УДК 681.324

ИЗМЕНЕННАЯ МОДЕЛЬ ДИФФУЗИОННОГО ГОРЕНИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО ГОРЮЧЕГО ГАЗА

THE MODIFIED MODEL OF DIFFUSION FLOW OF MULTICOMPONENT COMBUSTIBLE GAS

Р. А. Штыков
R. A. Shtykov

Муромский институт (филиал) Владимирского государственного университета, г. Муром

Ключевые слова: ***многокомпонентный горючий газ; диффузионное горение***
Key words: ***multicomponent combustible gas; diffusion combustion***

Предложенная в работе Я. Б. Зельдовича [1] модель диффузионного горения была построена на основе предположений о том, что первоначальная концентрация кислорода распределяется между горючими компонентами смеси согласно стехиометрическим уравнениям и исходным концентрациям компонентов, в результате образуется единый фронт пламени. Несмотря на достаточно удовлетворительное согласие полученных данных с экспериментом, неуниверсальность и большой объем алгоритма определения концентраций компонентов при изменении количества активных компонентов, а также их состава показывает слабую сторону данной модели. В связи с этим возникла необходимость разработки другой — простой модификации модели Я. Б. Зельдовича, которая позволила бы привести к наименьшему количеству операций для оп-

ределения температуры и плотности газа при известных значениях относительно избыточной концентрации и полной энтальпии.

Прототипом данной модели служила методика из курса практической теории горения [2], на основе которой определяется теоретически необходимое количество кислорода (или воздуха) для данной смеси горючих компонентов и правила аддитивности Кэя [3].

В турбулентном режиме течения учет многокомпонентности горючего газа приводит к вопросу о построении единого стехиометрического уравнения химических превращений, то есть можно игнорировать вопрос об обеспечении стехиометрического поступления химически активных газов к фронту пламени, который является краеугольным камнем при моделировании диффузионного горения одно- и многокомпонентной горючей смеси в ламинарных потоках.

Итак, в турбулентном потоке коэффициенты «турбулентной» диффузии для всех компонентов для фиксированной точки области течения одинаковы. Это позволяет нам записать уравнения сохранения и переноса i-го компонента в единой форме:

$$L(C_i) = (\vartheta)_i \qquad (i = 1..N) \tag{1}$$

где $L(C_i)$ — линейный и однородный относительно своего аргумента (массовой концентрации i-го компонента C_i) оператор, а $(\vartheta)_i$ — массовая скорость образования (исчезновения) i-го сорта молекул в данной точке фронта пламени в течение единичного отрезка времени.

Предположим, что в движении участвуют компоненты X_i при $i = 1..N$. Из них первый компонент представляет кислород O_2, последующие N_A — реагирующие с кислородом горючие компоненты, а остальные — нереагирующие. Нереагирующими считаются n сортов (последние из N) химически пассивные и инертные газы (например, азот, аргон…), а также компоненты продуктов горения, так как реакции в модели считаются необратимыми.

Необходимо подчеркнуть, что горючие компоненты могут находиться только в смеси, а окислитель — только в кислородосодержащей среде.

Горючая смесь *A*, которую именуем далее «горючим», имеет в своем составе компоненты A_i из числа X_i ($i = 2..N$) с объемными концентрациями $< n_i >_A$, а кислородосодержащая смесь, именуемая в дальнейшем «воздухом», — из B_i X_i ($i = 1, N_A + 1..N$) с объемными концентрациями $< n_i >$.

Известно, что для отдельно взятого горючего компонента A_k материальный баланс с учетом выделяемого тепла реакции горения имеет вид

$$A_k + \nu_{k1} O_2 \rightarrow \sum_{i=N_A+2}^{N-n} \nu_{ki} X_i + h_k^*, \tag{2}$$

где $k \in \{2...N_A + 1\}$. Например, для случая горения водорода сумма справа представляет один продукт, а для метана — два.

Стехиометрическое уравнение (2) гласит, что *1 гмоль* горючего компонента A_k, расходуя при горении ν_{k1} гмоль молекулярного кислорода, образует по ν_{ki} гмоль всевозможных продуктов горения X_i ($i = N_A + 2..N - n$). При этом выделяется тепло в количестве h_k^* (*Дж/гмоль*).

Так как кислород, подаваемый в составе «воздуха» *B*, имеет концентрацию $< n_i >_B$, то для полного сгорания *1* гмоль A_k потребуется $\nu_{k,1} / < n_i >_B$ гмоль «воздуха». С учетом этого обстоятельства стехиометрическое уравнение (2) переписывается в виде

$$A_k + \frac{\nu_{k,1}}{< n_1 >_B} B \quad \sum_{i=N_A+2}^{N-n} \nu_{k,i} X_i + \nu_{k,1} \sum_{i=N_A+2}^{N} \frac{< n_i >_B X_i}{< n_1 >_B} + h_k^*, \qquad (3)$$

где вторая сумма в правой части представляет собой состав «воздуха» за исключением кислорода. Учитывая то, что горючие и негорючие компоненты A_k (k 2,3,...N) составляют $< n_k >_A$ объемную часть *1* гмоль «горючего», вводим обозначение «горючего» — A

$$A = \sum_{k=2}^{N} < n_k >_A X_k \ . \qquad (4)$$

Чтобы получить «горючее» A в левой части стехиометрического уравнения с полным составом, (3) умножим на $< n_k >_A$ и суммируем по k от двух до $N_A + 1$ (то есть по всем горючим компонентам). Прибавим к обеим сторонам этой суммы члены $< n_k >_A X_k$ и (k N_A+1..N), представляющие химически пассивную и инертную часть «горючего», и окончательно получим

$$A + \sum_{k=2}^{N_A+1} < n_k >_A \frac{\nu_{k,1}}{< n^1 >_B} B \sum_{k=2}^{N_A+1} < n_k >_A \sum_{i=N_A+2}^{N-n} \nu_{k,i} X_i + \sum_{k=2}^{N_A+1} < n_k >_A \sum_{i=N_A+2}^{N-n} \frac{< n_i >_B}{< n1 >_B} \nu_{k,1} X_i + \sum_{k=N_A+1}^{N_A} < n_k >_A X_k + \sum_{k=2}^{N_A+1} < n_k >_A h_k^* . \qquad (5)$$

Правую часть уравнения (5) можно записать в коротком виде

$$\nu_D D + h_A^* ,$$

где D — «продукт горения», представляющий одновременно продукты горения и пассивные составляющие «горючего» и «воздуха».

Для определения молекулярной массы и теплоемкости «продукта горения» необходимо знать его объемный состав. А определение объемного состава «продукта горения» при известных значениях $< n_k >_A$ и $< n_k >_B$ не составляет труда. Например, компонент X_j составляет

$$\nu_j^{(D)} = \begin{cases} < n_j >_A + \sum_{k=2}^{N_A+1} < n_k >_A \left(\nu_{k,j} + \frac{\nu_{k,1} < n_j >_B}{< n_j >_B} \right) & \text{при } j = N_A+1..N-n \\ < n_j >_A + \sum_{k=2}^{N_A+1} < n_k >_A < n_k >_B \frac{\nu_{k,1}}{< n_1 >_B} & \text{при } j = N-n = 1...N \end{cases} \qquad (6)$$

гмоль части из общего

$$\nu_D = \sum_{j=N_A+1}^{N} \nu_j^{(D)} \qquad (7)$$

гмоль объема «продукта горения». С помощью (6–7) определяется молярная масса *1 гмоль* «продукта горения»

$$m_D = \sum_{j=N_A+2}^{N} \nu_j^{(D)} m_j / \nu_D \ . \qquad (8)$$

С помощью (6–8) последовательно определяются объемные

$$\nu_j^{(D)} /$$

$$< nj >^D = v_j \qquad v^D \tag{9}$$

и массовые концентрации

$$< C^j >^D = \nu_j \frac{(D \quad j / ()D \quad D}{m \quad v \quad m} \tag{10}$$

отдельно взятых компонентов X_j ($j = N_A + 2..N$) в «продукте горения», а также теплоемкости D при постоянном давлении

$$c_{pD} = \sum_{j=N_A+2}^{N} < C_j >_D c_{pj} . \tag{11}$$

Таким образом, приведенные выше формулы определяют единое стехиометрическое уравнение

$$\nu_A A + \nu_B B \quad \nu_D D + h_A^*, \tag{12}$$

где параметры «горючего» A определяется в виде

$$\nu_A = 1, \tag{13}$$

$$m_A = \sum_{j=2}^{N} < n_j >_A m_j , \tag{14}$$

$$c_{pA} = \sum_{j=2}^{N} < C_j >_A c_{pj} , \tag{15}$$

$$h_A^* = \sum_{j=2}^{N} < C_j >_A h_j^* ; \tag{16}$$

параметры «воздуха» B

$$\nu_B = \sum_{j=1;N_A+2}^{N} \nu_{j,1} < n_j >_B / < n_1 >_B , \tag{17}$$

$$m_B = \sum_{j=1;N_A+2}^{N} < n_j >_B m_j , \tag{18}$$

$$c_{pB} = \sum_{j=1;N_A+2}^{N} < C_j >_B c_{pj} , \tag{19}$$

а параметры «продукта горения» D — согласно формулам (6–11).

Полученные формулы достоверны также для случая, когда в составе «горючего» имеется один горючий компонент.

Так как рассматриваемые обобщенные компоненты учитывают все составляющие, которые имеют одинаковые скорости и коэффициенты диффузии в фиксированной точке, уравнения сохранения i-го компонента (1) можно представить для «компонентов» в виде

$$L(C_\alpha) = (9), \tag{20}$$

при $\alpha = A, B, D$.

Сравнивая данную задачу с задачей Я. Б. Зельдовича, убедимся в том, что индексы компонентов от 1, 2, 3 перешли в A, B, D, а уравнения для четвертого компонента — химически пассивного газа — выпало, так как нереагирующие компоненты включены

в составы A, B и D.

Концентрации компонентов в зоне горючего (то есть при $1? C > C^*$) определяем

$$C_1=0, \qquad C_3=<C_1>_1 \Theta_{21} I1-C ,$$

$$C_2 = (<C_2>_2 +\Theta_{21} <C_1>_1) C- \Theta_{21} <C_1>_1 .$$

На основе подобной оценки для зоны окислителя (то есть при $0 \; C < C^*$) —

$$C_1 =< C_1 >_1 -(< C_1 >_1 +\Theta_{21} <)C,$$
$$C_2>_2$$

$$C_2=0, \qquad C_3 = \Theta_{23} <C_2>_2 \; C.$$

А фронт пламени — по формуле $C = \Theta_{DA}$.

Необходимые для дальнейшего расчета молярная масса и теплоемкость (при постоянном давлении) смеси «компонентов» определяются по известным формулам

$$m = \left(\sum_{\alpha=A,B,D} C_\alpha / m_\alpha \right)^{-1}, \qquad (21)$$

$$c_p = \sum_{\alpha=A,B,D} C_\alpha c_{p\alpha} . \qquad (22)$$

Если возникает необходимость определения массовой концентрации отдельно взятой X_i компоненты, то при известных значениях C_A, C_B и C_D она определяется по следующим формулам:

для кислорода ($i = 1$)

$$C_1 = \frac{m_1}{m} <C> \; C_B \; C_B ,$$

для горючих компонентов ($i = 2,3,..., N_A +1$)

$$C_i = \frac{m_1}{m} <C> \; C_A \; C_A ,$$

и для остальных компонентов ($i = N_A +2, N_A +3,...N$)

$$C_i = \frac{m}{m} (<C_i>_A C_A + <C_i>_B C_B + <C_i>_D C_D) .$$

Проверив, можно убедиться, что сумма концентраций отдельных компонентов равна единице, что служит в пользу достоверности формул.

Список литературы

1. Зельдович Я. Б., Баренблатт Г. И., Либрович В. Б., Махвиладзе Г. М. и др. Математическая теория горения и взрыва. – М.: Наука, 1980. – 478 с.
2. Иссерлин А. С. Основы сжигания газового топлива. – Л.: Недра, 1987. – 336 с.
3. Коротаев Ю. П., Ширковский А. И. Добыча, транспорт и подземное хранение газа. – М.: Недра, 1997. – 487 с.

Сведения об авторе

Штыков Роман Александрович, *к. т. н., доцент кафедры «Физика и прикладная математика», Муромский институт (филиал) Владимирского государственного университета, г. Муром, тел. 8(920)6222022, e-mail: ipmrroman@yandex.ru*

Information about the author

Shtykov R. A., *Candidate of Science in Engineering, associate professor of the chair «Physics and applied mathematics», Murom Institute (branch) of Vladimir State University, phone: 8(920)6222022, e-mail: ipmrroman@yandex.ru*