

РАЗВИТИЕ МОДЕЛЕЙ ГОРЕНИЯ В ПК FLOWVISION

Т.В. Маркова, С.В. Жлуктов
ООО «ТЕСИС», г. Москва, Россия

ПК [FlowVison](#) предоставляет пользователю возможность решать индустриальные задачи, связанные с горением, помогает понять сложные течения в газовых горелках, котлах, камерах внутреннего сгорания.

В данной работе освещены реализованные в ПК FlowVision 3.xx.xx модели горения, которые хорошо зарекомендовали себя в ПК FlowVision 2.xx.xx, а также - новая модель горения, применимая как для предварительно перемешанных, так и неперемешанных реагентов. Представлены результаты тестирования новой модели на двух задачах: горение свободной струи природного газа в воздухе, работа малотоксичной эжекционной горелки тепловой мощностью 0,5 МВт. Кроме этого, демонстрируется возможность ПК FlowVision 3.xx.xx моделировать горение водорода в кислороде и процессы в пористой горелке. Первая из этих двух возможностей востребована космической промышленностью, вторая – газо-нефтедобывающей: в настоящий момент актуальной является задача горения сопутствующего газа в нефтеносном пористом пласте.

Обозначения

i_1 - стехиометрический коэффициент при Окислителе

$i_{2,3}$ - стехиометрический коэффициент при Продуктах

k - турбулентная энергия

T - температура

V - скорость

Y_f^* - восстановленная массовая доля Горючего

Y_f - истинная массовая доля Горючего

Y_o^* - восстановленная массовая доля Окислителя

Y_o - истинная массовая доля Окислителя

Y_p^* - восстановленная массовая доля Продукта 1

W_f - скорость реакции горения

$\alpha^* = \frac{Y_o^*}{i_1 Y_f^*}$ - восстановленный коэффициент избытка Окислителя

α_{\min}^* - нижний предел горения (определённый через восстановленный коэффициент избытка Окислителя)

α_{\max}^* - верхний предел горения (определённый через восстановленный коэффициент избытка Окислителя)

ε - скорости диссипации турбулентной энергии

Индексы:

f - компонент Горючее

o - компонент Окислитель

p - компонент Продукты

Теория

При моделировании горения решаются полные (без упрощений) уравнения Навье-Стокса, уравнение энергии, записанное через полную энтальпию, и уравнения для турбулентных переменных k и ε (или ε).

Модель Горения FlowVision предполагает, что в Фазе

- присутствуют, минимум, три Вещества,

- протекает одна необратимая брутто-реакция.

Можно задать брутто-реакцию, в которой образуется один продукт (в общем случае - смесь газов):



либо реакцию, в которой образуется два продукта:



Стехиометрические коэффициенты i_1, i_2, i_3 задаются в интерфейсе. Если $i_3 = 0$, то задана реакция (1). В этом случае

$$i_2 = i_1 + 1 \quad (3)$$

Если $i_3 > 0$, то задана реакция (2). В этом случае коэффициенты i_2, i_3 вычисляются по стехиометрии реакции и молярным массам компонентов. В уравнениях, приведённых ниже, предполагается (более общая) реакция (2).

Для компонента Горючее в общем случае решаются два уравнения: однородное для восстановленной массовой доли Горючего:

$$\frac{\partial(\rho Y_f^*)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho Y_f^* \mathbf{V}) + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{J}_{f,eff}^* = 0 \quad (4)$$

и неоднородное - для истинной массовой доли Горючего:

$$\frac{\partial(\rho Y_f)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho Y_f \mathbf{V}) + \vec{\nabla} \cdot \mathbf{J}_{f,eff} = -W_f \quad (5)$$

Здесь и далее звёздочкой обозначены восстановленные массовые доли и диффузионные потоки компонентов газовой смеси.

Выражение для источникового члена уравнения (5) определяется выбранной моделью горения.

На сегодняшний день в программе FlowVision реализованы следующие модели:

- «Зельдович»
- «Магнуссен»
- «Аррениус»
- «Аррениус-Магнуссен»
- упрощенная версия модели EDC (Eddy Dissipation Concept) [3]

Модель 'Зельдович'. Эта модель предполагает бесконечно большую скорость реакции горения: “что смешалось – то сгорело” (в иностранной литературе – “mixed is burned”). Если выбрана эта модель, то уравнение (5) не решается. Истинные массовые доли Горючего и Окислителя в этой модели восстанавливаются так:

$$Y_o = \begin{cases} Y_o^* - Y_f^* \cdot i_1 & \text{если } Y_o^* > Y_f^* \cdot i_1 \\ 0 & \text{иначе} \end{cases} \quad (6)$$

$$Y_f = \begin{cases} 0 & \text{если } Y_o^* > Y_f^* \cdot i_1 \\ Y_f^* - \frac{Y_o^*}{i_1} & \text{иначе} \end{cases} \quad (7)$$

Здесь

$$Y_o^* = 1 - Y_f^* - Y_{p1}^* - Y_{p2}^* - \sum_{i=p2+1}^N Y_i \quad (8)$$

Истинные массовые доли Продуктов восстанавливаются из соотношений

$$Y_{p1} = Y_{p1}^* + \Delta f \cdot i_2 \quad (9)$$

$$Y_{p2} = Y_{p2}^* + \Delta f \cdot i_3 \quad (10)$$

$$\Delta f = Y_f^* - Y_f \quad (10)$$

Здесь Y_{p1}^* и Y_{p2}^* - значения массовых долей Продуктов, полученные в результате решения соответствующих однородных конвективно-диффузионных уравнений (предполагается, что продукты могут подаваться на вход).

Модель 'Аррениус'. Скорость реакции горения W_{kin} определяется кинетикой процесса, что справедливо при ламинарном течении смеси горючего и окислителя.

Источниковый член в уравнении для истинной массовой доли Горючего в этом случае:

$$\text{Ошибка! Объект не может быть создан из кодов полей редактирования.} \quad (11)$$

Истинная массовая доля Окислителя восстанавливается так:

$$Y_o = \begin{cases} Y_o^* - \Delta f \cdot i_1 & \text{если } Y_o^* > \Delta f \cdot i_1 \\ 0 & \text{иначе} \end{cases} \quad (12)$$

Восстановленная массовая доля Окислителя Y_o^* вычисляется по формуле (8). Истинные массовые доли Продуктов вычисляются по формулам (9), (10).

Модель 'Магнуссен'. Скорость реакции горения определяется скоростью турбулентного смешения W_{turb} горючего и окислителя. Источниковый член в уравнении для истинной массовой доли Горючего [1]:

$$W_f = 0 \quad \text{при } T_{abs} < T_{ign} \text{ или } \alpha < \alpha_{min} \text{ или } \alpha > \alpha_{max} \\ W_f = W_{turb} = C \left(\frac{\mu \varepsilon}{\rho k^2} \right)^{0.25} \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(Y_f, \frac{Y_o}{i_1} \right) \quad \text{иначе} \quad (13)$$

Вычисление истинных массовых долей Окислителя и Продуктов – см. модель ‘Аррениус’.

Модель 'Аррениус-Магнуссен'. Скорость реакции горения определяется величиной γ , которая характеризует уровень пульсаций восстановленной массовой доли горючего. Источниковый член в уравнении для истинной массовой доли Горючего [2]:

$$W_f = 0 \quad \text{при } T_{abs} < T_{ign} \text{ или } \alpha < \alpha_{min} \text{ или } \alpha > \alpha_{max}$$

$$\frac{1}{W_f} = \frac{1-\gamma}{W_{kin}} + \frac{\gamma}{W_{turb}} \quad \text{иначе} \quad (14)$$

Здесь

$$\gamma = \min\left(1, \frac{\sqrt{g_f}}{Y_f^*}\right) \quad (15)$$

Для дисперсии восстановленной массовой доли Горючего g_f в данной модели решается конвективно-диффузионное уравнение [4]:

$$\frac{\partial g_f}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{V} g_f) = \frac{1}{\rho} \nabla(\mu_i \nabla g_f) + 2.8 \mu_i (\nabla g_f)^2 - 2 \rho \frac{\varepsilon}{k} g_f \quad (16)$$

Вычисление истинных массовых долей Окислителя и Продуктов – см. модель ‘Аррениус’.

Модель 'EDC'. Данная модель (Eddy Dissipation Concept) [3] предполагает, что реакция горения протекает в узких ламинарных зонах ("тонких структурах") между турбулентными вихрями. Концентрации горючего Y_f^0 и окислителя Y_o^0 в этих зонах, частично заполняющих расчётную ячейку, отличаются от своих средних (по объёму ячейки) значений. Они определяются из условия равенства скоростей турбулентной диффузии и ламинарного горения и, в свою очередь, определяют температуру и плотность "тонких структур" в ячейке. □□ Модель пригодна как для предварительно перемешанных так и неперемешанных реагентов. Источниковый член в уравнении для истинной массовой доли Горючего:

$$W_f = 0 \quad \text{при } T_{abs} < T_{ign} \text{ или } \alpha < \alpha_{min} \text{ или } \alpha > \alpha_{max}$$

$$W_f = \frac{\rho}{m_f} \frac{2.43 \left(\frac{\varepsilon}{\nu}\right)^{0.5}}{1-\gamma^0} (Y_f - Y_f^0) = \frac{\rho}{\rho^0} W_{kin}(Y_f^0, Y_o^0) \quad \text{иначе} \quad (17)$$

Здесь γ^0 - массовая доля "тонких структур" в расчётной ячейке

$$\gamma^0 = \left[2.13 \left(\frac{\nu \varepsilon}{k^2}\right)^{0.25} \right]^2 \quad (18)$$

Расчёты

Новая реализованная модель 'EDC' была протестирована на нескольких задачах, для которых имеются экспериментальные данные.

Горение струи природного газа в воздухе

В трубку диаметром 12x2 подается природный газ, который со скоростью 50 м/с выходит в неподвижный воздух. Далее струя поджигается и пламя стабилизируется на струе.

Постановка задачи: двухмерная (осесимметричная).

Расчётная область: сектор в 3 градуса. Размеры внешней области – диаметр 0,5 м, длина 1 м. Длина трубки принята 0,1 м.

Граничные условия: на боковых плоскостях задано условие симметрии. На внешних границах задано условие Вход/Выход с атмосферным давлением, позволяющее свободно втекать воздуху с температурой 25 °С, и свободно вытекать газам. На границе входа природного газа задана массовая скорость горючего [кг/с·м²] соответствующая скорости 50 м/с, температура природного газа 25 °С. Входы воздуха и природного газа показаны на рис.1.

Модель горения: ‘EDC’

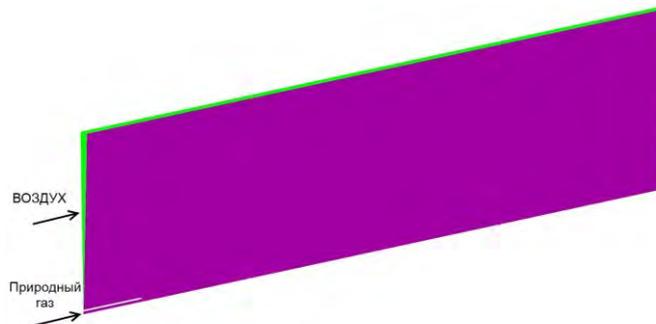


Рис.1. Горение струи природного газа в воздухе. Расчетная область

Расчеты, проведенные с использованием модели горения 'Аррениус-Магнуссен' во FlowVision версии 2 и 3, при полной постановке (3-х мерной) и секторной оказались идентичными и очень близки к эксперименту. Поэтому для тестового варианта была принята 2-х мерная секторная постановка.

Эксперимент представлен на фотографиях (рис. 2) проведенных сотрудниками одной из ТЭЦ ОАО «Мосэнерго» и Тишиным А.П. (ЗАО «Игл Дайнемикс») в 2007 году.

Проверка новой модели горения 'EDC' при решении данной задачи показала результаты схожие с экспериментальными. На рис. 3 представлена температура газов, видно, что пламя стабилизируется на струе, и форма факела близка к натурному.

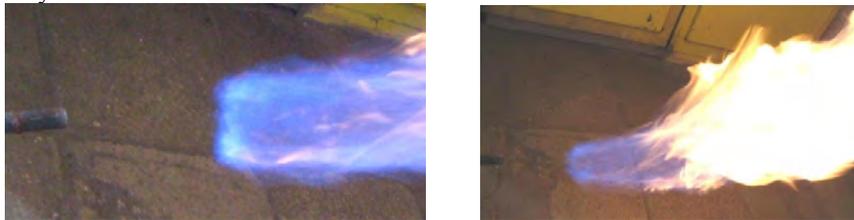


Рис.2. Горения струи природного газа в воздухе. Эксперимент: 23.07.2007 г. ТЭЦ ОАО «Мосэнерго»

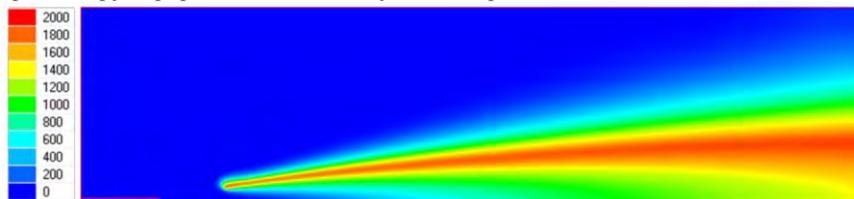
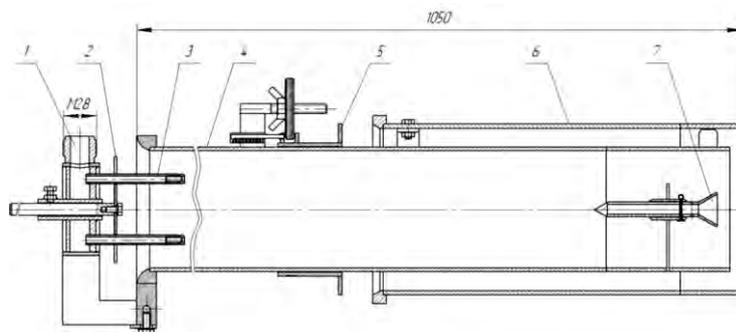


Рис.3. Горения струи природного газа в воздухе. Температура, °C

Эжекционная горелка номинальной тепловой мощностью 0,5 МВт

Данная горелка была разработана ЗАО «Игл Дайнемикс» с использованием ПК FlowVision 2.xx.x. Устройство горелки представлено на эскизе рис.4.



- | | |
|---|--|
| 1. Штуцер подвода газа. | 4. Корпус центрального канала. |
| 2. Заслонка, регулирующая состав смеси центрального канала. | 5. Регулятор расхода вторичного воздуха. |
| 3. Жиклеры, 4 шт. | 6. Корпус канала вторичного воздуха. |
| | 7. Стабилизатор. |

Рис.4. Устройство эжекционной горелки номинальной тепловой мощностью 0,5 МВт

В данной горелке для уменьшения концентрации оксидов азота в продуктах сгорания используется принцип ступенчатого сжигания. В центральном канале горелки образуется горючая смесь природного газа с воздухом, периферийный канал горелки служит для подачи воздуха в зону горения для дальнейшего дожигания полученных продуктов неполного сгорания. Для стабилизации факела горючей смеси центрального канала использоваться V-образный стабилизатор.

Эта задача также первоначально решалась в 3-х мерной постановке с учетом геометрии жиклеров – выхода и формирования струй природного газа, смешения газов в центральном канале. Далее задача была упрощена: исключена была левая часть горелки: геометрия жиклеров и зона смешения газов. Все данные о расходах, концентрации и дисперсии горючего, задаваемые на граничных условиях, были взяты из решения полной задачи. Для теста, задача была упрощена до 2-х мерной постановки – сектора в 3 градуса. Это позволило существенно сократить количество расчетных ячеек, но вполне достоверно смоделировать зону горения и форму факела.

Постановка задачи: двухмерная (осесимметричная).

Расчётная область: сектор в 3 градуса. Размеры внешней области – диаметр 1,6 м, длина 1,75 м.

Граничные условия: на боковых плоскостях задано условие симметрии. На внешних границах – условие Вход/Выход с атмосферным давлением, позволяющее свободно втекать воздуху с температурой 25 °C, и свободно вытекать газам. На границе центрального канала задана массовая скорость смеси газов [кг/с·м²] соответствующая скорости ~9,6 м/с, концентрация природного газа соответствует коэффициенту избытка воздуха $\alpha=0,66$, температура природного газа 25 °C. На границе периферийного канала задана массовая скорость воздуха, соответствующая скорости ~5,6 м/с. Входы воздуха и смеси газов показаны на рис.5.

Модель горения: 'EDC'

Расчетная сетка вблизи стабилизатора факела представлена на рис. 5 и 6. Данная сетка позволяет сформировать устойчивую возвратную зону вблизи стабилизатора.

Результаты расчета сравнивались с экспериментальными данными, факел горелки представлен на фотографиях рис. 7. Характерную форму факела можно наблюдать на результатах расчета по температуре, полученных на модели горения 'EDC' - рис.8.

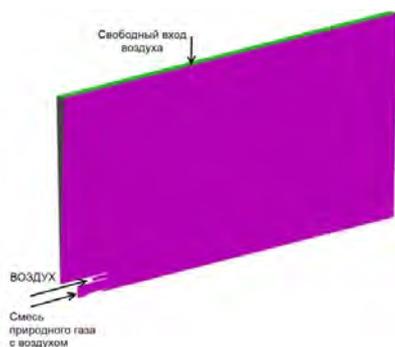


Рис.5. Эжекционная горелка. Расчетная область

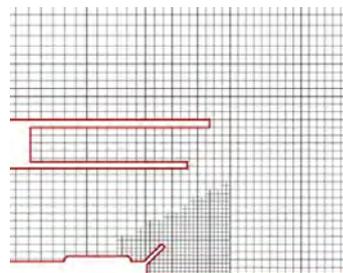


Рис.6. Эжекционная горелка. Расчетная сетка вблизи стабилизатора факела



Рис.7. Эжекционная горелка. Эксперимент: 06.03.07. Новогиреево

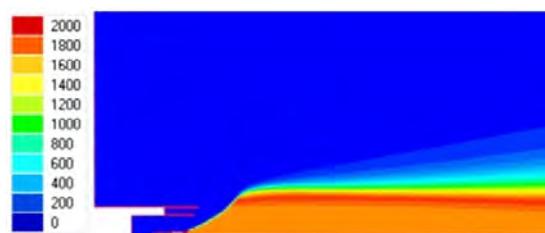


Рис.8. Эжекционная горелка. Температура, °С

В рамках работы с моделью горения были проведены несколько тестов на использование различных моделей горения при сжигании водорода в кислороде.

Один из таких тестов представлен в данной работе.

Горение водорода в кислороде в камере сгорания

Задача взята из общедоступного источника: отчета об изучении характеристик камеры сгорания, полученных в ходе эксперимента для анализа с CFD расчетами [4].

В камеру сгорания подается через центральную трубку окислитель O_2 и через узкий кольцевой канал – горючее H_2 .

Постановка задачи: двухмерная (осесимметричная).

Расчётная область: сектор в 3 градуса. Диаметр камеры 0,05 м, диаметр канала подачи кислорода 7,75 мм, канал подачи водорода высотой ~1,6 мм.

Граничные условия: на боковых плоскостях задано условие симметрии. На границе подачи O_2 задана массовая скорость $[кг/с \cdot м^2]$ соответствующая скорости ~55,5 м/с, На границе канала подачи H_2 задана массовая скорость, соответствующая скорости ~180 м/с. На выходе из камеры (граница справа) задано граничное условие Свободный выход. Давление в камере сгорания 13 атм., температура газов 21 °С. Входы O_2 и H_2 показаны на рис.9.

Модель горения: 'Аррениус-Магнуссен'

На рис.10 представлена расчетная сетка и вектора скорости вблизи торца трубки подвода газов. Данная сетка позволяет сформировать вихрь на торце трубки в зоне смешения горючего и окислителя, наличие которого влияет на устойчивость пламени.

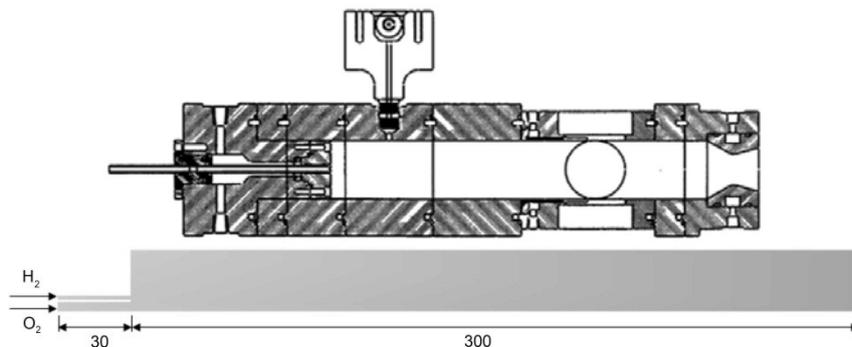


Рис.9. Камера сгорания H_2+O_2 . Устройство, расчетная область

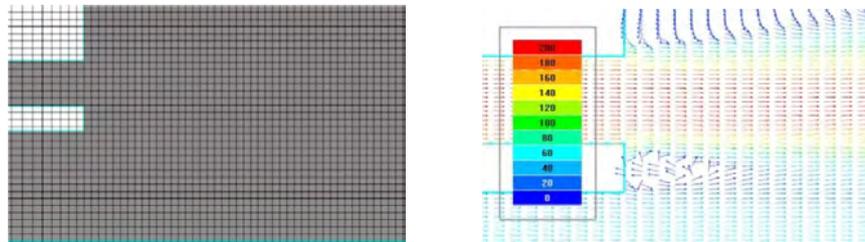


Рис.10. Камера сгорания H_2+O_2 . Сетка и скорость вблизи торца трубки подвода газов

Сравнение результатов расчета, полученных во FlowVision, с экспериментальными представлены на рис.11, 12. Как видно из графиков распределения мольных долей H_2 (рис.11) и O_2 (рис.12) тестовые расчеты удовлетворительно совпадают с экспериментом.

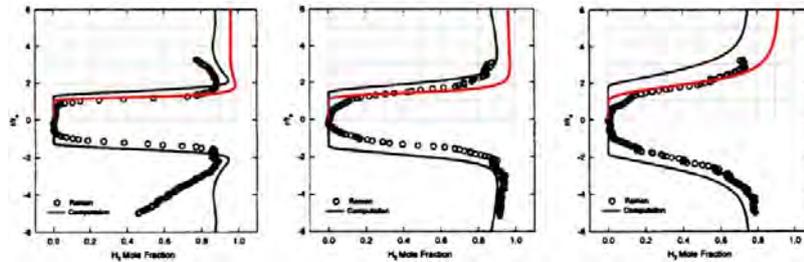


Рис.11. Камера сгорания H_2+O_2 . Радиальное распределение мольной доли горючего H_2 (вверху) по сечениям (0,0254 м, 0,0508 м, 0,127 м от торца трубки подвода газов. Красная линии – данные полученные во FV, сплошная черная линия – данные CFD, точечная линия – эксперимент

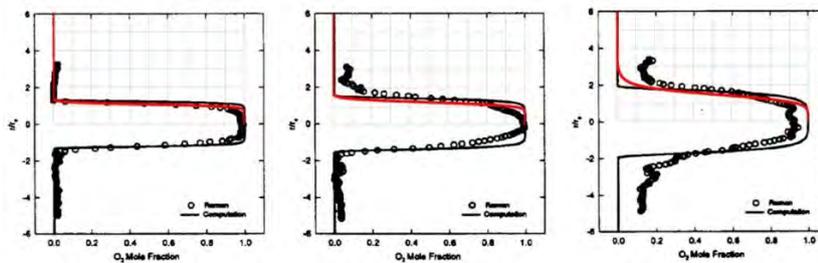


Рис.12. Камера сгорания H_2+O_2 . Радиальное распределение мольной доли окислителя O_2 по сечениям (0,0254 м, 0,0508 м, 0,127 м от торца трубки подвода газов . Красная линии – данные полученные во FV, сплошная черная линия – данные CFD, точечная линия – эксперимент

На рис.13 представлено распределение температуры, наглядно показывающее характер протекания горения и формирования факела в камере.

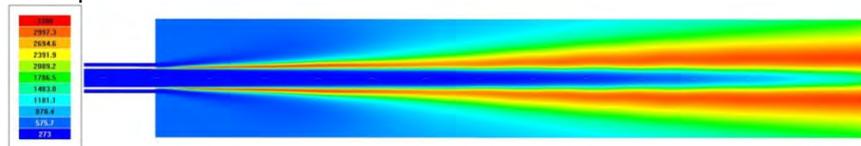


Рис.13. Камера сгорания H_2+O_2 . Температура, °C

Введение возможности во FlowVision задания сопротивления каркаса с учетом пористости среды позволило решить междисциплинарную задачу горения предварительно перемешанной метано-воздушной смеси в пористой горелке с учётом теплообмена между газовой фазой и пористым каркасом. Данная задача ориентирована на решение класса задач горения сопутствующего газа в нефтеносном пористом пласте.

Пористая горелка

На входе в горелочное устройство, тепловой мощностью 5 кВт (схема устройства представлена на рис.14) подается предварительно перемешанная смесь газов метана CH_4 и воздуха, далее горючая смесь поступает в камеру, где происходит процесс горения. Специфика данной горелки в том, что каждая из обозначенных зон А, Б и В представляют из себя различные каркасы, пористость которых задана коэффициентами: зона А $\phi_A = 0.4$; зоны Б $\phi_B = 0.81$ и зоны В $\phi_V = 0.4$.

На вход в горелку подается предварительно перемешанная смесь газов, концентрация CH_4 обеспечивает коэффициент избытка окислителя $\alpha=1.5$ и мощность горелки 5 кВт.

Постановка задачи: двухмерная (осесимметричная).

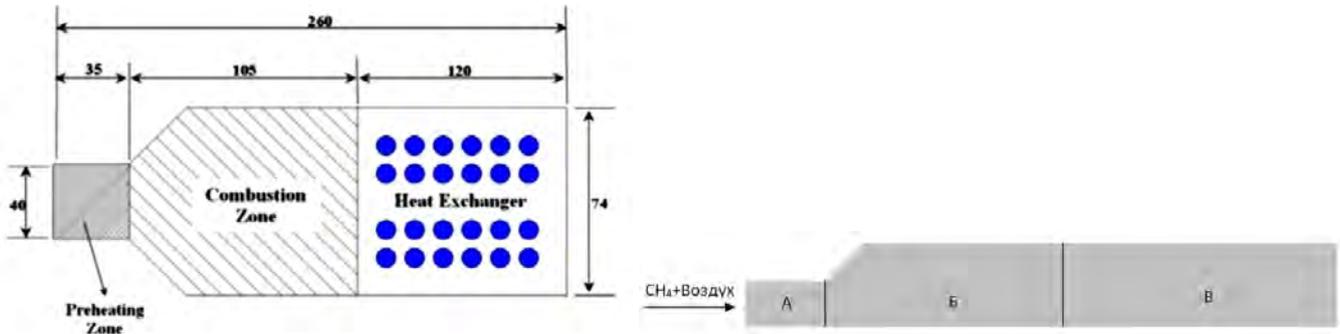


Рис.14. Пористая горелка. Устройство

Расчётная область: сектор в 4 градуса. Входной диаметра горелки 0,04 м, выходной диаметр камеры 0,074 м.

Граничные условия: на боковых плоскостях задано условие симметрии. На входе смеси газов задана концентрация горючего CH_4 обеспечивающая коэффициент избытка окислителя $\alpha=1,5$ и массовая скорость $[\text{кг/с}\cdot\text{м}^2]$ которая с учетом коэффициента пористости $\phi_A = 0.4$ обеспечивает мощность горелки 5 кВт. На выходе из устройства (граница справа) задан свободный выход с атмосферным давлением. Температура смеси 25 °С.

Модель горения: 'Аррениус'

Сила сопротивления изотропного пористого каркаса в уравнении импульсов для несущей фазы рассчитывается по формуле [5]

$$\mathbf{F}_{carcass} = - \left[180 \frac{(1-\phi)^2}{\phi^3} \frac{\mu}{d^2} + 1.8 \frac{1-\phi}{\phi^3} \frac{\rho |\mathbf{V}|}{d} \right] \mathbf{V} \quad (19)$$

Здесь

d - эффективный диаметр микро-элементов пористого каркаса ($d=0,001$ м).

Иначе силу сопротивления можно представить так:

$$\mathbf{F}_{carcass} = -\rho D \mathbf{V} \quad (20)$$

$$D = \frac{\nu}{k} + \frac{1}{2} C |\mathbf{V}| \quad (21)$$

$$k = \frac{\phi^3 d^2}{180(1-\phi)^2} \quad (22)$$

$$C = \frac{3.6}{d} \frac{1-\phi}{\phi^3} \quad (23)$$

Источниковый член, моделирующий теплообмен с каркасом в уравнении энергии для несущей фазы, рассчитывается следующим образом:

$$Q_{carcass} = h_{carcass} (T_{carcass} - T) \quad (24)$$

Здесь

$h_{carcass}$ - коэффициент теплообмена между жидкостью и каркасом ($h_{carcass}=100$ Вт/м³·К).

В настоящий момент теплоперенос в пористом каркасе во FlowVision пока моделироваться не может. Поэтому в расчётах температура каркаса в была задана:

Зона А: $T_{carcass} = 500$ К

Зоны Б, В: $T_{carcass} = 1400$ К

Данные значения по температуре приблизительно равны средним значениям в зонах А и Б, взятым из работы [5]

На рис.15 показано осевое распределение температуры газовой фазы, полученное во FlowVision, где сравнивается с распределением, полученным в работе [5] для рассматриваемого режима работы горелки и с экспериментальными данными.

На рис.16,17 и 18 показаны распределение скорости многокомпонентной газовой смеси, абсолютной температуры [К] и давления относительно опорного равного 101000 Па в объёме горелки.

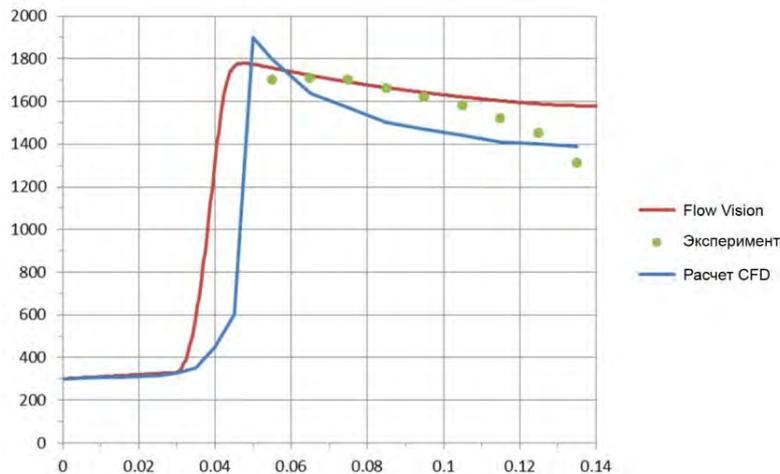


Рис.15. Пористая горелка. Осевое распределение температуры [K] газовой фазы



Рис.16. Пористая горелка. Скорость [м/с]



Рис.17. Пористая горелка. Температура [K]



Рис.18. Пористая горелка. Давление относительно опорного [Pa]. Опорное давление 101000 Па

Согласно полученным расчетам, можно сделать вывод, что качественная картина течения в объеме с переменной пористостью воспроизводится верно и совпадение с экспериментом - удовлетворительное.

Заключение

Индустриальные задачи горения, как правило, характеризуются сложной геометрической формой объекта, в котором происходит горение (горелка, камера сгорания автомобиля, камера сгорания турбины, ракетный двигатель). Для разрешения течения в сложном устройстве требуется большой расчетный ресурс. По этой причине индустриальная модель горения должна содержать минимум реакций (1-2). Реализованная в ПК FlowVision модель массопереноса 'Горение' предполагает одну брутто-реакцию с одним или двумя конечными продуктами. Скорость брутто-реакции зависит от конкретной модели горения. В настоящий момент пользователю предоставляется выбор из пяти моделей. Поскольку реальный механизм горения, включающий большое число реакций, представляется одной брутто-реакцией с ограничителями (температура воспламенения, минимальный и максимальный коэффициенты избытка окислителя), перед моделированием горения данного горючего в данном окислителе при данных условиях рекомендуется откалибровать выбранную модель на близкой задаче. Выведенные в интерфейс параметры позволяют это сделать. Настоящая работа демонстрирует эффективность данного подхода для различных индустриальных задач.

Список литературы

1. On Mathematical Modelling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion [Text] / Magnussen B.F., Hjertager B.H. // Proceedings of Sixteenth International Symposium on Combustion, 1976, pp. 719-729.
2. Исследование двухступенчатого сжигания метана в вихревой горелке [Текст] / Аксенов А.А., Похилко В.И., Тишин А.П. // Труды 2-ой Российской национальной конференции по теплообмену, Москва, 26-30 октября 1998, Том 3, с.161-164.
3. Magnussen, B. F. (2005) "The Eddy Dissipation Concept. A bridge between science and technology" // Invited paper at ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion, Lisbon, June 21-24, 2005, 25 p.
4. Santoro, R.J. (1997) "An Experimental Study of Characteristic Combustion-Driven For CFD Validation" // Final Report for NASA Contract NAS8-38862. Propulsion Engineering Research Center and Department of Mechanical Engineering. The Pennsylvania State University. University Park, PA., 119 p.
5. Farzaneh, M., Ebrahimi, R., Shams, M., Shafiey, M. (2007) "Two-dimensional Numerical Simulation of Combustion and Heat Transfer in Porous Burners" // Engineering Letters, 15:2, EL_15_2_28, 6 p.