(0)$ вместо $H_i^\circ(0)$, называют термохимическими. Согласно основному закону термохимии, использование в любых вычислениях термохимических потенциалов вместо истинных не должно влиять на окончательные результаты. Аналогичным свойством обладает и описанная выше модель термодинамики.

3. В общем случае скорости химических превращений W_i представляют собой суммы вкладов от химических реакций, протекающих как в газе, так и на поверхности капель. Однако в условиях, характерных для рассмотренных ниже двухфазных течений, т. е. в условиях интенсивного испарения капель, вклад гетерогенных химических реакций, в которых могут участвовать молекулы, радикалы и атомы, адсорбированные поверхностью капель, по-видимому, пренебрежимо мал по сравнению с вкладом газофазных реакций. Поэтому предполагается, что на поверхности капель имеет место только испарение молекул воды и что все химические реакции протекают в газовой фазе.

Кинетический механизм газофазных реакций полагался многостадийным и

состоящим из обратимых элементарных реакций от первого до третьего порядка включительно. Для большей наглядности приведенных ниже формул удобно использовать следующую символическую запись элементарных стадий:



Здесь r — номера стадий, $\vec{v}_i^{(r)}$ — стехиометрические коэффициенты, $\vec{q}^{(r)}$ — порядки соответствующих реакций, M_i — символы молекул или атомов химических компонент. Выражения для W_i , отвечающие механизму (3.1), имеют вид [9]

$$W_i = \sum_{(r)} (\vec{v}_i^{(r)} - \overleftarrow{v}_i^{(r)}) (\vec{W}^{(r)} - \overleftarrow{W}^{(r)}) \quad (3.2)$$

$$\vec{W}^{(r)} = \vec{K}^{(r)}(T) \exp \left[\sum_{(i)} \vec{v}_i^{(r)} \ln(p\gamma_i) \right] \quad (3.3)$$

С целью согласования [10] кинетики типа (3.1)–(3.3) с термодинамикой, описываемой потенциалом Гиббса вида (2.1), использовалась следующая связь между константами скоростей каждой пары взаимобратных реакций, образующих обратимые стадии (3.1):

$$\frac{\vec{K}^{(r)}(T)}{\overleftarrow{K}^{(r)}(T)} = \exp \left[\sum_{(i)} (\vec{v}_i^{(r)} - \overleftarrow{v}_i^{(r)}) \left(\frac{G_i^\circ(T)}{RT} + \frac{\ln RT}{p_0} \right) \right] \quad (3.4)$$

Что же касается аррениусовской аппроксимации температурной зависимости констант скоростей газофазных реакций в ее обобщенной форме

$$K(T) = A \exp \left(-\frac{E}{RT} + n \ln T \right) \quad (3.5)$$

то она использовалась только для одной из двух констант $\vec{K}^{(r)}(T)$ или $\overleftarrow{K}^{(r)}(T)$, а именно для той из них, для которой имеются более надежные справочные данные [9, 11] по параметрам A , E , n .

Отметим также, что использование соотношения (3.4), в котором все $G_i^\circ(T)$ заданы в одной и той же системе начал отсчета термодинамических величин, гарантирует заведомую неотрицательность вклада производства энтропии от каждой пары реакций (3.1) [10]. Тем самым исключается возможность существования у рассматриваемой модели химической кинетики каких-либо нефизических свойств.

4. В модели сопротивления и тепломассообмена испаряющейся капли задается конкретный вид соотношений, описывающих зависимость τ_u , τ_T , τ_m от параметров, характеризующих состояние и теплофизические свойства капли и обтекающего ее газа. Для указанной цели в настоящей работе использовались полуэмпирические критериальные зависимости, первоначально предложенные в [5] и затем обобщенные в [4, 6] на случаи квазистационарных непрерывных режимов тепло-массообмена и сопротивления одиночных испаряющихся капель, обтекаемых многокомпонентным газом.

Текущие значения τ_u , τ_m , τ_T находились по формулам [4]

$$\tau_u = \tau_u^\circ [1 + 0,167 \text{Re}^{23}]^{-1} \quad (4.1)$$

$$\tau_w = \tau_w^0 [1 + 0,287 \text{Re Sc} (\text{Re Sc}^{43} + 1,232)^{-1/2}]^{-1} \quad (4.2)$$

$$\tau_T = \tau_T^0 [1 + 0,287 \text{Re Pr} (\text{Re Pr}^{43} + 1,232)^{-1/2}]^{-1} \quad (4.3)$$

где τ_w^0 — время релаксации скорости для стоксовского режима обтекания, τ_m^0 и τ_T^0 — времена испарения и релаксации температуры необдуваемой капли, а выражения в прямоугольных скобках представляют собой поправки, описывающие отклонения от соответствующих законов сопротивления и теплообмена при увеличении скорости обтекания. Текущие значения чисел Рейнольдса Re, Прандтля Pr и Шмидта Sc, а также τ_w^0 , τ_m^0 , τ_T^0 находились по соотношениям [4, 6]

$$\tau_w^0 = \frac{\rho_l d_l^2}{18 \langle \eta \rangle}, \quad d_l = \left(\frac{6 m_l}{\pi \rho_l} \right)^{1/3} \quad (4.4)$$

$$\tau_m^0 = \frac{\rho_l d_l^2}{12 \langle \rho \rangle \langle D_k \rangle} b^{-1}, \quad b = \ln \left(\frac{1 - \mu_k \gamma_k}{1 - \mu_k \gamma_k'} \right) \quad (4.5)$$

$$\tau_T^0 = \frac{\rho_l d_l^2 c_{pl}}{12 \langle \lambda \rangle} \left[\frac{\exp(y) - 1}{y} \right], \quad y = \frac{\langle c_{pk} \rangle \text{Pr}}{\langle c_p \rangle \text{Sc}} b \quad (4.6)$$

$$\text{Re} = \frac{\langle \rho \rangle d_l |u - u_l|}{\langle \eta \rangle}, \quad \text{Pr} = \frac{\langle \eta \rangle \langle c_p \rangle}{\langle \lambda \rangle}, \quad \text{Sc} = \frac{\langle \eta \rangle}{\langle \rho \rangle \langle D_k \rangle} \quad (4.7)$$

Здесь d_l — диаметр капли, $\langle \eta \rangle$ и $\langle \lambda \rangle$ — коэффициенты вязкости и теплопроводности многокомпонентного газа, $\langle D_k \rangle$ — эффективный коэффициент диффузии водяного пара в многокомпонентном газе [11, 12].

Угловые скобки означают, что соответствующие характеристики газовой смеси находятся по значениям температуры и концентраций, осредненным по пограничному слою капли [4, 6]

$$\langle T \rangle = \beta T_l + (1 - \beta) T, \quad \langle \gamma_i \rangle = \beta \gamma_i' + (1 - \beta) \gamma_i, \quad 0 \leq \beta \leq 1 \quad (4.8)$$

где β — эмпирический коэффициент, γ_i' — удельные концентрации газообразных компонент непосредственно у поверхности капли, которые находились следующим образом [4]:

$$p_k^i = p_0 \exp \left[\frac{G_i(p, T_l) - G_k^0(T_l)}{RT_l} \right] \quad (4.9)$$

$$\mu_\Sigma^i = \mu_k \frac{p_k^i}{p} + \left(1 - \frac{p_k^i}{p} \right) \sum_{(i \neq k)} \mu_i \gamma_i \left(\sum_{(i \neq k)} \gamma_i \right)^{-1} \quad (4.10)$$

$$\gamma_k^i = \frac{p_k^i}{p \mu_\Sigma^i}, \quad \gamma_i^i = \gamma_i \left(1 - \frac{p_k^i}{p} \right) \left(\mu_\Sigma^i \sum_{(i \neq k)} \gamma_i \right)^{-1}, \quad i \neq k \quad (4.11)$$

Здесь p_k^i — парциальное давление паров воды у поверхности капли, которое, согласно формуле (4.9), полагалось равным давлению насыщенного пара воды при температуре капли.

Формулы (2.7)–(2.8) и (4.9) записаны в рамках допущения о том, что вкладом поверхностного натяжения в свободную энергию капли можно пренебречь. В случае воды это допущение перестает выполняться только для очень мелких капель ($d_l < 0,1$ мкм). Такие капли не рассматривались, поскольку режимы их сопротивления и теплообмена уже нельзя полагать непрерывными и

квазистационарными и, следовательно, замыкающие соотношения (4.1)—(4.7) для них непригодны.

Эффективный коэффициент диффузии паров воды в многокомпонентном газе D_k находился по формуле Уилки [11, 12]

$$D_k = \sum_{(i \neq k)} \gamma_i \left[\frac{\sum_{(i \neq k)} \gamma_i}{D_{ik}} \right]^{-1}$$

$$D_{ik} = \frac{3}{16} \left[\frac{2}{\pi} (RT)^3 \frac{\mu_i + \mu_k}{\mu_i \mu_k} \right]^{1/2} [N_A p \sigma_{ik}^2 \Omega_{ik}^{(1,1)*}]^{-1} \quad (4.12)$$

где N_A — число Авогадро, σ_{ik}^2 и $\Omega_{ik}^{(1,1)*}$ — сечение и интеграл столкновений соответственно.

Коэффициент вязкости многокомпонентного газа находился по приближенной формуле Уилки [11, 12], а коэффициент теплопроводности — по формуле Массона и Саксена с использованием уточненной корреляции Эйкена [11, 12]

$$\eta = \sum_{(i)} \eta_i \left(\frac{\gamma_i}{B_i} \right), \quad B_i = \sum_{(j)} A_{ij} \gamma_j$$

$$A_{ij} = \left[1 + \left(\frac{\eta_j}{\eta_i} \right)^{1/2} \left(\frac{\mu_j}{\mu_i} \right)^{1/4} \right]^2 \left[8 \left(1 + \frac{\mu_j}{\mu_i} \right) \right]^{-1/2} \quad (4.13)$$

$$\eta_i = \frac{5}{16} \left(\frac{\mu_i RT}{\pi} \right)^{1/2} [N_A \sigma_i^2 \Omega_i^{(2,2)*}]^{-1}$$

$$\lambda = \sum_{(i)} \eta_i \left(1,32 c_{pi} + 0,45 \frac{R}{\mu_i} \right) \left(\frac{\gamma_i}{B_i} \right)$$

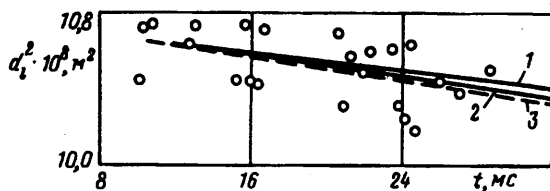
В рассматриваемом случае по крайней мере один из компонентов — пар воды — является полярным газом. Поэтому интегралы столкновений $\Omega_i^{(1,1)*}$ и $\Omega_{ik}^{(2,2)*}$ в формулах (4.12), (4.13) находились с использованием соотношений, полученных для потенциала Штокмайера и сводящихся в случае неполярных молекул к аналогичным формулам для потенциала Леннарда—Джонса. В частности, для интегралов столкновений Штокмайера применялась следующая аппроксимация Брокау [12]:

$$\Omega_{ik}^{(1,1)*} = \Omega_D(T_{ik}^*) + 0,19 \frac{\delta_{ik}}{T_{ik}^*}, \quad T_{ik}^* = \frac{RT}{N_A \epsilon_{ik}} \quad (4.14)$$

$$\Omega_i^{(2,2)*} = \Omega_V(T_i^*) + 0,2 \frac{\delta_i}{T_i^*}, \quad T_i^* = \frac{RT}{N_A \epsilon_i}$$

Здесь $\Omega_D(T^*)$ и $\Omega_V(T^*)$ — аналогичные интегралы для потенциала Леннарда—Джонса, значения которых вычислялись по их аргументам с использованием аналитических аппроксимаций [12].

Параметры потенциалов взаимодействия одинаковых молекул σ_i , ϵ_i , δ_i для конкретных веществ брались из справочников [12, 13]. Аналогичные параметры потенциалов взаимодействия различных молекул σ_{ij} , ϵ_{ij} , δ_{ij} ($i \neq j$), как правило, в справочниках отсутствуют, поэтому их обычно находят по правилам суперпозиции [11—13]. В данной работе σ_{ik} , ϵ_{ik} и δ_{ik} , присутствующие в формулах (4.12)—(4.14), находились по правилу суперпозиции, предложенному Брокау



Фиг. 1

специально для случаев, когда хотя бы одна из двух взаимодействующих молекул является полярной [12]

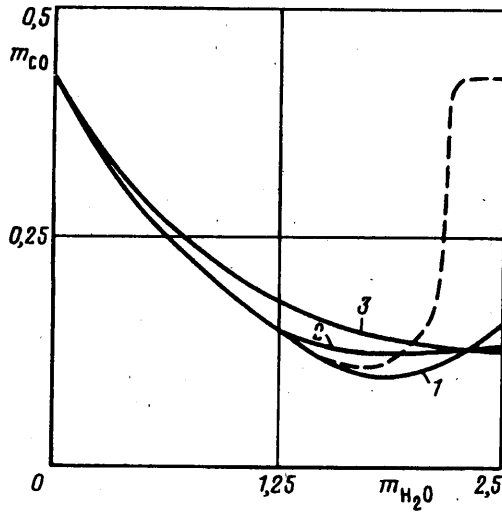
$$\sigma_{ik} = \sqrt{\sigma_i \sigma_k}, \quad \varepsilon_{ik} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_k}, \quad \delta_{ik} = \sqrt{\delta_i \delta_k} \quad (4.15)$$

Выше уже отмечалось, что эффективные значения всех параметров, характеризующих теплофизические свойства газа и входящих в формулы (4.1)—(4.7), вычислялись по формулам (2.3)—(2.5), (4.12)—(4.14) с использованием эффективных значений температуры и концентраций $\langle T \rangle$ и $\langle \gamma \rangle$. Коэффициент β , входящий в формулы (4.8) для $\langle T \rangle$ и $\langle \gamma \rangle$, является важным подгоночным параметром используемой модели теплообмена испаряющихся капель. С целью обоснования выбора подходящего значения β результаты расчетов по модели (1.6)—(1.7), (4.1)—(4.15) сравнивались с экспериментальными данными работы [14], в которой измерялись скорости стационарного испарения серий откалиброванных по размеру водяных капель, движущихся в высокотемпературных воздушных струях.

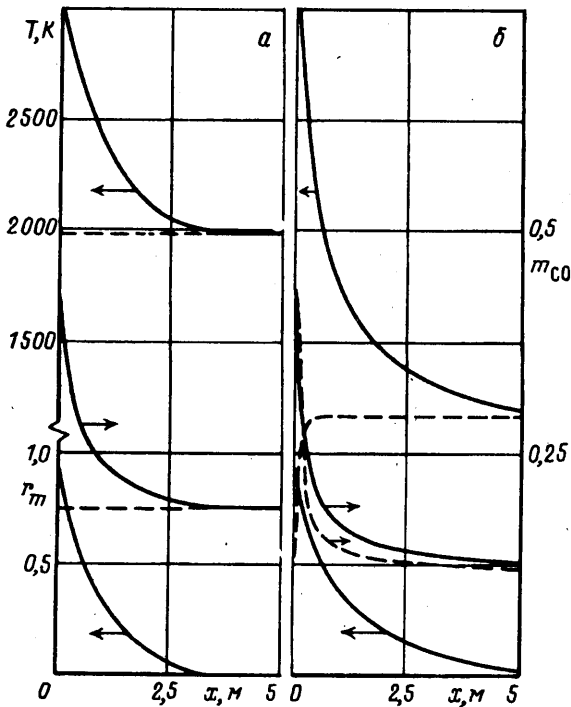
Стационарные режимы испарения капель устанавливаются в тех случаях, когда параметры обтекающего газа не изменяются со временем. В экспериментах [14] указанное условие приблизительно выполнялось, что подтверждалось данными, полученными путем обработки микрофотографий. Согласно модели (1.6)—(1.7), (4.1)—(4.11), после выхода на стационарный режим испарения температура капли не изменяется, а квадрат ее диаметра уменьшается со временем линейно. Семейство соответствующих прямых, рассчитанных применительно к условиям одного из экспериментов [14] (температура газа 847 К, скорость обдува капель 2,33 м/с) по модели (1.6)—(1.7), (2.1)—(2.9), (4.1)—(4.15) при различных β ($1 - \beta = 0,9$, $2 - \beta = 0,5$, $3 - \beta = 0,1$), изображено на фиг. 1. Там же нанесены экспериментальные точки и штриховой линией, которая практически не отличается от прямой, изображена осредненная экспериментальная зависимость квадрата диаметра капель от времени, полученная в [14] с помощью регрессионного анализа. В случае модели (1.6)—(1.7), (2.1)—(2.9), (4.1)—(4.15) наилучшее совпадение с экспериментом обеспечивает выбор значения $\beta = 0,1$ (прямая, соответствующая $\beta = 0,1$, в масштабе фиг. 1 совпадает со штриховой).

5. Наиболее известными постановками задач для систем дифференциальных и конечных соотношений типа (1.1)—(1.7), (2.1)—(2.9), (3.1)—(3.5), (4.1)—(4.15), описывающих одномерные течения в каналах, являются прямая и обратная [2, 3]. В данной работе применялся наиболее распространенный вариант обратной задачи: зависимость $p(x)$ полагалась заданной, а зависимость от координаты x всех остальных параметров реагирующего двухфазного потока, включая площадь его поперечного сечения F , находилась в ходе решения задачи Коши для системы (1.1)—(1.7), (2.1)—(2.9), (3.1)—(3.5), (4.1)—(4.15). Последняя относится к типу жестких. Ее численное решение находилось с помощью разработанных авторами данной статьи вычислительных алгоритмов [15], реализованных в виде пакета прикладных программ [16].

В качестве примера рассмотрим задачу о выборе оптимального расхода воды, вводимой в первом поясе впрыска на установке дожигания окиси углерода, описанной в [1]. Первый пояс впрыска смонтирован на секции, представляющей собой канал переменного сечения длиной 9 м, в который поступают продукты сгорания керосина в кислороде при недостатке кислорода ($\alpha = 0,76$). На входе



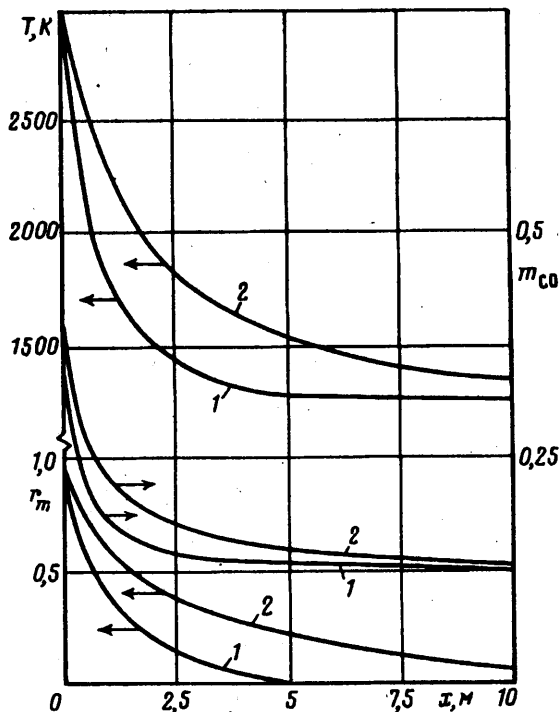
Фиг. 2



Фиг. 3

в канал продукты сгорания имеют параметры $T_n = 3200$ К, $p_n = 0,1$ МПа, $u_n = 200$ м/с. При указанных условиях их состав является равновесным и в них содержится 42,6% по массе токсичной окиси углерода, которую необходимо уничтожить. Во входном сечении канала расположены форсунки, через которые в продукты сгорания распыляется жидкая вода. Капли в факеле распыла имеют следующие параметры: $T_{лн} = 298$ К, $u_{лн} = 50$ м/с, $d_{лн} = 10-500$ мкм. Задача оптимизации сводится к выбору оптимального отношения расходов впрыскиваемой воды и продуктов сгорания m_{H_2O} , при котором расход окиси углерода через выходное сечение канала имеет минимальное значение.

Значение оптимального отношения расходов $m_{H_2O} = 1,75$, приведенное в [1], получено следующим



Фиг. 4

образом. Предполагалось, что испарение капель и смешение образующихся при этом паров воды с исходными продуктами сгорания происходят при неизменном давлении p_n и практически мгновенно, так что в уравнениях (1.2), (1.4), (1.5) можно пренебречь вкладом правых частей. Тогда, как следует из (1.1)—(1.5), параметры потока после испарения и смешения удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$u_1 = (1 - z) u_n + z u_{1n} \quad (5.1)$$

$$\sum_{(i)} \gamma_{in} H_i^* (T_1) + 0,5 u_1^2 = (1 - z) \left[\sum_{(i)} \gamma_{in} H_i^* (T_n) + 0,5 u_n^2 \right] + z [h_i (T_{1n}) + 0,5 u_{1n}^2] \quad (5.2)$$

$$\gamma_{1i} = (1 - z) \gamma_{in}, \quad i \neq k, \quad \gamma_{k1} = (1 - z) \gamma_{kn} + \frac{z}{\mu_k} \quad (5.3)$$

где индекс 1 относится к параметрам потока после испарения, z — массовая доля впрыснутой жидкой воды, связанная с отношением расходов m_{H_2O} следующим образом:

$$z = \frac{m_{H_2O}}{1 + m_{H_2O}} \quad (5.4)$$

Нахождение решения системы (5.1)—(5.3) очевидным образом сводится к численному решению одного нелинейного уравнения (5.2) для температуры T_1 . Найденные значения u_1 , T_1 , γ_{1i} использовались затем в качестве начальных данных в задаче Коши для системы уравнений, описывающих течение реагирующего газа и полученных из (1.1)—(1.5) при условии $p_{1n} = 0$ и дополненных замыкающими соотношениями (2.1)—(2.5), (2.9), (3.1)—(3.5).

Результаты расчетов для случая $p = \text{const} = p_n$ по описанной выше реальной модели испарения (сплошные кривые) и их сравнение с аналогичными расчетами по модели мгновенного испарения и смешения (штриховые кривые) представлены на фиг. 2—4. С целью более корректного сравнения с результатами [1] во всех расчетах использовался тот же самый механизм газозафазных реакций, что и в [1].

На фиг. 2 представлены расчетные графики безразмерного расхода окиси углерода m_{CO} на выходе из первой секции установки дожигания в зависимости от безразмерного расхода впрыскиваемой

воды m_{H_2O} (при обезразмеривании указанные расходы отнесены к расходу продуктов сгорания на входе в секцию). Кривые 1, 2, 3 получены для начальных диаметров капель $d_{H_2O} = 10, 200, 500$ мкм соответственно. Объяснение факта наличия минимумов у указанных кривых дано в [1]. Из анализа характера смещения точки минимума в зависимости от начальных размеров капель можно сделать вывод о том, что качество распыла сильно влияет на величину оптимального расхода m_{H_2O} и в то же время слабо влияет на m_{CO} . Установленная закономерность позволяет также утверждать, что рекомендации работы [1] по выбору оптимальных доз впрыскиваемой воды с использованием результатов расчетов по модели мгновенного испарения позволяют находить минимальные дозы, обеспечивающие требуемый эффект подавления окиси углерода. Действительно, из фиг. 2 видно, что дальнейшее уточнение m_{H_2O} в сторону их увеличения приводит к незначительному с точки зрения практических приложений уточнению m_{CO} .

Поведение различных кривых на фиг. 2 на участке $m_{H_2O} < 1,25$, где большинство из них практически полностью совпадают, объясняется тем, что при соответствующих дозах впрыска в канале длиной 9 м успевает установиться полное термодинамическое равновесие. Данное объяснение подтверждается графиками изменения параметров двухфазной смеси по длине канала, представленными на фиг. 3, 4. Все кривые на фиг. 3, 4 получены для капель начального диаметра 200 мкм и следующих относительных расходов воды: $m_{H_2O} = 1,0$ (фиг. 3, а), $m_{H_2O} = 1,875$ (фиг. 3, б), $m_{H_2O} = 1,75$ (фиг. 4). Графики параметра r_m на фиг. 3, 4 иллюстрируют изменение массы испаряющихся капель (r_m равно отношению текущей массы капель к ее начальному значению). В частности, из фиг. 3, 4 следует, что расслоение кривых, приведенных на фиг. 2, в окрестности их точек минимума обусловлено тем, что на выходе из канала параметры потока отличаются от равновесных либо из-за того, что не успевают испариться капли (фиг. 4), либо из-за незавершенности химических реакций (фиг. 3, б, 4).

На фиг. 4 проиллюстрировано влияние единственного подгоночного параметра используемой модели тепломассообмена испаряющихся капель β на результат прогнозирования содержания окиси углерода. Из фиг. 4 видно, что варьирование β почти во всем диапазоне его определения, точнее, от 0,1 (кривые 1) до 0,9 (кривые 2), заметно влияет в рассмотренном случае на прогнозирование параметров капель (их массы) и значительно слабее на прогнозирование содержания окиси углерода.

Представленный пример расчета иллюстрирует далеко не все потенциальные возможности модели реагирующих двухфазных сред, описанной выше и реализованной в пакете прикладных программ [16]. Указанная модель допускает очевидные обобщения на более сложные случаи постановки задач динамики реагирующих сред, возникающие в практических приложениях. Решение соответствующих задач значительно облегчается благодаря наличию в составе пакета [16] системы информационной поддержки, которая реализует описанный выше подход к замыканию моделей реагирующих сред, основанный на использовании для указанной цели надежных унифицированных данных, почерпнутых из авторитетных справочников и оригинальных работ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Папуша А. И., Пирумов У. Г., Прохоров М. Б. Газовая динамика процессов образования и распространения токсичных компонент // Изв. АН СССР. МЖГ. 1981. № 1. С. 98—106.
2. Стернин Л. Е. Основы газодинамики двухфазных течений в соплах. М.: Машиностроение, 1974. 211 с.
3. Яценко Н. Н., Солоухин Р. И., Папырин А. Н., Фомин В. М. Сверхзвуковые двухфазные течения в условиях скоростной неравновесности частиц. Новосибирск: Наука, 1980. 159 с.
4. Faeth G. M. Evaporation and combustion of sprays // Prog. Energy Combust. Sci. 1983. V. 9. № 1/2. P. 1—76.
5. Фукс Н. А. Испарение и рост капель в газообразной среде. М.: Изд-во АН СССР. 1958. 91 с.
6. Раушенбах Б. В., Белый С. А., Беспалов И. В. и др. Физические основы рабочего процесса в камерах сгорания воздушно-реактивных двигателей. М.: Машиностроение, 1964. 526 с.

7. Гурвич Л. В. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справ. изд. М.: Наука, 1982.
8. Ривкин С. Л., Александров А. А. Теплофизические свойства воды и водяного пара. М.: Энергия, 1980. 423 с.
9. Кондратьев В. Н., Никитин Е. Е. Кинетика и механизм газофазных реакций. М.: Наука, 1974. 558 с.
10. Горбань А. Н. Обход равновесия: Уравнения химической кинетики и их термодинамический анализ. Новосибирск: Наука, 1984. 226 с.
11. Гардинер У., мл., Диксон-Льюис Г., Целнер Р. и др. Химия горения. М.: Мир, 1988. 461 с.
12. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1982. 592 с.
13. Алемасов В. Е., Дрегалин А. Ф., Тишин А. П., Худяков В. А. Термодинамические и теплофизические свойства продуктов сгорания: Справочник. М.: ВИНТИ, 1971—1980.
14. Chan Su Ming, Frazier G. G. Vaporization of water droplets in high temperature air streams//AIChE Sympos. Ser. 1984. V. 80. № 236. P. 83—89.
15. Волков В. А., Мусин В. Р., Прохоров М. Б. Численный метод решения системы конечно-разностных уравнений химической кинетики//Вычислительные аспекты решения задач охраны окружающей среды. М.: Изд-во МАИ, 1988. С. 4—11.
16. Марасанов А. М., Мусин В. Р., Пирумов У. Г., Прохоров М. Б. Пакет прикладных программ химической кинетики: архитектура и адаптация для ПЭВМ//Матер. Междунар. симпоз.: Сб. докл. Минск: Изд-во БелНИИТМ, 1989. Т. 2. Ч. 11. С. 672—678.

Москва

Поступила в редакцию
14.VII.1992