

## Химическая модель горения жидких топлив

Химические реакции, происходящие в системе обозначаются:

$$\sum_m a_{mr} \chi_m = \sum_m b_{mr} \chi_{mr}$$

$\chi_m$  - один моль компоненты

$a_{mr}$   $b_{mr}$  - суммарные стехиометрические коэффициенты для реакции  $r$

Эти коэффициенты должны удовлетворять условию:

$$\sum_m (a_{mr} - b_{mr}) W_m = 0$$

В этом случае масса сохраняется в химических реакциях. Химические реакции делятся на два вида. Кинетическая реакция  $r$  описывается как:

$$\dot{\omega}_r = k_{fr} \prod_m (\rho_m / W_m)^{a'_{mr}} - k_{br} \prod_m (\rho_m / W_m)^{b'_{mr}}$$

Здесь коэффициенты реакции  $a'_{mr}$  и  $b'_{mr}$  не равняются коэффициентам  $a_{mr}$  и  $b_{mr}$

Можно использовать коэффициенты реакции, полученные экспериментально.

Коэффициенты  $k_{fr}$  и  $k_{br}$  принимают обобщенную форму:

$$k_{fr} = A_{fr} T^{\zeta_{fr}} \exp\{-E_{fr} / T\} \quad k_{br} = A_{br} T^{\zeta_{br}} \exp\{-E_{br} / T\}$$

$E_{br}$  - энергия активации прямой реакции

$E_{fr}$  - энергия активации обратной реакции. Коэффициенты в обратных реакциях определяются из уравнения:

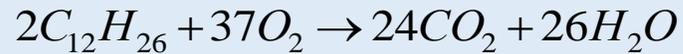
$$\prod_m (\rho_m / W_m)^b = m r^{-a} m r = K_c^r(T)$$

$K_c^r(T)$  - константа равновесия, которая имеет вид:

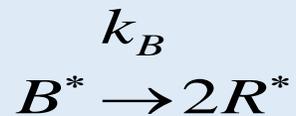
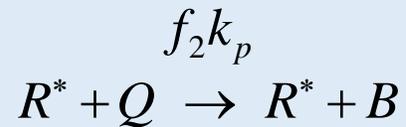
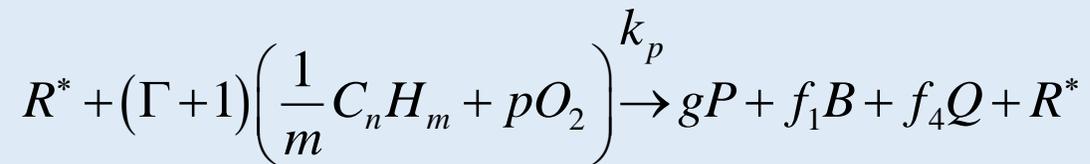
$$K_c^r = \exp\left\{A_r \ln T_A + B_r / T_A + C_r + D_r T_A + E_r T_A^2\right\}$$

$$T_A = T / 1000 \text{ K}$$

Химическая кинетика процесса горения представлена в виде обобщенных химических реакций для двух видов топлива – октана и додекана:



в результате которых образуются следующие продукты горения:  $CO_2$  и  $H_2O$



$R^*$  - все радикалы       $B$  - агент ветвления       $Q$  - промежуточный продукт

Коэффициенты  $\Gamma, p, g$  можно записать в виде:

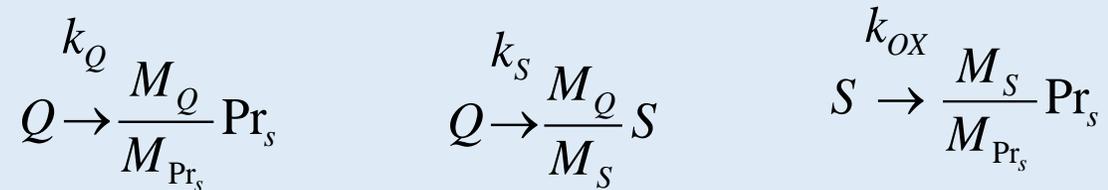
$$\Gamma = \frac{f_1 M_B + f_4 M_Q}{\frac{M_{RH}}{m} + p M_{O_2}} \quad p = \frac{n(2 - \lambda) + m}{2m} \quad g = \frac{n}{m} + 1$$

Коэффициент  $\lambda$  определяет отношение смеси продуктов  $CO / CO_2 = \lambda / (1 - \lambda)$

$$\lambda = 0,67$$

$$M_B \quad M_Q$$

определяются из уравнений баланса масс. Промежуточные продукты реакции можно записать следующим образом:



$S$  - обозначает сажу

$Pr_s$  - глобальные продукты окисления сажи.

Для характеристики турбулентного горения часто используют число Дамколера:  $Da = \frac{t_\tau}{t_c}$

$t_c$  - характерное время реакции, которое необходимо для перехода окислителя и топлива в продукты сгорания

$t_\tau$  - характерный временной масштаб турбулентности, т.е. время нахождения объема жидкости в определенной точке пространства.

Число Дамколера показывает влияние турбулентной и химической составляющих на процесс горения.

При числах Дамколера  $Da \rightarrow 0$  доминирующим являются химические реакции, при  $Da \rightarrow \infty$

ограничивающим являются процессы турбулентного смешения.

Другим важным параметром для характеристики процессов горения является число Карловитца.

Число Карловитца характеризует отношение химического  $t_c$  и колмогоровского  $t_k$  масштабов времени:

$$Ka = \frac{t_c}{t_k}$$

Также еще одним часто используемым параметром является число Льюиса для компоненты  $m$ , которое определяется как:

$$Le_m = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k} = \frac{D_{th}}{D_m}$$

$D_{th} = \frac{\lambda}{\rho c_p}$  - тепловой коэффициент диффузии. Число Льюиса показывает отношение тепловой скорости диффузии к скорости диффузии компоненты  $m$

Во многих моделях горения тепловая скорость и скорость диффузии для всех компонентов принимаются одинаковыми

$$Le_m = 1$$

## Уравнения движения одиночной жидкой частицы в потоке газа

Движения каплей основываются на уравнениях движения Ньютона, в предположении, что единственная сила, действующая на каплю, есть сила Стокса. Обычно, как результат измерений, уравнение Ньютона записывается в более обобщенном виде:

$$\frac{1}{6} \rho_p \pi d_p^3 \frac{d\vec{u}_p}{dt} = \frac{1}{2} (\vec{u}_g - \vec{u}_p) |\vec{u}_g - \vec{u}_p| \rho_g C_D \frac{\pi d_p^2}{4} + \vec{F}$$

где  $d_p$  - диаметр капли,  $\vec{u}_p$  - скорость капли,  $\vec{u}_g$  - скорость газа.

Уравнение движения капли будет иметь следующую упрощенную форму:

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = \frac{C_D}{\tau_p} \frac{\text{Re}_p}{24} (\vec{u}_g - \vec{u}_p)$$

Здесь  $\text{Re}_p$  - число Рейнольдса для капли и  $\tau_p$  - время релаксации капли,  $C_D$  - коэффициент

лобового сопротивления, основанный на экспериментальных корреляциях:

$$\text{Re}_p = \frac{|\vec{u}_g - \vec{u}_p| d_p}{\nu_g}$$

$$\tau_p = \frac{4}{3} \frac{\rho_p d_p}{\rho_g C_D |\vec{u}_p - \vec{u}_g|}$$

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}_d} (1 + 1/6 \text{Re}_d^{2/3}), & \text{Re}_d < 1000 \\ 0,424, & \text{Re}_d > 1000 \end{cases}$$

$$S_{mass} = \frac{4}{3} \rho_p \pi \left( \frac{d_p}{2} \right)^3 \quad S_{mom} = \frac{4}{3} \rho_p \pi \left( \frac{d_p}{2} \right)^3 \left( \frac{d\vec{u}_p}{dt} - \vec{g} \right) \quad S_{energy} = \frac{4}{3} \rho_p \pi \left( \frac{d_p}{2} \right)^3 \left( (H_g - H_p) + \left( \frac{P_g - P_{fv}}{\rho_p} \right) \right)$$

где  $H_g$  - энтальпия движущегося газа,  $H_p$  - энтальпия жидкости,  $P_g$  и  $P_{fv}$  - соответственно давления газа и паров топлива.

$$\bar{S}(x) = \frac{1}{V_{cell}} \sum_p S_i$$

Число Вебера, которое определяется как отношение степени инертности жидкости к поверхностному натяжению, становится решающим безразмерным числом при распаде капель:

$$We_p = \frac{\rho_g |\vec{u}_g - \vec{u}_p|^2 r_p}{\sigma_p}$$

Распад капли определяется через форму ее деформации, вызванную резонансом поверхности капли:

$$m_p \frac{d^2 x}{dt^2} + b \frac{dx}{dt} + kx = \vec{F}$$

Коэффициенты могут быть выражены следующим образом:

$$\frac{b}{m_p} = C_\mu \frac{\mu_l}{\rho_p r_p^2} \quad \frac{k}{m_p} = C_w \frac{\sigma_p}{\rho_p r_p^3} \quad \frac{F}{m_p} = \frac{1}{3} \frac{\rho_g |\vec{u}_g - \vec{u}_p|^2}{\rho_p r_p^2}$$