

# Горение капель

*Фролов С.М., Басевич В. Я.*

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, г. Москва

## Содержание

1. Введение
2. Капли однокомпонентного топлива
  - 2.1 Постановка задачи
  - 2.2 Кинетические механизмы самовоспламенения и горения капель
  - 2.3 Испарение капель
  - 2.4 Высокотемпературное самовоспламенение капель
  - 2.5 Низкотемпературное самовоспламенение капель
  - 2.6 Горение капель
3. Самовоспламенение и горение капель водно-топливных эмульсий
4. Заключение

## 1. Введение

Испарение и горение капель углеводородных топлив – важные составляющие сложных физико-химических процессов, протекающих в камерах сгорания двигателей и стационарных энергетических установок, аппаратах химической технологии и т.д. Для повышения эффективности сжигания топлива и снижения выхода вредных веществ (СО, NO, сажи и др.) кроме чистых углеводородных топлив часто применяют и водно-топливные эмульсии. Основы теории испарения и горения капли однокомпонентного топлива заложены в работах [1-5]. В настоящее время существует обширная литература по разным аспектам проблемы. Наиболее полно современное состояние знаний об испарении и горении капель представлено в обзорах [6-11].

Капля жидкости, помещенная в безграничную газовую среду, представляется, на первый взгляд, простым объектом исследования. Однако, как при математическом моделировании, так и при постановке эксперимента, часто сталкиваются с трудностями. Это связано со сложным характером взаимодействия капли и окружающего газа в условиях неоднородного распределения температуры. В поле силы тяжести вокруг капли возникают конвективные течения газа, вызывающие (вследствие вязких напряжений на поверхности раздела фаз) внутреннюю циркуляцию жидкости в капле и деформацию капли в целом. Направленные течения в газе возникают и в результате фазового перехода на поверхности капли, что приводит к переменному во времени и существенно неравномерному по пространству распределению компонентов газовой смеси и диффузионным потокам. Указанные эффекты в значительной мере зависят от размера капли и параметров газовой среды. При определенных условиях проявляются неравновесные явления [12]. В условиях, близких к критической точке топлива, сильно проявляются эффекты неидеальности системы «жидкость – пар – инертный газ» [13].

При горении капле водно-топливной эмульсии наблюдается ряд явлений, не присущих горению капле однокомпонентного топлива [14-24]. Поскольку давление паров у диспергированного компонента (воды) существенно выше, чем у основного, горение капле эмульсии сопровождается микровзрывом – внезапным разрушением вследствие вскипания микрокапель воды и образования вокруг них паровых пузырьков. Разрушение капле эмульсии приводит к значительному сокращению времени горения и, следовательно, повышению теплонапряженности процесса горения. При горении струй микровзрывы способствуют более полному перемешиванию топлива с окислителем и, следовательно, к снижению выхода вредных веществ.

Простые модели горения капле чистых топлив и водно-топливных эмульсий (см., например, [1-5, 25]) позволяют оценить время жизни капли, температуру пламени, расстояние от поверхности капли до фронта пламени и некоторые другие параметры. Однако применительно к современным задачам, особенно задачам управления горением струй и снижения выхода вредных веществ при горении, простые модели мало эффективны. Для решения таких задач требуются данные о динамике физических и химических процессов в самой капле и ее окрестности.

На практике, например, в жидких топливных струях и газовзвесах, часто используемое приближение одиночной капли может нарушаться. В относительно плотных капельных газовзвесах прогрев, испарение и горение отдельной капли происходят под влиянием других капле. Параметры газа вокруг каждой отдельной капли уже нельзя считать постоянными: температура и состав газа будут зависеть от расстояния между частицами и от свойств жидкости и газа и будут меняться во времени. В этих условиях задача о прогреве и испарении капли, а также о ее воспламенении и горении становится значительно сложнее. В литературе указанные эффекты называют «коллективными» или «струйными».

При моделировании испарения и горения капле с учетом коллективных эффектов используют несколько подходов: рассматривают две или несколько капле [26, 27], регулярную последовательность капле [28, 29], группу беспорядочно расположенных капле [30, 31] или газовзвесь [32]. Достоинства и недостатки этих подходов подробно проанализированы в обзорах [6–11]. Здесь лишь отметим, что наиболее детальное описание полей термодинамических параметров и скорости в пространстве между каплями получено при рассмотрении двух взаимодействующих капле или регулярной (например, линейной) последовательности капле. «Групповые» теории и модели газовзвеси, как правило, не учитывают нестационарный характер тепло- и массообменных процессов в капле и ее окрестности, а также зависимость этих процессов от расстояния между каплями.

В настоящее время самовоспламенение и горение капле жидких топлив в камерах сгорания поршневых двигателей моделируют без учета многих факторов, влияющих как на локальные, так и на интегральные характеристики рабочего процесса. Динамическое и тепловое воздействие капле на течение связывают с осредненными межфазными потоками массы, количества

движения и энергии [32]. Влияние турбулентности на взаимодействие фаз моделируют турбулентной дисперсией частиц [11]. Капли считают точечными источниками паров горючего. При моделировании процессов смешения паров горючего с газом, окружающим капли, используют модели микросмешения, не учитывающие различие коэффициентов молекулярной диффузии компонентов и конечную глубину проникновения диффузионных потоков [33]. Последнее выражается в том, что в численных расчетах испаренное горючее равномерно смешивается с газом, заполняющим расчетную ячейку, размер которой на несколько порядков превышает размеры капель. Как следствие, химические превращения в двухфазной среде представляются объемными процессами в расчетной ячейке, заполненной смесью испаренного горючего, окислителя, промежуточных продуктов реакций и инертных веществ.

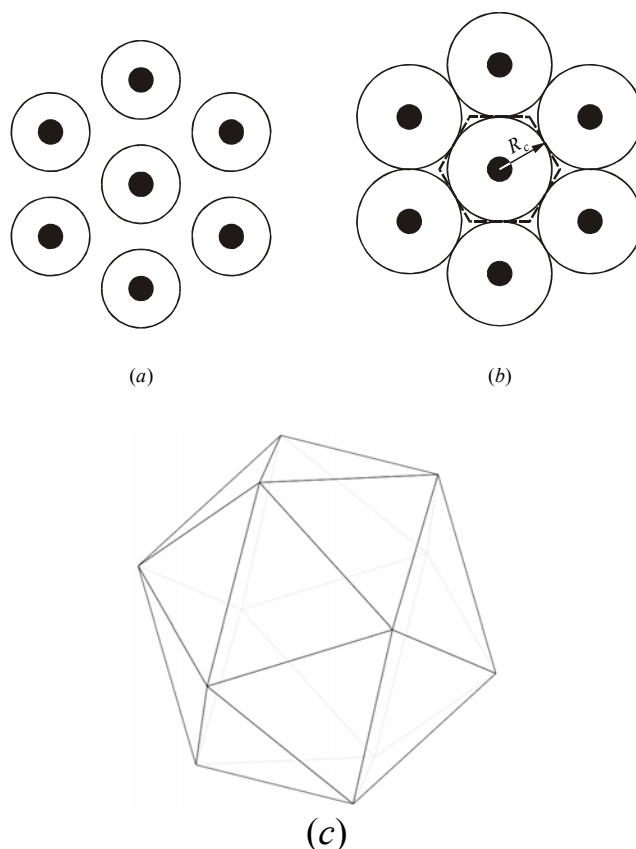
Таким образом, размер расчетной ячейки становится важным искусственным параметром решаемой задачи, от значения которого во многом зависит динамика локальных и интегральных характеристик всего изучаемого процесса. Между тем хорошо известно, что вокруг отдельных капель и групп капель имеются существенные неоднородности температурных и концентрационных полей [34, 35]. Глубина проникновения диффузионных потоков зависит от времени и взаимного расположения капель. В таких условиях испарение, самовоспламенение и горение горючего нельзя рассматривать как процесс в реакторе гомогенного смешения, размер которого равен размеру расчетной ячейки.

Цель данного обзора – описание результатов расчетов испарения, самовоспламенения и горения капель углеводородных топлив и водно-топливных эмульсий, полученных авторами в [34-52] на основе созданной ими математической модели.

## **2. Капли однокомпонентного топлива**

### **2.1 Постановка задачи**

Рассмотрим однородную монодисперсную газовзвесь капель однокомпонентной жидкости [50]. В такой газовзвеси все капли имеют одинаковый размер и находятся на одинаковом расстоянии друг от друга. На рис. 1а и 1б черными кружками схематически показаны капли одинакового размера, равномерно распределенные на плоскости. Окружности вокруг капель характеризуют глубину проникновения диффузионных потоков, т.е. условную границу, внутри которой концентрация пара жидкости и температура отличаются от параметров невозмущенного газа. До тех пор, пока окружности не сомкнутся (рис. 1а), параметры невозмущенного газа стационарны. Когда диффузионные потоки от разных капель встречаются (рис. 1б), все параметры газа в пространстве между каплями начинают изменяться во времени. Очевидно, что на стадии процесса, показанной на рис. 1а, коллективные эффекты отсутствуют (в приближении постоянного давления). Влияние коллективных эффектов на испарение капель появляется на стадии процесса, показанной на рис. 1б.



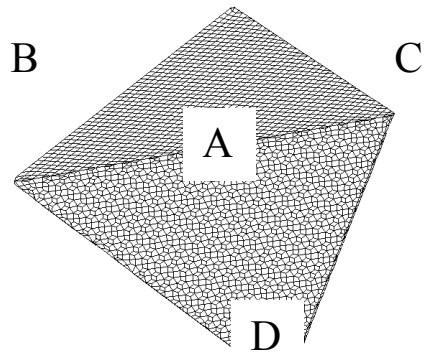
**Рис. 1:** К определению элементарной расчетной ячейки в однородной монодисперсной капельной газозвеси [50]. Черные кружки соответствуют каплям. Окружности вокруг капель характеризуют глубину проникновения диффузионных потоков. (а) коллективные эффекты отсутствуют; (б) коллективные эффекты влияют на испарение капель. Штриховая линия ограничивает элементарную ячейку, через поверхность которой отсутствуют потоки энергии и вещества;  $R_c$  - характерный размер ячейки; (в) трехмерная элементарная ячейка в виде правильного многогранника

Ввиду симметрии задачи, можно выделить элементарную ячейку (показана штриховой линией на рис. 1б), через поверхность которой отсутствуют потоки энергии и вещества. Характерный размер ячейки  $R_c$  – половина расстояния между каплями. На плоскости эта ячейка имеет форму правильного шестиугольника, а в пространстве – правильного многогранника с 20 гранями в виде равносторонних треугольников со стороной  $R_c$  (рис. 1в).

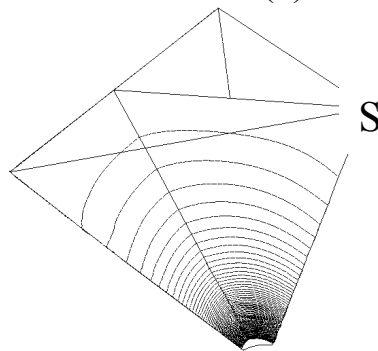
Таким образом, для учета коллективных эффектов необходимо, вообще говоря, решать трехмерную задачу с «внешними» граничными условиями нулевых потоков вещества и энергии через грани такой элементарной ячейки. Объем  $V_c$  и площадь поверхности  $S_c$  ячейки на рис. 1в равны:

$$V_c = \frac{5\sqrt{2}}{3}R_c^3, \quad S_c = 5\sqrt{3}R_c^2$$

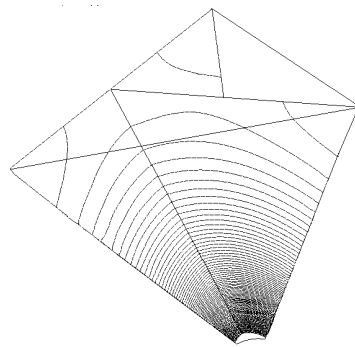
Для визуализации картины течения в такой ячейке в [50] решили нестационарную трехмерную задачу о поле течения вокруг пористой сферы, модели



(a)



(б)



(в)

**Рис. 2:** Трехмерная расчетная область в виде правильного тетраэдра, разделенная на 40000 ячеек (a) и расчетные изолинии длины вектора скорости (б) и температуры (в) вокруг пористой сферы радиусом  $r_{s0} = 0.5$  мм, моделирующей испаряющуюся каплю жидкости в плотной газовой среде при расстоянии между каплями  $R_c / r_{s0} = 10$  ( $R_c$  - длина ребра тетраэдра,  $S$  - элемент поверхности пористой сферы,  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$  - плоскости симметрии) [50].

рующей испаряющуюся каплю (рис. 2a). Расчетная область – правильный тетраэдр, составляющий 1/20 часть элементарной ячейки рис. 1в. Внешняя грань тетраэдра  $A$  – грань ячейки (плоскость симметрии). Боковые грани  $B$ ,  $C$  и  $D$  – плоскости симметрии внутри элементарной ячейки. В вершине тетраэдра находится элемент поверхности пористой сферы  $S$ , в окрестности которой

расчетная сетка сгущена для повышения точности вычислений. Считали, что в начальный момент времени расчетная область заполнена воздухом при атмосферном давлении и температуре 573.15 К. Через поры на поверхности сферы подавали воздух с температурой 373.15 К. Диаметр пористой сферы равен  $d_{s0} = 2r_{s0} = 1$  мм ( $r_{s0}$  – радиус сферы). Размер ячейки  $R_c = 10r_{s0} = 5$  мм.

Расход воздуха  $G$  (кг/(м<sup>2</sup>с)) задавали, исходя из классического закона испарения капли:

$$d_s^2 = d_{s0}^2 - Kt \quad (1)$$

по формуле

$$G \approx \frac{K\rho_l}{4d_{s0}}$$

где  $K$  – константа испарения жидкости,  $\rho_l$  – плотность жидкости,  $d_s$  – текущий диаметр капли, а индекс 0 здесь и далее соответствует начальному моменту времени  $t = 0$ . Течение считали ламинарным. На рис. 2б и 2в показаны расчетные изолинии длины вектора скорости ( $\vec{b}$ ) и температуры ( $\vec{v}$ ), полученные при  $\rho_l = 10^3$  кг/м<sup>3</sup>,  $K = 1.5 \cdot 10^{-7}$  м<sup>2</sup>/с, т.е.  $G = 0.037$  кг/(м<sup>2</sup>с). Изолинии построены в двух взаимно перпендикулярных плоскостях. К моменту времени  $t = 0.5$  с, которому соответствуют рис. 2б и 2в, температура в окрестности грани  $A$  понизилась на 120 К. Скорость газа в окрестности грани  $A$  очень мала в течение всего процесса.

Из рис. 2б и 2в следует, что поле течения в расчетной области очень близко к одномерному сферически симметричному полю. Отклонения от одномерности наблюдаются лишь в окрестности вершин тетраэдра, где имеются тангенциальные потоки энергии и незначительные тангенциальные конвективные потоки. В связи с этим вместо решения трехмерной задачи в [50] предложено решать сферически симметричную задачу с граничными условиями нулевых потоков вещества и энергии через поверхность сферы, которая моделирует элементарную ячейку-многогранник.

Ячейку-многогранник заменяли сферической элементарной ячейкой радиусом  $R$ , объемом  $V = \frac{4}{3}\pi R^3$  и с площадью поверхности  $S = 4\pi R^2$ . Из условия равенства объемов сферы и многогранника  $V = V_c$  следует, что радиус сферы

$$R = \left( \frac{5\sqrt{2}}{4\pi} \right)^{1/3} R_c \approx 0.826 R_c. \text{ При этом площади поверхности многогранника и}$$

сферы отличаются на 1%, т.е.  $S/S_c \approx 0.99$ . Несмотря на то, что в принятом приближении не учитываются тангенциальные потоки вещества и энергии в ячейке-многограннике, можно ожидать, что приближенное решение задачи все же будет отражать основные закономерности тепло- и массообменных процессов в газовзвеси<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Подчеркнем, что представленные соображения справедливы для локальной области газовзвеси с однородным пространственным распределением монодисперсных капель. В

Постановка одномерной сферически симметричной задачи совпадает с постановкой, описанной в [34, 35, 50]. Модель основана на нестационарных дифференциальных уравнениях сохранения вещества и энергии в жидкой и газовой фазах при переменных физических свойствах. В постановке задачи использована концепция многокомпонентной диффузии в смеси, содержащей пары горючего, кислород, азот и продукты горения, и учтено влияние силы поверхностного натяжения жидкости. Модель построена для условий постоянного давления в системе «газ – капля», т.е.  $p = p_0 = const$ .

В начальный момент времени  $t=0$  радиус элементарной ячейки-многогранника  $R_c$  находили по массовому содержанию жидкости в единице объема газовзвеси  $\eta \ll \rho_l$  и начальному радиусу капли  $r_{s0}$ :

$$R_c \approx \left( \frac{4\pi}{5\sqrt{2}} \right)^{1/3} r_{s0} (\rho_l / \eta)^{1/3} \approx 1.211 r_{s0} (\rho_l / \eta)^{1/3} \quad (2)$$

или по коэффициенту избытка горючего  $\Phi = \eta / (\phi_{st} \rho_g)$ :

$$R_c \approx \left( \frac{4\pi}{5\sqrt{2}} \right)^{1/3} r_{s0} [\rho_l / (\rho_g \Phi \phi_{st})]^{1/3} \approx 1.211 r_{s0} [\rho_l / (\rho_g \Phi \phi_{st})]^{1/3} \quad (3)$$

где  $\rho_g$  – плотность газа, а  $\phi_{st}$  – стехиометрическое соотношение топлива и воздуха<sup>2</sup>. Для радиуса сферической элементарной ячейки вместо (2) и (3) получим:

$$R \approx r_{s0} (\rho_l / \eta)^{1/3} \quad (4)$$

$$R \approx r_{s0} [\rho_l / (\rho_g \Phi \phi_{st})]^{1/3} \quad (5)$$

При нормальных условиях для стехиометрических воздушных смесей углеводородных топлив  $\rho_g = 1.19$  кг/м<sup>3</sup>,  $\rho_l = 700 - 800$  кг/м<sup>3</sup>,  $\phi_{st} \approx 0.06$  и  $\Phi = 1$ , следовательно, в таких смесях  $\eta = \eta_{st} \approx 0.07 - 0.08$  кг/м<sup>3</sup>,  $R_c / r_{s0} \approx 25 - 27$  и  $R_{st} / r_{s0} \approx 21 - 22$ , где  $R_{st}$  - радиус сферической элементарной ячейки в стехиометрической топливно-воздушной смеси. При повышенных давлениях, например, в конце такта сжатия в дизеле ( $\rho_g \approx 30$  кг/м<sup>3</sup>)  $R_c / r_{s0} \approx 9$  и  $R / r_{s0} \approx 8$ .

Поскольку постановка задачи предполагает постоянство давления  $p = const$ , параметр  $R$  (и  $R_c$ ) зависит от времени, т.е.  $R = R(t)$ . Текущее значение  $R(t)$  определяли в процессе решения задачи, позволяя границе элементарной ячейки двигаться со средней скоростью газа в точке  $r = R$ . Таким образом, условия на границе элементарной ячейки записывали в виде:

практических неоднородных двухфазных течениях с полидисперсными каплями ввиду динамического расслоения фракций, по-видимому, тоже можно выделить локальные области, в пределах которых выполняются предпосылки обсуждаемой модели.

<sup>2</sup> Параметры  $\eta$  и  $\Phi$  можно трактовать и как локальные параметры в неоднородных газовзвесах.

$$r = R(t): \quad \frac{\partial T_g}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial Y_j}{\partial r} = 0 \quad (j=1,2,\dots,M) \quad (6)$$

где  $T$  - температура,  $Y_j$  - массовая доля  $j$ -го компонента в газе,  $M$  – число компонентов в газе, индекс  $g$  относится к газу. Условия (6) отличаются от аналогичных условий для одиночной капли [34, 35] тем, что здесь потоки энергии и вещества прекращаются на конечном расстоянии от капли  $r = R$ , а не при  $r \rightarrow \infty$ .

Начальные условия ( $t = 0$ ) записывали так:

$$\begin{aligned} r_s(0) &= r_{s0} \\ r < r_{s0}, \quad T_l(r,0) &= T_{l0} \\ r > r_{s0}, \quad T_g(r,0) &= T_{g0} \\ R \geq r > r_{s0}, \quad Y_j(r,0) &= Y_{j0} \quad j=1,2,\dots,M \end{aligned} \quad (7)$$

где индекс  $l$  относится к жидкости. Условия (7) предусматривают ненулевое начальное содержание пара жидкости  $Y_{f0}$  в газовой фазе, где индекс  $f$  здесь и далее относится к пару жидкости.

Для численного решения задачи использовали конечно-разностный метод и метод последовательных приближений, детально описанные в [34, 35, 50].

## 2.2 Кинетические механизмы самовоспламенения и горения капель

Для изучения самовоспламенения и горения газовых углеводородов широко используют детальные кинетические механизмы. Что касается капель и струй жидких углеводородов, для исследования их самовоспламенения и горения детальные кинетические механизмы до сих пор не применялись. Это связано с тем, что кинетические механизмы окисления высших углеводородов еще мало изучены, и с тем, что горению капель сопутствуют сложные физические процессы. Именно по этим причинам в [36, 41] для моделирования вынужденного зажигания и горения капель парафиновых углеводородов использовали эмпирический механизм реакций, содержащий лишь 10 реакций с участием 10 компонентов (горючее,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $H_2$ ,  $H_2O$ ,  $NO$ , сажа и обобщенный радикал). Этот механизм представлен в табл. 1. Кроме самого механизма, в табл. 1 представлены кинетические и термодинамические параметры соответствующих реакций для  $n$ -гексана,  $n$ -гептана и  $n$ -тетрадекана – горючих, используемых в обсуждаемых ниже расчетах. В указанном кинетическом механизме основной процесс тепловыделения, учитывающий диссоциацию воды и разветвление цепей, представлен реакциями 1–6. Реакции 7–10 описывают образование и потребление окислов азота и сажи. Вообще говоря, в данном механизме предэкспоненциальные множители некоторых реакций зависят от локального коэффициента избытка горючего. Однако здесь этой зависимостью пренебрегали. Указанный механизм был проверен на задачах о распространении ламинарного пламени в предварительно перемешанных газах и диффузионном горении встречных



газовых струй, а также на задачах о самовоспламенении и горении капель [37-39, 53-55].

**Таблица 1:** Глобальный механизм самовоспламенения и горения n-алканов

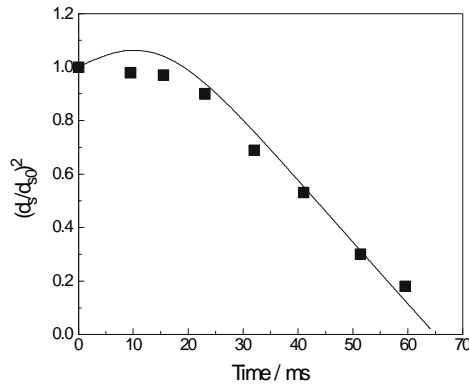
№	Реакция	Тепло- вой эффект $H$ ккал/ моль	Прямая			Обратная		
			$A$ моль, л, с	$m$	$E$ ккал/ моль	$A$ моль, л, с	$m$	$E$ ккал/ моль
1	$C_nH_{2n+2} + (n+0.5)O_2$ $= nCO + (n+1)H_2$	$H_1^*$	$6.0E13/p$ $7.0E14/p$	0 0	50 50	для горения для само- воспламенения		
2	$H_2 + H_2 + O_2$ $= H_2O + H_2O$	114	$7.0E13/p^{0.5}$	0	21			
3	$CO + CO + O_2$ $= CO_2 + CO_2$	134	$8.5E12/p^{1.5}$	0	21			
4	$H_2O + CO = H_2 + CO_2$	10	$1.0E12/p$	0	41.5	$3.1E13/p$	0	49.1
5	$H_2O + M = R + R + M$	-109	$2.8E17/p^{0.5}$	0	120	$9.5E12/p$	1	0
6	$R + O_2 + H_2$ $= R + R + R + H_2$	-4	$4.5E14/p$	0.5	16.4			
7	$C_nH_{2n+2} + O_2 + N_2$ $= C_nH_{2n+2} + NO + NO$	-43	$k_7^* A_1/p^2$	0	50			
8	$O_2 + N_2 = NO + NO$	-43	$1.7E17$	-0.5	136	$4.1E15$	-0.5	93.3
9	$C_nH_{2n+2} + C_nH_{2n+2}$ $= 2nC + (2n+2)H_2$	$H_9$	$A_9^*/p$	0	41.5			
10	$C + C + O_2$ $= CO + CO$	394	$2.6E14/p$	0	0			

\*) **Примечание:** Скорость реакции 1 рассчитывается как  $W_1 = A_1 T^{m_1} \exp(-E_1/RT)[C_nH_{2n+2}][O_2]$ ; давление  $p$  – в атм, другие параметры приведены ниже:

$N$	$H_1$ , ккал/моль	$A_7$	$H_9$ , ккал/моль	$A_9$ , моль, л, с
6	535	8.7	-2090	$2.0E12$
7	614	10.6	-2430	$4.0E12$
14	1200	16.3	-4826	$2.55E14$

Оказалось, что механизм табл. 1 вполне применим для описания высокотемпературного окисления n-алканов при температурах выше 1200–1300 К. При температурах ниже 900 К кинетика окисления у n-алканов изменяется и начинает проявляться так называемая многостадийность, ускоряющая химический процесс. Чтобы описать низкотемпературное окисление, нужны более сложные кинетические механизмы.

В литературе имеются сообщения о полуэмпирических кинетических механизмах окисления для некоторых высших углеводов. Например, в [56]



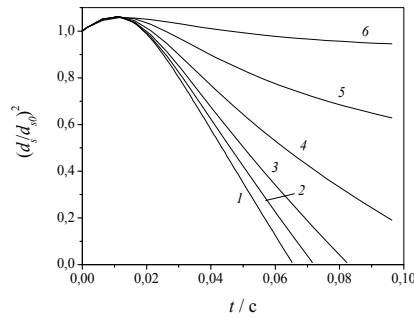
**Рис. 3:** Сравнение расчетной (кривая) и измеренной (точки) динамики регрессии поверхности капли *n*-тетрадекана при испарении в воздухе,  $d_{s0} = 70$  мкм,  $T_{l0} = 293.15$  К,  $T_{g0} = 573.15$  К [34, 35].

предложены механизмы окисления и горения *n*-гептана и изо-октана. Механизм [56] составлен из двух блоков реакций: детального механизма окисления углеводородов C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub> и эмпирических механизмов низкотемпературного окисления и редукции для *n*-гептана и изо-октана. В [39] разработан кинетический механизм низкотемпературного окисления *n*-тетрадекана, также составленный из двух блоков реакций. Первый блок – детальный механизм окисления углеводородов C<sub>1</sub>-C<sub>2</sub> – включает 119 обратимых реакций с участием 29 компонентов (ОН, Н, О, НО<sub>2</sub>, НСО, СН<sub>3</sub>, СН<sub>2</sub>, Н<sub>2</sub>, Н<sub>2</sub>О, Н<sub>2</sub>О<sub>2</sub>, СО, СО<sub>2</sub>, Н<sub>2</sub>СО, СН<sub>3</sub>О, СН<sub>3</sub>ОН, СН<sub>3</sub>СО, СН<sub>3</sub>СНО, С<sub>2</sub>Н<sub>5</sub>, СН, О<sub>2</sub>, СН<sub>4</sub>, С<sub>2</sub>Н<sub>2</sub>, С<sub>2</sub>Н<sub>6</sub>, С<sub>2</sub>Н<sub>4</sub>, С<sub>2</sub>Н<sub>3</sub>, С<sub>2</sub>Н<sub>3</sub>О<sub>2</sub>, СН<sub>3</sub>О<sub>2</sub>, СН<sub>3</sub>О<sub>2</sub>Н и С<sub>2</sub>Н). Этот блок реакций такой же, как и в [56]. Второй блок – эмпирический механизм низкотемпературного окисления и редукции для С<sub>14</sub>Н<sub>34</sub> – состоит из 15 реакций (включая 1 обратную реакцию) с участием 7 новых компонентов (С<sub>14</sub>Н<sub>30</sub>, С<sub>14</sub>Н<sub>29</sub>, С<sub>14</sub>Н<sub>29</sub>О<sub>2</sub>, С<sub>14</sub>Н<sub>29</sub>О<sub>2</sub>Н, С<sub>14</sub>Н<sub>29</sub>О, С<sub>6</sub>Н<sub>12</sub> и С<sub>6</sub>Н<sub>11</sub>).

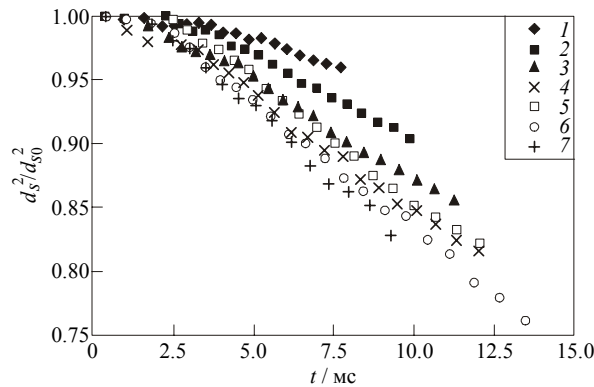
### 2.3 Испарение капель

Описанная в п. 2.1 математическая модель была использована в [34, 35] для сравнения расчетов с известными экспериментальными данными по испарению одиночных капель. На рис. 3 показано сравнение расчетных и измеренных кривых регрессии поверхности капли *n*-тетрадекана начального диаметра  $d_{s0} = 70$  мкм от времени при начальной температуре воздуха  $T_{g0} = 573$  К. В простейшей модели газификации капли, основанной на квазистационарном законе испарения (1), зависимость  $d^2(t)$ , как известно, линейная. В модели [34, 35] эта зависимость более сложная: вследствие термического расширения жидкости на стадии прогрева капли функция  $d^2(t)$  обнаруживает нелинейность.

Анализ испарения капель в плотных газовзвесах показывает [50], что время жизни капли в них значительно возрастает по сравнению с одиночной каплей, помещенной в неограниченную атмосферу. На рис. 4 показана расчетная динамика регрессии поверхности капель *n*-тетрадекана в виде



**Рис. 4:** Расчетная динамика регрессии поверхности капли *n*-тетрадекана при испарении в воздухе в зависимости от коэффициента избытка горючего  $\Phi$  (расстояния между каплями  $R_c/r_{s0}$ ) при  $d_{s0} = 70$  мкм,  $T_{l0} = 293.15$  К,  $T_{g0} = 573.15$  К и  $p = 0.1$  МПа [50]. 1 –  $\Phi = 0$  ( $R_c/r_{s0} \rightarrow \infty$ ), 2 – 0.6 (40.0), 3 – 1.2 (31.5), 4 – 2.4 (25), 5 – 4.75 (20), 6 – 9.5 (15.7).



**Рис. 5:** Измеренная динамика испарения монодисперсных капель этанола в линейной струйке, подаваемой вертикально вверх вдоль теплового пограничного слоя на вертикальной нагреваемой пластине [57]. Точки 1 – 7 соответствуют разному расстоянию между каплями  $R_c/r_{s0}$ : 1 –  $R_c/r_{s0} = 2.6$ , 2 – 5, 3 – 7.2, 4 – 9.4, 5 – 11.5, 6 – 13.6, и 7 – 15.8.

графиков  $(d_s/d_{s0})^2$  от времени при разных значениях коэффициента избытка горючего  $\Phi$  (или  $\eta$ ). Во всех расчетах принимали  $T_{l0} = 293.15$  К,  $T_{g0} = 573.15$  К и  $p = 0.1$  МПа. Из рассмотрения рис. 4 следует три важных вывода: во-первых, при учете коллективных эффектов капли испаряются всегда медленнее, чем в безграничной атмосфере; во-вторых, квазистационарный закон испарения (1), вообще говоря, не выполняется; и в-третьих, для каждой жидкости существует коэффициент  $\Phi_m$  (или  $\eta_m$ ), такой, что при  $\Phi > \Phi_m$  (или  $\eta > \eta_m$ ) капли испаряются лишь частично. Первый и второй выводы подтверждены экспериментально. Например, на рис. 5 приведены результаты измерений [56] динамики регрессии поверхности капель этанола в линейной монодисперсной струйке, подаваемой вертикально вверх вдоль вертикальной нагреваемой пластины. Видно, что уже на начальной стадии процесса при

уменьшении расстояния между каплями испарение замедляется, а зависимость  $d_s^2 / d_{s0}^2$  от времени все более отклоняется от линейной функции. Отметим, что в линейной струйке экранирующее влияние соседних капель меньше, чем на схемах рис. 1б и 1в.

## 2.4 Высокотемпературное самовоспламенение капель

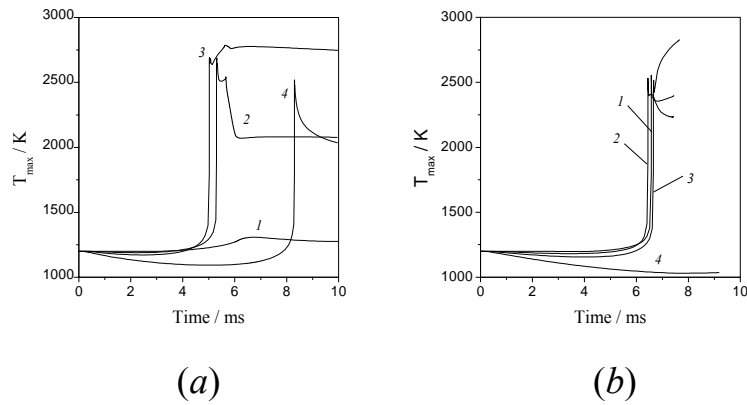
В работе [36, 37, 47] проведены расчеты высокотемпературного самовоспламенения капель н-гептана с использованием кинетического механизма табл. 1. Для одиночных капель в условиях микрогравитации получено удовлетворительное согласие расчетных и измеренных [58, 59] задержек самовоспламенения (см. табл. 2). Начальную температуру капель принимали равной 293 К. Температуру воздуха, окружающего каплю, принимали равномерно распределенной по пространству и равной  $T_{g0}$ . Размер расчетной области вокруг капли  $R$  выбирали достаточно большим по сравнению с начальным радиусом капли  $r_{s0}$ , чтобы в течение всего расчета параметры на внешней границе области оставались неизменными.

После некоторого периода времени, называемого задержкой самовоспламенения  $\tau_i$ , на некотором расстоянии от поверхности капли происходило самовоспламенение паров горючего. Задержку самовоспламенения  $\tau_i$  определяли как время от начала расчета до достижения скорости изменения максимальной температуры, равной  $T'_{\max} = 10^6$  К/с. Использовались и другие определения  $\tau_i$ , например, как время достижения  $T'_{\max} = 10^7$  К/с. Все использованные определения приводили к близким значениям  $\tau_i$ .

**Табл. 2:** Сравнение расчетных и измеренных задержек самовоспламенения для одиночных капель н-гептана при давлении 0,1 МПа в условиях микрогравитации [37, 47]

Начальный диаметр капли, мкм	Температура воздуха, К	$\tau_i$ , с	
		Измер.	Расч.
700	1000	0.30 [58]	0.19
1000	960	0.58 [59]	0.48

На рис. 6а и 6б приведены расчетные зависимости максимальной температуры в окрестности капель н-гептана (рис. 6а) и н-тетрадекана (рис. 6б) при  $T_{i0} = 293.15$  К,  $T_{g0} = 1200$  К и  $p = 0.1$  МПа. Одиночная капля н-гептана в этих условиях не самовоспламеняется, в то время как одиночная капля н-тетрадекана самовоспламеняется (см. кривые 1). Кривые 2–4 соответствуют  $\Phi = 0.5$ , 1.0 и 2.0 и показывают влияние струйных эффектов на самовоспламенение газозвесей капель двух топлив. Для газозвеси капель н-гептана наиболее короткая задержка самовоспламенения достигается в стехиометрической смеси с  $\Phi = 1.0$  (кривая 3 на рис. 6а). Газозвеси н-гептана,



**Рис. 6:** Расчетные зависимости максимальной температуры в окрестности каплей н-гептана (а) и н-тетрадекана (б) в условиях самовоспламенения. Начальные данные: диаметр капли  $d_{s0} = 50$  мкм, температура капли  $T_{l0} = 293.15$  К, температура газа  $T_{g0} = 1200$  К, давление  $p = 0.1$  МПа. 1 —  $\Phi = 0$  (одиночная капля), 2 — 0.5, 3 — 1.0, и 4 — 2.0.

обогащенные горючим ( $\Phi = 2.0$ ), самовоспламеняются только после полного испарения каплей. Для газозвесей каплей н-тетрадекана наиболее короткие задержки самовоспламенения наблюдаются в смесях, обедненных горючим (см. кривую 2 на рис. 6б,  $\Phi = 0.5$ ). Газозвеси н-тетрадекана, обогащенные горючим ( $\Phi = 2.0$ ), не самовоспламеняются, по крайней мере, в течение 10 мс. Таким образом, самовоспламенение газозвесей очень чувствительно к плотности газозвеси и свойствам горючего.

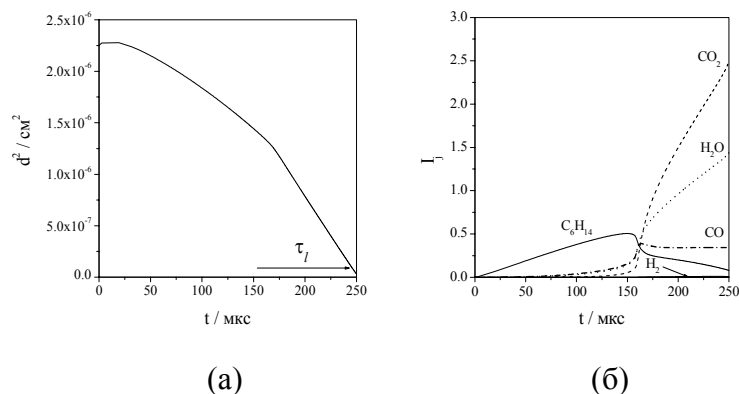
Следуя [37, 47], введем понятие приведенного содержания  $j$ -го компонента  $I_j(t)$  как отношение суммарной массы этого компонента в газовой фазе в момент времени  $t$  к начальной массе капли  $M_0 = (4/3)\pi r_{s0}^3 \rho_{l0}$ , т.е.

$$I_j(t) = M_0^{-1} \int_{r(t)}^R 4\pi \xi^2 Y_j(\xi, t) d\xi \quad (8)$$

Как и раньше, для паров горючего будем использовать индекс  $f$ . При этом, чтобы различать горючее, находящееся в начальный момент времени в жидкой и в паровой фазе, будем использовать индексы  $fd$  и  $fg$ , соответственно. Таким образом,

$$I_f(t) = I_{fd}(t) + I_{fg}(t)$$

Первое слагаемое в правой части описывает ту часть  $I_f$ , которая связана с горючим, первоначально находящимся в капле. Второе слагаемое описывает ту часть  $I_f$ , которая связана с горючим, первоначально находящимся в паровой фазе, например, вследствие предварительного частичного испарения капли. По определению, степень предварительного испарения (СПИ) горючего – это  $I_{fg}(0)$ . С течением времени приведенное содержание горючего изменяется вследствие двух процессов: испарения капли и химических превращений. Когда горючее испаряется, но не сгорает, величина  $I_{fd}$  стремится к единице. Если в газовой фазе протекают реакции окисления горючего, то по ходу реакции пары



**Рис. 7.** Расчетные зависимости квадрата диаметра капли н-гексана (а) и массового содержания различных продуктов реакции в газовой фазе (б) от времени;  $\tau_l$  – время жизни капли;  $d_{s0} = 15$  мкм,  $T_{g0} = 1500$  К и  $p_0 = 3$  МПа [36, 37].

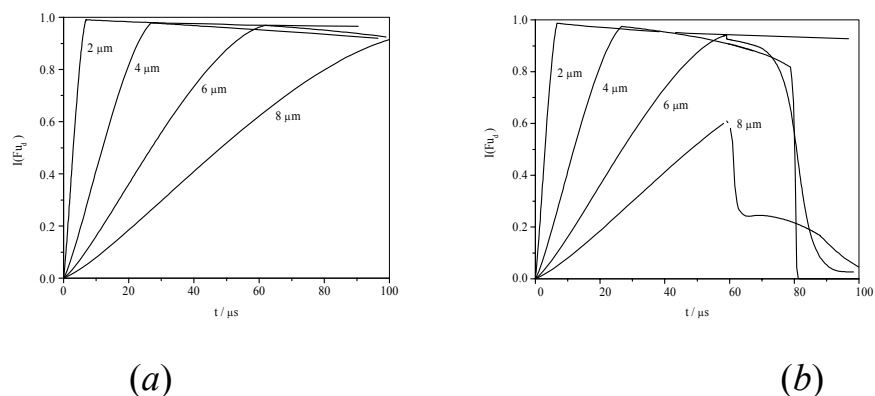
горючего расходятся, и значение  $I_f$  в конечном счете уменьшается (в случае одиночной капли  $I_f$  стремится к нулю).

На рис. 7а и 7б представлен пример временных зависимостей квадрата диаметра капли  $d^2(t)$  и приведенного содержания различных компонентов в газовой фазе при самовоспламенении одиночной капли н-гексана. По окончании периода индукции ( $\tau_i = 160$  мкс) на кривой  $d^2(t)$  наблюдается излом и зависимость становится линейной с феноменологической константой горения капли, равной  $K = 0.015$  см<sup>2</sup>/с. Время жизни капли на рис. 7а составило около 250 мкс.

На рис. 7б показаны зависимости  $I_f(t)$  для разных компонентов: горючего ( $C_6H_{14}$ ),  $CO$ ,  $H_2$ ,  $CO_2$  и  $H_2O$  при  $I_{fg}(0) = 0$ . Видно, что в газовой фазе в течение периода индукции накапливаются пары горючего (кривая  $C_6H_{14}$ ). После самовоспламенения часть паров горючего быстро сгорает, а затем процесс расходования горючего стабилизируется и протекает с почти постоянной скоростью. Эта стадия процесса связана с диффузионно-лимитированным горением капли. Двуокись углерода и вода с течением времени накапливаются, а суммарные выходы прочих продуктов ( $CO$  и  $H_2$ ) незначительны.

На рис. 8а представлена расчетная зависимость приведенного содержания паров горючего  $I_{fd}$  от времени (при  $I_{fg} = 0$ ) в стехиометрической ( $\Phi = 1,0$ ) воздушной газовзвеси мелких капель н-гептана начального диаметра 2, 4, 6 и 8 мкм. Капли диаметром 2 мкм быстро испаряются ( $\tau_l = 5,8$  мкс), но в дальнейшем за время 100 мкс количество паров горючего в газовой фазе уменьшается незначительно, т.е. реакция практически не идет. Анализ показывает, что вследствие испарения горючего температура вокруг капли внутри расчетной области радиусом  $R_{st}$  снизилась почти на 300 К – до значения меньше 1225 К. При такой низкой температуре реакция не успевает развиваться, например, за время 100 мкс. Из рис. 8а также видно, что все закономерности, обнаруженные для капель диаметром 2 мкм, справедливы и для капель диаметром 4, 6 и 8 мкм.

Время жизни капель значительно уменьшается, если в газовой фазе уже в начале процесса присутствуют пары горючего, например, вследствие частич



**Рис. 8.** Расчетные зависимости приведенного содержания горючего  $I_{fd}$  от времени для мелких капель н-гептана начального диаметра 2, 4, 6 и 8 мкм при  $T_{g0} = 1500$  К и  $p_0 = 3$  МПа. (а)  $I_{fg} = 0$ , (б) 0,25 [36,37].

ного предварительного испарения капель. В этом случае  $I_{fg} \neq 0$ . На рис. 8б представлены расчетные зависимости приведенного содержания горючего  $I_{fd}$  от времени для стехиометрической ( $\Phi = 1,0$ ) воздушной газозвеси мелких капель н-гептана начального диаметра 2, 4, 6 и 8 мкм при  $I_{fg}(0) = 0,25$ . Такое значение  $I_{fg}(0)$  соответствует случаю, когда в начальный момент времени 25% всей массы горючего находится в паровой фазе. При этом сохранено полное стехиометрическое соотношение воздуха и горючего.

Из сравнения рис. 8б с рис. 8а видно, что при  $I_{fg} \neq 0$  в поведении кривых  $I_{fd}(t)$  обнаруживается новый признак: начиная с некоторого момента времени значение приведенного содержания горючего резко уменьшается, т.е. происходит самовоспламенение. Например, при  $I_{fg}(0) = 0,25$  (рис. 8б) капли диаметром 6 мкм самовоспламеняются в момент времени  $t = 60$  мкс вследствие вспышки первоначально газообразного горючего. После вспышки скорость выгорания капли замедляется, что связано с переходом к диффузионно-лимитированному процессу. К моменту времени  $t = 100$  мкс остается несгоревшим приблизительно 2,5% горючего. Вспышка предиспаренного горючего в стехиометрической капельной смеси с частицами диаметром 8 мкм происходит приблизительно в то же время – через 60 мкс. Однако за 100 мкс не успевает сгореть 4,6% горючего. Самовоспламенение капель диаметром 4 мкм происходит с задержкой примерно 80 мкс (сказывается сильное первоначальное охлаждение среды вследствие испарения), но к моменту времени 100 мкс горючее полностью сгорает. Капли диаметром 2 мкм самовоспламеняются за время, превосходящее 100 мкс. С увеличением СПИ горючего картина несколько изменяется. При  $I_{fg}(0) = 0,5$  капли диаметром 2, 4 и 6 мкм полностью сгорают за время 100 мкс, тогда как капли диаметром 8 мкм сгорают не полностью: остается непрореагировавшим примерно 2,5% горючего. Даже при  $I_{fg}(0) = 0,75$  капли диаметром 8 мкм за время 100 мкс сгорают не полностью (остается примерно 1,5% непрореагировавшего горючего). Интересно, что

более крупные капли (диаметром 6 и 8 мкм) обнаруживают режимы горения с несколькими вспышками самовоспламенения [37].

## 2.5 Низкотемпературное самовоспламенение капель

В расчетах низкотемпературного самовоспламенения капель использовали полуэмпирический кинетический механизм окисления н-тетрадекана [39]. Расчеты проводили для стехиометрической газовзвеси, т.е., радиус расчетной области  $R$  вокруг капли принимали равным размеру сферической элементарной ячейки в монодисперсной газовзвеси стехиометрического начального состава  $R = R_{st}$ .

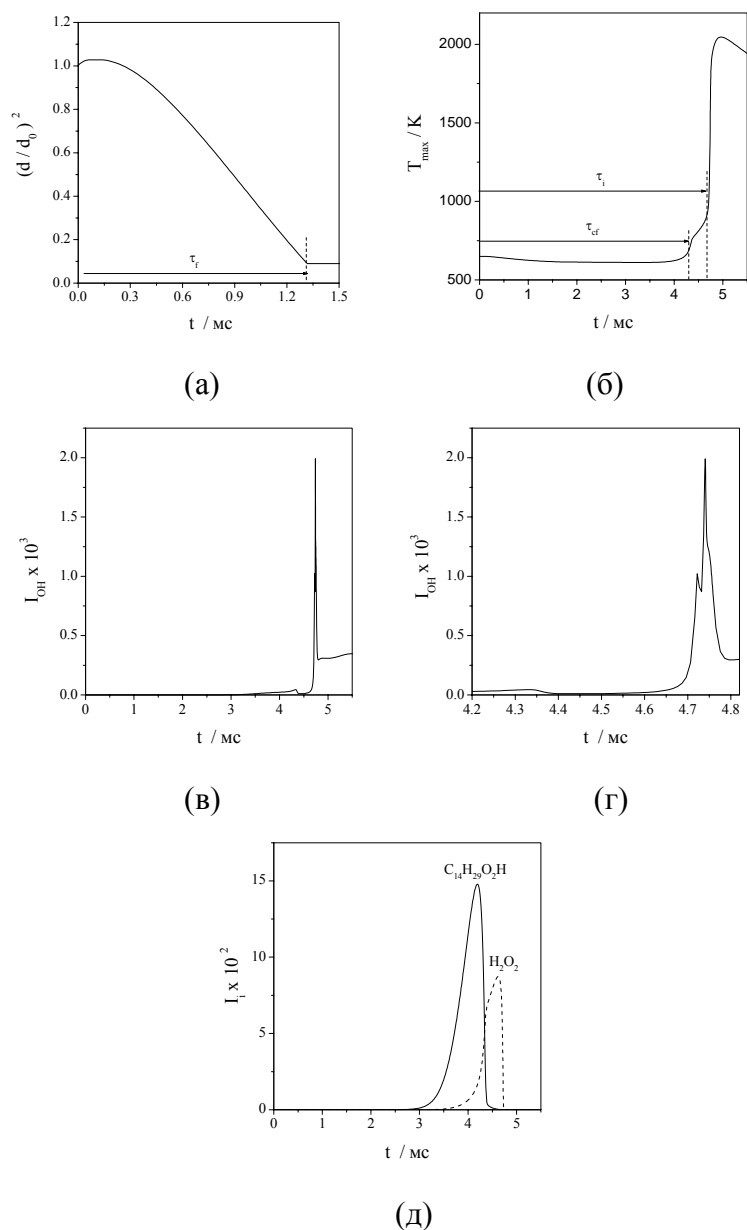
На рис. 9а-д показаны примеры расчетных зависимостей от времени квадрата относительного диаметра капли  $(d_s/d_{s0})^2$  (а), максимальной температуры газа  $T_{max}$  (б), приведенного содержания гидроксила ОН (в и г), а также приведенного содержания алкилгидроперекиси  $C_{14}H_{29}O_2H$  и  $H_2O_2$  (д) при самовоспламенении капли н-тетрадекана с  $d_{s0} = 20$  мкм ( $p = 2,5$  МПа и  $T_{g0} = 650$  К).

Время жизни капли  $\tau_l$  определяли, исходя из условия уменьшения ее массы в 30 раз. Стрелкой на рис. 9а показано расчетное время жизни капли с  $d_{s0} = 20$  мкм ( $\tau_l \approx 1,32$  мс). Из рис. 9б видно, что в начале процесса максимальная температура газа вокруг капли (на внешней границе расчетной области) снижается вследствие испарения и прогрева жидкости. К моменту времени около 1,7 мс  $T_{max}$  уменьшается приблизительно на 40 К и дальнейшее снижение максимальной температуры газа прекращается вследствие «исчезновения» капли и нарастающего тепловыделения в результате химических реакций. Самовоспламенение происходит в две стадии: сначала появляется холодное пламя с задержкой  $\tau_{cf} = 4,33$  мс (показана стрелкой на рис. 9б) и подъемом температуры приблизительно на 200 К, а затем происходит горячий взрыв с суммарной задержкой  $\tau_i = 4,71$  мс (показана стрелкой на рис. 9б) и подъемом температуры приблизительно до 2200 К.

Из сравнения рис. 9а и 9б видно, что для капли с  $d_{s0} = 20$  мкм  $\tau_{cf} > \tau_l$ . Это означает, что мелкие капли успевают испариться до возникновения холодного пламени, и процесс холоднопламенного окисления происходит в относительно большом газовом объеме. Такие условия близки к условиям протекания холоднопламенного окисления в гомогенной смеси, где оно было открыто и многократно наблюдалось.

С одной стороны, из сравнения рис. 9б с рис. 9в или 9г (то же, что и на рис. 9в, но при большем временном разрешении) следует, что повышение температуры в холодном пламени совпадает с нарастанием концентрации гидроксила. С другой стороны, из сравнения рис. 9в или 9г с рис. 9д следует, что нарастание концентрации гидроксила совпадает с распадом алкилгидроперекиси  $C_{14}H_{29}O_2H$ . В гомогенных смесях последнему процессу обязано появление холодного пламени. Отметим, что на рис. 9г по окончании суммарной задержки самовоспламенения ( $\tau_i = 4,71$  мс) отчетливо виден локальный максимум гидроксила, совпадающий с распадом перекиси водорода

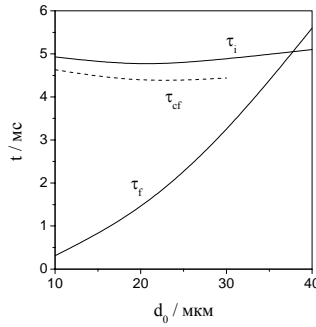




**Рис. 9.** Расчетные зависимости от времени квадрата относительного диаметра капли  $(d_s/d_{s0})^2$  (а), максимальной температуры газа  $T_{\max}$  (б), приведенного содержания гидроксила ОН (в и г), а также приведенного содержания алкилгидроперекиси  $C_{14}H_{29}O_2H$  и  $H_2O_2$  (д) при самовоспламенении капли н-тетрадекана с  $d_{s0} = 20$  мкм ( $p_0 = 2,5$  МПа и  $T_{g0} = 650$  К) [39].

$H_2O_2$  на рис. 9д (реакция  $H_2O_2 = OH + OH$  в блоке детального механизма окисления углеводородов  $C_1-C_2$ ). В гомогенных смесях этому процессу обязательно появление голубого пламени. На температурной кривой рис. 9б появление голубого пламени не идентифицируется в связи с тем, что оно практически совпадает с появлением горячего пламени.

На рис. 10 представлены расчетные зависимости суммарной задержки самовоспламенения  $\tau_i$  и времени задержки холодного пламени  $\tau_{cf}$  от начального диаметра каплей  $d_{s0}$  при  $p = 2,5$  МПа и  $T_{g0} = 650$  К. Кроме кривых  $\tau_i(d_{s0})$  и  $\tau_{cf}(d_{s0})$ , на рис. 10 приведена расчетная зависимость времени жизни капли от

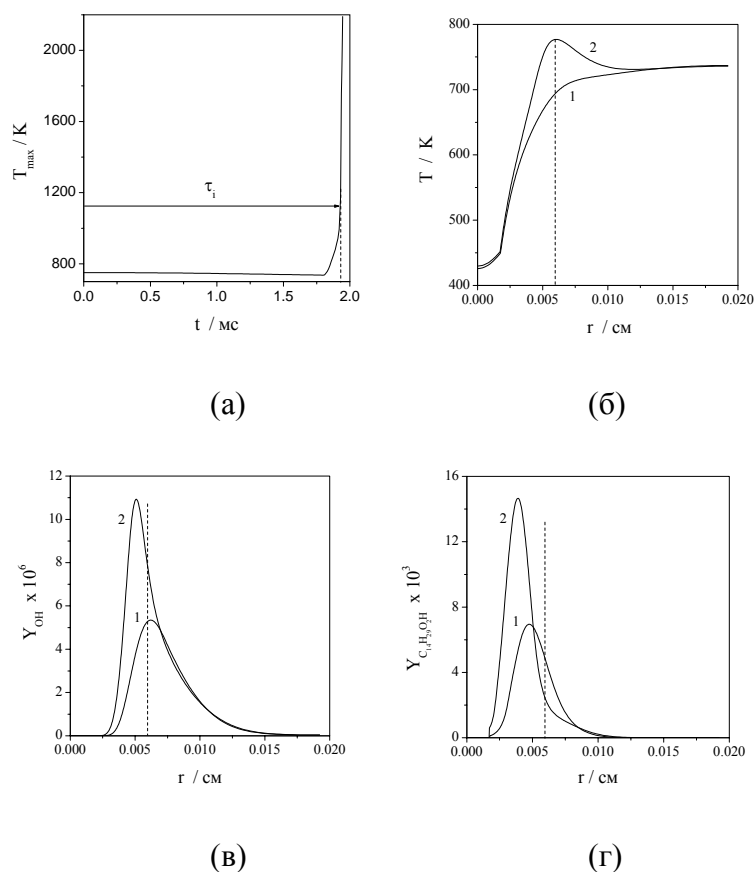


**Рис. 10.** Расчетные зависимости суммарной задержки самовоспламенения  $\tau_i$ , времени задержки холодного пламени  $\tau_{cf}$  и времени жизни капли  $\tau_l$  от начального диаметра каплей  $d_{s0}$  при  $p_0 = 2,5$  МПа и  $T_{g0} = 650$  К [39].

начального диаметра  $\tau_l(d_{s0})$ . Видно, что  $\tau_{cf} > \tau_l$  лишь для каплей с  $d_{s0} < 35$  мкм. При  $d_{s0} < 35$  мкм суммарная задержка самовоспламенения слабо зависит от диаметра капли, и главной составляющей  $\tau_i$  является время задержки холодного пламени  $\tau_{cf}$ . Отметим, что определение  $\tau_{cf}$  по температурной кривой для каплей с  $d_{s0} > 30$  мкм становится затруднительным, так как температурная кривая становится похожей на кривую одностадийного самовоспламенения.

Рассмотрим теперь случай, когда  $\tau_{cf} > \tau_l$ , на примере самовоспламенения капли н-тетрадекана с  $d_{s0} = 40$  мкм ( $p = 2,5$  МПа и  $T_{g0} = 750$  К). Из рис. 11а следует, что суммарная задержка самовоспламенения в этом случае  $\tau_i = 1,94$  мс (показана стрелкой). К моменту самовоспламенения площадь поверхности капли уменьшается на 20% и испаряется около 30% массы капли. По температурной кривой  $T_{max}(t)$  холодное пламя явно не обнаруживается. Оно не обнаруживается и по кривым приведенного содержания гидроксила и алкилгидроперекиси. Это связано с существенной неоднородностью температурного и концентрационных полей вокруг капли. Тем не менее, при тщательном анализе этих полей обнаруживается, что локально все закономерности, характерные для развития холодного пламени в гомогенных смесях, остаются в силе.

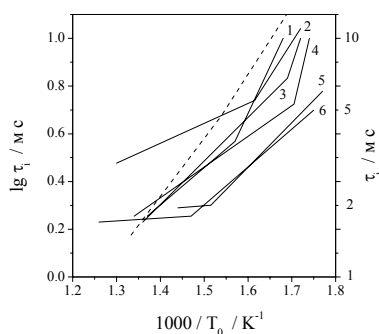
На рис. 11б–5г показаны мгновенные радиальные распределения температуры (б), а также массовых концентраций гидроксила  $Y_{OH}$  (в) и алкилгидроперекиси  $Y_{C_{14}H_{29}O_2H}$  (г) в моменты времени  $t = 1,75$  (кривые 1) и 1,85 мс (кривые 2). Из рис. 10б следует, что перед самовоспламенением в периоде задержки между  $t = 1,75$  и 1,85 мс на расстоянии  $r = 0,006$  см от центра капли (отмечено штриховой линией) происходит локальный подъем температуры. Этот подъем температуры соответствует ускорению реакции, обязанному локальному повышению концентрации гидроксила на таком же расстоянии от центра капли (рис. 11в), и, в свою очередь, вызван локальным распадом алкилгидроперекиси (рис. 11г). Специальный расчетный эксперимент показал, что, если с момента времени  $t = 1,75$  мс активные продукты распада алкилгидроперекиси в реакции  $C_{14}H_{29}O + OH$  заменить на гораздо более



**Рис. 11.** Расчетная зависимость максимальной температуры газа  $T_{\max}$  от времени (а) и мгновенные радиальные распределения температуры (б), массовых концентраций гидроксила  $Y_{\text{OH}}$  (в) и алкилгидроперекиси  $Y_{\text{C}_{14}\text{H}_{29}\text{O}_2\text{H}}$  (г) в моменты времени  $t = 1,75$  (кривые 1) и  $1,85$  мс (кривые 2) при самовоспламенении капли н-тетрадекана с  $d_{s0} = 40$  мкм ( $p_0 = 2,5$  МПа и  $T_{g0} = 750$  К) [39].

инертные начальные реагенты  $\text{C}_{14}\text{H}_{30} + \text{O}_2$ , реакция резко замедляется, и вместо разогрева происходит охлаждение от испарения капли. Таким образом, все происходит так же, как и в гомогенной смеси, но локально. Именно поэтому по осредненным характеристикам холоднотемная стадия явно не наблюдается.

Представляет интерес сравнить полученные расчетные результаты с известными экспериментальными данными. Для этого выбрали эксперименты, проведенные на одноцилиндровой установке одиночных циклов, воспроизводящей дизельный процесс [60]. В экспериментах [60] капли получались при впрыскивании топлива через форсунку. Из опытов известно, что распад струи происходит за время, меньшее 1 мс. При этом образуются капли разного диаметра – приблизительно от 10 до 40 мкм – и в области распадающейся топливной струи реализуется весь спектр составов по коэффициенту избытка топлива. Кроме того процессы межфазного тепло- и массообмена могут ускоряться вследствие турбулентности жидкой струи и турбулентных пульсаций скорости воздуха в камере. Несмотря на то, что используемая модель не описывает процесс проникновения струи топлива в сжатый и



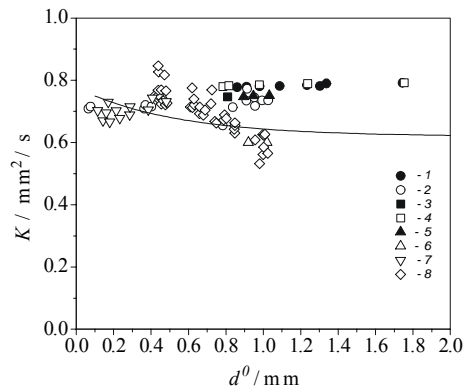
**Рис. 12.** Сравнение расчетной суммарной задержки самовоспламенения для капли н-тетрадекана диаметром  $d_{s0} = 20$  мкм (штриховая кривая) с измеренными значениями задержки горячего взрыва [60] (сплошные кривые) для капель тяжелых топлив с разным (ЦЧ) при использовании двух разных распылителей и  $p = 2,5$  МПа [39]. 1 – ЦЧ = 49 (распылитель №1); 2 – 50(1); 3 – 49(2); 4 – 50(2); 5 – 70(2) и 6 – 62(2).

нагретый воздух и распад струи, все же можно надеяться, что расчеты правильно отражают наблюдаемые тенденции.

На рис. 12 приведено сравнение расчетной суммарной задержки самовоспламенения для капли н-тетрадекана диаметром  $d_{s0} = 20$  мкм (штриховая кривая) с измеренными значениями задержки горячего взрыва [60] (сплошные кривые) для капель тяжелых топлив с разным Цетановым Числом (ЦЧ) при использовании двух разных распылителей и  $p = 2,5$  МПа. Видно, что модель удовлетворительно (по порядку величины) предсказывает суммарную задержку самовоспламенения.

Таким образом, использование кинетического механизма низкотемпературного окисления н-тетрадекана позволило исследовать некоторые качественные и количественные особенности самовоспламенения капель тяжелого углеводородного топлива в условиях дизеля. Оказалось, что самовоспламенение капель, вообще говоря, происходит так же, как и в гомогенной смеси, в две стадии: сначала появляется холодное пламя, а затем происходит горячий взрыв. В некоторых случаях удается идентифицировать и стадию голубого пламени. Все эти особенности согласуются с опытными наблюдениями холодных пламен в дизеле, проведенными с помощью записей давления, свечения и кинорегистраций [60].

При моделировании рабочего процесса в дизеле следует учитывать указанные особенности самовоспламенения капель. Однако использование «сеточных» численных методов для решения многомерных газодинамических задач может привести к значительному искажению характера самовоспламенения. В таких методах испаренное горючее равномерно смешивается с газом, заполняющим расчетную ячейку, причем размер ячейки, как правило, на несколько порядков превышает размеры капель. В этом случае самовоспламенение всегда происходит по всему объему расчетной ячейки независимо от степени испарения капель. Другими словами, локальное самовоспламенение – явление, присущее относительно крупным каплям, выпадает из рассмотрения.



**Рис. 13:** Сравнение расчетной (кривая) и измеренной (точки) зависимостей константы горения  $K$  для одиночных капель  $n$ -гептана от начального диаметра. Экспериментальные данные: 1 — [65], 2 — [66], 3 — [67], 4, 5 — [68], 6 — [69], 7 — [70], 8 — [71]

Альтернативой «сеточным» методам может служить «бессеточный» метод [61-64], в котором учитывается влияние локальных распределений параметров турбулентного течения на протекание химических превращений.

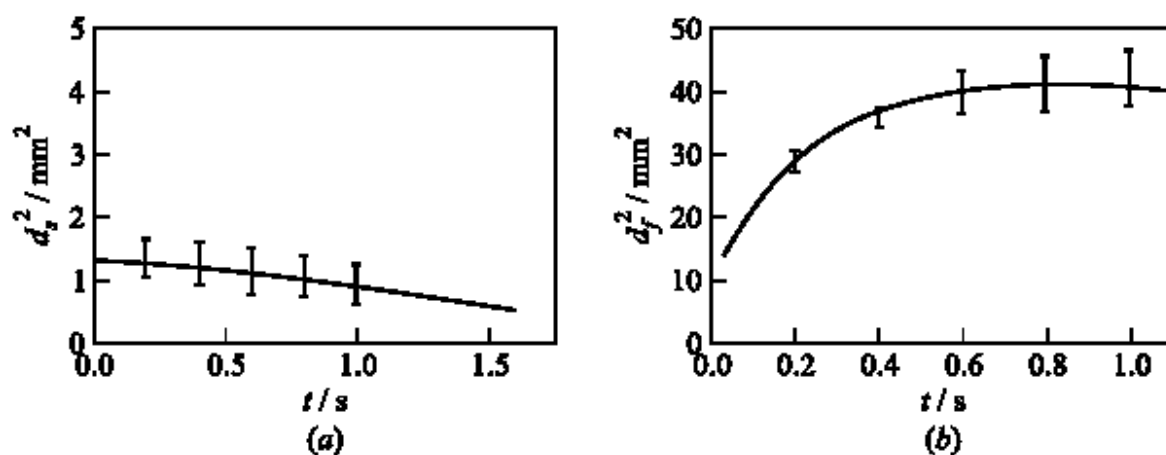
## 2.6 Горение капель

Математическую модель и механизм горения, приведенный в табл. 1, использовали для расчетов горения одиночных капель и капель в газозвеси [36]. Кривая на рис. 13 соответствует расчетным значениям константы горения  $K$  для одиночных капель  $n$ -гептана в зависимости от начального диаметра частицы. Константу горения в расчетах определяли по наклону кривой  $d^2(t)$  на линейном участке, соответствующем квазистационарной газификации капли, т.е.,

$$K = - \frac{d(d_s^2)}{dt}$$

Точки на рис. 13 представляют экспериментальные данные [65–71], полученные как в условиях микрогравитации, так и в условиях нормальной гравитации. В некоторых экспериментальных работах (например, [70]) константу горения определяли как  $K = (d_{s0})^2 / \tau_l$ . Из рис. 13 видно, что модель достаточно хорошо описывает экспериментальные данные для мелких капель. Для крупных капель модель предсказывает несколько меньшее значение константы горения. Отметим, что при горении крупных капель важную роль начинает играть конвективный тепло- и массоперенос, который в математической модели не учитывается.

Для капель  $n$ -декана модель удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными [72] по изменению диаметра капли (рис. 14а) и диаметра фронта пламени (рис. 14б) от времени в условиях слабой гравитации.

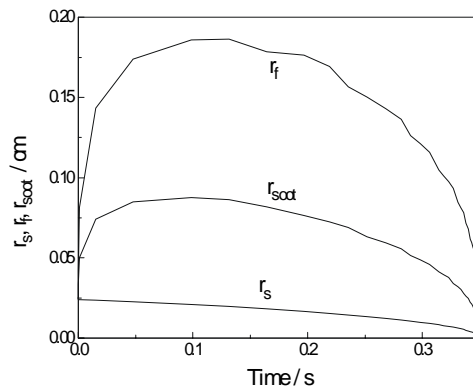


**Рис. 14:** Сравнение расчетных (кривые) и измеренных (вертикальные отрезки) зависимостей диаметра капли (а) и диаметра фронта пламени (б) для горящей капли *n*-декана в условиях слабой гравитации. Экспериментальные данные [72].

В приведенных примерах максимальная температура, достигаемая в окрестности капли, за все время ее жизни изменяется в пределах от 1800 до 2200 К, причем более высокие температуры достигаются при горении более крупных капель.

В расчетах горения одиночной капли обнаружено несколько важных особенностей. Первая – существование сажевой оболочки в виде шарового слоя, расположенного между поверхностью капли и пламенем. Вторая особенность относится к динамике горения. После зажигания капли пламя сначала удаляется от ее поверхности, а на заключительной стадии горения движение пламени меняется на обратное: пламя «схлопывается» по направлению к поверхности капли. Обе отмеченные особенности наблюдались в экспериментах [69, 72-75] и обсуждались в недавнем обзоре [10].

На рис. 15 показаны расчетные зависимости текущего радиуса капли  $r_s$ , радиуса пламени  $r_f$  (определяемого как радиальная координата максимума температуры) и радиуса сажевой оболочки  $r_{\text{soot}}$  (определяемого как радиальная координата максимума концентрации сажи). Можно выделить три характерных стадии в процессе горения капли: (1) зажигание, (2) удаление пламени от поверхности капли и (3) «схлопывание» пламени с последующим его потуханием. В процессе горения вокруг капли образуется сажевая оболочка. Массовая доля сажи в этой оболочке остается практически постоянной в течение всего процесса горения за исключением последней стадии. Когда пламя начинает схлопываться, оно приближается к сажевой оболочке, приводя к окислению сажи до СО и СО<sub>2</sub>. До момента потухания в пламени может сгореть значительная часть сажи. Понимание механизма сажеобразования при горении капель позволяет предложить эффективные методы снижения ее эмиссии, например, путем использования вводно-топливных и других эмульсий, а также многокомпонентных топлив [52]. Более подробно эти вопросы обсуждаются ниже.

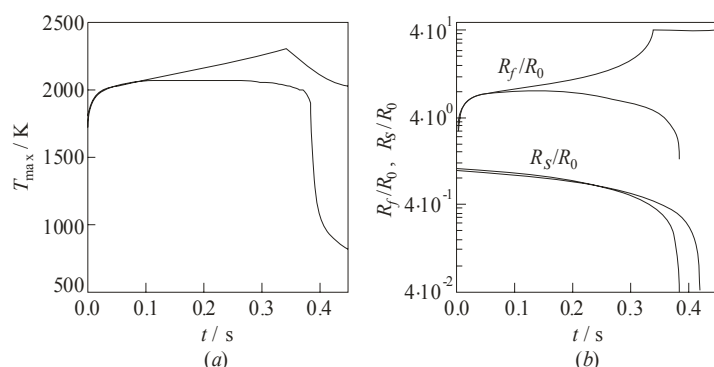


**Рис. 15:** Расчетные зависимости радиуса капли,  $r_s$ , радиуса пламени,  $r_f$ , и радиуса сажевой оболочки,  $r_{soot}$ , от времени при зажигании и горении капли н-гептана начальным диаметром 0.48 мм в воздухе при давлении 0,1 МПа и температуре 300 К.

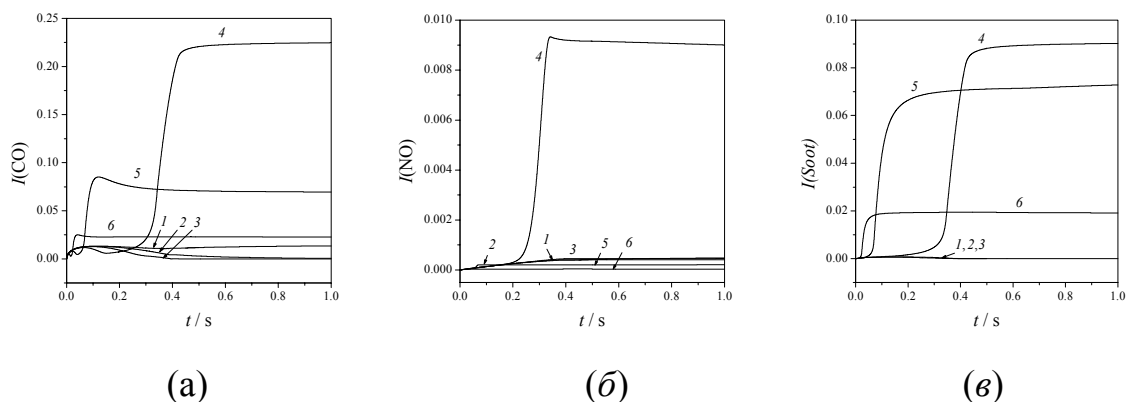
Подобно испарению объемное горение капель в плотной газозвеси очень чувствительно к плотности среды. Время жизни горящих капель увеличивается с ростом коэффициента избытка горючего  $\Phi$ . Более того, поведение температуры и фронта пламени в пространстве между каплями сильно отличается от случая горения одиночной капли при прочих равных условиях. На рис. 16 приведены расчетные временные зависимости температуры пламени (максимальной температуры)  $T_{max}$  и приведенных радиусов пламени и капли для одиночной частицы (сплошные кривые) и для частицы в газозвеси (штриховые кривые) при одинаковом начальном размере  $r_{s0}$ .

Плотность газозвеси в данном случае характеризуется коэффициентом избытка горючего  $\Phi = 1,1$ . Температура пламени для капли в газозвеси оказывается значительно большей, чем для одиночной капли, особенно в конце горения. В случае одиночной капли пламя стабилизируется на расстоянии около  $8r_{s0}$  от ее поверхности, тогда в случае капли в газозвеси пламя распространяется до границ элементарной ячейки, потребляя весь имеющийся в наличии окислитель. В газозвесах, обогащенных горючим, выгорает только часть горючего, а оставшееся горючее испаряется и аккумулируется в пространстве между каплями вместе с продуктами горения. Поскольку температура в пространстве между каплями может достигать высоких значений, пар горючего может частично разлагаться с выделением более реакционноспособных компонентов.

Показатели эмиссии вредных веществ также зависят от плотности газозвеси. На рис. 17 приведены расчетные показатели эмиссии CO (а), NO (б), и сажи (в). Показатели эмиссии определены по уравнению (8), в котором концентрацию  $Y$  рассматривали как концентрацию соответствующего химического компонента в газовой фазе. Из рис. 17 следует, что околостехиометрические газозвеси горят с наибольшим выделением вредных веществ. Как и ожидалось, при горении газозвесей, обогащенных горючим, достигаются более высокие показатели эмиссии CO и сажи и меньшие показатели эмиссии NO, чем при горении газозвесей, обедненных горючим.



**Рис. 16:** Сравнение температур пламени (а) и приведенных радиусов пламени и капли  $r/r_{s0}$  и  $r_f/r_{s0}$  для одиночной частицы (сплошные кривые) и частицы в газозвеси (штриховые кривые,  $\Phi = 1,1$ ) [36]. Горючее: н-гептан, окислитель: воздух, начальные давление и температура: 0,1 МПа и 300 К;  $r_{s0} = 0,25$  мм.



**Рис. 17:** Расчетные временные зависимости эмиссионных показателей CO (а), NO (б) и сажи (в) для горящих капель в газозвеси при разных  $\Phi$  [36]. Начальные параметры:  $d_{s0} = 500$  мкм,  $T_{i0} = T_{g0} = 293.15$  К и  $p = 0.1$  МПа. 1 —  $\Phi = 0$  (одиночная капля), 2 — 0.32, 3 — 0.55, 4 — 1.1, 5 — 5.3, and 6 —  $\Phi = 18.5$

### 3. Самовоспламенение и горение капель водно-топливных эмульсий

Водно-топливную эмульсию получают в результате механического смешения воды и топлива с добавлением поверхностно-активных веществ, обеспечивающих стабильную структуру из микрокапель воды, взвешенных в топливе. Зажигание и горение капель водно-топливных эмульсий изучалось экспериментально [14-24]. Сколько-нибудь значительное химическое влияние воды на процесс горения не обнаружено, хотя известна высокая эффективность молекул воды как агента при тройных столкновениях. Кроме того, известны и каталитические свойства воды при горении в окислительной атмосфере в отсутствие водорода, например, при горении CO в кислороде. По-видимому, отсутствие химического влияния воды связано с тем, что при окислении углеводородов вода — один из основных продуктов горения и не является недостающим компонентом.

В настоящее время считается общепринятым, что влияние воды на процесс горения и образование вредных веществ связано, главным образом, с



понижением температуры при увеличении содержания воды в реагирующей смеси. В частности, именно с этим связано понижение выхода NO при добавлении воды.

Известно, что при определенных условиях горение капли водно-топливной эмульсии сопровождается микровзрывом. Микровзрыв капли может возникнуть, когда температура зародышеобразования паровых пузырьков в эмульсии ниже, чем температура кипения горючего. Согласно [21], между зажиганием капли эмульсии и ее микровзрывом всегда существует некоторая временная задержка. Эта задержка связана с необходимостью перегрева внутренних областей капли для начала зародышеобразования паровой фазы. Степень перегрева, требуемая для вскипания воды внутри капли эмульсии, зависит от теплофизических свойств горючего. Поэтому для капель эмульсий с разным содержанием воды наблюдаются разные времена задержки микровзрыва. Экспериментально показано, что содержание воды в эмульсии слабо влияет на изменение массы капли в период от ее зажигания до микровзрыва.

В [20] проведены эксперименты по горению одиночных капель дизельного топлива и его водных эмульсий. Определяющие параметры в этих экспериментах изменялись в широких пределах: объемная доля воды (0-0.3), концентрация поверхностно-активного вещества (ПАВ) (0-0.05), начальная температура жидкости (298-380 К), температура газа в камере сгорания (400-950 К), давление в камере сгорания (0.44-3.92 МПа), концентрация кислорода в камере сгорания (0.16-0.75). Начальный диаметр капель эмульсии был равен 1600 мкм. Средний диаметр капель воды в эмульсии 2 мкм. Экспериментальные результаты показывают, что капли эмульсии горят с микровзрывом. Степень фрагментации капель эмульсии возрастает с увеличением содержания воды, концентрации ПАВ, начальной температуры жидкости, концентрации кислорода и температуры в камере сгорания, но слабо зависит от давления. При низких содержаниях воды наблюдалась лишь слабая тенденция к микровзрыву. Капли эмульсии воспламенялись труднее, чем капли чистого горючего. Для них наблюдалось более короткое пламя в следе, чем для капель чистого топлива. Кроме того, их пламя имело светло-желтый цвет, неровные края, обнаруживало внезапные изменения ширины и длины и спорадические расщепления на несколько пламен.

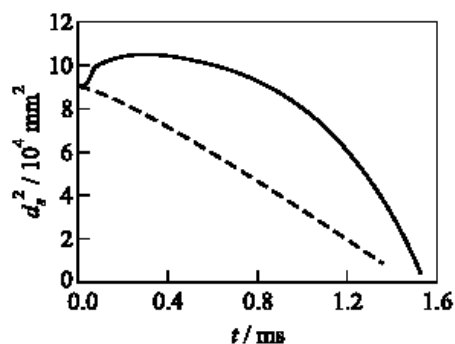
В отличие от теории горения капли чистого топлива, полная теория горения капли водно-топливной эмульсии в настоящее время отсутствует. Простая квазистационарная математическая модель предложена в [25], которая не учитывает нагрев капли и накопление паров горючего в ее окрестности, а также газофазную кинетику химических превращений. Тем не менее, эта модель дает некоторые физические объяснения снижению выхода вредных веществ и микровзрыву при добавлении воды в углеводородное топливо. Математическая модель, описывающая рост парового пузырька, возникшего в результате гомогенного зародышеобразования внутри капли, предложена в [13]. В этой модели учтена неустойчивость границы раздела пар – жидкость.

В работах авторов [40, 51, 52] предложена достаточно полная математическая модель испарения, зажигания и горения капли водно-топливной эмульсии. Цель исследований, описанных в данном разделе – сравнить характеристики горения и эмиссии вредных веществ для одиночных капель чистого топлива и водно-топливных эмульсий.

В [40, 51, 52] рассматривали сферически симметричную задачу о нестационарном тепломассообмене между каплей водно-топливной эмульсии и воздухом и горении капли. Постановка задачи включает уравнения теплопроводности в капле и газе с учетом наличия в капле трех фаз (жидкого топлива, микрокапель воды и паровых пузырьков), переменных физических свойств, излучения, фазовых переходов и химических превращений, а также уравнения диффузии для компонентов в газовой фазе и уравнение неразрывности. Для описания химического превращения использовали кинетический механизм табл. 1.

Задачу решали для водных эмульсий *n*-тетрадекана для условий, реализующихся в современных дизелях (давление 5-10 МПа, температура до 2500 К). Водная эмульсия *n*-тетрадекана моделирует, например, поведение Аквазоля – заменителя дизельного топлива [52]. Главная отличительная черта испаряющейся капли водно-топливной эмульсии – существование достаточно длительного периода (до  $0.5\tau_l$ ) термического расширения, вызванного парообразованием воды внутри капли. Расчетные значения перегрева паровых пузырьков достигают 100-150 К. На рис. 18 показано сравнение кривых  $d^2(t)$  для двух капель одинакового начального размера (30 мкм): капли эмульсии (95%*n*-тетрадекана + 5% воды, сплошная кривая) и капли чистого *n*-тетрадекана (штриховая кривая) при одинаковых начальных условиях ( $T_{g0} = 1200$  К и  $p = 0,1$  МПа). Из рис. 18 видно, что для капли эмульсии квазистационарный закон горения  $d^2$  не выполняется. Приблизительно в течение половины времени жизни диаметр капли эмульсии оказывается больше, чем ее начальный размер. После максимума на кривой  $d^2(t)$  наблюдается быстрая стадия уменьшения поверхности капли, причем на этой стадии константа горения оказывается приблизительно в 2 раза больше, чем константа горения капли чистого топлива. В [40, 51, 52] эту стадию условно трактовали как стадию микровзрыва.

На рис. 19 проведено сравнение расчетных профилей температуры и массовых концентраций горючего, сажи, СО и NO для горящих капель чистого *n*-тетрадекана и водно-топливной эмульсии (90%*n*-тетрадекана + 10% воды) при одинаковых начальных условиях ( $d_0 = 30$  мкм,  $p = 0,1$  МПа,  $T_{g0} = 1200$  К). Кроме того, на рис. 20 показаны временные зависимости приведенных значений радиуса капли  $r_s/r_{s0}$ , радиуса пламени  $r_f/r_{s0}$  и радиуса сажевой оболочки  $r_{soot}/r_{s0}$  для капель чистого *n*-тетрадекана (штриховые кривые) и водно-топливной эмульсии *n*-тетрадекана (сплошные кривые) с добавлением 10% (рис. 20а) и 20% (рис. 20б) воды при тех же условиях, что и на рис. 19. При рассмотрении рис. 19 и 20, так же как и при анализе рис. 15, можно выделить

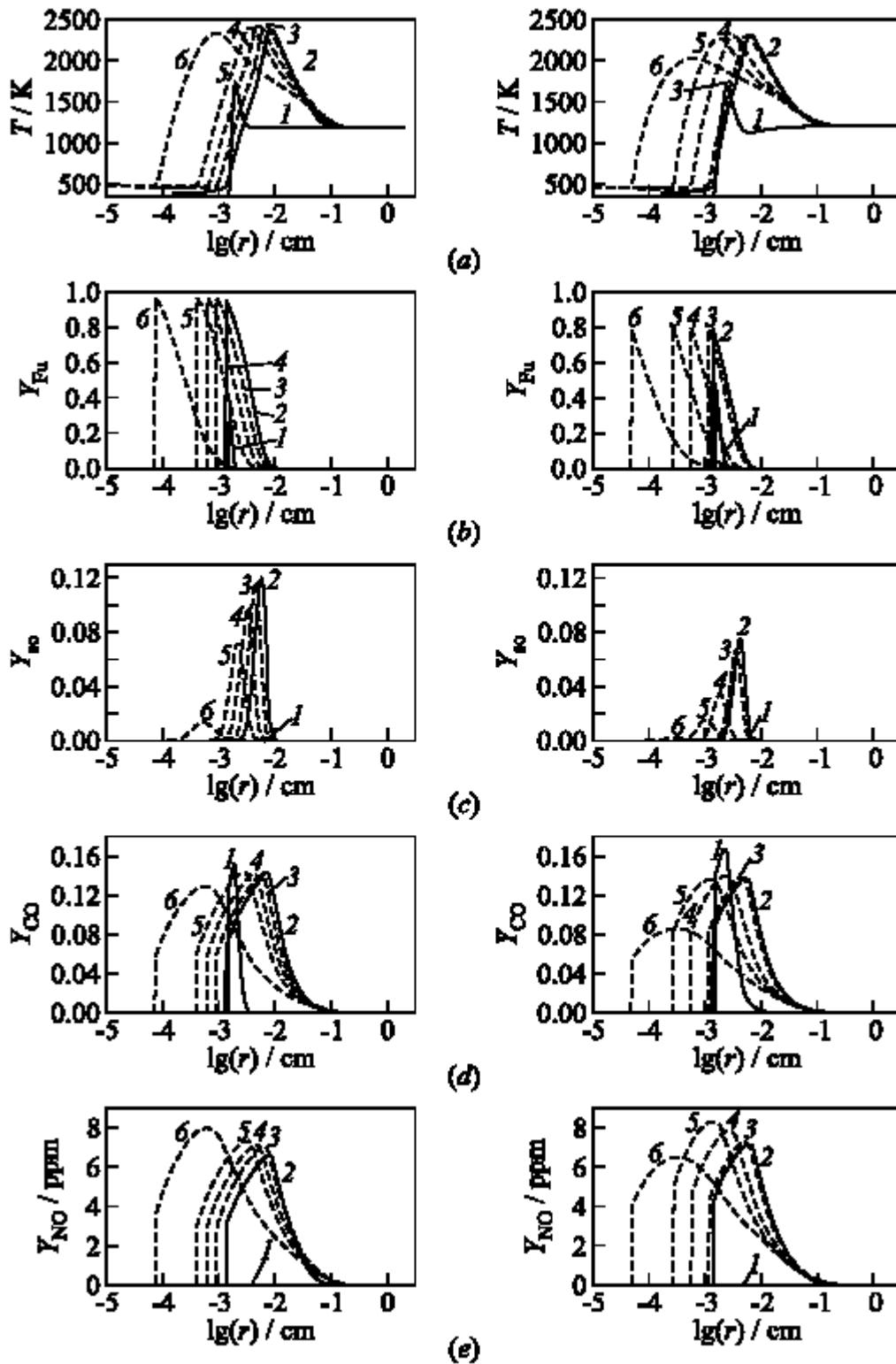


**Рис. 18:** Сравнение кривых  $d^2(t)$  для двух капель одинакового начального размера (30 мкм): капли эмульсии (95%н-тетрадекана + 5% воды, сплошная кривая) и капли чистого н-тетрадекана (штриховая кривая) при одинаковых начальных условиях ( $T_{g0} = 1200$  К и  $p = 0,1$  МПа) [51].

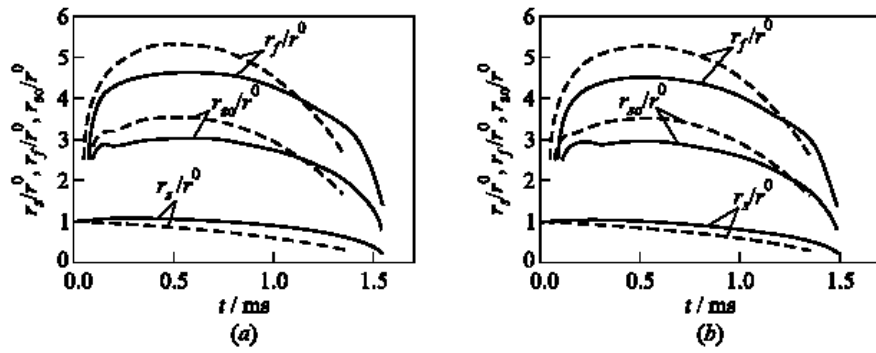
три характерных стадии в процессе горения капли эмульсии: (1) зажигание, (2) удаление пламени от поверхности капли и (3) схлопывание пламени (эта стадия показана штриховыми кривыми на рис. 19). Стадии зажигания для капель чистого топлива и эмульсии во многом подобны. На второй стадии в поведении капли эмульсии наблюдаются некоторые отличия. Во-первых, пламя удаляется от поверхности капли на меньшее расстояние, чем в случае капли чистого топлива. Во-вторых, снижается максимальная температура пламени. Что касается третьей стадии – схлопывания пламени, то она более ярко выражена для капли эмульсии.

Указанные особенности горения капли эмульсии объясняются следующим образом. Добавление легколетучего компонента (воды) в углеводородное топливо приводит к снижению парциального давления пара топлива на поверхности капли эмульсии и соответственно – к уменьшению количества пара горючего, накопленного между поверхностью капли и пламенем. Это иллюстрируется данными рис. 19б. Как следствие этого и ввиду более ярко выраженной стадии схлопывания пламени для капли эмульсии количество образующейся сажи в сажевой оболочке оказывается значительно меньшим (рис. 19в). Как следует из рис. 19в и 20, горение капли эмульсии, также как и горение капли чистого топлива, сопровождается образованием сажевой оболочки внутри пламени. Как и для капли чистого топлива, на стадии схлопывания пламя «накрывает» сажевую оболочку, приводя к окислению сажи до СО и СО<sub>2</sub>. Интересно, что в дополнение к снижению выхода сажи, количества СО и NO, образующиеся при горении капли эмульсии, также ниже, чем при горении капли чистого топлива (см. рис. 19г и 19д).

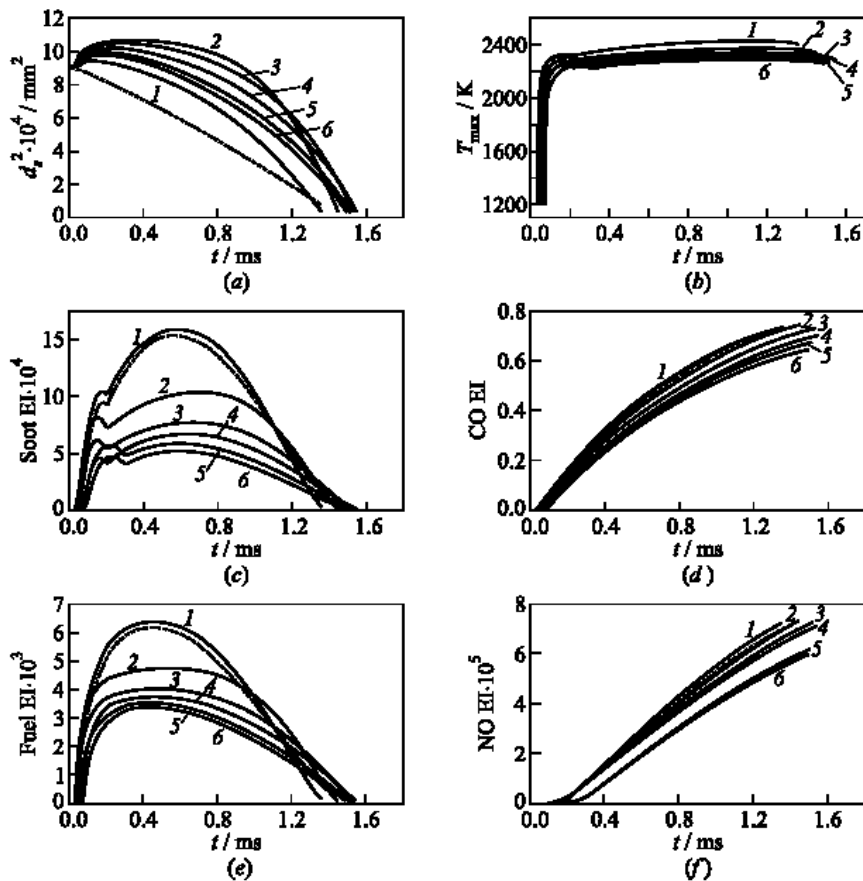
На рис. 21 приведено сравнение расчетных показателей эмиссии сажи, СО и NO для капель чистого н-тетрадекана и водно-топливной эмульсии н-тетрадекана с добавлением воды в количестве от 0,1% до 20% при одинаковых начальных условиях ( $d_{s0} = 30$  мкм,  $p = 0,1$  МПа,  $T_{g0} = 1200$  К). Для большей информативности такого сравнения на рис. 21 приведены соответствующие расчетные кривые регрессии поверхности капель (рис. 21а) и максимальной



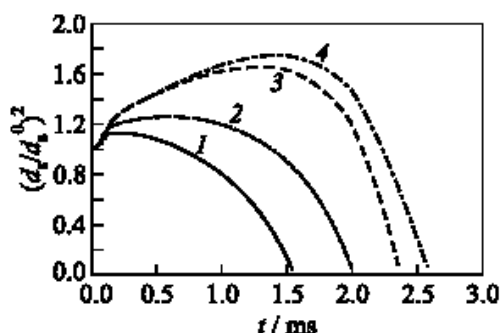
**Рис. 19:** Сравнение расчетных профилей температуры (а) и массовых концентраций горючего (б), сажи (в), CO (г) и NO (д) для горящих капле чистого н-тетрадекана (левая колонка) и водно-топливной эмульсии (90%н-тетрадекана +10% воды, правая колонка) при одинаковых начальных условиях ( $d_{s0} = 30 \text{ мкм}$ ,  $p = 0,1 \text{ МПа}$ ,  $T_{g0} = 1200 \text{ К}$ ) [51].



**Рис. 20:** Расчетные временные зависимости приведенных значений радиуса капли  $r_s/r_{s0}$ , радиуса пламени  $r_f/r_{s0}$  и радиуса сажевой оболочки  $r_{soot}/r_{s0}$  для каплей чистого н-тетрадекана (штриховые кривые) и водно-топливной эмульсии н-тетрадекана (сплошные кривые) с добавлением 10% (а) и 20% (б) воды при одинаковых начальных условиях ( $d_{s0} = 30$  мкм,  $p = 0,1$  МПа,  $T_{g0} = 1200$  К) [51].



**Рис. 21:** Расчетные временные зависимости квадрата диаметра (а), максимальной температуры (б) и показателей эмиссии сажи (в), СО (г), непрореагировавшего топлива (д) и NO (е) при горении каплей чистого н-тетрадекана (штриховые кривые) и водно-топливной эмульсии н-тетрадекана (сплошные кривые) с добавлением от 0.1% до 20% воды при одинаковых начальных условиях ( $d_{s0} = 30$  мкм,  $p = 0,1$  МПа,  $T_{g0} = 1200$  К). 1 – 0.1% воды, 2 – 1%, 3 – 5%, 4 – 10%, 5 – 15% и 6 – 20% воды [51].



$p$ , bar	$T_{\max}$ , K	EI NO $\cdot 10^6$
1	2323	72
2	2207	68
5	2139	67
20	1866	21

**Рис. 22:** Влияние начального давления на регрессию поверхности горячей капли водно-топливной эмульсии *n*-тетрадекана (сплошные кривые) с добавлением 10% воды при  $d_{s0} = 30$  мкм и  $T_{g0} = 1200$  К. 1 –  $p = 0,1$  МПа, 2 – 0,2, 3 – 0,5 и 4 – 20 МПа. В таблице показаны значения максимальной температуры горения и максимального показателя эмиссии NO [51].

температуры в окрестности капли (рис. 21б). Отметим, что начальный максимум на кривых  $T_{\max}(t)$  соответствует стадии зажигания. Из рис. 21 следует, что добавление воды в количестве, превышающем 1%, приводит к монотонному снижению эмиссионных показателей сажи (рис. 21в), CO (рис. 21г), непрореагировавшего горючего (рис. 21д) и NO (рис. 21е). При малых добавках воды (меньше 1%) в расчетах наблюдается некоторое увеличение эмиссионных показателей. С увеличением содержания воды от 0% до 20% время жизни капли изменяется менее, чем на 10% (рис. 21а), а максимальная температура горения снижается приблизительно на 10%.

На рис. 22 и присоединенной к нему таблице показано влияние начального давления (от 0,1 до 2 МПа) на кривые регрессии поверхности капли водно-топливной эмульсии *n*-тетрадекана с добавлением 10% воды, а также значения максимальной температуры и максимального показателя эмиссии NO. Видно, что с ростом давления условная стадия микровзрыва (по терминологии [40, 51, 52]) становится более ярко выраженной.

#### 4. Заключение

Описаны результаты математического моделирования испарения, самовоспламенения и горения капель однокомпонентных углеводородных горючих и водно-топливных эмульсий. Показано, что

- (1) капли в плотных газозвесах испаряются медленнее, чем одиночные капли;
- (2) квазистационарный закон испарения  $d^2$ , вообще говоря не выполняется для капель в газозвеси, капель тяжелых углеводородов и капель водно-топливных эмульсий;
- (3) при плотности газозвеси, превышающей некоторое предельное значение капли в газозвеси испаряются лишь частично;

- (4) задержка самовоспламенения капель зависит от их диаметра, типа топлива и от плотности газозвеси и сильно зависит от степени предварительного испарения горючего;
- (5) низкотемпературное самовоспламенение капель происходит так же, как и в гомогенной смеси, в две стадии: сначала появляется холодное пламя, а затем происходит горячий взрыв. В некоторых случаях удается идентифицировать и стадию голубого пламени.
- (6) структура пламени вокруг капли и характеристики горения зависят от плотности газозвеси;
- (7) показатели эмиссии вредных веществ (СО, NO и сажа) зависят от плотности газозвеси
- (8) значительную часть времени жизни капли вводно-топливной эмульсии занимает период теплового расширения, вызванного образованием и расширением паровых пузырьков внутри капли. Другой, относительно короткий период, связанный с быстрым уменьшением размера капли, может условно трактоваться как период ее микровзрыва.
- (9) При горении капли вводно-топливной эмульсии образуется меньшее количество сажи, СО и NO, чем при горении капли чистого топлива.

Проведено сравнение результатов расчетов с имеющимися экспериментальными данными. Для капель однокомпонентных горючих получено удовлетворительное количественное и качественное согласие результатов. Для капель водно-топливных эмульсий получено хорошее качественное согласие результатов расчетов с известными экспериментальными данными.

Работа выполнена при поддержке МНТЦ (проект 2740).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Варшавский Г.А. Труды НИИ-1, 1945, №6.
2. Godsave G.A.E. Studies of the combustion of drops in a fuel spray – the burning of single drops of fuel. Proc. 4<sup>th</sup> Symposium (Intern.) on Combustion, Williams and Wilkins Co., Baltimore, Md, 1953, pp. 818-830.
3. Spalding D.B. The combustion of liquid fuels. Proc. 4<sup>th</sup> Symposium (Intern.) on Combustion, Williams and Wilkins Co., Baltimore, Md, 1953, pp. 847-864.
4. Goldsmith M., Penner S.S. On the burning of single drops of fuel in an oxidizing atmosphere. Jet Propulsion, 1954, Vol. 24, No.4, pp. 245-251.
5. Франк-Каменецкий Д.А. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Изд-во АН СССР. 1947. 2-е изд. М.: Наука. 1961. 491 С.
6. Kent J.C. Quasi-steady diffusion-controlled droplet evaporation and condensation. Appl. Scient. Res. Ser., 1973, A28, pp. 315-359.
7. Law C.K. Recent advances in droplet vaporization and combustion. Prog. Energy Combust. Sci., 1982, Vol. 8, pp. 171-201.
8. Sirignano W.A. Fuel droplet vaporization and spray combustion theory. Prog. Energy Combust. Sci., 1983, Vol. 9, pp. 291-322.
9. Bachalo W. D. Proc. 25<sup>th</sup> Symp. (Intern.) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA. 1994. P. 333.

10. Avedisian C.T. Recent advances in soot formation from spherical droplet flames at atmospheric pressure. *J. Propulsion and Power*, 2000, Vol. 16, No.4, pp. 628–635.
11. Mashayek F., Pandya R. V. R. *Progress in Energy and Combustion Sciences*. 2003. Vol. 29. P. 329.
12. Кучеров А.Н. Режимы испарения капли водного аэрозоля. *Теплофизика высоких температур*. 1991, Т. 29, №1, С.144-152.
13. Matlosz R.L., Leipziger S., Torda T.P. Investigation of liquid drop evaporation in a high temperature and high pressure environment. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1972, Vol.15, pp. 831-852.
14. Cornet, I., and W. E. Nero. 1955. Emulsified fuels in compression ignition engines. *Ind. Eng. Chem.* 47(10):2133.
15. Ivanov, V. M. 1962. Fuel emulsions. Moscow: USSR Acad. Sci. Publ.
16. Lebedev, O. N. 1978. Some peculiarities of combustion of fuel-water emulsions in Diesel engines. *Combustion Explosion Shock Waves* 14(2):142.
17. Morrone, T., R. Lippman, and D. Wright. 1979. 2nd Symposium on Water-in-Fuel Emulsions in Combustion Proceedings. U.S. Department of Transportation. 29.
18. Lasheras, J.C., A. C. Fernandez-Pello, and F. L. Dryer. 1980. *Combustion Science Technology* 22:195-209.
19. Law, C. K., C. H. Lee, and N. Srinivasan. 1980. *Combustion Flame* 37:125.
20. Gollahalli, S. R., M. L. Rasmussen, and S. J. Moussavi. 1981. Combustion of drops and sprays of No. 2 Diesel oil and its emulsions with water. 18th Symposium (International) on Combustion Proceedings. Pittsburgh, PA: The Combustion Institute. 349-59.
21. Lasheras, J.-C., A.C. Fernandez-Pello, and F. L. Dryer. 1981. On the disruptive burning of free droplets of alcohol/n-paraffin solutions and emulsions. 18th Symposium (International) on Combustion Proceedings. Pittsburgh, PA: The Combustion Institute. 293-305.
22. Wang, C.H., X. Q. Liu, and C.K. Law. Combustion and microexplosion of freely falling multicomponent droplets. *Combustion Flame*, 1984, Vol. 56, pp. 175-197.
23. Prostov, V. N., A.V. Yakovlev, and V. A. Gladkikh. Ignition of fuel-water emulsions. *Combustion Explosion Shock Waves*, 1986, Vol.14, No. 5, pp.9-14.
24. Tsue, M., H. Yamasaki, T. Kadota, D. Segawa, and M. Kono. Effect of gravity on onset of microexplosion for an oil-in-water emulsion droplet. 27th Symposium (International) on Combustion Proceedings. Pittsburgh, PA: The Combustion Institute. 1998, pp. 2587-2593.
25. Law, C. K. A model for the combustion of oil/water emulsion droplets. *Combustion Science Technology*, 1977, Vol. 17, pp. 29-38.
26. Twardus E. M., Brzustowski T. A. *Archiwum Processow Spalania*, 1977, Vol. 8, p. 347.
27. Dwyer H. A., Nirschl H., Kerschl P., Denk V. Proc. 25<sup>th</sup> Symp. (Intern.) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA. 1994, p. 389.



28. Marberry M., Ray A. K., Leung K. *Combustion and Flame*. 1984, Vol. 57, p. 237.
29. Sivasankaran K., Seetharamu K. N., Natarajan R. *Int. J. Heat and Mass Transfer*. 1996, Vol. 39, p. 3949.
30. Chiu H. H., Liu T. M. *Combustion Science and Technology*. 1977, Vol. 17, p. 127.
31. Correa S. M., Sichel M. *Proc. 19<sup>th</sup> Symp. (Intern.) on Combustion*. The Combustion Institute, Pittsburgh. 1983. p. 300.
32. Нигматулин Р. И. *Динамика многофазных сред*. Ч. 1. М.: Наука. 1987.
33. Kailasanath K., Chang E. *Advanced Computation and Analysis of Combustion* / Eds. Roy G. D., Frolov S. M., Givi P. M.: ENAS Publ., 1997, p. 122.
34. Басевич В. Я., Беляев А. А., Евлампиев А. В., Посвянский В. С., Фролов С. М. Испарение и горение капли углеводородного топлива. I. Неэмпирическая модель испарения однокомпонентной капли. *Химическая физика*, 2002, т. 21, №3, с. 58-67.
35. Фролов С. М., Посвянский В. С., Басевич В. Я., Беляев А. А., Сметанюк В. А., Марков В. В., Семенов И. В. Испарение и горение капли углеводородного топлива. II. Неэмпирическая модель испарения капли с учетом многокомпонентной диффузии. *Химическая физика*, 2004, том 23, №4, с. 75-83.
36. Frolov S. M., Basevich V. Ya., Belyaev A. A., Posvyanskii V. S., Smetanyuk V. A. Modeling of drop evaporation and combustion with regard for spray effects. In: *Combustion and Pollution: Environmental Effect*. Eds. G. D. Roy, S. M. Frolov, A. M. Starik. Moscow, Torus Press, 2005.
37. Басевич В. Я., Фролов С. М., Посвянский В. С. Условия существования стационарной гетерогенной детонации. *Химическая физика*, 2005, №7.
38. Борисов А. А., Фролов С. М., Сметанюк В. А., Полихов С. А., Сегал К. Взаимодействие капли горючего с газовым потоком. *Химическая физика*, 2005, №7.
39. Басевич В. Я., Фролов С. М., Посвянский В. С., Веденеев В. И., Романович Л. Б. Низкотемпературное самовоспламенение капли. *Химическая физика*, 2005, №5.
40. Frolov S. M., Posvyanskii V. S., Basevich V. Ya., Belyaev A. A., Esmilaire O., Jablon C., Schmelzle P. Control of single drop combustion and emission by means of emulsifying fuel with water. In: *Advances in Combustion and Noise Control*. G. D. Roy Ed., Cranfield, UK, Cranfield University Press, 2005
41. Frolov S. M. Ignition and Combustion of Hydrocarbon Fuel Drops. In: *Progress in Combustion and Detonation*. Ed. by A. Borisov, S. Frolov, and A. Kuhl. Moscow, Torus Press, 2004, 170-172.
42. Frolov S. M. Ignition and Combustion of Hydrocarbon Fuel Drops. In: *Proc. International Conference on Combustion and Detonation – Zel'dovich Memorial*. August 30-September 3, 2004, CD, Paper No. OP-07.

43. Frolov S. M., Smetanyuk V. A. Mechanism of Fuel Drop Microexplosion. In: Progress in Combustion and Detonation. Ed. by A. Borisov, S. Frolov, and A. Kuhl. Moscow, Torus Press, 2004, 366-367.
44. Frolov S. M., Smetanyuk V. A. Mechanism of Fuel Drop Microexplosion. In: Proc. International Conference on Combustion and Detonation – Zel'dovich Memorial. August 30-September 3, 2004, CD, Paper No. PP10-20.
45. Frolov S. M., Basevich V. Ya. Role of Multicomponent Diffusion in Premixed and Nonpremixed Laminar Flames. In: Micromixing in Turbulent Reactive Flows. Ed. by S. Frolov, V. Frost, and D. Roekaerts. Moscow, Torus Press, 2004, p. 3-8.
46. Borisov A. A., Frolov S. M., Polikhov S. A., Segal C., Smetanyuk V. A. Interactions of Liquid Drops with Gas Flow – Review. In: Application of Detonation to Propulsion. Ed. by G. Roy, S. Frolov, J. Shepherd. Moscow, Torus Press, 2004, p. 99-109.
47. Frolov S. M., Basevich V. Ya., Posvianskii V. S. Limiting Drop Size and Pre vaporization Degree Required For Spray Detonation. In: Application of Detonation to Propulsion. Ed. by G. Roy, S. Frolov, J. Shepherd. Moscow, Torus Press, 2004, p. 110-119
48. Сметанюк В. А., Фролов С. М. Испарение и горение капли углеводородного топлива. III. Прогрев капли в газовом потоке с учетом внутренних движений жидкости. Химическая физика, 2004, том 23, №7, с. 40-48.
49. Frolov S. M., Smetanyuk V. A. Liquid drop heating with regard for internal circulation. In: Proc. 5<sup>th</sup> ISEHPM, Krakov, 2004, October 10-14, pp. 259-267.
50. Фролов С. М., Басевич В. Я., Посвянский В. С., Сметанюк В. А. Испарение и горение капли углеводородного топлива. IV. Испарение капли с учетом коллективных эффектов. Химическая физика, 2004, том 23, №7, с. 49-58.
51. Frolov S. M., Posvianskii V. S., Basevich V. Ya., Belyaev A. A., Kuznetsov N. M. On application of emulsified liquid fuels for combustion control. In: Combustion and Noise Control. Ed. by G.D. Roy, Cranfield, UK, Cranfield Univ. Press, 2003, pp. 257-263.
52. Frolov S. M., Posvyanskii V. S., Basevich V. Ya., Belyaev A. A., Esmilaire O., Jablon C., and Schmelzle P. Control of single droplet combustion and emission. Proc. 18<sup>th</sup> International Colloquium on Dynamics of Explosions and Reaction Systems. 29 July – 3 August, Seattle, WA, 2001. Paper # 142 (CD ROM).
53. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. «Глобальные» кинетические механизмы ламинарных пламен для моделирования турбулентных реагирующих течений. Ч.1. Основной химический процесс тепловыделения». Химическая физика, 1998, т.17, №9, 112-128.
54. Басевич В.Я., Беляев А.А., Фролов С.М. «Глобальные» кинетические механизмы ламинарных пламен для моделирования турбулентных реагирующих течений. Ч.2. Образование окиси азота». Химическая физика, 1998, т.17, №10, 71-79.

55. Евлампиев А. В., Фролов С. М., Басевич В. Я., Беляев А. А. «Глобальные» кинетические механизмы для моделирования турбулентных реагирующих течений. Часть IV: Диффузионное горение. Химическая физика, 2001, Т. 20, № 11, с. 21-27.
56. Басевич В. Я., Беляев А. А., Брандштетер В., Нейгауз М. Г., Ташл Р., Фролов С. М. Физика горения и взрыва. 1994, том 30, № 6, с. 15.
57. Atthasit A., Doue N., Biscos Y., Lavergne G., Berlemont A. Combustion and Atmospheric Pollution / Ed. by G.D. Roy, S. M. Frolov, and A. M. Starik. Torus Press, Moscow. 2003, p. 214.
58. Takei M., H. Kobayashi, T. Niioka. Ignition experiment of a blended fuel droplet in a microgravity field. Int. J. Microgravity Res. Appl. Microgravity Sci. Technol., 1993, VI/3:184-87.
59. Niioka T., H. Kobayashi, D. Mito. Ignition experiment on droplet array in normal and microgravity environments. IVTAM Symp. Mechanics and Combustion of Droplet and Sprays Proc. Tainan, 1994, 367-377.
60. Соколик А. С., Басевич В. Я. Журнал физической химии. 1954, том 28, № 11, с. 1935.
61. Rose M., Roth P., Frolov S.M., Neuhaus M.G., Klemens R. Advanced Computation and Analysis of Combustion / Eds. Roy G.D., Frolov S.M., Givi P. M.: ENAS Publ. 1997, p. 175.
62. Rose M., Roth P., Frolov S. M. Combust. Sci. Techn. 1999, Vol.149, p. 95.
63. Rose M., Roth P., Frolov S. M., Neuhaus M. G. J. Engineering Turbulence Modelling and Experiments. 1999, Vol. 4, p. 851.
64. Rose M., Roth P., Frolov S. M. Acta Mechanica. 2000, Vol. 145, p. 45.
65. Monaghan M.T., Siddall R.G., Thring M.W. The influence of initial diameter on the combustion of single drops of liquid fuel. Combustion and Flame, 1968, Vol. 12, pp. 45–53.
66. Kumagai S., Sakai T., Okajima S. Combustion of free fuel droplets in a freely falling chamber. Proc. 13<sup>th</sup> Symp. (Intern.) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA., 1971, pp. 779–785.
67. Okajima S., Kumagai S. Further investigations of combustion of free droplets in a freely falling chamber including moving droplets. Proc. 15<sup>th</sup> Symp. (Intern.) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA., 1975, pp. 401–407.
68. Jackson G.S., Avedisian C.T., Yang J.C. Observations of soot during droplet combustion at low gravity: heptane and heptane/monochloroalkane mixtures. Int. J. Heat Mass Transfer, 1992, Vol. 35, No.8, pp.2017–2033.
69. Hara H., Kumagai S. The effect of initial diameter of free droplet combustion with spherical flame. Proc. 25<sup>th</sup> Symp. (Intern.) on Combustion. Pittsburgh, PA, The Combustion Institute, 1994, pp. 423–430.
70. Mikami M., Kato H., Sato J., Kono M. Interactive combustion of two droplets in microgravity. Proc. 25<sup>th</sup> Symp. (Intern.) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA., 1994, pp. 431–438.

71. Jackson G.S., Avedisian C.T. The effect of initial diameter in spherically symmetric droplet combustion of sooting fuels. Proc. Royal Soc. London A, 1994, Vol. 446, pp. 255–276.
72. Shaw B.D., Dryer F.L., Williams F.A. Sooting and disruption in spherically symmetrical combustion of decane droplets in air. Acta Astronautica, 1988, Vol. 17, No. 11/12, pp. 1195–1202.
73. Randolph A.L., Law C.K. Influence of physical mechanisms on soot formation and destruction in droplet burning. Combustion and Flame, 1986, Vol. 64, pp. 267–284.
74. Avedisian C.T., Yang J.C., Wang C.H. On low-gravity droplet combustion. Proc. R. Soc. Lond., 1988, A420, pp. 183–200.
75. Hara H., Kumagai S. Proc. 23<sup>rd</sup> Symp. (Intern.) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, PA., 1990, pp. 1605–1610.

## Список обозначений

$A$	предэкспоненциальный множитель
$d_s$	диаметр капли
$d_{s0}$	начальный диаметр капли
$E$	энергия активации
$G$	массовый расход
$H$	тепловой эффект реакции
$I_j$	приведенное содержание $j$ -го компонента в газовой фазе
$K$	константа испарения или горения
$M$	число компонентов в газе
$M_0$	масса капли
$m$	показатель степени при температуре
$p$	давление
$R$	размер сферической элементарной ячейки
$R$	газовая постоянная
$R_c$	размер элементарной ячейки-многогранника
$R_{st}$	радиус сферической элементарной ячейки в стехиометрической топливно-воздушной смеси
$r$	радиальная координата
$r_f$	радиус пламени
$r_{s0}$	начальный радиус капли
$r_s$	радиус капли
$r_{soot}$	радиус сажевой оболочки
$S$	площадь поверхности сферической элементарной ячейки
$S_c$	площадь поверхности элементарной ячейки-многогранника
$T$	температура
$T'_{max}$	скорость нарастания температуры
$t$	время
$V$	объем сферической элементарной ячейки
$V_c$	объем элементарной ячейки-многогранника
$W$	скорость реакции
$Y_j$	массовая доля $j$ -го компонента в газе

## Греческие символы

$\eta$	массовое содержание жидкости в единице объема газозвеси
$\rho_l$	плотность жидкости
$\rho_g$	плотность газа
$\phi_{st}$	стехиометрическое соотношение
$\Phi$	коэффициент избытка горючего (по массе)
$\tau_i$	задержка самовоспламенения
$\tau_l$	время жизни капли
$\tau_{cf}$	время задержки холодного пламени

## **Индексы**

$0$	начальное значение
$cf$	относится к холодному пламени
$f$	относится к пару жидкого горючего
$fd$	относится к горючему, находящемуся первоначально в жидкой фазе
$fg$	относится к горючему, находящемуся первоначально в газовой фазе
$g$	относится к газу
$l$	относится к жидкости
$\max$	максимальное значение