

Piotr KOLNIAK, Ryszard MILLER
Mieczysław ZEMBRZUSKI

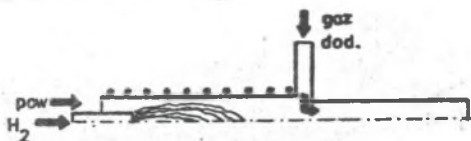
Instytut Techniki Ciepłej i Mechaniki Płynów
Politechnika Wrocławska

ANALIZA PROCESÓW FIZYCZNYCH W TURBULENTNYM PRZEPŁYWIE ZE SPALANIEM

Streszczenie: W pracy przedstawiono zagadnienia związane z matematycznym modelowaniem parabolicznych przepływów turbulencyjnych, w których zachodzą złożone reakcje chemiczne procesu spalania. Turbulencja przepływu uwzględniona jest przez zastosowanie modelu k-ε. Równania różniczkowe zwyczajne opisujące człony źródłowe równań zachowania składnika chemicznego (kinetyka chemiczna) rozwiązano metodą SAIM, która pozwala na efektywne połączenie zagadnień aerodynamiki i spalania. Sformułowany model posłużył do analizy procesu spalania i jego wpływu na formowanie się aerodynamiki przepływu.

1. Wstęp

W ostatnich latach znacznie wzrosło zainteresowanie likwidacją zanieczyszczeń powstających w czasie różnych procesów przemysłowych. Jedną z metod ich likwidacji jest metoda dopalania termicznego. Prezentowany tutaj model matematyczny został wykorzystany do symulowania procesów zachodzących w reaktorze, w którym zachodzi dopalanie termiczne zanieczyszczeń gazowych. Reaktor składa się z dwóch części: pierwszej, w której spalany gaz (wodór) wytwarza w odpowiednim reżimie rodniki i drugiej, właściwej, w której następuje spalanie mieszaniny gazu dodatkowego i pozostałości z płomienia pilotującego (rys. 1).



Rys. 1

W części pierwszej, w której produkowane są rodniki, ilość ich regulowana jest w dwojaki sposób, tj. poprzez zmianę natężenia paliwa i utleniacza dopływających do części pierwszej reaktora oraz przez skracanie strefy popłomiennej. Skracanie strefy popłomiennej realizowane jest poprzez wsuwanie palnika wodorowego do wnętrza reaktora. Reaktor służy do badania wpływu rodników wytworzonych w jego pierwszej części na sprawność procesu dopalania termicznego zanieczyszczeń gazowych w jego drugiej części.

W pracy przedstawiono model matematyczny opisujący przepływ turbulencyjny

ny w ogrzewanym cylindrycznym reaktorze kwarcowym, w którym zachodzą nierównowagowe procesy spalania w płomieniu dyfuzyjnym.

2. Model matematyczny

Prezentowany problem stanowi kontynuację prac autorów [1, 2, 3] nad zagadnieniem numerycznego modelowania przepływów turbulentnych ze spalaniem. Prezentowany tutaj model matematyczny pozwala symulować przepływy turbulentne ze spalaniem, w których szczegółowo analizowane są procesy kinetyki chemicznej.

W skład modelu wchodzi paraboliczne równania transportu dla uśrednionych w czasie zmiennych zależnych. Równania te opisane są w układzie współrzędnych cylindrycznych i mają postać:

- równanie pędu w kierunku x

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u u) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v u) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_w \frac{\partial u}{\partial r} \right) - \frac{\partial p}{\partial x}$$

- równanie pędu w kierunku r

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v v) = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_w \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \mu_w \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{2 \mu_w v}{r^2}$$

- równanie dyssypacji kinetycznej energii turbulencji ϵ

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \epsilon) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v \epsilon) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_w}{G_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial r} \right) + C_1 G_\epsilon - C_2 \rho \epsilon$$

- równanie kinetycznej energii turbulencji k

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u k) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v k) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_w}{G_k} \frac{\partial k}{\partial r} \right) + G_k - \rho \epsilon$$

- równanie energii h

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u h) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v h) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_w}{G_h} \frac{\partial h}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \sum_i \mu_w \left(\frac{1}{G_m} - \frac{1}{G_h} \right) h_i \frac{\partial m_i}{\partial r} \right)$$

- równanie zachowania składnika chemicznego m_i

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u m_i) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v m_i) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\mu_w}{G_m} \frac{\partial m_i}{\partial r} \right) + R_i$$

gdzie:

$$G_k = \mu_t \left[2 \left(\frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{v}{r} \right)^2 \right]$$

Dynamiczny współczynnik lepkości efektywnej wyraża się zależnością:

$$\mu_w = \mu + \mu_k$$

zaś

$$\mu_t = C_\mu \frac{\rho k^2}{\varepsilon}$$

W obliczeniach przyjęto następujące wartości stałych modelu turbulencji:

$$C_1 = 1.44, \quad C_2 = 1.92, \quad C_\mu = 0.09$$

Definicyjne równanie entalpii ma postać:

$$h = \sum_{i=1}^N m_i h_i = \sum_{i=1}^N m_i \left(h_i^0 + \int_{T_0}^T c_{pi} dT \right)$$

gdzie h_i^0 jest entalpią tworzenia w temperaturze 298,15 K.

Entalpię h_i aproksymowano wielomianem piątego rzędu w postaci:

$$h_i = R \cdot (a_1 T + 0.5 a_2 T^2 + 0.33 a_3 T^3 + 0.25 a_4 T^4 + 0.2 a_5 T^5 + a_6)$$

Podobnie traktowano właściwą pojemność cieplną c_p . Współczynniki $a_1 \dots a_6$ oraz wartości entalpii tworzenia przyjęto na podstawie literatury [4, 5]. W obliczeniach założono, że gazy biorące udział w procesie są gazami doskonałymi, wobec czego gęstość mieszaniny można wyznaczyć z równania stanu.

$$p = \frac{P}{RT \cdot \sum \frac{m_i}{W_i}}$$

gdzie p jest ciśnieniem

3. Metoda numeryczna

Do aproksymacji równań transportu równaniami różnicowymi użyto szczególnie użytecznej w tych zagadnieniach metody całkowania po objętości kontrolnej. Człony konwekcyjne i dyfuzyjne całkowano przy użyciu tej metody, zaś dla uzyskania drugiego rzędu aproksymacji członów źródłowych wykorzystano metodę aproksymacji wielomianami.

Równania różnicowe rozwiązywano metodą TDMA. Średni osiowy gradient ciśnienia występujący w równaniu pędu dla kierunku głównego x jest obliczany z założenia zachowania masy w przekroju przepływu [6]. Gradient ciśnienia w równaniu pędu dla kierunku promieniowego r obliczany był przy pomocy metody SIMPLE. Równanie poprawki ciśnienia rozwiązywano metodą Gaussa - Jacobiego. Temperatura mieszaniny w danym punkcie pola przepływu obliczana jest ze znanej wartości entalpii h i składu mieszaniny gazowej w danym punkcie. Do rozwiązania tego zagadnienia użyto iteracyjnej metody Newtona.

$$T^{k+1} = T^k + \frac{h - \sum m_i h_i(T^k)}{\sum m_i c_{pi}(T^k)}$$

gdzie T^k jest temperaturą w k -tej iteracji, $h_i(T^k)$ entalpią składnika i w temperaturze T^k , $c_{pi}(T^k)$ właściwą pojemnością cieplną składnika i w temperaturze T^k .

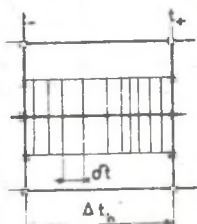
4. Approxymacja członów źródłowych

Człony źródłowe w równaniach zachowania składnika chemicznego określają się z zależności;

$$R_i = \frac{dc_i}{dt} W_i$$

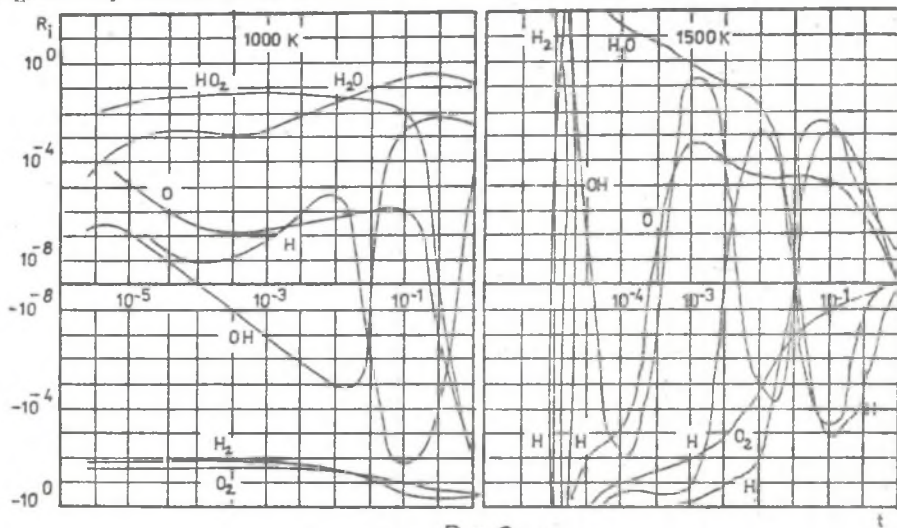
gdzie c_i jest koncentracją molową i -tego składnika chemicznego, zaś W_i jego masą cząsteczkową.

Równania te wykazują silną nieliniowość. Spowodowane jest to różnicą w krokach czasowych Δt_n stosowanych do całkowania równań opisujących aerodynamikę, a wymaganymi do całkowania równań opisujących kinetykę chemiczną krokami czasowymi δt (rys. 2).



Rys. 2

Na rysunku 3 przedstawiono zmiany wartości dc_i/dt dla wybranych temperatur 1000 i 1500 K. Obrazują one silną nieliniowość członów źródłowych i gwałtowną naturę zachodzących procesów chemicznych.



Rys. 3

Typowy krok całkowania równań transportu wynosi około 0,1 sek. W takim przedziale czasu zachodzi wiele procesów chemicznych (rys. 3). Jedne składniki powstają i znikają, inne, których tworzenie jest wolniejsze, zmieniają swoje koncentracje o kilka rzędów. Stąd całkowanie równań transportu skład-

nika chemicznego i jego członów źródłowych jest powodem największych trudności numerycznych występujących w algorytmach przepływu ze spalaniem.

Wśród metod pozwalających ominąć te trudności można wyróżnić metodę, w której rozprzega się równania transportu składnika chemicznego z ich źródłami [1]. Człony źródłowe opisane są układem równań różniczkowych zwyczajnych pierwszego rzędu i całkuje się je z użyciem kroku o długości δt w przedziale czasowym od t_- do $t_+ = t_- + \Delta t_n$. Po osiągnięciu rozwiązania w punkcie t_+ oblicza się wyrażenia dc_i/dt i na ich podstawie człony źródłowe. Następnie przy określonych źródłach całkuje się równania transportu składnika chemicznego.

Zagadnienie obliczania członów źródłowych sprowadza się do numerycznego rozwiązania nieliniowych równań zwyczajnych pierwszego rzędu. Zależności te tworzą sztywny układ nieliniowych równań różniczkowych zwyczajnych. Ilość równań jest zależna od liczby składników chemicznych N , biorących udział w reakcjach chemicznych. Równania różniczkowe zwyczajne rozwiązywane w programie mają postać:

$$\frac{dc_i}{dt} = F_i = Q_i - L_i c_i = Q_i - \frac{1}{\tau_i} c_i$$

gdzie człon Q_i jest szybkością produkcji, L_i jest odwrotnością czasu konsumpcji, τ_i - charakterystycznym czasem konsumpcji.

Przy całkowaniu układu tego typu równań krok całkowania zdeterminowany jest najkrótszymi stałymi czasowymi. Całkowanie przy użyciu dłuższych kroków czasowych powoduje brak zbieżności. Aby proces całkowania równań zwyczajnych w przedziale czasowym Δt_n był ekonomiczny, należałoby tego dokonać w kilkunastu krokach. Najkrótsze stałe czasowe są krótsze niż krok czasowy wymagany do takiego całkowania. Jeżeli iloczyn kroku czasowego δt i szybkości konsumpcji dla co najmniej jednego równania jest większy od pewnej wartości

$$\delta t \cdot L_i > 1,0$$

to układ równań różniczkowych zwyczajnych jest układem równań sztywnych. W tym przypadku należy stosować metody, które nie są czułe na wyżej postawiony warunek.

Metody rozwiązywania układu sztywnych zwyczajnych równań różniczkowych dzielą się na dwie grupy. Do pierwszej można zaliczyć metody, które bez względu na sztywność całkują wszystkie równania w jednakowy sposób. W drugiej rozdziela się równania sztywne od normalnych (niesztywne) i całkuje za pomocą metod bardzo stabilnych, zaś do normalnych używa się mniej stabilnych, lecz szybszych metod [1].

5. Wyniki obliczeń

Obliczenia przeprowadzono na maszynie RIAD-32 przy pomocy programu SPECTRA. Do obliczeń procesu spalania przyjęto mieszaninę gazową składającą się z 10 składników O, O₂, OH, H, H₂, H₂O, HO₂, H₂O₂, N, N₂. Schemat spalania składający się z 32 reakcji wraz ze stałymi kinetycznymi podano w tabeli 1.

Tabela 1

			A _{t,b}	n _{t,b}	F _{t,b}
1	O ₂ + H	= O + OH	2.20E 11 2.30E 10	0.0 0.0	8450.0 0.0
2	O + H ₂	= CH + H	1.80E 07 8.30E 06	1.0 1.0	4480.0 3500.0
3	OH + H ₂	= H + H ₂ O	2.20E 10 9.30E 10	0.0 0.0	2590.0 10250.0
4	O + H ₂ O	= OH + OH	6.80E 10 6.30E 09	0.0 0.0	9240.0 550.0
5	H ₂ + M	= H + H + M	2.20E 11 6.40E 11	0.0 -1.0	48300.0 0.0
6	O ₂ + M	= O + O + M	1.80E 15 1.90E 07	-1.0 0.0	59380.0 -900.0
7	OH + H + M	= H ₂ O + M	1.40E 17 2.20E 13	-2.0 0.0	0.0 52900.0
8	OH + OH + M	= H ₂ O ₂ + M	9.10E 08 1.20E 14	0.0 0.0	2550.0 22900.0
9	O ₂ + H + M	= HO ₂ + M	1.50E 09 2.10E 12	0.0 0.0	-500.0 23000.0
10	OH + H ₂ O ₂	= H ₂ O + HO ₂	1.00E 10 2.80E 10	0.0 0.0	910.0 16500.0
11	H + H ₂ O ₂	= H ₂ + HO ₂	1.70E 09 7.30E 08	0.0 0.0	1900.0 9400.0
12	H + HO ₂	= OH + OH	2.50E 11 1.20E 10	0.0 0.0	950.0 20200.0
13	H + HO ₂	= O ₂ + H ₂	2.50E 10 5.50E 10	0.0 0.0	350.0 29100.0
14	O + H + M	= OH + M	3.00E 08 6.96E 10	0.0 0.21	0.0 50950.0
15	OH + HO ₂	= O ₂ + H ₂ O	1.00E 10 2.10E 10	0.0 0.13	0.0 36300.0
16	N + N + M	= N ₂ + M	3.00E 08 3.70E 15	0.0 -1.6	-500.0 113200.0

Stałą szybkości reakcji chemicznych obliczono z zależności Arrheniusa

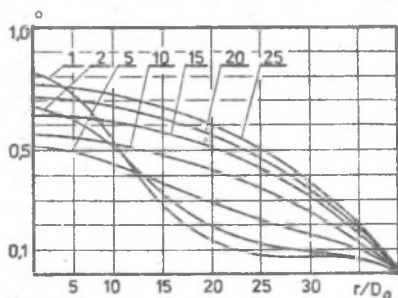
$$k_{t,b}^j = A_{t,b}^j \cdot T^{n_{t,b}^j} \cdot \exp(-F_{t,b}^j/T)$$

Reaktor kwarcowy ogrzewano z zewnątrz. Temperatura ścianki wynosiła 1290 K, zaś temperatura gazów wlotowych 301 K. Stopień turbulencji wynosił 0.03. Na rysunku 4 przedstawiono bezwymiarowe profile prędkości osiowej u/u_c (gdzie $u_c = 6.93$ m/s). Profile prędkości obrazują przepływ bez spalania. Na rysunku 5 przedstawiono zmiany wzdłuż osi przepływu bezwymiarowej prędkości u^* , ciśnienia p^* i temperatury T^* , gdzie wielkości normalizujące mają postać:

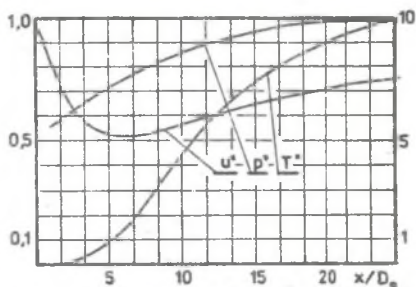
$$u^* = u_{cl} / u_{c10} ; p^* = (p - p_0) / p_0 ; T^* = (T - T_0) / T_0,$$

gdzie:

$$u_{c10} = 6.93 \text{ m/s}, \quad p_0 = 1.01 \cdot 10^5 \text{ N/m}^2, \quad T_0 = 301.1 \text{ K}, \quad D_0 = 6.5 \cdot 10^{-3} \text{ m}.$$



Rys. 4



Rys. 5

Literatura

- [1] Kolniak P.; Raport Politechniki Wrocławskiej ITCiMP PRE 21/80, Wrocław 1980,...
- [2] Grzegółka K., Kolniak P., Przekwas A.; XI Zjazd Termodynamików, Materiały Zjazdowe, Świnoujście 1981 r.
- [3] Kolniak P., Przekwas A., Wanik A.; III Krajowa Konferencja Mechaniki Cieczy i Gazów, Częstochowa 1978 r.
- [4] Gordon S., McBride B.J.; NASA SP-273, Washington 1971.
- [5] Gluszko W.P.; Termodinamiczeskije swojstwa indywidualnych wieszczestw. Nauka, Moskwa 1978.
- [6] Caretto L.S., Curr R.M., Spalding D.B.; Comp. Meth. Appl. Mech. and Eng. North-Holland v 1, 1972.

АНАЛИЗ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ТУРБУЛЕНТНОМ ТЕЧЕНИИ СО СГОРАНИЕМ

Резюме

В статье представлено проблемы связанные с математическом моделированием параболических турбулентных течений, в которых происходят сложные химические реакции процесса сгорания. В состав модели входят модель турбулентности $k-\epsilon$. Обыкновенные дифференциальные уравнения, которые описывают источникные члены уравнений баланса вещества были решены методом САИМ, с помощью которой связано аэродинамику и процессы сгорания. Построена модель использовалось к анализу процессов сгорания и его влияния на формирование аэродинамики течения.

ANALYSIS OF PHYSICAL PROCESSES
IN TURBULENT FLOW WITH COMBUSTION

S u m m a r y

Problems concerning mathematical modelling of parabolic turbulent flow in which complex chemical reaction of combustion process are taking place have been presented in the paper.

Turbulence of the flow was taken into account by using k- model. Ordinary differential equations related to the chemical kinetics were solved by using special method SAIM, which allows the effective coupling of aerodynamics and combustion. Thus formulated mathematical model was used for the analysis of combustion process and its influence on aerodynamics.