

УДК 621.45.026

Д.А. Долматов, А.В. Кукурудза, С.М. Нижник

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ НЕЗБАЛАНСОВАНОЇ ХІМІЧНОЇ КІНЕТИКИ ТА ЙОГО ОСОБЛИВОСТІ

Процеси горіння з розвинутою хімічною кінетикою та високим градієнтом концентрацій характеризуються великим числом процесів, що протікають одночасно та мають великий вплив на параметри полум'я. Мікрорівень фізико-хімічних процесів вимагає детального моделювання задля можливості безпосереднього впливу на стабільність горіння, контроль генерації шкідливих викидів та ефективність згоряння палива. Альтернативні види палива останнім часом стають все більш значущими у різноманітних теплових машинах. Всі вищезгадані фактори тісно пов'язані з незбалансованими процесами зони первинного горіння, що загалом визначають швидкісні механізми реакцій та кінцеві характеристики полум'я.

Безпосереднє спостереження цільових процесів за допомогою фізичних вимірів суттєво ускладнене через, по-перше, велику швидкість та нестационарну природу горіння, по-друге – малий розмір типових прошарків принципів зон. Таким чином, роль математичного моделювання високо деталізованих хімічних реакцій відіграє вирішальну роль в успішному проектуванні нових камер згоряння та інших приладів, що використовують горіння в якості джерела енергії, а також в удосконаленні існуючих.

Робота присвячена особливостям моделювання фізико-хімічних процесів мікрорівня зони первинного горіння бідного полум'я. В роботі розглянуті та частково вирішені наступні проблеми:

- 1) Аналіз необхідних та достатніх критеріїв, за умови дотримання яких можливий перехід від нестационарного моделювання фізико-хімічних процесів мікрорівня до псевдо-стационарних газодинамічних процесів макрорівня.

2) Вплив нерівноважної хімічної кінетики на особливості практичного моделювання хімічних перетворень та адаптації існуючих механізмів реакцій до обчислювальних схем.

3) Особливості хімічної кінетики горіння спиртів з низьким карбоновим числом (C_3H_7OH та C_4H_9OH) за умови часткового попереднього змішування.

4) Дослідження ролі вільних радикалів, у тому числі – OH , CH_2O , HO_2 , O , H тощо, у формуванні нестационарних процесів мікрорівня.

5) Поведінка швидко-визначальних механізмів при варіюванні початкового складу суміші та ефективної температури зони первинного горіння.

6) Можливість достовірного моделювання визначальних процесів при багатокомпонентному горінні при невизначеності ступеня нестационарності у зоні великої кількості реакцій, що протікають одночасно.

7) Аномальний зсув розподілу активних проміжних реагентів за ступенем збудження.

8) Вплив типового шагу кінцево-різницевої схем на швидкість процесу встановлення рішення та можливу точність результатів, що були отримані в процесі числового моделювання.

Виконана робота є важливим підґрунтям для подальшого вдосконалення методів математичного моделювання горіння та аналізу хімічної кінетики розгалужених процесів з високим ступенем нестационарності.