

УДК 621.43.056+519.6

В.А. БОГУСЛАЕВ<sup>1</sup>, Д.А. ДОЛМАТОВ<sup>2</sup><sup>1</sup>ОАО «Мотор Сич», Запорожье, Украина<sup>2</sup>Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина

## МЕТОД ФОРМИРОВАНИЯ ДЕТАЛИЗИРОВАННОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ СХЕМЫ ПРИ ВОЗДУШНОМ ГОРЕНИИ КЕРОСИНА

Статья содержит анализ существующих методик фильтрации генерального баланса реакций воздушногорения углеводородов, входящих в состав керосина. Доказана неинвариантность скоростных коэффициентов чувствительности отдельных компонент и интегральных характеристик процесса относительно начальных условий и температуры среды. Предложена универсальная методика фильтрации механизма, основанная на совместной оценке традиционной чувствительности, критически нестационарных эффектов, энергетического и скоростного вклада каждой реакции по компонентам среды, включая промежуточные реагенты.

**Ключевые слова:** кинетическая схема, коэффициент чувствительности, критерий фильтрации, скорость реакции, начальные условия

### Общие принципы фильтрации генерального баланса реакций

Математическое моделирование горения углеводородных топлив в настоящее время невозможно без детализации химической кинетики процесса, основанной на максимальном приближении модели к реальному физическому объекту. Существующие упрощенные методы, использующие интегральную реакцию горения либо концепцию предпламенной и запламенной кинетической схемы [1, 2] весьма неплохо зарекомендовали себя при моделировании детонационного горения и других объектов с преобладанием газодинамической составляющей процесса, однако требования (в том числе эмиссионные ограничения), предъявляемые к организации изобарных и политропических пламен в современных тепловых двигателях и других устройствах, делают невозможным достижение поставленных задач при использовании настолько грубого описания физической химии процесса. Вместе с тем вычислительная ресурсоемкость математических моделей, использующих полный генеральный баланс горения керосина и других топлив с углеродным числом более 6, остается за пределами возможностей наиболее мощных вычислительных станций. Другим фактором, делающим использование полного баланса нецелесообразным, является неразличимо малый вклад некоторых реакций в общую организацию физического процесса и формирование характеристик пламени. Таким образом, задача формирования кинетической схемы горения путем критериальной фильтрации генерального баланса остается весьма акту-

альной как с теоретической, так и с прикладной точки зрения.

Широко распространен метод фильтрации, основанный на вычислении скоростных коэффициентов чувствительности компонент смеси либо скорости распространения пламени по константам скорости реакции [3, 4]. Абсолютная и относительная чувствительность компонент определяется как

$$E_{i,j}^{abs} = \frac{\partial c_i}{\partial k_j}, \quad (1)$$

$$E_{i,j}^{rel} = \frac{k_j}{c_i} \frac{\partial c_i}{\partial k_j} = \frac{\partial \ln c_i}{\partial \ln k_j}, \quad (2)$$

где  $c_i$  – концентрация  $i$ -го реагента;

$k_j$  – константа скорости  $j$ -ой реакции.

Помимо концентрации компонент, аналогичным способом рассчитывается чувствительность скорости горения и некоторые другие параметры. На рис. 1 представлена чувствительность скорости распространения ламинарного пламени в метано-воздушной смеси к отдельным реакциям кинетической схемы [3]. Как видно из рисунка, даже для сравнительно простого по структуре гомогенного пламени относительная чувствительность скорости распространения не является константой относительно начальных и граничных условий, существенно завися от коэффициента избытка воздуха и от других величин (на графике не указано). В рамках исследования пламен до настоящего времени не проводилось полноценных численных экспериментов по изучению влияния интегральных характеристик пламени на чувствительность компонент к константам отдельных реакций.

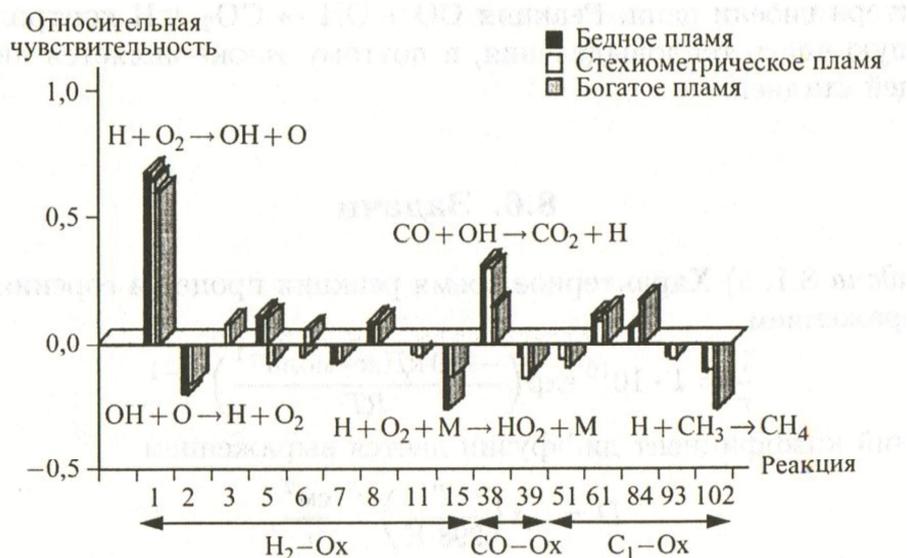


Рис. 1. Коэффициенты чувствительности скорости распространения ламинарного метано-воздушного пламени для различных  $\alpha$

Объект исследования, результаты которого представлены на рис.1, с точки зрения теории двигателей следует отнести скорее к модельным задачам, поскольку большинство пламен в ГТУ являются турбулентными либо переходными и в связи с этим должны обладать нелинейной зависимостью характеристик, включая чувствительность кинетики, от условий в реакционной зоне.

Первоочередной задачей исследования методов фильтрации кинетических схем является установление характера зависимости чувствительности компонент к различным реакциям и разработка критериев отсечки малозначительных реакций. В качестве объекта исследования выбраны турбулентные пламена метано-воздушного и керосино-воздушного типа.

### Скоростная чувствительность компонент при различных условиях горения

Математическая модель для определения коэффициентов чувствительности представляет собой систему уравнений, построенную по кинетическим уравнениям генерального баланса реакций:

$$v_{\Sigma i} = \frac{dc_i}{dt} = f_i(k_j, c_p), \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial k_j} \left( \frac{dc_i}{dt} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial c_i}{\partial k_j} \right) = \frac{\partial}{\partial k_j} f_i(k_j, c_p), \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial c_i}{\partial k_j} \right) &= \left( \frac{\partial f_i}{\partial k_j} \right)_{c_i, k_n \neq j} + \\ &+ \sum_{p=1}^{i_{\max}} \left( \frac{\partial f_q}{\partial c_p} \right)_{c_{p \neq i}, k_q} \left( \frac{\partial c_p}{\partial k_q} \right)_{k_q \neq j} \end{aligned} \quad (5)$$

и окончательно

$$\frac{\partial E_{i,j}^{abs}}{\partial t} = \left( \frac{\partial f_i}{\partial k_j} \right)_{c_i, k_n \neq j} + \sum_{p=1}^{i_{\max}} \left( \frac{\partial f_q}{\partial c_p} \right)_{c_{p \neq i}, k_q} E_{p,q}^{abs}, \quad (6)$$

где  $i_{\max}$  – число компонент в генеральном балансе. Решая систему уравнений (6), получим численные значения  $E_{i,j}^{abs}$ , легко преобразуемые в  $E_{i,j}^{rel}$ , причем для установившегося горения можно принять

$$\frac{\partial E_{i,j}^{rel}}{\partial t} = 0. \quad (7)$$

Выбрав в качестве контрольного параметра концентрацию  $CH_2O$ , было проведено численное исследование поведения решений системы (6) для метано-воздушного и керосино-воздушного турбулентного пламени. В качестве варьируемого параметра для смеси  $CH_4 + O_2 + N_2$  была выбрана эффективная температура зоны горения, соответствующая различным характерным зонам пламени. Для керосино-воздушного пламени был проведен расчет при различных значениях среднего начального диаметра каплей  $d_0$ . Предварительное задание значений концентраций характерных реагентов как функций температуры и оценка суммируемых производных по медианным значениям концентраций в настоящей работе не использовались, поскольку при постановке задачи в форме системы уравнений (6) и соблюдении условия (7), т.е. отсечки внешних нестационарных явлений при сохранении влияния криптонестационарных эффектов собственно горения, данные упрощения не являются необходимыми. Результаты расчетов в виде значений относительных коэффициентов чувствительности представлены на рис. 2, 3.

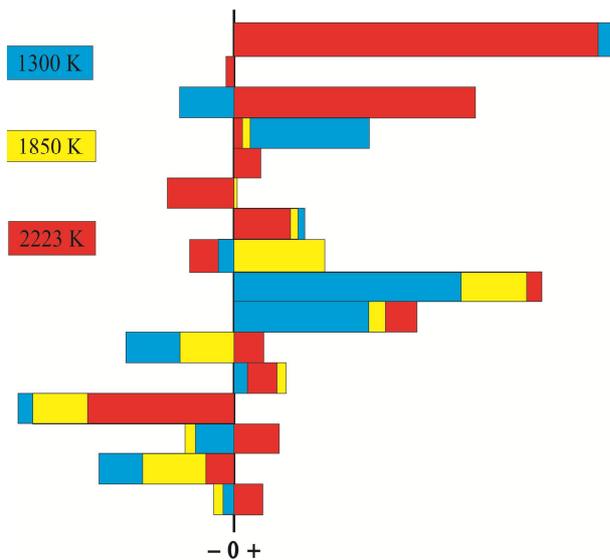


Рис. 2. Относительная чувствительность  $\text{CH}_2\text{O}$  в различных температурных зонах стехиометрического метано-воздушного пламени

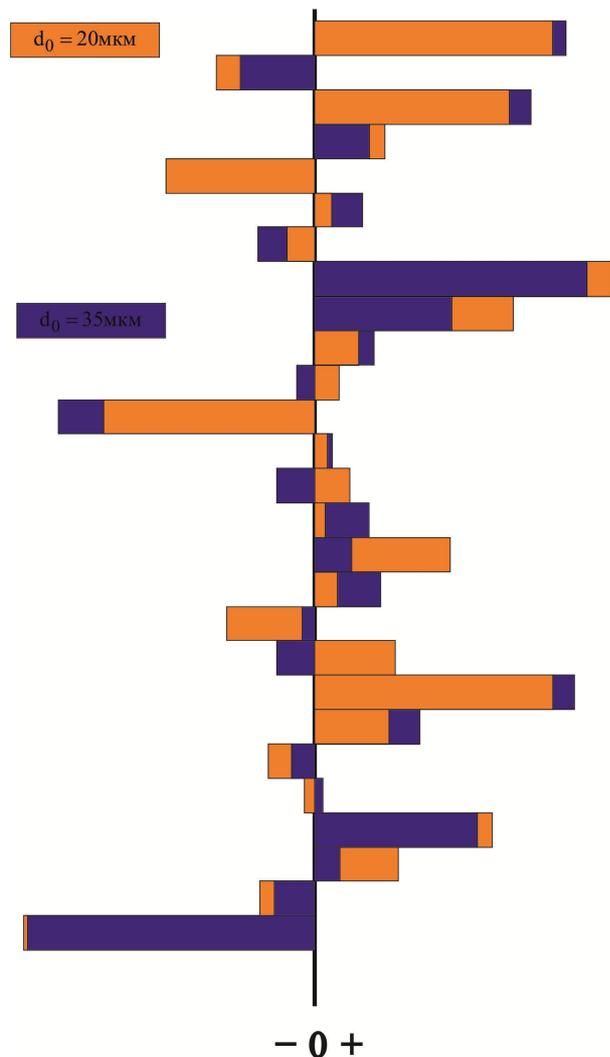


Рис. 3. Относительная чувствительность  $\text{CH}_2\text{O}$  при различном начальном диаметре капель в стехиометрическом керосино-воздушном пламени

Как нетрудно видеть из рис. 2 и 3, начальные условия и параметры среды протекания реакции оказывают существенное влияние на чувствительность коэффициентов вплоть до смены знака относительной чувствительности, что означает обращение воздействия реакции на производство-расходование компонента. Очевидно, полученная для фиксированных условий кинетическая схема реакций может быть неприменима для пламени с другими характеристиками или иного участка того же реакционного объема с отличными характеристиками. Кроме того, критерии фильтрации генерального баланса по  $E_{i,j}^{rel}$  в настоящее время достаточно произвольны в области выбора контрольных величин и не отражают в достаточной мере взаимосвязь химической кинетики с чувствительностью процесса в целом. Для усовершенствования метода фильтрации необходимо дополнительное ужесточение критериев фильтрации и введение дополнительных функциональных зависимостей, отражающих влияние изменения параметров в зависимости от времени и вдоль проточной части исследуемого объекта.

### Анализ путей реакции и резольвентный метод оценки чувствительности

Известен метод анализа путей развития реакций [5], основанный на изучении процентного вклада каждой реакции в производство-расходование каждой компоненты с последующим интегрированием по всей зоне реакции. Затем на основании полученных данных строится кинетическая схема с calorическими эффектами реакций в многомерном пространстве, чья размерность равна общему числу реагентов, включая начальные и конечные компоненты смеси. На основании исследования проекций полученной функции на условные плоскости, образованные концентрациями отдельных компонент, делается вывод о значимости каждого реагента для формирования кинетики процесса в целом. Заключение при этом основывается на оценке средней условной площади проекций функции на все плоскости при варьировании исключаемого/учитываемого компонента в области собственных допустимых значений.

Данный метод для проточных реакторов обладает двумя существенными недостатками. Во-первых, для генерального баланса горения керосина вычисление путей развития реакции даже на первом этапе связана с неопределенностью приоритетов кинетической схемы, не могущей быть разрешенной без определения концентраций и температур – т.е., до решения основной системы уравнений сплошной среды, для упрощения которой и применяется

фильтрация генерального баланса. Во-вторых, высокая разветвленность процесса делает практически невозможной оценку вклада реакций без заметного огрубления результата, основанного на различного рода допущениях относительно концентраций прочих реагентов.

С учетом вышеизложенных фактов, разработка метода фильтрации генерального баланса с поставленными требованиями к точности и универсальности требует такого усовершенствования методики выбора контрольных параметров, которое бы позволило производить выборку компонент без предварительного задания побочных концентраций и исключило бы эмпирику при определении коэффициентов и концентраций. Очевидно, что для этого необходимо учесть количество элементарных реакций с участием компонента и вероятностное распределение концентраций.

На основании анализа результатов численных и натуральных экспериментов по поведению концентраций компонент как функций элементарных реакций представляется целесообразным предложить интегральный критерий значимости компонента-реакции в форме функционала  $\kappa_{ij}$ , который в дальнейшем будет именоваться К-резольвентой:

$$\kappa_{ij} = \alpha_{\Theta} \Theta_{ij} + \alpha_{\Phi} \Phi_i + \alpha_K K_{ij}, \quad (8)$$

где  $\Theta_{ij}$  – слагаемое, учитывающее дисперсионную термическую стабильность чувствительности  $i$ -го компонента по  $j$ -й реакции,

$$\Theta_{ij} = \frac{(T_{\max} - T_{\min}) \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} \left( \frac{\partial E_{i,j}^{\text{rel}}}{\partial T} \right)^2 dT}{\sqrt{[E_{i,j}^{\text{rel}}(T_{\max})]^2 - [E_{i,j}^{\text{rel}}(T_{\min})]^2}}; \quad (9)$$

$\Phi_i$  – слагаемое, учитывающее энергетическую долю реакций с участием  $i$ -го компонента в общем балансе энергий процесса,

$$\Phi_i = \sum E_{i,p}^{\text{rel}} \bar{Q}_p, \quad (10)$$

суммирование по всем реакциям с участием  $i$ -го компонента;  $\bar{Q}_p$  – относительный калорический эффект  $p$ -ой реакции, приведенный к суммарному калорическому эффекту реакций смеси  $Q_{\Sigma}$ ,

$$\bar{Q}_p = \frac{Q_p}{Q_{\Sigma}}; \quad (11)$$

$K_{ij}$  – слагаемое, учитывающее быстроту  $j$ -ой реакции и общий порядок скорости производства-расходования  $i$ -й компоненты в целом,

$$K_{ij} = \frac{k_{\{J_{\max}\}} \left( \sum \frac{k_{\max}}{k_{n_i}} \right)^J}{k_j \left( \frac{k_{\max}}{k_{\min}} \right)^N}, \quad (12)$$

суммирование по всем реакциям с участием  $i$ -го компонента;  $k_{\max}$  и  $k_{\min}$  – максимальная и минимальная константы скорости среди всех реакций генерального баланса;  $k_{\{J_{\max}\}}$  – максимальная константа среди реакций, входящих в БПР  $i$ -го компонента;  $N$  – общее число реакций в генеральном балансе;  $J$  – число реакций в БПР  $i$ -го компонента;  $\alpha_{\Theta}$ ,  $\alpha_{\Phi}$ ,  $\alpha_K$  – весовые коэффициенты;  $T_{\min}$  и  $T_{\max}$  – минимальная и максимальная температура в реакционной зоне.

К-резольвента может быть найдена в аналитическом виде для любой реакции и любого компонента и является функцией только кинетических, калорических и стохастических параметров процесса. Для выбраковки реакции необходимо и достаточно, чтобы все К-резольвенты для этой реакции (т.е., все К-резольвенты с данным значением второго индекса) были меньше некоторого установленного предельного значения  $\varepsilon_K$ .

Согласно численным экспериментам, применение К-резольвенты в качестве фильтрационного критерия позволяет сократить генеральный баланс реакций на 75 – 81 % при максимальной погрешности получаемых результатов численного моделирования не выше 0,3% по сравнению с экспериментом, что значительно превосходит точность существующих методов на основе относительных коэффициентов чувствительности. Дальнейшие исследования предполагают уточнение вида функциональной зависимости  $\kappa_{ij}$  от основных и второстепенных параметров и решение вопроса устойчивости данной величины к возмущениям различного рода.

## Литература

1. Абдуллин, А.Л. Моделирование процессов горения и управление экологическими и энергетическими характеристиками тепловых двигателей и энергоустановок [Текст]: дис. ... докт. техн. наук: 05.07.05 / А.Л. Абдуллин. – Казань, 2004. – 309 с.
2. Faeth, J.M. Evaporation and combustion of sprays [Text] / G.M. Faeth // Prog. Energy combustion Sci., 1984. – № 9:1. – P. 43 – 47.
3. Варнатц, Ю. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ [Текст] / Ю. Варнатц, У. Маас, Р. Диббл. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 352 с.

4. Eggels, R.L. *Mathematically reduced reaction mechanisms applied to adiabatic flat hydrogen/air flames [Text]* / R.L. Eggels, L.P.H. Goey // *Combustion and Flame*, 1995. – P. 559 – 570.

5. Jones, W.P. *Global reaction schemes for hydrocarbon combustion [Text]* / W.P. Jones, R.P. Lindstedt // *Combustion and Flame*, 1988. – Vol. 73. – P. 233 – 242.

Поступила в редакцию 30.05.2012

**Рецензент:** д-р техн. наук, проф. Д.Ф. Симбирский, Национальный аэрокосмический ун-т им. Н.Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Харьков.

#### МЕТОД ФОРМУВАННЯ ДЕТАЛІЗОВАНОЇ КІНЕТИЧНОЇ СХЕМИ ПОВІТРЯНОГО ГОРІННЯ КЕРОСИНУ

*В.О. Богуслаєв, Д.А. Долматов*

Стаття містить аналіз існуючих методик фільтрації генерального балансу реакцій повітряного горіння вуглеводнів, що входять у склад керосину. Доведено не інваріантність швидкісних коефіцієнтів чутливості окремих компонент та інтегральних характеристик процесу щодо початкових умов та температури середовища. Запропоновано універсальну методику фільтрації механізму, засновану на спільній оцінці традиційної чутливості, криптонестационарних ефектів, енергетичного та швидкісного вкладу кожної реакції за компонентами середовища, враховуючи проміжні реагенти.

**Ключові слова:** кінетична схема, коефіцієнт чутливості, критерій фільтрації, швидкість реакції, початкові умови.

#### METHOD OF THE DETAILED KINETIC SCHEME FORMATION FOR AIR GAS COMBUSTION

*V.A. Boguslaev, D.A. Dolmatov*

The article consists the analysis of existing general balance filtration methods for air combustion of hydrocarbons that apply to gas. There is established that velocity sensitivity coefficients, both for concentration and flame integral characteristics, aren't invariant about initial conditions and domain temperature. The universal filtration methodic which based on combined evaluation of the traditional sensitivity, crypto transient effects, energy and velocity partial influence of each material including intermediate components, is developed.

**Key words:** kinetic scheme, sensitivity coefficient, filter criteria, reaction velocity, initial conditions

**Богуслаєв Вячеслав Александрович** – д-р техн. наук, проф., почетный президент ОАО «Мотор Сич», Запорожье, Украина.

**Долматов Дмитрий Анатольевич** – канд. техн. наук, доцент кафедры теории авиационных двигателей Национального аэрокосмического университета им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков, Украина, e-mail: ditrihantelson@yandex.ru.