

УДК 621.438.4

Д.А. ДОЛМАТОВ

*Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина*

### МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ ГОРЕНИИ ГЕТЕРОГЕННОЙ СМЕСИ В КАМЕРАХ СГОРАНИЯ ГТД

В статье содержится анализ процесса горения с учетом дискретности горящей смеси и неоднородности состава. Автором обоснована необходимость использования при построении реакционных цепей и схем методов дискретной газодинамики, предложены способы задания функций, связывающих параметры потока с молекулярным взаимодействием. Введено понятие вероятностного поля микрообъема, определены задачи дальнейшего развития дискретной газодинамики.

**молекула, вероятность реакции, энергия активации, локальные параметры, переходная функция**

Существующие модели горения как гомогенных, так и гетерогенных смесей используют принцип построения реакционных цепей и схем [1, 2], переходя таким образом от термогазодинамического расчета по входным и выходным параметрам с эмпирическими коэффициентами к моделированию кинетики действительных химических реакций. Следует отметить, что несмотря на наиболее точное задание собственно реакций (простейшие межмолекулярные/межатомные), математический аппарат оперирует макрофункциями состояния сплошной среды. Известна [1] форма задания скорости элементарной реакции, использующая эмпирические и полуэмпирические коэффициенты:

$$V_{эл} = b_1 T^{b_2} e^{\frac{E_{акт}}{R_y T}}, \quad (1)$$

где  $b_1, b_2$  – эмпирические коэффициенты;

$T$  – температура в точке определения скорости реакции;

$E_{акт}$  – энергия активации реакции;

$R_y$  – универсальная газовая постоянная.

Выражение (1) весьма удобно для задания мощности источника тепла при моделировании течения с использованием, например, конечно-элементных моделей [3]. Следует отметить, однако, что согласование молекулярных реакций с уравнениями со-

стояния сплошной среды путем введения эмпирических коэффициентов достаточно неудобно. Причиной тому служит сильная зависимость констант (1) от условий протекания реакции и невозможность задать достаточно точно в среде нестационарного горения концентрации компонентов, число которых зачастую превышает 1000. Кроме того, при отсутствии теоретических критериев, невозможно установить интервал условий (физических и физико-химических) проведения опытов по определению констант  $b_1, b_2$ , соответствующий единому механизму протекания реакций.

Особенно важно построение универсальной математической модели горения для гетерогенной смеси – в частности, для горения капель топлива в камерах сгорания ГТД. Задача моделирования кинетики реакций горения отдельной капли топлива существенно усложняется из-за интегральности  $b_1, b_2$ , поскольку при гетерогенном процессе данные величины являются, в свою очередь, функцией многих переменных, варьирование которых зачастую невозможно. Для современных моделей же одной из приоритетных задач является возможность теоретического моделирования генерации вредных примесей (в первую очередь  $NO_x$  и  $CO$ ) и снижения их количества на стадии проектирования КС. Для пе-

рехода к инвариантным относительно условий протекания реакции детерминирующим параметрам целесообразно использовать модель дискретной среды, позволяющую оперировать непосредственно функциями молекул, участвующих в реакции.

Введем понятие кинетической вероятности реакции на примере элементарной бимолекулярной реакции. Пусть  $\upsilon$  – объем ячейки конечно-элементной сетки исследуемого участка горения. Условием равновесия для такого объема, очевидно, будет постоянство количества вещества каждого из компонентов:

$$\sum N_i = const; \quad (2)$$

$$\left(\frac{\partial N_i}{\partial t}\right)_{mex} = \left(\frac{\partial N_i}{\partial t}\right)_{\sum \text{хим.реакций}}, \quad (3)$$

где  $N_i$  – количество частиц  $i$ -го вещества,

$\left(\frac{\partial N_i}{\partial t}\right)_{mex}$  – изменение количества частиц  $i$ -го

вещества за счет переноса массы;

$\left(\frac{\partial N_i}{\partial t}\right)_{\sum \text{хим.реакций}}$  – изменение количества час-

тиц  $i$ -го вещества за счет химических реакций.

Для левого члена в (3) можно записать:

$$\left(\frac{\partial N_i}{\partial t}\right)_{mex} = \frac{N_A}{M_i} \iint_{\sigma} \chi_i \rho C dF; \quad (4)$$

$$\chi_i = \frac{m_i}{\sum m_i} = \frac{N_i M_i}{\sum N_i M_i}, \quad (5)$$

где  $N_A$  – число Авогадро;

$M_i$  – молярная масса  $i$ -го вещества;

$\sigma$  – поверхность, ограничивающая объем  $\upsilon$ ;

$\chi_i$  – массовая доля  $i$ -го вещества.

При известном качественном составе возможно определить все возможные реакции между существующими в объеме  $\upsilon$  компонентами. Пусть число этих реакций равно  $j$  и известно время каждой элементарной реакции  $\tau_j$ . В дальнейшем полагаем элементарные реакции непрерывными, т.е. с начала

до окончания реакции участвующие в ней молекулы не могут прекратить взаимодействие и не могут участвовать в других реакциях. Для элементарной реакции, считая ее протекание линейным, можно записать

$$\left(\frac{\partial N_i}{\partial t}\right)_j = \frac{1}{\tau_j}, \quad (6)$$

и, соответственно, для  $\upsilon$

$$\left(\frac{\partial N_i}{\partial t}\right)_{\sum \text{хим.реакций}} = \sum_{n=1}^{a_i} \frac{A_n(t)}{\tau_n}, \quad (7)$$

где  $a_i$  – число реакций, в которых участвует  $i$ -ое вещество;

$A_n(t)$  – число  $n$ -ых реакций в объеме  $\upsilon$ .

У каждой частицы в объеме  $\upsilon$  есть координационное число  $k_o$ , определяющее число соседних частиц.

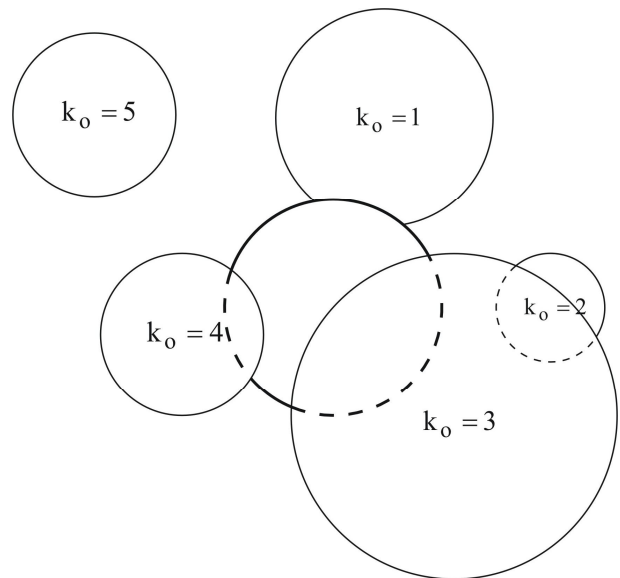


Рис. 1. К определению координационного числа частиц дискретной среды

На рис. 1 жирной линией выделена частица, для которой определяется вероятность реакции. Разумеется, возможны различные упаковки частиц, вероятность каждой из которых определяется анализом пространственных и физических условий в данной точке, однако на данной стадии разработки модели возможно считать  $k_o$  каждой частицы зависящим

только от ее координат  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  (для декартовой прямоугольной системы координат соответственно  $x, y, z$ ).

Задание поля вероятностей, т.е. значения вероятности  $j$ -ой реакции в объеме  $\nu$ , удобно при помощи массива  $\Xi_{ijk}$ , компонентами которого являются значения вероятности реакции частицы  $i$ -го типа, находящейся в точке с координатами  $(x, y, z)$  (для криволинейных систем  $(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ ), в текущее время  $t$  участвовать в  $j$ -ой реакции с частицей, имеющей по отношению к исследуемой частицей координационное число  $k$ . Значение параметров  $i$ ,  $j$  и  $k$  пробегает значения от 1 до максимально возможных для содержащихся в объеме  $\nu$  частиц. При этом для несуществующих значений  $j$  и  $k$ , т.е. для таких реакций, в которых данная частица не может участвовать, и для координационных чисел, превышающих максимально возможное  $k_0$  для данной частицы, компонента массива равны нулю.

Следует отметить, что согласно принятому предположению о непрерывности реакций, при вступлении частицы в реакцию соответствующие данной точке пространства компоненты  $\Xi_{ijk}$  для всех прочих  $i$ ,  $j$  и  $k$  обращаются в ноль, а для значений, соответствующих данной реакции, принимает значение 1. Кроме того, для состоявшейся реакции в точке  $(x_0, y_0, z_0)$  всегда верно равенство

$$\Xi_{ijk}(x_0, y_0, z_0) = \Xi_{i'j'k'}(x_0 + d_x \langle ij \rangle, y_0 + d_y \langle ij \rangle, z_0 + d_z \langle ij \rangle), \quad (8)$$

где  $i', j', k'$  – параметры массива второй частицы, участвующей в реакции и соответствующие параметрам  $i, j, k$  для  $(x_0, y_0, z_0)$ ;

$d_x \langle ij \rangle, d_y \langle ij \rangle, d_z \langle ij \rangle$  – межъядерное расстояние реагирующих молекул в проекции на оси  $x, y, z$ .

В силу несимметричности массива  $\Xi$  упрощение выражения (8) путем исключения дополнительных параметров затруднительно.

Компоненты  $\Xi$ , таким образом, являются функциями вида

$$\Xi_{ijk} = \{F(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)\}, \quad (9)$$

причем

$$\frac{\partial F(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)}{\partial t} = 0, \text{ для } F(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t) = 0; 1, \quad (10)$$

и для гомогенного горения с условно-равномерным смешением

$$\frac{\partial F}{\partial \xi_{i_1}} \approx \frac{\partial}{\partial \xi_{i_1}} (C_i C_{i'}), \quad (11)$$

где  $i_1 = 1..3$ ;

$C_i, C_{i'}$  – концентрации реагентов.

Функция  $F(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)$  является переходной функцией, связывающей математическую вероятность химической реакции с локальными физическими и газодинамическими параметрами сплошной среды. Для определения вида подобных функций требуется практическое исследование моделируемых малых объемов наряду с заданием систем уравнений, выражающих

Для гетерогенного горения условие (11) не выполняется из-за существования границы раздела фаз (сред), эффектов испарения/конденсации и сильной неравномерности распределения частиц реагентов в объеме реагирующей смеси.

Количество реакций, таким образом, представляет собой функцию времени вида

$$A_n(t) = \frac{\int \Xi_{ink} d\tau}{\nu}, \quad (12)$$

и для парного задания компонент тензора  $\Xi$

$$A_n(t) = \frac{\int \Xi_{ink} d\tau}{2\nu}. \quad (13)$$

В (13) множитель 0,5 появляется из-за симметричности массива  $\Xi$  при парном задании компонент

(способы такой симметризации  $\Xi$  будут рассмотрены в отдельной работе).

Подставляя (12) в (7), получим значение величины  $\left(\frac{\partial N_i}{\partial t}\right)_{\sum \text{хим.реакций}}$ .

Отметим, что благодаря учету в (9) обратных реакций полученное выражение можно использовать и для веществ с  $\left(\frac{\partial N_i}{\partial t}\right)_{\text{мех}} = 0$ .

Как видно из (9), практически любой процесс, включающий химические преобразования, с точки зрения дискретной газодинамики является нестационарным, что выражено зависимостью функции  $F(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)$  от времени. В связи с этим одним из приоритетных направлений разработки математических моделей является переход к осредненным по времени компонентам  $\Xi$ . Наиболее простым является простое осреднение по времени вида

$$\tilde{F}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{\int_0^{(m+1)T_O} F(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t) dt}{mT_O}, \quad (14)$$

где  $T_O$  – время осреднения;

$m$  – произвольное целое число.

Однако при таком методе сведения процесса к квазистационарному проблематично задание величины  $T_O$ , поскольку для достоверности осреднения недостаточно задать  $T_O = \max(T_j)$ . Очевидно, дополнительное условие для определения  $T_O$  выглядит как

$$\int_0^{(m+1)T_O} A_j(t) dt = \int_0^{(m+1,5)T_O} A_j(t) dt, \quad (15)$$

т.е. условие постоянства числа реакций при смещении границ осреднения на полуцикл и вообще

инвариантность осреднения относительно границ временного интервала. Данное требование обусловлено конечной величиной  $T_j$ .

Дальнейшее исследование методов дискретной газодинамики при моделировании процессов горения, особенно гетерогенного пламени в камерах сгорания ГТД, требует разработки аппарата функций  $F(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)$ , а также создания доступных для расчета методов определения сопутствующих функций вероятности положения частицы. Предлагаемая методика позволит с высокой точностью моделировать молекулярные процессы в камерах сгорания ГТД и прочих объектах, определять выход веществ и регулировать процесс горения.

### Литература

1. Законы горения. / Под общ. ред. Ю.В. Полежаева. – М.: Энергомаш, 2006. – 352 с.
2. Испарение и горение капли углеводородного топлива. II. Неэмпирическая модель испарения капли с учетом многокомпонентной диффузии / С.М. Фролов, В.С. Посвянский, В.Я. Басевич, А.А. Беляев, В.А. Сметанюк, В.В. Марков, И.В. Семенов // Химическая физика. – 2004. – Т. 23, № 4. – С. 75-83.
3. Суржиков С.Т., Краер Х. Вычислительные модели горения неметаллизированного гетерогенного ракетного топлива // ТВГ. – 2003. – Т. 41, № 1. – С. 106-142.

Поступила в редакцию 10.06.2006

**Рецензент:** д-р техн. наук, проф. В.П. Герасименко, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков.